

JAERI - M
91-043

KERMAファクターおよび
DPA断面積データの現状と応用

1991年3月

(編) シグマ研究委員会PKAスペクトルワーキンググループ

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 Division, Department of Technical Information, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-11, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 1991

編集兼発行 日本原子力研究所
印刷 原子力資料サービス

KERMA ファクターおよび DPA 断面積データの現状と応用

日本原子力研究所東海研究所

(編) シグマ研究委員会 PKA スペクトルワーキンググループ*

(1991年2月13日受理)

中性子核反応に伴う原子反跳スペクトル, DPA 断面積, KERMA ファクターに関するデータは, 材料の照射損傷評価, 発熱評価, 放射線医学・生物学, 放射線計測などに広く応用され, 最近これらのデータに対する要求がとみに高まっている。JENDL に基づく特殊目的データファイル作成の一環としてこれらのデータを整備するためにシグマ研究委員会に「PKA スペクトル・サブワーキンググループ」が設けられ, KERMA 関連の問題の研究の現状およびデータ適用の諸側面をレビューし検討した。本報告は, これらの調査, 検討の結果をまとめたものである。

東海研究所 : 〒319-11 茨城県那珂郡東海村白方字白根 2-4

※ 川合 将義, 飯島 俊吾 (東芝), 有賀 武夫, 深堀 智生, 真木 紘一, 柴田 恵一, 杉 暉夫, 山内 良麿 (原研), 喜多尾 憲助 (放医研), 高橋 亮人 (阪大), 山野 直樹 (住原工)

Review of the Research and Application of
KERMA Factor and DPA Cross Section

(Ed.) PKA spectra working group*
Japanese Nuclear Data committee

Tokai Research Establishment
Japan Atomic Energy Research Institute
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received February 13, 1991)

The data for recoil atom spectra, KERMA factor and displacement cross sections from neutron-induced reactions are calling increasing interest for applications to the study of radiation damage, calculation of heat generation in reactor, neutron therapy and biological research. PKA spectra sub-working group was recently established in Japanese Nuclear Data Committee as a part of developing JENDL Special Purpose Data Files. Current status of the data and various features of application of the KERMA-related problems were reviewed and discussed at the first meeting of the sub-working group. Present report is a compilation of the items presented at the meeting, covering a brief review of the existing research and the data, method of calculation, the KERMA factor data in neutron therapy, the deduction of KERMA factor of C-12 from neutron reaction measurement and analysis, the data base for radiation damage, the damage simulation calculation, and the method of storing the evaluated data in ENDF/B-VI format.

Keywords: KERMA Factor, DPA Cross Section, Review

* Masayoshi KAWAI, Shungo IIJIMA(Toshiba Corporation), Takeo ARUGA, Tomoo FUKABORI, Kouich MAKI, Keiich SHIBATA, Teruo SUGI, Yoshimaro YAMANOUTI(JAERI), Kensuke KITAO(Nat. Inst. of Radiological Sciences), Akito TAKAHASHI(Osaka Univ.) and Naoki YAMANO(Sumitomo Atomic Energy Ind. Ltd.)

目 次

1. はじめに (飯島 俊吾)	1
2. 国内外の評価データの状況 (飯島 俊吾, 川合 将義)	3
3. PKA スペクトル, KERMA ファクター, DPA 断面積の 計算方法 (飯島 俊吾)	9
4. PKA/KERMA データファイル (川合 将義)	23
5. C-12 からの 28.2 MeV 中性子の散乱と反跳 KERMA ファクター (山内 良麿)	35
6. 核融合炉材料の照射損傷の評価 (有賀 武夫)	41
7. 照射損傷のカスケードモデル計算 (野中 久典, 高橋 亮人)	67
8. RADHEAT-V4 コードシステムにおける DPA 断面積および KERMA ファクターの計算手法 (山野 直樹)	107
9. 放射線医学における中性子カーマファクターの現状 (喜多尾 憲助)	127
10. む す び (川合 将義)	137

Contents

1. Prologue	S. Iijima	1
2. Current status of the data and researches on KERMA factor and DPA cross section	S. Iijima and M. Kawai	3
3. Method of calculation of PKA spectra, KERMA factor and DPA cross section	S. Iijima	9
4. PKA/KERMA data file	M. Kawai	23
5. Scattering of 28.2 MeV neutrons from C-12 and recoil kerma factor	Y. Yamanouti	35
6. Neutron radiation damage parameters and a database system for fusion reactor materials	T. Aruga	41
7. Damage simulation by cascade collision model	H. Nonaka and A. Takahashi	67
8. Calculation methods of DPA cross section and KERMA factor adopted in the RADHEAT-V4 code system	N. Yamano	107
9. Neutron KERMA factor in radiology	K. Kitao	127
10. Summary comments	M. Kawai	137

1. はじめに

飯島 俊吾 (東芝)

JENDL特殊目的核データファイル作成の一環として、シグマ研究委員会にPKAスペクトル・サブワーキンググループが1989年4月に発足し、JENDL-3に基づいてKERMAファクター、損傷断面積、反跳原子スペクトルの計算・評価とPKAデータファイル作成の作業を開始した。これらのデータは、原子炉工学での熱発生評価、放射線計測、放射線医学・生物学、材料の照射損傷評価などの点で要求されている。活動の開始にあたって、この分野の国内外の研究状況、データニーズ、適用に関してレビュー或は紹介を行なった。本報告はこのレビューを話題ごとにまとめたものである。

中性子で物質を照射すると物質の発熱及び照射損傷を惹き起こす。これは中性子核反応による原子の反跳および帯電粒子の放出による局所的なエネルギー付与、格子原子の弾き出しによる格子欠陥の生成によるものである。

KERMAファクター(Kinetic Energy Release in Matter)は局所的なエネルギー吸収量であり、単位入射中性子束及び単位原子あたりの反跳原子と帯電粒子のエネルギー(残留核からの β , α 放射エネルギーも含めて)の和として定義される。放出中性子及びガンマ線はその場では熱エネルギーにならないので含めない。KERMAファクターは原子炉における発熱評価、計測器へのエネルギー付与の評価に用いられ、放射線医学・生物学ではドシメータで測定された吸収線量を生体組織に吸収される線量に変換するのに用いられ高い精度が要求されている(Ref.(1)参照)。医療用では生体構成元素について中性子エネルギー約100MeVまでの値が必要とされている。

DPA断面積は材料の照射損傷パラメータDPA(Displacement per Atom)を与える基礎量であり、単位入射中性子束及び単位原子あたりの原子変位数として定義される。

ASTMではDPA断面積をPKAスペクトル(Primary Knock-on Atom Spectrum)からLindhard-Robinsonの電子的エネルギー損失の補正式および標準NRTモデル(Norgett-Robinson-Torrens model)によって求めることが推奨されている。また、最近、損傷測定とシミュレーション計算の発達と共に、PKAスペクトル自体も照射パラメータとして考えられている。核融合炉材料の模擬照射実験では中性子エネルギー50MeVまでのデータが要求されている。

本報告では、第2章でKERMAファクター、DPA断面積の計算に関する国内外の主な研究の概略と問題点を述べる。第3章では核データファイルに基づく理論計算の方法を、さらに第4章では、KERMAファクター、DPA断面積およびPKAスペクトル計

算値を ENDF/B-VI 形式で格納する方法についての案を示す。第 5 章では、原研タンデム加速器による C-12 の 28 MeV 中性子弾性散乱、非弾性散乱の最近の測定と結合チャンネル法による理論解析を述べ、求めた partial KERMA factor を諸外国での値と比較して考察する。第 6 章では核融合炉材料の照射損傷評価データベースとしての DPA 断面積、PKA スペクトルの適用について述べる。第 7 章では、PKA スペクトルを入力とした損傷シミュレーションの計算例を述べる。第 8 章では RADHEAT-V4 コードシステムにおける DPA 断面積および KERMA ファクターの計算手法について述べる。第 9 章では放射線医学における KERMA ファクターデータの計算、測定の現状と生体への吸収線量評価への適用について述べる。

2. 国内外の評価データの状況

飯島 俊吾, 川合 将義 (東芝)

KERMAファクター, DPA断面積に関するデータおよび研究の状況を簡単にレビューし, 主要な問題点を述べる。主な参考文献をリストする。

Shungo IJIMA, Masayoshi KAWAI (Toshiba Corporation)

Current status of the data and researches on KERMA factor and DPA cross sections are reviewed briefly. Important problems are pointed out. Main references are listed.

1. KERMAファクター

KERMAファクターについては, すでに1950年代には遅い中性子および14 MeV中性子の生体への効果に関連して議論されている。また, 特に核融合炉における発熱評価のためにKERMAファクター値が要求されている。

下記の参考文献は順不同であるが1970年代になってから特に米国において研究は極めて活発化し, 1980年代後半に入っても多くの計算, 測定研究が英国, ドイツ, フランス, ユーゴスラビア, ポーランドなどからも発表されている。研究者もHealth Physics, Dosimetry分野に加えて核物理の測定, 評価分野からの参加がとくに増大しているように見受けられる。参考文献(5),(6)のCaswellらの仕事はこの分野では名高く, 歴史的な経由を知る上でも大変参考になる。また, Howerton(Ref.7)の広範な計算は最新の核データファイルに基づくものである。この2つについて以下述べる。医学用データとして特にcarbonについて詳細な研究が行われており, それについては第4章, 第5章に述べられている。

Caswell等(NBS, Ref.5)は, 0-30 MeVでのH, Li-6, Li-7, B, C, N, O, F, Na, Mg, K, Si, P, S, Cl, Ar, K, Ca, FeのKERMAファクターを計算し数値表を与えている。生物組織, 筋肉, 骨, プラスチック, ナイロン, 空気, ルサイト, アセチレン, エチレン, 炭酸ガスなどについても合成した値を示している。計算はエネルギーバランスの方法で行っている。核データはENDF/B-IVに基づいているが, 20 MeV以上では計算で補っており, また2粒子放出, 荷電粒子放出スペクトルについては種々の仮定をおいて粒子放出後のガンマ線放出エネルギーを求めている。反応生成物の残留放射能による

KERMA ファクターも評価している。Caswell は計算値を測定値および他の計算値 (Ref.3,4) と比較し、特に Fe については Plechaty 等 (LLNL, Ref.4) の値と 15 MeV 以上でファクター 2 以上の差があることを示している。これについては、Caswell 等は、これは基本核データライブラリーの差異であるとともに、データファイルに無いデータを如何に補ったかによっているものであろうと述べている。

Howerton (LLNL, Ref.7) は新しい ENDL ライブラリー (Dec. 27, 1985) を用いて 0-20 MeV での $Z=1-29$ の元素について KERMA ファクターを計算し数表で結果を与えている。この ENDL ではすべての 2 次粒子放出のスペクトルを補充し、エネルギー保存を良い精度でみたすガンマ線生成断面積が得られており、エネルギー保存は 5% 誤差或は 100 keV 誤差の小さい方の誤差で成り立っていると述べられている。計算法は記されていないが、多分エネルギーバランス法によるものと見られる。Fe についてのこの新しい計算結果は 15 MeV 以上で Caswell (Ref.5) の値と 30% 以内で一致している。

2. DPA 断面積, PKA スペクトル

これらの量の測定は極めて困難であり、計算によって求めることになる。核融合炉の材料照射損傷パラメータとして主に DPA が用いられるが、有賀、白石 (Ref.5) によると、模擬照射場での照射結果を核融合炉での照射と関連づけるためには、PKA スペクトルも損傷パラメータとして重要であると述べている。照射損傷シミュレーションの計算では PKA スペクトルが基礎入力データであるので信頼出来るデータが必要であり、またエネルギー・角度の 2 重微分 PKA スペクトルも望まれている。放射線医学・生物学からは KERMA スペクトルデータも用いるので、従って PKA スペクトルと粒子スペクトルの両方が要求される。

Doran-Graves (Ref.1) の計算が名高いが、核データベースはやや以前のものである。Al, V, Cr, Fe, Fe, Ni, Cu, Zr, Nb, Mo, Ta, W, Pb, 18Cr-10Ni-SS について 20 MeV 以下で DPA 断面積, PKA スペクトルを与えている。

Logan-Russel (Ref.2) は、ENDL ライブラリーを用いて、Al, Ti, V, Fe, Ni, Cu, Zr, Nb, Mo, Ag, Sn, Te, W, Au, Pb について RTNS-1I での中性子スペクトル場 (約 14.5 MeV) での損傷エネルギーと PKA スペクトル図を与えている。

有賀等 (Ref.4) は、TENJIN-2 コードを作成し、C, Al, Si, Cr, Fe, Ni の PKA スペクトル, DPA 断面積を JENDL-3T, ENDF/B-IV を用いて計算し比較している。山野等 (Ref.8) は RADHEAT-V4 コード、高橋 (Ref.3) は PKA-S コードを作成し ENDF/B 型式ファイルから計算を行っている。

上記の諸計算では KERMA ファクターの計算と同様にいずれも 2 粒子放出反応、荷

電粒子スペクトルについて仮定をもうけている。これに対して、核反応理論計算コードからの多粒子放出スペクトル計算値を用いてPKAスペクトルを計算することが最近 Uhl (Ref. 9), McFarlane & Foster (Ref.10)が行っている。Ref. 11 - 13 もそれに関連した論文であり、モンテカルロ的な計算法も用いられている。まだ多くの核種についての広範な計算は行われていないようである。

3. 今後のこと

以上簡単にレビューしたように多くの研究、計算が行われているが従来の計算結果にはいくつかの問題点がある。それらは、

- (1) 2粒子放出スペクトル、荷電粒子スペクトルは GNASH, TNG, PEGASUSなどのコードで計算出来るので、今後はそれを用いるべきであろう。またそれによって、KERMAファクターはエネルギーバランス法を用いずに直接的に計算出来るので、核データファイルのエネルギーバランスの崩れに影響を受けない利点がある。
- (2) 中性子エネルギーが20-50 MeVでは4-5粒子程度の多粒子放出反応が起こる。この場合のPKAスペクトル計算は大変面倒であり、多分モンテカルロ法が有力であろう。
- (3) 軽い核の break-up 反応も含めた測定、理論研究は困難ではあるが、医学上特に必要とされている。最近の研究も carbon に集中しているが今後他の元素についても行う必要がある。

KERMAファクターについての主要参考文献：

- (1) ICRU, Radiation Quantities and Units, Report 19, International Commission on Radiation Units and Measurements, Washington, D.C.1971
- (2) ICRU, Neutron Dosimetry for Biology and Medicine. Report 26, Appendix A, p. 74, International Commission on Radiation Units and Measurements, Washington, D.C.1971
- (3) Abdou, M.A., Roussin, R.W. : MACKLIB, 100-group Neutron Fluence-to-KERMA Factors and Reaction Cross Sections generated by the MAC Compute Program from Data in ENDF Format, ORNL-TM-3995, (1974)
- (4) Plechaty, E.F., Cullen, D.E., Howerton, R. J., Kimlinger, J.R. : Tabular and Graphical Presentation of 175 Neutron Group Constants derive from the LLL Evaluated Nuclear Data Library(ENDL), UCRL-50400, Vol. 16 1, 1976
- (5) Caswell, R.S., Coyne, J.J., Randolph, M.L. : KERMA Factors for Neutron Energies below 30 MeV, Radiation Research 83, 217 (1980)
- (6) Caswell, R.S., Coyne, J.J., Randolph, M.L. : KERMA Factors of Elements and Compounds for Neutron Energies below 30 MeV, Int. J. Appl. Radiat. Isot. 33, 1227 (1982)
- (7) Howerton, R.J. : Calculated Neutron KERMA Factors based on the LLNL ENDL Data file, UCRL-50400, vol. 27, Feb. 1986
- (8) Alsmiller, J.R., Barish, J. : Neutron KERMA Factors for H, C, N, O and Tissue in the Energy Range of 20 - 70 MeV, Health Phys. 33,98 (1977)
- (9) Bassel, R.H., Herling, G.H. : Energy Transfer to Hydrogen by Neutrons from 30 to 100 MeV, Radiation Research 69, 210 (1977)
- (10) ICRU : Neutron Dosimetry in Biology and Medicine. Appendix to ICRU Report No. 27 (1977)
- (11) Brenner, D.J. : Neutron KERMA Values above 15 MeV calculated with a Nuclear Model applicable to light Nuclei, Phys. Med. Biol. 29, 437 (1984)
- (12) Borker, G. et al. : Partial KERMA Factors for Carbon and Oxygen obtained from Cross Section Measurements, Radiation Protection Dosimetry 23,23 (1988)
- (13) Deluca, P.M., Barshall, H.H., Sun, Y., Haight, R.C. : KERMA Factors of Carbon, Aluminum, and Silicon for 15 to 20 MeV Neutrons, Radiation Protection Dosimetry 23,27 (1988)
- Deluca, P.M., et al. : KERMA Factor for 14.1 MeV Neutrons, Rad. Res. 100, 78 (1984)

- (14) McDonald, J.C., Cummings, F.M. : Calorimetric Measurements of Carbon and A-150 Plastic KERMA Factors for 14.6 MeV Neutrons, Radiation Protection Dosimetry 23,31 (1988)
McDonald : Calorimetric Measurement of the Carbon KERMA Factor for 14.6 MeV Neutrons, Rad. Res. 109, 28 (1987)
- (15) Antolkovic, B., Turk, M. : Correlations in Energy and Direction of Two Alpha Particles from the Reaction $n + {}^{12}\text{C} \rightarrow n + 3\alpha$: Measurement and Theoretical Calculation, Radiation Protection Dosimetry 23,19 (1988)
- (16) Morstin, K., Dydejczyk, A., Booz, J. : Nuclear Model Calculations for High Energy Neutron Dosimetry, Radiation Protection Research 23,35 (1988)
- (17) Finlay, R.W., Meigooni, S., Petler, J.S. : Partial KERMA Factors for Neutron Interactions with ${}^{12}\text{C}$ at $20 < E_n < 65$ MeV, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B10,396 (1985).
- (18) Wells, A.H. : Radiation Research 80, 1 (1979)
- (19) Behrooz, M.A. et al. : Phys. Med. Biol. 26, 507 (1981)
- (20) Dymbylow, P.J. : Phys. Med. Biol. 25, 637 (1980)
- (21) Dymbylow, P.J. : Phys. Med. Biol. 27, 989 (1982)
- (22) Romero, J.L. : Proc.Int. Conf. Nuclear Data for Science and Technol., Santa Fe, 1985, p.687 (EXFOR にデータがある.)
- (23) Yamauchi, Y. : Annual Meeting of Japan Atomic Energy Soc., 1989
- (24) Buheler, G. et al : Dosimetric Studies with Non-hydrogenous Proportional Counters in well-defined High Energy Neutron Field, Proc. Fifth Symposium on Neutron Dosimetry, pp. 309-320, ECC, 1984
- (25) Goldberg, E., Slaughter, D.R., Howell, R.H. : Experimental Determination of KERMA Factors at $E_n = 15\text{MeV}$. Report UCID-17789(1978)
- (26) Caswell, R.S., Coyne, J.J., Gerstenberg, H.M., Axton, E.J. : Basic Data necessary for Neutron Dosimetry, Radiat. Prot. Dosim. 23, 11 (1988).
- (27) Gerstenberg, H.M., Caswell, R.S., Coyne, J.J. : Initial spectra of Neutron Induced Secondary Charged Particles, Radiat. Prot. Dosim. 23,44 (1988)

PKAスペクトルおよびDPA断面積についての主要参考文献

- (1) Doran, D.G., Graves, N.J. : Displacement Cross Sections and PKA Spectra : Table and Applications, HEDL-TME 7670 (1976)
- (2) Logan, C.M., Russel, E.W. : Radiation damage at the Rotating Target Neutron Source(RTNS-1) Facility at Lawrence Livermore Laboratory, UCRL-52083(1976)
- (3) 高橋亮人 : 2次粒子放出2重微分断面積と反跳原子スペクトル, 文部省研究費補助金研究成果報告書 「D-T中性子による放射線損傷素過程のモデル化とシミュレーション」, 昭和62年3月, エネルギー特別研究(核融合)総合総括班, p. 71.
高橋亮人 : PKAスペクトルの計算, 同上, 昭和63年3月, p. 25
- (4) 曾根和穂, 白石健介 : 原子炉材料の中性子照射損傷の計算, JAERI-M 6358
- (5) Aruga, T., Shiraishi, K. : Comparison of Neutron Radiation Damage Parameters obtained by using JENDL-3T and ENDF/B-IV Libraries, 1988 Nuclear Data Seminar
- (6) MacFarlane, R.E., Muir, D.W. : New Treatment of Particle Emission in NJOY Radiation Damage Calculations, LANL Progress Report (1983)
- (7) 井出隆裕, 関泰, 飯田洪正 : 核融合炉材料の中性子照射損傷計算, JAERI-M 6672
- (8) Yamano, N., Koyama, K., Minami, K. : Proc. 6th Int. Conf. on Radiation Shielding, May 1983, Tokyo, Vol. 1, p.331 (1983)
- (9) Uhl, M : Calculation of Recoil Spectra resulting from Nuclear Reactions with Multiple Particle Emission, N.S.E 100, 77 (1988)
- (10) MacFarlane, R.E., Foster, Jr., D.G. : J. Nucl. Materials 122 & 123, 1074 (1984)
RECOIL code based on GNASH results
- (11) Parker, D.J., et al. : Phys. Rev. C30, 143 (1984)
- (12) Gadioli, E., Gadioli Erba, E., Asher, J., Parker, D.J. : Phys. Rev. C32, 1214 (1985)
- (13) Puehlhofer, F. : Nucl. Phys. A280, 267 (1977) CASCADE code.

3. PKAスペクトル, KERMAファクター, DPA断面積の計算方法

飯島 俊吾 (東芝)

KERMAファクターとDPA断面積の計算方法を述べる。特に、荷電粒子スペクトルを核反応計算コードで補いながらENDF/B-5形式の核データファイルから統一的に計算する手続きを述べる。また、弾性散乱、離散レベルへの非弾性散乱以外の反応和に対して近似的表式を示す。この近似式は多粒子放出の場合特に有効である。Feについて中性子エネルギー50 MeVまでの計算例を示し、最近のHowertonのKERMAファクターおよびRADHEAT-V4コードによるDPA断面積と比較する。

Shungo IJIMA (Toshiba)

Method of calculation of PKA spectra, KERMA factor and DPA cross section is described which is consistent with the data file in ENDF/B-5 format, supplementing the charged particle spectral data from nuclear cross section code. A new approximate but compact formula was proposed to calculate the KERMA factor and DPA cross sections for the sum over reactions other than the elastic and the inelastic scatterings to discrete levels. This formula is especially suited in case of multi-particle emission. Examples of calculation on iron are given for neutron energy up to 50 MeV. Comparison was made with the KERMA factor calculated by Howerton up to 20 MeV and the DPA cross section with RADHEAT-V4 code up to 15 MeV.

1. 反応のKinematics及びPKAスペクトル

実験室系での入射中性子エネルギー E_N に対して、KERMAファクター $KF(E_N)$ は

$$KF(E_N) = \int \int (E_p + E_k) \sigma(E_R, \epsilon_c, \theta_c) d\epsilon_c d\Omega_c \quad (a)$$

と書かれる。ここで E_k は放出荷電粒子エネルギー、 E_R は入射粒子と標的核の相対運動エネルギー、 $\sigma(E_R, \epsilon_c, \theta_c)$ はC. M系での2重微分断面積である。

DPA断面積は標準NRTモデルでは

$$\sigma_{DPA}(E_N) = (0.8/2\epsilon_d) \int [E_p / (1 + kg(E_p))] \sigma(E_N, E_p) dE_p \quad (b)$$

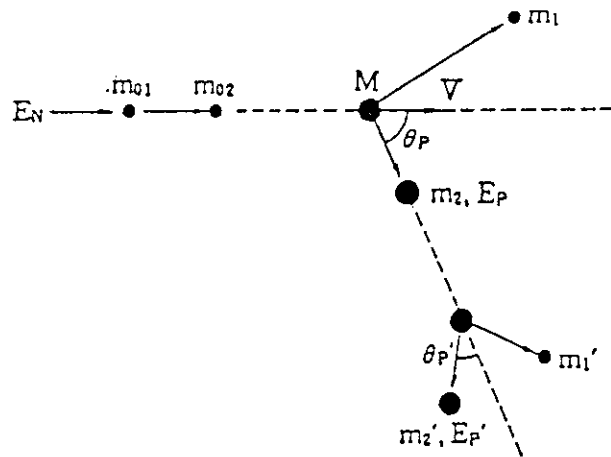
と書かれる。ここで E_P は反跳原子エネルギー、 ε_0 は格子原子弾き出しエネルギー、 k 、 $g(E_P)$ は Lindhard-Robinson の電子的エネルギー損失に対する補正因子、 $\sigma(E_N, E_P)$ は反跳原子スペクトル (PKAスペクトル) である。

PKAスペクトルは重心系での放出粒子スペクトルを実験室系に変換して得られる。入射粒子と静止標的核をそれぞれインデックス 01, 02, 放出粒子と反跳原子を 1, 2で表す。簡単のため $M = m_{01} + m_{02} = m_1 + m_2$ とする。入射エネルギーを E_N とすると、相対運動および重心運動のエネルギーは、

$$E_R = (m_{02}/M)E_N \quad (1)$$

$$E_G = MV^2/2 = (m_{01}/M)E_N \quad (2)$$

この後の議論では反応のQ値以外については入射粒子のことは考える必要は無く、一定速度Vで動いている系 (或は複合核) からの粒子放出について実験室系への変換を考えれば良い。



第1段階反応の Kinematicsの図式を右図に示す。添字 c は重心系での量を表す。

反跳原子の実験室系でのエネルギー、反跳角度をそれぞれ $E_P (= E_2)$ 、 $\theta_P (= \theta_2)$ とする。重心系での粒子運動エネルギーと放出角をそれぞれ ε_c 、 θ_c とする。これらの4つの量の内2つが独立で、2つを与えれば残りの2つは定まる。特に重要な関係式は

$$E_P = (m_2/M)E_c + (m_1/M)\varepsilon_c - 2(m_1 m_2 / M^2 \cdot E_c \varepsilon_c)^{1/2} \mu_c \quad (3)$$

$$\mu_P = \cos(\theta_P) = (1 - \eta_c \mu_c) / (1 + \eta_c^2 - 2\eta_c \mu_c)^{1/2} \quad (4)$$

ここで $\eta_c = v_{c2}/V = [(m_1/m_2)(\varepsilon_c/E_c)]^{1/2} \quad (5)$

放出粒子の実験室系でのエネルギー E_K は m_1, m_2 を入れ換え、かつ μ_c を $-\mu_c$ とおいて得られ、

$$E_K = (m_1/M)E_c + (m_2/M)\varepsilon_c + 2(m_1 m_2 / M^2 \cdot E_c \varepsilon_c)^{1/2} \mu_c \quad (6)$$

従って $E_p + E_x = E_c + \varepsilon_c$

γ 線放出に対する反跳は

$$E_p = E_c + \varepsilon_\gamma^2/2MC^2 - 2 (E_c \varepsilon_\gamma^2/2MC^2)^{1/2} \mu_c \quad (7)$$

Kinematics図から分かるように、 $\eta_2 = v_{c2}/V < 1$ の時には、一つの反跳角度に対して二つの反跳エネルギー E_p が許される。(但し切線条件 $1 \geq \mu_c \geq 1 - \eta_c^2$ の範囲で。)従って、離散レベルへの遷移 ($\eta_c = \text{const}$)で且つ $\eta_c < 1$ の場合は1つの角度 μ_c にたいして、PKAスペクトルには

$$E_p = (m_2/M)E_c [\mu_c \pm (\eta_c - 1 + \mu_c)^{1/2}]^2$$

で定まる2つのデルタ関数ピークが現れる。

重心系と実験室系の断面積の変換は

$$\sigma(E_N, E_p, \theta_p) = (M/m_1)^{3/2} (E_p/\varepsilon_c)^{1/2} \sigma(E_R, \varepsilon_c, \theta_c) \quad (8)$$

$$\sigma(E_N, E_p) = \pi M/(m_1 m_2)^{1/2} \int d\varepsilon_c (1/\varepsilon_c E_c)^{1/2} \sigma(E_R, \varepsilon_c, \theta_c) \quad (9)$$

煩雑さを避けるため、右辺での重心系断面積に対して特に添字(c.m.)は付けない。

(8)は一般的な変換であり、(9)は角度積分したPKAスペクトルを与える。

γ 線放出の場合は(8)に対応して

$$\sigma(E_N, E_p, \theta_p) = (MC^2/\varepsilon_\gamma) (2MC^2 E_p/\varepsilon_\gamma)^{1/2} \sigma(E_R, \varepsilon_\gamma, \theta_\gamma) \quad (10)$$

なお、(2)-(10)式は入射粒子、標的核に無関係であるので自然崩壊や第二段階以後の粒子の逐次放出にもそのまま適用出来る。

2粒子放出の場合は、PKAスペクトルは(9)式でのJacobianを2度乗じた2重積分で表される。そのさい、第1粒子、第2粒子スペクトルの各々が必要である。3粒子以上の放出では解析的計算が大変複雑に成ると共に、各段階の粒子スペクトル情報をすべて持っていなければならないので、多分モンテカルロ法的方法が適しているであろう。

2. KERMAファクターの計算

入射中性子エネルギー E_N に対して、KERMA ファクター $KF(E_N)$ は ((a)式再掲)

$$KF(E_N) = \sum_x \int \int (E_p + E_k) \sigma_x(E_R, \varepsilon_c, \theta_c) d\varepsilon_c d\Omega_c \quad (11)$$

ここで x についての和は反応和を表す。 E_k は放出荷電粒子エネルギーである。(11)式は多粒子放出反応についてはsymbolicな書き方であり、例えば $(n, n\alpha)$ 過程では (n, α) , $(n, n\alpha)$, $(n, \alpha n)$ のそれぞれについての和である。

ところで、

$$\int \sigma(E_N, E_p) dE_p = \int \int \sigma(E_R, \varepsilon_c, \theta_c) d\varepsilon_c d\Omega_c = \sigma(E_R) \quad (12)$$

であるから、(11)は、

$$KF(E_N) = \sum_x (\bar{E}_p + \bar{E}_k) \sigma_{n,x}(E_R) \quad (13)$$

と書ける。ここで \bar{E}_p, \bar{E}_k は重心系2重微分断面積による平均値で、(2), (5), (6)式から、

$$\bar{E}_p = (m_2/M)E_c + (m_1/M)\bar{\varepsilon}_c - 2(m_1 m_2/M^2 \cdot E_c \varepsilon_c)^{1/2} \bar{\mu}_c \quad (14)$$

$$\bar{E}_k = (m_1/M)E_c + (m_2/M)\bar{\varepsilon}_c + 2(m_1 m_2/M^2 \cdot E_c \varepsilon_c)^{1/2} \bar{\mu}_c \quad (15)$$

$$\bar{E}_p + \bar{E}_k = E_c + \bar{\varepsilon}_c$$

$\bar{\mu}$ は散乱角余弦の放出粒子エネルギー・角度についての平均を表す。2粒子放出の時は、上式の右辺の E_c を左辺の E_p で置き換えて新しい E_p', E_k' が得られる。第2粒子の角分布を C 。M系で等方とすると結果は簡単になり、

$$\bar{E}_p' = (m_2'/M')\bar{E}_p + (m_1'/M')\bar{\varepsilon}_c' \quad (14')$$

$$\bar{E}_k' = (m_1'/M')\bar{E}_p + (m_2'/M')\bar{\varepsilon}_c' \quad (15')$$

$$\bar{E}_p' + \bar{E}_k' = \bar{E}_p + \bar{\varepsilon}_c$$

入射エネルギーがあまり高くなければ第2粒子のエネルギーも低いので、第2反跳は小さく $\bar{E}_P' \approx \bar{E}_P$ と見なせる。ただし第2粒子が α 粒子の場合は必ずしも第2反跳は小さくない。3粒子以上の放出の場合も同様の手続きで得られる。

γ 線放出の場合は角分布が等方であるとし、 γ 線の多重度を Y_γ とすると、

$$\bar{E}_P = E_c + Y_\gamma \bar{\epsilon}_\gamma^2 / 2MC^2 \quad (16)$$

(16)では、平均エネルギー $\bar{\epsilon}_\gamma$ のガンマ線が1ヶ出る度に反跳が追加されるとしている。この仮定が良いかどうかは問題があろう。右辺第2項は $\bar{\epsilon}_\gamma = 5$ MeV, $Y_\gamma = 2$ とすると中重核では 500 eV 程度である。放射捕獲反応が弾性散乱に比べて重要な低エネルギー領域では(16)の右辺第1項は第2項に比べてほぼ無視出来る。他方、(n,n' γ)反応等の場合は、右辺第1項は(n,n')の反跳エネルギーであり、中重核では数10 keV 以上であるから逆に右辺第2項を無視出来る。すなわち、捕獲反応以外ではガンマ線放出による第2反跳は無視して良い。このことは計算を著しく簡単化する。

KERMA ファクター はまたエネルギーバランスを用いて

$$KF(E_N) = \sum_x (E_N + Q_{n,x}) \sigma_{n,x}(E_N) - [\bar{\epsilon}_N \sigma_{n-prompt}(E_N) + \bar{\epsilon}_\gamma \sigma_{\gamma-prompt}(E_N)] \quad (17)$$

と表せる。しかしこの計算法はエネルギーバランスのわずかの崩れに敏感である。というのは、荷電粒子放出があまり起こらない低エネルギーでは KERMA ファクターは $(E_N/A) \sigma_{n,x}$ の程度である。(17)の右辺の各項は $E_N \sigma$ の程度であるから、中重核 ($A=50$) ではエネルギーバランスが2%崩れると結果は100%変動することになる。従って低エネルギーでは(13)式のように直接に計算するのが良い。

以下、反応ごとの E_P , E_K の表式を記す。

$$\text{放射捕獲} : \bar{E}_P = E_c + (\bar{\epsilon}_\gamma^2 / 2MC^2) Y \quad (18)$$

$$\text{弾性散乱} : \bar{E}_P = [2A/(A+1)^2] E_N (1 - \bar{\mu}_c) \quad (19)$$

離散レベルへの非弾性散乱 :

$$\begin{aligned} \bar{E}_P &= (m_2/M) E_c + (m_1/M) \epsilon_{c1} - 2 (m_1 m_2 / M^2 \cdot E_c \epsilon_{c1})^{1/2} \bar{\mu}_{c1} \quad (20) \\ \epsilon_{c1} &= E_R + Q_1 \end{aligned}$$

連続レベルへの非弾性散乱および他の粒子放出反応和 :

$$KF(E_N) = (m_2/M) \sigma_R(E_N) + (m_1/M) \bar{\epsilon}_N \sigma_{n-p,prod}(E_N) + \sum_x \bar{\epsilon}_x \sigma_{x-p,prod}(E_N) \quad (21)$$

ここで

σ_R = 反応断面積和 (捕獲, 弾性散乱, 離散レベルへの非弾性散乱を除く)

$\sigma_{x-p,prod}$ = 粒子生成断面積,

ϵ_x = C.M系での放出粒子平均運動エネルギー.

(21)式の導出のさい(14'), (15')を用いて粒子が逐次的に放出されること, 及び $M \gg m_1$ すなわち複合核質量が放出粒子質量に比べて充分大きいことを仮定している。従って, breakup 反応および軽い核に対しては成り立たない。

(18)-(21)式において, 荷電粒子の平均エネルギーは GNASH, TNG, PEGASUS などのコードで出力される。他の量はすべて ENDF-5 形式のデータファイルから得られるので核データファイルと consistent に KERMA ファクターを計算出来る。

3. DPA断面積の計算

DPA断面積は標準NRTモデルでは((b)式再掲)

$$\sigma_{DPA}(E_N) = (0.8/2E_d) \sum_x \int [E_p / (1 + k g(E_p))] \sigma(E_N, E_p) dE_p \quad (22)$$

ここで x は反応を表す。 E_d は格子原子弾き出しエネルギーで結晶により約 20-60 eV である。 $k, g(E_p)$ は Lindhard-Robinson の電子的エネルギー損失に対する補正因子で

$$k = 0.13372 Z^{2/3} A^{1/2}, \quad (23a)$$

$$g(E_p) = 3.4008 \epsilon^{1/6} + 0.40244 \epsilon^{3/4} + \epsilon, \quad (23b)$$

$$\epsilon = E_p / (86.931 Z^{7/3}), \quad (E_p \text{ in eV}) \quad (23c)$$

補正因子 $1 / (1 + k g(E_p))$ を Fig. 1 に示す。この補正因子が E_p とともに比較的ゆっくり変わることから, 積の平均を平均の積で近似すると(22)は

$$\sigma_{DPA}(E_N) = (0.8/2E_d) \sum_x [\bar{\epsilon}_{px} / (1 + k g(\bar{\epsilon}_{px}))] \sigma_x(E_N) \quad (24)$$

この近似は弾性散乱，離散レベルへの非弾性散乱に対しては30%程度の過大評価になるので，これらの場合には(22)に戻ってPKAスペクトルから計算することが必要である。

それ以外の反応にたいしては(24)は数%の誤差で成り立つので，KERMAファクターの計算と同様にして，

$$\sigma_{DPA}(E_N) = (0.8/2E_d) [\bar{E}_P / (1 + k_g(\bar{E}_P))] \sigma_R(E_R) \quad (25)$$

ここで，

$$\bar{E}_P \sigma_R(E_R) \cong (m_2/M) E_c \sigma_R(E_N) + \sum_X (m_1/M) \bar{E}_X \sigma_{X-PKAs}(E_N) \quad (26)$$

(26)式の導出及び記法はKERMAファクターの場合の(21)式と同様である。

4. 計算例

Feについての計算例を示す。

Fig. 2 に15 MeVでの弾性散乱角分布およびに対するPKAスペクトルを，Fig. 3 に典型的な離散レベルへの非弾性散乱時のPKAスペクトルを示す。いずれもJENDL-3のNat. Feファイルによるもので，積分して1に規格化している。JENDL-3では，図示した $Q = -825$ keV, -2.11 MeVレベルへの非弾性散乱は結合チャンネル法で計算されたもので非等方性が強く，PKAスペクトルにもそれが反映している。Fig. 3中の点線は等方散乱を仮定した時の値である。

Fig. 4 は弾性散乱，離散レベル非弾性散乱に対するPKA平均エネルギー \bar{E}_P を入射中性子エネルギーの関数として示したものである。Fig. 5 はEGNASHコードで計算した中性子エネルギー50 MeVまでの放出中性子，陽子， α 粒子のC.M系での平均エネルギーを示す。

これらの値を用いて計算したKERMAファクターをFig. 6～8に，DPA断面積をFig. 9～10に示す。Fig. 8から判るように高いエネルギーでのKERMAファクターの主成分は荷電粒子エネルギーであるので，計算は核反応計算モデルに依存する。一方，DPA断面積の主成分はFig. 10から弾性散乱と σ_R 項が支配的であるので，中性子光学ポテンシャルを与えればほぼ定まり，核反応計算の詳細にあまり依存しない。

5. むすび

多粒子放出も含めて、DPA断面積、KERMAファクターを核データファイルおよび荷電粒子スペクトルの補助的計算からENDF-5型式ファイルに基づいて簡明に求める方法を述べた。しかし幾つかの問題点がありそれを以下に述べる。

- (1) ここで述べた反応和についての表式は軽い核にたいしては修正を要する。
- (2) breakup 反応が起こる場合の計算法は未解決である。
- (3) 多粒子放出時のPKAスペクトル計算の方法が未解決である。
- (4) 軽い核および合金、セラミックスでは Lindhard-Robinson の式の修正が必要とされている。
- (5) この分野の問題に基礎核データから本格的に取り組むのはわが国では初めてのことであり、従来の評価値と比較しながら研究を積むことが必要である。

参考文献 :

- (1) Yamamuro, N. : A Nuclear Cross Section Computational System with Simplified Input-Format Version I (SINCROS-I), JAERI-M 88-140 (1988)

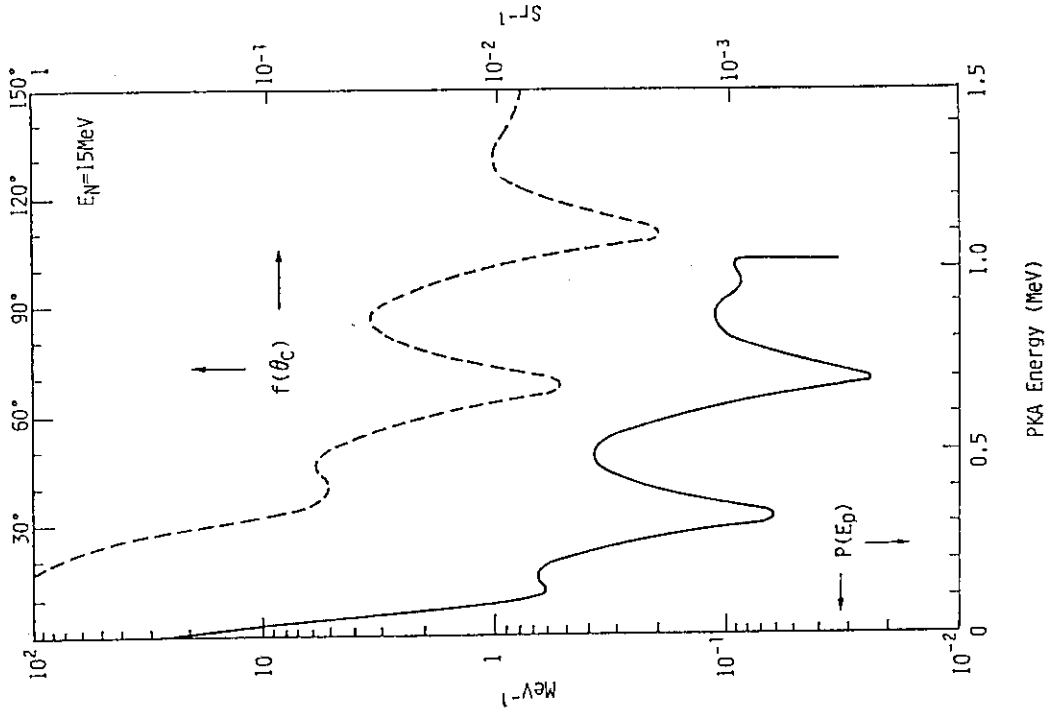


Fig. 2 Normalized PKA spectrum and angular distributions for natural iron from elastic scattering at $E_n = 15$ MeV.

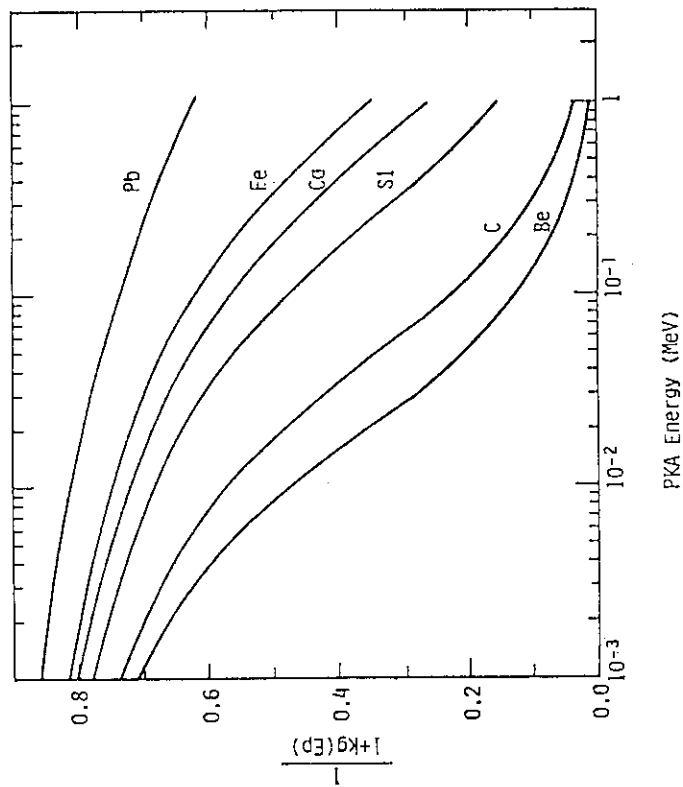


Fig. 1 Correction factor by Lindhard and Robinson.

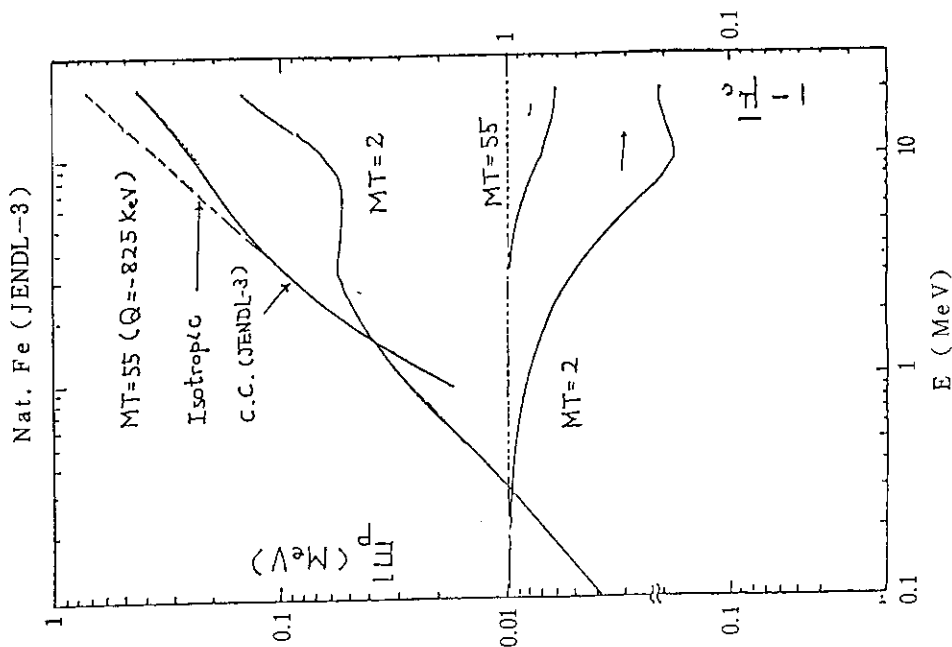


Fig. 4 Average PKA Energies for Elastic Scattering and Inelastic Scattering to Discrete Levels from Iron as a Function of Incident Neutron Energy.

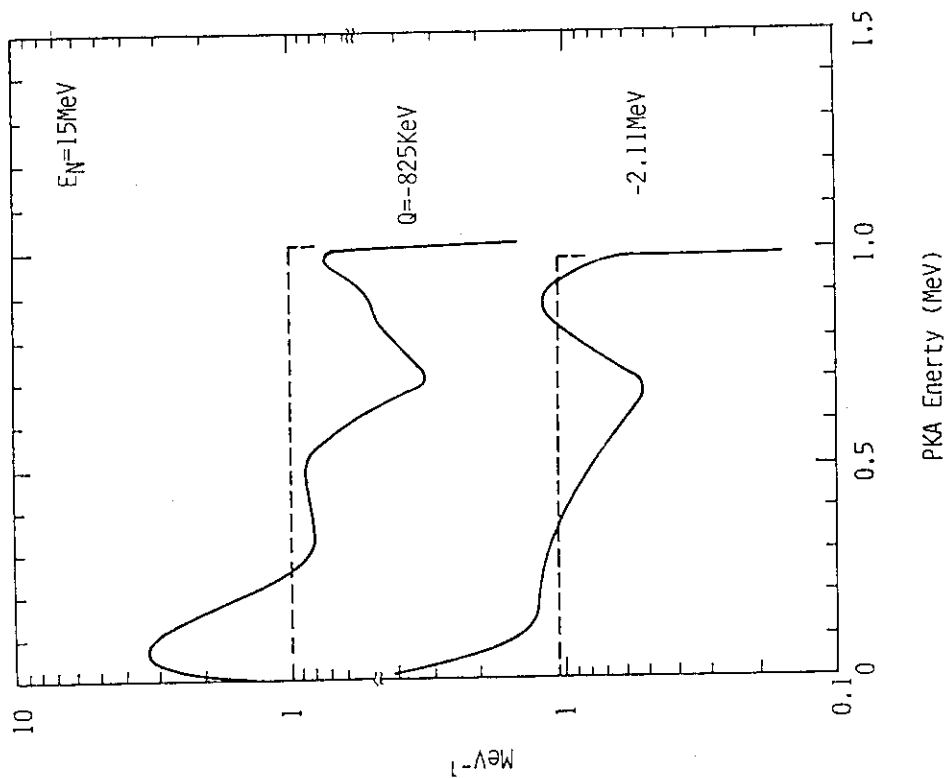


Fig. 3 Normalized PKA spectra for natural iron. Inelastic scattering to 825 keV and 2.11 MeV levels at $E_n = 15$ MeV. Dashed lines are those calculated by assuming isotropic angular distributions.

