三軸分光器入門

益田 隆嗣

(東京大学 物性研究所 中性子科学研究施設)

Introductory Lecture on Triple-axis Spectrometer

Takatsugu Masuda

Neutron Science Laboratory, ISSP, the University of Tokyo

ABSTRACT

Triple-axis spectrometer is a multi-purpose instrument for powder neutron diffraction, single crystal neutron diffraction, powder inelastic neutron scattering, single crystal inelastic neutron scattering, and neutron polarization analysis. In this lecture how to use the triple-axis spectrometer is explained for the beginners.

Keywords: *Triple-axis spectrometer*

1. はじめに

三軸分光器は、主として磁性・強相関分野の研究ツールとして精力的に利用されている。一番の特徴は、波数-エネルギー空間の任意の点で中性子動的構造因子を測定できる点にあり、非弾性散乱実験によるダイナミクス測定に大きな威力を発揮している。一方で、汎用性の高さも特徴の一つであり、幅広い分野のユーザーに有用な弾性散乱(回折実験)でも数多くの成果が挙げられている。最近の中性子集光・試料環境技術の進歩により、薄膜試料、パルス磁場環境、小さな磁気モーメントを有する粉末試料、などの実験が可能となっており、広い意味での物性物理、化学の分野の方々に興味を持っていただける分光器にもなっている。ここ数年の研究例としては、 $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CoO}$ 薄膜の交換バイアス[1], パルスマグネットを用いた 30T 高磁場下での磁気散乱[2], 多孔質ソーダライトに内包された Na 磁性の磁気構造[3], ヘキサフェライトの複雑な磁気構造[4,5]などが挙げられる。本稿では、三軸分光器の未経験者に当該分光器に興味を持っていただくことを目的とし、その原理と使用方法を簡潔に説明する。

2. 三軸分光器で何が測定できるか？

三軸分光器は汎用性の高い分光器であり、粉末中性子弾性散乱、単結晶中性子弾性散乱、粉末中性子非弾性散乱、単結晶中性子非弾性散乱を行うことができる。さらに、中性子偏極子を装備した分光器では、中性子偏極解析も可能である。中性子実験は事前に測定内容を吟味して行うことが普通であるが、三軸分光器においては、実験期間中

の計画変更に対応することが可能である。たとえば、主目的の単結晶試料の他にバックアップ実験の粉末試料を用意しておけば、主実験の試料環境調整の合間に、粉末試料の磁気回折についての予備的な結果を得ることが出来る。汎用性の高さは、三軸分光器がきわめてシンプルな原理に基づいており、ユーザーが分光器のコアな部分に容易にアクセスすることが可能であることに起因する。そこで本節では、三軸分光器の原理を説明する。

Fig.1 Schematic view of triple-axis spectrometer.

Fig. 1 に三軸分光器の概念図を示す．原子炉中心でウラン燃料の核分裂により発生した中性子は，モノクロメータ結晶，試料，アナライザ結晶に散乱されて検出器に到達する．オークリッジ国立研の三軸分光器 HB-1 の実物を Fig. 2 に示す．試料

Fig.2 Triple-axis spectrometer HB-1 installed in Oak Ridge National Laboratory.

ステージには，試料回転の角度 θ ，散乱角 2θ の自由度がある．同様の自由度は，モノクロメータ結晶とアナライザ結晶にもあり，試料を含めて 3 つの結晶が回転するので 3 軸分光器と呼ばれている．モノクロメータとアナライザ (Fig.3 (a)) には，多くの場合 Pyrolytic Graphite (PG) 結晶と呼ばれるものが用いられる．ソラーコリメータ (Fig. 3 (b),(c)) は，モノクロメータの前，試料の前後，検出器の前の 4 か所に設置されており，中性子ビームの発散角を抑える働きをする．試料の前には，中性子をカウントするモニタが設置され，測定時間を試料に照射する中性子数で規格化できるようになっている．試料の前もしくは後ろには，フィルタ (Fig.3 (d)) が設置され，モノクロメータやアナライザからの高調波の散乱をカットするローパスフィルタの役割をしている．検出器では， $^3\text{He} + n \rightarrow ^3\text{H} + p$ の ^3He 原子の電離反応を利用した中性子検出がなされている．実験者は，モノクロメータとアナライザの結晶の種類，結晶角度，コリメータの発散角，フィルタの種類を調整することで，目的の研究に適した実験環境をコントロールすることが出来る．

