JAEA-Review
2009-074

JAEA-Review

ベリリウム及び水素に対する熱中性子散乱則の現状調査

Investigation on Present Status of Thermal Neutron Scattering Law for Beryllium Metal and Hydrogen in Light Water

今泉 友見　竹本 紀之　長尾 美春　河村 弘

Tomomi IMAIZUMI, Noriyuki TAKEMOTO, Yoshiharu NAGAO and Hiroshi KAWAMURA

大洗研究開発センター
照射試験炉センター

Neutron Irradiation and Testing Reactor Center
Oarai Research and Development Center

March 2010

Japan Atomic Energy Agency　日本原子力研究開発機構

本レポートは独立行政法人日本原子力研究開発機構が不定期に発行する成果報告書です。
本レポートの入手並びに著作権利用に関するお問い合わせは、下記あてにお問い合わせ下さい。
なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ホームページ（http://www.jaea.go.jp）
より発信されています。

独立行政法人日本原子力研究開発機構　研究技術情報部　研究技術情報課
〒319-1195　茨城県那珂郡東海村白方白根 2 番地 4
電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency
Inquiries about availability and/or copyright of this report should be addressed to
Intellectual Resources Section, Intellectual Resources Department,
Japan Atomic Energy Agency
2-4 Shirakata Shirane, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195 Japan
Tel +81-29-282-6387, Fax +81-29-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

© Japan Atomic Energy Agency, 2009

JAEA-Review 2009-074

ベリリウム及び水素に対する熱中性子散乱則の現状調査

日本原子力研究開発機構大洗研究開発センター
照射試験炉センター

今泉　友見・竹本　紀之・長尾 美春・河村　弘

（2009 年 12 月 21 日受理）

JMTR の照射場評価においては、ある特定の照射領域（燃料領域を囲むベリリウム反射体の照射領域）で、熱中性子束のみ誤差が特に大きくなる傾向があり、その主な原因は、熱エネルギー領域における中性子散乱と吸収にある可能性が高いことがわかってきた。

そこで、軽水中の水素及び金属ベリリウムの熱中性子散乱則 $S(\alpha, \beta)$の影響について調べた。その結果、軽水中の水素については主だった誤差の要因が確認されなかったが、金属ベリリウムについては、干渉性散乱のうちの非弾性散乱の扱いが誤差の要因の一つである可能性が明らかとなった。

大洗研究開発センター　：　〒311-1393　茨城県東茨城郡大洗町成田町 4002

Investigation on Present Status of Thermal Neutron Scattering Law for Beryllium Metal and Hydrogen in Light Water

Tomomi IMAIZUMI, Noriyuki TAKEMOTO,
Yoshiharu NAGAO and Hiroshi KAWAMURA

Neutron Irradiation and Testing Reactor Center
Oarai Research and Development Center
Japan Atomic Energy Agency
Oarai-machi, Higashiibaraki-gun, Ibaraki-ken

(Received December 21, 2009)

For the neutronic calculation in JMTR, an error of only thermal-neutron-flux tends to extend in specific region, i.e. an irradiation region in beryllium reflectors surrounding the fuel region. From our former investigation, the reason is thought to be the neutron scattering and absorption in the thermal energy region.

Therefore, the effect on the thermal neutron scattering law $S(\alpha, \beta)$ to hydrogen in light water and to beryllium metal was investigated. As a result, it was confirmed that the error could be caused by the treatment in inelastic scattering within coherent scattering in the beryllium metal, whereas no error factor was found to the hydrogen in light water.

Keywords : JMTR, Thermal Neutron Scattering Law, Hydrogen in Light Water, Beryllium Metal, Inelastic Scattering, Coherent Scattering

目　　次

1. はじめに …… 1
2. 熱中性子散乱則 $S(\alpha, \beta)$の現状調査 …… 2
2.1 熱中性子散乱則 $S(\alpha, \beta)$の理論 …… 2
2.2 金属ベリリウムの $S(\alpha, \beta)$ …… 3
2.2.1 ベリリウムの散乱断面積 …… 3
2.2.2 ノーマルモード …… 4
2.2.3 調和振動子の確率関数 …… 4
2.2.4 〈 $\exp -i\kappa.u_0(0)\ \exp\ i\kappa.u_l(t)$ 〉の展開 …… 4
2.2.5 フォノン展開 …… 5
2.2.6 干渉性弾性散乱 …… 5
2.3 軽水中の水素の $S(\alpha, \beta)$ …… 7
2.3.1 速度自己相関関数 …… 7
2.3.2 速度振動数関数 …… 7
2.3.3 ガウス近似 …… 8
2.3.4 拡散 …… 8
2.3.5 結晶振動数分布 …… 9
2.3.6 ルート・サンプリング法 …… 11
3. $S(\alpha, \beta)$ライブラリの現状調査 …… 11
3.1 ENDF/B-III 及び ENDF/B-VII …… 11
3.2 JMTR の炉心解析における $S(\alpha, \beta)$ …… 11
3.3 金属ベリリウムの熱中性子散乱断面積 …… 12
3.4 軽水中の水素の熱中性子散乱断面積 …… 13
4. まとめ …… 13
謝辞 …… 14
参考文献 …… 14
附録　散乱則関連計算コード …… 17

Contents

1. Introduction ····· 1
2. Review of thermal neutron scattering law *S(α, β)* ····· 2
2.1 Theory of the thermal neutron scattering law *S(α, β)* ····· 2
2.2 *S(α, β)* of beryllium metal ····· 3
2.2.1 Scattering cross section of beryllium ····· 3
2.2.2 Normal modes ····· 4
2.2.3 Probability function for harmonic oscillator ····· 4
2.2.4 $\langle \exp -i\kappa.u_0(0) \exp i\kappa.u_l(t) \rangle$ expansion ····· 4
2.2.5 Phonon expansion ····· 5
2.2.6 Coherent elastic scattering ····· 5
2.3 *S(α, β)* of hydrogen in light water ····· 7
2.3.1 Velocity autocorrelation function ····· 7
2.3.2 Velocity frequency function ····· 7
2.3.3 Gaussian approximation ····· 8
2.3.4 Diffusion ····· 8
2.3.5 Frequency distribution of crystal ····· 9
2.3.6 Root sampling method ····· 11
3. Review of present status of *S(α, β)* library ····· 11
3.1 ENDF/B-III and ENDF/B-VII ····· 11
3.2 *S(α, β)* in core analysis of JMTR ····· 11
3.3 Thermal neutron scattering cross section in beryllium metal ····· 12
3.4 Thermal neutron scattering cross section in hydrogen in light water ····· 13
4. Summary ····· 13
Acknowledgements ····· 14
References ····· 14
Appendix Calculation code for thermal neutron scattering law ····· 17

1. はじめに

JMTR(Japan Materials Testing Reactor、熱出力 50MW)は、1968 年 3 月に初臨界を達成して以来、原子炉の燃料・材料に係る基礎研究や人材育成、医療・工業用ラジオアイソトープの製造等に活用されるなど、日本の原子力研究開発、利用の発展に貢献してきた。近年では、軽水炉の長期利用と高経年化に係る構造材料の照射誘起応力腐食割れ(IASCC)等の維持基準データの整備や軽水炉の経済性向上のための高燃焼度燃料照射試験等に利用されてきた。現在は、第 165 サイクルの運転をもって一旦停止(2006 年 8 月)[1]し、2011 年度の再稼働に向けて原子炉施設の改修を実施している。

再稼働後の JMTR は、現行軽水炉の高経年化対策、次世代軽水炉の開発などの軽水炉の長期化対策や医療用ラジオアイソトープ製造、その他科学技術の向上のための利用が期待されている。

JMTR では、モンテカルロ法による解析評価手法の導入により、現在では、中性子束の解析値は測定値に対して、高速中性子束±10%、熱中性子束±30%程度で解析評価が可能[2)~4)]であるが、これまでベリリウムを反射体として使用している JMTR を含む世界の照射試験炉では、実測値と比較して熱中性子束の解析評価精度だけが高速中性子束レベルまで改善されていなかった[5)]。再稼働後にはこれまで以上の高精度な照射試験が必要となるため、熱中性子束の評価精度の向上を目標とし、検討を実施してきた。

これまでに、放射化法による中性子束測定用モニタ（Fe ワイヤ及び Al-Co ワイヤ）の測定方法、解析モデル（炉心体系のモデル化、燃料の燃焼効果等）に起因する誤差について調査を実施してきたが、熱中性子束に対する誤差の要因は明らかにできなかった。

これまでの評価データを詳しく分析した結果、JMTR においては、ある特定の照射領域（燃料領域を囲むベリリウム反射体の照射領域）において、熱中性子束のみ特に誤差が大きく、過大評価傾向にあることがわかり、これから、熱エネルギー領域における中性子の散乱、吸収が誤差要因になっている可能性が高いことがわかった[6)]。

そのため、ベリリウムや軽水中の水素の熱中性子散乱則 $S(\alpha, \beta)$について、種々の $S(\alpha, \beta)$ライブラリを使用した計算や、$S(\alpha, \beta)$ライブラリの温度を変更した場合の計算等により比較検討した結果、ベリリウムの $S(\alpha, \beta)$ライブラリの温度を意図的に変更した場合に、過大評価傾向であったベリリウム反射体の照射領域のみで、熱中性子束の値が低下することがわかった。

以上の結果から、熱中性子束のみ誤差が特に大きくなる原因として、$S(\alpha, \beta)$を含む熱中性子領域のベリリウムの断面積に起因する可能性があることがわかった。

