

1. bsplit scanをして、移相子の上流側にあるスリット1,2の原点を決める。

>slits

でスリットの現在値を表示。blistは最初20(H)×5(V)とする。

>ascan bs1u

>cen

>set bs1u 0

>umv bs1u -8

bs22は手動 (2023.05).

bs2uも手動 (2023.11)

同様の作業をbs1d, bs12,bs14, bs2u, bs2d, bs22, bs24 についても行う。図1.

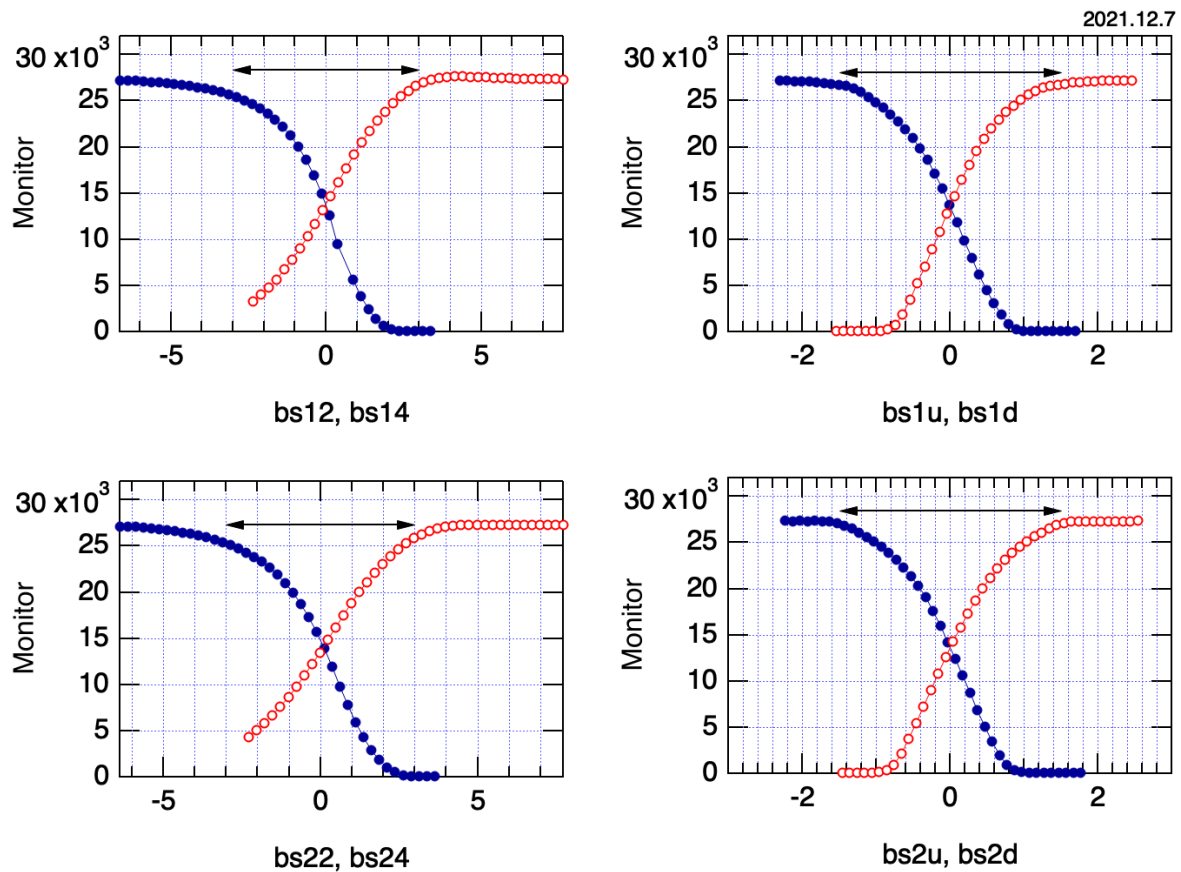


図1 bsplit1, bsplit2の半割スキャンの様子。bsplit1 (bsplit2)については12,14 (22, 24)が左右, 1u, 1d (2u, 2d)が上下。矢印はこの実験のときに最後に決めたスリット幅6(H)×3(V)を表すが、この幅は後で様子を見ながら決めればよい。

