

解説

準周期アンジュレータの概念設計とスペクトル解析

橋本 眞也*, 高雄 勝**, 小林 秀樹***, 佐々木 茂美**

*高輝度光科学研究センター, **日本原子力研究所, ***信越化学工業(株)

Conceptual Design and Spectrum Analysis of
Quasi-periodic Undulator

Shinya HASHIMOTO*, Masaru TAKAO**,

Hideki KOBAYASHI*** and Shigemi SASAKI**

* JASRI, ** JAERI, *** Shin-Etsu Chemical Co., Ltd.

A quasi-periodic undulator (QPU) has a quasi-periodic array of magnet blocks and generates irrational harmonics but not the rational harmonics. The emitted irrational harmonics can easily be eliminated by conventional crystal monochromators. The radiation power and energy band width of each irrational harmonic radiation from this undulator are comparable with those from the conventional periodic undulator with the same number of magnetic poles. Several papers so far reported on the QPU have been reviewed. That is, the description covers the following three points; 1) Conceptual design, 2) numerical spectrum calculation and 3) analytical equation of spectrum.

1. 光学素子依存の従来の放射光

放射光実験においても、純粹に単色の入射光が欲しいことが多い。その場合、偏向磁石、ウィグラーあるいはアンジュレータが発生する放射光は、広いバンド幅のスペクトルをもっていたり、整数倍の関係にある高調波が強く現れるスペクトルをもっていて、試料にそのまま入射して利用することはできない¹⁻⁶⁾。このため、光源と実験ステーションとの間に光学素子と呼ばれる装置を挿入して光線の性質を変える操作が通常行われる。実験にふさわしい光にするまでには一種類の素子では間に合わずに、数種類の素子を組み合わせなければならぬ場合も多い⁵⁾。すなわち、従来のビー

ムライン設計においては、利用放射光の特性は光学素子で補償することが当然のことと考えられていた。

もし、光学素子を使用しないで、放射光をそのまま試料に当てて実験ができれば、利用者にとっては願ってもないことである。ここで紹介する準周期アンジュレータは、必ずしも究極的な光源ではないが、これによって高エネルギー領域除去の全反射ミラーを一つ外すことができるのである。ちなみに、ミラーによって30 keVを越すエネルギー領域の光を除去しようとするならば、色々な困難に突き当たることに気が付く⁷⁾。それとともに重要なこととして、「アンジュレータは必ず周

*高輝度光科学研究センター 実験部門 〒678-12 兵庫県赤穂郡上郡町金出地 1503-1
TEL 07915-8-0960 FAX 07915-8-0965

期的な磁石配列をとらなければならない」という先入観を捨て去ることができたことをあげることができる⁸⁻¹⁰⁾。

われわれが欲しい入射光は、エネルギー幅が狭い単色光 ($\Delta E/E \sim 10^{-4}$) である。しかし、偏光磁石やウィグラはもちろんのこと、現在のアンジュレータ光でも準単色光とは言われているが、エネルギー幅は桁違いに大きいために、シリコンのように極めて高い結晶性をもつモノクロメータを使わざるを得ない。ところが、結晶モノクロメータには、この利点とは別に致命的な欠陥がある。図1は、結晶によるブラッグ反射を説明したものである。ブラッグの式を見て分かる通り、結晶はその構造にもよるが整数倍のエネルギーをもつ高調波を同じ方向に回折する性質がある。こうして、結晶モノクロメータの前後でのスペクトルは、図2のように模式的に表すことができる。この図か

ら、モノクロメータは入射光線をエネルギー幅の狭い高調波群として素通りさせる一種のバンドフィルタの役割をしていることが分かる。図では、入射光線として連続スペクトルを例にとったが、アンジュレータ光においても事情は同じである。

さて、この高調波を除去するために、これまで、光学素子を利用する幾つかの方法が考えられてきた。以下に、典型的な2つの例を紹介する。第一は全反射ミラーの性質を利用した方法で、第二はモノクロメータ結晶のX線光学的性質を利用したものである。

図3は、全反射ミラーの働きを示す。物質はX線に対して1よりわずかに小さい屈折率をもっているから、真空域から物質表面に入射するX線は全反射を起こすことができる。表面にすれすれに入射したX線は、その角度に依存したあるエネルギー (E_c : 臨界エネルギー) より小さいエネルギー成分は全反射を起こし、それより大きいエネルギーの光はミラーを透過し、また、その過程で吸収もされる。この臨界エネルギーは、入射線の覗き角が小さいほど、またミラー表面の元素が重いほど大きい。第三代放射光施設においては、高エネルギーを利用する頻度が高くなるから、重元素を使っても覗き角は数 mrad 以下になる計算である⁷⁾。したがって、調整には技術的な困難が伴い、ミラー・サイズも長大化し、また反射効率も低下する。

図4は、二結晶モノクロメータを利用して高調

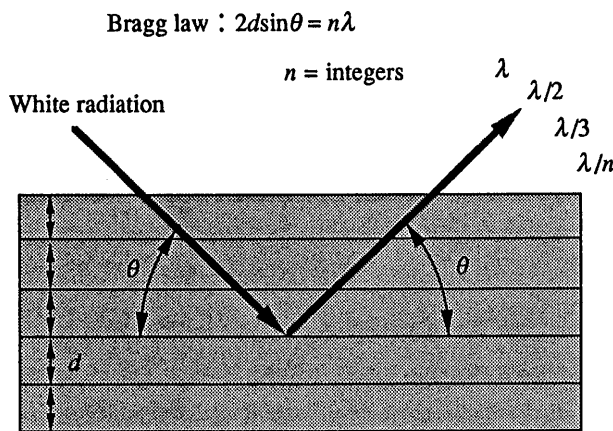


Figure 1. X-ray diffraction. d =inter-plane distance, θ =diffraction angle and λ =wavelength of the first harmonic.

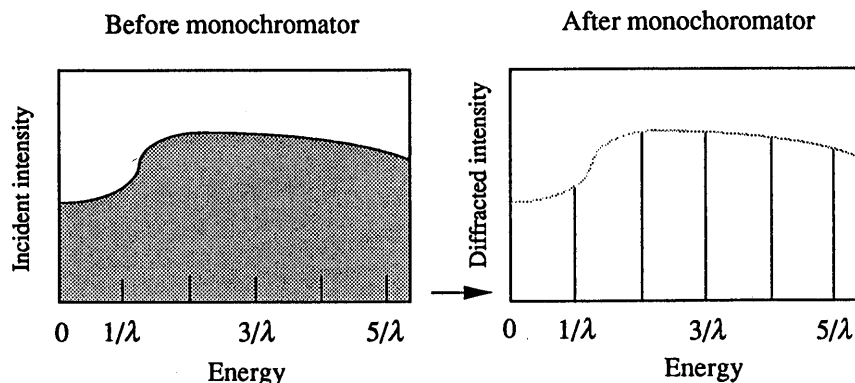


Figure 2. X-ray spectra before and after a monochromator.

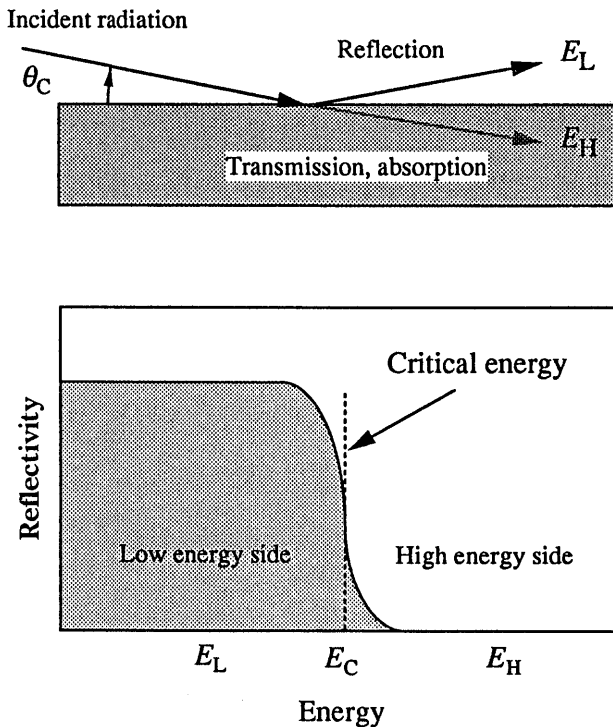


Figure 3. Elimination of the higher energy side of radiation with a total reflection mirror.

