

### (3) 奨励賞

## －PHITS イベントジェネレータのための 照射損傷モデルの開発－

日本原子力研究開発機構  
原子力基礎工学研究部門  
放射線防護研究グループ

岩元 洋介

[iwamoto.yosuke@jaea.go.jp](mailto:iwamoto.yosuke@jaea.go.jp)

#### 1. はじめに

原子炉材料や加速器機器の放射線照射による損傷の評価の指標として、照射領域に存在する全格子原子数に対する、はじき出された格子原子数の比で定義される DPA (displacement per atom) 値がある。DPA 値は、クーロン散乱に伴うはじき出し断面積と粒子フルエンスのエネルギー積分で物理的に表され、この値の評価精度が原子炉や加速器施設等の機器のメンテナンス時期に大きく影響する。しかし、これまでの施設設計に用いられてきた放射線輸送計算コードは、核反応モデルしか採用していなかったため、はじき出し断面積を正確に計算することができなかった。

そこで、eV から GeV 程度の幅広いエネルギーの種々の放射線（荷電粒子、重イオン、中性子）に対するあらゆる物質における照射損傷を評価するため、クーロン散乱を考慮したはじき出し断面積の導出が可能な計算モデルを PHITS コード[1]において開発した。

#### 2. 計算手法の概要

図 1 に計算手法の概要を示す[2]。過程は主に(1)イベントジェネレータを含んだ輸送計算、(2)クーロン散乱、(3)カスケード損傷近似の3つに分けられる。

入射粒子が荷電粒子の場合、最初に入射粒子とターゲット核種とのクーロン散乱から一次はじき出し断面積を導出する。続いて、核反応モデルにより生成する二次荷電粒子の運動エネルギーを用いて、二次はじき出し断面積を導出する。入射粒子が 20 MeV 未満の中性子入射に対しては PHITS 独自のイベントジェネレータモードを、20 MeV 以上の中性子に対しては核反応モデルを用いて荷電粒子を生成し、二次はじき出し断面積を導出

する。

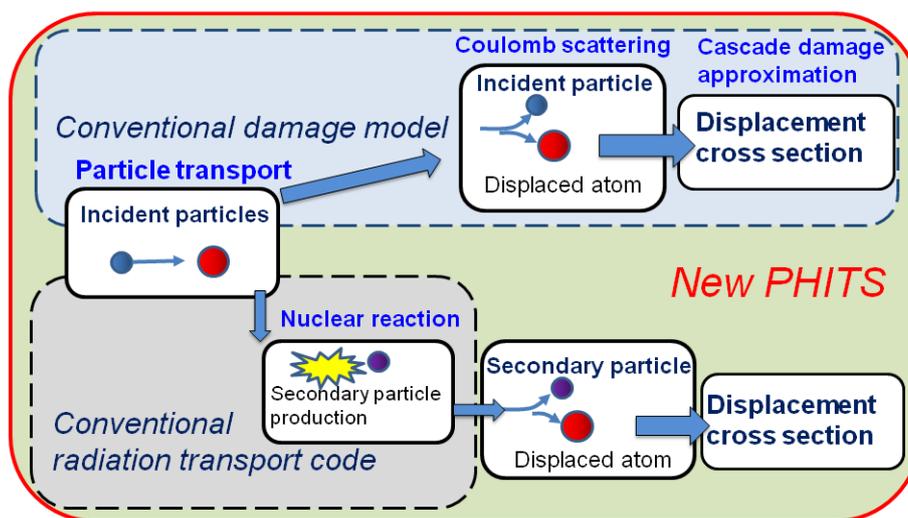


図1 PHITSにおける照射損傷モデルの概要

クーロン散乱断面積及びカスケード損傷近似を用いたはじき出し断面積計算過程において、一つの無次元化定数で記述するスクリーニング関数[3]に着目し、イベント毎に正確にはじき出し断面積を導出できる照射損傷モデルを開発した[2]。その計算式を図2に示す。

$$\sigma_{dcs} = \int_{t_d}^{t_{max}} \frac{d\sigma_{Coul}(t)}{dt} \eta \frac{0.8}{2 \cdot T_d} T_{dam} dt$$

Number of displaced atoms using NRT model

$$\sigma_{coul}(t) = \frac{\pi a_{TF}^2}{2} \frac{f(t^{1/2})}{t^{3/2}} dt$$

Screening function  
dimensionless collision parameter

図2 クーロン散乱断面積及びカスケード損傷近似を用いたはじき出し断面積の計算式

照射損傷モデルには、はじき出し欠陥効率  $\eta$  [4,5]やスクリーニング関数等、照射損傷分野の多くの知見を取り入れ、これら系統式やパラメータは、今後の照射損傷研究やはじき出し断面積導出の改善のために可変とした。

