
 会議のトピックス(II) 

IAEA 協力研究計画 (CRP)
非エネルギー分野に対する核反応計算のための
パラメータ (RIPL-3) に関する第 2 回調整会議報告

日本原子力研究開発機構
深堀 智生
fukahori.tokio@jaea.go.jp

1. はじめに

表記会合が、2005 年 11 月 28 日～12 月 2 日ウィーンの国際原子力機関 (IAEA) 本部にて開催された。RIPL-3 のための第 2 回会合である。まず、IAEA/Division of Physical and Chemical Sciences の部長である N. Ramamoorthy から挨拶があり、M. Herman (Brookhaven National Laboratory (BNL)) を座長に、R. Capote Noy (IAEA/ Nuclear Data Section (NDS)) を記録者を選出した。この後、Agenda を採択し、議論に入った。参加国は、ベラルーシ、ベルギー、中国、フランス、日本、オランダ、ルーマニア、ウクライナ、ロシア及び IAEA であった。以下、Agenda に沿って会合の概要を報告する。なお、文中の敬称は省略させていただく。

2. 各担当の発表及び進捗状況報告

S. Goriely (Institute of Astrophysics, Bruxelles Libre 大)、S. Hilaire (CEA/DAM Ile de France) はミクロスコピックな理論に関する報告を行った。核分裂障壁、準位密度、原子核質量及び光学模型パラメータ (OMP) に対して整合性のある Hartee-Fock-Bogolyubov (HFB) 計算を行った。準位密度パラメータ (LDP) は HFB 及び組み合わせモデルの範囲内で検討した。 α 粒子の OMP を double-holding ポテンシャルとして求めた (Demetriou et al., Nucl. Phys. A707, 25 (2002))。 γ 線強度関数は、Hartree-Fock + Bardeen-Cooper-Schrieffer (HF-BCS)、HFB 及び半経験的 damping 係数を用いて計算した。核分裂反応に関しては、 $Z=90\sim 96$ の 30 核種について、HFB によるエネルギー表面及び鞍点の LDP を用いて、励起エネルギー $U=0.25\sim 150$ MeV の範囲で計算した。

V. Plujko (国立 Taras Shevchenko 大) は、 γ 線強度関数に関連する研究成果を報告した。Closed Form モデル (Single Lorentzian model (SLO)、Enhanced Generalized Lorentzian model

(EGLO))、一般化 Fermi 液滴模型 (GFL)、Multi-Lorentzian model (MLO)、Quasiparticle Random Phase Approximation (QRPA) を用いて γ 線強度関数を計算している。重心の運動は固定し、準位密度に関して vibrational enhancement factor を用い、中性子と陽子の非対称性を考慮している。多重極巨大共鳴に対しては Damping 幅を使用した計算となっている。

P. Talou (Los Alamos National Laboratory (LANL)) は、LANL におけるコード開発について報告した。中性子の結合チャンネル (CC) OMP を 150 MeV まで求めた。150 MeV 以下の核分裂情報に関して CEM (Cascade Exciton Model) 2k+GEM2 を用いて求めた。また、Goriely から入手した HFB により計算された入力パラメータ (核分裂障壁、鞍点での準位密度) を用いて、GNASH によるブラインド計算を行った。KALMAN コードを用いて LDP の共分散データをテスト的に計算した。

Herman は RIPL-2 を用いたテスト計算を行った。また、これは ENDF/B-VII のための評価計算にも利用した。この結果、重大な問題は確認できなかった。ただし、離散準位セグメントに、不便な部分 (フォーマットが複雑すぎる、X、Y 準位として与えられている特定の準位からの相対エネルギーが利用できない等) がある。平均中性子共鳴間隔 (D0、D1) に関しては Mughabghab の新評価を利用して補完できる。EMPIRE による準位密度のテストとして、Mughabghab の新評価とのパリティ分布の比較、vibrational enhancement factor 及び核分裂障壁の検討を行った。OMP を EMPIRE によりサーチできるようにし、EMPIRE とモンテカルロ法及び KALMAN との組み合わせで共分散を計算した。

深堀は、www インターフェースの整備計画を報告した。

Y. Han (中国原子能科学研究院 (CIAE)) は、A が 209 以下の核種に対し、自動サーチプログラムを用いて、200 MeV 以下のエネルギー範囲での重陽子グローバル OMP を求めた。また、Cr 及び Pb (<250 MeV)、Th (<20 MeV) の中性子 OMP、Ni、Cu、Zn (<250 MeV) の陽子 OMP も求めた。UNF 及び MEND コードを用いて RIPL-2 の検証を行った。

