

話題・解説 (III)

IAEA 「核データモデル計算のための標準入力
パラメータライブラリ(RIPL Starter File)」の現状

原研核データセンター

深堀 智生

fukahori@cracker.tokai.jaeri.go.jp

1. はじめに

「限られた実験データに基づいて将来的な核データニーズにどう対応するか」という問題に関して、核物理モデルの予測精度を飛躍的に向上しなくてはならないことは論を待たない。原子核反応の理論的理解は、近年、かなりの信頼性を得るにいたり、核物理モデル開発は核データ評価の重要な資源となった。評価済核データを整備する上で核物理モデルが広く使用されるに伴い、評価計算には信頼性の高い入力パラメータが重要となった。中性子、陽子等の軽粒子入射による核反応を考慮するとき、発電用原子炉、遮蔽設計、サイクロトロンなどによる医療用 RI 製造及び放射線治療、核廃棄物の消滅処理等の利用があげられる。これらの利用分野においては、断面積、放出粒子の角度分布及びスペクトルに関する詳細な知見が必要となる。特に、低入射エネルギー粒子の利用分野に対しては、核物理理論は必要とされるほぼ全ての粒子及び反応を網羅するモデルを構築できるようになった。これらのモデルは、直接反応過程を含む光学模型、核分裂反応を含む複合核崩壊過程、前平衡過程(多段階直接反応過程)等である。実際のモデルコードに使用にあたっては、対象となる核種の非常に多くの状態を記述する数値データの入力が必要となる。例えば、原子核質量、離散準位、中性子共鳴、光学模型パラメータ、準位密度、核分裂障壁、 γ 線強度関数などである。これに対応して、多くの機関及び専門家たちが、多様な入力セットを独自に構築し、計算に使用してきた。しかし、これらデータベースの多くは報告書などが殆ど整備されておらず、関係者以外のユーザの使用は制限されていた。多くの核データ評価グループにとって、蓄積された膨大な入力データに関する知見及び関連する職人技が将来の利用分野のために維持できないというのは、重大な問題となっている。

この目標のために IAEA では、1994 年に「核データモデル計算のための標準入力パラメータライブラリの開発(RIPL-1 Starter File)」という標題の IAEA 協力研究計画(Coordinated Research Project: CRP)を発足させた。この計画は 1994-1997 年の 3 年間、

原研、RPCPI (Minsk, Beraruse)、CEADN (Havana, Cuba)、CEA (Bruyeres-le-Chatel, France)、IIHAS (Budapest, Hungary)、ECN (Petten, The Netherlands)、IPPE (Obninsk, Russia)、UAS (Kiev, Ukraine)、LANL、(Los Alamos, USA)の各参加機関の協力で実施され、“Starter File”を整備した。“Starter File”は、原子核質量及び変形、離散準位構造、平均中性子共鳴パラメータ、光学ポテンシャルパラメータ、準位密度、 γ 線強度関数及び連続領域の角度分布から成る数値データベースによって構成されている。本稿では、RIPL-1整備の経緯、内容の概説、入手方法、今後の展開について簡単に解説する。

2. 背景及び経緯

多様な入力データセットを主要な核データ評価グループの協力の下に収集し、一つの国際的に認知された入力データライブラリーを構築する案が、1990年代の初頭に核データコミュニティーで議論され、国際核データ委員会(INDC)によってIAEAの核データ関連計画の最優先課題として推奨された。日本でもシグマ委員会の中で同様の議論がほぼ同じ時期になされ、統合核データ評価システム(INDES)として、現在、整備されつつある。この目標のためにIAEAでは、この種の作業の膨大さを考慮して、2段階に分けて実行することとした。まず、これらパラメータの適切な解析を経て、現状での入力パラメータに関する知見を総括し、単一の“Starter File”として構築するために、1994年に「核データモデル計算のための標準入力パラメータライブラリーの開発(RIPL-1 Starter File)」という標題のIAEA協力研究計画(IAEA/CRP)を発足させた。この計画は1994-1997年に実施され、“Starter File”を整備した。

“Starter File”は以下に示す7つのセグメントから成る数値データベースによって構成されている。

- (1) 原子核質量及び変形
- (2) 離散準位構造
- (3) 平均中性子共鳴パラメータ
- (4) 光学ポテンシャルパラメータ
- (5) 準位密度 (全準位密度、核分裂準位密度、部分準位密度)
- (6) γ 線強度関数
- (7) 連続領域の角度分布

