

## 原子炉構造用鋼の中性子はじき出し断面積の簡易計算法

野間口 道 義\*

## Simplified Calculation Procedure for Neutron Displacement Cross Sections of Structural Steels for Nuclear Reactors

By  
Michiyoshi NOMAKUCHI

## Abstract

A simplified procedure is presented for calculating the neutron displacement cross sections for structural steels of nuclear reactors. The procedure differs from Doran's in the following matters:

- 1) Recoil kinematics of compound nucleus reactions are treated assuming that most of the recoil energy upon neutron capture is dissipated during the lifetime of compound nucleus.
- 2) The nuclear evaporation model is not used to estimate the kinetic energies of outgoing particles in the compound nucleus reactions of  $(n, n')$  at high neutron energies above 7 MeV,  $(n, p)$ , and  $(n, \alpha)$ . However, the energies are approximated by the kinematics that Doran et al. have used for  $(n, n')$  reactions below 7 MeV.
- 3) For the secondary displacement model, the ionization threshold model is adopted, being revised so that at low PKA energies the number of displacements in a steel per PKA of a constituent element is independent of that the PKA belongs to the element.

The displacement cross sections for Type 304 stainless steel are calculated in the range of neutron energy below 10 MeV by the procedure using ENDF/B-IV library data. The cross sections are compared with those calculated by Doran et al. for 18Cr-10Ni stainless steel. It is concluded from the comparison that the procedure gives the reasonable values of displacement cross sections for structural steels of definite chemical compositions at neutron energies below 10 MeV.

## 記号表

dpa: 原子あたりはじき出し数  
 $E$ : 入射中性子エネルギー  
 $\sigma_d(E)$ : 中性子はじき出し断面積  
 $G_d$ : 単位体積あたりはじき出し数  
 PKA: 一次ノックオン原子

$n_i$ :  $i$  と名付けられた元素に属する鋼材の構成  
 原子の単位体積当たり個数の全体のそれ  
 に対する比率

$T$ : PKA の初期運動エネルギー

$E_{PKA}$ : PKA の運動エネルギー

$W$ : 複合核反応の放射粒子の初期運動エネルギー

$E_i$ : 原子間衝突におけるイオン化のしきい値

$\nu^i(T)$ : 元素  $i$  に属する PKA 当たり、合金内で形

\* 原子力船部

原稿受付: 昭和59年6月22日

成される、はじき出し数

$\beta$  :  $\nu^i(T)$  の  $T$  に対する比例定数

$E_d$  : 有効はじき出しのしきい値

$N_p(E_p)$  : 運動エネルギー  $E_p$  の放射陽子あたりはじき出し数

$N_\alpha(E_\alpha)$  : 運動エネルギー  $E_\alpha$  の放射  $\alpha$  粒子あたりはじき出し数

## 1. ま え が き

原子炉構造材が他の構造材と特徴的に異なる点の一つは、中性子照射を受け、そのために機械的特性が劣化することである。そこで、原子炉の安全性および経済性の立場から、原子炉設計の段階で、各構成機器の寿命およびそれらの寿命末期における構造材の機械的特性を推定しておかなければならない。それには、各構成機器の構造材について、中性子照射量と機械的特性劣化との定量的な関係を試験しておく必要がある。この中性子照射量としては種々の単位が考えられて来たが、1970年代の初頭までは、もっぱら高速中性子フルエンス (neutrons/cm<sup>2</sup> > 1 MeV) がその単位として広く使用され、照射量と機械的特性劣化との大凡の相関関係が求められて来た。しかし、同一の材料についても、照射の原子炉が異なる場合は勿論、照射の中性子エネルギー・スペクトルが異なれば、異なった相関関係が得られる。すなわち照射の原子炉が異なれば、同じ高速中性子フルエンスの照射であっても、異なった材料劣化がもたらされる。安全性および経済性の向上をめざす原子炉材料の照射損傷の研究にとっては、種々の材料試験炉で、すなわち種々の中性子照射場で行われた実験結果の相互比較が必要である。この様な背景があって、1970年代初頭頃から、高速中性子フルエンスと共に材料の構成原子あたりはじき出し数 dpa (displacements per atom) が中性子照射量の単位として使用され、材料の機械的特性劣化との相関関係が報告されるようになって来た。

本報告で取り扱う中性子はじき出し断面積は中性子照射した場合の材料の dpa を求めるのに必要な量なのである。この中性子はじき出し断面積は理論的模型すなわち一次および二次はじき出し模型によって計算される。しかし、実験による中性子はじき出し断面積の絶対値は勿論、相対値さえも、いかなる材料についても、当時知られていなかったため、研究者の間で用いられる理論的模型は不統一であった。ここに、絶対値とは真の値、また相対値とはあるエネルギー範囲

において常に絶対値のある定数倍である値のことである。そこで、1972年に Serpan らの IAEA の原子炉放射線測定に関するワーキング・グループは二次はじき出し模型については NRT 模型を暫定的なものとして統一して用いることを勧告した。また、Doran ら<sup>2,3)</sup> は中性子照射の一次はじき出し模型として、複合核反応の取り扱いにおいて複合核寿命中には格子原子のはじき出しは起こらないと仮定することおよび蒸発モデルによって放射粒子のエネルギーを計算することに特徴を持つ模型を上記勧告の二次はじき出し模型と組み合わせる構造用金属の中性子はじき出し断面積の計算に使用した。以後、この計算結果の内の鉄のはじき出し断面積が ASTM の規格 E693-79「フェライト系鋼の中性子照射量を dpa によって表わすための標準的実際」において鉄の推奨はじき出し断面積として採用されている<sup>4)</sup>。しかし、Doran らの計算模型には、2章以下に詳細に述べるが、一次はじき出し模型において複合核反応の取り扱い上の問題点および二次はじき出し模型の合金への適用性の問題点がある。そこで、本報告においては、核分裂炉の構造用鋼について中性子エネルギーが 10MeV 以下の領域において上記 IAEA の勧告にとらわれず、1) 計算方法を簡易にすることおよび 2) 新しい考え方を導入することに留意しながら上記計算模型の問題点に関して改善をはかり、一つの計算模型を提案する。また、その計算模型によって Type 304 ステンレス鋼 (以下 SS304) の中性子はじき出し断面積を計算し、上記 Doran らの計算結果の内の 18Cr-10Ni ステンレス鋼のはじき出し断面積と比較することによって本報告の計算模型の妥当性を検討する。

