

令和元年度 修士論文

X 線天文衛星 XRISM の  
初期観測データ解析に向けた地上試験  
— 極低温検出器に用いる真空蓋の X 線透過率較正 —

東京大学大学院 理学系研究科天文学専攻  
宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所  
海老沢研究室

学籍番号 35-186132

博士前期課程 2 年

御堂岡 拓哉  
midooka@ac.jaxa.jp

初版 2020 年 1 月 27 日

最終版 2020 年 11 月 3 日

## Abstract

2016年に打ち上げられたX線天文衛星「ひとみ」に搭載された分光装置 (Soft X-ray Spectrometer; SXS) は、デュワー容器内で 50 mK の極低温に制御された X 線マイクロカロリメータ検出器を動作させることにより、 $\Delta E_{\text{FWHM}} \sim 5 \text{ eV}@6 \text{ keV}$  の超高エネルギー分解能を達成した。デュワー容器の X 線入射部には、地上での真空保持と打ち上げ後初期の衛星内アウトガスの影響を避けるため、約 3 cm 径の真空蓋 (=ゲートバルブ) が設置された。ゲートバルブは厚さ約 270  $\mu\text{m}$  の Be 窓が溶接され、ステンレスメッシュで Be 窓表面を保護している。「ひとみ」衛星は姿勢制御の不具合により 1 ヶ月ほどで運用を断念したため、全ての観測がゲートバルブを通して行われた。打ち上げ前にはゲートバルブの透過率測定は行われなかったため、運用終了後にフライトスペア品の Be 窓の透過率測定を行い、校正データベースファイルが作成された。この際、ステンレスメッシュの測定はなされていない上に、Be 窓の透過率モデルにも物理的に原因の特定できない不連続な構造が存在した。そのため、SXS で得られた「かに」星雲のスペクトルには、特に 2.0–4.0 keV 帯域において、ゲートバルブ由来の系統誤差が顕著に含まれており、高エネルギー分解能スペクトルを用いた天体物理学の解釈に大きな不定性が残った。

2022 年打ち上げ予定の X 線撮像分光衛星 XRISM に搭載される分光装置 Resolve は SXS とほぼ同じ設計であり、高分解能 X 線分光で新たなサイエンスを切り拓くことが期待されている。XRISM 衛星打ち上げ後 3 ヶ月ほど行われる初期観測のデータは全てゲートバルブを通して得られるため、これらのデータから科学成果を得るにはその X 線透過率を精密に測定しておく必要がある。

本研究の目的はゲートバルブの構成要素であるステンレスメッシュと Be 窓の透過率測定を独立に行い、高精度の透過率モデルを構築することである。これにより、ゲートバルブ起因で系統誤差の大きかった 2.0–4.0 keV 帯における X 線分光研究の発展が期待される。我々は宇宙科学研究所 X 線ビームラインにてステンレスメッシュの透過率測定を、KEK フォトンファクトリーと広島大学放射光科学研究センターの 2 つの放射光施設にて Be 窓の透過率測定を実施した。また、Be 窓の透過率カーブに現れる不連続構造をモデル化するため、首都大学東京にて Be 窓の X 線回折測定を行なった。これらの透過率測定データを元に、各要素の透過率モデルを作成した。ステンレスメッシュにおいては、構成元素である Fe, Ni, Cr の光電吸収、干渉性散乱、非干渉性散乱及びメッシュ形状をモデル化した。ステンレスメッシュの開口率は、これまでは設計図から 71.0% と仮定されていたが、実際には数 % の系統誤差を持つことがわかった。Be 窓においては、(1)Be の光電吸収及び非干渉性散乱の効果、(2) 微小元素 (Cr, Mn, Fe, Ni, Cu) の光電吸収の効果、(3)Be 結晶面に応じた干渉性散乱成分をモデル化した。本研究では、透過率不連続構造の物理的描像を理解し、干渉性散乱として透過率カーブ全体に取り込むことで、低エネルギー側の Be 窓が実効的に薄くなる効果をモデル化することに成功した。さらに Be 窓透過率には 2% ほどの空間非一様性があることを確認した。

本研究で得た Be 窓の透過率モデル構築方法に基づき、SXS フライトスペア Be 窓の透過率測定データから再モデリングを行なった。得られた透過率モデルを用いて、SXS で観測された「かに」星雲のスペクトルを再解析したところ、顕著な改善が確認できた。そのため、ここで作成した SXS ゲートバルブの透過率モデルは新たな校正データベースとして更新予定である。

SXS 観測データの再解析により透過率モデルの改善が確認できたので、この透過率モデルを Resolve の校正データベースとしても取り込むこととする。その際、測定したステンレスメッシュと Resolve 搭載品は開口率が数 % ほど異なると予想されるため、打ち上げ後に軌道上での天体観測データから開口率を算出する必要がある。そのため、軌道上校正計画についても本論文で議論した。



# 目次

第 1 章	X 線天文学	12
1.1	X 線天文学	13
1.1.1	X 線天文学の歴史	13
1.1.2	これからの X 線天文学	15
1.2	マイクロカロリメータ	17
1.2.1	構造	17
1.2.2	エネルギー分解能	18
1.3	XRISM 衛星	20
1.3.1	概要	20
1.3.2	軌道上での運用	20
1.3.3	Resolve	21
第 2 章	本論文の背景と目的及び構成	28
2.1	背景 – SXS 装置較正の問題点	29
2.1.1	SXS 有効面積の系統誤差	29
2.1.2	ゲートバルブ透過率測定試験	29
2.1.3	SXS ゲートバルブの最新の較正データベース	30
2.2	目的	33
2.3	構成	34
第 3 章	供試体: ゲートバルブ	35
3.1	用途	36
3.2	構成	38
3.2.1	Be 窓	39
3.2.2	ステンレスメッシュ	39
3.3	SXS からの変更点	41
3.4	軌道上でのゲートバルブ	45
第 4 章	測定 1: ステンレスメッシュの透過率測定	46
4.1	ISAS ビームラインでの透過率測定	47
4.1.1	目的	47
4.1.2	装置	47
4.1.3	セットアップ	57
4.1.4	測定結果	62

4.1.5	解析	65
第 5 章	測定 2: Be 窓の透過率・回折ピーク測定	70
5.1	KEK PF BL7C での透過率測定	71
5.1.1	目的	71
5.1.2	装置	71
5.1.3	セットアップ	72
5.1.4	測定と結果	74
5.1.5	解析	75
5.2	KEK PF BL11B での透過率測定	80
5.2.1	目的	80
5.2.2	装置	80
5.2.3	セットアップ	81
5.2.4	測定と結果	84
5.2.5	解析	86
5.3	HiSOR BL11 での透過率測定	96
5.3.1	目的	96
5.3.2	装置	97
5.3.3	セットアップ	100
5.3.4	測定と結果	101
5.3.5	解析	102
5.4	首都大学東京での X 線回折測定	106
5.4.1	目的	106
5.4.2	装置	107
5.4.3	セットアップ	108
5.4.4	測定と結果	109
5.4.5	解析	110
第 6 章	議論	115
6.1	ステンレスメッシュのモデリング	116
6.2	Be 窓のモデリング	119
6.2.1	微小元素	121
6.2.2	BDF	124
6.3	ゲートバルブ全体のモデリング	132
6.4	Resolve ゲートバルブの軌道上較正計画立案	134
6.4.1	ゲートバルブ閉栓時の軌道上較正計画	134
6.4.2	ゲートバルブ開栓時の軌道上較正計画	139
6.5	SXS データ再解析	147
6.5.1	SXS Be 窓の透過率測定データ再解析	147
6.5.2	SXS で観測された「かに」星雲のスペクトル再解析	150
第 7 章	結論	153

付録	155
A	結晶学の基礎知識 . . . . . 155
A.1	結晶の幾何学 . . . . . 155
A.2	自由電子による散乱 . . . . . 157
A.3	原子による散乱 . . . . . 158
A.4	単位格子による散乱 . . . . . 160
A.5	粉末結晶への応用 . . . . . 163
A.6	散乱強度の入射エネルギー依存性 . . . . . 171
B	測定ログ . . . . . 173
B.1	ISAS ビームラインでのステンレスメッシュ透過率測定 . . . . . 173
B.2	KEK PF BL7C での Be 窓透過率測定 . . . . . 174
B.3	KEK PF BL11B での Be 窓透過率測定 . . . . . 175
B.4	HiSOR BL11 での Be 窓透過率測定 . . . . . 177
B.5	首都大学東京での Be 窓 X 線回折測定 . . . . . 177
改訂履歴	178
謝辞	179

# 目次

1.1	「ぎんが」衛星搭載の比例計数管 LAC によるペルセウス銀河団の X 線スペクトル . . . . .	14
1.2	「すざく」衛星搭載 CCD 検出器 XIS によるペルセウス銀河団の X 線スペクトル . . . . .	15
1.3	「ひとみ」衛星搭載 X 線マイクロカロリメータ SXS によるペルセウス銀河団の X 線スペクトル . . . . .	16
1.4	マイクロカロリメータの構造 . . . . .	17
1.5	XRISM 衛星打ち上げ後の運用タイムライン . . . . .	20
1.6	XRISM 衛星の全体像と Resolve . . . . .	21
1.7	SXS のブロックダイアグラム . . . . .	22
1.8	XRISM 衛星搭載 X 線望遠鏡 XMA . . . . .	23
1.9	検出器方向から見たフィルタホイール . . . . .	24
1.10	Resolve 冷却デューワー . . . . .	25
1.11	Resolve の冷却チェーン . . . . .	26
1.12	Resolve センサー素子 . . . . .	26
2.1	「ひとみ」衛星で得られた「かに」星雲のスペクトルと有効面積系統誤差 . . . . .	29
2.2	SXS ゲートバルブ . . . . .	31
2.3	CALDB に用いられている Be 窓、ステンレスメッシュ各々の透過率曲線 . . . . .	32
2.4	CALDB に入っているゲートバルブ全体の透過率曲線 . . . . .	32
3.1	Resolve 冷却システムの概念図とデューワー容器の断面図 . . . . .	36
3.2	デューワー最上部に設置された Resolve ゲートバルブ . . . . .	37
3.3	Resolve Be 窓 . . . . .	38
3.4	Resolve ステンレスメッシュ . . . . .	38
3.5	Resolve ゲートバルブ設計図 (top view) . . . . .	42
3.6	Resolve ゲートバルブ設計図 (side view) . . . . .	43
3.7	ゲートバルブの幾何的構造に起因する透過率カーブ . . . . .	44
3.8	地上で開放された SXS デューワー上部のゲートバルブ . . . . .	45
4.1	ISAS ビームラインの全体図 . . . . .	48
4.2	熱電子を照射するターゲット . . . . .	48
4.3	金属フィルタの透過率 . . . . .	50
4.4	DCM の概要図 . . . . .	51
4.5	Ti K $\alpha$ 付近のロッキングカーブ . . . . .	51
4.6	測定チャンバの 3D イメージ . . . . .	52
4.7	供試体ステージ・検出器ステージの概要図 . . . . .	54

4.8	ラスタースキンの軌道	58
4.9	作成した治具	59
4.10	チャンバ内の様子	59
4.11	供試体アラインメント	60
4.12	ターゲット Ag K $\alpha$ 時の DCM	60
4.13	ステンレスメッシュ透過光を CCD 検出器で撮影した様子	62
4.14	ステンレスメッシュなしの直接光を CCD 検出器で撮影した様子	62
4.15	ロッキングカーブ	63
4.16	直接光のエネルギースペクトル	64
4.17	エネルギー換算後の直接光スペクトル	66
4.18	各スキンのカウントレートばらつき	67
4.19	透過率測定結果	69
5.1	BL7C 全体写真	72
5.2	BL7C ハッチ内の写真	72
5.3	BL7C の機器配置	73
5.4	測定で得られた Cu の XANES スペクトル	74
5.5	4.0–12.0 keV 帯域での Be 窓上部の透過率カーブ	77
5.6	4.0–12.0 keV 帯域での Be 窓中心の透過率カーブ	78
5.7	4.0–12.0 keV 帯域での Be 窓下部の透過率カーブ	79
5.8	BL11B の構成および制御系	80
5.9	BL11B の全体写真	81
5.10	BL11B の機器配置	81
5.11	BL11B 測定チャンバ内	82
5.12	モータードライブステージ	83
5.13	PVC の XANES スペクトル	84
5.14	1.8–5.0 keV 帯域での Be 窓上部の透過率カーブ	87
5.15	1.8–5.0 keV 帯域での Be 窓中心の透過率カーブ	88
5.16	1.8–5.0 keV 帯域での Be 窓下部の透過率カーブ	89
5.17	4000 eV でのスキン測定ライトカーブ	91
5.18	3456 eV でのスキン測定ライトカーブ	92
5.19	3000 eV でのスキン測定ライトカーブ	93
5.20	2700 eV でのスキン測定ライトカーブ	94
5.21	透過率位置依存性の測定結果	95
5.22	一次光と高次光フラックスの二結晶間の角度応答	97
5.23	HiSOR 各ビームラインのエネルギースペクトル	98
5.24	HiSOR BL11 全体像	98
5.25	HiSOR BL11 終端部	99
5.26	HiSOR BL11 終端部周辺の写真	99
5.27	供試体をチャンバ内に保持するための治具	101
5.28	detuning 時と full-tune 時での 2.1–2.4 keV 帯の透過率カーブ比較	102
5.29	2140 eV と 2400 eV の X 線を用いた定点観測結果	103

5.30	2.1–4.0 keV 帯域での Be 窓中心の透過率カーブ . . . . .	105
5.31	完全粉末 Be 結晶の X 線回折シミュレーション結果 . . . . .	107
5.32	X 線回折装置 Ultima IV の内部 . . . . .	108
5.33	回折測定結果の生データ . . . . .	110
5.34	図 5.33 上図の横軸を 95–120° の範囲で拡大した図 . . . . .	111
5.35	ガウシアン関数でフィッティングした結果 . . . . .	112
5.36	測定結果とシミュレーションでの回折ピークごとの強度比の比較 . . . . .	114
6.1	ステンレスメッシュの較正データベースモデルと断面を円としたモデル . . . . .	117
6.2	3 つの透過率モデルカーブと測定結果の比較 . . . . .	118
6.3	4.9–8.0 keV での Be 窓透過率カーブ . . . . .	120
6.4	8.0–10.0 keV での Be 窓透過率カーブ . . . . .	120
6.5	フィッティング後の Fe 吸収端付近の透過率カーブ . . . . .	122
6.6	フィッティング後の Ni 吸収端付近の透過率カーブ . . . . .	122
6.7	フィッティング後の Cr 吸収端付近の透過率カーブ . . . . .	123
6.8	フィッティング後の Mn 吸収端付近の透過率カーブ . . . . .	123
6.9	フィッティング後の Cu 吸収端付近の透過率カーブ . . . . .	124
6.10	微小元素を含めたモデルを用いた 2.4–12.0 keV での Be 窓透過率カーブ . . . . .	125
6.11	光電吸収と非干渉性散乱を取り込んだモデルを用いた 2.6–12.0 keV での Be 窓透過率カーブ . . . . .	127
6.12	BDF エネルギー前後でのフィッティングで決定した干渉性散乱厚み . . . . .	129
6.13	Be と微小元素の光電吸収に Be の散乱を加味した透過率カーブ . . . . .	130
6.14	Be 窓透過率測定から得られた BDF の深さと X 線回折測定でのピーク強度の比較 . . . . .	131
6.15	Be 窓とステンレスメッシュを組み合わせたゲートバルブ透過率カーブ . . . . .	133
6.16	ステンレスメッシュ開口率をパラメータにした「かに」星雲のスペクトル . . . . .	136
6.17	光電吸収厚みをパラメータにした「かに」星雲のスペクトル . . . . .	137
6.18	BDF の深さをパラメータにした「かに」星雲のスペクトル . . . . .	138
6.19	Vela X のゲートバルブ閉栓時と開栓時のスペクトル比較 . . . . .	141
6.20	B0540-69 のゲートバルブ閉栓時と開栓時のスペクトル比較 . . . . .	141
6.21	ステンレスメッシュ開口率をパラメータにした Vela X のスペクトル . . . . .	142
6.22	ステンレスメッシュ開口率をパラメータにした B0540-69 のスペクトル . . . . .	143
6.23	光電吸収厚みをパラメータにした Vela X のスペクトル . . . . .	144
6.24	光電吸収厚みをパラメータにした B0540-69 のスペクトル . . . . .	144
6.25	BDF の深さをパラメータにした Vela X のスペクトル . . . . .	145
6.26	BDF の深さをパラメータにした B0540-69 のスペクトル . . . . .	146
6.27	微小元素を含めたモデルを用いた 2.6–12.0 keV での Be 窓透過率カーブ . . . . .	148
6.28	BDF エネルギー前後でのフィッティングで決定した SXS Be 窓の干渉性散乱厚み . . . . .	149
6.29	Be と微小元素の光電吸収に Be の散乱を加味した透過率カーブ . . . . .	150
6.30	Be の厚みを変化させた際の SXS で観測された「かに」星雲スペクトル . . . . .	151
6.31	SXS で観測された「かに」星雲のスペクトル再解析結果 . . . . .	152
A.1	六方晶系である Be の結晶構造 . . . . .	155
A.2	格子面 ( <i>hkl</i> ) に対応する逆格子点 <i>P</i> . . . . .	156

A.3	Bragg 条件を満たす Ewald 球上の逆格子点 . . . . .	157
A.4	原子散乱因子の $\sin\theta/\lambda$ , 原子番号依存性 . . . . .	159
A.5	Be の光電吸収、干渉性散乱、非干渉性散乱それぞれの減衰係数 . . . . .	160
A.6	格子数 $N$ の時のラウエ関数 . . . . .	161
A.7	Be の単位格子中に含まれる Be 原子の位置 . . . . .	162
A.8	ラウエ法で観測されるラウエ斑点 . . . . .	163
A.9	粉末 X 線回折で得られるデバイシェラーリング . . . . .	164
A.10	(100) 面と同様の面間隔をもつ結晶面 . . . . .	165
A.11	Ewald 球での結晶面の法線 CP とその広がり分布 . . . . .	166
A.12	デバイシェラーリングでの粉末回折線 . . . . .	167
A.13	回折角に対するローレンツ因子 . . . . .	168
A.14	本議論で設定している空間座標系 . . . . .	171

# 表目次

1.1	Resolve 要求値 . . . . .	22
1.2	FWM の各フィルタの役割 . . . . .	24
2.1	透過率測定から求めた SXS Be 窓フライトスペア品のベストフィット値 . . . . .	31
2.2	Resolve の装置校正タスクとその主導機関の一覧 . . . . .	33
2.3	Be 窓、ステンレスメッシュそれぞれの校正要求 . . . . .	34
3.1	Resolve のゲートバルブ各要素の仕様 . . . . .	39
3.2	Materion 社からの納入時の Be 窓の幾何学的厚み . . . . .	39
3.3	SXS, Resolve の各ゲートバルブ要素のモデル . . . . .	40
4.1	ISAS X 線発生装置で用いることのできるターゲットとその典型的な輝線エネルギー . . . . .	49
4.2	X 線発生装置 (RA-HF18) の仕様 . . . . .	49
4.3	蛍光 X 線と対応する金属フィルタの種類 . . . . .	50
4.4	供試体ステージ・検出器ステージの基本情報 . . . . .	53
4.5	ガスフロー型比例計数管の仕様 . . . . .	55
4.6	マルチチャンネルアナライザーの仕様 . . . . .	55
4.7	背面照射型 CCD の仕様 . . . . .	56
4.8	本測定で用いたターゲット . . . . .	61
4.9	算出された透過率 . . . . .	68
5.1	BL7C で得られたデータセット . . . . .	75
5.2	BL11B Si 結晶を用いた DCM で得られたデータセット . . . . .	85
5.3	BL11B InSb 結晶を用いた DCM で得られたデータセット . . . . .	86
5.4	HiSOR BL11 データセット . . . . .	102
5.5	フィッティングで得られた回折ピークパラメータと文献値の比較 . . . . .	113
6.1	フィッティングで得られた微小元素の厚み . . . . .	124
6.2	BDF エネルギー前後での Be の干渉性散乱の厚み . . . . .	128
6.3	バルサー風星雲の星間吸収とフラックス . . . . .	140
6.4	フィッティングで得られた SXS Be 窓における Be と微小元素厚み . . . . .	148
6.5	BDF エネルギー前後での SXS Be 窓の干渉性散乱厚み . . . . .	149
A.1	六方晶である Be 結晶の多重度因子 $M$ . . . . .	165
A.2	12.0 keV 以下の結晶面についての結晶情報 . . . . .	169



---

A.3	12.0 keV 以下の消滅則を除いた結晶面についての結晶情報 . . . . .	170
B.4	ISAS ビームラインでの測定ログ . . . . .	173
B.5	BL7C 測定ログ . . . . .	174
B.6	BL11B 測定ログ . . . . .	176
B.7	BL11 測定ログ . . . . .	177
B.8	X 線回折測定ログ . . . . .	177

## 第 1 章

# X 線天文学

### Contents

<b>1.1</b>	<b>X 線天文学</b> . . . . .	<b>13</b>
1.1.1	X 線天文学の歴史 . . . . .	13
1.1.2	これからの X 線天文学 . . . . .	15
<b>1.2</b>	<b>マイクロカロリメータ</b> . . . . .	<b>17</b>
1.2.1	構造 . . . . .	17
1.2.2	エネルギー分解能 . . . . .	18
<b>1.3</b>	<b>XRISM 衛星</b> . . . . .	<b>20</b>
1.3.1	概要 . . . . .	20
1.3.2	軌道上での運用 . . . . .	20
1.3.3	Resolve . . . . .	21

1.1 節では X 線天文学の歴史を検出器の発展と共に振り返ったのち、X 線天文学の今後の見通しについて記す。  
 1.2 節では今後主流でなるであろう高エネルギー分解能検出器マイクロカロリメータについて、1.3 節では日本の将来ミッション XRISM 衛星について概要を記す。

## 1.1 X 線天文学

### 1.1.1 X 線天文学の歴史

観測天文学は人類史と共に発展してきた最も古い学問の一つに数えられるが、19 世紀までは可視光による観測のみに限られていた。19 世紀以降、科学技術の発展に伴い、電波や赤外線から  $\gamma$  線にいたるまで様々な波長の電磁波を利用した観測が可能となった。X 線天文学もその 1 つであるが、その歴史は浅く、実際に観測が行われるようになったのは 20 世紀後半に入ってからであった。X 線は地球大気で吸収されてしまうため、地上からは観測することができない。そのため人工衛星や気球、ロケットに観測機器を搭載し、大気圏外から観測する必要がある。1962 年、アメリカの R. Giacconi や B. Rossi らの観測ロケットによって、初めて太陽以外の天体（さそり座 X-1）からの X 線が観測され、X 線天文学が創始された<sup>1</sup>。その後の X 線観測により、超高温プラズマからの熱的な X 線放射、プラズマ中の高エネルギー電子から放射される非熱的な X 線放射などの高エネルギー現象が多数発見された。これらの X 線観測によりそれまで考えられてきた静的な宇宙観は覆され、現代では宇宙は動的でダイナミックなものであることが明らかになった。また、1960–1970 年代には、X 線星の放射起源は、高密度星に流れ込むプラズマによって解放される重力エネルギーであることが解明されてきた。これにより、今まで理論的にしか示されていなかった重い恒星の重力崩壊により生まれた高密度星、すなわち中性子星やブラックホールの存在が証明された。

本節では、日本の X 線天文学の発展とともに、その時代に主流であった検出装置について、エネルギー分解能に主眼を当てて説明する<sup>2</sup>。日本の X 線観測は小田稔が考案した「すだれコリメータ」によって、さそり座 X-1 の位置同定に成功したことから始まった。これは 2 層のすだれ状のコリメータを検出器の上に置くことで、入射 X 線の角度による強度変化を感知し、方向を知るという仕組みである。すだれコリメータは 1979 年に打ち上げられた日本初の X 線天文衛星「はくちょう」に世界で初めて搭載され、次々と新しい X 線源の位置を決定することに貢献した。

1983 年には 2 番目の X 線天文衛星として「てんま」が打ち上げられた。「てんま」には蛍光比例計数管が世界で初めて搭載され、これまでの比例計数管より 2 倍ほど分解能のよい ( $\Delta E_{\text{FWHM}} \sim 600 \text{ eV}@6 \text{ keV}$ ) スペクトルを取得することが可能になった。蛍光比例計数管は、キセノンガスの光電吸収で発生した一次電子群を高電圧を印加することで加速させる。加速した電子によりガスを励起することでシンチレーション光を発生させ、光電子増倍管で電気信号として検出する。通常のプロポーション計数管のように電子数揺らぎの増加を伴う電子増幅を行わないので、エネルギー分解能の悪化を抑えられる特徴がある。銀河面リッジの高温プラズマからのヘリウム様鉄輝線の初検出<sup>3</sup>など、高い分光性能を活かし、様々なサイエンス成果が上げられた。

1987 年に打ち上げられた「ぎんが」衛星は、当時最大の有効面積を誇る比例計数管 (Large Area Counter; LAC) を搭載し、X 線天体を高感度で観測することに成功した。LAC は 1 台あたり  $500 \text{ cm}^2$  の有効面積を持ち、8 台合計で  $4000 \text{ cm}^2$  の大面積を誇る。当時は X 線集光鏡を衛星に搭載する技術がなかったため、大面積を達成するには比例計数管を大型化するしかなかったのである。大胆な大型化により、これまでは暗くて精度の高い観測ができなかった系外の X 線連星や活動銀河核に対して数多くの成果を上げた。また、短時間で多くの光子を検出できるため、時間変動を追うタイプの研究にも大いに貢献した。高感度化に狙いを絞った衛星であるため、「てんま」衛星よりエネルギー分解能は悪く、 $\Delta E_{\text{FWHM}} \sim 1100 \text{ eV}@6 \text{ keV}$  ほどである。図 1.1 に「ぎんが」衛星の LAC で取得されたペルセウス銀河団中心部の X 線スペクトルを示す。モデルフィッティングに鉄輝線が必要であることを示した。

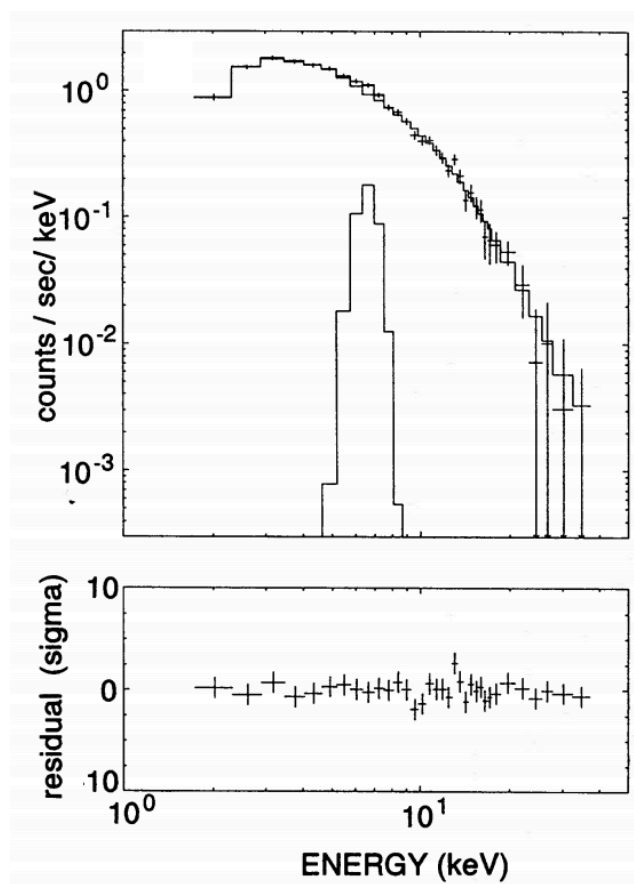


図 1.1: 「ぎんが」衛星搭載の比例計数管 LAC ( $\Delta E_{\text{FWHM}} \sim 1100 \text{ eV}@6 \text{ keV}$ ) によるペルセウス銀河団中心部の X 線スペクトル<sup>4</sup>。モデルフィッティングに鉄輝線が必要であることを示した。

1993 年の「あすか」衛星は日本で初めて X 線望遠鏡を搭載した X 線天文衛星である。また、位置検出能力のある蛍光比例計数管 (Gas Imaging Spectrometer; GIS) や X 線 CCD カメラ (Solid-state Imaging Spectrometer; SIS) を組み合わせることにより、2 keV 以上で撮像能力を持った世界で初めての X 線天文衛星となった。また、CCD 検出器に用いられるシリコンは平均電離エネルギーがキセノンより低く、一次電子の数が増えたため、エネルギー分解能が向上した ( $\Delta E_{\text{FWHM}} \sim 120 \text{ eV}@6 \text{ keV}$ )。望遠鏡はアルミニウムと金の多重薄膜鏡を採用しており、これまでの X 線衛星に搭載された望遠鏡と比べて軽量にも関わらず、大有効面積を可能にした。CCD 検出器は高いエネルギー分解能と撮像能力を兼ね備える優れた検出器である。それに加え、広視野・高時間分解能が特徴の GIS を相補的に用いることで、より効率的な観測を行うことが可能である。サイエンス面では、CCD の高い分光性能により、6.4 keV の中性鉄輝線と 6.7 keV のヘリウム様鉄輝線が分解できるようになった。

2005 年に打ち上げられた「すざく」衛星 (ASTRO-E2) は 5 台の軟 X 線検出器と 1 台の硬 X 線検出器 (Hard X-ray Detector; HXD) を搭載している。軟 X 線望遠鏡は、5 つの X 線反射鏡 (X-ray telescope; XRT) と 5 つの焦点面検出器からなる。焦点面検出器のうち、4 台は CCD 検出器 (X-ray Imaging Spectrometer; XIS)、1 台はマイクロカロリメータ (X-Ray Spectrometer; XRS) である。XRS は  $\Delta E_{\text{FWHM}} \sim 6 \text{ eV}@6 \text{ keV}$  の超高エネルギー分解能観測が期待されたが、打ち上げ直後に冷媒であるヘリウムが全て蒸発してしまい、観測することができなかった。HXD には、10–70 keV に感度をもつ PIN 検出器と、40–600 keV に感度を持つ GSO の 2 種類が搭載されている。徹底したバックグラウンドの軽減を行うことで、硬 X 線領域で高感度の観測を行うことに成功した。図 1.2 に「すざく」の XIS 検出器によるペルセウス銀河団の X 線スペクトルを示す。 $\Delta E_{\text{FWHM}} \sim 120 \text{ eV}@6 \text{ keV}$  ほどのエネル

ギー分解能の CCD 検出器なので、6.4 keV の鉄輝線付近だけでなく、低エネルギー側でも輝線が分解できている。

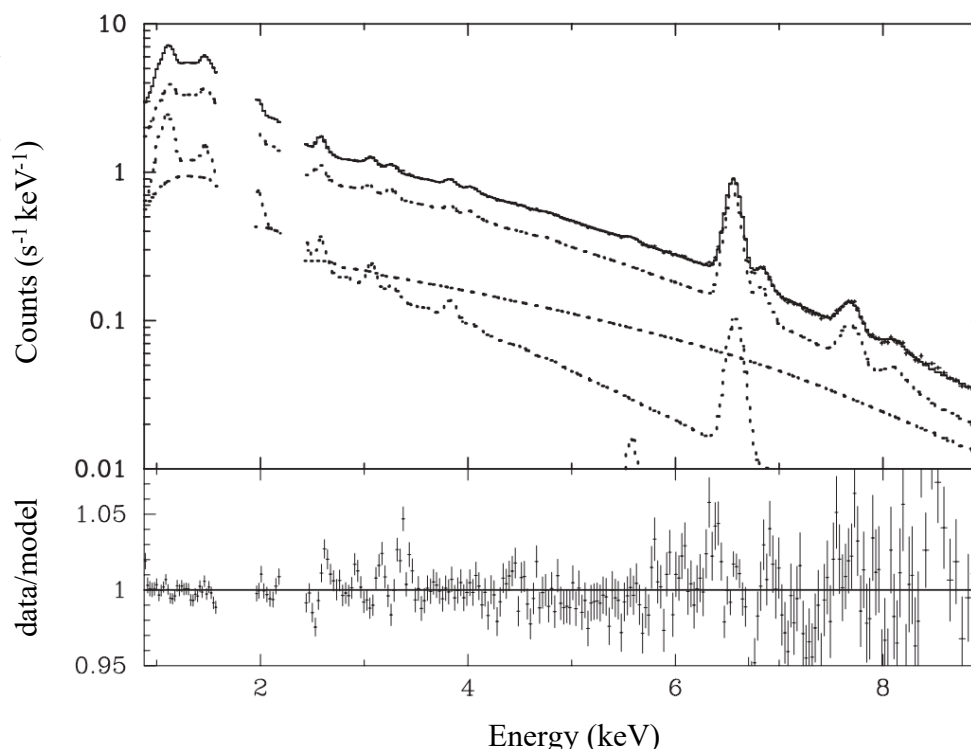


図 1.2: 「すぎく」衛星 CCD 検出器 XIS ( $\Delta E_{\text{FWHM}} \sim 120 \text{ eV}@6 \text{ keV}$ ) によるペルセウス銀河団中心部の X 線スペクトル<sup>5</sup>。多くの輝線が分解できている。

これまで日本の X 線衛星に用いられた軟 X 線領域の検出器として、比例計数管、蛍光比例計数管、CCD 検出器を説明した。日本ではこれまで用いられてないが、現在主流な検出器の一つとして、グレーティング（回折格子）検出器が挙げられる。1999 年に打ち上げられた NASA の Chandra 衛星と ESA の XMM-Newton 衛星には共にグレーティング検出器が搭載されている。グレーティング検出器は回折格子で X 線を分光し、回折後の X 線光子を CCD 検出器などの位置検出器で検出する。検出したピクセルに応じて回折角が決まり、その結果入射 X 線エネルギーがわかるという仕組みである。分光に適したエネルギー帯は回折格子の格子間隔によって決まり、エネルギーが高くなると回折角の変位が小さくなっていくので、分光が難しく、エネルギー分解能は悪くなる。また、入射光子のエネルギーを検出器上の位置の違いとして取り出すので、広がった天体の分光は困難である。

### 1.1.2 これからの X 線天文学

2016 年 2 月 17 日に日本で 6 番目の X 線天文衛星「ひとみ」が種子島宇宙センターから打ち上げられた。「ひとみ」衛星には CCD のエネルギー分解能を大きく上回るマイクロカロリメータ検出器（Soft X-ray Spectrometer; SXS）が搭載された。SXS は軌道上で  $\Delta E_{\text{FWHM}} \sim 5 \text{ eV}@6 \text{ keV}$  の超高分解能を達成し、初期観測のみに終わったにも関わらず多数の成果を上げた。例えば、ペルセウス座銀河団の高温プラズマの運動が予想されていたよりも穏やかで、速度分散に換算すると 150–200 km/s 程度であったこと<sup>6</sup>、同銀河団の鉄族 (Cr, Mn, Ni) 元素量を初めて精密測定し、それらの鉄に対する組成が太陽組成と同程度であったこと<sup>7</sup>、ダークマターの消滅線候補であった 3.5 keV 輝線の可能性を否定したこと<sup>8</sup> 等が挙げられる。図 1.3 に SXS 検出器で観測されたペルセウス銀河団の X

線スペクトルを示す。 $\Delta E_{\text{FWHM}} \sim 5 \text{ eV@6 keV}$  の高分解能を生かし、鉄族輝線の高階電離輝線など微細構造が分解できている。

SXS を用いて数多くの科学的成果を期待された「ひとみ」衛星であったが、非常に残念なことに、衛星の姿勢制御の不具合により打ち上げから 1 ヶ月で運用断念を余儀なくされた。しかし、SXS 装置自体は軌道上で完璧な動作を見せ、衛星が無事であれば数多くの科学成果を創出していたことは疑いようもないだろう。2022 年には「ひとみ」で行われる予定であったサイエンスを成し遂げるため、代替 X 線天文衛星 (X-Ray Imaging and Spectroscopy Mission; XRISM) を打ち上げ予定である。

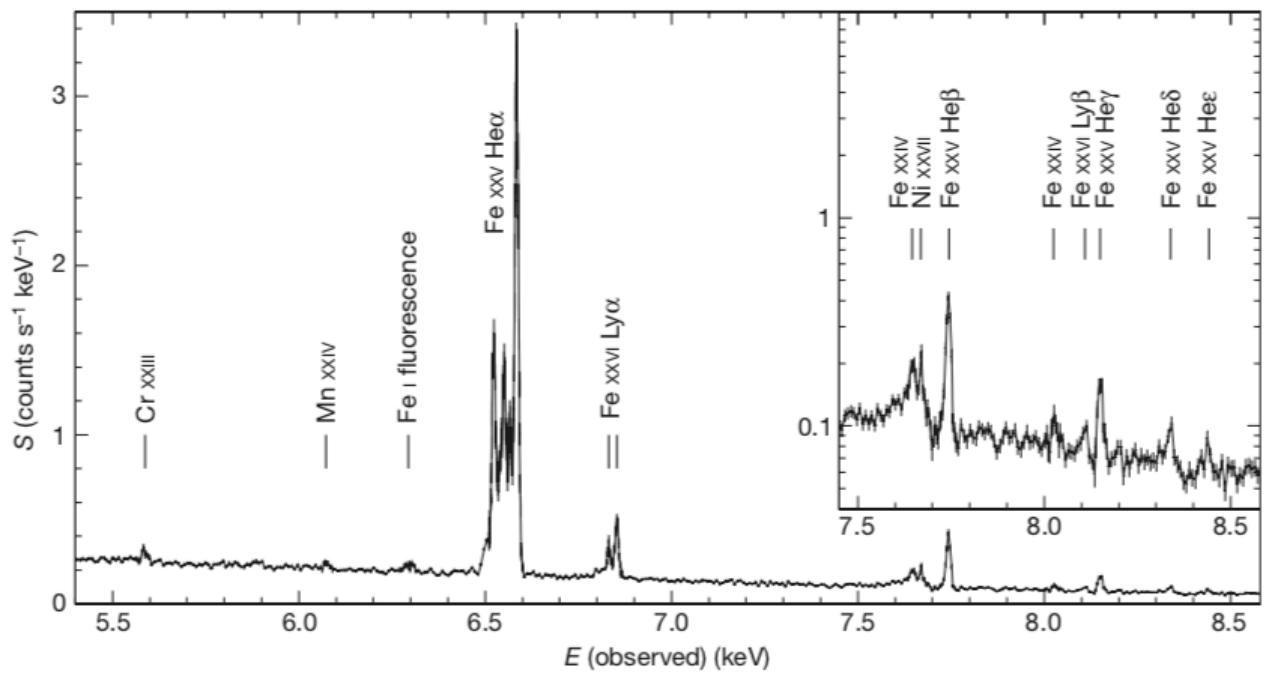


図 1.3: 「ひとみ」衛星搭載 X 線マイクロカロリメータ SXS ( $\Delta E_{\text{FWHM}} \sim 5 \text{ eV@6 keV}$ ) により観測されたペルセウス座銀河団中心部の X 線スペクトル。鉄族輝線の分解のみならず、微細構造も確認できる<sup>6</sup>。

## 1.2 マイクロカロリメータ

マイクロカロリメータ検出器は入射した X 線光子 1 個 1 個のエネルギーを素子の温度上昇として測定する。そのエネルギー分解能は素子内のフォノン数の揺らぎ等によって決まり、極低温に冷却することで飛躍的に向上する。2 keV 以下の低エネルギー帯でのエネルギー分解能こそグレーティングに劣るが、鉄の  $K\alpha$  輝線を含む高エネルギー帯でのエネルギー分解能では CCD 検出器の約 20 倍優れた  $\Delta E_{\text{FWHM}} \sim 5 \text{ eV} @ 6 \text{ keV}$  という超高分解能を可能とする。また、グレーティングと異なり、広がった天体に対しても精密分光が可能である。

### 1.2.1 構造

図 1.4 に示されているように、マイクロカロリメータは吸収体・ピクセル・温度計・サーマルリンク・熱浴からなっている。吸収体に入射した X 線は光電効果により吸収され、その光子が持っていたエネルギーが熱に変わる。そして、吸収体が熱平衡に達し、その熱がサーマルリンクを通してピクセルへと伝わり温度を感知する。その時のピクセルの温度変化は熱容量を  $C$  とすると、

$$\Delta T = \frac{E}{C} \quad (1.1)$$

となる。この温度変化を温度計の抵抗値の変化として読み取る。また、ピクセルと熱浴はサーマルリンクでつながっているため、熱は次第に熱浴へと逃げてゆき、やがて定常状態へと戻ることとなる。このとき、サーマルリンクの熱伝導度を  $G$  とすると、以下の式が成り立つ。

$$C \frac{d\Delta T}{dt} = -G\Delta T \quad (1.2)$$

これを解くことによって時定数が求まり、

$$\tau_0 = \frac{C}{G} \quad (1.3)$$

となる。この時定数に従って、ピクセルの温度上昇は指数関数的に低下していくことになる。

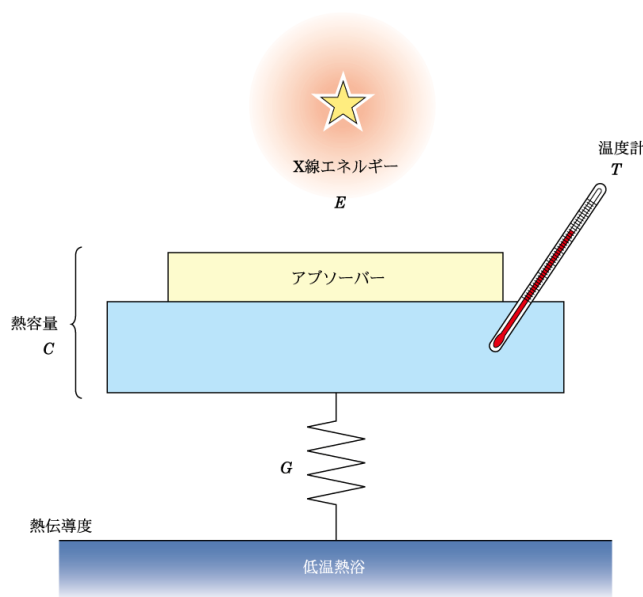


図 1.4: マイクロカロリメータの構造\*1

## 吸収体

X 線光子は光電吸収によって吸収体に吸収される。次項の式 1.5 からわかるように、吸収体は熱容量が小さいものが適している。ただし、熱容量を小さくするために吸収体そのものを小さくしすぎると、X 線の検出効率が悪くなってしまう。吸収体の大きさはこれらの条件を考慮して決めることになる。また、吸収体は熱が外部へ逃げる前にすばやく X 線のエネルギーを全てフォノンに変えることができ(熱化)、入射箇所による非一様性ののないように熱拡散に優れた物質でなければならない。これら全てを考慮したうえで物質を考えなければならないので、吸収体に使える物質は限られている。また、吸収体と温度計はある程度切り離されていなければならない。それは、吸収箇所による非一様性を避けるため、吸収体が熱拡散し平衡に達してから温度計に熱が流れるようにするためである。

## 温度計

温度計は、微小な温度変化に対して感度がよく、ジョンソンノイズや固有の熱揺らぎ以外のノイズができる限り小さなものでなければならない。現在、X 線分光検出器として動作しているマイクロカロリメータには用いる温度計に応じて、半導体サーミスタ型マイクロカロリメータ、超伝導遷移端センサー (Transition Edge Sensor; TES) 型マイクロカロリメータ、金属磁気マイクロカロリメータ (Metallic Magnetic Calorimeter; MMC)、動インダクタンス検出器 (Kinetic Inductance Detector; KID) の 4 種類が存在する<sup>2</sup>。

## サーマルリンク

温度計と熱浴は、サーマルリンクでつながれている。これによって、温度計と熱浴は熱的に切り離され、かつ、光子が入射したら適当な時間で最初の状態に戻るようになっている。式 1.3 からわかるように、サーマルリンクの熱伝導度でマイクロカロリメータの時定数が決まる。

### 1.2.2 エネルギー分解能

マイクロカロリメータのエネルギー分解能は 3 つの要素で制限されている。1 つ目は、フォノンノイズやジョンソンノイズなどの検出器固有のノイズ、2 つ目は、温度計の読み出し回路のノイズ、3 つ目は、熱浴の温度揺らぎや電磁干渉などによるその他のノイズである。このうち、検出器固有のノイズによるエネルギー分解能は以下のように考えることができる。素子全体の内部エネルギーは  $CT$  で、フォノン一個のエネルギーは  $kT$  なので、フォノンの数  $N$  は  $N = CT/kT = C/k$  となる。よって、フォノン数  $N$  による素子の揺らぎは、

$$\Delta E = \sqrt{\frac{C}{k}} kT = \sqrt{kT^2 C} \quad (1.4)$$

となる。X 線の入射による温度上昇  $\Delta T$  はとても小さいので、この  $\Delta E$  をエネルギー分解能として考えてよい。また、ジョンソンノイズや素子の熱揺らぎなどのほかのノイズを考慮して見積もると、より一般的には X 線マイクロカロリメータの固有ノイズのみで決まるエネルギー分解能は

$$\Delta E_{\text{FWHM}} = 2.35\xi\sqrt{kT_b^2 C} \quad (1.5)$$

となる<sup>9</sup>。ただし、 $T_b$  は熱浴の温度・ $\xi$  は温度計の感度などで決まるパラメータである。したがってマイクロカロリメータの分解能は温度と熱容量によって決まり、入射 X 線のエネルギーには依らない。実際にはセンサーの読み

<sup>2</sup> 以下の URL 参照。

<https://astro-dic.jp/x-ray-microcalorimeter/>



だし回路や熱浴の温度揺らぎの寄与もあるため、ここで定めた分解能は、マイクロカロリメータの分解能の上限値として与えられる。

## 1.3 XRISM 衛星

### 1.3.1 概要

XRISM 衛星は、NASA や ESA と共同で 2018 年に開始された JAXA 宇宙科学研究所の 7 番目の X 線天文衛星計画であり、2022 年に打ち上げ予定である。XRISM 衛星は、「ひとみ」の搭載機器のうち、特に X 線マイクロカロリメータによる超高分解能 X 線分光と撮像に焦点を絞った構成をとっている。すなわち、2 台の軟 X 線反射鏡の焦点面に、それぞれ X 線マイクロカロリメータ分光撮像器「Resolve」と広視野 X 線 CCD カメラ「Xtend」を搭載するミッションである。

また、XRISM 衛星は「ひとみ」衛星のミッションを引き継ぎ、以下のサイエンスを進める。

1. 宇宙の構造形成と銀河団の進化の研究
2. 宇宙の物質循環の歴史の研究
3. 宇宙のエネルギー輸送と循環の解明
4. 超高分解能 X 線分光で拓く新しいサイエンスの開拓

### 1.3.2 軌道上での運用

XRISM 衛星は、「H-IIA ロケット」にて小型月着陸実証機「SLIM」と相乗りで 2022 年 2 月に打ち上げ予定である。図 1.5 に XRISM 衛星打ち上げ後の運用タイムラインを示す<sup>10</sup>。高度約 575km の地球周回軌道に投入後、3 ヶ月ほどの初期運用 (Initial phase) を終え、検出器性能評価のための天体観測期間 (Performance Verification phase; PV phase) が半年間ほど行われる。Initial phase, PV phase が終わると、世界中の研究者からの観測提案に基づいた天体観測を行うノミナル観測期間が 2 年超行われる。その後、さらなる審査を経て、延長観測 (Latter phase) を行うかどうかの判断がなされる。図 1.5 下部にあるように、Initial phase は、衛星が安全に姿勢を保つことができることを確認するクリティカル運用期間と、それぞれのサブシステムの動作試験を行うコミッショニング期間とに大別される。

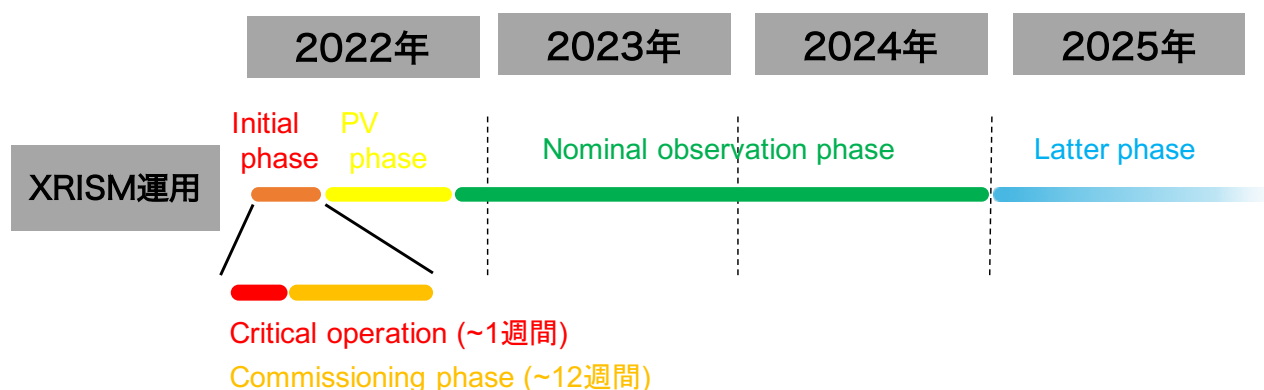


図 1.5: XRISM 衛星打ち上げ後の運用タイムライン

### 1.3.3 Resolve

XRISM 衛星に搭載される Resolve は、焦点距離 5.6 m の X 線望遠鏡 (X-ray Mirror Assembly; XMA) と、X 線マイクロカロリメータ検出器とを組み合わせた、極めて高い分光性能を特長とする分光撮像器である (図 1.6)。

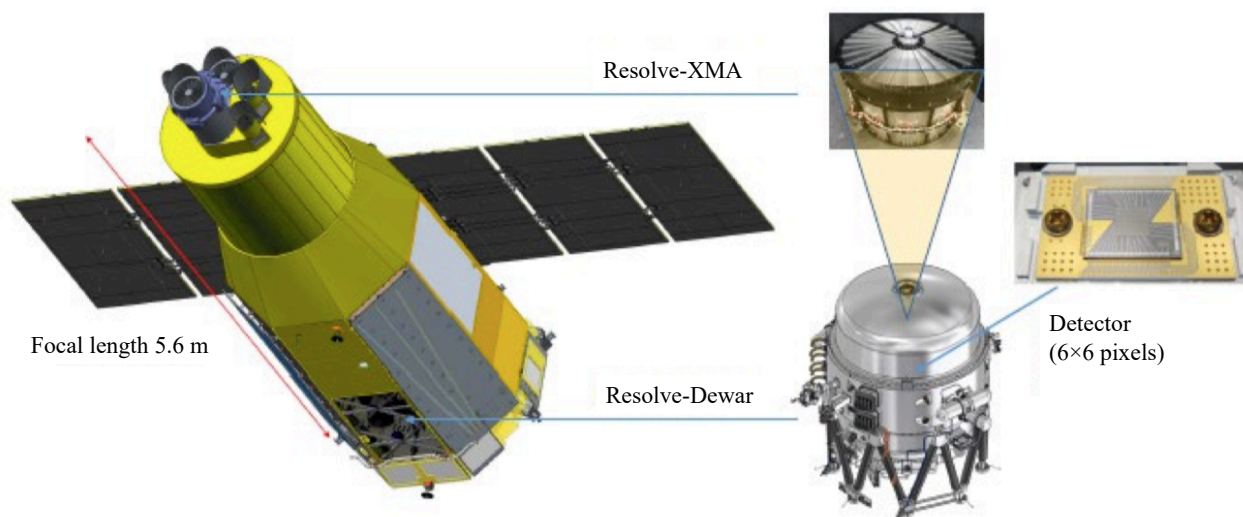


図 1.6: XRISM 衛星の全体像と Resolve<sup>\*2</sup>。Resolve-XMA で集光した X 線をデュワー内のマイクロカロリメータ検出器で検出する。

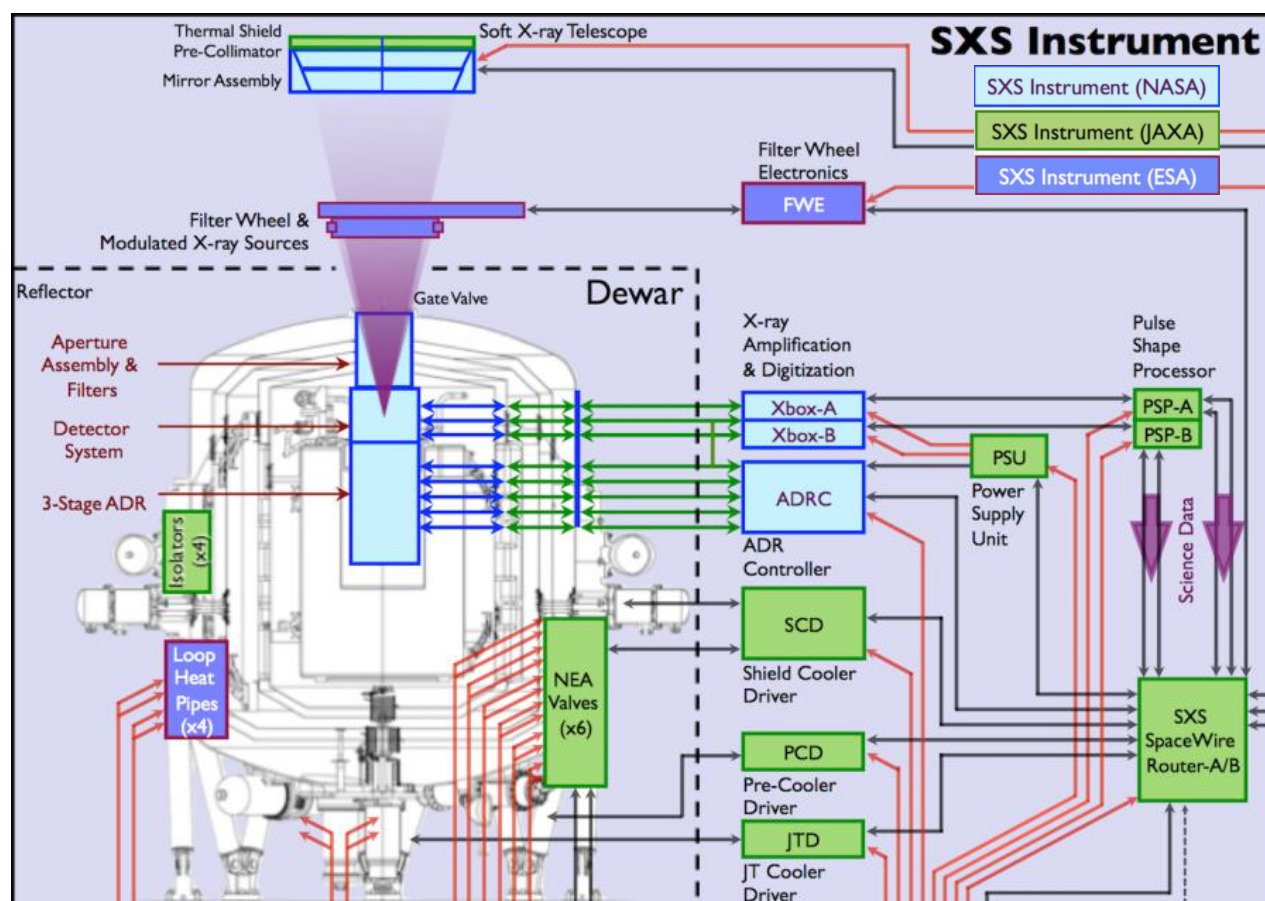
表 1.1 に Resolve のノミナル性能要求をまとめる。基本的な性能は「ひとみ」衛星の SXS と同様である。図 1.7 には SXS のサブシステム構成のブロックダイアグラムを示す。Resolve では、X 線望遠鏡 (X-ray Mirror Assembly; XMA) で集光した X 線がフィルタホイール (Filter Wheel Mechanics; FWM) やゲートバルブを通り、デュワー内に入射する。マイクロカロリメータは極低温でのみ高エネルギー分解能を達成できるので、デュワー内部は多段冷却機構を用いて約 50 mK に制御されている。X 線入射による温度上昇をセンサーが読み出し、信号処理系 (XBOX, PSP) で適切な信号処理を行うことで光子の到来時刻、位置、エネルギーをイベントとして抽出する。この一連の流れに従い、以下に Resolve の光学系、冷却系、検出器、信号処理について順に説明する。

<sup>\*2</sup> 以下の URL を参考にした。

<https://yamashita.issp.u-tokyo.ac.jp/ISSPWS191106/pp191106/hagiwarapp.pdf>  
[http://xrism.isas.jaxa.jp/technology/detail\\_02/](http://xrism.isas.jaxa.jp/technology/detail_02/)

表 1.1: Resolve の要求値<sup>\*3</sup>

分光性能 (FWHM)	7 eV (目標 5 eV)
エネルギー範囲	0.3–12.0 keV
array 全体の非 X 線ノイズ	$\leq 2 \times 10^{-3}$ counts/s/keV
エネルギー決定精度	$\leq 2$ eV
視野	$\geq 2.9 \times 2.9$ 秒角
ピクセル数	6×6 (1 つの較正用ピクセル含む)
角分解能 (Half Power Diameter)	$\leq 1.7$ 秒角
有効面積 (1 keV)	$\geq 160$ cm <sup>2</sup>
有効面積 (6 keV)	$\geq 210$ cm <sup>2</sup>
観測可能な上限カウントレート	$\geq 150$ counts/s (array 全体)
時刻決定精度	$\leq 1$ ms
寿命	$\geq 3$ 年

図 1.7: SXS サブシステム構成のブロックダイアグラム<sup>11</sup><sup>\*3</sup> 以下の URL 等を参照した。[http://www.isas.jaxa.jp/j/researchers/symp/ss11/paper/P2-017\\_20110118103705.pdf](http://www.isas.jaxa.jp/j/researchers/symp/ss11/paper/P2-017_20110118103705.pdf)

### 光学系

XRISMには、2つの望遠鏡 Xtend-XMA、Resolve-XMA（図 1.8）があり、それぞれの光路の先に Xtend センサー、Resolve デュワーが搭載されている。ここでは Resolve-XMA とデュワーまでの光路にある要素について説明する。XMA は焦点距離は 5.6 m、直径約 45 cm の Wolter 1 型望遠鏡である。42 kg という軽量であっても高い集光能力を実現するため、合計 1624 枚の多重薄板型望遠鏡を採用しており、有効面積は  $420\text{ cm}^2@6\text{ keV}$  を誇る。また、視線方向外からの迷光を避けるためのプリコリメータや、温度維持のためのサーマルシールドを搭載している。

XMA で集光された X 線はフィルタホイール (FWM) を通過する。FWM は図 1.9 のような外観をしており、図 1.6 における FOB lower panel のデュワー側に搭載される FW はステッピングモータで FWE によって回転駆動され、観測目的・観測対象に応じて適切なフィルタ等を選択できる。表 1.2 にそれぞれのフィルタ等の役割をまとめる。

$^{55}\text{Fe}$  は 36 ピクセルあるうちの 1 つの較正用ピクセルに常に照射されているが、各ピクセルごとのゲイン変動等は較正することができない。そこで FWM には、 $^{55}\text{Fe}$  だけでなく、X 線ジェネレータ (Modulated X-ray Source; MXS) が搭載されている。MXS は、マイクロカロリメータの全ピクセルに X 線を照射できるだけでなく、軌道上で高速に ON/OFF することも可能である。これにより天体観測中でもエネルギースケールの較正を行うことができる。

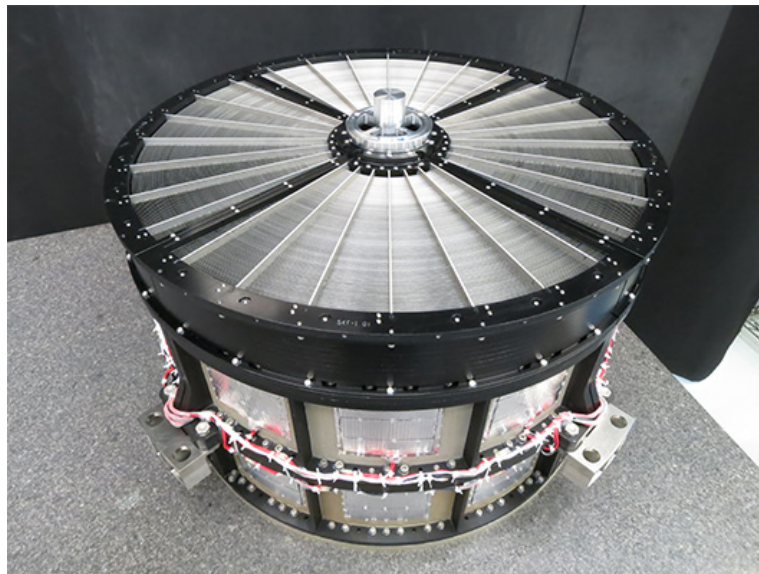
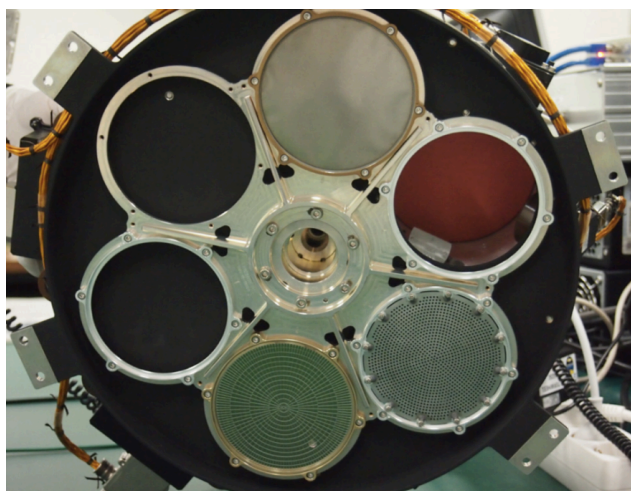


図 1.8: XRISM 衛星搭載 X 線望遠鏡 XMA<sup>\*4</sup>

<sup>\*4</sup> 以下の URL を参照した。

[http://xrism.isas.jaxa.jp/technology/detail\\_02/](http://xrism.isas.jaxa.jp/technology/detail_02/)



図 1.9: 検出器方向から見たフィルタホイール<sup>12</sup>表 1.2: FWM の各フィルタの役割<sup>12</sup>

番号	タイプ	角度	詳細
1	Open	30°	
2	可視光遮蔽	90°	285 nm 厚のポリイミド + 開口率 86.5% のメッシュ
3	X 線フラックス減衰	150°	1.49mm ごとに 1mm の穴が空いた 105 $\mu$ m 厚のモリブデン板
4	Open	210°	デフォルト
5	Be フィルタ	270°	25 $\mu$ m 厚のベリリウム板
6	<sup>55</sup> Fe	330°	較正 X 線源の <sup>55</sup> Fe

## 冷却系

Resolve の冷却系は、冷媒を含むデュワー、断熱消磁冷凍機 (ADR)、機械式冷凍機 (Joule-Thomson cooler, Pre-cooler, Shield-cooler; JTC, PC, SC)、ADR の制御を行う ADRC、機械式冷凍機の制御を行う JT Driver (JTD)、Cooler Driver A と B (CDA, CDB) からなる。デュワーは検出器を内部に搭載する真空断熱容器であり、他の冷却系と合わせて、検出器を 50 mK に冷却する。デュワーの外観を図 1.10 に、Resolve の冷却系を図 1.11 に示す。デュワーの質量は 270 kg、高さ 1290 mm で、最外層の直径は 950 mm である。

Resolve は機械式冷凍機として、1 台の JT 冷凍機と 4 台の 2 段式スターリング (ST) 冷凍機を用いる。JT はヘリウムタンクの放射シールド (約 4.5 K) を冷却するのに使用され、JTD によって駆動される。PC、SC は 2 段スターリング冷凍機それぞれ 2 台からなる。それぞれ JT の予冷とデュワーのシールドの冷却に用いられ、CDA、CDB によって駆動される。また CDA、CDB は冷凍機の駆動以外にもデュワー各部の温度計測やベント弁・ゲート弁の開閉モニタなどの機能も持つ。なお 4 台の ST 冷凍機のコンプレッサとデュワーのメインシェルの間には Vibration Isolation System (VIS) を導入し、擾乱の影響を抑えている。

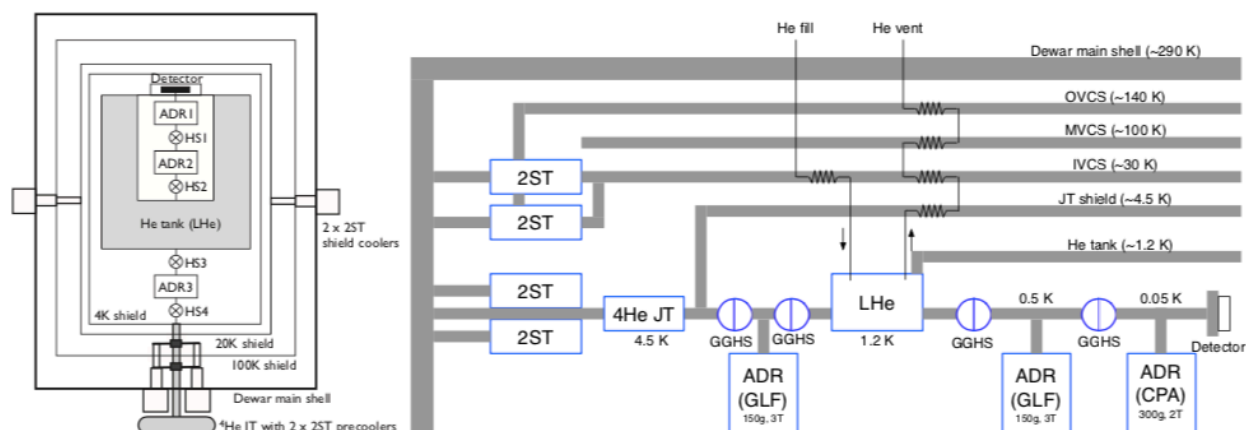
ADR は磁場により常磁性体の温度-エントロピー曲線を操作することで、マイクロカロリメータが設置される熱浴の温度を正確に 50 mK に保持するための冷凍機である。機械式冷凍機で予冷されたあと、2 段式の ADR で 50 mK の極低温まで冷却する。排熱は、寒剤として約 30 L 搭載されている約 1.2 K の超流動液体ヘリウムに捨てられる。ADR は、ADRC により制御され、およそ数日に一度、約 1 時間かけて ADR の再磁化を行う (ADR

recycle)。

なお、JT 冷凍機とヘリウムタンク間の 3 段目の ADR は通常は使用しないが、液体ヘリウムがなくなった後は 3 段目を用いることで冷媒なしでの運用を可能にする。すなわち、3 段目 ADR はヘリウムと機能冗長の関係にある。液体ヘリウム消費量や機械式冷凍機の性能の経年変化を考慮しても、観測寿命は Nominal 要求の 3 年を満たすと予想される。

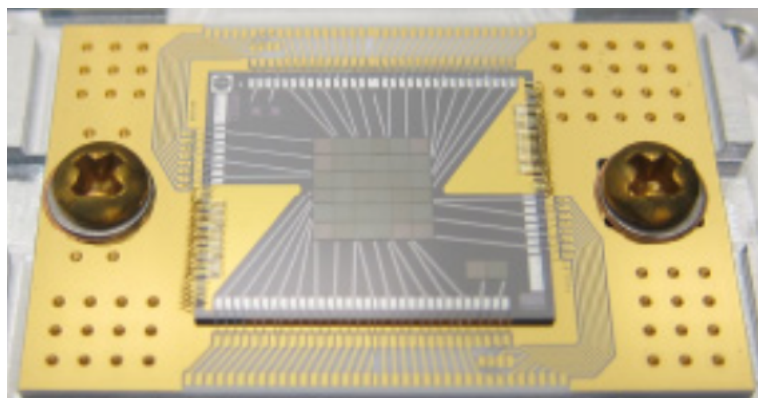


図 1.10: Resolve 冷却デューワー<sup>13</sup>

図 1.11: Resolve の冷却チェーン<sup>14</sup>

### 検出器

Resolve は温度変化に対して電気抵抗の変化の大きい抵抗体（サーミスタ）を用いた半導体サーミスタ型マイクロカロリメータを採用している。サーミスタとしてはシリコン半導体を用いている。また、化合物半導体の水銀テルル ( $\text{HgTe}$ ) を吸収体に用いた  $6 \times 6$  の二次元アレイ状 ( $5 \text{ mm}^2$ ) のセンサー（図 1.12）が搭載されているため、3 分角四方の視野を持った撮像が可能である。このセンサーをデュワー容器に収め、約  $50 \text{ mK}$  の極低温で動作させることで入射 X 線エネルギーによらず  $6\text{--}7 \text{ eV}$  の高エネルギー分解能を達成する。Resolve の場合、式 1.5 を用いてマイクロカロリメータ自身の固有ノイズによって決まるエネルギー分解能を計算すると、約  $2.7 \text{ eV}$  と見積もられる。最も寄与の大きいノイズは検出器固有のノイズである。あらゆるノイズの影響を考慮した上で、Resolve のエネルギー分解能はマージン込みで Resolve の要求値  $7 \text{ eV}$  を満たすように設計されている。

図 1.12: Resolve センサー素子<sup>\*5</sup>

\*5 以下の URL を参照した。

[http://xrism.isas.jaxa.jp/technology/detail\\_02/](http://xrism.isas.jaxa.jp/technology/detail_02/)



## 信号処理

X 線マイクロカロリメータからの信号はアナログ機器の XBOX で、増幅とローパスフィルタ処理がかけられた後にデジタル化される。antico 検出器からの信号もマイクロカロリメータとほぼ同等の回路を通して、XBOX でデジタル化されるが、信号を 2 つに分けて回路を冗長化している。XBOX でデジタル化された信号は、デジタル機器の PSP に送られる。PSP ではイベントトリガとデジタルフィルタによる信号処理を行って、X 線エネルギーと検出時間を計算する。XBOX は 18 ピクセルを処理する回路を電源も含めて独立に 2 系統持ち、どちらかが故障しても半分のピクセルで観測を行える設計としている。PSP も A,B2 系統の同等な 2 ユニットで構成され、それぞれ 18 ピクセル (PSP-A はピクセル 17 ch と cal ピクセル 1 ch) と antico 1 ch の処理を行う。

PSP-A,B は各々、電源 (PSU) ボード 1 枚、FPGA を備えた MIO ボード 1 枚、CPU を備えた Space Card(SpC) ボード 2 枚からなる。PSP-A,B 内のどのボードが故障したかによって、故障時の対応は異なる。たとえば PSP-A の PSU ボードもしくは MIO ボードが故障した場合、17 ピクセルと cal ピクセルのデータが失われるが、PSP-B が担当する残り 18 ピクセル分で観測が可能である。一方、PSP-A の SpC ボード 2 枚のうち 1 枚が故障した場合、高カウントレートの性能は落ちるが、全ピクセルで観測を続行できる。PSP-B の故障についても上と同様である。観測データや HK データは Space Wire Router (SWR) を介して衛星バスに送信される。また SWR は衛星バスからのコマンドを中継する役割も持つ。Resolve では冗長系および GSE 電源でも操作できるようにする観点から、SWR-A,B の 2 台構成としている。

PSU は XBOX に 2 次電源を供給する。特にコモンモードノイズが乗らないように 3 重静電シールドトランスを使用した厳重なフィルタを持つ。PSP,PSU,SWR,ADRC,JTD,SCD,PCD への電源は DIST によって供給される。DIST は衛星 1 次バス電源を分配し、ON/OFF を行い、また電流を測定して、過電流時に分離する。また、地上試験時には GSE からの電源を衛星を介さずに、MD コネクタから Resolve の各コンポーネントに供給することができる。

第 2 章

本論文の背景と目的及び構成

Contents

2.1	背景 – SXS 装置較正の問題点 . . . . .	29
2.1.1	SXS 有効面積の系統誤差 . . . . .	29
2.1.2	ゲートバルブ透過率測定試験 . . . . .	29
2.1.3	SXS ゲートバルブの最新の較正データベース . . . . .	30
2.2	目的 . . . . .	33
2.3	構成 . . . . .	34

2.1 節では、「ひとみ」SXS 検出器の問題点を挙げるとともに、現在用いられている SXS ゲートバルブの較正データベースについて記す。2.2、2.3 節で本論文の目的と構成を述べる。