原子炉には複数の三軸分光器が設置されているが，熱中性子を利用するものと，冷中性子を利用するものに大きく分けられる．前者は $1.8\text{\AA}$ にフラックスの極大を有しており，一般の弾性散乱実験や 2meV 以上のエネルギースケールの素励起測定に用いられる．後者は $4\text{\AA}$ にフラックスの極大を有しており，磁性体の磁気ブラッグピークを，角度分解能を高くして測定したい場合や， 10meV 以下の素励起測定に用いられる．前者はさらに，炉室に設置されているものと，実験ホールに設置されているものに分けられる．前者は，大きいビー

ム発散を利用することでフラックス強度が増すため，非弾性散乱実験や，微弱なピークを探索する場合に有利である．後者は，中性子導管による中性子輸送の際にビーム発散が抑えられるため，平行性の高いビームが得られ，高角度分解能の実験が可能である．どのタイプの分光器を選ぶかは，実験前に決定しておかなければならない．JRR-3 には，Table 1 にあるような分光器群が設置されている．

Fig. 3 (a) PG analyzer installed in ISSP 5G beam line. (b),(c) Soller collimator (d) PG filter (e) Beam narrower.

Table 1 Triple-axis spectrometers installed in JRR-3.

ビーム孔	装置略称	管理組織	装置責任者	分類
2G	TAS-1	原子力機構	脇本武田	熱中性子・炉室・偏極
4G	GPTAS	東大物性研	柴山佐藤卓	熱中性子・炉室内
5G	PONTA	東大物性研	益田	熱中性子・炉室・偏極
6G	TOPAN	東北大学理	岩佐	熱中性子・炉室
T1-1	HQR	東大物性研	吉沢	熱中性子・実験ホール
T1-2	AKANE	東北大学金研	大山	熱中性子・実験ホール
T2-4	TAS2	原子力機構	長壁久保田	熱中性子・実験ホール
C1-1	HER	東大物性研	横山(茨大)	冷中性子・実験ホール
C2-1	LTAS	原子力機構	金子山内	冷中性子・実験ホール

3. 弾性散乱実験

本節では弾性散乱実験の具体的手順について述べる。

(1) 試料準備

粉末試料の場合は、中性子照射により放射化した粉末試料が飛散しないように、試料缶に密封する。まず、内径 6mm-10mm 程度、高さ 60mm 程度のバナジウム製円筒容器に試料を入れる。この円筒容器を、さらに直径 54mm のアルミ缶[6]に入れ、インジウムワイヤにより完全に密閉する。試料ボリュームは典型的には 1cc~3cc 程度である。もしバナジウム容器の入手が困難な場合、肉厚 0.05mm 程度のアルミ製円筒容器を用いても良い。試料ボリュームが 3cc 程度あれば、肉薄アルミ製容器でも大きな問題はない。

単結晶試料の場合は、あらかじめ結晶軸を X 線ラウエ写真撮影などにより同定し、散乱面を水平面とするように、試料を固定しておくことが望ましい。試料ホルダ等の図面は物性研中性子施設ホームページ[6]などで入手可能である。ただし、通常の X 線は結晶表面で散乱されるため、ラウエ写真でラウエスポットが観測されても、必ずしも結晶全体がシングルドメインになっている保証はない。このため、X 線で確認した試料であっても、本測定の前には必ず中性子で試料チェックを行うことが必要である[7]。試料ボリュームは 1cc 程度あれば理想的であるが、多くの場合 0.1cc 程度でも十分な実験が可能である。試料形状は球形に近いものが理想的であるが、通常は直方体、平板状試料を用い、解析の段階で吸収補正を行う。

