

出國報告（出國類別：實習）

澳洲核能科學與技術組織中子技術研習 出國報告

服務機關：國家原子能科技研究院

姓名職稱：董曉明 副研究員

派赴國家/地區：澳洲/雪梨

出國期間：112年8月17日~112年10月27日

報告日期：113年1月11日

摘要

在澳洲核能科學與技術組織 (Australian Nuclear Science and Technology Organisation, ANSTO) 的實習期間，我主要的學習目標是掌握關於冷中子三軸散射儀建置的核心知識與人力資源規劃。ANSTO 自 1987 年成立以來，一直是澳洲核能科技應用研究的專業中心。該機構目前經營著包括 20MW 開放式水池研究反應爐 OPAL 在內的兩座核反應爐，提供從學術研究到產業應用的廣泛服務。

實習的重點是 SIKA 冷中子三軸散射儀，這是一項中子束量身設計的先進設施，專門用來測量樣品中原子的集體運動和磁矩。SIKA 儀器的主要組件包括主光譜儀、樣品位置設置以及次級光譜儀，其設計和材料選擇是基於儀器科學家的具體需求。此次實習深刻體會到，建置中子科學站是一項複雜工作，不僅需要跨學科的知識，還需要團隊合作來完成建設和日常運營。

從技術性的角度來看，SIKA 儀器的設計反映了在中子散射實驗設計中的多個關鍵因素。例如，主光譜儀的設計必須精確控制中子束的入射方向和能量，而次級光譜儀則必須能夠準確地檢測和分析樣品反射或散射後的中子。中子束的設計與應用涉及了對材料的深入理解，包括對中子的吸收和散射特性，這對於確保實驗結果的準確性至關重要。進一步地說，整個系統的組裝和運作需要考慮到精確的工程學和物理學原理，例如對於中子束的精確準直和測量以及對實驗環境的嚴格控制。此次實習的經驗不僅提高了專業知識，也增進了對於實驗物理學背後複雜而特殊設計的理解。

基於此次實習，國原院在中子技術發展上，可考慮加強國際合作和交流，以提升本院研究能力和基礎建設。重點可放在人才培養上，包括建立中子科學相關的工作坊，提供實際操作經驗，以及後續運轉維護的技術交流。此外，本院也可考慮通過國際合作項目和專業研討會來促進學術交流和技術合作，從而提升本院在國際核能科學領域的能見度和影響力。

Abstract

During the internship at the Australian Nuclear Science and Technology Organisation (ANSTO), the primary learning objectives were centered around acquiring expertise in the construction and human resource planning of cold neutron triple-axis spectrometers. ANSTO, established in 1987, has been recognized as Australia's center of excellence for the application of nuclear science and technology research. The organization operates two nuclear reactors, including the OPAL, a 20MW open pool research reactor that provides services ranging from academic research to industrial applications.

The focus was placed on the exchange of design and construction experiences concerning the SIKA cold neutron triple-axis spectrometer, a facility designed for the neutron beam, enabling the measurement of collective atomic movements and magnetic moments in samples. The SIKA instrument consists of primary and secondary spectrometers and a sample positioning setup, with its design and materials being selected based on the requirements of the instrument scientists. It was learned through the internship that the establishment of neutron science stations is a multifaceted endeavor, demanding not only interdisciplinary knowledge but also the collaborative efforts of teams to accomplish construction and operational tasks.

From the technical vantage point, the SIKA instrument's design was seen to embody numerous pivotal considerations in neutron scattering experiment design. The primary spectrometer is required to control the neutron beam's incident direction and energy with precision, whereas the secondary spectrometer is tasked with the accurate detection and analysis of neutrons that are reflected or scattered from the sample. The design and application of the neutron beam necessitate a profound understanding of material characteristics, such as the absorption and scattering of neutrons, essential for the precision of experimental outcomes. Additionally, the precise engineering and physical principles must be adhered to in the assembly and functioning of the system, which includes the meticulous collimation and measurement of the neutron beam and the stringent management of the experimental setting. The internship experience not only augmented professional knowledge but also fostered a deeper appreciation for the intricate and sophisticated design inherent in experimental physics.

Based on the internship experience, it is recommended for the institute to strengthen international collaboration and exchange in neutron technology development, aiming to enhance the institute's research capabilities and infrastructure. The focus should be on talent development, including the establishment of workshops related to neutron science, providing practical operational experience, and technical exchange for ongoing operations and

maintenance. Additionally, the institute should consider fostering academic and technical cooperation through international collaborative projects and professional symposia, thereby improving its visibility and influence in the international nuclear science field.

目 次

摘 要

(頁碼)

一、目 的	1
二、過 程	2
三、心 得	3
四、建 議 事 項.....	30
致 謝	31
參 考 文 獻	32

表 目 錄

(頁碼)

表 1：中子的性質	4
表 2：Wavelength, frequency, velocity and energy relationships for neutrons.	7

圖目錄

(頁碼)

- 圖 1：二維表示的倒易空間，顯示了 Ewald 圓和彈性散射和非彈性散射的向量表示。在這裡， G 是倒易晶格向量， q 是第一布里淵區內的動量轉移。..... 8
- 圖 2：非彈性散射的向量圖，分為(a)中子能量損失 ($k_f < k_i$) 和(b)中子能量增加 ($k_f > k_i$)。0 代表倒易空間的原點， G 是倒易晶格向量， q 是布里淵區的動量轉移。..... 9
- 圖 3：SIKA 冷中子三軸散射儀結構示意圖.....11
- 圖 4：SIKA 在不同最終能量下可存取的動量和能量轉移範圍^[1]..... 16
- 圖 5：SIKA 從平面、垂直、水平以及雙重聚焦配置中的單色中子束在其可存取的能量範圍內的強度和增益因子^[1]。..... 17
- 圖 6：SIKA 上典型的多功模式：(a) 標準平面分析器模式；(b) 點對點聚焦模式；(c) 多-Q 恆定- E_f 模式；(d) 恆定- Q_{\perp} 能量色散模式；(e) 修正標準平面刀片模式；(f) 修正標準模式的極端案例^[1]。..... 20
- 圖 7：(a) 在多-Q 恆定- E_f 模式下，SIKA PSD 的每根線上獲得的偵測器計數；這些線被分組成 9 個沒有串擾的獨立通道；在 Pb 中沿著縱向 (b) 和橫向 (c) 方向使用多-Q 恆定- E_f 模式測量的聲子色散^[1]。..... 22

圖 8：(a) 在修改標準模式下，對於每個刀片在優化的刀片角度上，PSD 上觀察到的 Ni 粉末樣品的非相干信號；插圖顯示了 PSD 上每個刀片通道的強度。(b) 在圖 6(f)所示的模式中，對於每個刀片在 PSD 上觀察到的 Ni 粉末樣品的非相干信號；插圖顯示了 PSD 上每個通道的強度。(c) 在單晶鉛中測量的能量掃描，紅色曲線是被照射線的信號總和，而紅色曲線下的其他曲線對應於 PSD 不同通道的信號^[1]。..... 24

圖 9：不同入射能量和準直條件下的能量分辨率^[1]..... 25

圖 10：從 PrFeO₃ 粉末樣品進行能量掃描以測量晶場激發^[1]..... 27

圖 11：(a) 在 TAIPAN 上進行的 3 和 6 meV 的恆定-E 掃描；(b) 在 SIKA 上進行的 3 和 6 meV 的恆定-E 掃描；(c) 在 NdFeO₃ 中觀察到的接近(101)的磁性激發強度的偽彩色映射，顯示出約 3.5 meV 的自旋能隙（插圖也請參見）^[1]。..... 28

圖 12：SnSe 中近(020)區域[q00]方向的橫向聲子色散偽彩色映射，虛線為觀察指引^[1]。..... 28

一、目的

此行為前往在澳洲雪梨的澳洲核能科學與技術組織(Australian Nuclear Science and Technology Organisation, ANSTO)進行實習，實習目的是多方面的，與提升中子科學領域的知識和專業技能密切相關，特別是專注於冷中子三軸光譜儀的運作機制和人力資源動態。這種先進的儀器在探測材料的原子級基本性質方面起著關鍵作用，是當代材料科學研究中不可或缺的工具。目標是深入了解冷中子三軸光譜儀的基本原則，並全面理解這種複雜科學設備的建構、設計和操作規範的複雜性。冷中子三軸散射儀(SIKA)是一項先進的設施，能夠測量樣品中原子的集體運動和磁矩，這對於理解材料的性質（如磁性和超導性）至關重要。實習經驗包括了解主光譜儀組件、樣品定位和次級光譜儀的知識，所有這些都是為了滿足研究人員和科學家在研究的特定需求而量身定制的。

二、過 程

112 年 08 月 17 日~08 月 18 日 往程（台灣桃園－澳洲雪梨）

08 月 19 日~10 月 25 日 冷中子散射儀建造與技術實習

10 月 26 日~10 月 27 日 返程（澳洲雪梨－台灣桃園）

三、心得

(一) 澳洲核能科學與技術組織(ANSTO)簡介

澳洲核能科學與技術組織是澳洲的國家核能組織，也是澳洲核能專業的中心。它是澳大利亞政府於 1987 年成立的法定機構，取代了澳大利亞原子能委員會。ANSTO 是澳洲最重要的研究地標和國家基礎設施的所在地。ANSTO 的任務目標有五項：(1)支持國內外核能及相關領域的政策和計畫的發展和實施；(2)運營基於核子科學和技術的設施，可應用於產業和澳洲及國際研究社群；(3)進行研究，推進核子科學和技術的應用；(4)應用核子科學、技術和專業知識，解決澳洲的環境挑戰，提高澳洲產業的競爭力；(5)製造和推進核醫藥物的使用，以改善澳洲人民的健康狀況。

ANSTO 目前有兩座核反應爐：HIFAR 和來自阿根廷公司 INVAP 的 The Open-pool Australian lightwater reactor (OPAL)。HIFAR 於 2007 年 1 月 30 日永久關閉。OPAL 於 2006 年 11 月投入運營，並於 2007 年 4 月 20 日正式開放。OPAL 是一座 20 百萬瓦(MW)的開放式水池研究用反應爐。在 ANSTO 的布拉格研究所設有 OPAL 的中子散射設施。它現在作為一個用戶使用的設施，為澳洲和世界各地的科學界提供服務。每年有來自工業和學術界的成千上萬名科學家從中，能夠使用先進儀器並進行相關學術研究與產業應用。

(二) 國內中子技術應用推廣

為了賦予國內學術與研究機構頂尖的中子實驗平台，行政院科學委員會委由國立中央大學負責在 ANSTO 建造一台先進的冷中子三軸散射儀—SIKA。在 SIKA 試運行成功後，同步輻射中心受國科會的指派，接手其日常運作與維護工作，支援國內研究群組赴澳洲 ANSTO 進行中子實驗設施進行研究，同時負責培養使用者、推動中子應用研究。並使本國與國際學者得以執行前沿中子科學研究，通過國際合作及參與全球中子研究組織，預期能顯著提升台灣的中子科學研究能量。

