トピックス

X 線コヒーレンスを扱うための完全結晶 X 線光学

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
石川哲也　独立行政法人理化学研究所播磨研究所　〒679-5148 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1

要　旨　X 線の単色化と平行化に使用される完全結晶の反射に対して，X 線コヒーレンスに関する特性を解析した。回折を記述する時間依存 Takagi-Taupin 方程式を解いて，反射波動場を任意の時間・空間構造を持つ入射波動場の積分変換として定式化した。結晶によるロッキングカーブから X 線のコヒーレンス特性を解析できることを示し，シリコン結晶で分光された放射光のコヒーレンス関数を決定した。また，反射によるコヒーレンスの変化もシミュレートした。本研究は，コヒーレンス特性の優れた次世代放射光のビームライン光学系の設計にとっての指針となるだろう。

1. はじめに

第 3 世代放射光源では蓄積リングを周回する電子ビームの鉛直方向のエミッタンスが小さく抑えられ，SPring-8 における鉛直方向の光源サイズは 10 μm 程度になっている。小さな光源から遠ざかるほど光の波面の乱れは少なくなり，光軸に垂直な方向の振幅と位相は良く揃う。この方向の波動性が顕著な状態を「空間的にコヒーレント」であると言う。第 3 世代放射光源で恩恵を受けるのは空間的コヒーレンスである。一方，光軸方向にも波としての振幅と位相の揃い具合を定義できる。この方向の波動性は単色性が高いほど顕著な傾向にあり，「時間的にコヒーレント」であると言う。標準的なシリコン111結晶で分光する場合，第 2 世代も第 3 世代も大差ない。第 3 世代放射光の空間的にコヒーレントな X 線は位相を利用する実験にとって重要であり，ホログラフィ[1]，波面分割干渉法[2]，回折顕微鏡[3]，ナノ集光[4]などの進展に不可欠な要素となっている。

第 3 世代放射光源の出現以降，空間的コヒーレンスを測定して光源サイズを推定する試みがなされた[5–10]。当初は，分光のために完全性の高いシリコン結晶を対称反射で使用するときには，可視光における鏡のように X 線の空間的コヒーレンスに影響を与えないと信じられていた。空間的コヒーレンスと時間的コヒーレンスを独立に扱うことができるという仮定の下で，空間的に振幅と位相の相関が維持される距離（空間的コヒーレンス長）は，van Cittert-Zernike の定理から $\lambda L/a$ と与えられる[11]。ただし，λ は波長，L は伝播距離，a は光源サイズである。しかし，実験で解析された空間的コヒーレンス長は見積もりを下回ることが多かった。その原因として，ビームラインに配置された窓材の不完全性による波面の乱れが疑われたが，次第に分光結晶が空間的コヒーレンスにも作用することが認識されてきた。利用実験としてのコヒーレンスの重要性が認められてきた反面，利用実験を支えるビームライン光学技術のコヒーレンスに関する理解は不足している。

次世代光源に目を向けると，エネルギー回収型ライナック[12]では電子ビームのサイズを 2 次元的に小さくすることにより，更なる空間的コヒーレンスの増大が期待される。自由電子レーザー[13–15]では，アンジュレータ内の電子群が自ら放出した放射光によってマイクロバンチを形成し，同調してコヒーレントな X 線を放出する。ビームライン光学技術の観点では，苛烈な放射パワーへの対応に加えて，光源特性に起因するコヒーレンスをいかに損なわずに試料まで導くかという新たな課題が課せられている。

コヒーレンスの基礎的な研究は可視光領域で行われてきた。この領域では準単色光源の使用により，時間的コヒーレンスの影響を無視して，空間的コヒーレンスだけを議論することが多くの場合許された。それでも，時間的コヒーレンスと空間的コヒーレンスを統合した相互コヒーレンスによる記述が必要になる場合があることは Mandel の研究[16]等により知られていた。その後コヒーレンスの研究は可視光における蓄積をベースとして X 線，電子線，中性子線へと広がって行くが，Mandel らの指摘だけは軽視され，物理的根拠もなく時間的コヒーレンスと空間的コヒーレンスを分離して扱ってきた。

結晶による X 線の反射を記述する Bragg 条件 $2d \sin \theta_B = \lambda$ は，角度と波長の関係式である。したがって，波長の選別にはビームの角度発散の変化を伴いうる。ビームの角度発散は空間的コヒーレンスに関係するので，時間成分と空間成分の分離は適切ではない。また，X 線は鏡面反射するのではなく，結晶の奥行き方向の周期的な構造を反映して反射する。波動場の潜り込みは波長の数十万倍に及ぶため，光線追跡のような幾何光学的な記述ではなく，波動光学的な記述が必要である。

本稿では，第 2 節で波動光学的手法で完全結晶による X 線の反射を記述する。対象とする入射波は，任意の時間・空間分布を持つ一般的な波動場である。この結果を基に，第 3 節では相互コヒーレンスを実験的に解析する手法を紹介し，第 4 節では結晶による反射で相互コヒーレンスがどのように変化するかを記述する。第 5 節で，コヒーレンスの解析が今後どのような役割を果たしていくかについて考えたい。

