

5 Stokes パラメータを使った電磁波の偏光状態と散乱強度の表現

物質による X 線の散乱断面積（散乱強度）や散乱後の偏光状態を知るには、 \mathbf{k} , \mathbf{k}' , ϵ , ϵ' をこれまでの章で説明した散乱振幅の式に代入して計算すればよい。しかし、 σ 偏光や π 偏光だけでなく、円偏光や楕円偏光まで含めたあらゆる入射 X 線の偏光状態について計算するのは単純ではない。特に、偏光解析アナライザーを使った強度測定データと散乱後の偏光状態とを、一般にどう結びつけたらよいのかについては、これまで説明してきた散乱振幅の式では不十分である。この章では、そのような目的に合致した、Stokes パラメータを使った方法を紹介する。

5.1 直線偏光，円偏光，楕円偏光

5.1.1 電磁波

真空中の電磁波は、Maxwell 方程式で記述され、 $\mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{A}$ で定義されるベクトルポテンシャル \mathbf{A} が、つぎのような波動方程式を満たすという形に変形される^{*117)}。

$$\nabla^2 \mathbf{A} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} \quad (5.1)$$

この方程式の解は、

$$\mathbf{A}_{\mathbf{k}\eta}(\mathbf{r}, t) = \epsilon_\eta e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (5.2)$$

で表され、これは波数ベクトル \mathbf{k} 、振動数 ω で ϵ_η の方向に振動しながら進む真空中の電磁波を表す。ここで、 \mathbf{k} と垂直な平面内で直交する 2 つの方向を $\eta = \sigma, \pi$ で表し、これらの方向の単位ベクトルを $\epsilon_\sigma, \epsilon_\pi$ としている。

一般の偏光状態は σ と π の重ね合わせであり、また、最終的な物理量は実数でなければならないから、複素共役を足し合わせる形にして、

$$\mathbf{A}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\eta} (q_{\eta} \mathbf{A}_{\mathbf{k}\eta}(\mathbf{r}, t) + q_{\eta}^* \mathbf{A}_{\mathbf{k}\eta}^*(\mathbf{r}, t)) \quad (5.3)$$

と書く。 q_{η} は重ね合わせの係数である。電磁波の電場と磁場は、 $\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$, $\mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{A}$ より、

$$\mathbf{E}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\eta} \{q_{\eta} \mathbf{A}_{\mathbf{k}\eta}(\mathbf{r}, t) - q_{\eta}^* \mathbf{A}_{\mathbf{k}\eta}^*(\mathbf{r}, t)\}, \quad (5.4)$$

$$\mathbf{H}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\eta} \hat{\mathbf{k}} \times \{q_{\eta} \mathbf{A}_{\mathbf{k}\eta}(\mathbf{r}, t) - q_{\eta}^* \mathbf{A}_{\mathbf{k}\eta}^*(\mathbf{r}, t)\} \quad (5.5)$$

と表される^{*118)}。

5.1.2 直線偏光，円偏光，楕円偏光

波数ベクトル \mathbf{k} の向きを z 軸にとる。偏光ベクトルは \mathbf{k} と垂直な平面内にあるので、 xy 面内にある。そこで、直交する 2 つのベクトルを、

$$\epsilon_{\sigma} = (1, 0, 0), \quad \epsilon_{\pi} = (0, 1, 0)$$

としよう^{*119)}。電磁波の \mathbf{E} も \mathbf{H} もこの 2 つのベクトルで表される。 \mathbf{E} が決まれば、 \mathbf{H} も自動的に決まるので、以下は \mathbf{E} についてだけ記す。

まず、基準として、 $q_{\sigma} = 1$ としよう。これに対して q_{π} がどのような値（一般に複素数）をとるかによって、たとえば、以下の場合が起こり得る。

^{*117)} 電磁波についての詳細は Appendix §A 「電磁波」を参照。ここに書かれているのはその要点の抜粋。

^{*118)} 正確には Appendix にあるようにいろいろな定数因子がついてくるが、偏光状態の記述にはほとんど関係がないので、ここでは見た目の簡潔さを重視して省略する。複数の項の重ね合わせになる場合の互いの位相関係だけが重要で、全体を定数倍しても偏光状態に変わりはない。

^{*119)} $\epsilon_{\sigma} \times \epsilon_{\pi} = \hat{\mathbf{k}}$ となるようにとる。

- $q_\pi = 0$ のとき :

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(z, t) &= \epsilon_\sigma \{e^{i(kz-\omega t)} - e^{-i(kz-\omega t)}\}(-i/2) \\ &= \epsilon_\sigma \sin(kz - \omega t)\end{aligned}\quad (5.6)$$

電場は x 軸 (σ) 方向に振幅をもって振動する. これを σ 直線偏光とよぶ^{*120}.

- $q_\pi = 1$ のとき :

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(z, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\epsilon_\sigma + \epsilon_\pi) \{e^{i(kz-\omega t)} - e^{-i(kz-\omega t)}\}(-i/2) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\epsilon_\sigma + \epsilon_\pi) \sin(kz - \omega t)\end{aligned}\quad (5.7)$$

電場は σ 成分と π 成分とが同位相, 同振幅で振動する. これも直線偏光であるが, 特に, 45° 直線偏光とよぶ. $q_\pi = -1$ なら -45° 直線偏光である.

- $q_\pi = e^{i\pi/2} = i$ のとき :

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(z, t) &= \{(\epsilon_\sigma + i\epsilon_\pi)e^{i(kz-\omega t)} - (\epsilon_\sigma - i\epsilon_\pi)e^{-i(kz-\omega t)}\}(-i/2) \\ &= \epsilon_\sigma \sin(kz - \omega t) + \epsilon_\pi \cos(kz - \omega t) \\ &= \epsilon_\sigma \sin(kz - \omega t) + \epsilon_\pi \sin(kz - \omega t + \frac{\pi}{2})\end{aligned}\quad (5.8)$$

$z=0$ の面内で電場ベクトルの時間変化を観測すると, 電磁波の進行方向 (\mathbf{k}) を向いて (z 軸負方向から正方向に向かって) 眺めたとき, 電場ベクトルの先端は時計回り (右回り) に回転する. 位置を固定して電場の時間変化をみると, σ 成分が最大になった後, 遅れて π 成分が最大値をとる. これを右円偏光 (Right-handed Circular Polarization) とよぶことにする^{*121}. 図 5.1 に右回り円偏光での電場ベクトルの様子を示す.

- $q_\pi = e^{-i\pi/2} = -i$ のとき :

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(z, t) &= \{(\epsilon_\sigma - i\epsilon_\pi)e^{i(kz-\omega t)} - (\epsilon_\sigma + i\epsilon_\pi)e^{-i(kz-\omega t)}\}(-i/2) \\ &= \epsilon_\sigma \sin(kz - \omega t) - \epsilon_\pi \cos(kz - \omega t) \\ &= \epsilon_\sigma \sin(kz - \omega t) + \epsilon_\pi \sin(kz - \omega t - \frac{\pi}{2})\end{aligned}\quad (5.9)$$

これは $q_\pi = i$ とは逆回りで, 左回り円偏光である. 図 5.2 に左回り円偏光での電場ベクトルの様子を示す.

