

## 6 透過型 X 線移相子による偏光制御

放射光リングからの X 線は、電場ベクトルが水平面内にある直線偏光ビームである。この偏光状態を縦方向の直線偏光にしたり、円偏光にしたりと、偏光状態を制御する素子が**移相子 (Phase Retarder)** である。  $E > 4 \text{ keV}$  ( $\lambda < 3 \text{ \AA}$ ) のエネルギー (波長) 領域における X 線移相子では、完全に近い結晶を透過する際の複屈折<sup>\*140)</sup> を利用する。この現象は、X 線が完全結晶で Bragg の回折条件を満たし、結晶中で Bragg 反射を起こしながら透過するとき、特に顕著になる。このとき、結晶中では X 線の多重散乱が起こっており、結晶中に X 線の波動場が形成される<sup>\*141)</sup>。そして、散乱面と垂直な方向に振動する波 ( $\sigma$  偏光) と、平行な方向に振動する波 ( $\pi$  偏光) とで、波数ベクトルにわずかな差が生じる (屈折率に差がでる) ため、波動場が結晶中を伝播するにつれて、 $\sigma$  偏光の波と  $\pi$  偏光の波とのあいだに位相差が生じる [42]。X 線移相子ではこの現象を利用する [43]。

### 6.1 基本原理

#### 6.1.1 $\sigma$ 偏光と $\pi$ 偏光の位相差

結晶を X 線が透過するときの配置を図 6.1 および図 6.2 に示す。移相子結晶を透過するときの経路の長さを  $t$ 、Bragg 角を  $\theta_B$  とするとき、透過した X 線の  $\sigma$  偏光に対する  $\pi$  偏光の位相差は次のように表される [43]。

$$\delta = -\frac{At}{\theta - \theta_B} \quad (6.1)$$

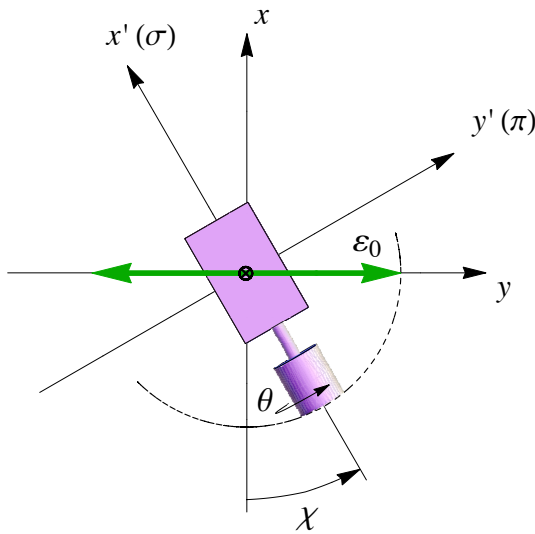


図 6.1: 移相子の軸の定義。ビームの進む方向を  $z$  軸の正方向にとり、鉛直上向きに  $x$  軸、水平面内に  $y$  軸をとる。入射 X 線の電場ベクトル  $\epsilon_0$  は  $y$  軸と平行である。移相子結晶での Bragg 反射の散乱面を  $y'z$  面とし、散乱面と垂直な方向を  $x'$  軸とする。したがって、この移相子結晶においては、 $y'$  軸と平行な偏光成分が  $\pi$ 、 $x'$  軸と平行な偏光成分が  $\sigma$  である。

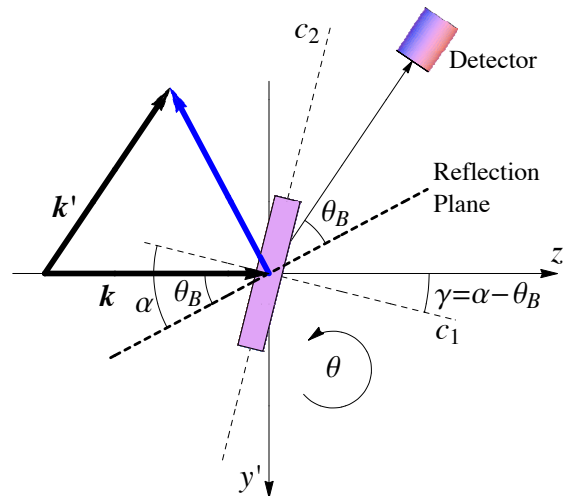


図 6.2:  $y'z$  散乱面内で Bragg 反射が起こるときの様子を図 6.1 の  $x'$  方向から見たもの。例えば、ダイヤモンドの 111 反射を利用する場合、結晶表面は (100) 面であり、図の  $c_1$  が [100] 方向、 $c_2$  が [011] 方向、 $\alpha = 35.264^\circ$  である。図の向きに  $\theta$  を回転させると、反射面に対して低角入射から高角入射、つまり  $\theta < \theta_B$  から  $\theta = \theta_B$  を経て、 $\theta > \theta_B$  へと変化する。

\*140) 光の偏光方向によって屈折率が異なる現象。

\*141) 周期的な誘電率の場合、Bloch 波ができる。ある結晶面で Bragg 反射された X 線が次の結晶面に対する入射波となり、結晶中で次々と反射が起こる。このような現象を扱う回折理論を**動力学的回折理論**という [42]。

ここで、係数  $A$  は

$$A = \frac{\pi}{2} \left[ \frac{r_e^2 \text{Re}(F_{hkl} F_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}) \lambda^3 \sin(2\theta_B)}{\pi^2 V^2} \right] \quad (6.2)$$

と表される。ここで、 $r_e$  は古典電子半径、 $\lambda$  は波長、 $V$  は単位格子の体積、 $F_{hkl}$  と  $F_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}$  は  $hkl$  反射と  $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$  反射の結晶構造因子である。ただし、実際の実験では  $At$  をパラメータとして扱い、解析に用いる。

**ダイヤモンドの 111 反射の場合** 例として、ダイヤモンドの 111 反射の場合を考えてみる。格子定数は  $3.567 \text{ \AA}$  であるから、111 反射に対する逆格子ベクトル  $\tau_{111}$  の大きさは  $3.051 \text{ \AA}^{-1}$  である。ちょうど  $\tau = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$  の Bragg 条件が満たされる時、Bragg 回折が起こり、 $\tau = 2k \sin \theta_B$  の関係を満たす。Ce の  $L_3$  吸収端  $5.724 \text{ keV}$  の X 線では、 $\theta_B = 31.727^\circ$  となる。したがって、 $\gamma = 35.264 - 31.727 = 3.537^\circ$  となり、ビームに対して角度  $\gamma$  だけ結晶を回したとき、ちょうど Bragg 条件が満たされる。このときの Bragg ピークを、移相子の軸に取り付けられた専用の検出器で検出し、移相子の条件出しをする。

### 6.1.2 移相子としての働き

$\sigma$  と  $\pi$  のあいだに位相差を生じさせるという働きを最もわかりやすくみることができるのは、 $\chi = -45^\circ$  のときである。このとき、入射 X 線の偏光ベクトル  $\epsilon_0$  は、移相子での散乱面  $y'z$  に対して  $45^\circ$  の角度をなしており、 $x'(\sigma)$  成分も  $y'(\pi)$  成分も等しく、同位相である。つまり、移相子の  $x'y'$  座標系でみると、入射する X 線は  $45^\circ$  直線偏光の状態にある。ベクトル表記すれば、 $(\epsilon_{x'}, \epsilon_{y'}) = (1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2})$  である。移相子を透過すると、式 (6.1) にしたがって、 $\sigma$  に対して  $\pi$  に  $\delta$  の位相差が生じる。今、 $y'$  成分が  $\pi$  であることに注意すると、 $(\epsilon_{x'}, \epsilon_{y'}) = (1/\sqrt{2}, e^{i\delta}/\sqrt{2})$  となる<sup>\*142)</sup>。つまり、 $\delta = \pi/2$  であれば右円偏光、 $\delta = -\pi/2$  であれば左円偏光である。さらに、 $\delta = \pm\pi$  であれば、 $x'y'$  系でみると  $(\epsilon_{x'}, \epsilon_{y'}) = (1/\sqrt{2}, -1/\sqrt{2})$ 、つまり、 $-45^\circ$  直線偏光になる。図 6.1 でみるとわかると思うが、 $x'y'$  系で  $-45^\circ$  直線偏光ということは、 $xy$  系でいえば、偏光ベクトルは  $x$  方向を向いているということであり、水平偏光から垂直偏光に変わったということができる。

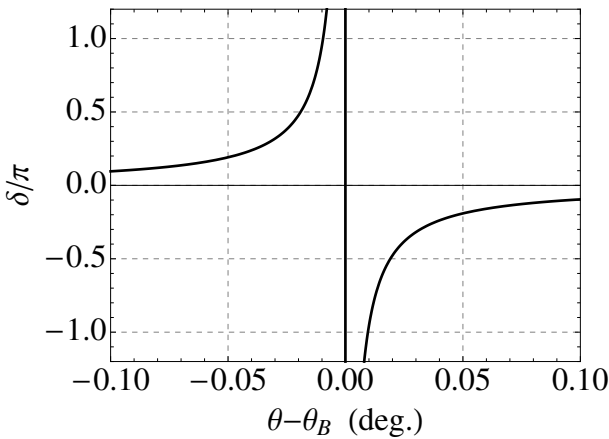


図 6.3:  $At = 0.03$  (rad-deg.) のときの、 $\theta - \theta_B$  に対する位相差  $\delta/\pi$  の変化。  $\chi = -45^\circ$  の場合、 $\delta/\pi = 1/2$  のとき右円偏光、 $\delta/\pi = -1/2$  のとき左円偏光、 $\delta/\pi = \pm 1$  のとき垂直偏光になる。

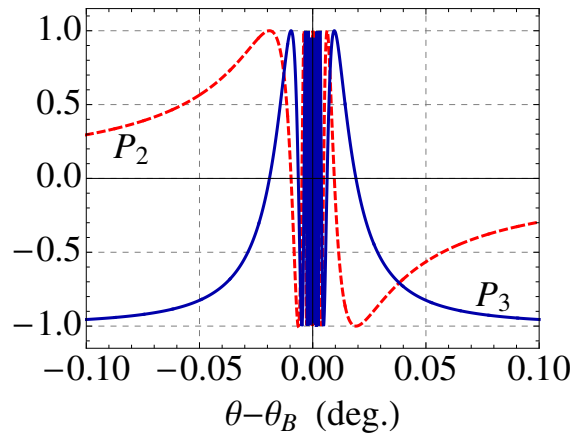


図 6.4:  $At = 0.03$  (rad-deg.),  $\chi = -45^\circ$  のときの、 $\theta - \theta_B$  に対する Stokes パラメータ  $P_2, P_3$  の変化。  $\chi = \pm 45^\circ$  のときは、常に  $P_1 = 0$  である。

