

ピエゾを使った $\Delta\theta_1$ チューニングの試み

1 動機

1. BL5S1 で分光器の (333) 回折を使って高エネルギーの光を出す実験を行った際、分光器の (333) 回折の幅は、(111) に比べて小さく、XAFS 測定範囲のどこか一点で $\Delta\theta_1$ を調整しただけでは、XAFS 測定を行った時、測定エネルギー範囲の全域で (333) 回折を捉えられないという問題が起こった。その場での対応として、幾つかのエネルギーで $\Delta\theta_1$ を調整して (333) 回折のピークを探し¹、その時の値をテーブルを作成した。さらに、XAFS 測定ではこのテーブルを参照して $\Delta\theta_1$ を変更する、という機能を制御プログラムに取り入れた。しかしこの対応では、テーブルの間隙のエネルギーでは線形補間で調整しており、それが正しいという保証はない。また、テーブルを作成した後に光学系に微妙な変化が起こって、最適の $\Delta\theta_1$ が変化する可能性もある。そこで、XAFS 測定の間動的に $\Delta\theta_1$ をチューニングする機構があることが望ましいと考えられた。
2. BL5S1 では、同一試料の XAFS 測定を繰り返し行なった時、XAFS スペクトルが 1 ~ 0.1eV のオーダーでシフトする現象が問題となっている。このシフトの原因を朝倉君が丹念に調査した過程で、

- BL5S1 では、 I_0 強度に 10 分のオーダーで数%の変動がある (図 1)
- この強度変動は、分光器で起こっている (分光器上流では見られず、下流で見られる)
- この強度変動と、エネルギーシフトの時間スケールは一致している (図 2)

という知見が得られている。

このことに加えて、今回、 $\Delta\theta_1$ のチューニングを行う実験で、 I_0 強度を最大に保つように $\Delta\theta_1$ の制御を行うと、上記の I_0 変動が消えた。従って、 I_0 変動の原因が、分光結晶の平行度の変動だった可能性が高く、 $\Delta\theta_1$ のチューニングでこれを解決すると、エネルギーシフトの問題も解決する可能性があるかと期待された。

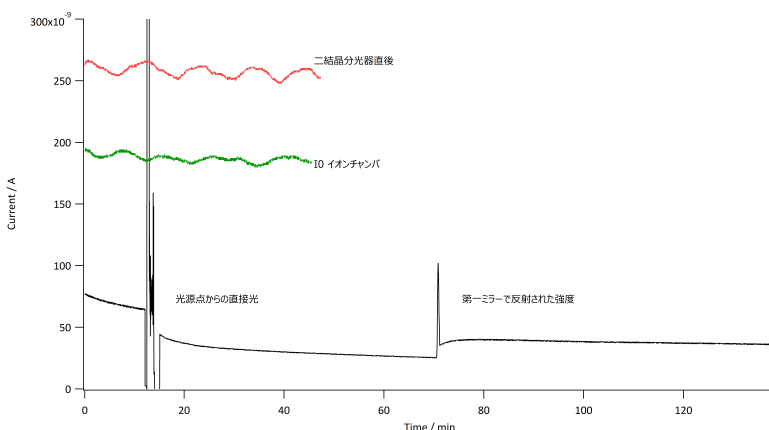


図 1: ビームライン上の様々な位置での光の強度の時間変化 (各強度は同じ時間に測定されたものではない)。分光器より上流では、顕著な変動が見られないが、分光器を含めてその下流では 10 分オーダーの時間で数%の強度変動がある。

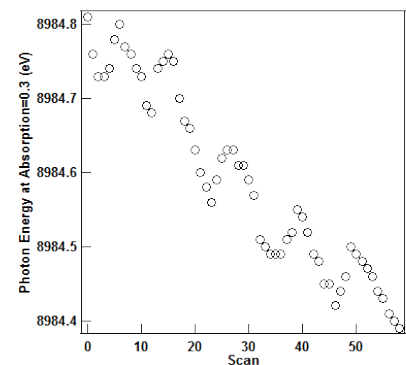


図 2: 同一試料に対して繰り返し XAFS 測定を行った時に見られるエネルギーシフト。やはり、10 分オーダーの時間での変動が見られる。

¹ここでの調整は、パルスモーターで第一結晶を動かすことで行った

以上のような理由から、 $\Delta\theta_1$ を高速でチューニングする機構が必要と判断した。このような、高速のチューニングを行おうとする時、従来行ってきた分光器第一結晶をパルスモータで駆動する方法では、1点あたり数秒の時間を必要とし、実用的ではない。そこで、 piezo素子を用いた $\Delta\theta_1$ の調整を行うこととした。

