

第 1 章

アンジュレータ放射光干渉法の原理

アンジュレータ放射光干渉法の概要を以下の図に示す。

図 1.1: アンジュレータ放射光干渉法の概要

初めに 1.1.1 章でアンジュレータ放射光の発生原理と放射される放射光の性質を述べる。続いて 1.1.2 節以降で 2 台のアンジュレータを用いることによる干渉の原理を示す。軸上 ($\theta = 0$) 放射の場合と、一般の θ におけるエネルギー決定公式を導く。続いて 1.2 章で放射光観測のための光学系による光学処理の原理を示す。最後に 1.3 章でこれらの原理をまとめた完全な物理モデルによる関数系の概要を示す。

1.1 アンジュレータ放射光

高エネルギーの荷電粒子が磁場中を通過するなどして加速度運動をすると、シンクロトロン放射光と呼ばれる電磁波が発生する。特に素粒子実験や加速器設計の立場からは、シンクロトロン放射によるエネルギー損失は無視できない問題であった。一方、電磁石の磁場を用いることで人為的に放射光を発生させ、利用する技術が開発されてきた。シンクロトロン放射は一般に指向性が高く極めて強い放射光を得ることができるため、物性科学や生物科学、医学などの広い分野で分光法やイメージング法に利用されている。

さらに、偏極電磁石による円軌道からの放射だけでなく、周期的な磁場を用いることでより高輝度で単色性の放射光が得られることが知られている。このような周期的磁場の発生装置をウィグラーやアンジュレータと呼び、特に電子ビームラインに挿入する形で用い

られることから挿入光源と総称される。アンジュレータ放射光干渉法はこのアンジュレータを利用した電子ビームエネルギー測定法である。次節ではまず、放射光の発生原理について述べる。

1.1.1 アンジュレータ放射光発生原理

この節ではアンジュレータの原理を示す。より詳細な記述に関しては[?, ?, ?]などがある。

放射光の一般原理

リエナール・ヴィーヘルト・ポテンシャルから出発して、放射強度の角度分布についての一般的な性質を説明する。電子から観測点へ向かうベクトルを \mathbf{R} 、これに平行な単位ベクトルを $\mathbf{n} = \mathbf{R}/R$ 、電子の電荷 e 、電子の相対論的速度 $\beta = v/c$ 、放射が発生した時刻(遅延時刻) t' 、放射の観測時刻 t として

$$\mathbf{A}(t) = \frac{\mu_0 c}{4\pi} \frac{e\beta(t')}{(1 - \mathbf{n}(t') \cdot \beta(t'))R(t')} \quad (1.1.1)$$

$$\varphi(t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e}{(1 - \mathbf{n}(t') \cdot \beta(t'))R(t')} \quad (1.1.2)$$

$$t = t' + \frac{R(t')}{c} \quad (1.1.3)$$

と書ける。放射される電磁場は、電磁ポテンシャルの定義から得ることができる。

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (1.1.4)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (1.1.5)$$

したがって

$$\mathbf{E} = \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{(1 - \beta^2)(\mathbf{n}(t') - \beta(t'))}{R(t')^2(1 - \mathbf{n}(t') \cdot \beta(t'))^3} + \frac{\mathbf{n}(t') \times \{(\mathbf{n}(t') - \beta(t')) \times \dot{\beta}(t')\}}{cR(t')(1 - \mathbf{n}(t') \cdot \beta(t'))^3} \right) \quad (1.1.6)$$

$$\mathbf{B} = \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{E}}{c} \quad (1.1.7)$$

と与えられる。 $1/R(t')^2$ の項は遠方で無視できるとして簡単にすると、

$$\mathbf{E} = \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{n}(t') \times \{(\mathbf{n}(t') - \beta(t')) \times \dot{\beta}(t')\}}{cR(t')(1 - \mathbf{n}(t') \cdot \beta(t'))^3} \quad (1.1.8)$$

$$\mathbf{B} = \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{E}}{c} \quad (1.1.9)$$

放射強度はポインティングベクトル $\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{B}/\mu_0 = |\mathbf{E}|^2 \mathbf{n}/c\mu_0$ を用いて、 $dP(t) = (\mathbf{S} \cdot \mathbf{n})R^2 d\Omega$ と表される。ただし、このままでは左辺が t の関数として与えられているの

に対し、右辺は t' の関数であり扱いづらい。ここでは t' に統一して、

$$\frac{dP(t')}{d\Omega} = \frac{dP(t)}{d\Omega} \frac{dt}{dt'} = \frac{e^2}{16\pi^2\epsilon_0 c} \frac{\left| \mathbf{n} \times \left\{ (\mathbf{n} - \boldsymbol{\beta}) \times \dot{\boldsymbol{\beta}} \right\} \right|^2}{(1 - \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\beta})^5} \quad (1.1.10)$$

