

²⁸Si Displacement KERMAにおける RADHEAT-V4とNJOYコードの比較

(1994年8月1日受理)

住友原子力工業(株)核設計部
山野直樹, 小迫和明

現在、日本国内でDisplacement KERMAに関連した量が計算可能な断面積処理コードとしてRADHEAT-V4⁽¹⁾, NJOY⁽²⁾, TENJIN-2⁽³⁾などがあるが、Displacement KERMAに対するコード間の相互比較は厳密な意味ではなされていない。そのためJENDL-3.1を用いてRADHEAT-V4とNJOY(83/6)で求めた²⁸SiのDisplacement KERMAをASTM E722-93⁽⁴⁾と比較した結果について報告する。

最初に、ASTM E722-93で与えられているDisplacement KERMAの定義について説明する。NRT標準モデルでは、弾き出し損傷関数 $v(T)$ と損傷エネルギー(damage energy) T_D は次式のように定義される：

$$v(T) = 0.8 \frac{T_D}{2 E_d} \quad (T > 2 E_d) \quad (1)$$

$$T_D = \frac{T}{1 + k g(\epsilon)} \quad (2)$$

ここで E_d (実効弾き出しエネルギー (effective displacement energy)
¹⁴Siは約25 eV)
 T (PKAの実験室系での運動エネルギー)
 $k = \frac{0.0793 Z_1^{23} Z_2^{1/2} (A_1 + A_2)^{3/2}}{(Z_1^{23} + Z_2^{23})^{3/4} A_1^{3/2} A_2^{1/2}}$ (無次元化された阻止能；
フィッティングパラメータ)
 $\cong 0.133745 Z^{23} / A^{1/2}$
 $g(\epsilon) = \epsilon + 0.40244 \epsilon^{3/4} + 3.4008 \epsilon^{1/6}$ (Robinsonの近似式)
 $\epsilon = \frac{0.8853 A_2}{27.2 Z_1 Z_2 (Z_1^{23} + Z_2^{23})^{1/2} (A_1 + A_2)} T$ (Eの無次元パラメータ)
 $\cong 0.01151 T / Z^{7/3}$
 $A_p Z_1$ (入射粒子の原子量と原子番号)
 $A_s Z_2$ (結晶原子の原子量と原子番号)

入射中性子エネルギーEにおける一般的な原子弾き出し(displacement per atom, DPA)断面積F(E)は、次式で表わせる：

$$F(E) = \alpha(E) \int_{E_d}^{T^{\max}} \left[\frac{1}{\sigma(E)} \frac{d\sigma(E, \phi)}{d\Omega} \right] \frac{d\Omega}{dT} (E, \phi) v(T) dT \quad (3)$$

ここで $\alpha(E)$ (中性子反応断面積)
 $d\Omega$ (立体角要素)

$$\begin{aligned} \phi & \quad (\text{重心系での散乱角}) \\ T^{\max} = \gamma E & \quad (\text{PKAの最大エネルギー；head-on衝突}) \\ & \quad (\phi=180) \text{に対応} \end{aligned}$$

重心系における散乱中性子とPKAのエネルギーの関係は、運動量保存則により次式で示される：

$$T = \alpha_1 \alpha_2 E + \frac{\alpha_1}{\alpha_2} E_m - 2\alpha_1 \sqrt{EE_m} \cos \phi \quad (4)$$

ここで E_m (散乱中性子のエネルギー)

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= 1 / (1+A) \\ \alpha_2 &= A / (1+A) \\ \gamma &= 4\alpha_1 \alpha_2 \end{aligned}$$

Displacement KERMA (DK)は、(3)式の $v(T)$ の代わりに $T_D(T)$ と置くことにより定義される：

$$DK(E) = \sigma(E) \int_{E_d}^{T^{\max}} \left[\frac{1}{\sigma(E)} \frac{d\sigma(E, \phi)}{d\Omega} \right] \frac{d\Omega}{dT}(E, \phi) T_D(T) dT \quad (5)$$

従って、 $F(E)$ と $DK(E)$ は $0.8/2E_d$ の係数の違いのみであり、一般のKERMA係数とは定義が異なる。

RADHEAT-V4 (太い破線) とNJOY (太い実線) で計算したDKとASTM E722-93 (細い実線) で与えられたDKの比較を図1に示す。RADHEAT-V4とNJOYの計算は、JENDL-3.1の ^{28}Si を(Maxwell+1/E)の荷重関数で100群に処理したものである。ASTMは、ENDF/B-Vの ^{28}Si をNJOYでSAND-IIの640群に処理し、それを評価者が調整したものである。比較結果から下記のことが言える：