(2) 中性子実験

モノクロメータとアナライザで同じ波長の中性子を選ぶか、あるいはアナライザ結晶を外して、実験室系の粉末 X 線回折装置のようにして（二軸モード）実験する。後者は正確な積分強度を得ることが容易だが、バックグラウンドが高くなる。超格子ピークのように弱いピークを測定したい場合には、前者で測定する方が良い。熱中性子を PG モノクロメータで単色化する場合、波長は、 $\lambda=2.46, 2.36, 1.64, 1.41\text{\AA}$ のいずれかを用いる。これらの波長では、PG モノクロメータ結晶からの $\lambda/2, \lambda/3$ 高調波を PG フィルタが効率的に排除してくれる。コリメータは、基本的には 20° や 40° 程度の細かいものを選び、角度分解能を高めるのが良い。二軸モードの場合、第 4 コリメータは外す。試料サイズが小さい場合や測定時間が限られている場合には、コリメータ発散角を広いものを用いる。制御ソフトは、施設、分光器により様々なものが使用されているが、実験に必要なコマンドは限定的であり、慣れるのに時間はかからない。粉末試料の実験であれば、試料の散乱角 2θ を動かすだけである。単結晶の場合、最初に 2 つの独立な結晶面のブラッグピークを探す。それらの $\theta, 2\theta$ 情報を (hkl) 指数と結晶格子情報とともに制御コンピュ

ータに入力することで、 $\theta, 2\theta$ と (hkl) 指数が対応付けられる。後は、目指す (hkl) に移動し、その周りで θ スキャンと $\theta-2\theta$ スキャンを実行すればよい。測定可能な (hkl) 領域がどの程度であるかは、事前にシミュレーションしておくことが望ましい。後述の Virspec は便利なシミュレータである。

三軸分光器の場合、一つの散乱面内でのデータ収集は可能であるが、散乱面外のデータを幅広く測定することはできないことが多い。したがって、全く新しい物質の結晶構造を決定することは困難である。一方、既知の物質の超格子構造、磁気構造を決定することは可能である。

試料前後には、ビームナローワ (Fig. 3(e)) を設置する場合がある。中性子ビームの幅と高さを調整することが可能なスリットであり、試料にあたるビームサイズを絞ることで、バックグラウンドを減らすことができる。

(3) データ解析

Rietveld 解析による構造解析ソフトがフリーウェアで配布されている[8]。磁気構造に関しては、対称性から可能な磁気モデルをリストアップしてくれるソフトがフリーウェアで配布されている[9]。構造解析ソフトと併用することで、磁気構造解析が楽に行えるようになっている。

4. 非弾性散乱実験

(1) 試料準備

非弾性散乱強度は弾性散乱強度よりも 2 桁以上小さくなるので、基本的には、試料ボリュームは多ければ多いほど良い。試料台中心での中性子ビームは、使用コリメータなどにより異なるが、最大幅 40mm 高さ 40mm 程度である。筆者は、粉末試料の場合、内径 2cm の円筒容器に高さ 5cm 程度に試料を詰めて実験を行うことが多い。容器はインジウムシールで密封する。含まれている元素の非干渉性散乱断面積や吸収断面積[10]が大きい場合には、試料の厚みが大きいと、中性子が透過せず効果的な実験が出来ない場合がある。この場合は、アルミ二重管容器のリング状のスペースに試料を充填する。これにより、試料を通過する中性

Fig. 4 (a) Three pieces of single crystals coaligned on sample holder. (b) 24 pieces of single crystals coaligned on sample holder.