### 3. 開発モデルを用いた照射損傷量計算

図3に陽子エネルギーに対する銅のはじき出し断面積を示す。計算結果は20 MeV 以下[6]及び1 GeV 以上の実験値[5]を精度良く再現した。Lu 氏ら[7]の計算結果は欠陥生成効率 $\eta$ を考慮していないために実験値を過大評価する。

図4は、200 MeV の陽子、 $^3\text{He}$ 、 $^{48}\text{Ca}$  ビーム照射に対する銅ターゲットの深さ方向のDPA 値分布を示す。SRIM コード[8]は照射損傷の評価で最も利用されているコードである。陽子や $^3\text{He}$ の軽核に対しては、核反応から発生する荷電粒子を考慮していないSRIM コードは、DPA 値を著しく過小評価することが分かった。また $^{48}\text{Ca}$ については、 $^{48}\text{Ca}$ のクーロン散乱断面積が、核反応により生成する二次粒子に比べて大きいために、PHITS とSRIM の計算結果は殆ど同じであることが分かる。

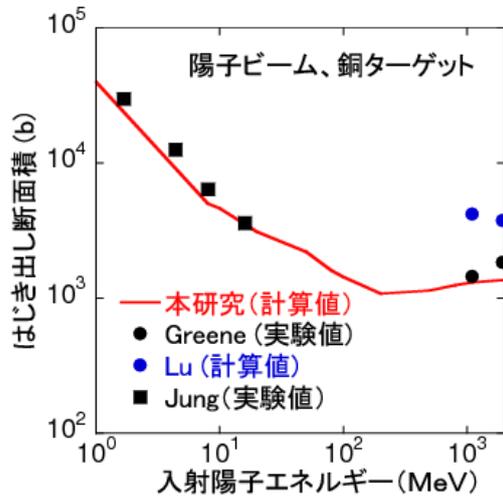


図3 陽子ビームエネルギーに対する銅のはじき出し断面積

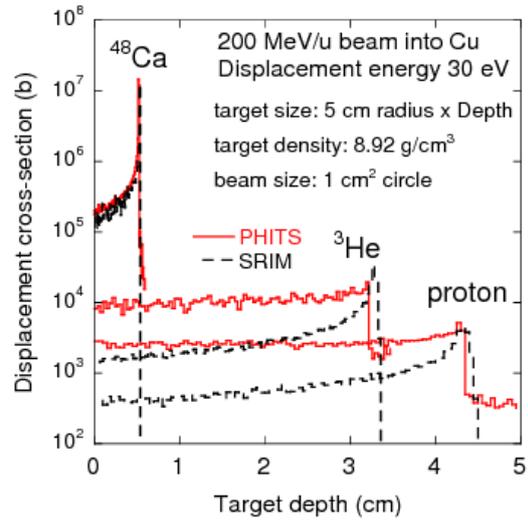


図4 陽子、 $^3\text{He}$ 、 $^{48}\text{Ca}$  に対する銅照射表面からのDPA 深さ分布

図5に、200 MeV の陽子、 $^{48}\text{Ca}$ 、中性子及び京大炉の中性子が、5 cm 厚さの銅へ照射したときのDPA 分布を示す[9]。陽子や $^{48}\text{Ca}$  ビームにおいて、ビームが完全に止まる深さまではDPA 値が高い。一方で、中性子ビームは核反応や弾性散乱を引き起こしながら二次荷電粒子を生成し、これら荷電粒子とターゲット原子とのクーロン散乱により損傷を与える。

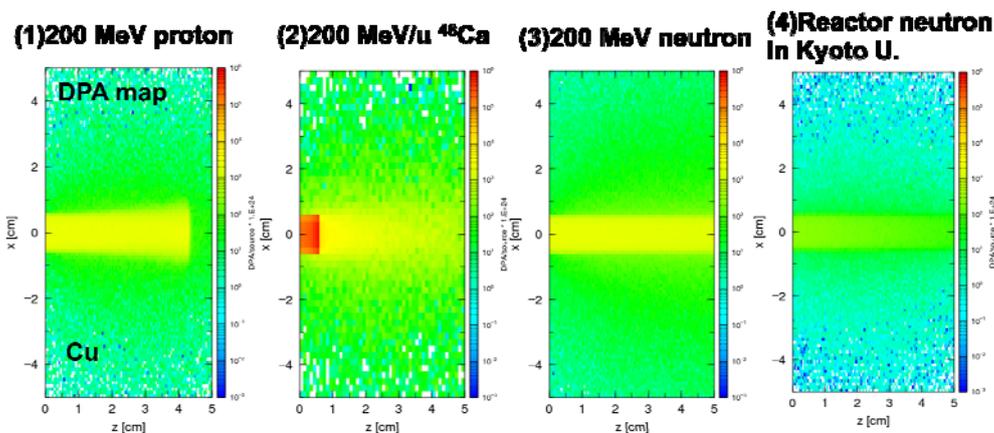


図5 200 MeV の陽子、 $^{48}\text{Ca}$ 、中性子及び京大炉の中性子を、5cm 厚さの銅へ照射した時の DPA 二次元分布

表1に、全 DPA 値に対する、核反応や弾性散乱により生じる荷電粒子の DPA 値との比を示す。14 MeV 陽子に関しては入射陽子の寄与が大きいが、200 MeV になると核反応から生成する荷電粒子の寄与が大きい。京大炉中性子照射の場合は、殆ど核的な弾性散乱によりはじき出されたターゲット原子核が、カスケード損傷の起点となる。中性子エネルギーが増えるにつれて、核反応で生成する荷電粒子の寄与が大きくなる事が分かる。