<sup>\*142)</sup> ここでの疑問は「 $\sigma$  偏光に対して  $\pi$  偏光に位相差  $\delta$  がつく」という言葉の説明が  $(\epsilon_{x'}, \epsilon_{y'}) = (1/\sqrt{2}, e^{i\delta}/\sqrt{2})$  を意味するのか、 $(\epsilon_{x'}, \epsilon_{y'}) = (1/\sqrt{2}, e^{-i\delta}/\sqrt{2})$  を意味するのか、どちらなのかである。いくつかの文献で確認しようとしたが、はっきりしなかった。理論的には決まるはずのものであるが、動力学的回折理論を使いこなすのも難しいので、最終的には何らかの実験で確認する必要がある。今のところ、空間群  $P6_122$  または  $P6_522$  で chiral な構造をとる  $\text{CsCuCl}_3$  を使った実験で、Cu サイトからの ATS 散乱の結果を説明できるように決めたものを使っている。その結果によると、 $\chi = 45^\circ$  のとき (KEK の BL-3A での配置)、 $\theta > \theta_B$  にしたときに我々の定義での右円偏光になるというものである。つまり、位相を  $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$  と表記するとき、 $(\epsilon_{x'}, \epsilon_{y'}) = (1/\sqrt{2}, e^{i\delta}/\sqrt{2})$  である。

$xy$ 系において、垂直偏光 ( $x$  方向) を  $\sigma$ , 水平偏光 ( $y$  方向) を  $\pi$  と定義すれば、放射光リングからの入射 X 線が完全に水平偏光であるとき、Stokes パラメータは  $(P_1, P_2, P_3) = (0, 0, -1)$  である。移相子結晶の  $\theta$  を  $\theta < \theta_B$  から正方向に回し、 $\theta = \theta_B$  の状態を経て、 $\theta > \theta_B$  のほうへ回していくと、位相差  $\delta$  は図 6.3 のように変化する。このとき、 $\chi = -45^\circ$  であれば、最初  $P_3 = -1$  であったのが、徐々に  $P_2$  が混じってきて、 $\delta = \pi/2$  になったときに  $\mathbf{P} = (0, 1, 0)$  となる。さらに  $\theta$  を正方向に回すと、 $\delta = \pi$  になったときに垂直直線偏光 ( $\sigma$  偏光) の状態が実現し、 $\mathbf{P} = (0, 0, 1)$  となる。この変化の様子を図 6.4 に示す。

### 6.1.3 位相差と吸収の相反関係

$\gamma$  は移相子結晶による X 線吸収を計算するのに用いられる。厚さ  $t_0$  の結晶が角度  $\gamma$  だけ傾いているとき、結晶を透過する X 線の経路  $t$  は

$$t = \frac{t_0}{\cos \gamma}$$

である。結晶の吸収係数が  $\mu$  であるとき、透過後の X 線の強度は透過前と比べて

$$\exp(-\mu t)$$

だけ減衰する。この計算は、X 線のエネルギーに対して、移相子の厚さ  $t_0$  をどの程度にすればよいかを見積もるのに必要である。厚さが大きければ、(6.1) より、 $\theta - \theta_B$  が大きくても十分な位相差  $\delta$  を得ることができ、角度やエネルギーの分解能の面で有利であるが、その反面、吸収が大きくなり、強度が必要な実験にとっては不利になる。一方で厚さが薄ければ、強度的には有利になるが、十分な位相差を得るためには  $\theta - \theta_B$  を小さくとる必要が出てきて、角度やエネルギーの分解能の面で不利になる。

分解能については、厚さを 2 倍に設定して、 $At = 0.06$  (rad·deg.) として計算した図 6.5, 6.6 をみるとよいだろう。図 6.3, 6.4 と同様な計算である。 $\delta = \pi/2$  や  $\pi$  のところの変化率が  $At = 0.03$  のときよりもずっとゆるやかになっている。その結果、 $P_2 = \pm 1$  や  $P_3 = 1$  となる  $\theta$  位置での曲率がゆるやかである。これはつまり、少しくらい  $\theta$  がずれても  $P_2 = \pm 1$  や  $P_3 = 1$  である状況が影響を受けにくいことを意味する。

実際のビームは完全に平行な一直線のビームではなく、ある程度の角度発散を持っている。また、エネルギー(波長)も完全に単一ではなく、ある程度の幅をもっている<sup>\*143)</sup>。ということは、横軸の  $\theta$  もただ 1 点でみるのではなく、角度発散程度の幅をもたせてみる必要がある。また、エネルギーが違えば  $\theta_B$  も違うので、その意味でも

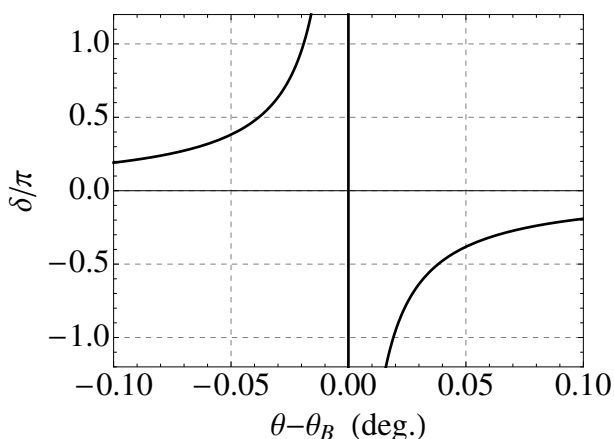


図 6.5:  $At = 0.06$  (rad·deg.) のときの、位相差  $\delta/\pi$  の変化。

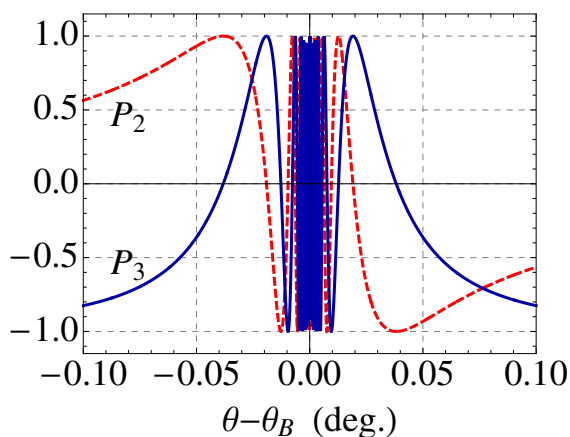


図 6.6:  $At = 0.06$  (rad·deg.),  $\chi = -45^\circ$  のときの、 $P_2, P_3$  の変化。

\*143)  $\Delta E/E \sim 3 \times 10^{-4}$  程度。

横軸の  $\theta$  には幅をもたせる必要がある<sup>\*144)</sup>。厚さが薄いと  $\delta$  の変化率が大きくなり、その結果、目標とする  $P_2$  や  $P_3$  になるよう移相子の  $\theta$  を決めても、その周辺の異なる  $P_2$  や  $P_3$  の状態が混じってきて、偏光度が期待通りにならない可能性がでてくるのである。

$\delta$  の変化率がゆるやかな領域を利用するため移相子を厚くすることと、実験に支障がない程度の強度が得られるよう移相子の厚さを薄くすること、この 2 点を両立する厚さを選択することが肝要である。図 6.7 に代表例であるダイヤモンド 111 反射および 220 反射における各種パラメータのエネルギー依存性を示す。目標の移相量を得るためにオフセット角を  $0.012^\circ$  より小さくしなければならないようだ、分解能としては非常に厳しい状態になる<sup>\*145)</sup>。一方の強度面については、透過率がたとえ 1% を下回ろうとも、強度的に差し支えなければ問題はないのであるが、一応の目安として 5% の線を示した。

---

\*144) 移相子の角度  $\theta$  はモーターの精度で決まる 1 点に決まるが、そのときの  $\theta - \theta_B$  がいくらなのかは、厳密な 1 点には定まらず、ビームの角度幅とエネルギー幅で決まる幅をもたせなければならない。

