

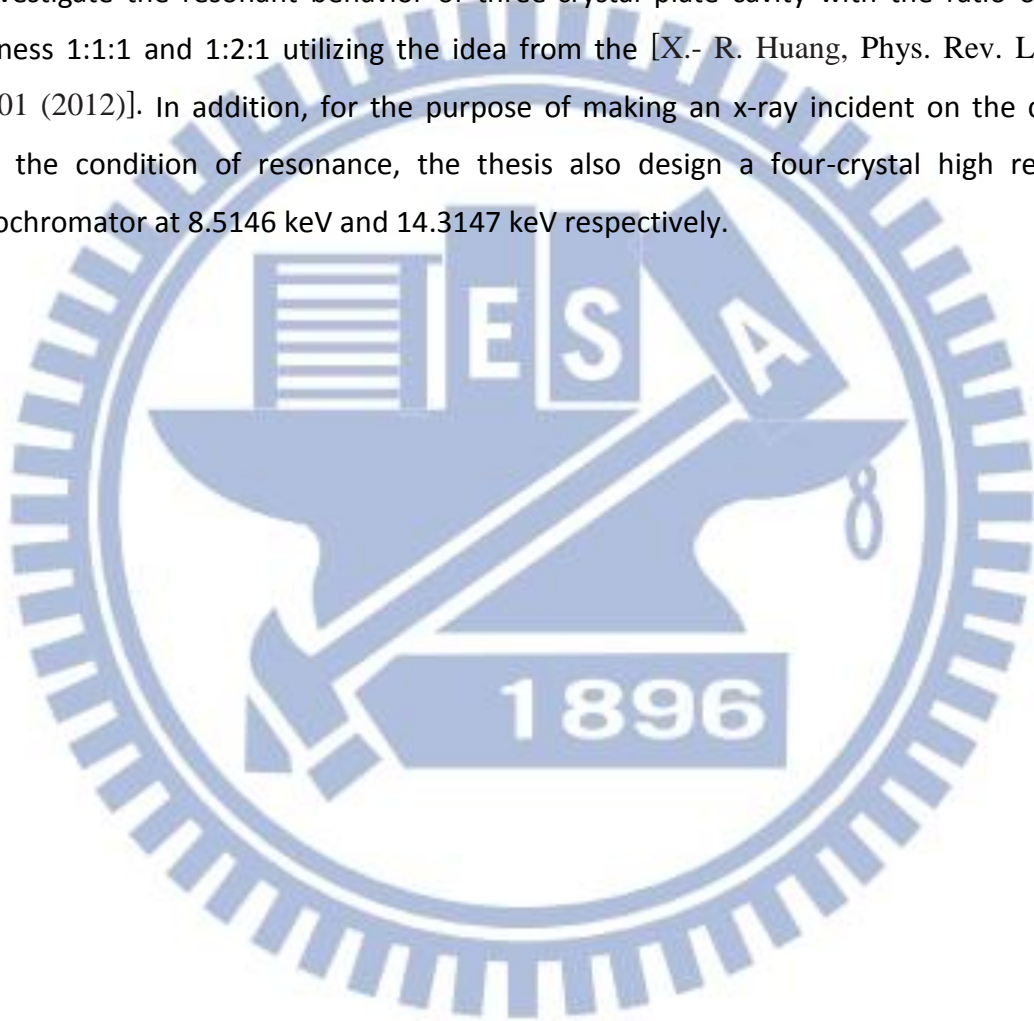
摘要

本論文主要是利用理論模擬的方式，使用 Yu. P. Stetsko 博士所寫的程式設計以藍寶石和矽晶體為材料的 X 光複合式共振腔系統，分為兩個部分：其一是將兩組 Fabry-Perot 共振腔透過適當晶體厚度與間距選擇結合在一起，可同時達到高 finesse[1]與高穿透率的目標；另一則是利用文獻[Phys. Rev. Lett. 108, 224801 (2012)]的想法，探討三片式共振腔晶體厚度比例為 1:1:1 與 1:2:1 的共振行為。另外為了使入射共振腔的光滿足共振條件，本論文也設計了能量分別在 8.5146keV 以及 14.3147keV 時的高解析度四晶單光儀。



Abstract

This thesis mainly uses the theoretical simulation, given by Stetsko, to design high performance X-ray multiple cavities of silicon and sapphire. There are two ways to reach the goal : One is to combine two Fabry-Perot cavities with appropriate crystal thickness and gap, so that the cavities have high finesse[1] and high transmissivity simultaneously; the other is to investigate the resonant behavior of three-crystal plate cavity with the ratio of crystal thickness 1:1:1 and 1:2:1 utilizing the idea from the [X.- R. Huang, Phys. Rev. Lett. 108, 224801 (2012)]. In addition, for the purpose of making an x-ray incident on the cavity to fulfill the condition of resonance, the thesis also design a four-crystal high resolution monochromator at 8.5146 keV and 14.3147 keV respectively.



致謝

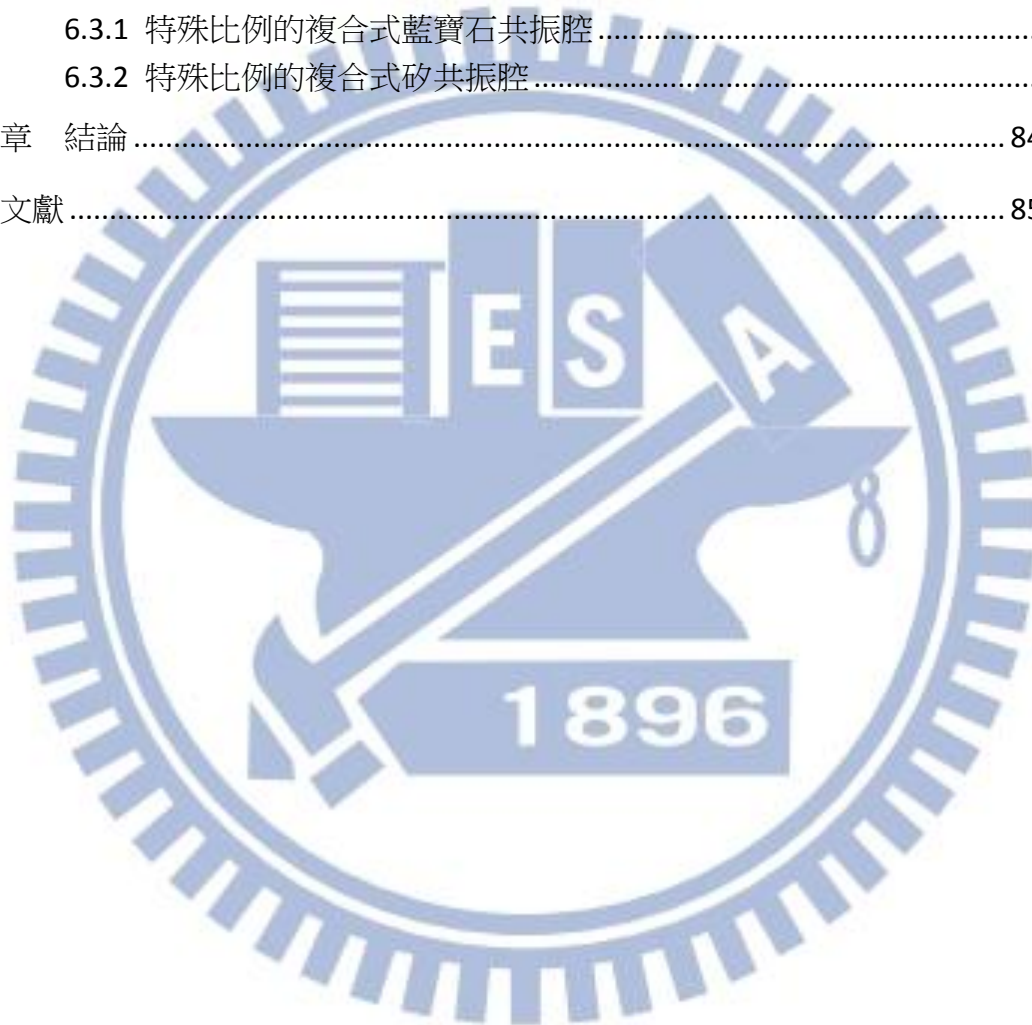
時光匆匆，兩年的時間過的好快阿！很開心在茫茫人海中能認識妳們，在你們身上我學到好多好多東西。很感謝張石麟老師、謝文峰老師以及實驗室學長姐這些日子以來的指導，我應該添了不少麻煩吧！還有和我一起打拼畢業的夥伴們以及我的狗狗“米米”，有妳們大家讓我的生活多了很多歡笑聲，也感謝我的父母親一路對我的支持及栽培，最後要感謝的是一葦學長，謝謝你我才有辦法完成我的學業。



目錄

摘要	I
Abstract.....	II
致謝	III
目錄	IV
表目錄	VI
圖目錄	VII
第一章 導論	1
第二章 X 光布拉格繞射	3
2.1 布拉格繞射 (Bragg diffraction).....	3
2.2 繞射幾何	4
2.3 修正後的布拉格繞射-入射光	5
2.4 對稱布拉格繞射的反射範圍	7
2.4 非對稱繞射幾何的反射範圍 ($\theta_c < 90^\circ$).....	10
2.5 修正後的布拉格繞射-出射光	12
2.5.1 出射光的反射區域 ($\theta < \pi/2$).....	13
第三章 X 光多片晶體繞射	17
3.1 高解析度的 X-ray 單光儀.....	17
3.2 兩片晶體的組合	18
3.3 晶體(+,+)組合型態的繞射.....	20
3.4 晶體(+,-)組合型態的繞射.....	24
3.5 晶體(+,-,+)組合型態的繞射	26
第四章 X 光 Fabry-Perot 共振腔	31
4.1 光學共振腔	31
4.2 X 光 Fabry-Perot 共振腔.....	35
4.2.1 一般 x 光共振腔的方程式.....	35
4.3 干涉條紋	38
4.3.1 解析度的條件.....	39
4.3.2 時間同調性與相干長度.....	39
第五章 實驗過程與準備	40
5.1 實驗準備	41
5.2 實驗步驟.....	43
5.3 實驗結果與分析.....	44

第六章	高解析度四晶單光儀理論計算與 X 光複合式共振腔模擬分析	47
6.1	高解析度四晶單光儀理論計算與分析	47
6.1.1	能量在 8.5146Kev 的四晶單光儀	47
6.1.2	能量在 14.3147Kev 的四晶單光儀	57
6.2	複合式共振腔	60
6.2.1	兩組共振腔的結合 -藍寶石共振腔	63
6.2.2	兩組共振腔的結合 -矽共振腔	69
6.3	特殊晶體厚度比例的複合式共振腔	72
6.3.1	特殊比例的複合式藍寶石共振腔	74
6.3.2	特殊比例的複合式矽共振腔	78
第七章	結論	84
參考文獻	85



表目錄

表 6.1 各個滿足繞射條件的原子面與其布拉格角 θ_B 、反射率 R 與對稱繞射幾何時的相對頻譜寬度 $\epsilon^{(s)}$ 。	48
表 6.3 固定非對稱性參數與一二塊繞射面，改變三四塊繞射面觀察相對光譜寬度、接受角與發散角的變化。	50
表 6.4.改變非對稱性參數 b_{12} 的值對於其他數值的影響。	51
表 6.5.固定其他參數改變非對稱性參數 b_{34} 的值對於其他數值的影響。	52
表 6.6 個別.改變四塊晶體的非對稱性參數觀察對於其他數值的影響。	52
表 6.7 放大率固定在 0.5012 下，非對稱性參數 b_1 與 b_4 之間的微調對於其他數值的影響關係圖。	53
表 6.8 後方共振腔晶體間距分別在 110、200、290 μm 時穿透光(藍線)的半高寬 Γ 、FSR、 \bar{F} 以及穿透率 T 的值。	64
表 6.9 改變前後共振腔晶體間距下穿透光(藍線)的半高寬 Γ 、FSR、 \bar{F} 以及穿透率 T 的值。	65
表 6.10 分別改變晶體厚度與晶體間距下穿透光(藍線)的半高寬 Γ 、FSR、 \bar{F} 以及穿透率 T 的值。	67
表 6.11 穿透光(藍線)在不同晶體間距、厚度參數下的半高寬 Γ 、FSR、 \bar{F} 以及穿透率的值。	71
表 6.12 穿透光在不同晶體厚度參數下且晶體厚度比例為 1:2:1 時的半高寬 Γ 、FSR、 \bar{F} 以及穿透率的值。	75
表 6.13 晶體厚度固定為(30,60,30) μm 時不同晶體間距在能量掃描下，穿透光的半高寬 Γ 、FSR、 \bar{F} 以及穿透率的值。	77
表 6.14 穿透光在不同晶體厚度參數下且晶體厚度比例為 1:2:1 時的半高寬 Γ 、FSR、 \bar{F} 以及穿透率的值。	80
表 6.15 晶體厚度固定為(50,100,50) μm 時不同晶體間距在能量掃描下，穿透光的半高寬 Γ 、FSR、 F^* 以及穿透率的值。	83

圖目錄

圖 2.1	實空間下的布拉格繞射情形。	3
圖 2.2.	布拉格繞射幾何下繞射原子面與入射光 K_0 與繞射光 K_H 的關係圖。	4
圖 2.3	大塊且完美無吸收的晶體布拉格繞射幾何下的反射率 R 與偏差參數 α 的全反射圖。	5
圖 2.4	非對稱參數 $b = -1$ 時的布拉格繞射幾何圖形。	7
圖 2.5	為對稱繞射幾何下晶體反射率最大值時, 以 (λ, θ) 空間描述的 dumond diagram。	9
圖 2.6	非對稱繞射幾何的例子。	10
圖 2.7	遠離背向繞射的情形下, 由修正後的布拉格公式得到在 (λ, θ) 空間描述下的 duMond Diagram。	11
圖 2.8	為布拉格繞射的全反射區從入射光(i)的 (λ, θ) 空間到出射光(e)的空間 (λ, θ') 的 duMond Diagram 轉換。	13
圖 2.9(a_π)	模式下, 布拉格繞射的全反射區從入射光(i)的 (λ, θ) 空間到出射光(e)的空間 (λ, θ') 的 duMond Diagram 轉換。	14
圖 2.10	Beam size 為 A_1 的入射光因非對稱幾何繞射使得出射光的 beam size 變為 A_2	16
圖 3.1.	(a)傳統光學稜鏡。(b)利用非對稱切割的晶體當作光學稜鏡使用。	18
圖 3.2.	(+,+)與(+,-)兩種不同組合型態的連續布拉格繞射。	19
圖 3.3.	在非對稱布拉格繞射下連續經過兩塊以(+,+)排列的晶體, 其全反射區以 DuMond Diagram 呈現。	21
圖 3.4.	黑色四邊形的全反射區顯示光在被兩塊晶體反射過程時相位空間上的變化。	22
圖 3.5	在非對稱布拉格繞射下連續經過兩塊以(+,-)排列的晶體, 其全反射區以 DuMond Diagram 呈現。	24
圖 3.7	連續被四塊以(+,-,-,+)排列的非對稱繞射幾何晶體繞射示意圖	27
圖 3.8	在非對稱布拉格繞射下連續經過四塊以(+,-,-,+)排列的晶體, 其全反射區以 DuMond Diagram 呈現。	28
圖 3.9.	白色四邊形的全反射區為被四塊晶體反射過程中在相位空間上的變化。	30
圖 4.1.	在光學 Fabry-Perot 共振腔中多光構造的示意圖。	32
圖 4.2.	Fabry-Perot 共振腔的穿透率 T 對相位 φ_A 的關係圖。	34
圖 4.3.	晶體在 X 光共振腔的排列。	36
圖 4.4.	兩片平行且完美的晶體取代高反射率鏡子的 X 光 Fabry-Perot 共振腔。	37
圖 4.5.	在能量掃描下穿透光與反射光的共振情形。	39

圖 5.1 實驗流程圖。	41
圖 5.1.光罩設計圖。	42
圖 5.2 Fabry-perot 共振腔，深度約 $70\sim 80\ \mu\text{m}$ 。	42
圖 5.3 為晶體厚度比例 1:1:1 與 1:2:1 的共振腔。	42
圖 5.7 非對稱角 η 為晶體表面與繞射原子面所夾之角度。	45
圖 6.1 非對稱繞射幾何 (a_0) 與 (a_π) 模式。	49
圖 6.2 能量在 8.5146Kev 且非對稱性參數分別為 $(b_1, b_2, b_3, b_4) = (0.075, 0.0255, 32.3, 32.3)$ 的四晶單光儀圖形。	54
圖 6.3 進入第一塊晶體的全反射區。	55
圖 6.4 出射第一塊晶體與入射第二塊晶體的全反射區。	55
圖 6.5 出射第二塊晶體的一二塊全反射區；入射第三塊晶體的全反射區；入射第三塊晶體的三四塊全反射區。	55
圖 6.6 出射第三塊晶體的全反射區；入射第四塊晶體的全反射區。	56
圖 6.7 出射第四塊晶體的全反射區。	56
圖 6.8 可連續被四塊晶體的全反射區投影到入射第一塊晶體的全反射區。	56
圖 6.9 能量在 14.3147Kev 且非對稱性參數分別為 $(b_1, b_2, b_3, b_4) = (0.1978, 0.0520, 13.9085, 13.9085)$ 的四晶單光儀圖形。	58
圖 6.10 進入第一塊晶體的全反射區。	58
圖 6.11 出射第一塊晶體的全反射區；入射第二塊晶體的全反射區。	58
圖 6.12 出射第二塊晶體的一二塊全反射區；入射第三塊晶體的全反射區；入射第三塊晶體的三四塊全反射區域。	59
圖 6.13 出射第三塊晶體的全反射區；入射第四塊晶體的全反射區。	59
圖 6.14 出射第四塊晶體的全反射區。	60
圖 6.15 可連續被四塊晶體的全反射區投影到入射第一塊晶體的全反射區。	60
圖 6.16 兩種共振腔結合的模擬圖，其中 $d = d_1 = d_2 = d_3 = d_4$ ，且 $g_1 < g_2$ 。	61
圖 6.17(0 0 30)材料為藍寶石。晶體厚度為 $30\ \mu\text{m}$ 、間距為 $30\ \mu\text{m}$ 和 $140\ \mu\text{m}$ 的穿透率對能量的圖型。	61
圖 6.18 將圖 6.17 的圖型重合在一起的穿透率對能量圖型。	62
圖 6.19 (0 0 30)材料為藍寶石。固定共振腔晶體厚度及前方共振腔晶體間距，調整後方共振腔晶體間距的穿透率對能量的圖型。	63
圖 6.20.(0 0 30)材料為藍寶石。將前方共振腔晶體間距改變成 30 與 $40\ \mu\text{m}$ ，調整後方共振腔晶體間距的穿透率對能量的圖型。	65

- 圖 6.21 (0 0 30)材料為藍寶石。將晶體厚度增加 $40 \mu m$ 與 $50 \mu m$ ，調整前後共振腔之晶體間距的穿透率對能量的圖型。 67
- 圖 6.22.(12 4 0)材料為矽晶體的兩組共振腔組合模擬。分別改變晶體厚度與間距，調整前後共振腔的晶體間距的穿透率對能量的圖型。 71
- 圖 6.23 將三塊晶體厚度比例為 1:1:1 的共振腔調整成晶體厚度比例為 1:2:1 的示意圖。 73
- 圖 6.24 (0 0 30)材料為藍寶石。共振腔晶體厚度比例為 1:1:1 和 1:2:1 的穿透率對能量關係圖。 73
- 圖 6.25.將圖 6.24 的圖型重合在一起的穿透率對能量關係圖。 74
- 圖 6.26(0 0 30)材料為藍寶石。固定晶體間距不同厚度下，共振腔晶體厚度比例為 1:1:1 和 1:2:1 的穿透率對能量的關係圖。 75
- 圖 6.27(0 0 30)材料為藍寶石。固定晶體厚度不同間距下，共振腔晶體厚度比例為 1:1:1 和 1:2:1 的穿透率對能量的關係圖。 77
- 圖 6.28(12 4 0)材料為矽。固定晶體間距不同厚度下，共振腔晶體厚度比例為 1:1:1 和 1:2:1 的穿透率對能量的關係圖。 80
- 圖 6.29(12 4 0)材料為矽。固定晶體厚度固定不同晶體間距下的穿透率對能量關係圖。 83

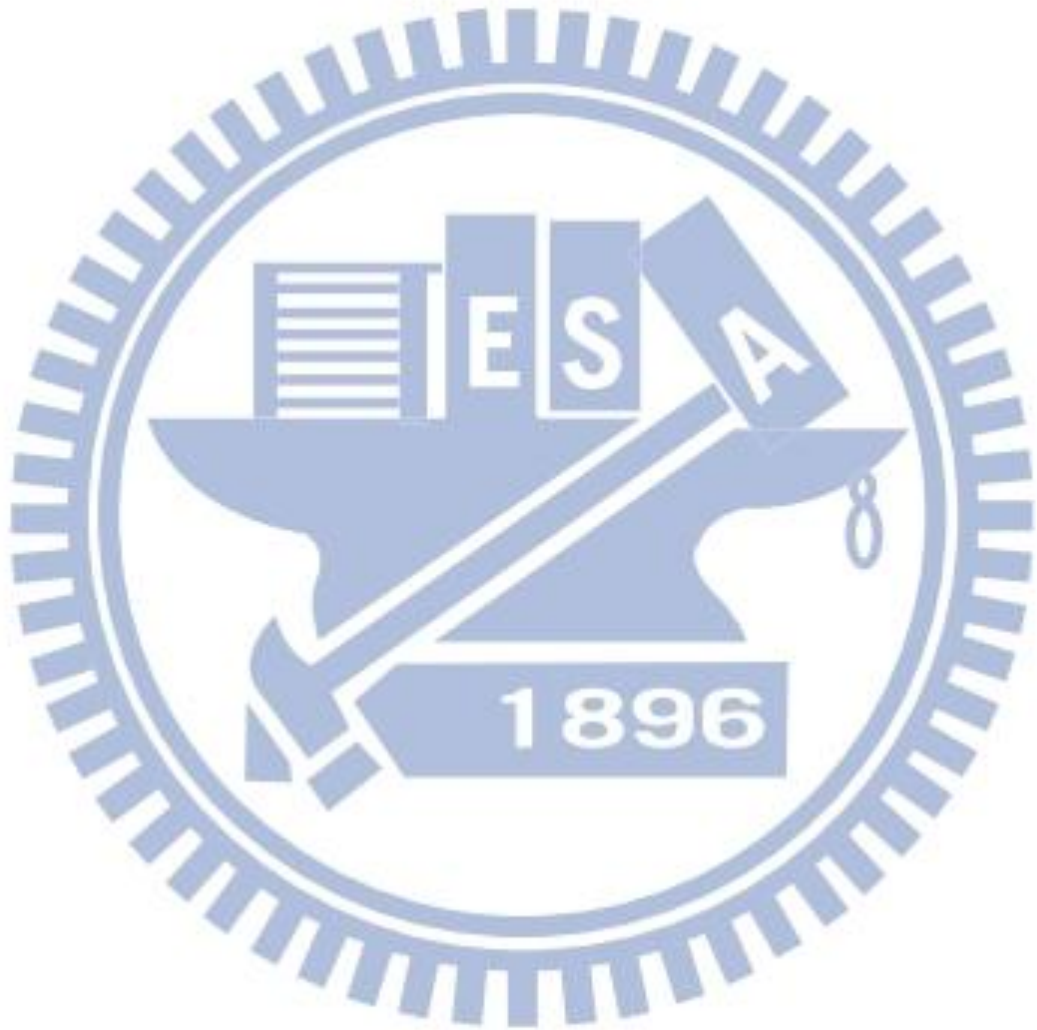
第一章 導論

在可見光波段光學 Fabry-Perot 共振腔已經被廣泛地運用在雷射以及光學領域[3,4]，相同的機制也已經延伸到波長較短電磁 EM 波的軟 X 光波段[5]。然而在硬 X 光甚至是 γ 光波段，藉由封閉路徑將入射光限制在兩片晶體、多片晶體或是在彎曲晶體中的這個想法已經被提出超過三十餘年[6-9]。而最簡單兩片式晶體共振腔經由 X 光動力繞射理論已算出預測結果[10-14]。各式各樣的實驗為了證實 X 光在共振腔內的共振現象也已經被提出與嘗試[11,15,16]。直到同步輻射光源的發展後，有關高能量解析度以及時間解析的實驗近年來才開始進行[17,18]。在 2004 年，分別經由能量掃描以及角度掃描的方式，成功觀察到兩片及多片式的矽晶體在背向入射幾何下，以(12 4 0)繞射面作為反射面且能量為 14.4388keV、能量半寬(ΔE)為 3.6meV 的條件下形成的干涉條紋[19]。

然而矽是高度對稱的晶體，導致在滿足入射光(0 0 0)與背向繞射光(12 4 0)產生條件時，同時也會有其他 22 光的產生，即所謂的 24 光繞射[19]。這樣的結果將導致光強度快速地減弱，而無法長時間的停留在共振腔內的來回反射且維持強度不變，若我們以 F 值 (finesse)表示光在共振腔內來回來反射的次數，2004 年所觀測到的干涉條紋其 F 值大約只有 5.4 而已，相較於一般傳統光學至少可達上百而言，相距甚遠。為了解決 24 光繞射問題，改以純兩光且背向繞射面為(0 0 30)的藍寶石共振腔取而代之，在相同條件下藍寶石共振腔將擁有較高的 F 值。而後也針對兩片式的 Fabry-Perot 藍寶石共振腔做了改變晶體厚度以及改變晶體間距的模擬，雖然晶體厚度的提高可以增加 F 值，但卻無法解決穿透率過低而無實用價值的問題[20]。

有鑑於此，本文提出了兩組 Fabry-Perot 共振腔結合的想法，由前方晶體間距較窄的共振腔決定自由光譜範圍(free spectral range)[3,4]，由後方晶體間距較寬的共振腔決定半高寬，且將兩共振腔距離拉開至 2049 μm 以上大於同調長度，並實際利用 Yu. P. Stetsko 所寫程式，做了藍寶石與矽材料的理論模擬，從結果確實可以達到在不降低穿透率的前提下仍可使 F 值大幅增加的目標。而根據文獻[2]的想法，也針對了晶體厚度比例為 1:2:1 與 1:1:1 的三片式藍寶石與矽共振腔，利用 Stetsko 所寫程式做了理論模擬，確實晶體厚度比例為 1:2:1 的共振腔可將分叉的兩根峰值合而為一變成單一波峰且擁有背景強度低的特性。

除此之外，要能滿足共振條件，入射共振腔的光同調時間必須要大於光在共振腔內來回一次反射的時間，即同調長度必須要大於兩倍晶體間距[19]，而入射光的能量寬度也必須小於共振峰值半高寬才可成功觀測，另外入射光的 **beam size** 也必須小於共振腔晶體的寬度及深度，要滿足這些條件，四晶單光儀的設計就顯得格外重要。因此本文將利用第二章及第三章的理論，針對在 8.5146keV 以及 14.3147keV 能量下設計高解析度四晶單光儀。



第二章 X 光布拉格繞射

一般情況討論的布拉格繞射只是一個粗略的近似，並無考慮晶體內折射所產生的效應，取的也是被原子面反射之後反射率最高的光。但事實上對於大塊且完美晶體的繞射，晶體內的折射是必須考慮進去的，且存在一個容許繞射的全反射區，而全反射區也會因為不同的繞射幾何而產生不一樣的變化，本章中將會對此做詳細的介紹。

2.1 布拉格繞射 (Bragg diffraction)

由於晶體內部原子為周期性的結構排列，形成等間距的原子面，如同光柵一般，當 X 光入射晶體時，與原子面上的原子交互作用產生散射，若不同原子面的散射光滿足建設性干涉，即兩光之間的波程差 ($2d_H \sin \theta_B$) 為入射光波長 (λ) 的整數倍時，將會在另一個特定方向產生繞射光。布拉格繞射公式描述在實空間中 X 光繞射條件成立時可表示為：

$$2d_H \sin \theta_B = \lambda, \quad (2.1)$$

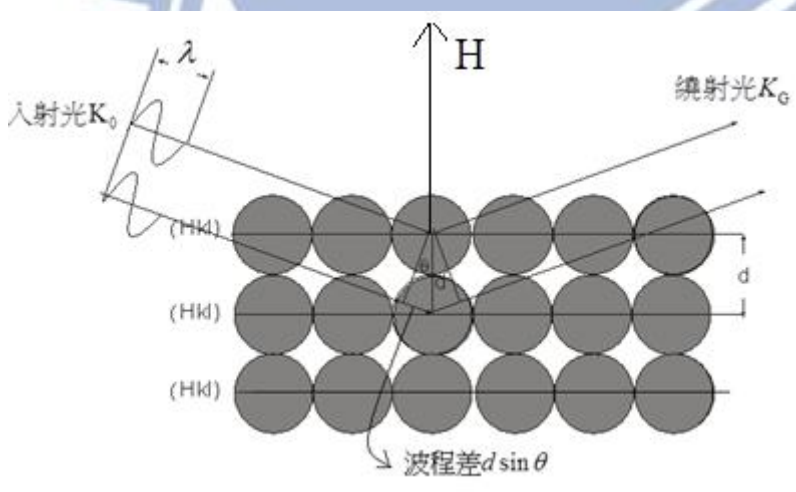


圖 2.1 實空間下的布拉格繞射情形，其中波程差為 $2d_H \sin \theta_B$ ， K_0 為晶體內入射光波向量， K_H 為晶體內繞射光波向量。

其中 H 為倒晶格向量， d_H 為原子面的間距， θ_B 為滿足布拉格繞射條件時的角度。因為 $\sin \theta_B \leq 1$ ，將式子(2.1)整理可得：

$$\sin \theta_B = \frac{\lambda}{2d_H} \leq 1 \Rightarrow \lambda \leq 2d_H. \quad (2.2)$$

由上式可得知要滿足繞射條件時，入射光波長 (λ) 必須小於等於兩倍的原子面間距 ($2d_H$)，亦即當原子面間距越密時，入射光子能量必須越大才可能滿足繞射條件。

2.2 繞射幾何

當晶體表面與繞射原子面之間存在非對稱幾何關係時，如圖 2.2，繞射光偏離繞射調建計算結果的程度可以由入射光與出射光分別的波向量和晶體表面單位法向量內積兩者的比值，或稱為”非對稱性參數”，來表示：

$$b = \frac{r_0}{r_H} = \frac{\overline{K_0} \cdot \hat{z}}{\overline{K_H} \cdot \hat{z}}, \quad (2.3)$$

這裡 \hat{z} 為晶體表面單位法向量。 K_0 與 K_H 分別為入射光與出射光的波向量，而 r_0 和 r_H 分別為入射光與出射光的方向餘弦。非對稱性參數 b 說明了入射光 K_0 和反射光 K_H 在繞射原子面與表面對稱時跟入射光 K_0 和反射光 K_H 在繞射原子面與表面不對稱時偏離的程度，如圖 2.2 所示。非對稱性參數也可表示為：

$$b = \frac{\cos \theta_H \sin \eta \cos \phi_H + \sin \theta_H \cos \eta}{\cos \theta_H \sin \eta \cos \phi_H - \sin \theta_H \cos \eta}. \quad (2.4)$$

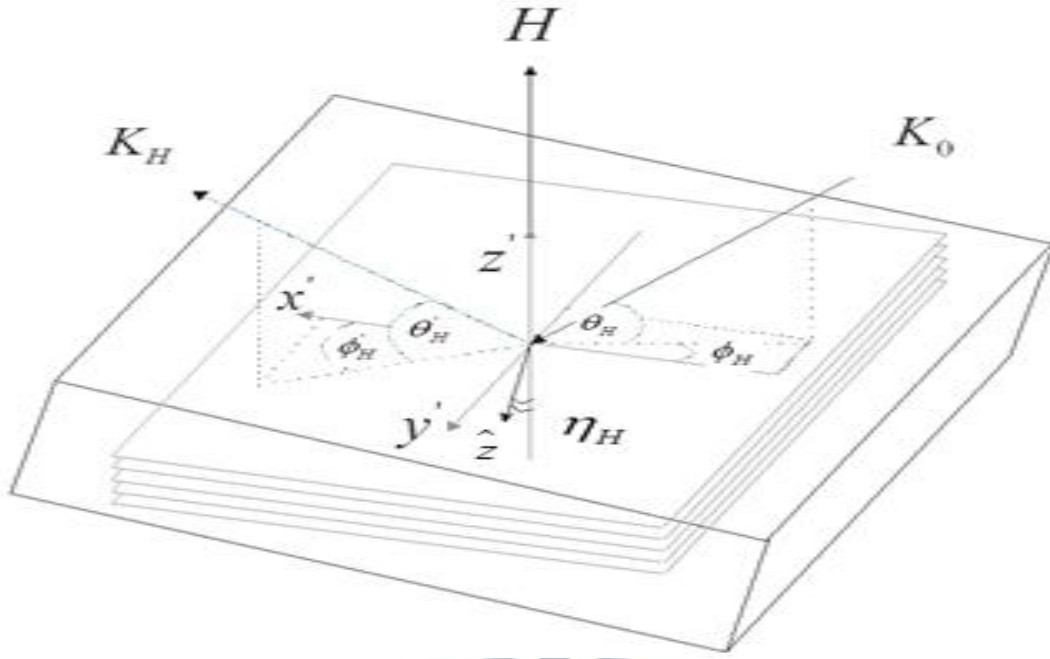


圖 2.2. 布拉格繞射幾何下繞射原子面與入射光 K_0 與繞射光 K_H 的關係圖。晶體輪廓為實線。 K_0 與 K_H 不在繞射平面 (x', z') 上， z' 與向量 H 垂直繞射原子面。

如圖 2.2，角度 η 為垂直晶體表面 \hat{z} 軸向量與繞射原子面法向量 H 所夾角度，可變範圍為 $0 \sim \pi$ ；角度 θ_H 為入射光與繞射原子面間所夾最小的角度，可變範圍為 $0 \sim \pi/2$ ；角度 ϕ_H 為入射光投影在繞射原子面後與繞射原子面 x' 軸的夾角，可變範圍為 $0 \sim 2\pi$ 。當 $b = -1$ 時表示繞射原子面與晶體表面對稱，即 $\eta = 0$ 。

2.3 修正後的布拉格繞射-入射光

2.1 小節討論的布拉格繞射條件只是一個粗略的近似，並無考慮晶體內折射所產生的效應，取的也是被原子面反射之後反射率最高的光。但事實上對於大塊且完美晶體的繞射，晶體內的折射是必須考慮進去的，且存在一個布拉格反射的範圍，由偏差參數(deviation parameter) α 來決定。全部反射範圍為：

$$\alpha_{+1} \leq \alpha \leq \alpha_{-1}, \quad (2.5)$$

$$\text{其中 } \alpha_{\pm 1} = \alpha_c \mp 2|P\chi_H|/\sqrt{|b|}, \quad (2.6)$$

$$\alpha_c = \chi_0' \left(1 - \frac{1}{b}\right), \quad (2.7)$$

$$\chi_H \text{ 為晶體的電極化率: } \chi_H = -\frac{r_e F_H}{\pi V} \lambda^2. \quad (2.8)$$

這裡 r_e 為古典電子半徑， F_H 為晶體單位晶胞的結構因子， λ 為真空下的波長， V 為單位晶胞的體積， χ_0' 是電極化率的實部； P 為偏振參數(polarization factor)， σ -極化時 $P=1$ ， π -極化時 $P=\cos 2\theta$ ；而 α_c 為全反射區的中心點，如圖 2.3 所示。

全反射區域的寬度為

$$\Delta\alpha = |\alpha_{-1} - \alpha_{+1}| = 4|P\chi_H|/\sqrt{|b|}. \quad (2.9)$$

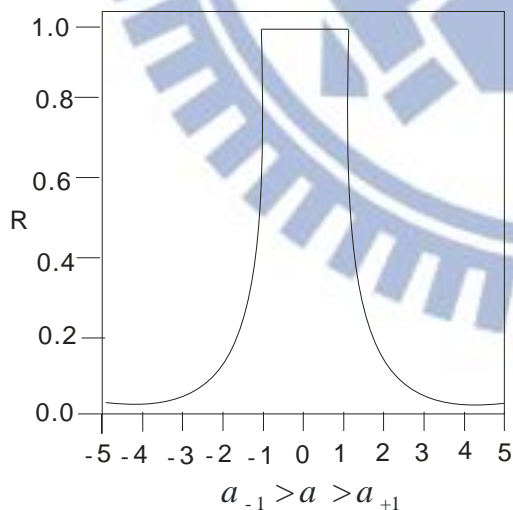


圖 2.3 大塊且完美無吸收的晶體在布拉格繞射幾何下的反射率 R 與偏差參數 α 關係圖

圖 2.3 表示偏差參數(deviation parameter) α 與反射率之間的關係， α 可表示為：

$$\alpha = \frac{2\lambda}{d_H(T)} \left[\frac{\lambda}{2d_H(T)} - \sin \theta \right], \quad (2.10)$$

其中 θ (glancing angle) 為入射光與繞射原子面所夾最小角度，可變範圍為 $0 \sim \pi/2$ ； $d_H(T)$ 表示原子面間距會隨著溫度 T 改變。所以能量(波長)、入射角與溫度都是改變 α (反射率) 的變數。換句話說，因為 α 是反射率的變數，所以能量(波長)、入射角與溫度也是改變反射率的變數。當式子(2.10)中 $\alpha = 0$ 時，反射率為最大，同時也等於修正前的布拉格公式。而 $\alpha = \alpha_c$ 時表示為全反射區的中心點， $\alpha_c \cong \sqrt{2\delta} \equiv \sqrt{10^{-6}} \sim 10^{-3}$ 非常的小；但若我們直接將 α_c 近似為 0，即等於忽略了晶體內重要的折射效應。藉由式子(2.8)我們可以將式子(2.7)的全反射區中心點 α_c 以波長 λ 表達：

$$\alpha_c = -2\omega_H^{(s)} \left(\frac{\lambda_c}{2d_H} \right)^2 \left(1 - \frac{1}{b} \right), \quad (2.11)$$

$$\text{其中 } \omega_H^{(s)} = -2\chi_0' \frac{d_H^2}{\lambda^2} = \frac{2r_e d_H^2}{\pi V} F_0', \quad (2.12)$$

χ_0' 是電極化率的實部項，而 F_0' 為結構因子實部項。另外 $\omega_H^{(s)}$ 為布拉格修正項可視為一個常數，約略等於 $10^{-4} - 10^{-6}$ ；此值由選擇的晶體與繞射原子面的間距決定，與入射角和波長無關。

將式子(2.11)與式子(2.10)結合可以得到修正後全反射中心點的布拉格公式：

$$2d_H \sin \theta_c = \lambda_c (1 + \omega_H), \quad (2.13)$$

$$\text{其中 } \omega_H = \omega_H^{(s)} \frac{b-1}{2b}. \quad (2.14)$$

修正後全反射區中心點的布拉格公式(2.13)也可以用光子能量 E_c 表示：

$$E_c \sin \theta_c = E_H (1 + \omega_H), \quad \text{而 } E_H = \frac{hc}{2d_H}. \quad (2.15)$$

