

## 化学結合を考慮した熱外中性子散乱断面積の評価

(東北大理<sup>1</sup>, 宮崎大工<sup>2</sup>) ○梅木 健太<sup>1</sup>, 保木 邦仁<sup>1</sup>, 河野 裕彦<sup>1</sup>, 藤村 勇一<sup>1</sup>, 五十嵐 明則<sup>2</sup>

【序】国内外で大強度陽子加速器（日本では J-PARC）の建設がはじまり、熱外中性子散乱による分子ダイナミクスの研究が注目されている。中性子散乱は、分子中の原子核に局所的な撃力を与える最も直接的な手法であり、電子や光子による散乱実験とは異なる分子の観測手段となり得る。これにより誘起される分子ダイナミクスに関する研究は大変興味深い。特に中性子はプロトンに対して敏感で、物質中のプロトンの位置や振る舞いを敏感に測定することができ、生物細胞中の水素原子の役割の解明などへの応用が期待できる。

しかしながら、熱外中性子散乱には未解明な部分も多い。例えば、近年の Dreismann らの研究グループは軽水-重水混合液中の中性子散乱実験を行い、核種あたりの断面積比が混合比に依存し、その変化幅は約 2 倍もあることを発見した [1]。本研究では、この熱外中性子散乱の実験結果の解明を目指して、まず部分微分散乱断面積に与える化学結合の影響を議論する。

【理論とモデル】図 1 に散乱系のモデルを示す。H-A 型の分子を考え、H を中性子の標的プロトン、分子の他の部分を剛体 A として取り扱う。ここで、 $V_{\text{mol}}$  は H-A 間の結合ポテンシャルである。

$$V_{\text{mol}}(r) = E_{\text{dis}} \left[ 1 - \exp\left(-\sqrt{\frac{\mu}{2E_{\text{dis}}}} \omega r\right) \right]^2 \quad (1)$$

ここで、 $E_{\text{dis}}$  は解離エネルギー、 $\mu$  は換算質量、 $\omega$  は基準振動数、 $r$  は結合距離を表す。

中性子とプロトンの部分微分散乱断面積  $d^2\sigma/d\Omega dE'$  は、1 次のボルン近似により以下のように表される [2]。

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} = \frac{k'}{k} \left( \frac{m_n}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \sum_{\lambda, \lambda'} p_{\lambda} \left| \langle k' \lambda' | V | k \lambda \rangle \right|^2 \delta(E_{\lambda} - E_{\lambda'} + E - E') \quad (2)$$

ここで、 $k, k'$  はそれぞれ散乱前後の中性子の波数、 $\hbar$  はプランク定数、 $\lambda, \lambda'$  は散乱前後の分子状態の量子数、 $E, E'$  は散乱前後の中性子のエネルギー、 $p_{\lambda}$  は分子の初期分布、 $V$  は中性子とプロトンの相互作用ポテンシャルを表す。

中性子とプロトンとの散乱長  $a$  は中性子の入射波よりも十分短いので ( $a \approx 12.8$  fm)、相互作用ポテンシャル  $V$  をデルタ関数で近似する。

$$V = \frac{2\pi\hbar^2}{m_n} a \delta(r_n - r_p) \quad (3)$$

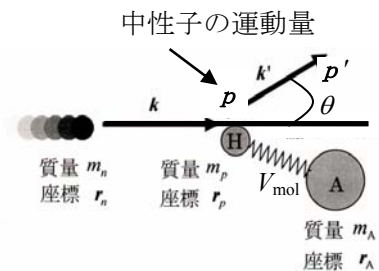


図 1 : 散乱系のモデル。  
 $m_n, r_n$  : 中性子の質量、座標  
 $m_p, r_p$  : プロトンの質量、座標  
 $m_A, r_A$  : 剛体部分の質量、座標  
 $\theta$  : 散乱角