\*145) わずかな角度の差が大きな移相量の差につながる領域に突入する。

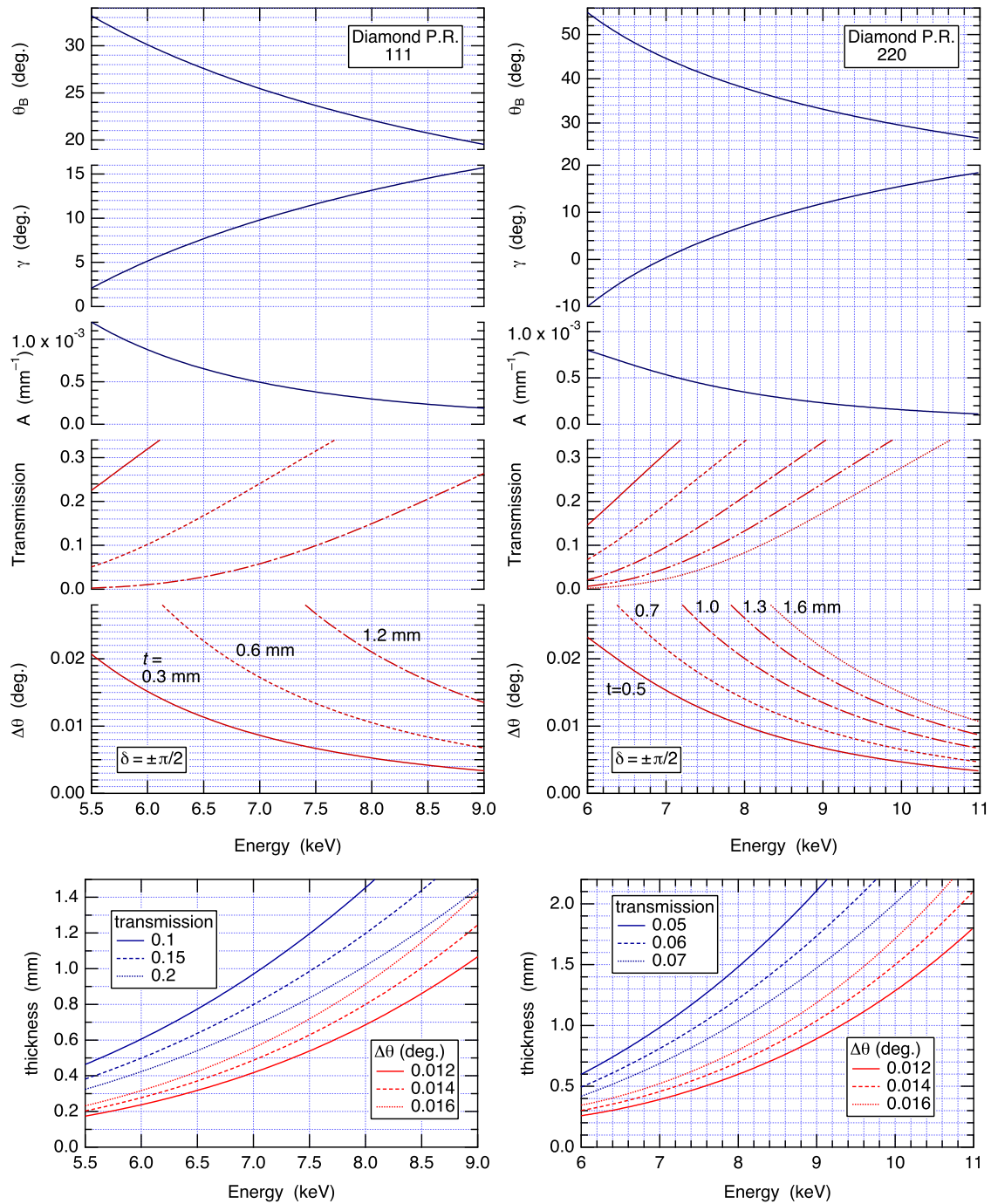


図 6.7: ダイヤモンド 111 反射および 220 反射での各種パラメータのエネルギー依存性. Bragg 角  $\theta_B = \sin^{-1}(\lambda/2d)$ ,  $\gamma = \alpha - \theta_B$ , 式 (6.2) で計算した係数  $A$ , 厚さ  $t$  の移相子 1 枚での透過率, 式 (6.1) で  $\delta = \pm\pi/2$  となるオフセット角  $\Delta\theta = \theta - \theta_B$ , 移相子 1 枚での透過率が 0.1, 0.15, 0.2 となるような移相子 1 枚の厚さ, オフセット角が 0.012°, 0.014°, 0.016° となるような移相子 1 枚の厚さ.

## 6.2 移相子を透過した X 線の偏光ベクトル

この節では、移相子を透過した X 線の偏光ベクトルをきちんと座標系を定義して計算し、 $\chi$  と  $\delta$  の関数として表す。座標系は図 6.1 に示すとおりである。まず、入射 X 線の偏光ベクトル  $(0, 1)$  を結晶の座標軸  $x'y'$  で表すと、

$$\boldsymbol{\varepsilon}_0 = \begin{pmatrix} \varepsilon_{x'} \\ \varepsilon_{y'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \chi & -\sin \chi \\ \sin \chi & \cos \chi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin \chi \\ \cos \chi \end{pmatrix}. \quad (6.3)$$

移相子を透過した後の偏光ベクトルを  $\boldsymbol{\varepsilon}$  とすると、 $\pi$  成分には位相差  $\delta$  が生じているので、

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} -\sin \chi \\ \cos \chi e^{i\delta} \end{pmatrix}. \quad (6.4)$$

これを  $xy$  系に戻すと、

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon} &= \begin{pmatrix} \cos \chi & \sin \chi \\ -\sin \chi & \cos \chi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sin \chi \\ \cos \chi e^{i\delta} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -\cos \chi \sin \chi (1 - \cos \delta) + i \cos \chi \sin \chi \sin \delta \\ \cos^2 \chi \cos \delta + \sin^2 \chi + i \cos^2 \chi \sin \delta \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.5)$$

である。これが実験室系への入射ビームとなる。

$(\varepsilon_x, \varepsilon_y)$  には、つぎのような性質がある。

$$|\varepsilon_x|^2 + |\varepsilon_y|^2 = 1 \quad (6.6)$$

$$|\varepsilon_x|^2 - |\varepsilon_y|^2 = -(\cos^2 2\chi + \sin^2 2\chi \cos \delta) \quad (6.7)$$

$\chi = -\pi/4$  のとき

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon} &= \begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\delta} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - e^{i\delta} \\ 1 + e^{i\delta} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - \cos \delta - i \sin \delta \\ 1 + \cos \delta + i \sin \delta \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.8)$$

$\chi = -\pi/4$ ,  $\delta = +\pi/2$  のとき

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - i \\ 1 + i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\pi/4} \\ e^{i\pi/4} \end{pmatrix} = \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\pi/2} \end{pmatrix} = \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \quad (6.9)$$

である。これは、 $\varepsilon_y$  の位相が  $\varepsilon_x$  より  $\pi/2$  だけ進んでいることを示している。 $\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$  と書かれる偏光状態は右円偏光 (RHC) であり、Stokes パラメータで表すと、この偏光状態は、

$$P_2 = 1$$

の状態である。

$\chi = -\pi/4, \delta = -\pi/2$  のとき

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+i \\ 1-i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\pi/4} \\ e^{-i\pi/4} \end{pmatrix} = \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\pi/2} \end{pmatrix} = \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \quad (6.10)$$

である。これは、 $\varepsilon_y$  の位相が  $\varepsilon_x$  より  $\pi/2$  だけ遅れていることを示している。 $\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$  と書かれる偏光状態は左円偏光 (LHC) であり、Stokes パラメータで表すと、この偏光状態は、

$$P_2 = -1$$

の状態である。

$\chi = \pi/4$  のとき

$$\begin{aligned} \varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \end{pmatrix} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ e^{i\delta} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 + e^{i\delta} \\ 1 + e^{i\delta} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 + \cos \delta + i \sin \delta \\ 1 + \cos \delta + i \sin \delta \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.11)$$

$\chi = \pi/4, \delta = +\pi/2$  のとき

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1+i \\ 1+i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i3\pi/4} \\ e^{i\pi/4} \end{pmatrix} = \frac{e^{i3\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\pi/2} \end{pmatrix} = \frac{e^{i3\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \quad (6.12)$$

である。これは、 $\varepsilon_y$  の位相が  $\varepsilon_x$  より  $\pi/2$  だけ遅れていることを示している。 $\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$  と書かれる偏光状態は左円偏光 (LHC) であり、Stokes パラメータで表すと、この偏光状態は、

$$P_2 = -1$$

の状態である。 $\chi = -\pi/4$  のときと逆になっている。

$\chi = \pi/4, \delta = -\pi/2$  のとき

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1-i \\ 1-i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i3\pi/4} \\ e^{-i\pi/4} \end{pmatrix} = \frac{e^{-i3\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\pi/2} \end{pmatrix} = \frac{e^{-i3\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \quad (6.13)$$

である。これは、 $\varepsilon_y$  の位相が  $\varepsilon_x$  より  $\pi/2$  だけ進んでいることを示している。 $\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$  と書かれる偏光状態は右円偏光 (RHC) であり、Stokes パラメータで表すと、この偏光状態は、

$$P_2 = 1$$

の状態である。 $\chi = -\pi/4$  のときと逆になっている。

### 6.3 移相子を透過した X 線の Stokes Parameter

この節では、移相子を透過した X 線の Stokes パラメータ ( $P_1, P_2, P_3$ ) を  $\chi$  と  $\delta$  の関数として表す。移相量  $\delta$  は (6.1) を通して  $\theta$  と直接結びついており、 $\delta$  の関数として表されていれば、 $\chi$  と  $\theta$  という機械的な数値と、散乱強度の計算に直接関係する Stokes パラメータとを結びつけることができる。

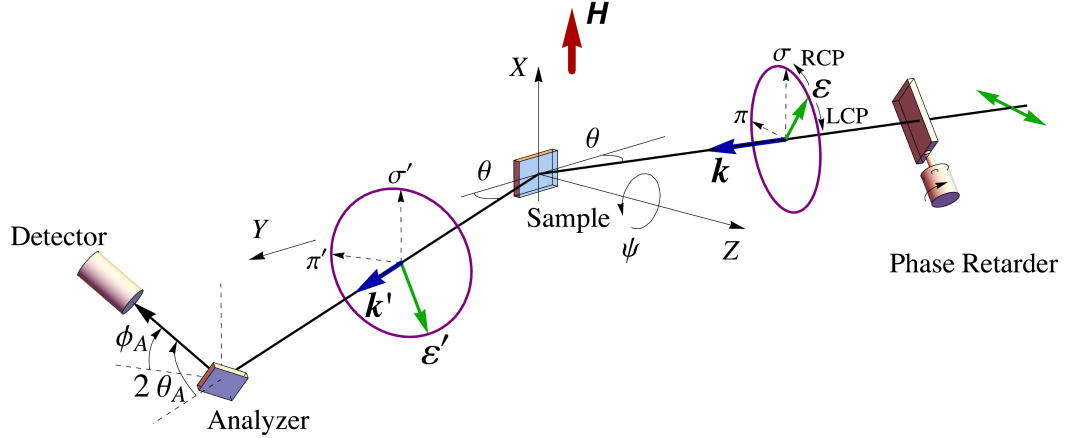


図 6.8: 実験室での  $XYZ$  座標系と各種ベクトルおよび回転角度の定義. 図 4.3 の再掲. 移相子を透過した X 線の Stokes パラメータは, この図に示すとおり, 偏光ベクトルの  $X$  軸成分を  $\sigma$ ,  $YZ$  散乱面内成分を  $\pi$  として定義する. KEK-PF の BL3A でのマグネットを使った水平散乱面での実験はこの図のとおりであり,  $\chi = 45^\circ$  である. 縦振りの 4 軸回折計を使う垂直散乱面の場合は, この図を  $Y$  軸まわりに  $90^\circ$  回転させた配置になる.