這裡的 θ_c 、 λ_c 與 E_c 的 c 表示 center，分別為全反射區中心點的入射角、波長以及能量。 $\omega_H^{(s)}$ 的 (s) 表示在繞射原子面與表面對稱時的繞射幾何。式子(2.13)-(2.15)與全反射區中心點的波長 λ_c 與能量 E_c 分別與入射角 θ_c 直接關聯；而其他角度如 ϕ_c 與 η 藉由改變不對稱性參數 b 間接的影響式子(2.13)-(2.15)。

式子(2.13)形式與布拉格公式很像(2.1)。然而，式子(2.13)卻存在一個很小卻相當重要的值 ω_H ，我們稱它做布拉格修正項。當滿足布拉格繞射時，式子(2.13)的布拉格修正項 ω_H 永遠為正數。因此若 $b < 0$ 時，與修正前布拉格公式(2.1)相比較，修正項會使得全反射中

心點的入射角 θ_c 變大，或者是使得波長 λ_c 變小。所以我們稱式子(2.13)或(2.15)為修正後布拉格公式。

當入射角為 θ_c 光朝著晶體入射時，並不是只有相對應的波長 λ_c 可被反射，事實上在波長 λ_c 的附近 λ_{+1} 與 λ_{-1} 皆可被反射， λ_{+1} 與 λ_{-1} 的值可由式子(2.5)偏差參數(deviation parameter) α_{+1} 與 α_{-1} 決定其範圍。並且利用式子(2.6),(2.10)以及(2.8)可以得到 λ_{\pm} 與入射角 θ_c 之間的關係式：

$$2d_H \sin \theta_c = \lambda_{\pm 1} \left(1 + \omega_H \pm \frac{\varepsilon_H}{2} \right), \quad (2.16)$$

$$\text{其中 } \varepsilon_H = \frac{\varepsilon_H^{(s)}}{\sqrt{|b|}}, \quad \text{而 } \varepsilon_H^{(s)} = \frac{4r_e d_H^2}{\pi V} |\mathbf{PF}_H|. \quad (2.17)$$

ε_H 為在選定繞射原子面下的相對光譜寬度，所以也定義為

$$\varepsilon_H = \frac{\lambda_{-1} - \lambda_{+1}}{\lambda} = \frac{\Delta\lambda}{\lambda} \equiv \frac{\Delta E}{E}. \quad (2.18)$$

當 $b = -1$ 時， $\varepsilon_H = \varepsilon_H^{(s)}$ ， $\varepsilon_H^{(s)}$ 為對稱繞射幾何時布拉格繞射的相對光譜寬度； $\varepsilon_H^{(s)}$ 當中的 (s) 表示為對稱繞射幾何。如同 $\omega_H^{(s)}$ 一樣為常數，由選擇的晶體與繞射的原子面決定其值。式子(2.13)-(2.14)和式子(2.16)-(2.17)利用入射角 θ 和波長來描述全反射區，而其他的角度，像是方位角 ϕ 或是非對稱角 η ，藉由改變不對稱性參數 b 間接的影響這些式子。

2.4 對稱布拉格繞射的全反射區

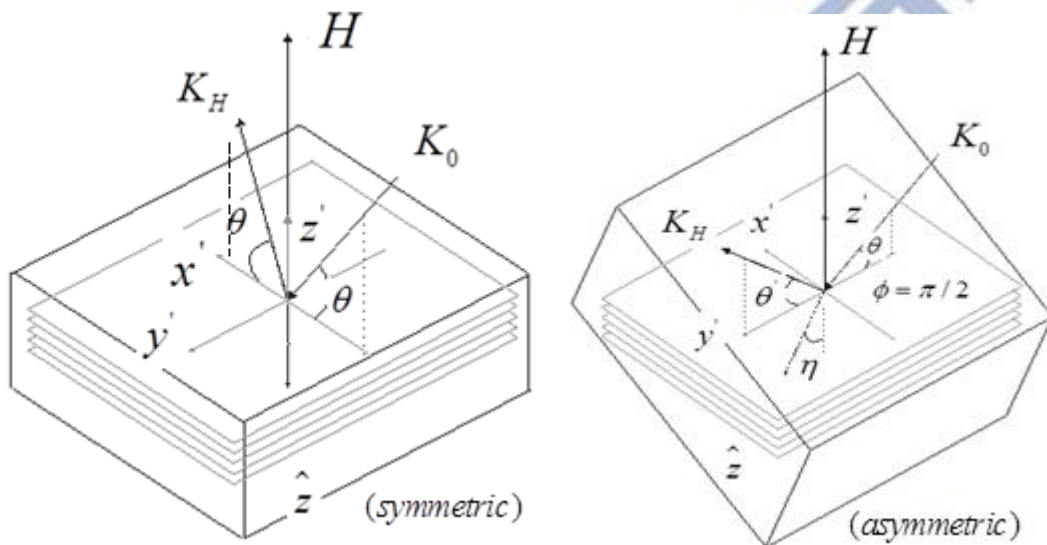


圖 2.4 非對稱參數 $b = -1$ 時的布拉格繞射幾何圖形：(symmetric)非對稱角 $\eta = 0$ ，

(asymmetric) $\eta \neq 0$ ，方位角 $\phi = \pi/2$ 。

當非對稱性角度 $\eta = 0$ 時，無論入射角 θ 與方位角 ϕ 為何值，非對稱性參數 b 皆等於 -1 ，如圖 2.4(symmetric) 所示。然而非對稱性參數 b 依然可以在 $\eta \neq 0$ 的時候等於 -1 ，如圖 2.4(asymmetric) 所示，發生在方位角 $\phi = \pi/2$ 。

利用式子(2.13)與式子(2.16)修正後的布拉格公式，可以描繪出波長對角度的全反射的軌跡，如圖 2.5。對稱布拉格繞射($b = -1$)的全反射的軌跡也在此圖中。

因為修正項 ω_H 的關係，使得修正後布拉格公式的波長會比修正前的布拉格公式的波長來的短，全反射的軌跡也有些不一樣。相同地，修正後的布拉格公式也可以看成原子面的間距為 $d_H / (1 + \omega_H)$ 來取代修正前的 d_H 。發生這些改變的原因來自於晶體內的折射。

在入射角 θ 小於 90 度的情況下，全反射區的中心波長 λ_c 與入射角 θ 幾乎成線性關係，如圖 2.5 與式子(2.13)。然而當入射角 θ 接近 90 度的時候，即使入射角 θ 增加，波長 λ_c 仍變化的很緩慢

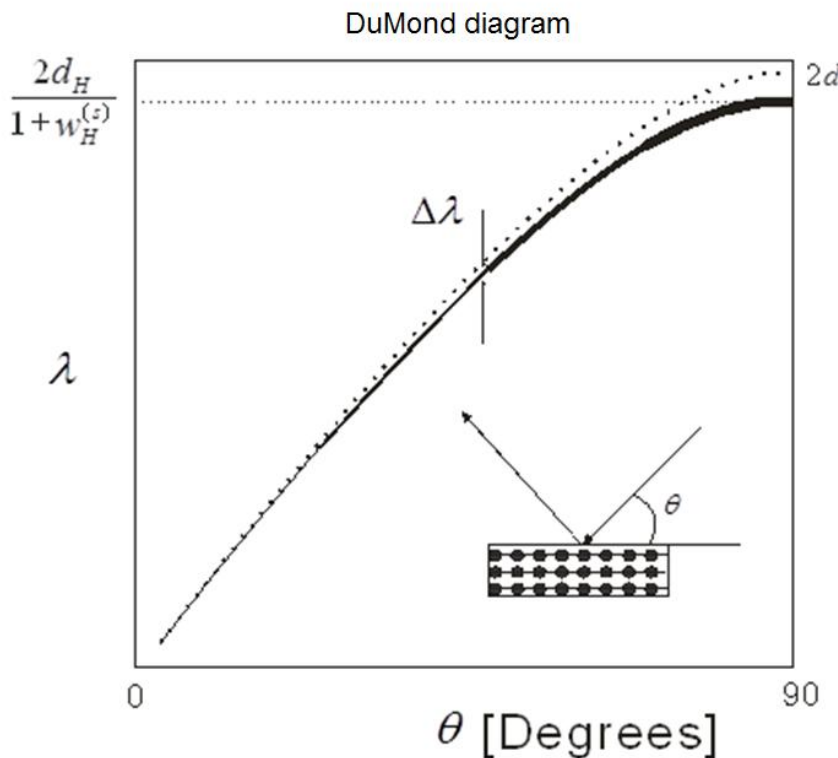


圖 2.5 為對稱繞射幾何下晶體對 X 光反射率以 (λ, θ) 空間描述的 DuMond diagram。虛線是修正前的布拉格公式(2.1)。實線是修正後對完美晶體的布拉格繞射(2.13)、(2.16)。在整個光譜及角度的範圍中，相對光譜寬度 $\Delta\lambda / \lambda$ 的比值是固定不變的[21]。

相對光譜寬度(relative spectral width)

相對光譜寬度 $\Delta\lambda / \lambda \equiv \Delta E / E$ 在對稱繞射幾何時 ($b = -1$) 可以表達為 $\varepsilon_H^{(s)}$ (2.17-2.18)， $\varepsilon_H^{(s)}$ 為晶體的布拉格繞射面對於光譜解析程度的影響。當原子面的間距 d_H 越小時，相同的也就是繞射原子面法向量 \mathbf{H} 的絕對值 $|\mathbf{H}| = 2\pi / d_H$ 增加，或是布拉格能量 $E_H = hc / 2d_H$ 越大時，布拉格繞射的相對光譜寬度將會越小，表示能量解析度越大。如圖 2.5 所示，相對光譜寬度 $\Delta\lambda / \lambda \equiv \Delta E / E$ 的不變性意味著當能量低時，選定的繞射面其能量寬度 ΔE 將隨著能量低而有較小的值。

角寬度(angular width) : $\theta < \pi / 2$

當全反射區中心點的波長固定在 $\lambda_c = hc / E_c$ 時，由式子(2.13)知道入射角 θ_c 附近也存在一個全反射區域，在 θ_{+1} 與 θ_{-1} 之間，由式子(2.10)以及偏差參數(deviation parameter) $\alpha_{\pm 1}$ [式子(2.6)]可決定 $\theta_{\pm 1}$ 的大小。而利用式子(2.10)以及(2.13)我們可以得到偏差參數變化量與入射角變化量之間的關係為 $\delta\alpha = -2\delta\theta \sin 2\theta_c$ ，若將其表達成 $\Delta\alpha$ 並且與式子(2.9)的 α 結合，可以很容易得到角寬度為：

$$\Delta\theta = \Delta\theta^{(s)} \frac{1}{\sqrt{|b|}}, \quad \Delta\theta^{(s)} = \frac{2|P\chi_H|}{\sin 2\theta_c}, \quad (2.19)$$

其中 $\Delta\theta^{(s)}$ 是對稱繞射幾何 ($b = -1$) 時全反射區的角寬度。因為式子(2.8)晶體的電極化率 χ_H 與能量(波長)有關，若我們將 χ_H 裡的參數 E_c 換成 $E_H / \sin \theta_c$ (忽略式子(2.15)的布拉格修正項 ω_H) 且與式子(2.17)的 $\varepsilon_H^{(s)}$ 結合，可以得到

$$\Delta\theta^{(s)} = \varepsilon_H^{(s)} \tan \theta_c. \quad (2.20)$$

因此，在選定布拉格繞射面下全反射區的角寬度 $\Delta\theta$ 隨著 $\tan \theta_c$ 當中的入射角 θ_c 變大而變大。由式子(2.17)， $\varepsilon_H^{(s)}$ 為對稱繞射幾何下全反射區的相對光譜寬度；根據 $\varepsilon_H^{(s)}$ 的值，角寬度大約為 $10^{-4} - 10^{-6}$ ，甚至更小。

2.4 非對稱繞射幾何的全反射區 ($\theta_c < 90^\circ$)

當非對稱角 η 不等於 0，而且非對稱參數 b 不等於 -1 時，非對稱繞射幾何的全反射區與對稱繞射幾何的全反射區相比較，會有很大的變化。

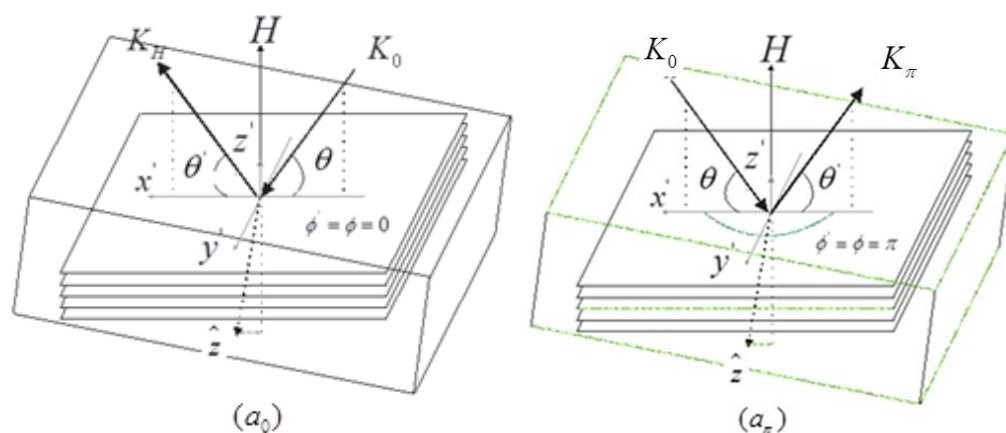


圖 2.6 非對稱繞射幾何的例子。 (a_0) 繞射幾何下，當 $\phi = \phi' = 0$ 時，非對稱性參數為 $b < -1$ 。 (a_π) 繞射幾何下，當 $\phi = \phi' = \pi$ 時，非對稱性參數為 $-1 < b < 0$ 。 (a_0) 與 (a_π) 兩種模式描述波向量 K_0 與 K_H 在色散平面 (x', z') 時的情況。 (a_0) 與 (a_π) 相比， (a_0) 的波向量 K_0 與 K_H 以繞射面法向量 H 為軸旋轉 180 度。註： $\theta(a_0) = \theta'(a_\pi)$ 和 $\theta(a_\pi) = \theta'(a_0)$ 。

非對稱角 η 對於在全反射區的改變可以由式子(2.4)的非對稱性參數 b 來描述，而非對稱性參數 b 的改變會直接對式子(2.13)-(2.14)與式子(2.16)-(2.17)造成變化。另外非對稱性參數 b 不只是由非對稱角 η 來決定，同時入射角 θ_c 和方位角 ϕ_c 也是必須考量因素。另因為 $\omega_H = \omega_H^{(s)}(1-b)/2b$ 與 $\varepsilon_H = \varepsilon_H^{(s)} / \sqrt{|b|}$ 決定全反射區的位置與寬度，這些數值也全部都跟非對稱性參數 b 有關，也就表示上述這些角度對全反射區有很大的影響。然而 $\omega_H^{(s)}$ 與 $\varepsilon_H^{(s)}$ 很小，導致布拉格繞射時的角寬度也很小，各個角度變化不大所以非對稱性參數 b 可視為一常數。

假設非對稱性參數 b 為一定值，非對稱角 η 對於全反射區的影響可簡單由非對稱性參數 b 來討論。不同的繞射幾何光的非對稱性參數 b 也有可能相同，原因來自於不同的角度 η 、 θ 和 ϕ 。為了將此狀況區別，我們藉由非對稱性參數 b 對於相對光譜寬度與角寬度改變趨勢的特性，將這些繞射幾何光分成兩種模式：第一種模式是當非對稱性參數為 $b < -1$ ，

如圖 2.6(a_0)；第二種模式是當非對稱性參數為 $-1 < b < 0$ ，如圖 2.6(a_π)。圖 2.6(a_0)與圖 2.6(a_π)兩者主要的差別在於方位角 ϕ 的角度，前者方位角 $\phi = 0$ ，後者的方位角為 $\phi = \pi$ 。

(a_0)與(a_π)這兩種非對稱繞射幾何在 (λ, θ) 空間中的 DuMond Diagram，如圖 2.7 所示。圖 2.7 中的條紋(S)表示為對稱繞射幾何下的全反射區，繞射幾何如圖 2.4(symmetric)所示。虛線(K)表示的是修正前的布拉格公式(2.1)。圖中各個條紋的邊界線由式子(2.16)-(2.17)決定，且與非對稱性參數 b 有密切的關係。

對稱繞射幾何時全反射區中心點的布拉格公式為 $\sin \theta_c^{(s)} = (\lambda_c / 2d_H)(1 + \omega_H^{(s)})$ ，而圖 2.7 表示為當 λ 接近 λ_c 且 θ 接近 θ_c 時在 (λ, θ) 空間中的 DuMond Diagram。

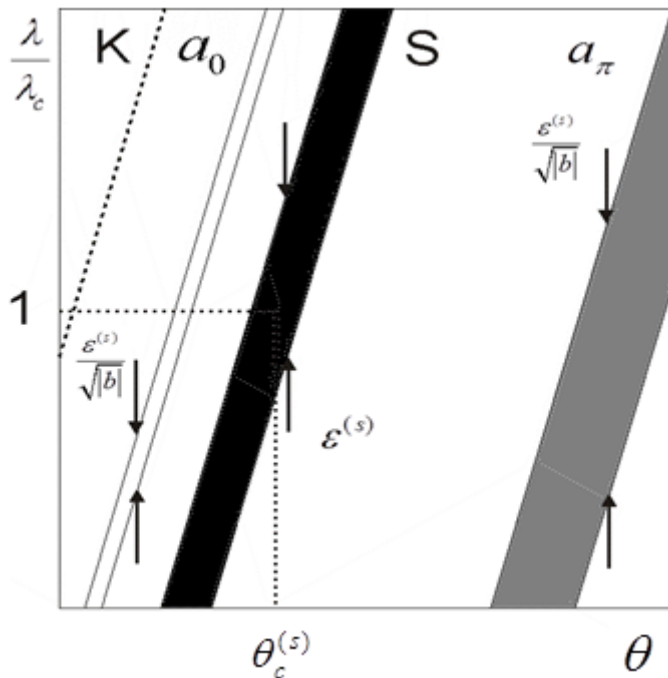


圖 2.7 遠離背向繞射的情形下，由修正後的布拉格公式得到在 (λ, θ) 空間描述下的 DuMond Diagram。條紋(S)為對稱繞射幾何且 $b = -1$ ，條紋(a_0)為非對稱繞射幾何且 $b < -1$ ，條紋(a_π)為非對稱繞射幾何且 $-1 < b < 0$ 。(S) (a_0) (a_π)的繞射幾何如圖 2.4 和 2.6 所示。虛線 K 為修正前布拉格公式(2.1)[22]。

與對稱繞射幾何情況 ($b = -1$) -圖 2.7(S)-相比較，可以觀察到兩種重要的改變。

1. 首先固定入射光的入射角 θ ，非對稱幾何 $b < -1$ (a_0)情況下的波長相對於對稱幾何 $b = -1$ (S)的波長會較大，而非對稱幾何 $-1 < b < 0$ (a_π)情況下的波長相對於對稱幾何

$b = -1$ (S)的波長會較小。由式子(2.13)-(2.14)可計算相對光譜寬度的 $\delta\lambda / \lambda_c$ 變化量

$$\frac{\delta\lambda}{\lambda_c} = \omega_H^{(s)} - \omega_H = \omega_H^{(s)} \frac{b+1}{2b}。 \quad (2.21)$$

同樣地，固定入射光的波長為 λ_c 時， $b < -1(a_0)$ 情況下的入射角較小，而 $-1 < b < 0(a_\pi)$ 情況下的入射角會較大。

2.由式子(2.17)可以得到全反射區的相對光譜寬度為

$$\varepsilon_H = \frac{\varepsilon_H^{(s)}}{\sqrt{|b|}}。 \quad (2.22)$$

非對稱幾何 $b < -1(a_0)$ 情況下的相對光譜寬度相對於對稱幾何 $b = -1$ (S)的相對光譜寬度會較小，而非對稱幾何 $-1 < b < 0(a_\pi)$ 情況下的相對光譜寬度相對於對稱幾何 $b = -1$ (S)的波長會較大。

同樣地，角寬度也會改變。 $b < -1(a_0)$ 情況下的角寬度較小，而 $-1 < b < 0(a_\pi)$ 情況下的角寬度會較大。由式子(2.19)可得知角寬度為

$$\Delta\theta = \frac{\Delta\theta^{(s)}}{\sqrt{|b|}}。 \quad (2.23)$$

上述這些特性對於 X 光光學有非常實際的重要性。因此，布拉格繞射時的相對光譜寬度與角寬度的特性可以經由非對稱性參數 b 的選擇來決定想要的數值。而這些特性對於 X 光單光儀的應用也將會在第三章做詳細討論。

2.5 修正後的布拉格繞射-出射光

由圖 2.2 中所示，如果非對稱角 η 不等於 0 時，入射光的角度將不會與出射光的角度相同。這關係到入射角 θ 與出射角 θ' 之間的關係以及方位角 ϕ 與 ϕ' 的關係。如同前面小節所建立的光在晶體全反射區中波長與入射角的關係-修正後布拉格公式-，下一步將要介紹入射光波長與出射角的關係。

出射角為 θ' 的修正後布拉格公式為：

$$2d_H \sin \theta'_c = \lambda_c (1 + \omega_H')。 \quad (2.24)$$

式子(2.24)建立了全反射區中心點波長 λ_c 與出射角 θ'_c 之間的關係，其中也因為修正項 ω_H' 的關係所以也與非對稱性參數 b [式子(2.4)]有關。式子(2.24)與式子(2.13)相似，我們稱式子(2.24)為修正後的出射光布拉格公式； ω_H' 為出射光布拉格公式的修正項。大體上因為

修正項 ω'_H 與 ω_H 的不同 ($\omega'_H \neq \omega_H$)，所以導致出射光與入射光的角度也不一樣 ($\theta'_c \neq \theta_c$)。

此外如同我們所知，當布拉格繞射的全反射區中心點其入射角固定為 θ_c 時，對應的波長為 λ_c 。由式子(2.16)-(2.17)可得知全反射區的波長範圍從 λ_+ 到 λ_- 之間，而 λ_+ 與 λ_- 各對應到一個出射光的角度，分別是 θ'_+ 與 θ'_- 。與式子(2.16)相似，出射角 θ'_\pm 與 λ_\pm 之間的關係可以表示為：

$$2d_H \sin \theta'_\pm = \lambda_\pm \left(1 + \omega'_H \pm \frac{\varepsilon'_H}{2} \right), \quad (2.25)$$

其中 $\varepsilon'_H = \varepsilon_H^{(s)} \sqrt{|b|}$ 。與 ε_H 類似， ε'_H 被稱作為出射光的相對光譜寬度。式子(2.25)告訴我們當入射角固定為 θ_c 時，出射角的角度從 θ'_+ 到 θ'_- 的變化將隨著入射光波長 λ_+ 到 λ_- 的變化而改變。即表示出射光有角度色散的現象。

2.5.1 出射光的全反射區 ($\theta < \pi/2$)

在章節 2.4. 中已討論非對稱角 η 以及非對稱參數 b 的改變對於在布拉格繞射下入射光的全反射區影響，以 (λ, θ) 空間的 DuMond Diagram 表達。由前面章節已經得到入射光波長與出射角之間的關係，本節將要介紹其在 (λ, θ') 空間中全反射區的形式-在光被晶體反射的空間中-各個特殊模式的非對稱幾何繞射。

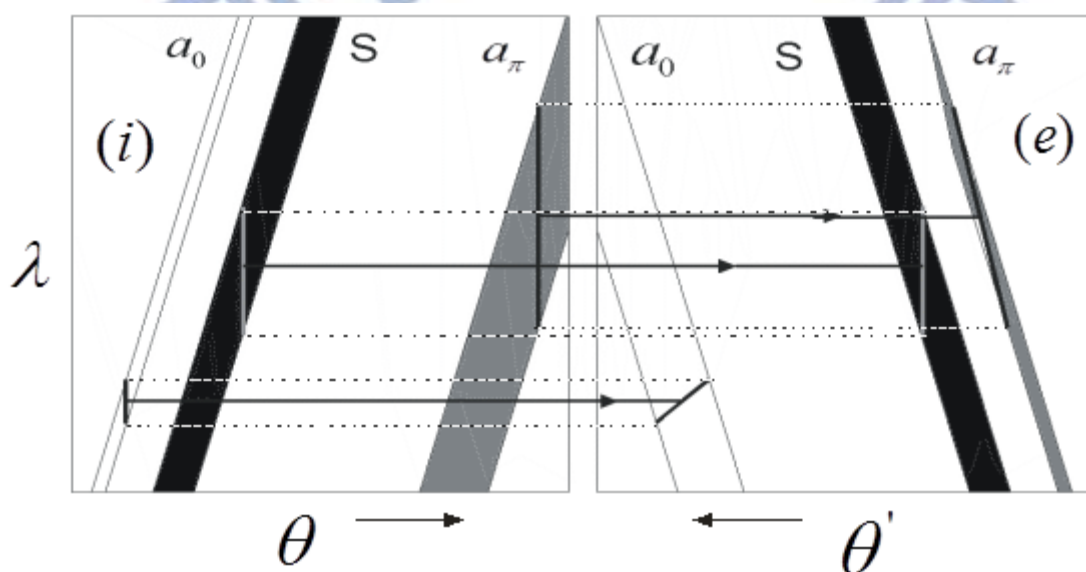


圖 2.8 為布拉格繞射的全反射區從入射光(i)的 (λ, θ) 空間到出射光(e)的 (λ, θ') 空間之

DuMond Diagram 轉換。根據式子(2.26)-(2.28)概要的描述不同繞射幾何下的全反射區：
 (s)條紋為對稱布拉格繞射幾何且 $b = -1$ ， (a_0) 條紋為非對稱繞射幾何且 $b < -1$ ， (a_π) 條紋為非對稱繞射幾何且 $-1 < b < 0$ 。其繞射幾何分別如圖(2.4)與圖(2.6)所示。圖 2.8(e) 中全反射區的橫軸角度以反向刻度呈現。

在繞射幾何下不同的非對稱性參數 b 對於入射光在 (λ, θ) 空間中的 DuMond Diagram，如圖 2.8(i)與圖 2.7 所示。而圖 2.8(e)顯示為相同的全反射區，但現在是出射光的 (λ, θ') 空間。如同之前所討論， (a_π) 條紋為非對稱繞射幾何在 $-1 < b < 0$ 時的全反射區， (a_0) 條紋為非對稱繞射幾何在 $b < -1$ 時的全反射區，(S)是對稱繞射幾何在 $b = -1$ 時的全反射區。圖 2.8(e)的角度尺度與圖 2.8(i)相反。為了更清楚觀察反射區域從 (λ, θ) 到 (λ, θ') 空間的轉移，圖(2.9)中將針對非對稱繞射幾何 $-1 < b < 0$ 的模式來做討論。

由修正後的布拉格公式可知，特定的波長 λ_c 會對應到一入射角 θ_c 。在 (λ_c, θ_c) 附近的全反射區如圖 2.9(i)所示。利用式子(2.16)計算 θ_c 並將之做為變數改變 θ ，我們可以得到全反射區的邊界線 $\lambda_\pm(\theta)$ 。遠離背向繞射下，在 θ_c 附近很小角度變化時的邊界線 $\lambda_\pm(\theta)$ 可以以線性的形式表示為：

$$\frac{\lambda_\pm - \lambda_c}{\lambda_c} = \frac{\theta - \theta_c}{\tan \theta_c} \mp \frac{\varepsilon_H^{(s)}}{2\sqrt{|b|}} \quad (2.26)$$

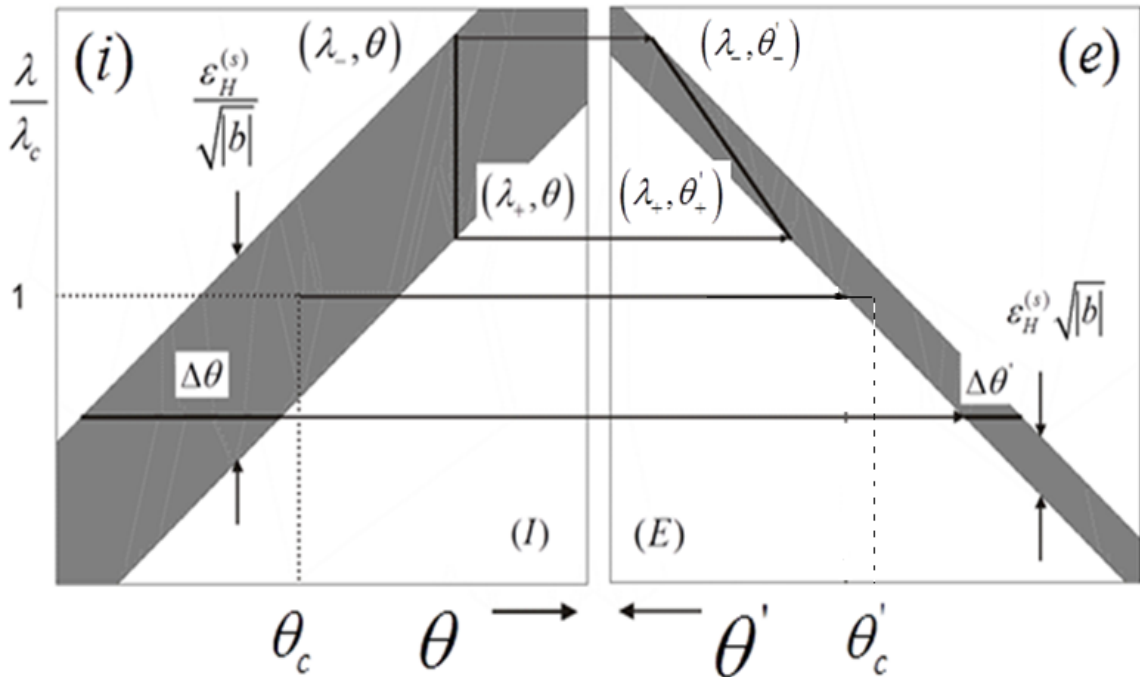


圖 2.9 為布拉格繞射的全反射區從入射光(i)的 (λ, θ) 空間到出射光(e)的 (λ, θ') 空間之

DuMond Diagram 轉換。全反射區如圖中灰色條紋所描述，為布拉格繞射下 (a_π) 的模式，且非對稱性參數為 $-1 < b < 0$ 。

入射光在 (λ, θ) 空間中的點 (λ_c, θ_c) 變成出射光在 (λ_c, θ'_c) 空間中的點 (λ, θ') ，如圖(2.9)所示。出射角 θ'_c 的值可由式子(2.24)計算，並且從由式子(2.13)與式子(2.24)可以得到 θ_c 與 θ'_c 的近似差值：

$$\theta_c - \theta'_c = \frac{\omega_H^{(s)}}{2} \left(b - \frac{1}{b} \right) \tan \theta_c。 \quad (2.27)$$

當非對稱繞射參數 $b = -1$ 時，入射角 θ_c 即等於出射角 θ'_c ，此時為對稱繞射幾何而這樣的情況也已在先前討論過。因為 $\omega_H^{(s)}$ 為正數，所以當非對稱性參數為 $b < -1$ 時，出射角 θ'_c 大於入射角 θ_c ： $\theta'_c > \theta_c$ 。另一方面，如果非對稱性參數在 $-1 < b < 0$ 之間，出射角 θ'_c 小於入射角 θ_c ： $\theta'_c < \theta_c$ 。由圖(2.9)顯示的 (λ, θ) 空間到 (λ, θ') 空間的 DuMond Diagram 轉換可以驗證。在接近背向繞射時 ($\theta_c \rightarrow \pi/2$) 式子(2.27)並不成立。

圖 2.9(i) 中的任意邊界點 (λ_\pm, θ) 轉移後變成圖 2.9(e) 中的點 $(\lambda_\pm, \theta'_\pm)$ ， θ'_\pm 的值可經由式子(2.25)算出。波長 λ_+ 對應到角度 θ'_+ ，波長 λ_- 對應到角度 θ'_- ，且 $\theta'_+ \neq \theta'_-$ 。所以圖(2.9)(i) 中的黑色垂直直線變成圖(2.9)(e) 中黑色斜線。

由式子(2.25)計算 θ'_\pm 的值並將之做為變數改變 θ' ，可以得到在 (λ, θ') 空間中由邊界線 $\lambda_\pm(\theta')$ 包圍的全反射區。遠離背向繞射下，在 θ'_c 附近很小角度變化時的邊界線 $\lambda_\pm(\theta)$ 可以以線性的形式表示為：

$$\frac{\lambda_\pm - \lambda_c}{\lambda_c} = \frac{\theta'_\pm - \theta'_c}{\tan \theta'_c} \mp \frac{\varepsilon_H^{(s)}}{2} \sqrt{|b|}。 \quad (2.28)$$

由式子(2.26)與圖(2.9)(i)，可以得到入射光在固定波長下的可容許繞射的角度寬度為 $\Delta\theta = \tan \theta_c \varepsilon_H^{(s)} / \sqrt{|b|}$ 。同樣地，由式子(2.28)與圖 2.9(e)，可以得到出射光的角度寬度：

$$\Delta\theta' = \varepsilon_H^{(s)} \sqrt{|b|} \tan \theta'_c。 \quad (2.29)$$

若我們將式子(2.28)與式子(2.29)結合，且近似 $\tan \theta'_c = \tan \theta_c$ 時，我們可以得到入射光在布拉格繞射下的角度接受角 $\Delta\theta$ 以及出射光的角度發散角 $\Delta\theta'$ 之間的關係：

$$\Delta\theta' = |b| \Delta\theta。 \quad (2.30)$$

因此我們可以經由非對稱性布拉格繞射的方式來操控 X 光的發散角。除此之外非對稱性布拉格繞射同時也改變了 X 光截面積大小，如圖 2.10 所示。

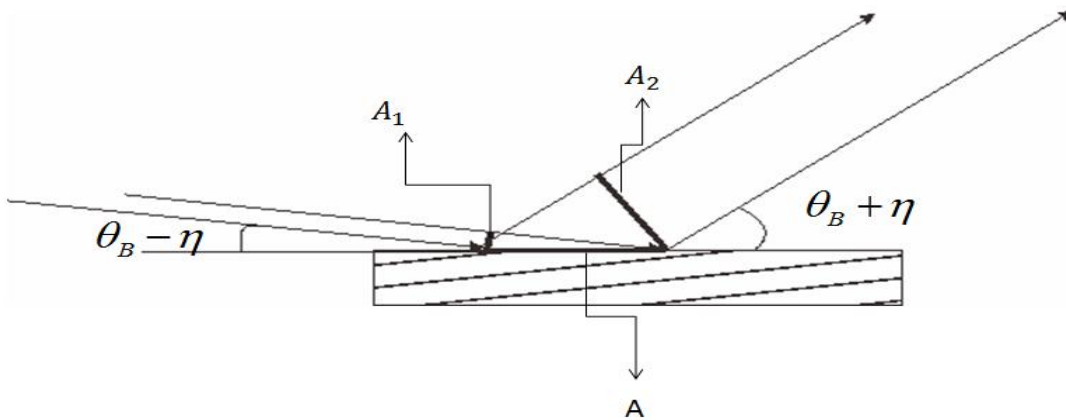


圖 2.10 Beam size 為 A_1 的入射光因非對稱幾何繞射使得出射光的 beam size 變為 A_2

在這裡，入射光的截面積為 $A \sin(\theta_B + \eta) = A_1$ ，

出射光的截面積為 $A \sin(\theta_B - \eta) = A_2$ ，

A_2 為出射光截面積， A_1 為入射光截面積， A 為入射光與出射光打在晶體表面上共同的區域，而入射光與出射光截面積的比值為：

$$\frac{A_2}{A_1} = \frac{A \sin(\theta_B + \alpha)}{A \sin(\theta_B - \alpha)} = \frac{1}{|b|}, \quad (2.31)$$

恰巧為非對稱性參數 b 的倒數，亦即 $A_2 = (1/|b|)A_1$ 。由式子(2.30)與(2.31)可知非對稱性參數 b 對出射光與入射光比值的角寬度與截面積有相反效果，滿足相位與體積的守恆(Liouville Theorem)。

第三章 X 光多片晶體繞射

從第二章了解單一晶體的布拉格繞射行為後，接著要探討多片晶體的連續繞射。正如我們將看到的，希望的相對光譜寬度以及角寬度特性—單色光、光擁有很小的角度發散角等等—可以透過幾個連續非對稱布拉格繞射達成。

這些有關多片晶體繞射的理論已經在文獻中廣泛的被討論[14,23,24,25]。DuMond[21]採用了圖形的簡單方法來分析 X 光在多片晶體繞射下的 (λ, θ) 空間轉換過程中的變化。DuMond diagram的分析提供了以圖型的方式去定義以及映射 X 光從一塊晶體傳播下一塊晶體時在角度—波長空間中的全反射區。Nakayama[26]、Kohra[27]、Matsushit 以及 Hashizume[28]將 DuMond diagram 擴展到非對稱幾何繞射。Davis[29]推導了一組轉換公式去映射 DuMond diagram 在晶體之間的行為。而相位空間分析是另外一個利用圖型的方式描述 X 光在 X 光光學元件的轉換行為[28,30]。

在本章節中首先會在 3.1 小節介紹一些使相對光譜寬度以及角寬度變化的方法。而 3.2-3.3 小節中會討論光在連續被兩塊晶體以(+,+)以及(+,-)排列反射後的相對光譜寬度以及角寬度，而四塊以(+,-,-)排列的晶體也將在 3.4 小節中討論。

3.1 高解析度的 X-ray 單光儀

為求得單光儀之 X 光的相對光譜寬度與角寬度變化，可經由下列方式達成：

1. 當 X 光經由完美單一晶體的布拉格繞射，可以使得 X 光相對光譜寬度 $\Delta E / E$ 縮小。當原子面的間距 d_H 越小時，相同的也就是增加繞射原子面法向量 \mathbf{H} 的絕對值 $|\mathbf{H}| = 2\pi / d_H$ ，或是布拉格能量 $E_H = hc / 2d_H$ 越大時，布拉格繞射的相對光譜寬度將會越小。
2. 相對光譜寬度與角寬度也可經由晶體自身的非對稱性幾何繞射來改變。由於入射光光源並非是平行光的關係，若要很小的相對光譜寬度與發散角並不能靠單一晶體的非對稱性幾何繞射來達成，但可透過連續晶體的非對稱性幾何繞射來解決此問題。3.2~3.4 小節將對此做詳盡的介紹。

3.經由準直器(collimator)，色散元件(dispersing element)，波長選擇器(wavelength selector)的裝置，可將 X 光達到分光效果。圖 3.1(a)為傳統光學，利用稜鏡當色散元件。圖 3.1(b)為 X 光單光儀，利用非對稱幾合繞射的晶體當作光學稜鏡使用。