2. Monitor値を見ながら, bslit1, bslit2を閉めていく. (Bragg反射強度も見ながらやるとよい)

```
>bslit1 10 5
>ct
```

のようにしてbslit1を8-3まで閉めていき, そのあとbslit2を8-3まで閉めたときの結果の例:

blist1				blist1(8-3)				bslit2	
H	V	Mon	Det	H	V	Mon	Det		
14	5	41476	5074	14	5	27461	3941		
10	5	36441	5098	10	5	27389	3829		
10	4	35746	4718	8	5	25834	3698		
6	4	21667	3546	8	3	25430	3841		
6	3	19783	3199						
8	3	27793	3856						

3. 移相子を入れる

PRxは移相子が並んだ方向の移動軸 (図2).

>PhasePlate 1 とすると1の位置へ

>PhasePlate 2 とすると2の位置へ

>PhasePlate 3 とすると3の位置へ

それぞれ移動する. ただし, 移動位置はずれている可能性あり.

ダイヤの厚さの公称値は1が0.2mm, 2が

0.5mm, 3が1.1mm.

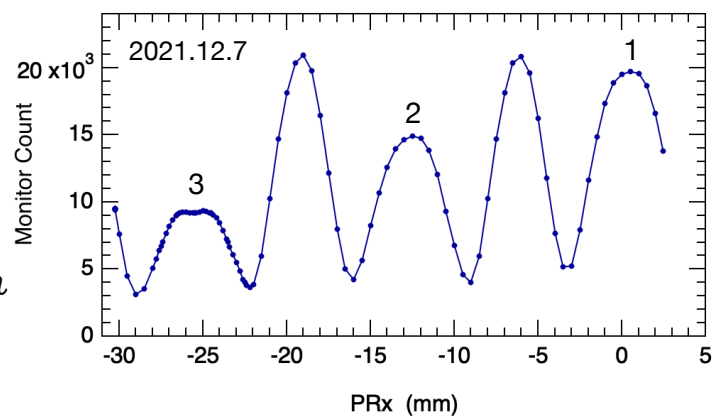


図2 全PRxスキャン.

位置情報:

2023.5 Phase Retarder 2 PRx = -13, PRy = 9.25, PRz = 8

4. PRx, PRy, PRzを決める

PRx, PRy, PRzを細かくスキャンして位置を決める.

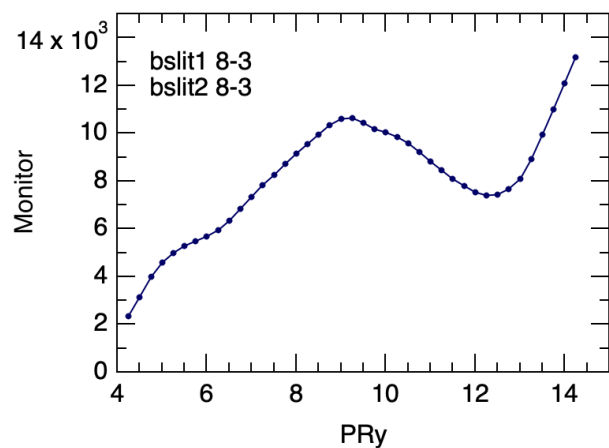
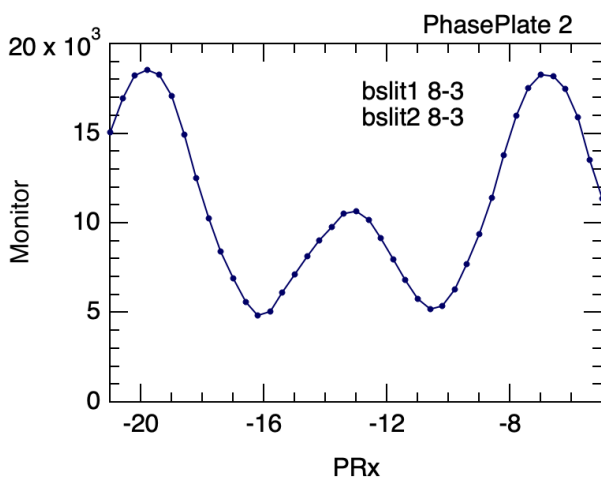


図3a bslit1,2が8(H)x3(V)でのPRxスキャンとPRyスキャン. bslit1,2の幅が広いと, このように鈍った形にしか見えない.

