会議のトピックス(V)

IAEA「熱中性子散乱データの EXFOR への採録」に関する専門家会合

名古屋大学工学研究科
鬼柳　善明
kiyanagi@phi.phys.nagoya-u.ac.jp

1.　はじめに

IAEA の EXFOR は有名な核データライブラリーであり、利用された人も多いことと思う。今回は、この中の熱中性子断面積関係の資料を充実させようと言うことで、IAEA の核データセクションがデータ採録について議論するための会合を開催した。IAEA には、北大理学部の加藤研出身の大塚直彦氏がいて、IAEA 側の主要なメンバーとして会議で発表をされていた。この原稿作成も助けて頂き、頼もしい限りでした。

熱中性子断面積については、ENDF などでも、原子力の分野で重要な水、ポリエチレンなど、あるいは研究炉や加速器中性子源で重要な液体水素や固体メタンなど極一部の物質についてデータがあるだけで、あまり整備されてこなかった。そのため、殆どの核データが熱中性子以下のエネルギー領域では、全断面積がエネルギーの低下とともに増加するようになっている。これは運動が自由ガスで扱われているためである。最近は小型中性子源などで熱中性子源や冷中性子源を設計することが増えているが、周りの構造材などの熱中性子断面積が整備されていないと結果が違ってしまうことになる。最近は、ボロン中性子捕捉療法などで水ファントムを計算に使用するが、その場合の水断面積も古いままのデータとなっている。さらには、体内の水と普通の水は運動状態が違う訳で、体内の水を模擬するという意味では厳密には異なった断面積が必要となる。このように熱（冷）中性子断面積にたいする需要は多くなってきており、整備を進めようという動きが出てきている。

このような状況のもと、IAEA 核データセクション（NDS）が世界 12 のデータセンターとともに整備している EXFOR に熱中性子散乱データをより積極的に取り入れてはどうか、という勧告が 2014 年の国際核データ委員会（INDC）会合においてなされた。EXFOR の規約には、自由原子と束縛原子、コヒーレントとインコヒーレント、というようなこの分野特有の概念に関する記述があり、標的物質の化学形状や温度に強く依存する 2200 m/s

あるいはこれ以下のエネルギー領域での断面積や散乱長などの測定データが EXFOR に収録されてきた。しかし多くの測定は数十年前に行われたものであり、現在 EXFOR の整備に関わる人たちにとって、これらの物理量や上に挙げた分野特有の概念は極めて馴染みが薄い。また、上述の INDC での勧告に「熱中性子散乱データ」とあるが、物理量としては現在 EXFOR に格納可能な範囲のものだけを考えて文献調査・遡及採録を行えば良いのか、あるいは格納可能な物理量を例えばフォノンスペクトルのようなものにまで拡張すべきなのか、などの問題が浮かび上がってきた。

そこで、NDS では表記の専門家会合（Consaltants' Meeting on the EXFOR Compilation of Thermal Neutron Scattering Data）を 2015 年 11 月 2 日～4 日に IAEA 本部にて開催した。私の他には D.V. Baxter（Indiana Univ,米）、F. Cantargi（CNEA/CAB,アルゼンチン）、E. Farhi（ILL,仏）、E. Liu（RPI,米）、J.I. Marquez Damian（CNEA/CAB,アルゼンチン）が専門家として出席し、また IAEA から V. Semkova、S. Simakov、大塚直彦氏が出席した。本記事ではこの会合の概要を報告する。なお、会合の詳細については議事録（INDC(NDS)-0697）が出版される予定である。

集まったメンバーは、熱中性子断面積測定の経験があり、熱中性子断面積そのものの成り立ちについても良く知っている人達で、熱中性子断面積の基礎から具体的な測定まで色々な議論が飛び出す、結構楽しい会議でした。会議の様子を示す写真を示します。皆さん、一生懸命 PC ワークをしています。

2.　IAEA からの問題提起

IAEA の大塚氏から、まず EXFOR の採録作業の一般的な流れ、現在 EXFOR で定義されている熱中性子散乱関連の物理量（辞書）、EXFOR 採録マニュアル（LEXFOR IAEA-NDS-208）の熱中性子散乱断面積の章の現在の記述（関連物理量の定義、採録規約）を紹介した。そして、熱中性子散乱と関わる機会が殆どない EXFOR 採録者にとって、現在の LEXFOR の記述は満足のいくものではなく、会議参加者の助言を得てこの章の全面改訂を会期中に行いたい、との意図を述べた。

