

2014 年原子力学会春の年会 核データ部会・炉物理部会合同セッション
「熱中性子散乱則データのこれまでとこれから」

(4) 分子動力学法を用いた軽水の散乱断面積解析

京都大学大学院工学研究科
原子核工学専攻 中性子工学研究室
安部 豊
yutaka_abe@nucleng.kyoto-u.ac.jp

1. はじめに

本稿では、新たな熱中性子散乱則データ評価方法として、筆者が近年取り組んできた分子動力学法 (MD) による軽水の中性子散乱断面積解析[1]を解説し、さらに昨年開発した Van Hove 時空相関関数からの非干渉性散乱の直接解析法[2]についても簡単に紹介する。

軽水の散乱則データは炉心解析や冷中性子源の設計など、中性子利用の様々な研究開発において利用されている。このような利用には、広い入射中性子エネルギー・液体温度にわたり、信頼性の高い軽水の散乱則データが必要になる。熱中性子散乱の理論は 1950 年代に Van Hove によって確立され[3]、散乱断面積は対象物質の原子数密度の時空相関関数の Fourier 変換として定式化されている。ただし、標的系の多体問題であるため、理想気体などの単純な系を除き、時空相関関数を厳密に求めることは困難である。そのため既存の核データにおいては、軽水の散乱則データは物理モデルによって評価されてきた[4-6]。しかしながらこうした核データでは、液体としての性質が顕わになる軽水分子の並進運動に、自由気体モデル (ENDF/B-VI[4]) や分子質量を補正した自由クラスタモデル (ENDF/B-VII[5]、JEFF-3.1[6]) といった簡略化した物理モデルを採用しているため、数 meV 以下の冷中性子領域で実験値の再現性に問題があった。また、既存の核データとは別に、水素結合を介した分子間振動や分子の拡散運動など、軽水の運動モードを詳細に考慮した散乱断面積モデルもこれまでに開発されているが[7-9]、広い液体温度・圧力領域にわたりモデルに含まれる全パラメータを系統的に与えることに難点があり、適用範囲が常温付近に限られていた。

そこで当研究グループでは、広い温度・圧力領域に対して適用可能な軽水の散乱断面積の解析方法として、MD による軽水の分子運動の詳細な解析に基づく散乱断面積の解析方法の開発を進めてきた。本稿では、この MD 法の概要と主な解析結果を実験値および既存の核データと比較しながら解説する。

2. 軽水の散乱断面積の解析方法

軽水分子は酸素原子一つと水素原子二つからなるが、表 1 に示すように、水素の非干渉性束縛原子断面積 $\sigma_{\text{inc}}^{\text{H}}$ (80 b) は、水素の干渉性束縛原子断面積 $\sigma_{\text{coh}}^{\text{H}}$ や酸素の干渉性束縛原子断面積 $\sigma_{\text{coh}}^{\text{O}}$ 、非干渉性束縛原子断面積 $\sigma_{\text{inc}}^{\text{O}}$ より 10 倍以上大きい。そのため、軽水の散乱断面積は二つの水素原子からの非干渉性散乱によりほぼ支配されており、軽水の二重微分散乱断面積は次式のように非干渉性散乱近似により表される（重水では D の干渉・非干渉散乱断面積が同程度であるため、この近似は適用できない）。

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\varepsilon} = \frac{2\sigma_{\text{inc}}^{\text{H}} + 2\sigma_{\text{coh}}^{\text{H}}}{4\pi\hbar} \sqrt{\frac{E}{E_0}} S_s^{\text{H}}(\kappa, \omega) + \frac{\sigma_{\text{inc}}^{\text{O}} + \sigma_{\text{coh}}^{\text{O}}}{4\pi\hbar} \sqrt{\frac{E}{E_0}} S_s^{\text{O}}(\kappa, \omega). \quad (1)$$

ここで、 E_0 および E は、それぞれ、入射中性子および散乱後中性子の運動エネルギーであり、 κ および ω は散乱前後の中性子の波数ベクトル \mathbf{k}_0, \mathbf{k} および Planck 定数 \hbar を用いて、 $\hbar\kappa = \hbar|\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}|$, $\hbar\omega = \varepsilon = E_0 - E$ として散乱前後での中性子の運動量と運動エネルギー変化を表す。また、 $S_s^{\text{H}}(\kappa, \omega)$, $S_s^{\text{O}}(\kappa, \omega)$ は、それぞれ、水素原子および酸素原子の自己散乱則であり、各原子の個別的な運動についての情報を含む。なお、ENDF などの汎用核データでは、自己散乱則を $S(\alpha, \beta)$ の数値データとして格納している (α および β は κ と ω の無次元化量)。

表 1 干渉性・非干渉性束縛原子断面積

	H	¹⁶ O	D
σ_{coh} (b)	1.8	4.2	5.6
σ_{inc} (b)	80	0	2.1

熱中性子散乱の理論では、自己散乱則 $S_s^{\text{X}}(\kappa, \omega)$ は自己中間散乱関数 $F_s^{\text{X}}(\kappa, t)$ の時間領域での Fourier 変換として

$$S_s^{\text{X}}(\kappa, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F_s^{\text{X}}(\kappa, t) e^{-i\omega t} dt \quad (2)$$

