

# PHITSに導入されたイベントジェネレーターモード Event Generator Mode Introduced in the PHITS Code

(財) 高度情報科学技術研究機構  
コード開発部  
仁井田 浩二

加速器分野、航空宇宙分野、粒子線がん治療などの医療分野等で広く利用されている粒子・重イオン汎用モンテカルロコードPHITS (Particle and Heavy Ion Transport code System) では、最近導入されたイベントジェネレーターモードにより、マイクロな領域での放射線挙動に重要な強度分布などの観測量を扱えるようになった。この試みは世界でも初めてのものであり、これにより、放射線影響のよりマイクロな視点からの解明や、物質、生命のマイクロドシメトリック的なアプローチへの橋渡しが可能となる。ここでは、イベントジェネレーター概念と、PHITSに導入されたイベントジェネレーターモードの詳細を、応用例とともに解説する。

## 1. はじめに

PHITS<sup>1)</sup> (Particle and Heavy Ion Transport code System) は、ほぼ全ての粒子と重イオン (原子核) の物質中の輸送を記述する3次元モンテカルロシミュレーションコードである。現在建設中のJ-PARC施設だけでなく、理化学研究所、アメリカ及びドイツの次期加速器計画、また、粒子線がん治療などの医療分野、航空宇宙分野、半導体の放射線によるソフトエラー評価などのマイクロな領域での利用など、世界的に幅広い分野で利用され、ユーザー数も急激に増加している。本コードは現在も当財団 (RIST) が中心となり、原子力機構、高エネルギー加速器機構 (KEK)、スウェーデンのチャルマース大学等の共同研究により、エネルギー、輸送粒子の拡張、核反応モデルの高度化等の開発が進められている。本解説では、最近のPHITSコードに導入されたイベントジェネレーターモードについて、その概念及び具体的なモデルの詳細を応用例とともに紹介する。

## 2. イベントジェネレーターモードとは

粒子輸送モンテカルロコードで、輸送粒子と物質との原子核反応を核データを用いて記述するシミュレーションでは、ヒストリー (モンテカルロ計算の中のひとつのイベントを通常ヒストリーと呼ぶ) 毎のエネルギーと運動量は必ずしも保存しない。モンテカルロ計算のヒストリーを多数回繰り返して、平均を取ると、エネルギーと運動量が保存されることが保証される。これは、核データを用いたモンテカルロシミュレーションが、一体のBoltzmann方程式を数値的に解いていることに対応している。従って、核データを用いた計算では、モンテカルロシミュレーションのひとつのヒストリーの事象は、現実の物理的なイベントには対応していない。また、一体の観測しか計算できない。例えば、ある領域の熱量、フラックスなどで、これらは一体の観測の期待値である。平均値の周りの分散は、二体以上の相関に関係するので、一体のBoltzmann方程式では導くことはでき

ない。また、モンテカルロ計算で用いる核データは、一体 (inclusive) のデータしか含まれていないので、基礎方程式を一体の Boltzmann 方程式ではなく、多体の方程式を基礎としても、一体の核データを使う限り分散や多体相関は計算できない。

PHITSコードの例で言うと、Heatタリーに含まれるdepositエネルギー分布は、平均値の周りの分散を記述し、二体以上の分布関数が必要になる量なので、核データを用いた計算では求めることができない。しかしながら、核データを用いる有名な米国ロスアラモスのMCNPコードには、depositエネルギー分布に相当するPulse Height Tallyというのがある。これは、MCNPコードの拠って立つ方程式から見れば、基本的には間違った概念である。ただし、MCNPのマニュアルにあるように、比較的低エネルギーの中性子反応で、反応チャンネルが弾性散乱だけという状況の下では計算することができる。もしくは、光子のみの輸送計算であれば可能である。つまり、反応で標的の原子核が変化しないのであれば、輸送粒子の一体の情報から反応に関与した全ての粒子・原子核のエネルギーと運動量が一意に決まるので計算できることになる。これは極めて例外的な状況で、反応後の生成粒子が変化したり、複数になったりすると破綻してしまう。