- $q_\pi = 2e^{i\pi/2} = 2i$ のとき :

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(z, t) &= \{(\epsilon_\sigma + 2i\epsilon_\pi)e^{i(kz-\omega t)} - (\epsilon_\sigma - 2i\epsilon_\pi)e^{-i(kz-\omega t)}\}(-i/2) \\ &= \epsilon_\sigma \sin(kz - \omega t) + 2\epsilon_\pi \cos(kz - \omega t)\end{aligned}\quad (5.10)$$

右回りの回転であるが, σ 成分より π 成分の振幅が大きい. このような偏光を楕円偏光とよぶ.

以上は, いくつかの例にすぎない. 他にも複素量 q_σ と q_π をどうとるかによって, あらゆる偏光状態を表すことができる.

結局, 電磁波の偏光状態は,

$$\boldsymbol{\epsilon} = \begin{pmatrix} q_\sigma \\ q_\pi \end{pmatrix}\quad (5.11)$$

^{*120} 全体に適当な定数をかけて偏光状態を簡潔に表すようにしている. ここでは, $-i/2$ をかけている. 以下も同様. 位相関係だけ崩さなければよい.

^{*121} 正面から光源を向いて眺めれば反時計回り (左回り) に回転するので, z 軸正方向から見ると定議すれば, 左円偏光である. どちらが正しいというものでもなく, 決まった定義もない. 呼び方は好みの問題である. 回り方の実態 (どちら側から見たときに時計回りか反時計回りか) を重視すべきである.

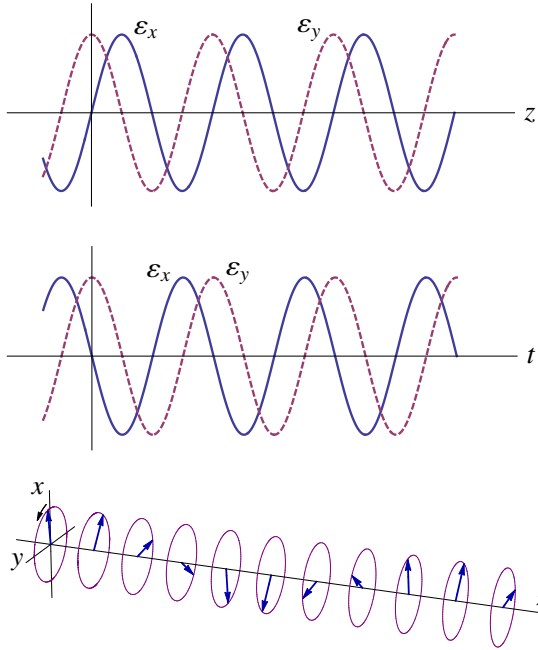


図 5.1: 右回り円偏光での電場ベクトルの空間および時間依存性. (上) ある時刻での z 依存性. (中) ある位置 z での時間依存性. (下) ある時刻での電場ベクトルの空間依存性. 特定の位置 z でみると, 時間経過とともに電場ベクトルの先端は, z 軸正方向からみて, 反時計回りに回転する.

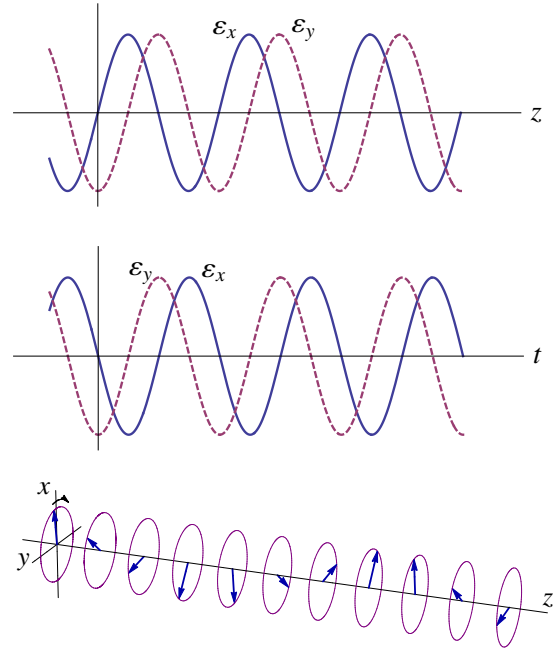


図 5.2: 左回り円偏光での電場ベクトルの空間および時間依存性. (上) ある時刻での z 依存性. (中) ある位置 z での時間依存性. (下) ある時刻での電場ベクトルの空間依存性. 特定の位置 z でみると, 時間経過とともに電場ベクトルの先端は, z 軸正方向からみて, 時計回りに回転する.

という形のベクトルで表すことができる. σ 偏光は $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, π 偏光は $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, 45° 直線偏光は $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, -45° 直線偏光は $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$, 右回り円偏光は $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$, 左回り円偏光は $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$ という具合である.

別の表記法 たとえば右円偏光を

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\text{RCP}}(z, t) &= \epsilon_\sigma \cos(kz - \omega t) + \epsilon_\pi \cos(kz - \omega t + \frac{\pi}{2}) \\ &= \epsilon_\sigma \cos(kz - \omega t) - \epsilon_\pi \sin(kz - \omega t) \\ &= \{(\epsilon_\sigma + i\epsilon_\pi)e^{i(kz - \omega t)} + (\epsilon_\sigma - i\epsilon_\pi)e^{-i(kz - \omega t)}\}/2, \end{aligned} \quad (5.12)$$

のように表すこともあるが, (5.8) とは原点位置が違うだけで, 時間変化, 空間変化は変わらない. 偏光ベクトルは同じく $\frac{1}{\sqrt{2}}(1, i)$ である.

5.2 Stokes パラメータ

偏光状態を表すのに、3つのパラメータ P_1, P_2, P_3 を使い、次のようなベクトルを考えるといろいろと便利である [3].

$$\mathbf{P} = (P_1, P_2, P_3) \quad (5.13)$$

ここで、 P_1, P_2, P_3 はそれぞれ $+45^\circ$ または -45° 直線偏光、右または左回り円偏光、 σ または π 直線偏光の度合いを表すパラメータであり、 -1 から 1 までの値をとる。 $P_1 = 1$ のとき完全な $+45^\circ$ 直線偏光、 $P_1 = -1$ のとき完全な -45° 直線偏光、 $P_2 = 1$ のとき完全な右円偏光、 $P_2 = -1$ のとき完全な左円偏光、 $P_3 = 1$ のとき完全な σ 直線偏光、 $P_3 = -1$ のとき完全な π 直線偏光という具合であり、まとめると次のような関係になる。

$$\begin{aligned} \sigma \text{ 直線偏光} : \mathbf{P} &= (0, 0, 1), & \pi \text{ 直線偏光} : \mathbf{P} &= (0, 0, -1) \\ 45^\circ \text{ 直線偏光} : \mathbf{P} &= (1, 0, 0), & -45^\circ \text{ 直線偏光} : \mathbf{P} &= (-1, 0, 0) \\ \text{右回り円偏光} : \mathbf{P} &= (0, 1, 0), & \text{左回り円偏光} : \mathbf{P} &= (0, 1, 0) \end{aligned}$$

何らかの状態に完全に偏光していれば $P_0 = \sqrt{P_1^2 + P_2^2 + P_3^2} = 1$ であり、一方、完全に無偏光であれば $P_1 = P_2 = P_3 = 0$ である。これら、 P_1, P_2, P_3 のことを Stokes パラメータと呼ぶ。

