

중성자 회절을 이용한  $\text{Nd}_3\text{Ba}_5\text{Co}_4\text{O}_{15}$ 의 구조 정련  
Structure refinement of  $\text{Nd}_3\text{Ba}_5\text{Co}_4\text{O}_{15}$  using neutron diffraction

심해섭, 이정수, 이창희, 송수호  
한국원자력연구소 중성자물리실

X-선 회절의 경우 X-선이 전자와 상호작용하여 산란하기 때문에 원자번호의 증가에 따라 산란단면적이 필연적으로 커질 수 밖에 없고 한 원자에 대한 산란강도의 각의존성 (Angular dependency)도 크다. 그래서, 무거운 원자를 포함하는 화합물에서 산소나 수소와 같은 가벼운 원자의 원자위치 결정이 쉽지 않고, 실제로 산소자리의 등방성열인자의 경우 물리적으로 의미없는 값으로 발산하거나 수렴하는 등 정련에 어려움이 따른다. 이러한 단점을 보완 할 수단으로 중성자회절을 이용할 수 있는데 중성자회절의 경우 중성자가 핵간 산란을 하기 때문에 앞서 제기한 문제점 들을 보완할 수 있을 뿐만 아니라, 중성자가 고유 스핀을 가지기 때문에 자성구조의 탐색도 가능하다는 장점을 가지고 있다. 따라서, 본연구에서는 고상합성법으로 합성된  $\text{Nd}_3\text{Ba}_5\text{Co}_4\text{O}_{15}$  화합물을 한국원자력연구소의 연구용 원자로 "하나로"에 설치하여 운영중인 고분해능 중성자 분말회절장치 (HRPD ; High Resolution Neutron Powder Diffractometer)로 회절데이터를 수집하고, 이것을 Full-pattern Fitting 법인 Rietveld 법으로 구조 정련하여 그 결과를 X-선 분말회절에서 얻어진 데이터와 각각 비교하였다.