

JENDL High Energy File 2004

九州大学 大学院総合理工学研究院

渡辺 幸信

watanabe@aees.kyushu-u.ac.jp

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

加速器駆動システムの開発研究、スプレーション中性子源開発と中性子科学への応用、悪性腫瘍の先進的粒子線治療、宇宙・地球環境で使用される半導体デバイスの放射線損傷評価などの応用分野において、20MeV 以上のエネルギー領域へ拡張された高エネルギー核データが要求されている。これらの応用分野では、中性子ばかりでなく陽子入射核反応の断面積データも必要となる。

こうした要求を受けて、高エネルギー核データ評価及びデータベース化に関連した様々な研究が国内外で行われている。米国では、BNL でパイオニアの活動がなされた後、LANL にて 150MeV までの LA150 ファイル (ENDF/B-VI.8 に格納) [1]が作成され、粒子輸送計算コード MCNPX 用ライブラリーとして広く利用されている。米国以外では、オランダ、フランス、ドイツ、ロシア、韓国、中国等で高エネルギー核データに関する研究やファイル作成作業が進んでいる。

わが国では、シグマ委員会高エネルギー核データ評価WG内に高エネルギーファイル作成サブWG*が設置され、3GeV までの中性子及び陽子入射反応に関する評価済高エネルギーファイル (JENDL High Energy File, JENDL/HE) の作成が行われている[2,3]。評価及びデータベース化は当初設定した優先度に従って進められてきた。2004年3月の時点で断面積評価・ファイル化を終えた核種 (66核種: Table 1 参照) について JENDL/HE-2004

* 高エネルギーファイル作成サブWG委員 (2005年度):

小田野直光 (海上技術安全研)、川合将義 (KEK)、桑折範彦 (徳島大)、小迫和明 (清水建設)、執行信寛 (九大)、柴田恵一 (原研)、千葉 敏 (原研)、中島 宏 (原研)、日野哲士 (日立)、深堀智生 (原研)、真木紘一 (物質・材料研究機構)、村田 徹 (アイテル)、山野直樹 (東工大)、渡辺幸信 (九大:グループ長)

ファイルとして公開した。本ファイルは、現時点で公開されている高エネルギーファイルの中では、格納している核種数及び入射エネルギー領域において最大規模を誇るものである。公開後、MCNP 用のライブラリーを順次作成しており、シグマ委員会中高エネルギー核データ積分テスト WG におけるベンチマーク解析が始まった状況である。

本報では、JENDL/HE-2004 公開から約 1 年が経過したので、この間なされたベンチマークテストの予備結果も含め、その評価手法や結果について概要を報告する。

Table 1 List of nuclides to be included in JENDL High Energy file

Released (66 nuclides)	^1H , $^{12,13}\text{C}$, ^{14}N , ^{16}O , $^{24,25,26}\text{Mg}$, ^{27}Al , $^{28,29,30}\text{Si}$, $^{39,41}\text{K}$, $^{40,42,43,44,46,48}\text{Ca}$, $^{46,47,48,49,50}\text{Ti}$, ^{51}V , $^{50,52,53,54}\text{Cr}$, ^{55}Mn , $^{54,56,57,58}\text{Fe}$, ^{59}Co , $^{58,60,61,62,64}\text{Ni}$, $^{63,65}\text{Cu}$, $^{64,66,67,68,70}\text{Zn}$, $^{90,91,92,94,96}\text{Zr}$, ^{93}Nb , $^{180,182,183,184,186}\text{W}$, $^{196,198,199,200,201,202,204}\text{Hg}$
In preparation (66 nuclides)	^2H , $^6,7\text{Li}$, ^9Be , $^{10,11}\text{B}$, ^{15}N , ^{18}O , ^{19}F , ^{23}Na , $^{35,37}\text{Cl}$, $^{35,38,40}\text{Ar}$, $^{69,71}\text{Ga}$, $^{70,72,73,74,76}\text{Ge}$, ^{75}As , $^{74,76,77,78,80,82}\text{Se}$, ^{89}Y , $^{92,94,95,96,97,98,100}\text{Mo}$, $^{113,115}\text{In}$, ^{197}Au , ^{181}Ta , $^{204,206,207,208}\text{Pb}$, ^{209}Bi , ^{232}Th , $^{233,234,235,236,238}\text{U}$, ^{237}Np , $^{238,239,240,241,242}\text{Pu}$, $^{241,242,242m,243}\text{Am}$, $^{243,244,245,246}\text{Cm}$

