

光のエネルギーを切り出す (X線編)

山崎裕史 財団法人高輝度光科学研究センター 〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
E-mail : yamazaki@spring8.or.jp

後藤俊治 財団法人高輝度光科学研究センター 〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
E-mail : sgoto@spring8.or.jp

1. はじめに

今回も、前回に引き続き、「光のエネルギーを切り出す」お話です。第4回「基礎編」ではエネルギーを切り出すために使用する光学素子の話が中心でした。放射光に対しても、光学素子の物理的な基礎は可視光の場合と同じであることが説明されています。今回は「X線編」として、数keVより高いエネルギーのX線を切り出すことについて説明します。より低いエネルギー領域に関しては次回の「真空紫外・軟X線編」をご覧ください。物理は同じでも、技術が全く違います。技術の違いは放射光ビームラインの外観をも変えてしまいます。X線ビームラインの基本的な構成はFig. 1のようになり、機器類は直線的に配置されています。次回の「真空紫外・軟X線編」と比較してください。

放射光リングから取り出される生の放射光には、様々なエネルギーのX線が含まれています。一方で、多くの実験では特定のエネルギーのX線だけが必要で、残りの大部分は不要です。「分光器」は、放射光の中から特定のエネルギー成分だけを抜き出してユーザーに提供するための装置です。ビームラインの設計は分光器を中心になされていると言っても過言ではありません。その分光器の仕組みをなんとなく知ってもらうのが本稿の目的です。

放射光を提供する施設にとって、「装置の詳細を知らなくても、高品位の放射光が誰にでも気軽に使用できる」というのがビームライン設計の究極のコンセプトです。「水道の蛇口をひねれば綺麗な水がでる」くらいのお気楽さが目標です。それは同時に、ビームラインの装置がブラックボックスに収められてしまうことにもなります。既に、一

部のユーザーにとっての分光器とは、エネルギー値をコンピュータに入力してリターンキーを押すだけの存在かもしれません。この機会に、ブラックボックスを覗き込んで、中身を想像してみてください。

X線分光器の仕組みは、どの施設でも、どのビームラインでも、ほとんど同じです。水道に例えれば、浄水の基本はフィルタリングと消毒であり、方法自体は確立しています。しかし、実際には、〇〇水系の水は硬い、△△水系はまろやか、といった違いがあります。水源の性質によって消毒のさじ加減が変わり、それが水道水の性質を決めるひとつの要因になります。放射光の分光器においても同様に、光源の種類や質によって変化する部分があります。同じ仕様の分光器を使ってエネルギーを切り出しても、光源によってX線の性質が異なることもあります。

本稿では、X線分光器の仕組みと、そこに使われている技術について説明します。分光器開発の現場では、強力な光源が出現する度に新しい困難に直面し、常に技術開発が進められています。その一端も紹介します。

2. 単位について

分光器の説明の前に、X線領域でよく使われる単位の関係について説明します。X線は電磁波の一種ですから、その波長で分類することができます。X線の波長を表すために現在よく使用されている単位はÅ（オングストローム）で、 $1 \text{ \AA} = 0.1 \text{ nm}$ となります。最近では国際単位系(SI)への移行が推奨されていて、将来はÅを使う機会は減っていくかもしれません。

また、電磁波は光子のエネルギーによって分類すること

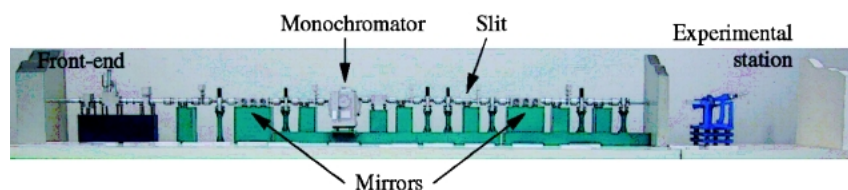


Fig. 1 Basic design of a beamline of the SPring-8.

もできます。放射光関連の分野ではeV(エレクトロンボルト)が基本です。1eVは電子(e)が1Vの電圧で加速されたときに獲得するエネルギー(SI単位では 1.6×10^{-19} J)です。eVにSI接頭語(k, m, μ など)を付けて使用します。eVはSIには属しませんが、SIと併用することができます。光子のエネルギー E [keV]と電磁波の波長 λ [Å]には、 $E=12.4/\lambda$ の関係があります。

平面角度もSIではrad(ラジアン)ですが、°(度), '(分), "(秒)も併用されます。 $1''=(1/60)'=(1/3600)^\circ$ の関係があります。秒をSI単位に変換する場面がしばしばありますが、 $1'' \approx 5 \mu\text{rad}$ と覚えておくと便利でしょう。

ここから先は便宜のため、エネルギーではなく波長を使って記述します。

3. 分光の仕組み

X線が原子に入射すると、電場の振動で電子が揺さぶられます。揺さぶられた電子が今度はアンテナの役目をして、入射波と同じ波長のX線を四方八方に放出します。これが原子によるX線の散乱です。原子核も同じ仕組みで散乱を起こしていますが、電子に比べて質量が大きすぎるため、その影響は無視できるくらいに軽微です。