さらにbslit1,2を閉めていく。2.でMonitor値が25430になり、移相子が入って約10000になった後の結果

blist1		blist2(8-3)	
H	V	Mon	Det
6	3	7536	1213
4	3	2385	463

blist1(4-3)		bslit2	
H	V	Mon	Det
6	3	2307	427
4	3	2009	374

bslit open, PR outの最初のMon=41476, Det=5074と比べるとDetは1/10以下になったが、ここでPRx, PRy, PRzスキャンをすると、右図のようにくっきりと見える。PRx=-13.2, PRy=9.25, PRz=8.25に決定。

bslit1,2を閉めるほど移相子の分解能（図7の角の鋭さと偏光度）がよくなるが、ビームを切るほど強度は減る。モニター値が減ってもBraggの強度はそれほど減らないかもしれないので、最終的なbslit1,2の幅は後で図7のスキャンの結果を見ながら、偏光度と強度の兼ね合いで調整していてもよい。

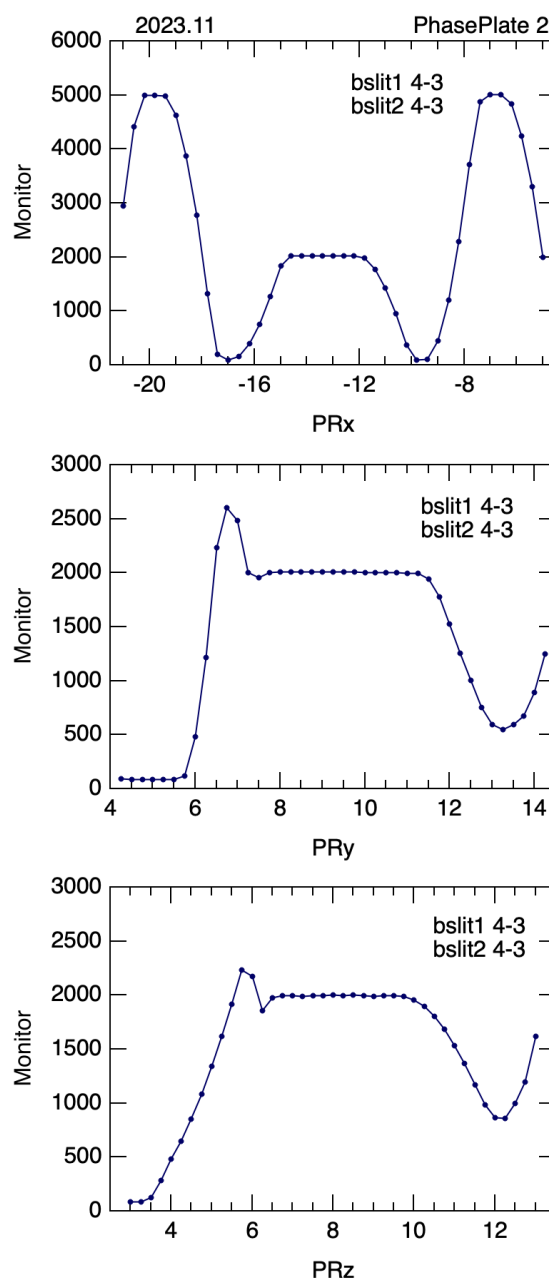


図3b 最終的な位置決めのためのPRx, PRy, PRzスキャン。

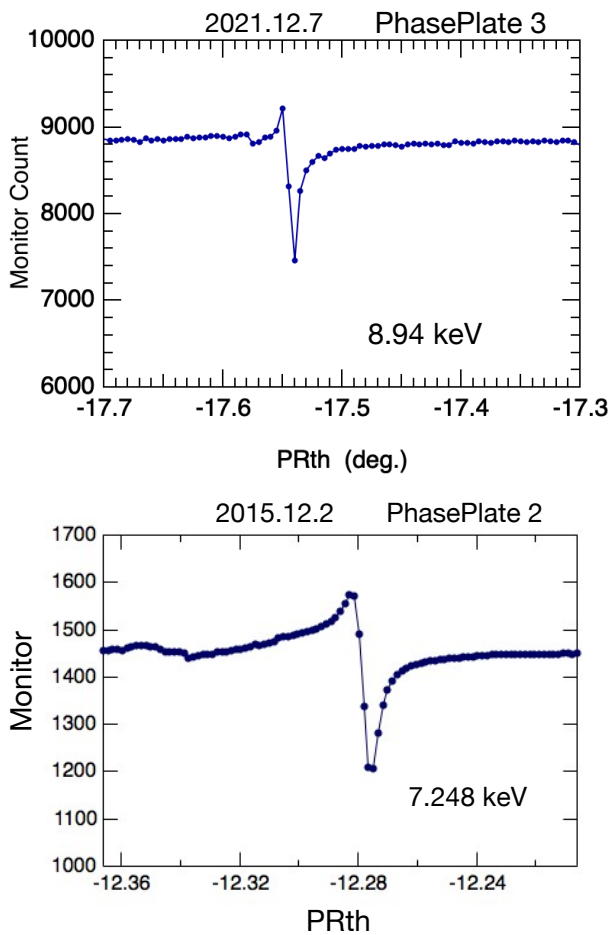


図4 PRthスキャンをしてBragg反射前後での異常透過と異常吸収を見つける。

5. PRthスキャンをしてBragg反射が起こる θ_B を見つける (図4) . 異常透過と異常吸収が見える. (たまにゴミもあるので、偽物をつかまないように注意.) これまでのBL3Aでの結果をまとめたものを図5に示す.

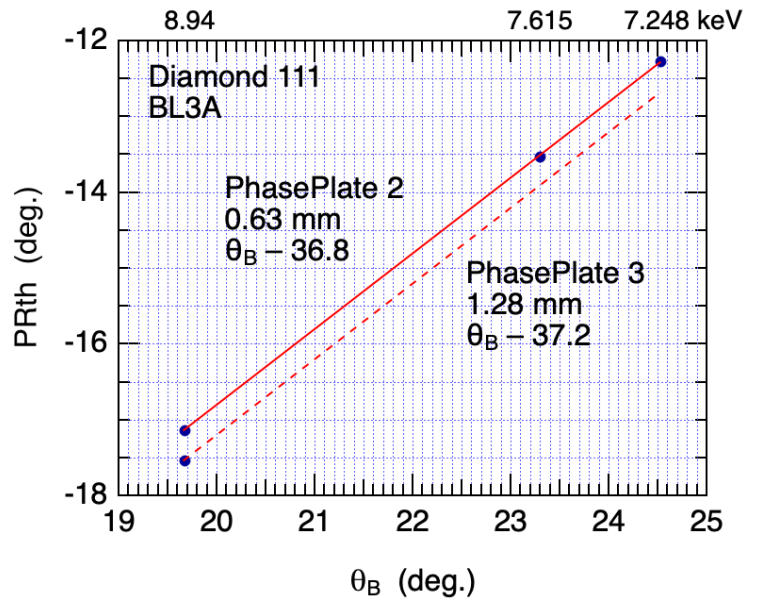


図5 Bragg反射が現れるPRthの角度と θ_B の関係をこれまでの結果からプロットしたもの.