## 2.1 背景 – SXS 装置較正の問題点

### 2.1.1 SXS 有効面積の系統誤差

図 2.1 は「ひとみ」衛星で得られた「かに」星雲の 2.0–12.0 keV でのスペクトルフィッティングの結果である。左図の黒線が「ひとみ」衛星の SXS 装置で得られた「かに」星雲のソーススペクトル、青線がこれまでの観測から得られている「かに」星雲のベストフィットモデルスペクトル<sup>15</sup>を表す。ここでは  $N_H = 0.42 \times 10^{22} \text{ cm}^2$  の星間吸収と  $\Gamma = 2.10$ ,  $Norm = 8.70$  の power-law をモデルとして用いている。下パネルの残差を見ると、2–4 keV のエネルギー帯で残差が大きくなっていることがわかる。この残差は有効面積の系統誤差から来るものである。系統誤差の要因を一つ一つ調べ、2.0–12.0 keV の有効面積系統誤差に寄与する割合を示したのが右図である<sup>16</sup>。望遠鏡の有効面積は鏡の面積だけでなく、様々なフィルタの透過率、検出器の量子効率や応答関数、イベント処理のデッドタイムなど様々な要素に左右される。その中でも特に、デュワーの最上部に設置されるゲートバルブ (Gate valve; GV) の X 線透過率の不定性は大きく、ゲートバルブ関連の系統誤差だけで過半数を占めている。図 2.1 の残差からもわかるようにゲートバルブの系統誤差は特に 2.0–4.0 keV で大きい。ため、ペルセウス銀河団の X 線スペクトル解析において、ケイ素の元素量や多温度プラズマなど、天体物理学の解釈に大きな不定性が残った。ゲートバルブについては 3 章で詳しく述べる。

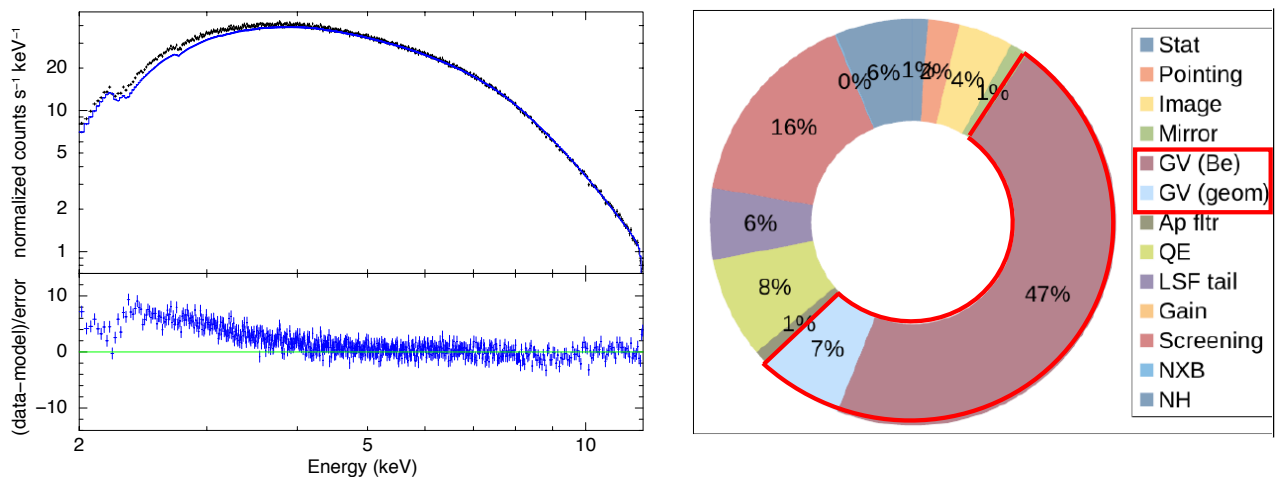


図 2.1: 左: 「かに」星雲の 2.0–12.0 keV でのスペクトル (黒線) とモデルスペクトル (青線)<sup>15</sup>。下のパネルが残差を表す。2.0–4.0 keV で残差が大きいことがわかる。右: 2.0–12.0 keV の有効面積系統誤差の起源<sup>16</sup>。ゲートバルブ由来の系統誤差が半数を超えていることが確認できる。

### 2.1.2 ゲートバルブ透過率測定試験

SXS 装置のほとんどの機器較正試験は、打ち上げ前にフライト品を用いて行われた<sup>17</sup>。しかし、ゲートバルブだけは、試験スケジュールの逼迫や定常観測で使用されないことによる優先度の低さにより、打ち上げ前に較正試験が実施されなかった。そのため、図 2.1 の右図から明らかなように、ゲートバルブ由来の系統誤差がかなり大きい。SXS ではゲートバルブを開ける前に衛星の姿勢制御不能となってミッションが終了したことにより、結果的に全ての観測がゲートバルブを通しての観測となった。ゲートバルブは厚さ (要求値) が  $300 \pm 30 \mu\text{m}$  の Be 窓とステンレスメッシュから構成される。「ひとみ」を失った後、フライトモデルと同じロットで作られたスペア品の Be 窓を

用いて透過率測定が行われ、得られた軌道上データを最大限に活かす努力は成された<sup>18,19</sup>。一方、ステンレスメッシュは、これまで透過率測定が一度もなされていない。

### 2.1.3 SXS ゲートバルブの最新の較正データベース

「ひとみ」衛星 SXS 装置に搭載されたゲートバルブの最新の較正データベースファイル (CALibration DataBase; CALDB) は 2016 年 10 月 27 日にリリースされたものである\*1。この較正データベースの作成方法について Be 窓とステンレスメッシュの 2 つの要素 (図 2.2) に分けて記す。

#### Be 窓

2016 年に放射光施設 SPring-8 で行われた SXS フライトスペア品 (図 2.2 左) の測定データを用いて 3.8–30 keV の Be 窓透過率カーブが作成された<sup>18</sup>。測定の結果、Be 窓の厚みは要求値より薄い 262  $\mu\text{m}$  であり、Be の他に微小元素として Ni, Fe, Cu, Mn, Cr の K 吸収端が確認された。また Be において  $\sim 7$  keV 以下は全ての吸収を光電吸収と近似できるが、 $\sim 7$  keV 以上では非干渉性散乱も効いてくる。そこでアメリカ国立標準技術研究所 (National Institute of Standards and Technology; NIST) のデータベース\*2から 0.4–30.0 keV での光電吸収の質量減衰係数、7.0–30.0 keV での非干渉性散乱の質量減衰係数を参照する。これらの値を用いて、以下の 2 つの式より透過率を計算している。

$$T(E) = \exp(-\rho\mu_{\text{photo}}(E)t) \quad (2.1)$$

$$T(E) = \exp(-\rho\mu_{\text{inc}}(E)t) \quad (2.2)$$

ここで  $t, \rho, \mu_{\text{photo}}, \mu_{\text{inc}}$  はそれぞれ厚み、密度、光電吸収の質量減衰係数、非干渉散乱の質量減衰係数である。また、これらに加え、6057 eV と 6915 eV に吸収端のような構造が確認された。このエネルギーはどの元素の吸収端とも一致しないため、Bragg 散乱による構造 (Bragg Diffraction Features; BDFs) ではないかと議論されている<sup>18,19</sup>。しかし、これらの構造を物理的に解釈するには至ってはいない。そのため、この較正データベースにおいては、不連続な透過率低下が起きたエネルギー  $E_c$  での構造の深さ  $D$  をそのまま透過率カーブに組み込み、以下のように表している。

$$T_{\text{unknown}}(E) = \exp\left(-D\left(\frac{E}{E_c}\right)^{-3}\right) \quad (2.3)$$

ここで  $E < E_c$  の領域では  $T_{\text{unknown}}(E) = 1$  であり、吸収端のような構造は局所的にしかモデル化されていない。Be、微小元素、未同定構造の 3 つを組み合わせ、Be 窓の透過率は以下のように記述されている。

$$T_{\text{Be}}(E) = \exp(-(\mu_{\text{photo}}(E) + \mu_{\text{inc}}(E))\rho t) T_{\text{unknown}}(E) \quad (2.4)$$

また、得られたベストフィットの値を表にまとめる。

\*1 [https://heasarc.gsfc.nasa.gov/docs/hitomi/calib/caldb\\_doc/asth\\_sxs\\_caldb\\_gatevalve\\_v20161223.pdf](https://heasarc.gsfc.nasa.gov/docs/hitomi/calib/caldb_doc/asth_sxs_caldb_gatevalve_v20161223.pdf)

\*2 <https://physics.nist.gov/PhysRefData/FFast/html/form.html><sup>20, 21</sup>

表 2.1: 透過率測定から求めた SXS Be 窓フライトスペア品のベストフィット値<sup>\*3</sup>

元素	密度 $\rho$ [g/cm <sup>3</sup> ]	厚み $t$	吸収の深さ $D$
Be	1.85	261.86 $\pm$ 0.01 $\mu$ m	
Cr	7.19	3nm (fixed)	
Mn	7.30	3.81 $\pm$ 0.05 nm	
Fe	7.87	10.83 $\pm$ 0.05nm	
Ni	8.90	16.48 $\pm$ 0.03nm	
Cu	8.96	5nm (fixed)	
6.057 keV			2.194 $\pm$ 0.02 $\times 10^{-3}$
6.915 keV			0.867 $\pm$ 0.03 $\times 10^{-3}$

### ステンレスメッシュ

Be 窓と同様に、式 2.1 を用いてステンレスメッシュ（図 2.2 右）の透過率モデリングを行っている。3 章にて詳しく述べるが、ステンレスメッシュの組成は Fe $\sim$ 70%, Cr  $\sim$ 20%, Ni $\sim$ 10%、メッシュワイヤの断面は 0.20 mm  $\times$  0.20 mm の正方形を仮定している。Fe, Cr, Ni の質量減衰係数には NIST のデータベース<sup>\*4</sup>を用いた。さらに線形で内挿し、2.0–45.0 keV のエネルギー帯で 0.25 eV ピッチのステンレスメッシュ透過率データを作成した。SXS のノミナルサイエンスバンドの 0.3–12.0 keV 帯域では、非開口部は X 線に対して透過率が 0 と仮定しているため、開口部のみが X 線を透過するということに注意されたい<sup>17</sup>。

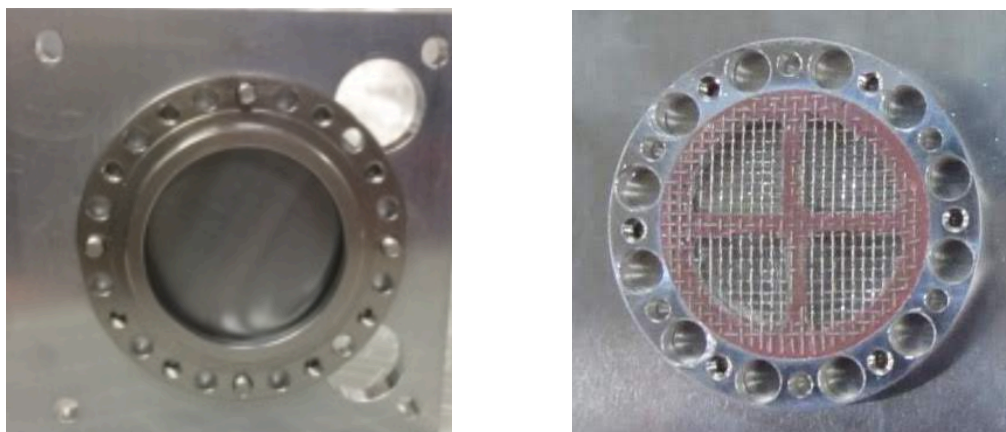


図 2.2: 左: SXS で用いられた Be 窓のフライトスペア品。立教大学で作成されたホルダーに装着されている。右: SXS で用いられたステンレスメッシュのフライトスペア品。中央に十字型構造が存在する。

### ゲートバルブ全体

作成した Be 窓、ステンレスメッシュのそれぞれの透過率データを結合することで、ゲートバルブ全体の透過率カーブを記述する較正データベースファイルが出来上がる。3 章にあるようにステンレスメッシュの幾何的開口率

<sup>\*3</sup> [https://heasarc.gsfc.nasa.gov/docs/hitomi/calib/caldb\\_doc/asth\\_sxs\\_caldb\\_gatevalve\\_v20161223.pdf](https://heasarc.gsfc.nasa.gov/docs/hitomi/calib/caldb_doc/asth_sxs_caldb_gatevalve_v20161223.pdf)

<sup>\*4</sup> <https://physics.nist.gov/PhysRefData/FFast/html/form.html><sup>20, 21</sup>

の設計値は 71% なので全体の透過率を記述する式は以下のように表せる。

$$T_{\text{total}}(E) = 0.71 T_{\text{Be}}(E) + 0.29 T_{\text{Be}}(E) * T_{\text{mesh}}(E) \quad (2.5)$$

図 2.3 は上記の式を用いて計算した Be 窓とステンレスメッシュそれぞれの X 線透過率カーブを、図 2.4 は Be 窓とステンレスメッシュを組み合わせたゲートバルブ全体の X 線透過率カーブを示す。

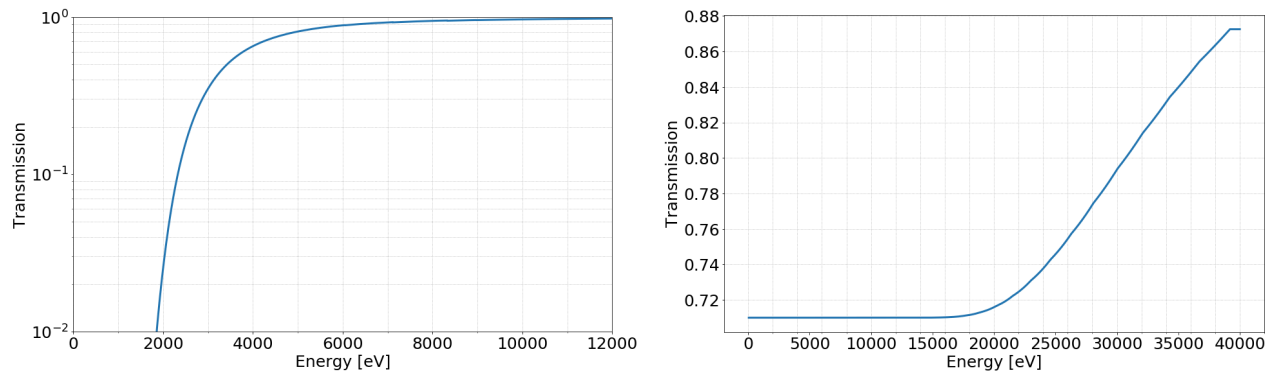


図 2.3: 左 : 最新の校正データベースに用いられている Be 窓の透過率カーブ。縦軸は対数でプロットしている。右 : 最新の校正データベースに用いられているステンレスメッシュの透過率カーブ。

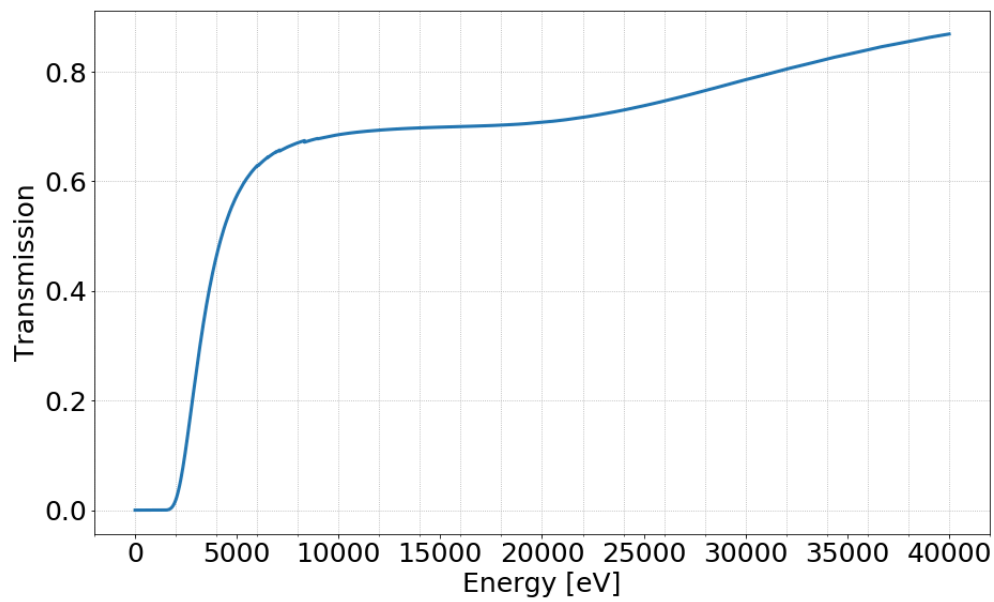


図 2.4: 最新の校正データベースに入っているゲートバルブ全体の透過率カーブ。

## 2.2 目的

これまでにないエネルギー分解能が特徴であるマイクロカロリメータのスペクトル解析では、不十分な装置較正のために装置由来の特徴が現れ、それが誤って天体物理的な解釈をされる可能性が十分ある。特に、ゲートバルブを閉じて行われるファーストライトを含めた初期観測データではゲートバルブの較正が必須である。XRISM 衛星では、「ひとみ」SXS 検出器の教訓を生かし、ゲートバルブの X 線透過率較正も打ち上げ前に行うことになった。

表 2.2 に Resolve 装置の地上較正試験とその主導機関の一覧をまとめる。JAXA が任されている較正試験はゲートバルブの透過率較正とタイミング較正の 2 つである。そのうちの 1 つであるゲートバルブ透過率較正の集大成が本論文である。

表 2.2: Resolve の装置較正タスクとその主導機関の一覧<sup>22</sup>

Task	Lead Agency		
	NASA	JAXA	SRON
Overall management of calibration activities	x		
Coordinating CALDB inputs with XARM Software Data Center	x		
Detector Measurements	x		
Dewar Filter Measurements	x		
GV Be Window Measurements		x	
FW Filter Measurements			x
Thermal shield measurements	x		
Mirror effective area measurements	x		
Mirror PSF measurements	x		
Timing calibration		x	
Modulated X-ray Source calibration			x

表 2.3 に XRISM ミッションのサイエンスゴール<sup>23</sup> から導かれたゲートバルブの較正要求を要素ごとにまとめる。ゲートバルブ、特に Be 窓の透過率はエネルギーに大きく依存するため、不十分な透過率較正ではエネルギースペクトルに系統誤差が乗ってしまう。例えば、XRISM 衛星でも初期観測を行う予定のペルセウス銀河団では、精密なスペクトルフィッティングを行うことで銀河団中の様々な元素量を見積もることが可能である。しかし「ひとみ」衛星では、ケイ素や硫黄の高階電離輝線が観測される 2.0–4.0 keV 帯において、主にゲートバルブの透過率起因の系統誤差が顕著であり、上記の元素量決定に大きな不定性が残った。XRISM 衛星では、ゲートバルブの透過率を精密に測定しモデル化することで、広帯域で高精度のスペクトル解析を行うことが可能になり、初期観測も科学成果に繋げることが期待される。

表 2.3: Be 窓、ステンレスメッシュそれぞれの較正要求<sup>24</sup>

要素	要求対象	要求精度	要求エネルギー帯	要求エネルギー帯 (ゴール)	コメント
Be 窓	連続的構造	1%	2.5–12.0 keV	1.8–25.0 keV	微小元素の K 吸収端と BDF は除く BDF と微小元素 (Fe,Mn,Cr,Ni) 透過率が 50% を超えるエネルギー かつ 100 以上のグリッドで
	微細構造	5% (2 eV ピッチ)			
	空間一様性	3%	単一 X 線		
メッシュ	連続的構造	1%	2.5–12.0 keV	1.8–25.0 keV	

本研究の目的は以下の 4 項目である。

1. Resolve-ゲートバルブの 2 つの要素である Be 窓とステンレスメッシュに対し、XRISM ミッションのサイエンスゴールから導かれた較正要求（表 2.3<sup>24</sup>）を満たす X 線透過率の測定を行う。
2. 測定結果を元にモデル透過率カーブを作成し、較正データベースとして世界中のユーザーに提供する。
3. 地上試験だけでは決まらないパラメータの決定及び地上で作成した透過率モデルの検証のため、軌道上での天体観測によるゲートバルブの較正提案を行う
4. 作成した較正データベースを用いて、SXS 観測データの再解釈を行う。

## 2.3 構成

本章以降の構成は以下の通りである。

- 第 3 章 本研究の測定対象であるゲートバルブについて説明する。
- 第 4 章 ISAS ビームラインでのステンレスメッシュの透過率測定について述べる。
- 第 5 章 KEK フォトンファクトリーと広島大学放射光科学センターで実施した Resolve Be 窓の透過率測定と首都大学東京の X 線回折装置を用いた Resolve Be 窓の回折ピーク測定について記述する。
- 第 6 章 測定結果を元に透過率モデルを作成する。また地上試験で決定できなかったパラメータを決定するための軌道上較正計画を立案する。さらに、作成したモデルを用いて SXS 軌道上データの再解析をする。
- 第 7 章 本論文の結論を述べる。



第 3 章

供試体：ゲートバルブ

Contents

3.1	用途 . . . . .	36
3.2	構成 . . . . .	38
	3.2.1 Be 窓 . . . . .	39
	3.2.2 ステンレスメッシュ . . . . .	39
3.3	SXS からの変更点 . . . . .	41
3.4	軌道上でのゲートバルブ . . . . .	45

3.1 節では、本研究の測定対象であるゲートバルブの用途について述べる。3.2 節でゲートバルブを構成する 2 つの要素について詳述し、3.3 節で「ひとみ」SXS 装置のゲートバルブと XRISM Resolve 装置のゲートバルブの差異について述べる。3.4 節で XRISM 衛星打ち上げ後の軌道上運用についてゲートバルブの開閉を中心に記す。

### 3.1 用途

Resolve では、極低温 (50 mK) で動作するセンサーを、液体ヘリウムタンクを保持するデュワー容器 (図 1.10) 内に設置する。図 3.1 に Resolve 冷却システムの概念図とデュワー容器の断面図を示す。地上でデュワーの真空を保持するため、X 線入射部に約 3 cm 径の真空蓋 (図 3.2) がある。これをゲートバルブ (GV) と呼ぶ。ゲートバルブを含め、デュワー容器は住友重機械工業株式会社 (SHI 社) が提供する。冷媒あり多段冷却システムを採用する Resolve 装置における、日本側の最も重要なハードウェア貢献の一つである。3.4 節で詳しく説明するが、XRISM 衛星打ち上げのおよそ 2 ヶ月後、周囲の真空度が十分下がり衛星由来の汚染ガス放出が止むまで、ゲートバルブは閉めたまま保たれる。以下にゲートバルブの 3 つの要件を挙げる。

- 地上でデュワーの真空を保持する
- 衛星打ち上げ直後のコンタミネーションからデュワー内部を守る
- ゲートバルブを閉じた初期状態でも X 線がある程度透過して観測を可能にする。

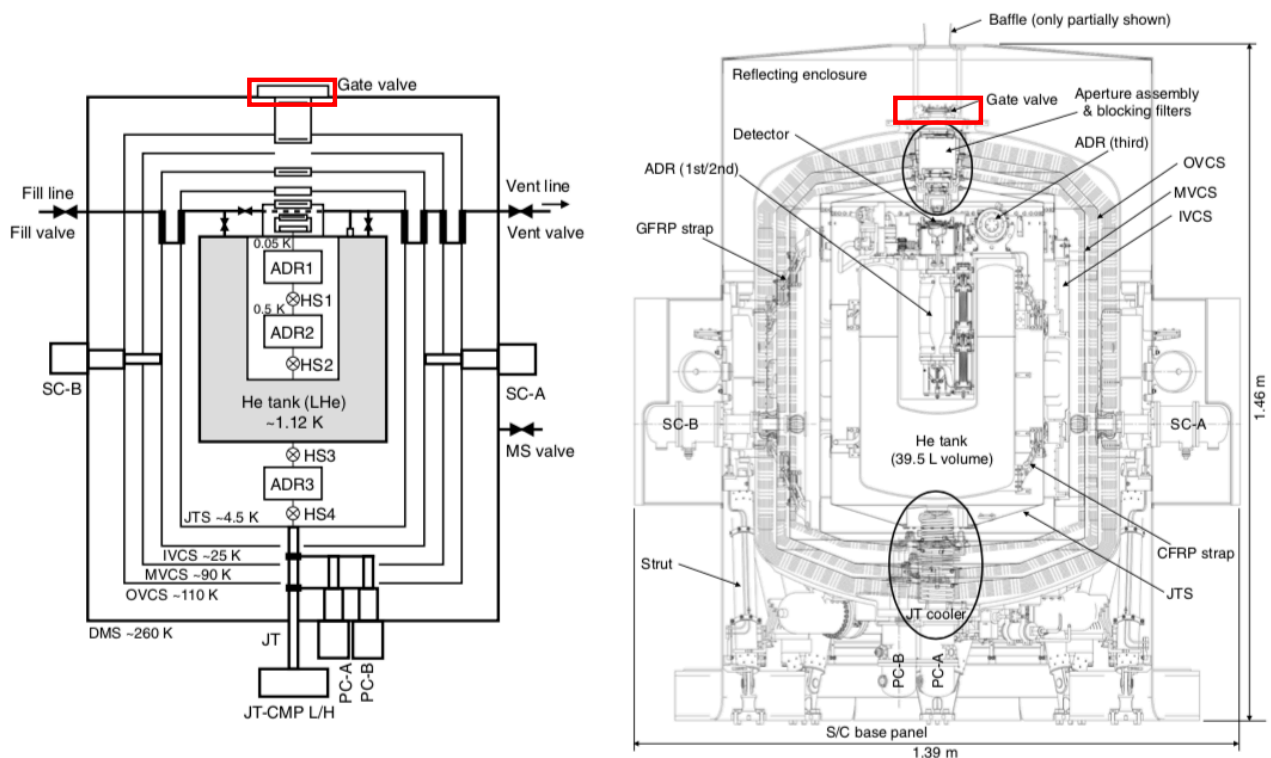


図 3.1: 左: Resolve 冷却システムの概念図。右: デュワー容器の断面図<sup>25</sup>。赤四角で囲った場所がゲートバルブである。

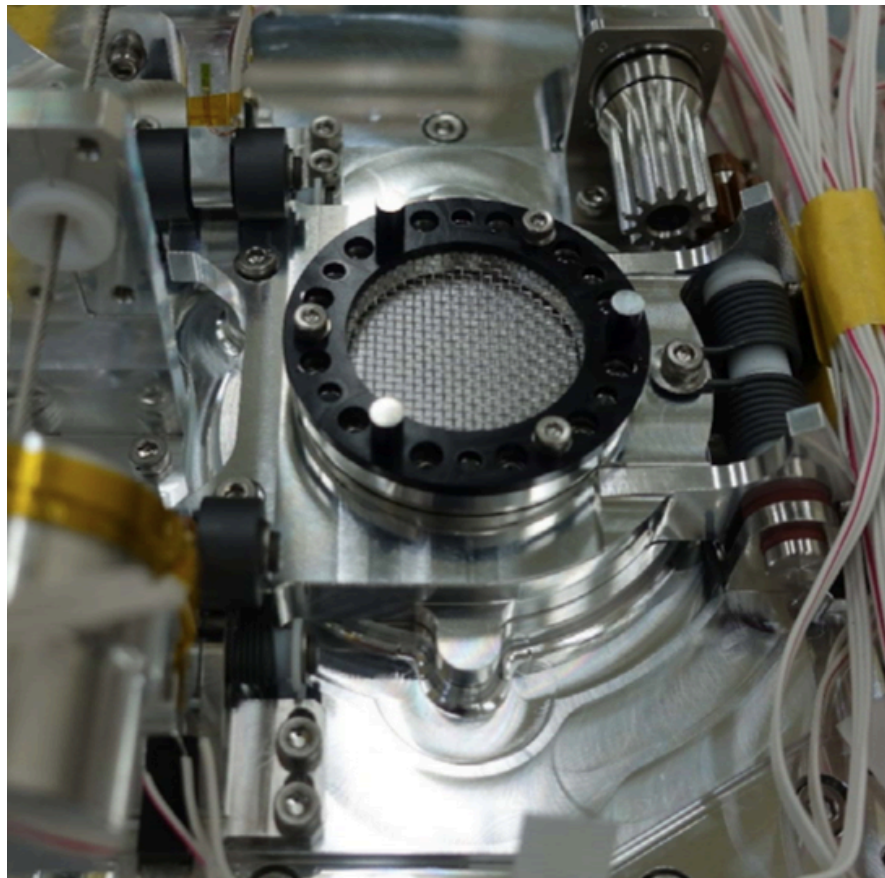


図 3.2: デュワー最上部に設置された Resolve のゲートバルブのフライトモデル。写真は SHI 社提供。

## 3.2 構成

ゲートバルブは大きく分けて2つの要素から構成される。一つは約  $270\text{ }\mu\text{m}$  厚の Be 窓 (図 3.3)、もう一つは物体の衝突から Be 窓を保護するためのステンレスメッシュ (図 3.4) である。これら2つが二層に重なることによって、X 線透過性と強度及び気密性を兼ね備えたゲートバルブが出来上がる。表 3.1 にそれぞれの要素について詳しくまとめ、以下で各要素について説明する。

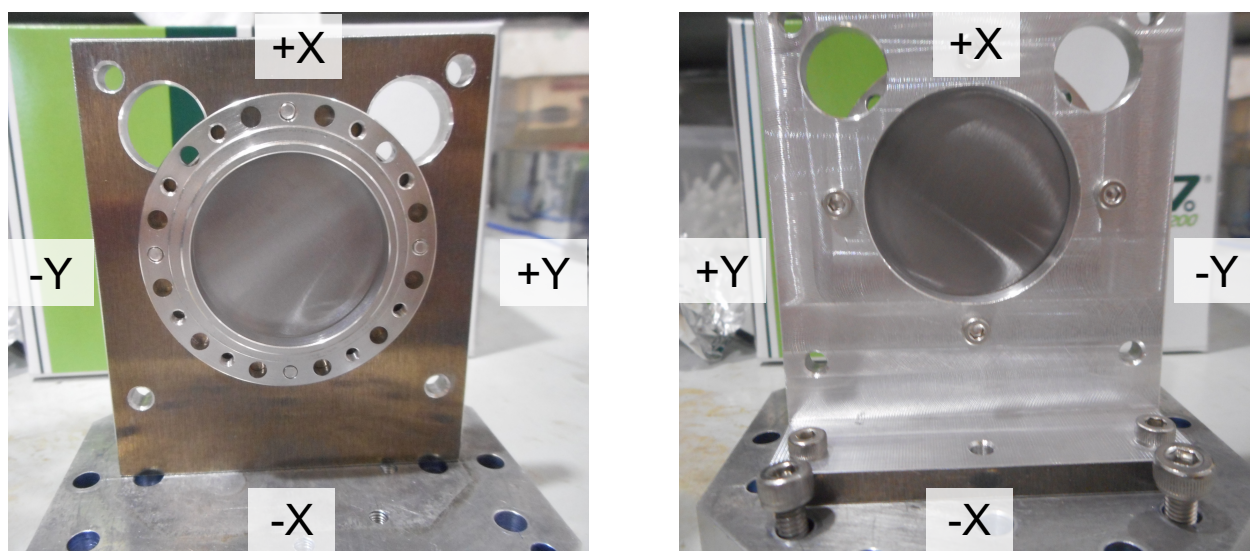


図 3.3: Resolve Be 窓校正用モデル (左: X 線入射面から見た Be 窓、右: 裏面から見た Be 窓)。図に示されたように Be 窓の座標が定義されている。

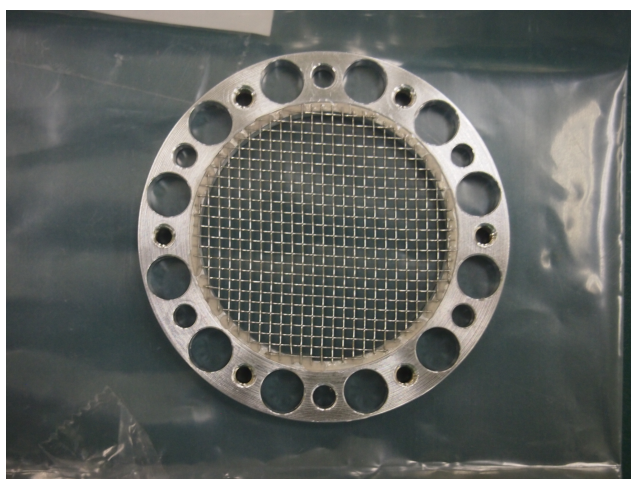


図 3.4: Resolve で用いられるステンレスメッシュのフライトモデル。SXS でのステンレスメッシュ (図 2.2 右図) と比較すると、十字要素がなくなりシンプルな構造になっている。

表 3.1: Resolve のゲートバルブ各要素の仕様

要素	材質	幾何的情報	厚み	コメント
Be 窓	主成分: Be, 微小元素: Mn, Cr, Fe, Ni, Cu	4 章で一様性測定	要求値 $300 \pm 30 \mu\text{m}$ 厚 <sup>a</sup>	
ステンレス メッシュ	ステンレス鋼: SUS304 Fe~70%, Cr ~20%, Ni~10%	1.27 mm ピッチ メッシュワイヤ	ワイヤ厚み: 0.20 mm	開口幅: $1.27 \text{ mm} - 0.20 \text{ mm} = 1.07 \text{ mm}$ 開口率: 71%

<sup>a</sup> 幾何学的厚みの実測値は表 3.2 を参照。

### 3.2.1 Be 窓

Be 窓は米国の Materion 社（旧名 Brush Wellman 社）により、同一のロットからフライトモデル、フライトスペアモデル、校正用モデルの合計 3 つが製作された。Be 窓とは言っても製作時に Mn, Ni などの微小元素が入り込むので、透過率校正ではこれら微小元素の吸収端も定量化する必要がある。また、圧延工法により作成されるので、厚みにばらつきが出る可能性がある。Be 窓は厚さ  $300 \pm 30 \mu\text{m}$  の要求だったが、Materion 社が納入時に 3 つのモデルの幾何学的厚みを測定したところ、表 3.2 にまとめるように  $30 \mu\text{m}$  ほど薄くてできていることがわかった。この厚みでも真空保持用途としては問題ないので、そのまま受領した。実際に X 線透過窓として機能する際に重要なのは幾何学的厚みでなく X 線透過率である。Be 窓は薄膜性などで密度が小さくなっている可能性があるため、X 線透過率測定が必須である。

表 3.2: Materion 社からの納入時の Be 窓の幾何学的厚み<sup>\*1</sup>

Be 窓モデル	幾何学的厚み [ $\mu\text{m}$ ]	表面粗さ <sup>a</sup> [ $\mu\text{m}$ ]
フライトモデル	265–278	0.25
フライトスペアモデル	268–273	0.25
校正用モデル	270–273	0.25

<sup>a</sup> 表面粗さの山谷の深さ平均を取った算術平均粗さ (Ra) で表している。小さいほど表面が滑らかであることを示す。JIS 規格「JIS B 0601-2003」を参照した。

地上実験時の Be 窓は安全のため L 字型ホルダーに装着されている（図 3.3）。左図が X 線入射面から見たホルダー付きの Be 窓を、右図が裏面から見たホルダー付きの Be 窓を表している。このホルダーは立教大学で製作されたものであり、ホルダーに開けられたネジ穴を用いて実験セットアップに固定することが可能である。Be 窓の保管時にはアルミニウム板とアクリル板でホルダーの上からさらなる防護をしている。ホルダーには、可動域の小さいステージ上であっても直接光を取得できるよう、右上・左上に直径 12 mm の穴が開いている。

### 3.2.2 ステンレスメッシュ

外部からの物体の衝突から Be 窓を保護する役目を持つステンレスメッシュは、SUS304(Cr-Ni 系) ステンレス鋼を使用して SHI 社により製作された。メッシュは平織りで、ワイヤの線径は 0.20 mm、間隔は 1.27 mm である。つまり、ステンレスメッシュの目開きは 1.07 mm であり、これより開口率は  $(1.07)^2 / (1.27)^2 \sim 71\%$  と計算される。衛星に搭載される際には、周囲の固定穴を用いて Be 窓と結合させ、デュワー最上部に設置される。表 3.3 に

<sup>\*1</sup> Materion 社からの Inspection report (Production No. 101349717) より抜粋した。

SXS, Resolve で のゲートバルブの各要素モデルについて、本論文のどの節に対応するかまとめた。

表 3.3: SXS, Resolve の各ゲートバルブ要素のモデル

要素	衛星/装置	モデル	用途	透過率測定施設	本論文で対応する節
Be 窓	ひとみ/SXS	フライト	衛星搭載	——	6.5
		フライトスペア	測定	KEK PF	2.1.2, 2.1.3
	XRISM/Resolve	フライト	測定&衛星搭載	KEK PF	5.1, 5.2, 6.4
		フライトスペア	予備	——	——
		校正用	測定	HiSOR, TMU	5.3, 5.4
ステンレスメッシュ	ひとみ/SXS	フライト	衛星搭載	——	6.5
		フライトスペア	測定	ISAS	4.1
	XRISM/Resolve	フライト	衛星搭載	——	6.4
		フライトスペア	予備	——	——

### 3.3 SXS からの変更点

図 3.5 はステンレスメッシュの設計図を、3.6 はゲートバルブ全体の設計図を表している。ゲートバルブの最下部は衛星ベースラインからの高さが 1307 mm、検出器面からの高さが 231 mm である。図に示された座標は図 3.3 と対応している。5.3 節で測定した Be 窓の X 線透過率の空間非一様性は、衛星に搭載する向きに制限を与えるので、座標軸を定義しておくことは重要である。ホルダーを外してしまうと、Be 窓だけでは方向を特定するのは難しいので注意する必要がある。

赤字で描かれた部分は SXS からの変更点を表す。「ひとみ」SXS と XRISM Resolve のゲートバルブでは、設計に 2 点の変更がなされた。1 つ目は、ステンレスメッシュについていた機械的強度を増強させる十字型の要素が撤廃された（図 3.5 中心の赤色部）。SXS では中心に幅 2 mm、厚み 6 mm の SXS の観測帯域で完全に X 線を透過しない十字型の要素が付属していた（図 2.2 右図）。この際、十字構造が作成されたのは、望遠鏡のアラインメントのため、X 線光路中心付近に反射率の高い面を作る必要があったからであった。今回は、SXS の経験を踏まえて、Be 窓にかからない中心ではない場所（図 3.5 円周上の赤色部）に反射率の高い面のマーカーを取り付けたため、十字構造は撤廃された。よりシンプルな構造になったため、透過率の系統誤差が小さくなることが期待される。

2 つ目に、ステンレスメッシュと Be 窓の下にあるフランジの形状が変更され、実効的な口径が 27.0 mm から 29 mm に増大した（図 3.6 赤色部）。SXS では、Be 窓溶接部の接着剤がはみ出る可能性のある溶接部近くの円周部分をフランジで覆うことで、よりシンプルな透過率となることを期待した。その代償として、校正用 X 線ジェネレータ (MXS) の X 線が一部遮蔽されてしまっていた。Resolve では十分な透過率校正をする予定なので、接着剤がはみ出ている可能性があるところも可能な限り X 線を透過させるようにして、MXS からの X 線の遮断をできるだけ減少させるようにした。

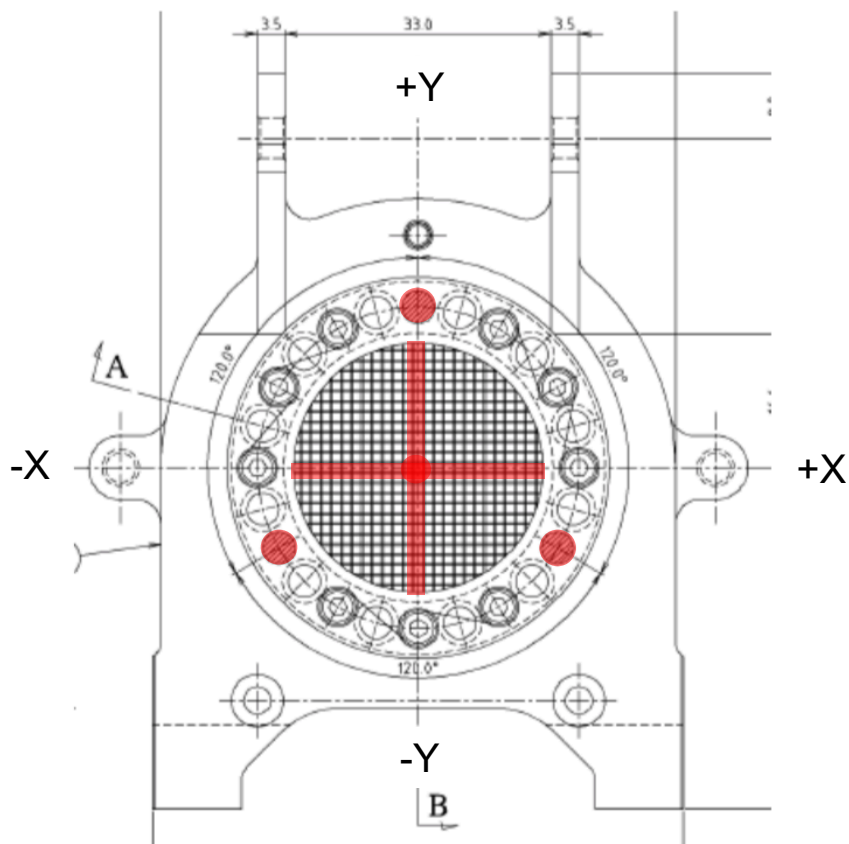


図 3.5: Resolve ゲートバルブ設計図 (top view)。SHI 社提供。SXS 時からの変更部分は赤で描かれている。



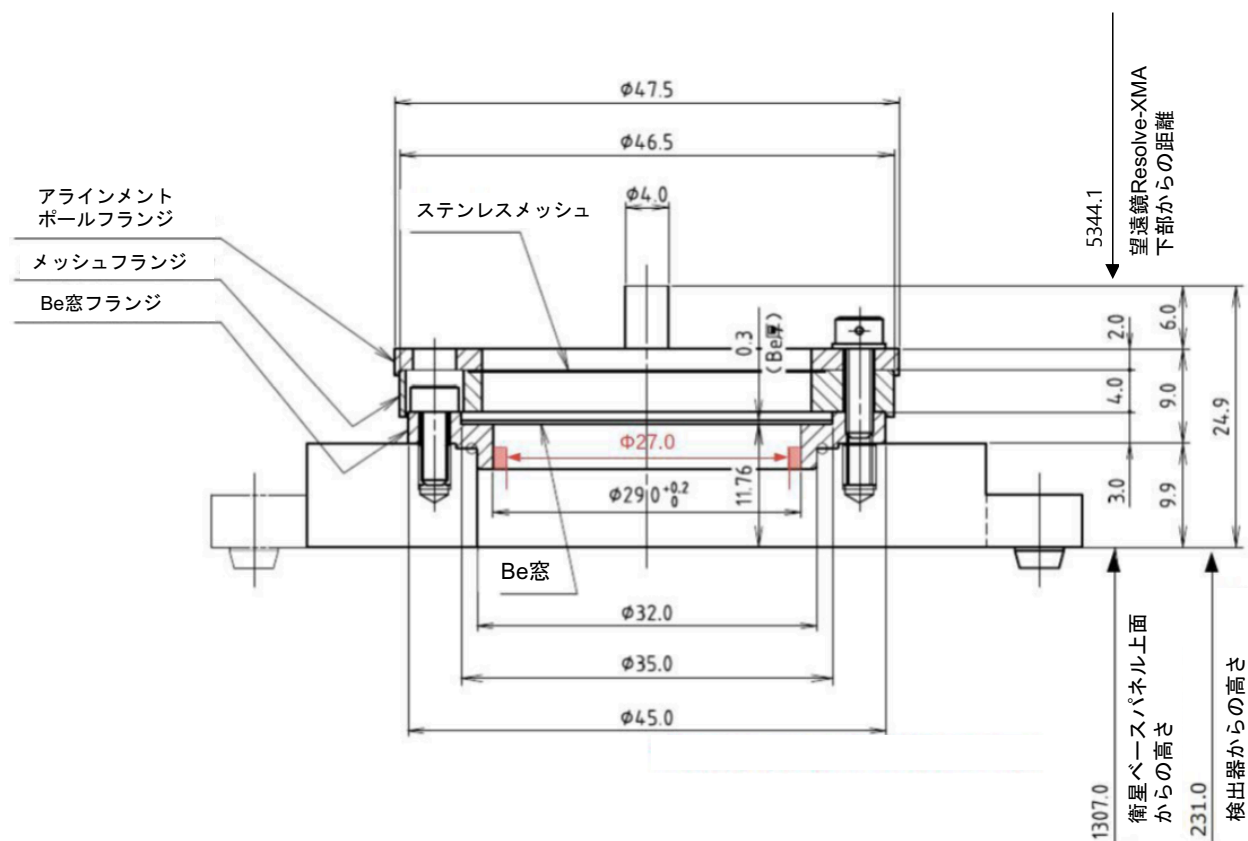


図 3.6: Resolve ゲートバルブ設計図 (side view)。SHI 社提供。SXS 時からの変更部分は赤で描かれている。

SXS では、ゲートバルブの透過率を算出する際に、Be 窓とステンレスメッシュ以外にも、十字構造とフランジによる幾何学的な遮蔽効果を考慮する必要があった。Ray-tracing シミュレーションにより、ゲートバルブの幾何的構造に起因する透過率カーブは図 3.7 のように算出された<sup>26</sup>。高エネルギー側ほど集光する際の全反射角が小さくなり、X 線光路中に十字構造が存在する割合が高くなるため、8 keV を超えたあたりから透過率が低下し始める。上記の変更により、Resolve ゲートバルブでの幾何構造起因の透過率は、25 keV 以下のエネルギー帯において一様に 1 になるというシミュレーション結果が得られている\*2。

\*<sup>2</sup> NASA/GSFC の Tahir Yaqoob 氏による最新の研究成果である。

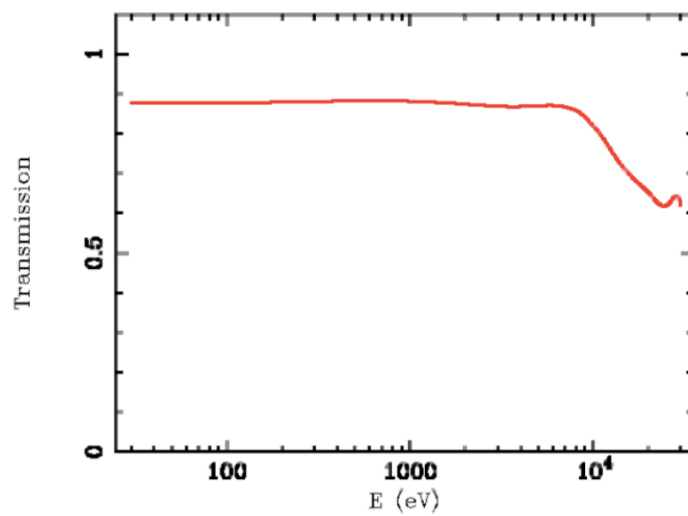


図 3.7: ゲートバルブの幾何的構造に起因する透過率カーブ<sup>26</sup>。Be 窓とステンレスメッシュによる透過率とは独立である。

### 3.4 軌道上でのゲートバルブ

衛星打ち上げ後約3ヶ月経ち、汚染ガスの放出が落ち着いた後、ゲートバルブは開けられる（図3.8）。地上では地上支援装置を用いて何度も開け閉めが可能だが、軌道上ではこの作業は一度きりで、二度と閉めることはできない。したがって、ゲートバルブ校正は最初の2ヶ月程度でのみ有効であるが、この間に Resolve のファーストライト、軌道上初期性能確認、SXS との比較という重大イベントが密集しているため、短期間であっても重要度は非常に高い。ゲートバルブの開放運用は図1.5でのコミッショニング期間の途中、打ち上げから80日程度で行われる予定である。

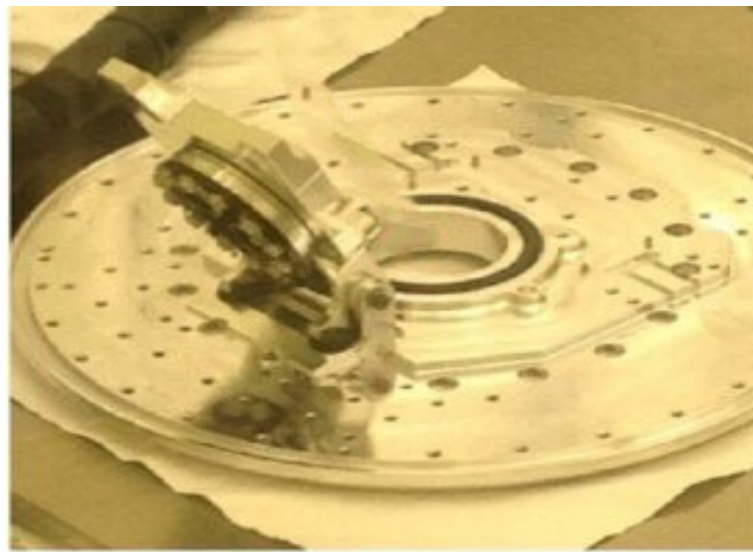


図 3.8: 地上で開放された SXS デュワー上部のゲートバルブ。写真は SHI 社提供。

## 第 4 章

# 測定 1: ステンレスメッシュの透過率測定

### Contents

<b>4.1</b>	<b>ISAS</b> ビームラインでの透過率測定 . . . . .	<b>47</b>
4.1.1	目的 . . . . .	47
4.1.2	装置 . . . . .	47
4.1.3	セットアップ . . . . .	57
4.1.4	測定結果 . . . . .	62
4.1.5	解析 . . . . .	65

本章では宇宙科学研究所 (ISAS)X 線ビームラインで行った **SXS** フライトスペア品のステンレスメッシュ透過率測定について述べる。4.1 節で 2019 年 2 月に実施したステンレスメッシュの透過率測定について記述する。

## 4.1 ISAS ビームラインでの透過率測定

測定日時: 2019/02/04-02/19

測定場所: ISAS ビームライン (D 棟 5120 室)

供試体: SXS フライトスペアモデルのステンレスメッシュ

### 4.1.1 目的

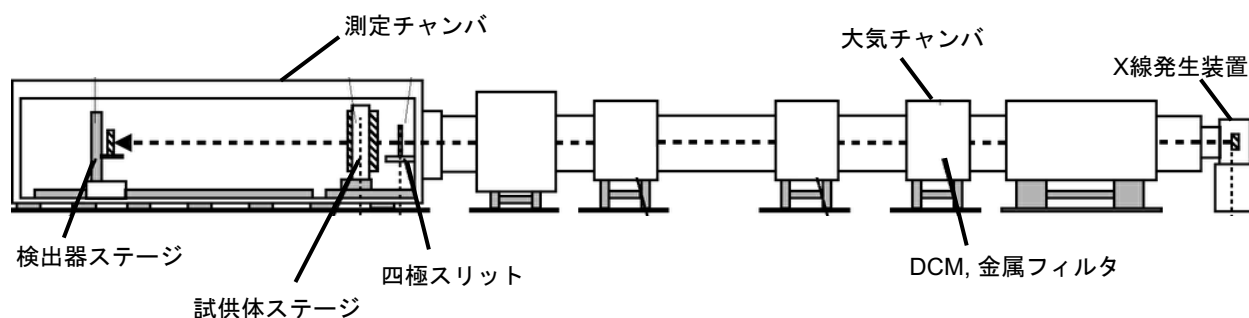
表 2.3 の精度要求より、1.8–25.0 keV 帯でのステンレスメッシュの透過率を 1% 以内の精度で測定することを目的とする。透過率に複雑な構造は見られないと仮定していくつかの単色エネルギーでの透過率測定を行う。また、本測定を行なった 2019 年 2 月には **Resolve** 用のステンレスメッシュの製作が完了していなかったため、**SXS** ステンレスメッシュのフライトスペアモデルを用いる必要があった。**SXS** のステンレスメッシュは **Resolve** と異なり、十字型のステンレスバーが付属している。そのため、十字を避けるように四分円ごとにステンレスメッシュ前面を一樣に測定する。**ISAS X 線**ビームラインはこれらの要求を満たすため、我々は本ビームラインで測定することを決定した。

### 4.1.2 装置

#### ビームライン

我々が用いた **ISAS** ビームライン<sup>27–30</sup> には、位置的可変機構を持たない固定式 X 線発生装置が採用されており、固定式発生装置からのビームは、陰極ターゲット面の数 mm 角の領域を焦点として発生する。従って、数 m 先で口径の大きな X 線ビームを得ようとする、完全な平行光にはならず拡散光になってしまう。そこで本ビームラインでは四極スリットにより細く絞ったペンシルビームを用いることで高い平行度の取得を可能にしている。X 線発生装置から出射されたビームは、制動放射による連続 X 線を除去するための金属フィルタやさらなる単色化を達成するための二結晶分光器にかけられる。そして X 線発生装置から約 27m の距離にある四極スリットによって、典型的には 2 mm × 2 mm 角まで X 線ビームを絞った後、検出器に照射される。この場合、発生装置の実効焦点を点源と見なすと、約 12 秒角のビーム平行度が達成される。

今回のステンレスメッシュ透過率測定では、ステンレスメッシュ面の様々な X 線照射位置での透過率を平均化したエネルギー依存性を測定するため、ステンレスメッシュ全体に X 線ビームを照射する必要がある。本ビームラインでは、ラスタースキャンという手法を用いて供試体ステージと検出器ステージを X 線発生装置に対して相対的に移動させることによって、絞られた X 線ビームのステンレスメッシュ全面への照射を可能にしている。図 4.1 に **ISAS** ビームラインの全体図を示す。また、ビームラインを構成する要素の詳細について順に説明していく。

図 4.1: ISAS ビームラインの全体図<sup>31</sup>

#### 固定式 X 線発生装置

ISAS 標準 X 線光源室に設置されている X 線発生装置は、卓上型回転対陰極 X 線発生装置の株式会社リガク（理学電機）製ロータフレックス (RA-HF18) である。X 線発生原理は次のようになっている。まず陽極であるフィラメントを加熱することによって熱電子を発生させる。この熱電子は、回転する陰極ターゲット（図 4.2）との間にかけられた管電圧によって加速され、ターゲットに衝突する。この時、制動放射によって電子の受けた加速度と垂直方向に電磁波が発生する。管電圧は kV のオーダーであり、発生する電磁波は X 線領域が主となる。一方で、ターゲットに蒸着された金属の内殻電子を電離するため、内殻電子のエネルギー準位差に相当するエネルギーの蛍光 X 線も発生する。ISAS ビームラインで用いることのできるターゲット物質と典型的な輝線エネルギーを表 4.1 にまとめた。X 線ビーム強度とエネルギー領域は、フィラメント電流と管電圧を調整することで制御している。X 線発生装置の仕様を表 4.2 に示す。



図 4.2: 熱電子を照射する銅のターゲット。最下部の茶色い部分に銅が蒸着されており、ここに熱電子を照射する。

表 4.1: ISAS X 線発生装置で用いることのできるターゲットとその典型的な輝線エネルギー

ターゲットの種類	典型的な輝線エネルギー [keV]
C	0.277 ( $K\alpha 1$ )
Al	1.49 ( $K\alpha 1$ )
Ti	4.51 ( $K\alpha 1$ )
Fe	6.40 ( $K\alpha 1$ )
Cu	8.05 ( $K\alpha 1$ )
W	8.40 ( $L\alpha 1$ )
Pt	9.44 ( $L\alpha 1$ )
Mo	17.48 ( $K\alpha 1$ )
Ag	22.16 ( $K\alpha 1$ )

表 4.2: X 線発生装置 (RA-HF18) の仕様<sup>\*1</sup>

最大定格出力	60 kV, 300 mA (18 kW)
管電圧設定	5–60 kV (1 kV step)
管電流設定	10–300 mA (1 mA step)
ターゲット回転数	6000 rpm
ビーム強度安定性	<0.01%/8 時間 (立ち上げから 1 時間後)

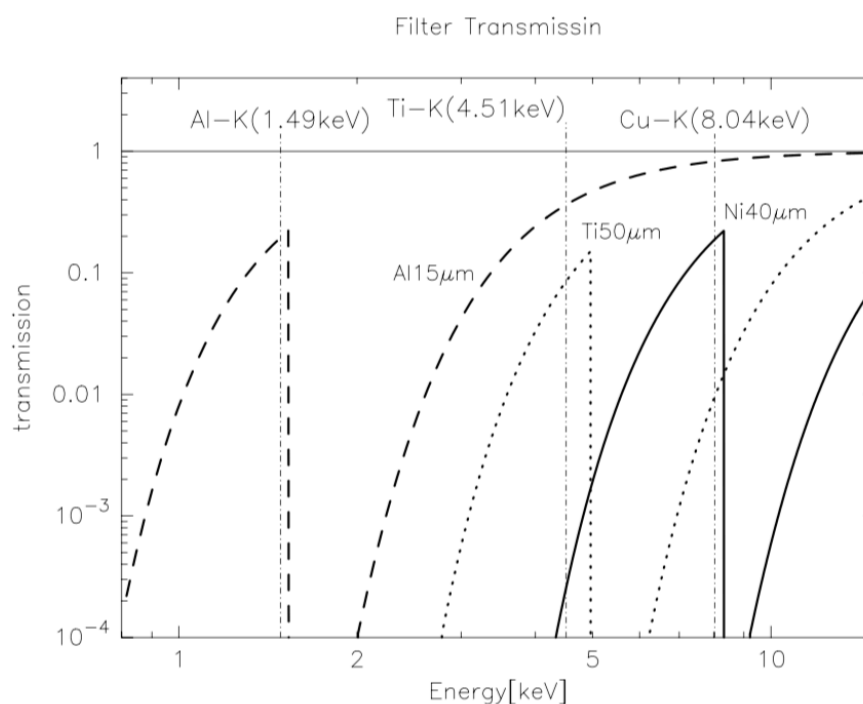
#### 透過型金属フィルタ

X 線発生装置からの X 線は、前述したように蛍光 X 線と制動放射による連続 X 線からなるが、本測定では透過率のエネルギー依存性を測定するため、単一エネルギーの X 線を用いる必要がある。大気チャンバには数種類の金属フィルタが入っており、目的とする蛍光 X 線以上のエネルギーの連続 X 線をフィルタで取り除くことが可能である。金属フィルタは光電吸収の吸収端における吸収係数の急激な変化を利用した素子である。各フィルタの K 吸収端エネルギーが、目的とする蛍光 K 輝線エネルギーより少しだけエネルギーが高いことを利用して、蛍光 X 線より高エネルギー側の連続 X 線を取り除くことができる。しかし低エネルギー側の連続 X 線及び  $K\beta$  輝線は除去することができない。ISAS ビームライン で用いられる蛍光 X 線とその時に使用するフィルタの種類を表 4.3 に示す。また各フィルタの透過率を図 4.3 に示す。

<sup>\*1</sup> リガク社のマニュアル (No. MJ14049B02) を参照した。

表 4.3: 蛍光 X 線と対応する金属フィルタの種類

特性 X 線	フィルター物質	フィルターの厚さ [ $\mu\text{m}$ ]
Al-K $\alpha$ (1.49 keV)	Al	15
Ti-K $\alpha$ (4.51 keV)	Ti	50
Cu-K $\alpha$ (8.04 keV)	Ni	40
Pt-L(9.44 keV)	Ni	40

図 4.3: 金属フィルタの透過率<sup>27-30</sup>

## 二結晶分光器

大気チャンバには二結晶分光器 (Double Crystal Monochromator; DCM) が設置されている。DCM は Bragg 反射条件を満たした波長の X 線だけを通し、高い単色性を実現する分光素子である。ここで Bragg 反射条件式は結晶面間隔  $d$  と X 線入射方向と結晶面のなす角  $\theta$  を用いて

$$\lambda = 2d \sin \theta \quad (4.1)$$

と表される。ISAS ビームラインにある金属フィルタのうち最も原子番号の大きい Ni フィルタの吸収端が  $\sim 10$  keV なので、10 keV を超える高エネルギー X 線の高精度透過率測定を行うためには DCM を用いる必要がある。ステンレスメッシュはおよそ 15 keV 以上の X 線で透過し始めることが期待されるので、今回の測定に DCM は必須である。DCM は一体加工された厚さ 3 mm の Ge(220) の結晶面を平行に向かい合わせた形をしており (図 4.4)、入射した X 線は 2 回の Bragg 反射によって、その時の角度に応じたエネルギーの X 線に単色化される。この一対の結晶が回転ステージ ( $A_\theta$  軸ステージ) の上に乗っており、さらにこのステージが並進ステージ ( $A_y$  軸ステージ)



に乗っている。ISAS ビームラインでは、3つの金属フィルタと DCM が大気チャンバ内の同一のステージ上にある。並進ステージによって透過型フィルタと DCM との切替を行い、回転ステージによって入射エネルギーに対応した角度に結晶面を制御する。回転ステージの最小ピッチは 7.2 秒角である。これは、図 4.5 に示したように Ti  $K\alpha_{1,2}$  を区別することができる。

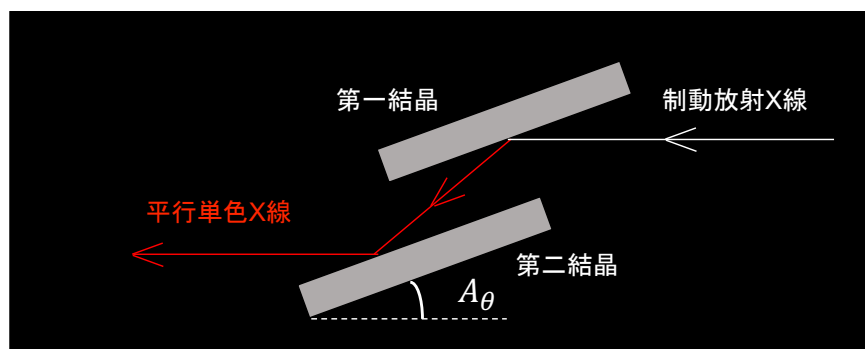


図 4.4: DCM の概要図

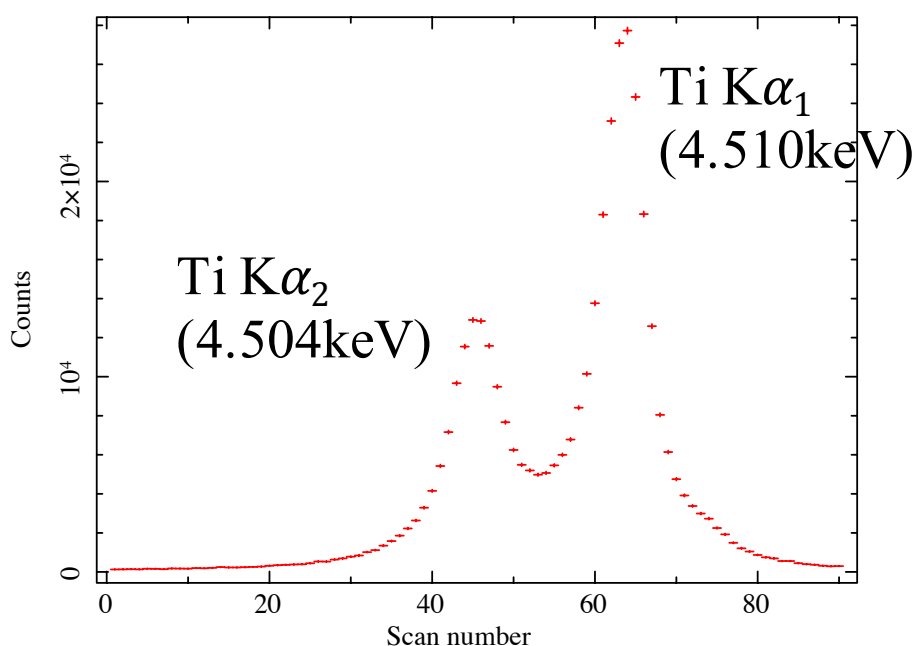


図 4.5: Ti  $K\alpha$  付近のロッキングカーブ—DCM を回転させ、入射角度を変えていったときの光量変化を表している。ビームライン搭載 DCM は Ti  $K\alpha_1$  (4.510 keV),  $K\alpha_2$  (4.504 keV) を区別することができる。横軸の Scan number は DCM の結晶角 ( $A_\theta$ ) に対応するものであり、Scan number が大きいほど  $A_\theta$  が小さく、式 4.1 より Bragg エネルギーは大きくなる。Scan number の 1 目盛は 0.002 度に対応する。

### 測定チャンバ

ISAS ビームラインにおける測定チャンバは全長 11.3m、直径 1.8m の円筒型である (図 4.6)。チャンバには内部へのアクセスがしやすいように、上流側と下流側にドアが設けられている。内部は十分に人が入れる空間があり、チャンバ内部での作業も容易である。測定チャンバ内部は一つの大きな空洞になっており、供試体ステージと検出器ステージが同一空間に設置されている。

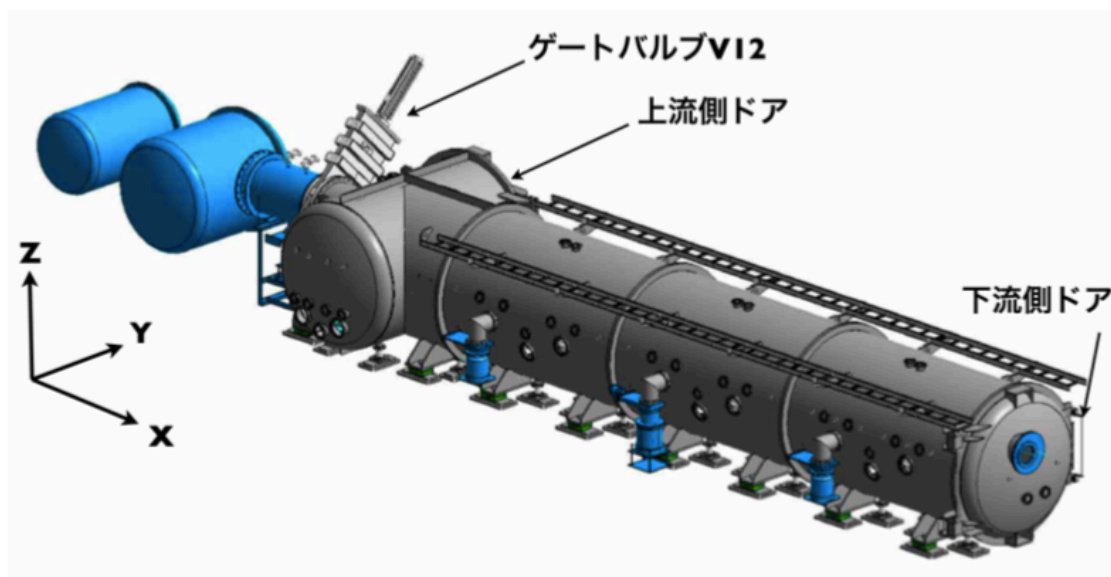


図 4.6: 測定チャンバの 3D イメージ<sup>27-30</sup>

### 供試体ステージ・検出器ステージ

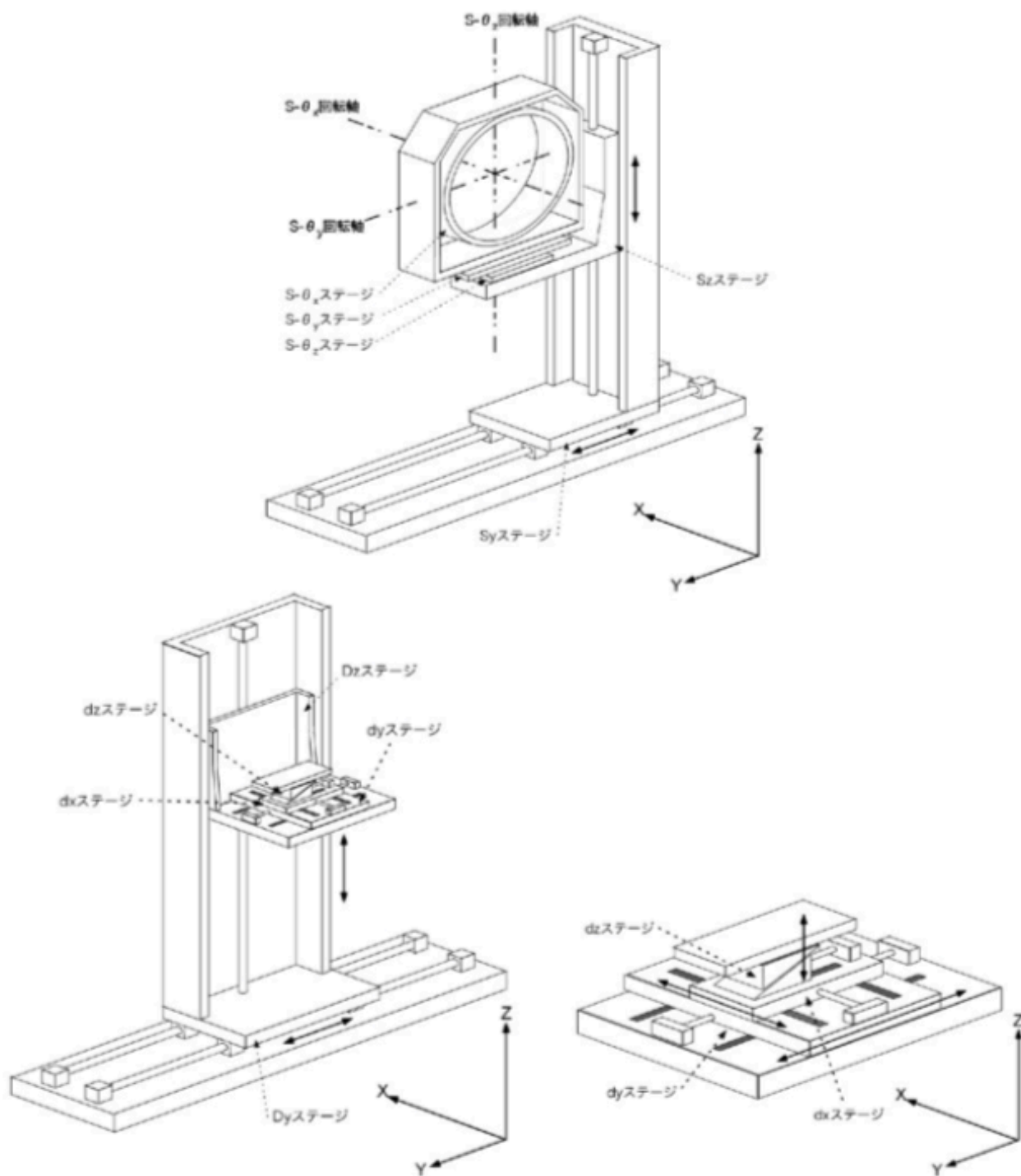
供試体ステージ・検出器ステージの基本情報を表 4.4 に示す。また、ステージの模式図を図 4.7 に示す。供試体ステージには  $S_y, S_z, S-\theta_x, S-\theta_y, S-\theta_z$  の 5 軸が搭載されている。検出器ステージは  $D_y, D_z$  の 2 軸が搭載されており、さらに検出器ステージにはそれと独立した検出器微調整ステージ  $dx, dy, dz$  の 3 軸が搭載されている。焦点距離の位置に検出器を置く調整は、主にこの  $dx$  軸が担っている。検出器微調整ステージ 3 軸は主に比例計数管と X 線 CCD カメラの切り替えに用いる。この微調整ステージにより、検出器ステージと供試体ステージの相対位置を変えることなく検出器の切り替えが行える。また、図 4.7 に示すように、供試体ステージ・検出器ステージはレールに載っており、大きく移動させることが可能である。各ステージの移動スピードは表 4.4 で示した通りであり、これはステージ仕様上の推奨スピードである。

表 4.4: 上: 供試体ステージの基本情報、下: 検出器ステージの基本情報<sup>27-30</sup>

試供体ステージ			
軸	移動量 [mm,deg/pulse]	移動可能範囲 [mm,deg]	移動速度 [mm,deg/sec]
Sy	0.01	-270 ~ 370	4.0
Sz	0.00025	-250 ~ 250	1.0
S- $\theta_x$	0.001	0 ~ 360	1
S- $\theta_y$	0.00025	-5 ~ 5	0.25
S- $\theta_z$	0.001	-5 ~ 5	1