## 2. 理論的計算模型

ある結晶質固体の中性子はじき出し断面積は、その固体の中性子はじき出し損傷断面積の一種であるが、その固体内でのフレンケル欠陥形成に対する有効さを表わす中性子エネルギー  $E$  の関数であって、次の(1)式の  $\sigma_d(E)$  によって定義される。

$$G_d = \int_0^\infty N \sigma_d(E) \Phi(E) dE, \quad (1)$$

ここに、 $G_d$  はその固体内での中性子照射による単位体積あたりはじき出し総数、すなわちフレンケル欠陥形成の総数、 $N$  はその固体の単位体積当たり構成原子の個数、および  $\Phi(E)$  は照射位置における単位エネルギー当たりフルエンスの単位で表わされた中性子スペク

トルである。従って、 $\Phi(E)$  の照射の場合の、その固体の  $dpa$  は(1)式より  $G_d/N$  として求まることになる。しかし、現在のところ  $G_d$  を測定することはほとんど不可能であるから、(1)式によって  $\sigma_d(E)$  を得ることは出来ない。従って、 $\sigma_d(E)$  を求めるためには、次に述べる方法によらざるを得ない。

一般に結晶質金属内では、同じ一個の中性子によってはじき出された一次ノックオン原子 (PKA) は互いに一次損傷ゾーンの平均の広がりよりはるかに遠く離れているということが知られている<sup>5)</sup>。従って、一次損傷ゾーンの重なり合いの効果は無視できて、ある鋼の  $\sigma_d(E)$  は次の(2)式によって近似できる。

$$\sigma_d(E) = \sum_i n_i \int_T f_i(T|E) \nu^i(T) dT, \quad (2)$$

ここに、 $n_i$  は  $i$  と名付けられた元素に属するその鋼材の構成原子の単位体積当たり個数の全体のそれに対する比率、 $f_i(T|E)$  は元素  $i$  に属する原子がエネルギー  $E$  の中性子との相互作用の際に運動エネルギー  $T$  の PKA になるための、断面積単位で表わされた、正規化されていない、確率密度関数、および  $\nu^i(T)$  は元素  $i$  に属する PKA 当たりその鋼材内で形成されるはじき出しの数すなわちフレンケル欠陥形成の数である。

これらの  $f_i(T|E)$  および  $\nu^i(T)$  はそれぞれ一次および二次はじき出し模型によって計算される。現在、純金属および低合金鋼のための模型として最も広く用いられているのは、1章で述べたとおり、上記の組み合わせの一次および二次はじき出し模型であり、それらを実際に用いて計算した例は Doran ら<sup>2,3)</sup> の純金属および 18Cr-10Ni ステンレス鋼についてははじき出し断面積の計算である。しかし、これらの模型には、次の3つの問題点がある。第一に、一次はじき出し模型については、ENDF/B シリーズの評価編集された中性子反応断面積データ以外に各構成原子核種の蒸発モデルのための核データを必要とする。第二に、同じく一次はじき出し模型において、複合核反応に関しては複合核の寿命が非常に短いことを理由に、複合核の寿命中には反跳原子のエネルギーが格子原子のはじき出しに消散されることはないという仮定がなされている<sup>6)</sup>。第三に、二次はじき出し模型においては、その模型は本来純金属内での PKA 当たりフレンケル欠陥形成数を与えるものであって、合金内でのそれを与えるものではない。合金の  $\nu^i(T)$  は PKA の低エネルギー領域においてその構成元素  $i$  に依存しない。このことについては、4章において詳しく述べる。

### 3. 一次はじき出し模型

一次はじき出し模型によって取り扱うべき中性子反応については5章において述べるが、それらの中性子反応の内では  $(n, n')$ 、 $(n, p)$ 、および  $(n, \alpha)$  の複合核反応の取り扱いについては、Doran ら<sup>3)</sup> は補合核の寿命が非常に短いことを理由に<sup>6)</sup>、複合核の寿命中には格子原子のはじき出しに反跳原子のエネルギーが消散されることはないと仮定している。さらに重心系において等方放射を仮定し、中性子エネルギーが 7MeV 以下の  $(n, n')$  反応については評価編集された ENDF/B シリーズの断面積データを用い、エネルギー保存式および運動量保存式によって、また  $(n, p)$ 、 $(n, \alpha)$ 、および中性子エネルギーが 7MeV 以上の  $(n, n')$  反応については蒸発モデルによってこれらの反応の PKA エネルギー・スペクトルへの寄与を計算している。後者の場合について Fig. 1 によって説明すれば、放射粒子の運動エネルギー  $W$  を重心系で等方放射の仮定のもとに蒸発モデルによって ENDF/B シリーズの断面積データのライブラリーにない核データを用いて計算し、次いで複合核寿命中に反跳核のエネルギー  $T_1$  が

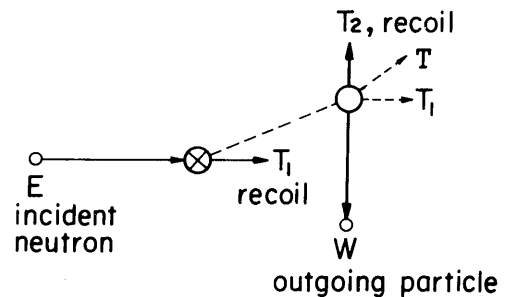


Fig. 1. Treatments of compound nucleus reactions for primary displacement models.

格子原子のはじき出しに消散されることはないという仮定のもとに運動量保存式が PKA のエネルギー  $T$  を計算している。これに対し、本報告では、複合核の寿命中に中性子捕獲の際の反跳核エネルギー  $T_1$  は他の構成原子に伝達されてしまうと仮定し、また重心系において等方放射を仮定して、さらに  $(n, p)$ 、 $(n, \alpha)$ 、および中性子エネルギーが 7MeV 以上の  $(n, n')$  反応も含めて複合核反応について蒸発モデルによらないで簡易に ENDF/B シリーズのライブラリーの断面積データだけを用い、エネルギー保存式と運動量保存式から Fig. 1 の  $W$  を計算し、その反跳の運動エネルギー

一  $T_2$  を求める。これによって1つの複合核反応によって運動エネルギー  $T_1$  と  $T_2$  とをそれぞれ得た2個のPKAが生ずるとして上記の反応のPKAエネルギー・スペクトルへの寄与を計算する。なお、 $(n, \gamma)$  反応は同じくPKA数個を生ずるとして取り扱い、 $(n, n)$  反応の共鳴吸収については弾性散乱として取り扱う。これらの取り扱いの理由については5章において述べる。

