

核反応の Kinematics と反跳原子スペクトル 計算のアルゴリズム

1. まえがき

(NAIG) 飯島 俊吾

JENDL特殊目的データのひとつとして、DPA 断面積や Kerma Factor、等の計算とそのファイル化が計画されてをり、PKA スペクトル サブワーキンググループで作業が始まっている。この計算の基本量は核反応のさいの反跳原子のスペクトル (或はPrimary Knock-on Atom Spectrum)であり、反応のkinematicsに基づいて重心系での相対運動のスペクトルを実験室系での反跳原子スペクトルに変換することにより求められる。

従来の計算コードでは、kinematicsが必要以上に複雑な形で書かれて居るように思える。そのためか放出粒子のスペクトルが連続の場合には仮想レベルを設ける等の連続レベルを離散化するなどの人工的方法がとられている。反応のkinematicsは速度ベクトルの合成そのものである。従って、変数として速度ベクトルの比を用いるとkinematicsは簡明に書き表せて、エネルギー、角度のついでに2重微分のJacobianを容易に導くことが出来る。ここでは、それを用いて、第一段階、第二段階の粒子放出反応について非相対論的近似で、見通しの良いPKAスペクトル計算のアルゴリズムを述べる。(相対論では表式は簡明であり、相対論の扱いになれている方には当然のことかも知れない。)

現在、JENDL-3の最終編集が進められているが、反跳原子スペクトルの計算のためには充分でなく、今後補充、作成して行かなければならないデータがある。その目的に必要なデータについてもコメントする。実際の計算への適用はこれからであり、誤りもあるかも知れないので指摘と批判を乞いたい。

2. Kinematics

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_{01} とすると、相対運動および重心運動のエネルギーは、

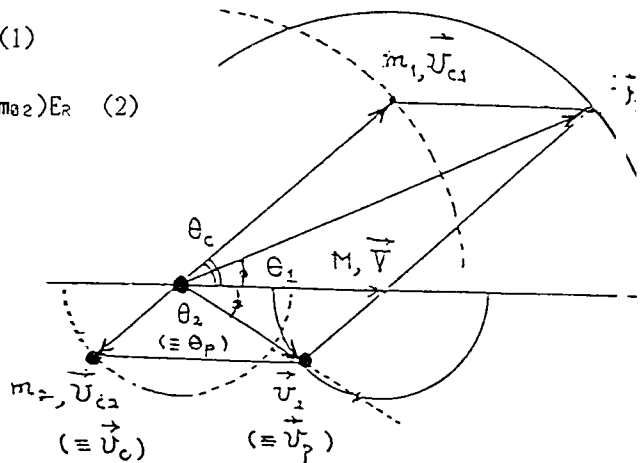
$$E_R = (m_{02}/M)E_{01} \quad (1)$$

$$E_G = MV^2/2 = (m_{01}/M)E_{01} = (m_{01}/m_{02})E_R \quad (2)$$

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。

Kinematicsの図式を右図に示す。添字cは重心系での量を表はす。重心系での粒子 (+反跳原子) の運動エネルギーは

$$E_c = (m_2 v_{c2})^2 / (2m_1 m_2 / M) \quad (3)$$



反跳原子の実験室系での速度とエネルギーをそれぞれ $v_p (=v_2)$, $E_p (=E_2)$ 、反跳角度を $\theta_p (= \theta_2)$ とする。ここで、

$$\eta_c \equiv v_{c2}/V = \sqrt{(m_1/m_2)(\epsilon_c/E_G)} = \sqrt{(m_{02}m_1/m_{01}m_2)(\epsilon_c/E_R)} \quad (4a)$$

$$\eta_p \equiv v_p/V = \sqrt{(M/m_2)(E_p/E_G)} \quad (4b)$$

を定義する。

ベクトル合成 $\vec{V} + \vec{v}_c = \vec{v}_p$ 、或は、ベクトル V の方向を逆にとり $(-\vec{V}) + \vec{v}_p = \vec{v}_c$ から、

$$\eta_p^2 = 1 + \eta_c^2 + 2\eta_c \cos(\pi - \theta_c), \quad (5a)$$

$$\eta_c^2 = 1 + \eta_p^2 + 2\eta_p \cos(\pi - \theta_p) \quad (5b)$$

(4), (5) 式から、

$$E_p = (m_2/M)E_G \eta_p^2 = (m_2/M)E_G(1 + \eta_c^2 - 2\eta_c \mu_c) \quad (6)$$

$$\mu_p = \cos(\theta_p) = (1 - \eta_c \mu_c) / \sqrt{1 + \eta_c^2 - 2\eta_c \mu_c} \quad (7)$$