たくさんの原子の集まりにX線を入射すると、それぞれの原子による散乱が起こります。ただし、散乱されたX線の強度は、それぞれの原子による散乱強度の和になるわけではありません。干渉という現象により、強度の強め合いや打ち消し合いが起こります。この現象が顕著になるのは、結晶のように原子が波長程度の間隔(1Å程度)で周期的に配置されている場合です。このときには、特定の方向にだけX線が放出されます。結晶による特定方向へのX線の散乱現象には名称があり、X線が影の部分へ回り込むことから「X線回折」とも、X線回折の理論と応用に貢献した親子の名前をとって「ブラッグ反射」とも呼ばれます。

ブラッグ反射について簡単に説明しましょう。原子は3次元的に並んでいるのですが、X線回折で重要になるのはその内の1方向の並びだけです。ある面内の原子をひとまとめにして、Fig. 2のように格子面と呼ばれる平面を定義します。図では線として描かれていますが、格子面は紙面に垂直な方向にも広がっています。格子面は、結晶の表面と必ずしも平行である必要はありません。この格子面でX線が反射すると考えます。反射面は原子の形状を反映してデコボコになっているように思えますが、この影響は無視できます。まず、Fig. 2のように格子面に視射角 θ_B で入射して、同じ角度で反射するX線について考えます。ある格子面で反射されたX線の光路(A-A')と、そのすぐ下の格子面で反射されたX線の光路(B-B')の差は $2d \sin \theta_B$ となります。ここで、 d は格子面の間隔です。この光路差が波長 λ の整数倍に等しいときには、反

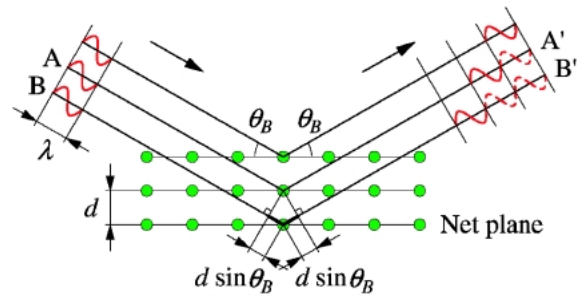


Fig. 2 Bragg condition.

射波の位相が揃います。このときには、どの格子面の光路差も $2d \sin \theta_B$ の整数倍になりますから、全ての格子面からの反射波が強め合います。光路差が波長の整数倍でないときには、格子面によって反射波の位相がまちまちなり、打ち消し合ってしまう。では、格子面に対して、入射波と反射波の視射角が異なるときはどうでしょう。このときは、格子面上のどこで反射するかによって位相が変わってしまい、結局打ち消し合います。

したがって、ブラッグ反射は、ブラッグ条件と呼ばれる

$$2d \sin \theta_B = \lambda \quad (1)$$

が成り立つときに限って起こります。「光路差が波長の整数倍に等しい」と言われたはずなのに、「整数倍」はどこに消えたのでしょうか。整数倍は格子面間隔 d に押し込んでしまったのです。例えば、格子面間隔 d_0 に対して、光路差が波長 λ の n 倍であるとしします。このときには、格子面間隔が $d=d_0/n$ であると思ってしまう方がいいのです。しかし、本当にそんな所に格子面が存在するのでしょうか? 答えのヒントは結晶の周期性です。少し数学的な話になりますが、フーリエ解析によれば、周期 d_0 の構造は、定数項と周期 d_0/n ($n=1, 2, \dots$)の正弦波(+余弦波)の和で表すことができます。X線は電子分布のそれぞれのフーリエ成分(周期の成分)に応答しているのです。特定の周期の成分だけに注目すれば、今まで見えなかった格子面が見えてくるでしょう。式(1)のように n を明示しない取り扱いの方が、X線回折の指数付け(分類)が簡単になります。

分光結晶としてよく使われるシリコンやダイヤモンドに限れば、格子面間隔は

$$d = a_0 / \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \quad (2)$$

となります。 a_0 は格子定数(室温でシリコン: 5.431 Å, ダイヤモンド: 3.567 Å)です。 hkl は反射の指数を表す整数の組で、(1)全て奇数, (2)全て偶数かつ $h+k+l$ が4の倍数のときだけブラッグ反射を起こします。それ以外の組合せのときには、各原子からの反射波が弱め合うため、ブ

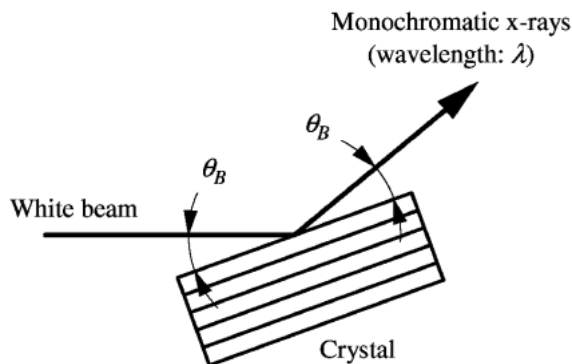


Fig. 3 Scheme of monochromator.