(三) 中子性質與散射原理簡介

(1) 中子概述

中子是一種理想的探測物質的工具。它首先在 1932 年被發現，四年後就證實了中子可以發生固態的布拉格散射。早期的實驗者因為鐳-鈹源的低通量而困難重重，

但仍建立了中子繞射的基礎。隨後費米和他的同事在 1942 年建造出第一個“原子爐”，開啟了中子研究的新紀元。後來的反應爐產生的中子越來越多，1960 和 1970 年代興建的高通量反應爐產生足夠多的中子，使得非彈性散射的研究成為可能。現在中子散射已廣泛被認為是研究物質的最重要和多用途的工具之一。這項技術的重要性在 1994 年被諾貝爾物理獎的頒發給麻省理工學院的 C. Shull 教授和麥克馬斯特大學的 B. Brockhouse 教授表彰他們在彈性和非彈性中子散射領域的貢獻而得到確認。三軸散射儀可能是中子譜學中最重要儀器，它由 B. Brockhouse 在 1961 年發明，能精確控制量測散射函數 $S(Q, \omega)$ 在動量($\hbar Q$)和能量($\hbar\omega$)空間的任意點的值。(此處 ω 是頻率 ν 的 2π 倍， \hbar 是普朗克常數除以 2π 。)

中子的一些性質如表 1 所示。中子的質量接近質子，這個相對較大的質量對中子研究有重要意義。高能中子可以通過和氫或氘等質量相近的原子碰撞而被減速或調節。減速後的中子能量分布符合馬克士威分布，平均速度由調節介質的溫度決定。帶進的一個結果是“熱中子”的大質量，即在接近室溫被緩速的中子具有適當的能量範圍 (1 - 100 meV) 來研究固體和液體中的各種動力學現象。

表 1：中子的性質

Quantity	Value
Rest mass, m_n	1.675×10^{-24} g
Spin	$\frac{1}{2}$
Magnetic moment, μ_n	1.913 nuclear magnetons, μ_N
Charge	0

中子的零淨電荷意味著它可以深入樣品而幾乎不與物質交互作用，這是中子的獨特優勢。更重要的是，零電荷也意味著中子直接與原子核交互作用，不受電子雲的影響。儘管中子與原子核之間的交互作用理論還不完整，但已知它是非常短程的($\sim 10^{-13}$ cm)，遠小於熱中子的波長，因此這交互作用可視為點狀的。結果是，中子-核散射僅包含 s 波部分，意味著散射是各向同性的，可以用單一的散射長度 b 來描述。元素的散射長度值通常在 1×10^{-12} cm 左右，與核半徑相當。(單個核的散射截面等於 $4\pi b^2$ 。)

散射長度可以是複數；但是虛部只在核共振附近才顯著。對多數元素而言，在熱中子能量範圍內散射長度基本上是與能量無關。

與電子和 X 射線相反，散射不取決於電子的數量，其強度在不同元素和同一元素的不同同位素之間略有隨機變化。此外，由於樣品中的散射強度相等於各個原子的散射強度之和，這一結果簡化了測量結果的解釋。

雖然中子沒有淨電荷，但其夸克(quarks)和膠子(glutons)的內部結構賦予了中子一個磁矩。列在表 1 中的中子的磁矩與未配對的電子自旋相互作用，與核相互作用的強度相當。因此，中子是固體磁性特性的強大探針，並對我們對磁性的理解做出了巨大的貢獻。對於有磁矩的磁性原子，其有效磁性散射長度 p 為：

$$p = 0.27 \times 10^{-12} \times n_{\mu_B} \text{ cm}$$

這個常數是電子古典半徑的一半，乘以中子的旋磁比(gyromagnetic ratio)。對於 $n_{\mu_B} \geq 1$ ，顯然 p 與 b 值相當，換句話說，與磁效應相關的散射強度與核散射強度相當。藉由每個中子的自旋角動量為 $\pm \frac{1}{2}\hbar$ 的中子，我們可以製備單一自旋態的中子束，無論是自旋向上 ($+\frac{1}{2}\hbar$) 還是自旋向下 ($-\frac{1}{2}\hbar$)。這些自旋極化的中子可用來測定磁結構，區分核散射和磁性散射，以及從總散射(total scattering)分別出非相干散射(incoherent scattering)。

(2) 中子的來源

散射實驗使用的中子可以來自核反應爐或散裂源。反應爐中中子來自 ^{235}U 的裂變，而散裂源中中子是通過高能質子轟擊重靶（例如 U、W、Ta、Pb 或 Hg）而產生的。在前者的情況下，中子在時間上連續地產生，而在後者中，它們通常以脈衝的形式出現。目前高通量反應爐的持續通量可達每秒 $10^{15}/\text{cm}^2$ 個中子。第一個為中子束研究優化的高通量光束反應爐(High Flux Beam Reactor, HFBR)是位於 Brookhaven 國家實驗室，它在 1965 年開始運行。雖然它已停止運轉，但其設計代表了大多數高通量反應爐。在這種設施中，反應爐及其輔助設備和實驗設施都包含在直徑約 50 米的密封建築物內，為要防止放射性物質洩漏到環境，並作為最終屏障。反應爐運行期間，建築物內的空氣壓力略低於外部大氣壓，以確保任何洩漏是向內而不是向外的。進入該建築的方法是通過一系列氣閘。

新的中子設施通常具有一個或兩個“冷源”。冷源是一種特殊的調節劑，通常使用低溫的液氫或甲烷，可以使馬克士威分布的中子峰值移至更低能量。通常會有有數條冷中子束的輸出，為了分離這些中子束，以達到能容納多個儀器與後續使用，必須藉由將中子在稍微發散的路徑上傳輸很長距離而進入“導管大廳”(guide hall)，進而達到分離的作用。例如在 ILL 的高通量反應爐總共有超過 40 個為用戶服務的實驗設施。

在脈衝來源中，中子約以 10^{14} 中子/(cm²-sec)的密度產生，脈衝寬度初約為 1 微秒，頻率為 10-50 Hz。一般而言，現有脈衝源的被緩速(被調節)中子在單位時間下之通量平均值遠小於穩態反應爐源。但在脈衝模式下之不連續時間的結構補償了較低的平均通量。

反應爐源和脈衝源的能譜略有不同。但無論哪種源，中子都必須調節以將有效中子溫度降低至接近室溫。在反應爐中，中子通量表現出等向性行為，大致符合特徵溫度為 350 K 的馬克士威速度分布。“熱中子”的有用能量範圍通常為 5-100 meV；來自低溫調節劑的“冷中子”約在 0.1-10 meV。在熱中子能量範圍內只有相對較小的過渡區(> 100 meV)貢獻，這有利於獲得低背景。相比之下，散裂源的能譜中過渡區中子較多，脈衝源可以有效利用這部分中子。反應爐也可以通過“熱源”提供這個更高能量範圍的有用通量；例如在 Institute Laue-Langevin (ILL)的熱源是一塊能加熱到 2400 K 的石墨。

脈衝中子束非常適合時間飛行技術(time of flight, TOF)。在某類設計的光譜儀中，入射中子通過一個或多個截波器(chopper)，然後通過檢測中子到達檢測器的時間來確定散射中子的能量。使用位置敏感檢測器陣列，可以同時大範圍的測量能量和動量的傳遞。在反應爐中，通常通過布拉格繞射光學來選擇中子能量。用彎曲單色儀將中子聚焦到樣品上，這在研究小範圍 ω -Q 空間的實驗中具有優勢。

所有繞射和散射實驗都遵循動量和能量守恆定律：

$$\begin{aligned} \mathbf{Q} &= \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i \text{ (動量守恆)} \\ |\mathbf{Q}| &= k_i^2 + k_f^2 - 2k_i k_f \cos \theta_s \\ \hbar\omega &= E_i - E_f \text{ (能量守恆)}. \end{aligned}$$

此處波向量量 $k = 2\pi/\lambda$ ， λ 是中子波長， Q 是傳遞到樣品晶體的動量；下標 i 和 f 分別對應入射和繞射束；入射和繞射束之間的角為 $2\theta_s$ ，傳遞到樣品的能量為 $\hbar\omega$ 。

由於中子有有限質量，其散度關係(dispersion relationship)為：

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n}$$

$$E[\text{meV}] = 2.072k^2[\text{\AA}^{-2}],$$

這裡 m_n 是中子質量。因此能量守恆定律可以寫為

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2m_n} (k_i^2 - k_f^2)$$

我們通常用 meV 單位為能量單位或等效於 E/h 以太赫茲 ($\text{THz} = 10^{12} \text{ Hz}$) 表示。

表 2 列出了中子在不同單位的能量關係及其在 10 meV 的值。

表 2：Wavelength, frequency, velocity and energy relationships for neutrons.

Quantity	Relationship	Value at $E = 10\text{meV}$
Energy	$[\text{meV}] = 2.072k^2 [\text{\AA}^{-2}]$	10meV
Wavelength	$\lambda[\text{\AA}] = 9.044/\sqrt{E[\text{meV}]}$	2.86\AA
Wave vector	$k [\text{\AA}^{-1}] = 2\pi/\lambda[\text{\AA}]$	2.20\AA^{-1}
Frequency	$\nu[\text{THz}] = 0.2418E[\text{meV}]$	2.418THz
Velocity	$\nu[\text{ km/s}] = 0.6302k [\text{\AA}^{-1}]$	1.38 km/s
Wavenumber	$\nu[\text{ cm}^{-1}] = \nu[\text{ Hz}]/(2.998 \times 10^{10} \text{ cm/s})$	80.65 cm^{-1}
Temperature	$T[\text{ K}] = 11.605E[\text{meV}]$	116.05 K

在任何散射實驗中，我們總是測量入射束(k_i)和繞射束(k_f)的性質，並通過上述公式推斷傳遞給樣品的動量和能量。由於熱中子的能量與固態中的許多激發過程的能量相當，能量解析度只需達到 10%即可獲得有用的結果，這相對容易實現。但是，這與使用 X 光或電子進行的散射實驗有很大的不同，特別是當考慮到 X 光的高能量 ($\sim 10 \text{ keV}$) 時，其精確度要求可能達到 $\Delta E/E$ 的 10^{-7} 。

(3) 彈性散射

首先考慮晶體中的彈性散射，即 $|\mathbf{k}_i| = |\mathbf{k}_f| = k$ 。為了理解繞射和散射測量，必須討論晶體的倒易晶格(reciprocal lattice)。圖 1 中的點代表二維晶體的倒易晶格，每一點對應一個倒易晶格向量。如果我們在該圖上畫一個圓，使其穿過圓上的兩點，其中一點是倒易空間的原點，那麼滿足晶體布拉格散射的條件。這個圓稱為艾瓦爾德(Ewald)圓(二維)或艾瓦爾德球(三維)。在圖中， \mathbf{k}_i 是入射束相對晶體的方向， \mathbf{k}_f 是繞射束的方向。對於滿足布拉格條件的情況：

$$\mathbf{Q} = \mathbf{G} = \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i$$

其中 \mathbf{G} 是倒易晶格向量。根據圖 1.5 和方程式 1.3，

$$|\mathbf{Q}| = |\mathbf{G}| = 2|\mathbf{k}_i|\sin\theta_s$$

這就是著名的布拉格定律，也可以用更為熟悉的形式

$$\lambda = 2d\sin\theta_s$$

注意到倒易晶格向量的大小 $|\mathbf{G}| = 2\pi/d$ ，此處 d 是晶面間距。在繞射實驗中，通過調整 \mathbf{k}_i 和 \mathbf{k}_f 之間的夾角 $2\theta_s$ 來控制 \mathbf{Q} 的大小。藉由旋轉樣品，來取得在倒易晶格內 \mathbf{Q} 的方向。因此，通過適當選擇 \mathbf{k}_i 、 $2\theta_s$ 和樣品相對於 \mathbf{k}_i 的角度 ψ ，可以測量倒易空間中的任意點。

