

Soft X-ray 영역 단색화 장치의 광학적 설계에 관한 연구

성면창 · 최원국 · 황정남 · 정광호

연세대학교 물리학과

김 영 식

단국대학교 물리학과

(1991년 11월 27일 받음)

Synchrotron 방사광으로 부터 soft X-ray, 광에너지 300~1200 eV, 영역의 특정 파장을 선택할 수 있는 단색화 장치의 설계에 대하여 알아보았다. C. T. Chen의 새로운 제안에 의해 건설되어 그 성능이 기존의 여러 단색화 장치보다 우수하다고 알려진 Brookhaven National Laboratory의 CEM(cylindrical element monochromator) 형태인 Dragon beam line을 모델로 하여 PLS(Pohang Light Source) 방사광 가속기의 구조에 맞게 광학적 설계시 고려해야할 조건을 조사하였다.

I. 서 론

일반 광원으로는 얻기 힘든 2~2000 Å의 VUV(vacuum ultra violet) 영역의 빛은 방사광 가속기로부터 얻어진다. 이 광원은 적외선에서 X-ray 까지의 광범위한 파장 영역과 고밀도, 고강도의 잘 편광되어 있는 매우 유용한 광원이다. 따라서 이러한 빛을 이용하기 위하여 특정한 파장을 골라 낼 수 있는 단색화 장치(monochromator)를 필요로 하게 된다. 이러한 VUV 영역의 빛은 종래의 광원으로는 불가능했던 표면 연구들을 가능하게 한다. 즉, 표면 전자 에너지 분포와 같은 표면 상태의 많은 물리적 성질을 이해하는데 도움이 되며, 표면 전자의 구조를 조사하는데 적합한 ARUPS(angle-resolved ultra violet spectroscopy)를 비롯하여, 흡수단의 바로 밑에서 수 백 eV의 high energy에 걸치는 연속 scan에서 얻어지는 X-선 흡수 측정에 의해 복잡한 표면의 특정한 원소 주변의 정보를 알아볼 수 있는 SEXAFS(Surface Extended X-ray Absorption Fine Structure)가 가능하게 된다. 그 이외에도 Near Edge Absorption Spectroscopy 또는 Photon Stimulated Desorption 등에 유용하게 사용될 수 있다. 이 광원으로부터 특정 파장을 골라내는 장치인 단색화 장치는 Grasshoper, Toroidal Grating, Plane Grating Monochromator^[1,3] 등 여러가지의 형태가 있고 우수한 분해능을 지닌 monochromator의 설계를 목적으로 연구가 진행되고 있다. 본 논문에서는 또한 방사광

가속기(Pohang Light Source)의 beam line design으로서 CEM^[4]을 모델로 하여 설계시 고려해야 할 여러가지 조건들을 알아보았다.

CEM은 prefocusing mirror인 HFM(horizontal focusing mirror), VFM(vertical focusing mirror)을 이용한 Kirkpatrick-Baez 형태로서^[8] 원형의 거울을 사용 거울 제작이 용이하고, 수평방향은 분해능에 영향을 주지않고 광량을 많이 받아들일 수 있다. HFM이 나머지 요소에 대한 radiation protector 역할을 함으로써 열로 인한 거울의 손상이 전체 단색화 장치의 분해능이나 transmission에 영향을 주지않고, HFM과 VFM이 분리되어 독자적인 focusing을 수행하기 때문에 위치이동에 대응하기 쉽다. 또한 파장에 따라 grating의 회전과 exit slit의 좌우이동 등 간단한 scanning 방법이 사용되고 있으며, exit slit의 거리가 비교적 멀기 때문에 분해능이 exit slit의 위치변화에 민감하지 않는 등 다수의 장점을 지닌다.^[4]

본 논문에서는 에너지영역은 300~1200 eV인 soft X-ray 영역이고 분해능은 2000 이상 그리고 10^{10} photon/sec(0.1% bandwidth^[3]) 정도의 광량을 목표로 하는 단색화 장치로서, 거울 재질에서 부터 각 구성요소의 배치와 입사각에 따른 분해능과 광량조건을 조사하여 최적조건을 찾는 것이다. Ray-tracing용 program으로는 Winsconsin 대학의 F. Cerrina 등에 의해 고안된 VAX computer용 synchrotron ray tracing program인 'Sha-

dow' 를 사용하였다.

