

連載講座



中性子イメージング技術の基礎と応用 (基礎編第2回)

中性子の特徴的透過特性——低エネルギー中性子断面積†

鬼柳善明

北海道大学大学院工学研究科量子理工学専攻応用量子ビーム工学講座
060-8628 北海道札幌市北区北13条西8丁目

Key Words : neutron, neutron imaging, differential cross section, low energy neutron, neutron diffraction, Bragg edge, refraction, reflection, vibration, energy spectrum

中性子は質量があり、数十 meV のエネルギーでも、その波長が回折を起こす領域となるため、低エネルギー領域における中性子の透過は、吸収断面積が極端に大きくない限り、原子・分子の運動や結晶の構造等に依存したものとなる。干渉性と非干渉性の二種類の散乱があることを本講座基礎編第1回(前号)で述べたが、それが散乱の様子に大きく影響する。構造や運動が中性子の透過にどう影響してくるかを知る基礎として散乱断面積について見てみる^{1)~4)}。

1. 散乱断面積の基礎

約 1 eV 以上のエネルギーでは、分子や結晶などの構造、原子の運動があまり影響しない断面積となり、それについては、本講座基礎編第1回(前号)に述べた通りである。低エネルギー領域においては、散乱断面積はより複雑な表式となる。散乱体の量子レベル ℓ の状態から ℓ' へ遷移し、中性子の波数ベクトル \mathbf{k} が \mathbf{k}' へ、エネルギーが E から E' へ変化するときの微分

散乱断面積は次の式で表される。

$$\left(\frac{d^2s}{d\Omega dE'}\right)_{\ell \rightarrow \ell'} = \frac{k'}{k} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |\langle \mathbf{k}'\ell' | V | \mathbf{k}\ell \rangle|^2 \delta(E_\ell - E_{\ell'} + E - E') \tag{1.1}$$

ここで、 m は中性子質量、 V は相互作用ポテンシャルである。 δ 関数はエネルギー保存則を表す。中性子の波長 λ 、波数ベクトル \mathbf{k} 、運動量 \mathbf{P} 、エネルギー E の関係は以下の通りである。

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \mathbf{P} = \hbar \mathbf{k} \tag{1.2}$$

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{1.3}$$

ここで、ポテンシャル V は、散乱体内原子の位置を \mathbf{R} 、中性子の位置を \mathbf{r} とすれば、フェルミ (Fermi) の擬似ポテンシャルから、次のように表される。

$$V(\mathbf{R} - \mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} b \delta(\mathbf{R} - \mathbf{r}) \tag{1.4}$$

このポテンシャルにより、中性子のコンタクトポイントは散乱原子と同じ場所になり、位置座標としては、散乱体内原子 (正確には原子核)

†Fundamentals and Applications of Neutron Imaging (Fundamentals Part 2).

Characteristic Transmission Feature of Neutrons—Low Energy Neutron Cross Section.

Yoshiaki KIYANAGI : Division of Quantum Science and Engineering, Graduate School of Engineering, Hokkaido University, Kita-13, Nishi-8, Kita-ku, Sapporo-shi, Hokkaido 060-8628, Japan.

の座標だけとなる。即ち、原子の位置を時間の関数として得られれば断面積が計算できることになる。強度因子 b は束縛散乱長であり、自由粒子の散乱長 α に対して、散乱体の原子量 M 、中性子質量 m とすると、以下の関係が成り立つ。

$$b = \alpha (M + m) / M \quad (1.5)$$

散乱体の中に、いくつかの原子が存在すると考えると、それらについて和をとらなければならない。その場合には、ポテンシャルも、

$$V = \sum_i V_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (1.6)$$

となる。ここで、 $\mathbf{k} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ とおくと、

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} \right)_{\ell \rightarrow \ell'} = \frac{k'}{k} \left| \sum_i b_i \langle \ell' | \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_i) | \ell \rangle \right|^2 \delta(E_\ell - E_{\ell'} + E - E') \quad (1.7)$$

$\hbar\omega = E - E'$ とし、 δ 関数を積分形で表し、ハイゼンベルグ表示を利用して変形し、位置座標を時間の関数として表すと、次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} &= \sum_{\ell, \ell'} P_\ell \left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} \right)_{\ell \rightarrow \ell'} \\ &= \frac{k'}{k} \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{ii'} b_i b_{i'} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{\ell} P_\ell \langle \ell | \exp \left\{ -i\mathbf{k}\mathbf{R}_i(0) \right\} \\ &\quad \exp \left\{ i\mathbf{k}\mathbf{R}_i(t) \right\} | \ell \rangle \times \exp(-i\omega t) dt \end{aligned} \quad (1.8)$$

ここで、

$$P_\ell = \frac{1}{Z} \exp(-E_\ell/k_B T) \\ Z = \sum_{\ell} \exp(-E_\ell/k_B T)$$

である。 k_B はボルツマン因子である。散乱断面積は、

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} = \frac{k'}{k} \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{ii'} \overline{b_i b_{i'}} \int \langle \ell | Q_{ii'} | \ell \rangle \exp(-i\omega t) dt \quad (1.9)$$