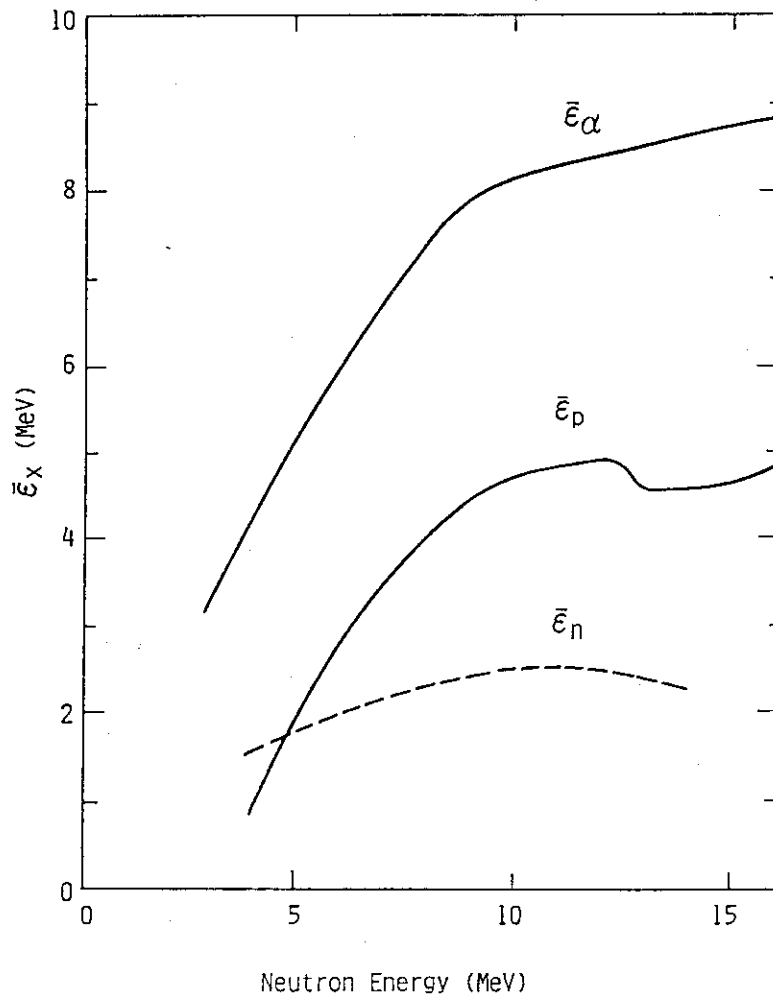


Fig. 5 Average energies of emitted particles as a function of incident neutron energy.

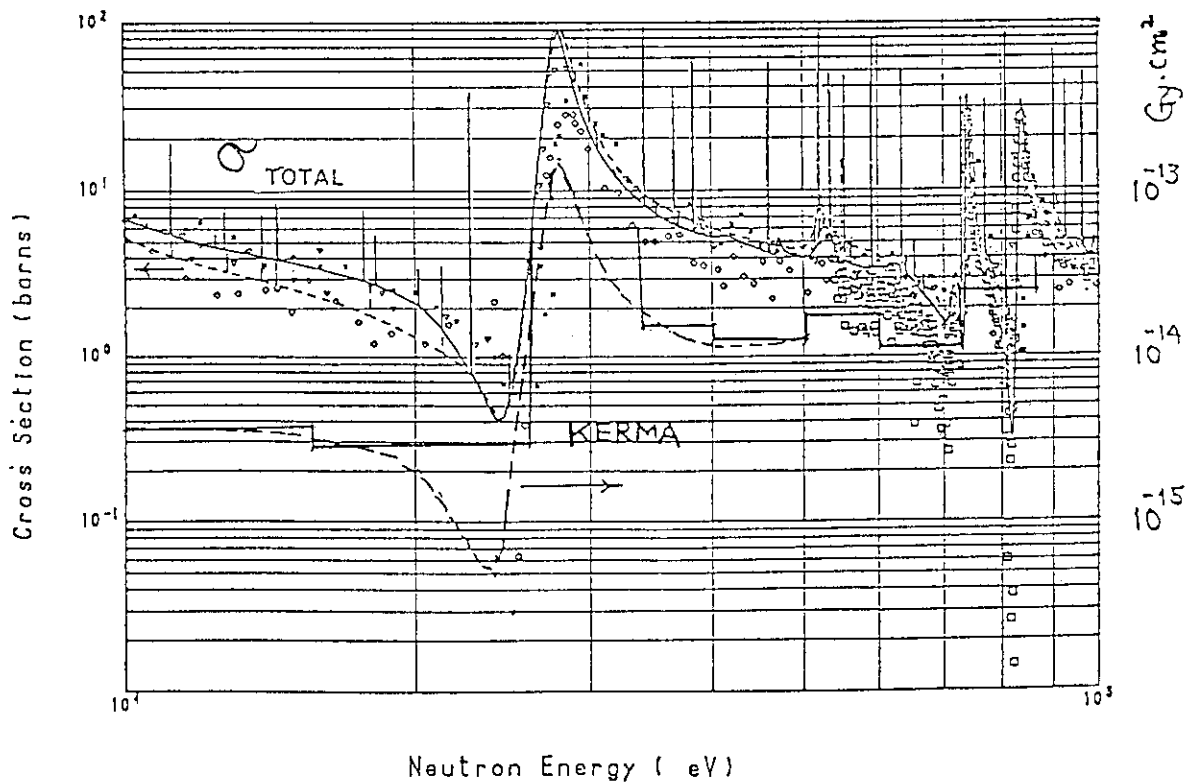
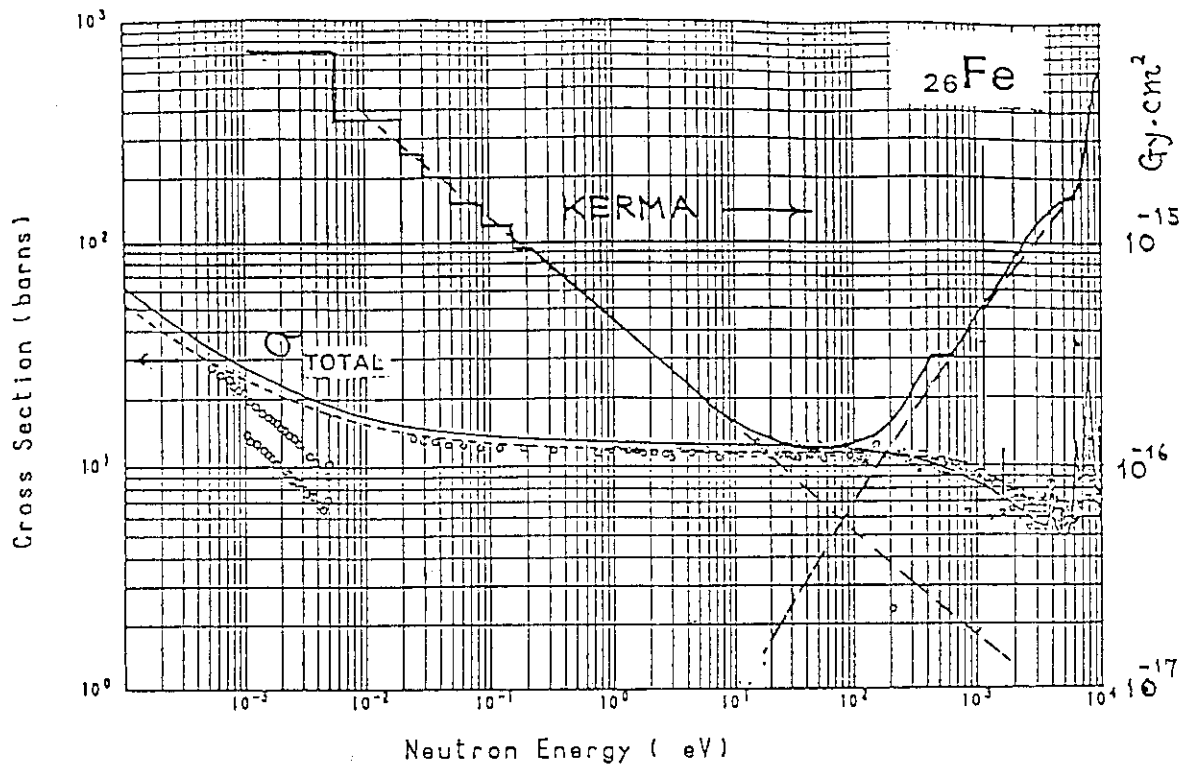


Fig. 6 Kerma Factor for Natural Iron for Neutron Energies below 100 keV.
 ----- Present calculation, histogram : Howerton's calculation.

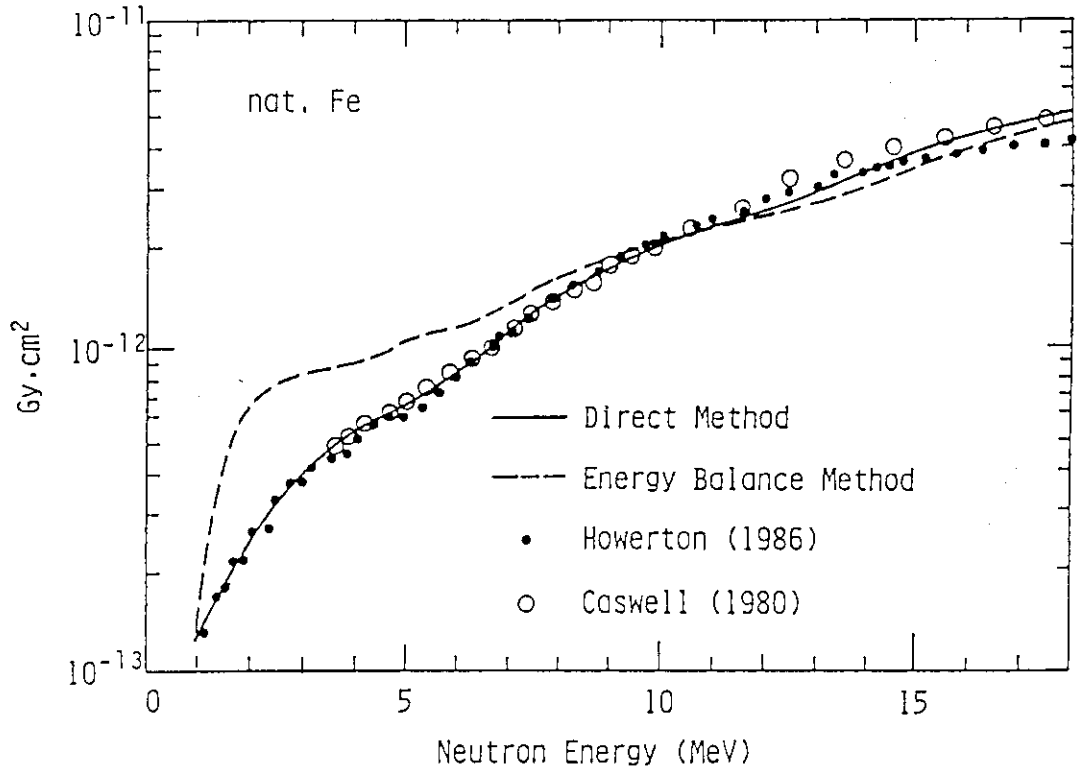


Fig. 7 Kerma factor of natural iron below 20 MeV. Comparison of the present calculation with those by Howerton and Caswell et al.

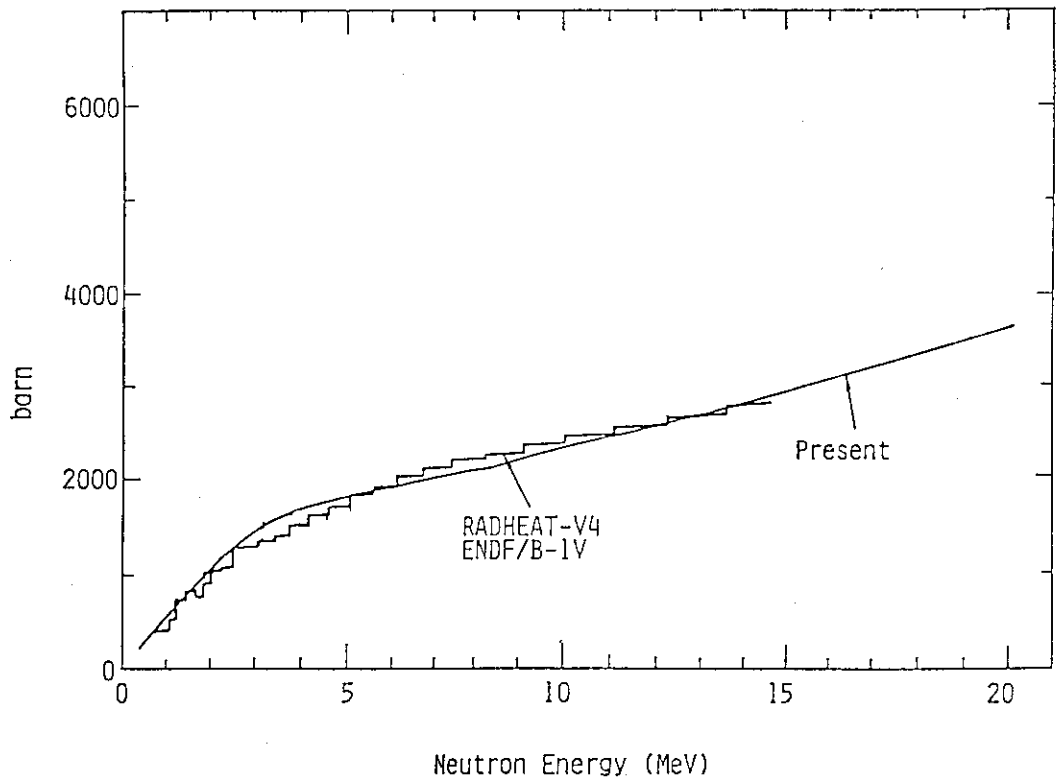


Fig. 9 DPA Cross Section for Natural Iron. Comparison with the Calculation by RADHEAT-V4 Code.

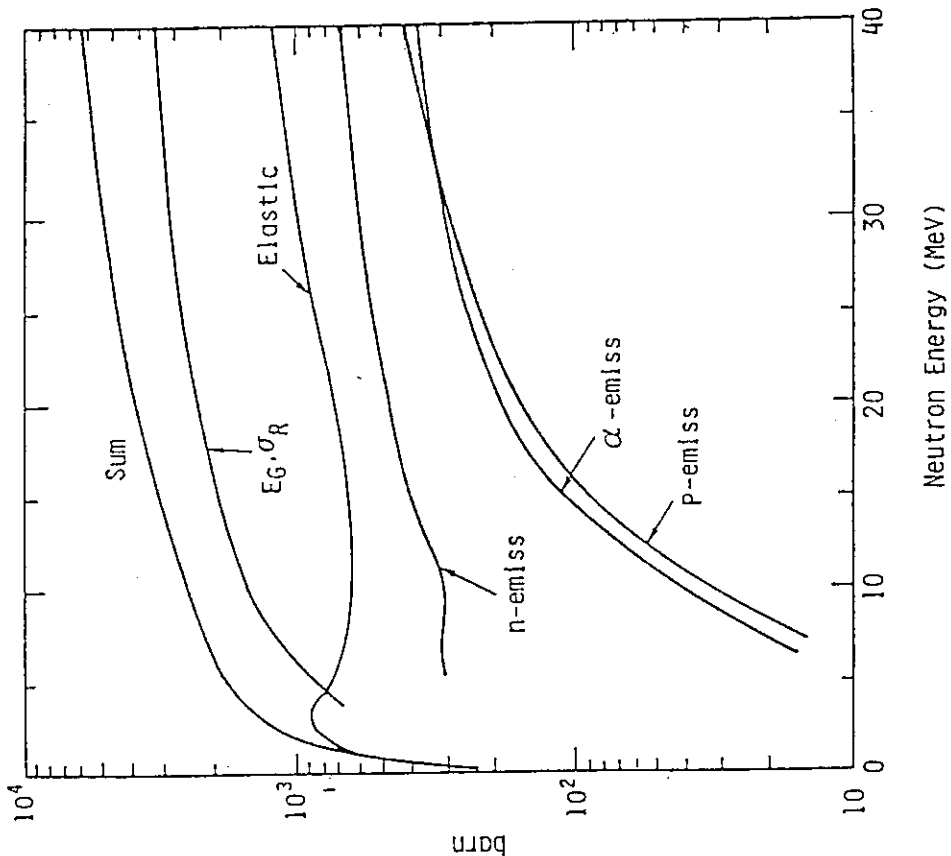


Fig. 10 DPA cross section and its components of natural iron for neutron energies below 50 MeV.

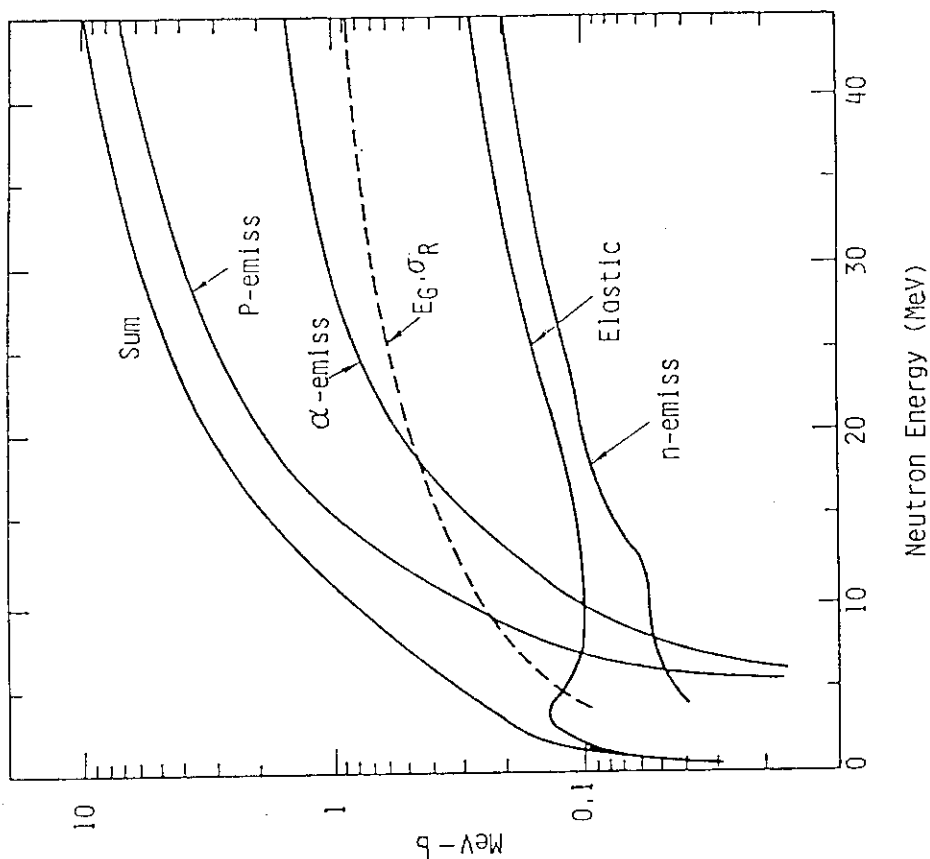


Fig. 8 Kerma factor and its components of natural iron for neutron energy up to 50 MeV.

4. PKA/KERMA データファイル

川合 將義 (東芝)

PKA/KERMA データファイルの構想とそのファイル構造について記す。対象は、水素からビスマスまでの47核種であり、データの処理の程度により2種類のファイルに分ける。即ち、ファイルは、生の核データに近いPKAスペクトル、damage energy スペクトル、荷電粒子スペクトル格納した1次ファイルデータ、また、炉定数的なKERMA ファクターやDPA 断面積を収納した2次ファイルからなり、各々のデータの格納形式データ処理について記す。

PKA/KERMA Data File

Masayoshi KAWAI (Toshiba Corporation)

Scope of the PKA/KERMA data file and its file structure are described. The file will contain the PKA and damage data for 47 materials. The data are categorized into two classes according to data procession: less processed data such as PKA, damage energy and charged particle spectra will be stored in the primary file, and processed data such as KERMA factor and DPA cross sections be in the secondary file. The input format basically according to the ENDF-6 format is also described in detail.

1. 格納量

1.1 対象元素

PKAデータおよびそれを処理して得た2次的なデータのKERMA ファクターやDPA 断面積(あるいは損傷エネルギースペクトル)は、材料の中性子損傷評価研究、核融合炉、その他照射材料での発熱評価、放射線化学や中性子ドジメトリーでの放射線計測、さらには中性子照射医療等の医学・生物学の分野で利用される。そのため、対象元素は、下記に示すように生体・有機物構成の水素、炭素をはじめ、構造材、半導体を多くのものが含まれる。

H, Li-6, Li-7, Be, B-10, B-11, C, N, O, F, Na, Mg, Al, Si, P,

S, Cl, K, Ca, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Ge, Ga, Ag, Zr, Nb,
Mo, Ag, Cd, Sn, Sb, Ba, Eu, Gd, Hf, Ta, W, Au, Pb, Bi.

1.2 格納データの種類

関係するデータには、最も基本的な1次データとして、PKAスペクトルやPKA断面積とともにKERMAファクターの構成要素の2次荷電粒子スペクトルが挙げられる。また、実際のユーザーが直接使用するDPA断面積(損傷エネルギースペクトル)やKERMAファクターなど前者の1次データを処理して得た2次的なデータがある。しかし、後者の特にKERMAファクターは、PKAスペクトルや2次荷電粒子スペクトルのデータ、あるいは、それらの平均エネルギーや放出角度の平均値 $\bar{\mu}$ を用いて第3章にて示した簡単な式で求めることができる。従って、1次データファイルでは、全体の容量を節約するために、上記の2次データを格納の対象から除外する。一方、DPA断面積は、PKAが最終的に静止するまでに結晶格子から原子を弾き出して作るフレンケル対(自由欠陥)の生成断面積で定義され、通常Norget-Robinson-TorrensモデルによってPKAスペクトルとの関係式が与えられている。その式の中には、結晶軸に対する異方性が強く、物理的によく決まらない原子弾き出しエネルギー(10eV~90eV、結晶により数100eVの値も観測されている)や比例係数が含まれている。そこで、そのような不確かさを除いたDamage energy spectrumを1次データファイルに与える。

従って、格納する1次データについて改めて示すと以下の通りである。

(1) PKA spectrum (2重微分断面積)

$$\begin{aligned} \sigma(E_N, E_P, \mu_P) &\equiv \left| \frac{\gamma(E_C, \mu_C)}{\gamma(E_P, \mu_P)} \right| \sigma_{cm}(E_R, E_C, \mu_C) \\ &= \sigma(E_N) f(E_N, E_P, \mu_P) \\ &= \sigma(E_N) \sum_i y_i(E_N) h_i(E_N, E_P, \mu_P) \end{aligned} \quad (1)$$

但し、 $\sigma(E_N)$: 入射エネルギー E_N による中性子反応断面積

$y_i(E_N)$: 対象とする反応についてチャンネル i への分岐比。

$$\sum_i y_i = 1.0$$

$h_i(E_N, E_p, \mu_p)$: チャンネル i で生成された PKA エネルギーと角度についての規格化された分布

チャンネルは、放出粒子が2ヶ以上の場合に、例えば (n, np) 反応と (n, pn) 反応を識別するものである。

(2) 2次荷電粒子の実験室系でのスペクトル

表式は (1) 式と同様であるが、 y_i と $f(E_N, E_p, \mu_p)$ の総数は1でなく、粒子の多重度となる点が異なる。

Damage energy spectrum については、

$$\begin{aligned} P(E_N, E_p) &= E_D(E_N) \sigma(E_N, E_p) \\ &= \sigma(E_N) \bar{E}_D(E_N) H(E_N, E_p) \end{aligned} \quad (2)$$

$$E_D(E_p) = E_p / (1 + k g(\varepsilon)) \quad (3)$$

但し、

$$\bar{E}_D(E_N) = \int \int E_D(E_p) f(E_N, E_p, \mu_p) dE_p d\mu_p$$

$$H(E_N, E_p) = \int E_D(E_p) f(E_N, E_p, \mu_p) d\mu_p / \int \int E_D(E_p) f(E_N, E_p, \mu_p) dE_p d\mu_p$$

$$k = 0.13372 Z^{2/3} A^{1/2}$$

$$g(\varepsilon) = 3.4008 \varepsilon^{1/6} + 0.40244 \varepsilon^{3/4} + \varepsilon$$

$$\varepsilon = E_p / (86.931 Z^{7/3}) \quad (E_p \text{ in eV})$$

なお、2次データのKERMAファクター KF とDPA断面積 σ_{DPA} は以下の式によって容易に求められる。

$$KF(E_N) = \int \int (E_{\text{changed particle}} + E_p) \sigma(E_N, E_p, \mu_p) dE_p d\Omega_p \quad (4)$$

$$\sigma_{DPA}(E_N) = \int \frac{\kappa}{2E_d} P(E_N, E_p) dE_p \quad (5)$$

但し、 E_0 : 原子弾き出しのしきいエネルギー
 $\kappa = 0.8$

なお、KERMA ファクターは、評価済み核データファイルからエネルギーバランス法を用いても計算でき、例えば、NJOYコードでは、そのアルゴリズムが組まれている。

PKAスペクトル、2次荷電粒子スペクトルおよび Damage energy spectrum を(1)、(2)式のように反応断面積とエネルギー・角度についての相対分布で表わした場合、それぞれの入射中性子エネルギーに対する変化は、反応断面積が共鳴エネルギー域で激しく変化するのに比べてスペクトルの変化はゆるやかといえる。従って、スペクトルや角度分布を代表的な入射エネルギーで与えて、その間を内挿する方法によっても精度がかなり良く保たれる筈である。従って、PKA/KERMAファイルはそうした形式で与えることによってデータ量をかなり少なくすることが可能である。また、そのことにより、相対分布のデータを他の断面積評価値によるPKA断面積評価値に融通することも可能となる。

2. 格納形式

PKA/KERMAファイルには、PKAや2次荷電粒子といった、これまでの ENDF/B-IVやENDF/B-Vで扱わなかった粒子のデータで、しかもそれらのエネルギーと角度に関する分布(2重微分型)を扱うことが必要である。そうした量を扱う目的で最近 ENDF-6 の入力形式が報告されている。これは、放出粒子はもとより、入射粒子についても中性子以外のものをサブライブラリーの形で扱えるようになっている。そして、粒子のエネルギーおよび角度分布の入力についてはファイル6(MF=6)にかなり融通性に富んだ入力形式が準備されている。従って、PKA/KERMAファイルの格納形式としては以下に示すように ENDF-6 のものを採用する。

まず、ENDF-6 のファイル構造は、Fig. 1に示すように、

テーブル>物質(MAT)>ファイル(MF)>セクション(MT)

となっている。MAT は標的核又は元素を示すものであり、次式で与える。

$$\text{MAT} = \text{原子番号} \times 100 + \text{MM}$$

ここで、MMは天然元素に対し0、また天然に存在する同位体の軽い順番に25から3番置きに与える。例えば、U-235 は、ウランで 2 番目としてMAT=9228 を与える。3番置きにしたのは、準安定核を 2ヶまでとれることを意味する。ファイル MF については、Table 1 に

示すように現在 40番まで割り当てられている。大別すると以下ようになる。

- MF=1 : 一般情報 (評価プロセス、ファイルの内容、 ν 等)
- MF=2 : 中性子共鳴パラメータ
- MF=3~7 : 核反応断面積データ
- MF=8~10 : 放射化及び崩壊データ
- MF=12~15: 2次ガンマ線生成核データ
- MF=23,27 : 光原子反応
- MF=31~40: MF=1(ν)~10のデータの共分散データ

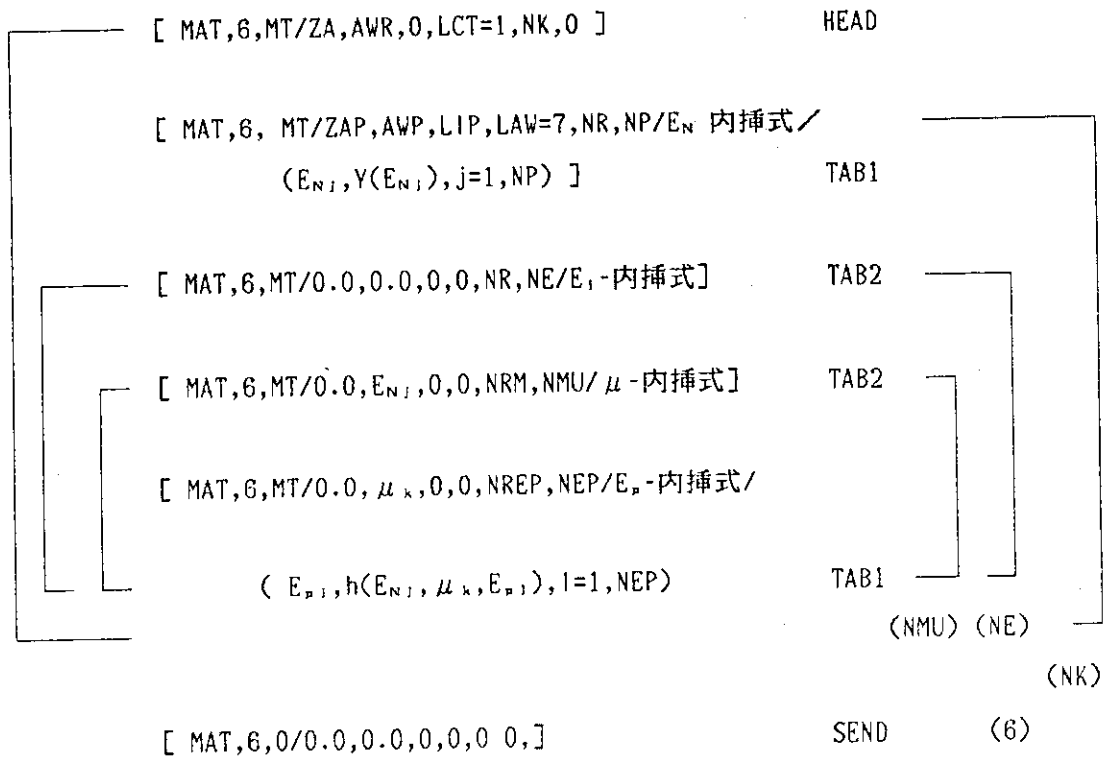
特にMF=6 (MF6と略称) は、前述したように核反応による2次粒子のエネルギーと角度に関する分布を与えるもので、核子だけでなく2次ガンマ線や反跳核も扱える。従って、(1)式の P K A および2次荷電粒子スペクトルは、MF6で与える。一方、2次的なデータの damage energy spectrum については、上記のMFの中に定義されていないため、60番台で与えることにする。

セクション番号(MT)は反応の種類を識別するものであるが、基本反応について MT=1~116 が与えられている。

結局、P K A / K E R M A ファイルのファイル構成は以下の通りである。

- MF2, MF3 : 中性子反応断面積 $\sigma(E_N)$
- MF6 : P K A, 荷電粒子スペクトル (2重微分断面積データ)
 $[y_i(E_N), h_i(E_N, E_P, \mu_P)]$
- MF66 : damage energy スペクトル (2重微分断面積データ: 等方分布)
 $[E_D(E_N), P(E_N, E_P)]$

なお、MF2、MF3のデータは、P K A と荷電粒子スペクトル計算のベースとなる核反応断面積であり、例えば JENDL-3 の値をそのまま採用すればよい。そして、P K A 又は荷電粒子のスペクトル $[y_i(E_N), h_i(E_N, E_P, \mu_P)]$ は、MF6 の入力形式に従って以下のように与える。その表現方法は、ENDF-6 の仕様と処理マニュアル (ENDF-102) に従っている。



但し

- LCT = 1 : データが実験室系で与えられていることを示す。
(0 なら重心系)
- NK : サブセクションの数 (PKA と荷電粒子チャンネル別に与える。)
- ZAP : 放出粒子の ZA 値
Z=0 → 光子、A=0 → e⁻, e⁺、 Z>0 で A=0 → PKA
- AWP : 中性子に対する放出粒子の質量比

また、LIP は 粒子又はチャンネル識別番号であり、下記のように与える。

0 : PKA	13 : (n,np)
1 : (n,n)	31 : (n,pn)
2 : (n,r)	17 : (n,nα)
3 : (n,p)	71 : (n,αn)
4 : (n,d)	37 : (n,pα)
5 : (n,t)	73 : (n,αp)
6 : (n,He-3)	
7 : (n,α)	

さらに、LAW = 7 は 実験室系での角度・エネルギー分布 $h(E_N, E_p, \mu_p)$ を特定の式でなく、数値表で与えることを示す。そのデータ入力形式が (6) 式で与えた方式である。

一方、Damage energy スペクトルの $E_D(E_N)$ 、 $P(E_N, E_p)$ は等方分布を仮定し、DDX の形で与える。その場合、(6) 式の入力形式の中で定数は以下のように置く。

$$NK = 1 \quad (\text{PKA についてのみ与える})$$

$$LIP = 0$$

$$y(E_N) = E_D(E_N)$$

$$NMU = 2 \quad (\mu_1 = -1.0, \mu_2 = +1.0)$$

$$h(E_N, \mu, E_p) = \frac{1}{2} P(E_N, E_p)$$

なお、2次ファイルとしては、KERMAファクター、DPA断面積が含まれる。前者のKERMAファクターはEnergy release parameter $E\sigma$ として $MT'=301\sim 350$ が用意されているため MF3 に全体の寄与を、また MF6 に LFW=1 としてチャンネル別の寄与を与える。具体的には、(6) 式の HEAD と TAB1 レコードでのみ与える。即ち、

```
[ MAT,6,MT'/ZA,AWR,LC,LCT=1,NK,0 ]           HEAD
[ MAT,6,MT'/ZAP,AWP,LIP,LAW=1,NR,NP/EN内挿式/
  (ENi,yi(ENi),j=1,NP)] TAB1,   i=1,NK       TAB1
[ MAT,6,0/0.0,0.0,0.0,0,0,0 ]                 SEND   (7)
```

但し、
 LC = 0 : エネルギー・バランス法による計算
 1 : (4) 式の kinematics による計算
 2 : E_p, E_γ を用いた簡便 kinematics 計算法、

$$y_i(E_N) = \overline{E\sigma}_i(E_N) / \sum_j \overline{E\sigma}_j(E_N)$$

なお、セクション番号 MT' は、反応を識別するための基本的なセクション番号 $MT(=1\sim 116)$ に 300 を加えた数字で与える。例えば、弾性散乱ならば $MT'=302$ で与える。

DPA 断面積は、damage energy E_D に NRT モデルの係数 $\kappa/2E_0$ と反応断面積の積で得られる。このデータの必要性はなお検討を要するが、一応 MF63 を用意し、そのデータの入力形式は MF3 に準じて与える。即ち

```

[ MAT,MF63,MT/ZA,AWR,0,0,0,0 ]          HEAD
[ MAT,MF63,MT/ $\kappa$ ,Ed,0,0,NR,NP/E-内挿式/
  (ENi, $\sigma_{DPA}(E_{N_i})$ ,i=1,NP)]      TAB1
[ MAT,MF63,0/0.0,0.0,0,0,0,0 ]          SEND          (8)

```

Table 2 に PKA/KERMA ファイルの構成についてまとめる。

3. データ処理

PKA, 荷電粒子スペクトルおよび Damage energy spectrum データの作成から PKA/KERMA ファイル作成に至るまでのデータの流れ図を Fig. 2 に示す。PKA スペクトル等のデータは、評価済み核データライブラリー JENDL を入力として、例えば、PKAR または PKA-S (阪大)、RADHEAT-V4 コード (原研、第4章参照) によって計算され、計算結果は、前節で説明した ENDF-6 の入力形式に従って出力される。各々のコードの計算機能に本質的な差はないが、PKAR が入射エネルギーについて代表的な点についていわゆるポイントワイズ的なスペクトルを計算するのに対し、PKA-S, RADHEAT-V4 コードは、群平均された量として算出している点が異なる。しかし、その差は、スペクトルの入射エネルギーによる変化がさほど大きくないので、まず同質と見放すことも可能である。但し、荷電粒子スペクトルや(n,2n) 反応の第1と第2放出中性子スペクトル等について、PKA-S, RADHEAT-V4 が簡単な蒸発モデルで与えているのに対し、PKA-R では前平衡過程を考慮した多段 Hauser-Feshbach 理論(GNASHコード) 又は多段蒸発モデル(PEGASUSコード) による計算結果を入力としており、その関係する量の計算精度は、PKAR の方がよいと考えられる。しかし、PKAR の方は開発途中にあり、現在の計算システムとしては PKA-S, RADHEAT-V4 の方が整っている。PKAR の結果は、MF6, MF66 の形式に従ったデータであり、最終的に求める PKA/KERMA 第1次ファイルへのデータ編集は、一般的な ENDF/B データの編集コード CORRECT-J の機能を拡張して行うことになる。

第2次ファイルのデータは1次ファイルから算術計算によって求めることができる。これには、PKAR-89コードにより放出粒子の平均のエネルギーと角度余弦のデータと反応断面積のデータを用いた簡便な式で精度良く計算でき、その結果をファイル化する。なお、KERMA-ファクターはエネルギーバランス法によっても得られるので、それによる結果も(7)式で $LC = 1$ とおいてファイル化できる。これらの2次ファイルデータも拡張 CORRECT-J で処理する。

Table 1 File (MF) structure of ENDF/B.

<u>MF</u>	<u>Description</u>
1	General Information
2*	Resonance parameter data
3*	Reaction cross sections
4	Angular distributions for emitted particles
5	Energy distributions for emitted particles
6*	Energy-angle distributions for emitted particles
7	Thermal neutron scattering law data
8	Radioactivity and fission product data
9	Multilicities for radioactive nuclide production
10	Cross sections for radioactive nuclide production
12	Multiplicities for photon production
13	Cross sections for photon production
14	Angular distributions for photon production
15	Energy distributions for photon production
17	Discrete delayed gamma rays
18	Continuous spectra of delayed-photon emission
23	Photo-atomic interaction cross sections
27	Atomic form factors for photo-atomic interactions
31	Data covariances for nuubar
32	Data covarinces for resonance parameters
33	Data covariances for reaction cross sections
34	Data covariances for angular distributiouons
35	Data covariances for energy distributions
39	Data covariances for radionuclide production yields
40	Data covariances for radionuclide production cross sections
63*	DPA cross sections (secondary file of PKA/KERMA file)
66*	Damage energy spectra (primary file of PKA/KERMA file)

N.B. *) Contained in PKA/KERMA file that was defined in the present work.

Table 2 PKA/KERMA file structure.

File	Quantities	MF	MT
Primary File	Resonance parameters	2	151
	Reaction Cross Sections	3	1~116
	PKA & Charged Particle Spectra	6 (LAW=7)	1~116
	Damage energy spectra	66 (LAW=7)	1~116
Secondary file	Kerma Factors (KF) (Energy Release Parameter)	3	321~ 416
	Partial Contributions of KF	6 (LAW=0)	301~ 416
	DPA Cross Sections	63 (LAW=0)	101~ 116

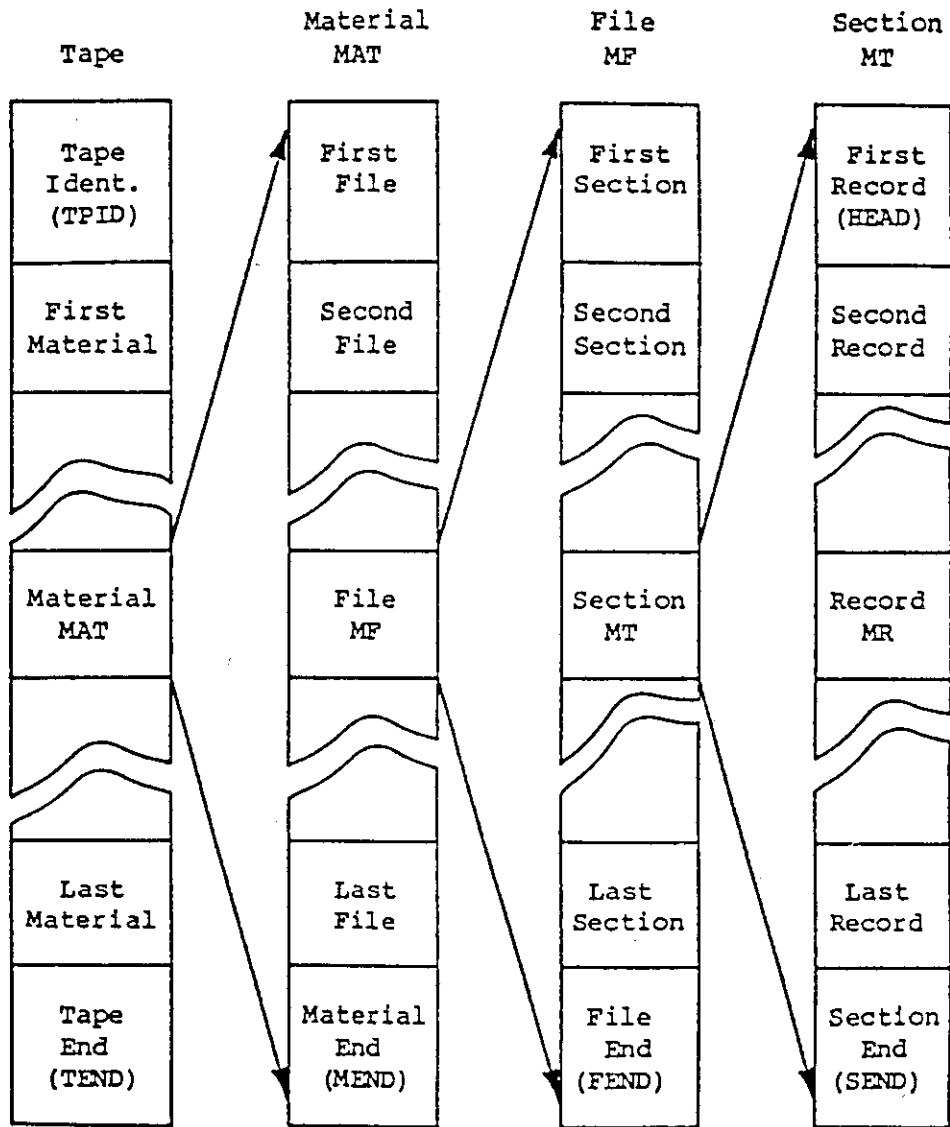
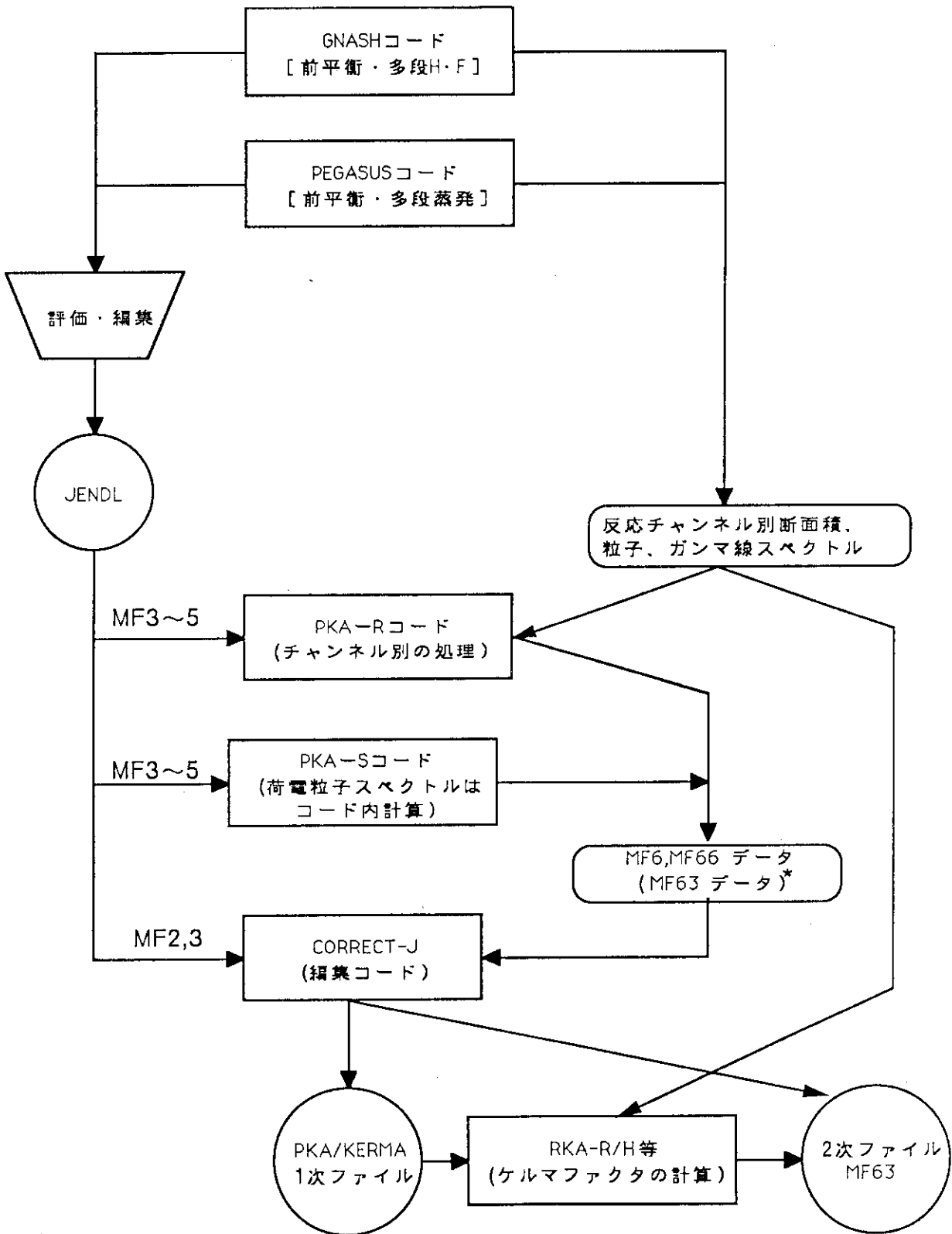


Fig. 1 Data hierarchy of ENDF/B.



* PKAR-89 による結果

Fig. 2 Flow chart of PKA/KERMA data file generation process.

5. C-12からの28.2MeV中性子の散乱と反跳KERMAファクター

山内 良磨 (原研)

SCATTERING OF 28.2 MeV NEUTRONS FROM ^{12}C AND RECOIL KERMA FACTORS

Yoshimaro YAMANOUTI

Department of Physics, Japan Atomic Energy Research Institute
Tokai, Ibaraki 319-11, Japan

Differential cross sections for elastic and inelastic scattering of neutrons from ^{12}C have been measured at 28.2 MeV. These experimental data are analyzed in terms of the phenomenological optical model potentials and the coupled-channel formalism. For applications of experimental data to neutron dosimetry heavy ion recoil kerma factors are deduced and compared with recent measurements and calculations.

1. Introduction

Neutron scattering cross sections of ^{12}C in the energy range above 20 MeV are of great importance for our understanding of the nucleon-nucleus interaction and neutron dosimetry for elements present in tissue. Due to the lack of neutron experimental cross sections in the energy region above 20 MeV, nuclear models are used to estimate differential cross sections. Therefore, study on systematics of the phenomenological optical model potential and the reaction mechanism is required for the nuclear model calculations. For the neutron scattering on ^{12}C in the energy range above 20 MeV, elastic and inelastic scattering at incident energies of 20.8, 22, 24 and 26 MeV¹⁾, and at 21.6 MeV²⁾ has been studied, and differential elastic cross sections at 40 MeV have been reported³⁾. In this work differential cross sections for elastic and inelastic scattering of neutrons from ^{12}C were measured at 28.2 MeV⁴⁾. The experimental data were analyzed by the optical model and the coupled-channel(CC) theory. These differential cross sections can be used to determine partial kerma factors for recoiling ^{12}C nuclei. The heavy ion recoil kerma factors for elastic and inelastic ($Q = -4.439\text{MeV}$) scattering were experimentally determined and compared with kerma factor values derived from other experimental data.

2. Experimental Methods

The measurements were performed with the pulsed beam time-of-flight technique. A pulsed beam of protons with a repetition rate of 4 MHz and with a burst duration of about 2 nsec was provided by the JAERI tandem accelerator. Neutrons were generated by the ${}^7\text{Li}(p,n){}^7\text{Be}$ reaction. A lithium metal target with proton energy loss of 450 KeV was used as a neutron producing target. The neutron detector is a 21 cm in diam. by 35 cm thick NE213 liquid scintillator viewed by RCA 8854 photomultiplier tubes at the front and rear faces. Neutrons were observed by an array of these four neutron detectors for efficient measurements of scattered neutrons.

The efficiency of the neutron detector was determined by measuring the angular distribution of neutrons from the n-p scattering. The differential cross sections were normalized to the known n-p scattering cross sections. The resulting differential cross sections were corrected for dead time in the data acquisition system, and also for multiple scattering and flux attenuation in the scattering sample. Differential cross sections were obtained for the elastic scattering and the inelastic scattering to the excited states at 4.439 MeV(2^+) and 9.641 MeV(3^-) over the angular range from 20° to 140° in 10° steps. The experimental cross sections are shown in figs.1 and 2 together with theoretical predictions.

3. Analysis

3.1 Optical model analysis

The data were analyzed first by the optical model. The code ELIESE3 was used for the optical model calculations. The compound nuclear contribution estimated by the Hauser-Feshbach formalism is small compared with the experimental cross sections at this incident energy.

3.2 Coupled-channel calculations

The CC calculations based on the rotational model and the vibrational model were performed with the code ECIS79 and JUPITOR1. In the CC calculations based on the rotational model, calculations with the quadrupole deformation only, and with the quadrupole and hexadecapole deformation were carried out. In the CC calculations optical potential parameters except the spin orbit term, and the deformation parameter were adjusted to get the best fit to the experimental cross sections for the elastic and inelastic scattering. The theoretical curves of the CC calculations are shown in figs.1 and 2. The rotational model calculation with the oblate quadrupole and hexadecapole deformation gives slightly better fit to the

experimental cross sections for the elastic and inelastic scattering from ^{12}C than the vibrational model calculation.

