

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 8 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

# 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 26 年度の feasibility study、平成 27 年度の研究開発方針の精査・決定、およびプログラム開発の開始に引き続き、平成 28 年度においては、以下のような計画を立案した。

阪大グループが開発する微視的核反応モデルへの構造情報のインプットを高精度計算から導出するため、必要となる核構造モデルの開発を実施する。大きな形状ゆらぎ等の複雑な核構造を有する対象 4 核種とその周辺核種を研究するため、時間依存密度汎関数理論からのアウトプットを multi-reference エネルギー密度汎関数の方法に応用するハイブリッド型の手法を採用し、必要な処方箋を確定し、これに基づいたコード開発を実行する。平成 28 年度中に偶々核への数値計算コードの完成を目標とする。また、線形応答計算による核構造情報・光反応断面積等の計算については、single-reference での基底状態の構造と応答関数・光吸収断面積計算の結果をもとに、統計モデル等を用いた中性子反応断面積の計算を進める。この段階において、JAEA の岩本氏等によって開発された計算コード CCONE を用い、北大・JAEA グループとの協力のもとで行う。

## 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

時間依存密度汎関数法によって微視的に集団ハミルトニアンを構築する手法を用いた核構造計算の処方箋を確立した。線形応答を用いた集団慣性質量の計算が、この計算上のネックであり、ここに有限振幅法を用いた新しい手法を導入し、3次元空間での計算を可能にする手法を確立した。現在、線形応答計算を可能にするコード開発に成功し、ここで計算された物理量を慣性質量に変換する段階に着手した。進捗状況は、計算プログラムのバグ除去に予定以上に時間がかかり、進捗は当初予定よりもやや遅れ気味であるが、具体的成果を出す準備は整いつつあり、平成 29 年度においてこれを達成する予定である。また、ジルコニウム核などの球形核という近似が比較的良い核種においては、この近似を用いて、核子ノックアウト反応に対する構造データを提供し、プロジェクト 3 の大阪大学を中心に開発が進められている微視的核反応モデルへのインプットとして利用された。

一方、single-reference における時間依存密度汎関数理論から得られた微視的ガンマ強度関数の計算を、対象 4 核種周辺核で実施し、統計モデル計算コード CCONE への微視的インプットとして導入し、中性子捕獲断面積を計算した。すでにこれまでの様々な角度からの検討により、複合核反応が主要な寄与

を及ぼすと考えられるため、直接捕獲反応過程は無視できると考えられ、統計模型を用いた中性子吸収断面積 ( $n, \gamma$ ) 計算のみを実行した。

## 2-2 成果

今年度の成果の概要は、大きく分けて以下の3つの内容にまとめることができる。

### (1) 集団ハミルトニアン構築に向けたコード開発

原子核エネルギー密度汎関数理論により、不定のパラメータを含まない微視的核構造計算に基づく四重極集団ハミルトニアンを構築するため、数値計算コードの開発に取り組んだ。非軸対称変形を取り入れる必要があるため、3次元座標表示を採用した。昨年度までに、ポテンシャル・エネルギーの計算コードは完成しているため、今年度は特に、集団質量パラメータに関するコードの開発に取り組み、有限振幅法を用いたコード開発がほぼ完了した。最後の、計算量を集団ハミルトニアンの慣性質量に変換する過程だけが残っている。一方、これらの微視的インプットを用いた集団模型のソルバーは準備が完了した。

### (2) 球形核・核子ロックアウト反応における核構造情報

形状揺らぎを無視した球形核の近似のもとで、一粒子波動関数を大阪大学グループに提供し、ロックアウト反応の断面積計算に利用され、対象4核種とその周辺核種において実験データと比較・検討された。多くのデータが微視的核反応模型でうまく記述される一方、ロックアウトされる核子数が少ない一部の原子核のデータの再現に問題が残っている。

### (3) 微視的ガンマ線強度関数と中性子捕獲断面積

single-reference における時間依存密度汎関数理論から得られた微視的ガンマ強度関数の計算を、対象4核種周辺核で実施した。光吸収断面積の実験データがある安定核において、その理論結果を比較し、電気双極子(E1)型のガンマ強度関数に対しては、形状ゆらぎを無視した single-reference 計算でも十分な精度があることを確かめた。続いて、これを JAEA で開発されている統計模型計算コード CCONE への微視的インプットとして導入し、中性子捕獲断面積を計算した。微視的ガンマ強度関数では、ベルギー・フランスの Goriely-Khan 等によって整備されたものが現在一般的に使われているが、彼らの理論モデルの欠点を解決したより信頼性の高いものを提供することができた。

## 2-3 新たな課題など

プロジェクト全体の計画変更により、本課題が平成 29 年度いっぱい終了することになったため、平成 29 年度の計画を元の計画から大幅に変更する必要が発生した。平成 30 年度に予定していた核反応モデルへのインプットを繰り上げて平成 29 年度内に可能な範囲で実行することにした。また、プロジェクト2で測定が予定される低エネルギーのデータに対応するための課題を加えた。

## 3. アウトリーチ活動報告

なし