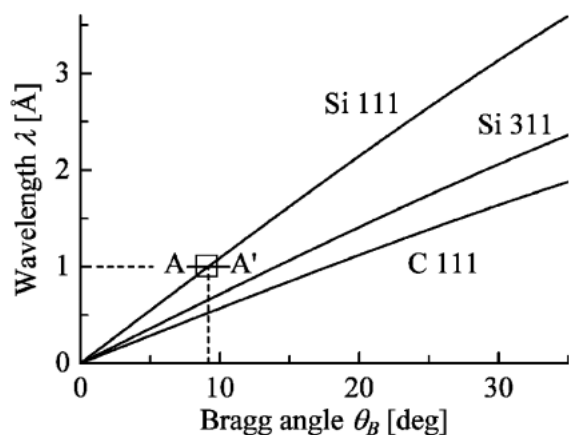


Fig. 4 Bragg conditions of silicon 111, 333, and diamond 111.

ラッグ反射は起こりません。例えば、111や333のときは反射を起しますが、222では起こりません。111に対応する周期を d_0 とすれば222は $n=2$ の場合に相当するのですが、結晶構造を反映してフーリエ成分が零になっているのです。

ここからが本題です。結晶を使ってどのように分光するのでしょうか。放射光の入射方向に対して、Fig. 3のように視射角 θ_B で結晶を置いてみます。たくさんの波長成分をもつ放射光の中から、ブラッグ条件を満たす波長 λ だけが同じ角度で反射されます。視射角を変えれば、違う波長の X 線が取り出せます。これが X 線の分光の基本です。Fig. 4 で、シリコン111、333とダイヤモンド111反射に対するブラッグ角と波長の関係を示しておきます。

さて、ブラッグ反射についての説明で、次の疑問が湧いてきた人はいませんか。「格子面での反射は1回だけだろうか？ 上に反射した X 線もブラッグ条件を満たしつつ、もう一度下に反射することができるのではないかと？ ジグザグな経路があってもいいのでは？」多重散乱と呼ばれるこの現象は、分光結晶の反射率や、分光された X 線の単色性を計算するときには考えなければなりません。もう少し踏み込んだ説明は後ほど行います。

4. 分光結晶の選択

では、分光の用途にはどのような結晶が適しているのでしょうか。とりあえず、天然の結晶を考えてみましょう。X線回折の黎明期には、方解石や岩塩が良質の結晶として扱われていました。これらの結晶には、格子面のひずみや折れ曲がり、格子面間隔の不均一性、不純物による結晶構造の変化などが随所に見られます。したがって、X線の当たる場所によってブラッグ条件が変わってしまいます。この結果、分光された X 線に強度ムラができることになります。

分光には完全性の高い結晶が必要です。現在入手できる最も完全に近い結晶は、人工のシリコンです。半導体産業の発展により高品質で大型のものが得られるようになりました。純度は最大で99.99999999%に達します。9が11個あるのでイレブン・ナインと呼ばれます。このような高純度シリコンは浮遊帯域融解法 (floating zone; FZ 法) と呼ばれる方法で工業的に製造されます。ネッキングという無転位化技術により、 $\langle 100 \rangle$ 、 $\langle 111 \rangle$ 方位成長の結晶には欠陥がほとんどありません。最近では、 $\langle 110 \rangle$ 方位成長の結晶でも無転位化に成功していて、SPring-8で分光結晶の材料として利用されています。この方法で作られる結晶は直径100から150 mmのロッドであり、分光結晶の材料として十分な大きさを持ちます。結晶の切削で導入されるひずみを除去するために、薬品で表面を溶かすエッチングという処理が欠かせません。分光結晶の表面は鏡面仕上げになりますが、ひずみが入らないように機械研磨とエッチングを組み合わせた研磨法が用いられます。

一方、分光の精度がそれほど要求されない場合には、チョクラルスキー (Czochralski; CZ) 法と呼ばれる方法で製造されたシリコンが使用されることもあります。この方法でも無転位化技術であるネッキングが使われています。不純物が FZ シリコンに比べて多く混入されるという問題がありますが、安価に購入できることが魅力です。シリコン結晶の製造や加工については文献 1) を参照してください。

近年、分光結晶としてダイヤモンドが注目されています。熱に対する特性が格段に優れていて、後述する放射光の熱対策の観点で非常に有利であるからです。ダイヤモンドの人工合成の歴史は古いのですが、生産されるほとんどが微粒子です。例えば、研磨剤として、あるいは半導体素子や道路工事に用いるダイヤモンド切削工具として使用されます。第3世代放射光の分光結晶としての使用も想定して、大型化・高品質化の研究が始まりました²⁾。現在では、 $10 \times 10 \times 1$ mm 程度の大きさまで成長させることができます。転位やひずみの問題も大分改善されてきたので、次世代の放射光では分光結晶の主流になる可能性があります。