4. Kerma calculations

The heavy ion recoil kerma factors for ^{12}C have been derived from the differential cross sections of neutron elastic and inelastic scattering in the energy region above 20 MeV by Meigooni et al^{5,6)} and in the energy range from 16.5 to 22 MeV by Olsson et al⁷⁾. The heavy ion recoil kerma factors have been also calculated by the deformed neutron optical potential in the energy range from 20 to 65 MeV⁵⁾. The kerma factor for any element can be calculated from the equation with E_j the energy imparted by the neutron through the interaction⁵⁾:

$$k_r = 2\pi N \sum_j \int E_j(\theta_{c.m.}, E) \sigma_j(\theta_{c.m.}, E) d(\cos \theta)$$

The heavy ion recoil kerma factors were experimentally determined from the present differential cross sections for elastic and inelastic scattering (4.439 MeV, 2^+) at $E_n = 28.2$ MeV. The recoil kerma factors thus obtained for elastic and inelastic scattering are 0.468 and 0.088 in unit of 10^{-15} Gy m^2 , respectively. Fig.3 shows the present ^{12}C recoil kerma factors and the kerma factor values from other experimental data. In fig.3 the solid lines are the results of calculations using the energy dependent optical potential parameters obtained in the coupled-channel analysis of Meigooni et al⁵⁾.

5. Conclusions

Differential cross sections for elastic and inelastic scattering of neutrons from ^{12}C have been measured at 28.2 MeV. The best fit phenomenological deformed optical model potential was obtained in the CC calculations. The CC calculations based on the rotational model with the oblate quadrupole and hexadecapole deformation well reproduce the experimental cross sections for elastic and inelastic scattering. The recoil kerma factors derived from the present experimental cross sections are consistent with the kerma factor values obtained in other scattering experiments and the results of the deformed optical model calculations.

References

- 1) A.Meigooni, R.W.Finlay, and J.S.Petler: Nucl. Phys. A445, 304 (1985)
- 2) N.Olsson et al: Nucl. Phys. A472, 237 (1987)
- 3) R.P.DeVito: Ph.D. thesis, Michigan State University (1979)
- 4) Y.Yamanouti, M.Sugimoto, S.Chiba, M.Mizumoto, Y.Watanabe and K.Hasegawa:
JAERI-M 89-119, p177
- 5) A.Meigooni, J.S.Petler and R.W.Finlay: Phys. Med. Biol. 29, 643 (1984)
- 6) R.W.Finlay, A.Meigooni and J.S.Petler: Nucl.Inst.Meth. B10/11, 396(1985)
- 7) N.Olsson, B.Trostell and E.Ramstrom: Phys. Med. Biol. 34, 909 (1989)

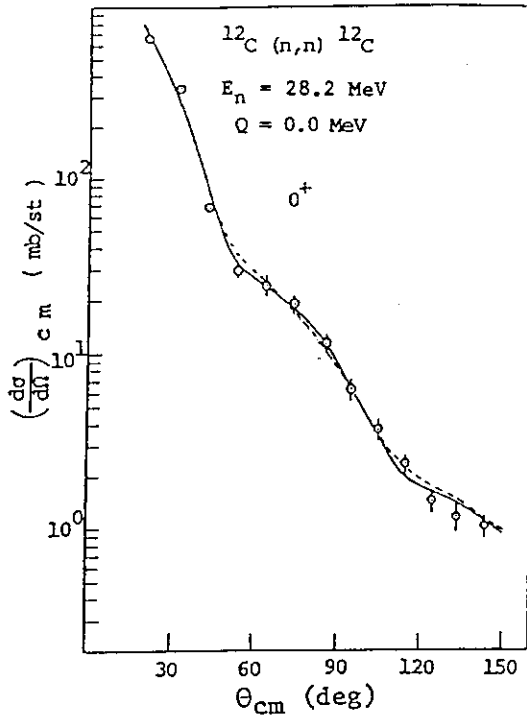


Fig. 1 Elastic scattering data and CC calculations. solid line: rotational model with oblate quadrupole and hexadecapole deformation, dashed line: vibrational model.

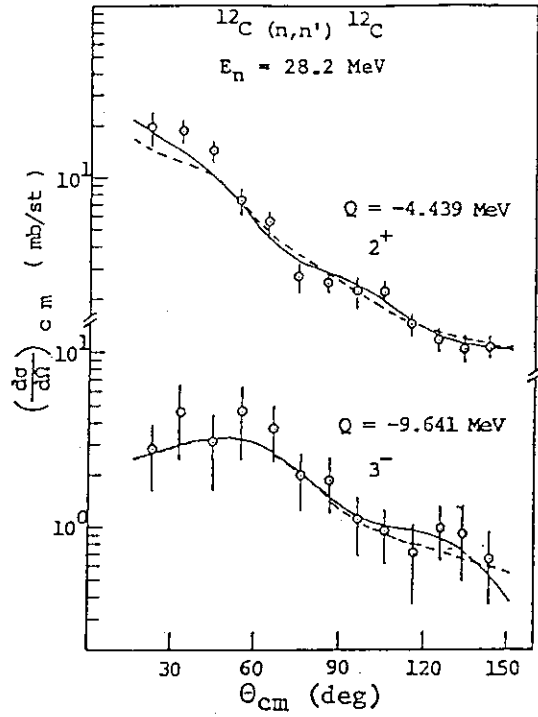


Fig. 2 Inelastic scattering data and CC calculations. solid line: rotational model with oblate quadrupole and hexadecapole deformation, dashed line: vibrational model.

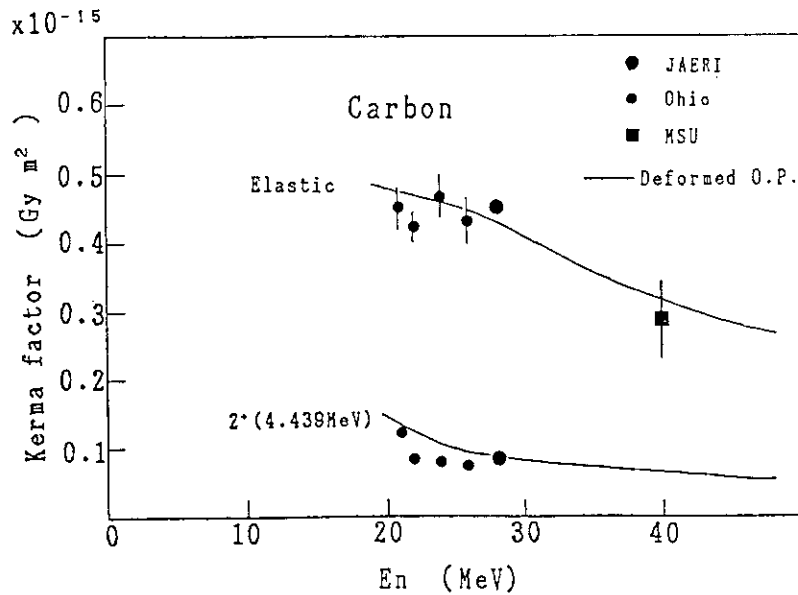


Fig. 3 Experimentally determined recoil kerma factors for neutron elastic and inelastic scattering from ^{12}C in the energy region above 20 MeV. Solid line: the kerma factors calculated from the deformed optical model potential of Meigooni et al.

6. 核融合炉材料の照射損傷の評価

有賀 武夫 (原研)

中性子照射損傷の基礎的な概要について述べ、損傷解析におけるはじき出し損傷率や PKA スペクトラムの意義を強調し、併せて核融合炉材料の照射損傷効果の評価のためのデータベースシステムの必要性を述べた。

Neutron Radiation Damage Parameters and A Database System for Fusion Reactor Materials

Takeo Aruga, JAERI

Necessity of evaluating neutron damage parameters such as displacements per atom and PKA energy spectrum is emphasized in view of damage analysis of fusion reactor materials. Based on the discussion on complexities encountered in finding simple correlation rules between the fission neutron and fusion neutron radiation effects, a need for materials database system is described for evaluating the radiation damages anticipated in the fusion neutron irradiation.

1. はじめに

核融合炉材料の開発においては、最高 14MeV の中性子照射による材料の機械的性質の変化、寸法変化などの照射効果は最も重要な問題である。しかし実用上問題となる使用条件の照射量まで核融合炉中性子を照射するための施設は当面存在しない。したがって、核分裂炉中性子照射によってこれまで豊富に蓄積されてきた照射試験データに基づいて、核融合炉中性子で照射した材料の特性変化を推測し、評価することが要請されている。その場合精度良く推測するためには、中性子照射損傷の初期における素過程を的確に把握することが重要である。

ここでは中性子照射による損傷評価の基礎を概観し、最近得られた 14MeV 中性子による照射試験データの意義について言及するとともに、核融合炉材料の照射効果の評価に関する研究の中で、材料の照射効果に関するデータベースの果たすべき役割について述べる。

2. 中性子照射効果と損傷量の評価

2.1 材料の中性子照射効果

核融合炉中性子で照射した材料で問題になる照射効果は、カスケード的な原子のはじき出し損傷及び核変換反応で生成する水素やヘリウムなどガス原子に起因する。材料の結晶格子に中性子が入射し格子原子の原子核と衝突すると、弾性散乱、非弾性散乱やこれら以外の核反応によって格子原子は反跳を受ける。反跳エネルギーが大きいと原子は格子位置からはじき出され、格子中に原子空孔と格子間原子の対が生成する。この一対は照射によって造られる格子欠陥の最も単純な欠陥であってフレンケル欠陥と呼ばれる。

安定に存在できるフレンケル欠陥を少なくとも一対生成するのに必要な最小の反跳エネルギーをはじき出しエネルギー E_d と呼び、多くの純金属について E_d の値は実験的に測定されている。 E_d の測定はフレンケル欠陥濃度の測定と対を成し、金属の点欠陥研究において重要で興味ある課題である。 E_d は同じ物質であっても反跳原子の運動する結晶方位に依存する。工学的なはじき出し損傷量の計算において実効的な E_d をどのような値にとるかは余り単純ではない。 E_d については6.3で述べる。

入射粒子との最初の衝突で反跳を受けた原子すなわち PKA (一次ノックオン原子、Primary Knock-on Atom) は、反跳エネルギーが充分高いと、格子原子相互間で二次、三次、…のはじき出しの連鎖(カスケード)を生じさせる。その結果、第1図^[1]に示すように中心部に格子原子が欠乏する領域とそれをとり囲む格子間原子数の多い領域とから成る高密度な欠陥生成が起こる。このような連鎖的のはじき出し損傷は、カスケード損傷と呼ばれる。生成したままのカスケード損傷は極めて不安定であり 10^{-12} s オーダの短時間内に非熱活性的過程で多くの欠陥は再結合して消滅するが、カスケードの中心部から離れた格子間原子及び中心部に残留する空孔の集合体など、かなりの格子欠陥が生き残る。

融点を T_m として $T_m/3$ 以上の照射温度では残留した欠陥のうち熱活性的過程で移動可能な欠陥はさらに再結合して消滅するほか、同じ型の欠陥すなわち格子間原子または空孔同士が合体して転位ループを形成するとともに、空孔は三次元的に集合してポイドを形成する(第2図(b,c))^[2]。ポイドが材料中に生成すると材料の体積膨張(スウェリング)を引き起こし照射下での材料の寸法変化の一因となり実用上重大な問題である。一方照射でつくられた格子間原子はかなり低い温度でも十分に移動可能であり、荷重のかかっている材料の応力場では、転位ループの非等方な生成と成長が起こる(第2図(a))。その結果結晶格子中に新たな結晶面が造られたり、転位線の非等方な運動が促進され、照射下で応力場の存在する材料の寸法変形(照射誘起クリープ)が促進される。普通クリープ現象は高温で熱力学的条件で形成される空孔と転位の移動が主な原因で進行する応力下での変形であるが、第3図^[3]に示すように、熱的クリープ変形が問題にならない低い温度で照射誘起クリープ変形は大きな問題となる。

数 MeV の電子線で材料を照射しても格子欠陥ができる。このとき材料中に造られるはじき出し損傷欠陥は、PKA エネルギーが高々百 eV のオーダーであるので、孤立したフレンケル欠陥であるが、この場合にも照射によるスウェリングやクリープが起こる。このため、超高圧電子顕微鏡を用いて試料を'その場観察'しながらはじき出し損傷を造り照射による材料内部の変化を直接知ることができ、照射損傷の機構についての理解が深められてきた。核分裂炉中性子の照射では数十 keV の PKA によって、ある程度のカスケード損傷が起こるが、最高 14 MeV の核融合炉中性子では PKA のエネルギーがさらに高くなるのでカスケード損傷が顕著になる。

実用的な高い照射量まで核融合炉中性子を照射したとき、カスケード損傷が材料の照射損傷効果にどのような影響をもたらすかについては、現在のところ未だよく分かってはいない。しかし、(D,Ti) 反応の 14 MeV 中性子で低い照射量まで照射した金属試料中の損傷組織の観察によると、一つの PKA で始まったカスケードが複数の小さなサブカスケードに分割されていくことが確認されている。さらに、核変換で生成するヘリウムガス原子は、はじき出しで造られる欠陥と複雑に相互作用し dpa 当り 1 appm 以下の適度な割合で生成すると著しいポイド形成をひき起こしスウェリングを助長するほか、高温では結晶粒界に集まってヘリウム気

泡を形成し材料を脆化させる。

実際の構造材料では純金属を使うことは稀であって冶金学的観点から複数の金属から成る合金として使用し、さらに微量な元素を添加するなどして材料特性や耐照射性の改良を行ってきたが、このような実用材料でも上述のはじき出し損傷や生成されるガス原子が原因となって、ボイドによるスウェリングや照射誘起クリープを完全に抑えることはできない。照射欠陥の挙動とその結果としての照射効果の発現の仕方は合金元素や照射前の転位密度、析出相などの材料の微視的組織に依存し微妙な差違が現れる。逆に合金元素を適当に選択したり加工や熱処理を施すことによって照射効果を小さく抑えることができる。耐照射性に優れた材料の開発はこのような考えに基づいて、高速炉の燃料被覆管材料の開発計画のなかで核分裂中性子の照射実験の枠内で行われてきた。

2.2 中性子照射損傷量の評価

中性子照射した材料の照射効果に関するデータは、照射した中性子フルエンスの関数として整理することが考えられる。IAEAの専門家によるはじき出し損傷率の計算に関する推奨案^[4]が提案されるまでは、0.1 MeV以上または1 MeV以上の中性子フルエンスが照射量の単位として利用されていた。原子炉の型が同じで同じ構造要素の材料について照射効果を比較するのであれば、中性子スペクトルはほぼ同じと考えられるので、中性子フルエンスを使ってデータを整理することは合理的である。

しかし、核分裂炉と核融合炉、高速炉と軽水炉、燃料領域と反射体領域、などのように、中性子スペクトルが大きく異なる場合に、照射効果に関するデータを中性子フルエンスで整理、比較するのは適当ではない。高いエネルギーの中性子は高いエネルギーのPKAを造り、これによってカスケード損傷を生成したり多くのはじき出し欠陥を造るからである。中性子スペクトルの違いを反映したはじき出し損傷率の評価が重要な意味をもつ理由はこの点にある。

高いエネルギーのPKAが造り出すはじき出しのカスケード損傷は、第1図に示した描像について二体間衝突近似の計算を実行すれば、1個のPKA当り何個の格子原子がはじき出されるかを求めることができる。はじき出しのカスケード損傷を計算するコードとして広く使われているMARLOWEコード^[5]では結晶格子位置に配置された原子間の各衝突で反跳を受けて運動する粒子の軌跡を計算し1個のPKAが造り出す格子間原子と空孔の数及びそれらの空間的な分布を求める。その際、高速で運動する原子の電子的なエネルギー損失を考慮しているので、高いエネルギーのPKAによる欠陥の生成事象は良く再現されると考えられる。しかし、中性子照射した場合のPKAは普通広いエネルギー範囲に分布するので、与えられた中性子スペクトルで照射した材料中のはじき出し損傷率をMARLOWEコードのようなカスケード損傷計算によって求めるのは容易ではない。

現在、金属の放射線照射によるはじき出し損傷の評価で標準的に使われている方法は、Lindhard^[6]らによって行われた仕事(LSS理論)に基づいている。彼らの理論では、Eなるエネルギーをもった原子が、同種原子から成る固体中の標的原子と衝突を繰り返しながら停止するまで運動する間に、電子雲で遮蔽された原子核のクーロンポテンシャルを介した標的原子との弾性衝突によって、固体中の原子に与える運動エネルギーを評価する。このとき、原子の励起やイオン化などの非弾性散乱によるエネルギー損失も考慮に入れる。後での議論のためにはじき出し損傷計算の基礎となっている式を以下に示す。

同種原子からなる固体中をエネルギー E の原子 (PKA に相当) が dR の距離運動する間に、固体中にひき起こされる物理的変化量を $\Psi(E)$ とすると、『衝突前の Ψ は衝突によってひき起こされた Ψ と衝突しないで残っている $\Psi(E)$ の和に等しい』という衡り合いの式

$$\Psi(E) = NdR \int d\sigma_{n..} \{ \Psi(E - T_n - \sum_i T_{e,i}) + \Psi(T_n - U) + \sum_i \Psi_e(T_{e,i} - U_i) \} + (1 - NdR \int d\sigma_{n..e}) \Psi(E),$$

から、 $\Psi(E)$ について

$$\int d\sigma_{n..e} \{ \Psi(E - T_n - \sum_i T_{e,i}) - \Psi(E) + \Psi(T_n - U) + \sum_i \Psi_e(T_{e,i} - U_i) \} = 0 \dots (1)$$

が導かれる。ここで、 \sum_i は i についての和を示し、 N は原子数密度、 $d\sigma_{n..}$ は標的原子に T_n なる運動エネルギーとともに i 番目の電子に $T_{e,i}$ なるエネルギーを与える衝突とイオン化の断面積であり、衝突の結果、着目している粒子のエネルギーは $(E - T_n - \sum_i T_{e,i})$ に減少して物理的変化に $\Psi(E - T_n - \sum_i T_{e,i})$ の寄与をする。同時に、標的原子はエネルギー U の結合を切って $T_n - U$ のエネルギーで運動し、 $\Psi(T_n - U)$ の寄与をする。一方、 $T_{e,i}$ のエネルギーを得た電子は U_i なるイオン化エネルギーを差し引いた $T_{e,i} - U_i$ で運動するが、これによる寄与は原子の運動による寄与とは異なるので別の記号 Ψ_e を用いて、 $\sum_i \Psi_e(T_{e,i} - U_i)$ で表してある。 $(1 - NdR \int d\sigma_{n..e})$ は衝突しないで E で運動する確率である。(1)式で注意することは(1)式が運動する粒子による固体中の物理的変化量 Ψ について線型(加法的)であって、例えば近接したカスケード損傷間の相互作用や反跳を受けて運動している原子相互間の衝突のような非線型効果、収束置換衝突などの結晶性の効果、近接欠陥の再結合による消滅効果などは考慮していないことである。

(1)式はさらに、(A)電子は原子との衝突で反跳原子を造らない、(B) $\Psi(T_n - U) = \Psi(T_n)$ として、原子間の結合は無視する、(C)1回の衝突で電子に与えるエネルギーは小さく $T_{e,i} \ll E - T_n$ である、(D)遮蔽クーロンポテンシャルを介した核的衝突と電子系との衝突は分離して取り扱える、(E)1回の衝突で $T_n \ll E$ である、などの(A)~(E)の近似を導入する。すなわち、 Ψ_e の項を無視するほか、

$$\Psi(E - T_n - \sum_i T_{e,i}) = \Psi(E - T_n) - (d\Psi/dE)_{E-T_n} \cdot \sum_i T_{e,i},$$

$$\text{さらに } d\sigma_{n..e} = d\sigma_n + d\sigma_e, \quad d\sigma_n \cdot \sum_i T_{e,i} = 0$$

$$\int (d\Psi/dE)_{E-T_n} \cdot d\sigma_e \cdot \sum_i T_{e,i} = \Psi'(E) \int d\sigma_e \cdot \sum_i T_{e,i} = \Psi'(E) S_e.$$

などを用いて、近似式

$$\Psi'(E) S_e(E) = \int d\sigma_n \{ \Psi(E - T_n) - \Psi(E) + \Psi(T_n) \} \dots (2)$$

が得られる。ここで、 $d\sigma_n$ は核的衝突断面積、 $d\sigma_e$ は、 $T_{e,i}$ に対する原子と電子の衝突断面積であり、 $S_e(E) = \int d\sigma_e \cdot \sum_i T_{e,i}$ は電子的阻止断面積である。

Lindhardらは、Thomas-Fermiの原子モデルに基づいて $d\sigma_n$ 、 $S_e(E)$ を衝突する原子と標的原子の質量、原子番号、原子数密度などで普遍的に表わされる換算エネルギー ε と換算距離 ρ を使って表し、(2)式の解を数値計算によって求めた。

計算に使われた $d\sigma_n$ について $S_n(E) = \int d\sigma_n T_n$ 、及び $S_e(E)$ を $\epsilon - \rho$ で図示したものを第4図に示す。ここで、 $(d\epsilon/d\rho)_n$ 、 $(d\epsilon/d\rho)_e$ は換算エネルギーと距離で表した核的阻止断面積、電子的阻止断面積である。

(2)式の解はエネルギー E の原子が固体中を運動して停止するまでの間に核的衝突によって固体中の原子に与える運動エネルギーを表し、はじき出し損傷エネルギー関数と呼ばれている。 ϵ を使って表した(2)式の解 $\nu(\epsilon)$ を第5図に示す。この解は第4図に示した $S_e(E)$ が、原子の速度 ($\epsilon^{1/2}$) に比例するエネルギー領域について求めたものである。Bohr速度を $V_0 = 2\pi e^2/h$ とすると、原子の速度 V が $V < V_1 \sim V_0 Z_1^2 / \rho^3$ の領域では

$$(d\epsilon/d\rho)_e = k\epsilon^{1/2}$$

が成立する。ここで k は原子番号 Z_1 、 Z_2 、質量数 A_1 、 A_2 などによって表される比例定数であり、 $0.1 \sim 0.2$ の間の値をとり、同種原子の場合、

$$k = 0.133 Z_1^{2/3} A_1^{-1/2}$$

と表される。 V_1 は原子番号 Z_1 の原子における電子の平均速度であり、 $V < V_1$ の条件は原子がほとんど中性原子とみなせるエネルギーの上限 E_{lim} を示すもので、

$$E_{lim} = 25 Z_1^{4/3} A \text{ (keV)}$$

と表される。 E_{lim} の値は C(炭素)では、3.3 MeV、Siで 23 MeV、Feで 101.7 MeV である。 E_{lim} より高いエネルギーにおける原子(イオン)の電子的阻止能は最大値を経てエネルギーの上昇とともに減少し、Bethe-Bloch の式に従う。第6図にその様子を核的阻止能と併せて示す。 E_{lim} より高いエネルギー領域では、 $S_e(E)$ を $\epsilon - \rho$ で汎用的に表すことはできない。しかし、LSS 理論の核的阻止断面積はエネルギーが高いところで Rutherford 散乱則と滑らかに繋がっている。

第5図からわかるように、 ϵ の大きいところでは、 $\nu(\epsilon)$ は k に反比例し、 ϵ の小さいところでは $\epsilon - \nu(\epsilon)$ が k に比例することから、フィッティング関数 $g(\epsilon)$ を使って

$$\nu(\epsilon) = \epsilon / (1 + k \cdot g(\epsilon)) \quad \dots \dots \dots (3)$$

と表すことができる。 $g(\epsilon)$ の形は Lindhard によって第7図の曲線で与えられた。(3)式で $\eta(\epsilon) = \nu(\epsilon)/\epsilon = 1/(1 + k \cdot g(\epsilon))$ は、エネルギー ϵ の原子の、固体中でのエネルギー損失全体に対する核的衝突によるエネルギー損失の割合を与える関数であり、損傷効率と呼ばれている。Robinson^[7] が、 $g(\epsilon)$ のフィッティング式を与えたことにより(第8図)、損傷効率 $\eta(\epsilon)$ は照射損傷計算に広く使われるようになった。

剛体球散乱を仮定すると、エネルギー T の原子が造りだすはじき出し原子数は、 E_d をはじき出しエネルギーとすれば、 $0 < T < 2E_d$ のとき 1 、 $T > 2E_d$ のとき $T/2E_d$ となることが Kinchin^[8] らによって示されている。これを使って、エネルギー T の PKA は、 T を換算エネルギー ϵ で表すと、 $T\eta(\epsilon)$ が電子的エネルギー損失を差し引いた核的衝突によるエネルギー損失であるから、これを剛体球散乱による原子のはじき出しに使われるエネルギーとみなせば、 $T\eta(\epsilon)/2E_d$ はエネルギー T の PKA によるはじき出し原子数を与える。しかしこの式で計算したはじき出し原子数は、電子的エネルギー損失を考慮した二体衝突近似のシミュレーション計算結果と比べると大きい。

はじき出し効率と呼ばれる因子 κ を乗じ、 $\kappa T\eta(\epsilon)/2E_d$ によってのはじき出し原子数を評価することにすると言う提案が、IAEA による「黒鉛、フェライト及びオーステナイト鋼の照射損傷単位に関する専門家会議」で Norgett, Robinson, Torrens によって提出された^[4]。したがってこの計算方法は、修正 Kinchin-Pease モデルまたは、NRT モデルと呼ばれている。そこでは、 $\kappa = 0.8$ とすること

が約束された。

はじき出し損傷量の計算方法について、この提案を受けて国際的な統一をしておくことが合意された背景には、イオン照射実験が照射損傷に関する研究において頻繁に行われはじめ、中性子照射実験結果との対比の必要性に基づいて共通のはじき出し損傷量の計算方法を決めようという要請に答えたものである。さらに IAEA 推薦提案の中では、中性子照射によるはじき出し損傷に関して核反応断面積と反跳エネルギーの運動学に基づいたはじき出し断面積セットのファイル化を勧告している。これを受けた IAEA 作業は REAL80、REAL84^[9,10]等で報告され、現在でもこの作業は続けられている。また、IAEA の勧告に次いで 1979 年に ASTM 標準^[11]でも同様の内容を標準の計算方法とするように決めるとともに鉄と鉄基合金の中性子照射に対するはじき出し断面積 $\sigma_d(E_n)$ の数値を、20 MeV までの中性子エネルギーについて 647 群で与えている。この値は中性子の散乱・反応断面積を $\sigma_i(E_n)$ 、i の型の反応によって T の反跳エネルギーを与える確率を $P_i(E_n, T)$ とすれば、

$$\sigma_d(E_n) = \sum_i \int_{T^{min}}^{T^{max}} dT \sigma_i(E_n) P_i(E_n, T) \kappa T \eta(E) / 2E_n \quad \dots\dots\dots (4)$$

で与えられる。ASTM の断面積は ENDF/B-IV を使って求めたものである。この結果は TENJIN-2 コードで同様に計算した結果と良い一致を示す(第9図)^[12]。

3. dpa 評価と利用上の問題点

3.1 核反応断面積と損傷評価

標準化された計算方法に従ってはじき出し損傷量 dpa を評価し、dpa を中性子照射損傷量の単位として使用する場合、dpa の評価方法に関する問題点について知っておくことが重要である。(4)式で示されるように、はじき出し損傷断面積 $\sigma_d(E_n)$ は、核反応断面積 $\sigma_i(E_n)$ 、核反応の運動学によって決まる反跳原子のエネルギースペクトル $P_i(E_n, T)$ 、及び物質中をエネルギー T で運動し始めて停止する間に PKA が核的衝突によって標的原子に与える運動エネルギーすなわち損傷エネルギー $T\eta(\epsilon)$ 、これらの積を E_n から T^{min} まで積分した値に $\kappa/2E_n$ を掛け算した値である。LSS 理論に基づく $T\eta(\epsilon)$ の評価では最大 40% 程度の誤差が含まれるとされ、低原子番号の物質中の高エネルギー PKA ほど誤差は大きい^[13]。

はじき出し損傷量 dpa は $\sigma_d(E_n)$ と中性子スペクトルの積を E_n について積分し、中性子フルエンスとの積をとれば求められる。したがって材料を照射するときの中性子場について、中性子スペクトルとフルエンスをできるだけ精度よく求めておくという線量評価の技術が要求される。このことは核反応断面積 $\sigma_i(E_n)$ が精度良く評価されていることが前提になる。 $\sigma_i(E_n)$ の精度はそのまま $\sigma_d(E_n)$ に受け継がれる。核分裂中性子の照射では、 $\sigma_i(E_n)$ は普通 ENDF/B-IV や JENDL-3 などの評価済み核データファイルが利用される。

核融合炉材料の照射損傷の研究やこれの模擬照射実験では特に 20 MeV を超える高いエネルギーの中性子の核反応断面積が要求されている。このとき、 $\sigma_i(E_n)$ の添字 i の示す核反応の種類が、ファイルされた核データの種類で必要十分になっていることが重要である。いくつかの型の核反応の断面積がこのエネルギー領域で高い精度で評価されていたとしても、相当な寄与をすると予想される種類の核反応断面積が欠落していたとすると、全体としては不十分な評価核データと言わざるを得ない。かなり精度が悪くても、考えられる全核反応が網羅されていることが

重要である。

反跳原子(PKA)のエネルギースペクトルを与える $P_i(E_0, T)$ についてもファイル化されている $\sigma_i(E_0)$ の種類と同様のことが考慮される必要がある。核分裂中性子の照射では弾性散乱がはじき出し損傷の大部分(例えば Fe では 75%)を占め、散乱中性子の角度分布の測定データの評価値がファイル化されているのでこれらを用いて近似的に PKA スペクトルを計算することはできる。しかし、連続エネルギー領域への励起による非弾性散乱や荷電粒子を含む多粒子放出核反応によって高いエネルギーの PKA が生じる。核分裂中性子照射の場合でも、Fe を例にとると、これらの核反応による高いエネルギーの PKA は全体の 5% を占めるに過ぎないが、はじき出し損傷全体の約 55% を占める^[12]。

ASTM で標準化され、現在一般に使われている PKA スペクトルの計算方法では、これらの核反応による反跳エネルギーは複合核形成の蒸発モデルに基づいて近似的に求められている。これは、二次放出粒子の放出角度分布やエネルギースペクトルの測定データが評価データとしてファイル化する程十分には存在しないことによる。一方、最近 PKA エネルギースペクトルと関連づけた照射損傷の基礎過程に関する研究が多く行われるようになった。特に加速器を使った D-T、D-Li 反応などの中性子源を使うと、照射中性子の入射方向と試料(結晶方位)方向との相対方位を決めることができるので、反跳原子の運動方向の効果が表れるような事象についての研究も可能になってきた^[14]。これらのことを反映して、精度の高い PKA スペクトルへの要求や二重微分断面積(barn/sr/MeV)のファイル化の計画が現実の話題となっている。二重微分断面積が精度良く広範に求められれば、それに越したことはないが、20 MeV 以上の高いエネルギー中性子による核反応では、多くの多粒子放出反応が起こるので、放出粒子の角度分布やエネルギースペクトルを精度よく求めることは容易なことではない。 $P_i(E_0, T)$ などのファイル化に当たっては、評価すべきデータの優先度に考慮しなければならない。

第一には、前平衡や直接過程の核反応理論によって重要な元素(核種ではなく)の $P_i(E_0, T)$ が求められるようにしておくことが重要である。このとき、理論はどの位の精度で僅かに存在する実験データを再現できるかという理論の精度についての言及が要請される。この点で、Si 半導体を使った検出器によって、14MeV 中性子で照射した Si 中の PKA のエネルギースペクトルを直接測定し、放出荷電粒子の効果を見積もって補正した計算結果とよくあっているという報告^[15]は興味深い。他の物質についても、高エネルギー中性子ビームで照射した薄膜からの反跳粒子のエネルギースペクトルを求める実験などが考えられる。

次に二重微分断面積を限られた元素について精度よく評価することが考えらる。特に 20MeV 以上の中性子による損傷解析では、この事情はちょうど 10cm 単位でしか物の長さを計る物差ししかないので、0.01mm 単位の精度を議論するのは暫く後に回そうということに似ている。一方、照射損傷研究の側からは、PKA スペクトルの精度がどの位の精度で与えられれば、どのような現象について、どの物理量がどの位の精度でもとめられると言うこと、さらにそのことが全体の研究の流れの中で占める重要性について十分検討し整理しておかなければならない。特に、PKA のエネルギースペクトルまたははじき出し損傷量と、照射された物質の物理量の変化の観測値と比較する場合、観測される物理的变化は原子のはじき出し現象の後で格子欠陥の再配列が行われたものであることに注意する必要がある。

PKA のエネルギー T が与えられると、 $\kappa T \eta(\epsilon)/2E_0$ は、はじき出し原子の個数を与えるが、前に述べた損傷効率関数 $\eta(\epsilon)$ とはじきだしエネルギー E_0 の値については、いくつか考慮を払わなければならない。

3.2 多元素系物質のはじき出し損傷断面積

先ず Lindhard の理論による固体の照射損傷の基礎式(1)から出発して最終的に $\eta(\epsilon)$ を導く過程で導入された前提条件によって、対象は単一成分系であることが要請される。しかし、IAEA の推奨や ASTM の標準方法でも分かるように、Fe, Cr, Ni を主な成分とする鉄基合金であるステンレス鋼では、各元素の原子番号および質量数の差が小さいので、はじき出し断面積に鉄の値を使ってもよいとされている。または成分毎に求めた後、成分の原子比率で平均してもほとんど同じ値になる。

原子番号および質量数が大きく異なる元素で構成される合金や酸化物などのセラミック物質では、成分毎のはじき出し断面積を原子比率で平均することの意味が余り明確ではない。この場合、異なる原子番号と質量数をもつ原子間の衝突によるエネルギー損失を考慮して、LSS 理論の基礎式に立ち返る必要がある。多元素系でののはじき出し原子数の計算の問題はかなり前から扱われている^[16-18]。

Coulter-Parkin らは、電子的損失まで考慮し、任意の多元素系物質における任意の元素の PKA について損傷エネルギー関数および各元素毎のはじき出し原子数の計算方法を示し、 Al_2O_3 , Y_2O_3 などの構成元素についてはじき出し損傷関数とはじき出し原子数の比を計算している^[19, 20]。 f_i ($i=1, 2, \dots, n$) を i 番目の元素の原子比率、 $S_{e,i}(E)$ を i 番目の原子の多元素系物質中での単位原子濃度当りの電子的阻止能、 $d\sigma_{n,i,j}$ をエネルギー E の i 原子が j 原子との核的衝突によって T の運動エネルギーを与える衝突断面積、さらに、 $M_{i,j} = 4A_i A_j / (A_i + A_j)^2$ とすると、 i 番目の原子の多元素系物質中における損傷エネルギー関数は n 元の連立微積分方程式、

$$S_{e,i}(E) \nu_i(E) = \sum_j f_j \int^{T_m^{i,k}} M_{i,j} d\sigma_{n,i,j} \{ \Psi_i(E - T_n) - \Psi_i(E) + \Psi_j(T_n) \} \dots (5)$$

の解 $\nu_i(E)$ で与えられる。ここで、 \sum_j は j についての和を表し、積分の下限は $E_{d,i}$ である。(5) 式の解 $\nu_i(E)$ は f_i , $E_{d,i}$ にも依存する形となるので、単一系での $\nu(E)$ の様に汎用的な形で求めることができない。また、多元素系物質中における各元素の $E_{d,i}$ は実験的に求めることが困難であるため、 $\nu_i(E)$ を正確に求められない場合が多い。

原子番号および質量数の差の大きな構成元素の系ほど、多元素系での各元素の損傷エネルギー関数と対応する元素単体での損傷エネルギー関数との差が大きくなる。重い元素だけの単体に軽い元素が混在して行く場合、例えば Al_2O_3 中の Al の $\nu_i(E)$ は(5)式で示される様に、 O (酸素) が混在すると Al と O の衝突が介在することで Al の損傷エネルギーは、PKA エネルギーの増加とともに単調に減少する。これに対して、軽い元素の単体に重い元素が加えられる場合は、電子密度の増加による電子的損失の増加すなわち損傷エネルギーの減少と重い元素の反跳による損傷エネルギーの増加との釣合で単体と較べた損傷エネルギーの減少、増加が起きる。上に示したように、低エネルギーの PKA では単体での値より小さいが、エネルギーが高くなると数十%も大きくなる。

中性子照射した多元素系物質の i -元素のはじき出し損傷断面積は、 $\nu_i(T)$ を使って

$$\sigma_{d,i}(E_n) = \sum_j f_j \sum_k \int^{T_m^{i,k}} T^{n-1} dT \sigma_{i,k}^j(E_n) P_{i,k}^j(E_n, T) \kappa \nu_i(T) / 2E_{d,i} \dots (6)$$

のように計算することができる。ここで、 \sum_k は核反応の種類 k についての和を、 $T_m^{i,k}$ は i 番目の元素の種類 k の核反応での反跳エネルギーの上限 T_m を表す。単体で

の $\kappa T \eta(\epsilon)/2E_d$ のようには、汎用的な損傷効率関数が使えないことに注意する必要がある。 $n_{ij}(T) = f_j \kappa \nu_j(T)/2E_{d,j}$ と表すと分かるように $n_{ij}(T)$ は i -元素のPKAがはじき出す j -元素の原子の数を表すが、 $f_j \kappa \nu_j(T)$ はエネルギー T をもつ i -元素のPKAの、多元系における損傷エネルギーのうち f_j に相当する分が j -元素に分配されるという近似が入っている。この近似を避けて、(4)式で j -原子の損傷エネルギー関数 $\Psi_j(T)$ の代わりに $n_{ij}(T)P_j(T)$ として $n_{ij}(E)$ についての式を解けば $n_{ij}(E)$ を直接計算することができる。ただし、 $P_j(T)$ はエネルギー T の反跳を受けた j -原子がはじき出される確率を表し、 $T > E_{d,j}$ のとき $P_j(T) = 1$ 、 $T < E_{d,j}$ のとき $P_j(T) = 0$ である。

Greenwood^[21] は Coulter-Parkin が求めた $n_{ij}(T)$ を使って中性子照射した多元系物質のはじき出し損傷断面積、 $\sigma_d(E_n) = \sum_i \sigma_{d,i}(E_n)$ を計算し、単体での断面積を元素の比率で平均した値と比較している。 Li_2O の $\sigma_d(E_n)$ について中性子エネルギーの関数として両者を比較したものを第10図に示す。 $n_{ij}(T)$ を使って求めた $\sigma_d(E_n)$ の値は Li の共鳴散乱のエネルギーのところで、原子比率の平均値より最高で約100%も大きい。これは、 Li 中での衝突過程に重い酸素原子が加わって Li のPKAの損傷エネルギーが増加したことによるが、この効果は高エネルギーのPKAができる高いエネルギーの中性子ほど顕著である。

いくつかの多元系物質について代表的な中性子スペクトルで平均した多元系のはじき出し損傷断面積を、原子比率で平均した断面積と比較して第1表^[21]に示す。質量数の大きく異なる元素で構成される Li_2O , LiAlO_2 では原子比率による平均値より45%から25%大きく、 TaO では14MeV中性子で15%大きいほかは4%から15%小さい。 Li を含む物質のHFIRでの値が両者でほぼ等しいのは、 ${}^6\text{Li}(n, \alpha)$ 反応によるはじき出しが大部分を占めていることによる。質量数がほぼ等しい元素で構成される V-14Cr-15Ti , 316SS では、どの中性子スペクトルでの平均でも多元系のはじき出し断面積は、単体のはじき出し断面積の原子比率での平均値と一致する。

第1表の結果は $n_{ij}(T)$ を計算するとき $E_{d,j}$ の値を適当に仮定しているので $E_{d,j}$ の値が変われば、 $n_{ij}(T)$ を使って求めた $\sigma_d(E_n)$ の値も変化すること注意する必要がある。例えば、表1では Li と O (酸素) の E_d はそれぞれ10, 30eVと仮定しているが、仮に O の E_d は30eVのまま Li の E_d を30eVとすると、 Li_2O のはじき出し断面積は原子比率平均の値より小さくなる。第1表と同様にいくつかの中性子スペクトルで平均した多元系物質のはじき出し断面積をCoulter-Parkinの方法に基づいて構成元素毎に計算した結果がDell-Goland^[22]によっても与えられているが、Greenwoodの評価値と較べて10-20%小さく、多元系でののはじき出し断面積の評価には未だ問題が残されている。

多元系物質のはじき出し損傷を正確に評価するためには各構成元素のはじき出しエネルギーを知ることが必要であり、そのことは多元系物質の照射損傷機構に関する研究と密接に関係している。単体での値の原子比率平均でははじき出し損傷量の正確な評価が難しい多元系物質の多くは酸化物などの絶縁体である。絶縁体では核的衝突によるばかりでなく、物質中を運動するPKA以降の粒子の電子的エネルギー損失によっても格子欠陥が生成される。文献[22]ではイオン化と関係したはじき出し断面積の評価値についても述べられている。

3.3 はじき出しエネルギー

修正Kinchin-Peaseモデルに基づいてエネルギー T のPKAが造る安定なフレンケル欠陥の数すなわちはじき出し原子数を $\kappa T \eta(\epsilon)/2E_d$ によって求めるとき、ここで使われるはじき出しエネルギー E_d は、一方で工学的な意味で照射損傷量の単位として使われるdpaと同じく便宜的な量ということができる。他方では、固体中にお

ける原子のはじき出しという物理現象を記述する一つの物理量として E_d は、PKAのはじき出される結晶方位に依存し、いくつかの純金属の単結晶で方位の関数として実験的に測定されている。現在広く使われている E_d のこのような二つの側面は材料の工学的な照射損傷の研究と固体物理学的な興味での格子欠陥研究の間にある隔たりを象徴的に表している。固体物理学での放射線照射による格子欠陥生成に関する研究では、照射で造られる点欠陥の濃度は1%未満と少ないが、照射損傷量の工学的な単位でdpaが用いられるときは1dpaより大きいばかりでなく100 dpaを超える損傷量が問題の対象になる。

照射で造られる点欠陥が移動しない液体ヘリウム温度で、純金属の単結晶試料を小刻みにエネルギーを変えた電子線で照射し、測定された試料の電気抵抗の変化と照射ビームに対する結晶学的方位すなわち最大反跳エネルギー方向とから、 E_d の方位依存性および最小のはじき出しエネルギーが実験的に求められている。しかし、このような測定によって方位依存性が求められた金属は、Cu, Pt, Moなど10種類にみたない。測定された E_d の方位依存性は分子動力学によるシミュレーション計算の結果とよい一致を示している。方位について平均した E_d が、損傷エネルギーからdpaへの換算に使われるべき'平均のはじき出しエネルギー'である。この値は純金属の多結晶試料を電子線照射して測定された'実効的はじき出しエネルギー'に相当する。これらのはじき出しエネルギーについてLucassonは考察を加えて表にまとめている^[23]。

はじき出し損傷の標準的計算方法についてのASTM標準^[11]では、Lucassonの表に基づいて実効的はじき出しエネルギーの推奨値をしめしているが(表2)、ここでは10または5eVのオーダーにまらめた値となっている。これは最も実用的な計算対象であるステンレス鋼のはじき出し損傷の計算に、実験的に評価されたFe, Cr, Niのはじき出しエネルギーをそのまま採用することの不合理さを考慮した結果であるとともに、dpaという単位の近似的、便宜的性格を反映している。また、推奨値を示すことでdpaの単位の統一的使用を計ろうとする姿勢が分かる。

酸化物などの多元系物質でののはじき出し損傷の正確な評価では、元素ごとの E_d が必要なことは前述の通りであり、損傷エネルギーの評価が E_d に依存することから単体でののはじき出し損傷量のように損傷エネルギーを適当な E_d で求めてから、後で正しい E_d で換算し直すということは出来ない。核融合炉工学の材料として酸化物、窒化物、炭化物などのセラミック材料の使用が考えられ、これらの材料の照射損傷に関する研究が行われ出して来たが、構成元素ごとの E_d は限られた物質で測定されているにすぎない。第3表にPells^[24]がまとめた電気絶縁材料として使われるセラミック材料のはじき出しエネルギーを示す。近い将来、多元系物質の照射損傷研究の進展によって構成元素毎のはじき出しエネルギーが多くのセラミック材料について測定されることが期待される。

4. 核融合材料データベースシステム

核融合炉物理の最近の進展によって、実験炉から実用炉の設計研究も現実味を帯びてきたが、核融合炉の設計研究に必要な核融合炉材料のデータベースが核分裂中性子による照射データで成立しているというのが実情である。核融合炉中性子照射を近似的に模擬する新たな強力中性子源が実現したとしても、核分裂炉の大きな照射空間を使って得られた照射データを新中性子源での照射で取り直すことが非現実的であることを考えれば、この事情は当面変わらない。高速増殖炉の被覆管材料の開発を目的に核分裂炉中性子照射によってこれまで豊富に蓄積されてきた照射データに基づいて、核融合炉中性子で照射したときの材料の特性変

化を推測し、評価することが要請されている。

この要請に応える第一段階は、材料の照射特性を照射損傷量の関数として客観的に整理することである。このために、316ステンレス鋼とこれの改良鋼およびフェライト系ステンレス鋼について、高温での中性子照射によるスウェリングや照射クリープなどの寸法変化、照射脆化、疲労強度などの機械的性質の変化に関して、公刊された照射データを収集しデータベースシステムに蓄積してきた。合金材料の照射特性を表現するデータ構造は文献[25]で検討されているが、その例を第4表に示す。照射データは数値データとして表現されるほか、材料組成、処理履歴、照射試験条件に関するデータ、出典情報など18個の関係データ表で表されている。

核分裂中性子の照射による材料の寸法変化や機械的特性の変化に関する照射データをデータベースシステムから検索し、微視的組織の観察結果に基づきながらこれらの特性を良い近似で説明できる中性子照射効果のモデルを確立することが現実的な課題である。このとき、照射温度、照射速度、応力レベルなどの照射条件の変動や冶金学的処理の微妙な差が照射データの分散に反映されるので、断片的でない、選択したデータの集合について照射特性を把握することが必要である。また、照射量は少なくとも dpa の単位で表されていることが必要であるが、照射量が 0.1 MeV 以上の中性子フルエンスで表されている照射データは、システムに格納されている中性子スペクトルとはじき出し断面積を使って dpa に統一的に換算される。このシステムを使って検索したデータの例を第11図に示す。

核分裂中性子の照射データから核融合炉中性子の照射効果を精度よく予測するためには、14MeV 中性子で造られる高エネルギーPKAのはじき出しカスケード損傷と多量に生成されるヘリウム原子の効果を特性変化のモデルの中で正しく評価することが求められる。この点で、14MeV 中性子照射した試料中のカスケード損傷の組織観察データ^[14]は重要といえる。そこでは、全体のPKAの高々10%に満たない数10keV以上のPKAによると仮定されるはじき出し損傷の観察結果がPKAのエネルギースペクトルと直接比較されているが、同時に、残留電気抵抗変化の焼鈍温度依存を測定することなどによって、電子顕微鏡観察では観察不可能な小さな欠陥集合体などのはじき出し損傷による欠陥とカスケード損傷との相互作用についての詳細な実験的知見が望まれる。

一方では、カスケードのシミュレーション計算によってカスケード構造の特徴、自由な欠陥の生成率をPKAエネルギーの関数として整理し、これを照射効果のモデルに組み込むことによって、PKAエネルギーの違いを反映できるモデルの確立が期待される。第12図は衝突カスケードとその後の短時間焼鈍のシミュレーション計算結果に基づいた中性子エネルギー依存の残留欠陥生成断面積である。これはPKAエネルギー依存の残留欠陥生成断面積をPKAエネルギーで積分し、中性子エネルギーの関数として示したものである。中性子エネルギー依存の残留欠陥生成断面積を使えば、任意の中性子スペクトルで照射した試料について、ポイドや転位ループの形成などの照射効果を記述する反応式の欠陥源を与えることができる。しかし、カスケードのシミュレーション計算で求めるPKA当りの残留欠陥数は、欠陥の含まれない結晶で一種類のエネルギーの単一のPKAが造るはじき出し損傷を追跡した結果であるので、カスケード損傷の実験的な値との比較が必要である。

5. おわりに

使用条件に匹敵する照射施設が当面存在しないところで進められる核融合炉材料の照射損傷の研究における、損傷量の評価方法や問題点を整理した。格子欠陥

の研究者からはdpaという単位では、観測された欠陥濃度を過大評価しているなど、この単位をより現実的なものに改めるべきだという意見が少なくない。この種の意見が多く出されることは、研究の進展を示していることで歓迎されるべきことではある。多元系物質で不用意にdpaを絶対的な単位として扱うことは注意する必要があると同時に、工学的には便宜的であるとは言っても、より現実的なはじき出し損傷の単位が合意されるまでは、できるだけ精度よく使うことが重要である。そして照射損傷の研究者の間で統一的に使われることが肝要である。そのために照射線量測定の高精度化や、PKAエネルギースペクトル計算の標準化、ファイル化とネットワーク化、丁寧に適切なマニュアルの用意などが必要とされる。

参考文献

- 1) Seeger, A : "The Nature of Radiation Damage in Metals" in Radiation Damage in Solids, IAEA, p.101 (1962).
- 2) Wiffen, F.W. : "Radiation Effects in Structural Materials for Fusion Reactors", in Critical Materials Problems in Energy Production, Stein, C. ed., Academic Press, p.164 (1976).
- 3) Gilbert, E.R. and Bate, J.F. : J. Nucl. Mater. 65, 204 (1977).
- 4) Norgett, M.J., Robinson, M.T. and Torrens, I. M. : Nucl. Eng. Design 33, 50 (1975).
- 5) Robinson, M. T. and Torrens, I. M : Phys. Rev. B 9, 5008 (1974).
- 6) Lindhard, J., Nielsen, V., Scharff, M. and Thomsen, P. V. : Kgl. Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-fys. Medd. 33 (no. 10) (1963).
- 7) Robinson, M. T. : "Energy Dependence of Neutron Irradiation Damage in Solids" in Proc. B.N.E.S. Nuclear Fusion Reactor Conf., British Nuclear Energy Society, London, p.364 (1970)
- 8) Kinchin, G. H. and Pease, R. S. : Report on Progress in Physics 18, 1 (1955).
- 9) Zijp, W. L., et al., : Nucl. Technol. 67, 282 (1984).
- 10) Zijp, W. L., et al., : ASTM-STP 956, p.750 (1987).
- 11) 1988 Annual Books of ASTM Standards vol. 12.02 , E521-83, E693-79 (1988).
- 12) Aruga, T. and Shiraishi, K : JAERI-M89-026, p.342 (1989).
- 13) Doran, D. G. and Graves, N. J. : HEDL-TME 76-70 (1976).
- 14) Kiritani, M : J. Nucl. Mater. 155-157, 113 (1988).
- 15) Yageta, K., Iwasaki, S. and Sugiyama, K. : JAERI-M88-065, p.399 (1988).
- 16) Baroody, E. M. : Phys. Rev. 112, 1571 (1958).
- 17) Andersen, N. and Sigmond, P. : Kgl. Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-fys. Medd. 39 (3) (1974).
- 18) Matsutani, Y. and Ishino, S. : J. Appl. Phys. 48, 1822 (1977).
- 19) Parkin, D. M. and Coulter, C. A. : J. Nucl. Mater. 85 & 86, 611 (1979).
- 20) Parkin, D. M. and Coulter, C. A. : J. Nucl. Mater. 103 & 104, 1315 (1979).
- 21) Greenwood, L. R. : ASTM-STP 1001, p. 598 (1989).
- 22) Dell, G. F. and Goland, A. N : J. Nucl. Mater. 102, 246 (1981).
- 23) Lucasson, P. : Conf-751006-P2, P.42 (1975).
- 24) Pells, G. P. : J. Nucl. Mater. 155-157, 67 (1988).
- 25) Ishino, S. and Iwata, S. : J. At. Energy Soc. Jpn. 23, 489 (1981).