“Starter File”は現在 WWW (<http://www-nds.iaea.or.at/ripl/>から見る事が出来る) 及び CD-ROM の形にて公開されている。また、IAEA-TECDOC[1]を“Starter File”の詳細報告書として作成した。これらは、核分裂・核融合エネルギー、RI 製造、中性子・陽子癌治療、遮蔽、核廃棄物消滅処理のような低エネルギー原子力利用のための原子核モデルコードユーザをターゲットしている。100 MeV までの中性子、陽子、重陽子、

三重陽子、 ^3He 粒子、 α 粒子及び γ 線を入射及び放出粒子として扱う。また、検討の経緯をしめす第 1、2 回会合の Summary Report[2,3]も公開されている。

3. 格納されているデータの概要

”Starter File”は、参加各国で集約した原子核質量及び変形、離散準位構造、平均中性子共鳴パラメータ、光学ポテンシャルパラメータ、準位密度、 γ 線強度関数及び連続領域の角度分布から成る数値データベースによって構成されている。これらデータベースは集められたそれぞれのセグメントの各国のファイルに対し、慎重な比較・検討の後、推奨ファイルとその他のファイルという形で分類されている。詳細は、文献[1]を参照していただきたいが、以下、セグメント毎に内容を概説する。

3.1 原子核質量及び変形

このセグメントに原子核質量、結合エネルギー及び基底状態の変形に関する情報が含まれている。推奨値として約 9000 核種に関する Möller らの評価値[4]が格納されている。実験値に基づいた Audi らのデータ[5]も約 3000 核種について同時に格納されている。一般的な原則として、Q 値などを計算する場合には、実験値のあるものに関してはこれを優先的に用いるべきである。

3.2 離散準位構造

基本的に ENSDF を基にした Budapest グループの推奨値が格納されている。ここには、2585 核種に対する 96834 本の離散準位データ（スピン、パリティ、半減期）が 105423 本の γ 線データ（ γ 線エネルギー、分岐比）とともに納められている。半減期が 1 秒以上の核異性体準位に関するフラグも含まれている。10 以上の準位データが既知の 1277 核種について指数関数フィットにより missing の無いと思われる準位数を与えている。また、スピン及びパリティが1つに決定されている準位数も各核種毎に格納されている。これらは、準位密度パラメータ決定のヒントになる。その他のファイルとして、原研、イタリア、中国、ロシア、米国の集約したデータも格納されている。

3.3 平均中性子共鳴パラメータ

中性子強度関数、平均共鳴幅及び平均共鳴間隔は統計模型計算に要求されるパラメータである。一般的に、これらパラメータは分離共鳴パラメータセットの解析によって得ることが出来る。しかし、実際は、実験データの分解能や感度に起因する不完全性(missing)及び共鳴幅の不確かさにより解析に制限が加えられることとなる。したが

って、普通パラメータ推定は共鳴準位の missing を考慮した評価に基づかねばならない。多くの統計解析手法が開発されており、殆どの手法が RIPL-1 のための評価に応用された。信頼性の高いパラメータ誤差の推定により Obninsk のパラメータセットが推奨値として格納されている。その他のファイルとして中国及びベラルーシのデータが格納されている。

3.4 光学ポテンシャルパラメータ

このセグメントには光学模型に関する表記法及び 293 のポテンシャルセットが格納されている。この内、中性子に関するものが 76 セット、陽子 125 セット、重陽子 6 セット、三重陽子 26 セット、 ^3He 粒子 53 セット、 α 粒子 7 セットが格納されている。同時に、核種別の球形、振動・回転準位のポテンシャルも格納されている。ここでパラメータセットは、一般的な表記法で格納されており、大まかに言って個別の核種のポテンシャルセットが優先的に使用されるべきである。グローバルポテンシャルセットを使用すべき場合は推奨セットとして記述されている。加えて、ファイルを集約するサブルーチン及び短いプログラムも与えられている。

3.5 準位密度

準位密度は核反応断面積計算のための鍵となる。ここでは、統計模型（主に低エネルギー領域の計算）用の全準位密度、核分裂過程計算用の核分裂準位密度及び核分裂障壁パラメータ、前平衡過程計算に必要な部分準位密度（粒子-空孔準位密度）に分けて格納してある。

