

IX. The Dynamics of Liquid H_2O and D_2O and Solid H_2O from the Inelastic Scattering of Epithermal Neutrons by O.K. Harling (Pacific Northwest Laboratory), SM104/80, Symposium on Neutron Inelastic Scattering, Copenhagen, May, 1968.

中原康明 (日本原子力研究所)

液体の軽水及び重水による熱中性子散乱に関してはかなり多くの実験や計算が行われている。この論文では $299^\circ K$ (液体), $268^\circ K$ (氷) の軽水及び $299^\circ K$ (液体), $272^\circ K$ (氷) の重水の $S(\alpha, \beta)$ を測定し、更にその測定値を解析してスペクトル密度関数を求めている。

主に中性子減速散乱で測定しており、測定装置には Battelle Rotating Crystal Spectrometer を用いている。入射中性子のエネルギーは $0.1 \sim 0.6 \text{ eV}$, エネルギー変化の範囲は $0 \sim 0.6 \text{ eV}$, 運動量変化の範囲は $0 \sim 3.2 \text{ \AA}^{-1}$ である。

$S(\alpha, \beta)$ の測定値は別の論文で数表の形で発表されている (BNWL-436, 1967)。多重散乱についてはその寄与は最も大きい場合でも 30% 以下であるとして、その補正は行っていない。

微分散乱断面積に見られる分子の振れ振動によるピークは液体の場合はピークの広がりが大きくて弾性散乱によるピークと分離し難いが、氷の場合はかなり区別できるようになる。氷内の分子の束縛回転のピークの中心は重水では約 7.0 meV , 軽水では 9.2 meV にみられる。この値は液体の場合よりかなり大きい。 $299^\circ K$ の軽水の場合束縛回転モードの中心は 7.7 meV である。これら中性子非弾性散乱による束縛回転モードのエネルギーはいずれもラマン・スペクトルによる値より大きめにしているが、その理由ははっきりしていない。水分子の分子振動の基本モードは 3 つあるが、その最低位のモードのエネルギーもこの論文で決定されている。このモードについてはラマン・スペクトルの方からも確かめられていることであるが、液体でも氷でもエネルギーはほとんど変わらない。

束縛回転モードよりエネルギーの低い氷の格子振動のモードについてはこの実験では分解能が十分でないので、意味のある結論を出すことはできないとしている。氷の格子振動の振動数分布を中性子散乱のデータから求める試みは $150^\circ K$ の立方晶系の氷について行われている (H. Prask et al private communication)。

理論によるこれらのデータの裏づけを行うことによって水の物理的性質が明らかにされて行くであろう。