

J A E R I - M  
88-212

時間分解X線吸収分光装置光学系の設計

1988年10月

宮下 敦巳・依田 修

日本原子力研究所  
Japan Atomic Energy Research Institute

JAERI-Mレポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。

入手の問合せは、日本原子力研究所技術情報部情報資料課（〒319-11 茨城県那珂郡東海村）あて、お申しこしください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-11 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費領布をおこなっております。

JAERI-M reports are issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Information Division Department of Technical Information, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokaimura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-11, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 1988

編集兼発行 日本原子力研究所  
印 刷 日青工業株式会社

時間分解 X 線吸収分光装置光学系の設計

日本原子力研究所高崎研究所開発部

宮下 敦巳・依田 修

( 1988年9月27日受理 )

時間分解軟X線吸収分光装置の設計に必要な全反射ミラーと分光結晶の光学計算を行った。この装置は金属にパルスレーザを照射して生ずるプラズマから誘起される擬連続軟X線を光源とし、90 eV から 3 keV のエネルギー範囲を分光する装置である。

ミラーや分光結晶として用いる材料のX線反射率の計算、X線の集光効率の計算及び光線追跡計算に基づいて、材料の形状、寸法、設置場所、材料選択等光学系の最適デザインを示した。

さらに、エネルギー領域50 keVまでのX線反射ミラーの反射率を、X線回折や分光に良く用いられるいくつかの材料について計算した。このエネルギー領域でのX線の反射率の計算結果は、放射光を用いるX線装置の設計に必要なものである。反射率の計算結果は著者から入手可能である。

Design of the Optical System for a New Time-Resolved  
X-Ray Absorption Spectroscopy Apparatus

Atsumi MIYASHITA and Osamu YODA

Department of Development  
Takasaki Radiation Chemistry Research Establishment  
Japan Atomic Energy Research Institute  
Watanuki-cho, Takasaki-shi, Gunma-ken

(Received September 27, 1988)

Calculations of total reflection mirror optics and analyzing crystal polychromator optics are done to design a new time-resolved soft X-ray absorption spectroscopy apparatus. This apparatus utilizes pulsed soft X-rays of pseudo-continuum energy which are generated by a pulsed laser-induced metal plasma, and covers an energy range of 90 eV~3 keV.

An optimal design of the optical system, i.e. optimal dimensions, setting positions and materials of the mirror and polychromator, is proposed based on the calculations of the reflectivity of the material, efficiency of the X-ray acceptance and ray-tracing.

Calculations are also made on the reflectivity of several mirror materials commonly used for the X-ray diffraction and spectroscopy in the energy range up to 50 keV. Data of the reflectivity in this energy region are necessary to design an X-ray apparatus using synchrotron radiation as an X-ray source. Numerical results of the reflectivity are available from the author.

Keywords: X-ray Absorption Spectroscopy, Time-resolved,  
Laser-induced Plasma, Soft X-ray, Total Reflection  
Mirror, Crystal Polychromator, Optical System

## 目 次

1.はじめに .....	1
2.光学系の概要 .....	3
3.集光光学系 .....	4
3.1 集光系の配置 .....	4
3.1.1 低エネルギー領域 .....	4
3.1.2 高エネルギー領域 .....	5
3.2 ミラーの反射率 .....	6
3.3 吸収係数の計算 .....	9
3.4 反射率の計算 .....	11
3.4.1 低エネルギー領域 .....	11
3.4.2 高エネルギー領域 .....	11
4.分光光学系 .....	13
4.1 低エネルギー領域 .....	13
4.2 高エネルギー領域 .....	13
5.さらに高いエネルギー領域でのX線ミラーの特性 .....	15
6.まとめ .....	16
6.1 低エネルギー領域 .....	16
6.2 高エネルギー領域 .....	16
参考文献 .....	19

## Contents

1. Introduction .....	1
2. Outline of the Optical System .....	3
3. Focusing Optics .....	4
3.1 Arrangement of the Focusing Optics .....	4
3.1.1 Lower Energy Region .....	4
3.1.2 Higher Energy Region .....	5
3.2 Reflectivity of the Mirror .....	6
3.3 Calculation of the Absorption Coefficient .....	9
3.4 Calculation of the Reflectivity .....	11
3.4.1 Lower Energy Region .....	11
3.4.2 Higher Energy Region .....	11
4. Analyzing Optics .....	13
4.1 Lower Energy Region .....	13
4.2 Higher Energy Region .....	13
5. Characteristics of the Mirror in Much Higher Energy Region .....	15
6. Conclusions .....	16
6.1 Lower Energy Region .....	16
6.2 Higher Energy Region .....	16
References .....	19

## 1. はじめに

高強度レーザビームを金属に集光照射したときの、金属プラズマから誘起されるX線は輝度が高く、かつ軟X線領域では、レーザエネルギーからX線エネルギーへの変換効率が極めて高いことが近年明らかにされ、この軟X線をX線リソグラフィー用光源として用いたり、X線吸収分光の光源として用いる試みが行われている<sup>1)</sup>。そこで高崎研究所では、昭和63年度から、放射線高度利用研究（いわゆる放射線ハイテク研究）の一環として、筑波大学と共同で時間分解X線吸収分光装置を試作開発することになった。この装置では、パルスレーザを金属に集光照射した時に発生するパルス状の擬連続軟X線を用いて吸収分光測定を行うことにより、イオンやレーザなどのエネルギーbeamを照射した固体表面や薄膜に引き起こされる、原子配列や電子状態のナノ秒オーダでの高速変化の様子を追跡することを第1の目的とし、他に、この短パルス軟X線を用いた物質材料の新しい解析評価技術の研究開発を行うことを計画している。

物質によるX線の吸収スペクトルを観察すると、内殻軌道の電子の励起による吸収端の近傍に微細な吸収係数の増減の振動構造がある。吸収端から30～50eVより高エネルギー側100OeV位の範囲に見える振動構造を、広域X線吸収微細構造（Extended X-ray Absorption Fine Structure; EXAFS）と呼ぶ。EXAFSは吸収原子の周りの原子の短距離秩序性を反映していることから、EXAFSの解析を通じて吸収原子の周りの原子の配位数や配位距離の情報を得ることができる。また、EXAFS領域から低エネルギー側吸収端近傍までの範囲に現れる微細構造はX線近吸収端構造（X-ray Absorption Near Edge Structure; XANES）と呼ばれ、励起された光電子の多原子散乱や、試料の多電子効果、同じ元素でも吸収端エネルギーにずれを生ずる化学シフトなど物質の電子構造に起因するものが重複して生じている。このためXANESの解析は複雑であるが、これを正しく解釈すれば物質の電子状態に関する知見が得られ、EXAFSと相補的に利用することが可能である<sup>2)</sup>。さらに、EXAFSは、吸収原子の周りの局所構造に関する知見を与えるが、X線の回折や散乱のような3次元的構造や長距離秩序性を決定することはできない。一方、EXAFSは長距離の秩序性に鈍感であるため、非晶質や液体、溶液中の溶質などの、特定の原子の周りの構造を決定できるが、X線の散乱から、多原子系におけるこれらの情報を引き出すのはきわめて困難であり、この点でEXAFSとX線散乱とは相補的である。

このように、物質の原子配列と電子状態に関して極めて有用な知見の得られるX線吸収分光法は、近年シンクロトロン放射光（Synchrotron Radiation; SR）施設が各国で建設され、広いエネルギー範囲にわたって強度の高い良質のX線が利用できることになって以来急速に用いられるようになった。しかしながらSRの利用に関しては、現在の2～3GeVクラスのマシンでは、静的な物質構造についての知見は得られても、動的な変化や、極めて早い現象の追跡には、パルス当たりのX線強度が十分でなく、時間分解能もミリ秒～サブミリ秒の時間分解能しか得られていない<sup>3)</sup>。十分な時間分解能でこれらの現象を追跡するには、次の世代のSR<sup>4,5)</sup>に待つほか無い。

高速で変化する化学構造の動的な研究において、レーザプラズマ誘起軟X線がEXAFSなどのX線吸収分光の光源としてきわめて有望であることが、米国バッテル・コロンバス研究所のMallozziら<sup>8)</sup>によって示されて以来、バッテルのグループによってアルミニウムの高速融解過程等の研究<sup>9)</sup>が、少し遅れて英國ラザフォード・アペルトン研究所のグループによって同様な研究<sup>10)</sup>が発表された。これらはいずれも、パルス当たり100Jを越える巨大なレーザシステムを寄生的に利用しているもので、通常の実験室に持ち込んで使えるものではない。一方、オランダのFOM研究所では、20Jのコンパクトなレーザ発生装置を用いてレーザプラズマの研究を行っていたが、これをX線吸収分光の光源として用いることを試み、ユニークな装置を製作し<sup>9)</sup>、レーザ照射したシリコンの構造変化の研究など<sup>10)</sup>を行っている。さらに、20J程度のレーザでも、単一ショットでX線吸収分光の可能性が示唆されている。

今回高崎研究所で製作を試みる装置では、パルス幅10ナノ秒出力20Jクラスのレーザを用い、利用できるエネルギー範囲を90~3000eVと極めて広くとることが特徴である。この範囲には、Be(原子番号4)からCl(原子番号17)までのK-吸收端とSi(原子番号14)からMo(原子番号42)程度までのL-吸收端を含む。この広いエネルギー範囲のX線を1つの集光一分光光学系でカバーすることは技術的に不可能のため、エネルギー範囲を90~1000eVまでと1~3keVの2つに分け、2系統の光学系を設置する必要がある。さらに、軟X線は空気によって容易に吸収されるため、X線発生源(レーザを集光照射する金属ターゲット)からX線検出器までの全系を真空容器内に設置しなければならない。将来サイクロトロンのビームラインに接続するために照射室の大きさを考慮すると、レーザ装置を除く部分の最大長は2.5m程度に納めなければならない。

上の2つの要請を満足するためには、X線集光ミラーの材質、形状、設置場所や分光素子の選択、配置など光学系のデザインを最適化し、X線吸収分光に必要十分なX線強度を得られるようになることが重要である。本報告書は、今回試作する装置の設計に必要な、集光ミラーの形状及び設置場所とX線の集光立体角の関係、ミラー材質のX線吸収係数とそれを用いたX線の反射率、高エネルギー領域における分光結晶の選択と配置等を上記の要請を考慮に入れつつ計算によって見積ったものであり、装置設計の基本を成すものである。なお、集光ミラーの反射率の計算には、将来の高輝度SRを利用するため必要となるであろういくつかの材質について、ここで用いるエネルギー範囲を越えた部分まで含めた。

## 2. 光学系の概要

時間分解X線吸収分光装置では90eVから3keV（波長4.1Å～138Å）までのX線吸収スペクトルを測定するが、このような広いエネルギー範囲を一つのX線集光一分光光学系で扱うことは困難である。このため、エネルギー範囲を2つの領域に分割して、低エネルギー側の領域を90eV～1keV、高エネルギー側の領域を1keV～3keVとして設計を行う。低エネルギー領域の光学系はX線の集光にトロイダル・ミラーを、分光に近似平面結像凹面回折格子を用い、高エネルギー領域は集光にトロイダル・ミラーを、分光に結晶ポリクロメータを用いて構成する。光学系全体の概略をそれぞれFig. 1(a)、Fig. 1(b)に示す。

低エネルギー領域ではX線ミラーと凹面回折格子を平行に配置している。ミラーに垂直な方向の焦点は試料面に(Fig. 1(a) i)、平行な方向の焦点は検出器面に(Fig. 1(b) ii)合わせている。これにより凹面回折格子へ入射するX線の斜入射角の分散が小さくなり、かつ、検出器面で直線上に分光させることができる。

高エネルギー領域ではミラーと結晶ポリクロメータを互いに直角に配置する。ミラーに平行な方向の焦点は試料面に(Fig. 1(b) i)、垂直な方向の焦点は検出器面に(Fig. 1(b) ii)合わせている。これにより平行に配置したときに比べ結晶ポリクロメータに入射するX線の取り込み角を大きくとることができ、また、検出器面で直線上に分光させることができる。

### 3. 集光光学系

集光光学系は高エネルギー領域、低エネルギー領域ともトロイダル・ミラーを使用するが、分光系が異なるためトロイダル・ミラーは共用しない。ミラーを各エネルギー領域で個別に持つことにより、それぞれの分光系に最適な集光系を構成できる。

集光系を構成するときに重要な点を挙げる。まず、ミラーの位置によって試料に到達するX線の量が決るために、ミラーの位置の集光特性に及ぼす影響を調べる必要がある。次に、エネルギーによってミラーに使用する材質の反射率が変わるために、それぞれの領域での材質の反射率を求める必要がある。以上の点を考慮して集光系の配置とミラーの材質とを最適化することにより、分光系に到達するX線の量を最大になるよう決定出来る。

#### 3.1 集光系の配置

##### 3.1.1 低エネルギー領域

低エネルギー領域の集光系の配置をFig.2(a)に示す。

ミラーに垂直な方向の焦点は試料面に、平行な方向の焦点は検出器面にある。トロイダル・ミラーの形状をFig.3の様に定めると曲率半径と各部の寸法との関係は以下の様になる<sup>11)</sup>。

$$\frac{1}{a} + \frac{1}{b+c+d} = \frac{2 \sin \theta}{R_v} \quad (3.1)$$

$$\frac{1}{a} + \frac{1}{b} = \frac{2}{R_p \cdot \sin \theta} \quad (3.2)$$

ここに、Fig.1(a)、Fig.2(a)、Fig.3に示したように、a、b、c、dはターゲットからミラーまで、ミラーから試料まで、試料から回折格子まで及び回折格子から検出器までの距離、θはX線の斜入射角、R<sub>v</sub>、R<sub>p</sub>はミラーの曲率半径、ψはミラーサイズの曲率中心から見たミラーの見込み角（ミラーの中心角）である。

このとき、ターゲットからミラーへの集光立体角Φは近似的に次のように表せる。

$$\Phi = \frac{2 R_v \cdot \ell}{a^2} \cdot \sin \theta \sin (\psi / 2) \quad (3.3)$$

### 3.1.2 高エネルギー領域

高エネルギー領域の集光系の配置をFig.2(b)に示す。記号は低エネルギー領域の場合と同様である。

ミラーに垂直な方向の焦点は検出器面に、平行な方向の焦点は試料面にあるので、トロイダル・ミラーの曲率半径と各部の寸法との関係は以下の様になる。

$$\frac{1}{a} + \frac{1}{b} = \frac{2 \sin \theta}{R_v} \quad (3.4)$$

$$\frac{1}{a} + \frac{1}{b+c+d} = \frac{2}{R_p \cdot \sin \theta} \quad (3.5)$$

ターゲットからミラーへの集光立体角 $\Phi$ 、及び試料への取り込み角 $\psi$ は次のように表される。

$$\Phi = \frac{2 R_v \cdot l}{a^2} \cdot \sin \theta \sin(\psi/2) \quad (3.6)$$

$$\tan \frac{\phi}{2} = (R_v \cdot \sin \frac{\psi}{2}) / (b - \frac{l}{2}) \quad (3.7)$$

斜入射角 $\theta$ 、取り込み角 $\psi$ 、集光立体角 $\Phi$ 、ミラーの位置の関係をFig.4に示す。

後に詳しくみるように、結晶分光器では結晶への入射角が分光X線のエネルギーに対応しているために、試料から分光器への取り込み角 $\psi$ を大きく取れるほど広いエネルギー範囲にわたって分光できる。逆に分光するエネルギー範囲が同じ場合、取り込み角が大きく取れるほど結晶の曲率半径が大きくなり、試料から分光結晶までの距離が短くなる。

このように取り込み角 $\psi$ が大きく取れるほど、分光系での設計が無理なく出来るため、集光系では $\psi$ をなるべく大きくしたい。しかし、試料からミラーへの取り込み角 $\psi$ を大きく取るようミラーを試料側に近付けると、ターゲットからミラーが遠くなり、集光立体角 $\Phi$ が小さくなるため試料への入射X線量が減少する。それを防ぐためにミラーへの斜入射角 $\theta$ をより大きくして、ターゲットからミラーへの集光立体角を大きくするとミラーの反射率が落ちてしまい、あまり斜入射角を大きくするとかえって試料への入射X線量が少なくなってしまう。つまり、試料への入射X線量に比例するミラーの集光立体角 $\Phi$ と取り込み角 $\psi$ は、トレードオフの関係になっているため、斜入射角やミラーの位置などをパラメータに試料への入射X線量を正確に求め、光学系の最適化を行う必要がある。

### 3.2 ミラーの反射率

次に、それぞれのエネルギー領域での集光光学系を決定するために、X線の集光によく用いられるAu、Pt、Ni、Pd、Ag、SiO<sub>2</sub>、SiCの各材質について反射率の計算を行なつた。

反射率Rはフレネルの式より以下のように表せる<sup>12)</sup>。

$$R = | r |^2 \quad (3.8)$$

$$r_s = \frac{\sin\theta - (n^2 - \cos^2\theta)^{1/2}}{\sin\theta + (n^2 - \cos^2\theta)^{1/2}} \quad (\text{S偏光}) \quad (3.9)$$

$$r_p = \frac{-n^2 \cdot \sin\theta + (n^2 - \cos^2\theta)^{1/2}}{n^2 \cdot \sin\theta + (n^2 - \cos^2\theta)^{1/2}} \quad (\text{P偏光}) \quad (3.10)$$

ただし、

n : 複素屈折率

$\theta$  : 斜入射角

である。

複素屈折率nは軟X線領域においては以下のように表せる<sup>13)</sup>。

$$n = 1 - \delta - i\beta \quad (3.11)$$

ここで、

$$\delta = \frac{N_{eff}}{2\pi} \left( \frac{e^2}{mc^2} \right) \lambda^2 \quad (3.12)$$

$$\beta = \frac{\mu}{4\pi} \lambda \quad (3.13)$$

$$N_{eff} = \frac{N_A \cdot Z}{A} \rho \quad (3.14)$$

ただし、

$N_A$  : アボガドロ数

$Z$  : 構成元素の原子番号の総和

$A$  : 構成元素の原子量の総和

$\rho$  : 密度

$(e^2/m c^2)$  : 電子の古典半径

$\mu$  : 線吸収係数

$\lambda$  : X線の波長

である。

X線領域では、 $\delta, \beta \ll 1$  であるので、

$$n^2 = 1 - 2\delta - 2i\beta \quad (3.15)$$

と書ける。

また、 $\theta \approx 0$  の時、 $\sin\theta = \theta$  とすると、

$$R_s = \left| \frac{\theta - (n^2 - 1 + \theta^2)^{1/2}}{\theta + (n^2 - 1 + \theta^2)^{1/2}} \right|^2 \quad (3.16)$$

$$= \left| \frac{\theta - (\theta^2 - 2\delta - 2i\beta)^{1/2}}{\theta + (\theta^2 - 2\delta - 2i\beta)^{1/2}} \right|^2 \quad (3.17)$$

である。 $R_p$ は $n \approx 1$ 、 $\theta \approx 0$  の時 $R_s$ よりわずかに小さいだけであるので、以下は、 $R_s$ についてのみ考える。

式3.17を $x^{1/2} + y^{1/2} = \{x + y + 2(xy)^{1/2}\}^{1/2}$ の関係を使って書き直すと、

$$R_s = \frac{(\theta - a)^2 + b^2}{(\theta + a)^2 + b^2} \quad (3.18)$$

ただし、

$$2a^2 = \{(\theta^2 - 2\delta)^2 + 4\beta^2\}^{1/2} + (\theta^2 - 2\delta) \quad (3.19)$$

$$2b^2 = \{(\theta^2 - 2\delta)^2 + 4\beta^2\}^{1/2} - (\theta^2 - 2\delta) \quad (3.20)$$

となる。ここで、臨界角 $\theta_c$ は、

$$\cos\theta_c = Re(n) = 1 - \delta \quad (3.21)$$

であるが、 $\theta_c \approx 0$  の時、 $\cos\theta_c \approx 1 - \theta_c^2/2$  であることを使うと、

$$\theta_c = (\epsilon \delta)^{1/2} \quad (3.22)$$

となる。この結果を使うと $R_s$ は、

$$R_s = \frac{(\phi - A)^2 + B^2}{(\phi + A)^2 + B^2} \quad (3.23)$$

ここに、

$$2A^2 = \{(\phi^2 - 1)^2 + k^2\}^{1/2} + (\phi^2 - 1) \quad (3.24)$$

$$2B^2 = \{(\phi^2 - 1)^2 + k^2\}^{1/2} - (\phi^2 - 1) \quad (3.25)$$

$$\phi = \frac{\theta}{\theta_c}, \quad k = \frac{\beta}{\delta} \quad (3.26)$$

である。

### 3.3 吸収係数の計算

反射率の式には線吸収係数 $\mu$ が含まれるが、この項は波長の関数であり、かつ簡単な解析関数で表すことが出来ないため、数値関数として定義する<sup>14)</sup>。ここでは、100eVから1MeVまでのX線領域について、誤差の少ない表現関数をつくることを目的とした。

まず、単原子系について考える。

上記のX線領域で、全線吸収係数 $\mu$ は、

$$\mu = \tau + \sigma_e + \sigma_i \quad (3.27)$$

のように、光電効果による項( $\tau$ )、弾性散乱による項( $\sigma_e$ )、非弾性散乱による項( $\sigma_i$ )に分けられるが、およそ100keVより高いエネルギーを持つ硬X線領域では $\sigma_i$ の項が支配的になっている。 $\sigma_i$ の項は硬X線領域でKlein-Nishinaの式( $\sigma_{KN}$ )を使って近似できるので、全線吸収係数 $\mu$ も $\sigma_{KN}$ を使った式により近似をすることを考えられる。しかし、そのままでは軟X線領域については表現できず、硬X線領域でも誤差が大きい。軟X線領域で $\mu$ は $\lambda^{-\rho}$ に比例するとして近似できるので $\sigma_{KN}$ により表現できない部分を多項式近似により表すことにする。よって、質量吸収係数 $\mu/\rho$ は次式のように表される。

$$\frac{\mu(\lambda)}{\rho} = N_A \cdot \sigma_{KN}(\lambda) \frac{Z}{A} + P_N(\lambda) \quad (3.28)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{KN} = & \frac{8\pi}{3} \left( \frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{3}{4} \left[ \frac{1+\alpha}{\alpha^2} \left\{ \frac{2(1+\alpha)}{1+2\alpha} - \frac{1}{\alpha} \ln(1+2\alpha) \right\} \right. \\ & \left. + \frac{1}{2\alpha} \ln(1+2\alpha) - \frac{1+3\alpha}{(1+2\alpha)^2} \right] \end{aligned} \quad (3.29)$$

$$\alpha = \frac{h}{mc} \cdot \frac{1}{\lambda} \quad (3.30)$$

$$P_N(\lambda) = \sum_{p=0}^N C_p \lambda^p \quad (3.31)$$

$P_N$ は離散的に与えられている $\mu/\rho$ の値<sup>15)</sup>から、計算で求められる $\sigma_{KN}$ による項を差し引いた値を表現する多項式となるので、離散的に得られるこの差の値をLagrange補間したのと同等になるように多項式の係数 $C_p$ を定める。但し、吸収端により $\mu$ の値が非連続的に変化することを表せるように、全体のエネルギー領域を吸収端などによって適当に区切り、それぞれのエネルギー領域で異なる係数 $C_p$ の値を取るようにした。また、 $P_N$ の最高次数は4次に制限している。

次に、複数の構成原子よりなる系について考えてみる。この系において構成原子の数分率を  $n_i$  とし、単位構成要素当たりが占める体積を  $V$  とする。また、構成要素当たりの原子量、原子番号の総和を新たに  $A$ 、 $Z$  と書く。すなわち、

$$A = \sum_i n_i A_i \quad (3.32)$$

$$Z = \sum_i n_i Z_i \quad (3.33)$$

系の線吸収係数  $\mu$  は構成元素の  $\mu_i$  を使った近似で、

$$\mu = \frac{1}{V} \sum_i n_i \left( \frac{\mu}{\rho} \right)_i \cdot \frac{A_i}{N_A} \quad (3.34)$$

とする。一方系の密度  $\rho$  は、

$$\rho = \frac{1}{V} \sum_i n_i \cdot \frac{A_i}{N_A} \quad (3.35)$$

であるので、結局、質量吸収係数  $\mu/\rho$  は、

$$\frac{\mu}{\rho} = \frac{1}{A} \sum_i \left( \frac{\mu}{\rho} \right)_i \cdot n_i A_i \quad (3.36)$$

と書くことが出来る。

これを  $\sigma_{K-N}$  による項と  $P_N$  の項とに分けてみると、

$$\frac{\mu(\lambda)}{\rho} = \frac{1}{A} \sum_i \left\{ N_A \sigma_{K-N}(\lambda) \frac{Z_i}{A_i} + P_N(\lambda)_i \right\} n_i A_i \quad (3.37)$$

$$= N_A \sigma_{K-N}(\lambda) \frac{Z}{A} + \frac{1}{A} \sum_i n_i A_i P_N(\lambda)_i \quad (3.38)$$

