

## 軽水および重水の中性子散乱における干渉効果

(東北大院・理) ○梅木 健太, 保木 邦仁, 河野 裕彦, 藤村 勇一

【序論】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析を目指して、分子集団の干渉性が中性子散乱にどのような影響を与えるのかを調べる。

【理論】原子集団からの中性子散乱波の干渉の影響を見積もるために、1 次のボルン近似により部分微分散断面積  $d^2\sigma/d\Omega dE'$  を評価した [2]。

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} = \frac{k'}{k} \sum_{\lambda\lambda'} p_\lambda \left| \langle \mathbf{k}'\lambda' | \hat{V} | \mathbf{k}\lambda \rangle \right|^2 \delta(E - E' + E_\lambda - E_{\lambda'}) \quad (1)$$

ここで  $\mathbf{k}, \mathbf{k}'$  はそれぞれ散乱前後の中性子の波数ベクトル、 $\lambda, \lambda'$  は散乱前後の原子集団の振動状態、 $p_\lambda$  と  $E_\lambda$  は状態  $\lambda$  の分布数とエネルギー、 $E, E'$  は散乱前後の中性子のエネルギー、 $V$  は中子と原子集団の相互作用ポテンシャルを表す。中子と原子との散乱長  $b_l$  は中子の物質波としての波長よりも十分短いので ( $b \approx 10$  fm)、相互作用ポテンシャル  $V$  をデルタ関数で近似できる。

$$V = \frac{2\pi\hbar^2}{m_n} \sum_l b_l \delta(\mathbf{r}_n - \mathbf{R}_l) \quad (2)$$

ここで、 $\mathbf{r}_n$  は中子の座標、 $\mathbf{R}_l$  は  $l$  番目の核の座標を表す。従って、

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}' | \hat{V} | \mathbf{k} \rangle &= \sum_l b_l \int d\mathbf{r} \exp(-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \\ &= \sum_l b_l \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{R}_l) \end{aligned} \quad (3)$$

ここで、 $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$  である。(3)式を(1)式に代入すると、以下の表式を得る。

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} = \frac{k'}{k} \sum_{\lambda\lambda'} p_\lambda \left\langle \left| \lambda' \left| \sum_l b_l \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l) \right| \lambda \right\rangle^2 \delta(E - E' + E_\lambda - E_{\lambda'}) \quad (4)$$

【結果と考察】本研究では簡単のため核は固定されているとして、弾性散乱における微分散乱弾断面積を考える。(4)式の核の振動の自由度を無視し、 $E'$ で積分して以下の式を得る。

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \bar{b} \right|^2 \left| \sum_{l=0}^{N-1} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l) \right|^2 + N \left\{ \overline{|b|^2} - \left| \bar{b} \right|^2 \right\} \quad (5)$$

ただし、 $N$  は核の粒子数を表し、核スピンの磁気量子数に対して統計平均をとった。ここで、 $b$  の上線はこのスピンに対する平均を表す。(4)式の右辺第一項が散乱断面積の干渉効果を表し、第二項が非干渉性の断面積を与える。

中性子-プロトン散乱の場合、 $\overline{|b|^2}$  の値は  $|b|^2$  より 50 倍大きい。従って、 $N$  が数個の場合においては、断面積に与える干渉効果も小さなものとなる。そこで、断面積における広範囲の  $N$  依存性を明らかにするために、ターゲット原子が  $Z$  軸上に多数 ( $N=1\sim 50$ ) 原子が並んだモデルを考える (図 1 参照)。

図 2 に重水素原子集合と中性子の全散乱断面積を示す。散乱波の干渉の影響により、断面積が入射中性子エネルギーに依存している。また、原子数が増えたとこの干渉効果が強くなり、 $N=20$  程度で値が収束した。この入射エネルギー依存性は軽水素に比べて重水素のほうが大きく、軽水素の時には 1%未満なのに対して重水素では 4%程度であった。従って、本研究で考慮された干渉効果では、Dreismannらにより示された断面積比の 2 倍の変化幅を説明することができない。現在、実際の水の構造 (図 3 参照) を反映した、より実験系に近いモデルで計算を行っている。

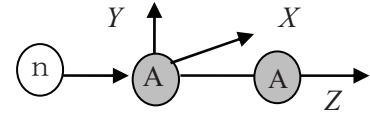


図 1 計算に用いたモデル。 $n$  は中性子、 $A$  は原子核を表す。中性子は  $Z$  軸方向から入射されるとする。

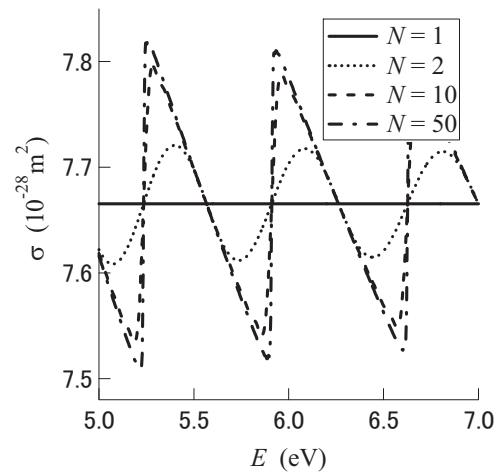


図 2 重水素と中性子の散乱断面積。横軸は入射中性子のエネルギー、 $N$  がターゲット原子数を表す。

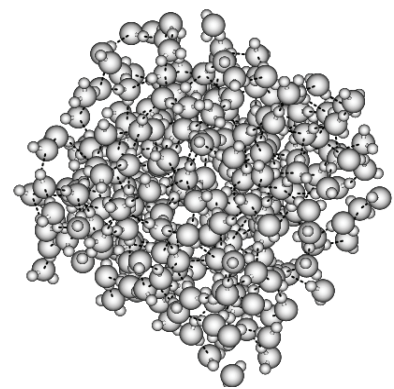


図 3 水の構造の一例。

- [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