また、分子の初期分布  $p_\lambda$  を低温極限、初期波動関数を振動数  $\omega$  の調和振動子の基底状態、散乱後のプロトンと剛体 A を自由粒子として、以下の近似式が得られる。

$$\frac{d\sigma}{d\Omega dE'} = \frac{a^2}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{M}{m_A}} \sqrt{\frac{1}{\hbar\omega E}} \sqrt{\frac{m_p}{m_n}} \sqrt{\frac{E'}{E + E' - 2\cos\theta\sqrt{EE'}}} \times \exp\left[ -\frac{1}{2} \frac{M}{m_A} \frac{E}{\hbar\omega} \frac{m_p}{m_n} \frac{\left[ (1 - m_n/m_p) - (1 + m_n/m_p)E'/E + 2(m_n/m_p)\cos\theta\sqrt{E'/E} \right]^2}{(1 + E'/E - 2\cos\theta\sqrt{E'/E})} \right] \quad (4)$$

【結果・考察】図 2 に計算と実験で得られた結果の比較を示す。計算で求めた散乱強度のピーク位置と幅は実験で得られたものとほぼ一致した。このピークの位置は中性子と核の弾性散乱の条件により説明される。飛行時間が 150  $\mu\text{s}$  付近のピークは軽水素 H と、300  $\mu\text{s}$  付近のピークは重水素 D と散乱した中性子の強度に対応する。散乱強度の幅は H のピークが 35 eV、D のピークは 2.8 eV 程度であった。この幅は分子の基底振動状態の運動量の幅を反映していることがわかった。

このピークの幅は、図 3 の模式図により説明される。中性子の衝突により、解離エネルギーよりも十分大きな運動エネルギーを得てプロトンが解離する。この時、解離波束 (b) の運動エネルギー分布 (c) は初期波動関数 (a) の幅によって決定される。このエネルギー分布の幅によりピークに幅が生じることから、分子内で核が強く結合しているとピーク幅が大きくなることがわかった。

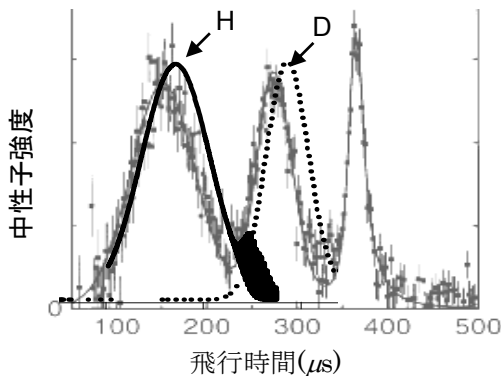


図 2：(灰色線) 軽水-重水混合液中の中性子散乱強度。横軸は入射中性子の飛行時間を表す。散乱中性子のエネルギーは 4.9 eV、散乱角は  $69^\circ$  に固定されている。(実線) 図 1 に示されるモデルを用いて得られた散乱強度。(点線) プロトン H を重水素 D に置換して同様の計算を行ない得られた散乱強度。

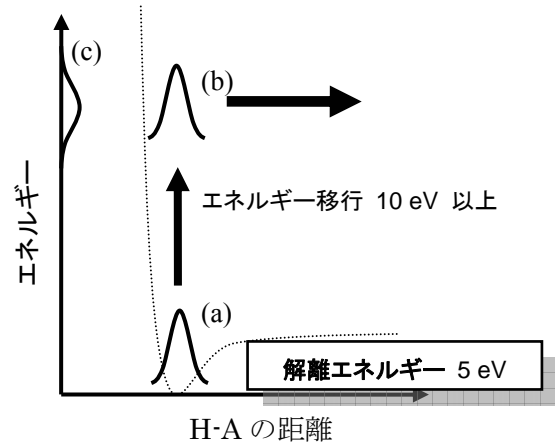


図 3：プロトンの運動量移行の模式図。横軸は H-A の結合距離、縦軸は振動エネルギーを表す。

- [1] C.A Chatzidimitriou-Dreismann, T.Abdul Redah, R.M.F. Streffer, J. Mayers, Phys. Rev. Lett. 79 (1997) 2839.  
 [2] S. Tanabe, K. Hoki, H. Kono, Y. Fujimura, Chem. Phys. Lett. 437 (2007) 267