

## 熱中性子散乱の直接シミュレーション (I) 自由ガスによる散乱

Direct Simulation of the Thermal Neutron Scattering  
(I) Scattering by Free Gas

角谷 浩享  
Hiroyuki KADOTANI

(平成17年9月14日受理)

熱中性子（ある温度で平衡にある水素原子と同じマックスウエル分布と同様な速度分布を持つ）の散乱過程の評価は、熱中性子炉の設計で重要な役割を持つばかりでなく、非常に低速な中性子（しばしば冷中性子と呼ばれる）を発生させるターゲットの設計でも必要となる。この熱中性子の散乱過程は、散乱体の原子（原子核）の運動によりほとんど決定されるが、その計算には、多くの近似を含む。そこでこの論文では、熱中性子の散乱過程の直接シミュレーションを行い、近似のない状態での散乱過程の評価が可能であることを提案する。(I)では、シミュレーションの実現可能性を確認するために、散乱過程が厳密に解かれている気体による散乱を取り上げ、厳密解との比較によりシミュレーションの妥当性を示した。(II)では、液体による熱中性子の散乱シミュレーションを取り上げる計画である。

### 1. 序論

中性子と物質を構成している原子核との相互作用には、さまざまなタイプが知られている。基本的な物理過程は、核破砕、核分裂、吸収、散乱などである。これらの物理過程の様相は、入射中性子のエネルギーにより大きく異なる。本論文では、非常に低速な中性子の原子核による散乱を取り上げる。原子炉理論で対象となる中性子のエネルギー範囲は、数MeV\*から数meVまでであるが、このエネルギー範囲に限っても中性子の散乱の様子は大きく変化する。

一般に中性子は電荷を帯びていないため、相手の原子核と直接相互作用を行う。高エネルギー（数MeV）の中性子が原子核により散乱される場合には、弾性散乱（原子核に取り込まれることのない散乱で、中性子と原子核の散乱前後の全運動のエネルギーが保存される）と非弾性散乱がおこる。非弾性散乱では中性子は、相手の原子核にいったん吸収された後放出される。この場合は散乱前後で粒子の運動のエネルギーは保存されず、一部のエネルギーは原子核の励起に使われる。中性子のエネルギーが下がり数keVから1eVの範囲では基本的に弾性散乱が起こるが、散乱の確率が中性子の幅のせまいあるエネルギーで非常に大きくなる共鳴現象が起こる。

---

\* 1eVは $1.602 \times 10^{-19}$ ジュール(J), Mはミリオン（またはメガ $10^6$ ）、mはミリ（ $10^{-3}$ ）を表す。

中性子のエネルギーがさらに下がり1 eV以下になると(中性子の速度は常温の空気の音速の数倍から数十倍となる)、散乱はすべて核的には弾性散乱となる。この領域の中性子は物質中で、物質の温度に相当する速度分布を形成するため、しばしば、熱中性子と呼ばれ、以下でもこの呼称を採用する。熱中性子の散乱は、上にも述べたように核的には、相手の原子核に一旦吸収されることのない弾性散乱であるが、中性子の運動エネルギーが低いため、相手の原子核の運動(熱運動)の影響を受ける。たとえば、相手の原子核の運動エネルギーが熱中性子の運動エネルギーより大きい場合、中性子が相手の原子核からエネルギーをもらいエネルギーが増加する散乱過程が発生する。このような散乱は相手の原子核の運動エネルギーが、中性子の運動エネルギーに比べて無視できる場合の弾性散乱過程では起こりえない。このような、相手の原子核の運動により核的には弾性散乱がおこっているにもかかわらず、中性子のエネルギーが増加するような散乱過程を熱中性子の非弾性散乱と呼ぶ。

熱中性子の非弾性散乱は、発電用原子炉の中心である軽水炉では非常に重要な物理過程である。これは、発電用原子炉の熱はU-235の核分裂により発生するが、核分裂はおもに熱中性子により引き起こされるためである。このため、軽水炉では大量の熱中性子を発生させる必要があるが、この熱中性子は、原子炉の中に蓄えられた水(軽水)と高速中性子が相互作用を行うことにより発生する。この相互作用の中心的な過程が、熱中性子の軽水(を構成する水素と酸素の原子核)との非弾性散乱過程である。

