

ビームライン AR-NE1 の集光光学系シミュレーション

森丈晴

高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所

概要

ビームライン AR-NE1 の集光光学系設計のために光線追跡法(レイトレース)を用いたシミュレーション計算を実施した。

高圧実験とメスバウアー分光実験がビームライン AR-NE1 で実施されることになり、ビームラインの再構築が実施されることになった。目的の実験実現のためには、試料位置への X 線ビームの収束性がビームライン光学系に要求される。また、メスバウアー分光実験で使用される高分解能分光器に対する入射 X 線の低角度発散化の有用性も問題となる。

光学系設計を進める上で検討すべき課題を、シミュレーションして確かめることによって、最適と考えられるビームライン光学系を決定した。

1 ビームライン AR-NE1 の光学系の検討

1.1 ビームライン AR-NE1 再構築の概容

高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所・放射光科学研究施設の PF-AR 6.5GeV リングのビームライン AR-NE1 を高圧実験とメスバウアー分光実験に転用する目的で、ビームラインの再構築を実施することになった。^[1]

高圧実験は、PF 2.5GeV リングのビームライン BL-13A で実施されてきた。高圧実験には、エネルギー30keV の単色 X 線が使用されるが、このエネルギー領域の X 線の出力は、ビームライン AR-NE1 の挿入光源 EMPW#NE1 の方が優れている。ビームライン AR-NE1 に移動することで、実験の効率が上がるとともに、エネルギー50keV の X 線を使用するなどの新たな可能性が生まれることも期待される。

メスバウアー分光実験は、PF-AR6.5GeV リングのビームライン AR-NE3 で実施されてきた。AR-NE1 をメスバウアー分光実験用に新たに整備することで、実験の効率を上げるとともに、AR-NE3 に新しい実験の展開をはかることが可能となる。

1.2 ビームライン AR-NE1 光学系設計に関する検討事項

BL-13A のビームライン光学系を出発点にして、ビームライン AR-NE1 の光学系の設計が進められた。

BL-13A のビームライン光学系は、X 線の進行方向に見て、エネルギー30keV の単色 X 線を出力する分光器、単色 X 線を試料位置に収束させる Kirkpatrick-Baez ミラー(K-B ミラー)集光システムの順に構成される。

BL-13A の分光器は、Si(111) 対称カット平板結晶と Ge(111) 非対称カット平板結晶を横向きに＋配置させた光学系を使用している。Si(111)対称カット平板結晶 2 枚を縦向きに＋配置した 2 結晶分光器に比べて、K-B ミラーに入射する X 線の強度を増大させられるというのが利点であるが、エネルギーチューナビリティーが悪いことが問題となった。メスバウアー分光実験で使用される単色 X 線のエネルギーは 14.4keV であり、高圧実験では 30keV の他に 50keV や 7keV あたりのエネルギーの単色 X 線を使用する可能性が検討されていた。

高圧実験で使用される試料は小さく、ビームライン BL-13A の光学系は、試料位置で 50 μm に収束される X 線の強度が最大になる様に設計されている。ビームライン AR-NE1 において、試料位置で 50 μm に収束される X 線の強度を、BL-13A よりどこまで強くできるかが、論点となった。

メスバウアー分光実験用には、分光器の後ろに新しく高分解能分光器が整備される。高分解能分光器の性能を決める要因の 1 つに、入射される X 線の低角度発散性が挙げられる。X 線の角度発散を低くする方法としては、高分解能分光器の上流にコリメーティング用の光学系(例えば屈折レンズや曲面ミラー)を配置することが考えられるが、これらの有用性も検討の対象となった。

2 光線追跡法(レイトレース)を用いたシミュレーション

ビームライン AR-NE1 で使用する分光器とメスバウアー分光実験用高分解能分光器に対するコリメーティング用の光学系の有用性を検討するために、光線追跡法(レイトレース)^[2]を用いたシミュレーション計算を実施することになった。

レイトレースは、シミュレーションを実施する光学系のモデルを設定し、現実の光源に即した形で多数の光線を発生させ、各々の光線が光学系モデルを通して観測点までたどり着くまでの様子を計算して調べる手法である。

2.1 光線追跡法(レイトレース)計算用の光学系モデル

ビームライン AR-NE1 の光学系検討用のレイトレース計算を実施するために、シミュレートすべき光学系モデルを組み立てた。計算に用いた光学系モデルを上流から順に記す。

- 光源 挿入光源 EMPW#NE1 のパラメータを使用。
- 固定マスク 光源より 19m 地点に配置。開口径を 2mm に設定。
- コリメーティング光学系 光源より 19.5m 地点に配置。反射 X 線の角度発散が極小になる様な曲率の円筒面ミラーを使用。
- 分光器 光源より 29m 地点に設置。BL-13A 型分光器と 2 結晶分光器の 2 種類を準備。
- 高分解能分光器 光源より 32m 地点に配置。
- X 線収束ミラー K-B ミラー集光システムを使用。光源より 32.5m 地点に縦方向 X 線収束円筒面ミラーを、光源より 35m 地点に横方向 X 線収束円筒面ミラーを配置。
- 観測点 試料位置に設定。光源より 37m 地点に配置。

