

トラック長測定に関わるlength bias: シミュレーションによる評価手法 (1)  
山田隆二\*

Length bias in fission-track length distributions: evaluation  
by Monte Carlo simulation (1)  
Ryuji Yamada\*

\* 防災科学技術研究所, National Research Institute for Earth Science and Disaster Prevention

はじめに

フィッション・トラック (FT) 法では, そのアニーリング特性を利用して, FT年代とトラック長分布から温度履歴パターンを復元する手法が一般化している. さらには, アニーリング kineticsに基づいて, 最高被熱温度や時期など, 温度履歴を定量的に逆解析するためのモデリングツールも整ってきている.

2次的熱影響を受けた試料においては, ホストトラック, トラック長測定対象の双方の長さが短くなるため, エッチングや測定がされにくいというlength biasが知られている (Laslett et al., 1982). 解析対象となる未知試料だけでなく, 温度履歴の定量解析を行う際に用いるannealing kineticsを求めるといった室内実験試料の測定データもlength biasの影響を受けている. 従って, もしlength biasの影響が無視できないものであるとすると, 未知試料, 室内実験試料ともlength biasの影響を取り除き真の分布に戻して比較するか, あるいは, 未知試料へのlength biasの影響を室内実験試料への影響と同等にするか, 等の対策が必要になる. このような複雑な作業の要否はlength biasの影響の大きさと, その補正の容易さによって決まる.

Laslett et al. (1982) は, 理論的な評価に基づいてTINTやTINCLEといったconfined trackが発見される確率はその測定値の逆数の2乗に比例するという次の補正式を提案した.

$$\hat{F}'(r_j) \equiv n_j r_j^{-1} / \sum n_j r_j^{-1} \quad (\text{式1})$$

(ただし, F'は頻度, nは観測数, rはヒストグラムの各階級の中央値.)

しかしながら, 実際の測定においては確率論や統計学的な扱いができるほど滑らかな分布を得ることはまれである. 特に非短縮トラックよりも有意に短縮した数 $\mu\text{m}$ の長さを持つトラックが

1-2本だけ見つかった場合, 上記の補正を施すと短いトラックの測定データが非常に強調された分布となる. このような場合においても, length biasの理論的な補正が実際のトラック長測定・分析において有効であるかを確認する必要があるため, 様々なトラック長分布を人工的に与えた試料を用いた室内実験によって, length biasの評価を実施しなければならない. しかしながら, 非短縮トラックと短縮トラックの長さ・量比および結晶中のトラック密度やクラックの有無など, 様々な組み合わせに対して, 統計的にある程度有意な結果が得られるような実験を行うのは, 必要な標準的試料の量や労力の観点から現実的ではない.

そこで, 数値実験によるlength bias評価を検討した. 実サンプルを用いた数々の室内実験の積み重ねにより, FTの生成からアニーリングの様式, エッチング特性などの実験要素に関して既に十分な評価が得られている. そのため, 仮想的な鉱物粒子の中に任意の密度や長さ分布を持つFTを生成させ, その粒子をエッチングし, 観察可能になった表面トラックと, そこから2次的にエッチングされうるconfined trackについて長さ分布を求め, 初期に与えた長さ分布と比較を行うことによりlength biasの評価が可能となる. 今回は, この評価を実現するシミュレーションシステムの開発と予察的な実験結果について報告する.

数値シミュレータの作製

FTの生成から観察までを模擬する数値シミュレータは, 基本的にランダムMonte-Carlo法を用いる. 計算の手順は以下の通り.

(1) 1つの仮想結晶内に, 任意のトラック長/密度分布をもつ初期分布を与える. 任意の大きさの結晶内に, ウラン原子をランダムな位置に配置し, 各原子に対して初期分布に従ったトラックを生成させる. トラックの方位はランダムに与える. TINCLEの評価をする場合には,

仮想粒子内にクラックを配置する。観察する結晶の $4\pi$ 面を用いるためには、トラック生成後に結晶の観察面を半飛程長以上縮退させる。

(2) 結晶内部に生成された各トラックについて、観察面あるいは配置されたクラックと交差したかを判定し、エッチング可否の特性を与える。エッチング可のものについては、表面トラックあるいはTINCLEと認定し、任意の時刻における幅をエッチング速度とエッチング異方性から算出し与える。

(3) エッチング可能ではないトラックについて、各エッチング可能トラックとの距離を計算し、距離がエッチング可能トラックの太さの半分以下であるものについて、ホストトラックと交差するconfined trackと認定する。複数の表面トラックと交差する場合、そのホストトラック数を記録する。

