

SMP045-12

会場:301B

時間:5月24日 17:15-17:30

## 光路長計算による吸収補正法のパリ - エジンバラセルへの適用 Attenuation correction for the Paris-Edinburgh cell using path-length calculation

小松 一生<sup>1\*</sup>, 飯塚 理子<sup>1</sup>, 阿部 淳<sup>2</sup>, 佐野 亜沙美<sup>2</sup>, 有馬 寛<sup>2</sup>, 服部 高典<sup>2</sup>, 鍵 裕之<sup>1</sup>

Kazuki Komatsu<sup>1\*</sup>, Riko Iizuka<sup>1</sup>, Jun Abe<sup>2</sup>, Asami Sano<sup>2</sup>, Hiroshi Arima<sup>2</sup>, Takanori Hattori<sup>2</sup>, Hiroyuki Kagi<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 東京大学・院・理, <sup>2</sup> 原子力機構

<sup>1</sup>The Univ. of Tokyo, <sup>2</sup>JAEA

J-PARC/MLF(物質・生命科学実験施設)のBL19/匠およびBL20/NOVAにおいて、パリ - エジンバラセルを用いた高圧下中性子回折実験が行われている。現状、室温下であれば15GPa以上の圧力下での中性子回折の測定に成功し、さらに高開口角・高圧力を目指したセル開発も進められている。得られたデータから構造情報を取り出すためには、適切な回折強度の補正が必要であるが、複雑な形状を持つアンビルやガスケットの吸収をどう補正するかが問題になる。先行するISISではレイトレーシングによる光路長計算と各種材料の中性子透過率の波長依存性からセル全体の吸収係数を計算している。今後PLANETで用いられるであろう種々の形状の高圧セルでも、それぞれについて同様の吸収補正が必要となるため、本邦でも光路長計算による吸収補正法を確立しておくことは重要である。我々は手始めにパリ - エジンバラセル用の光路長計算を行い、その計算によって得られる吸収係数の波長依存性がどの程度信頼できるかを検証することにした。検証するためには、別の方法で吸収係数を得る必要があるが、今回はバナジウムペレットを用いる方法を採用した。すなわち、バナジウムペレットの非干渉性散乱を高圧セルの内外で測定し、その比をとる、というものである。バナジウムペレットからの非干渉性散乱を効率よく測定するために、アンビルには中性子透過率の高いジルコニアを用いた。ガスケットは通常のシングルトロイダルアンビルで用いられるTiZr製のリングを用いた。バナジウムペレットの散乱強度測定から得られた吸収係数の波長依存性と光路長計算によるそれとは、ブラッグエッジの位置なども含めて良く一致しており、本手法の有効性が確認された。また、標準試料としてNIST SRM 676a (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)を用い、1.7 GPaにおける中性子回折強度を本手法による吸収補正を施して構造解析したところ、単結晶X線回折によって得られている原子座標と4シグマ以内で一致することがわかった。今後、さらに高精度な解析を行うためには、試料からのシグナルを上げ、それ以外のバックグラウンドを下げる努力が引き続き必要になる。バックグラウンド低減のためにはバックグラウンドの起源を知る必要があるが、パリ - エジンバラセルに用いられている各種遮蔽体の効果についても評価検討を行ったので簡単に報告したい。