2. 完全結晶による X 線の反射

結晶は原子が 3 次元周期性を持って並んだものである。各原子により弾性散乱された X 線の干渉の結果，位相の揃う特定の方向に回折線を生じる。サイズが大きく，完全な周期性を持つ結晶の場合には，回折線も回折条件を満たすようになり，多重散乱を考慮した動力学的回折理論[17]が必要になる。動力学的回折理論の幾つかの流儀の内，ここでは Maxwell 方程式を出発点とする Laue 流を採用する。原子と X 線の相互作用を記述する電気感受率 χ は場の量子論によって計算されるので，自己完結していない現象論的な方法ではあるが，波動場の時間と空間への依存性を同じ枠組みで記述できることが魅力である。

逆格子ベクトル $\mathbf{h}$ を含む散乱面内において，**Fig. 1** の座標系で，完全結晶の Bragg ケースの反射を考える。s_o 軸と s_h 軸の方向は入射波の中心波数 K に対して幾何学的な Bragg 条件を満たすようにとり，その交点を結晶表面 O_c にとる。つまり，X 線は真空中から結晶に向かってほぼ s_o 軸方向に入射し，結晶による回折の結果，ほぼ s_h 軸方向に反射する。「ほぼ」と書いたのは数秒程度の微小角だけずれるからである。X 線回折のほとんどの場合には，結晶内に発生する波動場（電気変位ベクトル $\mathbf{D}$）を

$$\begin{aligned}\mathbf{D}(\mathbf{r},t)=&\hat{\mathbf{e}}_o D_o(s_o,s_h,t)\exp[iK(\hat{\mathbf{s}}_o\cdot\mathbf{r}-ct)]\\&+\hat{\mathbf{e}}_h D_h(s_o,s_h,t)\exp[iK(\hat{\mathbf{s}}_h\cdot\mathbf{r}-ct)]\end{aligned}\tag{1}$$

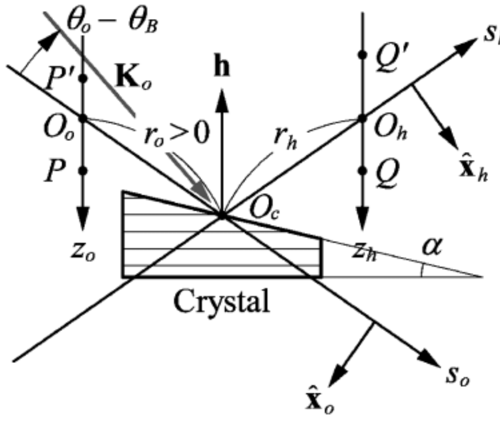

Fig. 1 Coordinate systems for incident and reflected beams.

として，主要な 2 成分だけで近似的に表現できる。D_o を含む成分（O 波と呼ぶ）は結晶への入射波に接続する波動場，D_h を含む成分（H 波）は反射波に接続する波動場である。ハット（ˆ）を付けた量は単位ベクトルを表す。$\hat{\mathbf{e}}_o$ と $\hat{\mathbf{e}}_h$ は O 波と H 波の偏光方向である。電気感受率の大きさが 1 よりはるかに小さく，D_o と D_h の空間的な変化が中心波長 $2\pi/K$ のスケールに対して十分緩やかであるという仮定の下で Maxwell 方程式を近似した結果，結晶内波動場は時間依存 Takagi-Taupin 方程式[18]

$$\left(\frac{\partial}{\partial s_o}+\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}-\frac{iK\chi_o}{2}\right)D_o=\frac{iKC\chi_{\bar{h}}}{2}D_h,\tag{2}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial s_h}+\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}-\frac{iK\chi_o}{2}\right)D_h=\frac{iKC\chi_h}{2}D_o,\tag{3}$$

に従うことになる。$\chi_j(j=o,h,\bar{h})$ は電気感受率の j-Fourier 成分である。$C=\hat{\mathbf{e}}_o\cdot\hat{\mathbf{e}}_h$ は偏光因子と呼ばれ，σ 偏光に対して 1，π 偏光に対して $\cos(2\theta_B)$ となる。ここで，θ_B は中心波数 K に対する Bragg 角である。

ここでの目的は結晶から真空中への反射波を，任意の入射波の関数として与えることである。我々の採用した解法は随伴 Green 関数を使用する線型偏微分方程式の標準的解法であるが，限られた紙面での記述は困難であるため，詳細は文献[19]を参照して頂きたい。結果を示す前に，時間依存 Takagi-Taupin 方程式における時間発展を説明しておく。

結晶内波動場の無限小時間 ε の時間発展を考える。式(2)の偏微分を差分にして，

$$\begin{aligned}&\frac{D_o(s_o,s_h,t-\varepsilon)-D_o(s_o-\delta,s_h,t-\varepsilon)}{\delta}\\&\quad+\frac{D_o(s_o,s_h,t)-D_o(s_o,s_h,t-\varepsilon)}{c\varepsilon}\\&\quad-\frac{iK\chi_o}{2}D_o(s_o-\delta,s_h,t-\varepsilon)\\&\quad=\frac{iKC\chi_{\bar{h}}}{2}D_h(s_o,s_h-\delta,t-\varepsilon)+O(\varepsilon)+O(\delta)\end{aligned}\tag{4}$$

となる。Landau 記号 $O(\varepsilon)$ は $\varepsilon\to0$ の極限で ε のオーダーの量であることを示す。微小量 δ は，$\delta=c\varepsilon+O(\varepsilon^2)$ を満たさないと波動場の停滞を引き起こすので，

$$\begin{aligned}D_o(s_o,s_h,t)=&\exp(ic\varepsilon K\chi_o/2)D_o(s_o-c\varepsilon,s_h,t-\varepsilon)\\&+(ic\varepsilon KC\chi_{\bar{h}}/2)D_h(s_o,s_h-c\varepsilon,t-\varepsilon)\\&+O(\varepsilon^2)\end{aligned}\tag{5}$$