2. 評価手法の概要 —計算コードシステム—

断面積評価は、実験データやそれに基づく系統式、核理論計算を用いて総合的に行われる。高エネルギー領域では、中性子入射実験データは非常に少なく、また系統的な陽子入射データも十分とは言えないために、核理論計算に重点を置かざるを得ない状況にある。核データ評価では、特定の反応過程のみに着目した断面積計算だけでは不十分で、すべての反応過程を考慮した計算が要求される。現時点では、一つの理論やモデルによって広い入射エネルギー範囲 (MeV~GeV) にわたり、全核反応過程を統一的に記述でき、かつ高い予測精度でそれら全ての断面積を計算することには限界がある。したがって、JENDL/HE 評価のために、適用可能な入射エネルギーや標的核質量数範囲を考慮して、いくつかの理論やモデル計算を組み合わせた最適な計算システムを構築した。Fig.1 に本研究で開発した統合コードシステムのブロック図を示す。150~250MeV の中間エネルギー領域を境として、異なった計算コード群を使用している。

まず、150~250MeV 以下の領域では、従来の評価で広く使われた光学模型や前平衡・統計模型による計算コードを用いた。主たるコードは、米国 LANL で開発され LA150 ファイル作成に使用された実績をもつ GNASH コード[4]である。このコードには前平衡励起子模型と Hauser-Feshbach 模型が組み込まれている。GNASH 計算には、各軽粒子 (n, p, d, t, ^3He , α) の透過係数と直接非弾性散乱過程の断面積が必要である。これらの物理量は、チャンネル結合理論に基づいて作成された光学模型計算コード OPTMAN[5]や ECIS コード[6]で計算される。これらのコードは全断面積、全反応断面積、弾性散乱断面積と角分布

の計算にも使われた。GNASH コードで出力される物理量は、軽粒子の放出エネルギースペクトル及びその中に占める前平衡成分の割合、さらに同位体生成断面積などである。これら全ての出力された断面積等の数値データは、処理コードを使って、ENDF-6 フォーマットに従った JENDL 高エネルギーファイルの形で出力される。

一方、150MeV 以上の高エネルギー領域については、放出粒子数も増え反応経路も複雑になるために、核反応シミュレーションの手法を使った計算の方が有利になる。また、パイオンや励起核子 (Δ 粒子やアイソバー) の自由度を考慮する必要もある。これらの点から、本計算システムでは、JQMD コード[7]か JAM コード[8]のいずれかを動的な反応過程の計算に使用し、それに続いて起こる統計崩壊過程の計算には一般化蒸発モデル (GEM) [9]を使用した。なお、これらのコード開発段階で、100MeV 以上における陽子入射反応に対する核子やパイオン生成二重微分断面積やフラグメント生成断面積の実験データを再現することが実証されている。

さらに、高エネルギー領域の評価では、少ない実験値を補うために、種々の系統式も併せて利用している。全断面積 (中性子のみ)、弾性散乱断面積、全反応断面積に関しては TOTELA コード[10]、高エネルギー核分裂断面積に関しては FISCAL コード[11]の系統式に基づくコードを使用した。また、上述の核反応シミュレーションで計算できないガンマ線生成断面積の評価には、前平衡成分の計算が可能な ALICE-F コード[12]を使用した。

JENDL/HE のファイル化の段階で、20MeV 以下の中性子データとして JENDL-3.3 データ[13]が組み込まれた。陽子については 20MeV 以下まで今回評価を拡張した。なお、放出軽粒子の二重微分断面積は最終的に実験室系に変換して LAW=7 形式で格納された。

