

JAERI-M
82-198

高エネルギー核反応および核子・中間子
輸送シミュレーション・コードシステム
NMTC/JAERI

1982年12月

中原 康明・筒井 恒夫

JAERI-M レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。

入手の問合わせは、日本原子力研究所技術情報部情報資料課（〒319-11 茨城県那珂郡東海村）あて、お申しこしてください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-11 茨城県那珂郡東海村 日本原子力研究所内）で複写による実費頒布をおこなっております。

JAERI-M reports are issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Information Section, Division of Technical Information, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-11, - Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 1982

編集兼発行 日本原子力研究所
印刷 日立高速印刷株式会社

高エネルギー核反応および核子・中間子
輸送シミュレーション・コードシステム
NMTC/JAERI

日本原子力研究所東海研究所原子炉工学部
中原 康明・筒井 恒夫

(1982年12月2日受理)

非均質媒質中において加速器などから打ち込まれる高エネルギー粒子（陽子、中性子等の核子およびパイ中間子等）によって発生する核反応（核破碎，核分裂，蒸発）およびその結果放出される粒子の輸送過程のモンテカルロ法によるシミュレーション計算を行うコード・システムNMTC/JAERIが開発整備された。NMTC/JAERIの土台となったコード・システムはORNLで開発されたNMTCにLANLおよびBNLにおいて改良が加えられた1978年版である。JAERI版では新たに統計モデルによる核分裂反応が蒸発過程との競争過程として組込まれるとともに，ターゲット／ブラケット中に標的核として存在を許される核種の質量数 A が $\{A=1; 8 \leq A \leq 239\}$ から $\{A=1; 6 \leq A \leq 250\}$ に拡張され，LiやBeのような軽い核種およびPu-240以上の超ウラン核種を含んだ体系に対する計算もできるようになっている。

媒質中の荷電粒子の輸送は，輸送途次のイオン化損失による減速を考慮して，連続減速モデルで取扱われ，中性粒子には中性子輸送に対する通常のモンテカルロ計算法が適用されている。粒子が原子核と衝突した場合の核反応は，核内核子カスケード・核分裂・蒸発の多段階過程としてモンテカルロ法で計算される。媒質内の全ての事象についての計算結果は磁気ファイルに記録される。媒質の種々の核特性量はこの記録を編集することによって求められる。このコード・システムの適用可能な入射粒子のエネルギー範囲は15 MeV～3.5 GeVである。ただしパイ中間子の場合には2.5 GeVが上限である。

NMTC/JAERIは加速器による核燃料生産や放射性廃棄物の消滅処理システムの初期核特性計算に用いられるが，強力破碎中性子源の設計，加速器の遮蔽，さらには宇宙船の遮蔽等の計算にも有用である。

NMTC/JAERI

A Simulation Code System for High Energy
Nuclear Reactions and Nucleon-Meson
Transport Processes

Yasuaki NAKAHARA and Tsuneo TSUTSUI

Division of Reactor Engineering, Tokai Research Establishment, JAERI

(Received December 2, 1982)

A computer code system NMTC/JAERI has been developed in order to perform Monte Carlo simulation calculations of nuclear reactions (nuclear spallation, fission, evaporation) caused in a heterogeneous medium by incident particles (nucleons such as proton and neutron, and pions) from an external source such as an accelerator and subsequent transport of particles emitted from nuclei. The base of NMTC/JAERI is a 1978 year version of NMTC, which was developed at ORNL and revised later at LANL and BNL. In the JAERI version a fission reaction based on the statistical model has been incorporated as a process in competition with an evaporation process. The mass number A of nuclides which can be included in a target/blanket has been extended from [$A = 1; 8 \leq A \leq 239$] to [$A = 1; 6 \leq A \leq 250$].

Charged particle transport in the medium is treated by the use of a continuous slowing down model to take into consideration of ionization loss. A conventional Monte Carlo method for neutron transport is applied to neutral particles. When a collision between a particle and a nucleus has taken place, nuclear reactions are calculated by a Monte Carlo method simulating a multi-step process of intra-nuclear nucleon cascades, fissions and evaporations. Calculated results for all the events in the medium are stored on magnetic files. Values of various nuclear parameters of the medium are obtained by analysing and editing the records on the files. Energy range of incident particles to which the

code system can be applied is between 15 MeV and 3.5 GeV. But for pions the upper boundary is 2.5 GeV.

NMTC/JAERI is used for the calculations of initial nuclear characteristics of nuclear fuel production and radioactive waste transmutation systems, and also useful for the design calculations of strong spallation neutron source, accelerator shieldings and even space ship shieldings.

Keywords : Spallation, High Energy Reaction, Cascade, Fission, Evaporation, Proton, Neutron, Pion, Muon, Nucleonics, Nucleon Transport, Meson Transport, Neutron Transport, Monte Carlo Method, Accelerator Breeding, Spallation Neutron Source, Transmutation, Actinide, Shielding

目 次

1. はじめに	1
2. コードシステムの概略	3
3. 理論的基礎と計算モデル	17
3.1 NMTCの計算モデル	17
3.2 高エネルギー核分裂	35
3.3 超ウラン核種の手扱い	44
4. コードシステム使用法および入力データ	51
5. あとがき	56
謝 辞	56
文 献	57
付 録 1 入力データ例	60
付 録 2 プリント出力例	65
付 録 3 NMTC/JAERI ヒストリー・ファイル	71

Contents

1. Introduction	1
2. Outline of the code system	3
3. Theoretical bases and computational models	17
3.1 Computational models used in NMTC	17
3.2 High energy nuclear fission	35
3.3 Computational assumptions for transuranic nuclides ...	44
4. How to use the code system and prepare the input data ...	51
5. Summary	56
Acknowledgment	56
References	57
Appendix 1. Example of input data	60
Appendix 2. Example of printed output	65
Appendix 3. NMTC/JAERI history file	71

1. はじめに

加速器によって1～2 GeVに加速された陽子を鉛やウランなどの重金属を含んだターゲットに当てると、ターゲットの組成にもよるが、いわゆる原子核の破砕反応(spallation)により入射陽子1個あたりおよそ20～60個の中性子が発生する。これには高エネルギー核分裂によって発生する中性子も含まれている。さらにこれらの中性子を核分裂炉中の中性子スペクトル領域まで減速させてさらに核分裂を起こさせれば、中性子数をさらに数10%増すことができ、極めて強力な大型中性子源を設計することができる。加速器として線型加速器を用いると、連続的な中性子源が得られる。加速器技術の進歩に伴って、加速器の工学的利用の可能性が認識されるようになり、特に原子力先進諸国においては線型加速器による核燃料生産および放射性廃棄物消滅処理が将来において核燃料サイクルに対する強力な補強手段となり得る可能性が⁽¹⁾注目され、地道な基礎研究が積み重ねられるとともに、種々の開発研究計画が提案されてきた。

これら核燃料生産用または放射性廃棄物消滅処理用のターゲット・ブランケット内での核反応は、入射陽子のエネルギーがGeVのオーダーの高エネルギーであるため、通常核分裂炉や核融合炉ブランケット内の核反応に比較してはるかに複雑であり、中性子だけでなく、陽子、パイ中間子やミュー中間子も関与する。粒子の非均質媒質中の輸送過程も数GeV～0MeVと非常に広いエネルギー範囲にわたるため、中性子の他に陽子などの荷電粒子を含めた計算を行い、ターゲット・ブランケット系の核特性を解析し、フィージビリティ・スタディを行うには膨大な計算を必要とする。

現在、数GeV～0MeVのエネルギー範囲における核反応・核子-中間子輸送計算を統一的に実行できる理論モデルも利用可能な核データ・ファイルも存在しない。したがって、種々の計算手段を組合せ、システム化して用いるしか方法がない。数GeV～0MeVの範囲にわたって系統的な解析をしたのは、ソ連のBarashenkovら⁽²⁾と高橋・中原⁽³⁾が恐らく最初であると思われる。その後原研においては、BNLの高橋らによって開発整備されたコードシステム⁽³⁾に類似の「加速器ターゲット・ブランケット体系の核特性解析用コード・システム：ACCEL」が開発整備された⁽⁴⁾。英国においてもAtchison⁽⁵⁾によって、また西ドイツにおいてはArmstrongら⁽⁶⁾によって独立にコードシステムが開発されている。

比較的低いエネルギー領域では、核分裂炉の核特性解析用に既に開発整備されている中性子輸送計算コードと核データファイルが利用できるため、全体の計算をこれらを活用する部分と別の計算手段を用意しなければならない部分に分けるのが賢明であり便利である。高橋や中原らは低エネルギー領域に対してGAMの100群エネルギー構造⁽⁷⁾を用いているので、15MeVがその境界になっている。以後この値を切断エネルギーと呼ぶことにする。

入射粒子エネルギーから切断エネルギーの間の領域における全ての核反応および粒子の輸送をモンテカルロ法で計算するのがArmstrongらによって開発されたNMTCである⁽⁸⁾。NMTCでは核反応過程としては、核内核子カスケードと蒸発のみが考慮されているが、精度を上げるには高エネルギー核分裂過程を組み込むことが必要となり、高橋⁽⁹⁾と中原⁽¹⁰⁾は独立にNMTC

を改良し、核分裂を考慮した計算ができるようにした。NMTCの適用できるエネルギーの上限は、パイ中間子生成反応モデルからの制限で、入射粒子が陽子や中性子の場合には3.5 GeV、パイ中間子の場合には2.5 GeVである。ArmstrongらはさらにNMTCを改良し、1 TeVまで適用可能なHETCを開発している。⁽¹¹⁾ NMTCはLANL、BNLおよび原研で使われ、プログラムの虫退治もかなり行われており、また1~1.5 GeVの入射陽子を用いる核燃料生産または廃棄物消滅処理用ターゲット・ブランケットの解析にはNMTCで十分である。なお、英国および西ドイツのコードシステムではHETCが用いられている。

NMTCおよびHETCでは、ターゲット中に含まれる核種の種類は、水素の他、質量数 A が $8 \leq A \leq 239$ のものに限られるが、原研版のNMTCではLiやBeを含んだ熔融塩ターゲットやAmなどの超ウラン核種を含んだターゲットの計算を行うために、 $6 \leq A \leq 250$ の核種の存在が許されるように拡張されている。

なおNMTC計算を切断エネルギー以下の領域での中性子輸送計算につなげるには、NMTCの計算中に切断エネルギー以下に減速された中性子は磁気ファイルに記録されるので、それを外部中性子源として、1次元輸送 S_n コードANISN⁽¹²⁾、2次元輸送 S_n コードTWOTRAN- Π ⁽¹³⁾もしくは3次元輸送モンテカルロ・コードMORSE-CG⁽¹⁴⁾等を用いればよい。

なお、HETCにも高エネルギー核分裂過程は含まれていなかったが、Atchison⁽¹⁵⁾およびAlsmillerら⁽¹⁶⁾によって独立に核分裂が考慮できるように改良が行われている。高橋、中原、AtchisonおよびAlsmillerらの核分裂計算モデルの相互比較はArmstrongにより行われている。⁽¹⁷⁾

2. コードシステムの概略

NMTC/JAERIは切断エネルギー以上のエネルギー領域において陽子、中性子、パイ中間子によって引き起こされる核反応とこれらの粒子の非均質媒質中の輸送過程のモンテカルロ法によるシミュレーション計算を行うためのコードシステムである。「加速器ターゲット・ブランケット体系の核特性解析用コード・システム：ACCEL」の中に占めるNMTC/JAERIの役割と位置付けがFig.1に示されており、またACCELで計算する物理現象がイラスト的にFig.2に示されている。NMTCは、独立に開発された幾つかの大きなコードをその基本構成ルーチンとして組み込み、さらにそれらに関連した数多くのサブルーチンを包含しているカード枚数にして1万枚を超える大きなコードシステムである⁽⁸⁾。核内核子カスケード計算にはBertiniによって開発されたMECC2⁽¹⁸⁾、励起された原子核からの粒子蒸発の計算にはDresnerによって作成されたEVAP⁽¹⁹⁾ および非均質媒質中の粒子輸送計算のためにはモンテカルロ法による中性子輸送計算コードO5R⁽²⁰⁾の主要サブルーチンが用いられており、さらに荷電粒子輸送やパイ中間子の関与する核反応を扱うための数多くのルーチンが付加されている。EVAPはその後Guthrieによって改良が加えられ、現在のNMTCにはEVAP-4⁽²¹⁾がDRESというサブルーチン名で用いられている。MECC2はNMTCの中ではBERTというサブルーチン名になっている。なお、NMTCで扱えるエネルギー範囲の上限以上の領域にも適用できるように改良されたHETC⁽¹¹⁾ではMECC7⁽²²⁾が用いられている。

さらに、NMTC/JAERIでは中原・筒井により作成された核分裂過程を扱うためのサブルーチン群が組込まれるとともに、 $A \geq 240$ 以上の核種をターゲットに含めた計算ができるように必要個所の修正が行われている。カスケード・蒸発計算モデルは、重い核種には精度よく適用できるが、軽い核種に対しては物理的に問題があるため、NMTCでは $A \geq 8$ の核種に対してのみ適用されるようになっている。ただし水素は含めることができるが、水素はカスケード・蒸発計算からは除外され、特別に扱われる。NMTC/JAERIでは、 ${}^6\text{Li}$ と ${}^7\text{Li}$ を含んだ体系に適用するために、 $A \geq 6$ まで適用条件がゆるめられている。軽い核のみの領域が存在する体系に対する計算では、計算誤差のためエネルギー保存則が成立たなくなり、計算が途中でストップしてしまうことがある。NMTC/JAERIでは、LiやBeのような軽い核の含有率が大きい場合には、エネルギー保存則の乱れが起こることがあるが、その頻度が小さい時には、エラーが生じたことをプリントし、計算上はエラーの発生を無視して続行するようにしてある。今のところそのために不都合な結果になった例はなく、熔融塩のように軽い核種を含んだ体系にもNMTC/JAERIは適用可能である。

なおNMTCおよびNMTC/JAERIいずれにおいてもガンマ線放出過程は考慮されていない。MECC2などによるカスケード計算の結果を用いて、カスケード終了後の励起核の減衰過程としてガンマ線放出を計算するコードとしては宇宙船の遮蔽計算用に開発されたDLIGHTというコードがあるが、未だに公開されていない。⁽²³⁾

コードシステムの構成と主要パッケージがFig.3と4に示されている。システムを構成する多数のサブルーチンの一つ一つの機能を解説するのは困難なので、以下パッケージ単位で主要な機能についてのみ記述することにする。

(1) 幾何形状パッケージ

NMTCでは、ターゲット・ブランケット体系の幾何形状および領域の指定に必要なサブルーチン群にはO5R⁽¹⁷⁾のものが用いられているが、BNL版のNMTCに基づいているNMTC/JAERIでは、LANLで開発された「モンテカルロ中性子輸送コードMCN」⁽²⁴⁾のものが採用されている。MCNの幾何形状入力形式は、O5Rのものより簡略化され、使用し易くなっていると同時に、入力エラー・チェック機能を備えている。幾何形状にかかわるサブルーチン群はJOMINが統括している。

入射陽子源の幾何形状およびエネルギー等の入力ルーチンは利用者が自分でプログラムすることになっているが、NMTC/JAERIではBNLで作成されたサブルーチンが用いられている。これはOVLY12パッケージにSORSとして含まれている。現在は円および直方形の面源、円柱および直方体の一様立体源が用意されている。ただし、陽子の入射方向は±Z軸方向のみである。

(2) 物質中の巨視的輸送パッケージ

物理計算はOVLY12で行われる。全てのサブルーチンを書き出すのには数が多過ぎるので、OVLY12に含まれる主要サブルーチンのみがFig.5に示されている。サブルーチン名の後に線が引いてあるのは、さらにそのサブルーチンに付属するサブルーチン群があることを示している。たとえば、Fig.6に示されているように、CASCADはさらに数多くのサブルーチン群を従えている。OVLY12によってコントロールされる計算の流れがFig.7に示されている。

ターゲット・ブランケット体系を構成する物質中の巨視的な粒子の輸送を取扱うサブルーチン群にはO5Rのものが活用されているが、NMTCでは陽子および π^+ や π^- のパイ中間子などの荷電粒子を扱う必要があるので、Fig.5にみられるように、幾つかのサブルーチン・パッケージが新しく用意され、プログラムはかなり複雑化している。荷電粒子の輸送やクーロン散乱はSPRDで計算され、また飛行中のエネルギー損失は、ECOLで求められるが、その計算に必要なレンジはRAINGEとRANGEで用意される。

(3) 核内核子カスケード・パッケージ

OVLY12で呼出されるCASCADがカスケード計算用のサブルーチン群を統括する。先にも触れたように、現在整備されているルーチンでは、ターゲット核種として質量数A=2~5のものが存在する場合には、計算は実行できない。

主要な副パッケージはOVLY21とOVLY22である。OVLY21に属するPCOLは、n, p, π^\pm および π^0 の2体衝突過程に関与するサブルーチン群を統括する。なおFig.6には記入されていないが、パイ中間子生成微分断面積はPCOLで呼出されるISOBで計算される。核内カスケード過程そのものはOVLY22に属するBERTで計算される。

(4) 粒子蒸発パッケージ

OVLY12に属するERUPが蒸発計算に関連したサブルーチン群を統括する。その中心

がDRESである。これはGuthrieによって改良が重ねられたDresnerのプログラムEVAP⁽¹⁹⁾の改訂第4版⁽²¹⁾である。改良されているのは以下の諸点である。原子質量単位が¹⁶O基準値から¹²C基準値に変更された。軽い核に対する質量公式表が改良された。⁸Beが生成された時には、2個の α に割れるとし、蒸発計算を行わないようにした。原子核の反跳計算法が改良された。さらに蒸発計算の打ち切り法が改良されている。すなわち、EVAPでは残留核の励起エネルギーから対エネルギーを差引いているが、蒸発計算の末期においてこの補正のためにエネルギー的には未だ蒸発可能な場合が殺されてしまうことがあり、これを避けるために、EVAP-4では蒸発計算終了の時点で対エネルギーを零とし、もう1回蒸発計算を行うようにしてある。物理的には、粒子蒸発終了後もガンマ線放出が続く可能性が残っているが、現在のコードシステムではこの過程を計算するようにはなっていない。

(5) 核分裂パッケージ

このパッケージは、中原の計算モデルに基づいて筒井が作成し、OVLY12の中で蒸発過程を競合するようにOVLY12の中に組込んだもので、その計算の流れについてはFig.7、計算モデルの詳細については第3.2節を参照されたい。各サブルーチンの機能についてはFig.5を参照されたい。

(6) NMTC核データ・ファイル

カスケードおよび蒸発計算に必要な核構造データおよび核子・核子断面積データがデータ・ライブラリとして磁気ファイルに収められている。NMTC用のファイルは単精度のバイナリー・データを収納しているが、NMTC/JAERI用では倍精度のバイナリー・データが収納されている。Fig.8にデータ・ファイルの構造が示されている。CRSCデータで質量数 $A = 240 \sim 250$ のデータは我々が新たに追加したデータである。

CRSCには核内核子カスケード計算に必要な核構造データが質量数の順に1核種10個のデータ・セットとして入っている。核を3領域に分け、まずその半径 R_i が〔cm〕で、次に各領域内一定と近似した核子密度パラメータ ρ_i が〔 $10^{30}/\text{cm}^3$ 〕で、最後にフェルミ・エネルギー・パラメータ U_i が〔MeV〕で与えられている。核内各領域における中性子と陽子の密度および中性子と陽子に対するフェルミ・エネルギーは、各々、コードの中で上記のデータから次のようにして計算される。原子核の電荷を Z とする。

核子密度分布 ($10^{30}/\text{cm}^3$)

$$\begin{aligned} \text{中性子に対して, } \rho_i^n &= \rho_i (A-Z) \\ \text{陽子に対して, } \rho_i^p &= \rho_i Z \end{aligned} \quad (1)$$

フェルミ・エネルギー (MeV)

$$\begin{aligned} \text{中性子に対して, } E_i^n &= U_i (A-Z)^{2/3} \\ \text{陽子に対して, } E_i^p &= U_i Z^{2/3} \end{aligned} \quad (2)$$

TAPCRSには核内核子カスケード計算に必要な(核子, 核子)および(パイ中間子, 核子)衝突に対する各種断面積データが入っている。すなわち,

$$(\pi^-, p), (\pi^0, p), (\pi^+, p), (\pi^0, n)$$

に対する； 弾性散乱断面積，
荷電粒子に対する荷電交換断面積，
微分散乱断面積パラメータ，
吸収断面積，
1個のパイ中間子生成を伴う非弾性散乱断面積，
(n, p)，(p, p)

に対する； 弾性散乱断面積，
微分散乱断面積パラメータ，
1個のパイ中間子生成を伴う非弾性散乱断面積，
2個のパイ中間子生成を伴う非弾性散乱断面積。

なお、 (π^+, n) 、 (π^-, n) 散乱に対するデータは用意されていないが、荷電対称性により各々 (π^-, p) と (π^+, p) のデータに等しいので、差しつかえない。一方、陽子同士に働くクーロン力は、10 MeV以上では狭い角度内への前方散乱を除けば、無視できるので、 (n, n) 断面積には (p, p) に対するものと同じデータが用いられる。

P0, P1, P2には、蒸発計算において、n, p, d, t, ^3He , α の6種の粒子の蒸発確率を求める際必要となる関数 I_0, I_1, I_2 の値が数表として入っている。これら関数の定義は、第3.1節を参照されたい。

GAR1には、蒸発計算の際必要となる粒子の結合エネルギーを求めるのに用いられる質量公式における中性子に対する殻構造補正と対エネルギー補正のデータが入っている。

GAR2には、陽子に対する同様のデータが入っている。

GAR3には、質量公式における(体積エネルギー)+(表面エネルギー)+(クーロン・エネルギー)+(交換エネルギー)補正值のデータが入っている。

$1 \leq A - 2Z + 5 \leq 14$ の範囲にある軽い核種に対しては、上記のGAR1, GAR2, GAR3データは用いられず、主プログラムのデータ文として、 $Z < 16$ に対しては、WAPS, $Z > 17$ に対してはWAP2として与えられているデータが用いられる。

RMASS, ALPHおよびBETは、粒子蒸発確率の計算の際必要となる逆反応断面積を求めるのに使われる数値である。定義については、第3.1節を参照されたい。

(7) 出力データ・ファイル

NMTC/JAERIによる計算で得られた全ての結果は2本の磁気ファイルに保存することができる。ファイル12には、切断エネルギー以下に減速された全ての中性子に関するデータが記録され、これは切断エネルギー以下の領域における中性子輸送計算の際の中性子源データとなる。ファイル22には、1次粒子およびその作用による核反応の結果生成された粒子や核種に関する情報がまとめて記録される。ファイルの内容については、付録3を参照されたい。

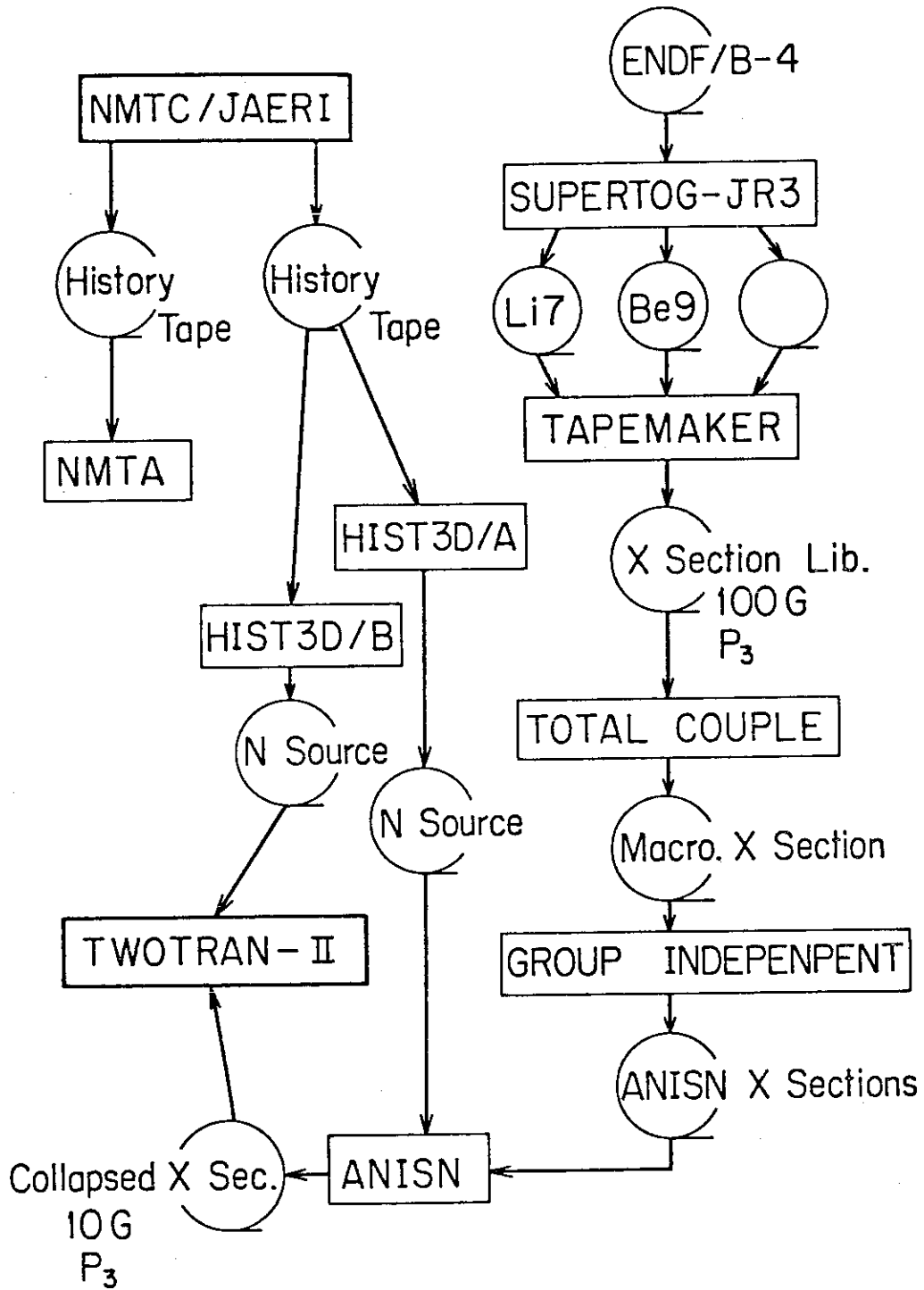


Fig.1 Flow of neutronics calculations

The base of NMTC/JAERI is the NMTC version revised at LASL and BNL.