次いで EXFOR において、現在どの程度の数の熱中性子散乱関連のデータセットが収録されているかを紹介した。それらは主には断面積（約 800）や散乱長（約 290）であり、S(Q,ω)あるいは S(α,β)の評価に重要な微分断面積については両手で数えられるほどのデータセットしか収録されていないことを紹介した。2005 年に Stuttgart 大学の M. Mattes と J. Keinert が公開した評価報告書（INDC(NDS)-0470, INDC(NDS)-0475）では EXFOR に収録されていない実験微分断面積データが数多く引用されており、EXFOR は現状では評価者が必要としている微分断面積の実験を網羅していないのではないか、という問題提起がなされた。

これに続いて、既に EXFOR に数多く収録されている熱中性子散乱に関する物理量について、以下二つの疑問を提示し、専門家の意見を求めた：(1) 散乱振幅（scattering amplitude）と散乱長（scattering length）の分野における標準的な使い分け、(2) 散乱長 b と関連付けられて報告される断面積 $4\pi b^2$ の入射エネルギー依存断面積との関係。

3. 参加者からのレポート

それぞれの観点から関連する報告が行われた。詳細は INDC(NDS)-0697 参照。

(1) D.V. Baxter 氏

LENS（Low Energy Neutron Source）はインデアナ大学にある加速器中性子源であり、Baxter 氏はそこで指導的立場にある。この施設はアメリカの核破砕中性子源 SNS の中性子源開発を目的に建設されたものである。日本の北大中性子源と J-PARC 中性子源のような関係を狙っており、中性子減速材開発、減速材物質の全断面積測定に加え、中性子小角散乱、反射率、イメージングなどの実験が行われている。

彼の報告の中でも、原子力技術が小型中性子源のデザイン、中性子や陽子の治療プランの開発などに展開されるようになって、十分な中性子断面積データが要求されることが述べられている。そのために基本的散乱データ取得が必要であるが、大型施設におけるこのような実験に対するレビューワーの評価が低いことを訴えている。この分野における小型中性子源の重要性も述べられている。

LENS では、エネルギー範囲が 0.1meV 以下から 1eV まで、温度が 10～70℃までの透過実験が可能であり、重要なデータの一つである全断面積を求めることができる。さらに、ベンチマークに用いることができる積分データとして重要な減速材スペクトル測定も可能である。ここでは、陽子ビーム照射後比較的短い時間でターゲット部にアクセスできるのが特徴である。新しい減速材体系としてシリコン単結晶を組み入れたものの測定を行って、その効果を調べている。このようなデータを MCNP や GEANT-4 コードに組入れる試みを進めている

(2) Li（Emily）Liu 氏

Rensselaer Polytechnic Institute は核データの分野では有名な施設の一つであるが、彼女

はRPIではなくOak Ridge National Laboratoryの大型加速器中性子源SNSを用いて、水、ポリエチレン、クオーツなどの中性子非弾性散乱実験を行っている。使用している装置はFine-Resolution Fermi Chopper Spectrometer（SEQUOIA）と Wide Angular-Range Chopper Spectrometer（ARCS）のチョッパー分光器である。2重微分散乱断面積を得るために、いろいろな入射エネルギーと温度に対して測定が行われた。それらのデータを解析し、角度と最終エネルギー依存の 2 重微分断面積を導出し、理論およびシミュレーションと比較検討を行っている。さらに S(Q,ω)、一般化状態密度から S(α,β)を導き出すことを進めている。実験から求めたフォノンスペクトルを使って計算した全断面積が実験結果と良く合うことを示していた。また、これを用いることによって MCNP-6 と実験との一致が良くなった。これまでも、水とかポリエチレンについてのデータはあるが、新しい測定によって最も正確なデータを提供することを目指している。

(3)　F. Cantargi 氏

アルゼンチンのバリローチェという小さな町に原子力研究所があり、そこに電子線型加速器が1970年に設置されている。25MeVと電子エネルギーは少し低いが北大電子加速器よりも 3 年前に研究を始めたことになる。残念ながら今は故障のために稼働しておらず、原子炉の建設計画RA-10に併せて整備する計画を持っている。