3.5.1 全準位密度

原子核反応への統計模型理論の応用のためには、信頼できる実験データから導出された準位密度パラメータを得ることが重要となる。一般的に、離散準位の集積及び中性子共鳴の平均準位間隔の実験データがこれに当たる。これら実験データにフィットされた準位密度パラメータが以下に示す3つの準位密度公式について格納されている。

(1) Gilbert-Cameron モデル

最多の格納核種数を持つ中国のパラメータセットが推奨ファイルとして格納されている。その他のファイルとして、原研、インド、ロシア、Iljinov ら[6]及び Mengoni ら[7]のデータが納められている。

(2) Back-shifted Fermi ガスモデル

ロシアのファイルが推奨ファイルとして、中国のデータがその他のファイルとして格納されている。

(3) 一般化超流動モデル

ロシアのファイルが推奨ファイルとして、中国のデータがその他のファイルとして格納されている。

この他、Ignatyuk らによって開発されたミクロスコピックなアプローチ[8]による準位密度計算のためのプログラム、Möller らの単一粒子準位データ、基底状態変形データ及びプログラムが添付されている。

3.5.2 核分裂準位密度

核分裂準位密度（核分裂複合核準位密度または核分裂鞍点変形準位密度）はアクチノイド核種の核分裂断面積の統計模型計算に必要である。Back-shifted Fermi ガスモデル、Constant Temperature モデル、一般化超流動モデルが広く準位密度の記述に用いられている。これらは、中性子結合エネルギー近傍での励起においてはほぼ適切な準位密度を与えている。しかし、核分裂断面積計算に重要であるにもかかわらず、低エネルギー領域で相違が観られる。Back-shifted Fermi ガスモデル及び Constant Temperature モデルは整合性のとれた対エネルギー、殻エネルギー、集団運動効果の補正を導入するのに困難がある。これら補正は、平衡状態または鞍点における変形に依存するので、準位密度パラメータ a の再規格化やエネルギー依存性の記述に欠くことが出来ない。この点、一般化超流動モデルには比較的簡単に導入できる。核分裂準位密度及び核分裂障壁パラメータは相互に依存関係があるので、RIPL-1 に含まれることになった。ここでは、ロシアの核分裂障壁パラメータを基にベラルーシで改訂されたものが推奨ファイルとして格納されている。その他のファイルとして中国のデータが格納されている。

3.5.3 部分準位密度

ここでは、前平衡過程計算における部分準位密度計算手法の記述に基づいた Avrigeanu ら[9]のプログラムが格納されている。このプログラムには closed-form の取扱の範囲内で対エネルギー及び殻エネルギーの補正を組み込んだ種々の等間隔及び Fermi ガス単一粒子モデルを使用している。また、Capote ら[10]により開発された BCS 対エネルギー補正を考慮した殻モデル単一粒子準位を用いたミクロスコピックなアプローチによるプログラムも含まれている。

3.6 γ 線強度関数

γ 線強度関数は核反応における γ 線チャンネル記述に重要となる。巨大共鳴（主に E1、但し E2、M1 も考慮）パラメータ及び γ 線強度関数の実験値から導出された系統性が格納されている。巨大電気双極子共鳴パラメータに関し、中国のものを推奨

ファイルとしている。その他のファイルとしてロシアのものが格納されている。また、グローバル γ 線強度関数に関してオランダのファイルが推奨されている。

3.7 連続領域の角度分布

連続領域の粒子放出角度分布は評価済核データファイルにとって重要である。RIPL-1 では Kalbach の系統式[11]が、その広い応用範囲及び簡便な記述方法により推奨されている。この系統式によるプログラムが推奨ファイルとして格納されている。また、Chadwick らによって提唱された式[12]によるプログラムも格納されている。

4. 入手方法

”Starter File”はネットワークを介して以下の方法で入手することが出来る。

- (1) WWW (<http://www-nds.iaea.or.at/ripl/>)
- (2) ftp ([iaeand.iaea.or.jp](ftp://iaeand.iaea.or.jp), username: ripl, パスワード不要)

ディレクトリー構成などの詳細は IAEA-TECDOC-1034[1]を参照していただきたい。IAEA-TECDOC 自身及び CD-ROM 版は、services@iaeand.iaea.or.atへ電子メールを送付すると入手することができる。