2 第一結晶の piezoコントロールシステム

BL5S1 の分光器第一結晶は、piezoによって微小な角度調整が可能になっている。piezoでの変位量は最大 $30\mu\text{m}$ で、約 15cm の分光結晶の端を押しているので角度にして $30\mu\text{m}/15\text{cm} = 0.2\text{mrad} = 0.0114\text{deg} = 41\text{arcsec}$ の範囲の調整が可能である。

piezoにかかる電圧は、 $0\sim 10\text{V}$ の電圧入力によってコントロール可能で、今回は、この電圧入力端子に D/A コンバータで発生させた電圧を供給することでコンピュータによる piezo の制御を行うことにした。その際、入力の 1mV の変化は $0.2 \times 0.001/10 = 2 \times 10^{-5}\text{mrad} = 0.02\mu\text{rad} = 1.14 \times 10^{-6}\text{deg} = 4.1 \times 10^{-3}\text{arcsec}$ に相当する。²

この piezo を使って分光器第一結晶の角度を制御するために、初期的に図 3、後に図 4 の様な制御系を準備した。どちらも、PC からのデータに従って D/A コンバータで発生した電圧を piezo コントローラに入力し、 I_0 強度をモニタするイオンチャンバの出力を A/D コンバータで取り込んでいる。

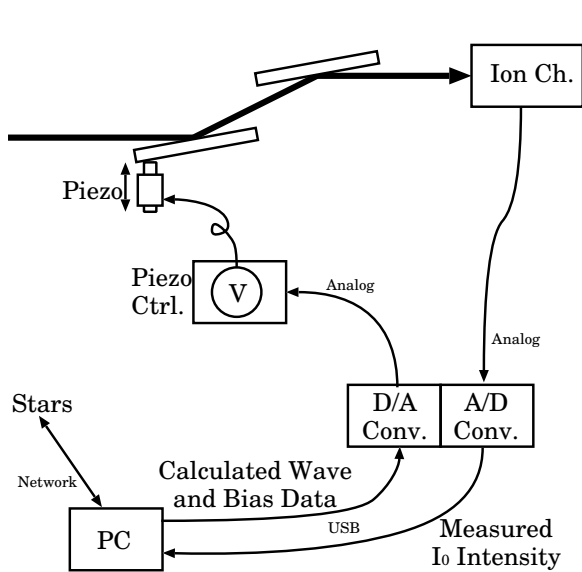


図 3: I_0 強度をモニタしながら piezo によって分光器を制御するために構成した初期のシステム。決まった位置に分光器を制御するバイアス電圧と、その周辺で揺動をかけて制御の方向を決めるための正弦波電圧の両方を PC 内でリアルタイムに計算し、D/A コンバータに出力する。

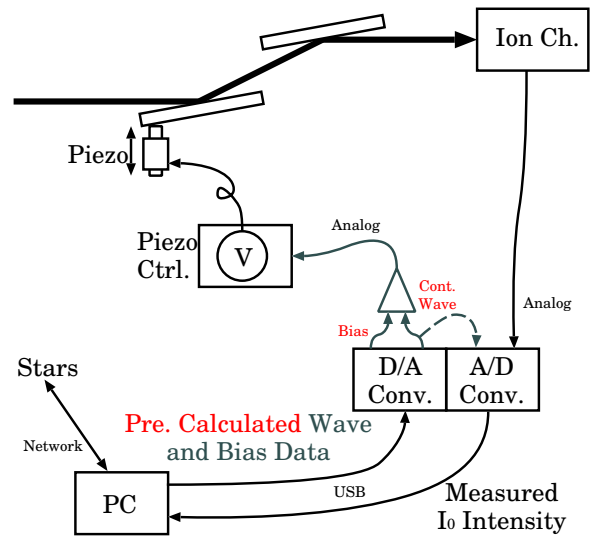


図 4: I_0 強度をモニタしながら piezo によって分光器を制御するために構成した現在のシステム。PC からリアルタイムに出力するのはバイアス電圧だけで、正弦波電圧を出力するためのデータは予め D/A コンバータに渡してある (D/A コンバータの 1 チャンネルを正弦波発生器として使う)。バイアス電圧と正弦波電圧は外部回路で加算して piezo コントローラに入力する。

²エネルギー変化に直す。 $d_{\text{Si}(111)} = 3.13553$ として、約 10keV に相当する回折角 12 度の波長は 1.30382669\AA 。上記の 1mV 程度に相当する $\Delta\theta = 1.14 \times 10^{-6}$ の変化があった時の波長は、 1.30382681\AA 。これをエネルギーに直した差は 0.9meV 。分光結晶の半値幅が 10arcsec 程度として、その $1/10$ の 1arcsec 程度ずれると 0.22eV ずれることになる。

両者の違いは、正弦波出力を PC の責任で行うか、D/A コンバータが行うかにある。PC の責任で正弦波出力を行う初期のシステムでは、せいぜい 10Hz のオーダの周波数の正弦波しか出力できず、波形の歪みも大きかった。現在使用している後者のシステムでは、最大 100kHz 程度の正弦波を安定して発生させることができている。

