

나노 계면분석을 위한 수평형 중성자 반사율 측정장치의 McStas 시뮬레이션 분석

권오선^{1,2} · 신관우^{2*}

¹로드아일랜드주립대 물리학과, Kingston, RI 02881

²서강대학교 화학과 및 바이오융합과정, 서울 121-742

(2006년 12월 13일 받음)

수평형 중성자 반사율 측정 장치는, 나노 박막의 두께와 구성성분, 표면의 거칠기 등 그 구조와 더불어 나노 박막의 동역학적인 거동을 연구하는데 중요한 측정 장치이다. 특히, 수평형이기 때문에 액체시료의 자유표면을 유지하며 표면을 분석하는 것이 가능하다. 30 MW의 하나로의 열중성자원에 적합하도록 최적화하기 위하여, 몬테카를로 수치해석 방법을 적용한 McStas를 사용하여 장치의 각 부분에서의 중성자의 빔을 추적 계산하였고 그 결과의 해석과 그에 따른 설계변수결정을 기술하였다. 최적화 상태에서 단색파장이 $\lambda = 2.5 \text{ \AA}$ 이고 $q < 0.126 \text{ \AA}^{-1}$ 그리고 시료위치에서 $10^4 \text{ n/cm}^2/\text{s}$ 이상의 중성자빔의 세기를 얻었다. 본 장치가 설치 완료되면 국내에서 나노박막의 구조를 연구하는데 크게 기여할 것이다.

주제어 : 중성자, 수평형 중성자 반사율 측정, McStas, 나노 표면구조분석

I. 서 론

지난 수십 년 동안 전자현미경, 원자힘 현미경(AFM)과 secondary ion mass spectrometry(SIMS)와 같은 계면 분석에 유용한 장치들이 다양하게 개발되어왔다 [1]. 그중에서 전기적으로 중성이며 낮은 에너지를 갖는 1~5 Å의 파장대의 중성자를 이용한 반사율 측정 장치(neutron reflectometer, NR)는 이미 광범위하게 사용되고 있는 X-ray 산란 장치 보다 높은 투과성을 갖고 있으면서도 시료를 파괴하지 않는 특징과 함께, 나노 단위로 이루어진 박막 계면의 두께, 거칠기와 밀도의 depth profiling 등을 통한 계면의 미세한 구조나 동적변화를 정밀하게 측정할 수 있어서 최근 많은 주목을 받고 있다 [1, 2]. 또한 상기의 다른 계면 측정 장치들과는 달리 샘플이 진공조건에 반드시 있을 필요성이 없고, 여러 층으로 이루어진 박막에 대하여 특정 한 층만을 동위원소로 치환하여 그 계면을 분석하는 동위원소 대비법(isotope contrast)이 가능한 독특한 특성이 있다 [1-3]. 이러한 특성은 H, O, C 및 N 등의 원소들로 이루어진 생체 물질, 예를 들면, 생체막의 구조 분석과 이물질이 세포내로 수송되는 과정을 관찰하는데 매우 유용하다 [4]. 특히, 음의 산란 길이 밀도를 갖는 수소(H)를 높은 산란 길이 밀도를 갖는 중수소(D)로 치환하는 동위원소 대비법(H/D contrast)은 현재 광범위하게 사용되고 있다.

현재 국내에서, 한국원자력연구의 30 MW의 ‘하나로(HANARO)’ 원자로의 열중성자원을 기반으로 하는 수평형 중성자 반사율 측정 장치(horizontal neutron reflectometer, REF-H)를 개발 중에 있으며 2007년 초에 설치를 완료할 예정이다 [4]. 고체 시료만을 측정할 수 있는 수직형과는 달리 수평형 반사율 측정 장치는 시료의 계면을 수평으로 유지하면서 입사각과 반사각을 동시에 움직이기 때문에 액체가 포함된 계면들 즉, 액체/기체, 액체/액체 및 액체/고체의 자유표면을 갖는 다양한 계면에서의 실시간 in situ 측정이 가능하다 [1-4].

장치의 설계는 미국 BNL에서 도입되는 H-9A 수평형 반사율 측정 장치 [5]를 모체로 하여 ‘하나로’의 열중성자 공급관(ST3 beam port)에 적합하고 보다 향상된 성능을 갖도록 개량하였다. 본 논문은 원자로에서 공급되는 중성자빔 선상에 놓이는 모든 반사율 측정 장치의 개별 부품들에 대하여 중성자에 대한 광학적 성능을 예측하고 분석하였다. 확률론적인 몬테카를로(Monte Carlo) 수치해석 방법을 따른 전산 코드 McStas(Monte Carlo Simulation of Triple Axis Spectrometer) [6]를 사용하여, 중성자빔 추적을 계산하여 최적화된 반사율 측정 장치를 구현하였다. 본 논문에서 수평형 중성자 반사율 장치에 관한 기본적인 이론, 계산과 분석 및 McStas를 사용한 계산결과의 해석과 그에 따른 설계 변수결정 기술에 관련된 연구결과를 설명하고자 한다.

