

ビームラインの統合的理解のために

平野馨一 高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所 〒305-0801 茨城県つくば市大徳 1-1
E-mail : keiichi.hirano@kek.jp

大橋治彦 勸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 : hohashi@spring8.or.jp

1. はじめに

約二年間にわたって連載してきたこのシリーズも、ついに今回で最終回です。思えば長い道のりでしたが、ここで簡単にこれまでの行程を振り返ることにしましょう。イントロダクションにあたる第一回では、このシリーズの趣旨説明を行い、全体的な展望を示しました。次に、人と機器の安全を守る上で重要な役割を果たしている遮蔽とインターロックシステム(第2回)、フロントエンド(第3回)について解説しました。続いて、ビームラインを構成している主要機器である、分光器(第4回~第6回)、ミラー(第7回)、フレネルゾーンプレート・屈折レンズ(第8回)、移相子・偏光子(第9回)について一つ一つ見てきました。さらに、放射光の持つ重要な性質であるコヒーレンス(第10回)やパルス特性(第11回)について概観し、それらを利用する技術について紹介しました。放射光のビームラインはこのような様々なハードウェアから成り立っていますが、それらを制御して有機的に連携させるためのソフトウェアも重要です。そこで前回(第12回)は制御の基礎について説明し、SPRing-8とPFという二つの放射光施設の例を紹介しました。

さて、このように振り返ってみると、これまでこのシリーズではビームラインを構成要素に分解して個々の要素について紹介してきたことがわかったと思います。これは自動車を例にとると、自動車をエンジン、トランスミッション、ハンドル、アクセルやブレーキ、フレーム、タイヤなどの部品に分解し、各パーツについて一つ一つ見ていく、というアプローチの仕方と同じです。もちろん、車の仕組みをきちんと理解するには、各部品の仕組みや機能をしっかり理解しなければなりません。ビームラインも同じです。その仕組みをきちんと理解したければ、ビームライン要素技術の基礎をしっかりとマスターする必要があります。しかし、ここで大きな疑問が生じます。はたして要素技術を習得しさえすれば、それでビームラインについて完全に理解したことになるのでしょうか? 残念ながら、その答えは「否」です。たとえば、ビーム強度を見積もることを考えてみましょう。はたしてビームラインの要素技術につい

て理解しただけで、ビーム強度を見積もれるようになるのでしょうか? 実は、ビームラインの構成がよほど単純なものでない限り、ビーム強度の見積もりはそれほど容易ではないのです。なぜなら、ビームライン構成要素間の干渉効果を考慮しなければならないからです。ビームラインが個々の要素から成り立っているのは事実なのですが、ビームライン全体の総合的性能を理解するには構成要素全体の複合的效果を考慮しなければならないのです。ここにビームラインを横断的、統合的に理解する必要性が生じます。

そこで最終回の今回は「ビームラインの統合的理解のために」と題して、これまでの回を踏まえつつ、ビームの強度・サイズ・発散などを見積もる方法について簡単に解説することになります。まずビーム強度の見積もり方については、第2章で二結晶分光器により単色化されたX線の強度を概算する方法について紹介します。次にビームのサイズと発散を見積もるには位相空間の概念が役に立つため、それについて第3章で説明します。第2章と第3章で述べる方法は近似にすぎませんが、ビームに関する諸々の物理量(強度、形、発散、位相、偏光、エネルギー分解能など)を簡便に計算する方法として光線追跡法(ray-tracing)があります。そこで第4章では、光線追跡プログラムの世界標準として有名なSHADOWについて触れることにします。

2. ビーム強度を見積もる方法

放射光で実験するユーザーにとって、ビーム強度は必要不可欠な情報の一つです。そこでこの章ではビーム強度の見積もり方について述べることにしましょう。例として、二結晶分光器で単色化されたX線の強度を見積もる方法を紹介します。

2.1 光の強度について

ビームラインで得られる光の強度を見積もるには、第一に光源から放射される光の強度を知る必要があります。例としてSPRing-8の偏向電磁石で得られる光の強度をFig. 1に示します。横軸はエネルギー(eV)、縦軸はフラックス

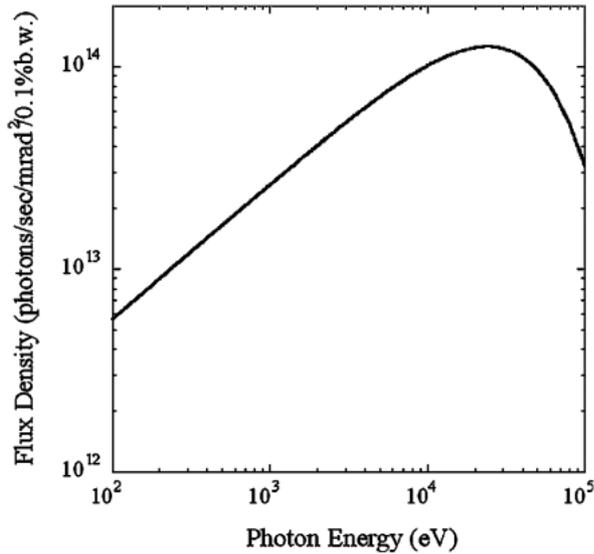


Fig. 1 Flux density spectrum of the SPring-8 bending magnet source.

