

中性子バイオ・ソフトマターワークショップ

中性子小角散乱の基礎

II. 実験、多成分系、ソフトマター

柴山 充弘 (東大物性研)



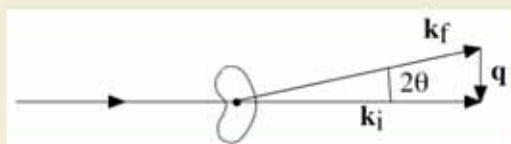
パルス中性子源(3Gev計画)



定常炉(20MW)

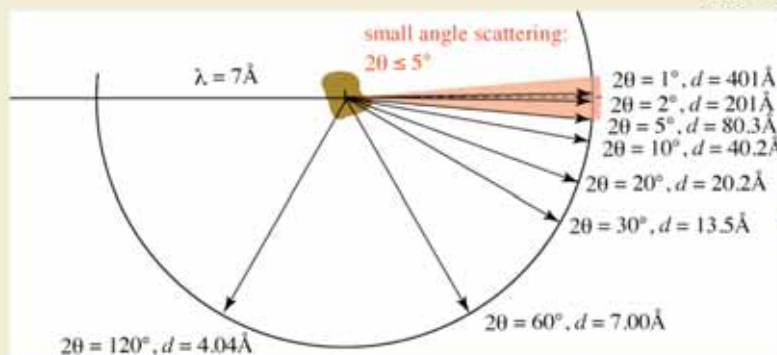
J-ARC: Japan Proton Accelerator Research Complex
 MLF: Materials and Life Science Facility
 JAEA: Japan Atomic Energy Agency
 JRR-3: Japan Research Reactor No. 3 (1990 -)

小角散乱



$$d \approx \frac{2\pi}{q}, \quad 2\theta \approx \frac{\lambda}{d} \approx \frac{7\text{\AA}}{40 \sim 800\text{\AA}}$$

$2\theta \approx 0.5^\circ \sim 10^\circ$ 小角散乱



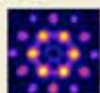
粒子間干渉

凝集構造
(相分離、ドメイン構造、...)



孤立ドメイン構造
(ミセル、ロッド、ラメラ、ベシクル)

結晶構造
局所非晶構造



孤立散乱



目次

- 装置と実験手順
- 高分子系
- 多成分系
- 応用例
- まとめ
- 付録



実験手順

experiment

Solid sample

Sample; $I_{\text{sample}}(q)$ $T_{\text{sample/open}}$

Open beam; $I_{\text{open}}(q)$

Block beam; $I_{\text{B4C}}(q)$

Standard Sample; $I_{\text{standard}}(q)$ $T_{\text{standard/open}}$

Liquid sample

Sample; $I_{\text{sample}}(q)$ $T_{\text{sample/open}}$

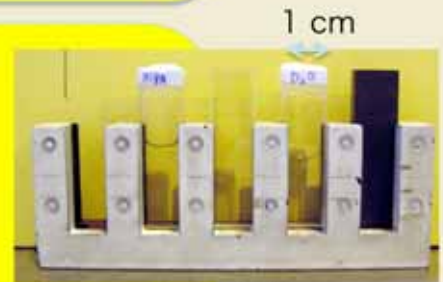
Open beam; $I_{\text{open}}(q)$

Cell; $I_{\text{cell}}(q)$ $T_{\text{cell/open}}$

Solvent; $I_{\text{solvent}}(q)$ $T_{\text{solvent/open}}$

Block beam; $I_{\text{B4C}}(q)$

Standard Sample; $I_{\text{standard}}(q)$ $T_{\text{standard/open}}$



From left to right:
Open, Sample, cell, D₂O,
B4C

データ処理

固体試料(セルなし)

$$I(q) = \frac{1}{T_{\text{Sample/Open}}} \left[I_{\text{Sample}}(q) - I_{\text{B4C}}(q) \right] - \left[I_{\text{Open}}(q) - I_{\text{B4C}}(q) \right]$$

試料
ノイズ
空気
ノイズ

液体試料(セル入り)

$$I(q) = \frac{1}{T_{\text{Sample/Open}}} \left[I_{\text{Sample}}(q) - I_{\text{B4C}}(q) \right] - \frac{1}{T_{\text{Cell/Open}}} \left[I_{\text{Cell}}(q) - I_{\text{B4C}}(q) \right]$$

