高解析非彈性軟 X 光散射實驗設施

科學研究方向： 探測物質的微觀電子與磁性結構，探討其低能量激發現象，開發新穎材料。

主要實驗技術： 非彈性軟 X 光散射 / 共振型非彈性軟 X 光散射。

概要介紹

原子最外層價帶電子之間的相互作用關鍵性地影響物質的巨觀物理性質，其中價電子的躍遷現象可以提供物質中導電特性與磁性結構之重要資訊，有助於瞭解材料物理特性的微觀機制，亦是凝態物理實驗中很重要的一環。一般而言，物質若因外界環境改變或受到其它粒子影響所造成的電子能態變化，即稱之為激發現象，如果激發前後能量變化在數個電子伏特範圍內，則稱為低能量激發，例如費米能階附近的電子躍遷或各種單粒子、多粒子的集合激發等。藉由測量激發能量、躍遷機率以及激發能量與動量之關係，即可獲得該物質價電子行為的重要資訊。在這方面的研究領域中，共振型非彈性軟 X 光散射 (resonant inelastic soft X-ray scattering) 實驗技術是其中一種非常重要的探測利器。

共振型非彈性軟 X 光散射是近年來發展甚為快速的能譜技術，目前世界各地越來越多的同步加速器光源設施在建置相關的實驗站。此能譜技術主要是利用能量共振躍遷原理來探測低能量激發現象，並結合軟 X 光適合探測物質的微觀電子與磁性結構之特性。然而，在非彈性軟 X 光散射能譜中，能譜本身擁有許多精細結構，但由於其散射截面極小，僅少量的散射光子可供偵測，使得探測這精細結構變得十分困難。因此，一座高亮度的光源設施與一座具備高能量解析力、高效率光子偵測的散射儀器，對於進行此項實驗技術是不可或缺的重要工具。為此，在臺灣光子源第一階段實驗設施興建計畫中，即包含建造一座高解析非彈性軟 X 光散射實驗設施。

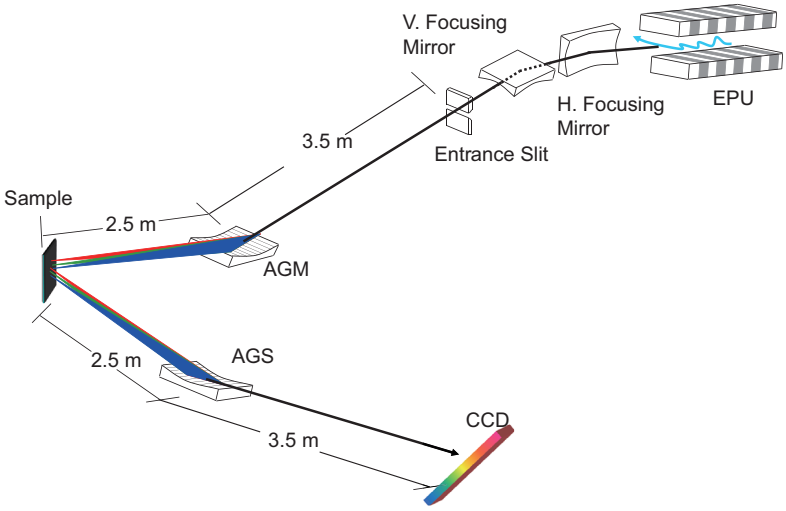
光束線設計

傳統式非彈性軟 X 光散射儀包含了一個分光儀 (monochromator) 和一個能譜儀 (spectrometer)，分光儀主要提供樣品單一能量的入射光，而能譜儀是用來解析光與樣品作用後之出射光的能量分佈，且這兩個儀器在光學運作上彼此獨立。

