

話題・解説(II)

くろたま模型 in PHITS

理化学研究所

仁科加速器科学研究センター R I 物理研究室

小濱 洋央 (こはま あきひさ)

kohama@riken.jp

<http://ribf.riken.jp/~kohama/>

1. はじめに¹

以前の核データニュース (No. 120) で, "The Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS)" の特集が組まれていた。ここでも PHITS に関わる話題を書かせていただきたい。

まずは僭越ながらご報告。私 (小濱)、飯田圭教授 (高知大学)、親松和浩教授 (愛知淑徳大学)、岩瀬広助教 (高エネルギー加速器研究機構) が共同で開発した計算コード、kurotama0、が、ガン治療計画をたてる際や理研 RIBF の放射線遮蔽などの simulation でも使われている汎用コード PHITS version 3.00 で、デフォルトモデルとして採用された [1, 2]。kurotama0 は、小濱、飯田、親松が共同で研究を続けている“くろたま模型 (Black Sphere Model)” [3,4]に基づいて開発された計算コードで、2012年5月にオプションとして PHITS version 2.52 に正式に採用されていた。

ご存じのこととは思いますが、デフォルトモデルとはオプションの最上位の選択肢で、他のオプションを指定しなければ自動的に選ばれる。つまり PHITS 開発者が、ユーザーに推奨する計算手法であることを示している。ここでは、全反応断面積の計算コードが、従来のフィッティングに基づく経験式から、物理的考察に基づいて構築された“くろたま断面積公式 (BS cross-section formula)” [5,6] ベースの“Hybrid-Kurotama” となっている [7,8]。

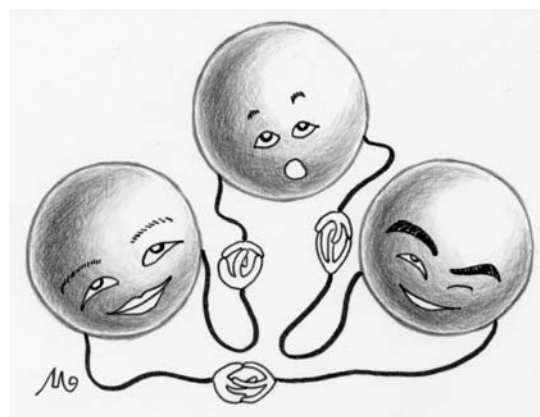


図1: くろたまロゴ (くろたまブラザーズ)

© 小濱真実子

¹ 「1. はじめに」は、仁科センターニュース No. 839 (2018年3月5日発行) の編集後記 (小濱) の多くを一部変更して使用した (ニュース購読などの問い合わせは、email: ribfnews@riken.jp まで)。

本ニュース読者には PHITS user が少なくない。まずはご挨拶を兼ねて、くろたま模型の PHITS での位置づけを報告させていただいた。さらに以下で、くろたま模型 (図 1) やくろたま断面積公式、Hybrid Kurotama、kurotama0 について簡単に紹介させていただきたい。

2. くろたま模型

この模型は、原子核を半径“ a ”の吸収の強い“くろたま”と見做すことで、陽子 - 原子核散乱データから原子核の大きさを直接に見積もることのできる模型である [3,4]。反応を回折現象と見做し、波動光学 (Fraunhofer 回折) (図 2) に基づいて記述する。一貫した枠組みでの陽子 - 原子核弾性散乱微分断面積や全反応断面積測定値 (σ_R) に基づいた原子核サイズの定量的解析を可能にした [9,10]。原子核 - 原子核反応への拡張も容易であるが [10]、本稿では陽子 - 原子核反応を中心に書きたいと思う。