しかしながら、熱中性子散乱則は、1970 年代以降、研究の進展はみられず、評価誤差、不確定因子などが十分把握されていないのが現状である。そこで、本報ではベリリウムの他、JMTR の冷却材でも使用されている軽水中の水素の熱中性子散乱則について調査した。

2. 熱中性子散乱則 $S(\alpha, \beta)$ の現状調査

中性子エネルギーが 4 eV 以下の熱エネルギー領域では、原子・分子や結晶格子の振動に起因する中性子へのエネルギー付与の影響、波動性に起因する干渉性散乱の影響が無視できなくなる。

熱中性子散乱則($S(\alpha, \beta)$)は、この熱エネルギー領域での中性子のふるまいについて扱うための関数である。$S(\alpha, \beta)$の影響を無視した場合には、上方散乱の過大・過小評価の原因となる。そのため、まず、$S(\alpha, \beta)$の理論について整理した。

2.1 熱中性子散乱則 $S(\alpha, \beta)$ の理論 [7), 8), 9), 10)]

一般的に、中性子の散乱は非等方的である。入射中性子と放出された中性子とがなす角度の関数として表された断面積を微分散乱断面積 $\dfrac{d^2\sigma}{d\Omega dE'}$ と呼び、核散乱での基本的な表現は、デルタ関数の積分表示を使い Van Hove によって次のように導かれる。

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} = \frac{k'}{k}\frac{1}{2\pi\hbar}\sum_{jj'} b_j b_{j'} \int_{-\infty}^{\infty} \left\langle \exp\left\{-i\kappa.R_{j'}(0)\right\} \exp\left\{i\kappa.R_j(t)\right\}\right\rangle \times \exp(-i\omega t)dt \qquad (2\text{-}1)$$

微分散乱断面積には、弾性散乱と非弾性散乱があるが、これらの微分散乱断面積は、特定の方向に中性子が放出される確率を表す。したがって、全立体角にわたり積分すると、弾性微分散乱断面積は弾性散乱断面積に、非弾性微分散乱断面積は非弾性散乱断面積に等しくなる。

また、中性子干渉性および非干渉性散乱は、式(2-2)のように表され、第 1 項は干渉散乱断面積 $\left(\dfrac{d^2\sigma}{d\Omega dE'}\right)_{coh}$、第 2 項は非干渉散乱断面積 $\left(\dfrac{d^2\sigma}{d\Omega dE'}\right)_{inc}$ を表す。この 2 つの項を詳しく書くと、式(2-3)と式(2-4)のように表わされる。ここで、k と k' は入射と散乱中性子の振動ベクトル、b は散乱長、$R_j(t)$ は時間依存ハイゼンベルグ因子、κ は散乱ベクトル（$\kappa = k - k'$）、ω は中性子のエネルギーの差（$\hbar\omega = E - E'$）を示す。

$$\begin{aligned}\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} &= \frac{k'}{k}\frac{1}{2\pi\hbar}\left(\bar{b}\right)^2 \sum_{jj'} \int \langle j', j\rangle \exp(-i\omega t)dt \\ &+ \frac{k'}{k}\frac{1}{2\pi\hbar}\left\{\overline{b^2} - \left(\bar{b}\right)^2\right\} \sum_{j} \int \langle j, j\rangle \exp(-i\omega t)dt\end{aligned} \qquad (2\text{-}2)$$

$$\begin{aligned}\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'}\right)_{coh} &= \frac{\sigma_{coh}}{4\pi}\frac{k'}{k}\frac{1}{2\pi\hbar}\sum_{jj'} \int_{-\infty}^{\infty} \left\langle \exp\left\{-i\kappa.R_{j'},(0)\right\} \exp\left\{i\kappa.R_j(t)\right\}\right\rangle \\ &\times \exp(-i\omega t)dt\end{aligned} \qquad (2\text{-}3)$$

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'}\right)_{inc} = \frac{\sigma_{inc}}{4\pi}\frac{k'}{k}\frac{1}{2\pi\hbar}\sum_j\int_{-\infty}^{\infty}\left\langle \exp\left\{-i\kappa.R_{j'}(0)\right\}\exp\left\{i\kappa.R_j(t)\right\}\right\rangle \times\exp(-i\omega t)dt \tag{2-4}$$

なお、ここで、干渉性断面積σ_{coh}と非干渉性断面積σ_{inc}は式(2-5)のように定義される。

$$\sigma_{coh} = 4\pi\left(\bar{b}\right)^2, \qquad \sigma_{inc} = 4\pi\left\{\overline{b^2} - \left(\bar{b}\right)^2\right\} \tag{2-5}$$

干渉性散乱は、同じ種類の核の異なる時刻における位置の相関に依存し、また、異なる種類の核の異なる時刻での位置にも依存するため、干渉効果を与える。非干渉性散乱は同じ核の異なる時刻での位置に依存する。

非干渉性近似において、多結晶による中性子散乱の結晶原子1個当りの微分散乱断面積と$S(\alpha, \beta)$には次のような関係がある。

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} \equiv \sigma\left(E \to E', \theta\right) = \frac{\sigma_b}{4\pi}\sqrt{\frac{E'}{E}}e^{-\frac{\beta}{2}}S(\alpha,\beta) \tag{2-6}$$

ここで、E、E'はそれぞれ入射、散乱中性子のエネルギー、θは散乱角、σ_bは結晶原子の結合断面積である。そして、$S(\alpha, \beta)$は、以下に示す2つの変数に依存する。なお、αとβはそれぞれ運動量移動、エネルギー移動を示す。なお、Aは散乱質量と中性子質量の比、Tは絶対温度、κはボルツマン定数である。

$$\alpha = \frac{E' + E - 2\sqrt{E'E\mu}}{A\kappa T} \tag{2-7}$$

$$\beta = \frac{E' - E}{\kappa T} \tag{2-8}$$

2.2 金属ベリリウムの $S(\alpha, \beta)$ [7), 8), 9)]

2.2.1 ベリリウムの散乱断面積

ベリリウムは、捕獲断面積が非常に小さいことから、全断面積はほとんど散乱によるものと考えてさしつかえない。この散乱について、非常に低いエネルギー領域では、中性子は散乱により結晶の格子振動からエネルギーを供給される一種の非弾性散乱となる。ベリリウムは干渉性弾性散乱を起こし、その干渉性弾性散乱は、ベリリウムの結晶構造に直接依存し、結晶の各格子面間の距離によって決まる[11)]。

散乱系が単結晶であるときのベリリウムの断面積については、単位格子あたり1個の原子のある結晶（Bravais crystal）について考えればよいので、以下のように表される。なお、ここでu_lは平衡位置からのずれを表す。

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'}\right)_{coh} = \frac{\sigma_{coh}}{4\pi}\frac{k'}{k}\frac{N}{2\pi\hbar}\sum_l \exp(i\kappa.l)\int_{-\infty}^{\infty}\langle\exp\{-i\kappa.u_0(0)\}\exp\{i\kappa.u_l(t)\}\rangle \times\exp(-i\omega t)dt \tag{2-9}$$

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'}\right)_{inc} = \frac{\sigma_{inc}}{4\pi}\frac{k'}{k}\frac{N}{2\pi\hbar}\sum_l \exp(i\kappa.l)\int_{-\infty}^{\infty}\langle\exp\{-i\kappa.u_0(0)\}\exp\{i\kappa.u_0(t)\}\rangle \times\exp(-i\omega t)dt \tag{2-10}$$

2.2.2 ノーマルモード

結晶中の原子核の間の力は harmonic であるため、平衡点からのずれの一次関数であると仮定できる。このときの原子核の振動は、振動数ωの調和振動子の量子論で記述でき、次のように表される。

$$u_l = \left(\frac{\hbar}{2MN}\right)^{1/2}\sum_s \frac{e_s}{\sqrt{\omega_s}}\left\{a_s\exp(iq.l) + a_s^+\exp(-iq.l)\right\} \tag{2-11}$$

$u_l(t)$は、消滅因子のa_sと生成因子のa_s^+については、ハイゼンベルグ因子の$a_s(t)$と$a_s^+(t)$でそれぞれ置き換えることができる。したがって、ノーマルモードにおける原子核の振動は次のように表わされる。ここで、Mは原子質量、Nは結晶の単位格子、e_sはノーマルモードの分極ベクトル、qはノーマルモードの振動ベクトルを示す。

$$\kappa.u_l(t) = \left(\frac{\hbar}{2MN}\right)^{1/2}\sum_s \frac{\kappa.e_s}{\sqrt{\omega_s}}\left[a_s\exp\{i(q.l-\omega_s t)\} + a_s^+\exp\{-i(q.l-\omega_s t)\}\right] \tag{2-12}$$

2.2.3 調和振動子の確率関数

場所の変位変数 Qにおける一次元振動子についての確率関数は、Bloch によって次のような Gaussian であることが示されている。

$$f(Q) = C\exp\left(-Q^2/2\sigma^2\right) \tag{2-13}$$

ここで、σ^2は次のように定義される。

$$\sigma^2 = \frac{\hbar}{2M\omega}\coth\left(\frac{1}{2}\hbar\omega\beta\right) \tag{2-14}$$

