非対称回転子による低エネルギー中性子散乱微分断面積の計算

坂　本　　　薫

昭和48年9月30日　受理

要　　約

非対称回転子による低エネルギー中性子の微分断面積に対する Volkin[1] の式の改良を試みようとしている．我々は非対称の回転子の波動関数を対称回転子の波動関数で展開する前に，回転の対称性を満足するように，対称回転子の波動関数を変換させて，得られた波動関数で展開し，回転エネルギーと展開係数を計算する．

1. 序　　言

分子による低エネルギーの微分断面積を研究する事は，原子炉の設計に必要な熱中性子の散乱微分断面積を正確にもとめるだけではなく，分子の動力学な挙動を研究するために重要である．まず，我々は分子の回転のみ考慮する．非対称回転子の古典的な効果は Volkin の式がそのまま使用されるが，量子補正を考えに入れると，Volkin の式からことなる．エネルギー E_J と角運動量Jと空間に固定されたある軸にそった角運動量の成分Mをもつ状態ベクトル $|JM\rangle$ にある固定された中心を持つ回転子と最初の運動量 $\vec{k_0}$ で最終の運動量 $\vec{k}$ を持つ中性子の散乱を考える．

運動量の移動は $\vec{\kappa}=\vec{k}-\vec{k_0}$ であり，エネルギーの移動は $\varepsilon=(2m)^{-1}(k^2-k_0^2)$ である．角運動量の方向においてのみ異なる状態，即ちことなったMの状態はエネルギー的に縮退している．分子の中心に対して，位置ベクトル $\vec{b_\nu}$ に散乱長 a_ν の1個の原子核による中性子微分断面積は次のようである．

$$\sigma_J(\theta,\varepsilon)=k(2\pi k_0)^{-1}\int_{-\infty}^{\infty}dt\,e^{-i\varepsilon t}<\chi>_J \tag{1.1}$$

ここで　$<\chi>_J=a_\nu^2(2J+1)^{-1}\sum_{M=-J}^{J}<JM|e^{iHt}exp(i\vec{\kappa}\cdot\vec{b_\nu})e^{-iHt}$

$exp(-i\vec{\kappa}\cdot\vec{b_\nu})|JM\rangle$，又 θ は散乱角である．

次のような有効ハミルトニアン H'_ν を定義すると，

$$H_\nu'=e^{i\vec{\kappa}\cdot\vec{b_\nu}}He^{-i\vec{\kappa}\cdot\vec{b_\nu}} \tag{1.2}$$

$\langle\chi\rangle_J$ は次のようになる．

$$<\chi>_J=a_\nu^2(2J+1)^{-1}\sum_{M=-J}^{J}\langle JM|e^{iHt}e^{-iH'_\nu t}|JM\rangle \tag{1.3}$$

(1.2) 式の有効ハミルトニアンは，次のようなリー展開で表現される.

$$e^{S}He^{-S}=H+[S,H]+\frac{1}{2}[S,[S,H]]+\cdots\cdots \tag{1.4}$$

$H=\vec{L}$ のとき，次のようになる.

$$e^{i\vec{\kappa}\cdot\vec{b}_\nu}He^{-i\vec{\kappa}\cdot\vec{b}_\gamma}=\vec{L}+[(i\vec{\kappa}\cdot\vec{b}_\nu),\vec{L}]+\frac{1}{2}[(i\vec{\kappa}\cdot\vec{b}_\nu),[(i\vec{\kappa}\cdot\vec{b}_\nu),L]]+\cdots \tag{1.5}$$

ここで次の交換関係を使用する.

$$[(i\vec{\kappa}\cdot\vec{b}_\nu),\vec{L}]=\vec{\kappa}\times\vec{b}_\nu$$

そのとき，(1.5) 式は次のようになる.

$$H_\nu'=\vec{L}+\vec{\kappa}\times\vec{b}_\nu \tag{1.6}$$

次にハミルトニアンHを非対称回転子のハミルトニアンにとると，$H=\frac{1}{2}\vec{L}\cdot II^{-1}\cdot\vec{L}$ である.
それ故に，

$$H_\nu^1=H+\frac{1}{2}(\vec{\kappa}\times\vec{b}_\nu)\cdot II^{-1}\cdot\vec{L}+\frac{1}{2}\vec{L}\cdot II^{-1}\cdot(\vec{\kappa}\times\vec{b}_\nu)$$
$$+\frac{1}{2}(\vec{\kappa}\times\vec{b}_\nu)\cdot II^{-1}\cdot(\vec{\kappa}\times\vec{b}_\nu) \tag{1.7}$$

(1.7) 式を (1.3) 式に代入すると，次のようになる.