一方、高エネルギーの核反応に対しては、通常、評価された核データが整備されていないので、例えば、PHITSコードの中では、カスケードモデル、JAM、JQMD、等<sup>2)</sup>の核反応モデルを利用する。これらの計算モデルは、ひとつの核反応毎に、物理モデルに従って核反応を計算する。このような核反応モデルを用いた輸送計算では、反応毎にエネルギーと運動量が保存されるので、全体としても、ひとつのヒストリー毎にエネルギー、運動量が保存される。即ち、数値計算上のひとつのヒストリーが、物理的な実際のイベント

を模擬するという意味で、イベントジェネレーターと呼ばれている。MCNPタイプの核データを使ったシミュレーションと数値計算上似ているが、概念的には全く異なるものである。MCNPタイプのシミュレーションでは、ひとつのヒストリー毎の観測量は物理的に意味を持たず、ヒストリーで平均した量だけが物理的に意味を持つ観測量である。平均値周りのヒストリーによる分散も計算できるが、これは、モンテカルロ計算での統計分散で、物理的な分散ではない。物理的な分散を記述する二体以上の相関の情報が核データにも基礎となる方程式にも含まれていないからである。

イベントジェネレーターでは、観測量の分散は物理的な分散に対応する。その精度の問題はあるが、全ての相関を記述している枠組みになっている。高エネルギーのシミュレーションは、大抵このイベントジェネレーターになっていて、一体の観測量のほかに、同時計測実験の解析や、測定器の応答関数のシミュレーションに応用することができる。

最近、低エネルギーの中性子の関係した分野でも、従来の一体の観測量、熱量やフラックスのほかに、depositエネルギー分布、2粒子相関などの高次の相関が含まれる物理量が求められてくるようになった。例えば、半導体素子の放射線によるソフトエラーの問題、細胞の放射線による影響の問題などは、微視的な領域でのdepositエネルギーの分散が問題になる。これらの問題に従来の核データを用いたMCNPタイプのシミュレーションでは対応することができない。そこで、PHITSでは、核データを使う低エネルギー領域でもイベントジェネレーターとして模擬できる核反応モデルを導入した。次章ではこのモデルの詳細を解説する。

### 3. イベントジェネレーターモデル

20MeV以下の低エネルギー中性子入射反

応においても、高エネルギーの場合と同様に核データではなく、核反応モデルを用いれば、低エネルギー領域でもイベントジェネレーターにすることができると思われるかもしれない。しかしながら、低エネルギーの中性子入射核反応断面積は、標的核の基底状態近傍の不連続な励起状態の情報を反映して、エネルギーと共に激しく変動する。このような量子力学的な複雑な振る舞いを、核反応モデルでその都度計算するのは不可能なので、そのような微細な情報を含んだ評価された核データを用いなければならない。そこで、我々の開発したイベントジェネレーターのモデルは、全反応断面積、各チャンネルの反応断面積、放出中性子のエネルギースペクトルと角分布については評価された核データを用い、中性子以外の放出粒子と原子核の種類と運動量及びそれらの相関は特殊な統計崩壊モデルで計算するというハイブリッドモデルである。

中性子入射反応で核データが記述するのは反応全断面積、捕獲反応、弾性散乱、非弾性散乱( $n, n'$ )、( $n, Nn'$ )等のチャンネル毎の断面積、それと放出中性子のinclusiveな2重微分断面積(DDX)である。ここでinclusiveと書いたのは、核データの持っている放出中性子のDDXの情報は、各チャンネル毎の情報ではなく、全てのチャンネルの平均のDDXだからである。最初に核データのチャンネル毎の断面積を用い、チャンネルを決定する。次に、各チャンネル毎に次のようなモデルを設定する。

まず、捕獲反応の場合、入射中性子が捕獲された場合の融合原子核の運動量及び励起エネルギーは、 $Q$ 値(基底状態のエネルギー差)を用い運動学的に一意に決定される。この励起した原子核は、粒子を放出しながら基底状態まで遷移するのであるが、その際、捕獲反応チャンネルでは中性子を放出しない。この事実を用いて、中性子の崩壊確率をゼロにし

