

 MLF Experimental Report	提出日 Date of Report
課題番号 Project No. 2012PM0007 実験課題名 Title of experiment TOF 法磁気構造解析の適用と FullProf・GSAS の普及 実験責任者名 Name of principal investigator 桑原慶太郎 所属 Affiliation 茨城大学	装置責任者 Name of responsible person 石垣徹 装置名 Name of Instrument/(BL No.) iMATERIA (BL20) 実施日 Date of Experiment 2012/6/19、2013/2/14、2013/4/26

試料、実験方法、利用の結果得られた主なデータ、考察、結論等を、記述して下さい。(適宜、図表添付のこと)
 Please report your samples, experimental method and results, discussion and conclusions. Please add figures and tables for better explanation.

1. 試料 Name of sample(s) and chemical formula, or compositions including physical form.
<p>MnF₂</p>

2. 実験方法及び結果 (実験がうまくいかなかった場合、その理由を記述して下さい。) Experimental method and results. If you failed to conduct experiment as planned, please describe reasons.
<p>典型的な磁性体の粉末中性子回折実験から得られたデータについて磁気構造解析を行い、その解析結果の検討を行った。測定試料として、正方晶 (空間群 P4₂/mnm) の結晶構造を持つネール温度 T_N = 67 K の反強磁性体である MnF₂ を選んだ。中性子回折実験は通常の無冷媒 ⁴He 冷凍機を用いて 3 回測定を行った。前 2 回の測定では測定温度に比べて試料温度が高い結果になった。その後、冷凍機のラディエーションシールドを改良し、3 回目の測定では試料が十分冷却された状態で測定を行った。以下では 3 回目の測定結果及び解析について述べる。</p> <p>実験方法： バナジウムセルを使用 試料体積： 内径 5.8mm φ × 高さ 50mm 試料重量 3.9198g 測定温度範囲 3.7 K ≤ T ≤ 100 K 測定時間 1 測定温度につき 20 分</p>

2. 実験方法及び結果(つづき) Experimental method and results (continued)

結果：

20 分の測定時間で十分な統計精度のデータを得ることができた。得られたデータについて GSAS (General Structure Analysis System) を用いた磁気構造解析を行った。図 1 に反強磁性秩序状態 ($T = 3.7 \text{ K}$) での 90° 検出器バンクのデータの Rietveld 解析パターンを、図 2 に実験と計算の構造因子 (F_{obs} , F_{cal}) を示す。プロファイル関数は Type3 の関数 (擬フォークト関数と指数関数のたたみこみ) を使用した。この解析では、Mn の磁気モーメントは $4.48 \mu_B/\text{Mn}$ 、R 因子は 7.25% とほぼ満足できる解析結果が得られた。今後、この解析手法を他の磁性体に適用していくことを考えている。

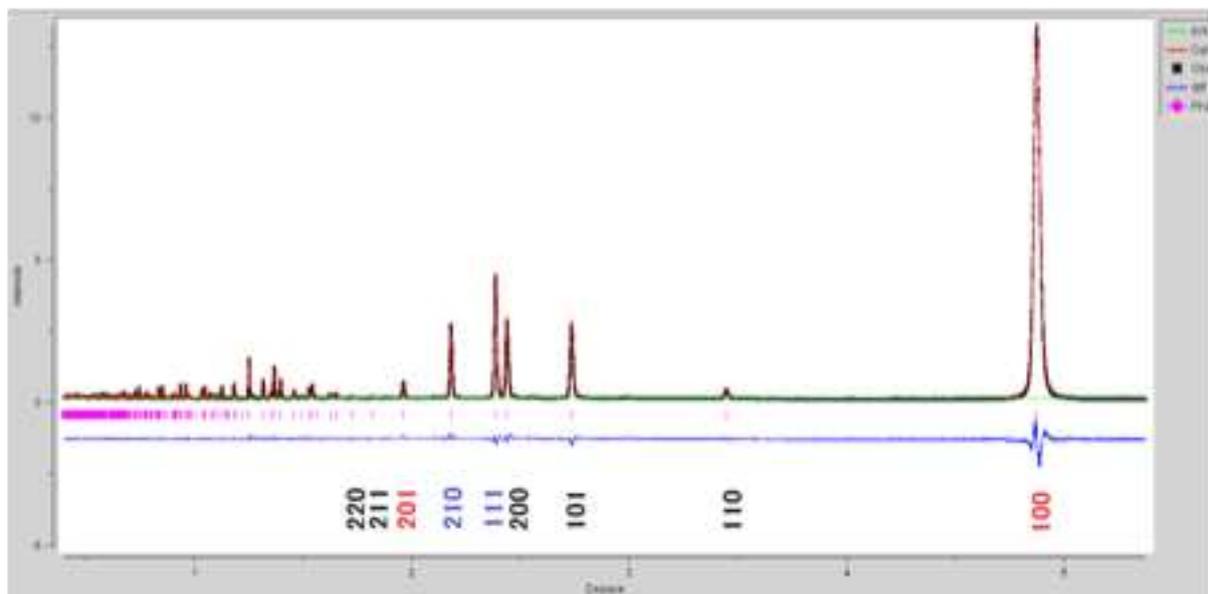


図 1 : MnF_2 の反強磁性秩序状態 ($T = 3.7 \text{ K}$) での Rietveld 解析パターン (指数の赤字、青字、黒字はそれぞれ磁気ピーク、磁気+核ピーク、核ピークを表している)

