

研究課題名：パラメトリック X 線放射による波長可変単色 X 線源の開発

研究代表者：早川 恭史（日本大学量子科学研究所）

研究従事者：佐藤 勇（日本大学量子科学研究所）

早川 建（日本大学量子科学研究所）

田中 俊成（日本大学量子科学研究所）

【研究目的】

125MeV 電子線形加速器を用いた単色 X 線源を開発し、応用研究に利用できるように実用化することを目的とする。電子エネルギーの制約から、従来の制動放射を利用する方法では単色 X 線源の実現は困難であるため、高エネルギーの電子線を結晶性物質に照射することによって生じるパラメトリック X 線放射（PXR）という現象を X 線源の素過程として採用する。PXR には単色性、指向性に優れ、結晶の角度によって波長の選択が可能という特徴がある。大電流の線形加速器と組み合わせることにより、ピーク輝度に優れた単色パルス X 線源の実現が期待できる。PXR による X 線源を実用化するために、専用ビームラインや PXR 発生装置を開発し X 線ビームラインの整備を行う。

【研究概要】

・PXR 発生装置の開発とビームラインの建設

プロジェクト以前より行っていた理論計算において、2 結晶システムによる PXR の線源化の可能性が示唆されていたので、この光線追跡による数値シミュレーションの精度を高めてさらに推し進めた。その結果に基づいて 2 結晶型 PXR 発生装置の仕様を決定し、開発に着手した。設計上はシリコン単結晶(111)面を使用した場合、4keV～20keV のエネルギー範囲の X 線の発生が可能である。装置の製作と並行して専用ビームラインの設計・建設も行い、平成 12 年度末にはビームラインと PXR 発生装置の設置が完了した。

・PXR 発生装置からの X 線の観測

放射線関連の申請および施設検査の遅れから実際に実験を開始したのは平成 15 年度後半からであるが、電子ビームの調整などを経て、平成 16 年 4 月 14 日に初めて X 線の観測に成功した。2 つの完全結晶を用いて PXR を取り出すのに成功したのは世界でも初である。その後 X 線の特性を調べたところ、理論的に予測されていた水平方向に線形に変化するエネルギー分布を様々な物質の吸収端によって確認することができた。この特性を利用し、イメージングによる XAFS 測定の可能性を示す実験結果も得られつつある。

・波長可変性や指向性の確認

PXR の特徴の 1 つは結晶の制御により X 線の波長を自由に選択できることであるが、吸収測定や結晶分光などによって確認することができた。平成 17 年 3 月までの実績として、7keV～20keV の範囲の X 線の発生に成功している。また X 線撮像でえられたイメージのエッジが非常にシャープであり、指向性に優れていることも確認された。アクリル板の撮像において X 線の屈折によると思われるエッジ強調も観測されており、このシステムで得られる X 線が理論的に期待されていた優れたコヒーレンシーを持っていることが示唆された。

- ・X線集光系の開発と測定系の整備

PXR 発生装置で得られる X 線はパルス輝度には優れているが、ビームの duty factor が小さいために積分強度は弱くなってしまう。これをカバーするためにロジウムコーティングの楕円ミラーを用いた X 線集光システムを導入した。しかしながら、放射光施設で用いられているものに比べても大きなミラーであるためアライメントが難しく、ある程度の集光は確認できたがまだ調整不足である。また、測定系に関してもパルス線源の対応がまだ不十分であり、今後の課題となっている。

【まとめ】

装置の製作から実際の運用までに時間がかかってしまったが、PXR による X 線源の実用化に世界で初めて成功し、イメージングを中心とした利用研究への供給を開始できることから、トータルでは本研究は順調に成果を出すことができたといえる。特に波長可変でコヒーレンシーに優れた X 線源を実現できたことは、これまで大型施設に依存していた研究手法を中規模加速器施設で行う可能性を示すことができたといえる。これは高度な X 線光学を用いた研究の裾野を広げるという意味でも意義のある成果であった。

測定系の整備に関してはまだ不十分であるが、今後パルス性やコヒーレンシーに適応した測定装置の導入によって PXR の特性を生かした新しい計測手法の開発が期待でき、更なる発展が見込める。

【研究業績等】

・発表論文

- (1) Y.Hayakawa, I.Sato, K.Hayakawa, T.Tanaka (2005) Simulation to the project of a PXR based X-ray source composed of an electron linac and a double-crystal system. *Nucl. Instr. and Meth.* **B 227**, 32-40.
- (2) Y.Hayakawa, I.Sato, K.Hayakawa, T.Tanaka, et al. (2004) PRESENT STATUS OF THE PARAMETRIC X-RAY GENERATOR AT LEBRA. *Proc. of the 1st Annual Meeting of Particle Accelerator Society of Japan and the 29th Linear Accelerator Meeting in Japan*, 60-62.
- (3) 早川 恭史, 佐藤 勇, 佐藤 和男, 早川 建, 田中 俊成, 他 (2001) 日大パラメトリック X 線発生装置の概要. *Proc. of 26th Linear Accelerator Meeting in Japan*, 110-112.

・学会発表

- (1) 早川 恭史, 佐藤 勇, 早川 建, 田中 俊成, 他 (2004) 日大パラメトリック X 線源の現状. 第 1 回日本加速器学会年会・第 29 回リニアック技術研究会 (日本大学量子科学研究所)
- (2) Y.Hayakawa, I.Sato, K.Hayakawa, T.Tanaka (2004) Parametric X-ray Radiation Generator Composed of an Electron Linac and a Double-crystal System. The VI Symposium on ``Radiation from Relativistic Particles in Periodic Structures" (RREPS-03) (ロシア・Tomsk 工科大学)
- (3) 早川 恭史, 佐藤 勇, 佐藤 和男, 早川 建, 田中 俊成, 他 (2001) 日大パラメトリック X 線発生装置の概要. 第 26 回リニアック技術研究会(高エネルギー加速器研究機構)

・学位の取得状況

- (1) 城所 明生 : 修士(理学)、パラメトリック X 線のエネルギー特性に関する研究、2005 年 3 月、日本大学大学院理工学研究科量子理工学専攻

日大パラメトリック X 線発生装置の概要

早川 恒史¹、佐藤 勇、佐藤 和男、早川 建、田中 俊成、松原 洋一

中澤 裕之^{A)}、横山 和枝^{A)}、菅野 浩一^{A)}、境 武志^{A)}、石渡 謙一郎^{A)}、猪川 弘康^{A)}

中村 吉宏^{A)}、中尾 圭佐^{A)}、橋本 英子^{A)}、藤岡 一雅^{A)}、村上 琢哉^{A)}

日本大学 原子力研究所 電子線利用研究施設

〒 274-8501 千葉県 船橋市 習志野台 7-24-1

A) 日本大学 理工学研究科 量子理工学専攻

〒 274-8501 千葉県 船橋市 習志野台 7-24-1

概要

日本大学電子線利用研究施設 (LEBRA) では新しいパルス X 線発生装置を開発し、そのためのビームラインを既存の 125 MeV 電子リニアックに設置した。これはパラメトリック X 線放射と呼ばれる現象を利用したもので、電子ビームを結晶性物質に照射することにより 100 MeV 程度のエネルギーで指向性のある単色 X 線の生成が可能である。この装置は実用性を考慮し、真空槽に収められた 2 台の結晶駆動装置によって構成されており、X 線取り出しそポートを固定したまま X 線の波長を変えることが可能となっている。

また、本装置で得られることが期待される X 線の特性の評価を数値計算によって行なった。

1. はじめに

日本大学電子線利用研究施設 (LEBRA) では 125 MeV 電子リニアックを基盤とした波長可変な単色光源の開発を目指し、平面アンジュレータを用いて近赤外から可視領域までの自由電子レーザ (FEL) の研究を行なってきた。FEL に関しては、2001 年 6 月までに波長 $1.5 \mu\text{m}$ での発振を達成している^[1]。しかしながら、加速器のエネルギーの制約から従来のアンジュレータを用いた方法では X 線領域をカバーすることは非常に困難である。そこでパラメトリック X 線放射 (PXR) と呼ばれる現象を採用することによって単色 X 線源を実現することを計画した^[2]。これは相対論的な荷電粒子と結晶のような周期構造を持つ物質との相互作用で発生する電磁放射現象の一一種で、数 10~ 数 100 MeV 程度のエネルギーの電子で指向性のある単色 X 線を発生させることができるとある^[3]。この種のプロセスではビーム破壊が生ずるが、リニアックの場合はビーム使い捨てであるために実用化の妨げにはならない。LEBRA では 2000 年に新たな電子ビームラインとパラメトリック X 線発生装置の設計、開発に着手し、2001 年 3 月にはビームライン、X 線発生装置共に完成した。

当施設のリニアックは FEL 用に改良されたものであり、通常のリニアックに比べるとマクロパルスが長い、ビーム電流が大きい、エミッタスが優れている、といった長所を持つ^[4]。発生する PXR にもその特徴が反映され、輝度の高いパルス X 線源となることが期待

