こんなことができる放射光 (3)

放射光利用における X 線光学素子

財団法人高輝度光科学研究センター 後藤俊治
理化学研究所 石川哲也

Shunji GOTO and Tetsuya ISHIKAWA: X-ray Optics for Synchrotron Radiation

Total reflection mirror and crystal monochromator are presented as two major optical elements in synchrotron radiation beamline. Reflectivity, typical X-ray mirrors used at SPring-8 beamlines, and sagittal and tangential focusing are shown for total reflection mirror. Energy range and energy resolution using crystal monochromator, geometry and mechanism for double-crystal monochromator, and cooling of first crystal from high heat load are shown briefly with the examples of SPring-8 standard beamlines. Photon flux through the beamline optics is also estimated with the effective band-width of monochromator.

1. はじめに

前号の2つの解説1, 2においてシンクロトロン放射光の発生原理やその性質について述べられた。実際に実験ステーションにおいて、偏向電磁石やウィグラーから放射される白色光やアンジュレータから放射される準単色光をそのままのスペクトルとパワー分布にて実験に使用するケースは稀であり、少なくともスリットやコリメータなどにより空間的・角度的なビームの制限をして利用することになる。最も簡単なビームラインは単なるビームパイプである。実際のビームラインは、これから発展し、蓄積リングの超高真空を維持するための真空中的な配慮、ビームシャッターやガンマ線ストッパ、遮蔽などの放射線防護的な配慮をして機能が加えられていったものである。さらに、放射光に対して、フォトンエネルギーおよびそのエネルギー幅、空間および角度的なビーム広がりなどの選択、加工をして、ユーザの必要とする光を実験ステーションに導くために、結晶や回折格子による分光光学系やミラーによる集光光学系などを付加してビームラインができあがっている。典型的な SPring-8 の X 線ビームラインの長さは 50 m 程度であり、30 ~ 40 m 付近に分光器やミラーが配置されている。

X 線ビームラインと軟 X 線や VUV ビームラインにおいては、例えば、用いられている分光素子が前者では主として単結晶、後者では回折格子と異なっているし、ビームライン真空に関する要求も異なり、真空チェンバや光学機器、機構部の作り方も違っていることが多い。ここでは、

SPring-8 において大半を占める X 線ビームラインを例にとり、X 線光学素子として重要なミラーと結晶分光器を中心として、これらの原理的なこととビームラインにおける実際の使われ方、どのようにしてエンドステーションまでに光が加工されていくのかなどについて概説する。これにより、続く 4 から 11 で解説される各応用分野の実験ステーションに光源～ビームライン光学系の流れで放射光を渡したいと考える。

2. 全反射ミラー

2.1 全反射ミラーの使用目的・機能

全反射ミラーは、以下のような目的でビームラインにおいて広く用いられている。

- (1) 高エネルギー成分除去
- (2) 湾曲ミラーによるビームの集光、平行化

(1) については分光器の基本波に付随する高次光成分の除去などが主な使用目的であり、(2) については、研磨によるサジタル方向のシリンドリカルミラー (図 3a 参照)、曲げによるタンジェンシャル方向のシリンドリカルミラー (図 3b 参照)、これらを組み合わせた擬似トロイダルミラー、高精度に研磨加工された非球面ミラーなどが用いられる。

2.2 反射率

X 線領域においては、屈折率がほとんど 1 程度であるので、原理的に反射率の高い直入射ミラーを得ることができない。しかしながら、屈折率が 1 よりごくわずかに小さいため臨界角以下の表面すれすれの入射により媒質中に

おいて屈折波は存在し得ず全反射が起きる。

全反射が起きる臨界角（表面から測った角度）は $\theta_c = \sqrt{2\delta}$ で与えられる。ここで、 δ はミラー媒質の屈折率 n の 1 からのずれ（実部）である。ミラー材料（電子密度）、フォトンエネルギーなどに依存するが X 線領域では臨界角は数 mrad 程度である。

理想的に平坦な表面における反射率は複素屈折率 $\tilde{n}$ を用いて、

$$R = \left| \frac{\sin\theta_0 - \tilde{n}\sin\theta_1}{\sin\theta_0 + \tilde{n}\sin\theta_1} \right|^2 \quad (\sigma \text{ 偏光}) \quad (1)$$

$$R = \left| \frac{\sin\theta_1 - \tilde{n}\sin\theta_0}{\sin\theta_1 + \tilde{n}\sin\theta_0} \right|^2 \quad (\pi \text{ 偏光}) \quad (2)$$