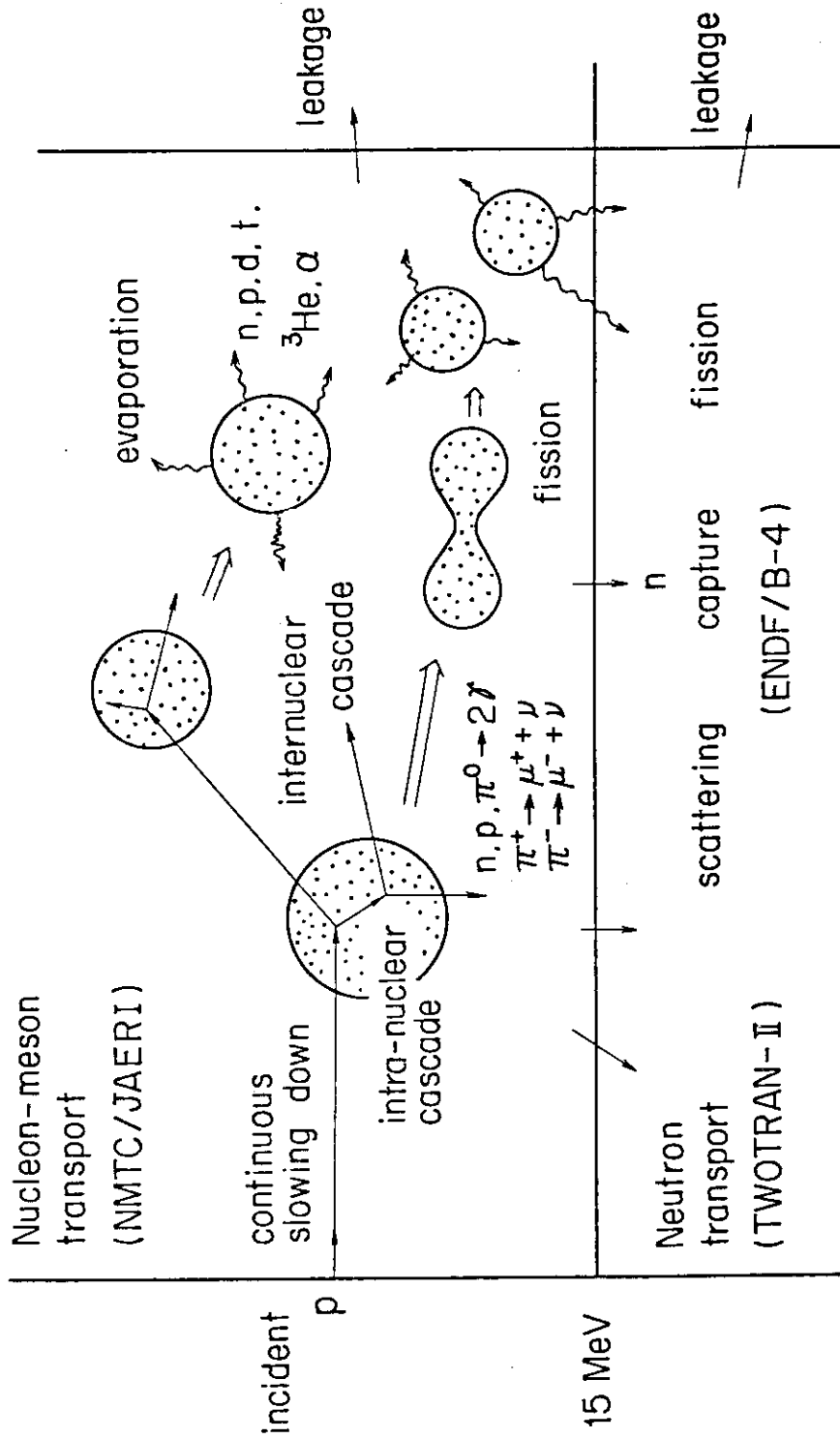


Fig. 2 Schematic illustration of nuclear reaction and nucleon transport processes

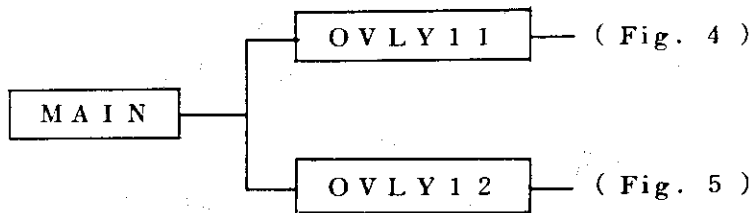


Fig. 3 Structure of main routine

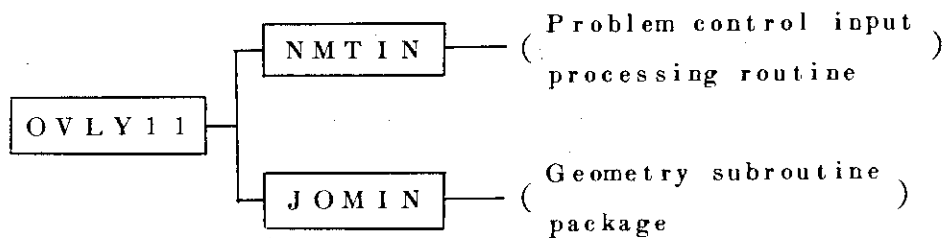


Fig. 4 Structure of OVLY11

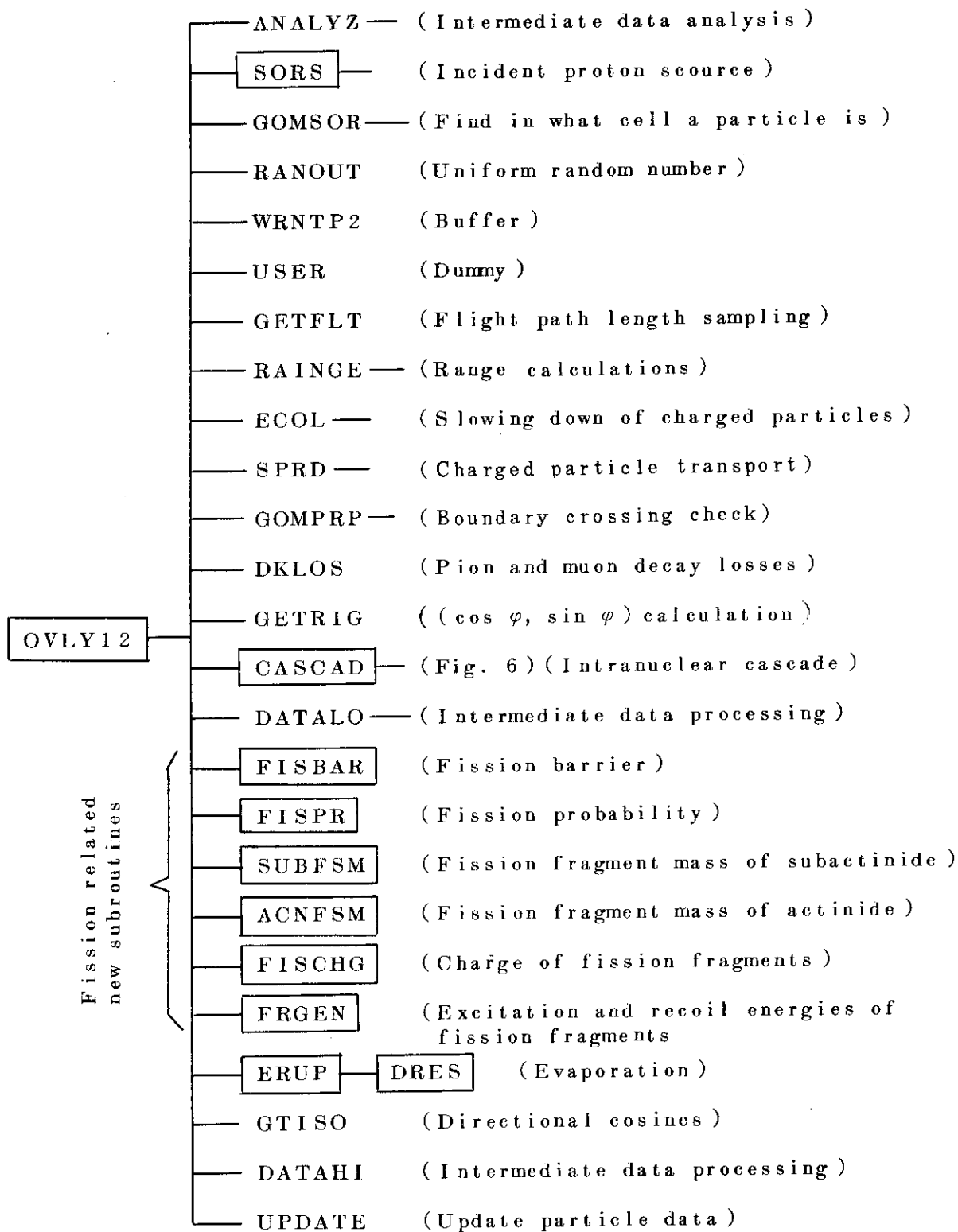


Fig. 5 Structure of OVLY12

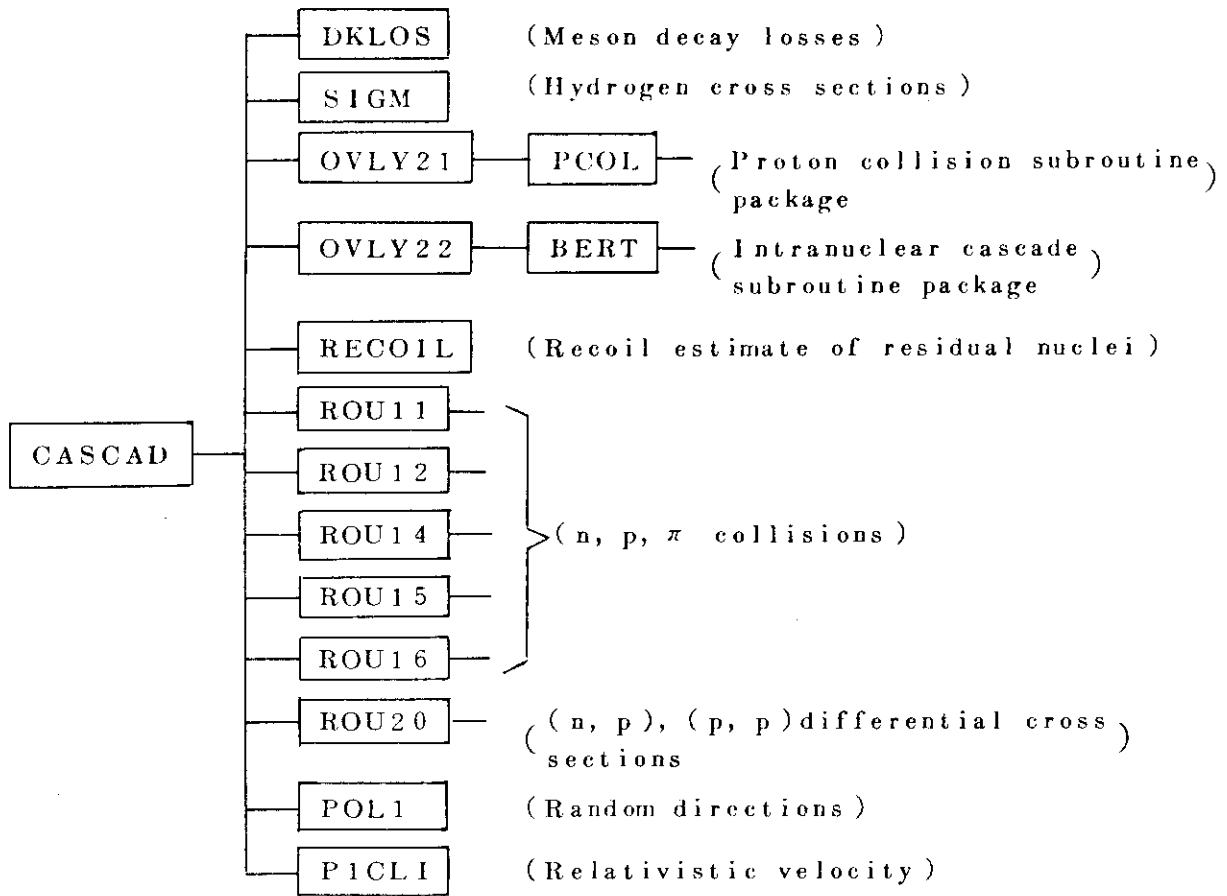


Fig. 6 Structure of CASCAD

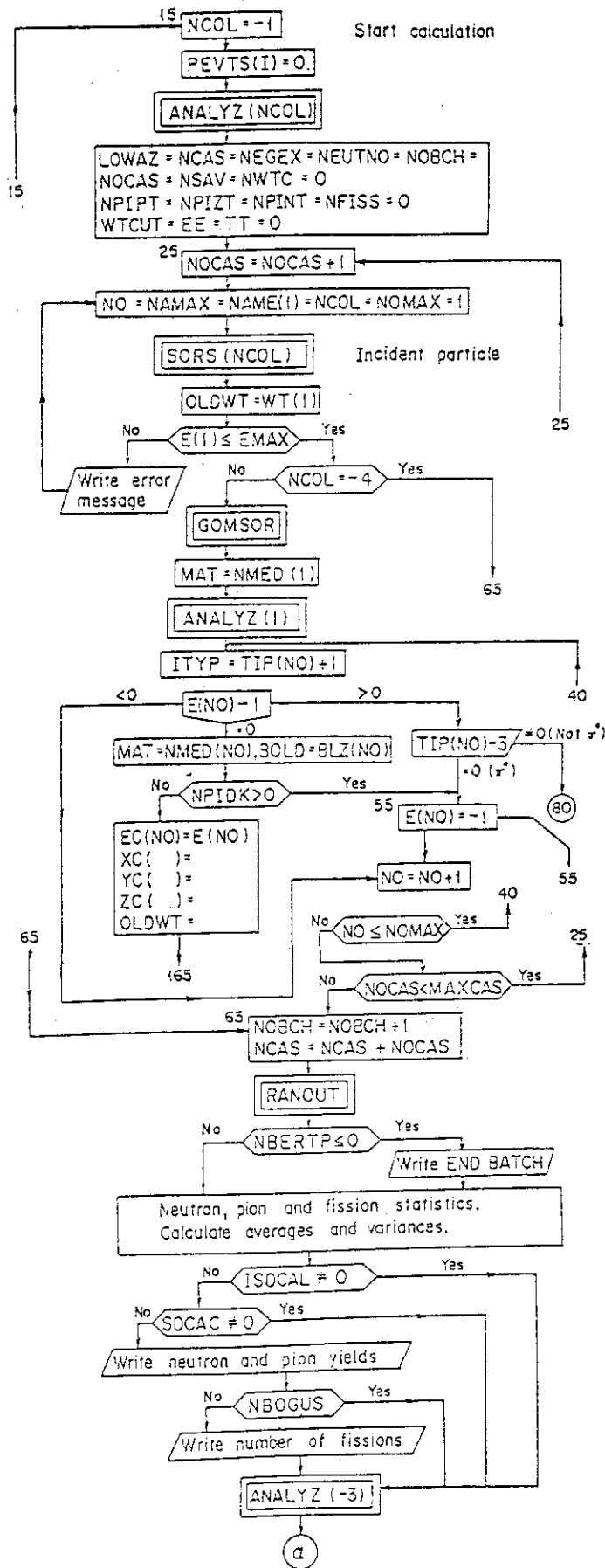


Fig. 7 Computation flow in OVLY 12

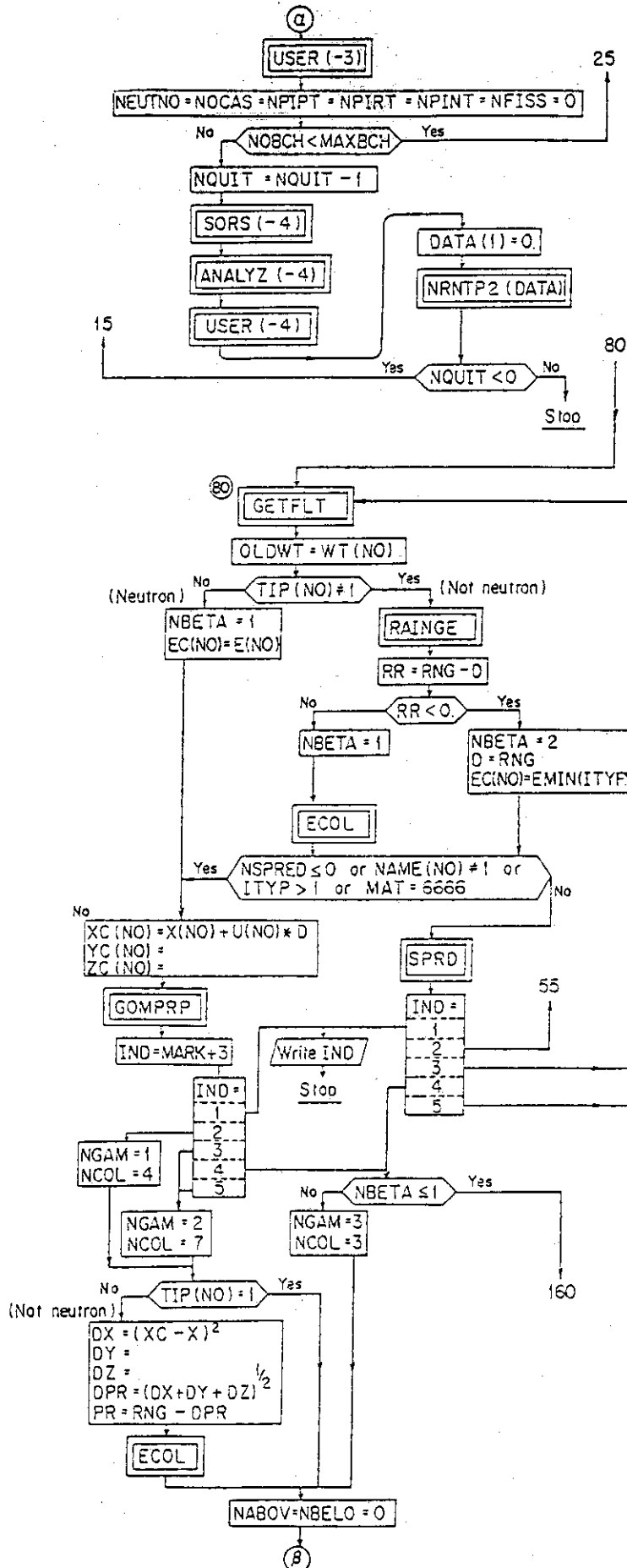


Fig. 7 (Continued)

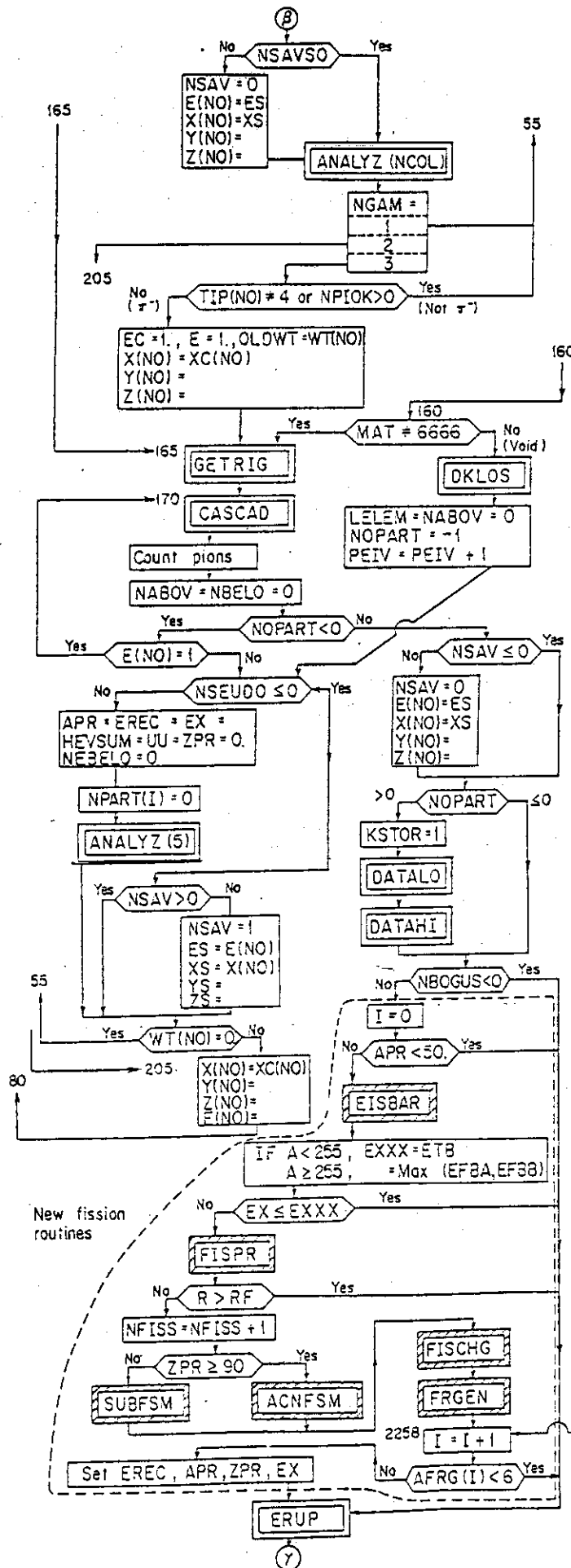


Fig. 7 (Continued)

