

不等刻線間隔回折格子を用いた高分解能の可変偏角斜入射分光器

雨宮健太 東京大学大学院理学系研究科 〒113-0033 東京都文京区本郷 7-3-1
 太田俊明 東京大学大学院理学系研究科 〒113-0033 東京都文京区本郷 7-3-1

要旨 不等刻線間隔平面回折格子を用いた、Monk-Gillieson マウント（回折格子に収束光を照射する方式）の可変偏角高分解能斜入射分光器に対するデザイン手法を紹介する。この手法を用いて典型的なアンジュレータ光源ビームラインをデザインしたところ、適切に偏角を変えることで広いエネルギー範囲にわたって光源サイズもしくは光学素子のスロープエラーによって決まる分解能の限界が達成できることが明らかになった。さらに、偏角を固定して光エネルギーを掃引した場合にも、比較的高い分解能が保たれることがわかった。また、このデザイン手法は偏向電磁石のような高エミッタンス光源でも有効であることが示された。

1. はじめに

主に軟 X 線領域をカバーするいわゆる斜入射分光器は、これまでに数多くのデザインが考案されてきたが、中でも平面回折格子に収束光を照射する方式（Monk-Gillieson マウント^{1,2)}と呼ばれている）に不等刻線間隔回折格子（varied line spacing grating; VLSG）を組み込んだ光学系^{3,4)}は、回折格子の回転だけで比較的広いエネルギー範囲で高いエネルギー分解能が得られることから、近年多くの放射光施設で採用されて成果をあげている。ところが、回折格子の回転だけでエネルギー掃引を行えるという利点から、このタイプ分光器はこれまで固定偏角で設計されており、広いエネルギー範囲をカバーする場合には回折格子、あるいはその上流の収束鏡を切り替える必要がある。これはまた、全エネルギー範囲にわたって高次光を抑制するのが難しいことも意味する。

一方、Monk-Gillieson 型以外の分光器に目を向ければ可変偏角の分光器も数多く設計されており^{5,6)}、広いエネルギー範囲を一度に掃引することを可能にしている。ところがこれらの分光器においては、偏角を正確に制御しないと設計どおりのエネルギー分解能が得られないという問題がある。したがって、例えば高次光を有効に除去できるような偏角にするとエネルギー分解能が大幅に低下する、ということもしばしば起こる。この問題は、最近開発された平行光照射型の分光器⁷⁾によって解決された。これは、光源からの発散光を前置鏡で平行化した後、偏角を決めるための可動平面鏡で反射させてから回折格子に照射し、回折光を後置鏡で集光するものである。この場合は全ての条件において収差が無いために上述のような問題は生じない。

しかしながら、確かにアンジュレータのような低エミッタンス光源の場合には前置鏡と後置鏡はともに円筒鏡で十分だが、これを偏向電磁石のような高エミッタンス光源に適用すると、放物面鏡を用いないと高分解能は得られない。また光学素子の数も多くなり、それだけ調製等が困難になってくる。

それでは、Monk-Gillieson 型 VLSG 分光器に可変偏角を組み合わせたらどうだろうか。実はその可能性は以前から指摘されており^{8,9)}、いくつかのデザイン例も示されている。しかし、残念ながら光学系の設計には利得関数の最適化という若干ブラックボックス的な方法が採用されている。また、理想的な偏角における性能は評価されているものの、そこからずれたときにどれだけ性能が低下するかといった、現実には極めて重要な問題については調べられていない。そこで本稿では、可変偏角の Monk-Gillieson 型 VLSG 分光器について、光路関数を用いた比較の見通しのきく設計方法を提案するとともに、典型的なアンジュレータおよび偏向電磁石光源を用いた場合のエネルギー分解能を様々な偏角に対して見積もることによって、このタイプの分光器が現実的にどれほど有用であるかを評価したい¹⁰⁾。

2. 光路関数を用いた分光器の設計手順

分光器の模式図を Fig. 1(a) に示す。点 A を光源とする白色光は短手円筒鏡 FM（入射角 η_A ）によって収束光となり、偏角を制御するための平面鏡 PM を経て不等刻線間隔平面回折格子 G に照射される。回折光はそのまま射出スリット B へと集光され、単色化される。なお、FM