試料
ノイズ
セル
ノイズ

$T_{A/B}$ はAのBに対する透過率、

$I_A(q)$ はA(=Sample, cell, B4C, Open beam)の散乱強度である。

B4Cはガンマ線や宇宙線、装置の電氣的ノイズなどの

バックグラウンド散乱を測るための試料である。

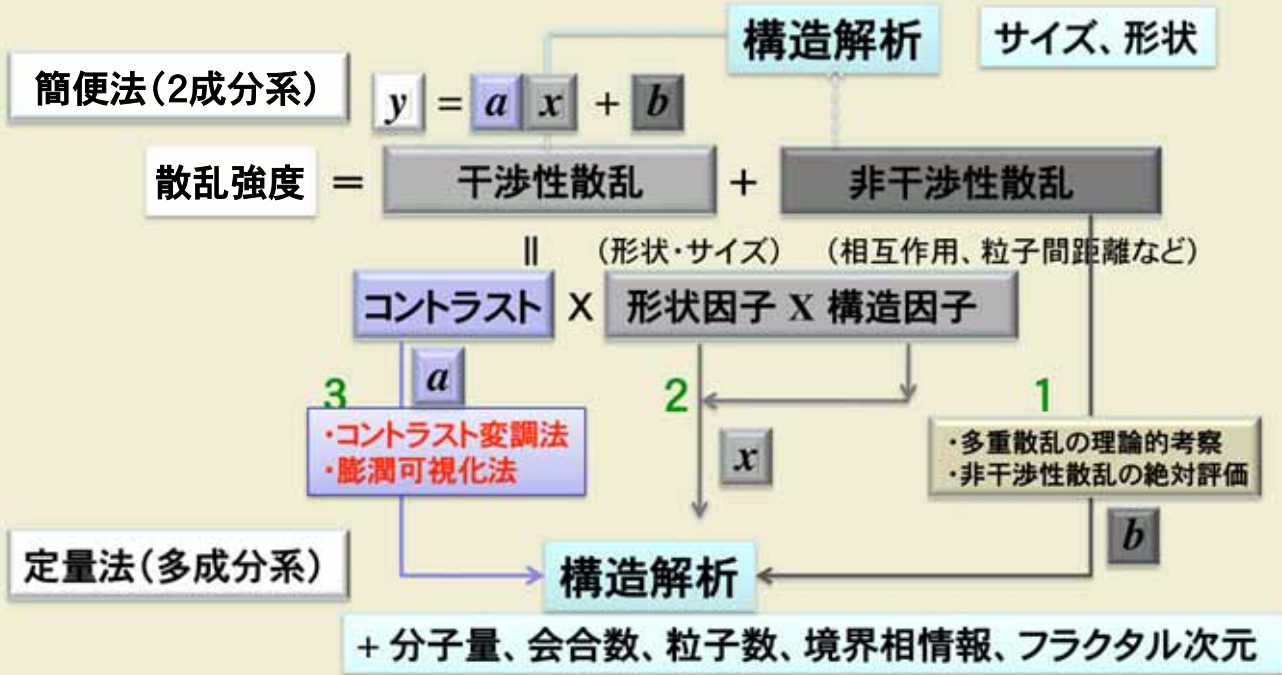
また、絶対強度に換算するために、標準試料の散乱強度を

測る必要がある。SANS-Uの場合、ポリエチレン標準試料(Lupolen)を用いて、

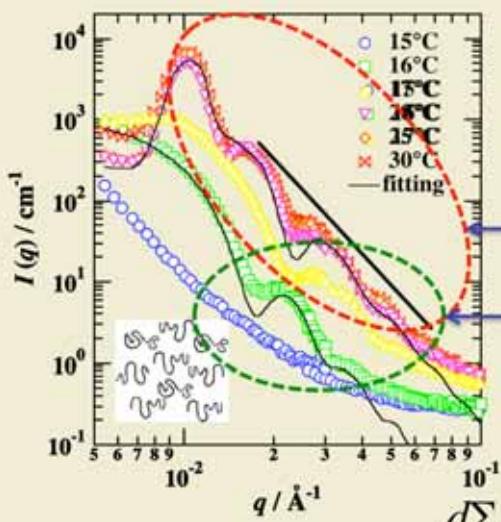
$I_{\text{Lupolen}}(q)$ を測定している。

したがって、試料の他に最低3つ(液体試料では4つ)の測定を行わなければならない。

中性子散乱による構造解析



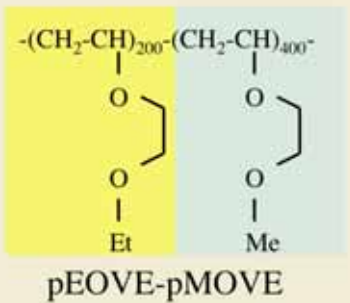
孤立散乱と粒子間干渉散乱



$T \leq 17^\circ\text{C}$; 溶液
 $T \geq 20^\circ\text{C}$; ゲル(流動性なし)

周期的ドメイン構造

孤立散乱



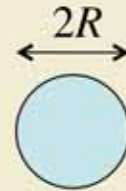
$$\frac{d\Sigma}{d\Omega} \equiv I(q) = (\Delta\rho)^2 nV^2 P(q)S(q)$$

$$n \equiv \frac{N}{V}$$

- 構造因子
- 形状因子
- 体積
- 粒子数濃度
- 散乱コントラスト

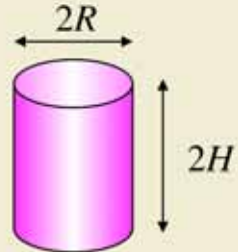
主な形状因子

球 $P(q) = \Phi^2(qR), \quad \Phi(qR) = \frac{3[\sin(qR) - qR \cos(qR)]}{(qR)^3}$



棒・円盤

$$P(q) \propto \int_{\alpha=0}^{\pi} \left[\frac{2J_1(qR \sin \alpha)}{qR \sin \alpha} \frac{\sin(qH \cos \alpha)}{qH \cos \alpha} \right]^2 \sin \alpha \, d\alpha$$



高分子

?



数珠(球)の集合体
(1分子自身、分子内相関をもつ)
不定形
(時々刻々、形が変わる)



9

高分子系からの散乱

1. 単一鎖
2. 回転半径
3. デバイ関数: ガウス鎖の散乱関数
4. 高分子希薄溶液の散乱関数(計算例)
5. 希薄系から濃厚系へ
6. 高分子溶液(小角X線散乱とのアナロジー)
7. ブロブの概念、準濃厚系の散乱関数
8. 同等な分子からなる同位体ブレンド

1. 単一鎖

鎖末端間距離

$$\mathbf{R} = \sum_{n=1}^N \mathbf{r}_n \quad (\text{鎖端ベクトル})$$

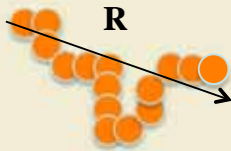
$$\langle \mathbf{R}^2 \rangle = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \langle \mathbf{r}_n \cdot \mathbf{r}_m \rangle = \begin{cases} Na^2 & \text{ガウス鎖} \\ \dots & \\ N^2 a^2 & \text{棒状分子} \end{cases}$$

$$\langle \mathbf{r}_n \cdot \mathbf{r}_m \rangle = \delta_{nm}$$

$$\langle \mathbf{R}^2 \rangle = Na^2$$

N : 一本の鎖中のセグメント数(重合度)

a : セグメント長

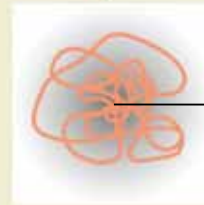
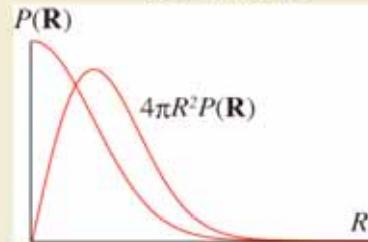


セグメント密度分布

$$P(\mathbf{R}, N) = \left(\frac{3}{2\pi Na^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{3\mathbf{R}^2}{2Na^2} \right)$$

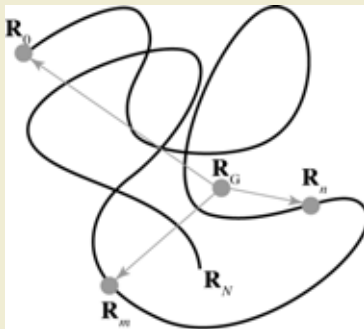
(3次元ガウス分布)

ガウス関数



(中心から外に向かうにつれて密度が減少)

2. 回転半径: 高分子の大きさの目安



回転半径: 重心からの距離の平均

$$\mathbf{R}_G = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathbf{R}_n$$

$$R_g^2 = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \langle (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_G)^2 \rangle \quad \text{重心からの距離の2乗平均}$$

$$R_g^2 = \frac{1}{2N^2} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \langle (\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)^2 \rangle \quad \text{任意の2点間距離の2乗平均}$$

分子量が大きいと ($N \gg 1$)

$$\langle (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)^2 \rangle \approx |n - m| b^2$$

$$R_g^2 = \frac{a^2}{2N^2} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N |n - m| = \frac{Na^2}{2} \int_0^1 x^2 dx$$

$$= \frac{Na^2}{6}$$

$$R_g^2 = \frac{Na^2}{6}$$

理想鎖の拡がり

$$R_g^2 = \frac{3}{5} R^2 \quad \text{球状粒子の場合の球の半径} R$$

3. デバイ関数: ガウス鎖の散乱関数



セグメントの対相関関数

$$g_s(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^N \langle \delta\{\mathbf{r} - (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_s)\} \rangle$$

$$g(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N g_s(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sum_{s=1}^N \langle \delta\{\mathbf{r} - (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_s)\} \rangle$$

形状因子

$$g(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} g(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sum_{s=1}^N \langle \exp[i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_s)] \rangle$$

ガウス鎖のフーリエ変換

$$\langle \exp[i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_s)] \rangle = \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \left(\frac{3}{2\pi|n-s|a^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{3\mathbf{r}^2}{2|n-s|a^2} \right)$$

$$= \langle \exp[iq_a(R_{na} - R_{sa})] \rangle$$

$$= \exp\left[-\frac{1}{2} q_a^2 (R_{na} - R_{sa})^2 \right] = \exp\left[-\frac{|m-n|}{6} a^2 q^2 \right]$$

