

最新の汎用核データライブラリ JENDL-5 の公開



岩本 修
Iwamoto Osamu

1 はじめに

中性子等の放射線に関わるシミュレーション計算では、原子核と放射線の反応の起こりやすさや反応によって生成・放出される粒子のデータ、また生成された放射性同位体の崩壊についてのデータが必要となる。これらの原子核に関わるデータをシミュレーション計算に適した形式で構成したデータベースを核データライブラリと呼ぶ。日本では高速中性子原子炉の開発のために整備が始まり、最初の核データライブラリ Japanese Evaluated Nuclear data Library version 1 (JENDL-1) が 1977 年に公開された。その後、JENDL は改良や拡張が重ねられ、2010 年に JENDL-4.0 が公開された¹⁾。JENDL-1 では 72 核種に対する中性子反応データが収録されていたが、JENDL-4.0 では 406 核種となる等、中性子反応データを中心に整備がなされてきた。JENDL-1 や JENDL-4.0 等は高速炉、軽水炉、核融合炉等の原子炉に汎用的に利用可能という意味合いで、汎用ファイルと呼ばれている。原子炉のシミュレーションを目的としているため、中性子の上限エネルギーは 20 MeV となっている。一方で、原子炉以外の放射線利用に対応できる核データライブラリとして特殊目的ファイルと呼ばれるデータベースも公開してきた。加速器利用で必要となる 20 MeV 以上の中性子や陽子の核反応データを収録した高エネルギーファイル、中性子による放射化学評価のための放射化断

面積ファイル、その他、光子や重陽子、 α 粒子による原子核反応等、2020 年までに改訂版も含めて 21 の特殊目的ファイルが公開されている²⁾。JENDL として提供されるデータの種類の充実したが、一方でデータ間の整合性や分かりやすさの面で、改善の余地があった。

JENDL-5 ではこれまでの汎用ファイルの枠を超えて、特殊目的ファイルとして公開してきた核データを包括し、真の意味で「汎用」となる核データライブラリを目指して開発を行った。汎用性を高めるため、これまで原子炉ではあまり重要でない核種の中性子反応データも追加した。このように JENDL-5 は JENDL-4.0 から大きく拡張されている。本稿では、2021 年 12 月に公開した JENDL-5³⁾ の概要について紹介する。

2 JENDL-5 の収録データ

JENDL-5 は表 1 に示すようにデータの種類の応じた 11 のサブライブラリで構成されている。前節で述べたように、JENDL は中性子の原子核反応データを中心に開発を行ってきた。一方で、原子炉では表 1 にある熱中性子散乱則や核分裂収率も重要なデータとなる。これらについては JENDL-4.0 までは独自の評価は行わず、米国の核データライブラリである ENDF 等のデータを採用してきた。しかし、近年日本でもこれらの核データ評価に関するアク

表1 JENDL-5のサブライブラリ

サブライブラリ名	内容	核種数等
中性子反応	H (Z=1) から Fm (Z=100) までの中性子入射反応データ	795 核種
熱中性子散乱則	37 物質 (62 元素) に対する熱中性子散乱則データ	37 物質
核分裂収率	31 核種の中性子核分裂と 10 核種の自発核分裂に対する収率	36 核種
崩壊データ	中性子, H (Z=1) から Og (Z=118) までの核種の崩壊データ	4071 核種
陽子反応	200 MeV までの陽子入射反応データ	239 核種
重陽子反応	軽核を中心とする核種の 200 MeV までの重陽子入射反応データ	9 核種
α 粒子反応	Li から Si までの核種の α 粒子入射反応データ	18 核種
光核反応	H-2 (Z=1) から Lr-266 (Z=103) までの核種の光核反応データ	2684 核種
光子原子	光子と原子の散乱や電子対生成, イオン化等の反応データ	100 元素
電子原子	電子と原子の散乱や励起, イオン化, 制動放射等の反応データ	100 元素
原子緩和	イオン化原子からの X 線や電子の放出データ	100 元素