となり、 $\sigma_{K-N}$  による項は单原子系と同様に扱え、 $P_N$  の項だけを原子量と構成比で重みづけして加え合わせればよいことがわかる。

このようにして求めた各種材質の吸収係数の値を Fig. 5 に示す。

### 3.4 反射率の計算

上で求めた結果により反射率の計算を行った。それぞれのエネルギー領域において各材質の反射率がどのように変化しているかを調べた。

#### 3.4.1 低エネルギー領域

低エネルギー領域での各材質の反射率を波長の関数として描くとFig.6の様になる。

各材質とも斜入射角が小さいところでは反射率が高いが斜入射角が少し大きくなると波長の短い方で反射率の低下が見られる。低下の度合を見ると、Ni、Au、Ptではあまりないが、その他の材質では大幅に落ちている。また、Au、Ptでは吸収端における反射率の飛び幅が小さいが他のものでは大きく、試料に当たるX線の量がわずかな波長の違いによって極端に変わることが考えられ望ましくない。とくに、Niはこの領域のほとんどで反射率が非常に高いにもかかわらず、1 keV付近で反射率が大きく変化しこの領域のミラーとしては使えない。

これらのことから、低エネルギー領域ではAu、Ptコーティングのミラーが望ましいことがわかる。

#### 3.4.2 高エネルギー領域

高エネルギー領域での各材質の反射率を波長の関数として描くとFig.7の様になる。

SiO<sub>2</sub>、SiCのミラーを使い高い反射率を得ようすると、斜入射角をごく小さくしなければならない。また、斜入射角を小さくして反射率を上げても、SiのK吸収端がここで用いるエネルギーの範囲に入ってきてしまい、反射率に大きな飛びが生じることが避けられない。

Au、Ptは反射率が高い利点があるが、Au、PtそれぞれのM吸収端がここで用いるエネルギーの範囲に現れて來るので、反射率に複雑な多段階の飛びが現れる。

Niはここで用いるエネルギーの範囲には吸収端が入って来ないので、反射率の変化が滑らかである。しかし、1 keV付近での反射率はAuやPtの80～90%程度しかない。

Pd、Agもここで用いるエネルギーの範囲に吸収端が入って来ないため、反射率はほぼ平坦である。反射率もNiに比べると大きく、とくにPdは、AuやPtに対しても、ここで用いるエネルギー範囲にわたって約95%以上の反射率を持っていてこれらに比して遜色がない。

これらの計算結果より、このエネルギー領域で用いるミラーの材質としてはPdが良く、次善のものとしてAg、Niが良いと言うこと考えられるが、さらに集光系の最適な位置についても求める。

まず、波長の関数として表現してあった反射率を、波長をパラメータとして斜入射角の関数として表現するとFig.8の様になる。さらに、ターゲットから出たX線がどの程度試料に到達するのか調べるために、各材質について、集光立体角の大きさ(Fig.4)に反射率(Fig.8)を掛けた有効立体角をもとめる。斜入射角の関数として表した有効立体角をFig.9に示す。各パラメータを、ターゲットから試料までの光路長l (=a+b)を730mm、ミラー長l'を150mm、

ミラーの中心角 $\theta$ を $120^\circ$ 、波長 $\lambda$ を $4.2\text{ \AA}$ とし、取り込み角 $\phi$ を $1.2^\circ$ と $1.5^\circ$ の2種類について計算した。

これより、取り込み角が大きくなると、全体的に有効立体角が小さくなるのがわかる。また、それぞれの取り込み角の場合でみてみると、有効立体角のピーク値が一番大きいのは、やはり、Pdであり、Ag、Niと小さくなっているのが分かる。Auは他の材質に比べて斜入射角の増加に伴う反射率の低下がさほど大きくなないので、ピークの位置は斜入射角が大きい側に相当ずれているが、波長 $4.2\text{ \AA}$ はすでにM吸収端の領域に入っていてピーク値はさほど高くない。前記のパラメータもとで、取り込み角を $1.2^\circ$ としたとき、反射率が最大になるよう集光系を最適化するには、Pdコートのミラーを使用し、斜入射角 $\theta$ を $21\text{ mrad}$ 、ターゲットからミラーの距離 $a$ を $180\text{ mm}$ とすれば良い事が分かる。

## 4. 分光光学系

### 4.1 低エネルギー領域

低エネルギー領域の分光系はFig. 10(a)の様に凹面回折格子により構成されている。

ここでは、平面形検出器で精度良く検出できるように、市販の不等間隔格子よりなる近似平面結像凹面回折格子を使用する。この回折格子の結像特性<sup>10)</sup>をFig. 11に示す。

### 4.2 高エネルギー領域

高エネルギー領域の分光系はFig. 10(b)の様にde Broglie型の結晶ポリクロメーターにより構成する。

結晶ポリクロメーターの場合、結晶面への入射角 $\theta'$ と面間隔 $d$ 、波長 $\lambda$ との間にはよく知られているようにプラッグ反射の条件

$$n\lambda = 2d \sin\theta' \quad (n = \text{整数}) \quad (4.1)$$

が成り立っている。

$\times$ 線の入射角 $\theta'$ と回折 $\times$ 線のエネルギー $E$ との関係を、軟 $\times$ 線領域の分光に用いられる PET(Pentaerythritol)(002) ( $2d = 8.8 \text{ \AA}$ )、Gypsum(020) ( $2d = 15.2 \text{ \AA}$ )、KHP(Potassium hydrogen phthalate)(100) ( $2d = 26.6 \text{ \AA}$ )について図示するとFig. 12の様になる。

de Broglie型のポリクロメーターは分光器系への入射角（試料と分光結晶の曲率中心を結ぶ直線と、試料と分光結晶を結ぶ線の成す角） $\phi'$ と分光結晶への入射角 $\theta'$ との間に次のような関係がある。

$$L \sin\phi' = r \cos\theta' \quad (4.2)$$

ここで、 $L$ 、 $r$ はFig. 10(b)に示すように、それぞれ、試料から結晶の曲率中心までの距離、及び、結晶の曲率半径である。

この関係を用いて、Fig. 12を分光器系への入射角 $\phi'$ とエネルギー $E$ との関係に書き換えたものがFig. 13である。これから、 $\phi'$ の増加に伴い $E$ も大きくなり、結晶面間隔 $d$ が大きいほど、また、試料から分光結晶の曲率中心までの距離と曲率半径との比 $L/r$ が大きいほど、増加率が大きいことが分かる。ただし、このままでは、高エネルギー領域を分光させるのに必要な $\phi'$ の範囲が明確に読み取れないので、各結晶について、1 keVから3 keVまでに対応する分光器系への入射角 $\phi'$ の範囲を $L/r$ について求めFig. 14に示す。ただし、Fig. 13を見ても分かる通り、PETはここで用いる範囲を分光できないため除外した。

3.4.2で求めた所では、分光器系への入射角 $\phi'$ の範囲（試料への取り込み角 $\phi$ となる）を狭くするほど、有効立体角 $\phi'$ が大きくなっている。このため、 $\phi'$ の範囲はなるべく狭くすることが望ましい。Fig. 14を見ると、 $\phi'$ の範囲を狭くするためには $L/r$ を大きくすれば良いが、試料からの距離 $L$ の上限は装置全体の大きさで制限されていて、かつ、分光結晶の曲率半径 $r$ もあまり小さくできないため $L/r$ はせいぜい5が最大である。Fig. 14を見ると、Gypsumでは $\phi'$ の範囲、 $L/r$ の双方とも大きくなりすぎ装置として構成出来なくなる。これに対し、KHPでは $L/r$ を5.0とすると分光器系への入射角 $\phi'$ の範囲は $1.2^\circ$ (21 mrad)ぐらいと見積ることが出来る。これより、分光結晶としてはKHPが望ましい事が分かる。ここで、Fig. 15に、KHPについて、 $L/r$ を5.0とした時の $\phi'$ とEとの関係を、分光に使用する範囲について拡大して示す。これより、 $\phi'$ が大きい方でエネルギーの変化が激しくなっていることが分かる。

次に、分光器系への入射角 $\phi'$ と検出器面上の焦点位置 $t$ 、エネルギーEとの関係を考えてみる。

検出器をFig. 10(b)の様に配置した時、検出器面上での焦点位置 $t$ の $r$ に対する比 $t/r$ と分光器系への入射角 $\phi'$ との関係を検出器の傾き $\alpha$ をパラメータとして計算したものをFig. 16に示す。ただしエネルギー1 keVの時の検出器面上の位置を $t=0$ の位置としている。

こちらの関係も、 $\phi'$ が大きい方で位置が大きく変わっている。前の結果と合わせエネルギーと位置の関係を示すとFig. 17になる。エネルギーの位置分解能に対するそれぞれの効果が相殺されて検出器位置-エネルギーの関係が比較的平坦になっている。

検出器の有効範囲が結晶の曲率半径程度取れれば1 keV～3 keVの範囲で位置-エネルギーの関係がほぼ線型になっていること、曲率半径の半分程度しか取れない場合エネルギーの高い方で単位長さ当たりのエネルギー変化が大きくなり、エネルギーが低い方に比べて分解能が落ちることが分かる。

結晶分光器の装置定数として、

$$d = 13.3 \text{ \AA} \quad (\text{KHP})$$

$$L = 5.0 \text{ } r$$

$$H = 1.2 \text{ } r$$

$$\alpha = 90^\circ$$

とした時に、結晶分光系について光線追跡した結果をFig. 18にしめす。

## 5. さらに高いエネルギー領域での X線ミラーの特性

今回試作する時間分解X線吸収分光装置に使用するX線ミラーのエネルギー領域は90eV～3keVであるが、近い将来SR光を利用して、より高いエネルギー領域のX線を用いる装置の設計・製作を行う計画がある。今回反射率の計算に用いたプログラムは100eV～1MeVのエネルギー範囲で利用できるので、さらに高エネルギー領域での計算も行った。

Fig.19に3keV～50keV領域でのX線ミラーの反射率を示す。この結果より、SiO2、SiCは臨界角が極く小さく、臨界角を少し大きくするとそれにともなって臨界波長は長波長側に大きく変化するのに対し、Au、Ptは臨界角が比較的大きく、臨界角を大きくしても臨界波長はあまり長くならない事が分かる。また、Au、Ptは臨界波長よりも長波長側での反射率があまり高くなく、吸収端の存在による反射率の飛びなども存在するのに対して、SiO2、SiCでは臨界波長付近での反射率の変化が急峻であり、臨界波長より長波長側では反射率がほとんど1になっている事も分かる。

これらの事から次の事が言える。すなわち、広いエネルギー範囲をコンパクトかつ簡易なミラーで製作する場合にはAu等をコートしたもので十分である。一方、ミラーを高エネルギー領域で高調波等のシャープなカットオフ・フィルターとしても利用するならばSiO2、SiCを用いる方がよい。

## 6. まとめ

以上のごとく、集光一分光光学系の特性について見てきたわけであるが、我々が実際に製作する装置の大きさを考慮して各部の寸法を定め、その値に基づいて総合的な計算を行った結果について以下にまとめる。

レーザ装置を除いた装置の全体は2.5m程度に納める必要がある。真空容器の大きさを考慮すると、光路の最大長は1.5m程度となる。

### 6.1 低エネルギー領域 ( $E: 100\text{eV} \sim 1\text{keV}$ , $\lambda: 12.4\text{\AA} \sim 124\text{\AA}$ )

凹面回折格子の平面結像条件より、試料－回折格子、回折格子－検出器の各距離、回折格子への斜入射角が求められる。X線ミラー－試料の距離を試料－回折格子の距離と等しくすれば、X線ミラーの光路方向の長さは回折格子の長さと等しくなる。また、X線ミラーへの斜入射角も回折格子へのそれと等しく取る。このような考えのもとで各パラメータの値を以下の様に決定した。但し、 $\psi$ の値は近接して高エネルギー領域のミラーを設置する必要があることから $60^\circ$ とした。

$$a = 230\text{mm}$$

$$b = 500\text{mm}$$

$$c = 500\text{mm}$$

$$d = 235\text{mm}$$

$$\theta = 1.35^\circ (= 23.6\text{ mrad})$$

$$l = 50\text{mm}$$

$$\psi = 60^\circ$$

このときトロイダル・ミラーの曲率半径とターゲットからミラーへの集光立体角はそれぞれ、

$$R_v = 9.14\text{mm}$$

$$R_p = 13.4\text{m}$$

$$\Phi = 0.20\text{msr}$$

と見積ることが出来る。ミラーの反射率を考慮して、凹面回折格子まで到達するX線量をターゲットからミラーへの集光立体角に換算すると有効立体角は $0.18\text{msr}$ 程度となる。

### 6.2 高エネルギー領域 ( $E: 1\text{keV} \sim 3\text{keV}$ , $\lambda: 4.1\text{\AA} \sim 12.4\text{\AA}$ )

ターゲットから試料までの距離 ( $a + b$ ) は低エネルギー領域と同じにする。また、X線ミラーの長さと幅はできるだけ大きく取る事として、

$$l = 150 \text{ mm}$$

$$\psi = 120^\circ$$

とする。

4.2の結晶分光器に対する考察から、結晶にKHPを用い曲率半径  $r$  を100mmとした時の各部の寸法は、

$$r = 100 \text{ mm}$$

$$L = 500 \text{ mm}$$

$$H = 120 \text{ mm}$$

$$\alpha = 90^\circ$$

となる。また、光路長  $c$ 、 $d$  もおよそ、

$$c = 470 \text{ mm}$$

$$d = 50 \text{ mm}$$

となる。

この様に設定した時、結晶分光器への入射角  $\phi'$  の振れ角（これが分光器への取り込み角  $\phi$  になる）は  $1.2^\circ$  程度必要であった。3.4.2の結果より、トロイダル・ミラーに  $Pd$  コートしたものを使い分光器への取り込み角を  $1.2^\circ$  とした時の最良点は、

$$\phi = 1.2^\circ$$

$$a = 180 \text{ mm}$$

$$b = 550 \text{ mm}$$

$$\theta = 21 \text{ mrad}$$

である。この時のトロイダル・ミラーの曲率半径とターゲットからミラーへの集光立体角はそれぞれ、

$$R_v = 5.70 \text{ mm}$$

$$R_p = 14.7 \text{ m}$$

$$\Phi = 0.96 \text{ msr}$$

となる。ミラーの反射率を考慮して、結晶分光器まで到達するX線量をターゲットからミラーへの集光立体角に換算すると有効立体角は0.60msr程度となる。

FOM研究所の装置<sup>9)</sup>での集光立体角は0.02msr程度であるので、この装置は分光器による輝度の低下を勘案しても十分実用的な値が得られるものと考えられる。

最終的な装置の各パラメータをTable 1に示した。

ここにまとめた計算は、今回試作する装置について、筑波大学村上浩一博士、青木貞雄博士、山口直洋博士と著者らとで行った議論を踏まえて、著者らの責任で行ったものである。光学系について御教示いただいた青木貞雄博士、山口直洋博士に感謝します。

## 参考文献

- 1) 望月 孝晏, 応用物理, 56(1) 2 (1987).
- 2) P.A. Lee, P.H. Citrin, P. Eisenberger and B.M. Kincaid, Rev. Mod. Phys. 53(4) Part I (1981).
- 3) 松下 正, 大柳 宏之, 西郷 敏, 日本結晶学会誌, 27(2) 113 (1985).
- 4) B. Buras and S. Tazzari, "European Synchrotron Radiation Facility", European Synchrotron Radiation Project, Geneva, (1984); 木原 元央, 安藤 正海, 日本結晶学会誌, 27(2) 152 (1985).
- 5) 北村 秀男, Photon Factory News, 6(2) 16 (1988).
- 6) P.J. Mallozzi, R.E. Schwerzel, H.M. Epstein and B.E. Campbell, Science, 206, 353 (1979); P.J. Mallozzi, R.E. Schwerzel, H.M. Epstein and B.E. Campbell, Phys. Rev. A23(2) 824 (1981).
- 7) H.M. Epstein, R.E. Schwerzel, P.J. Mallozzi and B.E. Campbell, J. Amer. Chem. Soc. 105, 1446 (1983).
- 8) R.W. Eason, D.K. Bradley and G.N. Greaves, J. Phys. C: Solid State Phys. 17, 5067 (1984).
- 9) H.C. Gerritsen, Doctoral Thesis (FOM Institute, Amsterdam, 1985).
- 10) K. Murakami, H.C. Gerritsen, H. van Brug, F. Bijkerk, F.W. Saris and M.J. van der Wiel, Phys. Rev. Lett. 56(6) 655 (1986).
- 11) 三宅 和夫, 「幾何光学」(共立出版, 東京, 1979).
- 12) E. Spiller, "Handbook on synchrotron radiation" Vol. 1, 1091 (North-Holland, Amsterdam, 1983).
- 13) T. Matsushita and H. Hashizume, "Handbook on synchrotron radiation" Vol. 1, 261 (North-Holland, Amsterdam, 1983),
- 14) "International tables for X-ray crystallography" 157 (Kynoch Press, Birmingham, 1968).
- 15) W.J. Veigle, "Handbook of spectroscopy" Vol. 1, 28 (CRC Press, Cleveland, 1974).
- 16) N. Nakano, H. Kuroda, T. Kita and T. Harada, Appl. Opt. 23(14) 2386 (1984).

Table 1 Optimal design parameters of the optical system for a new time-resolved X-ray absorption spectroscopy apparatus.

パラメータ項目	記号	単位	低エネルギー側 (900eV~1keV)	高エネルギー側 (1keV~3keV)
・装置間距離				
ターゲットとミラーの距離	a	mm	230	180
ミラーと試料の距離	b	mm	500	550
試料と分光器の距離	c	mm	500	470
分光器と検出器の距離	d	mm	235	50
・集光系				
ミラーの小半径	R <sub>v</sub>	mm	9.14	5.70
ミラーの大半径	R <sub>p</sub>	m	13.4	14.7
ミラーの長さ	l	mm	50	150
ミラーの中心角	ψ	°	60	120
ミラーへの斜入射角	θ	mrad	23.6	21.0
ミラーへの集光立体角	Φ	msr	0.20	0.96
・分光系(凹面回折格子)				
回折格子への斜入射角	θ	°	1.35	—
検出器の設置角	α	°	73	—
・分光系(結晶分光器)				
取り込み角	Φ	mrad	—	1.2
結晶曲率半径	r	mm	—	100
試料と曲率中心との距離	L	mm	—	500
結晶の設置角	ψ	°	—	60
検出器と曲率中心との距離	H	mm	—	120
検出器の設置角	α	°	—	90
・全光学系				
有効集光立体角	Φ'	msr	0.18	0.60

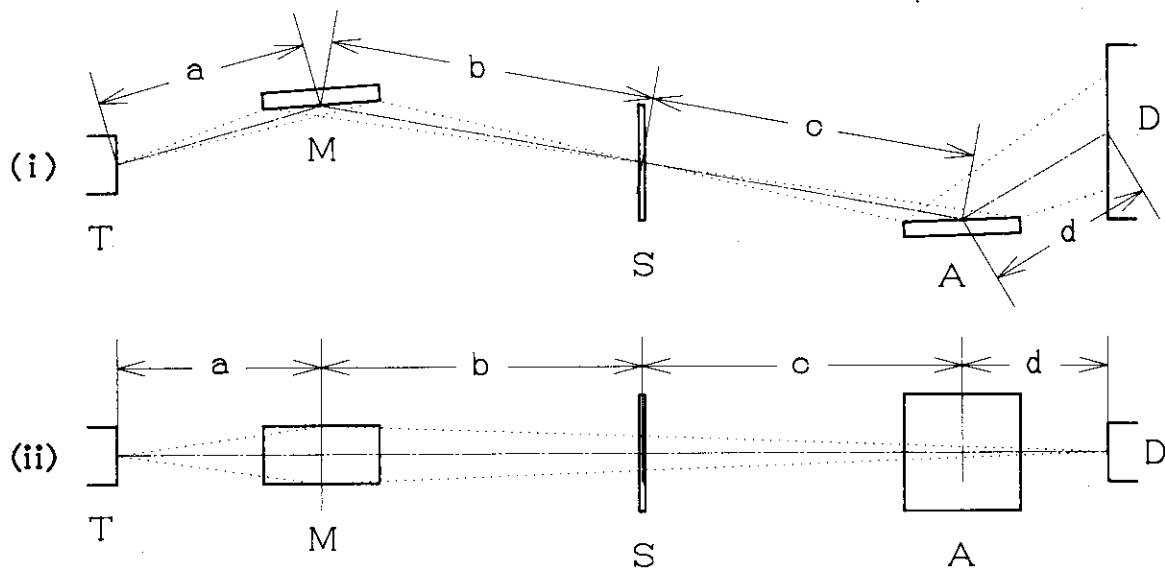


Fig. 1(a) Schematic representation of the optical system in the low energy soft X-ray region. (i) top and (ii) front views; T: target, M: toroidal mirror, S: sample, A: flat field spectrometer, D: position sensitive detector. Distances are between a: the target and the mirror, b: the mirror and the sample, c: the sample and the spectrometer, d: the spectrometer and the detector.

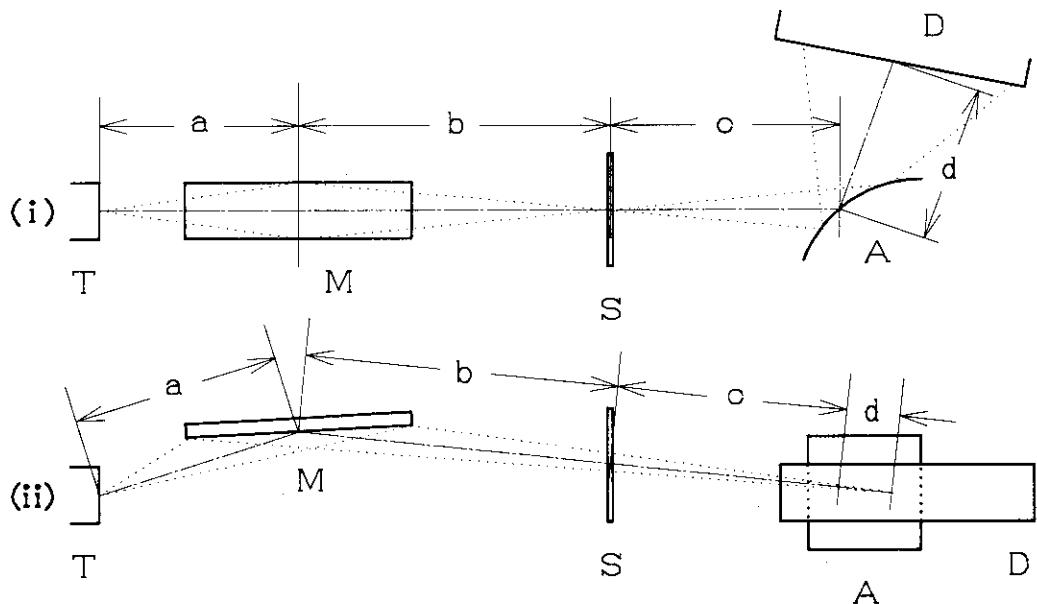


Fig. 1(b) Schematic representation of the optical system in the high energy soft X-ray region. (i) top and (ii) front views; T: target, M: toroidal mirror, S: sample, A: crystal polychromator, D: position sensitive detector. Distances are between a: the target and the mirror, b: the mirror and the sample, c: the sample and the polychromator, d: the polychromator and the detector.

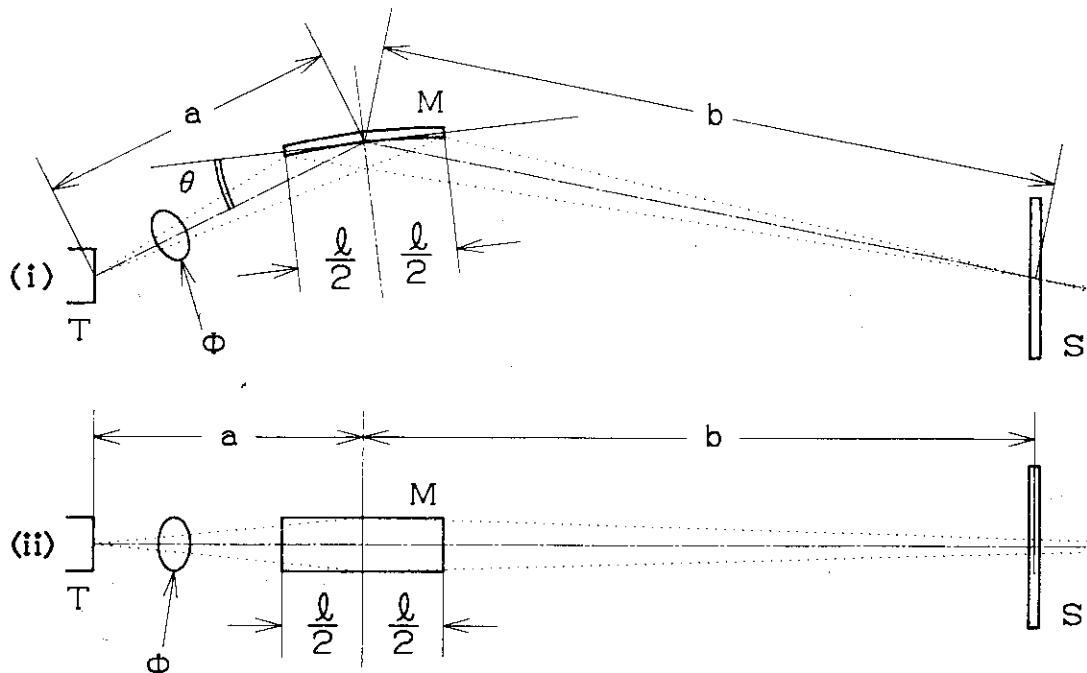


Fig. 2(a) Definition of the optical system parameters in the low energy soft X-ray region. (i) top and, (ii) front views;  $l$ : mirror length,  $\theta$ : glancing angle,  $\phi$ : acceptance solid angle, i.e. solid angle of the incident beam subtended by the mirror, which defines the amount of the incident X-ray photons to the sample.