くろたま模型は基礎的物理にのみ立脚しているので、模型選択に伴う不定性をほとんど

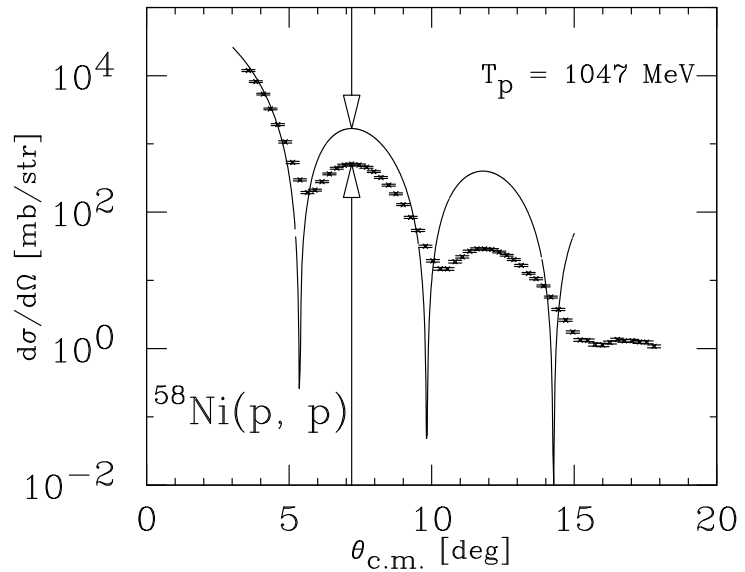


図 2: フラウンホーファー回折公式で求めた陽子 - ^{58}Ni 弾性散乱微分断面積 (入射陽子エネルギーは、1047MeV) [9]。×は実験データを表す。計算値は、矢印で示した第 1 ピーク角度の測定値を再現するように決めている。

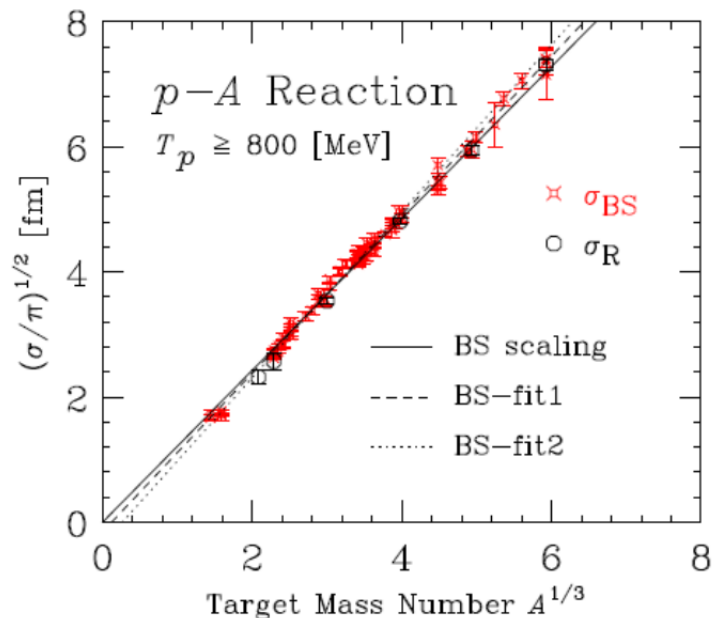


図 3: 有効半径と質量数の比較。フラウンホーファー回折公式で求めた陽子 - 原子核弾性散乱微分断面積 (入射陽子エネルギーは、1047MeV) [4]。○は σ_R 実験データを表す。

気にしないで済む。粗い近似のように思えるが、模型が含む唯一のパラメタ a (くろたま半径) を実験値から適切に決定する (後述) ことで、陽子 - 原子核全反応断面積 (σ_R) などの既存データを系統的に精度よく再現する [4,9,10]。

模型の適用範囲は、原子核に対して陽子の de Broglie 波長が十分に短く吸収が強い、陽子入射エネルギー $T_p \geq 800$ [MeV] の領域である。ただ、波長からくる制約はきつなく、de Broglie 波長が ^{58}Ni のくろたま半径とせいぜい同程度になる $T_p \geq 100$ [MeV] であれば吸収も十分に強く、模型が適用可能であることが後に判明した [4]。

くろたまを仮定しているので核密度分布は矩形となる。簡単のためこの矩形分布をとるとその平均二乗半径は、

$$r_{\text{BS}} = (3/5)^{1/2} a,$$

と表せる。これが原子核物質密度分布平均二乗半径 (r_m) と比べうる量である。

また、くろたま断面積、

$$\sigma_{\text{BS}} = \pi a^2,$$

はくろたまの吸収断面積として定義するので、 σ_R と比較できる量である。

上で導入した量を用いてデータを解析することで便利な関係式を得る。例えば

$T_p \geq 800$ [MeV] のとき：

$$a \cong 1.2135 A^{1/3} \text{ [fm]}, \quad (\text{BS scaling})$$

$$r_{\text{BS}} \cong 0.9400 A^{1/3} \text{ [fm]}, \quad (\text{radius formula})$$

$$r_m \cong r_{\text{BS}} \quad (A > 50)$$

さらに、

$T_p \geq 100$ [MeV] であれば；

$$\sigma_R \cong \sigma_{\text{BS}}. \quad (\text{くろたま経験則 / BS empirical rule})$$