密度です。ここで縦軸の単位に注目してください。photons/sec/mrad²/0.1%b.w. となっています。photons/secの意味はすぐにわかると思いますが、1秒あたりの光子数です。次にmrad²は単位立体角 (mrad²) あたりという意味です。では、0.1%b.w.とは何でしょう？ まずb.w.ですが、これはband widthの略でエネルギーのバンド幅 $\Delta E/E$ を意味します。次に0.1%とは何でしょう。これはエネルギーのバンド幅 $\Delta E/E$ の大きさが0.1%ということ。つまり

$$\Delta E/E = \Delta\lambda/\lambda = 0.1\% = 0.001 \quad (1)$$

となります。たとえばエネルギー E が10 keVの場合、エネルギー広がり ΔE は $10 \text{ keV} \times 0.001 = 10 \text{ eV}$ となります。エネルギー E が変われば、エネルギー広がり ΔE も変わることにご注意ください。例として Fig. 1で10 keVのエネルギーのところを見ると、フラックス密度は 1.0×10^{14} となっています。これは光源から毎秒発する光子のうち、エネルギーが9995 eVと10005 eVの間にある光子の単位立体角あたりの密度を意味します。

Fig. 1では光の強度を示す量としてフラックス密度を用いましたが、この他にもフラックス (photons/sec/0.1% b.w.) や輝度 (photons/sec/mm²/mrad²/0.1%b.w.) という量がよく用いられています。フラックス密度 D からフラックス F を計算するのは容易です。光の垂直方向の発散角を a_y (mrad)、水平方向の発散角を a_x (mrad) とすると、フラックスは $F = a_x a_y D$ という式で与えられます。 a_x と a_y の値はビームラインに設置されている取り出し口やスリットなどのサイズによって決まります。

Fig. 1ではSPring-8の偏向電磁石で得られる光のスペク

トルを天下一的に示しましたが、それ以外の光源のスペクトルを知るにはどうすればいいのでしょうか？ たいていの場合、放射光施設のホームページや刊行物にスペクトルが掲載されていますので、それを参照するのが楽でしょう。あるいは、スペクトルを計算してくれるありがたいソフトがフリーで出回っているの、それらのソフトを利用するのもいいでしょう。ちなみに Fig. 1のスペクトルはSPring-8で開発されているSPECTRA¹⁻²⁾というフリーのソフトを使って計算しました。海外ではESRFとAPSで開発されたXOP (X-ray Oriented Programs)³⁻⁵⁾というフリーソフトが有名です。これらの便利なツールのおかげで、放射光初心者でも手軽にスペクトルを計算することができます。

2.2 ベリリウム窓やグラファイトフィルター等による吸収の影響

光源から出た光はまずフロントエンドを通ります。フロントエンドにはマスク、スリット、グラファイトフィルター、ベリリウム窓、MBSなどが設置されています(第3回参照)。X線ビームラインの場合、MBS開の状態のとき、ベリリウム窓とグラファイトフィルターが光軸上に存在します。そのためビーム強度を計算するには、これらによる吸収を考慮しなければなりません。今、吸収物質の厚さを t 、吸収係数を μ とおくと、透過率 T は次式で与えられます。

$$T(E) = \exp[-\mu(E)t] \quad (2)$$

したがって入射ビーム強度を N とすると、透過ビーム強度は

$$N'(E) = N(E)T(E) = N(E) \exp[-\mu(E)t] \quad (3)$$

となります。ここで吸収係数 μ はエネルギー E の関数であることに注意してください。吸収係数 μ の値は文献[6-7]等に掲載されています。あるいはCXRO (Center of X-Ray Optics)⁸⁾やNIST (National Institute of Standards and Technology)⁹⁾のホームページに行くと透過率 T を計算してくれる便利なページが用意されています¹⁰⁻¹¹⁾。また、XOPを使って計算することもできます。

さて、例としてSPring-8の偏向電磁石ビームラインを考えてみましょう。グラファイトフィルターの厚さは0.3 mm、ベリリウム窓の厚さは0.25 mm × 2枚 = 0.5 mm とします。このときのグラファイトフィルターとベリリウム窓の透過率を Fig. 2に示します。これを見るとわかるように、3 keV以下のエネルギーでは透過率はほぼゼロとなるため、このエネルギー領域の光を使うことはできません。

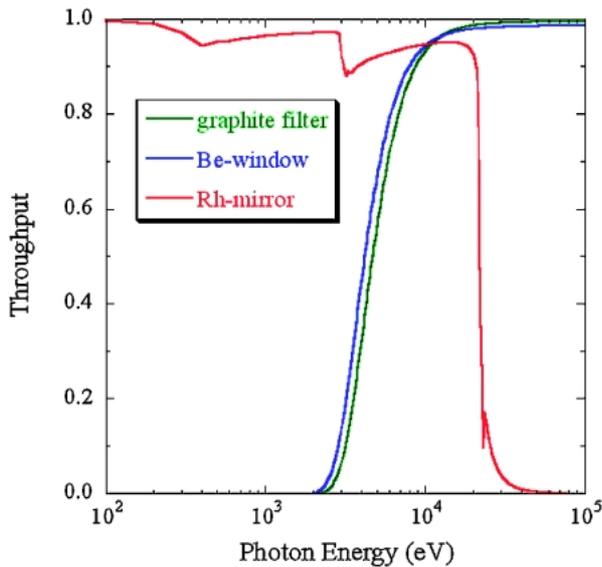


Fig. 2 Green line: transmittance of a graphite filter of 0.3 mm thickness. Blue line: transmittance of two beryllium windows of 0.25 mm thickness. Red line: reflectivity of a rhodium-coated mirror at grazing angle of 3 mrad.