波を取り除く方法を示している。反射方向を指定した場合、ダーウィン幅に対応するエネルギー範囲の光だけが反射を起こす^{11, 12)}。この幅は、反射の散乱能に比例するから、高次の反射は狭い幅になる。この性質を利用したのが、デチューニングと呼ばれる方法である。第二結晶をわずかに傾けると、ダーウィン幅の狭い高次光は第二結晶では反射を起こさなくなる¹¹⁾。これに対して、低次光のほうは強度は落ちるが、依然として反射条件を満たす重なり部分をもつから、かろうじて取り出すことができる。この方法の欠点は、強度を犠牲にすることと調整が微妙なことである。

以上の2つの方法のように、止むを得ず新たな光学素子を導入する解決法は、必ず光学性能の劣化を伴い、操作性も悪くしてマシントイムの浪費を引き起こすので、高エネルギー領域では是非とも避けたい仕事である。

2. 高調波除去法の新たな原理

先に、結晶モノクロメータにはバンドフィルタとしての性質があることを述べた。もし、アンジュ

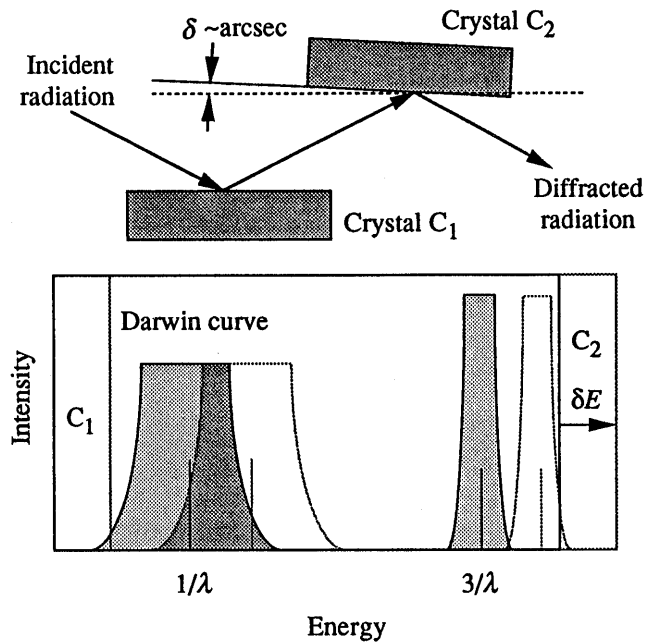


Figure 4. Elimination of the higher harmonics of radiation with a double crystal monochromator detuned by δE .

レータ光の高調波とモノクロメータの高次反射のエネルギー値が、注目したエネルギー・ピークにおいてのみ一致していて、他のピークでは、何らかの理由で外れている（ミスマッチしている）とすれば、高調波は遮断されてしまうから、純粋に単色の光を得ることができる。

固体物質には準結晶と呼ばれるものがある¹³⁻¹⁵⁾。準結晶からのX線散乱は、結晶と同様にきわめて鋭い回折斑点として観測されるが、逆空間における斑点の配置は周期的ではない。もし、この準結晶をモノクロメータとして使えば、上で述べたように、高次ピークのエネルギー関係にミスマッチが生じて、選ばれたエネルギー・ピークだけが反射を起こすことになる。この様子を図5a)に示した。ところが、シリコン・モノクロメータに匹敵するほど良質（大きさ、結晶性）の準結晶を得ることは現在よりも将来においても不可能であって、図5a)の構成は高エネルギーX線領域の高分解能装置として実現することはないと考えられる。

原理的には、周期-非周期の関係をアンジュレータとモノクロメータの間に入れ替えても同じこと

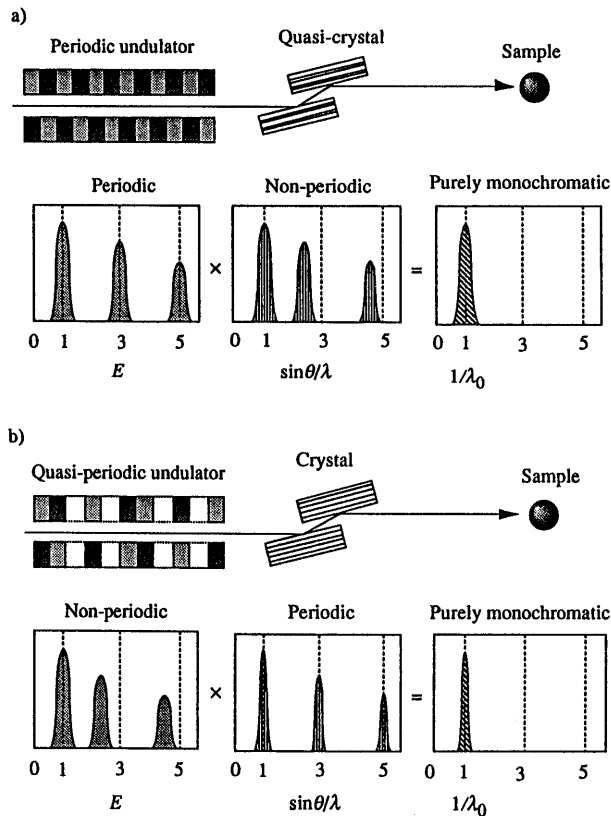


Figure 5. Elimination methods of the higher harmonics a) by a combination of a periodic undulator and a quasi-crystal and b) by a combination of a quasi-periodic undulator and a crystal.

であるから、アンジュレータのほうに準周期性をもたせ、モノクロメータには従来のシリコン結晶を用いてもエネルギーのミスマッチの事情は同じである。図5b)にその構成を示した。アンジュレータは、本来、人工的なものであるから磁石片をどの様に並べるかは自由である。ここに、磁石を準周期的に配列して準周期スペクトルをもつアンジュレータを作ろうという試みがはじまった。

磁石の配置を準周期的に並べるとスペクトルが準周期的になることが予想できるのは、次のような理由からである。アンジュレータ放射光のスペクトルは、アンジュレータから充分遠い観測点で、

$$\frac{d^2 I(\omega)}{d\omega d\Omega} = \frac{e^2}{16\pi^3 \epsilon_0 c}$$

$$\left| \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathbf{n} \times [(\mathbf{n} - \boldsymbol{\beta}(t)) \times \dot{\boldsymbol{\beta}}(t)]}{(1 - \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\beta}(t))^2} e^{i\omega[t - \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}(t)/c]} dt \right|^2, \quad (1)$$

のように与えられる¹⁶⁾。ここで、 \mathbf{n} は観測者方向の単位ベクトル、 $\mathbf{r}(t)$ は時刻 t における電子の位置ベクトル、そして、 $\boldsymbol{\beta}(t)$ はそこでの電子の速度ベクトルである。この式は、物質からのX線散乱強度式

$$I(q) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \rho(r) e^{2\pi i q r} dr \right|^2, \quad (2)$$

と非常によく似た形をしている¹⁷⁾。(1)式では、アンジュレータの磁極付近で値をもつ関数 $\mathbf{n} \times [(\mathbf{n} - \boldsymbol{\beta}(t)) \times \dot{\boldsymbol{\beta}}(t)] / (1 - \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\beta}(t))^2$ を、電子と光との間の時間差についてフーリエ積分を行っている。周期的磁極配置をもつアンジュレータが整数倍の高調波エネルギーを含むのはこのためである。準結晶を散乱試料とした場合に回折強度分布が準周期分布を取ることが知られていることから類推して、準周期の磁極配置をもつアンジュレータからは準周期の高調波エネルギー値をもつエネルギー・ピークが得られることが予想される。