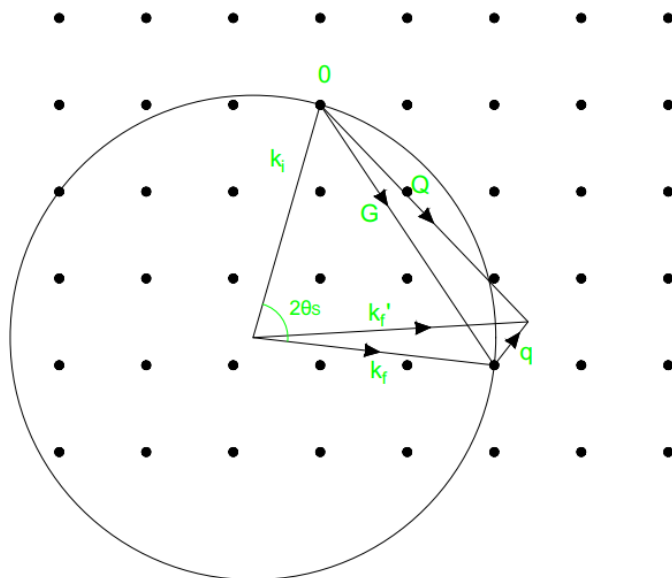


圖 1：二維表示的倒易空間，顯示了 Ewald 圓和彈性散射和非彈性散射的向量表示。在這裡， \mathbf{G} 是倒易晶格向量， \mathbf{q} 是第一布里淵區內的動量轉移。

(4) 非彈性散射

對於非彈性中子散射，情況更為複雜。在這種情況下， $|\mathbf{k}_i| \neq |\mathbf{k}_f|$ ，因為需要一個差異量(\mathbf{q})來描述能量轉移到樣品。在一個實驗中，一個波向量 (k_i 或 k_f) 保持恆定，而另一個則變化。對於單晶樣品，能量只取決於在布里淵區(Brillouin zone)內定義的相對動量 $\hbar\mathbf{q}$ ；因此，最方便的是將動量轉移到最近的倒格子向量，即，

$$\mathbf{Q} = \mathbf{G} + \mathbf{q}$$

如圖 2 所示。如果 \mathbf{Q} 保持恆定，當能量轉移變化時，可以直接解釋測量的光譜。圖 2 顯示了兩種情況，其中 k_i 保持恆定， k_f 變化。在第一種情況下 [Fig. 2(a)]，當 $k_i > k_f$ 和 $\hbar\omega > 0$ 時，能量從入射中子轉移到樣品，並產生一個激發；這等同於光學光譜中的斯托克斯散射(Stokes scattering)。在第二個例子 [Fig. 2(b)] 中， $k_i < k_f$ 和 $\hbar\omega < 0$ ，因此樣品釋放了一個量子的能量到中子束中，一個激發被消滅，我們有中子能量的增加（或反斯托克斯散射）。

為了保持 \mathbf{Q} 和 \mathbf{q} 不變，當變化 k_f 時，散射角度也必須變化，以及晶體對於 k_i 的相對取向。圖 2 中的示意圖顯示了晶格隨著 k_i 移動，而在實際情況中，情況剛好相反： k_i 在空間中保持固定，而晶體旋轉。

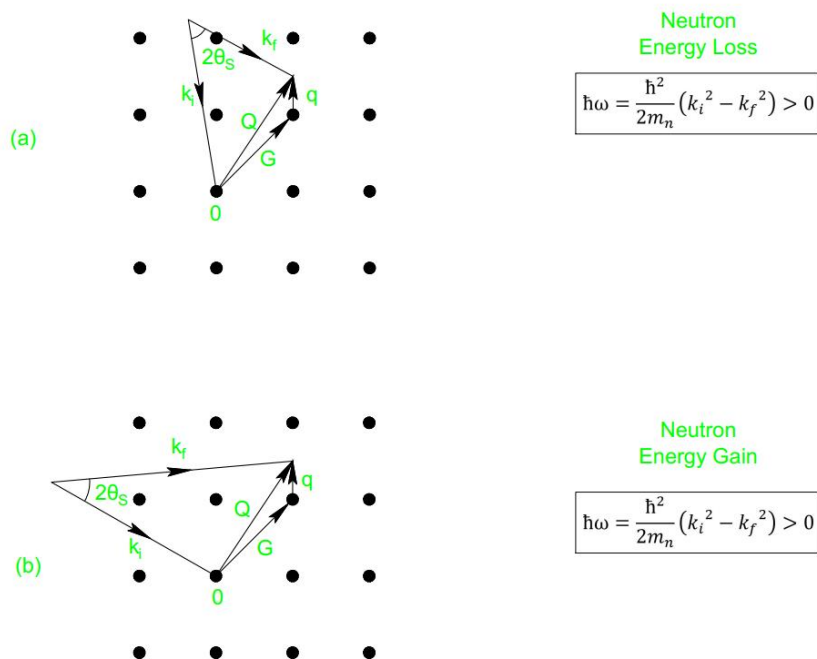


圖 2：非彈性散射的向量圖，分為(a)中子能量損失 ($k_f < k_i$) 和(b)中子能量增加 ($k_f > k_i$)。0 代表倒易空間的原點， \mathbf{G} 是倒易晶格向量， \mathbf{q} 是布里淵區的動量轉移。

(5) 時間飛行技術(Time of Flight, TOF)

飛行時間技術最早在 1935 年被引入，用於執行與能量相關的中子測量。雖然這技術在過去 50 年中已有所演進，其核心原理仍然沒變。使用 TOF 方法，我們會釋放一連串不同能量的中子，並量測從釋放到達偵測器的時間。中子在與樣品作用後，會有能量的變化，這導致其速度的改變，使得其到達的時間有所變化。如果中子源為反應爐，則使用一個或多個截波器(Chopper)來定義初始脈衝的時間 t_0 。

(四) 冷中子三軸散射儀

三軸散射儀是非彈性散射中最通用和有用的儀器，因為它可以精確控制探測在空間中的任何坐標的動量和能量。所謂“三軸”分別對應單色儀、樣品和分析儀的旋轉軸。單色儀定義入射束的方向和動量大小，分析儀執行繞射束或最終束的方向與能量等類似功能。

(1) SIKA 設計前之預備工作

SIKA 冷中子三軸散射儀(以下簡稱 SIKA)，是接在位於 OPAL 中子束廳 (Neutron Beam Hall, NBH)內部的冷導管 (Cold Guide No. 4, CG4)，以作為冷中子源的出口。該設備的需求是由儀器科學家(Instrument Scientist)所提出的，對於儀器科學家的要求，應能

- (a) 與專案計畫主持人合作進行討論，確保
 - 工程設計能滿足設計條件及使用者的需求；
 - 檢查確定的效能需求的合適性及可達成性；
 - 發現問題並建議解決方法；
- (b) 幫助找出特定元件或裝置的可能供應商以加速採購程序；
- (c) 將預算管理的職責和權力分配給待設計和購買的項目；
- (d) 與專案領隊共同確定首選的儀器採購策略，其中包含所需的資源和時間表。SIKA 是專為 CG4 冷中子束設計，具有先進的非彈性散射功能，能測量樣品中原子的集體動作 (phonons) 和它們的磁矩 (magnons)。

(2) SIKA 整體性概述

SIKA 儀器主要包括：主要光譜儀(Primary Spectrometer)、樣品位置(Sample

Stage)與次級光譜儀(Secondary Spectrometer)(圖 3)。各個部份可細分如下：

主要光譜儀(Primary Spectrometer)包括：

- 單色儀前置光學部分
- 單色儀的 Z 方向移動平台
- 單色儀後置光學部分
- 單色儀的屏蔽組件總成

樣品位置(Sample Stage)包括：

- 樣品的連接部位

次級光譜儀包括：

- 光譜儀腔體(Tank)連接部位
- 分析器的前端光學部分
- 分析儀器
- 分析器的後端光學部分
- 檢測器
- 輔助的屏蔽組件

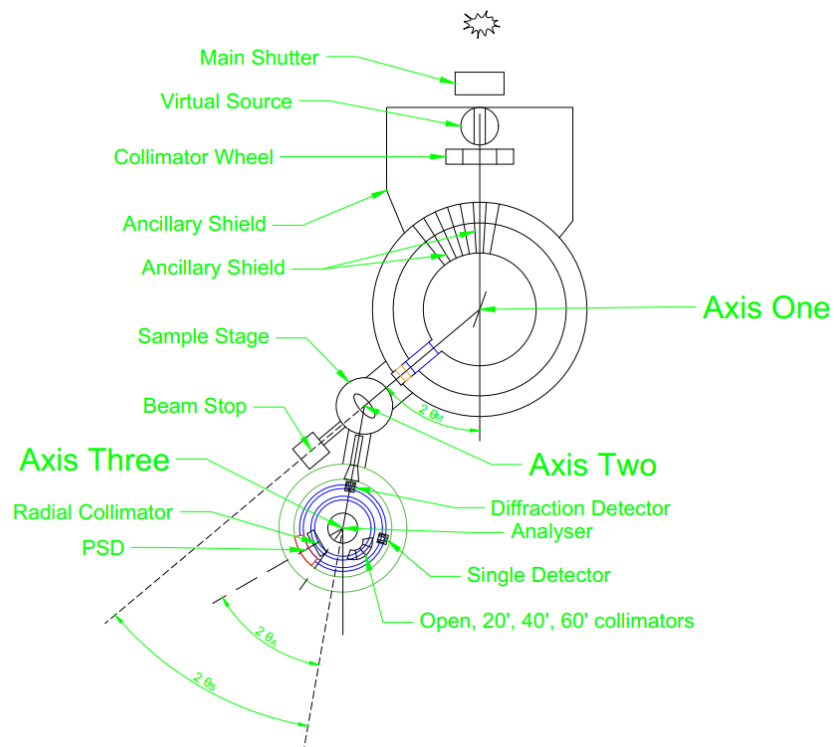


圖 3：SIKA 冷中子三軸散射儀結構示意圖

單色儀的前置光學部分位於反應器表面與和單色儀之間，藉由線性移動機構來移動。單色儀 Z 方向的移動平台位於屏蔽裝置內，包含兩個專用的聚焦單色儀（HOPG 002）裝置，該裝置能夠進行多方向調整，以達到科學家所需的精確位置。此外，單色儀與其 Z 方向移動平台的設計使得單色儀能夠輕鬆地從屏蔽裝置上部分離出來，並且可以精確地定位於單色儀位置。單色儀的後置光學部分配置在屏蔽裝置的前方。單色儀的屏蔽裝置是由特定的混合材料製成，並被放置在耐用的不銹鋼框架內，基座部分則使用了重型混凝土。主要的單色儀與輔助單色儀的屏蔽部分是為了 CG4 中子光束路徑設計的。這些單色儀屏蔽組件的設計與配置都必須與光束出口通道相對齊。