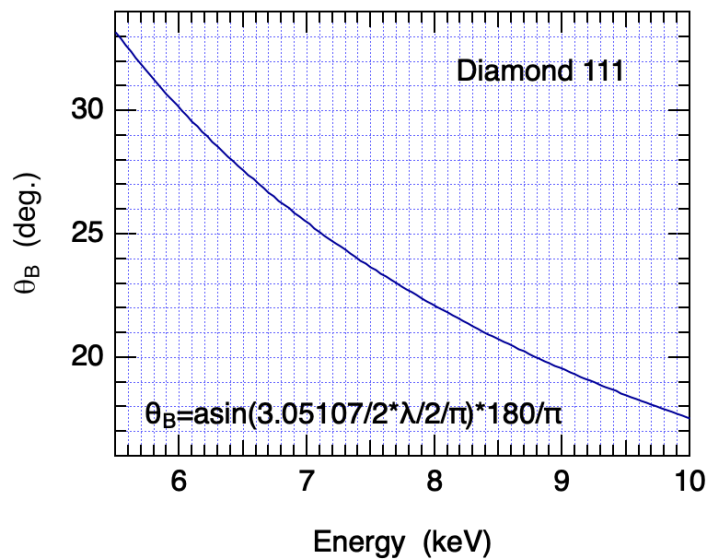


図6 ダイヤモンド111反射に対する θ_B とX線エネルギーの関係 (計算) .

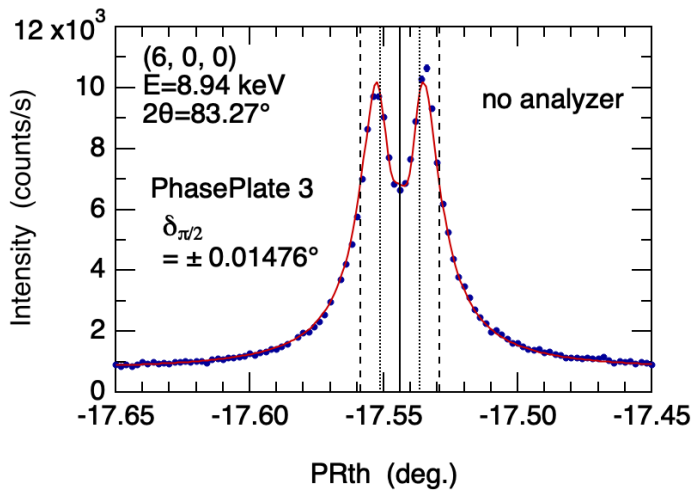


図7 試料のBragg反射 ($2\theta=83.27^\circ$) でのPRthスキュン。水平散乱面。アナライザーなし。実線は式(6)によるフィッティング。破線(点線)はフィッティングで得られた円偏光(σ 偏光)の位置。

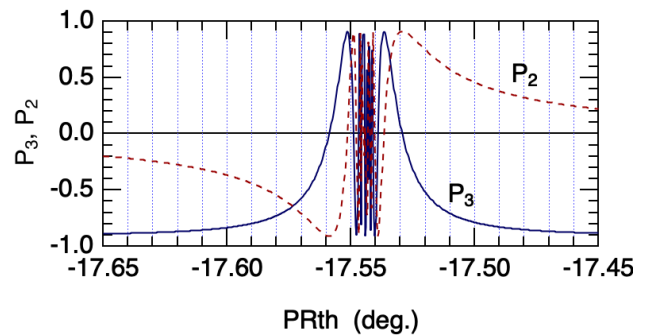


図8 PRthを振ったときのStokes Parameter P2 (円偏光)とP3 (直線偏光)の変化(計算)。

- 試料の格子基本Bragg反射を使ってPRthスキュンをする。図7に水平散乱面(2軸)でアナライザーなしで測定した例を示す。 θ_B から遠く離れると π 入射、近づくにつれて円偏光成分が混じり、ちょうど $\delta=\pi/2$ になったところで円偏光、 $\delta=\pi$ になったところで σ 偏光となって強度最大、中心を通り過ぎると再び σ 偏光を経て、逆円偏光となり、やがて π 偏光に戻る(図8)。 θ_B 付近では様々な位相が混在した無偏光状態になる。
- この結果を式(6)でフィッティングし、オフセット角 δ などのパラメータを決める。より厳密にやるには、図9のように、アナライザーを使ってPOL(ϕ_A) = 0° (σ')、POL(ϕ_A) = 90° (π')の両方でPRthスキュンを行い、式(1)を使った両方のフィッティング結果からパラメータを決めるとよいが(ダイレクトビームを使うと最も直接的)、時間を節約して測定を優先させたいときは、試料のBragg反射を使ったアナライザーなしでの測定一本のフィッティングで十分だと思う。