3 I_0 強度を最大に保つ制御

一般的なフィードバック制御では図 5 の様に、制御対象出力を参照値と比較し、差分を制御入力に使うことで、制御対象の「出力を一定に保つ」制御が基本である。ところが、制御の目標が「出力を最大に保つ」に変わると、同じ方法では使えなくなる。図 6 に例を示したが、横軸が分光器の角度で縦軸が I_0 強度と考えると、例えば、ピーク位置は変わらないが I_0 強度が変化する (青線)、 I_0 強度は一定だがピーク位置は変わってしまっている (赤線) などの場合があり得る。前者の場合、制御対象の I_0 強度は変化しているが、制御入力を変化させる必要はなく、後者の場合、制御対象の I_0 強度は変化していないのに、制御入力を変化させる必要がある。従って、 I_0 の強度をじっと観察していてもどのように制御すればよいか判断できない。

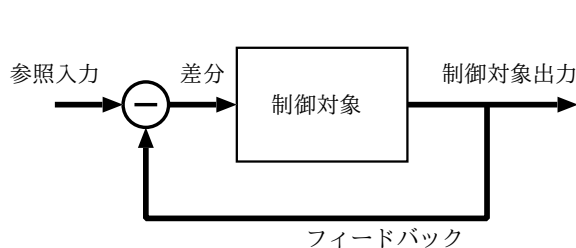


図 5: 基本的なフィードバックシステム。制御対象の出力と、参照入力の差分で制御を行う。

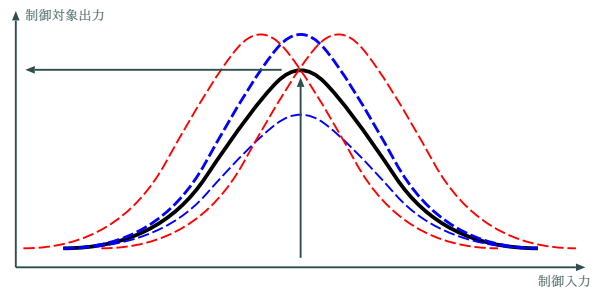


図 6: 「ピーク値を得る」というのが目標の場合、正しい制御入力の値を見つけるのは難しい。

そこで、今回は、 $\Delta\theta_1$ を小さな範囲で変化させ、その時の I_0 の変化から、正しい (I_0 を再最大にする) $\Delta\theta_1$ を探す様な制御を行うこととした。その際、その微小な範囲で I_0 最大値を探すような方式 (微小スキャン) と、 $\Delta\theta_1$ に正弦波的な変位を与え、対応する I_0 の変化をロックイン検出する方式を試みた。

3.1 微小スキャン

その時々 $\Delta\theta_1$ の値を中心に小さな範囲で、 $\Delta\theta_1$ を変化させ、対応する I_0 の値を見て、最大の I_0 を与える新たな $\Delta\theta_1$ を見つける、ということを短い時間間隔で繰り返し、 I_0 が最大値をとるように制御した。一般的にこの様な事を行う場合、 I_0 の測定値にのるノイズの影響を排除するため、単純に I_0 の最大値をとらず、測定値を適当な関数にフィッティングしてピーク位置を決める方法が取られるが、今回は、単純に I_0 の最大値をとる方法とした。これは、単に調整日に間に合わなかったのが理由である。

3.2 ロックイン検出

その時々³の $\Delta\theta_1$ の値を中心に、

$$\Delta\theta_1 = \Delta\theta_{10} + A \sin \omega t$$

の様に正弦波状の揺らぎを導入し、それに対応した I_0 を測定して、ピークが存在する位置を探した (A は十分に小さくとる)。よく知られているように、こうして測定された I_0 に $\sin \omega t$ をかけて積分すると、 $\Delta\theta_1$ が $A \sin \omega t$ 揺らいだことによる影響を抽出できる。これは、微小信号の検出にロックインアンプを用いてロックイン検出するのと同じ操作である。

この結果、ピークがどこにあるかの推定が可能になる。ピーク位置推定の原理を模式的に図7に示す。

この図を見ると、以下のことがわかる。

- 点 A で入力⁴が正弦波的に揺れると、対応する出力は、正弦波が正の時正に、負の時に負に振れる。両者の掛け算は常に正となり、積分値も正になる。
- 点 B で入力⁴が正弦波的に揺れると、対応する出力は、正弦波が正の時負に、負の時に正に振れる。両者の掛け算は常に負となり、積分値も負になる。
- 点 C で入力⁴が正弦波的に揺れると、正弦波が正負どちらに振れても出力は負に振れる。両者の掛け算は、正負に揺れることになり、積分値は 0 に近い値になる。

