



## 会議のトピックス (I)

# 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3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 2007 年 12 月 10~14 日ウィーンの国際原子力機関 (International Atomic Energy Agency, IAEA) 本部にて開催された。原子核物理のモデル計算のための参照入力データを格納した Reference Input Parameter Library, Version 3 (RIPL-3) のための第3回 (最終) 会合である。RIPL-3 の主目標は、

- RIPL データベースの維持と改訂のための、適切に定義され、明文化された手順の確定
- 周期律表全般にわたった原子核反応の大規模計算及び利用可能な実験データベースとの比較による RIPL の広範な信頼性評価
- RIPL に関する不確定性評価またはパラメータの適用範囲の明確化
- RIPL の可能な限りの完全性達成

である。RIPL は核物理計算に関する原子核質量、離散準位、平均中性子共鳴間隔、光学模型パラメータ (OMP)、準位密度及び準位密度パラメータ (LDP)、 $\gamma$ 線強度関数、核分裂障壁及び鞍点での準位密度の7セグメントで構成されている。

まず、IAEA/Nuclear Data Section (NDS) 長の A. Nicols から挨拶があり、M. Herman (Brookhaven National Laboratory, BNL) を座長に、S. Goriely (Institute of Astrophysics, Bruxelles Libre 大) を記録者に選出した。この後、Agenda を採択し、議論に入った。参加国は、オランダ、ベルギー、フランス、米国、日本、中国、ロシア、ウクライナ、ベラルーシ、ルーマニア、ハンガリー、インド及び IAEA であった。以下、セグメント毎に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. 原子核質量“Masses”セグメント（コーディネータ：S. Goriely）

現状では、Audi et al. (2003) の質量表を含む FRDM による原子核質量を準備し、同様に Audi et al. (2003) の質量表を含む Skyrme HFB (Hartee-Fock-Bogolyubov) による原子核質量を準備した。Skyrme HFB 及び Gogny HFB (S. Hilaire (CEA) により RIPL 形式に編集したもの。CEA/Bruyeres-le-Chatel からの了承がまだ得られていない) による球形核内核子分布も準備した。存在比に関しては、BNL/NNDC Wallet Card 2005 から Herman が抜き出した。それぞれに対する“readme file”を作成した。

上記原子核質量中に値が無い場合のため、及び誤差データを理論的な計算から求めるために、質量を推定する方法を提供する Duflo-Zuker の fortran プログラムも追加される予定である。また、核子分布に対する英名“nuclear matter distribution”を“nuclear density distribution”に変更する。

Audi et al. (2003) の原子核質量に対する誤差データをデータファイルに含め、モデル計算に対する誤差は、それぞれ FRDM、Duflo-Zuker 及び HFB について与える。同様に、Skyrme または Gogny ポテンシャルについても別途与える。

TECDOC には、shell correction energy や誤差データの議論に関しても (RIPL-2 と同様に) 掲載する。さらに、インターフェースに関しては、web における検索に誤差データを加えるためのツール改良、2 種類の核内核子分布表を検索・図示できるようにツールの更新 (特に変形に関して) を行う予定である。

## 3. 離散準位データ“Levels”セグメント（コーディネータ：R. Capote (IAEA/NDS)）

2005 年 12 月版の ENSDF を基にした離散準位データの更新について合意した。ここでは、RIPL-2 におけるいくつかのケースで不十分であったものを更新し、ENSDF からの更新プログラムを整備する。実施した関連作業は、相対準位( $X+0, X+, \dots$ )の準位構造を再構築することによる削除、DLSL プログラムの作成による「計算された」準位の存在による問題の解決、2007 年 11 月版による最終改訂である。アイソスピンは、Hauser-Feshbach 計算はほとんどこの依存性を利用しないので、準位構造の完全性のためには考慮しない。このことに関するコメントを TECDOC には記載する。Capote がデータファイルを 1 年ごとに改訂し、この改訂を web ページに明確に示す。

誤差データに関して、スピン、パリティ、内部転換係数 (ICC)、Nmax (準位の数え落としのない最大の準位数) について議論する必要がある。誤差データに関して、TECDOC は Capote により執筆される。Web ページから、不要な FORTRAN コードを取り除く。