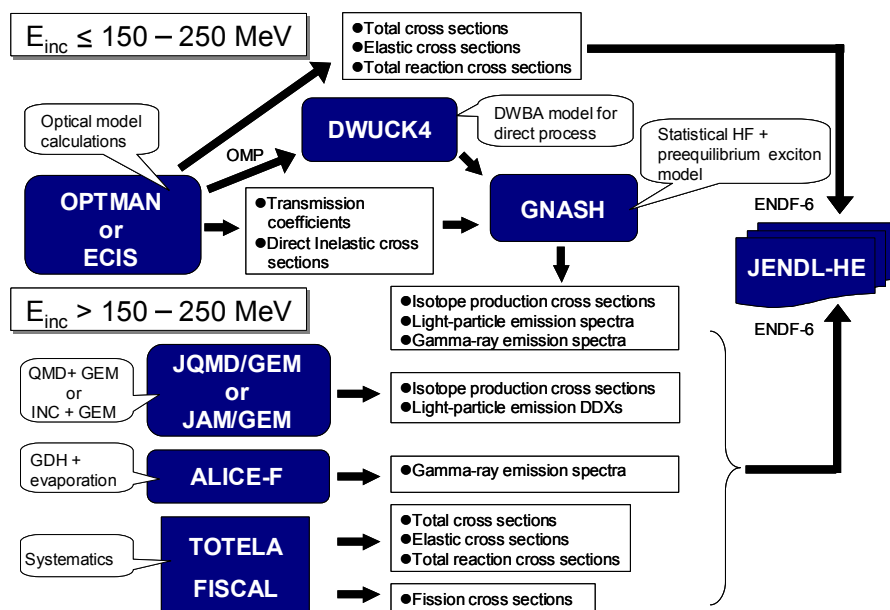


Fig.1 Nuclear model calculation code system used in the JENDL-HE evaluation

3. 評価結果 — 実験値並びに他の評価値との比較 —

先に述べたように高エネルギー領域での実験データが不足しているため、多くの評価結果を微分的に検証するのは難しい。ここでは、実験値の多い核種に限定して、実験並びに他の評価結果 [LA150[1] (最大エネルギー: 150MeV) や NRG2003[14] (最大エネルギー: 200MeV)] との比較をいくつか紹介する。

まず Fig.2 に鉄に対する中性子全断面積と陽子全反応断面積を示す。3つの評価値が実験値と比較され、いずれも実験値との良い一致を示している。JENDL/HE-2004 の中性子全断面積は他の2つの評価値に比べて、全エネルギー範囲で若干大きめの傾向がある。また、陽子全反応断面積の方は、30~80MeV 領域で JENDL/HE-2004 が低めの値を示している。

次に、 ^{28}Si に対する中性子弾性散乱微分断面積の結果を Fig.3 に示す。両評価値とも良好に実験データを再現している。入射エネルギーが高くなるにつれて、後方角で両者の違いが目立ってくるが、実験データが欠如しているために優劣の判断は出来ない。

さらに、 ^{12}C に対する 68MeV 陽子入射反応による軽イオン生成二重微分断面積の結果を Fig.4 に示す。陽子に関しては、JENDL/HE-2004、LA150 とともに実験データ[15]を良く再現している。一方、重陽子については両者に大きな差異が見られる。前方角で、JENDL/HE-2004の方が実験値とより良い一致を示している。また、Fig.5 に標的核 ^{90}Zr に対する(p,xn)反応二重微分断面積の実験データ[16]を JENDL/HE-2004 評価値と比較する。広い連続エネルギー領域では、後方角を除き実験値とのよい一致を示している。 0° の高い放出エネルギー領域に見られる構造はガモフ・テラー共鳴とアイソバリックアナログ状態の励起に対応しており、本評価で使用した前平衡モデルでは説明できず、直接反応理論による厳密な計算が必要であることを示している。

最後に、Fig.6 に陽子入射反応による同位体生成断面積の結果を2例だけ示す。左図の $^{\text{nat}}\text{Si}(p,x)^{22}\text{Na}$ 反応では、JENDL/HE-2004 及び LA150 は実験値を良く再現できている。50MeV 以下の立ち上がり部では JENDL/HE-2004の方が実験値との一致がよい。一方、右図の $^{56}\text{Fe}(p,x)^{54}\text{Mn}$ 反応の比較では、入射エネルギーが 100MeV を越えた領域で、JENDL/HE-2004の方が他の評価値に比べて実験値との一致がよい。250MeV で見られる不連続な振舞いは、250MeV 以下の GNASH 計算と 250MeV 以上の JAM/GEM 計算による断面積の接続の不連続性に起因している。エネルギー領域によって異なったモデル計算を使う場合には、反応によってはこのような不連続な振舞いが見られる。

ここで紹介した結果も含め、幾つかの核種の評価結果はすでに原著論文や会議報告として報告されているので、そちらを参考にしてもらいたい。例えば、C[17]、Al[18]、Cu[19]、Zr、Nb、W[20]がある。また、Si と Mg、及び一連の中重核 (K, Ca, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni) の評価結果は、昨年の核データ国際会議 ND2004 のプロシーディングスとして出版される予定である。