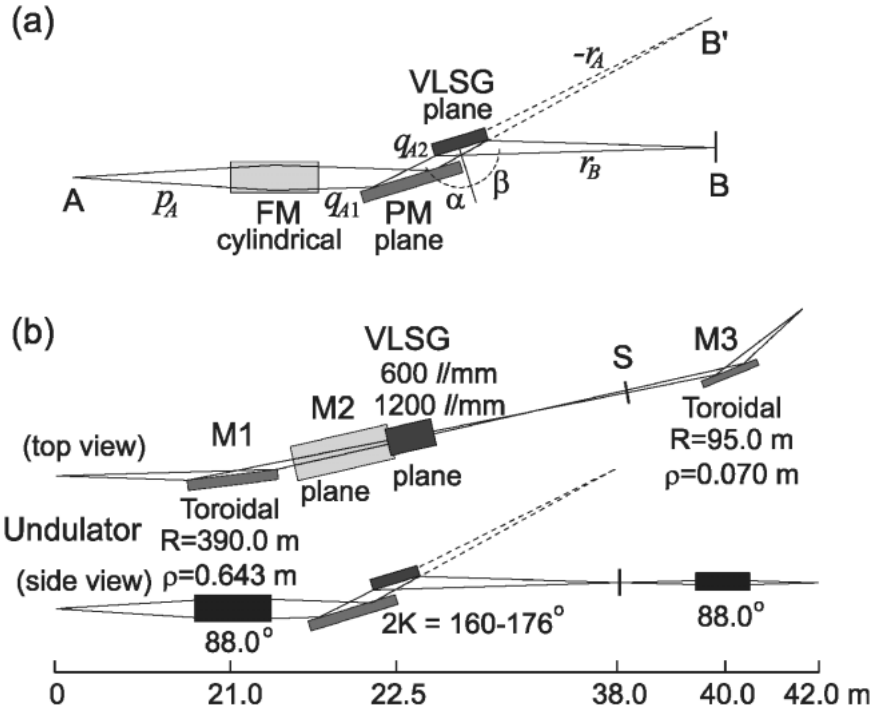


Fig. 1 Schematic diagram of a variable included angle Monk-Gillieson mounting monochromator with a varied line spacing plane grating (a) and a design example of a soft x-ray beamline with an undulator source (b).

は sagittal 集光条件で用いているが、これはアンジュレータのような低エミッタンス光源を念頭においているため、後に示すような偏向電磁石光源の場合には meridional 集光とするのが適当であろう。各光学素子間の距離や角度は図に示した通りに定義されるが、その他に FM によって収束された光の（仮想的な）焦点を B' とし、G から B' までの距離を $-r_A$ ($r_A < 0$) とする。ここで r_A が負の値になっているのは、B' が回折格子の背面に位置するからである。

さて、VLSG の刻線間隔については色々な定義の仕方があるが、ここではまず、中心から n 本目の溝が中心から距離 w の位置にある (n, w は符号も含み、光が入射してくる方向を正とする) として以下のように定義する。

$$n = n_{10}w + n_{20}w^2/2 + n_{30}w^3/2 + n_{40}w^4/8 + \dots \quad (1)$$

したがって n_{10} が VLSG のパラメータとなる。すると分光器全体に対する (FM, PM も含めた) 光路関数 F は係数 M_{ij} を用いて以下のように定義される。

$$F = p_A + q_A + r_B + M_{10}w + (M_{20}w^2 + M_{02}l^2 + M_{30}w^3 + M_{12}wl^2)/2 + (M_{40}w^4 + M_{22}w^2l^2 + M_{04}l^4)/8 + \dots + [n_{10}w + n_{20}w^2/2 + n_{30}w^3/2 + n_{40}w^4/8 + \dots]m\lambda \quad (2)$$

ここで、 $q_A = q_{A1} + q_{A2}$ 、 m は回折次数 (+1 とする)、 λ は

X 線の波長、そして l は VLSG 上における光の進行方向と垂直方向の位置である。なお、実際には q_A はわずかながらエネルギーに依存するが、無視できるほど小さいので以後定数とする。係数 M_{ij} を求めるのはいささか難しいが、文献11)と同じ手法を用いることで以下のように計算できる。

$$\begin{aligned} M_{10} &= -\sin \alpha - \sin \beta \\ M_{20} &= \cos^2 \alpha / r_A + \cos^2 \beta / r_B \\ M_{30} &= \sin \alpha \cos^2 \alpha / r_A^2 + \sin \beta \cos^2 \beta / r_B^2 \quad (\text{sagittal focusing}) \\ &\quad \sin \alpha \cos^2 \alpha / r_A^2 + \sin \beta \cos^2 \beta / r_B^2 \\ &\quad - 2(A_{10})_A^2 K_A / R_A \quad (\text{meridional focusing}) \\ &\dots \end{aligned} \quad (3)$$

