

WG 活動紹介

PKA スペクトルワーキンググループ

東芝 (株)

川合 将義

日本原子力研究所

深堀 智生

1. はじめに

本 WG は、JENDL 以降の特殊目的核データファイル作成の一環として約 8 年前に発足した。その目的は、JENDL に基づく中性子照射損傷評価のための基礎データファイルを作成することにある。本 WG では、そのライブラリー作成のため、核データの評価から発熱因子等の積分実験値によるデータの検証、基礎データファイル作成用コード開発とライブラリー作成作業を行っている。以下に活動概要を記す。

なお、本 WG が最終的に求める量は、Fig. 1 に示すように中性子との反応で生ずる反跳核 (1 次衝突原子、PKA と略称) のスペクトル、その PKA が基になってまわりの原子を格子点から弾き出す断面積 (DPA 断面積)、さらに PKA と 2 次荷電粒子が媒質に与える熱エネルギー (KERMA ファクター) である。

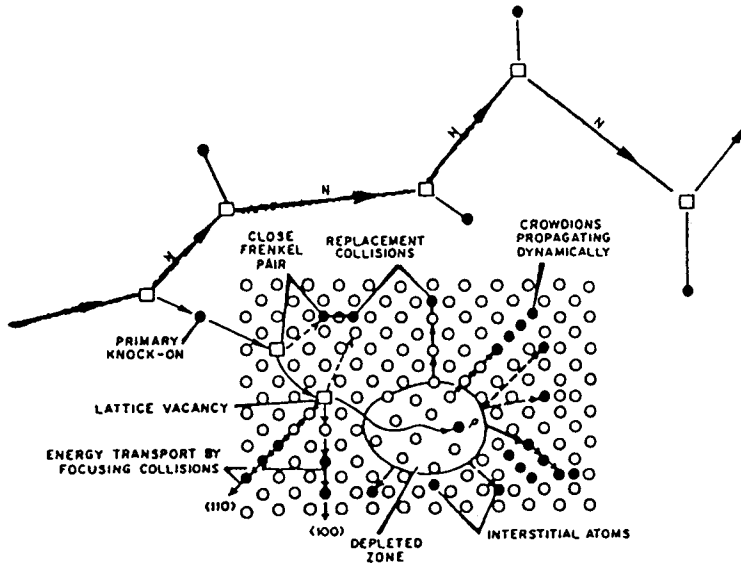


Fig. 1 中性子照射した固体中のはじき出し過程の模式図。Seeger⁽¹⁾に Wiffen⁽²⁾が手を加えたもの。連鎖的のはじき出しで中心から離れたところに格子間原子が形成され中心近傍は原子空孔が多く残る。

2. 経緯

従来、材料の中性子照射損傷データは、原子炉を中心に収集されてきた。それは、高速中性子のフルーエンスに対して整理され、原子炉の設計で参照されている。しかし、中性子フルーエンスという尺度は、中性子スペクトルが大きく異なる核融合炉に対して必ずしも良い尺度とは言い難い。したがって、できるだけ中性子スペクトルには影響されない量で、材料の照射損傷との相関の高い量として、DPA（原子弾き出し）断面積が提唱され、設計にも取り入れられるようになってきた。しかし、利用できるデータが ENDF/B-IV から作られたものであり、しかも、高エネルギーで重要となる 2 次荷電粒子のスペクトルに曖昧さがあることから、JENDL をベースとしたより信頼性の高いライブラリーを作成することの必要性が主張された。さらに、核融合炉材料照射試験装置として Li(d,n) 中性子源を用いた ESNIT 開発計画（現在は、IFMIF という国際計画に進展）の一環で、同装置の設計、実験計画立案、そして材料研究のためにも材料損傷研究のための核データライブラリーの必要性が叫ばれた。これらの要請を受けて本WGが発足した。WG 構成メンバーは下記の通りである。

有賀武夫、池田裕二郎、柴田恵一、千葉敏、深堀智生、山内良磨（原研）、喜多尾憲助（データ工学）、杉暉夫（総合技術情報機構）、高橋亮人（阪大）、真木紘一（日立）、村田徹（NFD）、山野直樹（住原工）、渡辺幸信（九大）、川合將義（東芝） <OB：岸田則夫（原研）、（故）飯島俊吾>

