

会議のトピックス (V)

IAEA/CRP

「核データ評価のためのモデルパラメータのテスト (Reference Input Parameter Library: Phase II、 RIPL-II)」 第2回研究調整会合

日本原子力研究所核データセンター

深堀 智生

fukahori@ndc.tokai.jaeri.go.jp

1. はじめに

IAEA/CRP 「核データ評価のためのモデルパラメータのテスト(Reference Input Parameter Library: Phase II、 RIPL-II)」 第2回研究調整会合が、2000年6月12日～16日にイタリアのヴァレンナにて開催された。会議ホストの E. Gadioli ミラノ大教授及び D.W. Muir IAEA 核データセクション(NDS)長の挨拶に引き続き、Agenda 及び座長(P.G. Young、LANL)の承認を行った後、会議に入った。Muir は、「長半減期 FP」、「中性子入射反応」、「放射化断面積」、「荷電粒子放出反応」、「光核反応データ」、RIPL-I 等の最近の IAEA/CRP 活動の経緯を紹介し、RIPL-II は最近の IAEA/NDS 新サービスのハイライトであると位置づけた。以下、会議の概要を報告する。尚、報告中の敬称は省略させていただく。

2. CRP 参加者による進捗状況などの発表

S. Goriely (ブリュッセル大)は、RIPL-II パラメータの内、質量表、準位密度パラメータ(LDP)、変形パラメータについての改良と拡張について報告した。原子核質量公式に関しては、拡張 Thomas-Fermi+Strutinsky 積分(ETFSD)法を用いた計算に加えて、平均場モデル(ミクロスコピック・モデルの近似)やマクロ・ミクロスコピック結合法等を加味して、質量表の信頼性、精度、質量及び核半径の予測性に関する発表を行った。変形パラメータに関しては、Raman ら(1987)の値を格納した。準位密度パラメータに関しては、現象論的な Back Shifted Fermi Gas (BSFG)モデルとミクロスコピック・モデルを比較することにより、現在格納されているパラメータの信頼性を検証した。

Young は、光学模型パラメータ (OMP)に関して、現在格納されているパラメータのスピニ・角運動量項 (S-O term)の改良、分散理論及び相対論を考慮したパラメータの格納を行った。また、格納フォーマットを若干変更し、検索コード OMINPUT を SCAT2 や ECIS

コード用に作成したと報告した。その他の活動として、RIPL-I の質量表及び LDP を GNASH で使えるようライブラリー化したことを報告した。この他、LANL の組織改革で旧 T-2 グループは T-16 となり、M.B. Chadwick による McGNASH の開発や GNASH のエラー・フィックス(150 MeV 近傍の全断面積が最大 30%も変わってしまうらしい)を行い、近日中に公開する旨報告した。

Ge Zhinang (CIAE)は、LDP 及び平均共鳴幅に関してテストを行った。準位密度パラメータに関しては、Na-24 から Cf-250 の 303 核種に関して準位の積算図に BSFG 及び Gilbert-Cameron (GC)モデルの計算値を重ねて比較した。平均共鳴幅に関しては図を作成したのみである。この他、OMP の拡張を行い、実計算テストのために UNF コード群の準備を行った。

R. Capote Noy (Centro de Estudios Aplicados al Desarrollo Nuclear)は、OMP 及び LDP (BSFG, GC)テストのためのソフトウェアパッケージを作成し、テストを行った。OMP に関しては、SCAT2 を GNASH の透過係数入力を作成するように改造し、RIPL を用いて光学模型計算を行う RIPL2SCAT2 を作成して、テストを行った。LDP に関しては、ミクロスコピックに統計準位密度計算を行う OBNINSK_MICRO.FOR をモンテカルロコードと比較すべく準備した。また、ミクロスコピック粒子・空孔準位密度計算コード CAPOTE_MICRO.FOR と比較した結果、Xp-Yh state のしきいエネルギーに矛盾がみられた。Generalized Super Flood (GSM)モデルの Collective Enhancement Factor と Interacting Boson Model (IBM)による Th-232 の集団運動準位予測と比較した結果、0 に漸近する点に相違があったと報告した。

O. Bersillon (CEA, Bruyeres-le-Chatel)は、Bruyeres-le-Chatel での光学模型研究について発表した。実験データに基づく現象論的なアプローチとしては、non-local なパラメータを導くためのエネルギー依存性の改良、OMP のエネルギーに関する接続性をよくするための 0.1~100 MeV 領域での連続的なパラメータサーチ、分散理論の研究などを通して、良好なフィッティングが得られている。また、グローバルパラメータの研究も行っている。準ミクロスコピックなアプローチとして、核子密度、核物質中での実効相互作用及び range force を用いた方法により、(n,n) 及び(p,p)の弾性散乱や(p,n)の IAS への散乱に関する統一的な記述を可能にしている。これらを利用すれば、安定核だけではなく、中性子及び陽子の drip-line 近傍の不安定核まで記述できるかもしれないと報告した。

