



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	北大45MeV電子線形加速器による液体の中性子回折
Author(s)	松本, 高明; Matsumoto, Takaaki; 大友, 詔雄 他
Citation	北海道大學工學部研究報告, 93, 11-21
Issue Date	1979-01-31
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/41550
Type	departmental bulletin paper
File Information	93_11-22.pdf



北大 45 MeV 電子線形加速器による 液体の中性子回折

松本高明* 大友詔雄** 千田正宣***
(昭和53年9月27日受理)

Neutron Diffraction for Liquids Using a 45 MeV Electron Linear Accelerator at Hokkaido University

Takaaki MATSUMOTO, Norio OHTOMO and Masanori SENDA
(Received September 27, 1978)

Abstract

A neutron diffractometer, which utilizes a time-of-flight (TOF) neutron diffraction method, has been newly installed in a 45 MeV electron linear accelerator at Hokkaido University. Using the equipment, measurements of structure factors for several polycrystalline materials and molecular liquids have been made with ease, and, especially, data of superior quality for liquids can be obtained. Thus, it has been shown that the TOF diffraction method is a powerful means for studying the structure of liquids, compared with the conventional neutron diffractometry using a steady reactor. The structure factors obtained for heavy water and acetonitrile have been demonstrated.

1. 序 言

中性子の波動性にもとづく回折の可能性が示唆され¹⁾, 最初の回折実験が行われたのは1936年のことである²⁾。以来40年を経過し, 今日では, 中性子回折は特に液体の研究の注目すべき重要な手段として確立して来ている。その理由は, 中性子回折がX線回折や電子線回折と原理的には同じであるが, 中性子の散乱が原子核そのものの散乱である点で, 荷電分布や電子雲による散乱であるX線や電子線の場合とは, 基本的に違った散乱振巾の特性を示し, 従って, 中性子回折が軽原子を含む多くの興味深い液体の研究に有力であることである。更に, 中性子回折は, 周期的構造を本質とする結晶の解析に著しい発展を見せたX線回折や, 孤立分子の分子内構造の決定に用いられている電子線回折では十分に見ることの出来ない, 固体や気体とは基本的に異なる分子間相互作用による液体構造をとらえることが出来ることである。

さて, 中性子回折実験の進歩を支えたのは, 安定で強力な熱中性子を供給する原子炉であった。しかし, Baconも言う様に, 中性子回折のためには「実用的視点から見れば, 原子炉を設置し保守するには莫大な技術的・経済的負担を不可避とする。この点から原子炉は不利である³⁾。」従っ

* 北海道大学工学部 原子工学科 (原子炉工学講座)

** 北海道大学工学部 原子工学科 (放射線源工学講座)

Department of Atomic Engineering, Faculty of Engineering, Hokkaido University, Sapporo, Japan.

*** CRC センチュリリサーチセンター株式会社

Century Research Center Co. Ltd. Nihonbashi 3-2, Chuoku, Tokyo.

て、60年代末になってからのことではあるが、電子線型加速器 (LINAC) の利用が行われる様になった⁴⁾。ところで、今日迄10年の経過を見ているが、LINAC 中性子回折は、上述した液体の研究と関わって、以下に述べる様な優れた点があるにもかかわらず、その利用は極めて限られている。

LINAC を利用した中性子回折では、中性子源がパルス状であるため、飛行時間 (TOF) 法によるエネルギー分析を行うこととなるが、その方法は、原子炉における定常中性子源による方法と対比して次の様な諸特徴をもつ⁵⁾。

i) TOF 法では、運動量変化の広い領域にわたって満遍無く同時測定がなされる。このことによって、計数効率を高めることが可能であり、統計精度の改善は容易である。

ii) LINAC では、熱外中性子強度が高いため、大きな運動量変化領域の測定が可能である。

iii) 原子炉における結晶反射法の場合とは違って、結晶モノクロメータを用いないから、半波長成分等の高調波成分の混入がない。

iv) 固定した散乱角で測定が行われるため、装置の作成が容易であり、又極端条件下での測定も比較的簡単になる。等々。

これらの特徴の中でも、i) 及び ii) は、TOF 法が測定点を数多く必要とする散乱体、即ち、粉体、液体、非晶体の測定に対して特に有利であることを示すものである。

ところで、液体の中性子回折は、その“構造”を明らかにするために、その静的 (平衡) 構造と動的構造とに関わって、この両面から研究が進められており、前者及び後者を反映するものとして、それぞれ (静的) 構造因子 $S(Q)$ 及び力学的構造因子 (dynamical structure factor) $S(Q, \omega)$ を求める努力が続けられている。 $S(Q, \omega)$ は散乱法則と呼ばれ、中性子と相互作用する散乱対象である液体の原子・分子の全ての構造と運動とを記述する最も重要な物理量である。しかし、一般にこれを厳密に求めることは困難である。又、液体のダイナミクスはその平衡構造によって規定されていることを考えれば、現時点ではむしろ $S(Q)$ を求めることが、液体の“構造”を明らかにする上で、当面可能な基本的に重要な目標となる。