II. 본 론

CEM design의 개념은 MS-TTGM(movable slit-toroidal mirror grating monochromator)의 특징인 exit-slit의 이동을 통한 defocusing 수차를 해결하며, 이 형태에서 문제된 astigmatic coma 수차를 줄이고, horizontal angular acceptance를 크게 하기 위하여 착안되었다. Astigmatic coma는 근본적으로 이상적인 horizontal image line이 vertical direction으로 휘어지는 현상으로, 이는 cylindrical optical element를 사용하여 수평과 수직 방향의 focusing을 분리(decouple) 시킴으로써 감소시킬 수 있다. 즉 이러한 광학적 구조에서 image pattern은 광로상에서 항상 그 단면의 모양이 rectangular한 모양을 가지게 된다. 그림 1은 CEM의 대략적 구조를 보여준다. 그림에서 보는 바와 같이 CEM은 prefocusing mirror 부분이 앞에 위치하여, HFM의 경우 수평 방향으로 광원을 sample 위치에서 focusing 시키며, VFM의 경우 entrance slit 상에 수직 focusing을 시킴으로써 photon의 transmission을 결정하게 된다. 다음에 grating이 위치하여 파장을 분리시키는 역할을 하며 분해능을 결정하게 된다.

Grating이나 거울은 강한 방사광을 받게 됨으로써 열전도도와 변형이 적은 SiC를 이용하고 코팅물질 역시 열에 강하고 고에너지 영역에서 반사율이 좋은 Au나 Pt가 사용된다. 그림 2는 Pt의 반사율(reflectivity)을^[11] 에너지와 grazing angle($\theta = \pi/2 - \theta'$; θ' 는 surface normal에서 측정된 입사각)에 따라 나타낸 것인데, 고에너지 영역에서 60% 이상의 균일한 반사율을 유지하기 위해서는 grazing angle이 35 mrad 이하 정도로 작아야 함을 알 수 있다. 따라서 광원으로부터 HFM까지의 거리(r_h)는

되도록 짧아야만 일정한 퍼짐을 가진 방사광에 대하여 저울 길이를 줄일 수 있다.

(1) HFM에서 VFM 의 거리(r_v)는 구조상 VFM이 직접 방사광에 노출되지 않을 조건으로부터 다음과 같이 구해진다. 여기서 방사각이 30 mrad인 수평 광원을 생각할 때 간단한 기하를 이용하여 구하면 다음과 같다.

$$\frac{r_v}{r_h} = \frac{\tan(15 \text{ mrad})(1 + 0.07 \sin(2\theta_h) + 0.003 \cos(2\theta_h))}{0.998 \sin(2\theta_h) - 0.998 \cos(2\theta_h)\tan(15 \text{ mrad})} \quad (1)$$

그림 3은 grazing angle θ 에 따른 r_v 와 r_h 의 비율은 (1)식의 결과로 나타낸 것이다. PLS 방사광 가속기의 구조 특성상 $r_h=4.7 \text{ m}$ 로 정하고 전체 수평방향의 방사광 26 mrad 중 10 mrad만을 받는다고 가정할 때의 입사각과 HFM의 길이(L_h)의 반비례 관계를 그림 4에 나타내었다. 위의 결과를 종합해 볼 때, 입사각 $\theta_h=35 \text{ mrad}$, $L_h=134 \text{ cm}$, $r_v=1.7 \text{ m}$ 그리고 반사율은 대략 60%가 적정하리라 생각된다.