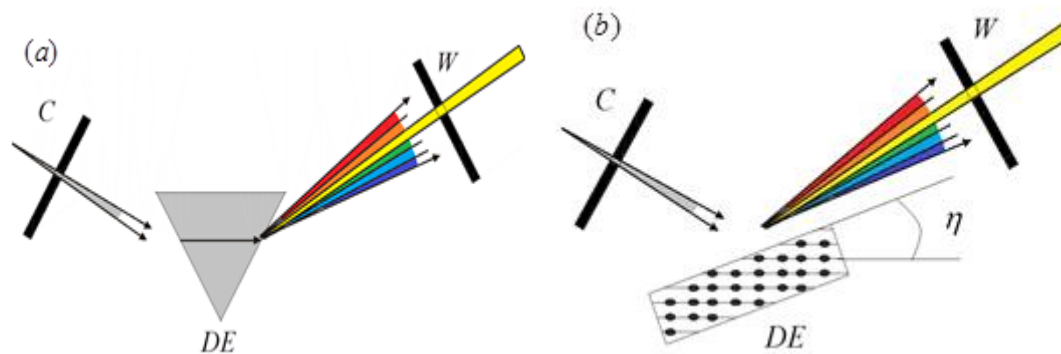


圖 3.1. (a)利用傳統光學稜鏡當色散原件(DE)，並透過準直器(C)與波長選擇器(W)來選擇能量。(b)利用非對稱切割的晶體當作光學稜鏡使用。

4.另外一種形式的單光儀，不是靠晶體本身繞射來降低相對頻譜寬度，而是如同 Fabry-Perot 干涉儀般，利用高反射率的原子面，讓光在共振腔內做多光干涉，而光在滿足共振條件後的穿透光具有單一波長的特性且相對光譜寬度很小，第四章將對此做詳盡的介紹。

上述這些單光儀性能的好壞可以由四個條件來評斷:相對頻譜寬度 $\Delta E / E$ (或 ΔE)、角度接受角 $\Delta\theta$ 、角度發散角 $\Delta\theta'$ 以及整體的穿透率 T。

3.2 兩片晶體的組合

連續經過兩片非對稱繞射幾何的晶體，分為兩種形式，如圖 3.2 與圖 3.3。入射光分別被第一塊與第二塊晶體的原子面反射， H_1 與 H_2 分別為第一片晶體與第二片晶體的原子面法向量，並假設 H_1 與 H_2 共平面。 ψ_{12} 為 H_1 順時針轉向 H_2 所夾角度。

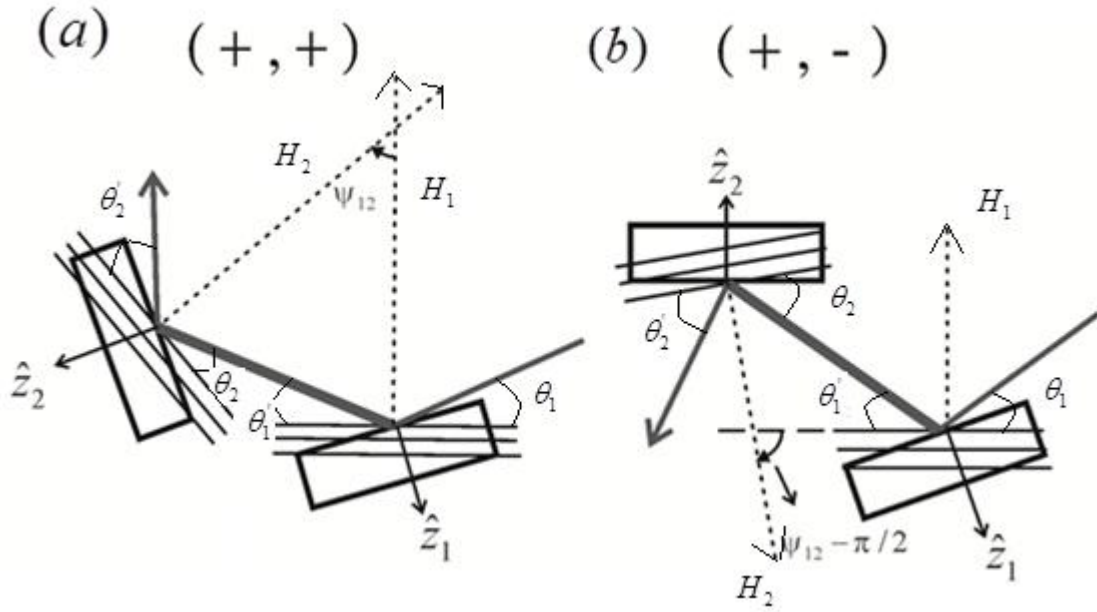


圖 3.2. (+,+)與(+,-)兩種不同組合型態的連續布拉格繞射。 H_1 與 H_2 為繞射原子面的法向量， z_1 與 z_2 為晶體表面的法向量， θ_1 與 θ_2 為第一二塊晶體的入射角， θ_1' 與 θ_2' 為第一二塊晶體的出射角。

可以經由光行徑的軌跡來判斷這兩種組合的方式。1. 如圖 3.2(a)，光被第二塊晶體反射後的方向與被第一塊晶體反射的方向同樣都是順時針，我們稱這樣的組合為(+,+)。2. 如圖 3.2(b)，光被第二塊晶體反射的方向與第一塊晶體相反，一為順時針，另一為逆時針，我們稱這樣的組合為(+,-)。

入射第二塊晶體的入射角 θ_2 ，由角度 ψ_{12} 與出射第一塊晶體的繞射角 θ_1' 所決定，圖 3.2(a)(+,+)組合型態的 θ_2 與 θ_1' 跟 ψ_{12} 關係式為：

$$\left(\frac{\pi}{2} - \theta_2\right) + \left(\frac{\pi}{2} - \theta_1'\right) + (\psi_{12}) = \pi \quad (3.1)$$

整理可得

$$\theta_2 = \psi_{12} - \theta_1' \quad (3.2)$$

相同的，圖 3.2(+,-)組合型態的 θ_2 與 θ_1' 跟 ψ_{12} 關係式為：

$$\left(\psi_{12} - \frac{\pi}{2}\right) - \theta_1' = \frac{\pi}{2} - \theta_2 \quad (3.3)$$

整理可得：

$$\theta_2 = (\pi - \psi_{12}) + \theta_1' \quad (3.4)$$

3.3 晶體(+,+)組合型態的繞射

討論圖 3.2(a)晶體(+,+)排列時的繞射行為，並假設繞射角不接近 90 度。圖 3.3(1)為入射光進入第一塊晶體在 (λ, θ_1) 空間中的 DuMond Diagram，圖中藍色條紋的邊界線由 $\lambda(\theta_1)$ 決定：

$$\frac{\lambda - \lambda_c}{\lambda_c} = \frac{\theta_n - \theta_{cn}}{\tan \theta_{cn}} \mp \frac{\varepsilon_n^{(s)}}{2\sqrt{|b_n|}}, n=1 \text{ 表示為第一塊。} \quad (3.5)$$

如式子(2.26)所描述。這邊的 λ_c 為我們選定的特定波長，並且由式子(2.13)可以得到在布拉格繞射下全反射區中心點相對應的入射角 θ_c 。

入射第二塊晶體在 (λ, θ_2) 空間中的全反射區，如圖 3.3(1'+2)黃色條紋所示。其邊界線範圍由式子(3.5)決定且 $n=2$ 。在選定波長 λ_c 與原子面間距 d_2 下，由式子(2.13)可以得到相對應的入射角 θ_{c2} 。

光被第一塊晶體反射後出射角的角度為 θ_1' ，有式子(2.24)的修正後出射光布拉格公式可以得到其全反射區中心點的角度 θ_{c1}' 。如果出射第一塊晶體的角度 θ_1' 與入射第二塊晶體的角度滿足式子 $\theta_2 = \psi_{12} - \theta_1'$ (3.2)的條件下將可被第二塊晶體反射。另外，當選定的波長為 λ_c 時，光在全反射區的中心點可連續被兩晶體反射條件為：

$$\theta_{c2} = \psi_{12} - \theta_{c1}' \quad (3.6)$$

將式子(3.6)與 $\theta_2 = \psi_{12} - \theta_1'$ (3.2)解聯立，整理可得連續被兩塊晶體反射的條件：

$$\theta_2 - \theta_{c2} = -(\theta_1' - \theta_{c1}') \quad (3.7)$$

圖 3.3(1'+2)中藍色的條紋為光出射第一塊晶體在 (λ, θ') 空間中的全反射區。全反射區的範圍由邊界線 $\lambda(\theta')$ 決定：

$$\frac{\lambda - \lambda_c}{\lambda_c} = \frac{\theta'_n - \theta'_{cn}}{\tan \theta'_{cn}} \mp \frac{\varepsilon_n^{(s)}}{2\sqrt{|b_n|}}, n=1 \text{ (表示為第一塊)。} \quad (3.8)$$

為式子(2.28)應用在多片晶體的情況。在式子(3.8)中，我們使用近似 $\tan \theta'_{cn} \approx \tan \theta_{cn}$ 。

在滿足式子(3.7)的條件之下，我們將出射第一塊晶體的全反射區與入射第二塊晶體的全反射區一起畫在圖 3.3(1'+2)中，但第一塊晶體的全反射區以相反尺度顯示。

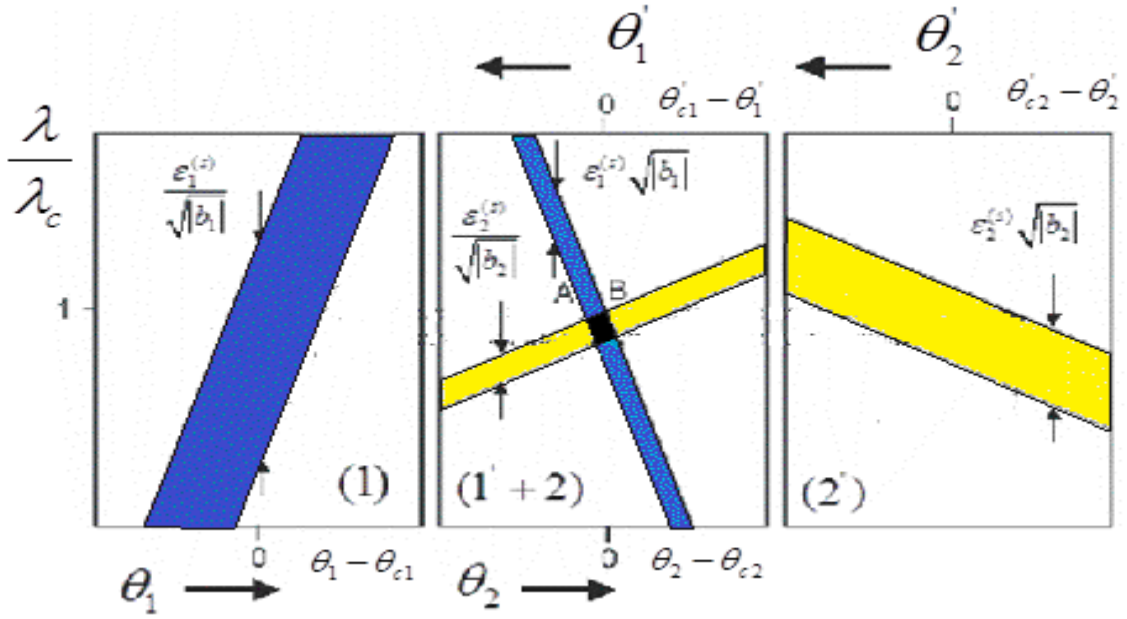


圖 3.3. 在非對稱布拉格繞射下連續經過兩塊(+,+)排列的晶體，其全反射區以 DuMond Diagram 呈現。

(1)：藍色條紋—入射第一塊晶體的全反射區。

(1'+2)：藍色條紋—出射第一塊晶體的全反射區，黃色條紋—入射第二塊晶體的全反射區。(1')上面的逗點表示為出射光。

(2')：黃色條紋—出射第二塊晶體的全反射區。(2')上面的逗點表示為出射光。

圖 3.3(1'+2)與圖 3.4(1'+2)中黑色的交集範圍 ABDE 為可連續被兩晶體反射的全反射區，此交集決定了入射光(出射光)的波長與角度範圍。波長 λ_x 為交集的點，且 X=A,B,D 或 E，可將式子(3.8)的 n=1 與式子(3.5)的 n=2，解聯立可分別得到四個點的值，解為：

$$\frac{\lambda_x - \lambda_c}{\lambda_c} = \pm \varepsilon_1^{(s)} \tau_1 \frac{\sqrt{|b_1|}}{2} \pm \varepsilon_2^{(s)} \tau_2 \frac{1}{2\sqrt{|b_2|}} \quad (3.9)$$

其中

$$\tau_1 = \frac{\tan \theta_{c1}}{\tan \theta_{c1} + \tan \theta_{c2}}, \tau_2 = \frac{\tan \theta_{c2}}{\tan \theta_{c1} + \tan \theta_{c2}} \quad (3.10)$$

而式子(3.9)中前後的正負號分別為：當 X=A 時為 -+；當 X=B 時為 ++；當 X=E 時為 --；當 X=D 時為 +-。

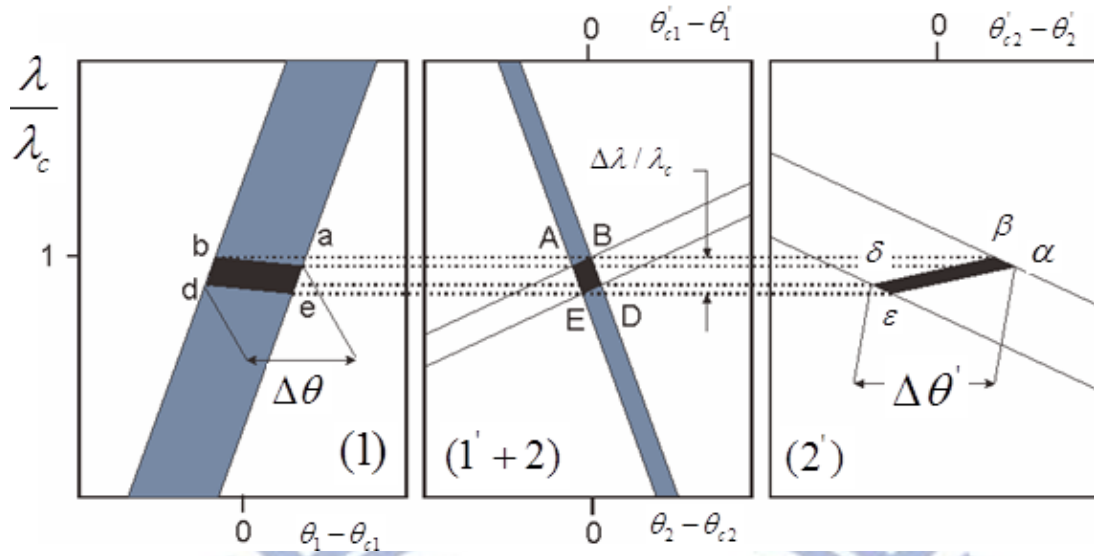


圖 3.4. 與圖 3.3 相同，另外由黑色四邊形顯示光在被兩塊晶體反射過程時相位空間上的變化。

利用式子(3.9)我們可以得到連續被兩片晶體繞射後的相對光譜寬度 $\Delta\lambda/\lambda_c=(\lambda_B-\lambda_E)/\lambda_c$

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_c} = \frac{\lambda_B - \lambda_E}{\lambda_c} = \varepsilon_1^{(s)} \tau_1 \sqrt{b_1} + \varepsilon_2^{(s)} \frac{\tau_2}{\sqrt{b_2}} \quad (3.11)$$

在晶體為(+,+)排列時，全反射區中心點的波長 λ_c 為一固定的值，且由 H_1 與 H_2 所夾角度 ψ_{12} 來決定，如圖 3.2 所示，而 ψ_{12} 的值由式子(3.6)計算。將式子(3.6)與修正後的入射光布拉格公式(2.13)-(2.14)以及修正後的出射光布拉格公式(2.24)結合，並且假設非對稱性參數為一定值，我們可以得到晶體在(+,+)排列時全反射區中心點的波長 λ_c 為：

$$\frac{1}{\lambda_c} = \frac{1}{\sin \psi_{12}} \sqrt{\frac{1}{(2d_1^*)^2} + \frac{1}{(2d_2^*)^2} + \frac{\cos \psi_{12}}{2d_1^* d_2^*}} \quad (3.12)$$

其中

$$d_1^* = \frac{d_1}{1 + \omega_1^{(s)}(1 - b_1)/2} \quad d_2^* = \frac{d_2}{1 + \omega_2^{(s)}(1 - 1/b_2)/2} \quad (3.13)$$

ψ_{12} 的變化將會使得 λ_c 的值改變，且根據式子(3.6) $\delta\theta_{c2} = \delta\psi_{12} - \delta\theta'_{c1}$ 得知 θ'_1 與 θ_2 的值也會隨 ψ_{12} 產生改變。利用 $\delta\theta'_{c1} \approx \tan \theta_{c1} \delta\lambda / \lambda$ (2.24) 以及 $\delta\theta_{c2} \approx \tan \theta_{c2} \delta\lambda / \lambda$ (2.13)，我們可以得到波長 λ_c 變化量與 ψ_{12} 之間的關係：

$$\frac{\delta\lambda_c}{\lambda_c} = \frac{\delta\psi_{12}}{\tan \theta_{c1} + \tan \theta_{c2}} \quad (3.14)$$

圖 3.4(1'+2)交集的區域 ABDE 可以投影到圖 3.4(1)的區域 abde。 θ_1 的寬度為滿足兩塊晶體連續反射時的角度接受角。角寬度的值以 $\Delta\theta$ 表示，當 $\Delta\theta = \theta_{1a} - \theta_{1d}$ ($\tau_1 |b_1| \geq 1$ 時) 最

大，當 $\Delta\theta = \theta_{1c} - \theta_{1b}$ ($\tau_1 |b_1| < 1$ 時) 最小。 θ_{1x} 的值为 ($x=a, b, c$ 或 d) 角度座標軸中 a, b, c 或 d 四個點。可以將式子(3.9)計算出來的 λ_x 代入式子(3.5)，最後可得到兩塊晶體連續反射時的角寬度：

$$\Delta\theta = \left(\varepsilon_1^{(s)} \frac{|1 - \tau_1 |b_1||}{\sqrt{|b_1|}} + \varepsilon_2^{(s)} \frac{\tau_2}{\sqrt{|b_2|}} \right) \tan \theta_{c_1} \quad (3.15)$$

光出射第二塊晶體的在 (λ, θ_2') 空間中的全反射區如圖 3.3(2') 黃色條紋所示。全反射區的邊界線由式子(3.8)計算且 $n=2$ 。當波長為 λ_c 以及原子面間距為 d_2 時，可由式子(2.24)得到出射角 θ_{c_2}' 的值。圖 3.4(1'+2) 交集的區域 ABDE 投影到圖 3.4(2') 的區域為 $\alpha\beta\varepsilon\delta$ 。當 $\Delta\theta' = \theta_{2\alpha}' - \theta_{2\delta}'$ ($\tau_2 \leq |b_2|$ 時) 最大，當 $\Delta\theta' = \theta_{2\varepsilon}' - \theta_{2\beta}'$ ($\tau_2 > |b_2|$ 時)。其中 θ_{2x}' 的值为 ($x=\alpha, \beta, \delta$ 或 ε) 角度座標軸中 α, β, δ 或 ε 四個點，由這些值可以得到光連續經過兩塊(+,+)排列的晶體之角度發散角。與計算角度接受角的方法相同，可得到：

$$\Delta\theta' = \left(\varepsilon_1^{(s)} \sqrt{|b_1|} \tau_1 + \varepsilon_2^{(s)} \sqrt{|b_2|} \left| 1 - \frac{\tau_2}{|b_2|} \right| \right) \tan \theta_{c_2} \quad (3.16)$$

與式子(3.11)、(3.15)和(3.16)相同的描述已經被 Nakayama et al. (1973) 和 Matsushita 及 Hashizume (1983) 推導。而他們將布拉格繞射時的角寬度表示為 $\Delta\theta = \varepsilon^{(s)} \tan \theta_c$ 。

如果繞射面皆相同時，其 $\varepsilon_1^{(s)} = \varepsilon_2^{(s)} = \varepsilon^{(s)}$ 、 $\tan \theta_{c_1} = \tan \theta_{c_2} = \tan \theta_c$ ，且令 $b_1 = 1/b_2$ ，而光在連續經過兩塊(+,+)排列的且繞射面皆相同的晶體時，相對光譜寬度可以表示為：

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_c} = \varepsilon^{(s)} \sqrt{|b_1|} \quad (3.17)$$

因此可以看出相對光譜寬度在(+,+)排列下且兩塊晶體的繞射面皆相同時，只與單一繞射面的相對光譜寬度 $\varepsilon^{(s)}$ 以及非對稱性參數 b 有關。與選定的波長 λ_c 及入射角 θ_c 無關。

如果 $|b_1| \ll 1$ ，則角度接受角 $\Delta\theta$ (3.15)，以及光穿越整個系統的角度發散角 $\Delta\theta'$ 可以近似為：

$$\Delta\theta = \Delta\theta' \approx \frac{\varepsilon^{(s)}}{\sqrt{|b_1|}} \tan \theta_c \equiv \frac{\Delta\theta^{(s)}}{\sqrt{|b_1|}} \quad (3.18)$$

因此，在(+,+)排列下且兩塊晶體的繞射面皆相同時，當非對稱參數 $|b_1| = 1/|b_2| \ll 1$ 將會使得角度接受角增加且同時可以降低相對光譜寬度。這樣的特性對於設計單光儀非常的重要。

由式子(3.11)、(3.15)和(3.16)可知透過選擇適當的繞射面(決定 $\epsilon^{(s)}$)，與非對稱性參數 b ，可以挑選想要的 X 光相對光譜寬度以及角寬度。因此適當的選擇這些參數將可以有效的控制相對光譜寬度、入射光的角度接受角與出射光的角度發散角。因此晶體(+,+)的組合型態是目前建造 x-ray 單光儀相當重要與實際的方法。

3.4 晶體(+,-)組合型態的繞射

接著要討論圖 3.2 晶體為(+,-)排列的繞射行為。將研究平常最常遇到的兩塊晶體繞射原子面相同的情況，且具有同樣的原子面間距 d 以及相對光譜寬度 $\epsilon^{(s)}$ 。然而雖然布拉格繞射面相同，其非對稱角的角度可能會不同 ($\eta_1 \neq \eta_2$)，而導致非對稱性參數的不同 ($b_1 \neq b_2$)。因此這裡將假設 $|b_1| < 1$ 與 $|b_2| < 1$ 。

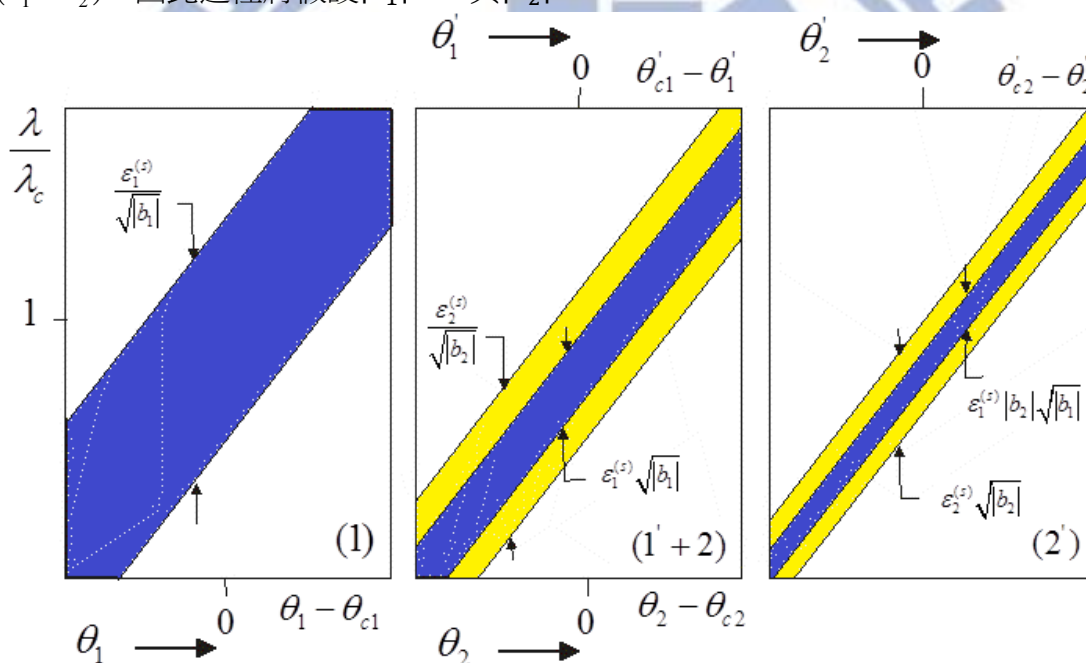


圖 3.5 在非對稱布拉格繞射下連續經過兩塊以(+,-)排列的晶體，其全反射區以 DuMond Diagram 呈現。

(1)：藍色條紋—入射第一塊晶體的全反射區。

(1' + 2)：藍色條紋—出射第一塊晶體的全反射區，黃色條紋—入射第二塊晶體的全反射區。

(2')：黃色條紋—出射第二塊晶體的全反射區，藍色條紋顯示光連續被兩塊晶體反射的相位空間。

圖 3.5(1)為入射第一塊晶體的反射區域。相同的尺度下圖 3.5(1'+2)藍色的部分為光出射

第一塊晶體的區域，黃色部分為光入射第二塊晶體的反射區域。而反射的區域範圍一樣由式子(3.5)與式子(3.8)決定。

在上一小節討論和圖3.3與3.4顯示晶體在(+,+)排列時其兩塊晶體的全反射區彼此交叉，然而晶體在(+,-)排列時則是互相平行。如圖3.5(1'+2)顯示，當它們全反射區彼此重疊時，光將可連續被兩晶體反射。造成這樣的改變原因是(+,-)排列時可連續被兩晶體反射的條件是由式子(3.4)決定，而兩塊晶體在全反射區的中心可連續反射的條件為：

$$\theta_2 - \theta_{c2} = +(\theta_1' - \theta_{c1}') \quad (3.19)$$

如同式子(3.7)連續反射的條件是由式子(3.2)得來，(3.19)也是由式子(3.4)得到。與式子(3.7)不同的地方是括號前面的正負號，導致角度尺度 $\theta_2 - \theta_{c2}$ 與 $(\theta_1' - \theta_{c1}')$ 在圖3.5(1'+2)中顯示的為同方向，但在圖3.3(1'+2)卻是以相反方向繪製。

當滿足兩塊晶體連續繞射條件發生在全反射區的中心點，如圖3.5(1'+2)所示， H_1 與 H_2 所夾角度 ψ_{12} ，可以經由式子(2.13)-(2.14)和(2.24)得到近似結果：

$$\theta_{c1}' - \theta_{c2}' = \frac{\omega^{(s)}}{2} \left(\frac{1}{b_2} - b_1 \right) \tan \theta_{c1}' \quad (3.20)$$

因假設第一二塊晶體使用相同的繞射原子面，所以 $\omega_2^{(s)} = \omega_1^{(s)} = \omega^{(s)}$ 。將式子(3.20)代入(3.4)，可得到連續被兩晶體反射的條件：

$$\psi_{12} = \pi + \frac{\omega^{(s)}}{2} \left(\frac{1}{b_2} - b_1 \right) \tan \theta_{c1}' \quad (3.21)$$

由式子(3.21)得知角度 ψ_{12} 與選定的波長 λ_c 無關。這樣的情形反而跟繞射發生在晶體(+,+)排列時，其角度 ψ_{12} 與波長 λ_c (3.12)有明確關係相反。因此我們稱(+,+)排列的晶體為色散組合型態，(+,-)排列的晶體(相同的繞射原子面)為非色散組合型態。

若角度 ψ_{12} 與式子(3.21)算出來的值不同時，全反射區將不會重疊，因此光將不會連續的被兩晶體反射。

圖3.5(2')中黃色條紋為光出射第二塊晶體的全反射區。藍色條紋為同時被第一二塊反射的區域，其條紋寬度為 $\varepsilon^{(s)} |b_2| \sqrt{b_1}$ ，且邊界線範圍：

$$\frac{\lambda - \lambda_c}{\lambda_c} = \frac{\theta_2' - \theta_{c2}'}{\tan \theta_{c2}'} \pm \frac{\varepsilon^{(s)}}{2} |b_2| \sqrt{b_1} \quad (3.22)$$

$$\theta_1' \rightarrow$$

$$\theta_2' \rightarrow$$

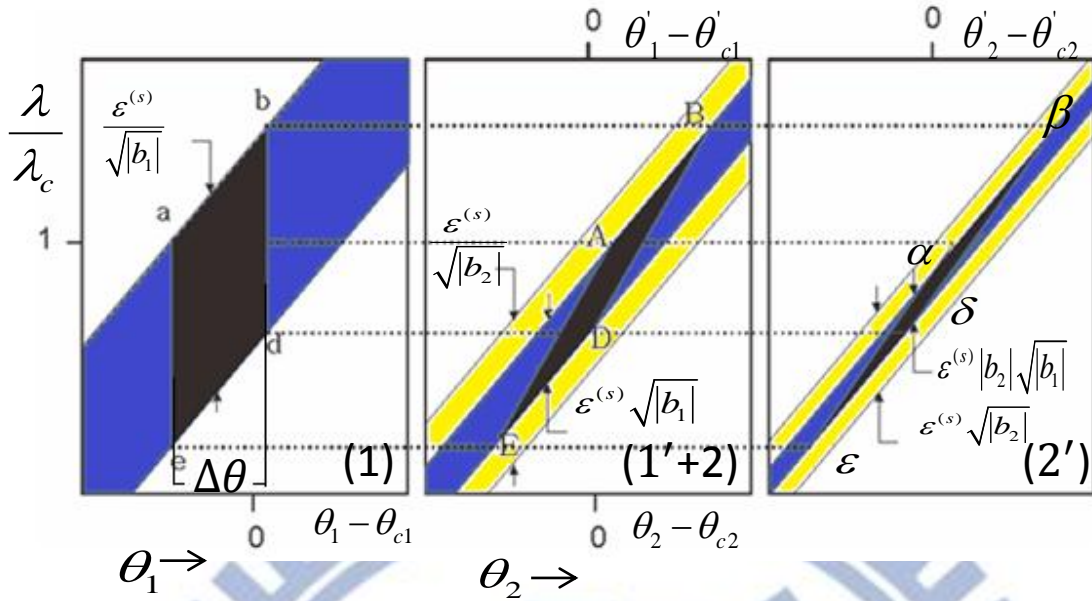


圖 3.6. 如圖 3.5 所示。此外，(1)的藍色條紋中的為入射第一塊晶體的全反射區而當中的 abde 黑色平行四邊形為部分的全反射區且入射角的角寬度為 $\Delta\theta$ ，平行四邊形 ABDE 與 $\alpha\beta\gamma\delta$ 分別為出射第一塊與第二塊晶體在空間轉換後的反射區域。

式子(3.22)中 b_1 有開根號而 b_2 則無，所以對於角度寬度的改變，第二塊晶體影響最大。在固定波長的情況下，連續被兩晶體反射後的角寬度為：

$$\Delta\theta' = \Delta\theta^{(s)} |b_2| \sqrt{b_1} \quad (3.23)$$

其中 $\Delta\theta^{(s)} = \varepsilon^{(s)} \tan \theta_c$ 為對稱布拉格繞射時的角度寬度。

概括上述的結論，若將此結果應用在 n 個晶體並且以 $(+,-,+,-,\dots)$ 直線前線排列，可推導出光在固定波長下，經過連續經過 n 個晶體以 $(+,-,+,-,\dots)$ 非色散組合型態排列的角寬度：

$$\Delta\theta' = \Delta\theta^{(s)} |b_n \dots b_3 b_2| \sqrt{b_1} \quad (3.24)$$

儘管因為參數 $|b_2| \sqrt{b_1}$ 的關係，全反射區的範圍在經過兩塊非對稱幾何繞射後被急遽的壓縮，但相對光譜寬度在光連續被兩晶體反射後並不會改變，這樣的情形可以由圖 3.6 觀察。入射第一塊晶體的反射區 abde，轉換成出射第一塊晶體的 ABDE，最後轉換成為出射第二塊晶體的反射區 $\alpha\beta\gamma\delta$ 。儘管全反射區的寬度變得很小，然而相對光譜寬度在連續繞射發生時仍維持不變，即表示不受第二塊晶體反射的影響。

3.5 晶體 $(+,-,-,+)$ 組合型態的繞射

由前面兩小節整理得知，當布拉格繞射發生在兩塊非對稱性幾何晶體以(+,-)排列時，儘管角度對波長空間中的全反射區寬度會大幅的壓縮，但對於相對光譜寬度卻不會改變；相較之下，兩塊晶體以(+,+)排列時可同時限制角度與波長範圍，提供了一個產生很小相對光譜寬度與角度寬度的可能性。

我們將四塊晶體標籤如 $n=1,2,3$ 和 4 。第一對組合的晶體($n=1,2$)以(+,-)的非色散組合排列如圖 3.2(b)。同樣的第二對晶體($n=3,4$)也以(+,-)的非色散組合排列。然而第一對組合的第二塊晶體($n=2$)與第二對組合的第一塊晶體($n=3$)卻是(-,-)的色散組合排列。而最後整體四塊晶體的組合型態可以以(+,-,-,+)來形容。

如同前面章節所介紹，在選定波長為 λ_c 時，我們將利用參數 $H_n, d_n, \epsilon_n^{(s)}, b_n$ 以及 θ_{cn} 來表示光在布拉格繞射下的特性。並且這邊假設每一對晶體的布拉格繞射面皆相同，所以每一對的原子面間距以及相對光譜寬度可以視作相同： $d_1 = d_2, d_3 = d_4$ 和 $\epsilon_1^{(s)} = \epsilon_2^{(s)}, \epsilon_3^{(s)} = \epsilon_4^{(s)}$ 。非對稱性參數可以為任意值，然而更具體來說，這邊我們將考慮 $n=1,2$ 為 $|b_n| < 1$ ，而 $n=3,4$ 為 $|b_n| > 1$ ，如圖 3.7 所示。

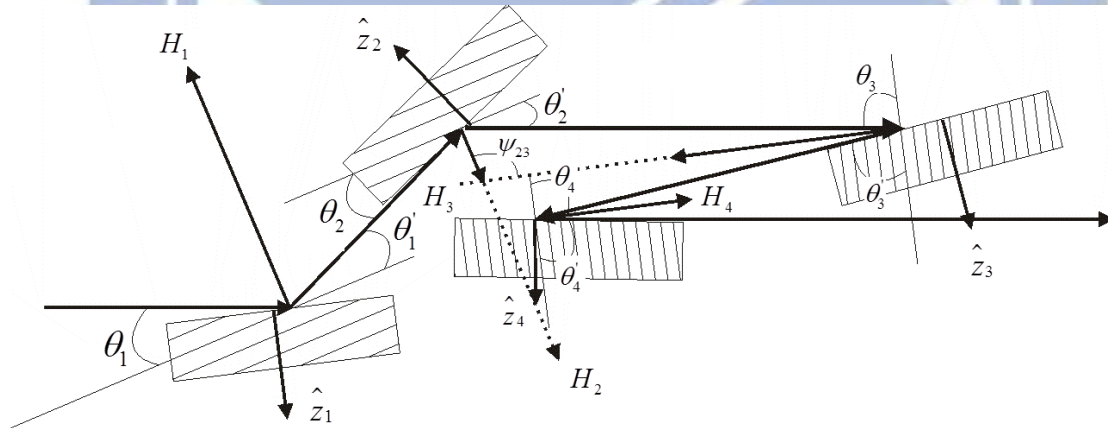


圖 3.7 連續被四塊非對稱幾何晶體以(+,-,-,+)排列的繞射示意圖

在選定的波長為 λ_c 下，出射第二塊晶體的前兩塊晶體($n=1,2$)全反射區在圖 3.8(2'+3)以綠色條紋且寬度為 $\epsilon_1^{(s)} |b_2| \sqrt{b_1}$ 呈現，而這已在上一小節(圖 3.5)以 DuMond Diagrams 介紹。其反射區域條紋寬度為 $\epsilon_1^{(s)} |b_2| \sqrt{b_1}$ 。而寬度為 $\epsilon_3^{(s)} / \sqrt{b_3}$ 的藍色條紋是入射第三塊晶體的全反射區。第二塊與第三塊為(-,-)色散型的組合排列，因此全反射區的角度尺度將會相反。而出射第三塊晶體與入射第四塊晶體以及出射第四塊晶體將分別在圖 3.8(3'+4)和圖 3.8(4')呈現。

光入射第三塊晶體且連續的被第三與第四塊晶體繞射的全反射區如圖 3.8(2'+3) 寬度為 $\varepsilon_4^{(s)} / |b_3| \sqrt{|b_4|}$ 的紫色條紋所示。

圖 3.8(2'+3) 與圖 3.9(2'+3) 白色交集的地方 ABDE 是可以連續被四塊晶體反射的區域，表現在出射第二塊晶體與入射第三塊晶體的空間中。區域 ABDE 也可被投影在其他的空間，如圖 3.9(4') 的 $\alpha\beta\varepsilon\delta$ ，都是相同的全反射區，然而 $\alpha\beta\varepsilon\delta$ 表達的是在波長與角度空間中出射第四塊晶體的光。

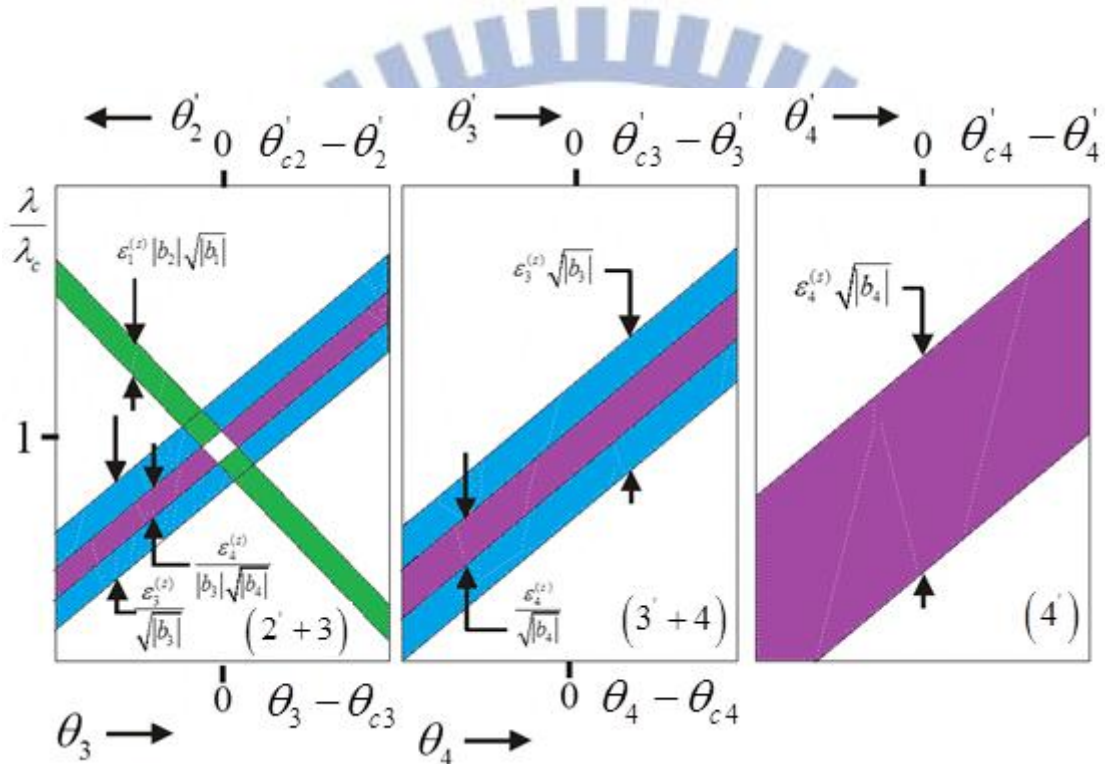


圖 3.8 在非對稱布拉格繞射下連續經過四塊以(+,-,-,+)排列的晶體，其全反射區以 DuMond Diagram 呈現。

(2'+3)：綠色條紋為光出射第二塊晶體的前兩塊晶體在空間中之全反射區一如圖 3.5。藍色條紋為光入射第三塊晶體的全反射區。紫色條紋為光入射第三塊晶體的三四塊晶體在空間中的反射區域。

