

BL23A小角度X光散射 (SAXS) 光束線設計

一條專屬為國內SAXS用戶研究群，特別建造的光束線及實驗站預計於2006 - 2007年間完工試車，此光束線可快速切換四種實驗模式以滿足不同需求的用戶進行基礎與應用研究，屆時將會促進國內小角度X光散射領域的蓬勃發展。

劉定國、鄭有舜、曾金榮、張劍虹、
曾平忠、馮學深、湯茂竹（光束線組）

2003年中，本中心由增頻磁鐵及超導移頻磁鐵個別提供給BL17B及BL01B光束線X光光源所架設臨時實驗裝置，帶動著許多SAXS相關研究。且這幾年來的SAXS成果鼓舞了許多計劃主持人及具有相當潛力的用戶躍躍欲試，於是一個SAXS的研究群就在2004年衍然而生。如今，本中心正於BL17B建立一個與X光散射實驗站共用光束時間的 BL17B3 SAXS實驗站。有鑑於國內SAXS用戶們強烈需求一條專屬的光束線，本中心決定在目前1.5 GeV儲存環內再置入一能散段超導增頻磁鐵 (IASW6)。以此磁鐵所產生高通量 (10^{13} 光子/秒)，寬能帶 (5 - 23 keV) 的先進硬X光光源，建造一條專屬小角度X光散射研究用的光束線BL23A，提供全國用戶使用。綜合歸納國內SAXS用戶所提出之研究需求與實驗計劃書，本小角度X光散射光束線之設計將滿足以下四種模式的運作需求。

(1) 高Q解析模式 (High Q-resolution mode)：在設計此模式時，直徑0.5 mm之光束線的最大發散度與能量的解析度 ($\Delta E/E$) 分別保持在 $\pm 50 \mu\text{rad}$ 與0.01內中，如此可量測的最小散射向量Q值將達 0.002\AA ($\pm 10\%$) 之設計值。依照布拉格定律 (Bragg law)，可解析層狀晶格間尺度達300 nm。

(2) 高通量模式 (High flux mode)：在此運作模式中，我們採用多層膜multilayer ($\Delta E/E \sim 1\%$)，可提供比一般常用的Si (111) ($\Delta E/E \sim 0.02\%$) 晶體，高出約50倍的光通量，可以 2×10^{12} photons/s之高光子通量進行微秒級的時間解析 (time-resolved) 研究。

(3) 非尋常小角度散射模式 (Anomalous SAXS mode, ASAXS)：在此模式中，採用Si (111) 雙晶體單頻器，小角度X光散射之入射光之能量解析度可保持在 $\Delta E/E < 5 \times 10^{-4}$ ，以便利用ASAXS進行多相結構系統之研究。

(4) 掠角入射式小角度散射 (Grazing incidence SAXS mode, GISAXS)：在此模式中，光束線能以精準之樣品入射角度 (0.005度內之精度)，進行銳角小角度X光散射，以解析平面膜內之結構。這條專屬的光束線的完成，預計將會促進國內小角度X光散射相關的研究，尤其是在軟物質 (soft matter) 及奈米科學 (nano-science) 方面。以下介紹此一光束線的設計概念及數值分析結果。

表一 能散段超導增頻磁鐵 (IASW6) 之設計參數

磁極數目	14
磁場週期 [cm]	≈ 6.1
磁場強度 [T]	3.1
光源水平張角 (mrad.) [68% of flux @ 0 mrad & 15 keV]	± 6 [± 3]
光源大小及光源發散角 σ_{rx} (σ'_{rx}), σ'_{rx} (σ'_{rx}) [μm], [mrad] @15 keV	0.01 (0.04), 0.86 (0.17)
光子通量 (photons / 0.1%bw / mrad)	2×10^{12}
總功率 (kW) @ 400 mA	2.7