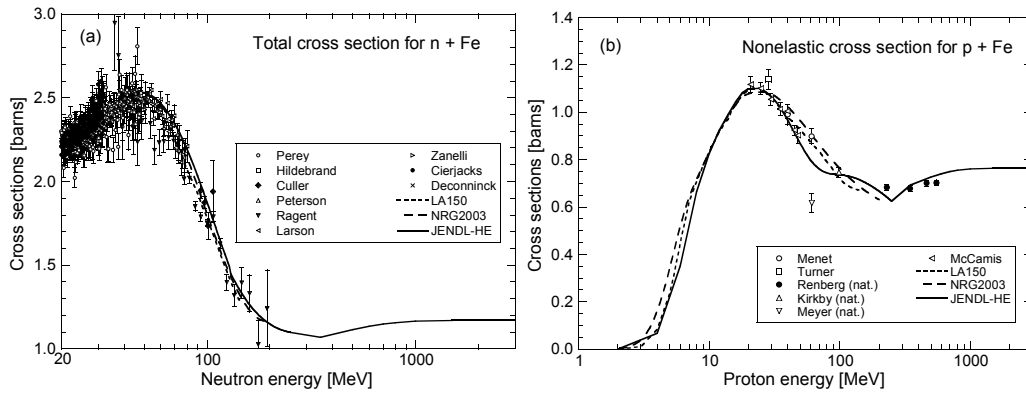


Fig.2 Neutron total cross section and proton nonelastic cross section for Fe

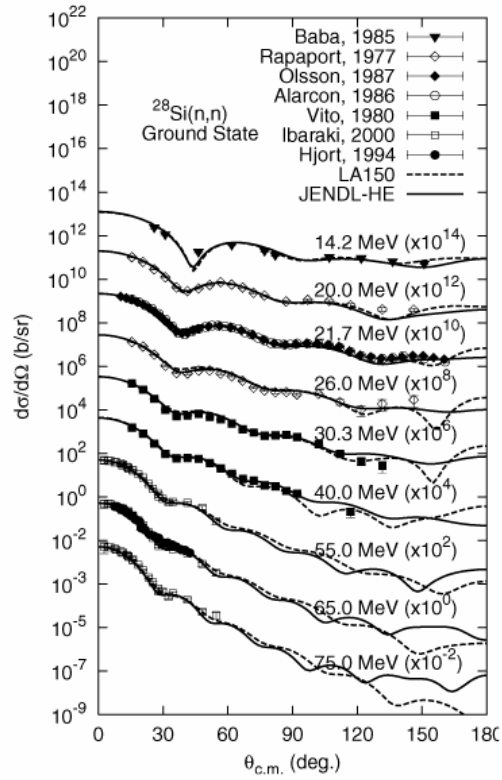


Fig.3 Angular distributions of neutron elastic scattering from ^{28}Si

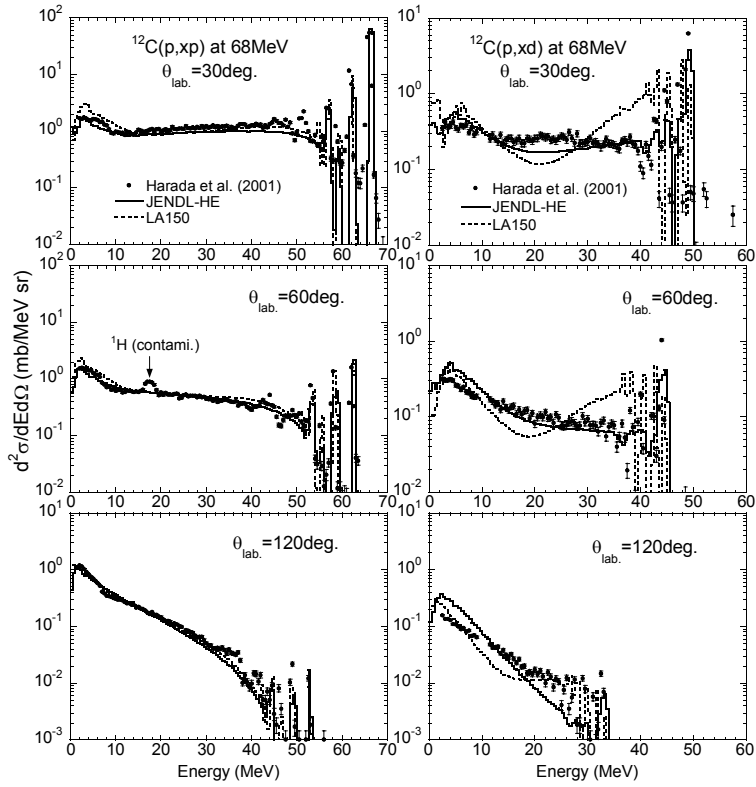


Fig.4 Double-differential proton and deuteron production cross-sections for proton-induced reactions on ^{12}C at 68 MeV