3. 準周期構造と散乱強度⁸⁾

3.1 準周期発生の原理

準周期格子をもつ物質からのX線散乱強度を求めることと、準周期アンジュレータのスペクトルを求めることはきわめて類似していることがわかったので、ここでは、アンジュレータの磁極配置の設計に入る前に、結晶学で知られている準結晶の性質を復習することにする。

準周期格子を作る見通しのよい方法は、投影法と呼ばれるものである。次元の高い空間における周期構造をより低い次元の空間に投影するというものであるが、その最も簡単な例は、2次元正方格子を1次元直線上に投影するものである。図6は、2次元xy空間に格子定数 a の正方格子を作り、それをx軸から角度 α だけ傾いた直線AA'に投影して準周期配列を作る過程を説明したものである。図の中の○印は正方格子を組んでいるが、一種の結晶格子と考えてよい。準周期を作る

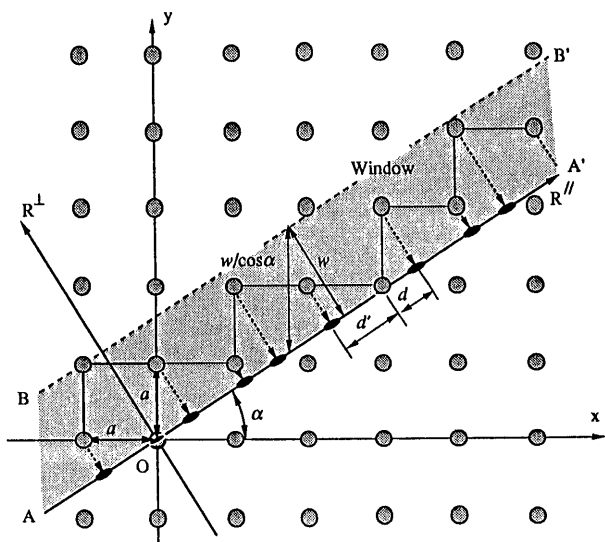


Figure 6. Creation of a one dimensional (1D) quasi-periodic array on AA' through a projection of a 2D regular lattice within the window AA'B'B.

基本は、直線 AA' を原点以外の新たな格子位置を決して通らないように傾けること、すなわち、 $\tan \alpha$ を無理数値に取ることである。

次に、どの格子点を投影するかを選ぶ。もし、全ての格子点を投影すると一様分布になってしまう。一般的な準結晶モデルでは、図6のように、直線 BB' を直線 AA' に平行に適当な距離 w だけ離して引き、その2直線に挟まれた格子点だけを選んで投影する操作がなされる。直線 AA' 上には、とびとびにしかも非周期的な格子点配列が現れる。領域 AA'B'B をウィンドウと呼び、直線 AA' を R'' 軸、それに垂直な軸を R^+ 軸と呼ぶのが慣わしである。図6では、準結晶の例にならってウィンドウ幅 w を正方単位胞が挟まれる広さにとっている。この場合、AA' 上の格子点は2種類の格子間距離 d' と d ($d'/d=1/\tan \alpha$) をもって非周期的に配列する。これは準周期配列と呼ばれている。もちろん、アンジュレータの設計では、幅 w は必ずしもこのように選ぶことは絶対的な条件ではない。

とりあえず、図6の幾何学にしたがって話を進めることにする。原点から数えて m 番目の格子点位置は R'' 軸上で

$$R_m'' = ma \cos \alpha + a(\sin \alpha - \cos \alpha) \left\lfloor \frac{m \tan \alpha}{1 + \tan \alpha} + 1 \right\rfloor, \quad (3)$$

のように表される。ここで、特殊な括弧 $\lfloor \dots \rfloor$ は最大整数を意味する。また、この点と R'' 軸との距離にあたる R^+ 座標は

$$R_m^+ = -ma \sin \alpha + a(\sin \alpha - \cos \alpha) \left\lfloor \frac{m \tan \alpha}{1 + \tan \alpha} + 1 \right\rfloor, \quad (4)$$

のように書ける。

さて、(3)式で表される配列をとった散乱点のフーリエ変換をすれば、回折強度が求められるが、(3)式を直接フーリエ変換する操作は見通しの良い方法ではない。もとの2次元正方格子の周期性を式の中に残したままフーリエ変換式を導く方法を以下に示し、将来、準周期アンジュレータを設計する場合の見通しを与える。

まず、ウィンドウ内の2次元格子点分布を $E(\mathbf{R})$ と書き、次のように表現する。

$$E(\mathbf{R}) = S(\mathbf{R})V(\mathbf{R}), \quad (5)$$

ここで、 $S(\mathbf{R})$ は図6の(2次元空間の)全体に渡って広がった格子点(仮に、 N 個)の分布を表し、

$$S(\mathbf{R}) = \sum_{I=1}^N \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_I), \quad (6)$$

のように表現される。(5)式の $V(\mathbf{R})$ はウィンドウ領域を指定する階段関数

$$V(R'', R^+) = \begin{cases} 1, & 0 \leq R^+ < w, \\ 0, & \text{その他,} \end{cases} \quad (7)$$

である。直線 AA' すなわち R'' 軸上への投影は

$$P(R'') = \int_{-\infty}^{\infty} E(R'', R^+) dR^+, \quad (8)$$

で表される。

この $P(R'')$ をフーリエ変換したものが散乱振幅であり、その絶対値の2乗が強度分布となる。図7に、この式のフーリエ変換の方法を示した。図の q'' および q^+ はそれぞれ R'' および R^+ に平行な軸である。 q'' 軸に垂直の短い斜線を○印で示した逆格子点を通るように無数に描いたが、これは、(5)式の $E(\mathbf{R})$ のフーリエ変換

$$e(\mathbf{q}) = s(\mathbf{q}) * v(\mathbf{q}), \quad (9)$$

を表したものである。 $(*)$ は畳み込みを意味する。図中の○逆格子点は、 $S(\mathbf{R})$ のフーリエ変換

$$s(\mathbf{q}) = N \sum_{J=-\infty}^{\infty} \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_J), \quad (9)$$

を表し、各逆格子点を中心とした斜線の太さおよび長さは、 $V(\mathbf{R})$ のフーリエ変換

$$\begin{aligned} v(\mathbf{q}) &= \int_{-\infty}^{\infty} V(\mathbf{R}) \exp(-2\pi i \mathbf{q} \cdot \mathbf{R}) d\mathbf{R} \\ &= \int_0^w \int_0^L \exp\{-2\pi i (q'' R'' + q^+ R^+)\} dR'' dR^+ \\ &= \frac{\sin(\pi L q'')}{\pi q''} \frac{\sin(\pi w q^+)}{\pi q^+} \exp(\phi) \quad (10) \end{aligned}$$

で記述される。ここで、右辺の第一因子はウィンドウを R'' 軸に沿った長さ L で切断したことによって現れる関数であり、第二因子は有限のウィンドウ幅 w によるものである。位相因子 $\exp(\phi)$ はウィンドウをどの位置に取るかで決まるものであるが、強度には現れず意味のない量である。図7の各逆格子点を中心とした斜線は L が大きい場合に狭い幅 ($1/L$) となり、 w が大きい場合に長さは短くなる ($1/w$)。したがって、図の影を施した領域に入る2次元逆格子点に由来する斜線の裾だけが q'' 軸と交差するから、 q'' 軸上では、周期性をもたないとびとびの強度斑点として現れる

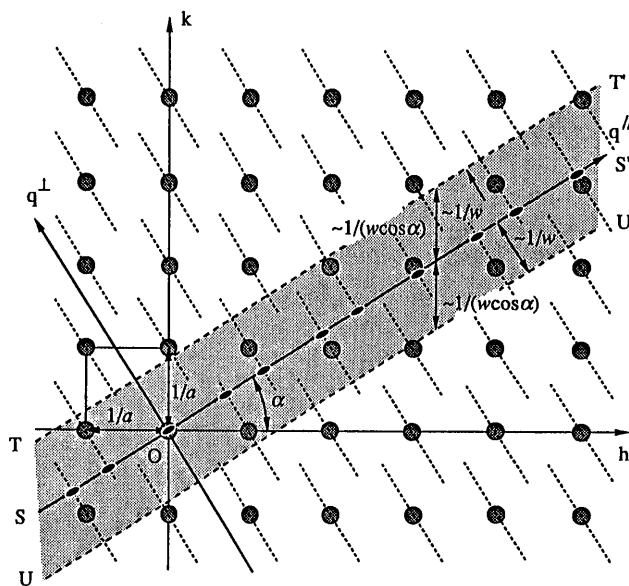


Figure 7. Fourier transformation of the figures in Fig. 6. A quasi-periodic array appears on the q'' axis.