深堀（原研）は、ENSDF 及び文献からの励起準位の変形パラメータの格納、WWW ページの試作、その他ユーティリティコード(COMPATH, TOTELA)等に関する進捗状況を報告した。

A. Koning (ECN, Petten)は、現象論的光学模型コードでのフィッティングに関して、大きな χ^2 を持つ初期値から始めるより、アイガイドで小さな χ^2 を持つ初期値から始める方が効果的であることを示した。また、核種別に OMP を評価しているが、論文公開した

後に RIPL-I に格納可能であると報告した。この他、 ECIS の計算結果を画面上に表示する ECISVIEW について報告した。

A.V. Ignatyuk (IPPE)は、RIPLの高エネルギー核データ評価に対する重要性を示唆し、Pb、Bi、U-238、MAに対するOMPのテスト、平均中性子共鳴パラメータ、LDP、 γ 線強度関数に関する現状報告を行った。OMP テストに関しては、球形核を仮定した計算ではだめで、Coupled-Channel (CC)計算が必要であること、現象論的ポテンシャルには形状パラメータの入射エネルギー依存性を考慮する必要があることを示した。平均中性子共鳴パラメータに関しては、p・波共鳴成分を追加した。LDP に関しては、T と E₀パラメータに系統式を導入した。 γ 線強度関数にも新しい系統式を導入したと報告した。

T. Belgya (Institute of Isotope and Surface Chemistry)は、準位構造セグメント及びこれを基にした LDP の導出に関する報告を行った。改良版の準位構造ファイルでは、同位体毎に ID、準位、分岐比レコードを分離し、isomer state を明記するようにした。多重変極、崩壊形式、分岐比に関する独立のチェックを行い、準位情報の完全さを示すカットオフエネルギーを決めるために T パラメータを決めた核種を増加させた。また、GC 公式のフィッティング方法をチェックし、LDP ファイルに関して、Meyer & Swiatesky の殻補正及び Moeller 質量表による変形の影響をチェックした。

S. Kailas (Bhabha Atomic Research Centre)は、OMP に関するチェックを中心に報告した。数核種について現象論的ポテンシャルから計算した断面積を実験値と比較した。また、重イオン反応からの中性子スペクトルの計算には殻補正が重要であることを示した。JLM、経験式、エネルギー及び質量毎に個別にフィッティングしたポテンシャルの体積積分値を比較したところ、比較的良好一致を示したと報告した。この比較には、評価済核データも利用している。Capote の SCAT2 へのインターフェースコードをチェックし、RIPL-II には α までの軽粒子の OMP を十分格納すべきであると提案した。

会議ホストの Gadioli は、「重イオン反応の評価のための核データ及びモデルの必要性」に関する講演を行った。Coulomb 障壁近傍エネルギーでは完全または不完全核融合反応が生起するが、励起関数の計算には前平衡過程の考慮が重要な意味を持つ。Gadioli は、前平衡過程計算に核子・核子相互作用、核子及びクラスター粒子放出スペクトルを考慮したマスター方程式を用いたアプローチを行っている。運動源モデルを用いた中性子多重度の計算結果と前平衡過程アプローチは、同様の結果を示す。放射化量解析結果に関する理論的（半古典近似及び平均場理論）及び半経験的な方法を比較すると、半経験的な方法はいくつかの場合完全に間違った結果を示すことがある。

各自の発表の後、前回のサマリーレポートを基に個別の作業分担の進捗状況をチェックした。

3. RIPL-2 作業分担の再検討

3.1 質量セグメント

Meyers-Swiatesky (MS) の殻補正を含める。

ミクロスコピックな殻補正(Goriely)を含める。

$M_{\text{micro}} = M_{\text{shell}} + M_{\text{pair}} + M_{\text{deform}} = M_{\text{exp}} - M_{\text{macro}}$ (Liquid-Drop)。

同じ質量表式を結合エネルギー及び準位密度計算に用いるべきである（未合意）。

3.2 離散準位セグメント

和が 1.0 にならないγ線分岐比は再規格化する。

現状のファイルで T のフィッティングが $\chi^2 > 0.05$ であるものは、改訂の努力をする。

3.3 平均中性子共鳴セグメント

p・波共鳴パラメーター（平均共鳴間隔 D_1 ）の追加。ただし、改訂が必要。

S-34 及び Pb-209 の不適切な値のチェック(Ge)。

3.4 OMP セグメント

励起準位の変形パラメーターはこのセグメントに付加する。

α までの軽粒子の OMP を追加する(Bersilon)。

現象論的 OMP の新評価値(local 及び global)を追加する(Bersilon, Koning, Ge)。

ミクロスコピックに決められた OMP を可能であれば格納する(Bersilon)。

3.5 LDP セグメント

部分準位密度に関しては、p-h 準位計算のための 2~3 個のサブルーティン(Williams、Avrigeanu 等)と、Nix-Moeller の質量表の対補正エネルギーを検索するサブルーティンを作成する(Copote)。