軟 X 光分光儀的主要光學像差為像散慧差 (astigmatic coma aberration)、散焦像差 (defocus aberration) 以及慧星像差 (coma aberration)，這些像差的大小攸關分光儀之能量解析力。由過去的實驗結果得知，如果整個光學系統在水平與垂直方向的聚焦作用能彼此獨立 (如「龍光束線」之設計)，則可消除像散慧差；散焦像差則來自於光柵的表面曲率為固定值，使得像距因光子能量不同而改變，此可利用移動式出射狹縫來排除；至於慧星像差則可使用非球面光柵加以改善。

消除這些光學像差後，光子的能量解析力仍與入射狹縫、出射狹縫之間隙大小，以及光學元件的表面斜率誤差等條件息息相關。過去科學家在入射狹縫和出射狹縫間常利用數個光學元件來相互抵銷像差，以利提升軟 X 光分光儀的解析力，然而每增加一個光學元件，卻因光學表面的斜率誤差，反而無法達致預期最高解析力，並降低光通量。因此，一座最理想的分光儀之元件配置，應該在其入射狹縫和出射狹縫間僅放置單一光柵，而此座高解析非彈性軟 X 光散射實驗設施就是依此原則來設計，光束線系統之分光儀及能譜儀則採用主動式光柵設計，並配合新建的臺灣光子源加速器設施，預期將可大幅度提高光子偵測效率與散射儀之能量解析力。以下為高解析非彈性軟 X 光散射光束線設計之目標：

1. 能量涵蓋範圍：450 eV 至 1500 eV。
2. 光源輸出通量：> 10^{15} photons/sec/0.1%bw。
3. 能量解析力 (E/△E)：> 20000。
4. 在樣品上之光通量：> 10^{13} photons/sec。
5. 光束水平方向大小：< 100 μm (FWHM)。



圖一 高解析非彈性軟 X 光散射實驗設施之基本光學元件架構圖。

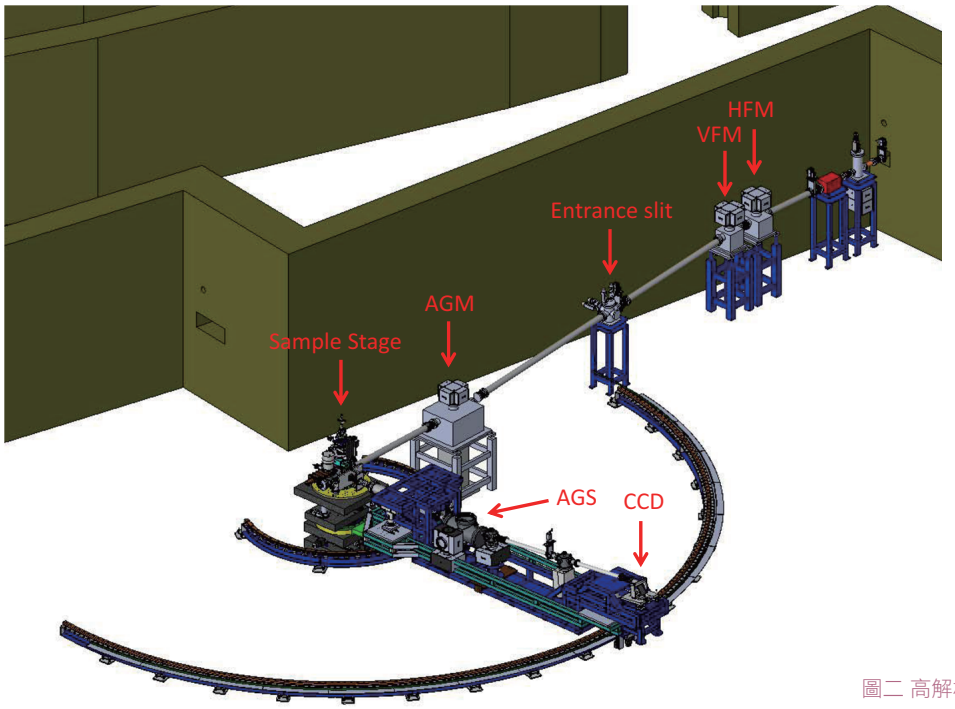
此一光束線的設計概念主要是由龍型光束線演進而來的，水平與垂直方向的聚焦作用能彼此獨立來消除像散慧差。光束線出光路徑第一面光學元件為水平聚焦鏡，使用液態氮冷卻以減少熱變形，並吸收大部分之熱功率；第二面光學元件為水冷式垂直聚焦鏡，利用連續的冷卻裝置，確保聚焦鏡片組在高熱載的情況下仍能保持優化精度。為了進一步提升散射儀的偵測效率，光束線設計團隊應用能量補償原理，設計出一座由分光儀與能譜儀密切組合的散射儀系統，不僅可以獲得與傳統式散射儀相同的超高能量解析力，相對於傳統設計更可大幅提升量測效率至百倍。而在分光儀方面，利用主動式光柵來取代球面光柵，藉由其曲率半徑可隨不同能量而調變之特性，使得能量掃描時，光束聚焦位置可以固定於樣品上。另外，因為僅在分光儀前方放置入口狹縫，而捨棄裝設出口狹縫，可以藉此提高光通量。在能譜儀方面，設計上採用與分光儀一樣的主動式光柵分光儀設計，在此架構下，非彈性軟 X 光散射訊號之收集效率，可提升一至兩個數量級。相對於傳統光柵之特性，主動式光柵乃利用高精密調整機制，讓其表面曲率調變至最佳聚焦條件：如焦距，像差等。