Table I: 電子線形加速器の仕様

加速周波数	2856 MHz
最大電子エネルギー	125 MeV
電子銃カソード	EIMAC Y646B
電子銃加速電圧	-100 kV
マクロパルス幅	$20 \mu\text{s}$
ビーム電流 (マクロ平均)	200 mA
繰り返し	12.5 Hz
ビームバンチ幅	3.5~10 ps
規格化工ミッタス	$20\pi \times 10^{-6} \text{ mrad}$
エネルギー分散	1 %

できる。このリニアックの仕様を Table I に、新ビームラインと PXR 発生装置の概略図を Fig. 1 示す。

2. PXR 発生装置の基本構成

PXR は結晶による X 線 Bragg 回折の入射 X 線を高エネルギー荷電粒子に置き換えたジオメトリーで生ずる放射現象で、放出される X 線のエネルギーと方向は Bragg 回折と同様に結晶面への入射角度 (Bragg 角) で決まる。この特性から、ゴニオメータに取り付けられた結晶の回転により X 線の波長を選択可能にすることができるが、発生する X 線の放出方向が波長によって変化することも考慮しなければならない。現実的な波長可変 X 線源として機能するためには、X 線の取り出しそポートが固定されなければならない。このことから、もう一度結晶を用いて X 線を対称に反射することにした。PXR は通常の X 線回折とは異なり入射角度に対し若干非対称な角度に強度のピークがあり、それに伴う波長のずれがあるために 2 番目の結晶をターゲット結晶とは独立に制御し、それを補償してやる必要がある。また、ターゲット結晶の回転に追随するためには並進移動しなくてはならない。これらを考慮して設計、製作された PXR 発生装置が Fig. 2 である。電子ビームで直接照射されるターゲット結晶は第 1 ゴニオメータに、反射用の結晶は第 2 ゴニオメータにそれぞれマウントされる。第 2 ゴニオメータは並進移動が可能となっている。これらは共に高真対応で、真空槽に収められて使用される。第 2 結晶で反射された X 線射は、Fig. 1 にあるように電子ビームラインから 200 mm 離れたラ

¹ e-mail: yahayak@lebra.nihon-u.ac.jp

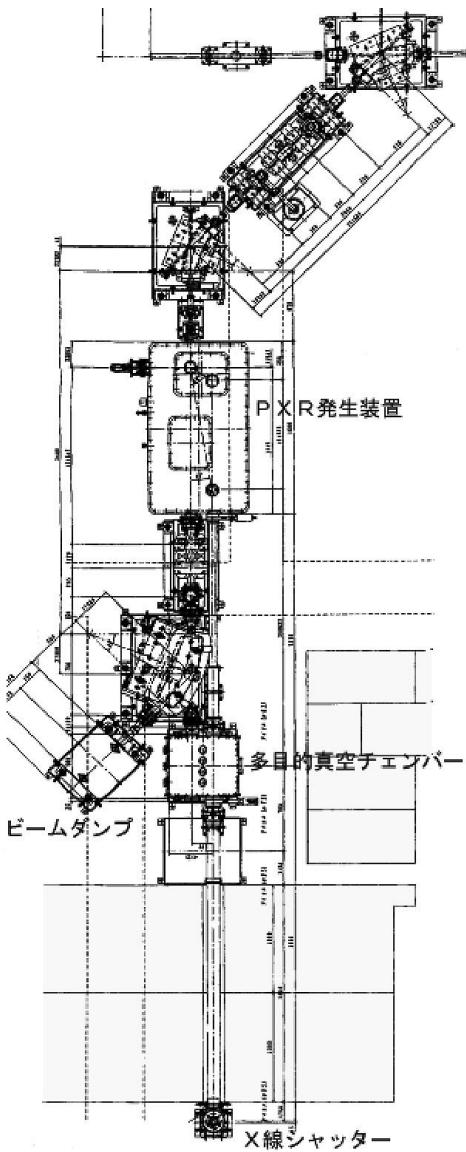


Figure 1: 新ビームラインと PXR 発生装置

インに沿って遮蔽壁を通過して実験室に運ばれる。X線をターゲットや上流のダクト等から来る γ 線ストリームと分離して輸送するという点もこのジオメトリーの長所である。また、わずかに非対称を持たせて反射させるため、基本反射と高次反射の分離が容易である。

電子ビームはターゲット結晶を通過する際に発散が大きくなり、ビームロスの結果として線量や放射化の増加を招く恐れがある。これを防ぐため、真空槽の内部のターゲット結晶の直後に電子ビーム収束のための4極永久磁石を設置した。

3. 結晶駆動装置の仕様

PXR発生装置の主要部分は2台の結晶駆動装置、すなわちゴニオメータであり、これによって生成されるPXRの特性が決まる。第1ゴニオメータは真空用モータで駆動される回転3軸と大気から動力導入されるビームラ

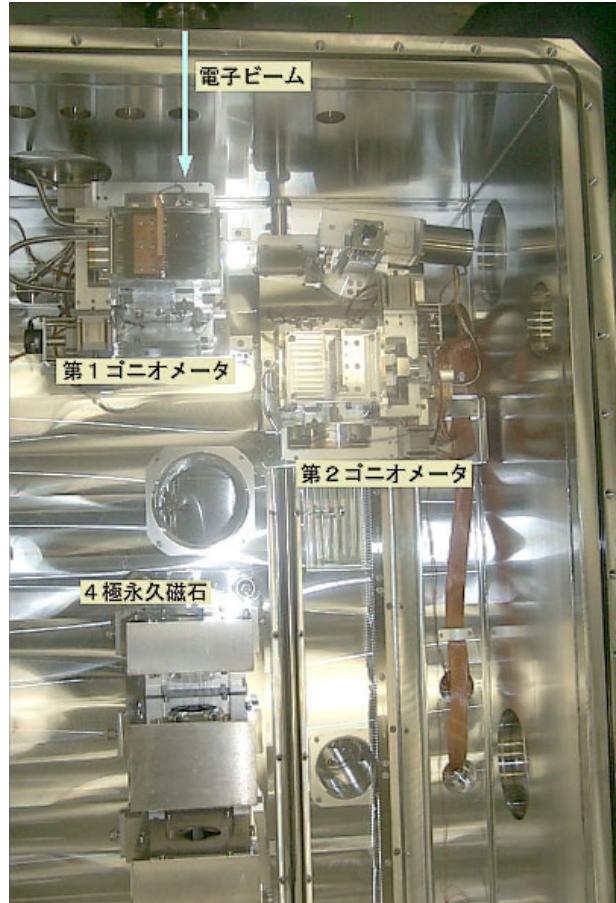


Figure 2: PXR 発生装置の写真。2台のゴニオメータで構成されている。第2ゴニオメータは並進移動が可能となっている。

イン退避用並進移動(X)の計4軸、同様に、第2ゴニオメータは真空用モータ駆動の回転3軸と長距離並進移動(Y)、手動のビームライン調整用並進移動(X)の計5軸を持っている。高さに関しては電子ビームラインに機械的に合わせるという思想であり、動的な調整はしないことにした。Table IIがこれらのゴニオメータの仕様である。

この装置でカバーできるBragg角の範囲は第2ゴニオメータの並進移動の駆動範囲で制限され、 $5^\circ \sim 30^\circ$ である。また、装置は加速器本体室内に置かれているので、PXRの波長制御に必要な軸はモータでリモート制御可能となっている。リモート制御はイーサネットを利用して行なう予定である。

4. 期待される PXR の特性

実際に得られるX線の特性はターゲット結晶の種類や結晶面に依存する。大電流の電子ビームを照射することを考慮すると、ダイヤモンドやシリコンの単結晶が強度、熱特性などの点から適していると思われる。コストと品質の面から、ターゲット結晶及び反射用結晶共にシリコン単結晶を使用することにした。Table IIIは、使用する結晶面と本装置によってカバーできるX線エネルギーの範囲である。

Table II: ゴニオメータの仕様

軸	駆動範囲	分解能
第1ゴニオ		
X	+5 ~ -65 mm	4 μm
θ_x	±10°	52.4 μ rad
θ_y	±10°	35 μ rad
θ_z	0 ~ 35°	11.6 μ rad
第2ゴニオ		
X	±5 mm	1 mm/rev
Y	-10 ~ +1030 mm	5 μ m
θ_x	±10°	52.4 μ rad
θ_y	±10°	35 μ rad
θ_z	0 ~ 35°	11.6 μ rad

Table III: 結晶面と PXR のエネルギー範囲

使用結晶面	第1結晶回転角(5 ~ 30°)
Si (111)	3.95 ~ 22.6 keV
Si (220)	6.46 ~ 37.0 keV
Si (333)	11.9 ~ 67.9 keV

電子ビームエネルギー 100 MeV、結晶面 Si(111)(実効厚さ 1 mm)の場合の X 線エネルギーと分散、積分強度を Bragg 角の関数として表したのが Fig. 3 である。また、ビーム発散 1 mrad、Bragg 角 21.48°(X 線エネルギー 5.4 keV に相当) という条件で得られる PXR のプロファイルを計算すると Fig. 4 のようになる。これは $1/\gamma$ の広がりを持つ PXR を第2結晶で反射することによって得られる X 線ビームであるため、その形状は第2結晶の角度に強く依存する。