で表される。ここで、 θ_0 は視射角（入射ビームと表面とのなす角）、 θ_1 は屈折ビームと表面とのなす角であり、Snell の法則により、

$$\cos\theta_0 = \tilde{n}\cos\theta_1 \quad (3)$$

の関係が成り立つ。X 線領域では、式 (1)、(2) で示されたそれぞれの偏光に対してほとんど反射率に違いが見られない。

波長がきわめて短い X 線領域では反射率は表面粗さの影響を受けやすく、1 nm rms のオーダーかそれ以下が要求される。表面粗さによる反射率の低下を表すのにはいくつかの計算モデルがある。表面の高低差による反射ビームの位相差を考慮し平均化した静的な Debye-Waller 因子で反射率低下を表すのがその 1 つである。しかしながら、Pt, Au, Rh など真空蒸着により表面コーティングしたミラーでは空間周波数として数十 nm 程度の比較的微視的な表面粗さとなることがあり、粗さの標準偏差として数 nm に達することがある。このような表面の場合、Debye-Waller 因子によるごく簡単な反射率低下では実験結果をうまく説明できないことがあり、別の計算モデルが用いられることがある。一例が屈折率勾配モデルであり、ミラー表面の粗さは深さ方向の屈折率の連続的な変化として取り扱われる。^{1),2)} ミラーを高次光除去などに用いる際には表面粗さによって特に低反射領域の反射率が著しく違ってくることがあるので、実際に使っているミラーの表面状態に対し情報を得ておくことが重要である。

2.3 SPring-8 におけるミラーの例

SPring-8 の X 線ビームラインにおいては、ミラー母材としては石英やシリコンを研磨したものが多く用いられている。熱的、放射線的な耐性から白色放射光を受けるミラーの材料として石英は適さず、SPring-8 では材料の入手のしやすさ、加工のしやすさ、熱的な性質の観点からシリコンを用いている。一方、熱負荷のない単色 X 線用には石英を用いることが多い。

ミラー表面のコーティング材料は、使用エネルギー、反射率、吸収端などを考慮して選択される。Pt, Rh, Ni などが用いられている。これらのコーティングを施すことによりシリコンや石英母材に比べて同一のフォトンエネルギーに対する臨界角を大きくすることができ、その分同じビームサイズのビームを反射するのに必要なミラーの長さを短くすることができる。ミラーに対する視射角は X 線ビームラインの場合 2 ~ 10 mrad の範囲で適当に選ばれる。図 1 に Pt および Rh をコーティングした場合の反射率曲線の計算例を示す。

必要となるミラーの長さは、光源や焦点からの距離、取り込み角度などによって決まる。例えば、偏向電磁石からの放射光の縦方向発散角を約 100 μ rad、光源からミラーまでの距離を 30 ~ 40 m、視射角を 2 ~ 10 mrad とすると少

図 1 全反射ミラーの反射曲線の計算例。Pt および Rh コーティングの場合。(Reflectivity for total reflection mirrors with Pt and Rh coating.) 膜厚 50 nm, 表面粗さ 1 nm を仮定。

図 2 SPring-8 偏向電磁石ビームライン白色用ミラーおよび保持機構。1 m 長用、水冷およびベント機構付。(1-m-long mirror with indirect cooling and bending mechanism for bending magnet beamline at SPring-8.)

なくとも1 m長のミラーが必要となってくる。SPRING-8におけるX線ビームライン用の標準ミラーは以下の3種類となっている。

- (1) アンジュレータビームライン用, 400 mm 長, 縦偏向
- (2) アンジュレータビームライン用, 700 mm 長, 横偏向
- (3) 偏向電磁石ビームライン用, 1 m 長, 縦偏向

図2は偏向電磁石ビームライン用の1 m長ミラーおよび保持機構を示したものである。このミラーは白色の放射光を受けるため、側面に水冷された銅ブロックを熱接触させ挟み込む格好で間接冷却がなされている。また、光軸方向に沿ってミラーを曲げる機構を有し、曲率半径1～10 kmのオーダーで曲げることができ、これによって以下に述べるようにビームを縦方向に集光したり平行にしたりする。