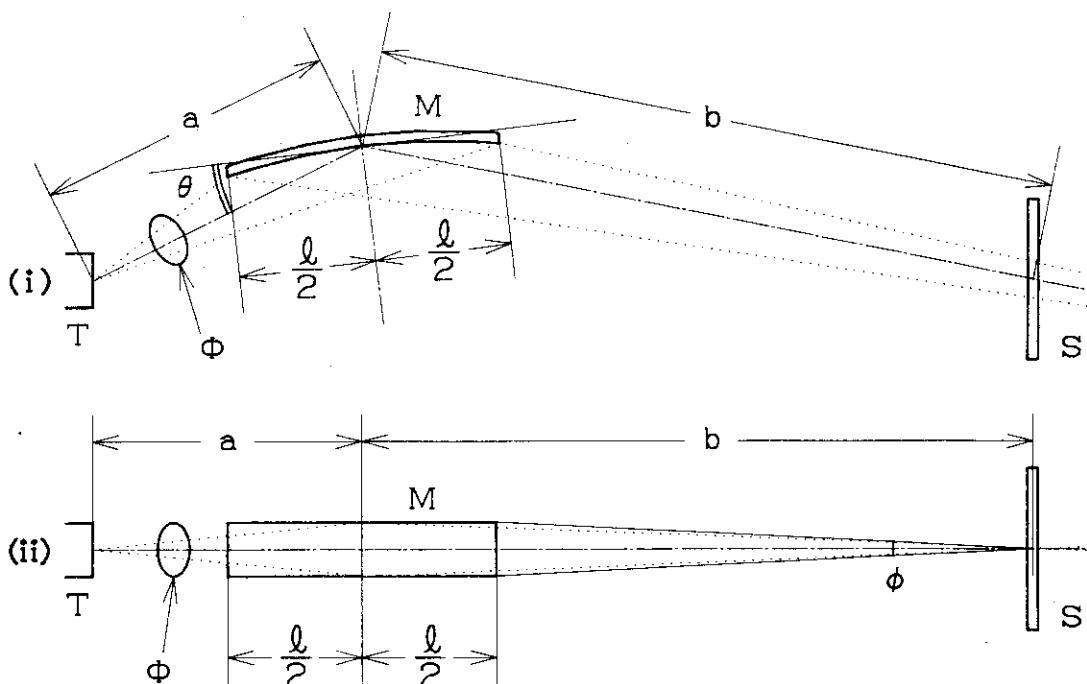


Fig. 2(b) Definition of the optical system parameters in the high energy soft X-ray region. (i) front and, (ii) top views;  $l$ : mirror length,  $\theta$ : glancing angle,  $\phi$ : aperture angle,  $\Phi$ : acceptance solid angle.

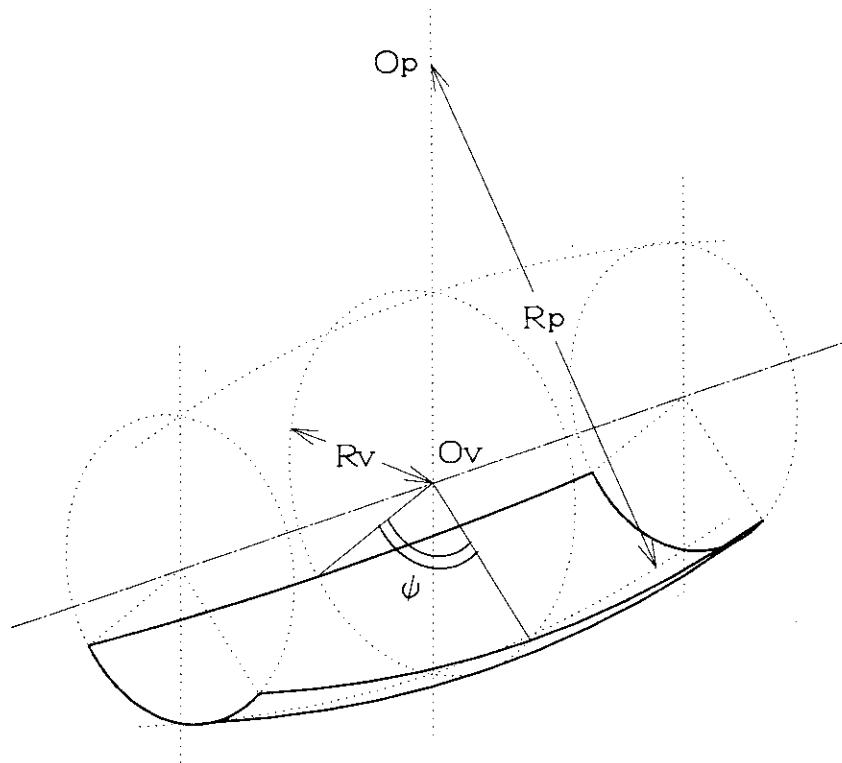


Fig. 3 Parameters defining the toroidal mirror.

A toroidal mirror is generated by rotating a circle of major radius( $R_p$ ) around a chord which lies a maximum distance( $R_v$ ) from the circle along a radial line.

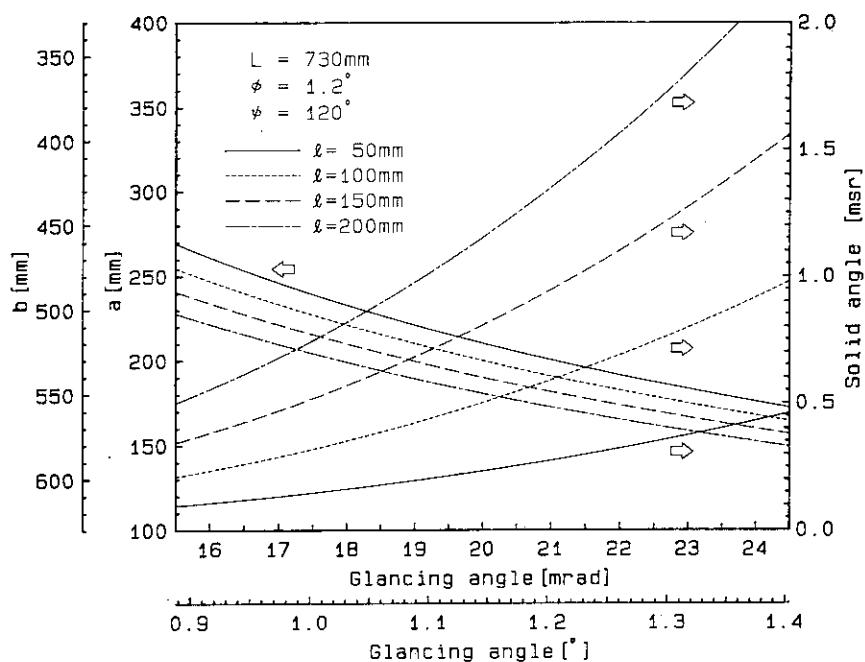


Fig. 4 Relationships between the position of the mirror and the glancing angle, and between the acceptance solid angle and the glancing angle as a parameter of the mirror length. For other dimensions, see the text.

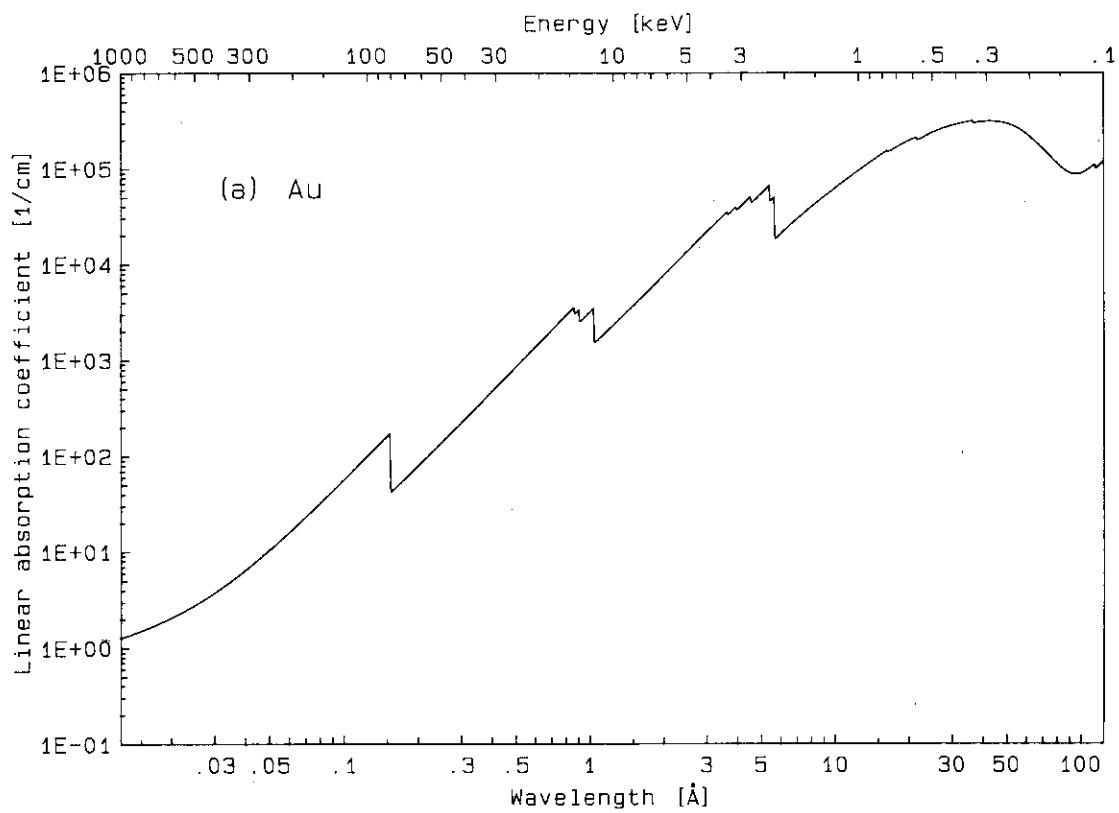


Fig. 5(a) Linear absorption coefficient of Au.

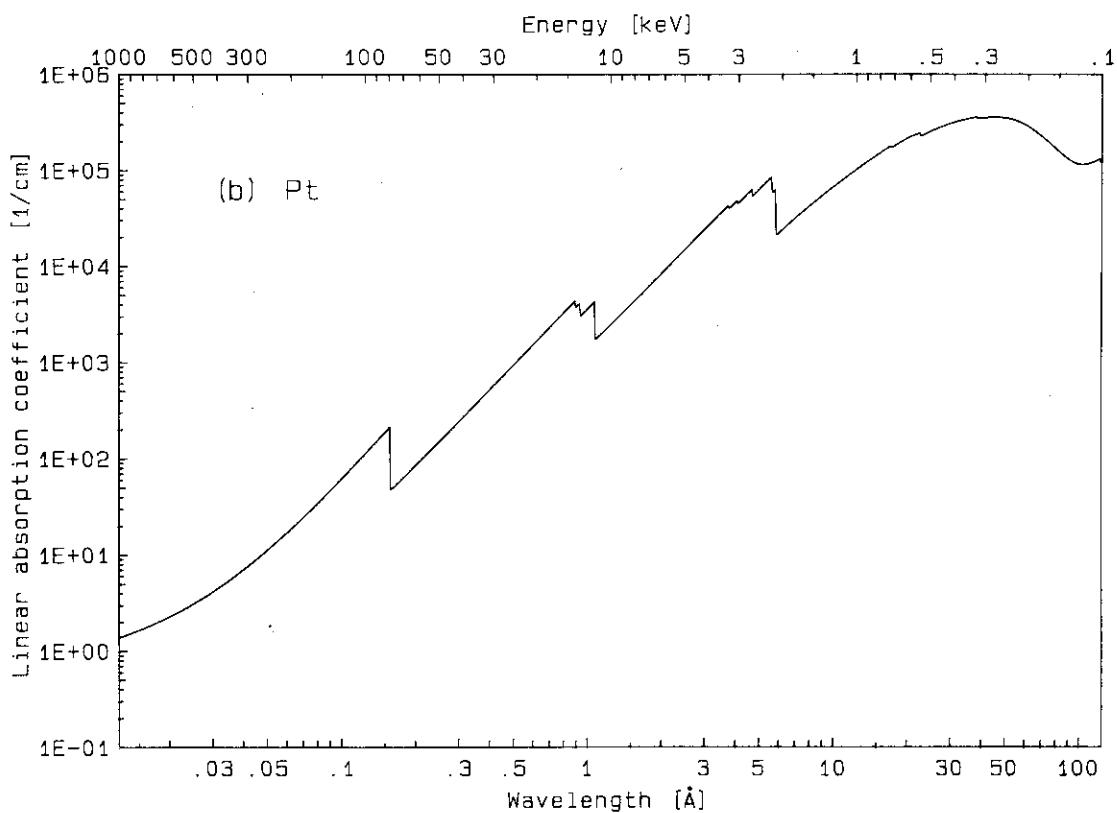


Fig. 5(b) Linear absorption coefficient of Pt.

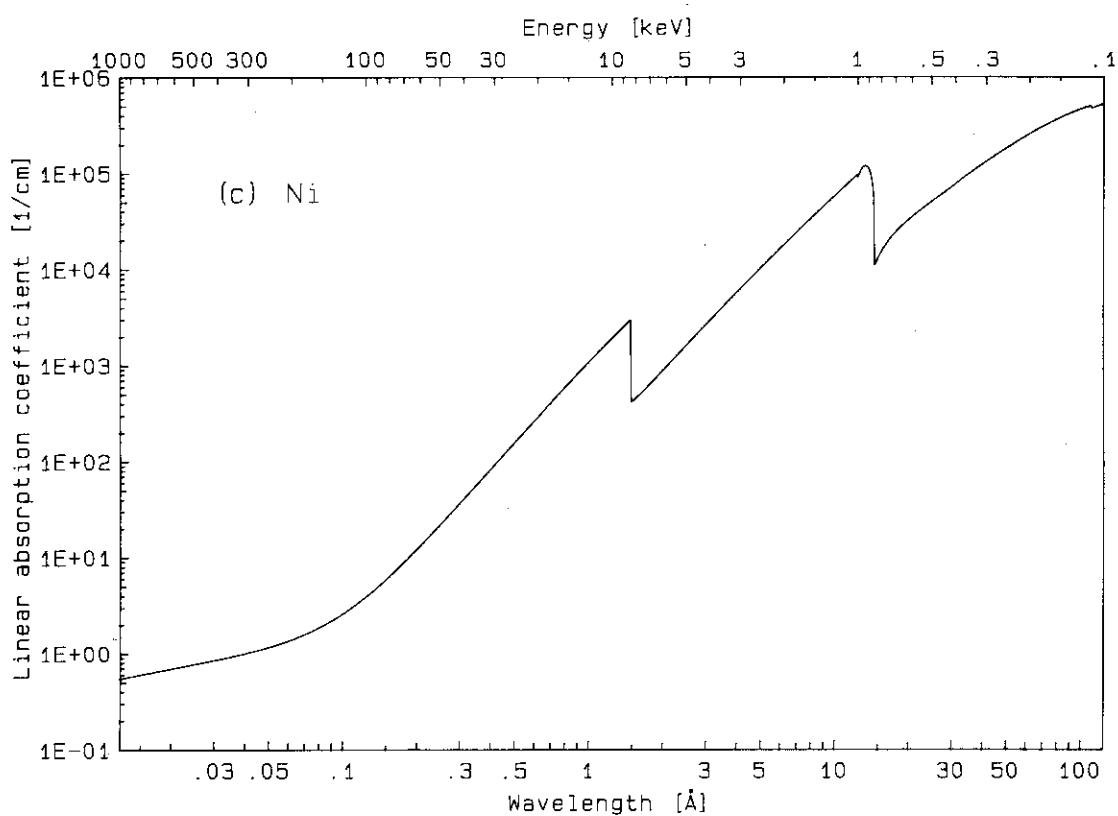


Fig. 5(c) Linear absorption coefficient of Ni.

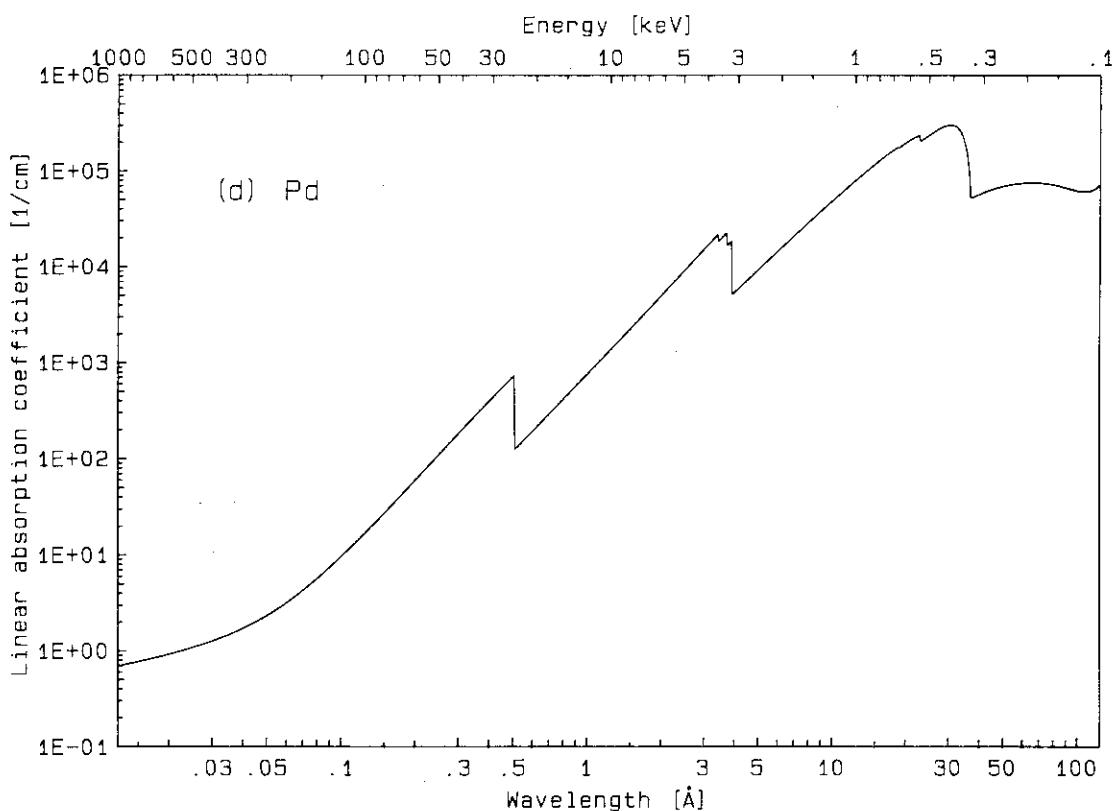


Fig. 5(d) Linear absorption coefficient of Pd.

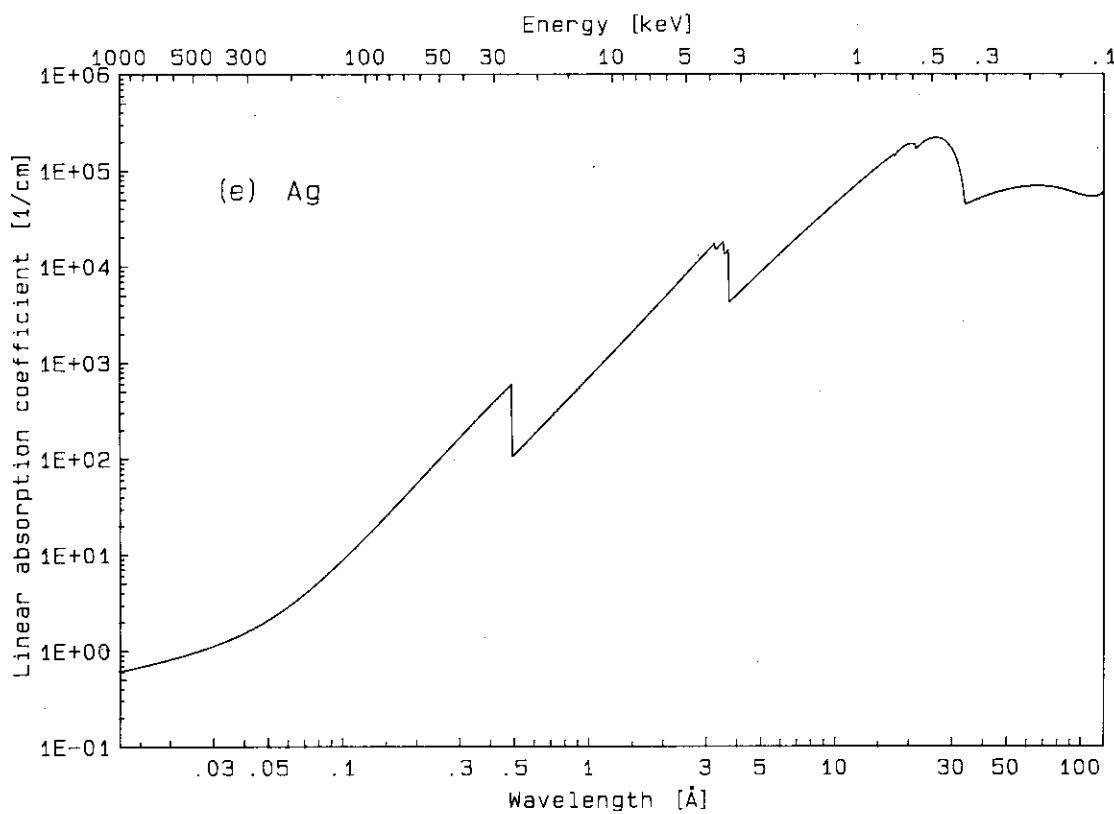
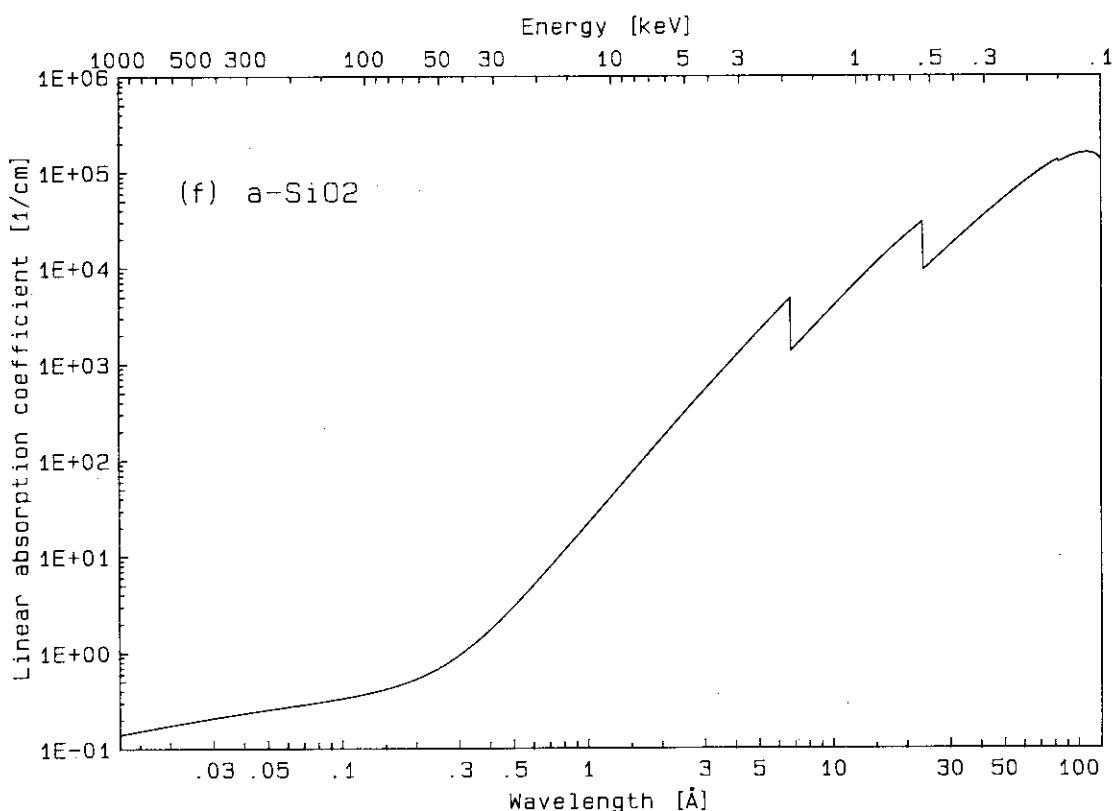


Fig. 5(e) Linear absorption coefficient of Ag.