原子炉構造用鋼材における複合核反応の中性子捕獲の際の反跳核運動エネルギーは複合核寿命中にどの様に他の構成原子に伝達されるかについては、その鋼の構成原子の核種ごとに種々に異なる伝達の仕方をすると思される。しかし、核種ごとにその伝達の様子を考慮するには複雑な計算を必要とする。従って、本報告においては簡易な計算をめざし、複合核寿命中に上記の反跳核運動エネルギーはすべて他の構成原子に伝達されてしまうと仮定する。ここで問題はDoranらの計算における仮定すなわち上記運動エネルギーは複合核寿命中に他の格子原子のはじき出しに消散されることはないという仮定と本報告における仮定すなわち上記運動エネルギーは複合核寿命中に他の構成原子に伝達されてしまうという仮定とどちらがより実際に近いかということである。いま、PKAのエネルギーがイオン化をほとんど引き起こさないほど低い場合について考えてみよう。著者の先の報告<sup>7)</sup>の $\alpha$ の鉄についての計算によると、鉄原子間の衝突カスケードにおいては格子原子のはじき出しと置換はじき出しとが同程度起こっている。このことから、低エネルギーのPKAは複合核寿命中に運動エネルギーを他の構成原子に伝達してしまう場合が多いと考えられる。また純鉄においてPKAのエネルギーがイオン化を引き起こすに充分なだけ高いとき、SeitzおよびKoehler<sup>8)</sup>によると、PKAのエネルギーは原子エネルギー準位の励起、イオン化、およびヘッドオンに近い衝突すなわち近接衝突によって減速される。従って、上記の低エネルギーの場合にはじき出しと置換はじき出しとが同程度起こっていることから、高エネルギーの場合にもPKAの運動エネルギーは複合核寿命中にその大部分が他の構成原子に伝達されることが多いと考えられる。以上から、原子炉構造用鋼材においても、Doranらの仮定より本報告の仮定の方がより実際に近いと考えられる。

#### 4. 二次はじき出し模型

上記のNRT模型は本来純金属に対するものである

ので、合金に適用する場合には、2章においても述べたが、次の様な問題点がある。すなわち、この模型は純金属内でのPKA当たりのフレンケル欠陥形成数を与えるものであって、合金内のそれを与えるものではない。PKAの低エネルギー領域では原子間の相互作用でのイオン化損失はほとんどないので、合金の場合、各構成元素の $\nu^i(T)$ は一つの原子間衝突カスケードで最初にはじき出されたPKAがどの元素に属していたかには依存しない。またPKAの高エネルギー領域では合金の $\nu^i(T)$ の $i$ への依存性は明らかではない。そこでDoranら<sup>2)</sup>は、18Cr-10Niステンレス鋼については、この模型による計算と異種原子間衝突をNRT模型の基本にたちもどって追跡した計算との差は1%以下であることを確かめている。これはDoranらが計算の対象とした18Cr-10Niステンレス鋼の構成元素Fe(72%)、Cr(18%)、およびNi(10%)の質量数および原子番号が互に似かよった値であることによると考えられている<sup>9)</sup>。しかし、3章において採用した一次はじき出し模型における仮定すなわち複合核反応の場合には捕獲の反跳のエネルギーは複合核の寿命中に他の構成原子に伝達されてしまうという仮定によって一つの複合核反応から2個のPKAが生ずるのであるから、本報告においてはPKAの低エネルギー領域が重要になって来る。従って、上記のSerpanらの勧告以前には広く用いられていたイオン化しきい値を設定する模型を基にしてPKAの低エネルギー領域では鋼材の構成元素には依存しない $\nu^i(T)$ に改善した次の簡易な二次はじき出し模型を採用することによって、原子炉構造用鋼材に対しては、 $E \leq 10\text{MeV}$ にわたって相対的に妥当な中性子のはじき出し断面積が計算できるのではないかと予想される。

さて3章においてはPKA自身に注目したが、ここではPKAのことは忘れてしまってPKAのエネルギー $E_{\text{PKA}}$ に注目する。この $E_{\text{PKA}}$ はイオン化のしきい値より高エネルギーの領域では励起、イオン化、および近接衝突によってつぎつぎと他の構成原子に伝達されて行く。この様に $E_{\text{PKA}}$ のいない手がつぎつぎと変わるので、PKAが元素 $i$ に属していても鋼材内における有効イオン化しきい値の $i$ への依存性は明らかでない。しかし、ここではイオン化のしきい値 $E_i$ を純金属の場合と同じくLeibfried<sup>5)</sup>によって次の(3)式のごとく与える。

$$E_i^i = A^i, \quad (\text{keV}), \quad (3)$$

ここに、 $A$  は PKA の原子質量単位で表わされた質量数である。そうすると、PKA が元素  $i$  に属するとき、 $E_{\text{PKA}}$  は  $E_i^i$  より低くなるまで置換はじき出しを繰り返しながら、ほとんどイオン化のみによって減速し、はじめて格子原子をはじき出すことが出来るようになる。また PKA の初期エネルギー  $T$  が  $E_i^i$  より低い領域では純金属の PKA 当たりはじき出し数は  $T$  に比例することが知られている<sup>8)</sup>。従って、鋼材の  $\nu^i(T)$  を次の (4a) および (4b) 式によって  $\beta$  を比例定数として与える。

$$\nu^i(T) = \beta T, \quad T \leq E_i^i \text{ のとき} \quad (4a)$$

$$\nu^i(T) = \beta E_i^i, \quad T > E_i^i \text{ のとき} \quad (4b)$$

## 5. 中性子反応の寄与

(2) 式の  $\sigma_a(E)$  は個々の中性子反応からの寄与の和として与えられる。以下に、個々の中性子反応からの寄与について述べる。

### 5.1. $(n, \gamma)$ 反応

SS304 においては、 $(n, \gamma)$  反応は中性子エネルギーが 0.3keV より高い領域ではほとんど起こらないので、中性子吸収の際の反跳のエネルギーは SS304 の有効はじき出しのしきい値  $E_d$  と同じ程度かそれより小さい。従って、一次はじき出し模型における本報告の仮定はここでは妥当な仮定であるといえる。また、崩壊と次の崩壊との期間は一つの原子間衝突キャスケードの寿命より一般にはるかに長い。従って、 $(n, \gamma)$  反応は複合核の場合と同じく取り扱ってよい。

$(n, \gamma)$  反応の寄与は 2 つの部分に分けられる。第一の部分  $\sigma_a^{1\gamma}(E)$  は中性子の捕獲の際の反跳による PKA からもたらされ、次の (5a) および (5b) 式によって与えられる。

$$E > \frac{M_r^i}{m} E_d \text{ のとき,}$$

$$\sigma_a^{1\gamma}(E) = \sum_i n_i \sigma_{\gamma}^i(E) \nu^i(T_i), \quad (5a)$$

$$T_i = \frac{m}{M_r^i} E - E_d, \quad (5b)$$

ここに、 $\sigma_{\gamma}^i(E)$  は元素  $i$  に属する原子の中性子エネルギー  $E$  における  $(n, \gamma)$  反応の断面積、 $m$  は中性子の質量、 $M_r^i$  は反跳核の質量である。なお、 $E \leq M_r^i E_d / m$  のときは、寄与は無い。