2.4 湾曲ミラーによる集光・平行化

図3に湾曲ミラーによるビーム集光の様子を模式的に示す。入射面（入射ビームとミラー法線でつくられる面）に対して垂直方向の集光をサジタル集光、入射面内の集光をタンジェンシャル集光と呼ぶ。光源からミラーまでの距離を p 、ミラーから焦点までの距離を q 、視射角を θ として、サジタル集光の場合およびタンジェンシャル集光の場合の曲率半径は以下の式で与えられる。

$$r = \frac{2pq}{p+q} \sin \theta \quad (\text{サジタル集光}) \quad (4)$$

$$R = \frac{2pq}{(p+q)\sin \theta} \quad (\text{タンジェンシャル集光}) \quad (5)$$

図3 湾曲ミラーによるビーム集光の様子。(Schematic of beam focusing using bent mirror.) (a) サジタル集光, (b) タンジェンシャル集光。

例えば、 $p = 40$ m, $q = 10$ m, $\theta = 5$ mrad の場合、 $r = 80$ mm, $R = 3.2$ km となり、表面すれすれ入射の条件ではそれぞれの方向で曲率半径が著しく異なる。このため、サジタル方向の集光には、あらかじめシリンドリカル形状に研磨したものが用いられる。一方、タンジェンシャル方向の曲率は研磨加工で実現することは難しく、K-B ミラーによるマイクロビーム実現などの場合を除いては機械的に曲げることが多い。また、 q を十分大きくすると平行化の条件になる。すなわち、

$$r = 2p \sin \theta \quad (\text{サジタル集光}) \quad (6)$$

$$R = 2p / \sin \theta \quad (\text{タンジェンシャル集光}) \quad (7)$$

となり、近似的に放物面をつくることができる。

ミラーの曲げによって実現されるビームサイズは以下の式で見積もられる。³⁾ ここで、 Σ は光源サイズ (rms)、 M は倍率 ($= q/p$)、 L はミラー上のビーム照射領域の長さ、 $\Delta_{\text{fabrication}}$ は加工時に生じるスロープエラー（表面の形状誤差）を表す。式 (8) はコマ収差、式 (9) は球面収差、式 (10) はスロープエラーに関する項であり、総合的に式 (11) のようになる。

$$F_{\text{coma}} = 2.35 \Sigma M \quad (8)$$

$$F_{\text{spherical}} = \frac{3L^2 \theta (1 - M^2)}{16pM} \quad (9)$$

図4 湾曲ミラーを用いたタンジェンシャル集光におけるビームサイズ。(Beam size estimation for tangential focusing mirror.) 光源サイズ 10 μ m, 光源～ミラー間距離 40 m, ミラー長 400 mm, 視射角 4 mrad, スロープエラー 3 μ rad の場合。

$$F_{\text{Fabrication}} = 2 \times 2.35 \Delta_{\text{fabrication}} M p \quad (10)$$

$$F_{\text{total}} = \left[\left(F_{\text{coma}} + F_{\text{spherical}} \right)^2 + F_{\text{fabrication}}^2 \right]^{1/2} \quad (11)$$

これらの式を用いて計算した集光ビームサイズの例を図4に示す. $p = 40$ m, $\theta = 4$ mrad, 光源ビームサイズ $\Sigma = 10$ μm , ミラー長 $L = 400$ mm, スロープエラー $\Delta_{\text{fabrication}} = 3$ μrad と SPring-8 のアンジュレータビームラインにおける縦集光を想定した条件である. 球面収差とスロープエラーの影響の加減により倍率 0.1 付近で 60 μm までビームが絞れることがわかる.

3. 結晶分光器

一部の白色の放射光をそのまま用いる実験ステーションを除き, 結晶分光器は X 線ビームラインにおいて必要不可欠な光学系コンポーネントである. 分光の原理は完全な単結晶による Bragg 反射である. 結晶分光器の主たる機能は, 所定のエネルギーの X 線を分光し取り出すこと, エネルギー幅を実験に必要なものに制御することである. また, 通常用いられる二結晶分光器では, エネルギーを変えても分光器を出射して試料に至るまでの光軸を変えないこと, さらに, 結晶の曲げによりビームを集光することなどの機能が加わる.

3.1 分光結晶

SPring-8 における分光結晶は大半がシリコン単結晶である. これは, 半導体産業においてシリコンが主材料であることと大きく関連しており, 完全で大きな単結晶が安価に得られること, 切断や研磨などの加工技術が確立していることなどがその理由である. また, 半導体材料としてのシリコン結晶の完全性を動力学的回折理論に基づいて X 線的に評価してきた歴史的な背景も手伝ってシリコン結晶についての X 線光学的な特性が古くから熟知されていることも一因である.

また, 近年完全結晶にかなり近い人工ダイヤモンドが合成されるようになっており, 一部のビームラインではその熱的特性の優位さや, X 線透過率の高さなどの理由によりダイヤモンドが用いられている.