ティビティが出て来た^{4,5)} ことを受け, 独自の評価データを JENDL として初めて JENDL-5 に収録した。

また, 崩壊データも重要なデータであるが, これまで特殊目的ファイルとして公開しているのみで, 汎用ファイルとしては収録してこなかった。しかしながら, 核分裂収率の独立収率データと累積収率データは崩壊データと整合させる必要があると共に, 核分裂生成物の崩壊熱の評価等では一体となり使用される。また, 放射化物の崩壊による放射線を計算する上でも必要となる。JENDL-5 では崩壊データサブライブラリとして, IAEA が取りまとめた国際協力で整備されている評価済核構造データファイル (ENSDF: Evaluated Nuclear Structure Data File) の最新版をもとに, 理論計算や ENSDF で参照されていない測定データを用いてデータの完備性や信頼性を高めたデータを収録した。

加速器による放射線利用や使用済み核燃料中での α 崩壊の影響評価等, 中性子以外の粒子による原子核反応についても必要とされるデータを特殊目的ファイルとして精力的に整備を行ってきた。JENDL-5 では特殊目的ファイルとして, これまで公開してきた陽子, 重陽子, α 粒子, 光子による核反応データをアップデートしつつ, 汎用ファイルとして必要なデータ等を追加し, サブライブラリとして統合した。

放射線と物質との反応では, 原子と光子及び電子との反応データ, 励起された原子からの放射線放出に関する原子データも必要となる。これらのデータについては JENDL として評価するアクティビティ

が無い場合, ENDF (Evaluated Nuclear Data File) の最新版からデータを採用した。しかしながら, 原子データの評価者は世界的にも限られており, 評価者が現役を引退する等, JENDL のみならず, 今後データを更新していくことは世界の核データライブラリ共通の課題となっている。

JENDL-5 では, 特殊目的ファイルを含め JENDL として公開してきたデータをアップデートし, サブライブラリとして, ほぼ集約することができた。すべてのデータが完備されているわけではないが, これまで JENDL では利用者のニーズに合わせたデータを可能な限り整備してきており, その集大成とも言える JENDL-5 は多くの利用者のニーズを満たすものと考えている。

3 中性子反応データ

原子炉やその他の様々な放射線利用において, 核データの中心となるのは, 中性子反応データと考えられる。JENDL-5 の開発においても, JENDL-4.0 から大幅な改訂を行った。図 1 に主な JENDL 汎用ファイルの中性子反応データの収録核種数とデータ容量を示す。JENDL-1 では 1 節で述べたように高速炉で重要となる 72 核種のみであったが, JENDL-5 ではその 10 倍以上となる 795 核種を収録している。前版の JENDL-4.0 から見ても 2 倍近い核種数となった。JENDL-4.0 において原子炉で必要とされる核種はほぼ網羅されていたが, 原子炉であまり必要でない核種は, 天然に存在するものでも必ずしも収録さ