と定義される（添え字 X は水素 (H) または酸素 (O) を表す）。本研究では $F_s^{\text{X}}(\kappa, t)$ を κ の Gauss 関数として表す Gauss 近似

$$F_s^{\text{X}}(\kappa, t) = \exp\left[-\frac{\kappa^2}{2} \Gamma^{\text{X}}(t)\right] \quad (3)$$

を採用した。上式の Gauss 関数の分散を与える $\Gamma^{\text{X}}(t)$ は幅関数と呼ばれ、 $\Gamma^{\text{X}}(t)$ は標的系原子の運動の周波数分布関数 $g^{\text{X}}(\omega)$ を用いて、次式のように定式化されている[10]。

$$\Gamma^X(t) = \frac{\hbar}{m_X} \int_0^\infty \frac{g^X(\omega)}{\omega} \left\{ \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) (1 - \cos\omega t) - i \sin\omega t \right\} d\omega. \quad (4)$$

ここで、 m_X は元素 X の質量、 k_B は Boltzmann 定数、 T は標的系の温度である。

Gauss 近似の根拠は、短時間 ($t < 1$ fs) における標的系原子による反跳散乱および長時間 ($t > 10$ ps) における原子の拡散運動による準弾性散乱の $F_s^X(\kappa, t)$ が κ の Gauss 関数で表されることに由来するが、中間の時間領域においても $F_s^X(\kappa, t)$ が Gauss 関数で表されることは保証されていない。しかしながら、Gauss 近似では標的系の $g^X(\omega)$ を与えれば、 $F_s^X(\kappa, t)$ を経由して散乱則を比較的簡単に解析できるので、Gauss 近似は既存の核データの評価においても採用されている。ただし、標的系は多体系であるため、単純な場合を除き $g^X(\omega)$ を解析的に求めることはできない。そのため、既存の核データや他の散乱断面積モデルでは $g^X(\omega)$ を物理モデルにより与えてきたが、前節で述べたようにモデルによる単純化の影響やモデルパラメータの与え方に問題があった。そこで本研究では、MD から得た $g^X(\omega)$ を用いることで、軽水の分子運動の詳細を散乱断面積の解析に反映させる。古典力学では、 $g^X(\omega)$ は元素 X の速度自己相関関数 $\langle \mathbf{v}^X(0) \cdot \mathbf{v}^X(t) \rangle_c$ の cosine 変換

$$g^X(\omega) = \frac{2m_X}{3\pi k_B T} \int_0^\infty dt \langle \mathbf{v}^X(0) \cdot \mathbf{v}^X(t) \rangle_c \cos\omega t \quad (5)$$

として与えられ、 $\langle \mathbf{v}^X(0) \cdot \mathbf{v}^X(t) \rangle_c$ は MD から得られる元素 X の速度ベクトルの統計平均をとることにより求められる。MD では軽水分子の分子間ポテンシャルを与えると各原子の軌跡をシミュレーションすることができるので、原理的には任意の温度・圧力条件で $g^X(\omega)$ を求めることが可能となる。

3. 軽水の MD シミュレーションと散乱断面積の解析結果

216 個の軽水分子に対して、表 2 に示す六つの温度・圧力条件で MD シミュレーションを実行し、各分子の軌跡データ (位置・速度ベクトル) を得た。なお、#1~5 は液体状態、#6 は超臨界状態である。シミュレーションの時間ステップ間隔および時間ステップ数は、#6 以外はそれぞれ、0.1 fs、100 万とし、#6 の超臨界状態では、時間ステップ間隔を 0.05 fs に狭め、時間ステップ数を 120 万とした。軽水の分子ポテンシャルには、比較的簡単な関数形で分子内振動も考慮した SPC モデル[11]を採用し、MD シミュレーションには計算コード DL_POLY[12]を用いた。

表 2 MDシミュレーションの温度・圧力条件

	#1	#2	#3	#4	#5	#6
温度 (K)	293.6	300	350	400	600	800
密度 (g/cm ³)	1.0	1.0	0.97	0.94	0.66	0.08
圧力 (MPa)	0.1	0.1	0.1	1	15	25

図 1 に 300 K における周波数分布関数 $g^X(\omega)$ の解析結果をエネルギー $\hbar\omega$ の関数として示す。水素(青)の解析結果には、軽水分子の三つの分子内振動モードに対応する鋭いピークが 210 meV 付近と 450 meV 前後に現れ、分子の束縛回転(稜動運動)を表す幅広いピークが 60 meV を中心に現れる。また 30 meV 以下では、水素結合を介した分子間振動(bending モード: 約 6 meV、stretching モード: 20~30 meV)の寄与が見える。分子の重心運動を表す酸素(赤)の解析結果には、分子内振動や束縛回転はほとんどなく、30 meV 以下の分子間振動の寄与だけが現れている。水分子全体の周波数分布関数(黒)を中性子非弾性散乱による実験値(白丸) [13]と比較すると、上述の様々な運動モードをよく再現していることがわかる。したがって、このような MD による $g^X(\omega)$ を用いることで、軽水分子の詳細な運動モードを散乱断面積に反映できることが期待できる。