$|m-n|$ を重合度とするガウス関数

デバイ関数

$$g(q) = \frac{1}{N} \sum_n \sum_m \langle \exp[i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)] \rangle = \frac{1}{N} \sum_n \sum_m \exp\left[-\frac{|m-n|}{6} a^2 q^2 \right]$$

$$= N g_D\left((qR_g)^2 \right)$$

$$g_D\left((qR_g)^2 \right) = g_D(x) = \frac{2}{x^2} (e^{-x} - 1 + x)$$

$$g_D(x) = \frac{2N}{x^2} (e^{-x} - 1 + x), \quad x \equiv R_g^2 q^2$$

$$g_D(q) = \begin{cases} N(1 - q^2 R_g^2 / 3), & qR_g \ll 1 \\ 2N / q^2 R_g^2, & qR_g \gg 1 \end{cases}$$

形状因子を $q = 0$ で1に規格化する

$$P_D(q) = \frac{g_D(x)}{N} = \frac{2}{x^2} (e^{-x} - 1 + x), \quad x \equiv R_g^2 q^2$$

$$P_D(q) = 1 - \frac{1}{3} R_g^2 q^2 + \dots$$

4. 高分子希薄溶液の散乱関数

$$I(q) = (\Delta\rho)^2 v_2 \phi N P_D(q)$$

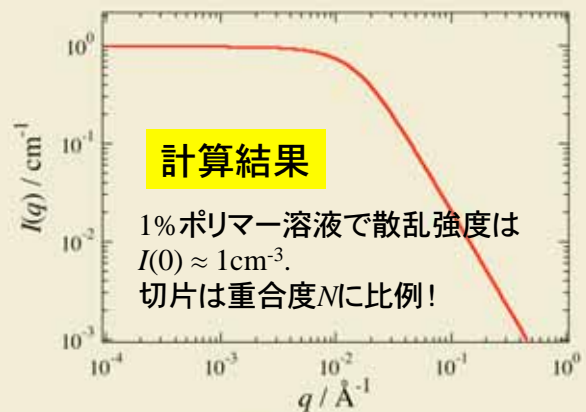
N : 重合度
 v_2 : 溶質セグメント1個あたりの分子体積
 ϕ : 高分子の体積分率
 $\Delta\rho$: 形状因子 (デバイ関数)
 N : 重合度
 ϕ : 体積分率 (濃度)
 $\Delta\rho$: コントラスト

ポリエチレングリコール(PEG)での計算例

$$(\Delta\rho)^2 = \left(\frac{b_{\text{PEG}}}{d_{\text{PEG}}} - \frac{b_{\text{D2O}}}{d_{\text{D2O}}} \right)^2$$

$$v_{\text{PEG}} = V_{\text{PEG}} / N_A = 6.48 \times 10^{-23} \text{ [cm}^3\text{]}$$

$$I(0) = (6.39 \times 10^9 - 6.36 \times 10^{10})^2 \times 6.48 \times 10^{-23} \times 0.01 \times 454 \times 1 = 0.9629 \text{ [cm}^{-1}\text{]}$$



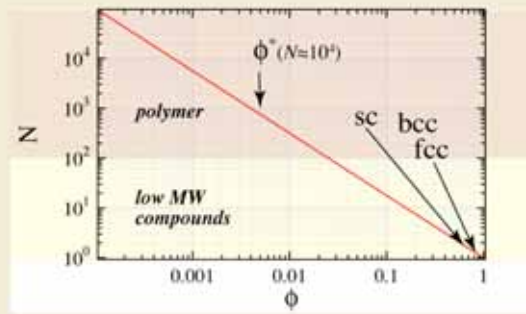
計算結果

1% ポリマー溶液で散乱強度は $I(0) \approx 1 \text{ cm}^{-3}$.
 切片は重合度 N に比例!

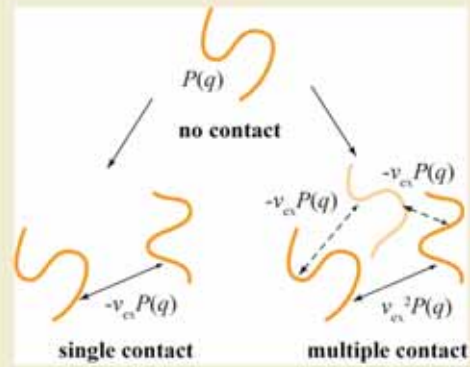
- $d_{\text{PEG}} = 1.129 \text{ [g/cm}^3\text{]}$
- $\rho_{\text{PEG}} = 6.39 \times 10^9 \text{ [cm}^{-2}\text{]} \text{ (NIST Table)}$
- $d_{\text{D2O}} = 1.10 \text{ [g/cm}^3\text{]}$
- $\rho_{\text{D2O}} = 6.36 \times 10^{10} \text{ [cm}^{-2}\text{]} \text{ (NIST Table)}$
- $m_{\text{D2O}} = 20 \text{ [g/mol]}$
- $m_{\text{PEG}} = 44.05 \text{ [g/mol]}$
- $b = 11 \text{ [Å]} \text{ (Rubinstein's book)}$
- $M_w = 20,000 \text{ [g/mol]}$
- $N = 454.03$
- $\langle R_g^2 \rangle = Nb^2/6 = 9156.27 \text{ [Å}^2\text{]}$

5. 希薄系から濃厚系へ

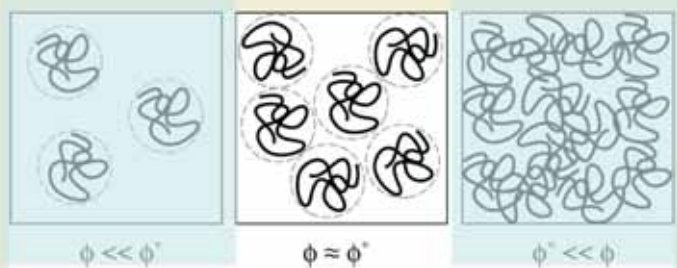
非常に低いオーバーラップ濃度 ($\ll 1\%$)



ϕ
 sc 0.52
 bcc 0.68
 fcc 0.74



オーバーラップ濃度, ϕ^* , が
 高分子の散乱挙動をわける



(希薄系) (overlap領域) (準濃厚系)

$$S(q) = 1 - \left(\frac{v_{ex}}{v_1}\right) [\phi NP(q)] + \left(\frac{v_{ex}}{v_1}\right)^2 [\phi NP(q)]^2 - \left(\frac{v_{ex}}{v_1}\right)^3 [\phi NP(q)]^3 + \dots = \frac{1}{1 + (v_{ex}/v_1)\phi NP(q)}$$

等比級数

散乱強度

$$I(q) = (\Delta\rho)^2 v_2 \phi NP(q) S(q) = \frac{(\Delta\rho)^2 v_2 \phi NP(q)}{1 + (v_{ex}/v_1)\phi NP(q)}$$

v_{ex} : 排除体積
 v_1 : 溶媒の分子体積

6. 高分子溶液 (Zimm散乱式)

(小角X線散乱の教科書などでよく見かける式で表記した場合)

高分子溶液の散乱関数

$$\frac{(b_2 v_1 / v_2 - b_1)^2 N_A c}{I(q) m^2} = \frac{1}{z m P_D(q)} + \frac{N_A v_{ex}}{m^2} c$$

$$= \frac{1}{M P_D(q)} + 2A_2 c$$

m : 分子量, N_A : アボガド口数,
 v_{ex} : 排除体積, M : 分子量, c : 高分子濃度
 b_2 : 溶質の散乱長, b_1 : 溶媒の散乱長,
 $P_D(q)$: デバイ関数

第2ビリアル係数

$$A_2 = \frac{N_A v_{ex}}{2m^2} = \frac{N_A a^3}{2m^2} (1 - 2\chi)$$

散乱強度式 (Zimm equation)

$$\frac{(b_2 v_1 / v_2 - b_1)^2 N_A c}{I(q) m^2} = \frac{1}{M} \left[1 + \frac{1}{3} R_g^2 q^2 + \dots \right] + 2A_2 c$$