子経路の距離を減じることができ、中性子透過率の減少を抑えることができる。試料ボリュームを稼げない場合には、試料に含まれる元素の散乱断面積、吸収断面積を考慮して効果的な試料容器の設計を行う。あらかじめ粉末非弾性散乱実験のみを行うことがはっきりと分かっている場合は、縦4cm 幅4cm 厚み1-3mm 程度のアルミ箔で作製した袋に粉末試料を入れ、これを押し固める。さらにカドミウム板で枠を作製し、試料の型崩れを防ぐ。これをアルミ缶に固定する。測定時には、中性子ビームが板状試料に垂直にあたるようにする。

単結晶試料の場合には、ビームサイズ程度の結晶を得ることは困難である場合が多い。このため、複数の結晶を、軸を揃えて並べたものを用いる。基本的には、以下の作業を、中性子を用いて行う。

1. 各結晶の独立なブラッグピークを二つ探し、散乱面が水平になるように試料ホルダに固定する。
2. 二つの結晶の軸が揃うように試料を並べて、ブラッグピーク周りでのロッキングカーブを測定する。
3. 各結晶からのブラッグピークが1度程度の誤差で重なるように調整する。
4. 3つ目以降の結晶についても2と3の作業を行う。結晶を3つ並べた例と24個並べた例をFig. 4に示す。実験ホール T11 ポートの HQR 分光器下流に設置された、軸立て専用分光器は、マシンタイムを申請せずに利用可能であるので、結晶を並べる作業に用いるとよい。また、筆者の研究室は、高エネルギーX線を利用した透過ラウエ写真装置を共同利用に提供しているので、ご活用いただければと思う。結晶形状から結晶軸が判断できる場合は、中性子やX線を用いずに、目で見て並べてもよい。ただし、軸が揃っていることの確認は、中性子かX線を用いて必ず行う。1.5度以内に揃っていれば本測定に用いてよい。

(2) 中性子実験

非弾性実験は、入射中性子エネルギー (E_i) を固定する場合と、反射中性子エネルギー (E_f) を固定する場合の二つの方式に分けられる。 E_f 固定での実験の方がより一般的である。熱中性子を利用する場合には、 $E_f=13.5, 14.7, 30.5, 41 \text{ meV}$ (波長にすると $\lambda=2.46, 2.36, 1.64, 1.41 \text{ \AA}$) のいずれかを用い、PG フィルタを第3 コリメータの上流に設置する。モノクロメータの $\theta, 2\theta$, 試料の $\theta, 2\theta$, アナライザの $\theta, 2\theta$, にはそれぞれ駆動可能範囲が限定されているので、目的とする ($h, k, l, \hbar\omega$) が測定可能範囲に入るような分光器を選び、実験条件を定めなければならない。

コリメータは、強度を稼ぐためになるべく発散角の広いものを用いる。三軸分光器の実験分解能は、Cooper と Nathans により議論され[11]、現在では便利なプログラムが公開されている[6]。実験条件を決定する上で、分解能の選定は重要である。分解能を上げれば高精度の実験を目指すことができるが、強度が減少するため、目的のシグナルを観測するのに最低限必要な実験分解能となるよう

に条件を設定することが重要である。Zheludev 氏のホームページで公開されている Virspec[12]は、分解能関数シミュレータとして非常に使いやすいので、簡単に説明しておく。

Fig. 5 Simulation program Virspec.

Virspec のページは Fig. 5 のようになっている。メニューは下にあり、「Vars」メニューで、試料結晶情報、モノクロメータ・アナライザ結晶面の種類、コリメータ条件、 E_i , E_f などの実験条件を設定する。次に、ためにしにコマンドラインで「br 1 0 0」と打ち込んでみる。これは、 $h=1, k=0, \hbar\omega=0 \text{ meV}$ の場所に分光器を動かさなさい、というコマンドである。メインウィンドウ内に、モノクロメータの $\theta, 2\theta$, 試料の $\theta, 2\theta$, アナライザの $\theta, 2\theta$, 角度が、M1~M6 の値として表示される。次に、メニューの「Resolution on」をクリックすると、Fig. 6 が現れる。

Fig. 6 Resolution parameters in Virspec.

