

中性子ブラッグエッジ解析コード RITS における シングルエッジフィッティングの改良

Improvement of the single edge fitting mode in the Bragg edge analysis code RITS

名大工¹ 大前 良磨¹, ○渡辺 賢一¹, 瓜谷 章¹, 山崎 淳¹, 吉橋 幸子¹,

鬼柳 義明¹, 佐藤 博隆²

Nagoya Univ.¹, Hokkaido Univ.², Kazuma Ohmae¹, ○Kenichi Watanabe¹, Akira Uritani¹,

Atsushi Yamazaki¹, Sachiko Yoshihashi¹, Yoshiaki Kiyanagi¹, Hirotaka Sato²

E-mail: k-watanabe@energy.nagoya-u.ac.jp

加速器パルス中性子源を利用した中性子透過イメージングでは、時間分解型二次元検出器を用い飛行時間法を適用することで、エネルギー分解された中性子透過像を取得することができる。中性子は干渉性散乱が特徴的な性質を示す数Åという波長域においても、元素によっては cm オーダーの比較的長い減衰長を示すため、中性子回折により厚みのある材料の深部の結晶組織構造の情報を取得することも可能である。中性子は回折された分だけ減ぜられるため、中性子透過率から中性子回折の情報を取得可能である。特に、粉末や多結晶のように微量結晶がランダムに配向している場合、中性子透過率スペクトルはブラッグエッジと呼ばれる鋸歯状の形状を示す。これまで、北大の佐藤ら[1]によってブラッグエッジ形状を解析する RITS コードが開発され、種々の材料の解析に用いられてきた。RITS には、スペクトル全体の形状より情報を抽出するリートベルト型解析と、単一のエッジ形状からミクロ歪み等格子定数に関わる情報を抽出するシングルエッジ解析をする二つのモードがある。シングルエッジ解析では、Jorgensen 関数と呼ばれる関数への非線形最小二乗フィッティングを行っており、現状では、その収束の不安定性が問題となっている。特に本方式では、二次元検出器で各画素ごとに得られる多数の透過率スペクトルに対してフィッティングを行う必要があるため、フィッティングの安定性の向上が求められている。

シングルエッジ解析では、エッジの広がり関数である Jorgensen 関数にフィッティングを行う前に、エッジ前後の直線部分へのフィッティングを行っているが、統計の悪いデータでは、この部分の不安定性が問題となっていることが判明した。Fig. 1 に人工的に生成された模擬データに対してフィッティングを行い得られたエッジ位置のヒストグラムを示す。今回、直線部フィッティングにランダムサンプリング法を採用することで、真値から大きく外れることを抑制できることが示された。

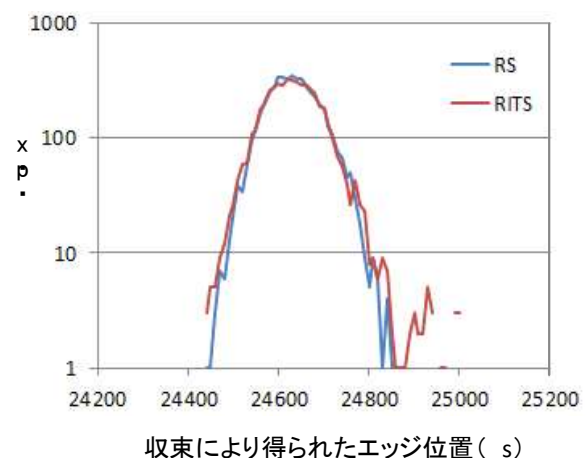


Fig. 1 Histogram of fitted value of the Bragg-edge position. RS: random sampling method.

[1] H. Sato et al., *Materials Transactions*, **52** (2011) 1294-1302.