Figure. 4において強度のピークでの PXR 散乱確率は $2 \times 10^{-7} [\text{photon}/\text{e}^- \text{ mrad}^2]$ 、エネルギーの分散は $\Delta \hbar\omega / \hbar\omega \sim 0.03\%$ 程度と見積もられる。リニアックのデューティーとバンチ長を考えると、理想的には平均で $6 \times 10^7 [\text{photon}/\text{s mrad}^2]$ 、ビームバンチのピークで $8 \times 10^{12} [\text{photon}/\text{s mrad}^2]$ の輝度が期待できる。X 線集光ミラーの使用によってさらに強い強度を得られる可能性もある。ただし、PXR は水平方向に波長のグラデーションを持つため、集光の方法によってはエネルギー分散が犠牲となってしまう。

5. 今後の計画と課題

ビームラインの設置と PXR 発生装置本体の製作は完了するに至ったので、今後は実験的に本装置の性能の検証を行ない、X 線源としての特性を確認していく。このプロセスはこの線源を実用化し応用研究に利用可能とするには不可欠な作業である。

応用研究として、まずはタンパク質構造解析と微小部 X 線回折が計画されている。そのための X 線集光ミラーシステムの設計がなされており、X 線ビームラインに導入される予定である。

将来的な課題として本装置のパルス光源としての特徴を生かせる測定システムを整備する必要がある。具体的にはビームとの同期測定が可能な MSGC や高速な

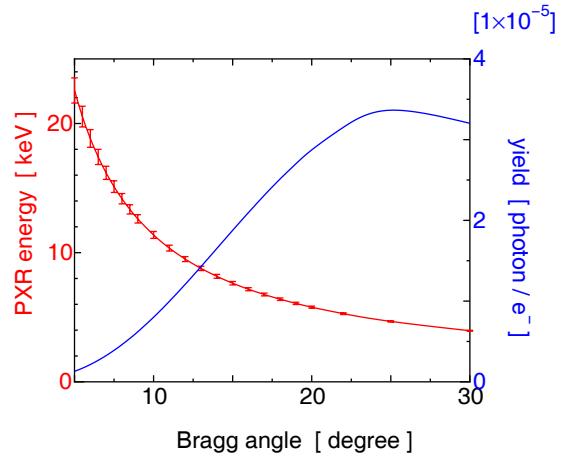


Figure 3: Si(111) の場合の、Bragg 角と PXR のエネルギー、強度との関係。

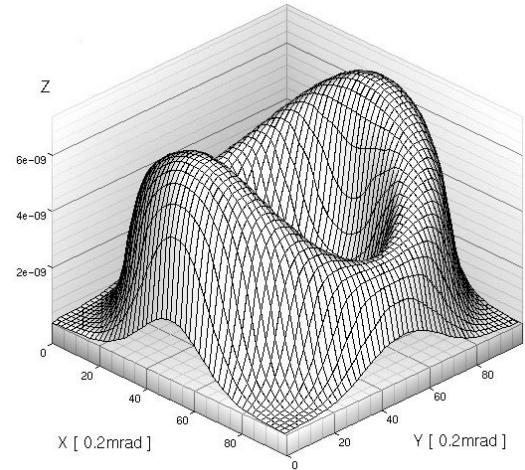


Figure 4: 得られる X 線プロファイルの例(X 線のエネルギーは 5.4 keV)

多素子 APD の導入が考えられる。特に後者のようにピコ秒オーダーの時間分解が可能な計測系は、パルス構造に柔軟性のあるリニアックの特徴を生かした時間構造解析への応用を可能にする。このような点からも、より高度な測定システムの開発と導入が望まれる。

参考文献

- [1] I. Sato et al., Proc. of this Meeting.
- [2] Y. Hayakawa et al., Proc. of the 12th Symposium on Accelerator Science and Technology, p. 391 (1999)
- [3] A.V. Shchagin et al., Phys. Lett. A **148**, p. 485 (1990)
- [4] I. Sato et al., Proc. of the 12th Symposium on Accelerator Science and Technology, p. 37 (1999)

PRESENT STATUS OF THE PARAMETRIC X-RAY GENERATOR AT LEBRA

Y. Hayakawa^{A)}, I. Sato^{A)}, K. Hayakawa^{A)}, T. Tanaka^{A)}, K. Yokoyama^{A)}, T. Kuwada^{A)},
A. Mori^{A)}, K. Nogami^{A)}, T. Sakai^{B)}, K. Kanno^{B)}, K. Ishiwata^{B)}, K. Nakao^{B)}

A) Institute of Quantum Science, Nihon University 7-24-1 Narashinodai, Funabashi, 274-8501

B) College of Science and Technology, Nihon University 7-24-1 Narashinodai, Funabashi, 274-8501

Abstract

A new X-ray generator based on a 125 MeV electron linac and parametric X-ray radiation (PXR) has been developed at the Laboratory for Electron Beam Research and Application (LEBRA) of Nihon University. In April 2004 the first observation of X-rays from this device has succeeded. After that several experiments of the X-ray imaging have been performed as the demonstration. The result indicates the X-rays from the PXR generator has a unique wavelength gradation and a small angular divergence.

日大パラメトリックX線源の現状

1. はじめに

日大電子線利用研究施設 (LEBRA) では自由電子レーザ (FEL) 用 125 MeV 電子線形加速器をベースとした X 線源の開発を計画し、X 線生成のプロセスとしてパラメトリック X 線放射 (PXR) と呼ばれる現象を採用した^[1]。2000 年度からスタートした学術フロンティア推進事業の一環として設計・建設を進め、2001 年に PXR 発生装置と専用のビームラインが完成した。このシステムは真空層に収められた 2 台のゴニオメータで制御される 2 つの Si 単結晶で構成され、X 線取り出しポートを固定したまま連続的に X 線のエネルギーを変えることができる^[2, 3]。(図 1)

真空チェックや試験運転を行ったが、FEL ビームラインについての遮蔽や管理区域設定の変更申請が行われるために、本格的な運用開始は施設検査合格まで見合わせることとなった。2003 年に PXR 用ビームラインの変更申請を行い、2004 年 3 月に検査合格となった。現在の PXR ビームラインでの電子ビームの仕様(現在の申請値)は表 1 のようになっている。アナライザーでのスリットが固定であるため、エネルギー分散は変えられないが、それ以外は FEL ビームラインとほぼ同じである。現在、ストレートライン 100 mA, 90° 偏向後 90 mA のビームカレントを達成している。

表 1: PXR ビームラインにおける電子ビームの仕様

加速周波数	2856 MHz
最大電子エネルギー	100 MeV
エネルギー分散	1 %
ビーム電流	100 mA
マクロパルス幅	20 μ s
繰り返し	2.5 Hz
平均電流	5 μ A
規格化工ミッタンス	< 20π mm mrad

*E-mail: yahayak@lebra.nihon-u.ac.jp

試験運転中にターゲットとして用いていた Si 結晶ウェハーに損傷が生じるなどの問題が発生したが、2004 年 4 月に電離箱を用いた PXR の観測に成功した。その後に行った X 線イメージングの結果と共に、現状を報告する。

2. ターゲット結晶の損傷

電子ビームを照射されるターゲット結晶は X 線のラジエーターであり、このシステムの基本となるものであるため、その耐久性は重要である。しかしながら、電子ビームの照射による結晶の損傷が確認された。図 2 は損傷部分の拡大写真である。横一列にならんでいるのは、ゴニオステージがモータドライブで退避している時に電子ビームのマクロパルス毎にダメージを受けたためと考えられる。スポットの拡大写真からは、損傷はビームバンチ毎に起こっているように見える。当初は熱的な問題を危惧していたが、電場による破壊の方がより深刻な問題であることがこの結果からわかる。ビームの電荷密度には制約があると思われるが、ターゲット結晶交換以後はこの現象は再現されておらず、結晶の破壊を引き起こす条件はかなり限定的で、ある閾値を超えない限り発生しないと思われる。

3. PXR の初観測と X 線イメージング

現在は PXR 発生システムとして Si(111)-Si(111) の組み合わせを用いている。PXR 発生の確認は、X 線出力ポートの直後に置かれた電離箱をモニターすることを行われた。Bragg 角 12° 付近で、反射鏡である第 2 結晶の回転角をスキャニングすると電離箱の出力に明確なピークが認められた。この時と同じ条件下後日測定されたのが図 3 である。ピークの幅は理論計算と比べるとやや広いがほぼ同程度であり、観測されたシグナルが PXR によるものであることを示している^[4]。

