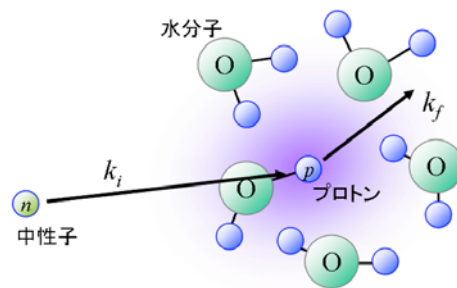


ディビジョン番号	3
ディビジョン名	理論化学・情報化学・計算化学

大項目	1. 理論化学
中項目	1-2. ダイナミクス
小項目	1-2-14. 中性子散乱

概要（200字以内）

各国で大強度陽子加速器（日本では J-PARC）の建設がはじまり、熱外中性子散乱による分子ダイナミクスの研究が注目されている。中性子散乱は光や電子散乱とは全く異なる性質を持つ観測手段であり、分子中のプロトンに局所的な撃力を与える直接的な手法である。水素は科学において最も基本的な元素であり、プロトンダイナミクスの中性子散乱による研究は物質・生命・惑星科学の幅広い分野に新たな知見をもたらす。



概念図：水の中性子散乱概念図。中性子は主にプロトンに短距離相互作用をとおして撃力を与え、サブフェムト秒の時間スケールでのプロトンダイナミクスを誘起する。

現状と最前線

熱外中性子散乱による分子構造・化学反応ダイナミクスに関する研究が盛んになってきた。熱外中性子のエネルギーは0.1eV から 100eV 程度であり、化学結合エネルギーと同程度かそれ以上である。また、中性子は主に原子核と相互作用するが、電子との直接的な相互作用はない。特に、中性子は他の原子核と比較してプロトンと相互作用しやすい（散乱断面積は約 100 fm² 程度）。従って、中性子散乱はプロトンと選択的に相互作用する点において光や電子散乱とは異なる観測手段と言える。日本では大強度陽子加速器（J-PARC）の建設がはじまり、高強度中性子ビームを用いた実験が本格的に始動する。

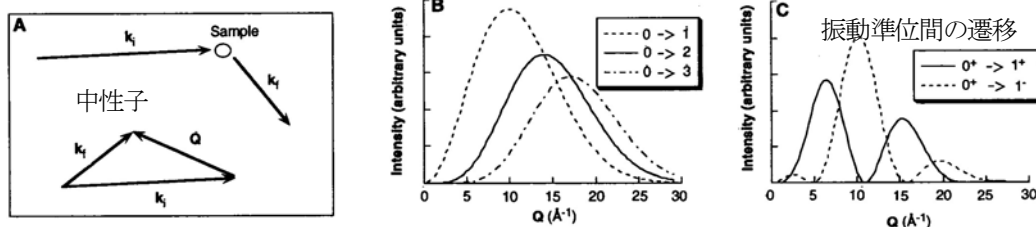


図1：中性子散乱による分子内プロトン移行の観測例 (*Science* **264**, 1285 (1994) より抜粋)。(A) 中性子散乱の運動量移行 Q 。(B) 調和ポテンシャル中のプロトンと衝突した中性子の散乱強度と Q の関係。(C) 二重井戸ポテンシャル中のプロトンと衝突した中性子の散乱強度と Q の関係。これらの図で示されるように、中性子散乱の強度はポテンシャル形状の影響を強く受ける。

熱外中性子散乱による分子構造の観測が有力な手法となる場合として、分子内のプロトンの位置特定やプロトン移動の解析が挙げられる (図 2)。X 線や電子線によって水素原子の位置を特定するのは一般に困難であり、高温・高圧実験のように試料の量に制限のある場合では NMR を用いた核配置の測定も難しいからである。水素は科学において最も基本的な元素であり、中性子散乱の研究成果は、惑星内部に存在する氷の状態や生体分子の機能発現などの解明につながると予想されている。

また、プロトンの量子力学的な動力学は科学の様々な分野において重要な役割を果たしていることが知られている。中性子散乱は、分子中の核に局所的な撃力を与える最も直接的な手法であり、これにより誘起される分子核束波ダイナミクスに関する研究は大変興味深い。特に、Dreismann らの研究グループは水-重水混合液の中性子散乱実験を行い、断面積比 (図 2 参照) が重水素の濃度に依存し、その変化幅は約 2 倍もあることを発見した。この結果を中性子散乱における従来の理論に基づいて説明するのは困難であり、この効果は分子振動状態の量子力学的な短寿命の相関に起因すると考えられている。

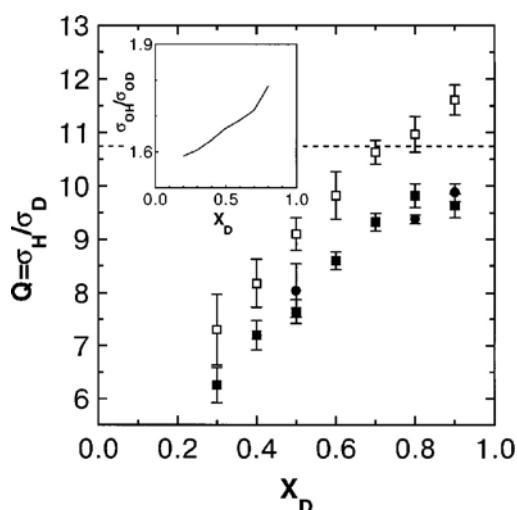


図 2 : 分子振動状態の量子力学的な短寿命の相関に起因する効果を示す熱外中性子散乱実験結果の一部 (Phys. Rev. Lett. 79, 2839 (1997) より抜粋). X_D は重水素と水素の濃度比, σ_H は水素原子核, σ_D は重水素原子核と中性子の散乱断面積.

将来予測と方向性

- ・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

光電子スペクトルに現れる核の反跳効果が近年議論されている。中性子散乱に関する新しい研究成果も踏まえ、分子ダイナミクスの「反跳の科学」に対する知見を深める。

- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

化学反応ダイナミクスを中性子で探る新規研究分野の開拓を目指す。そのためには、大強度中性子源を用いた実験手法や、その理論的な取り扱いの確立が望まれる。

キーワード

中性子散乱, 熱外中性子パルス, 核の反跳, 分子ダイナミクス, プロトン移動

(執筆者: 保木邦仁, 河野裕彦)