$$exp(-i\,H_\nu'\,t)=exp[-it[H+\frac{1}{2}(\vec{\kappa}\times\vec{b}_\nu)\cdot II^{-1}\cdot\vec{L}+\frac{1}{2}\vec{L}\cdot II^{-1}\cdot(\vec{\kappa}\times\vec{b}_\nu)$$
$$+\frac{1}{2}(\vec{\kappa}\times\vec{b}_\nu)\cdot II^{-1}\cdot(\vec{\kappa}\times\vec{b}_\nu)] \tag{1.8}$$

ハミルトニアンHの固有値を E_J とすると，次の式が成立する.

$$H|JM\rangle=E_J|JM\rangle \tag{1.9}$$

それ故に (1.3) 式は次のようになる.

$$\langle\chi\rangle_J=\frac{1}{2J+1}\sum_{M=-J}^{J}\langle JM|a_\nu^2\,e^{-i(H'_\nu-E_J)t}|JM\rangle \tag{1.10}$$

2. Vōlkin の理論

非対称回転子の状態ベクトル $|JM\rangle$ は次のように，対称回転子の状態ベクトル $|JKM\rangle$ によって展開する.

$$|JM\rangle=\sum_K a_K^{JM}\,|JKM\rangle \tag{2.1}$$

(2.1) を (1.3) に代入すると，

$$\langle \chi \rangle_J = a_\nu^2 \sum_{K', K=-J}^{J} a_{K'}^{J*} a_K^J \langle \chi \rangle_J \tag{2.2}$$

$$\langle \chi \rangle_{JK'K} = \frac{1}{2J+1} \sum_{M=-J}^{J} \langle JK'M | exp(-it(H'_\nu - E_J)) | JKM \rangle \tag{2.3}$$

3. Volkin の理論の修正

Volkin の理論では，対称こまの状態ベクトルで展開しているが，状態ベクトルに回転の対称性を考慮していない．

対称こまの波動関数 Ψ_{JKM} を次のように定義する．

$$\Psi_{JKM} \equiv \langle \varphi \mu \psi \mid JKM \rangle = N U^{(J)}_{KM} \tag{3.1}$$

ここで $N = [(2J+1)/8\pi^2]^{\frac{1}{2}}$ で $U^{(J)}_{KM} = \langle JK | U | JM \rangle$，$U = e^{i\psi J3} e^{i\theta J2} e^{i\varphi J3}$，$\psi$，$\theta$，$\varphi$ はオイレル角で，$\mu = \cos\theta$ である．

対称こまの波動関数を次のように変換する[2]．

$$S(J, K, M, \gamma) = 2^{-\frac{1}{2}} [\Psi_{J,K,M} + (-1)^\gamma \Psi_{J,-K,M}] \tag{3.2}$$

$$S(J, O, M, O) = \Psi(J, O, M, O), \tag{3.3}$$

非対称波動関数を A(J, M) とすれば，$S(J, K, M, \gamma)$ をもちいて，次のように展開される．

$$A(J, M) = \sum_K a^{JM}_{K\gamma} S(J, K, M, \gamma) \tag{3.4}$$

我々は次の行列 A^1 を対角化すれば，回転エネルギー E_J と展開係数 $a^{JM}_{K\gamma}$ を得ることが分る．

$$A^1 = \left(\begin{array}{c|c} \begin{array}{cccc} \ddots & \ddots & \ddots & \\ \ddots & \ddots & O & E_{13} \\ \ddots & O & E_{22} & O \\ & E_{13} & O & E_{11} - E_{-11} \end{array} & O \\ \hline O & \begin{array}{ccccc} E_{00} & O & 2^{\frac{1}{2}} E_{02} & & \\ O & E_{11} + E_{-11} & O & E_{13} & \\ 2^{\frac{1}{2}} E_{02} & O & E_{22} & O & \ddots \\ & E_{13} & O & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \end{array} \end{array} \right) \tag{3.5}$$

ここで $E_{KK}=\frac{1}{4}\left\{\left(\frac{1}{I_x}+\frac{1}{I_y}\right)\left((J(J+1)-K^2)+\frac{2K^2}{I_z}\right\}\right.$，$E_{KK+2}=E_{K+2K}=\frac{1}{8}\left\{\left(\frac{1}{I_y}-\frac{1}{I_x}\right)\right.$ $[(J-K)(J-K-1)(J+K+1)(J+K+2)]^{\frac{1}{2}}$，$I_x, I_y, I_z$ は分子の慣性主軸モーメントである．固有値 E_J と固有ベクトル $a^J_{K\gamma}$ を求めるサブルーチンは容易に作成される．

我々はこの修正した方法で非対称回転子の微分断面積の計算を進めつつある．

参　考　文　献

1) H. C. Volkin Phy. Rev. 1029, 15, 1960.
2) H. C. Allen etc. Molecular Vib-Rotors John Wiley.