或は、対称的な形で、 E_p , μ_p を与えて ϵ_c , μ_c を求める表式として、

$$\epsilon_c = (m_2/m_1)E_G \eta_c^2 = (m_2/m_1)E_G(1 + \eta_p^2 - 2\eta_p \mu_p) \quad (8)$$

$$\mu_c = \cos(\theta_c) = (1 - \eta_p \mu_p) / \sqrt{1 + \eta_p^2 - 2\eta_p \mu_p} \quad (9)$$

Kinematics図から判るように、 $\eta = v_{c2}/V < 1$ の時には、一つ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 $1 \geq \mu_p \geq \sqrt{1 - \eta_c^2}$ の範囲で。)

(6), (7) 式から重心系と実験室系のエネルギー、角度変換の Jacobian は

$$J \equiv \left| \frac{\partial(E_p, \mu_p)}{\partial(\epsilon_c, \mu_c)} \right|^{-1} = (M/m_1) \eta_c \sqrt{1 + \eta_c^2 - 2\eta_c \mu_c} = (M/m_1)^{3/2} \sqrt{E_p/\epsilon_c} \quad (10)$$

$$\tilde{J} \equiv \left| \frac{\partial E_p}{\partial \mu_c} \right|^{-1} = (M/m_2) / (2\eta_c E_G) = \sqrt{M^2/m_1 m_2} / (2\sqrt{\epsilon_c E_G}) \quad (11)$$

(10) は一般的な変換であり、(11) は相対運動エネルギー ϵ_c を固定した時の変換式である。放出粒子に対する kinematics は、質量のインデックス 1 と 2 を入れ替え、かつ μ_c を $-\mu_c$ で置き換えれば良い。

なお、(3)-(11) 式は入射粒子、標的核に無関係である。従って、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。

3. 原子反跳の断面積 (1粒子放出反応)

重心系での断面積を $\sigma_{cm}(E_R, \varepsilon_c, \mu_c)$ 、実験室系での原子反跳断面積を $\sigma(E_N, E_p, \mu_p)$ とすると、(10)式のJを用いて、

$$\sigma(E_N, E_p, \mu_p) = J \sigma_{cm}(E_R, \varepsilon_c, \mu_c) \quad (\text{b/MeV/sr}) \quad (12)$$

角度積分した反跳スペクトルは、

$$\sigma(E_N, E_p) = 2\pi \int d\mu_p (M/m_1)^{3/2} \sqrt{E_p/\varepsilon_c} \sigma_{cm}(E_R, \varepsilon_c, \mu_c)$$

ここで (4'), (5') から $d\mu_p = (1/2\eta_p)(m_1/m_2 E_G) d\varepsilon_c$ であるから

$$\sigma(E_N, E_p) = 2\pi \int d\varepsilon_c \tilde{J} \sigma_{cm}(E_R, \varepsilon_c, \mu_c(\varepsilon_c, E_p)) \quad (13)$$

$$\tilde{J} = (M/m_2)/(2\eta_c E_G) = \sqrt{M^2/m_1 m_2}/(2\sqrt{\varepsilon_c E_G}) \quad (11) \text{ (再掲)}$$

変数 ε_c の代わりに η_c を用いると(13)は更に簡単化され、

$$\sigma(E_N, E_p) = 2\pi M/m_1 \int_{\eta_c^{(1)}}^{\eta_c^{(2)}} d\eta_c \sigma_{cm}(E_R, \varepsilon_c, \mu_c) \quad (14)$$