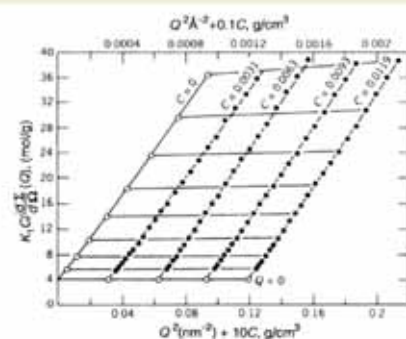
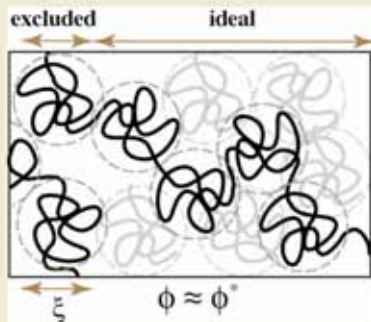
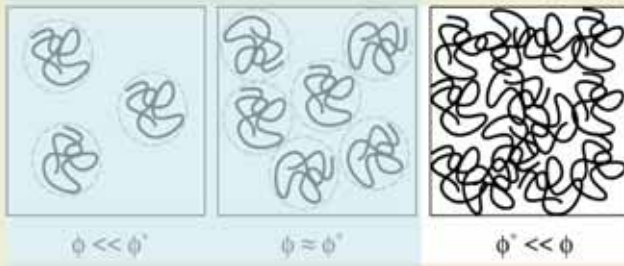


Fig. 8.2 Zimm plot of data in Fig. 8.1. The open circles are the result of extrapolation to zero C and zero Q ($= q$) (Kirste *et al.*, 1975). Reprinted with permission from Wignall (1987).

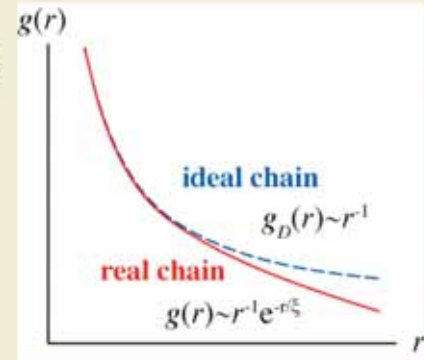
7. プロブの概念、準濃厚系の散乱関数



非相互作用鎖の最密充填

近距離で排除体積鎖(お互いを排除)
 長距離で理想鎖(排除しない)
 その境界は相関長(遮蔽長) ξ_E

相関関数



相関関数

$$g(r) \sim \frac{1}{r} \exp\left(-\frac{r}{\xi_E}\right)$$

↓ フーリエ変換

$$I(q) = \frac{I(0)}{1 + \xi_E^2 q^2}$$

オルンスタイン-ゼルニケ関数
 (Ornstein-Zernike関数) 17

8. 同等な分子からなる同位体ブレンド

一種類の散乱関数(デバイ関数 $P_D(q)$)しか存在しない。

$$P(q) = P_{D,11}(q) = P_{D,22}(q) = -P_{D,12}(q)$$

$$I(q) = \frac{(b_D - b_H)^2}{v_0} \phi(1 - \phi) N P_D(q)$$

$$= \frac{(b_D - b_H)^2 N_A}{\hat{v}_0} \phi(1 - \phi) N P_D(q)$$

例: 重水素化ポリスチレン、水素化ポリスチレンの
 50/50ブレンド(重合度 $N = 1000$)



$$I(q=0) = \left\{ (106.63 \times 10^{-13} [\text{cm}]) - (23.34 \times 10^{-13} [\text{cm}]) \right\}^2$$

$$\times 0.5^2 \times \frac{6.022 \times 10^{23}}{100 [\text{cm}^3]} \times 1000$$

$$= 104.4 [\text{cm}^{-1}]$$

散乱強度は分子量(重合度)に比例

9. 高分子ブレンド

ド・ジャンの散乱関数
(ランダム位相近似による散乱関数)

相互作用パラメーター

$$\frac{(\Delta\rho)^2}{v_0 I(q)} = \frac{1}{v_A \phi_A N_A P_D(q; N_A)} + \frac{1}{v_B \phi_B N_B P_D(q; N_B)} - 2 \frac{\chi}{v_0}$$

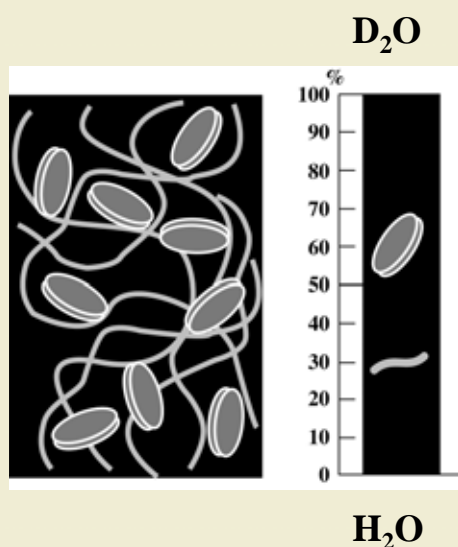
$$v_0 \equiv \sqrt{v_A v_B}$$

散乱強度の逆数

デバイ関数
重合度
体積分率
セグメント体積

散乱強度はそれぞれの成分の
散乱強度(デバイ関数)の調和平均(逆数の和)に
相互作用の補正(χ パラメーター)を加えたもの

多成分系



散乱実験は、いわば白黒写真でしかも
白・黒の2階調しかない。
しかし、一般の試料はさまざまなグレイ
の濃淡をもつ多成分系である。

たとえば、3成分系の散乱関数は
少なくとも異なる3つの散乱関数の和からなる。

$$I(q) = (\rho_C - \rho_S)^2 S_{CC}(q) + (\rho_P - \rho_S)^2 S_{PP}(q) + 2(\rho_C - \rho_S)(\rho_P - \rho_S) S_{CP}(q)$$

これでは、構造解析はできないので、コントラストマッチ
を行い、 $S_{CC}(q)$, $S_{PP}(q)$ を評価する。

多成分系の解析手順

$$I(q) = (\rho_C - \rho_S)^2 S_{CC}(q) + (\rho_P - \rho_S)^2 S_{PP}(q) + 2(\rho_C - \rho_S)(\rho_P - \rho_S)S_{CP}(q)$$

強調(可視化)

