Journal of the Korean Vacuum Society
Vol.14, No.3, 2005, pp.126~131

나노구조 분석을 위한 하나로 40 m 소각중성자산란장치 개발

최성민†* · 김태환* · 이지환* · 한영수** · 이창희**

*한국과학기술원 원자력 및 양자공학과, 대전시 유성구 구성동 373-1번지
**한국원자력연구소 하나로 이용기술 개발부, 대전시 유성구 덕진동 150번지
(논문접수일 : 2005년 6월 20일)

Development of the 40 m SANS Instrument at HANARO for Nanostructure Characterization

Sung-Min Choi†*, Tae-Hwan Kim*, Ji-Hwan Lee*, Young-Soo Han**, Chang-Hee Lee**

*Department of Nuclear & Quantum Engineering, Korea Advanced Institute of Science and Technology, 373-1 Guseong-dong, Yuseong-gu, Daejeon, 305-701, Korea
**Korea Atomic Energy Research Institute, HANARO Utilization Technology Development Division, 150 Dukjin-dong, Yuseong-gu, Daejon, 305-600, Korea
(Received June 20, 2005)

요 약

소각중성자산란 (Small-angle neutron scattering, SANS)은 물질의 내부 나노구조 분석에 매우 중요한 실험 방법론이다. 본 논문에서는 30MW HANARO 연구용 원자로의 냉중성자 연구시설에 설치하기 위하여 한국과학기술원과 한국원자력연구소가 공동으로 개발 중인 40m SANS장치의 개념설계 결과를 보고한다. 장치의 설계 최적화를 위한 전산모사를 수행하였으며, 이를 바탕으로 40m SANS 장치의 주요설계 인자를 결정하였다. 40m SANS 장치의 가능한 Q-range는 0.0005 $Å^{-1}$ - 1.0 $Å^{-1}$ 이며, 이는 세계 최고 수준의 SANS Q-range에 해당된다. 각 Q-range에 따른 시료위치에서의 중성자 속을 계산하였으며 전산모사에 사용된 냉중성자원이 구현될 시 세계적 수준의 값을 얻을 수 있을 것으로 예상된다.

주제어 : 소각중성자산란, 나노구조분석

Abstract

Small-angle neutron scattering (SANS) is a very powerful techniques for nanostructure characterization. In this paper, we report the conceptual design and technical description of the 40 m small angle neutron scattering (SANS) instrument which is being developed by KAIST and KAERI for installation at 30 MW HANARO research reactor. For the optimal design of 40 m SANS, a series of computer simulation were performed. The Q-range of the 40m SANS instrument is 0.0005 $Å^{-1}$ - 1.0 $Å^{-1}$ which is a world top-class SANS Q-range. When the cold neutron spectrum used in the simulation is realized, the neutron flux at sample position is expected to be comparable to the current state-of-art SANS instrument in the world.

Key Words : Small-angle neutron scattering (SANS), nanostructure characterization

† E-mail : sungmin@kaist.ac.kr

1. 서 론

소각중성자산란 (Small Angle Neutron Scattering, SANS)은 1 ~ 100 nm 영역의 물질 내부 나노구조를 측정하는 실험방법론 [1,2]으로서 고분자 및 생체분자 자기 조립 물질, 나노기공 물질, 나노자성 물질 등의 연구에 활발히 이용되고 있다. 최근 나노기술 및 생체기술에 대한 연구가 급증함에 따라 소각중성자산란에 대한 수요가 급증하고 있으며, 현재 한국원자력연구소의 연구용 원자로에 9 m 소각중성자산란장치가 설치되어 2001년 중반부터 산-학-연의 연구자들에 의해 활발히 이용되고 있다. 그러나 냉중성자원의 부재 및 한정된 Q-range로 인해 이용에 제약이 있는 실정이다. 따라서 2003년부터 하나로 냉중성자 연구시설 구축사업이 진행되고 있으며, 40 m 소각중성자산란(SANS) 장치는 냉중성자 연구시설 구축사업의 최우선 신규장치로 선정되어 개발 중에 있다.

