

平成 27年 3月 31日

プログラム名：核変換による高レベル放射性廃棄物の大幅な低減・資源化

PM名：藤田 玲子

プロジェクト名：反応理論モデルとシミュレーション

委 託 研 究 開 発

実 施 状 況 報 告 書 (成 果)

平成 26 年度

研究開発課題名：

核構造計算による核反応モデルの高精度化

研究開発機関名：

国立大学法人筑波大学

研究開発責任者

中務 孝

当該年度における計画と成果

1. 当該年度の担当研究開発課題の目標と計画

核変換による高レベル放射性廃棄物の大幅な低減・資源化の基礎となる核反応に関する知見を深めることを目的とした原子核構造および核反応の統一かつ普遍的な高精度数値計算に向けた研究開発を行うための準備を整える。特に、原子核を質量領域によらず広く統一的に記述することが可能な密度汎関数理論に基づく研究を推進し、数値計算により、現在の実験では得ることが困難な核反応データを整備するため、

(1) 線形応答計算を推進

し、同時に、

(2) 大振幅集団運動の微視的計算

(3) エネルギー密度汎関数の改良

に向けた feasibility study を実施する。

2. 当該年度の担当研究開発課題の進捗状況と成果

2-1 進捗状況

今年度は研究開発の開始にあたり、まず現段階での準備状況の確認を行った。(1)の線形応答計算に関しては、既に豊富な経験を有しており、中重核領域における計算データを揃えつつある。既に得られている成果については2-2.に記載する。これをもとにして、中性子捕獲反応の断面積計算に拡張していきたい。(2)および(3)の開発については、効率的な開発手順・優先順位を設定するため、まずは開発の中心的な役割を果たすポスドク研究員の雇用に向けたサーベイを行い、平成26年11月に国際公募を開始した。平成27年1月13日に公募を締め切り、3名の応募があった(うち1名は外国籍)。筑波大のメンバーによる協議の上、すみやかに1名を選定し、本人に連絡し、平成27年4月からの雇用を決定した。決定した研究員は、海外でのポスドク経験を有し、エネルギー密度汎関数計算を勢力的に実施してきた実績をもつ人材である。上記の(2)もしくは(3)に従事する上で、どちらを選択しても十分に成果が期待できる。どちらの課題も、コード開発が終わった後には大規模な数値計算を必要とするため、筑波大学計算科学研究センターにあるスパコンの利用申請を行い、平成27年度からの学際共同利用が認められた。この中で、必要とする計算量とCPU時間を見積もることにしている。

2-2 成果

今年度の具体的成果としては、筑波大・理研・北大などと協力しながら進めてきた光応答の計算結果が中心である。電気双極子(E1)強度関数を偶々核に関して系統的な計算を実施してきた。本プロジェクトの対象核種である ^{107}Pd 、 ^{93}Zr 、 ^{135}Cs 、 ^{79}Se の周辺核種に関する計算も実行した。

まず、エネルギー密度汎関数 SkM^* を用いて基底状態を求め、基底状態の変形と対凝縮の度合いについての情報を得た。対相関については、BCS 近似を用いている。Pd については、弱いプロレート変形を持つことがこの計算で予言された。一方、Zr アイソトープは、中性子数が60を超えないと変形が現れないという結果を得た。

続いてこれらの基底状態に E1 場による小さな揺動を加え、線形応答の実時間計算を実施した。計算のもとになる理論は、我々が開発してきた正準基底 TDHFB 法と呼ばれる方法であり、従来の方法に比べて圧倒的に計算量を削減することができることが強みである。この方法によって幅広い領域における応答を計算することができた。E1 強度のほとんどは巨大共鳴と呼ばれる高いエネルギー領域にあるため、このエネルギー領域に現れる強度はもともと小さい。しかしながら、光励起においては低エネルギー領域が増幅され、また中性子捕獲反応においても、複合核反応と直接捕獲反応の競合がこの低エネルギー E1 強度とその励起エネルギーによって決定される。中性子数が 50 や 82 を超えると、この低エネルギー E1 強度分布が急激に増加することが分かった。しかし、ここで得られた値は 1~2 %程度という値であり、直接反応よりも複合核反応が重要となるであろうことを示唆している。

(2)大振幅集団運動の微視的計算、および(3)エネルギー密度汎関数の改良に関しては、準備段階であり、今年度の具体的成果はまだない。

2-3 新たな課題など

計算量が相当大きなプロジェクトになっており、コードの並列化とスパコンの利用が不可欠になると予想される。今期成果に影響は出ないが、H26 年度に予定していたコード開発・デバッグ・プロダクトラン等に利用するための計算サーバーの購入が遅れた。これは、筑波大における耐震改修工事の予定が決定し、平成 27 年度からおよそ 1 年の間、研究室のサーバー室が利用できなくなることによる。代替りの設置場所が確保できるかどうかを確認するために時間がかかり、平成 26 年度中の購入を断念した。平成 27 年度に購入予定である。また、今回用いた実時間コードについては既に並列化が済んでいるが、その並列化効率はそれほど高くない。これらのコード開発と効率の改良が今後必要になるであろう。これらの課題に関しては、平成 27 年度からのスパコン利用申請を行うとともに、新計算サーバーの導入遅れの影響を最小限にするために早期に購入手続きを取る。コードの改良については、現在取り組んでいる。

3 . アウトリーチ活動報告

特になし。