2.3 ミラーによる影響

フロントエンドを通過した光は、いよいよ光学素子によって加工されることになります。ビームラインにおいて分光器と並んで重要な役割を果たしているのがミラーです。今、平面ミラーに平行ビームが入射する場合を考えることにしましょう。入射ビームのエネルギーを E 、照射角を θ 、強度を N 、ミラーの反射率を R とおくと、反射ビームの強度は次式で与えられます。

$$N'(E, \theta) = N(E)R(E, \theta) \quad (4)$$

反射率 $R(E, \theta)$ はフレネルの式を使って計算できます (第6回2-3節の式(4)及び(5)参照)。参考までに 3 mrad の照射角で Rh の平面ミラーに光が入射したときの反射率曲線を Fig. 2 に示します。20 keV 以下のエネルギーでは反射率は 1 に近いですが、30 keV 以上ではほぼゼロになります。

2.4 二結晶分光器で単色化された X 線の強度

X 線ビームラインでは単色 X 線を得るために二結晶分光器がよく利用されています (第5回参照)。ここでは、二結晶分光器で単色化された X 線の強度を与える式¹²⁾を天下り的に示すことにしましょう。二結晶分光器に入射するフラックス密度を D_{in} とすると、単色化された X 線の強度 N_{out} は次のような単純な式で与えられます。

$$N_{out}(\text{photons/sec/mrad}^2) \approx C \times D_{in}(\text{photons/sec/mrad}^2/0.1\% \text{ b.w.}) \quad (5)$$

Table 1 Values of C in eq. (5) for several commonly used crystal reflections

	(111)	(220)	(333)	(311)	(400)
Diamond	0.059	0.020	0.0028	0.0091	0.0078
Silicon	0.13	0.058	0.0087	0.028	0.025
Germanium	0.30	0.14	0.019	0.065	0.056

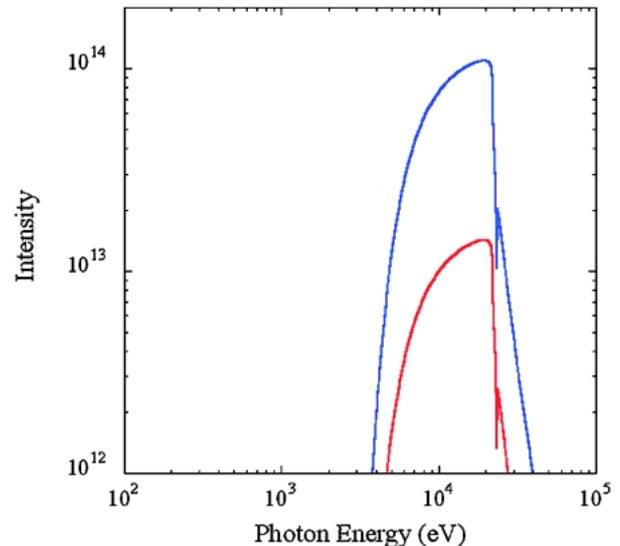


Fig. 3 Blue line: flux density spectrum of the SPring-8 bending magnet source after being transmitted by a graphite filter and two beryllium windows and reflected by a rhodium-coated mirrors, D_{in} (photons/sec/mrad²/0.1% b.w.). Red line: beam intensity after the Si(111) double-crystal monochromator, N_{out} (photons/sec/mrad²).

ここで C は分光結晶の種類と反射面によって決まる定数です。Si(111)の二結晶分光器の場合、 $C=0.13$ となります。他の反射面及び結晶の C の値を Table 1 に示します¹²⁾。

さて、これで二結晶分光器により単色化された X 線の強度を見積もる準備が整いました。試しに、グラファイトフィルター、ベリリウム窓、Rh ミラー、Si(111)二結晶分光器から成るビームラインについて考えることにしましょう。まずは二結晶分光器に入射するフラックス密度 D_{in} を計算します。これは光源のフラックス密度 D 、グラファイトフィルターの透過率 T_C 、ベリリウム窓の透過率 T_{Be} 、Rh ミラーの反射率 R_{Rh} から計算することができます。

$$D_{in} \approx R_{Rh}(E) T_{Be}(E) T_C(E) D$$

この式を用いて Fig. 1 と Fig. 2 から計算した結果が Fig. 3 の青色の曲線です。入射フラックス密度 D_{in} さえ求めれば、Si(111)二結晶分光器後の X 線強度 N_{out} を見積もるのは容易です。式(5)にしたがって D_{in} の値に 0.13 を掛けて、フ

ラックス密度の単位から「0.1% b.w.」を削除するだけです (Fig. 3の赤色の曲線)。

このように式(5)はとても便利であり、ほとんどのX線ビームラインに適用することができますが、注意も必要です。第一に、この式を適用できるのはシリコン、ゲルマニウム、ダイヤモンドのような完全に近い平板の結晶が二枚平行に配置されている場合に限られます。結晶がかなり不完全な場合、平行に配置されていない場合、湾曲している場合などは適用外となりますのでご注意ください。第二に、二結晶分光器で得られるエネルギーはブラッグの式 $\lambda = 2d \sin \theta_B$ より $\lambda = 0 (\theta_B = 0^\circ)$ から $\lambda = 2d (\theta_B = 90^\circ)$ までに限られます。実際は、分光器で駆動可能な θ_B の範囲は機械的理由によりさらに狭くなるため、それに応じて利用可能なエネルギー領域も狭まることとなります。Fig. 3ではこのような制限を無視して強度をプロットしていますので注意して下さい。