従って、積分出力が正なら、 $\Delta\theta_{10}$ をより大きくしたところにピークがあり、逆に負なら小さくなったところにあることになる。 I_0 を最大にする正しい $\Delta\theta_{10}$ にいるときには、積分値は小さくなる^{3 4}。

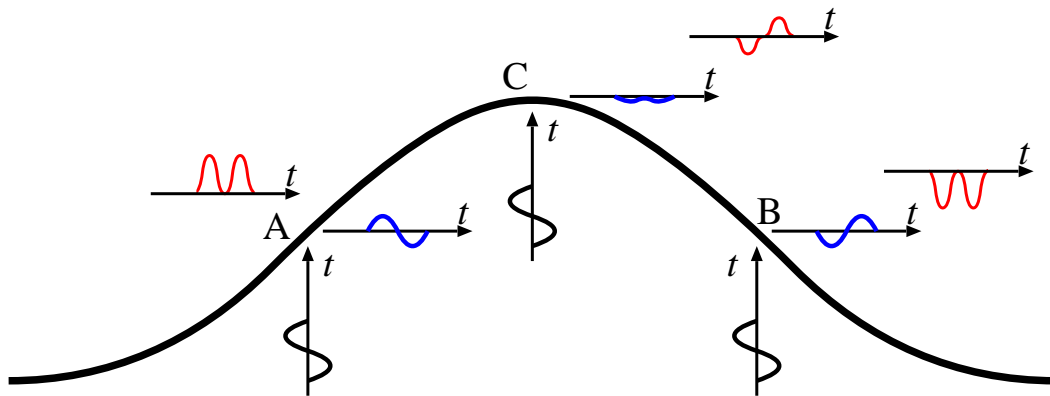


図 7: 点 A で、入力を揺らすと、揺れの正負と同符号で出力も揺れるので両者の掛け算を積分すると正になる。点 B では逆のことが起こって積分は負になり、点 C では積分は 0 に近い小さな値をとることになる。

³今考えている I_0 の出力は本当は「正負」に振れないが構わない。この点をもう少し丁寧に書く。入力 I が極小さく変化した時、出力 O は、 I の変化に応じて直線的に変化すると近似できる。すなわち $O = \alpha(I - I_0) + O_0$ 。 I の変化が正弦的で $I = I_0 + A \sin \omega t$ だとすると、 $O = \alpha A \sin \omega t + O_0$ となる。これに $\sin \omega t$ をかけて積分すると、積分 $= \alpha A \int \sin^2 \omega t dt + O_0 \int \sin \omega t dt$ なので、 O_0 の寄りは消える。普通の Lock-in アンプでは、 I と O の積を積分するが、その場合でも残るのは α に比例した項だけになる。

⁴実際の応答は、入力の揺らぎとタイミングがずれる可能性がある。これが心配な時には、出力に $\cos \omega t$ をかけた積分も同時にとれば良い。 \sin をかけた積分値を S 、 \cos をかけた積分値を C とすると、 $\sqrt{S^2 + C^2}$ が正しくタイミングが揃っている時の値になり、 $\tan^{-1} S/C$ が、タイミングがどれだけずれているかを示す。

このような方式でピークを決めることの利点は、原理的に信号のロックイン検出をしているのと同じで、 $\sin \omega t$ 以外の周波数成分を持つノイズは全て消えるので高いS/N比で制御が可能だと考えられることである。

4 フィードバック制御の効果 1

4.1 長時間の I_0 変動に対する効果

図8に、 I_0 が最大値になるようにフィードバックをかけた時の I_0 の値の変化を示す。図からわかるように、問題にしていた10分程度の時間スケールでの数%の強度変動が、フィードバックをかけると消えることがわかる。このことから、この変動の原因が2結晶分光器の結晶の平行度の変動であったことがわかる。

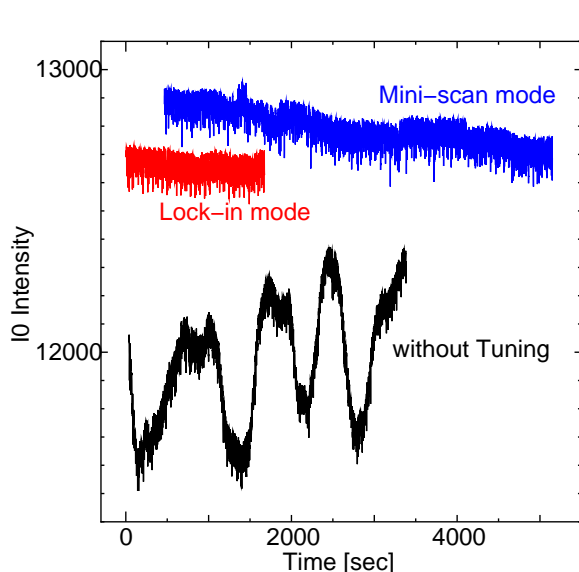


図8: $\Delta\theta_1$ に対してフィードバックを行わない時と、微小スキャン、ロックイン方式でフィードバックをかけた時の I_0 強度の変化。フィードバックをかけなかった時10分のオーダーで見られる変動が、フィードバックをかけると消える。