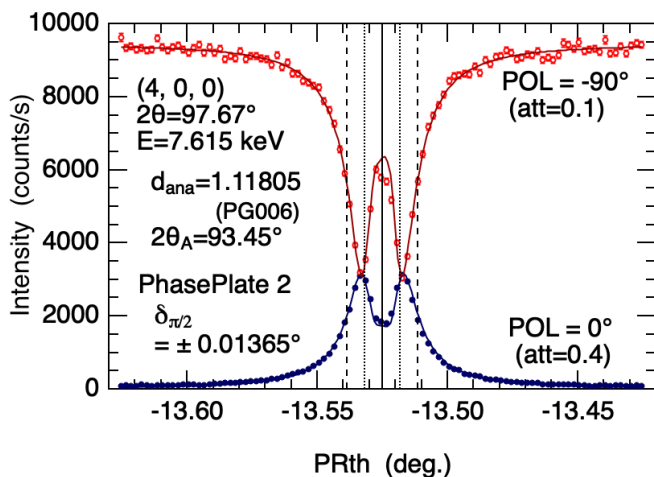


図9 試料のBragg反射 ($2\theta=97.67^\circ$) でのPRthスキュン。水平散乱面。アナライザー使用。実線はフィッティング結果。破線(点線)はフィッティングから得られた円偏光(σ 偏光)の位置を示す。

最も一般的な状況での式を示す。

図10のように、移相子を通過したビームが試料に照射されてBragg回折（非共鳴Thomson散乱）を起こし、回折角 2θ の方向へ回折されるとする。さらに、その回折X線がアナライザー結晶でBragg回折を起こし、回折角 $2\theta_A$ で回折され、それを検出器で観測するとする。アナライザー結晶と検出器は試料からの回折X線と平行な軸まわりに回転させることができ、その角度を ϕ_A とする（通常POLと呼ぶ角度）。 $\phi_A=0^\circ$ のとき σ' 偏光を観測、 $\phi_A=\pm 90^\circ$ のとき π' 偏光を観測することになる。このとき、検出器での強度は、比例定数をKとして、次のように表される。

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

（導出は、https://home.hiroshima-u.ac.jp/tmatsu/Matsumura/src/1666/resoxray16_sec5.pdf）

ここで、 P_3 は移相子透過後のビーム状態を表すStokesパラメータであり、 $P_3=1$ のとき σ 偏光、 $P_3=-1$ のとき π 偏光を表す。（ $\pm 45^\circ$ 直線偏光の状態を表すパラメータは P_1 であるが、移相子が水平面から 45° の角度で設置されている場合は $P_1=0$ 。）移相子を通過することにより、 σ 偏光成分と π 偏光成分のあいだには

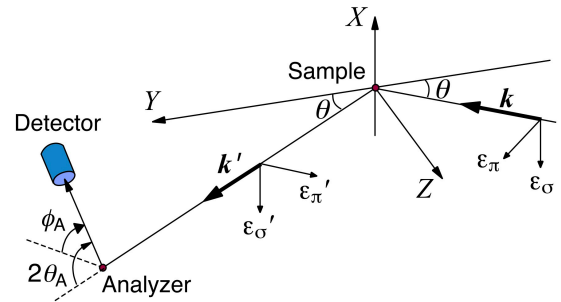


図10 一般的な回折実験の配置図。

$$\delta = \frac{At}{\theta_{PR} - \theta_B} \quad (2)$$

の位相差が生じ、

$$P_2 = P \sin\left(\frac{At}{\theta_{PR} - \theta_B}\right) \quad (3)$$

$$P_3 = -P \cos\left(\frac{At}{\theta_{PR} - \theta_B}\right) \quad (4)$$

と表される（ P_2 の符号は決まっているはずだが、何らかの標準試料での決定が必要。一応CsCuCl₃で確認した図8を今は正しいと思ってやっている）。 P は偏光度、 θ_{PR} は移相子の回転角度、 θ_B はダイヤモンド111反射のBragg角、 t は移相子の厚さであり、係数 A は次の式で表される。

$$A = \frac{\pi}{2} \left[\frac{r_e^2 \text{Re}(F_{hkl} F_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}) \lambda^3 \sin(2\theta_B)}{\pi^2 V^2} \right] \quad (5)$$