ここで、

$$\begin{aligned} r_A &= q_A + (1/p_A - 2 \cos \eta_A / \rho_A)^{-1} \quad (\text{sagittal focusing}) \\ &\quad q_A + (1/p_A - 2 \sec \eta_A / R_A)^{-1} \quad (\text{meridional focusing}) \\ (A_{10})_A &= -\cos \alpha / (A_A q_A \cos \eta_A) \\ A_A &= 1/p_A + 1/q_A - 2 \sec \eta_A / R_A \\ K_A &= \cos \alpha / r_A - (A_{10})_A / R_A \end{aligned} \quad (4)$$

であり、 R_A と ρ_A はそれぞれ、meridional 集光と sagittal 集光の場合における FM の曲率半径である。以下、求めた光路関数を用いて光学系の最適化を行う手順を示す。

最初に 2 つのエネルギー (E_1, E_2) を選び、それぞれに

対応する偏角 ($2K$) を $2K_1, 2K_2$ とする。なお、これらの値 (E_1, E_2, K_1, K_2) および回折格子中心における刻線密度 n_{10} は、分光器がカバーするエネルギー範囲や必要な分解能、強度などに応じて自由に選ぶことができる。次に、 r_A (R_A または ρ_A によって決まる)、および n_{20} を以下の式を満たすように決定する。

$$\begin{aligned} M_{20} + n_{20}m\lambda_1 &= 0 \quad (2K = 2K_1) \\ M_{20} + n_{20}m\lambda_2 &= 0 \quad (2K = 2K_2) \end{aligned} \quad (5)$$

ただし、 λ_1, λ_2 はそれぞれ E_1, E_2 に対応する波長である。これは、これらのエネルギーにおいて回折光が出射スリットに焦点を結ぶ (defocus 収差が消える) という条件である。他のエネルギー (波長 λ) については、(3)式を用いながら以下の式を解くことによって、それぞれのエネルギーに対する最適な偏角 $2K$ を求めることが出来る。

$$M_{20} + n_{20}m\lambda = 0 \quad (6)$$

つまり、偏角を適切に変えることによって全てのエネルギーにおいて defocus 収差を消すということになる。最後に n_{30}, n_{40} については、適当なエネルギー E_3, E_4 を設定し、以下の式を満たすように決定する。

$$\begin{aligned} M_{30} + n_{30}m\lambda_3 &= 0 \\ M_{40} + n_{40}m\lambda_4 &= 0 \end{aligned} \quad (7)$$

ここで、 λ_3, λ_4 はそれぞれ E_3, E_4 に対応する波長である。

3. ビームラインの設計例とエネルギー分解能の評価

3.1 アンジュレータ光源

前節で述べた設計手順が有効に機能することを確認するために、まず典型的なアンジュレータ光源を用いたビームラインを設計し、光線追跡 (ray trace) 法によってエネルギー分解能の評価を行う。ビームラインの模式図を Fig. 1(b) に示すが、集光鏡 (M1) がトロイダル鏡となっていること (水平方向の集光を兼ねるため) と、試料位置への集光のための後置鏡 M3 (当然、分解能には影響しない) を除いては Fig. 1(a) と同じ構成である。この例ではまず 600 l/mm の回折格子に対して $E_1 = 50 \text{ eV}$, $K_1 = 164^\circ$, $E_2 = 500 \text{ eV}$, $K_2 = 174^\circ$, $E_3 = E_4 = 100 \text{ eV}$ として設計する。なお、後に便利なので VLSG の刻線間隔を刻線密度 N で表しておく。