樣品台結構包含了頂部的傾斜台(χ 和 φ)、平移台(X 和 Y)、垂直移動台(Z)以及樣品旋轉台(ω)，主要是為了確保樣品能夠精確地與中子束進行對齊(alignment)。此外，它還具備了一個旋轉台 (2θ) 用於調整分析器(Analyzer)和偵測器(Detector)的位置。樣品台的這一設計特性使樣品可以在特殊環境下進行實驗，例如：使用複合式冷凍機、低溫爐和低溫磁鐵。

依據科學家的設計要求，樣品台和次級光譜儀（含分析儀和偵測器部分）均置於氣墊或氣墊滑板上，這樣做是為了正確地將樣品、分析儀和偵測器定位，並根據分析儀的位置確定中子與樣品間的能量傳遞。

樣品台和次級光譜儀的移動是在光潔的花崗岩地板（稱為 Dance Floor，意：一個平整的區域，儀器可在上面移動）上，並由氣墊或氣墊滑板支撐，這使得移動相對輕鬆。樣品台的連接臂確保單色儀與樣品間的距離保持在 2100 至 2300 mm 之間，並可以透過手動調整及特定夾具進行固定。分析儀和偵測組都安裝在旋轉桌上，位於次級光譜儀屏蔽組件內。樣品與分析儀的距離，以及分析儀與偵測器的距離，分別是 1350 mm 和 329-370 mm。

分析儀和偵測組都設有共同的輻射屏蔽，主要目的是在進行測量時，防護它們不受背景輻射的影響。為確保良好的輻射安全，在儀器四周設置防護牆，並加設警告標誌、出入控制以及確定限制區域。

(3) 施工材料

用於 SIKA 儀器建造的所有材料都是基於儀器科學家的要求。原則上所選的施工

材料都是非磁性的。像單色儀屏蔽部件的中子屏蔽材料是由遮蔽混合體製成，並包含超過 99% 的純度的鉛，並使用 300 系列的不銹鋼板、重型混凝土和聚乙烯塊來封裝。金屬部件是用鋁 6061 或不銹鋼 (304L 或 316L) 製成的。針對中子散射吸收，我們使用了 B_4C 。在儀器的組裝中使用的材料與他們可能接觸的輻射環境下相容。根據設計要求選擇的所有材料都具有足夠的強度。基於屏蔽功能，該 SIKA 儀器採用了鉛、重混凝土和屏蔽混合物；並由於其非磁性和強度特點，另外選用了鋁和 300 系列不銹鋼作為結構材料。

(4) 重要元件敘述

針對 SIKA 的光學元件，本報告內容僅就單色儀的前置與後置光學部分進行說明。

單色儀前置光學部分是為了 SIKA 儀器設計的，目的是創建一個虛擬源且減少快速中子的干擾，並且能進行第二階段的遮光(shutter)功能（除了在反應爐裡面的在主遮光組件），以便在單色儀晶體前對中子光束進行精確調整。

這組光學配置包括：

- 虛擬光源組件：第二快門組件這個虛擬光源組件是裝有裂縫的組件，由驅動器推動的直線模式設計，主要是用 10 mm 的 B_4C 和 170 mm 厚的特殊材料製成，目的是確定射向單色儀晶體的中子束的寬度。
- 第二道遮光組件：這個組件的目的是在需要的時候停止光束，以符合科學家的要求。該組件的開啟和關閉是透過電動驅動來實現的。
- 藍寶石過濾片：SIKA 儀器有 4 片光學級（或更高）的單晶藍寶石濾片，目的是要減少主光束中的快速中子干擾。這片藍寶石濾片被單色儀屏蔽組件所環繞，確保中子透過此一濾片，或是被周邊的均勻屏蔽組件所吸收
- 準直器組件：單色儀的前置光學部分包含一組光束準直的轉輪系統，可以根據科學家的要求調整至 20'、40'、60' 或 "全開(open)" 的輻射散度（註：1 度為 60'分， $1^\circ = 60'$ ）。

單色儀後置光學部分：單色儀後置準直組件、單色儀第三遮光組件、雷射引導組件、PG / Be 濾片、中子束監控裝置、中子束衰減器、單色儀後置狹縫組件。

- 單色儀後置準直組件：此組件可以調整 20'、40'、60' 和 "全開" 四種模式，這是

基於科學家的建議。設計要能夠允許手動將準直組件裝在準直基座的出口處，以便於根據需求調整準直方向，或讓光束不經準直器直接穿過。

- 單色儀第三遮光組件：此三級遮光器的主要功能是控制單色束流，並具有 "Fail Close" 自動關閉功能，以確保滿足科學家的安全規範。
- PG 濾片：這款 PG (熱解石墨) 濾片主要是用來過濾第二和第三的諧波，可以選擇於取樣前或後使用。每片晶體板的 C-軸都可以微調，使其與原始束流的角度誤差在 2 度之內。透過 X 軌道的設計，可以方便地安裝或拆除 PG 濾片。
- Be 濾片：主要是移除第二和第三的諧波，可選擇於取樣前或後使用。這款濾片特別適合傳輸冷中子。這是一塊由多晶鈹製成的濾片，透過 CCR (封閉循環冷卻) 技術冷卻到大約 40 K，以增進其一階穿透效能(first-order transmission)
- 中子束監控裝置：此光束監控器設置於取樣之前，作為計算中子的裝置。
- 單色儀後置狹縫組件：後單色儀狹縫組件置於 X-軌道上，儘量接近樣品位置。其縫隙由 5 mm 厚的 B₄C 製成。該組件需定位於光束中心高度內的 0.1 mm，並擁有獨立控制的上下和左右裂縫組。

(5) 建置時期的人力規劃

建置時期約略可分為三個時期，第一階段為概念設計，第二階段為採購與安裝，第三階段為試車。SIKA 大約花了 7 年左右時間，於 2012 年試車完成。其中概念設計最為重要，內涵包括模擬計算與驗證與工程概念設計。其中關鍵的專業人力為：模擬計算工程師、機械工程師、儀器科學家、電機工程師、電子工程師、軟體整合工程師與機械技師。

- 模擬計算工程師：中子靶站或儀器科學站之模擬設計與輻射防護計算。
- 機械工程師：該人員需與模擬驗證人員協同選擇材質規格，並進行靶站或儀器科學站繪圖、冷卻、與結構力學計算(有限元素法分析)，並把工程概念設計圖分解為可製作之工程圖。
- 儀器科學家：需要專精儀器，並選定材質並開出規格給機械工程師。
- 電機工程師：需能進行儀器控制(motion control)與電力系統配置 (大電)。
- 電子工程師：需要進行偵檢器數據擷取、電路、接線設計(弱電或小電)、通訊架

構，數據存儲建置管理(IT)。

- 軟體整合工程師：撰寫程式軟體整合儀器控制(電機工程師)與數據接收介面(電子工程師)，實現全自動化工作。
- 機械技師：現場專業技術人力需要有特定認證過的資格，如：車床、銲接、高處工作人員，起重機、堆高機、吊車(含吊掛) 等專業證照人員。

上面人員所需要的人員員額端看計畫規模大小。但上述說明僅為最小配置人力需求。該人員對於後續的運轉與維護，也是至關重要。

(五) 冷中子三軸散射儀的性能與表現

三軸散射儀是非彈性散射中最通用和有用的儀器，因為它可以精確控制探測在空間中的任何坐標的動量和能量。所謂“三軸”分別對應單色儀、樣品和分析儀的旋轉軸。單色儀定義入射束的方向和動量大小，分析儀執行繞射束或最終束的方向與能量等類似功能。SIKA 位於 CG4 端口，這裡正對著冷源，能在約 8 meV 提供最大的中子流量。不論是更高或更低的入射能量（如 26 meV 或 2.6 meV），中子的流量都會降至大約一半。接下來的部分將會詳細描述 SIKA 單色儀、樣品支架以及次級光譜儀的各項特性。

(1) 單色儀性能和 Q-E 範圍

SIKA 的 PG (002) 單色儀安裝在單色儀鼓的中心，直徑為 2.14 米，並配備有六個模塊化的屏蔽楔塊。這樣的設計使 SIKA 可以從單色儀鼓側面取得大角度範圍從 28.4° 到 120° 的能量，從而實現從 2.42 到 30 meV 的寬廣入射能量範圍，涵蓋了冷區和熱區的中子能量。利用 54 平方米的大樓板面積，SIKA 提供了大範圍的可變能量和 Q-E 範圍。可用的 Q 和能量轉移範圍顯示為 Q-E 圖在圖 2 中。

圖 4 是一個顯示 SIKA 儀器在不同最終能量 (E_f) 下，可達到的動量傳遞 (Q) 和能量傳遞 (E) 範圍的圖表。橫軸代表動量傳遞 (Q)，以倒埃 (\AA^{-1}) 為單位。動量傳遞是中子散射實驗中的一個關鍵變數，它與中子與樣品相互作用後方向的改變有關。縱軸代表能量傳遞 (E)，以毫電子伏特 (meV) 為單位。能量傳遞表示中子從樣品散射後的能量變化；正值表示中子獲得能量 (inelastic gain)，負值表示中子失去能量 (inelastic loss)。圖中顯示了三個閉合的迴路，每個迴路對應於 SIKA 儀器設定於不同最終能量 (E_f) 的情況。每條迴路是一條界限線，定義了在相應的 E_f 設定下，儀器

可以達到的 Q 和 E 的極限。

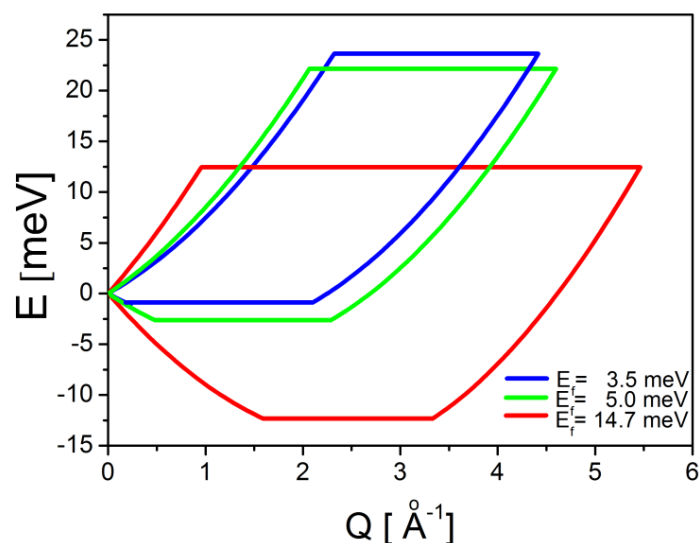


圖 4：SIKA 在不同最終能量下可存取的動量和能量轉移範圍^[1]

藍色迴路代表 E_f 為 3.5 meV。在這迴路內，SIKA 儀器可以探測來自該最終能量層次的樣品中動量和能量的變化。迴路擴展到略超過 $Q = 2 \text{ \AA}^{-1}$ ，包含的能量傳遞範圍大約在 -1.5 到 +1.5 meV 之間。綠色迴路代表 E_f 為 5.0 meV。這個迴路更大，表示在 5.0 meV 的 E_f 下，儀器可以接觸到更廣泛的動量和能量傳遞範圍。它覆蓋了更多的負能量傳遞（表示中子更多的能量損失），並擴展到近 $Q = 3 \text{ \AA}^{-1}$ 。紅色迴路代表 E_f 為 14.7 meV。這個迴路是最大的，顯示在這個最終能量層次下，儀器可以測量最大範圍的能量和動量傳遞。它拉伸到包括從大約 -10 meV 到 +20 meV 的能量傳遞，和動量傳遞高達 $Q = 5 \text{ \AA}^{-1}$ 。在中子散射實驗中，了解可達到的 Q 和 E 範圍對於規劃實驗和解釋數據至關重要。這些範圍決定了能夠提取關於樣品的哪些結構和動態信息。例如，較大的 Q 值與小尺度結構相關，而能量轉移可以提供有關樣品內部動態的信息，如振動或其他激發狀態。