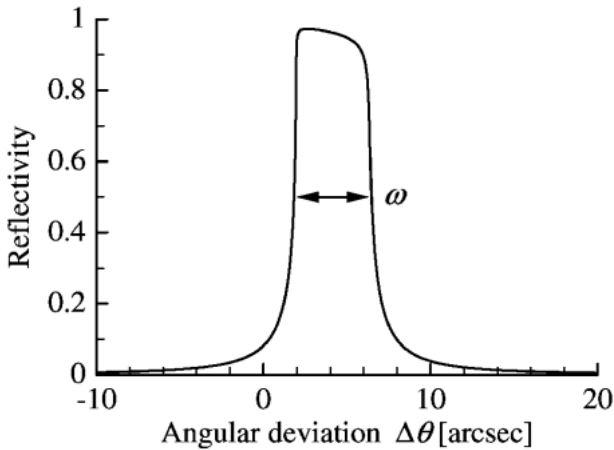


Fig. 5 Rocking curve of silicon 111 reflection for 1 Å x-rays.

5. 単色性

第3節では、結晶によるブラッグ反射を使って分光できることを説明しました。では、特定の波長を切り出したときの結晶の反射率はどのくらいでしょうか？ この問題に答えるには、かなり難解な「動力的回折理論」というものがようになります。この理論の特徴は、格子面による複数回の反射（多重散乱）を考慮していることです。興味のある方は文献3)を参照してください。

ここでは、具体例として、シリコン111反射を使って波長1 ÅのX線を取り出す場合を考えます。Fig. 4に示したブラッグ条件をもっと細かく見て行きます。まず、A-A'断面の反射率曲線はFig. 5のようになります。横軸Δθはブラッグ角θ_Bからの角度のずれです。反射の中心がブラッグ角から大きい方に微妙にずれています。これは結晶における屈折の影響です。結晶の屈折率は1より僅かに小さいので、結晶表面を通過したX線は屈折します。ブラッグ反射の説明では無視しましたが、角度の精密決定などの特別な理由がなければ、通常は補正する必要はありません。ブラッグ角9.18°に対して、屈折の影響は僅か4.15" = 0.00115°です。もうひとつの特徴は、全反射を起こす領域がω = 4.38" = 21.3 μradの幅をもっていることです。

Fig. 6は、Fig. 4のA-A'付近の□部分を拡大したものです。緑色の帯は全反射を起こす領域を示しています。ブラッグ条件を反映して傾いています。結晶は入射X線の中から、この帯の部分だけを抜き取るフィルターとして機能します。入射X線の波長-角度依存性をこの図に書き込んで、重なる部分が分光X線の波長-角度依存性となります。

現在の放射光では、光源から放出されるX線の波長広がりが多いので、単色性にはビームの角度発散φが主に効いてきます。Fig. 6上では水色で示した分布になります。取り出される波長広がりΔλとすれば、単色性は

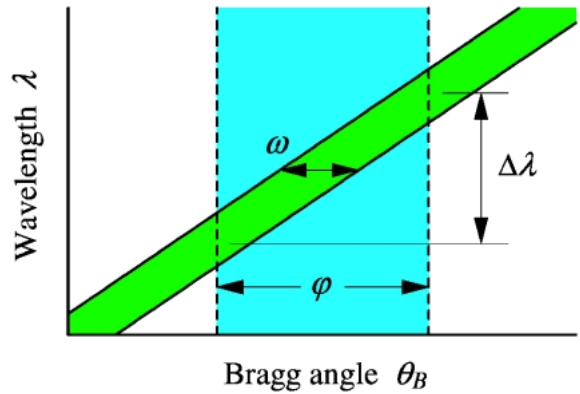


Fig. 6 Angular and wavelength dispersion of monochromatic x-rays.

$$\Delta\lambda/\lambda = \sqrt{\omega^2 + \phi^2} \cot \theta_B \quad (3)$$

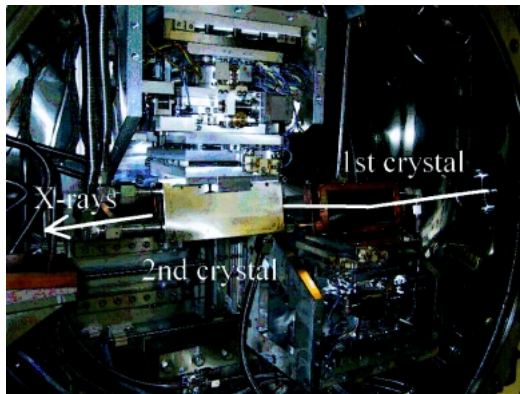
と与えられます。ωとφはrad単位で代入します。入射X線の角度分布が一様ではないので、便宜的に角度の2乗和の平方根を採っています。

