

## FP 核種の非弾性散乱断面積評価

評価・計算システム WG

### 1. はじめに

JENDL-3.2では、FP 核種に対する非弾性散乱断面積の評価を、DWBA 計算による直接過程と、Hauser-Feshbach-Moldauer 理論による複合核過程を計算することで行なっているが、この DWBA 計算の妥当性に対する疑問が近年起こっており、問題となっていた [1][2]。それは、FP 核種の非弾性散乱断面積を DWBA を用いて計算する際に、断面積の異常な増大が閾値近傍で起こるというもので、DWBA 計算は FP 核種領域の非弾性散乱断面積評価には不適切であると指摘された [1]。NEANSC では、この問題に取り組むために国際評価協力 Working Party の subgroup 10 を組織し [3][4]、断面積の異常な増大の原因と、FP 核の非弾性散乱断面積の標準的な評価方法について議論してきた。

本 Working Group では、この問題解決に協力するために、FP 核として Mo の同位体を取り上げ、DWBA による断面積の異常の原因、及び、直接過程非弾性散乱断面積計算のもう一つの有力な手法であるチャンネル結合法 (CC) による計算と DWBA 計算の差異について検討を行なったので報告する。

### 2. DWBA 断面積の増大

DWBA 断面積の異常な増大を調べるため、 $^{100}\text{Mo}$  に対して DWBA 計算を行なった。使用した  $\beta$  値は、Cereda[5]らの Coupled Channel 計算に使用されたもので、 $(p, p')$  の実験から得られたものであるが、第一近似としては良いものであると考えられるので、そのまま用いた。Cereda らは幾つかの coupling scheme で  $\beta$  値を得ているが、いずれも大きな差はないので、 $0^+ - 2^+ - (0^+, 2^+, 4^+) - 3^-$  の coupling scheme で得られた  $\beta_2 = 0.214$ ,  $\beta_3 = 0.208$  を採用した。

計算する励起準位は、 $2^+$  (535.57 keV),  $3^-$  (1908.3 keV) の 2 つの 1 音子状態とした。使用した光学ポテンシャルは、JENDL-3.2 で Mo の非弾性散乱断面積評価に用いられた Yamamuro による modified Walter-Guss[6] である。比較としてオリジナルの Walter-Guss[7] を用いた計算も行なった。以後、それぞれを “orgWG” と “modWG” と略記する。modWG と orgWG の違いは、以下に示す  $W_s$  のみである。

$$W_s = \begin{cases} 7.21 & -14.94\epsilon & & \text{MeV} & (E < 20) \\ 10.85 & -14.94\epsilon & -0.1571E & \text{MeV} & (E \geq 20) \end{cases} \quad (1)$$

ここで、 $\epsilon = (N - Z)/A$  である。 $^{100}\text{Mo}$  の場合、 $E_n = 0$  MeV で  $W_s = 8.46$  MeV(orgWG), 5.32 MeV(modWG) であり、modWG は orgWG よりも浅い虚部ポテンシャルを持つ。

DWBA による  $2^+$ ,  $3^-$  レベルへの直接過程断面積の計算結果を図 1 に示す。図で、細線は orgWG を用いた計算結果、太線は modWG の結果である。一点鎖線は、同じポテンシャルを用い、 $0^+ - 2^+ - 3^-$  を結合させた CC 計算の結果である。これらの図から、以下のことがわかる。