SIKA 單色儀鼓被設計為可以在垂直配置中自動旋轉。PG 單色儀目前已經安裝，是由一個陣列 ($230 \times 252 \text{ mm}^2$) 的 11 (H) x 9 (V) PG 晶體 (厚度: 2 mm, 馬賽克性: 50') 構建的，帶有垂直和水平的聚焦機制。編碼器安裝在垂直和水平聚焦運動上以獲得精確的控制。

PG 單色儀的垂直和水平曲率可以根據入射能量來進行最優化聚焦條件自動控

制。聚焦窗口在樣品位置的測量基於一個 $20\text{ (W)} \times 30\text{ (H)}\text{ mm}^2$ 的樣品視窗。虛擬源寬度為 20 mm 。如圖 5 所示，增益因子在可用的能量範圍內約為 2.0。雙重聚焦提供了在樣品位置的通量增益，可以通過更寬的虛擬源進一步增加。使用全單色儀和 10 毫米虛擬源時，入射能量為 5.11 meV ，通量增益約為 $5.6 \times 10^6\text{ (n/cm}^2\text{/s)}$ 。與全單色儀相比，估計樣品位置的通量增加到大於 $5 \times 10^7\text{ (n/cm}^2\text{/s)}$ 。

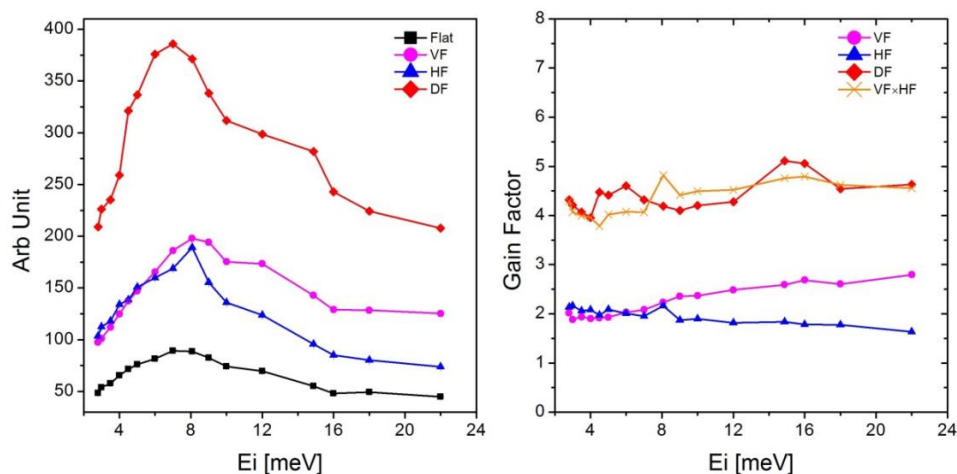


圖 5：SIKA 從平面、垂直、水平以及雙重聚焦配置中的單色中子束在其可存取的能量範圍內的強度和增益因子^[1]。

圖 5 展示了兩張圖表，分別顯示了 SIKA 儀器單色中子束在其可存取能量範圍內的特性。左側的圖表繪製了中子束強度作為初始能量 (E_i)，以毫電子伏特 (meV) 測量的函數。縱軸代表強度，用任意單位 (Arb Unit) 表示，這表示檢測到的中子數量或中子信號的強度。有四條曲線，每條代表單色儀的不同配置：

黑色（方形標記）：平面 (F) 配置

紫色（圓形標記）：垂直聚焦 (VF) 配置

藍色（三角形標記）：水平聚焦 (HF) 配置

紅色（菱形標記）：雙重聚焦 (DF) 配置

從圖表中，我們可以看到雙重聚焦配置（紅色）在大部分能量範圍內提供了最高的強度，尤其是在 8 meV 左右達到高峰。平面配置顯示了最低的強度，表明中子束的聚集效果較差。右側的圖表繪製了增益因子，同樣是作為初始能量 (E_i) 的函數。增益因子是相比於基線或參考條件中信號放大了多少的量。曲線對應於強度圖表中相

同的配置，其中，橙色（交叉標記）表示垂直與水平聚焦的乘積（VFxHF），這是一種計算出的組合，而非實際配置。所有配置的增益因子都大於一，顯示出聚焦比未聚焦或平面條件下增加了中子束的強度。雙重聚焦配置通常提供最高的增益，特別是在中等能量範圍內。有趣的是，VFxHF 曲線表明，結合垂直和水平聚焦的效果可能沒有雙重聚焦配置的增益因子高，這可能是由於不同聚焦效果之間的複雜相互作用。在圖 5 中，曲線的變化展示了如何根據不同的實驗需求（如在某些中子能量下需要更高的強度或特定的增益因子）優化不同的單色儀配置。以圖 5 中的數據為例，假設在進行一項需要在約 4 meV 的低初始能量進行測量的實驗。從圖中可以看出，在這個能量下，雙重聚焦（DF）配置（紅色曲線）提供了最高的中子束強度，這意味著更多的中子被檢測到，從而可能增加實驗的統計準確性。

(2) 樣品台及其環境設置

樣品台是通過一個直立的支臂與單色儀的角度相連接的，而且這個距離可以透過兩個水平方向的可伸展支臂來進行調整。樣品台擁有七個非磁性的 Huber™ 階梯裝置，能夠極為精確地控制 X-Y 軸的傾斜角度、X-Y-Z 軸的位移、樣品的旋轉角 (Ψ) 以及散射角 (s_2)。這個台階設計旨在能在樣品環境設備的輔助下，對樣品進行精確定位，可以承受最大 1.5 kN 的重量在有傾斜的台階上，以及達 6.5 kN 在無傾斜的台階上。整個樣品台裝設在氣墊上，使得在拋光過的花崗石地面上的移動既安全又輕鬆，幾乎不需要施加多少力氣。

一般而言，這些傾斜台階可以在 X 和 Y 軸上提供 $\pm 15^\circ$ 的調整範圍，調節精準度可達到 0.01° 。X、Y、Z（升降）台階則提供大約 ± 40 毫米的移動範圍，並在所有三個方向上保持 ± 0.02 毫米的高精度。樣品的旋轉角度和散射角 (s_2) 則可以在 $\pm 180^\circ$ 和 $\pm 120^\circ$ 範圍內調節，並且這些角度的調整精度同樣達到 0.01° 。樣品台設計原則上可兼容所有 ANSTO 提供的樣品環境設備。

(3) 次級光譜儀

SIKA 的次級光譜儀在設計上參照了位於 NIST 的 BT-7 次級光譜儀^[2]，它是一套集成了多功能分析及檢測的獨立系統。整個分析儀就設置在一個裝有氣墊的單元上。次級光譜儀擁有三組獨立的檢測系統，包含一個單一檢測器（SD）配備三個氦-3 管，

一個繞射檢測器（DD）也配備三個氦-3 管，以及一個 Ordelia 1348N 的直線型位置敏感檢測器（PSD）。這些檢測器各自裝設在可沿圓形軌道獨立移動的支架上。

SIKA 配置了一組水平聚焦的分析系統，由 13 塊高定向度的 PG 晶體組成，每塊晶體厚度為 2 毫米，馬賽克度為 50'，寬度為 20 毫米，高度為 150 毫米。這些分析器能夠在兩個方向上進行 $\pm 90^\circ$ 的自由旋轉，而整體的分析台還可以實現 $\pm 180^\circ$ 的轉動。在標準操作模式下，無論是配合 PSD 或 SD，都可以選擇使用水平聚焦或平面分析器。此外，SIKA 配備了三個用於分析前的 Söller 準直器（20'、40' 和 60'）以及四個用於 PSD 的徑向準直器（40' 和 80'），可在分析前和檢測前位置使用。憑藉這些部件，SIKA 能夠通過不同的準直器和檢測器配置來實現多種操作模式。下面會進一步探討這些不同的操作模式。

(4) 次級光譜儀的配置方式

採用 DD 檢測器的繞射分析模式：在 SIKA 的雙軸分析模式中，DD 檢測器位於預分析階段的準直器正後方。這個繞射模式的一大優勢在於，由於樣品到檢測器的距離較短，使得檢測到的信號強度較高。這種模式適合於探查低 Q 值範圍內的磁性特徵峰值，特別是當涉及到廣泛的人射波長時。

採用傳統的三軸分析模式：SIKA 提供的傳統三軸配置能夠利用分析器和單一檢測器 (SD) 來進行分析。在這種模式下，可以利用平面分析器和配備於分析器前後的準直器進行操作，從而增加檢測到的中子流量，而對整體的分辨率影響極小。

採用多重分析器操作模式：配備多刀片分析器和可變的檢測器選項，SIKA 提供了與 RITA 型分析器儀器相似的操作功能，如 BT-7^[2]、RITA-II^[3]、SPINS^[4]和 PANDA^[5]等。SIKA 上的所有分析器操作模式都是由電腦控制，可透過控制軟體由實驗者選擇和切換，唯獨更換準直器除外。Lefmann 等人^[6]討論了多重分析三軸光譜儀的靈活性。接下來的部分將詳細討論在 SIKA 上實施的幾種關鍵多重操作模式，圖 6 則示意性地展示了這些模式的基礎配置。

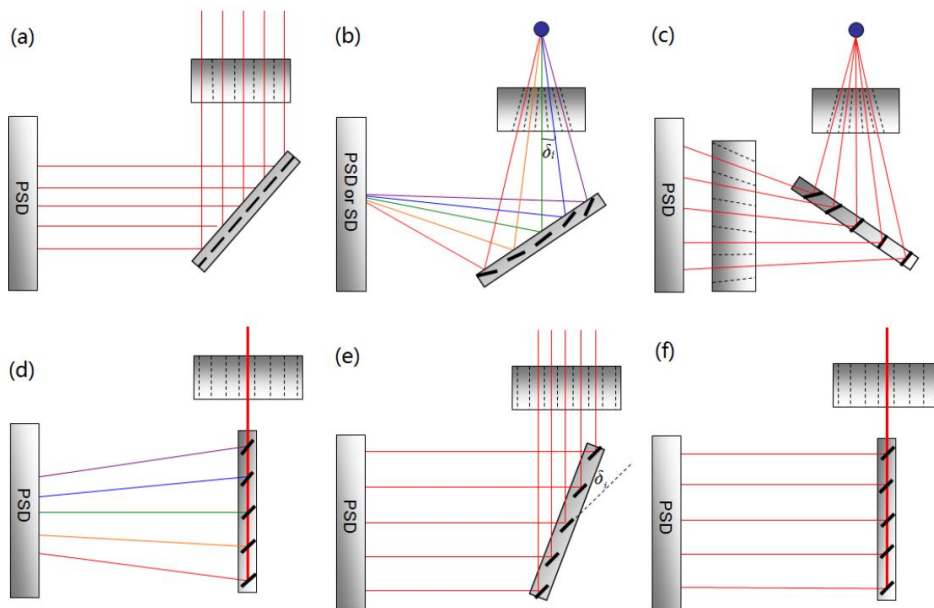


圖 6：SIKA 上典型的多功模式：(a) 標準平面分析器模式；(b) 點對點聚焦模式；(c) 多-Q 恆定- E_f 模式；(d) 恆定- Q_{\perp} 能量色散模式；(e) 修正標準平面刀片模式；(f) 修正標準模式的極端案例^[1]。