では、φはどのように与えるのでしょうか。入射光の角度分布を決める要素は、(1)光源サイズと分光器の前に置かれたスリットで決まる幾何学的な角度発散、(2)光源の放射角度分布です。光源の角度発散が大きくて、幾何学的な角度発散が主要な要素になる場合を考えましょう。偏向電磁石ビームラインがこの典型例です。光源から20 m下流に開口1 mmのスリットを配置したとします。光源サイズがスリットの開口に比べて十分小さいとき、角度発散は1 [mm]/20 [m] = 50 [μrad]となります。シリコン111反射による1 ÅのX線の分光の例では、Δλ/λ = 3.4 × 10⁻⁴となります。大雑把に言って、標準的な分光器を通して得られるX線の単色性は10⁻⁴のオーダーです。

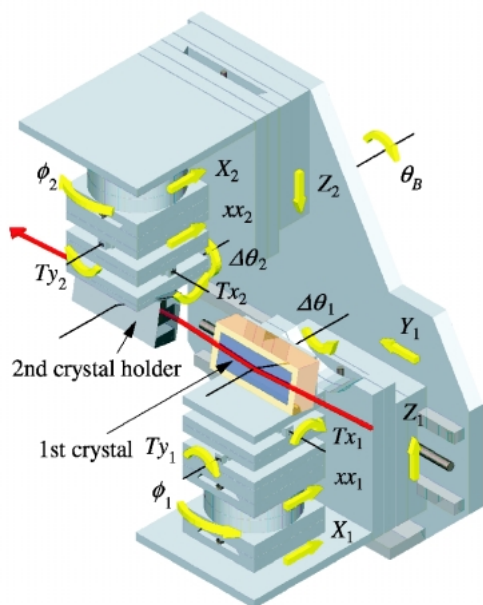
光源の放射角度分布による効果は挿入光源ビームラインで見られますが、その問題は単色性とどまらないので、最後にお話します。

6. 駆動機構

結晶を分光に使用するためには、結晶を取り付けて駆動する機械が必要です。Fig. 7にSPring-8で使用されている機械⁴⁾の写真(a)と模式図(b)を示します。結晶の表面があらぬ方向を向いていますが、今は気にしないでください。今までの説明では1個の結晶しか扱ってきませんでした。この図では結晶が2個取り付けられています。1個では何がいけないのでしょうか？ ブラッグ角を変えて波長を選択するたびに、X線の反射する方向が変わってしまいます。分光器の後方に置かれた実験装置一式をビームに合わせて移動するのはかなり不便です。同じ結晶をもうひとつ置いて逆向きに跳ねれば、分光X線の向きは入射X



(a)



(b)

Fig. 7 Mechanism and crystals of a beamline monochromator.

線に平行になります。多くの場合、機械の駆動機構に工夫を重ねて、波長によってビームの高さが変化しない様になります^{4,5)}。このために、X線ビームラインでは Fig. 1 のように機器が直線的に配置されるのです。

2結晶にしても、スループットや単色性はそれほど変化しません。第1結晶も第2結晶も波長と角度を切り出すフィルターとしての性能は同じです。全反射領域を重ねてやればよいのです。ただし、このためには、2個の結晶があたかもひと続きの結晶であるかのように調整する必要があります。写真の機械では、この目的のために、ブラッグ角の調整以外に14個の精密ステージが組み込まれています。

結晶の調整の中で最も精度が要求されるのは、2結晶の格子面を平行に維持することです。結晶の反射幅は数秒しかないわけですから、少なくとも $0.1'' = (1/36000)^\circ$ の精度で制御する必要があります。微小な角度の制御は、回転

中心から離れた場所を押すことによって行います。例えば、20 cm 離れた場所なら、 $0.1 \mu\text{m}$ 押し込めば、 $0.1''$ 変化します。

放射光ユーザーが所望の波長を選択するには、以下の手続を行います。

1. 2結晶を同時に回転させて希望のブラッグ角 θ_B にする
2. 第1結晶の角度 $\Delta\theta_1$ を微調整して、2結晶の格子面を平行にする

その他の自由度はビームラインの立ち上げや結晶の交換時など、初期の調整のみに使用されます。一度調整が済んだら、動かしてはいけません。

初期の調整には、結晶の角度のずれを修正して、波長を較正することも含まれます。 θ_B ステージを回してX線の波長を変化させながら、既知の物質（例えば単体の金属フォイル）の吸収スペクトルを測定します。波長のずれが求めれば、計算によって角度の補正値を求めることができます。この方法で、 1 \AA 付近で 10^{-4} \AA 程度の精度まで追込みます。行き過ぎた較正は手間隙がかかるだけです。分光されたX線には 10^{-4} \AA 程度の波長分散があることも忘れないでください。

