



IAEA 協力研究計画 (CRP) 「Primary Radiation Damage Cross Sections (初期の放射線損傷断面積)」に関する第一回会合報告

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 Gr

岩元 洋介

iwamoto.yosuke@jaea.go.jp

1. はじめに

国際原子力機関 (IAEA) が主催する国際共同研究活動 (CRP) 「初期の放射線損傷断面積」の第 1 回会合が、2013 年 11 月 4 日から 8 日まで、ウィーンの IAEA 本部で開催された。原子炉施設、加速器施設等の構造材の放射線照射による損傷は、放射線損傷断面積と粒子フルエンスの積で求める DPA 値 (Displacements per atom: 標的原子 1 個あたりのはじき出し数) で評価される。このうち放射線損傷断面積は、1975 年に提唱されたのはじき出し数を近似的に導出する NRT モデルと一次はじき出し原子 (PKA) エネルギースペクトルに基づき算出される。しかし、NRT モデルには欠陥の再結合の効果等の最新の材料損傷研究の知見が取り入れられておらず、また PKA スペクトルも十分に検証されていない問題がある。そこで、これらの問題を解決するために、標記の CRP では、2013 年 11 月から 2017 年 12 月までの 4 年間で、PKA スペクトル、損傷エネルギー、材料中のガス (水素及びヘリウム) 生成断面積等々を評価し、これらのパラメータをデータベース化して最終報告書にまとめる予定である。

本会合では、各参加者より、自己紹介とこれまでの研究活動、提案する作業内容についての発表が行われた後、研究活動期間における具体的な作業計画と役割分担についての議論が行われた。参加者は、オブザーバーを含めて、米国 3 名、イギリス 2 名、ドイツ 2 名、フランス 2 名、フィンランド 1 名、ベルギー 1 名、スペイン 4 名、オランダ 1 名、ロシア 1 名、中国 2 名、IAEA 2 名、日本 1 名 (筆者) の計 22 名であった。CRP の構成について、核データ関連と材料損傷の各分野の研究者は、おおそ半数ずつとなっている。筆者は、粒子・重イオン輸送計算コード PHITS により、核データと核反応モデルを用いたのはじき出し損傷計算手法を開発しており、本 CRP への招聘があった。

なお、本 CRP の活動内容の詳細は以下のホームページで公開されているので、興味ある方はご参照いただきたい。<https://www-nds.iaea.org/CRPdpa/>

また、参考資料として会議のアジェンダを本報告の参考資料として付した。



参加者集合写真

2. 核データ関連の研究者の発表

ここでは、核データ関連の研究者による発表内容をいくつか紹介する。

筆者は、自身が開発に関わっている PHITS のイベントジェネレータを用いた放射線照射による材料の PKA スペクトルと DPA 値を導出する手法について説明した。イベントジェネレータは、20 MeV 以下の中性子照射による散乱や核反応のイベント毎に、粒子間のエネルギーと運動量が保存できるという特徴がある。そこで、既に広く普及している米国の核データ処理コード NJOY を用いる計算手法に対し、イベントジェネレータ等の異なる手法を用いた計算と相互比較を行うことの重要性を強調し、今後の CRP で実施することを提案した。また、筆者が本年度から実施する極低温における電気抵抗測定手法を用いた 100 MeV 以上の陽子ビームによる銅の放射線損傷断面積の測定計画について紹介した。この実験では照射材料中に形成される初期の欠陥数を導出できるため、ヘルシンキ大学の Nordlund 氏をはじめとする材料損傷の研究者から、照射材料中に形成される初期の欠陥数を模擬する分子動力学 (MD) モデル検証に極めて価値があるというコメントがあった。当初、CRP の活動計画に対して、本測定について提案していなかったが、参加者らの強い要望により、計画に急遽追加された。

