

統計理論備忘録 複合核反応とランダム行列の交差点

ロスアラモス国立研究所 理論部門

河野 俊彦

kawano@lanl.gov

1. はじめに

Hauser-Feshbach 統計理論 [1] は核データ評価に広く用いられており、GNASH, Empire, TALYS, CCONE, CoH₃ 等の統計模型計算コードが評価用ツールとして開発・整備されてきた。そこで実際に計算されているものはしばしば「幅の揺らぎの補正付き」Hauser-Feshbach 統計理論と呼ばれるが、その目的は多くの共鳴にわたるエネルギー平均値を統計的に計算することにある。基本的には高速中性子エネルギー領域の断面積はこの平均値で代表され、それを何か別の既知の量で表現できればよい。光学模型では、原子核に入射してきた粒子が、原子核と一体となるか(複合核を形成するか)、あるいは散乱されるかのエネルギー平均値を計算する。この原子核の中へ入っていく確率である透過係数が分かっているとして、では今度は複合核からどんな粒子が飛び出してくるかも透過係数で表すことができれば、種々の断面積を予測することがきる。

簡単な例として、まず入射中性子が複合核を形成する透過係数を T_a とし、複合核から中性子を放出して崩壊する方法(チャンネル)が2つある場合を考える。Fig. 1 (a) に示してあるように、原子核が元の状態に戻る場合(弾性散乱)と、励起状態に行く場合(非弾性散乱)である。入射中性子の波数を k_a とすると、まず複合核が形成される断面積は $\pi T_a/k_a^2$ で与えられる。次にそれが崩壊する方法が2つある訳だから、Hauser-Feshbach ではこの断面積が T_a と T_b の比に分配されるとする。

$$\sigma_{\text{el}}^{\text{CN}} = \frac{\pi}{k_a^2} T_a \frac{T_a}{T_a + T_b} \quad \sigma_{\text{inel}}^{\text{CN}} = \frac{\pi}{k_a^2} T_a \frac{T_b}{T_a + T_b} \quad (1)$$

ちなみに T_b は「複合核状態から残留核の励起状態へ抜ける確率」ではなく、「励起した核に中性子が入射して複合核状態を形成する確率」として計算される。Hauser-Feshbach 統計模型コードは、この式を一般化した

$$\sigma_{ab}^{\text{CN}} = \frac{\pi}{k_a^2} \frac{T_a T_b}{\sum_c T_c} \quad (2)$$

を計算しているに過ぎない。後で述べるが、実はこの計算は正しくない。複合核状態と一本の線で描かれた部分は Fig. 1 (b) のように多くの共鳴からなっており、エネルギー平均された断面積を正しく計算するには個々の共鳴からの寄与の平均を計算する必要がある。これが複合核反応に対する統計理論であり、Hauser-Feshbach 理論はその統計理論に対する近似と考えることができる。そしてその平均を計算する為に用いられるのがランダム行列 [2]、中でも Gauss 直交アンサンブル (Gaussian Orthogonal Ensemble, GOE) と呼ばれるものである。拙稿ではこの数学ツール GOE がどのように原子核反応理論へ応用されているかを紹介する。なお $\Gamma_{a\mu}$ のような添字で、アルファベット a はチャンネルを表している。Fig. 1 で言えば弾性散乱と非弾性散乱が該当する。ギリシャ小文字 μ は共鳴状態のどれか一つを表している。またチャンネルの総数を Λ 、共鳴状態の総数を N としておく。

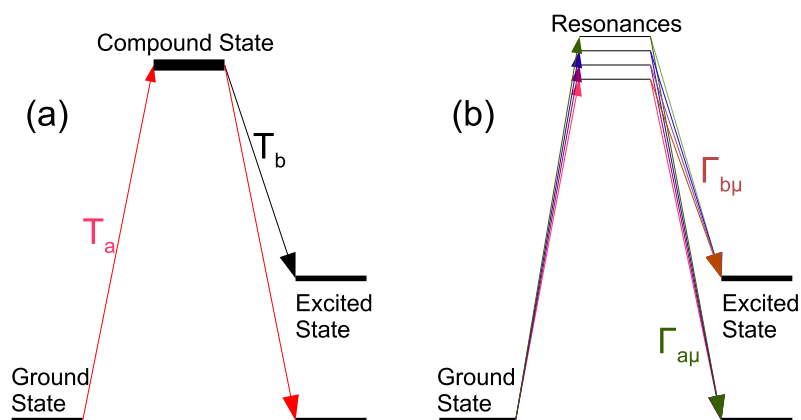


Fig. 1: 弾性散乱と非弾性散乱の模式図、その透過係数 T_a, T_b

2. 共鳴反応とエネルギー平均

2.1 Gauss 直交アンサンブル

GOE とは、Gauss 分布に従う乱数を要素に持つ対称行列の集団のことである。乱数を使うので、一つの行列だけを取り扱っても意味は無い。しかし多くの行列を生成すると、その統計的性質が複合核の統計的性質を再現するだろうというのが Wigner の仮説である。例として、平均値ゼロで分散が $1/3$ の要素を持つ 3×3 の行列を幾つか作ってみる。但し、対角要素の分散は二倍になる。

$$\begin{pmatrix} -0.51 & 0.27 & 0.21 \\ 0.27 & -0.87 & -0.29 \\ 0.21 & -0.29 & -0.67 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} -0.67 & -0.91 & -0.35 \\ -0.91 & -0.34 & 0.28 \\ -0.35 & 0.28 & 0.59 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0.23 & -0.07 & 0.17 \\ -0.07 & -0.40 & -0.35 \\ 0.17 & -0.35 & -0.99 \end{pmatrix}$$