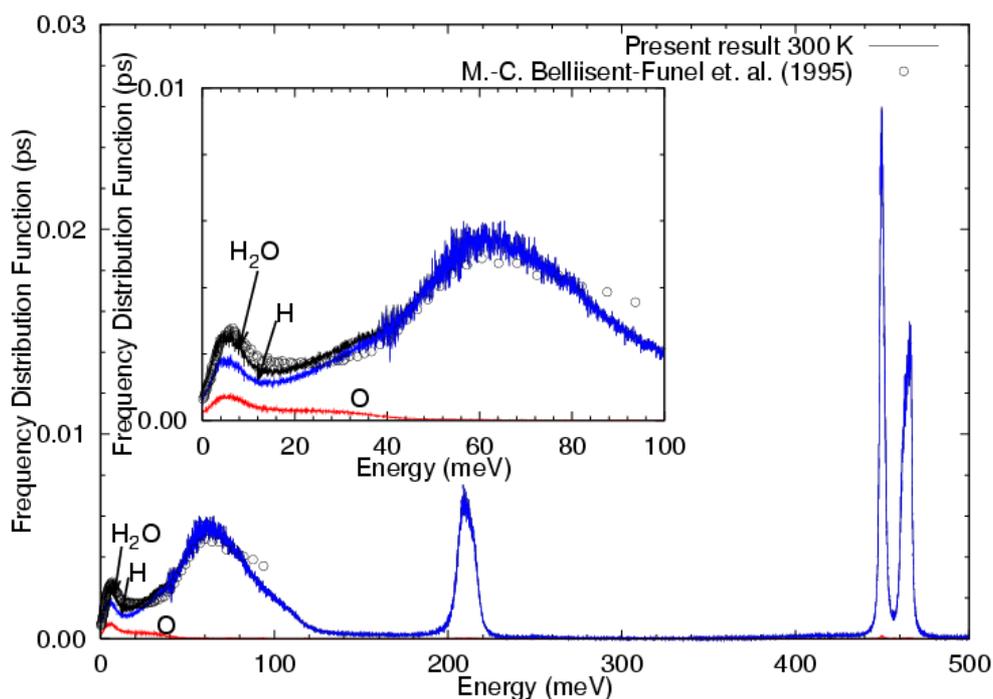


図 1 温度 300 K の軽水の周波数分布関数。実線は、それぞれ、水素原子(青)、酸素原子(赤)、軽水分子(黒)の解析結果、白丸は実験値[13]を表す。挿入図に 100meV 以下の周波数分布関数を拡大して示す。

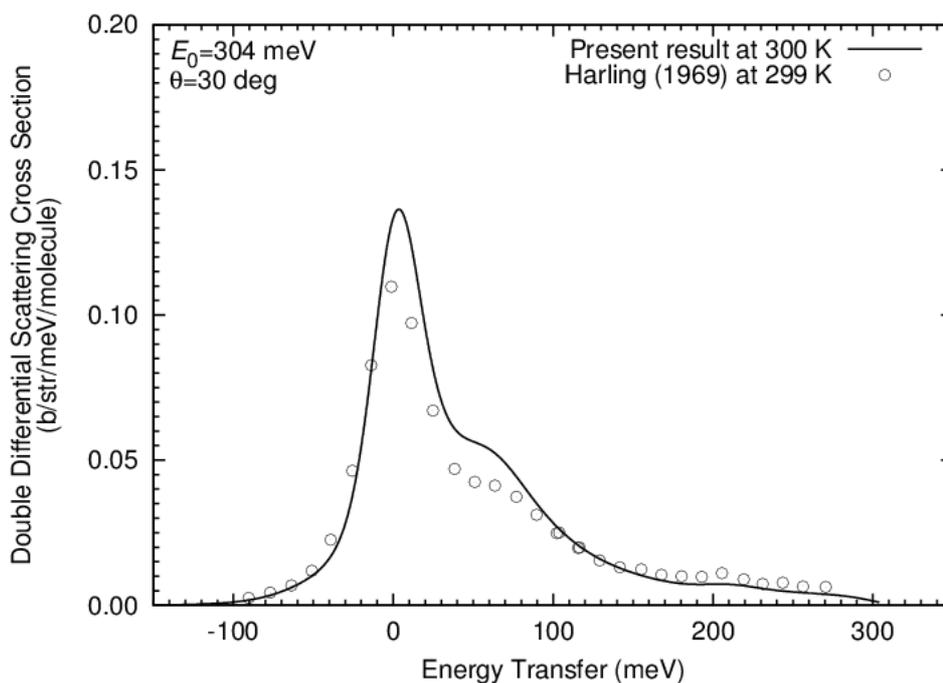


図 2 304 meV 入射中性子に対する軽水の二重微分散乱断面積（散乱角：30度）。実線は 300 Kでの解析結果、白丸は299 Kでの実験値[14]を表す。なお実験値との比較のため、解析結果にはGauss型の装置分解能関数($\sigma=9.6$ meV)を重畳している。