検出器ステージ			
軸	移動量 [mm/pulse]	移動可能範囲 [mm/pulse]	移動速度 [mm/sec]
Dy	0.001	-250 ~ 650	4.0
Dz	0.00025	-250 ~ 250	1.0
dx	0.002	-50 ~ 50	2.0
dy	0.00025	-2.5 ~ 2.5	4.0
dz	0.004	-60 ~ 60	0.25

図 4.7: 上: 供試体ステージ、左下: 検出器ステージ、右下: 検出器微調整ステージの概要図<sup>27-30</sup>

## 焦点面検出器

測定チャンバのステージには、検出器として以下の2つが搭載されている。それぞれの検出器について記述する。

- ガスフロー型比例計数管 (Proportional Counter; PC)
- 背面照射型 CCD カメラ

ISAS X 線ビームラインで使われている比例計数管はガスフロー型であり、P10 ガス (Ar: 90%、CH<sub>4</sub>: 10%) を大気圧で使用する。比例計数管は位置検出能力はないが、 $\Delta E_{FWHM} \sim 1.3 \text{ keV} @ 4.5 \text{ keV}$  の分光測定が可能である。表 4.5 に比例計数管の仕様をまとめる。比例計数管の出力信号はマルチチャンネルアナライザー (MCA) でエネルギースペクトルに変換される。本ビームラインでは Pocket MCA (MCA8000A) を使用しており、ワークステーションが読み取るのはこの MCA の出力データである。表 4.6 に MCA8000A の仕様をまとめる。

表 4.5: ガスフロー型比例計数管の仕様<sup>27-30</sup>

使用ガス	P10 ガス (Ar: 90%、CH <sub>4</sub> : 10%) 大気圧で使用
ガス深さ	20 mm
X 線入射窓	直径 12.0 mm、1 $\mu\text{m}$ 厚ポリプロピレン + カーボンダグ
印加電圧	2100 V (C K $\alpha$ の場合のみ 2200 V)
エネルギー範囲	$\sim 12.3 \text{ keV}$ (検出効率 10% 以上) $\sim 45\%$ (Al: 1.49 keV)
エネルギー分解能	$\sim 30\%$ (Ti: 4.51 keV) $\sim 20\%$ (Cu: 8.04 keV)

表 4.6: マルチチャンネルアナライザー (MCA8000A) の仕様<sup>27-30</sup>

ADC	逐次比較型 ADC
チャンネル	16k, 8k, 4k, 2k, 1k, 0.5k, 0.25k
変換時間	5 $\mu\text{s}$
最大カウント	$4.29 \times 10^9 \text{ counts/ch}$
動作温度	0–70 °C
ゲインスタビリティ	$\pm 10 \text{ ppm / } ^\circ\text{C}$

最後に CCD カメラについて述べる。現在、ISAS X 線ビームラインには、浜松ホトニクス株式会社製の背面照射型 X 線 CCD カメラシステムが設置されている。一辺  $22.5\ \mu\text{m}$  の正方形ピクセルが  $1242 \times 1152$  個からなっており、位置分解能をもった撮像能力があるため、サンプルのアラインメントやサンプルからの反射 X 線の位置確認に使われる。また暗電流を減らすために、ペルチェ素子を使って  $-60\ ^\circ\text{C}$  まで冷却して使用する。またペルチェ素子は、 $20\ ^\circ\text{C}$  に保った冷却水を循環させることにより冷却されている。表 4.7 に X 線 CCD カメラの仕様をまとめる。

表 4.7: 背面照射型 CCD の仕様<sup>27-30</sup>

撮像素子	背面照射型フルフレームトランスファ CCD
有効画素数	$1242(\text{H}) \times 1152(\text{V})$
画素サイズ	$22.5\ \mu\text{m} \times 22.5\ \mu\text{m}$
有効面積	$27.9\ \text{mm} \times 25.9\ \text{mm}$
フレームレート	約 0.1 フレーム/秒 (高精度読み出しモード)
飽和電荷量	360,000 electrons (高精度読み出しモード)
読み出しノイズ	8 electron r.m.s.
平均暗電流	0.3 electron/pixel/s
冷却方式	ペルチェ冷却 + 水冷

### 4.1.3 セットアップ

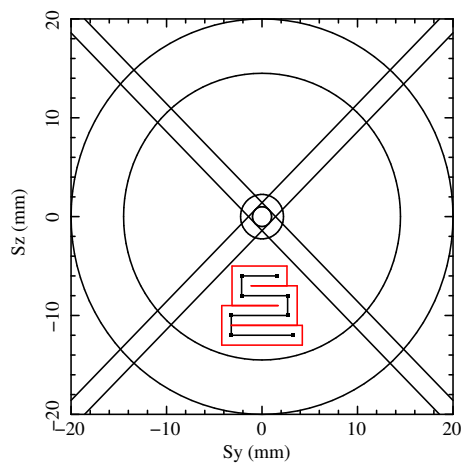
#### 透過率測定方法

本測定の目的はエネルギーに応じたステンレスメッシュの透過率カーブを測定することである。測定方法概観を以下に示す。まず二結晶分光器で蛍光 X 線のみを取り出し、そのエネルギーでのステンレスメッシュ透過光子数を比例計数管を用いて測定する。次にステンレスメッシュをビーム光路の外へずらすことで直接光子数を測定し、それらの比を取ることで透過率を算出する。ここで、二結晶分光器を通すことにより、ビームサイズは最大 2 mm 角程度になるため、40 mm ほどの大きさのステンレスメッシュ全体の透過率を一度に測定することはできない。また、ステンレスメッシュの開口幅は 1 mm 程度であるためビームを当てる場所に応じて透過光子数が大きく変動することが考えられる。

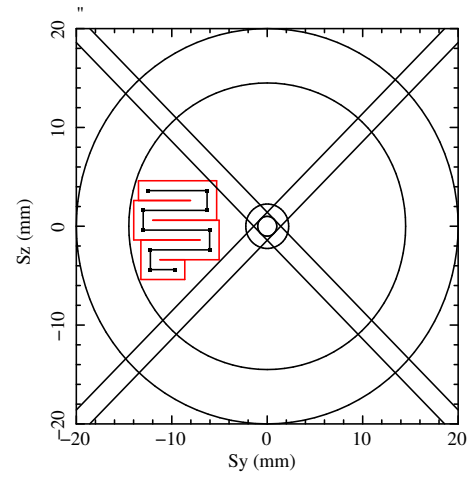
本測定ではこれらの問題を解決するため、ラスタースキャンという測定方式を採用した。ラスタースキャンでは、供試体ステージと検出器ステージを同期させて走査することにより、擬似的に供試体の広い範囲で平行 X 線が入射している状況を作り出す。通常は検出器を露光させながら、Y 方向（ビームと直交する方向）に検出器ステージ、供試体ステージを同期移動させ 1 ラインをスキャンし、Z 方向（鉛直方向）に 1 ラインの幅分移動させ、次のラインをスキャンする。今回我々は、2 mm×2 mm のスリットで絞られたビームを用いたラスタースキャンの軌道をステンレスメッシュの 1/4 区画ごとに作成した（図 4.8a–4.8d）。ここで、ビーム軌道を作成する際に留意したポイントは以下の 3 点である。

- ステンレスメッシュ周りの光学的に厚い部分に当たらないようにした。
- Z 方向の移動中は測定を行わず、Y 方向の移動中のみ比例計数管で透過光の測定を行った。
- 移動開始、終了時の加減速の影響を十分小さくするため、Y 方向の移動速度を 0.1 mm/s にすることで、1 ラインの測定に 50 秒以上かかるよう設定した。

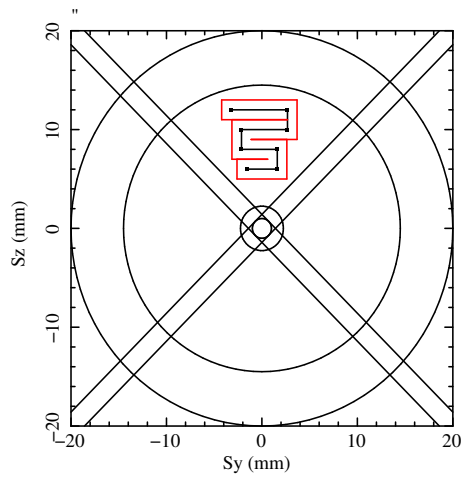
直接光はステンレスメッシュを光路の外へずらし、各ターゲットの透過光測定前後で測定した。その際、ラスタースキャンは必要ないのでステージは静止したまま測定を行った。



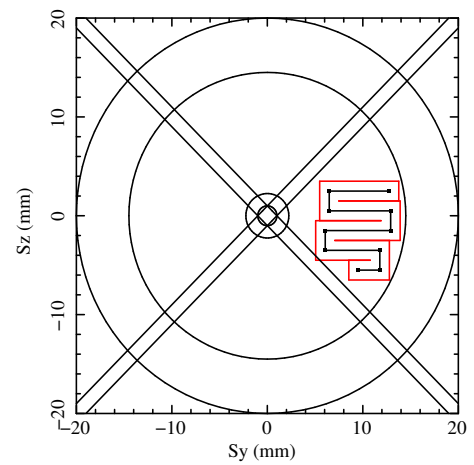
(a) bottom quadrant (204sec)



(b) left quadrant (282sec)



(c) top quadrant (173sec)



(d) right quadrant (282sec)

図 4.8: ラスタースキャンの軌道。(a)–(d) は各象限の軌道を示す。括弧内の数字は比例計数管作動時間の合計を表す。この際比例計数管は速度  $0.1\text{mm/s}$  の  $S_y$  方向走査時のみ作動させている。



### 治具

供試体を並進・回転の可能な供試体ステージに固定するため、ISAS 工作室にて治具を作成した（図 4.9）。この治具を用いて供試体をステージに固定し、測定チャンバ内に搬入した（図 4.10）。

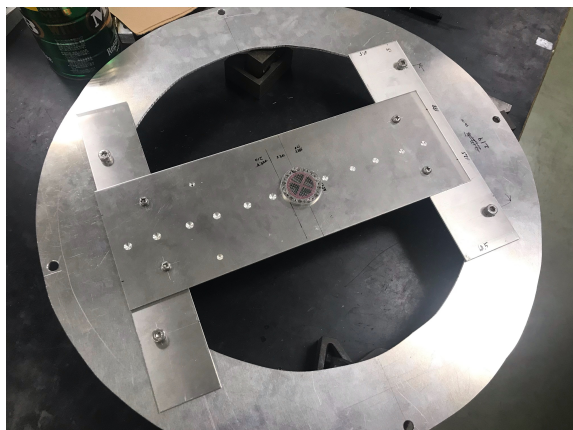


図 4.9: 作成した治具。写真にあるように中心に供試体を取り付けてチャンバ内の並進・回転ステージに固定する。

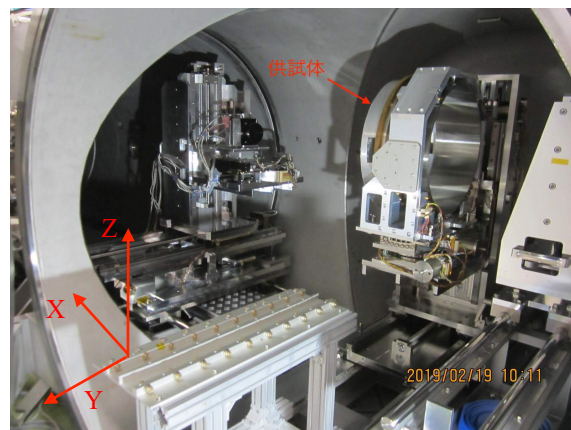


図 4.10: チャンバ内の様子。真ん中のドラムに取り付けられているのが作成した治具であり、その中心に供試体が固定してある。

### 供試体のアラインメント

ビームラインの X 軸（X 線が進行する方向）に垂直な平面でステージを回転させ、供試体の十字型の要素と CCD の Z 軸（鉛直方向）、Y 軸を一致させた（図 4.11 左）。また、その平面内で供試体、スリットを並進させ、CCD 中心と供試体中心、四極スリット中心を一致させ、並進方向の原点とした。Y 軸に沿った方向にラスタースキャン測定を行うので、図 4.11 左の状態だと、測定開始・終了箇所がステンレスメッシュ上か開口部分かによって測定結果にばらつきが生じてしまう。そこで、図 4.11 右のように 45 度傾けることで測定開始・終了時の位置依存性が小さくなるようにした。

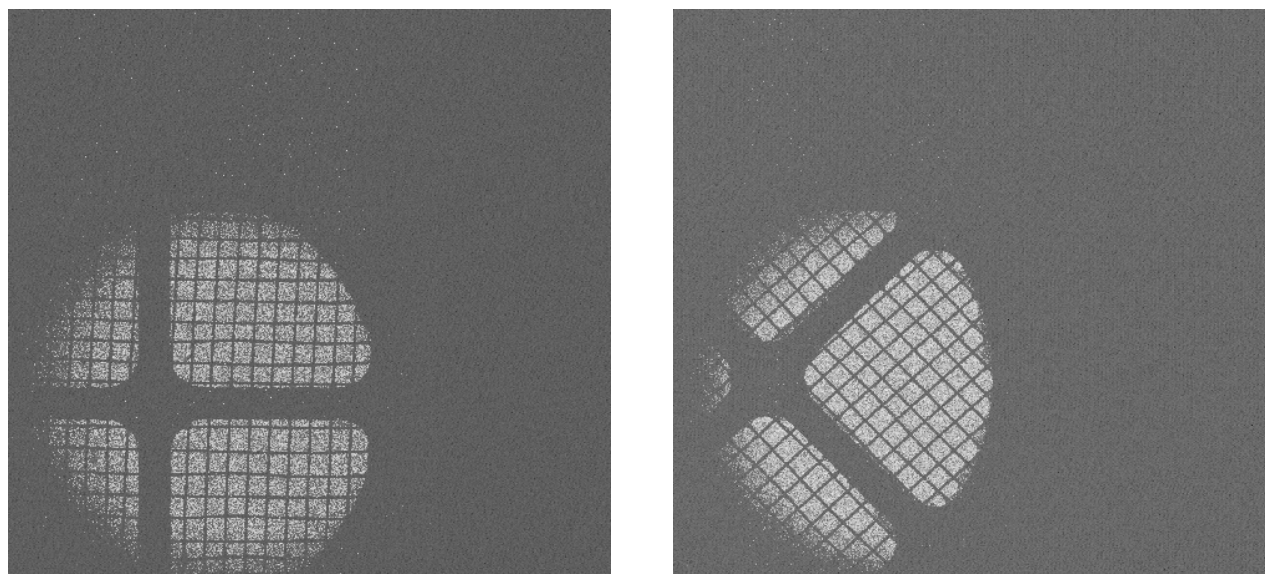


図 4.11: CCD を用いた供試体のアラインメント。左: 十字と CCD の Z 軸・Y 軸を一致させた状態。ここでは Cu のターゲットでの X 線を用いている。右: 左図より YZ 平面内で 45 度傾けた状態。ここでは Ti のターゲットでの X 線を用いている。このように 45 度傾けた状態でラスタースキャン測定を行った。

今回の実験で用いたターゲット物質と X 線発生装置の電流・電圧・輝線エネルギーを表 4.8 に示す。本測定では、Ag  $K\alpha$  を除く 5 つのターゲット (Ti  $K\alpha$ , Cu  $K\alpha$ , Pt  $L\beta$ , Mo  $K\alpha$ , Mo  $K\beta$ ) において、二結晶分光器で分光した X 線ビームの透過率を測ることに成功した。Ag  $K\alpha$  は最もエネルギーが高く、Bragg 反射角が約 8 度とかなり小さい。図 4.12 に概略図を示すように、反射角が小さいとビームの一部しか両方の結晶で反射することができない。そのためビーム強度が小さくなり、バックグラウンドに埋もれてしまう。Ag  $K\alpha$  は DCM での分光ができなかったため、Ni フィルタを通して測定を行なった。また、表 2.3 に示したように、ステンレスメッシュの透過率測定の要求精度は 1.8–25.0 keV で 1% 以内である。系統誤差の影響も考慮する必要があるため、統計誤差が精度要求の約 1/3 以内に収まるようそれぞれのターゲットの平均カウントレートに応じて測定時間を計算した。ラスタースキャンの軌道は固定なので、各象限を何周も測定することで測定時間を調節した。具体的な統計誤差の算出式については 4.1.5 項で示す。

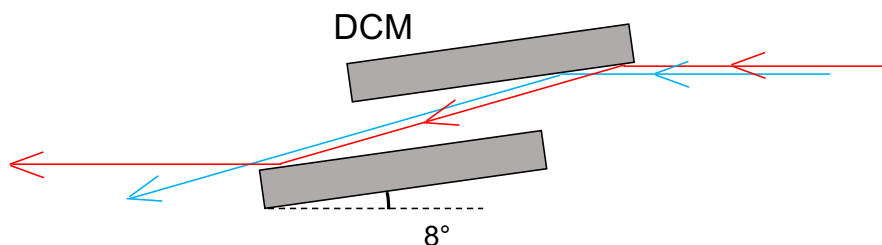


図 4.12: Bragg 反射角がごく小さい時の DCM 周辺の X 線光路概略図。赤線は二回反射できているが、水色線は一度しか反射できていないため検出器には到達しない。ターゲット Ag  $K\alpha$  時の反射角は  $8^\circ$  と小さいので、この図のような効果により入射 X 線の 1 割程度しか単色化できない。

表 4.8: 本測定で用いたターゲットと発生装置の電圧・電流

ターゲット	輝線	電圧 [kV]	電流 [mA]	エネルギー [keV]
Ti	K $\alpha$	20	10	4.51
Cu	K $\alpha$	30	35	8.05
Pt	L $\beta$	45	30	11.07
Mo	K $\alpha$	50	20	17.48
Mo	K $\beta$	58	70	19.61
Ag	K $\alpha$	50	10	22.17

#### 4.1.4 測定結果

表 B.4 (付録) に大まかな試験日程をまとめる。以下にそれぞれの測定結果について述べる。

##### CCD を用いた透過率測定

DCM を用いた測定の前に、Cu ターゲットの大きな X 線ビームをステンレスメッシュの 1/4 区画全体に当て CCD を用いて透過率を測定することで、アラインメント確認を行った。まず、ビームがステンレスメッシュの 1/4 区画にうまく当たるよう供試体を移動させ、8 mm×8 mm のスリットで区切り、CCD で撮像した (図 4.13)。エネルギー依存を考慮せず合計の ADU カウントを読み取ったところ、44,670,705 counts であった。次に、ステンレスメッシュをビームの当たらないところに移動させ、8 mm×8 mm ビームの直接光を撮像した (図 4.14)。ADU カウントは 62,438,034 counts であり、積分時間で規格化した後に比を取ったところ透過率は 71.5% と算出された。Cu K $\alpha$  輝線のエネルギーは 8.9 keV であり、このエネルギーの X 線に対してステンレスメッシュは光学的に厚い。また、ステンレスメッシュの幾何的情報から予想される開口率は 71% であるため、結果的に、ビームが途中で遮られず期待したアラインメントが得られていることが確認された。なお、上記で用いたカウント数は共に暗電流の寄与を差し引いたものである。

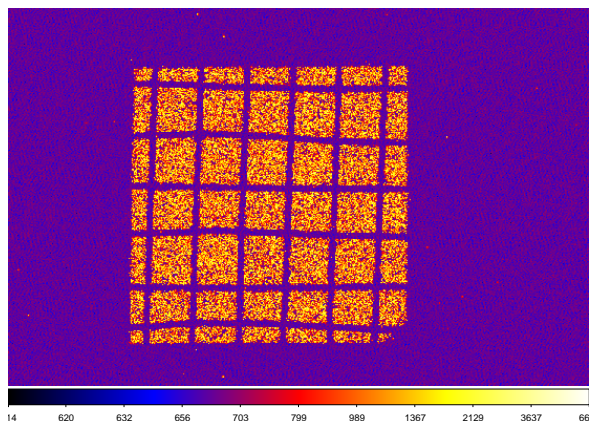


図 4.13: ステンレスメッシュ透過光を CCD 検出器で撮影した様子

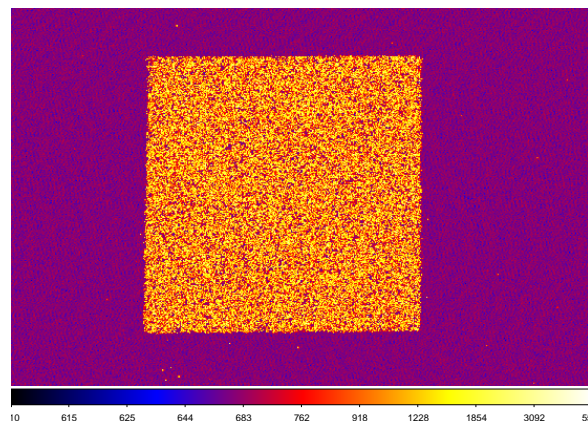


図 4.14: ステンレスメッシュなしの直接光を CCD 検出器で撮影した様子

##### ロッキングカーブを用いた Bragg 角決定

Bragg 反射角は DCM の結晶の厚みを用いて計算 (式 4.1) からある程度求められるが、精密に決定するために図 4.5 のようなロッキングカーブを描く必要がある。そこで、本測定では、6 つのターゲットでの全ての測定でまずロッキングカーブ (図 4.15) を描き、比例計数管での検出光子数がピークをとる scan number、すなわち、Bragg 角を透過率測定に使用した。Ag K $\alpha$  は先ほど述べたように、エネルギーが高く Bragg 角が小さいため、ピークを見つけることができず (図 4.15 右下)、結果的に DCM で分光することはできなかった。

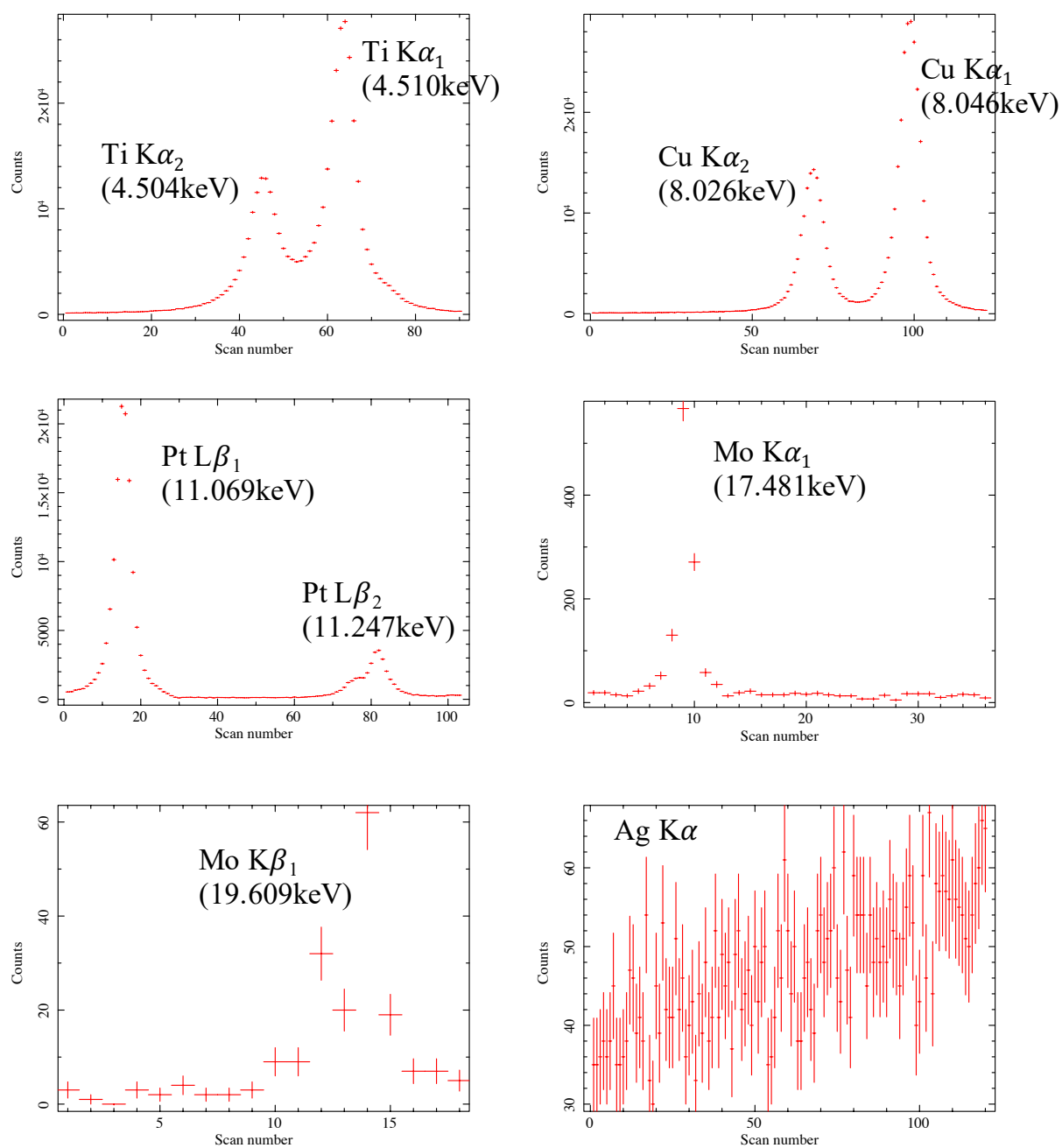


図 4.15: 各ターゲットのロッキングカーブを示す。横軸は回転角に対応するスキャン番号であり、DCM の Bragg 角  $\theta$  に対応する。番号が大きいほど Bragg 角が小さく、式 4.1X 線エネルギーは大きい。Scan number の 1 目盛は 0.002 度に対応する。右下の Ag  $K\alpha$  は DCM では分光できなかった (図 4.12 参照)。



## ステンレスメッシュ透過率本測定

次に比例計数管を用いた透過率本測定に移る。表 4.8 の 6 つのターゲットから得られたエネルギースペクトルを図 4.16 に示す。

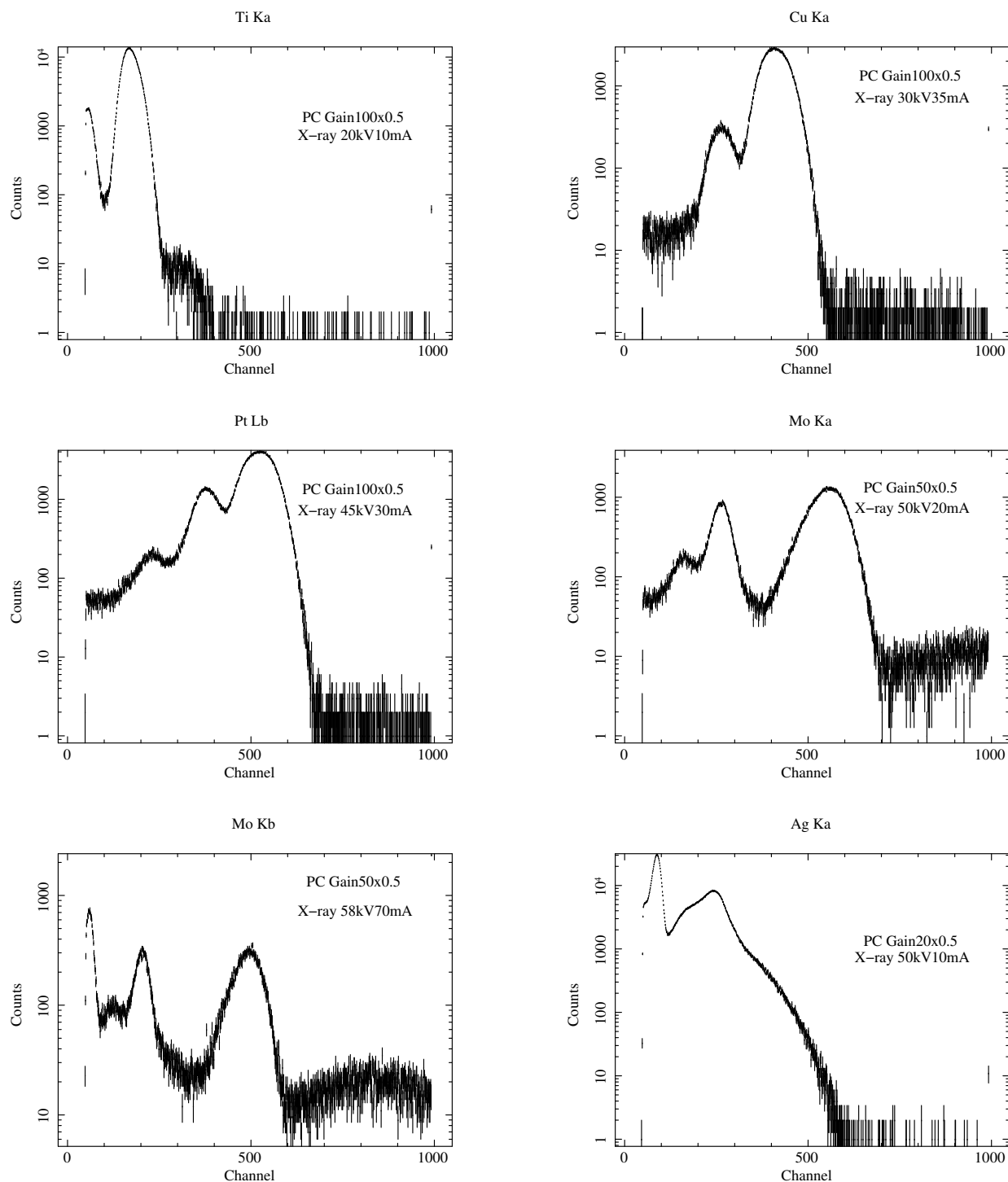


図 4.16: 6 つのターゲットから得られた直接光のエネルギースペクトル。横軸はチャンネル、縦軸はカウント数を表す。各プロットの右上には比例計数管のゲインと X 線発生装置の電圧・電流が記載されている。

### 4.1.5 解析

#### 透過率算出方法

比例計数管の出力信号はマルチチャンネルアナライザー（MCA8000A）で、横軸がチャンネル数のエネルギースペクトルに変換される（図 4.16）。比例計数管のゲインは P10 ガスの流量、気圧、温度に応じて変動するため、チャンネル数とエネルギーの対応は完全に線形ではない。よってゲイン変動に合わせて、チャンネルとエネルギーを変換する必要がある。そこでスペクトル上のピークチャンネルと輝線エネルギーの文献値を照らし合わせフィッティングを行い、ゲインを求める方法を用いた。ゲインフィットには複数点のピークが必要なので比例計数管に封入されている Ar ガスのエスケープライン（輝線エネルギーから 2.96 keV を引いたエネルギーにピークが出る）や比例計数管の陽極芯線に用いられている直径 50  $\mu\text{m}$  のタングステンの  $L\alpha$  輝線も用いた。

ゲインフィット後のエネルギースペクトルを図 4.17 に示す。横軸は下にチャンネルを、上にエネルギーを記した。ここで求めたゲインを用いてピークエネルギー  $\pm$  数 keV のエネルギー幅での光子数をカウントした。光子数積分には灰色の色付けしてある部分を使用した。

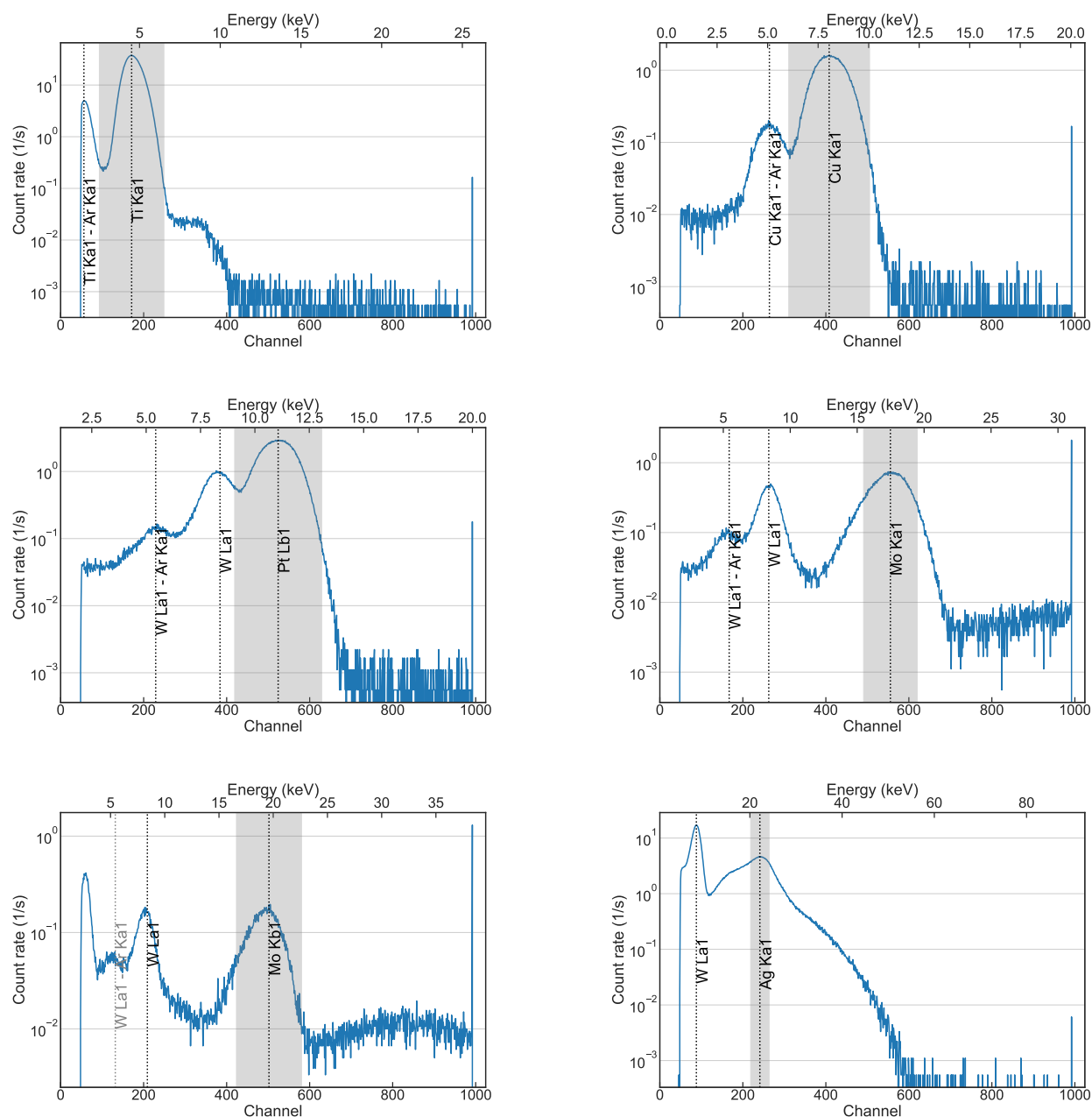


図 4.17: 図 4.16 の横軸をエネルギーに換算した後の直接光エネルギースペクトル。横軸は下にチャンネル、上にエネルギーを記してある。灰色に色付けしてあるエネルギー範囲を光子数カウントに用いた。黒字の輝線名はピークフィットに用いた輝線、薄灰色の輝線名はピークフィットには用いなかった輝線である。Ar  $K\alpha_1$  を差し引いているラインは比例計数管内に封入してあるアルゴンガスのエスケープラインを示す。W  $L\alpha$  は比例計数管の芯線に用いられているタングステンの  $L\alpha$  輝線を表す。



4.1.3 項で述べたように、ビーム変動の影響を小さくするため、本実験では透過光測定の前後に直接光を測定した。統計誤差を 0.33% 以内に収めるため、各象限を何周もすることで合計光子数を調整した。各ターゲットの直接光、透過光のカウントレートをそれぞれの平均カウントレートで割ったプロットを図 4.18 に示す。青色が直接光測定を表し、約 1800 秒の 1 スキャン測定が 1 つの測定点に対応している。カウントレートが最も小さい Mo K $\beta$  のみ前後に 2 セットずつ直接光を測定した。橙色が透過光を表し、60 秒の測定 6 回、合計およそ 360 秒の測定による平均カウントレートが 1 つの測定点に対応している。透過光は各ターゲットのカウントレートに応じて繰り返し測定を行った。カウントレートの平均値で規格化されているため、平均からのばらつきが直感的に確認できる。

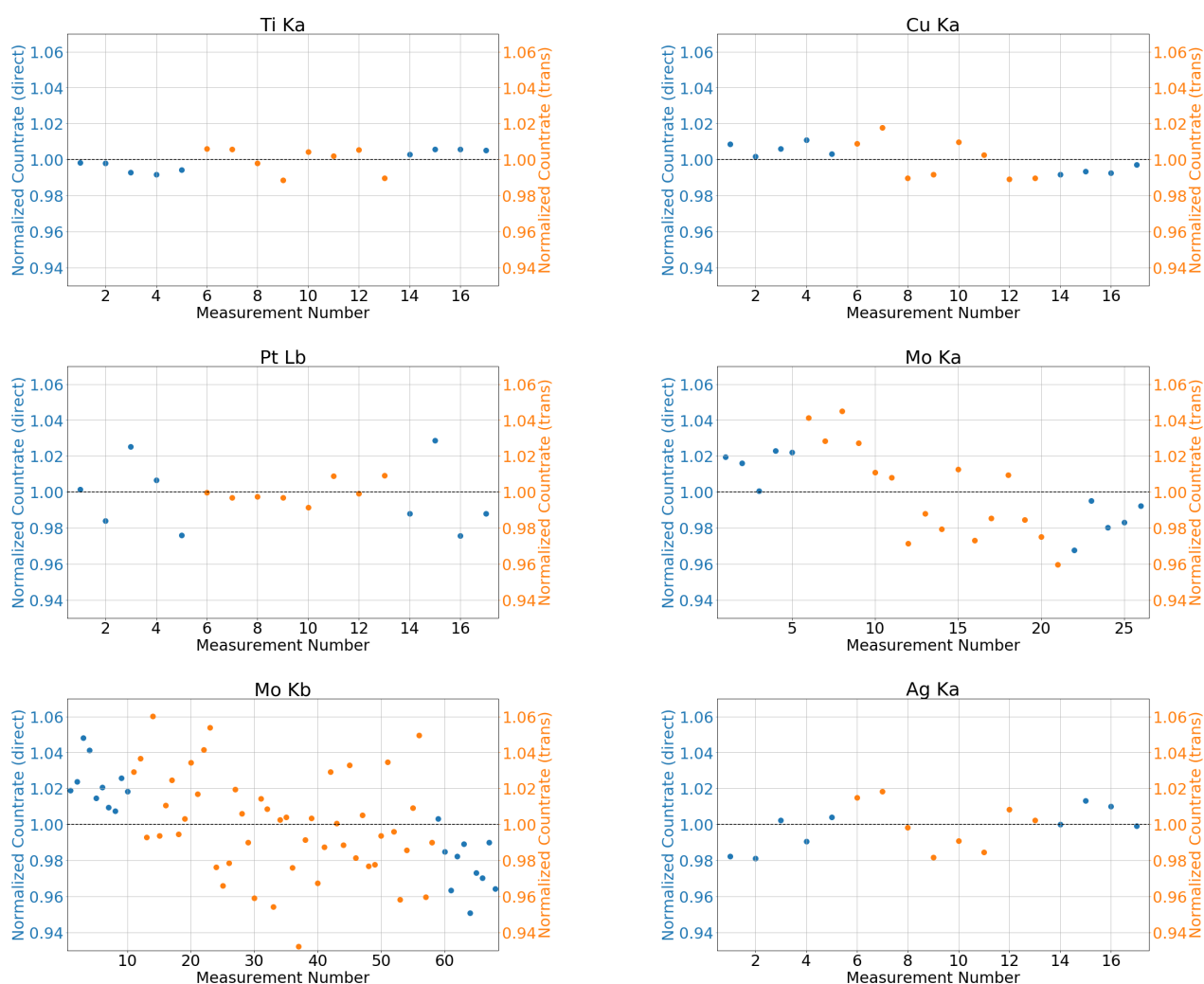


図 4.18: 各スキャンにおける直接光・透過光のカウントレートばらつき。横軸に測定の順番、縦軸に直接光・透過光それぞれの平均値で規格化したカウントレートを取っている。規格化することで 6 つのターゲットにおけるスキャンごとのカウントレートのばらつきを直感的にわかりやすくしている。青色が直接光、橙色が透過光を表す。

比例計数管を作動させた合計時間 (Y 軸方向のみ作動) と図 4.17 の灰色のエネルギー帯で検出された光子数の合計を透過光、直接光ごとに表 4.9 に示す。さらに各々のカウントレートの比を取ることで透過率の算出を行なった。ここでビームシャッターを閉めた際のダークのカウントレートは 1, 2 counts/s であり、数桁小さかったので無視した。

表 4.9: 透過光（供試体 ON）、直接光（供試体 OFF）それぞれの合計露光時間、合計検出光子数、算出された透過率、測定誤差

輝線	エネルギー [keV]	供試体	スキャン数 <sup>a</sup>	合計露光時間 [sec]	合計光子数 [counts]	透過率 [%]	測定誤差 [%]
Ti K $\alpha$	4.51	ON	8	1866.3	2562596	72.71	$\pm 0.62$
		OFF	10	3627.8	6850815		
Cu K $\alpha$	8.05	ON	8	1856.7	200030	71.74	$\pm 0.90$
		OFF	10	3601.7	540877		
Pt L $\beta$	11.07	ON	8	1858.0	422722	71.52	$\pm 1.46$
		OFF	10	3605.6	1149485		
Mo K $\alpha$	17.48	ON	16	3712.8	211733	72.32	$\pm 2.28$
		OFF	10	3601.6	285442		
Mo K $\beta$	19.61	ON	48	11136.2	122811	73.58	$\pm 2.80$
		OFF	20	7200.1	109824		
Ag K $\alpha$	22.17	ON	8	1861.2	270694	76.38	$\pm 1.31$
		OFF	10	3613.6	686769		

<sup>a</sup> 透過光については一象限の測定を 1 スキャンと呼ぶ。つまりステンレスメッシュ全体（四象限）を掃くには 4 スキャン必要である。直接光については 1 回およそ 60 秒の測定を 6 回セットで 1 スキャンと呼ぶ。1 スキャンは入射光の変動や比例計数管のゲインのばらつきを抑えるため、このように積分している。

#### 誤差の評価

直接光、透過光の合計測定時間を  $t_{tot,d}(E)$ 、 $t_{tot,t}(E)$ 、合計検出光子数を  $C_{tot,d}(E)$ 、 $C_{tot,t}(E)$  と表す。透過率  $T$  の算出式は

$$T = \frac{\langle \dot{C}_t \rangle}{\langle \dot{C}_d \rangle} = \frac{C_{tot,t}/t_{tot,t}}{C_{tot,d}/t_{tot,d}} \quad (4.2)$$

となる。ここで  $\langle \dot{C}_t \rangle$ 、 $\langle \dot{C}_d \rangle$  は透過光、直接光の平均カウントレートである。

以下で、ある特定のターゲット光での透過率の誤差評価を行う。ここでは図 4.18 でのカウントレートのばらつきが種々の系統誤差を具現化していると仮定する。式 4.2 の中央式を用いて、各スキャンにおける測定カウントレートのばらつきから測定誤差  $\sigma_{obs}$  を算出すると

$$\sigma_{obs}^2 = \left( \frac{\partial T}{\partial \langle \dot{C}_d \rangle} \Delta \langle \dot{C}_d \rangle \right)^2 + \left( \frac{\partial T}{\partial \langle \dot{C}_t \rangle} \Delta \langle \dot{C}_t \rangle \right)^2 \quad (4.3)$$

となる。ここで  $\Delta \langle \dot{C}_t \rangle$ 、 $\Delta \langle \dot{C}_d \rangle$  は各スキャンごとに得られた直接光・透過光それぞれのカウントレートの分散値である。つまり、あるターゲットで  $n$  回のスキャン測定を行い、 $n$  個のカウントレート  $\dot{C}_n$  が得られたとすると、その分散  $\Delta \langle \dot{C} \rangle$  は

$$\Delta \langle \dot{C} \rangle^2 = \frac{1}{n} \sum_{n=1}^n (\dot{C}_n - \langle \dot{C} \rangle)^2 \quad (4.4)$$

で表される。誤差伝播式を用いると

$$\sigma_{\text{obs}}^2 = \left( \frac{\langle \dot{C}_t \rangle}{\langle \dot{C}_d \rangle^2} (\Delta \langle \dot{C}_d \rangle)^2 \right) + \left( \frac{1}{\langle \dot{C}_d \rangle} (\Delta \langle \dot{C}_t \rangle)^2 \right)^2 \quad (4.5)$$

$$= \frac{\langle \dot{C}_t \rangle^2}{\langle \dot{C}_d \rangle^2} \left( \left( \frac{\Delta \langle \dot{C}_d \rangle}{\langle \dot{C}_d \rangle} \right)^2 + \left( \frac{\Delta \langle \dot{C}_t \rangle}{\langle \dot{C}_t \rangle} \right)^2 \right) \quad (4.6)$$

となる。つまり、測定誤差  $\sigma_{\text{obs}}$  は

$$\sigma_{\text{obs}} = T \sqrt{\left( \frac{\Delta \langle \dot{C}_d \rangle}{\langle \dot{C}_d \rangle} \right)^2 + \left( \frac{\Delta \langle \dot{C}_t \rangle}{\langle \dot{C}_t \rangle} \right)^2} \quad (4.7)$$

と求められる。求めた測定誤差を表 4.9 に記す。

測定された透過率に測定誤差をつけ、較正データベースに入っている透過率カーブと共にプロットすると図 4.19 のようになる。Ti K $\alpha$ (4.51 keV) などの低エネルギー側と Ag K $\alpha$ (22.17 keV) などの高エネルギー側でモデルと測定結果との残差が見られる。残差の起源については 6.1 節で議論する。

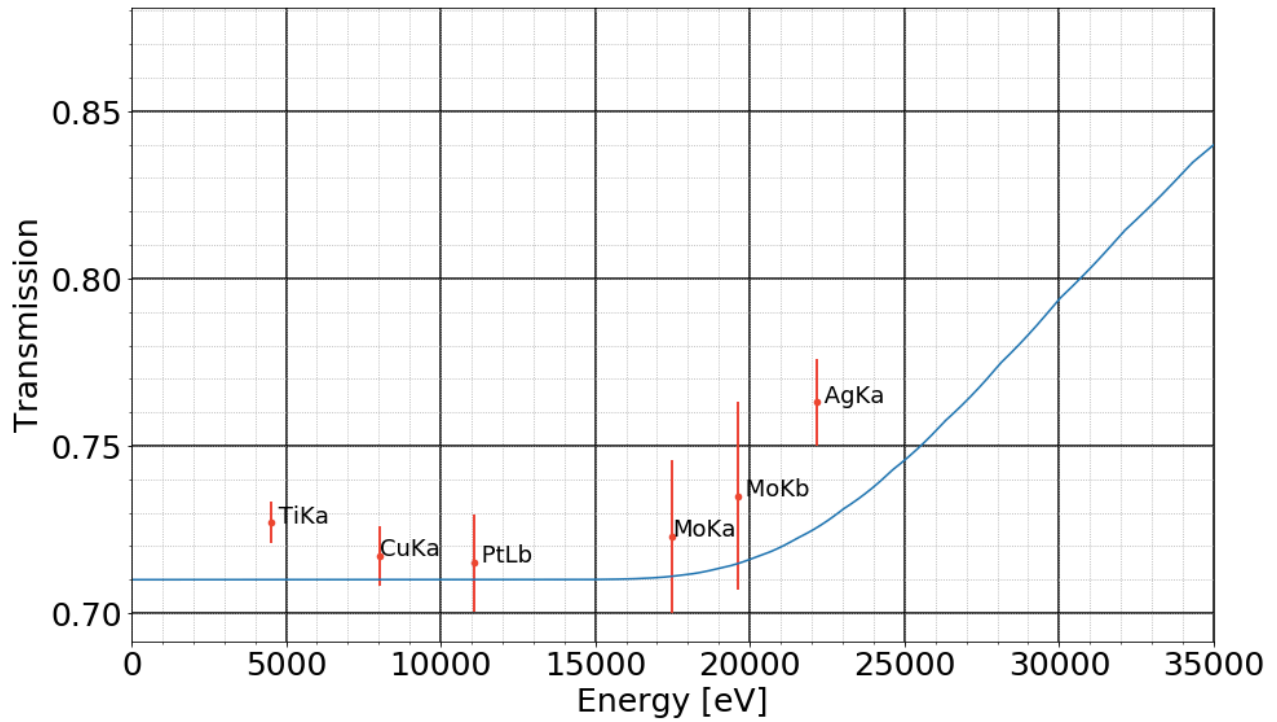


図 4.19: ステンレスメッシュの透過率測定結果。赤点は測定誤差を含めた透過率を、青線は「ひとみ」SXS 装置の較正データベースに入っているモデル透過率カーブ (2.3 参照) を示す。Ti K $\alpha$ (4.51 keV) などの低エネルギー側と Ag K $\alpha$ (22.17 keV) などの高エネルギー側でモデルと測定結果との残差が見られる。

## 第 5 章

# 測定 2: Be 窓の透過率・回折ピーク測定

### Contents

<b>5.1</b>	<b>KEK PF BL7C での透過率測定</b>	<b>71</b>
5.1.1	目的	71
5.1.2	装置	71
5.1.3	セットアップ	72
5.1.4	測定と結果	74
5.1.5	解析	75
<b>5.2</b>	<b>KEK PF BL11B での透過率測定</b>	<b>80</b>
5.2.1	目的	80
5.2.2	装置	80
5.2.3	セットアップ	81
5.2.4	測定と結果	84
5.2.5	解析	86
<b>5.3</b>	<b>HiSOR BL11 での透過率測定</b>	<b>96</b>
5.3.1	目的	96
5.3.2	装置	97
5.3.3	セットアップ	100
5.3.4	測定と結果	101
5.3.5	解析	102
<b>5.4</b>	<b>首都大学東京での X 線回折測定</b>	<b>106</b>
5.4.1	目的	106
5.4.2	装置	107
5.4.3	セットアップ	108
5.4.4	測定と結果	109
5.4.5	解析	110

本章ではシンクロトロン放射光施設を用いた Be 窓の X 線透過率測定と X 線回折装置を用いた回折ピーク測定について論述する。実験の内容に応じて、国内の複数の実験施設を利用した。複数の施設を利用した理由についてはそれぞれの節で述べる。5.1 節では、KEK フォトンファクトリー (PF) のビームライン 7C を用いた 4.0–12.0 keV 帯域の透過率測定について、5.2 節では 5.1 節と同じ KEK PF のビームライン 11B を用いた 1.8–5.0 keV 帯域の透過率測定について説明する。5.3 節では広島大学放射光施設のビームラインを用いた 2.1–4.0 keV 帯域の透過率追加測定について述べる。また、5.4 節では首都大学東京の X 線回折装置を用いた回折ピーク測定結果について述べる。

## 5.1 KEK PF BL7C での透過率測定

日時：2019 年 6 月 13 日～16 日

場所：高エネルギー加速器研究機構（KEK）フォトンファクトリー（PF）ビームライン 7C

供試体：Resolve Be 窓 フライトモデル

課題番号：2018G509

### 5.1.1 目的

表 2.3 で述べたように、Be 窓の透過率校正要求は 1.8–25.0 keV のエネルギーバンドにおいて、2 eV step で 1% の精度でデータを得ることである。そこで、BL7C では 4.0–12.0 keV のエネルギー帯にて 2 eV step、1% 以下の精度での透過率カーブを取得することを目標とする。1.8–4.0 keV の透過率測定は別のビームライン (5.2 節) で行う。その理由については次項で述べる。

### 5.1.2 装置

KEK PF には、電子ビームのエネルギーが 2.5 GeV、450 mA の PF リングと 6.5 GeV の PF-AR (Advanced Ring) の 2 つの光源加速器が存在する。通常時はトップアップモード（常時入射により、リング電流値を一定に保つ運転モード）で運転されており、ビーム強度の変動が小さいことが特徴である。PF 内には 39 ものビームラインが搭載されており、各ビームラインごとに特色ある測定を行うことが可能になっている。表 2.3 にもあるように、Be 窓の透過率測定が必要なエネルギー帯は 1.8–25.0 keV である。図 2.3 より、Be 窓は約 12 keV 以上の X 線を完全に透過するので 1.8–12.0 keV の測定が重要である。

約 5 keV 以上の X 線は大気中を少なからず透過するので、散乱 X 線から身を守るため、PF では実験ハッチ内に検出器を設置し、測定中はハッチ外に出ておく必要がある。逆に、軟 X 線は大気で大部分が吸収されてしまうので、光路を真空引きしておく必要がある。KEK PF において、硬 X 線測定は BL7C を用いて、また軟 X 線測定は BL11B を用いて実施した。

硬 X 線測定に用いた BL7C は特定・優先の使用目的を設けずに運用されており、実験装置を課題に応じて自由に搬入可能な PF で唯一の X 線汎用ステーションである\*<sup>1</sup>。図 5.1 に BL7C の全体の様子を、図 5.2 に測定ハッチ内の様子を示す。BL7C には Si(111) を用いた二結晶分光器 (Sagittal focusing DCM) が備えつけられている。この DCM では第二結晶を弯曲させることによって水平方向のビームを集光できる。また、単色光を 2 つの溶融石英集光鏡 (Focusing double mirror) で 2 回全反射させることによって、高次光の除去と縦方向のビームの集光が可能である。集光時の典型的なビームサイズは 1.5 mm(H)×1 mm(V) である。DCM と二回全反射集光鏡を用いると 4keV 付近での三次光の割合は  $3 \times 10^{-5}$  程度まで減少する。高次光の影響を無視しうる単色硬 X 線を供給できることが BL-7C の最大の特色である。

供試体の前後には前置・後置検出器として 2 台の平行平板型イオンチャンバが設置されており、ビーム強度を電流値 ( $I_0, I_1$ ) に変換して測定する。ガス長は前置検出器が 17 cm、後置検出器が 31 cm である。通常、イオンチャンバ内にフローさせて使用する。標準で用意しているガスは N<sub>2</sub>(100%), N<sub>2</sub>+Ar(15%), N<sub>2</sub>+Ar(25%), N<sub>2</sub>+Ar(50%), Ar(100%), N<sub>2</sub>+He(70%) の 6 種類である。これ

\*<sup>1</sup> 以下の URL を参照した。

[http://pfwww.kek.jp/users\\_info/station\\_spec/bl7/bl7c.html](http://pfwww.kek.jp/users_info/station_spec/bl7/bl7c.html)

らの前置・後置検出器は電動昇降可能な定盤の上に設置されているので、ハッチ外から容易に昇降させることが可能である。

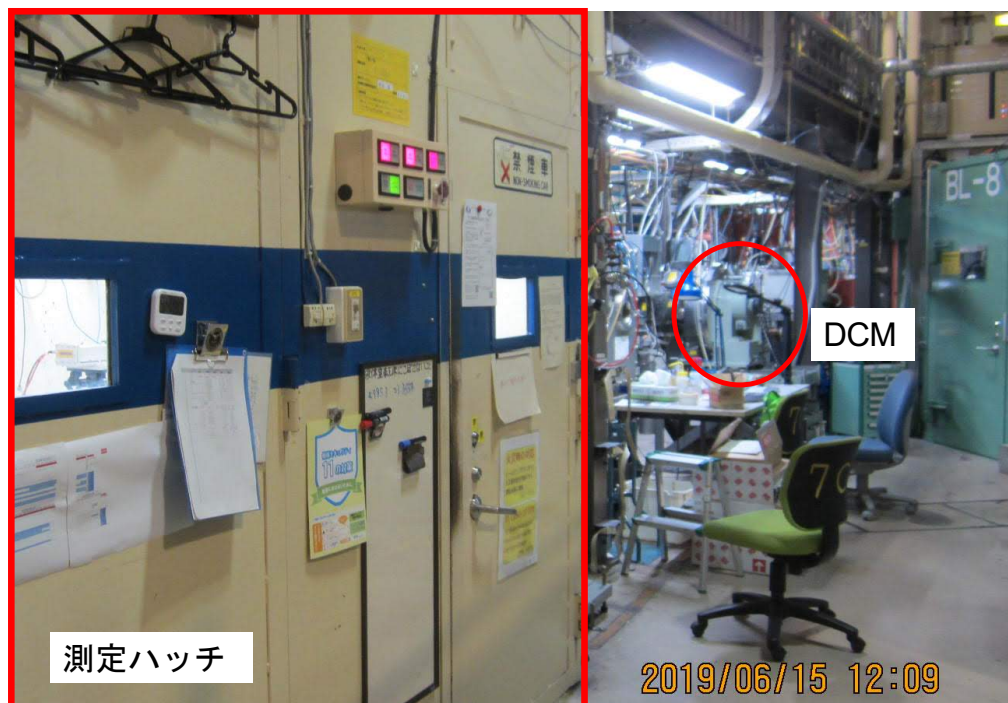


図 5.1: BL7C 全体写真

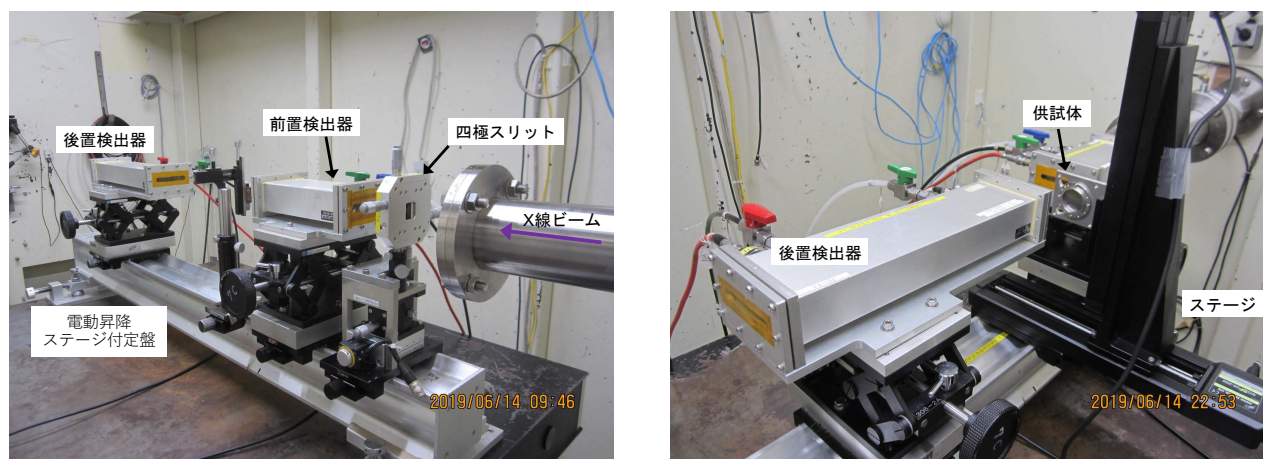


図 5.2: BL7C ハッチ内の写真。左: 上流から 右: 下流から

### 5.1.3 セットアップ

BL7C での機器配置を図 5.3 に示す。供試体はステージに乗っているので、ハッチ外からリモートコマンドで移動させることが可能である。ビーム光路に供試体を設置した時の前置・後置検出器での電流値  $I_0(E)$ ,  $I_1(E)$  と光路

から外した時前置・後置検出器での電流値  $I'_0(E)$ ,  $I'_1(E)$  をそれぞれ測定し、以下の式で透過率を算出する。

$$T(E) = \frac{I_1(E)/I_0(E)}{I'_1(E)/I'_0(E)} \quad (5.1)$$

このように double normalization を行うことで、ビームの時間変動と検出器応答を補正する。また、本測定ではイオンチャンバ内のガスフローは窒素ガス 100% を用いた。また前置・後置検出器の高電圧は 1 kV に設定した。前置検出器の上流側に設置されている四極スリットを用いて、ビームサイズは 1 mm×1 mm になるよう調節した。

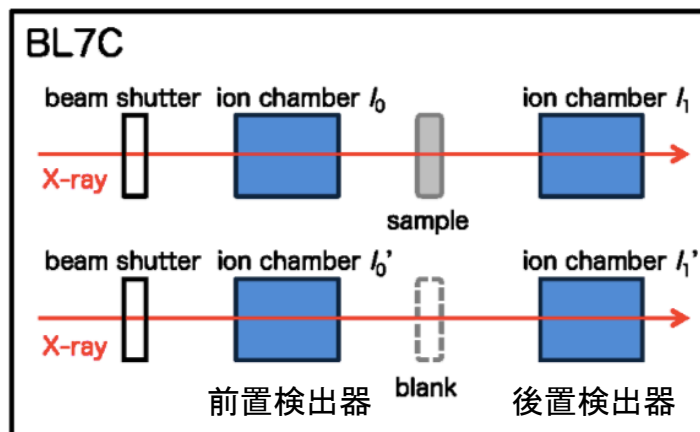


図 5.3: BL7C の機器配置<sup>19</sup>

DCM で指定できるのは入射 X 線と結晶表面のなす角度のみである。角度とエネルギーの関係は式 4.1 で表されるが、数 eV の系統誤差が生じる。そこで、6  $\mu\text{m}$  厚の銅箔を用いた X 線吸収端近傍構造 (X-ray Absorption Near Edge Structure; XANES) スペクトル (図 5.4) を取得することによりエネルギー較正を行った。XANES とは吸収端の前後約 50 eV 程度の領域に現れる微細構造のことであり、X 線吸収微細構造 (X-ray Absorption Fine Structure; XAFS) の一種である。以下に Cu の XANES スペクトルを示す。8980eV 付近に見られるピークエネルギーの対応する Bragg 角を 12.7129° に合わせてエネルギー較正を行う。エネルギー較正前の Bragg 角は 12.7186° であった。



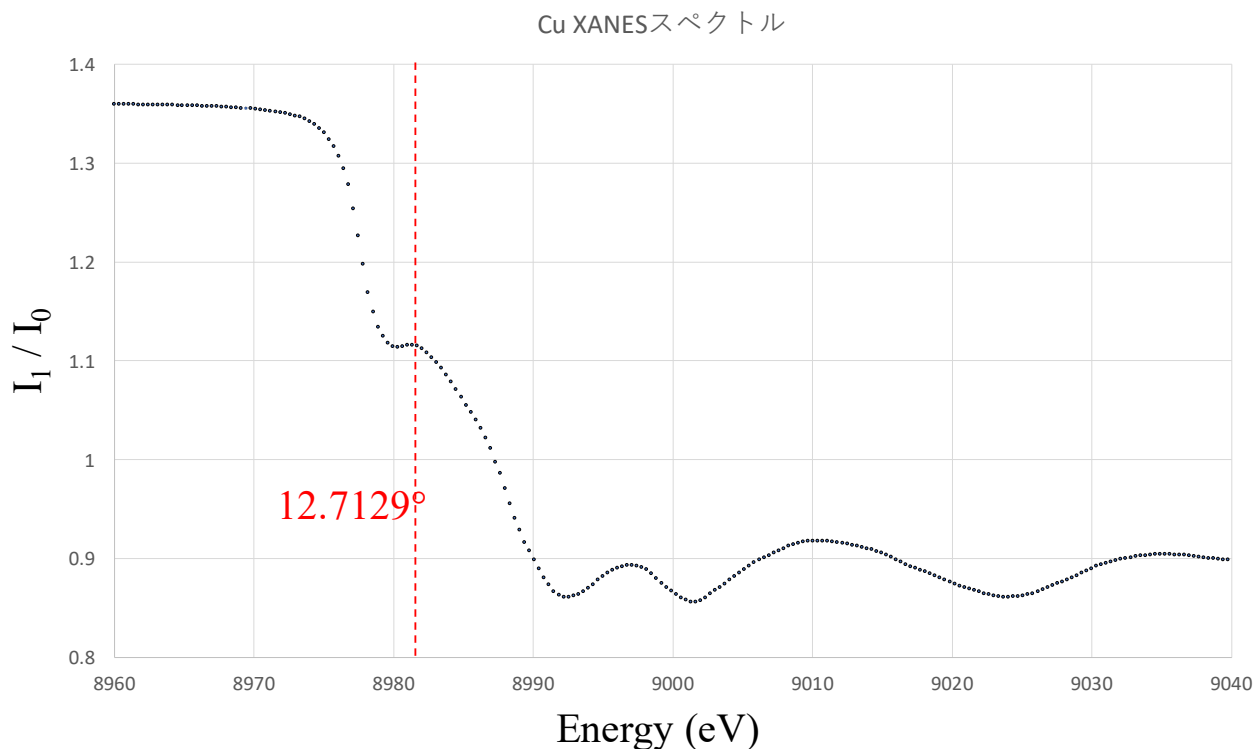


図 5.4: 測定で得られた Cu の XANES スペクトル。8980eV 付近に見られるピークエネルギーの対応する Bragg 角を  $12.7129^\circ$  に合わせてエネルギー較正とするのが本ビームラインの推奨値である。

本測定では、4.0–6.0 keV の測定をする際に高次光除去ミラーを用いる。Si(111) の二次光は消滅則 (付録参照) により Bragg 反射しないため、本測定で問題になるのは三次光の影響である。6.0 keV の三次光である 18.0 keV の X 線は BL7C ではほとんど発生しないので、6.0 keV 以上の X 線に対して高次光除去を行う必要はない。高次光除去の際、二回の全反射によりビームの平行性は保たれるが、ビームの高さが多少ずれるので、ビーム強度が最大になるように定盤の高さを調整する必要がある。

#### 5.1.4 測定と結果

表 B.5 (付録) に BL7C での測定実験のログを記す。本測定では Be 窓中心 (Center) の他に、中心から 6.5mm 上部 (Top) と 6.5mm 下部 (Bottom) の計 3 箇所を測定した。これにより、X 線照射位置による系統誤差を調べる。まず、Be 窓中心において 4.0–12.0 keV 帯でエネルギーステップ 2 eV (表 2.3 参照)、1 ステップごとの測定時間 2 秒間で測定を行なった。5.9–12.0 keV では長時間測定の後、失敗に気づくリスクを避け、また電流計のゲインが適切かどうかを確認するため 5.9–8.0, 7.9–10.0, 9.9–12.0 keV と 0.1 keV ほど重複させた 3 つのエネルギーバンドに区切って測定を行なった。中心部の 2 秒間積分で十分な統計が得られることがわかったので、Top, Bottom では 1 秒間積分で測定を行なった。

4–5 keV のエネルギー帯は BL7C で利用できる最低エネルギーであり、大気パスで少なからず吸収されてしまうのでビーム強度は弱くなる。それに加え 4 keV 付近では Be 窓透過率が徐々に下がり始めておりおよそ 70% となる。これらの 2 つの効果により、イオンチャンバで検出されるビーム強度は高エネルギー側に比べ小さくなる。そこで、4.0–5.0 keV 帯域においては、ビーム強度を電流値に変換して読み取る際に電流計のゲインを一桁あげることによって対応した。



表 5.1 に最終的に得られた BL7C でのデータセットをまとめる。

表 5.1: BL7C で得られたデータセット

X 線照射箇所	エネルギー帯 [eV]	供試体	ステップ [eV]	dwell 時間 [s]	プロット色 <sup>a</sup>
Center	4000–6000	OFF	2	2	赤
		ON	2	2	
	5900–8000	OFF	2	2	未使用
		ON	2	2	
	7900–10000	OFF	2	2	黒
		ON	2	2	
	9900–12000	OFF	2	2	黒
		ON	2	2	
	4000–5000	OFF	2	1	黒
		ON	2	1	
	4900–8000	OFF	2	1	黒
		ON	2	1	
Top	4000–5000	OFF	2	1	黒
		ON	2	1	
	4900–6000	OFF	2	1	黒
		ON	2	1	
	5900–8000	OFF	2	1	黒
		ON	2	1	
	7900–12000	OFF	2	1	黒
		ON	2	1	
Bottom	4000–5000	OFF	2	1	黒
		ON	2	1	
	4900–6000	OFF	2	1	黒
		ON	2	1	
	5900–8000	OFF	2	1	黒
		ON	2	1	
	7900–12000	OFF	2	1	黒
		ON	2	1	

<sup>a</sup> 図 5.5, 5.6, 5.7 の (e), (f) 段におけるプロットの色を表す。未使用のデータはゲインが不適切であったため精度の低いものになっており、図 5.6 では使用しなかった。

### 5.1.5 解析

Be 窓の Top, Center, Bottom に X 線を照射した際のデータプロットをそれぞれ図 5.5, 5.6, 5.7 に示す。(a)–(d) は、生データを確認するためのプロットである。(a) は前置検出器、後置検出器のそれぞれにて検出された値を電流計のゲインと dwell 時間で割った値を示す。直接光、透過光それぞれについてデータが存在するので合計 4 つプ

ロットした。これはいわゆる測定生データであり、入射ビームの変動や、検出器応答による不連続性がかなり見えていることがわかる。(b) では前置検出器、後置検出器のそれぞれについて透過光カウント/直接光カウントを計算した。ここでもかなり細かい変動が見えており、入射ビームが数秒のタイムスケールで変動していることがわかる。(c) では直接光、透過光それぞれについて後置検出器カウント/前置検出器カウントを計算してプロットした。前置検出器と後置検出器の比を取ることで入射ビーム変動がかなり補正されていることがわかる。(d) は (c) をスムージングしたカーブで規格化したものを表している。この操作を行うことで直接光の細かな変動を可視化することが可能になる。ここでいくつかのデータが 1.00 に張り付いているが、これは測定データの端でスムージングできなかったデータを表しており、人為的なものである。

(e), (f) には透過率カーブをプロットしている。(e) では式 5.1 を用いて二重に規格化して求めた透過率カーブを示す。(f) プロットで比を確認しながら厚みを変えていったところ、 $250\text{ }\mu\text{m}$  付近でフラットになったのでここでの破線は  $250\text{ }\mu\text{m}$  厚の Be 窓を仮定した透過率カーブをプロットしている。(f) では (e) での測定透過率カーブとここで仮定した  $250\text{ }\mu\text{m}$  厚の Be 窓を仮定した透過率カーブの比を示す。この値は図を見やすくするための暫定値であり、正確な導出は 6.2 節で行う。出来るだけフラットになるような厚みを選んだので基本的には比は 1.0 に張り付いているが、 $6.1\text{ keV}$  付近など、ところどころ不連続に見える構造が存在する。