ここで (ε_c, μ_c) は (η_c, η_p) から次式によって求められる。

$$\eta_c^2 = (m_1/m_2)(\varepsilon_c/E_G) = (m_0 m_1/m_0 m_1 m_2)(\varepsilon_c/E_R) \quad (4a)$$

$$\eta_p^2 = (M/m_2)(E_p/E_G) = 1 + \eta_c^2 - 2\eta_c \mu_c \quad (5a)$$

入射エネルギー E_N に対し、 ε_c の取り得る最大値は $\varepsilon_c^{\text{max}} = E_R + Q$ (Q は反応の Q 値) であるから、(4a)から η_c^{max} 値が定まる。

従って、 E_p (or η_p) の取り得る範囲は、(5a)より

$$\text{Max}(0, (1 - \eta_c^{\text{max}})) \leq \eta_p \leq 1 + \eta_c^{\text{max}} \quad (15)$$

この範囲の E_p に対し、(14)式の積分の上、下限 $\eta_c^{(2)}, \eta_c^{(1)}$ は

$$\eta_c^2 = 1 + \eta_p^2 - 2\eta_p \mu_p \quad (5b)$$

より、 $\eta_c^{(1)} = |1 - \eta_p|$, $\eta_c^{(2)} = \text{Min}(1 + \eta_p, \eta_c^{\text{max}})$ (16)

4. 原子反跳の断面積 (2粒子放出反応の場合)

理論計算ではあまり軽くない核の場合には、普通、第1粒子放出のあとで第2粒子放出が起きるものとしてをり、第2段階の粒子放出の分岐比は、第1段階の反跳原子に固定した座標系で、蒸発理論或は統計理論で表している。

スピン保存などを含めて反跳原子スペクトルを求めるのは扱いが大変複雑になるので、ここでは蒸発理論を用いる。第1粒子、第2粒子をそれぞれsuffix c, c' で表はす。第1段階には前平衡過程を含め、第2段階粒子放出は等方的とすると、チャネル (c, c') の反応の double spectrumは下記の形で書かれる。

$$\sigma_{cm}(E_R, \varepsilon_c, \mu_c, \varepsilon_c') = \hat{\sigma}_{cm}(E_R, \varepsilon_c, \mu_c) G_{cm}(\varepsilon_c, \varepsilon_c') \quad (17)$$

右辺の $\hat{\sigma}$ 印は第1段階反応であることを示す。 G_{cm} は粒子 c の放出後の残留核から粒子 c' が放出される分岐比である。 $\varepsilon_c, \varepsilon_c'$ の取り得る範囲は反応のQ値を $Q_{cc'}$ とすると、

$$0 \leq \varepsilon_c \leq E_R + Q_{cc'}, \quad 0 \leq \varepsilon_c' \leq E_R + Q_{cc'} - \varepsilon_c \quad (18)$$

(17)を ε_c' 或は ε_c について積分すればそれぞれ第1、第2粒子のスペクトルが得られる。例えば $(n, n' \alpha), (n, \alpha n')$ は別個のプロセスとして扱い、第2 α および第1 α のスペクトルを加え合わせて α スペクトルを求め、中性子データファイルに格納される。

(17)式に対応して、第1反跳原子 p 、第2反跳原子 p' のdouble spectrumは

$$\sigma(E_N, E_p, \mu_p, E_p', \mu_p') = \hat{\sigma}(E_N, E_p, \mu_p) G(E_p, \mu_p, E_p', \mu_p') \quad (19)$$

前節の(12)式と同様にして、

$$\hat{\sigma}(E_N, E_p, \mu_p) = (M/m_1)^{3/2} \sqrt{E_p/\varepsilon_c} \hat{\sigma}_{cm}(E_R, \varepsilon_c, \mu_c)$$

$$G(E_p, \mu_p, E_p', \mu_p') = (M'/m_1')^{3/2} \sqrt{E_p'/\varepsilon_c'} G_{cm}(\varepsilon_c, \mu_c, \varepsilon_c')$$

