

BL4B2粉末回折計の数え落としの評価

名古屋工業大学セラミックス基盤工学研究センター ○井田隆・岩田吉広

箔挿入法により，BL4B2 粉末回折計の数え落としについて調べた。非拡張死時間モデル，拡張死時間モデル，PHA 窓モデル，非拡張型と拡張型の間中型のモデルについて検討した。中間モデルは死時間 τ とその拡張度 ρ をパラメータとして含み，非拡張型と拡張型の間中型の特性を再現できる。さらに中間モデルを最大 0.0003 の相対誤差で再現する簡便な近似形式を導出した。この近似形式は数え落とし特性を表現する式が解析的に解けるので，数え落とし特性の評価も実測データの数え落とし補正も容易に実現できる。

【数え落としモデル】以下の形式の数え落としモデルについて検討した。

$$\text{非拡張死時間モデル: } n = \frac{r}{1+r\tau}, \quad \text{拡張死時間モデル: } n = r \exp(-r\tau),$$

$$\text{PHA窓モデル: } n = r \exp(-r\tau)Q(L, r\tau)$$

$$\text{中間拡張死時間モデル: } n = \frac{r}{1+(1-\sqrt{\rho})r\tau} \exp\left[-\frac{\sqrt{\rho}r\tau}{1+(1-\sqrt{\rho})r\tau}\right]$$

中間拡張死時間近似モデル:

$$n = \frac{1}{\sqrt{6\rho/13}\tau} \left\{ \exp\left[-\frac{\sqrt{6\rho/13}r\tau}{1+(1-1.5\sqrt{6\rho/13})r\tau}\right] - \exp\left[-\frac{2\sqrt{6\rho/13}r\tau}{1+(1-1.5\sqrt{6\rho/13})r\tau}\right] \right\}$$

ただし， n は実測計数率， r は真の計数率， τ は死時間， L は許容パルス高， ρ は死時間拡張度， $Q(v, x)$ は Legendre の第 2 種不完全 Γ 積分である。中間拡張死時間近似モデルの解は

$$r = \frac{\tau^{-1}}{1-1.5\sqrt{6\rho/13}} \left[-1 + \left(1 + \frac{1-1.5\sqrt{6\rho/13}}{\sqrt{6\rho/13}} \ln \frac{1+\sqrt{1-4\sqrt{6\rho/13}n\tau}}{2} \right)^{-1} \right]$$

と表される。

【実験と解析】PHA 微分曲線の主極大位置を基準として相対値 0.5 から 2.5 の範囲に PHA 窓を設定した。Mica 粉末(NIST SRM675)の 003-反射ピークについて A1 箔を挿入した場合としていない場合との回折強度曲線(それぞれ y_1 , y_2)を比較した。 y_1 と y_2 の相互相関曲線に Lorentzian 関数をあてはめることにより 0.0005° 程度のピーク位置のずれを見積もり，3 次スプライン補間を用いてそのずれを修正した。 y_2 を y_1 に対してプロットし，A1 箔の透過率 a ，数え落としモデル $n = f(r)$ として， $y_2 = f(f^{-1}(y_1)/a)$ をあてはめる最小二乗計算を行った。この際に数え落とし特性を特徴づけるパラメータ τ ， L または ρ ，透過率 a を可変パラメータとして最適化した。解析解が得られないモデルについては Newton 法により解(逆関数)を求めた。

【結果】非拡張死時間モデルと拡張死時間モデルに基づいて最適化された強度依存性には，計数統計誤差の範囲を超えて実測強度曲線からの系統的なずれが認められた。PHA 窓モデルではずれが計数統計誤差の範囲に収まったが，最適化された許容パルス高レベルは $L = 0.900(11)$ となり，測定条件に対応しない結果となった。中間拡張死時間モデルとその近似形式を用いた結果はほぼ一致し，死時間 $\tau = 0.842(5) \mu s$ ，拡張度 $\rho = 0.872(15)$ と見積もられた。この数え落とし特性は概ね拡張死時間型に近いが，わずかに非拡張型の寄与が存在することを意味する。図に中間拡張死時間近似モデルを用いた最適化の結果を示す。差プロットは計数統計誤差から見積もられる範囲内に収まり，実測曲線が良く再現されていることがわかる。

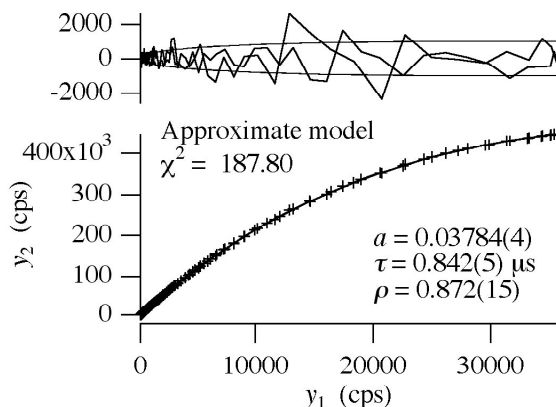


図 箔挿入法による強度曲線と中間拡張死時間近似モデルによるあてはめ

【文献】

Ida, T. & Iwata, Y. (2005). *J. Appl. Cryst.* (in press).