- 10 MeV 以下で、modWG の結果 (太線) が通常考えられる直接過程の断面積と比較して異常に増大する。

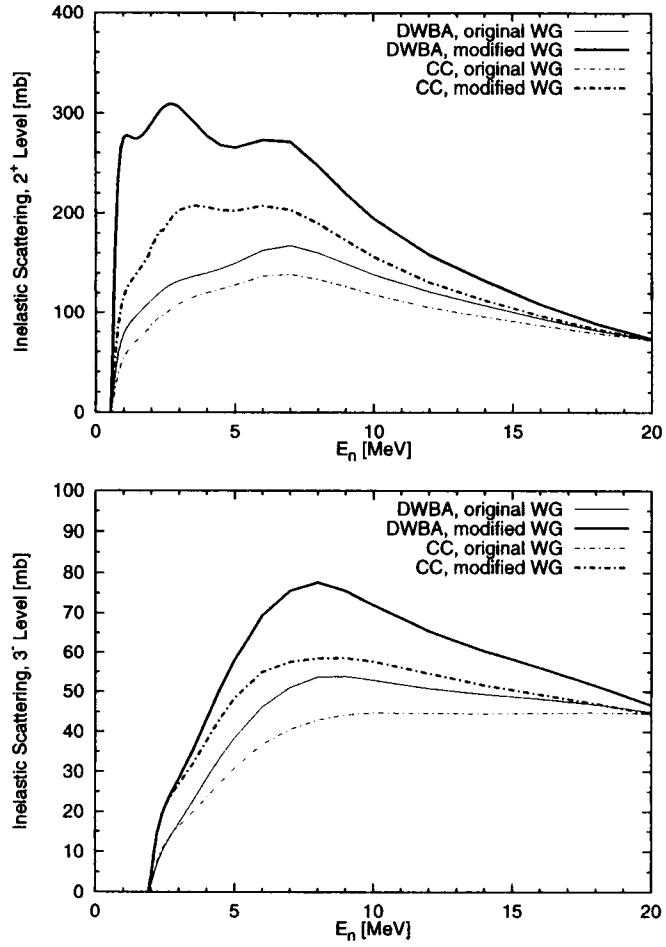


Fig. 1: Direct inelastic scattering cross sections to the  $2^+$  and  $3^-$  levels calculated with the original Walter-Guss potential (thin lines) and the modified Walter-Guss potential (thick lines). The dot-dashed lines are the CC results with the  $0^+-2^+-3^-$  coupling scheme.

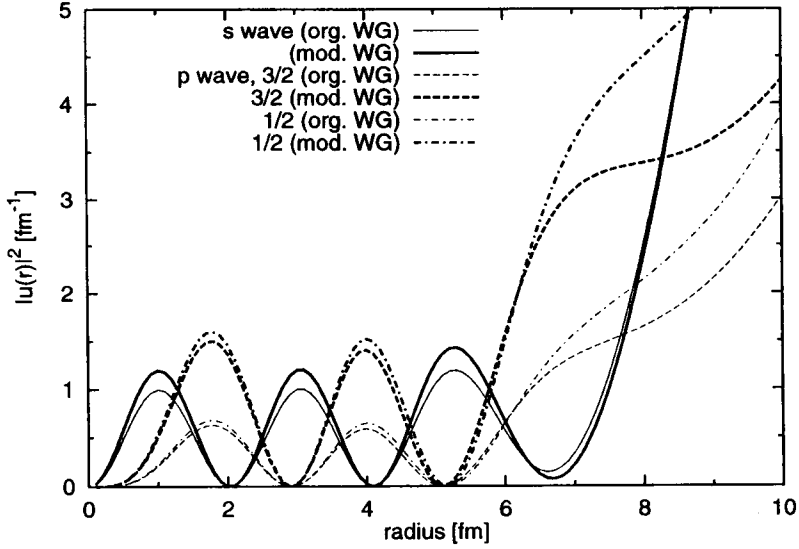


図 2: The squared values of the radial wave functions at  $E_n = 0.1$  MeV. The thin lines are calculated with the original Walter-Guss potential, and the thick lines are with the modified one.

- orgWG を用いた計算では、断面積の増大は見られない。
- 断面積の異常は modWG を用いた CC 計算でも起こる。ただし、CC 計算の異常は DWBA の異常程大きくはない。

従って、閾値異常の原因は DWBA 計算そのものではなく、使用する光学ポテンシャルパラメータにあると考えられる。

ポテンシャルパラメータの影響を調べるには、DWBA 計算を行なうより、SOM 計算で散乱状態を調べるほうが良い。閾値付近での散乱状態を調べるために、低エネルギー中性子 ( $E_n = 0.1$  MeV) の散乱波を計算した。図 2 は、動径方向の波動関数の振幅の絶対値自乗である。modWG の場合、 $p$  波の振幅が非常に強められていることがわかる。

