

核データ計算における最近の問題点とその解決法

核データ専門部会
評価計算システムWG*

評価計算システムWGでは、光学ポテンシャル、準位密度など、核データ計算に共通する基本的物理量に関する検討を進めるとともに、JENDL-3.2問題点検討小委員会、FPデータWGなどから提起された問題点を解決する指針を与えるべく活動してきた。そのなかで、種々のコードを使って核データ計算を行う上で留意すべき点がいくつか明らかになった。これらの知見は、評価者全般にとって有用あると思われるので、ここにその概要をまとめて解説する。

1. JENDL-3.2の理論計算上の問題点とその解決策

JENDL-3.2は1994年6月に公開されて以来、さまざまな方面で利用されてきたが、それに伴い、種々の問題点も明らかになってきた。JENDL-3.2問題点検討小委員会では問題点を洗い出し報告をまとめた。(その概要については『核データニュース』No.57(1997), pp.132-152を参照。)

当WGでは、そこで提起された問題点のうち理論計算法に関連した問題点を取り上げて検討を加え、その原因と解決策を探った。理論計算に関連した問題点は以下の3点である。

- (a) 主要重核(U, Puなど)の2次中性子連続スペクトルの形がMaslovの評価値と大幅に異なる問題
- (b) Direct captureの扱い
- (c) 新規実験データの反映の問題

以下に各項目につき検討した結果を述べる。

(a) 粒子放出反応における2次中性子連続スペクトルの形状の問題

JENDL-3.2の主要重核の連続領域における2次中性子スペクトルの形がMaslov(ベラルーシ)らの計算値と大きく異なることが明らかになった。例としてU-235の8MeV中性子に対する連続領域での非弾性散乱中性子スペクトルをFig.1に示す。JENDL-3.2はMaslovの計算値と比べてはるかにソフトなスペクトルを与えている。

検討の結果、次のことが分かった：

• Maslovが使用した計算コードはSTAPREをベースにしており、JENDL-3.2はGNASHコードを用いて計算している。両者とも統計モデルと前平衡モデルに基づき多段階粒子放出を計算するコードである。

*リーダー：大澤孝明(近畿大) E-mail: ohsawa@mvg.biglobe.ne.jp

^{235}U $E_n = 8 \text{ MeV}$
COMPARISON WITH JENDL-3

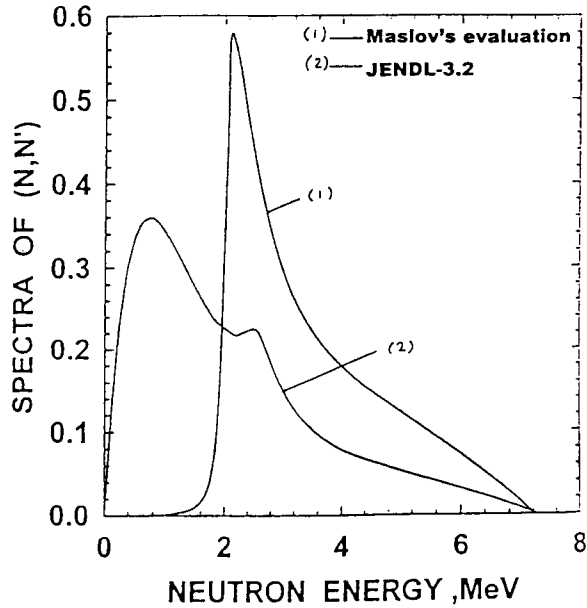


Fig. 1 Secondary energy distribution for U-235 (JENDL-3.2 and Maslov's evaluation)

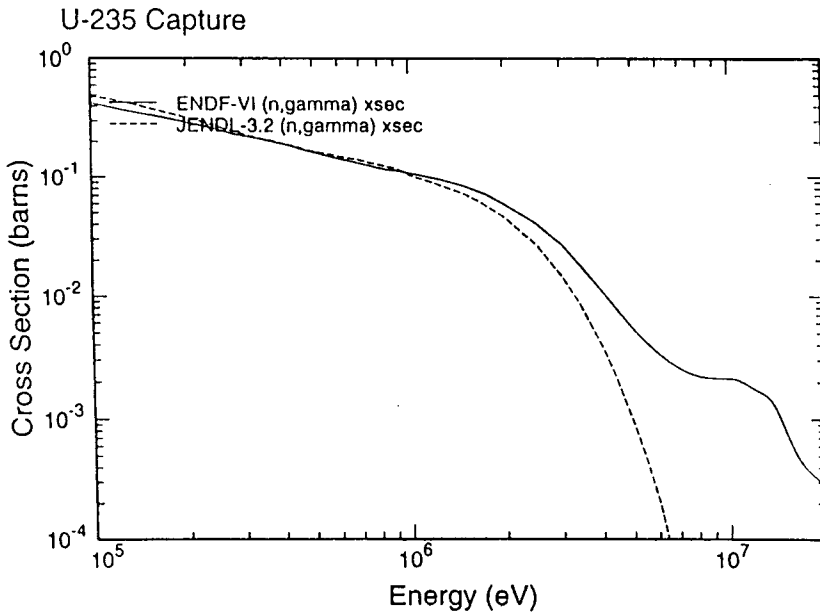


Fig. 2 U-235 capture cross-sections (MeV range)