### 6.3.1 $\varepsilon_x, \varepsilon_y$ を使った表記

まず, (6.5) のように, 実験室系への入射ビームが, 移相子の  $xyz$  系で

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ae^{i\alpha} \\ be^{i(\alpha+\varphi)} \end{pmatrix} = e^{i\alpha} \begin{pmatrix} a \\ be^{i\varphi} \end{pmatrix} \quad (6.14)$$

の形で表されるとき, Stokes パラメータを書き表してみよう. このとき,  $e^{i\alpha}$  の部分は位相差とは関係ないので, 考えなくてよい.  $\varepsilon_x$  を実数にして  $\varepsilon_y$  の位相を考える.  $x$  成分を  $\sigma$ ,  $y$  成分を  $\pi$  とすると,

$$\begin{aligned} P_1 &= 2ab \cos \varphi = \text{Re}[2\varepsilon_x \varepsilon_y] \\ P_2 &= 2ab \sin \varphi = \text{Im}[2\varepsilon_x \varepsilon_y] \\ P_3 &= a^2 - b^2 = |\varepsilon_x|^2 - |\varepsilon_y|^2 = -(\cos^2 2\chi + \sin^2 2\chi \cos \delta) \end{aligned} \quad (6.15)$$

と表すことができる<sup>\*146)</sup>.  $P_1$  は  $\varepsilon$  の  $x$  成分と  $y$  成分が同位相で変化する部分,  $P_2$  は  $\varepsilon$  の  $x$  成分と  $y$  成分が位相差  $\pi/2$  で変化する部分,  $P_3$  は  $\varepsilon$  の  $x$  成分と  $y$  成分の絶対値の差を表していることが読み取れる.

ただし, 実際に必要な Stokes パラメータは, 試料での散乱を扱うのに必要なパラメータであるから, 移相子での  $xyz$  系でのパラメータではなく, 図 6.8 で定義される実験室の  $XYZ$  系でのパラメータである. これを次に示す.

**水平散乱面の場合** 図 6.8 のような水平散乱面の場合, 次のようになる.

$$\begin{aligned} P_1 &= \text{Re}[2\varepsilon_x \varepsilon_y] \\ P_2 &= \text{Im}[2\varepsilon_x \varepsilon_y] \\ P_3 &= |\varepsilon_x|^2 - |\varepsilon_y|^2 = -(\cos^2 2\chi + \sin^2 2\chi \cos \delta) \end{aligned} \quad (6.16)$$

<sup>\*146)</sup>  $\sigma$  と  $\pi$  の定義は散乱面をどのようにとるかによって変化してくる. ここは移相子での座標系  $xy$  で考えている.  $x'y'$  ではないことに注意. 実験室の  $XYZ$  でもない.

垂直散乱面の場合 図 6.8 を  $Y$  軸のまわりに  $90^\circ$  まわした垂直散乱面の場合<sup>\*147)</sup>, 次のようになる.

$$\begin{aligned} P_1 &= -\text{Re}[2\varepsilon_x\varepsilon_y] \\ P_2 &= \text{Im}[2\varepsilon_x\varepsilon_y] \\ P_3 &= |\varepsilon_y|^2 - |\varepsilon_x|^2 = (\cos^2 2\chi + \sin^2 2\chi \cos \delta) \end{aligned} \quad (6.17)$$

注意:

- $\eta = 45^\circ$  の直線偏光を使って格子基本反射を観測すると,  $\phi_A = 45^\circ$  で最大強度になるが,  $\eta = 45^\circ$  が  $P_1 = 1$  (45° 直線偏光) なのか  $-1$  (-45° 直線偏光) なのかは  $\sigma$  と  $\pi$  をどう定義するか (散乱面をどうとるか) で変わる.
- $P_2$  は実験室系の軸の取り方によらず決まるものである.
- 円偏光の右左は  $\varepsilon_\sigma \times \varepsilon_\pi = \hat{\mathbf{k}}$  と関係しているので,  $\varepsilon_\pi \times \varepsilon_\sigma = \hat{\mathbf{k}}$  にすると逆になる. また,  $G_{\sigma\pi'}$  と  $G_{\pi\sigma'}$  の符号も逆転する.

### 6.3.2 $\chi$ と $\delta$ の関数としての表記

(6.16) や (6.17) の  $P_1$  や  $P_2$  はまだ  $\chi$  と  $\delta$  から直接計算できる形になっておらず, 不便である. そこで, これらを  $\chi$  と  $\delta$  の関数として書き表す. (6.5), または (6.6)(6.7) より,

$$\begin{aligned} |\varepsilon_x|^2 &= \frac{1}{2}(1 - \cos \delta) \sin^2 2\chi \\ |\varepsilon_x| &= \sqrt{\frac{1}{2}(1 - \cos \delta) \sin^2 2\chi} \equiv a \end{aligned}$$

(6.5) より, 実数  $a$  と  $b$ , 位相を表すパラメータ  $\alpha$  と  $\varphi$  を用いて,

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\cos \chi \sin \chi (1 - \cos \delta) + i \cos \chi \sin \chi \sin \delta \\ \cos^2 \chi \cos \delta + \sin^2 \chi + i \cos^2 \chi \sin \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ae^{i\alpha} \\ be^{i(\alpha+\varphi)} \end{pmatrix}$$

と書ける. したがって,

$$\begin{aligned} e^{i\alpha} &= (-\cos \chi \sin \chi (1 - \cos \delta) + i \cos \chi \sin \chi \sin \delta) / |\varepsilon_x| \\ e^{-i\alpha} &= -(\cos \chi \sin \chi (1 - \cos \delta) + i \cos \chi \sin \chi \sin \delta) / |\varepsilon_x| \end{aligned}$$

となり,  $\varepsilon_x$  と  $\varepsilon_y$  の両方に  $e^{-i\alpha}$  をかければ, 位相関係を変えることなく,  $\varepsilon_x$  だけを実数  $a = |\varepsilon_x|$  にできる. 計算をすると,

$$\begin{aligned} a &= |\varepsilon_x| \\ be^{i\varphi} &= \varepsilon_y e^{-i\alpha} \\ &= \frac{1}{2|\varepsilon_x|} \{ \sin 2\chi \cos 2\chi (1 - \cos \delta) - i \sin 2\chi \sin \delta \} \end{aligned}$$

となるので, Stokes パラメータは次のようにまとめることができる.

### 水平散乱面の場合

$$\begin{aligned} P_1 &= \text{Re}[2\varepsilon_x\varepsilon_y] = \frac{1}{2} \sin 4\chi (1 - \cos \delta) \\ P_2 &= \text{Im}[2\varepsilon_x\varepsilon_y] = -\sin 2\chi \sin \delta \\ P_3 &= |\varepsilon_x|^2 - |\varepsilon_y|^2 = -(\cos^2 2\chi + \sin^2 2\chi \cos \delta) \end{aligned} \quad (6.18)$$

<sup>\*147)</sup> KEK-PF での 4 軸回折計を使った実験はこのような垂直散乱面の配置である.

## 垂直散乱面の場合

$$\begin{aligned}
 P_1 &= -\text{Re}[2\varepsilon_x\varepsilon_y] = -\frac{1}{2}\sin 4\chi(1 - \cos \delta) \\
 P_2 &= \text{Im}[2\varepsilon_x\varepsilon_y] = -\sin 2\chi \sin \delta \\
 P_3 &= |\varepsilon_y|^2 - |\varepsilon_x|^2 = (\cos^2 2\chi + \sin^2 2\chi \cos \delta)
 \end{aligned}
 \tag{6.19}$$

水平散乱面の場合の計算例を図 6.10 に示す. 一般には  $P_1, P_2, P_3$  のすべてが混じってくるが, 特別な場合はどれかがゼロになる.

$\chi = \pm\pi/4$  のときに  $\theta$  を回して  $\delta$  を変化させる (いわゆる移相子スキャン) これは移相子の代表的な利用法である.  $\chi = \pm\pi/4$  のとき,  $P_1 = 0$  であり,  $\delta$  が変化すると,  $P_2$  と  $P_3$  とが入れかわるように変化する. 具体的には, 直線偏光に円偏光が混じって楕円偏光となり, 完全な円偏光を経て, やがて, はじめと  $90^\circ$  異なった方向に偏光した直線偏光へと変化する.  $\chi = \pi/4$  のときに  $\theta$  を回す状況を考えると,  $\theta \ll \theta_B$  のときは  $\delta \simeq 0$  であり, 水平方向の直線偏光 ( $\pi$  偏光) である.  $\theta$  が  $\theta_B$  に近づくにつれて  $\delta$  が増加し, 左円偏光成分が混じった横長の楕円偏光となり,  $\delta = \pi/2$  になったところで完全な左円偏光になる. さらに  $\delta$  が増加すると縦長の楕円偏光になっていき,  $\delta = \pi$  になったところで鉛直方向の直線偏光 ( $\sigma$  偏光) になる.  $\theta \simeq \theta_B$  の領域では激しく位相が変化して入り乱れる.  $\theta > \theta_B$  となった  $\delta < 0$  の側は反対で,  $\delta = -\pi$  での  $\sigma$  偏光に右円偏光が混じっていき,  $\delta = -\pi/2$  での完全な右円偏光を経て,  $\theta \gg \theta_B$  で再び  $\pi$  偏光に戻っていく.  $P_2$  の変化に対する強度変化を測定することで, 物質中の chirality に対して敏感な測定ができる.

KEK-PF の BL-3A で行う移相子スキャンはこのスキャンである. 水平散乱面で  $\chi = \pi/4$  として, (6.18) を (6.1) に代入すると,

$$P_1 = 0, \quad P_2 = \sin \frac{At}{\theta - \theta_B}, \quad P_3 = -\cos \frac{At}{\theta - \theta_B}.
 \tag{6.20}$$

格子基本反射 (Thomson 散乱) での測定例を図 6.9 に示す. この測定ではアナライザー結晶を使っていないので, (5.40) で強度変化をフィットしている<sup>\*148)</sup>. このフィッティングによって, パラメータ  $At$  が実験的に求められる<sup>\*149)</sup>.  $At$  が決まれば, 位相差  $\delta$  を  $\pm\pi/2$  にして左右円偏光を作るためのオフセット角  $\theta - \theta_B$  が決まり,  $P_2$  や  $P_3$  の関数形も定まるので, 目的とする磁気散乱の測定と解析の準備が整ったことになる.