となる。ただし、

$$\langle \ell | Q_{ii'} | \ell \rangle = \sum_{\ell} P_\ell \langle \ell | \exp \left\{ -i\mathbf{k}\mathbf{R}_i(0) \right\} \exp \left\{ i\mathbf{k}\mathbf{R}_i(t) \right\} | \ell \rangle$$

$$\overline{b_i b_{i'}} = (\overline{b})^2 \quad i \neq i' \\ \overline{b_i b_{i'}} = \overline{b^2} \quad i = i'$$

から、次式のように変形できる。

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} &= \frac{k'}{k} \frac{1}{2\pi\hbar} (\overline{b})^2 \sum_{ii'} \langle \ell | Q_{ii'} | \ell \rangle \exp(-i\omega t) dt \\ &\quad + \frac{k'}{k} \frac{1}{2\pi\hbar} \overline{b^2} \sum_i \int \langle \ell | Q_{ii} | \ell \rangle \exp(-i\omega t) dt \\ &= \frac{k'}{k} \frac{1}{2\pi\hbar} (\overline{b})^2 \sum_{ii'} \int \langle \ell | Q_{ii'} | i \ell \rangle \exp(-i\omega t) dt \\ &\quad + \frac{k'}{k} \frac{1}{2\pi\hbar} \left\{ \overline{b^2} - (\overline{b})^2 \right\} \sum_i \int \langle \ell | Q_{ii} | \ell \rangle \exp(-i\omega t) dt \end{aligned} \quad (1.10)$$

これから、回折、屈折などに関係する干渉性散乱 (coherent, 添字 coh) と $i = i'$ の項からなる非干渉性散乱 (incoherent, 添字 inc) の断面積に分けられる。

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} \right)_{\text{coh}} &= \frac{\sigma_{\text{coh}}}{4\pi} \frac{k'}{k} \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{ii'} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{\ell} P_\ell \langle \ell | \exp \left\{ -i\mathbf{k}\mathbf{R}_i(0) \right\} \exp \left\{ i\mathbf{k}\mathbf{R}_i(t) \right\} | \ell \rangle \\ &\quad \times \exp(-i\omega t) dt \\ \left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} \right)_{\text{inc}} &= \frac{\sigma_{\text{inc}}}{4\pi} \frac{k'}{k} \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_i \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{\ell} P_\ell \langle \ell | \exp \left\{ -i\mathbf{k}\mathbf{R}_i(0) \right\} \exp \left\{ i\mathbf{k}\mathbf{R}_i(t) \right\} | \ell \rangle \\ &\quad \times \exp(-i\omega t) dt \end{aligned} \quad (1.11)$$

ここで、 $\sigma_{\text{coh}} = 4\pi (\overline{b})^2$ 、 $\sigma_{\text{inc}} = 4\pi \left\{ \overline{b^2} - (\overline{b})^2 \right\}$ で

ある。

更にスピンによる干渉性、非干渉性を考慮すると、核スピン I と中性子スピンの平行の時の状態の数、

$$2\left(I + \frac{1}{2}\right) + 1 = 2I + 2$$

と、反平行の時の状態の数,

$$2\left(I - \frac{1}{2}\right) + 1 = 2I$$

から、スピンの平行の時の重みは,

$$g^+ = \frac{2I+2}{4I+2} = \frac{I+1}{2I+1}$$

スピンの反平行の時の重みは,

$$g^- = \frac{2I}{4I+2} = \frac{I}{2I+1}$$

になる。

したがって、 b^+ を核スピンと平行な時の散乱長、 b^- を反平行の時の散乱長とすると、

$$\bar{b} = \frac{1}{2I+1} \left\{ (I+1)b^+ + Ib^- \right\}$$

となる。

これから、 f_j を j 番目の同位体の割合とすれば、次式が得られる。

$$\bar{b} = \sum_j \frac{f_j}{2I_j+1} \left\{ (I_j+1)b_j^+ + I_j b_j^- \right\} \quad (1.13)$$

$$\bar{b}^2 = \sum_j \frac{f_j}{2I_j+1} \left\{ (I_j+1)(b_j^+)^2 + I_j (b_j^-)^2 \right\} \quad (1.14)$$

以上で、干渉性と非干渉性散乱断面積を具体的に検討していく上で必要な公式は得られた。

2. 中性子回折 (弾性散乱)

結晶の中の原子の位置は、基本ベクトル ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$) と整数値 (l_1, l_2, l_3) をもとに、以下のように表せる。

$$l = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3 \quad (2.1)$$

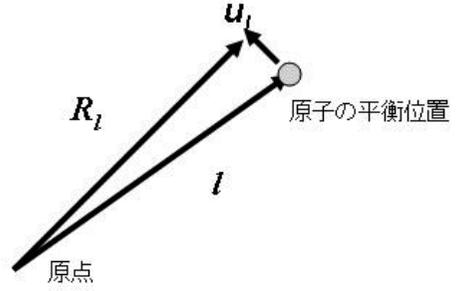


図1 原子の座標の取り方

この時、セルの体積は、

$$v_0 = \mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]$$

となり、以下の議論で必要となる逆格子ベクトル $\boldsymbol{\tau}$ は、次のようになる。

$$\boldsymbol{\tau}_1 = \frac{2\pi}{v_0} [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3], \boldsymbol{\tau}_2 = \frac{2\pi}{v_0} [\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1], \boldsymbol{\tau}_3 = \frac{2\pi}{v_0} [\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2]$$