3. ビームのサイズと発散を見積もる方法 ～位相空間の話～

放射光を使って実験するとき、ビーム強度だけでなく、ビームのサイズや発散に関する情報も必要になります。たとえば回折実験の場合、試料に入射するビームの発散はデータの角度分解能に影響を与えます。また、マイクロビームを使った実験では、試料位置におけるビームサイズがデータの空間分解能を決定します。そこで本章では、ビームのサイズと発散を見積もる上で役に立つ位相空間¹³⁻¹⁴⁾の概念について簡単に紹介することにします。

3.1 位相空間 (phase space) とは

話を簡単にするため、まず二次元平面内における光子の運動を考えることにします。Fig. 4(a)はz軸に対してほぼ平行に進む光子の軌道を描いたものです。光子はz軸に対してある距離を隔てて、ある傾きを持って進んでいます。このとき光子の位置は $x(z)$ 、傾きは $x'(z) = dx/dz$ で与えられます。位置 x も傾き x' も z の関数ですが、通常 (z) を省略して単に x, x' と記します。位相空間は光子の位置 x と傾き x' からなる二次元空間として定義されます。このように定義された空間では、Fig. 4(b)に示したように、一つの光子の軌道は一個の点で表され、その点は z と共にこの平面内を動いていくことになります。さて、この位相空間を用いると、光子集団の運動を容易に記述することができます。Fig. 5は $z = z_0$ における多数の光子の軌道についてプロットしたものです。通常、この点の分布は二次元的なガウス分布をしています。スリットなどで人工的にビームを切り出したりするとガウス分布ではなくなります。一般には、点を多数プロットするかわりに、ガウス分布の分散 σ に対応する境界を Fig. 5の実線のように楕円で示します。この楕円の形は、発散ビームのときは Fig. 5(a)

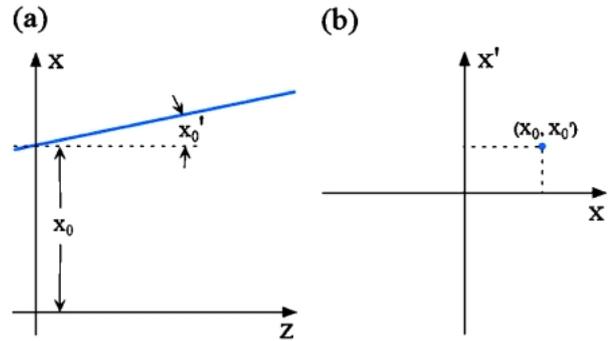


Fig. 4 A trajectory of a photon traveling along z-axis.

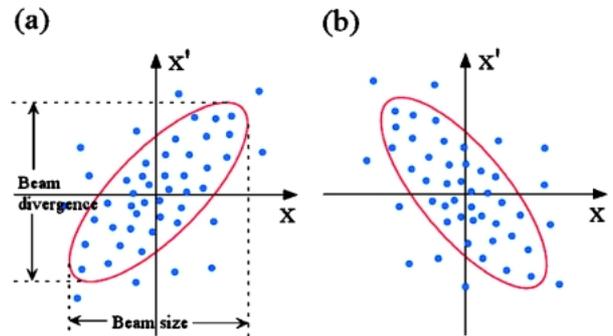


Fig. 5 Phase-space description of (a) a divergent beam and (b) a convergent beam.

のようになり、収束ビームのときは Fig. 5(b)のようになります。この楕円の大きさからビームのサイズや発散を知ることができます。

次に、三次元空間内における光子の運動について考えましょう。光子集団はz軸に対してほぼ平行に進んでいるとします。また、x軸を水平方向、y軸を垂直方向に取ります。このとき、位相空間は (x, x', y, y') という四次元空間になります。この四次元空間をそのまま扱うのは容易ではありませんが、幸いなことに放射光ビームラインではほとんどの場合、この四次元空間を二次元空間 (x, x') と (y, y') に分解して各々を独立に扱うことができます。そのおかげで、Fig. 5のような図を用いて視覚的に光子集団の運動を調べることができるわけです。

3.2 位相空間を用いる利点～エミッタンスの保存則～

読者の中には「なぜ、光子集団の運動を記述するのにわざわざ位相空間なんて概念を持ち出すんだろう？」と疑問に思う方がおられるかもしれません。実は、この位相空間にはとても重要な性質があるのです。例として Fig. 5の楕円を見て下さい。光子集団がビームラインを進むにつれて、この楕円の形は変形していくわけですが、その面積は常に一定に保たれます。これは四次元の位相空間 (x, x', y, y') の場合でも同じであり、その体積は常に一定に保たれます。このことをエミッタンスの保存則あるいはリウビ

ルの定理といいます。ただし、スリットなどを用いて人工的にビームを切り出した場合、この法則は成り立ちません。

このエミッタンスの保存則から一つの重要な結論が導かれます。すなわち、ビームの強度を失うことなく、ビームのサイズと発散の両方を小さくすることはできません。ビームのサイズを小さくしようとするれば発散が大きくなり、発散を小さくしようとするればサイズが大きくなります。ビームのサイズと発散を両方とも小さくするにはスリットなどでビームを人為的に切るしかありませんが、ビーム強度は弱くなってしまいます。

3.3 光源から放射される光のサイズと発散

位相空間を使って光子集団の運動を調べるには、まず出発点（光源点）における光子集団の分布を知る必要があります。特に光のサイズ $\Sigma_{x,y}$ と発散 $\Sigma_{x',y'}$ が重要です。そこでこれらの量を計算する方法について紹介することにします。これらの量は電子ビームの分布と放射光固有の分布の畳み込み（convolution）で与えられ、電子ビームのサイズ $\sigma_{x,y}$ 、発散 $\sigma_{x',y'}$ 、光子の自然サイズ σ_p 、自然発散 $\sigma_{p'}$ を用いて

$$\Sigma_{x,y} = \sqrt{\sigma_{x,y}^2 + \sigma_p^2}, \quad \Sigma_{x',y'} = \sqrt{\sigma_{x',y'}^2 + \sigma_{p'}^2} \quad (6)$$