第 2 の部分  $\sigma_a^{2\gamma}(E)$  は光子の放射から来るもので、次の (6a) および (6b) 式によって与えられる。

$$\sigma_a^{2\gamma}(E) = \sum_i \sum_j n_i \sigma_{\gamma}^i(E) \nu^i(T_{ij}), \quad (6a)$$

$$T_{ij} = (E_{\gamma}^{ij})^2 / 2M_{\gamma}^i C^2, \quad (6b)$$

ここに、 $E_{\gamma}^{ij}$  は元素  $i$  に属する原子の  $(n, \gamma)$  反応において放射され、 $j$  と名付けられた光子のエネルギー、 $T_{ij}$  はその光子の放射による反跳のエネルギー、および  $C$  は光子の速さである。なお、(6b) 式においては、有効はじき出しエネルギー  $E_d$  は無視されている。なぜならば、すでに中性子捕獲あるいは光子放射の際に、PKA は格子点からはじき出されている場合が多いからである。

いま、標的核を 26Fe のそれとしてみよう。このとき、この反応の核励起の最高準位エネルギーは  $\sim 10\text{MeV}$  であり、イオン化のしきい値  $E_i^i$  は  $\sim 57\text{keV}$  である。従って、 $T_{ij} < E_i^i$  である。また、標的核が別の原子、例えば 24Cr あるいは 28Ni のそれであるとした場合にも同じ結果が得られる。従って、 $j$  に関して平均された PKA 当たりのはじき出し数は  $j$  に関して平均された反跳エネルギー  $\bar{T}_i$  の PKA 当たりのそれに等しい。その理由は  $\nu^i(T)$  は  $T \leq E_i^i$  のとき  $T$  に比例しているからである。従って、 $\sigma_a^{2\gamma}(E)$  は次の (7a) および (7b) によって与えられることになる。

$$\sigma_a^{2\gamma}(E) = \sum_i n_i \sigma_{\gamma}^i(E) n_{\gamma}^i \nu^i(\bar{T}_i), \quad (7a)$$

$$\bar{T}_i = \frac{1}{2M_r^i} \int_{E_{\gamma}^i}^i f_{\gamma}^i(E_{\gamma}^i | E) (E_{\gamma}^i / C)^2 dE_{\gamma}^i, \quad (7b)$$

ここに、 $n_{\gamma}^i$  は中性子エネルギー  $E$  におけるこの反応当たり放射される光子の数、 $E_{\gamma}^i$  はその放射される光子のエネルギー、および  $f_{\gamma}^i(E_{\gamma}^i | E)$  はエネルギー  $E_{\gamma}^i$  の光子が放射される確率密度関数である。

### 5.2. $(n, n)$ 反応

$(n, n)$  反応の共鳴吸収については、複雑さをさげ簡易な計算をめざして弾性散乱として取り扱う。この様な近似を取り入れた場合にも計算結果は妥当な相対値を与えると予想される。

$(n, n)$  反応からの寄与  $\sigma_a^n$  は (8a) から (8c) 式によって与えられる。

$$E > 2E_d / S_i (1 - \mu) \text{ のとき,}$$

$$\sigma_a^n(E) = \frac{1}{2} \sum_i n_i \int_{-1}^1 \sigma_n^i(\mu, E) \nu^i(T_i) d\mu, \quad (8a)$$

$$T_i = \frac{1}{2} S_i (1 - \mu) E - E_d, \quad (8b)$$

$$\mu = \cos \theta, \quad (8c)$$

ここに、 $\theta$  は重心系における中性子の散乱角、 $\sigma_n^i(\mu, E)$  は入射中性子エネルギー  $E$  における元素  $i$  に属する原子の  $(n, n)$  反応の微分断面積、 $T_i$  は実験室系における PKA の運動エネルギー、および  $S_i$  はこの反応当たりの最大比エネルギー損失である。なお、 $E \leq 2E_d/S_i(1-\mu)$  のとき、 $(n, n)$  反応の寄与は無い。

### 5.3. $(n, p)$ および $(n, \alpha)$ 反応

3章において述べた理由によって、 $(n, p)$  および  $(n, \alpha)$  反応の寄与をそれぞれ2つの部分に分ける。 $(n, p)$  反応の寄与の第1の部分  $\sigma_d^{1p}(E)$  は中性子捕獲の際の反跳の PKA によってもたらされ、次の (9a) および (9b) 式によって与えられる。

$$\sigma_d^{1p}(E) = \sum_i n_i \sigma_p^i(E) \nu^i(T_i), \quad (9a)$$

$$T_i = \frac{m}{M_r^i} E - E_d, \quad (9b)$$

ここに、 $\sigma_p^i(E)$  は、入射中性子エネルギー  $E$  における、元素  $i$  に属する原子の  $(n, p)$  反応の断面積である。また、その第2の部分  $\sigma_d^{2p}(E)$  は陽子放射の反跳核および放射された陽子の鋼材内における散乱によってもたらされる。 $(n, p)$  反応で放射される陽子の運動エネルギーは3章で述べた方法で近似される。すなわち、 $\sigma_d^{2p}(E)$  は次の (10a) から (10c) 式によって与えられる。

$$E > -\frac{M_r^i}{M_r^i - m} Q_i \text{ のとき,}$$

$$\sigma_d^{2p}(E) = \sum_i n_i \sigma_p^i(E) \int_0^\pi \frac{1}{2} \sin \theta \{ \nu^i(T_i) + N_p(E_p^i) \} d\theta, \quad (10a)$$

$$T_i = \frac{m_p}{M_r^i} E_p^i \quad (10b)$$

$$E_p^i = \frac{m m_p}{(M_r^i + m_p)^2} E \left[ \cos \theta + \frac{\sqrt{\cos^2 \theta - (M_r^i/m_p + 1) \{ (m - M_r^i)/m - M_r^i Q_i / mE \}}}{M_r^i Q_i / mE} \right]^2, \quad (10c)$$

