

シグマ委員会だより(そのI)

核データ専門部会熱中性子散乱則WG報告

熱中性子散乱則WG*

1. まえがき

JENDL-3 の構想が着々と具体化する過程において、昨年はじめ頃から熱中性子散乱データも収納し、JENDL-3 をより完備なものにしようという気運が高まってきた中で、昔のシグマ委員会熱化グループのOBの面々が現役で活動している間に作業をしておかないとチャンスが失われてしまうということから、昔取った杵柄を役立てようと昨年4月にWGの初会合がひらかれた。

熱中性子散乱データを収納しているデータファイルとしては、ENDF/BとJEF-1 がある。ENDF/Bについては、熱中性子散乱データはENDF/A以来全く改訂されていないので、特に散乱則の計算モデルを再検討してみる必要があった。一方、比較的新しいJEF-1 については、収納減速材物質の種類が少なく、このままでは我が国のユーザーの要求に応えるのには不十分であることが分かった。そのため、JENDL-3 には出来るかぎり多数の物質を収納することになり、収納すべき物質の選定と採用すべき計算モデルの検討が行われた。結果的には、ENDF/Bで採用された計算モデルを変更すべき理由はほとんど無く、ENDF/Bに収納されている物質については同じモデルによる再計算を行った。

ENDF/Bに収納されているものと同じの物質についての作業はほぼ61年度中に完了したが、ENDF/B収納物質以外のものについては、種々の問題点があるため、作業は62年度に持越されている。

2. 作業完了減速材物質

61年度中にFile-7形式の熱中性子散乱則 $S(\alpha, \beta)$ データを揃える作業がほぼ完了している減速材物質はTable 1 にまとめて示してある。Table 1 のモデル欄に記載してある結晶の格子振動や分子の振動に対するモデルに基づくフォノン・スペクトルを入力データとして、GASKET/Jコードを用いて $S(\alpha, \beta)$ の計算を行った。GASKET/J出力はENDF/A形式になっているので、更にENDF/B形式への変換作業を行った。

H₂O のような分子やBeO のような化合物の場合、ENDF/Bでは分子や化合物に対するデータとして与えられているが、他の種類の核データは全て核種に対してのものであり、熱中性子散乱データのみの形式が異なっていると利用上不便なので、JENDL-3 では核種毎にデータを用意することにした。

なお、温度分点はENDF/Bと同じにしてある。

3. 本62年度中の作業予定

原子炉関連物質についてはTable 1 に示されているように、既に作業はほぼ完了しているが、冷中性子源用減速材物質や中性子実験で使用される特殊な有機物に対する要望もあるので、できればそれらのデータもこの際揃えておいた方が良いということで、検討が行われた。

(1) 冷中性子及び中性子実験用物質

* メンバー：飯島俊吾 (NAIG)、角谷浩亨 (CRC)、関谷 全 (阪大)、土橋敏一郎、後藤頼男、中原康明 (原研)

$S(\alpha, \beta)$ の計算等の実作業はCRCの奉仕的作業として角谷委員が担当した。

固体メタン (CH_4) : 格子振動モデル及びフォノン・スペクトルについては、Wasiutynski のものがあるので、これを用いて計算する。

液体水素 (H_2) : Young-Koppel のモデルに基づいたコードが原研にあるので、これを用いて計算できる。

液体重水素 (D_2) : 固有のモデルは未だ提案されていないので、液体水素に対するモデルのパラメータの値を変えれば計算できるのかどうかについての検討が必要である。

テフロン(Teflon)、ポリスチレン(Polystyrene) : 公表されているフォノン・スペクトル・データがないので、新たにこれを理論的に算出することも含めて、検討中である。

(2) 核燃料サイクル関連物質

フッ化ウラン (UF_6)、TBP (Triethylphosphate) 及びドデカン (Dodecan) が候補物質としてリストされているが、これらの物質については発表されている格子振動及び分子振動のモデルが無く、従ってフォノン・スペクトルや分子振動スペクトルも不明である。これらの物質については、調査検討を継続するが、JENDL-3 に収納できるかどうかは確かではない。