密度行列演算子 $\hat{\mu}$ photon の状態を表す密度行列演算子 $\hat{\mu}$ を次のように定義する。

$$\hat{\mu} = \frac{1}{2}(\hat{I} + \mathbf{P} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \quad (5.14)$$

$$= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + P_3 & P_1 - iP_2 \\ P_1 + iP_2 & 1 - P_3 \end{pmatrix} \quad (5.15)$$

ここで、 \hat{I} は単位行列、 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ は Pauli 行列で、

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.16)$$

である。

$\hat{\mu}$ について、最も簡単な使い方は次のようなものである。たとえば、偏光ベクトルが $\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ であるとき、

$$\boldsymbol{\varepsilon}^\dagger \hat{\mu} \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 + P_3 & P_1 - iP_2 \\ P_1 + iP_2 & 1 - P_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1 + P_3)$$

このとき $(1 + P_3)/2$ は、この電磁波が $\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ という偏光状態、つまり、 σ 偏光である割合（確率）を表しており、 $P_3 = 1$ のとき 1 、 $P_3 = 0$ のとき $1/2$ 、 $P_3 = -1$ のとき 0 である。すなわち、 \mathbf{P} が決まっているとき、その電磁波が偏光ベクトル $\boldsymbol{\varepsilon}$ を成分として持つ割合は $\boldsymbol{\varepsilon}^\dagger \hat{\mu} \boldsymbol{\varepsilon}$ で表されるということである。まとめると次のようになる^{*122)}。

- 直線偏光 (σ or π): $\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \boldsymbol{\varepsilon}^\dagger \hat{\mu} \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}(1 + P_3)$, $\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \boldsymbol{\varepsilon}^\dagger \hat{\mu} \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}(1 - P_3)$.
- 直線偏光 (45° or -45°): $\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \boldsymbol{\varepsilon}^\dagger \hat{\mu} \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}(1 + P_1)$, $\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \Rightarrow \boldsymbol{\varepsilon}^\dagger \hat{\mu} \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}(1 - P_1)$.
- 円偏光 (right or left): $\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \Rightarrow \boldsymbol{\varepsilon}^\dagger \hat{\mu} \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}(1 + P_2)$, $\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \Rightarrow \boldsymbol{\varepsilon}^\dagger \hat{\mu} \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}(1 - P_2)$.

^{*122)} 右か左かというのは呼び方の問題である。右左とは関係なく、Stokes パラメータ法では、 $(1, i)$ という状態に $P_2 = 1$ 、 $(1, -i)$ という状態に $P_2 = -1$ が結びつく。 $(1, i)$ とは、我々の定義では $\boldsymbol{\varepsilon}_\sigma \times \boldsymbol{\varepsilon}_\pi = \hat{\mathbf{k}}$ のとき $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = (\boldsymbol{\varepsilon}_\sigma + i\boldsymbol{\varepsilon}_\pi)e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + (\boldsymbol{\varepsilon}_\sigma - i\boldsymbol{\varepsilon}_\pi)e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$ で表される偏光状態のこととであり、これを右と名付けている。電磁波の表記法を変えて、 $\boldsymbol{\varepsilon}_\pi \times \boldsymbol{\varepsilon}_\sigma = \hat{\mathbf{k}}$ にすると、 $(1, i)$ が指す円偏光の実態が逆になり、それを $P_2 = 1$ と結びつけることになる。

5.3 位相の表記法： $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$ か $(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ か

円偏光は逆になる 本稿では一貫して位相部分を $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$ とする表記で記述しているが、これを $(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ とする表記法もあり、しばしば混乱を招く。直線偏光を記述するのであれば、 σ 成分と π 成分の間に位相差はなく、 $\cos(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$ であるから、どちらの表記でも同じである^{*123}。違うのは円偏光成分がある場合で、 σ 成分と π 成分の間に位相差があるために、同じ位相差でも、どちらの位相表記をとるかで、円偏光の右と左が逆転するのである。たとえば、右円偏光を表す (5.8) の表記では、位置を固定して電場の時間変化をみたとき、 σ 成分が最大になった後、遅れて π 成分が最大値をとる。しかし、 π 成分の位相差を $+\pi/2$ にしたまま、 $kz - \omega t$ を $\omega t - kz$ にすると、

$$\begin{aligned} \mathbf{E}'_{\text{RCP}}(z, t) &= \epsilon_\sigma \sin(\omega t - kz) + \epsilon_\pi \sin(\omega t - kz + \frac{\pi}{2}) \\ &= \{(\epsilon_\sigma + i\epsilon_\pi)e^{i(\omega t - kz)} - (\epsilon_\sigma - i\epsilon_\pi)e^{-i(\omega t - kz)}\}(-i/2) \end{aligned} \quad (5.17)$$

となる。こうすると、 π 成分のほうが位相が進んでいるので、位置を固定して時間変化をみると、 π 成分が最大になった後、遅れて σ 成分が最大値をとる。したがって、(5.8) とは電場の回転方向が逆転し、左円偏光となる。(5.17) は我々の呼び方では左円偏光なのである。

Stokes パラメータはどうなるか では、(5.17) で $e^{i(\omega t - kz)}$ の係数となっている $(\epsilon_\sigma + i\epsilon_\pi)$ をこの波の偏光ベクトルとして、改めて $\frac{1}{\sqrt{2}}(1, i)$ と書くべきなのだろうか。そして、この Stokes パラメータを $P_2 = 1$ とすべきなのだろうか。結論を先に述べると、我々の定義ではこの偏光状態は $\frac{1}{\sqrt{2}}(1, -i)$ であり、 $P_2 = -1$ なのである。

(5.17) を書き直してみると、

$$\mathbf{E}'_{\text{RCP}}(z, t) = -\{(\epsilon_\sigma - i\epsilon_\pi)e^{i(kz - \omega t)} - (\epsilon_\sigma + i\epsilon_\pi)e^{-i(kz - \omega t)}\}(-i/2) \quad (5.18)$$

となる。さらにこれをベクトルポテンシャルまで戻すと、

$$\mathbf{A}'_{\text{RCP}}(z, t) = \{(\epsilon_\sigma - i\epsilon_\pi)e^{i(kz - \omega t)} + (\epsilon_\sigma + i\epsilon_\pi)e^{-i(kz - \omega t)}\}/2 \quad (5.19)$$

である。これをもともとの (5.3) の表記法で見ると、 $e^{i(kz - \omega t)}$ の係数が $(\epsilon_\sigma - i\epsilon_\pi)$ であることから、偏光ベクトルは $\frac{1}{\sqrt{2}}(1, -i)$ であり、やはり、Stokes パラメータは $P_2 = -1$ とすべきである。Appendix にも述べてあるように、波数ベクトル \mathbf{k} の電磁波を表すベクトルポテンシャルは、

$$\mathbf{A}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega}} \sum_{\eta} \left(\epsilon_{\eta} a_{\mathbf{k}\eta} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + \epsilon_{\eta}^* a_{\mathbf{k}\eta}^{\dagger} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \right) \quad (5.20)$$