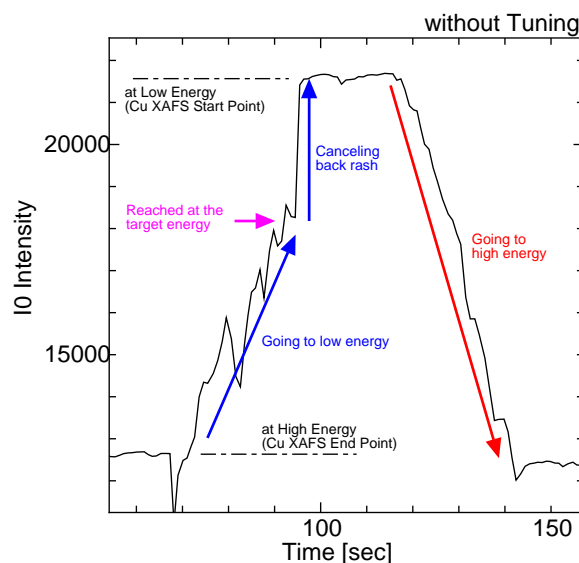


図9: フィードバック制御(チューニング)を行わずに分光器を回転した時の I_0 の変化。高エネルギーから低エネルギーに振った時には、結晶の平行度に大きなズレが蓄積している。また、低エネルギーから高エネルギーに振った時も、 I_0 には変動が見られ、平行度が変動していることが予想される。

4.2 分光器の回転に対する効果

次に、この様なフィードバックをかけながら分光器を回転した時の I_0 の変化を観察した。図9は、フィードバックなしで分光器を回転した時の結果で、図10は、フィードバックをかけながら分光器を回転した結果である。

フィードバック無しだと、分光器の回転中 I_0 強度に見られる変動が大きく、また、回転終了時に期待される強度にならないことがある。このことから、フィードバック無しでは分光器の回転に伴って、結晶の平行度に変動があり、さらにそれが蓄積されることがあると考えられる。

これに対して、フィードバックをかけた時には、回転中の I_0 強度の変動は小さく、回転が止まった時に期待される強度になっていないということもない。このことから、フィードバック

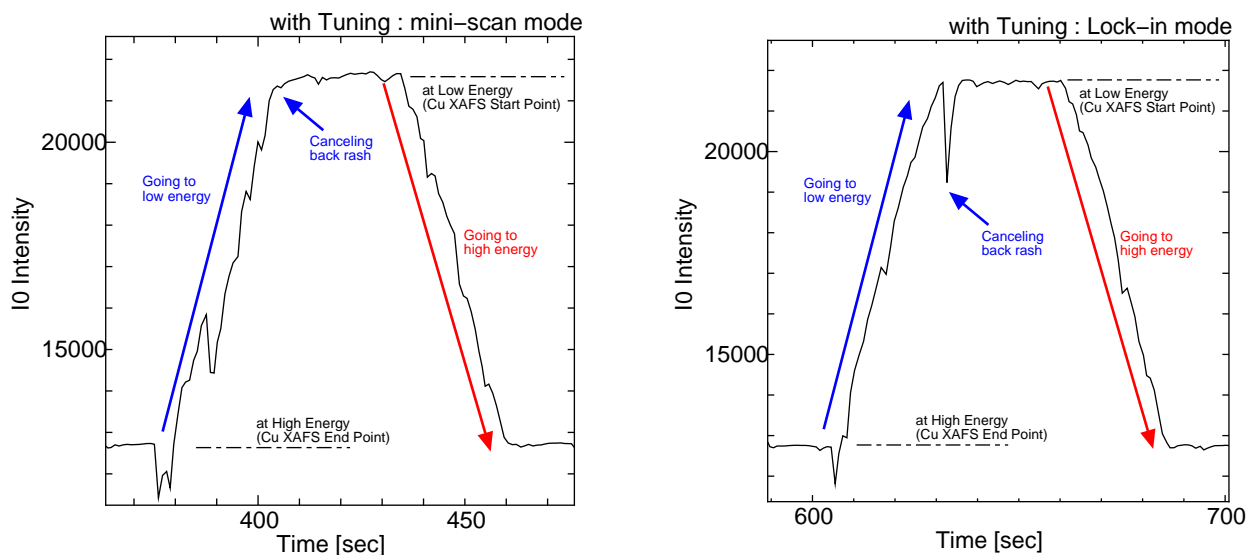


図 10: 微小スキャン方式、ロックイン方式でフィードバックをかけながら分光器を回転した時の I_0 強度の変化。フィードバックなしの時に比べて、累積的に蓄積する平行度のズレは見られず、回転中の平行度のズレも小さく抑えられている様に見える。