第1表 中性子スペクトルで平均した多元系物質のはじき出し断面積について、Coulter-Parkinの方法 (SPECOMP) で求めた値と単体の値の原子比率平均との比較^[21]。

Compound		14 MeV	Fusion ^a	HFIR ^b	EBR II ^c
Li ₂ O	SPECOMP	1040.	738.	2410.	939.
	Sum	728.	562.	2321.	636.
LiAlO ₂	SPECOMP	1648.	887.	1120.	1031.
	Sum	1336.	709.	1050.	808.
Al ₂ O ₃	SPECOMP	1685.	802.	303.	924.
	Sum	1718.	808.	304.	925.
SiO ₂	SPECOMP	1700.	814.	305.	944.
	Sum	1764.	824.	306.	943.
V-15Cr-5Ti	SPECOMP	2745.	791.	243.	577.
	Sum	2741.	789.	243.	576.
316 SS	SPECOMP	2889.	743.	198.	481.
	Sum	2889.	743.	198.	481.
Nb-Ti	SPECOMP	2564.	696.	199.	484.
	Sum	2575.	701.	202.	489.
TaO	SPECOMP	1592.	519.	159.	459.
	Sum	1371.	541.	185.	561.

^a Fusion first-wall spectrum (STARFIRE).

^b High-Flux Isotope Reactor, Oak Ridge National Laboratories.

^c Experimental Breeder Reactor II, Argonne National Laboratory.

第2表 損傷計算のASTM標準ではじき出しエネルギーの推奨値^[11]。

Metal	T_{min} (eV) ^A	T_d (eV)
Al	16	25
Ti	19	30
V	—	40
Cr	28 ^B	40
Mn	—	40
Fe	20 ^B	40
Co	22	40
Ni	23	40
Cu	19	30
Zr	21	40
Nb	36 ^B	60
Mo	33	60
Ta	34	90
W	40	90
Pb	14	25

^A See review by P. Lucasson in *Proceedings of International Conference on Fundamentals Aspects of Radiation Damage in Metals*, Gatlinburg, Tenn., October 1975.

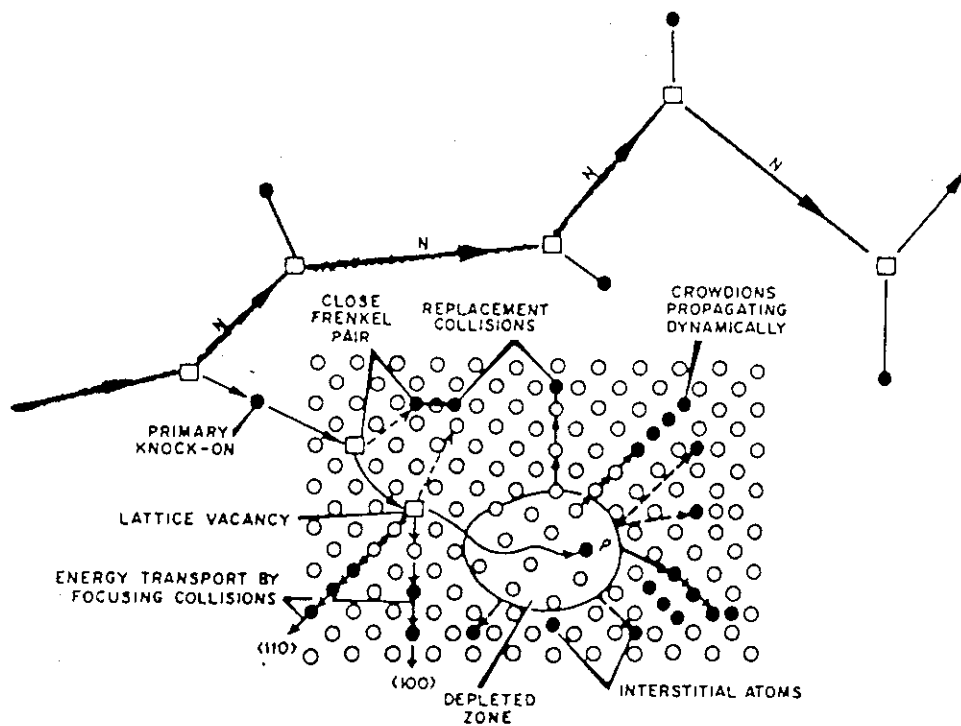
^B An effective threshold measured in a polycrystalline specimen.

第3表 セラミック絶縁体のはじき出しエネルギー^[24]。

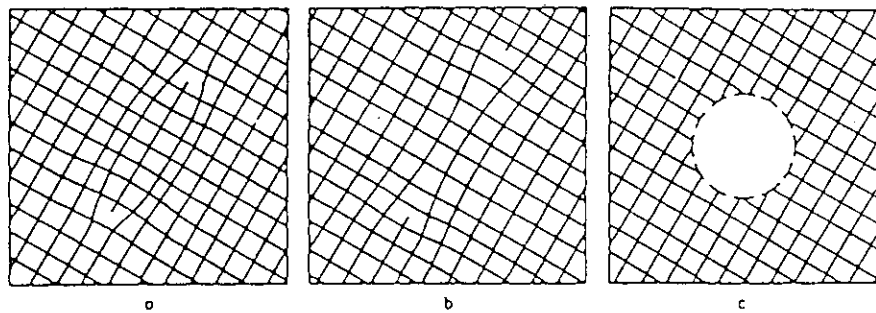
Material	Element and orientation	E_J (eV)	Average E_J (eV)		
BeO	Be	-20	50		
	O	76			
MgO	Mg <001>	60±3	56		
		<011>		60±3	
		<111>		60±3	
	O <001>	44±3		53	
		<011>			64±3
		<111>			46±3
Al ₂ O ₃	Al random	18±3	50		
	O random	76±3			
	random	90			
	<0001>	53			
	<11 $\bar{2}$ 0>	41			
MgAl ₂ O ₄	Mg <001>	20	45		
	Mg	30			
	Al	30			
	O	59			
Al ₂₃ O ₂₇ N ₅			-50		
AlN			-50		
Si ₃ N ₄			-50		

第1表 照射効果に関する材料データの構造。

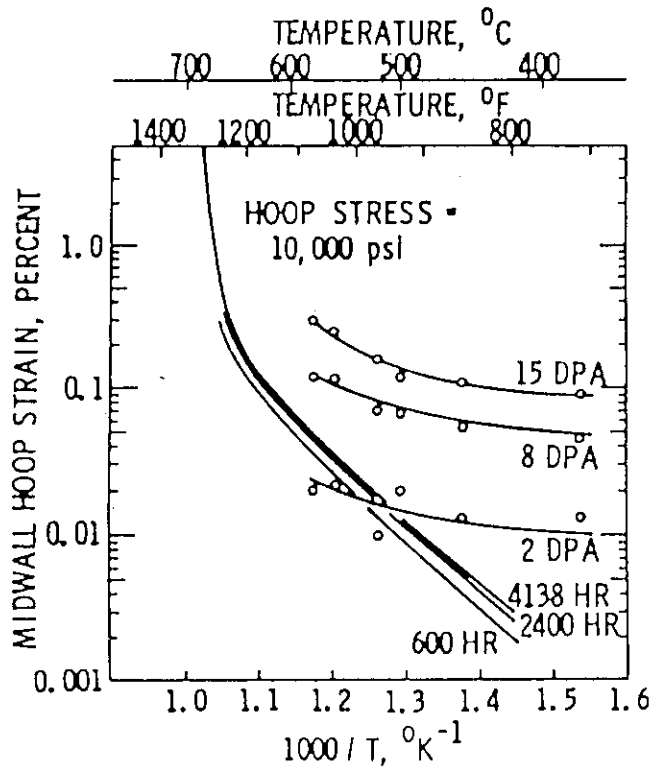
TABLE NAME		RECORD FIELDS FOR EACH TABLE																		
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19		
INFORM	TITL A240	AUT A160	PD L8	RR A20	J0 A80	VOL A16	NO I5	P0 I8	AK A200	COMHRT A80										
AVAIL	AD L8	TBLH A60	H0H I2	H0T I4	SP I8	E I8	COMHRT A80													
DOHAIN	DD L8	DDH A32	DDHRT A32	DT A2	UNIT A16															
NUMBER	AD L8	DDH L8	RD L8	VALUE 3E12.5																
TEXT	AD L8	DDH L8	RD L8	COMHRT A80																
SPEC	SP L8	H L8	INTRH A54	MSH I2	MSR I8	A I8	S I8	COMHRT A80												
PROC	H L8	SH L2	TYPE A8	ATH I8	P1 3E12.5	P2 3E12.5	P3 3E12.5	P4 3E12.5	P5 3E12.5											
SHAPE	S L8	SHRN A16	THI 3E12.5	H1D 3E12.5	LND 3E12.5	D1R 3E12.5	O1H1 3E12.5	VALUE1 3E12.5	O1H2 3E12.5	VALUE2 3E12.5	O1H3 3E12.5	VALUE3 3E12.5	O1H4 3E12.5	VALUE4 3E12.5	O1H5 3E12.5	VALUES 3E12.5	SDN A16			
ALLOY	A L8	ALLN A32	O1H1 A32	O1H2 A32	O1H3 A32	O1H4 A32	O1H5 A32	COMHRT A32	HEL A32	MPH A32										
PHASE	A L8	P11 L8	P15H L8	VALUE 3E12.5	UNIT A80															
COMPI	TRH A2	COM L8	UNIT A80	ES 3E12.5	VALUE 3E12.5															
ENVRN	E L8	EVNRH A32	LP L8	H1P I2	H1R L8	TC I8	N1C I2	H1CR A80	COMHRT A80											
IRRP5	LP L8	CN L2	TYPE A80	PTCL A80	ISHT A16	ATH I8	V1 A1	P1 3E12.5	UNIT1 A80	V2 A1	UNIT2 A80	V3 A1	UNIT3 A80	V4 A1	UNIT4 A80					
TESTC	TC L8	CN L2	TYPE A16	V1 3E12.5	UNIT A16															
HCRST	H L8	HCRH A32	IMP L2	VALUE 3E12.5	COMHRT A64															
HCRPH	H L8	HCRPH A32	UNIT A16	VALUE 3E12.5	COMHRT A64															
ATHOS	ATH L8	ATH A32	REL L2																	
COMP2	ATH L8	ATH A32	VALUE 3E12.5	UNIT A80																



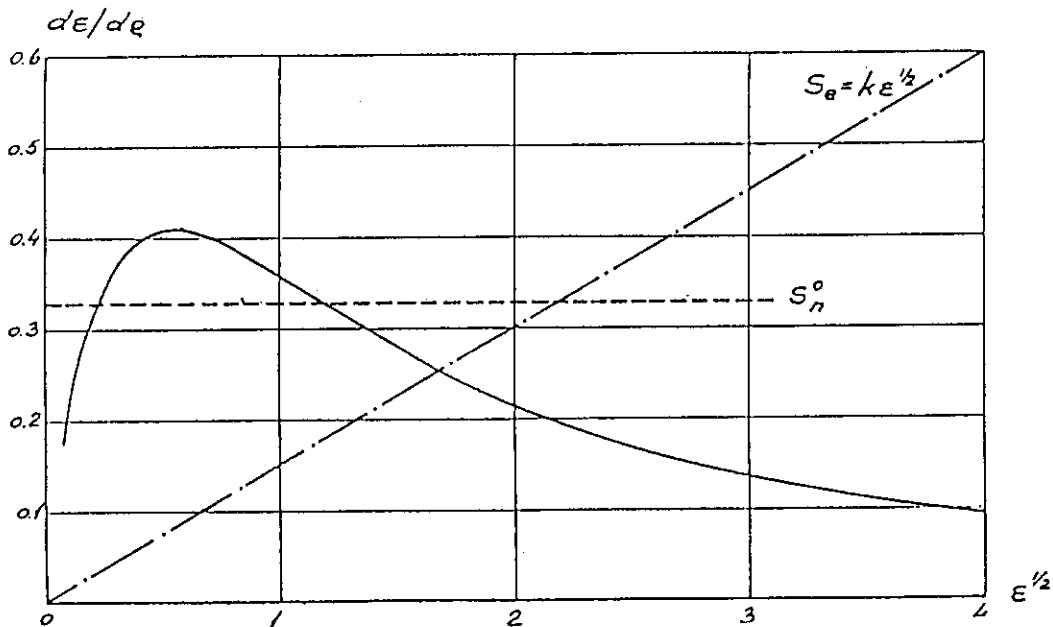
第1図 中性子照射した固体中のはじき出し過程の模式図。Seeger^[1]に Wiffen^[2]が手を加えたもの。連鎖的是じき出しで中心から離れたところに格子間原子が形成され中心近傍は原子空孔が多く残る。



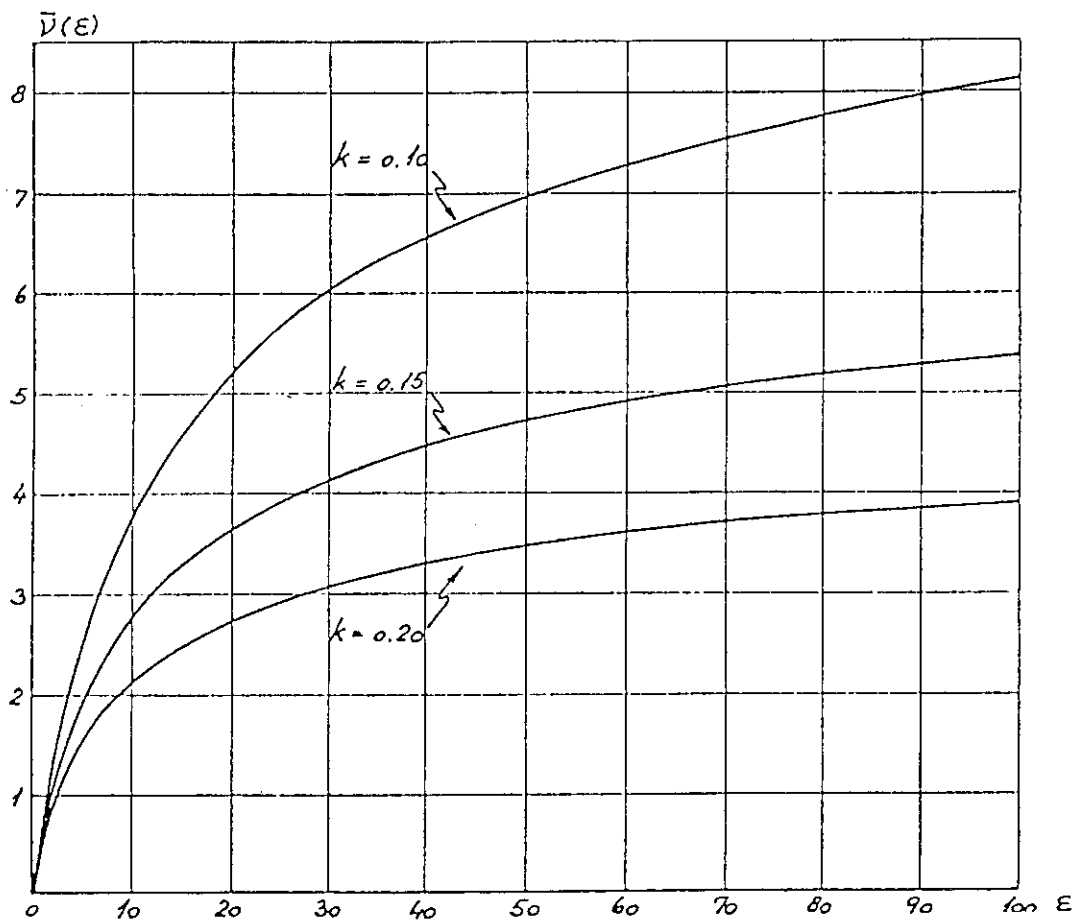
第2図 点欠陥の自由に移動できる高い温度で照射した金属中に安定に存在する欠陥集合体^[2]。(a) 格子間原子型転位ループ，格子間原子が結晶面間に集合したもの，(b) 原子空孔型単位ループ，原子空孔が結晶面間に集合したもの，(c) ボイド，原子空孔が立体的に集合したもの。



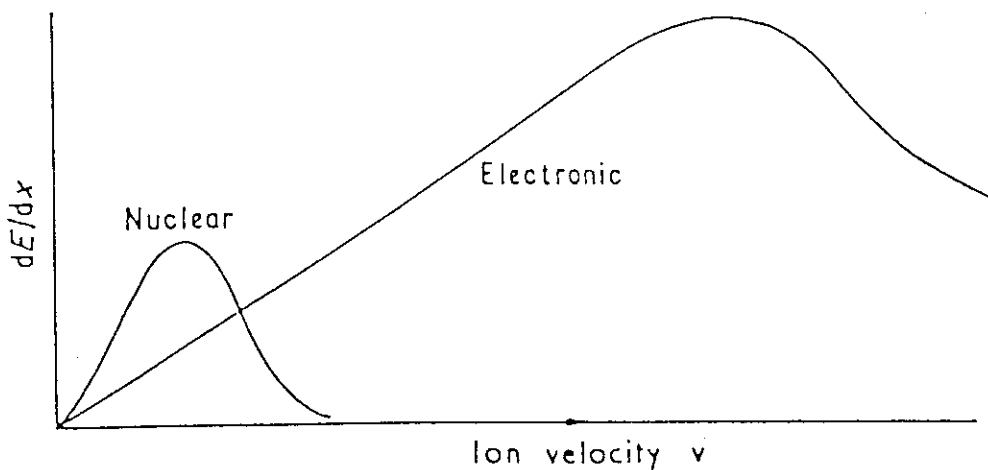
第3図 69MPa(10,000psi)にガスで内圧を加えた、20%の冷間加工した316ステンレス鋼加圧管のEBR-IIでの照射下クリープと非照射のクリープとの対比^[3]。例えば、400度Cで15dpaまで照射したときの変形量は同じ温度で同じ時間での変形の約100倍であることを示す。



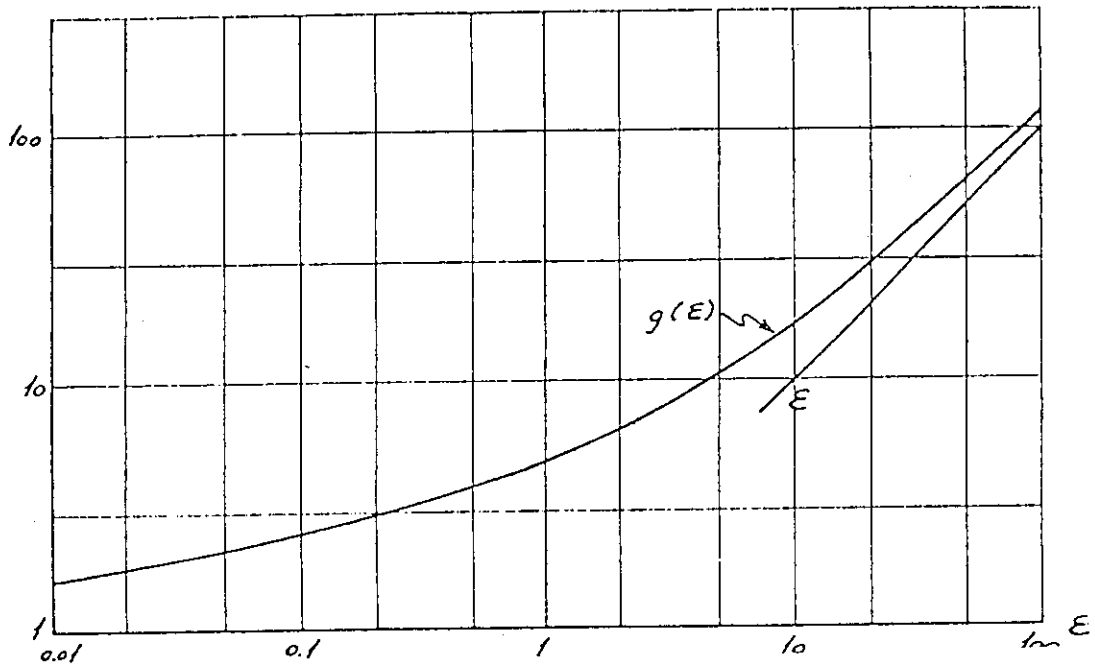
第4図 換算エネルギー ϵ と換算距離 ρ を使って表した、LSS理論の核的阻止断面面積 $(d\epsilon/d\rho)_n$ (実線)と電子的阻止断面面積 $(d\epsilon/d\rho)_e = k\epsilon^{1/2}$ (図では $k = 0.15$)。横軸は $\epsilon^{1/2}$ 。破線の S_n^0 は原子間ポテンシャルが距離の平方に反比例する場合である^[6]。



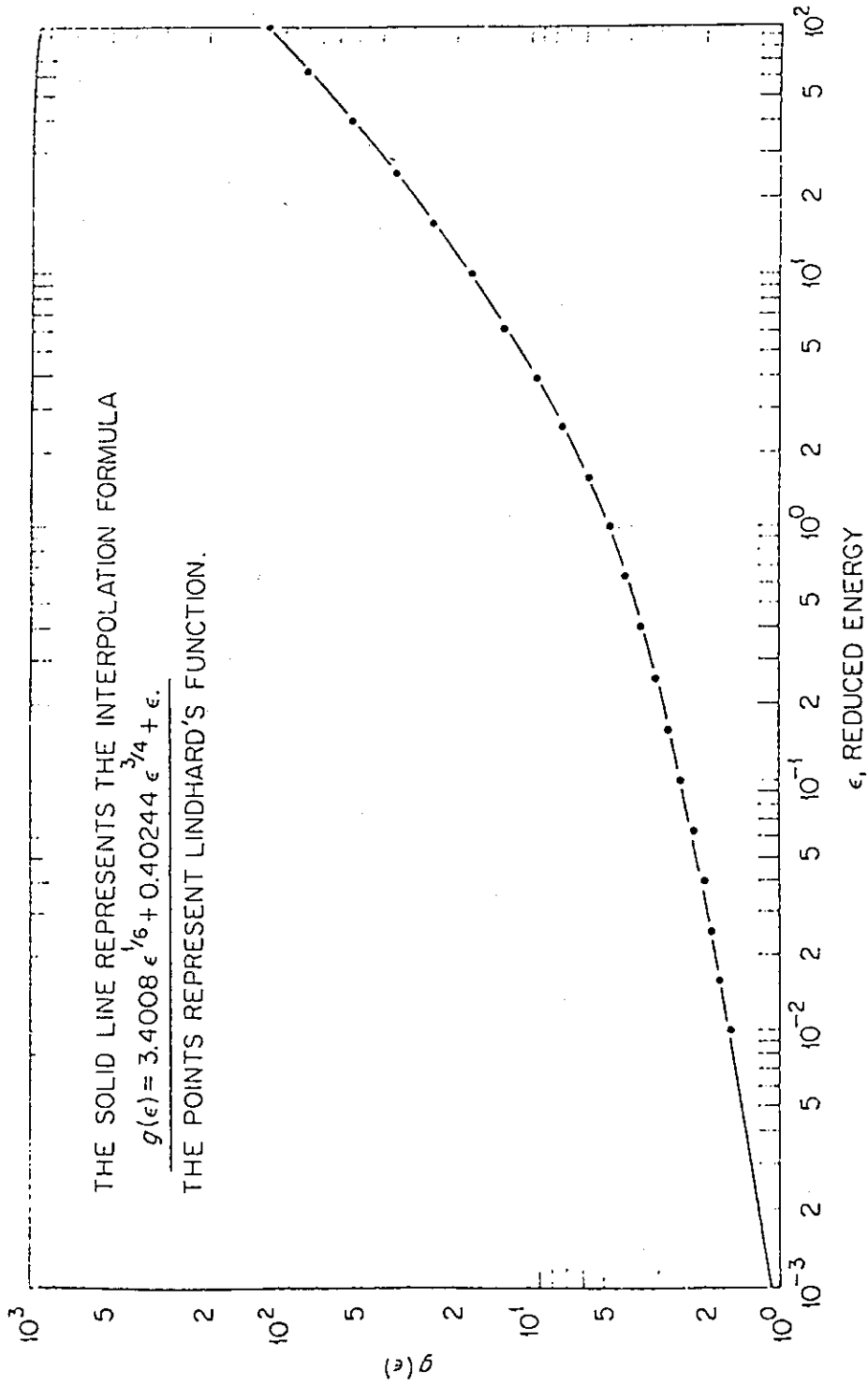
第5図 損傷エネルギー関数 $\bar{D}(\epsilon)$ ^[6]。電子的阻止断面積 $(d\epsilon/d\rho)_e = k\epsilon^{1/2}$ の k の三つの値: $k = 0.1, 0.15, 0.20$ に対して示す。



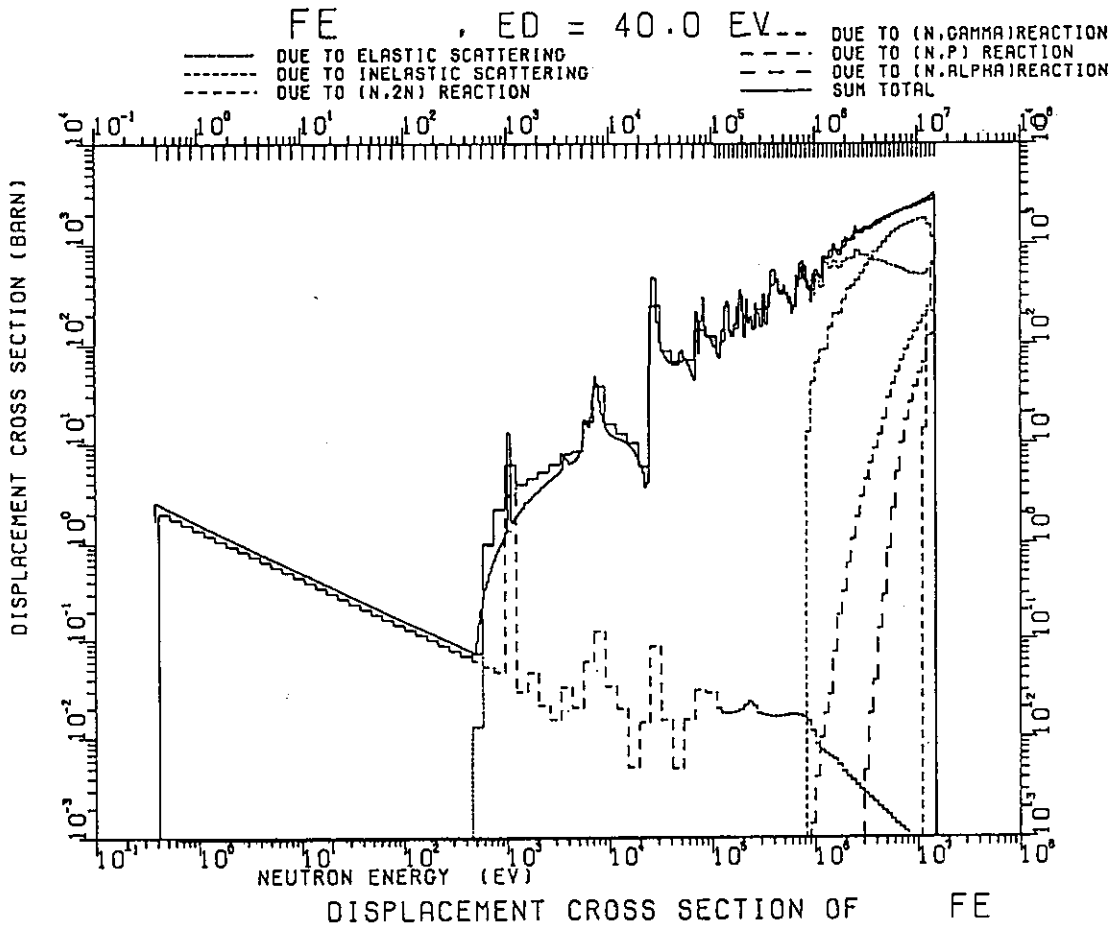
第6図 イオンの速度の関数で模式的に表した、高エネルギー領域までの核的および電子的阻止能。



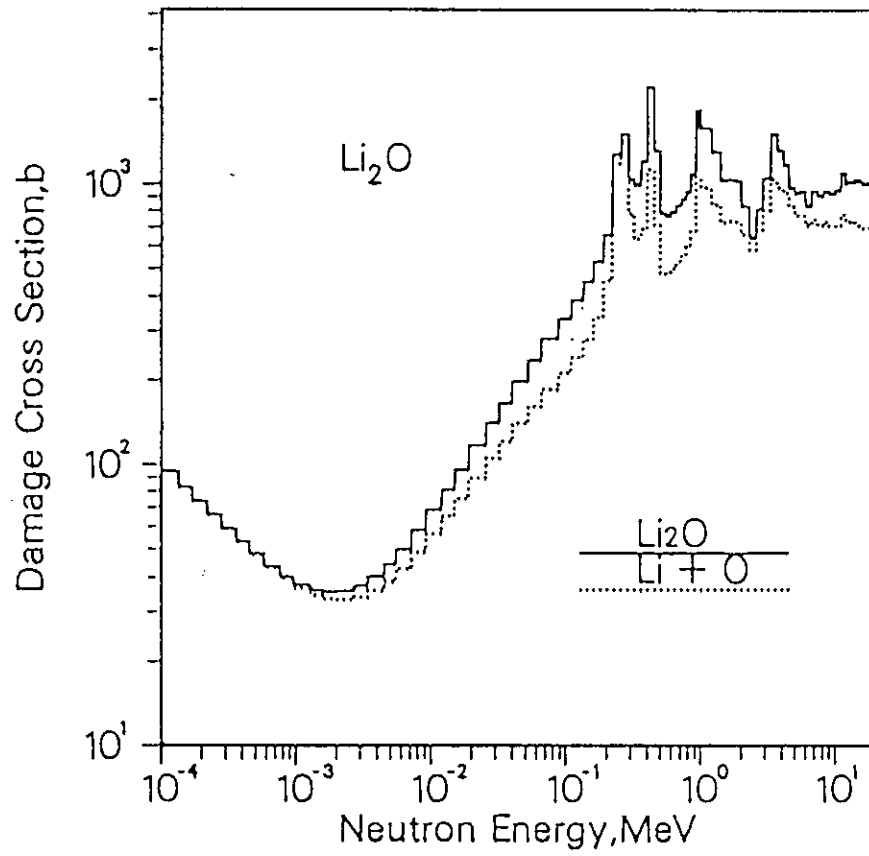
第7図 損傷エネルギー関数を $\nu(\varepsilon) = \varepsilon / (1 + k \cdot g(\varepsilon))$ で表したときの関数 $g(\varepsilon)$ ^[6]。



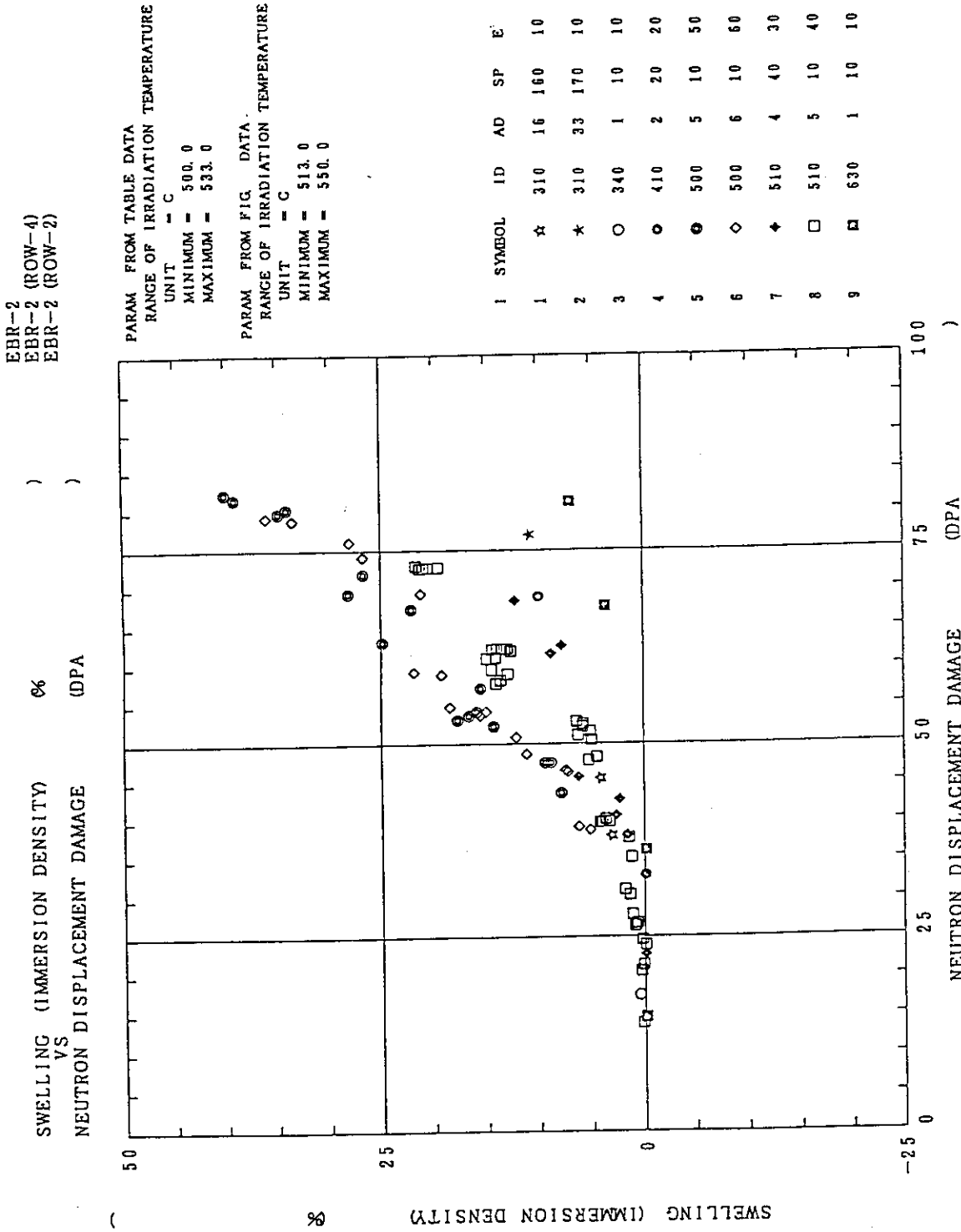
第8図 Robinsonが求めた $g(\epsilon)$ のフイッティング式^[7]。線上の点は Lindhard の値を示す。



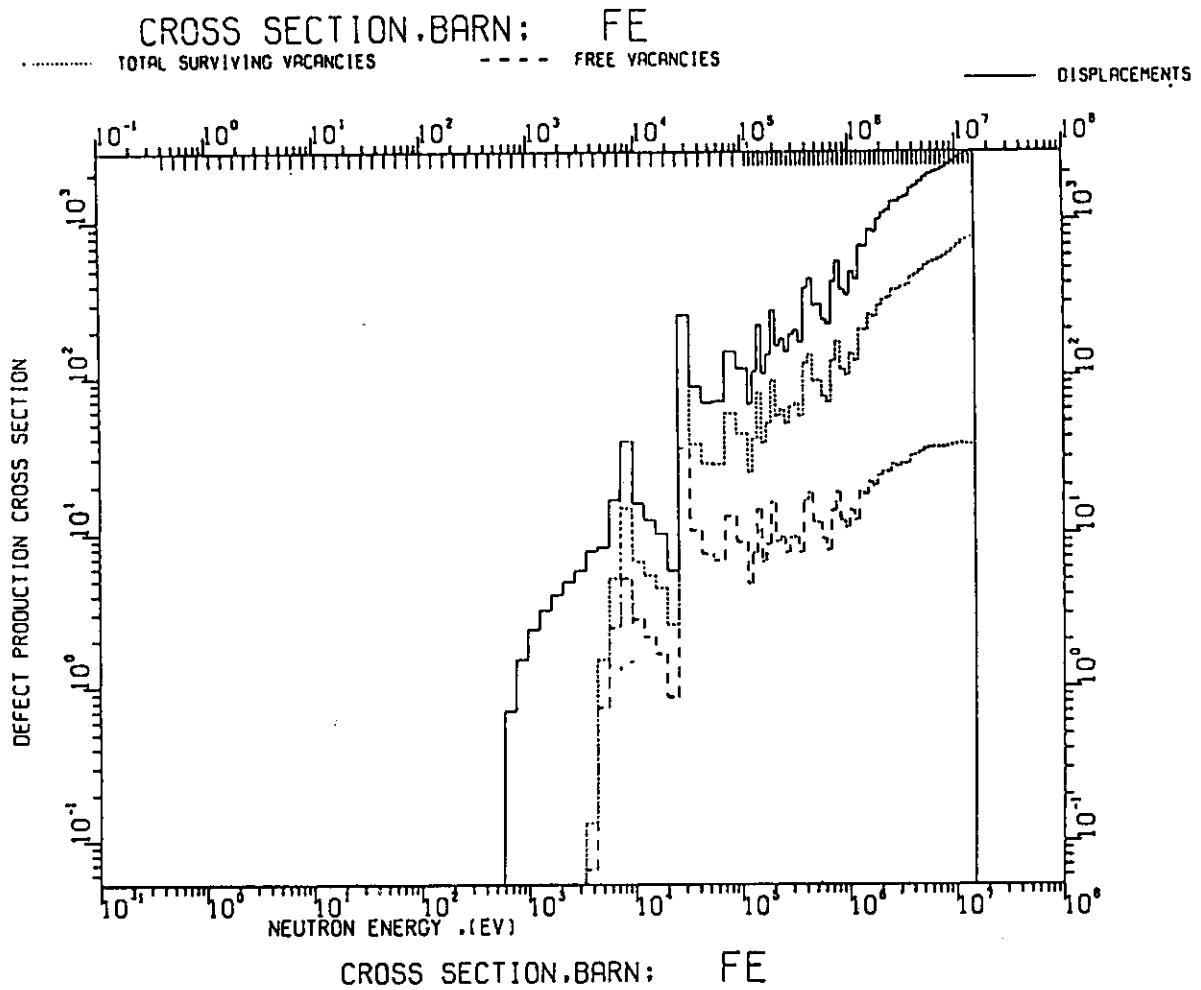
第9図 TENJIN-2コードで計算した中性子照射したFeのはじき出し断面積の各核反応の寄与とASTM標準¹⁾との比較。滑らかな647群のデータがASTM標準。



第10図 Coulter-Parkinによる方法と単体の値の原子比率で平均した Li_2O のはじき出し断面積の比較^[21]。



第11図 データベースからの検索結果の例。



第12図 短時間焼鈍後の残留欠陥生成数とPKAエネルギースペクトルを積分して求めたFeの欠陥生成断面積。高エネルギー中性子の造る欠陥では、全はじき出し原子の中自由な点欠陥は数パーセントである。

7. 照射損傷のカスケードモデル計算

野中 久典 (阪大工, 現日立エネルギー研)

高橋 亮人 (阪大工)

(要旨)

PKA より出発する原子衝突カスケードによる三次元原子はじきだし損傷シミュレーション計算をモンテカルロ法にもとづいておこなった。衝突過程は、核的エネルギー損失をラザフォード散乱に軌道電子による遮蔽効果を加えてモデル化し、さらに電子的エネルギー損失を扱っている。はじきだし数は、MeV 領域を除いて、NRT 標準モデルに一致する。フレンケル対分布、特に Star-burst 現象が示された。

Damage Simulation by Cascade Collision Model

Hisanori Nonaka

(Osaka University, present at Energy Lab., Hitachi)

Akito Takahashi (Osaka University)

(Abstract)

Three dimensional simulation of displacement damage starting from PKA was carried out based on the Monte Carlo method. Nuclear energy loss was treated with the Rutherford scattering taking into account the shielding effect by orbital electrons. In addition, the energy loss by electrons was treated. Total number of displacements (DPA) by the present model agrees well with that by the NRT model, except the MeV region. Distributions of Frenkel pairs, especially star-burst phenomena were shown varying PKA energies.