使用するレイトレースプログラムの問題で、構想中の光学系に忠実にモデル化できない部分があり、他の方法で対応した箇所がある。コリメーティング用の光学系として屈折レンズが、X 線収束ミラーでは多層膜ミラーの採用がされていたが、これらのプログラム関数が用意されていない関係で、ともに単相膜の円筒面ミラーのプログラム関数で代用した。単層膜の円筒面ミラーを使用しても同等の機能がはたせる様な条件を使用することで対応することにより、目的の計算を十分に達成する様なモデルが組み立てられた。

2.2 光線追跡法(レイトレース)計算結果の処理

レイトレース計算では、観測点に到達した光線 1 本毎に、位置座標、進行方向ベクトル、エネルギー、強度などのデータが得られる。これらを用いるとさまざまな知見が得られる。例えば、光線の位置座標をスポットで図示することで、X 線ビームの形状をイメージさせることができる。今回は、検討に使用するために、これらのデータの標準分散などの統計処理を実施した。

3 光線追跡法(レイトレース)計算結果の検討

3.1 ビームライン AR-NE1 で使用する分光器の検討

ビームライン AR-NE1 で使用する分光器を検討するために、観測点で $50\mu\text{m}$ のサイズを通過する X 線強度で比較した(表 1 参照)。ビームライン AR-NE1 の 2 つの光学系モデルは、ビームライン BL-13A に比べて、X 線強度が高くなるが、X 線収束後のビームサイズは大きくなっている。このため、AR-NE1 の光学系モデルは、 $50\mu\text{m}$ のサイズを通過する X 線強度でみた場合の X 線強度のロスが大きくなるが、それでも BL-13A に比べて強くなることがわかった。単純比較すると、AR-NE1 で BL-13A 型分光器を使用したモデルが最適となるが、2 結晶分光器を使用しても、BL-13A で実験していた時の約 4 倍の強度の増加が期待できることがわかった。約 4 倍の強度増強を有意義なものであると判断したこと、エネルギーチューナビリティに優れており、建設コストの節約も期待できることから、2 結晶分光器の使用が決定された。

2 結晶分光器の使用が決定された後、さらなる検討が進められ、光学系に細かな修正が加えられることになり(図 1 参照)、修正された光学系でのレイトレース計算も実施した(図 2 参照)。観測点で $50\mu\text{m}$ のサイズを通過する X 線強度は、 $7.0\text{e}+10$ photons/s と見積もられ、光学系の修正後も所定の性能が維持されていることが確認された。

表 1. 分光器検討のための光線追跡法(レイトレース)計算結果

光学系モデル	観測点ビームサイズ (標準偏差 mm)		X 線強度 (photons/s)	観測点で $50\mu\text{m}$ のサイズ を通過する X 線強度 (photons/s)
	横方向	縦方向		
BL-13A	0.034	0.020	$3.9\text{e}+10$	$1.7\text{e}+10$
AR-NE1 で BL-13A 型分光器を使用	0.055	0.027	$9.7\text{e}+11$	$2.2\text{e}+11$
AR-NE1 で 2 結晶分光器を使用	0.069	0.027	$4.2\text{e}+11$	$7.5\text{e}+10$

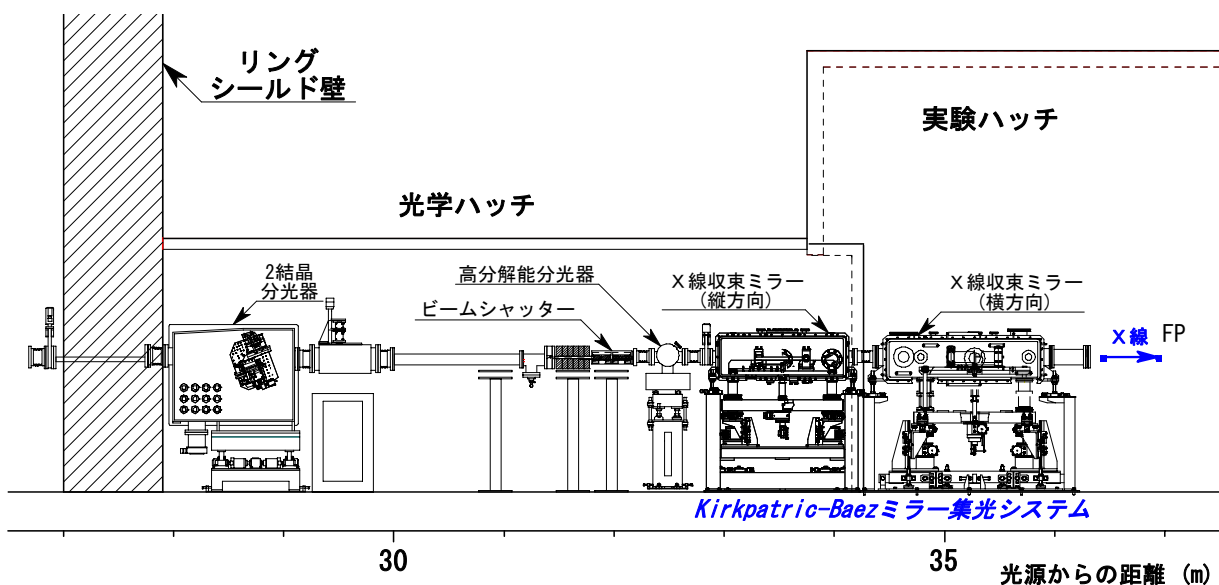


図 1. ビームライン AR-NE1 側面図(設計詳細検討終了後)