2.2.4 〈 exp $-i\kappa.u_0(0)$ exp $i\kappa.u_l(t)$ 〉の展開

式(2-5)、式(2-9)及び式(2-10)より、干渉性散乱断面積は次のように表される。

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'}\right)_{coh} = \frac{\sigma_{coh}}{4\pi}\frac{k'}{k}\frac{N}{2\pi\hbar}\sum_l \exp(i\kappa.l)\int_{-\infty}^{\infty}\langle \exp U \exp V\rangle \times \exp(-i\omega t)dt \tag{2-15}$$

ここで、U、V、g_s、h_s は次のように定義される。

$$U = -i\kappa.u_0(0) = -i\sum_s g_s a_s + g_s a_s^+ \tag{2-16}$$

$$V = i\kappa.u_l(t) = i\sum_s h_s a_s + h_s^* a_s^+ \tag{2-17}$$

$$g_s = \left(\frac{\hbar}{2MN}\right)^{1/2}\frac{\kappa.e_s}{\sqrt{\omega_s}} \tag{2-18}$$

$$h_s = \left(\frac{\hbar}{2MN}\right)^{1/2}\frac{\kappa.e_s}{\sqrt{\omega_s}}\exp\{\, i\,(q.l - \omega_s t)\} \tag{2-19}$$

これを〈 exp Uexp V〉展開し、まとめると、干渉性散乱断面積は次のように表される。

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'}\right)_{coh} = \frac{\sigma_{coh}}{4\pi}\frac{k'}{k}\frac{N}{2\pi\hbar}\exp\langle U^2\rangle\sum_l \exp(i\kappa.l) \times \int_{-\infty}^{\infty}\exp\langle UV\rangle \exp(-i\omega t)dt \tag{2-20}$$

2.2.5 フォノン展開

N 個の原子からなる結晶は 3N 個のノーマルモードをもつ。このノーマルモードに対応する 3N 個の振子の量子数を n とすると、弾性散乱では次の関係が成立する。

$$n_i = n_i' \qquad i = 1,\cdots 3N \tag{2-21}$$

式(2-21)を exp〈UV〉展開すると、次のように表される。ここで p 番目の項は p-phonon process に対応する。

$$\exp\langle UV\rangle = 1 + \langle UV\rangle + \frac{1}{2!}\langle UV\rangle^2 + \cdots + \frac{1}{p!}\langle UV\rangle^p + \cdots \tag{2-22}$$

2.2.6 干渉性弾性散乱

干渉性散乱のうち干渉性弾性散乱については、式(2-20)を exp〈UV〉= 1 で置き換えれば、t についての積分はデルタ関数となる。また、弾性散乱では散乱ベクトルκは等しく（$|k'| = |k|$）、入射エネルギーE は固定されているので、干渉性弾性散乱断面積は次のように表される。

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{coh\ el} = \int_0^\infty \left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'}\right)_{coh\ el} dE' = \frac{\sigma_{coh}}{4\pi} N \exp\langle U^2\rangle \sum_l \exp(i\kappa.l) \tag{2-23}$$

格子についての和は式(2-24)のように定義され、干渉性弾性散乱断面積は式(2-25)のように表わされる。なお、ここでv_0は単位セルの体積で、τは逆格子を示す。

$$\sum_l \exp(i\kappa.l) = \frac{(2\pi)^3}{v_0} \sum_\tau \delta(\kappa - \tau) \tag{2-24}$$

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{coh\ el} = \frac{\sigma_{coh}}{4\pi} N \frac{(2\pi)^3}{v_0} \exp\langle -2W\rangle \sum_\tau \delta(\kappa - \tau) \tag{2-25}$$

ここで、2Wは式(2-26)のように定義され、散乱が$\kappa = \kappa - \kappa' = \tau$のときのみ起きることを示す。この条件は、X線散乱のBragg's Lawと同じである。

$$2W = -\langle U^2\rangle = \langle \{\kappa.u_0(0)\}^2\rangle \tag{2-26}$$

また、式(2-25)の中の指数の項はDebye-Waller因子として知られ、次のように表される。

$$2W = \frac{\hbar}{2MN} \sum_s \frac{(\kappa.e_s)^2}{\omega_s} \coth\left(\frac{1}{2}\hbar\omega_s\beta\right) \tag{2-27}$$

立方体結晶の場合、$2W$は次のように表される。

$$2W = \frac{\hbar\kappa^2}{2M} \int_0^{\omega_m} \frac{1}{\omega} \coth\left(\frac{1}{2}\hbar\omega\beta\right) Z(\omega) d\omega \tag{2-28}$$

式(2-3)より、中間関数として知られている$I(\kappa,t)$は次のように表される。

$$I(\kappa,t) = \frac{1}{N} \sum_{jj'} \langle \exp\{-i\kappa.R_{j'}(0)\} \exp\{i\kappa.R_j(t)\}\rangle \tag{2-29}$$

ここで、Nは散乱系における原子核の数を示す。また、散乱関数である$S(\kappa,\omega)$は次のように表される。

$$S(\kappa,\omega) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int I(\kappa,t) \exp(-i\omega t) dt \tag{2-30}$$

$S(\omega)$は次のように表される。

$$\begin{aligned} S(\omega) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \{ I(\infty) + I'(t) \} \exp(-i\omega t) dt \\ &= \frac{1}{\hbar} \delta(\omega) I(\infty) + \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} I'(t) \exp(-i\omega t) dt \end{aligned} \tag{2-31}$$

したがって、固体における干渉性弾性散乱は次のようになる。

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'}\right)_{coh\ el} = \frac{\sigma_{coh}}{4\pi} \frac{N}{\hbar} \delta(\omega) I(\kappa,\infty) \tag{2-32}$$

2.3 軽水中の水素の $S(\alpha, \beta)$

固体に比べて液体の熱中性子散乱則は、散乱体の構造や力学的状態に複雑に依存する。液体における干渉散乱は、異なる粒子の位置と運動に関する情報を与える。この散乱により液体の構造として知られている静的二体相関関数 $g(r)$ を決定する。

式(2-32)より、液体における中間関数 $I(\kappa,t)$ と時間依存二体相関関数 $G(r,t)$ は $t=\infty$ のとき、次のように表される。

$$I(\kappa,\infty)=\int G(r,\infty)\exp(i\kappa.r)dr \propto \delta(\kappa) \tag{2-33}$$

$$G(r,\infty)=\frac{1}{N}\int\langle\rho(r')\rangle\langle\rho(r'+r)\rangle dr'=\rho \tag{2-34}$$

ここで、N は散乱系における原子核の数を示し、ρ は数密度を意味する。散乱関数 $S(\kappa,\omega)$ はデルタ関数となり、次のように表される。

$$S(\kappa,\omega)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int\{G(r,t)-\rho\}\exp\{i(\kappa.r-\omega t)\}drdt \tag{2-35}$$

$S(\kappa,\omega)$ のゼロ番目のエネルギーモーメント $S(\kappa)$ は構造因子として知られており、次にように表される。

$$S(\kappa)=1+\frac{4\pi}{\kappa}\int_0^\infty\{g(r)-\rho\}\sin(\kappa r)rdr \tag{2-36}$$

$g(r)$ と $G(r,t)$ は r の大きさに依存し、$S(\kappa,\omega)$、$S(\kappa)$、$I(\kappa,t)$ は κ の大きさに依存する。

2.3.1 速度自己相関関数 [7)]

速度自己相関関数(Velocity Autocorrelation Function)は、ある原子の時刻 t_0 での速度 $v(t_0)$ と、同じ原子の時刻 t_0+t の速度 $v(t_0+t)$ のスカラ積を集合の中のすべての原子について平均したものである。集合は平衡状態にあるので、この平均は t_0 に依存せず、$\langle v(0).v(t)\rangle$ の形で表される。ここで、ある原子のある時刻での位置を $r(0)$、同じ原子の時間 t 後の位置を $r(t)$ とすると、$\langle r^2(t)\rangle$ と速度自己相関関数の関係は次のように定義される。

$$\frac{d^2}{dt^2}\langle r^2(t)\rangle=2\langle v(0).v(t)\rangle \tag{2-37}$$

2.3.2 速度振動数関数 [7)]

$\langle v(0).v(t)\rangle$ のフーリエ変換は、速度振動数関数(Velocity frequency function) $p(\omega)$ として知られており、次にように表される。

$$p(\omega)=\frac{M\beta}{3\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\langle v(0).v(t)\rangle\exp(-i\omega t)dt \tag{2-38}$$

ここで、M は原子の質量であり、$M\beta/3\pi$ は振動関数が規格化されるように定義される。

また、$\langle r^2(t)\rangle$ と $p(\omega)$ の関係は次のように表される。

$$\langle r^2(t)\rangle = \frac{6}{M\beta}\int_0^\infty p(\omega)\frac{1-\cos\omega t}{\omega^2}d\omega \tag{2-39}$$

この表現は、$p(\omega)$を$Z(\omega)$に置き換えると、Cubic Bravais crystal についての$\langle r^2(t)\rangle$の古典的表現と一致する。

式(2-39)において、tが小さいとき$\frac{1}{2}\omega^2 t^2$となることから、$\langle r^2(t)\rangle$と$p(\omega)$の関係は次のように表される。この式は、自由粒子についての関係がある。

$$\langle r^2(t)\rangle = \frac{3t^2}{M\beta}\int_0^\infty p(\omega)\,d\omega = \frac{3}{M\beta}t^2 \tag{2-40}$$

2.3.3 ガウス近似 [7)]

自由な原子の古典的$G_s(r,t)$は、次のように表される。

$$G_s^{cl}(r,t) = \left\{2\pi\sigma^2(t)\right\}^{-3/2}\exp\left\{-r^2/2\sigma^2(t)\right\} \tag{2-41}$$