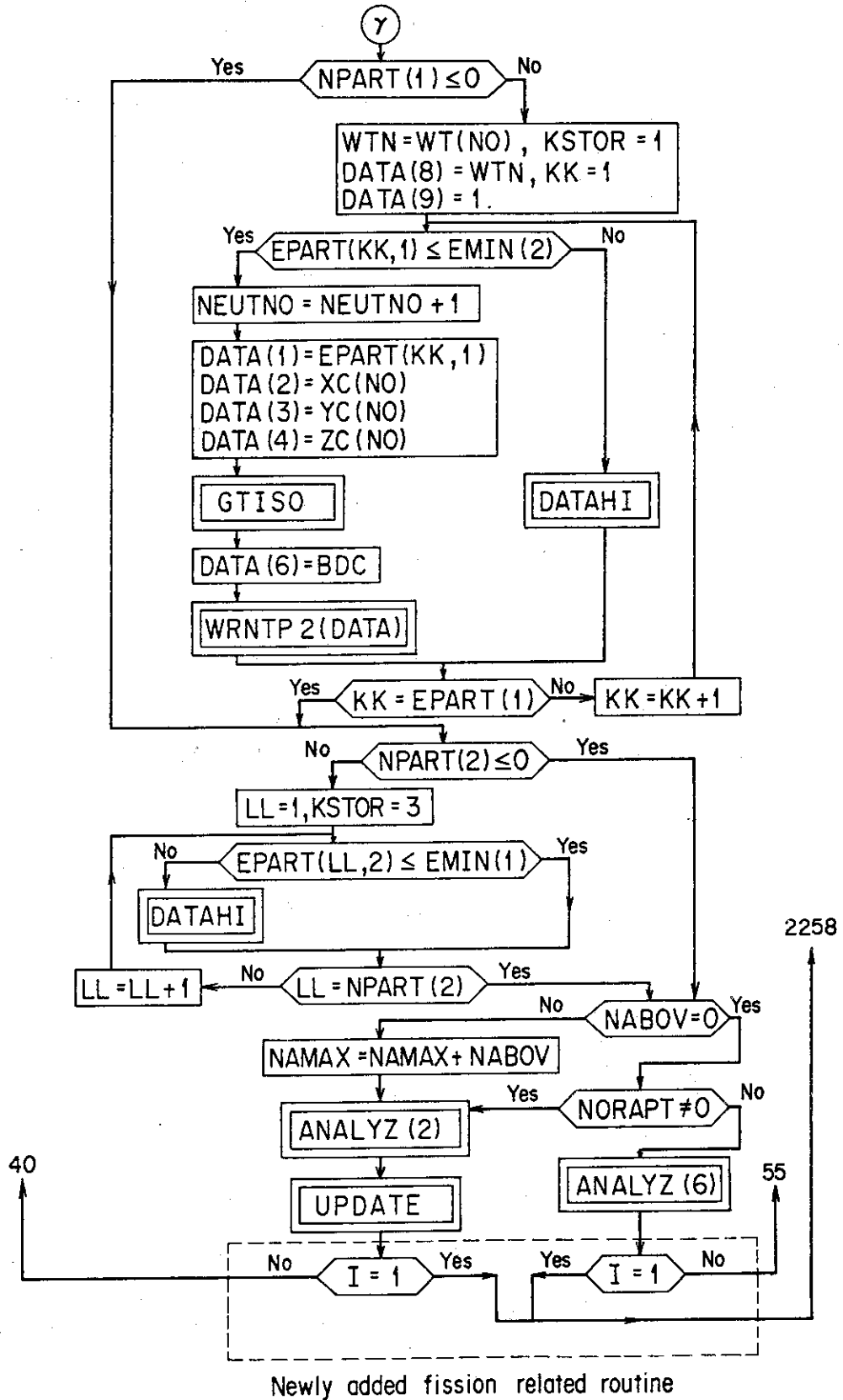


Fig. 7 (Continued)

ORSC(2500) : (Nuclear structure data)

A	R_1 R_2 R_3	ρ_1 ρ_2 ρ_3	U_1 U_2 U_3
1	$\underbrace{\hspace{2cm}}$ in cm	$\underbrace{\hspace{2cm}}$ in $10^{30}/\text{cm}^3$	$\underbrace{\hspace{2cm}}$ in MeV
}	original data		
239		
240			
}	supplemented data		
250		

TAPCRS(6343) : (Nucleon-Nucleon, Pion-Nucleon cross sections)

P0(I), P1(I), P2(I), I=1, 1001 : (Table of I_0, I_1, I_2 functions used in the evaporation probabilities)

GAR1(154) : (Shell and pairing energy correction data for neutron used in the mass formula)

GAR2(100) : (Shell and pairing energy correction data for proton used in the mass formula)

GAR3(253) : (Volume, Surface, Coulomb and exchange energy correction data used in the mass formula)

RMAS(300) : ($A^{1/3}$ -values)

ALPH(300) : (α -values used in the calculation of the inverse cross sections)

BET(300) : (β -values used in the calculation of the inverse cross sections)

Fig. 8 Contents of the NMTC/JAERI data file

3. 理論的基礎と計算モデル

3.1 N M T C の計算モデル

N M T C や H E T C は数人の研究者によって独立に開発されたコードを主要ルーチンとしてシステム化したという性格から、その理論的基礎と計算モデルについて統一的に記述された報告書は未だ出版されていないが⁽⁴⁾、最近 Armstrong らによる簡潔な解説が発表されている。⁽²⁴⁾ N M T C や H E T C はこの分野における研究の出発点となる重要な位置を占めているので、ここではできる限り統一的な立場から計算モデルのまとめを行うことにする。

3.1.1 核内カスケード

入射粒子から原子核をみると、円盤にみえるわけであるが、粒子の入射点は円盤上に一様分布しているとする。原子核は球形で、縮退したフェルミ気体であるとする。100 MeV 以上では、原子核内の核子の波長は核子間の平均相互距離より短くなるので、衝突過程としては2体衝突近似が精度良く成立つ。そこで陽子、中性子間の2体衝突を基本とし、さらにその過程で発生する π^+ , π^0 , π^- のパイ中間子をカスケード粒子に含める。したがって、第2章に記述してあるような核子、中間子に対する2体衝突断面積が基本データとして必要となる。核子・核子断面積には Bertini が編集したデータが用いられている。⁽²⁵⁾ パイ中間子の生成断面積は Sternheimer and Lindenbaum のアインバー・モデル⁽²⁶⁾ を用いて計算され、核子・核子衝突の場合は2個まで、パイ中間子-核子衝突の場合は1個までのパイ中間子発生が考慮されている。これらの場合、各々 3.5 GeV および 2.5 GeV 以上になると、より多くのパイ中間子発生を考慮する必要があり、このことが N M T C の適用可能なエネルギーの上限となっている。

陽子が原子核と衝突して、核内に侵入すると、陽子のエネルギーは核ポテンシャル・エネルギー分だけ増える。核内の個々の衝突事象において、散乱粒子のエネルギーと運動量は、相対論的動力学によってそれぞれの保存則が満足されるように定められるが、その際フェルミ統計に従ってその散乱はパウリの排他律で許されるかどうかをチェックする。つまり、散乱された核子のエネルギーがフェルミ・エネルギー以下であれば、その衝突は許されず、衝突はなかったとして、カスケード計算を続けるのである。核子のエネルギーが核ポテンシャル・エネルギーの絶対値より小さくなると、核子は核内に飛び出せずに核内に止まる。原子核から核子が飛び出す時は、核内における核子エネルギーからポテンシャル・エネルギー分を差引く。

(1) 核構造モデル

核子の核内カスケード計算を行うには核物質の構造を規定しておく必要がある。N M T C, N M T C / J A E R I および H E T C いずれのコードにおいても、原子核は、核子の密度分布、運動量分布およびポテンシャル・エネルギー分布の三つの分布のみで規定される。特定の核種に対するこれら分布の値は、データ・ライブラリのデータを用いて算出される。

(a)核子密度分布：厳密には、中性子と陽子の密度分布は同じではないが、その違いはわずか

なので、同じとして、Hofstadter の分布⁽²⁷⁾ を用いる。

$$\rho(r) = \frac{\rho_0}{e^{(r-c)/Z_1} + 1} \quad (3)$$

ここで、

$$\begin{aligned} c &= \rho \text{ が } \rho_0/2 \text{ になる } r \text{ の値} \\ &\approx r_1 A^{1/3}, \quad r_1 = 1.07 \times 10^{-13} \text{ cm}, \\ Z_1 &= 0.545 \times 10^{-13} \text{ cm}. \end{aligned}$$

Hofstadter の評価によれば、(3)式は多くの原子核に適用できる。

しかし、計算上は原子核を同心球殻領域に分割し、(3)式を階段関数で近似する⁽²⁵⁾ 各領域の外半径は次の関係から決められている。

$$\rho(r) = \alpha_i \rho(0), \quad (4)$$

ここで $\alpha_1 = 0.9$, $\alpha_2 = 0.2$, $\alpha_3 = 0.01$ 。

(b)運動量分布：核物質の構成員である中性子や陽子は絶対零度で縮退したフェルミ分布を持つと仮定する。すなわち、

$$f(p) = c_i p^2 \quad (5)$$

とする。ここで c_i は規格化因子で、(5)式の規格化を

$$\int_0^{p_F} f(p) dp = \text{領域 } i \text{ 内の中性子 (または陽子) の数 } N$$

とすると、

$$c_i = 3N / p_F^3$$

となる。 p_F はフェルミ・エネルギーに対応する運動量である。

(c)ポテンシャル・エネルギー分布：これも階段関数で近似する⁽²⁵⁾ 各領域のポテンシャル・エネルギーはその領域内の核子のフェルミ・エネルギーと結合エネルギーの和で与えられる。

Bertini による核内カスケード計算コードでは、結合エネルギーは全ての核種および全ての領域に対して一律に 7 MeV としてある⁽²⁵⁾。結合エネルギーは核種や核子によって異なるので、カスケードが終了した後の残留核の励起エネルギーを正しく求めるには、実際の値を用いる必要があるが、結合エネルギーの取扱いを変えると、核子が領域境界、すなわち運動量分布やポテンシャル・エネルギーの不連続面を通過する時、正しく保存則が成り立つように Bertini のプログラムを修正する必要があるため、一時 Schuttler がこの点についての改良を試み、うまく行かず中止した例はあるが⁽²¹⁾、この点について改良した試算ルーチンは未だ公表されていないようである。次節で述べる蒸発過程では、蒸発は比較的エネルギーの低い範囲での現象なので、結合エネルギーの取扱いは重要であり、そこでは一律 7 MeV というような近似は用いていない。

パイ中間子に対するポテンシャルは、パイ中間子と衝突する核子に対するものと同一であると仮定する。

(2) 飛程、衝突点、衝突反応の種類および衝突された粒子の運動量のサンプリング法

核内における衝突点と衝突反応の種類は同時に決定される。もし、反応が散乱であれば、散乱角が微分散乱断面積を用いて標本抽出される。もし反応がパイ中間子発生反応であれば、反

応生成物は重心系で等方に放出される。核内の座標系は、実験室系、標的粒子静止系と重心系を適宜用いる。

衝突に関与した粒子のエネルギーと運動量ベクトルが定まると、これらは一時記録され、その衝突点から衝突に関与した全ての粒子について粒子を出発させて、同じ計算を繰り返す。このようにしてカスケードが展開される。

衝突後の粒子のエネルギーが衝突のあった領域に対するフェルミ・エネルギーより小さい場合には、パウリの排他律によりその衝突は禁止されているので、衝突はなかったとする。衝突後の粒子のエネルギーが原子核外部場を基準にして測って切断エネルギー以下になったら、そのヒストリーは打切る。この切断エネルギーは、前に述べた15 MeVの切断エネルギーとは別物である。核内核子輸送切断エネルギーは、以後の衝突に対しては二体衝突近似が適用できない場合に、そこで計算を打切るために設定されたもので、原子核表面におけるクーロン・ポテンシャルの半分の値が採用され、これが全ての粒子に適用される。切断エネルギーとしては、陽子には全クーロン・エネルギー、中性子には零を用いるべきと思われるが、そうしないのは以下の理由による。クーロン・エネルギー以下の陽子でも中性子とは衝突でき、陽子エネルギーの大部分は中性子に与えられ、すると中性子はさらにカスケードを続けることができる。全クーロン・ポテンシャルを切断エネルギーとすると、このような過程を切捨ててしまうことになるので、便宜的に半分の値を用いているのである。

切断エネルギー位のエネルギーを持つ粒子の波長は、平均核内核子間距離位になり、計算モデルがその適用範囲外になる恐れもあるが、Bertiniによれば、切断エネルギーの値は結果にはあまり影響しないようである。

もし粒子が原子核から飛び出した時は、粒子の種類、エネルギー、方向餘弦、核内における最後の衝突点の座標が記録される。

以上おおよその計算手順を述べたが、ここで計算手法について具体的な説明をしておこう。ディラック常数 $h/(2\pi)$ と光速を1とする単位系を用いる。一般的な記号の定義をしておく。座標系は実験室系とする。

$$E_i = \sqrt{p_i^2 + m^2}, \text{ 入射粒子の全エネルギー}$$

$$\vec{p}_i, \text{ 入射粒子の運動量ベクトル}$$

$$m, \text{ 入射粒子の静止質量}$$

$$\rho, \text{ 入射粒子密度}$$

$$\vec{j} = \rho \vec{p}_i / E_i, \text{ 入射粒子流}$$

$$E_k, \text{ 入射粒子の運動エネルギー}$$

$$E = \sqrt{p^2 + M^2}, \text{ フェルミ海中の核子の全エネルギー}$$

$$\vec{p}, \text{ フェルミ海中の核子の運動量ベクトル}$$

$$M, \text{ フェルミ海中の核子の静止質量}$$

$$N(\vec{p}) d\vec{p}, \text{ 運動量空間における核子密度}$$

衝突される粒子が静止している座標系を静止系と呼ぶことにする。

$$\sigma(E'_k), \text{ 静止系における入射粒子のエネルギーが } E'_k \text{ の時の微視的断面積}$$

$\bar{v} = \bar{p}/E$, 静止系の速度

dR , $d\bar{p}$ あたりの反応率

Σ , 巨視的断面積

ここでパウリの排他律と相対論的效果を断面積で表現された確率分布によるサンプリング法の枠組みにどう組み込んでいるかを見ておく。

(a) パウリの排他律

断面積 σ^f を次式で定義する。

$$\sigma^f = \int_{\Omega_f} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$$

ここで Ω_f はフェルミ・エネルギー以上で核子が散乱する立体角である。従って σ^f は許容された衝突に対する断面積である。種類 ℓ の反応が許容される確率は $\sigma_\ell^f(E_k)/\sigma_\ell(E_k)$ である。

(b) 相対論的效果

静止系における許容される種類 ℓ の反応の割合は

$$dR_\ell^f = |\bar{j}'| \sigma_\ell^f(E_k) (N_\ell(\bar{p}) d\bar{p})'$$

で与えられる。 $\Delta x \Delta y \Delta z \Delta t$ はローレンツ変換に対して不変であるから、これは実験室における反応率でもある。実験室系における許容反応に対する巨視的断面積 Σ_ℓ^f を

$$dR_\ell(\bar{p}) = |\bar{j}| d\Sigma_\ell^f = dR_\ell^f \quad (6)$$

で定義する。

反応の種類と衝突された粒子の運動量を抽出するための分布関数 $g(\bar{p})$ は次式で与えられる。

$$g(\bar{p}) d\bar{p} = \frac{1}{K} dR(\bar{p}) = \frac{1}{K} \Sigma_\ell |\bar{j}'| \sigma_\ell^f(E_k) (N_\ell(\bar{p}) d\bar{p})' \quad (7)$$

ここで K は規格化因子で、

$$\begin{aligned} K &= \int dR(\bar{p}) = \Sigma_\ell \int |\bar{j}'| \sigma_\ell^f(E_k) (N_\ell(\bar{p}) d\bar{p})' \\ &= \Sigma_\ell \int |\bar{j}| d\Sigma_\ell^f = |\bar{j}| \Sigma_\ell \Sigma_\ell^f = |\bar{j}| \Sigma^f \end{aligned}$$

となる。

(7)式を実験室で表現する必要がある。相対性理論における4-ベクトルの変換式により、

$$\bar{j}' = \bar{j} + \frac{\bar{v}(\bar{j} \cdot \bar{v})}{v^2} \left(\frac{1}{\sqrt{1-v^2}} - 1 \right) - \frac{\rho \bar{v}}{\sqrt{1-v^2}} \quad (8)$$

の関係が成り立つ。

衝突される粒子の速度は入射粒子の速度に比べて、実験室系でははるかに小さいとして、静止系を重心系にすり変えると、次の関係が得られる。

$$\bar{v} = \bar{p}/E \quad (9)$$

従って、 $\sqrt{1-v^2} = \sqrt{(E^2 - p^2)}/E^2 = M/E$ となる。

一方、重心系における入射粒子の全エネルギーを E_i とし、 E_i に対応する運動量を \bar{p}_i

とすると,

$$E'_k = E'_i - m = \frac{E_i - \bar{p}_i \cdot \bar{v}}{\sqrt{1-v^2}} - m = \frac{E_i E - \bar{p}_i \cdot \bar{p}}{M} - m \quad (10)$$

となる。さらに,

$$\Delta x' \Delta y' \Delta z = \frac{\Delta x \Delta y \Delta z}{\sqrt{1-v^2}}$$

であるから,

$$[N(\bar{p}) d\bar{p}]' = N(\bar{p}) d\bar{p} \sqrt{1-v^2} = \frac{M}{E} N(\bar{p}) d\bar{p} \quad (11)$$

である。

(8)~(11)式の関係を用いれば、 $g(\bar{p})$ は実験室系の諸量から計算できる。ここで、次の関係により Σ^m を定義する。

$$\begin{aligned} \left(|\bar{j}'| \sigma_\ell(E'_k) \frac{M}{E} \right)_m &= \max \left(|\bar{j}'| \sigma_\ell(E'_k) \frac{M}{E} \right), \\ N_\ell^0 &= \int N_\ell(\bar{p}) d\bar{p}, \\ \Sigma_\ell^m &= \frac{1}{|\bar{j}'|} \left(|\bar{j}'| \sigma_\ell(E'_k) \frac{M}{E} \right)_m N_\ell^0, \\ \Sigma^m &= \sum_\ell \Sigma_\ell^m \end{aligned} \quad (12)$$

(c) 1回の衝突過程の計算手順

1. $\Sigma^m \exp(-\Sigma^m x)$ から x を標本抽出する。
2. Σ_ℓ^m / Σ^m の確率で、 ℓ の種類の反応を選定する。
3. 分布関数 $N_\ell(\bar{p}) d\bar{p} / N_\ell^0$ から運動量ベクトル \bar{p} を選定する。
4. 乱数 R が

$$R \leq |\bar{j}'| \sigma_\ell(E'_k) \frac{M}{E} / \left(|\bar{j}'| \sigma_\ell(E'_k) \frac{M}{E} \right)_m$$

であれば、 ℓ と \bar{p} を採用する。そうでなければ、 ℓ と \bar{p} を捨てて、1へ戻る。

5. エネルギー E'_k における反応 ℓ の角度分布から標本抽出を行い、次に個々の核子のエネルギーを計算する。

$$\sigma_\ell^i(E'_k) / \sigma_\ell(E'_k)$$

の確率によりパウリの排他律のチェックを行う。もし、衝突が許容されないならば、1へ戻る。 x の和が粒子の進んだ距離になる。

(d) 衝突後の粒子のエネルギーと運動量ベクトル

ステップ5.で必要なエネルギー計算をやや詳しく示しておこう。粒子1と2が衝突して粒子3と4ができたとする。重心系における衝突後の粒子のエネルギーを求めよう。

$$\bar{p}'_3 + \bar{p}'_4 = 0, \quad E' = E'_3 + E'_4 = E'_1 + E'_2$$

であるから、 $p = |\bar{p}'_3|$ として、

$$p^2 + m_3^2 = (E' - E'_4)^2 = (E')^2 + p^2 + m_4^2 - 2E'E'_4,$$

すなわち,

$$E'_4 = \frac{(E')^2 + m_4^2 - m_3^2}{2E'} \quad (13)$$

同様に

$$E'_3 = \frac{(E')^2 + m_3^2 - m_4^2}{2E'} \quad (14)$$

が得られる。

x, y, z 座標系を次の単位ベクトル $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$ により定義する。

$$\bar{p}'_1 = p_1 \bar{z}, \quad \bar{V} = \alpha \bar{x} + \beta \bar{y}, \quad \bar{p}'_1 \times \bar{V} = \delta \bar{y} \quad (15)$$

すなわち, $\alpha = \sqrt{V^2 - \beta^2}, \quad \beta = (\bar{p}'_1 \cdot \bar{V})/p'_1, \quad \delta = \alpha p'_1,$

$$\bar{x} = \frac{1}{\alpha} \bar{V} - \frac{\beta}{\alpha p'_1} \bar{p}'_1, \quad \bar{y} = \frac{1}{\alpha p'_1} \bar{p}'_1 \times \bar{V}, \quad \bar{z} = \frac{1}{p'_1} \bar{p}'_1 \quad (15')$$

重心系における散乱角を (θ, ϕ) とすると,

$$\begin{aligned} \bar{p}'_3 &= p'_3 (\sin \theta \cos \phi \bar{x} + \sin \theta \sin \phi \bar{y} + \cos \theta \bar{z}) \\ &= \bar{p}'_3 \left[\frac{1}{\alpha} \sin \theta \cdot \cos \phi \bar{V} + \left(\cos \theta - \frac{\beta}{\alpha} \sin \theta \cos \phi \right) \frac{\bar{p}'_1}{p'_1} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\alpha p'_1} \sin \theta \sin \phi (\bar{p}'_1 \times \bar{V}) \right] \end{aligned} \quad (16)$$

(16)式で, 散乱角は角度分布からの標本抽出により求まり, p'_3 は(14)式の E'_3 から $p'_3 = \sqrt{E'_3 - m_3^2}$ により計算され, \bar{p}'_3 が決まる。実験室系におけるエネルギー E_3 と \bar{p}_3 は, 4-ベクトルの変換公式により

$$\begin{aligned} E_3 &= \frac{E'_3 + \bar{p}'_3 \cdot \bar{v}}{\sqrt{1 - v^2}} \\ &= \frac{E}{E'} \left[E'_3 + p'_3 (\beta \cos \theta + \alpha \sin \theta \cos \phi) \right], \end{aligned} \quad (17)$$

$$\bar{p}_3 = \bar{p}'_3 + \frac{\bar{v} (\bar{p}'_3 \cdot \bar{v})}{v^2} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - v^2}} - 1 \right) + \frac{\bar{v} E'_3}{\sqrt{1 - v^2}} \quad (18)$$

の関係が成立つので, (16)と(17)式から求められる。ここで,

$$E = E_1 + E_2, \quad E' = E'_1 + E'_2$$

E_4 と \bar{p}_4 は

$$E_4 = E - E_3 \quad (19)$$

$$\bar{p}_4 = \bar{p}_1 + \bar{p}_2 - \bar{p}_3 \quad (20)$$

の保存則から決まる。

(3) 散乱角のサンプリング法

散乱粒子の運動方向や運動量ベクトルを決める場合の散乱角サンプリング法について述べる。パイ中間子の散乱の場合は特別に扱う。

(a) 核子-核子散乱：パイ中間子以外の散乱は次のようにして取る。重心系における微分散乱断面を

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = A + B\mu^m, \quad \mu = \cos\theta, \quad m = \text{integer} \quad (21)$$

の関数型で表現し、実験値にフィットさせて、 A , B , m をエネルギーの関数として求めておく。例えば、 $n-p$ 散乱で、 300 MeV までの中性子に対しては、

$$0 \leq E_n \leq 300\text{ MeV}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} (n-p) &= A_1 + B_1\mu^3 & 0 \leq \mu \leq 1 \\ &= A_1 + B_2\mu^4 & -1 \leq \mu \leq 0 \end{aligned} \quad (22)$$

が求められている。(21)を規格化するために Ω について積分して、

$$\begin{aligned} A_F &= \frac{A_1}{A_1 + B_1/4}, & B_F &= \frac{B_1}{A_1 + B_1/4} \\ A_B &= \frac{A_1}{A_1 + B_2/4}, & B_B &= \frac{B_2}{A_1 + B_2/4} \end{aligned}$$