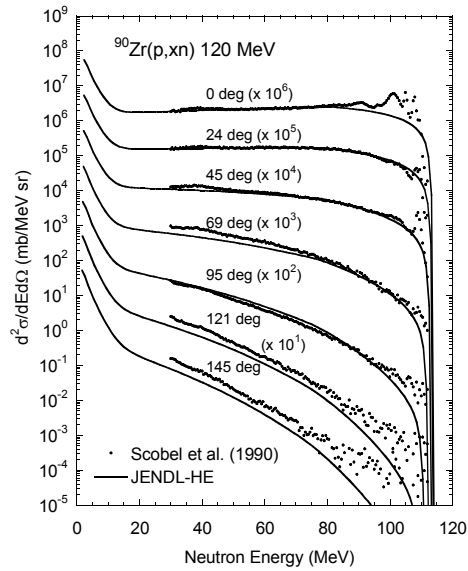


Fig.5 Double-differential neutron production cross sections for the $^{90}\text{Zr}(p,xn)$ reaction at 120 MeV

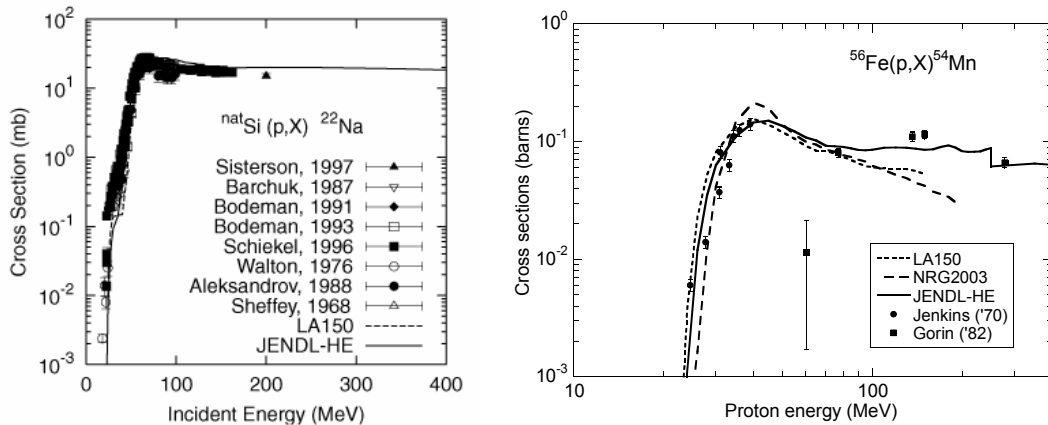


Fig.6 Isotope production cross sections: $^{nat}\text{Si}(p,x)^{22}\text{Na}$ and $^{56}\text{Fe}(p,x)^{54}\text{Mn}$

4. ベンチマーク解析結果

評価済核データファイルを実際の計算に使用するためには輸送計算コード毎にライブラリーを作成する必要がある。JENDL/HE-2004 を用いた MCNP 用のライブラリーは作成されており、MVP 用のそれも検討中である。また、 S_n 計算用のライブラリー作成も試みられている。現在、中高エネルギー核データ積分テスト WG で JENDL/HE-2004 を用いた積分的検証のためのベンチマークテストが行われている。以下、参考までに、厚いターゲット TTY 実験のベンチマークと中性子深層透過実験のベンチマークの結果を二例示すことにする。