ここで、実践的なトピックとして、高次光除去のテクニックであるディチューン (detune) について紹介します。シリコン111反射を使って波長 λ を選択したとしましょう。このとき、式(1)(2)によれば、波長 $\lambda/3$ のX線も333反射によって同じブラッグ角で抜けてきます。この余分なX線は高次光（この場合は3次光）と呼ばれ、実験によっては招かれざる客となることもあります。目的の波長が 1 \AA のとき、シリコン111反射の全反射幅は $4.38''$ 、3次光の全反射幅は $0.27''$ となります。したがって、2結晶が完全に平行な状態から $\Delta\theta_1$ を少し動かすと、3次光の強度は低下します。2結晶が平行なときの1次光と3次光の強度を共に100としましょう。 $\Delta\theta_1$ を $0.5''$ 移動させると、1次光は96に、3次光は5になります。 1 \AA のX線の強度も若干低下しますが、高次光の混入が重大な問題になるときにはよく使われるテクニックです。高次光の除去には反射鏡も使われます。反射鏡に関しては第7回をご覧ください。

駆動機構には幾つかの付加的な機能を加えることができます。反射面の切り替えをすることにより、利用可能な波長領域を拡大することができます。SPring-8の偏向電磁石ビームライン用の分光器では、シリコン111, 311, 511, 733反射の切り替えにより、原理的には波長で $2.85\text{--}0.07 \text{ \AA}$ (エネルギーで $4.35\text{--}178 \text{ keV}$) の範囲で使用することができます。また、2番目の結晶として薄い平板などを使用して、湾曲させる機能を付加すれば、集光が可能になります^{5,6)}。

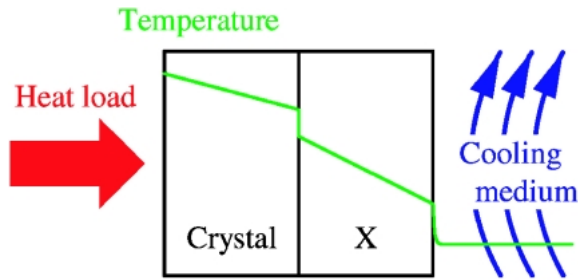


Fig. 8 Indirect cooling and temperature distribution.

7. 結晶の冷却

より優れた光源の開発は X 線強度の向上としてユーザーに多大なる恩恵を与えますが、一方で、分光結晶に対しては熱負荷の増大という好ましくない影響を与えています。この熱をいかにして取り除くかが分光器開発の主要なテーマのひとつです。

光源からの生の放射光は非常にたくさんの波長成分をもちますが、分光器を抜けてくるのは $\Delta\lambda/\lambda \sim 10^{-4}$ 程度の単色成分だけに限られます。放射光のパワーのほとんどが第 1 結晶の表面付近で熱に変わり、これが原因で結晶の温度の分布が不均一になります。結晶は熱膨張により温度分布に応じて体積を変化させようとするので、結晶内の原子の配列が狂います。その結果、格子面のゆがみや結晶の形状の変形を引き起こされます。このため、然るべき冷却をしなければ、分光された X 線の強度が低下したり、得られるビームに強度ムラができてしまいます。

では、分光器に入ってくる放射光のパワー密度はどのくらいでしょうか。Photon Factory の偏向電磁石ビームラインでは 0.06 W/mm^2 、SPring-8 の偏向電磁石ビームラインでは 1 W/mm^2 、SPring-8 のアンジュレータビームラインでは最大で 500 W/mm^2 です。ちなみに、代表的な発熱機器である家庭用ホットプレートの発熱密度は 0.02 W/mm^2 です。SPring-8 のアンジュレータビームラインでは特に強烈な熱負荷に曝されています。熱負荷の度合いに応じて冷却方法も変わってきます。

まず、Photon Factory の偏向電磁石ビームラインで使われる冷却方法を例にとって伝熱のお話をしましょう。Fig. 8 のように、シリコン結晶を何らかの物体 X (銅製の結晶ホルダーなど) を介して間接的に水冷します。結晶の側から熱が流入して十分時間が経過したときの温度分布は図中の緑色の実線のようにになります。結晶や物体の中では距離に比例して温度が低下しますが、結晶と物体、物体と冷媒(水)の界面では不連続な変化が起こります。一般に、冷媒の温度を基準にした結晶表面の温度差 ΔT と、入熱 Q (パワー密度に相当) の間には

$$\Delta T = RQ \quad (4)$$

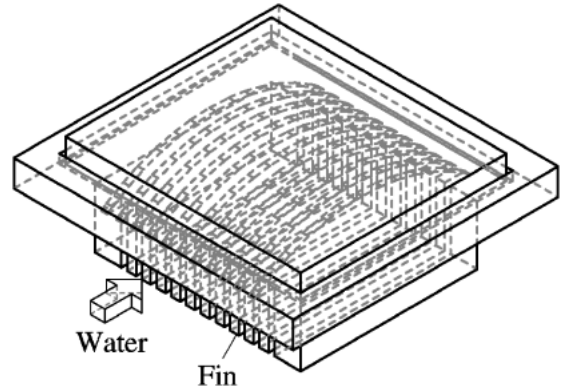


Fig. 9 Fin cooling.