본 논문에서 한국과학기술원과 한국원자력연구소가 공동으로 개발 중인 40 m SANS 장치에 대한 전산모사 결과와 이를 바탕으로 한 개념설계 결과를 보고한다.

2. 소각중성자산란장치의 기본원리

중성자 산란은 기본적으로 특정한 에너지 E_i와 운동량 $\vec{k_i}$를 갖는 중성자 빔을 물질에 조사시키고, 물질에 의해 산란된 중성자의 에너지 E_f와 운동량 $\vec{k_f}$를 측정하는 실험이다. 여기서 중성자의 에너지 변화 $\omega=(E_i-E_f)/\hbar$는 물질을 구성하고 있는 개체들의 움직임에 대한 정보를, 중성자의 운동량 변화 $\vec{Q}=\frac{4\pi}{\lambda}sin\frac{\theta}{2}=\vec{k_i}-\vec{k_f}$는 물질의 내부구조에 대한 정보를 제공한다 [3]. 여기서 λ는 입사중성자의 파장, θ는 산란각도를 의미한다. 중성자 산란은 크게 운동량 변화만을 측정하는 탄성 중성자산란과 운동량 변화와 에너지 변화를 동시에 측정하는 비탄성 중성자산란으로 구분된다. 따라서 탄성 중성자산란은 물질의 정적 구조를 측정하는 실험이고, 비탄성 중성자산란은 물질의 동력학을 측정하는 실험이다 [4].

소각중성자산란은 탄성 중성자산란 방법 중의 하나로서 다른 탄성 중성자산란에 비해 훨씬 작은 운동량 변화를 측정하는 실험이다. 따라서 작은 운동량의 변화를 측정하기 위해, 소각중성자산란 장치는 냉중성자원에서 생성되는 긴 중성자파장 (5-20Å) 을 사용해야 하며, 작은 각도로 산란된 중성자 빔을 검출해야 한다. 작은 각도로 산란된 중성자 빔을 검출하기 위해 긴 pre/post flight path와 2차원 위치 민감형 검출기를 사용한다. 그림 1은 SANS 장치의 도식도와 본 연구에서 개발중인 40 m SANS장치의 개념설계도를 보여준다.

냉중성자원으로부터 나온 중성자는 기계적인 중성자 파장 선택기(Velocity Selector)에 의해서 특정한 파장으로 선별되며 [5,6], 2개의 aperture (source aperture, sample aperture)에 의해 빔의 방향성이 정의(beam collimation)된다. Source aperture의 위치는 movable guide를 이용하여 조절가능하며, 이에 의해 빔 방향성의 정밀도가 조절된다. 시료에 의해 산란된 중성자의 산란각도는 진공챔버 안에 위치한 2차원 위치 민감형 검출기에 의해 검출된다. 2차원 위치 민감형 검출기는 적절한 측정 Q-range를 선택하기 위하여 빔 방향으로 이동할 수 있으며, 동일한 Sample-to-Detector 거리에서 Q-range 확보를 위해 빔 수직방향으로도 offset할 수

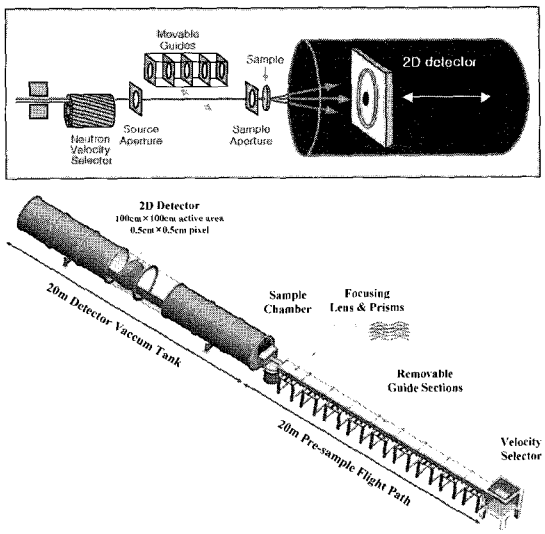

그림 1. SANS 장치의 도식도 (위) 및 40 m SANS 장치의 개념설계도(아래)

있다.