と表記することにする。

今はアンジュレータの磁場による偏向運動を考えたいため、 $\boldsymbol{\beta} \perp \dot{\boldsymbol{\beta}}$ として議論を進める。電子の運動方向を z 軸にとり $\boldsymbol{\beta} = (0, 0, \beta)$ とする。また、磁場が y 軸に向いているとすれば、 $\dot{\boldsymbol{\beta}} = (\dot{\beta}, 0, 0)$ とおける (図 1.2)。

図 1.2: 放射光計算の座標系

3 次元極座標表示で、 $\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$ とすると、

$$\frac{dP(t')}{d\Omega} = \frac{e^2 \dot{\beta}^2}{16\pi^2\epsilon_0 c} \frac{(\cos \theta - \beta)^2 + (1 - \beta^2) \sin^2 \theta \sin^2 \phi}{(1 - \beta \cos \theta)^5} \quad (1.1.11)$$

$\beta \simeq 1$ の時に式 (1.1.11) の分母が $\theta \ll 1$ で 0 に近づくことにより、放射強度は電子の進行方向に鋭く集中することがわかる。 $\theta \ll 1$ のもとで $(1 - \beta \cos \theta)^{-1}$ が最大値の $1/2$ になる角度を θ_{SR} とすると、

$$\theta_{SR} = \sqrt{2 \left(\frac{1}{\beta} - 1 \right)} \sim \frac{1}{\gamma} \quad (1.1.12)$$

となり、この角度より狭い円錐の中に放射強度の大部分が集中することがわかる。

アンジュレータの周期的磁場による放射

アンジュレータによって発生させられた周期的な磁場 $B = B_0 \sin(2\pi z/\lambda_U)$ 中を電子が運動すると、同じ周期長 λ_U を持つ正弦波状の軌道を描き、いわゆる蛇行 (undulation) 運動をする。この磁場中の電子の運動方程式を解くと、電子の速度および位置を

$$\beta_x = \frac{K\beta}{\gamma} \cos(\omega_0 t') \quad (1.1.13)$$

$$\beta_z = \beta \left[1 - \frac{K^2}{4\gamma^2} - \frac{K^2 \cos(2\omega_0 t')}{4\gamma^2} \right] \quad (1.1.14)$$

$$r_x = \frac{K\lambda_U}{2\pi\gamma} \sin(\omega t') \quad (1.1.15)$$

$$r_z = \left(1 - \frac{K^2}{4\gamma^2} \beta c t' \right) - \frac{K^2 \lambda_U \sin(2\omega_0 t')}{16\pi\gamma^2} \quad (1.1.16)$$

(a) 蛇行運動中の放射

(b) 偏向定数 K による放射の違い [?]

図 1.3: 周期的磁場中の電子の運動による放射特性。放射が $1/\gamma$ の狭い角度に集中することから観測者に強い放射が到達するのは蛇行運動のうち電子が観測者の方向に運動している時に限られる。また、偏向定数に依存して放射の時間構造はサイン型や歪んだパルス状などの形をとり、これに対応して周波数特性が変化する。

と得ることができる。ここで

$$\omega_0 = 2\pi c\beta \frac{1 - K^2/4\gamma^2}{\lambda_U} \quad (1.1.17)$$

であり、 K は偏向定数と呼ばれ、電子軌道の最大偏角 Ψ と

$$K = \gamma\Psi = \frac{eB_0\lambda_U}{2\pi mc^2} = 93.4 \frac{B_0}{[\text{T}]} \frac{\lambda_U}{[\text{m}]} \quad (1.1.18)$$

のように関係づけられる。表式からわかるように、アンジュレータの周期と磁場によって偏向定数が決まる。

アンジュレータ放射は偏向定数によって特徴づけられる。電子軌道は最大偏角 $\Psi = K/\gamma$ のサイン型であり、1.1.1 節で述べたように、放射強度の広がり $1/\gamma$ 程度となることから、 $K \sim 1$ の場合には電子からの放射はほとんどすべて観測者に到達する。この時の電場はほぼサイン型になり、フーリエ変換して得られるスペクトルは単色性を持つ (図 1.3)。このような放射をアンジュレータ放射と呼ぶ。一方、 $K \gg 1$ の場合には、電子がサイン型軌道の頂点を通過するときのみ放射が観測されるため、大きくゆがんだパルス状になる。フーリエ変換によって得られるスペクトルは高調波が卓越する。このような放射をウィグラー放射と呼ぶ。このように偏向定数によって放射特性を変化させることができ、実用上は磁場強度を変化させることで求められる特性の放射を取り出すことができる。

