

Memorandum

Title: TOPAN における λ , $\lambda/2$, $\lambda/3$ 波長中性子の割合について

Date: 2005 年 8 月 9 日

From: 松村武

To: TOPAN USER

実験内容: 入射中性子エネルギー $E_i=13.5, 15.0, 17.5, 22.5, 27.5, 32.5$ meV において, Si の粉末回折パターンをとり, RIETAN で解析し, $\lambda, \lambda/2, \lambda/3$ の割合を求めた. 方法は松浦さん (物性研) がオークリッジ HB-3 で同様の測定を行ったときのノートに習った.

実験条件: 2軸モード, B-sapphire30-30. 上流ナローア: 上 15mm, 下 15 mm, 左 8 mm, 右 8 mm. 下流ナローア: 上 15mm, 下 15 mm, 左 12 mm, 右 12 mm.

1 実験

Si 粉末 小野寺さんの部屋にあった Si 単結晶の破片を乳鉢で碎いて粉末にした. 粉末試料は直径 7mm の Vanadium 筒に入れ, Al のふたをアラルダイトで接着した. 粉末の密度は 1.563 g/cm^3 . Vanadium 筒入り Si 粉末は炉室中二階, TOPAN 用試料棚左上の TOPAN-IRT 用ボックスに置いておいた.

測定 通常のアルミナスキャンにならう. まず, 2軸モード, A2 のみ動かすようにする.

```
1> st13=0
1> st12=80
1> dda3;dda1;ddc2
1> dm
driven motors:
  A2
```

次に, 2θ のスキャン範囲がだいたい $10^\circ \sim 90^\circ$ になるようなスキャンを組み, 実行する. 例えば $E_i=13.5$ meV, $k_i = k_f=2.5525 \text{ \AA}^{-1}$ のときは, as=1 として,

NS	HS	KS	ES	DE	NP	MN	DH	DK
31	0.5	0	0	0	621	-4	0.005	0

のようにすると, 2θ が 11.240 から 89.690 まで約 0.1 度ステップでスキャンされる. 2θ が大きくなるにつれてステップ幅が大きくなり, 最終的に 80° 付近では約 0.15 度になる. 分解能は 2θ が大きくなるにつれて悪くなるので, これくらいでちょうどよい. また, 測定は 1 点 4 秒で行った. ナローアは特に試料サイズに合わせたわけではなく, 適当.

解析 解析は RIETAN2000 で行った。ここで、 $\lambda/2$, $\lambda/3$ によるピークは、それぞれ2倍および3倍の格子定数をもつ Si 相として扱う。 a , $2a$, $3a$ の格子定数をもつ3つの Si 相の scale factor, S_1 , S_2 , S_3 が RIETAN で求められる。回折強度は λ^3 に比例するので¹, λ/n の割合 F_n は

$$F_n = \frac{S_n/(\lambda/n)^3}{S_1/\lambda^3 + S_2/(\lambda/2)^3 + S_3/(\lambda/3)^3}$$

で求められる。また、RIETAN の出力には3相の mass fraction も含まれており、これをそのまま λ , $\lambda/2$, $\lambda/3$ の割合とすることもできる。結果は全く同じである。

2 結果

図1, 2 と次の表に粉末回折パターンと Rietveld 解析の結果を示す。

E_i (meV)	R_{wp}	R_e	S	S_1	S_2	S_3	F_1	F_2	F_3	$1/F_1$
13.5	8.21	5.11	1.61	1.88e-03	3.90e-04	1.09e-05	0.356	0.589	0.0557	2.81
15.0	10.71	7.53	1.42	1.38e-03	2.12e-04	4.51e-06	0.431	0.531	0.0381	2.32
17.5	8.92	5.47	1.63	1.91e-03	2.04e-04	3.19e-06	0.526	0.450	0.0237	1.90
22.5	13.99	6.87	2.04	1.39e-03	7.33e-05	0	0.704	0.296	0	1.42
27.5	10.13	6.81	1.49	1.26e-03	3.28e-05	0	0.828	0.172	0	1.21
32.5	11.58	6.67	1.74	1.12e-03	1.05e-05	0	0.930	0.070	0	1.08