(4) 段階エッチングを行う場合には、(2, 3)の工程を繰り返す。

(5) エッチングとconfined track認定が終わったら、トラックの観察条件(観察面からの傾斜角度、結晶学的方位など)を確認し、測定可能なconfined trackの長さ分布を求める。この分布を初期分布と比較する。

実際に開発したシミュレータの操作画面を図1に示す。このシミュレータには2つの機能がある。1つは、1個の仮想結晶内のトラック分布状況を確認できる。結晶中のトラック表示を3次元的に回転させたり、拡大したりすることによってトラックの立体的な分布状況や複数のトラックの交差状況を確認できる(図2)。もう1つは、粒径やトラック数など、同一実験条件を与えた複数の結晶中のトラック分布状況の統計処理を行う。この機能は、室内実験において1枚のマウントに複数の結晶を埋め込んで実験を行うことを模擬している。これらの機能によって、様々な実験条件下での模擬実験が計算機上で可能となる。

### 予察実験

予察的に、数値実験によって観察されるトラック長分布とトラック密度の関係を調べた。縦横 $300\ \mu\text{m}$ 、厚さが $40\ \mu\text{m}$ でcleavageが無いアパタイト結晶を仮定し、その中に $4\ \mu\text{m}$ と $20\ \mu\text{m}$ のバイモーダルピークを持ち、トラック数比は1:1のトラック長分布を与える。各ピークの形状は、補正を単純にするため正規分布ではない。各結晶中

のトラック数と結晶数を(100本, 10000個)、(1000本, 1000個)、(10000本, 100個)と変え、いずれものべ100万本のトラックを発生させた3つのパターンで実験を行い、観察される表面トラックとTINTの長さ分布を比較した。

実験の結果を図3に示す。各パターンにおける表面トラック密度はそれぞれ約 $1.5\times 10^4$ 、約 $1.5\times 10^5$ 、約 $1.5\times 10^6$ と各粒子に与えたトラック数に比例する。表面トラックとTINTのトラック長分布を比べると、どちらもlength biasの影響を受けて $4\ \mu\text{m}$ のピークの方が小さくなっているが、その影響は表面トラックの方が大きい。しかしながら、トラック密度によるトラック長分布の違いは顕著ではない。ここで見られたlength biasを(式1)を用いて補正した(図4)。その結果、表面トラックではほぼ初期のトラック長分布に戻るが、TINTでは短い方のピークが強調され、補正が利き過ぎてしまうことが分かる。また、TINTのうち、実際に温度履歴解析に用いられるhorizontal tracks(観察面からの傾斜角が $15^\circ$ 以下)に限定すると、length biasの影響は大きくなり、補正の効果はやや弱くなる。

Laslett et al. (1982)は、表面トラック、TINT、TINCLEとも同じ式で補正できるとしている。しかしながら、今回の予察的な数値実験においてはトラックの形状や観察条件によって補正の効果が異なることが示唆された。現時点では、このシミュレータにおけるトラックの交差条件等に対する検証が不十分である可能性も残っており、直ちに結論を出すのは拙速であるものの、length biasの評価が従来提案されたものよりも単純ではない可能性がある。今後は、先述のシミュレータの検証を十分に行うと共に、様々なトラック長分布パターンにおけるlength biasの影響に関する実験データを集める必要がある。特に、現実の未知試料解析において出会うことが多い、トラック密度が低かったり、トラック長測定数が少なかったりする場合のbias補正方法に関して何かしらの知見を得ることが、温度履歴定量解析の信頼度を向上させるためには重要となるであろう。

### 文献

Laslett, G.M., Kendall, W.S., Gleadow, A.J.W., and Duddy, I.R. (1982) Bias in measurement of fission-track length distributions. Nuclear Tracks, 6, 79-85.