をかけることによって、結晶の平行度の変動を小さく抑え、かつ累積的な誤差の蓄積も無くすることができていると考えられる。

4.3 連続的な $\Delta\theta_1$ チューニングを行った QXAFS 測定 (その 1、又カ喜び編)

図 11 に、フィードバックをかけながら繰り返し QXAFS 測定を行った時の、エネルギー変化を示す。 $\mu t = 0.3$ に最も近くなるエネルギーをプロットしてある。ロックイン方式でフィードバックをかけた時の変動は 0.03eV 程度、微小スキャン方式でフィードバックをかけた時の変動は、最大 0.3eV 程度あったが変動の値は 2 つのグループに別れ、それぞれの中では 0.05eV 程度の変動であった。この 0.3eV の大きなズレは、 piezo 素子のヒステリシスに由来していると考えられ、制御時のパラメータを調整することで回避できる可能性がある。

この 0.03eV 程度のエネルギー変動幅であれば QXAFS 測定にとりあえず支障がないと考えられ⁵、フィードバックが有効に働いた様に思われる。

しかし、この測定を行った時には、フィードバックなしでも、エネルギー変動は 0.03eV 程度以下に収まっていた。この原因は不明である。根拠はないが、推測として挙げられる原因には

1. フィードバックをかけるために piezo で分光結晶に微細な振動をかけたため、結晶の動きが良くなり、分光結晶を回転した時、正しい位置に収まるようになった、
2. piezo の電圧コントロールはこれまで開放で放置されていたが、これに一定電圧が加わったことで、分光結晶が安定した、
3. この日は、何故か分光結晶の平行度を乱す要因が働かない日だった、

などが考えられた。2. のケースなら、フィードバックは不要で状態を改善できることになり大変好ましい。3. のケースだと、今回のフィードバックが有効だったかどうか判断できなくなる。

⁵ただし、系統的な変動を示さないという条件付きで

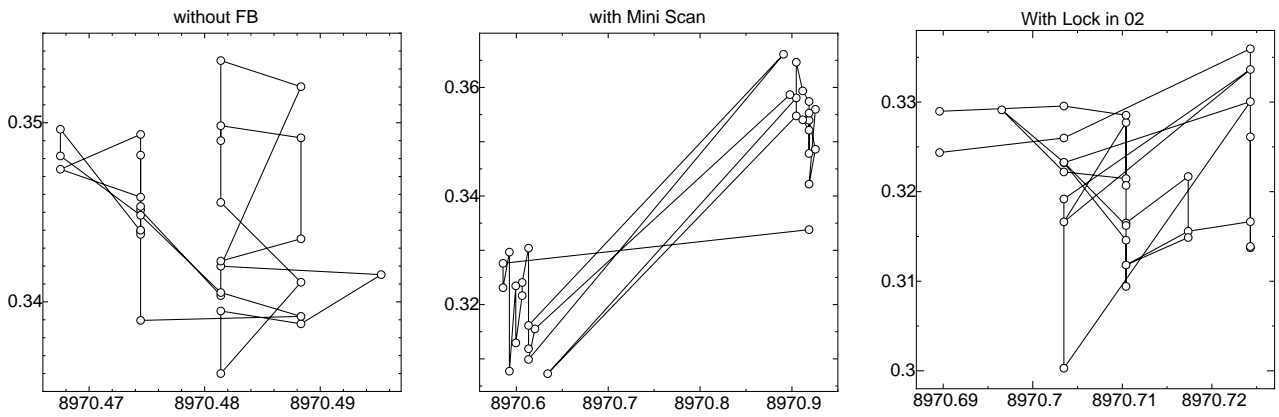


図 11: フィードバックをかけながら繰り返し QXAFS 測定を行った時のエネルギー変動。 $\mu t = 0.3$ に最も近くなるエネルギーをプロットしてある。ロックイン方式でフィードバックをかけた時の変動は 0.03eV 程度、微小スキャン方式でフィードバックをかけた時の変動は、最大 0.3eV 程度あったが変動の値は 2 つのグループに別れ、それぞれの中では 0.05eV 程度の変動であった。この 0.3eV の大きなずれは、ピエゾ素子のヒステリシスに由来していると考えられ、制御時のパラメータを調整することで回避できる可能性がある。しかし、この測定を行った時には、フィードバックなしでも、エネルギー変動は 0.03eV 程度以下に収まっていた。

そこで、後日、ピエゾの電圧コントロールに一定電圧をかけた状態で繰り返し測定でのエネルギー変動を見る実験を行ったが、改善は見られず、まず、2. のケースではないことがわかった。そこで、別の日に再度同様の実験を行うこととした。