$$N = dn/dw = N_0(1 + a_1w + a_2w^2 + a_3w^3 + \dots) \quad (8)$$

したがって、 a_i が不等刻線間隔のパラメータとなり、 N_0

($= n_{10}$) は回折格子中心における刻線密度 (ここでは 600 mm^{-1}) である。最適化されたパラメータは、 $a_1 = -1.2630 \times 10^{-4} \text{ mm}^{-1}$, $a_2 = 1.2 \times 10^{-8} \text{ mm}^{-2}$, $a_3 = -1.7 \times 10^{-12} \text{ mm}^{-3}$ (それぞれ $n_{20} = -7.5780 \times 10^{-2} \text{ mm}^{-2}$, $n_{30} = 4.7 \times 10^{-6} \text{ mm}^{-3}$, $n_{40} = -2.0 \times 10^{-9} \text{ mm}^{-4}$ に対応) となる。また、M1 の (sagittal 方向の) 曲率半径は $\rho_A = 0.643 \text{ m}$ で、 $r_A = -14.899 \text{ m}$ に対応する。もう一枚の回折格子 (1200 l/mm) についても同様の最適化を行うことも可能であるが、 $\rho_A(r_A)$ はすでに決まっているので、自由度は少なくなる。最も簡単なのは (8) 式において単純に $N_0 = 1200 \text{ mm}^{-1}$ とおいてしまい、 a_1, a_2, a_3 はそのままにする方法であろう。これは結局 E_1 から E_4 を全て $N_0 = 600 \text{ mm}^{-1}$ の場合の 2 倍にしたことに相当する (K_1, K_2 はそのまま)。

このように設計したビームラインに対して見積もったエネルギー分解能を Fig. 2 に示す。アンジュレータの長さは 4.5 m とし、電子ビームのパラメータは $\sigma_x = 350 \mu\text{m}$, $\sigma_y = 20 \mu\text{m}$, $\sigma'_x = 20 \mu\text{rad}$, $\sigma'_y = 5 \mu\text{rad}$ とした。なお、光線追跡法を用いたエネルギー分解能の見積もり方については文献 10, 12) を参照されたい。得られた分解能は光源のサイズで決まる分解能にほぼ一致しており、収差の影響はほとんどないことがわかる。また、図中には参考として VLSG と M2 の形状誤差 (0.1 秒とした) による分解能の限界を示してある。平面の光学素子に対して 0.1 秒というのは現在では十分達成できる値であるし、将来的にはもっと良くなることも考えられるので、光線追跡には形状誤差の影響を含めていない。なお、M1 は sagittal 集光条件で使用しているため、形状誤差の影響は VLSG や M2 に比べてはるかに小さい。

ここまでは各エネルギーにおいて偏角を適切に制御した場合の性能を示したが、実際にはその制御は必ずしも容易ではなく、さらに、高いエネルギー安定性 (精度) が求められる場合には回転軸は一つであることが望ましい。そこで偏角をある値に固定して回折格子の回転のみでエネルギー掃引を行った場合のエネルギー分解能を Fig. 3 に示す。驚くべきことに、数百 eV にわたって比較的高い分解能を維持できることがわかり、この分光器の最も重要な利点のひとつであると言えよう。これは出射スリット位置における焦点面が回折光の進行方向とほぼ垂直になっているためであり、実は Monk-Gillieson 型 VLSG 分光器 (定偏角タイプ) の特長として以前から知られていたのであるが、今回のデザインはその特長を生かしつつ可変偏角へと発展させてエネルギー範囲を広げたものと言えよう。Fig. 4 にはエネルギー分解能の等高線図を示したが、考え得るほぼすべての条件において 2000 程度以上の実用的な分解能が得られることがわかる。また、Fig. 3 には defocus 収差や光源サイズによって決まる分解能も併せて示した。全体のエネルギー分解能は、ほぼこの二つの寄与で説明できる。

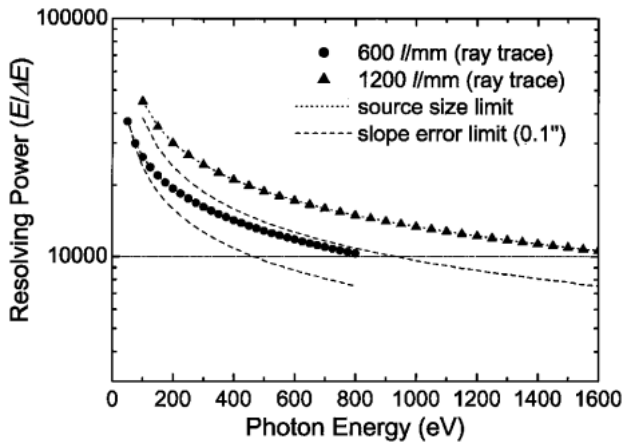


Fig. 2 Resolving power, $E/\Delta E$, for 600 (circles) and 1200-l/mm (triangles) gratings estimated by the ray-trace method, together with the source-size (dotted lines) and slope-error (dashed lines) limited resolving powers. The included angle is determined by solving eq. (6) at each photon energy.