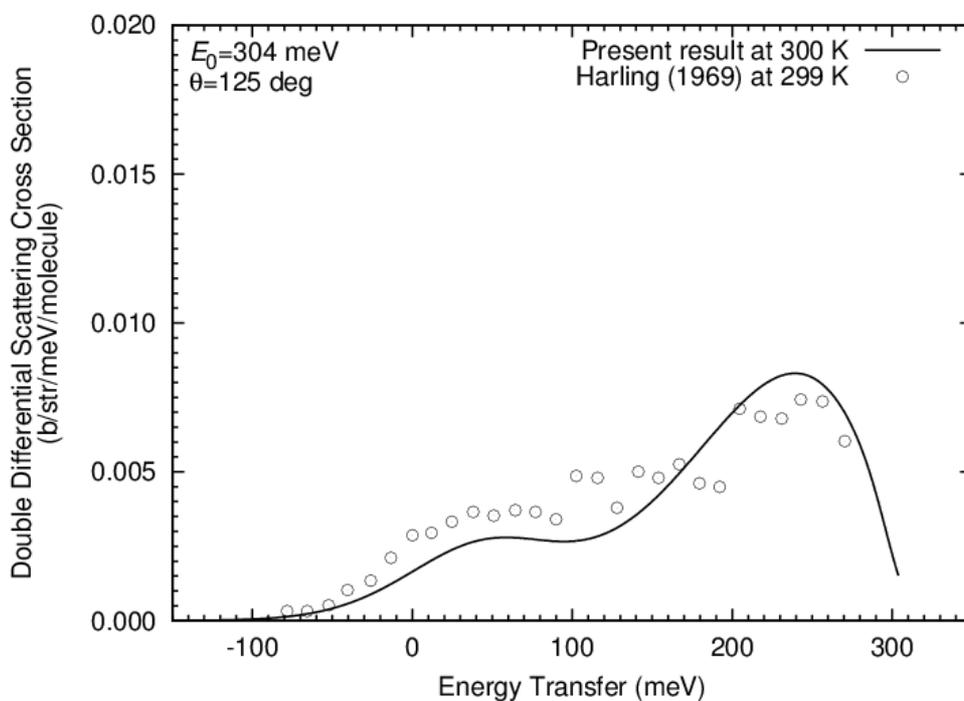


図 3 304 meV入射中性子に対する軽水の二重微分散乱断面積（散乱角：125 度）。実線は 300 Kでの解析結果、白丸は299 Kでの実験値[14]を表す。なお実験値との比較のため、解析結果にはGauss型の装置分解能関数($\sigma=9.6$ meV)を重畳している。

図 2、3 に 304 meV の入射中性子に対する二重微分散乱断面積の解析結果を実験値[14]とともに示す。なお、解析結果には実験値との比較のため、Gauss 型の装置分解関数 ($\sigma = 9.6$ meV) を重畳している。図の横軸は散乱前後での中性子のエネルギー変化 ε ($\varepsilon > 0$: 下方散乱) である。図 2 の低散乱角 (30 度) では、 $\varepsilon = 0$ を中心とした準弾性散乱の大きなピークとともに、準弾性散乱ピークの裾野に分子間振動や束縛回転による下方散乱が見取れ、 $\varepsilon = 200$ meV 付近には分子内振動による小さな寄与が現れる。一方、図 3 の高散乱角 (125 度) では、準弾性散乱ピークは完全に消え、約 60 meV 付近の束縛回転による幅広い寄与と 240 meV 付近の水素原子による反跳散乱ピークが重なり合っ て現れる。解析結果は実験値のこうした特徴をほぼ再現していることがわかる。

次に、散乱断面積の全体的な傾向を把握するために、図 4、5 に、それぞれ、常温と高温での全断面積の解析結果を実験値[15-17]および ENDF/B-VII と比較して示す。図 4 の常温では、熱中性子領域(約 10 meV)以上では、解析結果と ENDF はともに実験値にほぼ一致しているが、冷中性子領域(約 10 meV)以下では、ENDF は実験値を過大評価する一方で、解析結果は実験値の傾向を温度依存性も含めてほぼ再現している。冷中性子領域以下の散乱断面積には、拡散運動や分子間振動といった軽水の液体としての物性が影響するため、本解析と ENDF でこうした差異が生じたものと考えている。図 5 の高温の全断面積では、軽水の分子運動が気体に近づくため、両者の差異は小さくなる。