本中心已完成主動式光柵之調整機構，測量結果顯示此機構能精確地控制鏡面之曲率半徑，且可修正慧星像差 (coma)，配合可變線距 (varied-line-space, VLS) 光柵設計，還可提高系統之能量解析力。此一嶄新的能量補償式非彈性軟 X 光散射儀使用兩個完全相同的主動式光柵，從入射狹縫進入的光束，經過主動式光柵分光儀 (active grating monochrometer, AGM) 分光，並聚焦在樣品上。根據光的可逆性原理，在樣品上的彈性散射光可以反向聚焦回到入射狹縫位置。因此，如果將樣品放射出的散射光引導至另一個與分光儀完全相同，但呈垂直鏡像配置的主動式光柵能譜儀 (active grating spectrometer, AGS)，並在入射狹縫相對應的鏡向位置，放置一座光子面積偵測器 (例如 CCD 電荷耦合元件偵測器)，即可將散射光引導聚焦至偵測器上的位置。因此，即便入射光的能量是帶狀分佈而非單一能量，從樣品放射出的彈性散射光，都會被聚焦到偵測器上的同一位置。以此類推，當樣品放射出具有相同能量損失之非彈性散射光，也皆會被聚焦到偵測器上的同一位置 (但不在彈性散射的位置)，此種現象即為光柵色散的能量補償 (energy compensation) 原理。此一能量補償式非彈性散射儀的能量解析力，主要與入射狹縫之間隙以及偵測器圖元之間距有關，而與樣品入射光之積分範圍較無關聯。在超高能量解析力之情況下，傳統式散射儀之樣品表面垂直方向僅可有數微米的面積區域被入射光照射，而能量補償式散射儀卻可有數百微米範圍被照射，因此獲得百倍於傳統設計的量測效率。

結語

運用此先進的光束線光學元件設計概念，結合臺灣光子源高亮度與超低束散度之光源設施，未來這座高解析非彈性軟 X 光散射儀將可大幅減少訊號擷取所需之時間，並使系統達到極高之解析力，成為科學家探測物質的微觀電子與磁性結構上之重要利器。

計畫主持人：國家同步輻射研究中心 黃迪靖 副主任 (djhuang@nsrrc.org.tw)
建造主持人：國家同步輻射研究中心 鍾世俊 組長 (sc@nsrrc.org.tw)



圖二 高解析非彈性軟 X 光散射實驗設施 3-D 模型圖。