左下の「Energy width」がエネルギー分解能である。波数の分解能を散乱面に投影したものが右上図に描かれており、異方的であることが分かる。Var メニューでコリメータ条件、 E_i , E_f などを調整してシミュレーションを行い、最も適した実験条件を探す。初めての測定で必要分解能が分からな

い場合は、コリメーション発散角は最大、熱中性子の場合は $E_f = 14.7\text{meV}$ 固定、冷中性子では $E_f = 5\text{meV}$ 固定で実験することを推奨する。

単結晶での非弾性散乱実験を行う場合、分解能関数によるフォーカス効果を知っておくべきである。観測される中性子散乱強度は、

$$I_{\text{obs}}(Q_0) = \int dQ R_0(Q_0) S_{\text{calc}}(Q) \times \exp\left[-\frac{1}{2}(Q^i - Q_0^i)(Q^j - Q_0^j)M_{ij}(Q_0)\right] \quad (1)$$

$$Q = (\hbar\omega, Q_x, Q_y, Q_z) \quad (2)$$

で表される。 $S_{\text{calc}}(Q)$ は中性子動的散乱因子、 $Q_0 = k_i - k_f$ は散乱ベクトル、 $\hbar\omega$ はエネルギートランスファー、 M_{ij} は分解能行列である。(1)式の被積分関数を、波数-エネルギー空間に投影すると、Fig. 7 のようになる。図中では、分解能関数とともに、 Q_x 方向に 30meV のエネルギーバンドと 3meV のエネルギーギャップを有する一次元分散曲線が描かれている。分解能関数は、傾いた楕円の形をしている。 $Q_x = 3.1$ では楕円の長軸の傾きが分散曲線の接線と平行に近いため、分解能はよくなるが、 $Q_x = 2.9$ ではほぼ直角になるため分解能は悪くなる。 $S(q, \omega)$ は $Q_x = 3$ について対称であるが、 $Q_x < 3$ では分解能関数が off focus となり観測されるピークはぼやけ、 $Q_x > 3$ では on focus となりピークは鋭くなる。良いデータを収集するためには、on focus 側で一連のスキャンをすることが重要である。

Fig. 7 Resolution functions (ellipsoid shape) projected onto $E - Q_x$ plane. Solid Curve is a dispersion with energy gap of 3 meV at $Q_x = 0$.

測定中に偽のピークを観測するケースがしばしば発生する。有名な例として、 $E_f = 14.7\text{meV}$ 固定の条件下で 18.4meV に観測されるピークがある。原因は、モノクロメータの $\lambda/2$ 高調波が、試料の非干渉性弾性散乱により散乱され、これをアナライザで $\lambda/3$ 高調波として拾ってしまうことにある。非干渉性散乱[10]の強い元素を含む試料を用いる場合に顕著である。モノクロメータとアナライザ

の高調波の次数を各々 n_M, n_A とすると、試料の非干渉性弾性散乱で高調波を拾ってしまうケースは、一般に

$$(n_M k_i)^2 = (n_A k_f)^2 \quad (3)$$

が成り立つ場合に発生する。 n_M, n_A が 1~4 の場合について Table 2 にまとめられている。 18.4meV の偽ピークは $n_M = 2, n_A = 3, E_f = 14.7\text{meV}$ の場合である。

Table 2 Energy transfer of spurious peaks from higher order harmonics of monochromator and analyzer crystals. The values are normalized by E_f . The numbers in parentheses are the energy transfer in case of $E_f = 14.7\text{meV}$.

n_M, n_A	1	2	3	4
1	0	3 (44.1)	8 (117.6)	15 (220.5)
2	-3/4 (-11.0)	0	5/4 (18.4)	3 (44.1)
3	-8/9 (-13.1)	-5/9 (-8.2)	0	7/9 (11.4)