これらに対角化しその固有値を求めてみると、それらは大体 ± 2 の範囲に分布し、その

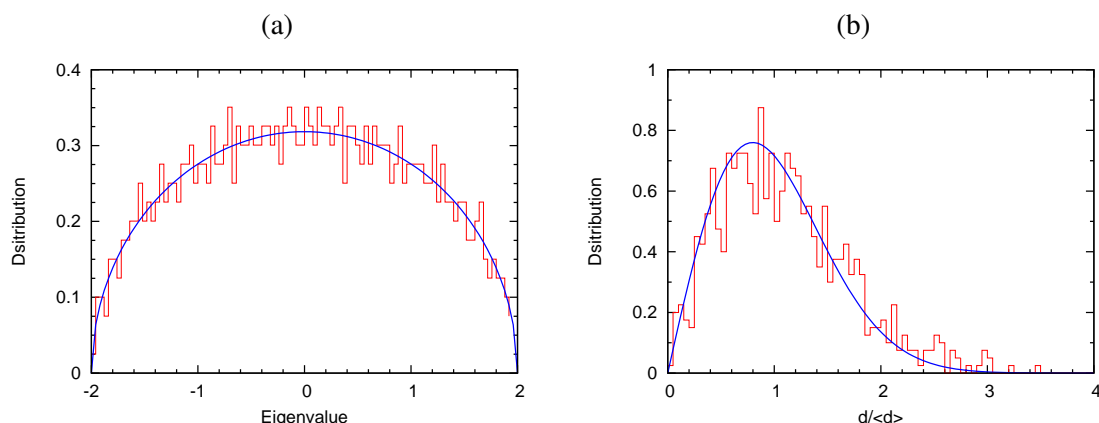


Fig. 2: 1000×1000 の GOE の固有値分布 (a) と、固有値間隔分布 (b) をヒストグラムで示す。固有値分布での実線は Wigner の半円則、固有値間隔分布の実線は Wigner 分布を表す。

密度はゼロを中心に半円形になることが知られている (Wigner の半円則)。Fig. 2 (a) はさらに大きな次元 (1000×1000 の行列) の GOE を生成して固有値の密度分布をプロットしたものである。

さらに隣り合った固有値の間隔を調べてみると、その分布は Wigner 分布と呼ばれる

$$P_W(x) = \frac{\pi}{2} x \exp\left(-\frac{\pi x^2}{4}\right) \quad (3)$$

に非常に近いものが得られる。これを Fig. 2(b) に示している。但し横軸は平均間隔 ($\langle d \rangle = \pi/1000$) で規格化した値を用いている。これは実際に原子核の共鳴で観測されるものと非常に似ており、GOE が複合核の統計的性質を解く鍵となる根拠の一つである。なお、しばしば GOE であれば Wigner 分布になるという記述を見かけるが、厳密には GOE の固有値間隔分布と Wigner 分布は一致しない [2]。

この様な計算は簡単なプログラムを書くだけでできるので、興味のある方の為にもう少し一般的に定義しておく。まずスケール因子 λ を導入するが、これは 1 でよい。行列のサイズは $N \times N$ としておく。行列は対称行列であり、各要素は平均ゼロで標準偏差 $\sigma = \lambda\sqrt{1/N}$ の正規分布乱数で生成する。但し対角要素の標準偏差は $\lambda\sqrt{2/N}$ としておく。EISPACK や LAPACK 等の数値計算ライブラリを用いれば、この行列を対角化して固有値を得るのは簡単である。固有値は $[-2\lambda, 2\lambda]$ に分布し、平均固有値間隔は $\pi\lambda/N$ となる。但しこの平均値は半円形に分布する固有値の中央での値である。

さて、GOE の固有値間隔の分布が、原子核の共鳴間隔の分布に関係がありそうだと思うだけでは、GOE を断面積の平均値計算に用いることはできない。これを行うためには共鳴理論に立ち入る必要がある。

2.2 R 行列による平均断面積

共鳴理論 (R 行列理論) は複合核反応に対する厳密な理論である。 R を以下の式で定義する。チャンネル総数が Λ のとき、行列 R は $\Lambda \times \Lambda$ の要素を持つ。

$$R_{ab}(E) = \sum_{\mu} \frac{\gamma_{\mu a} \gamma_{\mu b}}{E_{\mu} - E} \quad (4)$$

ここで $\gamma_{\mu a}$ は共鳴 μ からチャンネル a に崩壊する振幅、 E_{μ} は共鳴のエネルギーであり、それらは実験データに合うように決定されるパラメータである。核データ評価でよく使われる Reich-Moore の共鳴公式は R 行列理論の近似の一つであるが、極めて良い近似なのでこれを使おう。JENDL-4 の ^{56}Fe の Reich-Moore 共鳴パラメータから 500 ~ 800 keV の範囲で弾性散乱断面積を計算したものを、Fig. 3 の赤い曲線で示している。但し s 波共鳴 ($L = 0$) からの寄与のみを計算している。共鳴パラメータから断面積を導くにはまず S 行列を計算するが、これには少々面倒な逆行列計算が含まれる。多くの教科書・文献 [3, 4, 5] にこの計算が掲載されているので省略するが、 S が求めれば弾性散乱断面積は

$$\sigma_{\text{el}} = \frac{\pi}{k_a^2} |S_{ab} - \delta_{ab}|^2, \quad b = a \quad (5)$$