更に、分子性液体の場合、その構造は、基本的実体である個々の分子の分子内構造と、分子間相互作用によって決まる液体構造によって組み立てられている。この質的に異なる構造を内包させた液体構造は、中性子回折によって得られる $S(Q)$ に反映する。即ち、 $S(Q)$ 曲線において、 $Q \rightarrow 0$ の極限点では標的系全体の熱力学的特徴が反映し、小さな Q 領域では液体構造、大きな Q 領域では分子内構造がそれぞれ反映する。 Q のさらに大きな領域には、液体が自由気体の様に見える、所謂、運動力学的特徴が反映している⁶⁾。

このように、精度良く求められた $S(Q)$ には大きな価値がある。そこで我々は、北大工学部の 45 MeV 電子 LINAC⁸⁾ を利用した液体の中性子回折実験を行い $S(Q)$ を求めることを計画した。そのため先ず、中性子回折装置を作製・設置し、それによって種々の液体の散乱スペクトルの測定を行い $S(Q)$ を求めた。その結果、予想通りの質の高いデータを短時間で且つ容易に得ることが出来た。本論文においてそれらを報告する。

2. 中性子散乱理論^{6,7)}

中性子散乱は、量子力学的体系の時間依存の散乱理論における相互作用表示の理論を用いて記述される。この理論で中心的役割を果たす重要な物理量が、状態間の遷移確率を与える S 行列 (あるいは散乱行列) であり、散乱断面積はこの S 行列から決められる。低エネルギー中性子の散乱においては、Born 近似で計算されたこの遷移確率を、Fermi の擬ポテンシャルと呼ばれる δ -関

数で近似した相互作用ポテンシャルを用いて計算する。

こうして力学的構造因子 $S(Q, \omega)$ は、エネルギー変化 $\hbar\omega(=E_0-E_s)$ 及び運動量変化 $\hbar\mathbf{Q}(=\hbar\mathbf{k}_0-\hbar\mathbf{k}_s)$ に対応する保存則

$$\delta(\mathbf{Q}-\mathbf{k}_0+\mathbf{k}_s)\equiv\frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i(\mathbf{Q}-\mathbf{k}_0+\mathbf{k}_s)\cdot\mathbf{r}}d\mathbf{r} \quad (1\cdot a)$$

及び

$$\delta(\hbar\omega-E_0+E_s)\equiv\frac{1}{2\pi}\int e^{i[\hbar\omega-(E_0/\hbar)+(E_s/\hbar)]\tau}d\tau \quad (1\cdot b)$$

を用いて、次式で求まる。

$$S(Q, \omega)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}d\tau e^{-i\omega\tau}\sum_{\nu, \nu'}\langle b_\nu b_{\nu'} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_\nu(\tau)} e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_{\nu'}(0)}\rangle. \quad (2)$$

ここで、添字 0 及び s はそれぞれ入射中性子及び散乱中性子に対して用い、 ν, ν' は標的系内の原子核について用いている。 $\mathbf{r}_\nu(\tau)$ は、標的系についてのハミルトニアンを H とするときの Heisenberg 表示の演算子である：

$$\mathbf{r}_\nu(\tau)\equiv e^{i(H\tau/\hbar)}\mathbf{r}_\nu e^{-i(H\tau/\hbar)}. \quad (3)$$

このような Heisenberg 表示の演算子が現われるのは、標的系の力学的性質が散乱断面積に反映するからである。 b は、中性子に対する原子核の散乱長である。

さて、 $S(Q, \omega)$ は、散乱前後において相対的中性子束の差をもたらす中性子速度の変化 k_s/k_0 と、検出器の感度のエネルギー依存性 $F(k_s)$ とを考慮して、実験的に測定されることの出来る二次微分散乱断面積 $d^2\sigma/d\Omega d\omega$ と次の公式で結びつけられる。

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega}=F(k_s)\frac{k_s}{k_0}S(Q, \omega) \quad (4)$$

左辺を実験的に求めることによって $S(Q, \omega)$ を得ることが出来る。この $S(Q, \omega)$ がわかれば、液体内の原子の空間的・時間的分布構造を知ることが出来るので、この公式が、中性子散乱によって液体内の原子的構造を探る方法の基礎式になっている。 $S(Q, \omega)$ は、所謂、von Hove の時空間相関々数 $G(\mathbf{r}, t)$ によって次式で書き表わされる：

$$S(Q, \omega)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dte^{-i\omega t}\int d\mathbf{r}e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}}G(\mathbf{r}, t), \quad (5\cdot a)$$

$$G(\mathbf{r}, t)=\frac{1}{N}\sum_{\nu, \nu'}\int d\mathbf{r}'\langle\delta[\mathbf{r}-\mathbf{r}'+\mathbf{r}_\nu(0)]\delta[\mathbf{r}'-\mathbf{r}_{\nu'}(t)]\rangle. \quad (5\cdot b)$$

入射ビームに対して 2θ 方向に散乱される中性子を観測する場合、(1) 式から次の関係式を得る。

$$Q^2=2k_0^2\left[1-\frac{m\omega}{\hbar k_0^2}-\left(1-\frac{2m\omega}{\hbar k_0^2}\right)^{1/2}\cos\theta\right] \quad (6\cdot a)$$