のように、複素共役の足し合わせの形になっており、波数ベクトル \mathbf{k} が決まれば必ずこの形になるのであって、位相部分を $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$ とするか $(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ とするかにはよらない表記になっている。重要なのは、この2つの項のうち、 $e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$ が光子の消滅、 $e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$ が光子の生成に関係する点である。入射する X 線は電子との相互作用によって消滅し、エネルギーのやりとりを経た後、再び生成されるのであり、我々はこの消滅するほうで X 線の偏光状態を定義しているのである。波数ベクトル \mathbf{k} やエネルギー $\hbar\omega$ も量子力学での平面波表記 $e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$ と結びついている。したがって、(5.19) ではやはり偏光ベクトルは $\frac{1}{\sqrt{2}}(1, -i)$ であり、Stokes パラメータは $P_2 = -1$ なのである。

^{*123} \sin で表記しても、 $\sin(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = -\sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$ であるから、直線偏光状態を表す電場全体の符号が一斉に逆転するだけであり、時間変化や空間変化の様子が変わるわけではない。全体の位相が一斉に一樣に変化すれば、結局は何も変わっていないのと同じである。

5.4 散乱振幅演算子 \hat{G} を用いた散乱断面積と散乱後の偏光状態の計算

直交する4種類の散乱振幅を 2×2 の行列で表した散乱振幅演算子 \hat{G} がわかれば、入射する X 線の状態を Stokes パラメータ (P_1, P_2, P_3) で表すことで、散乱断面積 (散乱強度) と散乱後の偏光状態の計算ができる [3].

5.4.1 散乱振幅演算子 \hat{G}

散乱振幅演算子 \hat{G} は、 $\sigma\text{-}\sigma'$, $\sigma\text{-}\pi'$, $\pi\text{-}\sigma'$, $\pi\text{-}\pi'$ の4つの散乱過程についての散乱振幅 $G_{\sigma\sigma'}$, $G_{\sigma\pi'}$, $G_{\pi\sigma'}$, $G_{\pi\pi'}$ を行列要素に持つ、2行2列の行列であり、

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} G_{\sigma\sigma'} & G_{\pi\sigma'} \\ G_{\sigma\pi'} & G_{\pi\pi'} \end{pmatrix} \quad (5.21)$$

と定義される。任意の2行2列行列は、単位行列 \hat{I} とパウリ行列 $\hat{\sigma}$ を用いて、

$$\hat{G} = \beta \hat{I} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = \begin{pmatrix} \beta + \alpha_3 & \alpha_1 - i\alpha_2 \\ \alpha_1 + i\alpha_2 & \beta - \alpha_3 \end{pmatrix} \quad (5.22)$$

の形に表すことができる。ここで、 \hat{G} の各要素と $\beta, \boldsymbol{\alpha}$ とは

$$\begin{aligned} \beta &= (G_{\sigma\sigma'} + G_{\pi\pi'})/2 \\ \alpha_1 &= (G_{\pi\sigma'} + G_{\sigma\pi'})/2 \\ \alpha_2 &= i(G_{\pi\sigma'} - G_{\sigma\pi'})/2 \\ \alpha_3 &= (G_{\sigma\sigma'} - G_{\pi\pi'})/2 \end{aligned} \quad (5.23)$$

の関係で結びつけられている。ここで、散乱振幅演算子の各要素は、「散乱」という言葉のとおり、1個の原子からの散乱振幅でもよいし、あるいは、各原子からの散乱振幅に位相因子をかけて足し合わせた、結晶全体の散乱振幅 (結晶構造因子) であると考えてもよい。

photon の偏光状態を表す Stokes パラメータが \mathbf{P} であるとき、散乱振幅の期待値は、密度行列 $\hat{\mu} = \frac{1}{2}(\hat{I} + \mathbf{P} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})$ を用いて、 $\text{Tr}\{\hat{\mu}\hat{G}\}$ で表される。ここで、 Tr はトレース (trace) をとるという意味で、対角要素を足し合わせることを意味する。今の場合だと、

$$\begin{aligned} \hat{\mu}\hat{G} &= \frac{1}{2}(\hat{I} + \mathbf{P} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})(\beta\hat{I} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \\ &= \frac{1}{2}\{\beta\hat{I} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} + \beta\mathbf{P} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} + (\mathbf{P} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})(\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})\} \\ &= \frac{1}{2}\{(\beta + \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\alpha})\hat{I} + (\boldsymbol{\alpha} + \beta\mathbf{P} + i\mathbf{P} \times \boldsymbol{\alpha}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\} \end{aligned} \quad (5.24)$$

$$\begin{aligned} &= \begin{pmatrix} \beta + \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\alpha} & 0 \\ 0 & \beta + \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\alpha} \end{pmatrix} \\ &+ \begin{pmatrix} \alpha_3 + \beta P_3 + i(P_1\alpha_2 - P_2\alpha_1) & C_{12} \\ C_{21} & -\alpha_3 - \beta P_3 - i(P_1\alpha_2 - P_2\alpha_1) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.25)$$

なので^{*124)},

$$\begin{aligned} \text{Tr}\{\hat{\mu}\hat{G}\} &= \beta + \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\alpha} \\ &= \beta + P_1\alpha_1 + P_2\alpha_2 + P_3\alpha_3 \end{aligned} \quad (5.26)$$

である。これが Stokes パラメータが \mathbf{P} であるときの散乱振幅の期待値である^{*125)}。

^{*124)} $C_{12} = \alpha_1 + \beta P_1 + i(P_2\alpha_3 - P_3\alpha_2) - i(\alpha_2 + \beta P_2) + (P_3\alpha_1 - P_1\alpha_3)$,
 $C_{21} = \alpha_1 + \beta P_1 + i(P_2\alpha_3 - P_3\alpha_2) + i(\alpha_2 + \beta P_2) - (P_3\alpha_1 - P_1\alpha_3)$

^{*125)} ただし、実際にこの式を使う場面はない。使うのは次の散乱断面積と散乱後の Stokes パラメータを計算する式である。ここは単に $\hat{\mu}$ を演算子に作用させて対角和をとると期待値が得られるということを示しているだけである。

5.4.2 散乱断面積（散乱強度）

photon の偏光状態を表す Stokes パラメータが \mathbf{P} ，散乱振幅演算子が \hat{G} であるとき，散乱断面積は $\hat{G}^\dagger \hat{G}$ の期待値であり，密度行列 $\hat{\mu} = \frac{1}{2}(\hat{I} + \mathbf{P} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})$ を用いて，

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) = \text{Tr}\{\hat{\mu}\hat{G}^\dagger\hat{G}\} \quad (5.27)$$

と表される．つまり， $\sigma\text{-}\sigma'$ ， $\sigma\text{-}\pi'$ ， $\pi\text{-}\sigma'$ ， $\pi\text{-}\pi'$ の 4 つの散乱過程についての散乱振幅 $G_{\sigma\sigma'}$ ， $G_{\sigma\pi'}$ ， $G_{\pi\sigma'}$ ， $G_{\pi\pi'}$ がわかれば，任意の偏光状態にある入射 X 線に対する散乱断面積（散乱強度）がわかることになる．まず，(5.22) より，

$$\begin{aligned} \hat{G}^\dagger\hat{G} &= (\beta^\dagger\hat{I} + \boldsymbol{\alpha}^\dagger \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^\dagger)(\beta\hat{I} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \\ &= \beta^\dagger\beta\hat{I} + \beta^\dagger\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\alpha}^\dagger\beta \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} + (\boldsymbol{\alpha}^\dagger \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})(\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \end{aligned} \quad (5.28)$$

$$= \{\beta^\dagger\beta + (\boldsymbol{\alpha}^\dagger \cdot \boldsymbol{\alpha})\}\hat{I} + \{(\beta^\dagger\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\alpha}^\dagger\beta) + i(\boldsymbol{\alpha}^\dagger \times \boldsymbol{\alpha})\} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (5.29)$$