と計算される。Eq. (1) の $\sigma_{\text{el}}^{\text{CN}}$ は複合核を経由する弾性散乱であるが、 σ_{el} は全ての弾性散乱であることに注意する。Eq. (5) にある δ_{ab} は、弾性散乱チャンネルの場合に入射・放出中性子が区別できないことに起因する。

共鳴パラメータが与えられれば全ての断面積が計算されるので、統計理論の出番は無いが、まずはこの図の断面積の平均を求めてみよう。500 ~ 800 keV の s 波弾性散乱断面積のエネルギー平均は、青の横線で示された 1.81 b である。

さて共鳴理論を用いると、Lorentz 関数を用いた R や S のエネルギー平均を簡単に求めることができる。結果だけを示すと、 $\langle R(E) \rangle = R(E + iI)$ 、つまり Eq. (4) のエネルギー E を複素数 $E + iI$ に置き換えるだけである。ここで I は Lorentz 関数の幅である。 $I = 1, 10, 100$ keV とした時、断面積がどのように変化するかを Fig. 3 に示している。 I が増加するに従って共鳴部分の凹凸が均されていくが、断面積の平均値 1.81 b よりも低い値に収束していく。Eq. (5) のエネルギー平均を次のように計算する。

$$\begin{aligned} \langle \sigma_{\text{el}} \rangle &= \frac{\pi}{k_a^2} \langle |S_{aa} - 1|^2 \rangle \\ &= \frac{\pi}{k_a^2} \left\{ \langle |S_{aa} - 1|^2 \rangle + \langle |S_{aa}^{\text{CN}}|^2 \rangle \right\} = \sigma_{aa}^{\text{SE}} + \langle \sigma_{aa}^{\text{CN}} \rangle \end{aligned} \quad (6)$$

この $\sigma_{aa}^{\text{SE}} \propto \langle |S_{aa} - 1|^2 \rangle$ の部分はエネルギー平均された S や R から計算できる量で、形状弾性散乱断面積 (shape elastic) と呼ばれる。一方、 $\langle \sigma_{aa}^{\text{CN}} \rangle$ が $\langle \sigma_{\text{el}} \rangle$ に足りなくなっている分、これは複合核弾性散乱断面積 (compound elastic) である。

S 行列要素を図の範囲でエネルギー平均すると $\langle S_{aa} \rangle = 0.0921 - 0.473i$ が得られ、これより $\langle |S_{aa} - 1|^2 \rangle = 1.05$ となる。鉄の中性子捕獲反応断面積は小さいので無視すると、

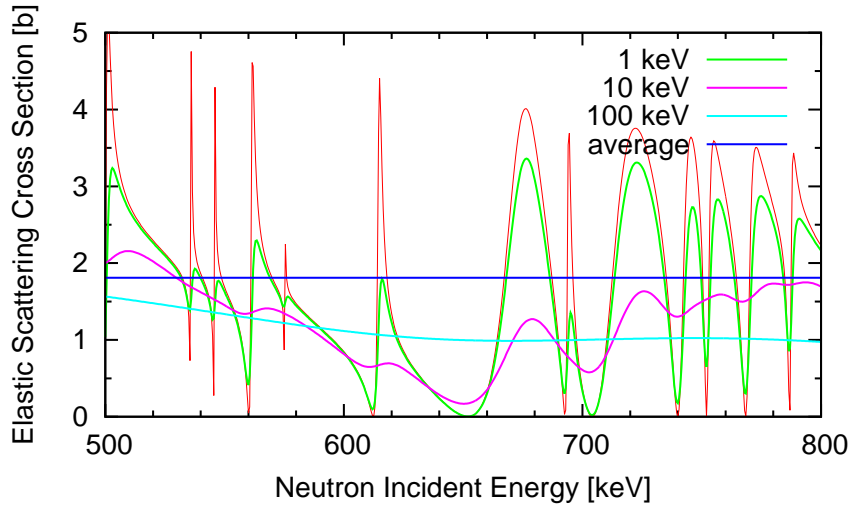


Fig. 3: JENDL-4 の ^{56}Fe 共鳴パラメータを持ちいて計算した弾性散乱断面積。赤い曲線はエネルギー平均を含まない元の断面積。それ以外はエネルギー平均された R 行列を用いて計算した ^{56}Fe 弾性散乱断面積を表す。平均幅はそれぞれ 1, 10, 100 keV である。青い実線は元の断面積のエネルギー平均値 (3.18 b) を表す。