弾性散乱のみについては、 $\omega=0$ であるから

$$Q\equiv 2k_0\sin\theta=\frac{4\pi}{\lambda_0}\sin\theta. \quad (6\cdot b)$$

ここで、 m は中性子質量であり、 λ は中性子波長である。

液体の平衡構造の決定を目的とする場合、構造因子 $S(Q)$ を求めればよい。これは、(4) 式から次式で求まる。

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\int_{-\infty}^{E_0/\hbar}F(k_s)\frac{k_s}{k_0}S(Q, \omega)d\omega, \quad (7)$$

ここで、中性子と原子核との間にあらゆる種類のエネルギー交換が無い場合、即ち、static 近似

のときには,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = S(Q) = \int_{\text{const. } \theta} S(Q, \omega) d\omega \quad (8\cdot a)$$

$$= \sum_{\nu, \nu'} \langle b_{\nu} b_{\nu'} e^{iQ \cdot r_{\nu\nu'}} \rangle, \quad (r_{\nu\nu'} \equiv r_{\nu} - r_{\nu'}). \quad (8\cdot b)$$

となる。ところが、実際の散乱過程に対しては (7) 式が成り立つから、 $S(Q)$ を求めるには、static 近似による差を補正しなければならない。その代表的な方法が、Placzek 補正と呼ばれる方法である。

最後に、 $S(Q)$ は、動径分布関数 $g(r)$ と次式で示される Fourier 変換で結ばれる：

$$S(Q) \equiv 1 + \frac{N}{V} \int e^{iQ \cdot r} [g(r) - 1] dr, \quad (9)$$

ここで、 N は標的系の原子核の数であり、 V はその体積である。

3. TOF 法による中性子回折実験

3.1 原理

中性子回折実験は、北大工学部の 45 MeV 電子線形加速器 (LINAC)²⁾ に付設されたパルス状熱中性子源からの低エネルギー中性子を用いて行われた。スペクトロメータを含めた全実験系の鳥瞰図が図 1 に示されている。又、その平面図が図 2 である。

LINAC・TOF 法は次のようにして行われる。LINAC からの電子ビーム (e^-) (エネルギー 45 MeV, パルス巾 $3\mu\text{s}$, パルスの繰返し周波数 100 pps) とターゲットの重金属原子の電子雲との相互作用による制動輻射 γ 線による (γ, n) 反応を通して、パルス状の高エネルギー中性子 (光中性子) が発生する。この光中性子が減速材体系において減速・熱化され Maxwell 分布をとる低エネルギー中性子となる。この白色中性子が試料を照射する。そして、試料で散乱された中性子が 2θ [度] 方向の検出器によって検出される。このとき、中性子の飛行距離を l [m] とすれば、エネルギー E [eV] (あるいは波長 λ [Å]) の中性子の飛行時間 t [μs] は、

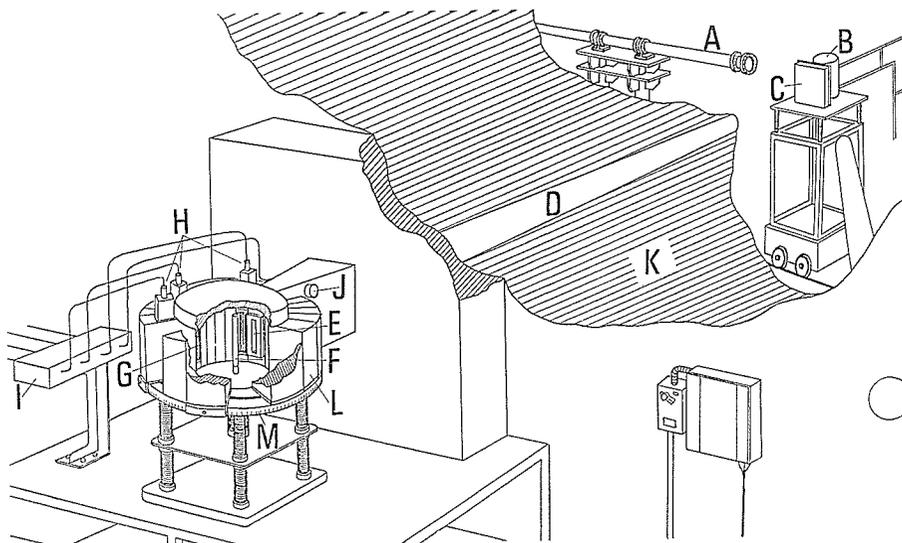


図 1 実験装置全体の鳥瞰図 A: LINAC, B: ターゲット (Pb), C: 減速体系 (H_2O), D: 飛行管, E: コリメータ, F: 試料, G: Soller コリメータ, H: 検出器 (^3He), I: 前置増巾器, J: モニター用検出器 (BF_3), K: 遮蔽壁