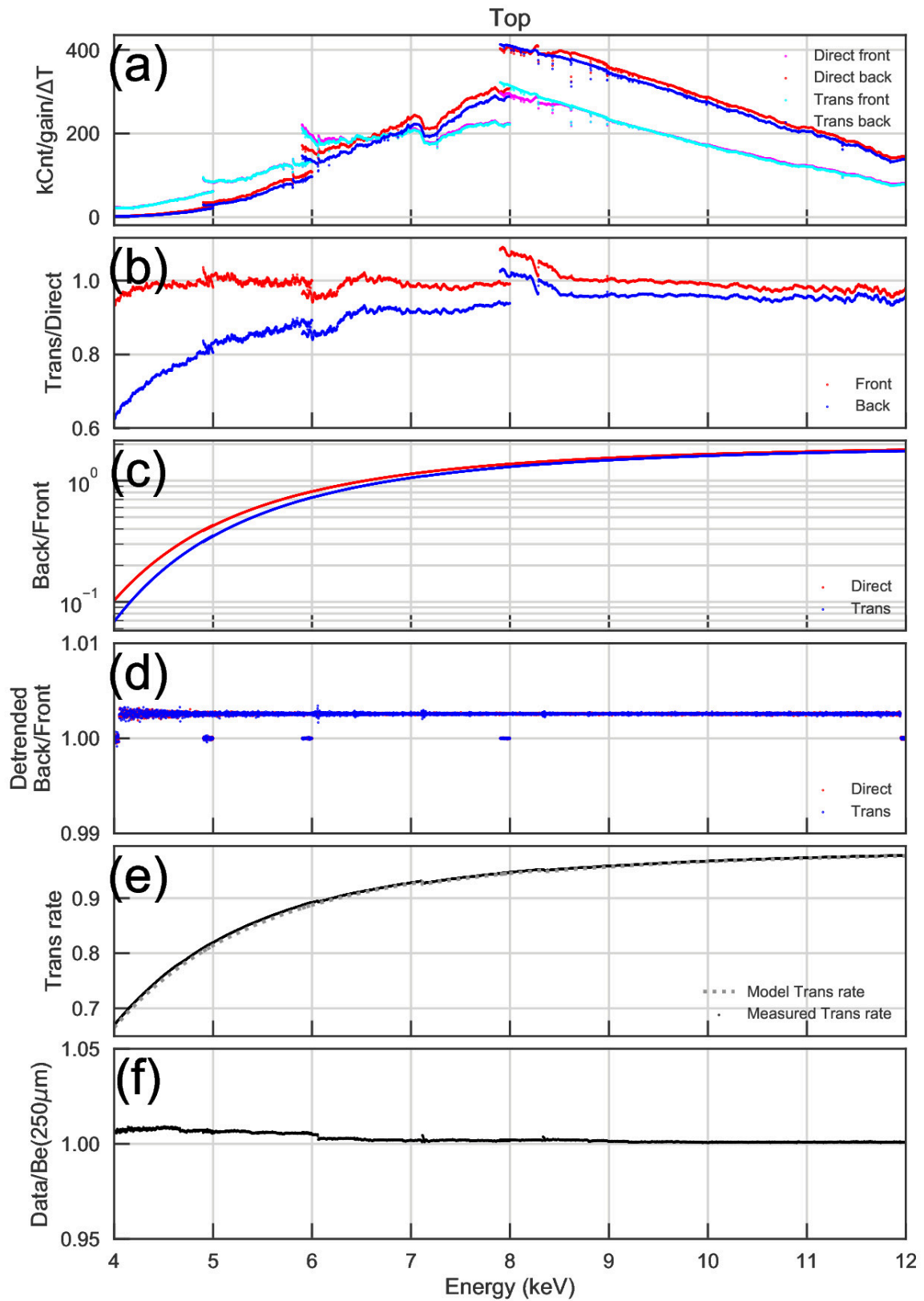


図 5.5: 4.0–12.0 keV 帯域での Be 窓上部の透過率カーブ。(a)–(f) についての説明は本文を参照。

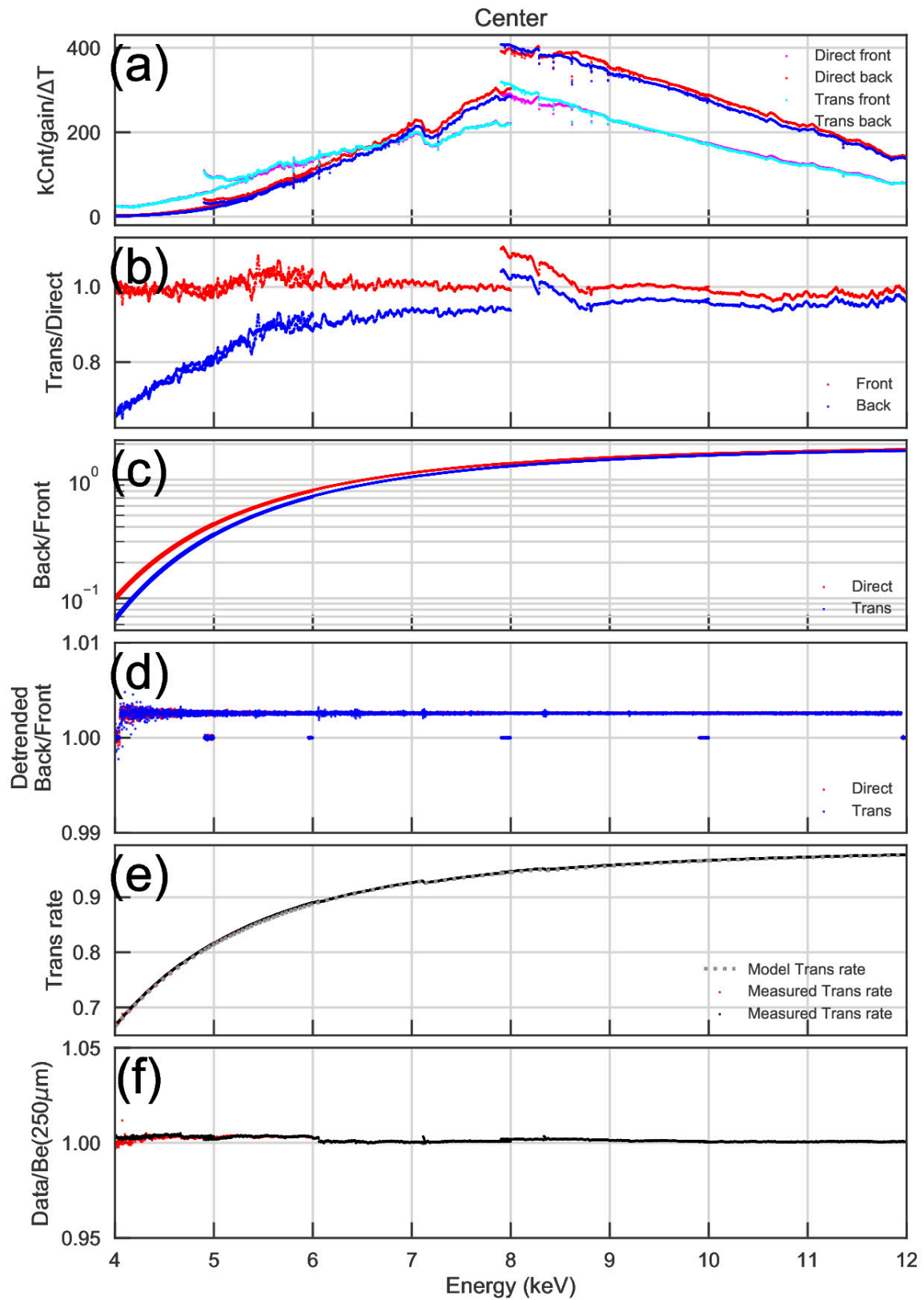


図 5.6: 4.0–12.0 keV 帯域での Be 窓中心の透過率カーブ

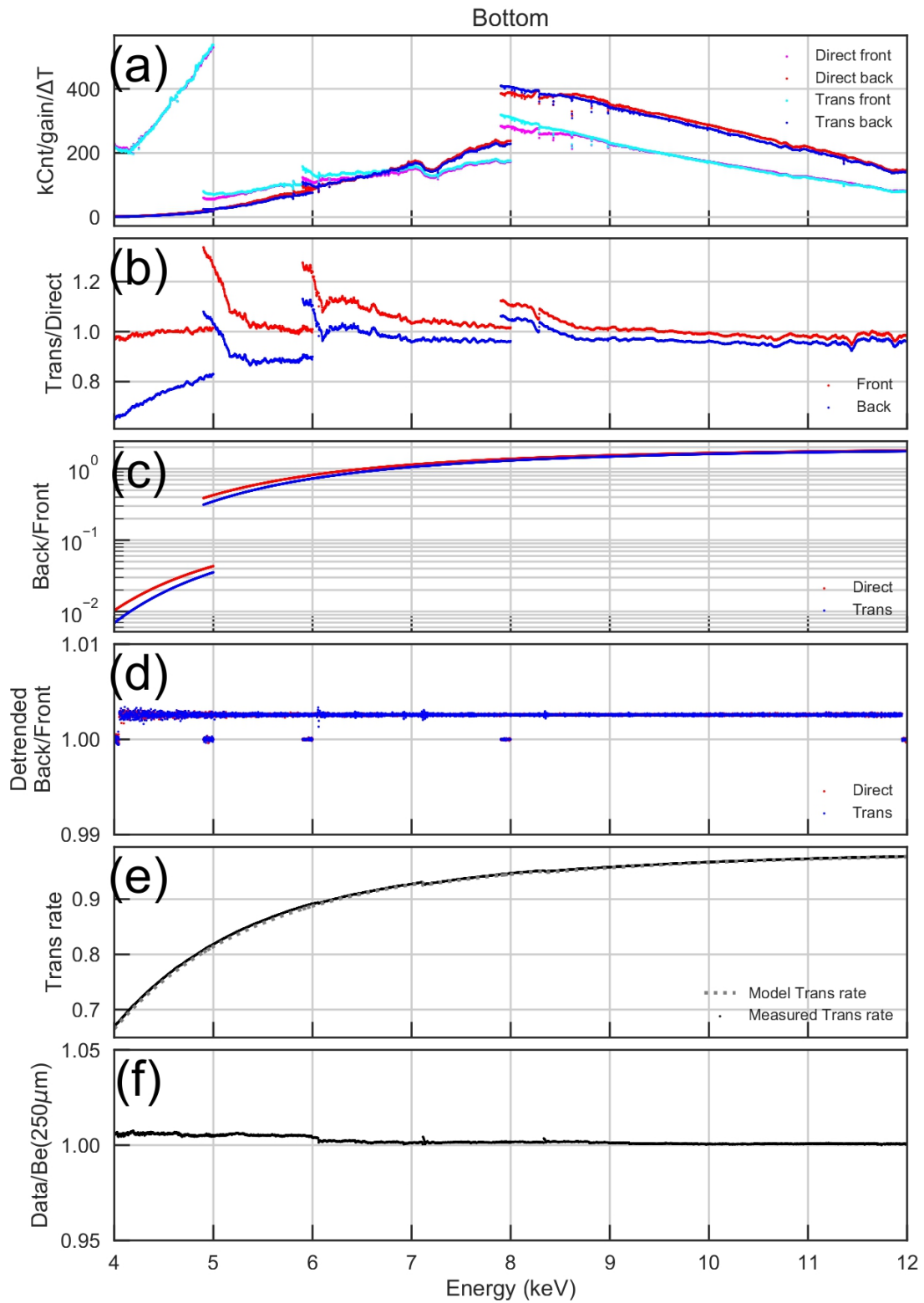


図 5.7: 4.0–12.0 keV 帯域での Be 窓下部の透過率カーブ

## 5.2 KEK PF BL11B での透過率測定

日時：2019 年 6 月 18 日～23 日

場所：KEK PF BL11B

供試体：Resolve Be 窓 フライトモデル

課題番号：2018G509

### 5.2.1 目的

次に BL11B では、1.8–5.0 keV 帯域での Be 窓透過率測定を 2 eV step で 1% 以下の精度で実施することを目標とする。また、本ビームラインでは 3% 以下の精度で Be 窓の空間一様性の測定も行う（表 2.3 参照）。表 2.3 にて、透過率 50% 以上のエネルギーで 100 以上のグリッドでの空間一様性測定が要求されている。Be 窓の透過率は 3.4 keV 付近で 50% となる。そこで、本ビームラインでは 3.4 keV 付近のエネルギーの X 線で 100 以上のグリッドでの測定を行うことも目標とする。

### 5.2.2 装置

BL-11B は、偏向電磁石を光源とし、集光鏡と高真空二結晶分光器を用いて軟 X 線領域（1.72–5.0 keV）の単色光を供給するビームラインである（図 5.8）。図 5.9 に BL11B の全体の様子を示す。二結晶分光器 (DCM) は Si(111) 結晶 (2057–5000 eV) と InSb(111) 結晶 (1724–3700 eV) の 2 種類から選ぶことができる。それぞれの分光結晶は真空を破ることなく、数十分ほどで切り替え可能である。分光した軟 X 線は前置検出器として機能する 2 $\mu$ m のチタン箔を透過して供試体に照射される。前置検出器は、試料への入射強度をモニタするためのもので、ピコアンメータを用いて光電子放出電流 ( $I_0$ ) を計測する。

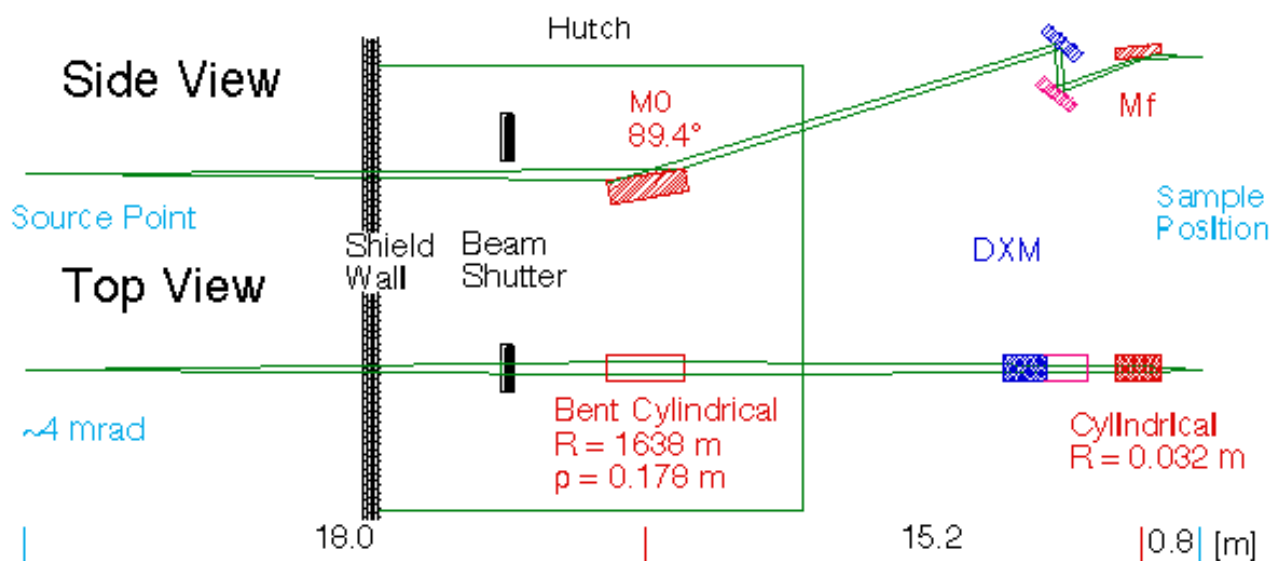


図 5.8: BL11B の構成および制御系\*2

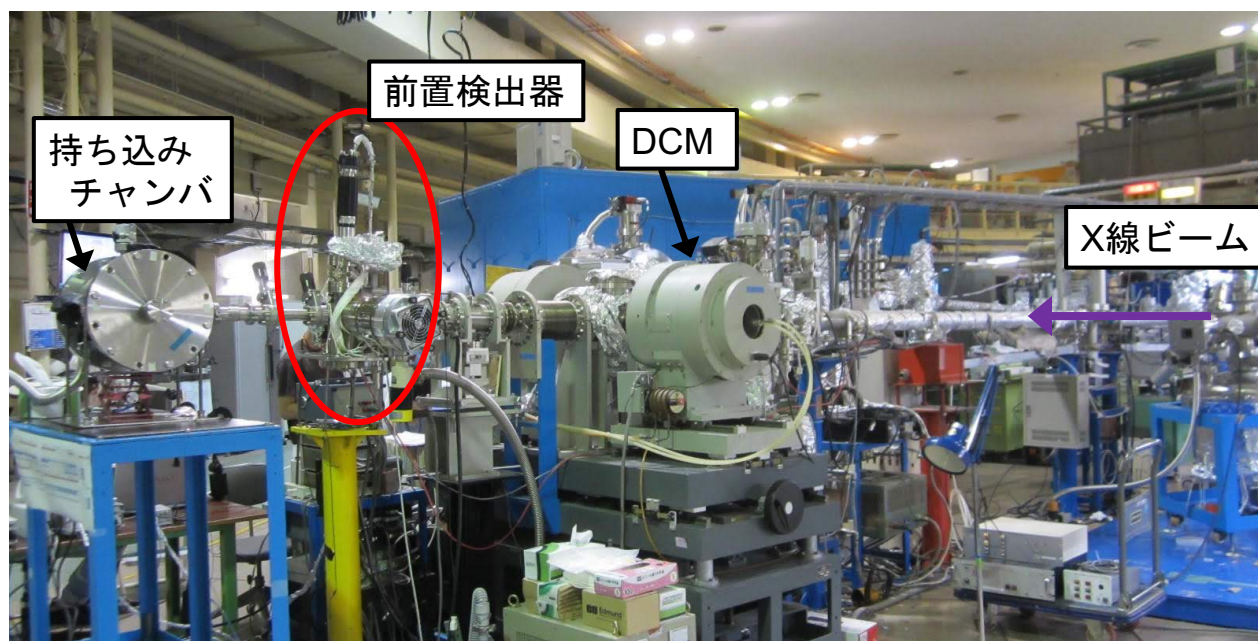
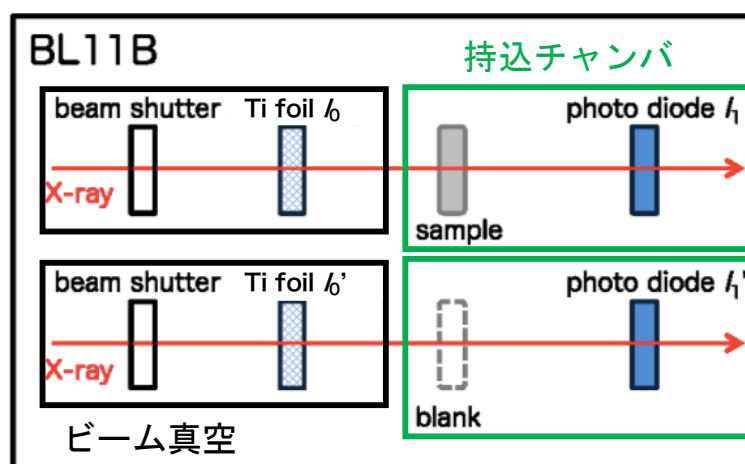


図 5.9: BL11B の全体写真

### 5.2.3 セットアップ

BL11B での機器配置を図 5.3 に示す。BL7C での測定と同様に式 5.1 を用いて透過率を測定する。本測定における測定チャンバ (図 5.9 左端)、後置検出器のフォトダイオード、コンピュータ制御可能なモータードライブステージ (図 5.11 右)、制御に用いる Windows PC とモニター等は全て立教大学北本研究室の備品を使用した。これらは SXS Be 窓のフライトスペア品の較正研究の成果物である<sup>18, 19</sup>。

図 5.10: BL11B の機器配置<sup>19</sup>

\*2 以下の URL を参照した。

<http://pfwww.kek.jp/sxs/spec/sx/bl11b.html>



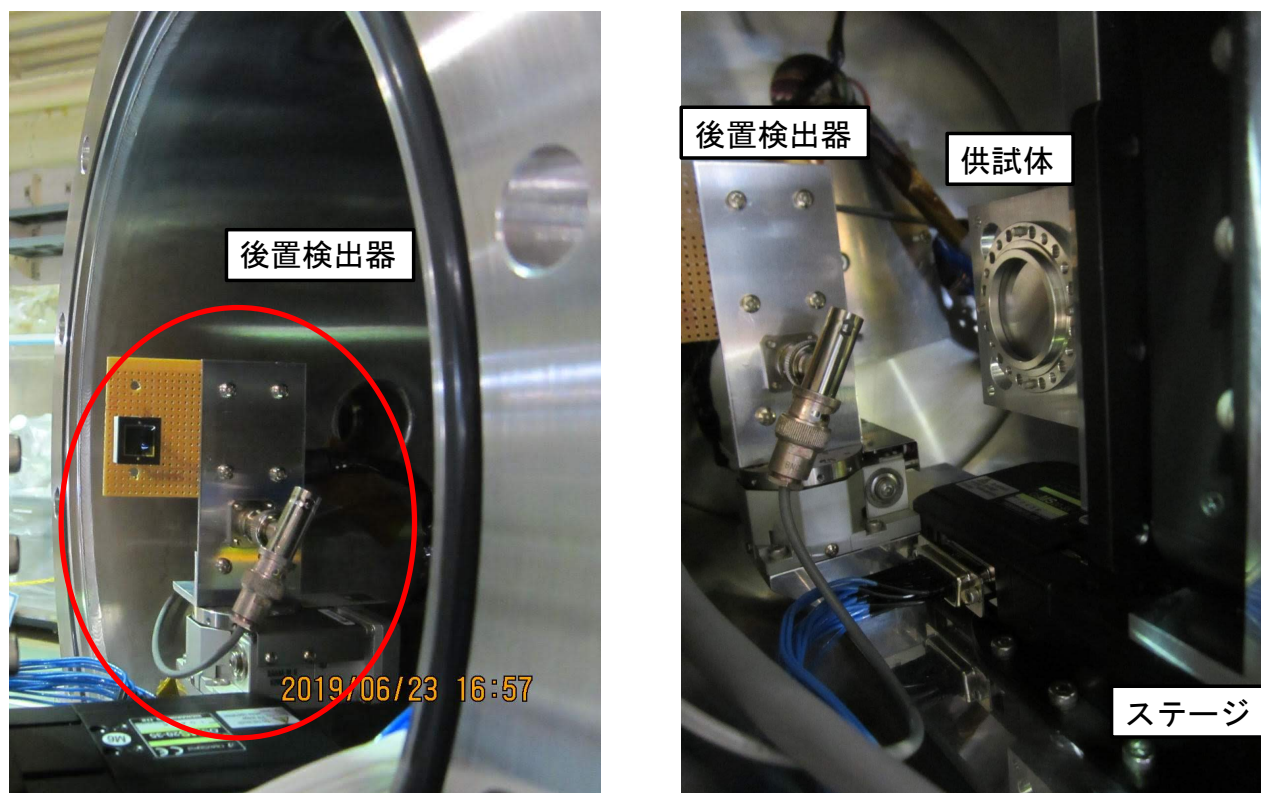


図 5.11: BL11B 測定チャンバ内。左: 後置検出器であるフォトダイオード。右: チャンバ内の機器配置

モータードライブステージはシグマ光機の OSMS20-35-M6 である。制御のためのパラメータはすでに出荷時に指定されており、そのパラメータを `python` スクリプト内で変数として用いることで制御可能である。ステージの概観図とスクリプトを用いた際の移動方向を図 5.12 に示す。ここで赤色で塗られた部分がステージ可動部分であり、垂直方向、水平方向に移動することが可能である。オレンジ色の矢印は `python` スクリプトを用いた際のステージの移動経路を示す。まず"D"で示された場所に移動し、Be 窓ホルダーに開いた穴から直接光を取得する。次に、測定予定の高さまで移動し、水平方向に移動する際にスキャン測定を行う。つまり、測定を実施するのは②と③の経路である。以下にステージの制御パラメータとその役割を列挙する。

- BINNUMBER : 図 5.12 における水色の短冊の数
- BINSIZE : 図 5.12 における水色の短冊の短辺の長さ ( $\mu\text{m}$ )
- SCANNUMBER : ②と③の往復回数
- INTERVALTIME : ②が終わり③が始まるまでの時間 (s)
- DIRECTDETECT : ①での直接光の測定時間 (s)
- WAITINGTIME : 測定開始前の①での待機時間 (s)



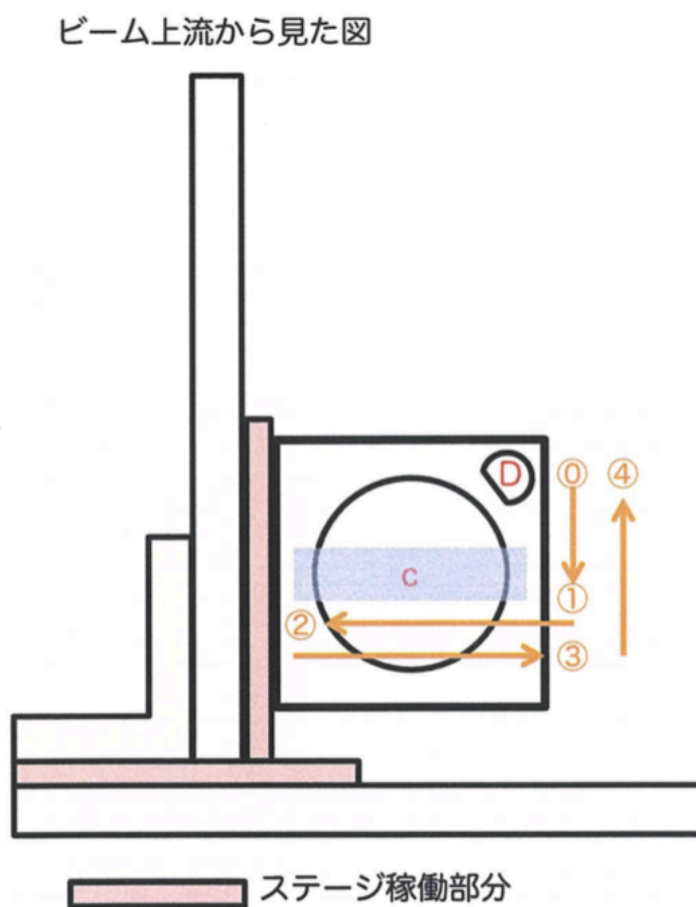


図 5.12: 立教大学のモータードライブステージ概観図。オレンジ色の矢印は python スクリプトを用いた際のステージの移動経路を示す。

BL7C と同様に BL11B でもエネルギー較正が必要である。本測定ではポリ塩化ビニル (PolyVinyl Chloride; PVC) を用いて較正を行なった。図 5.13 に PVC の XANES スペクトルを示す。得られたスペクトルでは 2821.0 eV に吸収端構造が見られたが、文献<sup>\*3</sup>によると Cl の吸収端が 2822.4 eV に現れることを用いて、エネルギー較正を行なった。

<sup>\*3</sup> <http://pfwww.kek.jp/sxspec/sx/edgetable.html>

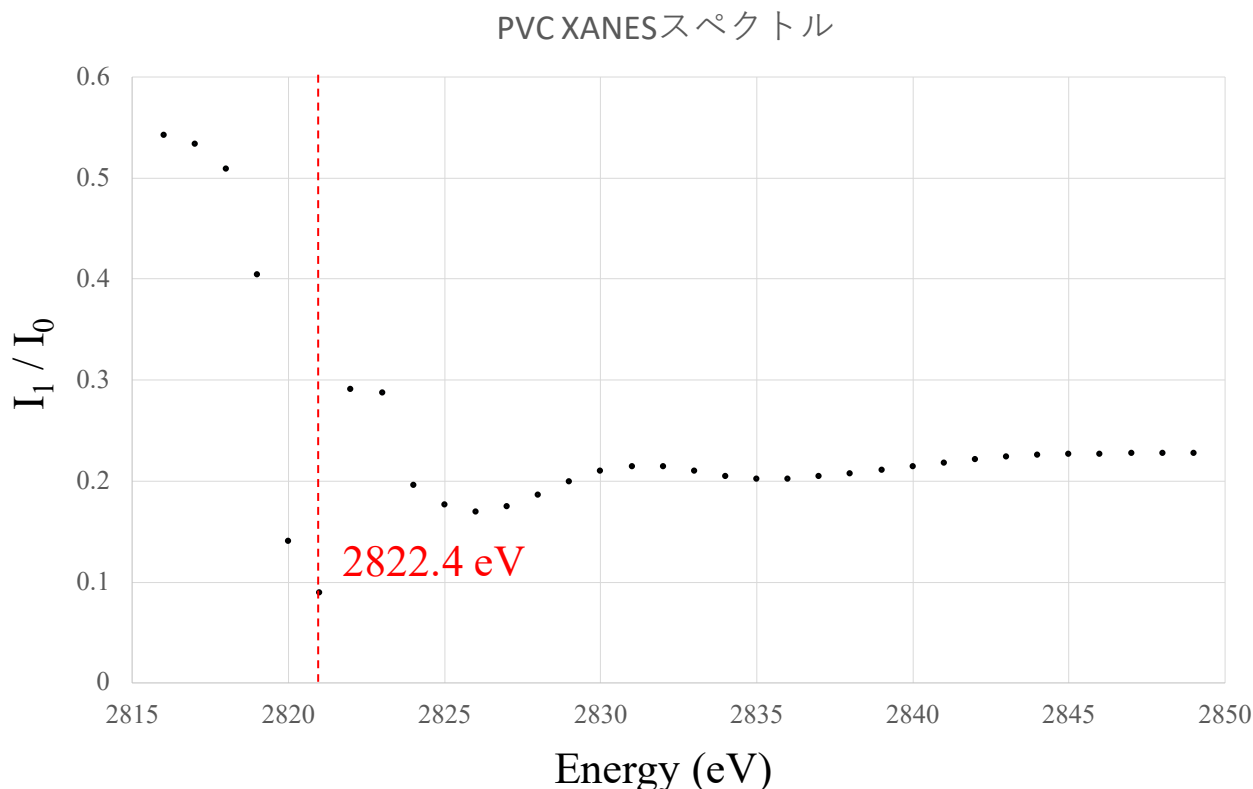


図 5.13: PVC の XANES スペクトル。このスペクトルでは 2821.0 eV に吸収端構造が見られたが、文献値では Cl の吸収端が 2822.4 eV に現れることを用いてエネルギー較正を行なった。PVC の文献値データには京都大学工学研究科の高岡昌輝教授のグループの研究結果を用いた<sup>32</sup>。

## 5.2.4 測定と結果

表 B.6 (付録) に BL11B での測定実験のログを記す。本ビームラインでは 5.2.2 項で述べたように DCM の結晶を Si と InSb の 2 種類から選ぶことができる。まず、Si 結晶を用いて Be 窓中心、上部、下部の計 3 箇所を測定した。Be 窓中心において 1.8–5.0 keV 帯でエネルギーステップ 2 eV(表 2.3 参照)、1 ステップごとの測定時間 2 秒間で測定を行なった。BL7C と同様に、電流計のゲインが適切かどうかを確認するためいくつかのエネルギーバンドに区切って測定を行なった。低エネルギー側では入射ビーム強度が落ちるのに加え、透過率の低下にしたがって透過光強度が桁で下がってしまう。それを補うため、dwell 時間を適切に延ばして測定を行った。

次に、より低エネルギー X 線での透過率を測定するために InSb 結晶を用いて、ビームタイムの制約上、Be 窓中心部のみで測定を行った。2.5 keV 以下には光電吸収等の連続的構造以外の構造はないと考えられているため、5 eV step に設定した。

二つの結晶を用いたエネルギースキャンを終えると、最後に透過率の位置依存性を測定するラスタースキャンを実施した。X 線ビームとしては、まず 3000 eV と 4000 eV を用いたが、低エネルギー側の方が透過率変動に敏感なことを考慮し、2700 eV での測定も行った。3456 eV でも測定を行った理由は 6 で詳しく述べるが、Bragg 散乱構造という不連続構造が 3460 eV 付近に見られることが期待されるからである。

以下に BL11B で得られたデータセットをまとめる。DCM に二つの結晶を用いたので、Si 結晶を用いた測定を表 5.2 に、InSb 結晶を用いた測定を表 5.3 にまとめる。

表 5.2: BL11B Si 結晶を用いた DCM で得られたデータセット

X 線照射箇所	エネルギー帯 [eV]	供試体	ステップ [eV]	dwell 時間 [s]	プロット色 <sup>a</sup>
Center	2060–2200	OFF	2	4	黒
		ON	2	14	
	2150–2400	OFF	2	2	黒
		ON	2	10	
	2350–2600	OFF	2	2	黒
		ON	2	10	
	2550–3000	OFF	2	2	黒
		ON	2	8	
	2950–3500	OFF	2	2	黒
		ON	2	6	
	3450–4000	OFF	2	2	黒
		ON	2	4	
Top	2060–2400	OFF	2	2	黒
		ON	2	10	
	2350–3000	OFF	2	2	黒
		ON	2	6	
	2950–4500	OFF	2	2	黒
		ON	2	4	
	2060–2400	OFF	2	2	黒
		ON	2	10	
	2350–3000	OFF	2	2	黒
		ON	2	6	
Bottom	2060–2400	OFF	2	2	黒
		ON	2	10	
	2350–3000	OFF	2	2	黒
		ON	2	6	
	2950–4500	OFF	2	2	黒
		ON	2	4	

<sup>a</sup> 図 5.14, 5.15, 5.16 の (e), (f) 段におけるプロットの色を表す。

表 5.3: BL11B InSb 結晶を用いた DCM で得られたデータセット

X 線照射箇所	エネルギー帯 [eV]	供試体 ON/OFF	ステップ	dwell 時間	プロット色 <sup>a</sup>
Center	1800–2100	OFF	5	10	シアン
		ON	5	20	
	2050–2400	OFF	5	10	シアン
		ON	5	20	
	2350–3050	OFF	5	10	シアン
		ON	5	20	
	3000–3400	OFF	5	2	シアン
		ON	5	10	
	3400–3500	OFF	2	2	シアン
		ON	2	10	

<sup>a</sup> 図 5.15 の (e), (f) 段におけるプロットの色を表す。

### 5.2.5 解析

BL11B では透過率のエネルギー依存性を測定するエネルギーキャンと、位置依存性を測定するラスターキャンを行った。以下ではエネルギーキャンとラスターキャン、それぞれの解析を行う。

#### エネルギーキャン

Be 窓の Top, Center, Bottom に X 線を照射した際のデータプロットをそれぞれ図 5.14, 5.15, 5.16 に示す。(a)-(f) までの構成は BL7C での図 5.5–5.7 と同様である。(f) のプロットから、3.4 keV 付近に大きな不連続構造があること、2.4 keV 以下で透過率が上昇を始めていることが確認できる。透過率が上昇する原因としてはいくつかの原因が考えられるが、本測定では原因の特定までは至らなかった。もしこれが実際の Be 窓の特性だとすると較正データベースに適切に組み込まなければ天体解析の際に誤って解釈をされる可能性が考えられる。そこで、この結果が実際の特性なのか検出装置由来の構造なのか切り離すために、独立な実験装置を用いて追加実験を行う必要がある。追加実験については 5.3 節で詳しく述べる。

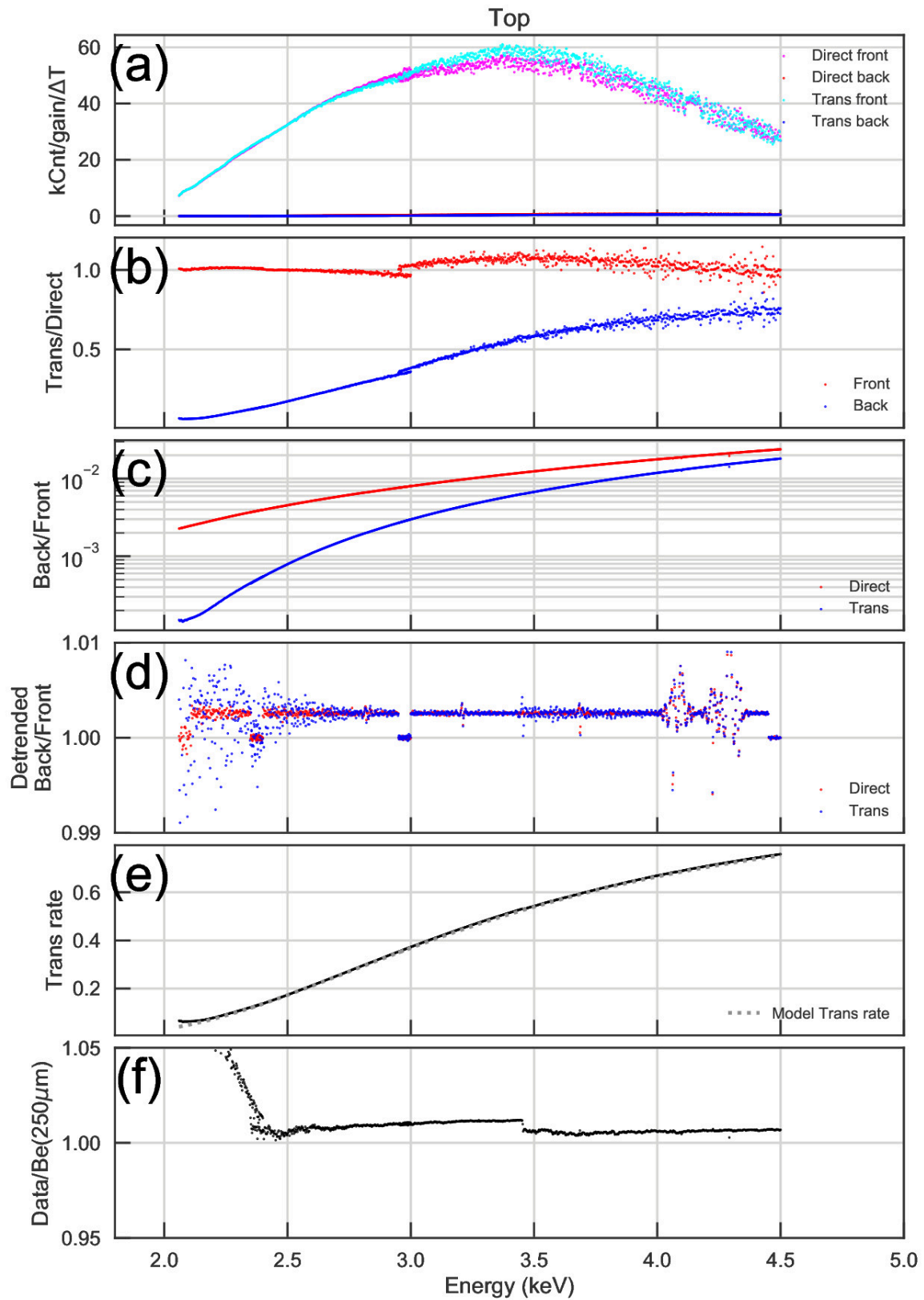


図 5.14: 1.8–5.0 keV 帯域での Be 窓上部の透過率カーブ。(f) パネルにおいて、3.4 keV 付近に顕著な不連続構造が見える。

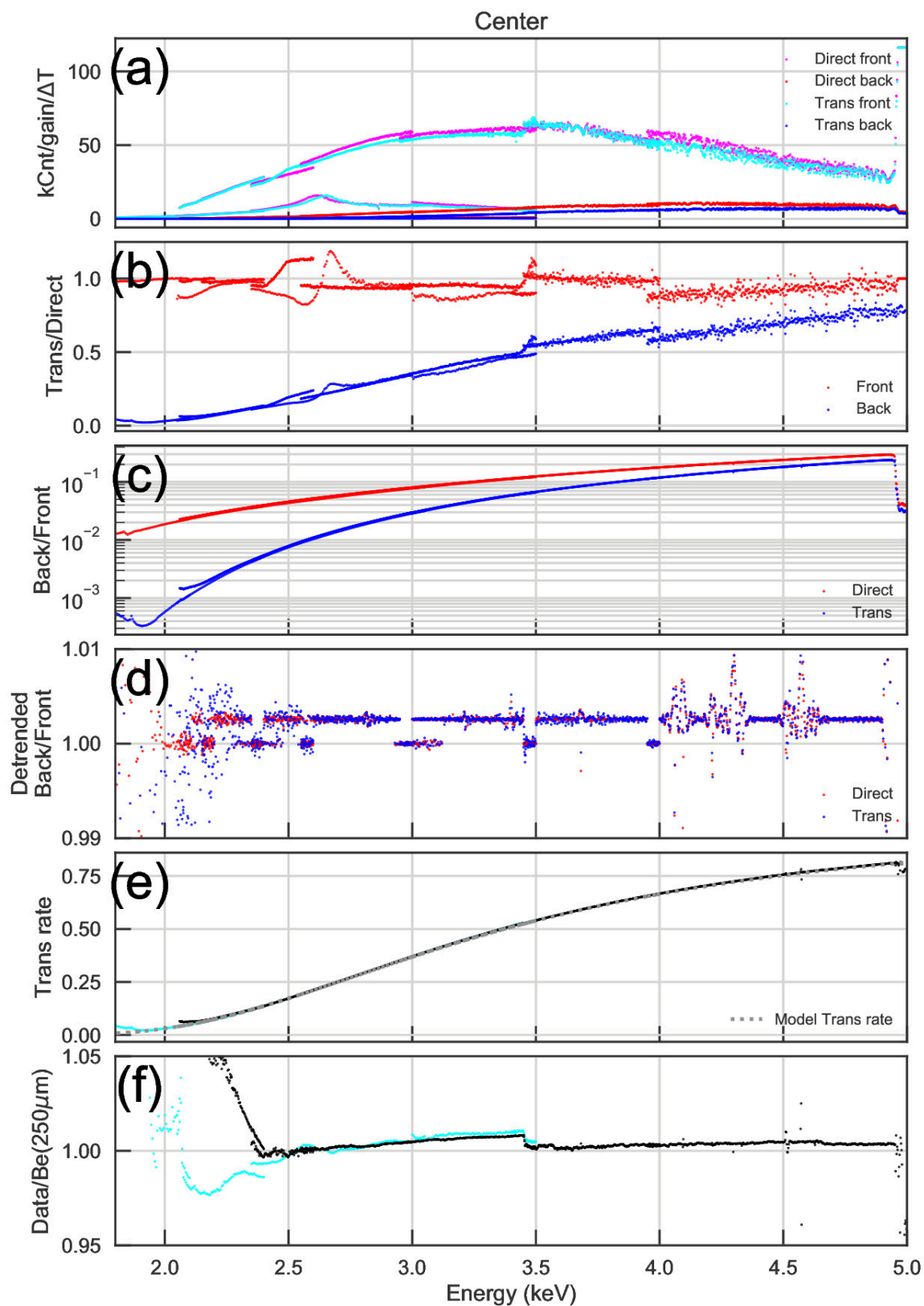


図 5.15: 1.8–5.0 keV 帯域での Be 窓中心の透過率カーブ。(f) で黒色は DCM に Si 結晶を用いた測定結果を、シアンは DCM に InSb 結晶を用いた測定結果を表す。2.4 keV 以下において異なる結果を示しており、このデータからはどちらが正しいのか読み取ることはできない。

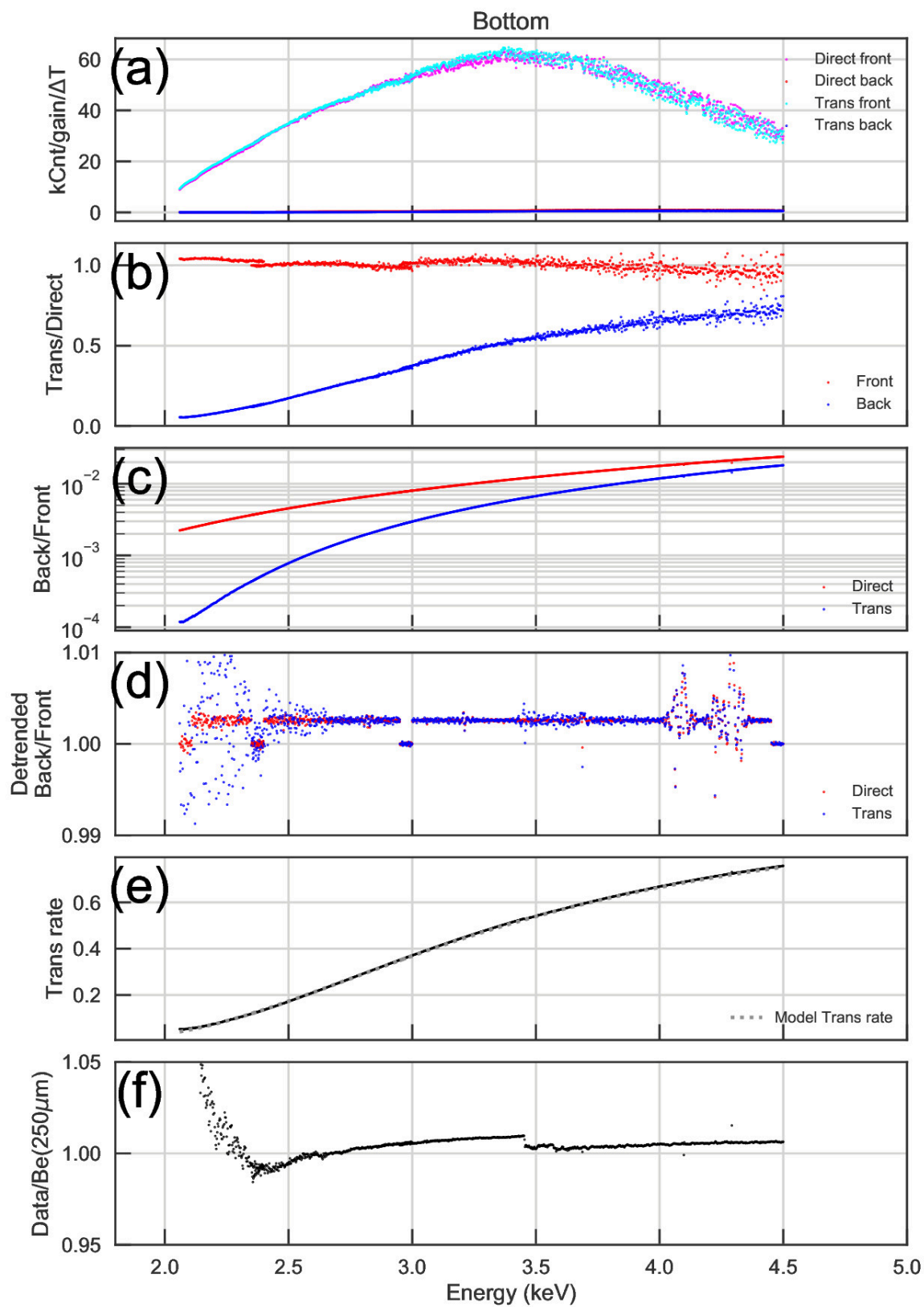


図 5.16: 1.8–5.0 keV 帯域での Be 窓下部の透過率カーブ

### ラスタースキャン

次に Be 窓の透過率位置依存性を調べるためのラスタースキャン結果の解析を行う。ラスタースキャン測定は図 5.12 の橙線で示した軌道を描いて直接光と透過光をそれぞれ交互に測定する。本測定の目的は 3.4 keV 以上の X 線でスキャンし、Be 窓全面での二次元透過率マップを描くことである。最初に、4000 eV の X 線を用いて測定を行った。ステージ移動制御ソフトの都合上、測定軌道を Be 窓の上半分と下半分に分け、さらにバックグラウンドを差し引くためシャッターを開けた状態と閉じた状態でスキャンを行った。つまり Be 窓全面の透過率を算出するには、1 つのエネルギーに対し計 4 回の測定結果が必要である。

測定結果を図 5.17 に示し、下部から順に説明する。以下のプロットは上述したように、全て上半分と下半分で別々に得られる。まず、(g), (h) は前置検出器と後置検出器で得られた生データを表す。紫色と茶色でプロットされたバックグラウンドデータは概ね 0 に張り付いている。(e), (f) はバックグラウンドを差し引き、さらに信号値を正の数で表すために符号を反転させた状態を表す。(c), (d) の橙線・青線は (e), (f) で得られた前置・後置検出器のデータの比を取った結果を表している。ここで点線のように見えるプロットはホルダーの斜め上部分の穴を通過した直接光の測定値である。また茶実線はステージの Y 座標値（鉛直方向）、紫実線は X 座標値（スキャン方向）を表している。時間経過とともに図 5.12 で描いた軌道に沿って移動していることがよくわかる。最後に、(c), (d) の直接光と透過光の比を取って (a), (b) に示している。

1 つのエネルギーのみでは再現性に欠けるので、次に 3456 eV の X 線を用いてスキャン測定を行った（図 5.18）。このエネルギーを用いたのは、要求である 3.4 keV 以上を満たすこと、6.2 節で詳述する Bragg 散乱構造が 3460 eV 付近に見えるためである。さらに、透過率の絶対値が低いほうが変化に敏感であるということから、3000 eV と 2700 eV でも測定を行った。その結果が図 5.19, 5.20 である。



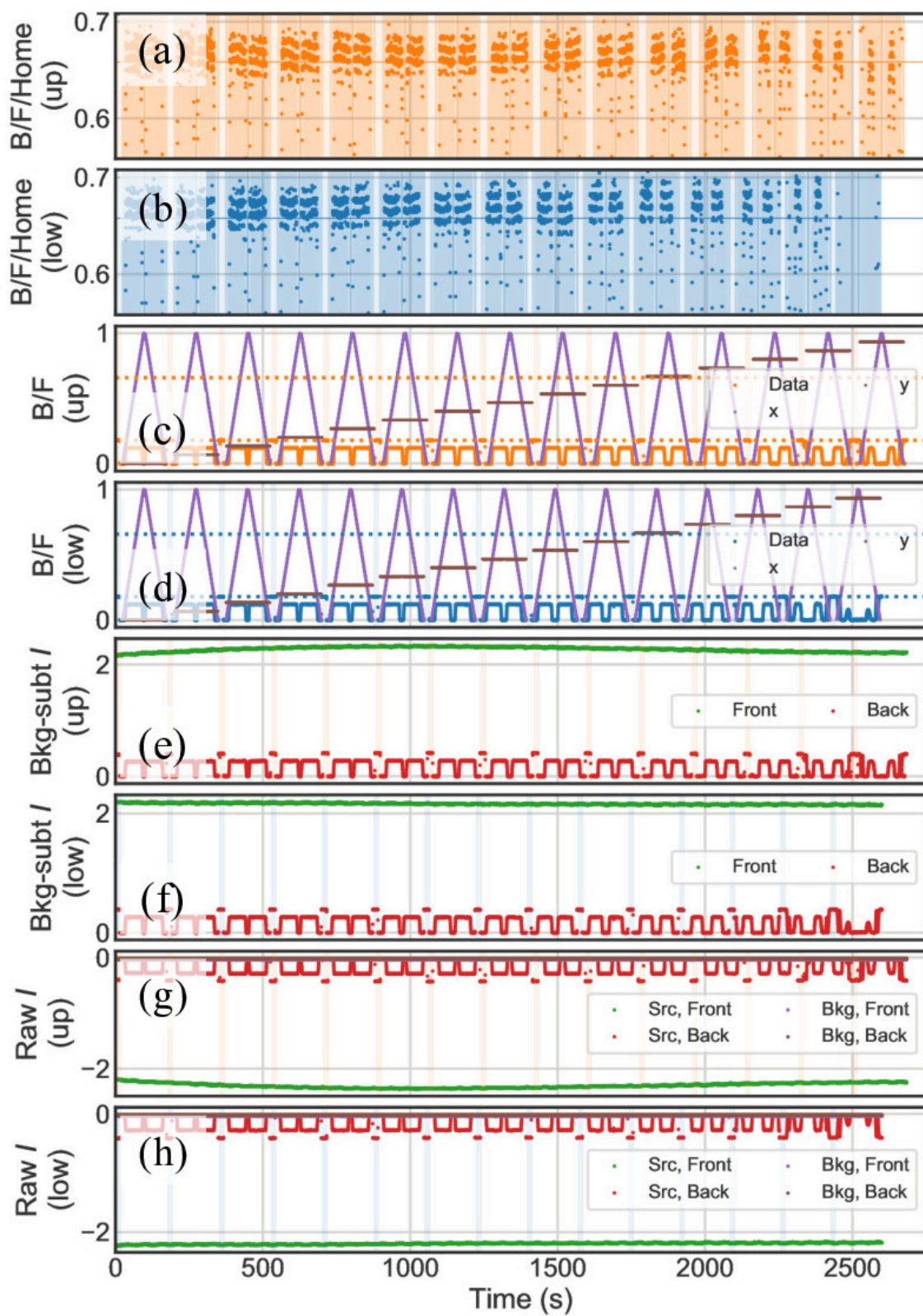


図 5.17: 4000 eV でのスキャン測定ライトカーブ。横軸は時間、縦軸は (a), (b) では透過率を (c)–(f) ではピコアンメータの出力値を表す。

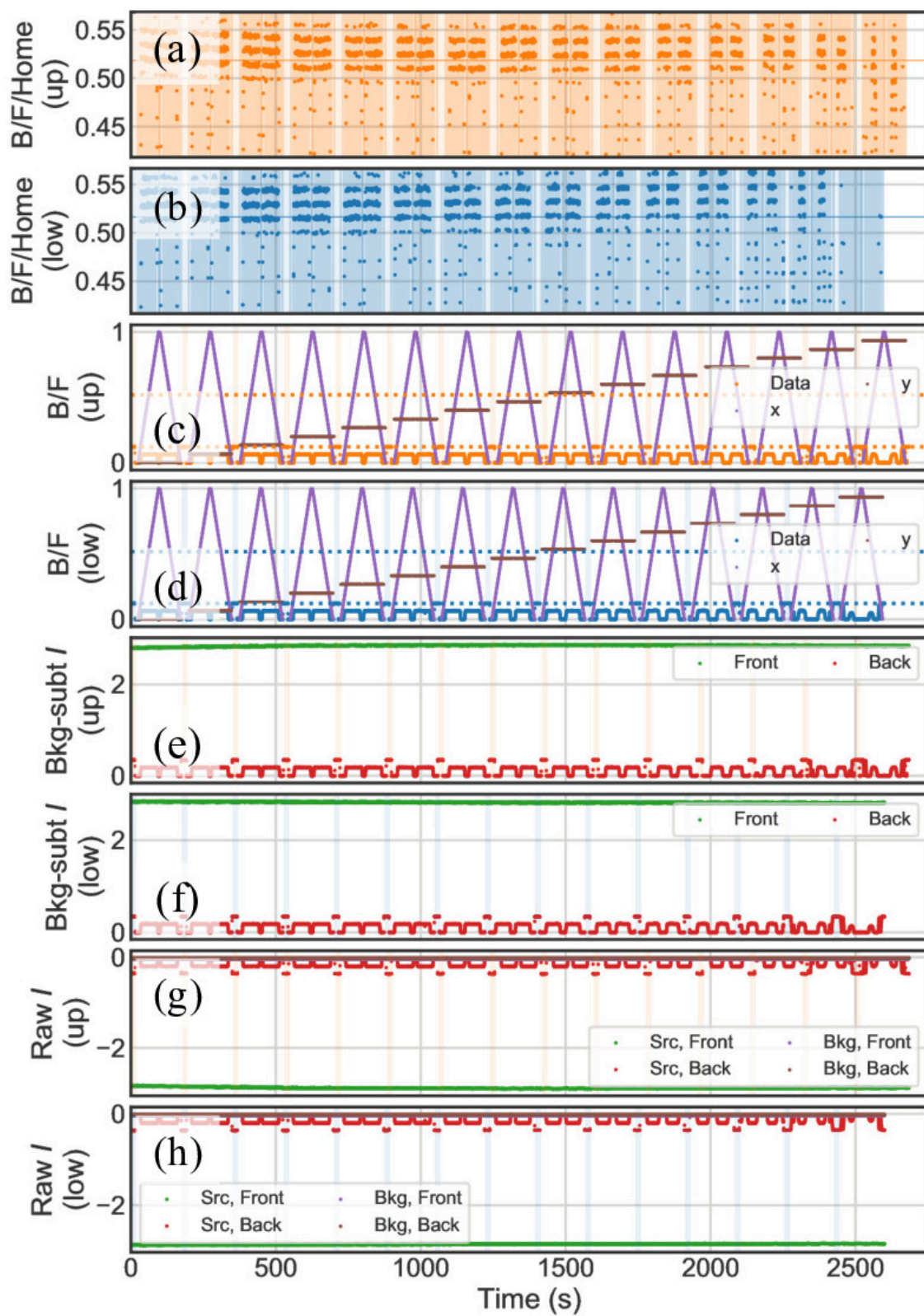


図 5.18: 3456 eV でのスキャン測定ライトカーブ



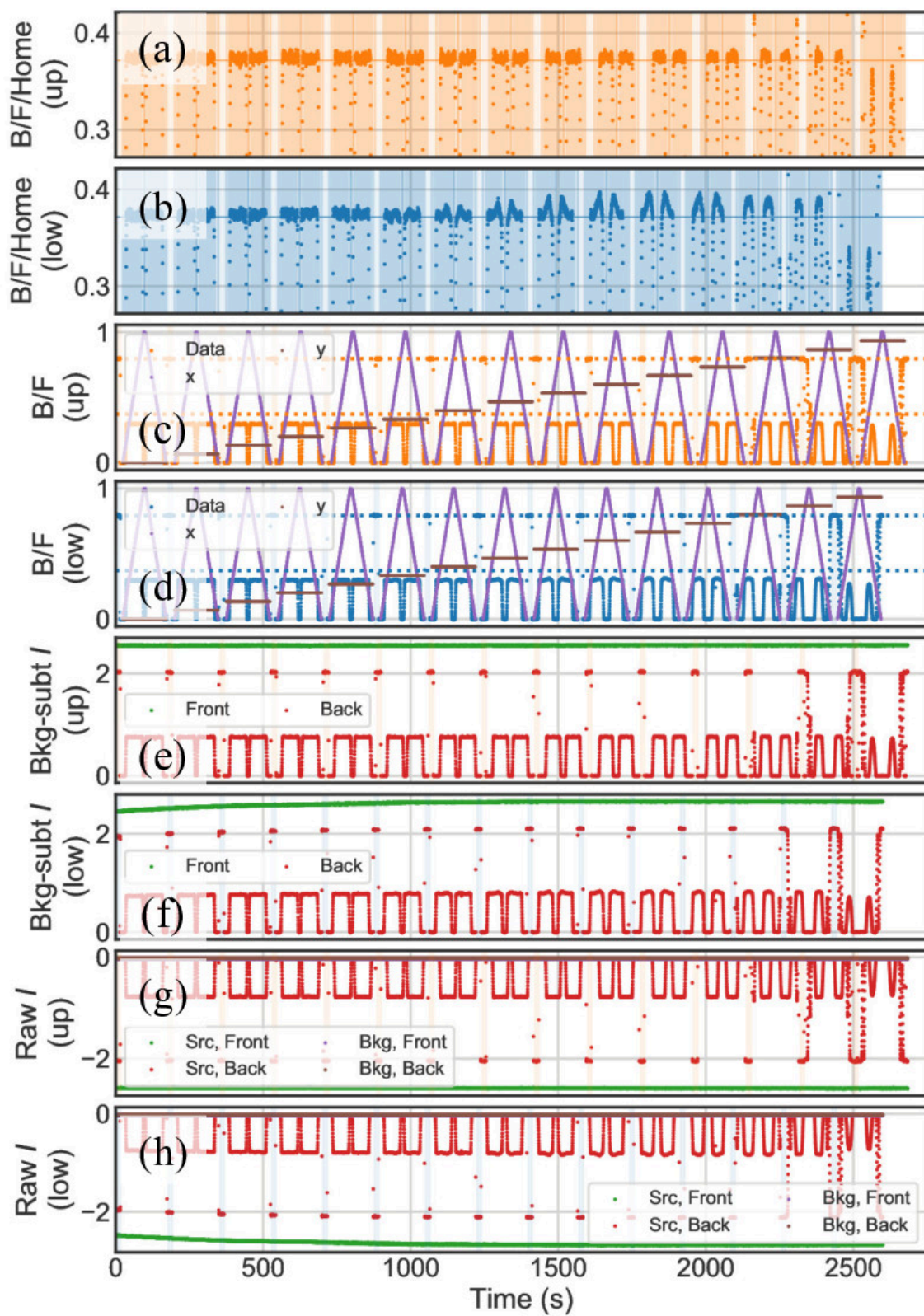


図 5.19: 3000 eV でのスキャン測定ライトカーブ

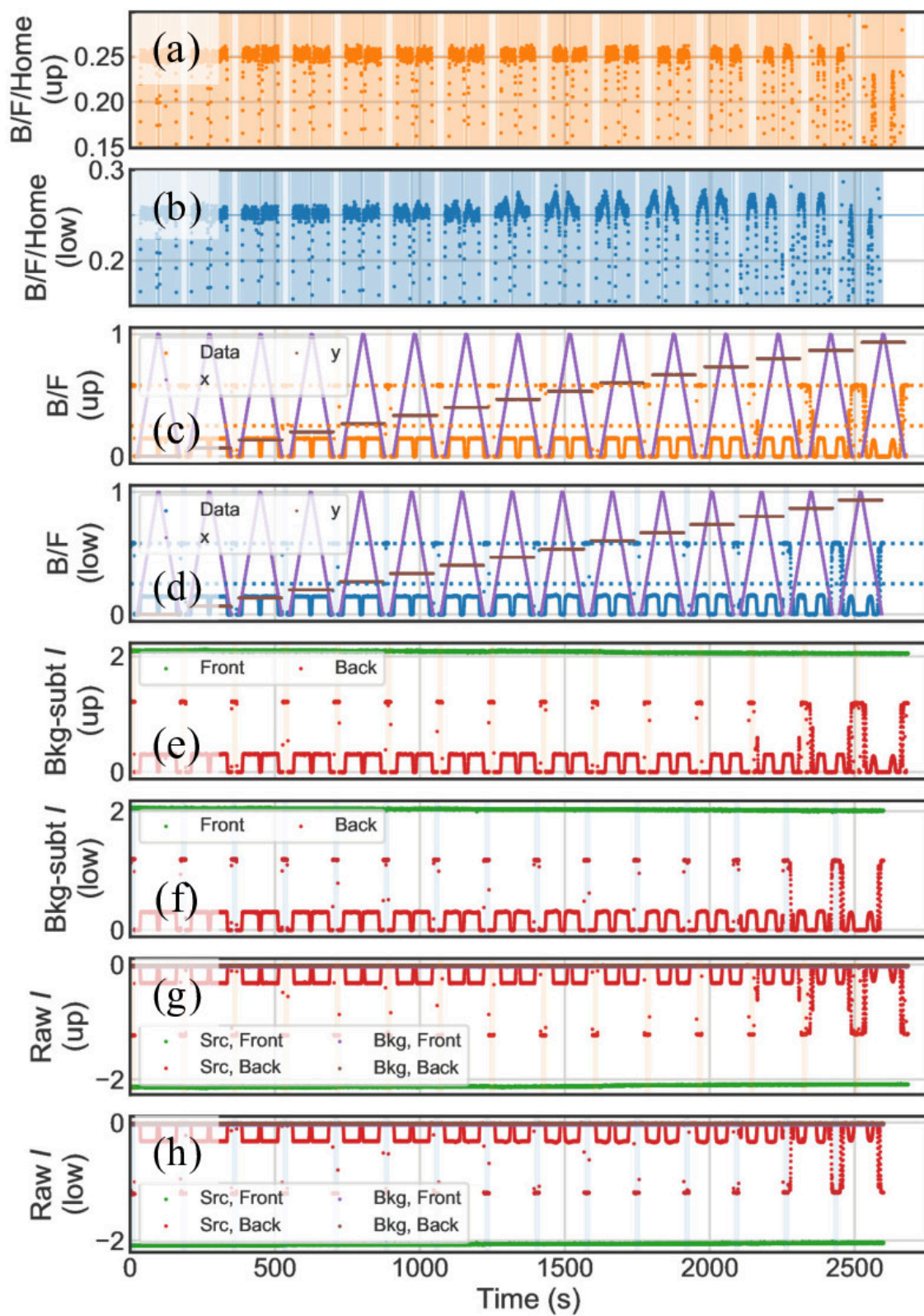


図 5.20: 2700 eV でのスキャン測定ライトカーブ



図 5.17–5.20 の (a), (b) に示した透過率プロットの横軸は時間であった。ステージ移動スピード等は既知なので、時間軸から XY 座標値への変換は可能である。そこで、横軸に X 軸、縦軸に Y 軸をとり、それぞれの位置での透過率をカラーマップで示した図が図 5.21 である。どのプロットを見ても Be 窓の左下の方が透過率が高くなっていることがわかる。Be の圧延の際に左下部分が薄くなってしまったことが考えられる。実際に衛星を打ち上げて観測を行う際、望遠鏡で集光される X 線はエネルギーによって反射角度が異なる。したがって本 Be 窓のように、集光途中の光学要素に空間非一様性があると、さらなるエネルギー依存性が発生する。ゆえにこの非一様性は較正データベースに取り込まなくてはならない。

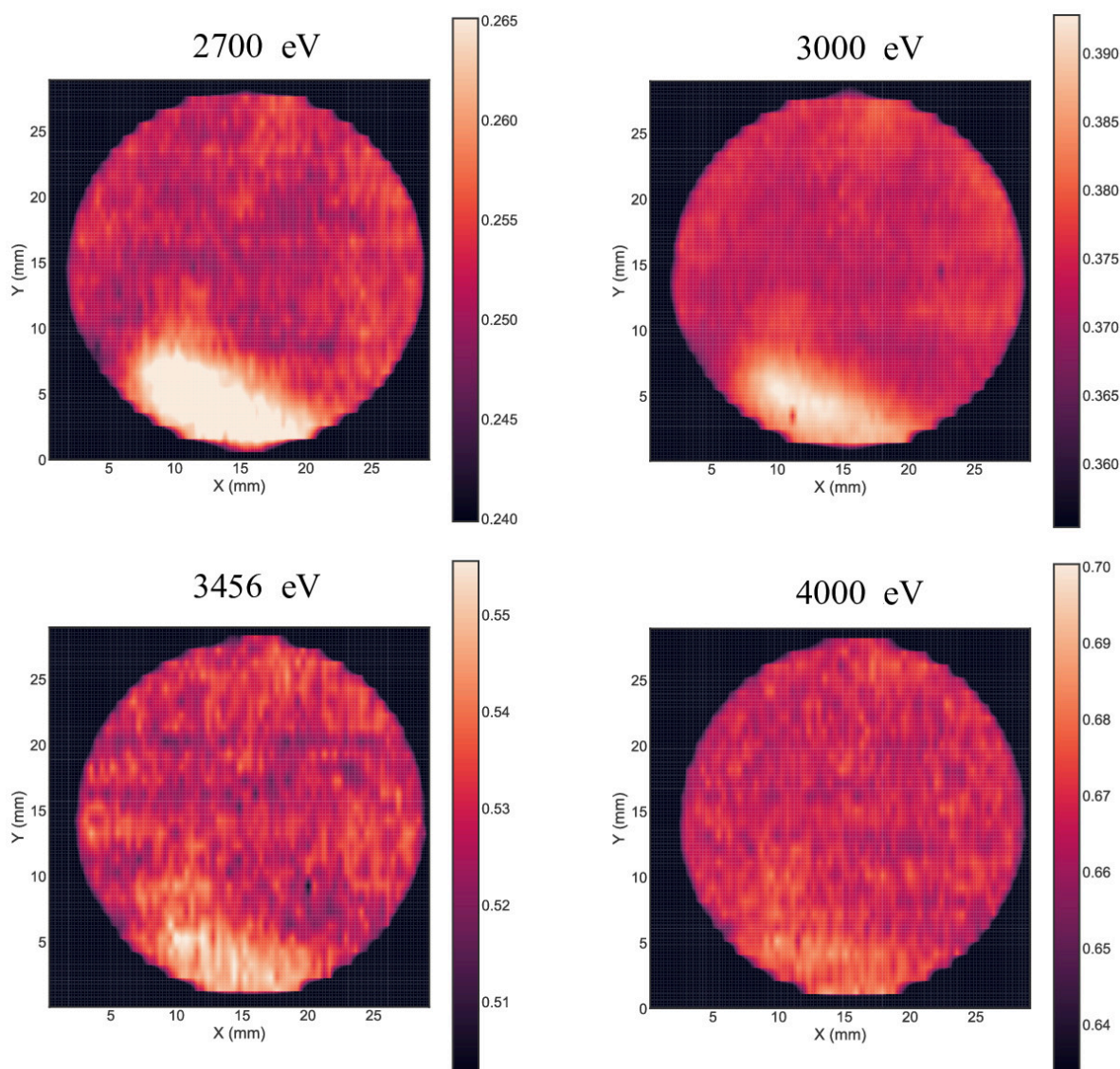


図 5.21: 透過率位置依存性の測定結果マッピング。X 線ビームには 2700, 3000, 3456, 4000 eV の 4 種類を用いた。図右横のカラーバーはそれぞれの位置での透過率を色で示すものである。どのプロットでも Be 窓の左下の方が透過率が高くなっていることがわかる。透過率の変動に敏感な低エネルギー側の方が顕著に透過率が上がっていることが見て取れる。

## 5.3 HiSOR BL11 での透過率測定

日時：2019 年 11 月 26 日～27 日

場所：広島大学放射光科学研究センター HiSOR BL11<sup>\*4</sup>

供試体：Resolve Be 窓 校正用モデル

課題番号：19BU007

### 5.3.1 目的

5.2 節で得られた結果において、2.5 keV 以下の透過率測定の精度が悪く、モデル曲線より透過率が高く出てしまう構造が見られた。我々はこの構造は Be 窓本来の構造でなく、測定手法由来の構造ではないかと疑った。考えられる一つの要因として、高次光の混入が挙げられる。BL7C では集光鏡で二回全反射させることによって高次光除去ができたが、BL11B には高次光除去機構が備わっていない。そのため想定 of 3 倍のエネルギーの X 線（三次光）が混入してしまい、その結果、高い透過率が得られてしまったことが考えられる。5 keV 以上の X 線に対しては前置ニッケル鏡の反射率が低いため、BL11B の測定可能な最高エネルギーは 5.0 keV と設定されているが、それを超えるエネルギーの X 線は微量ながら存在する。仮に 7 keV の X 線が存在すると、その 1/3 である 2.3 keV 以下では高次光の影響が顕著になるはずである。よって、1.8–2.5 keV 帯域 X 線の高次光混入を調べる実験を行う必要がある。

高次光除去には主に 2 つの方法が用いられる<sup>33</sup>。1 つ目は BL7C で実施したようなミラーの反射を用いた方法である。ミラーには反射可能な X 線エネルギーの上限値である全反射臨界エネルギー  $E_c$  が存在する。 $E_c$  は物質密度  $\rho$ 、傾斜角  $\theta_i$  を用いて

$$E_c = 20\rho^{0.5}/\theta_i \quad (5.2)$$

と表される。つまり、結晶材質と傾斜角をうまく調節し、得たい X 線エネルギーとその高次光エネルギーとの間にミラーの全反射臨界角が設定されていると、高次光を除去できるという仕組みである。

2 つ目は二結晶分光器のそれぞれの結晶のなす角度を少しずらす detuning と呼ばれる手法である。detuning 法は目的の X 線と高次光では反射の角度幅が異なることを利用する。例えば、温度 77K のシリコン結晶の 111 反射で 1 Å の X 線を単色化する場合、全反射幅は 4.34" である。それに対し、三次光の全反射幅は 0.28" となる。つまり、三次光の方が結晶の角度ずれに敏感である。結果的に、結晶の角度を 0.5" ずらした場合、高次光の強度は最大強度の 6% 弱まで落ちるが、目的の X 線強度は 96% 維持される<sup>33;34</sup>。2000 eV の X 線に Bragg 角を設定した際の一次光、三次光、四次光の角度幅を図 5.22 に示す。一次光に対して三次光、四次光の角度幅が十分に狭いことがわかる。

<sup>\*4</sup> HiSOR BL-11 マニュアル Ver. 3.0.1 を参照した。

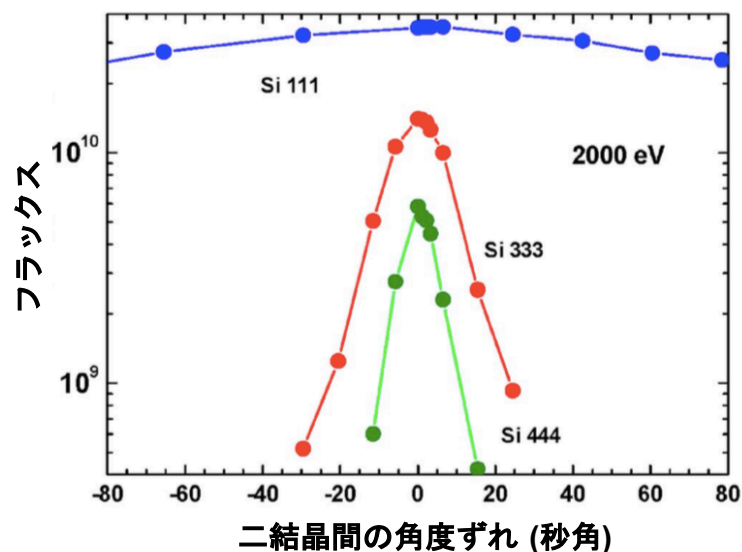


図 5.22: 一次光と高次光それぞれのフラックスの二結晶間の角度ずれ依存性<sup>34</sup>。2000 eV の一次光 (Si111) に対し、高次光 (Si333, Si444) の許される角度幅が十分小さいことがわかる。ここで、Si222 の結晶面での反射は消滅則により現れない (付録参照)。

我々は上記の目的を踏まえ、以下の条件に当てはまる国内施設の中から最適な施設を検討した。

- 1.8–3.0 keV 帯で 2 eV ピッチでの X 線が得られる
- 2019 年中に実験ができる
- 高次光評価システムが搭載されている
- 備え付けの設備で実験ができる

その結果、広島大学放射光科学センターの緊急課題枠として申請することを決定した。

### 5.3.2 装置

広島大学放射光科学研究センターは、光源加速器 HiSOR を中核とする放射光の共同利用・共同研究拠点である。1996 年に稼働した HiSOR は 150 MeV の入射用マイクロトロンと 700 MeV の小型電子シンクロトロン、2 台のアンジュレータから構成される。700 MeV レーストラック型小型シンクロトロンリングは周長 21.95m、蓄積電子エネルギーが 700 MeV であり、サイズが  $2\sigma_x=3$  mm,  $2\sigma_y=0.3$  mm (FWHM:  $2.35\sigma$ ) の X 線ビームを得ることができる。図 5.23 に示したのは HiSOR の各ビームラインで取得できる X 線スペクトルである<sup>35</sup>。横軸が X 線エネルギー、縦軸が単位時間・単位面積・単位立体角から放射される特定のエネルギー帯での光束量と定義される「輝度」を表す。本測定の目的は 1.8–4.0 keV の単色 X 線を得ることなので、BL11 を用いた。