1. 6 MeV以上でNJOYの値が低い (非弾性散乱, (n,2n)の処理に問題があると思われる)
2. 200 eV~3 keVの間でRADHEAT-V4の値が低い (弾性散乱の処理に問題がある)
3. 200 eV以下でRADHEAT-V4の値が高い ((n, γ)の処理に問題がある)

ここでは上記の2と3について議論する。

i) 弾性散乱の処理

RADHEAT-V4とNJOYは、両方ともNRT標準モデルに基づくDoranの方法⁶⁾を採用している。弾性散乱の場合、エネルギー保存則から $E_m = \alpha_2^2 E$ であるから、(4)式は次式となる：

$$T = \gamma E (1 - \cos \phi) / 2 \quad (6)$$

従って次式の関係が得られる：

$$d\Omega / dT = -2\pi d \cos \phi / dT = 4\pi / \gamma E = 4\pi / T^{\max} \quad (7)$$

エネルギーEの中性子が角度 ϕ に散乱する確率 $P(E, \mu)$ は次式のように表わせる ($\mu = \cos \phi$)：

$$P(E, \mu) = \frac{2\pi}{\sigma(E)} \frac{d\sigma(E, \mu)}{d\Omega} \quad (8)$$

(3)式は、(7)と(8)式から次式となる：

$$\begin{aligned} F(E) &= \frac{4\pi}{T^{\max}} \sigma(E) \int_{E_d}^{T^{\max}} \left[\frac{1}{\sigma(E)} \frac{d\sigma(E, \phi)}{d\Omega} \right] v(T) dT \\ &= \sigma(E) \int_{-1}^{1-r} P(E, \mu) v(T(E, \mu)) d\mu \end{aligned} \quad (9)$$

$$\text{ここで} \quad r = 2E_d / T^{\max} \quad (10)$$

NJOYは、(10)式からEに対する弾性散乱の threshold energy (E_b) を以下のように求めている：

$$E_b = E_d / (2\alpha_1 \alpha_2 r) \quad (11)$$

(9)式の積分範囲がゼロとなる $r=2$ の時が E_b である。例えば、 ^{28}Si を考えると $A=27.737$ 、 $E_d=25$ eVであるから $E_b=186.08$ eVとなる。しかし、実際には $E_b=6.25/\alpha_1 \alpha_2$ の式で計算されており、本来は元素毎に E_d を変更して計算すべきであるが25に固定されている。従って、Siの場合には $E_d=25$ eVであるため、偶然にも一致する結果となった。

これに対しRADHEAT-V4では、 E_b は以下のように与えられている (η は重心系における散乱角の余弦である)：

$$E_b = E_d / [\alpha_1 \alpha_2 (1 - \eta_{\max})] \quad (12)$$

$$\eta_{\max} = 1 - E_d / (\alpha_1 \alpha_2 E_b) \quad (13)$$

参考文献(1)から、 $\eta_{\max}=1$ の時が積分範囲がゼロとなる E_b である。 ^{28}Si の場合には、 $E_b=372.16$ eVとなる。しかし、本来は(9)式の積分範囲の関係から $1-r=\eta_{\max}$ となるべきであるから、(10)式から導出される η_{\max} は正しくは次式とならねばならない：

$$\eta_{\max} = 1 - \frac{E_d}{2\alpha_1 \alpha_2 E_b} \quad (14)$$

(13)と(14)式の右辺第2項の分母の係数2の違いにより、弾性散乱の立ち上がるエネルギー近傍でRADHEAT-V4の結果は過小評価となっていた。これはプログラムのバグであるが、このエネルギー近傍ではDPA断面積が極小となり、実用上問題とならないため見逃されていたものである。今回の検討により、このバグは修正されている。

ii) (n, γ) の処理

(n, γ) 反応におけるPKAの運動エネルギーは、衝突反応点の近傍で放出された全ガンマ線が直ちに弾き出しやエネルギー付与を起こすとする局所付与 (local deposit) の仮定によると、 (n, γ) 反応の反跳エネルギー (recoil energy) に等しいので次式となる：

$$T = \frac{E_\gamma^2}{2mc^2}$$

$$= \frac{E_\gamma^2}{1.862 \times 10^9 (1+A)} \quad (15a)$$

$$= \frac{Q^2}{1.862 \times 10^9 (1+A)} \quad (15b)$$

ここで E_γ (放出ガンマ線エネルギー)
 Q ((n,γ)反応のQ値)