3.2 分光可能なエネルギー範囲

シリコン単結晶を用いてどのようなエネルギー領域の X 線が分光可能か具体例を見てみる. よく知られているように Bragg の式は以下のように与えられる.

$$2d \sin \theta_{\text{BK}} = n\lambda \quad (12)$$

ここで, d は反射に寄与する格子面の面間隔, θ_{BK} は屈折の効果を考慮しない運動学的回折に基づく Bragg 角, λ は分光される X 線の基本波長, n はその n 次光が分光されることを意味している. 波長からエネルギーに換算するには,

$$E_{\text{BK}} [\text{keV}] = 1.24/\lambda [\text{nm}] \text{ を用いればよい.}$$

一例として, SPring-8 の標準型二結晶分光器は $3 \sim 27^\circ$ の範囲で Bragg 角が選択できるようになっている. Si 111 反射, 311 反射, 511 反射, 333 反射などが主として用いられ, これらの反射により 4.4 $\sim$ 110 keV の範囲の分光が可能である. 図5はこれらの反射において分光可能なエネルギー範囲を Bragg 角の関数として表したものである.

3.3 回折曲線

完全で大きな単結晶における X 線の回折は, 動力学的回折理論を用いて説明できる.⁴⁾ 加工ひずみや熱ひずみのないシリコン結晶の場合, 回折曲線 (反射率, 回折幅の角度もしくはエネルギー依存性) は完全結晶に対する動力学的回折理論を用いて計算したものと実際とはきわめてよ

図5 分光可能なエネルギーと Bragg 角の関係. (Photon energies as a function of the Bragg angle.)

図6 シリコン単結晶の回折曲線の計算例. 半無限に厚い結晶における対称 Bragg case (上図) の場合. (Intrinsic rocking curves for silicon perfect crystal in symmetric Bragg case for semi-infinite thick crystal.)

く一致する。図6は回折曲線の入射角依存性(イントリンシックなロッキングカーブ)の対称Bragg caseにおける計算例である。屈折を考慮しないBragg角 θ_{BK} からは屈折の影響で回折のピークを与える位置が高角度側にわずかにずれること、回折を起こす範囲が有限の幅をもつことなどが動力的回折理論の特徴である。また、吸収が少ない硬X線領域では反射率のピーク値は1に近い。

図7にはSi 111反射、311反射、511反射の回折幅(半値全幅 FWHM)のエネルギー依存性を示した。これからわかるように0.1~100 μrad のオーダーの回折幅を有している。比較のために同じグラフ中にSPring-8の偏向電磁石および標準アンジュレータ(周期長32 mm, 周期数140)からの放射光の角度発散(半値全幅)を示した。SPring-8において、偏向電磁石からの放射光の発散は回折幅に比べて1桁程度大きい。アンジュレータからの放射光の発散は低次の反射の回折幅と同程度である。

3.4 エネルギー分解能

結晶分光におけるエネルギー分解能は、結晶に入射するビームの角度発散 Ω と、結晶そのものが有する回折幅 ω のコンボリューションによって決定される。すなわち、

$$\frac{\Delta E}{E} = \cot \theta_B \sqrt{\Omega^2 + \omega^2} \quad (13)$$

で与えられる。

図8はSPring-8の標準アンジュレータ、偏向電磁石を光源としたときのエネルギー分解能について示したものである。ここでは、光源からの発散についてはスリットなどの制限はなく、そのものの自然発散を考えている。したがって、スリットや2.4の式(7)に示したようなコリメータ

図7 回折幅のエネルギー依存性および光源の発散角。(Diffraction widths of crystal and source divergences as a function of the photon energy.) SPring-8の偏向電磁石および標準アンジュレータ(周期長32 mm, 周期数140)の基本波の縦方向の角度発散についても示している。

ミラーを用いて光源からの発散を制限すると分解能を向上させることができる。通常の使用条件では $10^{-5} \sim 10^{-4}$ 程度である。

3.5 二結晶分光器と定位置出射

定位置出射型の二結晶分光器を用いることにより、Bragg角を変えて取り出すエネルギーを変化させても常に射出ビームの位置を一定に保つことができる。これにより、ユーザにとって利便性がもたらされる。

二結晶分光器における定位置出射の原理は、同一の格子面間隔を有する結晶を用いて、例えばまず斜め上方向、次に反対方向に振り戻す2回の反射をさせることにより入射ビームと射出ビームを平行に保つこと、それに加えて、2つの結晶の相対的な位置関係に対して適当な並進動作を加えることにより、Bragg角を変化させても射出ビームの位置と方向を一定に保つことである。