となる。右辺第 1 項は，O 波が屈折の影響で位相を変化させながら，s_o 方向に速さ c で進行することを表している。第 2 項は，s_h 方向に速さ c で進行して来た H 波の一

部が反射によってO波に変化することを示している。ここで重要なのは波動場が s_o 方向か s_h 方向に光速度で進行することであり，それ故，逆格子ベクトル $\mathbf{h}$ に垂直な $\hat{\mathbf{s}}_o+\hat{\mathbf{s}}_h$ 方向の速度成分は常に $c\cos\theta_B$ である。この性質は無限小時間発展を積み上げて有限の時間発展を考えても成立する。結晶近傍では，真空中の波動場も入射波に対しては s_o 方向に，反射波に対しては s_h 方向に速さ c で進行すると近似できる。**Fig. 1** のように O_c から s_o 軸に沿って $r_o(>0)$ 戻った点を O_o とし，O_o を原点として $\mathbf{h}$ に反平行な座標軸 z_o を定義する。同様に，O_c から s_h 軸に沿って r_h 進んだ点を O_h とし，O_h を原点として $\mathbf{h}$ に反平行な座標軸 z_h を定義する。このとき，時刻 t における z_h 軸上の波動場は，時刻 $t-(r_o+r_h)/c$ における z_o 軸上の波動場から決定できる。

結晶の散乱面内での微小な回転により，結晶に固定された座標系では波動場の位相が変化する。回転の効果を取り込むために，z_o 軸上の点 P における入射波と z_h 軸上の点 Q における反射波を次のように書き直す。

$$\begin{aligned} &D_o(P,t)\exp[iK(\hat{\mathbf{s}}_o\cdot\mathbf{r}_P-ct)]\\ &\quad=A_o(P,t)\exp[i(\mathbf{K}_o\cdot\mathbf{r}_P-cKt)], \quad (6)\\ &D_h(Q,t)\exp[iK(\hat{\mathbf{s}}_h\cdot\mathbf{r}_Q-ct)]\\ &\quad=A_h(Q,t)\exp[i(\mathbf{K}_h\cdot\mathbf{r}_Q-cKt)], \quad (7)\end{aligned}$$

$\mathbf{r}_P$ と $\mathbf{r}_Q$ は点 O_c を始点とする位置ベクトルである。$\mathbf{K}_o$ と $\mathbf{K}_h$ はそれぞれ入射波と反射波の中心波数ベクトルで，結晶への視射角を θ_o として，

$$\mathbf{K}_o=K\hat{\mathbf{s}}_o+K(\theta_o-\theta_B)\hat{\mathbf{x}}_o, \quad (8)$$
$$\mathbf{K}_h=K\hat{\mathbf{s}}_h+Kb(\theta_o-\theta_B)\hat{\mathbf{x}}_h, \quad (9)$$

と与える。非対称因子 b は結晶表面と回折面のなす角 α を用いて

$$b=-\frac{\sin(\theta_B-\alpha)}{\sin(\theta_B+\alpha)} \quad (10)$$

と与えられる。点 P の z_o 座標を z_P，点 Q の z_h 座標を z_Q として，反射波の振幅は最終的に入射波の積分変換として

$$\begin{aligned} A_h(Q,t)=&\frac{iKC\chi_h}{4\sin\theta_B}\int_{bz_Q}^{+\infty}dz_P\,A_o\left(P,t-\frac{r_o+r_h}{c}\right)\\ &\times\exp[iaW(z_P-bz_Q)]\,\omega(a(z_P-bz_Q)) \quad (11)\end{aligned}$$

と計算される[19]。ここで，W は視射角に関する無次元の複素パラメータである：

$$W=\frac{\sqrt{|b|}}{2|C|\sqrt{\chi_h\chi_{\bar{h}}}}\left[2(\theta_o-\theta_B)\sin(2\theta_B)+\chi_o\left(1-\frac{1}{b}\right)\right]. \quad (12)$$

パラメータ a は

$$a=\frac{K|C|\sqrt{\chi_h\chi_{\bar{h}}}}{2\sqrt{|b|}\sin\theta_B} \quad (13)$$

で与えられる。重み関数 ω は Bessel 関数を用いて

$$\omega(az)=J_0(az)+J_2(az) \quad (14)$$

と与えられ，この項は結晶内部への波動場の潜り込みを表している。

ここまでの定式化では，入射波が中心波数を決められる程度の単色性を持つことを暗に仮定して来た。しかし，全くの白色光であったとしても，入射ビームに対して結晶の角度を決めることで，分光する波数の分布を狭めている。Bragg 条件から大きく外れて反射に寄与しない成分は式(11)の積分で0になるので，式(11)自体は入射波の単色性に関わらず成立する。

3. 結晶による相互コヒーレンス関数の解析[19,20]

単一偏光の波動場に対して，空間上の点 $\mathbf{r}$ の時刻 t における波動場が偏光ベクトルを除いて $V(\mathbf{r},t)$ と与えられるとする。真空中の任意の2点 $\mathbf{r}, \mathbf{r}'$ の波動場を時間遅延 τ を持って重ねて強度検出器に導いたとすると，その強度は

$$I(\mathbf{r})+I(\mathbf{r}')+2\mathrm{Re}\{\langle V(\mathbf{r},t+\tau)V^*(\mathbf{r}',t)\rangle\} \quad (15)$$