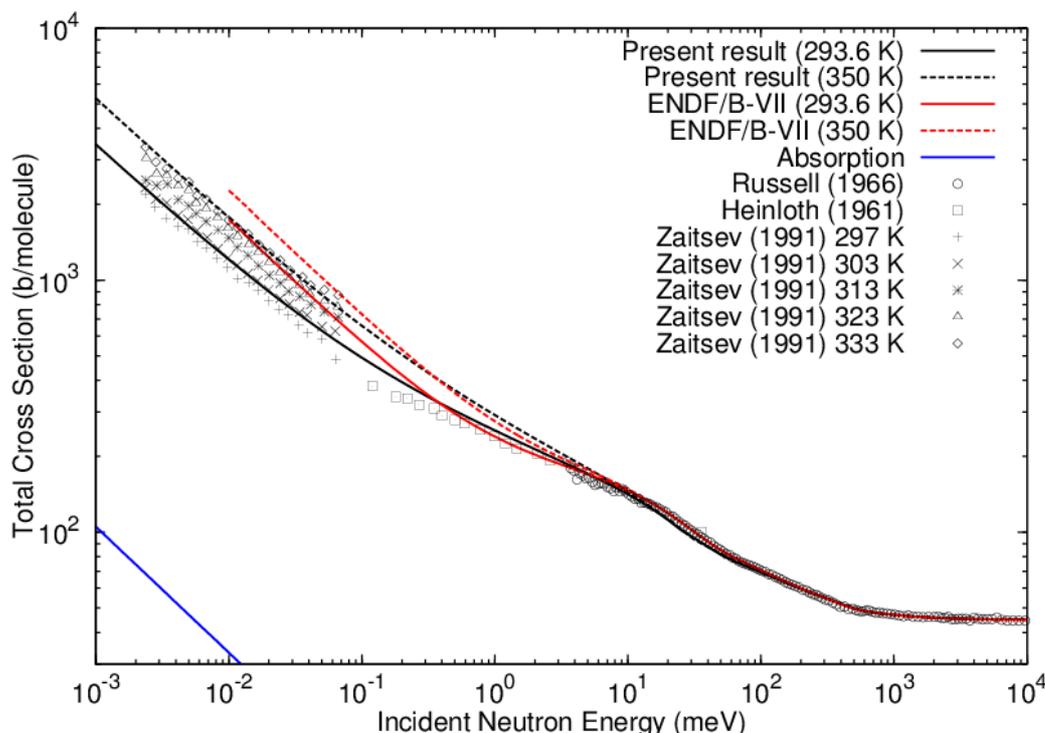


図 4 常温の軽水の全断面積. 実線(黒)および破線(黒)は液体温度 293.6, 350 K での解析結果, 実線(赤)および破線(赤)は液体温度 293.6, 350 K での ENDF/B-VII[5] を表し, 青線および記号は, それぞれ, 吸収断面積と実験値[15-17]を表す.

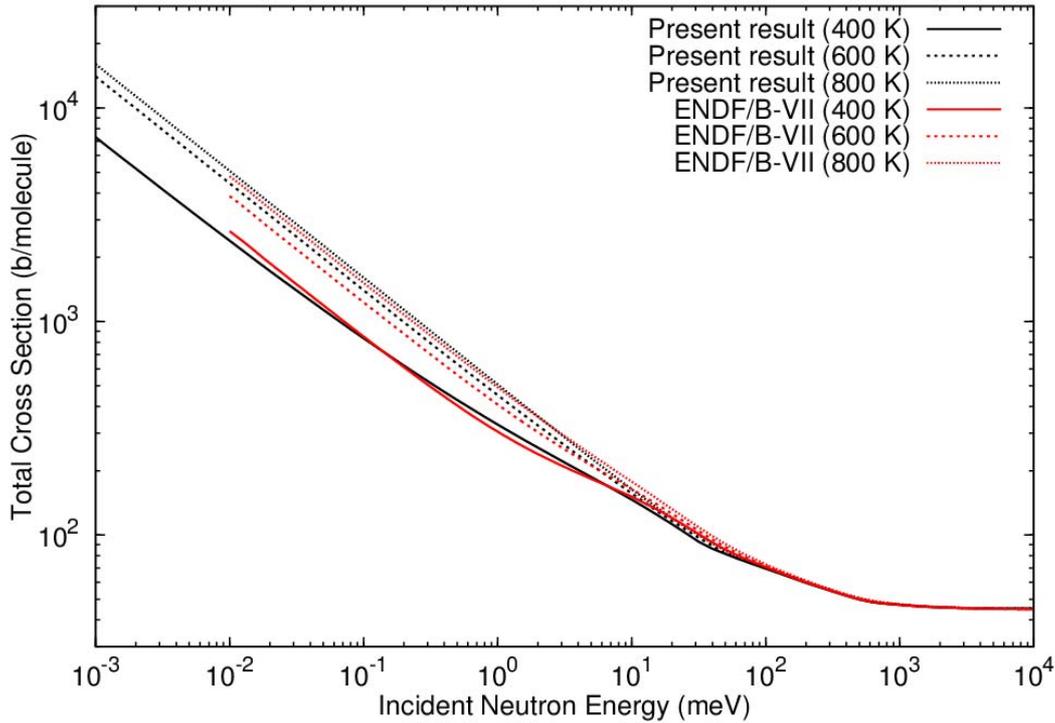


図 5 高温での軽水の全断面積。実線(黒)、破線(黒)および点線(黒)は温度400, 600, 800 Kでの解析結果、実線(赤)、破線(赤)および点線(赤)は温度400, 600, 800 KでのENDF/B-VII[5]を表す。

4. Van Hove 時空相関関数からの非干渉散乱の直接解析

前節までの散乱断面積の解析では、自己中間散乱関数 $F_s^X(\kappa, t)$ を κ の Gauss 関数として表す Gauss 近似を採用してきた。しかしながら、軽水では分子間に比較的強い水素結合が働くため、水分子の拡散運動は単純拡散ではなく、水素結合による過渡的なネットワーク形成と分子の熱運動によるネットワーク崩壊およびその後の分子拡散が間欠的に続く跳躍拡散モデル[18]で説明されており、こうした水分子の跳躍拡散的挙動は、実験的には中性子準弾性散乱ピーク半値幅の運動量遷移 $\hbar\kappa$ 依存性の解析から観測されている[19]。跳躍拡散モデルによる $F_s^X(\kappa, t)$ は水素結合ネットワークの崩壊時定数を含むため、 κ の単純な Gauss 関数にはならない。 $F_s^X(\kappa, t)$ のこうした非 Gauss 性は、水分子の拡散運動による準弾性散乱が支配的になる冷中性子領域以下の散乱断面積で影響する可能性がある。

そこで、こうした影響を考慮するために、Van Hove の自己時空相関関数 $G_s^X(\mathbf{r}, t)$ を用いて、 $F_s^X(\kappa, t)$ を $G_s^X(\mathbf{r}, t)$ の空間領域での Fourier 変換

$$F_s^X(\kappa, t) = \int_{-\infty}^{\infty} G_s^X(\mathbf{r}, t) e^{i\kappa \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (6)$$