逆格子空間の体積は、次式となる。

$$\boldsymbol{\tau}_1 \cdot [\boldsymbol{\tau}_2 \times \boldsymbol{\tau}_3] = \frac{(2\pi)^3}{v_0} \quad (2.2)$$

これらを用いて、中性子回折の散乱断面積を求めていく。原子の位置 \mathbf{R} を、 l は格子点の位置 (平衡位置)、 \mathbf{u} をそこからの変位として、次のように表す (図1 参照)。

$$\mathbf{R} = l + \mathbf{u} \quad (2.3)$$

\mathbf{u} は基準位置で振動していると考えると、回折には関係しない。それで、Bravais (ブラヴェ) 格子の場合で、散乱が弾性散乱 (elastic scattering) の時、散乱断面積は以下ようになる。 N は結晶中の原子の個数である。

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{coh,el}} = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} \right)_{\text{coh,el}} dE' \quad (2.4)$$

$$= \frac{\sigma_{\text{coh}}}{4\pi} N \exp(-2W) \sum_i \exp(i\boldsymbol{\kappa}l)$$

$$\sum_i \exp(i\boldsymbol{\kappa}l) = \frac{(2\pi)^3}{v_0} \sum_{\boldsymbol{\tau}} \delta(\boldsymbol{\kappa} - \boldsymbol{\tau})$$

と書けるので、

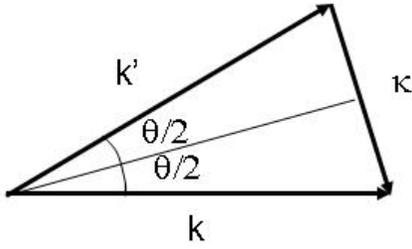


図2 波数ベクトルの関係

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{coh,el}} = \frac{\sigma_{\text{coh,el}}}{4\pi} N \frac{(2\pi)^3}{v_0} \exp(-2W) \sum_{\tau} \delta(\mathbf{k} - \boldsymbol{\tau}) \quad (2.5)$$

となる。2W は Debye-Waller (デバイ-ワラー) 因子であり、

$$2W = \langle |\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_0(0)|^2 \rangle$$

と表される。 \mathbf{u} の運動に調和振動子を仮定し、等方性とすれば、次のようになる。ここで、 ω_s は s 番目の振動モードである。

$$2W = \frac{\hbar}{2MN} \frac{\kappa^2}{3} \sum_s \frac{1}{\omega_s} \coth\left(\frac{1}{2} \hbar \omega_s / k_B T\right) \quad (2.6)$$

δ 関数から、 $\mathbf{k} = \mathbf{k}' - \boldsymbol{\tau}$ となるので、

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{k} = 2k \sin \frac{1}{2} \theta$$

となる (図2 参照)。 θ は散乱角である。これは、 n を整数、 d を面間隔とすれば、

$$\boldsymbol{\tau} = n \frac{2\pi}{d} \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

の関係から、有名な Bragg (ブラッグ) の式、

$$n\lambda = 2d \sin \frac{1}{2} \theta \quad (2.7)$$

が得られる。次に、ユニットセルに N 個の原子がある一般の場合を考える。この時、図3に示すように

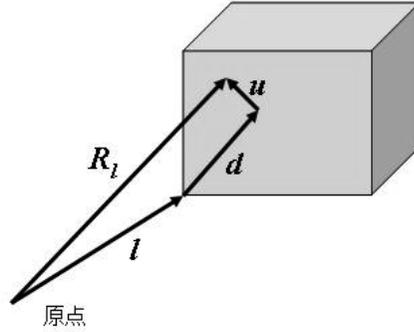


図3 一般の結晶の位置座標ベクトル

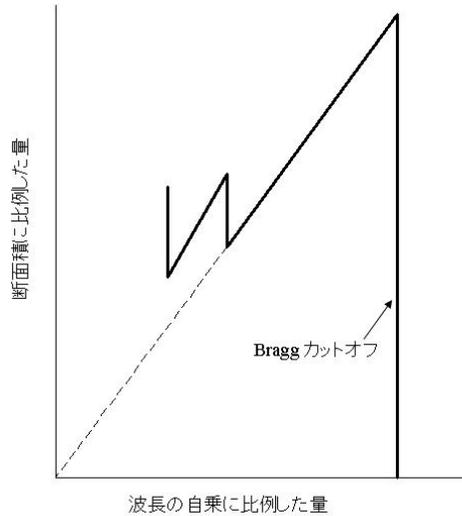


図4 干渉性散乱における多結晶の全散乱断面積

$$\mathbf{R}_l = \mathbf{l} + \mathbf{d} + \mathbf{u}$$

となる。この場合、断面積の表式は次のようになり、ユニットセルの構造因子 $F_N(\mathbf{k})$ が加わる。

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{coh,el}} = N \frac{(2\pi)^3}{v_0} \sum_{\tau} \delta(\mathbf{k} - \boldsymbol{\tau}) |F_N(\mathbf{k})|^2$$

$$F_N(\mathbf{k}) = \sum_d \bar{b}_d \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}) \exp(-W_d) \quad (2.8)$$