(n,γ)反応のガンマ線放出方向を等方と仮定すると、(9)式は次式のように簡略化できる：

$$F(E) = \sigma(E) v(T) \quad (16)$$

RADHEAT-V4では、(15b)と(16)式からF(E)を求めている。

NJOYではもっと複雑な手法を採用しており、使用する核データファイルで与えられているデータの内容に応じて2種類の処理が可能である：生成したガンマ線は、(a)局所的領域に全エネルギーを付与する、(b)その輸送を考慮してガンマ線生成データに基づき運動量保存則によってエネルギーを付与する。最初の(a)の処理は、RADHEAT-V4の場合と同様であり、(16)式を使用する。しかしNJOYは(15b)式ではなく次式を使用する（Eは中性子エネルギー）：

$$T = \frac{E}{1+A} + \frac{\overline{E_\gamma^2}}{2*(1+A)*mc^2}$$

$$\cong \frac{E}{1+A} + \frac{\left(\frac{AE}{1+A} + Q\right)^2}{2*939.512 \times 10^6 (1+A)} \quad (17)$$

(17)式は、反跳ガンマ線の平均エネルギーを利用可能なエネルギー $Q+AE/(1+A)$ で近似し、ガンマ線の運動量保存などを考慮することにより導出される。(17)と(15b)式を比較すると、中性子エネルギーが数keV以上になるとその差が顕著になり、エネルギーが高くなるにつれて差は広がり(17)式の方が相当大きくなる。しかし、(n,γ)反応断面積は高エネルギーではかなり小さいため、DPAに及ぼす影響は小さい。次に(b)の処理は、最初に(a)の計算を行い、その後で以下の補正を行う：ガンマ線生成データ(MF=12~15)を用いて次式から反跳ガンマ線の平均エネルギーTを求め、(2)式により損傷エネルギー T_D を求める。更に(1)式から損傷関数 $v(T)$ を求め、最終的に反跳ガンマ線エネルギーで補正した原子弾き出し断面積は、(19)式で与えられる（Y(E)はガンマ線生成multiplicitiesである）。

$$T = \frac{E^2}{2*939.512 \times 10^6 (1+A)} \quad (18)$$

$$F(E) = v(T) \sigma(E) Y(E) \quad (19)$$

(19)式で得られた補正断面積データがDPAまたはDKとして使用される。この補正は、

^{28}Si の場合には約0.6倍である。この効果がRADHEAT-V4とNJOY間の(n, γ)処理の最大の違いとなっている。

実際には、Doranによるこの局所付与の考え方は現実的ではないため、より厳密な取り扱いをする意味で、核データにガンマ線生成データが与えられている場合にはそれに基づく補正を行う必要がある。そのため、今回の検討ではRADHEAT-V4にNJOYで採用されている(n, γ)反応の補正方法を組み込み、DPAとKERMAの補正を行った。その結果を図2に示す。これによりRADHEAT-V4で計算されたDisplacement KERMAは、ASTM E722-93の評価値を良く再現する。

現在のRADHEAT-V4で処理対象となる反応は、評価済核データライブラリのエネルギー上限値20 MeVを考慮して、弾性散乱、非弾性散乱、(n,2n), (n, γ), (n,f), (n,n'p), (n,n' α), (n,n' $^3\alpha$), (n,2n α), (n,p), (n, α)である。今後50 MeVまでの中高エネルギー領域に適用するためには、(n,3n), (n,d), (n,t), (n, ^3He), (n,2p), (n,n'd), (n,n't)などの反応を取り扱えるように改良する必要があると考えられる。

今回の検討において、ASTM E722-93との比較の機会を与えて頂いた京都大学教授木村逸郎氏に深く感謝いたします。

【参考文献】

- (1) Yamano N., Minami K., Koyama K., and Naito Y.: "RADHEAT-V4: A Code System to Generate Multigroup Constants and Analyze Radiation Transport for Shielding Safety Evaluation," JAERI 1316 (1989).
- (2) R.E. MacFarlane, D.W. Muir, and R.M. Boicourt : "The NJOY Nuclear Data Processing System, Volume II: The NJOY, RECONR, BROADR, HEATR, and THERMR Modules," LA-9303-M, Vol. II (ENDF-324) (1982).
- (3) Aruga T. : "Neutron Radiation Damage Parameters and a Database System for Fusion Reactor Materials," JAERI-M 91-043, pp41-65 (1991).
- (4) E722-93 Standard Practice for Characterizing Neutron Energy Fluence Spectra in Terms of an Equivalent Monoenergetic Neutron Fluence for Radiation-Hardness Testing of Electronics. Annual Book of ASTM Standards, Vol. 12.02 (1993).
- (5) D.G. Doran : "Neutron Displacement Cross Sections for Stainless Steel and Tantalum Based on a Lindhard Model," Nucl. Sci. Eng., **49**, pp130-144 (1972).

