

JAERI-Research
2003-008



JP0350110



大強度陽子加速器計画における中性子分光器開発
のためのシミュレーション I.

— モデレーター・コンポーネント作成 —

2003年3月

田村 格良・相澤 一也・原田 正英・柴田 薫
前川 藤夫・曾山 和彦・新井 正敏

日本原子力研究所
Japan Atomic Energy Research Institute

本レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。

入手の問合わせは、日本原子力研究所研究情報部研究情報課（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村）あて、お申し越し下さい。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布を行っております。

This report is issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Research Information Division, Department of Intellectual Resources, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 〒319-1195, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 2003

編集兼発行 日本原子力研究所

大強度陽子加速器計画における中性子分光器開発のための シミュレーションI. -モデレーター・コンポーネント作成-

日本原子力研究所東海研究所大強度陽子加速器施設開発センター

田村 格良*・相澤 一也・原田 正英・柴田 薫

前川 藤夫・曾山 和彦・新井 正敏**

(2003年1月31日受理)

大強度陽子加速器計画における物質・生命科学実験施設に設置するパルス中性子分光器の開発のためモンテカルロ・シミュレーションを行っている。物質・生命科学実験施設に設置されるパルス中性子源には「結合型水素モデレーター」、「非結合型水素モデレーター」と「非結合型ポイズンド水素モデレーター」の3種類のモデレーターが設置される。パルス分光器では線源の特徴が分光器の性能に強い影響を与える。そのため実際に得られるスペクトルを正確に記述した線源のコンポーネントを作成しなければ詳細なシミュレーションを行うことが出来ない。NMTC/JAERI97とMCNP4Aのコードを用いて各ビームポート毎に得られた72点のパルスシェイプを基に、各ビームポートにおけるモンテカルロ・シミュレーション McStas 用の線源のコンポーネントを作成した。「結合型水素モデレータ」を線源とするビーム取り出し口ポート16と「非結合型水素モデレータ」を線源とするビーム取り出し口ポート11のそれぞれ1つのコンポーネントを作成した。

Simulation for Developing New Pulse Neutron Spectrometers I. -Creation of New McStas Components of Moderators of JSNS-

Itaru TAMURA^{*}, Kazuya AIZAWA, Masahide HARADA, Kaoru SHIBATA,
Fujio MAEKAWA, Kazuhiko SOYAMA and Masatoshi ARAI^{**}

Center for Proton Accelerator Facilities
Tokai Research Establishment
Japan Atomic Energy Research Institute
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received January 31, 2003)

Moderators components of the McStas code have been created for the design of JSNS instruments. Three cryogenic moderators are adopted in JSNS, One is coupled H₂ moderators for high intensity experiments and other two are decoupled H₂ with poisoned or unpoisoned for high resolution moderators.

Since the characteristics of neutron beams generated from moderators make influence on the performance of pulse neutron spectrometers, it is important to perform the Monte Carlo simulation with neutron source component written precisely. The neutron spectrum and time structure were calculated using NMTC/JAERI97 and MCNP4a codes. The simulation parameters, which describe the pulse shape over entire spectrum as a function of time, are optimized.

In this paper, the creation of neutron source components for port No.16 viewed to coupled H₂ moderator and for port No.11 viewed to decoupled H₂ moderator of JSNS are reported.

Keywords : Monte Carlo Simulation, Pulse Neutron Source, McStas, Coupled Moderator,
Decoupled Moderator, Neutron Source Component, Neutron Spectrometer,
J-PARC

^{*}Post-Doctoral Fellow
^{**}Invited Researcher

目次

1	序論	1
1.1	はじめに	1
1.2	McStas 選択	1
1.3	シミュレーションの目的	2
2	物質・生命科学実験施設に設置される中性子源	3
2.1	各モデレーターの特性について	3
2.2	モデレーターからの取り出し角度の差	4
2.3	他の中性子源との比較	5
3	McStas における中性子源コンポーネント作成	5
3.1	McStas における中性子源のコンポーネント作成条件	5
3.2	結合型水素モデレーターを見るポート 16 の中性子源コンポーネントについて	5
3.2.1	時間平均強度のエネルギー分布について	5
3.2.2	時間スペクトルの関数について	6
3.3	非結合型水素モデレーターを見るポート 11 の中性子源コンポーネントについて	8
3.3.1	時間平均強度のエネルギー分布について	8
3.3.2	時間スペクトルの関数について	8
4	生物用非弾性散乱装置 DYANA の分光器の開発	10
4.1	生物用非弾性散乱装置 DYANA	10
4.2	DYANA 分光器のシミュレーション	11
5	結論	12
	謝辞	12
	参考文献	12

Contents

1	Introduction	1
1.1	Background	1
1.2	Selection of Software Package McStas	1
1.3	The Aim of Simulation	2
2	Moderators of JSNS	3
2.1	Characteristics of Moderators	3
2.2	Difference of the Angle Each Moderator	4
2.3	Comparison to Other Neutron Source	5
3	Writing new Components of Moderators for McStas	5
3.1	Condition of Writing Components of Moderators	5
3.2	The Port16 Source Component: Viewed Coupled H ₂ Moderator Surface	5
3.2.1	Energy Dependence of Time-averaged Intensity	5
3.2.2	Pulse Shape as a Function of Time	6
3.3	The Port11 Source Component: Viewed Decoupled H ₂ Moderator Surface	8
3.3.1	Energy Dependence of Time-averaged Intensity	8
3.3.2	Pulse Shape as a Function of Time	8
4	Simulation for Developing DYANA Spectrometer	10
4.1	DYANA Spectrometer	10
4.2	Calculation of Simulation Model for DYANA Spectrometer	11
5	Conclusion	12
	Acknowledgment	12
	References	12

1 序論

1.1 はじめに

我々は大強度陽子加速器計画における物質・生命科学実験施設に設置するパルス中性子源 (略称 JSNS) に設置するパルス分光器の開発を行っている。日本に現在、パルス中性子源を用いた分光器は高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所の中性子科学研究施設 (KENS) に 17 台設置されており、いずれも高い成果をあげている。その KENS の中性子源の強度は 3kW である。大強度陽子加速器計画における物質・生命科学実験施設に設置するパルス中性子源は 1MW という非常に大強度の中性子源となる。このような大強度の中性子源に設置する分光器の開発を効率的に行うためにはシミュレーションを用いた計算が必要になる。大強度の中性子源に対して経験と勘による中性子分光器の設計は行えない。また、中性子分光器は非常に値段が高いものであり、簡単に作製や変更ができない点を考えるとシミュレーションは重要である。

大強度陽子加速器計画における JSNS は 3 種類のモデレーターが使用される。それぞれ「結合型水素モデレーター」、「非結合型水素モデレーター」と「非結合型ポイズンド水素モデレーター」の 3 種類のモデレーターが設置される。それぞれのモデレーターの特徴は以下の様になる。いずれのモデレーターも超臨界水素の使用を考えている。(1)「結合型水素モデレーター」はパルスシェイプよりも強度を優先したモデレーターである。(2)「非結合型水素モデレーター」はデカップラーでモデレーターと反射体を覆うことにより低エネルギーの中性子を吸収して鋭いパルスシェイプを持たしている。(3)「非結合型ポイズンド水素モデレーター」はモデレーター内にポイズンをいれることによりポイズニングエネルギー以下の中性子パルスの時間特性を向上させ、さらに鋭いパルスシェイプを作る。

発生する中性子のパルスシェイプや強度など中性子源の特性はパルス中性子分光器の性能に強い影響を与える。つまり分光器の設計に当たっては、中性子源となるモデレーターの特性を生かした設計が必要となる。そのためにはレイ・トレースのモンテカルロ・シミュレーション等を行い、分光器にとってガイド管、検出器の配置等の最適なパラメーターを決定することが必要となる。

1.2 McStas 選択

我々はシミュレーションのソフトウェアとして実績のある「McStas」¹⁾ を選択した。McStas は Riso、ILL 等の多くの中性子分光器のモンテカルロ・シミュレーションソフトとして使用されている。ILL の IN14、D20、IN16、IN10、IN6、D16、D11、IN5、Riso の TAS-1、ISIS の Prisma、FRM の PANDA そして HFBR の H8 等 3 軸中性子分光器からパルス中性子分光器まで、数多くの分光器のシミュレーションに使用されている。

このソフトウェアの特徴はそのプログラムの汎用性にある。コンポーネントという単位で中性子光学素子、いわゆる導管やモノクロメーター等を書き表し、コンポーネントの組み合わせで分光器等の体系を表して、計算をおこなう。コンポーネント自身、またはコンポーネントの組み合わせを記述するためには分光器の配置を表記しやすい特別な言語を用いる。作成元である Riso、ILL 等でこのコンポーネントの数が数多く公開されており、典型的な分光器であるならばすぐに作成

できる利点がある。

また重要なこととしてソフトウェアにきちんとしたマニュアルが存在することが挙げられる。さらに多くの OS で稼働する。推奨する OS は linux であるが、gcc のコンパイラが動く環境で動くので Windows でも使用可能となっている。昨今、linux が労もせずインストールできるようになっているので McStas も簡単にインストールできる。今まで作られたコンポーネントが使用できれば簡単に分光器のシミュレーションができる。

レイ・トレースのモンテカルロ・シミュレーションのソフトウェアは McStas だけではない。他にも GUI(Graphical user interface) を用いているソフトウェアである VITESS、IDEAS 等の Windows 上で動くプログラムである。ただし、中性子光学素子ははじめから用意されていたものしか使用できない。新しい光学素子を組み込む場合には、自分で中性子光学素子を C 言語を用いて記述する方法を理解していないと難しい。

ソフトウェアの選択で問題となるのはモンテカルロ・シミュレーションプログラム間に差が顕著に現れるかである。Seeger et al によるとシミュレーションプログラムの差はほとんど無い²⁾とされている。Seeger et al によるシミュレーションの比較は以下のように行われた。ブルックヘブン国立研究所 HFBR の H8 ビームポートに設置されていた 3 軸中性子分光器をそれぞれのシミュレーションソフトで計算してその強度と半値幅によりソフトウェアの差を検証するのである。試料はバナジウムを使用した。検証を行ったソフトウェアは RESTRAX、McStas、NISP、VITESS と IDEAS である。各ソフトウェアの特徴は次のようになる。

RESTRAX は古くかある 3 軸中性子分光器専用のシミュレーションプログラムである。よって 3 軸中性子分光器のシミュレーションに使用できるが、パルス中性子分光器には向かない。NISP は MCLIB のサブルーチンのライブラリーである。現在では 40 種類 (磁場中の場合も含む) の中性子光学素子を有している。このプログラムの特徴は、視覚化するのに web site を用いていることである。VITESS は 30 の中性子光学素子を持っている。上記のプログラムでサンプル直後のカウント数と、アナライザー結晶を通した後のカウント数の比がどのプログラムでも 3.7% 以内に収まった。これはどのプログラムも同じように扱えることを意味している。

McStas が他のソフトウェアに対して優れている点は、McStas のコンポーネント記述用の言語を理解すれば、いろいろな光学素子や中性子源コンポーネント (特にパルス中性子源) を記述できる点である。物質・生命科学実験施設に設置されるパルス中性子源の特性を十分シミュレーションに使用できるのはコンポーネント記述が他のモンテカルロ・シミュレーションのソフトウェアの中で比較的簡単な McStas が良いと考えられる。よって中性子装置開発に用いるソフトウェアとして McStas を使用することとした。

1.3 シミュレーションの目的

パルス分光器においては線源の特徴も分光器の性能に強い影響を与える。3 つのモデレーターを使用しているため、それぞれの中性子源の特徴を利用した分光器を作製する必要がある。特に大強度のパルス中性子源を線源とする中性子分光器の効率的な開発にはシミュレーションが不可欠である。そのためモンテカルロ・シミュレーションを行うにあたり、実際に得られるスペクトルを

正確に記述したシミュレーション用の線源のコンポーネントを作成する必要がある。

現在計画されている物質・生命科学実験施設では三つの種類のモデレーターと 23 本の中性子ビームラインが作られる。結合型水素モデレーターに 11 本、非結合型水素モデレーターに 6 本と非結合型ポイズンド水素モデレーターに 6 本中性子ビームラインが作られる。図 1 に装置設置案を載せる。設置案通りにビームラインに番号を振っていくとポート 1～ポート 6 とポート 13～ポート 17 のビームラインが結合型水素モデレーターを見ており、ポート 10～ポート 12 とポート 21～ポート 23 が非結合型水素モデレーターを見ており、ポート 7～ポート 9 が非結合型ポイズンド水素モデレーターの裏側をポート 18～ポート 20 が非結合型ポイズンド水素モデレーターの表側を見ることになる。

そこで線源グループが計算を行った結果を基に、各ビームポートにおけるシミュレーション用の線源のコンポーネントを作成した。モンテカルロ・シミュレーションのソフトウェアとしては McStas¹⁾ を使用することとして、「結合型水素モデレータ」を線源とするビーム取り出し口ポート 16 における中性子源のコンポーネントと「非結合型水素モデレータ」を線源とするビーム取り出し口ポート 11 における中性子源のコンポーネントのそれぞれのコンポーネント作成を報告する。

2 物質・生命科学実験施設に設置される中性子源

2.1 各モデレーターの特性について

「結合型水素モデレーター」、「非結合型水素モデレーター」と「非結合型ポイズンド水素モデレーター」から得られる線源の特徴は、NMTC/JAERI97/と MCNP4A のコードによって得られている。

図 2 は JSNS の各モデレーターにおけるエネルギーに対する時間平均強度をプロットしたものである。それぞれのポートは各モデレーターの正面を見ているビームラインである。ここでは結合型水素モデレーターの正面はポート 15 であり、非結合型水素モデレーターの正面はポート 22 である。非結合型ポイズンド水素モデレーターの正面はポイズンの位置がモデレーターの中心に無いので表側と裏側のそれぞれ正面である、ポート 19 とポート 8 を選択した。図 2 は「結合型水素モデレーター」の強度が一桁近く非結合型より大きいことを示している。また非結合型水素モデレーターでもポイズンを入れてあるモデレーターは強度が 1/2 から 1/4 程度弱くなる。ポイズンの位置がモデレーターの中央でないため、モデレーターの見ている面が表向きか裏向きかで強度が異なる。エネルギーに対する強度分布であるがほぼピークをとる 5meV 付近の強度が各モデレーターによる差が一番大きくなるが、1eV を越えるエネルギー領域ではほとんど差は見られなくなる。しかし、実際に実験に使用されている中性子のエネルギー範囲に相当する 0.1meV～1eV での強度差は明らかである。

