

## 軟 X 線発光分光器の改良

(広大理<sup>1</sup>・理研<sup>2</sup>) ○堀川裕加<sup>1</sup>, 徳島高<sup>2</sup>, 原田慈久<sup>2</sup>, 平谷篤也<sup>1</sup>, 辛埴<sup>2</sup>

### 【序】

軟 X 線発光分光は物質の占有電子状態を直接観測するのに有効な手段の 1 つである。軟 X 線を励起光に用い、軟 X 線領域の発光を観測する軟 X 線発光分光では、観測結果が電場や磁場の影響を受けないので光電子分光法が苦手とする絶縁体や粉末を測定することができ、軟 X 線を透過する窓材を使用することで、大気圧下にある溶液や生物系試料を測定することも可能である。我々は高性能軟 X 線発光分光器と軟 X 線分光用溶液セルを組み合わせることで、今まで困難であった軟 X 線照射による液体試料の電子状態の測定を、高分解能 (実測=1600) かつ容易に行うことの出来る装置を構築した。

我々はこの装置を用いてこれまでに純水、エタノール、ミオグロビン水溶液などの多様な水溶液、液体の発光スペクトルの測定をおこなった。純水の測定においては、他の研究グループの報告では 1 本とされていたピークが、高分解能発光測定を行うと 2 本に分裂して観測されることが明らかになった。これは水素結合の影響によるピークの分裂であると推測していて、ピークの帰属を行うために温度依存性、励起エネルギー依存性の測定や、分子軌道計算の結果との比較をおこなっているところである。

このように、発光分光器のエネルギー分解能をさらに上げていくと、これまで観測することが出来なかった、水素結合のような弱い結合による微細な電子状態の変化を捉えることが可能になる可能性があり、化学反応における価電子の状態変化やタンパク質などの生体物質の水素結合の様子を電子状態の観点から観察できるようになると期待している。そこで我々は、現在測定に用いている高分解能発光分光器(HEPA2)<sup>1</sup>の光学設計をもとにして改良を加えより分解能の高い分光器を設計することにした。

### 【設計】

2 次元検出器を用いた発光分光器では、使用している検出器の位置分解能によってエネルギー分解能が制限されることがある。特に小型の分光器では波長分散があまり大きくないため検出器の位置分解能を考慮に入れて設計を行わないと設計分解能を達成できない原因となる。HEPA2 は光学系の分解能は  $E/\Delta E=3000$  を達成することが可能であるが、効率を重視するために分光器の全長を小さめに設計しており、CCD 検出器の位置分解能によるエネルギー分解能の制限のため、到達分解能は 2000 程度にとどまっている。

そこで、この制限を緩和するためにまず分光器全体の大きさを大きくし波長分散を大きくすることで到達分解能を向上させることを試みた。しかしながら、分光器を大きくすることは、光源点からの距離が遠くなること

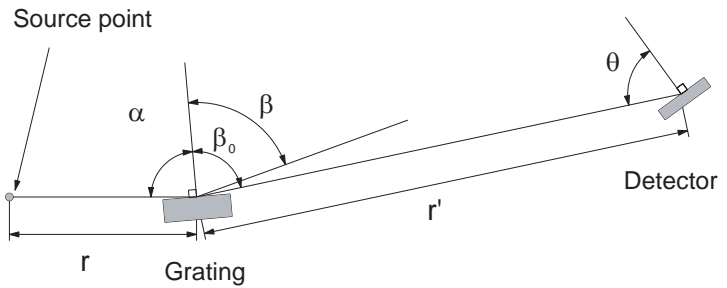


図1 光学系の概略図

によって取込角が減少し効率の低下を招く。その対策として、回折格子への入射角を反射率と取込角から検出効率の指標をもとめ最適化を行うことにした。

今回、設計を行った分光器の概略図を図1に示す。左から発光点、回折格子、検出器と並んでおり、HEPA2では $r = 300\text{mm}$ 、 $r' = 500\text{mm}$ となっていた入射長、出射長を新しい分光器では1.5倍の $r = 450\text{mm}$ 、 $r' = 750\text{mm}$ とすることにした。回折格子の刻線密度の最適

optics		Units
$R$	450	mm
$r'$	750	mm
$\alpha$	87.0	Degree
$\beta_0(@450\text{eV})$	-83.0103009	Degree
Detector		
$\theta$	46.164556	Degree

表1 光学パラメーター一覧表

化はHEPA2の設計時に採用された方法と同じく検出器面と集光曲線の差を最小にする方法でおこなった。

レイトレース計算をもとに分解能を算出したものを図2に示す。この分光器の分解能は、入射する光のスポットサイズが $10\mu\text{m}$ の時は $300\text{eV}$ 、 $5\mu\text{m}$ では $400\text{eV}$ で最大となっている。

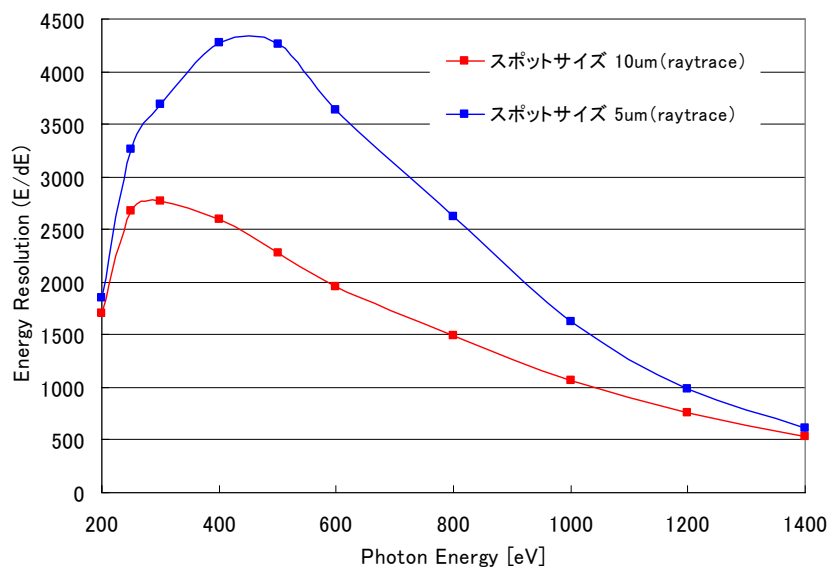


図2 レイトレースによるエネルギー分解能計算

このような改良を加え

て設計された新しい分光器は、HEPA2と同程度の検出効率を達成しつつ、検出器の位置分解能を考慮しても分解能 $E/\Delta E=3000$ を達成することができる。

<sup>1</sup> T. Tokushima, Y. Harada, H. Ohashi, Y. Senba, S. Shin, Rev. Sci. Instrum. 77, 063107 (2006)