• 連続領域での(n,n')反応の計算の場合、STAPREは2個以上の中性粒子を出さない純粋の(n,n')反応の2次中性子スペクトルを出力する。これに対し、GNASHでは総計何個の粒子が放出されるかに拘わりなく1,2,3...番目の放出粒子スペクトルを別個に出力する。すなわち、GNASHの1番目の粒子スペクトルには2個以上の中性粒子を出す場合も含まれている。

• この違いを意識せずにGNASHの1番目の放出粒子スペクトルを直接ファイル化したのが誤りの原因である。これを解決する方法としては、GNASHの出力をGAMFILコード(肥田氏(東芝)作成)で処理して(n,n')反応の2次中性子のみスペクトルを作ればよい。

(b) Direct captureの扱い

JENDL-3.2では捕獲断面積評価に対してdirect, semidirect captureを考慮していない。しかし、軽・中重核の熱中性子および低エネルギー中性子捕獲反応において、direct captureがしばしば支配的になることが知られている。また、絶対値は小さく炉物理的には重要ではないが、JENDL-3.2ではMeV中性子に対するdirect, semidirect captureを考慮していないため、ENDF/B-IVとの間に差異が見られる(Fig.2)。これらのことは、天体物理では大きな問題を生じるので汎用ファイルとしては正しいデータを与えておく必要がある。

• 北沢委員が作製したdirect, semidirect capture断面積計算コードHIKARIが核データセンターに提供してあるので、必要な核種についてこれを使って計算すればよい。

(c) 新規実験データ(特に10数MeVにおける断面積)の反映の問題

最近、中高エネルギー領域(10~100MeV)での新しい測定データが出てきているので、その結果をJENDLに反映する必要がある。

• 最近のデータの解析から、10数MeV領域でも前平衡過程が効いていることが明らかになってきた。中重核以上の核からの連続スペクトルを計算する場合には前平衡過程を考慮した計算を行うべきである。

• 従来は14MeV以上のデータが存在しない場合に、14MeVデータの解析に基づいて20MeVデータを外挿的に決めることが多かったが、中高エネルギーでの評価から決めた20MeVデータとうまく接続しない場合がある。今後評価を行う場合には、20MeV以上の領域のふるまいも考慮して解析すべきである。

2. F P核種の非弾性散乱断面積の評価法

NEA/NSC評価国際協力SG10でF P核種の非弾性散乱断面積の評価値に次のような問題があることが指摘されている。

- 1) 特に集団運動の直接励起過程の扱いに問題がある。JENDL-3.2ではDWBA(歪曲波ボルン近似)法がよく使用されているが、CC(チャンネル結合)法を使用すべきではないか、との意見もある。
- 2) F P核種の中でも評価値と実験値の差異が著しいものとそうでないものがある。たとえば、Mo同位体のうちMo-100のJENDL-3.2の評価値が実験値に比べて過大評価になっている。

この問題について各国で検討した結果を1998年6月のNEA/NSC会合で報告することにな

っている。シグマ委員会のF P核データWGはすでに解散したので、当WGで検討してほしいとの要望があった。

これについて検討した結果、次のことが分かった。

- 原理的にはDWBA法よりCC法が優れているが、すべてのF P核種をCCで計算するには及ばない。どの計算法を用いるかは、対象核種ごとにselectiveに考えるべきである。

- いずれの方法を採用するか判断基準の目安としては、

- ①変形パラメータ $\beta > 0.2$ の核種、

- ②準位間の γ 遷移に対する換算遷移強度の大きなもの

に対しては、チャンネル間の結合が強いので、CCを用いた方がよいと考えられる。また、中性子散乱のデータがない場合は、(p,p')データをCCで解析した β 値があれば、それを参考にするのがよい。

- 断面積の形に顕著な異常が見られるMo-100について、DWBAとCCを用いて計算を行った結果、この異常は計算法の問題(DWBAかCCか)というより、採用された光学ポテンシャルの問題であることが明らかになった。すなわち、p波中性子強度関数が最大になる質量領域の核種では、虚数部が小さい修正Walter-Gussポテンシャルを使用すると、overlap integralが大きくなり、しきい値近傍で断面積が異常になる。この傾向はDWBA計算において特に著しいが、CCでも同様な問題がおこる。(この結果については、河野、渡辺(九大)、川合(高エネ研)氏の論文がJ. Nucl. Sci. Technol. Vol.35, No.8, 519 (1998)に掲載予定であり、また評価者の便宜のため『核データニュース』No.60, p.107 (1998)に邦文の解説を掲載した。)

- Mo-100の場合に限らず、中性子強度関数が最大になる質量領域では同様な問題が発生する可能性がある。光学ポテンシャルの採用に当たっては、SPRT法によりs, p波強度関数、散乱半径、全断面積が適正な値になっていることを確認することが望ましい。