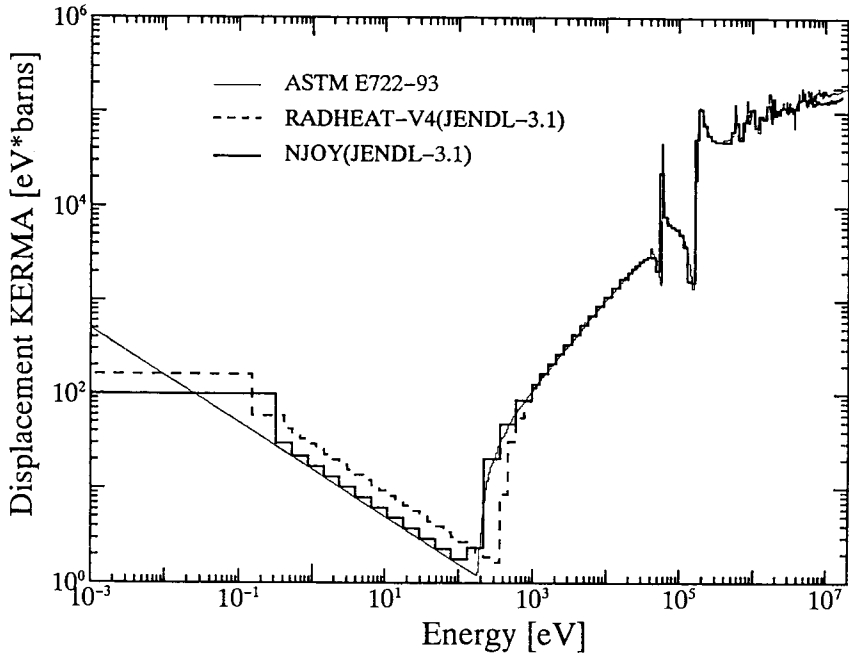


Fig. 1 Comparison of ^{28}Si Displacement KERMA for calculational results by RADHEAT-V4 and NJOY to ASTM E722-93

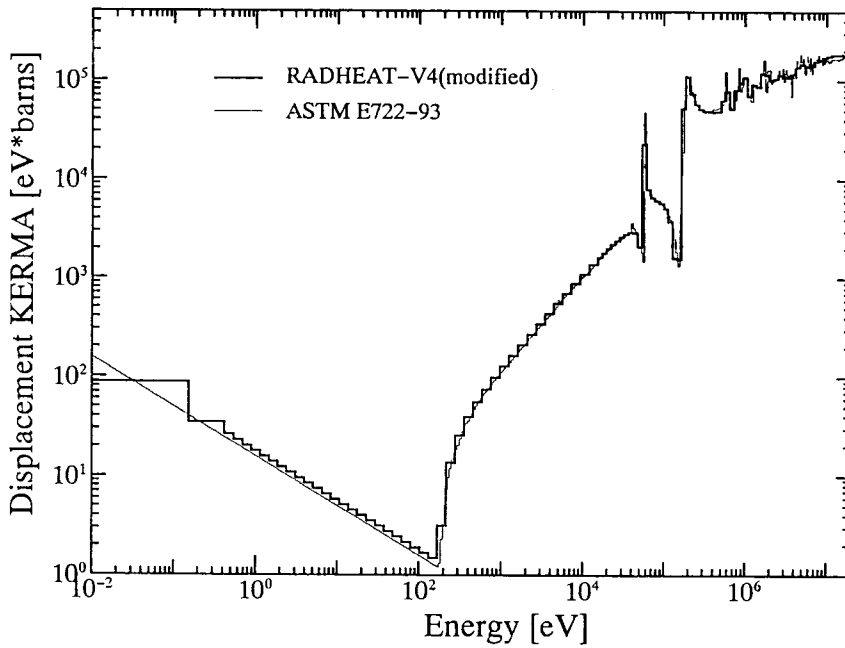


Fig. 2 Comparison of ^{28}Si Displacement KERMA between modified RADHEAT-V4 and ASTM E722-93