図9に定位置出射を実現する2つの方法を示す。(a)は第一結晶と第二結晶が独立の回転ステージに置かれ、それぞれでBragg角を設定するようになっている。⁵⁾ オフセット h の定位置出射を実現するためには入射ビーム方向に y 軸をとると、第一結晶と第二結晶の位置関係は、

$$y = \frac{h}{\tan 2\theta_{BK}} \quad (14)$$

でなければならない。この方法では、所定の角度と位置を送った際に、2つの結晶の平行性をいかに保つかが重要である。すなわち、2つの回転ステージの送り精度が高く、並進ステージの角度ぶれがきわめて小さいことがこのタイプの分光器の成否をにぎっている。一方、図9bは1軸の回転テーブルの上に第一結晶および第二結晶が併進2軸とともに置かれた配置である。⁶⁾⁻⁸⁾ この例では第一結晶に

図8 SPring-8標準アンジュレータ、偏向電磁石を光源としたときのエネルギー分解能。(Energy resolution with Si 111, 311, 511 reflections with bending magnet radiation, and 111 refl. with standard undulator radiation of SPring-8.)

(a) 回転 2 軸 + 並進 1 軸 型

(b) 回転 1 軸 + 並進 2 軸 型

図9 定位置出射を可能とする結晶の角度、位置の関係. (Angles and positions of first and second crystals for fixed-exit double-crystal monochromator.)

ついて直交2軸の並進操作を行うものとしている. この場合について定位置出射に必要な結晶の並進の条件を求めてみる. Bragg 角を変化させてもオフセット h を保つためには, 幾何学的考察から,

$$y = AB = \frac{h}{2\sin\theta_{BK}}, \quad z = OB = \frac{h}{2\cos\theta_{BK}} \quad (15)$$

の関係を満たす必要があることがわかる. これらの式から θ_{BK} を消去すると,

$$(y^2 - h^2/4)(z^2 - h^2/4) = h^4/16 \quad (16)$$

が得られる. これは y, z ともに $h/2$ に漸近する曲線を表している.

上で述べたような2軸 $y-z$ の並進を実現する1つの方法として, SPring-8 の標準型二結晶分光器^{7),8)}では図10に示すようなコンピュータ+カムリンク方式が用いられている. この方式では第一, 第二結晶とも同一の θ 回転ステージ上にあり, 反射する格子面の平行が保たれたまま Bragg 角を変えることができる. 第一結晶について2軸の並進を伴う. 実際の駆動 $\theta-y$ についてコンピュータリンク, $y-z$ についてカムによるリンクが行われる. カムの形状は上記の $y-z$ に関する式 (16) に基づいて決められている. 分光器全体を現実的な大きさにするため, オフセットとしては30 mm が選ばれ, Bragg 角の設定範囲は3 ~ 27° に選ばれている. このとき y ステージにおけるストロークは300 mm 近くになり, 一方, z ステージのストロークは数mm におさまる. したがって, y ステージの直進性が性能を左右することになる. この分光器でカバーできるエネルギー範囲は図5に例示したとおりである.

実際に使用される二結晶分光器では, 上で述べた主要なステージ ($\theta-y-z$) 以外にも多くの調整ステージを有している. Bragg 角の微調整, アオリ, 面内回転, 結晶位置

図10 コンピュータ+カムリンク方式による定位置出射. (Fixed-exit mechanism with computer-cam linkage.)

の調整などの調整機構を有している. 例えば Bragg 角の微調整については回折幅より十分小さな分解能と精度が必要であり, この場合 0.05 μrad となっている. その他の回転軸についても 1 μrad 程度かそれ以下, 並進軸で 0.1 μm 程度となっている.⁸⁾

3.6 結晶の冷却

第二世代から第三世代の放射光光源になって放射パワーおよび放射パワー密度が格段に大きくなってきた. 白色ビームにさらされる光学素子の熱負荷は尋常ではない. SPring-8 のビームラインでは結晶分光器は光源から 30 ~ 40 m 付近に設置される. 光源の種類にもよるが, 第一結晶が受ける熱負荷は最大数百 W/mm^2 になる. 結晶を冷却しないで用いれば最悪の場合融解, 破損に至るが, そうでなくても熱膨張による結晶のひずみ, 第一結晶と第二結晶の格子面間隔の不整合などをもたらす, 分光器の基本的な性能の劣化 (強度の低下, 発散の増大, 出射方向の変化) につながる. このため, 照射パワーおよび照射パワー密度に応じた冷却方法が用いられている. 第二結晶についても第一

表1 SPring-8における分光結晶の冷却方法. (Cooling methods for monochromator first crystal at SPring-8.)