に比例する。括弧〈…〉は時間平均を表す。右辺第1項と第2項は各点の強度であり，第3項が干渉項である。この式中の $\langle V(\mathbf{r},t+\tau)V^*(\mathbf{r}',t)\rangle$ を相互コヒーレンス関数と呼ぶ。空間的隔たりがなく（$\mathbf{r}=\mathbf{r}'$）時間遅延もない（$\tau=0$）とき相互コヒーレンス関数の絶対置は最大になる。空間的隔たりや時間遅延が大きくなるほど相互コヒーレンス関数の絶対置は小さくなり，徐々に干渉性を失っていく。X線のバンド幅がある程度狭く，進行方向もある程度揃っている場合に，中心波数ベクトルを $\mathbf{K}$ として，

$$\begin{aligned}\langle V(\mathbf{r},t+\tau)V^*(\mathbf{r}',t)\rangle=&\langle A(\mathbf{r},t+\tau)A^*(\mathbf{r}',t)\rangle\\ &\times\exp[i\{\mathbf{K}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')-cK\tau\}] \quad (16)\end{aligned}$$

と書き直す。単に，中心波数ベクトルによる速い位相変化と，そのエンベロープに分割しただけであり，エンベロープ内の関数 A は式(6)(7)中の A_o, A_h に対応する。詳しい

議論は文献[19,20]に譲るが，ビームの角度発散 φ と波数の広がり ΔK の間に

$$\varphi \ll \sqrt{\Delta K / K} \tag{17}$$

の関係があれば，時間遅延 τ の影響が簡略化されて，

$$\langle A(\mathbf{r}, t+\tau) A^*(\mathbf{r}', t) \rangle \approx \langle A(\mathbf{r}, t) A^*(\mathbf{r}' + c\tau\hat{\mathbf{K}}, t) \rangle \tag{18}$$

と近似できる。条件(17)は標準的なシリコン結晶で分光された X 線（$\Delta K/K \sim 10^{-4}$, $\varphi \sim 10^{-5}$）に対して容易に成り立つ。したがって，任意の 2 点間における時間遅延のないエンベロープが分かれば，相互コヒーレンス関数を知ることができる。

結晶の視射角 θ_o に対する反射率曲線をロッキングカーブと呼ぶ。**Fig. 1**の配置で，測定されるロッキングカーブは

$$R(W) = \left\langle \int_{-\infty}^{+\infty} dz_Q |A_h(Q, t)|^2 \right\rangle \Big/ \left\langle \int_{-\infty}^{+\infty} dz_P |A_o(P, t)|^2 \right\rangle \tag{19}$$

で与えられる。入射 X 線の z_o 軸方向のビーム幅が同じ方向のコヒーレンス長に対して十分大きいとき，z_o 軸上の時間遅延のないエンベロープは

$$\langle A_o(P, t) A_o^*(P', t) \rangle \approx I_o\left(\frac{z_P + z'_P}{2}\right) g_o(z_P - z'_P) \tag{20}$$

と近似できる。2 点 P, P' は共に z_o 軸上の点であり，その z_o 座標を z_P, z'_P とする。g_o は複素コヒーレンス度と呼ばれ，$g_o(0)=1$ に正規化されている。このとき，式(19)に式(11)を代入して，

$$R(W) = \int dW' R_i(W') \tilde{g}_o(W - W') \tag{21}$$

と畳み込みの形に変形される[19,20]。$R_i(W)$ は入射波が単色平面波のときに測定される結晶由来のロッキングカーブであり，次式で与えられる：

$$R_i(W) = \left|\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}\right| |\tilde{\omega}(W)|^2. \tag{22}$$

ただし，

$$\tilde{\omega}(W) = \begin{cases} -W - \sqrt{W^2 - 1} & (|W| > 1,\ \mathrm{Re}\{W\} < 0) \\ -W + i\sqrt{1 - W^2} & (|W| \leq 1) \\ -W + \sqrt{W^2 - 1} & (|W| > 1,\ \mathrm{Re}\{W\} < 0) \end{cases} \tag{23}$$

$\tilde{g}_o$ は複素コヒーレンス度の Fourier 変換である：

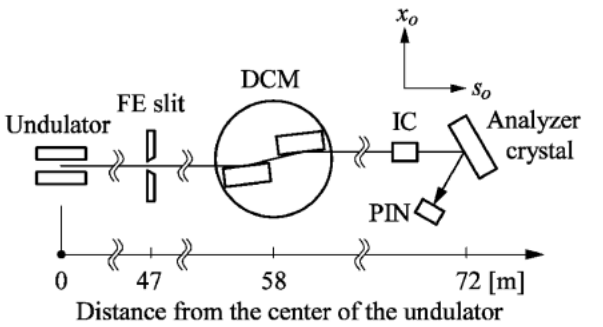

Fig. 2 Front view of the experimental setup for coherence analysis. The front-end (FE) slit was opened to the square with a side length 1 mm. An ionization chamber (IC) and a silicon PIN detector (PIN) were used for rocking-curve measurements with an analyzer silicon crystal.