ここで M', m_1' は第1段階後の残留核および第2段階放出粒子の質量である。

今必要な量は p' のエネルギースペクトルであるから、(14)式から(15)式を導いたのと同様に、 μ_p, μ_p' についての積分を $\varepsilon_c, \varepsilon_c'$ についての積分に変換して、

$$\sigma(E_N, E_p') = (2\pi)^2 (MM'/4 \sqrt{m_1 m_2 m_1' m_2'})$$

$$\int dE_p \iint d\varepsilon_c d\varepsilon_c' (1/\sqrt{\varepsilon_c E_G}) (1/\sqrt{\varepsilon_c' E_G'}) \sigma_{cm}(E_R, \varepsilon_c, \mu_c; \varepsilon_c') \quad (20)$$

ここで、 E_G' は第1残留核の運動エネルギーで E_p に等しい。

(20)の積分のさい、 E_p と ε_c の関数として μ_c が定まる。 E_p' と $E_G' (=E_p)$ を与えると ε_c' の範囲が定まる。

変数を $(\varepsilon_c, \varepsilon_c')$ から (η_c, η_c') に変換した方が表式は簡単になるが省略する。

5. PKAスペクトルからの導出量及び必要な中性子核データについて

PKAスペクトルは、材料損傷評価、炉工学（発熱評価）、医学、生物学への応用がある。要求される量は、

(a) double differential および角度積分したPKAスペクトル、

(b) Damage Energy (Lindhardt-Robinsonの理論)、

(c) DPA 断面積、

(d) KERMA Factor および KERMA Spectrum (実験室系での帯電粒子スペクトル)、である。医学用には特に軽い核が対象となる。

これらの計算のためには、連続レベルへのDDXスペクトル及び帯電粒子スペクトルが必要であり、JENDLファイルに格納しておくことが望ましい。また、(20)式から判るように、2粒子放出を扱うには2粒子のdouble spectrumが必要であり、適当な近似を用いない限り従来の核データ計算コードの改訂を要する。KERMA Factor はエネルギーバランスから計算することも出来るが、中性子核データの評価のさいにエネルギーバランスが保たれているかどうかを確かめておくことが必要である。

3粒子以上の放出も前節で述べたと同様に扱えるであろうが、break-upを伴う軽い核反応の場合の扱いはすこぶる厄介であり、核データ及びkinematicsの両面からchallengingな問題と言って良いであろう。

 附. ガンマ線放出の場合 (非相対論的な場合)

$$m_2 v_{c2} = p_\gamma = E_\gamma / C \quad (C \text{ は光速}) \quad \text{および} \quad m_2 = M \text{ より}$$

$$\eta_\gamma = v_{c2} / V = \sqrt{E_\gamma^2 / (2MC^2 E_G)} \quad (A1)$$

$$\eta_p = v_p / V = \sqrt{E_p / E_G} \quad (A2)$$

$$\begin{aligned} E_p &= E_G (1 + \eta_c^2 - 2\eta_c \mu_c) \\ &= E_G + E_\gamma^2 / 2MC^2 - 2\sqrt{E_G / (2MC^2)} E_\gamma \mu_c \end{aligned} \quad (A3)$$

$$\mu_p = (1 - \eta_c \mu_c) / \sqrt{1 + \eta_c^2 - 2\eta_c \mu_c} \quad (A4)$$

$$\text{或は、} \quad \mu_c = (1 - \eta_p \mu_p) / \sqrt{1 + \eta_p^2 - 2\eta_p \mu_p} \quad (A5)$$

中性子捕獲ガンマ線の場合には、 $\eta_c \approx E_\gamma (\text{MeV}) / \sqrt{2E_n (\text{keV})}$ であり、非弾性ガンマ線放出のときは、通常 $\eta_c \ll 1$ なので $E_p = E_G$, $\mu_p = 1$ である。

変換のJacobianは、

$$\begin{aligned} J &= \left| \partial(E_p, \mu_p) / \partial(E_\gamma, \mu_c) \right|^{-1} \\ &= (E_\gamma / 2E_G) (1 / \eta_c^3) \sqrt{1 + \eta_c^2 - 2\eta_c \mu_c} = (MC^2 / E_\gamma) \sqrt{2MC^2 E_p / E_\gamma^2} \end{aligned} \quad (A6)$$