全断面積は次式で計算される。

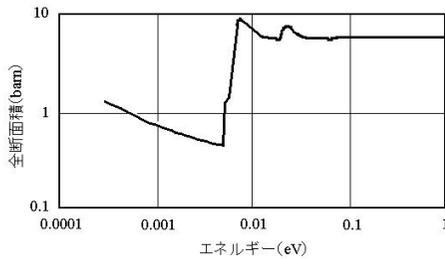


図5 ベリリウムの全断面積（干渉性断面積の例）

$$\sigma_{\text{tot}} = N \frac{4\pi^3}{v_0 k^2} \sum_{\tau}^{\tau < 2k} \frac{1}{\tau} |F_N(\tau)|^2 \quad (2.9)$$

多結晶での全散乱断面積の様子を模式的に示したのが図4である。Bragg角90°で最大面間隔 d_{max} に対応する波長、即ち $\lambda = 2d_{\text{max}}$ にBraggカットオフが現れ、そこから波長ゼロに向かって減衰していく。波長が短くなり、別の面間隔に対応する最大波長のところで次の回折が起き、そこでBraggエッジが現れる。あとは同様のことが繰り返される。波長が短くなると、個々のエッジが見えなくなり、一定値 σ_{coh} となる。典型的な例としてベリリウムの全断面積を図5に示した。5 meVのところにBraggカットオフが現れ、高エネルギー側にいくつかのピークが見られる。Braggカットオフより低いエネルギーでは、回折は起きないので断面積は小さくなっている。この領域は、一般に、吸収、非干渉性散乱、熱非弾性散乱が支配的となる。ベリリウムは吸収、非干渉性散乱とも小さいので、熱励起している原子振動のエネルギーを中性子が貰う熱非弾性散乱が支配的となっている。この励起は温度が低いほど少なくなるので、断面積は温度とともに急激に減少する。冷中性子用のフィルタとしてベリリウムを使用するとき、冷却して使用するのはこのためである。これまで、多結晶の場合の全断面積について述べてきたが、単結晶になると、決まった面だけの散乱が起きるようになる。図6に鉛の透過実験を行って求めた全断面積の例を示

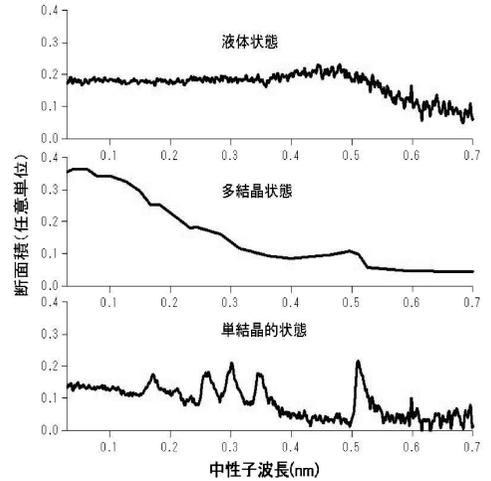


図6 鉛の液体、多結晶、単結晶の全断面積

した。断面積の絶対値は較正されていないので、ここでは形だけを議論する。上の図は液体状態の鉛の全断面積であり、液体の構造因子を反映しており、長波長では対応する構造がなくなるので断面積が減少している。中央の図は、多結晶鉛の断面積で、ベリリウムとは形は違うが、長波長で回折面がなくなるため、断面積が減少している。図6の3つ目の曲線は、単結晶的な鉛の断面積であり、対応する結晶面のところに強く散乱断面積が現れている。透過強度は、これの逆になるわけで、散乱体の結晶などの状態によって透過スペクトルが異なることがわかる。

3. 中性子の屈折

中性子の屈折を利用した中性子イメージングも行われている⁴⁾ので、屈折の原理を簡単に述べる。中性子と原子核との相互作用は、フェルミ (Fermi) の擬ポテンシャル、

$$V = -\frac{\hbar^2}{2\pi m} b_{\text{coh}} \delta(\mathbf{r})$$

によって定義される。中性子が媒質の表面で反射、屈折といった光学的現象を示す場合、これは媒質の表面に垂直な方向のポテンシャルによる散乱の1次元定常問題と考えることができる。

このポテンシャルは、単位体積あたりの原子

数密度 N を、先の擬ポテンシャルに掛けることにより表せる。

$$V = \frac{\hbar^2}{2\pi m} b_{\text{coh}} N \quad (3.1)$$

ポテンシャル V の一様な媒質内外の波動方程式は、以下のように表せる。 z の正の方向に媒質があるとする。

$$\nabla^2 \Psi(Z) + \frac{2m}{\hbar^2} E \Psi(Z) = 0 \quad (Z < 0) \quad (3.2)$$

$$\nabla^2 \Psi(Z) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \Psi(Z) = 0 \quad (Z > 0) \quad (3.3)$$