図 3 は JSNS の各モデレーターにおけるエネルギーに対するピーク強度をプロットしたものである。それぞれのポートは図 2 と同じ各モデレーターの正面を見ているポートである。水素結合型モデレーターと非結合ポイズンド水素モデレーターの強度差は 1 桁にも及ぶ。

図4は各モデレーターの半値幅を示している。半値幅は各エネルギーにおける時間のプロファイルの広がりである。これも強度と同じように1eV以上ではどのモデレーターもほぼ同じ幅を持つ。時間の広がりには構造等の測定において高分解能な測定ができないことを示している。そのため粉末構造解析、残留応力等の高分解能の測定を行う必要がある測定では半値幅の小さい中性子源を選択する必要がある。

ポイズニングされた非結合型水素モデレーターにおいて2つの半値幅が存在する理由はポイズンの位置がモデレーターを中心でないためであると考えられる。

2.2 モデレーターからの取り出し角度の差

図5及び図6は同じモデレーターからの取り出し角度の差をプロットした図である。図5は結合型水素モデレーターと非結合型水素モデレーターの取り出し角による強度分布の違いをプロットした図である。結合型水素モデレーターの形状は円筒形(直径14cm×10cm)であり、中性子ビーム取り出し方向以外にはH₂Oのプレモデレーターがある。図5では結合型水素モデレーターの正面を向いているポート3とポート15の時間平均強度と、図1においてポート3から時計回りに18度回転した中性子ビーム取り出し口に相当するポート1と反時計回りに27度回転した中性子ビーム取り出し口に相当するポート6の時間平均強度をプロットした。またポート15から時計回り、反時計回りにそれぞれ25.6度回転した中性子ビーム取り出し口に相当するポート15とポート17の時間平均強度をプロットしてある。同様に非結合型水素モデレーターのビーム取り出し角度の違いによる強度分布の違いもプロットしてある。非結合型水素モデレーターの形状は12×13×6.2cm³の直方体に近い形状をしている。非水素結合型モデレーターの正面の中性子ビーム取り出し口はポート11とポート22であり、ポート10とポート12はそれぞれポート11に対して時計回りに7.5度、反時計回りに10.3度回転した方向の取り出し口であり、ポート21とポート23はそれぞれポート22に対して時計回り、反時計回りに12.2度回転した方向の取り出し口である。

図5からモデレーターからの取り出し角度に大きな差は見られない。結合型水素モデレーターにおいては、中性子ビーム取り出し角度が大きく違っているが、結合型水素モデレーターの形状が円筒形であることにより大きな差が出ないと考えられる。また非結合型水素モデレーターの形状は直方体の平板面から出ているが、中性子ビーム取り出し角度の差が小さいためそのような差がないと考えられる。

図6は非結合型ポイズンド水素モデレーターのポイズニングを利かせた面と反対側の面の取り出し角による強度分布の違いをプロットした図である。ポート19がポイズニングの利いたモデレーターの正面の中性子ビーム取り出し口であり、それぞれ時計回りと反時計回りに6.8度回転した取り出し口がポート18とポート20である。反対側の面の正面の中性子ビーム取り出し口がポート8であり、それぞれ時計回りと反時計回りに6.7度回転した取り出し口がポート7とポート9である。非結合型ポイズンド水素モデレーターの形状は非結合型水素モデレーターの形状と同じである。

図6から、同じモデレーターの表面から取り出した場合には強度に対してのモデレーターからの取り出し角度の大きな差は見られない。

2.3 他の中性子源との比較

図 7 は他の中性子源と JSNS に設置されるパルス中性子源との時間平均強度のエネルギー分布について比較を行ったものである。JSNS の各モデレーターの強度は $100 \times 100 \text{mm}^2$ の導管のサイズで計算されており、実際に分光器の使用する中性子源のサイズとなっている。比較対照としては他のパルス中性子源だけでなく、研究用原子炉との比較も行っている。同じパルス中性子源との比較として KENS、ISIS、SNS の時間平均強度のエネルギー分布と定常中性子源である JRR-3M と ILL の時間平均強度のエネルギー分布も載せる。JSNS の結合水素モデレーターから得られる中性子の強度は KENS の 200 倍の強度を持つことがわかる。また ISIS と比較しても 50 倍の強度を持つことがわかる。現在建設の進められている SNS と同様な強度を持つ。一方定常炉と比較すると JRR-3M の冷中性子源の 2 倍の強度を持つ。

図 8 は中性子源と J-PARC の物質・生命科学に設置されるパルス中性子源 (JSNS) とのパルス強度のエネルギー分布について比較を行ったものである。時間平均強度と同様に JSNS の各モデレーターの強度は $100 \times 100 \text{mm}^2$ の導管のサイズで計算されている。パルス強度をみると現在世界最強の中性子源である ILL の 200 倍の強度をもつ。また JRR-3M と比較すると 300 倍である。

3 McStas における中性子源コンポーネント作成

3.1 McStas における中性子源のコンポーネント作成条件

モンテカルロ・シミュレーションでは中性子がある減速材の面積からランダムに発生すると考える。NMTC/JAERI97 と MCNP4A のコードから得られたデータは $100 \times 100 \text{mm}^2$ の面積から中性子が発生している状態に焼き直している。そのために減速材のコンポーネントを作成するにあたり、 $100 \times 100 \text{mm}^2$ の平板状のモデレーター表面では一様に中性子が発生しているとしている。発生した中性子は強度に対するエネルギー分布に即したエネルギーを持ち、エネルギーから中性子のパルスシェイプを決める。モデレーターの表面の任意の位置から任意の方向を向いた中性子を発生させる。

3.2 結合型水素モデレーターを見るポート 16 の中性子源コンポーネントについて

3.2.1 時間平均強度のエネルギー分布について

計算された中性子源における時間スペクトルを表す関数はいくつかある³⁻⁹⁾。ここではその中でも Ikeda-Carpenter の関数³⁾を元に関数を考えた。パルス中性子源から取り出される中性子束は中性子の発生原理より、減速材で十分に減速された中性子(熱平衡項)と不十分な減速の中性子(減速項)の和として表現される。Ikeda-Carpenter で示されているエネルギーにおける強度分布の関数は以下のようにになっている。

$$\bar{i}(E) = I_{Th} \frac{E}{E_T^2} \exp\left(-\frac{E}{E_T}\right) + I_{epi} \frac{\Delta(E)}{\Delta(E_0)} \frac{1}{E} \left(\frac{E}{E_0}\right)^\alpha \quad (1)$$

式の第一項が熱平均項であり第二項が減速項である。この2つの関数をまた joining function $\Delta(E)$ を使用して2つの異なる関数をつなげている。ここで $\Delta(E)$ は

$$\Delta(E) = (1 + \exp(a\lambda - b))^{-1} \quad (2)$$

である。序論に示したように結合型水素減速材でシミュレーションに使用するコンポーネントを作成したビームラインはポート16である。Ikeda-Carpenterの関数を使用して fitting を行った。fittingの結果、パラメーターを以下のようにすれば結合型水素モデレーターをみるポート16の時間平均強度はIkeda-Carpenterの関数をそのまま使用できることがわかった。実際に fitting に使用した関数は式(3)である。また fittingの結果は図9が示す。白抜きの丸がNMTC/JAERI97とMCNP4Aのコードを使用した計算値であり、曲線が式(3)を用いた fitting である。

$$\bar{i}(E) = I_{Th} \frac{E}{E_T^2} \exp\left(-\frac{E}{E_T}\right) + I_{epi} \frac{(1 + \exp(a_0\lambda_0 - b_0))}{(1 + \exp(a_0\lambda - b_0))} \frac{1}{E} \left(\frac{E}{E_0}\right)^{m_7} \quad (3)$$

ここで

$$\lambda_0 = 9.04429/\sqrt{E_0} \quad (4)$$

である。なお係数の値は表1に示した。

3.2.2 時間スペクトルの関数について

提供された72点の線源データにおいてIkeda-Carpenterの関数では強度の時間分布が再現できない。そこで及川⁴⁾のとった手法を用いて、次数を変えたIkeda-Carpenterの関数の和で表現することとした。高エネルギー領域でよく合う関数と低エネルギー側でよく合う関数の線形結合で時間のプロファイル関数を示すようにした。高エネルギー領域でよく一致する関数を $\Phi_{high}(t)$ 、低エネルギー領域でよく一致する関数を $\Phi_{low}(t)$ とする。低エネルギー領域ではIkeda-Carpenterの関数³⁾でよく合う。高エネルギー領域では及川の提案した関数⁴⁾で良く合う。

$$\Phi_{low}(t) = \int dt' \phi(t) \left[(1 - R)\delta(t - t') + R\beta\theta(t - t') \exp(-\beta t - t') \right] \quad (5)$$

但し、

$$\phi_{low}(t) = \frac{\alpha}{2} (\alpha t)^2 \exp(-\alpha t) \quad (6)$$

である。また高エネルギー領域で良く合う関数は

$$\Phi_{high}(t) = \int dt' \phi(t) \left[(1 - R)\delta(t - t') + R\beta\theta(t - t') \exp(-\beta t - t') \right] \quad (7)$$

$$\phi_{high}(t) = \frac{\alpha}{2} (\alpha t)^3 \exp(-\alpha t) \quad (8)$$

となる。それぞれの関数の積分を計算すると

$$\begin{aligned} \Phi(t)_{low} = & \frac{\alpha}{2} \left[(1-R)(\alpha t)^2 \exp(-\alpha t) \right. \\ & \left. + R \frac{2\alpha^2\beta}{(\alpha-\beta)^3} \left(\exp(-\beta t) - \exp(-\alpha t) \left(1 + (\alpha-\beta)t + \frac{1}{2}(\alpha-\beta)^2 t^2 \right) \right) \right] \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \Phi(t)_{high} = & \frac{\alpha}{2} \left[(1-R)(\alpha t)^3 \exp(-\alpha t) + R \frac{6\alpha^3\beta}{(\alpha-\beta)^4} \left(\exp(-\beta t) \right. \right. \\ & \left. \left. - \exp(-\alpha t) \left(1 + (\alpha-\beta)t + \frac{1}{2}(\alpha-\beta)^2 t^2 + \frac{1}{6}(\alpha-\beta)^3 t^3 \right) \right) \right] \end{aligned} \quad (10)$$

これらの二つの式を比 R' で結びつけると

$$\Phi(t) = (1-R')\Phi(t)_{high} + R'\Phi(t)_{low} \quad (11)$$

となる。実際に時間のプロファイルを fitting すると R と R' はほとんど同じ値をとる。そこで

$$\Phi(t) = (1-R)\Phi(t)_{high} + R\Phi(t)_{low} \quad (12)$$

として fitting を行った。具体的な式は以下の式となる。fitting の結果は図 10 となる。水素結合型モデレーターをみているポート 16 のビームラインにおけるのパルスシェイプをこの関数 (13) はほぼ完全に表していると考えられる。

$$\begin{aligned} \Phi(t) = & (1-R) \frac{\alpha}{2} \left[(1-R)(\alpha t)^3 \exp(-\alpha t) + R \frac{6\alpha^3\beta}{(\alpha-\beta)^4} \left(\exp(-\beta t) \right. \right. \\ & \left. \left. - \exp(-\alpha t) \left(1 + (\alpha-\beta)t + \frac{1}{2}(\alpha-\beta)^2 t^2 + \frac{1}{6}(\alpha-\beta)^3 t^3 \right) \right) \right] \\ & + R \frac{\alpha}{2} \left[(1-R)(\alpha t)^2 \exp(-\alpha t) \right. \\ & \left. + R \frac{2\alpha^2\beta}{(\alpha-\beta)^3} \left(\exp(-\beta t) - \exp(-\alpha t) \left(1 + (\alpha-\beta)t + \frac{1}{2}(\alpha-\beta)^2 t^2 \right) \right) \right] \end{aligned} \quad (13)$$

ここで関数 (13) の係数である α 、 β と R は波長依存があり、以下のような式になる。

$$\begin{aligned} \alpha(\lambda) = & c1 + c6 \frac{(1 + \exp(a2la2 - b2))}{(1 + \exp(-a2\lambda + b2))} \left(\frac{1}{\lambda^{e7}} \right) \\ & + c4 \frac{(1 + \exp(a2 * la2 - b2))}{(1 + \exp(a2 * \lambda - b2))} \frac{(1 + \exp(a1 * la1 - b1))}{(1 + \exp(-a1 * \lambda + b1))} \left(\frac{1}{\lambda^{e5}} \right) \\ & + c2 \frac{(1 + \exp(a1 * la1 - b1))}{(1 + \exp(a1 * \lambda - b1))} \left(\frac{1}{\lambda^{e3}} \right) \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \beta(\lambda) = & \frac{p1}{p2^2} \frac{1}{\lambda} \exp\left(\frac{\lambda^{p3}}{p2}\right) + q1 \exp\left(-\frac{9.088}{e1} \frac{1}{\lambda^{q2}}\right) + q3 \exp\left(-\frac{9.088}{e2} \frac{1}{\lambda^{q4}}\right) + r1 \\ & + r2 \exp\left(-\left(\frac{\lambda - r3}{r4}\right)^2\right) + r5 \exp\left(-\left(\frac{\lambda - r6}{r7}\right)^2\right) + r8 \exp\left(-\left(\frac{\lambda - r9}{r10}\right)^2\right) \end{aligned} \quad (15)$$

$$R(\lambda) = \frac{p1}{p2^2} \frac{1}{\lambda} \exp\left(\frac{\lambda^{p3}}{p2}\right) + q2 \exp\left(-\frac{9.088}{e0} \frac{1}{\lambda^{q1}}\right) + r1 + r2 * \exp\left(-\left(\frac{\lambda - r3}{r4}\right)^2\right) \quad (16)$$

なお $\alpha(\lambda)$ の係数の値は表 2 のようになり、 $\beta(\lambda)$ の係数の値は表 3 のようになり、 $R(\lambda)$ の係数の値は表 4 となる。図 11 は係数である α 、 β と R の波長依存と fitting の結果を示した図である。このように各係数も式 (14~16) で表すことができる。これによって JSNS のポート 16 の中性子ビーム取り出し口で得られる中性子源としての特徴を正確に記述したコンポーネントが作成できた。