偏向電磁石ビームライン
照射パワー：～100 W
照射パワー密度：～1 W/mm ² @40 m
冷却方式：フィン結晶直接冷却
もしくは間接冷却(Si/InGa/水冷Cuブロック)
標準X線アンジュレータビームライン(周期長 32 mm, 周期数140)
照射パワー：～500 W
照射パワー密度：～500 W/mm ² @40 m
冷却方式：ピンポスト結晶直接冷却
+回転傾斜型配置(→1～10 W/mm ²)
もしくは液体窒素間接冷却

結晶における分光後の単色X線のみならず、第一結晶においてCompton散乱されたX線が第二結晶に入射した結果、第二結晶が受ける熱も無視できず、それなりの冷却を必要としている。

表1はSPring-8における分光結晶の冷却方法をまとめたものである。照射パワーとパワー密度の値はビームラインのスリット系により空間的に制限したあとのものである。

3.6.1 偏向電磁石ビームライン用間接冷却

シリコンの平板結晶をInGaなどを介して水冷されたCuブロックに熱接触させる方式である。照射パワーおよびパワー密度が小さければ使用可能であろうが、SPring-8の偏向電磁石ビームラインにおいては冷却能力不足であり、次に述べる直接冷却を使用するほうが望ましい。

平板タイプの第二結晶の冷却については、同様の間接冷却が用いられる。

3.6.2 偏向電磁石ビームライン用フィン結晶直接冷却

シリコンの裏面にはフィンと溝の幅がそれぞれ1 mm程度のフィン型の流路が加工され直接水冷されている。冷却水が真空中に漏洩することがないように結晶とホルダの間はOリングによってシールされている。この際、結晶をひずませることがないように押さえ方が慎重にコントロールされている。

3.6.3 アンジュレータビームライン用ピンポスト結晶直接冷却 + 回転傾斜型配置^{7)・9)}

結晶表面は反射面(格子面)に対して80°となるように切り出され、面内回転によって視射角(Bragg角とは異なる)を1°程度になるように調整する。これによって結晶表面における照射面積を50倍程度拡大して熱負荷を軽減する。

さらにピンポスト結晶を用いて効率良く直接的に水冷する。ピンポスト結晶では表面から0.5～1 mm程度の深

さにピンポストの層があり、ここに直接冷却水を流すことにより効果的に冷却が行われる。シリコン基板へのピンポストの形成、Au-Si共晶接合によるシリコンどうしの接合(ピンポストのある面が接合される)、反射表面の研磨およびエッチングなどの加工工程を経てピンポスト結晶が製作される。

結晶とホルダ間のシールに関し注意すべきことはフィン型冷却と同様である。

3.6.4 アンジュレータビームライン用液体窒素冷却¹⁰⁾

シリコンは液体窒素温度付近において熱膨張係数がきわめて小さくなる。この性質を利用して冷却に関するFigure of meritである熱伝導率/熱膨張係数の比を大きくとることができ、実効的に冷却効率を高めることができる。液体窒素が循環する銅ブロックを結晶側面から接触させる間接冷却の方法がとられている。液体窒素はポンプにより循環されるとともに、ヘリウム冷凍機を介して熱交換が行われている。

4. 放射光強度の計算例

4.1 分光器における実効的なバンド幅を考慮したフラックスの評価

図11Aは偏向電磁石ビームラインにおける強度(スペクトル)の計算例で、二結晶分光器と2回反射の高次光除去ミラーからなる光学系を仮定したものである。偏向電磁石からの放射光スペクトル(a)は全反射ミラーにより15 keV以上の高エネルギー成分が除去される(b)。また、Be窓による吸収により10 keV以下の低エネルギー成分がいくぶん減少する(c)。さらに、結晶分光器により分光されることにより、最終的な単色X線(d)が得られる。