また放射スペクトル、すなわち放射強度の周波数 (ω) 分布を求めたい。そのためには式 (1.1.8) に式 (1.1.13) を代入し、電場の時間変化を得たうえでフーリエ変換を行えばよい。電場のフーリエ変換は観測点における周波数成分を求めることに対応するため

$$\mathbf{F}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(t') \exp(-i\omega t) dt \quad (1.1.19)$$

とすれば、全放射強度の角密度は

$$\frac{dW}{d\Omega} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dP(t)}{d\Omega} dt = \frac{1}{2c\mu_0\pi} \int_0^{\infty} |R\mathbf{E}|^2 dt = \frac{1}{c\mu_0} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{F}(\omega)\mathbf{F}(\omega)^* d\omega \quad (1.1.20)$$

と変形できる。一方で、単位周波数当たりの全放射強度は

$$\frac{dW}{d\Omega} = \int_0^{\infty} \frac{d^2 I}{d\omega d\Omega} d\omega \quad (1.1.21)$$

したがって

$$\frac{d^2 I}{d\omega d\Omega} = \frac{1}{2c\mu_0\pi} \mathbf{F}(\omega)\mathbf{F}(\omega)^* \quad (1.1.22)$$

ただし遅延時刻 t' で評価された式も観測時刻 t でフーリエ変換されていることに注意する。 $\mathbf{n} = (\sin\theta \cos\phi, \sin\theta \sin\phi, \cos\theta)$ を再び用いると、 $\mathbf{n} \perp \mathbf{E}$ であるから、 \mathbf{n} に垂直な 2 成分だけなので、特に $x-z$ 平面と平行な成分 E_{\parallel} およびこれに垂直な成分 E_{\perp} に分解することができる。フーリエ変換した結果は次のように表せる [?].

$$E_{\parallel} = g\xi \{2S_0\gamma\theta \cos\phi - K(S_1 + S_{-1})\} \quad (1.1.23)$$

$$E_{\perp} = g\xi \{2S_0\gamma\theta \sin\phi\} \quad (1.1.24)$$

この式で、 N をアンジュレータの周期数として、

$$g = -i \frac{e\gamma}{cR} \frac{\sin(N\pi(\omega/\omega_1 - 1))}{\omega/\omega_1 - 1} \exp[-ik\omega_1 R/c] \quad (1.1.25)$$

$$\omega_1 = \frac{2\gamma^2\omega_0}{1 + K^2/2 + (\gamma\theta)^2} \quad (1.1.26)$$

$$\xi = \frac{1}{1 + (\gamma\theta)^2 + K^2/2} \quad (1.1.27)$$

$$S_q = \sum_{p=-\infty}^{\infty} J_{1+2p+q}(2\xi K\gamma\theta \cos\phi) J_p(K^2/4) \quad (1.1.28)$$

であり、 J_p は p 次のベッセル関数である。このようにして、アンジュレータ放射光のスペクトルを求めることができる。

$$\begin{aligned} \frac{d^2 I}{d\omega d\Omega} &= \frac{e^2\gamma^2\xi^2}{\pi^2 c} \frac{\sin^2\{N\pi(\omega/\omega_1 - 1)\}}{(\omega/\omega_1 - 1)^2} \\ &\times [\{2S_0\gamma\theta \cos\phi - K(S_1 + S_{-1})\}^2 + \{2S_0\gamma\theta \sin\phi\}^2] \end{aligned} \quad (1.1.29)$$

最後に、電場の時間変化について簡単な計算を行う。 $\theta = 0$ で観測することを考える (図 1.4)。アンジュレータの入口に到達する時刻を $t' = t'_1$ 、アンジュレータの出口から出る時刻を $t' = t'_2$ とする。アンジュレータの長さを L とすれば、 $t'_2 - t'_1 \simeq L/v$ と書ける。さらにアンジュレータの出口から観測点までの距離を R とすれば、電場の時間変化の始まりと終わりを検知する時刻は、 $t_1 = t'_1 + (R + L)/c$ 、 $t_2 = t'_2 + R/c$ と書ける。したがって観測者が検知するパルス幅 Δt は、 $v/c \simeq 1 - 1/2\gamma^2$ を考慮して

$$\Delta t = t_2 - t_1 = \frac{L}{v} - \frac{L}{c} \simeq \frac{L}{2c\gamma^2} \quad (1.1.30)$$

図 1.5: アンジュレータ放射の時間構造

図 1.4: アンジュレータ放射の観測点における電場の時間変化

同様の計算は、アンジュレータの 1 周期について行うことも可能であり、電場変化の周期は $L \rightarrow \lambda_U$ の変換によって求められる。電場変化の周期はアンジュレータの磁場変化の周期に対応することから、アンジュレータ放射の時間構造は磁場と同じ回数振動するパルス状の波形になる (図 1.5)。