から直接求め、軽水の非干渉性散乱断面積を解析することを試みた。 $G_s^X(\mathbf{r}, t)$ は古典的に

は、時刻 0 で原点にいた原子が時刻 t で位置 \mathbf{r} の単位体積に存在する確率を意味し（標的系は等方的であるため、上式では $G_S^X(\mathbf{r}, t)$ を r の関数としている）、MD から得た各原子の位置ベクトル $\mathbf{R}^X(t)$ を用いて、統計平均

$$G_S^X(\mathbf{r}, t) = \langle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}^X(t) + \mathbf{R}^X(0)) \rangle_c \quad (7)$$

をとることにより求められる。

しかしながら、MD から直接求めた自己中間散乱関数（以下 $F_S^{X, \text{MD}}(\boldsymbol{\kappa}, t)$ と表す）は古典力学に基づくため、量子効果である詳細釣り合いや総和則（0 次以外）といった物理的条件を満たさない。そのため、量子力学に基づく Van Hove の $F_S^X(\boldsymbol{\kappa}, t)$ の代わりに、 $F_S^{X, \text{MD}}(\boldsymbol{\kappa}, t)$ を散乱断面積の解析に用いるためには、 $F_S^{X, \text{MD}}(\boldsymbol{\kappa}, t)$ に量子補正を施す必要がある。これまでに詳細釣り合いを満たすいくつかの量子補正（代表的なものは文献[20-22]）が提案されているが、いずれも 2 次までの総和則を同時に満たさないため、熱中子領域（約 100 meV）以上での深層非弾性散乱の評価において問題があった。そこで、本研究では古典液体に対する Sears の量子補正[23]に Gauss 近似での自己中間散乱関数（以下 $F_S^{X, \text{Gauss}}(\boldsymbol{\kappa}, t)$ と表す）を組み合わせた Gauss 近似援用量子補正（GAAQC）

$$F_S^X(\boldsymbol{\kappa}, t) = \frac{F_S^{X, \text{Gauss}}(\boldsymbol{\kappa}, t)}{\tilde{F}_S^{X, \text{Gauss}}(\boldsymbol{\kappa}, t)} F_S^{X, \text{MD}}(\boldsymbol{\kappa}, t) \quad (8)$$

を新たに考案した。ここで、 $\tilde{F}_S^{X, \text{Gauss}}(\boldsymbol{\kappa}, t)$ は $F_S^{X, \text{Gauss}}(\boldsymbol{\kappa}, t)$ の古典極限 ($\hbar \rightarrow 0$) である。GAAQC による $F_S^X(\boldsymbol{\kappa}, t)$ は詳細釣り合いと 2 次までの総和則を近似的に満たし、かつ分子の並進拡散による緩和が顕になる長時間 ($t > 1$ ps) では、MD による $F_S^{X, \text{MD}}(\boldsymbol{\kappa}, t)$ に漸近するという好ましい性質を持つ。

図 6 に、GAAQC により解析した軽水の準弾性散乱ピークに Teixeira らの解析モデル[19] を当てはめ、軽水分子の並進運動成分の半値半幅（HWHM）の $\boldsymbol{\kappa}^2$ 依存性を評価した結果（黒四角）を示す。なお、図には実験値（白丸）[19]とともに、比較のため前節の Gauss 近似による準弾性散乱ピークに対する同様な評価結果（白四角）も示す。Gauss 近似による HWHM は $\boldsymbol{\kappa}^2$ に対し直線的（単純拡散的）に増加するのに対し、直接解析では $\boldsymbol{\kappa}^2$ に対して HWHM の増加は抑制的（跳躍拡散的）になり、実験値とよく一致している。また、直接解析の HWHM を跳躍拡散モデル（破線）にフィッティングして得られた水素結合ネットワークの崩壊時定数 $\tau_0 = 1.18$ ps と水の拡散係数 $D = 0.241 \text{ \AA}^2/\text{ps}$ は妥当な値を示す。この結果から、Van Hove 時空相関関数の直接解析により軽水分子の跳躍拡散的な振舞いを準弾性散乱の評価に反映させ得ることが示された。

