

未知同位体の計算核データ ～原子核の形と理論計算核データ～

中務 孝

Nakatsukasa Takashi

1. 核データと核データセンター

原子核の構造や反応に関する実験データは、論文発表の後に、核データセンターに収集される。核データのほとんどは、加速器を用いた大掛かりな実験施設で得られたもので、人類共有財産として公開されており、原子炉設計、放射医学、基礎科学等、様々な用途に利用されている。国際原子力機関 (IAEA)¹⁾ 等のコア核データセンターに加えて、これを補完する専門核データセンターが存在し、国内では、日本原子力研究機構・核データグループ²⁾、北海道大学・原子核反応データ研究開発センター (JCPRG)³⁾ が特定のデータの収集と公開を行っている。これらは核反応データセンター国際ネットワーク (NRDC) として、協力して核データの普及にあたっている。

カルシウム (Ca) の原子核を例として、上記の IAEA の核データで検索してみると、中性子を 38 個含む ⁸⁸Ca までを見つけることができる (2019 年 5 月現在)。中性子数 40 の ⁹⁰Ca の原子核が日本の理化学研究所・RI ビームファクトリー (RIBF) で発見されており、2018 年 7 月に論文⁴⁾ は発表されているが、まだこのデータは収集されていない。この ⁹⁰Ca よりももっと多くの中性子を持った Ca のアイソトープは存在するのだろうか。存在するとすれば、どこまで存在するのか。また、これらの原子核の質量 (束縛エネルギー) や寿命 (半減期)、大きさ (半径)、中性子分離エネルギー (原子核から中性子を取り出すために必要なエネルギー) はどうなっているのだろうか。これらを実験で確かめるのは大変な仕事であり、多くの年月もかかる。

これらの実験データを補完するために必要になるのが、理論計算を用いた原子核構造・反応の計算で

ある。また、実験データの品質保証のための検証にも、いくつかの理論模型・計算が用いられている。検証後のデータは、評価済み核データライブラリとしてまとめられる。

2. 理論計算核データと原子核の形

今回、筑波大学・計算科学研究センターにおいて公開した理論計算核データ⁵⁾ は、実験データを補完したり評価したりする目的ではなく、原子核密度汎関数理論に基づいて、実験データの有無に関わらず、理論計算から予言されるデータを公開している。純粋に理論に基づいたものであり、実験データをベースにした核データとは異なるものであることをまず断っておく。特に、実験で直接観測することが難しい原子核の形状 (かたち) に、フォーカスをおいている。

核形状は、束縛エネルギー、寿命、半径、中性子

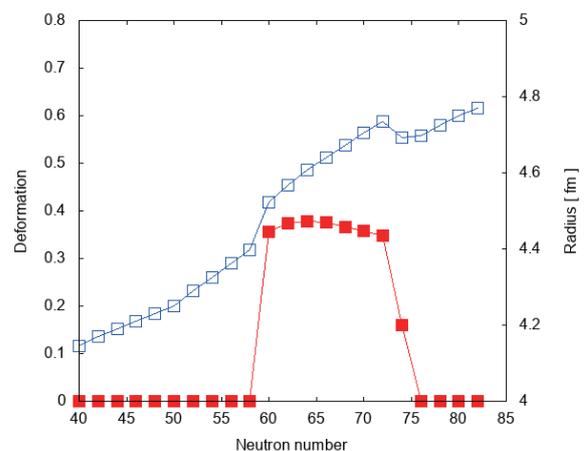


図1 ジルコニウム (Zr) アイソトープの四重極変形の大きさ (四角, 左軸), 及び核半径 (白抜き四角, 右軸)。

分離エネルギー等、原子核の基本データに強く影響することが知られている。例えば、**図1**には、今回計算で得られたジルコニウム (Zr) アイソトープの核半径と変形の大きさを示している。中性子数が60になると原子核は大きく変形し、それに伴って核半径も大きくなっている。更に中性子数が72を超えると変形が小さくなり、核半径も小さくなる。核変形が励起スペクトルに強い影響を与えることは良く知られているが、半径・寿命・分離エネルギー等にもその影響が顕著に現れる。この意味で、「かたち」は原子核の基本的性質（核データ）を決定する重要な要素であると言える。

3. 核変形の起源

原子核というと、何となく丸い形をイメージする人が多いが、実は多くの原子核は球形からずれた形を持っており、特に、ラグビーボールのような形をした原子核の数が多い。では、なぜ原子核は変形するのだろうか。

