

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：核反応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 9 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いた予言能力の高い核反応モデルとその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を構築し、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、平成 28 年度における応答関数・光吸収断面積計算と統計モデル等を用いた中性子反応断面積計算に引き続き、平成 29 年度は、以下のような計画を立案した。

まず、平成 28 年度まで二本柱で進めてきた開発のうち、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した中性子反応断面積計算については、JAEA グループが開発中の微視的準位密度などによって改良する余地はあるが、筑波大での開発は平成 28 年度で終了とした。もう一方の、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の構造に関する微視的情報を高精度に抽出するための開発に集中する。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として利用することがその先の目標である。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手法を採用し、これに関わる開発として平成 28 年度から行っているコード開発を完成させる。これを用いて対象 4 核種周辺の偶々核への応用を目標とする。また、核子ノックアウト反応の解析に必要とされる微視的構造データの提供と、低エネルギーでの実験データに対応するため、時間依存密度汎関数理論に基づく実時間発展計算についても可能性を検討する。

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

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ための計算コード開発を実施した。線形応答を用いた集団慣性質量の計算がこの計算上の最大のネックであり、平成 28 年度に、ここに有限振幅法を用いた新しいアルゴリズムを導入し、3次元空間での計算を可能にする方法を確立した。引き続き、このコード開発を行い、3次元空間における線形応答計算を可能にするコード開発に世界で初めて成功した。平成 29 年度には、これをもとにして、慣性質量の計算を実行し、対象 4 核種周辺の偶々核の励起スペクトル・遷移確率などを計算し、これらを実験データと比較した。この比較を通して得られた構造の情報を、反応モデルにフィードバックさせる手法について検討した。

また、低エネルギー実験データの解析のための時間依存密度汎関数理論に基づく実時間シミュレーションのテスト計算を行った。原子核・原子核反応においてこれまで大きな成功を収めた理論であるが、核子・原子核散乱に対しては、この方法に様々な困難があることが分かったため遂行を断念した。一方で、大阪大学グループが新たに開発した核内の密度・運動量分布を用いた核子ノックアウト反応の解析

のために必要となる構造データを提供するため、微視的構造モデルに基づくウィグナー分布関数の計算を行うこととした。

2-2 成果

(1) 集団ハミルトニアン構築に向けたコード開発と対象 4 核種周辺偶々核への応用

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、数値計算コードを開発した。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、ポテンシャル・エネルギーと集団質量パラメータに関するコードの開発に取り組み、これを用いた大規模数値計算によって、完全微視的に集団ハミルトニアンを構成することができた。集団ハミルトニアンの対角化によって、励起スペクトル・電気四重極遷移に関する情報を得ることができ、対象 4 核種周辺において実験データと定量的な比較を実行した。これにより、これらの原子核における形状揺らぎの重要性を再認識し、揺らぎの大きさ等が集団ハミルトニアンで再現されていることを確認するとともに、サイドバンドにおける実験との不一致に関する問題点について考察した。実験データとの詳細な比較・検討から判明した問題点として、ガンマバンドと呼ばれる回転バンドの偶数スピンと奇数スピン状態のエネルギー差がうまく再現できていないことがわかった。この原因を調査したところ、三軸非対称変形を表すガンマ変形に関する揺らぎをわずかに過大評価していることが原因となっていることが分かった。

(2) 核子ノックアウト反応に対する核構造情報

平成 28 年度において、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、ノ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、プロジェクト 2 の理研 RIBF における実験データと比較・検討された。多くのデータがうまく記述される中で、1 核子のみがノックアウトされる一部のデータの再現に問題が残っていることが明らかになったため、平成 29 年度に大阪大学グループが新たな反応モデルを提唱した。このモデルは、半古典的な密度・運動量分布が必要となるため、我々筑波大学グループが提供してきた量子的構造データを、ウィグナー変換を用いた半古典的な分布関数として提供した。1 核子ノックアウト反応の多くのデータを再現する核反応モデルを確立することができた。

2-3 新たな課題など

上記(1)の成果の最後にも一言記載したが、実験データとの詳細な比較・検討から判明した問題点の改良のために、現在用いている近似の妥当性などを精査する必要がある。この問題点の最終的解決は、今後も継続し、集団ハミルトニアン構築の完成度を向上させる。

3. アウトリーチ活動報告

特になし。