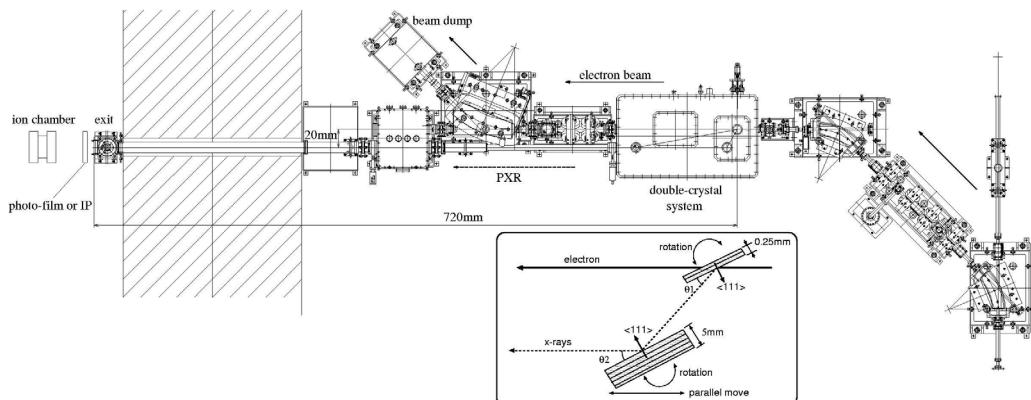


図 1: PXR 用ビームライン。

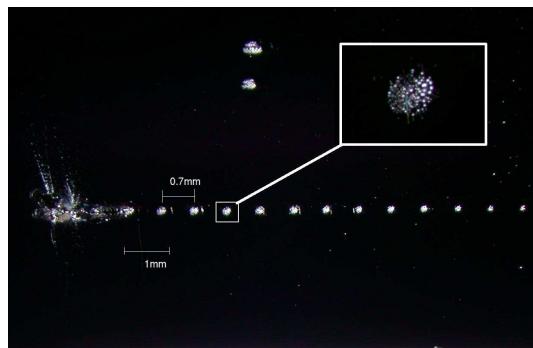


図 2: ターゲット Si 結晶が受けたダメージ。

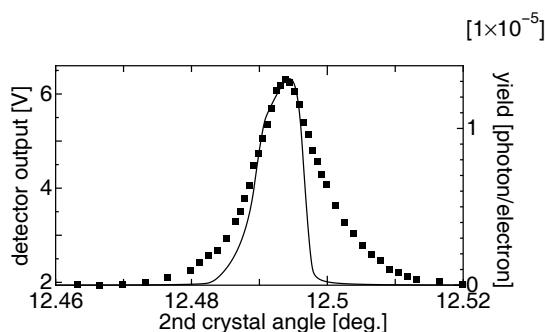


図 3: 第 2 結晶回転角度に対する PXR 強度の依存性この条件での X 線のエネルギーは 9.1 keV である。

また、ポラロイドフィルムやイメージングプロト（IP）による X 線透過画像を取ることにも成功した。図 4 はその典型的な例である。現在のところ、7 keV から 18 keV の範囲でのイメージングに成功している。エッジが非常に鮮明であり、この線源が指向性と単色性について優れていることを示唆している。

本来、PXR のプロファイルは図 5 のようなドーナツ状になるはずであるが、現状はダクト一杯に広がった、ほぼ一様な X 線ビームとなっている。輸送される PXR の空間モードは電子ビームの軸と分光結晶の成す角度に非常に敏感であるため、X 線プロファイルの一様化の原因として電子ビームの軌道の変動が考え

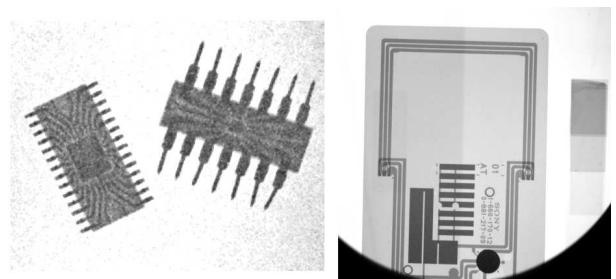


図 4: X 線透過画像: 左) ポラロイドによる IC チップ (18 keV); IP による IC カードと Al ステップ (13.5 keV)

られる。用途に合わせて軌道やターゲット結晶上で電子ビームのスポット形状を制御する必要があると思われる。

4. エネルギー勾配と K 吸収端の観測

PXR 発生装置で得られる X 線には、図 5 にあるように水平方向にほぼリニアなエネルギー（波長）グラデーションを持つという特徴がある。そのため、図 6 のようにイメージングによって K 吸収端を確認することができる。PXR 発生装置はパルス線源であるため半導体検出器による測定はシグナルのパイルアップの問題のため困難であり、また現在の 2 Hz 運転では結晶分光による測定は効率が悪い。そのため、現在は K 吸収端の観測によって簡易的に X 線エネルギーの確認を行っている。

ポラロイドフィルムの場合、乳剤に AgBr を使用しているため、Br の K 吸収端 (13.474 keV) で感度が大きく変わる。図 7 の画像は、ターゲット結晶の回転により PXR の中心エネルギーを変えたときの様子である。それに従って、K 吸収端に相当するエネルギーの位置が動いているのが確認できる。また下の図は、画像の破線内部の明度を縦方向を積算してプロットしたものである。横軸は吸収の立ち上がりを基準として理論的に予想されるエネルギー勾配で較正してある。吸収端の高エネルギー側に同じような構造が見られるが、これは XAFS 構造が直接観測されている可能性がある。X 線のエネルギーグラデーションの分

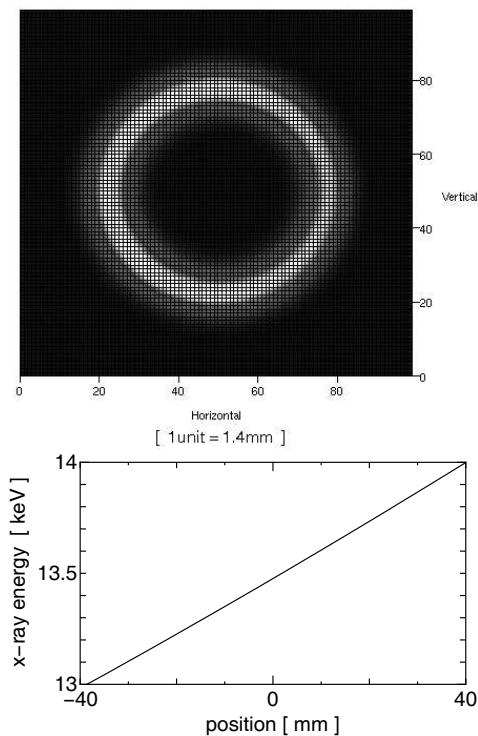


図5: X線ポート出口(ターゲット結晶からの距離は7 m)でのX線プロファイルとエネルギーグラデーション(13.5 keV)

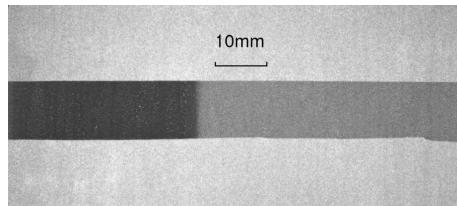


図6: ポラロイドによるCuのK吸収端(8.981 keV)の撮影。左側が高エネルギー側となっている。厚さ20 μm のCu薄膜を使用した。

解能は電子ビームのスポットサイズに強く影響されると考えられ、今後詳細に研究する必要がある。

5. X線集光光学系

PXRの強度は電子ビームのduty cycleで制限されているため、光子フラックスをエンハンスするために集光光学系の導入が望まれる。現在、Rhコーティングを施した全反射楕円ミラー(Kirkpatrick-Baez光学系)のセットアップを進めており、X線集光の実験を今後進めていく予定である^[4]。

6. まとめと今後の課題

2結晶型のPXR発生装置からのX線を実際に観測することに成功し、X線イメージングによって指向性や単色性、ユニークなエネルギーグラデーションなど

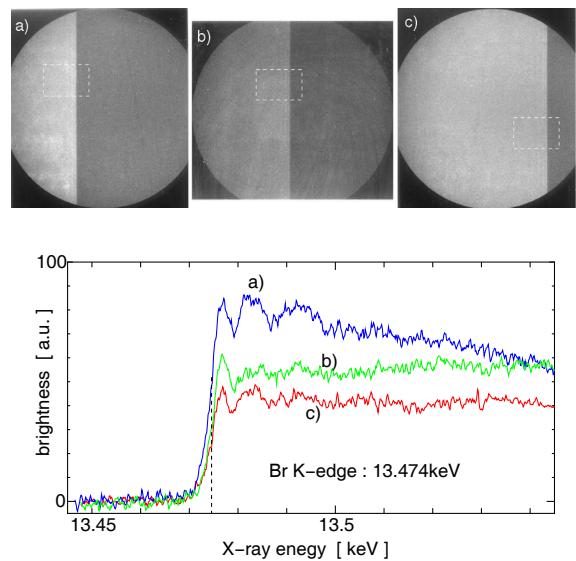


図7: ポラロイドフィルムのBr-K吸収端(13.474 keV)付近の挙動。中心エネルギーは、a)13.35 keV, b)13.5 keV, c)13.65 keVである。条件を変えても吸収端周辺に同じような構造が現れた。

が大まかに確認することができた。

今後取り組むべき課題として、

- X線強度の定量的な測定
- エネルギースペクトルやグラデーションの詳細な測定
- 高感度X線イメージングデバイスの導入
- X線ビームラインのバックグラウンド放射線流入の低減
- X線集光光学系のテスト
- 電子ビームとX線プロファイルの相関の研究
- 干渉イメージングの検討

などが挙げられる。

7. 謝辞

この研究は文部科学省・学術フロンティア推進事業および日本学術振興会・科研費(15760039)の助成を受けている。

参考文献

- [1] A.V. Shchagin et al., Phys. Lett. A **148**, (1990) 485.
- [2] Y. Hayakawa et al., Proc. of the 12th Symposium on Accelerator Science and Technology, (1999) 391.
- [3] Y. Hayakawa et al., Proc. of 26rd Linear Accelerator Meeting in Japan, (2001) 110.
- [4] Y. Hayakawa et al., Proc. of VI International Symposium "RREPS-03", Sep. 8-11, 2003, Tomsk (to be published in NIMB).