質量数 100 付近は、もともと  $p$ -波の共鳴が起こる領域である。表 1 に、modWG と orgWG で計算した  $s$  波・ $p$  波強度関数を、Mughabghab[8] の編集値と比較して示す。modWG は  $p$  波強度関数を過大評価することがわかる。

いま、ある半径  $r$  までの overlap integral の半径方向の変化を、

$$|I(r)|^2 = \left| \int_0^r u'_j(r') F_L(r') u_j(r') dr' \right|^2 \quad (2)$$

で定義する。ここで、 $u_j(r)$  と  $u'_j(r)$  は歪曲波、 $F_L(r)$  は形状因子である。図 3 は、 $j = j' = 3/2$  ( $\ell = 1, s = 1/2$ ),  $E_n = 0.1$  MeV の時の (2) 式の計算結果を半径  $r$  に対してプロットしたものである。DWBA 計算への歪曲波の効果のみを調べるため、 $2^+$  の準位の励起エネルギーを仮想的に 0 MeV とし、入口と出口チャンネルでの波数、及び光学ポテンシャルの差を無くした。従って、入口チャンネルと出口チャンネルの歪曲波は、図 2 に示されているものと同じである。図 3 から、

表 1:  $s$ -wave and  $p$ -wave strength functions for  $^{100}\text{Mo}$ .

	$s$ -wave $\times 10^4$	$p$ -wave $\times 10^4$
Mughabghab <i>et al.</i>	$0.73 \pm 0.17$	$4.4 \pm 0.9$
original WG	0.91	5.1
modified WG	0.61	7.5
Smith <i>et al.</i>	0.75	4.9

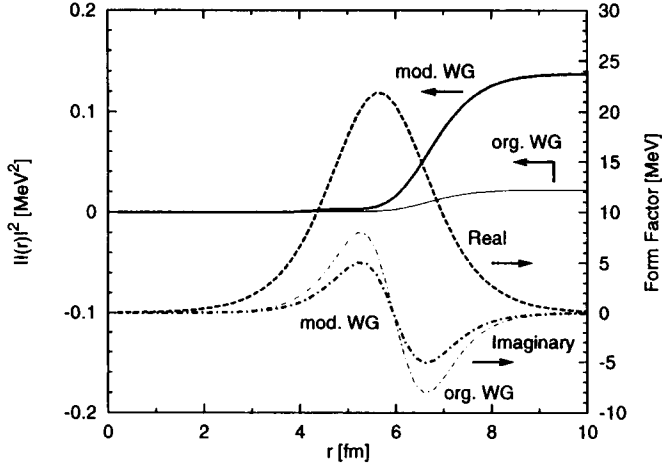


図 3: Comparison of the overlap integral with the original Walter-Guss and the modified Walter-Guss potentials. The entrance channel and the exit channel wave functions are for the  $p$ -wave,  $j = 3/2$  at  $E_n = 0.1$  MeV.

modWG の form factor の虚部は orgWG のものよりも小さいが、overlap integral は逆に非常に大きなものとなっていることがわかる。この効果は、 $p$  波間の overlap だけでなく、 $p$  波と  $f$  波の overlap にも生じる。

DWBA 計算に対する各部分波の寄与を調べる為に、単純な光学ポテンシャルを用いて、非弾性散乱断面積と部分断面積の比較を行なった。用いたポテンシャルパラメータは、

$$\begin{aligned} V &= 50 \text{ MeV}, & r_v &= 1.2 \text{ fm}, & a_v &= 0.6 \text{ fm} \\ W_s &= 3 \text{ or } 5 \text{ MeV} & r_w &= 1.3 \text{ fm}, & a_w &= 0.6 \text{ fm} \end{aligned} \quad (3)$$