とすると、前方散乱に対する規格化された確率は

$$A_F + B_F\mu^3$$

後方散乱に対しては

$$A_B + B_B\mu^4$$

となる。他のエネルギー範囲についても同様な方法を用いる。定数 A_F , B_F , A_B , B_B と m の値は 20 MeV 毎の数表として用意されている。

サンプリングは次の手順で行う。

1. 衝突する核子の相対運動エネルギーを計算する。 A_F , B_F , A_B , B_B , m の表から一次内挿により、このエネルギーに対応するこれら五つの定数の値を求める。
2. 乱数 R が $A_B + B_B\mu^m$ より小ならば、後方散乱、大ならば前方散乱とする。
3. 乱数を発生させ、これが A より小ならば、 $[0, 1]$ の一様分布から μ を抽出する。乱数が A より大ならば、 $(m+1)\mu^m$ から μ を抽出、すなわち、 $m+1$ 個の乱数から最大のものをとる*。
4. 前方散乱ならば μ の値は正のままにしておき、後方散乱ならば負にする。
5. 方位角 ϕ については対称性を仮定し、一様分布から抽出する。

* ステップ3が $f(\mu)d\mu = (A+B\mu^m)d\mu$; $0 \leq \mu \leq 1$ からのサンプリングになっていることについては、H.Kahn: "Applications of Monte Carlo", AECU-3259(1954)を参照されたい。

p-p 散乱については、相対運動エネルギー 500 MeV までは重心系で等方であると仮定されている。

(b) パイ中間子-核子散乱：この場合には微分散乱断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = A + B\mu + C\mu^2 \quad (23)$$

と表現できる。 π^+ -p 散乱, π^0 -p 弾性散乱, π^- -p 弾性散乱および π^- -p 荷電交換散乱に対して、20 MeV 毎に(a)の場合と同じように定数の値が表として用意されている。 μ の値は、乱数を R とすると、

$$R = \frac{\int_0^\mu (A + B\mu + C\mu^2) d\mu}{A + C/3} \quad (24)$$

を μ について解けば求められるが、0.05 間隔に対して μ の値が表になっている。従って、 μ の値を決めるには、乱数を発生させ、R と E についての内挿を行う。

(c) パイ中間子の発生を伴う場合：この場合の測定データはないので、適当な仮定を用いるしかないが、詳しくは(4)節を参照されたい。

(4) 断面積データ

原子核内のカスケード過程における衝突は n, p, π 間の二体衝突のみを考慮するので、計算でカスケードをシミュレートするには、次の諸反応に対する断面積データを用意しておく必要がある。これらのデータは TAPCRS としてデータ・ライブラリに収められているが、それらの素姓について以下解説しておく。

N は p または n, π は π^- , π^0 または π^+ であるとして、

- (N, N) 散乱
- (N, N) 1 π 生成
- (N, N) 2 π 生成
- (π , N) 弾性散乱
- (π , p) 荷電交換
- (π , N) 吸収
- (π , N) 1 π 生成

p-p 散乱断面積については、核子-核子散乱では 300 MeV 以下では弾性散乱のみと考えてよい。400 MeV ではパイ中間子の発生が多くなり、全断面積と弾性散乱断面積に差が出てくる。高エネルギーでは2個の中間子が発生するが 1.5 GeV では 1 π 発生断面積の約 1/10 である。

n-p 衝突でもパイ中間子の発生があるが、1.7 GeV になると、2個の π 発生が1個の π 発生より多くなる。

(5) 微分散乱断面積

(a) p-p 散乱：500 MeV までは p-p 散乱は重心系で等方であると仮定できる。

500~1000 MeV では測定値に Hess の半実験式：

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(p, p) = A + B\mu^3 \quad (25)$$

を用いる⁽²⁸⁾。ここで μ は散乱方位角の餘弦である。ここではクーロン効果は除かれている。パラメータAとBの値はRef. (25)で与えられている。

(b) n-p 散乱: Hess によって求められた半実験式を用いる。⁽²⁸⁾

$$0 \leq E_n \leq 740 \text{ MeV}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(n, p) = A_1 + B_1\mu^3 \quad 0 \leq \mu \leq 1 \quad (26)$$

$$0 \leq E_n \leq 300 \text{ MeV}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(n, p) = A_1 + B_2\mu^4 \quad -1 \leq \mu \leq 0 \quad (27)$$

$$300 \text{ MeV} \leq E_n \leq 740 \text{ MeV}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(n, p) = A_1 + B_3\mu^6 \quad -1 \leq \mu \leq 0 \quad (28)$$

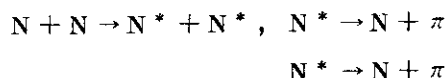
パラメータ A_1, B_1, B_2, B_3 の値は Ref. (25) に与えられる。

(c) π 発生を伴う N-N 散乱: パイ中間子の発生を伴う非弾性散乱断面積には Sternheimer and Lindenbaum のアイソバー・モデルによる理論計算値を用いる。⁽²⁶⁾ 原子核反応の場合とのアナロジーで、一種の複合核に似たものができるとする。すなわち、これを N^* で示し、アイソバーと呼ぶことにし、 π の発生過程を次のように二段階に分けて考える。物理的にはアイソバーは励起状態にある核子である。

(N, N) 1 π 発生:



(N, N) 2 π 発生:



(π , N) 1 π 発生:



中性子と陽子を同一種類の核子の異った荷電状態と考え、その核子は陽子、中性子の状態を持つとして、スピン演算子と同じ代数に従うアイソトピック・スピンを導入し、その z 成分が正であるのが陽子、負であるのが中性子の状態とみなす。 $T_z = 1/2$ (陽子), $-1/2$ (中性子) と対応させる。 π も同様に考えて、 $T_z = 1$ (π^+), 0 (π^0), -1 (π^-) と対応させる。そこで、アイソバー N^* は全アイソトピック・スピン $T = 3/2$, 全角運動量 $J = 3/2$ で定義されると仮定する。励起された核子状態は T_z の値で区別され、質量は同一であるが、 T_z の値の異なるアイソバーが定義される。アイソトピック・スピンの他に、アイソバーはその質量によっても規定される。

N-N 衝突で、1 個の N がアイソバー N^* に励起されたとすると、励起エネルギー (またはアイソバー質量 m_i) はエネルギー保存則に一致していろいろな値を取り得る。そこで、

アイソバーの励起エネルギー分布を $F(\bar{E}, m_i)$ とする。ここで \bar{E} は $N-N$ の重心系における全エネルギーである。 1π 発生および 2π 発生に対する微分断面積は次のように書くことができる⁽²⁶⁾。

$$\frac{d\sigma_s}{dm_1} = \text{const} \times F(\bar{E}, m_1) \sigma(m_1) a_s(\bar{\theta}) d\bar{\Omega} \quad (29)$$

$$\frac{d\sigma_d}{dm_1 dm_2} = \text{const} \times F(\bar{E}, m_1, m_2) \sigma(m_1) \sigma(m_2) dm_1 dm_2 a_d(\bar{\theta}) d\bar{\Omega} \quad (30)$$

(29)と(30)式で添字 s と d は各々 *single*, *double* を意味する。一方,

$$\sigma(m_i) = \text{const} \times |M_{m_i}|^2 \rho(m_i) \quad (31)$$

において $|M_{m_i}|$ はアイソバー形成に対する行列要素, $\rho(m_i)$ はアイソバー終状態の単位密度である。 $a_s(\bar{\theta})$ と $a_d(\bar{\theta})$ は, 重心系における散乱の方位角 $\bar{\theta}$ の関数である。二体分布 $F(\bar{E}, m_1, m_2)$ は,

$$F(\bar{E}, m_1, m_2) = \frac{\bar{p}_1 \bar{E}_1 \bar{E}_2}{\bar{E}} \quad (32)$$

とすることができる。ここで \bar{E}_1, \bar{E}_2 は重心系における核子 1, 2 の全エネルギー, \bar{p}_1 は運動量である。

(29)と(30)式から微分断面積の通常の変形式に変形すると, 次式の形になる。反跳核子の運動エネルギーを T_N とする。

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \sigma}{d\bar{T}_N d\bar{\Omega}_N} = \text{const} \times & \left[\int_{M_a}^{M_2} dm_2 \int_{M_a}^{M_{1,d}} \sigma(m_1) \sigma(m_2) F G_{N,1} dm_1 \right. \\ & \left. + k N \int_{M_a}^{M_{1,s}} \sigma(m_1) F(G_{N,1} + G_{N,2}) dm_1 \right] \quad (33) \end{aligned}$$

ここで,

$$M_a = m_p + m_\pi$$

$$M_b = \text{励起エネルギー} + M_a$$

$$M_{1,d} = \bar{E} - \min(m_2, M_b)$$

$$M_{1,s} = \min(\bar{E} - m_p, M_b)$$

$$k = 2N^* \text{ 生成と } N^* \text{ 生成率の比}$$

$$N = \int_{M_a}^{M_b} \sigma(m) dm$$

$$G_{N,1} = N^* \text{ の崩壊で生じる核子のエネルギー分布}$$

$$G_{N,2} = N + N \rightarrow N + N^* \text{ における励起されない方の } N \text{ のエネルギー分布}$$

発生するパイ中間子に対しては, (33)式と同じようにして, 次式が得られる。

$$\frac{d^2 \sigma}{d\bar{T}_\pi d\bar{\Omega}_\pi} = \text{const} \times \left[\int_{M_a}^{M_2} dm_2 \int_{M_a}^{M_{1,d}} \sigma(m_1) \sigma(m_2) F G_\pi dm_1 \right]$$

$$+ kN \int_{M_a}^{M_{1,s}} \sigma(m_1) FG_{\pi} dm_1, \quad (34)$$

ここで $G_{\pi}(m_1, \bar{T}_{\pi})$ は質量 m_1 のアイソバーから π が運動エネルギー \bar{T}_{π} で立体角 $d\bar{\Omega}_{\pi}$ 内に放出される分布関数である。

アイソバーの角度分布についてのデータはほとんどないので、NMT Cでは次の三通りのオプションを用意して利用者の選択にゆだねている。(1)等方、(2)等確率で真正面か真後、(3)50%は等方とし、50%は真正面か真後(等確率で)。アイソバーの崩壊は、アイソバーの静止系において等方と仮定する。

アイソバー・モデルの拡張はその後 Harp らにより行われ、 π の角度分布も計算されているが、⁽²⁹⁾ それらの成果は未だ NMT Cには取入れられていない。

(d) π -N 散乱 : 入射平面波とポテンシャル場によって散乱された後の平面波との位相のずれ (phase shift) を用いて散乱を記述する方法は量子論的散乱理論において良く知られているが、この方法を次の制限条件のもとで π -N 散乱に適用する⁽²⁵⁾。(a)力の及ぶ範囲は有限である。(b)アイソトピック・スピン T は良い量子数である。つまり T は反応の間不変である。

さらに Anderson らに従い、P 状態 (方位量子数 = 1) 以上の状態は散乱に寄与しないと仮定し、位相のずれは δ_{33} まで考慮する。 δ の添字のうち、最初のものはアイソトピック・スピンの 2 倍、後のものは全角運動量の 2 倍である。

微分断面積の位相のずれを用いた最終的な式は、例えば、 π^- -p 散乱に対しては次のようになる⁽²⁵⁾。次の式で、 K は重心系における波数に 2π をかけたもの、 δ_1 は S 状態 (方位量子数 = 0) に対する位相のずれで、 t はアイソトピック・スピンの 2 倍である。

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega}(\pi^-, p)_{\text{elastic}} = & \frac{1}{K^2} \left\{ \frac{1}{9} \left[6 + \cos 2(\delta_1 - \delta_2) - \frac{3}{2} \cos 2\delta_3 - 3 \cos 2\delta_1 \right. \right. \\ & + \cos 2(\delta_{33} - \delta_{13}) - 2 \cos 2(\delta_{11} - \delta_{13}) - \cos 2(\delta_{31} - \delta_{13}) \\ & \left. \left. - \cos 2(\delta_{11} - \delta_{33}) - \frac{1}{2} \cos 2(\delta_{31} - \delta_{33}) + \cos 2(\delta_{31} - \delta_{11}) \right] \right. \\ & + \frac{\cos \theta}{9} \left[13.5 + \frac{1}{2} \cos 2(\delta_{31} - \delta_3) + \cos 2(\delta_{11} - \delta_3) + \cos 2(\delta_{33} - \delta_3) \right. \\ & + 2 \cos 2(\delta_{13} - \delta_3) + \cos 2(\delta_{31} - \delta_1) + 2 \cos(\delta_{11} - \delta_1) \\ & + 2 \cos 2(\delta_{33} - \delta_1) + 4 \cos 2(\delta_{13} - \delta_1) - \frac{9}{2} \cos 2\delta_3 \\ & \left. \left. - 9 \cos 2\delta_1 - \frac{3}{2} \cos 2\delta_{31} - 3 \cos 2\delta_{11} - 3 \cos 2\delta_{33} - 6 \cos 2\delta_{13} \right] \right. \\ & \left. + \frac{\cos^2 \theta}{3} \left[8 + \frac{1}{2} \cos 2(\delta_{33} - \delta_{31}) + \cos 2(\delta_{12} - \delta_{31}) - \frac{3}{2} \cos 2\delta_{31} \right. \right. \\ & + \cos 2(\delta_{33} - \delta_{11}) + 2 \cos 2(\delta_{13} - \delta_{11}) - 3 \cos 2\delta_{11} \\ & \left. \left. + \cos 2(\delta_{33} - \delta_{13}) - 3 \cos 2\delta_{33} - 6 \cos 2\delta_{13} \right] \right\} \quad (35) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{d\sigma}{d\Omega}(\pi^-, p)_{\text{charge exchange}} &= \frac{1}{K^2} \left\{ \frac{1}{9} [3 - \cos 2(\delta_3 - \delta_1) + \cos 2(\delta_{33} - \delta_{11}) \right. \\
 &\quad - \cos 2(\delta_{31} - \delta_{11}) - \cos 2(\delta_{13} - \delta_{11}) - \cos 2(\delta_{33} - \delta_{31}) \\
 &\quad + \cos 2(\delta_{13} - \delta_{31}) - \cos 2(\delta_{13} - \delta_{33})] \\
 &\quad + \frac{\cos \theta}{9} [\cos 2(\delta_{31} - \delta_3) - \cos 2(\delta_{11} - \delta_3)] + 2 \cos 2(\delta_{33} - \delta_3) \\
 &\quad - 2 \cos 2(\delta_{13} - \delta_3) - \cos 2(\delta_{31} - \delta_1) + \cos 2(\delta_{11} - \delta_1) \\
 &\quad - 2 \cos 2(\delta_{33} - \delta_1) + 2 \cos 2(\delta_{13} - \delta_1)] \\
 &\quad + \frac{\cos^2 \theta}{3} [1 + \cos 2(\delta_{33} - \delta_{31}) - \cos 2(\delta_{13} - \delta_{31}) - \cos 2(\delta_{33} - \delta_{11}) \\
 &\quad \left. + \cos 2(\delta_{13} - \delta_{11}) - \cos 2(\delta_{13} - \delta_{33})] \right\} \quad (30)
 \end{aligned}$$

$\pi^+ - p$ や $\pi^0 - p$ 等の散乱に対しては、文献(28)を参照されたい。位相のずれの値については、Orearの値を利用する⁽³⁰⁾。

(6) 全断面積

(a) $p - p$ 衝突：高エネルギー領域においては、Kruse et al., Chamberlain et al. および Chen et al. のデータがある。また弾性散乱データとしては Smith et al. のデータがある。計算には、これらの実験データにフィットさせた Bertini の値を用いる。⁽²⁵⁾

80 MeV以下の低い領域については、Bertiniは Beretta et al. の微分散乱断面積から計算によって全断面積を求めた。⁽²⁵⁾ その際クーロン散乱効果は除かれている。その理由は、クーロン散乱では、非常に散乱角が小さく、散乱はなかったとして扱ってもよいからである。

(b) $n - n$ 衝突： $p - p$ 衝突でクーロン効果が無視されているので、 $n - n$ 散乱は $p - p$ 散乱と同じとして、断面積も同一のものを用いる。

(c) $n - p$ 衝突：高エネルギー領域においては、Chen et al. のデータがかなり広い範囲をカバーし、さらに Nedzel, De Juren and Moyerらのデータがある。計算には Bertini の値が用いられている。⁽²⁵⁾ エネルギーの低い領域に対しては BNL-325の値が用いられている。⁽³¹⁾

(d) $\pi - p$ 衝突：微分弾性散乱断面積に(33)~(35)式の関係があり、かつ荷電交換散乱に対する微分断面積は全て等しいので、 $\pi - n$ 衝突のデータは用意する必要はない。

$\pi^+ - p$ と $\pi^- - p$ に対する全断面積については、比較的エネルギーの低い領域では、Anderson et al., Lindenbaum and Yuan, Aahkin et al., らのデータがある。Bertini はこれらのデータに合わせたカーブを求めている。⁽²⁵⁾

$\pi^0 - p$ に対する値は $\sigma_1(\pi^-, p)$ の値から次の手順で計算する。⁽²⁵⁾

$$F_{-x} = \frac{\int \left[\frac{d\sigma}{d\Omega}(\pi^-, p)_{\text{exchange}} \right] d\Omega}{\int \left[\frac{d\sigma}{d\Omega}(\pi^-, p)_{\text{exchange}} + \frac{d\sigma}{d\Omega}(\pi^-, p)_{\text{elastic}} \right] d\Omega} \quad (37)$$

$$\sigma_{\text{exchange}}(\pi^0, p) = \sigma_{\text{exchange}}(\pi^-, p) = F_{-x} \sigma_t(\pi^-, p) \quad (38)$$

$$\sigma_t(\pi^0, p) = \frac{F_{-x}}{F_{0x}} \sigma_t(\pi^-, p) \quad (39)$$

$$\sigma_{\text{elastic}}(\pi^0, p) = \sigma_t(\pi^0, p) - \sigma_{\text{exchange}}(\pi^0, p) \quad (40)$$

F_{0x} は π^0-p 散乱に対する(37)式と同様な比率である。

(e) $\pi-p$ 吸収断面積: Metropolis らが理論的に次の式を導出している⁽³¹⁾。

$$\sigma_{\text{absorption}} = \frac{1}{\eta} \frac{7.8}{\eta} (0.14 + \eta^2) \quad (41)$$

ここで、 $\eta = kh / (2\pi m_\pi c)$, k = 波数, h = プランク常数, m_π = π の静止質量, c = 光速。

(40)式は π^-p , π^+p に対して成立つ。 π^0 に対しても, (41)式が適用できると仮定する。

3.1.2 粒子蒸発

励起された原子核からの粒子の蒸発過程のモンテ・カルロ法によるシミュレーション計算をコンピュータを用いて本格的に行ったのは, Dostrovsky et alが最初であり,⁽³²⁾ その後発表された Barashenkov et al. の計算,⁽³³⁾ Dresner の EVAP コード⁽¹⁹⁾ および Chen et al. の VEGAS コード⁽³⁴⁾ においても Dostrovsky らの方法が基本になっている。

Dresner のコードは ORNL で開発された NMTC コードの中にサブルーチンとして組み込まれているので, ここでは主として EVAP の方法を中心にしたまとめを行うことにする。

(1) 縮退したフェルミ気体の統計理論による定式化

(a) 粒子 x の蒸発確率: Weisskopf によれば, 励起状態にある複合核から運動エネルギー ϵ の粒子 x が放出される確率 P_x は次式で与えられる。

$$P_x = (2S_x + 1) m_x \epsilon \sigma_{cx}(\epsilon) \omega(E) \quad (42)$$

ここで,

S_x : 粒子 x のスピン

m_x : 粒子 x の質量

σ_{cx} : 逆反応, すなわち, 残留核にエネルギー ϵ の粒子が衝突して複合核 (compound nucleus) が形成される反応に対する断面積

E : 粒子 x を放出した後の残留核の励起エネルギー
 $= (\text{複合核の励起エネルギー}) - \epsilon - Q_x,$

Q_x = 粒子の結合エネルギー

$\omega(E)$: 励起エネルギー E の残留核のエネルギー単位密度

Hurwitz and Bethe によれば, $\omega(E)$ は次式によって与えられる。

$$\omega(E) = \omega_0 \exp \left[2 \sqrt{a(E - \delta)} \right] \quad (43)$$

ここで ω_0 は質量数 A と電荷数 Z に依存する量であるが, モンテカルロ計算では, P_x は P_p

／ P_n のように比の形でのみ用いられるので、 ω_0 の値は必要ない。 a は単位密度パラメータで、Dostrovsky et al., Barashenkov et al や Chen et al. (VEGAS コード) は、 a をパラメータとして扱い、 $a = A/10$, $A/20$ 等の値を用いており、 $a = A/20$ を用いると、中性子発生数は、 $a = A/10$ の場合より 10～20% 少なくなると報告されている⁽³⁵⁾。Dresner は a として LeCouteur の式を採用した⁽³⁶⁾ すなわち、

$$a = \frac{A}{B} \left(1 + Y \frac{d^2}{A^2} \right) \quad (44)$$

ここで、

$$d = A - 2Z$$

$$B \approx 8 \text{ MeV}, Y \approx 1.5$$

(43) 式中の δ は対エネルギー (pairing energy) と呼ばれる補正項である。偶-偶核では、全ての核子は同種の核子ともれなく対を組むことができ、他のタイプの核より安定である。従って、この効果を考慮するために、結合エネルギーに正の補正を加える。これが対エネルギーと呼ばれるものである。奇-奇核にはこの補正は行わない。 δ の値としては Z または N が 11 以上の原子核についての数値表を作られているので、それを利用する⁽³⁷⁾。 N や Z が 11 以下の核に対しては、Dresner の EVAP コードでは 0 の値が用いられていたが、これでは誤差が大きいとして、Guthrie の改訂版 EVAP では Peelle and Aebersold の数値表⁽³⁸⁾ の値が用いられている。これらの値は主ルーチン内に WAPS および WAP2 データ文として収められている。

(b) 逆反応断面積：中性子に対しては、Dostrovsky et al. は最初幾何断面積を用いたが、エネルギーが比較的低い範囲 (数 10 MeV 以下) ではエネルギー減少と共に、捕獲断面積が増加するので、後に彼らは次の実験式を用いた⁽³⁹⁾。

$$\sigma_{cn} = \alpha (1 + \beta / \epsilon) \sigma_g \quad (45)$$

ここで、

$$\alpha = 0.76 + 1.93 A^{-1/3}$$

$$\beta = (1.66 A^{-2/3} - 0.050) / \alpha$$

$$\sigma_g = \pi R^2; R = 1.5 \times 10^{-13} A^{1/3} \text{ cm}$$

$A^{1/3}$, α および β の値はデータ・ライブラリに RMASS, ALPH および BET として収められている。

荷電粒子に対してはクーロン障壁の効果を考慮する必要があり、Dostrovsky et al. は次の実験式を作成した。

$$\sigma_c = (1 + c_x) (1 - k_x V_x / \epsilon) \sigma_g, \quad \epsilon \geq k_x V_x \quad (46)$$

$$= 0 \quad \epsilon < k_x V_x$$

ここで、

V_x : 粒子 x に対するクーロン障壁

k_x : クーロン障壁の通り抜け効果に対する係数

c_x : fitting parameter

一般に k_x と c_x の値は Z に依存する。Dostrovsky らは、Shapiro⁽³⁹⁾ や Blatt and Weisskopf⁽⁴⁰⁾ が連続体理論 (continuum theory) を用いて計算した断面積に合うように k_x と c_x の値が定めた。陽子に対する k_p と c_p の値および α 粒子に対する k_α の値が Z について 10 毎に数値表として発表されており、重水素、三重水素等については次の c_p と k_p による関係式を仮定している⁽⁶⁸⁾。

$$c_d = \frac{1}{2} c_p, \quad c_t = \frac{1}{3} c_p, \quad c_x = 0 \quad (Z \geq 2)$$

$$k_d = k_p + 0.06, \quad k_t = k_p + 0.12, \quad k_{\text{He3}} = k_\alpha - 0.06$$

$$k_x = 1.00 \quad (A \geq 4)$$

クーロン障壁 V_x は次式で与えられる。

$$V_x = \frac{Z_x Z e^2}{R + R_x} \quad (47)$$

ここで、 Z_x は粒子 x の電荷数、補正因子 R_x については同じく Dostrovsky らにより数値表が作られている。

(e) 結合エネルギー：質量 A の原子核は Z 個の陽子と $(A - Z)$ 個の中性子からできていると考えられるが、これを単純に加えた質量は、 m_p, m_n を各々陽子、中性子の質量とすると、 $Zm_p + (A - Z)m_n$ となるが、原子核内ではこれらの粒子は相互に作用しあっているため、エネルギーは低くなる。この差 $M(A, Z)$ が結合の強さを表わし、これは超過質量と呼ばれる。一方、 $M(A, Z)$ の A と Z の関数としての半実験的表現を質量公式と呼んでいる。