膨潤可視化法

分離

コントラストマッチ法、
コントラスト変調法

$$S_{CC}(q), S_{PP}(q)$$

$$S_{ij}(q) = nV^2 P(q) S(q)$$

通常の2成分系の解析

コントラストマッチ法

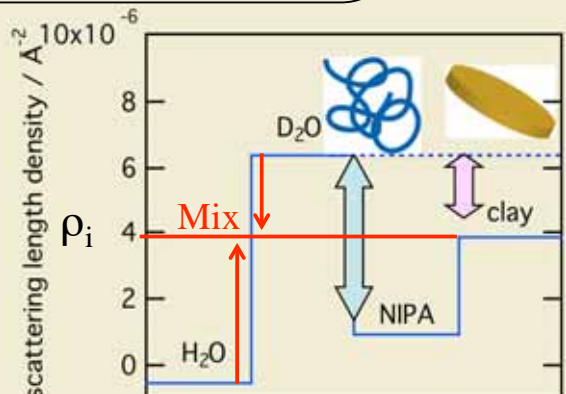
〔 クレイ(C), ポリマー(P), 溶媒(S) 〕
 S_{ij} ; 部分散乱関数

$$I(q) = \phi_P \phi_S (\rho_P - \rho_S)^2 S_{PP} + \phi_C \phi_S (\rho_C - \rho_S)^2 S_{CC} + 2\phi_P \phi_C (\rho_P - \rho_S)(\rho_C - \rho_S) S_{PC}$$

if $\phi_{H_2O} : \phi_{D_2O} = 0.34 : 0.66$

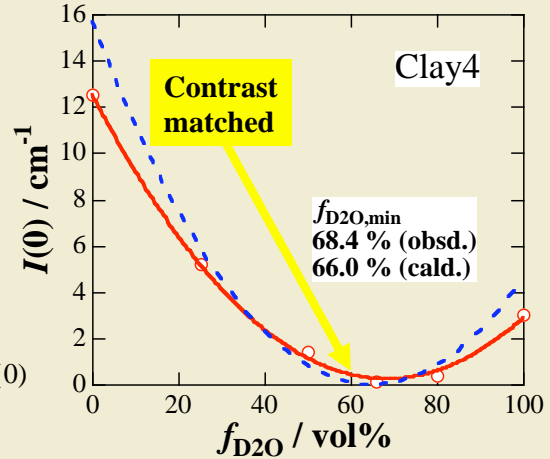
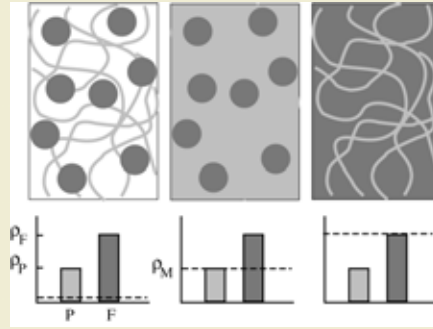
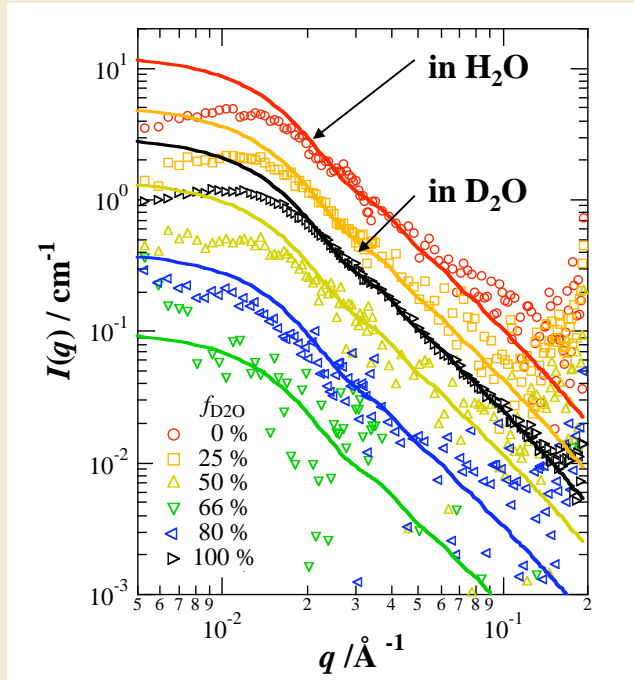
$$\rho_S = \rho_C$$

$$I(q) = \phi_P \phi_S (\rho_P - \rho_S)^2 S_{PP}$$



コントラストマッチにより、自己散乱関数が抽出可(S_{CC}, S_{PP}).

コントラストマッチ実験

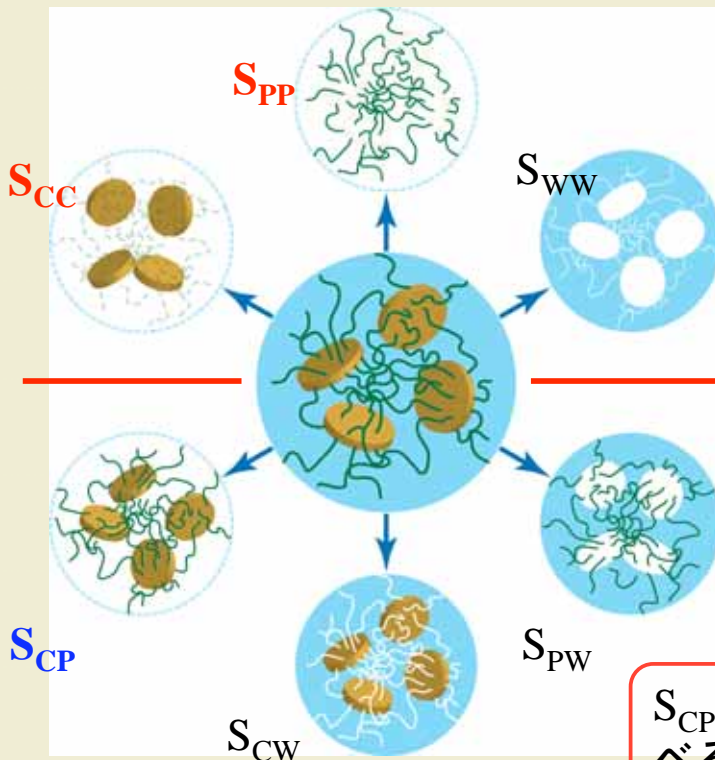


$$I(0) = \phi_C \phi_S \{ \rho_C - \rho_S(f_{D2O}) \}^2 S_{CC}(0)$$

$$\approx \phi_C \{ \rho_C - \rho_S(f_{D2O}) \}^2 V$$

コントラスト変調法— 概念

Self Terms ; 自己相関



NCゲルの散乱関数

$$I(q) = (\rho_C - \rho_S)^2 S_{CC}(q)$$

$$+ (\rho_P - \rho_S)^2 S_{PP}(q)$$

$$+ 2(\rho_C - \rho_S)(\rho_P - \rho_S) S_{CP}(q)$$

コントラスト・マッチング
→ 特定の自己相関, S_{ii}

コントラスト変調法
→ 全ての相互相関, S_{ij}

S_{CP} はクレイとポリマーの相関を調べる上で非常に重要

Cross Terms ; 相互相関

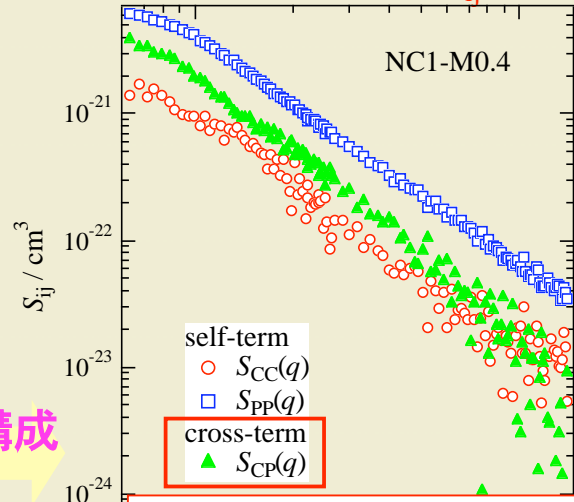
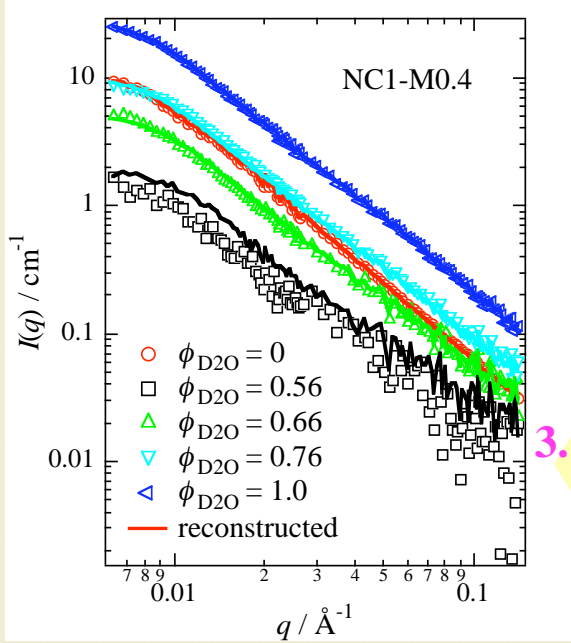
$$I(q) \rightarrow S_{ij}(q)$$