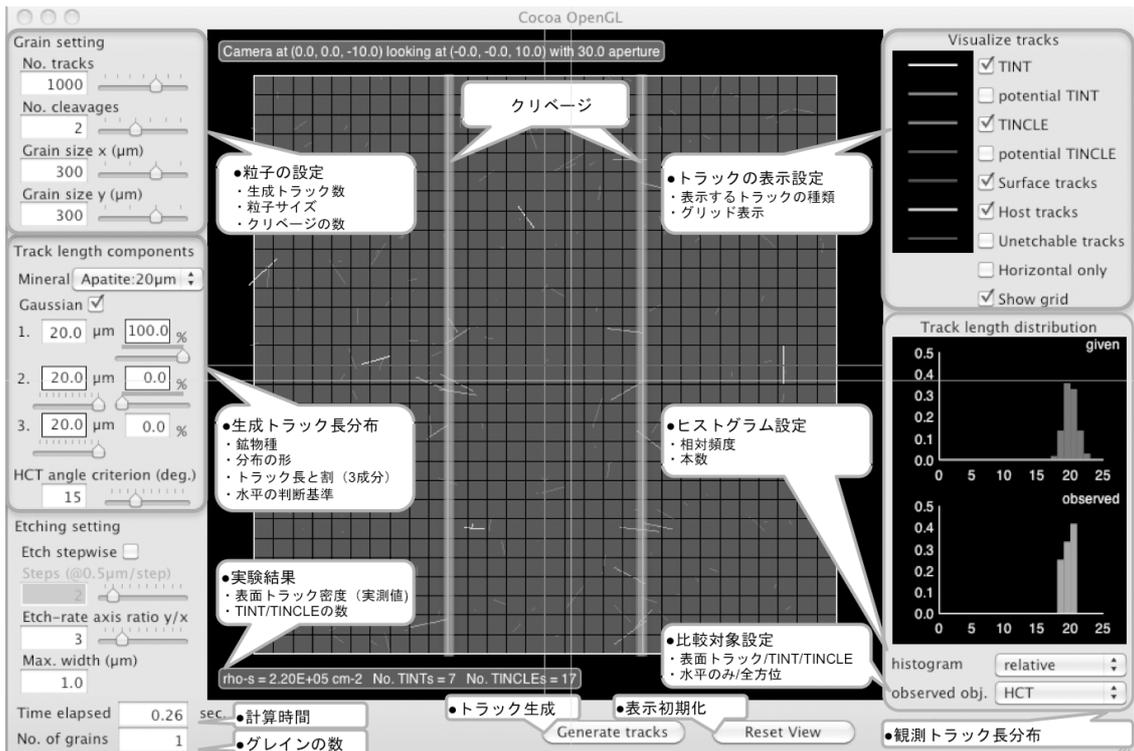


図1. 今回開発したトラック長分布測定シミュレータの操作画面。画面左側に計算条件を与え、画面中央に結晶中に観察されるトラックを三次元的に表示し、画面右側に測定結果の表示方法とヒストグラムを表示する。各結晶に関して与える条件は、結晶の大きさ、クレープジの数と結晶1粒子あたりのトラックの数。トラック長分布に関して与える条件は、最大3成分のピーク長と量比、および水平トラックと認定する場合の観察面からの傾斜角の範囲。同一の実験条件で実験を行う結晶の数を指定することもできる。結晶中に観察されるトラックは、表面トラック、TINCLE、TINTおよびそのホストトラック等を選択する。トラック長分布は、トラックの種類と水平かどうかを指定し、その分布と初期に与えた分布を並べて、相対頻度もしくは測定本数で表示する。複数の粒子を用いた場合にはその総数に対する頻度が表示される。これらの実験・測定結果は別途テキストファイルで書き出される。