た特殊な統計崩壊をさせる。この場合、光子の放出と荷電粒子の放出を記述し、最終的に全ての放出粒子及び残留核が、運動量とエネルギー保存の基に決定される。

弾性散乱では、核データに従って、放出中性子の運動量を決定する。この運動量から運動学的に反跳核の運動量は一意に決定されるので簡単である。

次に、非弾性散乱であるが、まず、( $n, n'$ )反応では、核データに従って、放出中性子の運動量を決定する。この運動量と $Q$ 値から運動学的に残留核の運動量と励起エネルギーが一意に決定される。この励起原子核は、すでに一個の中性子を放出しているので、これ以後は捕獲反応の場合と同様に、中性子の崩壊確率をゼロにした特殊な統計崩壊をさせ、光子の放出及び荷電粒子の放出を記述する。

非弾性散乱の( $n, Nn'$ )反応( $N \geq 2$ )では、最初は( $n, n'$ )チャンネルと同様に、核データを用い一個目の放出中性子の運動量を決定する。この運動量と $Q$ 値から運動学的に残留核の運動量と励起エネルギーが一意に決定される。この励起原子核には、放出中性子数が $N$ になるまで通常の統計崩壊をさせる。それ以後は、中性子の崩壊確率をゼロにした特殊な統計崩壊をさせ、光子の放出と荷電粒子の放出を記述する。この場合だけ、終状態の中性子の数が核データで指定された $N$ になる保証はないが、そのずれは小さい。

以上が低エネルギー中性子入射反応の核データを用いたイベントジェネレーターモデルの概要である。このようなモデルを用いることにより、核データを用いた低エネルギー中性子入射反応も、イベント毎にエネルギー、運動量の保存したイベントジェネレーターになり、核データだけでは記述できなかった、残留核の運動量、2粒子相関など全ての情報がイベント毎に記述できるようになる。

#### 4. イベントジェネレーターモデルの検証

このモデルの特徴は、核データとしては、中性子のinclusive情報だけを用いている点である。従って、入射エネルギーが高くなり、放出粒子として荷電粒子が中性子と同等の断面積を持つ場合、また、放出中性子の多重度が大きくなる場合は、中性子を代表粒子として扱えなくなるし、inclusiveな中性子スペクトルでは不十分になり、このモデルの適用限界を超える。それは、おおよそ20MeVであろう。

低エネルギー中性子入射の核データには、中性子の情報のほかにも、光子の情報、発熱の評価に使われるKerma係数、損傷の指標になるDPA因子等があるが、PHITSのイベントジェネレーターの場合、これらの量は核データを用いず、上述したイベントジェネレーターモデルで計算される。そこで、ここでは、イベントジェネレーターの結果と、核データに格納されている値、また、実験値との比較を行ってイベントジェネレーターモデルの精度検証を行った。

図1は、 $^{nat}\text{C}$ から放出される光子の総エネルギーを入射中性子のエネルギーの関数としてプロットしたものである。青線が

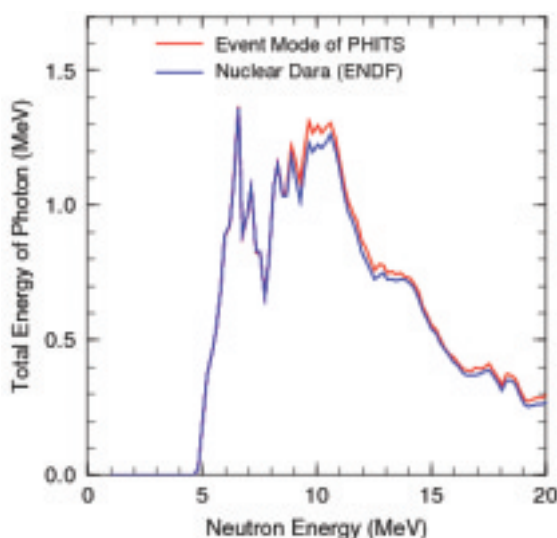


図1  $^{nat}\text{C}$ からの放出される光子の総エネルギー、横軸は入射中性子エネルギー

MCNPDATA (ENDF)に含まれる核データ、赤線が同じ核データの中性子の情報からPHITSのイベントジェネレーターモードで計算した光子の結果である。ここには示さないがDDXを含めて、イベントジェネレーターモデルは、非常に良く光子の核データを再現している。このことは、単に、イベントジェネレーターモデルが中性子の核データを基に光子の断面積を再現したということではなく、核データでは記述できない、中性子、光子、そして残留核や荷電粒子間の相関をイベント毎に精度よく記述していることを示している。