E. Soukhovitskii (Joint Institute of Energy and Nuclear Research (JIENR)) は、OPTMAN コードのための RIPL インターフェースを開発し、分散理論ポテンシャルを利用できるオプションを追加した。例題として(p,n)のアイソバリック・アナログ準位 (IAS) の計算を行った。

M. Avrigeanu (Institute of Physics for Nuclear Engineering) は、 α 粒子 OMP に関し、現象論的及び準ミクロスコピック (double-folding real + phenomenological imaginary) 解析を行った。80 MeV 以上では問題ないが、40 MeV 以下で差が出てしまう。40 MeV 以下のエネルギー依存の局所的 (A=100 近傍) な OMP を弾性散乱実験解析により求めた。RIPL-2 の核子密度分布はチェックのためにのみ用いた。

A. Koning (Nuclear Research & Consultancy Group (NRG)) は、変形核の (CC) OMP を検討し、Koning-Delaroche (2003) OMP の誤差データをランダム共分散モデル (モンテカ

ルロ共分散) で求めた。

A. Ignatyuk (Institute of Physics and Power Engineering (IPPE)) は、招待講演として、ALICE/IPPE、GNASH、EMPIRE を用いた医学利用のための荷電粒子入射反応解析を行った。陽子入射反応に関しては良好であるが、重陽子及び α 入射反応に関してはコード間に差がある。

Capote は、離散準位及び光学模型ポテンシャル(OMP)セグメントの更新を行った。「X+、Y+」表記のデータを通常の表現に修正できた。また、OMP セグメントを拡張し、SCAT2k、ECIS、OPTMAN に対する RIPL インタフェースを開発した。さらに、CC (振動 10 セット、回転 10 セット) 及び軟回転体模型 (SRM、2 セット) OMP を追加した。これを元に、ECIS 及び OPTMAN のための OMP 検索モジュールを開発した。 E^2 項及び分散関係の表現方法が必要である。

3. 原子核質量 (Masses) セグメント (コーディネータ : S. Goriely)

原子核質量表を Audi-Wapstra (2003) に更新し、HFB 原子核質量の更新を行った。HFB 核子密度分布 (「原子核物質密度 (nuclear mater density)」を「核子密度分布 (nucleon density distribution)」に名称変更) の更新も行った。変形核の核子密度分布は CEA のデータで更新予定であるが、許可が必要となるかもしれない。基底状態 (dinamical) 変形ファイルを削除するが、RIPL-2 のフォーマットは保存する。Zukka の FORTRAN コードはそのまま持ち越す。存在比はそのままであるが、今後、新しい wallet card のデータで Herman が更新する。

4. 準位データ (Levels) セグメント (コーディネータ : R. Capote)

準位エネルギーの「X+、Y+」表記の問題を解決し、新たにファイルを作成した。励起準位の変形パラメータは光学模型セグメントからここに移動する。RIPL-2 のものと Plujko のデータを深堀が比較する。

5. 光学模型 (Optical Model) セグメント (コーディネータ : A. Koning)

α 粒子ポテンシャルに関して、新しい Averigeanu OMP (Woods-Saxson 型に変換) を追加する。double-folding ポテンシャル計算サブルーチンとこの read.me も追加する。Goriely の double-folding ポテンシャル計算サブルーチンも追加する。

重陽子ポテンシャルに関して、新しい中国の評価を追加する。これは、C~Bi (A=12~209) の 120 核種に対する 200 MeV までの局所的及びグローバル OMP であり、検証のため全反応断面積及び弾性散乱角度分布データと比較した。

この他、励起準位の変形パラメータはここから準位データセグメントに移動する。Koning が、局所的及びグローバル変形 (CC) OMP を検討中である。アクチニド領域で

は Soukhovitskii OMP の方が、Koning-Delaroche 2003 OMP より良好であると報告した。RIPL-2 の球形核の核子密度分布を 3 パラメータでフィッティングしたものを、通常の半径依存ポテンシャルの形に変換するインターフェースプログラムとともに、Goriely が提供する。

6. 平均中性子共鳴間隔 (Resonances) セグメント (コーディネータ : M. Herman)

新しい Mughabghab の評価 (Atlas 用) を利用するために彼に確認することとした。RIPL-2 と Atlas の比較結果は、多くに 50% 以上の差がある。実験誤差が少ない 2~3 ケースに対する検証を行ってみる [Herman, Capote] ([] 内は担当者名) こととした。RIPL-2 を保持するか、Atlas をとるか、merge するか検討する。RIPL-2 では検討されていないが、LDP との整合性をチェックする [Mughabghab, Ignatyuk, Herman, Capote]。また、RIPL-2 の ^{30}Si の D1 及び ^{136}Xe の中性子分離エネルギーを Ignatyuk が修正した。Pb, Bi, Sm, Zr, Os に関する n-TOF データを考慮する [Capote]。