3.3 非結合型水素モデレーターを見るポート 11 の中性子源コンポーネントについて

3.3.1 時間平均強度のエネルギー分布について

結合型水素モデレーターでは Ikeda-Carpenter の関数³⁾に準じていたが、デカップラーが挿入されると、エネルギーに対する強度分布が異なってくる。非結合型水素モデレーターは 3 つの関数の和として表すことができる。

$$\begin{aligned} \bar{i}(E) = & I_{Th} \frac{E^{m8}}{E_T^2} \exp\left(-\frac{E}{E_T}\right) + c4 \frac{(1 + \exp(a_1 \lambda_1 - b_1)) (1 + \exp(a_0 \lambda_0 - b_0))}{(1 + \exp(a_1 \lambda - b_1)) (1 + \exp(-a_0 \lambda + b_0))} \frac{1}{E^{c5}} \\ & + I_{epi} \frac{(1 + \exp(a_0 \lambda_0 - b_0))}{(1 + \exp(a_0 \lambda - b_0))} \frac{1}{E} \left(\frac{E}{E0}\right)^{m7} \end{aligned} \quad (17)$$

ここで

$$\lambda_0 = 9.04429/\sqrt{E0} \quad (18)$$

$$\lambda_1 = 9.04429/\sqrt{E1} \quad (19)$$

である。

式 (17) の第一項が熱平均項であり第二項と第三項が減速項である。この 3 つの関数をまた joining function を使用して 3 つの異なる関数をつなげている。図 12 はポート 11 における時間平均強度のエネルギー分布と関数 (17) による fitting の結果を示している。なお係数の値は表 5 に示した。

3.3.2 時間スペクトルの関数について

提供された線源データにおいて Ikeda-Carpenter の関数ではすべてのエネルギー領域の時間のプロファイルが再現できない。そこで及川⁴⁾のとった手法を用いて、高エネルギー領域でよく合う関数と低エネルギー側でよく合う関数の線形結合で時間のプロファイル関数を示すようにした。高エネルギー領域でよく一致する関数を $\Phi_{high}(t)$ 、低エネルギー領域でよく一致する関数を $\Phi_{low}(t)$ とする。低エネルギー領域では Ikeda-Carpenter の関数でよく合う。また、高エネルギー領域では新しく作った関数で良く合う。

$$\Phi_{low}(t) = \int dt' \phi(t) \left[(1 - R)\delta(t - t') + R\beta\theta(t - t') \exp(-\beta t - t') \right] \quad (20)$$

但し、

$$\phi_{low}(t) = \frac{\alpha}{2} (\alpha t)^2 \exp(-\alpha t) \quad (21)$$

$$\Phi_{high}(t) = \int dt' \phi(t) \left[(1-R)\delta(t-t') + R\beta\theta(t-t') \exp(-\beta t - t') \right] \quad (22)$$

$$\phi_{high}(t) = \frac{\alpha}{2} (\alpha t)^5 \exp(-\alpha t) \quad (23)$$

よって、

$$\begin{aligned} \Phi(t)_{low} = & \frac{\alpha}{2} \left[(1-R)(\alpha t)^2 \exp(-\alpha t) \right. \\ & \left. + R \frac{2\alpha^2\beta}{(\alpha-\beta)^3} \left(\exp(-\beta t) - \exp(-\alpha t) \left(1 + (\alpha-\beta)t + \frac{1}{2}(\alpha-\beta)^2 t^2 \right) \right) \right] \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \phi_{high}(t) = & \frac{\alpha}{2} \left[(1-R1)(\alpha t)^5 \exp(-\alpha t) + R1 \frac{120\alpha^5\beta}{(\alpha-\beta)^6} \left(\exp(-\beta t) - \exp(-\alpha t) \left(1 + (\alpha-\beta)t \right. \right. \right. \\ & \left. \left. \left. + \frac{1}{2}(\alpha-\beta)^2 t^2 + \frac{1}{6}(\alpha-\beta)^3 t^3 + \frac{1}{24}(\alpha-\beta)^4 t^4 + \frac{1}{120}(\alpha-\beta)^5 t^5 \right) \right) \right] \end{aligned} \quad (25)$$

$$(26)$$

これらの二つの式を比 R' で結びつけると

$$\Phi(t) = (1-R')\Phi(t)_{high} + R'\Phi(t)_{low} \quad (27)$$

となる。計算の結果、式は以下の様になる。

$$\begin{aligned} \Phi(t) = & (1-R') \frac{\alpha}{2} \left[(1-R)(\alpha t)^5 \exp(-\alpha t) + R \frac{120\alpha^5\beta}{(\alpha-\beta)^6} \left(\exp(-\beta t) - \exp(-\alpha t) \right. \right. \\ & \left. \left. \left(1 + (\alpha-\beta)t + \frac{1}{2}(\alpha-\beta)^2 t^2 + \frac{1}{6}(\alpha-\beta)^3 t^3 + \frac{1}{24}(\alpha-\beta)^4 t^4 + \frac{1}{120}(\alpha-\beta)^5 t^5 \right) \right) \right] \\ & + R' \frac{\alpha}{2} \left[(1-R)(\alpha t)^2 \exp(-\alpha t) \right. \\ & \left. + R \frac{2\alpha^2\beta}{(\alpha-\beta)^3} \left(\exp(-\beta t) - \exp(-\alpha t) \left(1 + (\alpha-\beta)t + \frac{1}{2}(\alpha-\beta)^2 t^2 \right) \right) \right] \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} \alpha(\lambda) = & c1 + c6 \frac{(1 + \exp(a2la2 - b2))}{(1 + \exp(-a2\lambda + b2))} \left(\frac{1}{\lambda^{c7}} \right) \\ & + c4 \frac{(1 + \exp(a2 * la2 - b2))}{(1 + \exp(a2 * \lambda - b2))} \frac{(1 + \exp(a1 * la1 - b1))}{(1 + \exp(-a1 * \lambda + b1))} \left(\frac{1}{\lambda^{c5}} \right) \\ & + c2 \frac{(1 + \exp(a1 * la1 - b1))}{(1 + \exp(a1 * \lambda - b1))} \left(\frac{1}{\lambda^{c3}} \right) \end{aligned} \quad (29)$$

$$\begin{aligned} \beta(\lambda) = & c1 + c6 \frac{(1 + \exp(a2la2 - b2))}{(1 + \exp(-a2\lambda + b2))} \left(\frac{1}{\lambda^{c7}} \right) \\ & + c4 \frac{(1 + \exp(a2 * la2 - b2))}{(1 + \exp(a2 * \lambda - b2))} \frac{(1 + \exp(a1 * la1 - b1))}{(1 + \exp(-a1 * \lambda + b1))} \left(\frac{1}{\lambda^{c5}} \right) \\ & + c2 \frac{(1 + \exp(a1 * la1 - b1))}{(1 + \exp(a1 * \lambda - b1))} \left(\frac{1}{\lambda^{c3}} \right) \end{aligned} \quad (30)$$

$$R(\lambda) = \frac{p1}{p2^2} \frac{1}{\lambda} \exp\left(\frac{\lambda^{p3}}{p2}\right) + q2 \exp\left(-\frac{9.088}{e0} \frac{1}{\lambda^{q1}}\right) + r1 + r2 * \exp\left(-\left(\frac{\lambda - r3}{r4}\right)^2\right) \quad (31)$$

$$R'(\lambda) = \frac{p1}{p2^2} \frac{1}{\lambda} \exp\left(\frac{\lambda^{p3}}{p2}\right) + q2 \exp\left(-\frac{9.088}{e0} \frac{1}{\lambda^{q1}}\right) + r1 + r2 * \exp\left(-\left(\frac{\lambda - r3}{r4}\right)^2\right) \quad (32)$$

なお $\alpha(\lambda)$ の係数の値は表 6 に、 $\beta(\lambda)$ の係数の値は表 7 に、 $R1(\lambda)$ の係数の値は表 8 に、 $R2(\lambda)$ の係数の値は表 9 に示すようになる。このように各パラメーターも式 (29)~(32) で表すことができる。よって JSNS のポート 11 の中性子ビーム取り出し口で得られる中性子源の特徴を正確に記述したコンポーネントが作成できた。

4 生物用非弾性散乱装置 DYANA の分光器の開発

大強度の核破碎中性子源を線源とした物質・生命科学実験施設に設置する中性子分光器の一つとして提案している生物用非弾性散乱装置 DYANA(高エネルギー分解能非弾性散乱装置) の装置開発のシミュレーションを行った。DYANA は物質・生命科学実験施設のポート 11 に設置される予定である。非結合型水素モデレーターを見るポート 11 に関してはすでにモンテカルロ・シミュレーション用の中性子源のコンポーネントが出来上がっている。そこで上記で得られた中性子源のコンポーネントを使用したモンテカルロ・シミュレーションを行ったのでその結果を報告する。

4.1 生物用非弾性散乱装置 DYANA

DYANA のねらっているサイエンスは生体物質における非弾性散乱である。生物における生命活動を担うダイナミクスの測定や、高分子等の Soft Matter の振動運動と緩和運動の境界領域の測定を行えると考えている。

タンパク質の機能を調べるのに当たりまずその立体構造を調べることは重要である。現在、数多くのタンパク質の立体構造がわかってきた。しかしながら、タンパク質が酵素としての役割を果たすとき静的な構造だけでなく動的な構造が重要になる。特にタンパク質の動的特性と機能との関係で重要な蝶番運動があるがこれは運動モードとして計算すると数 meV ほどのエネルギーなるといふ。DYANA ではこの蝶番運動等の数 meV のエネルギー領域を調べることを目標にしている。生物用非弾性散乱装置 DYANA のねらっているエネルギー領域は 0.3meV~14.0meV である。

DYANA 分光器がねらっているエネルギー領域 0.3meV~14.0meV で非常に高い分解能を得るために結晶アナライザーを使用した逆転配置型を採用している。結晶アナライザーとして PG(002) を使用することで、エネルギー分解能は $15\mu\text{eV}$ ($E=0.0\text{meV}$) をねらうことができる。また Q の範囲は $0.05\sim 1.8(\text{\AA}^{-1})$ であり、Q の分解能は 0.03 程度 (\AA^{-1}) になる。また様々なアナライザー結晶を使用することにより、広い Q-E 分布の測定を可能としている。しかも分解能としては $\Delta E/E$ が 0.5%~0.8% と非常に高い分解能を示す。また、大きな立体角を覆うアナライザー結晶を散乱面の上下に使用することにより大強度が得られる。また逆転配置の構造上、偏極デバイスを簡単に設置することができる。

図 15 は DYANA の概略図である。25Hz の周期で非結合型水素モデレーターから発生する白色中性子を 32m のガイド管で試料まで運ぶ。試料の直前の 2m から集光ガイドにより $100\times 100\text{mm}^2$ の中性子のビームサイズを $20\times 20\text{mm}^2$ に絞る。試料に散乱された中性子は散乱面の上下にあるアナライザー結晶でブラッグ角 80 度の散乱に相当するエネルギーの中性子のみを選び出す。アナライザー結晶は散乱面に 5 度おきにあり、それぞれ ^3He カウンターに集光するように円周上に設置

している。 ^3He カウンターは試料の上下に設置しており、試料から散乱された中性子を大きな立体角で捕らえるようになっている。アナライザー結晶は試料の設置してある散乱面に水平な方向 5 度の範囲で散乱された中性子を集光する。また散乱面に対して垂直な方向に関しては片側で 20 度の範囲に散乱された中性子を集光する。

4.2 DYANA 分光器のシミュレーション

McStas によるモンテカルロ・シミュレーションでは、図 16 のような条件で計算を行った。3.3 で作成したポート 11 用の McStas の中性子源コンポーネントを使用して、32m の 3Q のスーパーミラーのガイド管により試料まで白色中性子を運ぶ。ガイド管の断面積は $100 \times 100 \text{mm}^2$ であり、試料 2m 手前から集光ガイドに変更し、試料直前で $20 \times 20 \text{mm}^2$ の断面積とした。

計算を単純化するためにアナライザー結晶は散乱面上方 1 枚のみ使用した。また試料としてはバナジウムの円柱 ($\phi 10 \text{mm} \times 10 \text{mm}$ (高さ)) を使用した。バナジウムによる非干渉性散乱は全方位 4π 方向に広がるが、計算効率を上げるために、中性子の散乱方向を円錐状に定義した。また、その円錐がアナライザー結晶の方向に向くようにした。アナライザー結晶におけるブラッグ角は 80 度であり、試料中心からアナライザー結晶の中心は 10 度上方に設置してある。また ^3He カウンターはサンプルの直上に置き、試料とアナライザー結晶と ^3He カウンターの配置がローランド円上に配置するように置いた。アナライザー結晶は散乱面に水平方向と垂直方向の 2 方向に集光するモノクロメーターを用いている。このモノクロメーターは $10 \times 10 \text{mm}^2$ のタイルを敷き詰めて作られている。

図 17 はアナライザー結晶が平板の状態では回折が起こったときにカウンター付近でどのような中性子ビームの広がりがあるか調べた結果である。 ^3He カウンター直前に 2 次元の位置敏感型カウンター (略称 2D-PSD) をおいたときに 2 次元の位置敏感型カウンターが観測する強度分布である。また、図 18 はアナライザー結晶を 2 方向に集光し状態で回折が起こったときにカウンター付近でどのような中性子ビームの集光が行われるか調べた結果である。アナライザー結晶が平板の時はアナライザー結晶から回折された中性子線が広がっているのがわかる。またアナライザー結晶を集光条件に合わせて曲げると図 18 の様に集光することが明らかになった。

DYANA 中性子分光器の分解能を調べるために、アナライザー結晶の分解能より (エネルギーにおける半値幅より) 大きなエネルギー分布を持っている中性子を、入射中性子とした。すると図 19 より明らかなようにカウンターで計測された中性子のエネルギー分布はガウス関数的であることが明らかになった。また半値幅を調べると $14 \mu\text{eV}$ となっており、概略で見積もられた分解能とほぼ同じであることがわかった。図 20 は入射中性子のエネルギー分布が DYANA の分解能より小さい幅としてシミュレーションを行った結果である。入射中性子の時間のプロファイルが非対称であったのがアナライザー結晶に回折後、やや対称的になることがわかった。これはアナライザー結晶による分解能関数の畳込みが行われたために時間のプロファイルがやや対称的になったと考えられる。これらのシミュレーションの結果から、DYANA 分光器の分解能を決めている主な中性子光学素子はアナライザー結晶であることが明らかになった。