というものである。このポテンシャルでは、 $W_s = 3$  MeV のときに  $p$  波の振幅が大きくなる。図 4 の実線は、第一励起準位 ( $2^+$ ) のエネルギーを 0 MeV にして、0~10 MeV 入射での非弾性散乱断面積を計算した結果である。この励起関数と、そのポテンシャルパラメータで SOM 計算したときの全断面積への部分波からの寄与を、重ねて図 4 に示している。 $W_s = 3$  MeV の場合、非弾性散乱断面積に共鳴の様なピークが 500 keV と 2 MeV 付近に現れている。部分断面積の励起関数から、2つのピークは、それぞれ  $p$  波と  $f$  波に対応していることがわかる。すなわち、DWBA の

断面積の異常な増大は、 $p$ 波共鳴が起こる  $A \sim 100$  の質量数領域において、その  $p$  波及び同じパリティを持つ  $f$  波をさらに強める光学ポテンシャルを用いたことが原因である。

同様の異常は、 $s$ 波共鳴が起こる質量数付近に於いて  $s, d$  波を強めるポテンシャルを用いても起こる筈である。それを確認するため、 $s$ 波強度関数が最大になる  $A = 50$  付近での計算を行なった。ポテンシャルパラメータは、

$$\begin{aligned} V &= 52 \text{ MeV}, & r_v &= 1.2 \text{ fm}, & a_v &= 0.6 \text{ fm} \\ W_s &= 1 \text{ MeV}, & r_w &= 1.3 \text{ fm}, & a_w &= 0.6 \text{ fm} \end{aligned} \quad (4)$$

で、 $^{50}\text{Cr}$  の非弾性散乱断面積を、 $J^\pi = 2^+, E_x = 0 \text{ MeV}$  に対して計算した。但し、ここでは非常に小さい値  $W_s$  を与えており、現実的なものではない。この計算結果が図 5 であり、この場合も DWBA 断面積の異常が現れ、それが  $d$  波と  $g$  波に対応しているのがわかる。

図 4, 5 に示された DWBA 断面積の異常は、極端な例を設定した場合であるが、 $W_s$  が小さい場合に起こり得ることが示されている。Walter-Guss のポテンシャルの虚部は  $-14.94(N - Z)/A$  の項を含むため、中性子過剰が大きな核では、 $W_s$  は小さいものとなり、断面積の異常を起こし易い。従って、 $^{100}\text{Mo}$  の他にも非対称性の大きな核で断面積異常が起こる可能性がある。

### 3. Geel のデータとの比較

$\text{Mo}$  同位体に対する  $(n, n'\gamma)$  反応断面積が、近年、Geel で測定されている [9]。非弾性散乱断面積計算を、この実験データに対して行なうことで、実際に断面積評価を行なう際の問題点である DWBA と CC 計算を比較し、FP 核種の非弾性散乱断面積評価手法の検討を行なう。

DWBA 断面積の異常な増大は、 $p$ 波強度関数が極大となる質量数領域で、虚部ポテンシャルが小さい場合に起こりやすいことがわかった。従って、DWBA 計算に使用する光学ポテンシャルは、 $p$ 波強度関数にも注意を払って得たものが適している。Smith らは、全断面積・散乱断面積・ $s$ 波、 $p$ 波強度関数のデータから、 $Z = 39 \sim 51$  の核種に対する局所的な光学ポテンシャルを得ている [10]。このパラメータを用いて計算した  $s$ 波、 $p$ 波強度関数を表 1 に示す。 $p$ 波強度関数は、Mughabghab の編集値と良く一致しており、DWBA 断面積の異常を起こしにくいことが期待される。

この Smith らの光学ポテンシャル [10] を、 $^{100}\text{Mo}$  に対する非弾性散乱の複合核過程と直接過程断面積計算に使用した。直接過程断面積を計算したのは、535.57 keV ( $J^\pi = 2^+$ ) と 1908.3 keV ( $J^\pi = 3^-$ ) の準位であり、CC と DWBA 計算を行なって差を比較した。CC 計算では、2 音子の triplet (0.69512, 1.06379, 1.13611 MeV) の直接過程断面積は非常に小さいと考えられるので考慮せず、 $(0^+-2^+-3^-)$  の結合を行なった。直接過程の断面積に、SOM による Hauser-Feshbach-Moldauer 計算 [11] による複合核断面積を加えて非弾性散乱断面積とした。HFM 計算では、ENSDF に与えられている準位を競合過程として計算した。2.3 MeV 以上は連続領域とし、準位密度パラメータには EGNASH [6] の内蔵値  $a = 17.9 \text{ MeV}^{-1}$  を用いた。変形パラメータは、 $\beta_2 = 0.214$  と  $\beta_3 = 0.208$  [5] である。