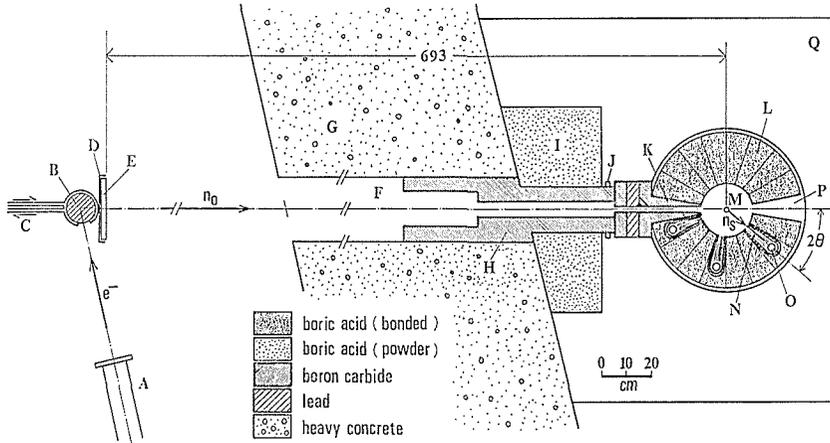


図2 実験装置の平面図 A: LINAC, B: ターゲット, C: 冷却水, D: Cd シート, E: 減速体系, F: 飛行管, G: 遮蔽壁, H: コリメータ, I: 遮蔽ブロック, J: モニター, K: プレ・コリメータ, L: 遮蔽ブロック, M: 試料, N: Soller コリメータ, O: 検出器, P: ゴニオメータ, Q: テーブル

$$t = \frac{72.3 l}{\sqrt{E}} = 106.01 l \lambda \quad (10)$$

となる。TOF 法では、以上の過程において l と θ を固定し、時刻 t に検出される中性子数を計測する。 $Q[\text{\AA}^{-1}]$ は、(10) 式を用いて、(6・b) 式から求まる。

$$Q = 3177 \frac{l}{t} \sin \theta \quad (11)$$

3.2 パルス状熱中性子源

パルス状熱中性子源は、ターゲットと減速材体系とから構成される。ターゲットは、12 cm ϕ の円筒状の Pb ブロックを強制水冷したものである。このときの冷却水は、光中性子の反射体を兼ねている。減速材体系は、板状 (250 \times 250 \times 25 mm³) の軽水である。中性子の強度とパルス巾は、実験の精度と分解能に寄与する重要な因子である。狭いパルス巾で最大強度を得る様に、ターゲットと軽水体系の幾何学的形状・寸法・配置に対して最適設計がなされている。又、反射中性子によるパルス巾の広がりを防ぐために、ターゲットと軽水体系の間に Cd シートが挿入されている。

3.3 スペクトロメータ

中性子源において発生した白色中性子は、 γ 線及び中性子線に対する遮蔽壁 (3.5 m 厚) 内に設けられた飛行管内を飛行する。この飛行管の出口には、過剰な γ 線と中性子線を除去するコリメータが置かれ、又、試料の前には、中性子ビームを平行化する Soller コリメータが置かれている。Soller コリメータの開き角は、分解能に最も影響する因子であるから、小さな散乱角で測定が行われる場合は十分に狭い開き角をもつものと交換される。これらのコリメータと試料との角度関係は、高精度のゴニオメータによって決められている。ゴニオメータは、迷中性子の遮蔽を十分に行うため、B₄C あるいは硼酸をエポキシ接着剤で固化・整形し、Cd でカバーしたブロックでおおわれている。

3.4 データ集積

散乱中性子による ³He カウンター内に発生した電気信号は電子回路によって増巾され波形整形・波高弁別の後、多重時間分析装置に送られる。多重時間分析装置は、LINAC トリガー信号によって時間起点が決められ、散乱中性子の信号の時間的分布を集積する。又、測定系は、3つ

の異なる散乱角に対しての測定とモニター系に対するものと合計4系統が同時測定可能となるように準備されている。現在の測定は、チャンネル巾 $20 \mu\text{s}$ 、チャンネル数512で行われた。従って、例えば、飛行路 7.13 m 、散乱角 $2\theta=50^\circ$ とした場合、 Q の値の下限は $\sim 1 \text{ \AA}^{-1}$ 、上限は $\sim 20 \text{ \AA}^{-1}$ となる。

3.5 分解能

分解能 $\Delta Q/Q$ は、(11) 式対数微分をとり、 θ, t 及び l の不確定さ $\Delta\theta, \Delta t$ 及び Δl が、それぞれ独立に分解能に寄与するとして次式で書かれる。

$$\frac{\Delta Q}{Q} = \left[(\Delta\theta \cot \theta)^2 + \left(\frac{\Delta t}{t}\right)^2 + \left(\frac{\Delta l}{l}\right)^2 \right]^{1/2} \quad (12)$$

i) $\Delta\theta$ は、Soller コリメータの巾 (w) による広がり、散乱ビームの検出器長 (H) 及び試料長 (X) による縦方向の広がりによる。 $2\theta=50^\circ$ のとき、 $H=X=10 \text{ cm}$ 、 $w=0.3 \text{ cm}$ で、試料と検出器間距離を 20 cm とし、 $\Delta\theta \cot \theta=0.066$ である。これが $\Delta Q/Q$ には最も大きく影響している。