ここで、$\sigma^2(t)$を次のように定義する。

$$\sigma^2(t) = \frac{t^2}{M\beta} \tag{2-42}$$

$G_s^{cl}(r,t)$の空間変動は、すべての時間について式(2-41)で記述され、すべての差は$\sigma^2(t)$の時間tについての変動に関係する。これはガウス近似として知られており、$\sigma^2(t)$の時間変動については、次のように表される。

$$I_s^{cl}(\kappa,t) = \int G_s^{cl}(r,t)\exp(i\kappa.r)\,dr = \exp\left\{-\frac{1}{2}\kappa^2\sigma^2(t)\right\} \tag{2-43}$$

$$\langle r^2(t)\rangle = 4\pi\int_0^\infty r^4 G_s^{cl}(r,t)\,dr = 3\sigma^2(t) \tag{2-44}$$

また、$p(\omega)$と$S_1(\kappa,\omega)$の関係は、$\widetilde{I}_s(\kappa,t)$についての Schofield の提唱とガウス近似から、次のように導かれる。

$$p(\omega) = 2M\hbar\beta\omega^2\lim_{|\kappa|\to 0}\frac{\widetilde{S}_i(\kappa,\omega)}{\kappa^2} \tag{2-45}$$

ωを固定して、κの関数として非干渉散乱断面積を測定し、$\widetilde{S}_i(\kappa,\omega)/\kappa^2$を$\kappa^2=0$まで外挿すると$p(\omega)$を得ることができる。

2.3.4 拡散 [7)]

短時間では液体の粒子は自由であるかのようにふるまい、長時間ではその運動は拡散となる。拡散過程による拡散運動についての断面積は、ガウス近似より次のように表される。

$$\begin{aligned}\widetilde{S}_i(\kappa,\omega) &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\widetilde{I}_s(\kappa,t)\exp(-i\omega t)dt \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\left[\int_0^{\infty}\exp\left\{-\left(\kappa^2 D+i\omega\right)t\right\}dt+\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left\{\left(\kappa^2 D+i\omega\right)t\right\}dt\right] \\ &= \frac{1}{\pi\hbar}\frac{D\kappa^2}{\left(D\kappa^2\right)^2+\omega^2}\end{aligned} \tag{2-46}$$

この関数は Lorentzian として知られ、κ の固定値についてプロットすると、$\omega=0$ に最大をもち、最大値の半分のところでの幅は、次のように表される。

$$\Delta E=\hbar\Delta\omega=2\hbar D\kappa^2 \tag{2-47}$$

式(2-38)から拡散についてのこの関数の理論値は、次のように定義される。

$$\widetilde{S}_i(\kappa,0)=1/\pi\hbar D\kappa^2 \tag{2-48}$$

また、κ^2 を固定し、ω を変数として $\widetilde{S}_i(\kappa,\omega)$ をフーリエ変換すると次のような $\widetilde{I}_s(\kappa,t)$ が得られる。

$$\widetilde{I}_s(\kappa,t)=\exp\left\{-\frac{1}{2}\kappa^2\sigma^2(t)\right\}\left\{1+\alpha(t)\kappa^4\sigma^4(t)\right\} \tag{2-49}$$

$\alpha(t)$ は $\widetilde{I}_s(\kappa,t)$ がガウス関数からのずれの目安であり、完全ガスのときは、次のように表される。

$$\sigma^2(t)=\frac{t^2}{M\beta}+\frac{\hbar^2\beta}{4M} \tag{2-50}$$

この結果から、式(2-42)とは量子項 $(\hbar^2)$ だけが異なっていることがわかり、これが効いてくるのは、$t\le 5\times10^{-14}s$ のときだけであることがいえる。

そして、拡散のふるまいは、次のように定義される。

$$\sigma^2(t)=2Dt \tag{2-51}$$

式(2-50)と式(2-51)より求められる波形は、理論値とも一致する。

2.3.5 結晶振動数分布

単純立方格子の場合、原子間の力は、最近接原子間と、次の近接原子間だけに Hook の法則に従って働くと仮定でき、その定数を α，2γ とする。各原子の番号を n, すなわち x, y, z 軸にそって n_1，n_2，n_3 として、つりあいの位置を $a_n(n_1a,n_2a,n_3a)$ とする。その変位を $u_{n_1n_2n_3}(u_{n_1n_2n_3},v_{n_1n_2n_3},w_{n_1n_2n_3})$ とすれば、運動方程式は、次のようになる。

$$
\begin{aligned}
& m\ddot{u}_{n_1n_2n_3} + \alpha\left(2u_{n_1n_2n_3} - u_{n_1+1,n_2,n_3} - u_{n_1-1,n_2,n_3}\right) \\
& + \gamma\left\{\left(u_{n_1n_2n_3} + v_{n_1n_2n_3} - u_{n_1+1,n_2+1,n_3} - v_{n_1+1,n_2+1,n_3}\right)\right. \\
& + \left(u_{n_1n_2n_3} + v_{n_1n_2n_3} - u_{n_1-1,n_2-1,n_3} - v_{n_1-1,n_2-1,n_3}\right) \\
& + \left(u_{n_1n_2n_3} - v_{n_1n_2n_3} - u_{n_1+1,n_2-1,n_3} + v_{n_1+1,n_2-1,n_3}\right) \\
& + \left(u_{n_1n_2n_3} - v_{n_1n_2n_3} - u_{n_1-1,n_2+1,n_3} + v_{n_1-1,n_2+1,n_3}\right) \\
& + \left(u_{n_1n_2n_3} + w_{n_1n_2n_3} - u_{n_1+1,n_2+1,n_3} - w_{n_1-1,n_2-1,n_3}\right) \\
& + \left(u_{n_1n_2n_3} + w_{n_1n_2n_3} - u_{n_1-1,n_2-1,n_3} - w_{n_1-1,n_2-1,n_3}\right) \\
& + \left(u_{n_1n_2n_3} - w_{n_1n_2n_3} - u_{n_1+1,n_2-1,n_3} + w_{n_1+1,n_2-1,n_3}\right) \\
& \left. + \left(u_{n_1n_2n_3} - w_{n_1n_2n_3} - u_{n_1-1,n_2+1,n_3} + w_{n_1-1,n_2+1,n_3}\right)\right\} = 0
\end{aligned}
\tag{2-52}
$$

α のかかっている項は x 方向の両隣にある二つの原子からの力であり、γ のかかっている項は x, y 方向に同時に格子定数 a だけ離れている（距離 $\sqrt{2}a$）原子からの力である。他の項もこれに準じる。式(2-52)の形の式が $\ddot{v}_{n_1n_2n_3}$, $\ddot{w}_{n_1n_2n_3}$ についても成り立ち、またすべての(n_1, n_2, n_3)の組みについても成り立つ。

ここで、$u_n(f)$ を次のように定義すると、式(2-54)に示す式が求められる。

$$
u_n(f) = u^0(f)e^{-iwt+if_1a_n} \tag{2-53}
$$

$$
\begin{aligned}
& \left[-mw^2 + 2\alpha\cos(f_1a) + 4\gamma\left(2 - \cos f_1a\cos f_2a - \cos f_1a\cos(f_3a)\right)\right]u \\
& + 4\gamma\, v\sin f_1a\sin f_2a + 4\gamma\, w\sin f_1a\sin f_3a = 0
\end{aligned}
\tag{2-54}
$$

また、u, v, w, f_1, f_2, f_3 を循環的に変えた式がもう 2 個得られる。それらの式から、u, v, w を消去すれば、次のような式が得られる。

$$
\begin{vmatrix}
\begin{array}{l}-m\omega^2 + 2\alpha(1-\cos f_1a) \\ +4\gamma\,(2-\cos f_1a\cos f_2a \\ -\cos f_1a\cos f_3a)\end{array} & 4\gamma\sin f_1a\sin f_2a & 4\gamma\sin f_1a\sin f_3a \\
4\gamma\sin f_2a\sin f_1a & \begin{array}{l}-m\omega^2 + 2\alpha(1-\cos f_2a) \\ +4\gamma\,(2-\cos f_2a\cos f_3a \\ -\cos f_1a\cos f_3a)\end{array} & 4\gamma\sin f_2a\sin f_3a \\
4\gamma\sin f_2a\sin f_1a & 4\gamma\sin f_3a\sin f_2a & \begin{array}{l}-m\omega^2 + 2\alpha(1-\cos f_3a) \\ +4\gamma\,(2-\cos f_3a\cos f_1a \\ -\cos f_2a\cos f_1a)\end{array}
\end{vmatrix} = 0
\tag{2-55}
$$

この式によって与えられた f (f_1, f_2, f_3) に対して、ω を計算することができる。

1 次元、2 次元の場合と同様に周期的境界条件 $\left(e^{if_1L} = e^{if_2L} = e^{if_3L} = 1\right)$ は次のように導かれる。f_1, f_2, f_3 は連続的な値をとらず、それぞれ次のように定義される。

$$f_1 = p_1 2\pi/L \quad , \quad f_2 = p_2 2\pi/L \quad , \quad f_3 = p_3 2\pi/L \tag{2-56}$$

p_1, p_2, p_3：正，負の整数または0、

L：結晶を立方体（巨視的な）としたものの一稜の長さで与えられる値をとる。

2.3.6 ルート・サンプリング法

振動数分布の近似計算をする最も容易な方法は、固有値方程式を First Brillouin zone の中で一様に分布した大量の振動ベクトルの点で解き、その分布を規格化したヒストグラムで近似することである。

