

量子論的分子動力学による中間エネルギー核反応解析

原子力データセンター

仁井田 浩二

1. はじめに

核物理、特に、原子核-原子核衝突、いわゆる重イオン衝突を用いた核物理において、シミュレーションの手法を用いた核反応解析が、この10年の間に急速に発展してきました。このシミュレーションの手法は、現在、核物理の分野だけでなく、核データなどのより実用的な分野でも、その成果が期待されています。この解説では、核反応の微視的シミュレーションの概説と最近の進展を示します。

2. 核反応モデルとしてのシミュレーション

ここでは、微視的シミュレーションの方法を、従来の核反応理論と比較しながら、歴史的に見てみたいと思います。

従来の核反応モデルは、直接過程と複合核過程という二つの対極的な範疇のもとに発展してきました。弾性・準弾性散乱の記述として、光学模型やボルン近似、複合核反応の理論として、Breit-Wignerの公式や、Hauser-Feschbachの統計理論が提案されてきました。もちろん、それらの中間には、多段階の直接反応があり、複合核過程からみれば、前平衡過程が存在します。それらを記述するために、エキシトン模型や、FKKの理論などが発展してきました。これらのモデルにより、比較的低エネルギーの核反応では、核反応機構の精密な解明と、関与する原子核の状態の克明な理解が得られてきました。しかしながら、加速器の進展にともない、エネルギーが高くなるにつれ、また、加速粒子が、核子、軽イオンから重イオンへと広がるにつれて、従来の核反応理論ではカバーできない反応形態が、全断面積の多くを占めるようになり、反応を時間に沿って動力学的に扱うことが必要となってきました。

反応を時間に沿って動力学的にシミュレーション的に扱うもっとも簡単なモデルは、カスケードモデルです。カスケードモデルでは、全反応を二体の核子-核子衝突、またその非弾性衝突で発生した、核子の励起状態や中間子と核子の衝突の積み重ねとして記述します。いわゆるピリヤードモデルです。中高エネルギーの核データの分野で使われている、HETCやNMTCの輸送コードの中の核反応部分は、基本的にこのカスケードモデルです。ただし、HETCやNMTCでは、核子もしくは中間子入射のみを想定しているので、標的核内のフェルミ運動やパウリ効果を近似的に取り扱っています。しかし、この場合でも平均場のダイナミカルな変化は記述できませんから、原子核-原子核衝突には拡張できませんし、ダイナミカルなクラスターの放出は記述できません。

中間エネルギーの核反応では、二体の核子-核子衝突だけでなく、平均場の効果も重要な働きをします。そこで登場したのが、VUU(Vlasov-Uehling-Uhlenbeck)方程式に基づいたシミュレーションです¹⁾。このVUU方程式は、Vlasov方程式に、パウリ効果の入った Boltzmann タイプの二体衝突項が加わったもので、波動関数を Wigner 変換して得られる位相空間での一体の分布関数に関する半古典的な方程式です。この枠組み自体は、70年代に重イオン反応を記述するものとして既に提出されていましたが、80年代半ばになって、この方程式を Test Particle 法という粒子描像で扱う数値解法が導入されて飛躍的な発展を遂げました。

VUU 法の特徴は、まず原子核の自己束縛状態としての基底状態の性質が古典近似の範囲で正しく記述されます。例えば、核子の束縛エネルギー、核半径などが、同じ相互作用を使った HF(Hartree-Fock)の計算と同等な値を与えます。また、反応の途中の平均場の効果、例えば中間状態での核物質の圧縮エネルギーの効果などが記述できます。これらの話題は、中高エネルギー重イオン物理で盛んに研究されてきました。しかしながら、VUU 方程式は、位相空間での一体の分布関数に関する方程式なので、基本的に一体の理論的枠組みです。従って、一体の観測量しか記述できません。多重核破砕反応で生成されるフラグメントの質量分布などは、多体の観測量なので、VUU では無力です。