これを理解するためには、量子力学が必要となる。**図1**に示した Zr アイソトープの核半径は4~5 fm である。フェムトメートル (fm) とは 10^{-15} m であり原子の10万分の1程度の大きさである。こんなミクロな領域に陽子と中性子が閉じ込められているのが、原子核なのである。量子力学では、位置と運動量の間には不確定性原理と呼ばれる関係があり、小さな領域に粒子を閉じ込めると、その運動量の不確定性が大きくなる。したがって、粒子は静止していることができず、有限の運動エネルギーを持たざるを得ない。これは零点運動と呼ばれ、この運動エネルギーが無視できないほど大きいので、原子核は、陽子や中性子の運動エネルギーをなるべく小さくしようとする。体積を一定に保ちながらこの最小化を施すと、すべての粒子の平均的速度分布は等方的に（丸く）なる。

速度分布が丸いのであれば、形も丸くなりそうだが、実はそうはならない。ここで重要なのが、パウリ排他律と呼ばれる多粒子系の量子力学を支配するもう1つの原理である。これは、陽子や中性子等の同種粒子について、同じ状態には1個の粒子しか入れないという規則であり、1個目が運動エネルギーの最も小さい状態にあると、2個目の粒子は運動エ

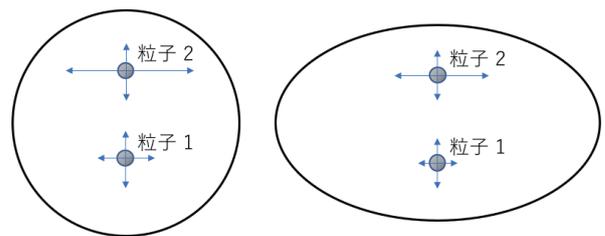


図2 不確定性関係で許される最低の運動エネルギーをもつ「粒子1」。パウリ排他率によって、2番目の粒子は、より大きな運動量をもつ。ここではその方向を横方向に取った（左図）。右図のように変形させると、横（縦）方向の運動量が小さく（大きく）なる。

ネルギーがより大きな状態にならざるを得ない。この時、(x, y, z) の3方向の中からどれか1つについて大きな運動量を持つことになり、結果的に速度分布は異方性を持つ。異方的な速度分布は、運動エネルギーを大きくしてしまうので、原子核は自らこれを修正しようとする。ここで、不確定性原理から決まる運動量の大きさは、閉じ込められた長さに反比例することを使う。すなわち**図2**の右図のように、変形させることで、長軸方向（短軸方向）の運動量を小さく（大きく）することができ、結果的に2粒子を合わせた速度分布を丸くすることができる。

実際の原子核には、陽子と中性子の2種類の（フェルミ）粒子があり、スピン自由度もあるためもう少し複雑であるが、本質的には変わらない。このように、陽子や中性子の数を増やすことで、どんどん増大してしまう運動エネルギーを最小限にとどめようとして、原子核は自ら変形するのである。

4. 密度汎関数理論

原子核の質量を良く記述する古典的な液滴模型として、有名なベータ・ワイゼッカー公式がある。この公式は古典的流体に基づいているため、原子核を変形させる機構は存在しない。したがって、原子核はすべて丸くなってしまふ。原子核の形を予言するためには、量子力学的な効果を加える必要があり、これを殻効果（シェル・エフェクト）と呼ぶ。魔法数と呼ばれる特別な陽子・中性子数が原子核に出現するのも、殻効果の現れの1つである。このように、古典的液滴模型に殻効果を加えるハイブリッド模型は、Strutinsky 法、mic-mac 模型等と呼ばれている⁶⁾。

一方、密度汎関数理論では、原子核の全エネル

ギー E が、陽子と中性子の密度分布 $\rho_p(r)$, $\rho_n(r)$ の汎関数として与えられており、これを目的の原子核に対応する陽子・中性子数の制限のもとで最小化することで、基底状態が決定される。式で書けば1行。

$$\delta (E[\rho_p, \rho_n] - \mu_p \int \rho_p(r) dr - \mu_n \int \rho_n(r) dr) = 0.$$

この計算の際、コーン・シャム方程式と呼ばれる平均場理論のハートレー・フォック方程式に類似した方程式を解くことになり、上記の量子的な運動エネルギーが自動的に考慮される。先ほどのハイブリッド模型の殻効果が自動的に考慮される仕組みである。液滴模型が示すような密度とエネルギーの飽和性も、定量的に記述することができ、軽い核から重い核、更には中性子星の中の核物質まで、広範な領域の記述が可能である。

5. 理論計算核データと InPACS

密度汎関数理論は、1行で済んでしまう式であるが、これを実際に解くのはかなり大変な計算が必要となる。これまでは、原子核の形の種類に制限を付けることで、計算コストを下げてきた。今回、スパコン(図3)を用いた大規模計算によって、この制限を一切排除した計算を行うことで、原子核には実



図3 筑波大学計算科学研究センター運用のスパコン COMA。

に様々な「かたち」があることが分かった。紙面の関係で、ここでそれらを紹介することはできないが、球形に加えて、レモン型(プロレート)、パンケーキ型(オブレート)、キウイ型(三軸非対称)、ヒョウタン型(八重極変形)等が現れ、重い原子核のほとんどが変形していることも分かった。