(3'+4)：藍色條紋為光出射第三塊晶體的全反射區，紫色條紋為入射第四塊晶體的全反射區。

(4')：紫色條紋為光出射第四塊晶體的全反射區。

與前面在 3.3 小節推導式子(3.11), (3.15)和(3.16)的過程相同，我們可以得到光被四塊晶體反射後的相對光譜寬度：

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_c} = \varepsilon_2^{(s)} \tau_2 |b_2| \sqrt{|b_1|} + \varepsilon_3^{(s)} \frac{\tau_3}{|b_3| \sqrt{|b_4|}} \quad (3.25)$$

其中

$$\tau_2 = \frac{\tan \theta_{c2}}{\tan \theta_{c2} + \tan \theta_{c3}}, \tau_3 = \frac{\tan \theta_{c3}}{\tan \theta_{c2} + \tan \theta_{c3}}$$

被四塊晶體繞射的角寬度(接受角)為:

$$\Delta\theta = \left(\varepsilon_2^{(s)} \frac{|1 - \tau_2 |b_1 b_2||}{\sqrt{|b_1|}} + \varepsilon_3^{(s)} \frac{\tau_3}{|b_3| \sqrt{|b_4|}} \right) \tan \theta_{c2} \quad (3.26)$$

光被四塊晶體連續反射後的角度發散角為:

$$\Delta\theta' = \left(\varepsilon_2^{(s)} |b_2| \sqrt{|b_1|} \tau_2 + \varepsilon_3^{(s)} \sqrt{|b_4|} \left| 1 - \frac{\tau_3}{|b_3 b_4|} \right| \right) \tan \theta_{c3} \quad (3.27)$$

上述的結果與前面小節(+,+)色散組合型態中的式子(3.11), (3.15)和(3.16)比較, 格式很相似, 因為第一二塊(+,-)為一對非色散的組合, 而第三四塊(-,+)為另一對非色散組合與第一二塊相似, 因此將第一二對合在一起即形成類似像(+,+)色散的組合。

為(+,-,+,-)排列的四塊晶體, 連續被四塊晶體繞射的全反射區中心點的波長 λ_c , 可由 H_2 與 H_3 的夾角 ψ_{23} 來決定, 如圖 3.7 所示。與前面 3.3 小節計算 λ_c 的方法利用式子(3.12)-(3.13)相同, 只是將 ψ_{12} 中的 1 改成 2, 而 2 改成 3。而夾角 ψ_{23} 的變化量對於與中心波長 λ_c 的影響為:

$$\frac{\delta\lambda_c}{\lambda_c} = \frac{\delta\psi_{23}}{\tan \theta_{c2} + \tan \theta_{c3}} \quad (3.29)$$

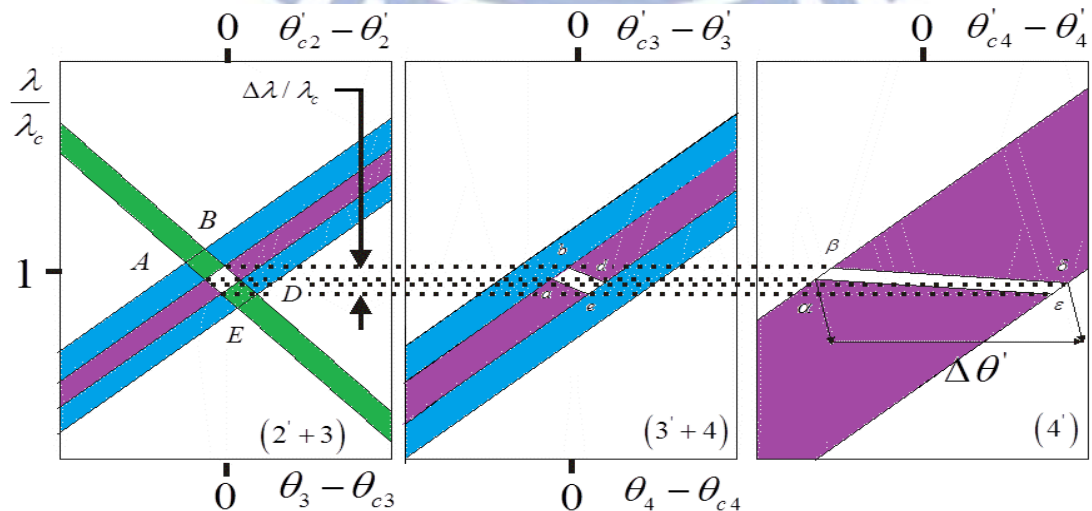


圖 3.9. 如圖 3.8 所示，顯示白色四邊形在四塊晶體反射過程中的相位空間上之變化。

為了將(3.25)-(3.27)的式子簡化，我們讓四塊晶體的繞射原子面皆相同，使得

$\varepsilon_2^{(s)} = \varepsilon_3^{(s)} = \varepsilon^{(s)}$, $\tan \theta_{c2} = \tan \theta_{c3} = \tan \theta_c$ ，另外讓 $b_1 = 1/b_4$, 且 $b_2 = 1/b_3$ 。在這些條件之下，
(+,-,-,+)組合型態的相對光譜寬度變為 (Yabashi et al. 2001):

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_c} = \varepsilon^{(s)} |b_2| \sqrt{b_1} \quad (3.30)$$

此外我們假設 $|b_1| \ll 1$ 並代入式子(3.26)與(3.27)，可以使得角度接受角 $\Delta\theta$ 與穿過整個系統的角度發散角 $\Delta\theta'$ 表示為:

$$\Delta\theta = \Delta\theta' \cong \frac{\varepsilon^{(s)}}{\sqrt{|b_1|}} \tan \theta_c \cong \frac{\Delta\theta^{(s)}}{\sqrt{|b_1|}} \quad (3.31)$$

將結果與式子(3.17)及(3.18)比較發現與兩塊晶體(+,+)排列的結果相似。另一個很重要的值是式子(3.30)中的非對稱性參數 $|b_2|$ 。與兩塊晶體為(+,+)排列時相比，當選擇 $|b_2| \ll 1$ 時將會使得光在四塊晶體為(+,-,-,+)排列時的相對光譜寬度急遽的縮小。換句話說，適當的選擇非對稱性參數 b 可以使得以(+,-,-,+)排列的四塊晶體有更好的濾波效果。

與兩塊晶體(+,+)排列的結果比較，入射光的角度接受角以及穿過整個系統的角度發散角幾乎維持不變。

第四章 X 光 Fabry-Perot 共振腔

Fabry-Perot 共振腔在 1899 年被 Fabry 和 Perot 兩人所發明[3,4]，在過去的一個世紀中被廣泛地運用在可見光光學中，由於能量解析度高，是產生 laser 的重要元件之一。由於它所產生的干涉條紋相當細銳，可用於精確的量測波長，應用於原子光譜學、天文學及其他生命科學等方面。因擁有很高的能量解析度所以也被拿來做為干涉儀使用，是雷射共振腔的基本構造。

X 光共振腔與光學共振腔相似，皆是用兩片高反射率的反射面組成平行腔長，使得光在平面之間進行多次反射。但兩者造成反射的原因不同，以下將在 4.1 小節與 4.2 小節針對光學共振腔與 X 光共振腔進一步各別探討。而在 4.3 小節將討論同調時間對於光以及共振腔的影響

4.1 光學共振腔

最簡單的 Fabry-Perot 共振腔主要是由兩片高反射率且無吸收的平行鏡面所組成。假設在兩平面鏡間的介質折射率為 n_g ，兩平面鏡外的介質折射率為 n 。若光是從外部介質的方向進入共振腔內，則反射面的反射率與穿透率為 r 與 t 。相同地，若光從共振腔內部往平面鏡外部出射，則反射率與穿透率為 \tilde{r} 與 \tilde{t} 。

如圖 4.1 所示，兩平面鏡作為反射面。當入射光進入第一片平面鏡與第二片平面鏡皆會發生部分穿透與部分反射，而部分穿透第一片平面鏡的光會與在第一二片平面鏡來回一次或 n 次反射的光互相干涉。

穿透光在經過總共 $2p$ 次的連續反射的強度為 $E_p = E_0 \tilde{t}^{2p} \exp(ip\delta\varphi)$ 。而 $\delta\varphi = K\Lambda$ 為兩相鄰光的相位差， Λ 為兩相鄰光的光程差， $K = 2\pi/\lambda$ 為波數， $\lambda = c/2\pi\omega$ 為波長，入射角為 θ ， E_0 為強度。兩相鄰穿透光的光程差為

$$\Lambda = n_g(AB + BC) - nAD = n_g \frac{2d_g}{\sin\theta_g} - n \overline{AC} \cos\theta \quad \circ$$

(4.1)

由司乃耳定律得知 $n \sin(90 - \theta) = n_g \sin(90 - \theta_g)$ ，整理後為 $n \cos\theta = n_g \cos\theta_g$

且 $\overline{AC} = 2d_g \cot\theta_g$ 代回(4.1)後得

$$\Lambda = n_g \frac{2d_g}{\sin\theta_g} - n 2d_g \cot\theta_g \times \frac{n_g}{n} \cos\theta_g = 2d_g n_g \sin\theta_g$$

(4.2)

若以入射角 θ 來表示光程差，並利用 Snell' s law

$$n^2 \cos^2 \theta = n_g^2 \cos^2 \theta_g = n_g^2 (1 - \sin^2 \theta_g), \quad (4.3)$$

整理為 $n_g \sin\theta_g = \sqrt{n_g^2 - n^2 \cos^2 \theta}$ 再將結果帶回(4.2)得到

$$\Lambda = 2d_g \sqrt{n_g^2 - n^2 \cos^2 \theta}$$

(4.4)

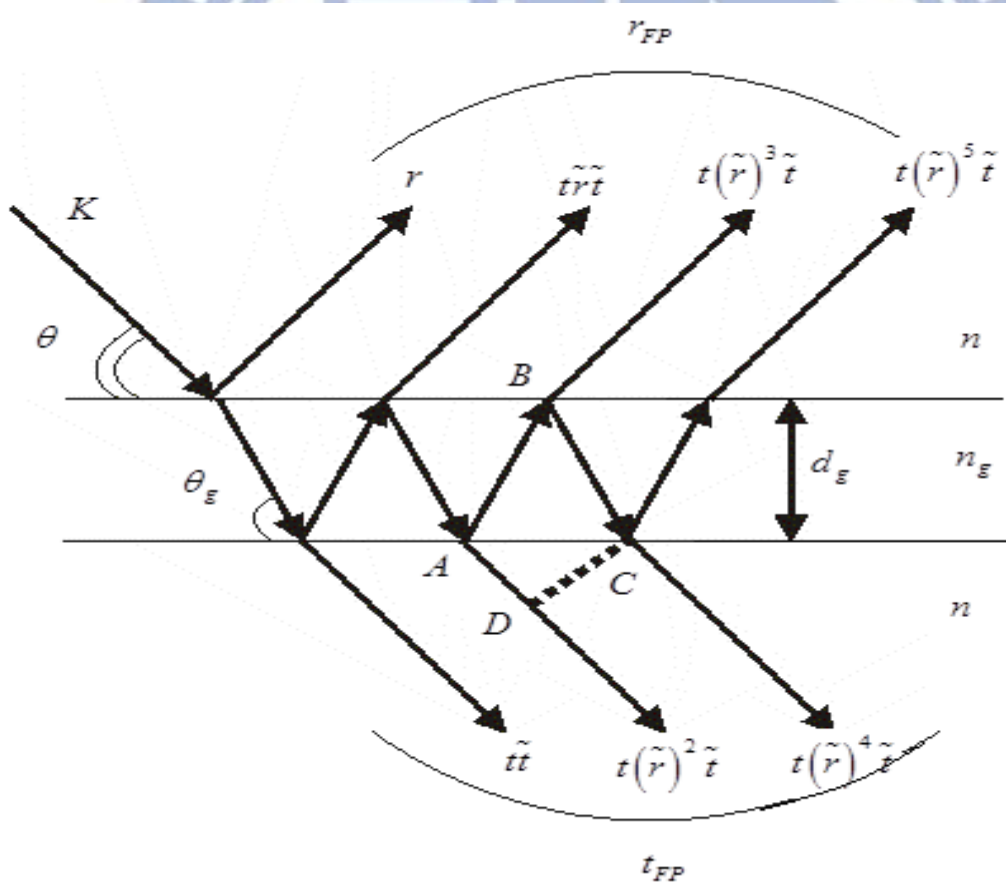


圖 4.1.在光學 Fabry-Perot 共振腔中多光構造的示意圖。

假設入射光的強度為 E_0 ，則所以可能在兩片鏡面間發生來回一次反射至來回 P 次反射的

穿透光強度總和為

$$E_t = \sum_{p=0}^{\infty} E_{tp} = E_0 \sum_{p=0}^{\infty} \tilde{t} \tilde{r}^{2p} \tilde{t} \exp(ip\delta\varphi) \quad (4.5)$$

上式可化簡為

$$\begin{aligned} E_t &= E_0 (\tilde{t} \tilde{t} + \tilde{t} \tilde{r}^2 \tilde{t} \exp^{i\delta\varphi} + \tilde{t} \tilde{r}^4 \tilde{t} \exp^{i2\delta\varphi} + \tilde{t} \tilde{r}^6 \tilde{t} \exp^{i3\delta\varphi} + \dots) \\ &= E_0 \frac{\tilde{t} \tilde{t}}{1 - \tilde{r}^2 \exp(i\delta\varphi)} \end{aligned} \quad (4.6)$$

令平面鏡的反射率 $R = |\tilde{r}^2|$ ，穿透率 $T = |\tilde{t} \tilde{t}|$ ，反射造成的相位改變為 $\phi_R = \arg[\tilde{r}^2]$ ，穿透造成的相位改變為 $\phi_T = \arg[\tilde{t} \tilde{t}]$ 。將上述這些符號代入穿透波與入射波強度的比值：

$$t_{FP} = \frac{E_t}{E_0} = \frac{|\tilde{t} \tilde{t}| \exp(i\phi_T)}{1 - |\tilde{r}^2| \exp(i(\delta\varphi + \phi_R))} = \frac{T \exp(i\phi_T)}{1 - R \exp(i\varphi_A)} \quad (4.7)$$

其中

$$\varphi_A = 2Kd_g \sqrt{n_g^2 - n^2 \cos^2 \theta} + \phi_R \quad (4.8)$$

稱 φ_A 為 Airy phase；而 Fabry-Perot 共振腔的穿透係數 T_{FP} 為

$$T_{FP} = |t_{FP}|^2 = \frac{T^2}{1 + R^2 - 2R \cos(\varphi_A)} = \frac{T^2}{(1 - R)^2 + 4R \sin^2(\varphi_A / 2)} \quad (4.9)$$

$$\text{定義 } F \text{ 為: } F = \frac{4R}{(1 - R)^2} \quad (4.10)$$

將式子(4.10)帶入式子(4.9)整理後為

$$T_{FP} = \frac{1}{1 + F \sin^2(\varphi_A / 2)} \quad (4.11)$$

式子(4.11)即為光的 Airy formula，描述光在兩片平行鏡面內多次反射後的穿透強度分布圖。利用同樣的方法可以得到整個系統的反射係數 R_{FP} 。若不考慮吸收的情況之下，反射係數可簡單的由式子 $R_{FP} = 1 - T_{FP}$ 計算。

利用(4.11)式可繪出穿透率 T_{FP} 與相位 φ_A 的關係圖，如圖 4.2 所示，並分別計算在不同平面鏡反射率 R 與 F 的情形。相鄰共振峰值的週期由 φ_A 決定，相位差固定為 2π 。圖型的峰值分別代表著第 $m-1$ 、 m 、 $m+1$ 的干涉條紋。當平面鏡反射率 R 越大，穿透圖型的干

干涉條紋將會變得更細銳，也就是說反射率提高後有更多的光會在共振腔裡來回反射。

兩相鄰共振峰值條紋間距(2π)與峰值半寬高($\Delta\varphi_A$)的比值稱為 finesse:

$$F^* = 2\pi / \Delta\varphi_A \quad (4.12)$$

當 $T = 0.5$ 時，可由式子(4.11)求得兩相位 φ_1 、 φ_2 ，各為

$$\sin(\varphi_1 / 2) = \frac{-1}{\sqrt{F}} \quad (4.13)$$

$$\sin(\varphi_2 / 2) = \frac{1}{\sqrt{F}} \quad (4.14)$$

若半高寬夠小的話，則 $\sin(\varphi_2 / 2) - \sin(\varphi_1 / 2)$ 表示為

$$\Delta\varphi_A = \varphi_2 / 2 - \varphi_1 / 2 = \frac{1}{\sqrt{F}} - \left(\frac{-1}{\sqrt{F}}\right) = \frac{2}{\sqrt{F}} \Rightarrow \Gamma = \frac{4}{\sqrt{F}} \quad (4.15)$$

因此將式子(4.15)代入式子(4.12)可得

$$F^* = \frac{\pi\sqrt{F}}{2} = \frac{\pi\sqrt{R}}{1-R} \quad (4.16)$$

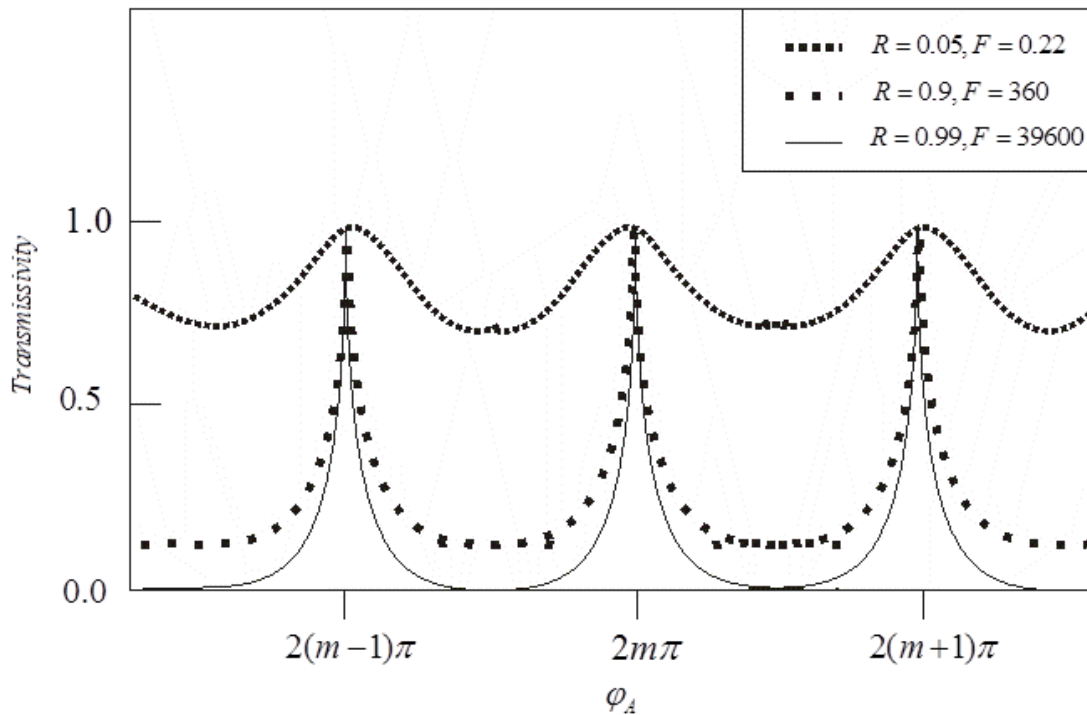


圖 4.2. Fabry-Perot 共振腔的穿透率 T 對相位 φ_A 的關係圖。曲線由式子(4.11)計算，並比較不同反射率 R 時曲線的差別，其中 $F = 4R / (1-R)^2$ 。

可以經由改變兩片平面鏡的間距 d_g ，來觀察干涉圖型的改變，這樣的儀器稱作 Fabry-Perot interferometers。因為相位 φ_A 與間距 d_g 成正比，因此以 d_g 為橫軸的干涉圖型將會與圖 4.2 相似。相同地，我們將間距 d_g 固定然後改變入射光的頻率，而這樣的儀器我們稱作 Fabry-Perot etalons。若以頻率(能量)為橫軸的所描繪的干涉圖型，也會跟圖 4.2 相似。而以能量為橫軸的干涉圖形中兩相鄰的干涉條紋間距為

$$E_f = \frac{hc}{2d_g \sin \theta}, \quad (4.17)$$

稱作自由光譜範圍(free spectral range)。以能量尺度為橫軸的干涉條紋半寬高為

$$\Gamma = \frac{E_f}{F^*}. \quad (4.18)$$

當垂直入射鏡面時，由鏡面間所夾距離可以得到自由光譜範圍，而 finesse F^* 可由鏡面的反射率計算得到，由這兩個數值的比值可以估算干涉條紋的半高寬。

4.2 X 光 Fabry-Perot 共振腔

4.1 小節大致上介紹了 Fabry-Perot 共振腔的結構與特性，接下來我們要將 Fabry-Perot 共振腔的原理應用在 X 光上。由於 X 光能量高波長短且穿透性強，因此與一般傳統光學共振腔使用鏡面當反射面不同，而是利用晶體的原子面作為反射面，如圖 4.4 所示。

4.2.1 一般 x 光共振腔的方程式

X 光 Fabry-Perot 共振腔是由兩片互相平行的完美晶體組成，厚度分別為 d 與 \tilde{d} ，間距為 d_g (介質不會產生繞射)，如圖 4.3(a)。

兩片晶體的相對位置可以由向量 u 來表示。當 $u=0$ 的時候，即等於兩片晶體合而為一，成為厚度為 $d + \tilde{d}$ 的單一晶體，如圖 4.3(b)。而間距 d_g 以 u 表示為 $d_g = u\tilde{z}$ 。

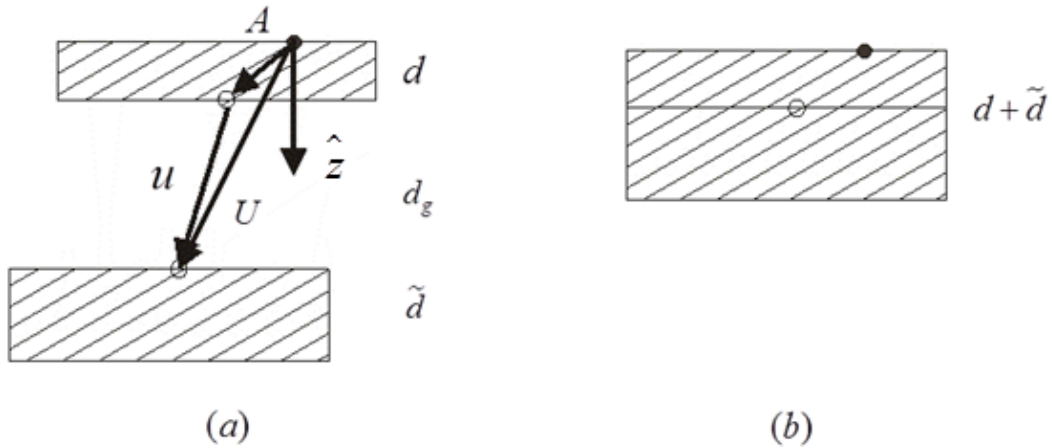


圖 4.3.(a)晶體在 X 光共振腔的排列。兩塊平行的晶體厚度分別為 d 和 d ，且間距為 d_g ； \hat{z} 為晶體表面的法向量。反射的原子面以平行的斜線表示。晶體的相對位置可以用兩種方式來表達，分別為平移向量 u 或 U 。當平移向量 $U=0$ 時表示兩塊晶體的上方表面以及繞射原子面重疊在一起。平移向量 u 則表示兩塊晶體組合成單一晶體厚度為 $d + \tilde{d}$ ，如圖 4.3(b)所示。 $A = U - u$ 為晶格的平移週期(translation period)。

兩片晶體的相對位置也可以由平移向量 U 來表示，當 $U=0$ 時，表示為 X 光入射兩塊晶體的人射面重疊在一起。此外，原子的位置也必須重疊在一起。令 $U - u = A$ ，其中 $A = \sum_{i=1}^3 n_i a_i$ 為晶格的平移週期(translation period)， a_i 為單位晶格向量， n_i 為任意整數。向量 A 為第一塊晶體上表面與下表面兩點的連線，可寫成 $d = A \hat{z}$ 或是 $d = U_z - d_g$

入射光進入第一塊晶體後，部分的光直接被第一塊晶體反射，部分的光進入共振腔之內來回的一次反射或 n 次反射後再穿出第一塊晶體，如圖(4.4)。同樣的，穿透出第二塊晶體的穿透光，有一次直接穿透，也有在共振腔內 n 次反射後再穿透出第二塊晶體。因此 Fabry-Perot 共振腔的反射率與穿透率的強度為所有可能路徑的總合。各個路徑的強度都互相有關聯性，為反射和穿透強度的乘積，與兩片晶體的間距也有關。

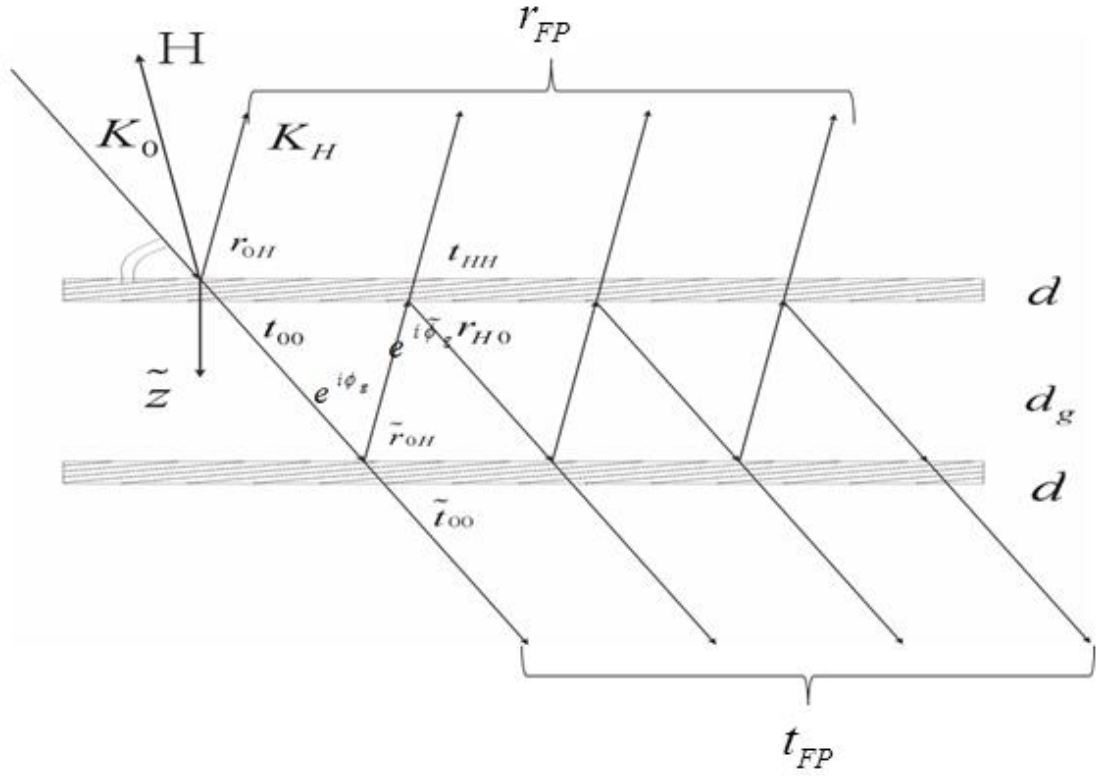


圖 4.4. 兩片平行且完美的晶體取代高反射率鏡子的 X 光 Fabry-Perot 共振腔

從第一塊晶體上表面入射共振腔的方向，反射強度為 $r_{0H}(d)$ 、穿透強度為 $t_{00}(d)$ ，由下表面出射共振腔方向的反射強度為 $r_{HO}(d)$ 、穿透強度為 $t_{HH}(d)$ 。

第二塊晶體相對於第一塊晶體的偏移量為向量 U ，因此入射第二塊晶體上方表面的反射強度與入射第一塊晶體上方表面的關係式為：

$$\tilde{r}_{0H}(d) = r_{0H}(d) \exp(iHU) \quad (4.19)$$

其中 H 是倒晶格的向量。光從上方表面穿透第一二塊晶體的強度皆相同：

$$\tilde{t}_{00}(d) = t_{00}(d) \quad (4.20)$$

入射光 K_0 與反射光 K_H 在兩片晶體間距內傳播時，強度需分別乘上 $e^{i\phi_s}$ 與 $e^{-i\phi_s}$ 。而 ϕ_s 為光在晶體間距內從第一塊晶體傳遞至第二塊晶體所產生的相位， ϕ_g 為光在晶體間距內從第二塊晶體傳遞至第一塊晶體所產生的相位。利用圖(4.4)中的符號，將所有可能路徑的反射的光與穿透光分別疊加起來，可以得到整體的反射光與穿透光的強度係數

$$r_{FP} = r_{0H} + t_{00} e^{i\phi_s} \tilde{r}_{0H} e^{-i\phi_s} (t_{HH} + r_{HO} e^{i\phi_g} \tilde{r}_{0H} e^{-i\phi_s} (t_{HH} + \dots) \quad (4.21)$$

$$t_{FP} = t_{00} e^{i\phi_g} (\tilde{t}_{00} + \tilde{r}_{0H} e^{i\phi_g} r_{H0} e^{i\phi_g} (\tilde{t}_{00} + \dots)) \quad (4.22)$$

上述級數整理可得：

$$r_{FP} = r_{0H} + t_{00} \tilde{r}_{0H} t_{HH} e^{i(\phi_g + \phi_g)} \left[1 + \sum_{m=1}^{\infty} (r_{H0} \tilde{r}_{0H} e^{i(\phi_g + \phi_g)})^m \right], \quad (4.23)$$

$$t_{FP} = t_{00} \tilde{t}_{00} e^{i\phi_g} \left[1 + \sum_{m=1}^{\infty} (r_{H0} \tilde{r}_{0H} e^{i(\phi_g + \phi_g)})^m \right]. \quad (4.24)$$

此級數總和最後簡化為

$$r_{FP} = r_{0H} + \frac{t_{00} t_{HH} \tilde{r}_{0H} e^{i(\phi_g + \phi_g)}}{1 - r_{H0} \tilde{r}_{0H} e^{i(\phi_g + \phi_g)}}, \quad (4.25)$$

$$t_{FP} = \frac{t_{00} \tilde{t}_{00} e^{i\phi_g}}{1 - r_{H0} \tilde{r}_{0H} e^{i(\phi_g + \phi_g)}}. \quad (4.26)$$

共振腔整體的穿透係數與反射係數為：

$$R_{FP} = |r_{FP}|^2, \quad (4.27)$$

$$T_{FP} = |t_{FP}|^2. \quad (4.28)$$

若無考慮吸收效應，則可直接寫成 $R_{FP} = 1 - T_{FP}$ 。在這情況下分析 X 光共振腔的反射率與穿透率會比較直接。

4.3 干涉條紋

想要觀測到共振現象並不容易，但我們可以經由能量掃描的方式，觀察強度對能量的共振干涉條紋。若圖形出現許多的波峰與波谷，如圖 4.5 所示，表示著反射光與穿透光來回的在 gap 裡面互相的交互作用，產生共振反應，形成所謂的干涉條紋。但是在實驗上要滿足產生共振條紋的條件，並不是那麼容易達成。因此以下分成能量解析度與同調時間來討論這些條件。

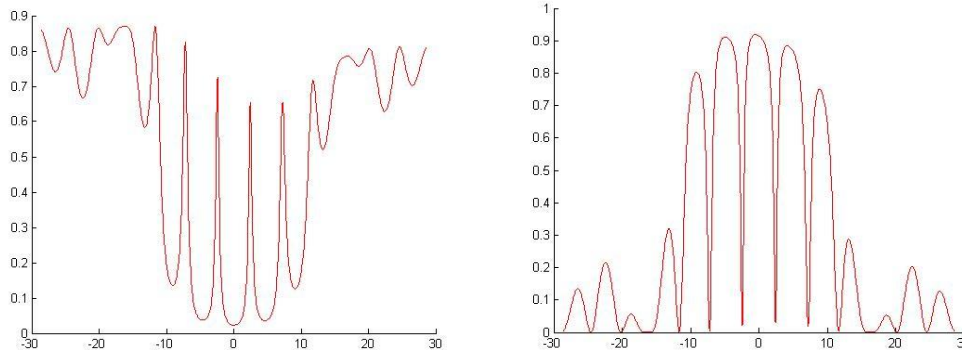


圖 4.5.在能量掃描下穿透光(左)與反射光(右)的共振情形

4.3.1 解析度的條件

X 光 Fabry-Perot 共振腔在能量掃描下的干涉條紋，峰與峰之間的距離(free spectral range，簡稱 FSR)為 $E_d = hc / (2d)$ ， h 與 C 分別為普朗克常數與光速、 d 的有效長度為兩片晶體的間距 d_g 加上一片晶體的厚度 d_c (假設兩片晶體的厚度一樣)，而 $d = d_g + d_c$ 。

假設 Γ 是條紋的半寬高， ΔE 是入射光的能量解析度，若要在能量掃描之下能看到干涉條紋，則必須滿足下列條件:

$$\Delta E < E_d, \quad (4.29)$$

$$\Delta E < \Gamma, \quad (4.30)$$

$$\Gamma \leq E_d. \quad (4.31)$$

入射光的能量寬度必須小於峰值半寬高，才可以看到有單一波峰或波谷的存在；同時入射光的能量寬度也必須小於 FSR，才可以鑑別出有兩個峰值的存在；最後半寬高也必須小於 FSR。因此必須謹慎的調整入射光的能量寬度以及共振腔晶體厚度與間距，滿足這三項條件才可觀測到干涉條紋。

4.3.2 時間同調性與相干長度

同調性可以分為縱向的時間同調性以及橫向的空間同調性。後者與光源的尺寸有關，若光在背向繞射(入射角接近 90 度)入射晶體，因發散角度較小所以目前同步輻射中心與 spring8 皆能滿足橫向的空間同調性，因此接下來將針對縱向的時間同調性來做討論。

根據測不準原理 $(\Delta t)(\Delta E) \cong \hbar$ ，我們可估計入射光的同調時間 Δt 。利用式子(4.30)的倒數與 FSR 結合，得到在時間上條件：

$$\Delta t(= \hbar / \Delta E) > t_f / 2\pi(= \hbar / E_d = 2d / 2\pi \cdot c), \quad (4.32)$$

其中 t_f 是光子在共振腔兩片晶體間來回一次的時間。若滿足上式條件，意味著穿透第一塊晶體的光與來回一次的二次反射光可以互相干涉(穿透光與二次反射光為同一個行徑方向)。如果 Δt 大於 t_f 很多，表示著二次反射光有非常多的機會可以和穿透光發生建設性干涉與破壞性干涉，而產生強度對時間的震盪條紋。若光子在共振腔內共振(無吸收)，則繞射強度在來回幾次的反射後仍可維持不變。換句話說，如果不滿足干涉的條件以及考慮晶體吸收的情況下，繞射強度會持續地減弱。

縱向的同調相干長度定義為：

$$l_L = \langle \lambda^2 / \Delta \lambda \rangle = \langle \lambda / (\Delta E / E) \rangle; \quad (4.33)$$

將式子(4.29)代入(4.33)，整理可得：

$$l_L = \lambda \left(\frac{E}{\Delta E} \right) > \lambda \left(\frac{E}{E_d} \right) = \lambda \left(\frac{hc}{\frac{\lambda}{hc}} \right) = 2d. \quad (4.34)$$

式子(4.35)表示入射光縱向的同調相干長度必須大於 $2d$ 。

第五章 實驗過程與準備

本次實驗是在日本 Spring-8 同步輻射的 Taiwan undulator beam line BL12XU 進行，且儲存環在能量 8Gev、電流 100mA 下運轉。如圖 5.1 所示，入射光先由兩片矽(111)晶體以(+,-)型態排列的單光儀(Double crystal monochromator，簡稱 DCM)初步的選擇能量，穿過 slits 後再經由四片矽晶體以(+,-,-,+)型態排列的高解析度四晶單光儀(four-crystal monochromator)得到能量在 14.3147keV 的光。接著入射光穿過可量測穿透光與反射光的 ion chamber，使光打在座落在八環繞射儀的樣品上，利用 pin-diode 探測器收集繞射穿透光強度。共振腔之晶向如圖 5.1 右下角方向所示(入射光沿 $[0\ 0\ \bar{1}]$)。

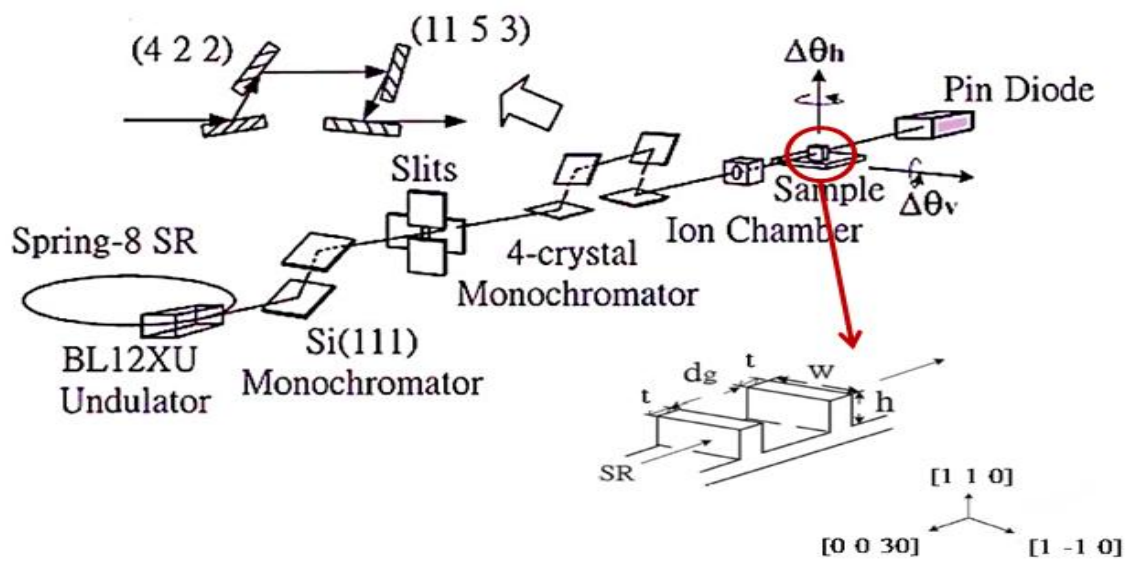


圖 5.1 實驗流程圖[19]。

5.1 實驗準備

我們利用 autocad 程式設計各個不同組合的共振腔圖型，如圖 5.1，再將檔案送交交大奈米中心製作光罩，而製做好的光罩最後交給清大動機實驗室，請他們運用微蝕刻的技術，在 normal 方向為 $(1\ 1\ 0)$ 的藍寶石晶體表面上製作大小數十到數百 μm 的共振腔，蝕刻完的共振腔如圖 5.2-5.3 所示。