IASW6光源參數

未來能散段超導增頻磁鐵 (IASW6) 將安裝在1.5 GeV 電子儲存環內的偏轉磁鐵之間，以提供強大的X光光源，預計使用出光口水平扇形中央軸0.5 mrad建造一條SAXS光束線。表一列出此插件磁鐵的設計參數，在規劃的5-23keV能量範圍區間提供 10^{12} - 10^{13} photons/s/0.1%bw 光子通量及 10^{13} - 10^{14} photons/s/0.1%bw/mrad²/mm² 輝度。

光束線光學設計

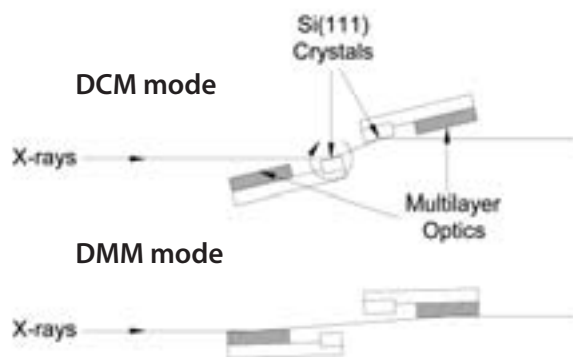
SAXS光束線光學元件配置如圖一，距離光源出牆後至下游實驗站末端，總長為28公尺，而光學元件則建構有光束劈光器 (beam splitter)、準直鏡 (collimating mirror, CM)、雙晶體及雙多層膜單光器 (double crystal and double multilayer monochromator, DCM/DMM) 及聚焦鏡 (focus mirror, FM) 等。另外，第一狹縫組 (S1) 選定不同實驗模式，所需界定光束面積大小，而第二 (S2) 及第三狹縫組 (S3) 為阻擋非必要散射光之用並進一步修飾光束形狀及準直性。在下游方向，有一Asymmetry-cut monochromator (ACCM) 之配置是未來做為支線規劃使用。

詳細的光學元件功能介紹如下：

從IASW磁鐵產生的光源依計算約有2700 W的熱功率，BL23A光束線是藉由位於靠近S1 (距光源6.44 m) 上游處的劈光器以 3×2 mm (H × V) 開口選取光源水平中央軸0.5 mrad張角範圍，並先阻擋掉其它大部分不需要之光源及減輕下游的熱負載。再進一步依照不同實驗模式，使用S1來設定適當的開口大小以符合實驗需求。隨後並以準直鏡 (距光源8.4 m) 將光束

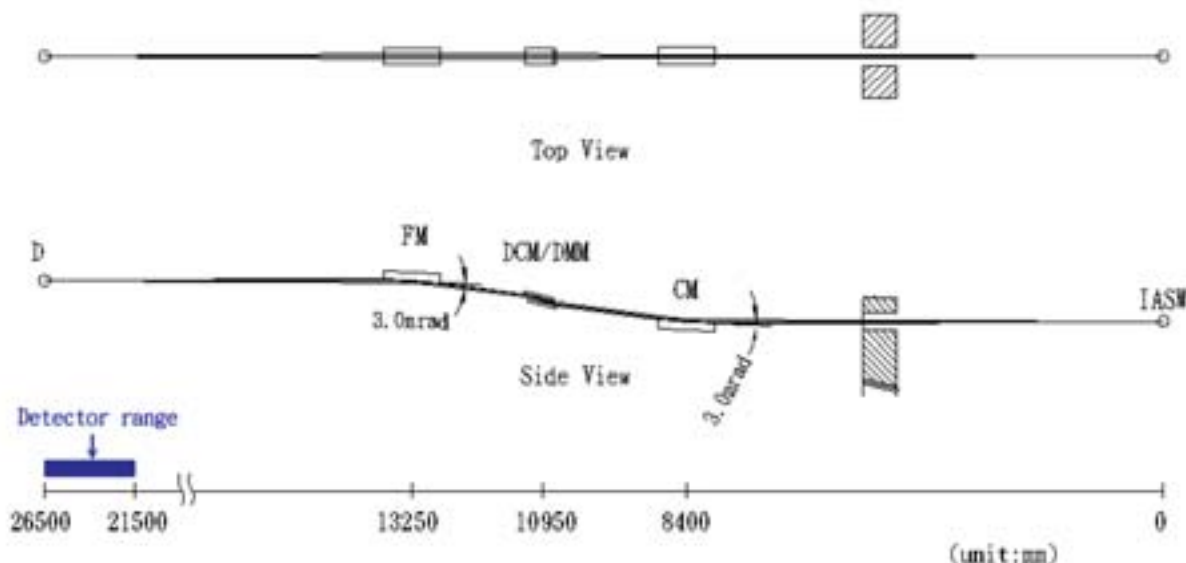
垂直方向張角縮小而得到近似於平行光而進入單光器上。準直鏡設計以Si為基材，並在鏡面鍍上一25 nm 鉬層與8 nm 鈹層，可適用於ISAW光源寬的能量範圍 (5 - 23 keV)。