サンプリング法の欠点は、振動数分布の中の特異点を再現するのに、Brillouin zone の中で、非常に多くの点について振動数の固有値方程式の計算を行わなければならないことである。

3. *S(α, β)*ライブラリの現状調査

3.1 ENDF/B-III 及び ENDF/B-VII[12)]

中性子が引き起こす核反応の断面積は核種ごとの個性が非常に強く、その評価は容易ではない。このため、日本、米国、ヨーロッパ連合、ロシアなど世界各国において精力的に評価済み核データの整備が進められてきた。

*S(α, β)*のデータが収録されている核データでは、米国の断面積評価ワーキンググループにより作成された Evaluated Nuclear Data File(ENDF)が有名である。ENDF/B-III は 1972 年、ENDF/B-VII は 2006 年に公開された。

連続エネルギーモンテカルロ計算コード MCNP (Monte Carlo For N-Particle Transport)用に準備されている *S(α, β)*ライブラリには、核データライブラリ ENDF-B/III から編集されているものの場合は、室温以上の軽水中の水素、ベリリウム、ベンゼン、重水中の水素、ポリエチレン中の水素、ベリリウム酸化物、グラファイト、水素化ジルコニウム中の水素、水素化ジルコニウム中のジルコニウムに対するデータが与えられている。

表 1 と表 2 に ENDF-B/III と ENDF-B/VII の核データに基づいて作成された金属ベリリウムと軽水中の水素の *S(α, β)*ライブラリの比較をそれぞれ示す。ENDF/B-VII の *S(α, β)*を作成する際には、ENDF/B-III に採用された測定データより新しい測定データの採用はなく、従来の *S(α, β)*の測定データを使用したと考えられる。また、処理コード NJOY、即ち LEAPR モジュールに採用された熱散乱法則の計算モデルについても変更がないため、従来の計算モデルを使用したと考えられる。ただし、表 1 および表 2 に示すように ENDF/B-VII の *S(α, β)*では、ENDF/B-III と比較して、角度分割数およびエネルギー分割数が大幅に増加されているなど、詳細になってきている。

3.2 JMTR の炉心解析における *S(α, β)*

近年、計算機の発達により物理現象の安全性の評価、性能評価等でのシミュレーション計算が

重要な役割を担いつつある。原子力研究では、原子炉や遮蔽体の中での中性子のふるまいを追跡する放射線輸送計算が代表的である。物質中での放射線の 3 次元の挙動を取り扱うシミュレーションの一つにモンテカルロ法がある。これは、物理現象を確率的にとらえ、確率過程を表す確率変数によって記述し、発生した乱数に従ってその過程を追跡するものである。中性子の計算コードとしては、米国ロスアラモス国立研究所(Los Alamos National Laboratory)で開発されたMCNP(Monte Carlo For N-Particle Transport)コードが広く使われている。

MCNP コードを利用して輸送計算を行うには、考えようとしているすべてのエネルギー範囲において、すべての核反応に対する断面積データが必要である。核データファイルに格納されている断面積は、標的となるそれぞれの核種に対して、実験データとそれに基づく経験式、原子核理論の計算を用いて総合的に評価され、その時点で最も良いと思われる値が使われる。この得られた断面積データの集合を評価済み核データファイルと呼ぶ。評価済み核データファイルには、中性子輸送断面積、2 次γ線生成断面積、光子輸送断面積、電子輸送断面積、熱中性子散乱則、ドシメトリー断面積及び放射化断面積などがある [12]。

熱エネルギー領域の中性子の散乱を厳密に取り扱う場合には、熱中性子散乱則($S(\alpha, \beta)$)が必要となる。中性子エネルギーが高い場合には、周辺の原子核の影響を考える必要はないが、中性子エネルギーが 4 eV 以下程度になると、原子・分子や結晶格子の振動に起因する中性子へのエネルギー付与の影響、さらに波動性に起因する干渉性散乱の影響が無視できなくなる。そのため、$S(\alpha, \beta)$の影響を無視した場合、上方散乱の過小評価の原因となる。

JMTR の照射場評価では、反射材にベリリウムを使用し、冷却材に軽水を使用していることから、金属ベリリウム及び軽水中の水素に対して $S(\alpha, \beta)$を使用している。

3.3 金属ベリリウムの熱中性子散乱断面積

ENDF-B/III、VII 等の核データライブラリにおける金属ベリリウムの $S(\alpha, \beta)$は、干渉性弾性散乱断面積及び非弾性散乱断面積からなる [13]。

金属ベリリウムの干渉性弾性散乱は、六方最密充填構造(Hexagonal close-packed)を用いて計算されるが、その格子力学モデルは、Debye-Waller 積分により求められている。干渉性弾性散乱を表す式については、エネルギーが保存されるため、式(2-32)のように簡略化できる。

非弾性散乱については、非干渉等方向近似を用いると、熱中性子の散乱断面積は格子振動のフォノン・スペクトルにのみ依存する。したがって、非弾性散乱または散乱カーネルはフォノン・スペクトルを計算することで求めることができる。フォノン・スペクトルの計算は、R.E.Schmunk 等によって提唱された力のモデル(Central fifth nearest neighbors モデル)を用いてルート・サンプリング法で計算され、$S(\alpha, \beta)$の計算に用いられている [14]。

干渉性の非弾性散乱の場合には、中性子はフォノンを作ったり消したりして非弾性散乱を起こし、その速度スペクトルにピークが観測されている。干渉多フォノン散乱も起こり、なだらかなバックグラウンドを与えることから、散乱過程において、干渉性散乱は、非干渉性と比べてフォノン数が増大するため、計算が非常に複雑になる。そのため、金属ベリリウムの $S(\alpha, \beta)$では、式

(2-22)に示すフォノン展開において、p>2 の場合、干渉性の非弾性散乱は、非干渉性の非弾性散乱で近似されて扱われてきた[7]。その計算結果については、L. S.Kothari 等[15]の評価によると、全断面積においては良い一致を示しているものの、詳細な評価は行われていない。さらに、R.E.Schmunk によれば[16]、干渉性非弾性散乱の非干渉近似は、あまり適当でないと結論づけている。

以上の文献調査の結果から、金属ベリリウム $S(\alpha, \beta)$のうち、干渉性の非弾性散乱については、その扱いに不確定な要素が含まれている可能性がある。

3.4 軽水中の水素の熱中性子散乱断面積

軽水の中の水素による熱中性子散乱の現実的モデルは Nelkin によって提唱された。このモデルでの散乱単位は、自由に跳ね返る水分子である。各分子は内部振動と同様に、分子全体として単一振動数のねじれ調和振動(Hindered rotations)を受ける。

ENDF のための GASKET[17]で計算された軽水中の水素の散乱法則は、Nelkin モデルの基本的特徴を保持するモデルに基づいている。しかし、単一のねじれ振動は分布したモードの幅のある帯域で置き換えられている。また、酸素原子による散乱は、表 2 で示した散乱法則データに含まれていない。

しかし、式(2-46)と式(2-47)によって与えられるカーブが、小さいエネルギー変換の領域で、理論値と実験値がよく一致し、拡散理論からのずれは、原子の振動運動で説明できることや、式(2-49)と式(2-50)によって与えられる波形も実験値と一致することから、軽水中の水素の $S(\alpha, \beta)$の誤差は少ないと考えられる。

4. まとめ

これまでベリリウムを反射体として用いている JMTR を含む世界の照射試験炉では、実測値と比較して熱中性子束の解析評価精度だけが高速中性子束レベルまで改善されていなかった。JMTR は再稼働後、これまで以上に高精度な照射試験が必要となるため、熱中性子束の解析評価精度の向上を目標とし、検討を行ってきた。その結果、熱エネルギー領域における中性子の散乱、吸収が誤差要因になっている可能性が高いことがわかった。

JMTR の照射場評価では、反射材にベリリウムを使用し、冷却材に軽水を使用していることから、金属ベリリウム及び軽水中の水素に対して、熱中性子散乱則 $S(\alpha, \beta)$を使用している。そこで本報では、これら $S(\alpha, \beta)$の影響について調査した。

その結果、軽水中の水素については主だった誤差要因は確認されなかったが、金属ベリリウムの $S(\alpha, \beta)$の干渉性散乱のうちの非弾性散乱の扱いが誤差の要因の一つである可能性が明らかとなった。