5 結論

大強度陽子加速施設計画における物質・生命科学実験施設に設置されるパルス中性子源の特性を十分に表すことのできるモンテカルロ・シミュレーション用のコンポーネントを作成した。エネルギーに対する強度分布や各エネルギーにおける時間分布を表現できる関数を見つけて、シミュレーションのソフトウェアである McStas のコンポーネントを作成した。

作成した中性子源コンポーネントを使用して実際の分光器のシミュレーション(生物用非弾性散乱装置 DYANA)を行った。その結果、DYANA が予想された分解能を持つことがシミュレーションでも明らかになった。

DYANA に関しては、入射側の収束コリメーターの仕様の決定のためと、アナライザー結晶の配置の再考のためにシミュレーションを行う必要がある。また DYANA のオプションである偏極装置であるが、McStas には偏極装置のコンポーネントとして ^3He の偏極装置しか無いので偏極ミラーを使用した偏極用のコンポーネントを作成する必要がある。

また、非結合型ポイズン水素モデレーターを線源とするビームラインにおける中性子源コンポーネントの作成が課題として残っているので早急に仕事を進める。

謝辞

本研究を進めるのにあたり、大強度陽子加速器施設開発センターの横溝英明センター長、大山幸夫次長、そして池田裕二郎次長をはじめとする中性子施設開発グループの皆様から貴重なご助言を頂いた。

物質材料研究機構の佐藤卓主任研究員には具体的なモンテカルロ・シミュレーションについてのご教示、そしてコンポーネントファイルの作成の際に貴重なご意見、ご指摘を頂いた。高エネルギー加速器研究機構の及川氏には中性子源のコンポーネントファイルの作成について、ご意見、ご助言を頂いた。

また、本研究を進めるに当たり、中性子利用開発グループの松林政仁様、山岸秀志様、中村龍也様、正岡聖様、山崎大様からは様々なご助言、ご助力を頂いた。ここに感謝の意を表します。

参考文献

- 1) K. Lefmann and K. Nilesen:Neutron News, 10, 20, (1999).
- 2) P.A. Seeger, L.L. Daemen, E. Farhi, W.-T. Lee, X.-L. Wang, L. Passell, J. Saroun and G. Zsigmond:Neutron News, 13, 24, (2002).
- 3) S. Ikeda and J. M. Carpenter:Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res. A, 239, 536, (1985).
- 4) K. Oikawa, T. Kamiyama and M. Teshigawara:JAERI-Conf 2001-002, "15th Meeting of the International Collaboration on Advanced Neutron Source" (Tsukuba, Japan, November 2000), 738(2000).

- 5) I. Cole and C.G. Windsor:Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res., 171, 107, (1980).
- 6) F. Kropff, J.R. Granada and R.E. Mayer:Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res., 198, 515, (1982).
- 7) J.M. Carpenter, R.A. Robinson, A.D. Taylor and D.J. Picton:Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res., A 234, 542, (1985).
- 8) C. Coceva, R. Simonini and D.K. Olsen:Nucl. Instr. and Meth., 211, 459, (1983).
- 9) F. Izumi, H. Asano, H. Murata and N. Watanabe:J. Appl. Cryst. 20, 411, (1987).

Table 1: Optimized coefficients of equation(3)

Coefficient	Calculated value
I_{Th}	3.3484×10^{15}
E_T	4.1784
I_{epi}	3.0786×10^{14}
a_0	58.18
b_0	181.11
E_0	4259.2
m_7	0.014587

Table 2: Optimized coefficients of equation(14)

Coefficient	Calculated value
c_1	0.014961
c_2	0.31175
c_3	0.94053
c_4	0.012601
c_5	2.5217
a_1	42.958
b_1	60.008
la_1	1.15
a_2	19.318
b_2	60.008
la_2	3.3
c_6	0.0027095
c_7	1.0829

Table 3: Optimized coefficients of equation(15)

Coefficient	Calculated value
<i>r</i> 1	0.0030307
<i>r</i> 2	0.0014123
<i>r</i> 3	5.9934
<i>r</i> 4	1.5794
<i>p</i> 1	0.034385
<i>p</i> 2	-0.247405
<i>p</i> 3	0.097206
<i>q</i> 1	0.2731
<i>q</i> 2	-0.69796
<i>e</i> 1	2.8823
<i>q</i> 3	1.4629
<i>q</i> 4	-2.1792
<i>e</i> 2	0.023654
<i>r</i> 5	0.0011232
<i>r</i> 6	7.9716
<i>r</i> 7	5.033
<i>r</i> 8	0.0012735
<i>r</i> 9	9.4254
<i>r</i> 10	5.3142

Table 4: Optimized coefficients of equation(16)

Coefficient	Calculated value
<i>r</i> 1	-0.36979
<i>r</i> 2	0.59554
<i>r</i> 3	0.66519
<i>r</i> 4	1.8293
<i>p</i> 1	-0.25967
<i>p</i> 2	-0.20872
<i>p</i> 3	-0.14341
<i>q</i> 1	1.1284
<i>q</i> 2	1.4911
<i>e</i> 0	3.9293

Table 5: Optimized coefficients of equation(17)

Coefficient	Calculated value
E_0	595.31
E_2	200.0
I_{Th}	7.0905×10^{14}
E_T	5.8066
I_{epi}	1.895×10^{14}
a_0	41.527
b_0	33.716
m_7	0.11017
m_8	0.84903
c_4	1.3694×10^{13}
c_5	0.50493
a_1	41.5
b_1	106.03

Table 6: Optimized coefficients of equation(29)

Coefficient	Calculated value
c_1	0.065151
c_2	0.69673
c_3	0.85867
c_4	0.86764
c_5	1.89
a_1	50.667
b_1	60.008
la_1	1.1506
a_2	21.653
b_2	60.008
la_2	2.1
c_6	0.60327
c_7	1.4169

Table 7: Optimized coefficients of equation(30)

Coefficient	Calculated value
<i>c1</i>	0.006481
<i>c2</i>	0.1842
<i>c3</i>	0.64507
<i>c4</i>	0.18345
<i>c5</i>	0.97089
<i>a1</i>	50.664
<i>b1</i>	60.01
<i>la1</i>	1.1506
<i>a2</i>	19.497
<i>b2</i>	49.721
<i>la2</i>	2.1
<i>c6</i>	0.47412
<i>c7</i>	1.6586

Table 8: Optimized coefficients of equation(31)

Coefficient	Calculated value
<i>r1</i>	0.22251
<i>r2</i>	0.22984
<i>r3</i>	0.4137
<i>r4</i>	1.2614
<i>p1</i>	0.0046896
<i>p2</i>	-0.40462
<i>p3</i>	-0.03741
<i>q1</i>	0.58773
<i>q2</i>	0.87373
<i>e0</i>	6.0484

Table 9: Optimized coefficients of equation(32)

Coefficient	Calculated value
r_1	0.0089573
r_2	-0.18902
r_3	1.2541
r_4	0.79551
p_1	-0.26063
p_2	-0.10413
p_3	-0.56164
q_1	0.43435
q_2	1.39
e_0	13.302

物質・生命科学実験施設
概念配置計画図 (地上1階)

装置配置試案 Ver.14(2002.6.6)

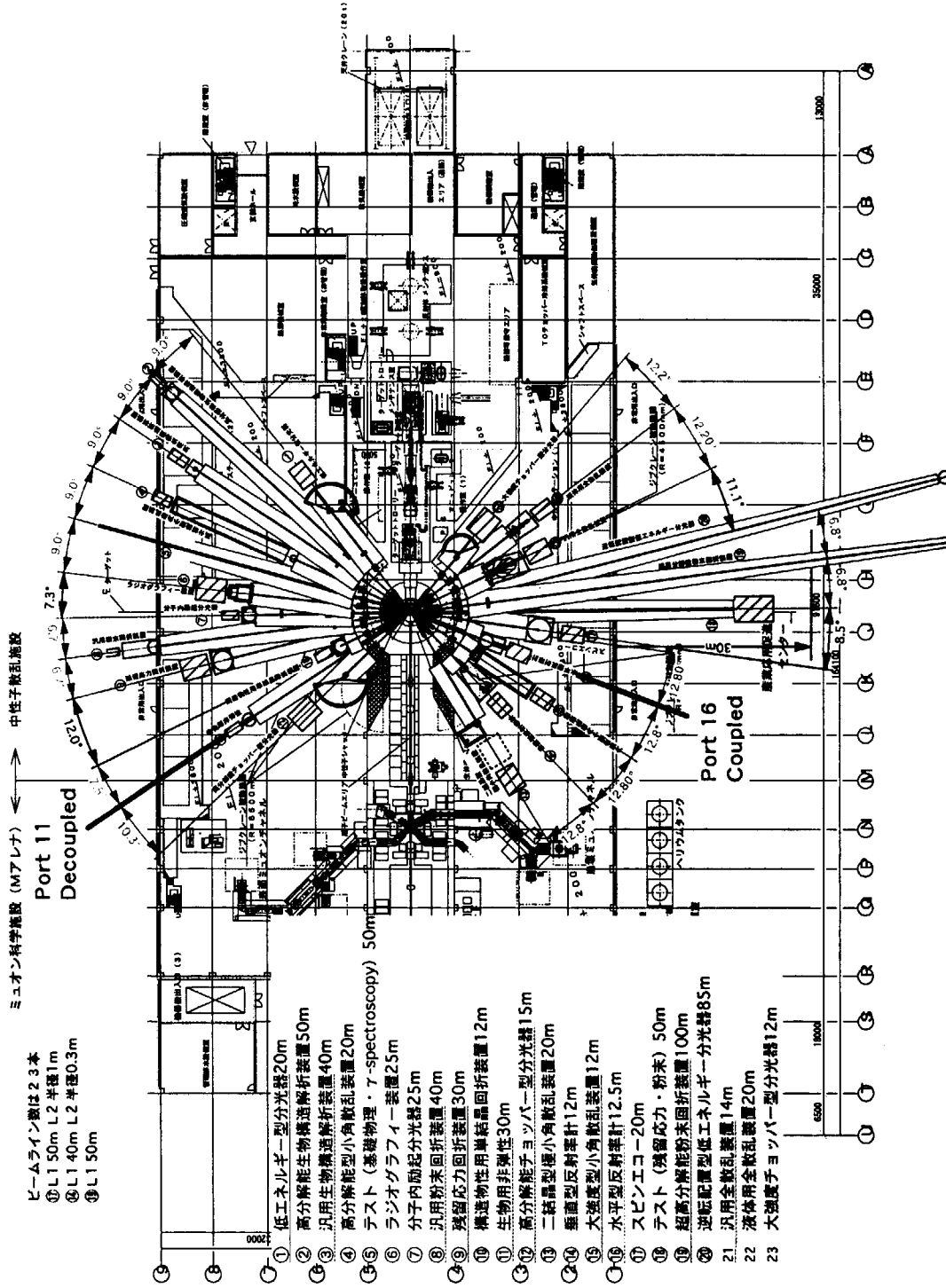


Fig. 1: The layout of instrument suits. Equalized port separation for each moderator ports. There are 23 ports and possibly additional ports.

This is a blank page.

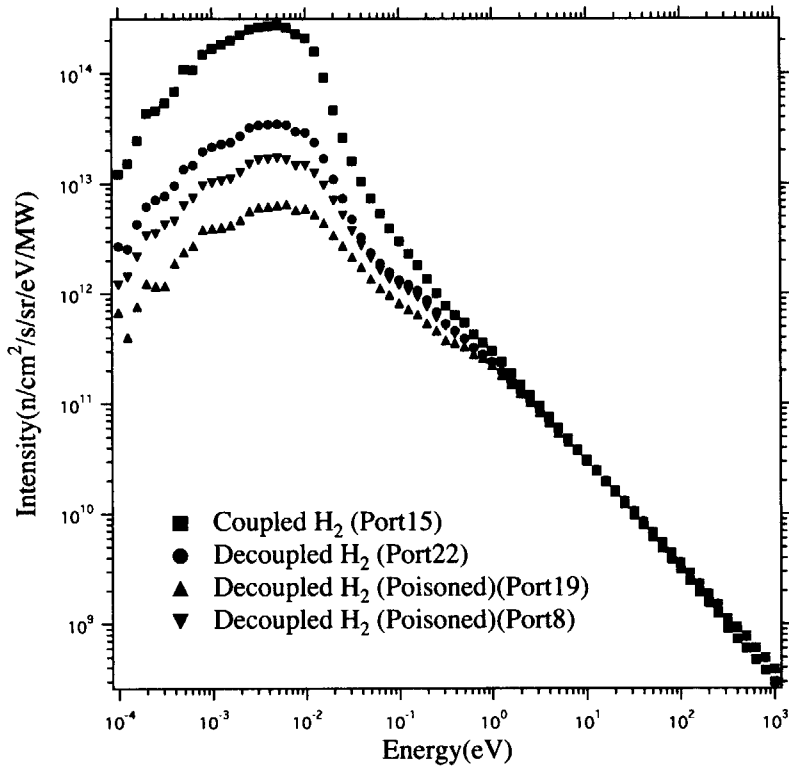


Fig. 2: Energy dependence of of time-averaged intensities emerging from the viewed each moderators surface

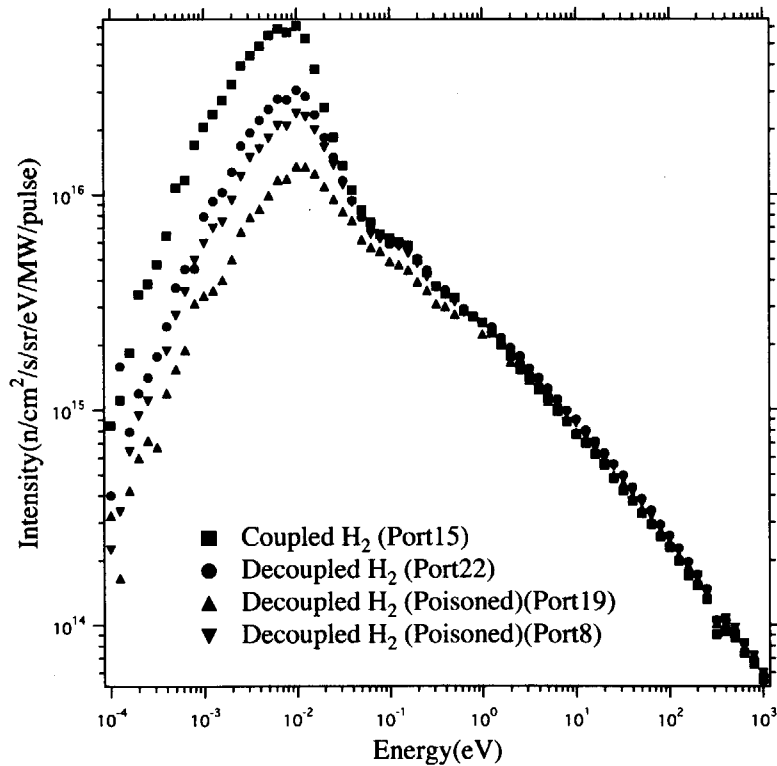


Fig. 3: Energy dependence of pulsed intensities of neutrons emerging from the viewed each moderators surface