この解は次の形となる。

$$\Psi(Z) = Ae^{ik_0 z} + Be^{-ik_0 z} \quad (Z < 0) \quad (3.4)$$

$$\Psi(Z) = Ce^{ikz} \quad (Z > 0) \quad (3.5)$$

式 (3.4) の第1項は入射中性子の平面波を表し、第2項は反射中性子の平面波を表している。また、

$$k_0^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V)$$

である。

ここで、媒質の表面における屈折率 n を、媒質内外の波数ベクトルの比から、以下のように定義する。

$$n = \frac{k}{k_0} \quad (3.6)$$

$$\therefore n^2 = \left(\frac{k}{k_0} \right)^2 = \frac{E - V}{E} \quad (3.7)$$

よって、 $E = \frac{1}{2} m v^2$ と V を用いると、

$$n^2 = 1 - \frac{4\pi \hbar N b_{\text{coh}}}{m^2 v^2} \quad (3.8)$$

更に、 $v = \frac{2\pi \hbar}{m \lambda}$ を用いると、

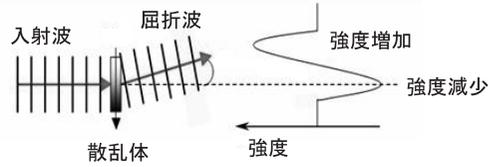


図7 中性子の屈折の様子

$$n = \sqrt{1 - \frac{\lambda^2 N b_{\text{coh}}}{\pi}} \quad (3.9)$$

となり、媒質の屈折率は波長に依存することがわかる。

屈折率 n_0 の媒質から屈折率 n_1 の媒質に中性子が入射する場合、媒質境界における屈折率はスネルの法則を用いて以下のように書ける。

$$\frac{n_1}{n_0} = \frac{\sin(90 - \theta_0)}{\sin(90 - \theta_1)} = \frac{\cos \theta_0}{\cos \theta_1} \quad (3.10)$$

ほとんどの物質について、屈折率は $n_1 \leq 1$ であり、空気の屈折率については $n_0 = 1$ である。サンプルの縦方向に屈折率の変化がある場合について、屈折による強度の変化の様子を図7に示した。ここでは、屈折による平面波の方向のずれについてのイメージを表している。ビーム入射方向では強度が減少しているが、隣接領域で強度が増えており、密度が急激に変化する物質境界、即ち縁が強調されることを示している。

中性子が空気からきわめて小さい角度で媒質に入射する場合、屈折角 θ_1 は急速に0に近づき、媒質の表面で全反射を起こす。この場合、全反射を起こす臨界反射角(臨界角)を θ_c とおくと、 $n_0 = 1$ かつ $\theta_1 = 0$ の極限において次式が成り立つ。

$$n_1 = \cos \theta_c$$

式 (3.9) で導出した屈折率を用いると、

$$\cos \theta_c = \sqrt{1 - \frac{\lambda^2 N b_{\text{coh}}}{\pi}} \quad (3.11)$$

つまり、臨界角 θ_c は、

$$\theta_c \approx \sin \theta_c = \lambda \sqrt{\frac{Nb_{coh}}{\pi}} \quad (3.12)$$

と近似することができ、臨界角は波長に比例する。イメージングに対する影響は通常は考える必要はないが、冷中性子以下のエネルギーで、構成要素の壁からの散乱がある場合には、その全反射の影響も考慮する必要が出てくるかもしれない。

4. 含水素物質による非干渉性散乱

非干渉性散乱が支配的であり、イメージングにとっても重要な元素は軽水素であるので、軽水素を含む物質に共通な断面積について述べる。

原子核の位置座標を

$$\mathbf{R} = \mathbf{w} + \mathbf{v} + \mathbf{u}$$

とおく。 \mathbf{w} は散乱分子の基準位置（重心位置）で並進運動に関係する。 \mathbf{v} はそこから原子（原子核）の平衡位置までのベクトルで、回転運動に関係する。 \mathbf{u} は原子核の平衡位置からのずれを示し、分子振動等に関係する。並進運動としては、結晶では格子振動、液体では拡散運動などが対応する。回転は特に分子の運動に関係するもので、その主慣性モーメントがすべて同じ場合は球コマになるなど、分子構造に依存した回転モデルとなる。これらの運動が非干渉性散乱に関与してくるが、ここでは代表例として振動について述べる。振動の弾性散乱断面積は次のようになる。

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{inc,el} = \frac{\sigma_{inc}}{4\pi} \exp(-2W) \quad (4.1)$$

また、振動モードがエネルギー分布 $Z(\omega)$ を持ち、その分布内のエネルギー変化 ω の散乱（1フォノン散乱）を行ったとする。この時、散乱断面積は次のようになる。 M は散乱体原子の質量である。

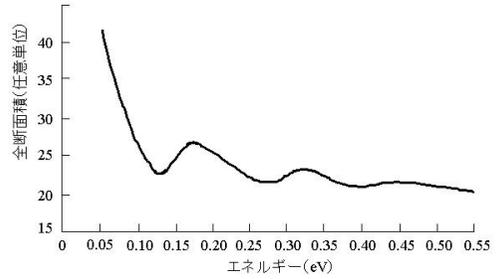


図8 金属水素化物の水素の断面積

$$\omega = (E - E')/\hbar$$

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega}\right)_{inc,\pm 1} = \frac{\sigma_{inc}}{4\pi} \frac{k'}{k} \frac{1}{4M} \kappa^2 \exp(-2W)$$

$$\frac{Z(\omega)}{\omega} \left\{ \coth\left(\frac{1}{2}\hbar\omega/k_B T\right) \pm 1 \right\} \quad (4.2)$$