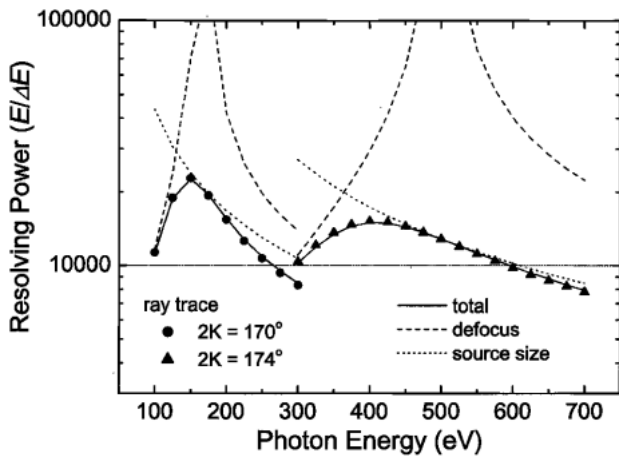


Fig. 3 Resolving power, $E/\Delta E$, for a 600-l/mm grating with fixed included angles of 170° (circles) and 174° (triangles), together with the defocus (dashed lines) and source-size (dotted lines) limited resolving powers. The total of the source-size and aberration (defocus, coma and spherical) contributions is also plotted (solid lines).

3.2 偏向電磁石光源

前節で述べた利点, すなわち偏角固定でもそれなりの分解能が得られるという点は, 発散角の大きい (つまり収差

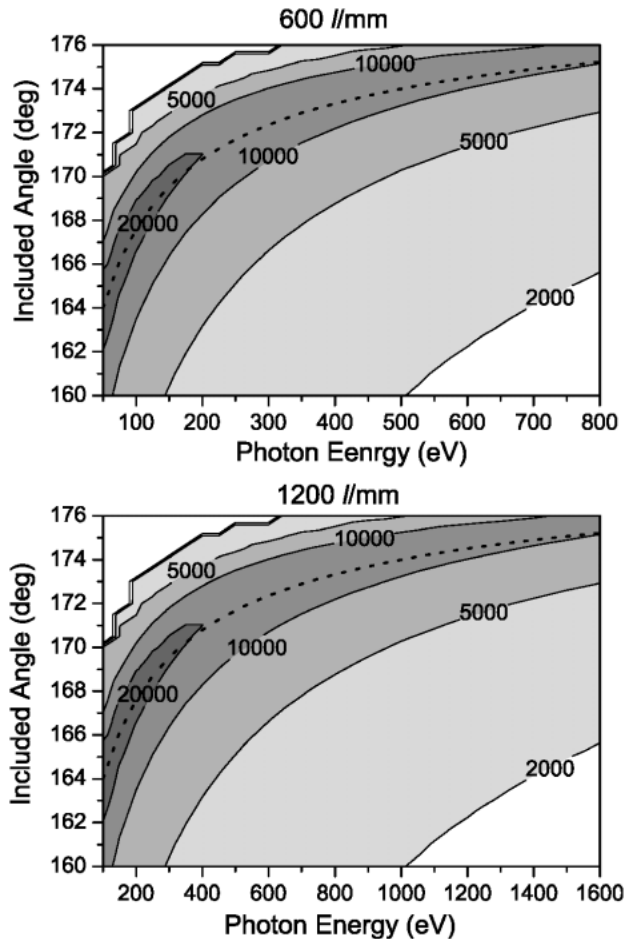


Fig. 4 Contour plot for the total of the source-size and aberration (defocus, coma and spherical) limited resolving powers as a function of photon energy and included angle for 600 (top) and 1200-l/mm (bottom) gratings. The defocus aberration vanishes on the dotted line, which represents the ideal included angle.

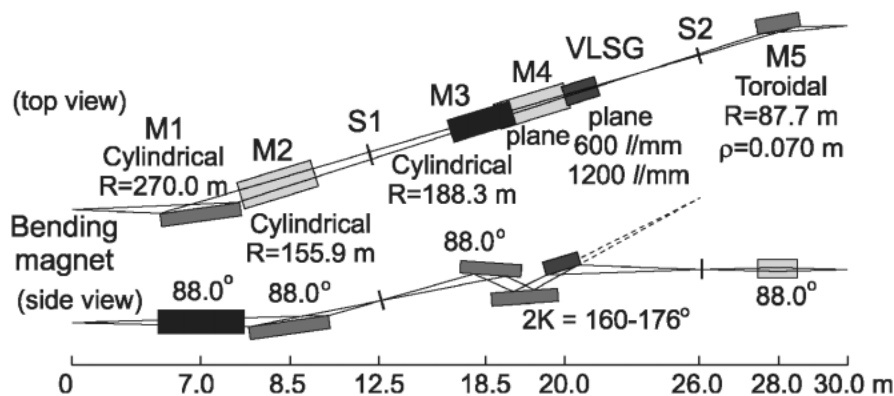


Fig. 5 Schematic layout of a design example with a bending magnet source.