全準位密度に関しては、各担当(GC, BSFG, GSF)が関連する殻補正エネルギーを供給する。また、GC には a , U_0 , U_x , T (Ge)を、GSM には a^* , δ_{shift} , ω_2 (数値と系統式), β_2 (質量表より), δW ($M_{\text{exp}} - M_{\text{LD}}$ 、MS の値) (Ignatyuk)を格納する。

核分裂準位密度に関しては、Ignatyuk が V. Maslov (RPCPI)と連絡をしながら進める。

3.6 γ線強度関数セグメント

従前のファイルに、Goriely の殻依存の巨大共鳴パラメータ(GDR、E1 強度関数)のハイブリッド公式を追加する。

以前の Oblozinsky の担当を M. Herman (IAEA/NDS)に変更する。

3.7 前平衡過程の角度分布セグメント

以前の Oblozinsky の担当を M. Herman (IAEA/NDS)に変更する。

M.B. Chadwick (LANL)または P. Oblozinsky (BNL)に改良の可能性を打診する。

3.8 新規追加パラメータ

同位体存在比、ETFSI 関連のデータ、基底準位変形パラメータを追加する。

3.9 核反応モデルコードとのインターフェース

コードと担当者は以下の通り。

ECIS (Koning)

SCAT2 (Capote)

GNASH ($\text{pregnash} \leftarrow \text{Koning} + \text{Young}$)

ALICE-95, -F, SINCRROSS (Fukahori)

EMPIRE (Herman)

3.10 Systematics

質量セグメントに関しては Plujko のサブルーティンをデータのない部分に適用すべく、Goriely が準備する。

準位密度セグメントに関しては、GSM (Ignatyuk)、GC (Capote)、BSFG (Goriely)、 D_0 (Belgya)、 Γ_y (Koning) に関する systematics を準備する。また、 D_0 に関して準位の積算図との比較によりチェックを行う。(Belgya)

γ 線強度関数に関しては、Goriely, Kopecky, Ignatyuk (E1, E2, M1) が検討する。

3.11 パラメータテスト

チェック用のコードの準備を行う。

セグメント毎に個別にチェックを行う。レビュー及びクロスチェックが必要。

中国のテスト用コードに関しては、Goriely, Herman, Ge で検討する。

選択した一部の OMP に関してテストを行う (Koning, Kailas, Ge, Goriery, Capote, Herman, Ignatyuk)。

3.12 Web ページ作成 (案)

質量表、平均中性子共鳴セグメント及び励起準位の変形パラメータに関しては、格納されるパラメータを検索し、表形式で表示する。

離散準位セグメントに関しては、準位データ及び情報が完全 (スピル、パリティ、励起エネルギーがわかっている) な準位数 N_{\max} を表形式で表示し、準位積算図を作成する。

OMP セグメントに関しては、インデックス、断面積 (单一入射エネルギー)、弹性散乱角度分布、透過係数、散乱行列計算値を表形式で表示する。また、断面積(あるエネルギー範囲、TOTELA 計算値(systematics)と重ね合わせることができれば更によい)、弹性散乱角度分布、ポテンシャル形状、体積積分値については、できれば、プロット図に

て表示する。

LDP セグメントに関しては、格納されるパラメータを検索し、表形式で表示する。更に、できれば準位積算図に重ねる形で、各公式及び D_0 からの計算値をプロットできると良い。また、部分準位密度に関しては、プログラムファイルにリンクを張る。

γ 線強度関数セグメントに関しては、格納されるパラメータを検索し、表形式で表示する。また、GDR から計算した γ 線吸収断面積をプロットする。プログラム及び関連するデータにはリンクを張る。

前平衡過程の角度分布セグメントに関しては、単にプログラム及び関連するデータにリンクを張る。

4. RIPL-II Format

RIPL-II フォーマットに関して、できるだけ統一する方向で議論を行った。以下概要を記す。() 中は、当面の担当者である。

4.1 一般原則 (Koning)