図12は(c)～(d)にいたる計算に必要な実効的なバンド幅である。このバンド幅と比較して放射光のスペクトルがこの近傍で十分一様とみなせる場合には、分光後のフォトン数を見積もる良い指標となる。まず、回折強度曲線から積分反射率を計算し、これと面積が等しく反射率100%×実効的バンド幅とする矩形分布に置き換えて、実効的バンド幅を計算したものである。通常の二結晶分光器を仮定し、対称Bragg caseで2回反射しているものとした。低エネルギー側では吸収により反射率が低下し、実効的バンド幅は低下するが、エネルギーが高くなると一定値に近づく。詳細は略すが、原子散乱因子のうち、異常分散項を無視した計算においては、実効的バンド幅はエネルギーによらず一定となる。Si 111反射において 1.38×10^{-4} 、Si 311反射において 2.83×10^{-5} 、Si 511反射およびSi 333反射において 8.54×10^{-6} となる。ちなみに、ダイヤモンド結晶では111反射において 6.07×10^{-5} 、311反射において 9.38×10^{-6} 、511反射および333反射において 2.89×10^{-6} となり、シリコンに比べ回折幅が小さくなることを反映し、同じ反射指数で比べると強度は30～40%になる。図11Aの

図 11 SPring-8 の X 線ビームラインにおけるフォトンフラックスの計算例。(Photon flux estimation for SPring-8 beamlines.) (A) : 偏向電磁石ビームラインの例. 光源からの距離 50 m における軸上の光子密度を表す. (a) ~ (c) は 0.1 % バンド幅当たりの強度, (d) は図 12 の実効的なバンド幅を考慮した分光後の強度を表す. (B) : 標準アンジュレータの例. 基本波エネルギー 10 keV の場合.

(a) ~ (c) は 0.1 % バンド幅当たりの強度であるから, これをいったん 1000 倍したのち上記の結晶分光器における実効的なバンド幅を乗ずることによって分光後の強度を計算することができる. 図 11A の (d) はこのようにして Si 111 反射の場合の強度を描いたものである. この例では, 蓄積電流値 100 mA, 光源から 50 m の位置, フォトンエネルギー 10 keV について約 3×10^9 ph/s/mm² のフォトンが得られることがわかる. 一方, 図 11B は標準アンジュレータにおける計算例である. 蓄積電流値 100 mA において計算上 8×10^{13} ph/s/mm² のフォトンが得られることがわかる. アンジュレータのスペクトル計算には SPEC-TRA¹¹⁾ を用いた.

光源, 光学系の条件が変わっても同様の考え方により

図 12 二結晶分光器の反射率および回折幅を考慮して計算した実効的なバンド幅. (Effective band-widths with double-crystal monochromator calculated by integrating reflectivity curves.)

そのビームラインにおいて得られる強度を見積もることができる.

4.2 高次光の除去

Bragg 反射による結晶分光では高次光の除去が必要となることが多いが, 上記の例では, ミラーによって, 例えば 10 keV の場合, 三次光 (30 keV) を 3×10^{-5} 低減できることがグラフから読み取れる. これに加えて, 結晶分光器の実効バンド幅分でさらに 0.06 程度低減され, 合わせて三次光は 6 桁低減されることがわかる.

このようにミラーを用いた高次光除去に対して, もう 1 つの方法としてデチューンと呼ばれる方法がある. これは二結晶分光器の第一結晶と第二結晶をわずかに平行からずらす方法である. 結晶固有の回折幅は高次反射ほど狭くなることを利用し, 基本波については二回の反射でも強度がそれほど低下せずに反射するが, 高次光のほうはほとんど反射してこないような角度に調整すれば高次光を除去できる. 例えば, Si 111 反射, 10 keV およびその三次光 (30 keV) について第一結晶と第二結晶に角度差 $\Delta\theta$ を 12 μ rad にすると基本波はピーク値の 70 % の強度に減少するだけなのに対して三次光は 0.3 % まで減少させることができる. ただし, 第一結晶と第二結晶が平行からわずかにずれると出射ビームの向きが変わる. 第二結晶を例えば 10 μ rad ずらすと 10 m 先ではビーム位置が 0.2 mm ずれる計算になる. 特に実験装置側でスリットによりビームサイズを小さく絞った場合には, この点も考慮して実験装置を配置する必要がある.

5. おわりに

本稿においては, X 線ビームラインの主要光学系である全反射ミラーと結晶分光器における基本的な解説に終始し, 結晶分光器におけるサジタル集光やタンジェンシャル

集光(ヨハン型, ヨハンソン型)などには言及しなかった。また, 完全結晶の動力学的回折を利用したさまざまな光学系, 例えば偏光状態を操る移相子¹²⁾ 高次反射や非対称反射を利用した高エネルギー分解能のモノクロメータ¹³⁾ やアナライザなど放射光利用において重要と思われる話題についてまったく触れることができなかった。さらに, 高精度非球面ミラーなどによるマイクロビーム実現¹⁴⁾ などにも触れていない。それぞれの要素技術において, 着実に性能向上が図られ, これらの光学素子を必要とするビームラインにおいて実用的に利用されていることを付記しておきたい。この解説を通じて, ビームライン光学系を通して得られる放射光の基本的な性質について, 少しでも理解が得られれば幸いである。