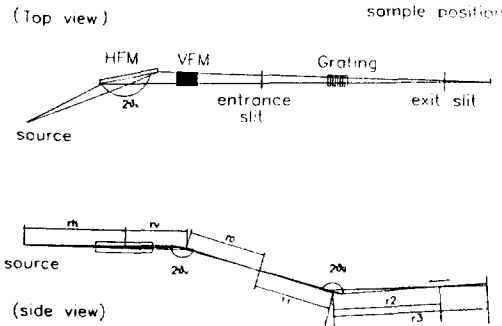


그림 1. CEM(cylindrical element monochromator)의 개념적인 구조도.

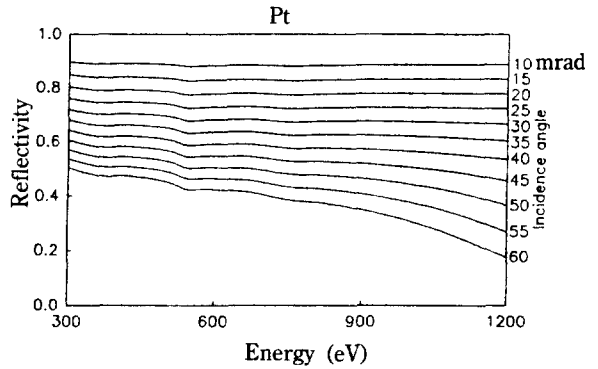


그림 2. Pt (두께 1 μm)의 입사에너지(300~1200 eV)와 입사각(10~60 mrad)에 따른 반사율.

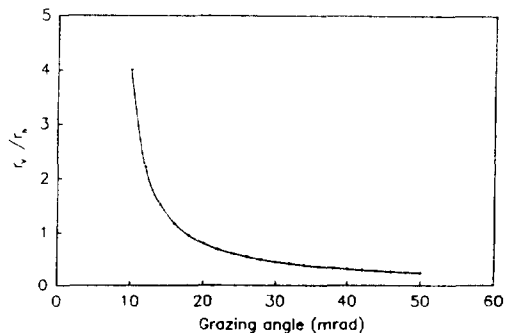


그림 3. 입사각(10~50 mrad)에 따른 r_v 와 r_h 길이의 비율.

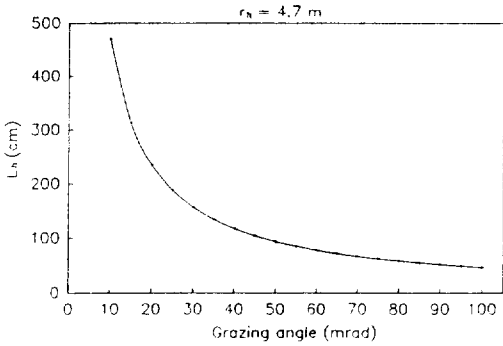


그림 4. HFM의 거울 길이와 입사각과의 관계($r_h=4.7$ m 인 경우).

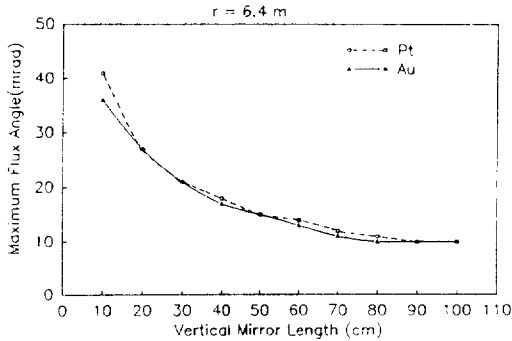


그림 5. VFM 길이에 따른 maximum flux angle($r=r_h+r_v=6.4$ m).