他の参加者の発表として、米国ロスアラモス国立研究所の Kahler 氏からは最新版の

NJOY2012、パシフィック・ノースウェスト国立研究所の Greenwood 氏から放射線損傷計算コード SPECTER についてはじき出し計算手法に関する紹介がそれぞれあった。カールスルーエ工科大学の Konobeyev 氏からは、NJOY2012 及び米国の粒子輸送計算コード MCNPX の核内カスケードモデルを用いて計算された放射線損傷断面積について紹介があり、出張者と同様に様々な計算手法や核データライブラリによる相互比較の提案があった。マドリッド大学の Cabellos 氏からは、中性子照射に対する加速器構造材の放射線損傷断面積について、欧州の核データライブラリ JEFF-3.1.1 及び TENDL2012 を用いて導出した結果が示された。この評価では、20 MeV 以下及び 20 MeV 以上の中性子照射に対し、それぞれ JEFF-3.1.1 及び TENDL2012 を使用しているが、断面積が 20 MeV で不連続になるため、CRP の活動でこの不連続を解消すること等の提案があった。イギリス原子力機関の Sublet 氏から、放射化量を計算するコード EASY-II の紹介があり、会合後に PHITS による計算値との相互比較に関する打診があった。IPPE（オブニンスク）の Bondarenko 氏からは、クロムへの 5~7 MeV の中性子入射によるヘリウム生成断面積測定計画の報告があり、JENDL-4.0 による ^{50}Cr への 5~16 MeV 中性子入射によるヘリウム生成の断面積が他のライブラリによる評価値や実験値に比べて 1 桁程高いことが指摘された。会合後に JAEA 核データ評価研究グループの岩本信之氏に調査いただいた結果、ヘリウム生成の断面積ではなく、陽子生成の断面積が間違っってプロットされていることがわかったため、CRP の関係者へその旨を周知した。

3. 活動計画の議論

本 CRP における研究の範囲は、①PKA のエネルギースペクトルと損傷エネルギーの導出と、②これらの結果に基づいた材料損傷応答関数の開発の 2 つに大きく分かれる。以下、基本的な内容の解説を含めて、今後の活動計画について説明する。

① PKA のエネルギースペクトルと損傷エネルギーの導出

最初に、放射線損傷の評価に用いる基本的なパラメータは、「PKA エネルギースペクトル」と「損傷エネルギー」の 2 つであると合意がなされ、代表的な施設の構造材として選択される材料に関して、これら基礎パラメータのデータベースを作成することとなった。

「PKA エネルギースペクトル」と「損傷エネルギー」のライブラリを作成するための核データ処理コードとして NJOY2012 が推奨された。ただし、PHITS や SPECTER 等におけるはじき出し断面積計算手法など、他の核データ処理コードとの比較・検討が必要であるというコメントがあった。

NJOY2012 を用いた計算に使用する断面積として、20 MeV 以下の低エネルギー領域は ENDF/B-VII.1、20~150 MeV の高エネルギー領域は、あらゆる核反応を考慮した最新版の TENDL 断面積が推奨された。加えて、JENDL 等の他のデータライブラリを用いた計

算との、相互比較・検証を実施し、PKA エネルギースペクトル導出過程を検討することとなった。

対象とするエネルギー範囲は、核分裂炉施設、核融合炉材料試験施設 IFMIF、粒子加速器施設等の構造材の損傷評価を想定して、熱エネルギーから 3 GeV となった。「PKA スペクトル」を導出するために、150 MeV 以下に関しては、前述したとおり、NJOY2012 と核データライブラリ ENDF/B-VII.1、TENDL を使用し、150 MeV 以上は核内カスケードモデルが含まれる PHITS 等を使用することとなった。

また、PKA の中でも材料中で生成するガス（水素とヘリウム）は、スエリング等を起こし、上述したはじき出し損傷メカニズムとは異なる放射線損傷過程を起こす。そのため、水素とヘリウムの生成断面積の評価も重要で、これらの断面積と誤差に関するデータベース作成、ガス生成断面積の測定も本 CRP 活動に含まれた。