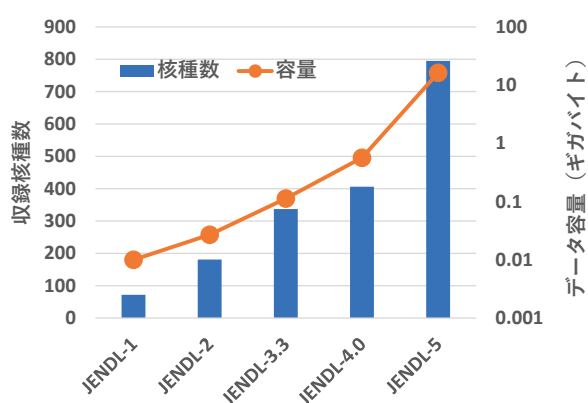


図1 JENDL の中性子データ

れていなかった。しかしながら、色々な用途で詳細な放射線のシミュレーション計算を行う上では不足する核種がある。JENDL-5では、新たな核データ評価を実施してデータを追加することにより、天然に存在する核種をすべて網羅した。また、中性子に関するデータでも放射化断面積については、特殊目的ファイルとして公開してきたが、JENDL-5では汎用ファイルとしてデータを統合した。中性子による放射化では、生成した放射性核種が二次的に反応して更に別の放射性核種を生成しうる。JENDL-5ではこれらの生成量の評価にも対応できるように、半減期が1日以上核種をほぼすべて収録した。この結果JENDL-5の核種数は大幅に増加することになった。また、放射化に関係するものとして、JENDL-4.0で天然核種として収録していた炭素(C)のデータを ^{12}C と ^{13}C の個別のデータとして分割した。 ^{13}C は天然に1%程度しか存在せず、放射線輸送計算上は天然Cのデータのみで問題ないが、 ^{13}C は中性子捕獲により半減期5700年の ^{14}C を生成するため放射化量の評価の上では重要なデータとなる。これによりJENDL-5では天然元素のデータはなくなり、すべて同位体や核異性体のデータのみとなった。

図1には中性子反応データの容量も示しているが、データ容量は対数軸でプロットしており、JENDLの改訂と共に指数関数的に増加していることが分かる。このデータ量の増加は、核種数の増加に加え、データの種類が増えたことが主因である。JENDL-1では15 MeVまでの断面積と中性子散乱角度分布、二次中性子スペクトル等が主なデータであったが、その後、エネルギーが20 MeVになり、更に二重微分断面積や γ 線放出、また、核データの

不確かさを表す共分散データ等が追加され、JENDL-4.0では数百メガバイトの容量となった。JENDL-5では更にデータ量の増加は加速し、10ギガバイトを超えた。これは主に中性子反応のエネルギー領域を200 MeVまで拡張したことによるものである。反応を起こす中性子のエネルギーが増加すると様々な反応が起こり、生成される粒子も増大する。更に、生成粒子のスペクトルは低エネルギーから、高エネルギーまで広がるため、データ量も必然的に大きくなる。これまで、加速器による放射線利用を見据えて20 MeV以上の中性子や陽子等の核反応データの評価を行い、JENDL特殊目的ファイルとして、JENDL高エネルギー核データファイルを公開してきたが、JENDL-5ではこのデータを取り込むと共に、新たな評価データを追加した。すべての反応データを200 MeVまで拡張できたわけではないが、全体の73%にあたる579核種について200 MeVまでのデータをカバーしている。一方で、汎用性が増してデータの種類や容量が増えたため、従来の利用が不便になることが想定される。これを防ぐため、20 MeVまでに限ったデータや放射化断面積のみを収録したファイルも同時に公開しているので、必要に応じて活用していただきたい。

核データの評価は実験データをもとに、核反応の理論モデル計算を利用して行われる。JENDLでも多くのモデル計算コードが開発、改良され利用されてきた。これらの計算コードは開発時の核反応の理論的な知見や計算機の環境に依存したものとなる。また、計算コードの開発者が引退する等により、改良が難しくなることがある。JENDL-4.0の開発ではそれまで利用されてきた計算コードを一新し、新しく核反応のモデル計算コードを開発した⁶⁾。この計算コードは核データライブラリで必要とされるデータを一貫した計算によって、完備した形で出力する。しかしながら、古い計算コードでは計算可能なデータが一部にとどまる等の制限があったため、それらによって評価されたデータも不完全なものがある。JENDLの評価に関わる人員にも限りがあるため、JENDLをバージョンアップする場合でも、すべてのデータを改訂できるわけではない。例えばJENDL-4.0では、アクチニドや核分裂生成物の改訂に重点が置かれたため、軽核や構造材等のデータについては、古くから改訂されていないデータも多く