3. 하나로 40 m 소각중성자산란 장치

하나로 40 m 소각중성자산란 장치설계의 기본 목표는 1) 세계 첨단 소각중성자산란 장치들(예, NIST NG3 & NG7, ILL D22)과 같거나 더 큰 Q-range를 확보, 2) 시료위치에서의 높은 중성자속 확보, 3) 다양한 시료 환경를 사용할 수 있는 공간 확보, 4) 향후 새로운 장치옵션 추가를 위한 공간 확보로 요약할 수 있다. 하나로 40 m 소각중성자산란 장치의 가능한 Q-range는 간단한 계산으로부터 구할 수 있다. 이 계산에서 pre-sample flight path (L1)와 sample-to-detector distance (L2)는 항상 같다라고 가정하였다. L1이 20m일 때를 제외하고 sample aperture (A1), source aperture (A2)는 각각 5, 1.25 cm로 가정하였다. 아주 높은 분해능을 위하여 L1 = 20 m일 때 A1은 3 cm로 가정하였다. 2차원 위치 민감형 중성자 검출기의 유효면적은 1 m × 1 m를 가정하였다.

가능한 최소 Q는 중성자 파장, 빔 collimation, L2, 검출기 분해능(d = 0.5 cm)에 의해서 결정된다. 계산의 간편성을 위해 검출기 앞의 beam stop은 연속적으로 바뀌고 중력에 의한 중성자의 비행특성 변화 효과는 무시한다. 그때 검출기에서 beam diameter B는 다음과 같이 주어진다 [1].

$$B = \frac{L2}{L1}(A1 + A2) + A2$$

또한 검출 가능한 최소 산란 각도 $\theta_{\min}$은

$$\theta_{\min} = \tan^{-1}\left(\frac{B/2 + d}{L2}\right)$$

로 주어지며, 최소 Q는 다음 식을 이용하여 계산할 수 있다.

$$Q_{\min} = \frac{4\pi}{\lambda}\sin\left(\frac{\theta_{\min}}{2}\right)$$

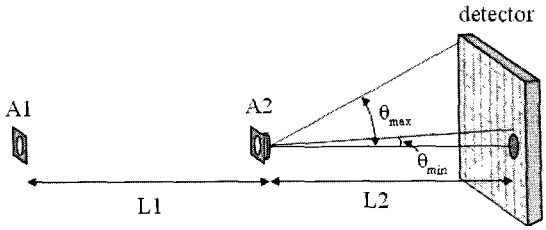

그림 2. 최소, 최대 산란 각도

여기서 λ는 중성자 파장이다. 최대 Q를 계산하기 위해서 검출기의 offset이 45 cm로 가정되었으며, 그림 2에서 보여지듯이 측정 가능한 최대 산란 각도 $\theta_{\max}$은 빔 중앙과 검출기의 모서리사이의 각도로부터 구할 수 있다.

중성자의 파장이 5 Å, 7 Å, 9 Å일 때의 최대 Q-range는 각각, 0.0019 $Å^{-1}$ - 1.0 $Å^{-1}$, 0.0013 $Å^{-1}$ - 0.71 $Å^{-1}$, 0.0010 $Å^{-1}$ - 0.56 $Å^{-1}$ 이며, 각 장치배열(Configuration)에 따른 Q-range는 그림 3에 주어져 있다. 여기서 주목할 것은 각 중성자 파장의 전체 Q-range가 2개의 장치배열만으로 가능하다는 점이다. 이는 대형 2차원 검출기(1 m × 1 m)의 넓은 유효면적에 의해 가능한 것이다. SANS 장치의 Q-분해능을 정의하는 최소 Q는 9 Å 중성자를 사용할 시에 0.001 $Å^{-1}$이며 중성자 광학렌즈를 사용할 시에는 0.0005 $Å^{-1}$ 정도까지 작은 값을 얻을 수 있을 것으로 예상된다 [7].