「損傷エネルギー」は、最も基本的な放射線損傷量で、LSS 理論に基づいて導出される。LSS 理論では、エネルギーを持った PKA が、同種原子からなる固体中の標的原子と衝突を繰り返しながら停止する間に、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。ただし、既存の LSS 理論は同種原子同士の散乱への適用に限定されるので、合金や核反応生成物による異種原子などに対応させるなど改良が必要であり、この CRP 活動で検討が行われることとなった。

活動リストと役割分担（下線は筆者、核データ関連の活動のみ）

- PKA エネルギースペクトルと損傷エネルギーの正しい導出方法に関する検討と、異なる核データライブラリや処理方法による違いの調査。
[O. Cabellos, Y. Iwamoto, A. Konobeyev, S. Simakov, J.-C. Sublet, A. Kahler, J. Kwon, M. R. Gilbert, P. Griffin]
- 損傷エネルギーに対する PKA スペクトル、はじき出し閾エネルギー等の誤差の伝搬
[O. Cabellos, A. Konobeyev, A. Koning, P. Griffin]
- 必要に応じて NJOY の修正 [A.C. Kahler]
- 異なる放射線環境下（1/4 T RPV, HFIR, PTP, ITER first wall, DEMO, PHENIX, SNS, IFMIF）における Fe, Zr, SiC の PKA エネルギー分布作成
[Y. Iwamoto, F. Mota, J.-C. Sublet, M.R. Gilbert]
- 評価済み核データと核反応モデルによるガス生成断面積の相互比較と推奨
[J.C. Sublet, A. Konobeyev, S. Simakov, O. Cabellos, A. Koning, Y. Iwamoto]

- ガス生成の誤差の評価 [O. Cabellos, A. Koning]
- 中性子エネルギー5～7 MeV における Cr と Fe のガス生成実験 [I. Bondarenko, IPPE]

② 材料損傷応答関数の開発

これまでに使用されてきたはじき出し数を近似的に導出する NRT モデルは、原子炉施設における照射損傷を対象として開発されたため、核融合炉施設や加速器施設等の高エネルギー領域を対象とした照射損傷においては必ずしも正しく評価できない。また、欠陥の再結合の効果等の最新の材料損傷研究の知見が取り入れられていない。そこで、NRT モデルの高エネルギーへの適応のための改良と、欠陥の熱運動による再結合等の「損傷応答関数」の NRT モデルへの組み込みが必要となる。「損傷応答関数」は、分子動力学に基づいたはじき出しカスケードシミュレーションコード MD による計算結果と、既存の実験データに加えて、筆者が提案した 100 MeV 以上の陽子ビームを用いた中高エネルギーの新しい極低温における欠陥生成実験等を用いて評価することとなった。

活動リストと役割分担

- MD コードに基づいた材料損傷応答関数の評価
[R. E. Stoller, K. Nordlund, L. R. Greenwood, J. P. Crocombette]
- 京大炉・FFAG 加速器施設における極低温欠陥生成実験 [Y. Iwamoto]

他の材料損傷に関する活動については、筆者の専門外であるので省略させていただきたい。興味ある方は、議事録:INDC(NDS)-0648 を参照していただきたい。

[https://www-nds.iaea.org/CRPdpa/INDC\(NDS\)-0648.pdf](https://www-nds.iaea.org/CRPdpa/INDC(NDS)-0648.pdf)

4. おわりに（個人的感想含む）

CRP の会合は全 4 回開催される予定で、次回は約 1 年後に開催されることとなった。筆者は今後 1 年間で、PHITS や NJOY2012 による計算と、京大炉 FFAG 施設における 100 MeV 程度の陽子照射によるはじき出し断面積測定を行う予定である。良い解析結果と実験データを出して、本 CRP に貢献できるように努める。

最後に、会合出席の機会を与えていただいた JAEA の深堀智生氏、及び会合の参加手続き及び現地の全般的な事項にて大変お世話になった IAEA 核データセクションの大塚直彦氏に深く御礼申し上げます。



1st Research Coordination Meeting (RCM-1) of CRP
“Primary Radiation Damage Cross Sections”