E が非常に小さい場合 ($E \ll k_B T$) を考えよう。その場合、散乱は、中性子が励起状態にある原子のエネルギーを貰う上方散乱となる。簡単のために、エネルギー変化を平均エネルギー E_F とする。 $E_F \gg E$ なので、 ω は一定値となり、これによって、 κ^2 , $Z(\omega)$, $2W$ が一定となる。

$$Z(\omega) \propto \delta(\omega - E_F/\hbar)$$

と仮定し、エネルギー積分を行うと、

$$\sigma_{total} \propto \sigma_{inc} \frac{1}{k} \quad (4.3)$$

となる。即ち、断面積が $1/k$, 即ち $1/v$ に従って大きくなる。ここでは振動についてであるが、一般に低エネルギーで断面積が増加していくのは、非干渉性散乱全断面積の特徴である。傾きは、その物質が持っている低エネルギー運動モードに依存する。

一方、 $T \rightarrow 0$ の極限（これは $\omega \gg k_B T$ と等価）で、アインシュタインモデルの振動、

$$Z(\omega) = \delta(\omega - \omega_E)$$

を考えると、全断面積は次のようになる。

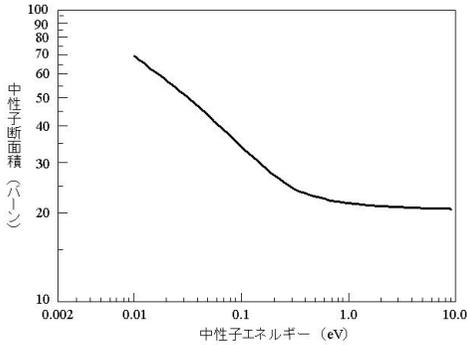


図9 軽水素の全断面積のエネルギー依存の変化
(非干渉性断面積の例)

$$\sigma_{\text{total}}(E) = \frac{\sigma_{\text{inc}}}{4} \frac{\omega_E}{E} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{(\sqrt{E}-\sqrt{E-n\omega_E})^2/\omega_E}^{(\sqrt{E}+\sqrt{E-n\omega_E})^2/\omega_E} x^n e^{-x} dx \quad (4.4)$$

この断面積の代表例は金属水素化物で、断面積の形は、図8のようになる。この例では、0.14 eVあたりから $n=1$ の振動モードの、0.28 eVあたりから $n=2$ の振動の断面積が立ち上がっている。

弾性散乱の全断面積は、

$$\sigma_{\text{total}}(E) = \frac{\sigma_{\text{inc}}}{4} \frac{\omega_E}{E} (1 - e^{-4E/\omega_E}) \quad (4.5)$$

となり、 $E \rightarrow 0$ で σ_{inc} となる。

一方、 $E \rightarrow \infty$ では、

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{total}}(\infty) &= \frac{\sigma_{\text{inc}}}{4} \frac{\omega_E}{E} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_0^{\infty} x^n e^{-x} dx \\ &= \frac{\sigma_{\text{inc}}}{4} = \sigma_{\text{inc, free}} \end{aligned} \quad (4.6)$$

となる。 $\sigma_{\text{inc, free}}$ は自由粒子の断面積で、水素原子の場合は、束縛原子の断面積 σ_{inc} の1/4である。

このように、エネルギーの高いところでは、自由粒子の断面積に、また、エネルギーの低いところでは、その4倍の断面積になる。ただし、先にも述べたように、温度が有限の場合では、エネルギーが低くなるに従って、断面積は中性

子速度 v に反比例して大きくなる。非干渉性断面積の例として、水素の全断面積を図9に示した。エネルギーの高い部分の一定の断面積から、低エネルギーでは、急激に断面積が増加していく特徴的な断面積の様子が良くわかる。

5. 中性子の減速とエネルギースペクトル

ここで、媒質中での中性子輸送について考える。中性子輸送においては、巨視的吸収断面積 Σ_a と散乱断面積 Σ_s が重要となる。一般に、中性子イメージング実験には、原子炉や加速器が用いられる。原子炉では、平均エネルギーが約1 MeV程度の中性子が、また、加速器では、発生方法によって差があるが、通常、平均 MeV オーダーの中性子が発生する。中性子イメージングでは、熱中性子、冷中性子が主として使われるので、このような中性子を生成させるために、減速材が用いられる。

無限大媒質中での、中性子の輸送方程式は次のようになる³⁾。

$$\Sigma_a(E) \phi(E) = \Gamma \phi(E) + S(E) \quad (5.1)$$

ここで、

$$\Gamma \phi(E) = \int_0^{\infty} \Sigma_s(E' \rightarrow E) \phi(E') dE' - \Sigma_s(E) \phi(E)$$