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

1980 年代以降、中性子共鳴間隔に関する Porter-Thomas 解析が開始された。異なるデー

データベース化 (Rohr (1979)、Mughabghab ら (1981, 1984)、Ilinov ら (1992)、Belanova ら (1996)、Reffo ら (1996)、Huang Zhongfu ら (1996)、Ignatyuk (2000, 2002)、Mughabghab ら (2006)) が試みられた。しかし、異なる解析間で推定誤差範囲を超える相違が見られた。最も重要な相違は、Mughabghab ら (2006) と RIPL-2 解析間のものである。同じ核種に対して、RIPL-2 では s-波及び p-波共鳴のデータが格納されており、それ故、矛盾が存在する。Mughabghab らの場合は、もし p-波データがより精度が高いとすると、s-波の値の推定に利用できる。これによる s-波のデータは、直接求められた値と一致しない。例えば、 $^{50}\text{Ti}$  の場合この相違が顕著である。また、 $^{238}\text{U}$  の特別な場合 (多くの共鳴が知られ、報告も多い)、主な相違は中性子強度関数に見られる。A. Ignatyuk (Institute of Physics and Power Engineering, IPPE) により 30 以上の相違の大きいケースについて新解析が行われ、約半分の場合、RIPL-2 の値に近く、残りは Mughabghab らの結果になった。

本 CRP による推奨として、基本的に RIPL-2 を持ち越し、相違の大きい (RIPL-2 と Mughabghab 間) 30 ケースについて Ignatyuk が改訂することとした。p-波データを基にした s-波データの間接的な決定ではない。TECDOC には Mughabghab データとの相違の原因について記載する。他の中性子共鳴間隔に関するデータベースは RIPL-3 には提供されない。n-TOF からの Zr、Pb、Sm の新データは追加検討する必要がある、現状データとの差違を精査する必要がある。また、誤差データを付加する。

TECDOC には、上記で述べたように、RIPL と Mughabghab との間の差違についての議論を記載し、一般的により悲観的な誤差評価をサブセクションで行う。解析に用いた共鳴数及びエネルギー範囲などを TECDOC に追記する (ただし表などは必要ない)。

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

殻補正エネルギー及び変形エネルギー計算のためのサブルーチンは、RIPL-3 のためには不要であるが、本 CRP 参加者のためには歓迎される。振動準位に関する強調因子 (Kvib) 計算プログラムは、2+及び 3-の集団励起状態のデータベース化のために改訂された。ミクロスコピック計算による全及び p-h 準位密度 (NLD) が提供された。Gilbert-Cameron (GC)、Back-shifted Fermi Gas (BSFG) 及び Generalized Super Fluid Model (GSFM) に対する改訂データベース及び関連する系統式が提供された。RIPL-3 の NLD 推定のための MODLIB テストモジュールを開発した。RIPL-2/3 データを用いた EMPIRE 固有の NLD 計算のためのサブルーチン及びデータベースが提供された。モンテカルロ法によるミクロスコピック NLD 計算コードは、その制限された利用目的のため、RIPL-3 には含まないこととした。

ミクロスコピック NLD に関連して、全及び部分 NLD に対して、Skyrme HFB による単一粒子状態密度及び pairing 強度による combinatorial アプローチの枠組みにより決定法を改訂した。新 NLD データベースが、振動強調因子 (vibrational enhancement factor) の記

述を改良（フォノン励起とそれらの単一粒子状態との結合を明示的に導入）することによって得られた。これに対する入力データは、HFB-14 質量模型を基にしており、質量及び核分裂セグメントとの整合性が担保されている。最終結果は、中性子結合エネルギー付近の s-波及び p-波の中性子共鳴間隔及び低エネルギーでの準位数え上げ数の説明に成功した。実際の利用には再規格化することが提唱された。核分裂セグメントで記述されているように、NLD 模型は核分裂障壁上での NLD 計算に利用されが、同じ模型が部分 NLD 計算に利用される。3p-3h 状態までの multi-step compound 及び multi-step direct 反応における 46 の異なる組み合わせ（例えば、 $^{250}\text{Mb}$  に対するもの）を格納することが提唱された。提供されたそれぞれのファイルに対する詳細及び 2 成分の枠組みから 1 成分の状態密度にするための推定手順を TECDOC に記載する。

