

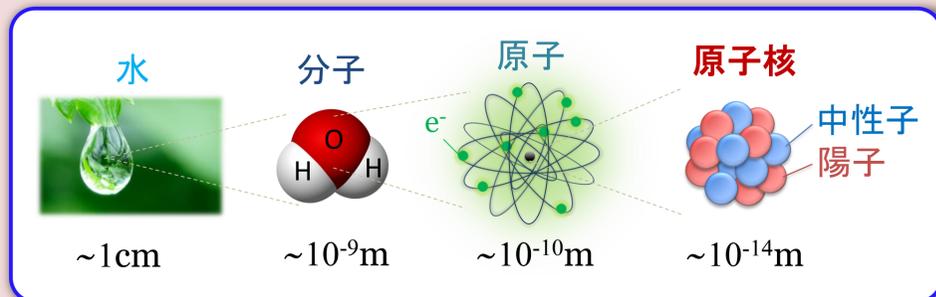
不安定核生成の予言に向けた 時間依存密度汎関数法の拡張とその応用

関澤 一之^A, 吉村健太^A, S. Ayik^B, P. Magierski^{C,D}, G. Wlazłowski^{C,D}

東京工業大学^A, テネシー工科大学^B, ワルシャワ工科大学^C, ワシントン大学^D

我々の興味: 原子核の量子多体ダイナミクス

原子核は核子(陽子・中性子)から成る小さな($\sim 10^{-14}\text{m}$)物体です。原子核は、核力で自己束縛した非相対論的量子多体系と見ることができます。私たちは、時間依存密度汎関数理論(Time-Dependent Density Functional Theory: TDDFT)に基づいた大規模並列計算により、原子核ダイナミクスを理解することを目指し、研究を進めています。

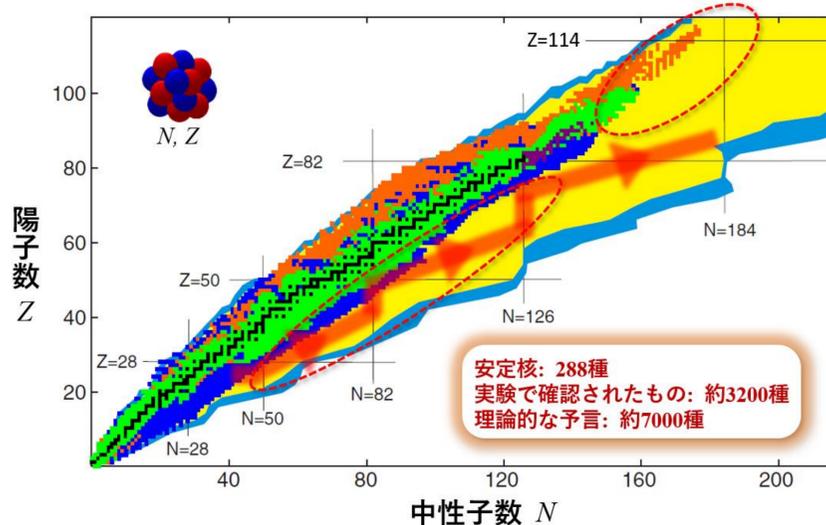


研究の目標: 未知の不安定核を生成する反応を予言すること

これまでに約3300種の不安定な核種が発見されました。一方で、理論的には約7000種以上存在することが示唆されており、それによるとまだ半分以上の核種が未発見のままであるということになります。これらの不安定核の性質を理解することは、我々の宇宙に存在する元素の起源を解き明かす上でも重要であると考えられており、原子核物理の重要課題の一つとして、世界中で研究が精力的に進められています。

不安定核は、加速器を用いて2つの原子核を衝突させること(核反応)により生成することが可能です。しかし、どの原子核を入射核と標的核に選び、どのようなエネルギーで衝突させれば目的の不安定核を生成できるのかということは自明ではなく、理論的な予測が不可欠です。本研究課題では、スーパーコンピュータを駆使し、理論的枠組みの拡張と応用を推し進めることによって、核反応の理解を深化させると共に、信頼できる理論予測を提示することを目指した研究に取り組んでいます。