別な有名な例は、エネルギースキャンにみられる不自然にシャープなピークである。これは、試料からのブラッグピークをアナライザ結晶が非干渉弾性散乱によりディテクタに散乱させてしまう場合に発生する。一般に、非弾性散乱スペクトルはエネルギー方向にも波数方向にもブロードになっているケースが多いので、観測されたピークが分解能程度以下になっている場合には、このケースを疑うべきである。

上記の2つのケースは、固定エネルギーの変更や、 E_f 固定を E_i 固定に変えるなど、異なる実験条件下で目的のピークが再現されるかどうかで判別される。偽ピークの場合、実験条件を変えるとピーク位置が変化するが、試料からのピークであれば実験条件に依存しない。

Fig. 8 Resolution function at $(E, Q_y) = (0.1\text{meV}, -0.03\text{Å}^{-1})$ detecting Bragg peak at $Q_y = 0$.

冷中性子の非弾性散乱で、低エネルギーに観測される偽ピークとして、ブラッグピークの裾をひっかけてしまうケースがある。分解能関数は一般に図の

ように傾いている。もし $Q_y=0$ のところにブラッグピークが存在していると、 $Q_y=0.03\text{\AA}^{-1}$ においてエネルギースキャンを行った場合に、 $\hbar\omega \sim 0.1\text{meV}$ でブラッグピークの裾を観測することになる。

Fig. 9 のように、 $q=2.0\text{\AA}^{-1}$, $\hbar\omega \sim 0.7\text{meV}$ 近傍にギャップ的励起が観測された場合、それは液体ヘリウムのロトンスペクトルである可能性を疑うべきである。液体ヘリウムタイプのクライオスタットを使用していて、交換ガスとして He ガスを大量に入れてしまった場合には、このようなスペクトルを観測してしまう可能性がある。

Fig. 9 Roton spectrum of Helium.

試料ホルダや試料缶は通常 Al を用いて作製しているので、Al のブラッグピークには注意を払うべきである。中性子が照射されるアルミの量は、可能な限り少量に抑えることが重要である。ただし、磁場中での実験を行う場合には、トルクにより試料が回転するケースがあるのでこの限りではない。

(3) データ解析

粉末試料実験で得られる情報は、励起のエネルギースケールと相関の強くなる波数（スカラー）のみである。したがって、粉末非弾性散乱実験のデータのみで 1 本の学術論文をまとめることは、一般的には、科学的に健全ではない。ただし、スピン・クラスター系（0 次元）や 1 次元スピン系の場合、粉末平均により失われる情報量が少ないので、この限りではない。モデルとなる $S(\mathbf{q}, \omega)$ を粉末平均したものを、実験データと比較することで、詳細な議論が可能である。また、スピン・ギャップの有無を議論する場合にも、粉末非弾性散乱実験は強力な手法である。

単結晶試料の場合、実験データを、モデル計算により得られる散乱断面積に分解能関数を畳み込むことで得られる予想値と比較する。分解能関数畳み込みのソフトはフリーで公開されているので、それらを用いるとよい[13]。

分解能関数は波数-エネルギー空間で形を変えるが、限られたエネルギー領域のデータ解析では、分解能関数を変化と近似してデータ解析をする場合がある。また、冷中性子実験のエネルギー領域では、波数平面へ投影された分解能関数は円に近

い。このような場合、分解能関数のことを気にせず、観測されたピークの積分強度を散乱断面積と近似してよい。散乱断面積から $S(\mathbf{q}, \omega)$ を求める際に、1 点気を付けるべきことがある。散乱断面積と $S(\mathbf{q}, \omega)$ の間には、

$$\frac{d^2\sigma}{dE d\Omega} = \frac{k_f}{k_i} S(\mathbf{q}, \omega) \quad (4)$$

の関係式がある。右辺に k_f/k_i の因子がかけられているので、 $d^2\sigma/dE d\Omega$ から $S(\mathbf{q}, \omega)$ を求めるには規格化が必要である。しかし、 E_f 固定の場合には、モノクロメータ下流に設置している中性子モニタの感度が波数の逆数に比例しているため、 k_f/k_i 因子を考慮する必要はない。 E_f 固定の実験では、モニタで計数された入射中性子数で規格化するので、観測された中性子数はすでに k_f/k_i が $S(\mathbf{q}, \omega)$ にかかれたものとなっているからである。