$$\begin{pmatrix} \Delta_1 \rho_C^2 & \Delta_1 \rho_P^2 & 2\Delta_1 \rho_C \Delta_1 \rho_P \\ \Delta_2 \rho_C^2 & \Delta_2 \rho_P^2 & 2\Delta_2 \rho_C \Delta_2 \rho_P \\ \Delta_3 \rho_C^2 & \Delta_3 \rho_P^2 & 2\Delta_3 \rho_C \Delta_3 \rho_P \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} I_1(q) \\ I_2(q) \\ I_3(q) \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{CC}(q) \\ S_{PP}(q) \\ S_{CP}(q) \end{pmatrix}$$

2. $I(q) \rightarrow S_{ij}(q)$

(singular value decomposition) 部分散乱関数; $S_{ij}(q)$

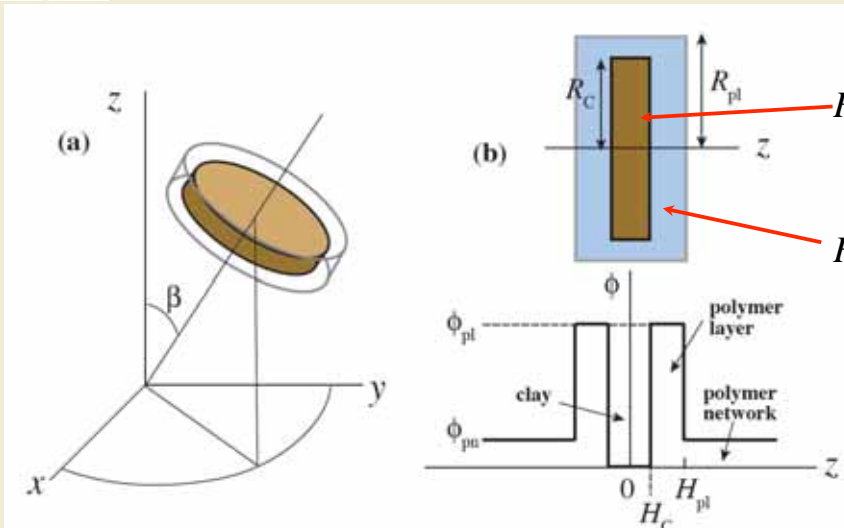
1. 実験



3. 再構成

Clay-polymer has strong correlation.

部分散乱関数 計算モデル



円盤の形状因子

$$F_{cyl} = 2V \frac{\sin(qH \cos \beta)}{qH \cos \beta} \frac{J_1(qR \sin \beta)}{qR \sin \beta}$$

厚み $2H$ 半径 R

$$F_{pl}(q) = (\phi_{pl} - \phi_{pn}) F_{cyl} - \phi_{pl} F_{cyl}$$

クレイ

$$S_{CC}(q) = \frac{N_C}{2} \int_{\beta=0}^{\pi} F_{cyl}^2 \sin \beta d\beta$$

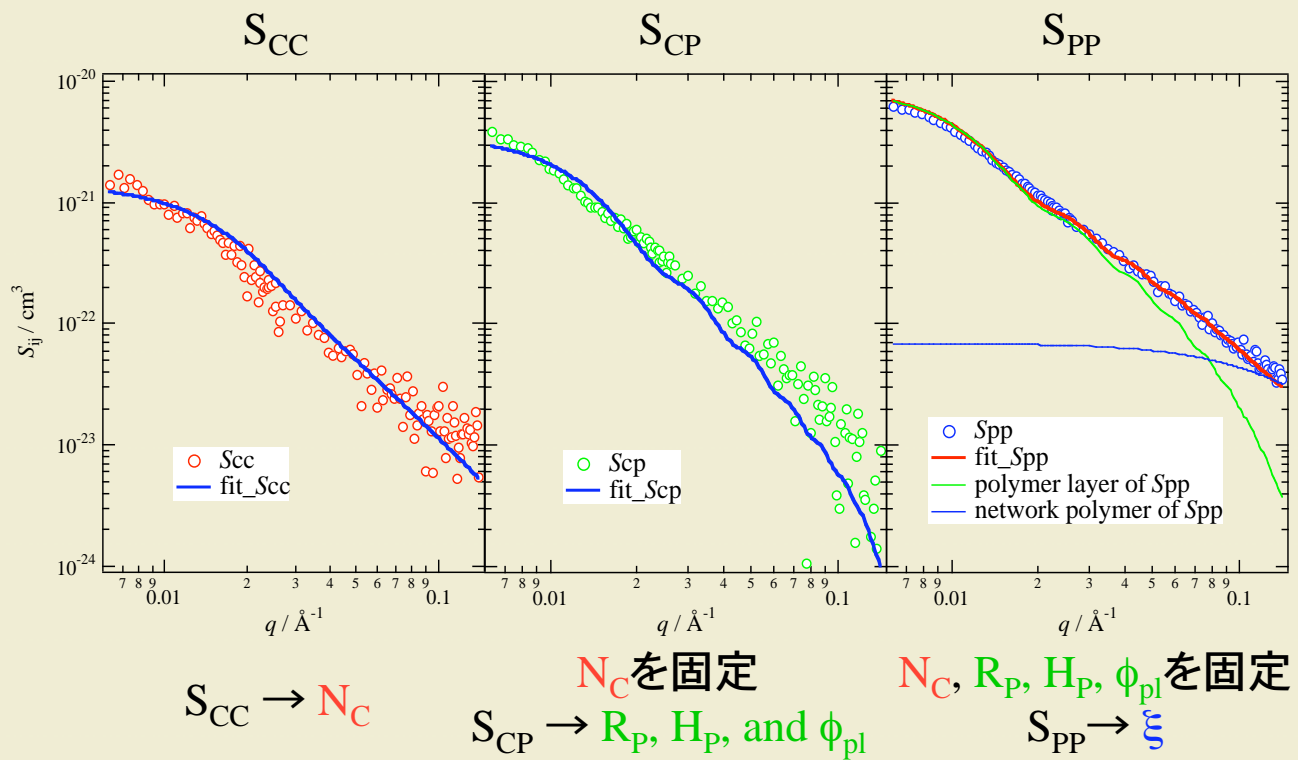
クレイと高分子

$$S_{CP}(q) = \frac{N_C}{2} \int_{\beta=0}^{\pi} F_{cyl} F_{pl} \sin \beta d\beta$$