Geel の実験データと DWBA を用いた計算結果の比較を図 6 に示す。実験データは、535.57 keV の第一励起準位の断面積に第二励起準位 (695.12 keV) の 88% が混ざったものとされている。第三励起準位 (1.0613 MeV) は複合核計算のみである。第三励起準位の断面積は実験データを良く再現出来ているのに対し、第一・第二励起準位では計算が過大評価になっている。

直接過程の断面積は、図 6 の点線で示されている。直接過程を CC で計算した結果を図 7 に示す。図 6 と比較すると、DWBA 計算と CC 計算の差は非常に小さく、DWBA 断面積の閾値付近での異常は見られない。従って、適切な光学ポテンシャルを用いれば DWBA によって非弾性散乱断面積を評価する手法が有効であることが確認できる。

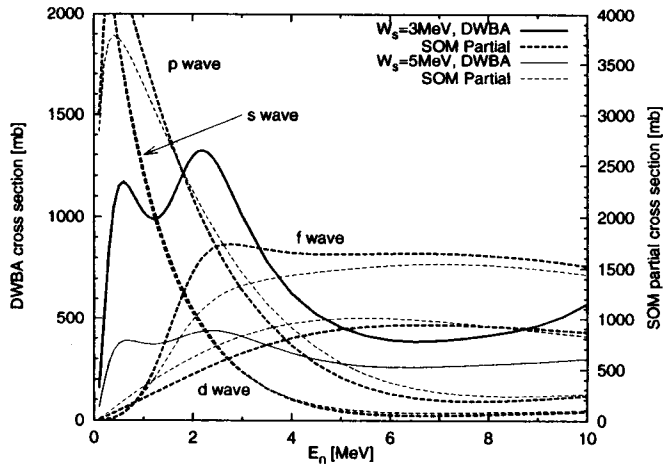


Fig. 4: Comparison of the calculated DWBA cross sections for  $^{100}\text{Mo}$  and the partial cross sections (dashed lines). The DWBA cross sections are calculated for a fictitious level having the excitation energy of 0 MeV and the angular momentum transfer of  $2\hbar$ .

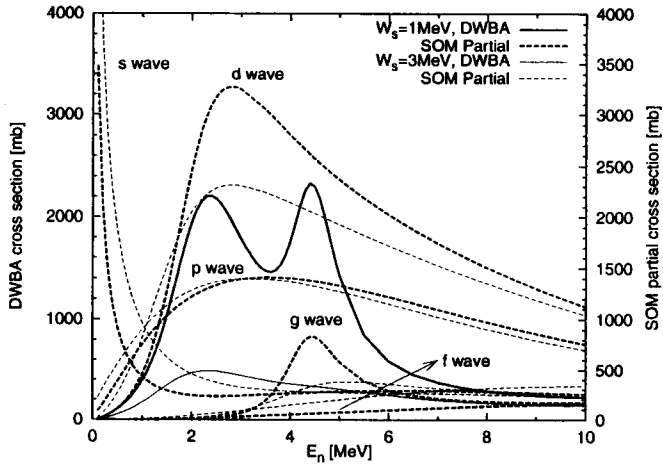


Fig. 5: Same as Fig. 4, but for  $^{50}\text{Cr}$ .