また、中性子の原子炉以外の新しい応用として、冷中性子の発生がある。冷中性子は熱中性子よりもさらにエネルギーの低い中性子で、生体を含む高分子の構造や運動に関する研究手段として、近年注目されている。この冷中性子を発生させるために、液体水素による非弾性散乱が主に利用される。

このため、現在までに軽水を含む多の物質について熱中性子の非弾性散乱に関する実験と理論が研究されている。この非弾性散乱の理論は、ある温度で熱平衡にある物質を構成する分子(原子)の運動から立式されるが、これにはさまざまな近似を導入する必要がある。第一の近似は、散乱体を構成する原子の運動に関するものである。正確に解かれているのは、単原子分子の気体と完全結晶の場合である。軽水を含む液体では厳密解を得ることは困難で、原子核の運動は簡単なモデルで近似される(たとえば、単原子分子の液体の場合原子核の運動は、単純な拡散運動とする)。また、この原子核の運動が既知であるとしても、ここから、熱中性子の非弾性散乱の断面積(散乱の確率と、散乱後の中性子の散乱角、散乱エネルギーを決める物理量)を導く過程での近似がある。(ここでは触れないが、ガウス近似とよばれる。)

このような近似を排除するには、熱中性子の散乱過程を直接シミュレーションすればよい。あるいはこれにより近似の精度を確かめることができる。

本論文では、この散乱過程の直接シミュレーションを提案する。このような直接シミュレーションが現在まで行われなかったのは、必要となる散乱サンプルの量がおおくて、精度のよいシミュレーションが行えなかったためと思われる。そこで筆者は、すでに発表した並列コンピュータ<sup>(1)</sup>の応用による手法を援用することにより、サンプル数が増大できることを示す計画である。

次に、単原子分子の場合であるが、液体アルゴンの原子の運動の情報を用いて、液体で

の熱中性子の非弾性散乱を直接シミュレーションすることを視野に入れて研究を行っている。液体アルゴン原子の運動のシミュレーションは、レナード・ジョーンズ型の分子間力を用いて、第一原理から並列コンピュータを用いてシミュレーションできることをすでに発表している<sup>(1)</sup>。

本論文は上に述べた計画の第一ステップとして、散乱体として単原子分子の気体を取り上げ、熱中性子による非弾性散乱の直接シミュレーションの可能性を検討する。

## 2. 熱中性子散乱の理論<sup>(2)</sup>、<sup>(3)</sup>とシミュレーション

### 2.1 散乱法則

熱中性子の非弾性散乱断面積 ( $\sigma$ ) は次の式で表される。

$$\sigma(E_0 \rightarrow E, \mu) = \frac{\sigma_b}{4\pi} \frac{1}{T} \sqrt{\frac{E}{E_0}} e^{-\beta/2} S(\alpha, \beta)$$

ここで、

$E_0, E$ : 中性子の入射と散乱エネルギー

$\mu$ : 中性子の散乱角の余弦

$T$ : 体系の温度 (eV)

$\sigma_b$ : 散乱体原子の束縛断面積

$S(\alpha, \beta)$  散乱法則と呼ばれる関数で、 $\alpha$  と  $\beta$  は

$$\alpha = \frac{m}{MT} (E_0 + E - 2\sqrt{E_0 E} \mu)$$

$$\beta = \frac{1}{T} (E_0 - E)$$

と定義される無次元化された中性子の散乱による運動量とエネルギーの変化量である。ここで、 $M$  と  $m$  はそれぞれ、散乱体と中性子の質量である。

散乱法則は、散乱体の性質によりガウス近似のもとで計算される。すなわち、

$$S(\alpha, \beta) = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\beta t} e^{-\alpha w(t)} dt$$

$w(t)$  は、width function と呼ばれる関数で、

$$w(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\beta) \frac{\cosh(\beta/2) - \cos(\beta t)}{\beta \sinh(\beta/2)} dt$$

と定義される。この式の関数  $\rho(\beta)$  は、散乱体の原子の運動を表す関数であり、Spectral Density (振動数分布) とよばれ、散乱体原子の速度分布の相関関数のフーリエ変換で求められる。