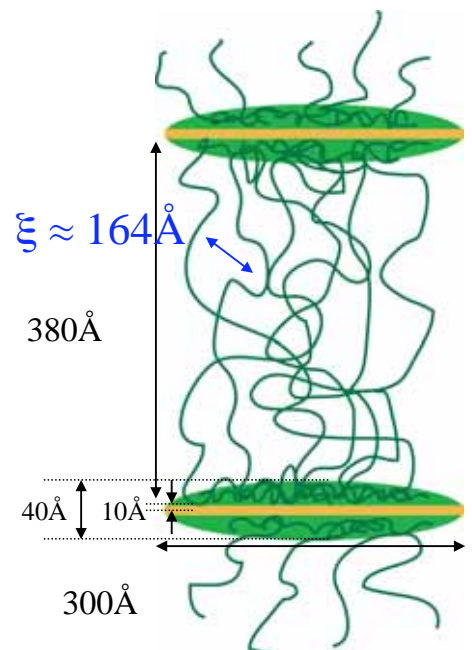
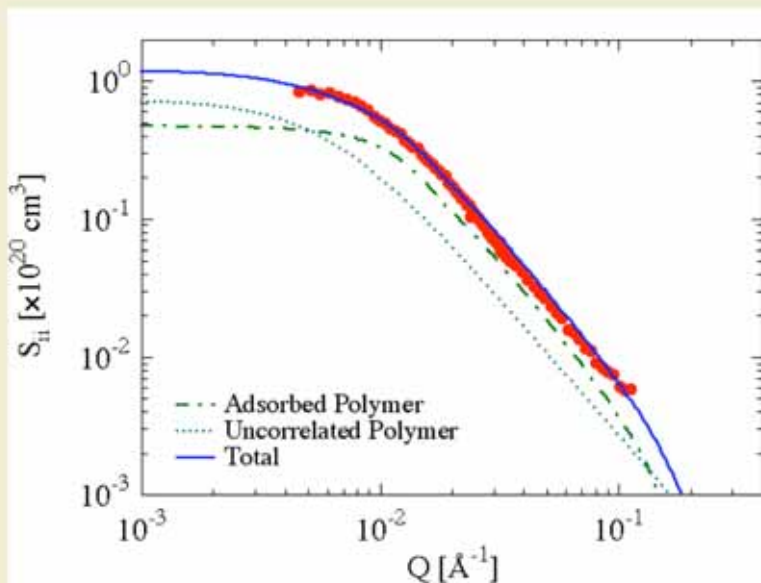
高分子

$$S_{PP}(q) = \frac{N_C}{2} \int_{\beta=0}^{\pi} F_{pl}^2 \sin \beta d\beta + \frac{S^0(0)}{1 + \xi^2 q^2}$$

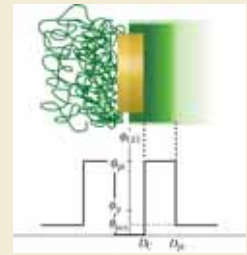
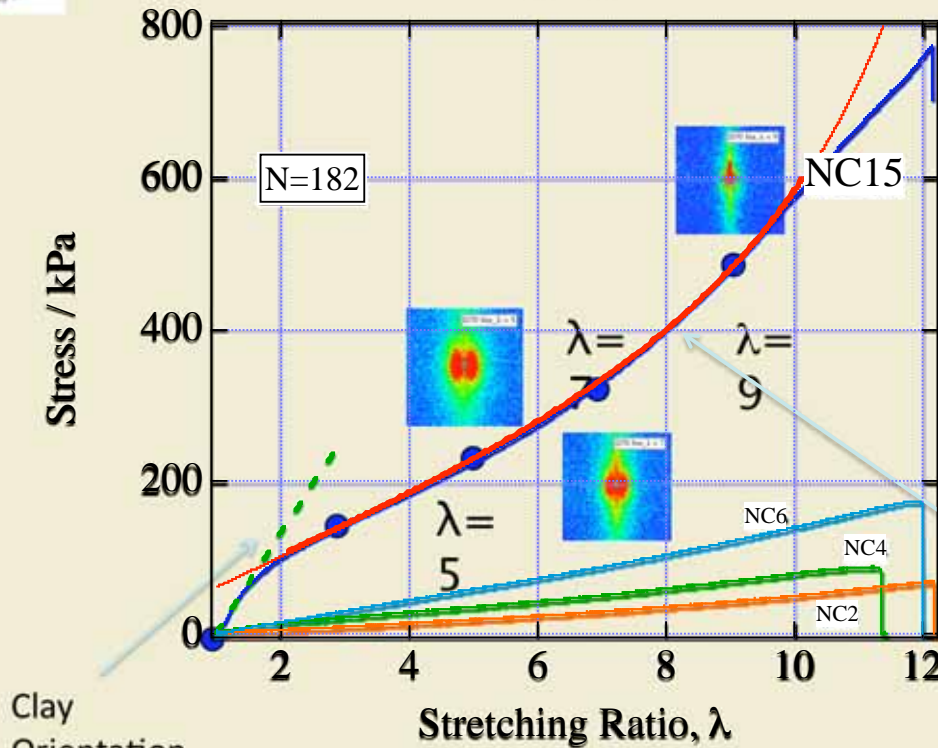
部分散乱関数



部分関数の評価- S_{pp}



Mechanical properties of NC15



Non-Gaussian Chain
 $Z \approx 182$,
 $E \approx 39$ kPa

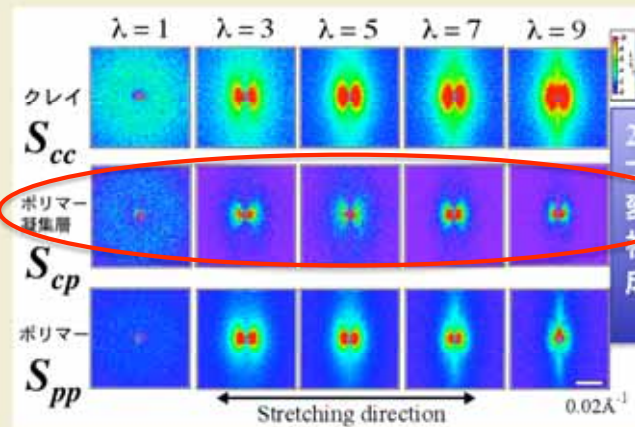
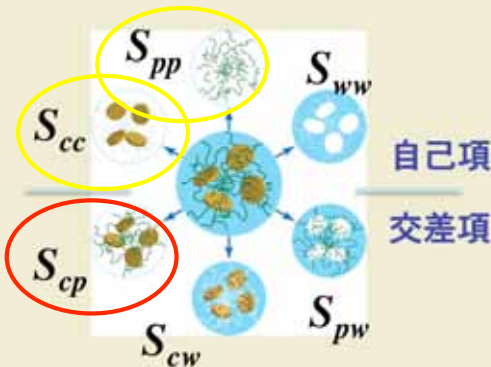
Clay Orientation
 $E \approx 130$ kPa

$$\sigma_{total} = \sigma_0 + \sigma \quad \sigma = \frac{E}{3} L^{-1} \{ (\lambda - 1) / \sqrt{Z} \}$$

応用例: 2次元コントラスト変調法

ナノコンポジットゲル

コントラスト変調法
 多成分系解析に威力を発揮



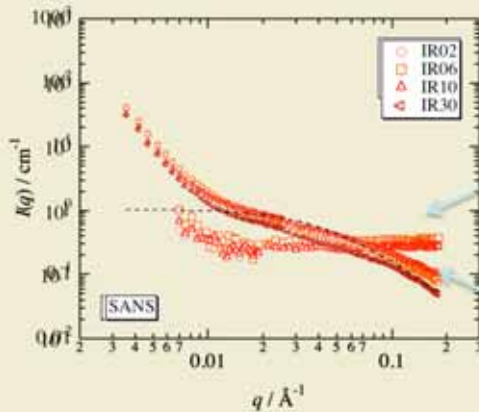
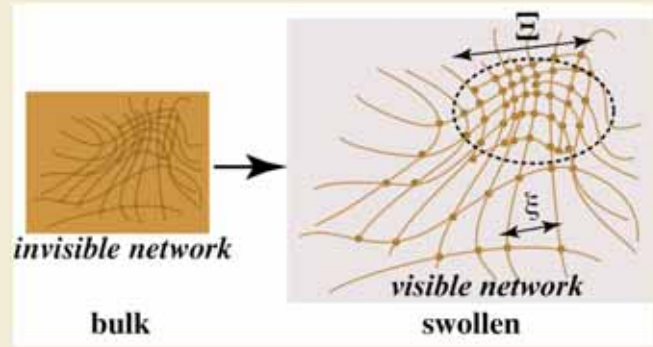
2次元
 コントラスト
 変調に
 初めて
 成功

Macromolecules, 40, 4287 (2007).
Macromolecules, 41, 5406 (2008).
 In preparation.