まず、炭素及び鉄の TTY ベンチマーク解析結果を Fig.7 と Fig.8 に示す。厚いターゲットからの陽子入射中性子放出スペクトルの実験値[21]と計算結果との比較である。実験値（黒丸）は LANL で行われた 113 及び 256MeV 陽子入射のものであり、計算値は JENDL/HE-2004 及び LA150 や NRG-2003 ライブラリーを使用した MCNPX 計算の結果である。炭素の 113MeV の結果を見ると、JENDL/HE-2004 は前方角で実験値との一致が大きく改善している。また、JENDL/HE-2004 には ^{13}C の評価値も含んでいるので、さらに低エネルギー陽子入射の中性子生成で $^{13}\text{C}(p,n)$ の影響 (^{13}C の存在比は 1.1% であるが、反応 Q 値が ^{12}C と約 15MeV 違っていることに起因する) が効いてくる場合に、LA150 に比べ高エネルギー中性子放出成分をより良く推定できることが期待される。Fig.8 の鉄については、いずれのライブラリーとも同程度に実験データを再現している。しかしながら、10MeV 以下の領域で過大評価が見られるなど、今後、さらなる検討や改善の余地はある。ただし、113MeV の放出角度 60 度の実験データは、ここだけ他と傾向がずれているので、一概に評価値が悪いとは断定できないと考えている。

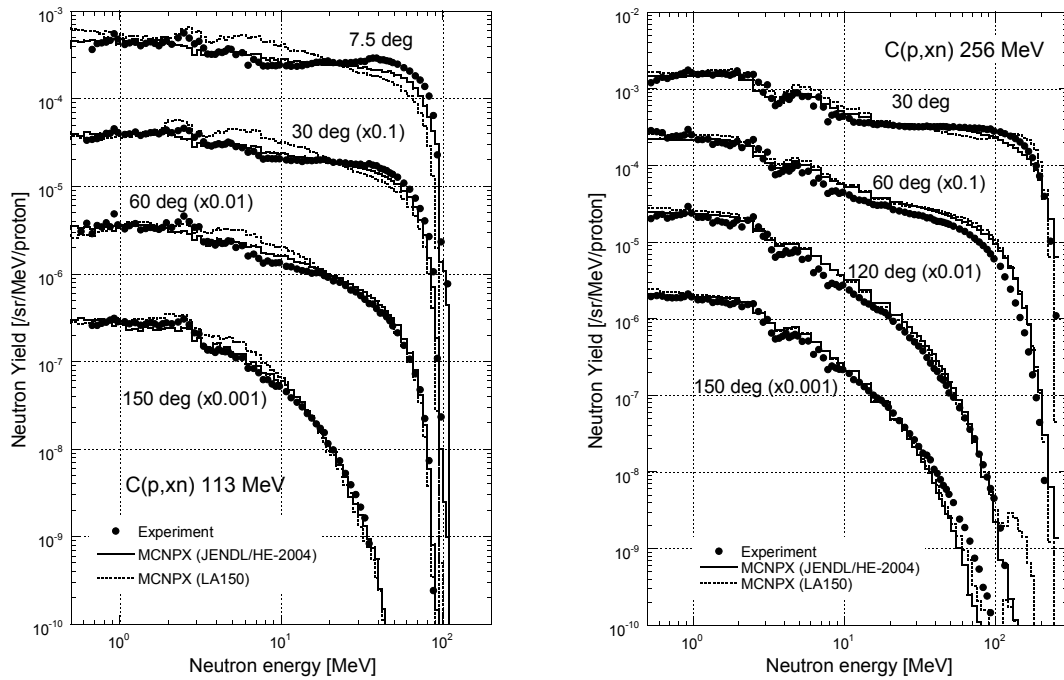


Fig.7 Comparison of MCNPX calculations and measurements for neutron yields from stopping-length carbon target for 113 MeV and 256 MeV protons.