ii) Δt は、中性子源からの低エネルギー中性子パルス巾 (τ_m) と、LINAC 電子銃からの電子パルス巾 (τ_p) 及び多重時間分析装置でのチャンネル巾 (τ_c) から決まる。 τ_m は、中性子の所謂平均放出時間に対応し、中性子源体系と中性子エネルギー依存の量であり、理論的・実験的に求められる。例えば、現在の体系では、 $\lambda=0.3 \text{ \AA}$ で $\tau_m \sim 1 \mu\text{s}$ 、 $\lambda=1.8 \text{ \AA}$ で $\sim 25 \mu\text{s}$ である。 $\tau_p=3 \mu\text{s}$ 、 $\tau_c=20 \mu\text{s}$ であるから、小波長領域では τ_c が主たる寄与をなす。

iii) Δl は、入射中性子飛行路長に対する不確定さとしての中性子源の放出面の有効半径 ($\sim 15 \text{ cm}$) と、散乱中性子の飛行路長に対する不確定さとしての検出器直径 ($\sim 2.54 \text{ cm}$) とから決まる。以上の詳細は、文献 9) に記述されている。 $\Delta Q/Q$ の一例を図3に示す。

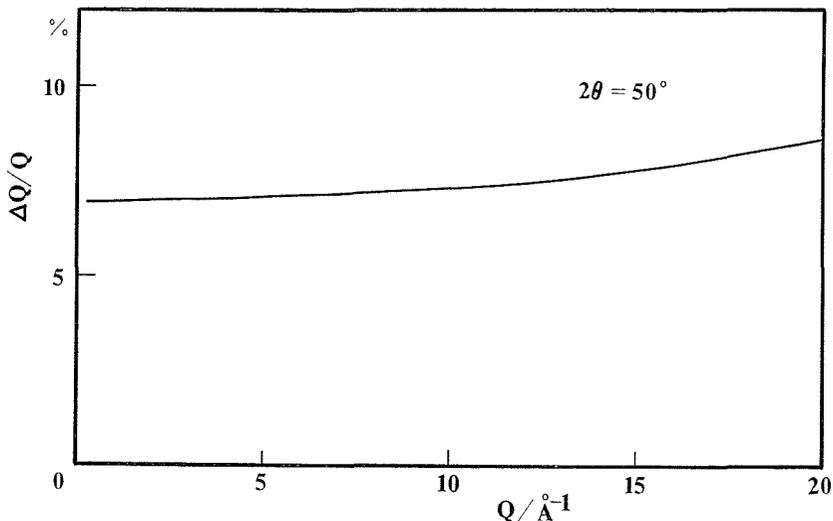


図3 分解能 $\Delta Q/Q$

3.6 Q 軸の変換と較正

(11) 式から、 l と θ が既知であれば飛行時間 t に対する Q の値が決まる。この Q の値については、前述の中性子源の平均放出時間 τ_m の補正を行って較正される。簡単で且つ精確な方法は、既知の明瞭な Bragg 反射ピークをもつ多結晶物質 (後述) あるいは熱中性子エネルギー領域で典型的な $1/v$ 吸収を示す物質からの散乱スペクトルを用いることである。本実験では、多結

晶物質 (Cu, Be, Zr 等々) を用いてその Bragg 反射ピークを測定して Q 軸の較正が行われた。又、これらの散乱ピークから逆に散乱角、飛行路長はもとより装置のみかけの分解能も求めることが出来る。

3.7 実験手順と $S(Q)$ の導出

構造因子 $S(Q)$ を得るには、少くとも次の三種の測定が必要である：i) 試料+容器+(B. G.), ii) 容器+(B. G.), iii) バナジウム+(B. G.)。ここで、B. G. とはバックグラウンドのことで、主に空気による散乱である。試料は、バナジウム箔 (0.025 mm 厚) によって作られた $1.0\text{ cm}\phi$ の円筒状容器に入れられている。標準物質として、ほぼ完全な非干渉性散乱体であるバナジウム棒 (試料と同形同寸法) が用いられている。上記の TOF スペクトルに対して、次に述べる各種の補正 (多重散乱, 吸収, B. G., Placzek 補正) 及び絶対値の規格・較正を行って $S(Q)$ が得られる。即ち、各種補正を行って得た試料に対する散乱データ $C(\theta, Q)$ は、バナジウムに対するデータ $C_v(\theta, Q)$ を規準にして、次式で $S(Q)$ に変換される。このとき、絶対値の規格・較正は、試料とバナジウムの原子の個数密度比を用いてなされる。

$$S(Q) = N_v b_v^2 \frac{C(\theta, Q)}{C_v(\theta, Q)} + \text{補正項} \quad (13)$$

3.8 各種補正

補正計算は、高次代数関数の最小自乗法による整合計算によって平滑化されたデータに対して適用される。補正方法は、実験装置及び試料の幾何学的形状に依存し、現在のところ一般的方法是未確立であるため、半経験的手法を用いて行なわれる⁹⁾。