(2) θ_c 의 결정은 입사각에 따른 광량의 변화관계를 고려하여야 한다. 전체 반사광량(transmission)은 Gaussian 형태의 방사광이 입사되어 정해진 반사율로 반사될 때 에너지에 대한 점분 형태로 다음과 같이 표시된다.

$$P = \int_{300\text{ eV}}^{1200\text{ eV}} R(E, \theta) \frac{1}{[(2\pi)^{1/2} \sigma_R]} \exp\left\{-\frac{(L \cos \theta / r)^2}{2\sigma_R^2}\right\} dE/E \quad (2)$$

(2)식에서 $R(E, \theta)$ 는 반사율, σ_R 은 angular distribution의 σ factor로 다음과 같이 주어진다.^[3]

$$\sigma_R = 0.565 \gamma [h\nu/h\nu_c]^{-0.425}, \quad \gamma = \{1 - (1 - v^2/c^2)\}^{1/2}$$

임계 광에너지(critical photon energy) E_c 는 다음과 같이 표현된다.

$$E_c = h\alpha_c = 2chr^3/4\pi\rho = 2.2 \times 10^3 E^3(\text{GeV})/\rho(\text{m})$$

ρ : bending radius

PLS인 경우 각각 $E_c = 2835.4$ eV, $\rho = 3914$ 이다.

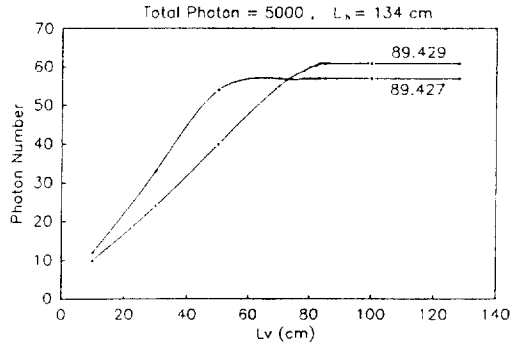


그림 6. Total incident photon flux=5000에 대한 ray tracing을 통한 VFM 길이에 따른 entrance slit상의 광량 변화($L_h=134$ cm).

그림 5는 L_v 에 대해 maximum flux를 가져오는 θ_c 를 $r=r_h+r_v=6.4$ m에 대해 나타낸 것이다. 여기서 거울길이 길어질수록 θ_c 가 작아져만 좋은 광량을 얻는다는 사실을 알게 된다. 이것은 θ_c 가 작아짐에 따른 반사율의 증가로 인한 효과가 빛을 받는 각의 감소로 인한 효과보다 크다는 것을 의미한다. 따라서 θ_c 는 작을수록 좋고 현재의 결과로는 $\theta_c=10$ mrad이 적절하다. VFM에서 entrance slit 사이의 거리(r_0)는 VFM의 배율인 $M=r'/r$ 따라 결정되고, 배율이 작으면 slit에 맺혀지는 상이 작아져서 광량은 증가하지만 반대로 그 다음 요소인 grating의 길이가 길어져서 분해능이 나빠지게 된다. 일반적으로 $M=0.5$ 즉 $r_0=3.2$ m인 경우를 고려해 보면 VFM의 곡률반경은 다음의 결상식 (3)에 의해 $R_v=462.674$ m로 정해지게 된다.

$$\frac{1}{r} + \frac{1}{r'} = \frac{2}{R \cos \theta'} \quad (3)$$

(3) L_v 의 설정은 ray tracing을 이용하여 PLS의 $\sigma_x=188 \mu\text{m}$, $\sigma_z=149 \mu\text{m}$ 의 emittance에 대해 입사각 $\theta'_v=89.427^\circ$ 일 때 동일한 반사각과 89.429° 의 반사각에 대해 slit(폭은 $10 \mu\text{m}$)을 통과하는 광량을 조사하면 그림 6과 같다. 거울길이가 60 cm를 넘으면 광량증가는 멈춰지는데 이것은 슬릿의 폭과 거울곡률로 인해 생기는 현상으로 $L_v=83$ cm, 광량은 1.22%가 최고광량을 얻는 적정값임을 알 수 있다.

