

## 分子動力学シミュレーションに基づく軽水及び重水に対する熱中性子散乱の理論研究

(原子力機構<sup>1</sup>・京大院工<sup>2</sup>)○市原 晃<sup>1</sup>・安部 豊<sup>2</sup>

Theoretical Study of Thermal Neutron Scattering by Light and Heavy Water with Molecular Dynamics Simulation (<sup>1</sup>Nuclear Data Center, Japan Atomic Energy Agency, <sup>2</sup>Department of Nuclear Engineering, Kyoto University) ○Akira Ichihara,<sup>1</sup> Yutaka Abe<sup>2</sup>

Light and heavy water are used as moderators in fission reactors. Reliable information of thermal neutron scattering in these materials is fundamental to the analysis of reactor cores, where thermal neutrons may be defined as neutrons with kinetic energy around 0.025 eV. In this study we tried to compute angular distribution and energy spectrum of emitted neutrons theoretically. We evaluated them employing the data obtained from molecular dynamics simulations<sup>1)</sup>, excluding normalization factors such as neutron scattering length. The simulations have been performed for light and heavy water. The thermal neutron scattering has been evaluated by using the fluctuation-dissipation theorem of statistical mechanics, where the trajectory data for hydrogen, deuterium and oxygen atoms were utilized. In calculation, incoherent scattering was assumed to be dominant in light water, while both the coherent and incoherent scattering contributions were considered in heavy water.

*Keywords : molecular dynamics simulation; light water; heavy water; thermal neutron scattering*

原子炉の減速材として、軽水及び重水が使用されている。これらに対する熱中性子散乱の信頼できるデータは、炉心解析にとって重要である。熱中性子は0.025eV程度の運動エネルギーを持つ中性子として特徴づけられる。本研究では、軽水や重水中で散乱される中性子の角度分布とエネルギー Spektrum を理論的に計算することを試みた。これらは、熱中性子の散乱長といった規格化因子を除いて、分子動力学シミュレーションから得られる情報を利用して計算することができる<sup>1)</sup>。分子動力学シミュレーションを、軽水及び重水に対して実施した。統計力学の揺動散逸定理に基づき、軽水では非コヒーレント散乱、重水ではコヒーレント散乱と非コヒーレント散乱の両者の寄与を考慮し、シミュレーションで得た水素、重水素及び酸素原子のトラジェクトリーデータを利用して散乱データを求めた。

1)A. Ichihara, JAEA-Review 2019-046 (2020).