解析的 NLD 計算に関して、constant temperature モデル (CT)、BSFG、GSFM（集団運動準位の効果を入れたものと入れないもの）に関連するグローバル及びローカルな解析モデルに対して、 $D_0$  の実験値及び準位数え上げ数についてのフィットを行った。ユーザが NLD を決定できることを保証するために、上記模型の範囲で推定された NLD に対するすべての成分が与えられた。これにより、それぞれの模型に対して整合性のあるパラメータセットが定義された。上記の手順については、Nuclear Physics に投稿された論文 (A. Koning (NRG, Petten) et al.) に記述されている。非核分裂性核種の CT 利用に対しては集団運動効果を考慮せず、核分裂性核種に対してはこれを考慮することが推奨された。また、上記及びすべての模型に関する記述を TECDOC に記載することとした。

上記解析模型及びミクロスコピックな模型に関する誤差に関して、TECDOC に記載することが強く推奨された。 $D_0$  の誤差に伴うパラメータに関する誤差については、EMPIRE に格納されているもののみについて与える。断面積及びスペクトルに対する模型の誤差についても記述することとした。

TECDOC について、ミクロスコピック模型に関する部分は Hilaire が記述する。各種模型についてのデータ及び利用の推奨についても記載する。TALYS に含まれる 6 つの模型、パラメータ及びプロット図の詳細に関しては、Koning により記述される。EMPIRE に利用されている特異な式に関する部分は Herman が、“empire-specific”という名称を改訂した上で記述される。MODLIB については P. Talou (Los Alamos National Laboratory, LANL) が、以前のデータとの比較図に関しては Capote が準備する。

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

論文になっているすべてのグローバルポテンシャルはライブラリに追加予定である。中性子に対するグローバル分散ポテンシャル、重陽子及び三重陽子に対するグローバルポテンシャル（中国）、国枝ポテンシャルを追加する。JLMB ポテンシャルは追加できない。150MeV までの核子入射反応の核分裂核種に対する LANL のチャンネル結合 (CC)

ポテンシャルパラメータ (OMP) が提供された。ND2007 及び JEFF 会合で発表された Fe 領域の $\alpha$ -OMP については、クーロン障壁以上の角度分布及びこれ以下の断面積について検証された。ECIS 及び OPTMAN (軟回転体模型 (SRM) のみ) に対する web インターフェースコードは国枝 OMP について開発済みであるが、RIPL 形式のものについて拡張する必要がある。現状での格納ポテンシャル数は 468 件であり、分散及び CC ポテンシャルの追加により、品質も向上している。これら OMP を格納するための RIPL フォーマット拡張も終了した。

以下の推奨について検討した。新しいアクチノイド ( $^{231}\text{Pa}$  から  $^{252}\text{Cf}$  まで)、W, Ta, Rh, Mn, Au (剛回転体) 及び  $A=24\sim 122$  (SRM) に対する E. Soukhovitskii (Joint Institute of Energy and Nuclear Research, JIENR) の CC 分散型核子ポテンシャルを追加する。しきい値から 200MeV までの重陽子に対するグローバルポテンシャルは Y. Han (中国原子能科学研究院, CIAE) らによって Physical Review C (2006) に発表された。Li, Be, C, Ca に対するローカルポテンシャルの角度分布は、グローバルポテンシャルと同様の結果を与える。Xe, Cs, Dy, Nd, Sm, Pr 同位体に対する 20MeV までの 27 の新しい中性子ポテンシャル (Koning-Delaroche ポテンシャルを基に表面虚数項を 15%下げた) が BNL から提供された。  $26\leq Z\leq 92$  に対する 1keV から 200MeV までのグローバル核子 OMP (球形及び CC) が国枝から提供された。ただし、複合粒子に関する OMP は現状では含めない。Kumar-Kailas (Nucl. Phys. A776, 2006)  $12<A<209$  に対するクーロン障壁から 140MeV までのグローバル $\alpha$ ポテンシャルが、弾性散乱及び非弾性散乱断面積に関してテストされた。50MeV 以下の  $50<A<124$  に対する現象論的グローバル $\alpha$ ポテンシャルが M. Avrigeanu (Institute of Physics for Nuclear Engineering) らにより提供された。RIPL フォーマット及び検索ツールをこれに対応するために拡張する。