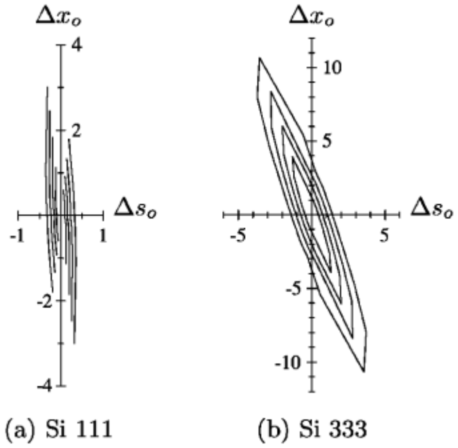

Fig. 3 The complex degrees of coherence of the x-ray beams prepared with the silicon DCM of (a) 111 and (b) 333 reflection. The contours show the positions where the absolute values of the complex degrees are 0.8, 0.6, 0.4 and 0.2, going from the inside outwards. The units of the coordinate axes are micrometer.

$$\tilde{g}_o(W - W') = \frac{a}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Delta z_o g_o(\Delta z_o) \exp[ia(W - W')\Delta z_o]. \tag{24}$$

したがって，z_o 軸方向の時間遅延のない複素コヒーレンス度を，

$$g_o(\Delta z_o) = \frac{\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} d\theta_o R(\theta_o - \theta_B) \exp[-iK(\theta_o - \theta_B)\Delta z_o \cos\theta_B]}{\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} d\theta_o R_i(\theta_o - \theta_B) \exp[-iK(\theta_o - \theta_B)\Delta z_o \cos\theta_B]} \tag{25}$$

により，測定されたロッキングカーブから抽出することができる。結晶の回折面を替えて複数の Bragg 角に関してコヒーレンス関数の抽出を行えば，散乱面内の複素コヒーレンス度を空間的隔たりに関する 2 次元分布として解析

することが可能になる。

Fig. 2 は SPring-8 の長尺アンジュレータビームライン BL19LXU で複素コヒーレンス度を解析したときの実験配置である。放射光はシリコン二結晶分光器（DCM）により111反射または333反射を用いて0.661 Å に単色化された。実験ステーションに導かれた X 線に対して，対称シリコン結晶の111面とその高次面を用いてロッキングカーブを測定した。**Fig. 3** は解析された複素コヒーレンス度の絶対値の等高線分布である。縦軸 Δx_o と横軸 Δs_o はそれぞれ **Fig. 2** に示す x_o と s_o 方向の座標の差である。離散的な Bragg 角に対して解析された結果を直線で補間した。333反射で分光された X 線ではコヒーレンスの高い領域が約18°傾いている。この角度は，分光器の逆格子ベクトル **h** の方向に一致する。コヒーレンスの時間・空間成分の分離が成立しないことは明らかである。111反射に関してもコヒーレンスの高い領域は分光器の逆格子ベクトルの方向に傾いている。しかし， シリコンの最低次の反射が111であり，それ以下の角度において解析ができないため，等高線が途切れてしまっている。この空間成分の推定の問題が課題として残されている。

4. 結晶によるコヒーレンスの伝播[19,21]

Fig. 1 の反射側の z_h 軸上の 2 点 Q, Q' における時間遅延 τ を持つエンベロープは，式(11)から

$$
\begin{aligned}
&\langle A_h(Q, t+\tau)A_h^*(Q', t)\rangle \\
&\quad = \left|\frac{KC\chi_h}{4\sin\theta_B}\right|^2 \int_{bz_Q}^{\infty} dz_P \int_{bz'_Q}^{+\infty} dz'_P \langle A_o(P, t+\tau)A_o^*(P', t)\rangle \\
&\qquad \times \exp\left[iaW(z_P - bz_Q) - ia^*W^*(z'_P - bz'_Q)\right] \\
&\qquad \times \omega(a(z_P - bz_Q))\,\omega^*(a(z'_P - bz'_Q))
\end{aligned}
\tag{26}
$$

となる。z'_Q は，点 Q' の z_h 座標である。反射波のエンベロープは，入射波の z_o 軸上の時間遅延 τ を持つエンベロープの 2 次元積分変換として与えられる。条件(17)の下で入射波の時間遅延のないエンベロープの 2 次元分布を知っていれば，式(18)から z_o 軸上の 2 点の遅延時間付きエンベロープを計算できる。同様に，式(26)によって数値的に計算された反射波の z_h 軸上の遅延時間付きエンベロープから，反射波の時間遅延のないエンベロープの 2 次元分布を導出できる。

例として，シリコン333二結晶分光器で分光された 0.661 Å の X 線ビームに対して，**Fig. 4** の様にシリコン111結晶で下向きに跳ねる状況を考える。つまり，結晶の配置は二結晶分光器も含めて（333, $\bar{3}\bar{3}\bar{3}$, $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$）である。入射波の複素コヒーレンス度に関しては，解析された関数を 2 つの Gauss 分布の積で近似し，**Fig. 5(a)** の楕円状の等

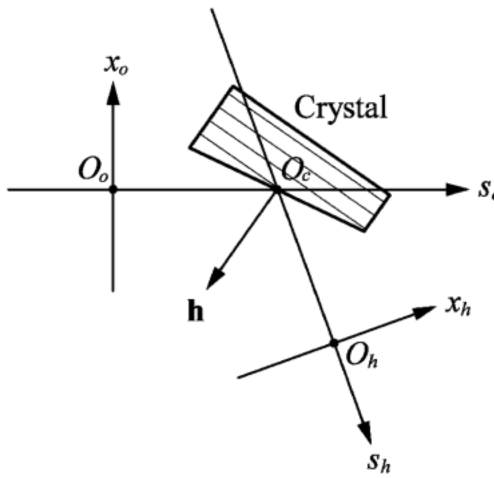

Fig. 4 Coordinate systems for the calculation of coherence propagation.