* [전자우편] kwshin@sogang.ac.kr

II. 수평형 중성자 반사율 측정 장치 및 기본원리

단파장의 중성자파(monochromatic neutron wave)가 박막에 입사될 때, 빛과 같이, 박막을 이루는 두 매질(매질 1과 매질 2)의 굴절율이 다르면, 입사파의 일부는 입사된 매질(매질 2)을 파장이 변하면서 파의 진행 방향이 굴절(refraction)하여 투과하고 나머지는 입사한 매질(매질 1)로 반사(reflection)된다. 일반적으로 입사매질을 공기로 할 때 매질 2의 중성자에 대한 굴절율(n)은 다음과 같이 주어진다 [1,2,7].

$$n = 1 - \delta + i\beta \quad (1)$$

여기서 허수 β 는 매질 2에서 흡수되는 성분인데 Li, B, Cd, Sm 및 Gd 등을 제외한 대부분의 원소의 경우에서 $\beta \approx 0$ 이다. 매질이 자성체가 아니고 입사파의 파장이 λ 일 때, δ 는

$$\delta = \frac{\lambda^2}{2\pi} N \sum_i \frac{\rho_i}{A_i} b_i = \frac{2\pi}{k^2} \rho \quad (2)$$

로 주어지는데, b_i 는 매질을 이루고 있는 성분원소(i)의 중성자 산란 길이(neutron scattering length)이고, ρ 는 매질을 구성하는 모든 성분원소의 원자량(A_i) 그리고 밀도 ρ_i 을 포함시켜 정의한 매질의 중성자 산란 길이 밀도(scattering length density, SLD)이다. 대부분의 관심이 있는 물질의 경우 δ 의 값은 10^{-6} 의 범위의 값을 갖는다 [2]. 그러므로 굴절율(n)은 1 보다 약간 작다 (광학의 경우는 $n > 1$ 이다). 한편 반사율(R)은 입사파의 세기(I_i)와 굴절율(n)의 함수로 주어지는 반사파의 세기(I_r)의 비로 정의되어 즉,

$$R = \left| \frac{I_r}{I_i} \right|^2 = \left(\frac{I_r}{I_i} \right) \left(\frac{I_r}{I_i} \right)^* \quad (3)$$

이고 SLD에 의존되므로 $1 \sim 10^{-6}$ 의 범위의 값을 갖는다.

그림 1a와 같이 x-, y-평면에 놓인 계면 평면에 단색 파장의 중성자파(e^{ikr})가 공기(매질1)에서 매질2로 입사하여 일부가 반사(e^{ikr})할 때, 계면이 완전 평면일 경우 입사각과 반사각이 같은 등각반사(specular reflectivity)를 한다. 이때 $\theta_i = \theta_f$ 또는 $k_i = k_f$ 이어서 파동벡터의 전이(wavevector transfer)는,

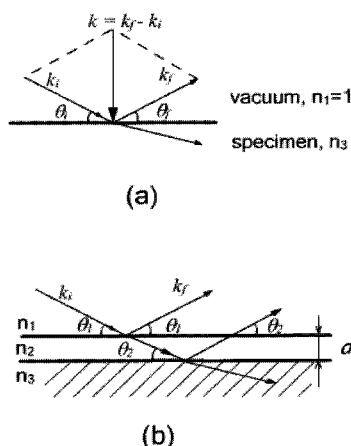


그림 1. 계면에 조사한 단색의 평면파. 박막을 완전평면으로 가정하였다. (a) 진공(또는 공기)에서 무한한 두께의 시료에 조사할 경우. 반사율(R)은 Fresnel 반사율(R_F)로 주어지고 이는 입사각이 전반사각보다 클 때는 산란벡터 $q = k_f - k_i$ 의 함수($R_F \propto q^{-4}$)이다. (b) 경우 (a)에 굴절률 n_2 인 한 박막이 굴절율이 n_1 와 n_3 인 두 매질 사이에 끼인 경우. $R(q)$ 을 측정하면 두께 d 와 두 계면의 거칠기 및 박막의 구성성분(SLD)을 알 수 있다. 박막 층이 네 개 층 이상일 경우도 같은 방식으로 각 층의 구조와 성분을 알 수 있다.

$$q = k_f - k_i = 2k \sin \theta \quad (4)$$

로 주어진다. 여기서 등각반사조건인 $k = k_i = k_f$ 과 $\theta = \theta_i = \theta_f$ 를 적용하였다.

등각반사율(R)은 Born-근사에 따르면 q -함수로 주어진다. 즉,

$$R(q) = \frac{16\pi^2}{q^4} \left| \int dz \rho'(z) e^{2iqz} \right|^2 = R_F |\rho(q)|^2 \quad (5)$$

여기서 $R_F = 16\pi^2/q^4$ 는 Fresnel 반사율이고 $\rho(q)$ 는 표면에 수직인 z-방향에 대한 SLD의 변화율 즉, $d\rho(z)/dz$ 의 q -공간으로의 Fourier 변환이다.