応用例：膨潤可視化法

天然ゴム・合成ゴム

膨潤可視化法
膨潤による揺らぎの顕在化



バルクフィルム

膨潤フィルム

まとめ

$$\frac{d\Sigma}{d\Omega} \equiv I(q) = (\Delta\rho)^2 nV^2 P(q)S(q)$$

$$n \equiv \frac{N}{V}$$

構造因子
形状因子
体積
粒子数濃度
散乱コントラスト

粒子系

孤立散乱、
粒子間干渉、

高分子系

孤立散乱、
粒子間干渉、
濃厚系
バルクブレンド系

多成分系

- ・コントラストマッチ法、
- ・コントラスト変調法、
- ・膨潤可視化法



付録

- 散乱長の計算
- 散乱長、散乱長密度の計算
- 便利な非干渉性散乱強度の評価



散乱長の計算

<http://www.ncnr.nist.gov/resources/n-lengths/>

$$b \equiv b_{molecule} = \sum_i r_i b_{atom,i}$$

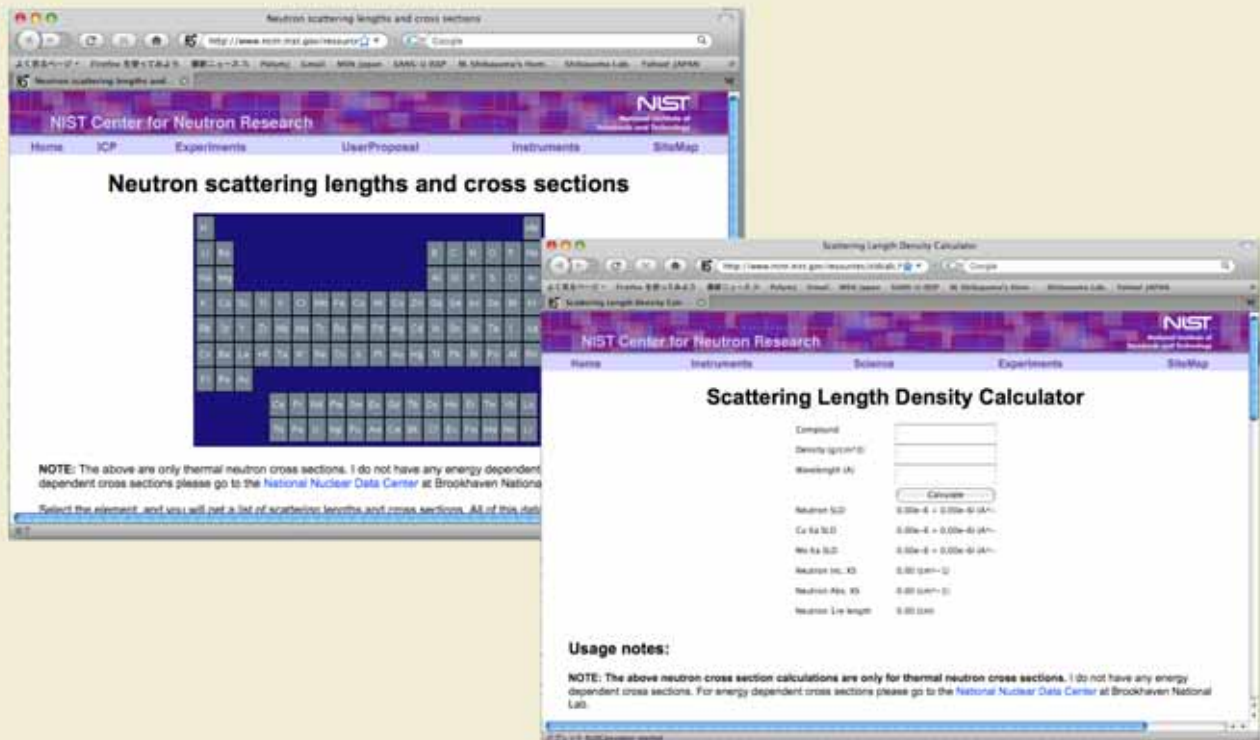
例 ベンゼン C₆H₆

$$\begin{aligned}
 b_{benzene} &= 6b_H + 6b_C \\
 &= 6 \times (-3.739 \times 10^{-13}) + 6 \times (6.646 \times 10^{-13}) \\
 &= 17.442 \times 10^{-13} [cm]
 \end{aligned}$$

Isotope	conc	Coh b	Inc b	Coh xs	Inc xs	Scatt xs	Abs xs
	%	fm (= cm ⁻¹³)	fm (= cm ⁻¹³)	barn (=cm ⁻²⁴)	barn (=cm ⁻²⁴)	barn (=cm ⁻²⁴)	barn (=cm ⁻²⁴)
同位体	濃度	干渉散乱長	非干渉散乱長	干渉断面積	非干渉断面積	散乱断面積	吸収断面積
H	---	-3.739	---	1.7568	80.26	82.02	0.3326
¹ H	99.985	-3.7406	25.274	1.7583	80.27	82.03	0.3326
² H	0.015	6.671	4.04	5.592	2.05	7.64	0.000519
C	---	6.646	---	5.551	0.001	5.551	0.0035
N	---	9.36	---	11.01	0.5	11.51	1.9
O	---	5.803	---	4.232	0.0008	4.232	0.00019

散乱長、散乱長密度の計算

<http://www.ncnr.nist.gov/resources/n-lengths/>



<http://www.ncnr.nist.gov/resources/sldcalc.html>

35

便利な非干渉性散乱強度の評価

従来法:

1. 純成分の和

$$I_{\text{inc}} = \phi_{\text{H}} I_{\text{inc,H}}^0 + \phi_{\text{D}} I_{\text{inc,D}}^0 \approx \phi_{\text{H}} I_{\text{inc,H}}^0$$

2. カーブフィッティング

$$I_{\text{inc}} = I_{\text{obs}}(q) - I_{\text{theory}}(q)$$

3. 非干渉性散乱断面積から計算 $\sigma_{\text{inc,H}}$

4. 新しい方法: *T*-method

透過率 *T*

$$T \equiv \frac{I_{\text{tr}}}{I_0} = \exp(-\Sigma_{\text{tot}} t)$$

非干渉性散乱強度, $(d\Sigma/d\Omega)_{\text{inc}}$

$$\left(\frac{d\Sigma}{d\Omega} \right)_{\text{inc}} = \frac{1}{4\pi} \frac{1-T}{Tt}$$

J. Appl. Cryst., in press.

36