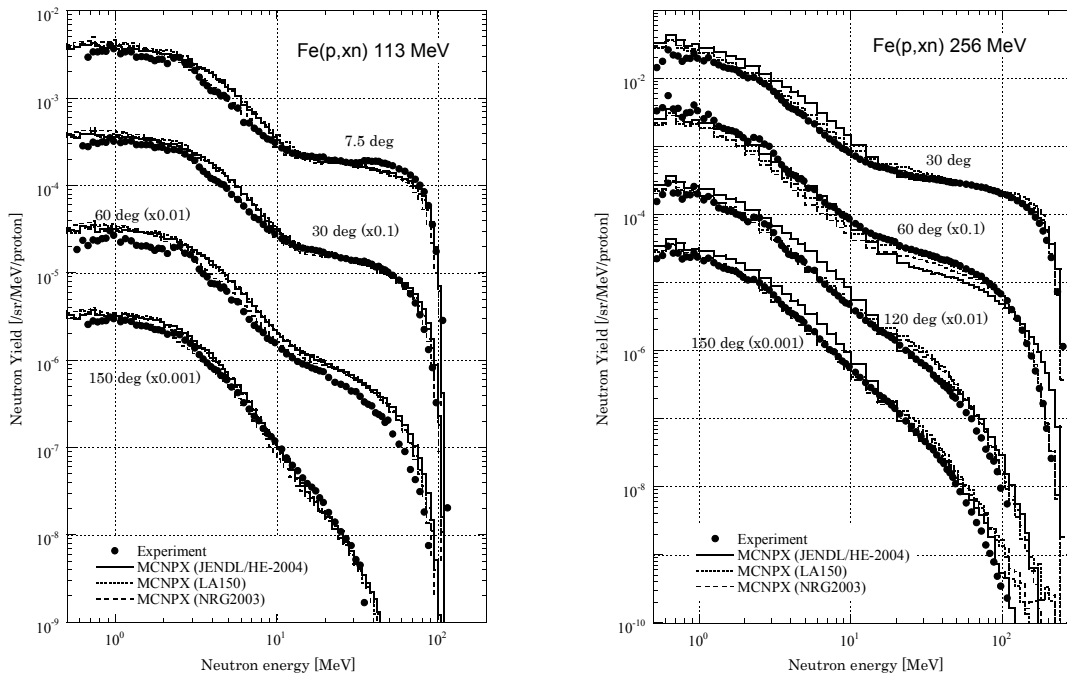


Fig.8 Comparison of MCNPX calculations and measurements for neutron yields from stopping-length iron target for 113 MeV and 256 MeV protons.

Fig.9 に原研 TIARA における 68MeV 中性子深層透過実験[22]の MCNPX 解析結果の例を示す。この場合の鉄遮蔽体厚さは 70 cm である。JENDL/HE-2004 も LA150、NRG-2003 も同様のスペクトル形状を示しているが、JENDL/HE-2004 が実験データ全体をよく再現しているのに比べて、LA150 や NRG-2003 は 2 倍程度の過大評価になっている。実験値と計算値のスペクトル形状が異なるのは、実験値がアンフォールディングされているが、この処理は計算値には施されていないためである。この結果からわかるように、少なくとも鉄体系では JENDL/HE-2004 のベンチマーク計算結果は、良い精度で積分実験データを再現している。さらなる詳細なベンチマーク解析は、中高エネルギー核データ積分テスト WG で進行中である。

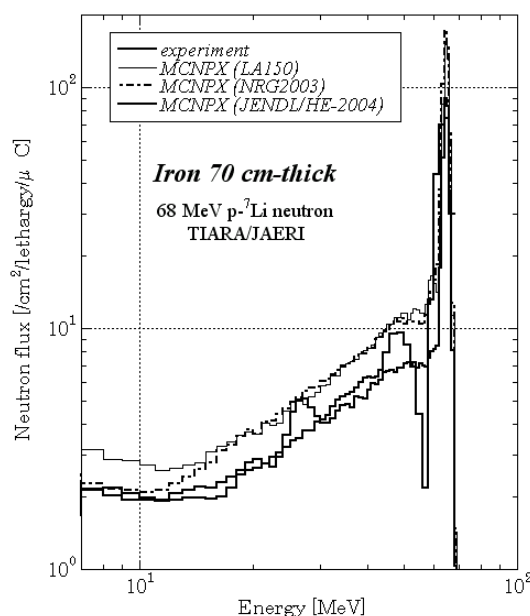


Fig.9 Comparison of benchmark test for iron 70 cm-thick with 68 MeV p-⁷Li neutron source at TIARA/JAERI.

5. まとめと展望

本報では、2004年3月に公開された高エネルギーファイル JENDL/HE-2004 の概要を紹介した。このファイルには表1に示す全 66 核種に対して、3GeV までの中性子及び陽子入射反応の評価済み断面積データが含まれている。断面積ファイルから MCNP 用ライブラリーを作成し、併せて提供している。今後は、さらに評価・ファイル化作業を継続して進め、全 132 核種の早期公開を目標にしている。すでに公開済の核種についても必要に応じて改訂を加えていく予定である。また、現ファイルには含まれていない核発熱や放射線損傷計算に不可欠な全反跳核のエネルギー分布について、その計算手法の開発や