次の検証は、Kerma係数である。通常核データには荷電粒子の情報は含まれないが、発熱の評価のためには残留核を含めた生成荷電粒子の運動エネルギーの総和が必要であり、Kerma係数として入射中性子のエネルギーの関数として格納されている。イベントジェネレーターモデルでは、核反応毎に全ての荷電粒子、残留核の運動量分布が求まるので、Kerma係数を簡単に計算できる。図2は、核データセットLA150<sup>3)</sup>、JENDL-HE<sup>4)</sup>に含まれる $^{12}\text{C}$ のKerma係数と、それぞれの核データの中性子の情報からイベントジェネレーターモデルで計算したKerma係数である。誤差棒がついているのは実験値<sup>5)</sup>であ

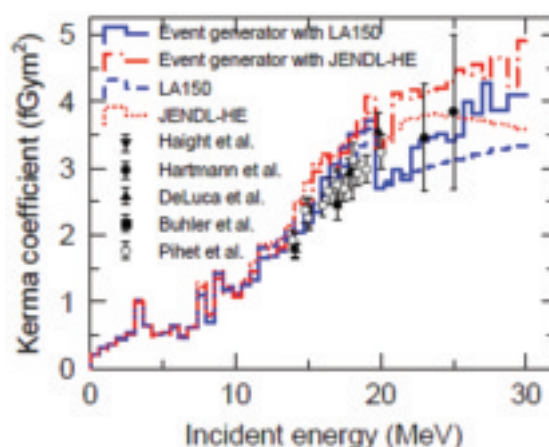


図2  $^{12}\text{C}$ のKerma係数、横軸は入射中性子エネルギー

る。10MeV以下は2つの核データも、PHITSの結果も良い一致を示している。一方、20MeV以上では、二つの核データに格納されている値も、イベントジェネレーターモデルで計算した値も差が大きくなる。これは20MeV以上で多くの荷電粒子を含む反応チャンネルが開くために、中性子の情報だけを基に反応全体を構築することが難しくなることを示している。

次は、DPA (Displacement Per Atom) 因子である。この量は物質の放射線による損傷の指標になる量で、物質中の一つの分子が放射線によって何回転置されるかの回数である。この量は、熱と同様に荷電粒子の物質に付与したエネルギー等の関数として定式化されている。従って、PHITSのイベントジェネレーションモデルでは、イベント毎に計算できる量であるが、核データでは、その平均値が入射中性子の関数として格納されている。しかし、全ての核種について用意されているわけではなく、DPAの評価方法の違いで結果も多少異なる。図3では、 $^{56}\text{Fe}$ についてのDPAについて、評価法の違う3つの値、Doran<sup>6)</sup>(赤点線)、ESPERANT<sup>7)</sup>(青一点破線)、RADHEAR-VI<sup>8)</sup>(緑破線)とイベントジェネレーターの結果(黒実線)が示してあ

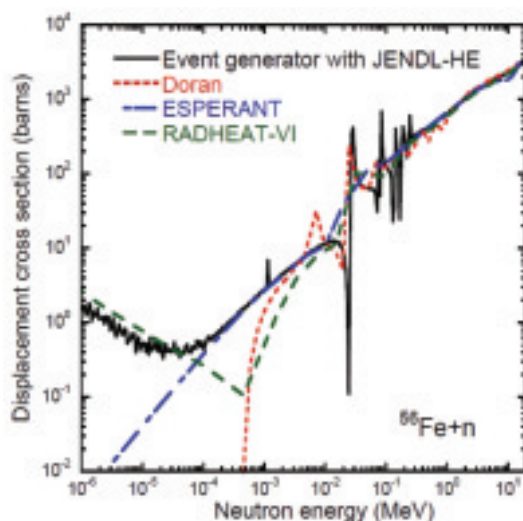


図3 DPA断面積、  
中性子入射、 $^{56}\text{Fe}$ 標的の場合

る。 $10^{-3}\text{MeV}$ 以上では、弾性散乱が主な反応チャンネルなので、これらの結果はほぼ同じであるが、 $10^{-4}\text{MeV}$ 以下では、中性子捕獲チャンネルが入っているかどうかで、結果が大きく変わることがわかる。イベントジェネレーターモデルでは、共鳴状態による反応断面積の鋭いピークを含めて、どの中性子反応チャンネルでも、荷電粒子のスペクトルを統一的に記述できるので、DPAや発熱の評価には適している。