今回の計算で得られた結果を、InPACS (Interactive Plot of Atomic nuclei and Computed Shapes) という名前のウェブサイトで公開した⁵⁾。ここでは、変形の

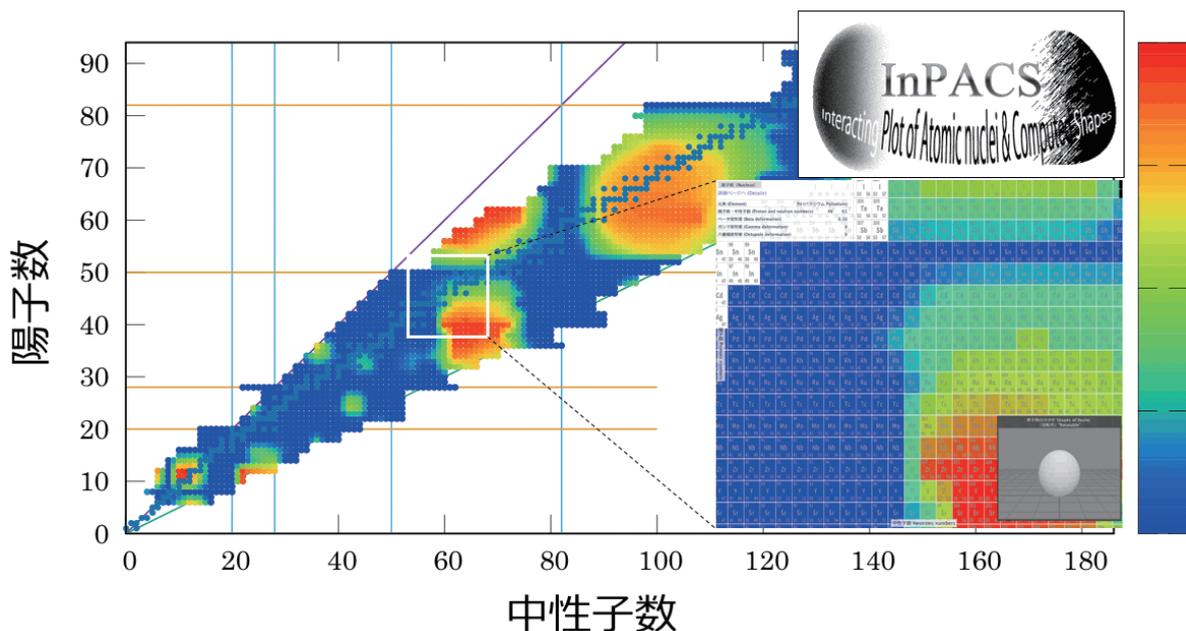


図4 変形核図表。InPACS 上ではカラーで、青が球形、緑・黄・赤の順で変形が大きくなる。図の中央部の拡大図を右側に示しており、特定の原子核を選ぶと計算結果の数値データと形状が図示される。

大きさによって色づけした核図表 (図 4) の上で、見たい原子核をクリックしてもらくと、その立体的な形の概要を図示し、計算された基底状態の性質(束縛エネルギー、半径、対エネルギーギャップ、2 中性子分離エネルギー、陽子・中性子密度分布等)を調べることができる。また、理学的観点から見た原子核の性質を一般向けに紹介するサイトとなっている。

6. まとめ

原子核には飽和性という顕著な性質があるため、古典的液滴模型で束縛エネルギーが良く近似できる。このため原子核に対して古典的なイメージを持つ読者がいるかもしれないが、原子核のほとんどの性質は、古典力学では理解不能である。本稿では原子核の「かたち」を決めているのが、量子力学の基本原理であることを強調した。

InPACS では、密度汎関数理論を用いて、飽和性と量子力学的効果を同時に取り入れた大規模数値計算の結果を公開した。原子核密度汎関数理論は、形の量子揺動を取り入れ、応答や反応計算への応用等、

近年更に発展している。これらの理論的發展と計算科学的アプローチとの融合により、より信頼性の高い、多種多様な理論計算核データが整備されていくと期待している。

謝辞

本研究は、筑波大学計算科学研究センター・学際共同利用プログラムによるスパコン資源を利用し、総合科学技術・イノベーション会議が主導する革新的研究開発推進プログラム (ImPACT) の一環として実施したものです。

参考文献

- 1) <https://www-nds.iaea.org>
- 2) https://www.ndc.jaea.go.jp/nucldata/index_J.html
- 3) <https://www.jcprg.org/nrdc/nrdc-j.html>
- 4) O.B. Tarasov, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 022501 (2018)
- 5) <http://www.nucl.ph.tsukuba.ac.jp/InPACS/>
- 6) M. Brack, *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* **44**, 320-405 (1972)
- 7) T. Nakatsukasa, *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* **88**, 045004 (2016)

(筑波大学 計算科学研究センター
原子核物理研究部門)