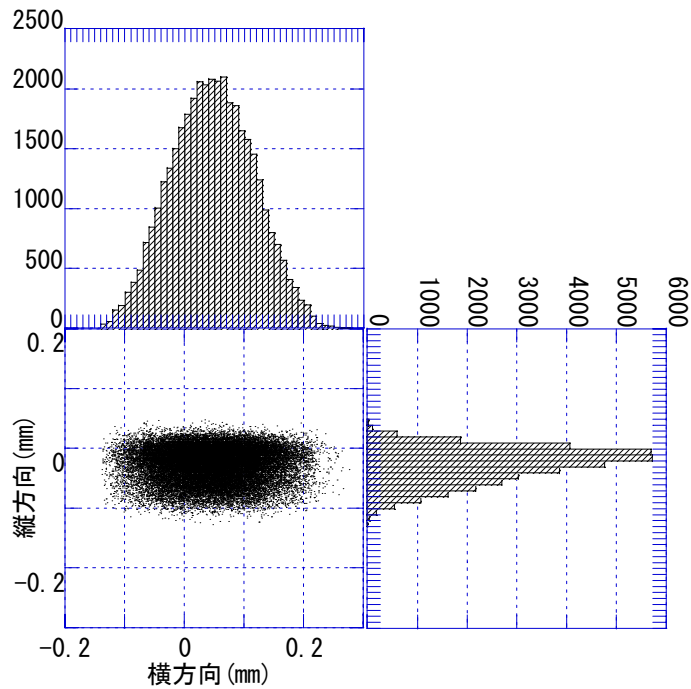


図 2. 試料位置の X 線ビーム形状(設計詳細検討終了後)

3.2 高分解能分光器に対するコリメーティング光学系の有用性

ビームライン AR-NE1 の分光器に 2 結晶分光器を採用することを決定した後、高分解能分光器に対するコリメーティング光学系の有用性検討のためのレイトレース計算を実施した。コリメーティング光学系は、メスbauer分光実験に使用されるものなので、X線のエネルギーを 14.4keV に設定した。

最初、縦横両方向にコリメーティング光学系を入れた計算を試みたが、横方向のコリメーティングに関しては、高分解能分光器入射時の X 線角度発散を低くする条件が見つけれなかった。光源の横方向ビームサイズは半値幅で約 2.4mm であり、コリメーティング光学系の受光幅と同等の大きさであることに起因しており、横方向のコリメーティング光学系は効果がないと判断された。

縦方向のコリメーティング光学系に関しては、高分解能分光器から出力される X 線のエネルギー分解能に改善は見られないが、高分解能分光器の入射時の角度発散が改善され、高分解能分光器から出力される X 線強度が 2 倍弱になることが確認された。メスbauer分光実験で得られる信号強度は、もともと小さいということもあり、縦方向のコリメーティング光学系を使用する価値はあるとの結論に達した。

表 2. コリメーティング光学系の有用性検討のための光線追跡法(レイトレース)計算結果

光学系モデル	観測点 ビームサイズ (標準偏差 mm)		高分解能分光器 入射時の角度発散 (縦方向) (標準偏差 mrad)	エネルギー 分解能 (標準偏差 eV)	X線強度 (photons/s) 20mm
	横方向	縦方向			
コリメーティング光学系無し	0.069	0.012	0.134	0.0029	3.1e+8
コリメーティング光学系有り	0.061	0.017	0.118	0.0028	5.4e+8

4 まとめ

ビームライン AR-NE1 の光学系の設計のために光線追跡法(レイトレース)を用いたシミュレーションを実施し、計算で得られたデータを検討することにより、ビームライン AR-NE1 の分光器として 2 結晶分光器を採用することが、高分解能分光器用に縦方向のコリメーティング光学系を検討することが決定された。

シミュレーション結果は、ある知見を与えているに過ぎず、技術的な可能性やコストなど、その他の事柄も考慮して総合的に判断することになる。

光線追跡法(レイトレース)計算は、光学系の決定の一手段として使用されるばかりでなく、例えば、X 線収束ミラーの最適な表面形状を調べるといった光学系の最適化にも使用されるなど、いろいろな用途に使用されている。

参考文献

- [1] Photon Factory Activity Report 2008, Vol.26 PART A, pp. 83-84.
- [2] Y. Muramatsu, Y. Ohishi and H. Maezawa, Development of a Ray Tracing Program fro Synchrotron Radiation, "SRXRAY v. 1", KEK Internal, 87-10 (1988)