である^{*126)}．少し複雑な計算を経ると，

$$\begin{aligned} \hat{\mu}\hat{G}^\dagger\hat{G} &= \frac{1}{2}\{\beta^\dagger\beta + \boldsymbol{\alpha}^\dagger \cdot \boldsymbol{\alpha} + \beta^\dagger(\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\alpha}) + (\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\alpha}^\dagger)\beta + i\mathbf{P} \cdot (\boldsymbol{\alpha}^\dagger \times \boldsymbol{\alpha})\}\hat{I} \\ &\quad + \frac{1}{2}\{\beta^\dagger\beta\mathbf{P} + i(\boldsymbol{\alpha}^\dagger \times \boldsymbol{\alpha}) + (\beta^\dagger\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\alpha}^\dagger\beta) + i\mathbf{P} \times (\beta^\dagger\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\alpha}^\dagger\beta)\} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \end{aligned} \quad (5.30)$$

となる．ここで， $\text{Tr}\{\hat{\mu}\hat{G}^\dagger\hat{G}\}$ に寄与するのは \hat{I} の項のみであるから，最終的には次のように表される．

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) &= \text{Tr}\{\hat{\mu}\hat{G}^\dagger\hat{G}\} \\ &= \beta^\dagger\beta + \boldsymbol{\alpha}^\dagger \cdot \boldsymbol{\alpha} + \beta^\dagger(\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\alpha}) + (\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\alpha}^\dagger)\beta + i\mathbf{P} \cdot (\boldsymbol{\alpha}^\dagger \times \boldsymbol{\alpha}) . \end{aligned} \quad (5.31)$$

ここで，一般的に

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} g'_{\sigma\sigma'} + ig''_{\sigma\sigma'} & g'_{\pi\sigma'} + ig''_{\pi\sigma'} \\ g'_{\sigma\pi'} + ig''_{\sigma\pi'} & g'_{\pi\pi'} + ig''_{\pi\pi'} \end{pmatrix} \quad (5.32)$$

として計算してみると，

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) &= \frac{1}{2}\{(g'_{\sigma\sigma'}{}^2 + g''_{\sigma\sigma'}{}^2) + (g'_{\pi\sigma'}{}^2 + g''_{\pi\sigma'}{}^2) + (g'_{\sigma\pi'}{}^2 + g''_{\sigma\pi'}{}^2) + (g'_{\pi\pi'}{}^2 + g''_{\pi\pi'}{}^2)\} \\ &\quad + P_1(g'_{\sigma\sigma'}g'_{\pi\sigma'} + g''_{\sigma\sigma'}g''_{\pi\sigma'} + g'_{\pi\pi'}g'_{\sigma\pi'} + g''_{\pi\pi'}g''_{\sigma\pi'}) \\ &\quad + P_2(g''_{\sigma\sigma'}g'_{\pi\sigma'} - g'_{\sigma\sigma'}g''_{\pi\sigma'} + g'_{\pi\pi'}g''_{\sigma\pi'} - g''_{\pi\pi'}g'_{\sigma\pi'}) \\ &\quad + P_3\frac{1}{2}\{(g'_{\sigma\sigma'}{}^2 + g''_{\sigma\sigma'}{}^2) - (g'_{\pi\sigma'}{}^2 + g''_{\pi\sigma'}{}^2) + (g'_{\sigma\pi'}{}^2 + g''_{\sigma\pi'}{}^2) - (g'_{\pi\pi'}{}^2 + g''_{\pi\pi'}{}^2)\} \end{aligned} \quad (5.33)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2}\{|g_{\sigma\sigma'}|^2 + |g_{\pi\sigma'}|^2 + |g_{\sigma\pi'}|^2 + |g_{\pi\pi'}|^2\} \\ &\quad + P_1\text{Re}\{g_{\pi\sigma'}^*g_{\sigma\sigma'} + g_{\pi\pi'}^*g_{\sigma\pi'}\} + P_2\text{Im}\{g_{\pi\sigma'}^*g_{\sigma\sigma'} + g_{\pi\pi'}^*g_{\sigma\pi'}\} \\ &\quad + P_3\frac{1}{2}\{|g_{\sigma\sigma'}|^2 - |g_{\pi\sigma'}|^2 + |g_{\sigma\pi'}|^2 - |g_{\pi\pi'}|^2\} \end{aligned} \quad (5.34)$$

となる．従って，偏光状態 (P_1, P_2, P_3) に対する散乱断面積は，定数 (C_0, C_1, C_2, C_3) を用いて，一般に

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) = C_0 + C_1P_1 + C_2P_2 + C_3P_3 \quad (5.35)$$

と表すことができる．

^{*126)} 次の点に注意．(i) $\hat{\boldsymbol{\sigma}}^\dagger = \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ である (エルミート)．(ii) $\boldsymbol{\alpha}, \beta$ (電子状態に関する演算子) と $\mathbf{P}, \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ (偏光状態に関する演算子) は可換である．

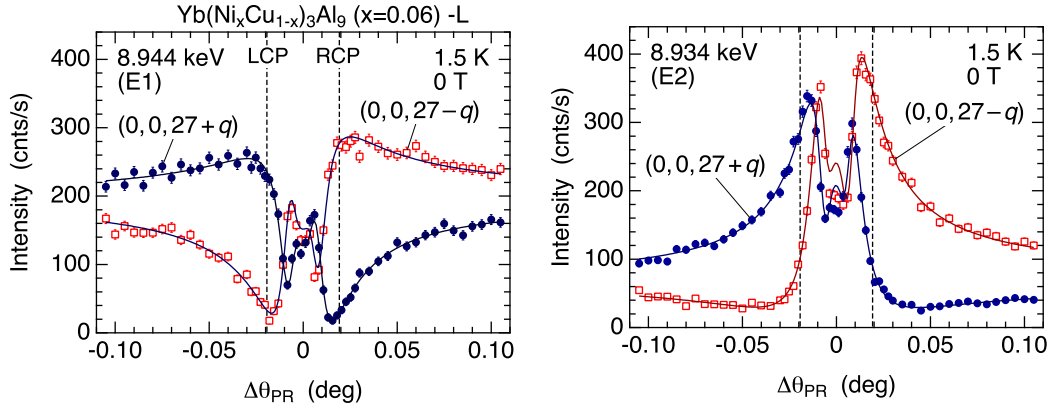


図 5.3: らせん磁性体 $\text{Yb}(\text{Ni}_{1-x}\text{Cu}_x)_3\text{Al}_9$ ($x = 0.06$, 左型結晶) で行われた移相子スキャン [31]. 散乱ベクトルは $(0, 0, 27 \pm 0.445)$. 左図は $E1$ 共鳴エネルギー, 右図は $E2$ 共鳴エネルギーで行われた測定結果. 横軸の $\Delta\theta_{\text{PR}}$ は移相子の Bragg 角からのオフセット角で, 縦の破線が左右円偏光の位置を表す. 実線は (5.35) を使ったフィッティング結果.