アンジュレータ内の蛇行運動によって z 軸方向の平均の相対論的速度は式 (1.1.13) より $\langle \beta_z \rangle = \beta(1 - K^2/4\gamma^2)$ であることがわかり、結果として観測される放射の周期は

$$T = \frac{\lambda_U}{v(1 - K^2/4\gamma^2)} \quad (1.1.31)$$

$$= \frac{\lambda_U}{2c\gamma^2}(1 + K^2/2) \quad (1.1.32)$$

したがってアンジュレータ放射の波長は

$$\lambda_R = \frac{\lambda_U}{2\gamma^2}(1 + K^2/2) \quad (1.1.33)$$

にピークを持つようなスペクトルを持つことがわかる。これは式 (1.1.26) に対応しており、特に共鳴波長と呼ぶ。

本研究で用いたアンジュレータの場合に得られる放射光強度の例を図 1.6, 1.7 に示す。

(a) 二次元スペクトル

(b) $y=0$

(c) $x=0$

図 1.6: $K = 0.710$ 、 $E_{beam} = 195$ MeV のとき、アンジュレータから $z=11$ m 後方で、 $\lambda_L=404.7$ nm の波長を観測したときに得られる放射光強度（振幅）。この時共鳴波長は $\lambda_R = 403.6$ nm であり、ビーム軸で強度は最大になる。

(a) 2次元スペクトル

(b) $y=0$ でのスペクトル

(c) $x=0$ でのスペクトル

図 1.7: $K = 1.046$ 、 $E_{beam} = 210$ MeV のとき、アンジュレータから $z=11$ m 後方で、 $\lambda_L=404.7$ nm の波長を観測したときに得られる放射光強度（振幅）。この時共鳴波長は $\lambda_R = 366.4$ nm であり、観測波長よりも短い。このとき強度が最大になるのはビーム軸の外になる。

1.1.2 アンジュレータ放射光 - タンデムアンジュレータ

アンジュレータを電子ビームに沿って 2 つ連結した構成は放射光科学において広く使われている。これらのアンジュレータ間にシケイン電磁石を配置することで遅延を調整することが可能になる。さらにアンジュレータの種類や構成によって位相や偏光状態の異なる様々な形状の放射光を得ることができる [?]

本研究では、タンデムアンジュレータを用いている。アンジュレータ自体を移動させアンジュレータ間の物理的距離を変化させる点が特徴的な構成である。

1.1.3 干渉の原理

1.1.1 節の議論から、タンデム型アンジュレータから放射される放射光はダブルパルス型の波形となることがわかる。そのままでは 2 つのパルスは干渉することができないため、遅延を発生させる必要がある。この役割を担っているのが回折格子である。回折格子

のそれぞれの溝から散乱された光は格子間隔に比例して遅延された光の干渉となる。そのためダブルパルスの二つのパルスは格子による遅延を受けて干渉できることになる (図 1.8)。

図 1.8: ダブルパルス間の間隔以上の遅延が回折格子の溝同士で起きれば、パルス同士の干渉作用を観測することができる。

1.1.4 電子ビームエネルギーと干渉光周期の関係式

ダブルパルスの間隔は以下のような近似で理解することができる。

図 1.9: アンジュレータ放射光干渉法の光路差、位相差、干渉光周期 λ_{osc} の関係。 λ_{osc} は、アンジュレータを λ_{osc} だけ移動させたときに二つの波束の位相がちょうど 1 波長 λ_L だけずれる長さとして定義される。

上流のアンジュレータで発生する放射光は電子ビームよりも早く、電子が下流側のアン

ジュレータに到達した時にはアンジュレータ間の距離 d' に比例した光路差が生じる。

$$\Delta = \frac{1}{2\gamma^2} d' \quad (1.1.34)$$

この時間差は放射光の 2 つのパルスの位相差となる。

$$\Phi = 2\pi \frac{\Delta}{\lambda_L} \quad (1.1.35)$$

位相差に対応して干渉光は強めあい、干渉光強度は

$$|\tilde{E} (1 + e^{i\Phi})|^2 = |\tilde{E}|^2 (1 + \cos(\Phi)) \quad (1.1.36)$$

$$= |\tilde{E}|^2 \left(1 + \cos\left(\frac{2\pi}{2\gamma^2 \lambda_L} d'\right) \right) \quad (1.1.37)$$

これより、 d' を変化させると干渉光の位相差が変化し強度が周期的に変動することがわかる。式 (1.1.37) から、アンジュレータ間距離を $2\gamma^2 \lambda_L$ だけ動かした時に 1 周する (図 1.9)。この周期を λ_{osc} とおけば γ および電子ビームエネルギーが

$$\gamma = \sqrt{\frac{\lambda_{osc}}{2\lambda_L}} \quad (1.1.38)$$

$$E_{beam} = m_e c^2 \sqrt{\frac{\lambda_{osc}}{2\lambda_L}} \quad (1.1.39)$$

すなわち、干渉光の波長 λ_L と、アンジュレータ間距離を変動させた時の干渉光の変動の周期 λ_{osc} を精密に測定することで電子ビームエネルギーが精密に測定できる。

