

メチルベンゼン類の熱中性子散乱断面積解析における分子力場依存性

Molecular force field dependence on the analysis of thermal neutron scattering cross-sections
for methylbenzene derivatives

*安部 豊¹, 田崎 誠司¹, 日野 正裕¹

¹京都大学

メチルベンゼン類の熱中性子散乱断面積解析における分子力場依存性を評価するために、代表的な 4 つの分子力場を用いて状態密度を解析した。冷中性子生成に重要となるメチル基の束縛回転や分子内振動において顕著な分子力場依存性が見られ、実験値と比較して CHARMM36 の結果が最も妥当であることが判明した。

キーワード：熱中性子散乱断面積，冷中性子源，メチルベンゼン類，分子力場

1. はじめに

メチルベンゼン類はベンゼン環に結合したメチル基の束縛回転が 10meV 程度の比較的低いエネルギーで運動モードを持つため冷減速材の有力な候補として考えられている。しかしながら、昨年報告した含水素分子の中性子減速特性の解析においては、メシチレン、*m*-キシレン、トルエンの中性子減速特性はメチル基の数に依存せずほぼ等しく、メチル基を持たないベンゼンよりも減速性能が劣るという不可解な結果が得られていた[1]。そこで分子動力学 (MD) によって得られるメチルベンゼン類分子の運動モードの妥当性を検討するために、解析で得られた状態密度と実験値[2]との比較を行った。MD においては使用する分子力場が解析結果に大きく影響するため、これまでの分子力場 (GROMOS54A7) に加え、他の代表的な分子力場 (CHARMM36, OPLS-AA, GAFF) との比較も併せて行った。

2. 解析方法・結果

図 1 にメシチレンの状態密度の解析結果を実験値とともに示す。なお、実験値は任意単位であるため、解析による状態密度と面積が同等になるように実験値のスケールを規格化した。実験値にはメチル基の束縛回転モードが 10meV 付近に中心を持つやや幅広いピークとして現れ、20meV 以上において分子内基準振動に由来するピークが幾つか見られる。メチル基の束縛回転モードと分子内基準振動に着目して実験値と解析結果を比較すると、検討した 4 つの分子

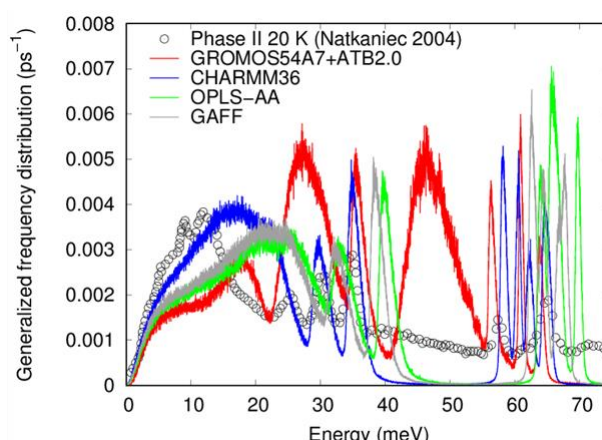


図 1 メシチレン (20K) の状態密度

力場では CHARMM36 が最も実験値の再現性が高く、ほぼ同等の傾向を示す OPLS-AA と GAFF の結果は、メチル基の束縛回転モードや分子内基準振動のピーク位置がやや実験値から外れている。また、これまで用いてきた GROMOS54A7 ではメチル基の束縛回転モードのピーク高さが実験値より低く、束縛回転による中性子減速効果を過小評価している。さらに、分子内基準振動についても実験値には見られない位置にピークが現れ、状態密度の全体的な再現性は他の分子力場より劣ることが判明した。

参考文献

[1] 安部, 沖田, 田崎, 日野, 日本原子力学会 2018 年秋の大会予稿集, 2A17.

[2] I. Natkaniec *et al.*, Physica B: Condensed Matter 350 (2004) E651 - E653.

*Yutaka Abe¹, Seiji Tasaki¹ and Masahiro Hino²

¹Kyoto Univ.