

【序】熱外中性子散乱による分子構造・化学反応ダイナミクスに関する研究が盛んになってきた。熱外中性子のエネルギーは 0.1 eV から 100 eV 程度であり、化学結合エネルギーと同程度かそれ以上である。また、中性子は主に原子核と相互作用するが、電子との直接的な相互作用はない。特に、中性子は他の原子核と比較してプロトンと相互作用しやすい（散乱断面積は約 100 fm²程度）。従って、中性子散乱はプロトンと選択的に相互作用する点において光や電子散乱とは異なる観測手段と言える。日本では大強度陽子加速器（J-PARC）の建設がはじまり、高強度中性子ビームを用いた実験が本格的に始動する。

本研究では、振動核波束ダイナミクス計算を行うことによって中性子散乱断面積を求める方法を開発し、分子内ポテンシャルが散乱断面積に与える影響の解析を目指す。入射中性子エネルギー E が分子の振動エネルギー $h\omega$ と比較して高いとき、分子結合を無視して原子核（プロトン）を自由粒子として考えることができる（図 1a）。一方、 E が $h\omega$ と比較して低いとき、振動運動を無視して分子全体を剛体として考えることができる（図 1b）。しかし、 E が $h\omega$ と同程度の場合は（図 1c）、分子の振動を考慮した取り扱いが必要である。

【結果と考察】水分子5個のクラスターをH-A型分子としてモデル化し、H-A 間の相互作用エネルギーは調和ポテンシャル $V_{\text{mol}}(\mathbf{r}) = \frac{\mu}{2}(\omega_x^2 r_x^2 + \omega_y^2 r_y^2 + \omega_z^2 r_z^2)$ とした。ここで、 μ はプロトンと剛体Aの換算質量である。図2に、核波束ダイナミクス計算により求められた散乱断面積の入射中性子エネルギー依存性を示す。図1aと図1bに対応する両極限では、散乱断面積は弾性散乱近似による値と一致する。図2b に示される非単一振動数モデルの結果が水の中性子散乱の結果を良く再現した。

分子振動を考慮した中性子散乱断面積を評価する手法を開発し、水分子のクラスターモデルに適用した。得られた結果は、水の中性子散乱断面積のエネルギー依存性を半定量的に再現した。

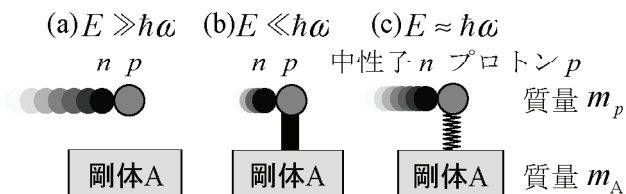


図 1: 入射中性子エネルギー E による H-A 型分子の振る舞い。(a) 自由プロトンと中性子の弾性散乱。(b) 剛体 A と強く結合したプロトンと中性子の弾性散乱。(c) 非弾性散乱。

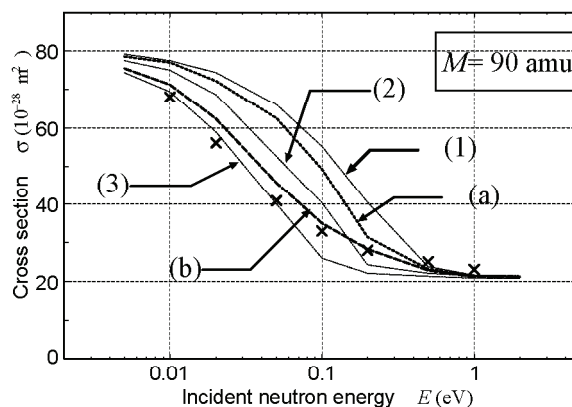


図 2: 散乱断面積 σ の入射中性子エネルギー E 依存性。(1) $\omega_x = \omega_y = \omega_z = 4000\text{cm}^{-1}$
 (2) $\omega_x = \omega_y = \omega_z = 2000\text{cm}^{-1}$
 (3) $\omega_x = \omega_y = \omega_z = 1000\text{cm}^{-1}$
 (a) $\omega_x = \omega_y = 2000\text{cm}^{-1}$, $\omega_z = 4000\text{cm}^{-1}$
 (b) $\omega_x = \omega_y = 2000\text{cm}^{-1}$, $\omega_z = 1000\text{cm}^{-1}$
 × 水の中性子散乱断面積（実験値）