Fig. 5(f) Linear absorption coefficient of a-SiO<sub>2</sub>.

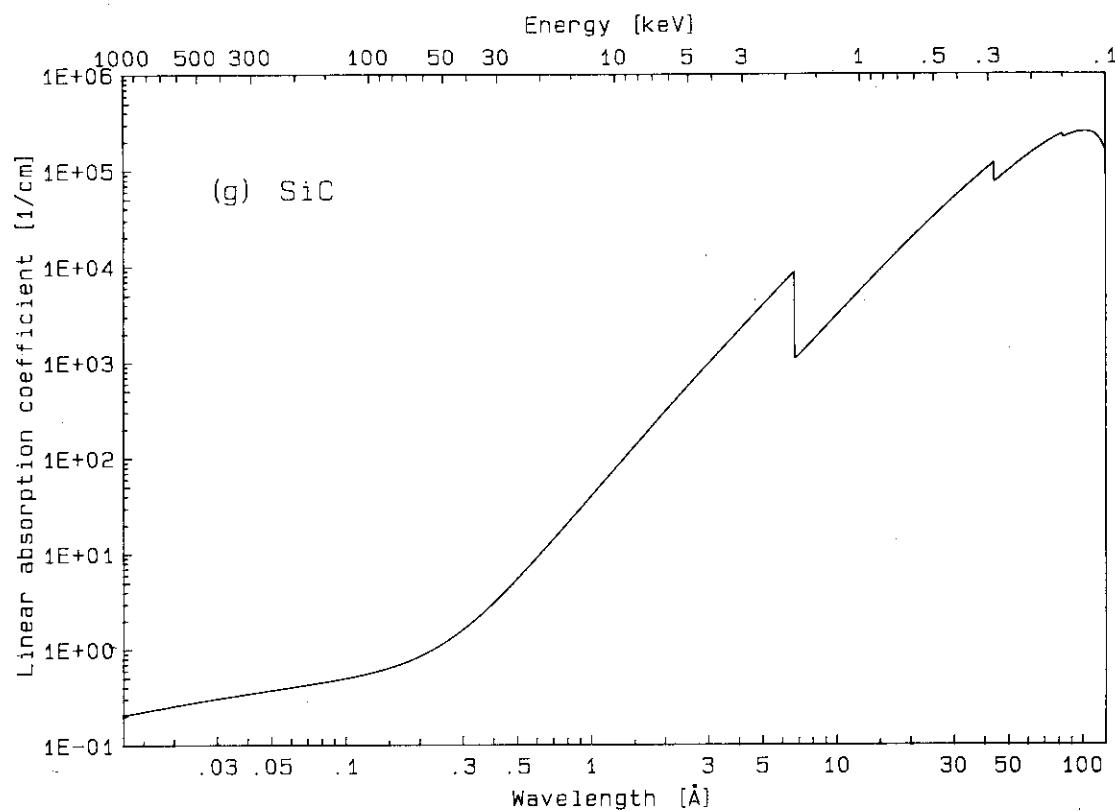


Fig. 5(g) Linear absorption coefficient of SiC.

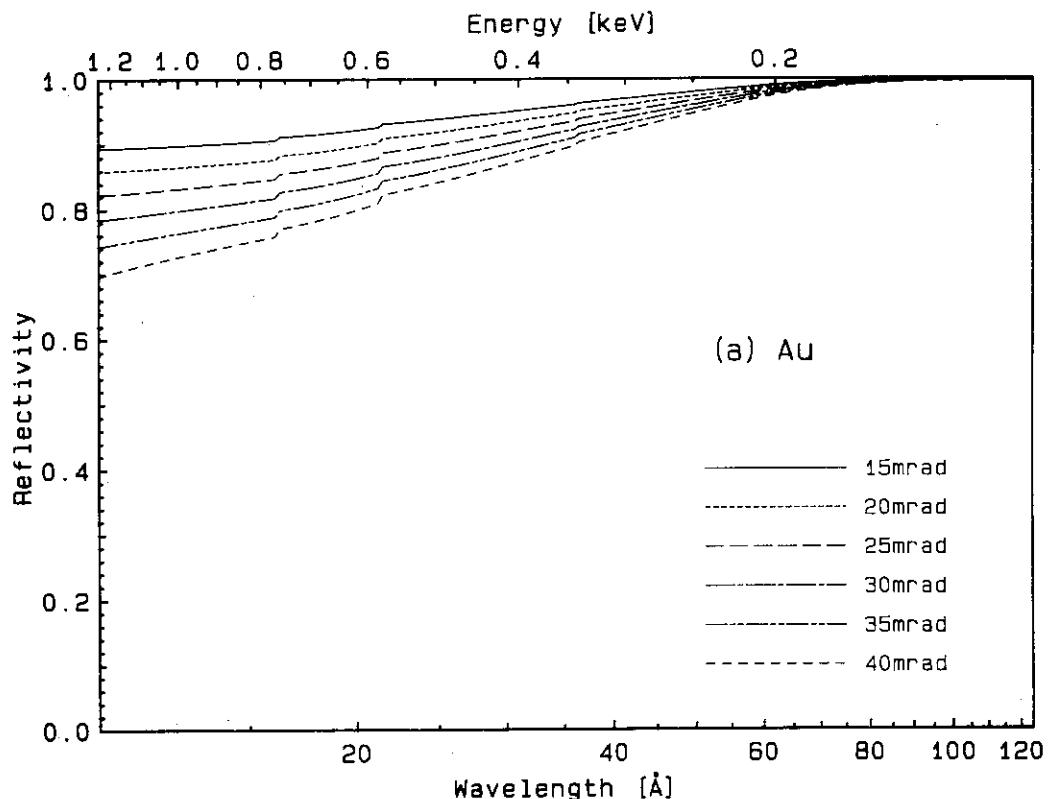


Fig. 6(a) Reflectivity of Au in the low energy soft X-ray region as a function of wavelength or the X-ray energy using the glancing angle as a parameter.

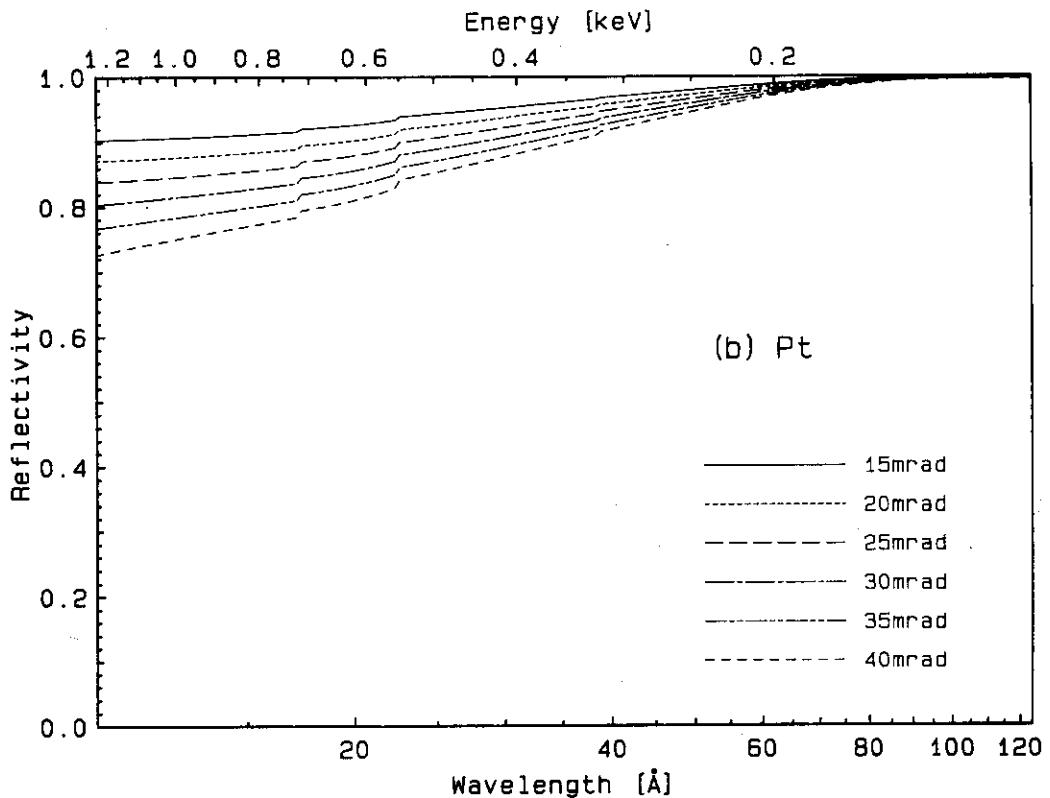


Fig. 6(b) Reflectivity of Pt in the low energy soft X-ray region as a function of wavelength or the X-ray energy using the glancing angle as a parameter.

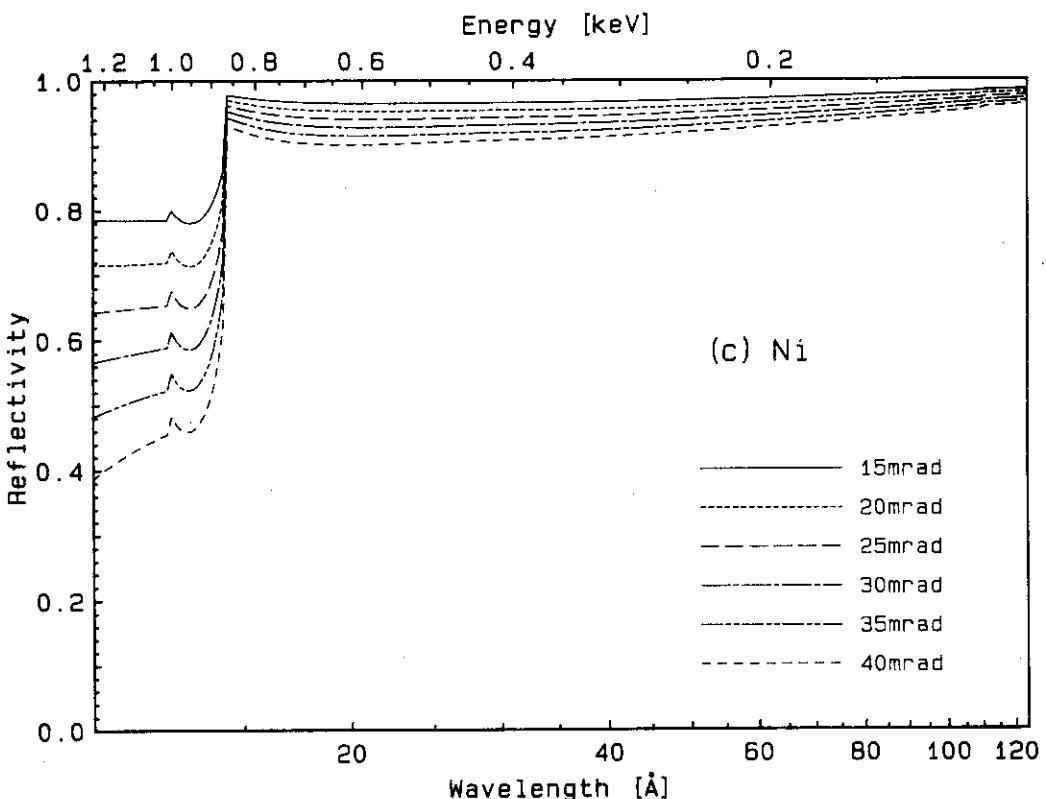


Fig. 6(c) Reflectivity of Ni in the low energy soft X-ray region as a function of wavelength or the X-ray energy using the glancing angle as a parameter.

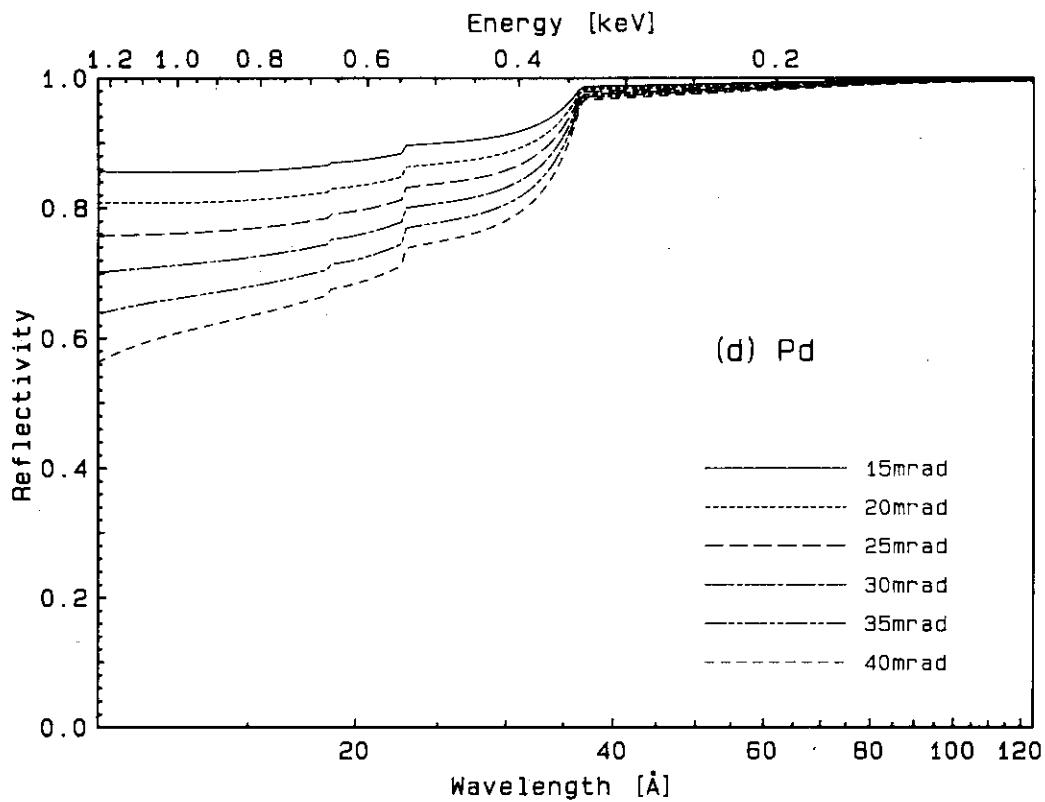


Fig. 6(d) Reflectivity of Pd in the low energy soft X-ray region as a function of wavelength or the X-ray energy using the glancing angle as a parameter.

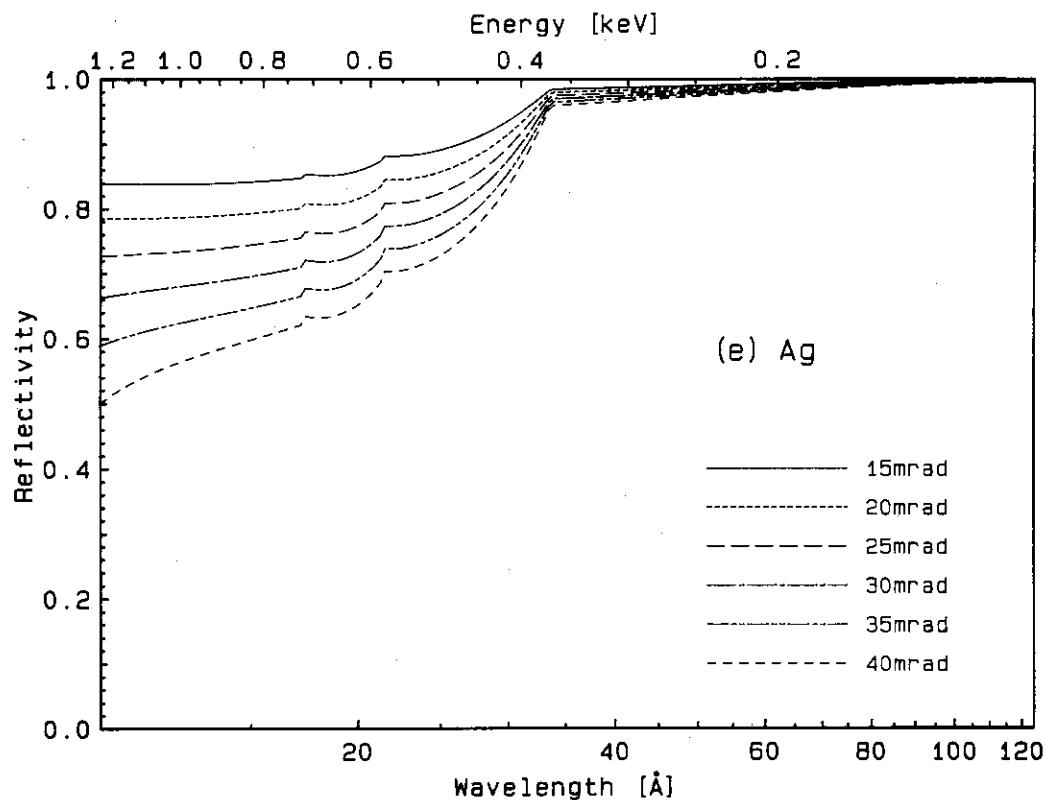


Fig. 6(e) Reflectivity of Ag in the low energy soft X-ray region as a function of wavelength or the X-ray energy using the glancing angle as a parameter.

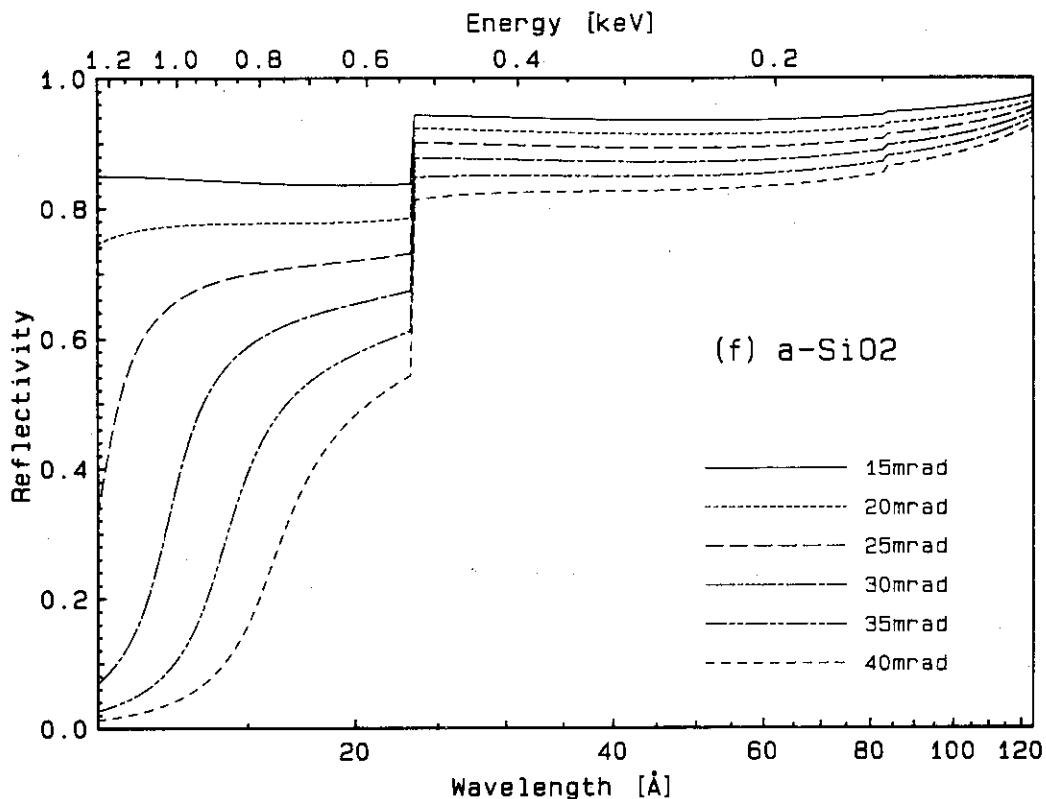


Fig. 6(f) Reflectivity of a-SiO<sub>2</sub> in the low energy soft X-ray region as a function of wavelength or the X-ray energy using the glancing angle as a parameter.

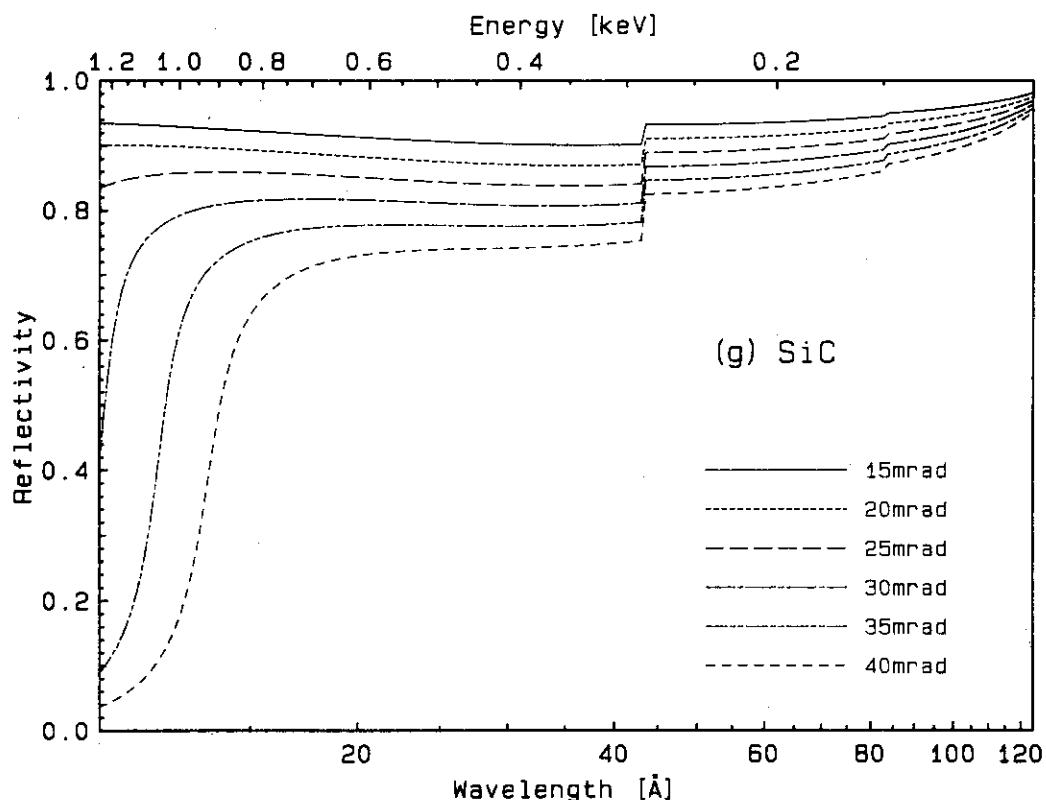


Fig. 6(g) Reflectivity of SiC in the low energy soft X-ray region as a function of wavelength or the X-ray energy using the glancing angle as a parameter.

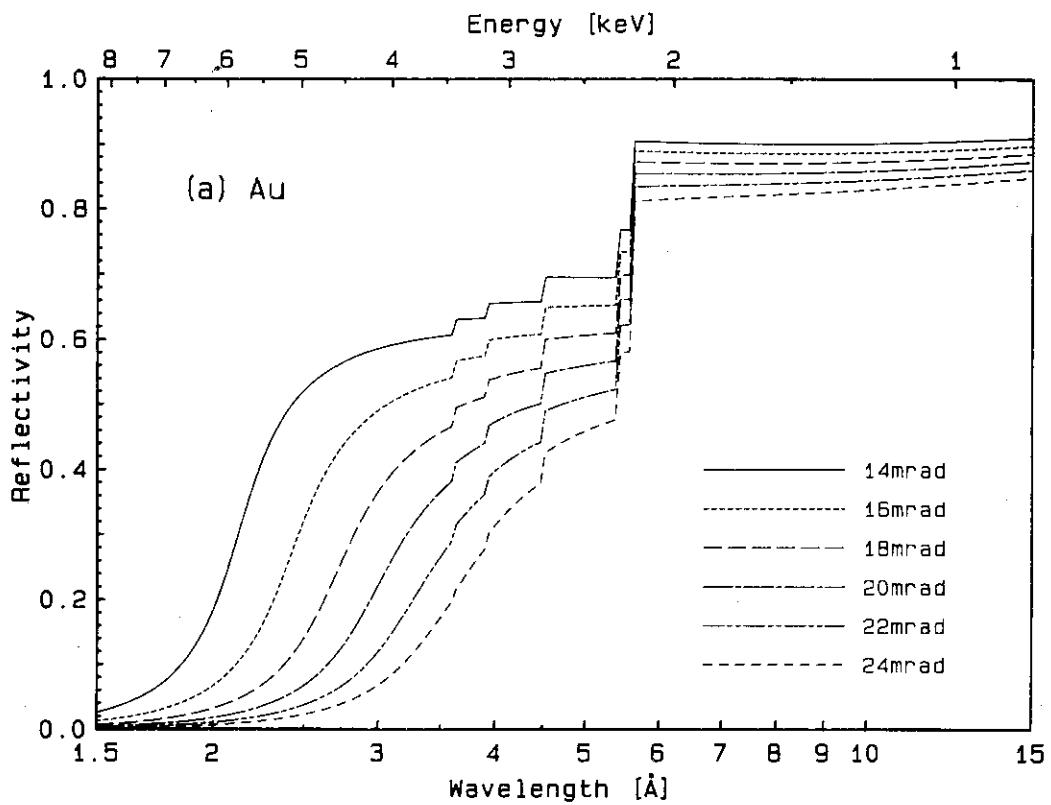


Fig. 7(a) Reflectivity of Au in the high energy soft X-ray region as a function of wavelength or the X-ray energy using the glancing angle as a parameter.