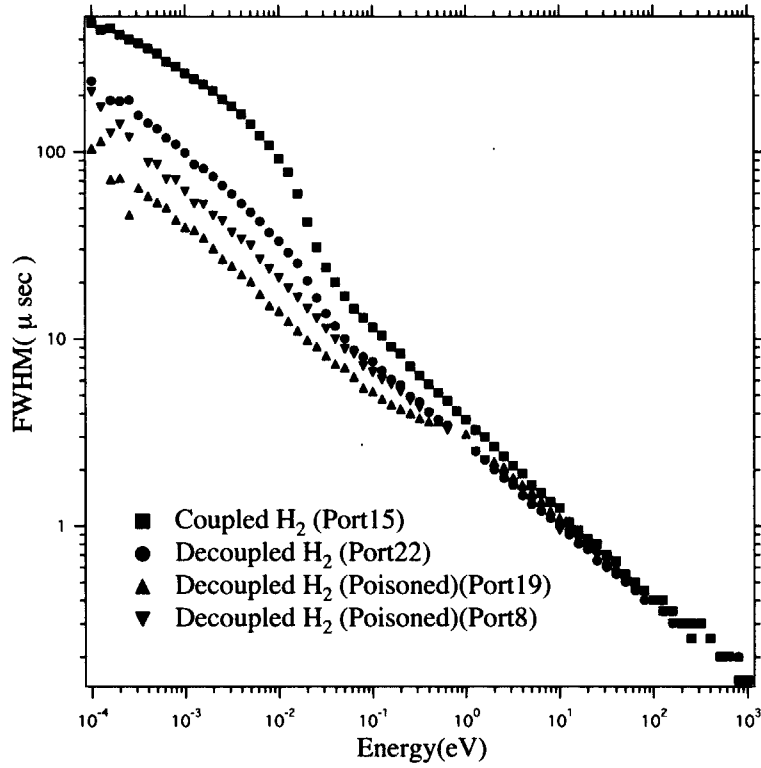


Fig. 4: Energy dependence of pulse widths in FWHM(full width of half maximum) as a function of the viewed each moderator surface

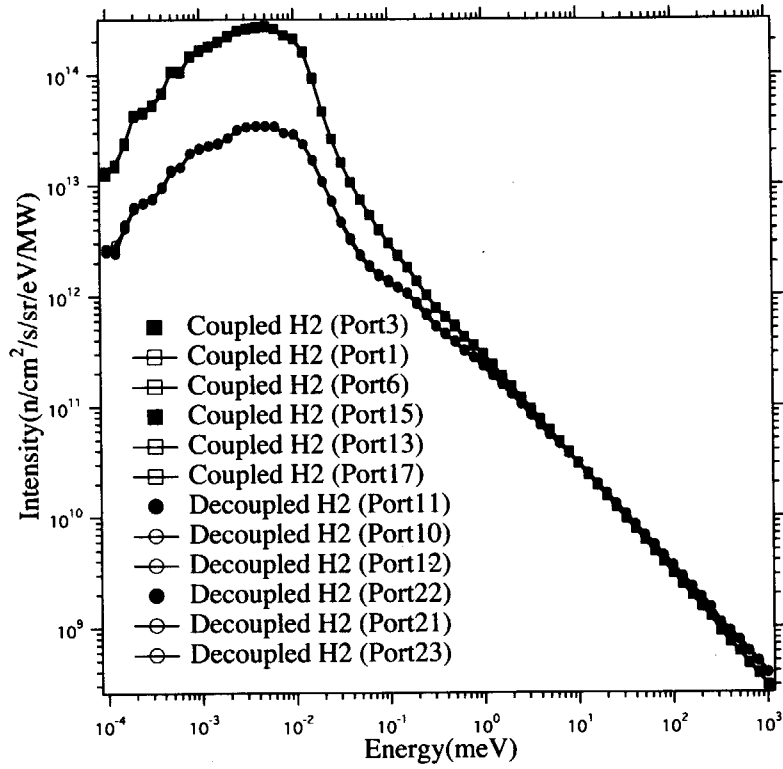


Fig. 5: Comparison of time-averaged intensities each port from the viewed Coupled H₂ moderator and decoupled unpoisoned H₂ moderator surface

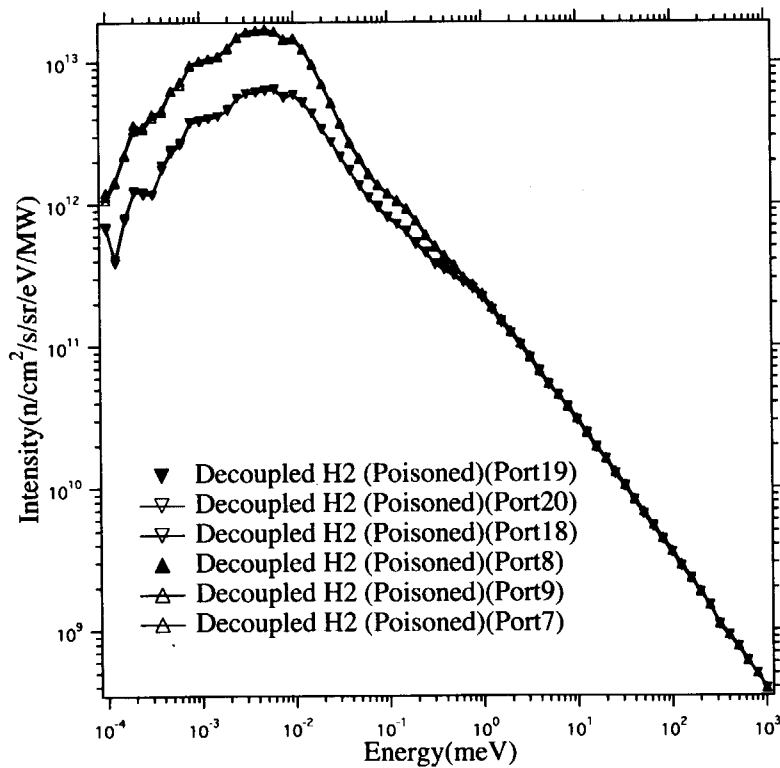


Fig. 6: Comparison of time-averaged intensities each port from the viewed Decoupled poisoned H₂ moderator surface

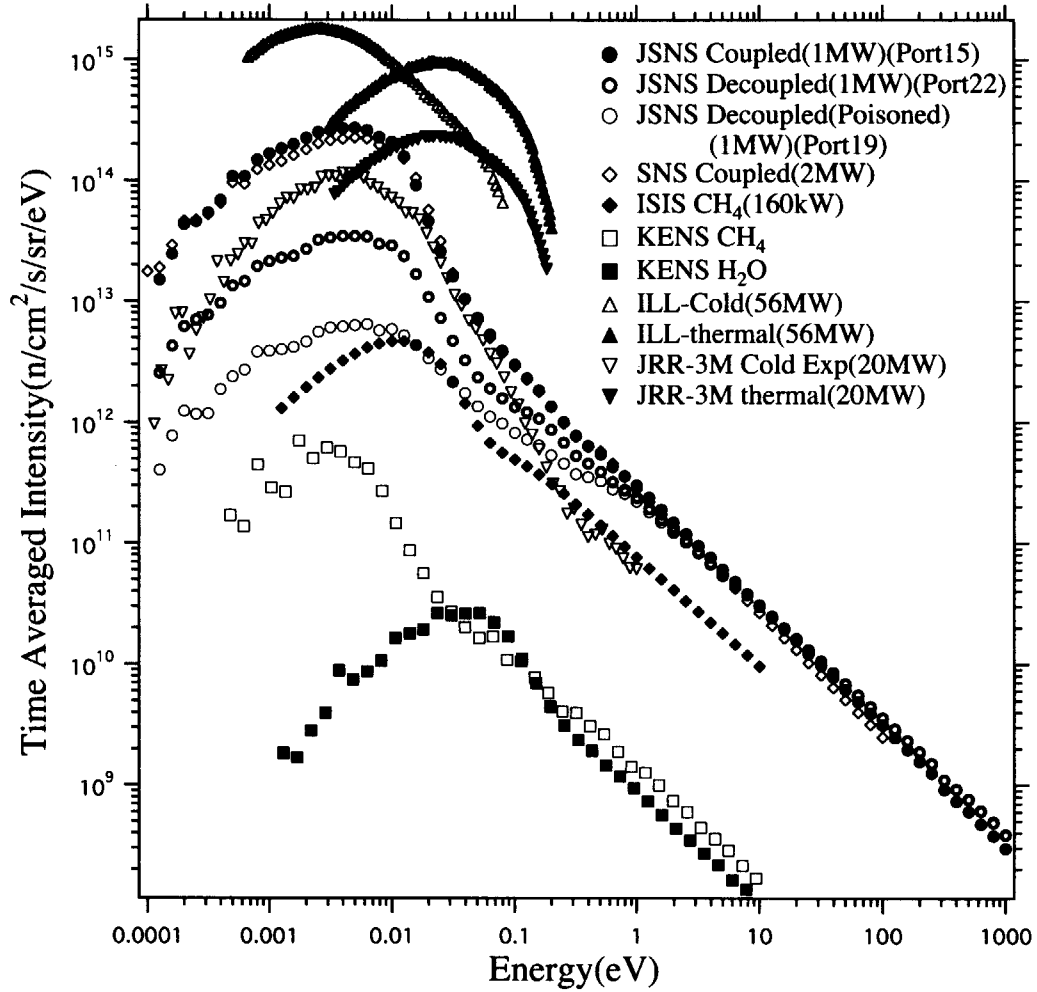


Fig. 7: Comparison of energy dependence of the time-averaged intensities of other neutron source including the steady reactor. The time-averaged intensity of emerging from the viewed Coupled H₂ moderator of JSNS is higher 10 times than that of ISIS CH₄ moderator. The time-averaged intensity coupled moderator higher 1/4 than that of ILLs cold source.

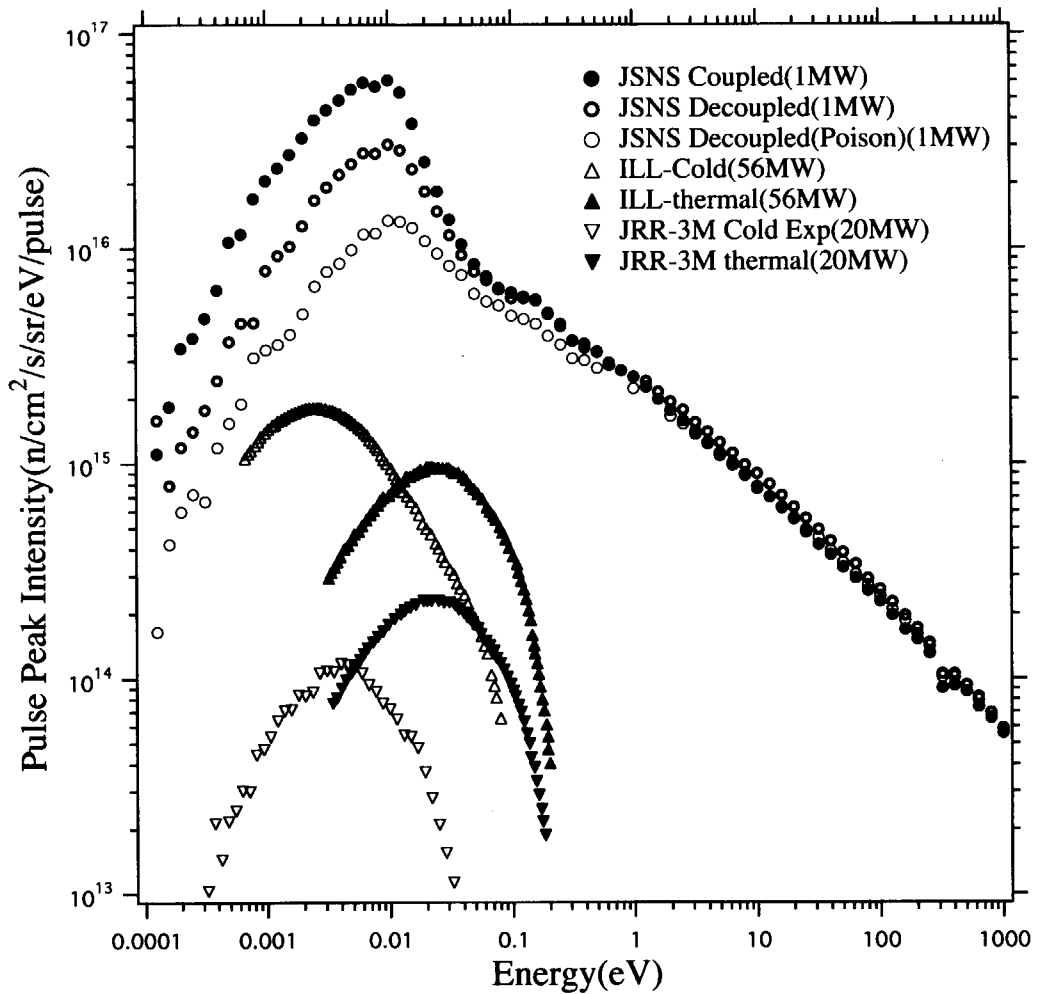


Fig. 8: Comparison of energy dependence of the peak intensities of other neutron source including the steady reactor. pulse peak intensity of emerging from the viewed Coupled H₂ moderator of JSNS is higher 100 times than that of ILL's cold source.