誤差データもしくは OMP の適用範囲については、Koning, Hilaire-Bauge (以上 ND2007, Phys. Rev. C63, 024607, Nucl. Data Sheet, 2007[12]) 等の発表がある。CC ポテンシャルについては、主な誤差は低エネルギーでの変形に起因するため、FRDM の値 (30%程度と推定) を使用すべきであることを推奨する。Koning-Delaroche の核子ポテンシャルの誤差については、推定値を格納し、TECDOC に記述する。各ポテンシャルモデルの誤差についても言及する。

TECDOC に関して、以下の議論を行った。誤差または利用可能範囲についての記述を Koning が執筆する。 $\alpha$ ポテンシャルについて Goriely, Avrigeanu 及び Kumar が執筆する。国枝ポテンシャルについては深堀が準備する。グローバル重陽子ポテンシャルについては、Han が記述する。Soukhovitskii は新しい CC ポテンシャルについて、Capote はデータベース及びフォーマット改訂について記述する。

## 7. $\gamma$ 線強度関数“Gamma”セグメント（コーディネータ：V. Plujko（国立 Taras Shevchenko 大））

ETFSI に基づく巨大共鳴（GDR）のエネルギー及び幅のデータベースが、変形パラメータとともに更新された。IAEA のデータベースに基づく実験的な GDR パラメータとともに現象論的データベースを更新した。RIPL-2 パラメータによる計算値と Varlamov（モスクワ大）らの光吸収断面積実験データベースとの比較を行う予定である。RIPL-2 の平均中性子共鳴間隔  $D_0$  に基づく実験的な放射幅のファイルを更新する。標準的な MLO1（Modified Lorentzian） $\gamma$ 線強度の GDR 及び低エネルギー実験データに基づく再規格化についても改訂する予定である。励起及び $\gamma$ 線エネルギーに直線的に依存する幅を持つように特化された SMLO（simplified MLO）が提唱され、テストされた。異なる単純なモデルの範囲内での計算及び実験データ間の総合的な比較は、相対的 $\gamma$ 線強度関数が非対称形状を持つ Closed Form モデル（SLO、EGLO）及び MLO（SMLO）は、GDR パラメータが知られているか、GDR の系統性が十分に利用可能であるときは、統一的で簡易な計算方法を提供できることが、示された。そうでなければ、HFB-QRPA（Quasi-particle Random Phase Approximation）が光吸収強度関数を記述するのに適切である。

以下の推奨データに関して検討した。光核反応データに関するIAEA/CRPからの実験データ情報を含むデータベース、実験データ（Varlamov compilation）及びこれにSMLOをフィットしたものを基にした球形及び変形核に対するデータベース、SLOによりフィットされたパラメータ等のデータベースを保持する。SLO、SMLO、EGLO及び一般化Fermi液滴模型（GFL）パラメータも格納し、関連するFORTRANコードも提供される。MLO2及びMLO3はRIPL-3に格納せず、RIPL-2を参照するのみとする。ETFSIによるGDRパラメータ及びQRPAによるHartree-Fock + Bardeen-Cooper-Schrieffer (HF-BCS) 計算結果は保持する。

GDRパラメータ「実験値」に関する誤差データは、SMLO解析の範囲内で提供され、TECDOC内で議論される。SLO、SMLO、EGLO及びGFLによる $\gamma$ 線強度関数のGDRピーク領域からの差については、webページ及びTECDOCに明記する。また、それぞれの計算式に関してはTECDOCに個別に明確に記載する。