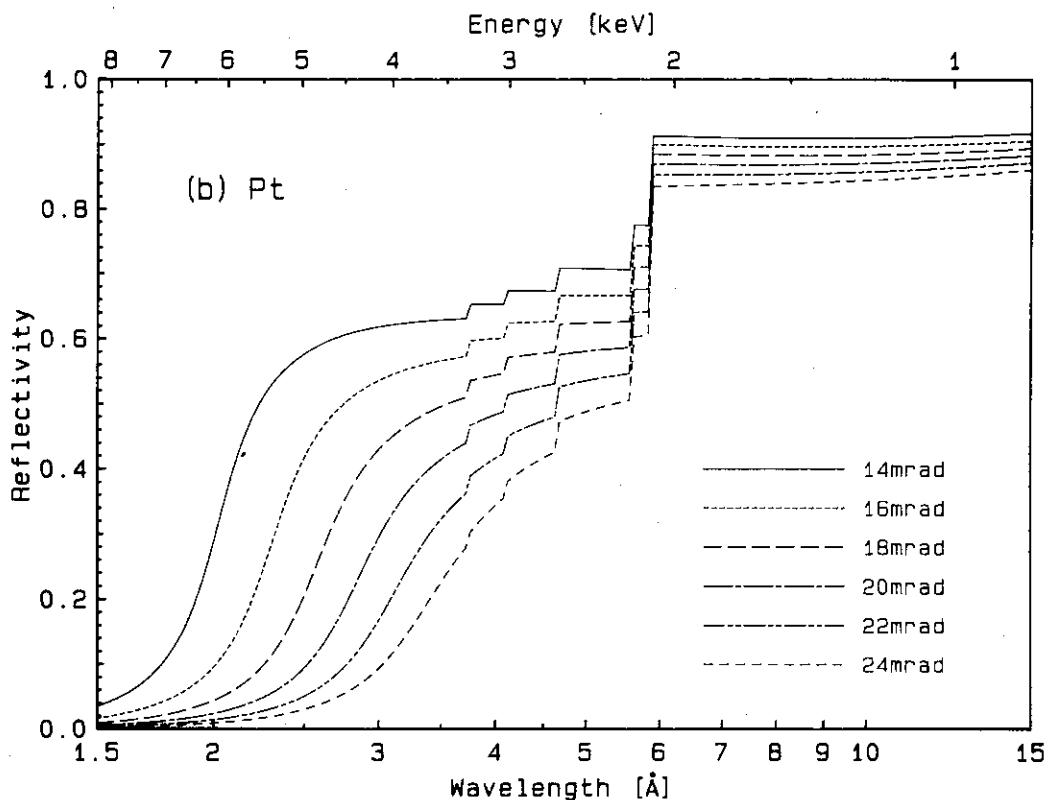


Fig. 7(b) Reflectivity of Pt in the high energy soft X-ray region as a function of wavelength or the X-ray energy using the glancing angle as a parameter.

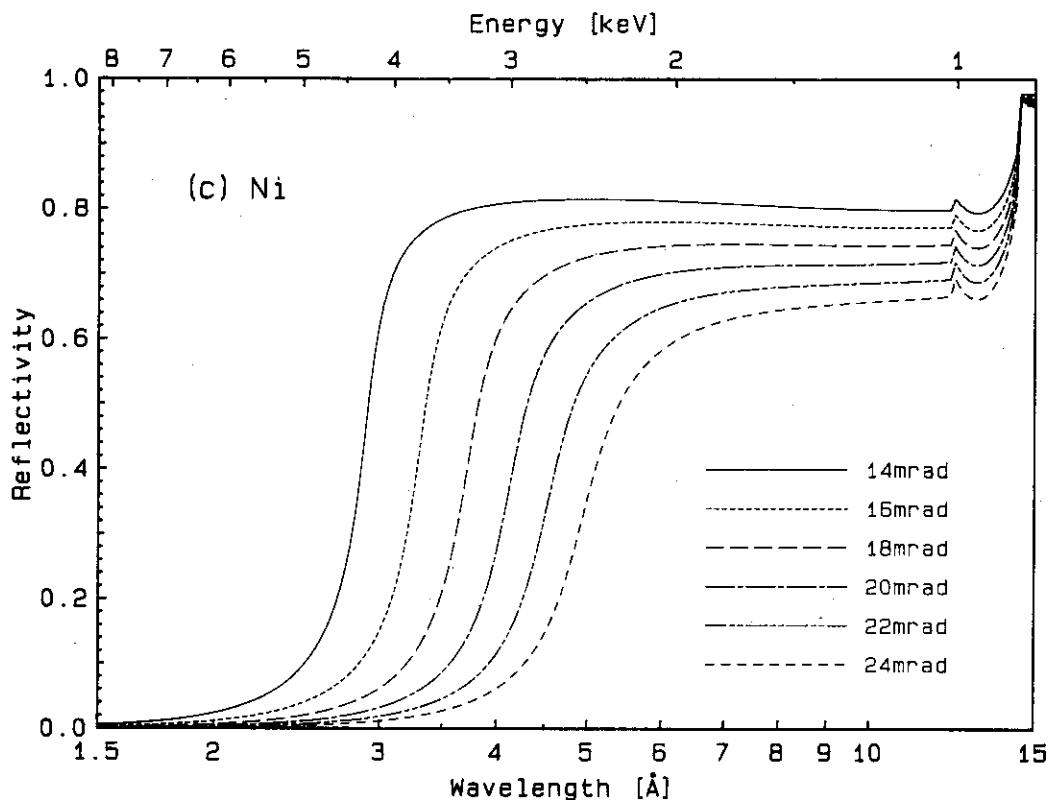


Fig. 7(c) Reflectivity of Ni in the high energy soft X-ray region as a function of wavelength or the X-ray energy using the glancing angle as a parameter.

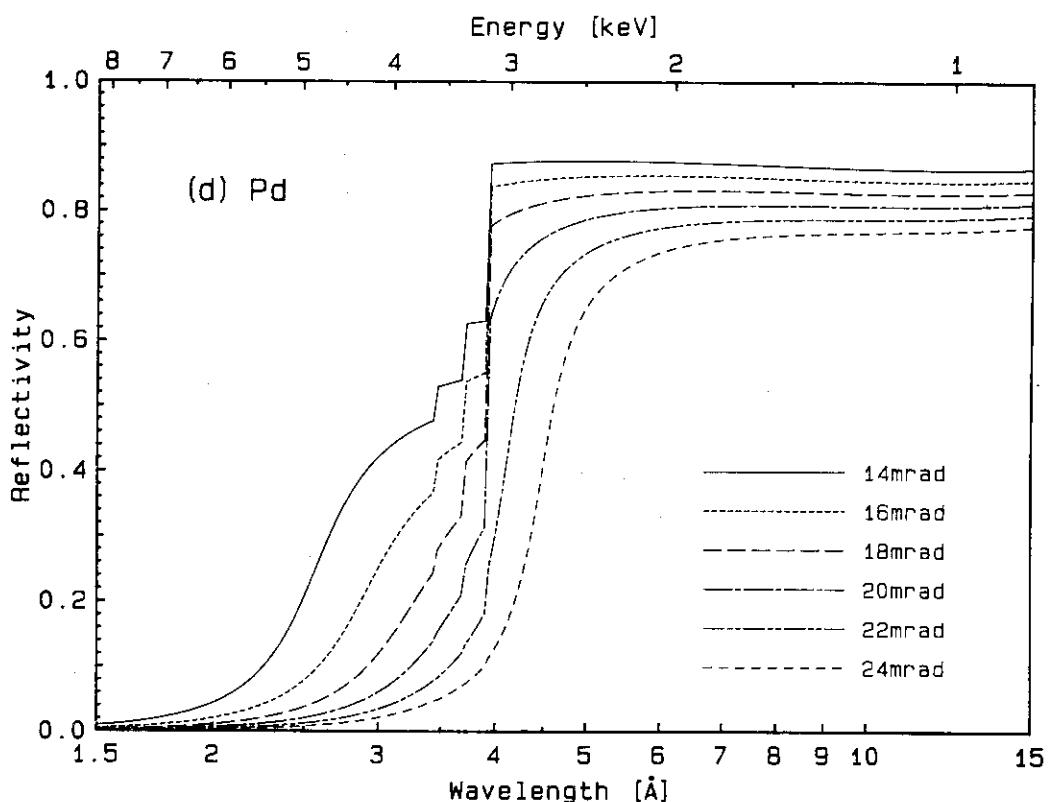


Fig. 7(d) Reflectivity of Pd in the high energy soft X-ray region as a function of wavelength or the X-ray energy using the glancing angle as a parameter.

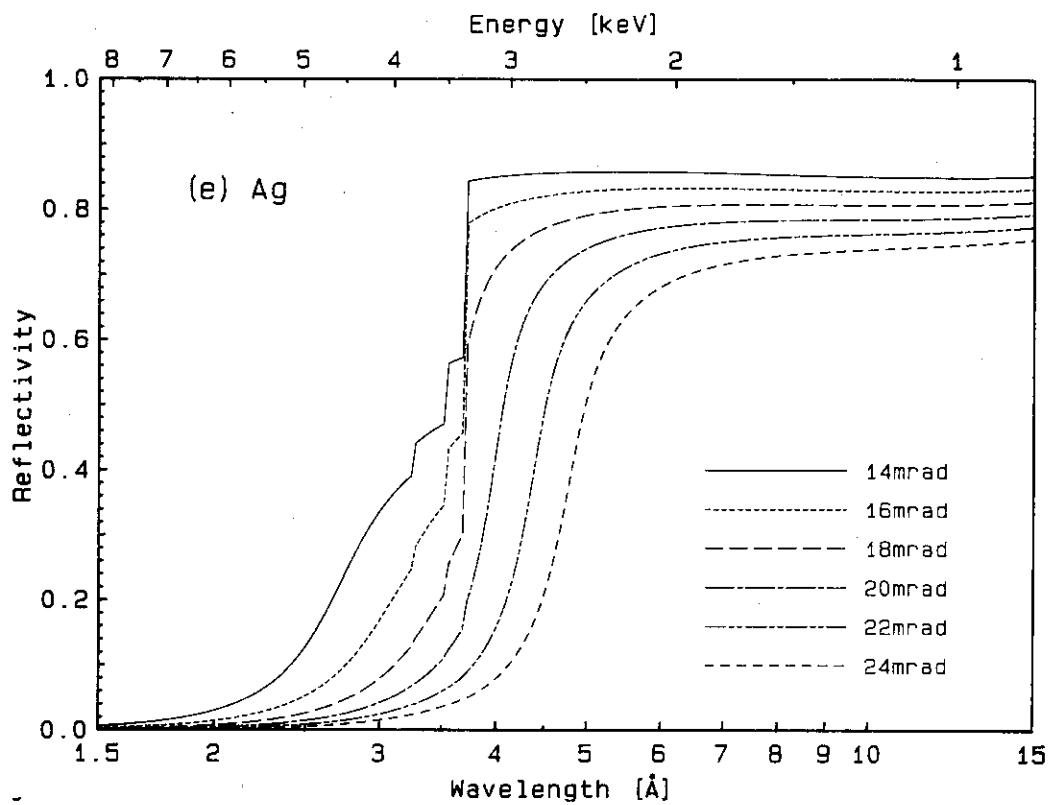


Fig. 7(e) Reflectivity of Ag in the high energy soft X-ray region as a function of wavelength or the X-ray energy using the glancing angle as a parameter.

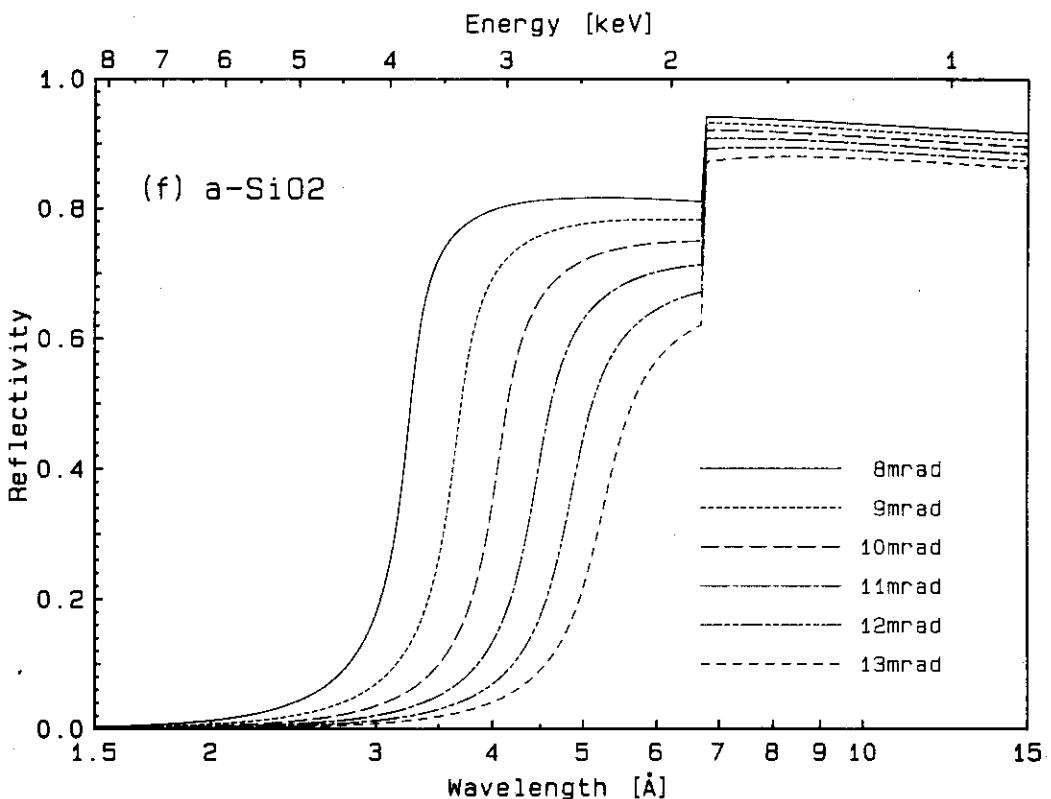


Fig. 7(f) Reflectivity of a-SiO<sub>2</sub> in the high energy soft X-ray region as a function of wavelength or the X-ray energy using the glancing angle as a parameter.

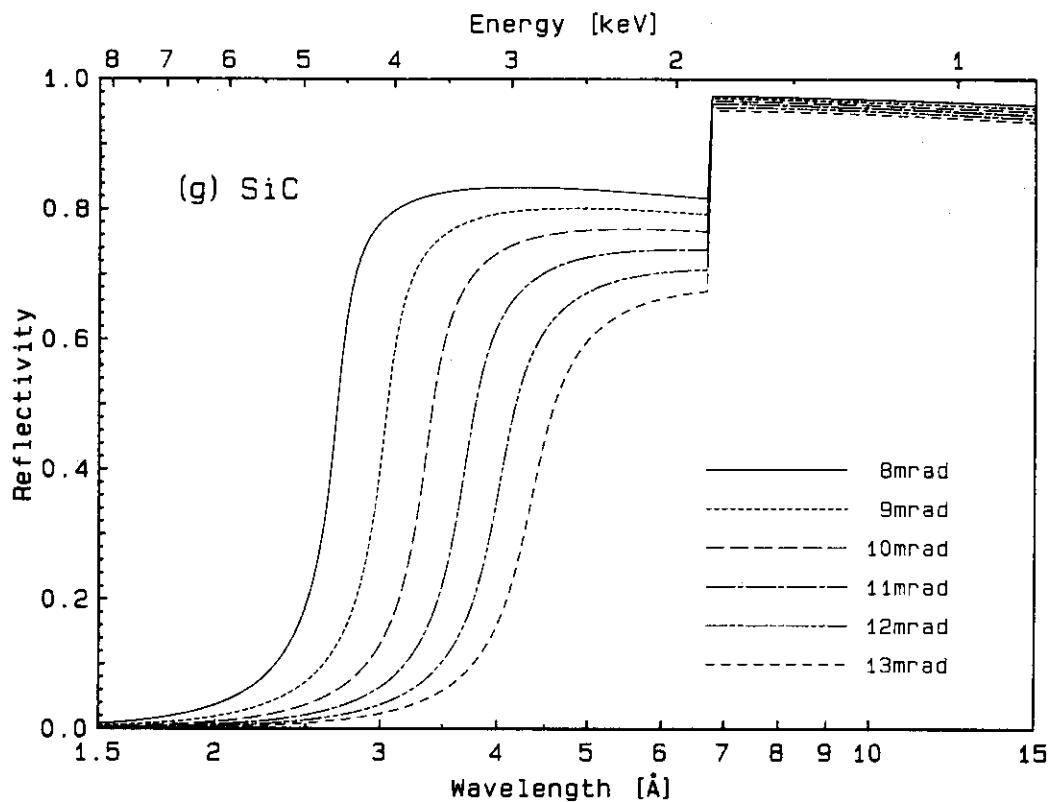


Fig. 7(g) Reflectivity of SiC in the high energy soft X-ray region as a function of wavelength or the X-ray energy using the glancing angle as a parameter.

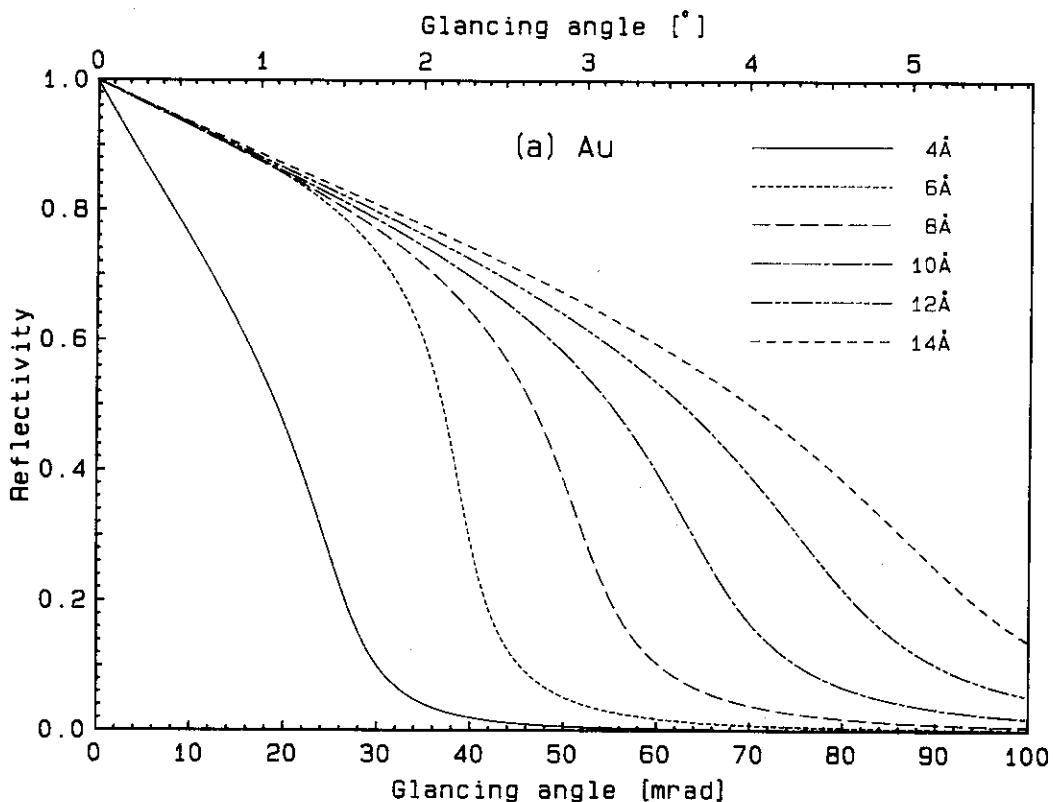


Fig. 8(a) Reflectivity of Au in the high energy soft X-ray region as a function of the glancing angle using wavelength as a parameter.

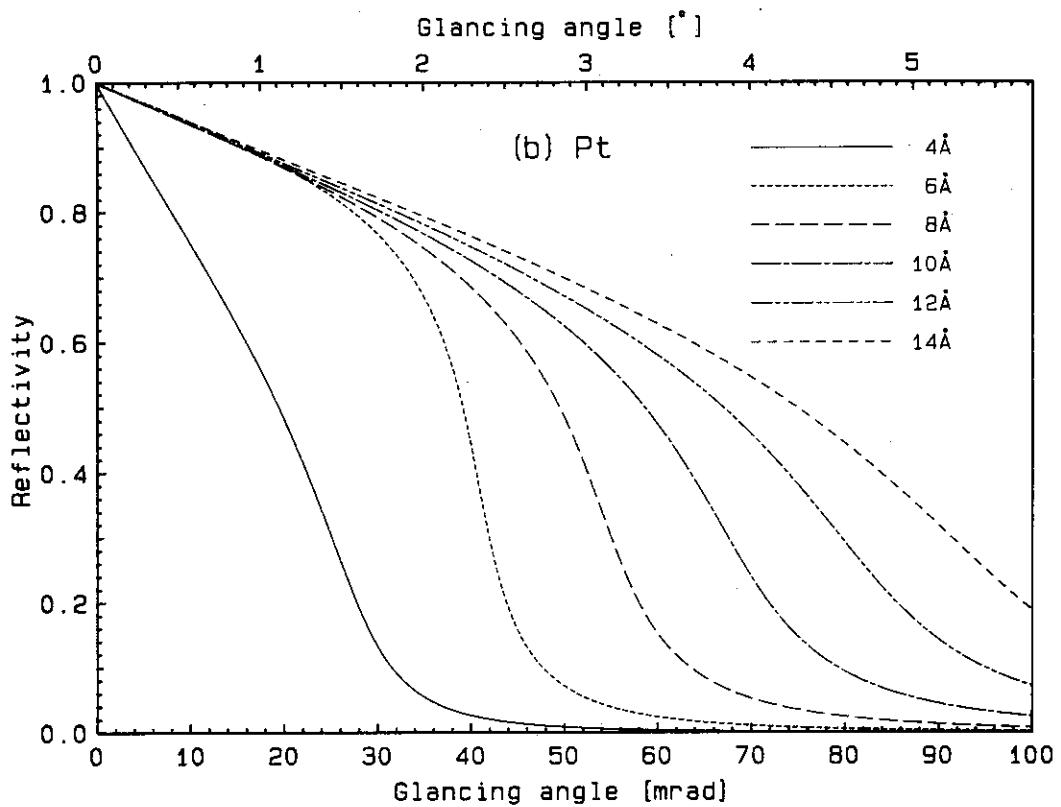


Fig. 8(b) Reflectivity of Pt in the high energy soft X-ray region as a function of the glancing angle using wavelength as a parameter.

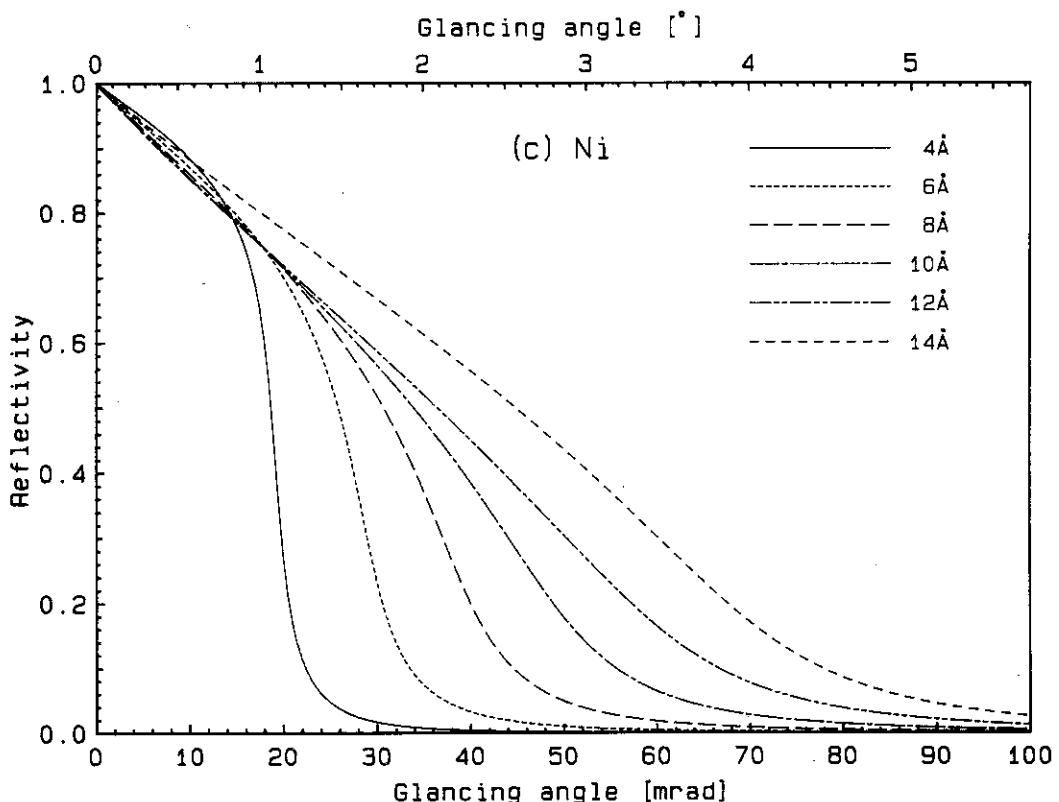


Fig. 8(c) Reflectivity of Ni in the high energy soft X-ray region as a function of the glancing angle using wavelength as a parameter.