ことになる。

以上が、準結晶の形成とそのフーリエ変換として準周期回折斑点(反射)が現れる原理である。

3.2 磁極配列への応用

3.1節では、一種類の散乱点が準周期配列を作るとごく単純な場合を例にして原理的な説明をした。しかし、アンジュレータにおいては、準結晶とは違った新たな性質を追加する必要がある。第一に考慮しなければならないことは、電子の軌道をアンジュレータの出口でもとの軌道に戻すことである。正負逆向きの磁場が等しい重みで存在すればこれは満足されるが、単純には、強さの等しい正磁極と負磁極を同数並べることが思いつく。さらに、それらが交互に(あるいは一様に)分布すれば、発光点(あるいは電子軌道)の光軸からのズレは小さくなって好都合のはずである。こうして、基本となる2次元格子として、図8のように正負2種類の散乱点を交互に分布させたものを想定してみる。単位胞は図に示したように $a' = a\sqrt{2}$ の格子定数を持ち45度傾いた正方形に取ることができる。したがって、この単位胞を含むようにウィンドウの幅を取ることもできるが、ここでは、先

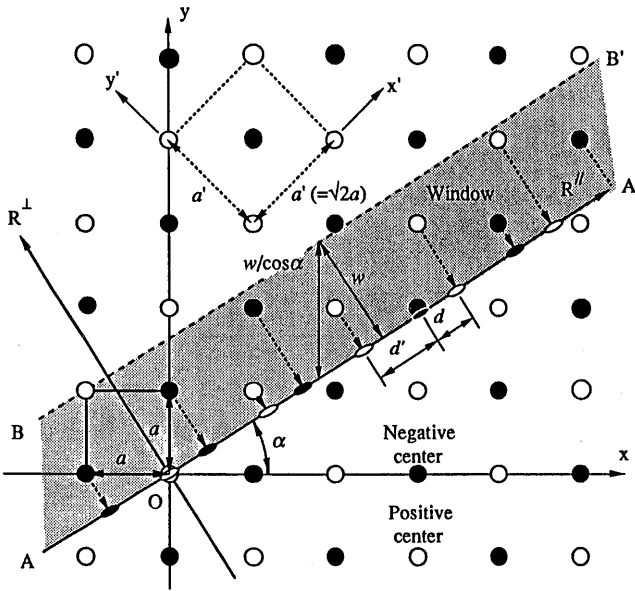


Figure 8. Creation of a 1D quasi-periodic array from a 2D ordered lattice with positive and negative scattering centers. ○=positive center and ●=negative center.

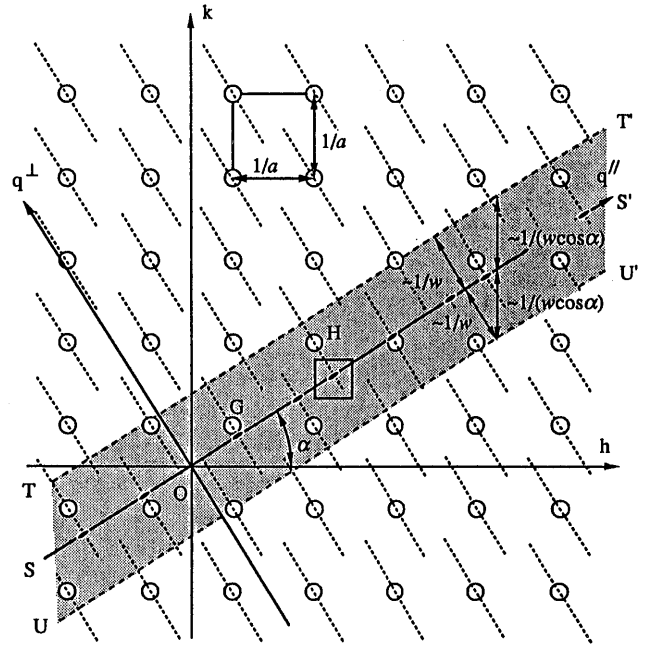


Figure 9. Fourier transform of a model structure of positive and negative scattering centers.

の例と対応させるために依然として a を定数とする正方形を含むウィンドウを取ることにする。(ウィンドウの幅をどのように取るかによって異なる準周期の磁石配列とそれに対応するスペクトルが得られる。) ウィンドウ $AA'B'B$ に含まれる散乱点を R'' 軸に投影すると、正と負の散乱点は交互に準周期的に分布することになる。したがって、これらを磁極に対応させると上で述べた条件を満たした磁極配列となる。上の2次元格子は正負二種類の散乱点からなる一種の規則構造であり、そのフーリエ変換は単一種散乱点の場合と違った特徴をもっている¹⁰⁾。図9にフーリエ変換を図式化したものを与える。2次元規則構造のフーリエ変換は、一種の消滅則と規則格子斑点の出現によって、奇数の指数をもつ逆格子点上にのみ値をもつ分布を与える。その各点に、 $1/w$ の長さをもつ斜線がのることになる。これらの斜線が q'' 軸と交差した位置での値が準周期配列のフーリエ変換であり、この分布がアンジュレータから放射される光のスペクトルに対応する。

さて、図9中の逆格子点を通る斜線は長さ方向に(10)式の第二因子で表される分布をもっていることを思いだそう。この減衰曲線をグラフに描く

と図10のようになる。したがって、格子点から伸びた線の q'' 軸との交点における値は、格子点に近いほど大きく、先端に行くほど小さい。図9のスペクトルでは、G点に最低エネルギーの比較的強いピークが現れることを示している。

図9の q'' 軸上を詳細に見ていくと、小さい正方形で囲んだH点に由来する光に出会う。これを「H光」と呼ぼう。そのエネルギーはG光のちょうど3倍になっている。それ以外の点に関しては、一切このような整数比の関係は生じていない。G光を利用しないことにすれば問題はないのであるが、この整数関係を生じさせないための方法は極めて簡単であるのでそれを手短かに述べることにする。H光が q'' 軸上で値をもたなければよいので、斜線の長さを短くして(ウィンドウ幅 w を広げて)図10のゼロ強度位置が q'' 軸と交差するように決める方法と、第二に、 q'' 軸の傾きを変えてゼロ強度位置が q'' 軸と交差する方法とが可能である。ここでは、これまでの方針としてウィンドウの幅を正方単位胞にするという前提を置いていたので、それを踏襲し後者の解決法を示すことにする。図11は、傾斜角度 α

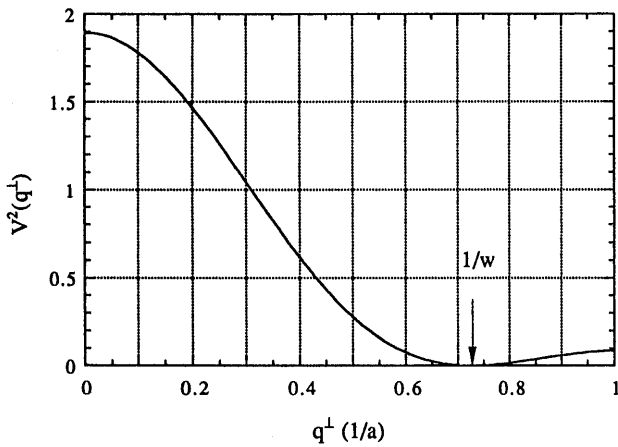


Figure 10. Variation of $V^2(q^+)$.