コンピュータ及び人間が簡単に読める形式にする。

- 原則として元素毎に、データファイル名として、zZZZ.dat の形式 (ZZZ は元素番号)、またはプログラムとして*.for 形式のファイルを作成する (例外: 質量表、平均中性子共鳴)。ただし、まとめたファイルも欲しい。
- フォーマットテストコードを準備する (Koning, NDS)。
- OMP セグメントだけは例外的に扱う。
- できるだけ column-wise にする。
- データが与えられていない場合は“blank”とし、0.0 等の値を入れることはしない。ただし、web 用のファイルは別に何かの文字を充填したものを作成する。
- 各ファイルの先頭には、コメント文字“#”を付加した説明行を 4 行つける。物理量の説明 (2 行)、単位の説明 (1 行)、線を入れた行 (1 行) とする。
- データ行の先頭は、[Z,A,Sym (2I4,1X, A2)] とし、Sym には“Fe”等を用いる。
- データの順番は、Z、A、その他とする。
- RIPL-II からは“other file”は除く。
- スピン、パリティ、励起エネルギーに関しては、全てのファイルで spin (f5.1)、parity (i3)、level energy [MeV] (f10.6) を採用する。

4.2 質量セグメント (Goriely)

従前のファイル: Z, ZZ, A, Mass_Excess(exp.), Mass_Excess(th.),....

Moeller-Nix ファイル (FRDM.dat): Z, 元素記号, A, Mass_Excess(exp.), M(FRDM), M(FRDM_micro.), deformations....

ETFSI ファイル(ETFSI.dat): Z, ZZ, A, Mass_Excess(exp.), M(ETFSI),
同位体存在比ファイルは Koning が担当する。

4.3 離散準位セグメント (Belgya)

基本的に現状の Belgya によるフォーマットとする。

N_{max} (NMAX.dat) も單一ファイルとする。

γ 線強度及び変換係数をチェックし、合計が 1.0 になるように規格化する。また、これらには E 形式を適用する。

単位は MeV, sec に統一する。

4.4 平均中性子共鳴セグメント (Ignatyuk)

s-及び p-波ファイルは分離する。

Obninsk ファイルに値がない場合は、CNDC ファイルの値を充填する。

4.5 OMP セグメント (Bersillon)

基本的に変更なし。

拡張部分（ミクロスコピック OMP や分散理論など）は別ファイルとする。

4.6 LDP セグメント

4.6.1 全準位密度 (Capote)

現象論的パラメータに関しては、次のように格納し、サブルーティンを Ignatyuk, Capote が準備する。

BSFG: Z, 元素記号, A, a, D₀ (Ignatyuk, Ge)

GC: Z, 元素記号, A, a, U₀, U_x, T, D₀ (Ignatyuk, Capote, Kailas, Ge)

GSM: Z, 元素記号, A, a*, δ_{shift}, ω₂, β₂, δW (Ignatyuk)

MS の殻補正を Ignatyuk が準備する。

ミクロスコピック・パラメータ(Goriely)

ETFSI の部分準位密度は別ファイルとする。

4.6.2 核分裂準位密度 (Ignatyuk)

核分裂障壁等を格納する。

式は、RIPL-I TECDOC のものを用いる。

Maslov ファイルに Obninsk ファイルを追加し、再フォーマットする(Herman)。

4.6.3 部分準位密度 (Capote)

Avrigeanu, Capote 等のモデルによるサブルーティンを供給する。

4.7 γ 線強度関数 (Herman)

Plujko, Kopecky, CNDC ファイルを格納する。

Goriely の殻依存の巨大共鳴パラメータ(GDR、E1 強度関数)のハイブリッド公式を追加する。

4.8 前平衡過程の角度分布セグメント

変更なし。

4.9 励起準位の変形パラメータ (Fukahori)

基本的に、[Z, ZZ, A, No., Ex, Spin, Parity, beta2, beta3 (I4,1X,A2,1X,I4,1X,I4,F11.6, F6.1,3X,I2,2f11.6)]を採用する。

JAERI ファイルを基本に、データのないところを ENSDF 及び文献より新しく格納した値で補完する。

5. TECDOC レイアウトに関する議論（担当分担）

Introduction (NDS)

WWW (Fukahori)

Mass (Goriely)

Discrete level (Belgya)

Average resonance parameter (Ignatyuk)

Optical model parameter + deformation parameter (Bersillon)

Level density

total (Ignatyuk + Capote)

fission (Ignatyuk)

partial (Capote)

Gamma strength function (Herman)

Angular distribution of pre-equilibrium (Herman)

format, systematics は各セグメントに含む。

第 3 回検討会合の 1 ヶ月前までにドラフトを作成する。

6. その他

以上の議論の終了の後、サマリーレポートの原稿を作成した。次回会合の時期、場所、その他の最終討論を行った後、散会した。次回会合は、特に問題がない場合は、2001 年 12 月の第 1 週にウィーンで開催される予定である。Muir 以外の意見は、2001 年核データ国際会議の次の週、原研東海で開催したいというものであったが…。