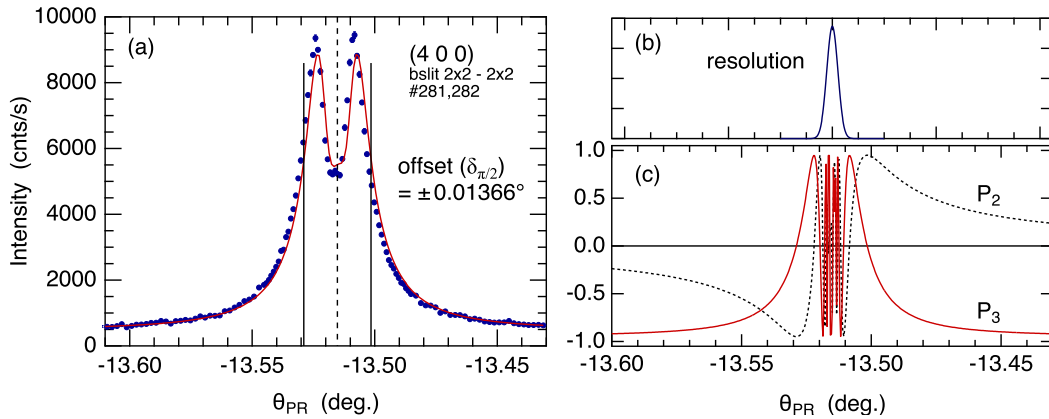


図 6.9: (a) 格子基本反射での移相子スキャンによるパラメータ  $At$  の決定.  $\theta_{PR}$  は移相子の角度  $\theta$  のこと (ただし, モーター値). アナライザーなし. 実線はフィッティング結果. 縦の実線は円偏光が得られる位置. (b) たたみ込みをかけてのフィッティングで用いられた Gaussian 分解関数. (c) Stokes パラメータ  $P_2$  と  $P_3$  の  $\theta_{PR}$  依存性.

\*148) アナライザー結晶を入れた場合は (5.47) でフィットする.

\*149) 試料からの基本反射を使わずに, ダイレクトビームで調べる場合は, アナライザー結晶を使ってこのスキャンを行う.

$\delta = \pm\pi$  で  $\chi$  を変化させる これも移相子の有効な利用法である.  $\delta = \pm\pi$  のとき,  $P_2 = 0$  であり,  $\chi$  を変化させることで  $P_1$  と  $P_3$  とが入れかわるように変化する. つまり, 直線偏光のまま偏光方向が  $\chi$  とともに回転する.  $\chi = 0$  のときは水平面内で直線偏光した  $\pi$  偏光であり,  $\chi$  をマイナス側に回していくと直線偏光の偏光面も傾いていき,  $\chi = -\pi/8$  になったところでちょうど  $-45^\circ$  直線偏光になる. さらに  $\chi$  をマイナス側に回していくと, 偏光面の傾きが増加し,  $\chi = -\pi/4$  になったところで鉛直方向に偏光した  $\sigma$  偏光の光になる.  $\chi$  をプラス側に回すとこの逆で,  $\chi = +\pi/8$  での  $+45^\circ$  直線偏光を経て,  $\chi = +\pi/4$  で  $\sigma$  偏光になる.

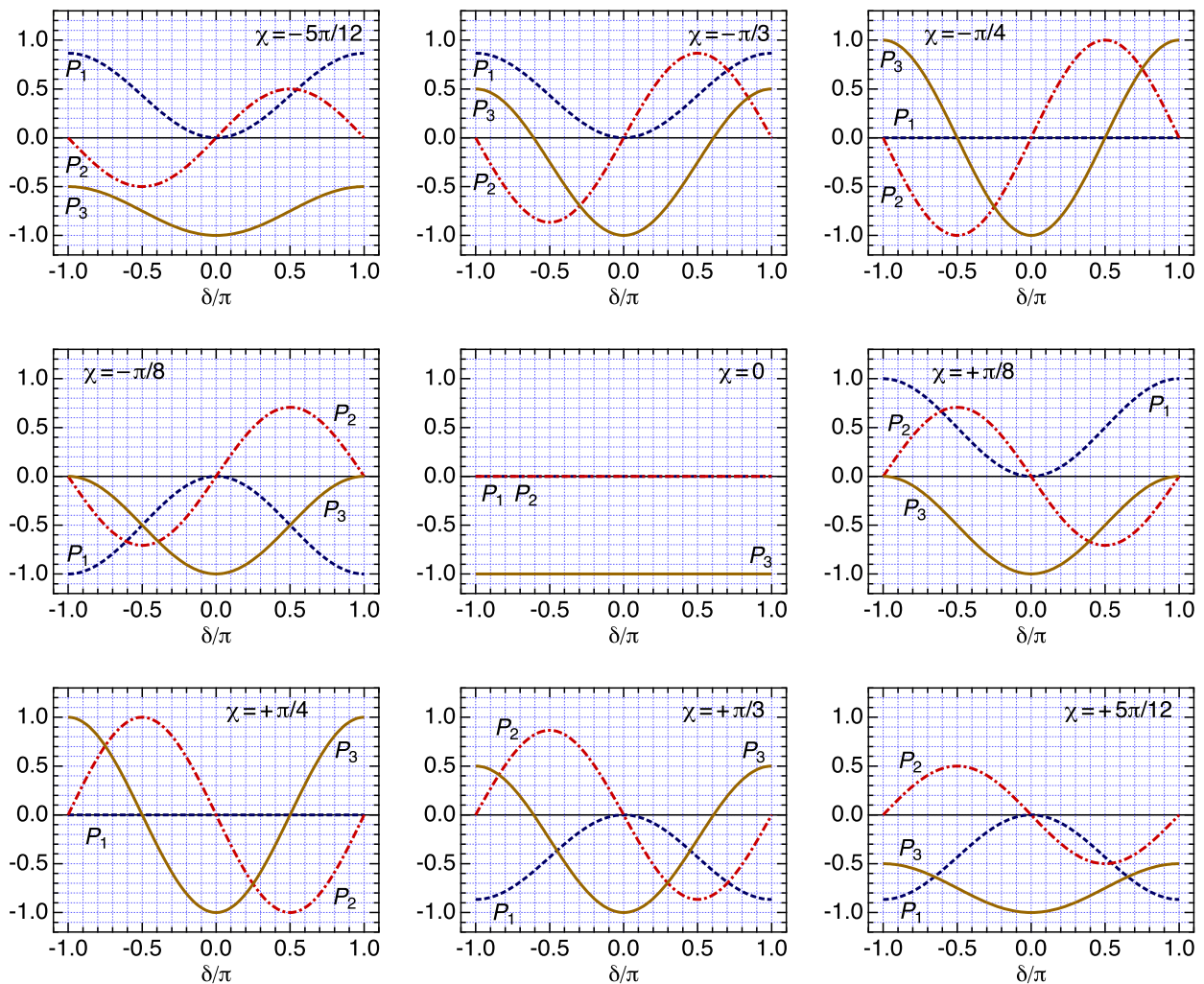


図 6.10: 水平散乱面の場合に, いくつかの移相子の角度  $\chi$  について, 移相量  $\delta$  に対する Stokes パラメータの変化を計算したもの.

## 6.4 SPring-8, BL22 における 2 重連結移相子システム

図 5.5 の移相子システム部分にも描かれているように, SPring-8 の BL22 に 2019 年まで設置されていた移相子システムでは, 移相子の設置角度  $\chi$  を自由に変えることができ, 入射 X 線の直線偏光角を水平から垂直まで任意の角度に設定することができる. 更に, 1 つの  $\chi$  軸上で互いに  $90^\circ$  ずれた位置に, 2 つの移相子が配置されている. これはビームが有限のエネルギー幅をもつことによる偏光度の低下を, 2 つの移相子を通すことで補償 (**Chromatic Aberration**) するための仕組みである<sup>\*150</sup>.  $\theta - \theta_B$  が小さくなるほど (位相差  $\delta$  が大きくなるほど), 有限のエネルギー幅による偏光度の低下が顕著になるため, 直線偏光の角度を  $90^\circ$  変えるときに効力を発揮する<sup>\*151</sup>. 現在では利用できない状況にはなっているが, 本節ではこれについて詳しく述べる.

### 6.4.1 システム全体の構成と座標軸の定義

図 6.11 に 2 重連結移相子システムの配置と各種角度の定義を示す. 第一移相子を  $PR_1$ , 第二移相子を  $PR_2$  と呼ぶ.  $PR_1$  までは図 6.1 と同じである. 上流の放射光源から, 水平面内に直線偏光した X 線が  $PR_1$  に入射してくる. この偏光ベクトルを  $\epsilon_0 = (0, 1, 0)$  とする. X 線の進行方向を  $z$  軸とし, 移相子系での鉛直上向きを  $x$  軸, 水平面を  $y$  軸とする.  $PR_1$  での Bragg 反射の散乱面が  $y/z$  面となるよう,  $PR_1$  での  $x'y'$  軸を定義する. このとき,  $PR_1$  では偏光ベクトルの  $y'$  成分が  $\pi$  偏光,  $x'$  成分が  $\sigma$  偏光となる. 同様に,  $PR_2$  での Bragg 反射の散乱面が  $y''/z$  面となるよう,  $PR_2$  での  $x''y''$  軸を定義する.  $PR_2$  では偏光ベクトルの  $y''$  成分が  $\pi$  偏光,  $x''$  成分が  $\sigma$  偏光となる.  $PR_1$  と  $PR_2$  の  $\chi$  は互いに  $90^\circ$  ずれており, 共通のパラメータ  $\chi_{PR}$  を用いて,

$$\chi_1 = \chi_{PR} + \frac{\pi}{2}, \quad \chi_2 = \chi_{PR}$$

と表すことにする.  $\chi$  の定義は図 6.1 のとおりである. たとえば,  $\chi_{PR} = -45^\circ$  のとき,  $\chi_1 = +45^\circ$ ,  $\chi_2 = -45^\circ$  である.

$\chi_1$  と  $\chi_2$  が互いに  $90^\circ$  ずれているため,  $PR_1$  での  $\sigma$  偏光は  $PR_2$  での  $\pi$  偏光であり,  $PR_1$  での  $\pi$  偏光は  $PR_2$  での  $\sigma$  偏光となる. これが後に色収差を補償する鍵になる.

移相子を通過するたびに偏光状態は変わる. そこで,  $PR_1$  の後の偏光ベクトルを  $\epsilon_1$ ,  $PR_2$  の後の偏光ベクトルを  $\epsilon_2$  とする.  $\epsilon_2$  が実験室系 (図 6.8) への入射偏光ベクトル  $\epsilon$  となる. 水平散乱面の実験室系では垂直成分 (移相子系の  $y$  成分) が  $\sigma$ , 水平成分 (移相子系の  $-x$  成分) が  $\pi$  である.