## 5. イベントジェネレーターモードの応用

前節では、核データの中性子の情報と反応モデルを組み合わせたイベントジェネレーターモデルで光子や荷電粒子の断面積を計算し、既存のデータや実験値と比較してモデルの検証を行った。前節で比較した量は、Kerma、DPA等の一体の平均値であるが、イベントジェネレーターの特長は、このような平均値の評価だけではなく、その周りの分散や相関を微視的な立場で評価できることである。半導体のソフトエラーの評価は、その典型的な例題で、微小な半導体素子に放射線で付与されるエネルギーの分布が問題になる。即ち、付与エネルギーがあるしきい値以上のときにメモリービットの反転が起こるので、ソフトエラーの発生率を評価するには、平均付与エネルギーではなく、付与エネルギー分布が必要になる訳である<sup>9)</sup>。

現在の放射線を用いたがん治療の治療計画では、線質の効果、生物学的効果等の因子は考慮されるが、基本的に局所的に患部に付与されるエネルギーの平均値が用いられ、細胞レベルでの微視的な付与エネルギー分布は考慮されていない。しかしながら、将来、細胞レベルでの放射線の微視的な効果が問題になれば、半導体のソフトエラーの評価と同様に、イベント毎の分散の情報と、マイクロな線量分布の情報が必要となってくるであろう。この点を、BNCT(ホウ素中性子捕獲療法)の簡

単化した微視的モデルによって見てみよう。

BNCTは、ホウ素の中性子捕獲断面積が他の原子核に比べて非常に大きいことを利用して、腫瘍に吸収されやすいホウ素化合物（以後キャリアと呼ぶ）を患者の血液中に注入し、腫瘍に吸収させ、そこへ熱もしくは熱外中性子を照射するという療法である。中性子を捕獲したホウ素は、Liとαに分解する。それらの飛行距離（レンジ）はマイクロオーダーの短いものであるから、近在の腫瘍細胞だけを選択的に破壊することができるのが特徴である。現在、京都大学附属原子炉が止まったので、日本原子力研究開発機構（JAEA）の原子炉のみで行われている。原子炉利用は利便性が悪いため、小型加速器による中性子源の利用も求められている。

JAEAのBNCT治療の治療計画には、JCDS (JAEA Computational Dosimetry System)<sup>10)</sup> という線量評価システムが使われている。このシステムでは、患者のCTやMRIのデータから作成したボクセルデータを基に3次元モンテカルロ計算をして線量評価をする。このときの線量は基本的に局所的に付与したエネルギーを核データのKerma係数から評価する。中性子を捕獲したホウ素から生成されるLiとαは、その場で全てのエネルギーを付与するという局所近似である。この近似は、線量評価が組織レベルで行われる場合、レンジが組織の大きさより十分小さいので正当化されるが、細胞レベルで評価する場合は、レンジと細胞サイズが同等になるので不適切になる。BNCTに限らず、現行の放射線治療の線量評価は、このような局所近似が用いられている。

ところで、現行のBNCTでは、数種類のホウ素化合物のキャリアが用いられている。化合物の種類による吸収率などの違いと共に、腫瘍細胞の周辺に吸着されるもの、腫瘍細胞の核近傍に吸収されるものと、細胞レベルでの吸収場所が異なることも報告されている。ここでは、そのような細胞レベルでの差異が

どのような効果の違いをもたらすかをイベントジェネレーターの機能を使って考察した。

図4の崩壊図のように、<sup>10</sup>Bは中性子を吸収し<sup>11</sup>Bの励起状態になり、この励起状態は15対1の分岐比で第一励起状態と基底状態に遷移する。第一励起状態は478keVの光子を出して基底状態に遷移する。そして基底状態は、<sup>7</sup>Liとαに崩壊する。PHITSのイベントジェネレーターモデルでは、統計崩壊部分に基底状態付近の状態の情報と分岐比を用いるように改良されているので、ホウ素の中性子捕獲反応からのLiとαのスペクトルを正確に記述できる。図5は、実際にPHITSで計算したホウ素の中性子捕獲反応からのLiとαのエネルギースペクトルである。