粒子 x の結合エネルギー Q_x はこの質量公式を用いて次のようにして計算される。まず、粒子 x に次の番号を割り当てる。

1 = n, 2 = p, 3 = d, 4 = t, 5 = ^3He , 6 = α の 6 種の粒子が蒸発粒子として取扱われる。Dresner のレポートには、さらにこれに加えて ^6He から ^{10}Be まで、全部で 19 種の粒子が放出されるとしているが、コードの中で扱われているのは、 α までの 6 種である。 x の番号付けに対応して、

$$\text{FLA}(1) = 1, \quad \text{FLZ}(1) = 0, \quad \text{EXMASS}(1) = M(1, 0)$$

$$\text{FLA}(2) = 1, \quad \text{FLZ}(2) = 1, \quad \text{EXMASS}(2) = M(1, 1)$$

$$\text{FLA}(3) = 2, \quad \text{FLZ}(3) = 1, \quad \text{EXMASS}(3) = M(2, 1)$$

$$\text{FLA}(4) = 3, \quad \text{FLZ}(4) = 1, \quad \text{EXMASS}(4) = M(3, 1)$$

$$\text{FLA}(5) = 3, \quad \text{FLZ}(5) = 2, \quad \text{EXMASS}(5) = M(3, 2)$$

$$\text{FLA}(6) = 4, \quad \text{FLZ}(6) = 2, \quad \text{EXMASS}(6) = M(4, 2)$$

を定義すると、 Q_x は次の関係から計算できる。

$$Q(x) = M(A - \text{FLA}(x), Z - \text{FLZ}(x)) + \text{EXMASS}(x) - M(A, Z) \quad (48)$$

質量公式 (A, Z) については、測定データをまとめた Wapstra⁽⁴¹⁾, Huizenga⁽⁴²⁾ および Mattauch et al.⁽⁴³⁾ の数値表がある。これらの数値表に含まれていない核種につ

いては Cameron の計算式を用いる⁽³⁷⁾

Cameron の質量公式 (MeV 単位) は

$$M(A, Z) = 8.367A - 0.783Z + E_v + E_s + E_c + E_{ex} + S(Z, N) + P(Z, N) \quad (49)$$

であるが、ここでは ^{16}O の質量を規準とする単位が用いられている。Guthrie によって改良された EVAP コードでは ^{12}C の質量を規準とする単位に変換されている。すなわち、MeV 単位でその相違は次の通りである。

$^{16}\text{O} = 16 \text{ amu 単位系}$	$^{12}\text{C} = 12 \text{ amu 単位系}$
単位質量 = 931.145	単位質量 = 931.478
$m_n = 939.5124$	$m_n = 939.550$
$m_p = 938.7298$	$m_p = 938.767$

^{12}C 単位系を用いると、単位質量を m として、

$$\begin{aligned} (48) \text{ 式の第 1 項} + \text{第 2 項} &= (m_n - m)(A - Z) \\ &\quad + (m_p - m)Z \\ &= (m_n - m)A - (m_n - m_p)Z \\ &= 8.072A - 0.783Z = 8.072N + 7.289Z \end{aligned}$$

となる。これに対する補正として次の項目を考慮する。

体積エネルギー E_v は飽和エネルギーと対称エネルギーの和である。飽和エネルギーは核力の飽和性のため A に比例する。原子核が一番安定なのは $N = Z$ の時である。 N が Z に等しくないとき、対にならない粒子ができ、そのためエネルギーが高くなり、その大きさは $N - Z$ にだけ関係し、対称エネルギーと呼ばれる。Wigner によれば、これは $(N - Z)^2 / A$ に比例する。したがって、

$$E_v = \alpha \left[1 - \frac{\beta}{\alpha} \frac{(A - 2Z)^2}{A^2} \right] A \quad (50)$$

となる。ここで α, β はパラメータである。

表面エネルギー E_s は次のように考える。先ず核半径を中心の核子密度の半分になる半径と定義する。スタンフォードにおける電子散乱実験の解析から得られた実験式は

$$R = 1.112A^{1/3} \left[1 - \frac{0.62025}{A^{2/3}} \right] \times 10^{-13} \text{ cm}$$

である。表面エネルギーは当然核表面 $4\pi R^2$ に比例すると考えられる。さらに表面エネルギーは核外周部における対称性の乱れによると考えられるので、対称エネルギー項を含むべきである。したがって E_s を次のように書くことができる。

$$E_s = r \left[1 - \frac{\phi}{r} \frac{(A - 2Z)^2}{A^2} \right] \left[1 - \frac{0.62025}{A^{2/3}} \right]^2 A^{2/3} \quad (51)$$

ここで r, ϕ はパラメータである。

クーロン・エネルギー E_c は、

$$E_c = 0.779 \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}} \left(1 - \frac{1.5849}{A^{2/3}} + \frac{1.2273}{A} + \frac{1.5772}{A^{4/3}} \right) \quad (52)$$

クーロン交換エネルギー E_{ex} は原子核の陽子の運動の相関によるもので、次の式が Bethe and Bacher により得られている⁽³⁷⁾

$$E_{ex} = -0.4323 \frac{Z^{4/3}}{A^{1/3}} \left[1 - \frac{0.57811}{A^{1/3}} - \frac{0.14518}{A^{2/3}} + \frac{0.49597}{A} \right] \quad (53)$$

(50)と(51)に含まれるパラメータ α , β , γ と ϕ の値は、質量の測定値を用いた最小自乗解析により Cameron が求めている。すなわち、

$$\alpha = -17.0354 \text{ MeV}, \quad \beta = -31.4506 \text{ MeV}$$

$$\gamma = 25.8537 \text{ MeV}, \quad \phi = 44.2355 \text{ MeV}$$

(49)式の最後の二項は、殻構造補正 (shell correction) と対エネルギーである。これらは核ポテンシャル内の粒子軌道エネルギーと軌道内粒子の相互作用に依存する。S と P は Z および N のみの関数の和で書けると仮定する。すなわち、

$$S(Z, N) = S(Z) + S(N)$$

$$P(Z, N) = P(Z) + P(N)$$

関数 $S(Z)$, $S(N)$, $P(Z)$ および $P(N)$ の値は、 $Z, N \geq 11$ の核種については、Cameron により $M(Z, A)$ の実測値から求められている⁽³⁷⁾。前にも述べたように、 $Z, N \leq 11$ の核種に対する対エネルギーについては、Peelle and Aebersold の数値表がある⁽³⁸⁾。

$S(N) + P(N)$, $S(P) + P(N)$ の値は、各々 GAR1 および GAR2 として、データ・ライブラリに収められている。その他の補正項は一括して GAR3 として同じくデータ・ライブラリに収納されている。

(2) モンテカルロ法による蒸発過程の計算法

カスケード過程終了後に励起状態になっている原子核からの粒子の放出は前節でまとめた理論とデータを用いてモンテカルロ法で計算される。

蒸発が始まる前の原子核は A , Z および励起エネルギー U で定義される。この核から蒸発できる粒子の持ち得る運動エネルギーの全範囲について(41)式を積分し、粒子 x の全放出確率 O_x を求めると、次のようになる⁽³⁷⁾。

$$O_x = (2S_x + 1) m_x \int_{k_x V_x}^{U - Q_x - \delta} \epsilon \sigma_{cx}(\epsilon) \omega(U - Q_x - \epsilon) d\epsilon \quad (54)$$

もし $U \leq k_x V_x + Q_x + \delta$ ならば、 $O_x = 0$ とする。

54式の積分は解析的に実行できて、次のようになる。

中性子に対しては、

$$O_x = A^{2/3} \alpha \{ I_1(s) + \beta I_0(s) \} e^s \quad (55)$$

ここで α と β は(45)式で導入されたものであり、一方

* 文献(25)では R_x という記号が用いられているが、(47)式中の R_x とまぎらわしいので、 O_x を用いることにした。

$$s = 2 [a (U - Q_x - \delta)]^{1/2}$$

$$I_0(s) = \frac{1}{2a} (s - 1 + e^{-s})$$

$$I_1(s) = \frac{1}{8a^2} [2s^2 - 6s + 6 + e^{-s} (s^2 - 6)]$$

となる。a は単位密度パラメータである。荷電粒子に対しては、

$$O_x = \frac{1}{2} (2S_x + 1) m_x (1 + c_x) A^{2/3} I_1(s) e^s \quad (56)$$

$$s = 2 [a (U - k_x V_x - Q_x - \delta)]^{1/2}$$

となる。

(a) 蒸発粒子の種類決定：次式によって O_x を規格化し、改めて粒子 x が放出される確率 P_x を定義する。すなわち、

$$P_x = O_x / \sum_{x=1}^6 O_x \quad (57)$$

一様分布乱数 r を発生させ、次に

$$\sum_{x=1}^{n-1} P_x \leq r < \sum_{x=1}^n P_x$$

を満足する n を探す。 n は 1 から番号付けられた粒子番号に対応する。

(b) 蒸発粒子の運動エネルギー決定：Weisskopf によれば、蒸発粒子の運動エネルギー・スペクトルは次式によって与えられる。

$$N(\epsilon_x) d\epsilon_x = \frac{\epsilon_x - k_x V_x}{T_x^2} e^{-(\epsilon_x - k_x V_x)/T_x} d\epsilon_x \quad k_x V_x \leq \epsilon_x < \infty \quad (58)$$

ここで T_x は残留核の単位密度に依存する核物質温度に対応する量で、 $\epsilon_x - k_x V_x$ の平均値の $1/2$ に等しい。

指数分布を持つ乱数を二つ発生させる。これを r_1, r_2 とする。 $w = (1/2)(r_1 + r_2)$ として、 ϵ_x は次式によって計算する；

$$\epsilon_x = 2T_x w + k_x V_x \quad (59)$$

ここで T_x の値が必要であるが、これは 54 式を重み関数として、 $\epsilon_x - k_x V_x$ を平均して求める。Dresner によれば、 T_x は次のようになる。

中性子に対しては、

$$2T_x = [I_2(s) + \beta I_1(s)] / [I_1(s) + \beta I_0(s)] \quad (60)$$

荷電粒子に対しては、

$$2T_x = I_2(s) / I_1(s) \quad (61)$$

ここで、

$$I_2(s) = \frac{1}{4a^3} [s^3 - 6s^2 + 15s - 15] + \frac{e^{-s}}{8} (s^4 - 12s^2 + 15s)$$

$I_0(s)$ 、 $I_1(s)$ および $I_2(s)$ の値は、各々 s の 1001 点の値に対する (P_0, P_1, P_2) の数値としてデータ・ライブラリに収められている。

(c) 粒子 x が蒸発した後の残留核

粒子 x が運動エネルギー ϵ_x で蒸発した後の残留核の状態は、

$$\begin{aligned} A' &= A - A_x \\ Z' &= Z - Z_x \\ U' &= U - Q_x - \epsilon_x \end{aligned} \quad (62)$$

によって定義される。

Dresner は残留核の反跳を考慮しなかったが、Guthrie はこの効果が入るように EV-AP を改良した。反跳エネルギーの計算式にあらわれる記号の定義をしておく。

- \bar{v}_c : 蒸発前の原子核の実験室系における速度
- \bar{v}'_i : 蒸発粒子 i の重心系における速度
- \bar{v}'_i : 粒子 i が蒸発した後の原子核の重心系における速度
- M_r : 粒子 i が蒸発した後の原子核の質量
- M_i : 粒子 i の質量
- θ : 重心系における \bar{v}'_i と \bar{v}_c の間の角度

\bar{v}_c は分っており、 \bar{v}'_i と M_i は、この節の(a)と(b)で説明した方法により求まり、すると \bar{v}'_i は次式から計算できる：

$$v'^2_r = \left(\frac{M_i}{M_r}\right)^2 v'^2_i + v_c^2 + 2\left(\frac{M_i}{M_r}\right) v'_i v_c \cos(180 + \theta) \quad (63)$$

角度 θ については、 $\cos \theta$ を一様分布乱数で抽出する。

残留核の励起エネルギーは、蒸発粒子の他に残留核の運動エネルギーも差引いて、(63)式中の U' の代りに、次の U' から求められる：

$$U' = U - Q_i - \frac{1}{2} \left[M_r \left(\frac{M_i}{M_r}\right)^2 + M_i \right] v'^2_i \quad (64)$$

残留核が軽い場合には、残留核自身が蒸発粒子として取扱われる6種類の粒子のうちに含まれるものと同じものになることもある。この場合は、残留核も蒸発粒子として処理される。

3.2 高エネルギー核分裂

(1) 蒸発と核分裂の競合

核内カスケードが終了すると、後に励起状態にある原子核が残留核として残る。励起エネルギーが核分裂障壁より大きい場合には核分裂が起こる可能性があり、前節で示した蒸発過程と競合する。競合過程の計算法の概略は Fig.9 に、また OVL Y 12 パッケージ中の計算の流れは Fig.7 に示されている。質量数 $A \geq 225$ 以上の核種はアクチノイド核種として、核分裂障壁の二重構造データを用いるようになっている。

核分裂が起こるかどうかは、確率 P_f を用いて、一様乱数によって判断される。すなわち、

$$P_f = \frac{1}{1 + \Gamma_n / \Gamma_f}, \quad (65)$$

ここで Γ_n および Γ_f は、各々、中性子巾および核分裂巾であり、原子核の統計理論によれば、両者の比は次の式で与えられる。⁽⁴⁵⁾

$$\frac{\Gamma_n}{\Gamma_f} = \frac{4 A^{2/3} a_f (E - Q_n)}{K_0 a_n [2 a_f^{1/2} (E - E_f)^{1/2} - 1]} \times \exp[2 a_n^{1/2} (E - Q_n)^{1/2} - 2 a_n^{1/2} (E - E_f)^{1/2}], \quad (66)$$

ここで、

A = 核分裂を起こす原子核の質量,

E = 核分裂を起こす原子核の励起エネルギー,

Q_n = 中性子結合エネルギー,

E_f = 核分裂障壁,

$K_0 = h^2 / (8 \pi^2 m r_0^2) \sim 13 \text{ MeV}$, ⁽⁴⁶⁾

m = 中性子質量, r_0 = 核半径,

a_n = 中性子蒸発に対するエネルギー単位密度パラメータ,

a_f = 核分裂に対するエネルギー単位密度パラメータ。

蒸発過程においては中性子の他に $p, d, t, {}^3\text{He}$ および α の蒸発も考慮しているので、厳密には(66)式の分母第2項は

$$\sum_j \Gamma_j / \Gamma_f ; \quad j \text{ for } n, p, \dots, \alpha,$$

とするべきであろうが、 Γ_n に比較して他の Γ_j は小さいと考えられるので、(66)式を近似式として用いても良いと考えられる。

(66)式における最も重要なパラメータは a_n と a_f である。Barashenkovらは、 $a_f = a_n = a = A/10$ または $A/20$ と仮定しているが、NMTCでは a_n に対して(44)式で与えられるLeCouteurの式を用いているので、NMTC/JAERIでも、最初はLeCouteurの式を用い、 a_f/a_n にはVandenbosch and Huizengaによって編集された測定データを Z^2/A の1次式で近似した式を用いていたが、その後この方式を組込んだNMTC/JAERIで核分裂断面積の値を計算したところ、系統的に過大評価になることが分かった。核分裂断面積による a_n と a_f の評価作業の結果、現在は次の値を用いるようになっている。すなわち、

$$a_n = A/10, \quad (67)$$

$$a_f/a_n = a E^2 + b E + c, \quad E \text{ in MeV} \quad (68)$$

$$a = 1.10107 \times 10^{-7} / (\text{MeV})^2,$$

$$b = -2.12189 \times 10^{-4} / (\text{MeV}),$$

$$c = 1.11208.$$

(68)式はIl'inovらが150, 660および1,000 MeVの陽子に対する核分裂断面積データの解析から求めた a_f/a_n の値、各々、1.07, 1.02および1.01⁽⁴⁷⁾に2次関数を当てはめたも

のである。励起エネルギーが E_f に比較して非常に大きい場合には、原子核の殻構造はほとんど影響がないので、入射粒子が中性子の場合にも(67)と(68)式を用いてよい。実際このモデルで入射粒子が陽子、中性子の場合の核分裂断面積を計算すると、ほとんど両者に差がないことが筆者により確認されている。

核分裂障壁 E_f にみられる殻構造の影響は、核の励起エネルギーが非常に高い場合にはほとんどないと考えられるが、低い励起エネルギーの場合も考慮して、実験データを用いるようにしてある。 $A < 224$ の核種に対しては、Fig.10 のデータ⁽⁴⁷⁾ が採用されている。計算上は、 $A \leq 200$ には、Fig.10 中の太い実線、 $200 < A \leq 224$ には、細い実線にガウス分布を当てはめた次の近似式で与えられる。

$$\begin{aligned}
 & 5.2 \exp \left\{ - \left(\frac{A-90}{70.6b} \right)^2 \right\} \quad \text{for } A \leq 90, \\
 & 5.2 \exp \left\{ - \left(\frac{A-90}{91.7b} \right)^2 \right\} \quad \text{for } 90 < A \leq 200, \\
 & 2.3 \exp \left\{ - \left(\frac{A-210}{11.0b} \right)^2 \right\} \quad \text{for } 200 < A \leq 224,
 \end{aligned} \tag{69}$$

ここで b は規格化定数で、 $b^2 = 1 / \ln 2$ である。 $A \geq 225$ のアクチノイド核種には、Kupriyanov らの二重構造データ (Table 1)⁽⁴⁸⁾ がサブルーチン FISBAR 中のデータ文として与えられている。

(69)式の中性子結合エネルギー Q_n は、蒸発計算用サブルーチン DRES で用いられている(48)式で計算される。

(2) 核分裂片の質量数と電荷数のサンプリング法

核分裂が起こると判定された場合、核分裂片を決めなければならない。まず、2個の核分裂片の A と Z を決める必要がある。なお、核分裂の瞬間には粒子放出はなく、粒子は全て核分裂片から蒸発すると仮定する。

ある系のパラメータ x の最も確からしい値 \bar{x} のまわりのゆらぎは、統計理論によれば、系の他のパラメータを固定したとすると、次の確率で与えられる；

$$P_y(x) \propto \exp \left[- \frac{(x-\bar{x})^2}{\langle \Delta x \rangle^2} \right], \tag{70}$$

ここで、原子核の場合、その全エネルギーを W 、核物質温度を T とすると、

$$\langle \Delta x \rangle^2 = \left[\frac{T}{2} \frac{\partial^2 W}{\partial x^2} \Big|_{x=\bar{x}} \right]^{-1} \tag{71}$$

の関係が成立つことが Pik-Pichak and Strutinskii によって示されている。⁽⁴⁹⁾

Pik-Pichak and Strutinskii の核分裂の統計理論によれば、核分裂を起す親核の質量数と電荷数を、各々、 A_0 および Z_0 とし、核分裂片の質量 A が分っているとすると、核分裂片の電荷分布に対するパラメータに対して次の関係が成立つ。

$$\bar{Z} = -s Z_0 / 2 + (1+s) A Z_0 / A_0, \tag{72}$$

こゝで、

$$s \equiv \frac{1}{10} \frac{e^2}{r_0 \beta} \left(\frac{A_0}{2} \right)^{2/3} \left(1 - \frac{5}{8\rho} \right).$$

および、

$$\frac{1}{\langle \Delta Z \rangle^2} = - \frac{16\beta}{A_0 T} \left[1 + \frac{\phi}{\beta} \left(\frac{2}{A_0} \right)^{1/3} - 0.055 \frac{e^2}{r_0 \beta} A_0^{2/3} \right]. \quad (72')$$

(71)と(72)式は、Cameronの質量公式(48)式に基づいて導かれており、パラメータ β と ϕ はCameronの公式に用いられているものと同じものである。ただし、(70)と(71)式を導く際には、対エネルギー項 P と殻補正項 S は、寄与が小さい(たかだか1~2 MeV)として、無視されている。 r_0 は核半径を R とした時、 $R = r_0 A_0^{1/3}$ で与えられるパラメータ、 2ρ は二つ核分裂片が分離する瞬間における各々の重心間の距離で、2個の核分裂片の半径の平均値を \bar{r} とすると、 $\rho = 1.1 \bar{r}$ と近似できる⁽⁴⁹⁾

質量数についても、Pik-Pichak and Strutinskiiは \bar{A} と $\langle \Delta A \rangle^2$ に対する計算式を導いている⁽⁴⁹⁾すなわち、

$$\bar{A} = A_0 / 2, \quad (73)$$

$$\frac{1}{\langle \Delta A \rangle^2} = \frac{1}{2} T \bar{A}^2 (1.084 E_s + 1.894 E_c - 1.77 \bar{E} - 4.2 \times 10^{-5} A_0^{7/3}), \quad (74)$$

こゝで、 ΔE_s と ΔE_c は、各々、最初の原子核(球対称とする)と二つの核分裂片(球対称とする)の表面エネルギーおよびクーロン・エネルギーの差、 \bar{E} は分離時点での二つの核分裂片のクーロン相互作用エネルギーである。しかし、これら(73)式に含まれるパラメータの値を求めるには、核分裂片の A や Z が分っていなければならず、堂々巡りである。計算を実行するためにはこの堂々巡りを断ち切る必要がある。この問題を切り抜けるために、Atchisonは、アクチノイド類とそれより質量数の小さい核種の類(サブアクチノイド類)に分け、前者には実験式を作るべく努力しており、後者に対してはNeuzil and Fairhallのガウス分布式⁽⁵⁰⁾を用いている⁽⁴⁵⁾一方、Takahashiは、実験式には依存せず理論のみに立脚した計算を試み、Fongの核分裂の統計理論⁽⁵¹⁾をモンテカルロ計算に適した形に簡略化して用いている⁽⁹⁾ Barashenkovらの場合、具体的方法は不明である。いずれにしても、核分裂計算で最も方法論的に議論の余地が残るのは、この核分裂片の質量計算である。

ウランなどの重い核の核分裂の特徴は、励起エネルギーの低い場合(入射粒子のエネルギーがおおよそ100 MeV以下)には、核分裂片の質量数分布は二峰性の非対称分布をしているが、励起エネルギーが高くなると、単峰性の対称分布になることである。このような励起エネルギーに依存して分布形が変化するアクチノイド核種の場合に適用できる質量数分布式は未だ発表されていない。PbやBiなどのサブアクチノイド核種の核分裂では、質量数分布はガウス分布で精度良く表現できる⁽⁵⁰⁾

アクチノイド核種に対しては、次のような三重のガウス分布を仮定する。

$$P(A) = \frac{2}{\sqrt{\pi} b \langle W_{1/2} \rangle (2\alpha + \beta)} \times \left\{ \alpha \exp\left[-\frac{(A - \bar{A}_1)^2}{b^2 \langle W_{1/2} \rangle^2}\right] + \beta \exp\left[-\frac{(A - \bar{A}_2)^2}{b^2 \langle W_{1/2} \rangle^2}\right] + \alpha \exp\left[-\frac{(A - \bar{A}_3)^2}{b^2 \langle W_{1/2} \rangle^2}\right] \right\}, \quad (75)$$