i) 多重散乱補正：厳密な計算には $S(Q, \omega)$ と実験体系の全ての知識が要求されるが、実際上は近似法が用いられる。我々は Blech と Averbach の方法を用いた¹⁰⁾。

ii) 吸収補正：円筒形あるいは環状形状の試料及び容器に対して、X 線回折の場合に用いられている Paalman と Pings の方法が応用出来る¹¹⁾。多重散乱補正を行った後に取り出された一回散乱中性子強度についてこの補正が行われた。

iii) B. G. 補正：多重散乱と吸収補正が行われた散乱データに対して、この B. G. データが差し引かれた。

iv) Placzek 補正：散乱核の熱運動等々の反跳効果によって、中性子の回折散乱は厳密に弾性散乱にはならない。この問題は、軽原子を含む液体 (例えば D_2O 等) の場合に無視出来ないものとなる。この効果の厳密な評価は、当然 $S(Q, \omega)$ の知識を必要とする。普通、単原子液体に対して近似として定式化されている Placzek の方法が用いられる¹²⁾。TOF 中性子回折法に対しては、この Placzek 近似を応用した Powles の方法がある¹³⁾。

4. 測定結果

4.1 多結晶物質の回折パターン

TOF 法では、(10) 式によって、中性子の飛行時間 t を測定することにより Bragg 反射を起す中性子波長 λ を知って、次式から格子間隔 d_{hkl} を求めることが出来る。

$$2d_{hkl} \sin \theta = \lambda \quad (14)$$

特に TOF 法の場合、一つの散乱角で全ての回折線の測定が可能である。

図 4 には、こうして得た Cu 多結晶の時間スペクトルを示してある。測定に要した時間は約 30 分であった。散乱角が大きい程、分解能は向上している。図 5 は、Be 多結晶について、時間軸を Q 軸に変換して示した散乱スペクトルである。

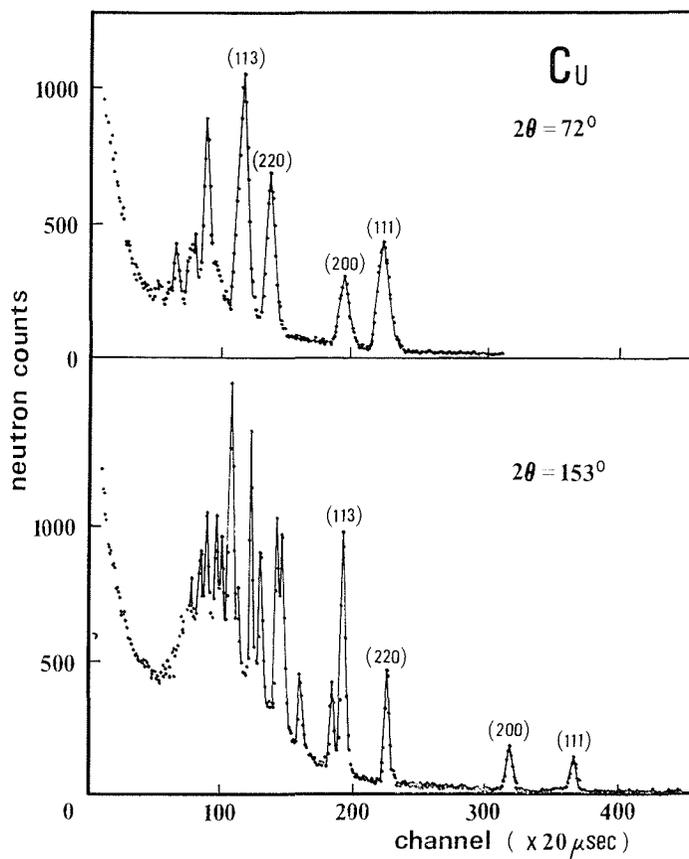


図4 Cu 多結晶の回折パターン

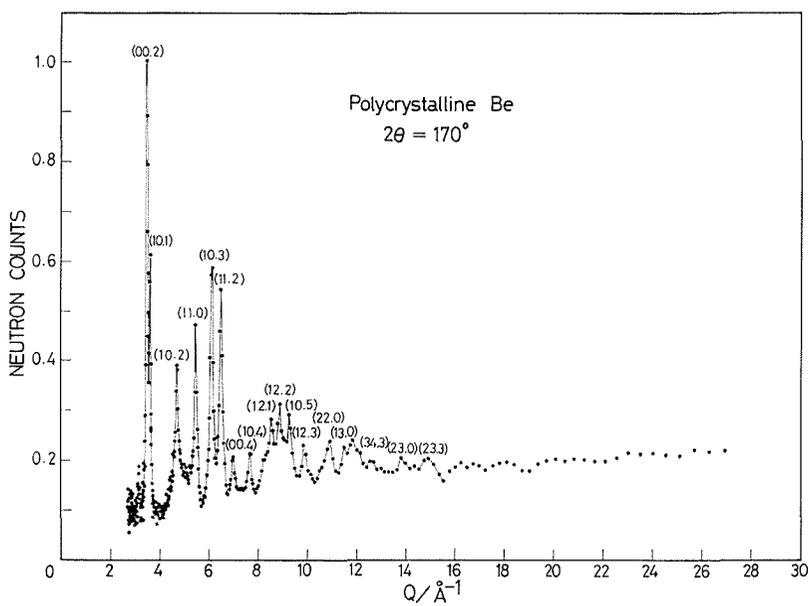


図5 Be 多結晶の回折パターン

4.2 分子性液体の回折パターン

分子性液体の構造因子 $S(Q)$ を求めることは、液体物性論の分野はもとより他の多くの研究分野で興味深い今日の研究課題となっている。先に述べた様に、TOF 法による中性子回折実験は、この目的のために極めて強力な手段となる。我々は、一連の分子性液体（例えば、重水及び電解質水溶液、アルコール系列、ベンゼン系列及びその他の有機溶媒等々）に対する測定を行った。