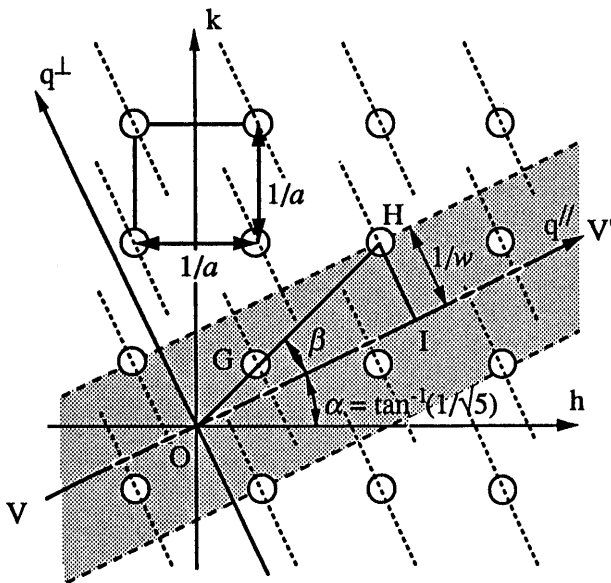


Figure 11. Geometry for eliminating the peak due to H with 3 times the q'' value of the minimum q'' peak of G.

を変えて、H 点の寄与がゼロになるようにした図である。 q'' 軸から H 点までの距離 $IH=1/w$ の関係にある場合で、単純な幾何学から

$$\alpha = \tan^{-1}\left(\frac{1}{\sqrt{5}}\right) \approx 24.0948 \text{ 度}, \quad (11)$$

が得られる。これは、準結晶に類出する $\tan^{-1}(1/\tau)$ に比べると、黄金比 τ は 1.618... であるから、少し小さい角度になる。(11) 式の $1/\sqrt{5}$ は 2 種類の磁極間の距離の比 d/d' でもある。逆空間でのこの幾何学を実現させる実空間における配置は図 12、あるいは、磁石の配列の実際的な形と

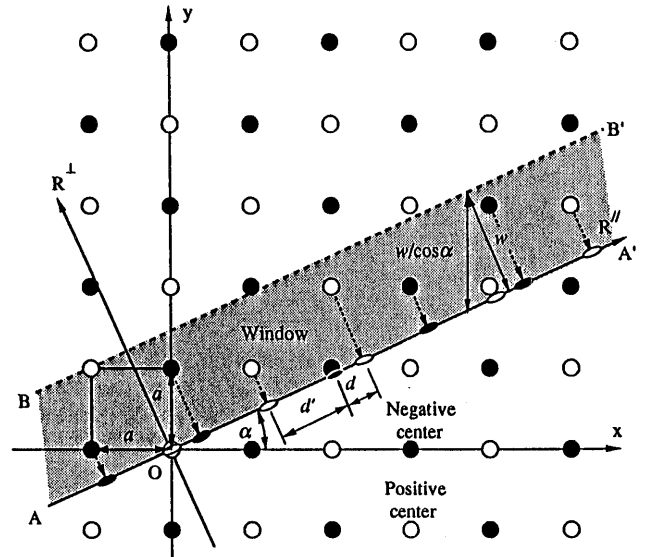


Figure 12. A quasi-periodic array of two kinds of scattering centers not to cause the peak with 3 times the q'' value of the minimum q'' peak.

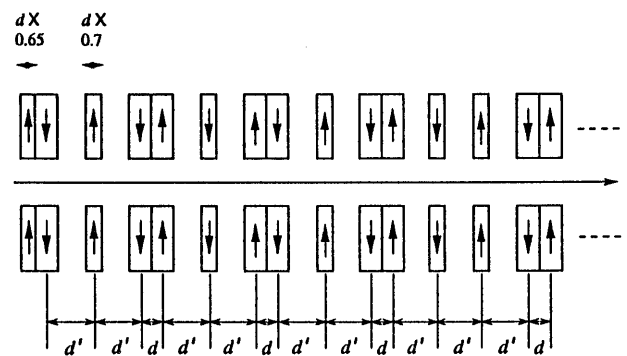


Figure 13. Real magnetic structure for $\alpha = \tan^{-1}(1/\sqrt{5})$.

して図 13 のようになる。ただし、この図は、次章で実行するスペクトル計算に用いた磁石配列モデルである。

4. 準周期アンジュレータからのスペクトル⁹⁾

図 13 には、これから実際的なスペクトル計算に用いる準周期アンジュレータの入り口部分の磁石配列を与えた。磁極の位置は図 12 あるいは(3)式をもとに決めたもので、 $\tan \alpha$ を $1/\sqrt{5}$ の値にとった 3 倍高調波が現れないモデルである。この磁気構造モデルでは、2 つの修正をしている。ひとつは、エンド・マグネットの長さを d の 0.65 倍としたことである。次に、図を見ると明らかのように、磁石間隔が d の場合と d' の場合がある

が、前者の場合は隣り合う磁石間で磁場の打ち消し合いが起こって、 d' の間隔の場合より弱い磁場になっているから、同一磁場強度の準周期配列にはならない。これを補償するために、独立磁石の長さを0.7倍したものに取った。

磁場計算は、条件として表1のパラメータ値を与えて、市販されている計算コード ELF/MAGIC

を用いて行った。これによって得られた磁場変化(実線)と電子軌道(破線)をアンジュレータ軸に沿って描いたものが図14である。ただし、これはアンジュレータ・ギャップを30mmに設定した場合のものである。電子軌道はアンジュレータ軸から若干反れて見えるが、この反れは軌道振動の振幅程度であり、この後に続く磁石によって

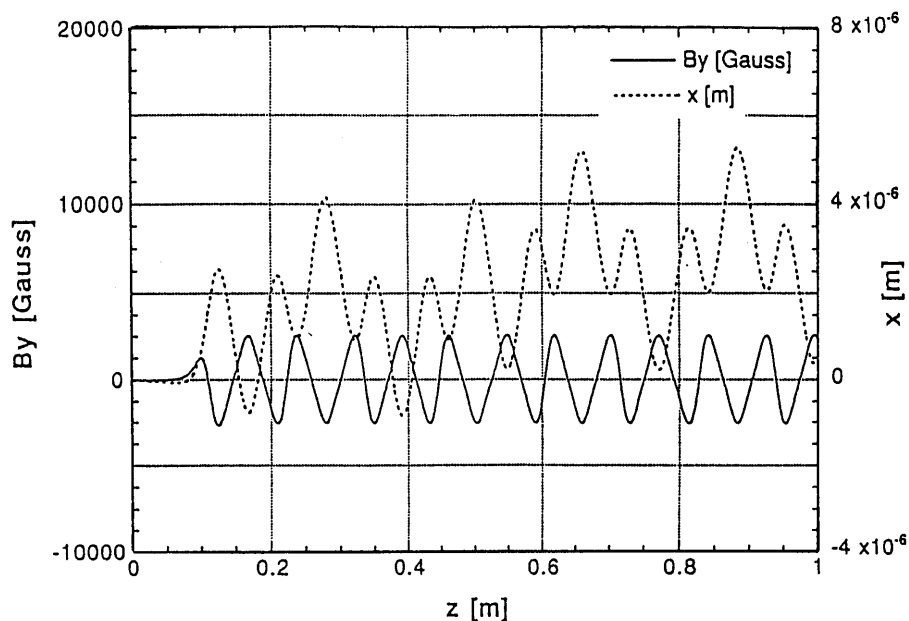


Figure 14. Variations of the magnetic field (full line) and the electron orbit (dotted line) at 8 GeV, 100 mA. Undulator gap = 30 mm.