表1 銅ターゲットの全 DPA 値に対する、核反応や核的な弾性散乱により生じる荷電粒子の DPA 値との比

	ratio of partial DPA to total (%)						
	proton	$^{48}\text{Ca}$	Fe	Co	Ni	Cu	others
14 MeV proton	89	-	-	-	2	6	3
200 MeV proton	17	-	8	13	27	28	7
14MeV/nucleon $^{48}\text{Ca}$	-	99.8	-	-	-	-	0.2
200MeV/nucleon $^{48}\text{Ca}$	-	88	-	-	-	2	10
Reactor neutron in Kyoto U.	-	-	-	-	-	99	1
14 MeV neutron	-	-	-	1	31	68	-
200 MeV neutron	1	-	14	19	29	25	12

#### 4. まとめ

クーロン散乱を考慮した照射損傷モデルと、低エネルギー中性子に対するイベントジェネレーターや高エネルギー粒子対応核反応モデルとを組み合わせた、統合的な照射損傷モデルを開発した。そして、開発したモデルを用いて、あらゆる粒子・エネルギーに対する物質の DPA 値をイベント毎に導出することが可能になった。今後は、中高エネルギー (20 MeV~1 GeV) の実験によるはじき出し断面積がなく、精度が不明確なので、現

在関係者ととともに測定を考えている。

## 謝辞

照射損傷に関して丁寧に粘り強くご教授して頂いた JAEA 沢井友次氏、及び PHITS へのコーディングに際し多大なご協力を頂いた RIST 仁井田浩二氏に深く感謝の意を申し上げます。研究の内容について多くの議論をして頂いた京大炉の義家敏正教授、JAEA 深堀智生氏に深く感謝いたします。この研究は、米国ミシガン州立大学国立超伝導サイクロトロン研究所への留学時に、 $^{48}\text{Ca}$  ビーム照射により壊れたタングステン板の DPA 値を計算することから始まりました。当時大変お世話になりました Reginald Ronningen 氏に深く感謝いたします。最後に、この研究を支えてくださった ATOX 坂本幸夫氏、JAEA 遠藤章氏、高橋史明氏、須山賢也氏に深く感謝いたします。

## 参考文献

- [1] K. Niita, N. Matsuda, Y. Iwamoto *et al.*, “PHITS: Particle and Heavy Ion Transport code System, Version 2.23,” JAEA-Data/Code, 2010-022 (2010).
- [2] Y. Iwamoto, K. Niita, T. Sawai *et al.*, “Improvement of radiation damage calculation in PHITS and tests for copper and tungsten irradiated with protons and heavy-ions over a wide energy range,” Nucl. Instrum. and Meth. B 274 (2012) 57-64.
- [3] 石野栞：照射損傷（東京大学出版会, 1979）。
- [4] M.J. Caturla, T. Diaz de la Rubia, M. Victoria, *et al.*, “Multiscale modeling of radiation damage: applications to damage production by GeV proton irradiation of Cu and W, and pulsed irradiation effects in Cu and Fe,” J. Nucl. Mater. 296 (2001) 90–100.
- [5] G.A. Greene, C.L. Snead Jr., C.C. Finfrock *et al.*, “Direct measurements of displacement cross sections in copper and tungsten under irradiation by 1.1-GeV and 1.94-GeV protons at 4.7 K”, in Proceedings, Sixth International Meeting on Nuclear Applications of Accelerator Technology (AccApp’03), American Nuclear Society, Ja Grange Park, Illinois, 2004, p. 881.
- [6] P. Jung, “Atomic displacement functions of cubic metals,” J. Nucl. Mater. 117(1983) 70–77.
- [7] W. Lu, M.S. Wechsler, Y. Dai, “The NCSU radiation damage database; proton induced damage energy and application to radiation damage at SINQ,” J. Nucl. Mater. 356 (2006) 280–286.
- [8] J.F. Ziegler, in: J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark (Eds.), “The Stopping and Range of Ions in Solids,” Pergamon Press, New York, 1985.
- [9] Y. Iwamoto, K. Niita, T. Sawai *et al.*, “Displacement damage calculations in PHITS for copper irradiated with charged particles and neutrons,” Nucl. Instrum. and Meth. B, to be published, DOI:10.1016/j.nimb.2012.11.023.