Available online at www.sciencedirect.com



Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 227 (2005) 32–40

NIM B
Beam Interactions
with Materials & Atoms

www.elsevier.com/locate/nimb

Simulations to the project of a PXR based X-ray source composed of an electron linac and a double-crystal system

Y. Hayakawa ^{*}, I. Sato, K. Hayakawa, T. Tanaka

Institute of Quantum Science, Nihon University, Narashinodai 7-24-1, Funabashi-shi, Chiba-ken 274-8501, Japan

Received 17 December 2003; received in revised form 15 June 2004

Abstract

To realize an X-ray source at the 100-MeV class linac of the Laboratory for Electron Beam Research and Application (LEBRA) at Nihon University, the application of Parametric X-ray Radiation (PXR) was proposed. In order to solve the problem of photon extraction, a PXR generator with a double-crystal system, which is similar to a monochromator for synchrotron radiation, was designed. A slightly asymmetric arrangement of the two crystals enables a relatively efficient transportation of the X-rays. Although this is not the best condition in terms of the PXR yield, there are many advantages owing to the fixed source point and the fixed radiation exit. The introduction of a focusing system of Kirkpatrick–Baez type equipped with rhodium coated elliptical mirrors into the X-ray beam line allows to improve the brilliance. A new beam line for the PXR generator has been developed and constructed at LEBRA. The experiments using this new device will begin at the end of 2003.

© 2004 Elsevier B.V. All rights reserved.

PACS: 41.60.–m; 41.50.+h; 29.17.+w

Keywords: PXR; Electron linac; Monochromatic X-ray source; Focusing system

1. Introduction

In the Laboratory for Electron Beam Research and Application (LEBRA) at Nihon Uni-

versity a 100-MeV class S-band electron linac was constructed in 1998 [1,2]. Since the linac has been developed for a free electron laser (FEL), electron beams with high current and a low emittance are obtained. Table 1 shows the parameters of the LEBRA linac, which is a conventional one not equipped with special devices such as an RF gun or a sub-harmonic buncher. Nevertheless, the FEL lasing has been achieved

^{*} Corresponding author. Tel.: +81 47 469 5983; fax: +81 47 469 5490.

E-mail address: yahayak@lebra.nihon-u.ac.jp (Y. Hayakawa).

Table 1
Specification of LEBRA linac

Beam energy	50–125 MeV
Acceleration frequency	2856 MHz
DC gun voltage	−100 kV
Beam pulse duration	20 μs
Bunch length	≤ 10 ps
Beam current	200 mA
Repetition rate	12.5 Hz
Average current	50 μA
Normalized emittance (rms)	≤ 20π mm mrad

in the near-infrared (NIR) region due to a precisely focused and highly stable electron beam [3].

Although the LEBRA FEL system can provide photons from the visible to the NIR region by the FEL and the enhanced higher harmonics, some applications require a monochromatic X-ray source [4]. However, it is difficult to generate tunable monochromatic X-rays using an ordinary insertion device because of the limitation of the critical wavelength in the synchrotron radiation [5]. In the case of bremsstrahlung, the screening effect due to the orbital electrons of the medium atoms suppresses the generation of longer wavelengths [6]. For the efficient generation of 5–30 keV X-rays using 100 MeV electron beams, a radiation process different from the bremsstrahlung is required. Thus, the use of parametric X-ray radiation (PXR) has been proposed to realize an X-ray source at LEBRA [7]. For actual application studies, a PXR generator using a double-crystal system was designed at LEBRA. The PXR generator in the dedicated beam line has been developed since 2000 [8].

In order to evaluate the X-rays generated by this device, numerical simulations have been carried out. In this paper the concept of the double-crystal system for PXR generation is reported and the result of the simulations is discussed.

2. Parametric X-ray radiation

PXR is a kind of radiation phenomena due to the polarization of crystalline medium irradiated

with relativistic charged particles. The characteristics of PXR such as monochromaticity and directivity are attractive for an X-ray source [9–13].

When a charged particle with a velocity \mathbf{v} passes through a crystalline medium in which the reciprocal lattice vector is \mathbf{g} and the constant part of the dielectric function is ϵ , the energy of PXR is expressed by

$$\hbar\omega = \frac{\hbar c^* |\mathbf{g} \cdot \mathbf{v}|}{c^* - \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\Omega}}, \quad (1)$$

where $c^* = c/\sqrt{\epsilon}$ and $\boldsymbol{\Omega}$ is the unit vector in the direction of the PXR emission. If the incident beam axis and the output direction of the X-ray exactly satisfy the Bragg condition, the energy $\hbar\omega$ in Eq. (1) equals to the energy of the X-ray scattered by the Bragg diffraction. This means that the energy of PXR can be tuned by controlling the Bragg angle.

The perturbation theory gives the spatial distribution of the PXR expressed by [14]

$$\begin{aligned} \frac{dN}{d\Omega} = & \frac{e^2 n \omega L |\chi_g(\omega)|^2}{2\pi \hbar \epsilon^3 v (c^* - \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\Omega})} \\ & \times \frac{\left| \frac{\omega}{c^*} \boldsymbol{\Omega} \times \left(\frac{\omega}{c^{*2}} \mathbf{v} + \mathbf{g} \right) \right|^2}{\left\{ \left| \frac{\omega}{c^*} \boldsymbol{\Omega}_\perp - \mathbf{g}_\perp \right|^2 + \frac{\omega^2}{v^2} [\gamma^{-2} + \frac{v^2}{c^2} (1 - \epsilon)] \right\}^2}, \end{aligned} \quad (2)$$

where dN is the number of quanta emitted in the solid angle $d\Omega$ when n particles with charge e , mass m and total energy E pass through a crystal with thickness L ; $\gamma = E/mc^2$, $v = |\mathbf{v}|$; $\boldsymbol{\Omega}_\perp$ and \mathbf{g}_\perp are the components of $\boldsymbol{\Omega}$ and \mathbf{g} perpendicular to \mathbf{v} , respectively. $\chi_g(\omega)$ means the Fourier component of the variable part of the dielectric susceptibility, which can be expressed for X-rays by

$$\chi_g(\omega) = -\frac{4\pi e^2}{m\omega^2} \cdot \frac{F(\mathbf{g})}{V}, \quad (3)$$

where $F(\mathbf{g})$ is the structure factor of the crystal and V is the volume of the unit lattice. The constant part of the dielectric susceptibility is expressed by $\chi_0 = \epsilon - 1$. As shown in Eq. (2), the dependence of PXR on the particle energy is weaker than that

of synchrotron radiation. In the case of PXR the energy-variable monochromatic X-rays can be generated by an electron beam at energies lower than 100 MeV [15,16]. Therefore, PXR is suitable for an X-ray source using a 100-MeV class electron linac. In addition, the invasion of the electron beam into the target crystal is not a serious problem because recirculation of the beam is not considered in LEBRA.

3. Concept of the PXR generator

3.1. Double-crystal system

There are several problems that have to be solved for the application of PXR tunable monochromatic X-ray source. The main problems are the transport and the extraction of the X-rays. Although the direction of the PXR emission depends on the X-ray energy, the practical X-ray beam line for applications should be fixed independently of the X-ray energy. In order to solve this problem a double-crystal system with (+, -) parallel arrangement has been proposed. One of the crystals is the radiator of PXR and another one acts as a reflector for X-rays. Fig. 1 shows the concept of the system. The system is similar in structure to a monochromator for synchrotron radiation [17]. The reflector crystal is movable parallel to the electron beam axis in order to extract the X-rays with any defined wavelength through the fixed output port.

