

分子動力学法による熱中性子散乱断面積の汎用解析コード開発： 含水素物質に対する適用

Development of a general-purpose code for thermal neutron scattering cross-sections by molecular
dynamics: An application to hydrogenous materials

*安部 豊¹, 船間 史晃¹, 田崎 誠司¹, 日野 正裕²

¹京大院工, ²京大炉

様々な物質に対する散乱則データを作成するために、分子動力学法を利用した熱中性子散乱断面積の汎用解析コードを開発している。第一段階として数種類の含水素物質に対し本コードを適用し、広い入射中性子範囲にわたり全断面積について妥当な解析結果を得た。

キーワード：熱中性子散乱断面積，分子動力学法，含水素物質，散乱則

1. はじめに

熱中性子散乱断面積は、原子炉炉心、冷中性子源、中性子散乱装置などの設計・性能評価のための基礎データとして利用されているが、ENDF/B-VII や JEFF-3.1 などの核データライブラリに収録されている評価済みデータは、現在のところ十数種類の物質に限られている。NJOY/LEAPR などの核計算コードによる散乱断面積の解析では、物質（加えて温度）ごとに物理モデル（状態密度関数など）や関連パラメータを与える必要があるため、汎用的な適用性に難点があった。そこで本研究では、様々な物質に対して原子・分子の詳細な運動を考慮した熱中性子散乱断面積を簡便に解析可能とするために、分子動力学法を利用した汎用解析コードの開発を目的としている。

2. 解析方法・結果

今回は汎用解析コード開発の第一段階として、軽水などの含水素物質を対象物質とした。そのため、解析コードでは散乱断面積の評価式を非干渉性散乱近似とガウス近似を用いて構成し、原子の平均二乗変位を与える幅関数を分子動力学法から解析することにより、物質固有の特性を散乱断面積に反映させている（解析方法の詳細は文献[1]を参照）。図1に示すエタノールの全断面積では、解析結果は数 eV から数 meV までの入射中性子エネルギー範囲にわたり実験値[2,3]をほぼ再現している。また、適用例として解析した他の数種類の含水素物質についてもほぼ同等の結果が得られることを確認している。当日の発表では、本解析コードの詳細とこれらの適用結果について報告する予定である。

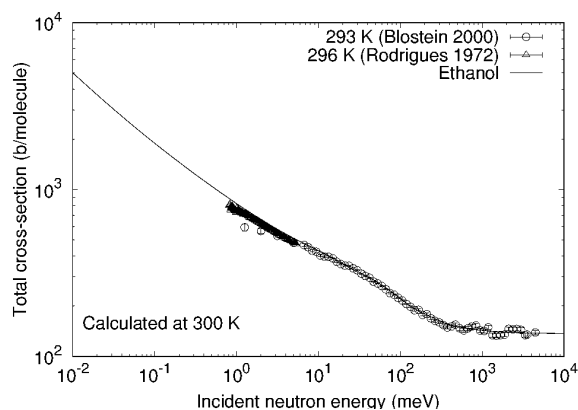


図1 エタノールの全断面積の解析結果

参考文献

- [1] Y. Abe, T. Tsuboi, S. Tasaki, Nucl. Instr. Meth. **A 735**, 568-573 (2014).
- [2] C. Rodrigues, L.A. Vinhas, S.B. Herdade, L.Q. do Amaral, J. Nucl. Energy **26**, 379-383 (1972).
- [3] J. Dawidowski, J.R. Granada, J.J. Blostein, Nucl. Instr. Meth. **B 168**, 462-466 (2000).

*Yutaka Abe¹, Fumiaki Funama¹, Seiji Tasaki¹ and Masahiro Hino²

¹Department of Nuclear Engineering, Kyoto Univ., ²Research Reactor Institute, Kyoto Univ.