4 - 8 November 2013
IAEA Headquarters, Vienna, Austria

Meeting Room A 0742_

AGENDA

(presentations's time is approximate and includes questions and breaks)

Monday, 4 November

09:30 - 10:15 Opening

Welcome address – **Meera Venkatesh** (NAPC, Director)

Self-introduction of Participants - **All**

Election of Chairperson and Rapporteur - **All**

Approval of Agenda - **All**

Administrative announcements – **Alexander Oechs** (NDS)

10:15 - 10:30 Stanislav Simakov, NDS - Objectives of CRP and its 1st RCM

10:30 - 11:00 Dieter Leichtle, F4 - Nuclear data for fusion applications: dpa beyond NRT?

Session 1: Presentations of Research Proposals

11:00 - 12:00 Kai Nordlund, Uni Helsinki - Summary of the final report of the OECD primary damage group

12:00 - 14:00 *Lunch break + Administrative issues*

14:00 - 15:00 Larry Greenwood, PNNL - The SPECTER computer code, describing the history, uses and limitations of the software

15:00 - 16:00 Alexander Konobeyev, KIT - Evaluation of displacement and gas production cross-sections for structure materials using advanced simulation methods and experimental data

16:00 - 17:00 Yosuke Iwamoto, JAEA - Calculation of PKA and DPA using event generator mode in PHITS code

Coffee breaks as needed

Tuesday, 05 November

9:00 - 10:00 Liu Ping, CIAE - The calculation method of KERMA and DPA in CNDC

10:00 - 11:00 Patrick Griffin, SNL - Uncertainty Analysis of Metrics Used for Assessing Primary Radiation Damage

11:00 - 12:00 David Simeone, CEA - The interest of dpa to handle the microstructure of irradiated materials

- 12:00 - 13:00 **Oscar Cabellos, UPM** - Processing of a damage energy cross-section library based on JEFF3.1.1 and the potential impact of nuclear data uncertainties on damage energy and gas production cross-sections
- 13:00 - 14:00 *Lunch break*
- 14:00 - 15:00 **Skip Kahler, LANL** - Using NJOY to Calculate ‘Damage’ with Modern Evaluated Nuclear Data Files
- 15:00 - 16:00 **Jean-Christophe Sublet, CCFE** - Radiation damage: beyond dpa - from nuclear data to?
- 16:00 - 17:00 **Mark Gilbert, CCFE** - Radiation damage: beyond dpa - visualisation techniques
- 17:00 - 18:00 **Roger Stoller, ORNL** - Details of cascade damage production relevant to damage accumulation

Coffee breaks as needed

Wednesday, 06 November

- 9:00 - 10:00 **Chung Woo, Uni Hong Kong** - Correlated Point-Defect Production from Cascades
- 10:00 - 11:00 **Dmitry Terentyev, SCK-CEN** - Development of potentials to study primary damage effects in Fe-Ni-Cu-Mn system
- 11:00 - 12:00 **Fernando Mota, CIEMAT** - Beyond NRT concept: using BCA codes to design irradiation experiments to emulate neutron fusion effects in materials
- 12:00 - 13:00 **Ivan Bondarenko, IPPE** - The improvement of the (n, α) reaction investigation method and first preliminary results
- 13:00 - 14:00 *Lunch break*
- 14:00 - 17:00 **Session 2: Discussion of expected outputs, individual contributions and their coordination**

Coffee breaks as needed

- 19:00 - **Hospitality event in Restaurant “Gösser Bierklinik”**
<http://www.goesser-bierklinik.at/>

Thursday, 07 November

- 09:00 - 12:30 **Session 2: Discussion of expected outputs, individual contributions and their coordination**
- 12:30 - 14:00 *Lunch break*
- 14:00 - 18:00 **Session 2: Drafting of the Summary Report of the Meeting**

Coffee breaks as needed

Friday, 08 November

- 09:00 - 12:30 **Session 2: Review of the Meeting Summary Report**
- ≈ 15:00 **Closing of the Meeting**