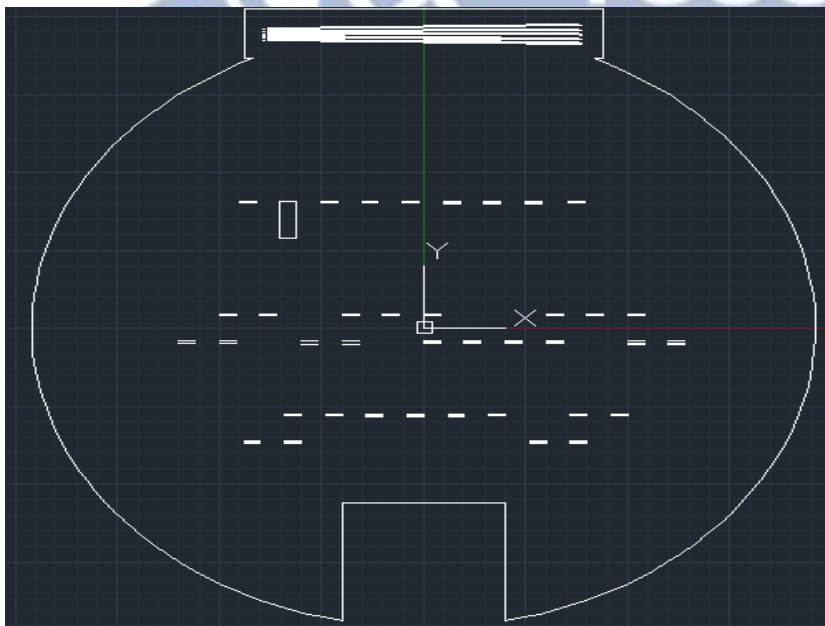


圖 5.1.光罩設計圖

本次實驗測量了三種不同樣式的共振腔：

(1) Fabry-Perot 共振腔，如圖 5.2：

在晶體厚度(d)加上晶體間距(g)等於 $130 \mu\text{m}$ 不變的前提下，選擇了以下這八組參數：
 $(d, g) = (10, 120), (20, 110), (30, 100), (40, 90), (50, 80), (60, 70), (70, 60), (80, 50)$

(2)將兩組 Fabry-Perot 共振腔組合在一起；這兩組共振腔有相同晶體厚度但不同晶體間距且彼此距離拉開到 $2000 \mu\text{m}$ 。

(3)三片式共振腔，晶體厚度比例分別為 1:1:1 與 1:2:1，如圖 5.3。

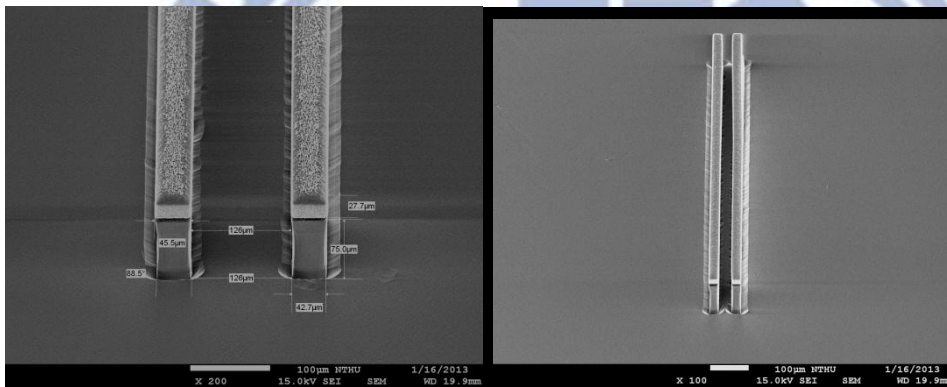


圖 5.2 Fabry-perot 共振腔，深度約 $70\sim 80 \mu\text{m}$ 。

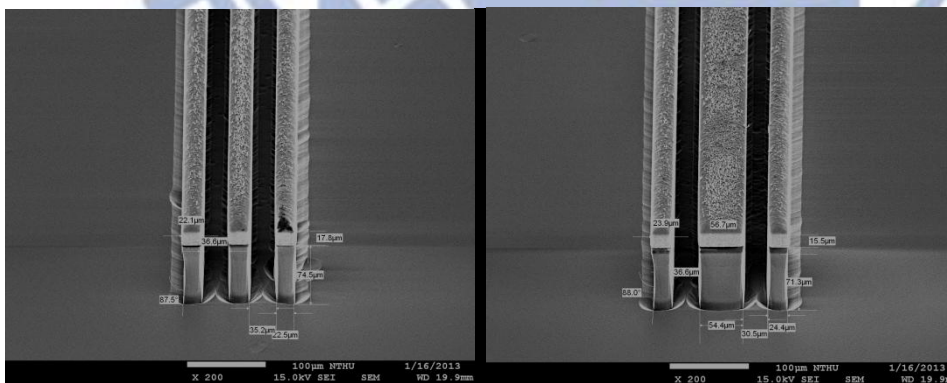


圖 5.3 左圖為晶體厚度比例 1:1:1 的共振腔；右圖為晶體厚度比例 1:2:1 的共振腔，深度約 $70\sim 80 \mu\text{m}$ 。

接著測量藍寶石晶體的非對稱角 η ：

將調完平的樣品之 θ 移到 0.3 度以及 detector 移到 0.6 度做全反射， θ -scan 後將峰值 θ_1 的

位置記錄下來，再將 ϕ 轉 180 度做 θ -scan，紀錄峰值 θ_2 ， $|\theta_1 - \theta_2|$ 即為非對稱角 η 。

5.2 實驗步驟

1. 定環心
2. Sample 調平
3. 原子面調平
4. 進行 ϕ -scan 找到藍寶石晶體 mirror point(0 0 4)的位置。
5. 利用 DCM 粗調能量，1step=1eV。
6. 四晶單光儀有四片晶體，依序做角度掃描調整晶體角度的位置。首先會貼 burn paper 確定光在打在第一塊晶體上，接著在第二塊晶體放上螢光板並且架設攝影機，之後調整第一塊晶體的布拉格角 θ 、方位角 ϕ 以及能量 E ，然後在實驗站外的螢幕上觀測螢光板是否有亮點產生，如圖 5.4。當最亮的亮點產生時為最接近精確能量。重複上述步驟調整四塊晶體。最後四晶單光儀的架設圖型如圖 5.5 所示。
7. 架設完四晶單光儀後，可也藉著改變第三、第四片晶體的角度微調能量，1 step=0.005 arcsecond=58.548 μ eV[19]。
8. 因四晶單光儀的架設使得入射光方向有所偏移，必須重新調整繞射儀的桌子讓光打在樣品上。
9. 再做一次晶面調平、原子面調平與 ϕ -scan。



圖 5.4 利用理論模擬計算光點應出現的位置，當光點出線且最亮時，最接近精確能量。

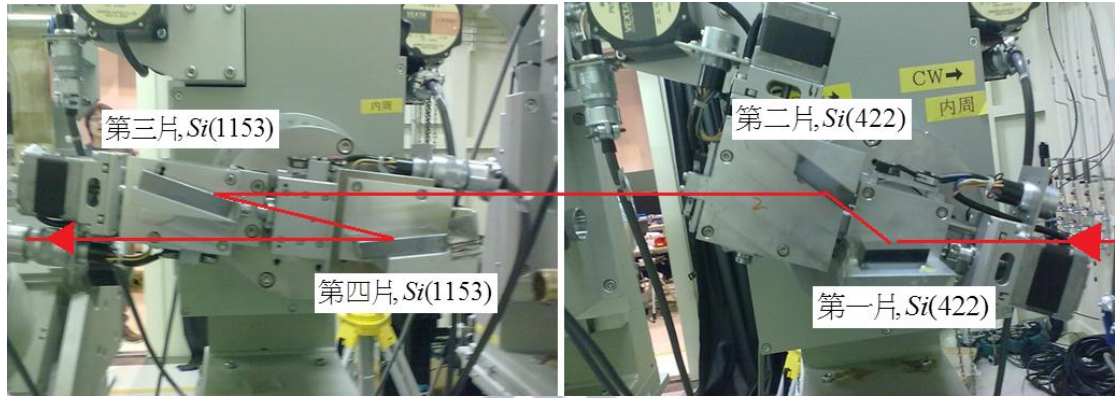


圖 5.5 實驗用的四晶單光儀。

- 找到 mirror point(0 0 4)的方向與我們欲做實驗的藍寶石共振腔背向繞射面(0 0 30)同一方向，如圖 5.6。

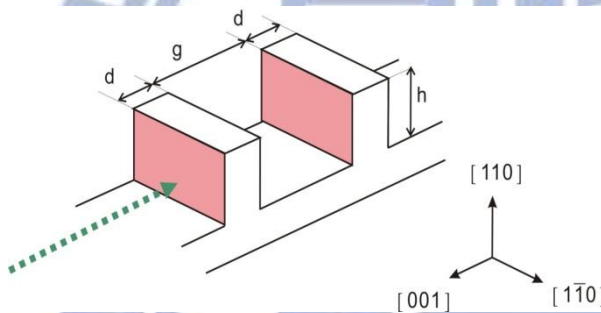


圖 5.6 Fabry-perot 共振腔

- 作共振腔(1 1 0)方向的 ϕ_z -scan，藉由強度對 ϕ_z 變化的圖型，可觀察到三個平台：(1) 量測到強度最大時，代表光尚未打到共振腔。(2)強度次之時，代表光全部打在共振腔上。(3)強度最低時，代表光打在晶片基底。最後將 ϕ_z 移到快接近(2)平台上方的位置。
- 微調四晶單光儀的三四塊晶體做能量掃描。

5.3 實驗結果與分析

這次今年二月初在日本 Spring-8 同步輻射的 Taiwan undulator beam line BL12XU 進行藍寶石共振腔可行性的實驗沒有成功的觀測到藍寶石共振腔的干涉條紋。

實驗過程當中，在進行 5.2 小節實驗步驟第 11 點時，並未如預料的看到三個平台。原因

可能是入射共振腔的光 **beam size** 過大以及藍寶石共振腔蝕刻深度不深的關係所致。而入射光涵蓋整個共振腔的結果，使得光無法成功的在共振腔內產生干涉而導致實驗失敗。

分析失敗原因如下：

四晶單光儀當中四片晶體各個非對稱角 η (如圖 5.7 所示) 分別為：



圖 5.7 非對稱角 η 為晶體表面與繞射原子面所夾之角度。

- 第一塊(4 2 2)矽晶片為 15.8664° ，
- 第二塊(4 2 2)矽晶片為 20.9264° ，
- 第三第四塊(11 5 3)矽晶片為 77.83° 。

原先上述這四片四晶單光儀的晶體是設計給能量在 14.4388keV 的(12 4 0)矽共振腔使用，在這能量之下(4 2 2)繞射面的布拉格角為 $\theta_{B(422)}=22.7864^\circ$ ，(11 5 3)繞射面的布拉格角為 $\theta_B=79.8170^\circ$ 。當方位角 $\phi=0$ 時，四塊晶體的非對稱參數分別為：

$$b_1 = \frac{\sin(\theta_B - \eta)}{\sin(\theta_B + \eta)} = 0.1929 ,$$

$$b_2 = 0.0470 ,$$

$$b_3 = b_4 = 10.9686 .$$

由上述參數計算四晶單光儀的光放大倍率為 $M = \frac{1}{b_1} \times \frac{1}{b_2} \times \frac{1}{b_3} \times \frac{1}{b_4} = 0.9168$ 。

然而將能量調整為藍寶石共振腔使用的 14.3147keV 時，(4 2 2)繞射面的布拉格角變為 $\theta_{B(422)}=22.9950^\circ$ ，(11 5 3)繞射面的布拉格角變為 $\theta_B=83.1055^\circ$ 。當方位角 $\phi=0$ 時，四塊晶體的非對稱參數分別變成

$$b_1 = 0.1978$$

$$b_2 = 0.0520$$

$$b_3 = b_4 = 3.5525$$

由此非對稱性參數下所計算的光放大倍率卻變成了 $M = 7.7038$ ，這樣的結果將使得入射共振腔的光 beam size 超越了共振腔的深度 $70\sim 80\ \mu\text{m}$ 。因放大倍率過大關係，即使調整 slit 使得 beam size 縮小，也會因為光強度大幅的減弱而偵測不到共振調紋。

因此將會在第六章重新設計一組在能量 14.3147keV 下給藍寶石共振腔用的高解析度四晶單光儀。



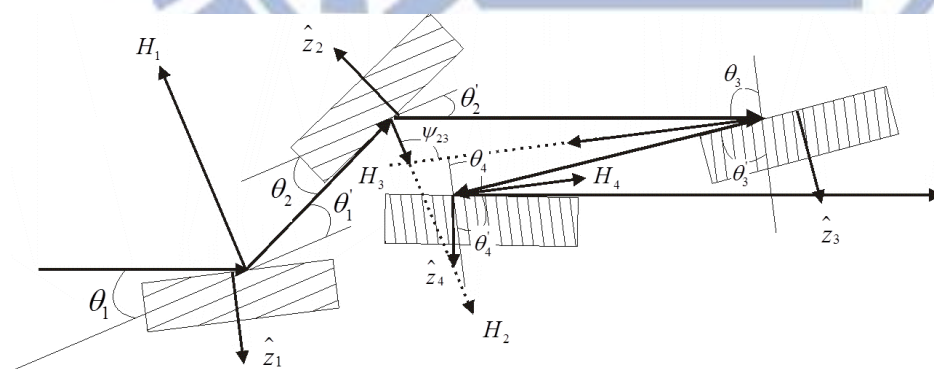
第六章 高解析度四晶單光儀理論計算與 X 光複合式共振腔模擬分析

本章將利用第三章所介紹的原理，在 6.1 小節中設計能量為 8.5146keV 以及 14.3147keV 時的高解析度四晶單光儀(Four-Crystal Monochromator)。而 6.2 小節將使用 Stetsko 所寫的程式模擬藍寶石與矽為材料的 X 光複合式共振腔，並藉由改變晶體厚度與間距，探討共振腔的穿透率以及 \bar{F} 變化情形。

6.1 高解析度四晶單光儀理論計算與分析

如前面 4.3 小節所介紹，為了滿足共振條件，成功使光在共振腔內產生共振並且可量測到干涉條紋，我們會在共振腔前面架設(+,-,-,+)排列的四晶單光儀使得入射共振腔的光有很小的相對光譜寬度、大的同調時間以及同調長度。接下來我將會針對在 8.5146keV 以及 14.3147keV 的能量下設計四晶單光儀。並且利用 3.5 小節(+,-,-,+)組態型態的非對稱晶體連續繞射中所使用的式子來計算相對頻譜寬度 $\Delta\lambda/\lambda$ 、角度接受角 $\Delta\theta$ 、角度發散角 $\Delta\theta'$ 、光的放大倍率 M 、入射光能量半寬 ΔE 、非對稱角 η 及穿透率 T ，並藉由改變不同的繞射面、非對稱性參數 b ，然後從結果中選擇最佳的參數。

模擬的四晶單光儀如下圖所示



6.1.1 能量在 8.5146Kev 的四晶單光儀

Silicon 晶體繞射面選擇條件為：

假設繞射面為(h k l)， h,k,l 必須為全奇或是全偶,且全偶時 h+k+l 相加的值必須為 4 的倍數。由此條件下挑出 8.5146Kev 能量下容許繞射的面。

接著計算在 8.5146Kev 能量下，各個滿足繞射條件原子面的反射率 R 、布拉格角 θ_B 以及對稱繞射幾何時的相對頻譜寬度 $\varepsilon^{(s)}$ ：

繞射原子面	布拉格角 θ_B	反射率 R	相對頻譜寬度 $\varepsilon^{(s)}$
(1 1 1)	13.4266	0.9245	1.329×10^{-4}
(0 2 2)	22.2829	0.9342	5.7459×10^{-5}
(1 1 3)	26.3995	0.9015	2.7429×10^{-5}
(0 0 4)	32.4281	0.9221	2.4117×10^{-5}
(1 3 3)	35.7575	0.886	1.36×10^{-5}
(2 2 4)	41.0531	0.9109	1.397×10^{-5}
(3 3 3)	44.1547	0.8705	8.3513×10^{-6}
(0 4 4)	49.3198	0.8991	9.1848×10^{-6}
(1 3 5)	52.4773	0.854	5.66×10^{-6}
(0 2 6)	57.9810	0.8863	6.477×10^{-6}
(3 3 5)	61.5331	0.8365	4.0694×10^{-6}
(4 4 4)	68.2481	0.8728	4.7843×10^{-6}
(1 1 7)	73.2124	0.818	3.0474×10^{-6}

表 6.1 各個滿足繞射條件的原子面與其布拉格角 θ_B 、反射率 R 與對稱繞射幾何時的相對光譜寬度 $\varepsilon^{(s)}$ 。

由表 6.1 發現當 $|H| = \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$ 的 $|H|$ 值越大時，8.5146keV 能量下的布拉格角 θ_B 會增加，然而反射率以及相對光譜寬度 $\Delta\lambda / \lambda$ 會變小。反射率越高將可以提高四晶單光儀整提的穿透率，而當中以(0 2 2)原子面的反射率最高。

為了滿足平行光條件與實驗便利性，我們讓第一二塊繞射原子面相同，三四塊的繞射原

子面相同。另外因為(+,-,-,+)組態的四塊晶體可看成[(+,-),(-,+)]=[+,+]的色散型組態，所以為了降低相對光譜寬度，增加角度接受角與減少角度發散度我們令第一二塊為 (a_π) 模式的非對稱性參數範圍在 $0 < |b| < 1$ 、且方位角 $\phi = 0$ ；第三四塊為 (a_0) 模式的非對稱性參數範圍在 $|b| > 1$ 、且方位角 $\phi = \pi$ ，如圖 6.1 所示。

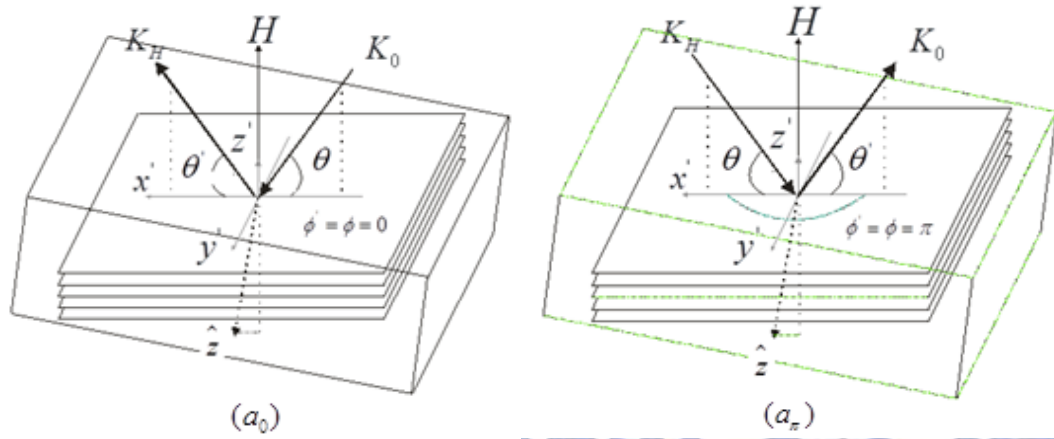


圖 6.1 非對稱繞射幾何 (a_0) 與 (a_π) 模式

$$\text{在這裡 } (a_0) \Rightarrow b = \frac{\cos \theta_c \sin \eta \cos \phi_c + \sin \theta_c \cos \eta}{\cos \theta_c \sin \eta \cos \phi_c - \sin \theta_c \cos \eta} = \frac{\sin(\theta_c + \eta)}{\sin(\theta_c - \eta)} \Rightarrow |b| > 1,$$

$$(a_\pi) \Rightarrow b = \frac{\cos \theta_c \sin \eta \cos \phi_c + \sin \theta_c \cos \eta}{\cos \theta_c \sin \eta \cos \phi_c - \sin \theta_c \cos \eta} = \frac{\sin(\theta_c - \eta)}{\sin(\theta_c + \eta)} \Rightarrow 0 < |b| < 1.$$

接著我們先固定四塊晶體非對稱性參數 b 的值與三四塊繞射面，觀察一二塊不同繞射面時對於相對光譜寬度 $\Delta\lambda/\lambda$ 、角度接受角 $\Delta\theta$ 、角度發散角 $\Delta\theta'$ 的影響。

若 b_1 、 b_2 、 b_3 及 b_4 分別為一二三四塊晶體的非對稱性參數的值，

令 $b_1 = 0.075$ ， $b_2 = 0.026$ ， $b_3 = b_4 = 32$ 且三四塊繞射面(h k l)固定為(1 1 7)，

一二塊繞射面	三四塊繞射面	$\Delta\lambda/\lambda$	$\Delta\theta$ (rad)	$\Delta\theta'$ (rad)
(1 1 1)	(1 1 7)	7.9274×10^{-8}	1.1595×10^{-4}	5.7301×10^{-5}
(0 2 2)	(1 1 7)	5.9996×10^{-8}	8.6155×10^{-5}	5.7242×10^{-5}
(1 1 3)	(1 1 7)	4.0080×10^{-8}	4.9937×10^{-5}	5.7178×10^{-5}
(0 0 4)	(1 1 7)	4.1746×10^{-8}	5.6217×10^{-5}	5.7187×10^{-5}

(1 3 3)	(1 1 7)	3.1113×10^{-8}	3.6066×10^{-5}	5.7154×10^{-5}
(2 2 4)	(1 1 7)	3.4029×10^{-8}	4.4779×10^{-5}	5.7167×10^{-5}

表 6.2 固定非對稱性參數與三四塊繞射面，改變一二塊繞射面觀察相對光譜寬度 $\Delta\lambda/\lambda$ 、接受角 $\Delta\theta$ 與發散角 $\Delta\theta'$ 的變化

由表 6.2 發現當 $|H| = \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$ 的 $|H|$ 值越大時，相對光譜寬度 $\Delta\lambda/\lambda$ 與角度接受角 $\Delta\theta$ 皆有越小的趨勢，而角度發散角沒有太大變化。然而角度接受角若小於入射光的發散角，將使得四晶單光儀的整體穿透率 T 降低。因此一二塊晶體我會選擇 $|H|$ 值較小的繞射面，犧牲一些相對光譜寬度 $\Delta\lambda/\lambda$ 來提高角度接受角 $\Delta\theta$ 。

接著固定一二塊繞射面，改變三四塊繞射面，觀察不同三四塊繞射面時對於相對光譜寬度 $\Delta\lambda/\lambda$ 、角度接受角 $\Delta\theta$ 、角度發散角 $\Delta\theta'$ 的影響。

一二塊繞射面	三四塊繞射面	$\Delta\lambda/\lambda$	$\Delta\theta$ (rad)	$\Delta\theta'$ (rad)
(1 1 1)	(0 4 4)	2.0321×10^{-7}	1.1613×10^{-4}	6.0586×10^{-5}
(1 1 1)	(1 3 5)	1.7303×10^{-7}	1.1601×10^{-4}	4.1850×10^{-5}
(1 1 1)	(0 2 6)	1.5405×10^{-7}	1.1605×10^{-4}	5.8739×10^{-5}
(1 1 1)	(3 3 5)	1.2835×10^{-7}	1.1597×10^{-4}	4.2619×10^{-5}
(1 1 1)	(4 4 4)	1.0642×10^{-7}	1.1601×10^{-4}	6.7975×10^{-5}
(1 1 1)	(1 1 7)	7.9274×10^{-8}	1.1595×10^{-4}	5.7301×10^{-5}

表 6.3 固定非對稱性參數與一二塊繞射面，改變三四塊繞射面觀察相對光譜寬度、接受角與發散角的變化。

與表 6.2 相同，當 $|H|$ 值越大時，相對光譜寬度 $\Delta\lambda/\lambda$ 有越小的趨勢，接受角 $\Delta\theta$ 與發散角 $\Delta\theta'$ 沒有太大的變化。因此為了降低相對光譜寬度 $\Delta\lambda/\lambda$ ，我會選擇 $|H|$ 值越大的面做為我三四塊晶體的繞射面。

考量到希望光經過四晶單光儀後可以有很小的相對光譜寬度 $\Delta\lambda/\lambda$ 、大的角度接受角、小的角度發散角以及高的穿透率，因此我選擇一二塊(h k l)為(0 2 2)，三四塊(h k l)為(1 1 7)，作為我在能量 8.5146Kev 下的繞射原子面。

接著在一二塊與三四塊繞射面分別為(0 2 2)與(1 1 7)的情況下，分別改變四塊晶體的非對稱性參數 b ，設計目標為：小的相對頻譜寬度 $\Delta\lambda/\lambda$ 、大的角度接受角 $\Delta\theta$ 、小的角度發散角 $\Delta\theta'$ ；同時因為共振腔深度大約在 $100\ \mu\text{m}$ 上下，也希望光進入四晶單光儀後的放大倍率 M 夠小，使得出射光的直徑小於 $100\ \mu\text{m}$ ；另外因為工業技術上的限制，布拉格角 θ_c 與非對稱角 η 的差值 $\theta_c - \eta$ 必須在 1 度以上。

$$\text{其中放大倍率 } M = \frac{1}{b_1} \times \frac{1}{b_2} \times \frac{1}{b_3} \times \frac{1}{b_4} \quad (6.1)$$

首先先令一二塊晶體的非對稱性參數相同 $b_{12} = b_1 = b_2$ ，三四塊非對稱性參數相同 $b_{34} = b_3 = b_4$ ，在滿足工業技術下調整 b_{12} 與 b_{34} 使得相對光譜寬度最小，之後再慢慢微調一、四塊晶體的非對稱性參數 b 值。因此我們先固定 $b_{34} = 32$ ，改變 b_{12} 觀察對於 $\Delta\lambda/\lambda$ 、 $\Delta\theta$ 、 $\Delta\theta'$ 、 M 及 $\theta_c - \eta$ 的影響，從中取得最佳解：

$$\theta_{c(022)} = 22.2829^\circ, \theta_{c(117)} = 73.2124^\circ, b_{34} = 32 \text{。}$$

b_{12}	$\Delta\lambda/\lambda$	$\Delta\theta$ (rad)	$\Delta\theta'$ (rad)	M	$\theta_{c(022)} - \eta$
0.5	2.2501×10^6	3.2579×10^{-5}	6.4502×10^{-5}	0.0039	14.5048
0.1	2.1489×10^{-7}	7.4573×10^{-5}	5.7756×10^{-5}	0.0977	3.7479
0.05	8.5662×10^{-8}	1.0547×10^{-4}	5.7327×10^{-5}	0.3906	1.9404
0.032	5.117×10^{-8}	1.3181×10^{-4}	5.7213×10^{-5}	0.9537	1.2577
0.026	4.1486×10^{-8}	1.4621×10^{-4}	5.7181×10^{-5}	1.446	1.0262
0.0255	4.0725×10^{-8}	1.4763×10^{-4}	5.7178×10^{-5}	1.5018	1.0069

表 6.4. 改變非對稱性參數 b_{12} 的值對於其他數值的影響。

由表 6.4 可看出當 b_{12} 越接近 0 時，相對光譜寬度 $\Delta\lambda/\lambda$ 越小，接受角 $\Delta\theta$ 越大-符合我們的目標，但放大率 M 卻越大與期望值相反。當 $b_{12} = 0.0255$ 時，非對稱角 η 以達工業技術上限。

接著我們固定一二塊的非對稱性參數 b_{12} ，改變三四塊的非對稱性參數 b_{34} ，觀察 b_{34} 的改

變對於其他數值的影響，從中取得最佳解：

$$\theta_{c(117)} = 73.2124^\circ, b_{12} = 0.0255。$$

b_{34}	$\Delta\lambda / \lambda$	$\Delta\theta$ (rad)	$\Delta\theta'$ (rad)	M	$\theta_{c(117)} - \eta$
5	2.6832×10^{-7}	1.4794×10^{-4}	2.1869×10^{-5}	61.5148	7.5602
15	7.2427×10^{-8}	1.4773×10^{-4}	3.9053×10^{-5}	6.8350	2.2355
25	4.7439×10^{-8}	1.4766×10^{-4}	5.0521×10^{-5}	2.4606	1.3109
30	4.2248×10^{-8}	1.4764×10^{-4}	5.5359×10^{-5}	1.7087	1.0863
32	4.0725×10^{-8}	1.4763×10^{-4}	5.7178×10^{-5}	1.5018	1.0166
32.3	4.0517×10^{-8}	1.4763×10^{-4}	5.7446×10^{-5}	1.4741	1.0069

表 6.5. 固定其他參數改變非對稱性參數 b_{34} 的值對於其他數值的影響。

由表 6.5 可看出當 b_{34} 越大時，相對光譜寬度 $\Delta\lambda / \lambda$ 越小、放大率 M 也越小符合我們的目標，但角度發散角卻越大。當 $b_{34} = 32.3$ 時，非對稱角 η 以達工業技術上限。

接著我們以 $b_{12} = 0.0255$ 與 $b_{34} = 32.3$ 為基準點，各別改變一二三四塊的非對稱性參數 b ，觀察對於其他數值的影響。

(b_1, b_2, b_3, b_4)	$\Delta\lambda / \lambda$	$\Delta\theta$ (rad)	$\Delta\theta'$ (rad)	M
(0.0255, 0.0255, 32, 32)	4.0517×10^{-8}	1.4763×10^{-4}	5.7446×10^{-5}	1.4741
(0.102, 0.0255, 32, 32)	6.6259×10^{-8}	7.3899×10^{-5}	5.7531×10^{-5}	0.3685
(0.0255, 0.102, 32, 32)	1.1774×10^{-7}	1.476×10^{-4}	5.7702×10^{-5}	0.3685
(0.0255, 0.0255, 8.075, 32)	8.4840×10^{-8}	1.4822×10^{-4}	5.7299×10^{-5}	5.8962
(0.0255, 0.0255, 32, 8.075)	5.5291×10^{-8}	1.4754×10^{-4}	2.8692×10^{-5}	5.8962

表 6.6 個別改變四塊晶體的非對稱性參數觀察對於其他數值的影響。

以一二塊晶體相比，第二塊晶體非對稱性參數 b_2 對於相對光譜寬度 $\Delta\lambda / \lambda$ 的改變相對第一塊晶體 b_1 來的明顯，但第一塊晶體 b_1 對於角度接受角 $\Delta\theta$ 的影響卻比第二塊晶體 b_2 明顯，與式子(3.28)-(3.29)預測的結果相符；而三四塊晶體相比，第三塊晶體非對稱性參數

b_3 對於相對光譜寬度 $\Delta\lambda/\lambda$ 的改變比第四塊晶體 b_4 來的明顯，但第四塊晶體 b_4 對於角度發散角 $\Delta\theta'$ 的影響比第三塊晶體 b_3 明顯。除此之外，當 b_1 與 b_2 變大時，放大率 M 變小符合期望值；當 b_3 與 b_4 變小時，放大率 M 卻變大與目標相反。

綜合以上特性，若我們讓二三塊的非對稱性參數 b_3 與 b_4 不變，將 b_1 的值升高，會犧牲一些相對光譜寬度 $\Delta\lambda/\lambda$ 與角度接受角 $\Delta\theta$ 來降低光的放大率 M ；若將 b_4 降低一些，會犧牲一些相對光譜寬度 $\Delta\lambda/\lambda$ 與光的放大率 M 來降低光的發散角。

由上述結論我做了一些微調：

(b_1, b_2, b_3, b_4)	$\Delta\lambda/\lambda$	$\Delta\theta$ (rad)	$\Delta\theta'$ (rad)	M
(0.075, 0.0255, 32.3, 32.3)	5.8922×10^{-8}	8.6154×10^{-5}	5.7507×10^{-5}	0.5012
(0.09, 0.0255, 32.3, 26.9167)	6.4546×10^{-8}	7.8644×10^{-5}	5.2514×10^{-5}	0.5012
(0.01, 0.0255, 32.3, 24.225)	6.8037×10^{-8}	7.4606×10^{-5}	4.9831×10^{-5}	0.5012

表 6.7 放大率固定在 0.5012 下，非對稱性參數 b_1 與 b_4 之間的微調對於其他數值的影響關係圖。

我先將 b_1 變大使得放大率 M 控制在 0.5012，之後等比例微調第一塊與第四塊晶體的非對稱性參數 b 值。可看出當 b_1 等比例上升 b_4 等比例下降時，會犧牲相對光譜寬度與角度接受角來降低角度發散度。

當 $(b_1, b_2, b_3, b_4) = (0.075, 0.0255, 32.3, 32.3)$ 時，出射光能量寬度 ΔE 為：

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{\Delta E}{E} = 5.8922 \times 10^{-8},$$

$$\Delta E = E \times 5.8922 \times 10^{-8} = 8.5146 \times 10^3 \times 5.8922 \times 10^{-8} \doteq 0.502 \text{mev}。$$

以相同的方法， $(b_1, b_2, b_3, b_4) = (0.09, 0.0255, 32.3, 26.9167)$ 的能量寬度 ΔE 約為 0.55mev；

$(b_1, b_2, b_3, b_4) = (0.1, 0.0255, 32.3, 24.225)$ 的能量寬度 ΔE 約為 0.58mev。

實驗上若要在波峰波谷處完整地觀測到一個共振峰值的形狀，出射光能量寬度 ΔE 至少要小於峰值的半寬 Γ 的三分之一，因此我挑選 $(b_1, b_2, b_3, b_4) = (0.075, 0.0255, 32.3, 32.3)$ 做為我在能量 8.5146keV 下四塊晶體的非對稱性參數的值。以下的圖是利用以上這些參數所

畫的模擬圖形：

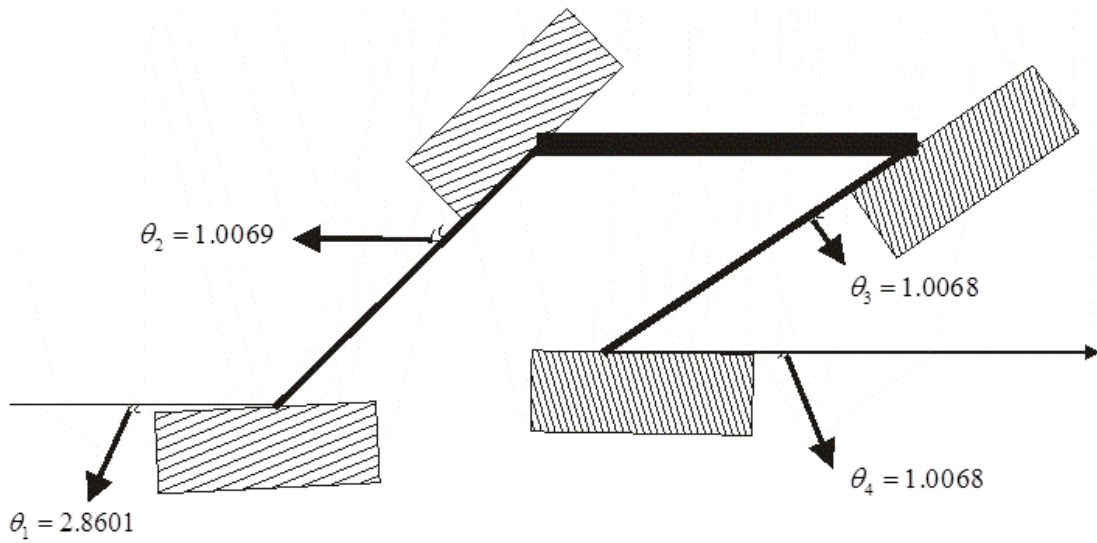


圖 6.2 能量在 8.5146Kev 且非對稱性參數分別為 $(b_1, b_2, b_3, b_4) = (0.075, 0.0255, 32.3, 32.3)$ 的四晶單光儀圖形。

假設入射四晶單光儀光的直徑為 1，則經過第一塊晶體後直徑變為 $1 \times \frac{1}{b_1} \cong 13.333$ ；通過第二塊後光直徑為 $1 \times \frac{1}{b_1} \times \frac{1}{b_2} \cong 522.8758$ ；通過第三塊後光直徑為 $1 \times \frac{1}{b_1} \times \frac{1}{b_2} \times \frac{1}{b_3} \cong 16.188$ ；通過第四塊後光直徑變為 $1 \times \frac{1}{b_1} \times \frac{1}{b_2} \times \frac{1}{b_3} \times \frac{1}{b_4} \cong 0.5012$ ，如圖 6.2 所示。