5 3次光((333)回折光)を追跡したXAFS測定

5.1 1次光の追跡によるシステムの検証

今回 $\Delta\theta_1$ をチューニングするシステムが必要だと考えたもうひとつの理由である、(333)回折光を逃さず、XAFS 測定を行うことについて検討を行った。

まず、(111)回折を使った Cu-K 端の XAFS 測定を行う際、測定の各点で $\Delta\theta_1$ をチューニングして、 I_0 が最大強度になるように調整する実験を行った。結果を図 12 に示す。

測定は、チューニング有り、無し、有り、無し... と繰り返し行なった。最初の 2 回のチューニング有りの測定で、チューニングに失敗している点が数点見られる。そこで途中でプログラムを変更した。以降の測定ではチューニング失敗が見られない。

その結果、プログラムを変更する前後どちらでもチューニングを行った結果はほぼ一致したラインを描く。これに対して、チューニングを行わない時にはやや再現性が悪い。また、途中で「フラフラ」と強度が変動している。

このことから、

- ステップ毎のチューニングは機能しそう
- チューニング無しだと、やはり XAFS 測定中の $\Delta\theta_1$ は不安定

ということがわかる。後者は、エネルギー変動の問題にやはり、 $\Delta\theta_1$ が関連している可能性を示唆している。

$[\times 10^5]$

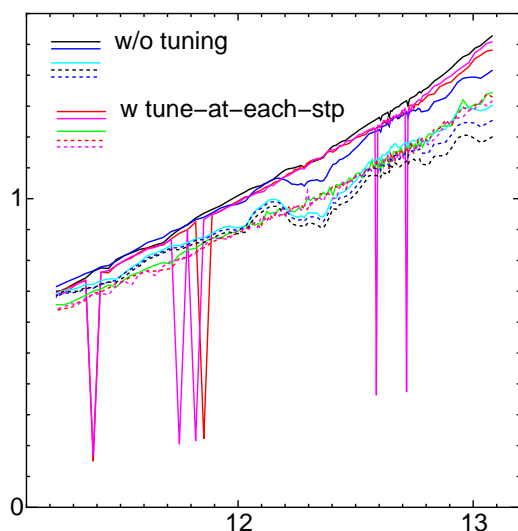


図 12: Cu-K 端に対してステップスキャンで XAFS 測定を行い、ステップの各点で、 $\Delta\theta_1$ を振って I_0 が最大強度になるように調整したときの I_0 強度の変化。横軸は角度。

$[\times 10^5]$

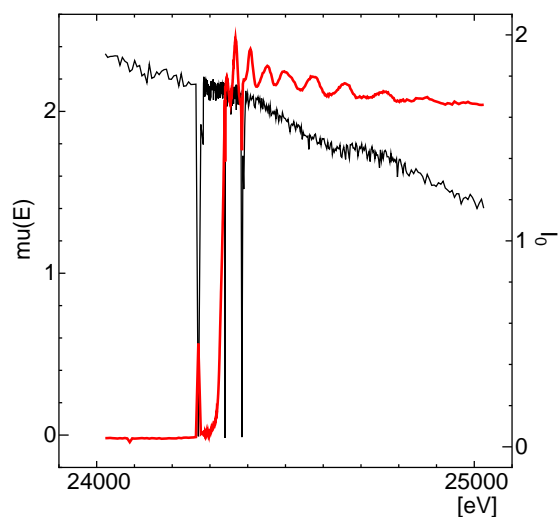


図 13: Pd-K 端に対してステップスキャンで XAFS 測定を行い、ステップの各点で、 $\Delta\theta_1$ を振って I_0 が最大強度になるように調整したときの I_0 強度の変化と、 $\mu(E)$ 。

5.2 3 次光 ((333) 回折光) を追跡した Pd-K の XAFS 測定

(111) 回折では各ステップでチューニングを行いながら XAFS 測定を行うシステムが良好に働いたので、(333) 回折を用いた Pd-K 吸収端の測定を行った。結果を図 13 に示す。

測定前に、始点、終点で $\Delta\theta_1$ のチューニングを行い、この 2 点での I_0 強度を測定したところ、約 2×10^6 と 1×10^6 であった。結果を見ると、数点、チューニングに失敗しているがそれを除くと、 I_0 強度は事前に測定した始点の値と、終点の値の間をほぼ線形に推移しており終始 3 次光を捉えられていることがわかる。得られた $\mu(E)$ も良好である。

この実験の際、各点でのチューニングには 1 秒前後の時間がかかっていた。稀にチューニングに失敗する問題と合わせて、このチューニングにかかる時間の短縮は今後の課題である (どちらも一応対応策の目処有り)。

6 連続的な $\Delta\theta_1$ チューニングを行った QXAFS 測定 (その 2、未解決編)