図3が λ , $\lambda/2$, $\lambda/3$ の割合の入射エネルギー依存性である。より正確に言うと、ディテクターで検出される中性子に含まれる λ , $\lambda/2$, $\lambda/3$ の波長の中性子の割合である。入射中性子モニターもディテクターも、同じように $1/v$ に比例した検出効率で中性子をカウントしているとする、図3はモニターカウントにおける λ , $\lambda/2$, $\lambda/3$ の中性子の割合であると考えてもよい。従って、 E_f -fixed, PG-after で非弾性散乱の測定をするとき、 λ に対するモニター値で規格化させるような補正をかけるには、モニター値を F_1 倍、すなわちディテクター値を $1/F_1$ 倍すればよいことになる。この補正值をプロットしたのが図4である。Brookhaven で用いられていたという、いわゆる Cowley 補正曲線も実線で示した²。 $E_i \leq 15$ meV でややずれているが、おおむね Cowley 補正曲線と一致している。 $E_i \leq 15$ meV でずれているのは、Cowley 補正曲線のほうが $\lambda/3$ の効果を考慮していないためである。

¹"Introduction to the theory of thermal neutron scattering", G. L. Squires, p. 43.

²8.285 と 23 meV という値は、結晶解析ハンドブック, p. 489. 廣田さん執筆の章からとった。この曲線は 23 meV=267 K の Maxwell 分布の式から計算される λ と $\lambda/2$ の割合から導いたものにほとんど等しい。