以上、熱中性子による非弾性散乱の理論の大枠を述べたが、散乱断面積は無次元の散乱法則と関連付けられる。散乱法則は結局、Spectral Density がわかれば計算できることになる。

単原子分子がある温度  $T$  で平衡にある気体の場合、Spectral Density は、原子間の速度に相関がないデルタ関数となる。すなわち、気体 (以下自由ガス) では

$$\rho(\beta) = \delta(\beta)$$

であることが知られている。この場合自由ガスの散乱法則は

$$S(\alpha, \beta) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\alpha}} \exp\left(-\frac{1}{4\alpha}(\alpha^2 + \beta^2)\right)$$

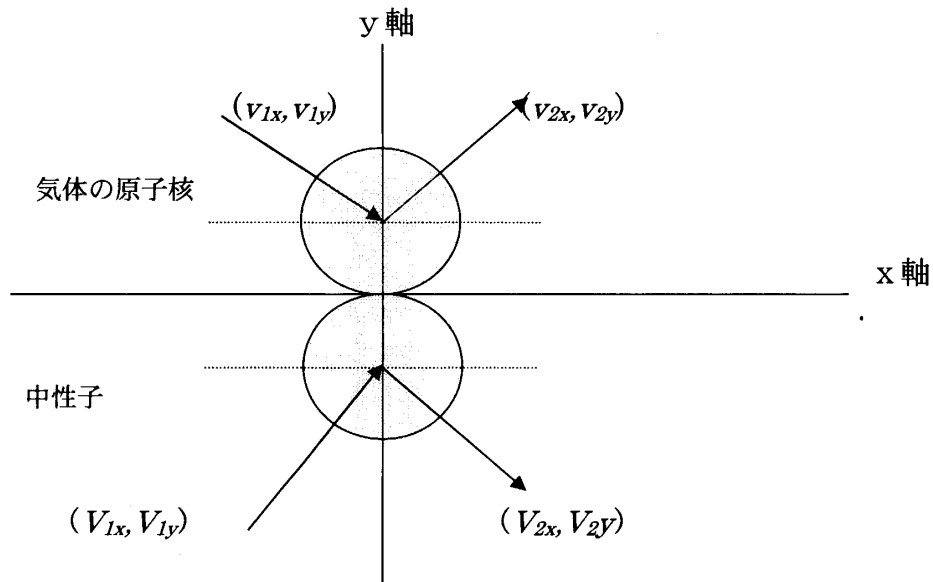
となる。

以上の立式から明らかなように具体的な散乱物質に対して散乱法則を求めるには、ガウス近似の正当性と Spectral Density の正確さの二つのあいまいさが残されることになる。ただし、自由ガスの散乱法則に関しては、散乱法則は正確に求められている。

そこで本論文では、理論的にもとめられている自由ガスの散乱法則を、散乱過程をシミュレーションして直接求めることを試みて、提案している手法の妥当性を検討する。

## 2.2 自由ガスによる中性子の散乱

単原子気体の原子核と中性子の散乱は、まず純粋な弾性散乱過程として取り扱う。原子核と中性子はともに質点とする。



上の図で、 $V$ 、 $v$  は速度、添え字 1 は散乱前、添え字 2 は散乱後の状態を示す。運動量保存則を用いると、気体の原子核と中性子の入射速度と角度が与えられれば、散乱後の中性子の速度と散乱角が求められる。衝突の瞬間に働く力は、原子核と中性子の中心を結ぶ中心線方向にのみ働く。このため、この中心線に垂直な方向では速度は変化しない。すなわち、 $v_{1x} = v_{2x}$ 、 $V_{1x} = V_{2x}$  である。また中心線方向の速度は、運動量の保存則より、 $v_{1y} = v_{2y}$ 、 $v_{2y} = V_{1y}$  となる。また、散乱角はそれぞれの速度成分から容易にもとめられる。

自由ガスによる中性子のシミュレーションは次のように実行する。

- (1) 気体原子核の速度を、温度  $T$  のマックスウエル分布に従って発生させる。
- (2) 気体の原子核の運動方向は  $x$  軸の上半面からランダムに選ぶ。
- (3) 中性子の速度は一定とし、入射方向は  $x$  軸の下半面からランダムに選ぶ。
- (4) 散乱後の中性子のエネルギーと散乱角を用いて、パラメータ  $\alpha$  と  $\beta$  を求める。
- (5) 求めた  $\alpha$  と  $\beta$  に相当する散乱法則、 $S(\alpha, \beta)$ 、に 1 を加える。