ファイル化が将来の高エネルギーファイルに対する課題の 1 つである。公開中の JENDL/HE-2004 を広くユーザーの方々に使用していただき、指摘された問題点を逐次解決していくことで、信頼性の高いファイルの完成を目指したいと考えている。なお、評価断面積ファイル及び MCNP 用ライブラリー入手については原研核データセンターまで直接問い合わせて頂きたい。

最後に、この場を借りて、高エネルギーファイル作成サブ WG メンバーの皆様に、これまでの断面積評価及びレビュー作業への協力並びに本報に掲載された図の提供に対して感謝を申し上げる。

参考文献

- [1] M.B. Chadwick, *et al.*, *Nucl. Sci. Eng.*, **131**, 293-328 (1999).
- [2] T. Fukahori, *et al.*, *J. Nucl. Sci. and Technol., Suppl.* **2**, 25-30 (2002).
- [3] Y. Watanabe *et al.*, presented at Int. Conf. on Nuclear Data for Science and Technology, Sept. 26-Oct. 1, 2004, Santa Fe, USA; Y. Watanabe, JAERI-Conf 2005-003 (2005), pp.50-55.
- [4] P.G. Young, *et al.*, LA-12343-MS, Los Alamos National Laboratory (1992).
- [5] E.S. Sukhovitskiĭ, *et al.*, OPTMAN and SHEMMAN codes, JAERI-Data/Code 98-019 (1998).
- [6] J. Raynal, Proc. of a Specialists Meeting on Nucleon-Nucleus Optical Model Up To 200 MeV, Nov. 13-15, 1996, Buyères-le-Châtel, France, NEA Nuclear Science Committee, (1997), pp. 159-166.
- [7] K. Niita, *et al.*, *Phys. Rev. C* **52**, 2620-2635 (1995); JAERI-Data/Code 99-042 (1999).
- [8] Y. Nara, *et al.*, *Phys. Rev. C* **61**, 024901 (2001).
- [9] S. Furihata, *Nucl. Inst. Method in Phys. Res. B* **171**, 251-258 (2000); S. Furihata and T. Nakamura, *J. Nucl. Sci. and Technol. Suppl.* **2**, 758-761 (2002).
- [10] T. Fukahori and K. Niita, Summary Report of the Second Research Coordination Meeting on Nuclear Model Parameter Testing for Nuclear Data Evaluation (RIPL-II), June 12-16, 2000, Varenna, Italy, INDC(NDS)-416, pp.97 (2000).
- [11] T. Fukahori, *et al.*, *J. Nucl. Sci. and Technol., Suppl.* **2**, 25-30 (2002).
- [12] T. Fukahori, *Proc. of the Specialists' Meeting on High Energy Nuclear Data*, JAERI-M 92-039 (1992), pp.114-122.
- [13] K. Shibata, *et al.*, *J. of Nucl. Sci. and Technol.*, **39**, 1125-1136 (2002).
- [14] A.J. Koning, private communication (2004).
- [15] M. Harada, *et al.*, *J. of Nucl. Sci. and Technol., Suppl.* **1**, 687-691 (2000); *J. of Nucl. Sci. and Technol., Suppl.* **2**, 393-396 (2002).

- [16] W. Scobel, *et al.*, *Phys. Rev. C* **41**, 2010-2020 (1990).
- [17] Y. Watanabe, *et al.*, Proc. of the 2002 Nuclear Data Symp. JAERI-Conf 2003-006 (2003), pp.183-188; Y. Watanabe, Proc. of XV Int. School on Nuclear Physics, Neutron Physics and Nuclear Energy, Sept. 9-13, 2003, Varna, Bulgaria, BgNS Transaction, Vol. **9**, 87-97 (2004).
- [18] Y.O. Lee, *et al.*, *J. Nucl. Sci. and Technol.*, **36**, 1125-1134 (1999).
- [19] N. Yamano *et al.*, Proc. of the 2002 Nuclear Data Symp., JAERI-Conf 2003-006(2003), pp. 195-200.
- [20] S. Kunieda, *et al.*, *J. Nucl. Sci. and Technol.*, **41**, 1033-1046 (2004).
- [21] M.M. Meier, *et al.*, *Nucl. Sci. Eng.*, **102**, 310-321 (1989); M.M. Meier, *et al.*, *Nucl. Sci. Eng.*, **110**, 299-301 (1992).
- [22] H. Nakashima *et al.*, *Nucl. Sci. Eng.*, **124**, 243 (1996).