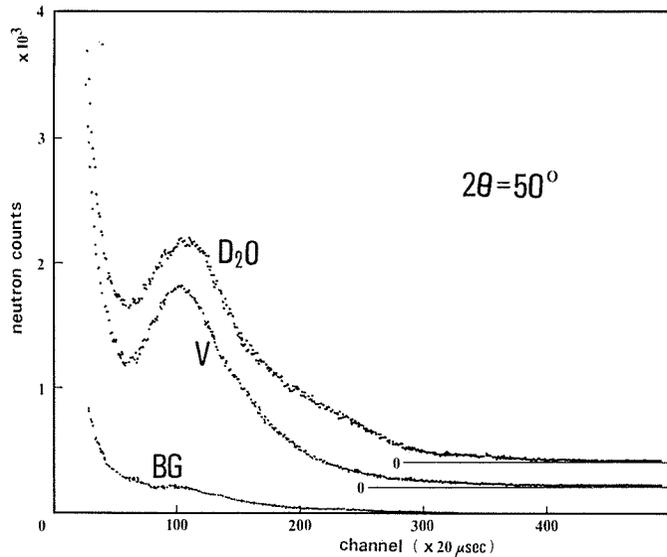


図6 重水 (D_2O) の回折パターン、バナジウム (V) の回折パターンとバックグラウンド (BG) が比較されている

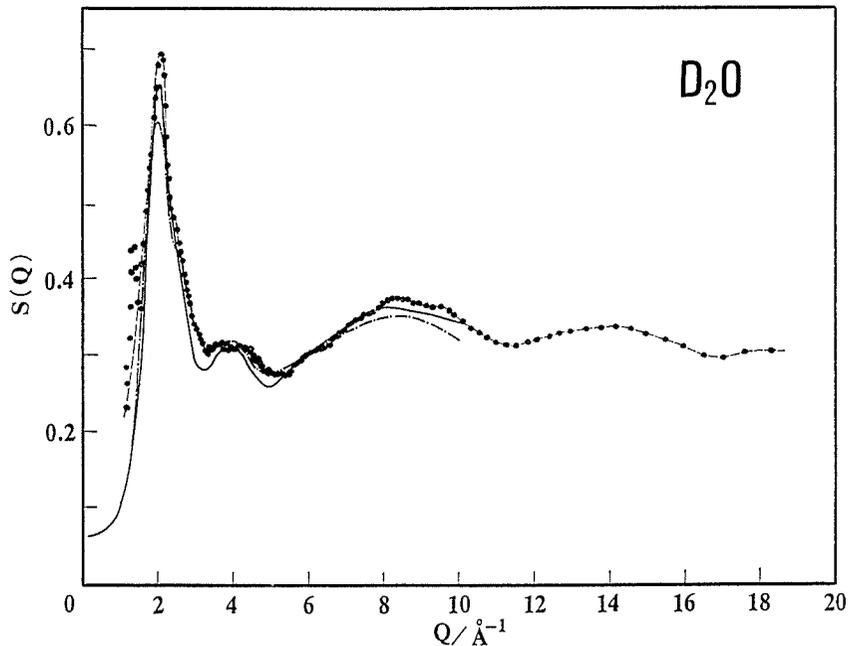


図7 D_2O の構造因子 $S(Q)$: 著者らによるもの (黒丸印)、Page-Powles によるもの (鎖線) 及び Narten によるもの (実線) が比較されている