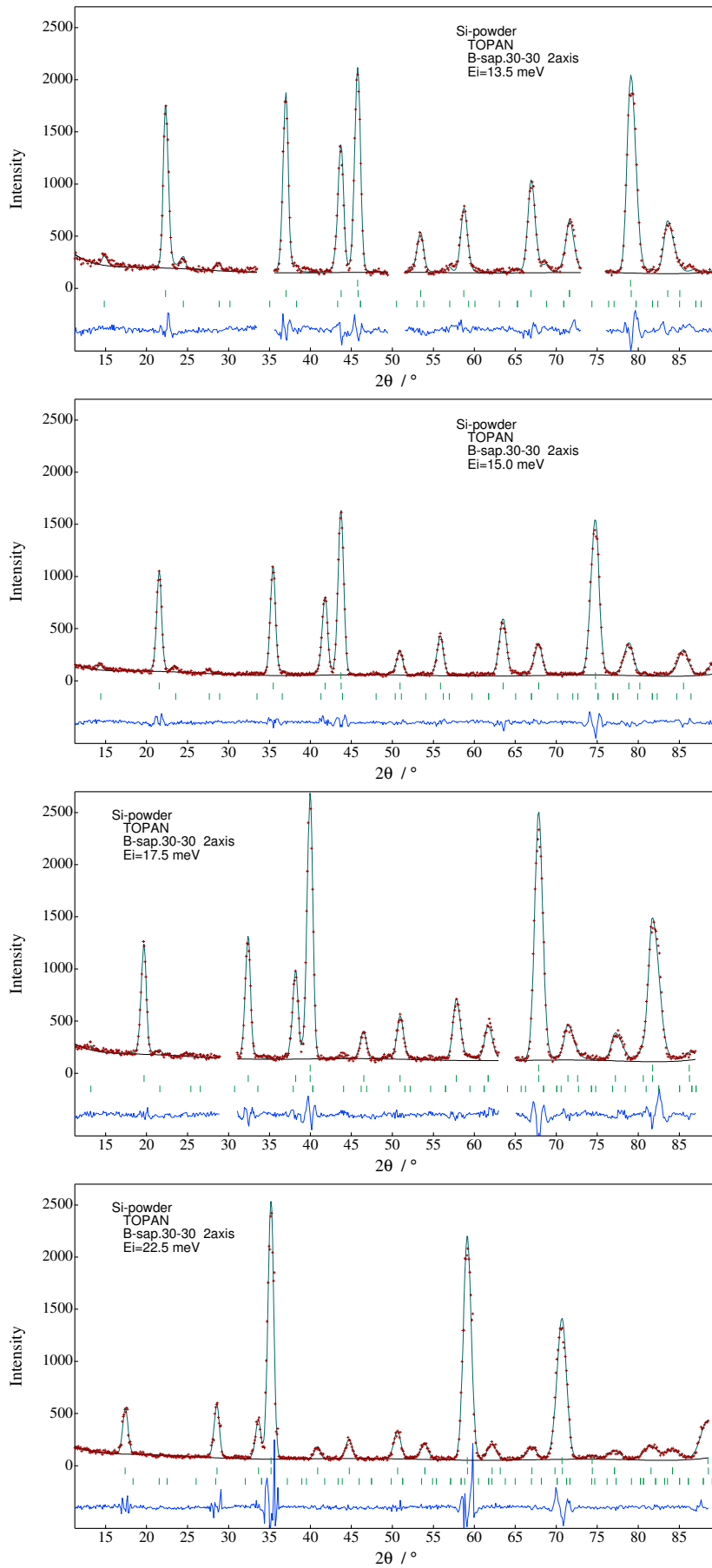


図 1: $E_i=13.5, 15.0, 17.5, 22.5$ に対する Si の粉末回折パターンと Rietveld 解析の結果.

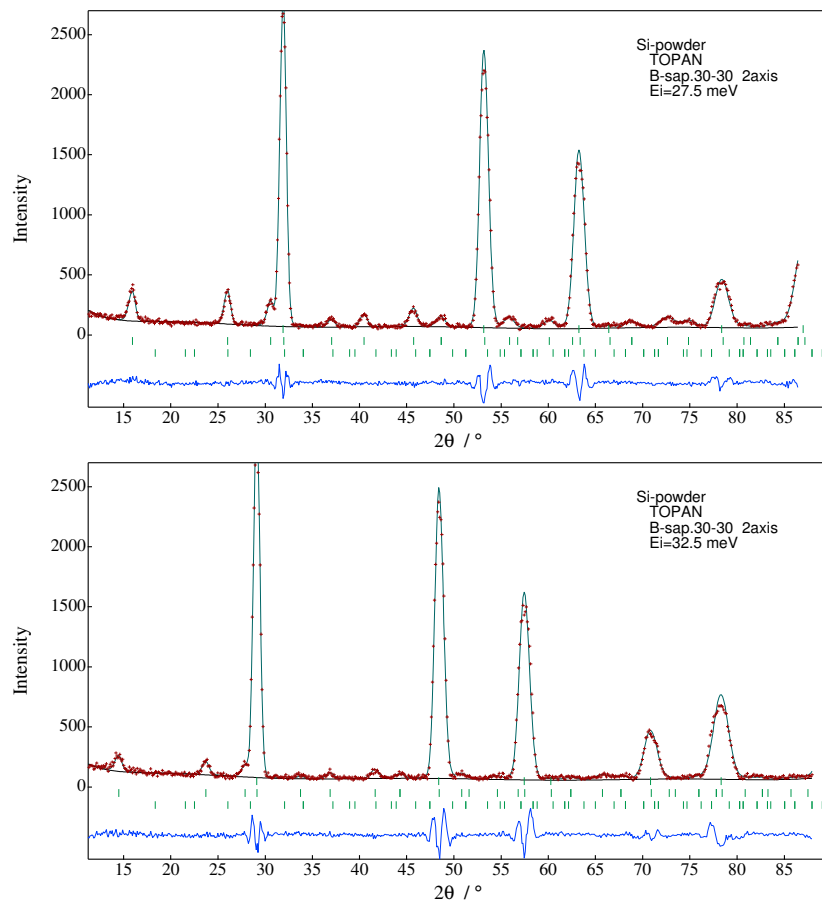


図 2: $E_i=27.5, 32.5$ meV に対する Si の粉末回折パターンと Rietveld 解析の結果.