1.1.5 補正 - 放射角度と干渉光周期の関係式

式 (1.1.34) は放射光角度が電子ビームと同じとき ($\theta = 0$) の光路差である。電子ビームの軸と放射光の放射角 (近似的に放射光の観測角) を θ とおくと、アンジュレータ間の距離 d' と θ で光路差が $d(1 - \cos \theta)$ と表される。これと電子ビームの遅延による光路差 1.1.34 の両方を考慮した光路差は、

$$\Delta = d' \frac{1}{2\gamma^2} + d(1 - \cos \theta) \quad (1.1.40)$$

$$\sim d' \left(\frac{1}{2\gamma^2} + \frac{\theta^2}{2} \right) \quad (1.1.41)$$

$$(1.1.42)$$

と表せる。したがって放射光の観測角 (\simeq 放射角) の補正を入れることで干渉光の周期は

$$\lambda_{osc} = \frac{\lambda_L}{\frac{1}{2\gamma^2} + \frac{\theta^2}{2}} \quad (1.1.43)$$

となる。

1.2 光学系

放射光は光学系を通してカメラで光学的に撮影する。光学系の役割は分光とパルス波形の平面化にある。式 (1.1.39) が示すとおり、電子ビームエネルギーは波長の平方根の逆数に比例するため 10^{-4} のエネルギー絶対値較正精度を得るために波長決定精度は少なくとも 10^{-4} 程度必要となる。またタンデムアンジュレータから放射される放射光は 1.1.1 節で示したようにダブルパルス型の波形を持ちこのままでは 2 つのパルスは干渉を起こさない。そのため平面波化（フーリエ変換）が必要となる。図 1.10 に光学系の概要を示す。矩形スリットで整形した光波は伝搬に伴って回折を生じる (1.2.1 章)。後段には回折格子

図 1.10: 光学系の概要

およびレンズがあり、光波は分光と平面波化 (1.2.2, 1.2.3 章) を受けカメラに到達する。

1.2.1 回折の定式化

この節ではマクスウェル方程式から出発して回折現象の定式化を行い、光学系に入射する放射光がカメラに作る像を求める式を導出する。

ヘルムホルツ方程式

光波の伝搬はマクスウェル方程式に従う。マクスウェル方程式から、電場の従う波動方程式が

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (1.2.1)$$

と導ける。これは磁場についても同様であるから、これを一般化し、以降波動方程式のスカラー解を $u(P, t)$ とあらわす。ここで P は空間座標を表す。さらに単色光を考えるこ

とで

$$u(P, t) = \text{Re} [U(P) \exp(-i\omega t)] \quad (1.2.2)$$

と時間に依存する項を分けることができる。 $U(P)$ は空間座標に関する複素関数である。式 (1.2.2) を式 (1.2.1) に代入することで、 U に関する方程式

$$(\nabla^2 + k^2) U(P) = 0 \quad (1.2.3)$$

を導くことができる。ここで k は波数であり、 $k = 2\pi\omega/c = 2\pi/\lambda_L$ である。方程式 (1.2.3) をヘルムホルツ方程式と呼ぶ。

ヘルムホルツ方程式はグリーン関数を用いて解くことができる。 $U(P)$ 、 $G(P)$ を位置に関する複素関数、体積 V の領域を囲む閉曲面 S を定義すると、

$$\int_V (U \nabla^2 G - G \nabla^2 U) dv = \int_S \left(U \frac{\partial G}{\partial n} - G \frac{\partial U}{\partial n} \right) ds \quad (1.2.4)$$

というグリーン関数の定理が成り立つ。ここで $\partial/\partial n$ は閉曲面に垂直な外向きのベクトルに沿った偏微分を表す。適当なグリーン関数 G を定義することで $U(P)$ に関する方程式を立てることができる。

フレネル・キルヒホッフ回折積分

観測点の座標を P_0 、 P_0 を囲む任意の閉曲面を S とする (図 1.11)。 P_0 における光波 $U(P_0)$ を S の表面の光波で表すことを考えたい。

図 1.11: 表面積分の積分領域 S と観測点 P_0

ここでグリーン関数として、 P_0 を原点とする一様振幅の球面波を考えることにする。すなわち、空間上の任意の点 P_1 に対して

$$G(P_1) = \frac{\exp(ikr)}{r}, \quad r = |P_0 - P_1| \quad (1.2.5)$$

この式は P_0 において発散するので、積分領域に工夫が必要である。 P_0 を中心とした微小半径 ϵ の球面 S_ϵ を考え、体積分の積分領域を S と S_ϵ で囲まれた領域とする。この時、