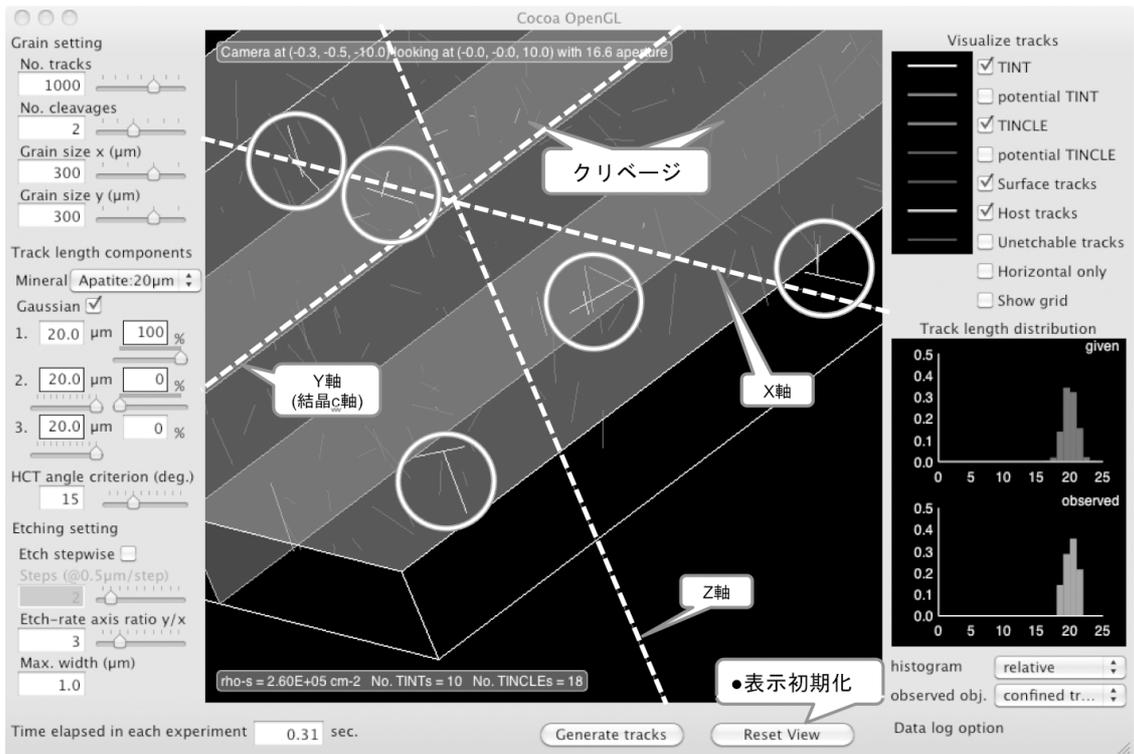


図2. シミュレータにおける結晶中に分布するトラックの立体表示。結晶の3軸によって観察する方位（視点）が表現される。視野を拡大・縮小することによって、各トラックの交差状況から結晶全体の分布状況までを確認できる。

=====  
 No. tracks per grain = 100  
 No. grains = 10000  
 ===== track density =====  
 mean rho-s = 1.49E+04 ± 3.63E+03 cm-2

=====  
 No. tracks per grain = 1000  
 No. grains = 1000  
 ===== track density =====  
 mean rho-s = 1.49E+05 ± 1.11E+04 cm-2

=====  
 No. tracks per grain = 10000  
 No. grains = 100  
 ===== track density =====  
 mean rho-s = 1.49E+06 ± 3.52E+04 cm-2

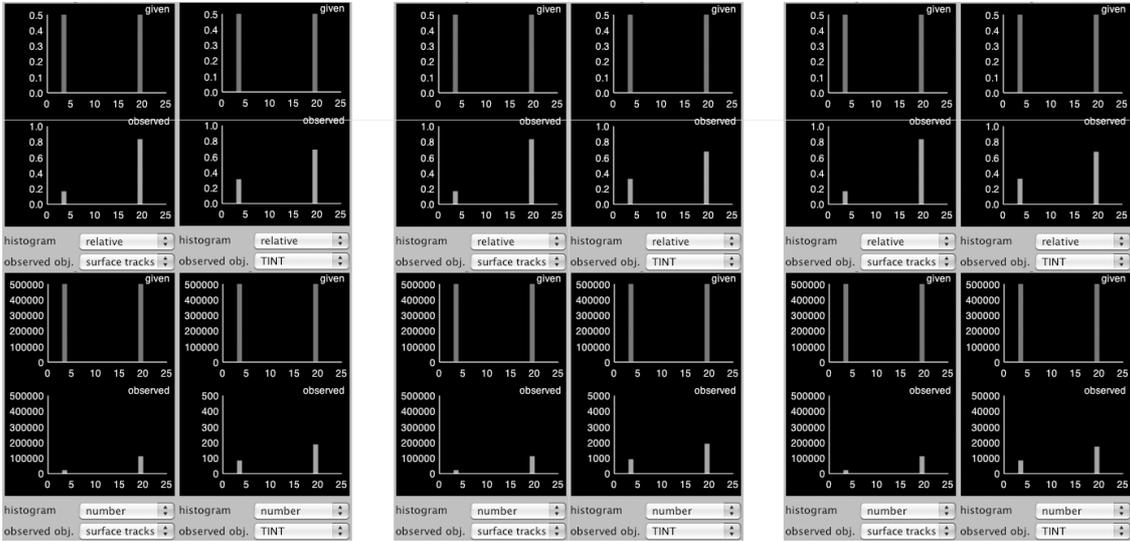


図3. 観察されるトラック長分布とトラック密度に関する予察的な数値実験の結果. 上段に1結晶あたりのトラック数と結晶数, および観察された表面トラックの平均密度を示した. どれも延べ100万本のトラックを発生させている. 中段は相対頻度, 下段は観察されたトラック数によるヒストグラム. 各実験条件に対して, 左側は表面トラックの, 右側はTINTの, 与えた分布 (given) と観察された分布 (observed) を示した. ここでの表示対象は水平トラックに限定していない.