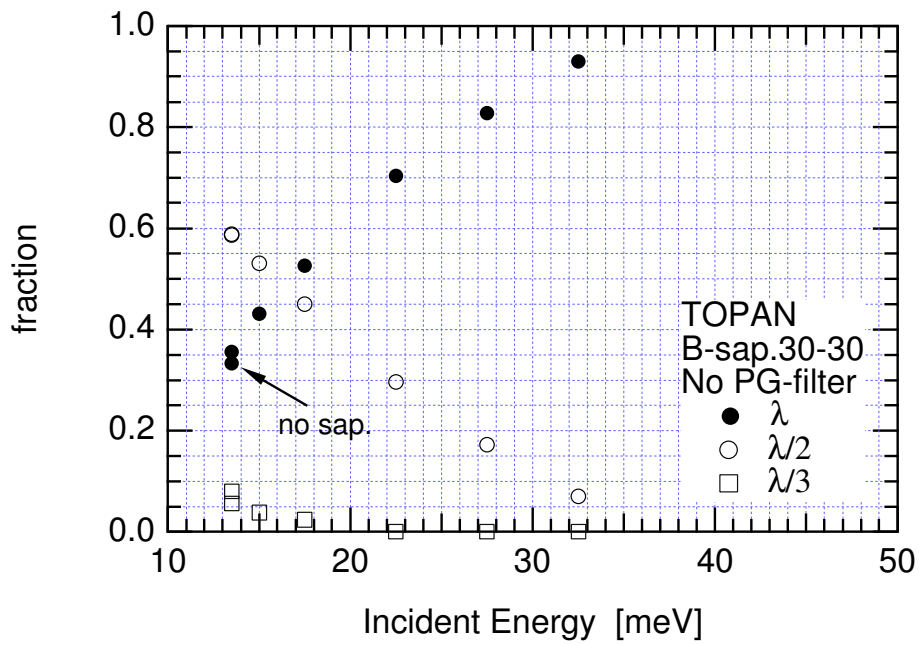


図 3: B-sap.30-30 のコリメーションのときに入射中性子に含まれる λ , $\lambda/2$, $\lambda/3$ の割合. $E_i=13.5$ meV については sapphire-filter なしのデータも加えた.

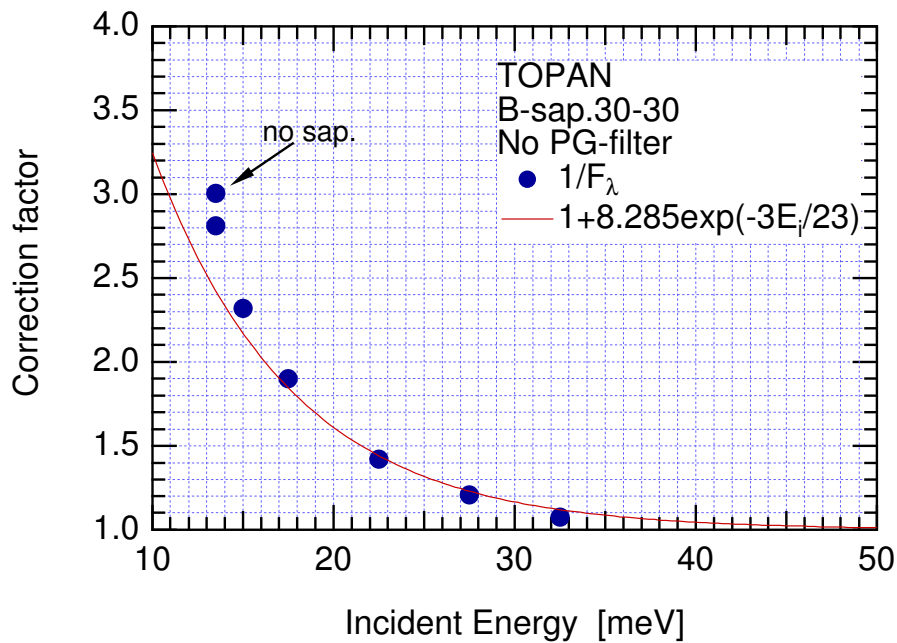


図 4: λ の割合の逆数といわゆる Cowley 補正曲線. $E_i=13.5$ meV については sapphire-filter なしのデータも加えた.