그림 1b와 같이 한 박막의 두께가 얇아 두 개의 계면이 형성된 경우, 각각의 면들에서 반사된 빔이 서로 보강, 상쇄간섭을 하여 검출기 위치에서 측정되는 반사율에는 소위 Keissig fringes (oscillations)가 나타나게 된다. 그러므로 측정된 반사율 변화 그래프를 세 매질의 SLD의 함수로 계산된 이론적인 반사율과 비교(fitting)하면, oscillation 사이의 q -값의 차이(Δq)로, 박막의 두께(d) $d \approx 2\pi/\Delta q$ 를 알아낼 수 있다. 박막이 여러 층으로 쌓여 있을 때도 같은 방식으로 해석된다 [1-3].

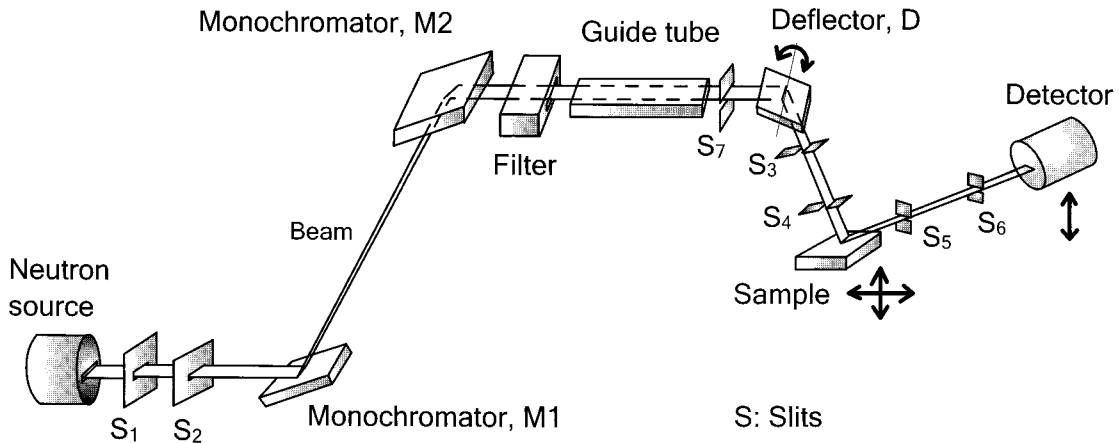


그림 2. 수평형 중성자 반사율 측정 장치의 모식도. S₁와 S₂: 중성자원 슬릿, S₃와 S₄: 시료 슬릿, S₅와 S₆: 검출기 슬릿, S₇: deflector 슬릿 그리고 M1과 M2: 단색기 쌍. Deflector가 빔을 시료에 조사하여 검출기로 입사각 스펙트럼의 함수로 반사율을 측정한다. 측정된 반사율을 해석하면 자유액체계면의 성질을 연구할 수 있다. 시료는 수직과 수평방향으로 움직일 수 있어 액체시료의 자유표면을 유지하면서 조사 빔의 초점을 고정된 시료위치에 맞출 수 있다.

표면이 완전 평면이 아니어서 거칠기(roughness)를 갖을 때는, 거칠기가 Gaussian 분포를 따르는 것으로 가정하면 반사율은,

$$R(q) = R_F(q) \exp(-4q^2\sigma^2) \quad (6)$$

로 주어짐을 알 수 있다 (거칠기가 없는 완전평면의 경우는 식 (5)로 주어진다) [1-3].

따라서 반사율을 측정하면 박막의 두께와 거칠기 또 계면을 구성하고 있는 성분 원소들을 알아 낼 수 있을 뿐만 아니라, 표면의 동적 상태 예를 들면 표면파(표면 탄성파나 capillary wave 등)와의 상호 작용을 분석 할 수 있다 [1-3].

실제 반사율 측정에 있어서는 식 (4)에서 볼 수 있듯이 입사각과 반사각을 고정시켜놓고 입사파의 파장의 스펙트럼으로 반사율을 측정하거나, 단색파로 시료에 입사시키고 사각과 반사각을 등각으로 유지하면서 입사각의 스펙트럼으로 반사율을 측정하는 두 가지 방식이 있는데, 여기서 우

리가 채택한 것은 후자 방식으로 단색 빔을 시료에 조사하고 등각의 반사율을 측정하는 방식이다. 그러므로 반사율을 측정하기 위하여 빔 궤적변화에 따라 모든 반사율 측정 장치의 부품들이 조화롭게 움직이도록 하는 것이 중요하다. 그림 2는 HANARO에 설치 예정인 반사율 측정 장치의 개략도이다 [8].