중성자 산란장치를 실제 건설하기 위해서는 매우 많은 재원을 필요로 하기 때문에 전산모사를

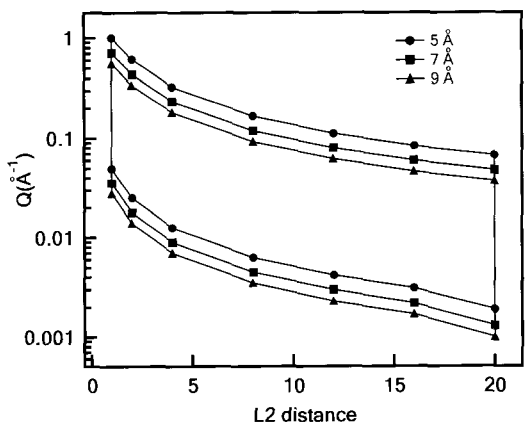

그림 3. 각 장치배열 별 40m 소각중성자산란 장치의 Q-range

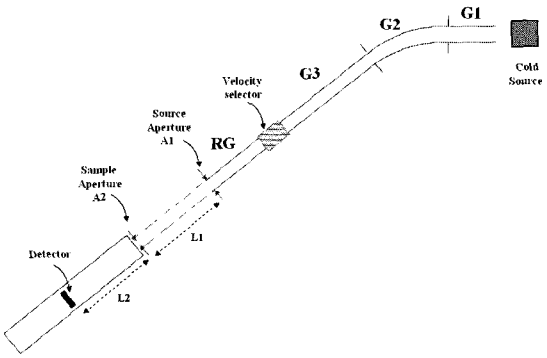

그림 4. 전산모사에 사용된 CG1B 빔 라인과 40 m 소각중성자산란장치의 배열

통해 설계을 최적화하는 것이 필수적이다. 따라서 하나로 40 m 소각중성자산란장치의 설계 최적화를 위하여 중성자 산란장치 전산모사 프로그램인 VITESS를 이용하여 전산모사를 수행하였다. 40 m SANS 장치는 건설될 냉중성자 실험동의 CG1B 빔 라인에 설치될 예정이며, 본 전산모사에서는 사용된 빔 라인의 구성과 40 m 소각중성자산란장치의 배열은 그림 4와 표 1에 정리되어 있다.

액체수소(온도 = 20 K)를 사용하는 냉중성자원은 직사각형 모양으로 중성자의 에너지 분포는 20 K에서 Maxwell-Boltmann 분포를 갖으며 총 중성자 속은 1×10^{14} n/cm^{2}sec으로 가정하였다. 냉중성자원에서 나온 중성자는 일련의 중성자Guide(G1, G2, G3)를 통해 SANS장치로 전송된다. 중성자 Guide는 Ni-58, Ni-natural, 또는 m = 2로 박막처리된 중성자 반사체로서 cirtical 각도 이하의 중성자를 전반사 시킴으로서 손실이 거의 없이 중성자 빔을 전송하는 장치를 말한다. G1, G2, G3를 지난 후의 중성자 스펙트럼은 그림 5에 보여진다. 여기서 각 가이드내에 반사체는 m = 2 supermirror를 가정하고 계산된 것이다. 중성자 빔이 각 가이드를 통과함으로서 모든 중성자 파장에서의 빔 Intensity는 감소하는 것을 보였다.