5. 今後の展開

RIPL-1 の IAEA/CRP の終了に伴い、同 CRP の critical review(特に、IAEA-TECDOC 作成)を行い、新しく開始される RIPL-2 に関する IAEA/CRP の作業内容及び目的選択に対する諮問を作成するために諮問家会合が、IAEA 本部において、1997 年 12 月 9-12 日に開催された。”Starter File”は多くのユーザに膨大なパラメータを与えるものとなるであろうし、将来の改訂及び開発に対して再現性を確保する。第 2 段階では、”Starter File”の検証、改訂・拡張、モデル計算コードとのインターフェースやライブラリ検索ツールの開発に焦点を当てる。これに従い、IAEA 核データセクション(NDS)は提案書の準備を行い、新 CRP 「核データ評価のための原子核模型パラメータのテスト (標準入力パラメータライブラリー(II))」は 1998 年発足 (活動期間：1998-2001 年の 3 年間) することとなった。

RIPL-2 は新 CRP の下、以下の 2 つの重要な作業を行う、

- (1) 要求されるデータの品質保証のために”Starter File”をテストする

”Starter File”の全てのセグメント (特に、光学模型パラメータ及び準位密度パラメータ) に関して徹底的なテストを行い、重要なセグメント (離散準位構造における準位積算プロット図の再解析、光学模型パラメータにおける広範囲のエネルギー領域に対応した現象論的

パラメータの付加、全準位密度公式への殻構造効果導入) 改訂を行い、いくつかのセグメントを拡張(集団運動準位に対する変形パラメータ及び巨大双極子共鳴パラメータの格納)する。

- (2) 実際の利用分野における"Starter File"利用促進のため、ユーティリティツールを開発する

慎重に選択された核反応計算コードに対する標準インターフェースを開発し、ライブラリーの保守・検索ツールを開発することである。

新 CRP から期待される成果は：

- (1) 国際的に検証・認知された核反応データモデル計算用入力データライブラリ
- (2) 選択されたモデル計算コードに対するユーザの使いやすいインターフェース
- (3) WWW 及び異機種 (VMS, Windows, UNIX) 対応の CD-ROM 用検索ツール
- (4) 本 CRP の最終報告書として作成され、IAEA-TECDOC として公開される改訂版標準入力パラメータライブラリーハンドブック

である。

6. おわりに

以上、RIPL-1 整備の経緯、内容の概説、入手方法、今後の展開について簡単に解説した。RIPL-2 は今後の理論計算に基づく核データ評価に多大な影響及び恩恵を与えるものであると考察する。この結果は、シグマ委員会と協力の下、統合核データ評価システム(INDES)へ取り込み、国内での利用の便に共する予定である。

参考文献

- [1] "Handbook for calculations of nuclear reaction data – Reference input parameter library -", IAEA-TECDOC-1034, IAEA (1998).
- [2] "First Research Co-ordination Meeting Summary Report", INDC(NDS)-321, IAEA (1994).
- [3] "Second Research Co-ordination Meeting Summary Report", INDC(NDS)-350, IAEA (1996).
- [4] P. Möller, et al.: Atomic Data and Nucl. Data Tables, **59**, 185 (1995).
- [5] G Audi and A.H. Wapstra: Nucl. Phys., **A595**, 409 (1995).
- [6] A.S. Iljinov, et al.: Nucl. Phys., **A543**, 517 (1992).
- [7] A. Mengoni and Y. Nakajima: J. Nucl. Sci. Technol., **31**, 151 (1994).
- [8] A.V. Ignatyuk: "Statistical Properties of Excited Atomic Nuclei", Energoatomizdat, Moscow (1983), in Russian; Translated by IAEA, Report INDC-233(L), IAEA(1985).

- [9] M. Avrigeanu et al.: “Development of Data Files with Partial Level Densities for Nuclear Data Calculations”, IAEA Report (To be published).
- [10] R. Capote and R. Pedrosa: DENSIDAD code (1996) unpublished; Private communication to P. Oblozinsky of the IAEA (1997).
- [11] C. Kalbach: Phys. Rev., **C37**, 2350 (1988).
- [12] M.B. Chadwick and P. Oblozinsky: Phys. Rev., **C50**, 2490 (1994).