

シグマ研究委員会・熱中性子散乱則ファイル作成 ワーキング・グループ会議事録

1. 日 時 昭和61年4月23日(水) 13:00 ~ 17:20

2. 場 所 原研本部第4会議室

3. 出席者 飯島俊吾(NAIG), 関谷全(阪大), 角谷浩享(CRC),
土橋敬一郎(原研), 中原康明(原研)以上5名

4. 配布資料

- (1) JEFのコメントのプリント・アウト (土橋)
- (2) 热中性子散乱に関する JENDL Format (角谷)
- (3) ENDF/B-4, File 7 Thermal Neutron Scating Law Data Format (角谷)

5. 議 事

- (1) ファイル収納物質の選定

次の物質を収納することが決った。先ず、

H₂O, D₂O, Be, BeO, Graphite, Polyethylene, ZrH_x, UO₂, UC,
Benzene

以上は ENDF/B-4 に収納されている。また下線をつけた物質は JEF に収納されている。

JENDL では更に上記の物質に加えて次の物質のデータを収納する。

Teflon, Polystyrene, Diphenyl, Terphenyl, Liquid H₂,
Liquid D₂, Solid CH₄

他に候補物質として次のものが検討された。

UF₆; これについては必要性を調査してから再検討することになった。

TBP (= tri-butyl-phosphate, 再処理用有機溶剤); これについては、複

雑な物質で直ぐには手が付けられそうもないで、 polystyrene や Teflon が片付いてから、改めて検討することになった。

(2) 振動数分布の検討

H₂O

モデルとしては、 JEF のものが free translation と hindered rotation に温度依存を考慮している点で一番進んでいるので、 JEF のモデルを採用することになった。

D₂O, Be, Graphite

JNDC のものを採用することになった。ただし、 Graphite については、 Butland の振動数分布を調査することになった。

Polyethylene

土橋委員が JEF と ENDF / B - 4 のものを比較検討することになった。

ZrH_x

Acoustic mode を中原は Debye 近似で処理しているが、 B - 4 では格子振動をまともに考慮した進んだ振動数分布を用いているので、 B - 4 のモデルを採用することになった。

UO₂, UC, Benzene

ENDF / B - 4 のモデルを採用することになった。

Teflon

関谷委員より次のような報告があり、諒承された。分散関係から決めた結合力を用いて molecular dynamics を解いて振動数分布を求めた。ただし、この結合力を用いて計算した分散関係に実験と合わないところがあるので、もう少し検討する必要がある。1 ~ 2 ヶ月の検討期間が必要。

なお、分散関係の測定データとしては、坂本（原研）のものがあるとのことであった。

Polystyrene

関谷委員から分子構造についての説明があった。振動分布については資料がなく、さらに調査研究が必要とのことであった。なお、分子振動に関する論文が 3

件あり、その著者らがその後の研究で、振動数分布の計算をしている可能性があるので、関谷委員が問合せの手紙を出して、確認することになった。

(3) ファイル作成の手順

熱中性子散乱に関する ENDL Format と ENDF/B-4 Format について角谷委員から説明があった。

温度内挿について ENDF/B の公式と中原の公式の比較について角谷委員から報告があり、エネルギーの低いところでは、カーネル、 σ_0 、 $\bar{\mu}$ の差はほとんどないことであった。これに対して、土橋委員から次のようなコメントがあった。 β の大きいところでは温度内挿は良くない。 $S(\alpha, \beta)$ の温度内挿は良くないことは JEF でも指摘しているし、土橋委員の経験でもそうである。温度内挿を否定すると、B-Format では T を explicit に扱っていないので、使い易くない。

Data section の構造について角谷委員から説明があった。

討論の過程で次の事項が明らかになった。

- σ_{tr} を入れるところはないが、File 4 にルジャンドル・モーメントとして、 $\sigma_1/\sigma_0, \sigma_2/\sigma_0, \dots$ の形で入っている。
- 分子データについては、0-th atom のみのデータで、他の atoms に対しては analytic functions で与えられている。
- $S(\alpha, \beta)$ の処理コードとしては、B-Format は FLANGAGE-II のみであるが、JEF では B-Format の他に NJOY 用 Format も含まれている。
- GASKET の出力は A-Format なので、B-Format への変換コードを作る必要がある。
- FLANGE では、E×E' メッシュ数 ≤ 900 の制限があり使い難い。PIXSE にはその制限がない。PIXE では A-Format を PIXSE Format に変換して使う。
- Coherent elastic scattering について飯島委員から次のような説明があった。B-Format には入っている。HEXCAT や UNCLE-TOM で

計算できる。

温度を変えて収納するのは大変である。温度によって変るのはエネルギーの低いところだけで、変らないデータはどう扱うか？

σ_1 については $E : \sigma_1 / \sigma_0$ が表になっている。温度は入っていない。

次に以下のことが確認された。

- ZrH_x について $S(\alpha, \beta)$ から $\sigma(E' \rightarrow E)$ への変換精度に問題があるので、 (α, β) メッシュを十分細かくする必要がある。 $S(\alpha, \beta)$ を入れておくが、THRUSHやHIKERで直接 $\sigma(E' \rightarrow E)$ を求めることを recommend する。
- H_2 について。LHXでは $S(\alpha, \beta)$ を計算していないので、これを算出するルーチンを角谷委員が作成する。しかしカーネルの計算時間は非常に短いので、直接 LHX で $\alpha(E \rightarrow E)$ を計算することを recommend する。
- D_2 について。LHXコードのパラメータを変えるだけで良いのかどうか更に検討する。

(4) 実作業の進め方

以下の事項が確認された。

- $S(\alpha, \beta)$ の計算には GASKET/J を用いる。
GASKET/J を土橋委員から角谷委員へ渡す。
- Polystyrene 以外の物質の計算は実行可能なので、GASKET/J と UNCLE-TOMによる計算を角谷委員が担当する。
- A-Formatで計算し、結果は適時土橋委員へ送付する。
- A-Formatでデータ・セットを作つておき、B-Formatへの変換はまとめて行う。
- B-Formatへの変換は核データセンターに依頼する。
- 温度分点については、JEF や ENDF/B-4 並みとする。Teflon などについては、用途を考えて決める。Teflon は京大炉でも使つているので、使用目的を関谷委員が確かめることになった。

(5) JEFの取扱い

JEFのモデルを採用する場合、JEFのデータをそのまま用いるのではなく、振動数分布から $S(\alpha, \beta)$ を出すことになった。その場合振動数分布の出典を引用するが、JEFの作成者の Mattes の諒解をとるだけで十分かどうか後日つめることになった。

なお、 H_2O に関するレポート IKE 6-105/1、グラファイトに関するレポート AEEW-R-882 と AERE-R-5778 の所在を調べ、コピーを中原委員から角谷委員に送ることになった。

(6) 積分テスト

次の事項が確認された。

- $S(\alpha, \beta)$, σ_t , $\bar{\mu}$ について前のものと比較する。
- σ_t については、武藏工大で測定できる。
- 拡散係数については松岡氏が作成したコードが使えるかどうかチェックする。
- 中性子スペクトルの数値データがあるかどうか調査するとともに、JEF のグループに問合わせる。

ただし、具体的担当者は未定。

(7) その他

次の事項が確認された。

- 問題が生じたら、随時個別に連絡し合う。
- 文献が必要になった場合は、中原委員へ連絡する。

次回予定

未定。作業がかなり進んだ段階で開催する。それ以前にどうしても会合を持つ必要が生じた場合は中原委員に連絡することが確認された。