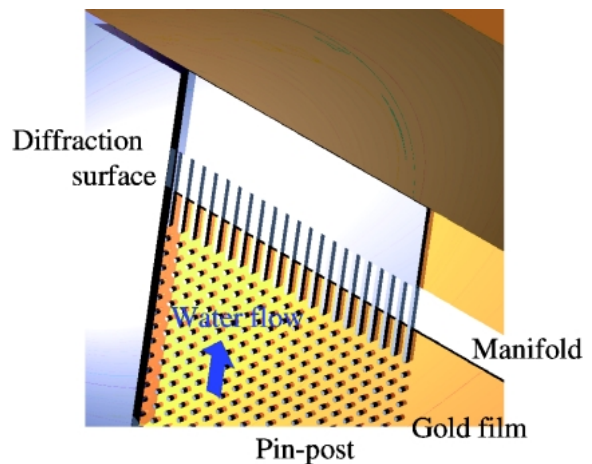


Fig. 10 Pin-post cooling.

という比例関係が成り立ちます。 Q を電流、 ΔT を電位差と見なせば、オームの法則と同じになります。 R は全体の熱抵抗で、熱の伝わりにくさを表しています。温度差を小さくすれば、熱変形の度合いは低下します。間接水冷方式は簡便な冷却法ですが、熱抵抗が大きいのが難点です。よりパワーのある光源に対しては熱抵抗を小さくしていく工夫が必要になります。

Photon Factory のウイグラービームラインや SPring-8 の偏向電磁石ビームラインでは、シリコン結晶の直接水冷方式が基本です。シリコン結晶に直接水を当てることで、間に挟まった物体による温度上昇を無くします。さらに、Fig. 9 のように冷却水路に多数のフィンを設置して熱の伝達経路を増やすことで、結晶と水の界面の不連続な温度変化を小さくすることができます。結晶表面のすぐ下を冷やすようにすれば、結晶内部での温度差も小さくなります。

500 W/mm^2 の熱負荷に対応するためには更に凝った冷却が必要になります。現在 3 種類の冷却方法が並存しています。1 つ目はシリコン結晶を液体窒素で間接冷却する方式です。シリコン結晶は低温になると熱が伝わりやすくなるので熱抵抗は減少します。また、低温では温度分布に

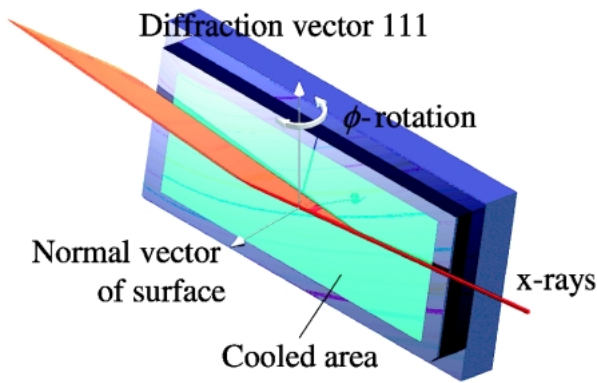


Fig. 11 Rotated-inclined geometry.

よる結晶の膨張の度合いが低下して、熱変形の影響が緩和されます。熱に対するシリコンの性質をうまく利用した方法と言えます。2つ目はダイヤモンド結晶を間接水冷する方式です。ダイヤモンドは室温でも熱が極めて伝わりやすい物質です。この2つの冷却方式は、Photon FactoryやPF-AR (Advanced Ring for Pulse X-rays) のアンジュレータビームラインでも採用されています。

3つ目は水冷ピンポスト結晶と呼ばれるものです。これはフィンによる水冷のコンセプトを更に推し進めたものです。フィンに変わって、Fig. 10のように、水路には直径0.2 mm程度の円柱を密に並べた構造（ピンポスト構造）を作ります。冷却水はピンに邪魔されて乱流になり、冷却効率を高めることができます。X線の照射面と冷却面の間隔を0.65 mmまで小さくして、熱抵抗をできるだけ減らします。この結晶は単一の結晶から削り出して製作することができないので、ピンポストと導入水路をもつ2種類の結晶を製作して、金箔を挟んで貼り合わせています。実は、これだけでは500 W/mm²に対応できません。Fig. 11のように結晶表面と回折格子面をわざと傾けておくことによって照射面積を拡大して、結晶表面上の実効的な熱負荷を約1/60に緩和します。これが、Fig. 7で結晶があさったの方向を向いていた理由です。

8. X線分光器の利用

X線領域の実験のほとんどは、X線を探針として物質の性質を調べることを目的としています。物質を通り抜けることによって、X線の振幅と位相が変化します。また、物質によってX線の散乱や回折が起こります。実験の目標はいろいろですが、実験の手法は振幅・位相の変化の検出と散乱・回折の観察がほとんどです。そのような手法に分光器がどのように関わっているか、数例を挙げておきます。