ここで、 $\langle W_{1/2} \rangle$ はガウス分布の半値巾で、(75)式中の三つの分布に対して同じであると仮定されている。定数 b は規格化因子、 α と β は、入射粒子のエネルギーや核の励起エネルギーに依存し、各々のガウス分布のピーク値の相対的なエネルギー変化を与える。すなわち、 $\alpha > \beta$ となれば、二峰性分布、 $\alpha < \beta$ となれば、一峰性分布が得られる。入射粒子のエネルギーを E とし、 ^{239}Pu の α 粒子による核分裂に対する Grass らの測定値⁽⁵²⁾ から α と β の値を求めると、次の近似式が得られる。すなわち、

$$\alpha(E) = \begin{cases} \exp(0.5991E - 13.1869), & 6\text{MeV} < E \leq 25\text{MeV}, \\ \exp(0.08026E - 0.2149), & 25\text{MeV} < E \leq 40\text{MeV}, \\ \alpha(40\text{MeV}), & 40\text{MeV} < E, \end{cases} \quad (76)$$

$$\beta(E) = \begin{cases} \exp(0.7013E - 17.5325), & 6\text{MeV} < E \leq 25\text{MeV}, \\ \exp(2.2672\sqrt{E} - 11.3431), & 25\text{MeV} < E \leq 48\text{MeV}, \\ \beta(48\text{MeV}), & 48\text{MeV} < E. \end{cases} \quad (77)$$

α 粒子と ^{239}Pu の複合核 ^{243}Cm 中の α 粒子の結合エネルギーは約 6 MeV であるから、複合核の励起エネルギーを E^* とすると、

$$E = E^* + 6 (\text{MeV})$$

とすることができる。

半値巾 $\langle W_{1/2} \rangle$ については、Neuzil and Fairhall の実験式：⁽⁵⁰⁾

$$\langle W_{1/2} \rangle = E^* - E_f + 7 \quad (78)$$

が使えると仮定する。さらに中心値 \bar{A}_1 、 \bar{A}_2 および \bar{A}_3 に対しては、

$$\bar{A}_1 = \frac{2}{5} A_0, \quad \bar{A}_2 = \frac{A_0}{2}, \quad \bar{A}_3 = \frac{3}{5} A_0. \quad (79)$$

とすることができる。

他の核種や入射粒子が中性子や陽子の場合についての核分裂片の質量数分布についてのデータが乏しく、かつ一度複合核が形成された後の核分裂の起り方は入射粒子に依存しないと考えられるので、NMTC/JAERI では、(76)~(79)式が全てのアクチノイド核種 ($Z \geq 90$) に対して適用できるとしてある。

サブアクチノイド核種に対しては質量数分布は対称であり、

$$P(A) = \frac{2}{\sqrt{\pi} b \langle W_{1/2} \rangle} \exp\left[-\frac{(A - \bar{A})^2}{b^2 \langle W_{1/2} \rangle^2}\right] \quad (80)$$

を用いる。 $\langle W_{1/2} \rangle$ には(78)式を用いる。

ここで A のサンプリング法を考えよう。(76)式の分布はかなり複雑であり、この分布からラン

ダム・サンプリングをするのは、手続きが面倒であるし、またこの式の精度をチェックするに
 足る十分なデータもない現状では、多少精度上の問題は残るが、計算上の面倒を避けるために
 次の方法を採用することにした。

$\alpha(E^*) > \beta(E^*)$ のときは、 $\beta(E^*) = 0$ として、2峰性分布とする。この近似では、
 非対称核分裂を過大評価し、対称核分裂を過少評価することになる。乱数は2重正規乱数 x を
 発生させる。すなわち、

$$f(x) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \left[\exp\left\{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right\} + \exp\left\{-\frac{(x+\mu)^2}{2\sigma^2}\right\} \right], \quad (81)$$

$$\mu = \frac{\bar{A}_1 - \bar{A}_3}{2}, \quad \sigma = \frac{1}{\sqrt{2}} b \langle W_{1/2} \rangle.$$

核分裂片の質量数 A_i ($i=1, 2$) は乱数 x から、

$$A_1 = x + \frac{1}{2} (\bar{A}_1 + \bar{A}_3), \quad \bar{A}_2 = A_0 - A_1 \quad (82)$$

により決定される。

$\alpha(E^*) \leq \beta(E^*)$ のときは、 $\alpha(E^*) = 0$ として、単峰性分布とする。乱数には正規乱
 数 x を用いる。

$$f(x) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right\}, \quad (83)$$

$$\mu = \bar{A}_2, \quad \sigma = \frac{1}{\sqrt{2}} b \langle W_{1/2} \rangle,$$

$$A_1 = x, \quad A_2 = A_0 - A_1 \quad (84)$$

から A_1 が求められる。この場合には、81式の場合とは逆に、非対称核分裂が過少評価され、
 対称核分裂が過大評価される。全体として、81)と83)式による誤差が相殺して精度はそう悪くは
 ならないと期待されるが、その点については今後の検討が必要であろう。また81)と83)式に注意
 すると分るように、76)式の α と77)式の β は、計算には直接使われない。

核分裂片の質量数が定まると、71)と72)式を用いて、

$$P(Z) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \langle \Delta Z \rangle} \exp\left\{-\frac{(Z-\bar{Z})^2}{\langle \Delta Z \rangle^2}\right\} \quad (85)$$

から電荷数が定められる。すなわち、83)式で、

$$\mu = \bar{Z}, \quad \sigma = \langle \Delta Z \rangle / \sqrt{2}$$

とすると、正規乱数 x から、

$$Z_1 = x, \quad Z_2 = Z_0 - Z_1 \quad (86)$$

となる。

以上の計算法はランダム・サンプリング法なので、 $A_2 \leq 0$ 、 $Z_2 \leq 0$ のような非物理的な
 結果が得られることがある。このような場合には、もう一回計算をやり直し、再び $A_2 \leq 0$ や
 $Z_2 \leq 0$ になるような結果が得られた時には、核分裂は起らなかったとして処理するようにし
 た。

(3) 核分裂片の運動エネルギーと励起エネルギー

二つの核分裂片の質量数と電荷数が定まると、次にそれらの運動エネルギーと励起エネルギーを求めることができる。核分裂片の運動エネルギーは二つの核分裂片に分離する時のクーロン反撥力によって決められると考えてよい。すなわち、二つの核分裂片の運動エネルギーの和を E_k 、核半径を各々 r_1 、 r_2 とすると、

$$E_k = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r_1 + r_2} \quad (87)$$

厳密には、 E_k は核分裂を起す原子核の励起エネルギーや角運動量にも依存するが、その分の寄与は大きくはないとされているが、⁽⁴⁵⁾ 計算には全ての効果を含んだ次の実験公式を用いる方が便利である；⁽⁴⁵⁾

$$E_k = 0.1071 Z^2 / A^{1/3} + 22.2 . \quad (88)$$

個々の核分裂片の運動エネルギーは次のようにして定められる。二個の核分裂片の運動エネルギーを各々 p_1 、 p_2 とすると、保存則により、

$$\frac{1}{2A_1} p_1^2 + \frac{1}{2A_2} p_2^2 = E_k ,$$

$$p_1 + p_2 = 0$$

であるから、

$$p_1 = -p_2 = p$$

とすると、

$$p^2 = 2E_k A_1 A_2 / (A_1 + A_2)$$

となり、従って、

$$E_{k1} = \frac{A_2}{A_1 + A_2} E_k , \quad E_{k2} = \frac{A_1}{A_1 + A_2} E_k \quad (89)$$

が得られる。

次に決めなければならないのは核分裂片の励起エネルギーである。Cameron の質量公式 $M(A, Z)$ (49式) を用いて、核分裂に際して放出される全エネルギー E_t は次のように書ける；

$$E_t = M(A_0, Z_0) + E^* - M(A_1, Z_1) - M(A_2, Z_2) . \quad (90)$$

E_t の一部は E_k となり、残りが核分裂片の励起エネルギーの和 $E^{*'}$ になる。すなわち、

$$E^{*' } = E_t - E_k \quad (91)$$

次にこの $E^{*' }$ を二つの核分裂片にどう配分するかという問題が出て来る。原子核の統計理論によれば、励起エネルギーは質量数に比例するので、

$$\eta = A_1 / (A_1 + A_2)$$

として、

$$E_1^{*' } = \eta E^{*' } , \quad E_2^{*' } = (1 - \eta) E^{*' } \quad (92)$$

を核分裂片の励起エネルギーの値とする。

(4) 核外核子輸送

入射陽子のターゲットへの入射点の座標は一様乱数発生によって定められる。陽子も含めて、中性子やパイ中間子等の粒子の飛程 S は次の分布関数から選定される。⁽⁵³⁾

$$F(S) = \int_0^S k \Sigma_m [E_{k,m}(s, E_0)] e^{-\int_0^s k \Sigma_m [E_{k,m}(s', E_0)] ds'} ds \quad (93)$$

ここで、

E_0 = 飛行開始時の粒子 k の運動エネルギー、

$E_{k,m}(s, E_0)$ = 距離 S を飛行した後の粒子 k の運動エネルギー、

$k \Sigma_m$ = 粒子 k に対する物質 m の巨視全断面積。

中性子やガンマ線のように電荷を持たないオリジナルの $O5R$ と異なる点は、陽子のような荷電粒子は、原子核と直接衝突しなくても、物質中の原子の軌道電子との相互作用によりエネルギーを失うこと（イオン化損失）を考慮していることである。電荷を持たない粒子の場合には、 $F(S)$ は簡単になり、

$$F(S) = k \Sigma_m(S, E_0) e^{-\int_0^S k \Sigma_m(s', E_0) ds'} \quad (94)$$

でよい。

荷電粒子に対する飛行距離とエネルギー損失の関係はレンジという概念を用いて定められる。 $R(E_0, E)$ を荷電粒子が E_0 から E まで減速される間に進んだ距離とする。 R をレンジ (range) と呼ぶ。連続減速モデルによれば、 R は次式によって定義される；⁽⁶⁰⁾

$$R(E_0, E) = \int_E^{E_0} \langle dT/ds \rangle^{-1} dT, \quad E < E_0, \quad (95)$$

ここで $-dT/ds$ は単位長あたりのエネルギー損失であり、 $\langle \rangle$ は平均値を意味する。Barkas and Berger によると、平均エネルギー損失率は次式によって与えられる。すなわち、

$$-\langle dT/ds \rangle = \frac{4\pi Z^2 e^4}{m_e c^2 \beta^2} \left\{ \ell n \left[\frac{2m_e c^2 \beta^2}{(1-\beta^2) I} - \beta^2 \right] \right\} \sum_{i=1}^n N_i Z_i \quad (96)$$

ここで、

Z = 粒子の電荷数 (e 単位)

e = 電子の電荷 (静電単位)

m_e = 電子の質量 (gr 単位)

c = 光の速さ (cm/sec)

β = 粒子の速さ (c との比)

N_i = 核種 i の個数密度 (cm^{-3})

Z_i = 核種 i の電荷数

$$\ell n I = \sum_{i=1}^n N_i Z_i \ell n I_i / \sum_{i=1}^n N_i Z_i$$

I_i = 核種 i の励起エネルギー (電子状態の)

n = 物質中の核種の総数

陽子に対するレンジを R_p とすると、NMTCでは陽子切断エネルギー E_{LOP} から計算中
 に取扱う粒子の最大エネルギー E_{MAX} までを等レザジー分割した E_i についてレンジ・エネ
 ルギー表としてテーブル化されたものを用いている。

荷電パイ中間子に対しては R_p から次の関係を用いて換算する。

$$R_\pi(E_0, E) = \frac{m_\pi}{m_p} R_p \left(\frac{m_p}{m_\pi} E_0, \frac{m_p}{m_\pi} E \right) \quad (97)$$

ここで π は π^+ または π^- を意味するとする。荷電ミュー中間子についても同様の関係を用いる。

(1)式による飛跡のサンプリングは具体的には次の手順で行う。

1. T を標本抽出される飛程, M を ${}_k\Sigma_m$ の上限とする。 $i = 1, z_0 = 0$ とする。
2. $\int_0^X M e^{-Mx} dx, 0 \leq X$ から x_i を抽出する。
3. $\int_0^R dr, 0 \leq R \leq 1$ から r_i を抽出する。(一様乱数)
4. $z_i = z_{i-1} + x_i$ を計算する。
5. $r_i \leq {}_k\Sigma_m / M$ ならば, $T = z_i$ とする。

そうでなければ, $i = i + 1$ と, ステップ2へ戻る。

M は粒子 k と物質 m の種類によって異なり,

$$M_{k,m} = {}_k\Sigma_D(E_k) + {}_k\Sigma_{m,H}^* + \sum_{n=1}^{L_m} \Sigma_{m,n}^* \quad (98)$$

で与えられる。ここで番号 k は粒子と次のように対応している。

$$k=0 = \text{陽子}, 1 = \text{中性子}, 2 = \pi^+, 3 = \pi^0, 4 = \pi^-, 5 = \mu^+, 6 = \mu^-$$

パイ中間子とミュー中間子の飛行中の自然崩壊は物質に吸収されて失われるのと同じ扱いで処
 理する。すなわち,

$${}_k\Sigma_D(E) = \text{崩壊断面積} (\text{cm}^{-1}), k = 2 \sim 6$$

$$E_k = {}_k\Sigma_D(E) \text{ が最大となるエネルギーの値}$$

$${}_k\Sigma_{m,H}^* = N_{m,H} \times {}_k\sigma_H^*$$

$$N_{m,H} = \text{物質 m 中の水素の個数密度}$$

$${}_k\sigma_H^* = \text{水素の微視的全断面積の最大値} (\text{cm}^2)$$

$$L_m = \text{水素を除いた物質 m 中の核種の数}$$

$$\Sigma_{m,n}^* = N_{m,n} \times \sigma_n^*, n = 1 \sim L_m$$

$$N_{m,n} = \text{核種 n の個数密度}$$

$$\sigma_n^* = \pi (r_n^*)^2$$

$$r_n^* = \text{実効原子核半径} (\text{cm}) \text{ で, 次式から決める。}$$

$$\rho_n(r_n^*) = 0.01 \rho(0)$$

$$\rho_n(r) = \text{Hofstadter の核内陽子電荷密度分布}$$

ステップ5の条件は ${}_k\Sigma_m(E) / M_{k,m}$ の確率で満足され, $1 - {}_k\Sigma_m(E) / M_{k,m} \equiv {}_k\Sigma_m^p(E) / M_{k,m}$ の確率で満足されない。そこで ${}_k\Sigma_m^p$ を擬似反応全断面積 (total c.s. for pseudo nuclear event) と呼ぶ。⁽⁵³⁾

粒子 k が物質 m 中のどの核種と衝突するかは, 次の確率分布から抽出される。

$$\frac{{}_k \Sigma_D^*(E)}{M_{k,m}(E)}, \frac{{}_k \Sigma_{m,H}^*}{M'_{k,m}(E)}, \frac{{}_k \Sigma_{m,1}^*}{M'_{k,m}(E)} \dots, \frac{{}_k \Sigma_{m,Lm}^*}{M_{k,m}(E)} \quad (9)$$

ここで、

$$M'_{k,m}(E) \equiv M_{k,m} - {}_k \Sigma_D(E)$$

で、(9)式の確率の総和は勿論1である。飛程内の粒子の崩壊は統計的重みに $M'_{k,m}(E)/M_{k,m}$ を乗じて計算される。水素との衝突があったと判定された場合、(9)式の確率は真の衝突確率の最大値なので、更にその衝突は真の衝突かどうかを ${}_k \Sigma_{m,H}(E)/{}_k \Sigma_{m,H}^*$ の条件付き確率を用いて判定する。

このようにして、飛程が定まると、次にその飛程内に媒質の境界を通り抜けたか、荷電粒子の場合は切断エネルギー以下に減速されたかをチェックする。もし、内部境界を横切った場合は、境界横断時点のエネルギー、座標、方向等が記録され、次の媒質中の飛程を算出する。もし媒質の外部へ出てしまったり、切断エネルギー以下になった場合は、その事象を記録し、そのヒストリーの計算は終了し、次のヒストリー計算に移る。切断エネルギー以下に減速された π^+ は直ちに μ^+ と中性微子に崩壊するとする。 π^- については、 μ^- と ν に崩壊する場合と吸収されてしまう二通りのケースがオプションとなっている。物質密度が高い場合は、吸収として取扱えばよい。

このようなチェックの後、物質内の衝突点と衝突核種が定まると、原子核内のカスケード計算を行う。

3.3 超ウラン核種の取扱い

入射粒子のエネルギーが核内核子のフェルミ・エネルギーよりはるかに大きい場合には、殻構造等の核の微細構造の影響は無視でき、核内カスケードや核分裂および粒子蒸発は単に中性子数 N と陽子数 Z のみに依存すると考えられるので、超ウラン核種についても特別な新しい計算法は考えず、 $A \leq 239$ の場合と同じように取扱い。 $A \geq 240$ 以上の核種をNMTCCで扱えるようにするには、核種の数が変わったことに伴いDimensionやCommon文の修正および若干のプログラムの修正の他、データ・ライブラリを既に収納されている $A \leq 239$ 以下の核種に対するデータと首尾一貫した形で拡張する必要がある。新たに追加すべきデータは、第2章で述べたように、CRSCに収められている核半径、核子密度、フェルミ・エネルギーである。既に収納されているデータを分析して、新しいデータは次のようにして作成した。

核の最外周半径(すなわち R_3)は $r_0 A^{1/3}$ で与えられるが、データ・ライブラリでは、 $A = 238$ や 239 の場合 $r_0 = 1.475 \times 10^{-13}$ cmとなっているので、 $A \geq 240$ でもこの値を用いた。

核子密度分布は次のようにして定めた。Kikuchi-Kawaiらによると、(3)式中の ρ_0 は次の式で与えられる。⁽⁵⁴⁾

$$\rho_0 = \frac{1.8}{1 + \frac{\pi^2 d^2}{R^2}} \times 10^{38} \quad \text{nucleons/cm}^3,$$

ここで, $R = 1.1 \times 10^{-13} A^{1/3} \text{ cm}$,
 $d = 0.57 \times 10^{-13} \text{ cm}$.

したがって,

$$\rho_0 = \frac{1.8 \times 10^{38}}{1 + 2.6501109/A^{2/3}} \quad \text{nucleons/cm}^3 \quad (100)$$

となる。(100)式から ρ_0 を求め、データ・ライブラリ中の ρ_1 の値との比をとると,

$$\frac{\rho_0(A)/\rho_1(A)}{\rho_0(A-1)/\rho_1(A-1)} = 1.0042$$

とほぼ一定値が得られる。そこで $A \geq 240$ に対しては,

$$\frac{\rho_0(A)}{\rho_1(A)} = 1.0042^{(A-239)} \times \frac{\rho_0(239)}{\rho_1(239)}, \quad (101)$$

として、 $\rho_0(A)/\rho_1(A)$ の値を求め、一方(100)式から $\rho_0(A)$ の値を出し、両者の値から $\rho_1(A)$ の値を定めた。さらに ρ_2 と ρ_3 を求めるには、厳密には(3)式の積分をしなければならぬが、今のところ精度の高い計算を行う必要はないので、ここでは次のような簡単な近似計算を行った。データ・ライブラリに収納されているデータは

$$\rho_2(A)/\rho_1(A) = 0.556$$

$$\rho_3(A)/\rho_1(A) = 0.062$$

とほぼ一定になっているので、先に定めた ρ_1 にこれらの数を掛けて ρ_2 と ρ_3 の値とした。

次にフェルミ・エネルギー・パラメータ U_1 について次のようにした。原子核内の中性子と陽子のフェルミ・エネルギーは、各々、次の式によって与えられる。⁽⁵⁵⁾

$$E_F^{(n)} = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m_n r_0^2} \left(\frac{N}{A}\right)^{2/3}, \quad (102)$$

$$E_F^{(p)} = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m_p r_0^2} \left(\frac{Z}{A}\right)^{2/3}.$$

ここで m_n , m_p は各々中性子および陽子の質量である。(102)式から $E_F^{(n)}$, (2)式からデータ・ライブラリの U_1 の値を用いて $E_1^{(n)}$ を求め、両者の比をとると、 $A \leq 239$ では,

$$E_1^{(n)}(A, N)/E_F^{(n)}(A, N) = 1.618$$

とほぼ一定値になっている。そこで $A \geq 240$ に対しても、(102)式から求めた $E_F^{(n)}$ に上記の値を掛け、これを $E_1^{(n)}$ とし、さらにこの値を $(A-Z)^{2/3}$ で割って U_1 の値とした。 U_2 と U_3 を求めるには、厳密には Woods-Saxon 型の分布関数⁽⁵⁵⁾の積分をしなければならないが、簡単のために、次のようにした。密度分布パラメータの時と同じように、 U_1 と U_2 および U_3 の比をとってみると、 $A \leq 239$ に対しては、平均して

$$U_2(A)/U_1(A) = 0.67626 \quad ,$$

$$U_3(A)/U_1(A) = 0.15653$$

となっている。したがってこれらの値を上記の U_1 に掛けて各々の値とした。これらのデータは Table 2 にまとめられている。

他のデータについては、 $A \leq 250$ の範囲では追加の必要はない。

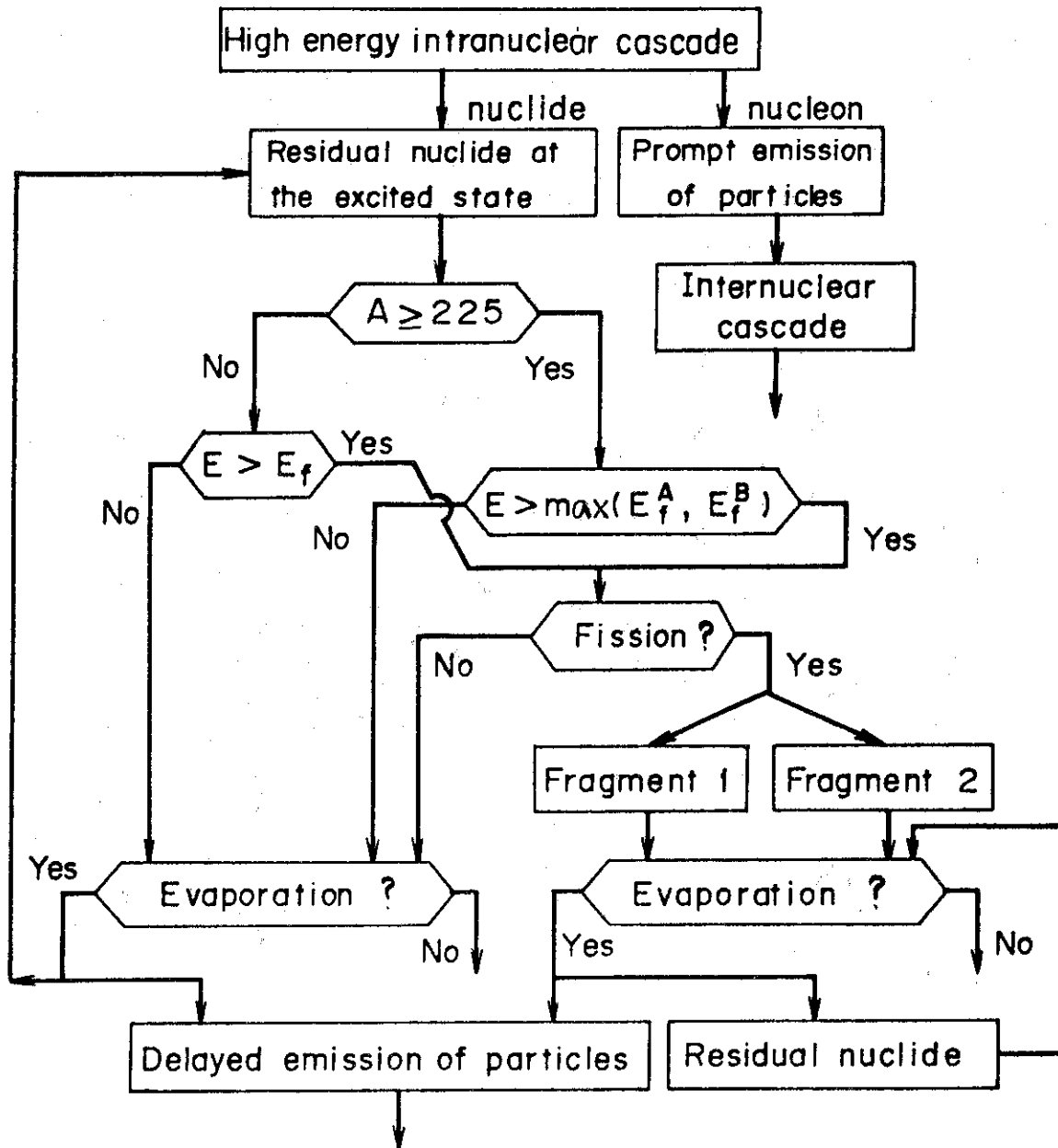


Fig. 9 Computational scheme and flow of spallation and fission reactions

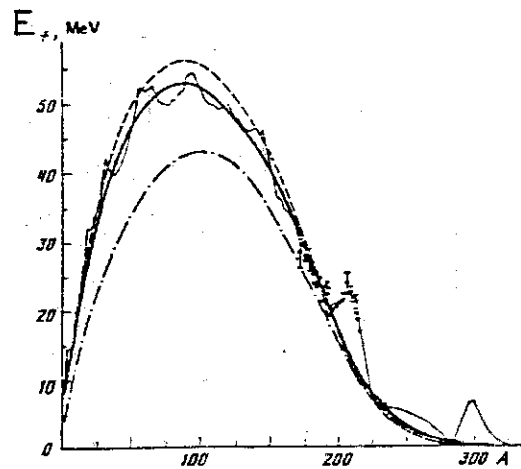


Fig. 10 Fission barrier heights⁴⁷⁾

The solid curves are calculations with (thin line) and without (thick line) shell corrections based on the parameters of Swiatecki et al.