III. 시뮬레이션 결과 및 분석

3.1 McStas

McStas (Mote Carlo Simulation of Triple Axis Spectrometers)는 중성자 산란 장치를 보다 경제적이고 효율적으로 최적화된 설계를 구현할 목적으로 Risø와 ILL이 공동으로 개발한 범용 프로그램이다 [6]. McStas는 중성자선원에서부터 중성자빔이 지나가는 궤적에 있는 각각의 광학적 부품에 대하여 빔의 거동과 산란된 변화를 확률론적인 Monte Carlo 수치해석 방법을 이용하여 빔의 위치와 분포를 추적한다. 임의의 시간에서 한 공간에 있는 중성자의 물리적 양을 기술할 때, 고전적인 확률이론에 따르면 확률분포함수를 P라고 할 때 초기 에너지(E)와 진행방향(Ω)을 알면 온도나 위치(r) 등에 의존하는 확률분포밀도는 $\Pi(E, \Omega, r) = dP/(dEd\Omega d^3r)$ 로 주어지는데 반하여, 한 변수(j)의 미소 변위에 대한 Monte Carlo 방법에 의한 확률분포함수

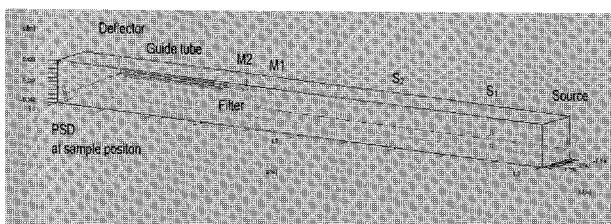


그림 3. MATLAB으로 확인한 수평형 중성자 반사율 측정 장치의 중성자빔 궤적

$f_{MC}(E, \Omega, r)$ 에 대하여 확률분포밀도가 $\Pi(E, \Omega, r) = f_{MC}(E, \Omega, r) \pi_i(E, \Omega, r)$ 이 되도록 가산치(weight factor), π_i 를 주는 것이 Monte Carlo 방법의 핵심이다 [6]. McStas에는 각 중성자 광학기기들 예를 들어, 슬릿(slit), 집속기(collimator), 필터(filter), 단색기(monochromator), 거울(mirror) 또는 반사기(deflector), 회전기(chopper), 검출기(detector) 등에 대한 중성자빔 궤적의 변화를 Monte Carlo 방법으로 모사하는 풍부한 모듈들이 내장되어 있어 반사율 측정 장치를 모사하는데 매우 적합하다. 그림 3은 하나로 수평형 중성자 반사율 측정 장치의 각 장치에 지나가는 중성자빔 궤적을 MATLAB 프로그램으로 확인한 것이다.

3.2 중성자선원(Neutron source)

본 반사장치는 30 MW의 HANARO 중성자원을 기반으로 설계되었다. 노심내의 감속재의 온도 $T = 320$ K에서 Maxwell분포를 이루며 열적평형 상태에 있는 중성자를 유도관을 통하여 뽑아 노심 밖의 ST3 빔 출구로 즉, 반사장치의 입구로 공급된다(그림 1). 이를 McStas에서 모사하기 위하여, 실제원자로의 중성자세기 4×10^{13} n/cm²/s를 갖는 0.1 m의 반경의 2차원 원형 형태의 백색의 중성자원(white source)으로 가정하였다. 그리고 그림 2와 같이 거리 1.5 m와 3.4 m 떨어진 곳에 창의 크기가 각각 6.2 cm×12.0 cm와 5.0 cm×12.0 cm인 고정형 슬릿 S₁과 S₂를 한 쌍으로 배치하여 방사형의 빔을 리본형태의 빔으로 변환하고 단색기의 중심에 빔의 중심을 일치시켜 조사한다. 이렇게 슬릿을 통과한 빔의 파장분포(spectrum)와 빔의 세기(intensity)

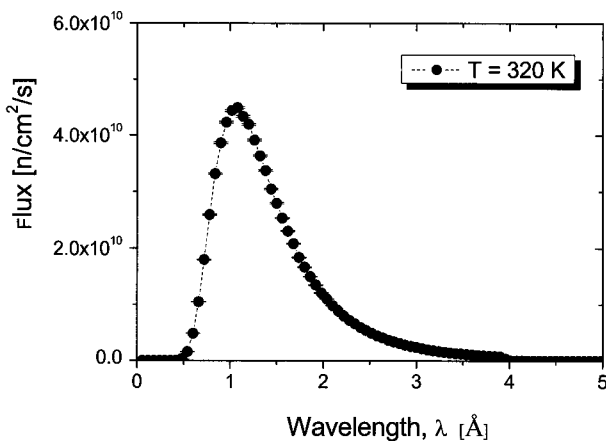


그림 4. 백색의 열중성자선원(white neutron source)의 세기를 파장의 함수로 S₂ 통과 직후에 측정된 결과

와 발산(divergency)을 McStas에 내장된 가상의 파장측정기와 위치민감형 검출기 PSD(position sensitive detector) 모듈을 써서 점검하면서 실제 중성자원에 근사되게 모사하였다. Monte Carlo 모사에서 중성자원을 좌표의 원점으로 하고 빔의 진행방향을 z-축, 수평과 높이방향을 각각 x-, y-축으로 가정하였다. S₂를 통과한 빔의 세기를 파장의 함수로 측정된 결과를 그림 4에 나타내었다.