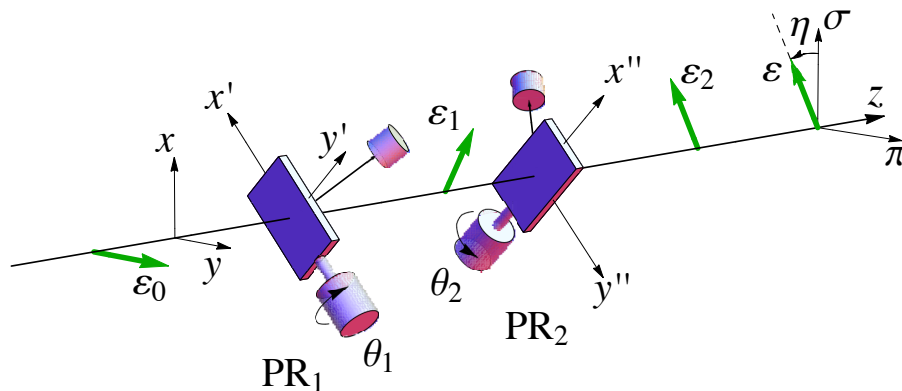


図 6.11: 色収差補償のための 2 重連結移相子システムの配置と各種角度の定義.

\*150) エネルギーまたは波長は, 可視光でいえば「色」にあたるので, 「色収差」と呼んでいる. 収差とは光学用語でレンズを通した結像がぼやけることを差し, 屈折率が光の波長によって異なるために起こる収差を色収差という. この用語をそのまま X 線に持ち込んだ言い方である.

\*151) 移相子 1 枚でも  $\delta = \pi$  にすれば横偏光を縦偏光に変えることができるが, 偏光度は悪くなる. 入射 X 線の偏光度が 99.9% を超えるほどの SPring-8 であっても, 移相子 1 枚で縦偏光を作ると 90% 程度にまで低下する [41].

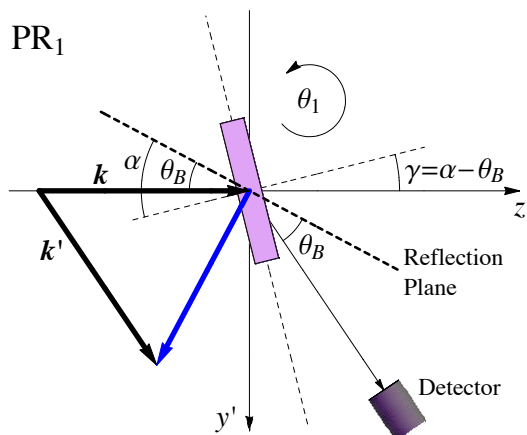


図 6.12: PR<sub>1</sub> で Bragg 条件が満たされるときの様子を図 6.11 の  $x'$  軸方向から見たもの。正方向である反時計回りに  $\theta_1$  を回転させると、反射面に対して高角入射するところから始まり、Bragg 反射を経て、低角入射で終わる。

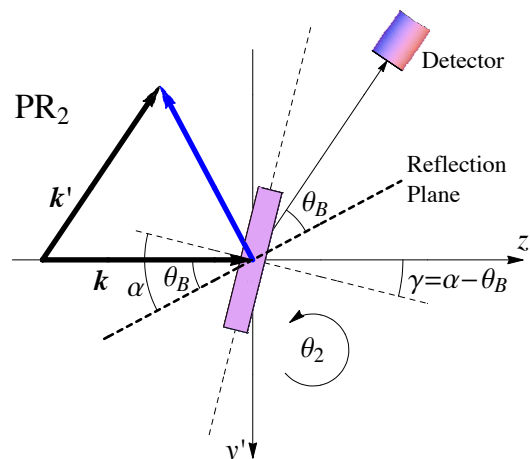


図 6.13: PR<sub>2</sub> で Bragg 条件が満たされるときの様子を図 6.11 の  $x''$  軸方向から見たもの。正方向である反時計回りに  $\theta_2$  を回転させると、反射面に対して低角入射するところから始まり、Bragg 反射を経て、高角入射で終わる。

#### 6.4.2 移相子 1 と 2 での Bragg 反射

PR<sub>1</sub> と PR<sub>2</sub> で Bragg 反射が起こるときの様子を図 6.12, 6.13 に示す。逆格子ベクトルが散乱ベクトルと一致する ( $\tau = k' - k$  である) ことが Bragg 反射の条件であり、このとき  $\theta = \theta_B$  が実現する。この点については PR<sub>1</sub> も PR<sub>2</sub> も共通である。しかし、両者ではその配置 ( $k'$  の方向) が逆になっている。ここで、移相子の回転軸である  $\theta_1$  と  $\theta_2$  は、いずれも反時計回りを正方向として回転するよう定義されている<sup>\*152)</sup>。

**PR<sub>1</sub>** PR<sub>1</sub> では、反時計回りに  $\theta_1$  を回転させると、反射面に対して高角で入射するところから始まり、Bragg 反射が起こる  $\theta_1 = \theta_B$  を経て、低角入射へと変わっていく。回転の際に、 $\theta_1$  の目盛りは  $\theta_1 < \theta_B$  から始まり、 $\theta_1 = \theta_B$  を経て、 $\theta_1 > \theta_B$  となって終わるのだが、実際には高角入射から低角入射へと変化しているのので、式 (6.1) に  $\theta_1$  を当てはめるときには、全体の符号を逆にしなければならない。

**PR<sub>2</sub>** PR<sub>2</sub> では、反時計回りに  $\theta_2$  を回転させると、反射面に対して低角で入射するところから始まり、Bragg 反射が起こる  $\theta_1 = \theta_B$  を経て、高角入射へと変わっていく。 $\theta_2$  の目盛りは  $\theta_1 < \theta_B$  から始まり、 $\theta_1 = \theta_B$  を経て、 $\theta_1 > \theta_B$  となって終わるので、目盛りと実際の動きが一致している。したがって、式 (6.1) に  $\theta_2$  をそのまま当てはめてよい。

#### 6.4.3 色収差の補償

図 6.14(a), (b) にそれぞれ PR<sub>1</sub>, PR<sub>2</sub> を正方向 ( $\theta_1, \theta_2$  が増加する方向、反時計回り) に回したときの、 $\sigma$  偏光に対する  $\pi$  偏光成分の位相差 (移相量) を示す。ただし、 $\sigma$  と  $\pi$  の定義は、PR<sub>1</sub> では  $x'y'$  軸について、PR<sub>2</sub> では  $x''y''$  軸についてなされている。

**PR<sub>1</sub>:** 図 6.14(a) PR<sub>1</sub> では、 $\theta_1$  が増加するとき、ビームと結晶の関係は高角入射 (high) から低角入射 (low) へと変わっていく。つまり、図 (a) で、 $\theta_1 - \theta_B < 0$  のとき、実際は高角入射 (high) になっている。そのため、式 (6.1) に  $\theta_1$  を当てはめるとき、全体の符号が逆になり、高角入射である  $\theta - \theta_B < 0$  のとき  $\delta < 0$  になる。また、X 線の

\*152) 回転軸は反時計回りを正方向とすることを原則とし、逆配置へはソフト上で対応するという考え方に基づく

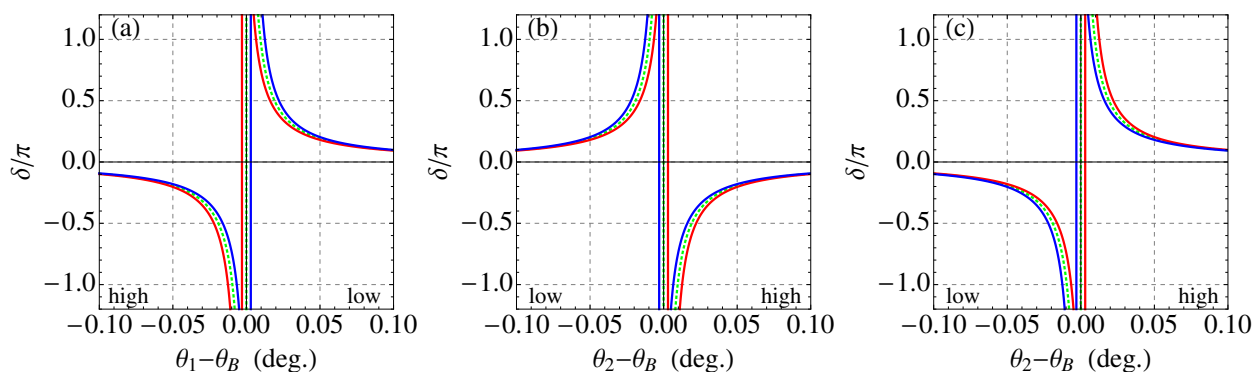


図 6.14: (a) PR<sub>1</sub> で  $\theta_1$  を正方向に回したときの、 $\sigma$  に対する  $\pi$  の位相差の変化 ( $x'y'$  軸での定義). (b) PR<sub>2</sub> で  $\theta_2$  を正方向に回したときの、 $\sigma$  に対する  $\pi$  の位相差の変化 ( $x''y''$  軸での定義). (c) 図 (b) を PR<sub>1</sub> と同じ  $x'y'$  軸での定義で言いかえた図. 緑 (点線) は中心エネルギーの光, 青 (濃い実線) は高エネルギー側, 赤 (薄い実線) は高エネルギー側にわずかにずれた光を表す.

エネルギーはある値を中心に有限の幅をもって分散しているので, 図では緑の線が中心エネルギー, 赤が低エネルギー側, 青が高エネルギー側での移相量変化を表すように描かれている. 高いエネルギーの光ほど,  $\theta_B$  が小さくなるので, 全体が低角入射側 (図 (a) では  $\theta - \theta_B > 0$  のほう) にずれる.

**PR<sub>2</sub> I:** 図 6.14(b) PR<sub>2</sub> では,  $\theta_2$  が増加するとき, ビームと結晶の関係も低角入射 (low) から高角入射 (high) へと変わっていく. 図 (b) で,  $\theta_2 - \theta_B < 0$  のとき, 実際も低角入射 (low) である. したがって, 式 (6.1) にはそのまま  $\theta_2$  を当てはめればよい. 低角入射である  $\theta - \theta_B < 0$  のとき  $\delta > 0$  になる. また, 高いエネルギーの光ほど, 全体が低角入射側 (図 (b) では  $\theta - \theta_B < 0$  のほう) にずれる.