接著模擬在相同範圍下進入晶體與出射晶體的 DuMond diagram：

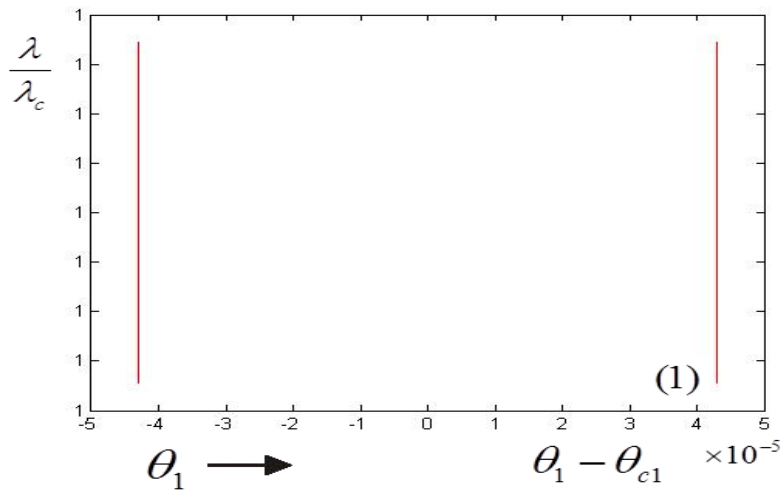


圖 6.3 紅線包圍的區域為進入第一塊晶體的全反射區。

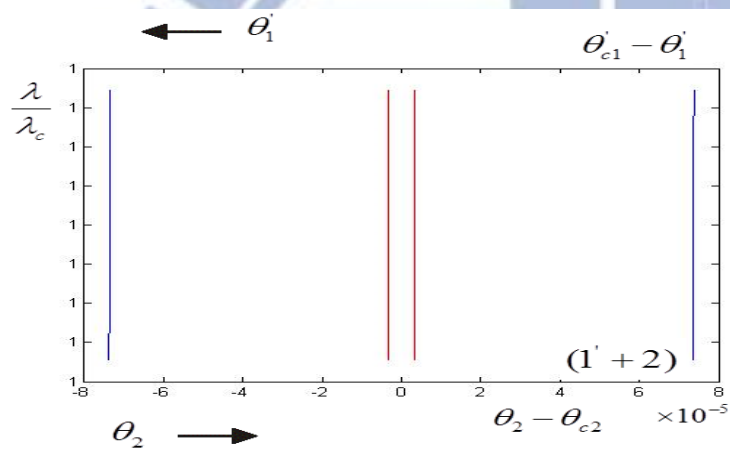


圖 6.4 紅線包圍的區域為出射第一塊晶體的全反射區；藍線包圍的區域為入射第二塊晶體的全反射區。

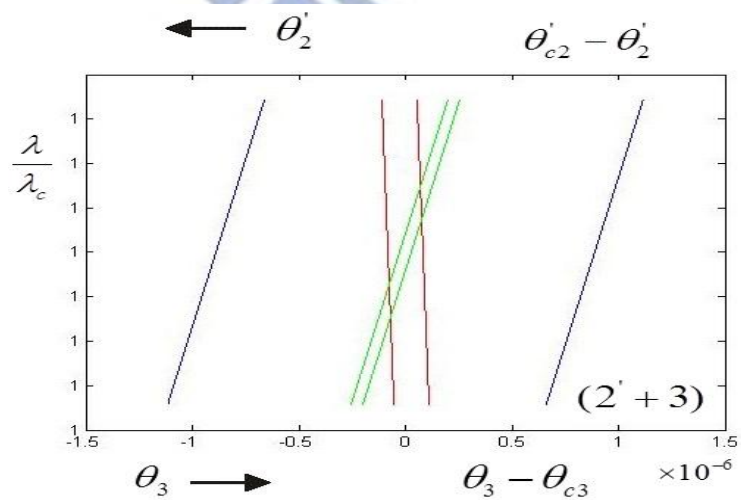


圖 6.5 紅線包圍的區域為出射第二塊晶體的一二塊全反射區；藍線包圍的區域為入射第

三塊晶體的全反射區；綠線包圍的區域為入射第三塊晶體的三四塊全反射區。

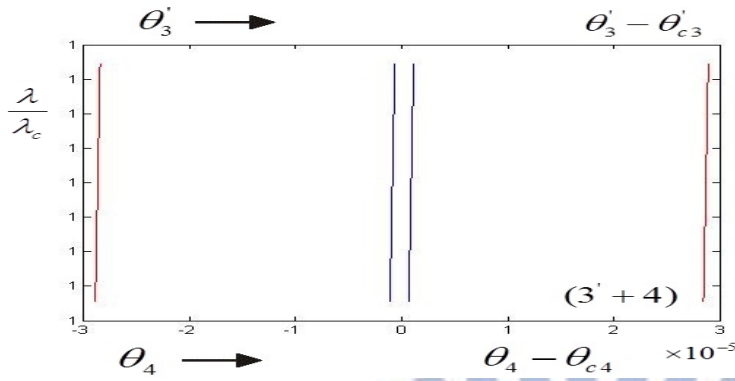


圖 6.6 紅線包圍的區域為出射第三塊晶體的全反射區；藍線包圍的區域為入射第四塊晶體的全反射區。

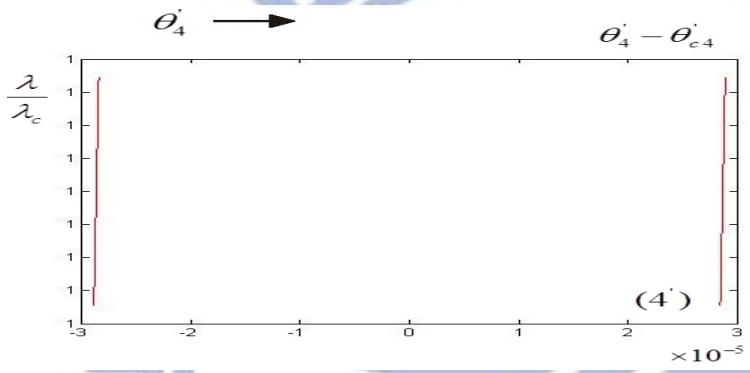


圖 6.7 紅線包圍的區域為出射第四塊晶體的全反射區。

在相同的範圍之下，可由圖 6.9 與圖 6.11 來估算入射四晶單光儀的穿透率 T 。

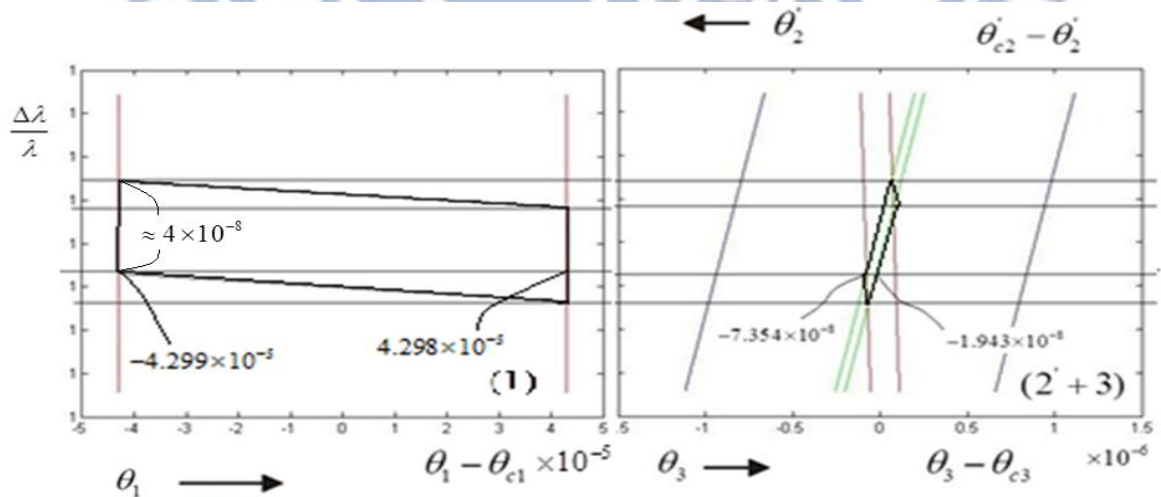


圖 6.8 在相同的範圍下，(2' + 3) 圖形中黑色線包圍的範圍是可連續被四塊晶體反射的區域，將此區域投影到(1)中可得到對應入射第一塊晶體的全反射區。

在相同的範圍下，(2' + 3) 紅線與綠線交集的範圍為能連續被四塊晶體反射的全反射區，將此全反射區投影到入射第一塊晶體空間中的全反射區，如圖 6.8(1)。而入射四晶單光儀光的相對光譜寬度 $\Delta\lambda/\lambda$ 約為 10^{-4} ，角寬度 $\Delta\theta$ 約為 10^{-5} ，而入射四晶單光儀的全反射區與圖 6.8(1)中黑色框框所包圍面積兩者的比值即為穿透率(Throughput)。

初步估計穿透率 T 約為：

$$T \cong \frac{(4.3 \times 10^{-5} + 4.299 \times 10^{-5}) \times 4 \times 10^{-8}}{10^{-4} \times 10^{-5}} = 3.4396 \times 10^{-3}。$$

6.1.2 能量在 14.3147Kev 的四晶單光儀

因先前實驗上已有在 14.4388keV 下給矽共振腔使用的四晶單光儀，所以當能量些許改變成 14.3147Kev 時，在不改變繞射面的情況下，我們些許的微調第三與第四塊晶體非對稱性參數 b 值，來滿足相對頻譜寬度 $\Delta\lambda/\lambda$ 、角度接受角 $\Delta\theta$ 、角度發散角 $\Delta\theta'$ 、光的放大倍率 M、入射光能量半寬 ΔE 、非對稱角 η 及穿透率 T 的期望值。

$$T \cong \frac{(4.3 \times 10^{-5} + 4.299 \times 10^{-5}) \times 4 \times 10^{-8}}{10^{-4} \times 10^{-5}} = 3.4396 \times 10^{-3}$$

利用與 6.1.1 小節同樣的方法，得到以下結果：

	布拉格角 θ	非對稱角 η	非對稱性參數 b	對稱幾何相對頻譜寬譜 $\epsilon^{(s)}$
第一塊晶體繞射面 (422)	22.9950°	15.8664°	0.1978	1.3712x10 ⁻⁵
第二塊晶體繞射面 (422)	22.9950°	20.9264°	0.0520	1.3712x10 ⁻⁵
第三塊晶體繞射面 (1153)	83.1055°	82.05°	13.9085	3.0834x10 ⁻⁷
第四塊晶體繞射面 (1153)	83.1055°	82.05°	13.9085	3.0834x10 ⁻⁷

利用相對頻譜寬度 $\lambda/\lambda_c = 2.1133 \times 10^{-8}$

角度接受角 $\Delta\theta = 1.3111 \times 10^{-5}$ (rad)

角度發散角 $\Delta\theta' = 9.59 \times 10^{-6}$ (rad)

放大率 M = 0.5031 和

能量半寬 = 0.3025 meV 這些參數

模擬在能量 14.3147keV 下的四晶單光儀圖型

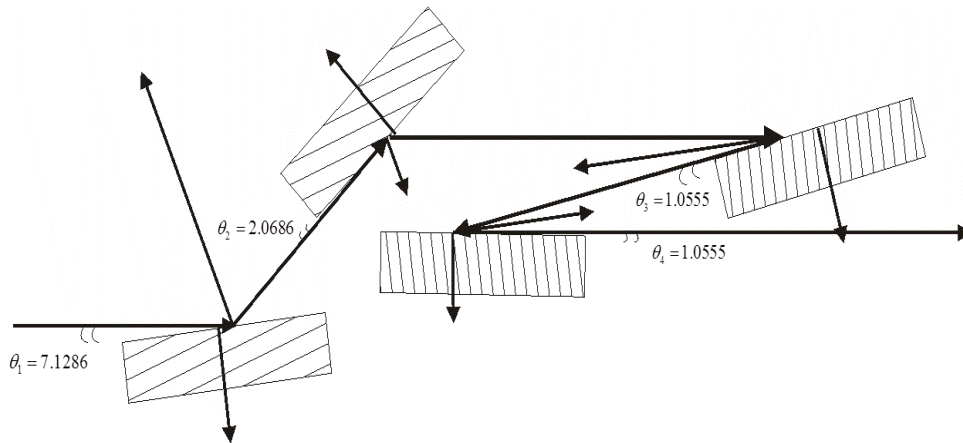


圖 6.9 能量在 14.3147Kev 且非對稱性參數分別為 $(b_1, b_2, b_3, b_4) = (0.1978, 0.0520, 13.9085, 13.9085)$ 的四晶單光儀圖形。

接著利用上述參數模擬在相同範圍下進入晶體與出射晶體後的 DuMond diagram :

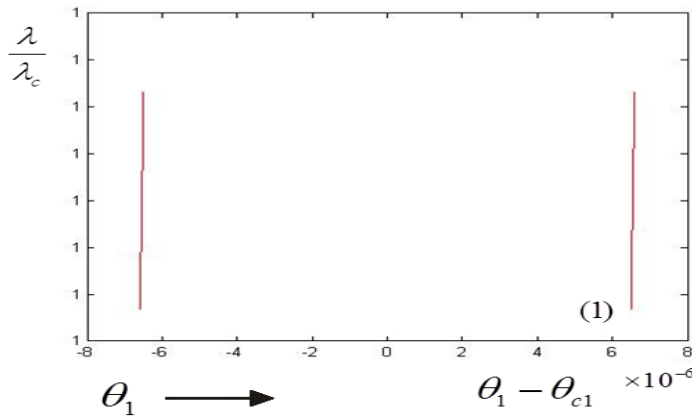


圖 6.10 紅線包圍的區域為進入第一塊晶體的全反射區。

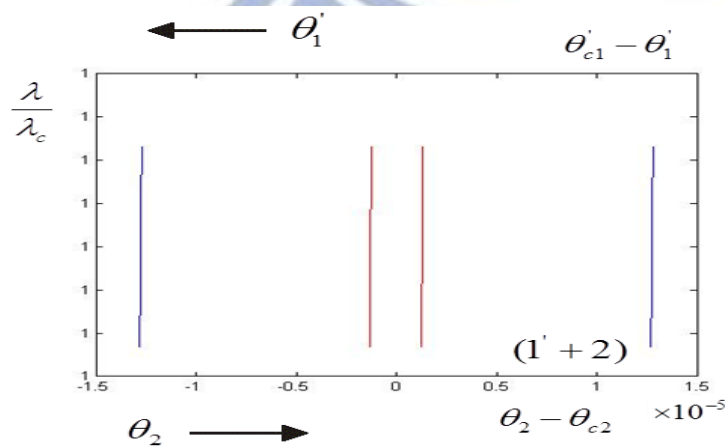


圖 6.11 紅線包圍的區域為出射第一塊晶體的全反射區；藍線包圍的區域為入射第二塊

晶體的全反射區。

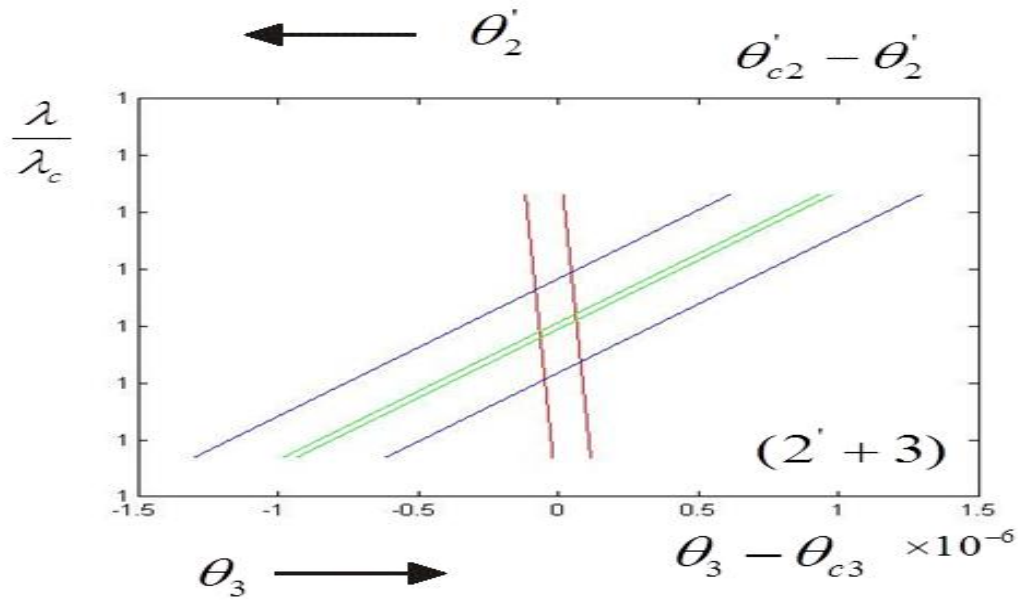


圖 6.12 紅線包圍的區域為出射第二塊晶體的一二塊全反射區；藍線包圍的區域為入射第三塊晶體的全反射區；綠線包圍的區域為入射第三塊晶體的三四塊全反射區域。

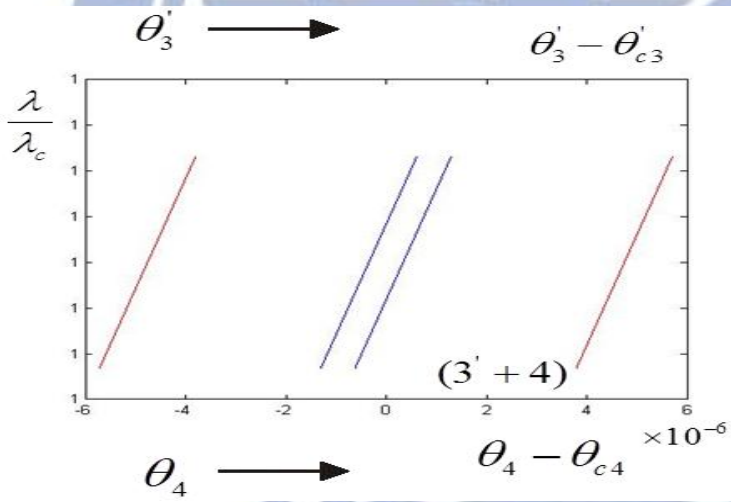


圖 6.13 紅線包圍的區域為出射第三塊晶體的全反射區；藍線包圍的區域為入射第四塊晶體的全反射區。

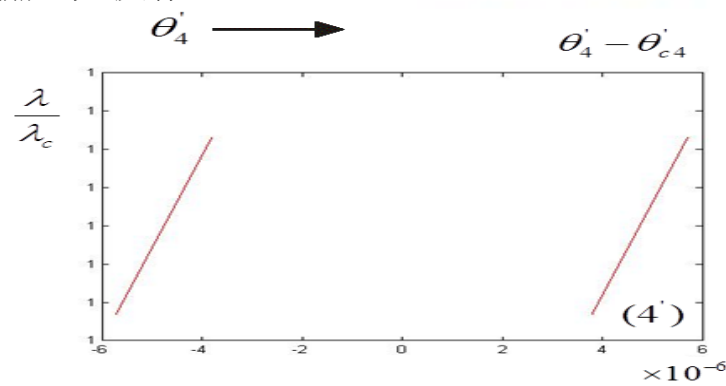


圖 6.14 紅線包圍的區域為出射第四塊晶體的全反射區。

在相同的反射範圍之下，可由圖 6.16 與圖 6.18 來估算入射四晶單光儀的穿透率 T 。

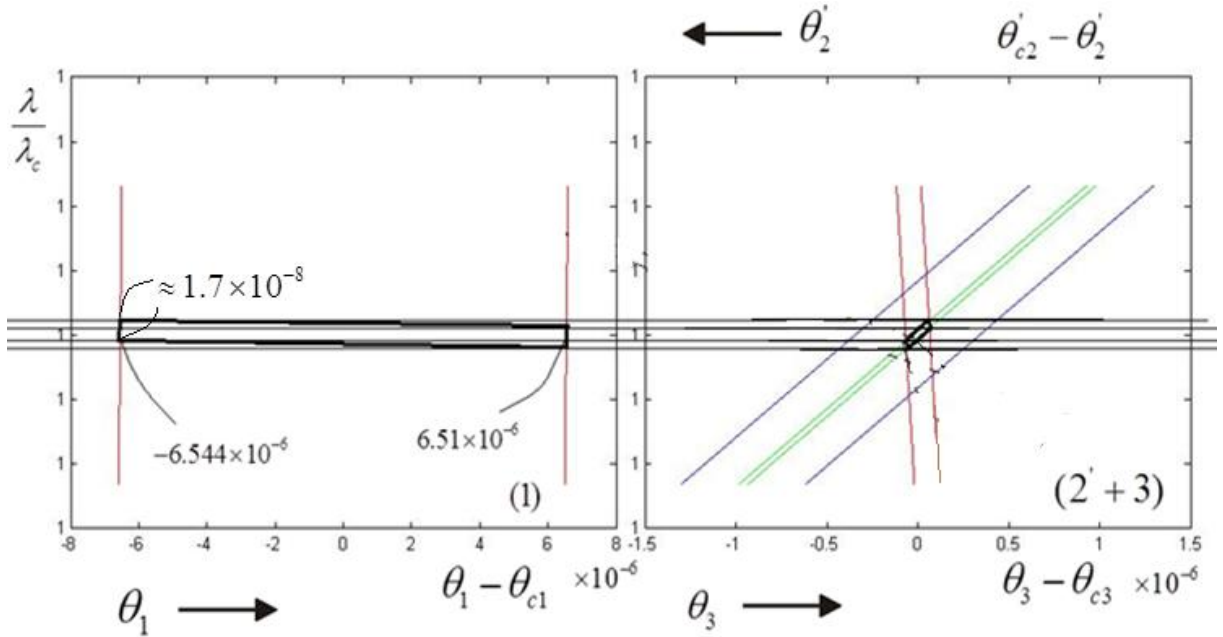


圖 6.15 在相同的範圍下，(2' + 3) 紅線與綠線交集的範圍為能連續被四塊晶體反射的反射區域，將此反射區域的面積投影到入射第一塊晶體的反射區域，如圖 6.15 (1)。

而入射四晶單光儀光的相對光譜寬度 $\Delta\lambda/\lambda$ 約為 10^{-4} ，角寬度 $\Delta\theta$ 約為 10^{-5} ，而入射四晶單光儀的全反射區與圖 6.8(1) 中黑色框框所包圍面積兩者的比值即為穿透(Throughput)。

初步估計穿透率 T 約為：

$$T \cong \frac{(6.544 \times 10^{-6} + 6.51 \times 10^{-6}) \times 1.7 \times 10^{-8}}{10^{-4} \times 10^{-5}} = 2.2192 \times 10^{-4}。$$

6.2 複合式共振腔

在傳統光學中，若任意兩組共振腔厚度相同時，穿透光的 finesse ($F^* = \pi\sqrt{R}/(1-R)$) 值也相同，另外共振峰值在能量尺度下的半高寬為 $\Gamma = E_d / F^*$ ，因此單純改變間距時自由光譜範圍(free spectral range, 簡稱 FSR 為兩共振峰值的間距 $E_d = hc / 2d$)與半高寬將只會等比例放大與縮小。為了使穿透光同時保有大的 FSR 與細的半高寬，我們設計將兩組厚度相同但間距不同的共振腔組合在一起，實驗架設如圖 6.16。藉由前方間距較小的共振

腔決定穿透整個系統光的 FSR，由後方間距較大的共振腔決定穿透整個系統光的半寬高。此外為了避免光在兩共振腔間干涉，兩組共振腔彼此的距離最好拉開到 $2049 \mu\text{m}$ 以上大於入射光的同調長度，如此一來便可直接將前方共振腔穿透光的強度乘上後方共振腔穿透光的強度，而得到單一波長且半寬窄的穿透光，如圖 6.17(c)所示。

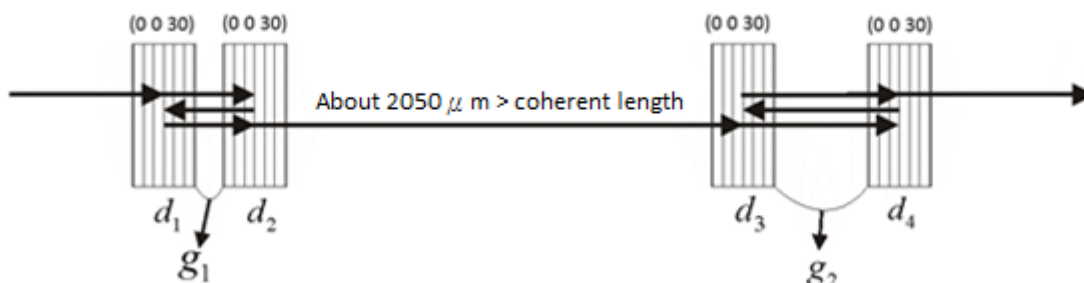


圖 6.16 兩種共振腔結合的模擬圖，其中 $d = d_1 = d_2 = d_3 = d_4$ ，且 $g_1 < g_2$ 。

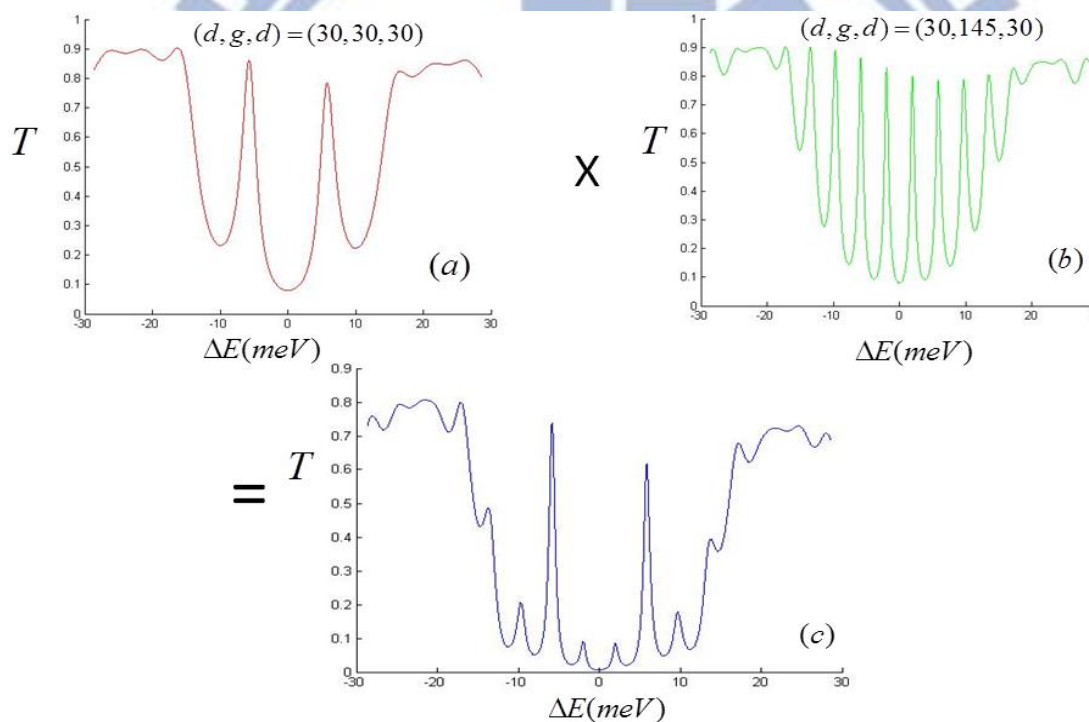


圖 6.17 (a)晶體厚度為 $30 \mu\text{m}$ 、間距為 $30 \mu\text{m}$ 的穿透率對能量的圖型。(b)晶體厚度為 $30 \mu\text{m}$ 、間距為 $140 \mu\text{m}$ 的穿透率對能量的圖型。將(a)與(b)的穿透強度相乘可得到(c)圖穿透率對能量的圖型

About $2000 \mu\text{m} > \text{coherent length}$

當厚度相同時晶體間距較小的共振腔擁有寬的 FSR 以及大的半高寬，如圖 6.17(a)；但當晶體間距增加時，中央峰值會慢慢分裂成許多寬度較小的共振峰值，隨著晶體間距增加，共振峰值的數目也會增加且半高寬變小，原因來自於 FSR 反比於晶體間距，如圖 6.17(b)。若兩共振腔彼此間距離大於光的同調長度，圖 6.16(a)穿透光強度可直接乘上圖 6.17(b)

穿透光的強度，最後得到圖 6.17(c) 穿透光。將圖 6.16(a)(b)(c) 三圖放在一起可得到圖 6.18。

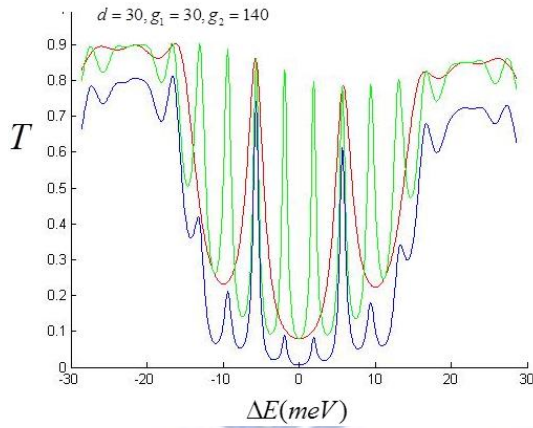


圖 6.18 將圖 6.17 的(a)、(b)、(c) 三張圖放在一起的穿透率對能量圖型。

由圖 6.18 可明顯看到，藍線的 FSR 由前方共振腔穿透光紅線的 FSR 決定，另外藍線的半高寬則由後方共振腔穿透光綠線的半高寬所決定。因此在模擬設計時我會先由前方共振腔決定穿透光的 FSR，再慢慢調整後方共振腔的間距使的穿透光(綠線)與前者穿透光的峰值(紅線)重疊在一起，使得系統穿透光(藍線)強度更強。

接下來我們利用 Stetsko 所寫的程式，分別模擬以藍寶石以及矽為材料的複合式共振腔，藉由改變不同晶體厚度、晶體間距以及特殊的晶體厚度比例，來設計出一套穿透光擁有大的 FSR 且半高寬窄特性的共振腔。而藍寶石共振腔與矽共振腔分別固定輸入的參數為：

藍寶石共振腔參數

物理量	輸入數值
入射面	(0,0,30)
波長	0.86613(A)
χ_0	$-7.9622 \times 10^{-6} - 2.8513 \times 10^{-8}i$
χ_{0-G}	$8.7664 \times 10^{-7} + 2.0071 \times 10^{-8}i$
χ_{G-0}	$8.7664 \times 10^{-7} + 2.0071 \times 10^{-8}i$

矽共振腔參數

物理量	輸入數值
入射面	(12,4,0)
波長	0.85871
χ_0	$-3.45 \times 10^{-8}i$
χ_{O-G}	$3.927 \times 10^{-7} + 1.8 \times 10^{-8}i$
χ_{G-O}	$3.927 \times 10^{-7} + 1.8 \times 10^{-8}i$

6.2.1 兩組共振腔的結合-藍寶石共振腔

首先我將兩組共振腔晶體厚度設定為 $30 \mu\text{m}$ 且前方共振腔晶體間距固定為 $20 \mu\text{m}$ ，調整後方共振腔晶體間距使得穿透兩組共振腔的光強度有最大值，分別得到以下模擬結果：

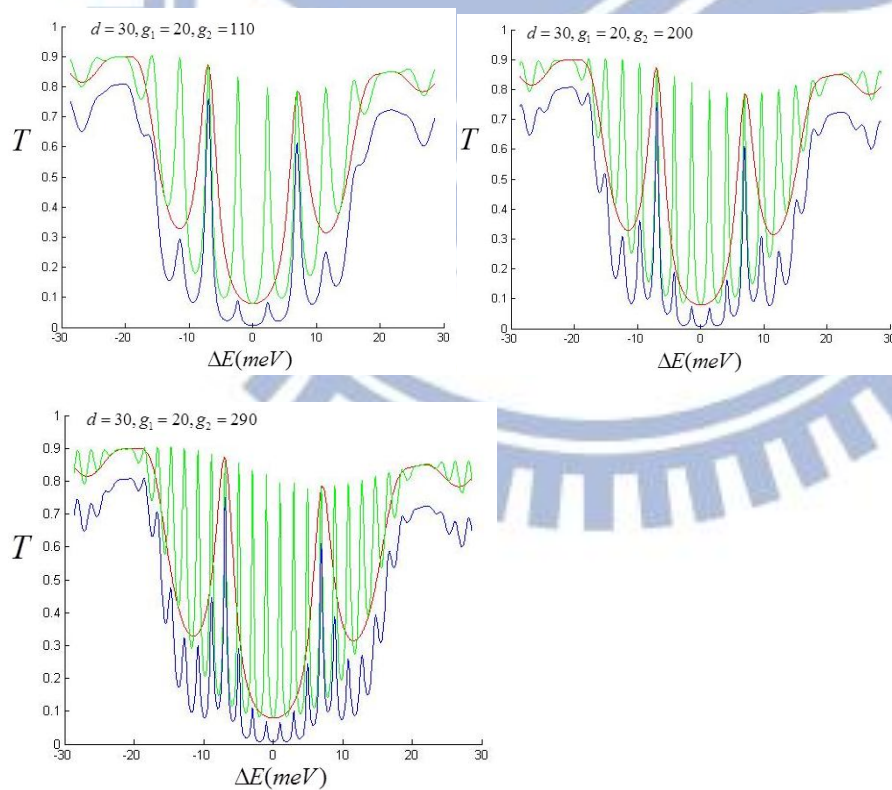


圖 6.19 (0 0 30)固定兩組共振腔晶體厚度及前方共振腔晶體間距，調整後方共振腔的晶體間距使得穿透光(藍線)有最大值。紅線為前方共振腔的穿透光對能量關係圖，綠線為

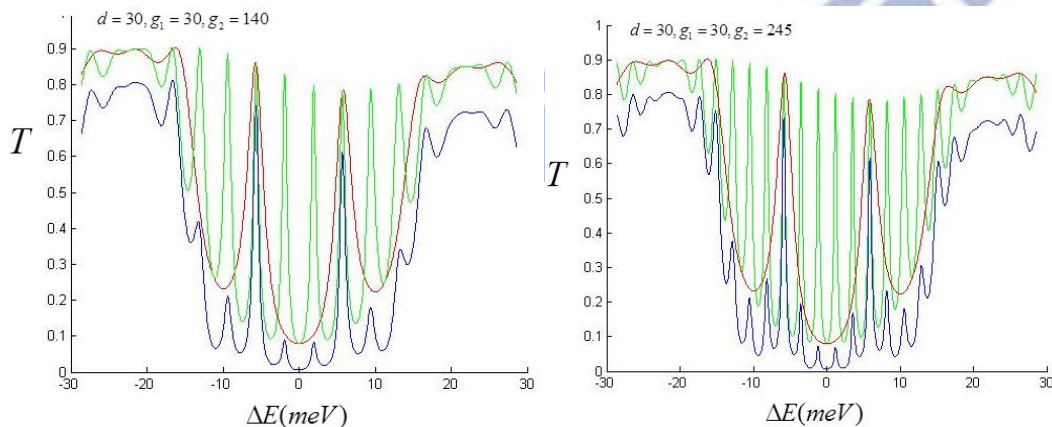
後方共振腔穿透率對能量關係圖，藍線為紅線與綠線相乘下的結果。其中能量值為經過平移的結果 $\Delta E = E - 14.3147(\text{keV})$ 。

$d(\mu\text{m}), g(\mu\text{m})$	$\Gamma(\text{meV})$	$FSR(\text{meV})$	$\bar{F} = \frac{FSR}{\Gamma}$	T(max)	Signal to noise ratio
$d = 30, g_1 = 20, g_2 = 110$	1.087	13.905	12.7920	0.7587	0.1191
$d = 30, g_1 = 20, g_2 = 200$	0.687	13.79	20.0728	0.7437	0.2538
$d = 30, g_1 = 20, g_2 = 290$	0.493	13.848	28.089	0.7508	0.3892

表 6.8 後方共振腔晶體間距分別在 110、200、290 μm 時穿透光(藍線)的半高寬 Γ 、FSR、 \bar{F} 、穿透率 T 以及 Signal to noise ratio 的值。

\bar{F} 定義為為系統穿透光(藍線)的 FSR 與半高寬的比值，若 \bar{F} 越大則越接近我們目標有寬的 FSR 與窄的半高寬；而 Signal to noise ratio 為峰值穿透光強度與隔壁背景穿透光峰值之間比值，當 Signal to noise ratio 值越小，代表背景強度越弱。由圖 6.19 及表 6.8 可以發現後方共振腔的間距在等差級數增加下有穿透兩組共振腔的光強度最大值，而三組穿透光(藍線)相比較，FSR 及穿透強度仍大約相同，同時隨著後方共振腔間距增加半高寬 Γ 將變窄且 \bar{F} 變大，但背景強度變得較複雜。

接著我將前方共振腔晶體間距分別調整成 30 μm 與 40 μm ，調整後方共振腔晶體間距使得穿透兩組共振腔的光強度有最大值，分別得到以下模擬結果：



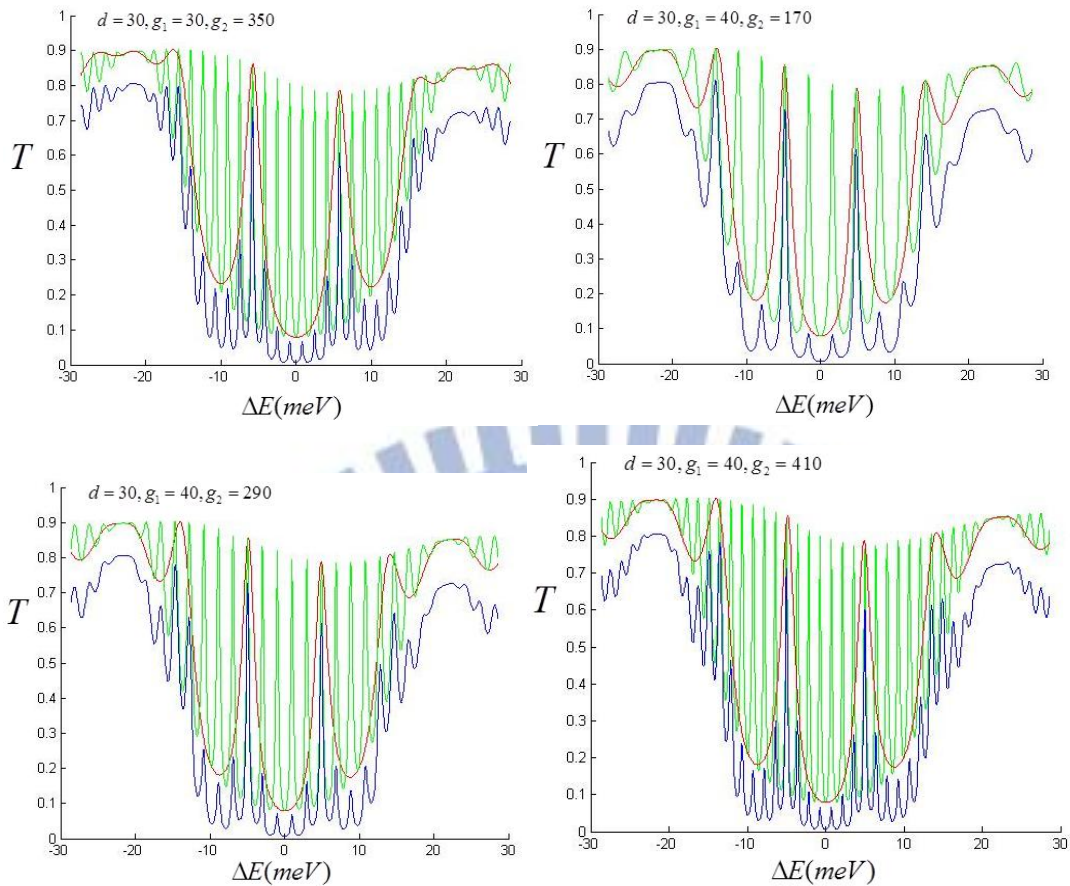


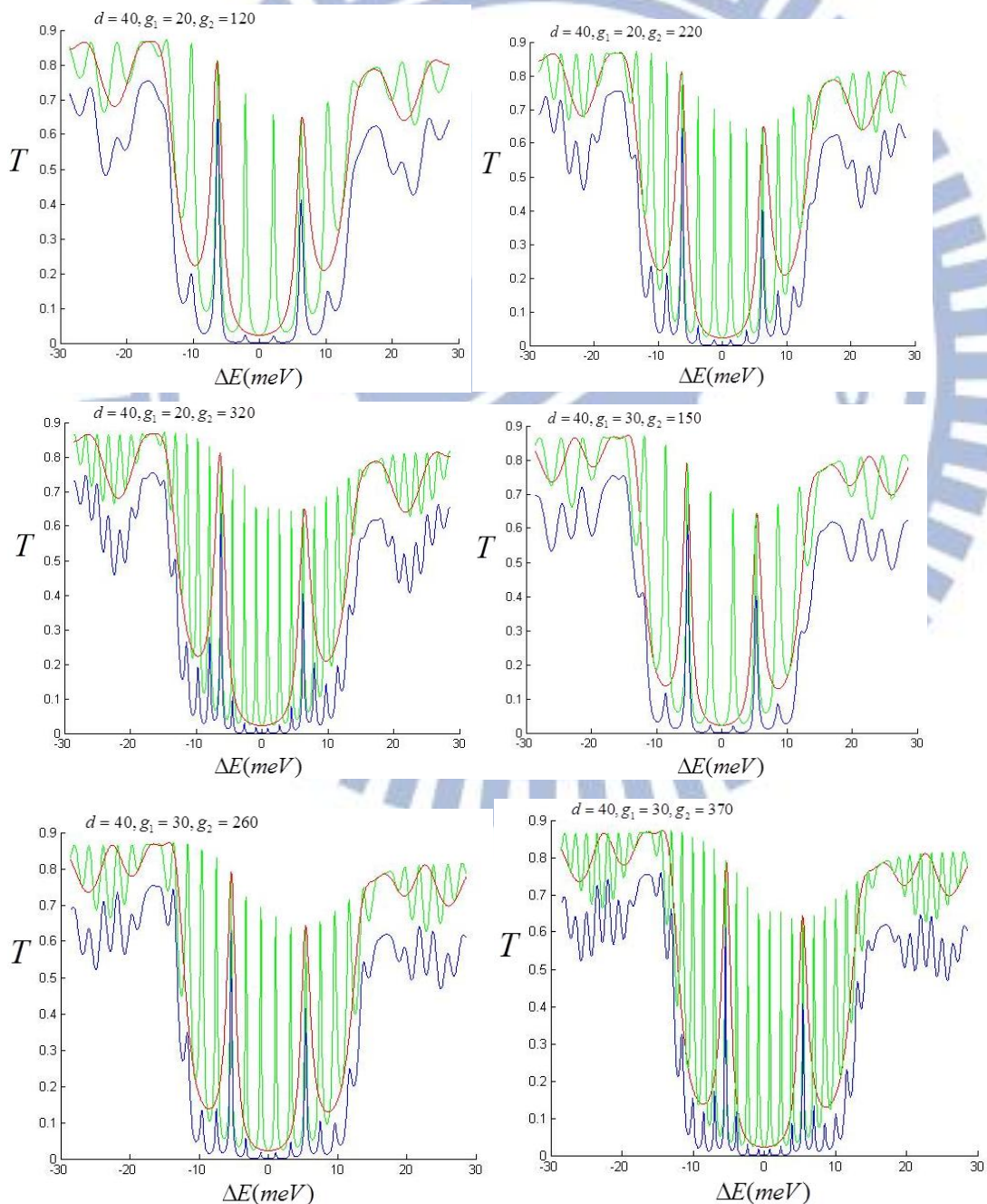
圖 6.20.(0 0 30)將前方共振腔晶體間距改變成 30 與 40 μm ，然後調整後方共振腔晶體間距使得穿透光(藍線)強度有最大值。紅線為前方共振腔的穿透光對能量關係圖，綠線為後方共振腔穿透率對能量關係圖，藍線為紅線與綠線相乘下的結果。其中能量值為經過平移的結果 $\Delta E = E - 14.3147(\text{keV})$ 。