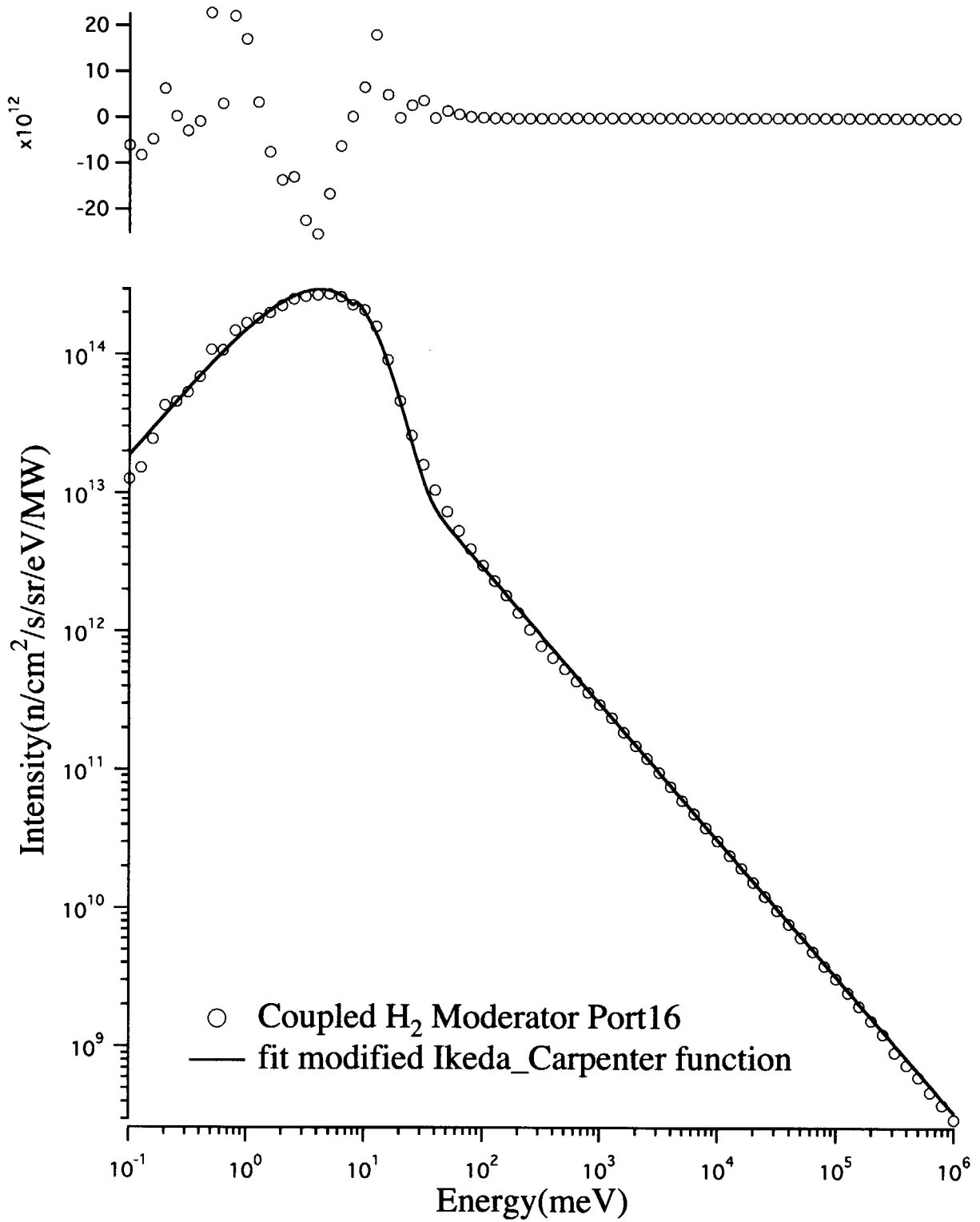


Fig. 9: Energy dependence of time-averaged number of neutrons emerging from port16 viewed Coupled H₂ moderator surface

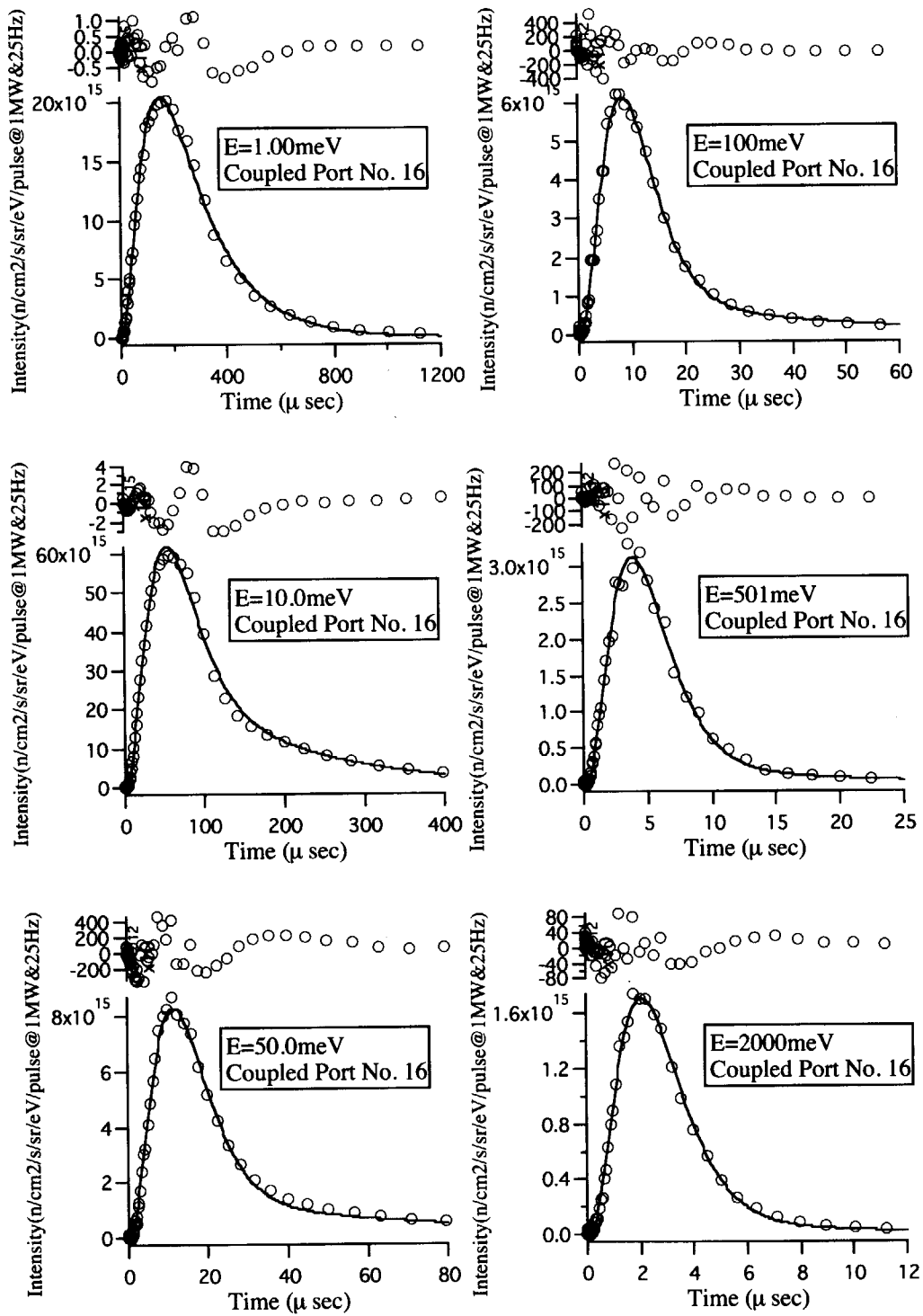


Fig. 10: Pulse shapes of 1.00, 10.0, 50.0, 100, 501 and 2000 meV at port 16.

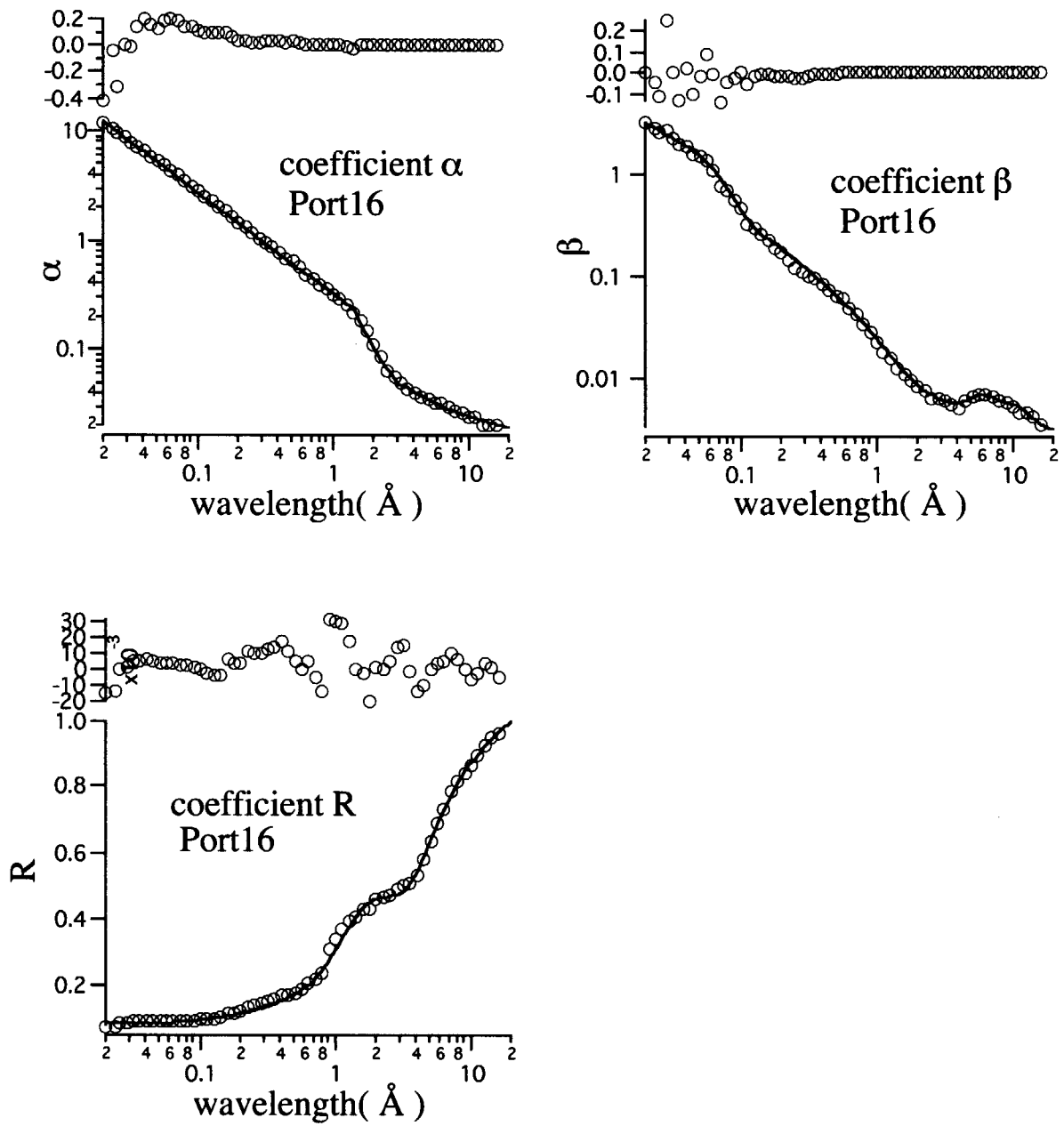


Fig. 11: Wavelength dependence of coefficients parameters α , β and R for port16 viewed coupled moderator.

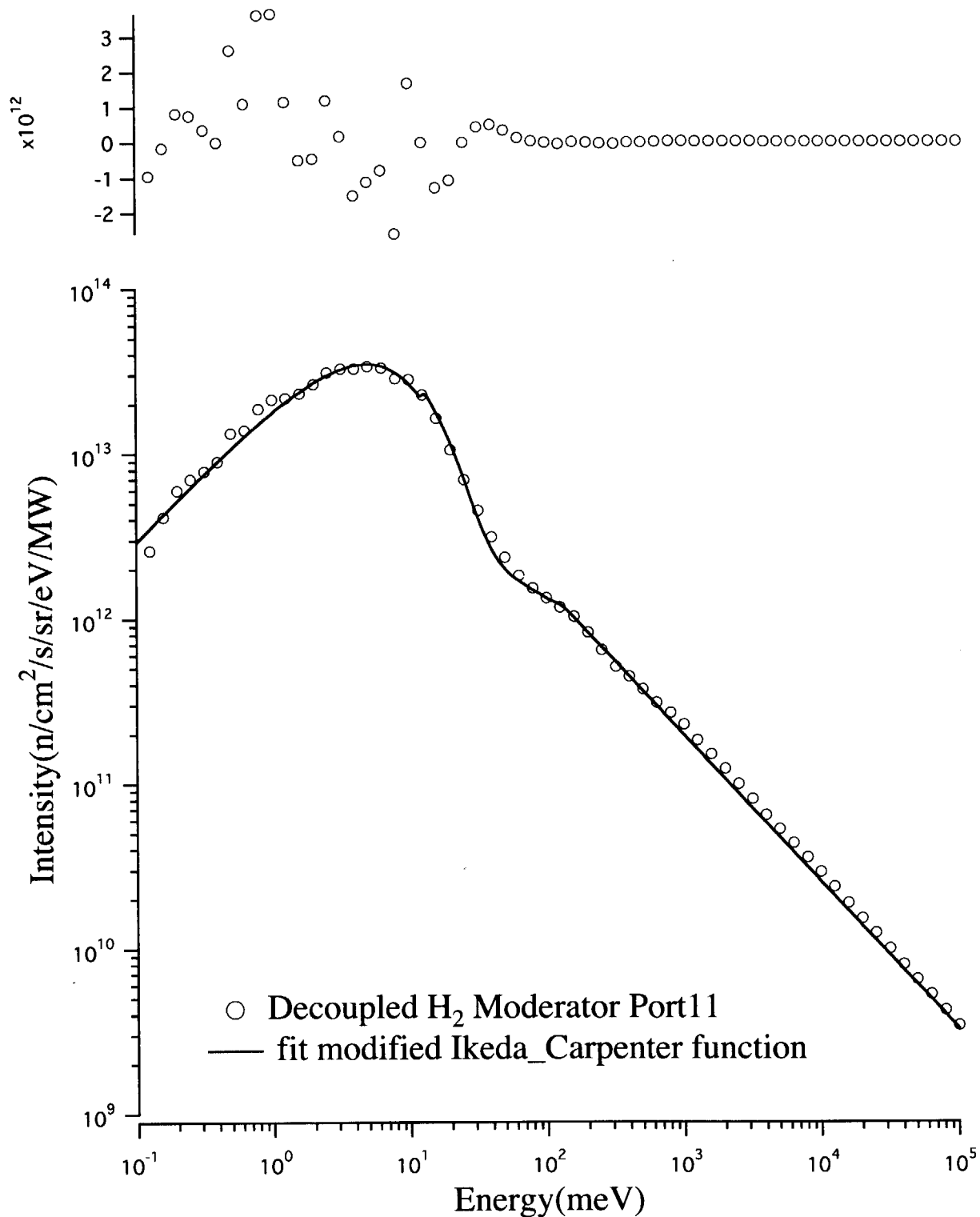


Fig. 12: Energy dependence of time-averaged intensity number of neutrons emerging from the viewed Decoupled H₂ moderator surface