In the case of perfect crystals if X-rays have higher energies, the angular allowance of Bragg diffraction becomes narrower. Therefore, the reflector crystal acts not only as a mirror for X-rays but also as a filter for higher harmonics. In addition, this PXR based system has another advantage. Since γ -rays of bremsstrahlung are emitted within $1/\gamma$, PXR has low background due to emission with Bragg diffraction. However, multiple scattering in the target crystal increases the electron beam divergence. This effect causes beam loss on the way to the beam dump which results in an increase of incoming background γ -rays into the X-ray transport line. Thus, a focusing system with permanent magnets is placed downstream of

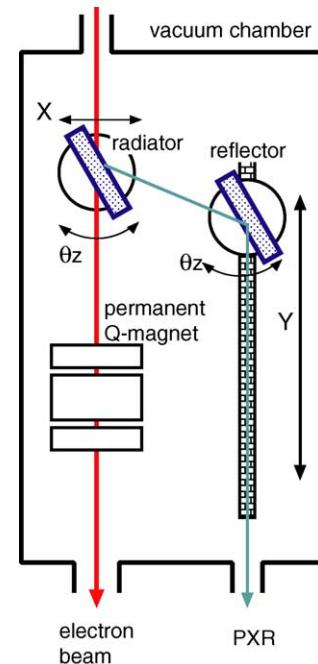


Fig. 1. Scheme of the PXR generator. The generator consists of a double-crystal system in a vacuum chamber. A triplet permanent Q-magnet is placed behind the target crystal to avoid electron beam loss.

the target section in the vacuum chamber to reduce beam loss.

3.2. Transport of PXR to the extracting port

According to Eqs. (1) and (2), PXR has the typical spatial distribution with the energy gradation in the horizontal direction as shown in Fig. 2. In this case the incident electron energy is 100 MeV and the target is a Si wafer having its (111) planes perpendicular to the horizontal plane. The angle of the crystal with respect to the direction of the electron beam is 8.422185° that corresponds to the X-ray energy of 13.5 keV. If a perfect crystal is used as reflector, only the X-rays close to the Bragg condition are transported to the exit port. According to the dynamical theory of X-ray diffraction, the reflectivity I_g/I_0 of the perfect single crystal in the symmetrical Bragg case is described by

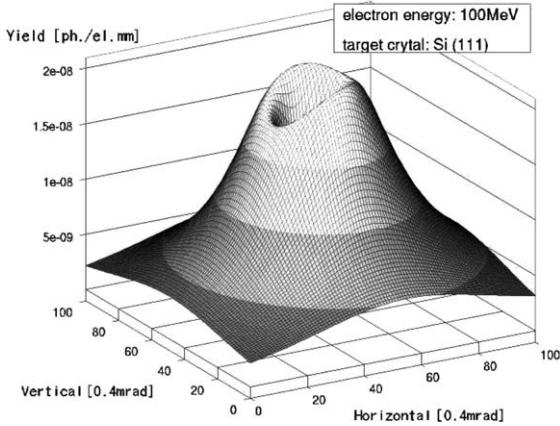


Fig. 2. The spatial distribution of PXR from Si(111) planes irradiated with 100 MeV electrons at the Bragg angle $\theta_B = 8.422185^\circ$. The horizontal and the vertical axes are described in the units of 0.4 mrad and the yield is normalized for a 1 mm thick target.

$$W = \frac{\sin 2\theta_B}{|P||\chi_g|} (\theta - \theta_B) + \frac{\chi_0}{|P||\chi_g|},$$

$$\begin{cases} P = 1 & \text{for } \sigma\text{-polarization,} \\ P = \cos 2\theta_B & \text{for } \pi\text{-polarization,} \end{cases} \quad (4)$$

$$\frac{I_g}{I_0} = \begin{cases} 1 & \text{if } |W| < 1, \\ (|W|^2 - \sqrt{|W|^2 - 1})^2 & \text{otherwise,} \end{cases}$$

where θ is the angle of the incident X-ray and θ_B is just the Bragg angle [18]. Eq. (4) is well known as the Darwin curve.

Due to the energy gradation and the typical spatial distribution of PXR, the transport efficiency of X-rays increases when the arrangement of the two crystals is slightly asymmetric. In order to search for the optimal arrangement of the crystals for the Si(111)–Si(111) system, ray-tracing simulations have been carried out using Eqs. (1), (2) and (4). Here, a kind of the polynomial approximation was applied to the atomic scattering factor in order to calculate the structure factor of the crystal $F(\mathbf{g})$ in Eq. (3) [19]. Since it is assumed that the target crystal is thin and the reflector is sufficiently thick, the calculations scanning the X-ray energy were for ease performed without taking the attenuation of X-rays in the medium into account.

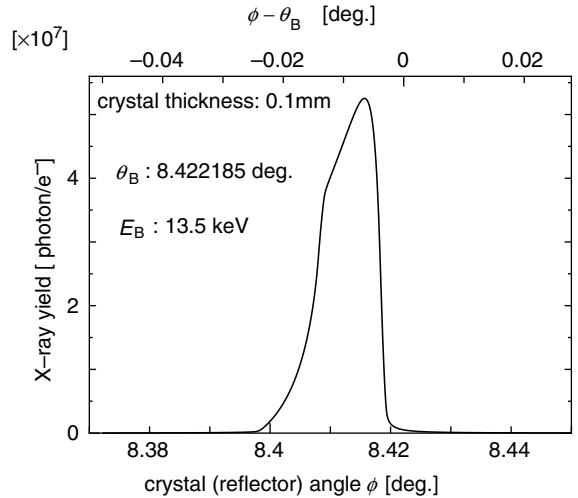


Fig. 3. The expected X-ray yield from the Si(111)–Si(111) system as a function of the reflector angle ϕ , when the target angle is $\theta_B = 8.422185^\circ$.

Fig. 3 shows the dependence of the expected X-ray yield on the reflector angle ϕ , where the target angle is $\theta_B = 8.422185^\circ$. When the difference of the angles between the radiator and the reflector is in the range from -0.004° to -0.015° , PXR emitted from the target crystal can reach the exit port. Although this is not the best condition in terms

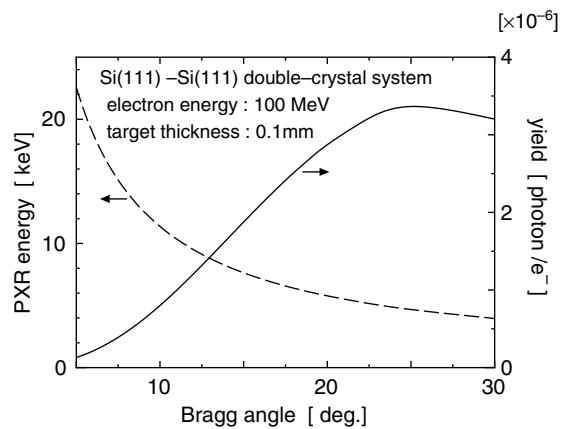


Fig. 4. The energy (---) and the yield (—) of the PXR beam from the Si(111)–Si(111) system. The energy and the yield are defined as the average and the peak values with respect to the reflector angle, respectively.

of the yield, there are many advantages owing to the fixed exit position.

The X-ray beam extracted from the PXR generator has the energy variability owing to the property of PXR. In Fig. 4 the energy and the yield of PXR from the Si(111)–Si(111) system is shown as functions of the Bragg angle (i.e. the target crystal angle), where the yield corresponds to the peak value of the curve in Fig. 3 and the energy is defined as the average value over the X-rays around the peak.

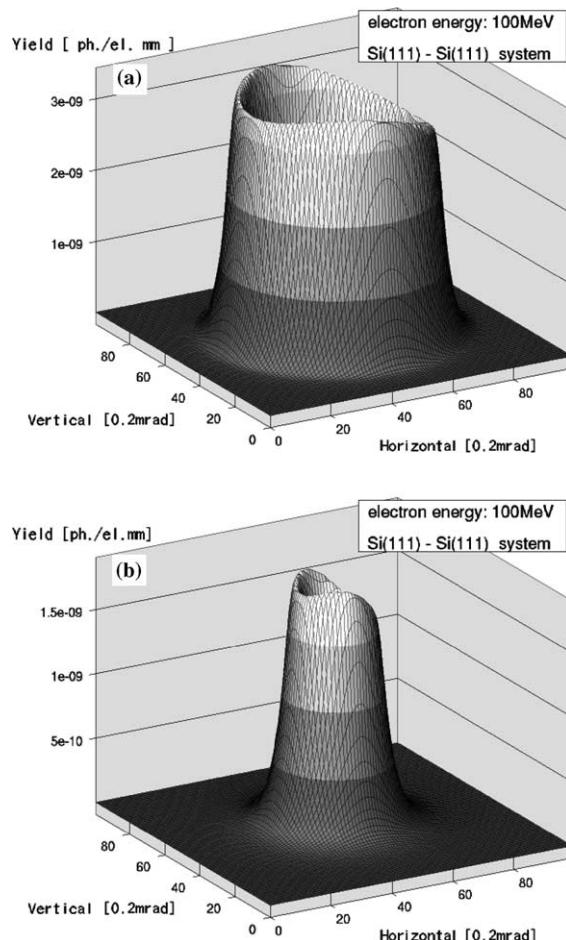


Fig. 5. PXR beam profile in the case of 100 MeV energy and 8.422185° Bragg angle using Si(111) planes, when (a), the yield is maximum (ϕ : 8.415685°) and (b), the energy spread is minimum (ϕ : 8.418685°), respectively. The horizontal and the vertical axes are described in the units of 0.2 mrad.