5. まとめ

中性子三軸分光器は、粉末弾性散乱、単結晶弾性散乱、粉末非弾性散乱、単結晶非弾性散乱のいずれもが可能な汎用性の高い分光器である。分光器のコアな部分へのユーザーアクセスが可能であることは、汎用性の高さにつながると同時に、中性子散乱の初学者の教育にも適していることを意味している。波数-エネルギー空間の任意の 1 点での測定が可能であることと、定常的に中性子が結晶に照射されていることから、非弾性散乱分光器としては、限定された波数-エネルギー領域での測定で特に威力を発揮する。また、中性子偏極オプションを利用すれば、偏極中性子解析も可能である。本稿では触れなかったが、水平集光のモノクロメータやアナライザを設置することにより、ここ 10 年で強度は格段に増大している。さらに海外の施設では、多数の検出器を並べるマルチディテクタシステムを用いることで、より効率的なデータ収集が可能な分光器[14]も存在している。J-PARC が本格稼働している現在、非弾性用飛行時間分光器や粉末回折計と相補的に利用することで、物質科学の理解に貢献する重要な分光器となっている。

謝辞

本稿の執筆にあたり、左右田稔氏から有益な助言を頂いたことに感謝いたします。

参考文献

- [1] Y. Ijiri, T.C. Schulthess, J.A. Borchers, P.J. van der Zaag, and R.W. Erwin, Phys. Rev. Lett. 99, 147201 (2007).
- [2] K. Kuwahara et al., Phys. Rev. Lett. 110, 216406 (2013).
- [3] T. Nakano, M. Matsuura, A. Hanazawa, K. Hirota, and Y. Nozue, Phys. Rev. Lett. 109, 167208 (2012).
- [4] Y. Tokunaga et al., Phys. Rev. Lett. 105, 257201 (2010).
- [5] M. Soda et al., Phys. Rev. Lett. 106, 087201 (2011).
- [6] 物性研で用いているアルミ製試料缶, 試料ホルダ等の情報は, 物性研中性子施設のページに記載されている.
<http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/labs/neutron/accesary/acinfo.html>.
- [7] 筆者の研究室では, 高エネルギー X 線ラウエ写真装置を共同利用に提供している. 450kV 加速電圧により X 線を発生させているため, 数 cm 程度の厚みの金属化合物結晶であれば透過ラウエ写真の撮影が可能である.
<http://masuda.issp.u-tokyo.ac.jp/instruments.html>
- [8] Rietveld 解析のソフトとしては, 泉富士夫氏の RIETAN や, ILL で開発されている FULLPROF などが良く使われている. 下記ページからソフトを得ることができる.
<http://fujioizumi.verse.jp/download/download.html>
<http://www.ill.eu/sites/fullprof/>
- [9] A.S. Wills の開発した SARAh は Fullprof の入力ファイルを自動生成してくれるので便利である. 下記ページからダウンロード可能である.
<https://dl.dropboxusercontent.com/u/8933134/Website/Site/Welcome.html>
- [10] 各元素の (干渉性/非干渉性) 散乱断面積, 散乱長のデータベースは, 米国 NIST 研究所のホームページで公開されている.
<http://www.ncnr.nist.gov/resources/n-lengths/>
- [11] M.J. Cooper and R. Nathans, Acta Cryst. 23, 357 (1967).
- [12] Virspec は A. Zheludev が開発したソフトである.
<http://www.neutron.ethz.ch/research/resources/virspec>
- [13] ILL で開発された Rescal や Zheludev 氏により開発された Reslib が便利である.
- [14] NIST の冷中性子マルチディテクタ分光器 MACS や ILL の Flat cone などがある.