7. γ 線強度関数 (Gamma) のモデルセグメント (コーディネータ : V. Plujko)

MLO が EGLO [Kopetzky] や SLO より良好な結果を与える。重心運動の効果を除去した。また、殻効果の補正を考慮する。データに関して、少なくとも Pd の M1 パラメータをチェックし、温度及び変形に対する依存性を考慮する [Plujko]。RIPL-2 データは保持するが、E3、M2 以上は無視する。

必要なパラメータは、A、Z、 $\beta(j,T)$ に依存した E_i 、 Γ_i 、 σ_i である。RIPL-2 パラメータを用いた計算結果と Varlamov の編集値の比較を行う [深堀]。SLO の低エネルギーテールは過大評価となるが、これを MLO を用いて Plujko がチェックする。RIPL-2 の D0 データを巨大共鳴パラメータ (GDR) 評価に利用する。

8. 核分裂 (Fission) セグメント (コーディネータ : S. Goriely)

核分裂障壁の実験データを「解析核分裂障壁」として利用することを検討した。修正が必要であるが、解析モデルに依存する。CIAE (20 核種)、BNL (Am)、LANL (10 核種)、CEA、Th-U CRP (U, Th) の修正値が存在する。これらは、参考文献付で RIPL に追加する。Th-U CRP から triple humped 核分裂障壁パラメータを提供する。遷移準位 (2+) データの編集の可能性をたずねる [Tauro, Hilaire, Capote]。ミクロスコピック核分裂障壁に関して、ETFSI (Extended Thomas-Fermi plus Strutinsky Integral) を基礎に Goriely が試行してみるようになった。

準位密度 (ETFSI) に関して、核分裂障壁を固定した検証を、U, Th, Pa [Capote]、U, Am [Tauro, Herman] について行う。液滴模型による核分裂障壁計算コードは保持する。

核分裂スペクトルについて、Madland-Nix コード及びそのパラメータを格納するかどうか

か議論した。Madland-Nix コードについては Tauro が検討し、入力データを Capote 等が提供する。

9. 準位密度 (Level Density) セグメント (コーディネータ : S. Hilaire)

全準位密度に関しては、Gilbert-Cameron (GC)、Back-shifted Fermi Gas (BSFG)、Generalized Super Fluid Model (GSFM) の枠組みとパラメータは維持する。もし、ファイル中にデータがなければ、系統式によるものを使用するよう推薦する。ミクロスコピックな計算結果をフィットしたパラメータ及び規格化定数を用いて解析式を作る [Goriely]。これらを、RIPL-2 の www ページの準位密度プロット図作成機能を使ってチェックする [深堀]。EMPIRE から抜き出した準位密度部分も利用する。上記のプログラムや系統式を変換し、MODLIB に提供する [Tauro]。

Vibrational enhancement factor に関して、Hilaire の表を初期値とし、2+、3-準位の系統式を作成する [Plujko]。コード及び実験データか系統式が必要である。アイソスピン効果を RIPL-3 には組み込む。Goriely-Hilaire のミクロスコピックな準位密度を RIPL-2 形式及び系統式の形で準備する。また、damping を検討する。

Mughabghab の新しい評価と整合性を持つため、新しい D0 を用いてパラメータの再フィットを行う (GC、BSFG、GSFM) ことを検討した。RIPL-2 の D0 を GSFM パラメータファイルを用いてチェックする [Ingnytyuk]。GC、BSFG、GSFM に対する TALYS を用いた新しい解析 (rotational 及び vibrational. Enhancement factor を考慮する場合としない場合に分け、フィットした D0 及び離散準位の積み上げから推定) の結果、グローバル及び個別の LDP セットを得、これを提供する [Koning]。スピンカットオフ因子 $\sigma^2 \sim (aU)^{1/2}$ または $(U/a)^{1/2}$ (Koning は 2 番目のものを使用) を採った。