面積分の積分領域は S および S_ϵ である (図 1.11)。領域 V 内部でグリーン関数 (1.2.5) は

$$(\nabla^2 + k^2)G = 0 \quad (1.2.6)$$

を満たす。これによりグリーン関数の定理 1.2.4 の左辺は、 U もヘルムホルツ方程式をみたすことから、

$$\int_V (U \nabla^2 G - G \nabla^2 U) dv = - \int_V (k^2 U G - k^2 G U) dv = 0 \quad (1.2.7)$$

となる。したがって、右辺から、

$$\int_{S+S_\epsilon} \left(U \frac{\partial G}{\partial n} - G \frac{\partial U}{\partial n} \right) ds = 0 \quad (1.2.8)$$

$$- \int_{S_\epsilon} \left(U \frac{\partial G}{\partial n} - G \frac{\partial U}{\partial n} \right) ds = \int_S \left(U \frac{\partial G}{\partial n} - G \frac{\partial U}{\partial n} \right) ds \quad (1.2.9)$$

ここに $G(P_1) = \exp(ikr)/r$ を代入すると、

$$\frac{\partial G(P_1)}{\partial n} = \cos(\mathbf{n}, \mathbf{r}) \left(ik - \frac{1}{r} \right) \frac{\exp(ikr)}{r} \quad (1.2.10)$$

となる。特に S_ϵ においては、 $\epsilon \rightarrow 0$ の極限をとることで、

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_S \left(U \frac{\partial G}{\partial n} - G \frac{\partial U}{\partial n} \right) ds = 4\pi U(P_0) \quad (1.2.11)$$

と計算できるから、

$$U(P_0) = \frac{1}{4\pi} \int_S \left(\frac{\partial U}{\partial n} \left[\frac{\exp(ikr)}{r} \right] - U \frac{\partial}{\partial n} \left[\frac{\exp(ikr)}{r} \right] \right) ds \quad (1.2.12)$$

より、 $U(P_0)$ が任意の閉曲面 S の境界上の光波 $U(P)$ から計算できることがわかる。

これをスリットによる回折現象のように、ある平面上の波面から回折像を計算する場面に適用したい。そのために図 1.12 のように半径 R の球面 S_2 をスリットの平面 S_1 で切断した閉曲面を考える。

図 1.12: スリットによる回折のための閉曲面の定義。観測点 P_0 を中心とする半径 R の球面を S_2 、この球面が開口のある平面で切断される平面を S_1 とおく。また開口面の領域を Σ と置く。

観測点 P_0 における光波は S_1 および S_2 を合わせた閉曲面上の積分となり、

$$U(P_0) = \frac{1}{4\pi} \int_{S_1+S_2} \left(\frac{\partial U}{\partial n} \left[\frac{\exp(ikr)}{r} \right] - U \frac{\partial}{\partial n} \left[\frac{\exp(ikr)}{r} \right] \right) ds \quad (1.2.13)$$

R が十分大きい極限で、 S_2 の寄与が無視できることを示したい。 S_2 上では

$$G = \frac{\exp(ikR)}{R} \quad (1.2.14)$$

であるから、十分大きな R に対して

$$\frac{\partial G}{\partial n} = \left(jk - \frac{1}{R} \right) \frac{\exp(ikR)}{R} \simeq jkG \quad (1.2.15)$$

と近似できる。この時 S_2 上の積分は

$$\int_{S_2} = \left[G \frac{\partial U}{\partial n} - U(jkG) \right] ds = \int G \left(\frac{\partial U}{\partial n} - jkU \right) R^2 d\Omega \quad (1.2.16)$$

と変換できる。ここで $|RG|$ は S_2 上で定数であるから、 S_2 上での積分が無視できる十分条件は、

$$\lim_{R \rightarrow \infty} R \left(\frac{\partial U}{\partial n} - jkU \right) = 0 \quad (1.2.17)$$

が等方的に成り立つことである。 U が外向きの球面波と近似できるときにはこの条件が成り立つが、今考えている状況は S_2 上での内向きの光波を考える必要がないため、結論として S_2 上での積分は 0 と計算できる。したがって、最終的に

$$U(P_0) = \frac{1}{4\pi} \int_{S_1} \left(\frac{\partial U}{\partial n} G - U \frac{\partial G}{\partial n} \right) ds \quad (1.2.18)$$

によって計算できることが確かめられる。

最後に、 S_1 全体における積分を開口面 Σ のみに制限した積分計算で置き換えることが可能かを検討する。 S_1 上の積分を Σ の積分で置き換えるためには、

- Σ における $U, \partial U/\partial n$ が、開口面がない時の S_1 と正確に一致すること
- Σ 以外の S_1 上で U と $\partial U/\partial n$ の寄与が 0 であること