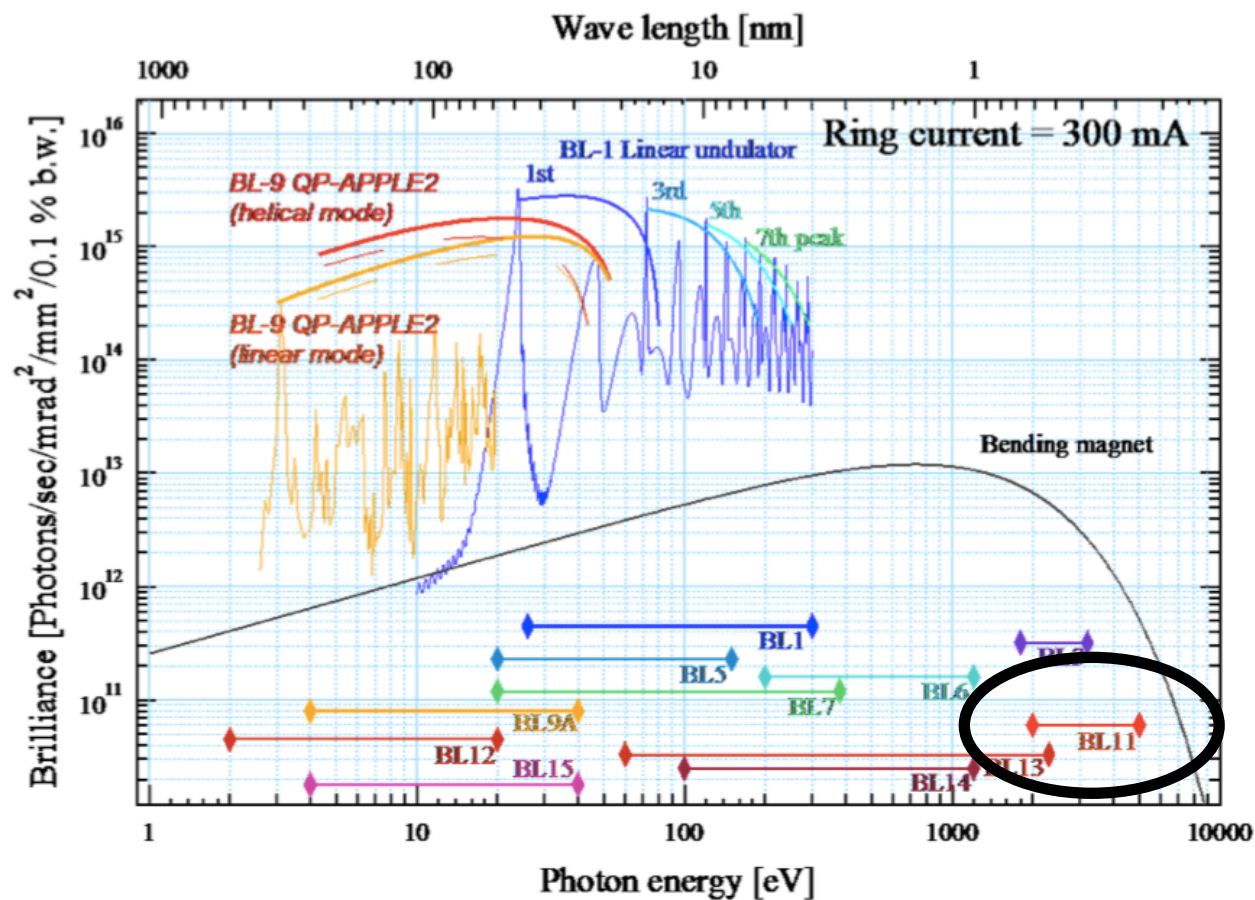


図 5.23: HiSOR 各ビームラインのエネルギースペクトル<sup>35</sup>。縦軸は単位時間・単位面積・単位立体角から放射されるあるエネルギー帯での光束量と定義される「輝度」を表す。

HiSOR BL11 は放射光源からの X 線と二結晶分光器を組み合わせたビームラインであり、2.1–5.0 keV の単色 X 線を得ることが可能である。図 5.24 に BL11 の全体像を示す。図 5.24 の右端にあたるビームライン終端部分については拡大して図 5.25、図 5.26 に示す。また、このビームラインを構成する要素について以下に順に説明する。

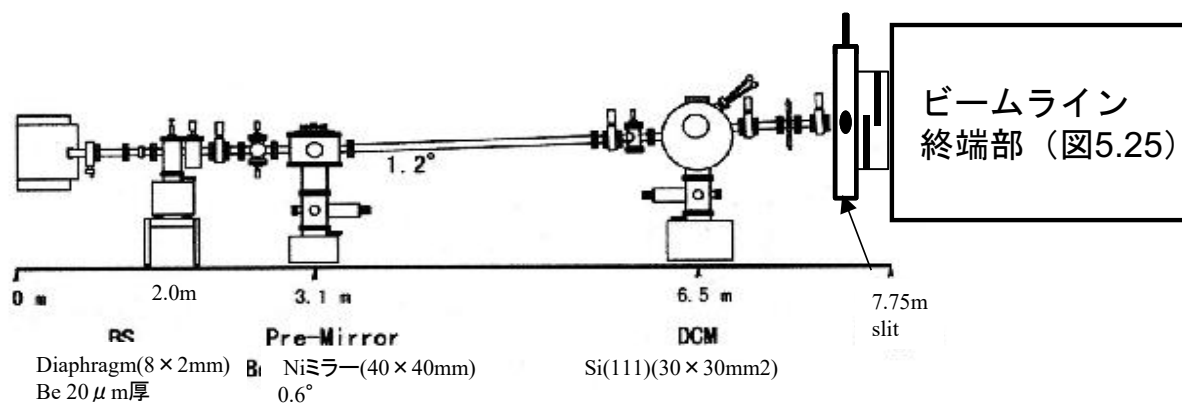


図 5.24: HiSOR BL11 全体像<sup>\*5</sup>



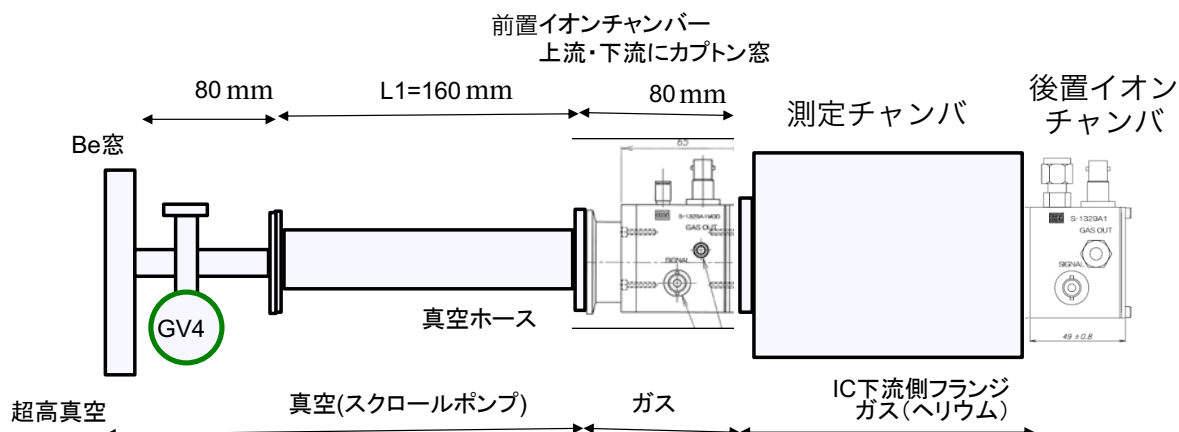


図 5.25: HiSOR BL11 終端部\*6

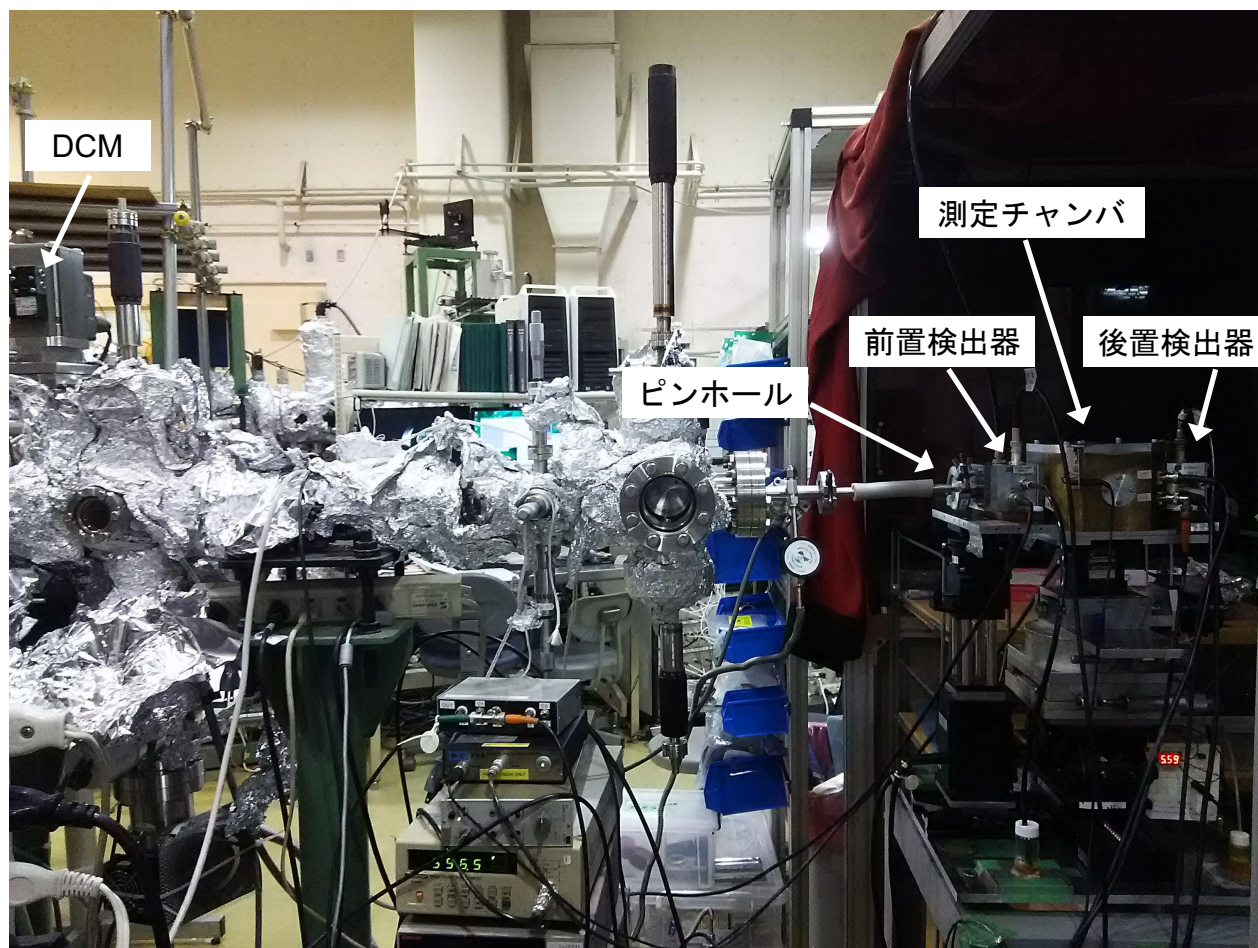


図 5.26: HiSOR BL11 終端部周辺の写真

\*5 ビームライン備え付けの HiSOR BL-11 マニュアル Ver. 3.0.1 を参照

\*6 ビームライン備え付けの HiSOR BL-11 マニュアル Ver. 3.0.1 を参照

### 二結晶分光器

シンクロトロンリングから放射された光はトロイダルミラーで 2.0 mm(H)×1.0 mm(V) ほどのビームサイズに集光される。その後 Si(111) 結晶を用いた二結晶分光器 (DCM) で単色化される。DCM の可動領域は  $\theta = 20 - 7^\circ$  であり、これはエネルギー換算すると 2.1–5.9 keV に対応する。二結晶の平行性の制御のため、パーレー社のインチワーム式ピエゾ素子を搭載している。このピエゾ素子を用いて二結晶間の角度をずらす (detuning) ことで、先ほど述べた原理より、高次光を除去し単色光を得ることが可能になる。

### 検出器

本実験では KEK PF での測定と同様に前置・後置検出器で供試体あり・なし時のビーム強度を電流値として読み取り、式 5.1 を用いて透過率算出を行った。前置・後置検出器は共にイオンチャンバである。前置イオンチャンバ (応用光研 S-1329) の上流・下流には 7.5  $\mu\text{m}$  厚のカプトン窓がついており、内部のガスと上流・下流との仕切り役を担っている。ここで前置イオンチャンバ内のガスは  $\text{N}_2(40\%)+\text{He}(60\%)$  の混合ガスを使用している。また、上流側にはピンホールが隣接しており、このピンホールによって L:8.0 mm(H)×0.5 mm(V)、M:4.0 mm(H)×0.5 mm(V)、S:直径 0.5 mm の 3 つのビームサイズを指定することが可能である。後置イオンチャンバ (応用光研 S-1329A1) のカプトン窓は上流側が 7.5  $\mu\text{m}$  厚、下流側が約 50  $\mu\text{m}$  である。後置チャンバ内のガスは大気を使用している。

### 測定チャンバ

本測定は内寸は直径 120 mm の測定チャンバ内に供試体を設置し、He 置換して大気を外に逃がすことで大気吸収の影響を極力抑えつつ行う。PF の BL11B とは異なり、真空引きをする必要がないのでスピーディに供試体の出し入れが可能である。また、チャンバは上下に移動可能なステージ上に載っている。チャンバ内に約 1 mm×10 mm ほどのスリットの入った鉛板を設置し、移動させることでビームプロファイルを取得し、アラインメントすることが可能である。

## 5.3.3 セットアップ

### ビームサイズ

本測定では、前置イオンチャンバ隣接のピンホールは M サイズ (4.0 mm(H)×0.5 mm(V)) を用いた。しかし、実際にはトロイダルミラーにより 2.0 mm(H)×1.0 mm(V) ほどに集光されているので、供試体に照射されるビームサイズはおよそ 2.0 mm(H)×0.5 mm(V) ほどである。

### 治具

本測定に際し、供試体をチャンバ内に保持するための治具をビームライン担当者である早川教授に作成していただいた (図 5.27)。チャンバ中心より 20 mm ほど上流寄りに供試体が設置されるようになっており、供試体から後置イオンチャンバのカプトン窓までは 90 mm 離れている。

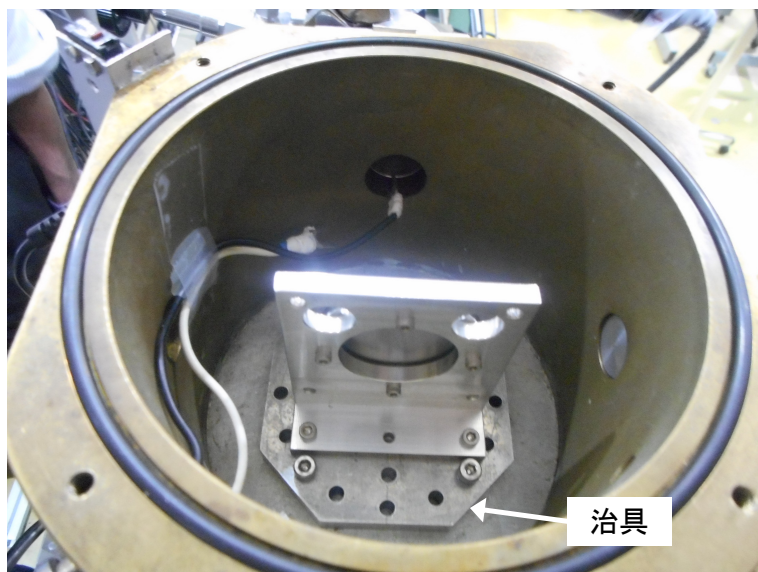


図 5.27: 供試体をチャンバ内に保持するための治具

#### 高次光除去

本ビームラインでは二結晶の平行状態から第二結晶の角度をずらすことにより高次光除去を達成する **detuning** を実施することが可能である。具体的には、第二結晶をピエゾ素子を用いて傾けていき、前置検出器の出力電流値  $I_0$  が 8 割ほどの強度になる角度にて測定を行った。この際に、図 5.22 より、この角度で高次光を十分落とせることを確認した。

#### 5.3.4 測定と結果

表 B.7 (付録) に HiSOR BL11 での測定実験のログを記す。すでに空間依存性についてはわかっているため、HiSOR BL11 では Be 中心のみ測定を行った。まず、**full-tune** 時 (二つの結晶が完全に平行) の入射光強度の 8 割ほどに入射光が弱まるまで DCM の第二結晶を傾け、**detuning** を実施した。**detuning** 状態のまま 2100–2540 eV の測定を行い、これ以上のエネルギーの X 線では統計を重視して **full-tune** に戻してから測定を行った。2.1–4.0 keV の測定が一通り終わった後、高次光寄与の確認をするため、**full-tune** のまま再度 2.1–2.3 keV の高次光寄与の大きいとされる領域の測定を行った。その際、低エネルギー側でビーム強度が透過率応答が時間変動していることに気づいた。この要因としてチャンバ内残存大気の影響を疑い、2140 eV での定点観測 (固定エネルギー X 線での測定) を実施した。また、大気吸収が比較的小さい 2400 eV での定点観測も実施し、チャンバ内の大気による透過率の影響が存在するか検証した。

得られたデータセットを表 5.4 に記す。最後の二つは定点観測データを示す。

表 5.4: HiSOR BL11 データセット

照射場所	エネルギー帯 [eV]	供試体	ステップ [eV]	dwell 時間 [s]	プロット色 <sup>a</sup>	detune <sup>b</sup>
Center	2100–2540	OFF	2	2	黒	ON
		ON	2	10	黒	ON
	2100–2300	OFF	2	5	青	OFF
		OFF	2	5	マゼンタ	OFF
		ON	2	10	青、マゼンタ	OFF
	2450–4000	OFF	2	1	赤	OFF
		ON	2	1	赤	OFF
定点観測	2140	OFF	0	10 <sup>c</sup>	N/A	N/A
	2400	OFF	0	10	N/A	N/A

<sup>a</sup> 図 5.30 の (e), (f) 段におけるプロットの色を表す。

<sup>b</sup> ON は detune 状態を、OFF は full-tune 状態を表す。

<sup>c</sup> 10 [sec/point]

### 5.3.5 解析

まず、BL11B での不自然な透過率上昇 (e.g. 図 5.15) が高次光の影響かどうか確かめる一つの手法として、detuning により透過率上昇を抑えられるかどうか検証する。図 5.28 に detuning 時と full-tune 時での 2.1–2.4 keV 帯の透過率カーブの比較を示す。上のプロットが透過率カーブ、下のプロットが 250  $\mu\text{m}$  厚を仮定した Be 透過率モデルとの比を取った結果である。

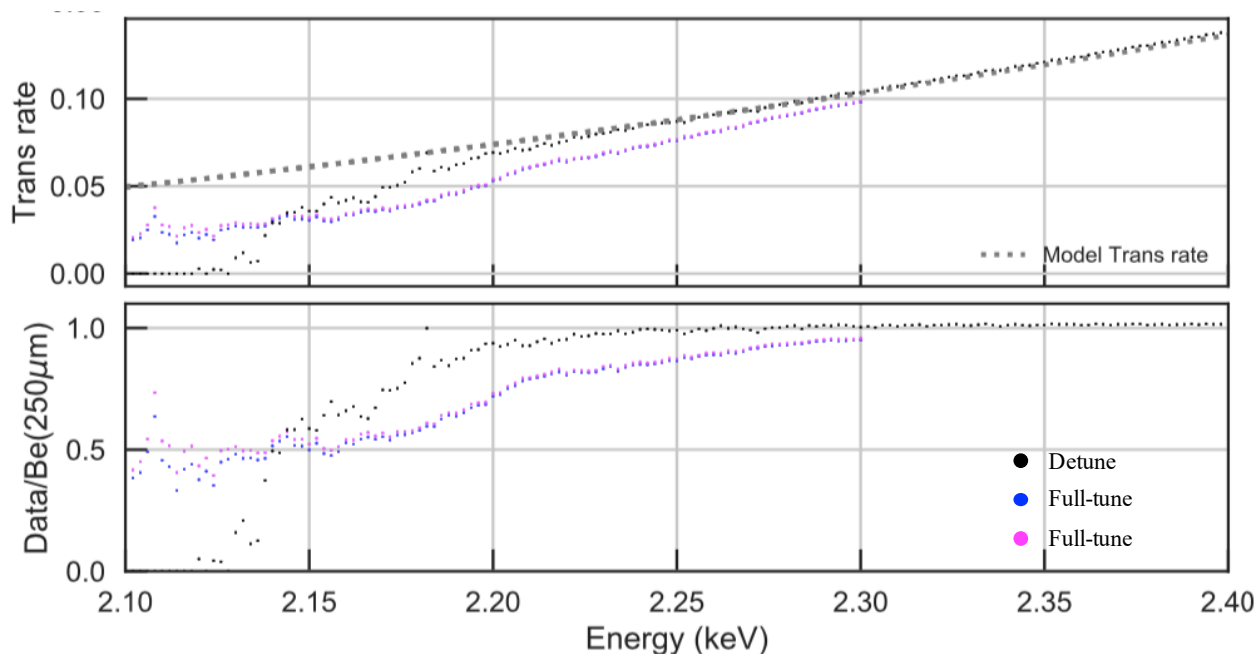


図 5.28: detuning 時と full-tune 時での 2.1–2.4 keV 帯の透過率カーブ比較。黒点が detune 時の透過率カーブを、青とマゼンタの点が full-tune 時の透過率カーブを示す。



図 5.28 の 2.30 keV 以下において、full-tune、detuning 時のどちらも、モデルカーブに対して透過率が下がっている。この差異の一つの要因として、チャンバ内残存大気の影響が考えられる。そこで、大気吸収の時間変動を確認するため、2140 eV にて 2500 秒間、2400 eV にて 890 秒間の定点観測を行った。図 5.29 に 2140 eV と 2400 eV の X 線を用いた定点観測結果のプロットを示す。横軸が時間を表し、縦軸が透過光と入射光の強度比を、その最大値で規格化したものを表している。2400 eV のプロットが 1% 程度で安定しているのに対し、2140 eV のプロットは 40 分で 30% も変動しているのが確認できる。この理由として、ヘリウム置換していたチャンバ内に残存大気や漏れ入った大気が少量あり、それが低エネルギー側 (2140 eV) でより顕著な透過率変動を引き起こしているということが考えられる。また、同じ条件で繰り返し測定してみたところ、異なった結果が得られたので、大気吸収の量はチャンバの開け閉めや時間経過に応じて、変動することも示唆される。detuning 状態での測定は 11/26 13 時から 17 時に、full-tune での測定は翌日 11/27 の 10 時から 12 時にかけてと、日にちをまたいで行われているので、数 % 程度の変動は十分考えられる。

しかし、大気組成を窒素 78.0%、酸素 21.0%、アルゴン 0.9% として透過率を計算してみたところ、残存大気だけではこのような急峻なエネルギー依存性を説明することはできないとわかった。明確な原因は不明だが、2.3 keV 以下のエネルギー帯には測定セットアップ由来の透過率低下が存在することが考えられる。どの測定でも測定セットアップ由来の透過率低下が一樣に起こると仮定すると、2.2–2.3 keV 付近で detune 時と full-tune 時の 2% ほど透過率が異なる理由を測定セットアップだけで説明することはできない。我々は 2.2–2.3 keV 付近での透過率の違いは、測定ごとに残存大気量が異なるためではないかと考えている。

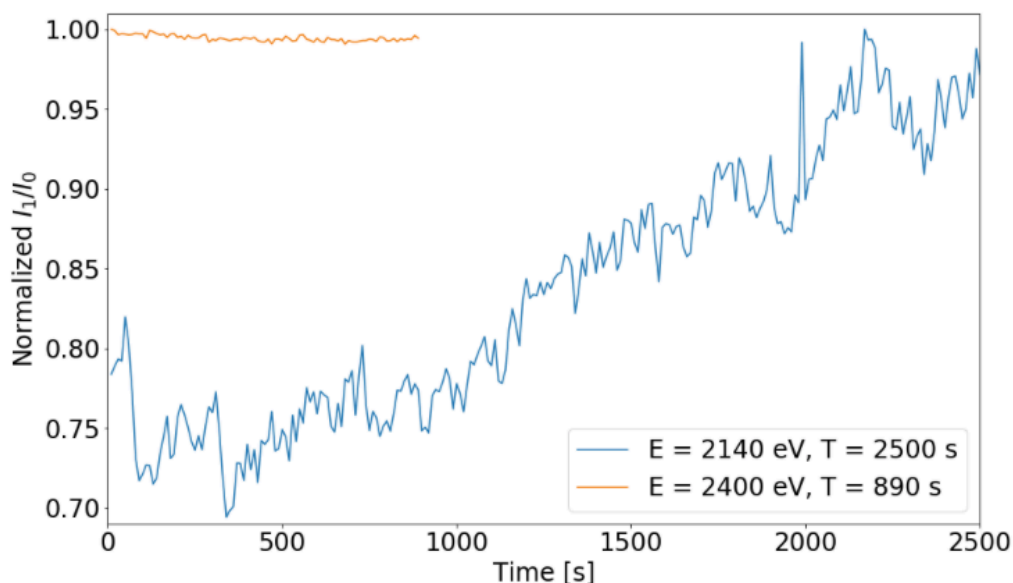


図 5.29: 2140 eV と 2400 eV の X 線を用いた定点観測結果。横軸が時間を、縦軸が最大値で規格化した透過光と入射光の強度比を表す。

測定セットアップ由来の透過率低下と残存大気吸収の時間変動による透過率の系統誤差を考慮すると、2.15–2.3 keV の detuning, full-tune それぞれの透過率カーブの説明はつく。それより低いエネルギー帯 (2.10–2.15 keV) において、detune 時の透過率カーブ (図 5.28 黒線) はエネルギーが下がるにつれ、指数関数的に透過率低下している。一方、full-tune 時の透過率カーブ (図 5.28 青線、マゼンタ線) は透過率低下が緩やかになっている。この部分が高次光混入による透過率上昇を示唆しており、高エネルギーの三次光が紛れ込んだことにより透過率が上昇したと考えられる。

2.1–4.0 keV での透過率カーブを図 5.30 に示す。(a)–(f) までの構成は BL7C, BL11B の時と同様である。(f) において、2.5–2.8 keV での赤色のプロットは光子統計が悪いため、ばらつきが多く見られるがこの付近でのデータは BL11B のより統計誤差の小さい結果があるので問題ない。本測定は統計誤差の大きさから、直接的に透過率モデル作成に用いることはない。しかし、本実験により、低エネルギーバンドでの透過率測定の際に高次光が混入しうることが明らかになった。おそらく同様のことが KEK BL11B の透過率測定でも起こっており、図 5.14, 5.15, 5.16 に見られる低エネルギーでの透過率上昇は、高次光によるものと推測される。

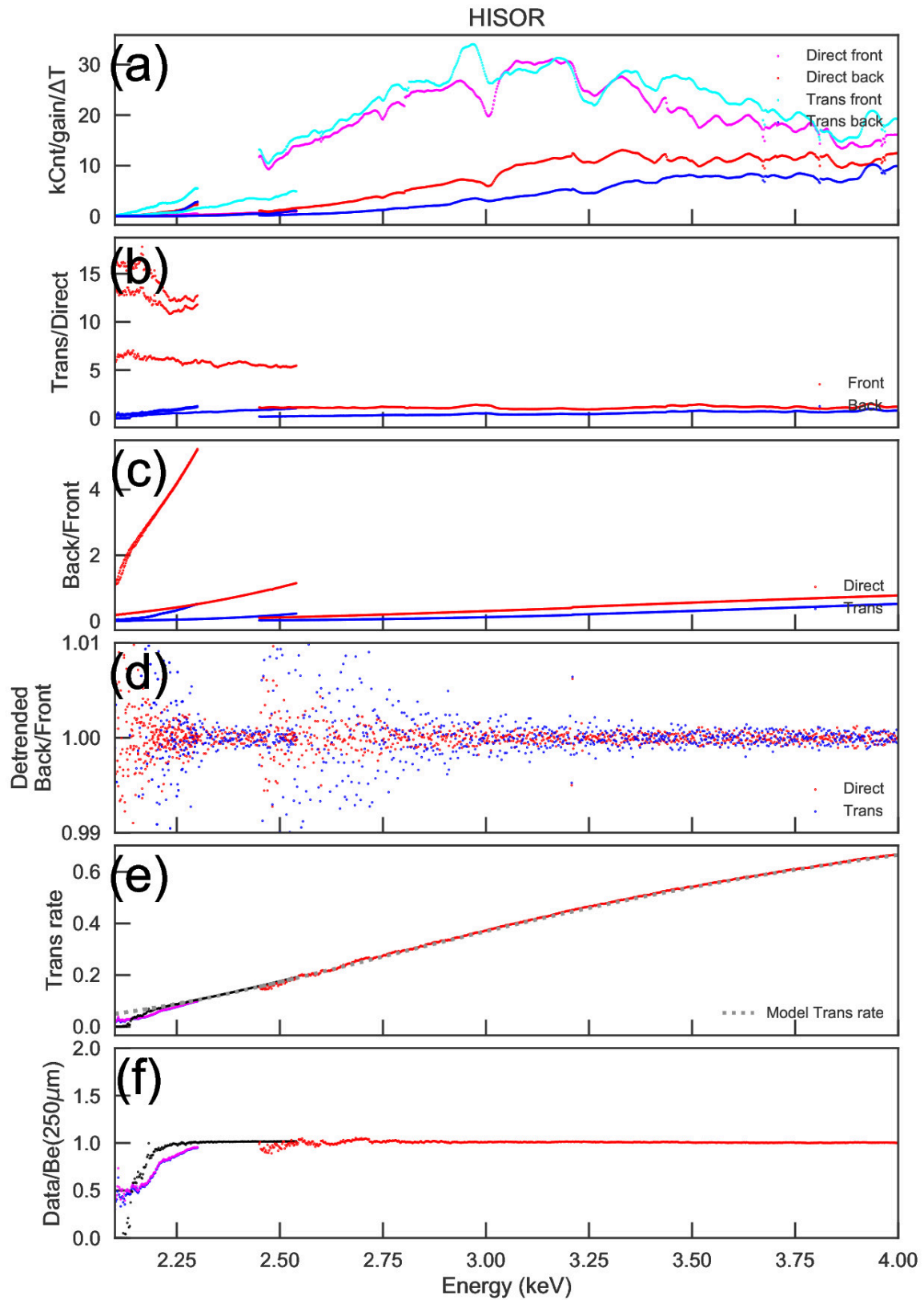


図 5.30: 2.1–4.0 keV 帯域での Be 窓中心の透過率カーブ。(f) において 2.1 keV 付近で full-tune での透過率（青、マゼンタ）が上昇を始めており、これを高次光混入の影響と考えている。2.3 keV 以下でモデルカーブに対して透過率が低く出ているのはチャンバ内の残存大気と測定セットアップの影響とみられる。

## 5.4 首都大学東京での X 線回折測定

日時：2019 年 12 月 23 日

場所：首都大学東京 日野キャンパス 4 号館

供試体：Resolve Be 窓 校正用モデル

### 5.4.1 目的

2 章で述べたように、SXS Be 窓の測定<sup>18,19</sup>と本研究での Resolve Be 窓の測定共に、得られた透過率カーブにどの元素の吸収端とも一致しない構造が見られている。この不連続な透過率低下構造は Be の Bragg 散乱による構造 (Bragg Diffraction Features; BDFs) ではないかと議論されている。その正確な定量化は透過光ではなく散乱光を測定することで可能になる。

図 5.31 に、3.47 keV と 8.27 keV の入射 X 線に対しての完全粉末 Be 結晶の回折シミュレーション結果を示す。完全粉末とは、一定の大きさの結晶面が完全にランダムに分布し、その結果どの入射角、エネルギーに対しても Bragg 条件を満たす結晶面が存在するという理想化である。試料が粉状であるという意味ではない。ここで、Be の結晶パラメータとして空間群 194:P63/mmc、格子定数 (a,b,c) = (2.2858, 2.2858, 3.5843)[Å] の六方晶を用い<sup>\*7</sup>、回折シミュレーションソフト Mercury<sup>\*8</sup>を用いて計算を行った。結晶学の基礎については付録にまとめているので、そちらを参照されたい。

図 5.31 左図は 3.47 keV の X 線に対する回折パターンを示す。 $2\theta = 170\text{--}175^\circ$  付近にミラー指数 ( $hkl$ ) = (002) のピークが確認できる。入射エネルギーを小さくすると、ある結晶面間隔  $d$  に対して Bragg 条件の式 4.1 を満たす  $\theta$  は大きくなり、やがて  $2\theta = 180^\circ$  に至る。それより低いエネルギーでは、この結晶面での回折は生じない。結晶面 (002) が 3.46 keV でちょうど  $2\theta = 180^\circ$  になることで、このエネルギーでの透過率の不連続的变化をもたらす。これこそが BDF の物理的描像であると我々は解釈している。3.46 keV での透過率不連続変化はもっとも顕著な BDF の一つであり、例えば図 5.15 の (f) パネルにおいて、明らかに構造があるのが見てとれる。

右図は Cu  $K\alpha$  を意図した X 線での回折パターンを示す。エネルギーが高い分、より多くの結晶面での回折ピークが見えている。例えば図 5.6 の (f) パネルにおいて 6.12 keV に顕著な BDF が見えるので、この回折ピークも確認したいことを考慮すると 6.12 keV 以上での X 線で回折測定を行うことが好ましい。

<sup>\*7</sup> 例えば、以下の URL を参照。

[https://www.webelements.com/beryllium/crystal\\_structure.html](https://www.webelements.com/beryllium/crystal_structure.html)

<sup>\*8</sup> <https://www.ccdc.cam.ac.uk/solutions/csd-system/components/mercury/>



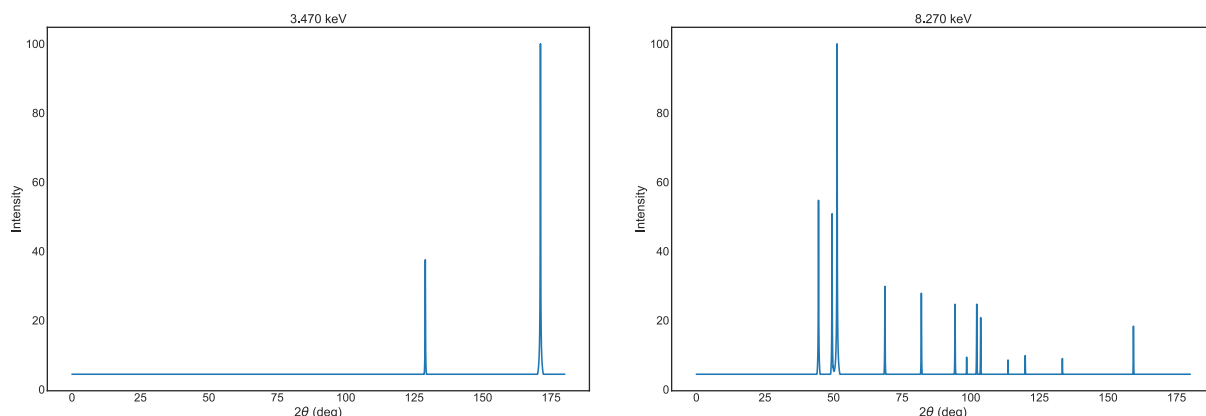


図 5.31: 完全粉末 Be 結晶の X 線回折シミュレーション結果。左: 3.470 keV の入射 X 線、右: 8.270 keV (Cu  $K\alpha$ ) の入射 X 線を用いたシミュレーションである。横軸は回折角  $2\theta$ 、縦軸はもっとも強いピークで規格化した X 線強度を表す。

シミュレーションでは完全粉末結晶を仮定したが、Be 窓が完全に粉末状態になっているかどうかは定かではない。そのため、X 線照射位置に応じて回折パターンがばらついたり、粉末具合によって回折ピーク強度がシミュレーション結果と異なることが予想される。したがって、今回の目的は複数の照射位置で回折パターンを取得し、ピークの強度比を取得することである。

我々は上記の目的を踏まえ、以下の条件を満たす国内施設の中から最適な施設を検討した。

- Cu  $K\alpha$  など 5 keV 以上の X 線で回折パターンが取得できる
- 直径 29 mm、厚さ約 300  $\mu\text{m}$  の供試体を水平に置くことが出来る
- 2020 年 1 月までに使用可能

その結果、首都大学東京 システムデザイン研究科の北園教授が所有している X 線回折装置を使用させていただくことに決定した。

## 5.4.2 装置

北園教授の所有する回折装置は株式会社リガクの試料水平型多目的 X 線回折装置 Ultima IV である。(図 5.32)。試料水平型の X 線回折計は X 線源と検出器軸が駆動するため、試料を水平に置いたまま測定が可能である。Ultima IV は X 線発生装置、各種スリット、供試体ステージ、モノクロメータ、検出器を搭載しており、これ一台と付属の制御解析ソフトで X 線回折測定を完結させることができる。以下にそれぞれのパートの詳細について述べる。

X 線発生装置の定格電圧は 20–50 kV, 定格電流は 2–60 mA である。発生させた X 線を供試体に入射する前に入射スリットを通すことが可能である。入射スリットは 2 つまで装着でき、横スリットと縦スリットを組み合わせることで入射 X 線のサイズと強度を調整することが可能である。また回折後のスリットは広がっているので散乱スリットと受光スリットを用いて角度を制限する。このスリットを用いることで、ある幅を持った角度の回折 X 線が検出器に入ってしまうことを防ぎ、結果的に回折ピークの分解能の改善に繋がる。

試料台は供試体の大きさに応じて選択することができ、また調節可能な供試体ステージ上に設置される。供試体ステージは鉛直方向への並進移動、鉛直方向を軸として回転する面内回転、手前方向への煽り角を設定する回転、と並進・回転合わせて 3 パターンの調整が可能である。基本的にこれらは測定セットアップ時に用いられる。ここ

で供試体表面の高さを基準面に高精度で合わせることで、回折角に系統誤差が生まれることを防いでいる。

発生させた X 線には、制動放射による連続 X 線と  $K\alpha$ ,  $K\beta$  輝線が含まれるので、高精度で回折ピークを得るには単色化は不可欠である。Ultima IV では供試体と検出器の間に、グラファイト結晶での Bragg 反射を利用したモノクロメータが搭載されている。この分光器により、 $K\beta$  輝線をほとんど除去し、低バックグラウンドの測定が可能になる。

検出器にはシンチレーションカウンタが採用されている。シンチレーションカウンタは 0 次元検出器であり半導体 1 次元検出器と比較してデータ取得速度は劣るが、分光結晶によるモノクロメータを用いることができるため、低バックグラウンドの測定が可能である。

また、リガク社の X 線回折装置に付属している解析ソフトウェア PDXL を用いることができる。このソフトウェアには様々な結晶のデータベースが内蔵されている。測定結果の各ピークに対しガウシアンを仮定してフィッティングを行い、データベースと照らし合わせることで、簡単にピーク同定を行うことができる。また、ローレンツ因子補正や偏光補正など様々な補正機能が装備されており、ソフトウェア上で様々な解析を行うことが可能である。

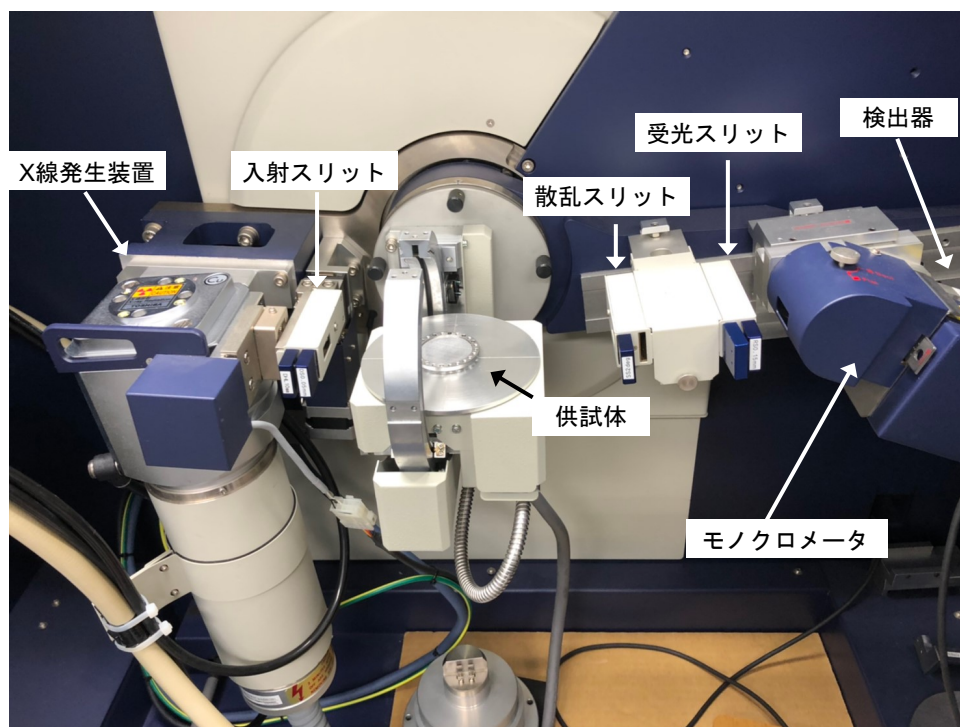


図 5.32: X 線回折装置 Ultima IV の内部

### 5.4.3 セットアップ

今回の測定では、デフォルトの Cu ターゲットを用いた。Cu  $K\alpha$  は 8.27 keV なので、我々の必要とする 6.12 keV 以上という条件に適合している。電子を加速するための電圧・電流はそれぞれ 40 kV, 20mA である。

入射スリットは縦 10 mm, 横 1° のものを用いた。また、散乱スリットは 1°, 受光スリットは 0.3 mm を用いた。これらのスリット幅は装置の自動セットアップ機能により決定した。

供試体ステージに標準で装備されている標準試料台は約 20 mm×20 mm 以下の試料しか載せることができない。Be 窓は周囲の治具も合わせると 30 mm 以上あるので標準試料台に載せることはできなかった。そこで本測定では

それ以上大きい試料を載せることのできる多目的試料台を用いた。図 5.32 で供試体が載っている台が多目的試料台である。

#### 5.4.4 測定と結果

表 B.8 (付録) に首都大学東京での X 線回折測定のログを記す。まず、供試体を多目的試料台に載せ、装置の自動セットアップ機能にてステージの高さと推奨されるスリット幅を決定した。次に、回折ピークが得られるかどうか確認するため、スキャンスピードを  $10^\circ/\text{min}$  と高速で測定を行なった。その結果十分にピークが確認できたので、本測定に移行した。本測定ではスキャンスピード  $2^\circ/\text{min}$ 、ステップ幅  $0.0200^\circ$  で  $20\text{--}80^\circ$  のスキャン範囲で測定を行なった。良好な測定結果を確認した後、スキャン範囲を  $80\text{--}160^\circ$  に伸ばして測定を行い、結果的に  $20\text{--}160^\circ$  の範囲での回折ピークを得ることができた (図 5.33 上; 測定 1)。

次に回折ピークの位置依存性を確認するため、供試体の向きを反転させ、さらに照射位置をずらし  $20\text{--}160^\circ$  の範囲で測定を行なった (図 5.33 下; 測定 2)。もし供試体が傾いていてステージに置かれていると、文献値と少しずれた角度に回折ピークが現れることが考えられる。ここで供試体の向きを反転させたのはピーク角度の供試体向き依存性を確認するためである。どちらのプロットもピークが出ている角度は同じだが、強度はそれぞれで異なっている。

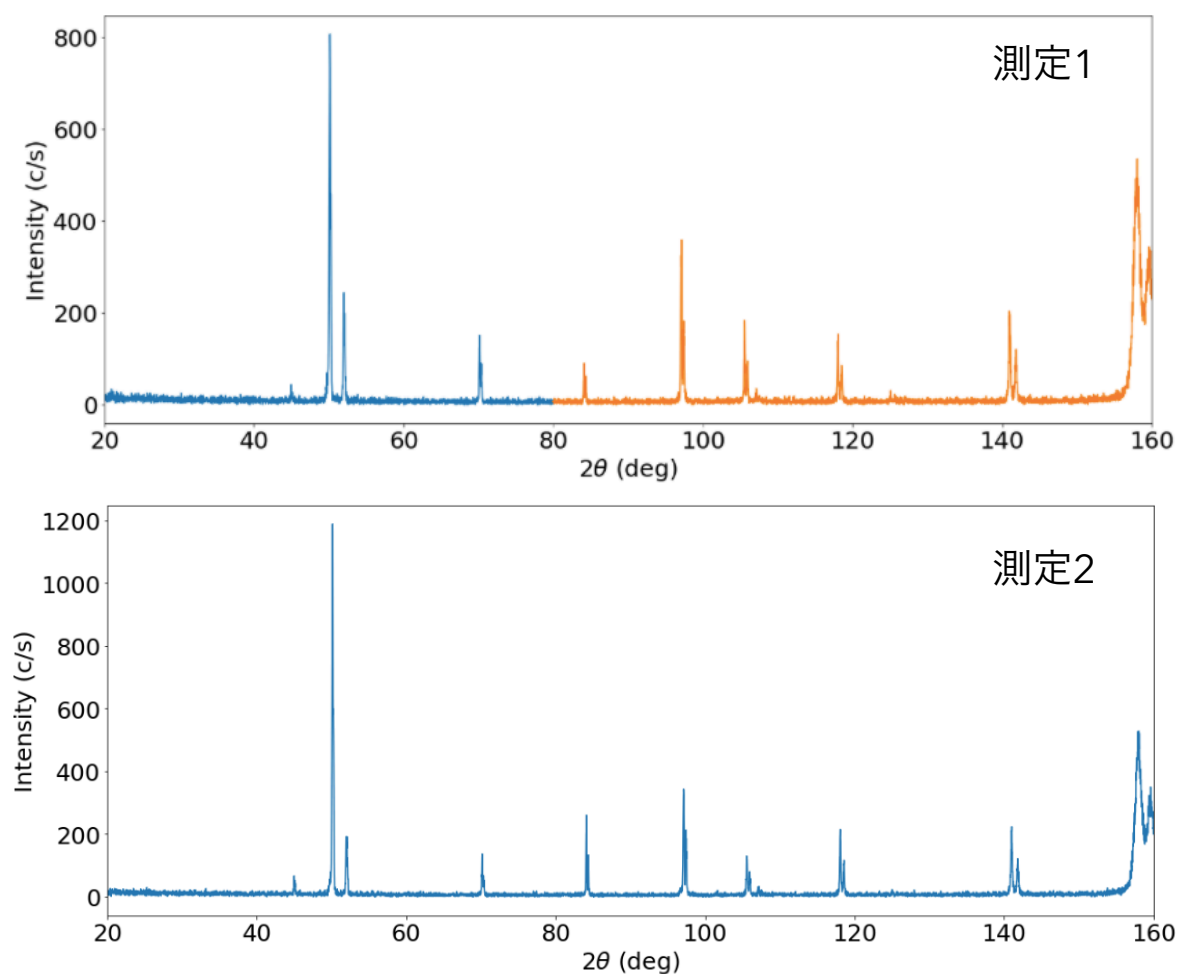


図 5.33: 回折測定結果の生データ。横軸は回折角  $2\theta$ 、縦軸はカウントレートを表す。上図が測定 1 で  $20\text{--}80^\circ$  の結果と  $80\text{--}160^\circ$  の結果を重ねてプロットしている。下図は供試体の向きと X 線照射位置を変更後の測定 2 の結果を表す。上下でピーク角はほぼ同じだが、強度は異なっていることが確認できる。

#### 5.4.5 解析

図 5.33 上図の横軸を  $95\text{--}120^\circ$  の範囲で拡大したものが図 5.34 である。全てのピークが二つに分かれていることが確認できる。

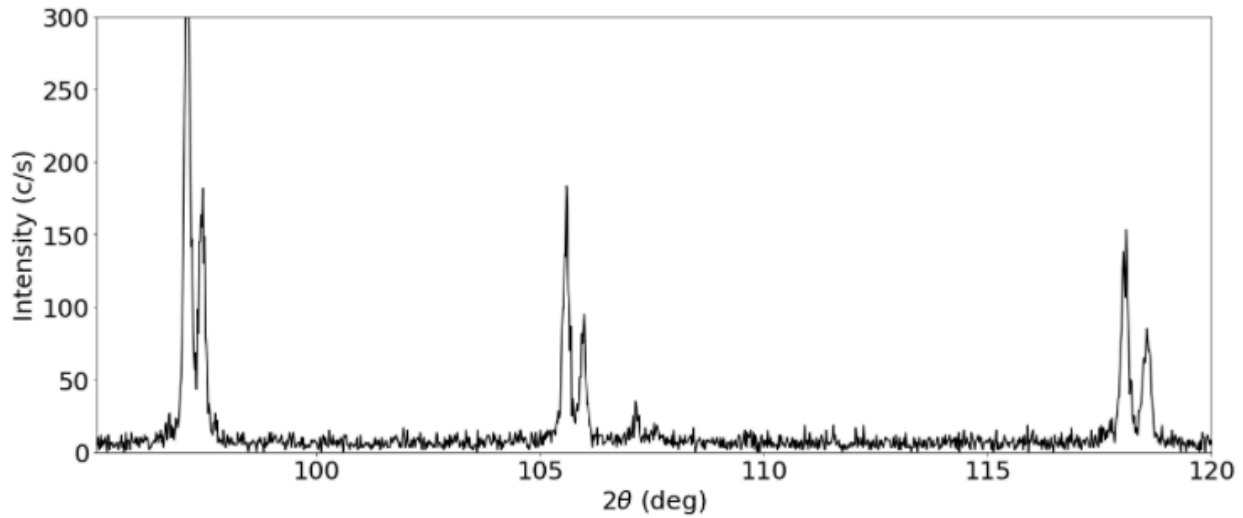


図 5.34: 図 5.33 上図の横軸を 95–120° の範囲で拡大した図

これは単色化された後の回折 X 線に  $\text{Cu K}\alpha_1$  ( $E_1=8.046$  keV) と  $\text{Cu K}\alpha_2$  ( $E_2=8.026$  keV) が混在していることによる。ダブルピークのそれぞれに対し、強度比 2:1 のガウシアンを仮定したフィッティングを行う。フィットに用いるガウシアン関数の関数形は以下で表される。

$$g(\theta) = I \left\{ \exp \left( -\frac{(\theta - \theta_1)^2}{2\sigma^2} \right) + \frac{1}{2} \exp \left( -\frac{(\theta - \theta_2)^2}{2\sigma^2} \right) \right\} + bkg \quad (5.3)$$

ここで、 $bkg$  はバックグラウンドノイズであり、今回の測定では 10 counts/s 程度であった。また、 $\theta_1, \theta_2$  はそれぞれ  $\text{K}\alpha_1$  と  $\text{K}\alpha_2$  の Bragg 反射角を示している。ここで  $\theta_2$  は式 4.1 より、

$$\theta_2 = \sin^{-1} \left( \frac{E_1}{E_2} \sin \theta_1 \right) \quad (5.4)$$

と表される。式 5.3 で表される関数において  $I, \theta_1, \sigma$  をフリーパラメータにし、図 5.33 の上下それぞれをフィッティングした結果を図 5.35 に表す。また、それぞれのベストフィットパラメータである角度  $\theta_1$  と測定された回折強度  $I$  を表 5.5 に記す。文献値から、ピーク角度とエネルギー、さらにはそのピークをとる結晶面のミラー指数を表 5.5 にまとめる。

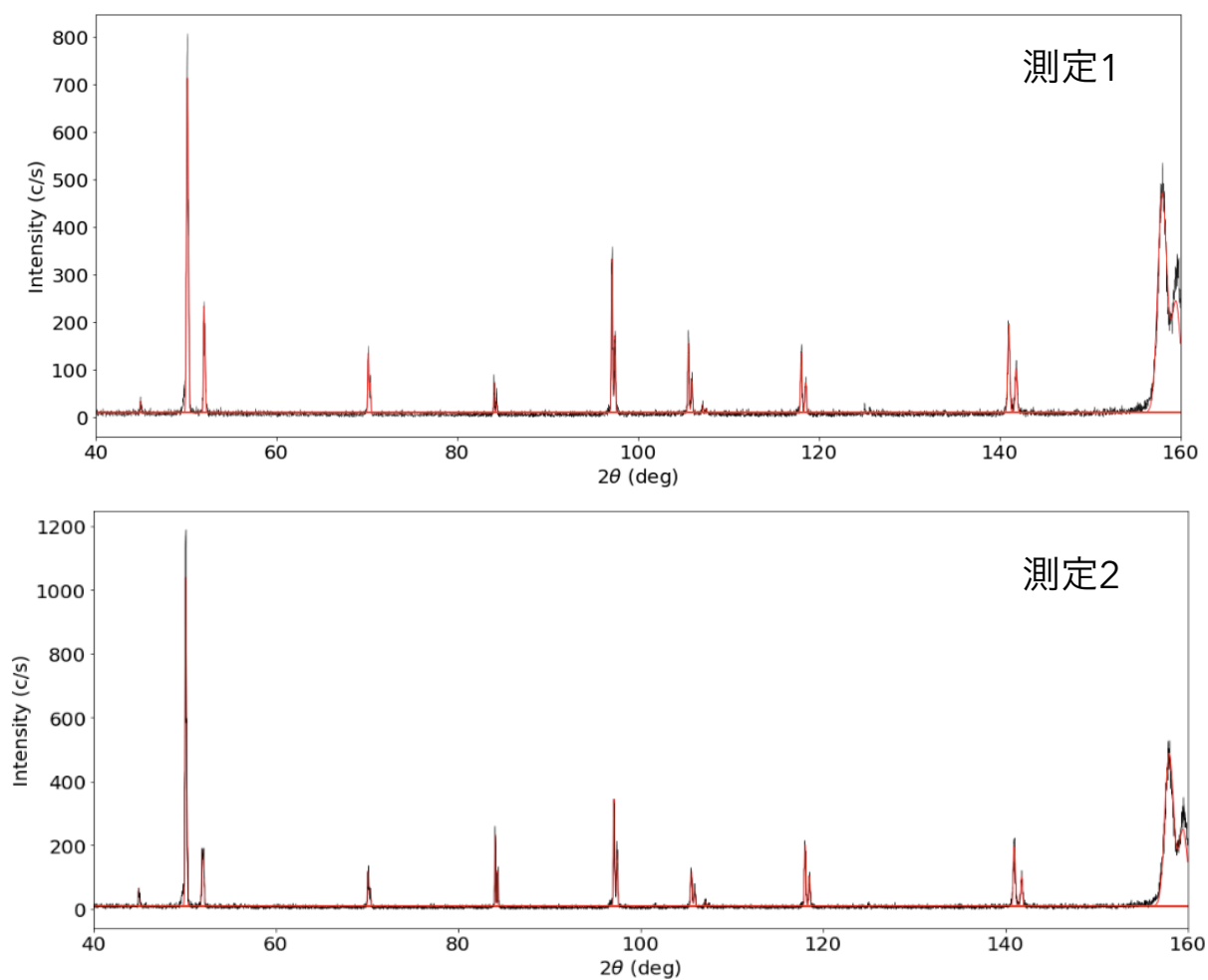


図 5.35: 図 5.33 のピークにガウシアン関数でフィッティングした結果。黒が測定結果、赤がフィッティングモデルを表す。上図は測定 1、下図は測定 2 のプロットである。40° 以下には回折ピークはないので、横軸は 40–160° でプロットしている。

表 5.5: フィッティングで得られた回折ピークパラメータと文献値の比較

番号	測定 1			測定 2			文献値		
	角度 $\theta_1$	強度 $I$	ピーク幅 $\sigma$	角度 $\theta_1$	強度 $I$	ピーク幅 $\sigma$	ミラー指数	エネルギー [keV]	角度 [ $^\circ$ ]
1	44.99	23.83	0.04	45.02	54.77	0.04	100	3.133	44.518
2	50.14	606.02	0.08	50.14	975.88	0.06	002	3.460	49.458
3	52.00	217.44	0.06	52.01	156.75	0.08	101	3.578	51.279
4	70.17	125.21	0.06	70.18	110.50	0.06	102	4.667	68.713
5	84.11	63.07	0.05	84.11	223.80	0.05	110	5.426	82.005
6	97.13	323.78	0.07	97.13	337.74	0.07	103	6.062	94.270
7 <sup>a</sup>	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	200	6.265	98.505
8	105.60	145.13	0.07	105.59	110.95	0.08	112	6.435	102.176
9	107.16	16.71	0.05	107.15	15.97	0.06	201	6.500	103.614
10	118.07	126.20	0.08	118.08	192.21	0.07	004	6.919	113.577
11	125.09	15.59	0.03	125.08	4.18	0.07	202	7.157	119.860
12	141.02	184.70	0.11	141.01	186.84	0.11	104	7.595	133.390
13	158.00	460.00	0.5	157.99	478.08	0.47	203	8.135	159.289

<sup>a</sup> ピークがバックグラウンドに埋もれており、フィッティングできなかった。

表 5.5 で得られた強度  $I$  を測定ごとに最大強度で規格化してプロットしたのが図 5.36 である。さらにその上に、シミュレーションソフトで取得した強度  $I = |F|^2 * LP * M$  の比を規格化したものをプロットし、測定結果と比較した。ここで、 $F$  は結晶構造因子、 $LP$  はローレンツ補正因子と偏光補正因子の積、 $M$  は多重度を表す（付録参照）。図 5.36 において、測定 1, 2 の結果の差が大体の測定誤差を表すものと仮定すると、完全粉末結晶を仮定したモデル（緑点）は測定結果から有意にずれていることがわかった。測定 1 と測定 2 の差から、X 線照射位置・向きによって結晶状態に非一様性が存在することが示唆される。

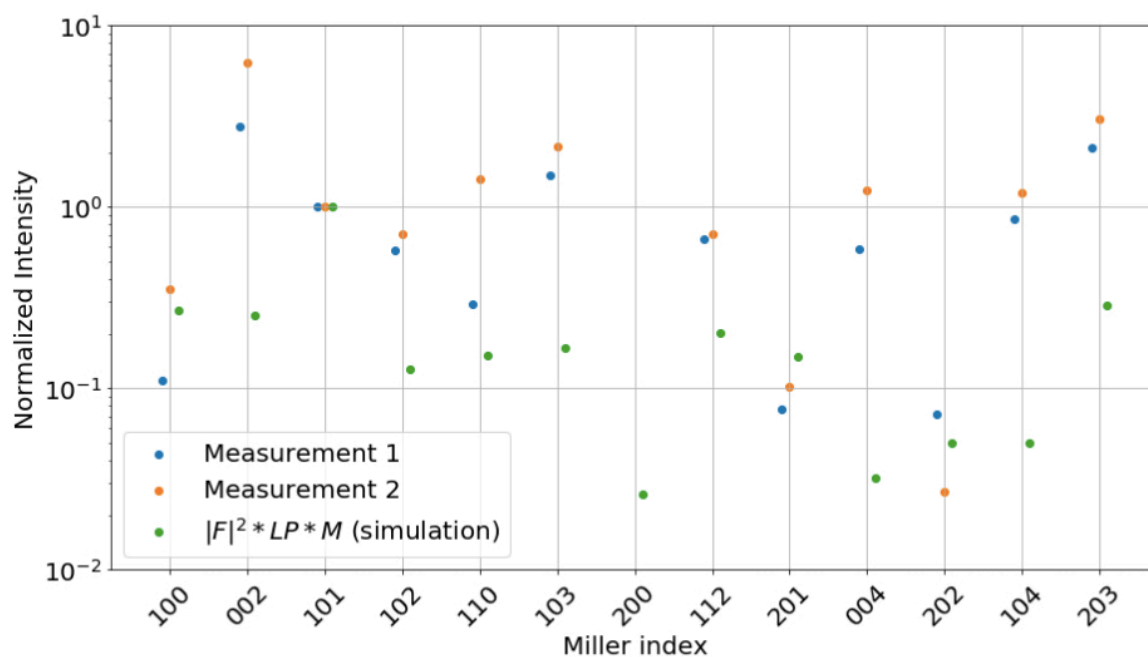


図 5.36: 測定結果とシミュレーションでの回折ピークごとの強度比の比較。横軸は Bragg 散乱を起こした結晶面 ( $hkl$ )、縦軸は (101) 面のピークで規格化した強度  $I$  を示す。シミュレーションでの強度はローレンツ因子、偏光因子、多重度因子が考慮されている（付録参照）。なお、散布点が重ならないように少し左右にずらしている。また、(200) 面の回折測定でのピーク強度は (100) 面での 1% 以下であるため、図中にプロットされていない。



第 6 章

議論

Contents

6.1	ステンレスメッシュのモデリング . . . . .	116
6.2	Be 窓のモデリング . . . . .	119
6.2.1	微小元素 . . . . .	121
6.2.2	BDF . . . . .	124
6.3	ゲートバルブ全体のモデリング . . . . .	132
6.4	Resolve ゲートバルブの軌道上較正計画立案 . . . . .	134
6.4.1	ゲートバルブ閉栓時の軌道上較正計画 . . . . .	134
6.4.2	ゲートバルブ開栓時の軌道上較正計画 . . . . .	139
6.5	SXS データ再解析 . . . . .	147
6.5.1	SXS Be 窓の透過率測定データ再解析 . . . . .	147
6.5.2	SXS で観測された「かに」星雲のスペクトル再解析 . . . . .	150

本章では、6.1 節にて透過率測定結果からステンレスメッシュのモデリングを行う。6.2 節では透過率測定から Be 窓のモデリングを行い、BDF について回折測定結果と合わせて議論する。6.3 節ではステンレスメッシュと Be 窓の透過率モデルを統合し、XRISM Resolve のゲートバルブ較正データベースを完成させる。6.4 節では地上試験では完全に決定することのできなかったパラメータを軌道上較正で決定するためのプランについて述べる。最後に 6.5 節では作成した較正データベースを補正し、SXS ゲートバルブの較正データベースを作成する。また、SXS で観測された「かに」星雲のデータ再解析を実施し、フィッティング結果がどのように変化したか確認する。

## 6.1 ステンレスメッシュのモデリング

図 4.19 に現在の較正データベースに入っている SXS ステンレスメッシュの透過率カーブと、SXS ステンレスメッシュの透過率測定結果をプロットしたところ、Ti K $\alpha$ (4.51 keV) と Ag K $\alpha$ (22.17 keV) で不一致が見られた。

較正データベースに入っているステンレスメッシュのモデルは元素組成が Fe $\sim$ 70%, Cr  $\sim$ 20%, Ni $\sim$ 10%、メッシュワイヤ断面は 0.20 mm $\times$ 0.20 mm の正方形と仮定し、NIST の質量減衰係数を用いて作成されたものであった。しかし、ステンレスメッシュを製作した SHI 社に確認したところ、実際にはワイヤ断面は円なので正方形断面の近似では十分な精度が出ないことがわかった。断面が直径 0.20 mm の円だとすると、円の端の方では 0.20 mm より厚みが小さく、高エネルギー X 線が透過しやすくなるため、透過率の立ち上がりがより低エネルギー側にシフトする曲線となることが期待される。

よってメッシュワイヤの断面  $t = 0.20$  mm の直径を持つ円と仮定した透過率モデルを作成する。ワイヤ中心から  $x(< t/2)$  だけ離れたところを X 線が通過する時の厚みは  $2\sqrt{t^2/4 - x^2}$  と表される。光電吸収や非干渉性散乱を全て加味したある金属元素の減衰係数<sup>\*1</sup>を  $\mu_{\text{tot,metal}}(E)$ 、ある金属元素の質量密度を  $\rho_{\text{metal}}$ 、組成比を  $A_{\text{metal}}$  とすると、減衰係数  $\alpha(E)$  は

$$\alpha(E) = \sum_{\text{metal}} A_{\text{metal}} * \rho_{\text{metal}} * \mu_{\text{tot,metal}}(E) \quad (6.1)$$

$$= 0.7 * \rho_{\text{Fe}} * \mu_{\text{tot,Fe}}(E) + 0.2 * \rho_{\text{Cr}} * \mu_{\text{tot,Cr}}(E) + 0.1 * \rho_{\text{Ni}} * \mu_{\text{tot,Ni}}(E) \quad (6.2)$$

と求められる。

結果として、ステンレスメッシュの透過率  $T_{\text{mesh}}(E)$  は

$$T_{\text{mesh}}(E) = f + (1 - f) * \int_0^{t/2} \exp\left(-2\sqrt{\frac{t^2}{4} - x^2} \alpha(E)\right) dx \quad (6.3)$$

と計算できる。ここで一旦、低エネルギー X 線に対してはメッシュワイヤは光学的に厚いので幾何的開口率  $f$  は設計値の 71% に固定した。式 6.3 の積分は解析的に解けないので、数値積分を行った。具体的には  $x$  を  $0 \leq x < t/2$  で 1000 等分して  $\exp\left(-2\sqrt{\frac{t^2}{4} - x^2} \alpha(E)\right)$  の平均値を取得し、透過率を算出した。ここで、平編みでワイヤが重なっている効果は無視した。

その結果の透過率カーブを図 6.1 にプロットする。青線が現在の較正データベースに入っているもので、メッシュワイヤの厚みを 0.2 mm の正方形と仮定したものである。橙線はステンレスメッシュ断面を円と仮定し、上式にて数値積分を解いて作成したモデルカーブである。橙線のモデルカーブの方が誤差付きの測定結果プロットに近いことがわかる。また、これまで較正データベースに入っていなかった Cr, Fe の吸収端構造も見えている。しかし、いまだにモデルカーブ上に Ti K $\alpha$ (4.51 keV) と Ag K $\alpha$ (22.17 keV) の測定点は乗っていない。

<sup>\*1</sup> 以下の URL のデータベースを用いた。それぞれの散乱についての解説は付録を参照する。  
<https://physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/html/xcom1.html>

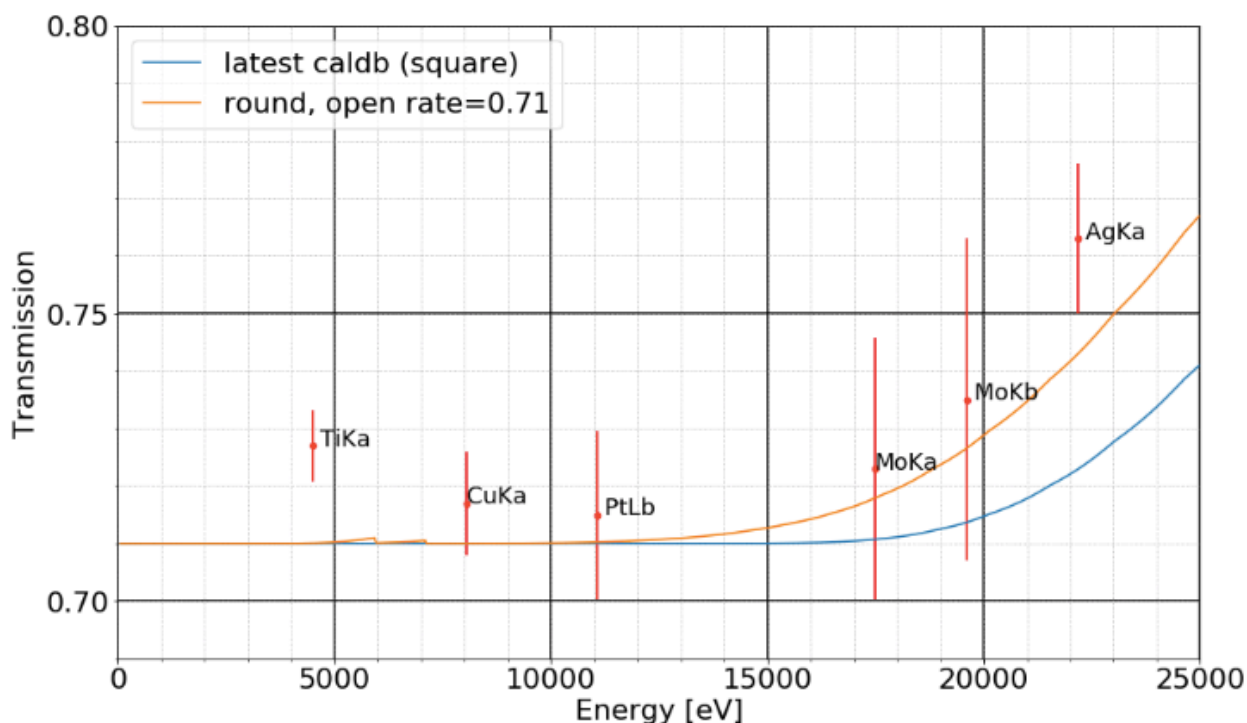


図 6.1: ステンレスメッシュの較正データベースモデルと断面を円としたモデル。青線は較正データベースに入っているもので、ワイヤの厚みを 0.2 mm の正方形と仮定したものである。橙線はワイヤ断面を円と仮定し作成したモデルカーブである。誤差付きの測定結果プロットに、より近づいたことがわかる。

現在用いている開口率の 71% は SHI 社の設計図でのワイヤ線径 0.20 mm とワイヤ間隔 1.27 mm から計算して求めている値であり、これらの値の系統誤差から、作成された複数のステンレスメッシュにおいて開口率のばらつきが生じることは容易に考えられる。実際、図 4.13, 4.14 から簡易的に求めた開口率は 71.5% であった。そこで、幾何的開口率に系統誤差が存在することを仮定し、開口率をフリーパラメータとしたフィッティングを実施した。式 6.3 において減衰係数  $\alpha(E)$  は離散値なので、まず積分部分に対して一次のスプライン補間を行った。その後  $f$  を唯一のパラメータとし、誤差付きの測定結果に対してカイ二乗検定を用いたフィッティングを行った。結果的に、ベストフィットでの開口率は  $0.723 \pm 0.003$  と求まった。図 6.1 に、フィッティング後の開口率を用いたモデルカーブを追加したプロットを図 6.2 に示す。全ての測定点が新たに追加した緑色のモデルカーブに乗っていることが見てとれるので、ステンレスメッシュの透過率モデルとして緑線のモデルを用いる。

なお、今回測定したステンレスメッシュは SXS のフライトスペア品であり、Resolve のステンレスメッシュは透過率測定していない。本結果から開口率は個体に応じてフリーパラメータとした方がよいということが示唆されるため、軌道上でのパラメータ較正が追加が必要である。

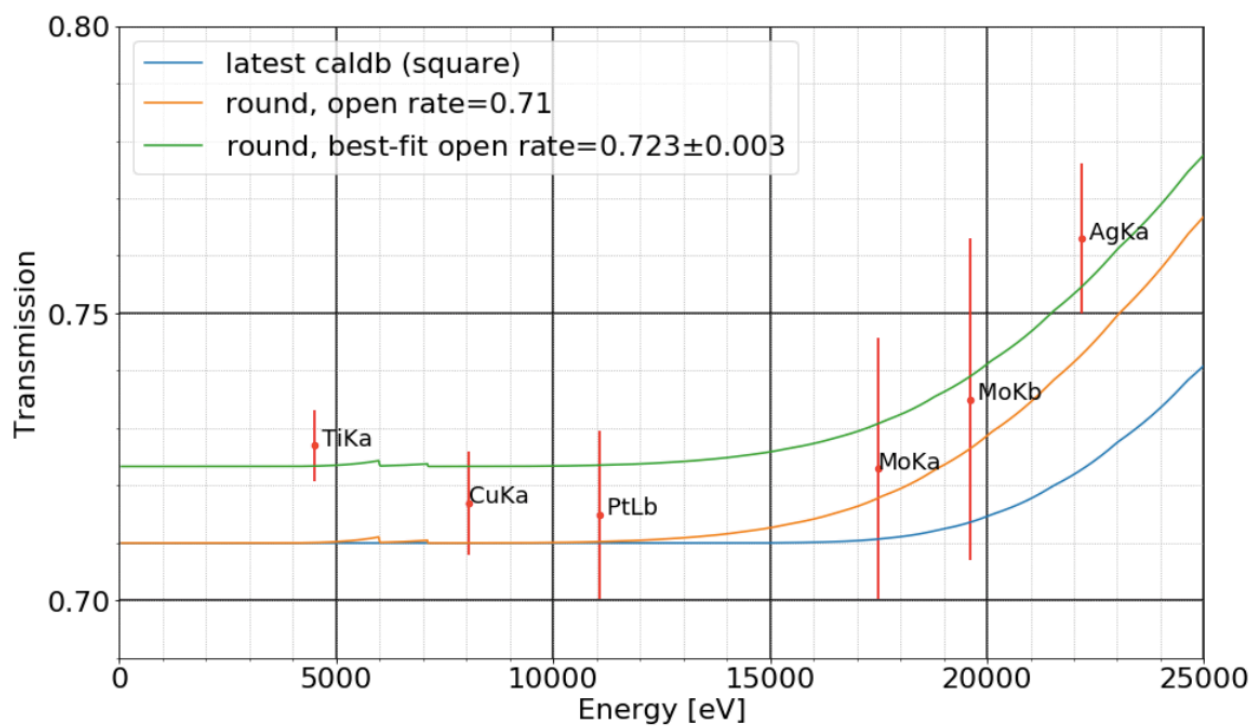


図 6.2: 3つの透過率モデルカーブと測定結果の比較。緑線がフィッティング後の開口率を用いた透過率モデルカーブである。全ての測定点がモデルカーブに乗っていることが見てとれる。