発足当初は、データニーズとその利用形態、材料損傷データ作成の基礎式やコード、実験値を調査した³⁾。その結果、原子炉や核融合炉の設計、放射線計測、保健物理の分野からの DPA 断面積や KERMA ファクターだけでなく、材料研究からの希望が高い PKA スペクトル（エネルギーと角度に対する 2 重微分断面積の形式）を作成することにした。対象とするエネルギー範囲は、 10^5 eV から 50 MeV である。そして、WG 活動は、反跳核が容易に識別でき、現行ライブラリーの処理で目的のデータが得られる中重核のデータ作成グループ、識別が困難で核データの評価が必要な軽核グループ、データの利用検討グループ、実験値の調査グループに別れて進められている。

3. 活動概要

中重核のデータ作成は、評価済核データファイルを処理する方法を取る。即ち、20 MeV 以下は、JENDL Fusion File から作成し、それ以上は、高エネルギー核データ評価 WG が作成する JENDL 高エネルギー核データファイルから作る。したがって、活動の中心は、データ処理コードの開発と PKA/KERMA ファイル作成と結果のレビューである。

処理コードの開発に取り掛かった時には、阪大の PKAS、原研の TENJIN-2 や RADHEAT-V4 が開発済であったので、一旦はそれらの改良が志向された。しかし、荷電

粒子のスペクトルについて PEGASUS コードや GNASH コードによる評価結果が出ていたこと、また、ENDF-6 フォーマットではそのための書式も準備されていることがわかり、改めて計算式を確認しながら開発することになった。まず、2次粒子や PKA の平均エネルギーに着目して DPA 断面積と KERMA ファクターを近似的に計算する式が導出された⁴⁾。それに基づいて核融合炉ニュートロニクスライブラリー-FUSION-J3 の KERMA ファクターと DPA 断面積が作成された⁵⁾。次いで PKA スペクトル作成のため、2体粒子衝突の Kinematics を忠実に扱った方法検討され、一応、(n,2n)反応(2段階反応)までの式を導き、PKA スペクトルの形成が検討された。その結果に基づいて、多粒子放出が問題となる高エネルギー中性子反応で効果的な実効的単一粒子放出モデルが考案され、それに基づく ESPERANT コードが開発された^{6,7)}。開発したコードの検証として、JENDL Fusion File のアルミニウムと鉄のデータを処理して、PKA スペクトルはモンテカルロ法に基づく前平衡過程を考慮した多粒子放出計算コード MCEXITON⁸⁾による結果と、KERMA ファクターは LBNL の Howerton⁹⁾が計算したものと、DPA 断面積は、RADHEAT-V4 コード¹⁰⁾や Doran ら¹¹⁾による結果と比較、検討して問題の無いことを確認した。Fig. 2-5 にその結果を例示する。なお、図において 10 keV 域で ESPERANT の結果が滑らかなのは、平均断面積を用いたことにより、他は共鳴による変化を示している。

軽い核では、いくつも粒子を出した後での残留核が例えば α 粒子であるなど、どれが PKA が特定出来ない場合がある。また、高エネルギーでは、3体以上に別れる Breake-up 反応も起こり、一般的な2体衝突モデルで PKA を扱うことが不可能な部分がある。したがって、酸素より軽い核の PKA スペクトルは、基礎となる核データも評価して与えることとした。すなわち、複合核や弾性散乱による反跳核も含めて反応生成物全てのスペクトルを2重微分断面積の形で与えることにした。これらの軽い核の評価では、核の個性が強いため、(統一した核モデルによらず)それぞれ適当なものが採用され、適宜改良しながら評価が進められている。例えば、C-12 より軽い核の評価では、Breake-up 反応も含めた多段階の反応過程を考慮したモンテカルロ計算によって粒子スペクトルを計算する SCINFUL/DDX コード¹²⁾が使われている。計算に必要な全断面積や全反応断面積、反応の分岐比などの基礎データは、測定データの外、微視的光学模型による計算結果などが使われている。また、窒素と酸素の評価では、前平衡モデルによる EXIFON コードにて α 粒子などのクラスター形成過程や直接過程について改良作業が行われた。これまでに評価の終了した核は、水素、Li-7、炭素である。C-12 の評価では、2次粒子のスペクトルだけでなく、Fig. 6 に示すように KERMA ファクターの測定値の再現性も考慮され、全体的に整合性のとれた評価結果が得られた¹¹⁾。