を仮定する必要がある。これらの条件は**キルヒホッフの境界条件**として知られる。この条件は Σ の長さスケールが波長より十分大きい時には成り立つことが知られており、この場合には

$$U(p_0) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Sigma} \left(\frac{\partial U}{\partial n} G - U \frac{\partial G}{\partial n} \right) ds \quad (1.2.19)$$

$$= \frac{1}{4\pi} \int_{\Sigma} \left(\frac{\partial U}{\partial n} \frac{\exp(ikr)}{r} - U \cos(\mathbf{n}, \mathbf{r}) \left(ik - \frac{1}{r} \right) \frac{\exp(ikr)}{r} \right) \quad (1.2.20)$$

と簡単にできる。

近似として、 $k \gg 1/r$ の時には、

$$U(P_0) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Sigma} \frac{\exp(ikr)}{r} \left[\frac{\partial U}{\partial n} - ikU \cos(\mathbf{n}, \mathbf{r}) \right] \quad (1.2.21)$$

本実験では $r \sim 4$ m、 $\lambda_L \sim 400$ nm であるからこの近似が正当化できる。

レイリー・ゾンマーフェルト回折積分

フレネル・キルヒホッフの回折積分ではキルヒホッフの境界条件が暗に仮定されているが、 U および $\partial U/\partial n$ が開口面の外で同時に 0 になることを仮定すると、全領域に渡って $U = 0$ となることが解析的に得られる。これは物理的な解とは言えない。フレネル・キルヒホッフの回折積分は厳密にはこのような不整合性を内在している。この問題を解決するために、式 (1.2.4) において別のグリーン関数を定義して解く方法が知られている。これがレイリー・ゾンマーフェルト回折積分である。

グリーン関数として、 P_0 を原点とする球面波と、開口面 S_1 平面に対する鏡像の球面波の和を考える (図 1.13)。すなわち

$$G(P) = \frac{\exp(ikr_{01})}{r_{01}} - \frac{\exp(ik\tilde{r}_{01})}{\tilde{r}_{01}} \quad (1.2.22)$$

と取ると、 S_1 平面上で $G = 0$ となる。

図 1.13: レイリー・ゾンマーフェルト回折積分のグリーン関数

したがって、 Σ の外で $U = 0$ であることに注意すれば、

$$U(P_0) = -\frac{1}{4\pi} \int_{\Sigma} \left(U \frac{\partial G}{\partial n} \right) ds \quad (1.2.23)$$

対応する G の法線微分は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial n} = & \cos(\mathbf{n}, \mathbf{r}_{01}) \left(ik - \frac{1}{r_{01}} \right) \frac{\exp(ikr_{01})}{r_{01}} \\ & - \cos(\mathbf{n}, \tilde{\mathbf{r}}_{01}) \left(ik - \frac{1}{\tilde{r}_{01}} \right) \frac{\exp(ik\tilde{r}_{01})}{\tilde{r}_{01}} \end{aligned} \quad (1.2.24)$$

P_1 が S_1 上にあるから、 $r_{01} = \tilde{r}_{01}$ 、 $\cos(\mathbf{n}, \mathbf{r}_{01}) = -\cos(\mathbf{n}, \tilde{\mathbf{r}}_{02})$

$$\frac{\partial G}{\partial n} = 2 \cos(\mathbf{n}, \mathbf{r}_{01}) \left(ik - \frac{1}{r_{01}} \right) \frac{\exp(ikr_{01})}{r_{01}} \quad (1.2.25)$$

フレネル・キルヒホッフの回折積分と同様に、近似¹ $k \gg 1/r$ の近似を用いるとより簡単に表せて、これを代入すれば、

$$U(P_0) = \frac{1}{i\lambda} \int_{\Sigma} U(P_1) \frac{\exp(ikr_{01})}{r_{01}} \cos(\mathbf{n}, \mathbf{r}_{01}) ds \quad (1.2.26)$$

と計算できることになる。この時、キルヒホッフの境界条件は $U = 0$ のみを用いているため、フレネル・キルヒホッフの回折積分で生じた不整合は解決できた。

フレネル・キルヒホッフの回折積分もレイリー・ゾンマーフェルトの回折積分も実験結果を正しく説明できることが知られており、解析的にも等価であることが示せる [?]。ここでは計算の簡略化のため、以降レイリー・ゾンマーフェルトの回折積分の表式を用いて計算することにする。

改めて書き下すと

$$U(P_0) = \frac{1}{i\lambda} \int_{\Sigma} U(P_1) \frac{\exp(ikr)}{r} \cos(\mathbf{n}, \mathbf{r}) ds \quad (1.2.27)$$