K , P , θ_B , At , およびGaussian分解能幅がフィッティングパラメータである。

図7の測定では、アナライザー結晶を置かずに回折X線を直接検出器に入れているので、 $2\theta_A=0$ とすればよい。したがって、(1)は

$$I = K \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left(1 + P \cos \frac{At}{\theta_{PR} - \theta_B} \right) \sin^2 2\theta \right\} \quad (6)$$

となる。

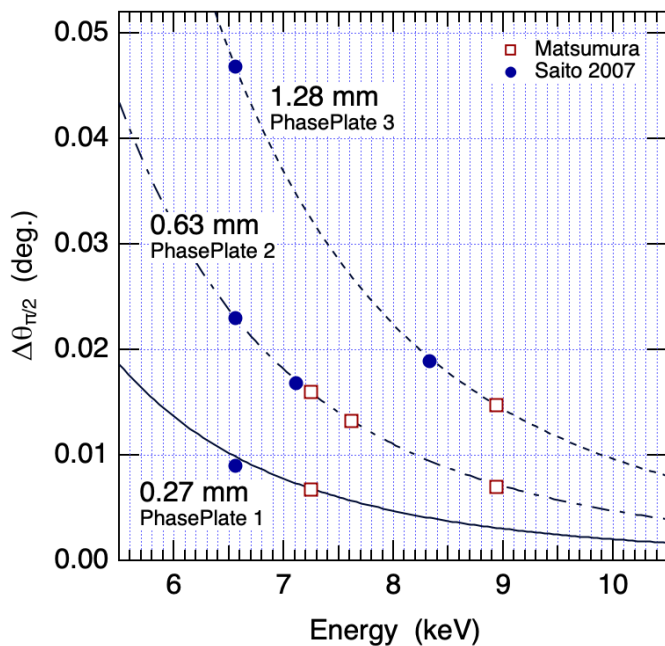


図11 BL3Aに設置されている3種類の移相子について、これまでの実験で求められた円偏光オフセット角とエネルギーの関係。

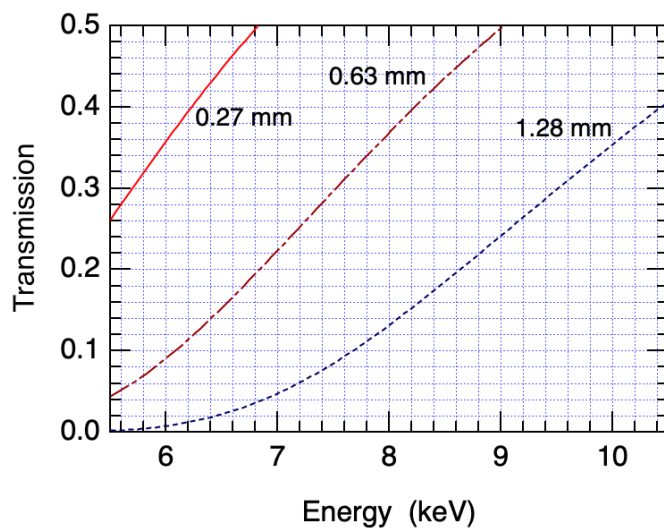


図12 3種類の厚さの移相子に対するX線透過率の計算値。

図11にBL3Aに設置されている3種類の移相子についての円偏光オフセット角（円偏光が得られる θ_{PR} とBragg角 θ_B との差、位相差が $\pi/2$ になるところ）とエネルギーの関係を示す。データ点はこれまでの実験の結果。実線、一点鎖線、破線はそれぞれ厚さを0.27mm, 0.63mm, 1.28mmとしたときの計算値であり、データ点をよく再現する。計算は式(2)(5)からそのまま、以下の式で計算している（IgorProの式そのまま、 γ はビームに対するダイヤモンド100結晶面の傾き）。オフセット角が 0.01° 以下だときれいな円偏光が得られず、実験はかなり苦しい。図12はダイヤモンド移相子の透過率の計算値である。厚い結晶を使うとオフセット角が大きくなってきれいな円偏光や σ 偏光が得られるが、吸収が大きくなって強度が落ちる。