が成り立つ。ここで特筆すべきは、質量数 (A) 全体に渡って原子核の大きさを素直に表現できるのは a であるのを見つけた (BS scaling) ことである (図 3) [4]。

くろたま模型は中性子過剰度の勘案にも対応できている。中性子過剰不安定核反応データと状態方程式の関係の議論に適した手法である [5]。ただ、中性子過剰度がゼロと顕著に異なる軽い核は変形度も強く、対応する試み [11] を行っている。この模型は、励起状態の大きさの議論 [12] にも有効であることも判明した。また、陽子入射反応以外にも、反陽子や他のハドロンを入射した反応でも、くろたま経験則が成り立っていることがわかってきた [4]。さらにくろたま模型の精度の高さを生かし、それまで同一視されてきた相互作用断面積と σ_R の違いを安定核の場合に系統的に明らかにした [13]。

ところでこのくろたま模型、筆者が理研に着任して現在の 2 人の共同研究者と出会えたことで、生まれることとなったものである。よくあることではあるが、3 人での雑談がきっかけである。

当時の私は Glauber 近似を用いた核半径や核密度分布に関わる計算を行っていたのだが、自分の計算力不足からか、行き詰まりを感じていた。そんなことを話していたところ、親松さんが

「じゃあさあ、まずは一番簡単なやり方でやってみたら？」

と、“いつもの調子”でおっしゃった。

「あっ、そうか。その方法があったか！」

“目から鱗が落ちる”とは、まさにこのことだろう。ちょうどその頃、Glauber の有名な review 論文 [14] を読み返していた私は、やけに簡単な式があったのを思い出した。

“どーせ実際には使えないんだろうな”

と思って見ていたその式が Fraunhofer 回折の式で、これがくろたま模型へとつながっていくのである。この後も、親松さんの一言には、大事な局面で助けられている。

核半径推定にも使う陽子 - 原子核弾性散乱微分断面積は、Fraunhofer 回折のパターンを示す。光学でも用いる Fraunhofer 回折の式が含む唯一のパラメタ “ a ” を実験値に基づいて決めよう、というのは、すぐに決まった (図 2)。一方で、問題も生じた。そのパラメタを実験値の 1st dip angle あるいは 1st peak angle どちらを再現するように決めるかということだ。理論的にゼロ点を決めやすい前者を主張する私と実験データが見やすく不定性が少ないことを理由に後者を主張する飯田さん。実験データとの絡みで飯田さんは一歩も引かず、まずは後者を試してみようとなった。

実験データやデータベースの利用経験が多かった私が、せっせとデータ解析を行い、 r_{BS} を r_m と同じ図に載せていった。結果はすぐに明らかになった。どの核に対しても両者が誤差の範囲でぴたりと一致していくのだ。想像を超えたくろたまの精度に、キーボードを叩く手が震えたのを今でも覚えている。貴重な経験である。因みに 1st dip で実験値と合わせた場合、両者は見事にずれた。飯田案の勝利であった。

かくして、くろたま模型の原形が完成した。そして、くろたま兄弟の誕生である (図 4)。



図 4：くろたまブラザーズ。(左から、親松、筆者、飯田。2004 年 2 月ごろ)

3. くろたま断面積公式

くろたま模型で σ_R は πa^2 で書き表せる。このくろたま半径 a のエネルギー依存性を加味することで、 σ_R のエネルギー依存性を表現しようという試みが、くろたま断面積公式である。肝は、それぞれのエネルギーでの a を陽子が原子核を“貫通できる”ぎりぎりの臨界半径と見做すことにある。その際、陽子に対する原子核の“光学的厚み”を導入する。大雑把に言って、原子核の厚みを陽子の核内での平均自由行程でわったものである。

平均自由行程と同様に光学的厚みにも含まれる陽子 - 核子全断面積を通じて、くろたま断面積公式にエネルギー依存性を持ち込んでいる。また、計算の便宜上、公式を導く過程で陽子 - 核子全断面積を 800 [MeV] での値を基準にして、その値からのずれで差分展開する。この差の値の大きさからの寄与が公式の誤差の大きな部分を占め、約 100 [MeV] 以下で顕著となる。このエネルギーを断面積公式の適用限界としている。