ホウ素化合物のキャリアの吸着位置依存性を見るために、図6のような簡単な細胞モデルを作成した。細胞の大きさは半径6 μmの球体で、表面に1 μmの細胞膜領域があり、

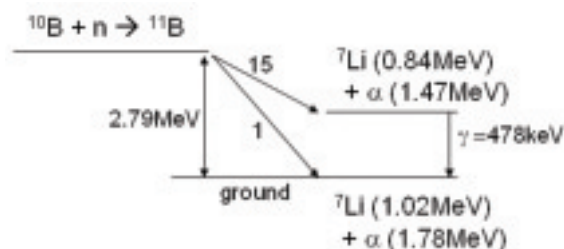


図4 <sup>10</sup>Bの中性子捕獲状態からの崩壊図

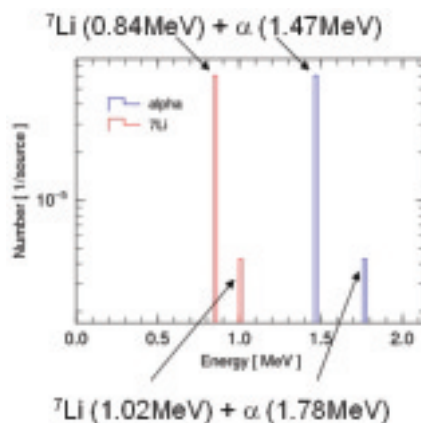


図5 <sup>10</sup>B中性子捕獲反応からのLiとαのエネルギースペクトル

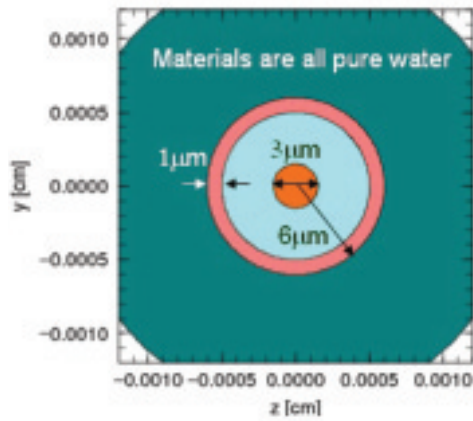


図6 細胞のモデル

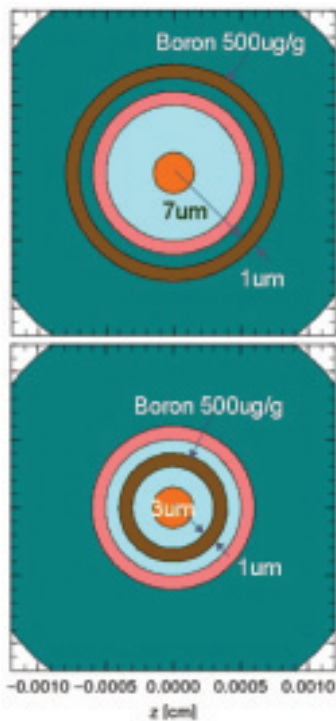


図7 ホウ素化合物の吸着位置、  
 (上) 細胞膜の外側、半径7  $\mu\text{m}$ の球殻上、  
 (下) 細胞膜の内側、半径3  $\mu\text{m}$ の球殻上

中心に直径3  $\mu\text{m}$ の球形の細胞核がある。物質は全て水と仮定してある。この細胞に対して、ホウ素が吸着するのであるが、図7のように、(上)細胞膜の外側、(下)細胞膜の内側の2通りを考える。ホウ素の密度はどちらも500  $\mu\text{g}/\text{cm}^3$ である。このような細胞モデルに熱中性子を照射し、ホウ素中性子捕獲反応を起こさせる。