3.3 이중 단색기 시스템(Double monochromator system, M₁과 M₂)

여러 파장이 분포된 백색의 중성자원(white source)으로부터 단색빔(monochromatic neutron beam)을 얻기 위해서는 하나의 단색기를 사용하는 것이 강한 빔의 세기를 얻기 위해서는 최선의 선택이 될 수 있으나, ST3 빔 출구와 이를 덮고 있는 콘크리트 차폐체의 공간이 제약되어 있기 때문에 빔의 진행방향을 바닥에서 높이방향으로 이동(parallel translation)하는 것이 최적의 해결 방법임이 이전의 연구결과로 밝혀졌다 [8,9]. 그러므로 이중 단색기(60 mm × 30 mm × 2 mm, GE Advanced Materials, Co.) 시스템을 채택하였는데, 그림 2에서와 같이 두 M₁과 M₂의 단색기를 선원으로부터 각각 6,142 cm 6,232 cm에 놓고 빔의 진행 방향에 대하여 각각 $q = 22.5^\circ$ 의 각도로 평행하게 기울여 빔의 높이를 22 cm 올렸다. 평행한 이중 단색기 시스템의 또 다른 이점은 (q, f)-각도의 미세한 조정으로 빔의 발산을 현저히 줄일 수 있다.

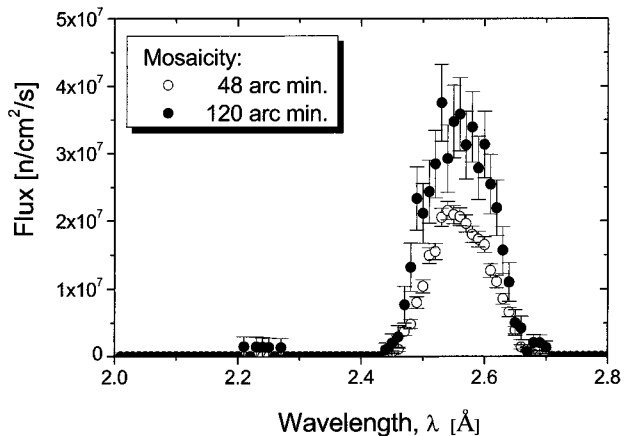


그림 5. 단색기의 두 가지 다른 mosaicity 변화에 따른 빔의 세기 비교. Mosaicity가 큰 120 arc min.일 경우가 48 arc min. 보다 약 1.6배 높은 빔 세기를 나타낸다.

두 단색기는 수직과 수평방향의 24 arc min의 mosaicity를 갖는 Pyrolytic graphite(PG) 결정을 사용한다. 면 사이의 거리가 d인 결정면에서 빔의 입사각, θ 에 의하여 주어지 Bragg법칙에 의하여, $n\lambda = 2d\sin\theta$ 으로 결정되는데, PG의 (002)면을 Bragg 반사면으로 사용하여 $n = 1$ 인 $\lambda = 2.5 \text{ \AA}$ 의 단색 중성자를 채택하였다. 앞서 기술하였듯이 이중 단색기 시스템은 빔의 세기가 약해지는 단점이 있기는 하지만 빔의 발산도(divergence)를 줄이는 장점이 있다. 높은 mosaicity는 빔의 세기를 높여주기 때문에 최근에 개발되어 있는 128 arc min의 높은 mosaicity를 갖는 PG 결정을 이용하는 것을 검토하였다. 이전에 채택한 24 arc min의 mosaicity와 비교할 때, 그림 5에서와 같이 빔의 세기가 약 1.6 배로 높아지는 것을 볼 수 있다. 그러므로 높은 mosaicity를 갖는 PG 결정을 사용할 때는 이중 단색기 시스템이 빔의 발산도의 큰 변화 없이 빔의 세기를 향상시키는 것을 확인 하였다.

3.4 필터(Filter)

단색기를 통과한 단색화 된 중성자빔에는 그림 5과 같이 반사 차수(order of reflection)가 2 이상의 높은 에너지의 중성자가 있으므로 이를 제거하기 위하여 mosaicity가 120 arc min이고 두께 10 cm인 PG 필터를 사용한다. 필터를 지나면서 Bragg 번사조건 $n\lambda = 2d\sin\theta$ 에서 $n \geq 2$ 인 파장이 짧은 중성자는 마이크로 graphite의 결정면들에서 Bragg 반사를 하여 필터를 싸고 있는 Cd에 흡수되어 원하는 단일 파장의 $\lambda = 2.52 \text{ \AA}$ 만이 필터를 통과하게 된다. 그러므로 필터 대신에 TOF(time of flight) 방식을 추가로 선택적으로 설치하거나 이후 보강할 경우, 보다 높은 세기를 갖는 파장의 스펙트럼에서 단색빔을 선택적으로 뽑아 사용하는 기능을 갖는 다기능형(hybrid) 반사율 측정 장치로도 확장이 가능하다.

