

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 2 7 年 度

研究開発課題名：

「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

I 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

放射性廃棄物の軽減・資源化にむけた基礎データ取得を目指した本プロジェクトにおいて、放射性イオンビーム施設や中性子ビーム施設での実験はその中核を成すものであるが、必要とされるすべてのデータを整備することは非常に困難である。従って、量子的核反応理論に基づく数値計算は非常に重要な要素である。その核反応計算による予測精度をあげるため、反応理論・モデルの高度化に加えて、原子核構造に関する知見・情報の数値計算とその高精度化が必要不可欠となっている。本研究課題において、原子核密度汎関数理論を用いた核構造研究を進展させ、未知の原子核に対して高い予言能力を持った理論モデルの構築し、大規模数値計算を実行、さらに核反応モデルとの融合を本研究開発の目標とする。平成 27 年度においては、以下のような計画を立案した。

まず、平成 26 年度における feasibility study の結果を基に、新たに雇用する研究員とともに今後の核構造研究の方向性・手法を決定する。対象核種とその周辺のアイソトープの構造の実験データを精査し、その性質の解明に最適と考えられる方法を選択する。続いて、時間依存密度汎関数理論 (TDDFT) に基づく核励起の性質の精査とそれに必要な数値計算法の開発を実施する。年度後半においては、決定した研究開発方針に基づき、数値計算コードの開発を行うことを中心的な目標とする。密度汎関数理論に基づく研究を推進し、その中で対象核種の構造を解明できるコード開発を実施する。今年度中にコード開発にめどを付けることを目標とする。

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

原子核密度汎関数理論に関する専門的知識と経験を生かした開発を実行するための開発方針を決定し、これに基づく開発を実行した。対象核種が存在する領域は、陽子や中性子の数をわずかに変化させるだけで、原子核がその構造を大きく変化させる領域である。特に、球形・変形の転移、通常相・対凝縮相への転移などが実験データから示唆されている。形状相転移、形状揺らぎ、振動・変形などのダイナミクスを取り入れた核構造モデルを構築するため、TDDFT に基づき、核子対相関を取り入れた四重極集団ハミルトニアンを構築する。この開発に関して、コード開発をほぼ予定通りに進めることができている。

また、大阪大学で開発中の微視的核反応モデルへの構造データの提供を目的に、対象核種に対する核子密度分布の計算を行えるようにコードの改良を行い、構造データを提供することができた。続いて、核子ロックアウト反応に対する構造データの提供に関する計算を現在検討中である。

2-2 成果

今年度の成果の概要は、大きく分けて以下の 3 つの内容である。

(1) 集団ハミルトニアン構築に向けたコード開発

微視的核構造計算に基づき、不定のパラメータを含まない四重極集団ハミルトニアンを構築するため、原子核のエネルギー密度汎関数の 3 次元座標表示による数値計算コードの開発に取り組んだ。ポテンシャル・エネルギーの計算に関しては、コード開発が完了し、実際の数値計算（プロダクト

ラン)も実行し、結果を得ている。一方で、集団質量パラメータに関するコードは開発中である。有限振幅法を用いたコードを開発しているが、年度末には反復法による応答関数計算の予備的な結果を得ることができた。

(2) 陽子・中性子の密度分布計算と弾性散乱断面積計算

上記の計算は、形状揺らぎを取り入れる最先端の理論計算であるが、その前段階として、揺らぎを無視した核構造計算に基づき、核子の密度分布の微視的数値計算を実行した。対象核種とその周辺核を中心に、計算結果を大阪大学・北大・JAEA（原子力機構）のグループと共有し、今後のベンチマークテストや、核反応計算に利用することにした。特に、大阪大学の微視的核反応模型計算において、この密度分布データを用いて中性子弾性散乱断面積を計算し、実験データとの比較等が行われた

(3) エネルギー密度汎関数の不定性の評価

共変形式エネルギー密度汎関数 (Covariant energy density functional) の理論予測の不確定性を見るため、特に不確定性が大きいと考えられるアクチナイド領域よりも質量数が大きい「超重核」の領域で予測値の広がり进行评估した。その結果、閉殻配位から比較的離れた変形核領域においては、理論予測の不確定性が小さいのに対して、魔法数の近傍領域では、その不確定性が増大していることが分かった。この成果を基に、(1)の揺らぎを取り入れた集団ハミルトニアン¹の微視的構築が必要であると判断した。

2-3 新たな課題など

集団ハミルトニアン構築のためのコード開発に、ある程度²のめどが立ちつつあり、大型計算機の利用を目指した並列化を進める必要がある。さらに、プロダクトランを予定にいった計算 (CPU) 時間と必要リソースの評価を行う必要がある。これらは平成 28 年度に実行したいと考えている。また、まずは陽子・中性子数が偶数である偶々核を対象に計算を実行するが、奇核に拡張するために必要な近似手法、あるいはハイブリッド模型の可能性の検討を行う必要がある。

3. アウトリーチ活動報告

自動車技術会関東支部から、会誌への寄稿の依頼があり、その中で「物質を構成する原子核」という題目で原子核の話、および ImPACT のプロジェクトで目指す開発の内容を一般向けに簡単に紹介した。