(4) Grating부분은 두 개의 슬릿과 grating으로 구성되며 grating의 회전각(scanning angle) Φ 는 다음의 식으로 주어진다.^[5-7]

$$\Phi = \sin[Nm\lambda/2 \cos \theta] \quad (4)$$

N : groove density
 m : order of diffraction
 θ : 0차 입사각

(4)식에서 scanning angle ϕ 의 범위는 $0^\circ \sim (90 - \theta)^\circ$ 까지이다. θ 가 작을수록 좋은 분해능을 얻을 수 있지만 반사율이 떨어지고 N 이 증가하여 제작상의 문제점이 발생한다. 주어진 에너지영역의 적절한 조건을 찾으면 $\theta = 87^\circ$ 로서 $\Phi = 0.8 \sim 1.9^\circ$ 의 scanning angle을 갖게 된다. Grating의 분해능은 에너지에 따라 변하게 되는데 300~600 eV 영역에서는 $N = 800/\text{mm}$, 600~1200 eV에서는 $N = 1600/\text{mm}$ 과 같이 두 영역에서 나누어서 N 이 다른 두 개의 grating을 사용하는 것이 적당하리라 생각된다. 이 두 영역의 분해능 특성은 동일하다.

Entrance slit에서 grating까지의 길이 r_1 과 grating의 곡률반경 R_G 는 분해능에 따라 정해진다. Concave grating의 수차중 분해능을 좌우하는 요인으로서 CEM인 경우는 주로 astigmatism임이 이미 밝혀져 있다.^[4,8,9] 그 외에 영향을 주는 요인으로는 슬릿의 폭으로 인한 요소와 곡률 오차인데 가장 큰 요인은 곡률의 오차라는 사실도 역시 밝혀져 있다.^[4,10]

수차요소를 표시하면 다음과 같다. $\Delta\lambda_w$, $\Delta\lambda_s$ 는 슬릿의 폭으로 인한 오차 $\Delta\lambda_w$ 는 grating의 곡률때문에 생기는 astigmatism 그리고 $\Delta\lambda_s$ 는 제작상의 곡률오차이며 다음과 같이 주어진다.

$$(\Delta\lambda_{tot})^2 = (\Delta\lambda_w)^2 + (D\beta)^2 + (\Delta\lambda_s)^2 + (\Delta\lambda)^2 \quad (5)$$

$$\Delta\lambda_w = s_1 \cos\alpha / r_1 N m \quad \Delta\lambda_w = 1.8(L/2)^2 N m$$

$$\Delta\lambda_s = s_2 \cos\beta / r_2 N m \quad \Delta\lambda_s = 2\sigma_{cr} \cot\Phi$$

분해능은 $\lambda/\Delta\lambda_{tot}$ 로 정의되며 간단한 기하를 이용하면 grating의 길이(L_G)는 다음과 같이 주어진다.

$$L_G = \frac{r_1}{r_0} \frac{L_s \sin\theta_s}{\sin\theta_G} \quad (6)$$

(6)식에 $r_0 = 3.2 \text{ m}$, $\theta_s = 10 \text{ mrad}$, $L_s = 83 \text{ cm}$, $\theta_G = 2^\circ$ 를 대입하여 r_1 과 R_G 를 변화시켜 가며 분해능의 최적조건을 찾으면 $r_1 = 2.3 \text{ m}$, $R_G = 62 \text{ m}$, $L_G = 11.3 \text{ cm}$ 가 에너지에 따라 고른 분해능 분포를 가지는 적절한 값임을 알 수 있다.

(5) 그림 7은 grating의 길이에 따라 exit slit을 통과하는 광량을 ray tracing을 이용 에너지별로 나타낸 것이다. $L_G = 6 \text{ cm}$ 일 때 전 영역에 걸쳐 비교적 고른 광량이 통과하고 있음을 볼 수 있다. 따라서 전체광량의 대략 0.3~1%의 광량이 통과하고 있고 거울의 반사율(HFM

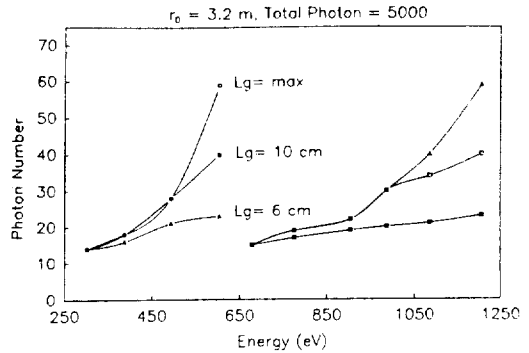


그림 7. Grating 길이에 따른 exit slit 상의 광량 변화.