1. はじめに

炉材料の中性子による照射効果のうち、PKA によっておこるカスケード型はじき出しによる損傷劣化は材料の強度や電気的特性等と深くかかわっており、特に核融合炉においては中性子の発生エネルギーが約 14 MeV と核分裂炉と比べて高いため、はじき出し損傷劣化に対する解析は非常に重要である。

現在損傷断面積の計算に広く用いられている NRT モデルは① 原子の結晶に対する束縛の影響 (化学結合効果)、および結晶効果 (focusing, channeling など) を無視する。② アニ—リ

ングを無視する。③ 反跳電子によって反跳原子が作られることはない。④ 核的衝突と電子的衝突は分離可能とする。などの仮定が用いられる。又特に高エネルギーのPKAによって作られることの多いサブカスケードの $\nu(E_p)$ に対する影響が考えられていないことや、単体以外のターゲットに対して適用が難しいことなどの問題点も持つが、現在の所では最も合理的なはじき出し損傷量計算モデルと考えられている。

以上の様なNRTモデルの問題点に対して、モンテカルロ法によるはじき出し損傷量の計算を出来るだけ現実に近い散乱モデルにもとづいて行ない、NRTモデルの妥当性のチェックとその結果を用いてのはじき出し関数の高エネルギー側、あるいは混成原子系に対する適用範囲の拡大、および散乱カスケードの属性の解析と理解を図る目的で、三次元はじき出し散乱カスケードシミュレーションコード(RUCAS)を開発した。モンテカルロ法では1つの散乱則に基づいて繰り返す衝突-散乱あるいははじき出しの計算を行なうため、新しい衝突モデルを旧散乱則に取り入れるといったバージョンアップが容易である。今回は散乱則としてはNRTモデルと同様の仮定を用いて計算を行なったが将来的には化学結合の効果を散乱則に取り入れるなどより現実に近いモデルに発展させて行くことが可能であると言える。

2. 計算モデル

中性子によって格子点からはじき出されたPKAあるいはPKAによってカスケード的にはじき出しを受けた原子が材料中でエネルギーを失っていくメカニズムの主なものには原子との弾性衝突によって核的エネルギー損失と、ターゲット原子の電子を励起したりイオン化したりすることによる電子的エネルギー損失がある。又これらの損失はここでは独立のものであるとして取り扱う。それ以外のエネルギー損失としては、① 核の励起や核反応、② 放射損失(制動放射、チェレンコフ光など)③ 非弾性的電子的損失(荷電変換など)。などがあるが、①、②の損失機構はエネルギーが極めて高い場合にしか起こり得ないためここでは考えず、又③は電子的エネルギー損失の中に包括して考えることにする。以下ではエネルギーの核的損失、および電子的損失のそれぞれの理論について述べ、又実際のプログラムにおけるこれらの理論の取り扱いについて考える。

今回、計算の試料とした核種は将来の核融合炉において最も多角的に利用されるであろう鉄を選び、これを中心として考察を進めた。

2.1 核的エネルギー損失

[I] Rutherford 散乱

核的エネルギー損失は互いの原子の電氣的な反発力による衝突-散乱によって起こる。この原子同士の衝突-散乱の最も単純なモデルはクーロン力による散乱(Rutherford 散乱)である。ここでは先ずこのRutherford 散乱の理論について述べ、これを基礎モデルとしてより実際に近い場合へとモデルの修正を行なって行く。クーロン力は中心力であるから二原子の衝突を考える場合相対運動座標系で取り扱うのが便利である。相対運動系の特徴としては次の様なものがある。ここで入射原子、ターゲット原子の原子番号をそれぞれ z_1 、 z_2 、質量数をそれぞれ A_1 、 A_2 とする。

- ① ターゲット原子を原点にとると散乱は原子が作るポテンシャル場の中での換算質量 μ を持った入射粒子の運動に帰着される。ここで μ は

$$\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} \quad (1)$$

である。

- ② 相対運動系における粒子の散乱角 θ_r は重心系における散乱角 θ_c と等しい。又衝突係数 (impact parameter) p もこの両系で等しい。
- ③ 系の全エネルギー E_r も重心系同様

$$E_r = \frac{1}{2} \mu v_r^2 + V(r) = \text{const.} \quad (2)$$

となる。ここで v_r は相対速度、 r は相対距離、 $V(r)$ はポテンシャルエネルギーである。 E_r に実験室系から見た重心の運動エネルギーを加えると実験室系における全エネルギーが求まる。ポテンシャルによって二粒子に働く力、 F_r は

$$F_r = -\text{grad } V(r) \quad (3)$$

であり、クーロンポテンシャルに対しては

$$V(r) = z_1 z_2 e^2 / r \quad (4)$$

ここで e は電子の素電荷である。

Fig. 26 (b) において A にあった粒子が dt 時間後に B にあるとすると

$$\begin{aligned} \angle ACB &\cong \angle R \text{ より} \\ v_r^2 &= \dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2 \end{aligned} \quad (5)$$

が成り立つ。又相対運動系における入射粒子の入射速度を v_{r0} とすると (5) および全エネルギーの保存則より

$$E_r = \frac{1}{2} \mu v_{r0}^2 = \frac{1}{2} \mu (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) + V(r) = \text{const.} \quad (6)$$

となる。次に相対運動系の角運動量の保存を考える。Fig. 26 (b) において原点回りの角運動量、 L_r は

$$L_r = \mu v_r r_m \quad (7)$$

$d\phi$ は微小角であるから $\triangle ABC \cong \triangle OAD$ でありこれより

$$r_m = -\frac{r^2}{v_r} \dot{\phi} \quad (8)$$

又 L_r の保存及び (7), (8) より

$$L_r = \mu v_{r_0} p = -\mu r^2 \dot{\phi} = \text{const.} \quad (9)$$

$$\therefore \dot{\phi} = -\frac{v_{r_0} p}{r^2} \quad (10)$$

(10) を (6) に代入して整理すると

$$\dot{r} = \mp v_{r_0} \sqrt{1 - \frac{V(r)}{E_r} - \frac{p^2}{r^2}} \quad (11)$$

負号は Fig.26 (a) の A 点まで, 正号は A 点以降に対応する。

i) 最接近距離

二粒子が最も近づくのは (11) で $\dot{r} = 0$ に対応しこの距離を r_m とすると (11) より

$$1 - \frac{V(r_0)}{E_r} - \frac{p^2}{r_m^2} = 0 \quad (12)$$

$V(r)$ がクーロンポテンシャルであるなら (4), (12) より

$$r_m = \frac{\frac{z_1 z_2 e^2}{E_r} + \sqrt{\left(\frac{z_1 z_2 e^2}{E_r}\right)^2 + 4p^2}}{2} \quad (13)$$

を得る。すなわち r_m は p に依存する。

$p = 0$, すなわち原子の正面衝突に対応する r_m を b と表わし最接近距離 (distance of closest approach) と呼ぶ。(13) で $p = 0$ とすることにより

$$b = \frac{z_1 z_2 e^2}{E_r} \quad (14)$$

これを使うと (13) は

$$r_m = \frac{b + \sqrt{b^2 + 4p^2}}{2} \quad (15)$$

と表さわれる。

ii) 散乱角の決定

$$(10) \text{ より } d\phi = -\frac{v_{r_0} p}{r^2} dt = -\frac{v_{r_0} p}{r^2} \frac{dt}{dr} dr \quad (16)$$

これに (11) を代入すると

$$d\phi = \pm \frac{p}{r^2} \left\{ 1 - \frac{V(r)}{E_r} - \frac{p^2}{r^2} \right\}^{-\frac{1}{2}} dr \quad (17)$$

さて相対運動系における散乱角 θ_r は Fig.26 (a) に

$$\theta_r = \pi - 2 \angle AOP = \pi - 2 \int d\psi = \pi - 2 \int_{r_0}^{\infty} \frac{p}{r^2} \left\{ 1 - \frac{V(r)}{E_r} - \frac{p^2}{r^2} \right\}^{-\frac{1}{2}} dr \quad (18)$$

となる。(18)はユニバーサルな式であって任意の $V(r)$ について成立するが、この式を解析的に解くことは $V(r) \propto \frac{1}{r}$ 、又は $V(r) \propto \frac{1}{r^2}$ などの場合を除いて非常に難しくなる。今考えている(4)式のクーロンポテンシャルに対しては(18)式は解析的に解けて、

$$\tan \frac{\theta_r}{2} = \frac{b}{2p} \quad (19)$$

を得る。

iii) 全一次はじき出し断面積

実験室系におけるエネルギー E の入射粒子とターゲット原子が衝突係数が $p \sim p + dp$ である散乱を行ない、ターゲット原子が E_p なるエネルギーを受け取るとする。この様な衝突が起こるための微小断面積 $d\sigma$ は

$$d\sigma(E, E_p) = 2\pi p \left| \frac{dp}{dE_p} \right| |dE_p| \quad (20)$$

と表すことが出来る。

又弾性散乱のカイネマティクスより、

$$E_p = E_{pmax} \sin^2 \frac{\theta_r}{2} \quad (21)$$

$$E_{pmax} = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \quad (22)$$

が成り立つから(19)と(21)より $\frac{dp}{dE_p}$ を求めることが出来る。すなわち(19)、(21)より

$$\frac{b^2}{4p^2} = \tan^2 \frac{\theta_r}{2} = \frac{\sin^2 \frac{\theta_r}{2}}{1 - \sin^2 \frac{\theta_r}{2}} = \frac{E_p}{E_{pmax}} \left/ \left(1 - \frac{E_p}{E_{pmax}} \right) \right. = \frac{E_p}{E_{pmax} - E_p} \quad (23)$$

$$\therefore \frac{dp}{dE_p} = - \frac{b^2}{8p} \frac{E_{pmax}}{E_p^2} \quad (24)$$

これを(20)に代入して整理すると結局

$$d\sigma(E, E_p) = \frac{\pi b^2}{2} \frac{E_{pmax}}{E_p^2} |dE_p| \quad (25)$$

全一次はじき出し断面積、 σ_D とはターゲットがはじき出しエネルギー E_d 以上のエネルギーを受け取りはじき出しがおこるための断面積であり、(25)式より

$$\sigma_D = \int_{E_d}^{E_{pmax}} d\sigma(E, E_p) = \int_{E_d}^{E_{pmax}} \frac{\pi b^2}{2} \frac{E_{pmax}}{E_p^2} dE_p = \frac{\pi b^2}{4} \left(\frac{E_{pmax}}{E_d} - 1 \right) \quad (26)$$

と求まる。(14)式を代入すると

$$\sigma_D = \frac{\pi}{4} \left(\frac{z_1 z_2 e^2}{E_r} \right)^2 \left(\frac{E_{pmax}}{E_d} - 1 \right) \quad (27)$$

相対運動系における全エネルギー E_r は実験室系における全エネルギー E を用いて

$$E_r = E - \frac{1}{2} M V_c^2 \quad (28)$$

と表せる。ここで $M = M_1 + M_2$, V_c は実験室系における重心の速度であり粒子の実験室系における入射速度を v_{i0} とすると V_c は

$$V_c = \frac{M_1}{M_1 + M_2} v_{i0} \quad (29)$$

なる式で表され、これを(28)に代入して整理すると

$$E_r = \frac{M_2}{M_1 + M_2} E \quad (30)$$

となる。ここで $E_r = \frac{1}{2} \mu v_{co}^2$, $E = \frac{1}{2} M_1 v_{i0}^2$ を使っている。

又(30)式を速度の関係式に書き直すと結局

$$v_{ro} = v_{i0} \quad (31)$$

が得られる。同核種同士の散乱 ($z_1 = z_2$, $M_1 = M_2$) においては(30)より

$$E_r = \frac{1}{2} E \quad (32)$$

これを用いて(27)式を書き直すと

$$\sigma_D = \frac{\pi (ze)^4}{E^2} \left(\frac{E}{E_d} - 1 \right) = \frac{\pi (ze)^4}{E} \left(\frac{1}{E_d} - \frac{1}{E} \right) \quad (33)$$

iv) Rutherford 散乱における問題点

Rutherford 散乱はいわゆる“裸の”原子核同士のクローン衝突を扱ったものであり、このモデルが実際に適用できるのは入射粒子が極めて高速(高エネルギー)で運動し、軌道電子をふり切っているような場合のみに限られる。この様な場合を除き、原子核の電荷は軌道電子によって遮蔽されており、この効果を考慮する必要がある。又 iii) で求めた断面積ははじき出し断面積であって実際の散乱で用いられるべき散乱断面積とは異なる。散乱断面積は定性的にはエネルギーの増加に対して単調減少となると思われるがはじき出し断面積は(33)式によると $E = 2E_d$ で $\sigma_D = \frac{\pi (ze)^4}{4E_d^2}$ なる極大値を持つことになり σ_D をそのままプログ

ラムに組込むことは出来ないといえる。

[II] 軌道電子による遮蔽効果

i) 遮蔽された相互作用ポテンシャル

実際の原子の相互作用ポテンシャルは軌道電子による遮蔽効果によって距離とともに急激に減衰すると考えられる。このようなポテンシャルは

$$V(r) = \frac{z_1 z_2 e^2}{r} \phi\left(\frac{r}{a}\right) \quad (34)$$

という表式で一般的に表される。ここで a は遮蔽半径と呼ばれ、原子の大きさに相当する量であり、遮蔽効果の強くなる距離の目安を与える。 $\phi\left(\frac{r}{a}\right)$ は遮蔽関数であり、 $\phi(0) = 1$, $\phi(1) \ll 1$, $\phi(\infty) = 0$ なる値を取る関数である。 $\phi\left(\frac{r}{a}\right)$ を具体的に表式化して用いた $V(r)$ の代表例としては次の様なものがある。

① Bohr のポテンシャル

$$\left\{ \begin{array}{l} V(r) = \frac{z_1 z_2 e^2}{r} \exp\left(-\frac{r}{a_B}\right) \end{array} \right. \quad (35)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} a_B = a_0 (z_1^{1/2} + z_2^{1/2})^{-1/2} \end{array} \right. \quad (36)$$

a_0 はボーア半径であり $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0.529 \text{ \AA}$ である。Bohr ポテンシャルは正確な核物理的理論にもとづいたものでなく、直感的な表式であるが解析が容易であり定性的な議論には便利であってしばしば用いられる。

② Firsov のポテンシャル⁹⁾ (Thomas-Fermi 遮蔽ポテンシャル)

Firsov は Thomas-Fermi の原子模型にもとづいて二原子の体系について相互作用ポテンシャル式

$$\left\{ \begin{array}{l} V(r) = \frac{z_1 z_2 e^2}{r} \phi_{TF}\left(\frac{r}{a_F}\right) \end{array} \right. \quad (37)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} a_F = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3} a_0 (z_1^{1/2} + z_2^{1/2})^{-2/3} \end{array} \right. \quad (38)$$

を求めた。 $\phi_{TF}\left(\frac{r}{a_F}\right)$ は Thomas-Fermi 遮蔽関数である。Firsov のポテンシャルは Bohr のポテンシャルと異なり、十分な理論的根拠にもとづいて求められているため、より実際に近いポテンシャルと言える。

③ Moliere のポテンシャル

Moliere 関数、 $\phi_M\left(\frac{r}{a}\right)$ は $\phi_{TF}\left(\frac{r}{a}\right)$ の良い近似であり

$$\phi_M\left(\frac{r}{a}\right) = 0.35 e^{-\frac{0.3r}{a}} + 0.55 e^{-\frac{1.2r}{a}} + 0.10 e^{-\frac{6.0r}{a}} \quad (39)$$

なる表式で与えられる。これを Firsov のポテンシャルにおいて $\phi_{TF}\left(\frac{r}{a}\right)$ のかわりに用いた $V(r)$ が Moliere のポテンシャルである。すなわち

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \phi_M \left(\frac{r}{a_F} \right) \quad (40)$$

である。以降は実際のポテンシャルを良く表現していること、および解析的取り扱いが容易であることからポテンシャルとしては Molieré ポテンシャル を用いて解析を進めた。

ii) Lindhard の微分散乱断面積

散乱の断面積を求めるためには用いている $V(r)$ に対して (18) 式を解くことが必要である。しかし先に述べた様な遮蔽ポテンシャルに対して (18) 式を解析的に解くことは非常に難しく、多くの場合ある一定の条件下で近似的に解けるにすぎない。

これに対して Lindhard は Thomas-Fermi ポテンシャルにおいてユニバーサルに微分散乱断面積を求めるための理論を展開した。¹⁰⁾ それによると、

$$\begin{cases} t = \varepsilon^2 \sin^2 \frac{\theta_r}{2} & (41) \\ \varepsilon = a_F / b & (42) \end{cases}$$

により定義されるパラメータ t に対し、微分散乱断面積 $d\sigma$ は

$$d\sigma = \pi a^2 \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) \quad (43)$$

なる単一パラメータの関数として表すことが出来る。

$f(t^{1/2})$ は Lindhard によりグラフ、および数値で与えられているが、Winterborn¹¹⁾ は $f(t^{1/2})$ の近似式として

$$\begin{cases} f(t^{1/2}) = \lambda t^{1/2} [1 + (2\lambda t^{1/2})^2]^{-3/2} \\ \lambda = 1.309 \end{cases} \quad (44)$$

を与えた。(43) 式は入射原子とターゲットの組合せによらず弾性散乱の微分断面積を与えるユニバーサルな関係式である。

(43) 式を θ_r を変数として書き直すと $dt = \frac{\varepsilon^2 \sin \theta_r}{2} d\theta_r$ であることより

$$\frac{d\sigma(E)}{d\theta_r} = \frac{\pi a^2 \varepsilon}{4} t(\theta_r)^{-3/2} f(t^{1/2}(\theta_r)) \sin \theta_r \quad (45)$$

を得る。Fig. 1 に $\frac{d\sigma(E)}{d\theta_r}$ を θ_r に対して描いた。

入射原子が高エネルギーになる程前方性が強く、同時に $\frac{d\sigma(E)}{d\theta_r}$ の値も小さくなっていく傾向が見られる。

$\frac{d\sigma(E)}{d\theta_r}$ を θ_r について $0 \sim \pi$ まで積分することによってある入射エネルギーに対する全散乱断面積を算出できるが $\frac{d\sigma(E)}{d\theta_r}$ は $\theta_r \rightarrow 0$ で無限大に発散するため積分範囲を θ_r について $\theta_{\min} \sim \pi$ とする必要がある。すなわち θ_r に下限を設けて σ の発散をおさえるわ

けである。

ここで θ_{\min} は全断面積を求める上で重要なファクターとなるが θ_{\min} の決め方によって全断面積の意味が変わってくることに注意しなくてはならない。

iii) 全はじき出し断面積

入射原子のエネルギーが E の時、ターゲット原子がはじき出しエネルギー E_d 以上のエネルギーを受け取るための最小の入射粒子の散乱角を θ_{\min} とすると、散乱のカイネマティクスより $E_d = E \sin^2 \frac{\theta_{\min}}{2}$ が成り立ちこれより

$$\theta_{\min} = 2 \sin^{-1} \sqrt{\frac{E_d}{E}} \quad (46)$$

を得る。この場合 θ_{\min} は E に対して単調に減少する。この θ_{\min} を下限として $\frac{d\sigma}{d\theta_r}$ を積分して求まる断面積は全はじき出し断面積であって一般的な散乱断面積とは意味が異なる。全はじき出し断面積を $\sigma_D(E)$ とすると

$$\sigma_D(E) = \int_{\theta_{\min}}^{\pi} \frac{d\sigma(E)}{d\theta_r} d\theta_r \quad (47)$$

であるが (47) の積分を解析的に求めることは非常に難しく、又本論文の本来の目的を逸脱すると思われるためこれをニュートン・コーツ 9 点則を用いて積分し $\sigma_D(E)$ を求めた。さらに $\sigma_D(E)$ を E の関数として得るために多くの E の値に対して $\sigma_D(E)$ を求め、これを回帰することにより $\sigma_D(E)$ を E に対して表式化し、プログラム内で用いている。回帰計算は E , $\sigma(E)$ が非常に広い範囲にあるため

$$\begin{cases} x = \log_{10} E \\ y = f(x) = Ax^4 + Bx^3 + Cx^2 + Dx + E \\ \sigma_D(E) = 10^y \end{cases} \quad (48)$$

なる表式によって E に対して $\sigma_D(E)$ を求めている。(48) における A, B, C, D は回帰計算によって定められる定数である。以上の様に得られる Fe における $\sigma_D(E)$ を Fig. 2 において描いた。比較のために Rutherford 散乱におけるはじき出し断面積も同じ図に描いている。

高エネルギー側において σ_D (Thomas-Fermi) $>$ σ_D (Coulomb) となっているのは $E_d = 25 \text{ eV}$, $E = 10^7 \text{ eV}$ を例にとると $\theta_{\min} \approx 0.181 \text{ deg}$ と非常に小さくなり、Fig. 1 における $\theta_r \approx 0$ のピーク部分の積分を行なっていることに起因している。定性的には高エネルギー側でははじき出し断面積は Rutherford 散乱における値に近づくとと思われるからこの結果は積分ライブラリの適用限界をピーク部分の積分において越えているためと考えられる。

以上の様に θ_r が variable であることは $\theta_r \approx 0$ において積分に問題があり、又実際の散乱では、特に低エネルギー側ではじき出しをとみなわない衝突、いわゆるかすり衝突が優勢になると思われ、これを扱うためには断面積としては散乱断面積を用いなければならない。

iv) 散乱断面積

散乱断面積を求めるためには θ_{\min} を固定する。

すなわち散乱角の lower limit, θ_{\min} を設け $\theta_r < \theta_{\min}$ なる散乱を計算の枠外におくという考え方である。 θ_{\min} が必要以上に大きいと散乱断面積は実際から離れたものになるが θ_{\min} をいたずらに下げるとは散乱断面積の急激な増大による平均自由行程の短縮をもたらす衝突点に関するメモリーを増すが増大した断面積の成分は極めて薄い衝突(かすり衝突)であるためカスケードの形にはほとんど影響を与えないと思われる。したがって θ_{\min} の最適化を図る必要がある。

Fig. 3 に $\theta_{\min} = 0.5 \text{ deg}$, および 1.0 deg のそれぞれに対して $\sigma_D(E)$ と同様の手法で求めた散乱断面積, $\sigma_S(E)$ を示す。高エネルギー側で $\sigma_S(E) < \sigma_D(E)$ となっているがこれはそのエネルギー範囲で $\theta_{\min} < \theta_{\min}$ となっているためである。しかし定性的には $\sigma_S(E)$ は E に対して単調減少となり納得のいく結果となっている。

以上のようにして求めた $\theta_{\min} = 0.5 \text{ deg}$ に対する散乱断面積を RUCAS において用いた。

v) 散乱角の取り扱い

任意の相互作用ポテンシャルに対する散乱公式 (18) を再記すると

$$\theta_r = \pi - 2 \int_{r_0}^{\infty} \frac{p}{r^2} \left\{ 1 - \frac{V(r)}{E_r} - \frac{p^2}{r^2} \right\}^{-1/2} dr \quad (49)$$

となる。 $V(r)$ がクーロンポテンシャルである場合には (49) は解析的に解けて

$$\tan \frac{\theta_r}{2} = \frac{b}{2p} \quad (50)$$

を得るが $V(r)$ が軌道電子によって遮蔽されたクーロンポテンシャルである様な場合には (49) 式を解くことは非常に難しくなる。

Thomas-Fermi ポテンシャルに対しては Lindhard の理論により (45) 式より散乱の角度分布を求めることは原理的には可能であるが、実際の計算にあたっては数値的手段に頼らざるを得ずプログラムの複雑化、および計算時間の著しい増大を招くと思われモンテカルロ計算には適当でないと考えられる。そこで Rutherford 散乱角公式をアレンジして Thomas-Fermi ポテンシャルに対する散乱角公式として用いて散乱角の決定を行なった。

ターゲット原子が単独で存在している場合、もしくは原子間距離が十分に大きい場合には相互作用ポテンシャルとしては一原子のもののみに対するものを考えればよく、その場合の散乱の角度分布は Fig. 1 の様になるが、実際の材料中では原子核の中心から平均原子半径だけ離れた場所においても $V(r)$ は有意の値を取り入射原子は複雑なポテンシャル場の中を運動することになる。したがって相互作用ポテンシャルとしては一原子回りのポテンシャルも考慮する必要がある。

最密充填の場合には一つの原子の回りに 12 個の原子が存在し、厳密にはポテンシャルの異方性があるが、ここではそれを考えず一原子中の相互ポテンシャルは方向によらず Fig. 4 に示す様に $V(r) + V(2R - r)$ として表すことが出来ると仮定する。ここで R は平均の原子半径である。又 $r = R$ の点におけるポテンシャルの値を相対値でゼロになるようにす

ると、この合成ポテンシャル、 $V_h(r)$ は次の式で定義される。

$$V_h(r) = V_i(r) + V_i(2R - r) - 2V_i(R) \quad (0 \leq r \leq R) \quad (51)$$

ここで $V_M(r)$ は Moliere のポテンシャルである。

次にこの合成ポテンシャルにおける散乱角を決定するために合成ポテンシャルとクーロンポテンシャルとの対応を行なう。Fig.26 (c) において対応づけの手順を説明する。

- ① $p = R \times \sqrt{\text{RAN}}$ により合成ポテンシャル上での衝突係数 p を定める。ここで RAN は $0 \leq \text{RAN} \leq 1$ なる乱数である。
- ② $E_{rp} = V_h(p)$ を求める。 $V_h(r)$ は (51) 式で定義される合成ポテンシャルである。
- ③ クーロンポテンシャルにおいてエネルギー E_{rp} に対応する衝突係数 p' を求める。(4) 式より

$$p' = z_1 z_2 e^2 / E_{rp} \quad (52)$$

- ④ Rutherford 散乱における散乱公式より

$$\theta_r = 2 \tan^{-1} \left(\frac{b}{2p'} \right) \quad (53)$$

として散乱角 θ_r を求める。この合成ポテンシャルにおける散乱の角度分布を Fig. 5, 6 に示す。クーロンポテンシャルや一般的な Moliere ポテンシャルと比べて合成ポテンシャルにおいては“厚い”衝突をする割合が高く、特に低いエネルギーの入射粒子に対しては散乱の後方性が見られることになる。

この様にして散乱角 θ_r 及び ③ の段階で p' が求まるが p' より (5) 式を用いてクーロンポテンシャル上における二原子の接近距離が求まる。すなわち

$$r_m' = \frac{b + \sqrt{b^2 + 4p'^2}}{2} \quad (54)$$

であり今度は先程と逆の手順で r_m' を合成ポテンシャル上の r_m に対応させる。この場合合成ポテンシャルの逆関数は回帰計算によって求まる。以下に r_m を求める手順を示す

- ① $E_{r_m'} = z_1 z_2 e^2 / r_m'$ として $E_{r_m'}$ を求める。
- ②
$$\begin{cases} x = \log_{10} (E_{r_m'} + 2V_M(R)) \\ r_m = f(x) \end{cases} \quad (55)$$

によって r_m を得る。ここで $f(x)$ は

$$x = V_M(r) + V_M(2R - r) \quad (56)$$

の逆関数である。今回の計算においては、 r_m は x の 4 次式で回帰した。

vi) 乱数の発生

RUCAS におけるモンテカルロ計算では 1 回の衝突計算につき 3 つの乱数を用いている。

以下にそれらの乱数を扱う式を示す。

① 自由行程の決定

今、一様な媒質中を粒子が透過して行く場合単位面積あたりの粒子を n 、媒質の巨視的断面積を Σ 、距離を ℓ とすると

$$dn = -n \Sigma d\ell \quad (57)$$

が成り立ち、 $\ell = 0$ における n を n_0 とすると

$$n = n_0 e^{-\Sigma \ell} \quad (58)$$

を得る。このとき

$$\frac{|dn|}{n_0} = \frac{n \Sigma d\ell}{n_0} = \frac{n_0 e^{-\Sigma \ell} \cdot \Sigma d\ell}{n_0} = \Sigma e^{-\Sigma \ell} d\ell \quad (59)$$

距離 ℓ 以下で散乱を受ける確率 $P(\ell)$ は

$$P(\ell) = \int_0^{\ell} \Sigma e^{-\Sigma \ell} d\ell = 1 - e^{-\Sigma \ell} \quad (60)$$

今 $0 \leq \text{RAN} < 1$ なる乱数を用いると $P(\ell)$ は

$$P(\ell) = \text{RAN} = 1 - e^{-\Sigma \ell}$$

$$\therefore \ell = -\frac{1}{\Sigma} \ln(1 - \text{RAN})$$

$$\text{あるいは } \ell = -\frac{1}{\Sigma} \ln(\text{RAN}) \quad (61)$$

② 衝突係数 p の決定

半径 R の円内に一様に粒子が入射する場合①と同様の考え方により半径 P 以内に粒子が入る確率は

$$P(p) = \text{RAN} = \frac{\pi p^2}{\pi R^2} = \frac{p^2}{R^2}$$

$$\therefore p = R \times \sqrt{\text{RAN}} \quad (62)$$

③ 散乱方向 ϕ の決定

Fig.26 (d) における AB 軸回りの散乱方向 ϕ は

$$\phi = 2\pi \cdot \text{RAN} \quad (63)$$

vii) 方向ベクトルの変換

$\vec{a}_0 = (x_0, y_0, z_0)$ なる単位方向ベクトルで入射した粒子が Fig.26(d) で表された散乱を受けた場合散乱後の単位方向ベクトル $\vec{a}_1 = (x_1, y_1, z_1)$ は

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_0 \cos \theta - \frac{y_0}{\sqrt{x_0^2 + y_0^2}} \sin \theta \cos \phi - \frac{x_0 z_0}{\sqrt{x_0^2 + y_0^2}} \sin \theta \sin \phi \\ y_0 \cos \theta + \frac{x_0}{\sqrt{x_0^2 + y_0^2}} \sin \theta \cos \phi - \frac{y_0 z_0}{\sqrt{x_0^2 + y_0^2}} \sin \theta \sin \phi \\ z_0 \cos \theta + \frac{x_0^2 + y_0^2}{z_0} \sin \theta \sin \phi \end{pmatrix} \quad (64)$$

と変換される。

viii) 散乱のカイネマティクス

質量 M_1 の入射粒子と質量 M_2 の粒子が衝突、散乱を行う時、散乱力学によってそれぞれの散乱後のエネルギーを求めることが出来る。実験室系における入射粒子のエネルギーを E' 、散乱後の入射粒子と散乱粒子のエネルギーをそれぞれ E_{no} 、 E_{po} とすると

$$\begin{cases} E_{no} = \frac{M_1^2 E'}{(M_1 + M_2)^2} \left\{ \frac{M_2^2}{M_1^2} \left(1 - \frac{Q}{Q_{lim}}\right) - 1 + 2\mu_0^2 \right. \\ \quad \left. \pm 2\mu_0 \sqrt{\mu_0^2 - 1 + \frac{M_2^2}{M_1^2} \left(1 - \frac{Q}{Q_{lim}}\right)} \right\} \end{cases} \quad (65)$$

$$E_{po} = \frac{M_1 M_2 E'}{(M_1 + M_2)^2} \left(2\lambda_0^2 - \frac{Q}{Q_{lim}} \pm 2\sqrt{\lambda_0^2 - \frac{Q}{Q_{lim}}} \right) \quad (66)$$

ここで μ_0 は入射粒子の実験室系での散乱角余弦、 λ_0 はターゲット原子の実験室系での散乱角余弦、 Q は反応の Q 値でありここでは便宜上 $Q > 0$ に吸熱反応が対応している。また

$$Q_{lim} = \frac{M_2}{M_1 + M_2} E' \quad (67)$$

今考えている様な $M_1 = M_2$ 、 $Q = 0$ の弾性散乱に対しては (65)、(66) は大幅に単純化できて

$$\begin{cases} E_{no} = E \mu_0^2 \end{cases} \quad (68)$$

$$\begin{cases} E_{po} = E \lambda_0^2 \end{cases} \quad (69)$$

$$\text{又このとき} \begin{cases} \mu_0 = \sqrt{\frac{1 + \mu_c}{2}} \end{cases} \quad (70)$$

$$\begin{cases} \lambda_0 = \sqrt{\frac{1 - \mu_c}{2}} \end{cases} \quad (71)$$

μ_c は相対運動系における散乱角余弦である。

2.2 電子的エネルギー損失

電子的エネルギー損失には入射粒子の速度が大きくかかっている。すなわち入射粒子の速度が電子の軌道速度を越える程に十分高速である場合には、粒子は自らの軌道電子を振り切り、

$z_1 e$ の電荷を持った粒子として振舞い、主に電子との Rutherford 散乱によってエネルギーを失うが、減速につれて自由電子をピックアップしてゆきその有効電荷は減少し、最後にはほとんど中性原子となり、電子的エネルギー損失はゼロに近づく、といった定性的な特徴を持つ。

荷電粒子に対する電子的阻止能の代表的な理論式としては、Born 近似¹²⁾ が適用できる高エネルギー領域 (Bethe-Bloch 領域) においては Bethe の阻止能公式¹³⁾ 原子を Thomas-Fermi 模型¹⁴⁾ にもとづいて扱うことの出来る低エネルギー領域においては LSS の阻止能公式¹⁵⁾ が掲げられる。

i) Bethe の阻止能公式

原子番号 z_1 のイオンの $1s$ 電子の軌道運動速度 v_0 は $v_0 \sim z_1 v_0$

$$v_0 = e^2/\hbar \approx 2.19 \times 10^8 \text{ cm/s}$$

と表される。ここで v_0 はボーア速度と呼ばれる。今イオンの速度を v_1 、エネルギーを E_1 、質量を M_1 として $v_1 > v_0$ である場合、すなわち

$$\frac{E_1}{M_1} = \frac{v_1^2}{2} \approx 24.9 z_1^2 \text{ (keV/amu)}$$

以上の E_1 に対しては入射粒子は $z_1 e$ の荷電を持った粒子として振舞う。Bethe はイオンとターゲット物質中の電子との古典的なラザフォード散乱の式に対して Born 近似を用いて

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(-\frac{dE_1}{dx}\right)_e = \frac{4\pi z_1^2 e^4}{m_e v_1^2} N_2 B \quad (72) \\ B = z_2 \ell n \left(\frac{2m_e v_1^2}{I} \right) \quad (73) \end{array} \right.$$

を導出した。ここで B は阻止数、 m_e は電子の質量、 N_2 はターゲット原子の原子密度、 I は平均の励起エネルギーであり、 $z_2 \gg 1$ に対し

$$I \approx 11.5 z_2 \text{ (eV)}$$

で与えられる。 B についてはさらに高速の入射粒子に対する相対論的補正や逆に低速の入射粒子に対する内殻補正があるがここでは省略する。

ii) LSS の阻止能公式

Thomas-Fermi 模型においては大部分の電子は、

$$v_e = v_0 z_1^{2/3} \quad (74)$$

以上の速度を持っており $v_1 < v_e$ 、すなわち

$$\frac{E_1}{M_1} \approx 24.9 z_1^{2/3} \text{ (keV/amu)} \quad (75)$$

以下の E_1 に対しては入射粒子は中性であるとして扱われる。Lindhard は電子ガス中を進行するイオンに対する阻止能の理論を Thomas-Fermi 模型における電子に対して適用させることにより、 $v_1 < v_0 = v_0 z_1^{2/3}$ に対して

$$\left(-\frac{dE_1}{dx} \right)_0 = \xi_0 \cdot 8 N_2 \pi e^2 a_0 \cdot \frac{z_1 z_2}{z} \cdot \frac{v_1}{v_0} \quad (76)$$

$$z^{2/3} = z_1^{2/3} + z_2^{2/3} \quad (77)$$

$$\xi_0 = z_1^{-1/2} \quad (78)$$

なる阻止能を求めた。この公式の適用可能な入射粒子の Upper limit energy を z_1 に対して描いたものが Fig. 7 である。 ^{56}Fe に対しては Upper limit energy は 10^8 (eV) を越え、14 MeV 中性子によってはじき出される Fe の PKA の最大エネルギーが約 1 MeV であることから、この場合 LSS 阻止能公式の適用範囲内に十分にあると考えられる。(76) 式を実用的な単位で表わすと、

$$\left(-\frac{dE_1}{dx} \right)_0 [\text{eV/cm}] = 1.216 \times 10^{-6} \cdot N_2 \xi_0 \frac{z_1 z_2}{z} \sqrt{\frac{E_1 [\text{eV}]}{A_1 [\text{amu}]} \quad (79)$$

であり、さらに $z_1 = z_2$ ならば

$$\left(-\frac{dE_1}{dx} \right)_0 [\text{eV/cm}] = 4.299 \times 10^{-17} \cdot N_2 z_1^{7/6} \sqrt{\frac{E_1 [\text{eV}]}{A_1 [\text{amu}]} \quad (80)$$

z_1 , A_1 および密度は定数であるから (80) 式は、

$$\left(-\frac{dE_1}{dx} \right)_0 = k \sqrt{E_1} \quad (81)$$

$$k = 4.299 \times 10^{-17} \cdot N_2 z_1^{7/6} / \sqrt{A_1} \quad (82)$$

(81) 式は変数分離型の微分方程式であって、これを解くと、材料中の任意の点においてエネルギー E_0 を持って発生したイオンが核による散乱なしに材料中を x cm 進んだ後のエネルギー $E_1(x)$ は

$$E_1(x) = \left(\sqrt{E_0} - \frac{k}{2} x \right)^2 [\text{eV}] \quad (83)$$

と表すことが出来る。 E_1 と $-\left(\frac{dE_1}{dx}\right)_0$ との関係を図. 8 に、 x と $E_1(x)$ との関係を図. 9 に示す。

3. RUCAS による計算結果と検討

Fig.10 ~ Fig.22 に RUCAS によって計算された Fe 中の 1 つの PKA によって発生する三次元はじき出し散乱カスケードの図の例を示す。Fig.10 ~ Fig.19 はカスケードの図を $x-y$ 平面上に投影した図であり、Fig.19 は Fig.18 の一部分の拡大図である。Fig.20 ~ Fig.22 は 1 つのカスケードに対する三面図に相当する。いずれの図においても PKA は座標原点において発生し

(1.0.0) 方向に入射するとしている。これから言えることとしては次のことがある。

- ① PKA のエネルギーが高くなるにつれ、カスケードが前方へ集中する傾向が見られる。しかしここでは示していないが例外的には入射後早い段階でカスケードの分裂がおり左右に大きく広がってゆくものもある。
- ② 高エネルギー PKA に対するカスケードは低エネルギー PKA によって生ずるカスケードを継ぎ合わせた様な形となっている。
- ③ Fig.15 で特に顕著であるがはじき出された原子 (荷電粒子) が高エネルギーの間は、粒子は主に電子的損失によってエネルギーを失なってゆくが、ターゲット核との散乱において強い前方性を持つため散乱角の大きな散乱は容易に起こらず、したがってあまりはじき出しも作らずに直線的に進行する。しかしある程度エネルギーが下がると散乱断面積の増大と相まってある比較的散乱角の大きな散乱をきっかけとして、局部的に多くのはじき出しを行なってカスケードが終端する。この部分では核的エネルギー損失が支配的になっていると思われる。前者の様な直線のカスケード部分は一般に“chain” 後者は“star burst” と呼ばれ、これらの発生は H. L. Heinisch による MARLOWE コードを使っての Cu に対するはじき出しシミュレーション¹⁶⁾ においても指摘されている。参考のためにこの MARLOWE コードによるシミュレーション結果を Fig.24, 25 に示す。
- ④ 同じ入射 PKA エネルギーに対してもカスケードの形態、および大きさは非常に変化に豊むが、Frenkel pair の数 (= はじき出し数) はある入射エネルギーに対してほぼ一定の値をとっている。これははじき出し数, ν が入射エネルギー, E_p の関数 (はじき出し損傷関数, $\nu(E_p)$) であるということの証明となっている。

Fig.23 に入射 PKA エネルギーとはじき出し数との関係を示す。RUCAS での計算値はエネルギーが 10^6 eV 以下では NRT 標準モデルによる計算値と良く一致している。しかし RUCAS でははじき出し数がほぼ飽和する PKA エネルギーが 10^6 eV 程度と NRT モデルに比べて低く、これ以上のエネルギーに対しては、RUCAS によるはじき出し数は NRT モデルの 30 ~ 40 % の値になっている。これについては実験値との比較によって検討を行う必要がある。またカスケードはもともと積載量の性格のものであるから高エネルギー側になるほど、つまりカスケードが伸びてゆく程誤差は増大してゆき 10^8 eV においてははじき出し数は 30 ~ 40 % の誤差を持つことになる。これはカスケードの性格上、避けられない誤差であると言える。

- ⑤ ④ で述べた様に一定のエネルギーの PKA に対してもカスケードの形態や大きさはさまざまになるが、全体の傾向としては、カスケード自体の大きさ (高エネルギー PKA においてはむしろ長さ) は重大なサブカスケードが発生する様な場合を除いてエネルギーに応じて増大し、特にきわだった飽和傾向は見られない。

4. おわりに

モンテカルロ法による三次元カスケードシミュレーションコード RUCAS によってカスケードの PKA エネルギーに対する形態、大きさの依存性が指摘され、高エネルギー側におけるカスケードの属性の拡散 (Frenkel Pair の数に対する誤差量の増加 - カオス性の増大) が確認され

た。又 Fe を試料とした場合の RUCAS によって計算されたはじき出し数と NRT 標準モデルによる計算値とは 1 MeV 以上の高エネルギー側を除いて良い一致を見せ、RUCAS 内部における衝突-散乱のモデリングは一応妥当であるといえる。しかし RUCAS を軽い核種に用いた場合、電子的エネルギー損失を与える LSS 公式の適当限界を越える場合が考えられ、このような事態に対するモデルの補正が必要になると思われる。このような補正に対しても、モンテカルロ法にもとづいているためモデルの多少の改良によって解決可能であると考えられる。

今後は RUCAS を混成原子系に対して用い、その場合の損傷関数の決定、およびサブカスケード発生のはじき出し数に対する効果の解析などが考えられる。

Reference

- 1) Sakakibara, Y.; "Neutron Transport Analysis used Double Differential Cross Section", (master thesis) (1980)
- 2) Miyaguchi, J.; "Measurement of Double Differential Cross Section", (master thesis) (1980)
- 3) Takahashi, A., Rusch, D.; KfK2822 1;II (1979)
- 4) Yugami, K.; "Bracket Experiment of Lithium Sphere", (master thesis) (1985)
- 5) R.E. Macfarlane, et al; J. Nucl. Materials, 122-123, 1047-1052 (1984)
- 6) S. Pearstein, et al; BNL-NCS-37084
- 7) Kono, S.; "Analysis of P.K.A. Spectrum for D-T Neutron", (master thesis) (1985)
- 8) "Recommendation for Displacement Calculation for Reactor/Accelerator Studies in Austenitic Steels", Nucl. Eng. & Design, 33(1975), 91
- 9) O.B. Firsov: J. Exp. Theor. Phys. (USSR), 36(1959), 1517; Sov. Phys. JETP, 9(1956), 1076
- 10) J. Lindhard, V. Nielsen and M. Scharff; Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 36, No.10 (1968)
- 11) K.B. Winterbon, P. Sigmund and J.B. Sanders: Kgl. Danske Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd., 37(1970), No.14.
- 12) L.I. Schiff; Quantum Mechanics (McGraw Hill, New York, 1949).
- 13) H. Bethe; Ann. Physik 5, 325(1930), Handb. Physik 24/1 (Springer Verlag, Berlin, 1933) p.491
- 14) P. Gombas; Handbuch der Physik, ed. S. Flugge (Springer Verlag, Berlin. 1956) Vol.36, p.109
- 15) J. Lindhard; Dan. Vid. Selsk. Mat.-Fys. Medd. 28 No.8 (1954)
- 16) H.L. Heinisch, et al; "Computer Simulation of Displacement Cascades in Copper", HEDL-TME 83-17 UC-20, 20c

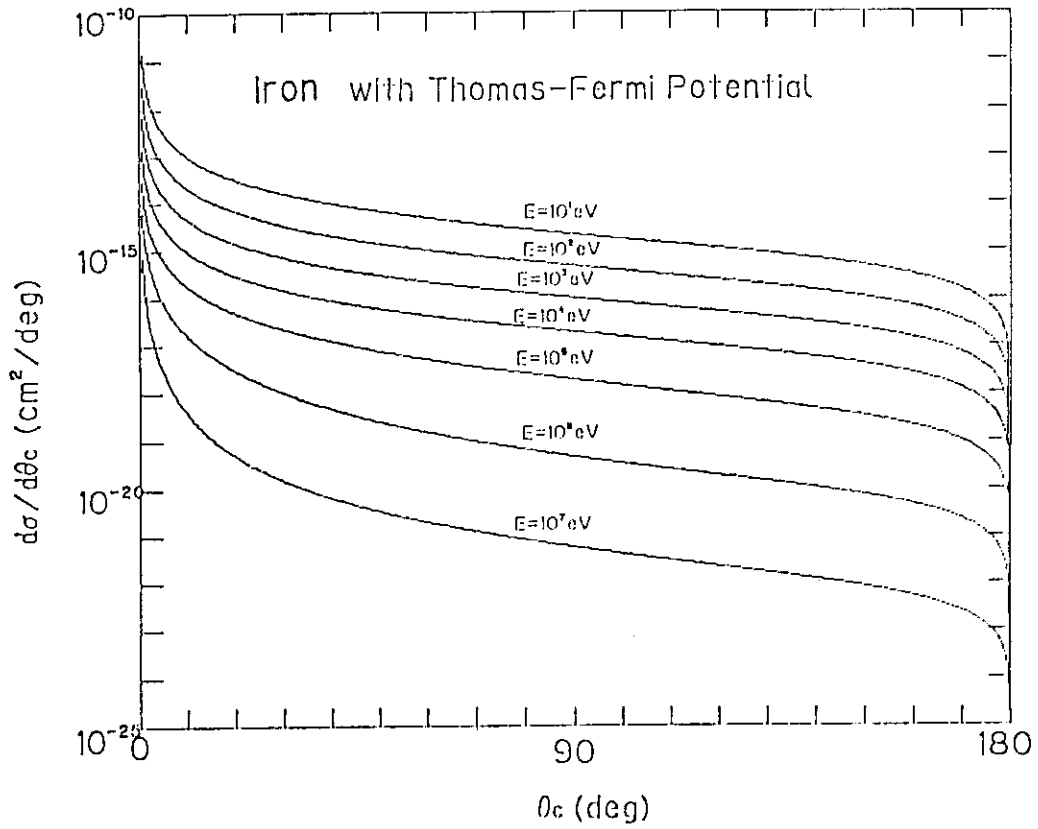


Fig. 1 Scattering angular distribution cal. by Lindhard theory.

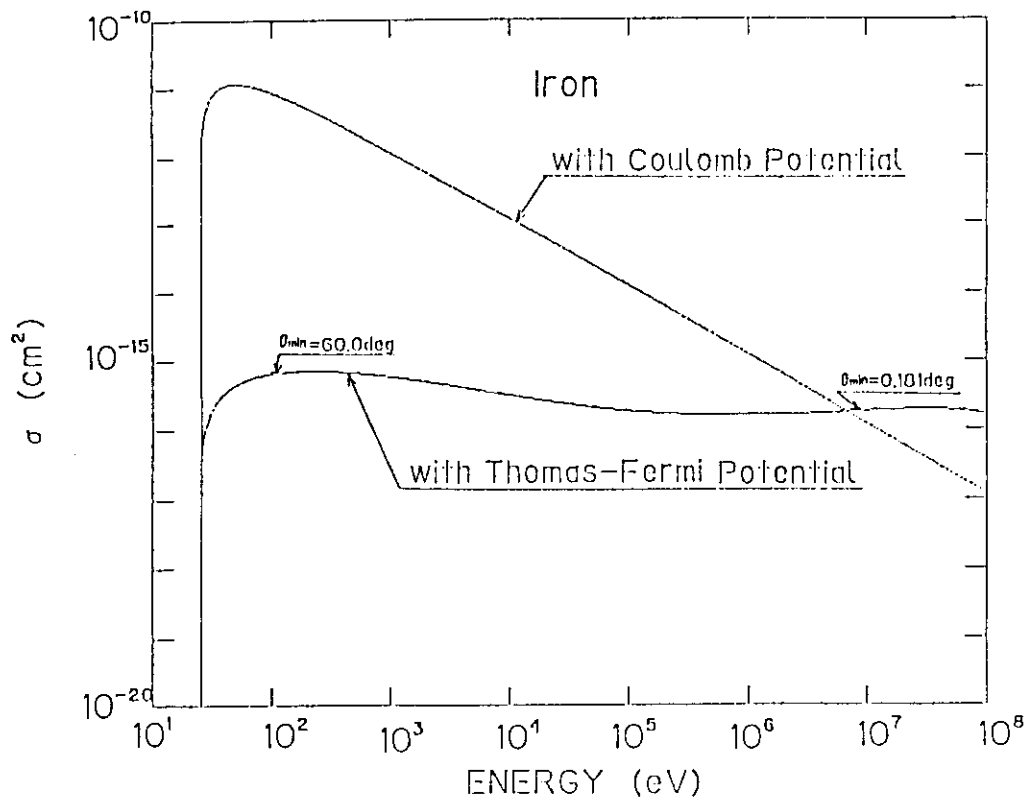


Fig. 2 Displacement cross section cal. by Lindhard theory.

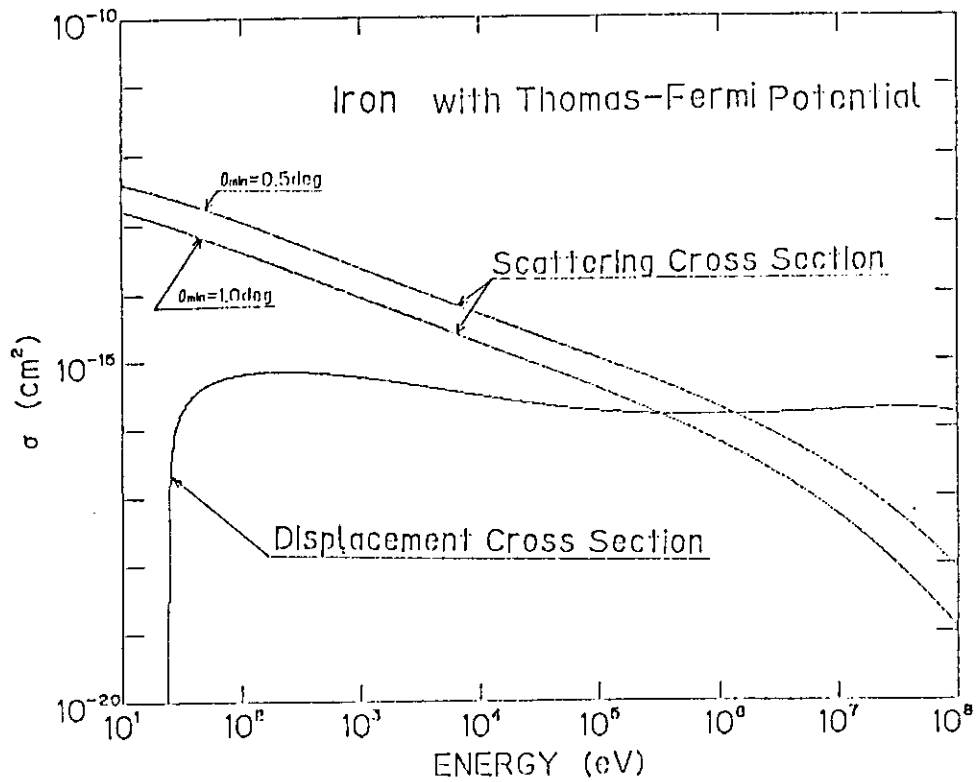


Fig. 3 Two kinds of cross section cal. by Lindbard theory.

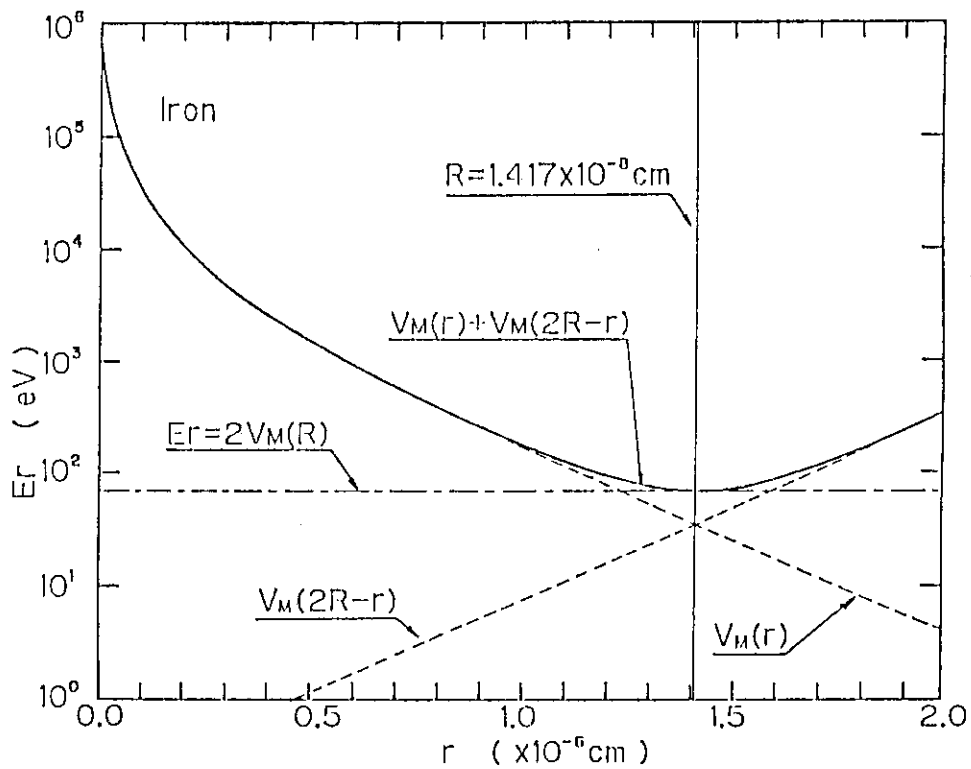


Fig. 4 Corrected Moliere potential.