ここに、 $m_p$  は陽子の質量、 $\sigma_p^i(E)$  は、入射中性子エネルギー  $E$  における、元素  $i$  に属する原子の  $(n, p)$  反応の断面積、 $Q_i$  は同じく  $(n, p)$  反応の  $Q$  値、 $\theta$  は中性子の入射方向に対する陽子の実験室系における放射角、 $T_i$  は陽子放射の反跳核の運動エネルギー、および  $N_p(E_p)$  は運動エネルギー  $E_p$  をもって放射される陽子当たりの鋼材内におけるはじき出し数である。なお、

$E \leq -M_r^i Q_i / (M_r^i - m)$  のときは、この寄与は無い。

$(n, \alpha)$  反応の寄与は  $(n, p)$  反応のそれと同じ方法で近似される。すなわち、 $(n, \alpha)$  反応の寄与は (9a) から (10c) までの式において  $p$  を  $\alpha$  に置き換えた式によって与えられる。

AISI 304 ステンレス鋼の  $N_p(E_p)$  および  $N_\alpha(E_\alpha)$  の値は陽子および  $\alpha$  粒子の一連の散乱を計算機で模擬し、追跡することによって、6章において、計算される。

また、 $(n, d)$ 、 $(n, t)$ 、 $(n, \text{He}^3)$ 、および  $(n, 2\alpha)$  反応は、 $E \leq 10 \text{ MeV}$  の範囲では、原子炉構造用鋼においては、ほとんど起こらないので、これらの反応からの寄与は考慮に入れる必要がない。

### 5.4. $(n, n')$ 反応

3章において述べた理由によって、 $(n, n')$  反応の寄与は2つの部分に分けられる。第1の部分  $\sigma_d^{1n'}$  ( $E$ ) は中性子捕獲の際の反跳核すなわち PKA によってもたらされ、次の (11a) および (11b) 式によって与えられる。

$$E > \frac{M_r^i}{m} E_d \text{ のとき}$$

$$\sigma_d^{1n'}(E) = \sum_i n_i \sigma_n^i(E) \nu^i(T_i), \quad (11a)$$

$$T_i = \frac{m}{M_r^i} E - E_d, \quad (11b)$$

ここに、 $\sigma_n^i(E)$  は中性子エネルギー  $E$  における元素  $i$  に属する原子の  $(n, n')$  反応の断面積である。なお  $(n, n')$  反応は、SS304 においては、中性子エネルギーが  $10^5 \text{ eV}$  以下のときは起こらないとしてよい (Fig. 5 参照)。従って、そのときはこの寄与は無い。

第2の部分は中性子および光子の放射の際の反跳核すなわち PKA によってもたらされる。この部分は3つの種類に別けられる。その第一種  $\sigma_d^{21n'}$  ( $E$ ) は離散的準位を励起するこの反応における中性子放射の際の反跳の PKA によってもたらされ、(12a) および (12b) によって与えられる。また、第2の部分の第2種  $\sigma_d^{22n'}$  ( $E$ ) は連続準位を励起するこの反応における中性子放射の反跳の PKA によってもたらされ、(13a) および (13b) によって与えられる。また、その第3種は光子の放射から来る。しかし、この第3種の寄与は  $(n, n')$  反応の寄与の総和に比較してはるかに小さく無視できるので、考慮に入れる必要はない。

$$E > -\frac{M_r^i}{M_r^i - m} Q_{ij} \text{ のとき,}$$

$$\sigma_a^{21n'}(E) = \sum_i \sum_j n_i \sigma_n^i(j, E) \int_0^\pi \frac{1}{2} \sin \theta \nu^i(T_{ij}) d\theta, \quad (12a)$$

$$T_{ij} = \frac{m}{M_r^i} E_n^{ij}, \quad (12b)$$

ここに、 $\theta$  は中性子の入射方向に対する、実験室系での、中性子放射角、 $\sigma_n^i(j, E)$  は、離散的準位を励起する  $(n, n')$  反応の、入射中性子エネルギー  $E$  における、元素  $i$  に属する原子の断面積、 $-Q_{ij}$  は準位  $j$  の励起エネルギー、 $E_n^{ij}$  は放射される中性子のエネルギー、および  $T_{ij}$  はその中性子放射の反跳の PKA のエネルギーである。 $E_n^{ij}$  は 3 章において述べた方法によって近似され、(10c) 式において、 $E_p^i$  を  $E_n^{ij}$  に、 $m_p$  を  $m$  に、および  $Q_i$  を  $Q_{ij}$  に置き換えた式によって与えられる。なお、 $E \leq -M_r^i Q_{ij} / (M_r^i - m)$  のときは、 $\sigma_n^i(j, E)$  がほとんど零であるので、この寄与は無い。

$$E > -\frac{M_r^i}{M_r^i - m} Q_i \text{ のとき,}$$

$$\sigma_a^{22n'}(E) = \sum_i n_i \int_{Q_i} \int_0^\pi \frac{1}{2} \sigma_n^i(Q_i, E) \nu^i(T_i) \sin \theta d\theta dQ_i, \quad (13a)$$

$$T_i = \frac{m}{M_r^i} E_n^i, \quad (13b)$$

ここに、 $\sigma_n^i(Q_i, E)$  は元素  $i$  に属する原子の、連続準位の励起エネルギー  $-Q_i$  における、かつ入射中性子エネルギー  $E$  における、 $(n, n')$  反応の微分断面積、また  $T_i$  は中性子放射の反跳核すなわち PKA のエネルギーである。(13a) 式においては、 $\sigma_n^i(Q_i, E)$  は  $Q_i$  の範囲内において一様であると仮定されている。また、 $E_n^i$  は 3 章において述べた方法によって求められ、(10c) 式において、 $E_p^i$  を  $E_n^i$  に、かつ  $m_p$  を  $m$  に置き換えた式によって与えられる。なお、 $E \leq -M_r^i Q_i / (M_r^i - m)$  のときは、この反応はほとんど起こらないので、この寄与は無い。

$(n, n')p$ 、 $(n, n')\alpha$ 、および  $(n, n')3\alpha$  反応は、中性子エネルギー  $E \leq 10\text{MeV}$  のとき、原子炉構造用鋼においては、ほとんど起こらないので、 $(n, n')$  反応において放射される  $\alpha$  粒子および陽子の寄与は考慮に入れる必要がない。