The dashed and dash-dotted curves are calculations with the Pauli-Ledergerber and Krappe-Nix parameters, respectively, without shell corrections.

Table 1 Double-humped fission barrier heights (MeV)⁴⁸⁾

Element	A	E_f^A	E_f^B	Element	A	E_f^A	E_f^B	
Ra	225	5.69	7.89	Np	233	5.69	5.21	
	226	5.50	7.68		234	6.10	5.69	
	227	5.08	7.30		235	6.02	5.68	
	228	5.07	7.34		236	6.171	5.926	
Ac	326	5.69	7.35		237	5.96	5.79	
	227	5.42	7.14		238	6.17	6.08	
	228	5.26	7.04		239	5.815	5.79	
	Th	227	5.45		6.58	Pu	237	6.25
228		5.59	6.79		238		6.22	5.39
229		5.42	6.68		239		6.40	5.65
230		5.48	6.80	240	6.16		5.48	
231		5.45	6.84	241	6.17		5.46	
232		5.41	6.86	242	5.94		5.41	
233		5.29	6.79	243	5.92		5.52	
234		5.24	6.80	244	5.71		5.32	
Pa	230	5.57	6.26	245	5.67		5.34	
	231	5.45	6.21	Am	239		6.40	4.87
	232	5.65	6.48		240	6.59	5.15	
	233	5.48	6.38		241	6.34	4.98	
U	231	5.67	5.75		242	6.44	5.16	
	232	5.79	5.95		243	6.09	4.89	
	233	5.97	6.20		244	6.26	5.13	
	234	5.92	6.23		245	5.82	4.77	
	235	5.91	6.29		246	5.92	4.94	
	236	5.83	6.28		247	5.37	4.45	
	237	5.89	6.40		Cm	241	6.56	4.50
	238	5.65	6.23	242		6.45	4.38	
	239	5.63	6.26	243		6.53	4.54	
	240	5.42	6.12	244		6.41	4.50	
				245		6.54	4.72	
			246	6.32		4.57		
			247	6.32		4.65		
			248	6.10		4.50		
			249	5.89		4.36		
			250	5.48		4.02		

Table 2 Supplemented nuclear structure data

A	Nuclear radii (10^{-13} cm)	Nucleon density parameters (10^{30} / cm^3)	Nucleon potential parameters (MeV)
240	5.456 7.413 9.166	7.434 4.137 4.611	1.631 1.103 .2553
241	5.463 7.424 9.179	7.403 4.121 4.592	1.626 1.100 .2545
242	5.471 7.434 9.192	7.378 4.104 4.574	1.621 1.096 .2537
243	5.478 7.442 9.204	7.348 4.088 4.556	1.617 1.094 .2531
244	5.486 7.455 9.217	7.319 4.072 4.538	1.613 1.091 .2525
245	5.493 7.464 9.229	7.289 4.055 4.319	1.608 1.087 .2517
246	5.501 7.475 9.242	7.260 4.039 4.501	1.604 1.085 .2511
247	5.509 7.485 9.255	7.230 4.022 4.483	1.600 1.082 .2504
248	5.516 7.495 9.267	7.202 4.006 4.465	1.595 1.079 .2497
249	5.523 7.506 9.280	7.173 3.990 4.447	1.591 1.076 .2490
250	5.531 7.515 9.292	7.144 3.974 4.429	1.587 1.073 .2484

4. コードシステムの使用法および入力データ

このコードシステムは単独で用いることもできるし、またファイル22をカタログして、磁気ファイルに計算結果を記録しておく、ヒストリー・テープ解析用コードNMTA⁽⁵⁶⁾で入射粒子、反応の結果生じた粒子の空間分布やスペクトル、生成核種の空間分布や総量等が求められる。一方、ファイル12をカタログして、磁気ファイルに保存しておく、これを中性子源として中性子輸送計算コードANISN、TWOTRAN-IIやMORSE-CGに計算を連結することができる^{(3),(4)}。

ANISNやTWOTRAN-II用の中性子源分布を求める時には、NMTC/JAERIでの内部空間メッシュとANISNやTWOTRAN-IIでのメッシュは同一である必要はなく、外部境界のみ一致していればよい。NMTAで衝突密度法によって粒子の空間分布を求める時には、NMTC/JAERIとNMTAの内部メッシュは同じである必要はないが、境界通過法で空間分布を求める場合には、その境界面はNMTC/JAERIで定義されていなければならない。

NMTC/JAERI入力データ

A. 問題設定データ

1. Format (8A10), タイトル・カード。
2. Format (8A10), タイトル・カード。
3. Format (Z16), 初期乱数。初回計算の時にはブランクにしておく。継続計算を行う時にはFinal random number (出力データ)を入力する。
4. Format (3E10.4, 4I10)
 - a. EMAX, 入射粒子のエネルギー (MeV)。陽子と中性子に対しては, 3500 MeV以下, パイ中間子に対しては, 2500 MeV以下でなければならない。
 - b. ELOP, 陽子に対する切断エネルギー (MeV)。
 - c. ELON, 中性子に対する切断エネルギー (MeV)。ELOP=ELON=「ANISNやTWOTRAN-IIによる計算の上限のエネルギー」とする。
 - d. MXMAT, 物質領域の数。1 ≤ MXMAT ≤ 16。
 - e. MAXCAS, 1バッチ計算における入射(源)粒子の数。
 - f. MAXBCH, バッチ計算回数。
 - g. N1COL, このデータが追加された理由不明。0としておいて何ら支障はない。
5. Format (6I10)
 - a. NQUIT, 繰返し計算に対する印。
 - b. NEUTP = 23
 - c. NBERTP = 21
 - d. NPOWR2 = 11, レンジの数値表におけるエネルギー群数のlog₂値。

e. NPIDK, π^- の取扱いに関するオプション。

≤ 0 ならば, π^- としての反応を考慮する。

> 0 ならば, 崩壊として取扱う。

f. NHSTP = 22 .

6. Format (2E10.4, 4I10)

a. ANDIT, 核子・核子衝突におけるアイソバー (84式に続く説明を参照されたい) の角度分布についてのオプション。

0. , 50%等方, 50%前方。

1. , 100%等方。

2. , 100%前方。

b. CTOFE = 0.

c. NBOGUS, 蒸発計算上のオプション。

< 0 , 蒸発計算をしない。

> 0 , 蒸発の前に励起エネルギーから反跳エネルギーを差引く。

= 0, 反跳エネルギー補正をしない。

d. NSPRED, > 0 ならば, 陽子ビームのクーロン力による拡がり を考慮する。

e. NWSPRD, > 0 ならば 入射陽子のトラジェクトリーをヒストリー・テープに書く。

f. NSEUDO, > 0 ならば, 全ての擬似散乱の記録をヒストリー・テープに書く。

B. 物質領域定義データ

MXMATの数のカード7と8のセットが必要。

7. Format (E10.4, I10)

a. 物質内の水素密度 (10^{24} atoms/cm³)。

b. NEL, カード8でデータを与える核種の数。 (≤ 10)

8. Format (3E10.4)

NEL枚数必要。

a. 電荷数。

b. 質量数。 ($6 \leq A \leq 250$)

c. 個数密度 (10^{24} atoms/cm³)。

C. 幾何形状設定データ

実体系の一番外側にボイド領域を定義する必要がある。この便宜的に設定された外側ボイド領については, そのサイズをカード10の表面データで指定する必要はない。

9. セル・カード

セルの数だけの枚数が必要。

a. セルの通し番号。Format (I5)

b. Bカードで定義される物質領域の番号。Bでデータを与えた順番で物質領域の番号は定義される。Format (I2)

c. 計算上使用されないダミー・データだが、形式的に b 1. としておく。b はブランク。ボイド領域に対しては、データ b. と c. が入るコラムに 6 6 6 6 を与える。

d. セルの定義データ。Format (Free)

先ず 1 コラム以上の b。

次にカード 10 で定義される境界面の番号。データ a. で定義されたセルがこの境界面の下側または左側にある場合には、- 符号をつける。

次に、をつけてこの境界面を共有する隣接セルの番号を列記する。セル番号の間には、. を入れる。

以上のデータを 1 セットとして、データ a. のセルの全ての境界面に対して列記する。

境界面が反射面である場合には、元のセルへ戻るようにデータを与えれば良い。すなわち、境界面番号の次にデータ a. のセル番号を書く。

一つのセルに対するデータが 7 2 コラム以上になり、カードが 2 枚以上になる時には、2 枚目以降はコラム 6 から書き始め、その際先頭のデータを、で始めないように注意する。

ブランク・カード。セル・データが全て与え終わったら、最後にブランク・カードを一枚つける。

10. 表面カード

境界面の数だけの枚数が必要。

a. 境界面を定義する表面の番号。Format (15)。

b. 一つ以上の b をおいて、表面の種類を定義する Fig. 1 1 の Mnemonic の欄に示された記号。

c. 一つ以上の b をおいて、表面を定義する方程式の係数の値を Fig. 1 1 に示された順に与える。(cm)。

ブランク・カード。境界面データが全て与え終わったら、最後にブランク・カードを一枚つける。

11. インポートランス・カード

セルが体系の内側にあるか、外側にあるかを指定する。0. を与えると、そのセルは外側にあるとされ、そのセルに入った粒子は再び体系内に戻らず、洩れとして処理される。セル・カードの順番にセルの数だけ値を与える。内側のセルには 1. を与える。

a. b b b I O

b. たとえば、1. b 1. b 1. b 1. b, 7 2 コラムまで。2 枚目以降は、6 コラム目から 1. b 1. b 0. b 0. のように書く。

ブランク・カード。最後にブランク・カードを一枚つける。

D. 入射粒子源データ

12. 源の形状カード。Format (15)

1 円柱(円面も含む)。

2 角柱(長方形も含む)。

13. 源のサイズ・カード。Format (8F103)

円柱の場合

- a. R O, 円柱の半径。(cm)
- b. Z O, 円柱の Z 軸上の下限 (cm)
- c. Z 1, 円柱の Z 軸上の上限。(cm)
円の場合には, Z 1 = Z O とする。
- d. E 0, 入射粒子のエネルギー。(MeV)
- e. T I P O, 入射粒子の種類
 - 0., 陽子,
 - 1., 中性子,
 - 2., π^+ ,
 - 3., π^0 ,
 - 4., π^- 。
- f. T L, タイム・リミット(無効データ)。
- g. D I R E C, 入射粒子の方向。
 - 1., +z 軸方向。
 - 1., -z 軸方向。

4角柱の場合

- a. X 0 } 長方形の x 座標 ($X 0 \leq X 1$)。
- b. X 1 }
- c. Y 0 } 長方形の y 座標 ($Y 0 \leq Y 1$)。
- b. Y 1 }
- e. Z 0 } 長方形の z 座標 ($Z 0 \leq Z 1$)。
- f. Z 1 }
- g. E 0。
- h. T I P O。
- i. T L。
- j. D I R E C。

以上が NMTC/JAERI を使用する際に必要な入力データの全てである。幾何形状入力データにエラーがあった場合には, 詳細なエラー・メッセージがプリントされるので, 訂正する上で大いに助けになる。具体的な入力データ例は付録 1 に与えられている。またプリント出力例は付録 2 に示されている。

Mnemonic	Type (Equation)	Coefficients in Order of Entry
P	$Ax + By + Cz - D = 0$	A, B, C, D
PX	$x - D = 0$	D
PY	$y - D = 0$	D
PZ	$z - D = 0$	D
S \emptyset	$x^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0$	R
S	$(x-\bar{x})^2 + (y-\bar{y})^2 + (z-\bar{z})^2 - R^2 = 0$	$\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, R$
SX	$(x-\bar{x})^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0$	\bar{x}, R
SY	$x^2 + (y-\bar{y})^2 + z^2 - R^2 = 0$	\bar{y}, R
SZ	$x^2 + y^2 + (z-\bar{z})^2 - R^2 = 0$	\bar{z}, R
C/X	$(y-\bar{y})^2 + (z-\bar{z})^2 - R^2 = 0$	\bar{y}, \bar{z}, R
C/Y	$(x-\bar{x})^2 + (z-\bar{z})^2 - R^2 = 0$	\bar{x}, \bar{z}, R
C/Z	$(x-\bar{x})^2 + (y-\bar{y})^2 - R^2 = 0$	\bar{x}, \bar{y}, R
CX	$y^2 + z^2 - R^2 = 0$	R
CY	$x^2 + z^2 - R^2 = 0$	R
CZ	$x^2 + y^2 - R^2 = 0$	R
K/X	$-t^2(x-\bar{x})^2 + (y-\bar{y})^2 + (z-\bar{z})^2 = 0$	$\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, t^2$
K/Y	$(x-\bar{x})^2 - t^2(y-\bar{y})^2 + (z-\bar{z})^2 = 0$	$\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, t^2$
K/Z	$(x-\bar{x})^2 + (y-\bar{y})^2 - t^2(z-\bar{z})^2 = 0$	$\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}, t^2$
KX	$-t^2(x-\bar{x})^2 + y^2 + z^2 = 0$	\bar{x}, t^2
KY	$x^2 - t^2(y-\bar{y})^2 + z^2 = 0$	\bar{y}, t^2
KZ	$x^2 + y^2 - t^2(z-\bar{z})^2 = 0$	\bar{z}, t^2
SQ	$A(x-\bar{x})^2 + B(y-\bar{y})^2 + C(z-\bar{z})^2 + 2D(x-\bar{x}) + 2E(y-\bar{y}) + 2F(z-\bar{z}) + G = 0$	A, B, C, D, E, F, G, $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$
GQ	$Ax^2 + By^2 + Cz^2 + Dxy + Eyz + Fzx + Gx + Hy + Jz + K = 0$	A, B, C, D, E, F, G, H, J, K

Fig. 11 Cell boundary surfaces

5. あとがき

核分裂過程を組込むことによって、中性子収量などの積分データはかなり精度良く計算できるようになったが、何分にも未だ比較すべきデータが少ないので、精度の検証については今後の研究の進展にまつべき点が多い。特に2次粒子のエネルギー・スペクトルや空間分布等の微分データには、測定値と計算値とのずれが見られる⁽⁵⁷⁾。また核反応生成物の計算も、一つには統計精度の良い結果を得るためには、膨大なヒストリー数の計算を行う必要があることと、Fragmentation など未だその機構が良く分かっていない反応などがあり、理論モデルも十分とは言い難い。しかし、現時点においては、測定精度もそれほど良くないし、また加速器の工学的利用形態についてはアイデアの段階で、定量的に十分な精度でつめる必要がでてくるのは、アイデアが相当具体的に固まってくる将来のことになるろう。その間に基本的な物理的および基礎工学的パラメータについての実験を積み重ね、それらのデータとの比較検討を通じて理論モデルや計算法の改良が計られるべきであろう。

謝 辞

BNLの主幹研究員 Dr. H. Takahashi に対しては、筆者の一人(中原)がこの分野の研究を始めるきっかけを与えるとともに、客員研究員としてBNLに滞在した期間を通じ、また原研に戻った後も種々御指導下されたことに最大の謝辞を呈する次第である。塚田甲子男教授(日大)に対しては、種々の示唆に富んだ議論に深く感謝する。

5. あ と が き

核分裂過程を組込むことによって、中性子収量などの積分データはかなり精度良く計算できるようになったが、何分にも未だ比較すべきデータが少ないので、精度の検証については今後の研究の進展にまつべき点が多い。特に2次粒子のエネルギー・スペクトルや空間分布等の微分データには、測定値と計算値とのずれが見られる⁽⁵⁷⁾。また核反応生成物の計算も、一つには統計精度の良い結果を得るためには、膨大なヒストリー数の計算を行う必要があることと、Fragmentation など未だその機構が良く分かっていない反応などがあり、理論モデルも十分とは言い難い。しかし、現時点においては、測定精度もそれほど良くないし、また加速器の工学的利用形態についてはアイデアの段階で、定量的に十分な精度でつめる必要がでてくるのは、アイデアが相当具体的に固まってくる将来のことになるろう。その間に基本的な物理的および基礎工学的パラメータについての実験を積み重ね、それらのデータとの比較検討を通じて理論モデルや計算法の改良が計られるべきであろう。

謝 辞

BNLの主幹研究員Dr. H. Takahashiに対しては、筆者の一人(中原)がこの分野の研究を始めるきっかけを与えるとともに、客員研究員としてBNLに滞在した期間を通じ、また原研に戻った後も種々御指導下されたことに最大の謝辞を呈する次第である。塚田甲子男教授(日大)に対しては、種々の示唆に富んだ議論に深く感謝する。

文 献

- (1) 次の解説記事およびその引用文献を参照されたい。塚田甲子男：日本原子力学会誌，20，533 (1978)。高橋 博：ibid, 21，397 (1979)，23，500 (1981)。
- (2) Barashenkov V.S. : Sov. J. Part Nucl., 9, 452 (1978)。
- (3) Takahashi H. and Nakahara Y. : Bull. Amer. Phys. Soc., 24, 874 (1979)。
- (4) 中原 康明，筒井 恒夫，田次 邑吉：所内資料 (1981)。
- (5) Atchison F. : RL-81-006, "A Theoretical Study of a Target Reflector and Moderator Assembly for SNS" (1981)。
- (6) Armstrong T.W., Cloth P., Filges D. and Neef R.D. : Jül-Spez-120, "Theoretical Target Studies for the SNQ Spallation Neutron Source" (1981)。
- (7) Wright R.Q., Green N.M., Lucius J.L. and Craven C.W. Jr. : ORNL-TM-2679, "SUPERTOG: A Program to Generate Fine Group Constants and P_n Scattering Matrices from ENDF/B" (1969)。
- (8) Coleman W.A. and Armstrong T.W. : RSIC CCC-161, "NMTC Monte Carlo Nucleon Meson Transport Code System"。
- (9) Takahashi H. : BNL-NCS-51245, "Fission Reaction in High Energy Cascade" (1980)。
- (10) Nakahara Y. : KENS Report II, "Studies on High Energy Spallation and Fission Reactions" (1981)。
- (11) Chandler K.C. and Armstrong T.W. : RSIC CCC-178, "HETC Monte Carlo High-Energy Nucleon Meson Transport Code"。
- (12) Engle W.W. Jr. : RSIC CCC-82, "ANISN, a One Dimensional Discrete Ordinate Transport Code"。
- (13) Lathrop K.D. and Brinkley F.W. : LA-4848-MS, "TWOTRAN-II, An Interfaced, Exportable Version of the TWOTRAN Code for Two-Dimensional Transport" (1973)。
- (14) Straker E.A., Scott W.H. Jr. and Byrn N.R. : DNA-2860T, "The Morse Code with Combinatorial Geometry" (1972)。
- (15) Atchison F. : Jül-Conf-34, p.17. "Spallation and Fission in Heavy Metal Nuclei under Medium Energy Proton Bombardment" (1980)。
- (16) Alsmiller F.S., et al. : ORNL-TM-7528, "A Phenomenological Model for Particle Production from the Collision of Nucleons and Pions with Fissile Elements at Medium Energies" (1981)。
- (17) Armstrong T.W. and Filges D. : Jül-Conf-45, p.281, "A Comparison of High-Energy Fission Models for the HETC Code" (1981)。
- (18) Bertini H.W., Guthrie M.P. and Hermann O.W. : ORNL-4564, "Instructions for the Operation of Code Associated with MECC-3, a Preliminary

- Version of an Intranuclear Cascade Calculations for Nuclear Reaction" (1971).
- (19) Dresner L. : ORNL-TM-190, "EVAP-A Fortran Program for Calculating the Evapolation of Various Particles from Excited Compound Nuclei" (1962).
- (20) Coveyou R.R., et al. : ORNL-3622, "O5R, a General Purpose Monte Carlo Neutron Transport Code" (1965).
- (21) Guthrie M.P. : ORNL-TM-3119, "EVAP-4 : Another Modification of a Code to Calculate Particle Evaporation from Excited Compound Nuclei" (1970).
- (22) Bertini H.W. and Guthrie M.P. : Nucl. Phys., A169, 670 (1971).
- (23) Hill C.W. and Simpson K.M. Jr., : NASA-SP-71, "Calculation of Proton-Induced Gamma-Ray Spectrum and Comparison with Experiments" (1964).
- (24) Armstrong T.W. and Filges O. : Jül-Conf-45, p.173, "Models and Computational Methods in the Theoretical Treatment of Spallation Neutron Sources" (1981).
- (25) Bertini H.W.: ORNL-3383, "Monte Carlo Calculations on Internuclear Cascade" (1963).
- (26) Sternheimer R.M. and Lindenbaum S.J. : Phys. Rev. 105, 1874 (1957), 109, 1723 (1958) ; 123, 333 (1961).
- (27) Hofstadter R. : Rev. Mod. Phys., 28, 214 (1956).
- (28) Hess W.N. : Rev. Mod. Phys., 30, 368 (1958).
- (29) Harp G.D. : Phys. Rev. C, 8, 581 (1973); 10, 2387 (1974).
- (30) Orear J. : Phys. Rev., 100, 288 (1955).
- (31) Metropolis N., et al. : Phys. Rev., 110, 185 (1958) ; 110, 204 (1958).
- (32) Dostrovsky I., Rabinowitz P. and Bivins R. : Phys. Rev., 111, 1659 (1958).
- (33) Barashenkov V.S., Gudima K.K. and Toneev V.D. : JINR R2-4065, "Computational Scheme of Internuclear Cascade" (1968) (in Russian).
- (34) Chen K., et al. : Phys. Rev., 166, 949 (1968).
- (35) Barashenkov V.S., Tonnev V.D. and Chirgrinov S.E. : JINR R2-7694, "On the Computation of Electronuclear Nucleon Generation Method" (1974) (in Russian).
- (36) LeCouteur K.J. : Proc. Phys. Soc. (London), A63, 259 (1950).
- (37) Cameron A.G.W. : Canad. J. Phys., 35, 1021 (1957).
- (38) Peele P.W. and Aebersold P.M. : ORNL-TM-1538, "Energy Parameters for Light Nuclides in Monte Carlo Nuclear Evaporation Program based on EVAP" (1966).