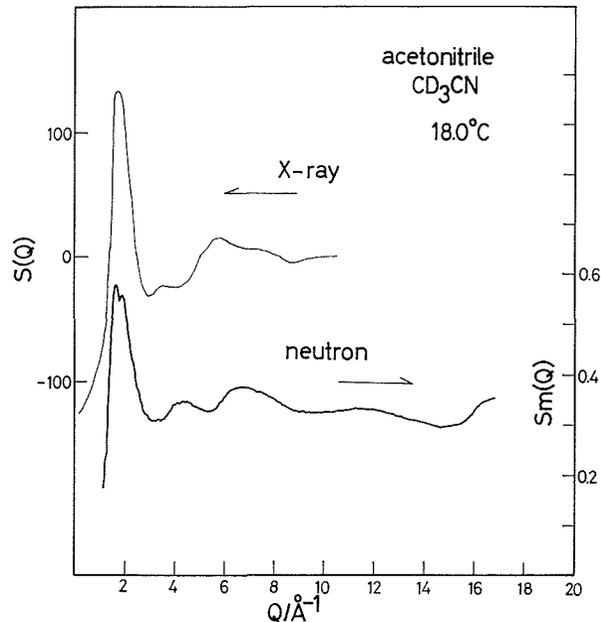


図8 アセトニトリル (CD_3CN) の構造因子 $S_m(Q)$: X線による因子 $S(Q)$ と比較されている

その結果、一層そのことが明確になった。本論文では、その中から例として、重水 (D_2O)¹⁴⁾ とアセトニトリル (CD_3CN) の結果について紹介する。

図6は、 D_2O (17°C) に対して得た時間スペクトル (生データである。バナジウム及び平滑化した B. G. スペクトルも示してある。散乱角 $2\theta = 50^\circ$ であり、測定時間は全て 90 分である。スペクトルについて、統計誤差は $Q > 2 \text{ \AA}^{-1}$ で、約 1.7% である。これらのデータに対して全ての補正及び較正を行って求めた構造因子 $S(Q)$ を図7に示してある。図には、原子炉における定常中性子源を用いた回折法によって得られている Page と Powles¹⁵⁾ 及び Narten¹⁶⁾ の結果が、比較のために示されている。我々によって得られた $S(Q)$ は、かなり大きな Q の値 ($\sim 18 \text{ \AA}^{-1}$) 迄求められている。三者の $S(Q)$ は、 2 \AA^{-1} の第一ピーク及び $8 \sim 10 \text{ \AA}^{-1}$ の巾広のピークの絶対値に若干の差が認められるが、我々の得た結果は、他の二者のものとは比べて、LINAC と原子炉しかも TOF 法と結晶回折法との違いがあるにもかかわらず基本的な一致を見ている。

図8は、同様にして求められた CD_3CN の $S(Q)$ である。測定は $2\theta = 45^\circ$ で行われた。補正は、バナジウムの吸収に対してのみ行われている。X線回折による結果¹⁷⁾が比較されている。両者の結果は、ピーク位置での良い一致が得られている。一方、相対的ピーク強度には、中性子とX線とで異なる散乱振巾による差が出ている。中性子回折で得た $S(Q)$ には、重水素による比較的大きな寄与があらわれている。

5. 結 言

北海道大学工学部の 45 MeV 電子 LINAC を利用した TOF 法による中性子回折実験を行うために著者らによって作られ設置された中性子回折装置によって、多結晶物質及び分子性液体についての構造因子の測定が行われた。その結果、得られるデータが極めて良質であること、又、実験も非常に簡便であり、本装置が優れて高い実用性と有効性をもつことが明らかになった。こ

うして、TOF 法による中性子回折は、特に液体の構造因子の決定のために、極めて強力な手段となることが証明された。

参 考 文 献

- 1) Elsasser, W. M.; C. r. held. Séanc. Acad. Sci. Paris **202**, 1029 [1] (1936).
- 2) Halban, H. and Preiswerk, P.; *ibid.*, **203**, 73 [1] (1936).
- 3) Bacon, G. E.; "Neutron Diffraction" 3-rd ed., Clarendon Press, Oxford (1975).
- 4) Moore, M. J., Kasper, J. S. and Manzel, J. H.; *Nature, Lond.* **219**, 848 (1968). Kimura, M., Sugawara, M., Oyamada, Y., Tomiyoshi, S., Suzuki, T., Watanabe, N. and Takeda, S.; *Nucl. Instrum. Methods* **71**, 102 (1969).
- 5) 石川義和, 渡辺 昇; 日本物理学会誌 第28巻第6号, 461 (1973). 石川義和; 日本原子力学会誌 Vol. 18, No. 7, 401 (1976).
- 6) Powles, J. G.; *Adv. in Phys.*, 22, 1 (1973). Egelstaff, P. A.; 廣池和夫, 守田徹訳, "液体論入門", 吉岡書店 (1971), 原書は1967年刊.
- 7) 砂川重信; "散乱の量子論", 岩波全書 (1977).
- 8) Enoto, T., Tanida, H., Sato, K. and Ozawa, Y., *Proceedings of the 1978 Linear Accelerator Meeting in Japan* (1978).
- 9) 大友詔雄, 松本高明, 千田正宣; 内部資料.
- 10) Blech, I. A. and Averbach, B. L.; *Phys. Rev.*, 137 A, 1113 (1965).
- 11) Paalman, H. H. and Pings, C. J.; *J. Appl. Phys.*, 33, 2645 (1962).
- 12) Placzek, G.; *Phys. Rev.*, 86, 377 (1952).
- 13) Powles, J. G.; *Mol. Phys.*, 26, 1325 (1973).
- 14) Ohtomo, N. and Arakawa, K.; *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **51**, 1649 (1978).
- 15) Page, D. I. and Powles, J. G.; *Mol. Phys.*, 21, 901 (1971).
- 16) Narten, A. H.; *J. Chem. Phys.*, 56, 5681 (1972).
- 17) Bertagnolli, H. and Zeidler, M. D.; *Mol. Phys.*, 35, 177 (1978).