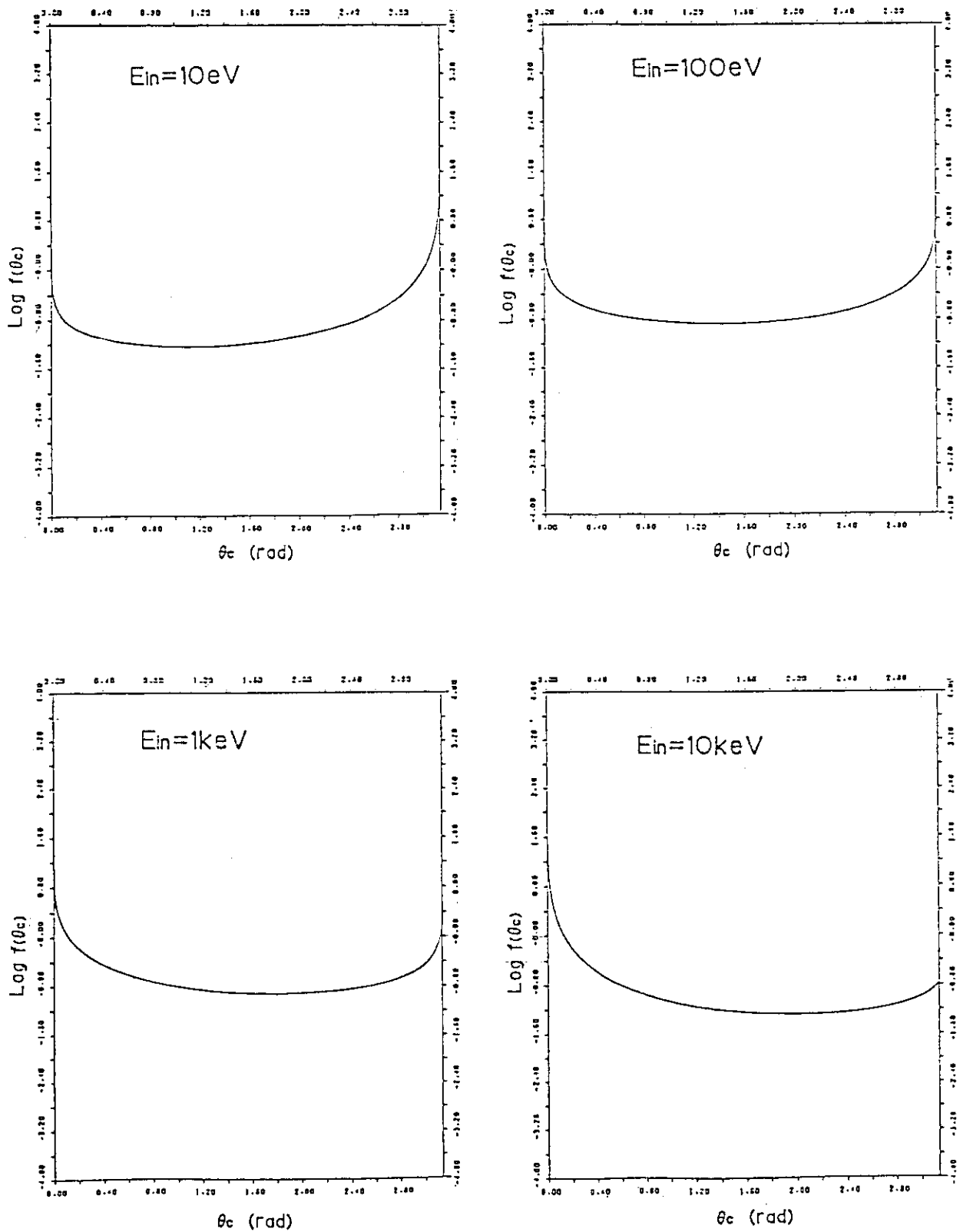


Fig. 5 Scattering angular distribution with corrected Moliere potential ($E_p = 10^1 \sim 10^4$ eV)

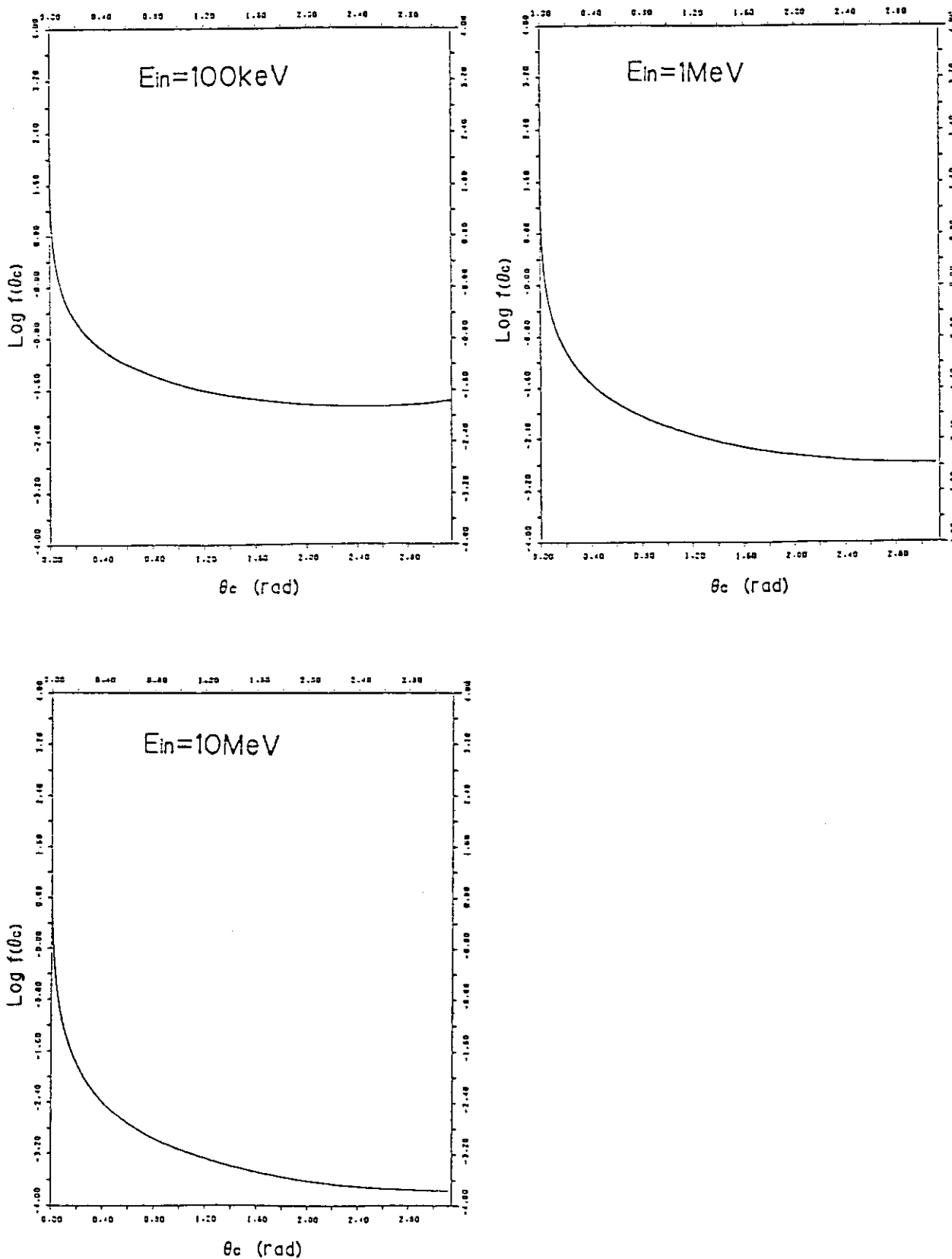


Fig. 6 Scattering angular distribution with corrected Moliere potential ($E_p = 10^5 \sim 10^7$ eV).

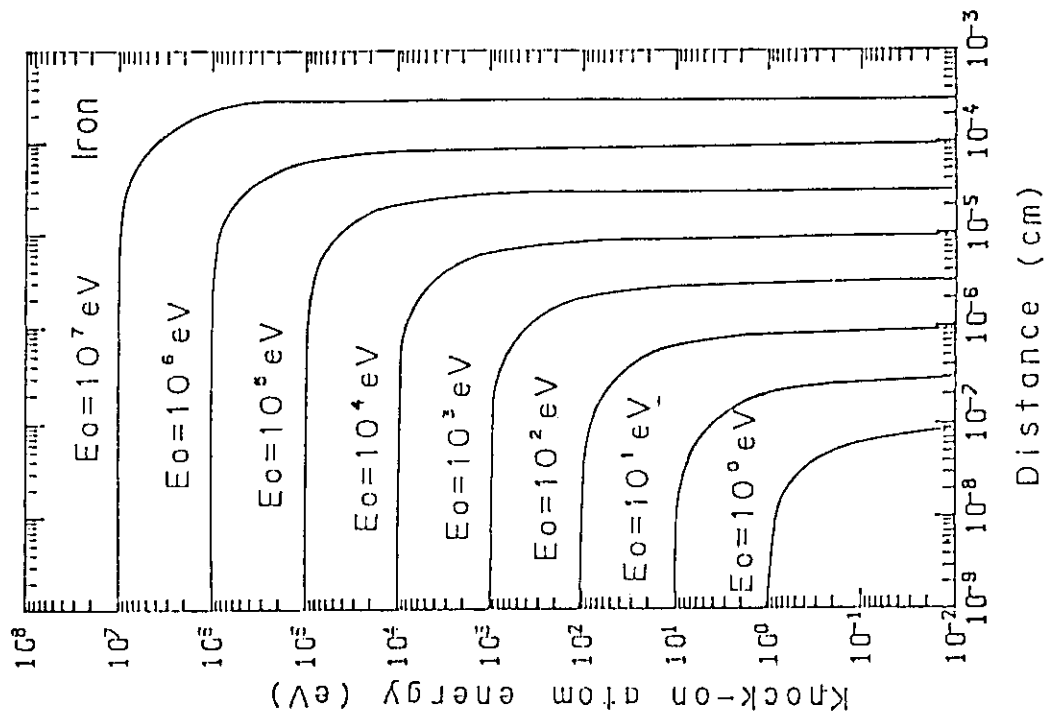


Fig. 9 Knock on atom energy vs distance.

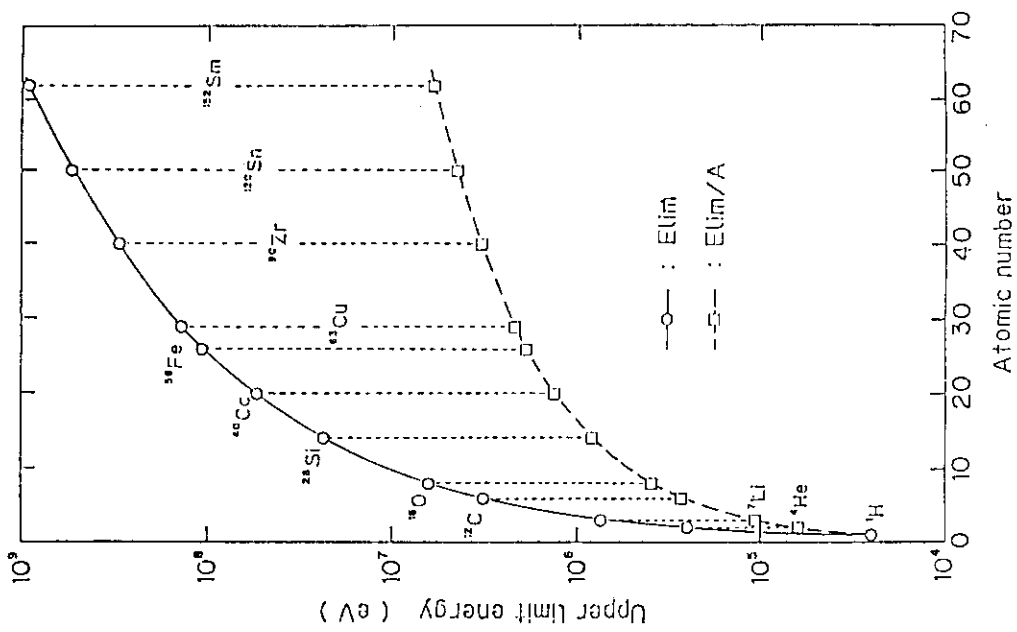


Fig. 7 Upper limit for application of LSS stopping power formula.

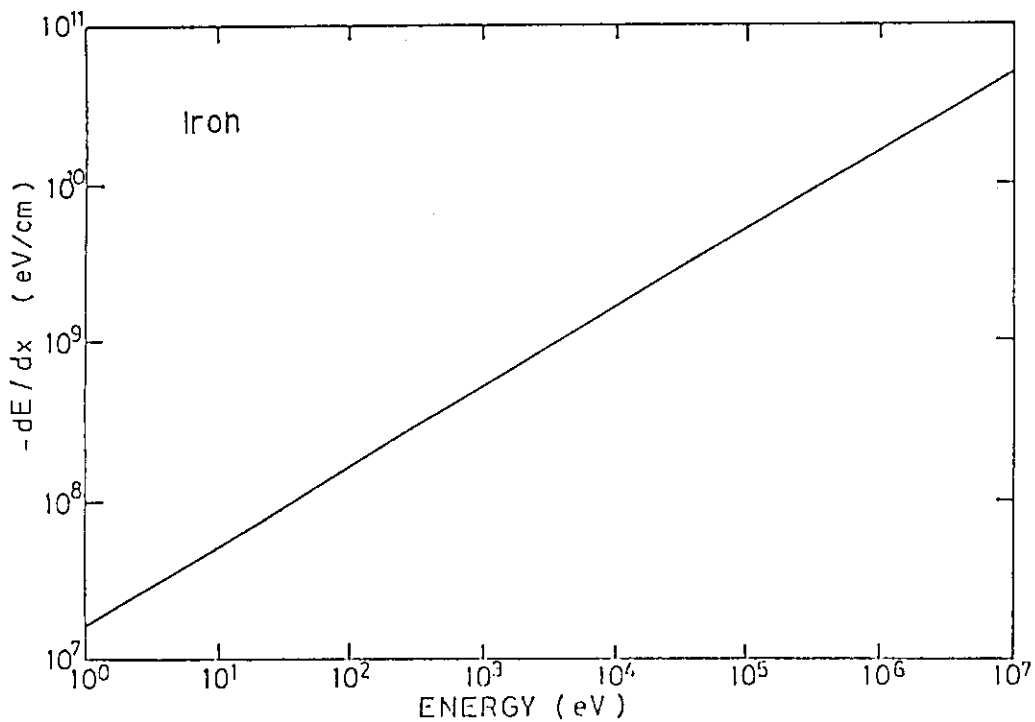
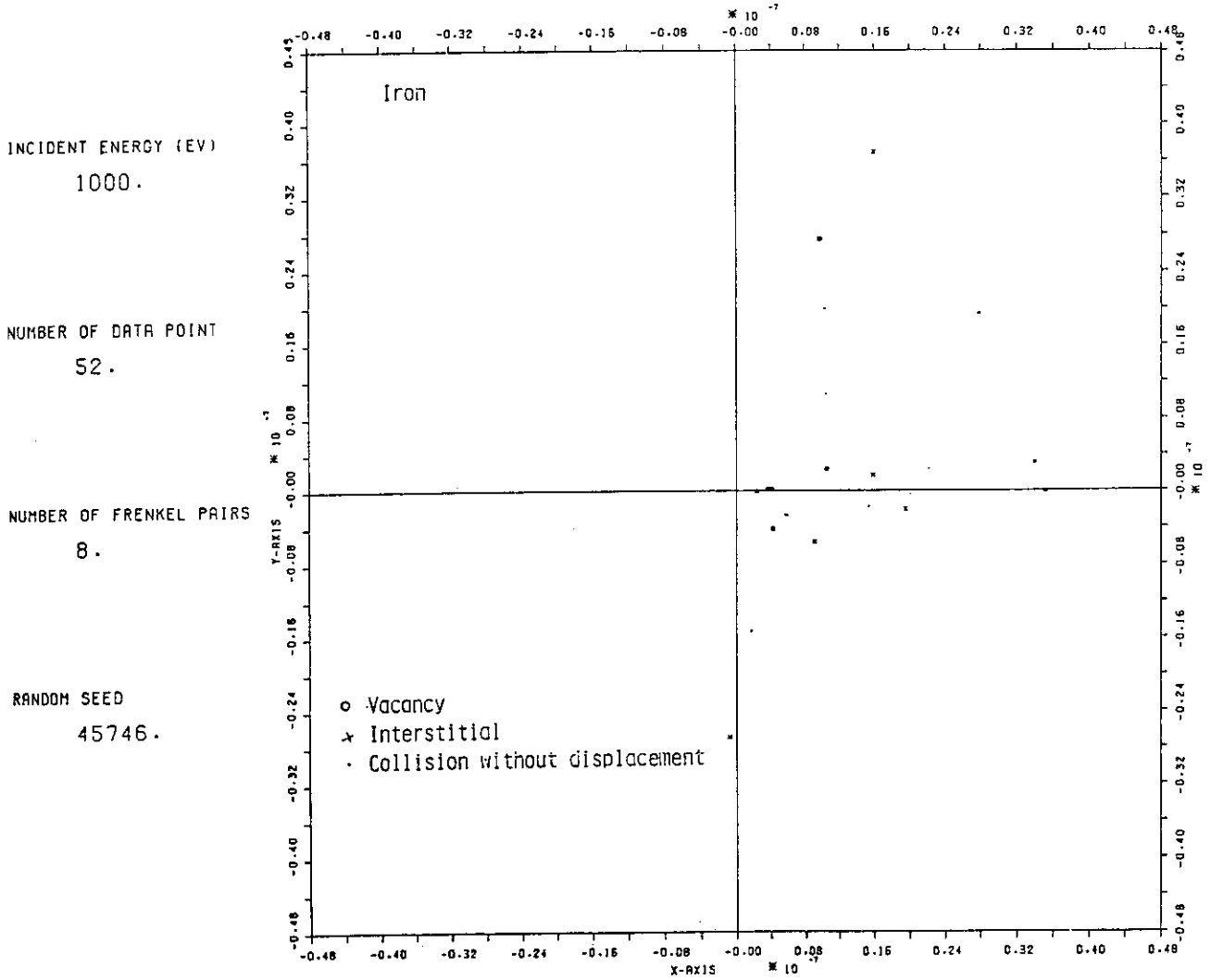


Fig. 8 Electronic stopping power cal. by LSS formula.

入力データファイル (6092033010/NONAKA/1E3-3P)] 反応因子 (999.0) WINDOW SIZE (0. 0. 42.4 31.2)

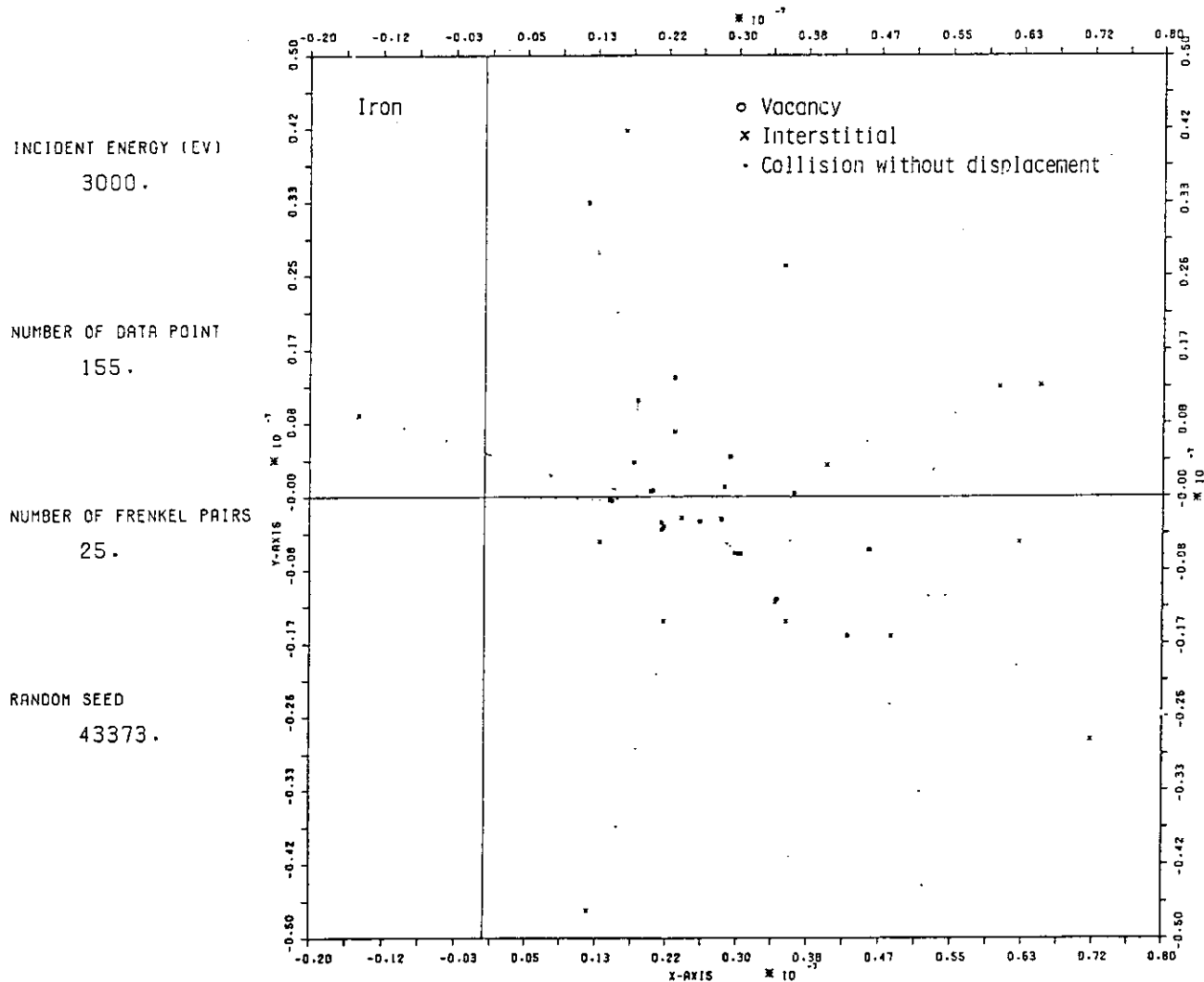


FE CAL. BY RUCASZ

Fig. 10 Orthographic projection of the typical cascade induced by P.K.A. cal. by RUCAS.

入カデータファイル名 6092033011/2

1 尺数因子 (999.0) WINDOW SIZE (0. 0. 42.4 31.2)



FE CAL. BY RUCASZ

Fig. 11 Orthographic projection of the typical cascade induced by P.K.A. cal. by RUCAS.

入力データファイル名 [6092831772/1

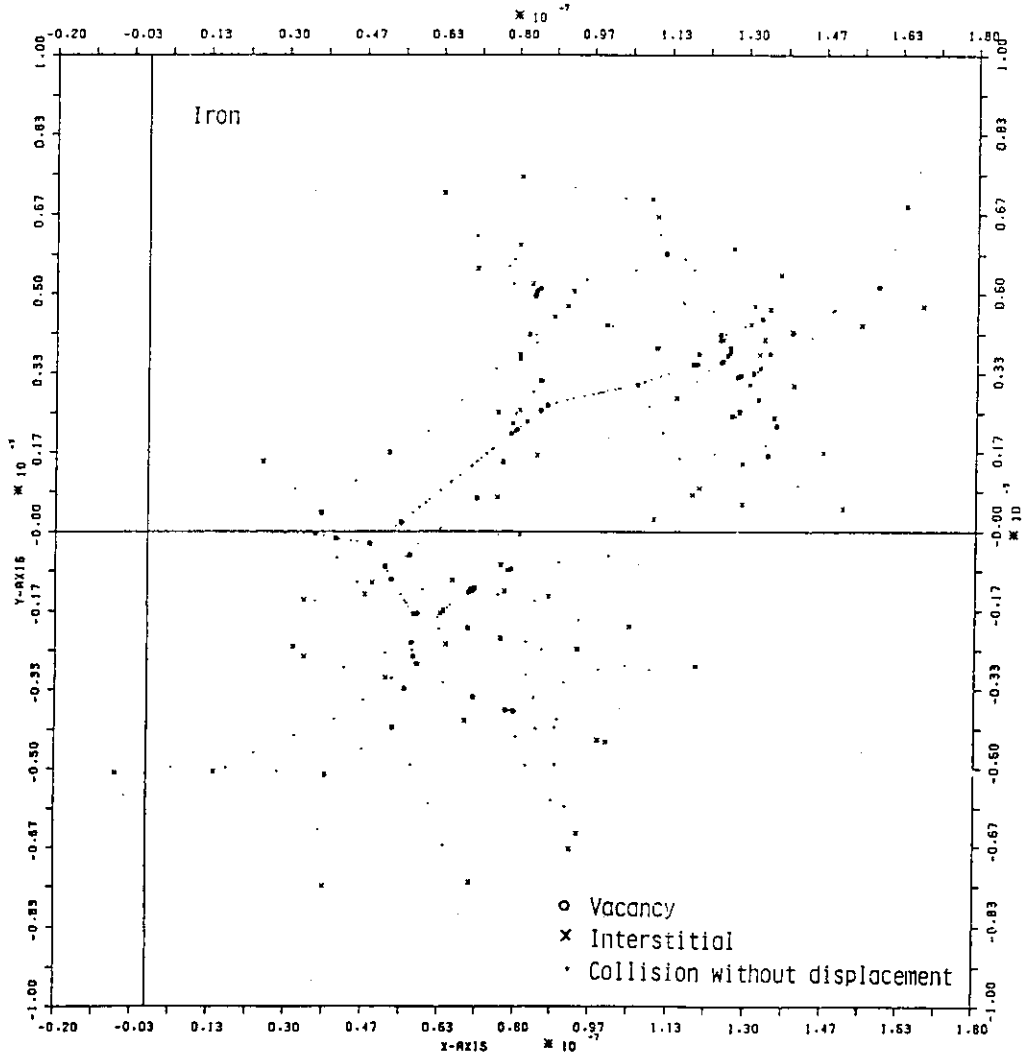
1 反応原子 [999.0] WINDOW SIZE [0. 0. 42.4 31.2]

INCIDENT ENERGY (eV)
10000.

NUMBER OF DATA POINT
534.

NUMBER OF FRENKEL PAIRS
82.

RANDOM SEED
61534.



FE CAL. BY RUCASZ

Fig. 12 Orthographic projection of the typical cascade induced by P.K.A. cal. by RUCAS.

入力データファイル [6092831772/2

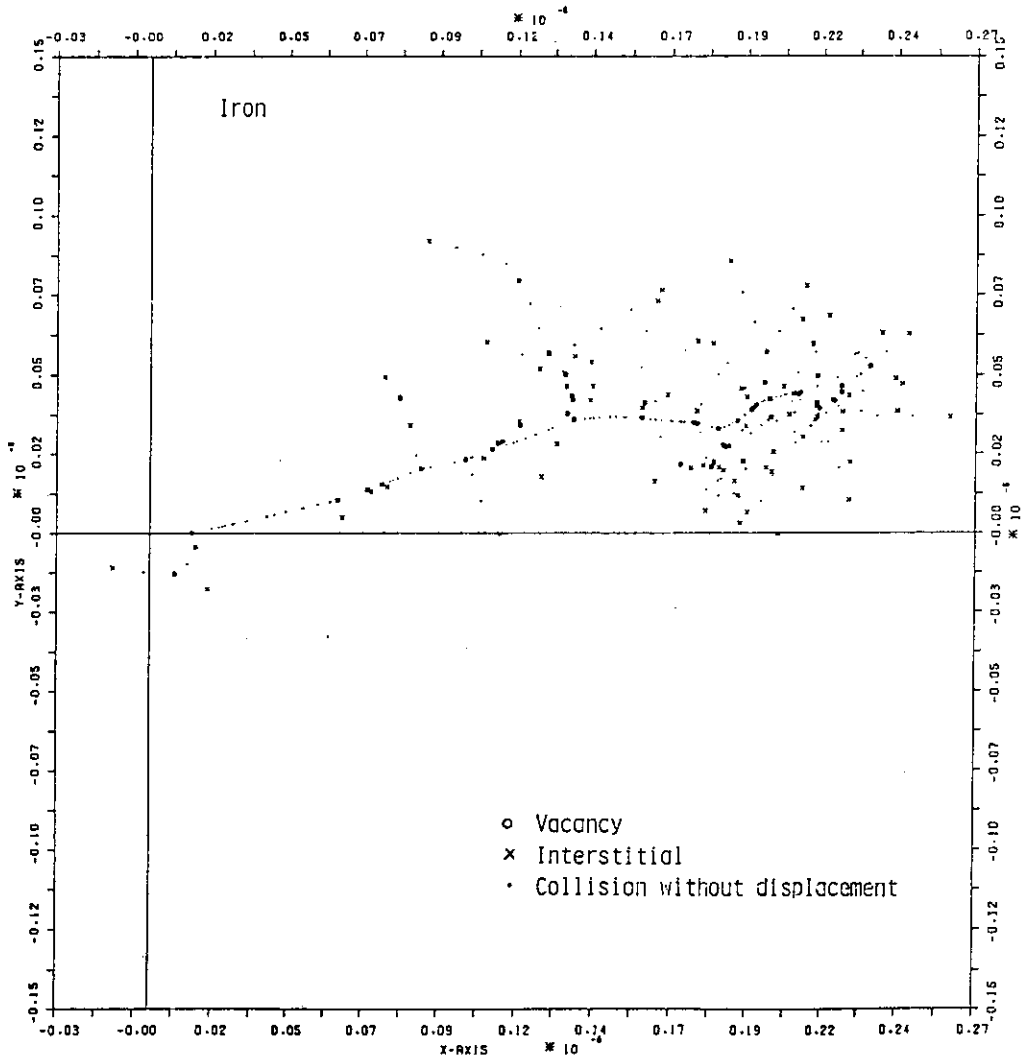
] 尺数因子 [999.0] WINDOW SIZE [0. 0. 42.4 31.2]

INCIDENT ENERGY (EV)
10000.

NUMBER OF DATA POINT
498.

NUMBER OF FRENKEL PAIRS
76.

RANDOM SEED
86217.



FE CAL. BY RUCASZ

Fig. 13 Orthographic projection of the typical cascade induced by P.K.A. cal. by RUCAS.

入力データファイル名 6092033011/5

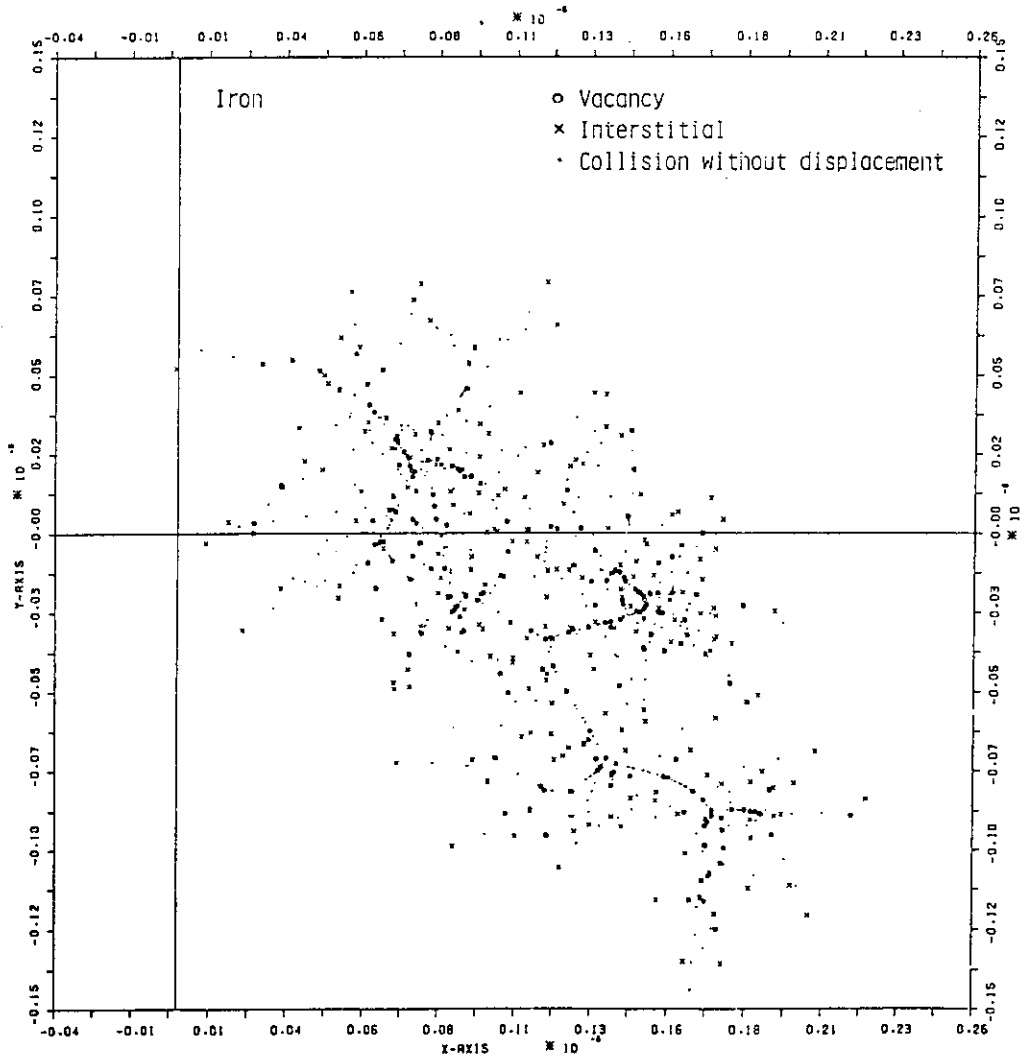
1 尺度因子 999.01 WINDOW SIZE 0. 0. 42.4 31.2 1

INCIDENT ENERGY (EV)
30000.

NUMBER OF DATA POINT
1509.

NUMBER OF FRENKEL PAIRS
250.

RANDOM SEED
16405.



FE CAL. BY RUCASZ

Fig. 14 Orthographic projection of the typical cascade induced by P.K.A. cal. by RUCAS.

入カデータファイル名 6092831772/3

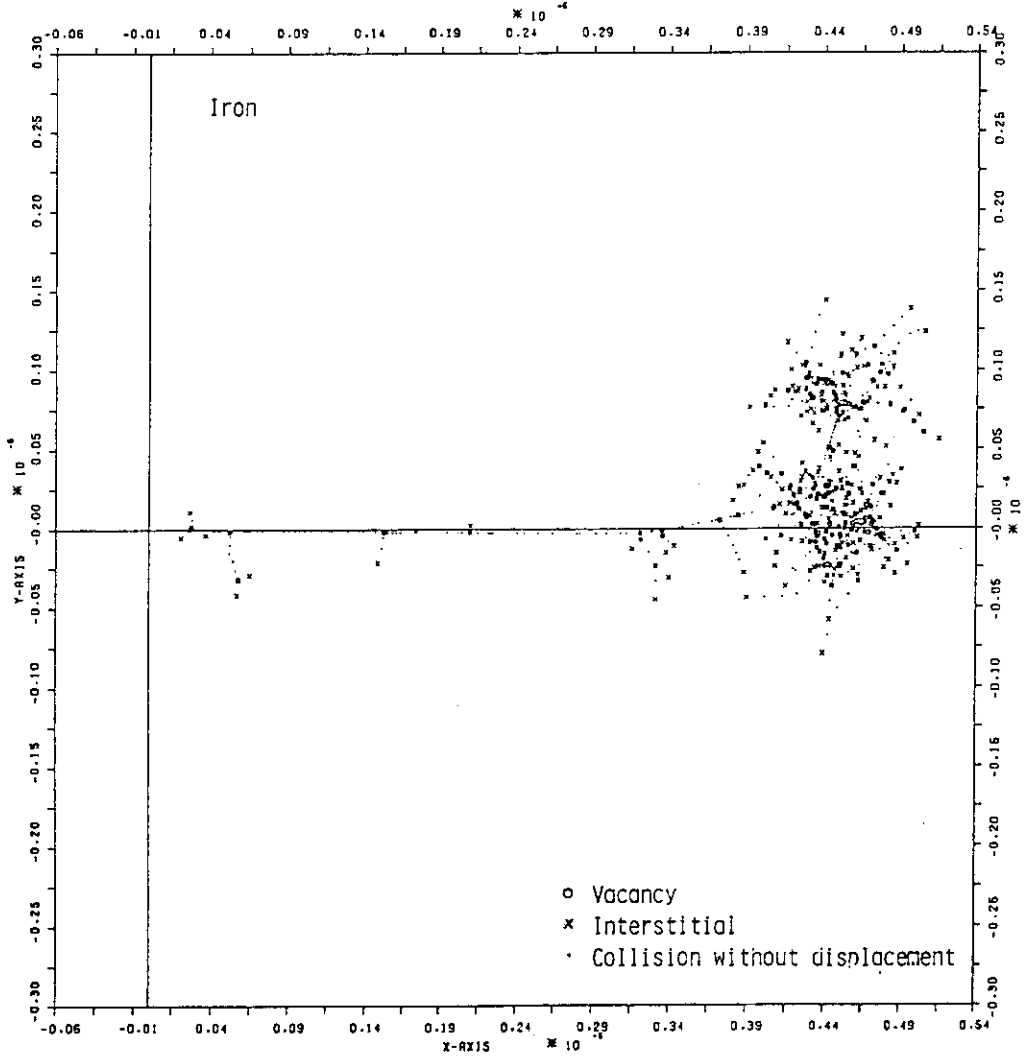
] 尺屋因子 → [999.0] WINDOW SIZE → [0. 0. 42.4 31.2]

INCIDENT ENERGY (EV)
30000.

NUMBER OF DATA POINT
1499.

NUMBER OF FRENKEL PAIRS
228.

RANDOM SEED
24800.



FE CAL. BY RUCASZ

Fig. 15 Orthographic projection of the typical cascade induced by P.K.A. cal. by RUCASZ.

入力データファイル (6092033011/7

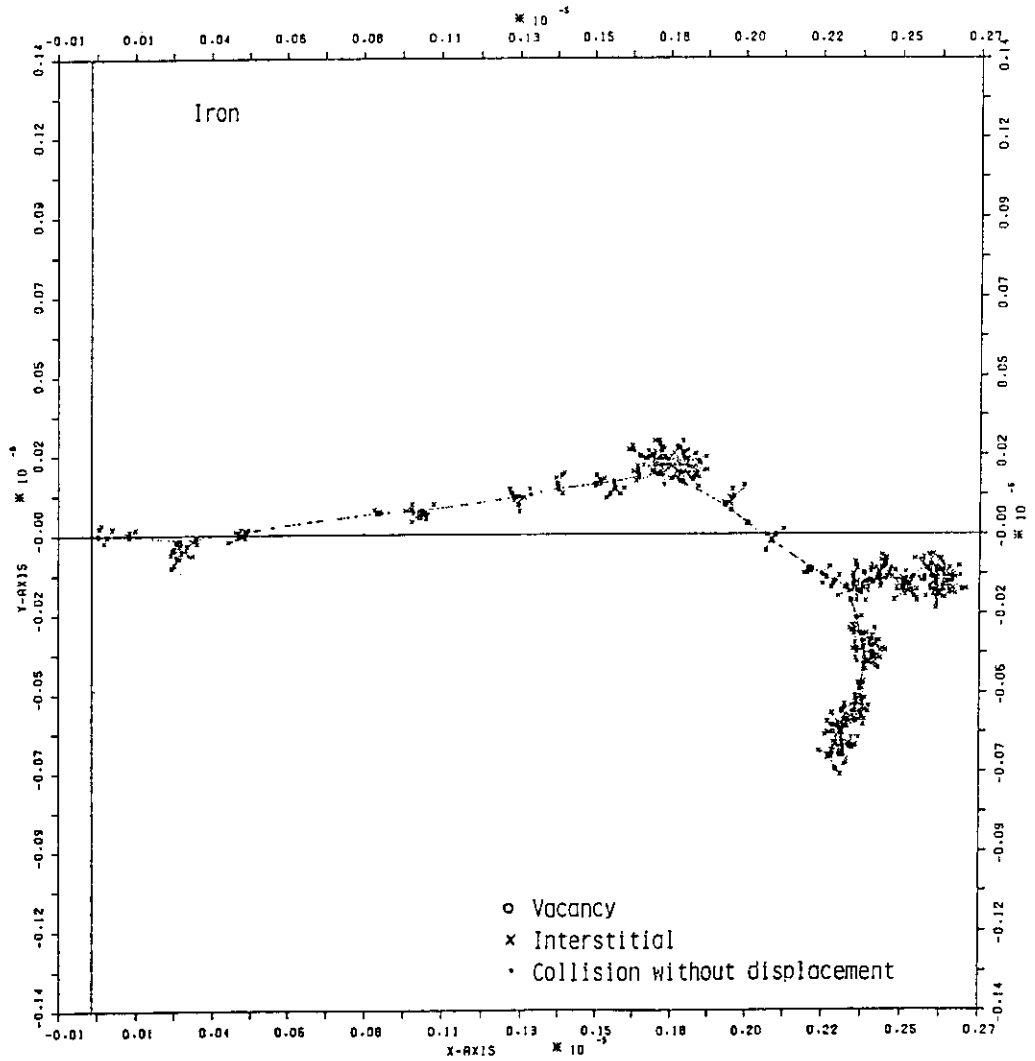
1 尺数因子 (999.0) WINDOW SIZE (0. 0. 42.4 31.2)

INCIDENT ENERGY (EV)
100000.

NUMBER OF DATA POINT
4539.

NUMBER OF FRENKEL PAIRS
678.

RANDOM SEED
37777.



FE CAL. BY RUCASZ

Fig. 16 Orthographic projection of the typical cascade induced by P.K.A. cal. by RUCAS.

入力データファイル→16092033011/10

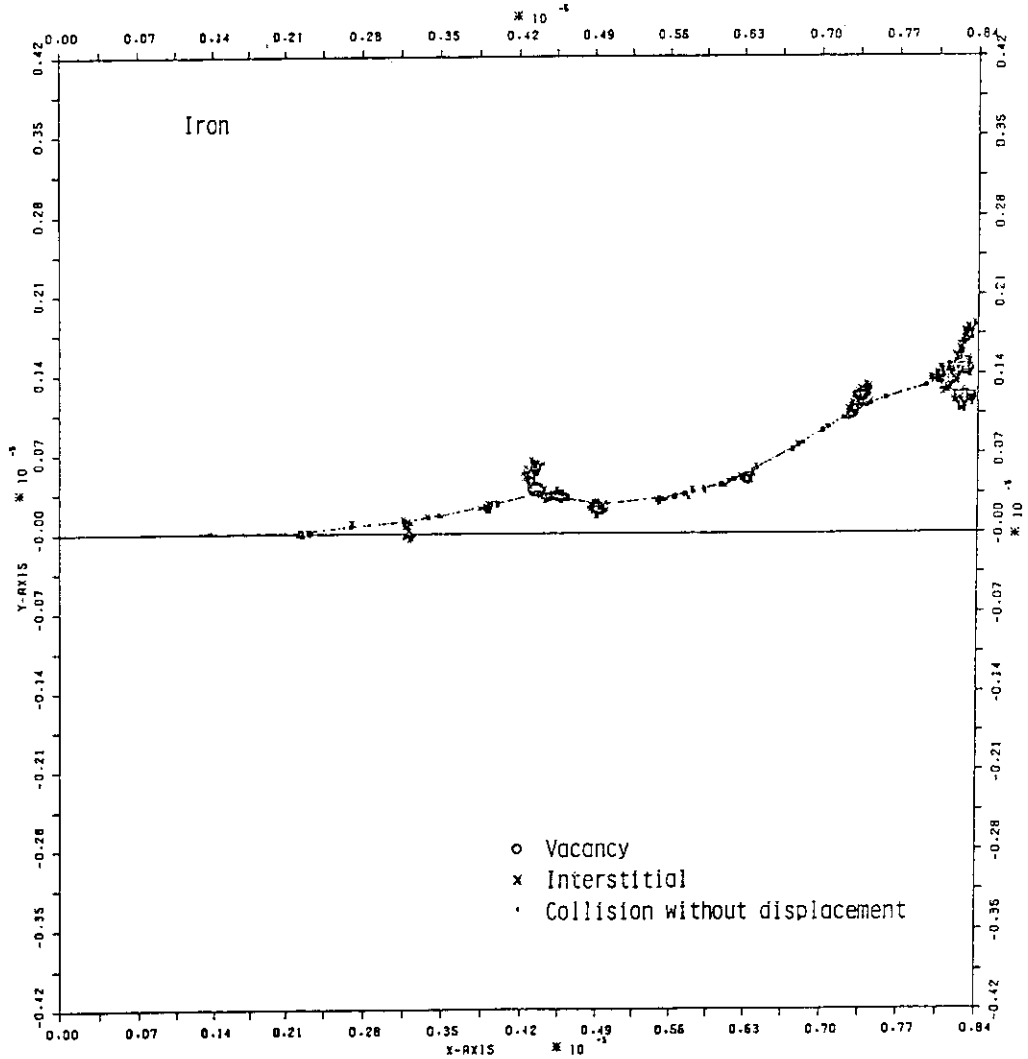
1 尺数因子→[999.0] WINDOW SIZE→[0. 0. 42.4 31.2]

INCIDENT ENERGY (eV)
300000.

NUMBER OF DATA POINT
11256.

NUMBER OF FRENKEL PAIRS
1733.

RANDOM SEED
19612.

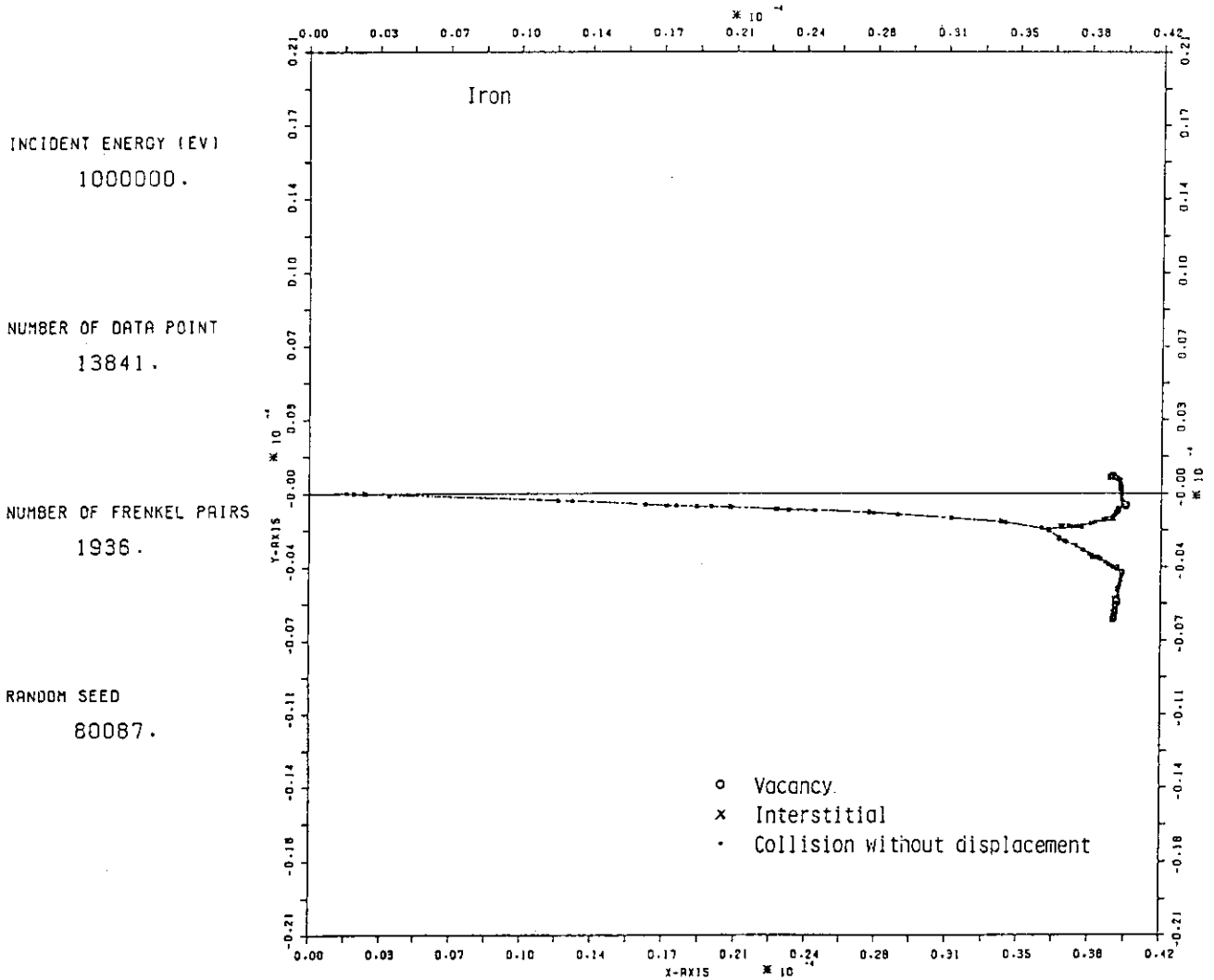


FE CAL. BY RUCASZ

Fig. 17 Orthographic projection of the typical cascade induced by P.K.A. cal. by RUCASZ.

入力データファイル→ [6092033011/13

] 尺成因子→ [999.0] WINDOW SIZE→ [0, 0, 42.4 31.2]

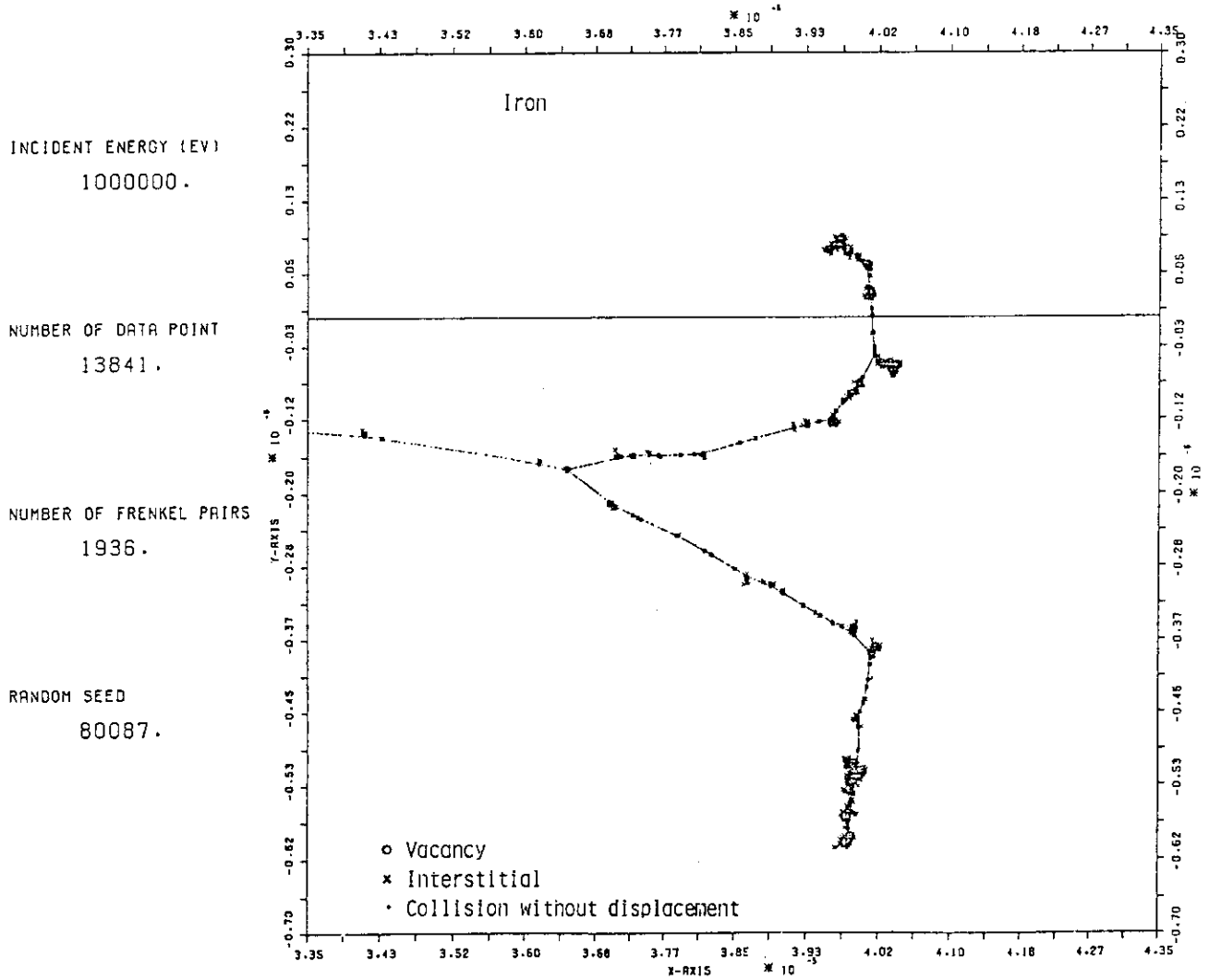


FE CAL. BY RUCASZ

Fig. 18 Orthographic projection of the typical cascade induced by P.K.A. cal. by RUCAS.