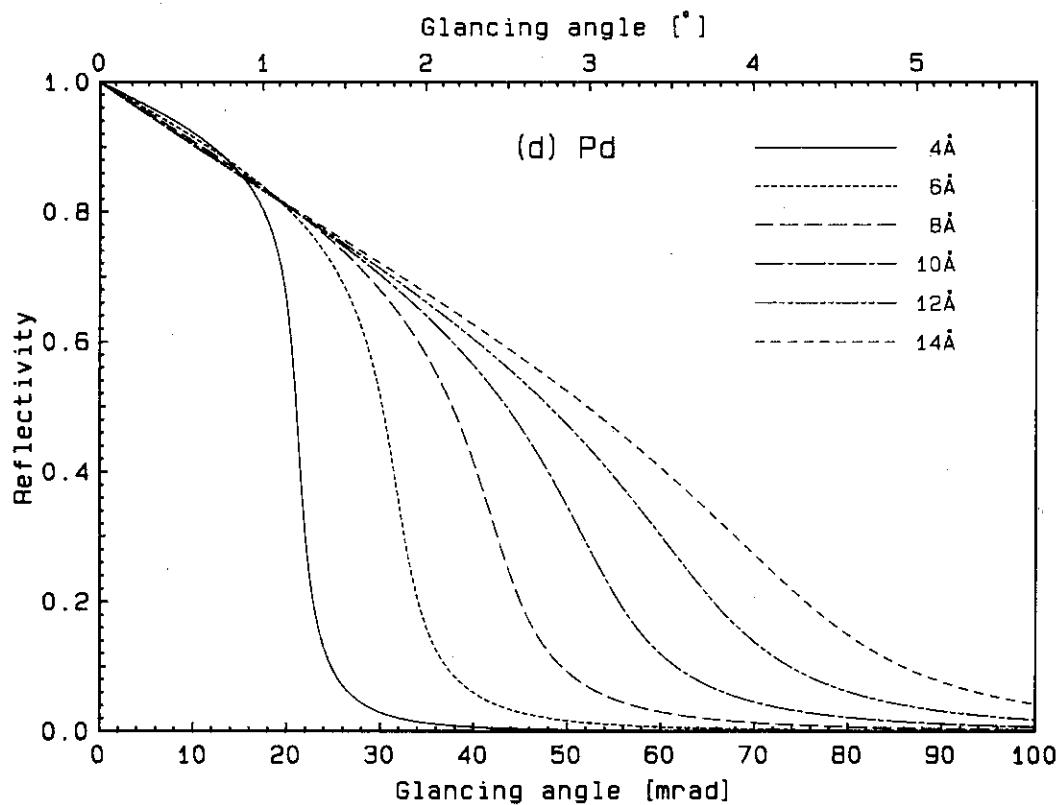


Fig. 8(d) Reflectivity of Pd in the high energy soft X-ray region as a function of the glancing angle using wavelength as a parameter.

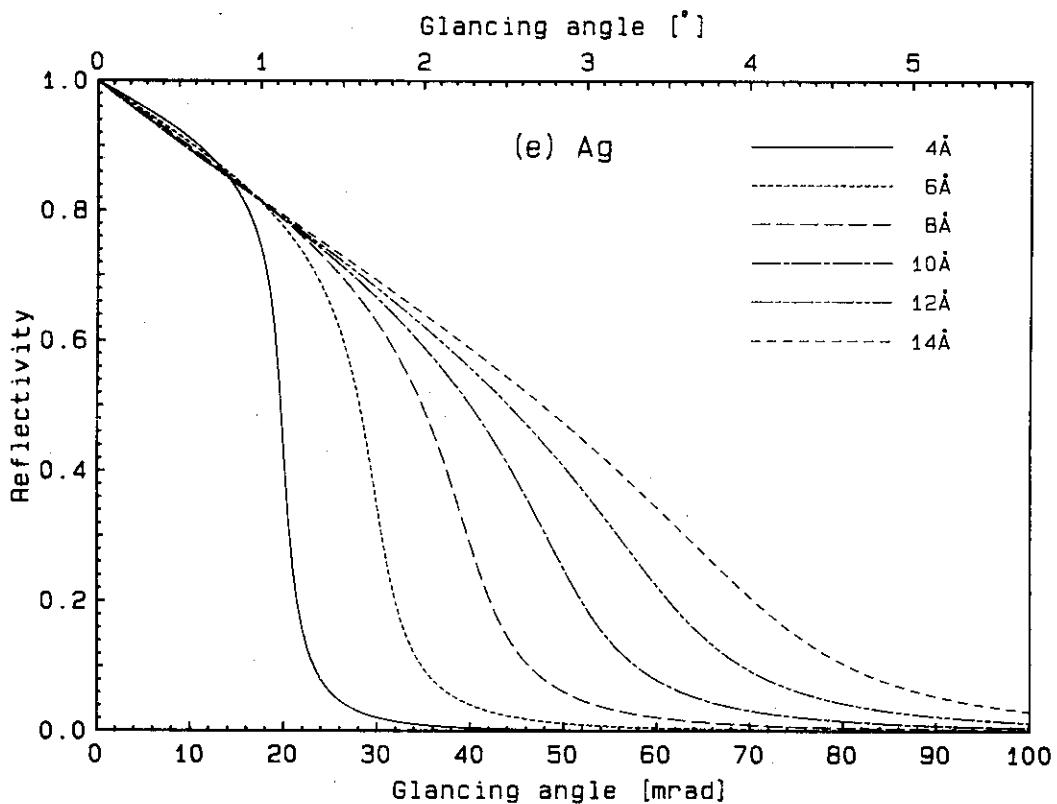


Fig. 8(e) Reflectivity of Ag in the high energy soft X-ray region as a function of the glancing angle using wavelength as a parameter.

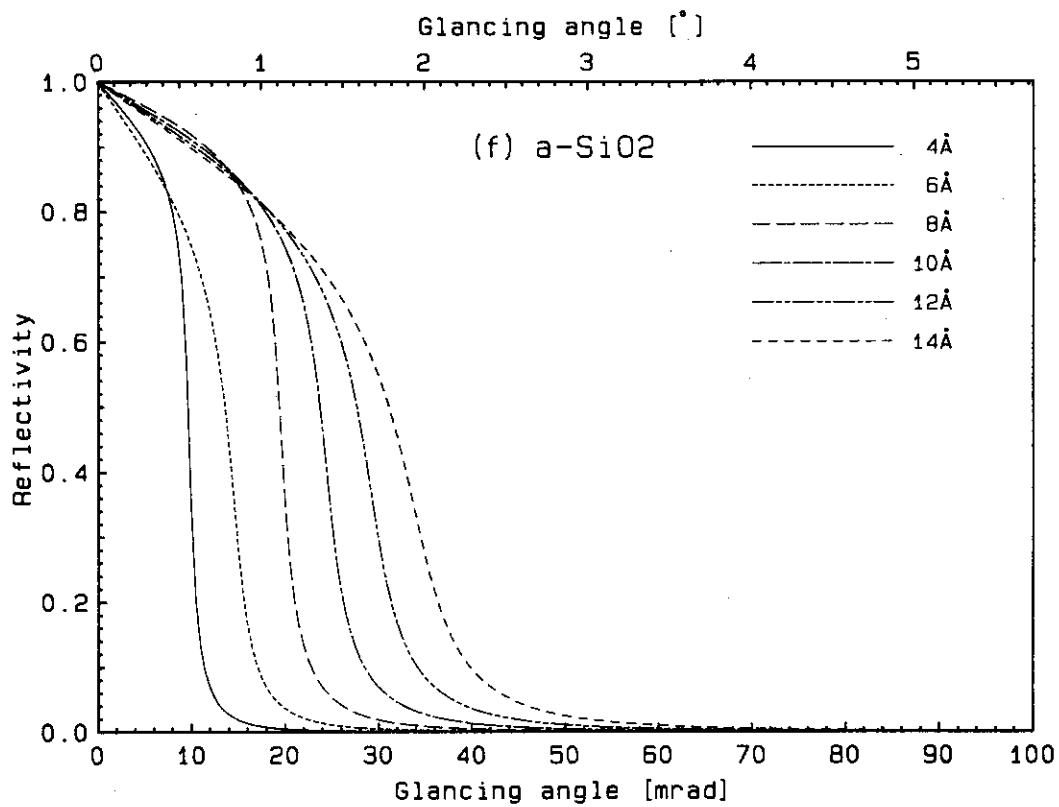


Fig. 8(f) Reflectivity of a-SiO<sub>2</sub> in the high energy soft X-ray region as a function of the glancing angle using wavelength as a parameter.

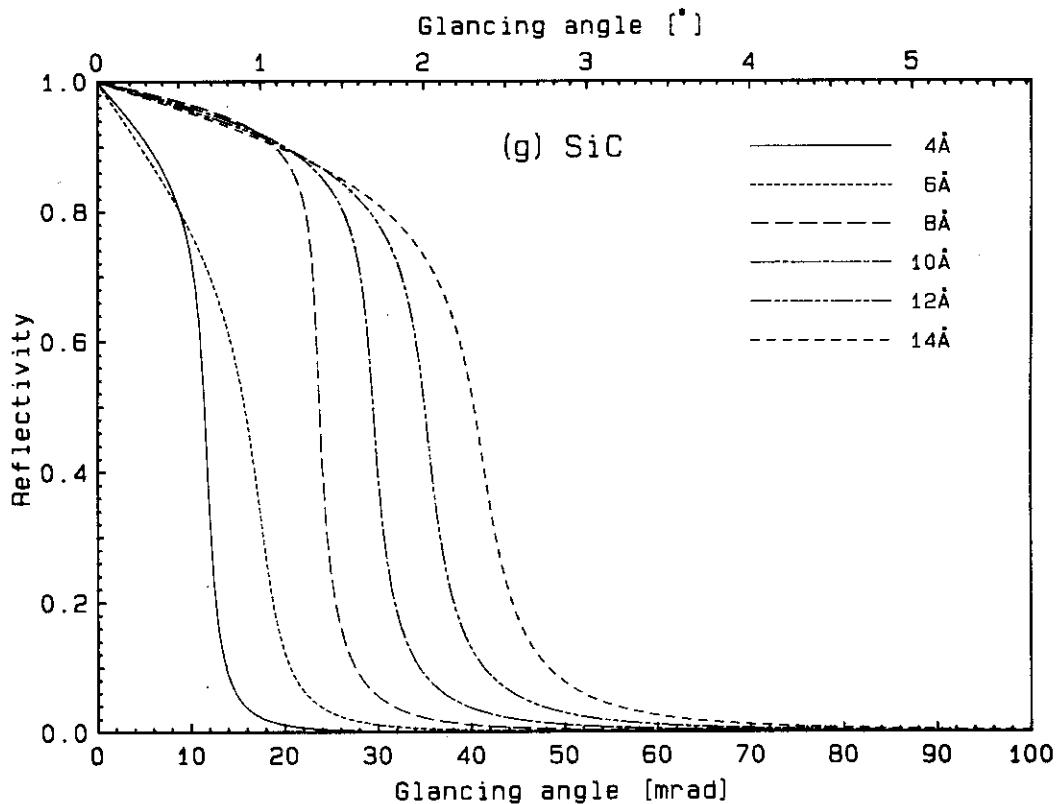


Fig. 8(g) Reflectivity of SiC in the high energy soft X-ray region as a function of the glancing angle using wavelength as a parameter.

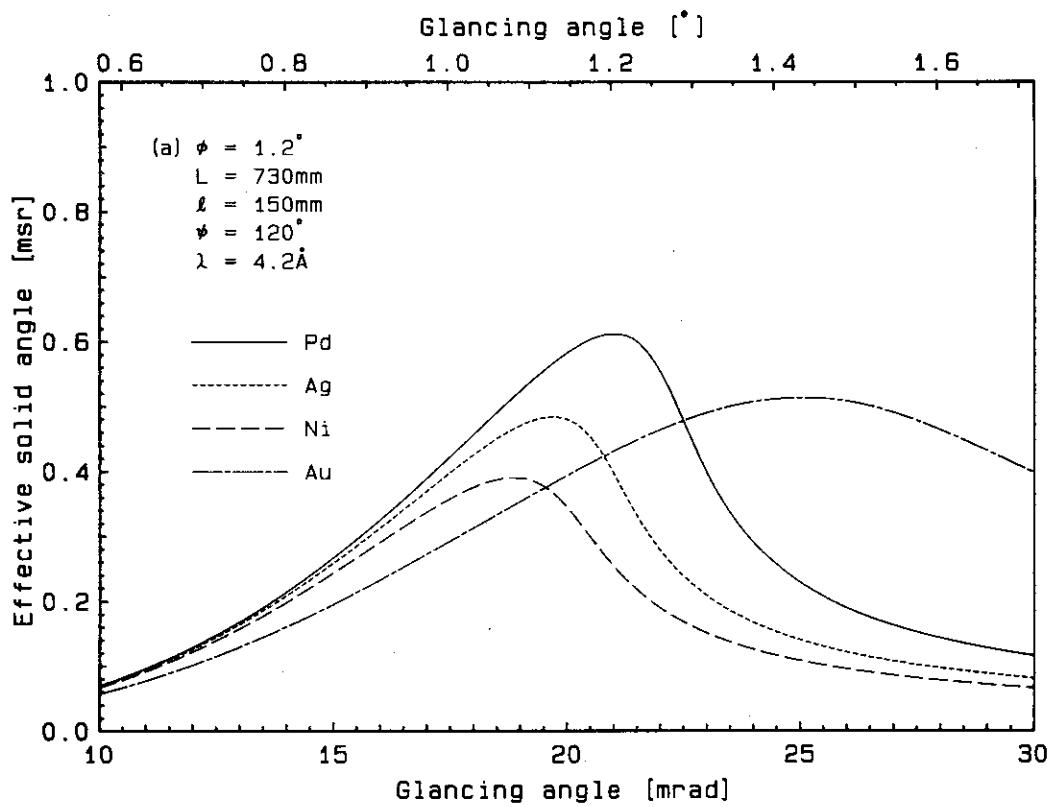


Fig. 9(a) Effective solid angle of the incident X-rays subtended by the mirror with an acceptance angle of  $1.2^\circ$  as a function of the glancing angle.

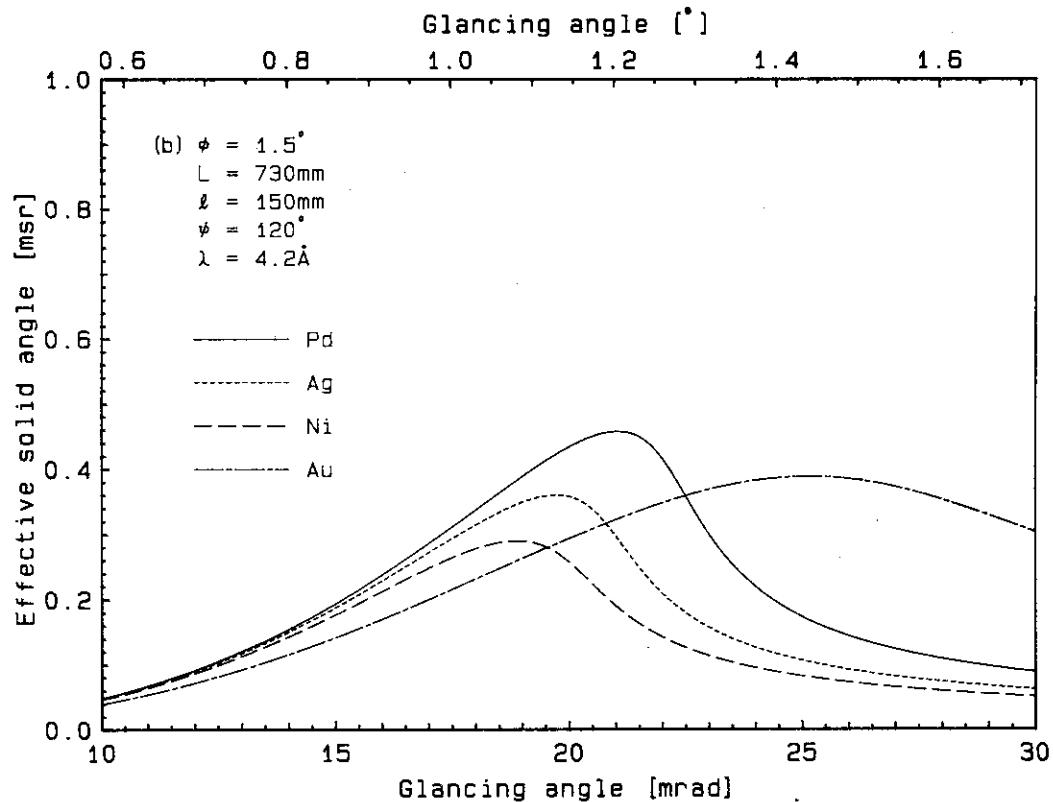


Fig. 9(b) Effective solid angle of the incident X-rays subtended by the mirror with an acceptance angle of  $1.5^\circ$  as a function of the glancing angle.

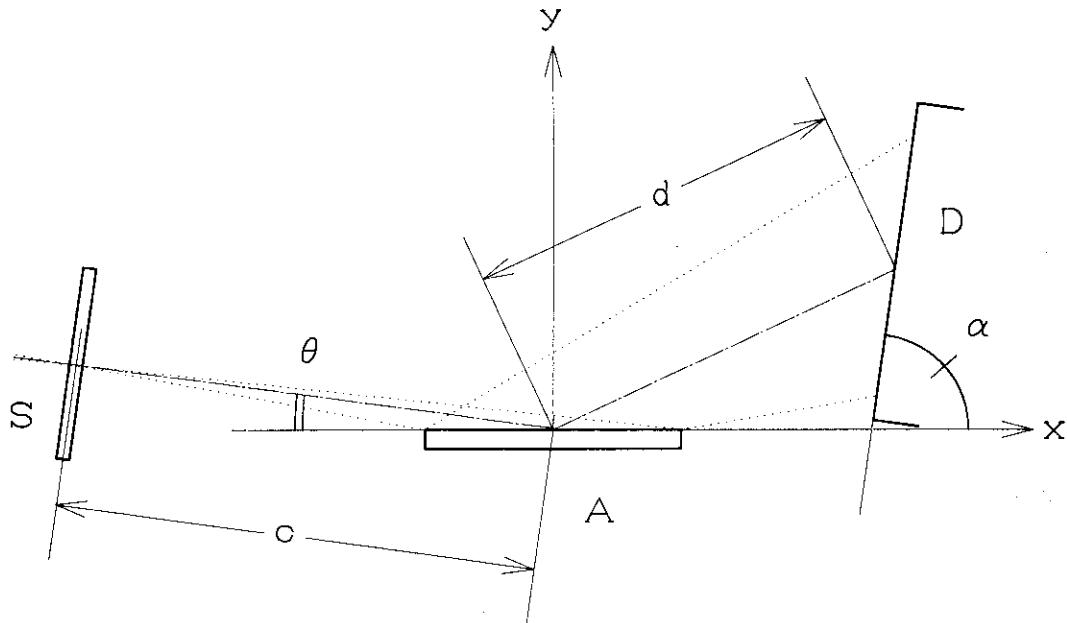


Fig. 10(a) Design parameters of the flat-field spectrometer system in the low energy soft X-ray region. *S*: sample, *A*: flat field spectrometer, *D*: position sensitive detector, *c*: distance between the sample and the spectrometer, *d*: distance between the spectrometer and the detector,  $\theta$ : glancing angle of the spectrometer,  $\alpha$ : setting angle of the detector.

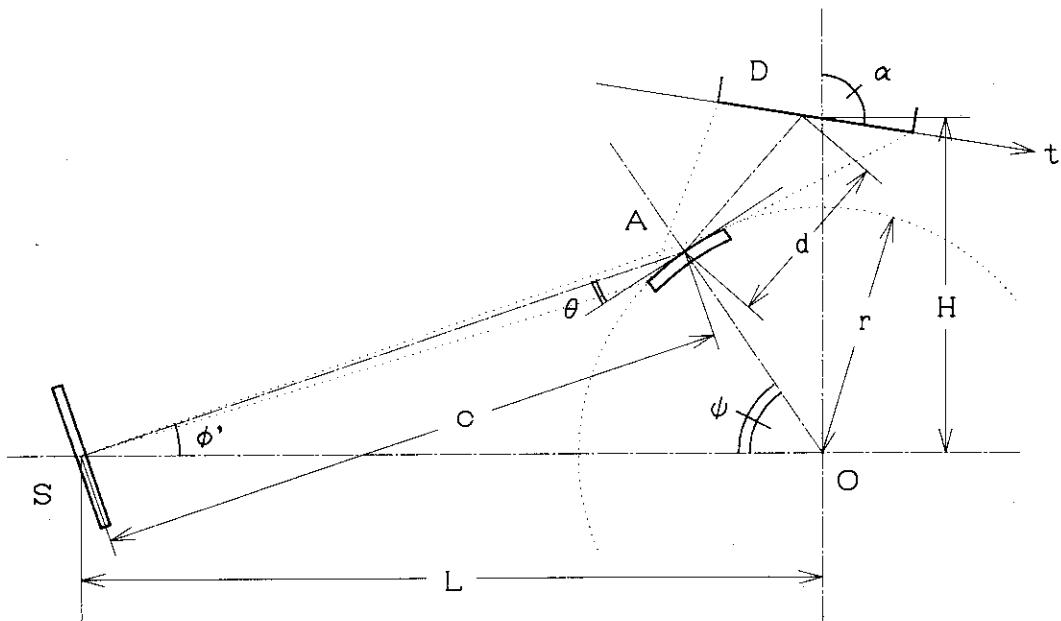


Fig. 10(b) Design parameters of the analyzing system in the high energy soft X-ray region. *S*: sample, *A*: crystal polychromator, *D*: position sensitive detector, *O*: center of the crystal curvature. Distances are between *c*: the sample and the polychromator, *d*: the polychromator and the detector, *L*: the sample and the center of the crystal curvature, *H*: the center of the crystal curvature and the detector, *r*: radius of the crystal curvature,  $\phi'$ : incident angle to the polychromator system, i.e., angle between *SO* and *SA*,  $\theta$ : glancing angle of the crystal,  $\psi$ : setting angle of the crystal,  $\alpha$ : setting angle of the detector, *t*: position on the detector.

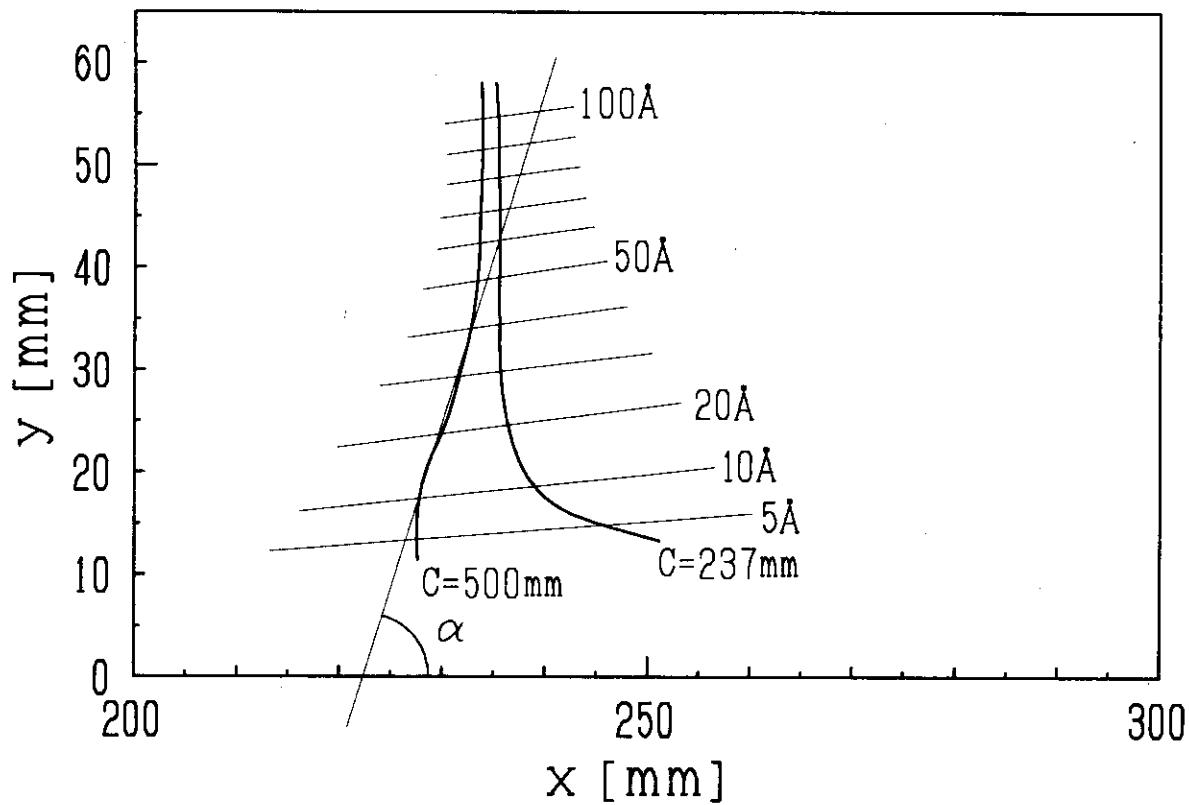


Fig. 11 Focal curves of the aberration-correction concave grating.