と書くことができます。電子ビームに関する量 ($\sigma_{x,y}$ と $\sigma_{x',y'}$) は放射光施設の資料などに記載されています。他方、光子に関する量 (σ_p と $\sigma_{p'}$) は光源ごとに異なります。そこで偏向電磁石とアンジュレータについて、さらに詳しく見ていくことにしましょう。

(A) 偏向電磁石の場合

偏向電磁石から放射されるパワーはほぼ $\pm 1/\gamma$ の領域に集中しています。ここで電子の蓄積エネルギーを $E(\text{GeV})$ とすると γ は

$$\frac{1}{\gamma} = \frac{0.511}{E(\text{GeV})} \text{ (mrad)} \quad (7)$$

で与えられます。SPring-8 では $E = 8 \text{ GeV}$ なので $1/\gamma = 0.064 \text{ (mrad)}$ 、PF では $E = 2.5 \text{ GeV}$ なので $1/\gamma = 0.2 \text{ (mrad)}$ となります。さて、光子の自然発散ですが、次式で与えられます。

$$\sigma_{p'} \approx \frac{0.565}{\gamma} \left(\frac{\lambda}{\lambda_c} \right)^{0.425}$$

$$\lambda_c = \frac{4\pi\rho}{3\gamma^3} \quad (8)$$

ここで ρ は円軌道の曲率半径、 λ_c は臨界波長です。次に

光子の自然サイズは

$$\sigma_p = \frac{\lambda}{4\pi\sigma_{p'}} \quad (9)$$

となります。

例として PF の BL-15C ($\rho = 8.66 \text{ m}$) について計算してみましょう。光のエネルギーは 10 keV とします。PF の資料を調べると、電子ビームに関する量は $\sigma_x = 0.203 \text{ mm}$ 、 $\sigma_y = 0.061 \text{ mm}$ 、 $\sigma_{x'} = 0.245 \text{ mrad}$ 、 $\sigma_{y'} = 0.0125 \text{ mrad}$ となっています。

$$\lambda = \frac{12.4}{10} = 1.24 \text{ \AA}$$

$$\lambda_c = \frac{4 \times 3.14 \times 8.66 \text{ m}}{3 \times 4892^3} = 3.1 \times 10^{-10} \text{ m} = 3.1 \text{ \AA}$$

$$\sigma_{p'} = \frac{0.565}{4892} \left(\frac{1.24 \times 10^{-10} \text{ m}}{3.1 \times 10^{-10} \text{ m}} \right)^{0.425} = 7.82 \times 10^{-5} \text{ rad}$$

$$= 0.0782 \text{ mrad}$$

$$\sigma_p = \frac{1.24 \times 10^{-10} \text{ m}}{4 \times 3.14 \times 7.82 \times 10^{-5} \text{ rad}} = 0.126 \times 10^{-6} \text{ m}$$

$$= 0.126 \text{ \mu m}$$

$$\Sigma_x \approx \sigma_x = 0.203 \text{ mm}$$

$$\Sigma_y \approx \sigma_y = 0.061 \text{ mm}$$

$$\Sigma_{y'} = \sqrt{(0.0125 \times 10^{-3})^2 + (0.0782 \times 10^{-3})^2}$$

$$= 7.9 \times 10^{-5} \text{ rad} = 0.079 \text{ mrad}$$

(B) アンジュレータの場合

アンジュレータから放射される n 次の光（波長 λ_n ）の自然発散と自然サイズは、アンジュレータの周期 N と周期長 λ_u を用いて

$$\sigma_{p'} = \sqrt{\frac{\lambda_n}{2N\lambda_u}} = \sqrt{\frac{\lambda_n}{2L}}$$

$$\sigma_p = \frac{\sqrt{2N\lambda_u\lambda_n}}{4\pi} = \frac{\sqrt{2L\lambda_n}}{4\pi} \quad (10)$$

で与えられます。ここで $L (L = N\lambda_u)$ はアンジュレータの長さです。

例として PF の BL-3A について計算してみましょう。BL-3A に設置されているアンジュレータのパラメーターは $\lambda_u = 18 \text{ mm}$ 、 $N = 26$ ($L = 468 \text{ mm}$) であり、そこから放射される 10 keV の光（5 次光）について計算することにします。PF の資料を調べると、電子ビームに関する量は $\sigma_x = 0.582 \text{ mm}$ 、 $\sigma_y = 0.01 \text{ mm}$ 、 $\sigma_{x'} = 0.072 \text{ mrad}$ 、 $\sigma_{y'} = 0.026 \text{ mrad}$ となっています。

$$\lambda_n = \frac{12.4}{10} = 1.24 \text{ \AA}$$

$$\sigma_{y'} = \sqrt{\frac{1.24 \times 10^{-10} \text{ m}}{2 \times 0.468 \text{ m}}} = 1.15 \times 10^{-5} \text{ rad} = 0.012 \text{ mrad}$$

$$\sigma_p = \frac{\sqrt{2 \times 0.468 \text{ m} \times 1.24 \times 10^{-10} \text{ m}}}{4 \times 3.14} = 0.86 \times 10^{-6} \text{ m}$$

$$= 0.86 \text{ } \mu\text{m}$$

$$\Sigma_x \approx \sigma_x = 0.582 \text{ mm}$$

$$\Sigma_y \approx \sigma_y = 0.01 \text{ mm}$$

$$\Sigma_x = \sqrt{(0.072 \text{ mrad})^2 + (0.012 \text{ mrad})^2} = 0.073 \text{ mrad}$$

$$\Sigma_y = \sqrt{(0.026 \text{ mrad})^2 + (0.012 \text{ mrad})^2} = 0.029 \text{ mrad}$$