ここで得られた PKA スペクトル、KERMA ファクターや DPA 断面積の妥当性を検証するため、関連する実験データの収集とレビューが進められている。PKA スペクトルと DPA

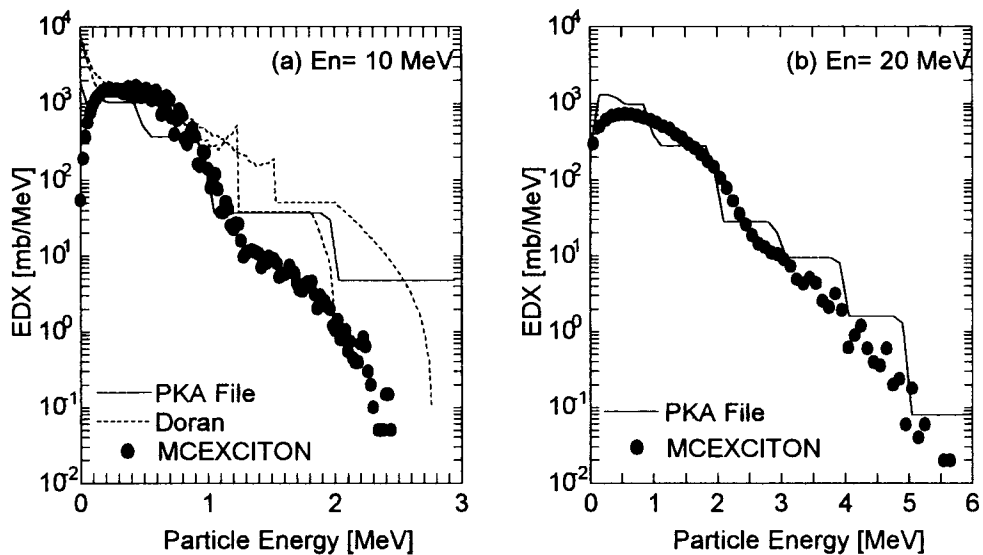


Fig.2 ^{27}Al PKA Spectra of PKA File Compared with Calculations by MCEXCITON and Doran at (a) $E_n=10$ MeV and (b) $E_n=20$ MeV

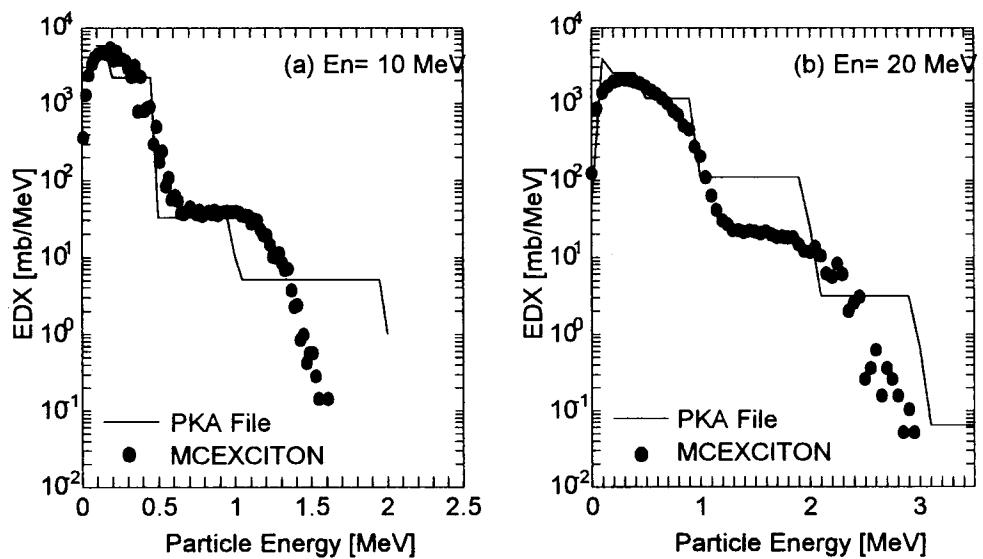


Fig.3 ^{56}Fe PKA Spectra of PKA File Compared with Calculations by MCEXCITON at (a) $E_n=10$ MeV and (b) $E_n=20$ MeV