## 6. Type 304 ステンレス鋼の中性子はじき出し断面積

原子炉構造用鋼の中性子はじき出し断面積計算模型としての本報告の計算模型の妥当性を検討するために、SS304 のはじき出し断面積計算にその計算模型を

適用してみることにする。

核分裂炉の場合、炉心の中性子スペクトルにおいても中性子エネルギーが 10MeV より高い範囲の中性子フルエンスは 10MeV 以下のそれに比較してはるかに小さい。従って、ここでは中性子エネルギーの範囲は 10MeV 以下としてよい。SS304 の化学成分を Table 1 に示してある AISI 304 ステンレス鋼のそれによって近似する。ここでは他の構成元素例えば  $P$  あるいは  $S$  は無視されている。なぜならばそれらの原子数密度は Table 1 にある元素たちのそれらに比較して十分に小さいからである。ENDF/B-IV ライブラリーの中性子反応断面積データを用いる。二次はじき出し模型の  $\nu^i(T)$  の  $\beta$  すなわち (4a) および (4b) 式の  $\beta$  については、計算結果を Doran らの 18Cr-10Ni ステンレス鋼のはじき出し断面積と比較し、計算結果が  $E \leq 10\text{MeV}$  にわたって SS304 のはじき出し断面積の妥当な相対値を与えるかどうか検討するのであるから、ここではまず  $\beta$  に対して任意の値を選んで与えてよい。後に  $\beta$  に対してはこの比較から上記 IAEA の勧告に適合するように値を選んで与える。著者の先の報告<sup>7)</sup> の計算によれば、 $\alpha$  鉄に対して  $\beta \approx 0.006$  Frenkel defects/eV であった。そこで、 $\beta$  に対してまずこの値を採用する。また本報告の一次はじき出し模型の  $E_d$  は一つ一つの一次はじき出しにおける有効はじき出しのしきい値で、Doran<sup>2)</sup> が単一はじき出し模型 (one-step displacement model) のためのはじき出しエネルギーと呼んでいるものに当たる。従って、 $E_d$  ははじき出しの方向および構成原子に関して平均されたはじき出しのしきい値であり、Doran らの二次はじき出し模型における有効はじき出しのエネルギー  $T_d$  の下限である。この  $T_d$  の下限としては ASTM の規格 E521-77 に Cr, Fe, Ni, Cu, および Mo に対してそれぞれ 28, 20, 23, 19, および 33eV が推奨されている<sup>10)</sup>。また  $E_d$  としては従来一般に鉄に対して 25eV が採用された。従って、本報告においては SS304 の  $E_d$  として 25eV を採用する。

$(n, p)$  および  $(n, \alpha)$  反応で、それぞれエネルギー  $E_p$  および  $E_\alpha$  をもって放射されたばう大な数の陽子および  $\alpha$  粒子が、それらの行程が  $\sqrt{3}a$  ( $a$  は格子定数) を超えるまで、追跡される。この追跡は SS304 の結晶格子構造内における一連の散乱過程を計算模擬することによって行われる。その結晶構造では Mo, Mn, Cr, Cu, Fe, そして Ni の原子が格子点を占め、Si および C の原子は格子間位置を占める。そして、放射粒子当た

Table 1 Chemical composition of an AISI 304 stainless steel

Steel	$n_i$ , Ratio of number of constituent atoms of element $i$ per unit volume to that of whole							
	Fe	C	Mn	Si	Cr	Ni	Mo	Cu
AISI 304	0.6824	0.0022	0.0121	0.0117	0.1989	0.0902	0.0010	0.0015

りはじき出し数のそれぞれ  $E_p$  および  $E_a$  に関する微係数が計算される。粒子放射方向および格子点・格子間位置を占める原子の属する元素はモンテカルロ法によって抽出される。これらの放射粒子と鋼材の構成原子との間の相互作用は単純クーロンの相互作用であると仮定してよい<sup>11)</sup>。また1箇の放射粒子と周囲の複数箇の格子原子とは同時に結晶格子構造の中で相互作用する。しかし、この同時に起こる相互作用たちは2体衝突模型によって近似することが出来る<sup>12)</sup>。問題の微係数は行程の単位長さ当たり構成原子に伝達されたエネルギーで同行程当たりはじき出し数を除すことによって与えられる。本報告においては、これらの微係数は  $\sqrt{3} a$  の行程の間に伝達されたエネルギーによって除された同行程ぞいに生ずるはじき出しの数を放射方向に関して平均したものによって近似される。行程の単位長さとして、 $\sqrt{3} a$  を選んだ理由は FCC 格子構造においては放射粒子から  $\sqrt{3} a$  以下の距離はなれた複数箇の格子原子がその粒子と同時に相互作用し

得るとしてよいからである。以上のようにして  $dn_p(E_p)/dE_p$  および  $dN_a(E_a)/dE_a$  の値が計算され、その結果は Fig. 2 および 3 に示されている。また Table 2 には入射中性子エネルギーが 3MeV より高い領域における  $\sigma_a(E)$  の値と複合核反応および放射粒子の  $\sigma_d(E)$  に対する寄与とが示されている。伝達されるエネルギーは単純クーロン相互作用の遠隔衝突においては初期エネルギーに逆比例する<sup>13)</sup> のであるから、計算された微係数は高エネルギー領域においては行程の単位長さの増加に伴って増加するはずである。実際、行程の単位長さを  $5a$  とすると、それを  $\sqrt{3} a$  としたときの計算結果に対して放射粒子のエネルギーが 1MeV のとき ~ 3 倍、10MeV のとき ~ 2 倍の結果が得られた。行程の単位長さの真の値は  $5a$  より短いにちがいない。なぜならば  $5a$  の行程の間に数10回の衝突が起こるからである。従って、Table 2 から放射粒子の  $\sigma_d(E)$  への寄与は総計において 1% を超えることはなく、無視してよいことが知られる。

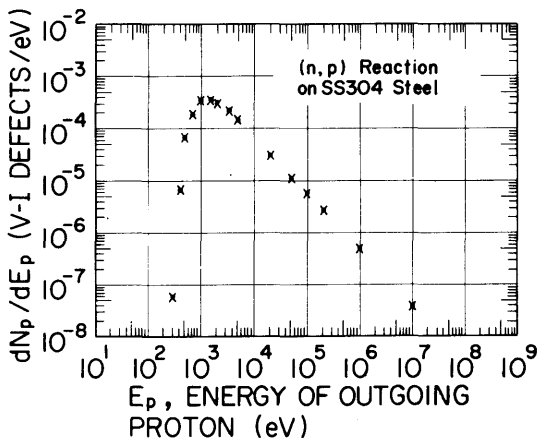


Fig. 2.  $dn_p/dE_p$  of AISI 304 stainless steel in Table 1 where V-I defects stand for Frenkel defects.