- (39) Shapiro M.M. : Phys. Rev., 90, 171 (1953).
- (40) Blatt J.M. and Weiskopf V.F. : "Theoretical Nuclear Physics", Wiley and Sons. 1952.
- (41) Wapstra A.M. : Physica, 21, 367, 385 (1955).
- (42) Huizenga J.R. : Physica, 21, 410 (1955).
- (43) Mattauch J.H.E., Thiele W. and Wapstra A.H. : Nucl. Phys., 67, 1 (1965).
- (44) Wigner E.P. : Phys. Rev., 51, 947 (1937).
- (45) Vandenbosch R. and Huizenga J.R. : "Nuclear Fission", Academic Press, 1973.
- (46) Perfilov N.A. : "Physic of Nuclear Fission", p.151, edited by N.A. Perfilov and V.S. Eismont, Israel Program for Scientific Translation, 1964.
- (47) Il'inov A.S., Cherpanov E.A. and Chirginov S.E. : Sov. J. Nucl. Phys., 32, 166 (1980).
- (48) Kupriyanov V.M., et al. : Sov. J. Nucl. Phys., 32, 184 (1980).
- (49) Pik-Pichak G.A. and Strutinskii V.M.: p.8 of Ref. (46).
- (50) Neuzil E.F. and Fairhall A.W. : Phys. Rev., 129, 2705 (1963)
- (51) Fong P. : "Statistical Theory of Nuclear Fission", Gordon and Breach Science Publisher, 1969.
- (52) Grass R.A., et al. : Phys. Rev., 104, 404 (1956).
- (53) Coleman W.A. : ORNL-TM-2206, "Thermal Neutron Flux Generation by High Energy Protons" (1968).
- (54) Kikuchi K. and Kawai M. : "Nuclear Matter and Nuclear Reaction", North Holand Publ. Co., 1968.
- (55) Marmier P. and Sheldon E. : "Physics of Nuclei and Particles", vol. II, Academic Press, 1970.
- (56) Armstrong T.W. and Chandler K.C. : ORNL-4736, "Analysis Subroutines for the Nucleon-Meson Transport Code NMTC" (1971).
- (57) Bauer G.S. and Filges D. (ed.) : Jül-Conf-45, "ICANS-V : Proceeding of the 5th Meeting of the International Collaboration on Advanced Neutron Sources" (1981).

付録1 入力データ例

例1 大型ターゲット

これは実効的に無限大体系に対するもので、形状と内部の領域が Fig. 12 に示されている。このように領域がとられているのは、後で NMTA を用いてヒストリー・テープを解析・編集することが想定されているからである。

例2 薄い板状ターゲット

ターゲット内の多重散乱が無視できる程度に薄いターゲットの場合の入力データ例が Fig. 14 に示されている。これは非弾性散乱断面積や核分裂断面積の計算に用いられたデータである。

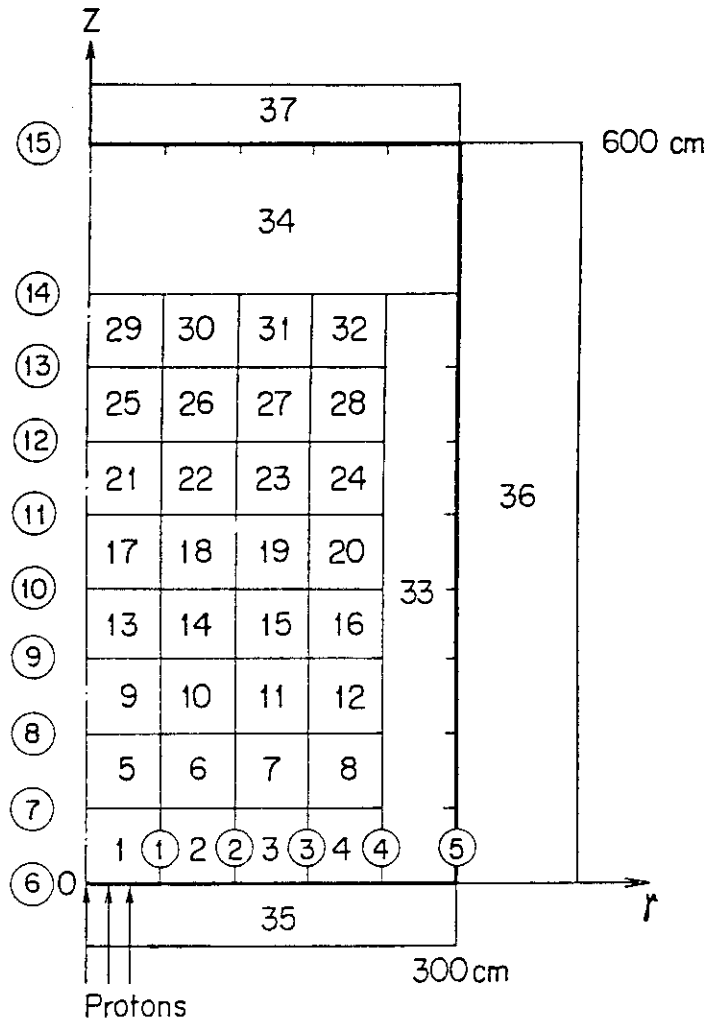


Fig.12 Effectively infinite target
 1 material region (cell 1~34)
 3 external void regions (cell 35~37)
 15 boundary planes (①~⑮)

```

T.5
C.5
W.2
I.4
OPTP PASSWORD=
// EXEC LMGO,LM='J0051.NMTCOV12'
// EXPAND DISK,DDN=FT11FOO1
// EXPAND DISK,DDN=FT12FOO1
// EXPAND DISKTO,DDN=FT21FOO1,DS#='J0051.NMTCLB25'
// EXPAND DFDISK,DDN=FT22FOO1,DSN=J1035.NMTCCA13,RECFM=VBS,RSIZE=3196,
// BSIZE=3200,UNIT=TSSWK
// EXPAND DISK,DDN=FT23FOO1
//SYSIN DD *
NMTC --- MOLTEN SALT TARGET/BRANKEI SYSTEM --- 1 GEV 0.3A PROTON BEAM
LIF-BEF2-THF4(64-18-18) --- CASE 4

1000.      15.      15.      1      25      10      0
  1         23         21         11         0         22
  0.         0.         1
  0.         4
  3.         7.12.925E-03
  4.         9.3.6353E-03
  9.         19.34.734E-03
 90.         232.3.6353E-03
1 1 1. -1,2 6,35 -7,5
2 1 1. 1,1 -2,3 6,35 -7,6
3 1 1. 2,2 -3,4 6,35 -7,7
4 1 1. 3,3 -4,33 6,35 -7,8
5 1 1. -1,6 7,1 -8,9
6 1 1. 1,5 -2,7 7,2 -8,10
7 1 1. 2,6 -3,8 7,3 -8,11
8 1 1. 3,7 -4,33 7,4 -8,12
9 1 1. -1,10 8,5 -9,13
10 1 1. 1,9 -2,11 8,6 -9,14
11 1 1. 2,10 -3,12 8,7 -9,15
12 1 1. 3,11 -4,33 8,8 -9,16
13 1 1. -1,14 9,9 -10,17
14 1 1. 1,13 -2,15 9,10 -10,18
15 1 1. 2,14 -3,16 9,11 -10,19
16 1 1. 3,15 -4,33 9,12 -10,20
17 1 1. -1,18 10,13 -11,21
18 1 1. 1,17 -2,19 10,14 -11,22
19 1 1. 2,18 -3,20 10,15 -11,23
20 1 1. 3,19 -4,33 10,16 -11,24
21 1 1. -1,22 11,17 -12,25
22 1 1. 1,21 -2,23 11,18 -12,26
23 1 1. 2,22 -3,24 11,19 -12,27
24 1 1. 3,23 -4,33 11,20 -12,28
25 1 1. -1,26 12,21 -13,29
26 1 1. 1,25 -2,27 12,22 -13,30
27 1 1. 2,26 -3,28 12,23 -13,31
28 1 1. 3,27 -4,33 12,24 -13,32
29 1 1. -1,30 13,25 -14,34
30 1 1. 1,29 -2,31 13,26 -14,34
31 1 1. 2,30 -3,32 13,27 -14,34
32 1 1. 3,31 -4,33 13,28 -14,34
33 1 1. 4,4,8,12,16,20,24,28,32 -5,36 6,35 -14,34
34 1 1. -5,36 14,29,30,31,32,33 -15,37
35 6666 -6,1,2,3,4,33
36 6666 5,33,34

```

Fig.13 NMTC/JAERI execution deck for an effectively infinite target


```

// JUSER 73691035, YA.NAKAHARA, 0431.200
T.4
C.5
W.1
I.4
//***** PASS WORD CARD IS REQUIRED. *****
// EXEC LMG0, LM='J0051.NMTCOV12'
// EXPAND DISK, DDN=FT11F001
// EXPAND DISK, DDN=FT12F001
// EXPAND DISKTO, DDN=FT21F001, DSN='J0051.NMTCLB25'
// EXPAND DISK, DDN=FT22F001
// EXPAND DISK, DDN=FT23F001
//SYSIN DD *
NMTC/JAERI --- EVALUATION OF FISSION CROSS SECTION
PB
150. 15. 15. 1 500 10 0
1 23 21 11 0 22
0. 0. 1
0. 4
82. 204..46142E-03
82. 206.7.9430E-03
82. 207.7.2838E-03
82. 208.17.270E-03
1 1 1. 1,2 -2,3 -3,4
2 6666 -1,1
3 6666 2,1
4 6666 3,1

1 PZ 0.
2 PZ 2.0
3 CZ 5.0

10 1. 0. 0. 0.

1
2.5 0. 0. 150. 1. 0. 1.
++ LAS MAE
// LASTCARD

```

Fig.14 NMTC/JAERI execution deck for a thin slab target

付録2 プリント出力例

この出力例は付録1の例2に対応するものである。

NMTC/JAERI --- EVALUATION OF FISSION CROSS SECTION

PB

INITIAL RANDOM NO. 00000000000000000000
 EMAX = 0.15000+03 ELOP = 0.15000+02 ELON = 0.15000+02 MXMAT = 1 MAXCAS = 500 MAXBCH = 10
 NQUIT = 1 NEUTP = 23 NBERTP = 21 NPOWR2 = 11 NPIDK = 0 NHSTP = 22
 ANDIT = 0.0 CTOFE = 0.0 N1COL = 0 NEXITE = 1 NSPRD = 0 NWSPRD = 0 NSEUDO = 0
 HSIKMX 0.29500D-24 0.14600D-23 0.20030D-24 0.0 0.66900D-25

入力データ

THIS IS MEDIUM 1

DENH(1) = 0.0 NEL(1) = 4
 ZZ(1, 1) = 82.0 A(1, 1) = 204.0 DEN(1, 1) = 0.461420D-03
 ZZ(2, 1) = 82.0 A(2, 1) = 206.0 DEN(2, 1) = 0.794300D-02
 ZZ(3, 1) = 82.0 A(3, 1) = 207.0 DEN(3, 1) = 0.728380D-02
 ZZ(4, 1) = 82.0 A(4, 1) = 208.0 DEN(4, 1) = 0.172700D-01

*GEOMETRIC CROSS SECTIONS FOR NUCLIDES 1- 4 IN MEDIUM 1 IN RECIPROCAL CENTIMETERS

0.1125D-02 0.1946D-01 0.1789D-01 0.4251D-01

MAXIMUM HYDROGEN CROSS SECTIONS FOR PARTICLE TYPES 1 THROUGH 5 IN MEDIUM 1 IN RECIPROCAL CENTIMETERS

0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0

TRANSPORT CROSS SECTIONS (THE SUM OF *GEOMETRIC* XSECTS+MAX HYDROGEN XSECT+MAX DECAY XSECT) FOR PARTICLE TYPES 1 THROUGH 7 IN MEDIUM 1 IN RECIPROCAL CENTIMETERS

0.8099D-01 0.8099D-01 0.8801D-01 0.0 0.8801D-01 0.8885D-04 0.8885D-04

1 1 1. 1,2 -2,3 -3,4
 2 6666 -1,1
 3 6666 2,1
 4 6666 3,1

幾何形状入力データ

1 PZ 0.
 2 PZ 2.0
 3 CZ 5.0

10 1. 0. 0. 0.

CELLS

I	NCL	IMAT	FIO	RHO	LCA	LJA
1	1	1	1.00000D+00	1.00000D+00	1	1
2	2	6666	0.0	0.0	4	-1
3	3	6666	0.0	0.0	5	2
4	4	6666	0.0	0.0	6	3

SURFACES

I MSF KSF LSC SCF
 1 1 PZ 1 0.0
 2 2 PZ 2 2.00000D+00
 3 3 CZ 3 2.50000D+01

HISTORY TAPE CONTAINS FOLLOWING VALUES OF NCOL

-4
 -3
 1
 2
 4
 6
 7

NO HSTP. HI-E OUTPUT ON TAPE11, LO-E NEUTRONS ON TAPE12.

MONOENERGETIC AXIAL SOURCE OF RADIUS R = 2.500, AT Z = 0.0 TO 0.0

入射粒子源入力データ

ENERGY= 150.000 TIP= 1. DIREC= 1.
 S= 1, C= 1 1.500D+02 -4.982D-02 -1.097D+00 0.0 0.0 1.000D+00 1.000D+00 1.
 11 1 1.500D+02 -4.982D-02 -1.097D+00 2.000D+00 0.0 0.0 1.000D+00 1.000D+00 1.
 12 1 6.571D+00 3.909D-01 2.207D+00 3.360D-01 4.102D-01 -7.648D-01 -4.967D-01 1.000D+00 1.

END OF TAPE ON TAPE12. LAST PARTICLE IS

12 63 1.998D+00 2.135D+00 -6.106D-02 8.048D-01 -7.816D-01 1.461D-01 6.065D-01 1.000D+00

NUMBER RECORDS SUM WEIGHTS

0 0.0
 63 6.300D+01
 0 0.0
 0 0.0
 0 0.0

中間結果

END OF TAPE ON TAPE11. LAST PARTICLE IS

11 63 1.500D+02 2.233D+00 -7.704D-01 2.000D+00 0.0 0.0 1.000D+00 1.000D+00

NUMBER RECORDS SUM WEIGHTS

1 100回衝突
 62 (毎170μ) 1.000D+00
 0 (ト粒子) 6.200D+01
 0 0.0
 0 0.0

座標 (cm) X Y Z U V W 変み 粒子の種類
 12 100 8.105D-01 1.787D-01 1.787D-01 2.579D-01 7.728D-01 7.728D-01 -7.680D-01 -6.390D-01 4.197D-02 1.000D+00 1.
 12 101 2.052D+00 1.787D-01 1.787D-01 2.579D-01 7.728D-01 7.728D-01 8.103D-01 5.432D-01 2.198D-01 2.198D-01 1.000D+00 1.

END OF TAPE ON TAPE12. LAST PARTICLE IS

12 126 1.705D+00 4.655D-01 -1.197D+00 7.594D-01 -3.270D-02 9.014D-01 4.317D-01 1.000D+00

NUMBER RECORDS SUM WEIGHTS

0 0.0
 126 1.260D+02
 0 0.0
 0 0.0
 0 0.0

11 100 1.500D+02 1.201D-01 1.782D+00 2.000D+00 2.000D+00 0.0 0.0 1.000D+00 1.000D+00 1.
 11 101 1.500D+02 1.430D+00 1.432D+00 2.000D+00 2.000D+00 0.0 0.0 1.000D+00 1.000D+00 1.

NUMBER RECORDS	SUM WEIGHTS								
3	3.000D+00								
438	4.380D+02								
0	0.0								
0	0.0								
0	0.0								
12	2.908D+00	-1.081D+00	-3.197D-01	1.907D+00	-8.355D-01	2.484D-01	-4.902D-01	1.000D+00	1-
12	3.802D+00	-1.081D+00	-3.197D-01	1.907D+00	6.312D-01	7.725D-01	6.962D-02	1.000D+00	1-

END OF TAPE ON TAPE12. LAST PARTICLE IS

12	504	6.617D-01	-1.081D+00	-3.197D-01	1.907D+00	-2.362D-01	-6.711D-01	-7.027D-01	1.000D+00
----	-----	-----------	------------	------------	-----------	------------	------------	------------	-----------

NUMBER RECORDS	SUM WEIGHTS								
0	0.0								
504	5.040D+02								
0	0.0								
0	0.0								
0	0.0								

END BATCH 1. OSR NEUTRONS (THIS BATCH) = 542, CUMULATIVE CASCADES = 500. RANDOM = 0000878001B08E00

1回目のバッチ計算終了

最終結果

BATCH NO.=	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
NEUTRONS=	542	405	384	494	402	594	588	564	484	534
N/MAXCAS	1.08	0.81	0.77	0.99	0.80	1.19	1.18	1.13	0.97	1.07
AVERAGE=	0.99820									
STD. DEV. =	0.1577127									

BATCH NO.=	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
PIPLUS=	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
N/MAXCAS	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
AVERAGE=	0.0									
STD. DEV. =	0.0									

BATCH NO.=	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
PIZEROS =	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
N/MAXCAS	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
AVERAGE=	0.0									
STD. DEV. =	0.0									

BATCH NO.=	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
PINEGAS =	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
N/MAXCAS	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
AVERAGE=	0.0									
STD. DEV. =	0.0									

BATCH NO.=	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
FISSIONS=	0	0	0	1	0	2	0	0	0	0
NF/MAXCAS	0.0	0.0	0.0	0.00	0.0	0.00	0.0	0.0	0.0	0.0
AVERAGE=	0.00060									
STD. DEV. =	0.0013499									

MEDIUM 1	0.52000D+03	0.52300D+03	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	REAL NONHYDROGENOUS COLLISIONS	PSEUDO NONHYDROGENOUS COLLISIONS	REAL HYDROGEN COLLISIONS	PSEUDO HYDROGEN COLLISIONS	PSEUDO HYDROGEN COLLISIONS	PSEUDO HYDROGEN COLLISIONS	PSEUDO HYDROGEN COLLISIONS	PSEUDO HYDROGEN COLLISIONS	PSEUDO HYDROGEN COLLISIONS	PSEUDO DECAY COLLISIONS

PSEUDO COLLISIONS WITHIN INTERNAL VOID BY PARTICLES OF

TYPE 1	TYPE 2	TYPE 3	TYPE 4	TYPE 5	TYPE 6	TYPE 7
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

***** WARNING. 1 RESIDUAL NUCLEI HAD NEGATIVE EXCITATION ENERGY.

NUMBER OF COLLISIONS WRITTEN ON HISTORY TAPE, VS. NCOL

-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5	6	7	8
1	10	0	1	0	5000	353	0	4720	0	170	0	0

FINAL RANDOM NUMBER = 000019ESACB6DA8D

END OF TAPE ON TAPE11. LAST PARTICLE IS

11 4720 1.5000+02 -2.2440+00 -5.4220-01 2.0000+00 0.0 1.0000+00 1.0000+00

NUMBER RECORDS SUM WEIGHTS

41 4.1000+01
 4679 4.6790+03
 0 0.0
 0 0.0
 0 0.0

	REAL NONHYDROGENOUS COLLISIONS	PSEUDO NONHYDROGENOUS COLLISIONS	REAL HYDROGEN COLLISIONS	PSEUDO HYDROGEN COLLISIONS	PSEUDO DECAY COLLISIONS
MEDIUM 1	0.52000+03	0.323000+03	0.0	0.0	0.0

PSEUDO COLLISIONS WITHIN INTERNAL VOID BY PARTICLES OF

TYPE 1	TYPE 2	TYPE 3	TYPE 4	TYPE 5	TYPE 6	TYPE 7
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

***** WARNING. 1 RESIDUAL NUCLEI HAD NEGATIVE EXCITATION ENERGY.

FINAL RANDOM NUMBER = 000019E5ACB6DA8D

END OF TAPE ON TAPE12. LAST PARTICLE IS

12 4991 2.3670-01 1.1310-01 -7.0660-02 3.3980-01 -7.3410-01 7.5440-02 6.7480-01 1.0000+00

NUMBER RECORDS SUM WEIGHTS

0 0.0
 4991 4.9910+03
 0 0.0
 0 0.0
 0 0.0

付録3 NMTC/JAERI ヒストリー・ファイル

高エネルギー陽子によって引き起された一連の核反応過程における各事象はヒストリー・テープとしてサブルーチン ANALY 3 においてファイル 22 に全て記録される。NMTC の利用者はこのヒストリー・テープに含まれる衝突に関する情報を分析、編集することにより種々の物理量、たとえば、粒子分布、粒子のエネルギー・スペクトル、生成核種の質量分布、中性子発生数等を得ることができる。

以下ヒストリー・テープに記録されるパラメータを列記する。

1. NCOL : 事象の種類を同定するための整数パラメータ
 - 4 : 計算終了
 - 3 : バッチ終了
 - 2 : (使用されていない)
 - 1 : 計算開始
 - 0 : (使用されていない)
 - 1 : 源粒子
 - 2 : 核反応(吸収反応以外)
 - 3 : 荷電粒子が切断エネルギーまで減速された時
 - 4 : 粒子が標的系から洩れ出た時
 - 5 : 擬似衝突
 - 6 : 吸収反応
 - 7 : 標的系内境界の横断
2. NOCAS : 追跡中のカスケード番号
3. NAME : 追跡中のカスケード内の粒子を同定するための番号
4. MAT : 現事象より一つ前の事象の起った媒質の番号
5. NMED : 現事象の属する媒質の番号
6. X }
7. Y } 一つ前の事象の空間座標
8. Z }
9. XC }
10. YC } 現事象の空間座標
11. ZC }
12. OLDWT : (XC, YC, ZC) で事象が起る前の粒子の統計的重み
13. WT : (XC, YC, ZC) で事象が起った後の粒子の統計的重み
14. E : (X, Y, Z) における粒子の運動エネルギー (MeV)
15. EC : (XC, YC, ZC) における粒子の運動エネルギー (MeV)

16. U }
 17. V } (XC, YC, ZC)における粒子の x, y, z 方向に対する方向餘弦
 18. W }
19. TIP : 粒子の種類
 0 = 陽子
 1 = 中性子
 2 = π^+
 3 = π^0
 4 = π^-
 5 = μ^+
 6 = μ^-
20. BOLD : (X, Y, Z)の属する幾何形状ブロックとゾーンを与える濃縮語
 (packed word)
21. BLZ : (XC, YC, ZC)の属する幾何形状ブロックとゾーンを与える濃縮語
22. L ELEM : 媒質中の標的核種を同定する番号
 -1 水 素
 0 擬似衝突
 1, 2, 3, ... 入力データで指定された核種
23. NOPART : 一回の核反応に対して核内カスケード過程で放出された粒子の数, 擬似衝突に対してはNOPART = -1とする。
24. NABOV : 一回の核反応に対して核内カスケード過程で切断エネルギー以上で放出された粒子の数
25. NBELLO : 一回の核反応に対して核内カスケード過程で切断エネルギー以下に放出された粒子の数
26. APR : 核内カスケード・蒸発過程終了後の残留核種の質量数
27. ZPR : 核内カスケード・蒸発過程終了後の残留核種の電荷数
28. EREC : 蒸発終了後の残留核種の反跳運動エネルギー (MeV)
29. EX : 蒸発が始まる前の複合核の励起エネルギー (MeV)
30. HEVSUM : 蒸発陽子以外の全ての荷電粒子の運動エネルギーの総和 (MeV)
31. UU : 蒸発終了後の残留核種の励起エネルギー (MeV)
- 32~37. NPART(1)~NPART(6) : 蒸発した中性子, 陽子, d, t, ^3He と α の数
 もし NABOV > 0 ならば, 切断エネルギー以上のエネルギーを持つ生成粒子について次の情報が記録される。I = 1 ~ NABOV に対して
 NAMEA (I) : 生成粒子の名前
 TIP A (I) : 粒子の種類 (TIP を参照のこと)
 EA (I) : 粒子の運動エネルギー (MeV)

$U A (I)$
 $V A (I)$
 $W A (I)$

} 粒子の方向餘弦

$W T A (I)$: 粒子の統計的重み

もし $N B E L O > 0$ ならば, 切断エネルギー以下のエネルギーを持つ生成粒子に対して次の情報が記録される。 $T I P B (I)$, $E B (I)$, $U B (I)$, $V B (I)$, $W B (I)$, $W T B (I)$, $I = 1 \sim N B E L O$ 。これらの記号の定義は $N A B O V > 0$ の場合と同じである。

$N P A R T (J) > 0$ ならば, 蒸発生成物に対する次の情報が記録される。

$W T E V A P$: 蒸発粒子に共通の統計的重み

$E P A R T (K, J)$: $J = 1$ 中性子

$J = 2$ 陽子

$K = 1 \sim N P A R T (J)$

K 番目に蒸発した中性子, または陽子のエネルギー

$H E P A R T (K, L)$: $L = 1$ d

= 2 t

= 3 $^3H e$

= 4 α

$K = 1 \sim N P A R T (L)$

K 番目に蒸発した粒子のエネルギー