**PR<sub>2</sub> II:** 図 6.14(c) PR<sub>1</sub> と PR<sub>2</sub> では,  $\sigma$  と  $\pi$  の定義が入れかわっている. PR<sub>2</sub> で  $\pi$  の位相が進むということは, 同じ  $x''y''$  系でいえば,  $\sigma$  の位相が遅れることと等価である. そして, PR<sub>2</sub> で  $\sigma$  の位相が遅れることを, PR<sub>1</sub> の  $x'y'$  系で言い表すと,  $\pi$  の位相が遅れることと等価である. したがって, 図 (b) の縦軸の上下を逆転させれば, PR<sub>2</sub> での位相変化を PR<sub>1</sub> の  $x'y'$  系で言い表したことになる. これが図 (c) である.

**色収差の補償** 図 (a) と図 (c) を重ね合わせると, エネルギー分散による移相量のぼやけが補償されることがわかるだろう. 実際には, PR<sub>1</sub> と PR<sub>2</sub> を連結させ, 同じオフセット角  $\Delta\theta = \theta - \theta_B$  を設定することに相当する. 全体で  $\delta = -\pi$  の移相量が欲しいときには, PR<sub>1</sub> で  $\delta_1 = -\pi/2$ , PR<sub>2</sub> で  $\delta_2 = -\pi/2$  の移相量を作り, 両者合わせて  $\delta = -\pi$  にするようにすれば, エネルギー分散による移相量のぼやけが補償された偏光ビームを作ることができるのである.

#### 6.4.4 2重連結移相子を透過した X 線の偏光状態 I: $\chi_{PR} = -45^\circ$ の場合

ここでは、円偏光や垂直直線偏光を作る  $\chi_{PR} = -45^\circ$  の配置について、 $PR_1$  と  $PR_2$  を透過した後の X 線の偏光状態 (Stokes Parameter) を  $\theta_1$  および  $\theta_2$  の関数として表す。  $\chi_{PR} = -45^\circ$  のとき、

$$\chi_1 = +45^\circ, \quad \chi_2 = -45^\circ$$

である。まず、 $PR_1$  を透過した X 線の偏光ベクトル  $\varepsilon_1$  を  $xy$  系で表すと、(6.5) より、

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \varepsilon_{1x} \\ \varepsilon_{1y} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \cos \chi_1 & \sin \chi_1 \\ -\sin \chi_1 & \cos \chi_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sin \chi_1 \\ \cos \chi_1 e^{i\delta_1} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 + \cos \delta_1 + i \sin \delta_1 \\ 1 + \cos \delta_1 + i \sin \delta_1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6.21)$$

これが  $PR_2$  への入射 X 線となる。次に、 $PR_2$  での  $x''y''$  系で  $\varepsilon_1$  を表すと、

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \varepsilon_{1x''} \\ \varepsilon_{1y''} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \cos \chi_2 & -\sin \chi_2 \\ \sin \chi_2 & \cos \chi_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{1x} \\ \varepsilon_{1y} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \varepsilon_{1x} + \varepsilon_{1y} \\ -\varepsilon_{1x} + \varepsilon_{1y} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \cos \delta_1 + i \sin \delta_1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta_1} \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6.22)$$

この後、 $PR_2$  を透過すると、 $\pi$  成分 ( $y''$  成分) に位相差  $\delta_2$  がつくので、

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \varepsilon_{2x''} \\ \varepsilon_{2y''} \end{pmatrix} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\delta_1} \\ e^{i\delta_2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{e^{i\delta_1}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i(\delta_2 - \delta_1)} \end{pmatrix} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i(\delta_2 - \delta_1)} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.23)$$

となる。最後は位相差  $\delta_2 - \delta_1$  をパラメータとする形に変形し、共通因子である  $e^{i\delta_1}$  を 1 で置き換えて  $\varepsilon_{2x''}$  を実数にした。これを  $xy$  系での表記に戻すと、

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \cos \chi_2 & \sin \chi_2 \\ -\sin \chi_2 & \cos \chi_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i(\delta_2 - \delta_1)} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - \cos(\delta_2 - \delta_1) - i \sin(\delta_2 - \delta_1) \\ 1 + \cos(\delta_2 - \delta_1) + i \sin(\delta_2 - \delta_1) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.24)$$

となり、これが実験室系への入射 X 線の偏光ベクトル  $\varepsilon$  となる。

この  $\varepsilon$  には、次のような性質がある。ただし、 $\delta_{21} = \delta_2 - \delta_1$  である。

$$|\varepsilon_x|^2 = \frac{1}{2}(1 - \cos \delta_{21}) \quad (6.25)$$

$$|\varepsilon_y|^2 = \frac{1}{2}(1 + \cos \delta_{21}) \quad (6.26)$$

$$|\varepsilon_x|^2 + |\varepsilon_y|^2 = 1 \quad (6.27)$$

$$|\varepsilon_x|^2 - |\varepsilon_y|^2 = -\cos \delta_{21} \quad (6.28)$$

**Stokes Parameter** Stokes パラメータ ( $P_1, P_2, P_3$ ) を求めるため、 $\varepsilon = (\varepsilon_x, \varepsilon_y)$  に

$$\frac{\varepsilon_x^*}{|\varepsilon_x|} = \frac{1 - \cos \delta_{21} + i \sin \delta_{21}}{\sqrt{2}(1 - \cos \delta_{21})}$$

をかけて、 $\varepsilon_x$  を実数にする。すると、

$$\frac{\varepsilon_x \varepsilon_x^*}{|\varepsilon_x|} = |\varepsilon_x| = \sqrt{\frac{1 - \cos \delta_{21}}{2}} \quad (6.29)$$

$$\frac{\varepsilon_y \varepsilon_x^*}{|\varepsilon_x|} = i \frac{\sin \delta_{21}}{\sqrt{2(1 - \cos \delta_{21})}} \quad (6.30)$$

であることがわかる。したがって、

図 6.8 のような水平散乱面の実験室系において、 $\chi_{\text{PR}} = -45^\circ$  のとき、

$$\begin{aligned} P_1 &= 0 \\ P_2 &= \text{Im}[2\varepsilon_x \varepsilon_y] = \sin \delta_{21} \\ P_3 &= |\varepsilon_x|^2 - |\varepsilon_y|^2 = -\cos \delta_{21} \end{aligned} \quad (6.31)$$

BL22 の定義では、 $\text{PR}_1$  は、 $\theta_1$  が増加するとき高角入射から低角入射へ変化し、 $\text{PR}_2$  は、 $\theta_2$  が増加するとき低角入射から高角入射へ変化するので<sup>\*153)</sup>、

$$\begin{aligned} \delta_1 &= +\frac{At}{\theta_1 - \theta_B} = +\frac{At}{\Delta\theta_1} \\ \delta_2 &= -\frac{At}{\theta_2 - \theta_B} = -\frac{At}{\Delta\theta_2} \end{aligned}$$

したがって、

$$\delta_{21} = -At \left( \frac{1}{\Delta\theta_1} + \frac{1}{\Delta\theta_2} \right) \quad (6.32)$$

である。

#### 6.4.5 2重連結移相子を透過した X 線の偏光状態 II : $\delta_1 = \mp\pi/2, \delta_2 = \pm\pi/2$ の場合

もう一つの代表的なケースとして、 $\delta_1 = \mp\pi/2, \delta_2 = \pm\pi/2$  となるように  $\theta_1, \theta_2$  を固定して<sup>\*154)</sup>、 $\chi_{\text{PR}}$  を動かす場合を考えよう。添字を省略して  $\chi_{\text{PR}} = \chi$  とし、

$$\chi_1 = \chi + \frac{\pi}{2}, \quad \chi_2 = \chi, \quad \delta_1 = \mp\pi/2, \quad \delta_2 = \pm\pi/2$$

とする。

まず、 $\text{PR}_1$  を透過した X 線の偏光ベクトル  $\varepsilon_1$  を  $xy$  系で表すと、(6.5) より、

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \varepsilon_{1x} \\ \varepsilon_{1y} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \cos \chi_1 & \sin \chi_1 \\ -\sin \chi_1 & \cos \chi_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sin \chi_1 \\ \cos \chi_1 e^{i\delta_1} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -\sin \chi & \cos \chi \\ -\cos \chi & -\sin \chi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\cos \chi \\ \pm i \sin \chi \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sin \chi \cos \chi (1 \pm i) \\ \cos^2 \chi \mp i \sin^2 \chi \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6.33)$$

<sup>\*153)</sup> ここでの  $\delta_1$  は  $x'y'$  系、 $\delta_2$  は  $x''y''$  系での値になるので、 $\delta_1$  は図 6.14 の (a)、 $\delta_2$  は (b) に対応する。(c) ではない。

<sup>\*154)</sup>  $\delta_1 = -\pi/2, \delta_2 = +\pi/2$  のとき、 $\theta_1$  は高角入射側、 $\theta_2$  は低角入射側にオフセットがかかる。軸の目盛りでいえば、両方とも  $\theta_B$  よりもマイナス側にオフセットがかかる。

これが PR<sub>2</sub> への入射 X 線となる。次に、PR<sub>2</sub> での  $x''y''$  系で  $\epsilon_1$  を表すと、

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \epsilon_{1x''} \\ \epsilon_{1y''} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \cos \chi_2 & -\sin \chi_2 \\ \sin \chi_2 & \cos \chi_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{1x} \\ \epsilon_{1y} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \pm i \sin \chi \\ \cos \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \chi e^{\pm i\pi/2} \\ \cos \chi \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.34)$$

この後、PR<sub>2</sub> を透過すると、 $\pi$  成分 ( $y''$  成分) に位相差  $\delta_2 = \pm \frac{\pi}{2}$  がつくので、

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \epsilon_{2x''} \\ \epsilon_{2y''} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \sin \chi e^{\pm i\pi/2} \\ \cos \chi e^{\pm i\pi/2} \end{pmatrix} \\ &= e^{\pm i\pi/2} \begin{pmatrix} \sin \chi \\ \cos \chi \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \sin \chi \\ \cos \chi \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.35)$$

となる。最後は共通因子である  $e^{\pm i\pi/2}$  を 1 で置き換えて  $\epsilon_{2x''}$  を実数にした。これを  $xy$  系での表記に戻すと、

$$\begin{aligned} \epsilon &= \begin{pmatrix} \cos \chi_2 & \sin \chi_2 \\ -\sin \chi_2 & \cos \chi_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin \chi \\ \cos \chi \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 2 \sin \chi \cos \chi \\ \cos^2 \chi - \sin^2 \chi \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sin 2\chi \\ \cos 2\chi \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.36)$$