この結果を踏まえ、今後は、ベリリウムの $S(\alpha, \beta)$についての不確定要素を検討する予定である。

謝辞

本報告書の作成に際し、内容について貴重なご意見を頂きました神永 雅紀・原子炉施設管理部次長に深く感謝致します。

参考文献

1) 原子炉施設管理部, 照射試験炉センター：“ 材料試験炉の活動報告 (2006 年度)”, JAEA-Review 2008-006 , (2008).
2) 長尾美春:“ JMTR の炉心計算 -MCNP による全炉心計算- ”, JAERI-Review 97-003 , pp.74-95, (1997).
3) 長尾美春：“ JMTR の炉心計算 ”, JAERI-Review 98-010 , pp.128-165, (1998).
4) 長尾美春：“ MCNP による JMTR 炉心計算 ”, JAERI-Conf 2000-018 , pp.156-167, (2000).
5) M. Ishihara , H. Kawamura : “ Proceedings of the International Symposium on Materials Testing Reactors ”, JAEA-Conf 2008-011, (2008).
6) 長尾美春：“ JMTR の改修・再稼働計画 (8) JMTR 照射場評価の高精度化のための検討 ”, 日本原子力学会「2009 年春の年会」, L57, (2009)
7) Squires Gl : “ Introduction to the Theory of Thermal Neutron Scattering ”, Cambridge University Press, (1978).
8) 鬼柳善明：“ 中性子と物質の相互作用 ”, RADIOISOTOPES ,56, pp.211-217 ,(2007).
9) 鬼柳善明:“ 中性子の特徴的透過特性－低エネルギー中性子断面積 ”, RADIOISOTOPES ,56, pp.271-281, (2007).
10) 飯島俊吾：“ 非等方結晶に対する模型のコードのマニュアル; UNCLE コード ”, JAERI 1087, (1965).
11) D.J.Hughes (西野治訳)：“ 中性子断面積 －原子力実験の基礎－ ”, 産業図書, (1966).
12) 前川藤夫、長家康展：“ 中性子・光子断面積ライブラリー－MCNP と MVP の具体例－ ”, JAERI-Review 2002-004 , pp.119-145, (2002).
13) Cross Section Evaluation Working Group : “ ENDF-102 ENDF-6 Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File ENDF-VII ”, BNL-NCS-44945-01/04-Rev. Informal Report, (2005).
14) R.E.Schmunk : “ Lattice Dynamics of Beryllium ”, Physical Review , 128 , 2 , pp.562-573, (1962).
15) L.S.Kothari , K.S. Singwi : “ Interaction of Thermal Neutrons with Solids ”, Source [H]: Vol. 8, pp.110-190, (1959).
16) R.E.Schmunk : “ Slow-Neutron Inelastic Scattering from Beryllium Powder ”, Physical Review : Vol. 136 , pp.A1303-A1311, (1964).
17) J.U.Koppel, J.R.Triplett, Y.D.Naliboff : “ GASKET : A Unified Code for Thermal Neutron Scattering ”,GA-7417, (1966).

表 1　MCNP コードに附属した金属ベリリウムの *S(α, β)* ライブラリの比較

配布 MCNP コード	MCNP4B	MCNP5v1.4	MCNP5v1.5
S(α, β) の核データ	ENDF/B-V （但し *S(α, β)* については ENDF/B-III のもの）	ENDF/B-VI Release 6.3	ENDF/B-VII Release 7.0
核データの評価年代 1)	1964	1993	1993
処理コード	NJOY-91(?) Up. Ver 不明 （LEAPR）	NJOY-94 Up. Ver. 不明 （LEAPR）	NJOY-99 Up. Ver. 99.248 （LEAPR）
MCNP ライブラリ名	TMCCS	sab2002	endf70sab
温度	4 点（300～1200K）	8 点（77～1200K）	7 点（293.6～1200K）
角度分割数 2)	8	16	20
エネルギー分割数 3)	20	64	80
弾性散乱データ 4)	Coherent 弾性散乱データ（Bragg 散乱）	Coherent 弾性散乱データ（Bragg 散乱）	Coherent 弾性散乱データ（Bragg 散乱）
散乱の特徴 5)	モデル： 金属 Be における central force with extend to the fifth nearest neighbors ENDF の反応： MT 231（金属 Be の非弾性熱散乱）, MT 232（金属 Be の弾性熱散乱）		

1) 評価年代：米国核データ委員会 CSWEG が最終的に評価した年.

2) 角度分割数：二次中性子の散乱角度のコサインビンの数（等分割）；非弾性散乱の場合は，入射エネルギーと二次中性子エネルギーの組み合わせごとに与えられる．弾性散乱の場合は，入射エネルギーごとに与えられる.

3) エネルギー分割数：非弾性散乱における二次中性子のエネルギービンの数

4) 弾性散乱データ：金属ベリリウムのような固体（結晶）には Bragg 散乱を考慮する．水のような液体には弾性散乱データはない.

5) 熱エネルギーにおいて N 粒子（スピン分布はランダム）による中性子散乱は，干渉成分（coherent：互いに干渉する波の和）と非干渉（incoherent：非干渉波の和）からなる.

表 2　MCNP コードに附属した軽水中の水素の $S(\alpha, \beta)$ ライブラリの比較

配布 MCNP コード	MCNP4B	MCNP5v1.4	MCNP5v1.5
$S(\alpha, \beta)$の核データ	ENDF/B-V （但し $S(\alpha, \beta)$についてはENDF/B-IIIのもの）	ENDF/B-VI Release 6.3	ENDF/B-VII Release 7.0
核データの評価年代 1)	<1969	1993	2006
処理コード	NJOY-91(?) Up. Ver 不明 （LEAPR）	NJOY-94 Up. Ver. 不明 （LEAPR）	NJOY-99 Up. Ver. 99.248 （LEAPR）
MCNP ライブラリ名	TMCCS	sab2002	endf70sab
温度	5 点（300～800K）	5 点（294～1000K）	9 点（293.6～800K）
角度分割数 2)	8	16	20
エネルギー分割数 3)	20	64	80
弾性散乱データ 4)	弾性散乱データなし	弾性散乱データなし	弾性散乱データなし
散乱の特徴 5)	軽水中の水素による散乱はほぼ全部 incoherent（非干渉波の和） 非弾性及び弾性の成分を考慮する． モデル： (1) 制約回転を模擬する固体振動数分布， (2) 分子振動を模擬する 2 不連続振子（2 Discrete Oscillators，2 個の水素 0.205eV と 0.408eV）， (3) 自由並進（ガス，free gas translational，原子質量 18） ENDF の反応： MT 222（水中の H の熱散乱）		

1) 評価年代：米国核データ委員会 CSWEG が最終的に評価した年．

2) 角度分割数：二次中性子の散乱角度のコサインビンの数（等分割）；非弾性散乱の場合は，入射エネルギーと二次中性子エネルギーの組み合わせごとに与えられる．弾性散乱の場合は，入射エネルギーごとに与えられる．

3) エネルギー分割数：非弾性散乱における二次中性子のエネルギービンの数

4) 弾性散乱データ：金属ベリリウムのような固体（結晶）には Bragg 散乱を考慮する．水のような液体には弾性散乱データはない．

5) 熱エネルギーにおいて N 粒子（スピン分布はランダム）による中性子散乱は，干渉成分（coherent：互いに干渉する波の和）と非干渉（incoherent：非干渉波の和）からなる．

附録　散乱則関連計算コード

熱中性子散乱則関連の計算コードはいくつかあるが、今回はこのうちGASKET[17]について調べた。

1. GASKETコードの概要

GASKETは、干渉散乱は別に取り扱い、非干渉近似で散乱則を計算し、散乱系については①自由並進（ガス）、②拡散またはブラウン運動、③連続振動数分布を持つ調和等方振動、④連続振動数分布を持つ調和非等方振動、⑤非連続な振動数分布をもつ調和等方振動の力学モードを取り扱うことができる。また、これらのモードのすべて又は一つが同時に存在していても取り扱うことができる。

④以外のモードの共通の特徴は、これらの中間散乱関数が、αについて指数関数で、散乱に複数のモードが寄与するとき、その結果のX-functionは、次のように表されることである。

$$X = \exp\left[\alpha \sum_i w_i G_i(t)\right] \tag{A-1}$$

ここで、wは1に規格化される重み因子である。

$$\sum_i W_i = 1 \tag{A-2}$$

弾性散乱でσ-functionの特異な寄与をもつ結晶$S(\alpha, \beta)$については、$X(\alpha,t)$のtが無限に大きくなってもゼロにならない極限に近づくことがあり、この定数部分を差引いておく必要がある。これは、Debye-Waller因子と呼ばれ、時間積分を収束させるために行われる。もし、自由並進または拡散（モード①または②）が寄与する場合は、散乱則は解析的に求められる。

2. 動的モード

$X_i(\alpha,t)$は非対称性中間散乱関数を意味し、X_iはPlaczekの$S(\alpha, \beta)$についての和の法則を満たす必要がある。

2.1 自由ガス

$$G_1(t) = iTt - T^2t^2 \tag{A-3}$$

$$G_1(t + i/2T) = -\left(1/4 + T^2t^2\right) \tag{A-4}$$

これに対する散乱法則S_1は次のように表される。

$$S_1(\alpha,\beta) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\alpha w_1 T^2}} \exp\left[-\frac{1}{4\alpha w_1}\left(\beta^2 + w_1^2\alpha^2\right)\right] \tag{A-5}$$

2.2 拡散運動

完全に厳密な拡散運動の取扱いは未だなく、本調査では、式(A-6)または式(A-7)のように表す。ここで、d は拡散係数、c は調整のためのパラメータである。

$$G_2(t) = 2d\left(\sqrt{T^2t^2 + c^2 - iTt} - c\right) \tag{A-6}$$

$$G_2\left(t + \frac{i}{2T}\right) = 2d\left(\sqrt{T^2t^2 + c^2 + 1/4} - c\right) \tag{A-7}$$

2.3 多結晶での調和振子（等方向振動数分布）

調和結晶の単位セルの中の ℓ 番目の中間散乱関数では、次のように表される。

$$X_3^{(\ell)}(\alpha,t) = \exp\left\{\frac{w_3}{2NM_\ell}\sum_{\vec{k},s}\left|\vec{x}.\vec{C}\left(\ell\middle|\vec{k}_s\right)\right|^2 g\left[w_s\left(\vec{k}\right),t\right]\right\} \tag{A-8}$$