對於單光器 (距光源10.95 m)，為達到快速切換機構，因此將DCM及DMM雙模式整合製作成單一系統內，如圖二示意。此時，若要進行高Q-解析度實驗，是以Si (111) DCM ($\Delta E/E \sim 0.02\%$) 為主，可用能量範圍為5 - 23 keV，在樣品置放處，光束面積限制在0.5mm²大小、發散角最大值為 $\pm 50 \mu\text{rad}$ ，即可得之光通量將近 1×10^{11} photons/s。若選用高光通量模式，則使用W/B₄C多層膜之 DMM ($\Delta E/E \sim 1\%$) 機制，而可使用之能量範圍為6 - 13 keV，光束面積則調整為1 mm²，發散角增加至最大值 $\pm 100 \mu\text{rad}$ ，如此通量亦可提昇至 2×10^{12} photons/s。

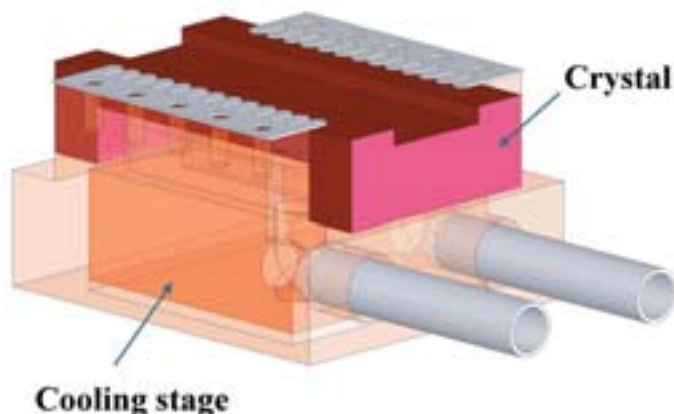


圖二 使用於ALS之DCM/DMM單光器內部示意圖，上方為DCM模式，下方為DMM模式，其中以DCM的入射第一塊晶體為整個機構之旋轉中心。

由於DCM/DMM的性能優劣乃是影響日後研究發展之關鍵處，尤其是在高Q-解析度模式及ASAXS模

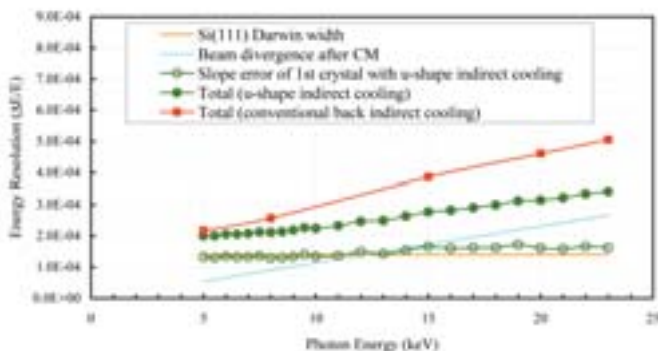


圖一 BL23A小角度X光散射光束線規劃配置圖

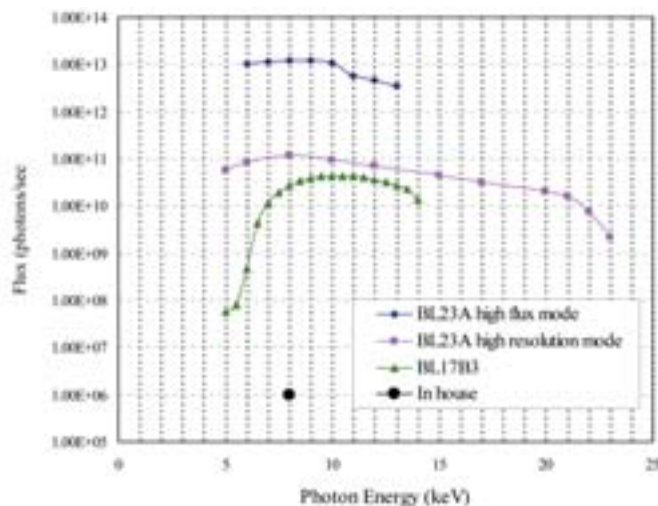


圖三 在DCM模式中，第一塊晶體為U型式設計。

式之實驗進行時，因此極需注意伴隨光束而來的熱負載對於DCM晶體繞射面之局部變形，造成出射光束截面積量散開，無法有效通過下游的S3狹縫組（距光源14.46 m），不僅光通量損失，也一併使得能量解析度明顯下降。相對的，以DMM模式運轉時，光束以較小之掠角入射角度通過緣故，在multilayer繞射



圖四 使用改良式晶體形狀得到的能量解析度最大值為 3×10^{-4} 優於傳統水冷式。



圖五 高Q-解析度與高光通量兩種光束模式設計之對應光子通量。