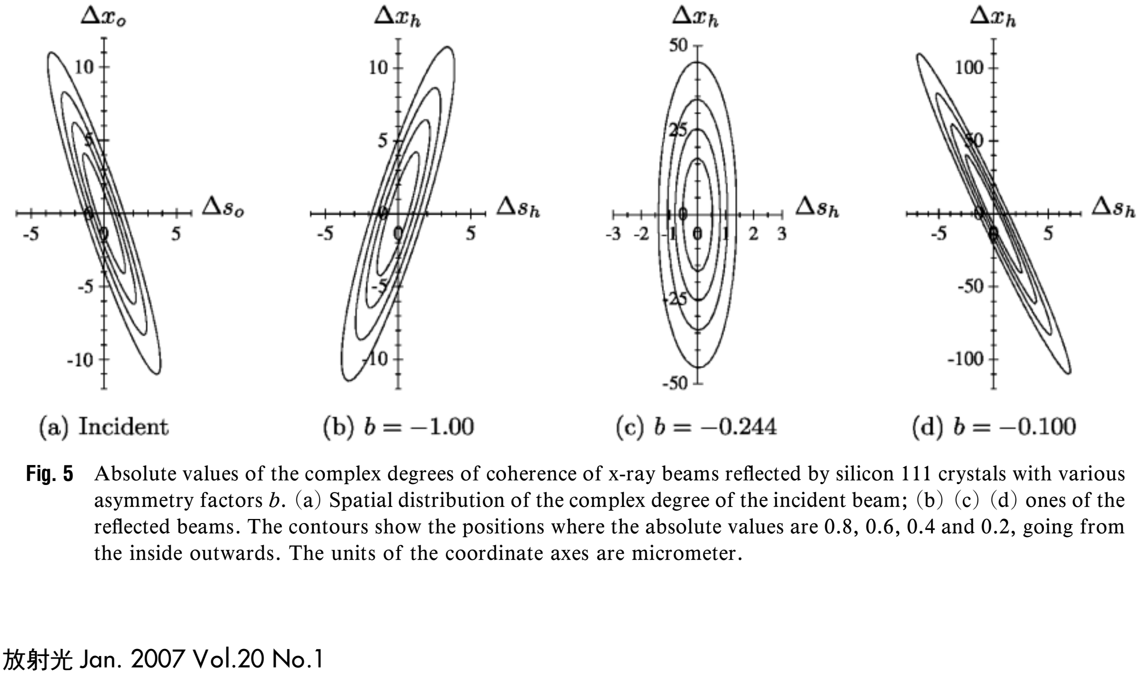

Fig. 5 Absolute values of the complex degrees of coherence of x-ray beams reflected by silicon 111 crystals with various asymmetry factors b. (a) Spatial distribution of the complex degree of the incident beam; (b) (c) (d) ones of the reflected beams. The contours show the positions where the absolute values are 0.8, 0.6, 0.4 and 0.2, going from the inside outwards. The units of the coordinate axes are micrometer.

高線分布を持つものとする。前節では式(20)のように強度分布のある程度の変化を許していたが，簡略化して一様強度のビームとして扱う。このとき，入射波に対して **Fig. 4** の直交座標系 O_o–$s_o x_o$ を定義すると，エンベロープは

$$\langle A_o(s_o, x_o, t) A_o^*(s_o', x_o', t) \rangle = I_o\, g_o(\Delta s_o, \Delta x_o) \tag{27}$$

と書ける。ただし，Δs_o, Δx_o は各座標の差 $s_o - s_o'$, $x_o - x_o'$ を表す。また，結晶による吸収はない，すなわち電気感受率の Fourier 成分 χ_j ($j = o, h, \bar{h}$) の虚部が0であると仮定する。結晶の回転角 θ_o は通常，全反射領域の中心に合わせるので，結晶による吸収がないときは $W=0$ となる。このとき，式(26)を介して計算される反射波の時間遅延のないエンベロープも，反射波に対する直交座標系 O_h–$s_h x_h$ に対して

$$\langle A_h(s_h, x_h, t) A_h^*(s_h', x_h', t) \rangle = I_h\, g_h(\Delta s_h, \Delta x_h) \tag{28}$$

の形に書ける。ただし，Δs_h, Δx_h は各座標の差 $s_h - s_h'$, $x_h - x_h'$ である。

111結晶の非対称因子として $b = -1.00$, -0.244, -0.100を選んだとき，反射波の複素コヒーレンス度は **Fig. 5** **(b)(c)(d)** の等高線分布になる。対称反射 **(b)** においてもコヒーレントな領域のサイズは幾分大きくなっている。**(a)** と **(b)** で傾きが違うのは反射によって鏡像を得ているからである。非対称因子を大きくしていくとコヒーレントな領域の傾きが変わり，**(c)** では複素コヒーレンス度が空間方向に特化され，**(d)** では傾きが逆になる。この一連の変化は，結晶の回折面と非対称因子の選択によってコヒーレンスを制御できることを示している。

波動光学に基づいて結晶によるコヒーレンスの伝播を考えたのは，結晶への波動場の潜り込みがコヒーレンスに影響を与えることを想定したからである。ここでは，光線追跡による幾何光学的な記述では説明できない現象の一例を挙げる。結晶による反射では逆格子ベクトル方向の同時刻の波動場が重なり合うので，コヒーレンスもこの方向に変化を受け易い。そこで，式(26)で時間遅延 $\tau=0$ の場合を考える。シリコン111の対称反射結晶に対して，中心波長 0.661 Å で σ 偏光のX線が入射すると仮定する。**Fig. 1** の座標系で z_o 軸上のエンベロープが，

$$\langle A_o(P, t) A_o^*(P', t) \rangle = I_o \exp\left[-\left(\frac{z_P - z_P'}{l_o} \right)^2 \ln 2 \right] \tag{29}$$