移相子スキャンのフィット 移相子を使って入射 X 線の偏光状態 (P_2, P_3) を連続的に変化させながら測定した強度変化は, この式でフィットすることができる. 円偏光を作るための移相子配置では $P_1 = 0$ なので, (C_0, C_2, C_3) の 3 つのパラメータで, あらゆるデータはフィット可能である^{*127}). また, ここでアナライザー結晶を入れて散乱後の直線偏光成分を分離すると, $\phi_A = 90^\circ$ のときは散乱後の偏光が π' の強度成分だけを抽出し, $\phi_A = 0^\circ$ のときは散乱後の偏光が σ' の強度成分だけを抽出することになる.

らせん磁性体 $\text{Yb}(\text{Ni}_{1-x}\text{Cu}_x)_3\text{Al}_9$ ($x = 0.06$, 左型結晶) で行われた移相子スキャンの例を図 5.3 に示す^{*128}). ab 面内に寝た磁気モーメントが波数ベクトル $\mathbf{q} = (0, 0, 0.445)$ でらせんを巻きながら c 軸方向に伝播する磁気構造をしている. $E1$ 共鳴の結果は, 信号が磁気双極子のらせん秩序によるものとして説明可能であるが^{*129}), $E2$ 共鳴の結果は全く異なる形をしており, 単純には説明できそうにない. 磁気八極子による散乱であると考えたことで説明可能なのであるが, ミクロな機構が不明であっても, とりあえずは (5.35) を使ってフィットすることは可能なのである^{*130}).

5.4.3 散乱後の偏光状態

散乱後の偏光状態を表す Stokes パラメータを \mathbf{P}' とすると,

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) \mathbf{P}' = \text{Tr}\{\hat{\mu}\hat{G}^\dagger\hat{\sigma}\hat{G}\} \quad (5.36)$$

という関係がある. これも複雑な計算になるが, 地道に展開して計算すると,

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) \mathbf{P}' = & \beta^\dagger \boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\alpha}^\dagger \beta - i(\boldsymbol{\alpha}^\dagger \times \boldsymbol{\alpha}) + \beta^\dagger \beta \mathbf{P} - i\beta^\dagger (\mathbf{P} \times \boldsymbol{\alpha}) + i(\mathbf{P} \times \boldsymbol{\alpha}^\dagger) \beta \\ & + \boldsymbol{\alpha}^\dagger (\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\alpha}) - \boldsymbol{\alpha}^\dagger \times (\mathbf{P} \times \boldsymbol{\alpha}). \end{aligned} \quad (5.37)$$

実験と解析 したがって, 2×2 行列 \hat{G} がわかっているならば, 任意の偏光状態にある入射 X 線に対する散乱断面積 (散乱強度) と散乱後の偏光状態 \mathbf{P}' がわかる. 我々が実験で行うのは, 様々な条件 (入射 X 線のエネルギー $\hbar\omega$,

*127) P_2 項は磁気らせんヘリシティに敏感で, うまく使えば移相子スキャンは強力な情報をもたらしてくれる.

*128) 移相子による円偏光制御については次章を参照のこと.

*129) らせん磁気秩序を仮定して, 磁気双極子による散乱の幾何学因子 $\boldsymbol{\epsilon}' \times \boldsymbol{\epsilon}$ を使って散乱振幅 \hat{G} を計算し, (5.34) で実験結果を再現できる.

*130) パラメータ C_0, C_2, C_3 の意味は不明であってもフィットは可能.

偏光状態 \mathbf{P} , 散乱ベクトル $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$, アジマス角 ψ , 温度, 磁場, 圧力) で散乱強度を測定することである. 偏光解析アナライザーを入れる場合は, ϕ_A を変えながら強度の変化をみる. 散乱振幅行列 \hat{G} は, これらのパラメータのうち, 入射 X 線のエネルギー, 散乱ベクトル, アジマス角, 温度, 磁場, 圧力によって定まる^{*131)}. これらの条件を変えながら, どのような X 線を入射したときにどのような散乱 (回折) X 線が観測されるか, 図 4.3 でいえば, Stokes パラメータ \mathbf{P} と ϕ_A を変数とする強度変化を測定するのである.

解析では, \hat{G} を何らかのモデルに基づいて計算する. \hat{G} が決まれば, \mathbf{P} と ϕ_A の関係がすべて計算できるので, 実験結果と比較する. 実験結果がモデルで再現できれば, 立てたモデルが正しいという根拠になり得る.

5.5 非共鳴 Thomson 散乱への適用

散乱機構がよくわかっている非共鳴 Thomson 散乱について, \hat{G} と \mathbf{P} を使った強度計算を行ってみよう.

5.5.1 散乱振幅演算子 \hat{G}

非共鳴 Thomson 散乱の散乱振幅演算子は,

$$\begin{aligned}\hat{G} &= (\boldsymbol{\varepsilon}'^* \cdot \boldsymbol{\varepsilon}) F_c \\ &= F_c \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cos 2\theta \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (5.38)$$

と表される. ここで, F_c は結晶構造因子である^{*132)}. (5.23) の関係より,

$$\begin{aligned}\beta &= \frac{F_c}{2} (1 + \cos 2\theta) = F_c \cos^2 \theta \\ \alpha_1 &= 0, \quad \alpha_2 = 0, \quad \alpha_3 = \frac{F_c}{2} (1 - \cos 2\theta) = F_c \sin^2 \theta\end{aligned}\quad (5.39)$$

である.

5.5.2 散乱断面積

非共鳴 Thomson 散乱の散乱断面積は, (5.31) より,

$$\begin{aligned}\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) &= |F_c|^2 (\cos^4 \theta + \sin^4 \theta + 2P_3 \sin^2 \theta \cos^2 \theta) \\ &= |F_c|^2 \left\{ 1 - \frac{1}{2} (1 - P_3) \sin^2 2\theta \right\}.\end{aligned}\quad (5.40)$$

5.5.3 散乱後の偏光状態 (Stokes パラメータ)

散乱後の Stokes パラメータは, (5.37) より,

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) \mathbf{P}' = |F_c|^2 \left\{ (2 \sin^2 \theta \cos^2 \theta + P_3 \sin^4 \theta) (0, 0, 1) + (\cos^4 \theta) (P_1, P_2, P_3) - (\sin^4 \theta) (P_1, P_2, 0) \right\}.$$

*131) 圧力は物質の状態を決める変数の一つなので記したが, 圧力下の共鳴 X 線回折は非常に特殊な圧力技術が必要であり, 容易ではない.

*132) 添字の c は Charge の c .

従って,

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) P_1' &= |F_c|^2 P_1 \cos 2\theta, \\
 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) P_2' &= |F_c|^2 P_2 \cos 2\theta, \\
 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) P_3' &= \frac{1}{2}|F_c|^2 \{\sin^2 2\theta + P_3(1 + \cos^2 2\theta)\} \\
 &= |F_c|^2 \left\{ P_3 + \frac{1}{2}(1 - P_3) \sin^2 2\theta \right\}.
 \end{aligned} \tag{5.41}$$

\mathbf{P}' を求めるには, $(\frac{d\sigma}{d\Omega})\mathbf{P}'$ を $(\frac{d\sigma}{d\Omega})$ で割ればよい. (5.40), (5.41) より, 非共鳴 Thomson 散乱の後の Stokes パラメータは,

$$\begin{aligned}
 P_1' &= \frac{P_1 \cos 2\theta}{1 - \frac{1}{2}(1 - P_3) \sin^2 2\theta}, \\
 P_2' &= \frac{P_2 \cos 2\theta}{1 - \frac{1}{2}(1 - P_3) \sin^2 2\theta}, \\
 P_3' &= \frac{P_3 + \frac{1}{2}(1 - P_3) \sin^2 2\theta}{1 - \frac{1}{2}(1 - P_3) \sin^2 2\theta}.
 \end{aligned} \tag{5.42}$$

図 5.4 に $\mathbf{P} = (1, 0, 0)$ の場合について, Thomson 散乱後の Stokes パラメータの 2θ 依存性を示した. (5.41) から, $2\theta = 90^\circ$ のとき, 必ず $P_1' = P_2' = 0$ となり, $P_3' \neq -1$ である限り, 必ず $P_3' = 1$ となることがわかる.