3.3. Profile and polarization of the PXR beam

The beam profile of the extracted X-rays is strongly dependent upon the angular asymmetry of the radiator and the reflector. The typical profiles are shown in Fig. 5.

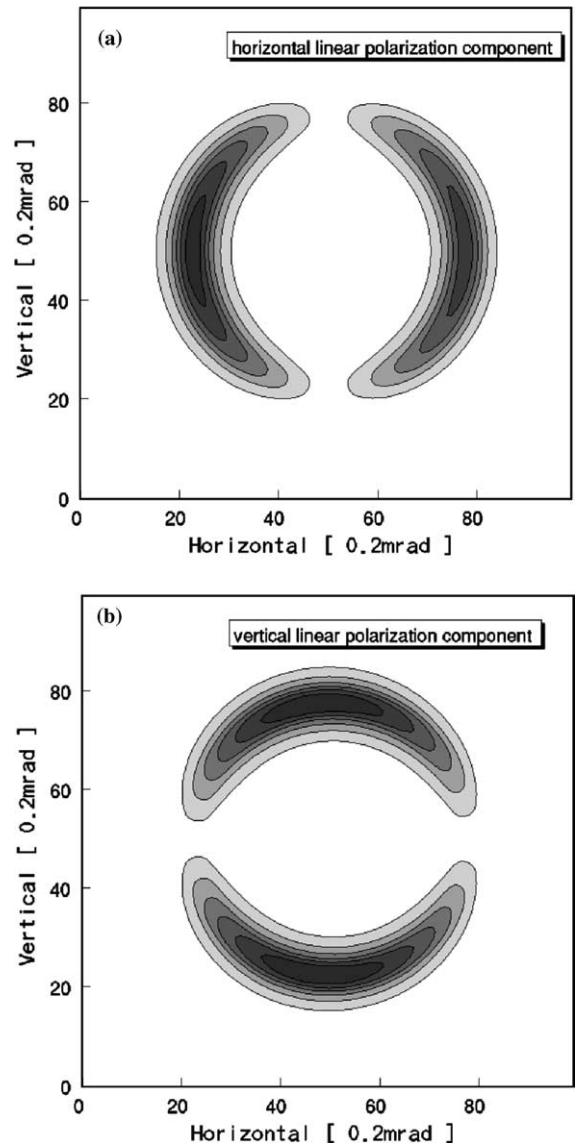


Fig. 6. Linear polarization of PXR beam corresponding to Fig. 5(a). The components oriented horizontally and vertically are shown in (a) and (b), respectively.

The linear polarization of PXR is radially oriented around the Bragg direction, in which the Bragg conditions are exactly satisfied [20,21]. The PXR beams reflected by the 2nd crystal have the same property although the reflectance depends on the polarization. Fig. 6 shows the horizontal and the vertical linear polarization components in the case of Fig. 5(a).

3.4. Practical design of the PXR generator

The practical PXR generator is designed as shown in Fig. 7. The X-ray beam line lies parallel to the electron beam line at a distance of 200 mm, passing through a 2 m thick concrete wall. The system covers the Bragg angle range from 5° to 30°, which corresponds to a PXR energy range from

4 to 22 keV in the case of Si(111). The new beam line for the PXR generator has been developed and constructed since 2000. The experimental work at this device will begin in the fall of 2003.

4. X-ray brilliance and the focusing system

Since PXR has in principle rather low-intensity and divergent property, it is not easy to obtain a high brilliance of such source. For example, in the case of Fig. 5(a) the PXR flux from a 0.1 mm thick target crystal is 5.7×10^{-11} [photons/e⁻ mm²] at the peak along the vertical axis when the X-ray irradiation point of samples is at a distance of 12 m from the source point. However, it seems that the optical focusing is effective since

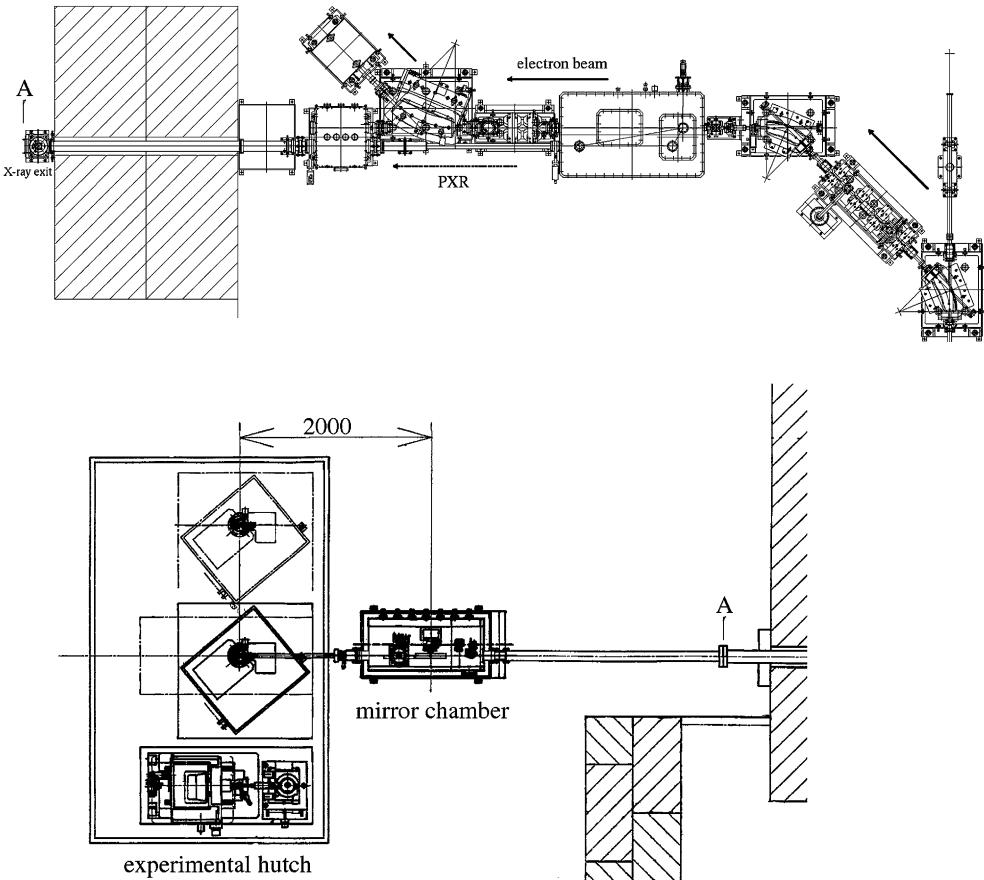


Fig. 7. Layout of the practical beam line with the PXR generator (upper) and the X-ray focusing system (lower) developed at LEBRA.

PXR behaves as a point-like source provided that the electron beam is well focused. Therefore, we decided to introduce a vertical focusing system into the X-ray transport line. Considering applicability to various X-ray energies, a Kirkpatrick–Baez (K–B) type system, which is a kind of grazing incident optics using rhodium coated elliptical mirrors, has been designed [22,23]. Fig. 8 shows the basic design of the focusing system which has a magnification of approximately 1/5.

The total reflection of X-rays on a material surface is strongly dependent on the incident angle θ_0 of X-rays and on the critical angle θ_c of the surface material of the mirror described by

$$\theta_c = \sqrt{2\delta}; \quad \delta = \frac{2\pi r_e(\hbar c)^2 N_e}{(\hbar\omega)^2}, \quad (5)$$

where r_e is the classical electron radius, N_e is the number density of electrons expressed by $N_e = N_A Z \rho / A$ (N_A : Avogadro's number; ρ : the material density; Z , A : the atomic number and the mass number of the mirror material, respectively). The reflectivity $|E/E_0|^2$ is expressed as a function of $u = \theta_0/\theta_c$, i.e.

$$h = u^2 + \left[(u^2 - 1)^2 + \left(\frac{\mu\rho}{2\hbar\omega\delta} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (6)$$

$$\left| \frac{E}{E_0} \right|^2 = \frac{h - u\sqrt{2(h-1)}}{h + u\sqrt{2(h-1)}},$$

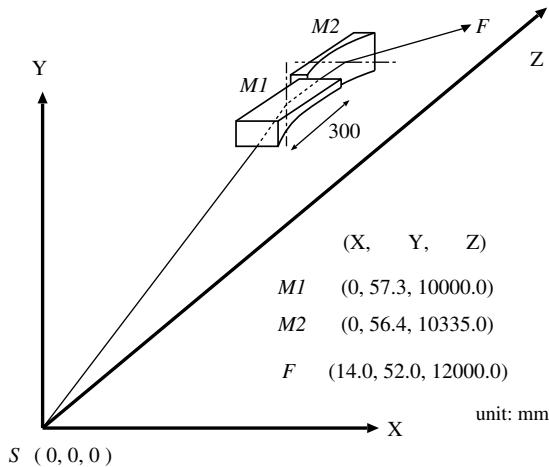


Fig. 8. Elliptical mirror system with the K–B arrangement for X-ray focusing. S : source point of PXR; $M1$, $M2$: centers of the rhodium coated elliptical mirrors; F : focus point for a sample.

where μ denotes the mass absorption coefficient [18].