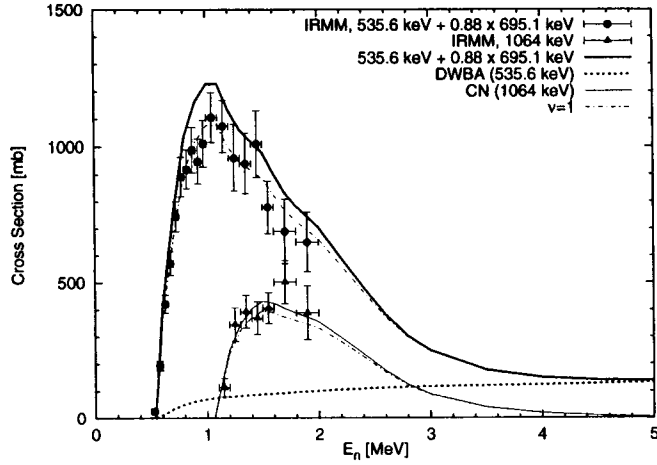


Fig. 6: Comparison of the calculated inelastic scattering cross sections of  $^{100}\text{Mo}$  for the 535.6, 695.1, and 1064 keV levels with the experimental data. Cross sections for the first level contain 88% of the second level. The direct process is calculated with the DWBA. Cross sections for the 1064 keV level contain the compound nucleus (CN) process only. The dot-dashed line corresponds to the compound cross section calculated on the assumption that the level widths distribution is the Porter-Thomas distribution.

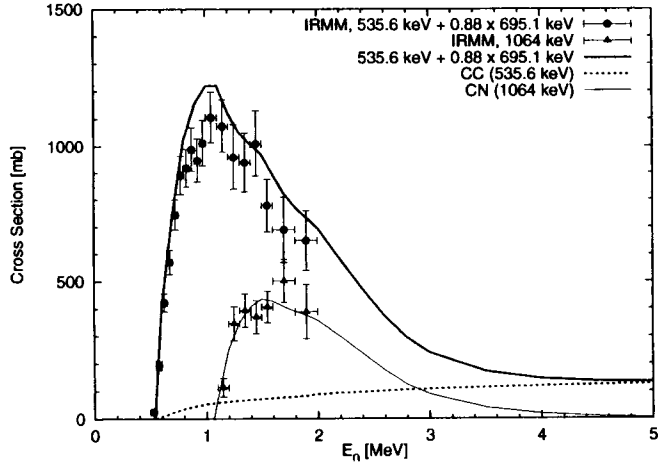


Fig. 7: Same as Fig. 6, but the direct process is calculated with the CC.

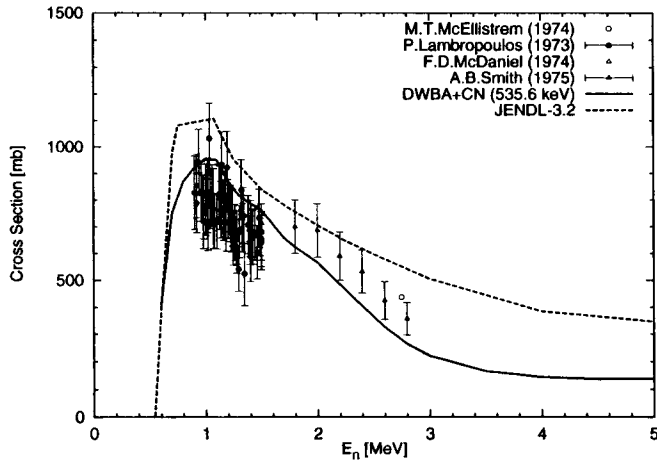


図 8: Comparison of the calculated inelastic scattering cross sections of  $^{100}\text{Mo}$  for the 535.6 keV level with the experimental data.

HFM 計算に使用したチャンネル自由度  $\nu$  は、Moldauer が Monte Carlo シミュレーションで与えたシステマティックである。

$$\nu = 1.78 + (T^{1.212} - 0.78) \exp(-0.228 \sum T) \quad (5)$$

これに対し、しばしば  $\nu$  に対して行なわれる仮定は  $\nu = 1$  で、これは共鳴幅に Porter-Thomas 分布を仮定することになる。この場合は複合核弾性散乱断面積が最大となり、非弾性散乱は小さくなる。図 6 の一点鎖線で示したのが  $\nu = 1$  の場合であり、複合核断面積計算手法の違いによる評価断面積の差異が大きいことがわかる。