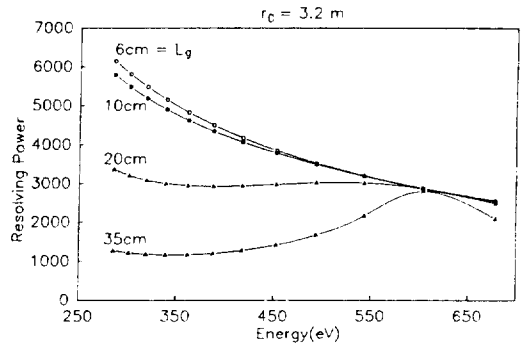


그림 8. Grating 길이에 따른 분해능 ($r_0 = 3.2 \text{ m}$).

60%, VFM 90%, grating 50%)을 고려하면 입사광량의 0.082~0.27%의 광량을 얻을 수 있을 것으로 기대된다. 그림 8은 grating의 길이에 따른 분해능을 나타낸 것이다. 위의 두 결과에서 광량과 분해능은 상호 대치하고 있어서 grating의 길이를 얼마로 할 것인가는 분해능과 광량을 고려하며 분해능을 우선으로 할 것인가 광량을 우선으로 할 것인가에 따라 결정하여야 할 것이다. 그림 9는 ray-tracing에 의한 분해능과 이론적인 분해능을 함께 나타낸 것이다. Ray-tracing에 의한 분해능은 grating의 길이를 고정시키고, 일정한 파장(λ)을 가지고 grating에 입사된 광에 대해 큰소산 차이($\Delta\lambda$)가 있는 파장의 광을 동시에 입사시켜 exit slit 위에 맺혀진 image가 분리될 때를 비교하여 구하였다. 이 때 Ray-tracing에 의한 분해능이 이론보다 약간 적게 나타남을 알 수 있다. 다만 $L_G = 6 \text{ cm}$ 인 경우에는 이론의 분해능과 잘 일치하고 있는데 결론적으로 이 경우가 분해능도 좋고 광량도 전 범위에 걸쳐 고르게 얻을 수 있는 적당한 길이라 생각된다. 만일 배율 M 을 변화시키면 그림 10과 같은 분해능 분포를 얻을 수 있는데 $M = 0.3 \sim 0.5$ 가 적절하다고 생각된다.

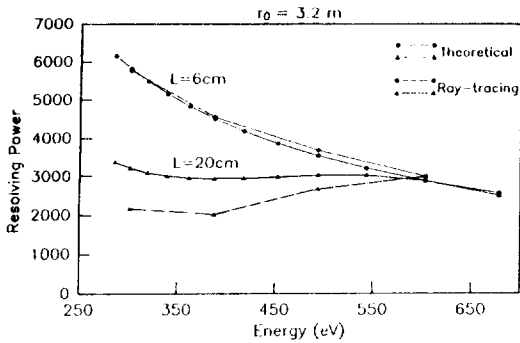


그림 9. Ray-tracing과 이론적 계산에 의한 분해능 비교.

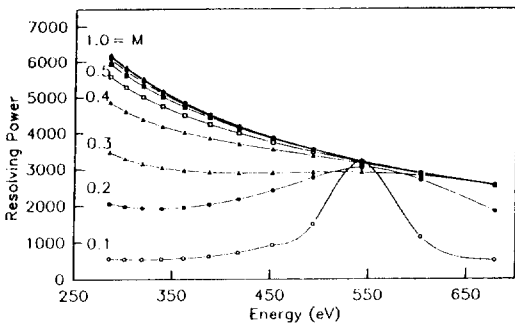


그림 10. VFM의 배율에 따른 분해능의 변화.