(After N. Nakano et al. [16])

x: Distance from the center of grating. y: Distance from the x-axis.

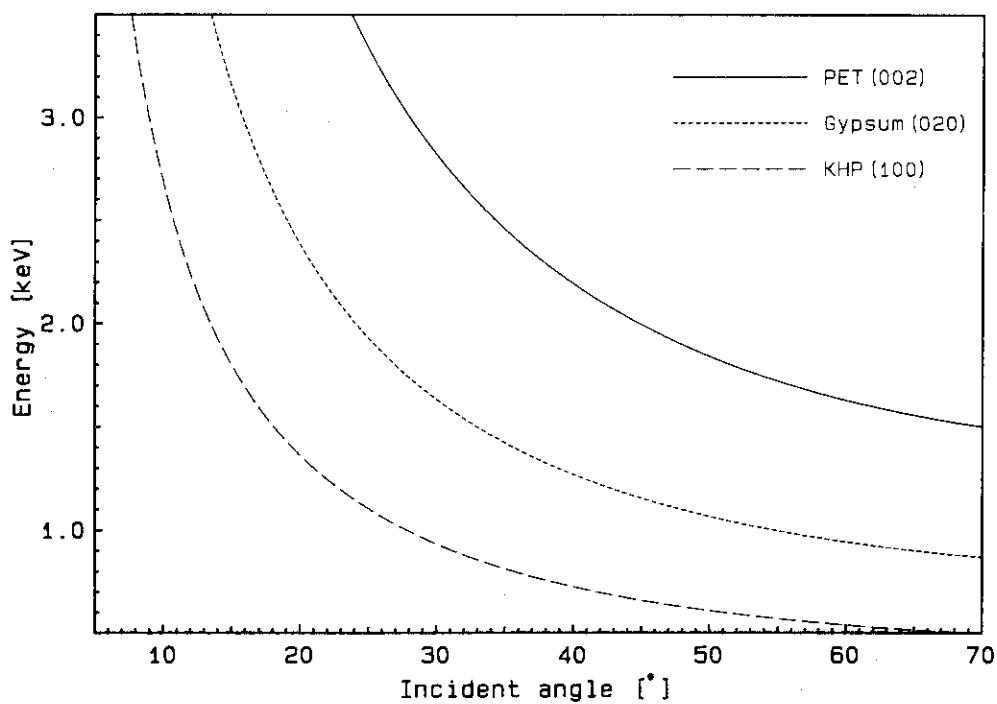


Fig. 12 Relationship between energy of X-rays and the incident angle (Bragg angle).

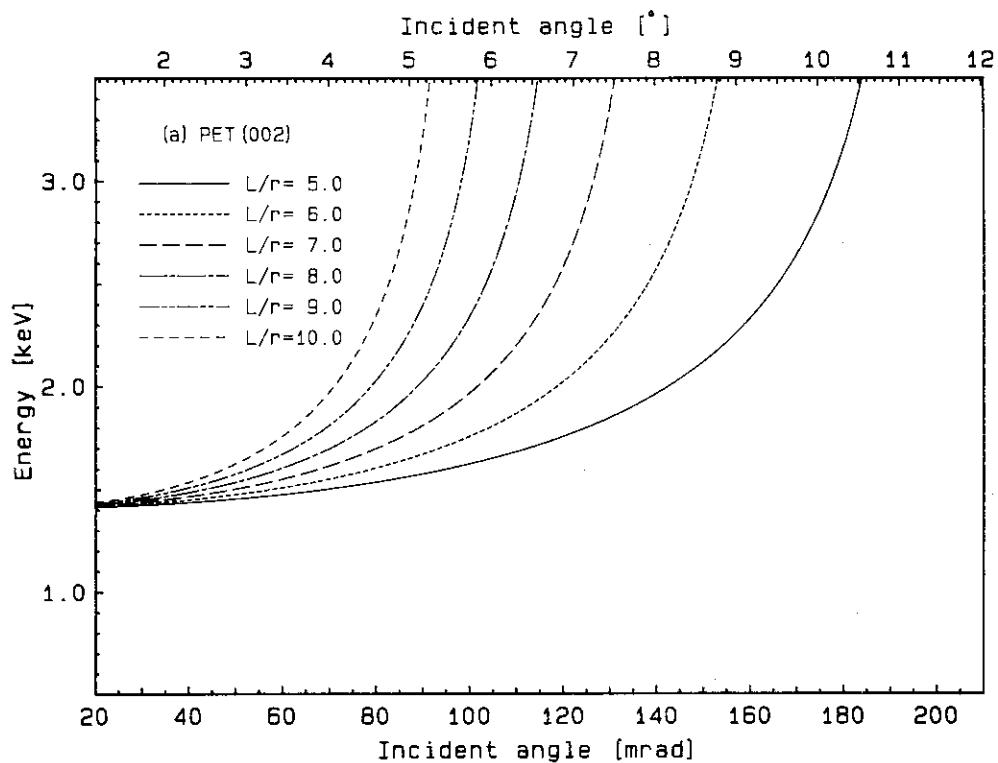


Fig. 13(a) Relationship between the incident angle to the crystal and analyzed energy for PET crystal as a parameter of the radius of the crystal relative to the distance from the sample to the center of the crystal curvature ( $L/r$ ).

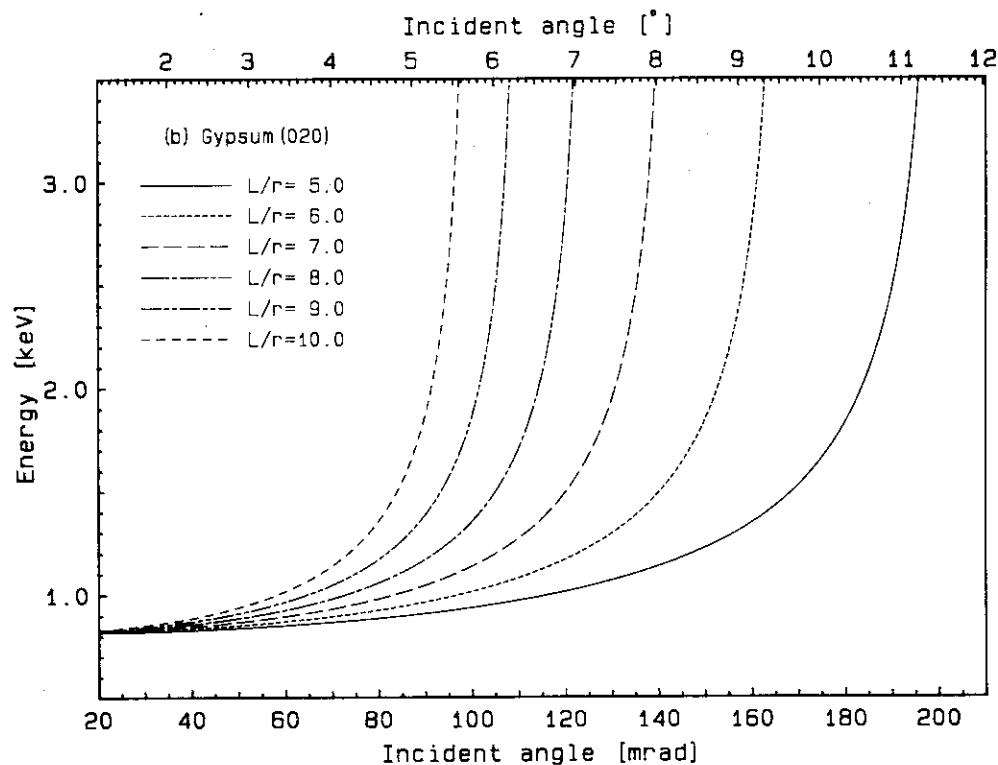


Fig. 13(b) Relationship between the incident angle to the crystal and analyzed energy for Gypsum crystal as a parameter of the radius of the crystal relative to the distance from the sample to the center of the crystal curvature ( $L/r$ ).

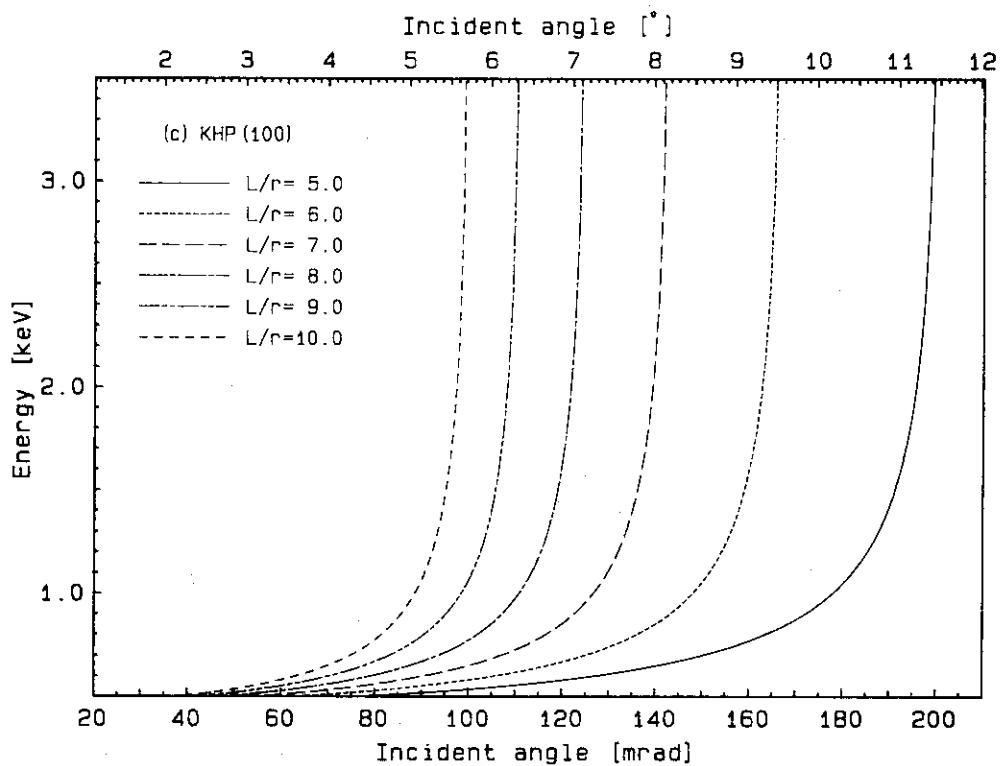


Fig. 13(c) Relationship between the incident angle to the crystal and analyzed energy for KHP crystal as a parameter of the radius of the crystal relative to the distance from the sample to the center of the crystal curvature ( $L/r$ ).

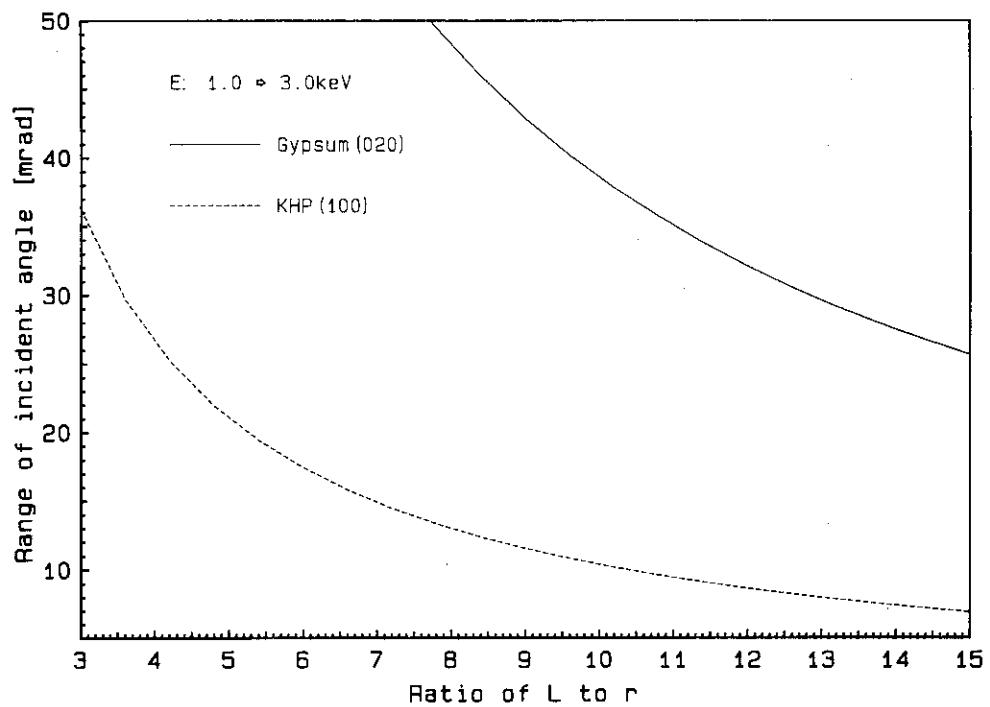


Fig. 14 Range of the incident angle to the polychromator system corresponding to the energy of 1~3 keV as a function of the ratio of L and r ( $L/r$ ).

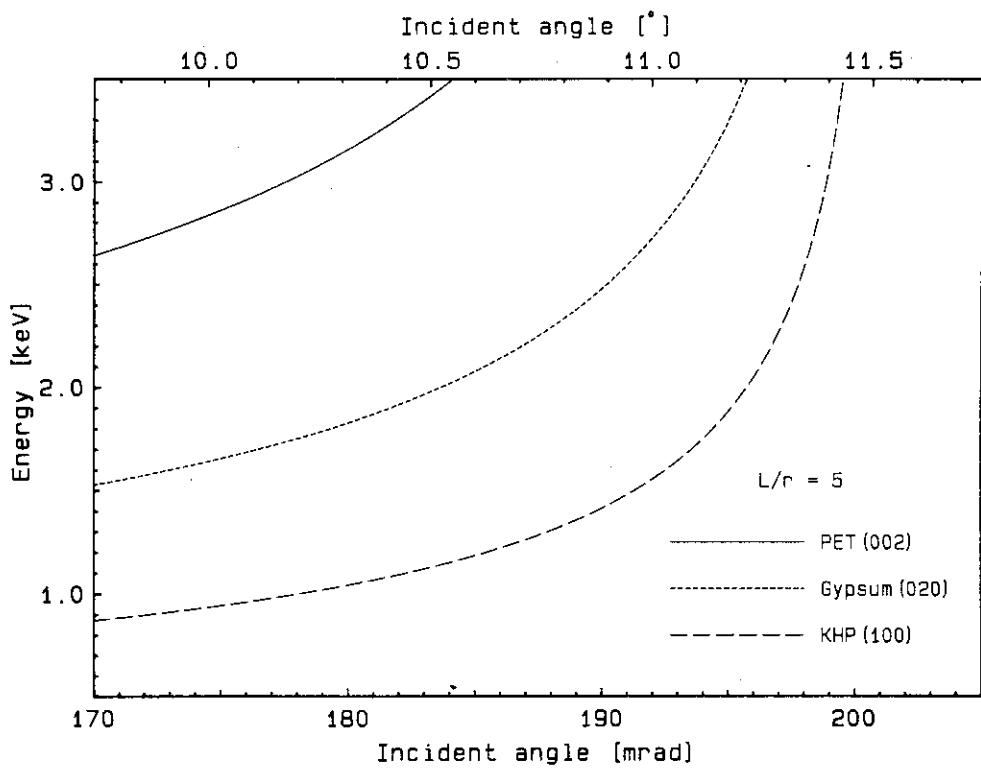


Fig. 15 Analyzed X-ray energy as a function of the incident angle which corresponds to the horizontally expanded portion of Fig. 13.

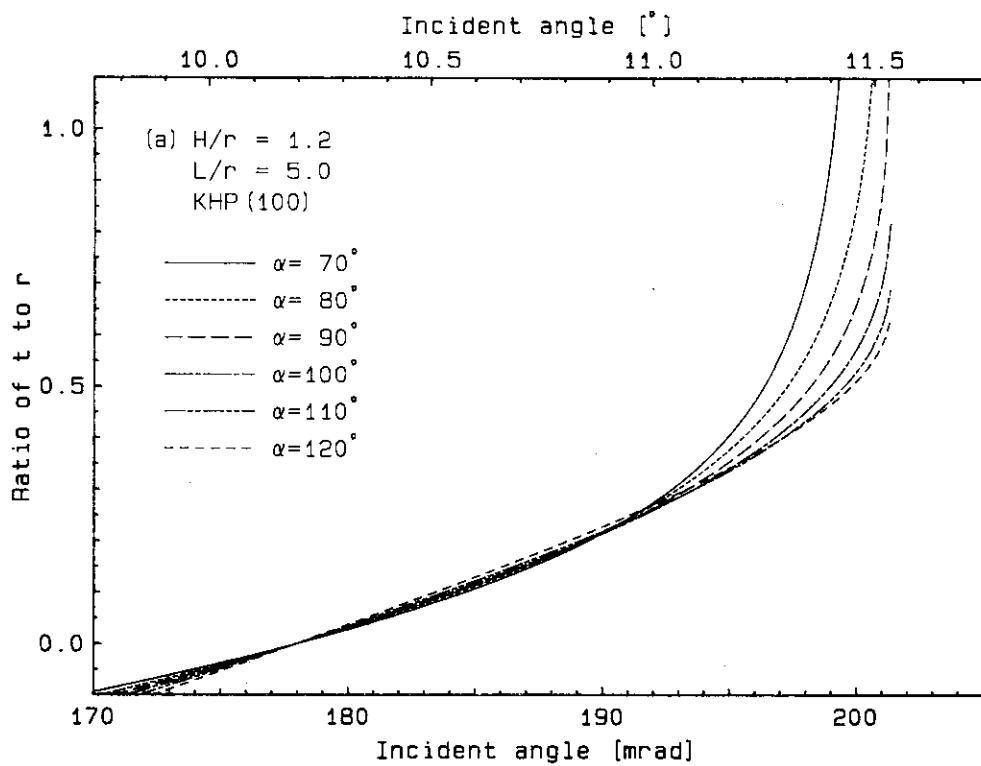


Fig. 16(a) Relative detecting position (position on the detector relative to the distance from the sample to center of the crystal curvature  $t/r$ ) as a function of the incident angle using detector setting angle( $\alpha$ ) as a parameter.  
Position of the detector ( $H/r$ ) is 1.2.

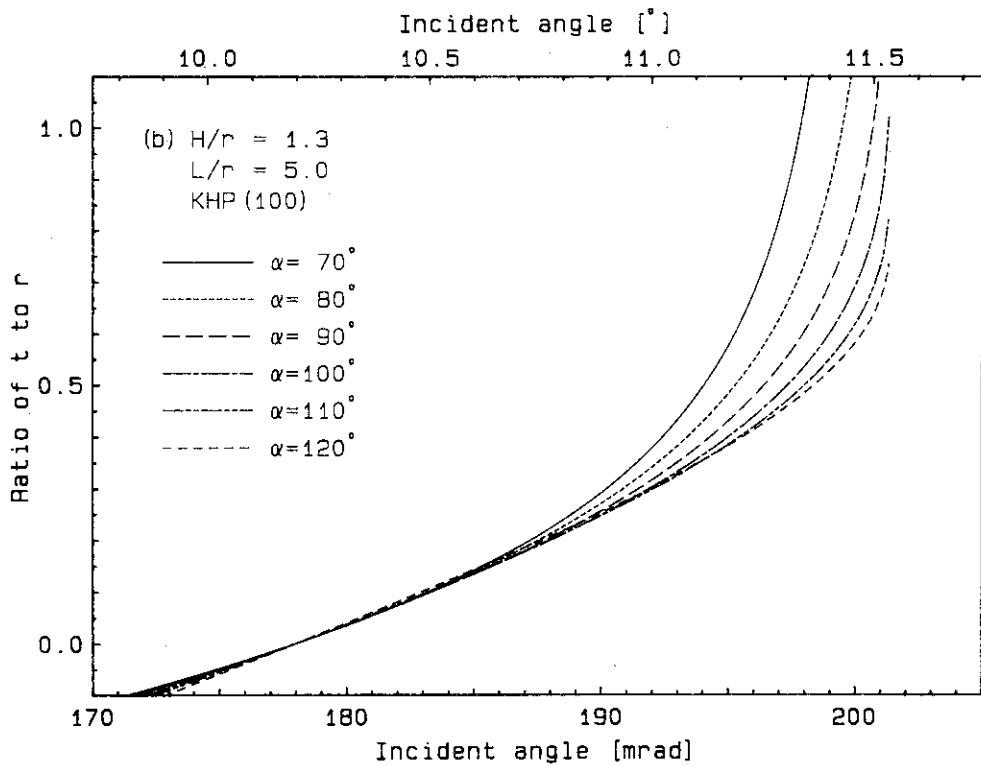


Fig. 16(b) Relative detecting position (position on the detector relative to the distance from the sample to center of the crystal curvature  $t/r$ ) as a function of the incident angle using detector setting angle( $\alpha$ ) as a parameter.  
Position of the detector ( $H/r$ ) is 1.3.

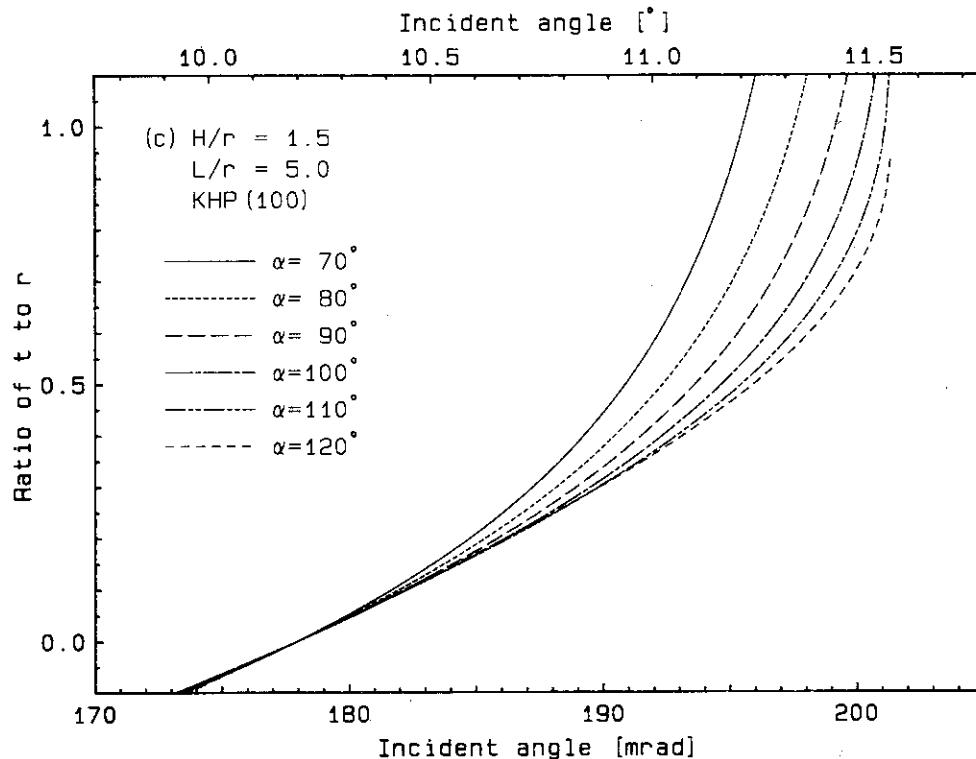


Fig. 16(c) Relative detecting position (position on the detector relative to the distance from the sample to center of the crystal curvature  $t/r$ ) as a function of the incident angle using detector setting angle( $\alpha$ ) as a parameter.  
Position of the detector ( $H/r$ ) is 1.5.