図 8 に、535.6 keV 準位への非弾性散乱断面積の中性子測定による実験値 [12][13][14][15] と計算値の比較を示す。実験データのばらつきは大きいですが、計算値はデータの傾向を再現していると言える。図 8 の鎖線は、modWG を用いて DWBA 計算を行なった JENDL-3.2 の評価値であり、全体的に過大評価となっている。

#### 4. 結論

虚部の浅い光学ポテンシャルを  $^{100}\text{Mo}$  の DWBA 計算に使用すると、DWBA 断面積が異常に増大する。この断面積の異常は、虚部に対称項を持つポテンシャルを用いて中性子過剰核に対して計算を行なった時に生じやすい。この問題は DWBA だけでなく CC でも起こるが、その程度は DWBA に比較して小さい。

DWBA 断面積の閾値の異常は、 $p$  波強度関数と関連している。大きな  $p$  波強度関数を与える光学ポテンシャルは、大きな DWBA の断面積を与える。光学ポテンシャルが適切なものであれば、DWBA の断面積異常は起こらず、DWBA と CC の差は小さい。従って DWBA は、FP 核種の核データ評価に有用な手法と言える。



## 参考文献

- [1] Gruppelaar, H., Hogenbirk, A. : *Proc. Specialists' Meeting on Fission Product Nuclear Data, Tokai, Japan, 25-27 May 1992*, p.207 (1992).
- [2] Chiba, S., Smith, A. B. : *Proc. Specialists' Meeting on Fission Product Nuclear Data, Tokai, Japan, 25-27 May 1992*, p.162 (1992).
- [3] Kawai, M., Gruppelaar, H., Schenter, R. E., Wright, R. Q. : *Proc. Specialists' Meeting on Fission Product Nuclear Data, Tokai, Japan, 25-27 May 1992*, p.39 (1992).
- [4] Kawai, M., Chiba, S., Nakagawa, T., Nakajima, Y., Watanabe, T., Zukeran, A., Gruppelaar, H., Hogenbirk, A., Salvatores, M., Dietze, K., Wright, R. Q., Schenter, R. E. : *Proc. Int. Conf. Nuclear Data for Science and Technology, Gatlinburg, U.S.A., 9-13 May 1994*, p.795 (1994).
- [5] Cereda, E., Pignanelli, M., Micheletti, S., von Geramb, H. V., Harakeh, M. N., De Leo, R., D'Erasmo, G., Pantaleo, A. : *Phys. Rev.*, **C26**, 1941 (1982).
- [6] Yamamuro, N. : *JAERI-M 90-006* (1990).
- [7] Walter, R. L., Guss, P. P. : *Proc. Int. Conf. Nuclear Data for Basic and Applied Science, Santa Fe, 13-17 May, 1985*, p.1079 (1986), *Rad. Effect*, **95**, 73 (1986).
- [8] Mughabghab, S. F., Divadeenam, M., Holden, N. E. : "*Neutron Cross sections*" Vol.1: "*Neutron Resonance Parameters and Thermal Cross Sections*", Academic Press, New York (1981).
- [9] Birn, I. -G., Meister, A., Wattecamps, E., Weigmann, H. : *Proc. Int. Conf. Nuclear Data for Science and Technology, Trieste, Italy, 19-24 May 1997, to be published*, Numerical data by private communication.
- [10] Smith, A. B., Guenther, P. T., Whalen, J. F. : *Nucl. Phys.*, **A415**, 1 (1984).
- [11] Moldauer, P. A. : *Nucl. Phys.*, **A344**, 185 (1980).
- [12] Lambropoulos, P., Guenther, P., Smith, A., Whalen, J. : *Nucl. Phys.*, **A201**, 1 (1973).
- [13] McEllistrem, M. T., Brandenberger, J. D., Sinram, K., Glasgow, G. P., Chung, K. C. : *Phys. Rev.*, **C9**, 670 (1974).
- [14] McDaniel, F. D., Brandenberger, J. D., Glasgow, G. P., Leighton, H. G. : *Phys. Rev.*, **C10**, 1087 (1974).
- [15] Smith, A. B., Guenther, P., Whalen, J. : *Nucl. Phys.*, **A244**, 213 (1975).