原子核の一覧表: 核図表



M. Thoennessen, Rep. Prog. Phys. **76**, 056301 (2013)

自然界に存在する最大の原子番号は? (\Leftrightarrow 超重元素合成)
鉄より重い元素の起源は? (\Leftrightarrow r過程, 中性子過剰核の性質)

研究成果: 核融合反応における対相関効果を検証した

未知の不安定核の中でも生成が困難なものの一つに、**超重元素**があります。超重元素とは、原子番号(陽子数)が103を超える元素のことであり、その原子核(超重核)は、2つの原子核を衝突させ、くっつける、**核融合反応**によって実験的に生成されてきました。しかしながら、超重核は陽子間に働く強いクーロン斥力の影響で合成することが非常に困難であることが知られています。実験的に未知の超重元素を合成するためには、どの原子核を入射核と標的核に選び、どのようなエネルギーで衝突させるのか、**理論的な予測が不可欠**です。

一方で、重い原子核を合成する核融合反応過程における**対相関**の効果はこれまであまり調べられていませんでした。対相関というのは、スピンの向きが上向きと下向きの中性子2つや陽子2つが対(クーパー対)を形成する相関であり、閉殻構造を持たない多くの原子核の基底状態に見られる重要な性質の一つです。微視的な理論に基づき対相関を考慮に入れた計算によって、対相関が重イオン反応等のダイナミクスにどのような影響を及ぼすのかということは、理論的枠組みの発展とスパコンの利用によって調べることが可能となり、現在盛んに研究が進められています。

本課題の実施期間には、ポーランドのワルシャワ工科大学との共同研究を実施し、対相関効果を含めた計算と含めない計算を比較することによって、 $^{90-96}\text{Zr} + ^{124}\text{Sn}$ の核融合反応における対相関効果を分析しました。(⇒ [次ページへ](#))

不安定核生成の予言に向けた 時間依存密度汎関数法の拡張とその応用

関澤 一之^A, 吉村健太^A, S. Ayik^B, P. Magierski^{C,D}, G. Wlazłowski^{C,D}

東京工業大学^A, テネシー工科大学^B, ワルシャワ工科大学^C, ワシントン大学^D

研究成果: 核融合反応における対相関効果を検証した

超重元素を合成するためには、入射核と標的核の陽子数の合計が少なくとも目的の超重元素の原子番号と同じである必要があります。そのため、入射核と標的核の電荷の積 $Z_p Z_T$ が必然的に大きくなってしまいますが、 $Z_p Z_T \geq 1600$ を超えると核融合反応が阻害されてしまうことが知られており、核融合阻害 (fusion hindrance) と呼ばれています。

このような核融合阻害現象に対する対相関効果を調べるために、 $^{90-96}\text{Zr}$ (陽子数40) と ^{124}Sn (陽子数50) の正面衝突のTDDFT計算を実施しました。図1に、Extra-push energyと呼ばれる、単純にCoulomb障壁を超えて融合するとした場合のエネルギーよりどれだけの付加的なエネルギーを要するかを表す量を示しました。大まかな特徴として、実験データはExtra-push energyが大きく出ている傾向がありますが、これは実験的にどのようにそのエネルギーを定義したかに依存するものなので、現時点ではあまり重要でないと考えています。一方で、実験データは入射核を ^{90}Zr から ^{96}Zr へと中性子数の大きいものに変えるにしたがって、Extra-push energyが増加する傾向にあることを示しています。これらの反応のTDDFT計算の結果が四角い凡例で示されており、エネルギー密度汎関数(有効相互作用)の異なる2つの結果(SLy4d, SkM*)が示されています。その結果、SLy4dの方がSkM*に比べてExtra-push energyが大きく出る傾向があること(核融合反応が起こりにくい)がわかりました。また、入射核の中性子数を大きくするにしたがって、SLy4dを用いた場合にはExtra-push energyが減少し、SkM*を用いた場合には増加する傾向があることがわかりました。したがって、SkM*の方が実験データに見られる傾向を再現していることがわかります。