開口面 Σ 上の座標 P_1 における光波 $U(P_1)$ から、観測点 P_0 における光波 $U(P_0)$ を、 $r = |P_0 - P_1|$ を用いて計算できる。今回のセットアップでは更に近似を用いて簡潔に表すことができる。観測点 P_0 は Σ から 4 m 離れた平行な平面上（カメラのスクリーン）にあり、 Σ は高さ 6 mm の矩形スリット、スクリーンの幅は 15 mm とする。

- $k \gg 1/r$ の近似。 $r \sim 4 \text{ m}$ 、 $\lambda_L \sim 400 \text{ nm}$ であるから、この近似が正当化できる。
- $\cos(\mathbf{n}, \mathbf{r}) = 1$ の近似。 \mathbf{n} 、 \mathbf{r} がなす角 θ の最大値は $\tan \theta = 10.5 \text{ mm}/4 \text{ m} \sim 0.0027$ であり、この時 $\theta \sim 0.027 \text{ rad}$ 、 $\cos \theta \sim 1 - \theta^2/2$ であるから、この近似が正当化できる。
- Σ 上で $r = \text{const.}$ の近似。 $z \sim 4 \text{ m}$ 、 $|y| < 10 \text{ mm}$ であるから、この近似が正当化できる。

これらの近似により、により式 (1.2.1) は

$$U(P_0) = -\frac{i}{2\lambda r} \int_{\Sigma} U(P_1) \exp(ikr) ds \quad (1.2.28)$$

と計算できる。

このような回折現象は伝搬距離によっては近似計算できることが知られている。以下では積分領域 S 上の座標を x, y 、観測点 P の座標を x_0, y_0 と表記する。

$$r = \sqrt{z^2 + (x - x_0)^2 + (y - y_0)^2} \quad (1.2.29)$$

$$= z + \frac{1}{2} \frac{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}{z} - \frac{1}{8} \frac{[(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2]^2}{z^3} + \dots \quad (1.2.30)$$

と展開できるから、 $[(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2]^2 / 8\lambda_L \ll z^3$ が成立するなら

$$U(x_0, y_0) \sim -\frac{i}{2\lambda z} \int U(x, y) \exp\left(ik \left\{ z + \frac{1}{2} \frac{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}{z} \right\}\right) \quad (1.2.31)$$

これはフレネル近似として知られている。更に z が大きく、 $(x - 2 + y^2)/\lambda_L \ll z$ が成り立つならば、

$$U(x_0, y_0) \sim -\frac{i}{2\lambda z} \int U(x, y) \exp\left(ik \left\{ z - \frac{xx_0 + yy_0}{z} \right\}\right) \quad (1.2.32)$$

というフラウンホーファー近似が成立する。

数値計算手法については第 3 章に記述する。

1.2.2 回折格子とレンズによる分光

波面は回折格子で波長ごとに特定の方法に分光される。レンズによって集光することでカメラでは特定の波長が鋭いピークとなるため、高い波長分解能を実現できる (図 1.14)。

図 1.14: 波長分光の概要

1.2.3 回折格子による平面波化

回折格子は図 (1.8) のようにブレードと呼ばれる溝が掘られている。光波はブレードによって反射されるが、隣り合うブレードから反射される光波は干渉を起こし、平面波となる。このような平面波化はフーリエ変換として理解できる。タンデム型アンジュレータから放射されるダブルパルス型の放射光が回折格子によって平面波化されることで、前後のパルスが干渉を起こす。

1.2.4 電子ビームの集団運動

これまでの議論は電子 1 個の場合について述べたが、実際には電子ビームは多数の電子からなり、放射光もその一つ一つから放射されるパルスの重ね合わせである。そのため、異なる電子から放射されたパルス同士が干渉することも考慮しなければいけないが、自己相関の干渉項以外はランダム性から無視できると考えられる。

1.2.5 撮影画像

これらの一連の流れを図 1.15 に示した。

図 1.15: 撮影画像の概要。スリットによる回折の縞模様が、回折格子で水平方向にのみ平面波化される結果、水平方向の縞模様の画像が得られる。

放射光がスリットによって回折を受けると、カメラでは2次元の回折パターン構造が得られると推定される。一方で回折格子による分光、平面波化作用は水平方向にのみ作用する。従って画像の横軸は波長に対応し、縦軸の座標は観測角に対応する。

1.3 モデル関数

モデル関数の概要を示す。モデル関数は、アンジュレータの位置座標 d とカメラにおける y 座標、および観測波長 λ_L の関数として定義され、カメラの撮影画像のある波長 λ_L での発光量を再現する。モデル関数は、放射光の電場振幅・位相を計算する放射光関数と、回折の効果を計算する光学関数に分離できる。具体的な関数の形は、第??章で述べる。