と半値半幅 l_o の Gauss 分布で与えられるとする。半値半幅をコヒーレンスを特徴付けるパラメータとみなし，コヒーレンス長と定義する。入射波のコヒーレンス長 l_o を変えて，反射波のコヒーレンス長 l_h を求めたものが **Fig. 6** である。ここでも，結晶による吸収がなく，結晶の角度

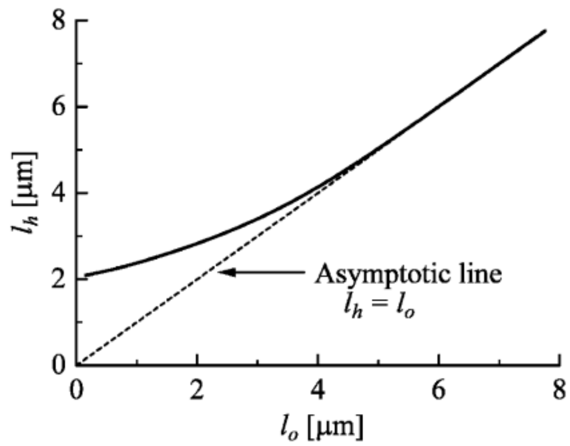

Fig. 6 Change of coherence length in the direction of the reciprocal vector. The incident beam with 0.661 Å-wavelength, σ-polarization and l_o-coherence length impinges on a silicon crystal of 111 symmetric reflection to become the reflected beam with l_h-coherence length.

が全反射領域の中心にあると仮定した。漸近線 $l_h = l_o$ は，結晶の表面で幾何光学的に反射すると仮定した場合のコヒーレンス長の変化（不変化）である。この条件では，入射波のコヒーレンス長が 6 μm を超えていれば，結晶による潜り込みの効果は無視できる。一方，入射波のコヒーレンス長が短くなると，反射波のコヒーレンス長は漸近線から逸脱して長くなる。これは，結晶への潜り込みによって波動場が引き伸ばされ，その結果，干渉性を増したことによる。たとえ入射波がインコヒーレントであったとしても，逆格子ベクトル方向にはそれなりのコヒーレンスを獲得する。このことが，**Fig. 3** において二結晶分光器の逆格子ベクトル方向に傾いた複素コヒーレンス度を生み出した要因である。

5. まとめと展望

X線コヒーレンスの研究の初期の目的のひとつは，準単色光源に対する van Cittert-Zernike の定理を用いて光源サイズを推定することであった。そのため，白色に近い光源からのX線ビームを結晶により分光し，単色化されたビームの空間的コヒーレンスを解析したのである。しかし，第4節で示したように，結晶による単色化は一般に空間的コヒーレンスを保存しない。その理解には，時間的コヒーレンスと空間的コヒーレンスを統合した相互コヒーレンスの概念を必要とする。また，対称反射の結晶で分光した場合でさえ結晶への波動場の潜り込みがコヒーレンス特性に影響を与え，その結果，第3節で示したようにコヒーレンスの高い領域が傾いたX線を生成する。それ故，分光されたX線の空間的コヒーレンスは van Cittert-Zernike の定理による見積もりを下回ったのである。波動光学に基づく定式化によって，X線コヒーレンスの定量

的評価が初めて可能になった。

結晶によるコヒーレンスの伝播は，入射波の相互コヒーレンス関数が与えられれば，式(26)を使って解析できる。入射波のコヒーレンス関数は，結晶によるロッキングカーブから解析できる。ただし，使用できる Bragg 角が離散的なので，**Fig. 3(a)**のようにコヒーレンスの空間成分が解析できないことがある。この点に関しては更に検討が必要である。

次に，本研究がもたらす可能性について考える。次世代放射光源のコヒーレンス特性を本格的に利用するためには，コヒーレンスを損ねないビームライン光学系の開発が必須である。本研究はコヒーレンスの観点から分光結晶を設計していく指針となる。結晶を適切に選べば，個々のアプリケーションの要請に応じたコヒーレンスの制御も可能であろう。干渉計測の高精度化にはビームのコヒーレンスを高めるという直接的な方針に加えて，細心の注意が必要であるが，正確に把握したコヒーレンス関数を用いてその影響を数値的に取り除くということもできよう。数値的補正が十分な精度を持つならば，ビームラインのデザインを検討した結果，分光結晶を使用しないという解もありうる。

本稿では具体的な結晶としてシリコンを想定して話を進めたが，完全に近い結晶であれば同じ議論が成り立つ。むしろ，次世代放射光源の熱特性を勘案すれば，ダイヤモンド[22]の積極的な利用も視野に入れるべきである。現状のダイヤモンドの性能はコヒーレンスの観点からはまだ不足である。コヒーレントなビームは位相を変化させる僅かな乱れに敏感であり，欠陥や表面構造によってビームの質を変化させ易い。次世代放射光の出現までに質の向上を期待したい。

また，本稿の趣旨からは外れるが，次世代放射光源は高輝度短パルスX線源である。パルス特性が分光結晶によりどの程度維持されるかという問題は，時間分割測定にとって本質的な問題になる。第2節で展開した一般的な入射波動場に対する動力学的回折理論は，この問題にも答えるものとなっている。0.661 Å のX線をシリコン111の対称結晶で分光するときのパルス幅の増加は高々 3 fs であり，10 fs 程度のパルス幅を扱わない限り問題になることはないであろう。