詳細は、原著論文 [5,6] をご覧いただきたい。

この枠組みで構築した反応断面積公式（くろたま断面積公式）は、少なくとも安定核の範囲では、入射エネルギーに依存した調整パラメタなしに陽子 - 原子核および原子核 - 原子核全反応断面積測定値を数 % の精度で再現する。この模型の適用範囲は、質量数は 3 以上で重い方は特に制限なし、そして入射エネルギーは核子あたり 100 [MeV] 前後以上の広い領域である。ただし、クーロン分解の寄与が無視できなくなる重い核どうしの反応については、今後の検討が必要となる [15]。

さて、くろたま模型が一段落した頃の私は、くろたま半径は原子核密度分布の表面付近、 $\rho \cong 0.04$ [fm⁻³] 辺りを教えてくれているものと理解し、機会があればそのように発表していた。このこと自体は間違いではないのだが、飯田さんはこの理解では飽き足らなかったようで、ある日、断面積公式論文下書きを親松さんと私に見せつつ、くろたま模型にとっての新しい概念、光学的厚み、を導入することの御利益を説明してくれた。くろたま半径のエネルギー依存性について、きちんと考えたらどうなるか、という話である。2005 年のハワイでの日米合同学会でのことである。

広い質量数範囲のくろたま半径と密度分布の関係を謙虚に眺めていればわかったはずの断面積のエネルギー依存性であるが、当時の私の理解ではそこに至るには不十分であった。くろたま半径の物理的意味にもう一步、思いを馳せるべきであった。光学的厚みの導入は、こうした過程での必要性から為されたものと理解している。

もう一步、踏み込むことの重要性を飯田さんに教えてもらった。これも貴重な経験である。

ちょうどこの頃、仁科センターにポスドクで滞在していた Mathias Lantz さんが、KEK の岩瀬広さんを紹介してくれた。この出会いがくろたまに新たな展開点を与えてくれよ

うとは夢にも思わなかった。私の記憶が正しければ、

RIBF Mini Workshop “One goal, different approaches - how to predict total reaction cross sections”, RIKEN Nishina Center, Wako, Saitama, May 15th, 2009

でのことである。

有り難いことに、岩瀬さんはくろたま論文をご覧になってとても気に入ってくれていた。そして、くろたま断面積公式を是非 PHITS に組み込みたいと言って下さった。心底、驚いた。単に原子核の大きさをきちんと知りたくて始めたくろたま。そこに実用的な活用法を見出していただけたのである。まさに

“こんなに嬉しいことはない・・・。”

この気持ちである。

しかし、ここで壁が。前項でも述べたように、断面積公式の適用範囲は、入射エネルギー 100 [MeV] 前後以上である。ここが問題となった。当時のくろたまコードは、原子核のくろたま描像が破綻するであろう 100 [MeV] 以下の計算を想定していなかった。

「Simulation code がエネルギーが外れて止まるようでは困るんですよ。」

組み込みを主張する岩瀬さんと私に、PHITS 開発者の一人の方が穏やかに、だけどきっぱりとおっしゃった。

“ううむ、なんてこった。”

言われてみればもっともな話ではあるが、想定外の事態である。

4. Hybrid-Kurotama そして kurotama0

2012 年の正月休み、私はくろたまコードの改良に取り組むことになる。そもそも低エネルギー側の適用限界は、くろたま断面積公式で用いている陽子 - 核子全断面積の差分展開（前項）に由来する。しかし、この展開を使わないことは公式の根幹にも関わる。そのため必要なのは、くろたま断面積公式自身の改良ではなく、低エネルギー領域で使える公式を見つけてうまく活用すること、それに尽きると考えた。