3. 核モデル計算の入力パラメータ

核モデル計算をおこなう際に、適切なコードの選択と並んで重要なのは入力パラメータの選択である。本WGでは、光学ポテンシャル(OMP)、準位密度(LDP)など基本的物理量についての検討も進めてきた。これらの量は、従来は現象論的なパラメータとして扱われることもあったが、近年の研究の進展によりその物理的根拠が明らかになりつつある。本WGとしていまだ推奨値を出すには至っていないが、現在の研究の状況を簡単に紹介しておく。

(1) 光学ポテンシャル

- 分散関係式の効果

原子核が分散性媒質としての性質を有することから、OMPの実数部と虚数部の間に分散関係式と呼ばれる関係が成立することが知られている。これを考慮すると実数部は従来のようなWoods-Saxon型からずれた形状をもつことになる。

北沢委員(東工大)の研究によると、Dave-GouldのOMPをHartree-Fockポテンシャルと見なし、これに分散項を付加することによりつくったC-12の分散ポテンシャルは、低エネルギー中性子の直接捕獲反応断面積の測定値を良好に説明できることがわかった。このことから、軽核の低エネルギー領域での全断面積の計算には分散項が重要であり、直接

捕獲過程の解析において Hartree-Fock ポテンシャルの非局所性を考慮することが重要であることが明らかになった。(H.Kitazawa *et al.*, Phys. Rev. C57, 202 (1998)を参照。)

- ポテンシャルの軌道角運動量依存性

⁵⁶Fe の共鳴領域の平均全断面積の 1 MeV 付近での実験値と OMP 計算値との食い違いの問題はチャンネル結合法や分散ポテンシャルによっては解消されない。これを説明するために、河野氏(九大)らはポテンシャルの幾何学的因子は固定したまま、**実数および虚数部の深さに軌道角運動量依存性をもたせる試み**を行い、これにより 1 MeV 近傍での断面積のエネルギー依存性が良好に再現された。(T.Kawano & F.H.Froehner, Nucl. Sci. Eng. 127, 130 (1997)および『中性子ポテンシャルの現状』(日本原子力学会刊、1997) p.162を参照。)

- 微視的理論にもとづく光学ポテンシャル

核力から出発して OMP を構成する方法の研究が進み、実用の域に近づいてきた。千葉委員(原研)は、JLM(Jeukenne-Lejeune-Mahaux)理論および相対論的インパルス近似(RIA)に基づいて光学ポテンシャルを構成し、それを用いて C-12、Pb-208 の断面積を計算した。この2つの核種についてはポテンシャル強度を調整することなくデータを再現することができた。このような微視的 OMP と従来のグローバル OMP との関係は必ずしも明らかでないが、これを検討することによりグローバル OMP の改良をはかることも期待できる。

(2) 準位密度パラメータ

従来の準位密度公式では shell 効果と pairing 効果が別々に扱われてきた。中村委員(富士電機)は、① shell 効果と pairing 効果の励起エネルギー依存性、②両者の間の干渉効果、③ collective enhancement を考慮し、また、④変形エネルギー補正項の励起エネルギー依存性を考えることにより核の基底状態と励起状態に対して同一のモデルを適用した、という特徴を有する SPC モデルを提案した。この新しいモデルではパラメータの系統性が改善されることがわかった。(H.Nakamura, Proc. 1997 Symposium on Nuclear Data, p.352 (1998)を参照。Full paper は近日中に発表予定。)

(3) Reference Input Parameter Library (RIPL)

IAEA/CRPでは、核モデル計算の入力パラメータ・ライブラリ **Reference Input Parameter Library (RIPL)**を作成中である(日本からは深堀委員(原研)が参加している)。現在その phase-I が終了した段階であるが、これには次のような物理量および処理プログラムが含まれている。

- ・ 光学ポテンシャル (OMP)
- ・ 準位密度パラメータ(LDP)
- ・ 原子質量と核変形度
- ・ 準位構造
- ・ 平均中性子共鳴パラメータ
- ・ ガンマ線強度関数
- ・ 連続領域角度分布

これらはいずれも核データ評価計算にとって基本的な重要性をもつ課題であり、学問的にも未解決な—それゆえに興味深い—問題も含んでいる。現段階では各パートのとりまとめ責任者の見解を色濃く反映した"Starter file"の性格を免れないが、完成の暁には入力パラメータを決定する際の有力な資料になることが期待される。本WGでもここにあげられた

物理量について検討を進める予定である。

4. まとめ

評価計算システムWGで検討を進めてきた課題について、これまでに得られた成果と現在検討中の問題について解説した。JENDL-3.3 作成へ向けての仕事の中でこれらの知見が活かされることを希望する。このWGは、このほか、統合核データ評価システム (INDES) の発展・拡充の課題にも取り組む予定であり、また、他のWGから理論計算に関連した問題が提起されれば、その解決にも尽力するつもりである。