謝辞

本研究をまとめるにあたり，東京大学の雨宮慶幸教授，高橋敏男教授，百生敦助教授には特に有意義な助言を頂いた。ここで改めて感謝したい。

参考文献

1) P. Cloetens, W. Ludwig, J. Baruchel, D. van Dyck, J. van Landuyt, J. P. Guigay and M. Schlenker: Appl. Phys. Lett. **75**, 2912 (1999).
2) 鈴木芳生：放射光 **18**, 75 (2005).
3) 西野吉則，石川哲也：放射光 **19**, 3 (2006).
4) 石川哲也，森　勇藏，遠藤勝義：放射光 **17**, 3 (2004).
5) T. Salditt, H. Rhan, T. H. Metzger, J. Peisl, R. Schuster and J. P. Kotthaus: Z. Phys. B **96**, 227 (1994).
6) A. Q. R. Baron, A. I. Chumakov, H. F. Grünsteudel, H. Grünsteudel, L. Niesen and R. Rüffer: Phys. Rev. Lett. **77**, 4808 (1996).
7) K. Fezzaa, F. Comin, S. Marchesini, R. Coïsson and M. Belakhovsky: J. X-ray Sci. Technol. **7**, 12 (1997).
8) V. Kohn, I. Snigireva and A. Snigirev: Phys. Rev. Lett. **85**, 2745 (2000); Opt. Commun. **198**, 293 (2001).
9) W. Leitenberger, S. M. Kuznetsov and A. Snigirev: Opt. Commun. **191**, 91 (2001).
10) M. Yabashi, K. Tamasaku and T. Ishikawa: Phys. Rev. Lett. **87**, 140801 (2001).
11) J. W. Goodman: ''Statistical Optics'' (Wiley, New York, 1985).
12) S. M. Gruner, D. Bilderback, I. Bazarov, K. Finkelstein, G. Krafft, L. Merminga, H. Padamsee, Q. Shen, C. Sinclar and M. Tigner: Rev. Sci. Instrum. **73**, 1402 (2002).
13) J. Arthur: Rev. Sci. Instrum. **73**, 1393 (2002).
14) G. Materlik and Th. Tschentscher, ed.: ''TESLA Technical Design Report V'' (2001).
15) T. Shintake, H. Matsumoto, T. Ishikawa and H. Kitamura: Proc. SPIE **4500**, 12 (2001).
16) L. Mandel: J. Opt. Soc. Am. **51**, 1342 (1961).
17) R. W. James: ''The Optical Principles of the Diffraction of X-Rays'' (G. Bell, London, 1962).
18) J. S. Wark and H. He: Laser Particle Beams **12**, 507 (1994).
19) 山崎裕史：「動力学的回折によるX線コヒーレンスの伝播と解析」(博士論文，東京大学，2005).
20) H. Yamazaki and T. Ishikawa: J. Appl. Cryst. **37**, 48 (2004).
21) H. Yamazaki and T. Ishikawa: J. Appl. Cryst. **35**, 314 (2002).
22) 玉作賢治，石川哲也：放射光 **19**, 92 (2006).

● 著者紹介 ●

山崎裕史
財団法人高輝度光科学研究センター
E-mail：yamazaki@spring8.or.jp
専門：X 線光学
[略歴]
1996年3月東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻修士課程修了，同年4月より財団法人高輝度光科学研究センター入所。SPring-8 の分光器開発を中心にビームライン建設に携わる。現在は，高コヒーレント X 線を利用する干渉計測技術の開発に興味がある。X 線のコヒーレンスを評価し制御するための研究を行い，2005年3月「動力学的回折による X 線コヒーレンスの伝播と解析」で博士（科学）号取得。

石川哲也
理化学研究所　播磨研究所　放射光科学総合研究センター・センター長
専門：X 線光学
E-mail：ishikawa@spring8.or.jp
[略歴]
1982年東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻博士課程修了，工学博士。高エネルギー物理学研究所放射光実験施設助手，東京大学工学部助教授，理化学研究所・マイクロ波物理研究室主任研究員を経て，X 線干渉光学研究室主任研究員。加速器工学，X 線光学等の研究に従事。2006年10月より現職。

Perfect-crystal x-ray optics to treat x-ray coherence

Hiroshi YAMAZAKI Japan Synchrotron Radiation Research Institute (SPring–8)
1–1–1 Kouto, Sayo-cho, Sayo-gun, Hyogo 679–5198, Japan

Tetsuya ISHIKAWA RIKEN Harima Institute, RIKEN SPring-8 Center
1–1–1 Kouto, Sayo-cho, Sayo-gun, Hyogo 679–5148, Japan

Abstract X-ray diffraction of perfect crystals, which serve as x-ray monochromator and collimator, modifies coherence properties of x-ray beams. From the time-dependent Takagi-Taupin equations that x-ray wavefields obey in crystals, the reflected wavefield is formulated as an integral transform of a general incident wavefield with temporal and spatial inhomogeneity. A reformulation of rocking-curve profiles from the field solution of the Takagi-Taupin equations allows experimental evaluation of the mutual coherence function of x-ray beam. The rigorous relationship of the coherence functions between before and after reflection clarifies how the coherence is transferred by a crystal. These results will be beneficial to developers of beamline optics for the next generation synchrotron sources.