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

グローバルなミクロスコピック計算結果が検証された。Madland-Nixの核分裂中性子スペクトルに対するコードが提供された。核分裂障壁及び鞍点上の準位密度に対するHFB予測値を用いたGNASH計算結果が提供される予定である。

実験から求められた核分裂障壁に関して、以下の議論があった。Maslov及びSmirenkinの最近の解析データを追加するためのRIPL-2の「実験的」核分裂障壁ファイルの拡張については、まだ議論が必要である。ファイルには、障壁の高さ、幅、対称性が、ユーザがデータ解析に必要なとする追加パラメータ（準位密度、透過係数、クラス-II準位等）を

参照できる関連する参考文献とともに含まれるべきである。データはRIPL-2に変更を加えることなく、追加の形で、Capoteが更新する。ファイル名は“empirical-barriers”となる予定である。RIPL-2 (GSFM) と同様の現象論的準位密度も提供される。これは、問題点を明らかにするために、明確に記載されなければならない。クラス-II準位のデータベース化に関しては、新しいデータは利用可能となっていない。更新情報を含むBjornholm-Lynnデータベースが、Talouにより提供される。RIPL-1のtransition band-headはRIPL-3に再格納される。

核分裂中性子スペクトルについては、以下の議論があった。Madland-Nix (1982, Nucl. Sci. Eng. 81, 213) 模型を基礎としたFORTRAN95モジュールをTalouがオリジナルデータと比較することでテストし、提供する。詳細はTECDOCに記載し、他のコードでのベンチマーク計算等の追加テストを行う。

核分裂に関するミクロスコピック成分について、重要な努力が、HFBの枠組みで核分裂に関する情報についての開発及びテストについて払われた。詳細は以下の通り。

- HFBによる核分裂経路(障壁高さ、幅、変形)が決定され、 $80 \leq Z \leq 97$ の80核種 ( $90 \leq Z \leq 97$ の約370の中性子過剰核は除く) について解析された。
- HFB及びCombinatorial法による鞍点上の準位密度や形状核異性体 (shape isomer) については、 $90 \leq Z \leq 97$ の約50核種について決定された。
- 同様の開発作業が、核分裂に関する準位密度、障壁に対する核分裂透過係数計算を含めるために、TALYS及びEMPIREに導入された。
- UからPu同位体に対する中性子核分裂断面積が、TALYS及びEMPIREによりテストされた。ここでは、HFB-14入力パラメータと一貫したもの (例えば、HFBによる核分裂経路やHFB及びCombinatorial法による基底状態及び鞍点上の準位密度) が使用された。

標的核の準位密度をテストするために、非弾性散乱断面積が利用できる。 $90 \leq Z$ の60核種に対する全核分裂経路、鞍点上の準位密度及び核異性体についてのデータを格納することが推奨された。実験的に核分裂障壁などのデータが確認できていない核種に対する拡張については、間に合えば格納する。

個々の核分裂障壁についての誤差データはない。解析ごとに与える予定である。TECDOCには何らかのコメントを掲載する。模型パラメータ中の誤差データは即発中性子スペクトルについて作業してみる。

TECDOC のとりまとめは、Goriely が行うが、追加データの格納は Capote が実施する。

## 9. 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。ただし、公開までの作業はまだかなり残っているため、公開予定はまだ定かではない。

また、せっかく RIPL-1, 2, 3 とやってきたので、TECDOC に記載されている記事だけでも核データ評価の模型パラメータについては、結構な量となる。これを今後の評価者への資産として、RIPL-3 の TECDOC 以外に、Nucl. Data Sheets の特別号（毎年 12 月号は特別号で、まとまった論や記事を載せるそうである。ENDF/B-VII の論文もこれに当たる）にまとめようということになった。実現すれば、核データ評価のための一つの教科書とすることができるかもしれない。

RIPL-3 以降の計画についても簡単ではあるが議論された。基本的に「原子核モデル計算コードの将来の方向性」といったことに関して議論した。RIPL-3 を基礎に、新しい CRP の提案を行う予定である。今後の活動に関する読者諸氏のコメント及び提言をお待ちしている。