3.4 位相空間による光子集団の運動の記述

さて、光源を出た光がビームラインをどのように進んでいくのか、位相空間を利用して調べることにしましょう。ここでは垂直方向の位相空間 (y, y') について説明しますが、水平方向の位相空間 (x, x') についても同じ議論が成り立ちます。

(A) 自由空間の伝搬

まず光子が自由空間を進んでいく場合について考えましょう。このとき、軌道の傾き y' は不変です。しかし、 z 軸に沿って進んだ距離を l とすると、 y 座標は y' だけ増加することになります。そこで始点を (y_1, y'_1) とし、終点を (y_2, y'_2) とすると、

$$\begin{pmatrix} y_2 \\ y'_2 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & l \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y'_1 \end{pmatrix} \quad (11)$$

という関係式が成り立ちます。光子集団について考えると、すべての光子が上式にしたがって運動するので、始点の集合が Fig. 6(a) のようだったとすると、終点の集合は Fig. 6(b) のようになります。3.2節で述べたように、始点と終点で楕円の面積は同じです (エミッタンス保存)。これは式(11)の変換行列の行列式が 1 となることからわかります。

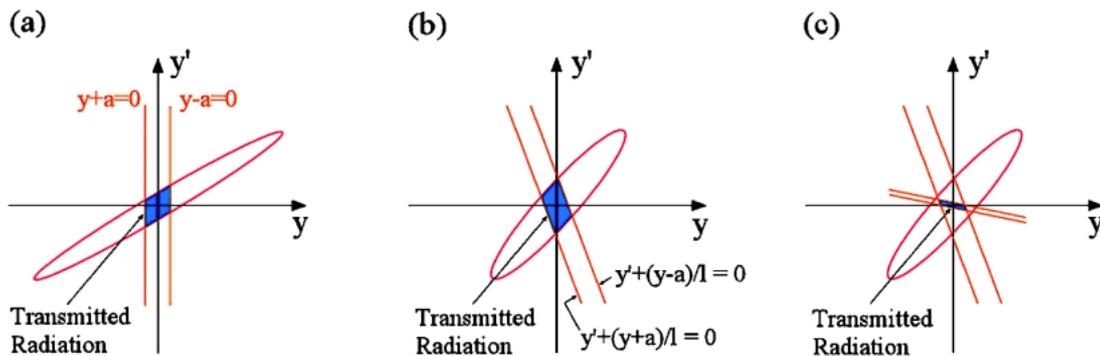


Fig. 6 Phase-space description of a drift space. The phase ellipse of photons traveling through a drift space is transformed from (a) to (b).

(B) スリットの影響

光源から距離 l の点に幅 $2a$ のスリットを置いたとき、そのスリットは Fig. 7(a) のように二本の垂直な線で表されます。そして、この二本の線の間にある領域だけが透過できることになります。スリットで切り出される領域を光源点に逆投影すると (Fig. 7(b)), スリットのエッジは次式で与えられます。

$$y' + (y-a)/l = 0$$

$$y' + (y+a)/l = 0 \quad (12)$$

Fig. 7(b) からわかるように、スリット幅 ($2a$) をいくらゼロに近づけても、ビームの角度発散はある値以下にはなりません。角度発散をさらに絞りたい場合、もう一つスリットを追加する必要があります。光源から距離 l' の位置に幅 $2a'$ のスリットを追加した場合を Fig. 7(c) に示します。ビームの角度発散が抑えられている様子がわかります。

(C) 集光素子の効果

集光素子は一種のレンズとみなすことができます (Fig. 8)。レンズではビームの方向だけが変化し、その直前と直後でビーム位置は変わりません。また、軸に平行な光線は

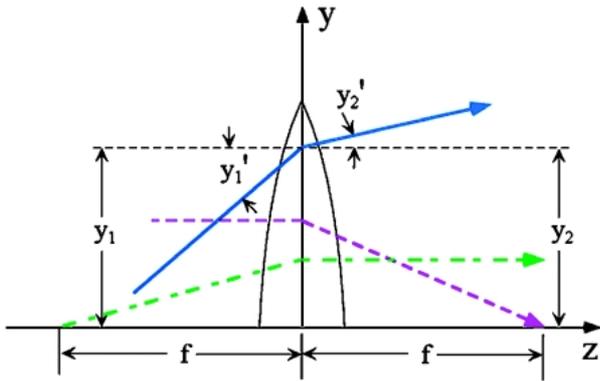


Fig. 8 Real-space description of a thin lens.