となり、これが実験室系への入射 X 線の偏光ベクトル  $\epsilon$  となる。結局、予想通りの当然の結果であるが、 $x, y$  両成分が同位相で振動する直線偏光であり、その偏光方向が  $\chi$  に伴って回転することがわかる。

最後に、この結果を Stokes Parameter の形に直しておく。

図 6.8 のような水平散乱面の実験室系において、 $\delta_1 = \mp \pi/2, \delta_2 = \pm \pi/2$  のとき、

$$\begin{aligned} P_1 &= \text{Re}[2\epsilon_x \epsilon_y] = \sin 4\chi_{\text{PR}} \\ P_2 &= 0 \\ P_3 &= |\epsilon_x|^2 - |\epsilon_y|^2 = -\cos 4\chi_{\text{PR}} \end{aligned} \quad (6.37)$$

図 6.8 では、移相子を透過して出てきた直線偏光の角度を  $\eta$  と定義している。 $\eta$  を使うと、

$$P_1 = -\sin 2\eta, \quad P_2 = 0, \quad P_3 = \cos 2\eta$$

である。したがって、 $\eta$  と  $\chi_{\text{PR}}$  とは、

$$\chi_{\text{PR}} = \frac{\eta - 90^\circ}{2} \quad (6.38)$$

の関係で結ばれている<sup>\*155)</sup>。

<sup>\*155)</sup>  $\chi_{\text{PR}} = (\eta + 90^\circ)/2$  としてもよいが、 $\eta = 90^\circ$  のとき、 $\chi_{\text{PR}} = 90^\circ$ 、このとき  $\chi_1 = 180^\circ$  となってしまう、ケーブル等がひっかかる危険がある不自然な配置になる。 $\chi_{\text{PR}} = (\eta - 90^\circ)/2$  のほうが  $\eta = -90^\circ \sim +90^\circ$  の領域を自然な配置で動かせる。

#### 6.4.6 Direct Beam を使ったオフセット値の決定

図 6.15 に  $\chi_{PR} = -45^\circ$  の配置での Direct Beam を Cu-220 アナライザー結晶を通して観測した結果を示す. X 線のエネルギーは 6.712 keV で, ダイヤモンド移相子 1 枚の厚さは 0.5 mm であり, 220 反射を使っている. このように, 移相子を通しただけの Direct beam を直接アナライザーで解析する場合は, 非共鳴 Thomson 散乱に対する式 (5.46) で  $2\theta = 0$  とすればよい.

左側の図は,  $\theta_2$  を  $\theta_B$  から  $+1^\circ$  ずらし (オフセットをかけ) た状態で  $\theta_1$  の scan を行った結果である.  $+1^\circ$  のオフセットをかけると,  $PR_2$  は移相子としての機能をほとんどなさなくなる<sup>\*156)</sup>. (6.31), (6.32) を参考にしながら,  $\theta_1$ -scan についてみてみよう. まず, scan のはじめの  $\theta_1 < \theta_B$  の領域はほとんど入射 X 線の  $\pi$  偏光 ( $P_3 = -1$ ) の状態であり,  $\phi_A = 90^\circ$  での強度が強い.  $\theta_1$  を増やしていくと,  $PR_1$  での移相量が増えていき, 円偏光成分が混じってくる.  $\theta_1 - \theta_B = -0.017^\circ$  付近がちょうど  $\delta_{12} = -\pi/2$  であり, このとき, (6.31) より  $P_2 = 1, P_3 = 0$  である. さらに  $\theta_1$  を増やしていくと,  $\theta_1 - \theta_B = -0.0085^\circ$  付近で  $\delta_{12} = -\pi$  となり,  $P_2 = 0, P_3 = 1$  ( $\sigma$  偏光) となる. 計算上はこのとき  $\phi_A = 90^\circ$  での強度がゼロになるはずであるが, このあたりは移相量の変化が激しく, ぼやけが生じて  $\delta_{12} = -\pi$  付近の移相量が混じるため, 有限の強度が残る. この様子は  $\theta_1$  に分解能幅を設定してたたみ込み積分をかけることでうまくフィットできている<sup>\*157)</sup>. そして, PIN1 の強度がピーク値をとる  $\theta_1 = -0.912^\circ$  のとき,  $\theta_1 = \theta_B$  となる. このあたりは移相量が発散し, 偏光がぐちゃぐちゃに入り乱れた状態である. さらに  $\theta_1$  を増やしていくと, この逆コースをたどり,  $\theta_1 - \theta_B = +0.0085^\circ$  付近で  $\delta_{12} = +\pi$ ,  $P_2 = 0, P_3 = 1$  ( $\sigma$  偏光),  $\theta_1 - \theta_B = +0.017^\circ$  付近でちょうど  $\delta_{12} = +\pi/2$ ,  $P_2 = -1, P_3 = 0$  となる. さらに  $\theta_1$  を増やしていくと,  $\delta_{12}$  がゼロに近づいていき,  $\pi$  偏光状態に戻っていく.

右側の図は同様な scan を  $PR_2$  について行った結果である. これら合計 4 種類の測定を行い, 式 (5.46) を使ってたたみ込みフィッティングをかけることで,  $At$  などの実験パラメータを決定することができる. 図 6.15 では,  $At_1 = 0.0264, At_2 = 0.0274$  (rad.deg) と求まった. 各種のパラメータが決まれば, 目的の移相量を得るための適切なオフセット値を求めることができる. たとえば,  $\sigma$  偏光ビームを作るには,  $\Delta\theta_1 = -0.0168^\circ, \Delta\theta_2 = -0.0174^\circ$  として, 両者合わせて  $\delta_{12} = -\pi$  になるようにする. そうすることで, 色収差が補償された, 偏光度の高い  $\sigma$  偏光ビームが得られる. そして, どの程度の品質の  $\sigma$  偏光ビームが得られたかを確かめるために, 図 5.6 のような測定を行ったのである.

\*156) といっても  $PR_2$  での移相量が完全にゼロになるわけではないので, フィッティングではこのオフセットをきちんと考慮する必要がある.

\*157) 分解能幅もフィッティングパラメータになっていて, 図 6.15 では半値幅約  $0.008^\circ$  である.

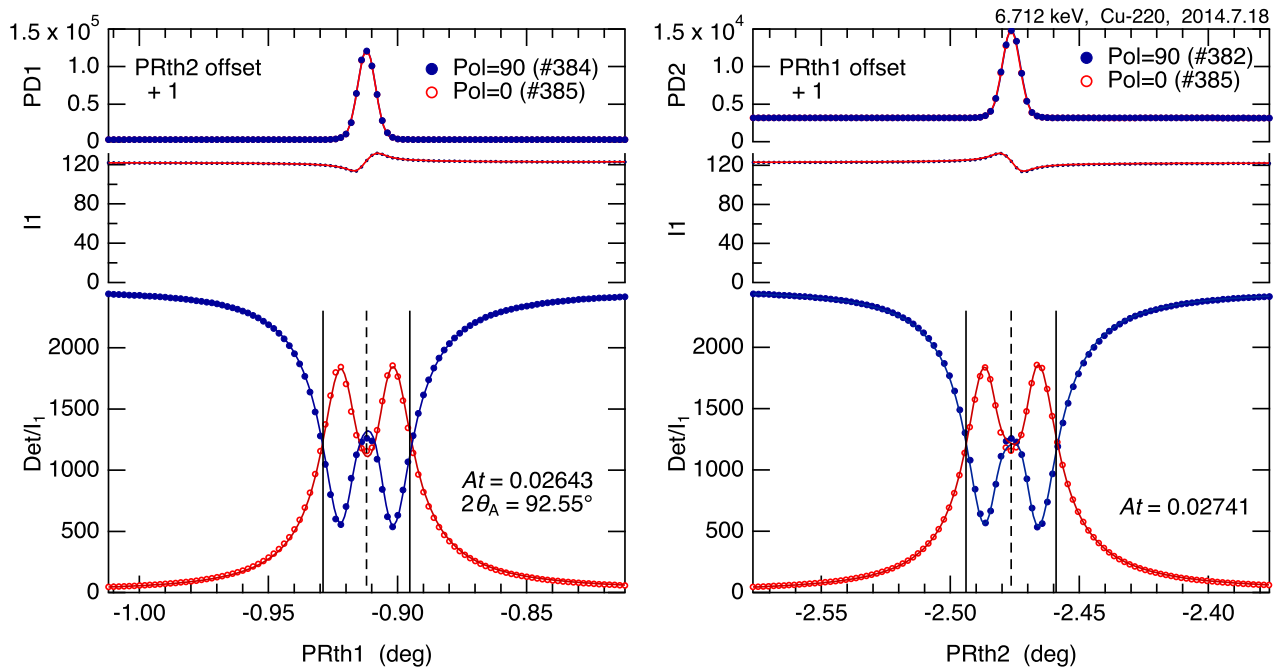


図 6.15:  $\chi_{PR} = -45^\circ$  の配置での Direct Beam を Cu-220 アナライザー結晶を通して観測した結果. X 線のエネルギーは 6.712 keV で, ダイヤモンド移相子 1 枚の厚さは 0.5 mm, 220 反射を使用.  $2\theta_A = 92.552^\circ$  である. PRth1 は  $\theta_1$ , PRth2 は  $\theta_2$ , PD1 は PR<sub>1</sub> の検出器, PD2 は PR<sub>2</sub> の検出器, I1 は移相子の下流側に置かれた強度モニター, Det はアナライザーの後の検出器, POL は  $\phi_A$  のこと. PRth2 offset は  $\theta_1$ -scan を行うときに  $\theta_2$  にかけるオフセット. PRth1 offset は  $\theta_2$ -scan を行うときに  $\theta_1$  にかけるオフセット. 実線はフィッティング結果で,  $At_1 = 0.0264$ ,  $At_2 = 0.0274$  (rad·deg.). ただし,  $\theta_1$  の分解能幅を  $0.0086^\circ$ ,  $\theta_2$  の分解能幅を  $0.0080^\circ$  としてたたみ込みをかけている. 縦の実線は位相差が  $\pm\pi/2$  になって左右円偏光が得られる位置, 点線は中心を表す.