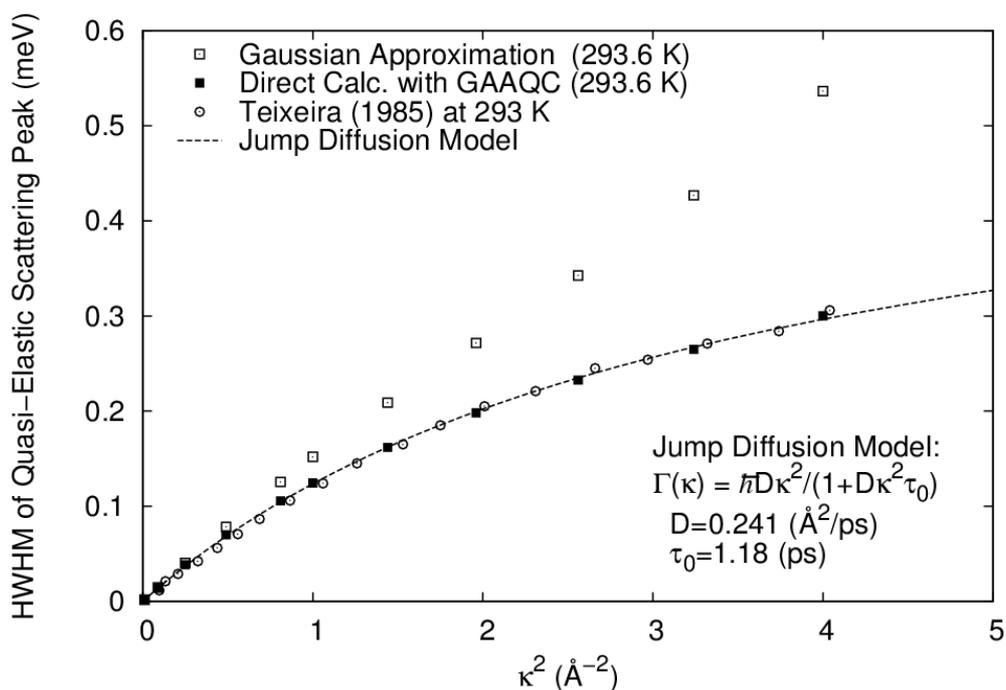


図 6 準弾性散乱ピーク（並進運動成分）の半値半幅（HWHM）の κ^2 依存性。図には、Gauss近似（白四角）、直接解析（黒四角）、実験値（白丸）[19]および直接解析の跳躍拡散モデルによるフィッティング結果（破線）を示す。

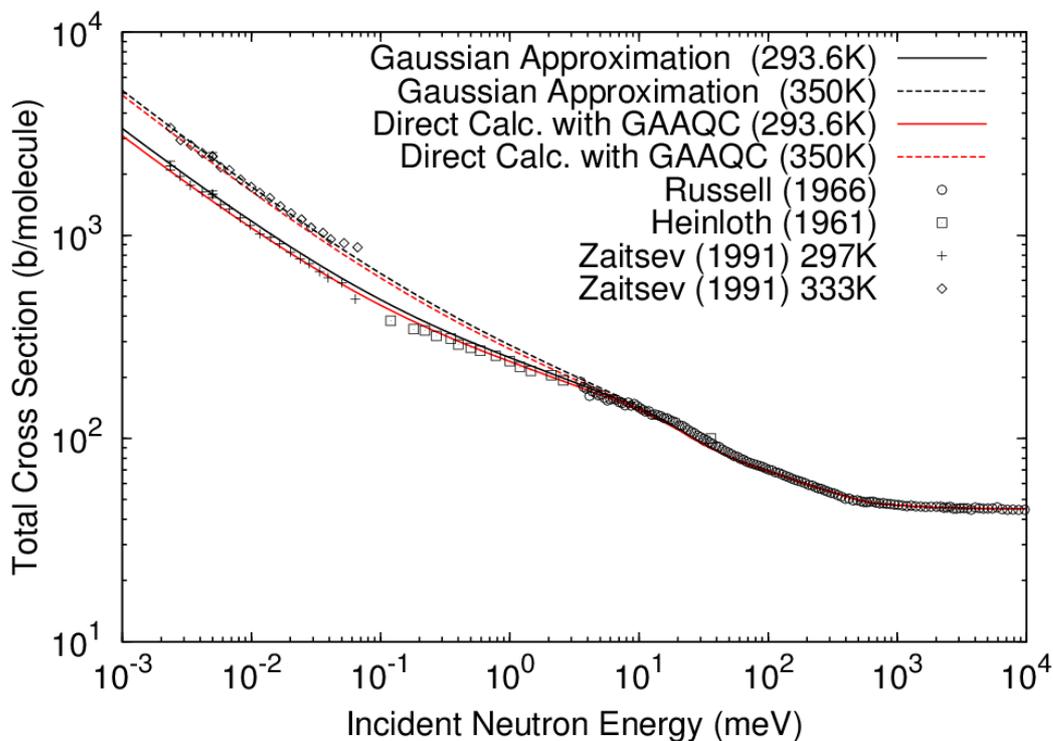


図 7 常温の軽水の全断面積。実線（黒）および破線（黒）は293.6, 350 KでのGauss近似による解析結果、実線（赤）および破線（赤）は293.6、350 Kでの直接解析による解析結果、記号は実験値[15-17]を表す。

軽水分子の跳躍拡散的な振舞いの散乱断面積への影響を把握するために、図 7 に 293.6、350 K における全断面積の解析結果を実験値[15-17]と比較して示す。293.6 K では約 10 meV 以下の冷中性子領域で直接解析（実線（赤））は Gauss 近似（実線（黒））より若干小さくなり、実験値により近づいている。これは、Van Hove 時空相関関数の直接解析により水の並進拡散運動が抑制的に評価されたため、準弾性散乱ピークの幅が減少し、その結果として準弾性散乱の全断面積への寄与も減少したものとする（中性子共鳴吸収における共鳴幅と共鳴積分の関係に類似）。また、温度の上昇により水の並進拡散は単純拡散に近づくため、350 K では両者（破線（黒）と破線（赤））の違いは小さくなる。

5. おわりに

本稿では MD による軽水の散乱断面積解析について、筆者が近年開発した二つの方法を解説した。ガウス近似による方法では、自己中間散乱関数 $F_S^X(\kappa, t)$ の幅関数の評価に MD による周波数分布関数 $g^X(\omega)$ を用いることで軽水の分子運動の詳細を散乱断面積に反映させることが可能になり、既存の核データと比較して冷中性子領域（10 meV）以下の全断面積において実験値の再現性が改善した。また、Van Hove 時空相関関数の直接解析と新たな量子補正（GAAQC）により、熱外中性子領域（100 meV 以上）での全断面積の自由原子散乱断面積への漸近特性を保ちつつ、冷中性子領域での水分子の跳躍拡散的な振舞いを準弾性散乱に反映させることが可能となり、冷中性子領域以下の全断面積においてガウス近似と比較して実験値の再現性がさらに向上した。