入力データファイル→ [6092033011/12

] 尺取因子→ [999.0] WINDOW SIZE→ (0. 0. 42.4 31.2)



FE CAL. BY RUCASZ

Fig. 19 Orthographic projection of the typical cascade induced by P.K.A. cal. by RUCAS.

入力データファイル名 [6092033011/6

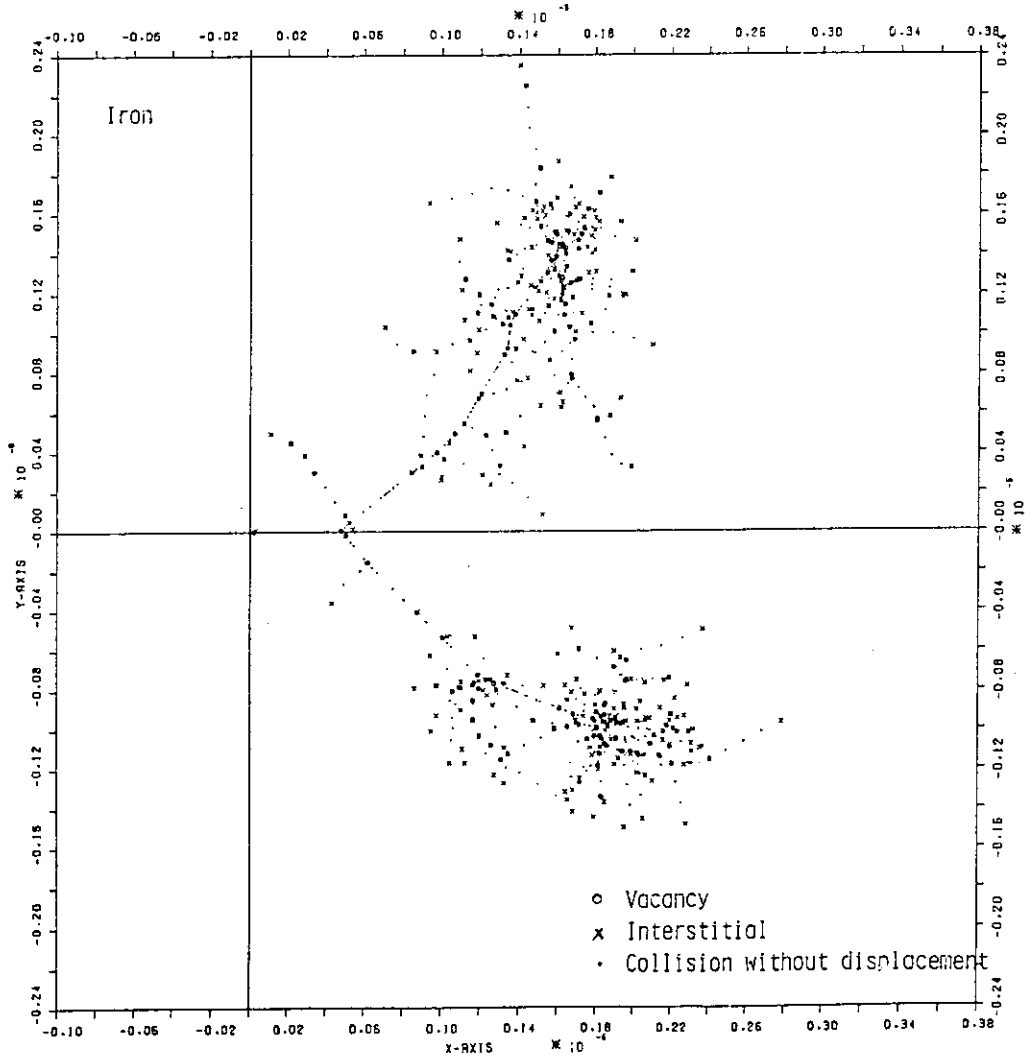
] 尺取因子 [999.0] WINDOW SIZE [0. 0. 42.4 31.2]

INCIDENT ENERGY (eV)
30000.

NUMBER OF DATA POINT
1512.

NUMBER OF FRENKEL PAIRS
236.

RANDOM SEED
45018.



FE CAL. BY RUCASZ

Fig. 20 Orthographic projection of the typical cascade induced by P.K.A. cal. by RUCAS.

入力データファイル (6092831772/3

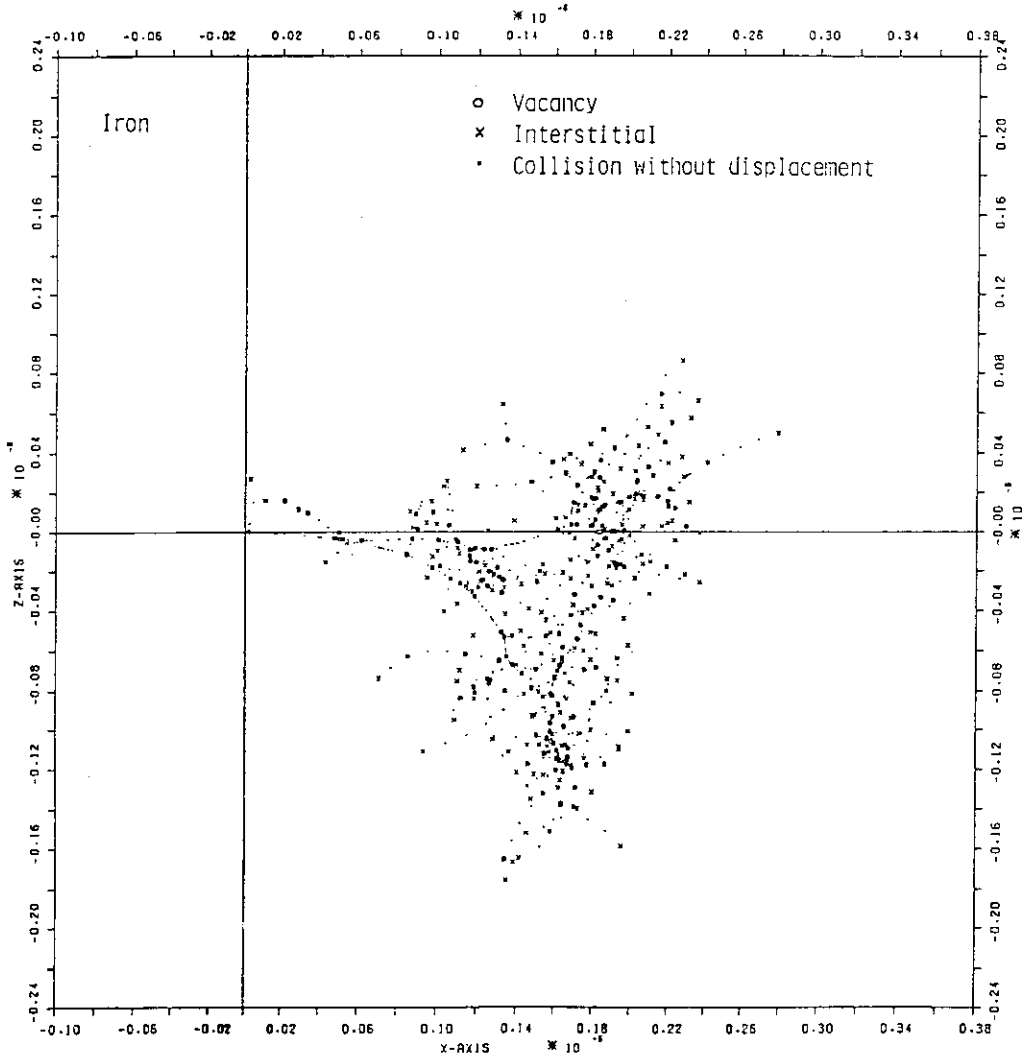
1 尺度因子 (999.0) WINDOW SIZE (0. 0. 42.4 31.2)

INCIDENT ENERGY (EV)
30000.

NUMBER OF DATA POINT
1512.

NUMBER OF FRENKEL PAIRS
236.

RANDOM SEED
45018.



FE CAL. BY RUCASZ

Fig. 21 Orthographic projection of the typical cascade induced by P.K.A. cal. by RUCASZ.

入力データファイル [6092831772/1

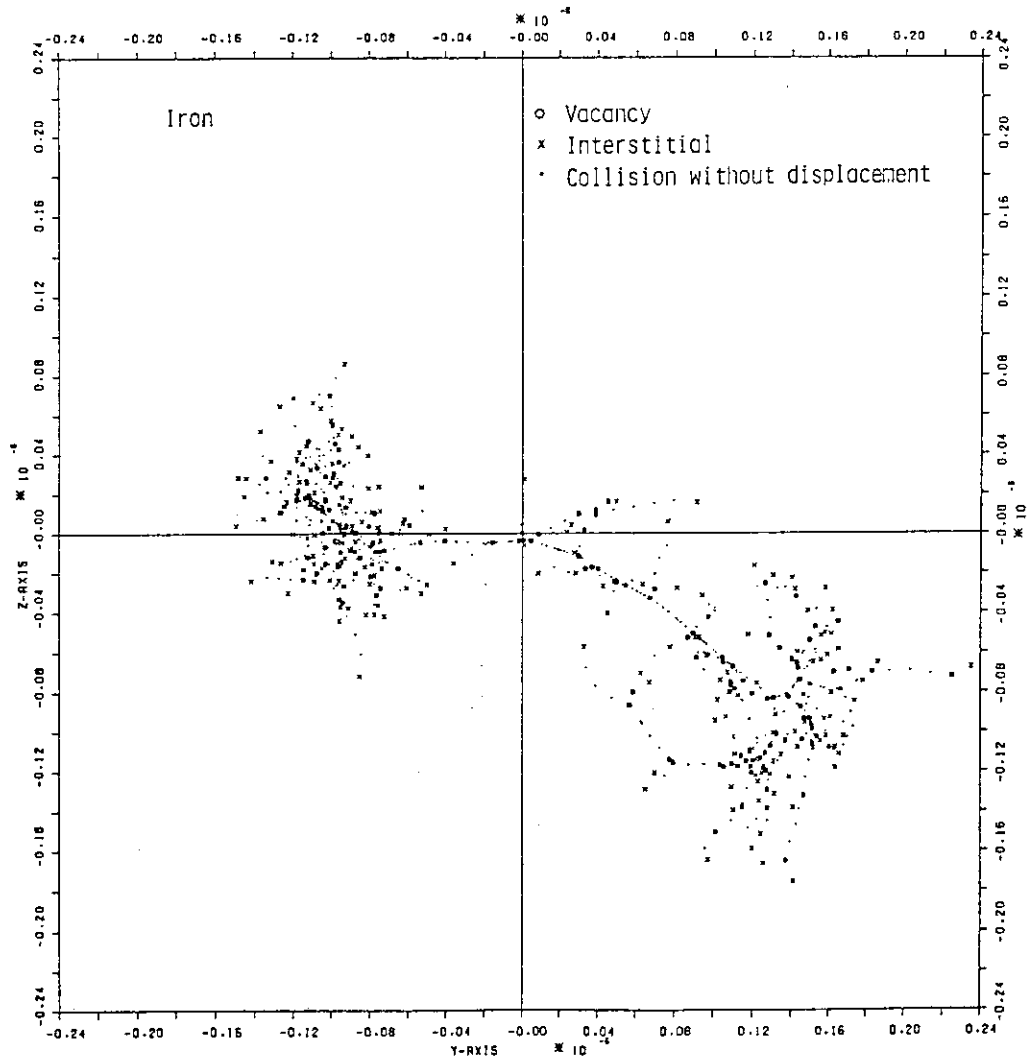
] 反応因子 [999.0] WINDOW SIZE [0. 0. 42.4 31.2]

INCIDENT ENERGY (EV)
30000.

NUMBER OF DATA POINT
1512.

NUMBER OF FRENKEL PAIRS
236.

RANDOM SEED
45018.



FE CAL. BY RUCASZ

Fig. 22 Orthographic projection of the typical cascade induced by P.K.A. cal. by RUCASZ.

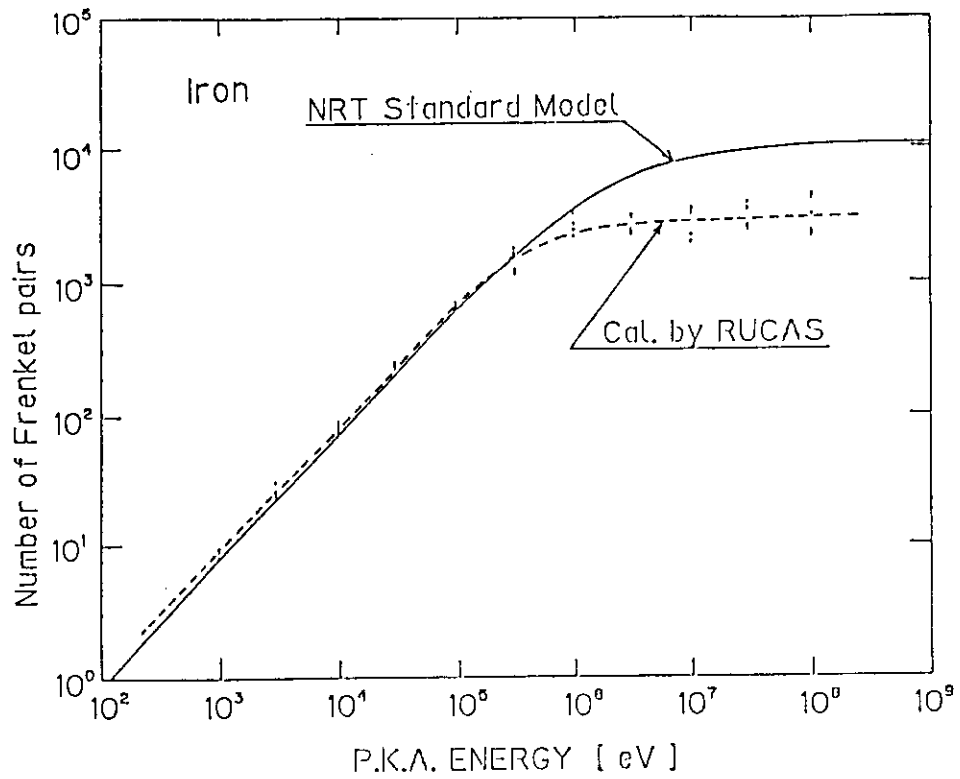


Fig. 23 Displacement function cal. by RUCAS.

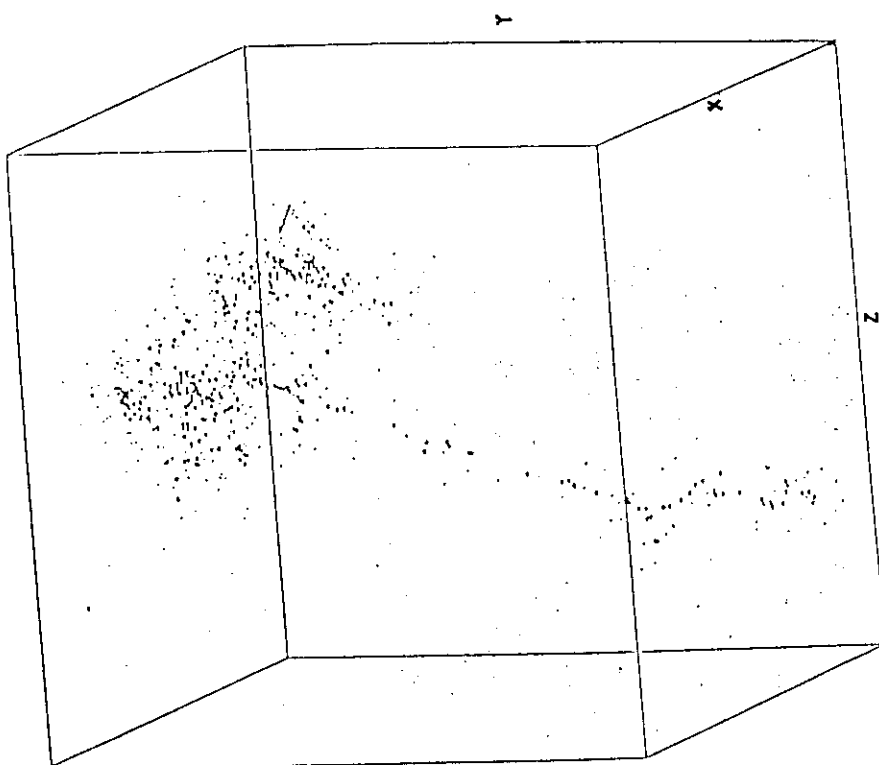


Fig. 24 3-D View of typical 30 keV cascade cal.
by MARLOWE16).

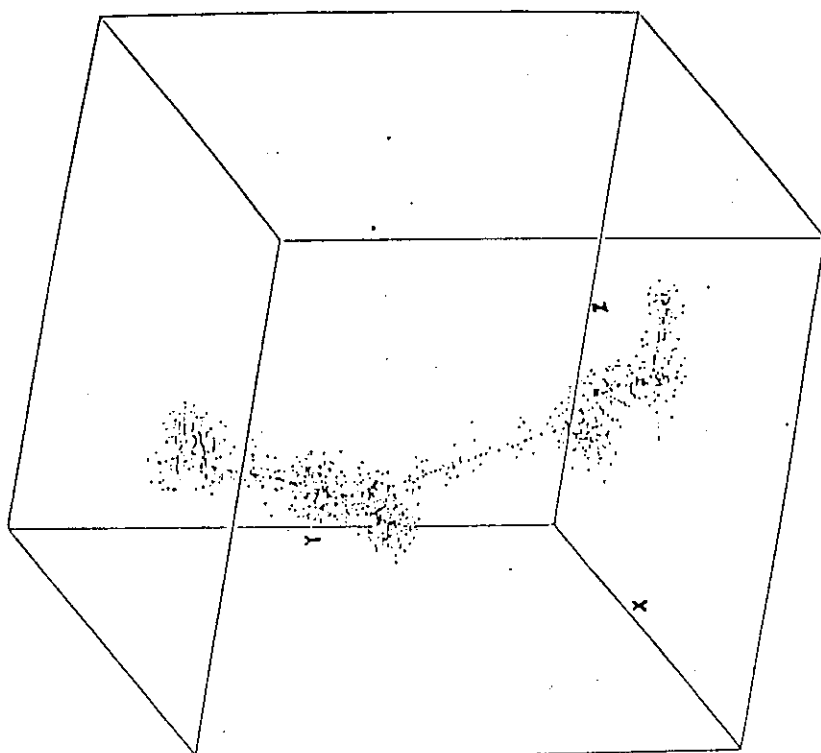


Fig. 25 3-D View of typical 100 keV cascade cal.
by MARLOWE16).

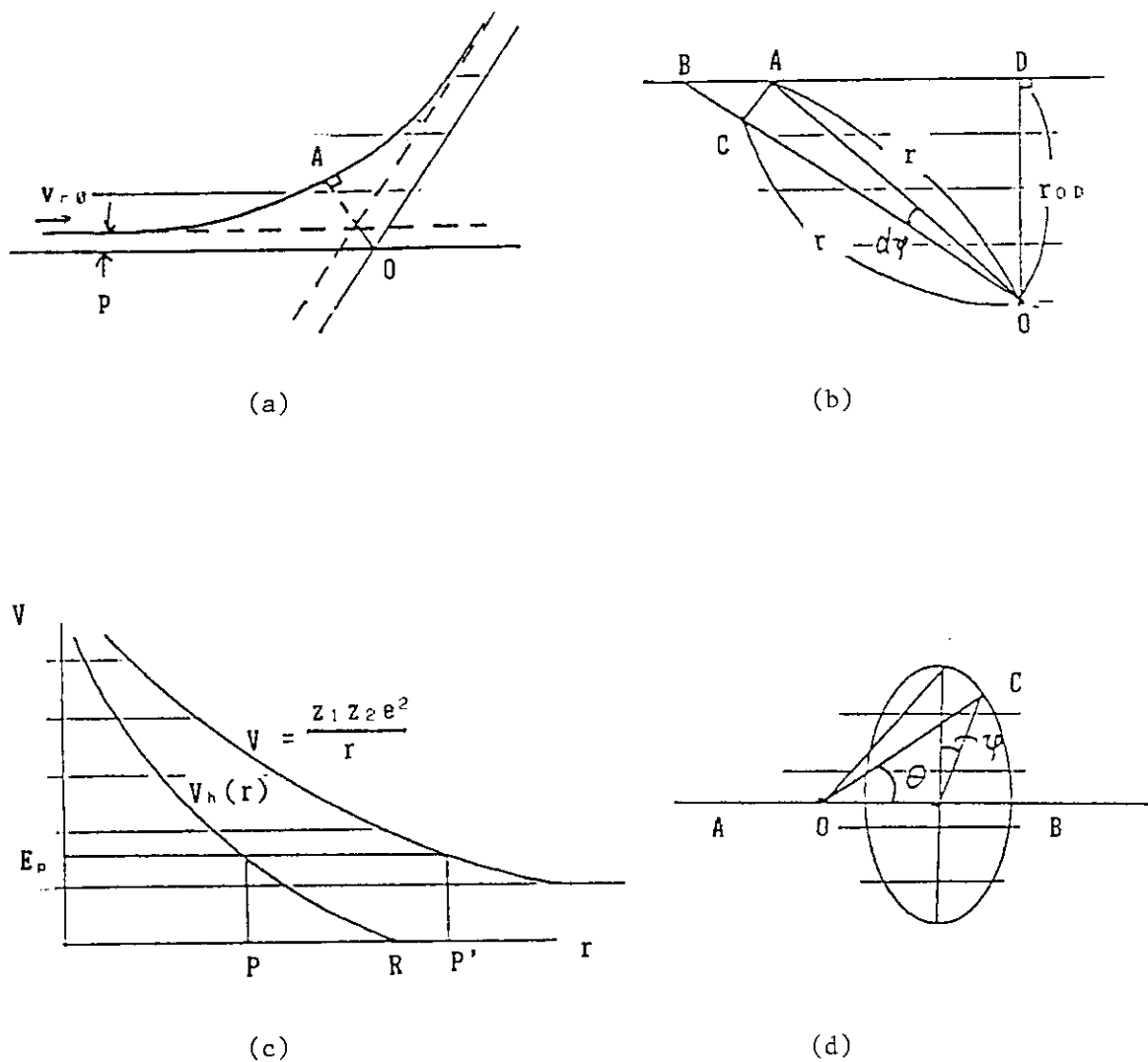


Fig. 26 Scattering of particle in the potentials.
 (a) Rutherford scattering (b) Velocity of particle
 (c) Coulomb and V_h potentials (d) Direction of scattering

8. RADHEAT-V4コードシステムにおけるDPA断面積およびKERMAファクターの計算手法

山野 直樹 (住友原子力工業株式会社)

RADHEAT-V4コードシステムにおけるDPA断面積およびKERMAファクターの計算手法を述べる。本コードによるDPA断面積およびKERMAファクターの算出方法を示し、JENDL-3を用いたDPA断面積ライブラリの現状も合わせて述べる。

Naoki YAMANO (Sumitomo Atomic Energy Ind. Ltd.)

Calculation methods of DPA cross section and KERMA factor adopted in RADHEAT-V4 code system are described. The procedure for generating DPA cross section and KERMA factor is shown. The status of DPA cross section library using by JENDL-3 is also described.

1. RADHEAT-V4コードシステムの概要

RADHEAT-V4コードシステム(Ref.1)は日本原子力研究所で開発された遮蔽安全解析用計算コードシステムであり、Fig. 1に示すように評価済核データファイルJENDL、ENDF/B-IV、-V、DLC-15、DLC-136/PHOTX等より輸送計算用の中性子・ガンマ線結合群定数を作成するFAIR-CROSS、TWOWAYモジュールと1～3次元の輸送計算を行うDIAC、ESPRIT、MCACEモジュールから構成されている。

RADHEAT-V4コードシステムでは通常の放射線遮蔽解析を行う機能の他に、材料の照射損傷および発熱量を算出することが可能であり、そのため群定数処理モジュールFAIR-CROSSでDPA断面積、KERMAファクターを任意のエネルギー群構造で計算する機能を持っている。

次節以降にRADHEAT-V4コードシステムで採用しているDPA断面積およびKERMAファクターの計算手法および算出手順を述べた。また、JENDL-3を用いたDPA断面積ライブラリの現状についても示した。

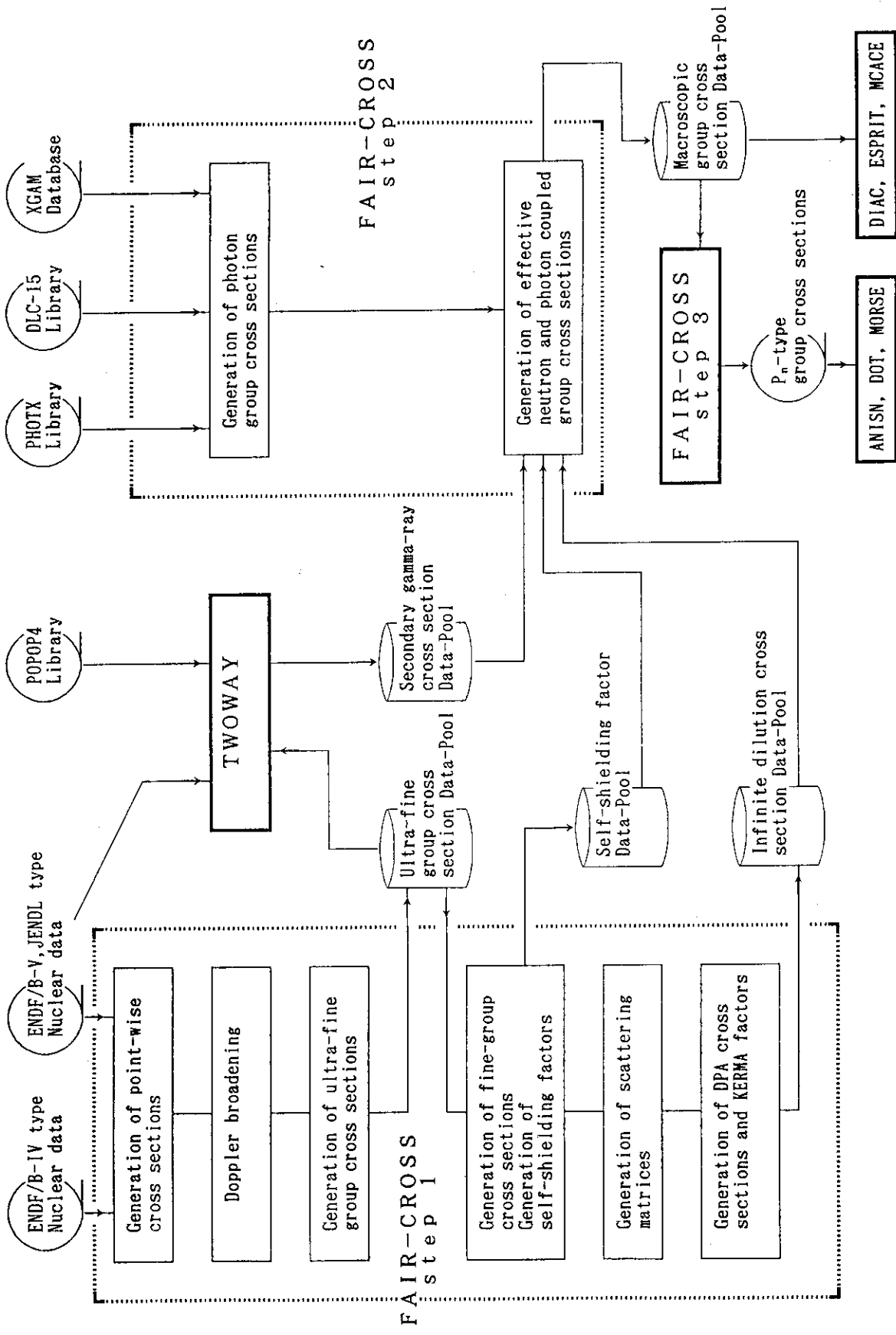


Fig. 1 Flow of cross section generation in the RADHEAT-V4 code system.

2. DPA断面積の計算手法

原子はじき出し (Displacement Per Atom) 断面積はDoranらの先駆的な研究(Ref.2)により、一般的に(1)式により求められる。

$$\sigma_{\text{DPA}}(E) = \sigma_x(E) \int_0^{E_x^{\text{max}}} dE_x \int_{-1}^{+1} d\mu \cdot f(E, E_x, \mu) \cdot \nu(T, E, E_x, \mu) \quad (1)$$

ここで、 f は規格化されたPKAスペクトル関数であり、 ν ははじき出し損傷関数で、PKAが静止するまでにカスケード反応によって生成される2次はじき出し粒子の総数である。

ν は Lindhard モデルによって以下のように記述される。

$$\nu(T) = 0.8T_D / 2E_d \quad (T > 2E_d) \quad (2)$$

$$T_D = T / (1 + K_L \cdot g(\epsilon)) \quad (3)$$

$$K_L = 0.1337 Z^{2/3} / A^{1/2} \quad (4)$$

$$g(\epsilon) = \epsilon + 0.40244 \epsilon^{3/4} + 8.4008 \epsilon^{1/8} \quad (5)$$

$$\epsilon = 0.01151 T / Z^{7/3} \quad (6)$$

ここで、 T_D は損傷関数、 E_d は実効閾エネルギーであり、 A および Z は原子量および原子番号である。

上記における反跳原子の実験室系でのエネルギー T 、複合核 (または重心) のエネルギー E 、重心系での散乱角の余弦 μ と散乱後の中性子エネルギー E_p は運動量保存則によって(7)式のように関係づけられる。

$$T = \alpha_1 \alpha_2 E + (\alpha_1 / \alpha_2) E_p - 2\alpha_1 \mu \sqrt{E \cdot E_p} \quad (7)$$

ここで、

$$\alpha_1 = 1 / (1 + A) \quad (8)$$

$$\alpha_2 = A / (1 + A) \quad (9)$$

である。また、重心系、実験室系のそれぞれにおける散乱角の余弦 μ と μ' は(10)、(11)式で関係づけられる。

$$\mu' = (1 - \eta \mu) / \sqrt{1 + \eta^2 - 2\eta \mu} \quad (10)$$

$$\eta = \sqrt{(\alpha_1 / \alpha_2)(E_p / E)} \quad (11)$$

DPA断面積 $\sigma_{\text{DPA}}(E)$ はRADHEAT-V4システムを用いて3865群の超多群構造で計算し、任意の少数群構造に重み関数 ϕ を用いて、(12)式で示されるように縮約して求める。

$$F_s = \int_{E_s}^{E_{s+1}} \sigma_{\text{DPA}}(E) \phi(E) dE / \int_{E_s}^{E_{s+1}} \phi(E) dE \quad (12)$$

上記のDPA断面積は、弾性散乱、非弾性散乱、 $(n, 2n)$ 反応、 (n, γ) 反応、 (n, p) 反応および (n, α) 反応の各反応ごとに計算される。各反応についての計算手法は以下のとおりである。

(a) 弾性散乱

弾性散乱では(13)式に示すエネルギー保存則が成立する。

$$E_p = \alpha_2^2 E \quad (13)$$

この場合には(7)式は(14)式のように示される。

$$T = 2\alpha_1 \alpha_2 E (1-\mu) \quad (14)$$

また、規格化されたPKAスペクトル関数 f は(15)式で表される。

$$f(E, \mu) = \frac{2\pi}{\sigma(E)} \cdot \frac{d\sigma(E, \mu)}{d\Omega} \quad (15)$$

したがって、DPA断面積は(16)式のように求められる。

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{DPA}}(E) &= 2\pi \int_{-1}^{\mu_{\text{max}}} \frac{d\sigma(E, \mu)}{d\Omega} \cdot \frac{0.8}{2E_d} \cdot \frac{2\alpha_1 \alpha_2 E (1-\mu)}{1+K_L \cdot g(\epsilon)} \cdot d\mu \\ &= \frac{1.6\pi \alpha_1 \alpha_2 E}{E_d} \int_{-1}^{\mu_{\text{max}}} \frac{d\sigma(E, \mu)}{d\Omega} \cdot \frac{1-\mu}{1+K_L \cdot g(\epsilon)} \cdot d\mu \end{aligned} \quad (16)$$

ここで、 μ_{max} は(17)式で示される。

$$\mu_{\text{max}} = 1 - \frac{E_d}{\alpha_1 \alpha_2 E} \quad (17)$$

(b) 非弾性散乱

非弾性散乱では、離散レベルおよび連続レベルについて個別に取扱う。

離散レベルについては核データファイルに格納されているすべてのレベルについて、(18)式のように求める。

$$\sigma_{\text{DPA}}(E) = \sum_i \sigma_{\text{DPA}, i}(E) \quad (18)$$

ここで、 $\sigma_{\text{DPA}, i}$ は i 番目の離散レベルにおける原子はじき出し断面積であり、このレベルの Q 値を Q_i で示せば、エネルギー保存則により(19)式の関係が成立する。

$$E_p = \alpha_2(\alpha_2 E - Q_i) \quad (19)$$

したがって、

$$T_i = 2\alpha_1\alpha_2 \{E - \mu \sqrt{E(E - Q_i/\alpha_2)}\} - \alpha_1 Q_i \quad (20)$$

さらに、非弾性散乱では散乱中性子が複合核から放出されると考えられるため等方散乱であると仮定できる。このとき、 $\sigma_{\text{DPA}, i}(E)$ は(21)式で与えられる。

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{DPA}, i}(E) &= \frac{\sigma_i(E)}{2} \int_{-1}^{+1} \nu(T_i(E, \mu)) d\mu \\ &= \frac{\sigma_i(E)}{5E_d} \int_{-1}^{+1} \frac{2\alpha_1\alpha_2 \{E - \mu \sqrt{E(E - Q_i/\alpha_2)}\} - \alpha_1 Q_i}{1 + K_L \cdot g(\epsilon)} \cdot d\mu \quad (21) \end{aligned}$$

連続レベルについては、 E_p はエネルギー分布関数 $f(E, E_p)$ で与えられ、DPA断面積は(22)式で求められる。

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{DPA}, c}(E) &= \frac{\sigma_c(E)}{2} \int_0^{E_p^{\text{max}}} f(E, E_p) \int_{-1}^{+1} \nu(T(E, E_p, \mu)) d\mu dE_p \\ &= \frac{\sigma_c(E)}{5E_d} \int_0^{E_p^{\text{max}}} f(E, E_p) \\ &\quad \times \int_{-1}^{+1} \frac{\alpha_1\alpha_2 E + (\alpha_1/\alpha_2)E_p - 2\alpha_1\mu \sqrt{E \cdot E_p}}{1 + K_L \cdot g(\epsilon)} d\mu dE_p \quad (22) \end{aligned}$$

(c) (n, 2n) 反応

(n, 2n) 反応では、1中性子モデルを採用する。このモデルでは、散乱後に放出される2つの中性子のエネルギーを E_p 、 E_p' とすれば、(23)式で表される最初の中性子(エネルギー E_p)を放出した後の平均反跳エネルギー T_1^{av} を用いて、 T を(24)式のように示すことができる。

$$T_1^{av} = \alpha_1 \alpha_2 E + (\alpha_1 / \alpha_2) E_p \quad (23)$$

$$T = \frac{A}{A-1} \cdot \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \cdot E_p + \frac{A-1}{A} \cdot T_1^{av} - 2\mu \sqrt{(\alpha_1 / \alpha_2) \cdot T_1^{av} E_p'} \quad (24)$$

ここで、 $E_p' = E_p$ と仮定すると、(24)式は(25)式のように示される。

$$T = \frac{A-1}{(A+1)^2} \cdot E + \left(\frac{1}{A-1} + \frac{A-1}{A^2} \right) E_p - \frac{2\mu}{A} \left[E_p \left\{ \frac{A^2}{(A+1)^2} \cdot E + E_p \right\} \right]^{1/2} \quad (25)$$

(25)式を用いて、非弾性散乱の連続レベルの計算方法と同様な手法でDPA断面積が計算できる。

(d) (n, γ) 反応

(n, γ) 反応では、PKAの運動エネルギーは(n, γ) 反応の反跳エネルギーと等しいと仮定する。すなわち、

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2} \cdot \frac{E_{GAM}^2}{(A+1)C^2} \\ &= \frac{1}{1.862 \times 10^9} \cdot \frac{Q^2}{A+1} \end{aligned} \quad (26)$$

(26)式において、 E_{GAM} は γ 線の平均エネルギーであり、 Q は(n, γ) 反応のQ値である。

(e) (n, p) 反応および(n, α) 反応

荷電粒子放出反応では、PKAスペクトルを逆過程複合核形成断面積およびレベル密度を用いて、詳細に計算する。これらの反応に対しては、残留核および放出核の原子量をそれぞれ $A_{r,n}$ および A_p とすれば、 T は(27)式で表される。また、PKAスペクトル関数(エネルギー分布関数)は、統計モデルを用いて、(28)、(29)式で示される。

$$T = \frac{A_{r,n}}{(A+1)^2} \cdot E + \frac{A_p}{A_{r,n}} \cdot E_p - \frac{(4A_p E_p E)^{1/2}}{A+1} \cdot \mu \quad (27)$$

$$f(E, E_p) = \frac{1}{I} \cdot E_p \cdot \rho(E^*) \cdot \sigma_c(E_p) \quad (28)$$

$$I = \int_0^{E_p^{\max}} E_p \cdot \rho(E^*) \cdot \sigma_c(E_p) \cdot dE_p \quad (29)$$

(28)式において、 ρ はレベル密度であり、 σ_c は逆過程複合核形成断面積である。 σ_c は光学モデルによる断面積計算コード ELIESE-3 によって計算され、 ρ は以下の①、②に示す Gilbert-Cameron's formula を用いて計算される。

① $E^* \geq E_x$

$$\rho(u) = \rho_2(u) = \frac{\sqrt{\pi}}{12} \cdot \frac{1}{a^{1/4} u^{5/4}} \cdot \exp(2\sqrt{au}) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \quad (30)$$

② $E^* < E_x$

$$\rho(u) = \rho_1(E^*) = \frac{1}{T} \cdot \exp\left\{\frac{E^* - E_0}{T}\right\} \quad (31)$$

ここで、

$$u = E^* - \Delta$$

$$E^* = \frac{A}{A+1} \cdot E + Q - E_p$$

$$E_x = 2.5 + \frac{150}{A} + \Delta$$

$$\sigma^2 = 0.0888(au)^{1/2} A^{2/3}$$

$$\frac{1}{T} = \frac{\sqrt{a/u_x} - 3}{2u_x}$$

$$E_0 = E_x - T \cdot \log\{T \cdot \rho_2(u_x)\}$$

$$u_x = E_x - \Delta$$

Δ : pairing energy

a : レベル密度パラメータ

$$a/A = 0.00917S + 0.147 \text{ (MeV}^{-1}\text{) [for undeformed nuclei]}$$

$$a/A = 0.00917S + 0.120 \text{ (MeV}^{-1}\text{) [for deformed nuclei]}$$

$$86 \leq A - Z \leq 122$$

$$130 \leq A - Z \leq 182$$

$$54 \leq Z \leq 78$$

S : Total Shell Correction

3. KERMAファクターの計算方法

KERMAファクターの算出は前節で示したDPA断面積の計算方法と同様に、以下の式で計算される。変数の定義は前節で示したものと同一である。

$$H(E) = C \cdot \sigma_x(E) \int_0^{E_x^{\max}} dE_x \int_{-1}^{+1} d\mu \cdot f(E, E_x, \mu) \cdot T(E, \mu) \quad (32)$$

ここで、 C は単位変換のための定数である。

KERMAファクター $H(E)$ はRADHEAT-V4システムを用いて3865群の超多群構造で計算し、任意の少数群構造に重み関数 ϕ を用いて、(33)式で示されるように縮約して求める。

$$H_g = \int_{E_g}^{E_{g+1}} H(E) \phi(E) dE / \int_{E_g}^{E_{g+1}} \phi(E) dE \quad (33)$$

上記のKERMAファクターは、弾性散乱、非弾性散乱、 $(n, 2n)$ 反応、 (n, γ) 反応、 (n, p) 反応、 (n, α) 反応および核分裂反応の各反応ごとに計算される。各反応についての計算手法は以下の通りである。

(a) 弾性散乱

弾性散乱の場合はDPA断面積の計算手法と同様に以下の式で求められる。

$$\begin{aligned} H(E) &= C \cdot 2\pi \int_{-1}^{+1} \frac{d\sigma(E, \mu)}{d\Omega} \cdot 2\alpha_1 \alpha_2 E (1-\mu) d\mu \\ &= C \cdot 4\pi \alpha_1 \alpha_2 E \int_{-1}^{+1} \frac{d\sigma(E, \mu)}{d\Omega} \cdot (1-\mu) d\mu \end{aligned} \quad (34)$$

(b) 非弾性散乱

非弾性散乱では、離散レベルおよび連続レベルについて個別に取扱う。

離散レベルについては核データファイルに格納されているすべてのレベルについて、(35)式のように求める。

$$H(E) = \sum_i H_i(E) \quad (35)$$

ここで、 H_i は i 番目の離散レベルにおけるKERMAファクターであり、このレベルのQ値を Q_i で示し、非弾性散乱では散乱中性子が複合核から放出されると考えられるため等方散乱であると仮定すると、 $H_i(E)$ は(36)式で与えられる。

$$\begin{aligned} H_i(E) &= C \cdot \frac{\sigma_i(E)}{2} \int_{-1}^{+1} T_i(E, \mu) d\mu \\ &= C \cdot \sigma_i(E) (2\alpha_1 \alpha_2 E - \alpha_1 Q_i) \end{aligned} \quad (36)$$

連続レベルについては、 E_p はエネルギー分布関数 $f(E, E_p)$ で与えられ、KERMAファクターは(37)式で求められる。

$$\begin{aligned} H_0(E) &= C \cdot \frac{\sigma_0(E)}{2} \int_0^{E_p^{\max}} f(E, E_p) \int_{-1}^{+1} T(E, E_p, \mu) d\mu dE_p \\ &= C \cdot \sigma_0(E) \int_0^{E_p^{\max}} f(E, E_p) \{ \alpha_1 \alpha_2 E + (\alpha_1 / \alpha_2) E_p \} dE_p \end{aligned} \quad (37)$$

(c) (n, 2n) 反応

(n, 2n) 反応では、DPA断面積の計算手法と同様に1中性子モデルを採用し、非弾性散乱の連続レベルの計算方法と同様な手法でKERMAファクターを計算する。

(d) (n, γ) 反応

(n, γ) 反応では、PKAの運動エネルギーは(n, γ) 反応の反跳エネルギーと等しいと仮定し、DPA断面積の計算手法と同様な手法でKERMAファクターを計算する。

(e) (n, p) 反応および (n, α) 反応

荷電粒子放出反応では、PKAスペクトルを逆過程複合核形成断面積およびレベル密度を用いて詳細に計算するDPA断面積の計算手法と同様な手法でKERMAファクターを計算する

(f) 核分裂反応

核分裂反応によるKERMAファクターは核分裂片の運動エネルギー H_f を入力データで与え、以下の式で計算する。

$$H(E) = C \cdot H_f \cdot \sigma_f(E) \quad (38)$$

(g) ガンマ線による反応

ガンマ線によるKERMAファクターはDLC-15ライブラリに格納されているエネルギー吸収係数(μ_{en}/ρ)とガンマ線のエネルギー群gの平均エネルギー E_g を用いて、以下の式で計算される。なお、KERMAファクターの単位は(barn·watt·sec)となる。

$$H(E) = 1.6 \times 10^{-19} (\mu_{en}/\rho) E_g \quad (39)$$

4. DPA断面積の計算手順

本節では、前節までに示した計算手法に従ってDPA断面積およびKERMAファクターを計算するために使用するRADHEAT-V4コードシステム中の群定数処理コードFAIR-CROSSの概要と計算手順を示す。

(1) 計算コード (FAIR-CROSS) の概要

FAIR-CROSSは評価済核データファイル (JENDL、ENDF/B-IV、-V) から多群群定数を計算するコードであり、その機能により3つのステップに分けられる。

(a) FAIR-CROSS Step1

- ① 核データファイルに与えられている共鳴パラメータから、分離共鳴領域のpoint-wise断面積を作成する。また、非分離共鳴領域の平均断面積を作成する。
- ② ドップラーの広がり考慮した温度依存断面積を計算する。
- ③ 散乱マトリクス、DPA断面積、KERMAファクター、2次 γ 線生成断面積及び多群断面積を作成するために用いる超多群断面積 (3865群) を計算する。
- ④ バックグラウンド断面積及び温度ごとに、全、弾性散乱、核分裂及び(n, γ)反応のボンダレンコ型自己遮蔽因子を計算する。
- ⑤ 弾性散乱、非弾性散乱及び(n, 2n)反応の散乱マトリクスを計算する。
- ⑥ PKAによるDPA断面積及びKERMAファクターを計算する。

(b) FAIR-CROSS Step2

- ① 内挿法によって自己遮蔽因子を求め、実効断面積を作成する。
- ② 実効断面積と2次 γ 線生成データを用いて、2次 γ 線生成断面積を作成する。

- ③ γ 線断面積及びエネルギー吸収係数を、経験式または DLC-15 ライブラリを用いて計算する。
- ④ 散乱マトリクスを散乱角を関数とした断面積に変換する。
- ⑤ 制動放射データを作成する。

(c) FAIR-CROSS Step3

- ① FAIR-CROSS Step2 で作成した実効マクロ断面積を、 S_n 輸送計算コードで直接使用可能な P_n 展開による群定数に変換する。

(2) 計算手順

DPA断面積及びKERMAファクターを計算する手順は以下の通りである。

- ① 評価済核データファイルとして JENDL-3 を使用し、FAIR-CROSS Step1 コードによって、核種ごとの、超多群断面積、無限希釈断面積、自己遮蔽因子、散乱マトリクス、DPA断面積及びKERMAファクターを計算する。
- ② Step1 コードによって得られた核種ごとの計算結果から、物質ごとの実効マクロ断面積を Step2 コードによって計算する。物質ごとのDPA断面積及びKERMAファクターも合せて計算される。

FAIR-CROSS Step1 及び Step2 コードの入力データ及びジョブ制御文の例を Fig. 2～Fig. 5 に示した。

Record 1 ♣ タイトル (80文字以内)
 CALCULATION OF ATOMIC DISPLACEMENT CROSS SECTIONS

Record 2 ♣ DATA-POOL 論理ユニットの指定。必ず第2カラムから与える。
 &UNIT ULTX=91,INFX=91,FTBL=91 &END

Record 3 ♣ エネルギー群数 ♣ エネルギー群構造を表すノード名
 1# 1 1 37 0 0 4HEDPA 1 0 T

Record 4 ♣ エネルギー群境界値を降順に与える。(eV単位)
 2** 2.000+7 1.750+7 1.490+7 1.350+7 1.220+7 1.000+7
 8.190+6 6.700+6 5.490+6 4.490+6 3.680+6 3.010+6
 2.460+6 2.020+6 1.650+6 1.350+6 1.110+6 9.070+5
 7.430+5 4.980+5 3.340+5 2.240+5 1.500+5 8.650+4
 3.180+4 1.500+4 7.100+3 3.350+3 1.580+3 4.540+2
 1.010+2 2.260+1 1.070+1 5.040+0 2.380+0 1.120+0
 4.140-1 1.000-4 T

Record 5 ♣ タイトル (80文字以内)
 MAT=3261 FE-54 FROM JENDL-3 AT 300K (TAPE302)