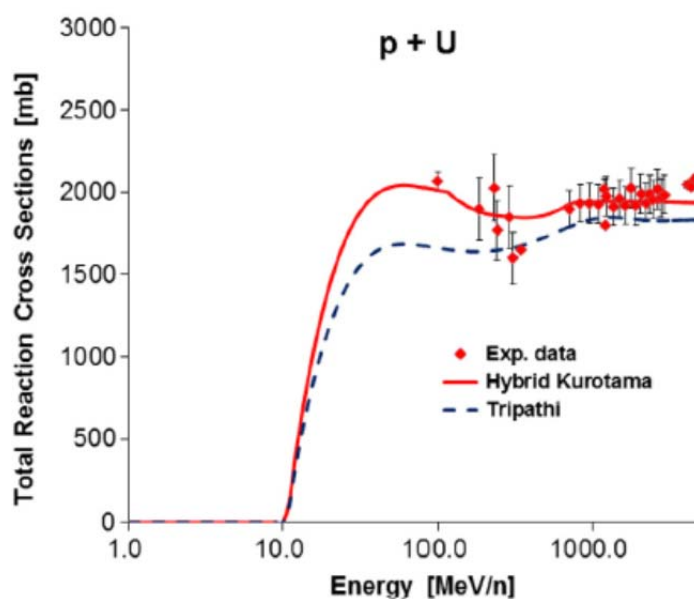


図 5: Hybrid Kurotama model vs. Tripathi formula. それぞれの公式が与える σ_R の値。実線はデータをよく再現する [8]。

使えそうな公式として思い付いたのは、simulation code でよく使われている Tripathi formula (NASA formula)。この公式をくろたま断面積公式が危うくなる低エネルギー側に使い、低エネルギー領域との境で両者を繋げば良いのである。接続点で両者の値は違うわけだが、そこは勿論、くろたま断面積公式の値に合わせるように調整。くろたま単独でもかなり低エネルギー領域に攻め込めそうにも思ったが、用心をして、 $T_p = 115$ [MeV] を接続点とした。

二つをただ繋ぐのも面白くない。それぞれの関数値を接続点で滑らかに cut-off して繋ぐことにした。この cut-off 関数のパラメータを決めていくのが、正月休みの具体的な課題となる。

Cut-off 関数は、Fermi 関数を用いて“滑らかな階段関数”を模している。半値半径と diffuseness / width に当たる量がパラメータとなる。半値半径は接続点なので悩む必要はなく、悩むべきは“diffuseness”である。特に指導原理があるわけでもなく、試行錯誤が続く。

結局、階段関数を模しているので幅は狭い方が良いわけで、幅を 1 [MeV] と置いて計算を始めてみた。まあ、 $T_p = 100$ [MeV] 以上であれば、元々のくろたま断面積公式の精度がすでに良かったので半ば想像できたことではあるのだが、hybrid 化して低エネルギー側まで実験値と比較した図を描いてみて、驚いた。実験値を低エネルギー領域まで高精度で綺麗に再現しているのだ。偶然かも、と思いつつ、核半径の図を描いていた時と同じく、とりつかれたように、標的核を変えて反応の計算をこれでもかと試してみた。とにかく、良く合うのだ。2度目の感激である (図 5)。

こうしてできた新しい“くろたま断面積公式”、Tripathi formula と hybrid 化しているので、“Hybrid Kurotama model” と名付けてみた [7,8]。

冒頭でも述べた通り、“Hybrid Kurotama model” はデータの再現性の高さ (図 5) から、ガン治療計画をたてる際などの simulation でも使われている PHITS に version 3.00 からデフォルトモデルとして採用された。嬉しいことである。また、Hybrid Kurotama model は、PHITS の中では “kurotama0” というコード名になっている。

実は高エネルギー側も 5 [GeV] を超えるとコードが止まるバグがあった。通常の使い方では出てこない高いエネルギーなので、見逃されていたのである。滞在していた Lembit Sihver さんが見つけてくれた。陽子 - 核子全断面積の値を返す subroutine が 5 [GeV] までしか定義していなかったことが原因だったのでエラーが出ないように対処したが、今後、改善の余地がある。

5. これからに向けて

これまでくろたま模型は、私どもに多くのことを教えてくれた。くろたまの声に耳をすましてデータを解析、そしてわかったことをまとめたものがこれまでの論文、と言っても言い過ぎではないだろう。

新たな展開も少しずつ始めたところである。原子核の質量公式の専門家である小浦寛之氏（JAEA）をくろたま徒弟に迎え、変形核反応の全反応断面積の系統的計算を進めている（図6）[11]。また、くろたま断面積公式は他の理論計算と比較しても、実験値の再現性が高い。このことを活用し、実験値が本来示している振る舞いを系統的に調べていきたい。

有り難いことに、くろたま模型は PHITS 以外でも少しずつその有用性を認識していただけるようになってきた。くろたま模型の基礎づけを考察する論文を共著で出版したり[16]、共同研究者を交えた状態方程式の研究会（高知大学で発足した「くじらの会」の流れを汲む会）[17]で中心課題として取り上げられたりするなど（図7）、関心を持っていただけになってきた。