XAFS (X線吸収微細構造) の測定は、X線分光器をまさしく分光 (スペクトロスコピー) の用途に用いている例

です。分光器のブラッグ角を変えてX線の波長を変化させながら、物質の吸収スペクトルを測定します。このスペクトルから、注目している原子の酸化数や、原子の局所的配列に関する情報を引き出すことができます。第9回で説明される移相子を用いてX線の偏光の制御も加えれば、この分光法は物質の磁性を解析する強力な手段となります。

既に説明したように結晶はブラッグ反射を起こします。分光器で単色化したX線を、今度は未知の構造の結晶に入射させたとしましょう。結晶を様々な方向に回転させてブラッグ反射を起こす条件を探し求めれば、結晶構造を解析することができます。

X線の最も古い利用法は、物体を透過したX線の強度分布の撮影、いわゆるレントゲン撮影です。骨などの重い元素でできている場所でX線が吸収されて、ビームにコントラストが付きます。軽元素でできた物体では吸収はあまり起こりませんが、X線の位相は変化します。分光器で単色化されたX線を用いて、位相の変化をビームの強弱に変換するイメージング法が開発されています。レンズ (第8回参照) を使えば拡大投影も可能です。

用途によっては、 $\Delta\lambda/\lambda \sim 10^{-4}$ 程度では単色性が不足していることがあります。核共鳴散乱実験やフォノン解析のように極めて高度な単色性が要求される場面においても、熱対策の観点から、本稿の分光器は第1段目の分光器として使用され、その後方に高分解能分光器が設置されます。

利用方法によって、分光器に要求される性能は少しずつ違ってきます。イメージングには強度ムラのないビームの方が有利です。スペクトロスコピーでは強度ムラにそれほど敏感になる必要はありませんが、エネルギーの安定性には十分に気を使います。また、非常に現実的な問題として、コストパフォーマンスも考慮しなければなりません。本稿で結晶や冷却方式には複数の選択肢があることを示しましたが、それぞれ異なる長所もっています。ビームラインの利用目的に合わせて、異なった選択がなされます。

9. おわりに

挿入光源のビームラインでは、光源のもつ放射角度分布が無視できないことがあります。特にアンジュレータは、その種類によりますが、独特な放射パターンをもちます。挿入光源にも、磁石列の間隙 (gap) などの波長を選択するパラメータがあります。分光器で選択した波長に対して適切なパラメータを選ばないと、分光X線は不思議な強度分布をもつこととなります。例えば、磁石列の間隙が適正值から少しだけずれていると、2個に分裂したビームになることがあります。大きくずれた場合には、光軸上の強度が低下して、周りの強度の方が大きくなることもあります。また、光源の低エミッタンス化で、放射角度分布の影

響が幾何学的角度発散の影響を上回ることもあります。単色性が 10^{-4} 程度であることに変わりはないですが、詳細な計算は難しくなっています。

ここまでX線分光器について説明してきましたが、少しでも装置の概要を分かっていただけでしょうか。利用するX線をもっと深く理解するには、「ビームライン光学技術シリーズ」という枠組みを外れますが、光源についてのある程度の知識も必要です。一番単純な放射光は偏向電磁石からのX線です。それでは物足りなくなると、電子を蛇行させてより強い放射光を取り出すようになりました。電子に複雑な挙動をさせる分、上で示したようなクセが生じます。分光器はこの光源の性質を取り除くことはできません。次世代放射光である自由電子レーザーやエネルギー回収型ライナックのように優れた光源はもっと個性的になるでしょう。光源や光学素子を目的に合わせて選択することが、実験を成功させるための要素として、ますます重要になっていくでしょう。

お願い

本シリーズでは、初心者ユーザーが陥りやすい誤りやビームライン担当者の貴重な経験談を募集しております。最終回でご紹介したいと考えております。また、本シリーズに関してご意見・ご要望がございましたら編集担当 (SPring-8 JASRI 大橋治彦/hohashi@spring8.or.jp, KEK-PF 平野馨一/keiichi.hirano@kek.jp) までどうぞお便りください。

参考文献

- 1) 志村史夫：“半導体シリコン結晶工学” (丸善, 1993).
- 2) H. Sumiya, N. Toda, Y. Nishibayashi and S. Satoh: *J. Cryst. Growth* **178**, 485 (1997).
- 3) 三宅静雄：“初等固体物理講座 動力学的回折理論—結晶内の波動のふるまい” 固体物理 Vol. 8 No. 9 (1973)–Vol. 9 No. 6 (1974); 加藤範夫：“X線回折と構造評価” (朝倉書店, 1995).
- 4) M. Yabashi *et al.*: *Proc. SPIE* **3773**, 2 (1999).
- 5) T. Matsushita, T. Ishikawa and H. Oyanagi: *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **246**, 377 (1986).
- 6) Y. Yoneda, N. Matsumoto, Y. Furukawa and T. Ishikawa: *AIP. Conf. Proc.* **708**, 720 (2004).