の影響の大きい) 光源の場合にどれほど維持されるのであろうか。そこで本節では Fig. 5 に示すような偏向電磁石光源のビームラインを設計し、分解能の評価を行う。なお、ほとんどの偏向電磁石ビームラインがそうであるように、入射スリット (S1) を用いて仮想的な光源サイズを制御できるようにしている。前節と全く同じく $E_1=50$ eV, $K_1=164^\circ$, $E_2=500$ eV, $K_2=174^\circ$, $E_3=E_4=100$ eV として最適化を行うと、その結果は $a_1 = -3.2627 \times 10^{-4} \text{ mm}^{-1}$, $a_2 = 9.4 \times 10^{-8} \text{ mm}^{-2}$, $a_3 = -4.2 \times 10^{-12} \text{ mm}^{-3}$, $R_A = 188.4$

m ($r_A = -5.767$ m) となる。このビームラインに対して、前節と同様にして光線追跡法を用いて見積もった分解能を Fig. 6 に示す。電子ビームのパラメータはフォトンファクトリーとほぼ同じく、 $\sigma_x = 350 \mu\text{m}$, $\sigma_y = 75 \mu\text{m}$, $\sigma'_x = 200 \mu\text{rad}$, $\sigma'_y = 20 \mu\text{rad}$ とした。また、入射スリット開口は $20 \mu\text{m}$ としたため、実際に分光器に入る光量は 20% 程度である。これは決して非現実的な値ではないし、収差の影響を明らかにするためにはスリット開口は小さいほうが良い。図から明らかなように、理想的な偏角の場合に高分解能が得られるだけでなく、偏角固定の場合でもかなり広いエネルギー範囲にわたって 1000 以上の分解能が得られることがわかる。

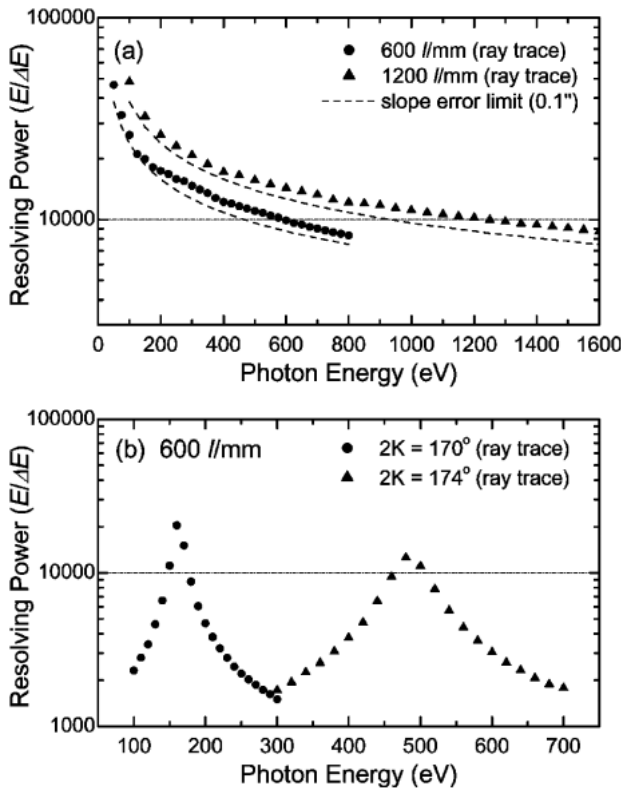


Fig. 6 Resolving power, $E/\Delta E$, for a bending magnet beamline with the ideal (a) and fixed (b) included angles. The entrance slit opening was assumed to be $20 \mu\text{m}$. The slope-error limited resolving power (dashed lines) is also plotted in (a).