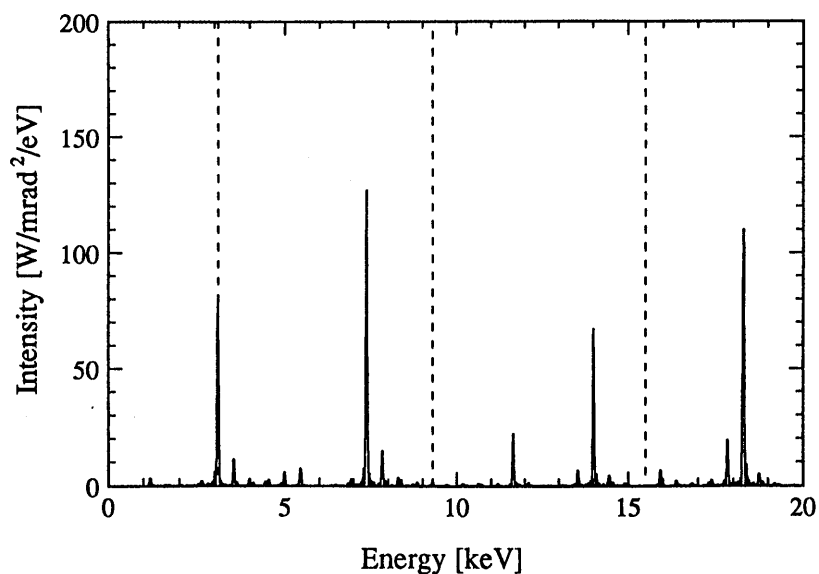


Figure 15. Spectrum from a quasi-periodic undulator of $\tan \alpha = 1/\sqrt{5}$ model at 8 GeV, 100 mA. Undulator gap = 30 mm.

表1 スペクトル計算に用いた定数

電子	
電子加速電圧	8 GeV
電子電流	100 mA
磁石	
残留磁場	12.1 kG
磁石長さ	20.41 mm
磁石間隔	$d = 20.41$ mm
	$d' = 45.64$ mm
	$(d'/d \approx \sqrt{5})$
磁極数	100
アンジュレータ長	3.8 m
アンジュレータギャップ	20, 30, 40, 50 mm

復元され、これ以上はズレないことが分かっている。この場合（アンジュレータ・ギャップ＝30 mm, 8 GeV）のスペクトルは図15のように計算された。図11で予想したように、非常に鋭いエネルギー・ピークが出現しているが、準周期的に配置し、互いに整数比のエネルギー・ピークは現れないことが認められる。

ここで、各エネルギー・ピークがどの程度の強度をもつかを考察してみよう。比較のために、図16に同一磁極数の周期アンジュレータで基本波のエネルギーが3.06 keV（図15の第一番目の強いピーク位置と一致）になるように設計したもののスペクトルを示した。準周期アンジュレータのピーク強度は50%から70%になっていて、極端に弱いという状況ではない。従来のアンジュレータにおけるミラーの導入やデチューニングにともなう強度減衰などを考慮すれば、強度的にはほとんど同等のものとして扱えると結論してよい。

ここで示したアンジュレータ・ギャップ30mmの例を含めて、4種類のギャップの場合について計算を行ったが、ギャップが大きくなるにしたがって相似的に広がる性質がある。これは、周期アンジュレータの場合と同じである。

5. スペクトルを計算する解析的な式¹⁰⁾

第3章で磁石配列の概念（あるいは初期）設計、

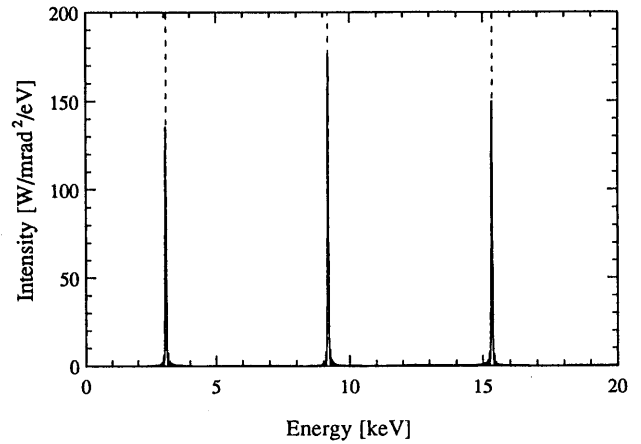


Figure 16. Spectrum from a periodic undulator with the same number of poles as those of the quasi-periodic undulator giving Fig. 15.

すなわち、予想されるピーク・エネルギーの相対的位置関係を準結晶のフーリエ変換を用いて考察する方法を述べた。また、第4章では、準周期アンジュレータの磁場分布を数値計算で求めて、これをもとにして、公式(1)を数値積分することによってスペクトルを導いた。この章では、アンジュレータ放射光のスペクトル公式(1)を解析的に評価した結果について述べる。強度式の解析的展開の過程で、準周期配列によって特徴付けられる幾つかの興味ある性質が捉えられ、結果の式を用いることにより、スペクトルに現れるピークの位置および強度の値が簡便に求められるようになった。

解析的な評価に先だって、ひとつの仮定を置いた。磁場は磁極のあるところでは正弦的に変化し、それ以外のところでは全くないものとする。このとき、アンジュレータの磁場は

$$B_y(z) = \sum_{m=0}^{N'-1} (-1)^m B_0 \cos\left[\frac{\pi}{u}(z-z_m)\right] \quad (12)$$

のように書くことができる。この式の $\cos x$ は、 $-\pi/2 \leq x < \pi/2$ の範囲でのみ $\cos x$ の値を取り、外では0を取るものとし、一般的な定義とは異なる。 N' は磁極数、 B_0 はピーク磁場、 u は磁極の長さ、 z_m は m 番目の準周期格子点で、(3)式から

$$z_m = \frac{d'}{a \cos \alpha} R''_m, \quad (13)$$

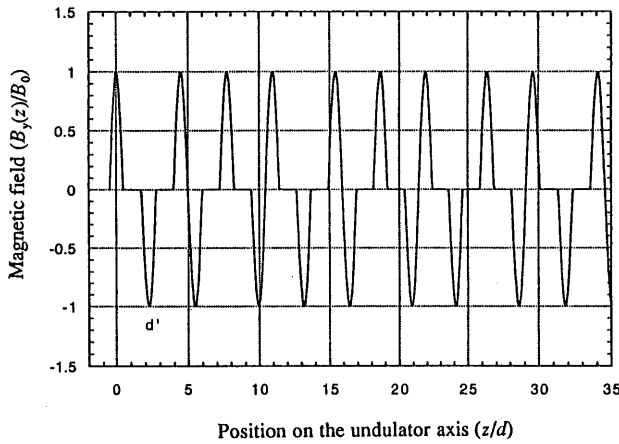


Figure 17. Behaviour of eq. (12) in the case of $u=d$ in the $\tan \alpha = 1/\sqrt{5}$ quasi-periodic model.