共鳴反応を起こして原子核に吸収された中性子はまた同じ道を通って飛び出してくるしかない。これはチャンネルが一つしか無い場合 ($\Lambda = 1$) であり、その確率 (透過係数) は

$$T_a = 1 - |\langle S_{aa} \rangle|^2 = 0.768 \quad (7)$$

と計算される。Eq. (1) で $T_b = 0$ とおくと、複合核弾性散乱断面積は $\sigma_{aa}^{\text{CN}} = \pi/k_a^2 \cdot T_a$ である。650 keV での $\pi/k_a^2 = 1.04$ b を使えば、 $1.04 \times (1.05 + 0.768) = 1.89$ b となり、断面積を直接平均して得られた値 1.81 b がほぼ戻ってくる。つまりエネルギー平均された S を使うと原子核に吸収されて行く分が消失するが、この場合はチャンネルが一つしか無いので、吸収分が放出分と等しく、それを加えてやれば全平均値が保存されることになる。

なおここで透過係数と形状弾性散乱断面積は共鳴の平均から求めたが、光学模型でも計算できる。Koning-Delaroche ポテンシャルを使った場合の 650 keV での $\langle S_{aa} \rangle$ は $-0.281 - 0.0576i$ であり、これから $T_a = 0.917$ となる。

2.3 Moldauer 理論

チャンネルが複数あれば、共鳴で吸収された分が、出口に於いてそれら複数に分配される。統計模型では共鳴パラメータの統計的性質と平均断面積の関係を調べ、この分配

を透過係数 T_a で計算するが、この比は T_a の単純比にはならない。Moldauer の方法を用いると、まず Fig. 1 (b) の各共鳴の崩壊幅 $\Gamma_{a\mu}$ は自由度 ν_a の χ^2 分布に従うとし、複合核断面積 σ_{ab}^{CN} はその分布に対して平均を取る。

$$\sigma_{ab}^{\text{CN}} = \frac{\pi}{k_a^2} \frac{T_a T_b}{\sum_c T_c} W_{ab} \quad (8)$$

$$W_{ab} = \left(1 + \frac{2\delta_{ab}}{\nu_a}\right) \int_0^\infty \prod_f \left(1 + \frac{2tT_f}{\nu_f \sum_c T_c}\right)^{-\nu_f/2 - \delta_{fa} - \delta_{fb}} dt \quad (9)$$

ここで W_{ab} が幅の揺らぎの補正と呼ばれる項である。あとは T_a と ν_a の関係が分かれば良いが、これは解析的には求められない。Moldauer[6] は、GOE から帰納される共鳴パラメータの統計性を Monte Carlo に応用して、平均断面積の数値計算を行っている。具体的には、共鳴エネルギーを Eq. (3) の Wigner 分布から、また共鳴振幅を正規分布からサンプルして、断面積を模擬する。要するに非分離共鳴で用いられる Picket-Fence と呼ばれる手法である。これを何度も繰り返して平均値を求める訳であるが、これはアンサンブル平均であってエネルギー平均では無い。両者は一致するという暗黙の了解がある。またパラメータのサンプル方法によっては、結果にやや偏りが出る恐れもある。Moldauer がシミュレーションで得た結果は

$$\nu_a = 1.78 + (T_a^{1.212} - 0.78) \exp(-0.228 \sum_c T_c) \quad (10)$$

というシンプルなものであるが、この式はあまり精度が良くないことが分かっている [7]。 $\sum_c T_c$ が大きいときに 1.78 という数値に収斂するが、後で述べる GOE を用いた計算で得られる漸近値は 2.0 である。

なお、Eq. (9) を Moldauer の揺らぎ補正の式と書かれることがあるが、出典は 1957 年の Dresner の論文 [8] に遡るようである。元論文が入手できなかったので、確認はしていない。

2.4 弾性強化因子

Eq. (9) の W_{ab} は、厳密には二つの補正からなっている。 $1 + 2\delta_{ab}/\nu_a$ の部分は弾性散乱チャンネルの場合に断面積が $(1 + 2/\nu_a)$ 倍になるという弾性強化 (elastic enhancement) であり、積分部分が実際の幅の揺らぎの補正項である。この弾性強化の部分だけを取り出して $W_a = 1 + 2/\nu_a$ と書く。

Λ 個のチャンネルの透過係数が同一、つまり $T_a = T_b = T_c = \dots = T$ である場合を考える。この場合、Hauser-Feshbach 理論による断面積は、全てのチャンネルで等しくなり、

$$\sigma_{aa} = \sigma_{ab} = \sigma_{ac} = \dots = \frac{\pi}{k_a^2} \frac{T^2}{\sum_i T_i} = \frac{\pi}{k_a^2} \frac{T^2}{\Lambda T} = \frac{\pi}{k_a^2} \frac{T}{\Lambda} \quad (11)$$

それは複合核形成断面積 $\sigma^{\text{CN}} = \pi T/k_a^2$ を Λ 個に均等に配分するだけである。しかし実際には W_a があるため、 σ_{aa} のみ他のチャンネルの断面積より大きくならなければならない。ここでは Hofmann らの方法 (Hofmann, Richert, Tepel, Weidenmüller, HRTW)[9, 10] を用いよう。HRTW では W_a が与えられているとして、透過係数 T_a を以下の V_a で置き換えて断面積を計算する。

$$V_a = \frac{T_a}{1 + \frac{(W_a - 1)V_a}{\sum_i V_i}} \quad (12)$$

$$\sigma_{ab} = \frac{\pi}{k_a^2} \frac{V_a V_b}{\sum_i V_i} \{1 + (W_a - 1)\delta_{ab}\} \quad (13)$$