焦点に集まり、逆に焦点から出た光は軸に平行な光線となります。以上の点を考慮すると、

$$\begin{pmatrix} y_2 \\ y_2' \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1/f & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_1' \end{pmatrix} \quad (13)$$

という関係式が成り立つことになります。ここで f は焦点距離であり、収束の場合は正の値、発散の場合は負の値を取ります。ここでも集光素子の変換行列の行列式は 1 であり、集光素子の前後で位相楕円の面積は変わりません (エミッタンス保存)。

さて、集光素子によって光源点がどのように焦点に投影されるか見てみましょう。光源から集光素子までの距離を p 、集光素子から焦点までの距離を q とします。光源から出た光は、まず p の距離を進んで集光素子に到達し、集光素子で方向変換を受けた後、 q の距離を進んで焦点に到達します。この一連の過程は行列の掛け算で表せます。

$$\begin{pmatrix} y_2 \\ y_2' \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & q \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1/f & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & p \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_1' \end{pmatrix} \quad (14)$$

このように行列の掛け算で光子の運動を追跡できることも、位相空間の大きな利点の一つです。ここで $1/f = 1/p + 1/q$ という関係式を用いて (14) 式を展開すると

$$\begin{pmatrix} y_2 \\ y_2' \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} -q/p & 1 \\ -1/p - 1/q & -p/q \end{bmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_1' \end{pmatrix} \quad (15)$$

となります。この式から、光源の倒立像が倍率 $M = q/p$ で焦点に形成されることがわかります。参考までに、光源点、集光素子直前、集光素子直後、焦点における位相楕円の様子を Fig. 9 に示します。

(D) 分光結晶の影響

白色光を単色化する分光結晶の働きは、位相空間ではど

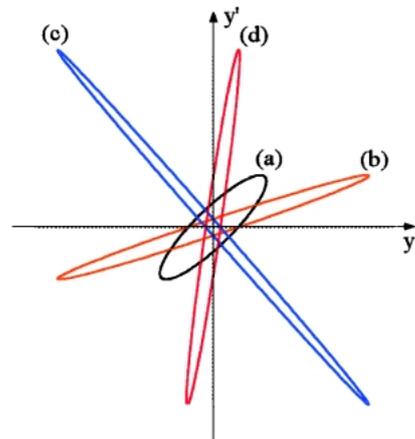


Fig. 9 Phase ellipses (a) at the source, (b) right before the focusing element, (c) right after the focusing element and (d) at the focus.

のように表現されるのでしょうか？ 実はこの場合、波長 λ の影響が重要になるため、これまで述べてきた $x-x'$ や $y-y'$ という位相空間では不十分になります。その代わりによく用いられるのが角度-波長空間です (DuMond 図形, 第 5 回の Fig. 4 と Fig. 6 参照)。ちなみに、位相空間と DuMond 図形を組み合わせた $x-x'-\lambda$ や $y-y'-\lambda$ という三次元空間も考案されており、それらを用いることにより分光結晶が光子集団に及ぼす影響を正確に扱うことができます。紙面の都合により本稿では割愛しますが、興味のある方は文献[14]をご覧ください。

4. ビームラインで得られる光の特性を計算する方法～光線追跡プログラム SHADOW について～

これまで述べてきた方法はいずれも近似であり、ビームの強度、サイズ、発散を粗く見積もるのに役に立ちますが、正確な数値を算出することはできません。では、正確に計算するにはどうすればいいのでしょうか？ ここで登場するのが光線追跡法 (ray tracing) です。光線追跡法は幾何光学に基づくシミュレーション技法です。Fig. 10 に示すように、所定の光源から放射された光線を考え、その光線の位置・方向・強度などがビームラインの光学素子によってどのように変化していくかを計算で追跡します。通常、数千から数万の光線について計算を行い、像面におけるビームの強度、形、発散などを算出します。

光線追跡プログラムは色々と開発されていますが¹⁵⁻¹⁷⁾、その中でも最も有名なものが SHADOW です¹⁸⁻¹⁹⁾。SHADOW は 1980 年代後半に Wisconsin 大学の Cerrina らによって開発されました。多くの人が SHADOW の動作検証を行ったところ、正しい計算結果を与えることが相次いで報告されました。こうして人々の信頼を得た

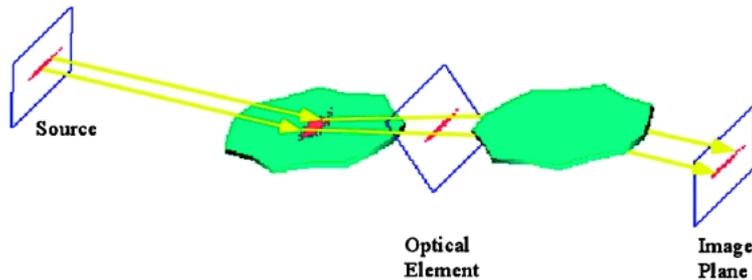


Fig. 10 Ray-tracing process. Physical quantities of rays, such as position, direction, intensity, phase, polarization and so on, are traced from the source to the image plane by numerical calculations.

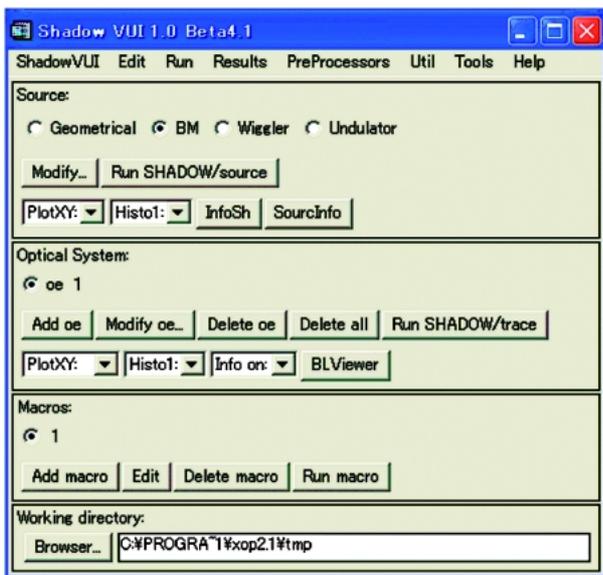


Fig. 11 The main Shadow VUI window.