4. 回折格子に発散光を照射した場合との比較

最後に、Monk-Gillieson マウントを採用せずに、VLSG に発散光を照射した場合⁶⁾について述べる。ビームラインとしては Fig. 7 に示すように M1 がトロイダル鏡から (長手) 円筒鏡になったものであり、M1 は水平方向の集光のみを担っている。そのために最適化に使用できるパラメータが一つ減ることになるので、まず 500 eV, 偏角 174° で defocus 収差が消えるように a_1 を決め (600 l/mm の場合), その他のエネルギーでは偏角 $2K$ を適切に変えることで defocus 収差が消えるようにする。続いて 100 eV ($2K = 166.54^\circ$) において a_2, a_3 を最適化する。得られたパラメータは $a_1 = -2.3535 \times 10^{-4} \text{ mm}^{-1}$, $a_2 = 1.5 \times 10^{-8} \text{ mm}^{-2}$, $a_3 = -1.7 \times 10^{-12} \text{ mm}^{-3}$ である。1200 l/mm の VLSG については先ほどと同様, a_1, a_2, a_3 は変えずに N_0 のみを 1200 mm^{-1} とする。

このビームラインに対してエネルギー分解能を見積もった結果を Fig. 8 に示す。偏角を適切に制御した場合 (a) には Monk-Gillieson マウントと同程度の分解能が得られるが、(b) から明らかなように少しでも理想の偏角からずれると分解能は著しく低下する。これは設計通りの分解能を得るためには偏角を極めて正確に、エネルギーと同期して

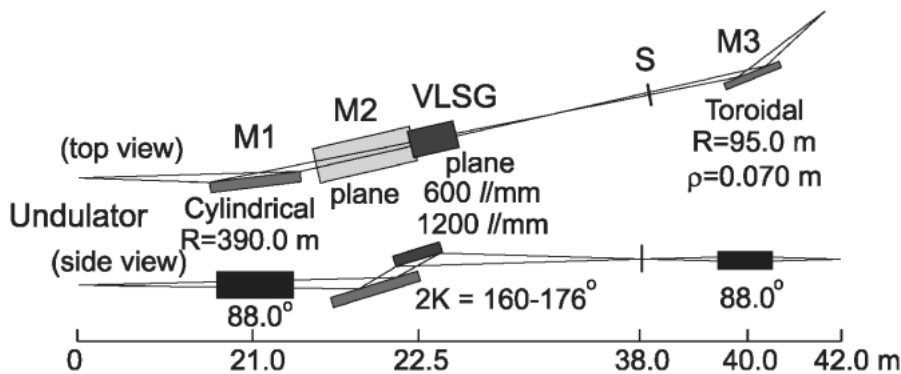


Fig. 7 Schematic layout of an undulator beamline with diverging illumination on VLS gratings.

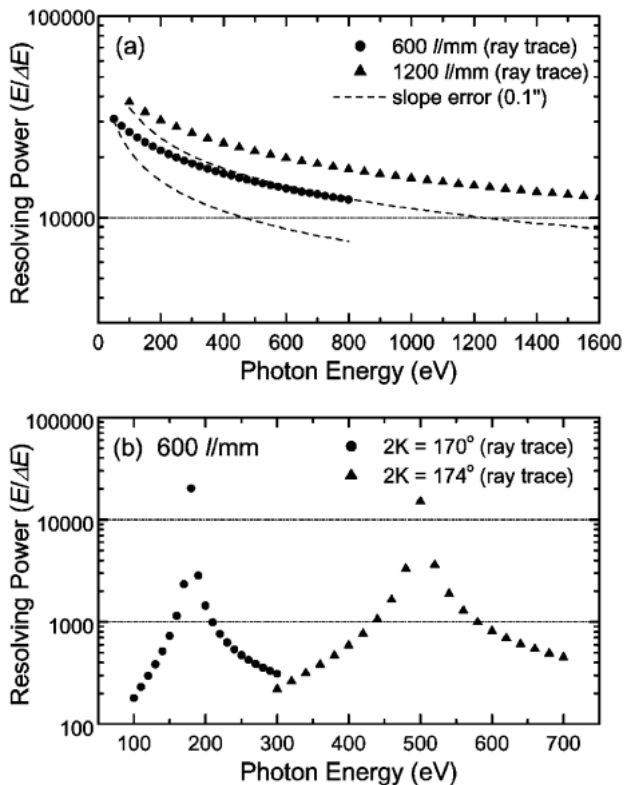


Fig. 8 Resolving power, $E/\Delta E$, for an undulator beamline with diverging illumination on VLS gratings with the ideal (a) and fixed (b) included angles. The slope-error limited resolving power (dashed lines) is also plotted in (a).