多くの共鳴が重なっている状況では $W_a = 2$ に漸近することが分かっている。また簡単のため $\Lambda = 2$ としておく。Eq. (12) は非線形方程式で、通常は反復計算で解かれるが、 $T_a = T_b = T$ の場合は簡単で $V_a = 2T/3$ となる。これを Eq. (13) に代入してやれば、弾性散乱断面積は $\sigma_{aa} = (2/3)\pi T/k_a^2$ 、非弾性散乱はその半分の $\sigma_{ab} = (1/3)\pi T/k_a^2$ と計算される。つまり総量 σ^{CN} を保存し、かつ弾性散乱断面積だけが W_a 倍になるように再分配している。Eq. (12) は、入射と放出の確率が保存するという、 S 行列のユニタリティの要請から来るものである。

Moldauer の ν_a 同様、 W_a も Monte Carlo を用いた数値的推定がなされているが、この値は「全てのチャンネルが等価のとき、弾性散乱と非弾性散乱断面積の比」という定義で与えられるので注意を要する。 W_a は共鳴の重なり具合によって 2 ~ 3 の値を取ることが知られているが、各チャンネルの透過係数が異なる一般の場合、弾性散乱断面積が Hauser-Feshbach の W_a 倍になるわけではない。

Kawai, Kerman, McVoy (KKM)[11] は Moldauer や HRTW とは全く異なる出発点から統計理論を組み立てており、ここまで述べてこなかった直接反応の影響も統一的に取り扱えるようになっている。なお直接反応が無い場合の KKM 断面積は、Moldauer や HRTW で $\nu_a = W_a = 2$ とした結果と似た形で書けることが知られており、 $\sum_c T_c$ がそれなりの数値になると各モデル間の差異は小さい。 $\sum_c T_c$ が十分大きいときは $\Lambda \gg 1$ 、すなわち多くのチャンネルがある場合に相当する。その様な状況で σ^{CN} を Λ 個に配分すれば、其々のチャンネルの断面積は既に十分小さい値である。弾性散乱チャンネルだけが他の 2 倍になったとしても、非弾性散乱チャンネルへの実質的な影響は無視できるようになる。これが Hauser-Feshbach の「近似」の結果である。

幾ら弾性散乱が小さいとは言え、このチャンネルの断面積だけ見れば 2 倍になるのは大きな効果に見える。しかしながら、2 倍になるのは複合核を経由する弾性散乱断面積である。その断面積の数百 ~ 数千倍の大きさの形状弾性散乱 σ_{aa}^{SE} があるので、やはりこの変化は実験的には殆ど見えないのである。

2.5 GOE を用いた平均断面積

Moldauer や Hofmann らは GOE の特性を用いて共鳴をコンピュータ上で生成し、断面積の平均値を求めたが、これでは現象論上の制約から逃れることができない。直接 GOE を原子核反応理論に組み込むことにより断面積平均値を解析的に求めることに成功したのが、Verbaarschot, Weidenmüller, Zirnbauer [12] である。この導出は河合光路・吉田思郎共著の「原子核反応論」(朝倉書店)の第7章でも解説されているが、まず S 行列を以下の様に定義する。

$$S_{ab}(E) = \delta_{ab} - 2\pi i \sum_{\mu\nu} W_{a\mu} D^{-1} W_{\nu b} \quad (14)$$

$$D_{\mu\nu} = E\delta_{\mu\nu} - H_{\mu\nu}^{\text{GOE}} + \pi i \sum_c W_{\mu c} W_{c\nu} \quad (15)$$

H^{GOE} の部分に GOE で生成した行列を用いる。 W は崩壊振幅 $\gamma_{a\mu}$ を行列で表したものである。Moldauer らが行った数値シミュレーションではこの振幅も乱数で表現されたが、本来これは入射/放出中性子と共鳴状態の結合の強さを表す量であり、原理的には計算できるものでランダムでは無い。GOE を用いた S 行列計算では、 W 行列は透過係数 T_a を含む模型パラメータとなる。 $W_{a\mu}$ を適当に決め、GOE を発生すれば、任意の断面積を生成することができる。これにより共鳴間隔と崩壊幅の分布が一つの行列によって表現される。勿論個々の H^{GOE} に対する断面積には何の意味も無い。求めようとしているのは、多くの GOE に対するアンサンブル平均である。

Fig. 4 に、透過係数が非常に小さい場合(上段)、中程度(中段)、ほぼ 1.0 の場合(下段)について、Eq. (14) 並びに断面積 $|\delta_{ab} - S_{ab}|^2$ を計算した例を示している。弾性散乱と非弾性散乱の2つのチャンネルが存在する場合について示してある。横軸はスケール因子 λ で測った無次元のエネルギーである。断面積から π/k_a^2 を省いてるためエネルギーが負の数字から始まっているが、これが適当に非分離共鳴領域にマッピングされると思えば良い。 S 行列要素の図に示されたスムーズな曲線は、 $S(E + iI)$ で得られるエネルギー平均 S 行列である。ここから透過係数 T_a, T_b が計算できる。