以上のように、軽水については MD による散乱断面積の解析方法の有効性が確認できたため、本方法（ガウス近似および直接解析）による ENDF 形式の核データ ($S(\alpha, \beta)$) を作成し、炉心解析や冷中性子源設計などの中性子輸送解析への利用に供したいと考える。なお、重水についても MD による散乱断面積の解析を進めており[24]、軽水と同様に核データの作成まで行う予定である。

また、これまでの軽水の散乱断面積解析の知見から、セメント、燃料電池、生体物質などの含水物においても、冷中性子領域の散乱断面積はこうした物質中での水分子の運動に大きく影響され得ると考える。そのため、例えば中性子 TOF イメージング法[25]により測定される冷中性子領域の全断面積（画像データ）から、こうした物質中の水の状態（自由水、結合水など）に関する情報を逆に引き出せる可能性がある。本研究で開発した MD 法はこうした含水物の散乱断面積の解析への適用も期待でき、また、MD の軌跡データを解析すれば含水物中の水分子の運動と散乱断面積の変化を関係づけることも原理的には可能であるため、中性子 TOF イメージング法による画像データの評価・解釈など非破壊検査や物性研究へも応用され得ると考える。今後の検討課題としたい。

参考文献

- [1] Y. Abe, T. Tsuboi, S. Tasaki, *Nucl. Instrum. Method A* **735**, 568 (2014).
- [2] 安部豊, 田崎誠司, 「分子動力学法による軽水の非干渉性中性子散乱断面積の直接解析」, 2013年日本中性子科学会 第13回年会予稿集, PS-41.
- [3] L. Van Hove, *Phys. Rev.* **95**, 249 (1954).
- [4] R.E. MacFarlane, "New Thermal Neutron Scattering Files for ENDF/B-VI Release 2," Los Alamos National Laboratory Report LA-12639-MS, August 1994.
- [5] M.B. Chadwick *et al.*, *Nucl. Data Sheets* **107**, 2931 (2006).
- [6] M. Mattes, J. Keinert, "Thermal Neutron Scattering Data for the Moderator Materials H_2O , D_2O and ZrH_x in ENDF-6 Format and as ACE Library for MCNP(X) Codes," IAEA Report INDC(NDS)-0470, April 2005.
- [7] N. Morishima, Y. Aoki, *Ann. Nucl. Energy* **22**, 147 (1995).
- [8] Y. Edura, N. Morishima, *Nucl. Instrum. Method A* **534**, 531 (2004).
- [9] A.D. Viñales, J. Dawidowski, J.I. Márquez Damián, *Ann. Nucl. Energy* **38**, 1687 (2011).
- [10] A. Rahman, K.S. Singwi, A. Sjölander, *Phys. Rev.* **126**, 986 (1962).
- [11] L.X. Dang, B.M. Pettitt, *J. Phys. Chem.* **91**, 3349 (1987).
- [12] W. Smith, C.W. Yong, P.M. Rodger, *Mol. Simul.* **28**, 385 (2002).
- [13] M.-C. Bellissent-Funel, S.H. Chen, J.-M. Zanotti, *Phys. Rev. E* **51**, 4558 (1995).
- [14] O.K. Harling, *J. Chem. Phys.* **50**, 5279 (1969).
- [15] K.N. Zaitsev, V.N. Petrov, S.P. Kuznetsov, O.A. Langer, I.V. Meshkov, A.D. Perekrestenko, *Sov. At. Energy* **70**, 238 (1991).
- [16] K. Heinloth, *Z. Phys.* **163**, 218 (1961).
- [17] J.L. Russell, Jr., J.M. Neill, J.R. Brown, "Total Cross Section Measurements of H_2O ," General Atomic Report GA-7581, 1966.
- [18] K.S. Singwi, A. Sjölander, *Phys. Rev.* **119**, 863 (1960).
- [19] J. Teixeira, M.-C. Bellissent-Funel, S.H. Chen, A.J. Dianoux, *Phys. Rev. A* **31**, 1913 (1985).
- [20] P. Schofield, *Phys. Rev. Lett.* **4**, 239 (1960).
- [21] P.A. Egelstaff, *Adv. Phys.* **11**, 203 (1962).
- [22] R. Aamodt, K.M. Case, M. Rosenbaum, P.F. Zweifel, *Phys. Rev.* **126**, 1165 (1962).
- [23] V.F. Sears, *Phys. Rev. A* **31**, 2525 (1985).
- [24] 安部豊, 田崎誠司, 「分子動力学法による重水の中性子散乱断面積解析」, 2010年日本原子力学会 秋の大会予稿集, I39; 安部豊, 田崎誠司, 「分子動力学法による重水の時空相関関数の解析と中性子散乱断面積の評価」, 2012年日本原子力学会 秋の大会予稿集, K18.
- [25] Y. Kiyonagi, H. Sato, T. Kamiyama, T. Shinohara, *J. Phys.: Conf. Ser.* **340**, 012010 (2012).