この施設では、Granada氏を中心に長い間、熱（冷）中性子全断面積の測定とそれを計算するための散乱モデルについて研究している。散乱理論と中性子源がGranada氏、原子炉アプリケーションの材料のための散乱カーネル開発とベンチマークをDamian氏、原子炉応用（例えば冷減速材または中性子フィルタ）などと直接関係しない物質の散乱断面積の開発にCantargi氏が働いている。

熱中性子散乱カーネルを作るため、初めに、全断面積を計算するための散乱カーネルを作成し、それを実験結果と比較する。次いで、減速材のスペクトルデータなどの積分データなどと比較する。彼ら自身の実験データが得られなければ、EXFORや文献からのデータを用いて比較している。全断面積は一つの重要な比較すべき実験値であり、低強度パルス中性子源は、アイデアをテストしたり、方法をチェックしたりするのに向いており、全断面積測定は一つの有用な応用法であると述べている。

研究例としては、冷中性子減速材として重要なメジチレンがあり、実際に使用を考えていた Dubna のグループとの共同研究である。実験と計算が行われている。次は、中性子フィルタとして用いられる単結晶サファイヤで、結晶の主軸にそってビームを入射している。この実験は、全断面積データをEXFORに格納するときに、入射ビーム方向を入力すべきかどうかという問題を提起することになった。

(4)　J.I.M. Damian 氏

熱中性子ライブラリーの評価に必要とされる実験データについて発表された。EXFOR に採録するために考慮すべき実験データの役割について以下のように述べている。まず、

断面積評価は次のように行われる。

i) 従来の方法によるもの。そこでは、入力パラメータを選ぶことによって、実験や理論的方法で得られたモデルのセットが提供される。

ii) 計算化学法（分子動力学や密度関数理論）を用いて、これらのパラメータを計算するもの。

iii) 計算化学法から得られる結果からの直接的計算によるもの。

これらの三つの方法は動的構造因子 S(Q,ω)の計算へ結びつき、これから以下のものが計算される。

- 二重微分断面積
- 角度微分断面積 - 全散乱断面積
- 中性子拡散パラメータ

このような観点から、実験データとして次のようなものが欲しい。

a) 入力パラメータ

b) 導出された中性子散乱量

c) 実験ベンチマーク結果.

EXFOR では主として b)のデータを、実験に関係するなら a)のデータも入れるべきであると述べている。

(5) 鬼柳

日本における熱中性子断面積評価の例と応用分野、可能な測定について述べた。

日本では熱中性子断面積に関しては安部氏が理論解析で大きな成果を上げているので、今回の発表でも、安部先生が評価した水の全断面積データ評価について説明した。この内容は核データニュース No.108 に詳しく紹介されている。分子動力学や独自に開発した量子補正（GAAQC）などの手法を用いることにより、水分子の拡散運動を実際に近い跳躍拡散的な運動とすることによって、低エネルギー領域で実験値との一致の度合いを向上させている。

また、応用分野として、加速器中性子源やボロン中性子捕捉療法用の中性子源などのシミュレーションで熱中性子断面積が必要となる。さらには散乱実験においても、実験シミュレーションなどで結晶の散乱断面積が必要となる。我々が最近開発したパルス中性子イメージングでは、水や氷の断面積、結晶物質の熱中性子断面積が要求される。このように、シミュレーション計算が色々な局面で使われるようになり、熱中性子断面積の重要性が高まっていることを述べた。

日本では小型中性子源があり、このような施設は全断面積測定に向いており、一方、大型施設では非弾性散乱実験が可能である。このような実験の評価者のプライオリティが高くないので、実験を実施していく上では、国際的サポートが望まれる。

(6)　E. Farhi 氏

熱中性子散乱断面積を求める方法について詳しく説明された。主要な方法では全断面積測定、飛行時間法散乱実験、分子動力学、基準振動のダイナミクスマトリクスの評価が含まれる。それから、それらの方法は、S(Q,ω)散乱則を求めるために、例えば NJOY/LEAPR の入力として状態密度を評価するのに用いられる、あるいは直接 S(Q,ω)の動的構造因子を求めるのに使われる。これまで使われてきた伝統的な方法は、一般化状態密度を求め、ついで S(α,β)を評価するために LEAPR のモデルの一つを用いるというものである。しかし、EXFOR に収納されているこのようなデータセットの数は少なく、Be, BeO, D_2O ZrH_x, graphite, l-D_2, l-H_2 などである。多くのモデルはガウス近似を用いており、構造的な、また、正しいフォノン分散を考慮していない。