5.5.4 アナライザー結晶での偏光解析

一般の散乱の場合 結晶からの散乱を, 後方に設置された偏光解析アナライザーを通して観測する場合を考える. アナライザーでの回折角は $2\theta_A$ である. アナライザーでの回折は非共鳴 Thomson 散乱であるから, 散乱断面積は (5.40) で表される. ただし, P_3 はアナライザーで起こる散乱に対するものにならなければならない. これを P_{3A} と書くと^{*133)},

$$P_{3A} = -P_1' \sin 2\phi_A + P_3' \cos 2\phi_A. \tag{5.43}$$

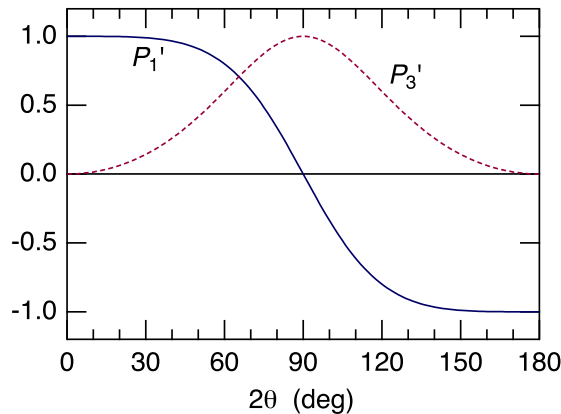


図 5.4: $\mathbf{P} = (1, 0, 0)$ のときの Thomson 散乱後の Stokes パラメータの 2θ 依存性. $P_2' = 0$.

^{*133)} 今は $\mathbf{e}'_\sigma \times \mathbf{e}'_\pi = \hat{\mathbf{k}}'$ となるような偏光ベクトルの定義を採用しているので, 図 4.3 から, $\phi_A > 0$ のときは $P_1' < 0$ の状態を観測することになる. $\mathbf{e}'_\pi \times \mathbf{e}'_\sigma = \hat{\mathbf{k}}'$ の定義にすればこの違和感は解消されるが, 今度は円偏光の扱いがうまくいなくなる.

これを用いて,

一般の散乱の場合に検出器で観測される強度は, K を定数として,

$$I = K \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) \left\{ 1 - \frac{1}{2}(1 - P_{3A}) \sin^2 2\theta_A \right\} \quad (5.44)$$

で計算される. ここで, $(\frac{d\sigma}{d\Omega})$ は試料での散乱断面積であり, (5.31) で計算されるものである.

非共鳴 Thomson 散乱の場合 Stokes パラメータ (5.41) を P_{3A} の式 (5.43) に代入すると,

$$P_{3A} = \frac{-P_1 \cos 2\theta \sin 2\phi_A + \left\{ P_3 + \frac{1}{2}(1 - P_3) \sin^2 2\theta \right\} \cos 2\phi_A}{1 - \frac{1}{2}(1 - P_3) \sin^2 2\theta}. \quad (5.45)$$

これと, 散乱断面積 (5.40) を用いて, 非共鳴 Thomson 散乱の場合に検出器で観測される強度は, K を定数として,

$$I = K |F_c|^2 \left\{ 1 - \frac{1}{2}(1 - P_3) \sin^2 2\theta \right\} \left\{ 1 - \frac{1}{2}(1 - P_{3A}) \sin^2 2\theta_A \right\} \quad (5.46)$$

で表される. ここで, $P_1 = 0$ の場合は,

$$I = K |F_c|^2 \left[\left\{ 1 - \frac{1}{2}(1 - P_3) \sin^2 2\theta \right\} \left(1 - \frac{1}{2} \sin^2 2\theta_A \right) + \frac{1}{2} \left\{ P_3 + \frac{1}{2}(1 - P_3) \sin^2 2\theta \right\} \cos 2\phi_A \sin^2 2\theta_A \right] \quad (5.47)$$

となる. たとえば, 入射 X 線に $\chi = \pm 45^\circ$ の配置で移相子を入れて格子基本反射の強度を測定した場合などは, この式でフィットする.

5.6 直線偏光 X 線を使った偏光解析

放射光リングからの入射 X 線は偏光ベクトルが水平面内にある直線偏光である。このビームをそのまま使うと、水平散乱面の場合は π 偏光入射、垂直散乱面では σ 偏光入射での実験になる^{*134}。現在ではできなくなってしまったが、かつて、SPring-8 の BL22 では、移相子 (Phase Retarder) を使って左右円偏光を作るだけでなく^{*135}、図 5.5 のように、直線偏光ベクトル ϵ の方向を σ - π 面内で自由に制御して共鳴 X 線回折を行う実験システムが存在した。アナライザー結晶を使って散乱後の偏光解析も行えば、完全直線偏光解析 (Full Linear Polarization Analysis) となる [29]。磁場中でアジマス角依存性測定ができないときなどに秩序変数を決定する強力な手法となる^{*136}。

この入射 X 線の偏光ベクトルの角度 η を図 5.5 のように定義する^{*137}。 $\eta = 0^\circ$ のとき σ 偏光、 $\eta = 90^\circ$ のとき π 偏光である。実験室の XYZ 座標系で、

$$\begin{aligned}\epsilon_\sigma &= (1, 0, 0) \\ \epsilon_\pi &= (0, -\sin\theta, -\cos\theta)\end{aligned}\quad (5.48)$$

であるから、完全な直線偏光になっていると仮定すると、移相子透過後の偏光ベクトルは、

$$\begin{aligned}\epsilon &= \epsilon_\sigma \cos\eta - \epsilon_\pi \sin\eta \\ &= (\cos\eta, -\sin\eta \sin\theta, -\sin\eta \cos\theta)\end{aligned}\quad (5.49)$$

と表される。これを Stokes パラメータで表すと、

$$\mathbf{P} = (P_1, P_2, P_3) = (-\sin 2\eta, 0, \cos 2\eta)\quad (5.50)$$

である。Stokes パラメータを使うと、完全な直線偏光になっていない状態も簡単に扱えるという利点があるので、以下では Stokes パラメータを使った式で書き表していく。