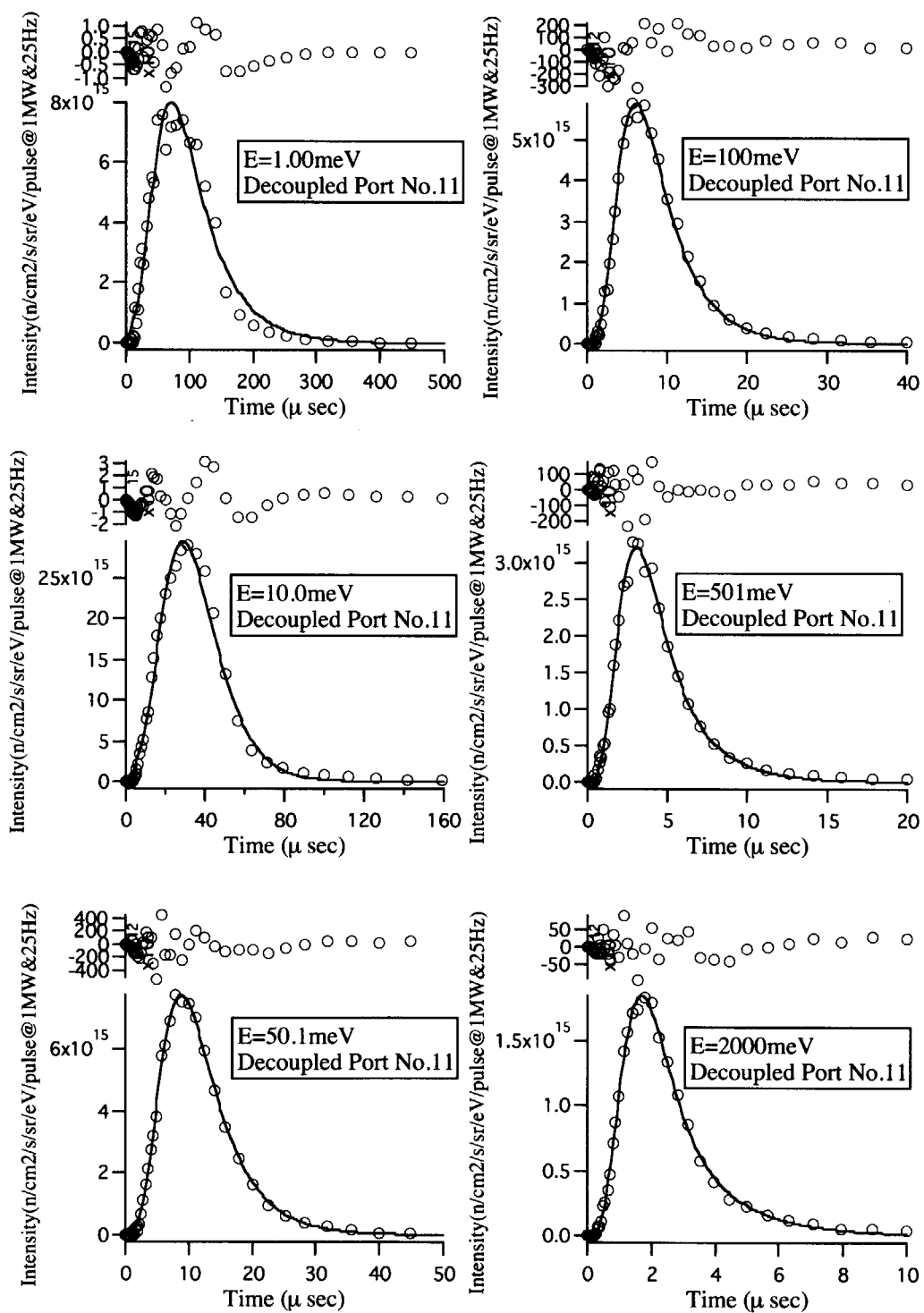


Fig. 13: Pulse shapes of 1.00, 10.0, 50.0, 100, 501 and 2000meV at port 11

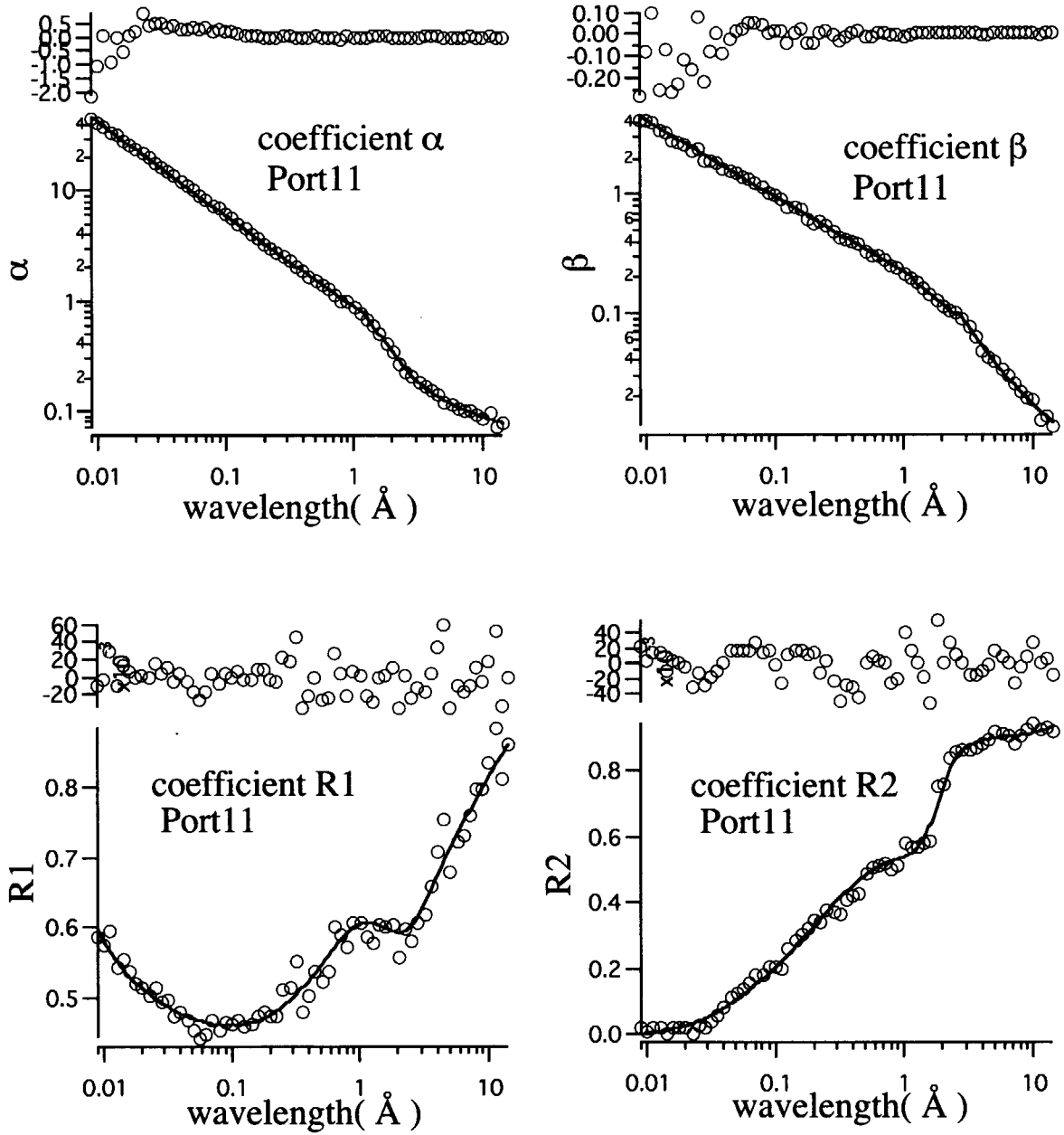


Fig. 14: Wavelength dependence of coefficients parameters α , β , $R1$ and $R2$ for port11 viewed decoupled unpoisoned moderator.

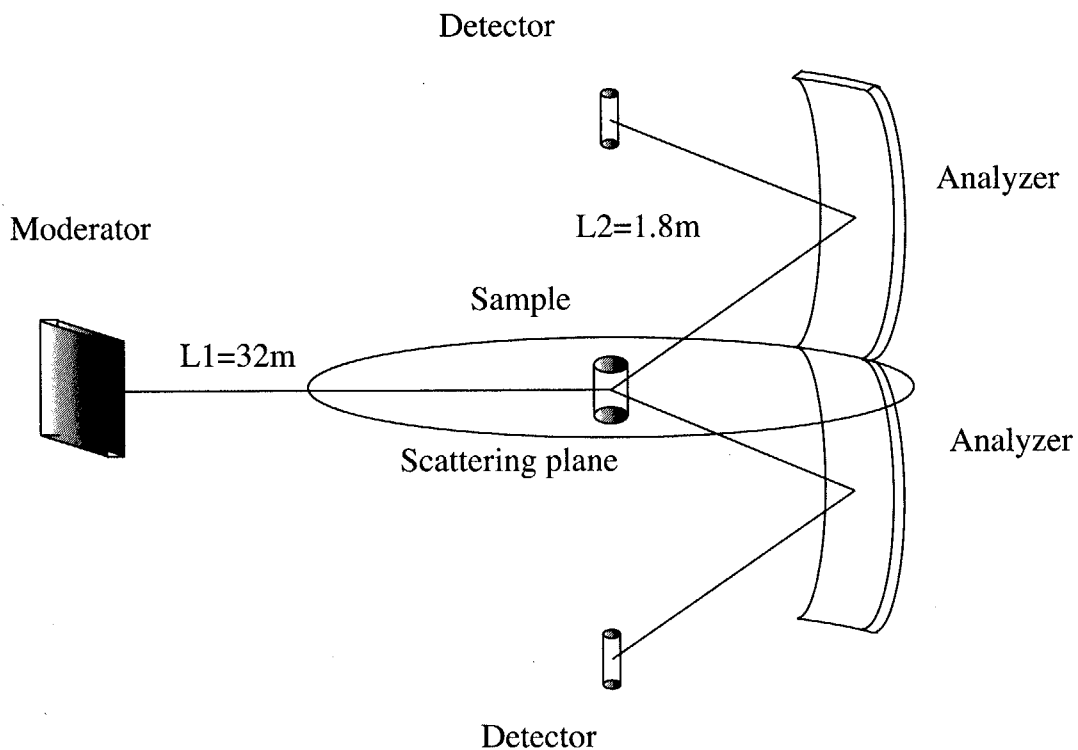


Fig. 15: A schematic sketch of the DYANA instrument

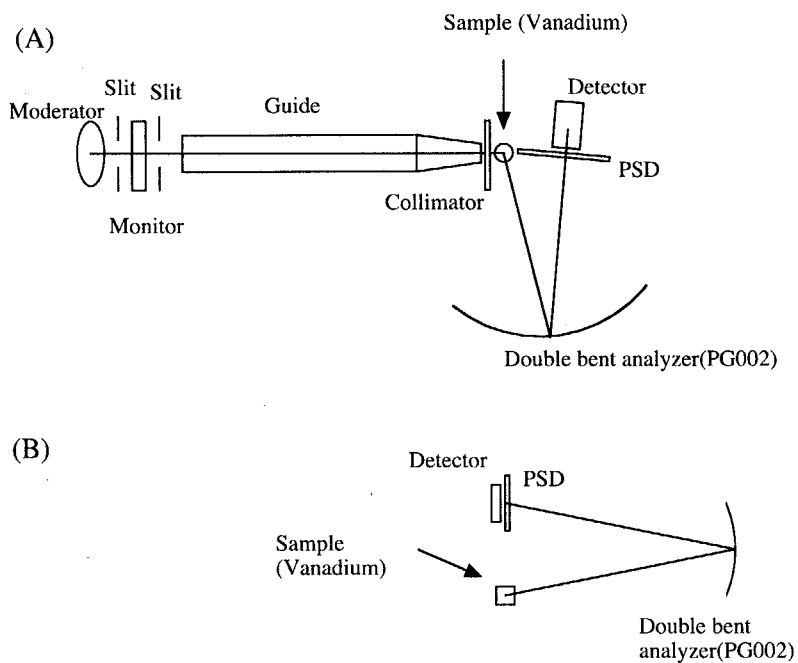


Fig. 16: A sketch of the simulation model of DYANA instrument

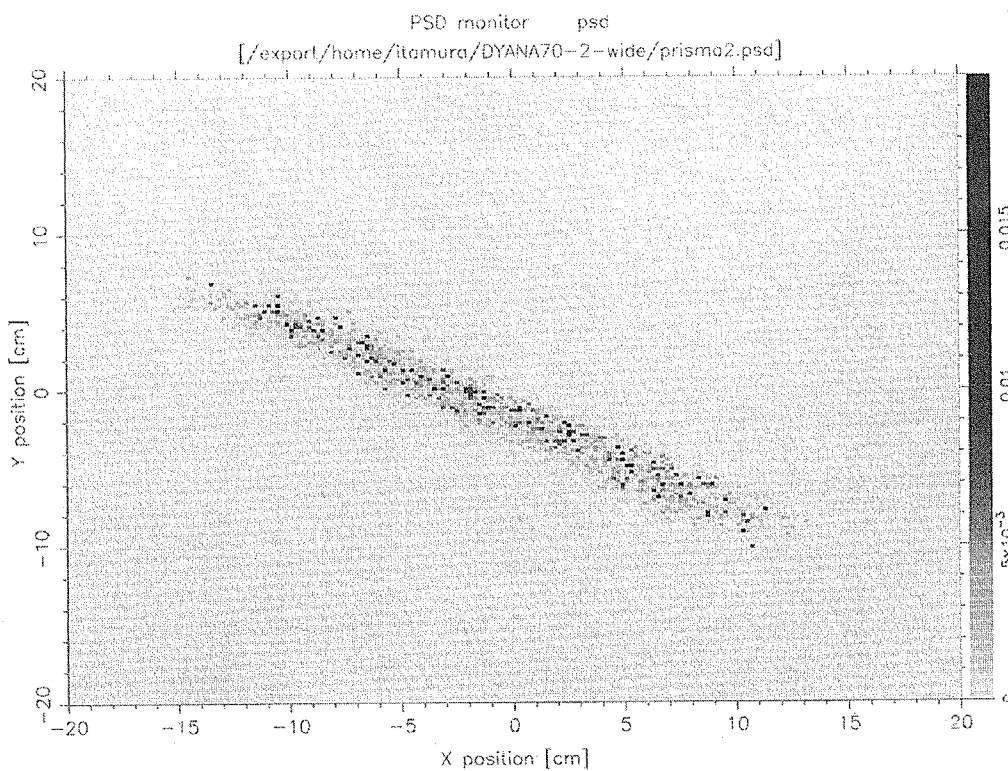


Fig. 17: Neutron distribution at ^3He counter after the diffraction analyzer. The analyzer is not converged vertical and horizontal directions.

