

分子動力学法による熱中性子散乱断面積の汎用解析コード開発 (IV) : 干渉性散乱断面積解析機能の実装

Development of a general-purpose code for thermal neutron scattering cross-sections by molecular dynamics (IV): Implementation of the function for analyzing coherent scattering cross-sections

*安部 豊¹, 田崎 誠司¹, 日野 正裕¹

¹京都大学

重水素化分子の熱中性子散乱則評価のために、当研究グループで開発している熱中性子散乱断面積汎用解析コードに干渉性散乱の解析機能を実装した。発表では本コードでの干渉性散乱の評価方法と重水や重水素化アルコールへの適用結果を報告する。

キーワード：熱中性子散乱則，干渉性散乱，重水素化分子，分子動力学法

1. はじめに

熱中性子散乱則データは核設計・遮蔽計算などの基礎データであるが、ENDF/B-VIII等の核データライブラリで利用可能な物質は20種類程度に限られる。一方、核計算コードNJOY/LEAPRで散乱則データを新たに作成する場合、物質ごとに物理モデルや関連パラメータが必要になるため、汎用的な適用性に難点があった。当グループでは、様々な分子に対して分子の運動や構造・配置の情報を詳細に反映させた散乱則データの作成を可能とするために、分子動力学法を利用した汎用解析コードを開発している[1]。しかしながら、これまでのコードの適用対象は非干渉性散乱近似で評価できる含水素分子に限られていた。そこで今回、重水などの含重水素分子へも適用可能とするために、本コードに干渉性散乱の解析機能を実装した。

2. 解析方法・結果

分子動力学法により得られる原子の位置情報から部分構造因子を計算するコードを新たに作成し、部分構造因子と自己散乱則からVineyard近似またはSköld近似を用いて干渉性散乱を解析する機能を本コードに追加した。図1に適用例として、重水素化エタノール（液体 293 K）の全断面積の解析結果を実験値[2]とともに示す。実験値（○）は1eV以上の自由原子断面積から入射中性子エネルギーの減少にしたがい次第に増加し、20 meV付近で分子構造を反映した干渉性散乱による肩を持つ。さらに、2 meV以下では、液体での平均分子配置に由来する異分子間の干渉性散乱が急激に減少する様子が見て取れる（固体のBraggエッジに対応）。解析結果と実験値を比較すると、5 meV付近まではVineyard近似（赤線）とSköld近似（青線）はほぼ同等に実験値を再現しているが、2 meV以下での干渉性散乱についてはSköld近似の方が実験値の再現性が良い。Sköld近似による散乱則は1次までの総和則を満たすため（Vineyard近似は0次のみ）、干渉性散乱の再現性が向上したものと考えられる。なお、分子構造や分子配置を考慮しない非干渉性散乱近似（黒線）では、上で述べた干渉性散乱の特徴は全く再現されないことがわかる。

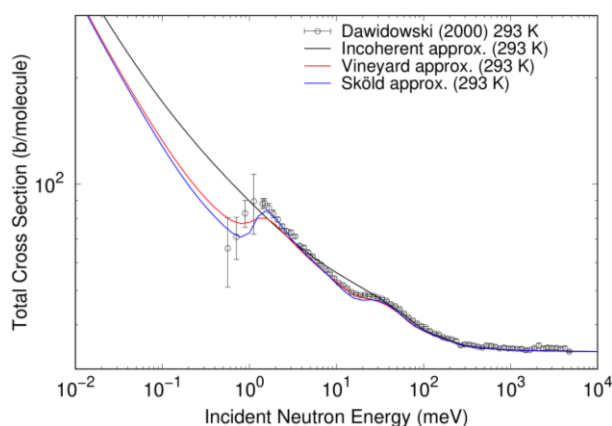


図1 重水素化エタノールの全断面積

下では、液体での平均分子配置に由来する異分子間の干渉性散乱が急激に減少する様子が見て取れる（固体のBraggエッジに対応）。解析結果と実験値を比較すると、5 meV付近まではVineyard近似（赤線）とSköld近似（青線）はほぼ同等に実験値を再現しているが、2 meV以下での干渉性散乱についてはSköld近似の方が実験値の再現性が良い。Sköld近似による散乱則は1次までの総和則を満たすため（Vineyard近似は0次のみ）、干渉性散乱の再現性が向上したものと考えられる。なお、分子構造や分子配置を考慮しない非干渉性散乱近似（黒線）では、上で述べた干渉性散乱の特徴は全く再現されないことがわかる。

参考文献 [1] 安部, 船間, 田崎, 日野, 日本原子力学会 2018 年春の年会予稿集, 1G05.

[2] J. Dawidowski, J. Granada, J. Blostein, Nucl. Instrum. Method B 168 (2000) 462-466.

*Yutaka Abe¹, Seiji Tasaki¹ and Masahiro Hino¹

¹Kyoto Univ.