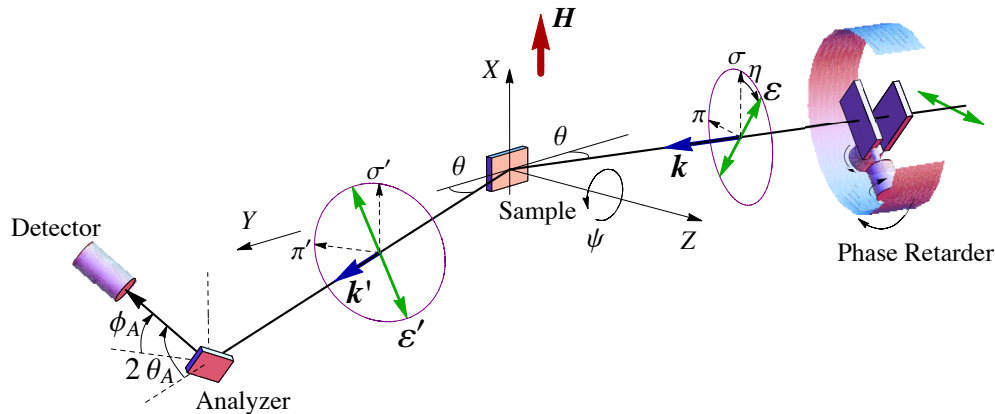


図 5.5: SPring-8 の BL22 で 2019 年まで可能だった完全直線偏光解析システム (Full Linear Polarization Analysis)。入射直線偏光の角度 η を自在に変えることができる。移相子 2 枚を連結することで色収差 (波長分散による偏光度の劣化) を補償した偏光度の高い σ 偏光ビームが得られる。

*134) 超伝導マグネットを使った磁場中実験では水平散乱面になる。縦振りの四軸回折計を使うと垂直散乱面になる。

*135) 移相子については §6 「透過型 X 線移相子による偏光制御」を参照。

*136) 磁場中で試料を回すと磁場方向が変わってしまう。

*137) η の向きを ϵ_σ から ϵ_π に倒れる方向にして、 P_1 の符号と対応させるといいのだが、そうすると Thomson 散乱を観測したとき、 ϕ_A と η との関係が逆になってしまうのである。ならば ϕ_A の向きを逆にすればよいと思うかもしれないが、ビームラインでの定義がこの向きになっており、変えるとややこしくなって仕方がないのである。

まず、直線偏光度が P_0 ($0 \leq P_0 \leq 1$) であるとする^{*138)}。また、移相子の χ_{PR} 軸を回転させることで角度 η が変化し、直線偏光度は P_0 のまま、偏光状態が $\sigma \rightarrow 45^\circ \rightarrow \pi \rightarrow -45^\circ$ と変化していくものとする。このとき、

$$P_1 = -P_0 \sin 2\eta, \quad P_3 = P_0 \cos 2\eta \quad (5.51)$$

と表される^{*139)}。

Direct Beam Direct Beam を偏光解析アナライザーを通して観測する場合、観測強度は式 (5.46) で $2\theta = 0$ とした式で表される。したがって、次に示す関数 polscanBR(w,x) で tth=0 としてフィットすればよい。実際の実験結果をフィットした様子を図 5.6 に示す。

基本 Bragg 反射の測定 試料の格子基本反射を偏光解析アナライザーを通して観測する場合を考える。試料での散乱は非共鳴 Thomson 散乱なので、観測強度は式 (5.46) で表される。

式 (5.46) を Igor-Pro の Fitting 関数にしたものを次に示す。これを使って実際の実験結果をフィットしたのが図 5.7 である。 η -scan の場合が etascanBR(w,x) で、POL-scan (ϕ_A -scan) の場合が polscanBR(w,x) である。

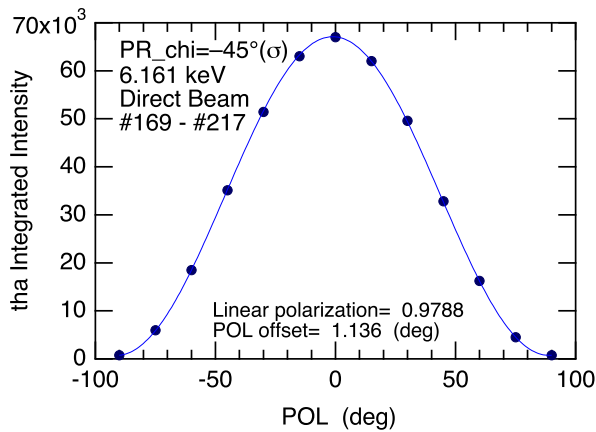


図 5.6: 移相子を使って σ 偏光にした Direct Beam についての、アナライザー積分強度の POL ($= \phi_A$) 依存性とフィッティング。

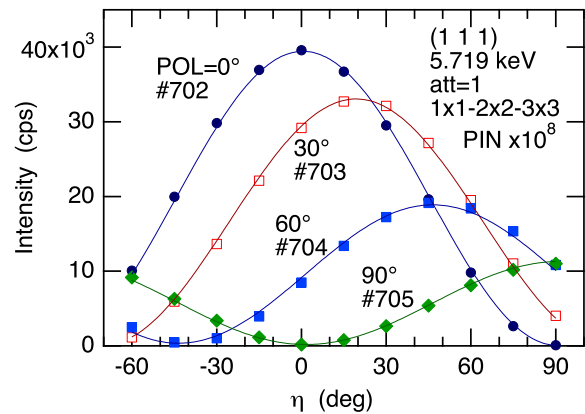


図 5.7: 格子基本反射について、 $\phi_A = 0^\circ, 30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$ におけるピークトップ強度の入射偏光角 η 依存性、およびそのフィッティング。 $2\theta = 53.95^\circ, 2\theta_A = 87.088^\circ$ 。

*138) 完全な偏光状態からのずれが円偏光のほうに逃げている可能性もあるが、ここでは無偏光状態に逃げているものとする。

*139) [41] によれば、もともと水平偏光をそのまま透過させる $\eta = 90^\circ$ の配置が最も P_0 が高く、 σ 偏光に回す $\eta = 0^\circ$ の配置が最も P_0 が低くなる。

```

Function etascanBR(w,x)
Wave w
Variable x
Variable tth, ttha, p1in, p3in, int,p1out,p3out,p3A
//w[0]: POL , w[1]: tth (deg), w[2]: ttha (deg), w[3]: PL, w[4]: Intensity, w[5]: offset
tth=w[1]*pi/180; ttha=w[2]*pi/180
p1in=-w[3]*sin(2*x*pi/180)
p3in=w[3]*cos(2*x*pi/180)
int=(1-(1-p3in)/2*sin(tth)^2)
p1out=p1in*cos(tth)/int
p3out=(p3in+(1-p3in)/2*sin(tth)^2)/int
p3A=-p1out*sin(2*(w[0]+w[5])*pi/180)+p3out*cos(2*(w[0]+w[5])*pi/180)
return w[4]*int*(1-(1-p3A)/2*sin(ttha)^2)
End

```

```

Function polscanBR(w,x)
Wave w
Variable x
Variable tth, ttha, p1in, p3in, int,p1out,p3out,p3A
//w[0]: eta, w[1]: tth (deg), w[2]: ttha (deg), w[3]: PL, w[4]: Intensity, w[5]: offset
tth=w[1]*pi/180; ttha=w[2]*pi/180
p1in=-w[3]*sin(2*w[0]*pi/180)
p3in=w[3]*cos(2*w[0]*pi/180)
int=(1-(1-p3in)/2*sin(tth)^2);
p1out=p1in*cos(tth)/int
p3out=(p3in+(1-p3in)/2*sin(tth)^2)/int
p3A=-p1out*sin(2*(x+w[5])*pi/180)+p3out*cos(2*(x+w[5])*pi/180)
return w[4]*int*(1-(1-p3A)/2*sin(ttha)^2)
End

```