存在した。JENDL-5の開発においては、それらのデータについても最新の核反応の計算コードを用いて大幅な見直しを行って信頼性を向上させた。

高エネルギーの核反応では様々な残留核が生成されるが、反応過程に応じた運動エネルギーを持ち、材料損傷等に影響する。しかしながら、測定データは少なく、また、一般に残留核は複雑な過程を経て生成されるため、運動エネルギーを理論的に計算することが困難である。このため、これまで公開してきた特殊目的ファイルでは残留核の運動エネルギーについてのデータが与えられておらず、はじき出し断面積が20 MeV以上で極端に過小評価となっていた。今回のJENDL-5の開発過程において、モンテカルロ法を用いることで精度よく計算できる手法を新たに考案⁶⁾することで、はじき出し断面積についても妥当な結果が得られるようになった。

γ 線の生成データは放射線の影響評価で重要となるため、JENDLでもJENDL-3の開発時からデータを提供してきている。JENDL-4.0では中性子データの87%にあたる354核種に γ 線のデータが与えられている。JENDL-5では788核種で全体の99%を超えており、二次 γ 線のデータについても非常に充実したものとなっている。ただし、データが与えられている核種でも、データの完備性や品質の面で不十分なものもあるため、今後も改訂を行っていく予定である。

4 その他の反応データ

陽子、重陽子、光子の反応データについては、比較的最近公開された特殊目的ファイルのデータをもとにしており、大幅な改訂は行っていない。しかし、陽子の反応データについては、加速器中性子源として重要とされる⁹Beの中性子放出データの新しい評価式を基にした評価や、機械学習を取り入れた核種生成断面に評価の結果を取り込む等、部分的な改良を行った。また、重陽子のデータについても、特殊目的ファイルでは収録していないAlやCu、Nb等の構造材のデータを新たに追加する等、データを充実させた。

α 粒子については、特殊目的ファイルとして(α , n)反応に関するデータが2005年に公開されていた。このデータは、断面積については実験データを再現しているが、中性子スペクトルに問題があることが

指摘されていた。JENDL-5では、この問題点を解消すると共に、放射線シミュレーション計算コードで必要とされるが不足していたデータを、新たに追加した。この α 粒子反応サブライブラリは主に使用済み燃料から放出される放射線の評価に活用できると考えられる。

5 まとめと今後の展望

JENDL-5は最新の測定データを反映させると共に、汎用性を大幅に高めた核データライブラリである。これまで公開してきた特殊目的ファイルのデータを改訂しつつ統合している。JENDL-5は、多くのアプリケーションに対して利用可能と考えている。ただし、JENDL-5では要望があった不確かさを表す共分散データの拡充が一部にとどまった。今後は共分散データの充実を図っていく予定である。共分散データを与えることによって、様々な核データの利用分野における不確かさの評価を促進し、シミュレーション計算の更なる活用に貢献したいと考えている。JENDL-5では共分散データが必要なドシメトリファイルを取り入れることができなかった。共分散データを充実させることで、汎用性を高めることにもつながる。

JENDLの方向性やデータの改訂はユーザーの声に大きく依存している。様々な用途でJENDL-5を使っていたが、不十分な点や不足しているデータ等があれば、ぜひフィードバックしていただきたい。すべてを満足させることはできないかもしれないが、それらがJENDLを成長させる原動力になることは間違いない。

参考文献

- 1) K. Shibata, *J. Nucl. Sci. Technol.*, **50**, 449-469 (2013)
- 2) https://www.ndc.jaea.go.jp/jendl/Jendl_J.html
- 3) O. Iwamoto, *et al.*, *J. Nucl. Sci. Technol.*, submitted.
- 4) Y. Abe, *et al.*, *Nucl. Instr. Method.*, **A735**, 568-573 (2014)
- 5) K. Tsubakihara, *et al.*, *J. Nucl. Sci. Technol.*, **58**, 151-165 (2021)
- 6) O. Iwamoto, *J. Nucl. Sci. Technol.*, **44**, 687-697 (2012)
- 7) O. Iwamoto, *J. Nucl. Sci. Technol.*, DOI: 10.1080/00223131.2022.2038300 (2022)

(日本原子力研究開発機構 原子力基礎工学研究センター)