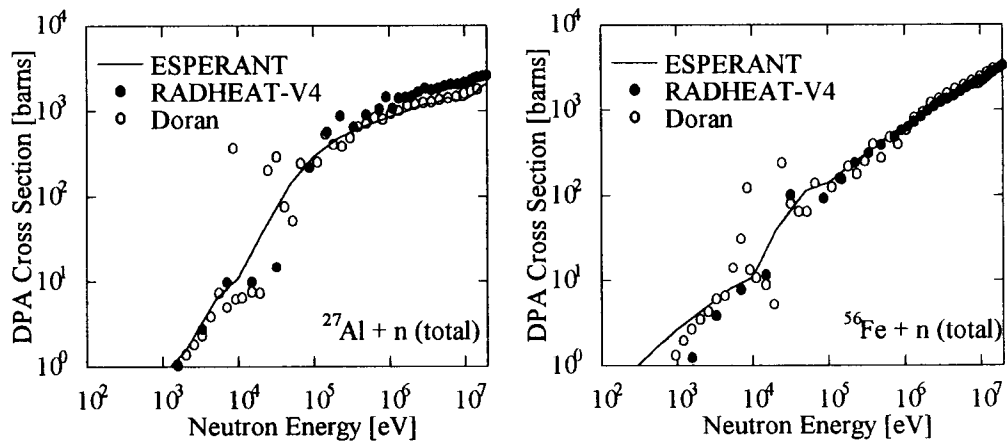


Fig. 4 ^{27}Al and ^{56}Fe DPA Cross Sections of KERMA File Compared with Calculations by RADHEAT-V4 and Doran

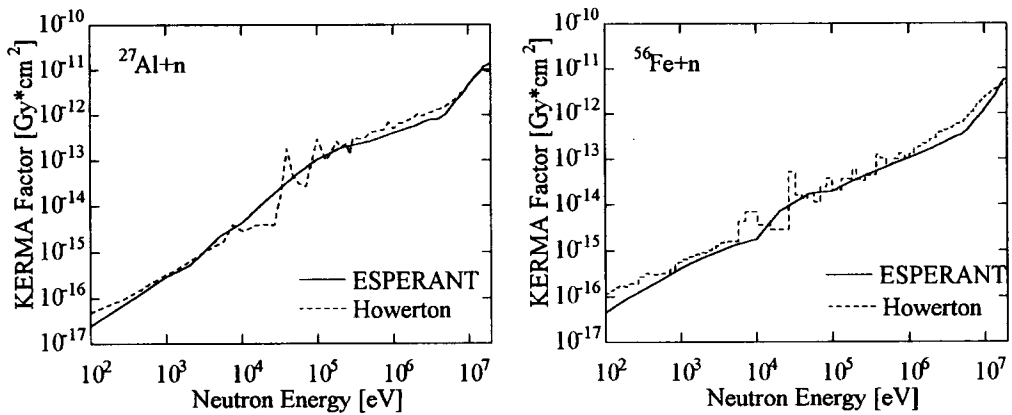


Fig. 5 ^{27}Al and ^{56}Fe KERMA Factors of KERMA File Compared with Calculations by Howerton

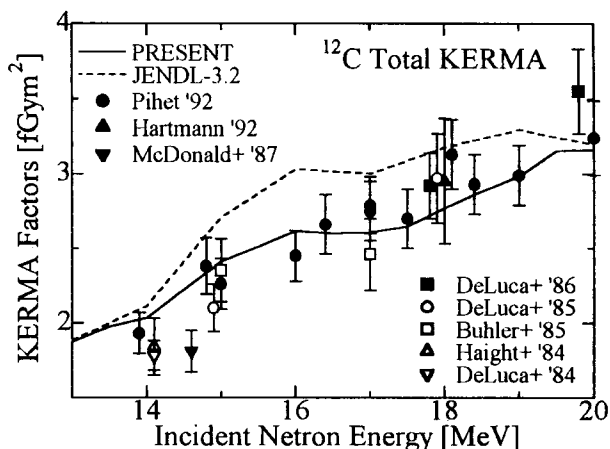


Fig.6 KERMA Factors of ^{12}C Calculated by SCINFUL/DDX

断面積について、直接比較できるデータは殆ど無いが、KERMA ファクターは FNS での実験結果¹³⁾を含めて集まっており、今後の積分的な検証に活用される予定である。