圖 6(a)展示了標準平面分析器模式的配置。在圖片的左側，PSD 被描繪為一個垂直的矩形。它探測中子在被樣品散射並由分析器反射後撞擊的位置。這個偵測器對撞擊位置敏感，允許對中子散射進行空間解析的測量。圖中心上方帶有對角線的灰色矩形代表分析器。這個組件在中子光譜學中扮演關鍵角色，它根據中子的波長以一定角度（布拉格角）反射中子。分析器的平面方向意味著它反射中子時不會聚焦它們，這與將中子集中在偵測器特定點的曲面分析器形成對比。紅色線條展示了中子通過儀器的路徑。

其中使用了 Söller 前樣品和後樣品準直器，所有刀片角度 χ_i (i 為刀片號) 都設定為零。分析器台角度位於二倍角 $\omega_A = (2\theta_A)/2$ 的二等分角位置，就像傳統的三軸散射儀(TAS)模式一樣。在樣品之前（前樣品）和樣品之後（後樣品）使用，用來定義中子束的發散度。在這個模式中，由於平面刀片的原因，中子能量和 Q 都是非色散的。與傳統的平面分析器 TAS 模式相比，這個模式保持了高能量和 Q 解析度的同時，也將檢測強度提高到了與水平聚焦分析器模式相媲美的水平。在這個模式下，可以通過提高分析器刀片數量來提高信噪(S/N)比。選擇平面分析器模式是為了特定的實驗需求，特別是當需要高中子強度而不犧牲分辨率時。

圖 6(b)顯示點對點聚焦模式（或稱為水平聚焦），這是傳統 TAS 中用於單色儀和

/或分析器的模式。樣品到分析器晶體再到偵測器的彩色線代表中子的路徑。每條線對應於具有特定散射角度和能量的中子。分析器晶體的位置使其能夠將這些中子反射到偵測器上。 δ_i 在分析器附近標示的符號，可能代表與分析器晶體相關的特定角度或調整。它可能表示反射中子與預期角度的偏差，或者是設置的一個可調參數，允許對儀器進行微調。在此模式中，必須在分析器前方放置徑向準直器。由於樣品-分析器和分析器-檢測器不同的距離，聚焦模式遵循不對稱反射幾何，所有刀片都必須位於 Rowland 圓上的不同角度，以便入射中子束被反射到檢測器的同一點。為了滿足這一條件，刀片角度和分析器台角度必須遵循以下公式：

$$\theta_A + \chi_i = \delta_i + \Psi$$

其中 θ_A 是每個刀片上的中子入射角， χ_i 是第 i 個刀片與分析器台之間的角度， δ_i 是散射中子束與第 i 個刀片之間的角度， Ψ 是分析器台角度。根據這個模式的幾何設計，分析器台角度由以下方程決定：

$$\sin(\Psi) = \frac{L_{SA} \sin(\theta(2\theta_A))}{\sqrt{L_{SA}^2 + L_{AD}^2 + 2L_{SA}L_{AD} \cos(2\theta_A)}}$$

其中 L_{SA} 是樣品到分析器的距離， L_{AD} 是從分析器到檢測器的距離。這種多工分析器的聚焦機制已由 Lefmann^[6]等人和 Broholm^[7]等人詳細討論。

圖 6(c)是多-Q 恆定- E_f 模式。在此操作模式中，中子由所有分析器刀片在相同的布拉格角 θ_A 下反射，但不是聚焦在單一檢測器上，而是反射到位置敏感偵測器(PSD，見圖 5(c))。為了區分不同的 Q 通道並避免相鄰檢測器通道之間的串擾，對於前/後分析器位置都需要徑向準直器。徑向前分析器準直器讓中子束中的不同射線以稍微不同的 s_2 角度通過。前檢測器準直器用於避免在檢測器上的串擾。每個分析器刀片必須設定在一定角度以保持相同的最終能量。每個刀片反射的中子被某些檢測器線圈作為單一信號通道收集。所有通道都對應於同一能量轉移的 Q 空間映射，即多 Q 常數-能量模式。此操作模式的分析器台旋轉角 (ψ) 是根據^[8]：

$$\cos \psi = \frac{r \sin(2\theta_A) \pm \sqrt{1 - r^2 + R^2 + 2R \cos(2\theta_A)}}{1 + R^2 + 2R \cos(2\theta_A)}$$

其中 $r = p_i/d_i$ ，是偵測器上截獲點之間的距離 p_i 與分析器刀片間距 d_i 的比值。(實際上這個比率對於所有刀片都不同，因為從樣品看分析器具有不對稱性)。對於 SIKA

的分析器， $d_i=20.5$ 毫米。 $R=L_{AD}/L_{SA}$ 是分析器-檢測器和樣品-分析器距離之間的比率。對於 PSD，入口處與分析器中心的距離 $L_{AD}=368$ 毫米。樣品-分析器距離 L_{SA} 固定在 1664 毫米，因此 $R=0.221$ 。由於水平聚焦模式，角度 δ_i 的偏差按以下方式給出（數學意義上的符號慣例）：

$$\tan \delta_i = \frac{d_i \sin \omega_A}{L_{AD} + d_i \cos \omega_A}$$

各別刀片的旋轉角 χ_i 是：

$$\chi_i = \theta_A - \omega_A + \delta_i$$

這種模式在 SIKA 上進行了系統測試。在此測試中，不是 13 個而是 9 個刀片被用於分析器，且兩個徑向準直器都是 80 度。圖 7(a)展示了在固定能量 8.07 meV 下的 Ni 粉末樣品的非相干散射信號。如圖 7(a)所示，每個刀片通道在 PSD 上形成一個單獨的峰，這些峰與相鄰通道明顯分離，表明沒有串擾。這些數據清楚地表明，SIKA 可以在此模式下運行。

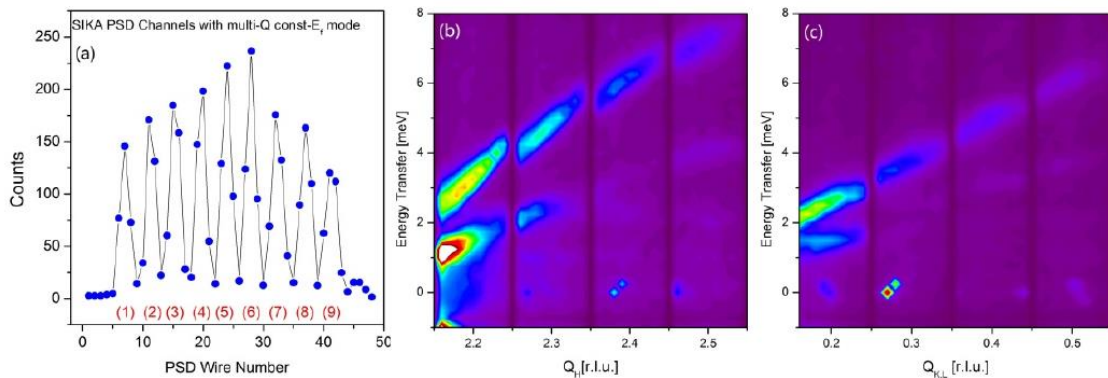


圖 7：(a) 在多-Q 恆定- E_f 模式下，SIKA PSD 的每根線上獲得的偵測器計數；這些線被分組成 9 個沒有串擾的獨立通道；在 Pb 中沿著縱向 (b) 和橫向 (c) 方向使用多-Q 恆定- E_f 模式測量的聲子色散^[1]。

圖 7(b)和 7(c)顯示了沿著縱向和橫向方向收集的 Pb 晶體聲子色散數據，使用這種多 Q 模式。在四個不同的 Q 點收集的數據顯示，多 Q 常數- E_f 模式在 SIKA 上是可行的，且無需串擾，數據演示了多通道操作的潛力。如圖 7(b)和 7(c)顯示，九個中央刀片相應的點通過使用 PSD 收集。實驗數據表明，除了中心的 q 值有一個垂直於中央 q 值的小分量外，在地圖上的每一個點都幾乎有相同的能量轉移。由於這個橫向分量，映射捕捉了從 0 到 2 meV 能量範圍內的橫向聲子分支。

圖 6(d)顯示恆定- $Q \perp E_f$ 色散模式。在此模式下，來自樣本的散射中子束穿過 Söller 預分析儀準直器。分析器階段與散射束平行對齊（即 $\psi=0$ ）而分析器刀片相對於中心刀片有一個小的偏移角（即， $\chi = \theta_A$ ， $\chi_i = \theta_A + i \Delta \theta$ ），這散射了最終能量以在 PSD 上擴展反射中子能量。葉片偏移角引起了色散的 E_f ，這擴大了能量解析度但增加了總強度。這種模式在某種方式上類似於能量聚焦分析器模式。然而，刀片的透明度可能會限制這種模式下的反射效率。單個刀片覆蓋的立體角在這種模式中相當小，這是實驗的另一個限制條件。這將在下面更詳細討論。

圖 6(e)顯示修正後標準平面刀片模式。此模式具有如上所述的優點。然而，一個典型的非彈性中子散射樣本尺寸通常比準直器寬度小。此外，取決於分析器晶體和實驗的最終能量，被中子照射區域在分析器上的通道中通常比準直器開口小。還有，每個分析器刀片之間有間隙以進行獨立旋轉。這些特點限制了標準平面分析器模式的優點。修正後的標準平面分析器模式在刀片處於為最終能量補償的角度時，更多刀片被中心的平行中子束照射，而且當選擇了優化的分析器台階角度時，刀片之間間隙被最小化。最後，圖 6(f)展示了極端案例的修正後標準平面分析器模式。很明顯刀片相互重疊，這減少了整個分析器的中子反射效率。因此，對於修正後的標準平面模式，找到一個優化的分析器台階角度以最大化信號強度至關重要。為了實現這一點，應該選擇一個特定的分析器台階角度，該角度允許更多的刀片被散射束覆蓋，但不要彼此重疊。有了這種配置，每個刀片的最大強度可以通過在 PSD 上旋轉每個刀片（所有其他刀片都設置為偏移位置）來找到。

圖 8(a)顯示了 SIKA 分析器的中心刀片通道在 PSD 上的最大強度。插圖顯示了每個刀片的旋轉掃描中強度是如何分佈的。如圖 8(a)所示，在 PSD 上的強度在刀片上顯示了一個合理定義良好的高斯分佈，這對於典型的 Söller 準直器來說是正常的。由於幾乎全部覆蓋了中子束，樣品收集的背景值可以通過精心選擇 PSD 上的線來保持較低背景值，以便做訊號強度積分。作為比較，我們測試了極端案例，如圖 8(b)所示。數據顯示，第一個刀片主要貢獻了觀察到的強度。從第二個刀片開始剩下的貢獻迅速降低。在第四個刀片之後，對於那些遠離中心的刀片，貢獻幾乎為零。考慮到散射中子束的覆蓋範圍僅限於單個刀片的寬度，這種模式的效率較低。由於圖 6(d)中的能量