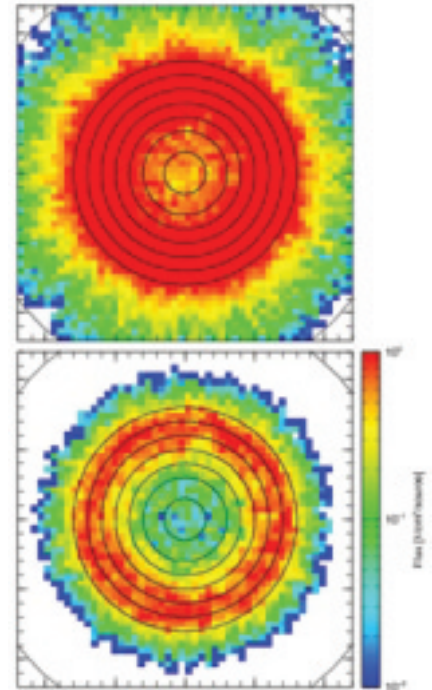


図8 細胞膜の外側にキャリアが付着した場合の $\alpha$ (上)とLi(下)のトラック

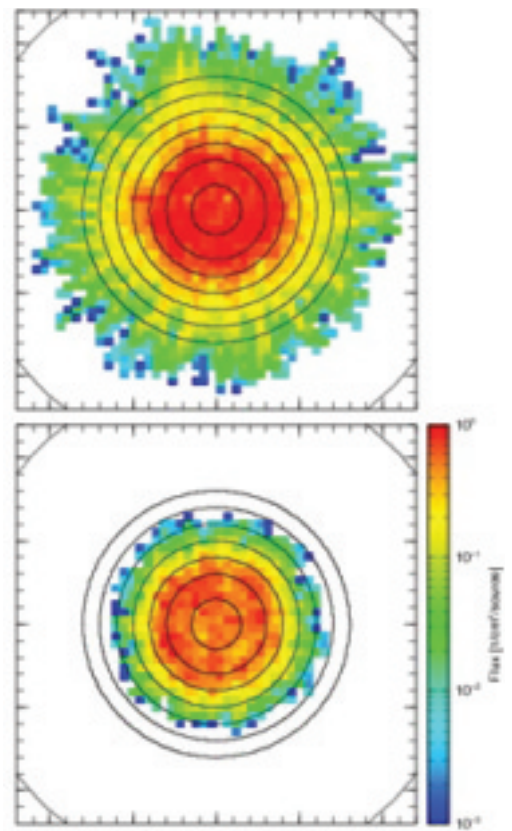


図9 細胞膜の内側にキャリアが付着した場合の $\alpha$ (上)とLi(下)のトラック

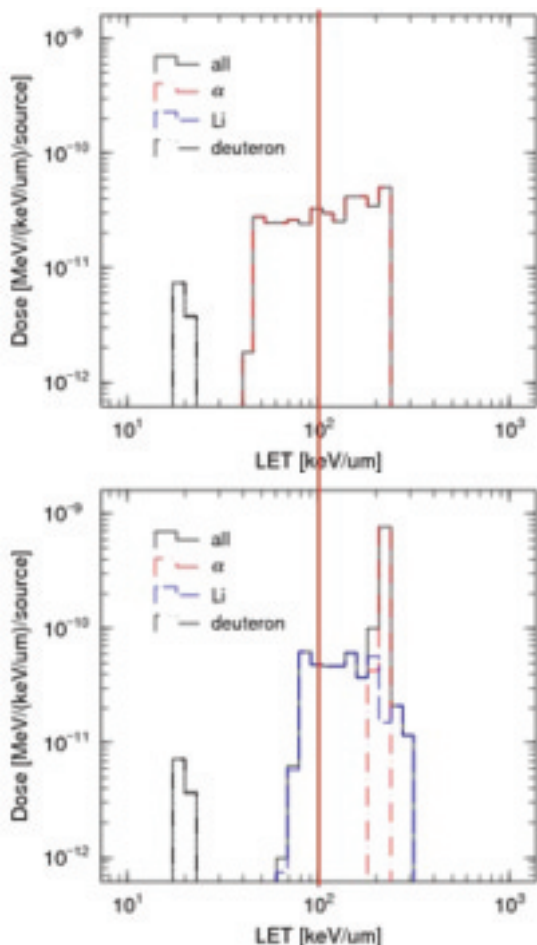


図10 付与線量のLET分布、  
(上)細胞膜の外側に吸着した場合、  
(下)内側に吸着した場合

図8と図9は、ホウ素中性子捕獲反応から発生するLiと $\alpha$ のトラックを図示したものである。図8は、キャリアが細胞膜の外側に吸着した場合、図9が内側に吸着した場合である。外側にある場合は、Liのトラックは細胞核まで達していない。当然、細胞核に付与するエネルギー(線量)は、細胞核の内側に吸着した場合のほうが近傍なので大きい。実際、内側の場合が、33.3meV、外側の場合が6.9meVでほぼ4倍強の差がある。しかしながら、線量のLET(Linear Energy Transfer)分布を見ると(図10)、分布の形に差があり、仮に100keV/ $\mu$ m以下の領域の成分が主に寄与するとすれば、外側に吸着した場合のほうが、総線量は小さいが効果は大きくなる。こ

のように、細胞レベルの小さな領域を扱うときは、反跳荷電粒子の輸送まで扱うマイクロな線量評価とイベント毎の線量分布を記述できるイベントジェネレーターモードが必要になってくる。

## 6. まとめ

PHITSは、エネルギー範囲及び輸送粒子の拡張によって、加速器分野、航空宇宙分野、粒子線がん治療などの医療分野等、原子力の幅広い分野に利用されるとともに、異なる分野を関連付けて研究の交流のための横糸の役割を果たして来た。また、今回解説したイベントジェネレーターモードにより、マイクロな領域での放射線挙動に重要な強度分布などの観測を扱えるようになった。この試みは世界でも初めてのものであり、これにより、放射線影響のよりマイクロな視点からの解明や、物質・生命のマイクロシメトリ的な解析への橋渡しが可能となるであろう。

## 謝辞

本報告は、原子力機構の岩本洋介氏、佐藤達彦氏、高エネルギー加速器機構の岩瀬広氏の協力のもとに作成されました。ここに深く感謝致します。

## 参考文献

- 1) H. Iwase, K. Niita and T. Nakamura, *J. Nucl. Sci. Technol.* **39** (2002) 1142.
- 2) K. Niita, T. Sato, H. Iwase, H. Nose, H. Nakashima, L. Sihver: *Radiat. Meas.* **41**, (2006) 1080.
- 3) M.B. Chadwick, et al., "LA150 Documentation of Cross Sections, Heating, and Damage", Los Alamos Natinal Laboratory report; LA-UR-99-1222 (1999).