3.5 중성자유도관(Guide tube)

필터를 통과한 빔은 필터에서 다시 공기로 나오면서 그 경계면의 굴절률의 차이 때문에 빔이 발산도가 커지고 굴절기(Deflector, D)까지의 긴 거리를 비행하므로 빔을 집중시키기 위하여 길이가 1.1 m인 중성자유도관을 설치할 필요가 있다. 사각형 각주형의 중성자유도관의 내부 면들

은 큰 SLD의 차이가 있는 Ni과 Ti을 사용한 박막으로 만든 중성자 초거울(supermirror)로 이루어져 있어, 임계각이하의 중성자 빔을 99%이상 전반사를 시켜 유도관을 따라 (마치 전자기파의 유도관과 같이) 빔을 수송한다. $m = 2$ 초거울(supermirror)를 사용하였는데 통상 쓰여지는 Ni⁵⁸으로 만든 $m = 1$ 중성자 거울의 임계각($q_c = 0.24^\circ$) 보다 두배로 큰 임계각을 갖는다. 임계각 보다 높은 입사각($q > q_c$)에 대한 초거울에 의한 반사율은 다음과 같은 실험식을 사용하였다 [6].

$$R = \frac{1}{2} R_0 (1 - \tanh[(q - mq_c)/W]) (1 - \alpha(q - q_c)) \quad (7)$$

여기서 $R_0 = 1$ 이고 W는 R의 cut-off에 대한 q-값의 크기이다. 위의 식을 McStas 써서 모사하였다.

높이 방향의 빔의 발산은 단일파장을 사용하고 굴절기(Deflector, D)를 사용하여 시료에 조사 각도를 변화하는 수평형 반사율 측정 장치에서 빔의 해상도를 낮게 하므로 가능하면 줄여야 한다. 또한 유도관의 상부의 초거울면에서 전반사한 빔은 적은 각도의 범위에서 움직이는 굴절기를 거치지 않고 직접적으로 시료에 도달할 가능성이 있다. 이러한 빔은 초거울면에서 전반사한 빔과 함께 시료에 함께 조사되어 빔의 위상차의 교란(incoherence)을 일으켜서 시료에서의 등각 반사빔의 세기를 떨어뜨리기 때문에 이것을 제거한 즉, 두 수직 초거울만 사용하는 변경된 유도관을 사용하는 방안을 검토할 수 있다. 두 가지 유도관에 대한 McStas의 빔의 발산도를 비교 계산한 결과를 그림 6에 나타내었다. 그림에서 두 수평 초거울이 없을 때 $\pm 1 \sim \pm 2^\circ$ 사이의 높은 빔의 발산도가 현저히 줄어드는 것이 나타나 있어 상·하부의 유도관의 반사면이 빔의 수직방향의 발산도를 높이는 것을 확인할 수 있다. 그러므로 두 수직 초거울들만 사용하는 것이 타당하다.

3.6 반사기(Deflector)

서론에서 기술하였듯이 본 장치는, 시료표면에 대하여 입사각 스펙트럼(또는 q-스펙트럼)의 함수로 반사율을 측정한다. 그러므로 이중 단색기 M1과 M2를 이용하여 얻은 열중성자 단색 빔을 시료에 조사하기 위하여 빔의 방향을 변경하는 또 다른 반사기(deflector)가 필요하다.