표 1. 전산모사에 사용된 인자

구역	길이(m)	단면적 (cm×cm)	반사체	비고
G1	5	5 × 5	m = 2	Straight guide, Distance from source = 1.45 m
G2	18	5 × 5	m = 2	Curved guide, Radius of curvature = 800 m
G3	25	5 × 5	Ni-58 Ni m = 2	Straight guide
RG	0, 6, 12, 18	5 × 5	Ni-58 Ni m = 2	Removable guide, Straight guide
L1	20, 14, 8, 2	-	-	Source to sample distance (SSD)
L2	20, 14, 8, 2	-	-	Sample to detector distance (SDD)

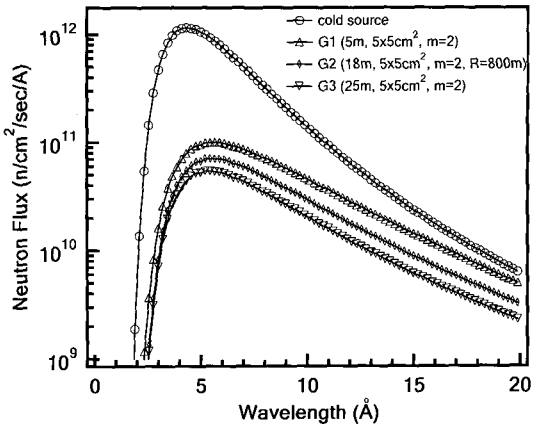

그림 5. 냉중성자원과 G1, G2, G3를 지난 후의 중성자 스펙트럼

G1, G2, G3를 지난 후의 2차원 빔 분포도를 보면 G2를 지난 후에는 빔의 분포가 왼쪽으로 치우쳐져 있다는 것을 알 수 있다. 이것은 G2가 곡선 Guide를 사용했기 때문이다. 그러나 중성자가 G3 가이드(직선가이드)를 지난 후에는 다시 균일한 분포를 보임을 알 수 있다 (그림 6).

G3 가이드에 사용된 반사체 물질(m = 2, Ni-58, Ni-natural)을 변화하면서 중성자 스펙트럼에 대한 계산이 이루어졌다. G1, G2의 반사체 물질은 m = 2를 유지하였다. 빔 Intensity는 m = 2일 때 가장 높았으며, Ni-58 그리고 Ni-natural 순이었다. m = 2 supermirror를 사용하였을 때 G3에서의 빔 Intensity가 가장 큰 것으로 나타났으며, 이는 m = 2 supermirror (Ni-natural은 m = 1, Ni-58은 m=1.2)의 critical angle 즉, 중성자 빔의 divergence angle이 Ni-58과 Ni-natural보다 크기 때문이다. 하지만 높은 분해능을 요구하는 소각중성자산란장치에서는

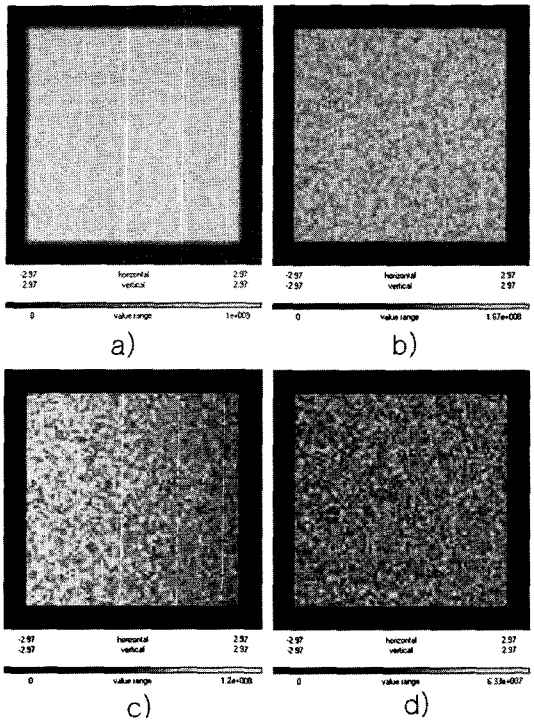

그림 6. 각 가이드에서의 2차원 빔 분포도 a) G1입구, b) G1 출구, c) G2 출구, d) G3 출구

m = 2가 가지는 divergence angle보다 훨씬 작은 빔 divergence를 사용하기 때문에 m = 2에 의해 얻어지는 빔 Intensity를 모두 사용할 수 없을 것이다.