$W_{a\mu}$ を固定していても、新しく GOE を生成すれば断面積はランダムに変化する。これをアンサンブル平均すれば、透過係数と平均断面積の正確な関係が求まる。行列のサイズ N を無限大に取れば GOE についての平均値の解析解が得られるが、それは以下の非常に複雑な3重積分になる [12]。

$$\begin{aligned} \langle |S_{ab}|^2 \rangle &= \langle |S_{ab}|^2 \rangle + \frac{T_a T_b}{8} \int_0^\infty d\lambda_1 \int_0^\infty d\lambda_2 \int_0^1 d\lambda \mu(\lambda, \lambda_1, \lambda_2) \\ &\times \prod_c \frac{1 - T_c \lambda}{\sqrt{(1 + T_c \lambda_1)(1 + T_c \lambda_2)}} \\ &\times \{ \delta_{ab}(1 - T_a) F_1(\lambda, \lambda_1, \lambda_2) + (1 + \delta_{ab}) F_2(\lambda, \lambda_1, \lambda_2) \} \end{aligned} \quad (16)$$

$$\mu(\lambda, \lambda_1, \lambda_2) = \frac{\lambda(1-\lambda)|\lambda_1 - \lambda_2|}{\sqrt{\lambda_1(1+\lambda_1)}\sqrt{\lambda_2(1+\lambda_2)}(\lambda + \lambda_1)^2(\lambda + \lambda_2)^2} \quad (17)$$

$$F_1(\lambda, \lambda_1, \lambda_2) = \left(\frac{\lambda_1}{1+T_a\lambda_1} + \frac{\lambda_2}{1+T_a\lambda_2} + \frac{2\lambda}{1-T_a\lambda} \right)^2 \quad (18)$$

$$F_2(\lambda, \lambda_1, \lambda_2) = \frac{\lambda_1(1+\lambda_1)}{(1+T_a\lambda_1)(1+T_b\lambda_1)} + \frac{\lambda_2(1+\lambda_2)}{(1+T_a\lambda_2)(1+T_b\lambda_2)} + \frac{2\lambda(1+\lambda)}{(1-T_a\lambda)(1-T_b\lambda)} \quad (19)$$

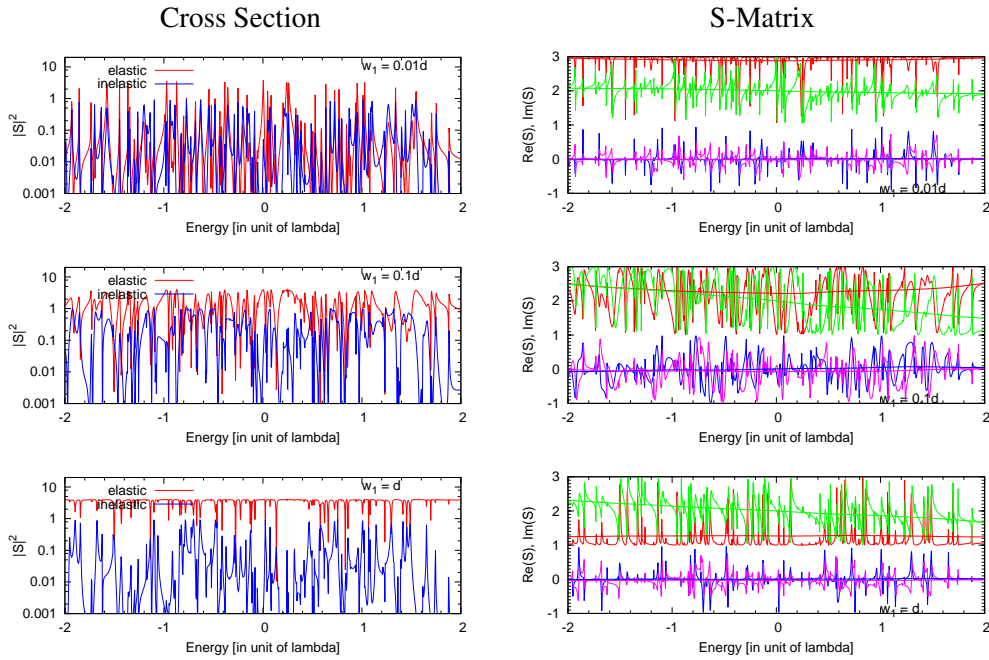


Fig. 4: GOE を用いて生成された断面積 (左) と S 行列 (右)。断面積を $|S|^2$ と表記しているが、実際は $|\delta_{ab} - S_{ab}|^2$ である。上段が透過係数が非常に小さい場合、中段は中程度、下段は透過係数がほぼ 1 に近い場合である。 S 行列の図の曲線はそれぞれ、弾性散乱実部 (赤)、虚部 (緑)、非弾性散乱実部 (青)、虚部 (マゼンタ) となっている。図を見やすくするために弾性散乱の S 行列は +2 移動してある。図中に示されたスムーズな曲線は Lorentz 関数を用いたエネルギー平均値である。

適当な変数変換 [13] を行い Gauss-Legendre 積分を用いれば、Eq. (16) の数値計算はさほど困難では無いが、多くのチャンネルが存在する現実的な核データ評価への応用にはやはり不便である。Fröhner [14] や五十嵐 [15], Hilaire ら [16] はこの 3 重積分計算を行い、Moldauer の揺らぎ補正計算がこれの良い近似になっていることを確認している。