損傷データ利用グループは、処理された PKA スペクトルなどのデータを利用する上の問題点を検討するグループである。その一つとして、軽い原子より成る媒質での損傷に対する 2 次荷電粒子の影響の検討がある。軽い媒質では、荷電粒子の質量やエネルギーがそこそこ大きい場合には、反跳核同様にその荷電粒子によっても原子の弾き出しが起こる。C-12 について試算した場合、入射エネルギーが 50 MeV でその影響が 37%にも及ぶことが分かった¹⁴⁾。また、媒質が酸化物や混合物質より成る場合、PKA の阻止能は単体のそれとは違って来る筈であり、DPA 断面積や KERMA ファクターにはその効果を考慮する必要がある。現在、その検討を行っている。

4. 今後の予定

(1) PKA/KERMA ファイルの作成として、JENDL FUSION File に含まれる以下の 69 核種の処理を行い、20 MeV 以下のデータを早期（1997 年度初頭）に公開する。なお、公開に先立って、ORNL RSIC などから入手できるライブラリーの主だったものとの比較・検討を行う。

F-19, Al-27, Si-28, 29, 30, Ca-40, 42, 43, 44, 46, 48, Ti-46, 47, 48, 49, 50, V-51, Cr-50, 52, 53, 54, Mn-55, Fe-54, 56, 57, 58, Co-59, Ni-58, 60, 61, 62, 64, Cu-63, 65, As-75, Zr-90, 91, 92, 94, 96, Nb-93, Mo-92, 94, 95, 96, 97, 98, 100, Sb-121, 123, Sn-112, 114, 115, 116, 117, 118, 119, 120, 122, 124, W-182, 183, 184, 186, Pb-204, 206, 207, 208, Bi-209.

(2) IFMIF 用の 50 MeV 以下の PKA/KERMA ファイルを作成する。対象は、以下の 29 元素、78 同位体である。(1998 年度予定)

H, Li, Be, B, C, N, O, Na, Mg, Al, Si, Cl, K, Ca, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Ge, Zr, Nb,
Mo, W, Pb, Bi.

(3) KERMA ファクター等の実験値による積分的検証を行う。

(4) 軽い核の DPA 断面積計算システムを作成する。

参考文献

- 1) A. Seeger: "The Nature of Radiation Damage in Metals", in Radiation Damage in Solids, IAEA, p.101 (1962).
- 2) F.W. Wiffen: "Radiation Effects in Structural Materials for Fusion Reactors", in Critical Materials Problem in Energy Production, C. Stein (Ed.), p.164 (Academic Press, 1976).
- 3) 飯島俊吾、他 : KERMA ファクターおよび DPA 断面積の現状と応用、JAERI-M 91-062 (1991).
- 4) S. Iijima and M. Kawai: J. Nucl. Sci. Technol., **27**, 375 (1990)
- 5) 真木紘一、他 : JAERI-M 91-072 (1991).
- 6) T. Fukahori et al.: JAERI-Conf 96-005, p.130 (1996).
- 7) T. Fukahori et al.: Status of PKA, KERMA and DPA Files of JENDL, presented at 9th Int. Symp. on Reactor Dosimetry, Prague, September 2 - 6, 1996, Oral Session C. A111.
- 8) N. Kishida, H. Kadotani, Proc. Int. Conf. on Nuclear Data for Science and Technology, Mito, May 30- June 3, 1988, p.1209 (1988).
- 9) R.J. Howerton, UCRL-50400 Vol. 27 (1986).
- 10) N. Yamano et al.: JAERI-1316 (1989).
- 11) D.G. Doran, N.J. Graves, HEDL-TME 7670 (1976).
- 12) H. Kasimoto et al.: JAERI-M 93-046, p.287 (1993)
- 13) Y. Ikeda, A. Kumar: Direct Nuclear Heating Measurement with Micro-Calorimeter and its Application to Fusion Dosimetry, presented at 9th Int. Symp. on Reactor Dosimetry, Prague, September 2 - 6, 1996, Oral Session F. A120.
- 14) T. Aruga et al.: Damage Energy Cross Section of Charged Particles from Light Nuclides Irradiated with High Energy Neutrons, *ibid.*, Poster Session, A105.