これに加えて、ポーランドのグループが行った超流動性を考慮に入れたTDDFT計算の結果 (Time-Dependent Superfluid Local Density Approximation: TDSLDA) も示されています (hp220072)。TDSLDA計算の結果は、SLy4dとSkM*の中間に位置しており、中性子数を増やしたときの増加傾向は少し弱めに出ていることがわかります。このように、 $^{90,92,94,96}\text{Zr} + ^{124}\text{Sn}$ 反応の核融合閾値は複雑な様相を呈しており、まだ最終的な結論が得られていないというのが現状です。詳細な分析を続け、このメカニズムを明らかにすることにより、核融合反応における相互作用・対相関の影響を明らかにできると期待しています。加えて、我々の計算コードにBerdeen-Cooper-Schrieffer (BCS) 理論に基づき対相関を取り入れる拡張にも取り組んでおり、2023年度に実施しているHPCI課題においてその応用を進めています。

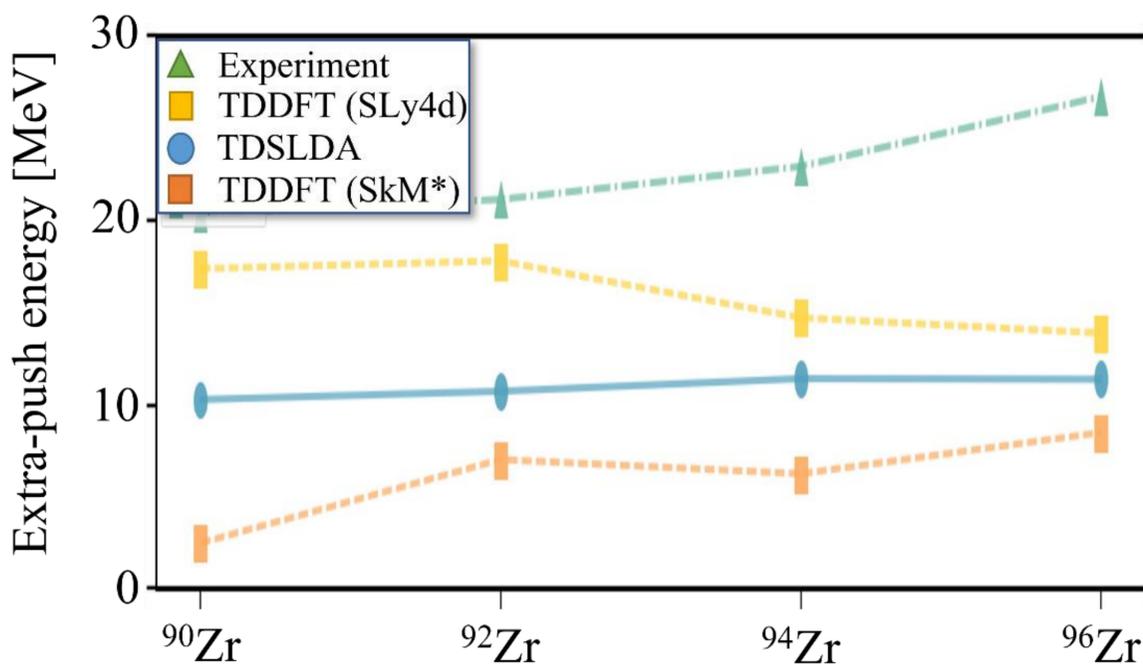


図1: $^{90,92,94,96}\text{Zr} + ^{124}\text{Sn}$ 反応におけるExtra-push energy (核融合を起こすのに必要な付加的なエネルギー)。実験データ (▲), TDDFT計算 [有効相互作用: SLy4d (■), SkM* (■)], TDSLDA計算 (●)。