変化させる必要があることを意味する。ここで、光源は3.1節と全く同じアンジュレータであることを強調しておきたい。さらに驚くべきことには、この分解能の低下はFig. 6(b)に示した偏向電磁石光源と Monk-Gillieson マウントの組み合わせよりもはるかに深刻である。VLSG の上流のミラーで発散光を収束光にすることがいかに重要であるかがわかる。

5. 終わりに

以上のいくつかの例から、可変偏角の Monk-Gillieson

型 VLSG 分光器が、広いエネルギー範囲にわたって高分解能を達成できるだけでなく、偏角を固定して VLSG の回転だけでエネルギー掃引を行っても比較的高い分解能を維持できることが理解頂けたと思う。また、低エミッタンスのアンジュレータ光源のみならず、比較的高エミッタンスの偏向電磁石光源においても、この利点がかかり保たれることから、適用範囲の広いデザインであると言えよう。さらに、ここで提案した設計手順は、2つのエネルギー (E_1, E_2) とそれぞれに対する偏角 ($2K_1, 2K_2$) をほぼ自由に選択することが出来るため、ビームライン利用上の要請に応じて柔軟な設計が可能である点も強調したい。なお、このタイプのビームラインの第一号機がフォトンファクトリーの BL-28 に建設され、2004 年秋から立ち上げ・調整を行っている。

謝辞

分光器の設計に関して、柳下明教授 (物質構造科学研究所)、小池雅人博士 (日本原子力研究所)、鈴木章二助教授 (東北大学) らから重要なコメントをいくつも頂いた。この場を借りてお礼申し上げたい。

参考文献

- 1) G. S. Monk: *J. Opt. Soc. Am.* **17**, 258 (1928).
- 2) A. H. C. P. Gillieson: *J. Sci. Instrum.* **26**, 335 (1949).
- 3) M. C. Hettrick: *Nucl. Instrum. Method A* **266**, 404 (1988).
- 4) M. C. Hettrick, J. H. Underwood, P. J. Batson and M. J. Eckart: *Appl. Opt.* **27**, 200 (1988).
- 5) H. Petersen: *Opt. Commun.* **40**, 402 (1982).
- 6) M. Itou, T. Harada and T. Kita: *Appl. Opt.* **28**, 146 (1989).
- 7) R. Follath and F. Senf: *Nucl. Instrum. Method, A* **390**, 388 (1997).
- 8) M. Koike and T. Namioka: *Rev. Sci. Instrum.* **66**, 2144 (1995).
- 9) M. Koike: US patent No. 5,528,364 (1996).
- 10) K. Amemiya and T. Ohta: *J. Synchrotron Rad.* **11**, 171 (2004).
- 11) T. Namioka and M. Koike: *Appl. Opt.* **34**, 2180 (1995).
- 12) K. Amemiya, H. Kondoh, T. Yokoyama and T. Ohta: *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **124**, 151 (2002).

● 著者紹介 ●



雨宮健太

東京大学大学院理学系研究科化学専攻・助手

E-mail: amemiya@chem.s.u-tokyo.ac.jp

専門：放射光科学，表面磁性，表面化学

【略歴】

1999年に東京大学大学院理学系研究科博士課程中退，同研究科附属スペクトル科学研究センター助手。2000年に博士（理学）取得，2002年より現職。卒業研究から現在にかけてフォトンファクトリーにあるいくつかの軟X線ビームラインの改良・建設を行い，それらを用いて表面化学，表面磁性の研究を行っている。現在は主に「深さ分解XMCD法」の開発と応用に従事。



太田俊明

東京大学大学院理学系研究科化学専攻・教授

E-mail: ohta@chem.s.u-tokyo.ac.jp

専門：物性化学，表面化学

【略歴】

1971年に東京大学大学院理学系研究科博士課程修了（理学博士）。東京大学理学部助手，高エネルギー物理学研究所助教授，広島大学理学部教授を経て1992年より現職。その間，1978-1979年に米国スタンフォード大学客員研究員。

High-resolution variable included angle grazing-incidence monochromator with a varied line spacing grating

Kenta AMEMIYA Graduate School of Science, The University of Tokyo 7-3-1 Hongo, Bunkyo, Tokyo 113-0033, Japan

Toshiaki OHTA Graduate School of Science, The University of Tokyo 7-3-1 Hongo, Bunkyo, Tokyo 113-0033, Japan

Abstract A design concept is presented for a high-resolution variable included angle grazing-incidence monochromator with a varied line spacing plane grating, in which the grating is illuminated by converging X-rays (Monk-Gillieson mounting). A design example with a typical undulator source revealed that the source-size or slope-error limited resolution is achieved in a wide energy range by properly altering the included angle. Moreover, relatively high resolution is maintained even if one scans the photon energy with a fixed included angle. It was also demonstrated that the present design concept is valid even for a high-emittance bending magnet source.