- 4) K. Shibata, et al., *J. Nucl. Sci. Technol.* **39**, 1125 (2002).



- 5) R.C. Haight, S.M. Grimes, R.G. Johnson and H.H. Barschall, *Nucl. Sci. Eng.* **87** (1984) 41.: C.L. Hartmann, P. M. Deluca. Jr and D. W. Pearson, *Radiat. Prot. Dosim.* **44**, (1992) 25.: P.M. Deluca. Jr, H.H. Barschall, M. Burhoe and R.C. Haight, *Nucl. Sci. Eng.* **94** (1986) 192.: G. Buhler, H.G. Menzel, H. Schuhmacher and G. Dietze, *Radiat. Prot. Dosim.* **13** (1985) 13.: P. Pihet, S. Guldbakke, H.G. Menzel and H. Schuhmacher, *Radiat. Prot. Dosim.* **37** (1992) 1957.
- 6) D.G. Doran and N.J. Graves, HEDL-TME 7670, Hanford Engineering Development Laboratory (1976).
- 7) T. Fukahori et al., *Reactor Dosimetry : Radiation Metrology and Assessment* (ASTM STP 1398) (2001) 591.
- 8) N. Yamano et al., *JAERI-1316*, Japan Atomic Energy Institute (1989).
- 9) Y. Arita, et al., *Jpn. J. Appl. Phys.* **46** (2007) 3377.
- 10) H. Kumada, K. Yamamoto, A. Matsumura, T. Yamamoto, Y. Nakagawa, N. Nakai, T. Kageji, "Verification of the Computational Dosimetry System in JAERI for boron neutron capture therapy", *Physics in Medicine and Biology*, **49** (2004) 3353; H. Kumada, K. Yamamoto, T. Yamamoto, K. Nakai, Y. Nakagawa, T. Kageji, A. Matsumura, "Improvement of dose calculation accuracy for BNCT dosimetry by the multi-voxel method in JCDS", *Applied Radiation and Isotopes*, **61** (2004) 1045.