- (6) 上のシミュレーションを繰り返し、
- (7) 必要な規格化をおこない散乱法則を求める。

### 3. シミュレーションの結果

シミュレーションは常温 (0.0253eV) の単原子水素原子の原子核に関して行った。原子核はマックスウェル分布に従った速度分布を持たせ、中性子の速度は2200m/sec (0.0253eV) に固定した。

シミュレーションは、マックスウエルのサンプル数4988点、散乱角の変動を含めたすべてのサンプル数、249400000 ( $2.494 \times 10^8$ ) で行った。結果の一例を図1に示した。図は $\beta = 0.5$ の場合である。

理論値の散乱法則とシミュレーションの散乱法則の一致はよいといえよう。さらにシミュレーションのサンプル数を増加することにより一致の程度は改善されることが期待される。

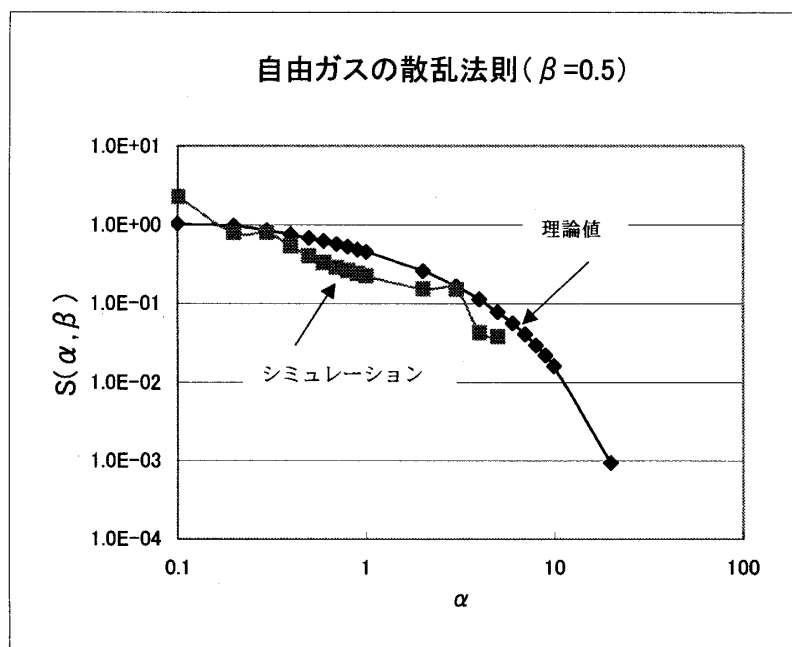


図1 自由ガスの理論値とシミュレーションの比較

### 4. 結論と今後の計画

この論文で、熱中性子による非弾性散乱の直接散乱のシミュレーションが可能であることが確認できた。今後の計画は次のとおりである。

- (i) プログラムの高速化が必要である。このためには、並列計算を可能にする。
- (ii) 散乱体の物理モデルを変更する。特に単原子気体の液体 (液体Ar) に関しては、すでに分子動力学の並列化計算プログラムの開発は完了しており、モデルの変更は容易に行える。

さらに新しい研究課題として次のようなテーマが考えられる。熱中性子による散乱では、

ここで述べたような非干渉性散乱（中性子の波として性質が表に表れないタイプの散乱過程）以外に干渉性散乱が知られている。非弾性の干渉性散乱は、形式的な立式はできているが、簡単な結晶以外での散乱法則の計算は行われていない。そこで、本論文で述べた手法を非弾性干渉散乱過程への拡張の可能を検討する。

## 5. 参考文献

- (1) 小島航、角谷浩享、“並列計算機の試作とその性能評価”、静岡産業大学 国際情報学部 研究紀要、第6号、p.45～p.49 (2004)
- (2) V. F. Turchin, “Slow Neutrons”, Sivan Press, Jerusalem, 1965
- (3) Hiroyuki Kadotani, “THRUSH: A Code For Calculating Thermal Neutron Scattering Kernel”, 1980, JAERI-M 8927 (1980)