ここで、以下のように定義する。

$$g(\omega,t) = \frac{1}{\omega}\left[\frac{e^{\omega/T}}{e^{\omega/T}-1}\right]\left(e^{i\omega t}-1\right) + \frac{1}{e^{\omega/T}-1}\left(e^{-i\omega t}-1\right) \tag{A-9}$$

N は単位セルの総数、$\vec{C}\left(\ell\middle|\vec{k}_s\right)$ は ℓ 番目の原子の分極ベクトル、k は振動ベクトルであり、その branch が s である。立体対称を持つ Bravais 格子については、次のように表される。

$$X_3(\alpha,t) = \exp\left[\alpha w_3 G_3(t)\right] \tag{A-10}$$

ここでは以下のように定義する。

$$G_3(t) = \gamma(t) - \gamma(0) \tag{A-11}$$

そして、ここで、$f(w)$は結晶の振動のノーマルモードの振動数分布で規格化されている。

$$\gamma(t) = T\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(|\omega|)\,e^{\omega/2T}}{2\omega\sinh\omega/2T}e^{i\omega t}d\omega \tag{A-12}$$

そして次の量は、以下のように定義される。

$$D = \exp\left[-\alpha\, w_3\gamma(0)\right] \tag{A-13}$$

これはいわゆる Debye-Waller 因子である。

2.4 非等方振動数分布

例えば黒鉛のように、方向依存の振動数を導入することが可能である。

$$f(\omega)=f_{//}(\omega)\cos^2\theta+f_{\perp}(\omega)(1-\cos^2\theta) \tag{A-14}$$

ここでθはミクロ結晶の中で選んだ方向と固定軸の間の角を表す。そして、$f_{//}$と$f_{\perp}$はそれぞれ選んだ方向に平行と垂直な分極ベクトルをもつモードの振動数分布である。$X_4(\alpha,t)$は式(A-15)または式(A-16)のように表わされる。

$$X_4(\alpha,t)=\int_0^1 d(\cos\theta)\exp\left\{w_4\alpha\left[G_{//}(t)\cos^2\theta+G_{\perp}(t)(1-\cos^2\theta)\right]\right\} \tag{A-15}$$

$$X_4(\alpha,t)=\exp\left[\alpha w_4 G_{\perp}(t)\right]\int_0^1 d\mu\,\exp\left\{-\alpha w_4\left[G_{\perp}(t)-G_{//}(t)\right]\mu^2\right\} \tag{A-16}$$

2.5 不連続な等方向振動数分布

分子結晶や液体の振動数分布は、分子の内部振動に、基づくいくつかの鋭いピークをもつ（たとえば水分子 H_2O の屈曲や伸縮)。これらのモードでは、離散的な振動数スペクトルを導入でき、$t+\dfrac{i}{2T}$ で計算すると、$X_{5,k}\left(\alpha,t+\dfrac{i}{2T}\right)$は、次のように表される。

$$X_{5,k}\left(\alpha,t+\frac{i}{2T}\right)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}C_k^{(n)}(\alpha)\cos(n\omega_k t) \tag{A-17}$$

ここで、$C_k^{(n)}(\alpha)$は次のように定義される。

$$C_k^{(n)}(\alpha)=I_n\left(\frac{\alpha T w_5 a_k}{\omega_k\sinh\dfrac{\omega_k}{2T}}\right)\exp\left(-\alpha T w_5\frac{a_k}{\omega_k}\coth\frac{\omega_k}{2T}\right) \tag{A-18}$$

$I_n(x)$は第 1 種変形 Bessel 関数、n-th オーダーで、フーリエ変換を行えば、$S_{5,k}(\alpha,\beta)$が次のように得られる。

$$S_{5,k}(\alpha,\beta)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}C_k^{(n)}(\alpha)\,\delta(T\beta-n\omega_k) \tag{A-19}$$

この結果と畳込み定理を用いると、完全なフーリエ変換が求まり、$S_5(\alpha,\beta)$を得る。

3. モード 1 と 3 の組合せ

モード 1 と 3 を組合わせた場合、非対称散乱法則$S(\alpha,\beta)$の定義と式(A-1)、式(A-3)と式(A-11)、式(A-12)より、次のように表わされる。

$$\begin{aligned}S(\alpha,\beta)=\frac{D}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dt\exp\left[iTt\,(\beta+\alpha w_1)+i\alpha T w_3\int_0^{\infty}f(\omega)\sin\omega t\frac{d\omega}{\omega}\right]\\ \times\exp\left\{-\alpha T\left[w_1 T t^2-w_3\int_0^{\infty}f(\omega)\coth\frac{\omega}{2T}\cos\omega t\frac{d\omega}{\omega}\right]\right\}\end{aligned} \tag{A-20}$$

積分を偶関数と奇関数の成分に分けて

$$S(\alpha,\beta)=\frac{D}{\pi}\int_0^\infty dt\cos\left[(\beta+\alpha w_1)Tt+\alpha Tw_3\int_0^\infty f(\omega)\sin\omega t\frac{d\omega}{\omega}\right]$$
$$\times\exp\left\{\alpha T\left[-w_1Tt^2+w_3\int_0^\infty f(\omega)\coth\frac{\omega}{2T}\cos\omega t\frac{d\omega}{\omega}\right]\right\} \tag{A-21}$$

$X(\alpha,t)$から、ゼロフォノン散乱（または、$w_1=0$極限での弾性散乱）を分離すると便利である。

$$X_1X_3=X_1(X_3-D)+X_1D \tag{A-22}$$

奇関数と偶関数をそれぞれ定義する。

$$F(t)=w_3T\int_0^\infty f(\omega)\sin\omega t\frac{d\omega}{\omega} \tag{A-23}$$

$$H(t)=w_3T\int_0^\infty f(\omega)\coth\frac{\omega}{2T}\cos\omega t\frac{d\omega}{\omega} \tag{A-24}$$

(A-22)式は次のように表せる。

$$S(\alpha,\beta)=\frac{D}{\pi}\int_0^\infty dt\{\cos[(\beta+\alpha w_1)Tt+\alpha F(t)]\times\exp[-\alpha w_1T^2t^2+\alpha H(t)]$$
$$-\cos[(\beta+\alpha w_1)Tt]\exp(-\alpha w_1T^2t^2)\}+\frac{D}{2\pi}\int_{-\infty}^\infty e^{i\beta Tt}X_1(\alpha,t)dt \tag{A-25}$$

または、

$$S(\alpha,\beta)=S^{(1)}(\alpha,\beta)+S^{(2)}(\alpha,\beta) \tag{A-26}$$

$$S^{(2)}(\alpha,\beta)=\frac{D}{\sqrt{4\pi\alpha w_1T^2}}\exp\left[-\frac{1}{4\alpha w_1}(\beta^2+w_1^2\alpha^2)\right] \tag{A-27}$$

これは(A-5)から導出できる。そして、

$$S^{(1)}(\alpha,\beta)=\frac{e^{\beta/2}D}{\pi}\int_0^\infty dt\,[Q(t)\cos\lambda t-R(t)\sin\lambda t] \tag{A-28}$$

ここで、

$$\lambda=(\beta+\alpha w_1)T \tag{A-29}$$

$$Q(t)=\left\{\cos[\alpha F(t)]e^{\alpha H(t)}-1\right\}e^{-\alpha w_1T^2t^2} \tag{A-30}$$

$$R(t)=\sin[\alpha F(t)]e^{-\alpha w_1T^2t^2+\alpha H(t)} \tag{A-31}$$

同様にモード２と３の組合せも可能である。

国際単位系（SI）

表１．SI 基本単位

基本量	SI 基本単位	
	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質量	モル	mol
光度	カンデラ	cd

表２．基本単位を用いて表されるSI組立単位の例

組立量	SI 基本単位	
	名称	記号
面積	平方メートル	m^2
体積	立法メートル	m^3
速さ，速度	メートル毎秒	m/s
加速度	メートル毎秒毎秒	m/s^2
波数	毎メートル	m^{-1}
密度，質量密度	キログラム毎立方メートル	kg/m^3
面積密度	キログラム毎平方メートル	kg/m^2
比体積	立方メートル毎キログラム	m^3/kg
電流密度	アンペア毎平方メートル	A/m^2
磁界の強さ	アンペア毎メートル	A/m
量濃度[a]，濃度	モル毎立方メートル	mol/m^3
質量濃度	キログラム毎立法メートル	kg/m^3
輝度	カンデラ毎平方メートル	cd/m^2
屈折率[b]	（数字の）　1	1
比透磁率[b]	（数字の）　1	1

(a) 量濃度（amount concentration）は臨床化学の分野では物質濃度（substance concentration）ともよばれる。
(b) これらは無次元量あるいは次元１をもつ量であるが、そのことを表す単位記号である数字の１は通常は表記しない。