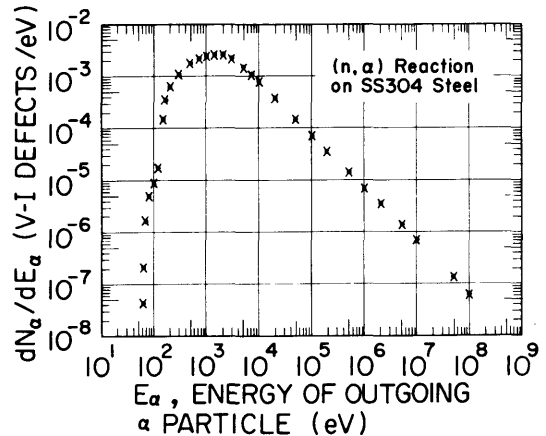


Fig. 3.  $dN_a/dE_a$  of AISI 304 stainless in Table 1 where V-I defects stand for Frenkel defects.



Table 2  $\sigma_d(E)$ 's calculated for the steel in Table 1 and contributions of compound nucleus reactions at high neutron energies  $E$ 's.

Steel	E (MeV)	$\sigma_d(E)$ (Frenkel defects ·barns)	Contribution of (n, n')		Contribution of (n, p)		Contribution of (n, $\alpha$ )	
			Total	Recoil upon emission	Total	Emitted proton	Total	Emitted $\alpha$ particle
AISI 304	3.16	754	551	182	12.2	0.09	0.02	0.002
	5.01	986	774	276	32.1	0.24	2.05	0.18
	10.0	996	758	336	86.0	0.69	25.4	2.33

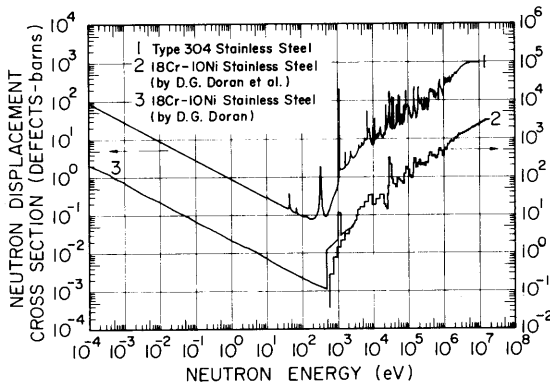


Fig. 4 Comparison of  $\sigma_d(E)$  calculated in the present paper for SS304 with  $\sigma_d(E)$  calculated by D. G. Doran et al. for 18Cr-10Ni stainless steel<sup>2,3)</sup>.

これまで述べて来た方法によって計算された SS304 の  $\sigma_d(E)$  は Fig. 4 の 1 に示されている。また Fig. 4 の 2 および 3 には Doran らによる 18Cr-10Ni ステンレス鋼 (以下 18/10SS) の  $\sigma_d(E)$  が Fig. 4 の 1 と比較するために示されている。なお Fig. 4 の 2 は Doran ら<sup>3)</sup> によるもので、 $(n, \gamma)$  反応の寄与を含まない。また、Fig. 4 の 3 は  $(n, \gamma)$  反応の寄与を含み、Doran ら<sup>2)</sup> によるものであるが、IAEA の勧告に従い 0.66 倍されている<sup>4)</sup>。また個々の中性子反応の SS304 の  $\sigma_d(E)$  への寄与がそれぞれ中性子エネルギーのどの様な範囲においてどの様な寄与を持つものであるかを図示するために、Fig. 5 に示されている。

### 7. 計算模型の妥当性検討

二次はじき出し模型としての IAEA の勧告の NRT

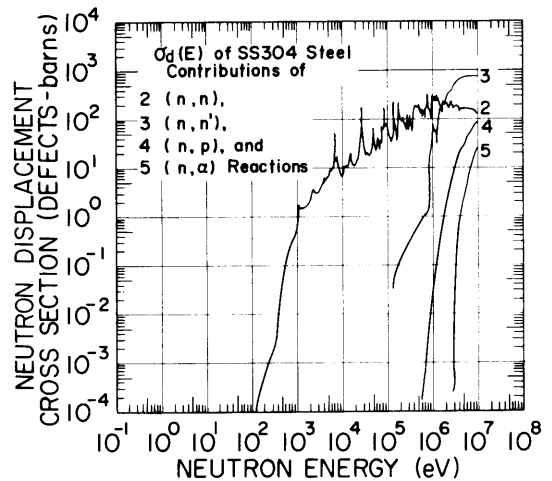


Fig. 5. Contributions of specific reactions to  $\sigma_d(E)$  calculated for SS304.

模型では PKA 当たりはじき出し数は PKA の初期エネルギーが 100keV に至るまでそのエネルギーに正比例している<sup>2)</sup>。Fig. 5 より明らかな様に 1MeV 以下においては、 $\sigma_d(E)$  への寄与はほとんど  $(n, \gamma)$  および  $(n, n)$  反応によるものである。また鉄原子と中性子との  $(n, n)$  反応における最大比エネルギー損失は  $\sim 0.007$  であるため、SS304 においては中性子エネルギーが  $\sim 800$ keV より低い領域では PKA の初期エネルギーは 56keV を超えることはほとんどない。従って、中性子エネルギーが  $\sim 800$ keV より低い領域においては、NRT 模型と本報告のイオン化のしきい値を設定する模型とはほぼ同じであり、また  $(n, \gamma)$  および  $(n, n)$  反応を取り扱う一次はじき出し模型については Doran らの模型と本報告の模型とはほぼ同じである。従

Table 3 Comparison of displacement cross sections for SS304 and 18/10SS.

Neutron Energy <sup>a</sup> (MeV)	Displacement Cross Sections (Defects.barns)			(A / B)
	Present Paper $\beta = 0.014$ V-I/eV <sup>b</sup>	(A) Doran et al. 2, 3)	(B) Present Paper $\beta = 0.006$ V-I/eV	
9.756	$2.339 \times 10^3$	$2.331 \times 10^3$	$9.996 \times 10^2$	2.33
8.828	$2.349 \times 10^3$	$2.211 \times 10^3$	$1.004 \times 10^3$	2.20
7.988	$2.354 \times 10^3$	$2.120 \times 10^3$	$1.006 \times 10^3$	2.11
6.875	$2.340 \times 10^3$	$2.005 \times 10^3$	$9.998 \times 10^2$	2.01
5.918	$2.334 \times 10^3$	$1.880 \times 10^3$	$9.974 \times 10^2$	1.88
5.094	$2.281 \times 10^3$	$1.764 \times 10^3$	$9.747 \times 10^2$	1.81
3.873	$2.021 \times 10^3$	$1.513 \times 10^3$	$8.638 \times 10^2$	1.75
2.939	$1.533 \times 10^3$	$1.292 \times 10^3$	$6.551 \times 10^2$	1.97
1.970	$1.060 \times 10^3$	$9.852 \times 10^2$	$4.529 \times 10^2$	2.18
$6.316 \times 10^{-3}$	$2.225 \times 10^1$	$2.193 \times 10^1$	9.507 x	2.30
$4.919 \times 10^{-3}$	$1.622 \times 10^1$	$1.579 \times 10^1$	6.932 x	2.27
$1.000 \times 10^{-4}$	$2.222 \times 10^{-1}$	$2.152 \times 10^{-1}$	$9.497 \times 10^{-2}$	2.27
$1.000 \times 10^{-5}$	$7.336 \times 10^{-1}$	$6.992 \times 10^{-1}$	$3.135 \times 10^{-1}$	2.23
$1.000 \times 10^{-6}$	2.094	2.139	$8.947 \times 10^{-1}$	2.39
$1.000 \times 10^{-7}$	6.582	6.899	2.813 x	2.45
$1.000 \times 10^{-9}$	$6.582 \times 10^1$	$6.945 \times 10^1$	$2.813 \times 10^1$	2.47
$1.000 \times 10^{-10}$	$2.082 \times 10^2$	$2.101 \times 10^2$	$8.896 \times 10^1$	2.36

