

# 中性子透過ブラッグエッジイメージングにおける 結晶組織構造情報直接推定法の開発

Development of a direct evaluation method of crystalline microstructural information  
from neutron Bragg-edge transmission spectrum

\*榊原 亜子<sup>1</sup>, 佐藤 博隆<sup>1</sup>, 加美山 隆<sup>1</sup>

<sup>1</sup>北海道大学

BCC 構造を持つ  $\alpha$ -Fe に関し、結晶組織構造情報が中性子透過ブラッグエッジスペクトルに及ぼす影響を系統的に調べ、スペクトルから結晶組織構造パラメータを直接推定する手法を開発した。その結果、3%の統計誤差を含むスペクトルについても、フィッティングを介さずに結晶組織構造情報を推定できることを確認した。

**キーワード:** 中性子イメージング、ブラッグエッジ、中性子透過率スペクトル、結晶組織構造情報、直接推定

## 1. 緒言

中性子透過率スペクトルをブラッグエッジ解析コード RITS によりフィッティング解析すると、定量的な結晶組織構造情報を測定試料内各位置で入手できる。しかし、フィッティング解析を行う際に、入力する初期値が期待値と大きく離れていると正常にプログラムが動かないため、正しい解析には高度な専門性が必要である。そこで BCC 構造を持つ  $\alpha$ -Fe に関し、フィッティングを介さずに、透過率スペクトルより直接、投影原子数密度  $\rho t$ 、集合組織の選択配向ベクトル  $\langle HKL \rangle$  とその発達の程度を表す March-Dollase (MD) 係数、結晶子サイズ  $S$  の4つの結晶組織構造情報を推定する手法の開発を行った。特に本研究では実験データ解析を見据え、スペクトル測定時の統計誤差が含まれるスペクトルへの適用性も検討した。

## 2. 結晶組織構造情報直接推定法の開発

結晶組織構造情報が透過率スペクトルの形状に及ぼす影響をシミュレーション計算により系統的に調べることで、各パラメータの推定手法を検討した。その結果、理想的な条件に対するスペクトルに関し、投影原子数密度は短波長側の透過率から、選択配向ベクトルは全断面積に現れるピーク位置から、MD 係数は前述したピークの急峻さから、結晶子サイズはブラッグエッジの高さから、それぞれ推定可能であることがわかった。さらに、実験で得られるような統計誤差を含むスペクトルに対し本手法を適用するため、投影原子数密度と結晶子サイズについてはスペクトルの

特定波長範囲の線形近似、選択配向ベクトルと MD 係数はスペクトルの平滑化をそれぞれ施し、統計誤差によるスペクトルへの影響を軽減した。その結果、3%の統計誤差を有するスペクトルに対して、統計誤差を含まないスペクトルと同程度の精度で結晶組織構造パラメータの推定が可能であることを確認した (図1)。一方、5%の統計誤差を有するスペクトルに対する推定値は、3%の統計誤差を有する場合と比べ誤差が大きくなった。これは、MD 係数の推定に用いるピークの急峻さをスペクトル上の2点のみで定義したことで、統計誤差の影響を強く受けたためと考えられる。

## 3. 結言

本手法を用いることで、3%の統計誤差を有する透過率スペクトルに対しては、フィッティングを介さずに、RITS の初期値として使用できる程度の結晶組織構造パラメータを推定できることを確認した。統計誤差による直接推定法への影響を減らすため、ピークの急峻さの定義を再検討する必要がある。

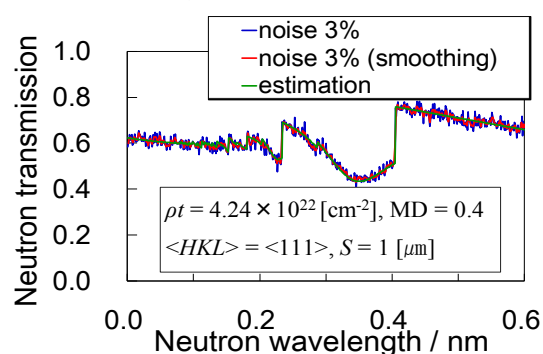


図1. 統計誤差3%を付加した透過率スペクトルと、直接推定されたパラメータにより再現したスペクトル

\*Ako Sakakibara<sup>1</sup>, Hirotaka Sato<sup>1</sup> and Takashi Kamiyama<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Hokkaido Univ.