## 6.2 Be 窓のモデリング

本節では透過率と回折ピークの測定結果を用いた Be 窓のモデリングを行う。まず、KEK BL7C(5.1 節) で得た Be 窓中心部の 4.9–8.0 keV での透過率カーブを図 6.3 にプロットする。上パネルは測定で得られた透過率カーブと 252  $\mu\text{m}$  の Be での吸収モデルを、下パネルは残差（測定結果とモデルの比をとった結果）を示している。まずは Be の減衰係数として図 A.5 で最も顕著な光電吸収係数<sup>\*2</sup>を使用している。ここで、252  $\mu\text{m}$  という値は、4.9–8.0 keV 帯において、Be の厚みだけをフリーパラメータとした最小二乗フィッティングにより決定しているが、残差の構造を視覚化しやすいように便宜的に用いた値である。

下パネルの残差には、いくつかの吸収端構造が見受けられる。これはつまり、Be 窓に Be 以外の元素が微量含まれていることを示唆している。そこでこのエネルギー帯で、Ti, Cr, Mn, Fe, Co の混入を疑い、吸収端エネルギーを緑線でプロットした。その結果、Fe では顕著な吸収端が確認でき、Cr, Mn では微かに吸収端が存在することが確認できた。対して、Ti, Co では吸収端構造を確認することができなかった。6.1 keV 付近にも顕著な吸収端らしき構造が確認されるが、このエネルギーはどの元素の吸収端エネルギーとも一致しない。これまでも何度か述べたが、この構造は Bragg 散乱による構造 (Bragg Diffraction Feature; BDF) ではないかと議論されている<sup>18, 19</sup>。

図 6.3 と同様に、図 6.4 では 8.0–10.0 keV での透過率カーブをプロットしている。フィッティングにより、Be の厚みは 272.4  $\mu\text{m}$  と決定した。この値も上記の Be 厚みと同様に、構造を視覚化しやすいように便宜的に用いた値である。上記の Be 厚みと 20  $\mu\text{m}$  ほどズレがあるが、Be 以外の微小元素による吸収等についてモデリングしていないためである。このエネルギー帯において、微小元素として Ni, Cu, Zn の存在を確認したところ、Ni では顕著な吸収端が見られた。Cu では微かに吸収端が見られ、Zn では全く確認できなかった。また、微小元素による吸収端に加え、8.8 keV や 9.2 keV 付近に BDF と思われる構造が確認できる。

以上の結果から、Be 窓の透過率カーブは Be の光電吸収に加え、微小元素による吸収と BDF が寄与していることがわかる。本節では、6.2.1 項で微小元素の吸収モデルについて述べ、6.2.2 項で BDF のモデリングについて議論する。

---

<sup>\*2</sup> 以下の URL の NIST データベースを用いた。それぞれの散乱についての解説は付録を参照する。  
<https://physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/html/xcom1.html>

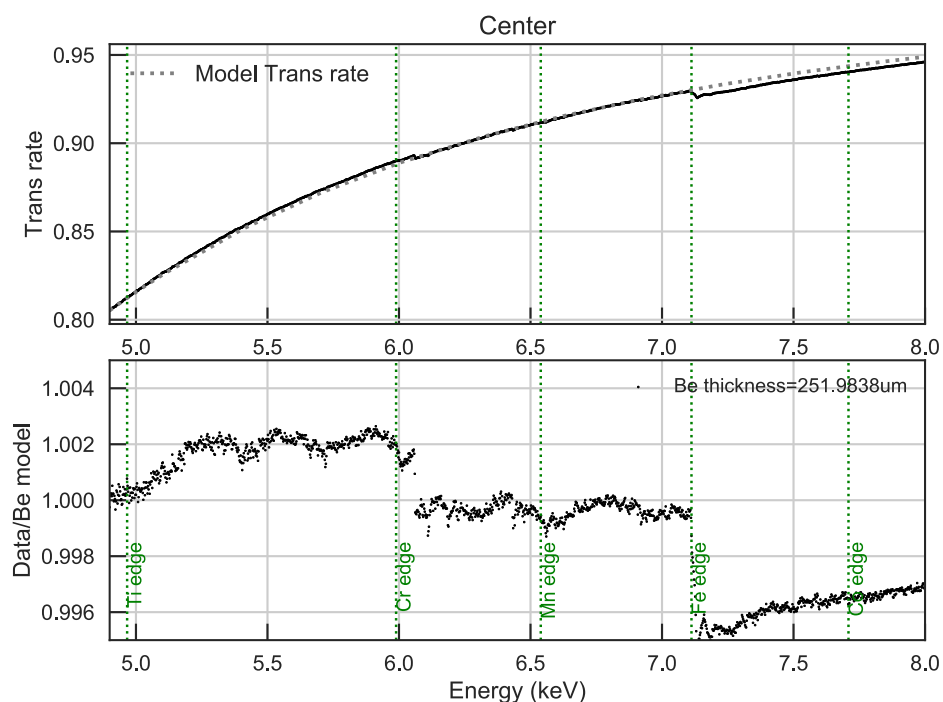


図 6.3: 4.9–8.0 keV での Be 窓透過率カーブ。上パネルは測定結果とモデルを、下パネルは残差を表している。含まれている可能性のある微小元素の吸収端エネルギーを緑点線で示している。

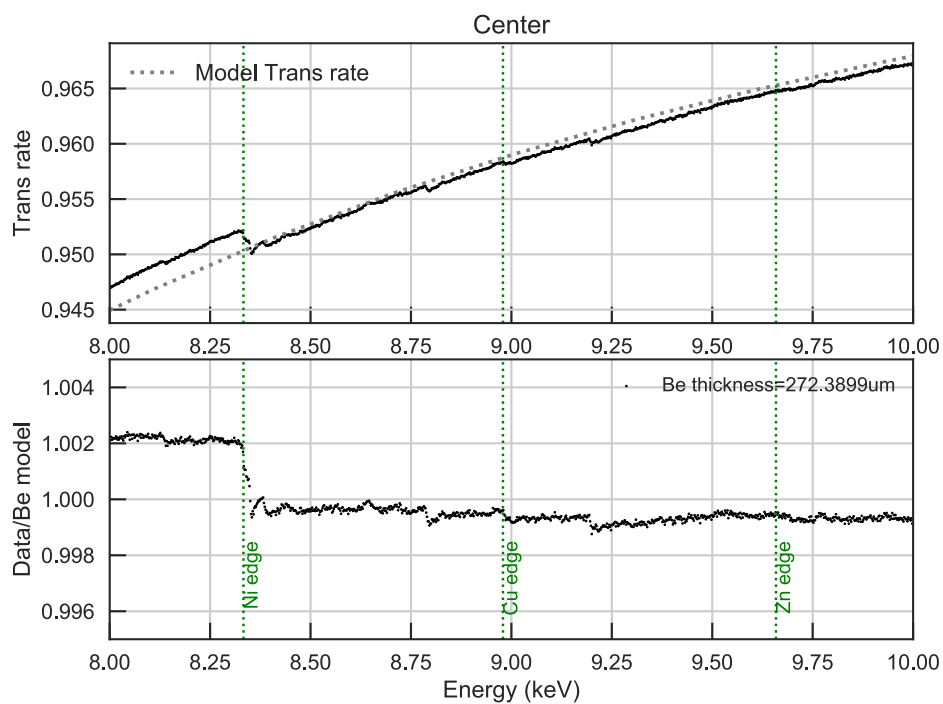


図 6.4: 8.0–10.0 keV での Be 窓透過率カーブ。上パネルは測定結果とモデルを、下パネルは残差を表している。含まれている可能性のある微小元素の吸収端エネルギーを緑点線で示している。

### 6.2.1 微小元素

まず、吸収端が如実に表れていた Fe と Ni のモデリングから行う。減衰係数としては最も顕著な光電吸収  $\mu_{\text{photo}}^{*3}$  を用いる。複数のフリーパラメータを用いてフィッティングを行うとパラメータ縮退してしまう恐れがある。そこで、例えば Fe では、吸収端エネルギー (7.112 keV) 前後の限られたエネルギー (7.0–7.5 keV) にて Be の厚み  $t_{\text{Be}}$  と Fe の厚み  $t_{\text{Fe}}$  の 2 つをフリーパラメータとしてフィッティングを行った。この操作において、他の微小元素や BDF による吸収は、Be の吸収で近似している。フィッティングに用いた透過率モデルを数式で表すと以下のように表される。

$$T_{\text{Be,Fe}}(E) = \exp\{-\rho_{\text{Be}} * \mu_{\text{Be,photo}}(E) * t_{\text{Be}}\} * \exp\{-\rho_{\text{Fe}} * \mu_{\text{Fe,photo}}(E) * t_{\text{Fe}}\} \quad (6.4)$$

ここで  $\rho$  はそれぞれの元素の質量密度を表している。フィッティング後の透過率カーブを図 6.5 に示す。吸収端エネルギー付近は X 線吸収微細構造 (X-ray Absorption Fine Structure; XAFS) 構造により、残差に構造が残って見えるが、その前後では綺麗に残差が収まっていることがわかる。これは用いた減衰係数の分解能が十分でなく XAFS を記述しきれていないためであり、この構造があるエネルギー帯はフィッティングには使用しなかった。結果的に、7.0–7.5 keV では  $t_{\text{Be}} = 251.41 \pm 0.22 \mu\text{m}$ 、 $t_{\text{Fe}} = 14.5 \pm 0.2 \text{ nm}$  と算出された。

同様の最小二乗フィッティングを Ni, Cr, Mn, Cu に対しても行い、その透過率カーブを図 6.6–6.9 に表す。

<sup>\*3</sup> 以下の URL にて、NIST のデータベースを使用した。1.0–5.0 keV は 40 eV ごとに、5.0–12.0 keV では 300 eV ごとに線形内挿した。  
<https://physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/html/xcom1.html>

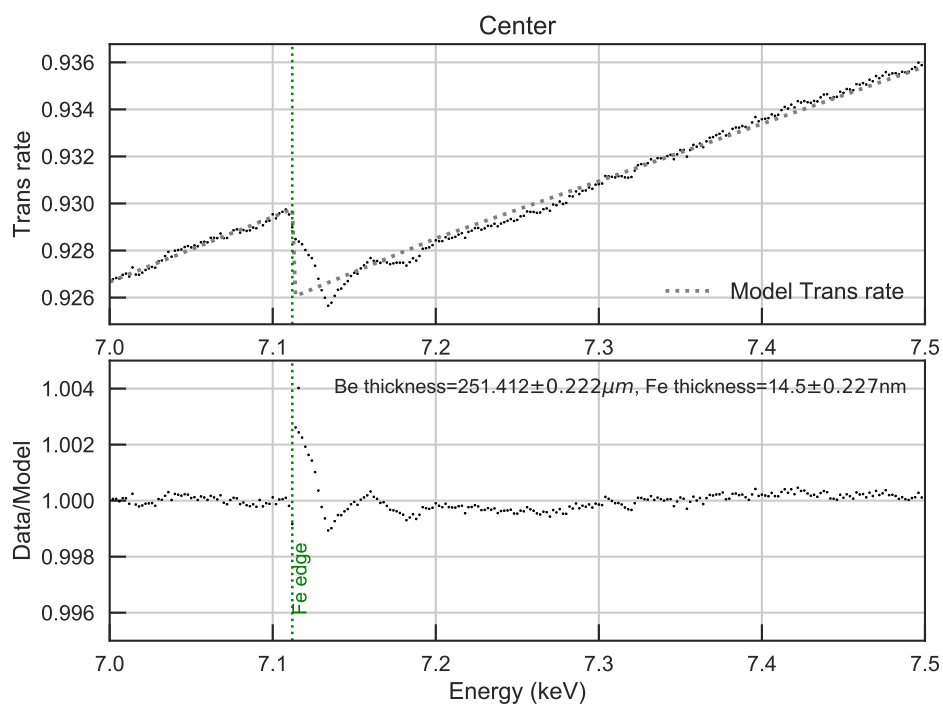


図 6.5: フィッティング後の Fe 吸収端付近の透過率カーブ。XAFS により残差に構造が残っているが、その前後では綺麗に残差が収まっている。

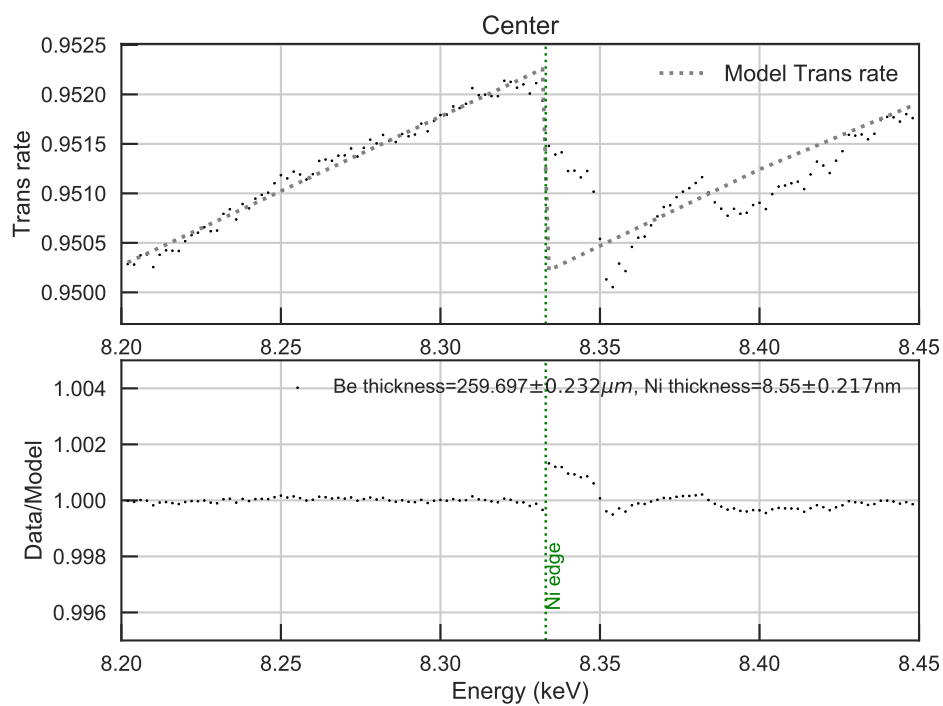


図 6.6: フィッティング後の Ni 吸収端付近の透過率カーブ。XAFS により残差に構造が残っているが、その前後では綺麗に残差が収まっている。



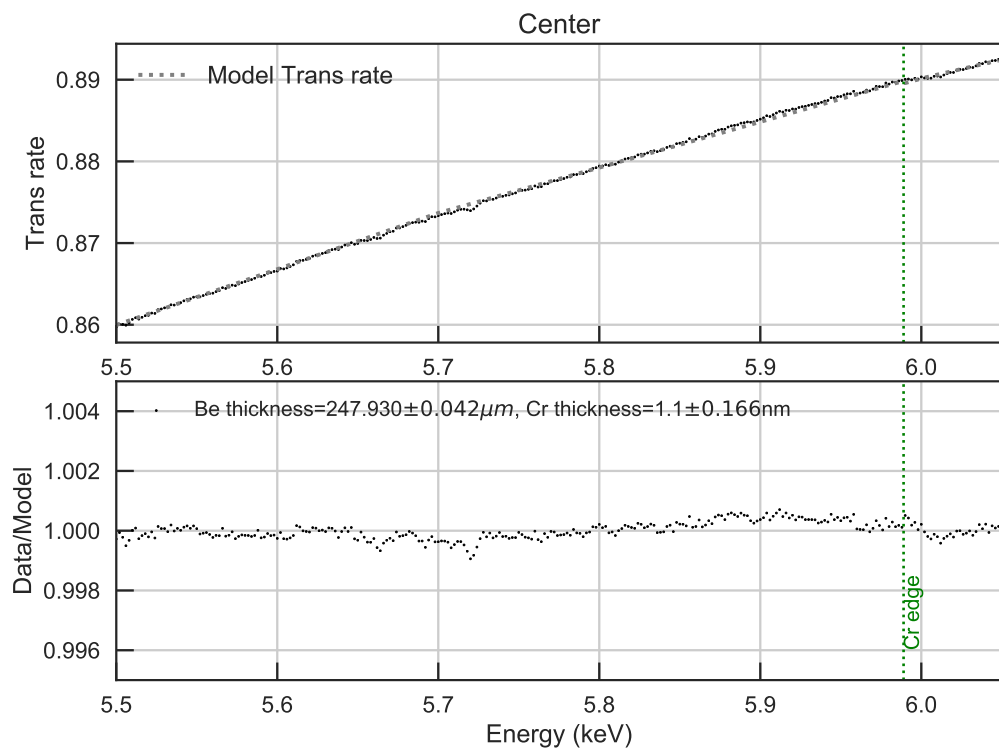


図 6.7: フィッティング後の Cr 吸収端付近の透過率カーブ

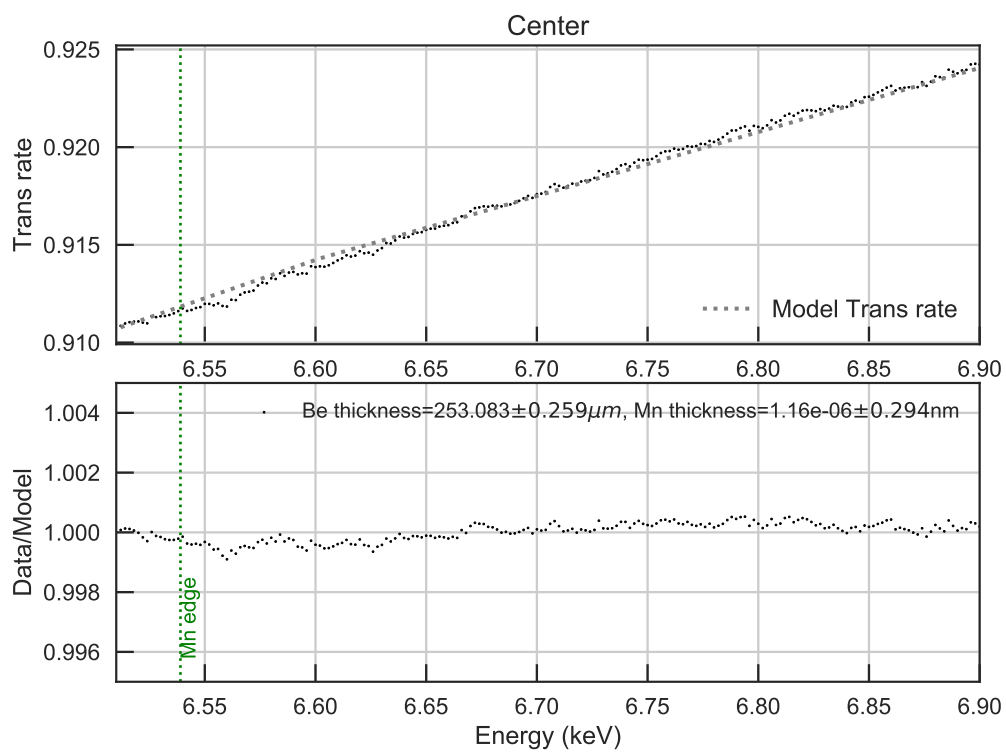


図 6.8: フィッティング後の Mn 吸収端付近の透過率カーブ

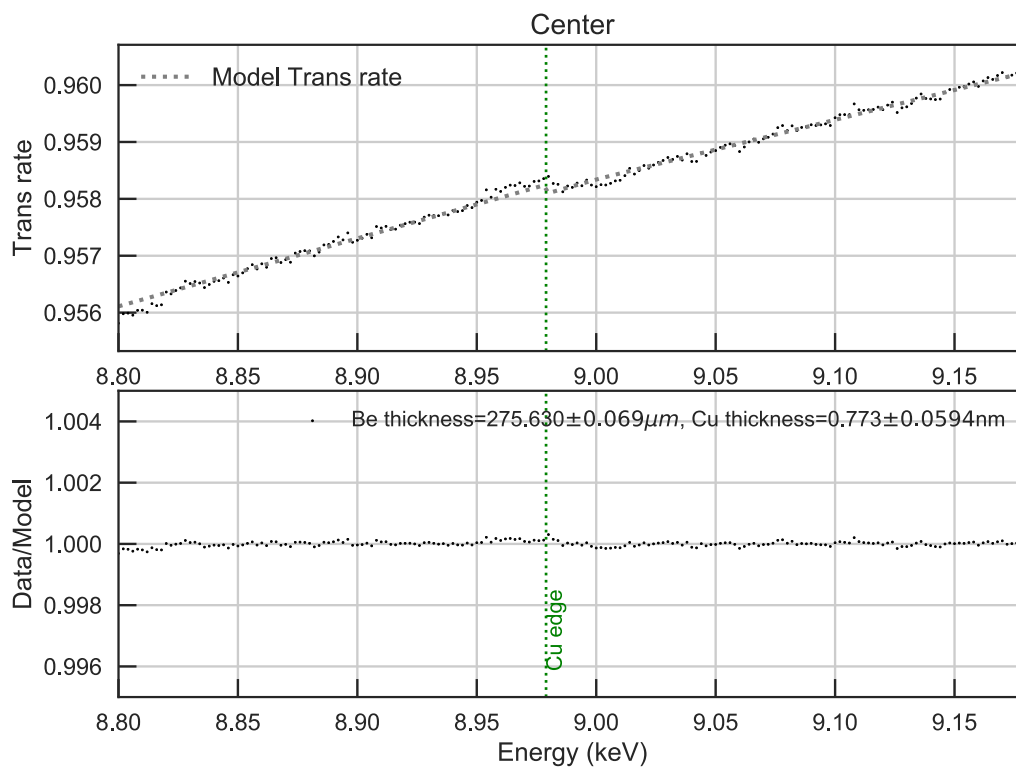


図 6.9: フィッティング後の Cu 吸収端付近の透過率カーブ

微小元素ごとの吸収端エネルギー、フィッティングに用いたエネルギー帯、得られた微小元素の厚みを表 6.1 にまとめる。フィッティングに用いたエネルギー帯は、顕著な BDF 構造には重ならないように注意して決定した。参考のため Materion 社による微小元素混入率測定を厚み換算した結果を記す。

表 6.1: フィッティングで得られた微小元素の厚み

微小元素	吸収端エネルギー [eV]	フィッティング範囲 [eV]	Be 厚み [ $\mu\text{m}$ ]	微小元素厚み [nm]	参照厚み <sup>a</sup> [nm]
Cr	5989	5500–6050	$247.93 \pm 0.04$	$1.1 \pm 0.2$	12
Mn	6539	6510–6900	$253.08 \pm 0.26$	$< 0.3$	1
Fe	7112	7000–7500	$251.41 \pm 0.22$	$14.5 \pm 0.2$	12
Ni	8333	8200–8450	$259.70 \pm 0.23$	$8.6 \pm 0.2$	5
Cu	8979	8800–9180	$275.63 \pm 0.07$	$0.8 \pm 0.1$	1

<sup>a</sup> Materion 社による微小元素測定を厚み換算した結果を表す。

## 6.2.2 BDF

前項で微小元素 Cr, Mn, Fe, Ni, Cu による吸収を含んだモデルを作成した。2.4–12.0 keV 帯で、測定透過率カーブとモデルカーブを図 6.10 にプロットする。プロット色ごとに異なるデータセット計 8 つを用いており、それぞ

れのデータセット間のずれは、高エネルギー側の測定データに合致するように定数倍することにより補正している。Be の厚みは 10.0–12.0 keV でのフィッティングで決定した 245.45  $\mu\text{m}$  を用いている。

紫線は BDF が現れるエネルギーを表しており、括弧内数字は BDF を起こす結晶面 ( $hkl$ ) を表している。あるエネルギーにおいて、通常の散乱はあらゆる方向に散乱している。しかし、そのエネルギーがある結晶面 ( $hkl$ ) の格子間隔  $d_{hkl}$  に対応する Bragg 条件を満たしていると、極端な異方性を持った干渉性散乱を起こす。各結晶面に対し、 $2\theta = 180^\circ$  の Bragg 反射を起こす入射エネルギーを BDF エネルギー  $E_{hkl}$  と呼ぶ (式 A.7)。図 6.10 では、3.5, 6.1 keV 付近に顕著な BDF が見られる。

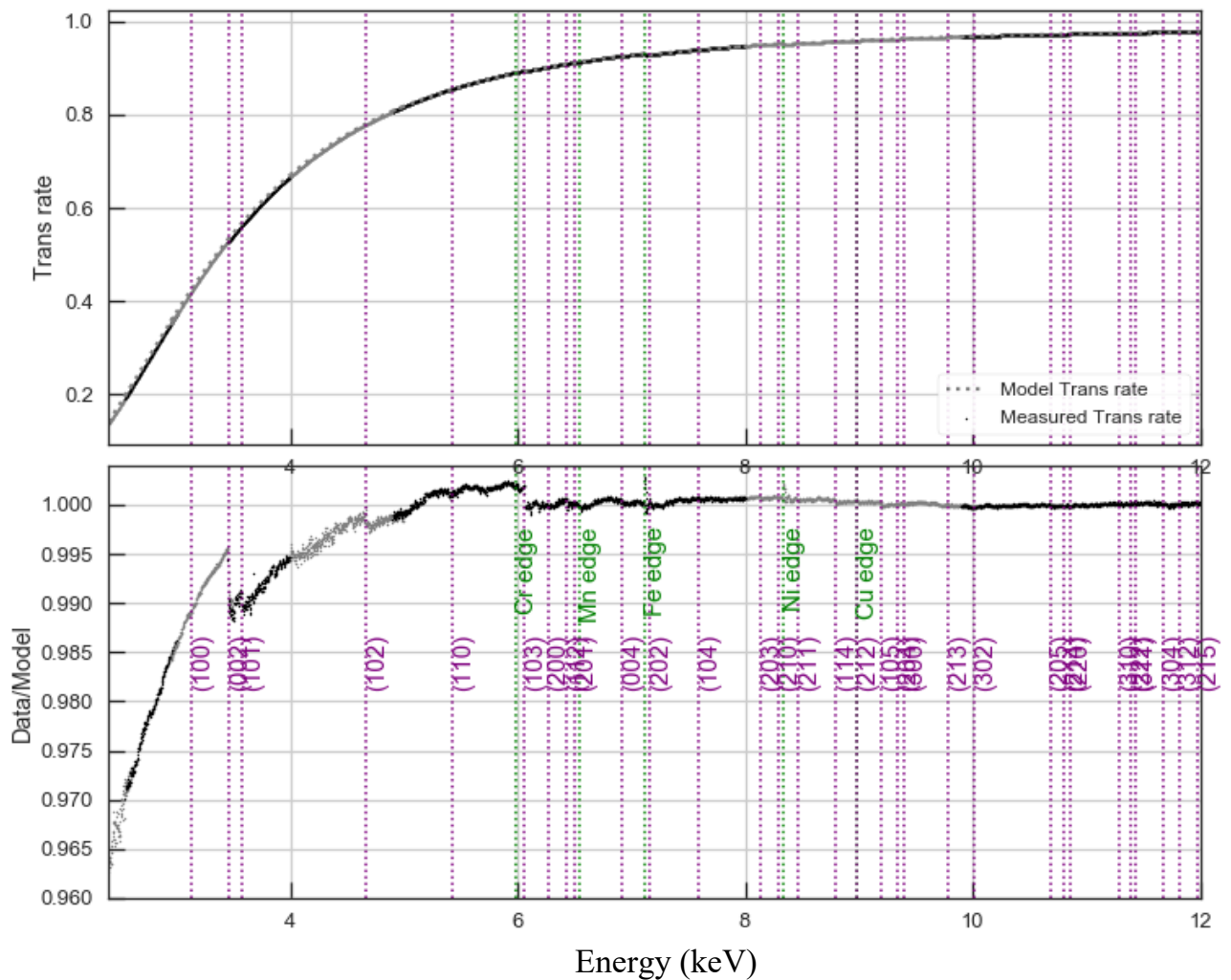


図 6.10: 微小元素を含めたモデルを用いた 2.4–12.0 keV での Be 窓透過率カーブ。Be の厚みは高エネルギー側で残差が小さくなるように設定している。測定データセット間のズレが可視化できるように黒色と灰色で交互にプロットしている。

低エネルギー側での残差は BDF モデルが組み込まれていないことに由来すると考えられる。また残差から BDF 近傍で局所的に補正すればよい訳ではなく、 $E_{\text{BDF}}$  以下を全体的に補正する必要があることがわかる。BDF は干渉性散乱の異方性がエネルギー依存性を持つことに起因すると考えているので、干渉性散乱断面積をパラメータにしてモデル化していく。散乱断面積は散乱係数  $\mu$  と厚み  $t$  の積で表される。散乱係数 (質量あたりの散乱断面積) は

原子に固有な値であり、Be の散乱係数は付録図 A.5 のように与えられる。これは結晶を成さない原子に対する値である。結晶に対しては、散乱光同士の干渉により実効的に散乱断面積が増減する。ここでは散乱係数  $\mu$  は付録図 A.5 の値を用い、Be の干渉性散乱の実効的厚み  $t_{\text{Be,coh}}$  をエネルギー依存のパラメータとして扱うことで干渉性散乱断面積の増減を表現する。干渉性散乱の厚みがエネルギー依存性を持つと仮定すると、同様に非干渉性散乱の厚みもエネルギー依存性を持つのではないかと考えられる。しかし、付録図 A.5 より、BDF の効いてくる低エネルギー側での非干渉性散乱は、光電吸収に比べ 2,3 桁小さく、フィッティングで決めることができない。非干渉性散乱の影響は無視できなくなってくる 8–12 keV の帯域でフィッティングしたところ  $t_{\text{Be,photo}}$  と  $t_{\text{Be,inc}}$  は同じ値で矛盾がなかったため、両者は全エネルギー帯で同じとし、 $t_{\text{Be,photo+inc}} = t_{\text{Be,photo}} = t_{\text{Be,inc}}$  と 1 つのパラメータで代表させた。

以下では、エネルギー依存のない光電吸収及び非干渉性散乱の厚み  $t_{\text{Be,photo+inc}}$  とエネルギー依存のある干渉性散乱の厚み  $t_{\text{Be,coh}}(E)$  をパラメータとし、BDF のモデリングを行う。式 6.5 に Be 窓全体の透過率モデルを示す。それぞれの成分については式 6.6 にモデル式を示す。

$$T_{\text{Be}}(E) = T_{\text{Be,photo+inc}}(E) * T_{\text{minor,photo}}(E) * T_{\text{BDF}}(E) \quad (6.5)$$

$$\left. \begin{aligned} T_{\text{Be,photo+inc}}(E) &= \exp\{-t_{\text{Be,photo+inc}} * \rho_{\text{Be}} * (\mu_{\text{Be,photo}}(E) + \mu_{\text{Be,inc}}(E))\} \\ T_{\text{minor,photo}}(E) &= \prod_{\text{minor}} \exp\{-t_{\text{minor,photo}} * \rho_{\text{minor}} * \mu_{\text{minor,photo}}(E)\} \\ T_{\text{BDF}}(E) &= \exp\{-t_{\text{Be,coh}}(E) * \rho_{\text{Be}} * \mu_{\text{Be,coh}}(E)\} \end{aligned} \right\} \quad (6.6)$$

図 6.10 では高エネルギー側で Be の光電吸収厚みを合わせたので、低エネルギー側にエネルギー依存の大きな残差が生まれている。図 A.5 からわかるように、散乱の寄与は光電吸収より桁で小さいので、散乱のみではこのような斜めの残差を説明することはできない。低エネルギー側では特に光電吸収が顕著であることを考慮し、2.0–3.4 keV での残差が小さくなるように光電吸収及び非干渉性散乱の厚み  $t_{\text{Be,photo+inc}}$  を 252.5  $\mu\text{m}$  に設定し、プロットしたのが図 6.11 である。図 6.10 と比較して、残差のエネルギー依存性が減少したが、いまだ不連続な構造はモデリングできていない。

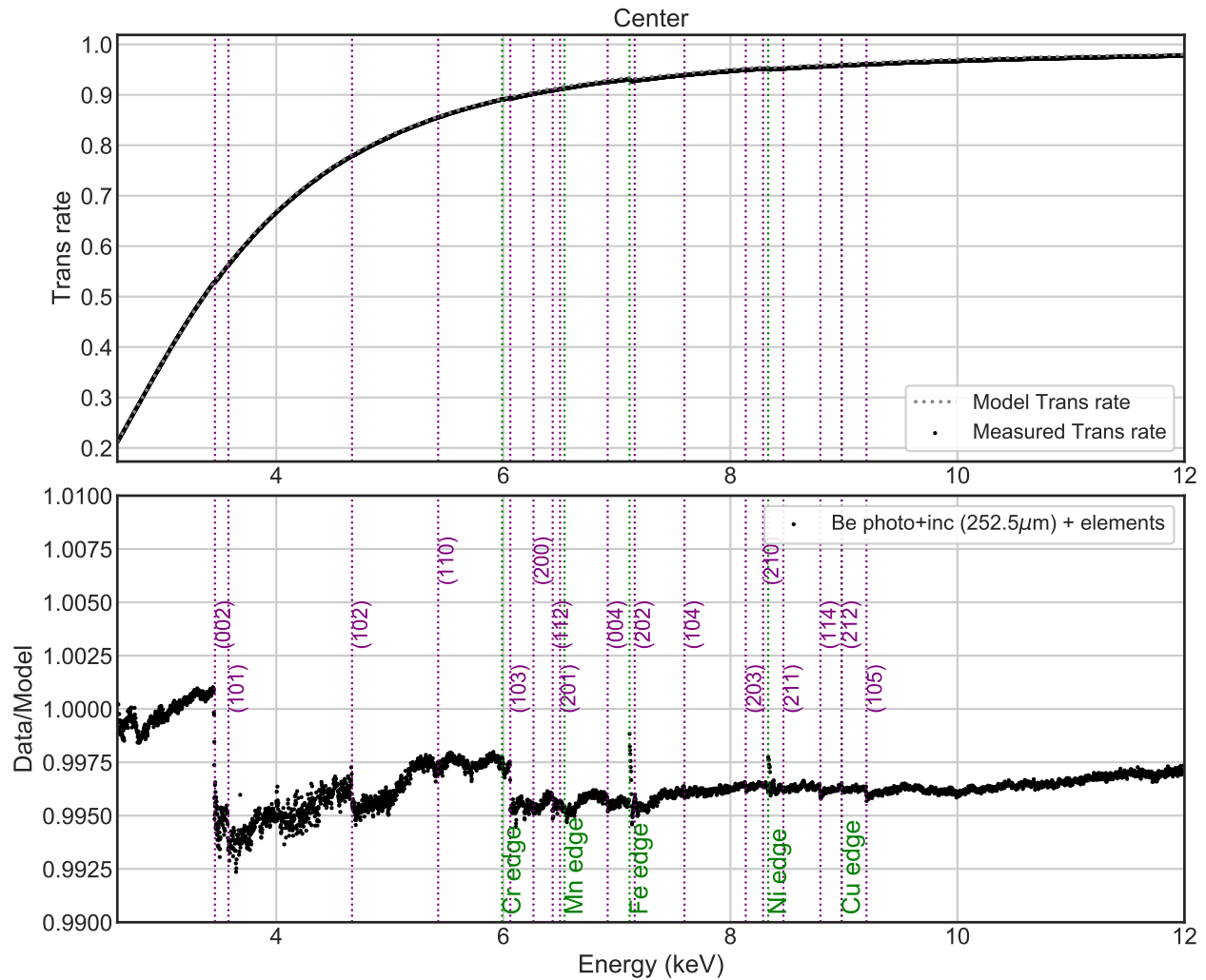


図 6.11: Be、微小元素による光電吸収と Be による非干渉性散乱（共に 252.5  $\mu\text{m}$ ）を取り込んだモデルを用いた 2.6–12.0 keV での Be 窓透過率カーブ。Be の光電吸収及び非干渉性散乱の厚みは低エネルギー側で残差が小さくなるように設定している。

次に BDF エネルギーの前後でフィッティングすることによって、散乱厚み  $t_{\text{Be,coh}}$  を決定する。式 6.6 にて、 $\rho_{\text{Be}} * \mu_{\text{Be,coh}}(E) = \alpha(E)$  と置くと、 $\alpha(E) \ll 1$  より

$$T_{\text{BDF}}(E) \sim 1 - \alpha(E) t_{\text{Be,coh}}(E) \quad (6.7)$$

と表される。これは透過率なので、散乱率は  $1 - T_{\text{BDF}}(E) \sim \alpha(E) t_{\text{Be,coh}}(E)$  とかける。付録 A.6 節での議論から、ある結晶面での散乱強度は入射エネルギーのマイナス二乗に比例することがわかっている。つまり、入射エネルギーが  $E_0$  のときの散乱断面積を  $t_0$  とすると、 $E_0 < E < E_1$  において、 $\alpha(E) t_{\text{Be,coh}}(E) \sim \alpha(E) t_0 (E/E_0)^{-2}$  と近似できる。したがって、BDF エネルギーの直後での散乱厚み  $t_0$  をフリーパラメータにして測定透過率とのフィッティングが可能である。

図 5.36 にある結晶面での BDF の他に、8.2 keV 以上で顕著な構造の見た (114), (105) 面の BDF エネルギーを境界に設定し、各エネルギー帯域で独立にフィッティングを行なった。付録図 A.5 からわかるように、光電吸収と  $E^{-2}$  の依存性を加えた干渉性散乱は類似したエネルギー依存性を持つため、両者を区別することができない。また、

(002) 面での BDF エネルギー (3.46 keV) 以下には顕著な BDF 構造はないので、 $t_{\text{Be,coh}} = 0$  とした。9.2–12.0 keV 帯では表 A.3 からわかるように高密度で BDF が存在する。しかし各段を制限するほどのデータはないので、簡単のため  $t_{\text{Be,coh}}(E)$  はエネルギーによらず一定にした。求めた  $t_{\text{Be,coh}}$  を表 6.2 にまとめる。横軸にエネルギー、縦軸に決定した  $t_{\text{Be,coh}}$  をとったプロットを図 6.12 に示す。落差  $\Delta t_{\text{Be,coh}}$  が大きいほど、BDF の構造が顕著であることに対応している。

表 6.2: BDF エネルギー前後での Be の干渉性散乱の厚み

ミラー指数 $hkl$	BDF エネルギー [keV]	フィッティング範囲 [keV]	干渉性散乱の厚み $t_{\text{Be,coh}}$ [ $\mu\text{m}$ ]	BDF エネルギー前後での <sup>b</sup> $t_{\text{Be,coh}}$ の差 $\Delta t_{\text{Be,coh}}$ [ $\mu\text{m}$ ]
100	3.1326	N/A	0 <sup>a</sup>	0
002	3.4596	3.47–3.57	115.2 $\pm$ 1.6	115.2
101	3.5785	3.59–4.66	150.5 $\pm$ 0.8	42.8
102	4.6671	4.67–5.42	123.5 $\pm$ 0.8	35.0
110	5.4259	5.43–6.05	88.5 $\pm$ 0.7	0.02
103	6.0616	6.07–6.25	158.2 $\pm$ 1.1	85.0
200	6.2653	6.27–6.43	156.0 $\pm$ 0.9	7.9
112	6.4350	6.44–6.49	159.4 $\pm$ 1.4	11.3
201	6.4999	6.51–6.91	167.9 $\pm$ 0.6	11.9
004	6.9191	6.93–7.1	171.2 $\pm$ 0.6	23.0
202	7.1569	7.16–7.59	178.0 $\pm$ 0.5	18.1
104	7.5953	7.6–8.13	172.7 $\pm$ 0.4	14.6
203	8.1353	8.14–8.78	178.6 $\pm$ 0.9	28.1
114	8.7929	8.8–9.19	192.9 $\pm$ 0.5	40.1
105	9.1988	9.2–12.0	208.0 $\pm$ 0.2	31.7

<sup>a</sup> (002) 面での BDF エネルギー以下では  $t_{\text{Be,coh}} = 0$  とした。

<sup>b</sup> 図 6.12 における青線の段差深さを表す。

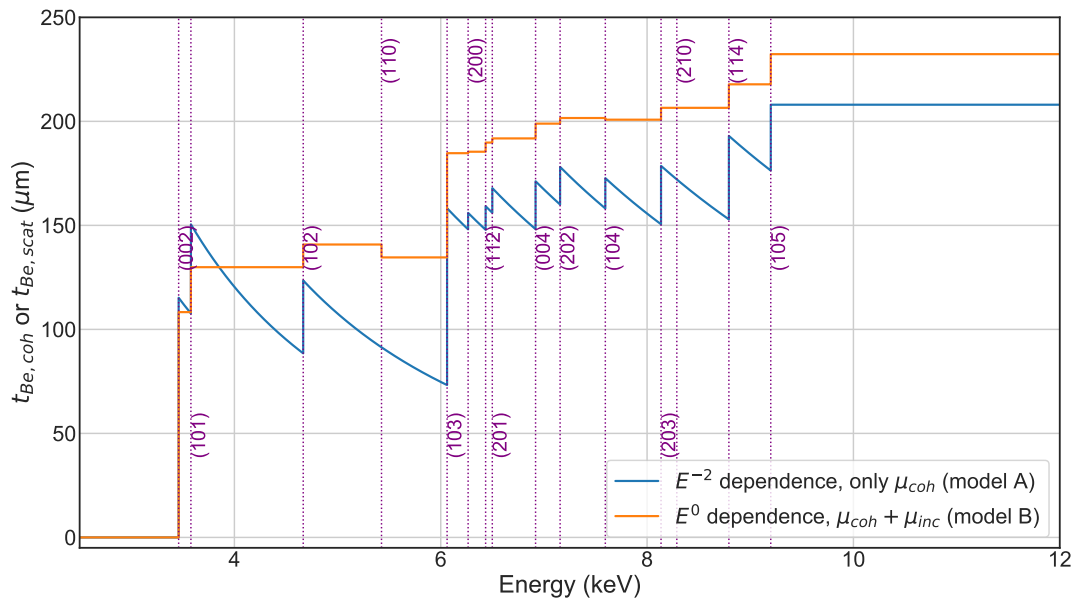


図 6.12: 青線は BDF エネルギー前後でのフィッティングで決定した干渉性散乱厚み  $t_{\text{Be,coh}}$  を表す。付録 A.6 節での議論に倣い、入射エネルギーのマイナス二乗に比例するモデル（後述のモデル A）を用いた。橙線は入射エネルギーの 0 乗に比例するモデル（後述のモデル B）を仮定した際の散乱厚み  $t_{\text{Be,scat}} (=t_{\text{Be,coh}}=t_{\text{Be,inc}})$  を表す。

Be と微小元素 (Cr, Mn, Fe, Ni, Cu) の光電吸収に加え、Be の散乱を上記で決定した  $t_{\text{Be,coh}}$  を用いてモデル化した透過率カーブを図 6.13 に示す。全エネルギー帯域で残差が 0.2% 以内に抑えられており、表 2.3 に挙げた要求較正精度 1%（連続成分）、5%（微細構造）を遥かに上回っていることがわかる。したがって、このモデルを Resolve Be 窓の透過率カーブとして採用する。



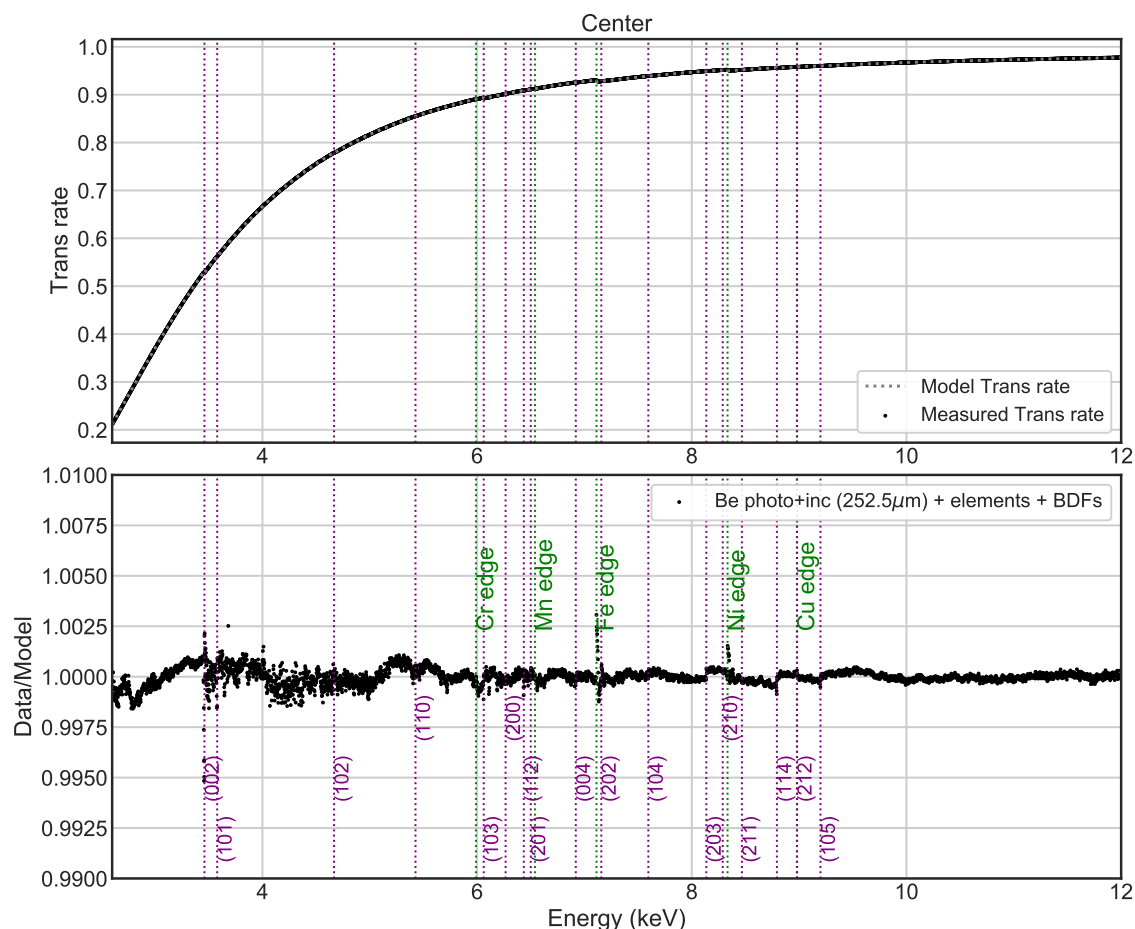


図 6.13: 2.6–12.0 keV 帯において、Be と微小元素の光電吸収に Be の干渉性及び非干渉性散乱を加味した透過率カーブ。表 2.3 に挙げた要求校正精度 1%（連続成分）、5%（微細構造）を遙かに上回っている。よって、このモデルを 10–40000 eV に外挿したものを Resolve Be 窓の透過率カーブとして採用する。

BDF とは、X 線回折ピークの回折角が  $2\theta = 180^\circ$  を満たすエネルギーで、干渉性散乱厚みが実効的に増大する現象であると考えている。表 6.2 右端列の「BDF エネルギー前後での  $t_{\text{Be,coh}}$  の差  $\Delta t_{\text{Be,coh}}$ 」は、それぞれの結晶面での BDF の深さに対応している。つまり、 $\Delta t_{\text{Be,coh}}$  は、5.4 節で行なった X 線回折測定での回折ピーク強度と相関をもつことが予想される。そこで、図 5.36 に各結晶面 ( $hkl$ ) に対応する  $\Delta t_{\text{Be,coh}}$  を追加プロットし、回折測定で得られたピーク強度と比較した（図 6.14）。測定結果とシミュレーション結果にはローレンツ補正因子と偏光補正因子  $LP$  が含まれている。ゲートバルブ透過率測定から求めた BDF 深さ  $\Delta t_{\text{Be,coh}}$  にはこれらの因子は含まれていないため、強度比較するためには他の結果と整合性を保つため  $LP$  を掛け合わせる必要がある（A.5 節参照）。こうして求めた値を (101) 面での値で規格化してプロットした。図 6.11 の残差で顕著に見えている (002), (103) 面の BDF をはじめとして、BDF 構造の深い結晶面では、回折測定結果（青点、黄点）と透過率測定から算出した値（赤点）が近いことが見てとれる。これらの面については、完全結晶を仮定したシミュレーション結果（緑点）よりは、再現度の高い結果となった。これより、Be 結晶面の方向性に非一様性が存在すること、BDF の物理描像が大きく間違っていないことが示唆される。

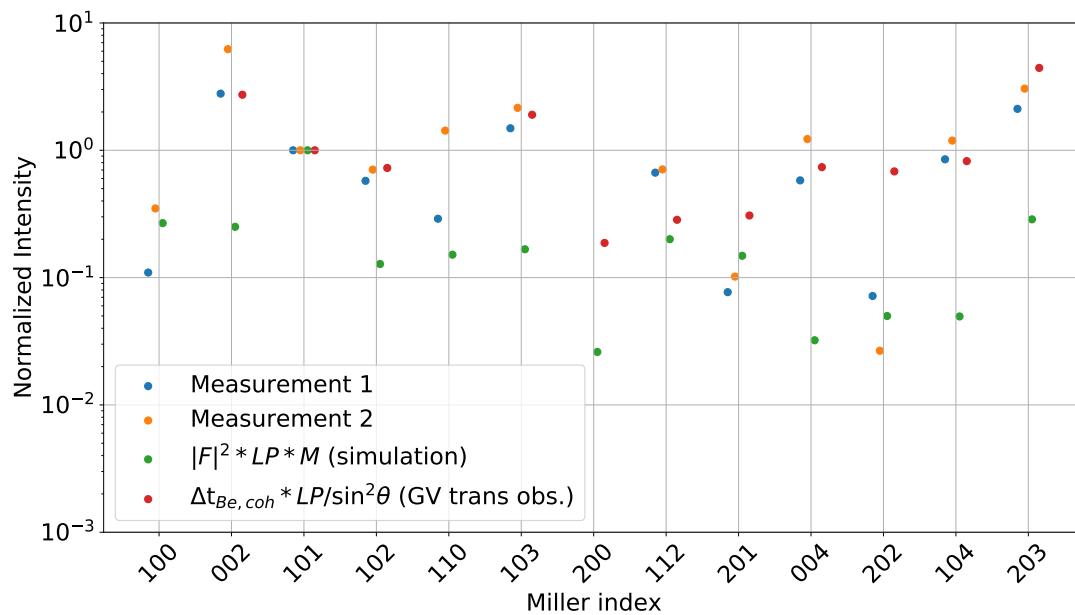


図 6.14: Be 窓透過率測定から得られた BDF の深さと X 線回折測定でのピーク強度の比較。BDF エネルギー前後での  $t_{\text{Be,coh}}$  の差  $\Delta t_{\text{Be,coh}}$  にローレンツ補正因子  $L$  と偏光補正因子  $P$  を掛け合わせ、回折測定、完全結晶を仮定したシミュレーション結果と比較している (A.5 節参照)。(114), (105) 面での散乱は回折測定に用いた Cu  $K\alpha$  のエネルギー (8.27 keV) を超えているので、ここでは比較できなかった。尚、散布点が重ならないように少し左右にずらしている。

これで 12 keV 以下では、測定データを高い精度で再現する結晶学的にも尤もらしいモデルが得られた。較正データベースに採用する透過率モデルでは、SXS の較正データベースに従い 10–40000 eV まで値を外挿する必要がある。この時、12 keV 以下では目立たなかった系統誤差が、40 keV まで外挿することで初めて顕著になることも考えられる。そこで、現象論的なモデルをいくつか試行した。すなわち、 $t_{\text{Be,coh}}(E) \propto E^\beta$  として、 $\beta = -2$  の代わりに  $\beta=2, 1, 0, -1$  とした。また、それぞれにおいて非干渉性散乱の扱いを変化させたいくつかのモデルを試行した。その結果、12 keV 以下のデータだけでほとんどのモデルが棄却されることが分かった。残ったのは 2 つ — 上述した物理的に尤もらしいモデル (モデル A) と、 $\beta=0$ 、 $t_{\text{Be,photo}}=253.5 \mu\text{m}$  かつ干渉性散乱と非干渉散乱を同じ重みで足したモデル (モデル B) — である。図 6.12 にはモデル B の結果も載せた。モデル A, B を 40 keV まで外挿したところ、実際の透過率モデルの差異は 0.3% 以下に収まった。そこで、較正データベースを構築する際 (6.3 節) はモデル A を用いるものの、観測の効果を見る考察 (6.4.1, 6.4.2 項) ではより簡便なモデル B を用いる。

### 6.3 ゲートバルブ全体のモデリング

6.1, 6.2 節でステンレスメッシュと Be 窓の透過率モデリングが完成した (図 6.2 緑線、図 6.13)。3 章で述べたように、これらの 2 つの要素が二層に重なることによって完成したゲートバルブが実際に Resolve デュワーの最上部に設置される。つまり、最終的に得たい透過率は 2 つの要素の透過率をかけ合わせたものである。

Be 窓の透過率を  $T_{\text{Be}}(E)$ 、ステンレスメッシュの透過率を  $T_{\text{mesh}}(E)$  とすると、統合後の透過率  $T(E)$  は以下の式で表される。

$$T(E) = T_{\text{Be}}(E)\{f + (1 - f)T_{\text{mesh}}(E)\} \quad (6.8)$$

ここで  $f$  はステンレスメッシュの開口率である。

(100) 面の BDF エネルギー 3.13 keV が最も低いエネルギーなので、2.4 keV 以下には構造はないと仮定し、それより低いエネルギーでの  $t_{\text{Be,coh}}$  は 0 とする。また、図 A.4 より、入射 X 線のエネルギーが高いときに原子散乱因子  $f$  が小さくなり、結果的に結晶構造因子  $F_{hkl}$  が小さくなるため、回折強度は弱くなる。つまり、X 線エネルギーが高くなるにつれ、BDF の深さは浅くなっていく。故に、散乱のフィッティングで考慮した最高エネルギーである (105) 面の BDF エネルギー 9.2 keV 以上で起こる BDF は無視することにする。また、9.2–12.0 keV の  $t_{\text{Be,coh}}(E)$  をエネルギーによらず一定にしたように、外挿する際は  $E^{-2}$  の依存性は持たせない。

252.5  $\mu\text{m}$  の Be による光電吸収及び非干渉性散乱、表 6.1 で得られた有意な厚みをもつ微小元素の光電吸収、6.2 で得られた厚みをもつ Be の干渉性散乱の 3 つを考慮した Be 窓の透過率モデル  $T_{\text{Be}}(E)$  と、開口率 72.3% のステンレスメッシュの透過率モデル  $T_{\text{mesh}}(E)$  のそれぞれを式 6.8 に代入してゲートバルブ全体の透過率モデルを作成した。10–40000 eV のエネルギー範囲、0.25 eV 刻みになるように線形内挿・外挿した。その結果を図 6.15 に示す。

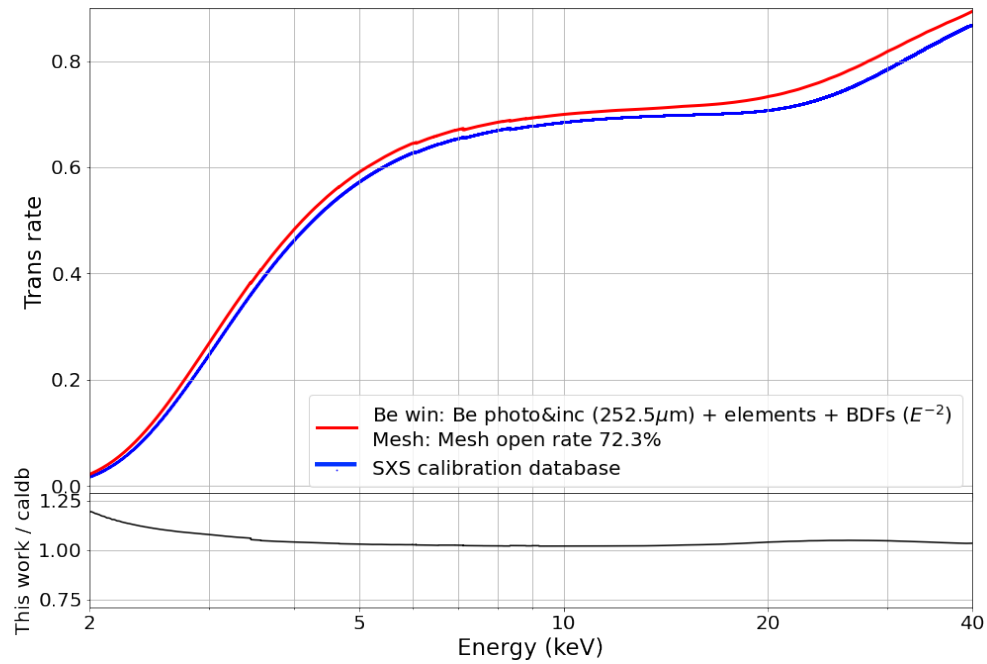


図 6.15: Be 窓とステンレスメッシュを組み合わせたゲートバルブ透過率カーブ。エネルギー範囲は 2.0–40.0 keV でプロットしている。青線がこれまで用いられていた SXS ゲートバルブの校正データベースに入っている透過率カーブ、赤線が本研究で作成した透過率カーブである。下パネルに示された 2 つの透過率の比から、低エネルギー側でモデルが顕著に異なること、15 keV 以上にて透過率比が大きくなっていることが読み取れる。前者は BDF モデルの改善により、後者はメッシュワイヤの形状を正方形から円形に変更したことに起因する。

## 6.4 Resolve ゲートバルブの軌道上較正計画立案

本節では、XRISM 衛星打ち上げ後の天体観測データを用いた軌道上透過率較正計画について議論する。打ち上げからゲートバルブを開けるまでの数ヶ月程度の間に行うことのできる初期較正計画を 6.4.1 項に、ゲートバルブ閉栓後の天体スペクトルを閉栓時のものと比較することで、実効的なゲートバルブ透過率カーブを取得及び検証する最終較正計画を 6.4.2 項にて述べる。本節では Be 透過率モデルとして、より簡便なモデル B を用いる。

### 6.4.1 ゲートバルブ閉栓時の軌道上較正計画

3.4 節で述べたように、衛星打ち上げから数か月経ち汚染ガスの放出が落ち着いた後、ゲートバルブは開けられる。その間も 2 keV 以上の X 線は一部透過するため、天体観測が可能である。Be 窓については 5.1, 5.2 節でフライト品を用いた透過率測定を行なっているが、ステンレスメッシュについては SXS のフライトスペア品を用いて透過率測定を行なった。6.1 節の結果として、ステンレスメッシュの開口率は設計図上の値である 71% に対し、数 % の不定性があることがわかった。そのため、Resolve フライト品のステンレスメッシュ開口率を求めるには、軌道上での透過率較正が必要である。また、図 5.21 より、Be 窓の厚みには空間的に非一様性が存在することがわかっている。さらに、BDF の深さ、つまりは散乱厚みについても、図 5.36 より、X 線照射場所・向きに応じてある程度の不定性が予想される。本項では、ゲートバルブ閉栓時の軌道上観測より、これら 3 つのパラメータの値を検証できるか調べる。

手順としては、いくつかのパラメータで透過率モデリングを行い、対応する Ancillary Response File (ARF ファイル) を作成する。ARF ファイルとは、検出器の検出効率と望遠鏡の光学系応答を反映した、有効面積のエネルギー依存性を補正するファイルである。複数の ARF ファイルを用いてスペクトル解析を行うことで、パラメータをどの程度の精度で決定することができるのかシミュレーションを行なう。

この際、天体のスペクトルが時間変動していると、透過率モデル由来の残差なのかスペクトルの変動由来の残差なのか縮退してしまい、透過率較正を行うことができない。そのため、ターゲット天体のスペクトルモデルに時間変動がなく既知であることが必要条件として挙げられる。その他、以下の要求を全て満たすようなターゲット天体を選定する。

- 時間変動がほとんどなく、これまでの観測で標準的なスペクトルモデルが確立されている。
- 熱プラズマによる輝線などがなく、単純な power-law と星間吸収のみでスペクトルが記述される。
- ゲートバルブ閉栓時は 2.0 keV 以上にしか感度を持たないので、2.0 keV 以上である程度明るい。

時間変動の小さい天体の 1 つにパルサー風星雲が挙げられる。多くのパルサー風星雲には熱的プラズマ放射は観測されておらず、比較的シンプルな power-law のみでスペクトルを説明できる天体が多い。そのため、我々は SXS でも観測を行なった最も明るいパルサー風星雲である「かに」星雲をターゲット天体を選定した。スペクトル解析には NASA が提供している X 線スペクトル解析ソフト XSPEC<sup>\*4</sup>を用いた。XSPEC では、FITS 形式ファイルで天体のスペクトルデータおよび検出器の応答関数を読み込み、応答関数が補正されたエネルギースペクトルを出力することができる。さらに、XSPEC の fake コマンドでは、スペクトルモデル、検出器の応答関数、観測時間を入力すると、予想されるエネルギースペクトルを出力することができる。

本解析では fake コマンドを用いて、「かに」星雲の標準モデル、Resolve の応答関数を考慮した 100ksec 観測の「かに」星雲擬似スペクトルを作成する。応答関数には先ほど説明した ARF ファイルと Response Matrix File(RMF ファイル)が含まれる。RMF ファイルは検出器上でのチャンネル波高値とエネルギーの変換を行う行列

<sup>\*4</sup> <https://heasarc.gsfc.nasa.gov/xanadu/xspec/>

形式のファイルである。チャンネルとエネルギーが線形の間隔を保っていると対角成分のみが必要となるが、実際の RMF ファイルには非対角成分が存在する。図 2.1 では、ゲートバルブにより吸収されるはずの 2.0 keV 以下の X 線がスペクトル上に存在することが確認できる。これは RMF ファイルの非対角成分に由来しており、低エネルギー側に裾を引いているため *low energy tail* と呼ばれる。

本研究では *low energy tail* 等を考慮した RMF ファイルとゲートバルブの透過率モデルに応じた ARF ファイルを読み込ませることで、「かに」星雲擬似スペクトルを作成した。標準モデルには、水素柱密度  $N_H = 0.42 \times 10^{22} \text{ cm}^2$  の星間吸収とべき  $\Gamma = 2.10$ 、強度  $Norm = 8.70$  の power-law を加味したモデル<sup>15</sup>を採用した。

### ステンレスメッシュ開口率

図 6.16 の上パネルにステンレスメッシュ開口率を変化させた時のスペクトル変化の様子を示す。黒線が設計値である開口率 71% を、緑線と赤線がそれぞれ 72% と 70% のステンレスメッシュ開口率を仮定した ARF ファイルを用いた「かに」星雲の模擬スペクトルである。下パネルは、3 つの模擬スペクトルと、設計値である 71% の開口率を仮定したモデルスペクトルとの残差を示している。残差を見ると、モデルスペクトルより 1% 大きい開口率を仮定している緑線は、全体的にモデルスペクトルより強度が大きい傾向にあり、開口率が大きいとより X 線が透過するという直感に合った結果となっている。同様に、モデルスペクトルより 1% 小さい開口率を仮定している赤線は比較的強度が小さい様子が見て取れ、結果的に開口率は 1% ほどの精度で判別できるように考えられる。

しかし、このシミュレーションはモデルが完全に既知であるという理想的な条件を仮定したものである。図 6.2 からわかるように、このエネルギー帯ではステンレスメッシュの透過率にエネルギー依存性はない。実際の観測では、全体的なスペクトル強度を一意に決定することは難しく、開口率起因の残差かどうかは閉栓時の観測から判断することはできない。この縮退を解くには、ゲートバルブ閉栓時と開栓時のスペクトル比較が有効だと期待されるため、次項にて議論する。

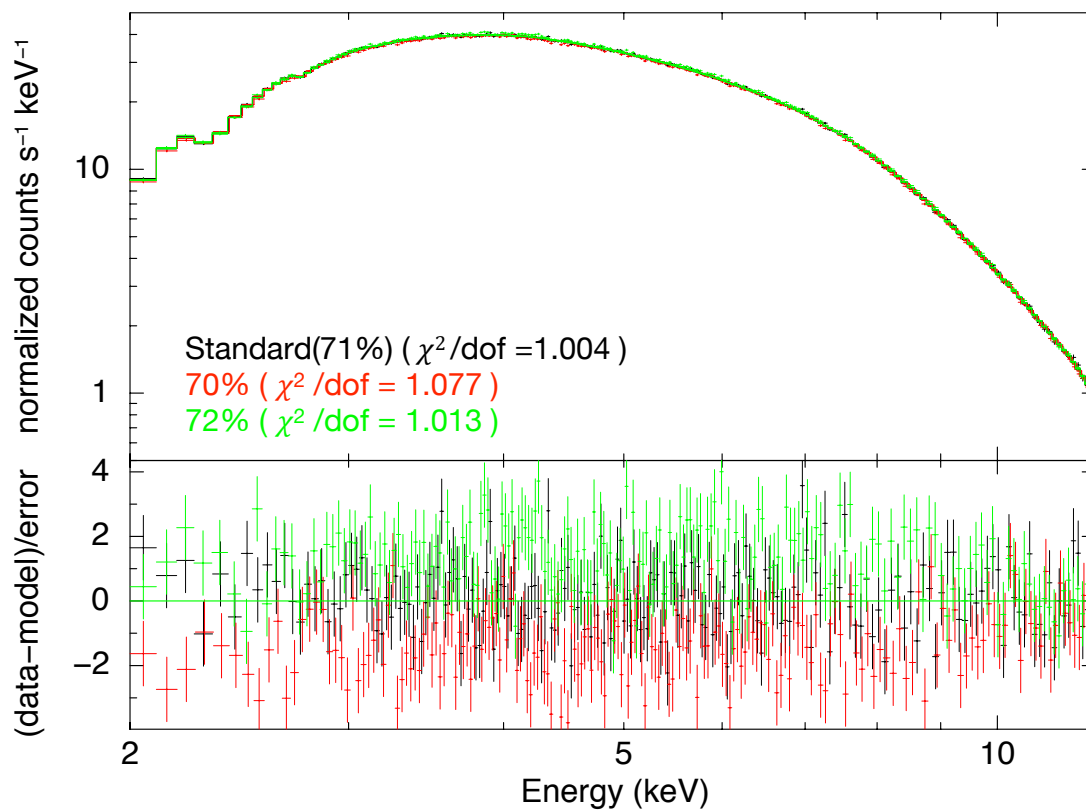


図 6.16: 2.0–12.0 keV におけるステンレスメッシュ開口率をパラメータにした「かに」星雲のスペクトル。



### Be の光電吸収厚み

次に、Be 窓の厚みについて天体観測データからどの程度制限をつけることができるか、以下でシミュレーションを行う。図 5.21 の 4000 eV での透過率マッピングを見ると、透過率はおよそ 66% から 69% の間に分布しており、 $\pm 1.5\%$  ほどの位置依存性が存在することがわかる。66–69% の透過率に対応する Be の厚みは 268–240  $\mu\text{m}$  であり、 $\pm 5.5\%$  の不定性が生じていることがわかる。6.3 で述べたように、Be の光電吸収に対する厚みのベストフィット値は 253.5  $\mu\text{m}$  である。以下では、 $\pm 3\%$  ほどの精度で軌道上パラメータ決定できるか確認するため、ベストフィット値の他に 252.5  $\mu\text{m}$ , 254.5  $\mu\text{m}$ , 250.0  $\mu\text{m}$ , 260.0  $\mu\text{m}$  の 5 つのモデルを作成し検証する。

5 種類の Be 厚みを仮定した透過率モデルを用いて作成した「かに」星雲の擬似スペクトルを図 6.17 に示す。Be の光電吸収のエネルギー依存性は 2.0–5.0 keV で変動率が最も大きいので、そのエネルギー帯でプロットしている。残差を見ると、1  $\mu\text{m}$  しか差異のない赤線、緑線はベストフィット値を用いた黒線とほとんど違いが見受けられない。だが、3.5  $\mu\text{m}$  薄い Be を仮定している青線では 2.0–3.0 keV 付近でモデルスペクトルより強度が大きいことが確認できるようになっている。さらに 6.5  $\mu\text{m}$  分厚い Be を仮定している水色線では 2.0–3.0 keV 付近でモデルスペクトルより顕著に強度が小さく出ていることがわかる。よって、ゲートバルブ閉栓時の「かに」星雲の観測から 5  $\mu\text{m}(\pm 2\%)$  程度の精度で厚みを決定できると推測される。

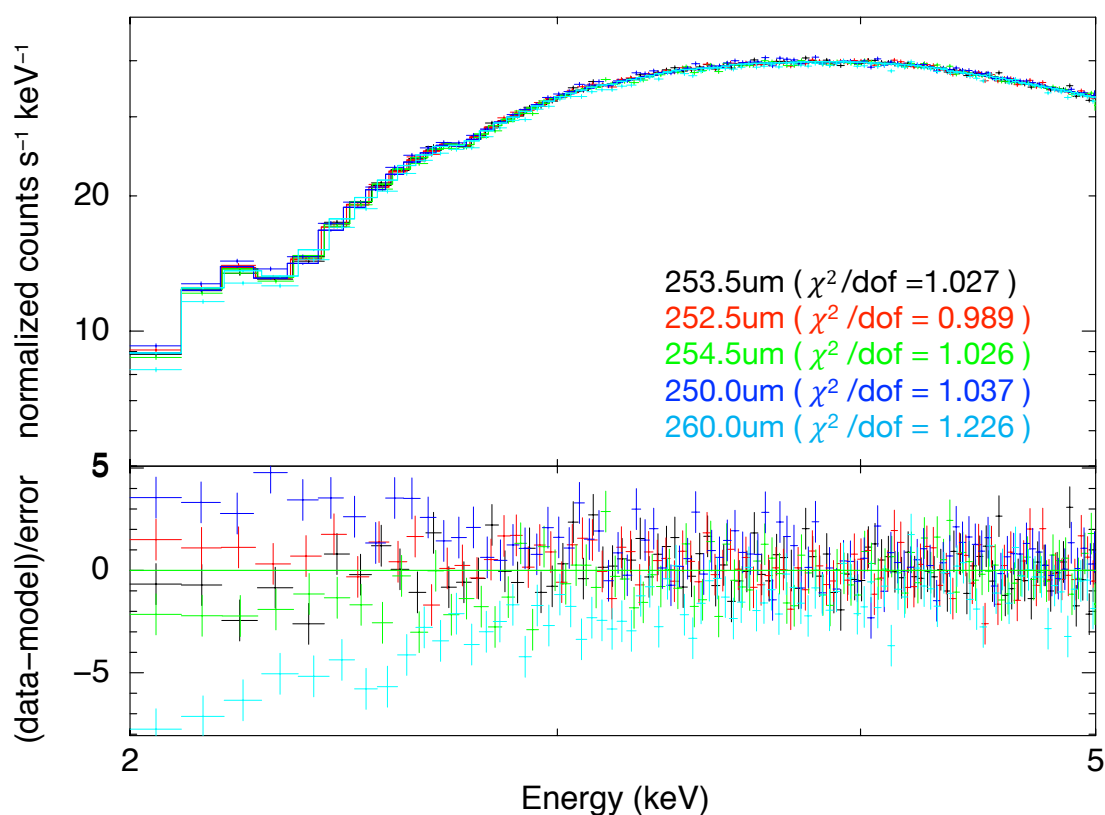


図 6.17: 光電吸収厚みをパラメータにした「かに」星雲のスペクトル。横軸は Be 窓の透過率変化の激しい 2.0–5.0 keV 帯で表している。

## BDF の深さ

次に、BDF の深さについてどの程度制限をつけることができるか検証する。図 5.36 より、各結晶面での回折ピーク強度は 2 回の測定でファクター 2 程度の測定誤差を持つことがわかった。つまり、6.2.2 項の議論より、BDF の厚みにファクター 2 程度の不定性があることが示唆される。そこで以下では、BDF の厚みを軌道上で決定できるか確認するため、図 6.12 に示した散乱厚み  $t_{\text{Be,scat}}$  の他に、全エネルギー帯で算出値の半分にして光電吸収に加えたモデルと 2 倍にして加えたモデルを用意し検証する。3 種類の  $t_{\text{Be,scat}}$  を仮定した透過率モデルを用いて作成した「かに」星雲の擬似スペクトルを図 6.18 に示す。 $t_{\text{Be,scat}}$  を全体的に半分にしたもの（赤線）、2 倍の厚みにしたもの（緑線）で表している。残差を見ると、モデルによる差異は誤差の範疇に埋まっており、見た目では判断することができない。カイ二乗値を求めても半分の  $t_{\text{Be,scat}}$  がむしろベストフィット値を用いたモデルより小さく出ており、この観測から  $t_{\text{Be,scat}}$  に制限をつけることは難しいということがわかった。