가능하면 높은 분해능과 높은 세기의 단색 빔을 얻는 것이 수평형 반사율 장치에서 가장 핵심적인 것이다. 입사각

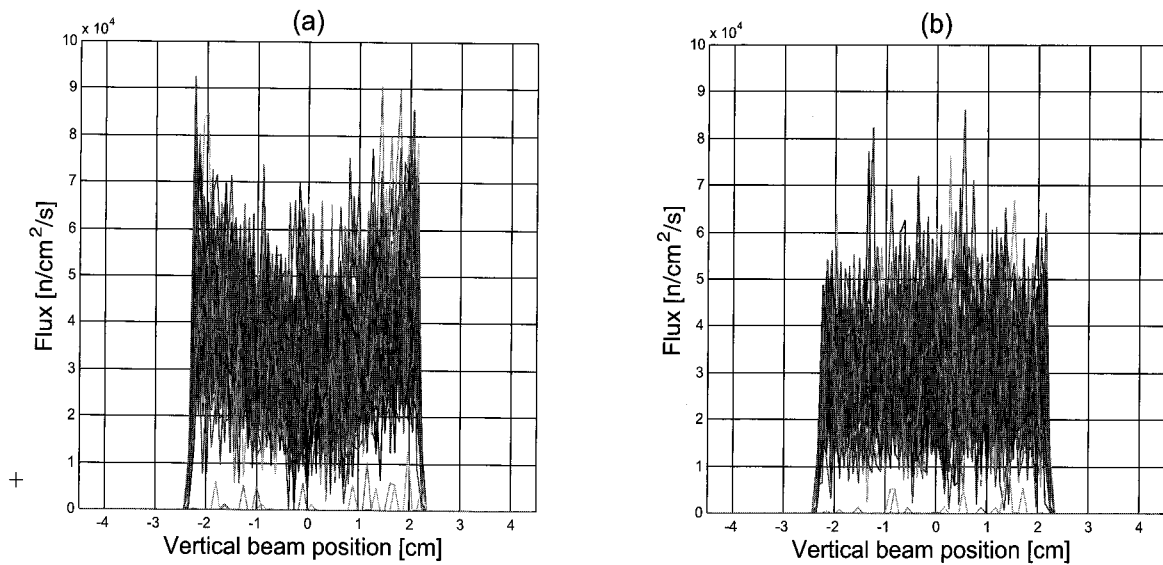


그림 6 중성자자유도관의 상부와 하부의 초거울에 의한 빔 발산효과: (a) 상부와 하부의 초거울이 있을 경우와 (b) 없을 경우. (b)에서 수직방향의 양끝에서 빔의 발산이 현저히 줄어드는 것을 볼 수 있다.

도의 범위를 넓히면 식 (4)와 같이 q -범위가 늘어나 시료의 두께 등과 같은 물리량의 측정범위를 크게 할 수 있으나, 보다 적은 범위에서 더 높은 세기의 빔을 조사할 수 있으면 보다 높은 분해능을 갖는 반사율을 얻을 수 있다. 이전의 연구결과에 따르면 초거울 반사기를 사용한 방식이 효율적인 것으로 밝혀졌다 [6]. 반사기의 회전 축은 유도관에서 나오는 빔 중심에 수직으로 되어 있어 빔을 수직방향으로 회전하면서 빔을 시료로 반사시킨다. McStas로 분석된 q -값의 유효범위는 0.12 \AA^{-1} (반사기의 회전각 $q = 0.7^\circ$)인데, 이것은 $26 \sim 52 \text{ \AA}$ 의 박막을 약 10%의 정확도로 반사율을 측정할 수 있음을 의미한다. 이는 phospholipid 단분자(monolayer) 박막의 두께에 해당하며 세포 이중막 분석이 가능하여 NT 뿐만 아니라 특히 BT 재료 분석에 아주 적합함을 알 수 있다. 본 장치의 q -값에 따른 예측된 반사율은 이전 논문에 나타나 있다 [8, 9].

3.7 슬릿장치(Slits), 시료장치(Sample table) 및 검출기(Detector system)

슬릿은 중성자의 흡수체인 3mm 두께의 B4C로 만들어진 두 쌍의 판(blade)들로 이루어져 있다. 한 쌍은 수평방향으로 다른 쌍은 수직방향(그림 2에서는 수직 쌍만을 보여 주었다)으로 움직이도록 되어 있는데, 3 mm 정확도로 모터로 구동되며 각각 수직과 수평의 빔의 집속 형태를 만

들고 빔의 발산을 줄여 시료표면(S_3 과 S_4)이나 검출기(S_5 와 S_6)에 빔을 집속시킨다. 한편 McStas 계산 결과에 따르면 반사기의 회전각도가 매우 적으므로 반사기에 조사하기 전에 빔의 수직방향의 발산을 최대한 줄여야 하는 것으로 나타났다. 그러므로 슬릿 S7를 유도관과 초거울 반사기 사이에 설치하여 유도관에서 나오는 빔을 수평으로 퍼진 리본 형태의 빔을 초거울 반사기에 조사시켜 시료슬릿 S3과 S4와 연동하여 시료표면에 조사할 빔의 footprint를 만든다.

반사기에서 1.0 m 떨어진 곳에 시료선반이 있다. 그 위에 무진동장치가 놓여 특히, 액체시료의 경우 자유계면을 관찰하는 것이 가능하다. 고정된 축에 따라 회전되는 반사기(그림 2)는 시료에 q -입사각의 scanning 스펙트럼을 제공하는데, 시료에 조사되는 빔의 footprint가 일정하게 되도록(빔 위치보정을 위하여) 시료장치의 선반은 수직과 수평방향 즉, 3차원 방향으로 움직이도록 되어있다. 빔의 footprint의 크기를 고려하였을 때 시료대의 유효 넓이는 약 $30 \times 50 \text{ cm}$ 이하이다.