この式は N が非常に大きな場合の解析解であるが、 N が小さいときも十分正確であることが数値的に確かめられている。但しここでも、エネルギー平均がアンサンブル平

均と一致するという暗黙の了解がある。共鳴の数が少ないと、エネルギー平均値は局所的な変動が大きくなるので、非常に多くの GOE を生成してアンサンブル平均する必要がある。

3. 核データ評価用コードへの応用

Verbaarschot, Weidenmüller, Zirnbauer[12] の 3 重積分公式により、統計模型の問題は解決したと言える。この公式は (計算できるかどうかは別として)、直接反応が存在する場合にも拡張できる [17]。しかしながら、先にも述べた様に、この式を核データ評価用のコードに適用するには少々厄介である。チャンネルを全て明示的に指定する必要があり、粒子放出後の状態が連続領域にある場合は工夫しないとイケない。またチャンネル数が多くなってくると、計算時間が飛躍的に増大する。

Empire は HRTW を採用している。Eq. (13) の V_a の計算は反復的に解く必要があるが、この部分は問題なく収束するようである。問題は弾性散乱強化 W_a のみを見ている点で、計算に含まれる透過係数のばらつきが大きい時、計算結果の精度にやや疑問が生じる [7]。

最も実用的なのは、Eq. (9) の Moldauer の方法である。この式の積分部分は連続領域にある場合にも拡張できる [18]。また変数変換して積分区間を $[0, 1]$ に移せば、Gauss-Legendre 積分を適用でき、計算時間は極めて短い。CoH₃ では、Eq. (10) に Kawano, Talou による改訂版の式 [7] を用いる Moldauer 方式を採用しているが、この方法で実質的に GOE の 3 重積分と等価な結果を得ることができる。TALYS も Moldauer をデフォルトにしておき、将来改訂版に移行すると聞いているが、現行のものがどうなっているのかは分からない。

Moldauer の Eq. (10) は、共鳴を生成して平均し、その時の弾性強化 W_a からチャンネルの自由度 $\nu_a = 2/(W_a - 1)$ を求めたものである。現在では GOE による S 行列のアンサンブル平均が 3 重積分で与えられることが分かっているので、 $T_a = T_b = \dots = T$ の場合に対して Eq. (16) を計算し、それから ν_a を求め、これを T_a と $\sum_c T_c$ で表す。全チャンネルの透過係数が等しいので、 $\sum_c T_c = \Lambda T$ である。同様の計算は Ernebjerg, Herman[19] も行っているが、彼らはチャンネル透過係数にやや違いを持たせている。Fig. 5 に T_a と $\sum_c T_c$ で表された ν_a を示す。図の左側、赤い点が GOE の計算結果で、青い線が簡単な関数を用いてそれらへのフィットした Kawano, Talou[7] の結果である。各線は異なる透過係数 T に対応し、上から下へ T が減少していく。右側の図の赤の点線は Eq. (10)、青い実線は Ernebjerg, Herman のものである。Ernebjerg の式は HRTW の W_a として Empire のオプションに組み込まれているようであるが、このように GOE の結果からはややずれる傾向にある。

$\sum_c T_c$ 、つまり Λ が増加すると、GOE の結果は $\nu_a = 2$ に漸近する。これは $W_a = 2$ に対応し、HRTW と KKM の結果と矛盾しない。一方 Moldauer の Eq. (10) の漸近値は 1.78

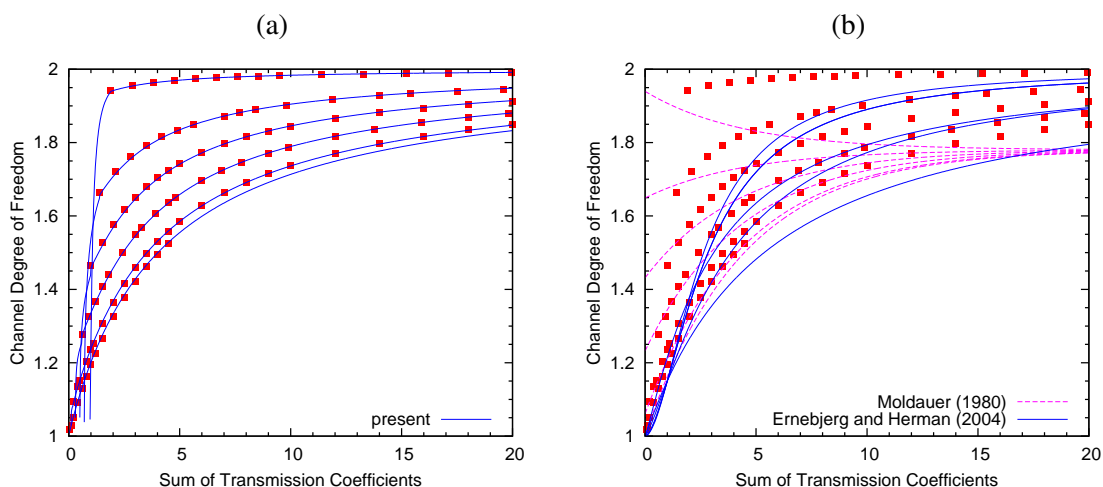


Fig. 5: チャンネル自由度 ν_a と透過係数 $\sum_c T_c$ の関係。赤の点が GOE による計算値、カーブはフィッティングの結果であり、(a) は Kawano, Talou[7]、(b) は Moldauer[6] と Ernebjerg, Herman[19] による式。各カーブは上から、透過係数が 0.95, 0.7, 0.5, 0.3, 0.1, 0.01 の場合に相当する。(図は Ref.[7] より転載)