$d(\mu\text{m}), g(\mu\text{m})$	$\Gamma(\text{meV})$	$FSR(\text{meV})$	\bar{F}	T(max)	Signal to noise ratio
$d = 30, g_1 = 30, g_2 = 140$	0.83	11.387	13.7192	0.7413	0.1183
$d = 30, g_1 = 30, g_2 = 245$	0.61	11.73	19.1967	0.7337	0.2648
$d = 30, g_1 = 30, g_2 = 350$	0.438	11.558	26.3881	0.7385	0.4018
$d = 30, g_1 = 40, g_2 = 170$	0.72	9.612	13.35	0.7274	0.1200
$d = 30, g_1 = 40, g_2 = 290$	0.47	9.842	20.9404	0.7256	0.2563
$d = 30, g_1 = 40, g_2 = 410$	0.344	9.956	28.9418	0.7134	0.4221

表 6.9 改變前後共振腔晶體間距下穿透光(藍線)的半高寬 Γ 、FSR、 \bar{F} 、穿透率 T 以及 Signal to noise ratio 的值。

由圖 6.20 及表 6.9 可看出，當前方共振腔晶體間距增大時，穿透光(藍線)的 FSR 將變小。而固定前方共振腔晶體間距時，後方共振腔的晶體間距在等差級數增加下有穿透光(藍線)強度最大值，另外隨著我們增加後方共振腔的晶體間距，穿透率 T 依然可大約維持不變且同時半高寬 Γ 將變窄、 \bar{F} 變大，符合我們的目標，唯缺點是背景強度變的較複雜。

接著將晶體厚度增加重複上述相同步驟，可得到下列模擬結果：



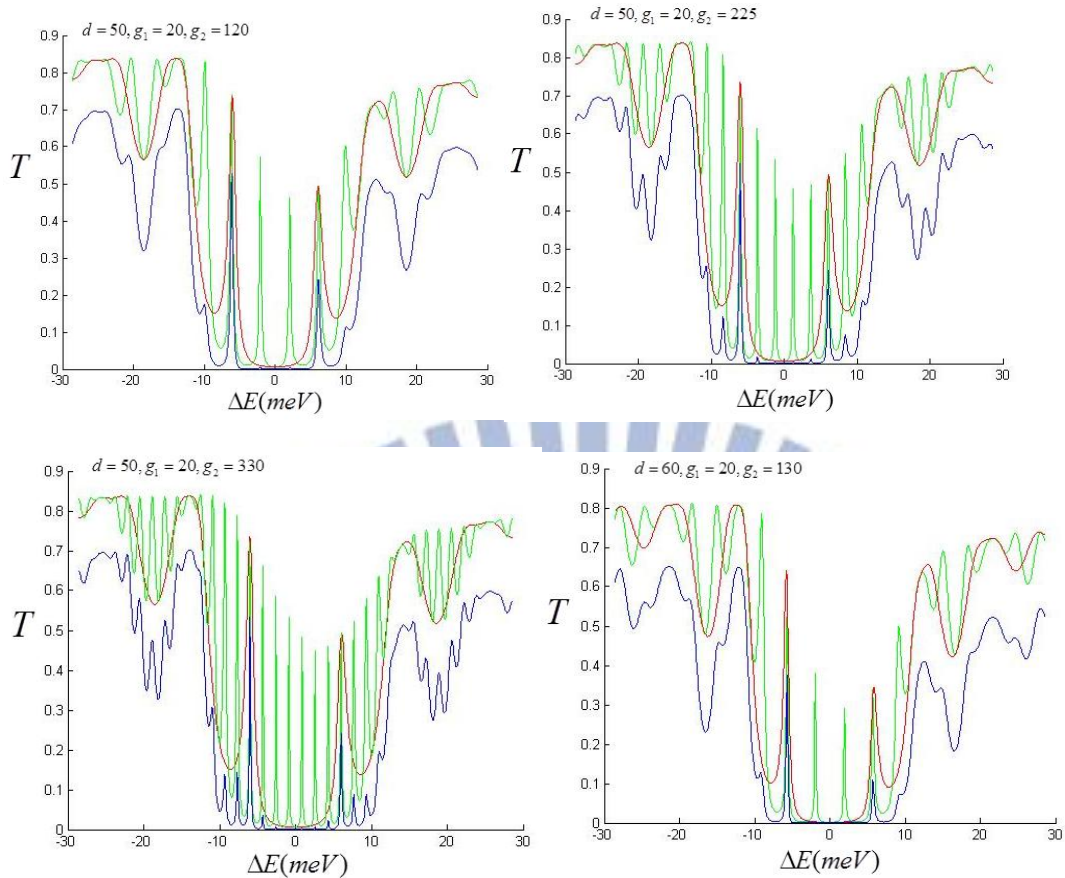


圖 6.21(0 0 30)將晶體厚度增加 $40 \mu\text{m}$ 與 $50 \mu\text{m}$ ，調整晶體間距使得穿透光(藍線)有最大值。紅線為前方共振腔的穿透光對能量關係圖，綠線為後方共振腔穿透率對能量關係圖，藍線為紅線與綠線相乘下的結果。其中能量值為經過平移的結果 $\Delta E = E - 14.3147(\text{keV})$ 。

$d(\mu\text{m}), g(\mu\text{m})$	$\Gamma(\text{meV})$	$FSR(\text{meV})$	\bar{F}	T(max)	Signal to noise ratio
$d = 40, g_1 = 20, g_2 = 120$	0.639	12.531	19.610	0.6442	0.0569
$d = 40, g_1 = 20, g_2 = 220$	0.41	12.474	30.4243	0.6441	0.0900
$d = 40, g_1 = 20, g_2 = 320$	0.286	12.474	43.61538	0.6357	0.1673
$d = 40, g_1 = 30, g_2 = 150$	0.47	10.471	22.5787	0.6093	0.0369
$d = 40, g_1 = 30, g_2 = 260$	0.31	10.758	34.7032	0.6228	0.09134
$d = 40, g_1 = 30, g_2 = 370$	0.229	10.872	47.4759	0.6128	0.1897

$d = 50, g_1 = 20, g_2 = 120$	0.572	12.246	21.409	0.527	0.0094
$d = 50, g_1 = 20, g_2 = 225$	0.31	12.073	38.9451	0.5216	0.033
$d = 50, g_1 = 20, g_2 = 330$	0.194	12.016	61.9381	0.5318	0.0688
$d = 60, g_1 = 20, g_2 = 130$	0.293	11.444	39.058	0.3737	0

表 6.10 分別改變晶體厚度與晶體間距下穿透光(藍線)的半高寬 Γ 、FSR、 \bar{F} 、穿透率 T 以及 Signal to noise ratio 的值。

由圖 6.21 以及表 6.10 可知當晶體厚度增加時，因反射率的增加讓光在共振腔內來回反射的次數變多，使得穿透光的半高寬變得更窄、 \bar{F} 值變得更大，且背景強度光也隨著晶體厚度增加而減少，缺點是穿透率 T 變弱。

因此我們可以透過適當的調整晶體厚度與等差級數調整後方共振腔晶體間距的兩種方式，從中選擇我們希望穿透光(藍線)半高寬 Γ 、 \bar{F} 以及穿透率 T 的值。

從圖 6.20 與圖 6.21 發現峰值有左右不對稱性且左高右低的現象，其原因是因為晶體吸收效應的影響，且當晶體厚度越厚時，吸收效應增強導致左高右低的現象會更明顯。而在主要峰值兩側的共振現象原因來自於單塊晶體的正面反射光與背面反射光彼此干涉效應所造成。

實驗上為了確實在能量掃描下量測到穿透兩組共振腔的光(藍線)，入射共振腔的光能量半高寬 ΔE 最好小於共振腔的穿透光峰值半高寬 Γ 的三分之一，才可在波峰與波谷處偵測完整的波型。當入射光能量為 14.3147 keV 且解析度為 2.1133×10^{-8} 下，能量半高寬 ΔE 為：

$$\Delta E = 14.3147 \times 10^3 \times 2.1133 \times 10^{-8} = 0.3025 \text{ meV} \quad (6.1)$$

因此實驗上要驗證兩組共振腔的結合是否可行其共振峰值半高寬最好大於 0.9075 meV 為入射光能量寬度 ΔE 的三倍，才可在波峰與波谷處觀測到完整峰型。利用測不準原理與式子(6.1)的結果可以計算入射光的同調時間

$$\Delta t \approx \frac{\hbar}{\Delta E} \approx 2.1759075 \times 10^{-12} \text{ s} \quad (6.2)$$

並計算入射光的同調長度：

$$l_L = \left\langle \frac{\lambda}{\Delta\lambda} \right\rangle = \left\langle \frac{\lambda}{\frac{\Delta E}{E}} \right\rangle = 2.049 \times 10^{-3} m = 2049 \mu m \quad (6.3)$$

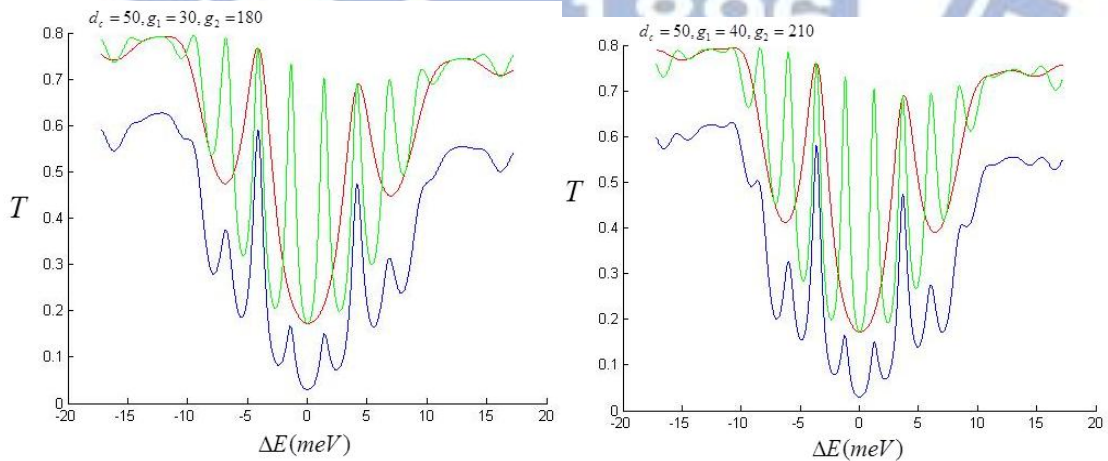
由式子(6.3)可知晶體間距至少必須小於 2049 μm 光在共振腔內才會滿足干涉條件。

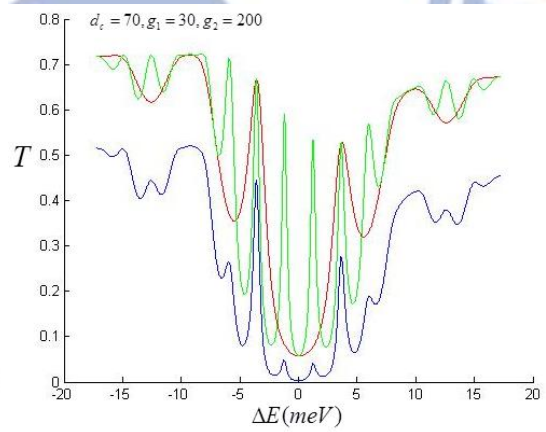
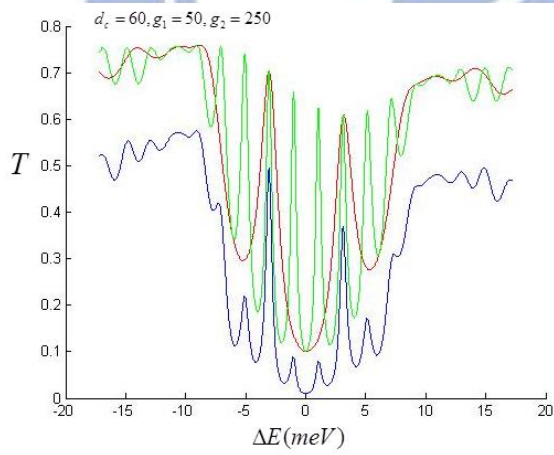
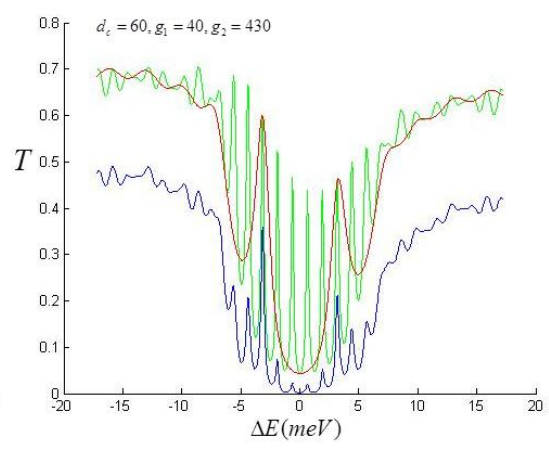
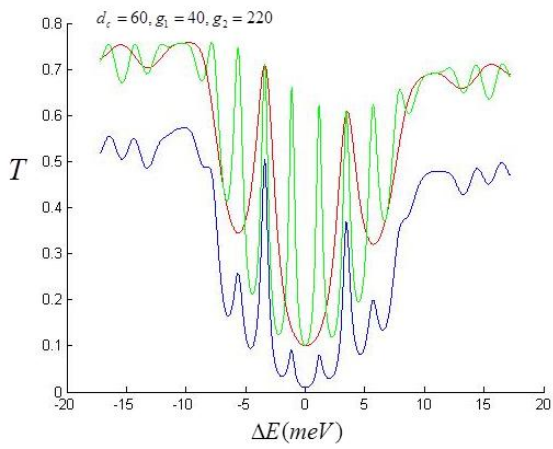
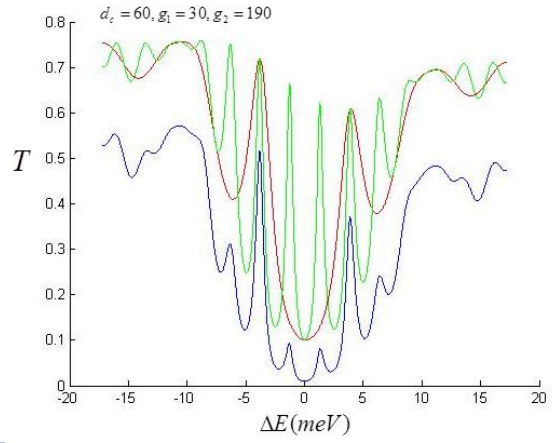
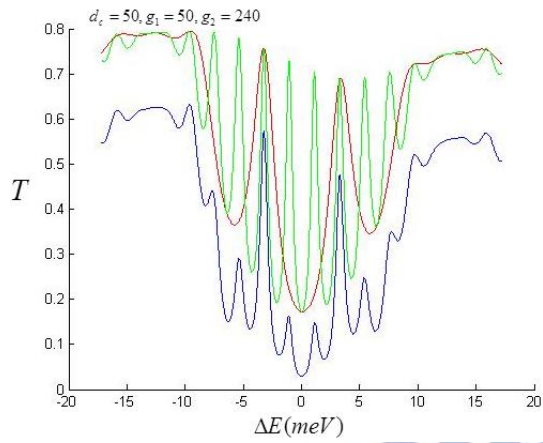
考量到上述條件，我選擇了以下的共振腔做為我實驗時的參數：

$d(\mu m), g(\mu m)$	$d(\mu m), g(\mu m)$
$d = 30, g_1 = 20, g_2 = 110$	$d = 40, g_1 = 20, g_2 = 120$
$d = 30, g_1 = 30, g_2 = 140$	$d = 40, g_1 = 20, g_2 = 220$
$d = 30, g_1 = 30, g_2 = 245$	$d = 40, g_1 = 20, g_2 = 320$
$d = 30, g_1 = 40, g_2 = 170$	$d = 40, g_1 = 30, g_2 = 150$
$d = 50, g_1 = 20, g_2 = 120$	

6.2.2 兩組共振腔的結合-矽共振腔

接下來將材料換成矽晶體材料，利用(12 4 0)的兩光背向繞射光，重複上述的模擬步驟，得到以下結果：





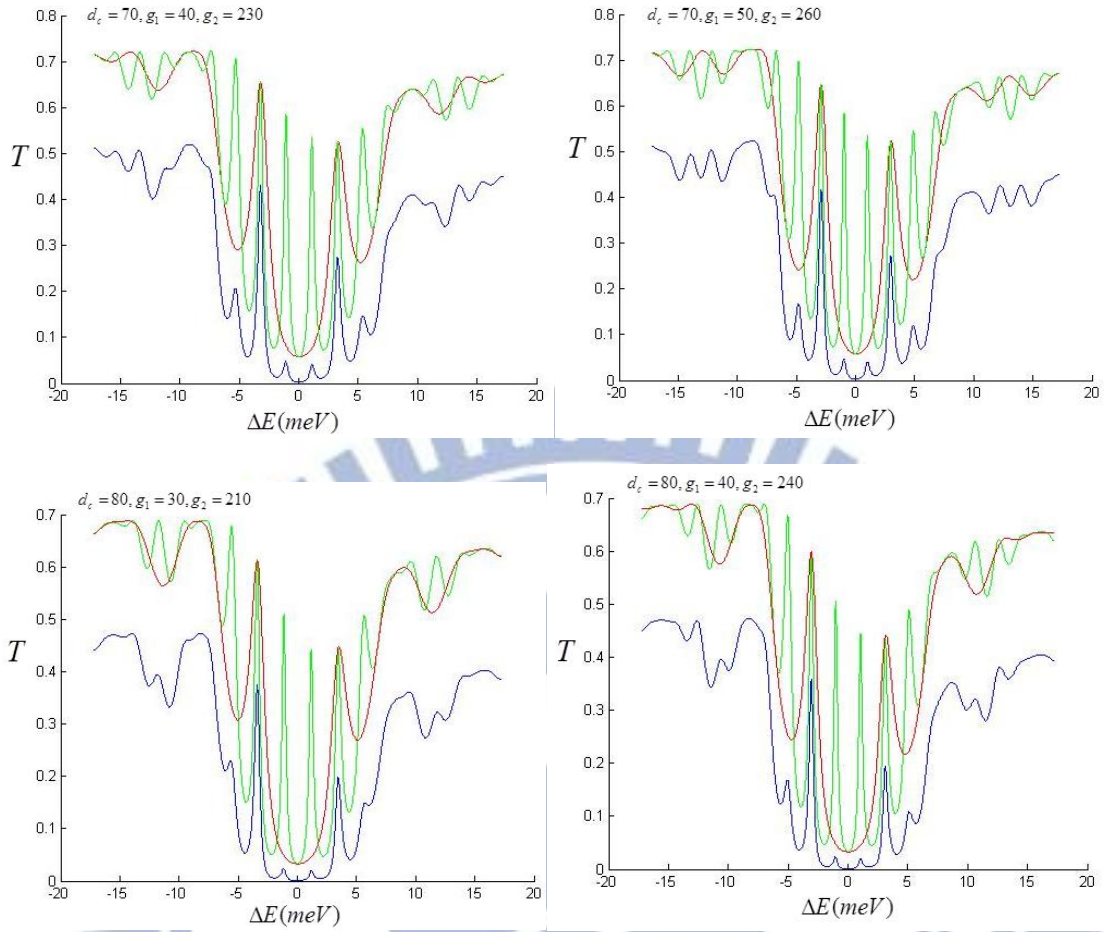


圖 6.22.(12 4 0)材料為矽晶體的兩組共振腔組合模擬。分別改變晶體厚度與間距，調整前後共振腔的晶體間距使得穿透光(藍線)有最大值。紅線為前方共振腔的穿透光對能量關係圖，綠線為後方共振腔穿透率對能量關係圖，藍線為紅線與綠線相乘下的結果。其中能量值為經過平移的結果 $\Delta E = E - 14.3147(keV)$ 。

$d_c (\mu m), g (\mu m)$	$\Gamma (meV)$	$FSR (meV)$	\bar{F}	T(max)	Signal to noise ratio
$d_c = 50, g_1 = 30, g_2 = 180$	1.044	8.269	7.9204	0.5808	0.2868
$d_c = 50, g_1 = 40, g_2 = 210$	0.873	7.295	8.3562	0.5803	0.2824
$d_c = 50, g_1 = 50, g_2 = 240$	0.744	6.495	8.7298	0.5732	0.2796
$d_c = 60, g_1 = 30, g_2 = 190$	0.83	7.696	9.2722	0.516	0.1798
$d_c = 60, g_1 = 40, g_2 = 220$	0.686	6.881	10.0306	0.5042	0.1786
$d_c = 60, g_1 = 40, g_2 = 430$	0.35	6.323	18.0657	0.3563	0.2014

$d_c = 60, g_1 = 50, g_2 = 250$	0.629	6.165	9.8012	0.4947	0.1822
$d_c = 70, g_1 = 30, g_2 = 200$	0.658	7.224	10.9787	0.4444	0.1095
$d_c = 70, g_1 = 40, g_2 = 230$	0.572	6.495	11.3548	0.4299	0.1073
$d_c = 70, g_1 = 50, g_2 = 260$	0.481	5.893	12.2515	0.4176	0.1129
$d_c = 80, g_1 = 30, g_2 = 210$	0.53	0.6838	12.9018	0.375	0.0661
$d_c = 80, g_1 = 40, g_2 = 240$	0.44	6.165	14.0113	0.358	0.0672
$d_c = 80, g_1 = 50, g_2 = 270$	0.37	5.621	15.1918	0.3435	0.0660

表 6.11 穿透光(藍線)在不同晶體間距、厚度參數下的半高寬 Γ 、FSR、 \bar{F} 以及穿透率的值。

圖 6.22 與 6.2.1 小節以藍寶石為材料的結果趨勢一樣，當固定晶體厚度以及前方共振腔的晶體間距時，後方共振腔的晶體間距在等差級數增加下有穿透光最大值，同時隨著後方共振腔間距增加半高寬 Γ 將變窄且 \bar{F} 變大。若將前方共振腔晶體間距增加，穿透光的 FSR 將變小。而晶體厚度增加，也可令半高寬 Γ 變小、 \bar{F} 值增加以及背景強度光減弱，唯缺點是穿透率會減弱，導致實用價值變低。

然而因為矽晶體的反射率與藍寶石晶體相比之下較弱，導致前者的背景光強度較強且更複雜，無法達到單一波長的效果。若將晶體厚度增加至 $80 \mu m$ 提高反射率降低背景光強度，但穿透過兩組共組腔的光強度(藍線)卻過低只有 $0.3 \sim 0.4$ ，較無利用價值。

6.3 特殊晶體厚度比例的複合式共振腔-

根據文獻[X.- R. Huang, Phys. Rev. Lett. 108, 224801 (2012)]所提出的鑽石共振腔概念，將三塊晶體厚度相同的共振腔調整比例，讓排列在中間的晶體厚度變成排列在前後晶體厚度的兩倍，如圖 6.23。

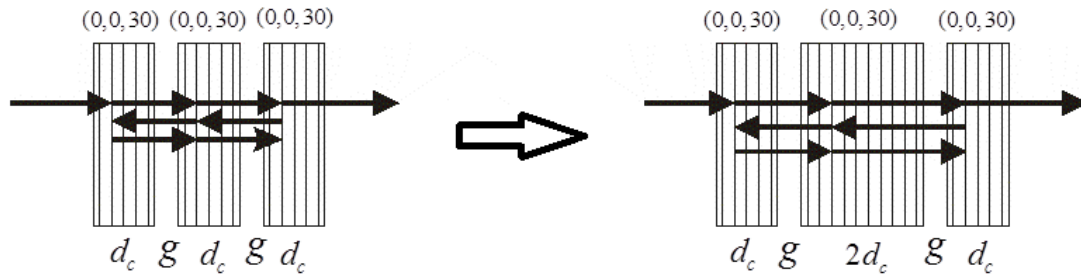


圖 6.23 將三塊晶體厚度比例為 1:1:1 的共振腔，調整成晶體厚度比例為 1:2:1。

利用這樣的調整做了共振腔模擬，確實發現穿透光分岔的波峰合併成為單一波峰，如圖 6.24 與圖 6.25

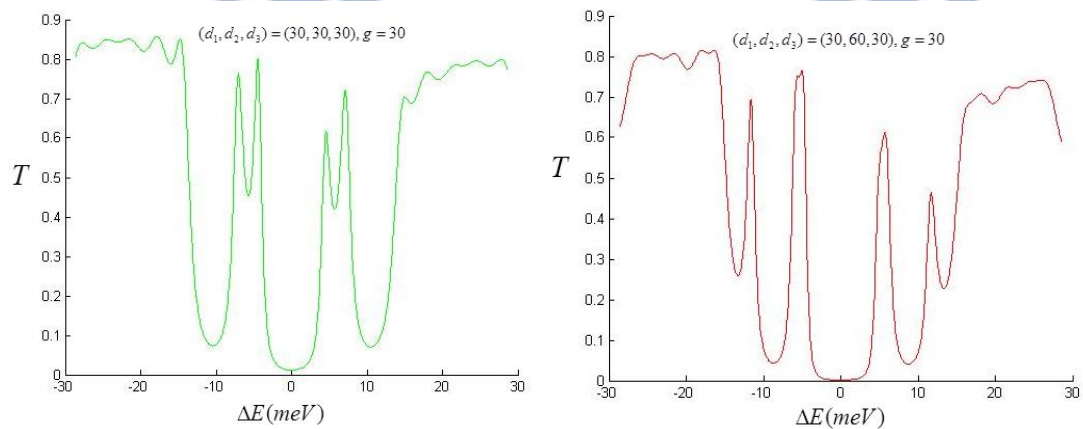


圖 6.24 (0 0 30)左圖為共振腔晶體厚度比例為 1:1:1 的穿透率對能量關係圖，右圖為晶體厚度比例為 1:2:1 的穿透率對能量關係圖。其中能量值為經過平移的結果 $\Delta E = E - 14.3147(keV)$

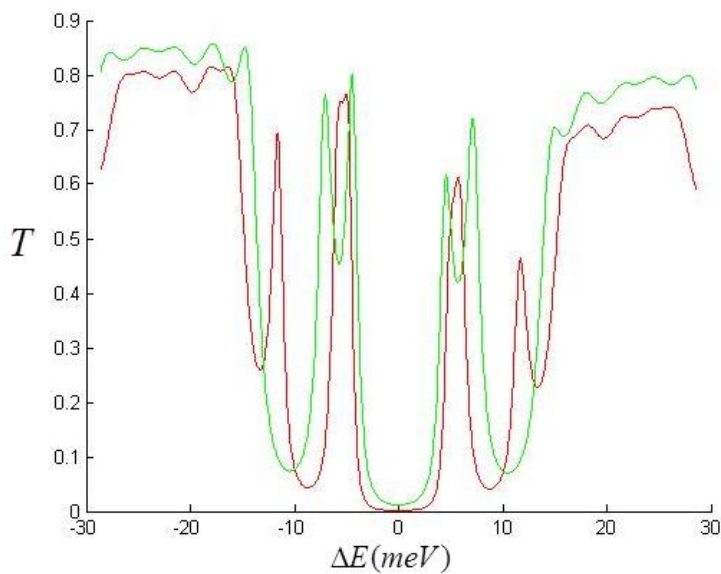
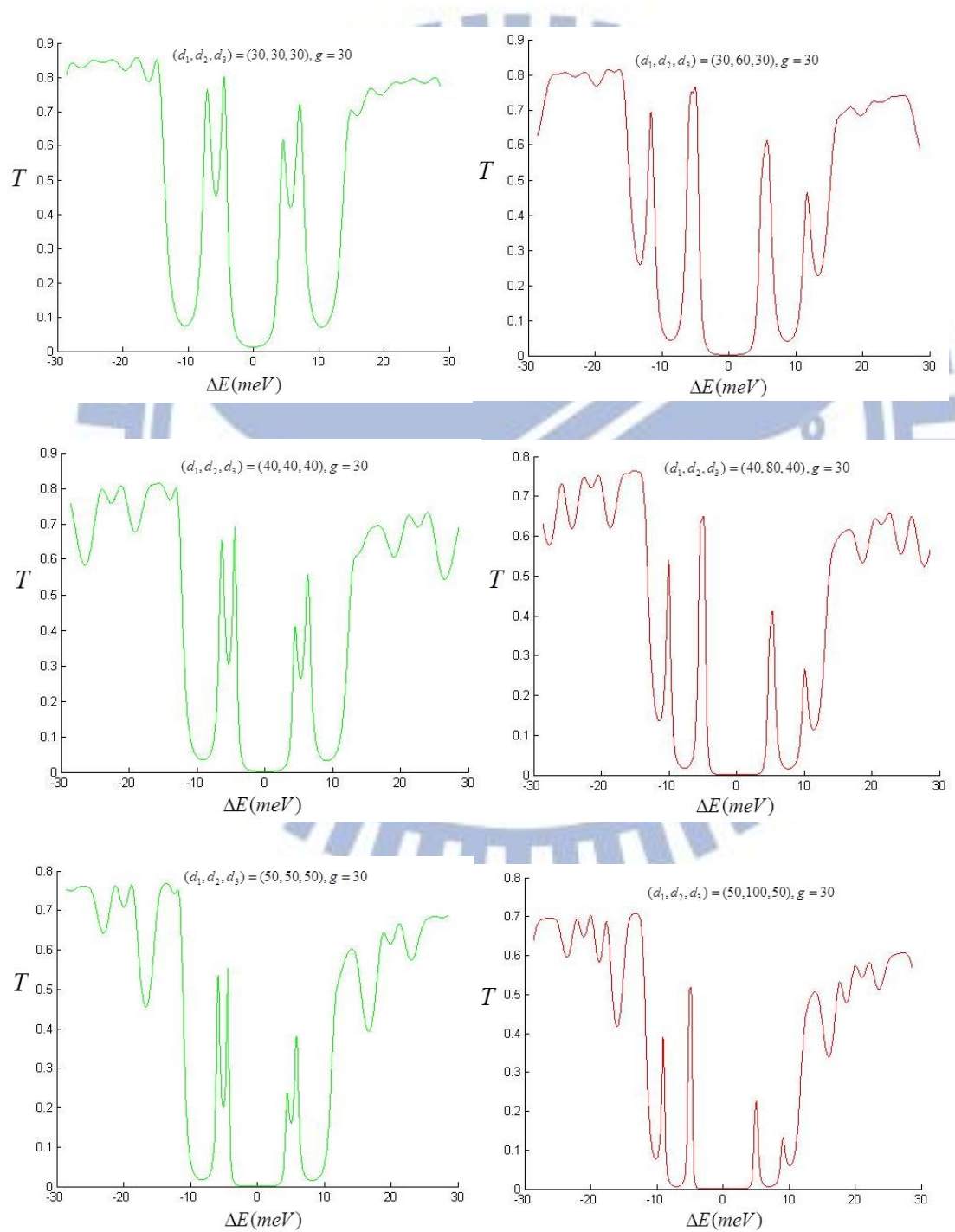


圖 6.25.將圖 6.23 左右兩張圖放在一起比較，確實共振腔在晶體厚度比例為 1:2:1 時分叉的穿透光將合併為單一波峰。

6.3.1 特殊厚度比例的複合式藍寶石共振腔

因此將這樣的想法應用在藍寶石共振腔以及矽共振腔下，得到以下模擬結果：



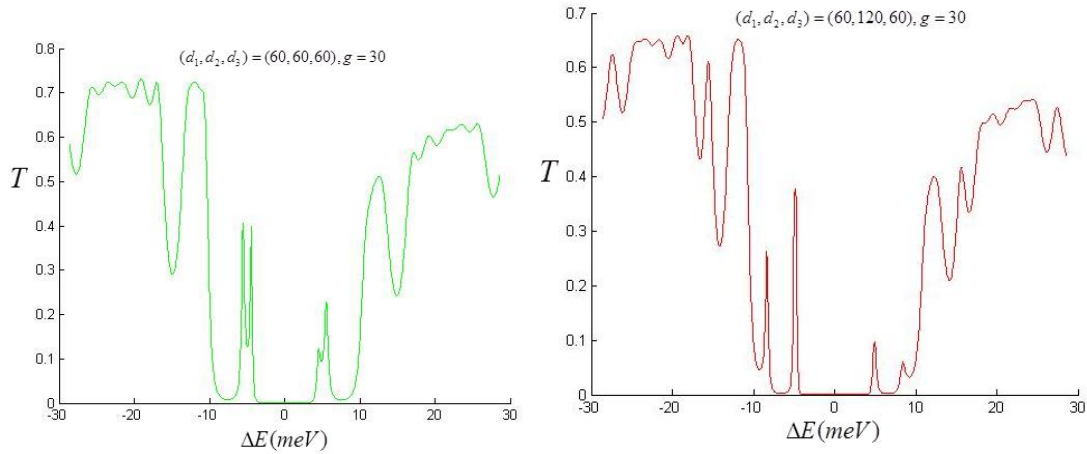


圖 6.26 利用藍寶石晶體的(0 0 30)兩光背向繞射，在不同厚度下能量掃描圖型。左圖為晶體厚度比例為 1:1:1 的穿透率對能量的關係，右圖為晶體厚度比例為 1:2:1 的穿透率對能量的關係，且晶體間距固定為 $30 \mu m$ 。其中能量值為經過平移的結果 $\Delta E = E - 14.3147(keV)$ 。

我們探討藍寶石晶體在(0 0 30)兩光背向繞射、晶體厚度比例分別為 1:1:1 與 1:2:1 下，改變晶體厚度，觀察穿透率對能量變化的情形，且晶體間距固定為 $30 \mu m$ 。

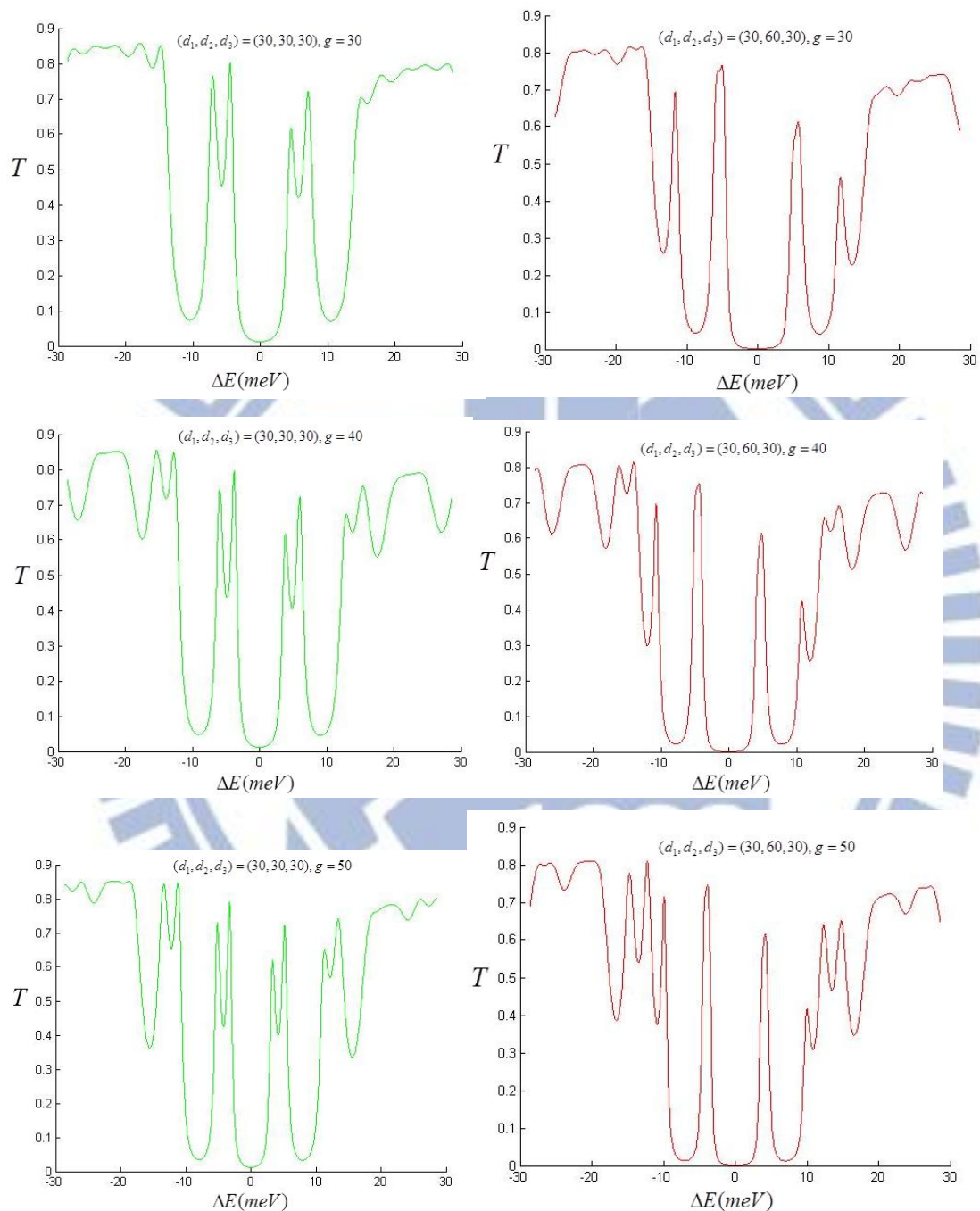
針對圖 6.26 的模擬結果，觀察晶體厚度比例為 1:2:1 的共振腔，比較穿透光在不同晶體厚度參數下的半高寬 Γ 、FSR、 \bar{F} 、穿透率以及背景強度 *constast* 的值。