最近の高中性子束飛行時間分光器は S(Q,ω)を直接観測することができる。しかし、実験的制約から規格化や測定エネルギー範囲などが十分でない場合がある。それを補うものとして、分子ダイナミクスシミュレーションがある。実験結果、評価モデル、分子ダイナミクスシミュレーションが散乱測を計算する上で、エネルギーレンジをお互いに相補的にカバーするために用いられる。

4.　議論と提言

EXFOR のマニュアルにある熱中性子関連の記述に関連して、熱中性子断面積の基本的考え方についても色々な議論が行われた。散乱振幅、散乱長の違い、低エネルギーで自由原子断面積は一定になると書いてあるのに、水素の断面積はエネルギーが低くなると、再び大きくなっていくのは何故か、など根本的なところの議論が行われた。昔、色々勉強したことを懐かしく思い出しながら、楽しく議論に参加できた。このような議論を通じてマニュアルの改訂が行われた。また、実際に EXFOR に実験データを入れるとした場合、どんな情報を入れるべきか、それも原子炉と加速器中性子源データではどのようにするかなど、非弾性散乱測定や全断面積測定などの実験のことを知らないと分からない話題も出ていた。特別な議論として、核データ関係の測定は、大型施設では申請してもレビューワーに高い評価をしてもらえないという話もでた。さらに、論文として投稿したときも、受け付けてもらい難いことがあるので、それを改善するにはどうしたら良いかという話題も出ていた。以下、提言の抜粋である。

原子炉や原子力システムを設計する上で、既存の熱中性子散乱データが不十分であることは良く知られている。さらに、現在収蔵されているデータも 1970 年代から 80 年代のものである。現在の中性子散乱装置は、熱中性子散乱断面積の構築に必要な広い Q,ω レンジのデータを提供することができるが、このような実験はレビュウーワーの優先度が低いのが問題である。いずれにしろ、中性子輸送計算の応用範囲が広がっており、EXFOR に熱中性子散乱データの整備を進めることの重要性を認め、以下の提言をまとめた。

1) 二重微分断面積、微分断面積、全断面積実験データは、実験および測定装置の詳細とともに EXFOR に採録されるべきである。
2) EXFOR に採録されるのに何が必要かのガイドラインを作るべきである。そこでは、必要とされる、また、推奨される実験の詳細を含んだ補助データを明記する。それらはデータ処理過程を理解するために必要なものである。これは、EXFOR のテンプレートとして与えられるべきである。
3) S(Q,ω)や S(α,β)は導出過程の詳細とともに新しい専用の EXFOR セクションに入れられるであろう。
4) フォノンスペクトラム、構造パラメータやその他の情報は別の場所に収蔵し、導出されたデータとして評価者がアクセスできるようにすべきである。
5) 核データセクションが既存の熱散乱データ評価を再調査すること、さらに熱散乱データの改善や応用性を高める活動を調整あるいはサポートすることを提案する。
6) NRDC コーディネーターはジャーナルの編集者に核データに関する質が高い研究に対しては、すでに測定された物質にたいする新しい測定であっても、受け付けることを奨励すべきである。
7) 核データセクションは既存の実験データを EXFOR に採録するプロジェクトを始めることを考えるべきである。
8) 最近の評価法の流れは実験データに新しい要求を課しており、EXFOR がそのような実験データを組み入れることを提案する。また、このような測定のためのプロジェクトを始めることを提案する。特に、小型加速器を用いた全断面積データの測定は特に強調されるべきである。

5. 感想

熱中性子断面積については、以前から不満足に思っていたので、今回の IAEA の動きは、本当に良かったと思う。これでより正確な、より多くのデータが揃えられることを願っている。日本の熱（冷）中性子断面積については、故井上和彦先生が計算をしており、筆者も固体メタン、固体水素などのモデルの作成をしていた。その後、京大の森島先生が分子動力学を用いて水の断面積を詳細に評価した。それを継承して、安部先生が水や重水の断面積を評価しており、日本でも熱中性子断面積評価の芽は続いている。全断面積測定は北大で行われていたが、評価に必要な非弾性散乱断面積測定は日本では殆ど行われていない。最近、極冷中性子用の反射体として注目されているナノダイアモンドの全断面積測定や非弾性散乱測定が J-PARC で行われ始め、新しい動きがでてきた。海外では GEANT4 に結晶性物質の熱中性子断面積を格納しようとしている。日本もそのような動きに遅れをとらないように願っている。