であり、チャンネル数が多くなってくると断面積にずれが生じることが分かる。

Fig. 5 は全てのチャンネルの透過係数が等しい場合であるが、一般的には其々のチャンネルで T_a が異なるので、今度は乱数を用いてそのような状況を模擬する。チャンネル数が極めて少ない時、Kawano, Talou の式でも GOE の結果を再現できないケースが出てくるが、それはある特殊な T_a の組み合わせの場合である。実用上 Fig. 5 の左で示される Kawano, Talou の式 [7] で十分であろう。

4. おわりに

Hauser-Feshbach による統計理論の日本語の記述は、例えば光学模型ポテンシャル、準位密度、強度関数等の模型計算のパラメータに関連付けた形で核データ関連の論文・報告にしばしば登場する。しかしながら実際の意味での統計模型としては、簡単に「揺らぎの補正」という一言で片付けられ、最近の日本語解説にあまり見られ無いようだったので、簡単にまとめてみた。

中性子核データに限って言えば、統計模型が重要なのは中重核の分離共鳴領域のすぐ上から数 MeV の領域で、さらにエネルギーが高くなりチャンネル数が多くなるに従って通常の Hauser-Feshbach 計算で十分になってくる。共鳴公式に基づく面倒な計算をする割には「補正」のような扱いになっているため、目立たない存在であるが、これが実際の統計理論である。球形核に対する反応でチャンネル数がそれなりに多ければ、Moldauer, HRTW, KKM, GOE はほぼ同じ結果を与えることが Monte Carlo シミュレーションを用

いて確認されている [7]。実際に核データ評価に適用する場合は、プログラミングの観点からおそらく Moldauer が一番合理的であろう。

直接反応を含む、即ち変形核に対する統計理論については本稿では述べていないが、これも GOE に基づいた計算を行うことができる。チャンネル結合理論と統計理論を組み合わせる必要があるので、CCONE や CoH₃ のような内部にチャンネル結合理論計算部分を持つコードならこれが可能である。一方、例えば TALYS や Empire のように ECIS を透過係数計算モジュールとして持つコードでは変形核への拡張はかなり面倒であろう。時間と機会、そしてそんな需要があれば、直接反応を含む場合のこともいつか書いてみたいと思う。

参考文献

- [1] W. Hauser, H. Feshbach, Phys. Rev. **87**, 366 (1952).
- [2] M. L. Mehta, “Random Matrices, Third Edition,” Elsevier Academic Press, 2004.
- [3] A. M. Lane, R. G. Thomas, Rev. Mod. Phys. **30**, 257 (1958).
- [4] J. E. Lynn, “The Theory of Neutron Resonance Reactions,” Clarendon Press, Oxford (1968).
- [5] F. H. Fröhner, “Evaluation and Analysis of Nuclear Resonance Data,” JEFF Report **18**, OECD Nuclear Energy Agency (2000).
- [6] P. A. Moldauer, Nucl. Phys. A, **344**, 185 (1980).
- [7] T. Kawano, P. Talou, Nuclear Data Sheets **118**, 183 (2014).
- [8] L. Dresner, Proc. Int. Conf. on Neutron Reactions with the Nucleus, Columbia U. , Report CU-157, p. 71 (1957).
- [9] H. M. Hofmann, J. Richert, J. W. Tepel, H. A. Weidenmüller, Ann. Phys. **90**, 403 (1975).
- [10] H. M. Hofmann, T. Mertelmeier, M. Herman, J. W. Tepel, Z. Phys. A **297**, 153 (1980).
- [11] M. Kawai, A. K. Kerman, K. W. McVoy, Ann. Phys. **75**, 156 (1973).
- [12] J. J. M. Verbaarschot, H. A. Weidenmüller, M. R. Zirnbauer, Phys. Rep. **129**, 367 (1985).
- [13] J. J. M. Verbaarschot, Ann. Phys. **168**, 368 (1986).
- [14] F. H. Fröhner, Nucl. Sci. Eng. **103**, 119 (1989).
- [15] S. Igarasi, Proc. Int. Conf. on Nuclear Data for Science and Technology, 13 – 17 May, 1991, Jülich, Germany, Ed. S.M. Qaim, Springer-Verlag, p.903 (1992).
- [16] S. Hilaire, Ch. Lagrange, A. J. Koning, Ann. Phys. **306**, 209 (2003).
- [17] H. Nishioka, H.A. Weidenmüller, S. Yoshida, Ann. Phys. **193**, 195 (1989).
- [18] T. Kawano, T. Sanami, M. Baba, H. Nakashima, J. Nucl. Sci. Technol., **36**, 256 (1999).
- [19] M. Ernebjerg, M. Herman, Proc. Int. Conf. on Nuclear Data for Science and Technology, 26 Sept. – 1 Oct., 2004, Santa Fe, USA, Ed. R.C. Haight, M.B. Chadwick, T. Kawano, and P. Talou, American Institute of Physics, AIP Conference Proceedings **769** p.1233 (2005).