<sup>a</sup>Middle energies of groups for (A) at energies  $E \geq 4.919 \times 10^{-3}$  MeV.

<sup>b</sup>V-I/eV stands for Frenkel defects/eV.

って、中性子エネルギーが $\sim 1$ MeVより低い領域においてはDoranらの18/10SSの $\sigma_d(E)$ と本報告のSS304の $\sigma_d(E)$ とはほぼ同じであるはずである。実際Fig. 4において中性子エネルギーが $\sim 1$ MeVより低い領域では前者は後者のほぼ定数倍になっている。またTable 3によると、本報告の二次はじき出し模型における $\beta$ を0.014 Frenkel defects/eVとした場合、中性子エネルギーが $\sim 1$ MeVより低い領域においては両者はほぼ同じである。また以上より二次はじき出し模型としてのIAEAの勧告のNRT模型と本報告の一次はじき出し模型を組み合わせた計算模型がこの領域においてDoranらの $\sigma_d(E)$ および本報告の $\sigma_d(E)$ とほぼ同じ計算結果を与えることは明らかである。Table 3には $\sigma_d(E)$ の $(n, n)$ 反応の共鳴ピークの少ないエネルギー領域について両者を比較してある。

中性子エネルギーが $\sim 1$ MeVより低く10MeV以下の領域においては本報告の $\sigma_d(E)$ はDoranらの $\sigma_d$

(E)より大きい。ここで二次はじき出し模型としてのIAEA勧告のNRT模型と本報告の一次はじき出し模型を組み合わせた計算模型はこの領域においてどのような $\sigma_d(E)$ をもたらすか考察してみよう。以下この計算模型をA\*型計算模型と呼ぶ。このA\*型計算模型と本報告の計算模型との相違は二次はじき出し模型にある。A\*型計算模型の二次はじき出し模型すなわちNRT模型においてはPKA当たりはじき出し数はPKAの初期エネルギーが100keVに至るまでそのエネルギーに正比例する<sup>2)</sup>。これに対し本報告の二次はじき出し模型ではPKA当たりはじき出し数はPKAの初期エネルギーが100keVよりかなり小さいイオン化しきい値まではそのエネルギーに正比例するが、以後は(4b)式のとおり一定である。従って、問題のエネルギー領域においてはA\*型計算模型による $\sigma_d(E)$ は本報告の $\sigma_d(E)$ より大きい。従って、本報告の計算模型による計算結果はIAEAの勧告のNRT模型に

よる二つの計算値の間にある。

以上の検討から明らかとなり、中性子エネルギーが $\sim 1\text{MeV}$ より低い領域では本報告の計算模型はIAEA 勧告のNRT 模型による計算結果とほぼ同じ結果を与える。また、中性子エネルギーが $\sim 1\text{MeV}$ より高く $10\text{MeV}$ 以下の領域では本報告の計算模型はNRT 模型による二通りの計算値の中間の計算値を与える。従って、本報告の計算模型はSS304のはじき出し断面積に対して実用的に妥当な値を与える。

## 8. 結 論

本報告で採用した簡易な計算模型においても、Doran らの計算模型と同様に、本来純金属のための模型であると云える点を残している。すなわち、イオン化しきい値の設定の点である。しかし本報告の簡易計算模型がSS304の $\sigma_d(E)$ に対して実用的に妥当な計算値を与えるのは、SS304の主な構成元素Fe, Ni, およびCrの質量数および原子番号がほぼ同じであり、Feと質量数および原子番号が大きく異なる構成元素、例えばC, Si, およびMoの原子密度がFeのそれに比して十分に小さいことによるといえる。従って、Feと質量数および原子番号が大きく異なる元素が構成元素としてSS304と同じ程度含まれているような原子炉構造用鋼に対しては、SS304の場合と同じく、本報告の簡易計算法は実用的に妥当な中性子のはじき出し断面積を与える。

## 参考文献

- 1) Serpan, Jr., C. Z. : Nucl. Eng. Design, 33(1975) 1.
- 2) Doran, D. G. : Nucl. Sci. Eng., 49(1972) 130.
- 3) Doran, D. G. and Graves, N. J., in : ASTM STP 611, (ASTM, Philadelphia, 1976) p. 463.
- 4) ASTM Standard E 693-79, in : Annual Book of ASTM Standard, part 45, (ASTM, Philadelphia, 1980) p. 1204.
- 5) Leibfried, G., in : The Interaction of Radiation with Solids, Eds. Strumane et al.(North-Holland, Amsterdam, 1964) p. 1.
- 6) Merkle, K. L. : Nucl. Technol., 22(1974) 66.
- 7) Nomakuchi, M. : Papers of Ship Research Institute No.38 (Ship Research Institute, Tokyo, 1972) p. 17.
- 8) Seitz, F. and Koehler, J. S., in : Solid State Physics, Vol. 2, Eds. F. Seitz et al. (Academic Press, New York, 1956) p. 305.
- 9) 桜井文雄, 新保利定 : 日本原子力学会誌, 25 (1983) 372.
- 10) ASTM Standard E 521-77, in : Annual Book of ASTM Standards, part 45, (ASTM, Philadelphia, 1980) p. 1087.
- 11) Billington, D. S. and Crawford, Jr., J. H. : Radiation Damage in Solids (Princeton University Press, Princeton, 1961) p. 19.
- 12) Robinson, M. T. and Torrens, I. M. : Phys. Rev. B, 9(1974) 5008.
- 13) Evans, R. D. : The Atomic Nucleus (McGraw-Hill, 1955) p. 847.