第三世代の放射光の本格的な利用が進む一方で, X-FEL など第四世代光源の開発が始まっている。当然これらはそれぞれの得意とする領域を分け合いながら共存していくものと思われる。ここで述べた全反射や結晶分光の技術はX線の発見された1895年以降はやくからその性質が理解され始め, ほぼ1世紀にわたってさまざまな技術的進歩に支えられながら利用されて続けてきたものである。今後, ビームライン光学系がどのような展開を見せるのか, 既存の技術の延長線上にあるのか, 別の原理に基づくものになっていくのかなど, ビームライン光学系に関わりをもちながらその推移を見届けていきたいと思う。本特集では, このあと特に結晶学に関連の深い分野の解説が行われていくが, これらに限らず, さまざまな利用分野から光源やビームライン光学系へのあくなき要求があって, 相互の発展につながっていくものと考えらる。

文 献

- 1) L. Névt and P. Croce: *Revue Phys. Appl.* **15**, 761 (1980).
- 2) D. H. Bilderback: *Proc. SPIE* **315**, 90 (1981).
- 3) T. Uruga, H. Tanida, Y. Yoneda, K. Takeshita, S. Goto and T. Ishikawa: *Nucl. Instrum. Methods* **A467-468**, 782 (2001).
- 4) 例えば, 「X線回折・散乱技術上」(菊田惺志, 東大出版会), 「X線の回折」(三宅静雄, 朝倉)を参照。
- 5) H. Kawata and M. Ando: *Nucl. Instrum. Methods* **A246**, 368 (1986).
- 6) T. Matsushita, T. Ishikawa and H. Oyanagi: *Nucl. Instrum. Methods* **A246**, 377 (1986).
- 7) T. Uruga, H. Kimura, Y. Kohmura, M. Kuroda, H. Nagasawa, K. Ohtomo, H. Yamaoka, T. Ishikawa, T. Ueki, H. Iwasaki, S. Hashimoto, Y. Kashihara and K. Okui: *Rev. Sci. Instrum.* **66**, 2254 (1995).
- 8) M. Yabashi, H. Yamazaki, K. Tamasaku, S. Goto, K. Takashita, T. Mochizuki, Y. Yoneda, Y. Furukawa and T. Ishikawa: *Proc SPIE* **3773**, 2 (1999).
- 9) H. Yamazaki, H. Kimura, I. Kagaya, C. Yamashita and T. Ishikawa: *Proc. SPIE* **3773**, 21 (1999).
- 10) T. Mochizuki, Y. Kohmura, A. Awaji, Y. Suzuki, A. Baron, K. Tamasaku, M. Yabashi, H. Yamazaki and T. Ishikawa: *Nucl. Instrum. Methods* **A467-468**, 647 (2001).
- 11) T. Tanaka and H. Kitamura: *J. Synchrotron Rad.* **8**, 1221 (2001).
- 12) M. Suzuki, N. Kawamura, M. Mizumaki, A. Urata, H. Maruyama, S. Goto and T. Ishikawa: *Jpn. J. Appl. Phys.* **37**, L1488 (1998).
- 13) M. Yabashi, K. Tamasaku, S. Kikuta and T. Ishikawa: *Rev. Sci. Instrum.* **72**, 4080 (2001).
- 14) H. Mimura, S. Matsuyama, H. Yumoto, H. Hara, K. Yamamura, Y. Sano, M. Shibahara, K. Endo, Y. Mori, Y. Nishino, K. Tamasaku, M. Yabashi, T. Ishikawa and K. Yamauchi: *Jpn. J. Appl. Phys.* **44**, L539 (2005).

プロフィール

後藤俊治 Shunji GOTO
財団法人高輝度光科学研究センター
Japan Synchrotron Radiation Research Institute
〒679-5198 兵庫県佐用郡三日月町光都 1-1-1
1-1-1 Kouto, Mikazuki 679-5198, Japan
e-mail: sgoto@spring8.or.jp
専門分野: X線光学

石川哲也 Tetsuya ISHIKAWA
独立行政法人理化学研究所播磨研究所
The Institute of Physical and Chemical Research
(RIKEN) Harima Institute
〒679-5148 兵庫県佐用郡三日月町光都 1-1-1
1-1-1 Kouto, Mikazuki 679-5148, Japan
e-mail: ishikawa@spring8.or.jp
専門分野: X線光学