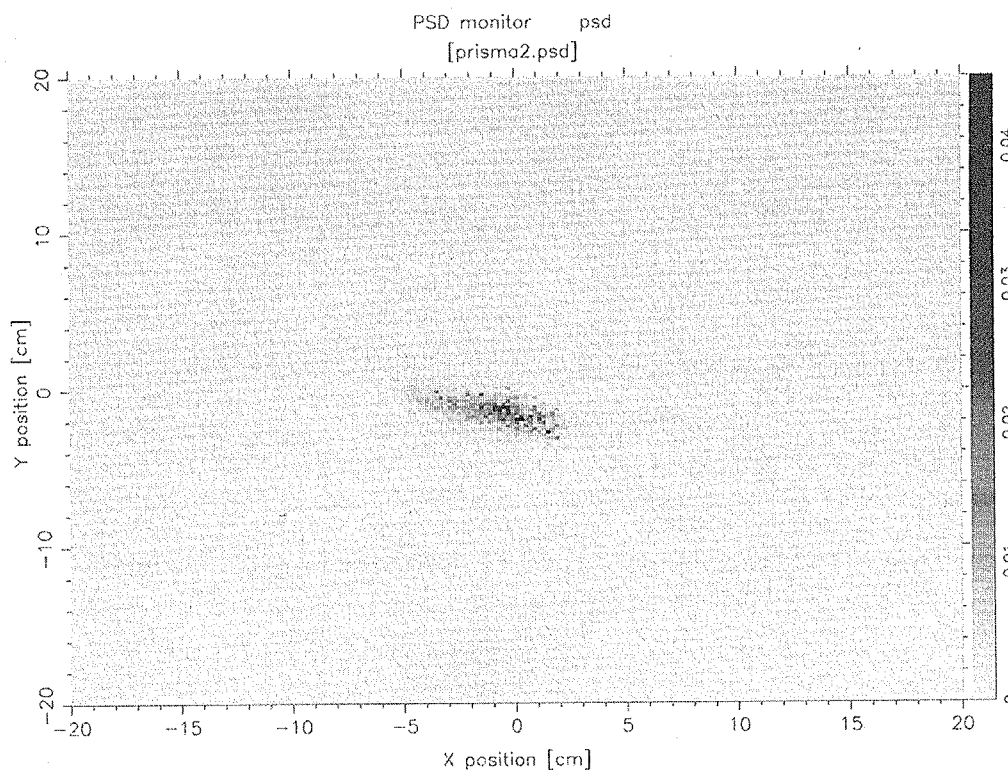


Fig. 18: Neutron distribution at ^3He counter after the diffraction analyzer. The analyzer is converged vertical and horizontal directions.

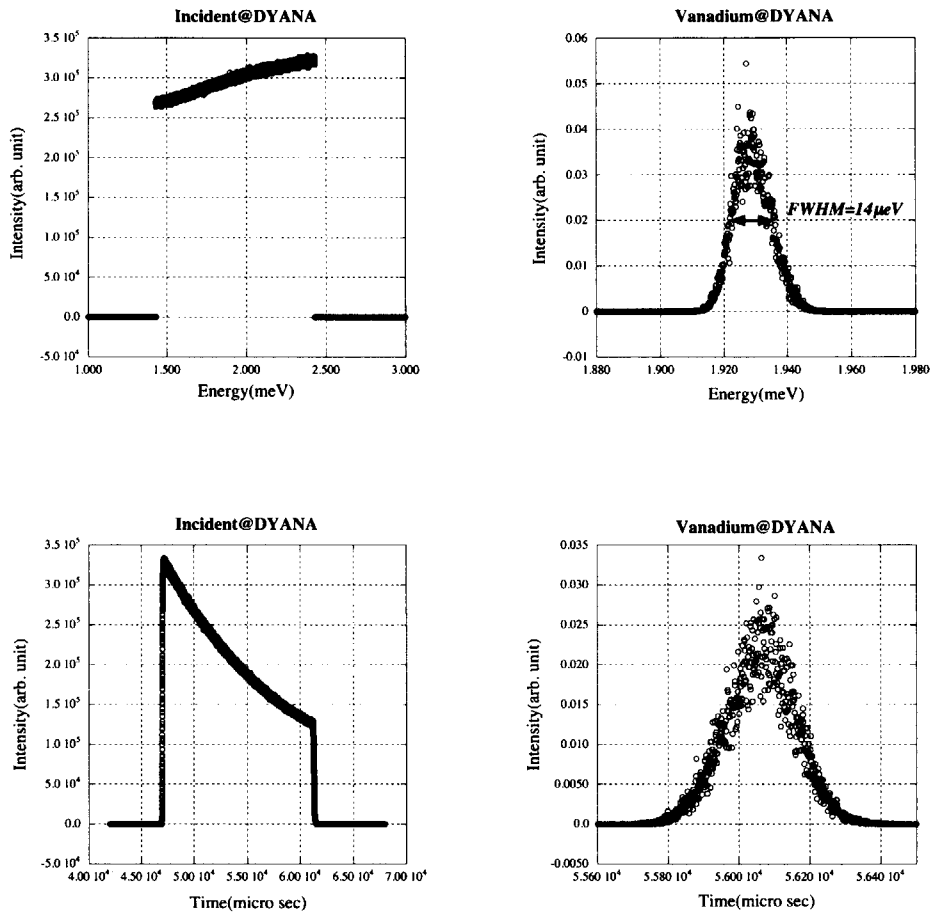


Fig. 19: Energy dependence of the intensity incident neutrons and at neutrons counted by ³He counter. Full width of half maximum of energy of DYANA instrument is 14μeV. The Shape of intensity dependence of energy is like a Gaussian. Time dependence of the intensity incident neutrons and at neutrons counted ³He counter. The Shape of intensity as a function of times at ³He counter shows the effect of convolution of analyzer resolution function.

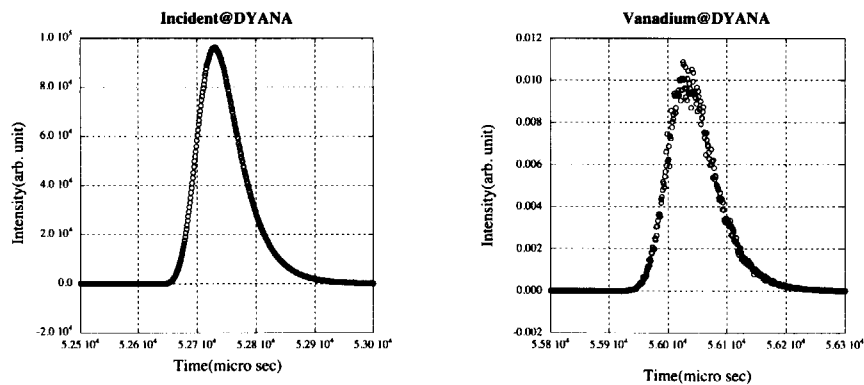


Fig. 20: Time dependence of the intensity incident neutrons and at neutrons counted ³He counter. The Shape of intensity as a function of times at ³He counter shows the effect of convolution of analyzer resolution function.

国際単位系 (SI) と換算表

表1 SI基本単位および補助単位

量	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質質量	モル	mol
光度	カンデラ	cd
平面角	ラジアン	rad
立体角	ステラジアン	sr

表3 固有の名称をもつSI組立単位

量	名称	記号	他のSI単位による表現
周波数	ヘルツ	Hz	s ⁻¹
力	ニュートン	N	m·kg/s ²
圧力, 応力	パスカル	Pa	N/m ²
エネルギー, 仕事, 熱量	ジュール	J	N·m
工率, 放射束	ワット	W	J/s
電気量, 電荷	クーロン	C	A·s
電位, 電圧, 起電力	ボルト	V	W/A
静電容量	ファラド	F	C/V
電気抵抗	オーム	Ω	V/A
コンダクタンス	ジーメンズ	S	A/V
磁束	ウェーバ	Wb	V·s
磁束密度	テスラ	T	Wb/m ²
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A
セルシウス温度	セルシウス度	°C	
光束度	ルーメン	lm	cd·sr
照射度	ルクス	lx	lm/m ²
放射能	ベクレル	Bq	s ⁻¹
吸収線量	グレイ	Gy	J/kg
線量当量	シーベルト	Sv	J/kg

表2 SIと併用される単位

名称	記号
分, 時, 日	min, h, d
度, 分, 秒	°, ', "
リットル	l, L
トン	t
電子ボルト	eV
原子質量単位	u

1 eV = 1.60218 × 10⁻¹⁹ J
1 u = 1.66054 × 10⁻²⁷ kg

表4 SIと共に暫定的に維持される単位

名称	記号
オングストローム	Å
バ	b
バール	bar
ガリ	Gal
キュリー	Ci
レントゲン	R
ラド	rad
レム	rem

1 Å = 0.1 nm = 10⁻¹⁰ m
1 b = 100 fm² = 10⁻²⁸ m²
1 bar = 0.1 MPa = 10⁵ Pa
1 Gal = 1 cm/s² = 10⁻² m/s²
1 Ci = 3.7 × 10¹⁰ Bq
1 R = 2.58 × 10⁻⁴ C/kg
1 rad = 1 cGy = 10⁻² Gy
1 rem = 1 cSv = 10⁻² Sv

表5 SI接頭語

倍数	接頭語	記号
10 ¹⁸	エクサ	E
10 ¹⁵	ペタ	P
10 ¹²	テラ	T
10 ⁹	ギガ	G
10 ⁶	メガ	M
10 ³	キロ	k
10 ²	ヘクト	h
10 ¹	デカ	da
10 ⁻¹	デシ	d
10 ⁻²	センチ	c
10 ⁻³	ミリ	m
10 ⁻⁶	マイクロ	μ
10 ⁻⁹	ナノ	n
10 ⁻¹²	ピコ	p
10 ⁻¹⁵	フェムト	f
10 ⁻¹⁸	アト	a

(注)

- 表1-5は「国際単位系」第5版、国際度量衡局 1985年刊行による。ただし、1 eV および 1 uの値はCODATAの1986年推奨値によった。
- 表4には海里、ノット、アール、ヘクトールも含まれているが日常の単位なのでここでは省略した。
- barは、JISでは流体の圧力を表わす場合に限り表2のカテゴリーに分類されている。
- EC閣僚理事会指令ではbar, barnおよび「血圧の単位」mmHgを表2のカテゴリーに入れている。

換算表

力	N (=10 ⁵ dyn)	kgf	lbf
	1	0.101972	0.224809
	9.80665	1	2.20462
	4.44822	0.453592	1

粘度 1 Pa·s (N·s/m²) = 10 P (ポアズ) (g/(cm·s))

動粘度 1 m²/s = 10⁴ St (ストークス) (cm²/s)

圧	MPa (=10 bar)	kgf/cm ²	atm	mmHg (Torr)	lbf/in ² (psi)
	1	10.1972	9.86923	7.50062 × 10 ³	145.038
力	0.0980665	1	0.967841	735.559	14.2233
	0.101325	1.03323	1	760	14.6959
	1.33322 × 10 ⁻⁴	1.35951 × 10 ⁻³	1.31579 × 10 ⁻³	1	1.93368 × 10 ⁻²
	6.89476 × 10 ⁻³	7.03070 × 10 ⁻²	6.80460 × 10 ⁻²	51.7149	1

エネルギー・仕事・熱量	J (=10 ⁷ erg)	kgf·m	kW·h	cal (計量法)	Btu	ft·lbf	eV
	1	0.101972	2.77778 × 10 ⁻⁷	0.238889	9.47813 × 10 ⁻⁴	0.737562	6.24150 × 10 ¹⁸
	9.80665	1	2.72407 × 10 ⁻⁶	2.34270	9.29487 × 10 ⁻³	7.23301	6.12082 × 10 ¹⁹
	3.6 × 10 ⁶	3.67098 × 10 ⁵	1	8.59999 × 10 ⁵	3412.13	2.65522 × 10 ⁶	2.24694 × 10 ²⁵
	4.18605	0.426858	1.16279 × 10 ⁻⁶	1	3.96759 × 10 ⁻³	3.08747	2.61272 × 10 ¹⁹
	1055.06	107.586	2.93072 × 10 ⁻⁴	252.042	1	778.172	6.58515 × 10 ²¹
	1.35582	0.138255	3.76616 × 10 ⁻⁷	0.323890	1.28506 × 10 ⁻³	1	8.46233 × 10 ¹⁸
	1.60218 × 10 ⁻¹⁹	1.63377 × 10 ⁻²⁰	4.45050 × 10 ⁻²⁸	3.82743 × 10 ⁻²⁰	1.51857 × 10 ⁻²²	1.18171 × 10 ⁻¹⁹	1

1 cal = 4.18605 J (計量法)
= 4.184 J (熱化学)
= 4.1855 J (15 °C)
= 4.1868 J (国際蒸気表)
仕事率 1 PS (仏馬力)
= 75 kgf·m/s
= 735.499 W

放射能	Bq	Ci
	1	2.70270 × 10 ⁻¹¹
	3.7 × 10 ¹⁰	1

吸収線量	Gy	rad
	1	100
	0.01	1

照射線量	C/kg	R
	1	3876
	2.58 × 10 ⁻⁴	1

線量当量	Sv	rem
	1	100
	0.01	1

大強度陽子加速器計画における中性子分光器開発のためのシミュレーション！
—モデレーター・コンポーネント作成—

R100

古紙配合率100%
白色度70%再生紙を使用しています