殻効果補正の格納方法 (表か、プログラムか) 選択に関する検討を行った。D0 にフィットした修正 Meyer-Sweatecky (M-S) 殻効果補正は、一般的なパラメータフィットより 20% 良い。RIPL-3 では、「(殻効果補正) = (実験的な原子核質量) - (液滴模型の質量)」と定義する。液滴模型の原子核質量公式の選択として (RIPL-2 ハンドブックを参照)、

$$E_{LD} = a_v * A + a_s * A^{2/3} + (a_{sym} + a_{ss}) * A * I^2 + a_c * Z^2 / A^{1/3}$$

$$a_v = -15.6428, a_s = 17.5418, a_{sym} = 27.9418, a_{ss} = -25.3440, a_c = 0.70$$

(enhancement factor 及び変形の効果を除く)

を採用する。変形エネルギー (enhancement factor を含む) をどのように定義するかについても検討し、変形エネルギーは E_{LD} から除かれるべきであるとした。M-S は変形エネルギーと殻効果の補正の和として与えられている。このため、Ingnytyuk が M-S 計算のサブルーチンを提供する。

p-h 状態密度に関して、スピン及びパリティを考慮しない、1 ないし 2 コンポーネントの準位密度を組み合わせ計算サブルーチンとともに提供する [Hilaire]。

10. RIPL パラメータの誤差推定に関する議論

Koning-Delaroche (2003) OMP の誤差について Koning が報告した。TALYS を用いたランダム (モンテカルロ) 共分散モデルにより、与えられた 19 パラメータの誤差及び共分散を求めた。実験的及び理論的共分散を組み合わせた共分散推定のための GANDR システム [A. Trkov, IAEA/NDC] では、EMPIRE とモンテカルロ方による入力パラメータの変化により計算した今日分散行列を初期値として用い、GANDR システムで実験データをフィッティングすることにより共分散を求める。実験データを用いた EMPIRE-KALMAN 入力パラメータ誤差推定システム [M. Herman] についての報告があった。EMPIRE から感度行列を出力することができるので、これを KALMAN に入力する。実験データを考慮しない場合、エネルギービン間に強い相関が現れる。共分散行列はその評価方法に強く依存する。結局、日本の方式が良いように思える。

誤差データは、RIPL データベース自身には積極的に格納しない。この代わり、TALYS、EMPIRE 等を用いた経験的な誤差表をハンドブックに記述することで対応する。

11. インターフェース及び www 検索ツール (コーディネータ : 深堀)

EMPIRE、GNASH、TALYS、POD、COCOON 等のコードへの入力データ編集のためのインターフェースを検討することとした。

12. TECDOC レイアウトに関する議論

ドラフトのための作業及び締め切りを検討した。ドラフト締め切りは 2006 年末。将来的な更新、拡張、メンテナンス及び展望を含める。CRP 終了後は RIPL 更新のため定期的に諮問家会合を持つこととする。非エネルギー核データ利用分野に関する記述を追加する。各担当は、原子核質量セグメント [Goriely]、離散準位セグメント [Capote, Beruga、更新手順を含む]、平均中性子共鳴間隔セグメント [Herman]、光学模型セグメント [Koning]、準位密度セグメント [Hilaire]、 γ 線強度関数セグメント [Plujko]、核分裂セグメント [Goriely]、インターフェース及び www 検索ツール [深堀] となった。

平均中性子共鳴間隔セグメントに関しては、数値データの入手後、これに関する諮問家会合を 2006 年前半に行う。参加者は Ignatyuk、Mughabghab、Hilaire、Herman、Capote 等を予定している。光学模型セグメントには、最新のデータ統計及び更新された OMP を記述する。誤差及び共分散についての記述も含める。準位密度セグメントには、Ignatyuk、Capote、Herman (EMPIRE で使用している公式についての記述) らの原稿を利用し、RIPL-2 ハンドブックの公式の記述を踏襲する。 γ 線強度関数セグメントに Goriely によるミクロスコピックな部分を追加する。また、できるだけ簡潔に記述する。核分裂セグメントには、提供されたデータの説明、Goriely、Koning、Hilaire、Herman、Capote らのテスト結

果を記述する。準位密度の部分 (RIPL-2 ハンドブックの Maslov の記述部分) は削除する。インターフェース及び www 検索ツールの部分は、www の 1 ページの紹介とする。

13. その他

各セグメントリーダーは会合のまとめと宿題リストを Capote に送付する。CRP のホームページ (<http://www-nds.iaea.org/ripl3/>) を準備する予定である。また、ND2007 に付随した会合を検討する。

14. 終わりに

RIPL-3 は、RIPL-1 及び RIPL-2 の経験を生かし、より網羅的に、よりテストされたモデルパラメータを格納できそうである。また、誤差データに関する考察も含まれ、信頼性検証に有効となるだろう。読者諸氏のコメント及び提言をお待ちしている。