くろたまは、まだまだ沢山のことを教えてくれそうである。

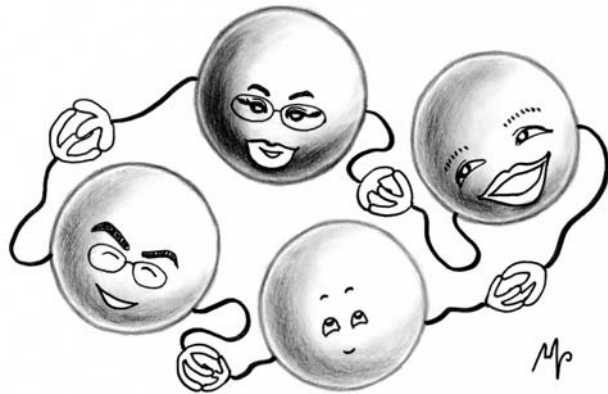


図6：変形核版くろたまロゴ（くろたまブラザーズ＋くろたま徒弟） © 小濱真実子

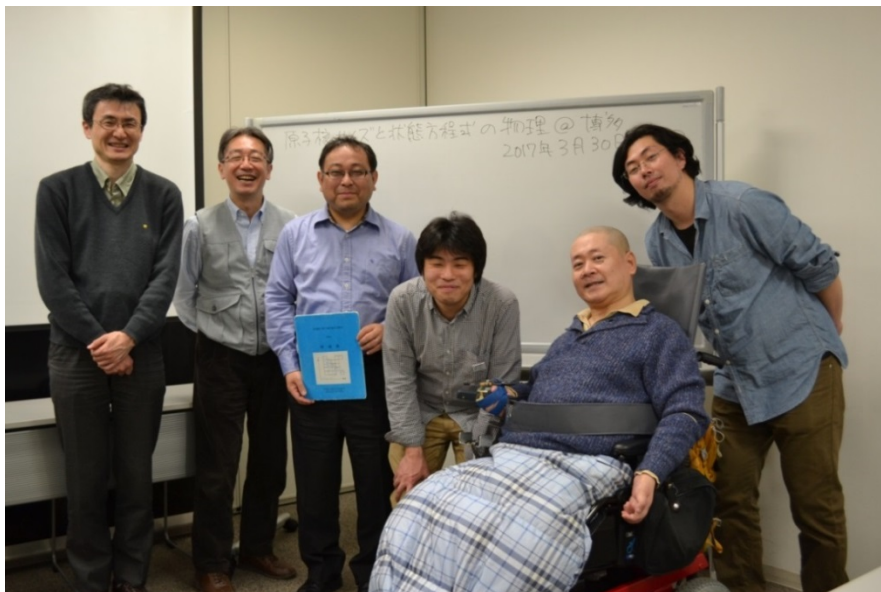


図7：博多での研究会[17]の参加者。左から、飯田（高知大）、親松（愛知淑徳大）、小浦（JAEA）、中里健一郎（九大）、筆者、富樫甫（理研）。所属は当時のもの。

謝辞

私と共にくろたま模型を使った共同研究を進めて下さっている飯田圭氏と親松和浩氏に感謝したい。両氏がいなければ、くろたま模型がここまで使える枠組みにはならなかった。お二人にはいつも助けていただいていたばかりである。この原稿にも目を通して下さり、有益なコメントをいただいた。本研究の立ち上げ時に、恩師である矢崎紘一名誉教授（東京大）とおこなった議論も忘れ難い。とても感謝している。本研究は初期から、データ検索には EXFOR を活用している。当初たぶん今でも、使い方に不慣れな私に、北大 JCRPG の大塚直彦氏（現 IAEA）の助言は、なくてはならないものである。共同研究者である小浦寛之氏（JAEA）は、本誌の編集委員でもあり、この原稿を書く機会を与えてくれた。2018 年の“災害級”猛暑で体調を崩し、なかなか脱稿できない私を辛抱強く待つて下さった。感謝申し上げたい。岩瀬広氏はくろたま模型と実社会とのつながりをつけてくれた大事な方である。彼なくしてくろたま模型の現在までの発展は考えられない。また、kurotama0 コードの改良に当たっては、Lembit Sihver 教授 (TU Wien) にもご協力いただいた。最後に妻の小濱真実子にこの場をお借りして感謝の気持ちを表したい。イラストをはじめ、妻は学会などでの出張に、介助の必要な私に付き添ってくれるなど、普段から多くの手助けをしてくれている。有り難いことと感謝している。