중성자 검출기는 입사빔의 세기를 측정하는 감시용 검출기(monitors)와 반사빔의 세기를 측정하는 주 검출기(main detector)가 있다. 감시용 검출기는 입사빔을 실시간으로 측정하여 주 검출기의 측정치를 규격화(normalization)하는데 사용된다. 반사율 측정에 있어 매우 중요한 주 검출기는, $\lambda = 2.5 \text{ \AA}$ 인 중성자에 대하여 95% 이상의 고효율(high efficiency)인 3He가 10 atm 층

전된 점위치(point detector) 검출기 또는 선형의 위치민 감형(position sensitivity detector, PSD)를 사용한다. 전자를 사용할 때는 scanning시 변화하는 반사각에 따라 검출기가 수직방향으로 따라 움직이도록 되어 있다. 비탄성 충돌에 의하여 빔의 진행 방향에서 날아오는 속중성자나 γ -선의 잡음(background)을 최대한 제거하기 위하여 검출기 입구를 제외한 곳을 붕소판과 Cd 막으로 씌워 차폐하였다. 차폐가 잘 되었을 경우 잡음은 1000초에 수 개 정도로 예상된다. 초거울을 사용한 중성자 유도관이 보강되었을 때 최종 검출기에서 얻어지는 빔의 세기는 $q < 0.126 \text{ \AA}^{-1}$ 범위에서 $>10^4 \text{ n/cm}^2/\text{s}$ 을 얻었다. 보다 높은 $m \geq 3$ 값의 초거울 반사기를 사용할 시 $q < 0.168 \text{ \AA}^{-1}$ 까지 확장되고 빔의 세기는 약 10 배로 증가한다. 더욱이 앞으로 건설이 예정된 냉중성자빔원을 이용할 때는 더욱 넓은 q -값의 범위와 보다 높은 반사율을 갖는 장치로 성능이 향상될 것으로 기대된다.

IV. 결 론

수평형 중성자 반사율 측정 장치는 나노 박막의 두께와 구성성분, 표면의 거칠기 등 그 구조와 더불어 박막의 동역학적인 거동을 연구하는데 긴요한 측정 장치이다. 특히, 수평형은 액체시료의 자유표면을 유지 하며 표면을 분석하는 것이 가능하게 해준다. 본 장치는 BNL의 H-9A을 기반으로 하여 30 MW의 하나의 열중성자원에 적합하도록 개발되었다. 몬테카를로 수치해석 방법을 적용한 McStas를 사용하여 장치의 각 부분에서의 중성자의 빔을 추적 계산하였고 그 결과의 해석과 그에 따른 설계변수결정을 기술하였다. 최적화 상태에서 단색파장이 $\lambda = 2.5 \text{ \AA}$ 이고 $q < 0.126 \text{ \AA}^{-1}$ 그리고 시료위치에서 $10^4 \text{ n/cm}^2/\text{s}$ 이상의 중성

자빔의 세기를 얻었다. 본 장치가 설치 완료되면 국내에서 나노박막의 구조를 연구하는데 크게 기여할 것이다. 그리고 수 년 내에 도입될 냉중성자원에 적용될 경우 더 넓은 q -범위가 가능해져서 본 장치를 이용하는 NT와 BT 연구는 더욱 활발해 질 것으로 예상된다.

감사의 글

본 연구는 한국원자력연구소 및 한국과학기술원의 BAERI, 과학기술부의 '21세기 프론티어 연구개발과제 (과제번호: 06K1501- 01311)', KAERI의 연구비를 지원받아 수행되었다.

참고문헌

- [1] J. Penfold, *et al.*, J. Chem. Soc. Faraday Trans. **93**(22), 3899 (1997).
- [2] T.P. Russel, Mat. Sci. Rep. **5**, 171 (1990).
- [3] M.J. Grundy, R.M. Richardson, S.J. Roser, J. Penfold and R.C. Ward, Thin Soild Film **159**, 43 (1988).
- [4] 신관우, Polymer Science and Technology **15**, 6 (2004).
- [5] E.M. Lee, C.F. Majkrzak, M. Elmiger and L. Passell, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B **93**, 75 (1994).
- [6] <http://nuetron.risoe.dk>.
- [7] G.E. Bacon, Neutron Diffraction, 3th Ed., (Clarendon Press, Oxford, 1975).
- [8] 이종오 외, 한국진공학회지 **14**, 119 (2005).
- [9] C. O. Lee et al., Physica B **385-386**, 1170 (2006).

Analysis of Horizontal Neutron Reflectometer for Nanointerfaces Using McStas

Oh-Sun Kwon^{1,2} and Kwanwoo Shin^{2*}

¹*Department of Physics, University of Rhode Island, RI 02881, USA*

^{2*}*Department of Chemistry, Sogang University, 121-742, Seoul*

(Received December 13, 2006)

A new horizontal neutron reflectometer has been designed and now under construction at the HANARO, 30 MW research reactor, in Daejeon, Korea. We performed simulations of neutron ray-tracing to evaluate the performance of all of the optical components of the instrument with a Monte Carlo technique using McStas. The feasible wavelength of the incident neutron beam is 2.5 Å. It produces a q -range up to 0.126 Å⁻¹ with a supermirror as a deflector. Our studies showed improvement of the performance of the guide tube and monochromators. Although the performance is limited in q -range, it promises to be the first reflectometer in Korea for the study of free surfaces, which is currently in demand.

Keywords : Neutron, Neutron Reflectometer, McStas, Nanointerface

* [E-mail] kwshin@sogang.ac.kr