面上形成的足跡（footprint）範圍較寬，不易有局部熱變形，所以必須針對DCM，設計一足夠的冷卻機制以保持實驗操作時的穩定性。考量本中心內之硬X光蛋白質結晶學光束線，該光束線在DCM晶體冷卻方面選用性能優異的液態氮系統，可有效的消除晶體之熱載形變效應。但考慮該冷卻系統除造價不菲、後續投入人力維護保養及操作便利性等因素外，再加上經審慎評估國外同步輻射研究機構如ALS有指標性的參考設計，並計算評估其可行性，決定採用基本的水冷式系統。在與光束線組相關同仁多次討論及電腦模擬計算後，完成第一晶體為U型外形構造的特殊DCM設計，如圖三。此特殊設計晶體形狀，晶體沿光軸方向兩邊雙肋結構有助於消除變形，並在底部藉由水冷機構將熱量帶走。在水冷的方式下，新設計之晶體在能量範圍5 - 23 keV所得到的能量解析計算，如圖四，經考量固有的達爾文寬度（Darwin width）、入射光發散角及晶體表面的局部熱脹效應等因素後，能量解析度仍可滿足實驗所需的 $\Delta E/E < 5 \times 10^{-4}$ 之需求。

經過單光器之單光受到圓環型（Toroidal）聚焦鏡（距光源13.25 m）作用，將光束的水平及垂直方向皆聚焦至實驗站內偵測器（距光源26.5 m）處，水平聚焦比例（物距/像距）為選擇成1:1。此聚焦方式，光束線的大小隨距離的變化較小，可配合小角度X光散射偵檢器之大範圍移動特性（~5 m）。圖五中所表達為，在高Q - 解析度與高光通量兩種光束模式設計下，通過樣品位置的光子通量模擬計算。

預期目標

此專屬的小角度X光散射光束線及實驗站預計在2006年進行試車，2007年中開放予全國用戶。屆時，當可大有助益於奈米結構與軟物質研究之發展，包括（1）低電子密度對比系統，如生物分子高分子溶液或原子序數相近之合金；（2）微秒動態結構之時間解析，如結晶動力學、相變化；（3）臨場 SAXS/WAXS/DSC 實驗量測結構形成之動力；（4）ASAXS之多相結構解析，如奈米粒子組成、核 - 殼量子點及多元素磁性奈米粒子；以及（5）高分子薄膜或脂質膜的in-plane結構訊息等。