色散模式具有類似的幾何配置，其數據收集效率也不高，儘管每個刀片的透明度略好。

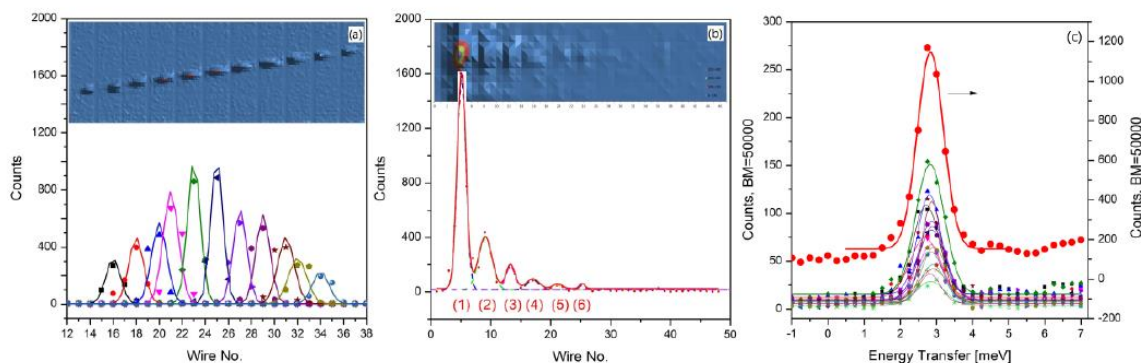


圖 8：(a) 在修改標準模式下，對於每個刀片在優化的刀片角度上，PSD 上觀察到的 Ni 粉末樣品的非相干信號；插圖顯示了 PSD 上每個刀片通道的強度。(b) 在圖 6(f)所示的模式中，對於每個刀片在 PSD 上觀察到的 Ni 粉末樣品的非相干信號；插圖顯示了 PSD 上每個通道的強度。(c) 在單晶鉛中測量的能量掃描，紅色曲線是被照射線的信號總和，而紅色曲線下的其他曲線對應於 PSD 不同通道的信號^[1]。

修正後的標準模式已被用來測量 Pb 晶體中的聲子激發。最終能量是 8.07 meV，使用 PG 濾鏡，而分析器台階角度設為 12 度，以便有更多的刀片被照射而不重疊。數據如圖 8(c)所示。紅色曲線顯示了在那個配置中被照射的 PSD 線的總信號。在約 2.7 meV 處可以看到一個強烈的峰值，超過 1000 計數。每根線上的信號繪製在紅色曲線下方，與傳統 TAS 模式中 SD 上的計數相當。從這個比較來看，這個配置中獲得的強度比來自 SD 管的強度要高得多。這些數據清楚地表明，修正後的標準模式可能有其優勢。

(5) 高階過濾器與準直器

作為一台現代化的三軸散射儀 (TAS)，SIKA 提供了多種實驗所需的準直選項。它擁有 4 種預單色準直器、5 種預樣品準直器、7 種預分析器準直器和 3 種預探測器準直器。這四種預單色準直器 (20'、40'、60' 及開放式) 已安裝在可通過馬達控制轉換準直器的準直器選擇輪內。預分析器準直器可以是 Söller 準直器或徑向準直器，具體取決於分析器配置。對於 PSD，可選擇兩種後分析器徑向準直器 (40' 和 80') 來抑制鄰近分析器刀片之間的串擾。在典型的冷中子能量 $E_f = 5.11 \text{ meV}$ ($K_f = 1.57 \text{ \AA}^{-1}$) 下，能達到 $156 \mu\text{eV}$ (FWHM) 的能量分辨率，並且配合標準的全 60' 準直配置。在

相同的 K_f 下，最佳能量分辨率可透過全 20' 準直提升至 $86 \mu\text{eV}$ 。圖 9 展示了通過測量金屬鈮樣品的非彈性散射，使用不同準直配置下的入射能量對彈性線的能量分辨率。藍色線條與方形標記代表 "20-60-20-60" 準直配置獲得的 FWHM 值。數字越小表示準直越緊。更嚴格的準直通常會導致更好的解析度，但強度較低。紅色線條與圓形標記顯示 "60-60-60-60" 準直配置的 FWHM 值，這表明是一種較不嚴格的準直設置。這通常會允許更高的強度，但代價是較低的解析度。此圖顯示，隨著入射能量的增加，兩種準直設置的 FWHM 也會增加，這是預期的，因為更高能量的中子本質上會有更廣泛的能量擴散（解析度較低）。然而，這種增加的速率對於兩種準直配置是不同的，"20-60-20-60" 設置顯示出 FWHM 的增加較為平緩，與 "60-60-60-60" 設置相比。準直的選擇將取決於特定實驗的要求，平衡解析度與強度的需求。

若要去掉高階散射超過 5.2 meV ，可以在散射側使用 170 mm 厚的多晶鈹 (Be) 濾波器作為低能帶通濾波器。Be 濾波器封裝在超高真空室內，並可以在約 45 K 的溫度下提供超過 87% 的冷中子傳輸率。對未來更低的恆定 E_f 模式，正在考慮使用 BeO 濾波器。有兩種不同大小 (2 cm 和 3 cm 厚) 的 PG 濾波器可用於特定能量範圍，以抑制高階中子。

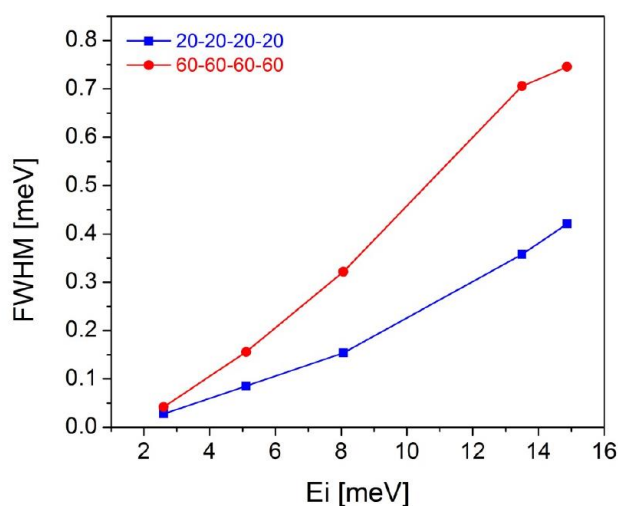


圖 9：不同入射能量和準直條件下的能量分辨率^[1]

(6) SIKA 控制與分析軟體

SIKA 使用的是 SIKA 光譜儀儀器控制環境 (SIKA-SPICE) 作為儀器控制軟體，該軟體是基於 LabVIEW 平台開發，源自於橡樹嶺國家實驗室的 SPICE 軟體。與 SPICE 不同，SIKA-SPICE 是建立在客戶端-伺服器架構上，每個客戶端都可以通過儀器網絡與伺服器進行通信，以控制和查看 SIKA。在此配置中，伺服器是一台強大的電腦，用以與運動控制、安全聯鎖系統和數據採集系統通信，並通過乙太網管理數據存儲。客戶端則是工作站，實現用戶界面和顯示儀器狀態，快速瀏覽和擬合數據。在客戶端，用戶能夠發送指令、編輯宏、模擬掃描、檢查儀器狀態及分析數據。

(7) SIKA 上測量的科學實例

(i) PrFeO_3 粉末的晶場激發

SIKA 進行的第一個非彈性中子散射實驗是測量稀土正石鐵礦 PrFeO_3 的晶場激發。 PrFeO_3 是一種由鐳 (Pr)，鐵 (Fe) 和氧 (O) 元素組成的化合物。它屬於稀土金屬氧化物，具有一定的磁性和電性質。這種化合物在材料科學和固態電子學中具有重要的應用價值，例如在磁性材料、電子器件和能源轉換領域中有廣泛的應用。這種材料因 Fe^{3+} 在遠高於室溫的 Néel 溫度的長程磁性排序而呈現反鐵磁性。在低溫時， Pr^{3+} 的磁性質特徵變得更加明顯。這個樣品的有趣之處在於 Pr^{3+} 在低溫時的晶場激發。我們在 SIKA 上測量了 PrFeO_3 的晶場激發之一。 PrFeO_3 粉末樣品被裝入內徑 18 毫米、外徑 20 毫米的雙層鋁樣品罐中，並用底部裝載式低溫爐冷卻至 5 K。在一個恆定的最終能量 $E_f=5 \text{ meV}$ 下，觀察到如圖 10 所示的非彈性中子散射結果。圖 10 顯示約位於 0 meV 中心，主要特徵是一個非常尖銳且明顯的峰，這對應於中心彈性峰。這是零能量轉移點，此時中子發生了彈性散射，沒有獲得或失去能量。這種彈性散射是中子散射實驗中的典型特徵。在中心峰的右側，約在 2 meV 處可見一個小的、強度較低的峰，這是研究的焦點。這個次要峰表示發生了非彈性散射事件，其中中子與晶場的相互作用而獲得或失去了能量，導致晶體結構的激發。這與之前報導的 Pr^{3+} 在此材料中的晶場激發數據一致。這種精確的激發測量對於理解所研究材料的電子和磁性特性至關重要。

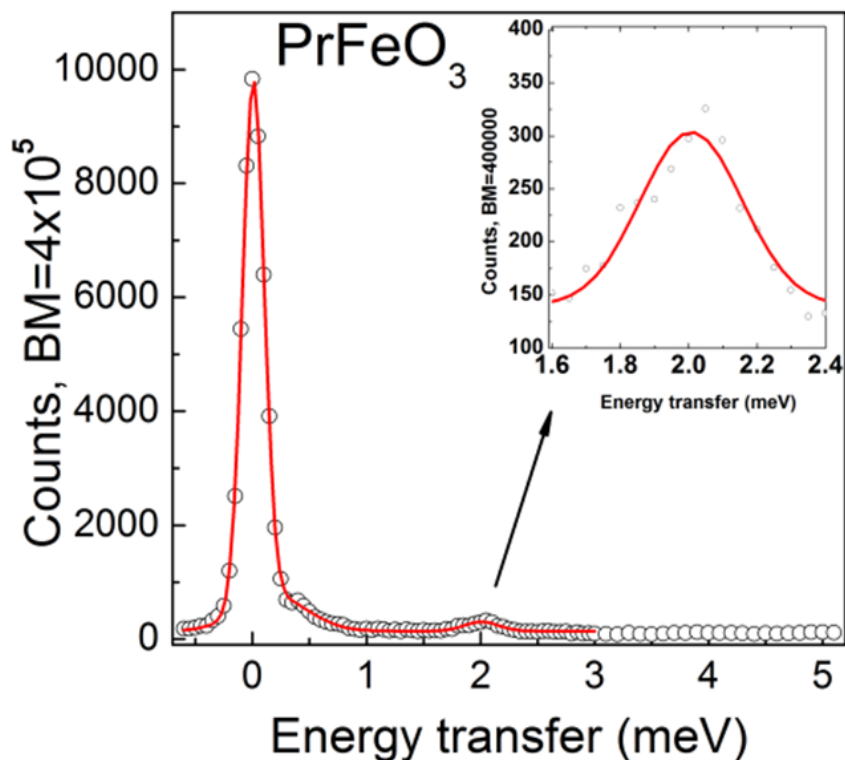


圖 10：從 PrFeO_3 粉末樣品進行能量掃描以測量晶場激發^[1]