表３．固有の名称と記号で表されるSI組立単位

組立量	SI 組立単位			
	名称	記号	他のSI単位による表し方	SI基本単位による表し方
平面角	ラジアン[b]	rad	1 [b]	m/m
立体角	ステラジアン[b]	sr[c]	1 [b]	m^2/m^2
周波数	ヘルツ[d]	Hz		s^{-1}
力	ニュートン	N		m kg s^{-2}
圧力，応力	パスカル	Pa	N/m^2	m^{-1} kg s^{-2}
エネルギー，仕事，熱量	ジュール	J	N m	m^2 kg s^{-2}
仕事率，工率，放射束	ワット	W	J/s	m^2 kg s^{-3}
電荷，電気量	クーロン	C		s A
電位差（電圧），起電力	ボルト	V	W/A	m^2 kg s^{-3} A^{-1}
静電容量	ファラド	F	C/V	m^{-2} kg^{-1} s^4 A^2
電気抵抗	オーム	Ω	V/A	m^2 kg s^{-3} A^{-2}
コンダクタンス	ジーメンス	S	A/V	m^{-2} kg^{-1} s^3 A^2
磁束	ウエーバ	Wb	Vs	m^2 kg s^{-2} A^{-1}
磁束密度	テスラ	T	Wb/m^2	kg s^{-2} A^{-1}
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A	m^2 kg s^{-2} A^{-2}
セルシウス温度	セルシウス度[e]	℃		K
光束	ルーメン	lm	cd sr[c]	cd
照度	ルクス	lx	lm/m^2	m^{-2} cd
放射性核種の放射能[f]	ベクレル[d]	Bq		s^{-1}
吸収線量, 比エネルギー分与, カーマ	グレイ	Gy	J/kg	m^2 s^{-2}
線量当量, 周辺線量当量, 方向性線量当量, 個人線量当量	シーベルト[g]	Sv	J/kg	m^2 s^{-2}
酸素活性	カタール	kat		s^{-1} mol

(a)SI接頭語は固有の名称と記号を持つ組立単位と組み合わせても使用できる。しかし接頭語を付した単位はもはやコヒーレントではない。
(b)ラジアンとステラジアンは数字の１に対する単位の特別な名称で、量についての情報をつたえるために使われる。実際には、使用する時には記号rad及びsrが用いられるが、習慣として組立単位としての記号である数字の１は明示されない。
(c)測光学ではステラジアンという名称と記号srを単位の表し方の中に、そのまま維持している。
(d)ヘルツは周期現象についてのみ、ベクレルは放射性核種の統計的過程についてのみ使用される。
(e)セルシウス度はケルビンの特別な名称で、セルシウス温度を表すために使用される。セルシウス度とケルビンの単位の大きさは同一である。したがって、温度差や温度間隔を表す数値はどちらの単位で表しても同じである。
(f)放射性核種の放射能（activity referred to a radionuclide）は、しばしば誤った用語で"radioactivity"と記される。
(g)単位シーベルト（PV,2002,70,205）についてはCIPM勧告2（CI-2002）を参照。

表４．単位の中に固有の名称と記号を含むSI組立単位の例

組立量	SI 組立単位		
	名称	記号	SI 基本単位による表し方
粘度	パスカル秒	Pa s	m^{-1} kg s^{-1}
力のモーメント	ニュートンメートル	N m	m^2 kg s^{-2}
表面張力	ニュートン毎メートル	N/m	kg s^{-2}
角速度	ラジアン毎秒	rad/s	m m^{-1} s^{-1}=s^{-1}
角加速度	ラジアン毎秒毎秒	rad/s^2	m m^{-1} s^{-2}=s^{-2}
熱流密度，放射照度	ワット毎平方メートル	W/m^2	kg s^{-3}
熱容量，エントロピー	ジュール毎ケルビン	J/K	m^2 kg s^{-2} K^{-1}
比熱容量，比エントロピー	ジュール毎キログラム毎ケルビン	J/(kg K)	m^2 s^{-2} K^{-1}
比エネルギー	ジュール毎キログラム	J/kg	m^2 s^{-2}
熱伝導率	ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m K)	m kg s^{-3} K^{-1}
体積エネルギー	ジュール毎立方メートル	J/m^3	m^{-1} kg s^{-2}
電界の強さ	ボルト毎メートル	V/m	m kg s^{-3} A^{-1}
電荷密度	クーロン毎立方メートル	C/m^3	m^{-3} sA
表面電荷	クーロン毎平方メートル	C/m^2	m^{-2} sA
電束密度，電気変位	クーロン毎平方メートル	C/m^2	m^{-2} sA
誘電率	ファラド毎メートル	F/m	m^{-3} kg^{-1} s^4 A^2
透磁率	ヘンリー毎メートル	H/m	m kg s^{-2} A^{-2}
モルエネルギー	ジュール毎モル	J/mol	m^2 kg s^{-2} mol^{-1}
モルエントロピー, モル熱容量	ジュール毎モル毎ケルビン	J/(mol K)	m^2 kg s^{-2} K^{-1} mol^{-1}
照射線量（X線及びγ線）	クーロン毎キログラム	C/kg	kg^{-1} sA
吸収線量率	グレイ毎秒	Gy/s	m^2 s^{-3}
放射強度	ワット毎ステラジアン	W/sr	m^4 m^{-2} kg s^{-3}=m^2 kg s^{-3}
放射輝度	ワット毎平方メートル毎ステラジアン	$W/(m^2\ sr)$	m^2 m^{-2} kg s^{-3}=kg s^{-3}
酵素活性濃度	カタール毎立方メートル	kat/m^3	m^{-3} s^{-1} mol

表５．SI 接頭語

乗数	接頭語	記号	乗数	接頭語	記号
10^{24}	ヨタ	Y	10^{-1}	デシ	d
10^{21}	ゼタ	Z	10^{-2}	センチ	c
10^{18}	エクサ	E	10^{-3}	ミリ	m
10^{15}	ペタ	P	10^{-6}	マイクロ	μ
10^{12}	テラ	T	10^{-9}	ナノ	n
10^9	ギガ	G	10^{-12}	ピコ	p
10^6	メガ	M	10^{-15}	フェムト	f
10^3	キロ	k	10^{-18}	アト	a
10^2	ヘクト	h	10^{-21}	ゼプト	z
10^1	デカ	da	10^{-24}	ヨクト	y

表６．SIに属さないが、SIと併用される単位

名称	記号	SI 単位による値
分	min	1 min=60s
時	h	1h =60 min=3600 s
日	d	1 d=24 h=86 400 s
度	°	1°=(π/180) rad
分	’	1’=(1/60)°=(π/10800) rad
秒	”	1”=(1/60)’=(π/648000) rad
ヘクタール	ha	$1ha=1hm^2=10^4m^2$
リットル	L，l	$1L=1l=1dm^3=10^3cm^3=10^{-3}m^3$
トン	t	$1t=10^3$ kg

表７．SIに属さないが、SIと併用される単位で、SI単位で表される数値が実験的に得られるもの

名称	記号	SI 単位で表される数値
電子ボルト	eV	$1eV=1.602\ 176\ 53(14)\times10^{-19}J$
ダルトン	Da	$1Da=1.660\ 538\ 86(28)\times10^{-27}kg$
統一原子質量単位	u	1u=1 Da
天文単位	ua	$1ua=1.495\ 978\ 706\ 91(6)\times10^{11}m$

表８．SIに属さないが、SIと併用されるその他の単位

名称	記号	SI 単位で表される数値
バール	bar	$1\ bar=0.1MPa=100kPa=10^5Pa$
水銀柱ミリメートル	mmHg	1mmHg=133.322Pa
オングストローム	Å	$1\ Å=0.1nm=100pm=10^{-10}m$
海里	M	1 M=1852m
バーン	b	$1\ b=100fm^2=(10^{-12}cm)2=10^{-28}m^2$
ノット	kn	1 kn=(1852/3600)m/s
ネーパ	Np	SI単位との数値的な関係は、対数量の定義に依存。
ベル	B	
デジベル	dB	

表９．固有の名称をもつCGS組立単位

名称	記号	SI 単位で表される数値
エルグ	erg	$1\ erg=10^{-7}$ J
ダイン	dyn	$1\ dyn=10^{-5}N$
ポアズ	P	$1\ P=1\ dyn\ s\ cm^{-2}=0.1Pa\ s$
ストークス	St	$1\ St\ =1cm^2\ s^{-1}=10^{-4}m^2\ s^{-1}$
スチルブ	sb	$1\ sb\ =1cd\ cm^{-2}=10^4cd\ m^{-2}$
フォト	ph	$1\ ph=1cd\ sr\ cm^{-2}\ 10^4lx$
ガル	Gal	$1\ Gal\ =1cm\ s^{-2}=10^{-2}ms^{-2}$
マクスウェル	Mx	$1\ Mx\ =\ 1G\ cm^2=10^{-8}Wb$
ガウス	G	$1\ G\ =1Mx\ cm^{-2}\ =10^{-4}T$
エルステッド[c]	Oe	$1\ Oe \triangleq (10^3/4\pi)A\ m^{-1}$

(c) ３元系のCGS単位系とSIでは直接比較できないため、等号「 ≙ 」は対応関係を示すものである。

表10．SIに属さないその他の単位の例

名称	記号	SI 単位で表される数値
キュリー	Ci	$1\ Ci=3.7\times10^{10}Bq$
レントゲン	R	$1\ R\ =\ 2.58\times10^{-4}C/kg$
ラド	rad	$1\ rad=1cGy=10^{-2}Gy$
レム	rem	$1\ rem=1\ cSv=10^{-2}Sv$
ガンマ	γ	1 γ =1 nT=10-9T
フェルミ		1フェルミ=1 fm=10-15m
メートル系カラット		1メートル系カラット = 200 mg = 2×10-4kg
トル	Torr	1 Torr = (101 325/760) Pa
標準大気圧	atm	1 atm = 101 325 Pa
カロリー	cal	1cal=4.1858J（「15℃」カロリー），4.1868J（「IT」カロリー）4.184J（「熱化学」カロリー）
ミクロン	μ	$1\ \mu\ =1\mu m=10^{-6}m$

（第8版，2006年改訂）

この印刷物は再生紙を使用しています。