SHADOW は、その後世界中の人々から利用されるようになり、今では光線追跡プログラムの世界標準としての地位を確立しています。SHADOW の改良も少しずつ行われています。中でも特に重要だったのはユーザーインターフェースの改良でしょう²⁰⁻²¹⁾。SHADOW は当初 CUI (Character User Interface) だったため、操作性はあまり良くありませんでした。これが初心者を遠ざける大きな要因の一つになっていたように思われます。そこで操作性を改善するために、ESRF と APS の研究者たちが共同で SHADOW に GUI (Graphical User Interface) を組み込む作業を行いました。その努力は Shadow VUI (Visual User Interface for SHADOW) というフリーのソフトとして実を結びました (Fig. 11)。マニュアルなども整備され、チュートリアルにしたがって学習を進めていけば基本的な操作方法は一通りマスターできるようになっています。この Shadow VUI のおかげで、初心者でも手軽にビームに関する諸々の物理量 (強度, 形, 発散, 位相, 偏光, エネルギー分解能など) を計算できるようになりました。ビームラインに対する理解を深めて研究に役立てるために、あな

たも Shadow VUI を使って光線追跡をしてみたいでしょうか。このシリーズをここまで読み進んでこられた読者なら、必ずできるはずです!

SHADOW は非常に優れたプログラムですが、改良を要する点もいくつかあります。第一に、SHADOW ではコヒーレントビームを扱うことができません。現在、世界各地で X 線自由電子レーザー (XFEL) の計画が進められています。XFEL の大きな特長の一つは空間的にコヒーレントなビームが得られることです。したがって残念なことに、XFEL では SHADOW を用いることはできません。第二に、SHADOW はビームのパルス構造を扱うことができません。従来の放射光施設ではビームのパルス幅は数十ピコ秒～数百ピコ秒だったので特に問題は生じませんでした。パルス幅が数フェムト秒～数百フェムト秒となる XFEL では話が変わってきます。XFEL の場合、光学素子がパルス構造に及ぼす影響を無視できなくなるのです。このように SHADOW にはビームのコヒーレンスや時間構造を扱えないという問題があるため、XFEL の登場を間近に控えた今、SHADOW に代わる新しいプログラムの登場が待ち望まれています。

4. おわりに

ビームライン光学技術シリーズを締め括るにあたり、放射光ユーザーの皆様へ 3 つの質問をしたいと思えます。

質問①「ご利用のビームラインで得られる光の性質 (ビームサイズ, 強度, エネルギー, エネルギー幅, 偏光, コヒーレンス, 時間特性…) のうち、あなたの実験にとってどれが最も重要でしょうか?」

質問②「ご利用のビームラインの光の性質であなたが最も満足できるものと最も不満なものは何でしょうか?」

質問③「光のどの性質が現状と比べどの程度向上すれば、あなたが新たに観測したい物理量を捉えられるようになるでしょうか?あるいは測定効率を向上できるでしょうか?」

こうした観点からこのシリーズを読み返してみたいでしょうか? あなたの実験に必要な光の性質を読み解く基礎知識が紹介されています。新たな実験装置のヒント

が得られるかもしれません。

紙面の都合で残念ながら収録できなかった多くの事例や、失敗談を盛り込んだ単行本を企画しています。皆様からの質問や意見をどうぞお寄せください。

最後に、読者の皆様ならびに、編集担当からの無理難題を快く引き受けて下さった各回執筆者に深く御礼申し上げます。

参考文献

- 1) T. Tanaka and H. Kitamura: AIP Conf. Proc. **879**, 355 (2006),
- 2) <http://radiant.harima.riken.go.jp/spectra/index.html>
- 3) M. Sanchez del Rio and R. J. Dejus: SPIE Proc. **3152**, 148 (1997).
- 4) M. Sanchez del Rio and R. J. Dejus: AIP Conf. Proc. **705**, 784 (2004).
- 5) <http://www.esrf.eu/computing/scientific/xop2.1/>
- 6) S. Sasaki: KEK Report 90-16 (1990).
- 7) B. L. Henke et al.: At. Data Nucl. Data Tables **54**, 181 (1993).
- 8) <http://www-cxro.lbl.gov/>
- 9) <http://physics.nist.gov/>
- 10) http://www-cxro.lbl.gov/optical_constants/
- 11) <http://physics.nist.gov/PhysRefData/FFast/Text/cover.html>
- 12) M. Sanchez del Rio and O. Mathon: SPIE Proc. **5536**, 157 (2004).
- 13) T. Matsushita and U. Kaminaga: J. Appl. Cryst. **13**, 472 (1980).
- 14) T. Matsushita and U. Kaminaga: J. Appl. Cryst. **13**, 465 (1980).
- 15) Y. Muramatsu et al.: KEK Internal Report **87-10** (1988).
- 16) T. Yamada et al.: J. Synchrotron Rad. **8**, 1047 (2001).
- 17) T. Hatsui et al.: J. Elec. Spec. Relat. Phenom **144**, 1059 (2005).
- 18) B. Lai and F. Cerrina: Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. **A246**, 337 (1986).
- 19) C. Welnak, G. J. Chen and F. Cerrina: Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. **A347**, 344 (1994).
- 20) M. Sanchez del Rio and R. J. Dejus: SPIE Proc. **3448**, 340 (1998).
- 21) M. Sanchez del Rio: SPIE Proc. **4501**, 160 (2001).