시료에서의 중성자 Intensity를 계산하기 위하여 G3에서 가장 높은 중성자 속을 갖는 5 Å 중성자를 선택하여 사용하였으며, 중성자 파장 선별기를 통과하고 나온 중성자의 파장분포(wavelength spread, FWHM)는 12%가 되도록 하였으며, 이때 중성자 파장 선별기를 통과한 5 Å 중성자속은 2×10^{10} n/cm^{2}sec이었다. L1 = 2 m, 8 m, 14 m, 20 m일 때 시료에서의 중성자 Intensity를 계산하였으며, 이때 source aperture (A1)는 3cm (L1 = 2 m, 8 m, 14 m) 또는 5 cm (L1 = 20 m)을 사용하였으며, sample aperture (A2)는 항상 1.25 cm를 사용하였다. 이 계산을 G3와 removable guide의 반사물질(Ni-natural, Ni-58, m = 2 suppermirror)을 변화 시키면서 반복하였다. 그림 7 에서 볼 수 있듯이, L1의 길이가 감소함에 따라 중성자 Intensity가 증가함을 알 수 있다. 이는 L1이 감소함에 따라 중성자 beam

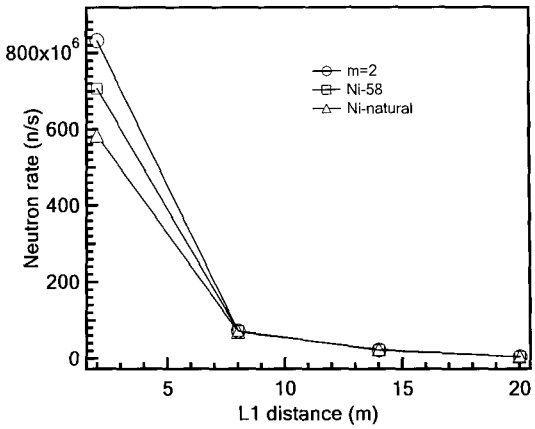

그림 7. L1 길이 및 G3가이드 반사체에 따른 시료에서의 중성자 Intensity

divergence가 증가하기 때문이다. 여기서 주목할 것은 L1의 길이가 20 m에서 8 m로 감소할 때까지 RG와 G3의 반사체 물질에 따른 중성자 Intensity의 차이는 거의 없으며 L1 = 2 m에서 비로소 그 차이가 확실하게 보여진다는 점이다. 따라서 RG와 G3의 반사체 물질에 m = 2 supermirror를 사용하는 것은 별다른 장점이 없으며, 오히려 중성자 background을 높이는 악 영향을 미칠 수도 있다. 이는 높은 Q-분해능을 요구하는 소각중성자산란 장치의 각 L1별 중성자 빔의 divergence angle를 고려하면 잘 이해 될 수 있다.

SANS 장치의 성능은 측정 가능한 Q-range와 각 Q-range에서의 중성자 속으로 판단된다. 그림 8은 전산모사로 얻어진 40 m 소각중성자산란장치의 Q-range와 시료위치에서의 중성자 속을 보여주고 있다. 이 때 사용된 중성자의 파장은 5 Å, 9 Å, 13 Å 이며, G1, G2는 m = 2 supermirror을 사용하였으며 G3와 removable guide의 반사체 물질은 Ni-58을 사용하였다. 중성자의 파장이 길어짐에 따라 측정할 수 있는 Q-range는 작은 값으로 이동하며, 이와 더불어 중성자 속 또한 감소한다. 전산모사에 사용된 냉중성자원의 중성자 스펙트럼은 실제 궁극적으로 구현될 중성자 스팩트럼과 차이가 있을 것으로 예상된다. 따라서 그림 8의 중성자 속은 상대적인 값으로 이해하여야 한다. 다만, 현재 개발 중인 하나로 냉중성자원이 미국 최고의 중성자 산란 연구시설인 미국표준연구소(NIST)의 연구용 원자