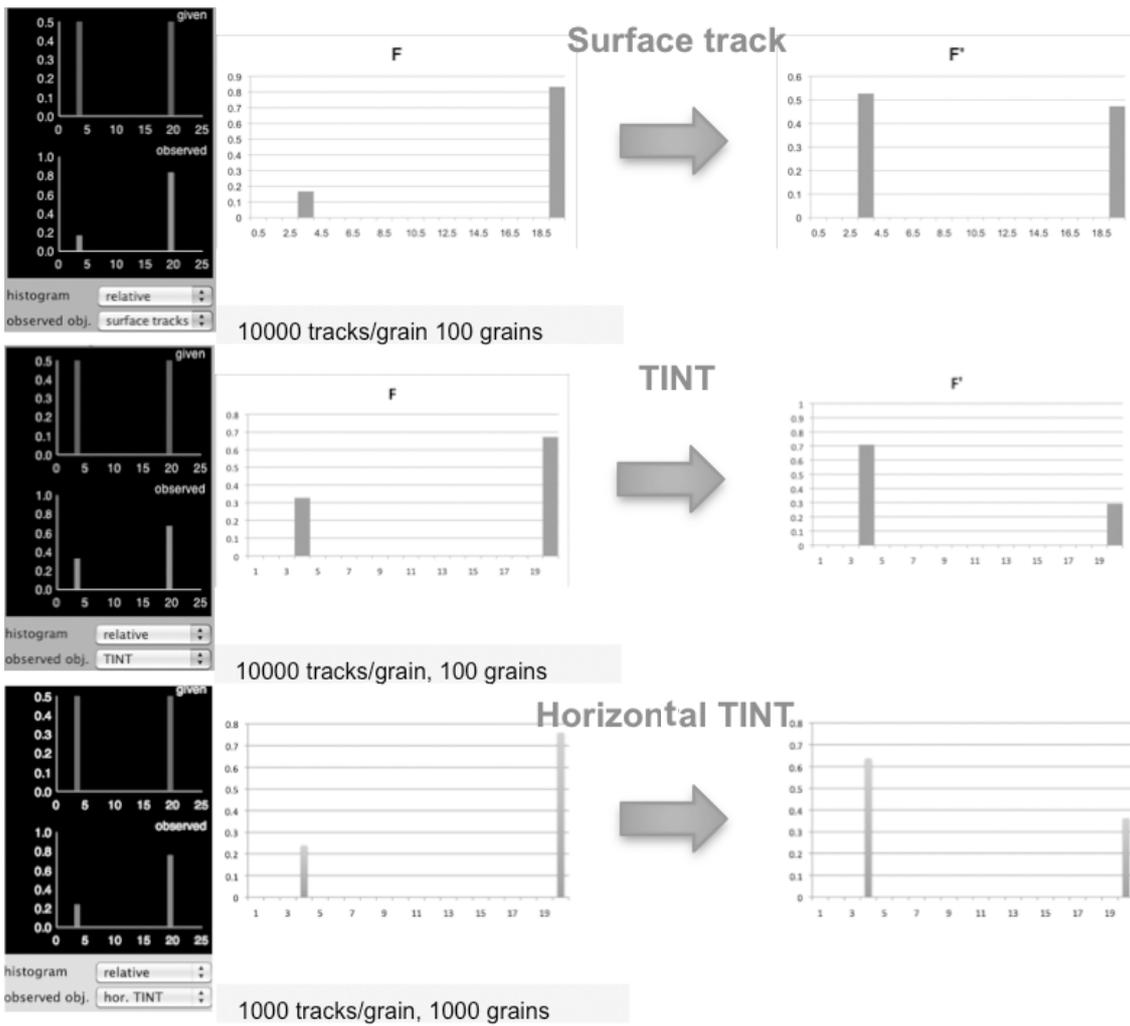


図4. 予察的な数値実験の結果に対するlength bias補正の効果。上段および中段は、1結晶あたり10000本、100粒子の実験における表面トラックおよびTINTの観察結果で、水平トラックに限定していない。下段は1結晶あたり1000本、1000粒子の実験におけるTINTの観察結果で、水平トラックに限定したもの。TINTのトラック長分布はトラック密度（ここでは1粒子あたりのトラック数）にはほとんど影響しないので代表的なものを示した。他の密度でも傾向に変化は見られない（図3参照）。