In order to estimate the expected intensity of X-rays after the reflection due to the Rh coated mirror, the ray-trace calculation was carried out by taking the dependence on the incident angle and the X-ray energy in Eq. (6) into account, where PXR was assumed to be an ideal point like source. A typical result for the beam in Fig. 5(a) is shown in Fig. 9. The spot size at the focus of the mirrors, attributed to the accuracy of the calculation, is smaller than the design value of 10 μm that is restricted by the tolerance of the mirror surface. For the 10 μm spot, the condensed yield is estimated at 2×10^{-6} [photons/e⁻ mm²], an increase by four orders of magnitude. Since the X-rays are condensed mainly in the vertical direction, the degradation of the monochromaticity is not so heavy. In the case of 13.5 keV X-rays the width of the energy spectrum is approximately 0.1% as shown in Fig. 10. Hence, the brilliance during the macropulse of the LEBRA linac is roughly expected to be 1×10^{12} [photons/s mm² mrad² 0.1% BW].

However, the actual electron beam has a finite size, which causes considerable reduction of the focusing effect. If the electron beam size is 0.5 mm in diameter, the focused spot size increases to approximately 100 μm , resulting in a reduction

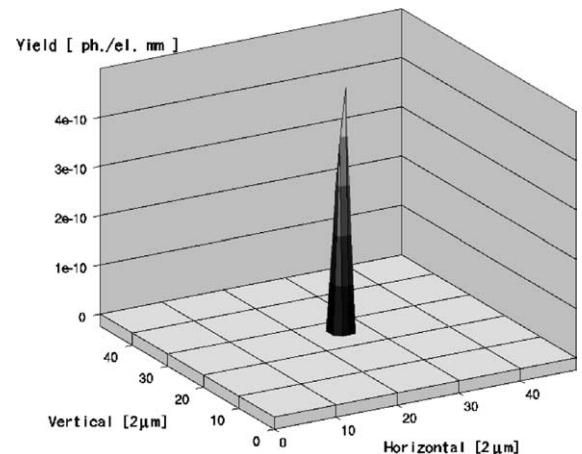


Fig. 9. The X-ray spot at the focus point of the K–B focusing system calculated by the ray-tracing method. The horizontal and the vertical axes are described in the units of 2 μm .

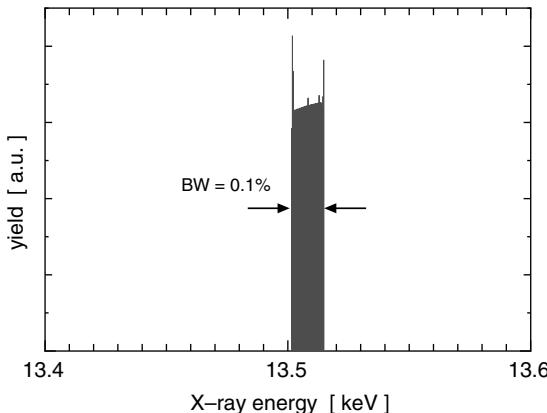


Fig. 10. The calculated energy spectrum of the expected X-rays from the K-B focusing system.

of the brilliance by a factor of 1/100. To suppress the reduction an electron beam with a lower emittance is required. Therefore, the improvement of the electron gun might be necessary to adapt the X-ray source for applications that require a higher brilliance. If an application requires more intense X-ray flux, introducing a secondary condensing system for X-rays is effective. Fortunately, advanced instruments such as a zone plate lense have been developed in recent study of X-ray microbeams [24].

5. Summary

The PXR generator with the double-crystal system has been designed and constructed at LEBRA. This device realizes a tunable source of linear polarized monochromatic X-rays source at a 100-MeV class electron linac. As the result of the simulations for the PXR generator and the X-ray focusing system, the brilliance of 13.5 keV X-rays during the electron beam macropulse is estimated to be 1×10^{12} [photons/s mm² mrad² 0.1% BW] in an ideal condition. Taking the duty cycle of the LEBRA linac into account and assuming the electron beam spot size on the target crystal is 0.5 mm in diameter, this value corresponds to an average brilliance of 2.5×10^6 [photons/s mm² mrad² 0.1% BW]. Although the average brilliance of this X-ray source is not so high, it is adequate to strobo-

scopic measurements for minute samples using time-resolved detectors.

Acknowledgement

This study has been financially supported by the grant from Ministry of Education, Science, Sports and Culture to promote multi-disciplinary research projects since 2000.

References

- [1] T. Tanaka, K. Hayakawa, K. Sato, Y. Matsubara, I. Sato, I. Kawakami, S. Ohsawa, S. Fukuda, S. Anami, Free Electron Lasers 1997, Elsevier, Amsterdam, 1998 (II-103).
- [2] I. Sato et al., in: The 13th Sym. on Accel. Sci. and Tech., Osaka, Japan, 2001, p. 117.
- [3] Y. Hayakawa et al., Nucl. Instr. and Meth. A 483 (2002) 29.
- [4] Y. Hayakawa, I. Sato, K. Hayakawa, T. Tanaka, K. Yokoyama, K. Kanno, T. Sakai, K. Ishiwata, K. Nakao, E. Hashimoto, Nucl. Instr. and Meth. A 507 (2003) 404.
- [5] J. Schwinger, Phys. Rev. 75 (1949) 1912.
- [6] V.G. Baryshevsky, I.D. Feranchuk, Nucl. Instr. and Meth. 228 (1985) 490.
- [7] Y. Hayakawa, I. Sato, K. Sato, K. Hayakawa, T. Tanaka, H. Nakazawa, K. Yokoyama, K. Kanno, T. Sakai, in: The 12th Sym. on Accel. Sci. and Tech., Wako, Japan, 1999, p. 391.
- [8] Y. Hayakawa et al., in: Proc. 26th Linear Accelerator Meeting in Japan, Tsukuba, Japan, 2001, p. 110 (in Japanese).
- [9] D.I. Adejshvili, S.V. Blazhevich, G.L. Bockek, V.I. Kulibaba, V.I. Lapko, V.L. Morokhovskij, G.L. Fursov, A.V. Shchagin, Prib. Tekh. Eksp. 3 (1989) 50.
- [10] A.V. Shchagin, V.I. Pristupa, N.A. Khizhnyak, Phys. Lett. A 148 (1990) 485.
- [11] R.B. Fiorito, D.W. Rule, X.K. Maruyama, K.L. DiNova, S.J. Evertson, M.J. Osborne, D. Snyder, H. Rietdyk, M.A. Piestrup, A.H. Ho, Phys. Rev. Lett. 71 (1993) 704.
- [12] Y.N. Adishchev, V.A. Verzilov, A.P. Potylitsyn, S.R. Uglov, S.A. Vorobyev, Nucl. Instr. and Meth. B 44 (1989) 130.
- [13] I. Endo et al., Phys. Rev. E 51 (1995) 6305.
- [14] H. Nitta, Phys. Lett. A 158 (1991) 270.
- [15] Y. Hayakawa, M. Seto, Y. Maeda, T. Shirai, A. Noda, J. Phys. Soc. Jpn. 67 (1998) 1044.
- [16] T. Akimoto, M. Tamura, J. Ikeda, Y. Aoki, F. Fujita, K. Sato, A. Honma, T. Sawamura, M. Narita, K. Imai, Nucl. Instr. and Meth. A 459 (2001) 78.
- [17] H. Kawata, M. Ando, Nucl. Instr. and Meth. A 246 (1986) 368.

- [18] S. Kikuta X-Ray Diffraction and Scattering, Vol. 1, University of Tokyo Press, 1992 (in Japanese).
- [19] E.N. Maslen, A.G. Fox, M.A. O'Keefe, in: N.F.M. Henry, K. Lonsdale (Eds.), International Tables for X-Ray Crystallography, Vol. I, Kynoch Press, 1952 (Vol. II, 1959; Vol. III, 1962; Vol. IV, 1974).
- [20] A.V. Shchagin, X.K. Maruyama, Accelerator-based Atomic Physics Techniques and Applications, AIP Press, 1997, p. 299.
- [21] K.H. Schmidt, G. Buschhorn, R. Kotthaus, M. Rzepka, P.M. Weinmann, V.V. Morokhovskii, J. Freudenberger, H. Genz, A. Richter, *Nucl. Instr. and Meth. B* 145 (1998) 8.
- [22] P. Kirkpatrick, A.V. Baez, *J. Opt. Soc. Am.* 38 (1948) 766.
- [23] Y. Suzuki, F. Uchida, Y. Hirai, *Jpn. J. Appl. Phys.* 28 (1989) L1660.
- [24] M.A. Piestrup, H.R. Beguiristain, C.K. Gary, J.T. Cremer, R.H. Pantell, R. Tatchyn, *Nucl. Instr. and Meth. B* 173 (2001) 170.