(ii) NdFeO_3 中的自旋間隙

NdFeO_3 是另一種正石鐵礦。之前已經在 ANSTO 的熱三軸譜儀 TAIPAN 上測量了 Fe^{3+} 亞晶格的自旋波。當晶體冷卻至 100 K 以下時，反鐵磁區中心會出現自旋間隙（見圖 11(a)）。然而，由於能量分辨率的限制，在低能量範圍使用熱中子進行固定能量掃描時，區中心總會有額外的信號，這讓人們對自旋間隙是否完全開放感到疑惑。同一晶體在 SIKA 上以一個固定的 $E_f=8.07 \text{ meV}$ 進行測量，結果顯示在圖 11(b) 中的自旋間隙至少大於 3 meV，因為在 3 meV 的能量傳遞中掃描是完全平坦的。圖 11(c) 是在低能量範圍內自旋波的映射。色彩尺度代表中子散射的強度，較暖的顏色（紅色和黃色）表示較高的強度。這種圖用於可視化自旋波的色散關係，顯示激發能量如何隨著 Q 變化。間隙作為散射的缺失（較冷的顏色）被觀察到，介於低能量的聲學自旋波和更高能量的光學自旋波之間，這是反鐵磁材料的典型特徵。隨著能量傳遞的增加，自旋波的擴大可以清楚看見。自旋間隙約為 3.5 meV。

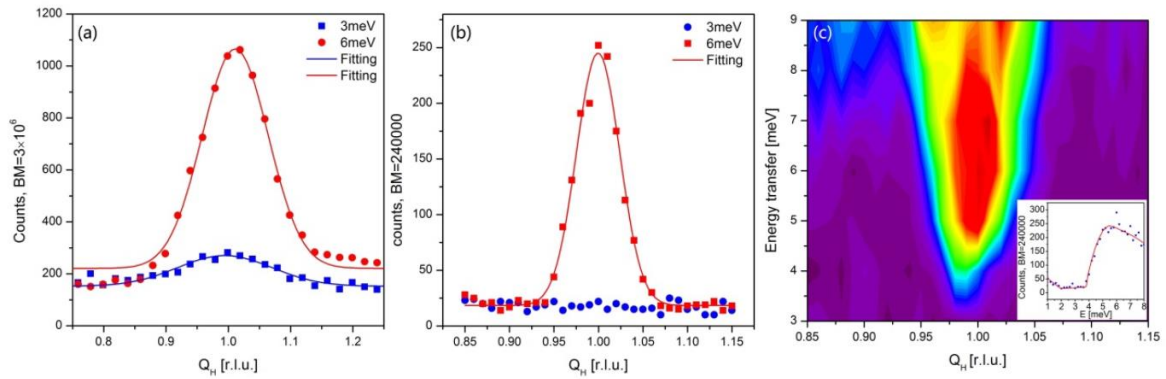


圖 11：(a) 在 TAIPAN 上進行的 3 和 6 meV 的恆定-E 掃描；(b) 在 SIKA 上進行的 3 和 6 meV 的恆定-E 掃描；(c) 在 NdFeO₃ 中觀察到的接近(101)的磁性激發強度的偽彩色映射，顯示出約 3.5 meV 的自旋能隙（插圖也請參見）^[1]。

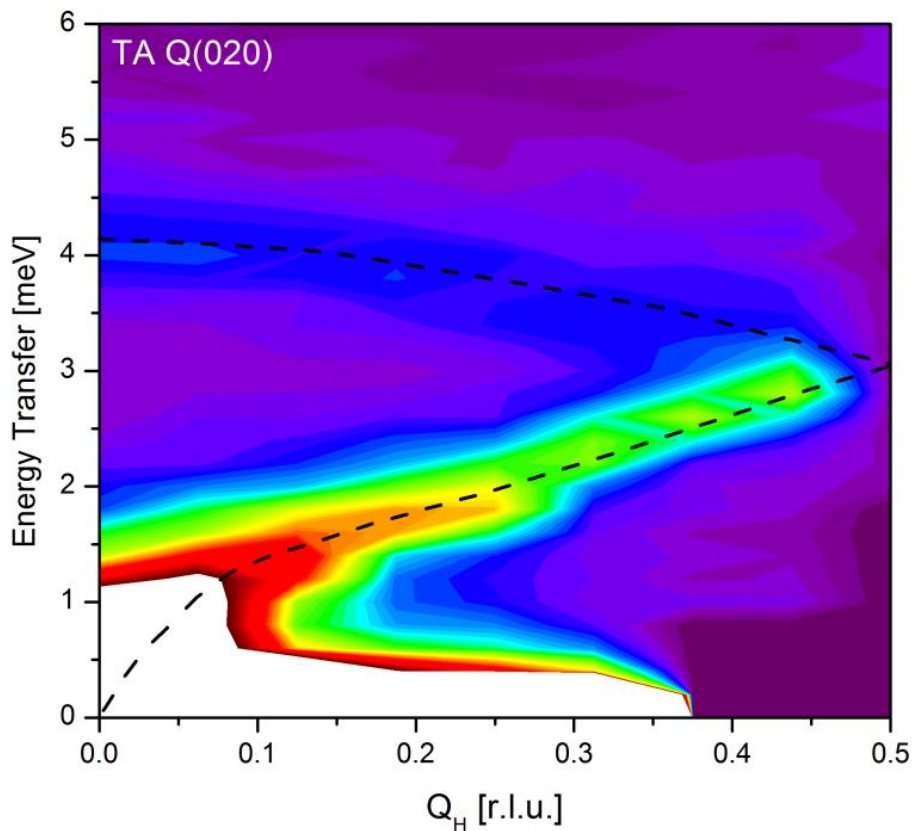


圖 12：SnSe 中近(020)區域[q00]方向的橫向聲子色散偽彩色映射，虛線為觀察指引^[1]。

(iii) SnSe 單晶中的軟聲子模式(Soft phonon mode)

熱電材料是一類半導體材料，能將熱能（熱）轉換為電能（電力）。良好的熱電材料需要具有高電導性但低熱導性。最近，SnSe 因在特定晶體方向上達到創紀錄的良好特性而被報導，人們認為這歸因於其在電和熱傳導性質上的顯著各向異性，尤其是非常低的晶格熱導率。在 SIKA 上測量了一個大的 SnSe 單晶，最終能量 $E_f=8.07$ meV。圖 12 展示了 SnSe 材料中沿 $[q00]$ 方向接近(020)倒易晶格區的橫向聲子色散的偽彩色映射。偽彩色映射（False-colour mapping）是一種圖像處理技術，其中將圖像的一部分或某些特性轉換成在原始影像中不存在的顏色，以突顯某些細節或用於分析。透過顏色的變化，可以更容易地區分和解釋數據中的趨勢和模式。圖 12 顯示 a 軸附近區中心的橫向聲子模式相對於其他方向和類似材料而言是軟的。如圖 12 所示，沿這個方向的聲子和光子聲子分支(the acoustic and optic phonon branches)很清晰。聲子帶的頂部只有約 3 meV，與沿其他方向的值相比非常低（此處未顯示）。這可能是 SnSe 高熱電性能的原因之一。最近發表的有關 SnSe 的研究工作在(100)方向上呈現了聲子色散，與我們在圖 12 中的結果非常吻合。("Soft phonon mode"指的是在固態物理學中，一種隨著溫度變化或某些外部條件變化而其頻率趨於零的聲子模式。這種聲子模式通常與晶體結構的相變過程相關，特別是與結構相變相關，如鐵電相變。當聲子模式變軟，即其頻率降低時，相應的晶體振動模式變得非常容易激發，導致晶體結構的動態不穩定性，這可能引發晶體結構的變化或相變。在許多情況下，軟聲子模式被視為相變的前兆。)

四、建議事項

鑒於這次出國實習，對於我國在 70MeV 迴旋加速器所衍生出來之中子的應用，相當有助益。此交流經驗甚為寶貴，對於本次實習提出建議如下：

(一) 強化中子科學的國際合作及交流

建議本院積極尋求與 ANSTO 等國際核能科學組織的合作，特別是在中子科學和技術方面。透過建立長期合作機制，本院研究人員可以參與 ANSTO 等機構的實習和研究項目，從而獲得寶貴的國際經驗和專業知識。此外，本院亦可考慮與具有中子源設施機構共同舉辦國際研討會和工作坊，以促進學術交流和技術合作。透過這些活動，本院研究人員將有機會與國際在中子領域頂尖的專家建立聯繫，並學習先進的中子科學技術。這將有助於提升本院在國際核能科學應用領域的能見度和影響力。

(二) 提升本土中子科學的研究能力與基礎設施

建議本院重視本土中子科學研究的發展，並投資相關的基礎設施建設。包括建立和升級中子散射實驗設施，如中子源、散射儀器和相關的輔助系統。這樣的投資不僅將提高本院在這一領域的研究能力，也有助於培養具有專業技能的科研人才。與此同時，本院可推廣此一技術，強化與工業界的合作，將中子科學技術推廣並應用於材料科學、生物學、醫學等領域，推動科技創新和經濟發展。

(三) 加強中子科學教育和人才培養

因中子科學實屬高度專業性的研究與技術，為使技術人才不至於斷層，建議本院需考量與大學合作，培育下一代年輕人投入此領域。這可以通過建立與中子科學相關的課程，提供研究生實際操作和研究機會來實現。與此同時，中子科學站並非一人能以設計與建造而完成，需要不同領域的專家進行團隊合作，需為中子科學家和工程師提供進一步的訓練機會，例如，提供訓練進修機會或線上教育資源，以提升整體人力素質。

致 謝

本次能成功出國實習，除了感謝本院院長、所長等人員的鼎力支持外，也需特別感謝國家同步輻射中心中子小組不遺餘力進行出國協助與實習實際內容的提點與建議。

參 考 文 獻

- [1] C.-M. Wu et al., SIKA—the multiplexing cold-neutron triple-axis spectrometer at ANSTO, *J. Instrum.* 11 (2016) P10009.
- [2] J.W. Lynn et al., Double-Focusing Thermal Triple-Axis Spectrometer at the NCNR, *J. Res. Nat. Inst. Stand. Technol.* 117 (2012) 61.
- [3] S.N. Klausen, K. Lefmann, D.F. McMorrow, F. Altorfer, S. Janssen and M. Lithy, Simulations and experiments on RITA-2 at PSI, *Appl. Phys. A* 74 (2002) 1508.
- [4] <http://www.ncnr.nist.gov/instruments/spins/>.
- [5] A. Schneidewind and P. Čermák, PANDA: Cold three axes spectrometer, *J. Large-Scale Res. Facil.* 1 (2015) A12.
- [6] K. Lefmann et al., Added flexibility in triple axis spectrometers: the two RITAs at Risø, *Physica B* 283 (2000) 343.
- [7] C. Broholm, Proposal for a doubly focusing cold neutron spectrometer at NIST, *Nucl. Instrum. Meth. A* 369 (1996) 169.
- [8] S.M. Shapiro and N.J. Chesser, Characteristics of pyrolytic graphite as an analyzer and higher order filter in neutron scattering experiments, *Nucl. Instrum. Meth.* 101 (1972) 183.