$d_c (\mu m), g(\mu m)$	$\Gamma(meV)$	$FSR(meV)$	\bar{F}	T(max)	contrast
$(d_1, d_2, d_3) = (30, 60, 30), g = 30$	2.003	11.042	5.5132	0.7507	0.0588
$(d_1, d_2, d_3) = (40, 80, 40), g = 30$	1.16	10.242	8.8293	0.6496	0.0280
$(d_1, d_2, d_3) = (50, 100, 50), g = 30$	0.7	9.899	14.1414	0.5171	0.0127
$(d_1, d_2, d_3) = (60, 120, 60), g = 30$	0.445	9.785	21.9887	0.3777	0.0066

表 6.12 穿透光在不同晶體厚度參數下且晶體厚度比例為 1:2:1 時的半高寬 Γ 、FSR、 \bar{F} 、穿透率以及背景強度 *contrast* 的值。

Contrast 為穿透光峰值與背景強度光強度的比值，值越小代表背景強度光越弱。由圖 6.26 以及表 6.12 可以看出，當晶體厚度增加時， \bar{F} 的值會明顯的增加，然而穿透率 T 卻跟著降低，此意味著有較好的共振性但卻測不到強度，即無實用價值，因此設計晶體厚度時以 $30 \sim 50 \mu m$ 較為適當，也易於觀測共振條紋。

接下來針對晶體厚度為 $(30,30,30) \mu\text{m}$ 與 $(30,60,30) \mu\text{m}$ 的共振腔，改變晶體間距觀察穿透率對能量的圖形。



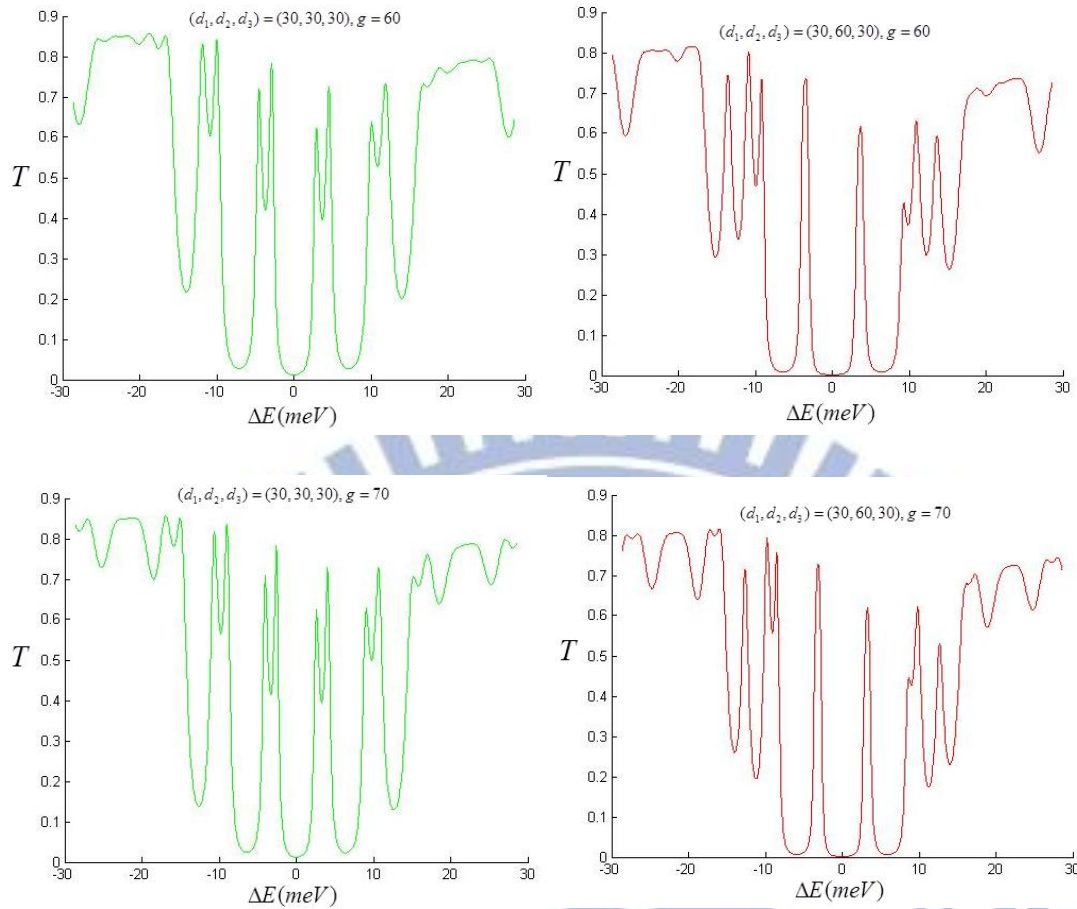


圖 6.27 利用(0 0 30)兩光背向繞射，左右兩圖分別為晶體厚度固定在(30,30,30) μm 與 (30,60,30) μm 時不同晶體間距下的能量掃描圖型。其中能量值為經過平移的結果 $\Delta E = E - 14.3147(\text{keV})$

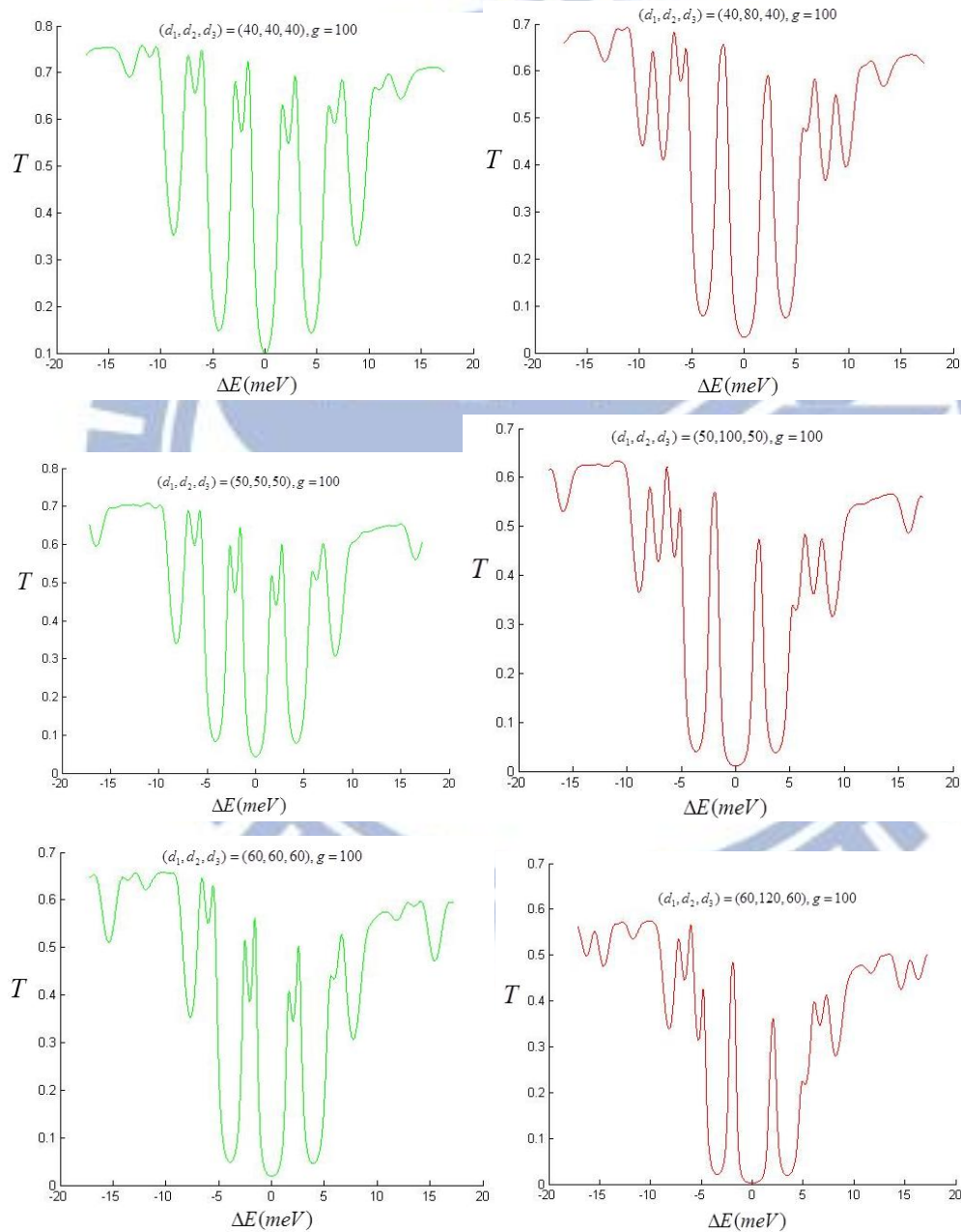
$d_c(\mu\text{m}), g(\mu\text{m})$	$\Gamma(\text{meV})$	$FSR(\text{meV})$	\bar{F}	T(max)	Contrast
$(d_1, d_2, d_3) = (30, 60, 30), g = 30$	2.003	11.042	5.5132	0.7507	0.0572
$(d_1, d_2, d_3) = (30, 60, 30), g = 40$	1.58	9.27	5.867	0.7521	0.0297
$(d_1, d_2, d_3) = (30, 60, 30), g = 50$	1.29	8.011	6.21	0.745	0.0202
$(d_1, d_2, d_3) = (30, 60, 30), g = 60$	1.1	7.152	6.5018	0.7363	0.0125
$(d_1, d_2, d_3) = (30, 60, 30), g = 70$	1.04	6.409	6.16	0.7287	0.0024

表 6.13 晶體厚度固定為(30,60,30) μm 時不同晶體間距在能量掃描下，穿透光的半高寬 Γ 、FSR、 \bar{F} 、穿透率 T 以及背景強度 contrast 的值。

有圖 6.27 及表 6.13 可知，當晶體間距增加時，共振峰值數目會增加且峰值寬度以及峰與峰之間的問題會變小，但因為晶體厚度不變的情況下， \bar{F} 並沒有太大的改變。

6.3.2 特殊比例的複合式矽共振腔

接下來將材料換成矽晶體，利用(12 4 0)兩光背向繞射，重複同樣的模擬方法得到以下結果：



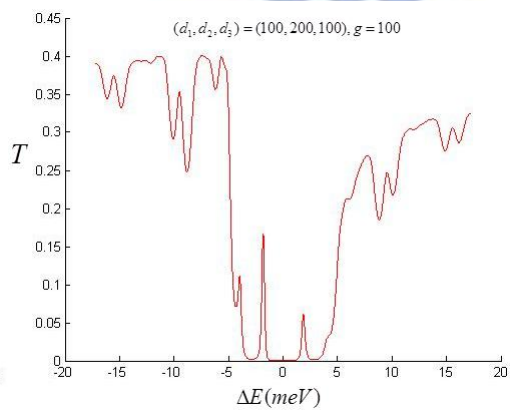
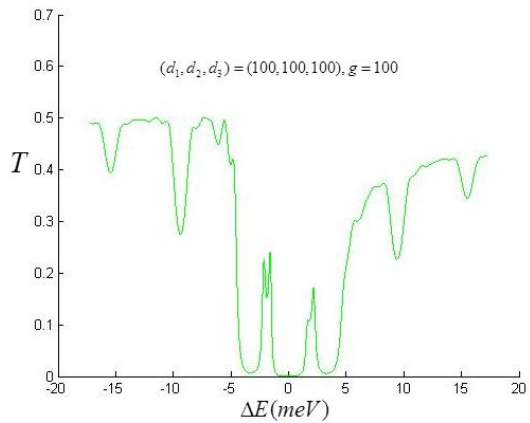
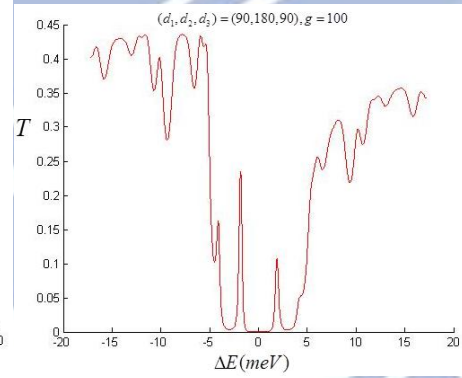
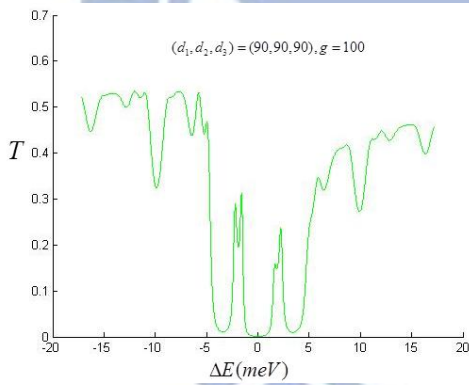
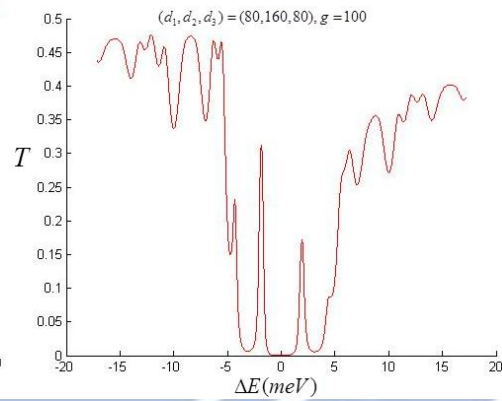
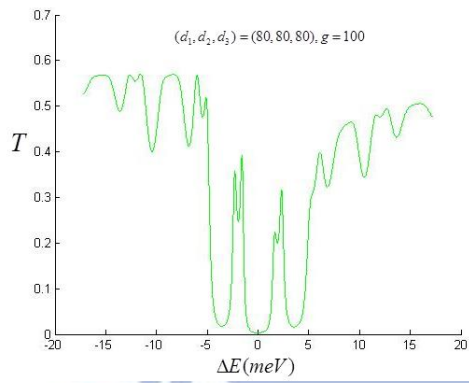
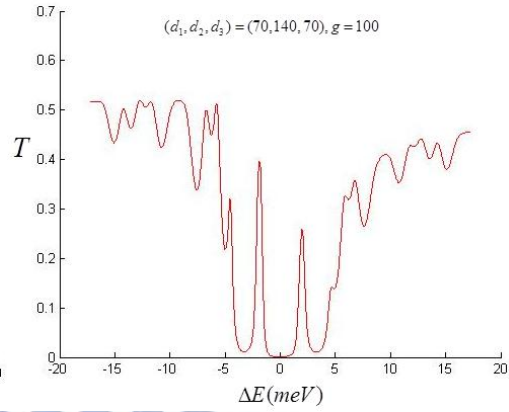
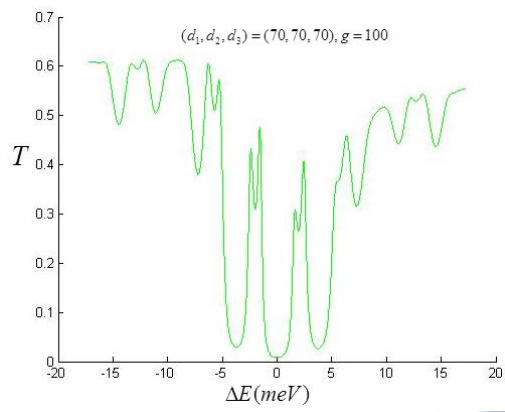


圖 6.28 利用(12 4 0)兩光背向繞射，在不同厚度下能量掃描圖型。左圖為晶體厚度比例為 1:1:1 的穿透率對能量的關係，右圖為為晶體厚度比例為 1:2:1 的穿透率對能量的關係，且晶體間距固定為 $100 \mu m$ 。其中能量值為經過平移的結果 $\Delta E = E - 14.4388(keV)$ 。

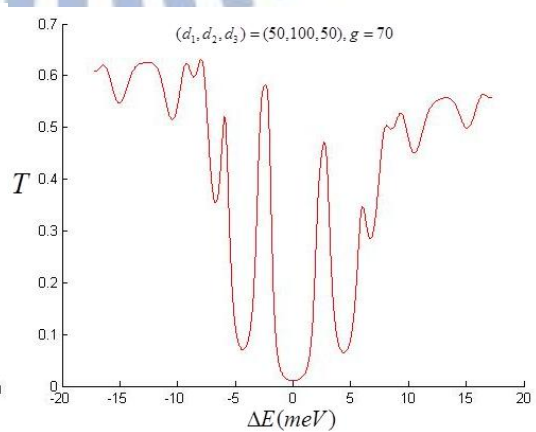
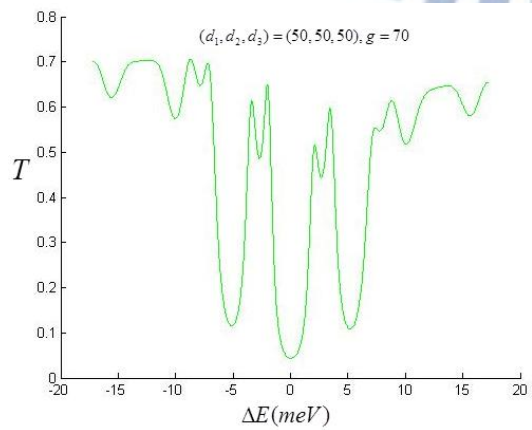
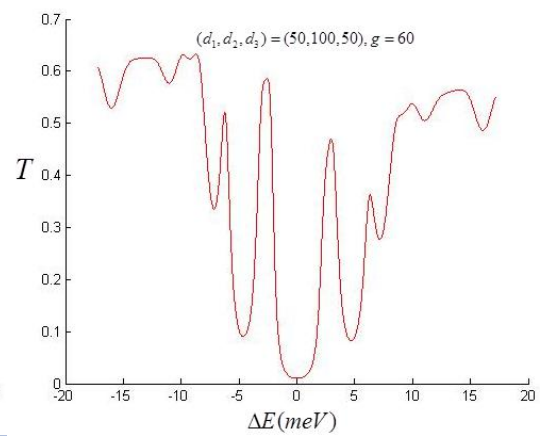
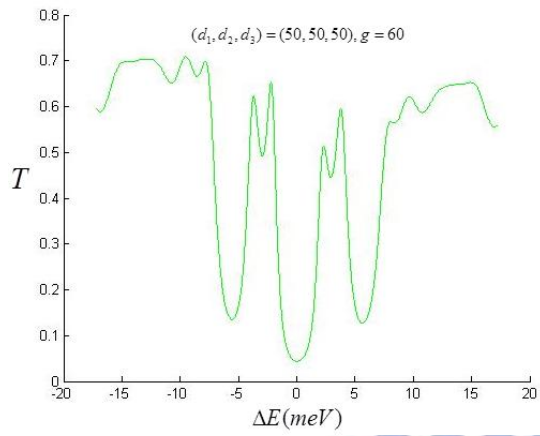
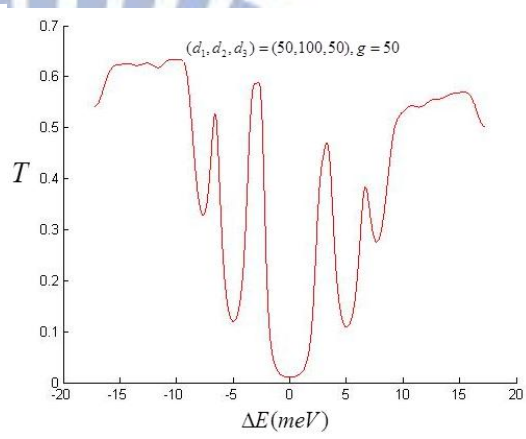
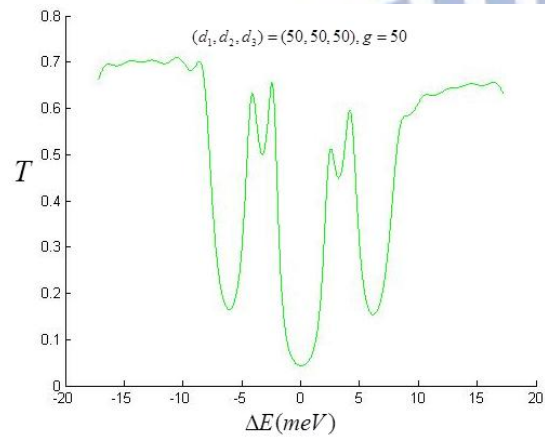
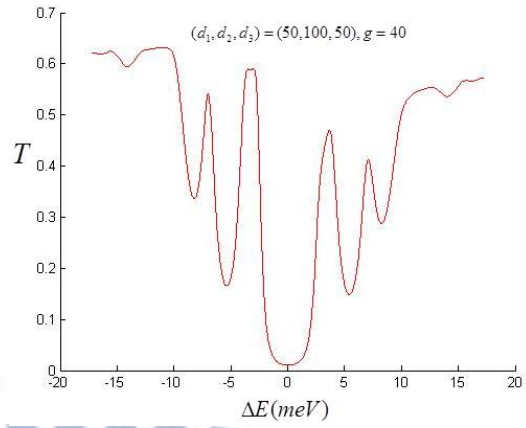
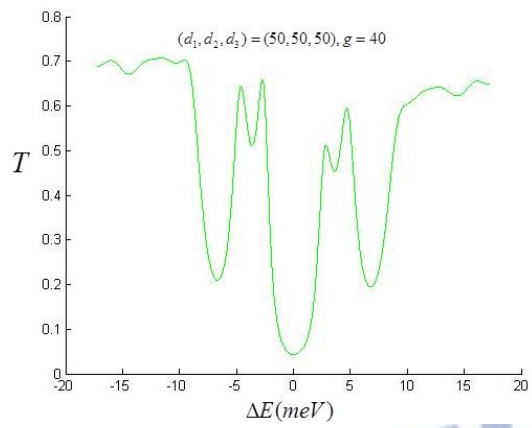
針對圖 6.28 的模擬結果，觀察晶體厚度比例為 1:2:1 的共振腔，比較穿透光在不同厚度參數下的半高寬 Γ 、FSR、 \bar{F} 、穿透率 T 以及背景強度 contrast 的值。

$d_c(\mu m), g(\mu m)$	$\Gamma(meV)$	$FSR(meV)$	\bar{F}	T(max)	Contrast
$(d_1, d_2, d_3) = (40, 80, 40), g = 100$	1.359	4.263	3.137	0.6559	0.1210
$(d_1, d_2, d_3) = (50, 100, 50), g = 100$	1.01	4.077	4.037	0.5705	0.0905
$(d_1, d_2, d_3) = (60, 120, 60), g = 100$	0.773	3.963	5.127	0.4834	0.0837
$(d_1, d_2, d_3) = (70, 140, 70), g = 100$	0.595	3.79	6.37	0.3965	0.0311
$(d_1, d_2, d_3) = (80, 160, 80), g = 100$	0.465	3.776	8.12	0.3125	0.0201
$(d_1, d_2, d_3) = (90, 180, 90), g = 100$	0.363	3.734	10.31	0.2347	0.0153
$(d_1, d_2, d_3) = (100, 200, 100), g = 100$	0.3	3.677	12.26	0.1669	0.0141

表 6.14 穿透光在不同晶體厚度參數下且晶體厚度比例為 1:2:1 時的半高寬 Γ 、FSR、 \bar{F} 、穿透率 T 以及背景強度 contrast 的值。

由圖 6.28 及表 6.14 可以看出，當晶體厚度增加時， \bar{F} 的值會變大，然而穿透率 T 卻降低許多，此意味著有較好的共振性但卻測不到強度，即無實用價值，因此設計晶體厚度時以 $50 \sim 70 \mu m$ 較為適當，也易於觀測共振條紋。

接下來針對晶體厚度為(50 50 50)與(50 100 50) μm 的矽共振腔，改變晶體間距觀察穿透率對能量的圖形。



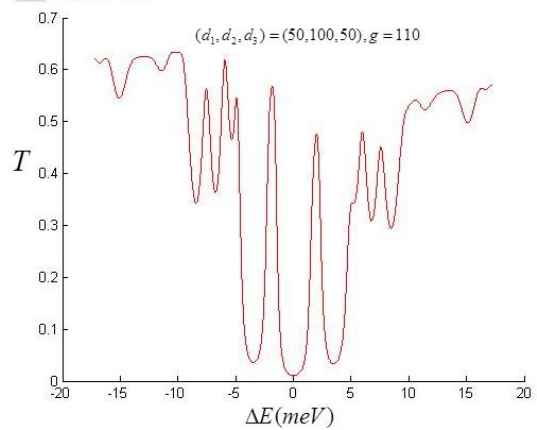
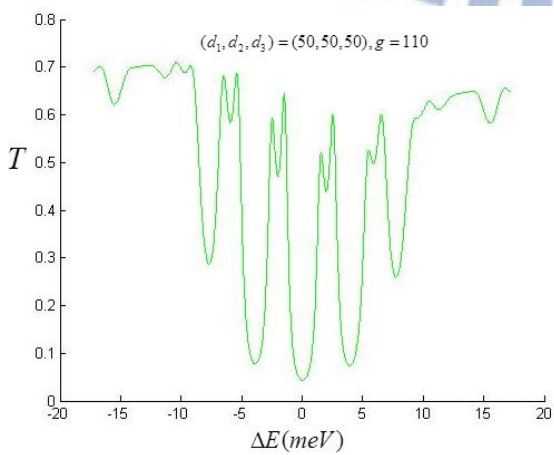
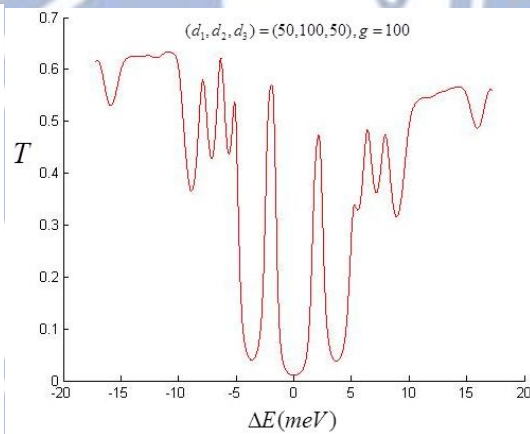
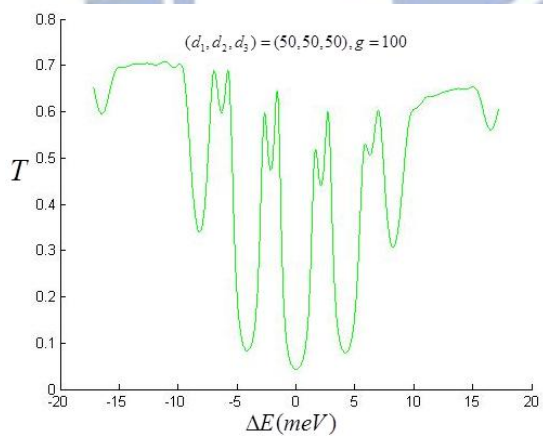
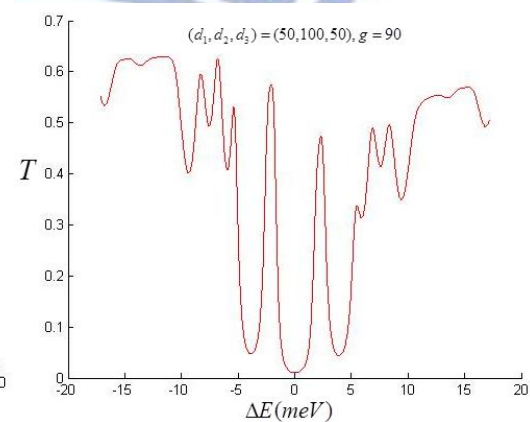
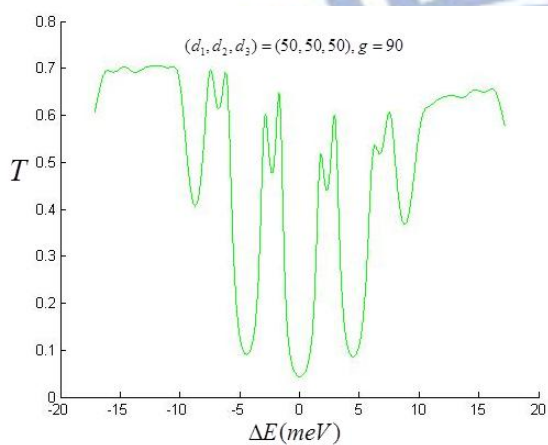
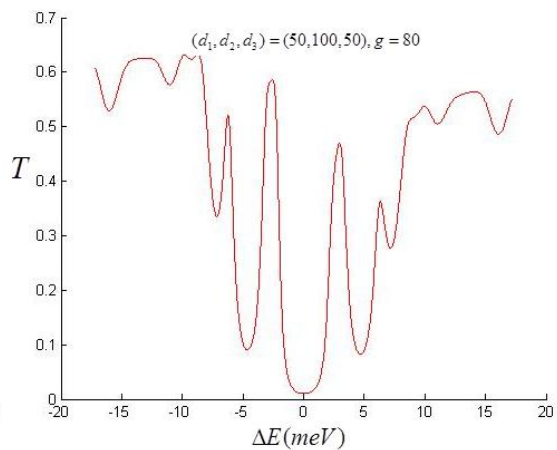
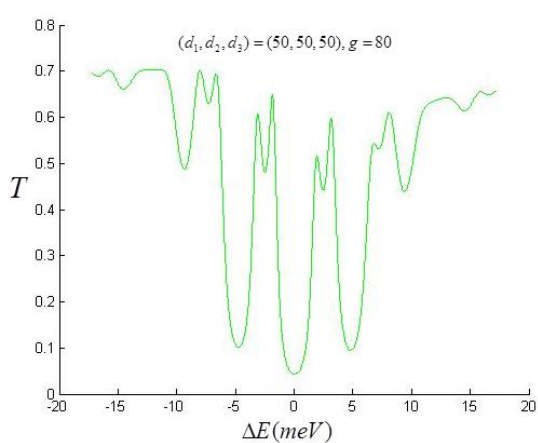


圖 6.29 利用(12 4 0)背向繞射，左右兩圖分別為晶體厚度固定在(50,50,50) μm 與 (50,100,50) μm 時不同晶體間距下的能量掃描圖型。其中能量值為經過平移的結果 $\Delta E = E - 14.3147(keV)$ 。

$d_c(\mu m), g(\mu m)$	$\Gamma(meV)$	$FSR(meV)$	\bar{F}	T(max)	Contrast
$(d_1, d_2, d_3) = (50, 100, 50), g = 40$	2.103	6.895	3.279	0.5875	0.2978
$(d_1, d_2, d_3) = (50, 100, 50), g = 50$	1.774	6.208	3.499	0.5878	0.2177
$(d_1, d_2, d_3) = (50, 100, 50), g = 60$	1.539	5.522	3.588	0.5856	0.1612
$(d_1, d_2, d_3) = (50, 100, 50), g = 70$	1.36	5.107	3.755	0.582	0.1214
$(d_1, d_2, d_3) = (50, 100, 50), g = 80$	1.53	5.522	3.609	0.5859	0.1570
$(d_1, d_2, d_3) = (50, 100, 50), g = 90$	1.117	4.392	3.932	0.5742	0.0821
$(d_1, d_2, d_3) = (50, 100, 50), g = 100$	1.026	4.09	3.986	0.5705	0.0706
$(d_1, d_2, d_3) = (50, 100, 50), g = 110$	0.95	3.815	4.02	0.567	0.0635

表 6.15 晶體厚度固定為(50,100,50) μm 時不同晶體間距在能量掃描下，穿透光的半高寬 Γ 、FSR、 \bar{F} 、穿透率 T 以及背景強度 contrast 的值。

由圖 6.29 與表 6.15 看出，其結果趨勢與藍寶石複合式共振腔結果相同，隨著晶體間距增加，共振峰值數目變多且峰值寬度以及峰與峰之間間距會變小，但因為晶體厚度不變反射率不變的情況下， \bar{F} 並沒有太大的改變。

將改良後晶體厚度比例為 1:2:1 的藍寶石與矽複合式共振腔模擬結果與 6.2 小節的兩組共振腔結合的模擬相比，雖然前者其穿透光會合併成為單一波峰且背景強度較為單純且較弱，但 \bar{F} 的值卻小了許多，雖然可透過晶體厚度增加使 \bar{F} 變大卻犧牲了穿透率 T，無實用價值。然而兩組共振腔的結合除了可以透過增加晶體厚度改善 \bar{F} 值，也可由等差級數方式改變後方共振腔的晶體間距增加 \bar{F} 值，所以認為兩組共振腔結合的實用性與效果較好。

第七章 結論

連續的非對稱性幾何繞射是一個可以使光達到很好能量解析度的方法，並透過選擇非對稱性參數 b 來控制相對光譜寬度、接受角以及光放大倍率等等的值，可經由 DuMond diagram 了解光在入射與出射晶體時全反射區域的變化。最後考量了四塊晶體的繞射面以及非對稱參數 b 後，設計出在 8.5146keV 與 14.3147keV 能量之下的兩組高解析度四晶單光儀。

為了提高 X 光光學共振腔的 $\bar{F} (= E_d / \Gamma)$ ，希望穿透光的峰值擁有半高寬窄且峰值彼此間距(free spectral range)寬的特性，我們提出將兩組厚度相同晶體但間距不同且彼此距離拉開至 2000 μm 的組合 Fabry-Perot 共振腔，並分別實際做了藍寶石與矽材料的模擬設計。從模擬圖型觀察，穿透光的 free spectral range 由前方晶體間距較窄的共振腔決定，半高寬則由後方晶體間距較寬的共振腔決定。另外從分析結果證實，可以不用為了要提高 \bar{F} 而將晶體厚度增加，因為這樣將使得穿透率降低，卻只要單純的將後方共振腔晶體間距等差級數的拉大，即可達到高穿透率且高 \bar{F} 的目標。

根據文獻[X.- R. Huang, Phys. Rev. Lett. 108, 224801 (2012)]中的方法，我們將三片晶體厚度比例為 1:2:1 的共振腔取代原先三片晶體厚度皆相同 1:1:1 的共振腔，經過模擬後結果確實看到分岔的兩根峰值合而為一變成單一波峰且擁有背景強度低的優點。而實際計算其 \bar{F} 的結果相較兩組共振腔結合的 \bar{F} 來的小，雖然可透過晶體厚度增加使 \bar{F} 較大卻導致穿透率 T 過低而無實用價值。因此未來將針對兩組共振腔的組合設計更多的樣式及變化，或是在晶體間距之間填入適當的增益介值，或許發展 X 光雷射共振腔將是指日可待。

參考文獻

- [1] 盧和璟. 矽與鑽石材料X光共振腔之可行性研究, 碩士論文, 國立清華大學物理系. (2008).
- [2] X.- R. Huang, D. P. Siddons, A. T. Macrander, R.-W. Peng, X.-S. Wu, *Phys. Rev. Lett.* 108, 224801 (2012)
- [3] M. Born. and M. Wolf, *Principles of Optics* (Pergamon Press, Oxford, 1964).
- [4] J. M. Vaughan, *The Fabry-Per'ot Interferometer* (Hilger Press, Bristol, 1989).
- [5] N. M. Ceglio, D. P. Gaines, J. E. Trebes, R. A. London, D. G. Stearns, *Appl. Opt.* 27, 5022 (1988).
- [6] V. Vali, W. Vali, *Proc. IEEE*, 51, 1248 (1963)
- [7] W. L. Bond, M. A. Duguay, P. M. Rentzepis, *Appl. Phys. Lett.* 10, 216 (1967).
- [8] R. D. Deslattes, *Appl. Phys. Lett.* 12, 133 (1968).
- [9] M. Hart, *Rep. Prog. Phys.* 34, 435 (1971).
- [10] A. Steyerl, K.-A. Steinhauser, *Z. Physik. B* 34, 221 (1979).
- [11] A. Caticha, S. Caticha-Ellis, *Phys. Rev. B* 25, 971 (1982).
- [12] A. Caticha, S. Caticha-Ellis, *Phys. Status Solidi A* 119, 643 (1990).
- [13] V. G. Kohn, Yu. V. Shvyd'ko, E. Gerdau, *Phys. Status Solidi B* 221, 597 (2000).
- [14] A. Authier, *Dynamical Theory of X-Ray Diffraction* (Oxford University Press, Oxford, 2001).
- [15] R. Colella, A. Luccio, *Opt. Commun.* 50, 41 (1984).
- [16] S. Kikuta, Y. Imal, T. Iizuka, Y. Yoda, X.-W. Zhang, K. Hirano, *J. Synchrotron. Rad.* 5, 670 (1998)
- [17] K. D. Liss, R. Hock, M. Gomm, B. Waibel, A. Magert, M. Krisch, R. Tucoulou, *Nature* 404, 371 (2000).
- [18] Yu. V. Shvyd'ko, M. Lerche, H.-C. Wille, E. Gerdau, M. Lucht, H. D. R'uter, E.E. Alp, R. Khachatryan, *Phys. Rev. Lett.* 90, 013904(1) (2003).
- [19] S.-L. Chang, Yu. Stetsko, M.-T. Tang, Y.-R. Lee, W.-H. Sun, M. Yabashi, T. Ishikawa, *Phys. Rev. Lett.* 94, 174801 (2005).
- [20] 黃亮諭. 藍寶石X光共振腔之可行性研究, 碩士論文, 國立清華大學物理系. (2009).
- [21] J. W. M. DuMond, *Phys. Rev. Lett.* 52, 872-883(1937)
- [22] Yuri Shvyd'ko, *X-ray Optics*(Springer, Berlin, 2004)
- [23] A. H. Compton, S. K. Allison, *X-ray, X-Rays in Theory and Experiment* (van Nostrand, New York, 1935)

- [24]W. H. Zachariasen, *Theory of X-Ray Diffraction in Crystals* (Dover Publication, New York, 1967)
- [25]Z. G. Pinsker, *Dynamical scattering of X rays in Crystals* (Springer press, Berlin, 1978)
- [26]K. Nakayama, H. Hashizume, S. Kikuta, K. Kohra, *Z. Naturforsch. A* 28,632-638 (1973)
- [27]K. Kohra, M. Ando, T. Matsushita, H. Hashizume, *Methods Phys. Res.* 152, 161-166.(1978)
- [28]T. Matsushita, H. Hashizume, *Handbook on synchrotron radiation* (North-Holland, Amsterdam, 1983)
- [29]T. J. Davis, *Journal of X-Ray Science and Technology* 2, 180-94 (1990)
- [30]P. Suorti, A. Freund, *Rev. Sci. Instrum.* 60, 2579-85 (1989)