しかし、BDF の補正（図 6.12）を入れるべきか入れないべきかは判別できる。入れない場合、Be の厚みは  $245.45\mu\text{m}$ （図 6.10）になるが、ここは図 6.17 で明確に区別できる。

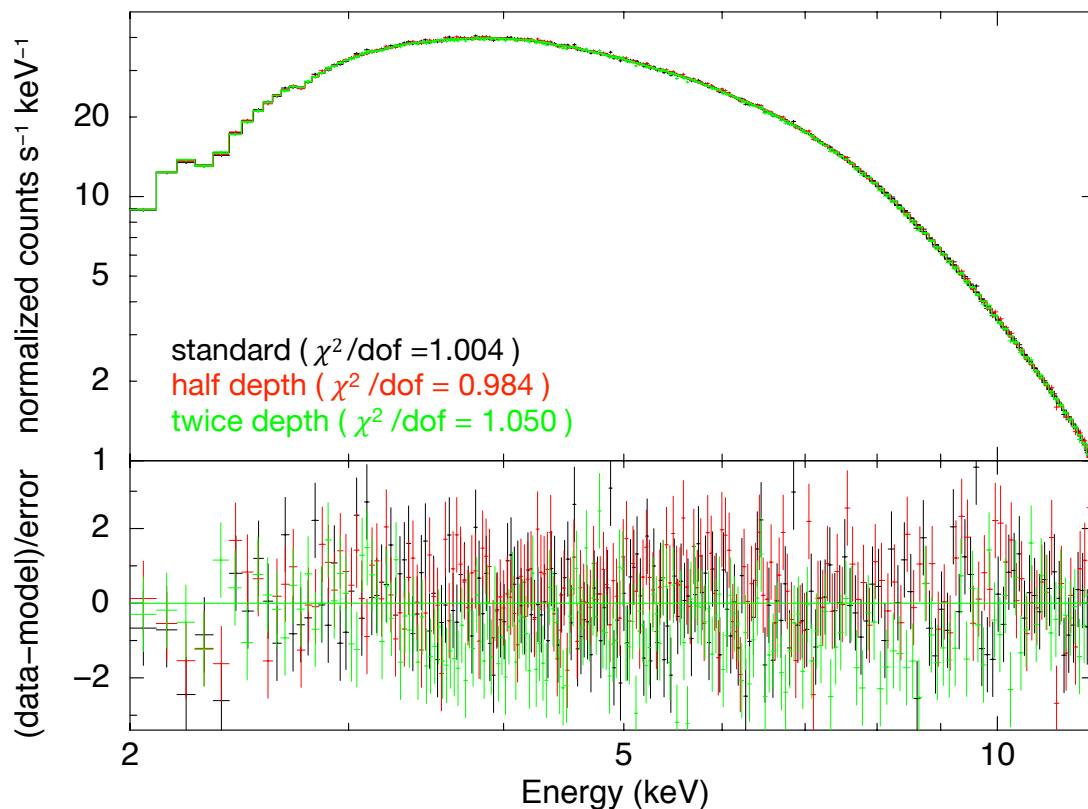


図 6.18: 2.0–12.0 keV における BDF の深さをパラメータにした「かに」星雲のスペクトル。3 つの透過率モデルによるスペクトルの差異は誤差の範囲に収まっており、この観測から制限をつけることはできない。

### 6.4.2 ゲートバルブ閉栓時の軌道上校正計画

前項で、ゲートバルブ閉栓時にどれほどの精度でパラメータの値が検証できるか議論した。しかし実際には、ゲートバルブ以外の要素の系統誤差が大きく、それらとの判別が容易でないことが予想される。ゲートバルブは軌道上で開けられるので、開栓時・閉栓時のスペクトルを比較することが可能である。開閉時のスペクトルの比をとると、スペクトル変動がないという理想的状況の元では、ゲートバルブの透過率カーブが得られるはずである。そこで本項では、ゲートバルブ開閉時のデータを比較することで、メッシュ開口率の決定及び Be 厚みと BDF 深さの地上モデルの検証を行う。

表 1.1 に Resolve の観測可能な上限カウントレートの要求値を記した。これは「かに」星雲のカウントレートの約 1/10 に相当する。よって閉栓時の観測ターゲットである「かに」星雲は、開栓時には明るすぎて観測することができない。そのため、開栓時も閉栓時も観測ができるような新たなターゲットを探さなければならない。本校正では、閉栓時のターゲット選定より多くの制約があり、以下の要求を全て満たすようなターゲット天体を選定する必要がある。

- 時間変動がほとんどなく、標準的なスペクトルモデルが確立されている。
- 熱プラズマによる輝線などがなく、単純な power-law と星間吸収のみでスペクトルが記述される。
- かに星雲ほど明るすぎないが、ある程度明るい
- 2.0 keV 以下のスペクトルが重要なので、ソフトなスペクトルかつ星間吸収が小さい。
- ゲートバルブ閉栓時にも開栓時にも観測できるよう、観測ウィンドウが広い。

我々はこれらの条件に見合った最適なターゲットを選定するため、パルサー風星雲のカタログ<sup>\*5</sup>を活用した。このカタログには、これまで X 線で検出されたパルサー風星雲が全部で 29 天体掲載されている。それぞれの天体において銀河座標、星間吸収の柱密度  $N_H$ 、X 線フラックスを調べた結果を表 6.3 にまとめる。ここで銀河座標は SIMBAD<sup>\*6</sup>のデータを用いた。

その結果、星間吸収が小さく、軟 X 線帯域でのフラックスの大きい J0540-6919 (B0540-69) と J0835-4510 (Vela X) をターゲット候補として選定した。それぞれの 0.5–20.0 keV 帯域でのスペクトルを図 6.19, 6.20 に示す。これらは共に、星間吸収が比較的小さく、べきが 1.9–2.0 と比較的大きい power-law でスペクトルを記述することができる。また名前から分かる通り、赤緯も -69 度、-45 度と大きいので観測ウィンドウが広く、NASA の viewing ツール<sup>\*7</sup>で XRISM 衛星の観測ウィンドウを調べたところ、1 年中観測可能との結果が得られている。以下で、前項で検証した 3 つのパラメータ、メッシュ開口率・Be 厚み・BDF 深さのそれぞれについて、上記で決定した 2 天体を用いて検証を行う。

<sup>\*5</sup> 以下の URL にある McGill 大学パルサー研究グループがまとめたカタログを用いた。<http://www.physics.mcgill.ca/~pulsar/pwncat.html>

<sup>\*6</sup> <http://simbad.u-strasbg.fr/simbad/sim-fbasic>

<sup>\*7</sup> <https://heasarc.gsfc.nasa.gov/cgi-bin/Tools/viewing/viewing.pl>

表 6.3: パルサー風星雲の星間吸収とフラックス。灰色塗りした天体を軌道上較正の候補天体に出した。

天体 <sup>a</sup>	G name	その他の名称	銀経	銀緯	星間吸収柱密度 $N_H$ [ $10^{21} \text{ cm}^2$ ]	吸収を受けたフラックス <sup>b</sup> [ $10^{-11} \text{ erg/s/cm}^2$ ]	エネルギー範囲 <sup>c</sup> [keV]
J0205+6449 <sup>36</sup>	G130.7+3.1	3C 58, SN1181	130.719	+3.084	3.7	1.3	0.5–10.0
J0437-4715 <sup>37, 38</sup>	G253.4-42.0		253.394	-41.964	0.1	0.19	0.1–2.4
J0534+2200 <sup>15</sup>	G184.6-5.8	Crab, SN1054	184.557	-5.784	4.2	1850	2.0–10.0
J0537-6910 <sup>39</sup>	G279.6-31.7	N157B, 30 Dor B	279.559	-31.746	5.6	0.19*	0.5–10.0
J0540-6919 <sup>40</sup>	G279.7-31.5	N158A, B0540-69	279.717	-31.516	3.7	2.61	2.0–10.0
J0633+1746 <sup>41</sup>	G195.1+4.3	Gemina	195.134	+4.266	0.1	0.08	0.3–8.0
J0835-4510 <sup>42, 43</sup>	G263.9-3.3	Vela X	263.552	-2.787	0.2	3.3*	2.0–10.0
J1016-5857 <sup>44</sup>	G284.3-1.8	3EG J1013-5915	284.079	-1.880	9.0	0.15	0.5–8.0
J1048-5832 <sup>45</sup>	G287.4+0.58	B1046-58, puppy	287.425	+0.578	9.0	0.007	0.5–10.0
J1119-6127 <sup>46</sup>	G292.2-0.5		292.151	-0.537	18.0	0.03*	0.5–10.0
J1124-5916 <sup>47</sup>	G292.0+1.8	MSH 11-54	292.038	+1.751	3.0	1.0*	2.0–8.0
J1341-6220 <sup>48</sup>	G308.8-0.1		308.730	-0.035	3.0	0.5	0.5–3.5
J1420-6048 <sup>49</sup>	G313.6+0.3	Kookaburra	313.541	+0.227	22.0	0.47	2.0–10.0
J1513-5908 <sup>50</sup>	G320.4-1.2	B1509-58, MSH 15-52, Dragon	320.321	-1.162	14.0	2	0.5–7.0
J1709-4429 <sup>51</sup>	G343.1-2.3	B1706-44	343.098	-2.685	5.5	0.034	0.5–8.0
J1747-2958 <sup>52</sup>	G359.23-0.82	Mouse	359.305	-0.841	27.0	1.1*	0.5–8.0
J1801-2451 <sup>53</sup>	G5.27-0.9	Duck, B1757-24	5.254	-0.882	35.0	0.069	2.0–10.0
J1811-1925 <sup>54</sup>	G11.2-0.3	SN 386, Turtle	11.182	-0.347	21.4	0.44*	1.0–10.0
J1826-1334 <sup>55</sup>	G18.0-0.7	B1823-13, Turkey	18.000	-0.691	10.0	0.025	0.7–7.0
J1833-1034 <sup>56, 57</sup>	G21.5-0.9		21.501	-0.886	32.0	0.3	2.0–8.0
J1846-0258 <sup>58</sup>	G29.7-0.3	Kes 75	29.712	-0.240	40.0	1.4	0.5–10
J1856+0113 <sup>59</sup>	G34.7-0.4	W44, 3C 392	34.560	-0.497	13.0	0.02	2.0–8.0
J1932+1059 <sup>60</sup>	G47.4-3.9	B1929+10	47.382	-3.884	2.5	0.014	0.3–8.0
J1930+1852 <sup>61</sup>	G54.1+0.3		54.096	+0.265	15.7	0.75*	2.0–10.0
J1952+3252 <sup>62</sup>	G69.0+2.7	CTB 80, B1951+32	68.765	+2.823	3.0	1.0*	0.2–10.0
J1959+2048 <sup>63</sup>	G59.2-4.7	B1957+20, Black Widow	59.197	-4.697	1.8	0.01*	0.3–8.0
J2021+3651 <sup>64</sup>	G75.2+0.1	GeV J2020+3658, Cisne	75.222	+0.111	7.8	0.17*	0.5–10.0
J2229+6114 <sup>65</sup>	G106.6+3.1	3EG J2227+6122	106.647	+2.948	6.3	0.13	2.0–10.0
J2225+6535 <sup>66</sup>	G108.6+6.8	B2224+65, Guitar	108.636	+6.845	1.3	0.002	0.5–10.0

<sup>a</sup>  $N_H$  とフラックスを引用した文献を天体名の横に記す。<sup>b</sup> \*付きは星間吸収を補正したフラックスを表す。<sup>c</sup> フラックスを算出したエネルギー範囲を示す。

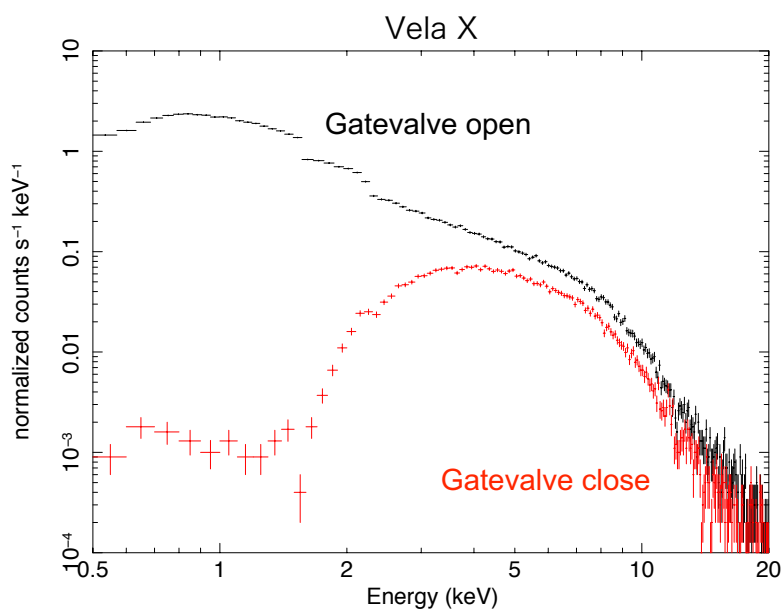


図 6.19: 0.5–20.0 keV における Vela X のゲートバルブ閉栓時と開栓時のスペクトル比較。閉栓時の ARF ファイルには、6.3 節で作成したゲートバルブの透過率モデルを用いている。

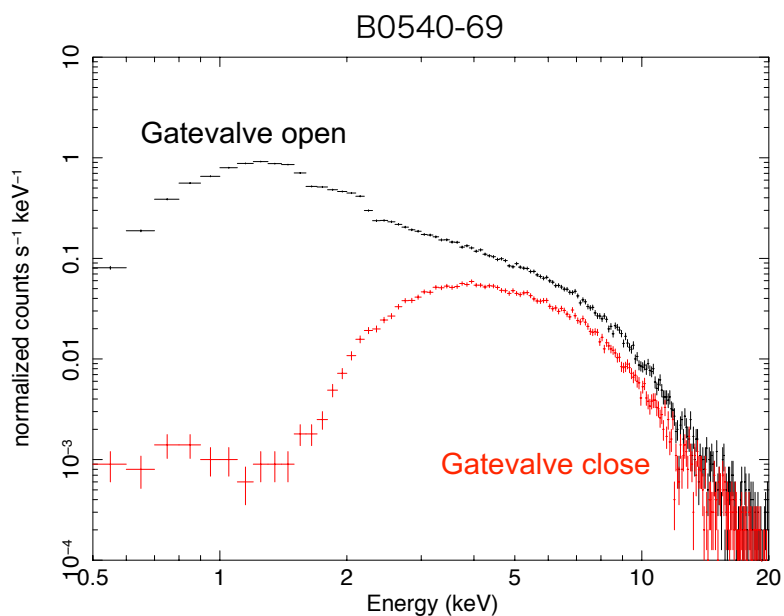


図 6.20: 0.5–20.0 keV における B0540-69 のゲートバルブ閉栓時と開栓時のスペクトル比較。閉栓時の ARF ファイルには、6.3 節で作成したゲートバルブの透過率モデルを用いている

## ステンレスメッシュ開口率

ゲートバルブ閉栓時の観測では、ステンレスメッシュの開口率に制限をつけることは難しいとわかった。そこで、開閉時のスペクトルの比をとることで開口率に制限をつけることができるかどうかの検証を行う。3.3 節で述べたように、ゲートバルブの幾何構造由来の透過率は 0.5–20 keV 帯域でエネルギーに依らず 1 とすると、図 6.19, 6.20 に示された開栓時と閉栓時のスペクトルの比をとることで実効的にゲートバルブの透過率が得られる。上記で選定した 2 天体は、カタログの中では最も明るかったとはいえ、フラックスは「かに」星雲の約 1/1000 しかない。統計誤差が大きいため、適切なビンまとめが必要である。1 ビンが小さいと統計誤差に埋もれてしまうので、透過率カーブの構造が確認できる上で、できるだけ 1 ビンが大きくなるようにビンまとめを行なった。

ステンレスメッシュの開口率は 67%, 69%, 70%, 71%, 72%, 73%, 75% の 7 種類を仮定し、ARF ファイルを作成した。Vela X に対し、7 種類の ARF ファイルを用いて作成したゲートバルブ閉栓時のスペクトルと開栓時のスペクトルの比をとった結果を図 6.21 にプロットする。下パネルの残差は、7 つの実効的透過率データと、本研究のベストフィット値である 71% のメッシュ開口率・253.5 $\mu$ m の Be 窓を仮定したモデルスペクトルとの差分を統計誤差で割った値 ( $=\chi$ ) を示している。残差を見ると、67%, 69% 開口のデータは常に負の値をとっており、73%, 75% 開口を仮定したデータは正の値をとっている。よって、開閉時のスペクトルを比較することで、約 2% ほどの精度で開口率を決定できそうだということがわかる。B0540-69 のプロット (図 6.22) を見ても、おおよそ同精度の結果が得られている。

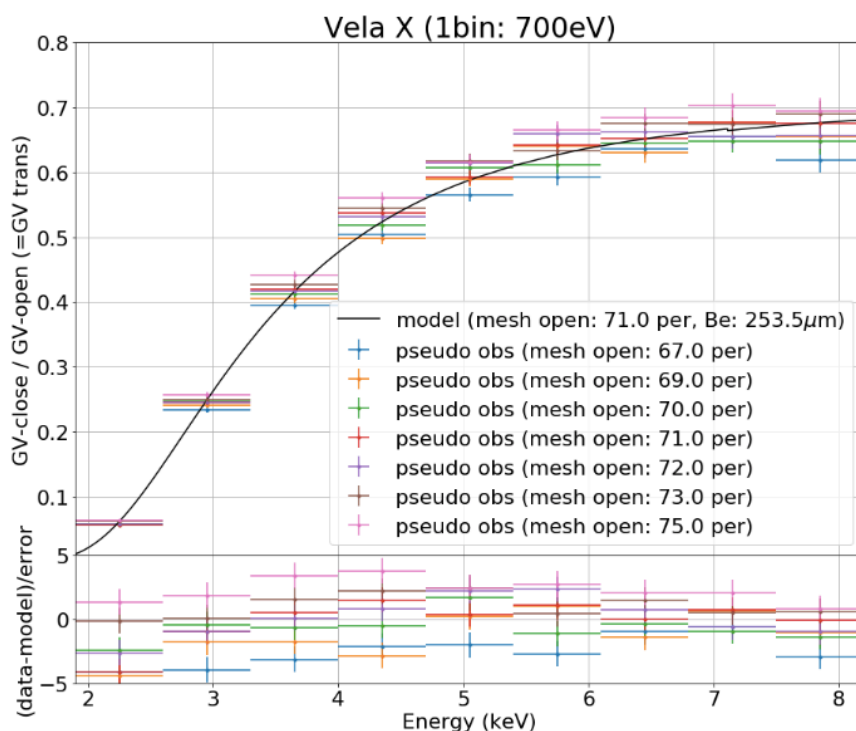


図 6.21: 2.0–8.0 keV におけるステンレスメッシュ開口率をパラメータにした Vela X のスペクトル。

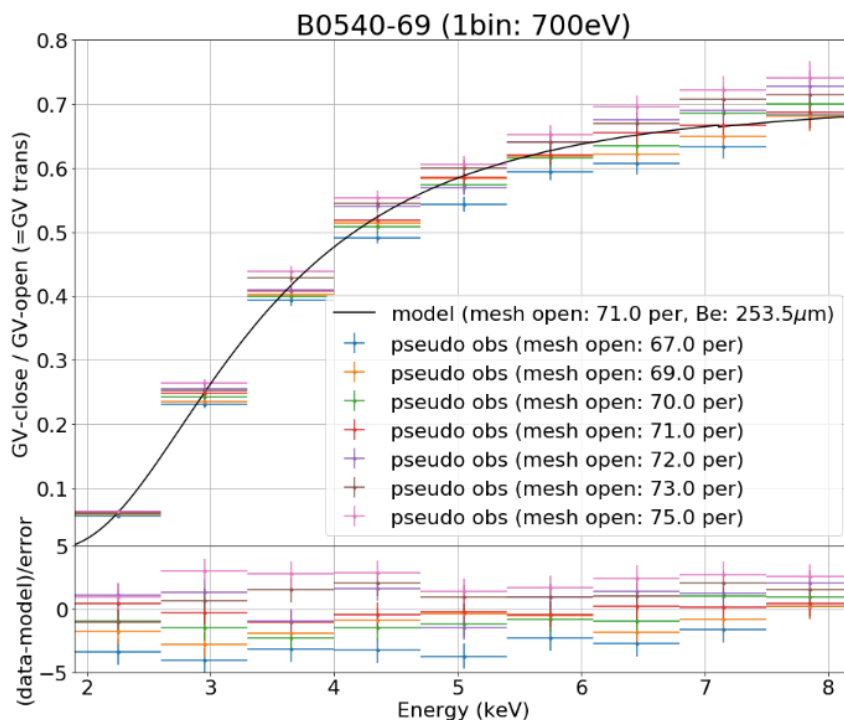


図 6.22: 2.0–8.0 keV におけるステンレスメッシュ開口率をパラメータにした B0540-69 のスペクトル。

### Be の光電吸収厚み

次に、Be の光電吸収厚みについて開閉時のスペクトル比較からどの程度制限をつけることができるか、以下で検証する。ここではベストフィット値である  $253.5\mu\text{m}$  の他に、 $240, 247, 250, 257, 260, 270\mu\text{m}$  の計 7 種類の透過率モデルを用いてシミュレーションを行なった。先ほどと同様に、開閉時の比をとった結果を図 6.23, 6.24 に示す。Be の光電吸収のエネルギー依存性は  $2.0\text{--}5.0\text{ keV}$  で変動率が最も大きいので、その付近のエネルギー帯でプロットしている。残差を見ると、 $240\mu\text{m}$  の青線と  $270\mu\text{m}$  のマゼンタ線が外れていることがかろうじて確認できる程度であり、高精度のパラメータ制限はできそうにない。「かに」星雲よりフラックスが 3 桁小さいことにより、変動が統計誤差に埋もれてしまっていることが示唆される。よって、Be の厚み較正は閉栓時に「かに」星雲観測で実施することが望ましい。

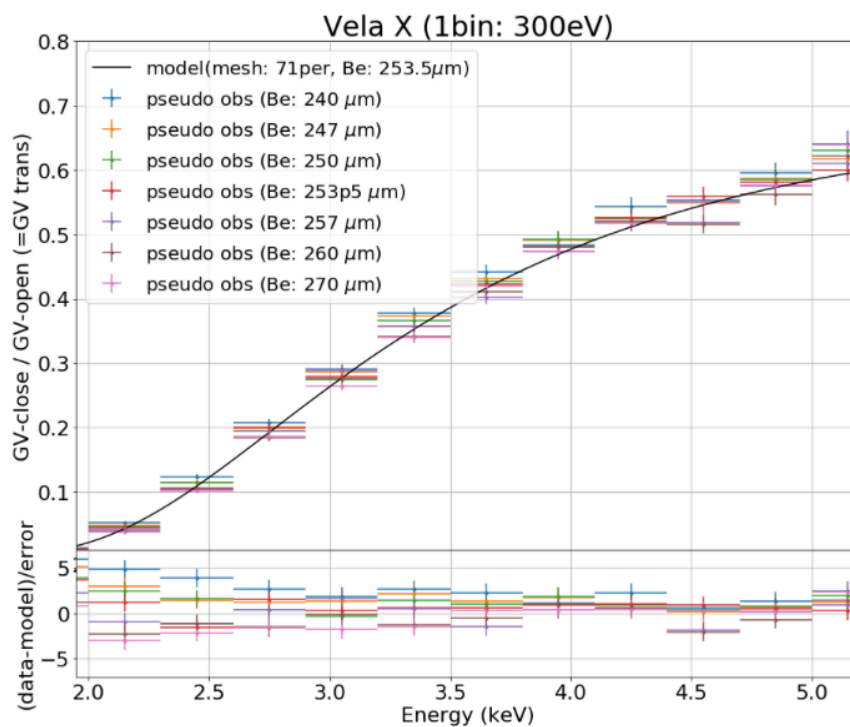


図 6.23: 光電吸収厚みをパラメータにした Vela X のスペクトル。横軸は Be 窓の透過率変化の激しい 1.9–5.2 keV 帯で表している。

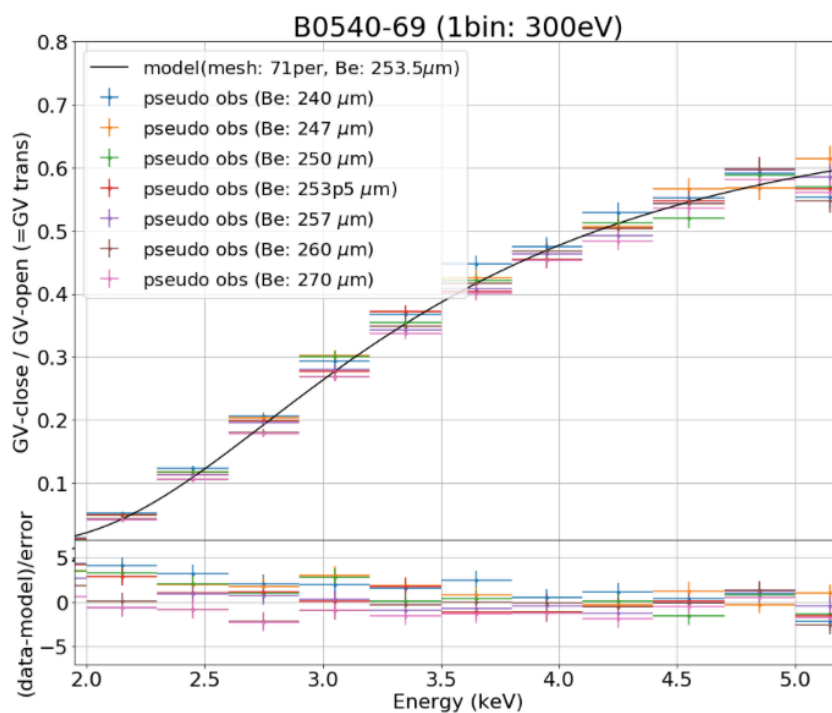


図 6.24: 光電吸収厚みをパラメータにした B0540-69 のスペクトル。横軸は Be 窓の透過率変化の激しい 1.9–5.2 keV 帯で表している。



## BDF の深さ

次に、BDF の深さについてどの程度制限をつけることができるか検証する。前節と同様に、図 6.12 に示した散乱厚み  $t_{\text{Be,scat}}$  の他に、全エネルギー帯で算出値の半分にしたモデルと 2 倍にしたモデルを用意する。3 種類の  $t_{\text{Be,scat}}$  を仮定した透過率モデルを用いて開閉時の比をとった結果を図 6.25, 6.26 に示す。ベストフィットモデルから算出したデータを水色、 $t_{\text{Be,scat}}$  を全体的に半分にしたものを黄色、2 倍の厚みにしたものを緑色で表している。残差を見ると、モデルによる差異は誤差の範疇に埋まっており、見た目では判断することができない。よって、閉栓時と同様に、軌道上観測により、 $t_{\text{Be,scat}}$  に制限をつけることは難しいということがわかった。

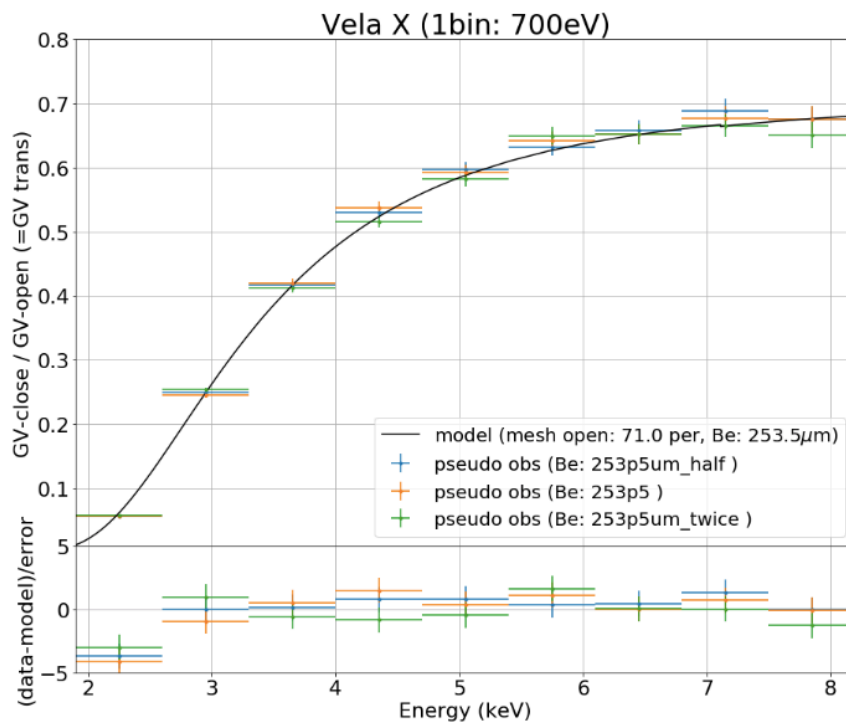


図 6.25: 2.0–8.0 keV における BDF の深さをパラメータにした Vela X のスペクトル。

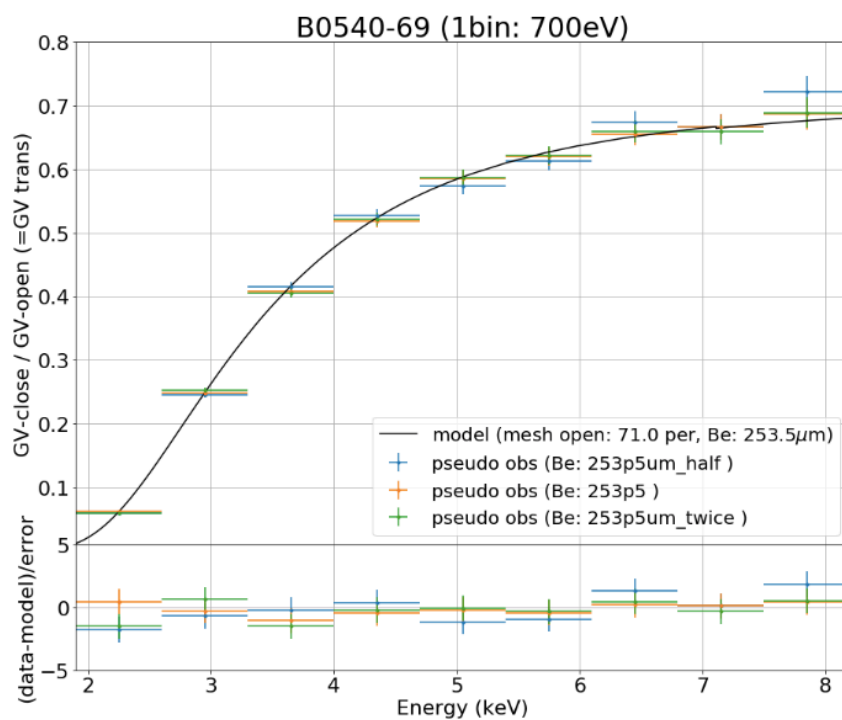


図 6.26: 2.0–8.0 keV における BDF の深さをパラメータにした B0540-69 のスペクトル

## 6.5 SXS データ再解析

これまでは Resolve に搭載されるゲートバルブの透過率モデルについて議論してきた。6.5.1 項では、SXS に搭載されたゲートバルブの透過率モデルについて議論し、最終的に新たな較正データベースに用いる透過率モデルを構築する。作成した透過率モデルを用いて、6.5.2 項にて SXS で観測された「かに」星雲の再解析を行い、残差が改善されるかどうか確認する。

### 6.5.1 SXS Be 窓の透過率測定データ再解析

「ひとみ」衛星運用終了後の 2017 年 12 月、KEK PF にて SXS Be 窓 フライトスペア品の透過率測定が行われた。測定に用いた装置、セットアップは 5.1, 5.2 節で述べたものとほぼ同様である。ただし、KEK BL11B で用いた後置検出器の信号を読むピコアンメータはノイズフロアの高いものであった。そのため、低エネルギー側での測定誤差が大きくなっている<sup>18, 19</sup>。

現在の較正データベースに入っている透過率モデルは、この測定結果を元に作成されたものであった。しかし、現在採用されている透過率モデルは、BDF 構造を散乱として透過率カーブ全体に組み込むのではなく、透過率の不連続変化を説明するために局所的に挿入したものである（式 2.3 参照）。そのため、図 2.1 左図の残差からわかるように、特に 2.0–4.0 keV 帯域でゲートバルブ起因の系統誤差が大きく乗ってしまっている。そこで我々は、本研究で得られた透過率モデルの構築方法に基づき、SXS Be 窓の再モデリングを行う。

図 6.27 に 2017 年 12 月に得られた測定データから式 5.1 を用いて計算した Be 窓の透過率カーブと、272.5  $\mu\text{m}$  の Be と微小元素の光電吸収モデルで比をとった結果を示す。この時の透過率測定も本論文で行なった測定と同様に BL7C(4.0–12.0 keV) と BL11B(2.6–5.0 keV) を用いて行われたのだが、BL11B での測定の系統誤差がかなり大きく出ている。また、構造がないと考えられるエネルギー帯ではエネルギーステップを最大 50 eV 刻みに測定しているため、以下で行うカイ二乗フィッティングにおいて誤差が比較的大きい結果となっている。

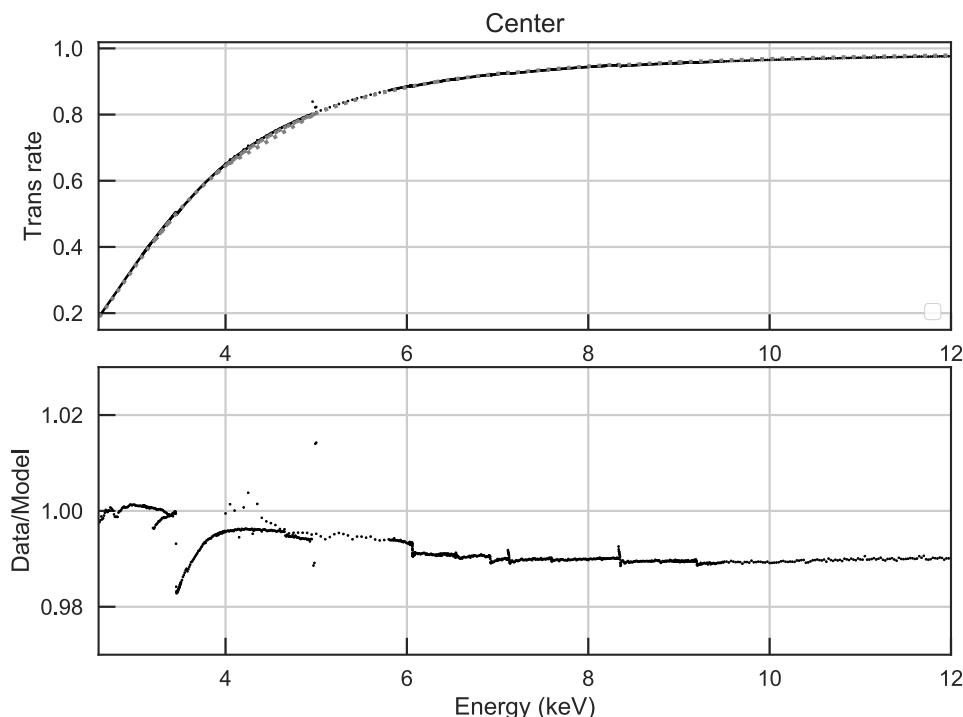


図 6.27: 微小元素を含めたモデルを用いた 2.6–12.0 keV での Be 窓透過率カーブ。Be の厚みは 3.4 keV 以下で残差が小さくなるように設定している。

6.2.1 項と同様に、まずは微小元素のモデリングを行う。Be と微小元素の光電吸収に対する厚みをパラメータとして吸収端前後のエネルギー帯でフィッティングを行なった結果を表 6.4 にまとめる。Resolve Be 窓で確認できていた Cr と Cu の吸収端は誤差に紛れてしまったため、Mn, Fe, Ni の 3 つの微小元素のみを用いた。

表 6.4: フィッティングで得られた SXS Be 窓における Be と微小元素厚み

微小元素	吸収端エネルギー [eV]	フィッティング範囲 [eV]	Be の厚み [ $\mu\text{m}$ ]	微小元素厚み [nm]	先行研究 <sup>19</sup> での微小元素厚み [nm]
Be	5989	N/A	272.5 $\mu\text{m}$ <sup>a</sup>	N/A	261.86 $\pm$ 0.01 $\mu\text{m}$
Cr	5989	N/A	N/A	N/A	3.0 (fixed)
Mn	6539	6520–6900	266.34 $\pm$ 0.26	1.6 $\pm$ 0.3	3.81 $\pm$ 0.05
Fe	7112	7050–7500	267.49 $\pm$ 0.55	9.3 $\pm$ 0.6	10.83 $\pm$ 0.05
Ni	8333	8200–8450	274.29 $\pm$ 1.09	10.2 $\pm$ 1.0	16.48 $\pm$ 0.03
Cu	8979	N/A	N/A	N/A	5.0 (fixed)

<sup>a</sup> 微小元素の厚み決定後、6.0 keV 以下での残差がフラットになるように決定した。

次に BDF エネルギーの前後でフィッティングすることによって、散乱の厚み  $t_{\text{Be,coh}}$  を決定する。今回は系統誤差が大きいのので、不連続透過率変動が顕著に見えている (002), (103), (004), (104), (105) 面のみを  $t_{\text{Be,coh}}$  決定の境界に設定し、フィッティングを行なった。Resolve Be 窓と同様に (002) 面での BDF エネルギー以下では  $t_{\text{Be,coh}} = 0$  とした。2.6–3.4 keV のエネルギー帯で残差がフラットになるように Be 光電吸収厚み  $t_{\text{Be,photo+inc}}$  を調整した結果、272.5  $\mu\text{m}$  という値を用いることに決定した。フィッティングにより求めた  $t_{\text{Be,coh}}$  を表 6.5 にま

とめる。また、横軸にエネルギー、縦軸に決定した  $t_{\text{Be,coh}}$  をとったプロットを図 6.28 に示す。Resolve Be 窓の  $t_{\text{Be,coh}}$  と概ね一致している。

表 6.5: BDF エネルギー前後での SXS Be 窓の干渉性散乱厚み

ミラー指数	BDF エネルギー [keV]	フィッティング範囲 [keV]	散乱の厚み $t_{\text{Be,coh}}$ [ $\mu\text{m}$ ]
100	3.1326	N/A	0 <sup>a</sup>
002	3.4596	3.47–6.00	$73.8 \pm 12.1$
103	6.0616	6.07–6.90	$153.5 \pm 1.7$
004	6.9191	6.93–7.58	$194.7 \pm 2.1$
104	7.5953	7.6–9.18	$236.6 \pm 3.2$
105	9.1988	9.2–12.0	$238.5 \pm 1.2$

<sup>a</sup> (002) 面での BDF エネルギー以下では  $t_{\text{Be,coh}} = 0$  とした。

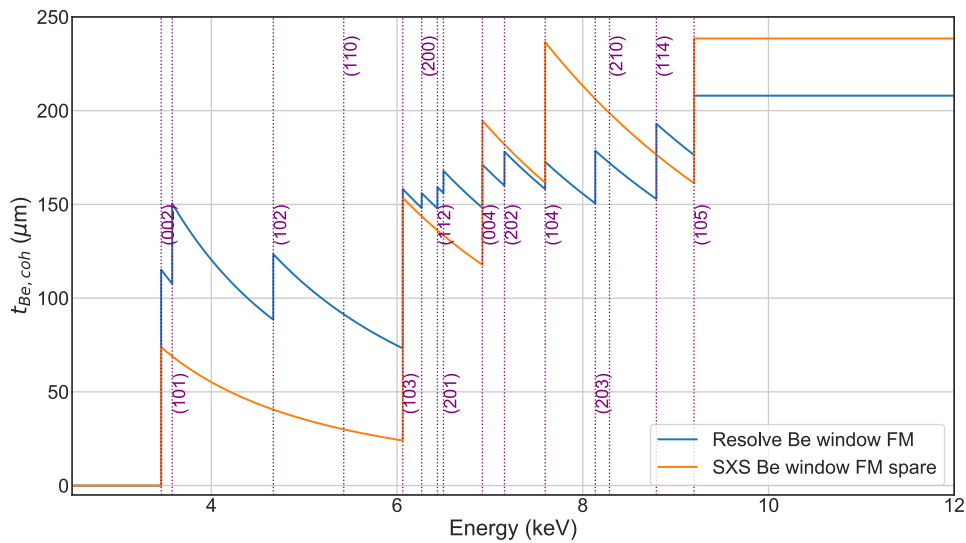


図 6.28: BDF エネルギー前後でのフィッティングで決定した SXS Be 窓の干渉性散乱厚み。図 6.12 の青線を比較のため示している。

272.5  $\mu\text{m}$  の Be と表 6.4 に示した微小元素 (Mn, Fe, Ni) の光電吸収に加え、Be の散乱を上記で決定した  $t_{\text{Be,coh}}$  を用いてモデル化した透過率カーブを図 6.29 に示す。5.0 keV 以下の測定誤差は大きいですが、Resolve Be 窓と同様と仮定すると、3.46 keV 以下に構造はないと考えているので、このエネルギー帯での不定性はあまり問題にならないと想定される。

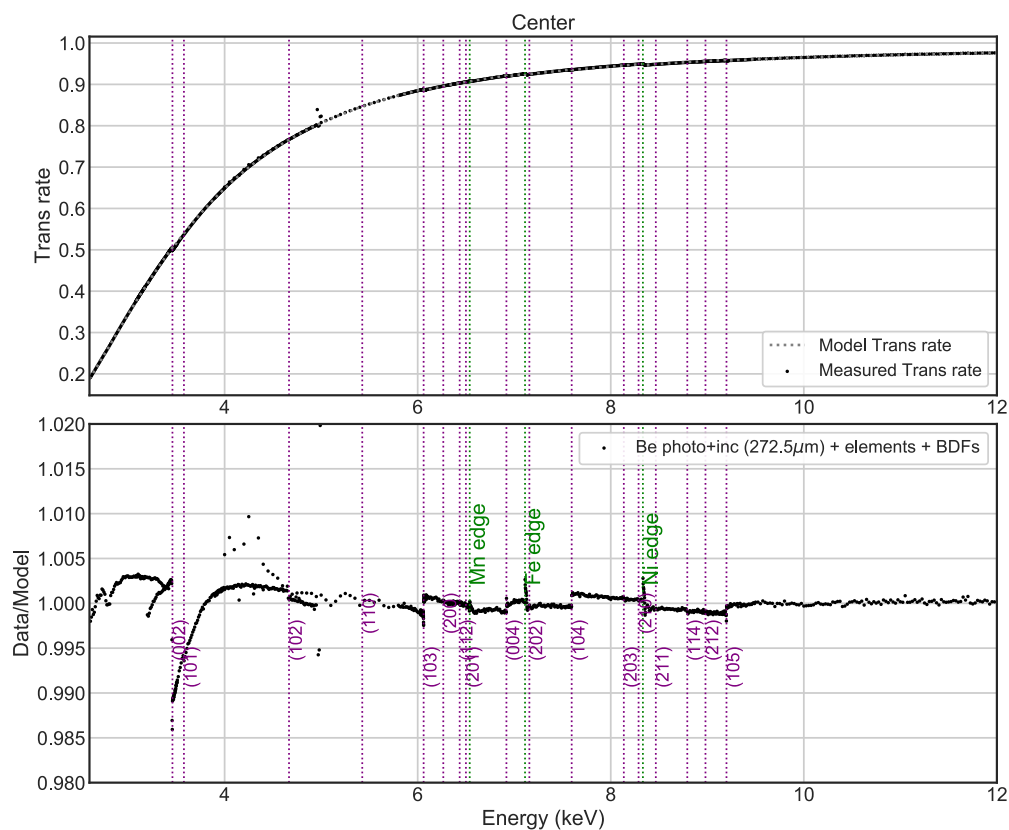


図 6.29: Be と微小元素の光電吸収に Be の散乱を加味した透過率カーブ。エネルギー帯は 2.6–12.0 keV。吸収端や BDF 付近で構造が残っているが、天体観測では誤差に埋もれる程度の構造であり、全体的な残差をフラットにすることを重視した。

### 6.5.2 SXS で観測された「かに」星雲のスペクトル再解析

前項で作成した SXS Be 窓フライトスペア品の透過率モデルを用いて、2.1.1 項で行なった SXS による「かに」星雲観測データの再解析を実施する。SXS Be 窓において、フライト品とフライトスペア品は同じロットから作成されたが、図 5.21 の Be 窓の空間一様性測定からわかるように、同一の Be 窓内であっても位置に応じた厚み不定性をもっている。6.4.1 で議論したように、同一の Be 窓内での厚み不定性は  $\pm 5.5\%$  ほどであるため、フライト品とフライトスペア品の Be 厚ではその程度の違いはありうると想定する。

この不定性は 6.4.1 で論じたような軌道上較正によって、ある程度制限をつけることができる。SXS フライトスペア品の Be 窓においてベストフィット値であった  $272.5\ \mu\text{m}$  から  $\pm 5.5\%$  の不定性を考えると、SXS フライト品の Be 窓の平均厚みは  $256\text{--}286\ \mu\text{m}$  であることが推測される。6.4.1 の議論より、閉栓時の Be 窓の厚みは  $5\%$  ほどの精度で決定できるという結論だったので、 $256\text{--}286\ \mu\text{m}$  の間で  $5\ \mu\text{m}$  おきに透過率モデルを作成し、「かに」星雲の観測スペクトルを用いて尤もらしい Be の厚みを決定する。また、6.4.1 で述べたように、ステンレスメッシュの開口率はスペクトル強度不定性と縮退してしまうので、本解析では設計値の  $71\%$  に固定して解析を進める。

$256, 261, 266, 271, 276, 281, 286\ \mu\text{m}$  の厚みを仮定した SXS 搭載ゲートバルブの透過率モデルを計算し、それをもとに 7 つの ARF ファイルを作成した。7 つの ARF ファイルに加え、6.4 節で用いたものと同様の RMF ファイル、「かに」星雲標準モデルを入力した結果得られたプロットが図 6.30 である。下パネルの残差から一目瞭然だが、

Be の厚みは  $256.0\mu\text{m}$  が最も測定スペクトルと合致する結果となった。よって、SXS ゲートバルブ フライト品の透過率モデルとして、(1) 厚みが  $256.0\mu\text{m}$  の Be の光電吸収及び非干渉性散乱と表 6.4 での厚みをもつ微小元素の光電吸収、(2) BDF の構造を説明するための、表 6.5 で表された実効的厚みをもつ Be の干渉性散乱、(3) 71.0% の開口率をもつステンレスメッシュを仮定したモデルを採用する。

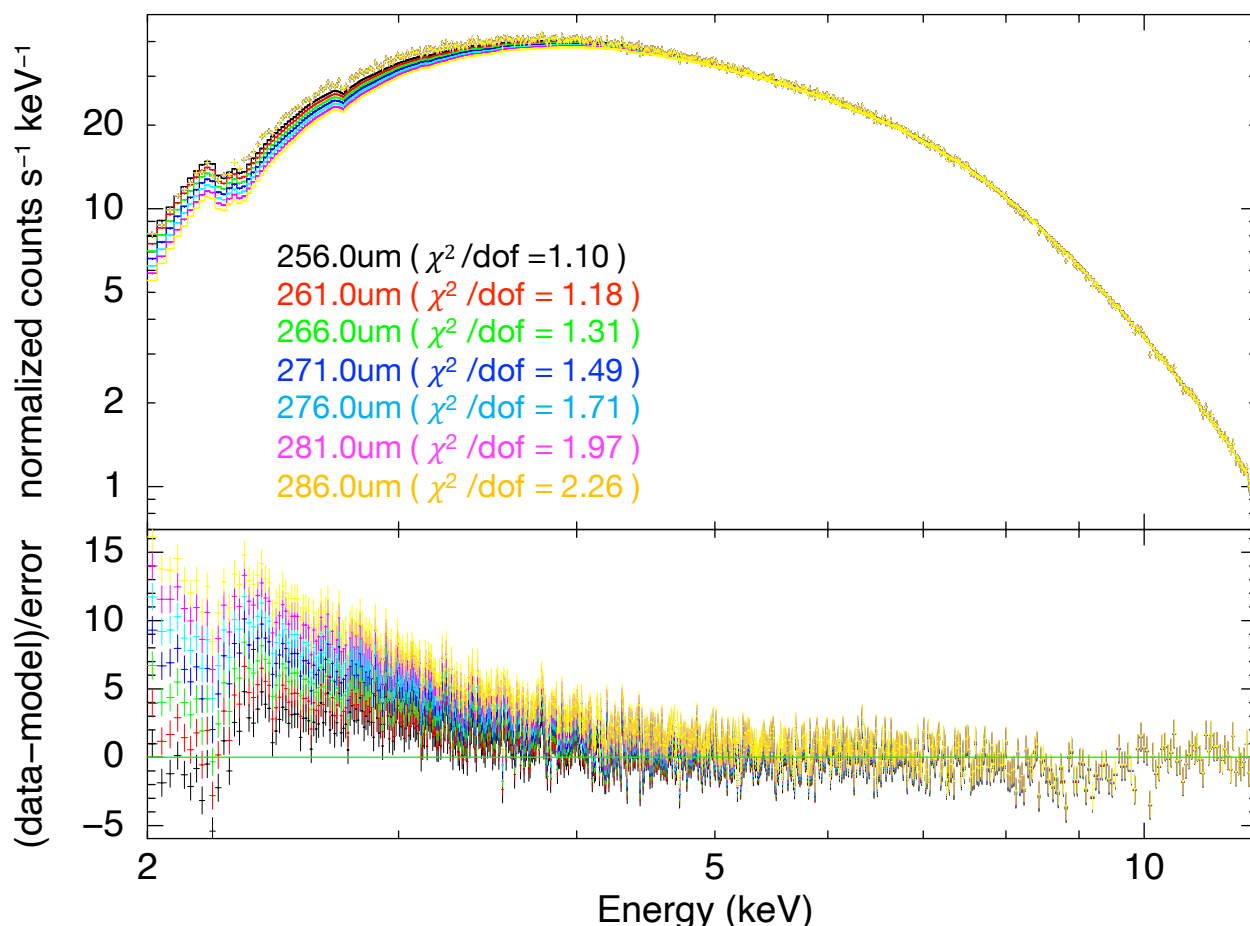


図 6.30: Be の厚みを変化させた際の SXS で観測された「かに」星雲スペクトル。黒線で表された厚み  $256.0\mu\text{m}$  のモデルが最も残差が小さいことがわかる。

図 2.1 左図に、新たなゲートバルブ透過率モデルを考慮したスペクトルを加えた結果を図 6.31 に示す。青線が SXS の較正データベースを用いた ARF ファイルでのプロットで、赤線が新たな ARF ファイルを用いたプロットである。この際どちらのプロットも、同様の RMF ファイルと標準モデルを使用している。下パネルの残差を見ると、青線に比べ、赤線の残差が改善していることがわかる。定量的には、 $\chi^2/\text{dof}=1.37$  から  $\chi^2/\text{dof}=1.10$  に改善することに成功した。

未だ残っている残差の 1 つの要因として、望遠鏡の有効面積較正が不十分であることが挙げられる。残差を確認すると、 $2.3 \text{ keV}$  付近で折れ曲りが存在するが、これは「ひとみ」衛星の望遠鏡に用いられている Au の M5, M4 吸収端 ( $2.206 \text{ keV}$ ,  $2.291 \text{ keV}$ ) の構造が残っているものと考えられる<sup>16,67</sup>。よって、ゲートバルブのみでこれ以上の改善を目指すことは現実的ではない。

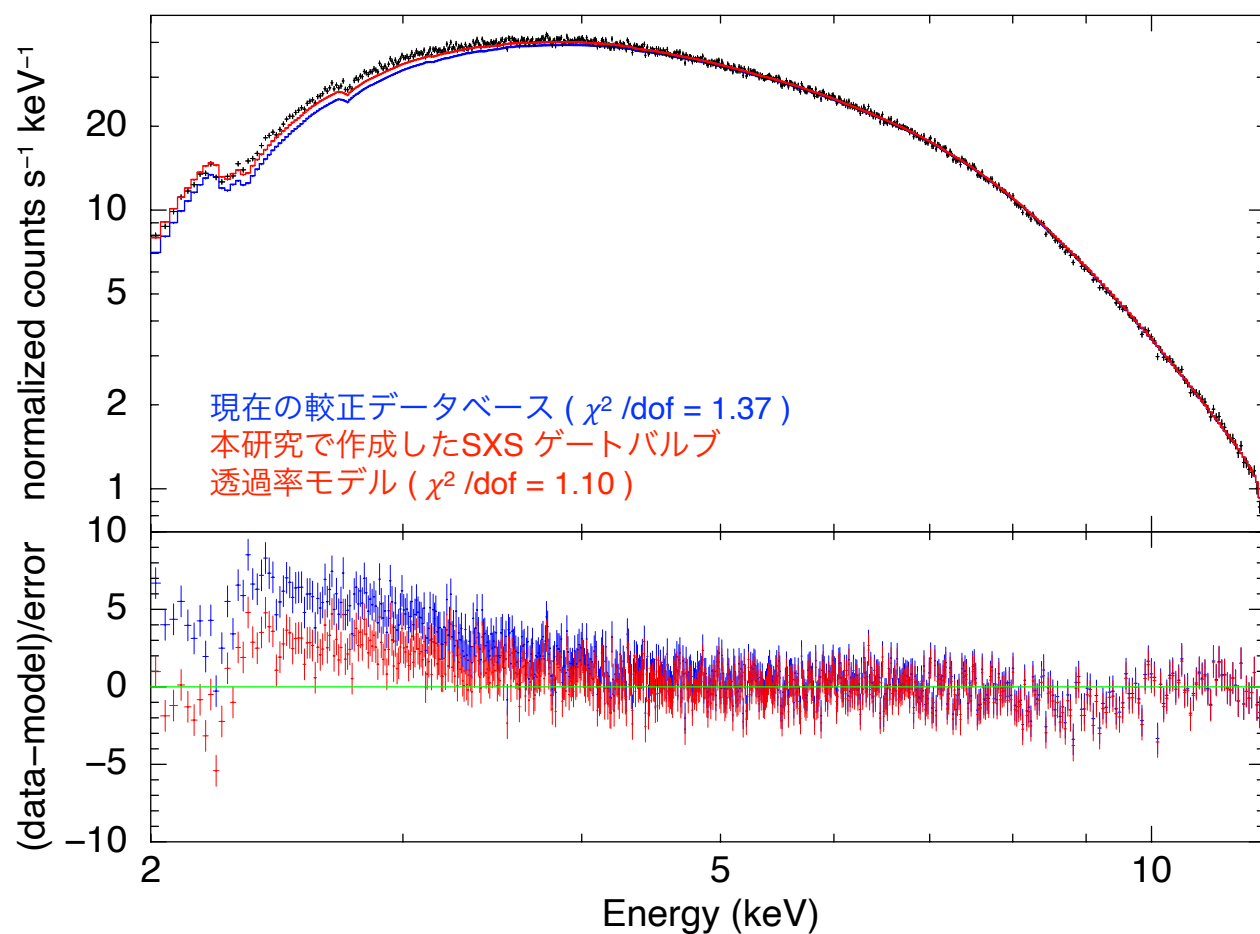


図 6.31: SXS で観測された「かに」星雲の 2.0–12.0 keV でのスペクトル再解析結果。黒線が観測スペクトル、青線がこれまでの SXS の較正データベースを用いたモデルスペクトル、赤線が今回作成した透過率モデルをもとに作成した ARF ファイルを用いたモデルスペクトル。青線と比較し、残差が顕著に小さくなっている。



## 第 7 章

# 結論

2.2 節で挙げた目的に 1 対 1 対応させて本研究の結論を述べる。

1. **Resolve** ゲートバルブの 2 つの要素である **Be** 窓とステンレスメッシュに対し、**XRISM** ミッションのサイエンスゴールから導かれた較正要求（表 2.3<sup>24</sup>）を満たす X 線透過率の測定を行う

**KEK** フォトンファクトリーのシンクロトロン放射光を利用して、2.0–12.0 keV 帯域の **Be** 窓透過率測定を実施した。その結果、2.5–12.0 keV のエネルギー帯で連続成分の要求精度 1%、微細構造成分の要求精度 5% を大幅に上回り、微細構造も含め、0.1% ほどの精度で透過率を測定することができた。2.5 keV 以下については再現性の低い測定結果となったが、広島大学放射光センターの放射光を用いた追測定により、要因が高次光混入であることを推測できた。また、空間一様性についてもフォトンファクトリーにて 2.7, 3.0, 3.456, 4.0 keV の単色 X 線を用いたスキャン測定を行い、要求精度 3% を優に超える精度でデータを取得した。

ステンレスメッシュについては、宇宙科学研究所の X 線ビームラインを用いて 6 つのエネルギー点で透過率を測定した。これまでの較正データベースには設計図からの計算値のみが入っていたので、今回が初めての透過率測定である。統計誤差は 0.3% ほどの精度で測定することができたが、シンクロトロン放射光と異なり、測定エネルギーが限られること、後置検出器しか設置されていないため入射 X 線ビームの変動が測定結果に乗ってしまうこと、より系統誤差が精度要求を超える結果となった。

測定結果から、ステンレスメッシュの開口率、**Be** 窓の厚み、**Be** の BDF 深さは軌道上で検証すべき項目として摘出した。

2. 測定結果を元にモデル透過率カーブを作成し、較正データベースとして世界中のユーザーに提供する

測定結果を元に、ステンレスメッシュと **Be** 窓のそれぞれで透過率モデルを作成した。ステンレスメッシュについてはこれまでは 20 keV 以下では光学的に厚いと思われていたが、断面を正方形から円形に変更したため、15 keV 付近で光学的に薄くなり始めることがわかった。ステンレスメッシュの開口率は、これまでは設計図から 0.71 と仮定されていたが、実際には数 % の系統誤差を持つことがわかった。

**Be** については、**Be** の光電吸収及び非干渉性散乱の他に、微少量混入していた元素 **Cr**, **Mn**, **Fe**, **Ni**, **Cu** の光電吸収の厚みも定量化した。これまでの較正データベースでは BDF の素性がわからず、単に吸収端のような構造を説明するため、局所的に吸収を追加していた。本研究では、BDF の物理的描像を理解し干渉性散乱として透過率カーブ全体に取り込むことで、低エネルギー側を含めた全エネルギー帯域でのモデル改善に成功した。

測定した **SXS** ステンレスメッシュのフライトスペア品と「ひとみ」衛星に搭載されたステンレスメッシュのフライト品の開口率の差異を補正し、**SXS** 搭載ゲートバルブのモデル化を行なった。結果的に、10–40000 eV のエネル

ギー範囲、0.25 eV 刻みでのエネルギー-透過率テーブルを作成した。今後、較正データベースとして世界中のユーザーに提供予定である。

### 3. 地上試験だけでは決まらないパラメータの決定及び地上で作成した透過率モデルの検証のため、軌道上での天体観測によるゲートバルブの較正提案を行う

打ち上げからゲートバルブ開放までの数ヶ月間の間にできる較正と、開閉時のスペクトルを比較することで可能になる較正の2つの独立な計画を提案した。前者においては、ゲートバルブが閉じていることもあり、非常に明るく時間変動の少ない「かに」星雲を観測可能である。この閉栓時の観測により、Be の厚みを 2% 程度の精度で決定できるとの結果を得た。また、BDF 補正の必要性については、Be の厚みの最適値の違いで判別できることがわかった。ステンレスメッシュの開口率については、フラックスと縮退してしまうため閉栓時の観測のみでは決定できない。

ゲートバルブ開閉時に得られるスペクトルの比をとることで実効的にゲートバルブの透過率を取得することができる。この操作により得た透過率と地上で作成した透過率モデルを比較することで、パラメータの検証を行うことが可能になる。地上試験で不定性の残っていたメッシュ開口率については、スペクトル比をとることで、2% ほどの精度で決定できそうだという結果を得た。一方、Be 窓の厚みは、統計誤差が大きいため、閉栓時の「かに」星雲観測の方が精度よくパラメータ制限できることが示された。BDF の深さ、つまりは干渉性及び非干渉性散乱の実効的厚みについては、光電吸収と比べて寄与が小さいため、軌道上で制限をつけることが難しいことがわかった。

### 4. 作成した較正データベースを用いて、SXS 観測データの再解釈を行う

2017 年 2 月にフォトンファクトリーにて SXS Be 窓 フライトスペア品の透過率測定が行われた。本研究で確立した透過率モデリングの手法を用いて、この時のデータを再解析し、SXS ゲートバルブの透過率モデルを仮作成した。さらに、ゲートバルブ閉栓時に SXS で観測された「かに」星雲のスペクトルを用いて、Be の厚みを決定し、SXS 搭載ゲートバルブの透過率モデルを最終決定した。これまでのゲートバルブ較正データベースを用いたモデルスペクトルは観測スペクトルに対し、 $\chi^2/\text{dof}=1.37$  であった。対して、本研究で作成した透過率モデルを用いたモデルスペクトルでは  $\chi^2/\text{dof}=1.10$  と大幅にカイ二乗値が改善した。

# 付録

## A 結晶学の基礎知識

\*1本章では本研究の供試体である Be 窓のような粉末結晶の散乱強度の一般形 A.21 を理解することを最終目標とし、結晶学の基礎からまとめていく。A.1 で結晶の幾何学について、本論文の議論に必要な部分をピックアップして説明する。A.2 では自由電子による散乱、A.3 では束縛電子による散乱の概略を述べ、後述する結晶散乱に必要な知識をまとめる。A.4 では結晶格子による散乱についての基礎知識をまとめ、最終的に A.5 で粉末結晶散乱について説明する。なお、ここでは一回散乱だけを考慮した運動学的回折理論について述べる。多重散乱を考慮した動力学的回折理論は扱わない。

### A.1 結晶の幾何学

#### 結晶構造

結晶とは、原子が規則的に 3 次元的に周期配列した固体物質である。まず、Be の結晶構造を図 A.1 に示す。左図にて、黒丸を格子点、紫線で囲まれた平行六面体を単位格子と呼ぶ。平行六面体の形はその 3 軸の長さ  $a, b, c$  とそのなす角  $\alpha, \beta, \gamma$  で一義的に決めることができる。Be 結晶は六方晶系という結晶形に属しており、 $a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$  という関係が成り立つ。

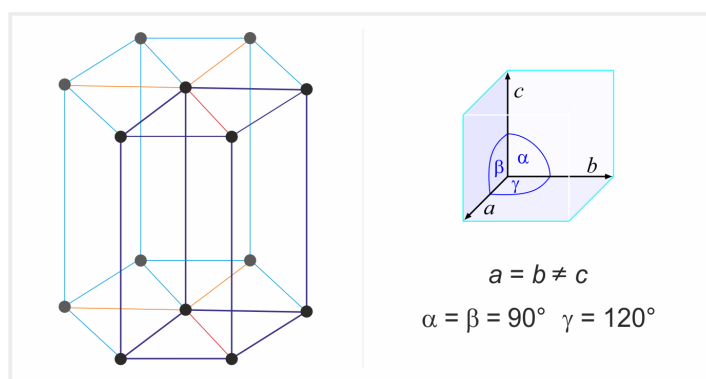


図 A.1: 六方晶系である Be の結晶構造\*2

全ての格子点は、互いに平行で等間隔に配列した平面の集合の上に載せることができる。この平面を格子面と呼

\*1 以下の内容は主にカリティ著『X 線回折要論<sup>68</sup>』、中井泉著『粉末 X 線解析の実際<sup>69</sup>』、Oxford 大学講義ノート ([https://www2.physics.ox.ac.uk/sites/default/files/CrystalStructure\\_fullnotes6.pdf](https://www2.physics.ox.ac.uk/sites/default/files/CrystalStructure_fullnotes6.pdf)) を参考に記述した。

\*2 以下の URL を参照した。格子定数の説明のためこちらの図を採用したが、実際には中間に底面が逆三角形の単位格子が存在する。  
<https://www.periodni.com/be.html>

ぶ。格子面の中で、単位格子の原点を通る面に最も近い面が結晶軸を  $a/h, b/k, c/l$  ( $h, k, l$  は互いに素の整数) の位置で横切る時、この格子面をミラー指数 ( $hkl$ ) で表し、その面間隔を  $d_{hkl}$  と表す。格子面が座標軸に平行な場合は、その軸についての指数をゼロにする。結晶軸をマイナスの方向で切る場合は指数の上にバーをつける。六方晶系の場合、 $c$  軸に垂直な面内で互いに  $120^\circ$  で交差する 3 本の軸を定義し、4 つの軸を使ってミラー指数を ( $hkil$ ) で表すこともある。ただし、 $i = -(h+k)$  の関係が成り立つので、本論文では ( $hkl$ ) の書式をとる。

結晶学では原子の位置を単位格子の大きさや形に影響されない分率座標で表す。また、ある結晶のもつ格子タイプと様々な対称要素の組み合わせを空間群として表現する。空間群は全部で 230 のタイプが存在し、Be は空間群 194:P63/mmc に属する<sup>\*3</sup>。空間群を指定することで、対称操作で関連づけられる原子を記述する必要がなくなり、独立な原子座標だけを記述すれば済むようになる。まとめると、ある物質の結晶構造は格子定数、空間群、独立な原子座標の 3 つの情報によって記述できる。

### 逆格子

ある格子面を定義する際、その面がどの方向を向いて、どのような面間隔で並んでいるか表現できれば十分であり、面の二次元的広がりには意味を持たない。図 A.2 に ( $hkl$ ) 格子面に対応する逆格子点の概要図を示す。図 A.2 をみると、ある面 ( $hkl$ ) の方向は垂線方向によって表される。さらに、垂線と面との交点から  $1/d_{hkl}$  だけ離れた垂線上の点 P を考える。この点 P は面に垂直で長さが  $1/d_{hkl}$  のベクトル (逆格子ベクトル) の頂点に位置する。このように約束すると、3 次元的で複雑な面情報をシンプルな 1 つの点に変換できるので非常に便利である。上記の規則に従って結晶に含まれる全ての格子面を点に変換すると、それらの点の集合は結晶の周期性を反映して格子状の配列を作る。これを逆格子、各点を逆格子点と呼ぶ。

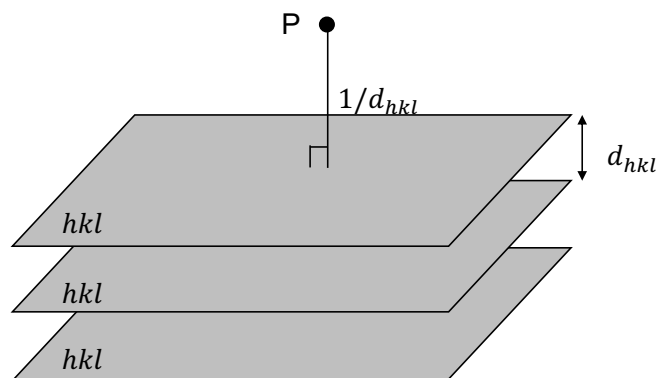


図 A.2: 格子面 ( $hkl$ ) に対応する逆格子点 P<sup>69</sup>

ある点 O に単結晶試料が置いてある状況 (図 A.3) を考える。点 O を通る入射 X 線上に中心を A とする半径  $1/\lambda$  の球 (Ewald 球) を描く。ここで球の中心 A は球面が O を通るように決める。図 A.3 の黒丸は全て逆格子点である。これらのうち Ewald 球上に点 B (ミラー指数  $hkl$  とする) が存在する。点 A, O, B を結んでできた三角形 AOB は二辺 (AB と AO) の長さが  $1/\lambda$  の二等辺三角形である。底辺 BO の長さは定義より ( $hkl$ ) 面の面間隔  $d_{hkl}$  の逆数  $1/d_{hkl}$  に等しい。頂点 A から底辺 BO に下ろした垂線 AH は  $\angle BAO$  を二等分し、その角度を  $\theta$  とすると、

$$2 \times \frac{1}{\lambda} \times \sin \theta = \frac{1}{d_{hkl}} \quad (\text{A.1})$$

<sup>\*3</sup> 例えば、以下の URL を参照。

[https://www.webelements.com/beryllium/crystal\\_structure.html](https://www.webelements.com/beryllium/crystal_structure.html)



ビームの電子からの距離  $r$  における強度  $I$  は、無偏光の場合次式で与えられることを導いた。

$$I = I_0 \left( \frac{\mu_0 e^2}{4\pi m_e} \right)^2 \frac{1 + \cos^2 \theta}{2r^2} \quad (\text{A.3})$$

ここで、 $I_0$  は入射ビーム強度、 $\mu_0$  は真空の透磁率を表す。このトムソンの式は散乱強度は散乱電子からの距離の 2 乗に反比例して減少し、散乱ビームは前方または後方に強度が強く、入射方向に対して垂直方向には弱いことを示している。

### コンプトン散乱

入射エネルギーが電子の質量エネルギーに対して無視できなくなると、トムソン散乱近似からずれ、コンプトン散乱でよりよく記述される。コンプトン散乱は、ゆるく束縛された電子もしくは自由電子に X 線が衝突する際に起こり、入射ビームを波動でなく  $h\nu$  のエネルギーを持った光子と考えると最もよく理解することができる。光子と自由電子が衝突する際は衝突前と衝突後でエネルギー保存が成り立つ弾性衝突である。運動量保存とエネルギー保存の式を解くと、コンプトン散乱による電磁波の波長変化は以下の式で与えられる。

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta) \quad (\text{A.4})$$

コンプトン散乱では散乱 X 線の波長が入射 X 線の波長よりもわずかに長くなるため（非弾性散乱）、干渉による強弱の変化は見られない。そのため X 線回折で重要となるのは電子によるトムソン散乱である。ただし、式 A.3 はそのままでは散乱角  $2\theta$  のなめらかな関数であり、強度の不連続的なピーク（図 5.33 参照）は出現しない。これを説明するためには物質の結晶構造を理論に取り入れなければならない。

## A.3 原子による散乱

本項では原子、もしくは束縛電子による散乱について 3 つに大別して記述する<sup>68</sup>。

### 光電吸収

光電吸収過程では、光子は吸収物質原子との相互作用で完全に消失する。光子の持っていたエネルギー  $h\nu$  により、原子の中の束縛された電子が殻から放出され光電子となる。この相互作用は原子に束縛された電子との間で起こるものであり、自由電子との間では起こらない。はじき出された光電子は次のようなエネルギー  $E$  をもつ。

$$E = h\nu - E_b \quad (\text{A.5})$$

ここで、 $E_b$  は K,L,M,... 殻の結合エネルギーである。K 殻の結合エネルギーよりも大きなエネルギーを持つ光子に対しての光電吸収は、80% 以上が K 殻電子によるものとなる。光電子放出の結果として殻にできた空孔は、自由電子の捕獲や原子内の外殻電子の再配列によって直ちに満たされる。初期状態と最終状態のエネルギー差はオージェ電子または特性 X 線の放射によって解放される。

- オージェ電子

光電子放出などによって通常満たされているはずの殻の一部が空になると、原子の励起エネルギー（内殻－外殻のエネルギー差）が直接外殻電子 1 個に付与され、その電子が原子から放出されることがある。この電子をオージェ電子という。