で与えられる。図17に、先の章で述べた $\tan \alpha = 1/\sqrt{5}$ 準周期モデルで $u=d$ とした場合の(12)式の振る舞いを示した。

アンジュレータ放射光のスペクトル式(1)において、被積分項は磁極領域でのみ値を持ち、同形の分布を取るから、形状因子と構造因子の積の形に整理することができて

$$\frac{d^2 I(\omega)}{d\omega d\Omega} = \frac{e^2}{16\pi^3 \epsilon_0 c} \left| \sum_{l=\text{integers}} [X_l(\omega), Y_l(\omega), 0] Q_l(\omega) \right|^2, \quad (14)$$

のようになる。 $[X_l(\omega), Y_l(\omega), 0]$ は、磁極内での電子運動に伴う因子 ($[x, y, z]$ はベクトル成分)、すなわち形状因子である。 $Q_l(\omega)$ は磁極中心間の飛行時間差にともなう有効位相差に関する因子、すなわち構造因子で

$$Q_l(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{m=0}^{N-1} e^{i[k(\omega) z_m / u - k(\omega) \eta m - \pi l m]}, \quad (15a)$$

のように表現できる。ここで

$$k(\omega) = \pi \frac{\omega}{\omega_2}, \quad (15b)$$

$$\omega_2 = \frac{u}{d'} \frac{2\gamma^2 \omega_0}{1 + K^2 + (\gamma \theta_0)^2}, \quad (15c)$$

$$\eta = \frac{u}{2d'} \frac{K^2}{1 + K^2 + (\gamma \theta_0)^2}. \quad (15d)$$

また、 $\omega_0 = c\pi/u$ (周期アンジュレータにおけるアンジュレータ周期の1/2を磁石長 u としたときのアンジュレータ振動数にあたる)、 θ_0 はアンジュレータ軸と観測方向のなす角である。(15a)式の[...]内の第1項は準周期格子点の各点における位相差を表す。第2項は磁極内での電子運動とスパーサ範囲内での自由運動の観測方向の速度に差があるため、実際の d'/d がノミナルな d'/d からずれることによって現れる補正項を表す。第3項は磁極の極性が交番していることを表す。 l は電子運動のベッセル級数展開の次数に対応している。

(15a)式における磁極 (m) に関する和を $N' = \infty$ の近似で実行すると

$$Q_l(\omega) = \sum_{p, q = \text{integers}} e^{iX_{pq}^{(l)}/2} \times \frac{\sin(X_{pq}^{(l)}/2)}{(X_{pq}^{(l)}/2)} \delta(k(\omega) - k_{pq}^{(l)}), \quad (16)$$

となり、 $Q_l(\omega)$ は $k(\omega) = k_{pq}^{(l)}$ が成り立つ ω においてのみピークを持つことが分かる。ここで、 $k_{pq}^{(l)}$ の肩に付けた (l) は、 l の偶奇にのみ依存することを示す。 $k_{pq}^{(l)}$ は l の値に関わらず、 l が偶数のとき

$$k_{pq}^{(l=\text{even})} = 2\pi \left(p + q \frac{\tan \alpha}{1 + \tan \alpha} \right) / \left(\frac{1 + \tan^2 \alpha}{1 + \tan \alpha} - \eta \right), \quad (17a)$$

また、 l が奇数のとき

$$k_{pq}^{(l=\text{odd})} = [2\pi \left(p + q \frac{\tan \alpha}{1 + \tan \alpha} \right) - \pi] / \left(\frac{1 + \tan^2 \alpha}{1 + \tan \alpha} - \eta \right), \quad (17b)$$

の値を取る。 $X_{pq}^{(l)}$ もまた $k_{pq}^{(l)}$ の l の偶奇に対応して

$$X_{pq}^{(l)} = 2\pi q - (\tan \alpha - 1) k_{pq}^{(l)}, \quad (18)$$

のように表される。(16)式の因子 $\sin(X_{pq}^{(l)}/2)/(X_{pq}^{(l)}/2)$ は、 $X_{pq}^{(l)}$ が0に近い場合にのみ大きな値を持つから、 p, q に渡る和において、(18)式が0に近い値となる $k_{pq}^{(l)}$ を与える組 (p, q) が意味ある値として生き残る。こうして、その $k_{pq}^{(l)}$ で指定されるとびとびの位置に(16)式を通してエネルギー・ピークが現れることが分かる。このエネルギー列が非周期的に配列することは、(17)式および(18)式が $\tan \alpha$ という無理数を含んでいることから容易に想像がつくが、これは一般化されたフィボナッチ数列となることが他の研究で分かっている¹⁹⁾。このことから、準周期アンジュレータのスペクトルには、一般に整数倍の高調波は現れないことが分かる。

結局、磁極内に関する因子と磁極間の電子の飛行時間に関する位相因子とを併せて、アンジュレータ放射光のスペクトル公式(1)は、

$$\begin{aligned} \frac{d^2 I(\omega)}{d\omega d\Omega} &= \frac{e^2 N^2 \gamma^2}{16 \pi \epsilon_0 c} \sum_{(l = \text{even, odd})} \\ &\left[\left| \gamma \theta_0 \cos \phi_0 F^{(l)}(\omega) - \frac{K}{2} G^{(l)}(\omega) \right|^2 \right. \\ &\left. + \left| \gamma \theta_0 \sin \phi_0 F^{(l)}(\omega) \right|^2 \right] \sum_{p, q = \text{integers}} H_{pq}^{(l)}(\omega), \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} H_{pq}^{(l)}(\omega) &= \left[\frac{\sin(X_{pq}^{(l)}/2)}{X_{pq}^{(l)}/2} \right]^2 \\ &\times \delta(k(\omega) - k_{pq}^{(l)}), \end{aligned} \quad (20)$$

と変形される。ここで、 $H_{pq}^{(l)}(\omega)$ は $|Q_l(\omega)|^2$ に由来する構造因子であり、(19)式の $F^{(l)}(\omega)$ や $G^{(l)}(\omega)$ を含む大きな()で括られた因子は形状因子に由来するものである。この $F^{(l)}(\omega)$ や $G^{(l)}(\omega)$ は l の偶奇にしたがって、次のように計算

されるものである。 l が奇数の場合、

$$\begin{aligned} F^{(l = \text{odd})}(\omega) &= \left[\frac{2\tilde{k}(\omega)}{1 + K^2/2 + (\gamma \theta_0)^2} \right. \\ &\times \sum_{i = \text{odd}} \left. \frac{S_i^{(0)}(\tilde{k}(\omega))}{\frac{\pi}{2}(\tilde{k}(\omega) - l)} - \frac{4}{\pi} C(\theta_0, \phi_0) \right] \\ &\times \cos\left(\frac{\pi}{2}\tilde{k}(\omega)\right), \end{aligned} \quad (21a)$$

$$\begin{aligned} G^{(l = \text{odd})}(\omega) &= \left[\frac{2\tilde{k}(\omega)}{1 + K^2/2 + (\gamma \theta_0)^2} \right. \\ &\times \sum_{i = \text{odd}} \frac{S_i^{(1)}(\tilde{k}(\omega)) + S_i^{(-1)}(\tilde{k}(\omega))}{\frac{\pi}{2}(\tilde{k}(\omega) - l)} \\ &\left. - \frac{8}{\pi} B(\theta_0, \phi_0) \right] \cos\left(\frac{\pi}{2}\tilde{k}(\omega)\right), \end{aligned} \quad (22a)$$

l が偶数の場合、

$$\begin{aligned} F^{(l = \text{even})}(\omega) &= \left[\frac{2\tilde{k}(\omega)}{1 + K^2/2 + (\gamma \theta_0)^2} \right. \\ &\times \sum_{i = \text{even}} \left. \frac{S_i^{(0)}(\tilde{k}(\omega))}{\frac{\pi}{2}(\tilde{k}(\omega) - l)} - \frac{4}{\pi} B(\theta_0, \phi_0) \right] \\ &\times \cos\left(\frac{\pi}{2}\tilde{k}(\omega)\right), \end{aligned} \quad (21b)$$

$$\begin{aligned} G^{(l = \text{even})}(\omega) &= \left[\frac{2\tilde{k}(\omega)}{1 + K^2/2 + (\gamma \theta_0)^2} \right. \\ &\times \sum_{i = \text{even}} \frac{S_i^{(1)}(\tilde{k}(\omega)) + S_i^{(-1)}(\tilde{k}(\omega))}{-(\tilde{k}(\omega) - l)} \\ &\left. - \frac{8}{\pi} C(\theta_0, \phi_0) \right] \cos\left(\frac{\pi}{2}\tilde{k}(\omega)\right), \end{aligned} \quad (22b)$$