여기서 배율이 0.3인 경우 고른 분해능 분포를 보여주고 있는데 이 경우 광량도 배율이 0.5일 때 보다 크기 때문에 더욱 좋은 결과를 가져올 것이라 생각한다. 이에 대한 연구와 더불어 slit의 폭의 변화로 인한 효과도 같이 연구되어야 할 것이다.

III. 결 론

에너지가 300~1200 eV인 soft X-ray 영역의 beam line monochromator의 설계는 분해능과 광량을 동시에 적정수준이 되도록 고려하여야 하며 이에 있어서 다음과 같은 점을 고려하여야 한다. 고에너지 영역에서 반사율이 낮고 HFM 거울길이에 따라 광량을 최대를 하는 입사각이 반비례하기 때문에 일정길이에 대하여 grazing incidence angle을 작게 하고, HFM을 광원에 가까이 설치하여야 한다. VFM과 entrance slit 사이의 거리는 광량과 분해능을 고려하여 결정하여야 하지만 대체로 0.3~0.5의 배율을 갖는 것이 좋고 0.3의 배율이 분해능과 광량을 최적으로 할 수 있을 것으로 기대된다. Grating의 입사각은 클수록 분해능을 좋게 하지만 반사율을 떨어

뜨리고 또 groove density가 증가하여 제작상 난점을 가지게 됨으로 입사각은 87° 근처가 적당하리라 생각된다. 한편 ray-tracing 결과 entrance slit을 통과하는 광량은 거울의 길이에 단순히 비례하지 않고 일정한 적정값이 존재하며, 광원 전체 입사광량의 대략 0.3~1%의 광량이 주어진 조건에서 통과하고 있다. 따라서 거울의 반사율(HFM 60%, VFM 90%, grating 50%)을 고려하면 입사광량의 0.08~0.27%의 광량을 얻을 수 있을 것으로 기대된다.

감사의 글

본 연구는 미국 BNL의 NSLS의 UV-ring에 설치되어 있는 U-4B Beamline과 설치중에 있는 U-13 Beamline을 모델로 하여 포함 방사광 가속기의 source parameter에 따른 결과이다. 이에 BNL의 Steven L. Hulbert와 Bell Lab의 C. T. Chen에 감사드린다. 본 논문은 1990년도 연세대학교 학술연구비에 의하여 연구된 것이다.

참 고 문 헌

- [1] J. A. R. Samson, *Techniques of Vacuum Ultraviolet Spectroscopy* (Wiley, New York, 1967).
- [2] J. B. West and H. A. Padmore, *Optical Engineering* (Handbook on Synchrotron radiation, Vol. 2, 1987).
- [3] Margaritondo, *Introduction to Synchrotron Radiation* (Oxford University Press, 1988).
- [4] C. T. Chen, *Nucl. Instr. and Meth.* **A256**, 595 (1987).
- [5] H. Haber, *J. Opt. Soc. Am.* **40**, 153 (1950).
- [6] H. G. Beutler, *J. Opt. Soc. Am.* **35**, 311 (1945).
- [7] W. T. Welford, *Geometrical Opticals* (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1962).
- [8] A. G. Michette, *Optical Systems for Soft X-rays* (Plenum Press, New York, 1986).
- [9] M. R. Howells, *Nucl. Instru. and Meth.* **177**, 127 (1980).
- [10] C. T. Chen, E. W. Plummer and M. R. Howells, *Nucl. Instru. and Meth.* **222**, 103 (1984).
- [11] B. L. Henke et al., *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **27**, 1 (1982).

Optical Design of Soft X-ray Region Monochromator

Myeon-Chang Seung, Won-Kook Choi, Chung-Nam Whang and Kwangho Jeong

Department of Physics, Yonsei University

Yeoung-Sik Kim

Department of Physics, Dankook University

(Received: November 27, 1991)

We describe the design of a soft X-ray grating monochromator for synchrotron radiation in the photon energy range 300~1200 eV. We investigate the optimum condition in optical parameters of CEM (cylindrical element monochromator), whose performance is well known by Dragon beam line installed recently at Brookhaven National Laboratory by C. T. Chen, fitting the parameter of PLS (Pohang Light Source) storage ring construction.