4.3 節で述べたように、繰返し QXAFS を行った時、エネルギーシフトが見られる問題に対して、 $\Delta\theta_1$ の連続的なチューニングは効果があるように思われた。しかし、確定的な結果ではなかったので再度検証を行った。結果を図 14 に示す。ここで、は QXAFS の測定中に連続チューニングを行わない場合でも、各スキャンの先頭で一度だけチューニングを行っている。

図からわかるように、今回の検証では、チューニングのあるなしに関わらず、エネルギーの経時的(?)なシフトが見られた。しかし、図 2 に見られるような周期的な変動は見られない。また、図に示した 3 種類の測定は連続して行っているが、青の測定の後、赤の測定では青の最初の測定のエネルギーに戻っている。

これらのことをどう解釈すれば良いか、現時点で解答はないが、一つの推測として、周期的な変動はチューニングによって解決しており、他にもうひとつエネルギーシフトの原因がある、

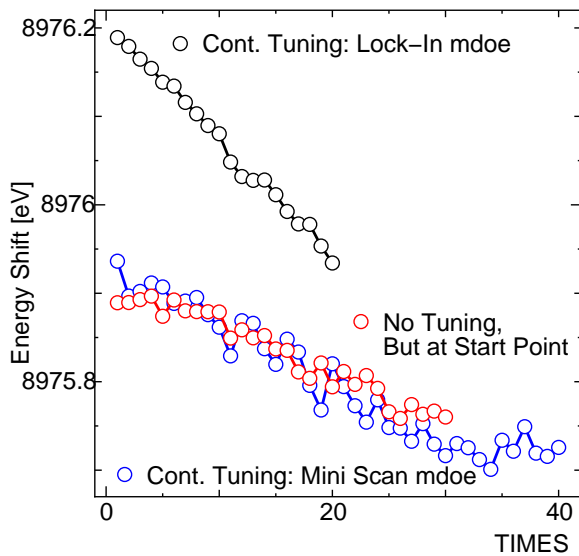


図 14:

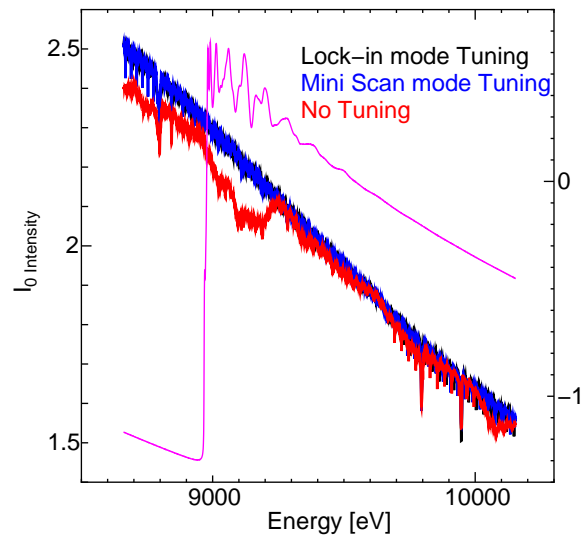


図 15:

という見方ができる。この点に関しては今後検証を行う。

最後に、図??に、QXAFSの間、連続チューニングを行った場合と、行わなかった場合の I_0 強度の変化を比較した。図で黒線と青線は完全に重なっていてほとんど見分けられない。この様に、連続チューニングを行うことで I_0 強度は劇的に安定する。従って、エネルギーシフトの問題とは別に、これを利用する価値はあるものと思われる。

7 まとめ (今後の課題の整理)

今回、2つの目的をもって、 $\Delta\theta_1$ をピエゾ経由でコンピュータコントロールするシステムを導入し、その動作を検証した。

- 第一の目的であった、3次光を使った測定のための、各点での I_0 チューニングは有効に働いた。課題として、
 1. 稀にチューニングに失敗することに対する対策
 2. 1回1回のチューニングの高速化

が挙げられるが、どちらも見通しがあり、今後の調整で解決する予定である。

- 第二の目的であった、繰返しスキャンの際のエネルギーシフトの解決に関しては、今後検討すべき内容を含んだ多くの結果が得られたが解決には至らなかった。重要なポイントを挙げると以下のようなものである。
 1. 連続チューニングで I_0 強度は大幅に安定化でき、高い再現性が得られる
 2. チューニングを行うことで、10分スケールの I_0 強度変動は消えた
 3. 同じくチューニングによって、10分スケールのエネルギーシフトも消えたように思われるが確実ではない
 4. チューニングを行った結果では、エネルギーシフトの値に関して、振動する成分が消え、経時的に一方方向にシフトしている様子が見られたが、なぜか、違う一連のシリーズでは、シフトが振り出しに戻った

5. この「エネルギーシフトがふりだしに戻る」現象の原因を見つけ出せばエネルギーシフトの問題が解決できる可能性がある