である。ここで、

$$\tilde{k}(\omega) = \frac{d'[1 + K^2/2 + (\gamma \theta_0)^2]}{\pi u[1 + K^2 + (\gamma \theta_0)^2]} k(\omega), \quad (23)$$

$$\begin{aligned} S_i^{(h)}(\tilde{k}(\omega)) &= \\ &\sum_{n = -\infty}^{\infty} J_n(\xi_z \tilde{k}(\omega)) J_{2n+l+h}(\xi_x \tilde{k}(\omega)), \end{aligned} \quad (24)$$

$$\xi_x = \frac{2K\gamma\theta_0 \cos \phi_0}{1+K^2/2+(\gamma\theta_0)^2}, \quad (25a)$$

$$\xi_z = \frac{K^2}{4[1+K^2/2+(\gamma\theta_0)^2]}, \quad (25b)$$

また, (21, 22)式の $B(\theta_0, \phi_0)$, $C(\theta_0, \phi_0)$ は

$$B(\theta_0, \phi_0) = \frac{1+K^2+(\gamma\theta_0)^2}{[1+K^2+(\gamma\theta_0)^2]^2+(2K\gamma\theta_0 \cos \phi_0)^2}, \quad (26a)$$

$$C(\theta_0, \phi_0) = \frac{2K\gamma\theta_0 \cos \phi_0}{[1+K^2+(\gamma\theta_0)^2]^2+(2K\gamma\theta_0 \cos \phi_0)^2}, \quad (26b)$$

である。形状因子は, これらの関数を通して, θ_0 (観測方向のアンジュレータ軸からの角度), ϕ_0 (アンジュレータ軸に関する観測方向の方位角) 依存性の情報を含んでいる。

(19)式の有効性を確かめるために, 数値計算と比較したものが図18である。スペクトルのピーク位置および強度値が, 正確に与えられていることが分かる。

6. おわりに

純単色の放射光を作るという要求は根強いもの

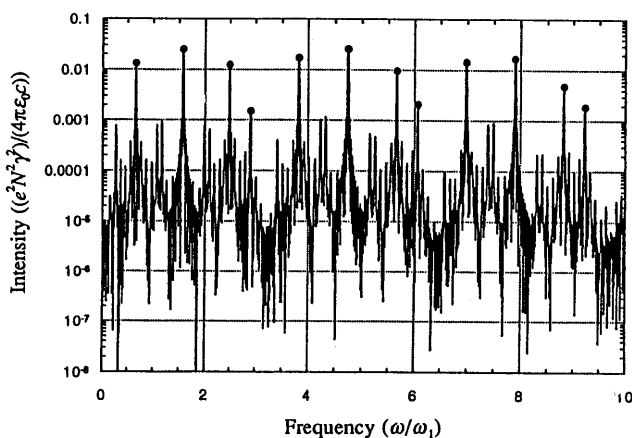


Figure 18. Comparison between the analytical calculation and numerical one. ● indicates the spectral peak position and intensity calculated with the analytical equation, and the line gives the spectrum by the numerical calculation.

であって, 従来, 光学素子を用いてそれを得ようとしてきたことを冒頭において強調したが, 光源を工夫する試みの例がなかったわけではない。磁極の周期的配列を基本として, それを2分割して位相誤差を導入したり, あるいは, 円偏光アンジュレータも一種であるが水平磁場を導入する方法が考案されている²⁰⁻²³⁾。それらは, ここで述べた準周期アンジュレータと比べると大きな違いがある。準周期アンジュレータが高調波(無理数次)をしつかりと発生して, 高エネルギー光を利用することができるのに対して, それらは, エネルギーの低い一次光のみを残して高次波を発生しないようにしている点である。すなわち, 準周期アンジュレータは従来の直線偏光の周期アンジュレータと全く同じ感覚で汎用的に使うことができ, しかも, 結晶モノクロメータによって, 選んだ高調波以外の反射は完全に遮断することができる性質がある。したがって, 従来のアンジュレータに取って代わって準周期アンジュレータを用いても新しい不都合は発生しないのである。

準周期アンジュレータが広く利用されることを望むが, これを引き金として, 単純な周期ではない任意の磁極配列を工夫して, 実験に最も相応しい放射光を発生するアンジュレータの考案も期待する。

謝辞

絶えずこのアンジュレータに興味を持ち, 激励を惜しまなかった宮原義一氏に感謝の意を表します。

文献

- 1) Ed. by H. Winick and S. Doniach : "Synchrotron Radiation Research" (Plenum Press, 1980).
- 2) A. Hofmann : Phys. Rep., **64**, 253 (1980).
- 3) Ed. by E.E. Koch : "Handbook on Synchrotron Radiation" (North Holland, 1983).
- 4) K-J. Kim : Nucl. Instr. Methods in Phys. Res., **A246**, 67 (1986).
- 5) 高良和武監修 : "シンクロトロン放射利用技術" (サ

- イエンス・フォーラム, 1989).
- 6) 日本物理学会編: "シンクロトン放射" (培風館, 1986).
 - 7) 宮下敦巳, 依田修: "時間分解X線吸収分光装置光学系の設計" JAERI-M 88-212, 1988.
 - 8) S. Hashimoto and S. Sasaki: "A Concept of a New Undulator That Will Generate Irrational Higher Harmonics in Synchrotron Radiation" (JAERI-M, 1994); S. Hashimoto and S. Sasaki: Nucl. Instr. Methods in Phys. Res., **A361**, 611 (1995).
 - 9) S. Sasaki, H. Kobayashi, M. Takao, Y. Miyahara and S. Hashimoto: Rev. Sci. Instrum., **66**, 1953 (1995).
 - 10) M. Takao, S. Sasaki and S. Hashimoto: Phys. Rev. E **52**, 5454 (1995).
 - 11) R.W. James: "The Optical Principles of the Diffraction of X-rays" (Cornell University Press, 1965).
 - 12) 三宅静雄: "X線の回折" (朝倉書店, 1969).
 - 13) P. Kramer and R. Neri: Acta Cryst., **A40**, 580 (1984).
 - 14) A. Janner: Acta Cryst. **A47**, 577 (1991).
 - 15) N.G. de Bruijn: Proc. K. Ned. Akad. Wet. Ser., **A43**, 39 (1981).
 - 16) J.D. Jackson: "Classical Electrodynamics" (John Wiley & Sons, 1975).
 - 17) A. Guinier: "X-ray Diffraction in Crystals, Imperfect Crystals, and Amorphous Bodies" (W.H. Freeman, 1963).
 - 18) B.E. Warren: "X-ray Diffraction" (Addison-Wesley, 1969).
 - 19) D. Levine and P. J. Steinhardt: Phys. Rev., **B34**, 596 (1986).
 - 20) B. Kincaid: SPIE Proc., **582**, 72 (1985).
 - 21) R. P. Walker: "Nucl. Instr. Methods in Phys. Res., **A335**, 328 (1993).
 - 22) G. Dattori and G. Voykov: Phys. Rev., **E48**, 3030 (1993).
 - 23) V. M. Popik and N.A. Vinokurov: Nucl. Instr. Methods in Phys. Res., **A331**, 768 (1993).

きいワード

準周期

分布が並進対称性をもたず非周期的であり, そのフーリエ変換が逆空間内で δ 関数の和となる構造の規則性(対称性)を総称したものである。この性質を持つ結晶は, その存在が1984年シェヒトマンによって発表されて以来, 準結晶(準周期結晶の意味)とよばれて注目を集めている。準周期は数学的には色々なところに現れていて, 作り方として, フィボナッチ配列, 異

なる複数種類のタイルを空間に充填するペンローズタイルリング, そして直接投影法などがある。直接投影法は, より高い次元の周期格子において帯状のウィンドウを想定し, その中に含まれる格子点を格子軸からの勾配が無理数である一般面に投影して準周期を作る方法であるが, これは冒頭の定義を満足することを理解する容易な方法でもある。