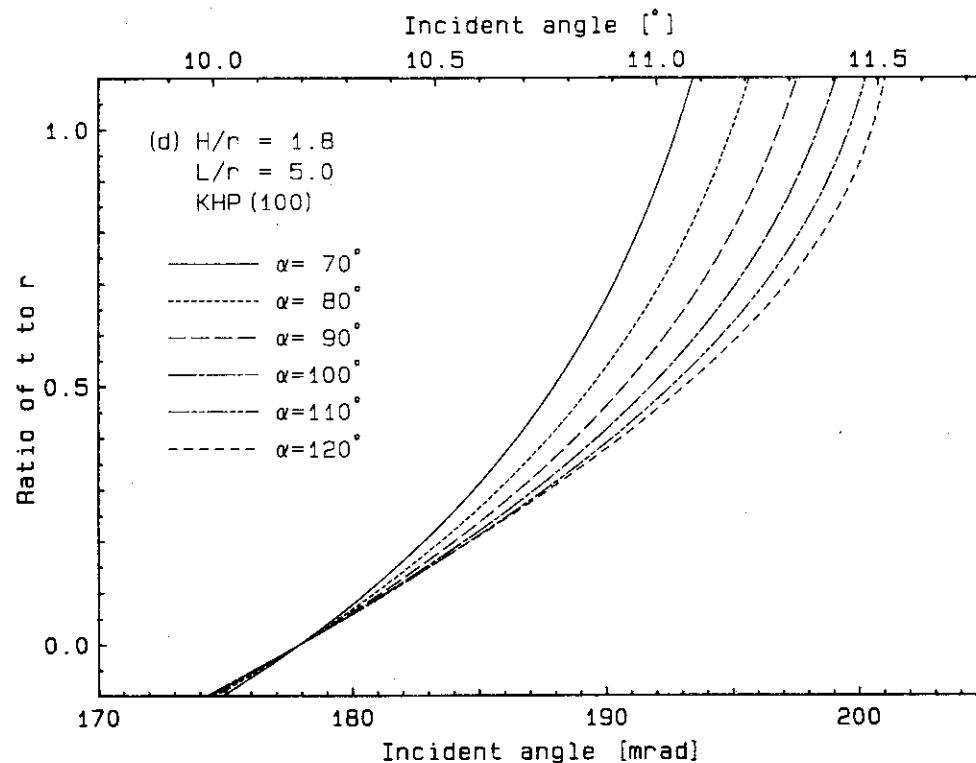


Fig. 16(d) Relative detecting position (position on the detector relative to the distance from the sample to center of the crystal curvature  $t/r$ ) as a function of the incident angle using detector setting angle( $\alpha$ ) as a parameter.  
Position of the detector ( $H/r$ ) is 1.8.

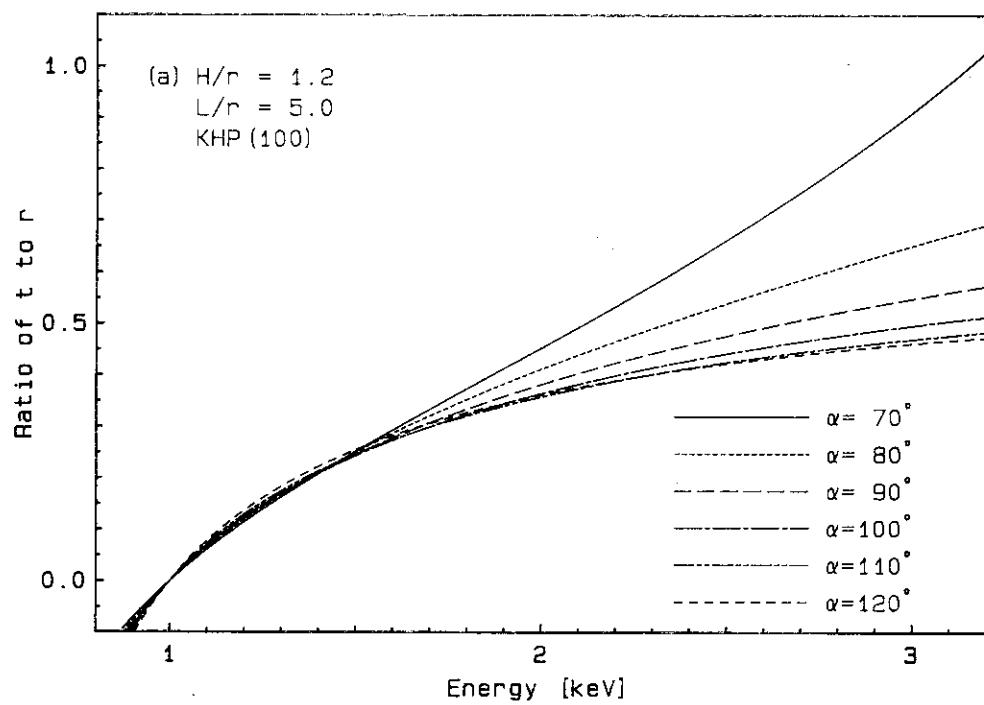


Fig. 17(a) Relative detecting position as a function of analyzed energy as a parameter of the detector setting angle. Position of the detector ( $H/r$ ) is 1.2.

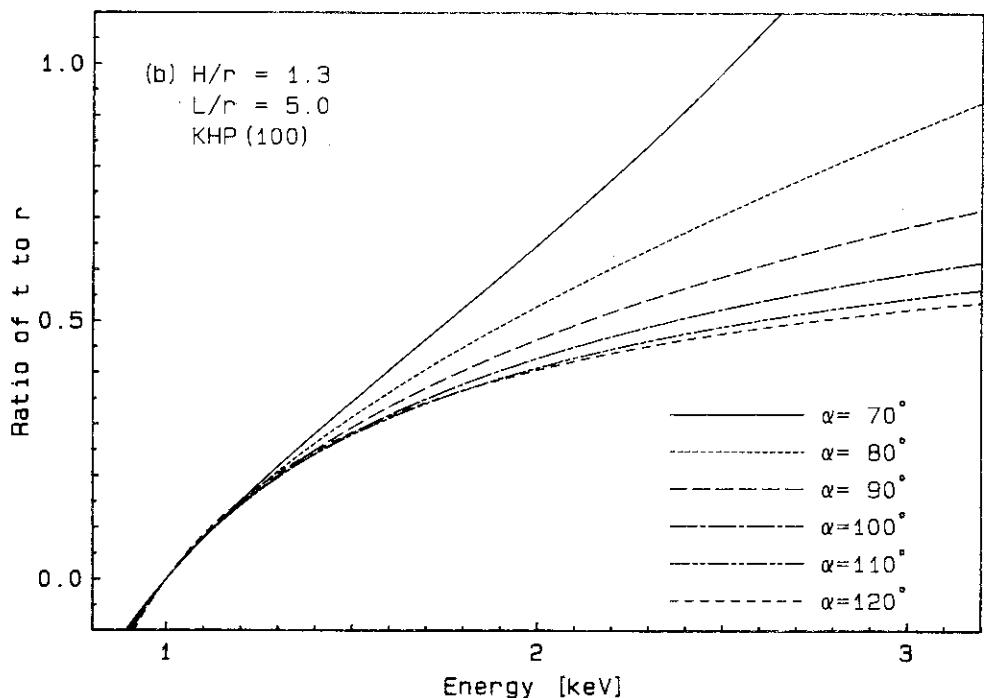


Fig. 17(b) Relative detecting position as a function of analyzed energy as a parameter of the detector setting angle. Position of the detector ( $H/r$ ) is 1.3.

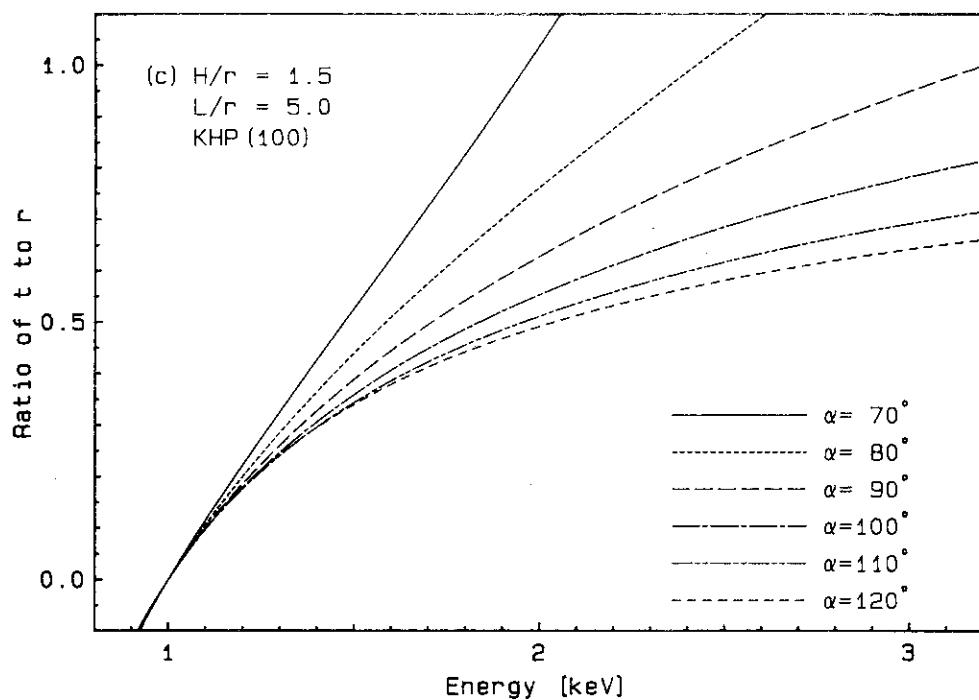


Fig. 17(c) Relative detecting position as a function of analyzed energy as a parameter of the detector setting angle. Position of the detector ( $H/r$ ) is 1.5.

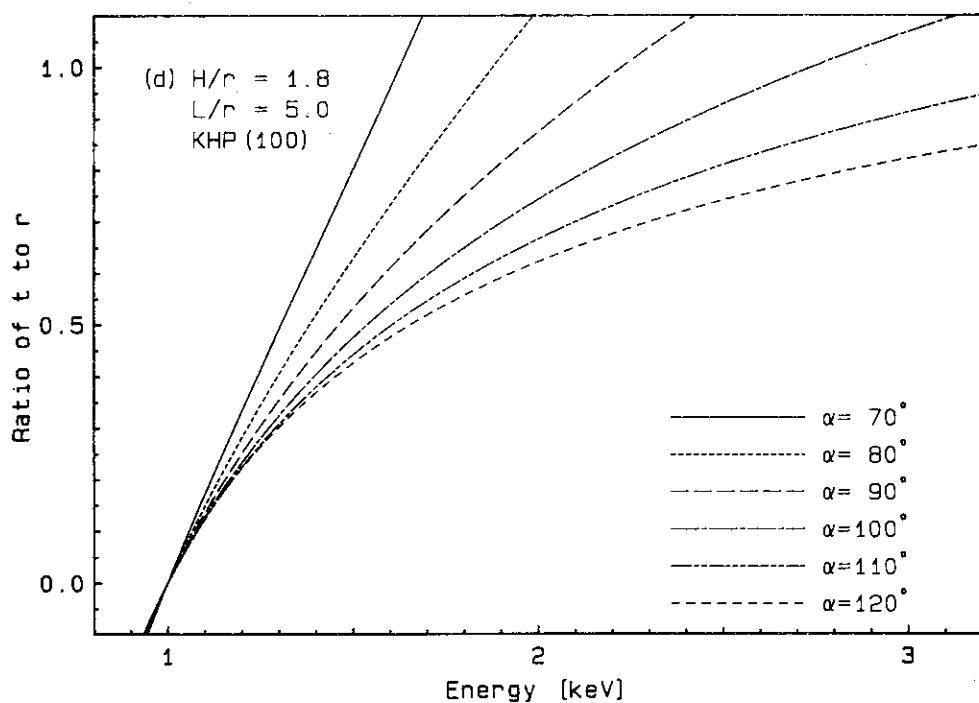


Fig. 17(d) Relative detecting position as a function of analyzed energy as a parameter of the detector setting angle. Position of the detector ( $H/r$ ) is 1.8.

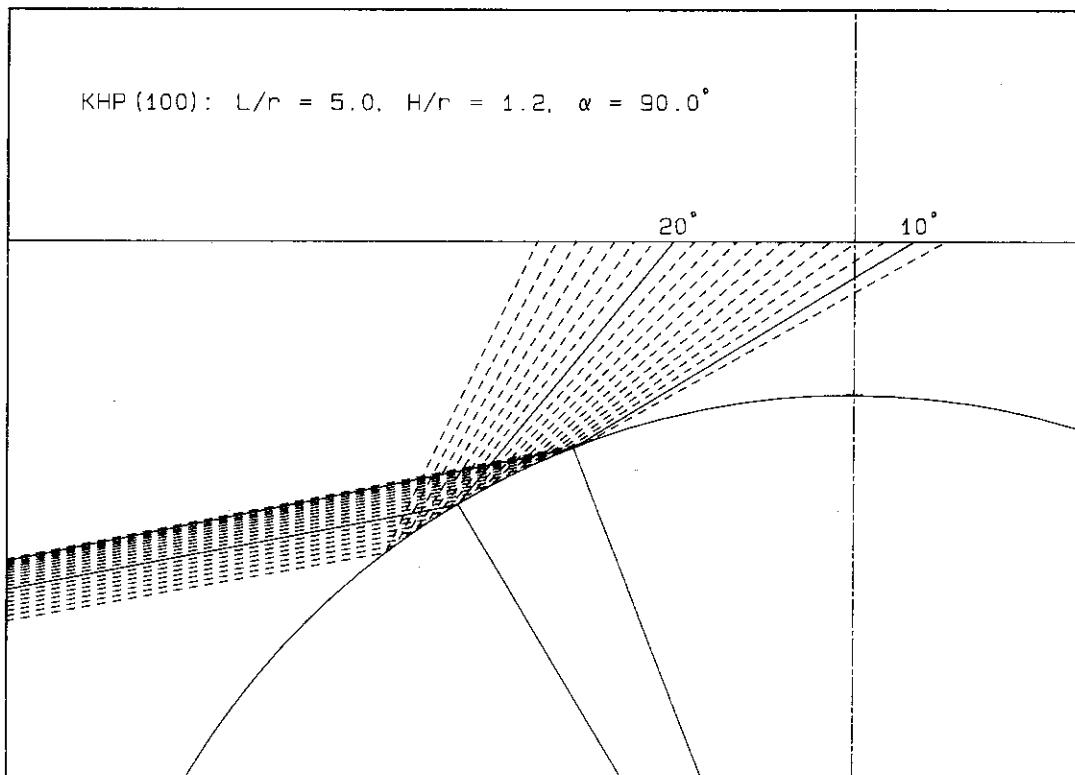


Fig. 18 Ray-tracing diagram computed for the KHP crystal polychromator.  
The arc and the solid straight line are setting faces of the crystal and the  
detector, respectively. The analyzed X-ray energy ranges from 1 to 3 keV.

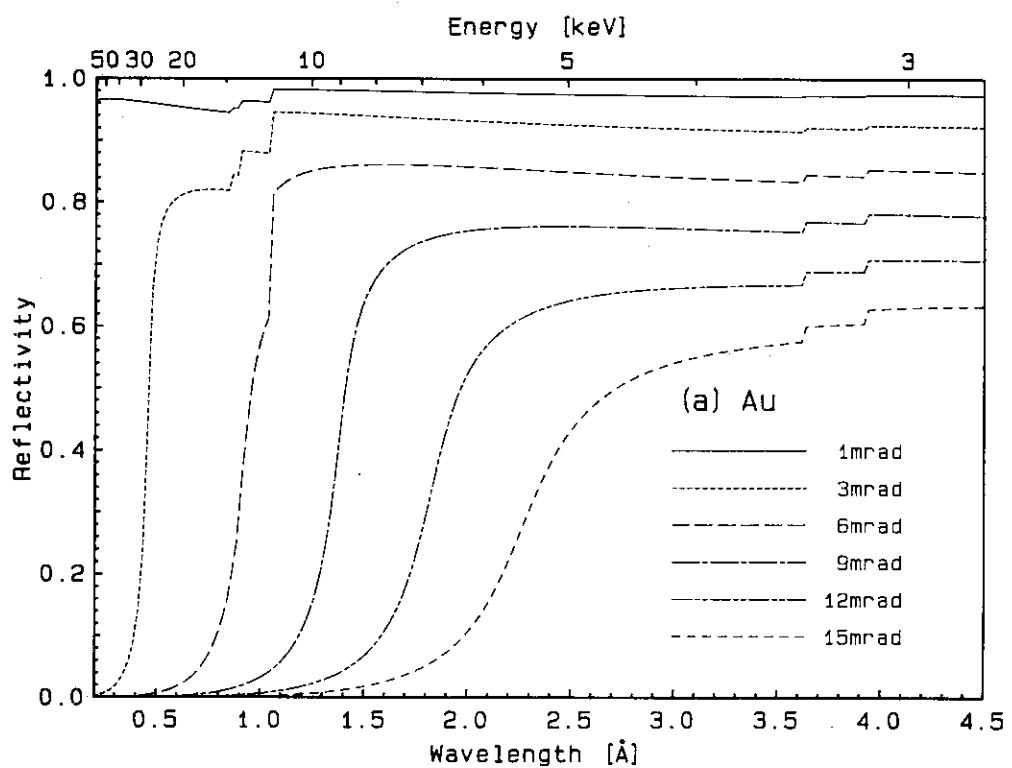


Fig. 19(a) Reflectivity of Au in the energy range up to 50keV as a function of wavelength using the glancing angle to the mirror as a parameter.

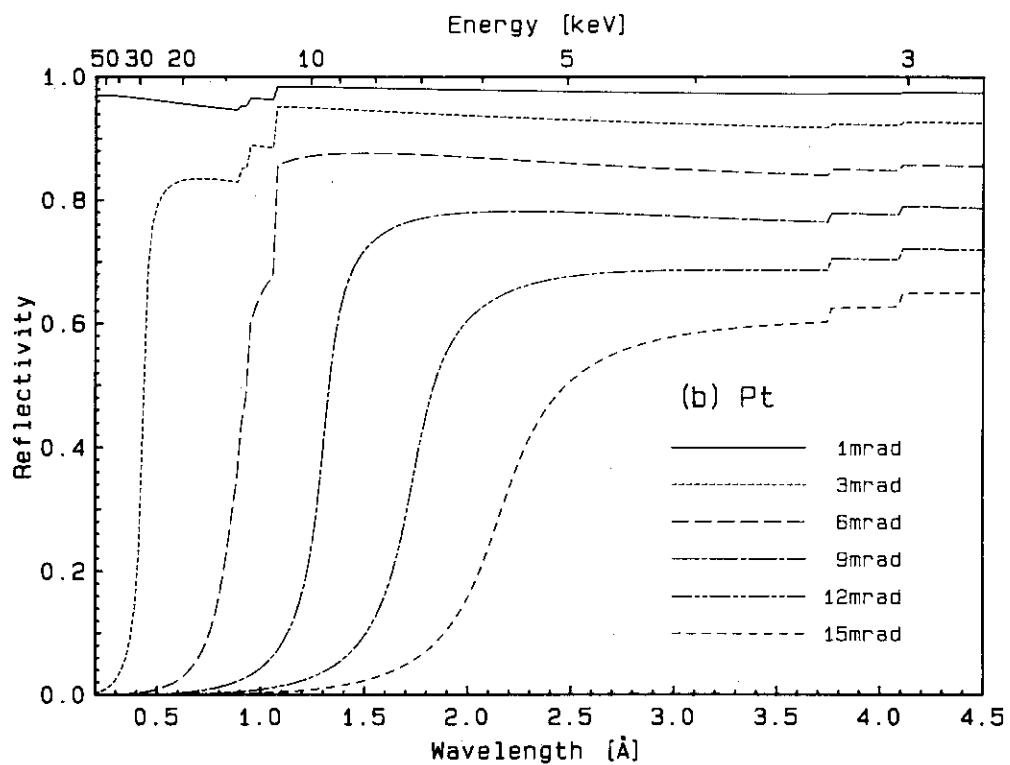


Fig. 19(b) Reflectivity of Pt in the energy range up to 50keV as a function of wavelength using the glancing angle to the mirror as a parameter.

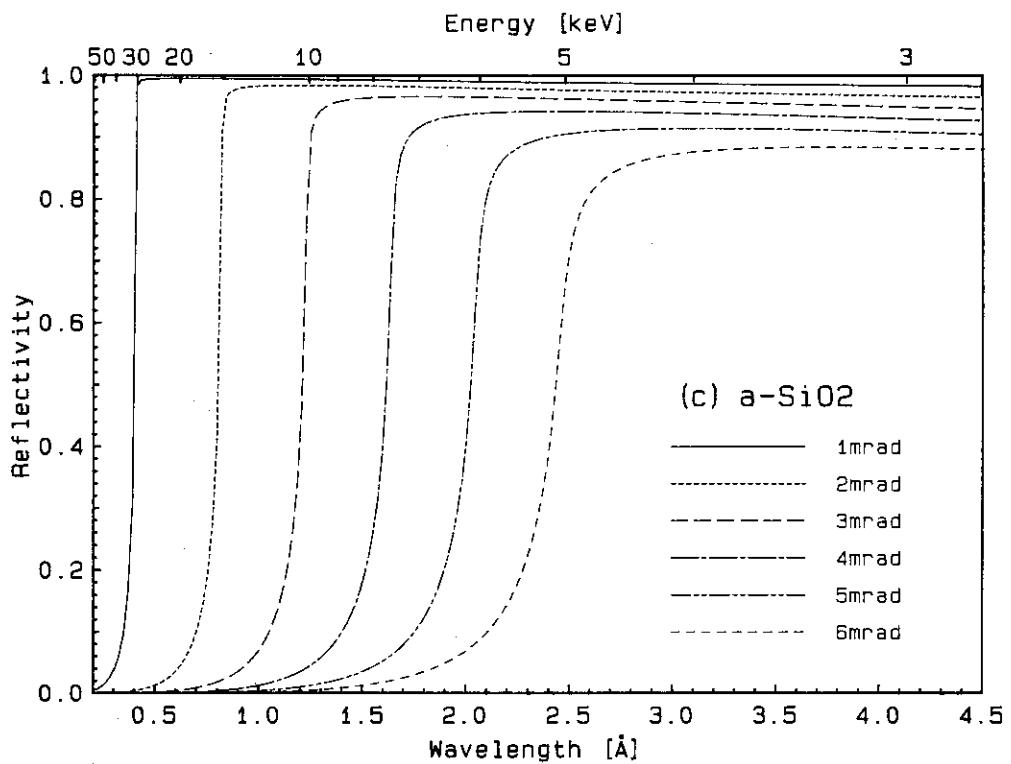


Fig. 19(c) Reflectivity of  $\alpha\text{-SiO}_2$  in the energy range up to 50keV as a function of wavelength using the glancing angle to the mirror as a parameter.

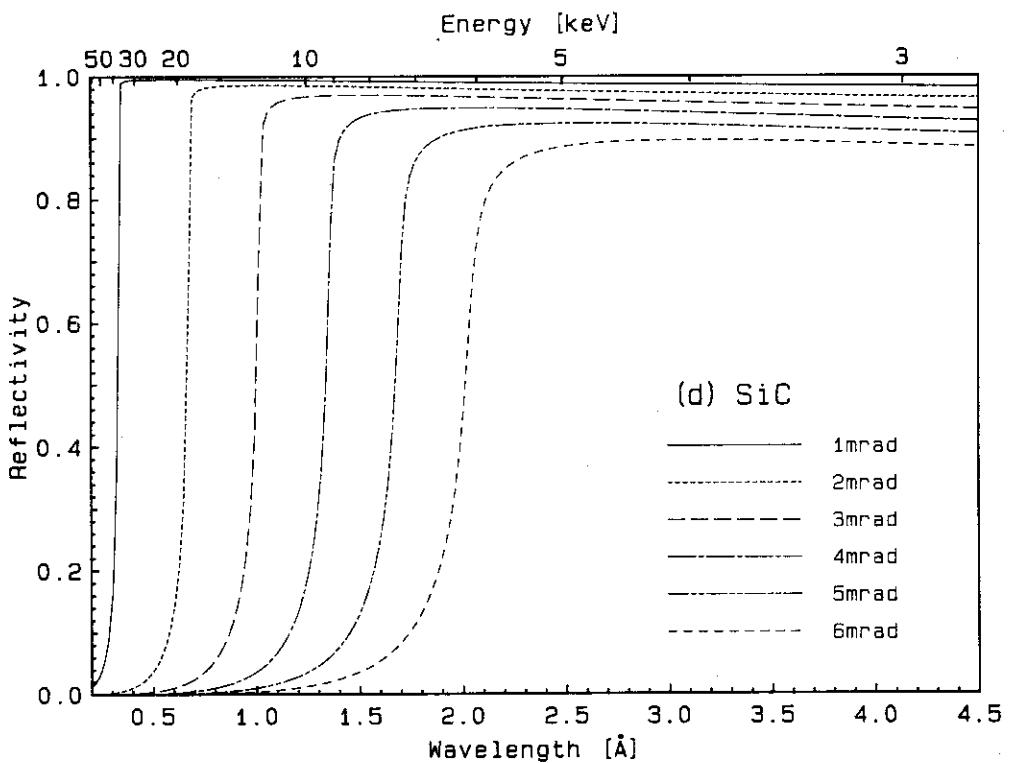


Fig. 19(d) Reflectivity of SiC in the energy range up to 50keV as a function of wavelength using the glancing angle to the mirror as a parameter.