参考文献

- [1] 2017/10/05: PHITS ver.3.00 への更新パッチファイルリリース
<https://phits.jaea.go.jp/indexj.html>
- [2] コード変更履歴「原子核・原子核間の反応断面積モデルのデフォルトを Kurotama モデルに変更しました。」
<https://phits.jaea.go.jp/rirekij.html>
- [3] “くろたま” 描像で眺望した原子核、
小濱洋央、飯田圭、親松和浩、原子核研究、Vol. 49, p.27 (2005).
- [4] Energy and mass-number dependence of hadron-nucleus total reaction cross sections,
A. Kohama, K. Iida, K. Oyamatsu, J. Phys. Soc. Japan, 85, 094201 (2016).
<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.85.094201>
- [5] Formula for proton-nucleus reaction cross section at intermediate energies and its application,
K. Iida, A. Kohama, and K. Oyamatsu, J. Phys. Soc. Japan, 76, 044201 (2007).
<http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.76.044201>
- [6] Supplemental material of Ref. [4].
<https://journals.jps.jp/doi/suppl/10.7566/JPSJ.85.094201>
- [7] Subroutine “kurotama” in PHITS,

- A. Kohama, K. Iida, K. Oyamatsu, H. Iwase, S. Hashimoto, and K. Niita,
RIKEN Accel. Prog. Rep. 2012, Vol. 46, p.55 (2013).
http://www.nishina.riken.jp/researcher/APR/Document/ProgressReport_vol_46.pdf
- [8] Current status of the "Hybrid Kurotama model" for total reaction cross sections
L. Sihver, A. Kohama, K. Iida, K. Oyamatsu, S. Hashimoto, H. Iwase, and K. Niita,
Nucl. Instr. Meth. B 334, p.34 (2014).
<http://dx.doi.org/10.1016/j.nimb.2014.04.021>
- [9] Nuclear radius deduced from proton diffraction by a black nucleus,
A. Kohama, K. Iida, and K. Oyamatsu, Phys. Rev. C 69, 064316 (2004).
<https://dx.doi.org/10.1103/PhysRevC.69.064316>
- [10] Reaction cross section described by a black sphere approximation of nuclei
A. Kohama, K. Iida, and K. Oyamatsu, Phys. Rev. C 72, 024602 (2005).
<https://doi.org/10.1103/PhysRevC.72.024602>
- [11] Deformed nuclei in the black-sphere approximation
A. Kohama, K. Iida, K. Oyamatsu, and H Koura,
RIKEN Accel. Prog. Rep. 2013, Vol. 47, p. 62 (2014).
<http://www.nishina.riken.jp/researcher/APR/APR047/pdf/62.pdf>
- [12] Proton inelastic diffraction by a black nucleus and the size of excited nuclei,
K. Iida, S. Koide, A Kohama, and K. Oyamatsu,
Mod. Phys. Lett. A 27, 1250020 (2012).
http://www.worldscientific.com/doi/ /10.1142/abs_S0217732312500204
- [13] Difference between interaction cross-sections and reaction cross-sections,
A. Kohama, K. Iida, and K. Oyamatsu, Phys. Rev. C 78, 061601(R) (2008).
<https://doi.org/10.1103/PhysRevC.78.061601>
- [14] High Energy Collision Theory,
R. J. Glauber, Lectures in Theoretical Physics, Vol. I, ed. W. E. Brittin and D. G. Dunham
(Interscience, New York, 1959), p. 315.
- [15] Total reaction cross sections between heavy nuclei,
A. Kohama, K. Iida, K. Oyamatsu, H. Iwase, and K. Niita
RIKEN Accel. Prog. Rep. 2010, Vol. 44, p. 47 (2011).
http://www.nishina.riken.jp/researcher/APR/Document/ProgressReport_vol_44.pdf
- [16] Nuclear surface diffuseness revealed in nucleon-nucleus diffraction,
S. Hatakeyama, W. Horiuchi, and A. Kohama, Phys. Rev. C 97, 054607 (2018).
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevC.97.054607>
- [17] A possible approach to nuclear EoS using total reaction cross sections
via Kurotama model, A. Kohama, March 30th, 2017
研究会「原子核のサイズと状態方程式の物理 —この10年とこれから—」
<http://www.artsci.kyushu-u.ac.jp/~nakazato/meeting1703.html>