4. ファイル作成上の問題点

JENDL-3 用データファイルとして最終的なまともを行う前にクリアしておく必要のある問題点がいくつかある。

(1) 干渉性弾性散乱角度分布データ $\sigma_{el}(E, \theta)$

このデータは、ENDF/B (File 4, MT=2) には収納されているが、JENDL には収納されないので、どうすべきか。

(2) 干渉性弾性散乱断面積 $\sigma_{el}(E)$

このデータは物質の構造やスピン配列に依存した特別な中性子エネルギー依存性を持っていて、E-一点内挿は良くないので、データセットとして与えておくのではなく、別コード (HEXCAT 及び UNCLE-TOM) を用いて即座に計算できるように、Debye-Waller 積分等入力データとして必要なパラメータ値を MF=1, MT=451 に収納しておいてはどうか。

(3) $S(\alpha, \beta)$ の温度内挿精度

散乱則の温度内挿法としては FLANGE-II で用いられているものと中原の公式が知られているが、いずれも精度上問題があることが土橋氏などにより指摘されている。温度内挿はむしろ散乱核データを用いて行った方が良いとも言われているので、問題点に関する Comments や Recommendation を付けておく。

(4) 散乱則 $S(\alpha, \beta)$ から散乱核 $\sigma_{\ell}(E_0, E)$ への変換精度の問題

熱中性子散乱データをユーザーが利用する時には、ユーザーが $S(\alpha, \beta)$ を $\sigma_{\ell}(E_0, E)$ に変換することになる。その際、注意しなければならないことは、物質によってはこの変換精度が非常に悪い場合があることである。このことについても Comments や Recommendation を付けておくことにする。

5. 積分テストについて

散乱則データの積分テストの実施については、その必要性の議論は行われたが、具体的な実施スケジュールは未だ決まっていないので、今後の検討が必要である。 (文責：中原)

Table 1 JENDL-3 への収納準備作業の完了した熱中性子散乱 $S(\alpha, \beta)$ データ

| 核種(減速材) | 温度範囲(分点数) | モデル(結晶及び分子振動、フォノン・スペクトル) (共通データ・ファイル) |
|------------------------|--------------|--|
| H (H ₂ O) | 296-1000K(8) | Haywood モデル (ENDF/B, JEF-1) |
| O (H ₂ O) | 同上 | 自由ガス・モデル (同上) |
| D (D ₂ O) | 296-1000K(8) | Haywood モデル、Incoherent近似 (ENDF/B, JEF-1) |
| O (D ₂ O) | 同上 | 自由ガス・モデル (同上) |
| Be | 296-1200K(8) | Schmunk モデル、Incoherent近似 (ENDF/B) |
| Be(BeO) | 296-1200K(8) | Borgonovi モデル、Incoherent近似 (ENDF/B) |
| O(BeO) | 同上 | 同上 |
| C (Graphite) | 296-2000K(8) | 吉森・北野モデル、Young-Koppelフォノン・スペクトル Incoherent近似 (ENDF/B) |
| H (Poly-ethylene) | 296-350 K(2) | Koenigモデル、Sprevak-Koppelフォノン・スペクトル (JEF-1) |
| H (Benzene) | 296-1000K(8) | Sprevak, Borgonovi, et al's モデル (ENDF/B) |
| C (Benzene) | 同上 | 同上 |
| H (ZrH ₂) | 296-1200K(8) | Slaggie モデル、Incoherent近似 (ENDF/B) |
| Zr (ZrH ₂) | 同上 | 同上 |
| O (UO ₂) | 296-1200K(8) | Dolling, Cowley&Woodsモデル、Incoherent近似 (ENDF/B) |
| U (UO ₂) | 同上 | 同上 |
| C (UC) | 296-1200K(8) | Slaggie モデル、Incoherent近似 (ENDF/B) |
| U (UC) | 同上 | 同上 |

(1) この表の減速材は全てENDF/Bに収納されている。

(2) JEF-1に収納されているのは、H₂O, D₂O, Graphite, Polyethyleneのみである。

(3) モデル欄で()内のファイル名は、同じモデルが採用されているもの。