である。

また、 $\Sigma_s(E' \rightarrow E)$ はエネルギー E' から E へ中性子が散乱される巨視断面積、 $\phi(E)$ は媒質中の中性子束である。ここで、中性子の吸収が非常に小さい場合を考える。また、 $S(E)$ で表される中性子源のエネルギーは、注目している散乱中性子のエネルギーより高い。その場合、

$$\Gamma \phi(E) = 0 \quad (5.2)$$

となる。これを満たす $\phi(E)$ は、熱平衡状態のエネルギー分布を表すマックスウエル分布 $M(E)$ となる。したがって、熱平衡における中性子のエネルギースペクトル $\phi_e(E)$ は、次のようになる。

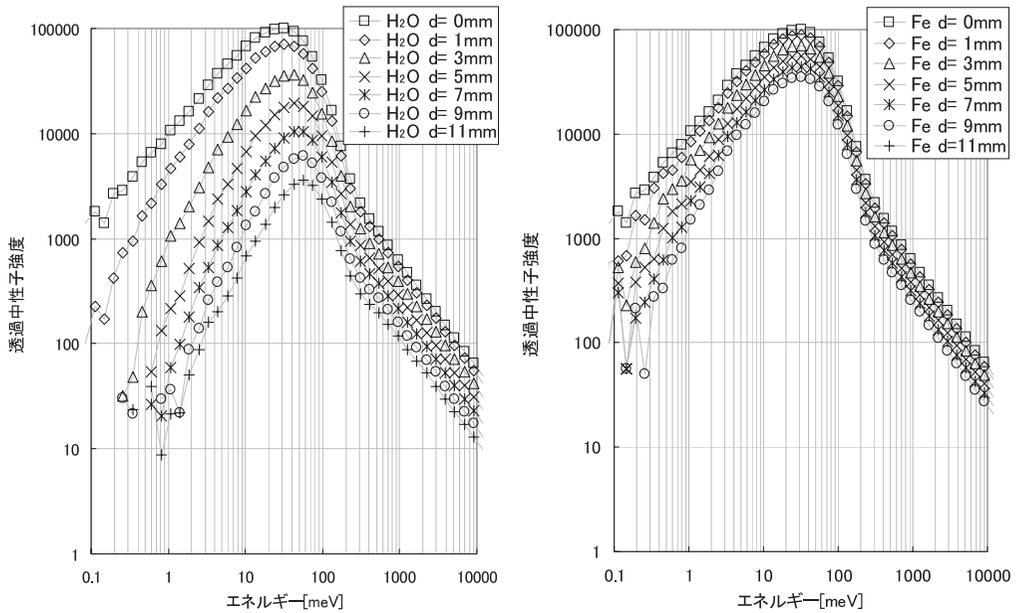


図 10 熱中性子入射の場合の透過スペクトルの試料厚さによる変化

$$\phi_e(E) = M(E) = \frac{E}{(kT)^2} \exp(-E/kT) \tag{5.3}$$

一般に、減速材には吸収が極めて小さい物質が選択される。また、減速材の大きさは、中性子の減速に要する距離、水の場合 5 cm 程度よりは大きいので、今の条件は概ね満足している。したがって、媒質中の中性子スペクトルは、媒質温度で規定されるマックスウェル分布で近似できることになる。体積が小さくなったり、吸収が強くなると、マックスウェル分布のピークエネルギーが高い方にシフトしていく。このスペクトルは媒質だけで決まるので、入射中性子エネルギーによらない。

一方、熱平衡にいたる前の段階、即ち、媒質温度に比べて非常に高いエネルギー領域では、中性子は減速材原子核との衝突でエネルギーを失う。エネルギーの減少は、古典的な弾性散乱モデルで良く近似でき、散乱前のエネルギーを E 、散乱後のそれを E' とすれば、最大で

$$\frac{E'}{E} = \left(\frac{A-1}{A+1} \right)^2 \tag{5.4}$$

となる。より厳密には中性子散乱断面積の自由ガスモデルによる表式³⁾が参考になる。 A は質量数であるので、H では 1 回の衝突でエネルギーゼロまで減速できる確率がある。いずれにしても、質量数が小さい物質が減速材に向いており、軽水、重水など含水素物質が使われることが多い。このような減速領域のエネルギースペクトル $\phi_m(E)$ は、無限大媒質で吸収がある場合に、以下ようになる。