Record 6 ♣ 核データファイルでの核種番号
 4# 3261 -8 0 1 7 2 0 0 1 1
 1 0 2 0 0 0 T

Record 7 ♣ 温度を与える。(Kelvin)
 5** 300.0

Record 8 ♣ バックグラウンド断面積を与える。
 6** 1.0+8 0.0 1.0 1.0+1 1.0+2 1.0+3 1.0+4

Record 9 ♣ 重み関数変更点のエネルギー等を与える。(eV単位)
 7** 0.4 2.5851-2 3.000+7

Record10 ♣ Reconstruction Tolerance を与える。
 10** 0.01 0.0 0.03 0.0

Record11 ♣ DPAの実効しきいエネルギー
 11** 40.0 0.0 0.0 0.0 0.0

Fig. 2 Sample input data of FAIR-CROSS Stepl for each nuclide
 (-----, ----- shows data are changed by each nuclide and element, respectively)

```

//FCROSS EXEC LMG0,
// LM='J9432.FCSTEP1M',
// OBSIZE=137,
// ORECFM=FA
//FT01F001 DD DSN=&&F1,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(100,20)),
// DCB=(LRECL=19064,BLKSIZE=19068,RECFM=VBS)
//FT02F001 DD DSN=&&F2,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(100,20)),
// DCB=(LRECL=19064,BLKSIZE=19068,RECFM=VBS)
//FT03F001 DD DSN=&&F3,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(100,20)),
// DCB=(LRECL=19064,BLKSIZE=19068,RECFM=VBS)
//FT04F001 DD DSN=&&F4,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(100,20)),
// DCB=(LRECL=19064,BLKSIZE=19068,RECFM=VBS)
//FT10F001 DD DSN=&&FA,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(100,20)),
// DCB=(LRECL=19064,BLKSIZE=19068,RECFM=VBS)
//FT11F001 DD DSN=&&FB,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(100,20)),
// DCB=(LRECL=19064,BLKSIZE=19068,RECFM=VBS)
//FT12F001 DD DSN=&&FC,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(100,20)),
// DCB=(LRECL=19064,BLKSIZE=19068,RECFM=VBS)
//FT13F001 DD DSN=&&FD,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(100,20)),
// DCB=(LRECL=16804,BLKSIZE=16804,RECFM=F)
//FT14F001 DD DSN=&&FE,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(100,20)),
// DCB=(LRECL=19064,BLKSIZE=19068,RECFM=VBS)
//FT15F001 DD DSN=&&FF,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(100,20)),
// DCB=(LRECL=80,BLKSIZE=3120,RECFM=FB)
//FT08F001 DD DSN=J1615.JENDL302.DATA,DISP=SHR,LABEL=(,,IN)
//* FT91F001 IS CROSS-SECTION OUTPUT DATA-POOL
//FT91F001 DD DSN=J3233.DPA001.DATA,DISP=SHR,LABEL=(,,OUT)
//SYSIN DD *

```

FAIR-CROSS Step1 Input Data

```

++
//

```

Fig. 3 Job control cards for executing FAIR-CROSS Step1

Record 1 ▼タイトル (80文字以内)
 CALCULATION OF EFFECTIVE MACRO CROSS SECTIONS

Record 2 ▼DATA-POOL 論理ユニットの指定。必ず第2カラムから与える。
 &UNIT ULTX=91, INFX=91, FTBL=91, SELF=92, FXSN=92 &END

Record 3 ▼ 1つの物質に含まれている核種数
 1¥¥ 2 4 37 0 32 4HEDPA 0 0 T

Record 4 ▼タイトル (80文字以内)
IRON CROSS SECTION BY JENDL-3

Record 5 ▼物質を表すノード名
 4¥¥ 4H**** 1 0 0 1 0

Record 6 ▼物質構成核種のMAT (Step1で使用) を与える。
 5¥¥ 3261 3262 3263 3264

Record 7 7¥¥ 3261 3262 3263 3264

Record 8 ▼物質構成核種の原子番号を与える。
 8** 26 26 26 26

Record 9 ▼物質構成核種の原子個数密度を与える。(n/barn/cm)
 9** 1.100-2 1.200-3 1.300-4 1.400-5

Record10 ▼物質構成核種の温度を与える。(Kelvin)
 10** 300.0 300.0 300.0 300.0

Record11 T

Record12 12¥¥ 1 0 T

Record13 29¥¥ 0 0 1 1 T

Fig. 4 Sample input data of FAIR-CROSS Step2 for each material
 (----- shows data are changed by each material)

```

// EXEC LMGO, LM='J1446.FCSTEP2M',
//FT11F001 DD DSN=&&F1,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(50,20)),
// DCB=(LRECL=19064,BLKSIZE=19068,RECFM=VBS)
//FT13F001 DD DSN=&&F3,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(50,20)),
// DCB=(LRECL=16804,BLKSIZE=16804,RECFM=F)
//FT14F001 DD DSN=&&F4,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(50,20)),
// DCB=(LRECL=19064,BLKSIZE=19068,RECFM=VBS)
//FT16F001 DD DSN=&&F6,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(50,20)),
// DCB=(LRECL=19064,BLKSIZE=19068,RECFM=VBS)
//FT17F001 DD DSN=&&F7,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(50,20)),
// DCB=(LRECL=19064,BLKSIZE=19068,RECFM=VBS)
//FT18F001 DD DSN=&&F8,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(50,20)),
// DCB=(LRECL=19064,BLKSIZE=19068,RECFM=VBS)
//FT21F001 DD DSN=&&FA,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(50,20)),
// DCB=(LRECL=19064,BLKSIZE=19068,RECFM=VBS)
//FT22F001 DD DSN=&&FB,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(50,20)),
// DCB=(LRECL=19064,BLKSIZE=19068,RECFM=VBS)
//FT23F001 DD DSN=&&FC,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(50,20)),
// DCB=(LRECL=19064,BLKSIZE=19068,RECFM=VBS)
//FT24F001 DD DSN=&&FD,UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(50,20)),
// DCB=(LRECL=19064,BLKSIZE=19068,RECFM=VBS)
//FT08F001 DD DSN=J3631.DLC15.DATA,DISP=SHR,LABEL=(,,IN)
//FT09F001 DD DSN=J1446.PHOTX.DATA,DISP=SHR,LABEL=(,,IN)
//FT91F001 DD DSN=J3233.DPA001.DATA,DISP=SHR,LABEL=(,,IN)
//* FT92F001 IS MACROSCOPIC CROSS-SECTION OUTPUT DATA-POOL
//FT92F001 DD DSN=J3233.DPA002.DATA,DISP=SHR,LABEL=(,,OUT)
//SYSIN DD *

```

FAIR-CROSS Step2 Input Data

```

++
//

```

Fig. 5 Job control cards for executing FAIR-CROSS Step2

5. DPA断面積ライブラリの整備の現状

現在、DPA断面積はJENDL-3を用いて、Table 1 に示す11元素34核種について整備されている。計算する際に採用した実効閾エネルギー E_0 も合わせて示した。

エネルギー群構造は Table 2 に示すDLC-87/HILOで採用されている中性子66群のうち、20MeVまでの37群についてのみ考慮した。これは、JENDL-3に格納されている上限エネルギーが20MeVであることによる。

計算結果の一例として、 ^{56}Fe の各反応別のDPA断面積を Fig. 6 に示した。

参考文献：

- (1) Yamano, N. et al.: "RADHEAT-V4: A Code System to Generate Multigroup Constants and Analyze Radiation Transport for Shielding Safety Evaluation", JAERI-1316 (1989)
- (2) Doran D. G.: Nucl. Sci. Eng., 49, 130 (1972)

Table 1 Nuclides and Adopted Effective threshold energies in the DPA cross section library.

Nuclide	JENDL-3 Material Number	Effective Threshold Energy(eV)	Nuclide	JENDL-3 Material Number	Effective Threshold Energy(eV)
C -12	3061	47	Cr-50	3241	40
			Cr-52	3242	
N -14	3071	40	Cr-53	3243	
N -15	3072		Cr-54	3244	
O -16	3081	40	Fe-54	3261	40
			Fe-56	3262	
Al-27	3131	27	Fe-57	3263	
			Fe-58	3264	
Si-28	3141	46	Ni-58	3281	40
Si-29	3142		Ni-60	3282	
Si-30	3143		Ni-61	3283	
Ti-46	3221	48	Ni-62	3284	
Ti-47	3222		Ni-64	3285	
Ti-48	3223		Mo-92	3421	
Ti-49	3224		Mo-94	3422	
Ti-50	3225		Mo-95	3423	
V -51	3231	43	Mo-96	3424	45
			Mo-97	3425	
			Mo-98	3426	
			Mo-99	3427	
			Mo-100	3428	

Table 2 Energy group structure of DLC-87/HILO library.

*1 No.	Energy (eV) *2		Upper Lethargy	No.	Energy (eV) *2		Upper Lethargy
	Upper	Lower			Upper	Lower	
# 1	4.00 E+8	3.75 E+8	-3.689	34	1.22 E+7	1.00 E+7	-0.199
# 2	3.75 E+8	3.50 E+8	-3.624	35	1.00 E+7	8.19 E+6	0.000
# 3	3.50 E+8	3.25 E+8	-3.555	36	8.19 E+6	6.70 E+6	0.200
# 4	3.25 E+8	3.00 E+8	-3.481	37	6.70 E+6	5.49 E+6	0.400
# 5	3.00 E+8	2.75 E+8	-3.401	38	5.49 E+6	4.49 E+6	0.600
# 6	2.75 E+8	2.50 E+8	-3.314	39	4.49 E+6	3.68 E+6	0.801
# 7	2.50 E+8	2.25 E+8	-3.219	40	3.68 E+6	3.01 E+6	1.000
# 8	2.25 E+8	2.00 E+8	-3.114	41	3.01 E+6	2.46 E+6	1.201
# 9	2.00 E+8	1.80 E+8	-2.996	42	2.46 E+6	2.02 E+6	1.402
#10	1.80 E+8	1.60 E+8	-2.890	43	2.02 E+6	1.65 E+6	1.599
#11	1.60 E+8	1.40 E+8	-2.773	44	1.65 E+6	1.35 E+6	1.802
#12	1.40 E+8	1.20 E+8	-2.639	45	1.35 E+6	1.11 E+6	2.002
#13	1.20 E+8	1.10 E+8	-2.485	46	1.11 E+6	9.07 E+5	2.198
#14	1.10 E+8	1.00 E+8	-2.398	47	9.07 E+5	7.43 E+5	2.400
#15	1.00 E+8	9.00 E+7	-2.303	48	7.43 E+5	4.98 E+5	2.600
#16	9.00 E+7	8.00 E+7	-2.197	49	4.98 E+5	3.34 E+5	3.000
#17	8.00 E+7	7.00 E+7	-2.079	50	3.34 E+5	2.24 E+5	3.399
#18	7.00 E+7	6.50 E+7	-1.946	51	2.24 E+5	1.50 E+5	3.799
#19	6.50 E+7	6.00 E+7	-1.872	52	1.50 E+5	8.65 E+4	4.200
#20	6.00 E+7	5.50 E+7	-1.792	53	8.65 E+4	3.18 E+4	4.750
#21	5.50 E+7	5.00 E+7	-1.705	54	3.18 E+4	1.50 E+4	5.751
#22	5.00 E+7	4.50 E+7	-1.609	55	1.50 E+4	7.10 E+3	6.502
#23	4.50 E+7	4.00 E+7	-1.504	56	7.10 E+3	3.35 E+3	7.250
#24	4.00 E+7	3.50 E+7	-1.386	57	3.35 E+3	1.58 E+3	8.001
#25	3.50 E+7	3.00 E+7	-1.253	58	1.58 E+3	4.54 E+2	8.753
#26	3.00 E+7	2.75 E+7	-1.099	59	4.54 E+2	1.01 E+2	10.000
#27	2.75 E+7	2.50 E+7	-1.012	60	1.01 E+2	2.26 E+1	11.503
#28	2.50 E+7	2.25 E+7	-0.916	61	2.26 E+1	1.07 E+1	13.000
#29	2.25 E+7	2.00 E+7	-0.811	62	1.07 E+1	5.04 E+0	13.748
30	2.00 E+7	1.75 E+7	-0.693	63	5.04 E+0	2.38 E+0	14.501
31	1.75 E+7	1.49 E+7	-0.560	64	2.38 E+0	1.12 E+0	15.251
32	1.49 E+7	1.35 E+7	-0.399	65	1.12 E+0	4.14 E-1	16.005
33	1.35 E+7	1.22 E+7	-0.300	66	4.14 E-1	1.00 E-4	17.000

Note: *1 DPA cross section is not given in the energy group marked with #

*2 4.00 E+8 means 4.00×10^8

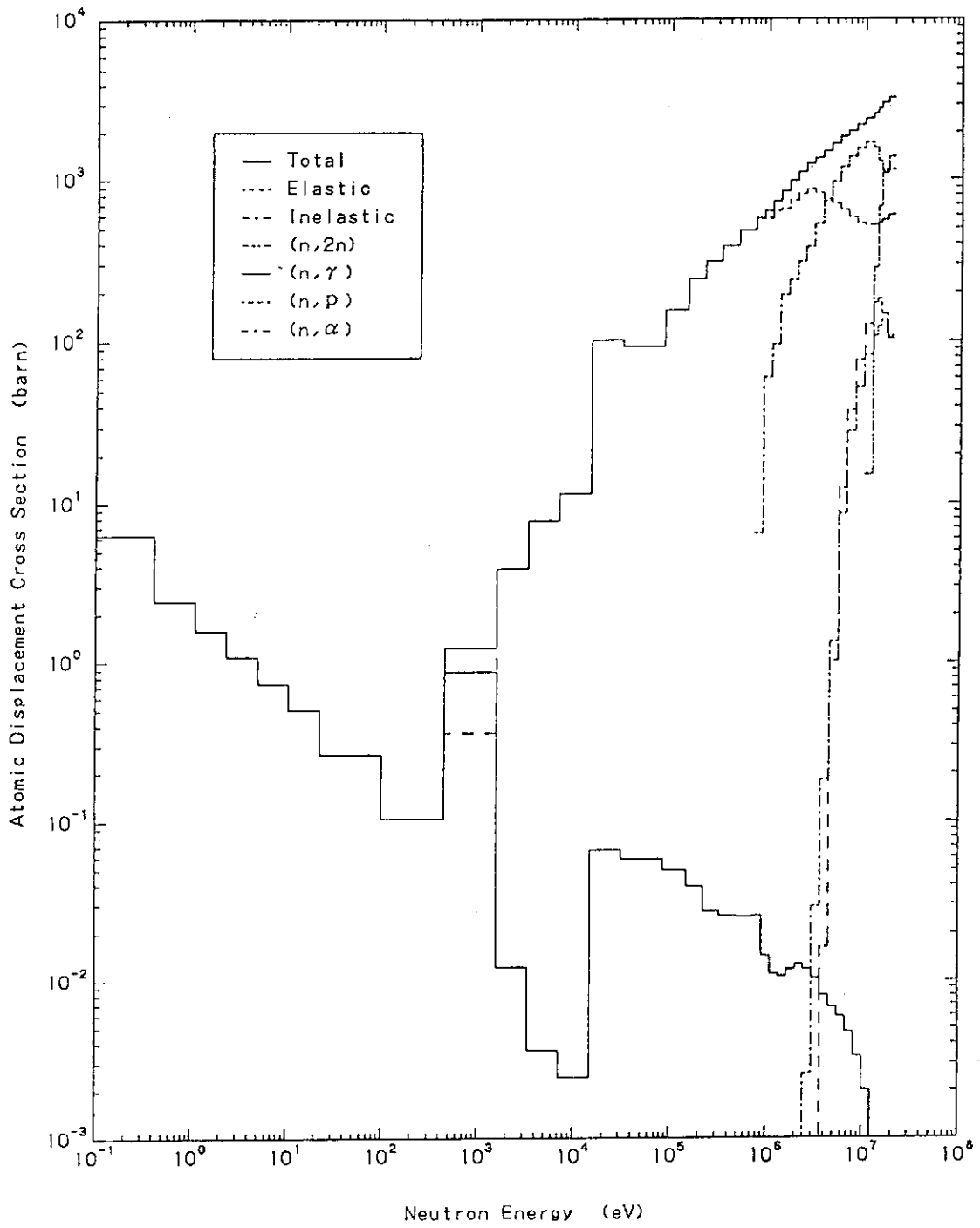


Fig. 6 DPA cross section of ^{56}Fe for each reaction.

9. 放射線医学における中性子カーマファクターの現状

喜多尾憲助 (放射線医学総合研究所)

高エネルギー中性子治療の分野では、100MeVまでのエネルギーをもつ中性子カーマが必要である。thermal energy から 30MeVまでのエネルギーの中性子に対して Casewell が与えた計算値は、中性子治療や放射線防護でのドシメトリに広く利用されている。最近 14~20MeVの中性子による炭素のカーマの測定実験は、ENDF/B-Vを用いたCasewellの値を大きく下回り、計算の見直しや断面積についての研究を促している。その他、30MeV以上のエネルギーをもつ中性子のカーマについての現状も紹介する。

Neutron Kerma Factor in Radiology - a short review

Kensuke KITAO

National Institute of Radiological Sciences

Kerma factors of neutrons with energies up to 100 MeV are required in the use of high-energy neutron for radiation therapy. For neutron energy from thermal energy to 30 MeV, the values calculated by Caswell et al have been commonly used for dosimetry in neutron therapy and radiation protection. Recent experiments on the carbon kerma factors suggest that their calculated ones, based on ENDF/B-V, for 14-20 MeV neutrons are rather overestimated to experimental values. The fact has stimulated the recalculation on the carbon kerma factor and the investigation on the neutron cross section for carbon. And the status of kerma factors for neutrons with energies greater than 30 MeV is presented.

1. 放射線医学と中性子カーマ

放射線医学あるいは放射線防護の分野では、放射線の生物効果を定量的に表すことがなお困難であるにしても、放射線の照射を受けた身体の部分や臓器が吸収する放射線のエネルギーをまず正確にかつ精度良く押さえておきたいという希望はきわめて強い。例えばICRU (国際放射線防護測定委員会) では、X線あるいはγ線治療のさい患者に与えられる吸

吸収量は±2%、の精密さ、不確かさ±5%以下に抑えるべきだとしている[1]。

中性子や光子など、いわゆる非荷電電離粒子によるエネルギー付与は身体構成原子との相互作用によって発生する二次荷電粒子粒子を通して行われる。この荷電粒子のもつ運動エネルギーがカーマである。すなわち中性子の照射をうけている物質内のある点の中性子カーマとは、その点を含む体積要素内で問題の物質中において中性子との相互作用によって直接生成する荷電粒子のもつ（静止エネルギーを除く）エネルギーの総和をその体積要素の質量で除した商である。これら生成荷電粒子のあるものは制動放射の形でエネルギーを放出するから、実際にエネルギー吸収（すなわち吸収線量）に寄与するのは制動放射で逃げる分を除いたものである。

中性子治療における吸収線量評価はカーマを基礎にするから、カーマもかなりの精度を要求されよう。Broerseら[2]によると、中性子照射を受けた身体内での組織吸収線量の評価値で、不確かさ（5.4～10.8%）の大部分（50～90%）はカーマの不確かさによる。

2. カーマが必要な中性子のエネルギー範囲

患者の身体を放射線にさらす外部照射法では、身体深部にどれほどの吸収線量を与えられるかによって照射放射線の種類やエネルギーが選択される。第1図は、陽子で衝撃したベリリウムターゲットから発生する中性子について、陽子エネルギーと、入射線の方向に垂直な体内20cm×20cmの断面での吸収線量が最大吸収線量値の50%となるような深さを、実際に使われている施設で得られたデータにもとづいてプロットしたものである。いわゆるビルドアップのため、常に表面が吸収線量の最大値を与えないとは限らないが、ここでいう深さは、まず表面から入射線の方向に沿っての深さと考えてよい。この深さは、アイソトープ線源であるコバルト (^{60}Co) では11cm、ライナックなど制動放射を利用する18MeV X線では21cmである。照射に使われる中性子のスペクトルの例を第2図に示すが、高エネルギー側は衝撃粒子のエネルギーに近い値になっている。従って、中性子治療の分野では100MeVまでの中性子カーマが必要とされていることが理解できよう。

中性子のエネルギーを選択するもう一つの目安は酸素効果である。放射線照射治療の対象とする腫瘍細胞には酸素分圧の低い低酸素細胞が存在する。この細胞は放射線に対する抵抗性が強く多量の吸収線量を与えないと死滅しない。無酸素状態の細胞と、通常酸素分圧の細胞との致死線量の比が酸素効果oxygen enhancement ratio, OERと呼ばれるもので、X線では2.5～3.1である。14MeV中性子では1.6～1.8、中性子のエネルギーが高くなるに従って第3図のように1.2にもなる。

3. Caswellの計算

中性子線量測定において、カーマを必要とするものは水素、炭素、窒素、酸素などの人体構成元素と構成物質、吸収線量測定用検出器の材料や構成元素である。ICRUの報告書[3]がCaswellのカーマに関する計算を載せて以来、彼らの仕事[4,5]は中性子ドシメトリに広く利用されている。しかしこの値がカーマ計算の「すべて」ではない。Caswell自身も述べているように、計算の基礎となった仮定の検証と確認、核データの充実、基礎データ推定手法の改良が、なお必要である。彼らの計算[4]を要約する。

中性子エネルギー：thermal energy～30MeV

計算した元素（核種）：H, ^6Li , ^7Li , B, C, F, Na, Mg, Al, Si, P, S, Cl, Ar, K, Ca, Fe

計算した物質：水、二酸化炭素、プラスチック、生体組織など 15種

(文献[5]では44種)

断面積データ (< 20MeV)：ENDF/B-IV

(炭素) ENDF/B-Vの暫定版

(S, P, Ar) ENDL(Livermore)

(^{11}B) UKAEAのファイル

〃 (> 20MeV)：(全断面積からの弾性散乱断面積、全反応断面積の分離)

光学模型による。規格化は実験値があればそれによる。

ない場合には < 20MeVの値で規格化する。

反跳エネルギーは放出粒子の運動エネルギーから計算されている。非弾性散乱では放出中性子は蒸発模型に基づく平均値、荷電粒子放出では残留核の終状態の平均励起エネルギーから計算、(n, 2n)は γ 線放出の最終段階を考慮した3段階崩壊による。また(n, γ)は多重カスケードを考慮して平均する。

Caswellによれば、文献[3]と[4,5]とでは使用した断面積の違いから、15MeV以上のカーマに差が生じたと述べている。又カーマの不確かさの主な原因は核データの不確かさ、核データがないときに行う推測で、前者はカーマに1%～20%、後者は20%～40%の誤差をもたらすという。最近15 MeV-20 MeVのエネルギーをもつ中性子によって、酸素、アルミニウム、ケイ素のカーマが比例計数管を用いて測定された[6]。Caswellの計算値に比べケイ素では±数%、アルミニウムでは数%から20%低く、酸素では40%から10%低い。又いわゆる14-MeV中性子源によって炭素のカーマの測定もいくつか行われている。(次章参照)

なお、おなじく包括的にカーマを計算したものとして次のようなHowerton[27]の仕事がある。

中性子エネルギー：1.3 MeV～20 MeV（化合物・混合物 19 eV～20 MeV）

計算した元素（核種）：Z = 1～29

計算した物質：水、二酸化炭素、プラスチック、生体組織など 19種

断面積データ：ENDL(Livermore)

4. 炭素の 14MeV - 20MeV 中性子カーマ

炭素カーマについて、14-MeV中性子源による最近の直接測定（電離箱、比例計数管による）は Caswellの計算値より 21 % ほど下回っている[7]。このほか 14MeV - 20MeVの範囲について、いくつか実験が報告された[8,9,10,11,12]。これらの実験結果は第4図に示すように、いずれもCaswellの計算値を下回っており、計算の基礎にした ENDF/B-V の断面積の検討を促すことになった。

Caswellらは Axton の評価値を用い、新しく実験値に近い計算値を提案した（第4図の実線曲線）[13]。Caswell によれば、この変更が大きく寄与するのは $^{12}\text{C}(n, \alpha)^9\text{Be}$ 及び $^{12}\text{C}(n, n'3\alpha)$ の断面積で、16.9 MeV中性子の場合、それぞれENDF/B-Vの76, 79%という評価値が使われている。第5図に $^{12}\text{C}(n, n'3\alpha)$ に対するAxtonの評価値をENDF/B-V、JENDL-3(PR1)及び実験値と共に示した。

5. 30 MeV以上の中性子カーマ

30MeV 以上のエネルギーをもつ中性子の、上記物質に対するカーマはもとより断面積についても実験データは少ない。計算値にはAlsmiller(< 70MeV)[15]、Wells(< 80MeV)[16]、Behrooz(< 60MeV)[17]、Dimbylow(< 50MeV)[18,19]、又半実験値としてRomero(<60MeV)[20]があるが、よく一致しているとは言い難いし、その検証も十分ではない。これについては、Kitao[21]のレビューを参照されたい。なおこのレビューには比較のため、ALICEから出力される放出粒子スペクトルを使って計算した（反跳核を除く）カーマを掲げてある。第6図に例として、これまで報告された酸素に対するカーマ値を示す。なお図は便宜上 Brenner[14]の値からのずれとして表してある。Romeroら[20]は、身体組織構成元素に対するnon-elastic cross sectionの測定と共に、反応生成荷電粒子スペクトルの測定を行い、それにもとずいて炭素、酸素、窒素のカーマを計算した。窒素の場合には、Alsmiller [15]の計算値を除いてよく一致しているが、その他はこれまでの計算とかなり違っている。（第7図）

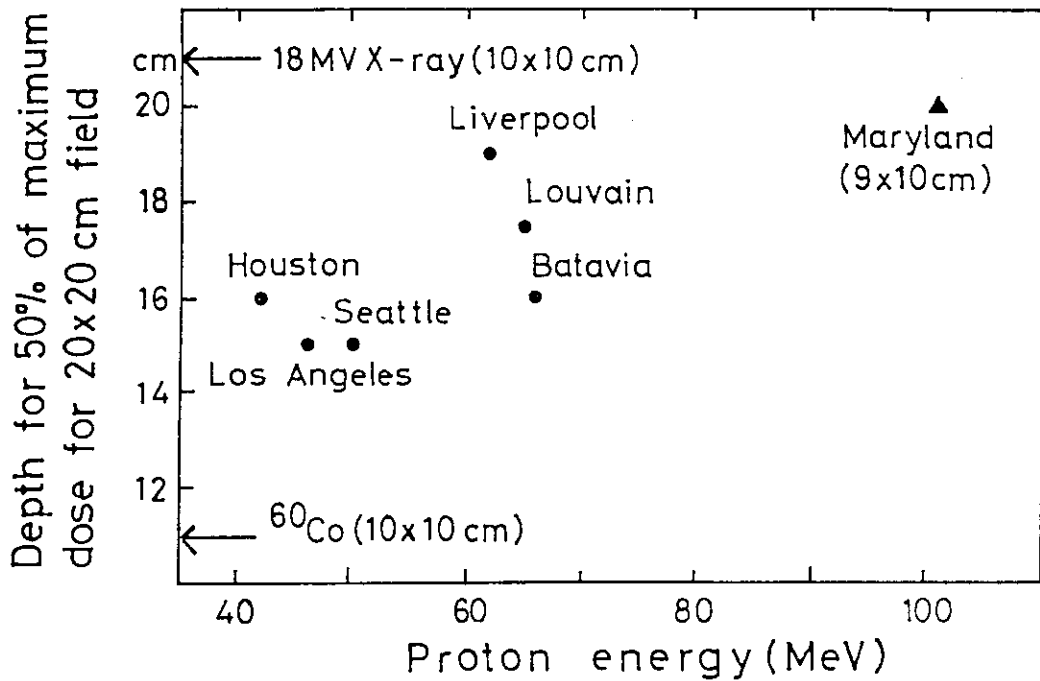
6. 結び

計算カーマの実験的検証は、熱量測定法や比例計数管を使うマイクロシメトリ測定法によって行なうことができる。しかしこれはいわば「積分」実験であり、エネルギーを物質に与える荷電粒子の「顔」を識別することはできない。又逆に、これらの測定に対する系統誤差を評価するには、荷電粒子のスペクトルとその生成断面積のデータが必要であろう。月並みな表現であるが、「今後の研究がまたれる」ところである。

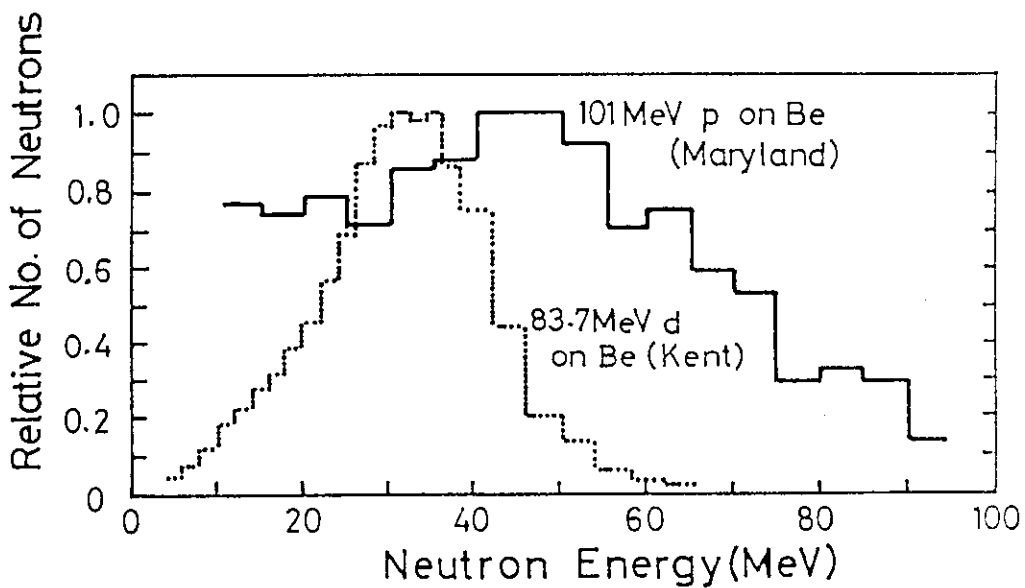
参考文献

- 1) ICRU: Detamination of Absorbed Dose in a Patient Irradiated by a Single Beam of X or Gamma Rays in Radiotherapy Procedures, Report 24 (1976).
- 2) Broerse, J.J and Mijnheer, B.J. : Int. J. Radiat. Oncol. Biol. Phys. 8, 2049 (1982).
- 3) ICRU: Neutron Dosimetry for Biology and Medicine, Report 26, Appendix A, p. 4-90, Washington DC (1977).
- 4) Caswell, R.S., Coyne, J.J. and Randolph, M.L.: Radiat. Res. 83, 217 (1980).
- 5) Caswell, R.S., Coyne, J.J. and Randolph, M.L.: Int. J. Appl. Radiat. Isot. 33, 12-27 (1982).
- 6) DeLuca, Jr., P.M., Barschall, H.H., Sun, Y. and Haight, R.C.: Radiat. Prot. Dosim. 23, 27 (1988).
- 7) DeLuca, Jr., P.M., Barschall, H.H., Haight, R.C. and McDonald, J.C.: Radiat. Res. 100, 78 (1984).
- 8) Buhler, G., Dietze, G., and Menzel, H.G.: from ref. [13].
- 9) DeLuca, Jr., P.M., Barschall, H.H., Haight, R.C. and McDonald, J.C.: Proc. 5th Symp. on Neutron Dosimetry, EUR 9762 (Luxembourg; CEC) pp.193-201 (1984).
- 10) Haight, R.C., Grimes, S.M., Johnson, R.G. and Barschall, H.H.: Nucl. Sci. Eng. 87, 41 (1987).
- 11) DeLuca, Jr., P.M., Barschall, H.H., Burhoe, M.: Nucl. Sci. Eng. 94, 192 (1986).
- 12) McDonald, J.C.: Radiat. Res. 109, 28 (1987).
- 13) Gerstenberg, H.M., Caswell, R.S. and Coyne, J.J.: Radiat. Prot. Dosim. 23, 44 (1988).

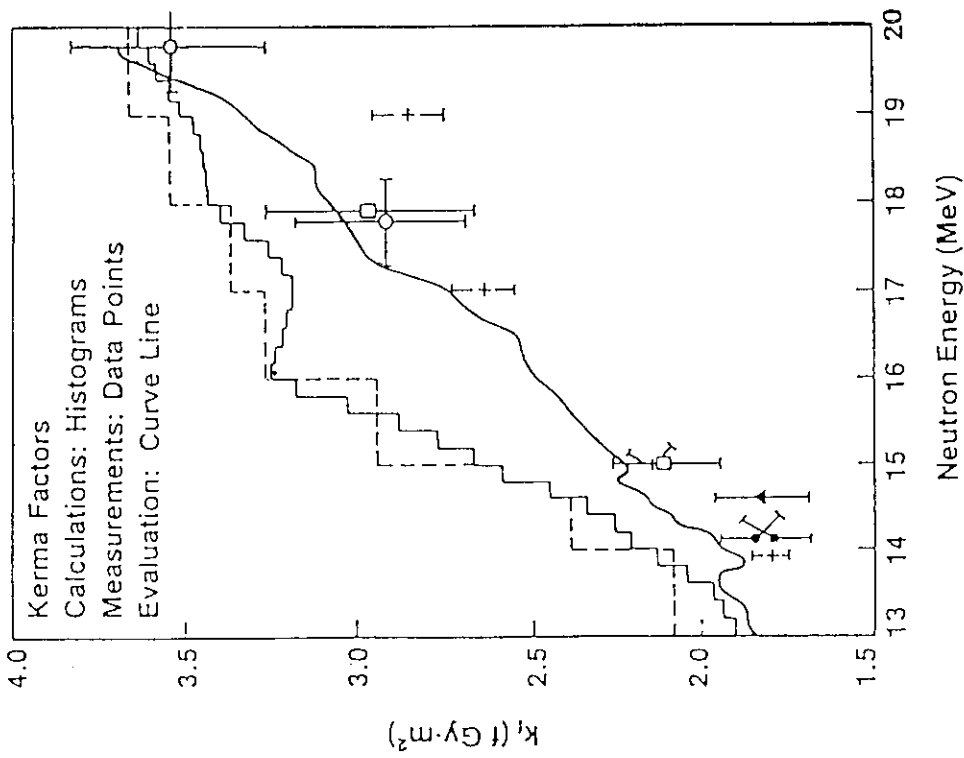
- 14) Brenner, D.J.: *Phys. Med. Biol.*, 29, 437 (1983).
- 15) Alsmiller, R.G. and Barish, J.: *Health Phys.*, 33, 98 (1977).
- 16) Wells, A.H.: *Radiat. Res.* 80, 1 (1979).
- 17) Behrooz, M.A. and WATT, D.E.: *Radiat. Prot. Dosim.* 1, 291 (1981).
- 18) Dimbylow, P.J.: *Phys. Med. Biol.* 25, 637 (1980).
- 19) Dimbylow, P.J.: *Phys. Med. Biol.* 27, 989 (1982).
- 20) Romero, J.L., Brady, F.P. and Subramanian, T.S.:
Proc. Int. Conf. on Nucl. Data for Basic and Appl. Sci., Santa Fe (1985), pp.
 687-699.
- 21) Kitao, K.: *Proc. 1988 Seminar on Nucl. Data, JAERI-M 89-026 (1989)* pp.323-331.
- 22) Antolkovic, B., Slauss, I., Plenkovic, D., Macq, P. and Meulders, J.P.: *Nucl. Phys.*
 A394, 87 (1983).
- 23) Frye, G.M., Rosen, L. and Stewart, L.: *Phys. Rev.* 99, 1375 (1955).
- 24) Vasilev, S.S., Komarov, V.V. and Popova, A.M.: *JETP* 6, 1016 (1958).
- 25) Cocu, F., Haouat, G., Lachkar, J., Patin, Y., Sigaud, J. and Dalbera, G.: *CEA-R-4746*
 (1976).
- 26) Grin, G.A., Vaucher, B., Alder, J.C. and Joseph, C.: *Helv. Phys. Acta*, 42, 990 (196
 9).
- 27) Howerton, R.J.: *UCRL-60400, vol.27 (1986)*.



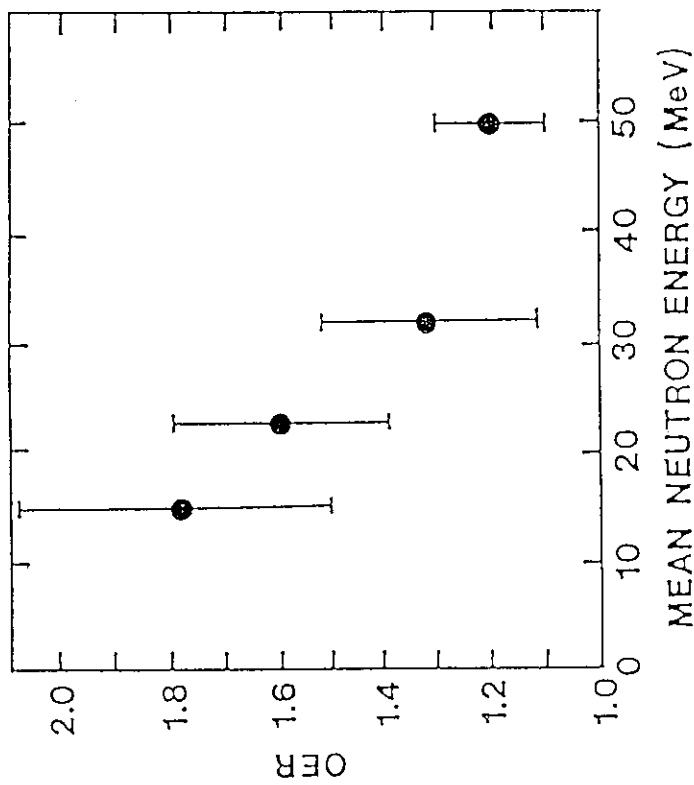
第1図 (Be + p)中性子と加速陽子エネルギー。縦軸は深部率50%の吸収線量を与える深さ(照射野 20 cm x 20 cm)。



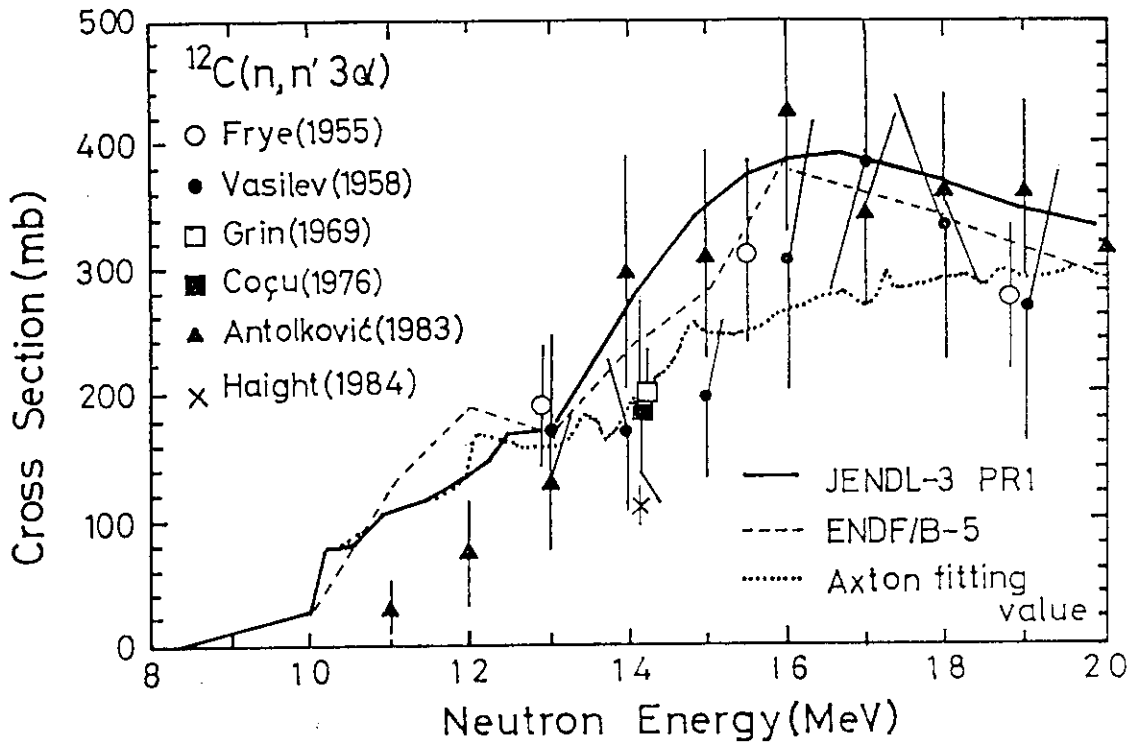
第2図 治療中性子線のスペクトル。



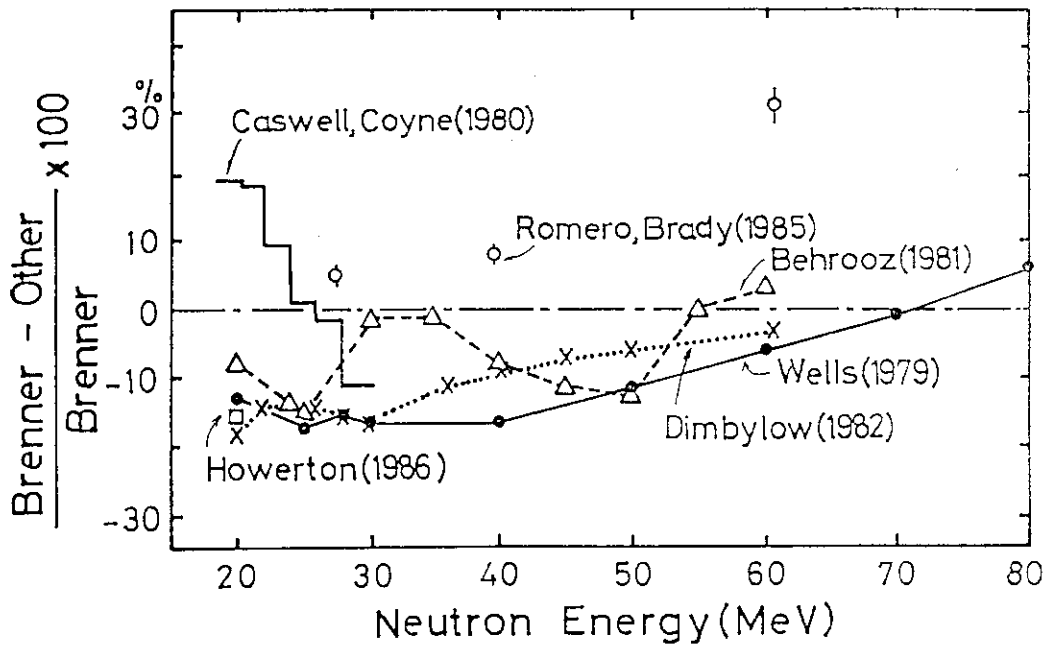
第4図 炭素カーマの計算値 (Caswell[4], --- ビン幅1MeV, ビン幅200keV, 実線の曲線はAxtonの評価)と、実験値 (■ Deluca[7], + Buhler[8], □ Deluca[9], ● Haight[10], ○ Deluca[11], ▲ McDonald[12])との比較。(図はGerstenberg[13]による)



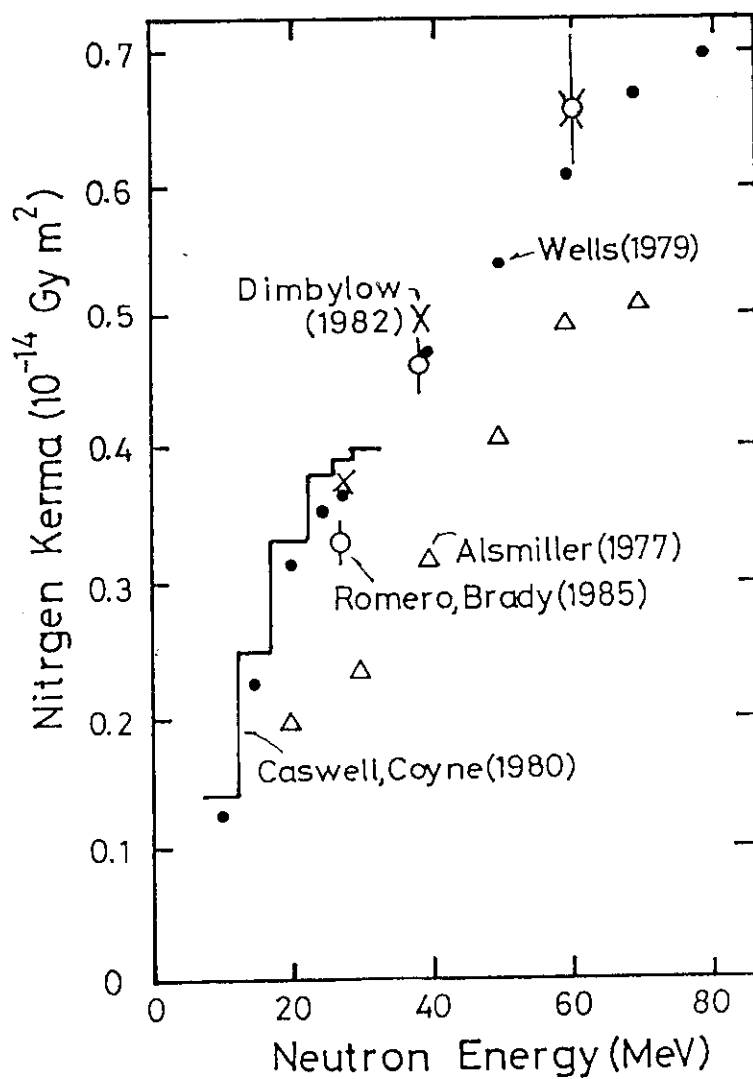
第3図 中性子エネルギーと酸素効果比(OFR)。
G. H. Harrison et al. (British J. Radiology, 49, 733(1976)) による。



第5図 $^{12}\text{C}(n, n' 3\alpha)$ 断面積。評価値と実験値 (Frye[23], Vasilev[24], Grin[26], Cocu[25], Antolkovic[22], Haight[10])



第6図 酵素カーマ。Brenner[14]の値との相対値。



第7図 窒素カーマの計算値。ただし Romero, Brady (1985) [20] は半計算値。

10. む す び

川合 將義 (東芝)

本報告は、PKAとKERMAのデータファイル作成を意図して発足したシグマ研究委員会PKAスペクトル・ワーキンググループの作業指針を明確にするため、平成元年度と2年度の2年間に渡ってデータファイルに対する需要とその使われ方やデータファイルの現状とそうしたデータの計算法について調査検討した結果をまとめたものである。その結果、材料の中性子照射損傷や生物学的な影響のメカニズムまで立ち入って調べる場合には、対象物質に賦与されるエネルギー分布の詳細を初期条件としてより厳密に与えるためにPKAスペクトルや損傷エネルギースペクトルという微分的なデータが必要であること、また、原子炉や核融合炉での核発熱や材料の照射損傷量の評価、さらに蛍光線量計の工学的な用途においては、KERMAファクターやDPA断面積のエネルギー積分した量が用いられていることがわかった。

これらのデータの作成法についても調査し、これまでにDoranの手法を参考としてTENJIN、PKAS、RADHEAT-V4コードが開発され、JENDL-3データの処理も可能であることがわかった。しかし、理論的検討を進めた結果、PKAスペクトルなどの微分的なデータについては、入射中性子エネルギーを20 MeV以下に限っても従来計算法に精度上多少問題あることが定量的に確認され、計算手法上改善の余地のあることもわかった。一方、エネルギー積分した量については、比較的精度の高い近似式が得られ、入射中性子エネルギー20 MeV以上のデータ処理にも適用可能と考えられる。なお、JENDL-3データ処理用にこの式を組み込んだ計算コードPKAR-89が開発されている。

理論的に得られた結果の検証として、実験データは非常に重要であり、軽い核での測定値がまとめられた。軽い核の特徴は、複合核反応だけでなく、いわゆるbreakup 反応などの特別な反応があり、理論的にかなり難しい面があり、測定値はそれ自体ファイルの一部として取り込むことを考慮することが大切である。また、それは、今後の理論の発展に役立つものと考えられる。かくして、当ワーキンググループとしては、新たに計算コードを作成してデータファイル作成に当たることにした。そして、新たに作成するデータファイルの構成やその格納フォーマットについても検討した。

今後のワーキンググループ活動の詳細についてはさらに議論が必要であるが、一応、上記検討結果に従ってコードならびにファイルの作成、さらには測定値による結果の検証を行う予定である。ただし、これまでの理論的な検討は、主として構造材のそれも20 MeV以

下のデータに対するものである。従って、軽い核や高エネルギーでのPKAスペクトルの計算法については、今後の課題といえる。特に、20 MeV以上のデータについては、材料照射試験装置ESNITや宇宙開発などからの要求が高いものであり、かなり急いで開発する必要があるものと考えられる。そのための道具としては、本報告書では紹介できなかったがモンテカルロ法があり、その適用性について評価する一方、それを参考として容認される精度内でより効率的な計算法を考案することが当ワーキンググループの現実的な進め方と考えられる。また、データファイルの形式についても、核データファイルとしての整合性を重視していわゆるENDF-6フォーマットを採用しているが、ユーザー向けにもっと加工したデータを提供する必要があり、これも今後の課題といえる。