- 特性 X 線

励起状態から基底状態へ遷移するときに放射される X 線を特性 X 線と呼び、そのエネルギーは初期状態と最終状態のエネルギー差になる。もし K 殻に 1 個の空孔が一時的にできた際、空孔を埋める電子が L 殻から来

る場合には、K 殻と L 殻のエネルギー差に等しいエネルギーを持つ  $K\alpha$  線が放射される。M 殻から電子が来る場合には、よりエネルギーの大きな  $K\beta$  線が放射される。K 殻の空孔を埋めた電子を供給したために生じる外側の殻の空孔はさらに外側の電子によって次々に満たされて、順次 L, M, ... 系列の特性 X 線を放射する。

励起原子がオージェ電子を放出する確率をオージェ収率、特性 X 線を放射して遷移する割合を蛍光収率といい、この割合は原子番号  $Z$  に依存する。

### 干渉性散乱

X 線ビームが原子に当たると、その中の各電子はトムソンの式 (A.3) に従って干渉性のある X 線を散乱する。原子核も電荷を持っているが、質量が大きいため、散乱強度は電子散乱と比べて無視できる。そのため 1 つの原子からの散乱は、その原子を構成する全電子からの散乱の合成波として表される。従って原子が X 線を散乱する能力は、電子の数が多い、すなわち原子番号の大きい原子ほど大きい。 $2\theta = 0$  の前方散乱なら、全電子による散乱波の位相が揃うため、振幅をそのまま足し合わせることができる。しかし、入射 X 線の進行方向から散乱 X 線を観測する方向（これは散乱角  $2\theta$  で表される）が離れるほど、その散乱能は小さくなる。個々の原子がもつ X 線の散乱能を原子散乱因子と呼び、記号  $f$  で表す。

すでに述べたように、原子番号  $Z$  の原子の前方散乱では  $f=Z$  である。しかし散乱角  $2\theta$  が増大すると、個々の電子によって散乱された波は光路差のため次第に位相が合わなくなり、 $f$  が減少する。また、原子散乱因子は入射ビームの波長  $\lambda$  に依存する。 $\theta$  が一定の時、波長が短くなるほど、干渉は難しくなる。よって、実質的效果としては  $\sin \theta / \lambda$  が増大すると  $f$  は減少する。図 A.4 に、H, C, F について種々の  $\sin \theta / \lambda$  で計算した  $f$  を表す。このように干渉性散乱では、振幅が原子散乱因子で表される。

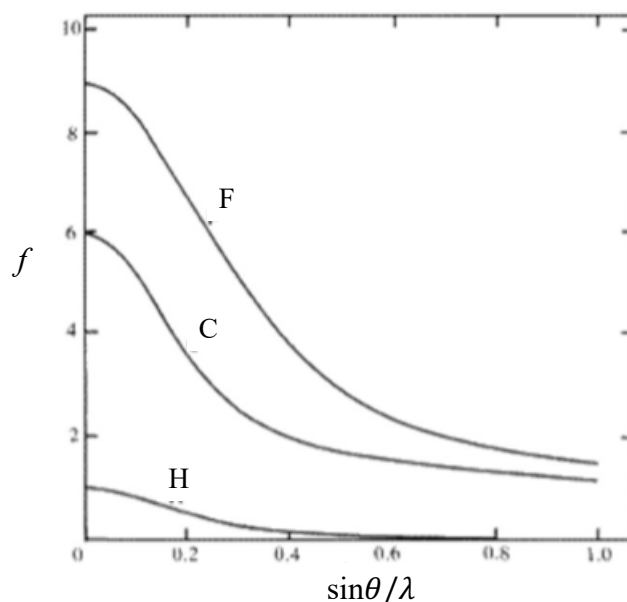


図 A.4: 原子散乱因子の  $\sin \theta / \lambda$ , 原子番号依存性<sup>\*5</sup>

<sup>\*5</sup> 以下の URL を参照した。

[https://www.unf.edu/~michael.lufaso/chem4627/ch2\\_solid\\_state.pdf](https://www.unf.edu/~michael.lufaso/chem4627/ch2_solid_state.pdf)

### 非干渉性散乱

一方で、ゆるく結合している電子と X 線光子の衝突により、非干渉性散乱が発生する。この散乱はゆるく結合している電子の割合が増大すると増していく。つまり、原子番号が減少するほど、結合がゆるくなり、非干渉性散乱強度は増大する。

図 A.5 に Be 原子における 2000-12000 eV での光電吸収、干渉性散乱、非干渉性散乱それぞれの減衰係数を表す。このエネルギー帯では光電吸収の寄与が支配的であり、干渉性散乱と非干渉性散乱の寄与は 1-3 桁小さい。この傾向は特に 4.0 keV 以下の低エネルギー側で顕著である。

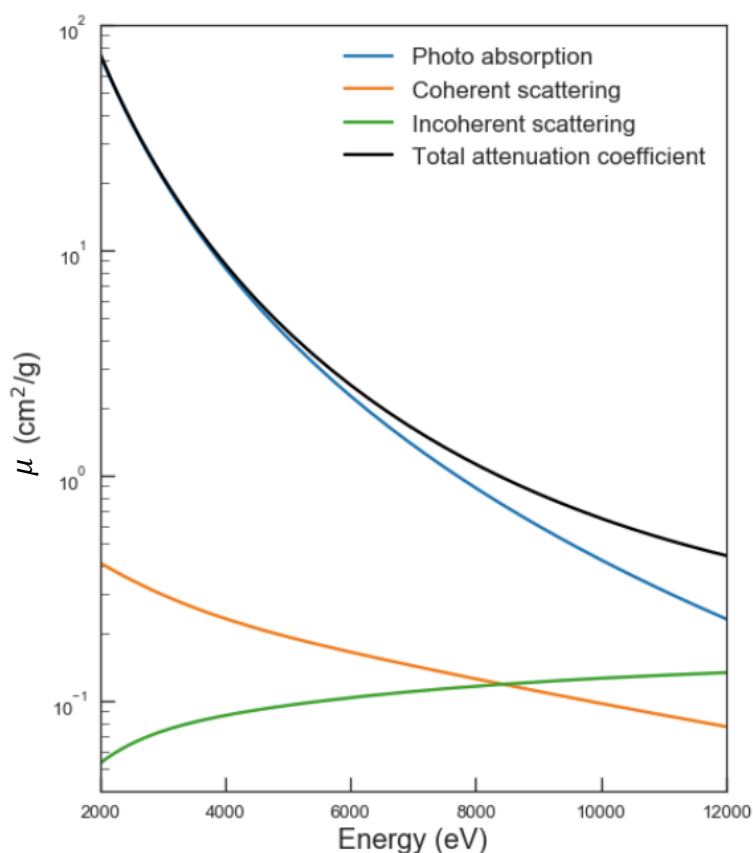


図 A.5: Be 原子における光電吸収、干渉性散乱、非干渉性散乱それぞれの減衰係数とその合計\*<sup>6</sup>

## A.4 単位格子による散乱

### X 線回折

$d_{hkl}$  の面間隔で平行に配列しているミラー指数 ( $hkl$ ) の格子面  $P_1, P_2$  を想定する。ここで入射方向に近い面を  $P_1$  とする。 $P_2$  で反射した波 2 は  $P_1$  で反射した波 1 より  $2d_{hkl} \sin \theta$  だけ位相が遅れて反射する。この光路差  $2d_{hkl} \sin \theta$  が X 線波長  $\lambda$  の整数倍であれば、反射した波 1 と 2 の位相が揃うので互いに強め合う。これが式 4.1 で

\*<sup>6</sup> 以下の URL の NIST データベースを用いた。

<https://physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/html/xcom1.html>



示した Bragg 条件  $2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda$  である。ここで  $d_{hkl}$  は結晶系に応じて計算が可能であり、六方晶の場合は

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{(4/3)(h^2 + hk + k^2) + l^2/(c/a)^2}} \quad (\text{A.6})$$

と表される。つまり、ミラー指数と格子定数から  $d_{hkl}$  が求まり、波長  $\lambda$  の X 線とその回折角  $\theta$  の関係が Bragg 条件から決定できる。上式より、ある結晶面  $(hkl)$  で回折角  $\theta$  で Bragg 散乱した時の Bragg エネルギー  $E_{hkl}(\theta)$  は

$$E_{hkl}(\theta) = \frac{hc}{2d_{hkl} \sin \theta} \quad (\text{A.7})$$

と求められる。ここで  $h$  はプランク定数である。各結晶面に対し、 $2\theta = 180^\circ$  の Bragg 反射を起こす入射エネルギーを特に BDF エネルギー  $E_{\text{BDF}}$  と呼ぶ

単結晶に X 線を照射した時、どの方向で回折 X 線が観測されるかわかったので、次に回折強度について説明する。個々の原子はその電子数に応じた X 線の散乱能である原子散乱因子  $f$  をもつ。単位格子中に散乱能  $f_j$  をもつ  $N$  個の原子が含まれており、それぞれの原子分率座標が  $(x_j, y_j, z_j)$  だとすると、ある格子面  $(hkl)$  からの散乱に寄与する  $N$  個の原子からの散乱の合成波は

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^N f_j \exp\{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)\} \quad (\text{A.8})$$

で与えられる  $F_{hkl}$  に比例する。ここで、 $F_{hkl}$  は結晶構造因子と呼ばれる。 $F_{hkl} = |F_{hkl}| \exp i\phi_{hkl}$  という形の複素数であり、 $|F_{hkl}|$  は散乱波の振幅、 $\phi_{hkl}$  は位相である。単位格子中の全ての原子によって Bragg の法則で予想された方向に散乱された回折強度は  $|F_{hkl}|^2$  に比例する。式 A.8 は、原子の位置が既知な結晶について、あらゆる結晶面反射の強度が計算できるので、X 線結晶学について非常に重要な関係式である。

結果的に、 $N$  個の単位格子で出来上がった単結晶による散乱波強度  $I$  は

$$I = I_e G |F_{hkl}|^2 \quad (\text{A.9})$$

で与えられる。ここで  $I_e$  は 1 つの電子による散乱強度、 $G$  はラウエ関数と呼ばれる。ラウエ関数は逆格子内での散乱強度の広がり大きさに関係し、逆格子点近傍でのみ強度をもつ関数である (図 A.6)。

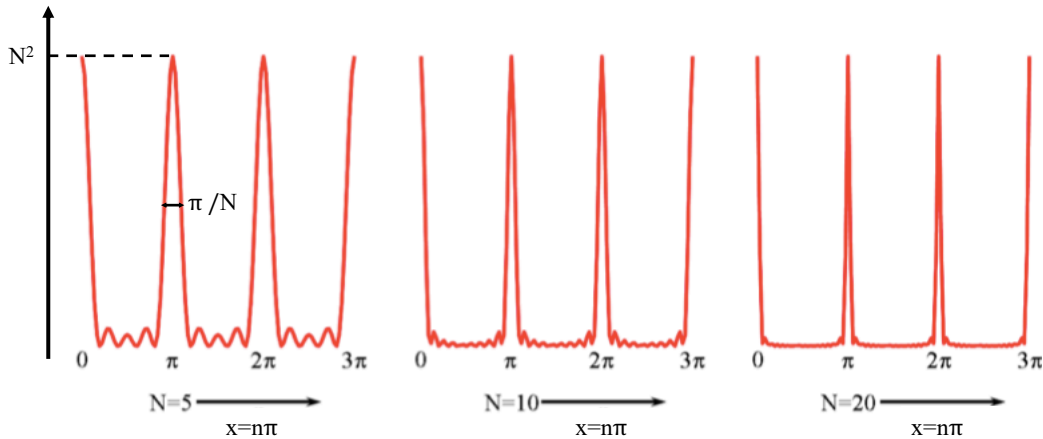


図 A.6: 格子数  $N$  の時のラウエ関数。代表して  $N=5, 10, 20$  の時のラウエ関数の形を規格化してプロットしている。 $N$  が大きいほどピークの幅が狭くなり、実効的にデルタ関数に近づいていく。<sup>\*7</sup>

## 消滅則

2つの結晶面で散乱した波の位相がちょうど  $1/2$  波長ずれ、かつ互いの結晶面の散乱波強度が等しい時、反射強度の和がゼロになる。結晶面での回折ピークが現れなくなることから、このような関係は消滅則と呼ばれる。消滅則から格子タイプ、映進面（鏡面 + 並進）、螺旋軸（回転 + 並進）に関する情報が得られ、未知試料の場合は空間群の決定に繋がる。

以下で Be 結晶の消滅則を導く。Be は六方晶であり、単位格子中に Be 原子は 2 つ含まれる。原子散乱因子  $f$  は原子によるので、それぞれの Be 原子は共に原子散乱因子  $f_{Be}$  をもつ。つまり、Be の消滅則は

$$F_{hkl} = f_{Be}(\exp\{2\pi i(hx_1 + ky_1 + lz_1)\} + \exp\{2\pi i(hx_2 + ky_2 + lz_2)\}) = 0 \quad (\text{A.10})$$

を満たす  $h, k, l$  で表される。よって、Be の 2 つの原子座標がわかれば消滅則を満たす  $h, k, l$  を導くことができる。

Be は図 A.1 で表される六方晶の結晶形を持っている。この単位格子内に 2 つの原子が入っており、1 つの原子が原点に分布しているとする、もう一つの原子の  $c$  座標値は  $c=1/2|c|$  と表されることは明らかである。原子の  $a, b$  座標での値を求めるため、 $ab$  平面で幾何学的に考える。図 A.7 に  $\gamma = 120^\circ$  の  $ab$  平面を示す。図中の平行四辺形が単位格子を平面でカットした様子を表している。原子は一様に分布するので、この平面上では、2 つの原子  $Be_1$ ,  $Be_2$  は平行四辺形を二分割してできた正三角形の重心にそれぞれ位置しているはずである。 $Be_1$  の座標  $(x_1, y_1)$  と  $Be_2$  の座標  $(x_2, y_2)$  を  $\vec{a}, \vec{b}$  で表すと、それぞれ  $1/3(2\vec{a} + \vec{b})$ ,  $1/3(\vec{a} + 2\vec{b})$  と表される。つまり、 $Be_1$  を原点にとると、 $Be_2$  の座標は  $(-1/3, 1/3, 1/2)$  と表される。式 A.10 に代入すると、

$$F_{hkl} = f_{Be}(\exp\{2\pi i(h * 0 + k * 0 + l * 0)\} + \exp\{2\pi i(-h/3 + k/3 + l/2)\}) = 0 \quad (\text{A.11})$$

となり、これを解くと

$$-h/3 + k/3 + l/2 = \frac{2n - 1}{2} \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (\text{A.12})$$

と計算できる。したがって、この式を満たす結晶面  $hkl$  での回折ピークは消滅する。

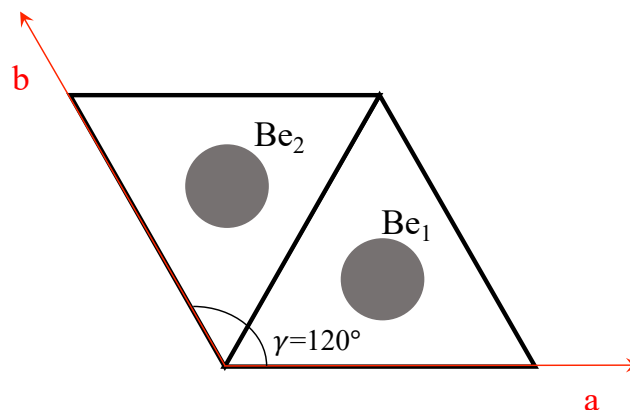


図 A.7: Be の単位格子中に含まれる Be 原子の位置

\*7 以下の URL を参照した。

<http://mukiken.eng.niigata-u.ac.jp/satokougi/daigakuin/kikibunpresen.pdf>

### 単結晶回折法

単結晶試料に連続 X 線を照射し、その回折現象を観測する最も古い回折法がラウエ法である。観測される回折像をラウエ斑点（図 A.8）といい、これをシミュレーション結果と比較することで単結晶の軸を決定できる。もちろんここでも消滅則を満たす結晶面での反射は斑点として見えることはない。単結晶は回折方向が限られているので、単結晶 X 線回折を行う際は、二次元検出器もしくは 2 軸駆動機構を備えている検出器が必要である。

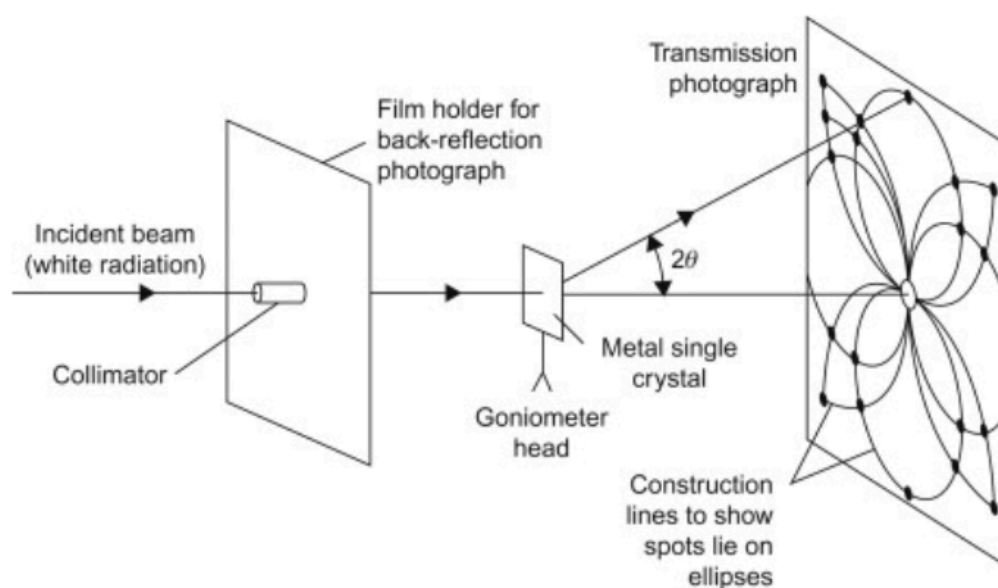


図 A.8: ラウエ法で観測されるラウエ斑点<sup>70</sup>。

## A.5 粉末結晶への応用

### 粉末結晶回折法

粉末結晶は単結晶と異なり、あらゆるミラー指数の結晶面が存在する。また、結晶面の方向もランダムなので、単結晶と同様に二次元検出器で粉末 X 線回折結果を観測すると、環状の回折パターンが見られる。このパターンをデバيشェラーリングと呼ぶ。図 A.9 は、粉末結晶として体心立方構造のフェライト系ステンレス鋼を用いた際のデバيشェラーリングのシミュレーション結果を示している。5 つのリングは、内側からミラー指数 (110), (200), (211), (220), (310) の結晶面に対応する。粉末 X 線回折では円環もしくは楕円状に回折パターンが現れるので、一次元の測定が可能である。一次元方向 ( $2\theta$  方向) に検出器を走査させて得られる回折パターンが図 5.33 等である。これらの回折ピークはそれぞれが、あるミラー指数をもつ結晶面での回折と対応している。

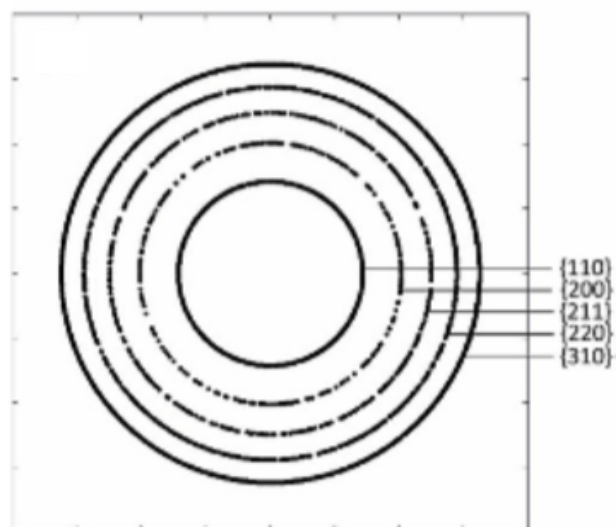


図 A.9: 粉末 X 線回折で得られるデバイシェラーリングのシミュレーション図<sup>71</sup>。粉末結晶として体心立方構造のフェライト系ステンレス鋼を用いている。

粉末法では、単結晶と異なり回折強度の計算は非常に煩雑であり、一般に、結晶構造因子  $F_{hkl}$  以外にも以下の 3 つの因子に左右される。

- 多重度因子  $M$
- ローレンツ因子  $L$
- 偏光因子  $P$

#### 多重度因子

結晶面には面間隔が同じかつ同じ構造因子を示すが、方位の異なる結晶面が存在する。これを多重度因子と呼び、回折 X 線強度を計算する際には多重度因子  $M$  を考慮する必要がある。

以下で六方晶である Be 結晶の多重度因子について考えてみる。c=0 での ab 平面における (100) 面と同様の面間隔をもつ結晶面を図 A.10 に示す。赤線で示された (100) 面とその他 5 つの色付けられた線で示された面が等しい面間隔を持つことは明らかである。それぞれのミラー指数を表示すると図のようになる。 $d_{100}$  の面間隔での散乱波と  $d_{010}$  の面間隔での散乱波はそれぞれ区別することができないので、散乱強度は 6 倍となり観測される。ここでの定数を多重度因子  $M$  と呼び、Be 結晶の (100) 面では  $M=6$  である。

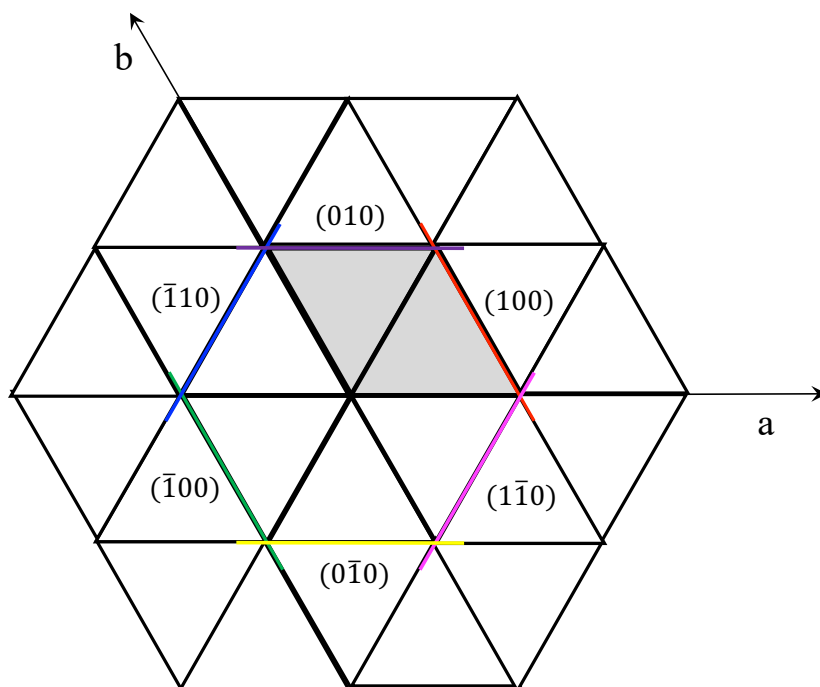


図 A.10: (100) 面と同様の面間隔をもつ結晶面

同様に、他の結晶面についても考えていくと、Be 結晶の多重度因子は以下の表のようにまとめることができる。

表 A.1: 六方晶である Be 結晶の多重度因子  $M$ 

システム	$hkl$	$hhl$	$h0l$	$hk0$	$hh0$	$h00$	$00l$
多重度因子 $M$	24	12	12	12	6	6	2

### ローレンツ因子

ローレンツ因子は、実験方法自体に基づいて必要となる補正因子のことで、粉末結晶を仮定した場合、3つの要素からなる。1つ目のローレンツ因子  $L_1$  は結晶が有限の広がりを持っている事による因子である。単結晶による X 線回折の場合、その回折強度は式 A.9 で与えられる。この式に含まれるラウエ関数は、実効的にデルタ関数をなましたような関数であり、鋭いピークを持つので、幾何学的に極めて鋭い X 線強度を観測しなければならない。しかし、実際に利用する X 線は有限の大きさやエネルギー幅を持つので Bragg 条件を満たす近傍で波長や散乱角に対して積分した強度を測定しており、結果として

$$L_1 = \frac{1}{\sin 2\theta} \quad (\text{A.13})$$

という因子を考慮する必要がある。

粉末法の場合は任意の Bragg 角における積分反射強度が微結晶（結晶子）の数に依存することを考慮する必要がある。図 A.3 にて説明した半径  $1/\lambda$  の Ewald 球において、結晶子は球の表面全体に一樣に分布していると考え。すなわち全結晶子の数  $N$  を球の表面積で表し、 $4\pi(1/\lambda)^2$  とおく。この時、反射に寄与する結晶子の数  $\Delta N$  を求め

る。図 A.11 で直線 CP を 1 粒の粉末結晶子の  $hkl$  反射面に垂直にとる。散乱の許容範囲を  $\Delta\theta$  とすると、法線 CP の一端が球面上の  $(1/\lambda)\Delta\theta$  の幅にある時のみ、この結晶子が反射に寄与する。図の帯状の面積  $\Delta N$  は

$$\Delta N = \frac{1}{\lambda} \Delta\theta 2\pi \frac{1}{\lambda} \sin(90^\circ - \theta) \quad (\text{A.14})$$

$$= 2\pi \frac{1}{\lambda} \Delta\theta \cos\theta \quad (\text{A.15})$$

である。従って、回折条件を満たすように配列している結晶子の比率は

$$\frac{\Delta N}{N} = \frac{\Delta\theta \cos\theta}{2} \quad (\text{A.16})$$

反射の条件に合うように配列している結晶の数は、このように  $\cos\theta$  に比例する。つまり、2 つ目のローレンツ因子  $L_2$  は  $\cos\theta$  であり、背面反射に対する散乱は少ないという条件を与える。

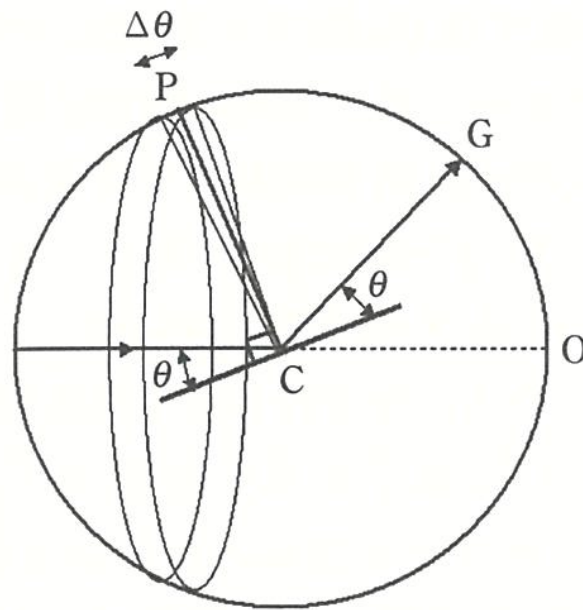


図 A.11: Ewald 球での結晶面の法線 CP とその広がり分布<sup>69</sup>。

相対強度を測定するとき、デバイシェラーリングの円錐について全強度を測るのではなく、一般にはある一定の長さを測る。例えば、デバイシェラー法では図 A.12 に示すように回折 X 線の一部をフィルムが切る。カメラ半径を  $R$  とすると、回折円錐の底面の半径は  $R \sin 2\theta$  である。よって回折円錐全体での回折線の長さは  $2\pi R \sin 2\theta$  となる。用いる回折線の長さを  $\Delta R$  とするとその比率  $\Delta R / 2\pi R \sin 2\theta$  が実際に測定する反射強度に対応する。よって第 3 のローレンツ因子として  $L_3 = 1 / \sin 2\theta$  が与えられる。

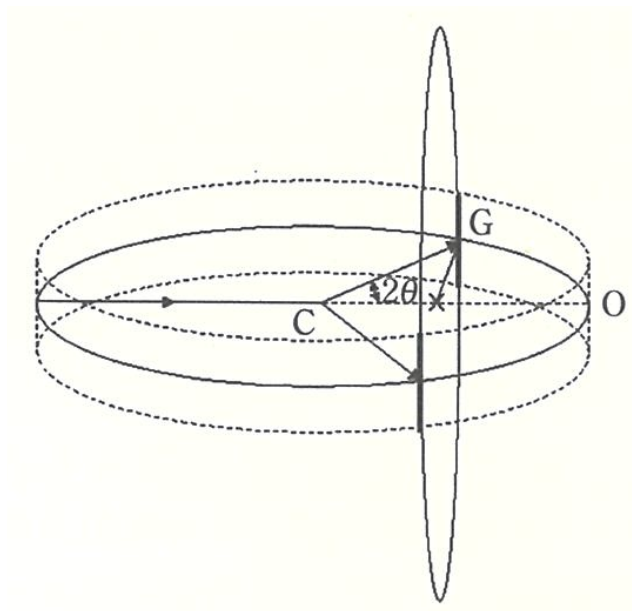


図 A.12: デバイシェラーリングでの粉末回折線<sup>69</sup>。

したがって、これら 3 つのローレンツ因子をまとめると、

$$L = \frac{1}{\sin 2\theta} \cos \theta \frac{1}{\sin 2\theta} = \frac{1}{4 \sin^2 \theta \cos \theta} \quad (\text{A.17})$$

と表されることがわかる。横軸に回折角、縦軸に合計のローレンツ因子をプロットした図を図 A.13 に示す。回折角が小さい、もしくは大きい時にローレンツ因子が大きく、中間の値では小さいことがわかる。

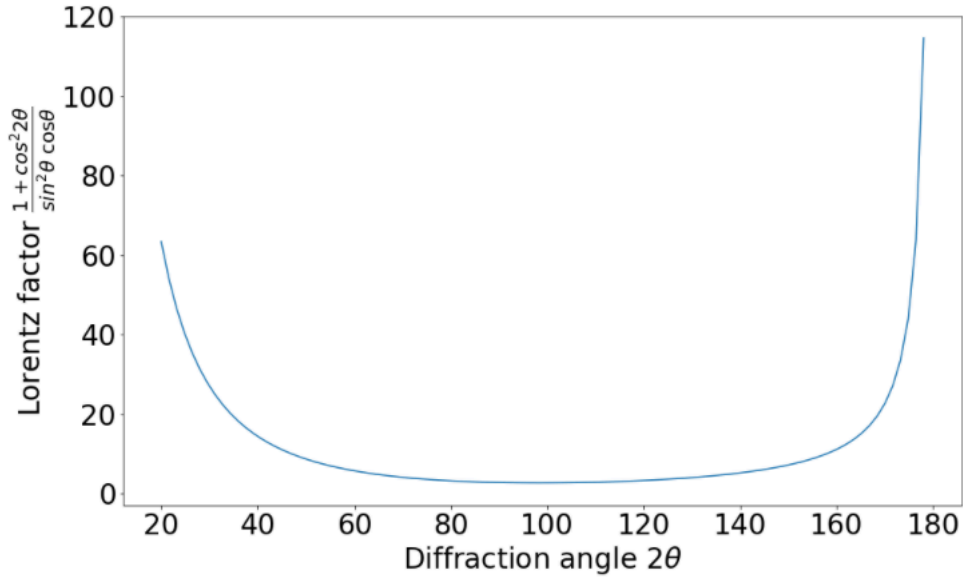


図 A.13: 回折角に対するローレンツ因子

### 偏光因子

偏光因子はトムソン散乱の起こりやすさが角度によって変わることを取り入れた補正である。トムソンの式 A.3 より、

$$\frac{1 + \cos^2 2\theta}{2} \quad (\text{A.18})$$

の角度依存性がある。仮に、入射光が偏光していると補正因子の算出式は少し異なり、

$$\frac{1 + k \cos^2 2\theta}{1 + k} \quad (\text{A.19})$$

となる。つまり、入射 X 線が無偏光の時、 $k=1$  である。

### 粉末法での散乱強度

式 A.9 で表される単結晶の散乱強度に、上記 3 つの補正を取り入れた完全粉末の X 線回折強度  $I$  は

$$I \propto MLPI_e G |F_{hkl}|^2 \quad (\text{A.20})$$

$$\propto M \left( \frac{1 + k \cos^2 2\theta}{(1 + k) \sin^2 \theta \cos \theta} \right) I_e G |F_{hkl}|^2 \quad (\text{A.21})$$

と表される。なお、5.4 で用いた X 線回折装置は透過型ではなく反射型なので吸収補正は考慮しなくてよい。

表 A.2 に Be の 12.0 keV 以下の全ての結晶面 ( $hkl$ ) と、その面に対する面間隔  $d_{hkl}$ 、多重度  $M$ 、( $hkl$ ) 面での BDF エネルギー  $E_{\text{BDF}}$  をまとめる。さらにそれぞれの面が消滅則を満たすかどうかについても記載する。また、表 A.2 において消滅則を満たす結晶面を除き、BDF エネルギーの小さい面から順に並べた表が表 A.3 である。



表 A.2: 12.0 keV 以下の結晶面についての結晶情報

$hkl$	$d_{hkl}$ [Å]	$E_{\text{BDF}}$ [keV]	$M$	消滅則
001	3.5842	1.7298	2	消滅
002	1.7921	3.4596	2	
003	1.1947	5.1894	2	消滅
004	0.8961	6.9191	2	
005	0.7168	8.6489	2	消滅
006	0.5974	10.3787	2	
100	1.9791	3.1326	6	
101	1.7325	3.5785	12	
102	1.3284	4.6671	12	
103	1.0228	6.0616	12	
104	0.8163	7.5953	12	
105	0.6740	9.1988	12	
106	0.5719	10.8412	12	
110	1.1427	5.4259	6	
111	1.0887	5.6949	12	消滅
112	0.9635	6.4350	12	
113	0.8258	7.5080	12	消滅
114	0.7051	8.7929	12	
115	0.6072	10.2100	12	消滅
116	0.5294	11.7114	12	
200	0.9896	6.2653	6	
201	0.9539	6.4997	12	
202	0.8663	7.1570	12	
203	0.7621	8.1353	12	
204	0.6642	9.3342	12	
205	0.5805	10.6798	12	
210	0.7480	8.2882	12	
211	0.7323	8.4668	24	
212	0.6903	8.9812	24	
213	0.6340	9.7787	24	
214	0.5742	10.7967	24	
215	0.5176	11.9791	24	
220	0.5713	10.8518	6	
221	0.5642	10.9888	12	消滅
222	0.5443	11.3899	12	
300	0.6597	9.3979	6	
301	0.6488	9.5558	12	消滅
302	0.6191	10.0145	12	
303	0.5775	10.7355	12	消滅
304	0.5313	11.6703	12	
310	0.5489	11.2949	12	
311	0.5426	11.4266	24	
312	0.5248	11.8128	24	

表 A.3: 12.0 keV 以下の結晶面についての結晶情報。表 A.2 において消滅則を満たす結晶面を除き、BDF エネルギーの小さい面から順に並べた。

$hkl$	$d_{hkl}$ [Å]	$E_{\text{BDF}}$ [keV]	$M$
100	1.9791	3.1326	6
002	1.7921	3.4596	2
101	1.7325	3.5785	12
102	1.3284	4.6671	12
110	1.1427	5.4259	6
103	1.0228	6.0616	12
200	0.9896	6.2653	6
112	0.9635	6.4350	12
201	0.9539	6.4997	12
004	0.8961	6.9191	2
202	0.8663	7.1570	12
104	0.8163	7.5953	12
203	0.7621	8.1353	12
210	0.7480	8.2882	12
211	0.7323	8.4668	24
114	0.7051	8.7929	12
212	0.6903	8.9812	24
105	0.6740	9.1988	12
204	0.6642	9.3342	12
300	0.6597	9.3979	6
213	0.6340	9.7787	24
302	0.6191	10.0145	12
006	0.5974	10.3787	2
205	0.5805	10.6798	12
214	0.5742	10.7967	24
106	0.5719	10.8412	12
220	0.5713	10.8518	6
310	0.5489	11.2949	12
222	0.5443	11.3899	12
311	0.5426	11.4266	24
304	0.5313	11.6703	12
116	0.5294	11.7114	12
312	0.5248	11.8128	24
215	0.5176	11.9791	24

## A.6 散乱強度の入射エネルギー依存性

前節までは簡単のため散乱断面積の入射エネルギー依存性は無視して議論した。ここでは単結晶の散乱断面積を入射 X 線のエネルギー依存性を含めて議論し、最終的に粉末結晶の散乱強度の入射エネルギー依存性を導出する\*8。本節では偏光因子  $P$  は無視する。

### 単結晶の散乱断面積

まず結晶全体の体積を  $V$ 、単位格子の体積を  $v_0$ 、結晶中の単位格子数を  $N_c (= V/v_0)$  とする単結晶を考える。入射 X 線、散乱 X 線の波数ベクトルを  $\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_f$  とすると、散乱ベクトル  $\mathbf{q}$  は  $\mathbf{q} = \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i$  と表される。それぞれのミラー指数  $hkl$  に対応する逆格子点の節を  $\boldsymbol{\tau}$  とすると、 $\mathbf{q} = \boldsymbol{\tau}$  を満たす  $\boldsymbol{\tau}$  を全て足し合わせることで全散乱断面積を算出できる。

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = N_c \frac{(2\pi)^3}{v_0} \sum_{\boldsymbol{\tau}} \delta(\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}) |F(\boldsymbol{\tau})|^2 \quad (\text{A.22})$$

ここで式 A.8 で表された構造因子  $F_{hkl}$  は  $\boldsymbol{\tau}$  を用いて  $F(\boldsymbol{\tau})$  と表す。式 A.22 を出発点として散乱断面積を計算していく。球座標  $(q, \alpha, \chi)$  でのディラックのデルタ関数  $\delta(\mathbf{q})$  として以下の表式を用いる。

$$\delta(\mathbf{q}) = \frac{\delta(q)\delta(\alpha)\delta(\chi)}{q^2 \sin \alpha} \quad (\text{A.23})$$

本議論で仮定している座標系として、図 A.14 で表されるような状況を考える。鉛直方向に Z 軸、入射 X 線と平行方向に Y 軸をとり、これらと直行する軸を X 軸とする。XY 平面と散乱面がなす角を  $\chi$ 、散乱面上で  $\mathbf{q}$  と Y 軸がなす角を  $\alpha$ 、散乱 X 線の波数ベクトルと Y 軸がなす角を  $\gamma$  とおくと、図 A.14 より以下の式が成り立つことがわかる。

$$\alpha = \frac{\pi + \gamma}{2} \quad (\text{A.24})$$

$$\delta(\alpha)\delta(\chi) = 2\delta(\gamma)\delta(\chi)$$

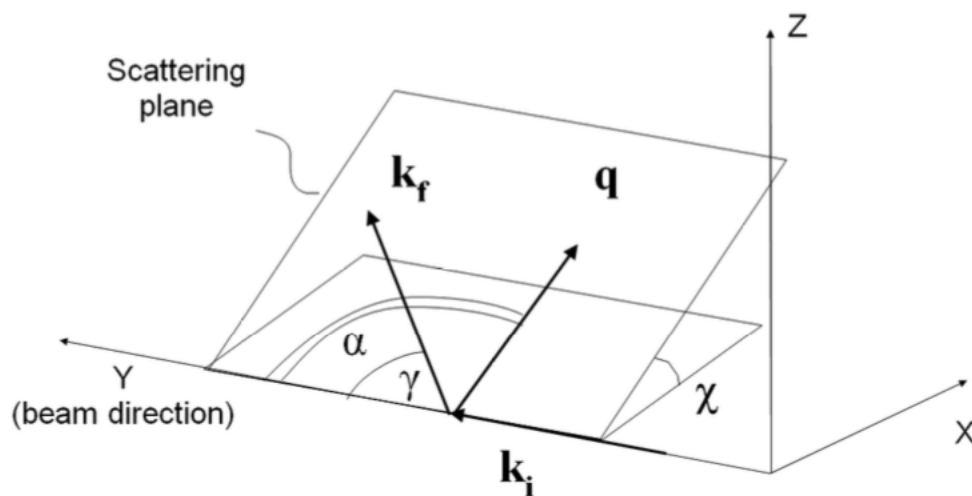


図 A.14: 本議論で設定している空間座標系\*9

\*8 [https://www2.physics.ox.ac.uk/sites/default/files/CrystalStructure\\_fullnotes6.pdf](https://www2.physics.ox.ac.uk/sites/default/files/CrystalStructure_fullnotes6.pdf)

$\bar{q} = q - \tau$ ,  $\bar{\alpha} = \alpha - \alpha_\tau$ ,  $\bar{\chi} = \chi - \chi_\tau$  と表記すると、結果として式 A.22 は以下のように書き換えられる。

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = N_c \frac{(2\pi)^3}{v_0} \sum_{\tau} \frac{2\delta(\bar{q})\delta(\bar{\gamma})\delta(\bar{\chi})}{q^2 \cos(\gamma/2)} |F(\tau)|^2 \quad (\text{A.25})$$

散乱角  $\gamma$  は  $\theta$  を用いると  $\gamma = 2\theta$  と表される。

式 A.25 は単結晶と粉末結晶の両方の散乱断面積に共通する表式である。以下では粉末結晶による散乱断面積を導出する。デバイシェラーリング上に散乱された光子全てを足し合わせることで BDF の深さと対応づける。あるミラー指数を持つ結晶子が  $i$  パターン存在し、それらが全て同じ数  $n_c$  個の単位格子を持つと仮定すると、式 A.25 は以下のように表される。

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{(2\pi)^3 n_c}{v_0} \sum_i \sum_{\tau} \frac{\delta(\bar{q})\delta(\alpha - \alpha_i(\tau))\delta(\chi - \chi_i(\tau))}{q^2 \sin(\alpha)} |F(\tau)|^2 \quad (\text{A.26})$$

ここで  $\alpha_i(\tau)$ ,  $\chi_i(\tau)$  は  $i$  番目の結晶子の逆格子ベクトル  $\tau$  がなす角度を表す。結晶子数  $n_p$  の角分布が均一 ( $n_p/4\pi$ ) とすると、上式は角度変数の積分を用いて以下のように表される。

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{(2\pi)^3 n_c n_p}{\pi v_0} \sum_{\tau} \int \sin \alpha(\tau) d\alpha(\tau) d\chi(\tau) \frac{\delta(\bar{q})\delta(\alpha - \alpha_i(\tau))\delta(\chi - \chi_i(\tau))}{q^2 \sin(\alpha)} |F(\tau)|^2 \\ &= \frac{2\pi^2 N_c}{v_0} \sum_{\tau} \frac{\delta(\bar{q})}{q^2} |F(\tau)|^2 \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

$N_c (= n_s n_p)$  は結晶全体に含まれる単位格子数である。前節で論じたように、粉末結晶では多重度因子  $M$  を考慮する必要があり、結果的に散乱断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2\pi^2 N_c}{v_0} M_{\tau} \frac{\delta(\bar{q})}{q^2} |F(\tau)|^2 \quad (\text{A.28})$$

と表される。本論文では単位エネルギーあたりの散乱強度を議論するため、まず

$$\begin{aligned} q &= |\mathbf{q}| = \frac{4\pi \sin \theta}{\lambda} \\ \delta(q) &= \frac{\lambda}{2\pi \cos \theta} \delta(\gamma) \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

の関係式を用いて式 A.29 を変形する。

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = N_c \left( \frac{d_{\tau}^3}{v_0} \right) M_{\tau} |F(\tau)|^2 \frac{\tan \theta}{2\pi} \delta(\gamma) \quad (\text{A.30})$$

ここで  $d_{\tau}$  は Bragg 散乱を起こす際の結晶面間隔を示す。

次に単位時間、単位面積、単位波長あたりの入射フラックス密度  $\Phi(\lambda)$  をかけ、全立体角 ( $d\Omega = \sin \gamma d\gamma d\chi$ ) で積分することで散乱強度 (単位時間あたりの散乱光子数)  $P_{\tau}$  に変換する。

$$\begin{aligned} P_{\tau} &= \int \frac{d\sigma}{d\Omega} \Phi(\lambda) d\Omega \\ &= \int \int N_c \left( \frac{d_{\tau}^3}{v_0} \right) M_{\tau} |F(\tau)|^2 \Phi(\lambda) \frac{\tan \theta}{2\pi} \delta(\gamma) \sin 2\theta d\gamma d\chi \\ &= \int_0^{\pi} N_c \left( \frac{d_{\tau}^3}{v_0} \right) M_{\tau} |F(\tau)|^2 \Phi(\lambda) \frac{\sin \theta^2}{\pi} d\chi \\ &= N_c \left( \frac{d_{\tau}}{v_0} \right) M_{\tau} |F(\tau)|^2 \Phi(\lambda) \frac{h^2 c^2}{4E^2} \propto E^{-2} \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

となり、結果として、散乱強度  $P_{\tau}$  は入射エネルギーのマイナス二乗に比例することがわかる。

\*9 以下の URL 参照。

[https://www2.physics.ox.ac.uk/sites/default/files/CrystalStructure\\_fullnotes6.pdf](https://www2.physics.ox.ac.uk/sites/default/files/CrystalStructure_fullnotes6.pdf)

## B 測定ログ

本章では、それぞれの測定実験でのログをまとめる。

### B.1 ISAS ビームラインでのステンレスメッシュ透過率測定

表 B.4: ISAS ビームラインでの測定ログ

日付	作業内容
2019/2/4	供試体の搬入、真空引き
2/5	アラインメント、CCD を用いた透過率測定
2/6	Cu $K\alpha$ の DCM slit 作成、 $A_\theta$ scan
2/8	Cu $K\alpha$ の直接光、透過光のスキャン測定
2/10	Mo $K\alpha$ の直接光探し
2/12	Mo $K\alpha$ の直接光、透過光のスキャン測定
2/13	Mo $K\beta$ 直接光探し
2/14	Mo $K\beta$ 直接光、透過光スキャン測定
2/15	Ag $K\alpha$ 直接光探し、Ni filter を通した測定
2/17	Pt $L\beta$ 直接光、透過光スキャン測定
2/18	Ti $K\alpha$ 直接光、透過光スキャン測定、大気開放
2/19	供試体取り出し

## B.2 KEK PF BL7C での Be 窓透過率測定

日付	時刻	作業内容
2019/6/14	9:00	セットアップ
	11:54	銅箔を用いたエネルギー較正
	16:25	供試体設置し中心決定、OFF 位置の決定
	19:40	測定 (Center, 4-6 keV, 2 eV step, 2s dwell)
	20:45	測定 (Center, 5.9-8 keV, 2 eV step, 2s dwell)
	21:45	測定 (OFF, 4-6 keV, 2 eV step, 2s dwell)
6/15	12:15	測定 (OFF, 5.9-8 keV, 2 eV step, 2s dwell)
	13:37	測定 (OFF, 7.9-10.0 keV, 2 eV step, 2s dwell)
	14:29	測定 (Center, 7.9-10.0 keV, 2 eV step, 2s dwell)
	15:22	測定 (OFF, 9.9-12.0 keV, 2 eV step, 2s dwell)
	16:13	測定 (center, 9.9-12.0 keV, 2 eV step, 2s dwell)
	17:25	測定 (OFF, 5.9-8 keV, 2 eV step, 1s dwell)
	18:06	測定 (Top, 5.9-8 keV, 2 eV step, 1s dwell)
	19:01	測定 (OFF, 7.9-12.0 keV, 2 eV step, 1s dwell)
	20:08	測定 (Top, 7.9-10.0 keV, 2 eV step, 1s dwell)
	21:50	測定 (OFF, 4-5 keV, 2 eV step, 1s dwell)
	22:08	測定 (Top, 4-5 keV, 2 eV step, 1s dwell)
	22:28	ゲインー桁下げる
	22:47	測定 (Top, 4.9-6 keV, 2 eV step, 1s dwell)
	23:10	測定 (Top, 4.9-6 keV, 2 eV step, 1s dwell)
6/16	8:20	ゲインー桁上げる
	8:45	測定 (OFF, 4-5 keV, 2 eV step, 1s dwell)
	9:11	測定 (bottom, 4-5 keV, 2 eV step, 1s dwell)
	9:30	ゲインー桁下げる
	9:34	測定 (OFF, 4.9-6 keV, 2 eV step, 1s dwell)
	9:53	測定 (bottom, 4.9-6 keV, 2 eV step, 1s dwell)
	10:15	測定 (OFF, 5.9-8 keV, 2 eV step, 1s dwell)
	10:52	測定 (bottom, 5.9-8 keV, 2 eV step, 1s dwell)
	11:48	測定 (OFF, 7.9-12.0 keV, 2 eV step, 1s dwell)
	12:55	測定 (bottom, 7.9-12.0 keV, 2 eV step, 1s dwell)
	14:15	<Center 取り直し>
	14:19	測定 (OFF, 4.9-8 keV, 2 eV step, 1s dwell)
	15:39	測定 (Center, 4.9-8 keV, 2 eV step, 1s dwell)
	16:30	ゲインー桁上げる
	16:40	測定 (OFF, 4-5 keV, 2 eV step, 1s dwell)
	17:05	測定 (Center, 4-5 keV, 2 eV step, 1s dwell)

表 B.5: BL7C 測定ログ

## B.3 KEK PF BL11B での Be 窓透過率測定

日付	時刻	作業内容
2019/6/18	13:00	<エネルギースキャン測定>
	13:09	真空引き
	18:53	PVC を用いたエネルギー較正
	19:35	大気リークし Be 設置
	20:02	真空引き
	21:12	Be 位置出し
	22:55	測定 (OFF, 3.95-5.0 keV, 2 eV step, 2s dwell)
	23:56	測定 (Center, 3.95-5.0 keV, 2 eV step, 2s dwell)
6/19	8:00	真空引き
	8:55	測定 (OFF, 3.45-4.0 keV, 2 eV step, 2s dwell)
	9:30	測定 (Center, 3.45-4.0 keV, 2 eV step, 4s dwell)
	10:15	測定 (OFF, 2.95-3.5 keV, 2 eV step, 2s dwell)
	10:49	測定 (Center, 2.95-3.5 keV, 2 eV step, 6s dwell)
	11:41	測定 (OFF, 2.55-3.0 keV, 2 eV step, 2s dwell)
	12:11	測定 (Center, 2.55-3.0 keV, 2 eV step, 8s dwell)
	13:05	測定 (OFF, 2.35-2.6 keV, 2 eV step, 2s dwell)
	13:23	測定 (Center, 2.35-2.6 keV, 2 eV step, 10s dwell)
	14:09	測定 (OFF, 2.15-2.4 keV, 2 eV step, 2s dwell)
	14:36	測定 (Center, 2.15-2.4 keV, 2 eV step, 10s dwell)
	15:14	測定 (OFF, 2-2.2 keV, 2 eV step, 4s dwell)
	15:31	測定 (Center, 2-2.2 keV, 2 eV step, 14s dwell)
	16:52	測定 (Top, 2-2.4 keV, 2 eV step, 10s dwell)
	17:42	測定 (OFF, 2-2.4 keV, 2 eV step, 2s dwell)
6/21	8:20	真空引き
	9:05	Si 結晶から InSb 結晶へ変更
	9:20	スリットを調整しアラインメント
	10:45	測定 (OFF, 3000-3400: 5eV, 3400-3500: 2eV, 2s)
	11:30	測定 (OFF, 3000-3400: 5eV, 3400-3500: 2eV, 2s)
	12:09	測定 (OFF, 2350-3050, 5eV, 10s)
	12:51	測定 (Center, 2350-3050, 5eV, 20s)
	13:55	測定 (OFF, 2050-2400, 5eV, 10s)
	14:25	測定 (Center, 2050-2400, 5eV, 20s)
	15:04	測定 (OFF, 1800-2100, 5eV, 10s)
	15:35	測定 (Center, 1800-2100, 5eV, 20s)
	16:20	InSb 結晶から Si 結晶へ変更
	16:33	ビーム位置調整

日付	時刻	作業内容
	16:44	測定 (OFF, 2.35-3.0 keV, 2 eV step, 2s dwell)
	17:26	測定 (Top, 2.35-3.0 keV, 2 eV step, 6s dwell)
	18:32	測定 (OFF, 2.95-4.5 keV, 2 eV step, 2s dwell)
	20:00	測定 (Top, 2.95-4.5 keV, 2 eV step, 2s dwell)
6/22	8:20	真空引き
	8:46	測定 (OFF, 2.06-2.4 keV, 2 eV step, 2s dwell)
	9:11	測定 (Bottom, 2.06-2.4 keV, 2 eV step, 10s dwell)
	10:02	測定 (OFF, 2.35-3.0 keV, 2 eV step, 2s dwell)
	10:44	測定 (Bottom, 2.35-3.0 keV, 2 eV step, 6s dwell)
	11:47	測定 (OFF, 2.95-4.5 keV, 2 eV step, 2s dwell)
	13:16	測定 (Bottom, 2.95-4.5 keV, 2 eV step, 2s dwell)
	15:42	<位置スキャン測定>
	16:35	ビームサイズを横 0.8 mm× 縦 1.2 mm に調整
	16:45	ビームプロファイル取得
	18:15	ステージ移動スクリプト作成
	19:05	測定 (3keV, upper, Beam Shutter open)
	20:50	測定 (3 keV, lower, Beam Shutter open)
	21:45	測定 (3 keV, upper, Beam Shutter close)
	22:30	測定 (3 keV, lower, Beam Shutter close)
6/23	8:14	真空引き
	8:46	測定 (4000 eV, upper, Beam Shutter open)
	9:36	測定 (4000 eV, lower, Beam Shutter open)
	10:24	測定 (3456 eV, upper, Beam Shutter open)
	11:13	測定 (3456 eV, lower, Beam Shutter open)
	12:03	測定 (3000 eV, lower, Beam Shutter open) 2 回目
	13:44	Gain 変更
	13:51	測定 (3000 eV, lower, Beam Shutter open) 3 回目
	14:54	測定 (2700 eV, upper, Beam Shutter open)
	15:40	測定 (2700 eV, lower, Beam Shutter open)

表 B.6: BL11B 測定ログ



## B.4 HiSOR BL11 での Be 窓透過率測定

表 B.7: BL11 測定ログ

日付	時刻	作業内容
2019/11/26	10:45	4 keV の X 線で鉛スリット用いて鉛直方向アラインメント (大気中)
	10:55	スリット 90 度回転し、水平方向アラインメント
	11:02	Be 窓設置
	11:09	測定チャンバ内 He 置換
	11:30	ピエゾモータで第二結晶傾け (detuning) 高次光除去
	12:57	測定 (Center, 2100–2540 eV, 2 eV step, 10s dwell)
	13:51	測定 (OFF, 2100–2540 eV, 2 eV step, 2s dwell)
	16:55	full tune に戻す
	17:41	測定 (Center, 2450–4000 eV, 2 eV step, 1s dwell)
	18:20	測定 (OFF, 2450–4000 eV, 2 eV step, 1s dwell)
11/27	10:05	最大光量になるようアラインメント
	10:36	測定 (Center, 2100–2300 eV, 2 eV step, 10s dwell)
	11:08	測定 (OFF, 2100–2300 eV, 2 eV step, 5s dwell)
	11:44	測定 (OFF, 2100–2300 eV, 2 eV step, 5s dwell)2 回目
	12:36	チャンバ内残存大気の影響を確認するため、2140 eV にて定点測定
	13:23	チャンバ内残存大気の影響を確認するため、2400 eV にて定点測定

## B.5 首都大学東京での Be 窓 X 線回折測定

表 B.8: X 線回折測定ログ

日付	時刻	作業内容
2019/12/23	10:15	供試体設置、自動セットアップ
	10:33	セットアップ確認 (range: 20–80°, step: 0.02°, scan speed: 10°/min)
	11:08	測定 1 (range: 20–80°, step: 0.02°, scan speed: 2°/min)
	11:50	測定 1 (range: 80–160°, step: 0.02°, scan speed: 2°/min)
	13:15	供試体反転、照射位置変更
	13:20	自動セットアップ
	13:31	測定 2 (range: 20–160°, step: 0.02°, scan speed: 2°/min)

# 改訂履歴

変更日時	改訂履歴
2020/1/27	初版、天文事務室へ提出
2020/2/21	審査員の勝川さんからのコメントを取り込み、タイポを修正
2020/5/18	付録 A.6 節を追記、図 6.14 を修正
2020/10/31	散乱強度が $E^{-2}$ に比例し、非干渉性散乱と光電吸収厚みが等しい新モデル（モデル A）の作成 6.2, 6.3 節, 6.5 節, 付録 A.6 節の修正

## 謝辞

本論文を執筆するにあたり、ご協力くださった方々に深く感謝申し上げます。

指導教官である海老沢研教授には、X線天文学全般をはじめとして、学会発表や申請書作成についてなど、あらゆることを教えていただきました。質問にいくと、どんなに忙しい時でも時間を取って熱心に指導してくださり、この研究室で本当によかったと思いました。海老沢先生の「物理現象を直感的に理解しようとする姿勢」にはとても共感が持て、普段の研究生活で常に意識するようにしています。また、海老沢先生の文章作成能力には脱帽するばかりでした。文章を添削していただく度に真っ赤になって返ってきますが、そのほとんどのコメントが建設的で納得のいくものでした。研究者には国語力が重要であることを再認識させていただきました。積極的に国内・海外への出張の機会をくださったのも研究のモチベーションとなりました。まだまだ若造ですが、海老沢先生のような研究者になれるよう、博士課程でも精進致します。来年からもよろしくお願いします。

本修士論文を作成するにあたり、最もお世話になったのが宇宙研 准教授の辻本匡弘さんです。Resolve 装置較正の日本側の責任者である辻本さんのおかげで、このような貴重な研究を修士論文のテーマにすることができました。頭の回転がとても早く、置いてけぼりにされることも多々ありましたが、辻本さんとの議論から数多くのことを学ぶことができました。学生の目線に立った丁寧なコメントには何度も救われました。辻本さんと共同研究できたおかげで、研究者として成長することができたと実感しています。家族を大切にしているところや超健康的な生活リズムなど、生活面でもとても尊敬しています。

立教大学の北本俊二教授には、Be窓の透過率測定において大変お世話になりました。真空チャンバや検出器、測定ステージなど、様々なものを北本先生から貸し出していただきました。また、SXS Be窓の透過率較正での経験をもとに、本研究について多くのアドバイスをいただきました。本修士論文の添削をお願いした際には、お忙しいにも関わらず快く引き受けてくださり、大変丁寧かつ有益なコメントを頂きました。北本先生なしではこの研究は成り立ちませんでした。ありがとうございました。

宇宙研ビームラインでの測定では宇宙研 助教の前田良知さんと博士学生の中庭望さんに大変お世話になりました。特に中庭さんは治具作成を含め、実験の全日程に付き合ってください、本当に良くしていただきました。宇宙研ビームラインでの実験は本研究の最初の測定であり、X線実験の経験がなかった僕に、測定原理や真空技術など基礎的な質問にも丁寧に答えていただきました。測定計画の立案と結果の解釈の際には、石田学教授にもお力添えいただきました。

立教大学 研究員の吉田裕貴さんには SXS Be窓の透過率測定の経験を踏まえ、立教大学の測定装置の使用方を教えていただきました。また、吉田さんの先駆的研究<sup>19</sup>が基盤となり、BDFの考察を進めることができました。KEK PF BL7Cのビームライン責任者の杉山弘さんは、放射光実験に不慣れな我々のために、BL7Cでのセットアップを整備し、測定を手伝ってくださいました。KEK PF BL11Bのビームライン責任者の北島義典さんには、緊急の分光結晶交換などのご支援をいただきました。京都大学工学研究科の高岡昌輝教授、塩田憲司 技術専門職員には、BL11Bでのエネルギー較正で用いたPVC K吸収端のXAFSデータを提供していただきました。立教大学4年生の針ヶ谷くん、福一くん、村井くん、荒神くんはKEK PFでの測定を手伝ってくださいました。

HiSORでの実験(課題番号19BU007)では、広島大学の早川慎一郎教授に大変お世話になりました。我々の実験

のために測定治具を作成してくださり、また低エネルギー側まで測定したいというわがまを聞いてビームラインまで改造していただきました。結晶解析が専門でない我々にとって、分析化学者である早川先生のコメントは大変貴重でした。また、追加実験の候補施設を調べ、HiSORを紹介してくださった立教大学の武井大さん、山口大学の堀川裕加さんにも厚く感謝を申し上げます。

首都大での回折実験では北園幸一教授の所有する X 線回折装置を使用させていただきました。また、修士学生の藤森佑太さんは、自身も修論に追われているにも関わらず、我々の実験に終始立会い、測定装置の操作をしてくださいました。お二人が参加され、奇しくも XRISM と同じロケットで打ち上げられる SLIM がうまくいくことを祈っています。

Resolve チームの皆様には、サブシステム試験に参加する機会をいただきました。フライト品を前に専門家の方々に説明していただいたおかげで、1 章で述べた Resolve のサブシステムについての理解が深まりました。特に、竹井洋さんは本修士論文を隅々まで読んでコメントしてくださりました。竹井さんと議論を重ねることにより、結果的に結晶学への理解が深まり、より尤もらしいモデルを作成することができました。吉田誠至さんをはじめ SHI 社の皆様には、SHI 新居浜工場での Resolve サブシステム試験に参加させていただいた際、実際に Be 窓を作成した現場を見せていただき、フライト品の撮影許可をいただきました。また、ゲートバルブの設計図や写真の提供をしていただきました。JAXA プロジェクト研究員の林佑さんは、Be 窓の表面状態を確認する顕微鏡撮影を手伝ってくださいました。SXS ゲートバルブの較正データベースを作成した NASA/GSFC の Megan Eckart さんには、較正データベースのドキュメントを送っていただきました。同じく NASA/GSFC の Tahir Yaqoob さんには、ゲートバルブの仕様が変わったことによる幾何学起因の透過率への影響について、ray tracing シミュレーションの結果から様々な助言をしていただきました。国立天文台の勝川行雄准教授には、修士論文の査読委員として丁寧に査読をしていただきました。他波長の実験屋として、我々が思い付かなかった視点から建設的なコメントを頂きました。ありがとうございました。

宇宙研の皆さんには修士 2 年間を通じて大変お世話になりました。ポスドクの菅原泰晴さんには、データ解析等でつまづいたときに質問に行くとき常に丁寧に教えてくださいました。特に修士一年次に Wolf-Rayet 論文を書いた際には、データ取得から解析まであらゆる面でお世話になりました。菅原さんのおかげで一つの成果が上げられ、少しだけ自信を持って研究を行えるようになりました。また、Wolf-Rayet 星の話題をつまみに美味しそうにお酒を飲む菅原さんの姿を見て、幸せな気持ちになりました。国際トップヤングフェローの和泉究さんには、X 線天文学しか頭になかった私に、重力波という魅力的な研究テーマを提示してくださいました。このまま重力波の研究を続けていくとすると、和泉さんとの出会いが僕の人生を変えたと言っても過言ではないかもしれません（過言かもしれません）。和泉さんのおかげで KAGRA 立ち上げ実験、Caltech の 40 m プロトタイプ見学など今後の研究テーマに大きく影響を与えるであろう経験を多数させていただきました。海老沢研の先輩である下向さんには、宇宙研での研究生活や東大の授業について等、様々なことを教えていただきました。英語でプレゼンテーションをする地域団体トーストマスターズも紹介していただきました（体験しか行きませんでした）。後輩の富永さんは研究意識が高く、富永さんのおかげでとてもやる気が出ました。富永さん、八木くん、松本くんと始めた宇宙論・ArXiv ゼミは大変勉強になっています。誘ってくれてありがとう。NTP サーバの組み立てに四苦八苦したのも良い思い出です。宇宙研同期の高倉くん、渡辺くん、武尾さん、福岡さん、大平くんがいたおかげで、研究生活を充実したものにすることができました。ありがとう。

最後に、これまで支えてくれた家族には本当に感謝しています。本当に多くの方々に支えられ、本研究を行うことができました。ありがとうございました。

This work was performed under the approval of the Photon Factory Program Advisory Committee (Proposal No. 2018G509). We used software, API, and databases provided by the Cambridge Crystallographic Data Centre. This research has made use of the SIMBAD database, operated at CDS, Strasbourg, France.

## 参考文献

- [1] Giacconi, Riccardo, Gursky, Herbert, Paolini, Frank R., & Rossi, Bruno B., 1962, *Physical Review Letters*, 9, 439
- [2] 井上一 高橋忠幸 水本好彦 梶田隆章, 2012, 宇宙の観測 (3) 高エネルギー天文学 現代の天文学 (日本評論社)
- [3] Koyama, K., Makishima, K., Tanaka, Y., & Tsunemi, H., 1986, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 38, 121
- [4] Ishida, M., et al., 1992, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 254, 647
- [5] Tamura, T., et al., 2009, *The Astrophysical Journal*, 705, L62
- [6] Hitomi Collaboration, 2016, *Nature*, 535, 117
- [7] Hitomi Collaboration, 2017, *Nature*, 551, 478
- [8] Aharonian, F. A., et al., 2017, *The Astrophysical Journal*, 837, L15
- [9] Moseley, S. H., Mather, J. C., & McCammon, D., 1984, *Journal of Applied Physics*, 56, 1257
- [10] Watanabe, S., Iizuka, R., & Sato, R., 2019, XRISM Resolve Status Talk "Mission Operations and Mission Operation Preparation Status", Matsuyama, XRISM Science Meeting,
- [11] Kelley, Richard L., et al., 2016, *Proc. Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers*, 99050V
- [12] de Vries, Cor P., et al., 2017, *Journal of Astronomical Telescopes, Instruments, and Systems*, 4, 1
- [13] Takahashi, Tadayuki, et al., 2018, *Journal of Astronomical Telescopes, Instruments, and Systems*, 4, 1
- [14] Mitsuda, Kazuhisa, et al., 2014, *Proc. Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers*, 91442A
- [15] Weisskopf, M. C., et al., 2010, *The Astrophysical Journal*, 713, 912
- [16] Tsujimoto, Masahiro, et al., 2018, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 70, 20
- [17] Eckart, Megan E., et al., 2018, *Journal of Astronomical Telescopes, Instruments, and Systems*, 4, 1
- [18] Hoshino, Akio, et al., 2017, *Proc. Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers*, 103970E
- [19] Yoshida, Yuki, et al., 2017, *Proc. Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers*, 103971D
- [20] Chantler, C. T., 1995, *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 24, 71
- [21] Chantler, C. T., 2000, *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 29, 597
- [22] Eckart, M. E., Leutenegger, M. A., Okajima, T., Hayashi, T., Mori, H., Sawada, M., Maeda, Y., Tsujimoto, M., & Vries, d. C., 2019, "XRISM Resolve Calibration Requirements Reference document accompanying RESOLVE-SYS-REQ-0017, Rev-A (RESOLVE-SCI-REQ-0073)",
- [23] Nakazawa, K., & Tashiro, M., 2017, "X-ray Astronomy Recovery Mission (XARM) Mission requirement flow down (RPR-XA16015)",
- [24] Eckart, M. E., Leutenegger, M. A., Okajima, T., Hayashi, T., Mori, H., Maeda, Y., Tsujimoto, M., & Vries, d. C., 2013, "XARM Resolve Calibration Requirements (RESOLVE-SYS-REQ-0017)",
- [25] Fujimoto, Ryuichi, et al., 2017, *Journal of Astronomical Telescopes, Instruments, and Systems*, 4, 1
- [26] Yaqoob, T., & Center, G. H. S. D., 2016, "ASTRO-H Instrument Calibration Report SXS Gate Valve and

- Filter Wheel Filters ASTH-TEL-CALDB-FILT",
- [27] 市原昂, 2013, 修士論文, 首都大学東京
- [28] 富川和紀, 2014, 修士論文, 首都大学東京
- [29] 佐藤寿紀, 2015, 修士論文, 首都大学東京
- [30] 浅井龍太, 2019, 修士論文, 首都大学東京
- [31] Hayashi, Takayuki, et al., 2015, *Journal of Astronomical Telescopes, Instruments, and Systems*, 1, 044004
- [32] Fujimori, Takashi, Tanino, Yuta, Takaoka, Masaki, & Morisawa, Shinsuke, 2010, *Analytical Sciences*, 26, 1119
- [33] 大橋治彦, 平野馨一, 2019, 放射光ビームライン光学技術入門改訂版 (日本放射光学会)
- [34] Schaefer, Franz, Mertin, Matthias, & Gorgoi, Mihaela, 2007, *The Review of scientific instruments*, 78, 123102
- [35] Miyamoto, Atsushi, Goto, Kiminori, Sasaki, Shigemi, & Taniguchi, Masaki, 2014, *Proc. of the 11th Annual Meeting of Particle Accelerator Society of Japan*, 4
- [36] Torii, Ken'ichi, et al., 2000, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 52, 875
- [37] Becker, W., & Trümper, J., 1997, arXiv:astro-ph/9708169
- [38] Zhang, L., & Cheng, K. S., 2003, *Astronomy & Astrophysics*, 398, 639
- [39] Chen, Yang, et al., 2006, *The Astrophysical Journal*, 651, 237
- [40] Campana, R., et al., 2008, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 389, 691
- [41] Posselt, B., et al., 2017, *The Astrophysical Journal*, 835, 66
- [42] Collaboration, The Fermi LAT, & Consortium, Pulsar Timing, 2010, *The Astrophysical Journal*, 713, 146
- [43] Horns, D., et al., 2006, *Astronomy & Astrophysics*, 451, L51
- [44] Williams, Brian J., Rangelov, Blagoy, Kargaltsev, Oleg, & Pavlov, George G., 2015, *The Astrophysical Journal*, 808, L19
- [45] Gonzalez, M. E., Kaspi, V. M., Pivovarov, M. J., & Gaensler, B. M., 2006, *The Astrophysical Journal*, 652, 569
- [46] Kumar, Harsha S., Safi-Harb, Samar, & Gonzalez, Marjorie E., 2012, *The Astrophysical Journal*, 754, 96
- [47] Hughes, John P., et al., 2001, *The Astrophysical Journal*, 559, L153
- [48] Wilson, A. S., 1986, *The Astrophysical Journal*, 302, 718
- [49] Roberts, Mallory S. E., Romani, Roger W., & Johnston, Simon, 2001, *The Astrophysical Journal*, 561, L187
- [50] Hu, Chin-Ping, et al., 2017, *The Astrophysical Journal*, 838, 156
- [51] Gotthelf, E. V., Halpern, J. P., & Dodson, R., 2002, *The Astrophysical Journal*, 567, L125
- [52] Gaensler, B. M., et al., 2004, *The Astrophysical Journal*, 616, 383
- [53] Kaspi, V. M., Gotthelf, E. V., Gaensler, B. M., & Lyutikov, M., 2001, *The Astrophysical Journal*, 562, L163
- [54] Roberts, Mallory S. E., et al., 2003, *The Astrophysical Journal*, 588, 992
- [55] Pavlov, G. G., Kargaltsev, O., & Briskin, W. F., 2008, *The Astrophysical Journal*, 675, 683
- [56] Hitomi Collaboration, et al., 2018, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 70
- [57] Matheson, Heather, & Safi-Harb, Samar, 2010, *The Astrophysical Journal*, 724, 572
- [58] Ng, C.-Y., Slane, P. O., Gaensler, B. M., & Hughes, J. P., 2008, *The Astrophysical Journal*, 686, 508
- [59] Uchida, Hiroyuki, et al., 2012, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 64, 141
- [60] Misanovic, Z., Pavlov, G. G., & Garmire, G. P., 2008, *The Astrophysical Journal*, 685, 1129
- [61] Bocchino, F., Bandiera, R., & Gelfand, J., 2010, *Astronomy and Astrophysics*, 520, A71
- [62] Li, X. H., Lu, F. J., & Li, T. P., 2005, *The Astrophysical Journal*, 628, 931

- [63] Huang, R. H. H., et al., 2012, The Astrophysical Journal, 760, 92
- [64] Hessels, J. W. T., et al., 2004, The Astrophysical Journal, 612, 389
- [65] Halpern, J. P., et al., 2001, The Astrophysical Journal, 552, L125
- [66] Hui, C. Y., et al., 2012, The Astrophysical Journal, 747, 74
- [67] Kurashima, Sho, et al., 2016, Proc. Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers, 99053Y
- [68] B.D. カリティ, (松村源太郎 訳)1999, X 線回折要論 (アグネ承風社)
- [69] 中井泉, 泉富士夫, 2009, 粉末 X 線解析の実際 (朝倉書店)
- [70] Smallman, R. E., & Ngan, A. H. W., 2013, Modern Physical Metallurgy 8th Edition (Butterworth-Heinemann)
- [71] Erinosho, T.O., et al., 2016, International Journal of Plasticity, 83, 1