$$\phi_m(E) = \frac{q}{\xi(\Sigma_s + \Sigma_a)E} \tag{5.5}$$

ここで、 ξ は次式で表される平均対数エネルギー減少、

$$\xi = 1 + \frac{(A-1)^2}{4A} \ln \left[\frac{(A-1)^2}{A+1} \right] \tag{5.6}$$

q は減速密度である。(5.5) 式からわかるよう

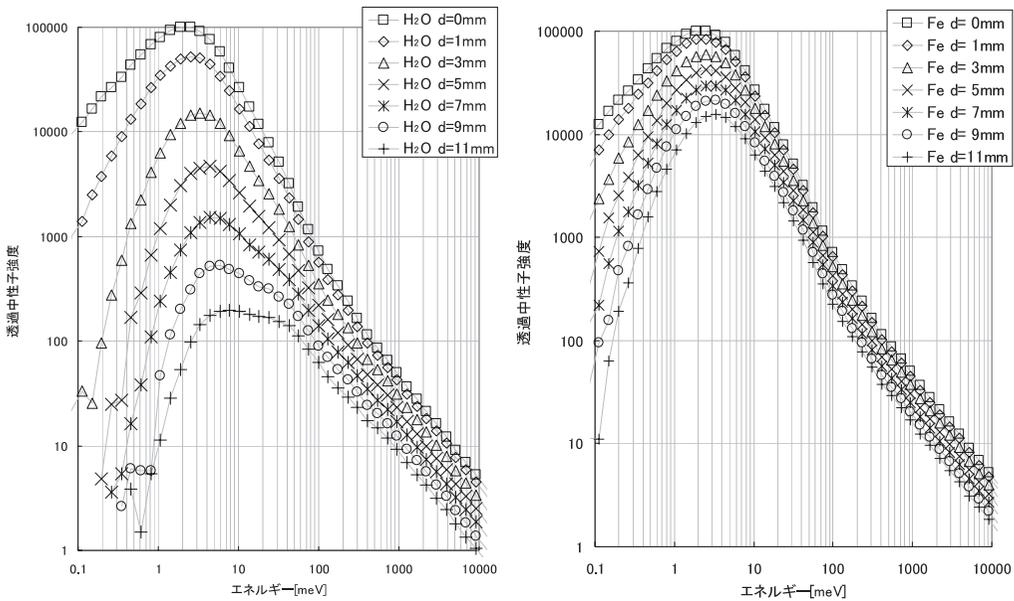


図11 冷中性子入射の場合の透過スペクトルの試料厚さによる変化

に、媒質中での中性子のエネルギースペクトルは $1/E$ に比例する。これは、減速材温度より約1桁以上エネルギーの高い領域で成り立つ。したがって、減速材中のエネルギースペクトルは、概ね

$$\phi(E) = \alpha\phi_s(E) + \beta(E)\phi_m(E) \quad (5.7)$$

α : 強度因子,

β : 二つのスペクトル関数をつなぐための補正因子

となる。このような特徴は、液体水素や固体メタンといった冷中性子源のエネルギースペクトルについても当てはまる。

更に、このようなエネルギースペクトルを持った中性子がイメージング試料に入射した場合にどうなるかを考える。図10に、水試料、鉄試料に熱中性子源からのスペクトルを入射した場合の試料透過スペクトルの変化を、いくつかの厚さで示してある。なお、この計算で用いた鉄の断面積はBragg散乱を正確に組み入れたものになっていないので、Braggエッジは見

えていない。厚さ0cmが入射スペクトルである。水の場合には、厚くなるに従って、強度も減少するが、ピークエネルギーが高い方へ移って行くのがわかる。図9に示したように、低エネルギーで断面積が増加し、遅い中性子ほど抜けにくくなるのが、主たる原因である。一方、鉄試料では、強度減少はあるが、ピークエネルギーに大きな変化はない。図11に冷中性子入射の場合の結果を示す。この場合には、水の結果も鉄の結果も、試料が厚くなるに従ってピークエネルギーが高くなっている。これは、室温の試料中での散乱によって、この温度での熱平衡状態に移ろうとするからである。したがって、この場合には散乱による中性子エネルギーの変化についても注意する必要がある。

6. まとめ

干渉性と非干渉性散乱の全断面積の概要について述べた。干渉性散乱長が非干渉性のものより大きい物質が殆どであるため、大抵の物質に低エネルギーでBraggカットオフが現れる。

一方、非干渉性散乱では、断面積は1 eV 位までの自由粒子の断面積から、低エネルギーになるに従って断面積が増加する。約1 eV 以上では、大まかには一定なポテンシャル散乱断面積に共鳴断面積が乗った形となっている。共鳴が現れるエネルギーは、質量数が大きな物質ほど低くなる傾向があり、共鳴の間隔もより密になる。1 MeV 以上では、粒子生成をともなう核反応の断面積が現れてくる。これからの中性子イメージングでは、エネルギー的には広い範囲を利用し、また一方、対象物に応じて最も有効なエネルギー範囲を選択的に使用するようになると考えられる。したがって、全断面積の情報を知っておくことは、測定最適化において重要である。また、試料中でのスペクトル変化についても考慮すべきと考えられるので、そのことも留意する必要がある。

文 献

- 1) Williams, M. M. R., *The Slowing Down and Thermalization of Neutrons*, North-Holland Publ., Amsterdam (1966)
- 2) Squires, G. L., *Introduction to the Theory of Thermal Neutron Scattering*, Cambridge University Press, Cambridge (1978)
- 3) Beckurts, K. H. and Wirts, K., *Neutron Physics*, Springer-Verlag, Berlin-Göttingen-Heidelberg-New York (1964)
- 4) Gurevich, I. I. and Tarasov, L. V., *Low Energy Neutron Physics*, North-Holland Publ., Amsterdam (1968)
- 5) Allman, B. E., McMahon, P. J., Nugent, K. A., Paganin, D., Jacobson, D. L., Arif, M. and Werner, S. A., *Nature*, **408**, 158-159 (2000)