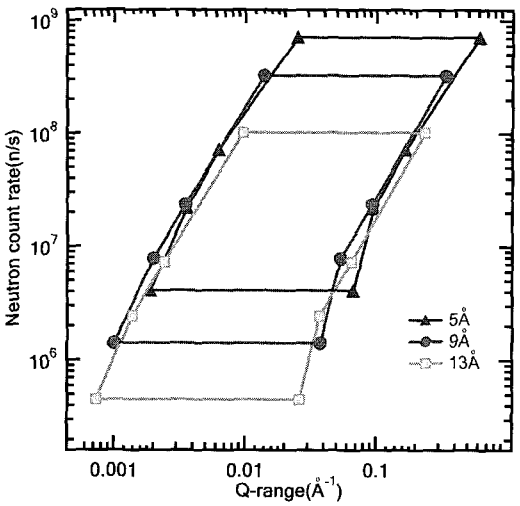

그림 8. 시료에서의 가능한 Q-range와 중성자 flux

로 중성자 스펙트럼과 비교하여 유사하거나 다소 우수할 것으로 예상되고 있어, 하나로 40 m SANS 장치의 중성자속 또한 NIST의 SANS 장치와 유사하거나 보다 우수할 것으로 예상된다.

4. 결 론

하나로 40 m SANS 장치의 설계 최적화를 위한 전산모사 실험을 수행하였다. 중성자 Guide 물질의 종류에 따른 중성자 속 변화를 계산하였으며, 40 m SANS의 경우 Ni-58 또는 Ni-natural을 사용하는 것이 m = 2 supermirror 보다 적합할 것으로 판단된다. 개념설계 된 40 m SANS장치는 약 0.001 Å^{-1} - 1.0 Å^{-1}의 넓은 Q-range 갖는다는 것을 확인하였다. 이는 세계 최고수준의 SANS Q-range에 해당한다. 중성자 광학렌즈를 사용할 시에는 최소 Q값을 0.0005 Å^{-1} 정도로 감소시킬 수 있을 것으로 예상한다. 시료에서의 중성자 속에 대한 절대값은 냉중성자원의 중성자 스펙트럼에 대한 정확한 정보 부재로 계산할 수 없었으나, 세계 최고 중성자 연구시설 중 하나인 미국 NIST SANS 장치와 유사하거나 보다 우수할 것으로 예상된다. 또한 세계 최고 수준의 하나로 40m SANS 장치의 개발은 향후 국내 나노구조 분석에 새로운 전기를 마련할 것으로 예상된다.

5. 감사의 글

본 연구는 하나로 냉중성자 연구기반시설 구축 및 이용기술개발 사업에 의해 지원되었음.

참 고 문 헌

[1] C. J. Glinka, J. G. Barker, B. Hammouda, S. Krueger, J. J. Moyer, and W. J. Orts, J. Appl. Cryst. **31,** 430 (1998).

[2] B. Hammouda, S. Krueger, and C. J. Glinka, *J.* Res. Natl. Inst. Stand. Technol. **98,** 31 (1993).

[3] A. Guinier and G. Fournet, *Small-Angle Scattering of X-Rays* (John Wiley and Sons, New York, 1955).

[4] J. S. Higgins and H. C. Benoit, *Polymers and Neutron Scattering* (Oxford University Press, New York, 1994).

[5] J. G. Dash and H. S. Sommers, Rev. of Sci. Int. **24,** 91 (1953).

[6] C. D. Clark, E. W. J. Mitchell, D. W. Palmer, and I. H. Wilson, J. Sci. Intrum. **43,** 1 (1966).

[7] S. M. Choi, J. G. Barker, C. J. Glinka, Y. T. Cheng, and P. L. Gammel, J. Appl. Cryst. **33,** 792 (2000).