$$\begin{aligned} \theta_B &= \arcsin(3.05107/2 * \lambda / \pi) * 180 / \pi \\ A_{111} &= 2.81794^2 * 293.308 * \lambda^3 / \pi^2 / 3.56688^6 * \sin(2 * \theta_B * \pi / 180) * 0.001 \\ \gamma &= (90 - \theta_B) - 54.73561 \\ \Delta &= A_{111} * 1280 / \cos(\gamma * \pi / 180) / 1000 * 180 / \pi \\ \text{trans} &= \exp(-1280 / \cos(\gamma * \pi / 180) / \mu) \end{aligned}$$

図7のフィッティングはGaussian分解能幅を考慮してconvolutionを入れたフィットになっている。これを式(6)のままでフィットすると図13のようになる。フィットはできるが、パラメータとして得られるオフセット角は少し大きめ。

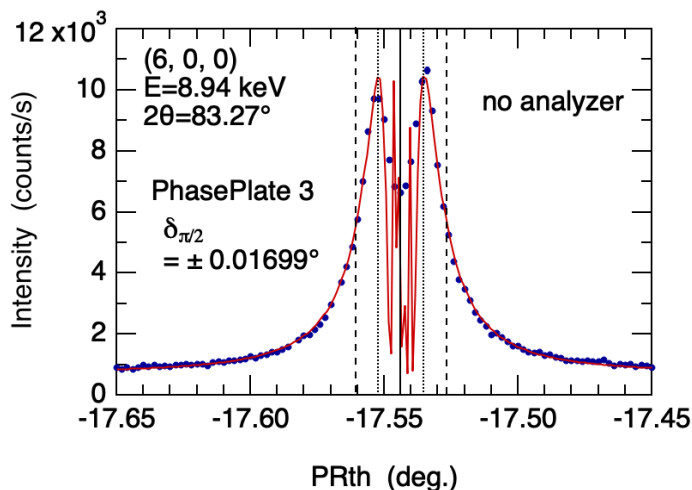


図13 図7の結果を式(6)そのまま、分解能によるconvolutionを入れずにフィットした結果。

Igor Proでのフィッティング：

サンプルファイル <https://home.hiroshima-u.ac.jp/tmatsu/Matsumura/PFBL3A-PR.html>

dataXにPRth, dataYにIntensityのデータがあるとする。

(フィッティング準備)

```
Make/N=200/D/0 reso1
SetScale/I x -0.02,0.02,"", reso1
Make/N=600/D/0 fitfcn1
SetScale/I x dataX[0]-0.02,dataX[numpts(dataX)-1]+0.02,"", fitfcn1
duplicate/o fitfcn1 fg1,p3in1
```

(フィッティング関数)

```
Function PRthfit(w,h)
Wave w; Variable h
Wave fitfcn1,reso1,fg1
Variable tth, ttha, phia, chiPR
Wave p1in1, p3in1
Variable fsc=-1 // fsc=-1 for horizontal scattering plane, fsc=1 for vertical
scattering plane
// w[0]: phiA, w[1]: Intensity, w[2]: At, w[3]: cen_PRth, w[4]: reso, w[5]:
Polarization, w[6]: tth, w[7]: ttha
tth=w[6]*pi/180 // tth=0 for a direct beam, tth≠0 for a fundamental
Bragg peak
ttha=w[7]*pi/180; phia=w[0]*pi/180 // ttha=0 for No analyzer
p3in1=fsc*w[5]*cos(w[2]/(x-w[3]))
reso1=(exp(-x^2/2/w[4]^2))/w[4]/sqrt(2*pi)
fitfcn1=w[1]*((1-(1-p3in1)/2*sin(tth)^2)*(1-sin(ttha)^2/2)+(p3in1+(1-p3in1)/
2*sin(tth)^2)*cos(2*phia)*sin(ttha)^2/2)
fg1=fitfcn1(x)*reso1(h-x)
return area(fg1,leftx(fitfcn1),rightx(fitfcn1))
End
```

(dataX,dataY)をPRthfitでフィット。w[0], w[6], w[7]は固定。