この点を克服したのが、QMD(Quantum Molecular Dynamics)の方法です²⁾。QMD 法は、核子を波束で表し、核子間の有効相互作用のもとで Molecular Dynamics を行います。その際、二体の衝突は、VUU と同様にパウリ効果の入った Boltzmann タイプの衝突項で取り扱います。波束で表されていることにより、平均場の効果も取り入れられていて、また、QMD は、N 体の理論的枠組みなので、クラスター生成、多重核破砕反応での質量分布についても記述できます。当初は、数値解法の問題から、基底状態の不安定性、生成クラスターの不安定性の問題がありましたが、現在は克服され、重イオン反応を解析する上で非常にパワフルな手法となっています。次節で具体的に QMD の詳細を紹介します。ざっと、QMD までの進展を見てきましたが、これらシミュレーションによる核反応の解析は、従来の量子力学的取扱いに比べ、荒削りな印象を与えるかも知れませんが、従来の核反応モデルに比較して、シミュレーションが統一的に扱える範囲が、格段に広いということを、強調したいと思います。

3. QMD(Quantum Molecular Dynamics) の方法

QMD 法では、核子をガウス型の波束で次のように表します。

$$\phi_i(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi L)^{3/4}} \exp \left[-\frac{(\vec{r} - \vec{R}_i)}{4L} + \frac{i}{\hbar} \vec{P}_i \cdot \vec{r} \right] \quad (1)$$

ここで、 \vec{R}_i , \vec{P}_i は、核子 i のガウス波束の位置と運動量の中心値です。全系の波動関数は

これらの波束の直積として表します。中心値 \vec{R}_i , \vec{P}_i の時間発展は、時間依存の変分原理から得られるニュートン方程式

$$\dot{\vec{R}}_i = \frac{\partial \langle \Phi | H | \Phi \rangle}{\partial \vec{P}_i} \quad (2)$$

$$\dot{\vec{P}}_i = - \frac{\partial \langle \Phi | H | \Phi \rangle}{\partial \vec{R}_i} \quad (3)$$

と、後述する 2 体の衝突項によって決定されます。ハミルトニアンは

$$H = \sum_i \sqrt{m_i^2 + \vec{P}_i^2} + \sum_{i>j} V(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (4)$$

2 体の有効相互作用としては、原子核の基底状態を再現する、有効相互作用を使う必要があります。ここでは、スキルムタイプの次のようなものを使います。

$$V(\vec{r}_i - \vec{r}_j) = t_0 \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j) + t_3 \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot \rho[(\vec{r}_i - \vec{r}_j)/2] \\ + \text{Coulomb term} + \text{Symmetry term} \quad (5)$$

2 体の衝突項の取扱いは、基本的にカスケードモデルと同じです。2 核子の衝突係数が核子-核子断面積で決まる距離 $\sqrt{\sigma_{NN}/\pi}$ 内に入射するとき、散乱させます。核子-核子断面積、その角分布は実験値を使います。QMD では各時刻での位相空間の分布関数 $f(\vec{r}, \vec{p})$ を計算できますから、核子の終状態のパウリ効果を $(1 - f(\vec{r}, \vec{p}_1))(1 - f(\vec{r}, \vec{p}_2))$ から決定される確率に従って評価します。核子-核子断面積としては、具体的には Cugnon のパラメトリゼーション³⁾ を使い、非弾性チャンネルとして、 Δ , $N^*(1440)$ の生成、またそれらの崩壊、それに伴う π 中間子生成、 π -核子散乱による Δ , $N^*(1440)$ の生成が含まれます⁴⁾。

実際の QMD の計算では、まず、安定な入射核と標的核の基底状態を作り、それを入射エネルギーに応じてブーストして、上で述べた運動方程式に従って時間発展を追います。反応にも依りますが、ダイナミカルな過程を終了した段階で、核子や励起したフラグメントが終状態として出てきます。これらの励起した原子核は、核分裂や蒸発過程を経て安定な原子核だけが生き残りますが、このような統計過程は QMD では追いません。QMD の計算で求められたフラグメントの運動量と励起エネルギーを入力として通常の統計崩壊コードにつなぎます。QMD で記述されるダイナミカル過程とこの統計崩壊過程の接続に関しては、ほとんど曖昧がありません⁵⁾。それは、後者の過程は前者に比べて 2 桁位遅い過程ですし、QMD で作られたフラグメントはダイナミカルな過程の時間スケールでは十分に安定だからです。さて、こうして終状態の観測量を計算するわけですが、微分断面積を実験値と比較するには、このようなイベントを数多く行って統計を上げる必要

があります。例えば次節で示す結果は、50000 イベントの結果です。

4. QMD の結果

これまで、QMD は重イオン反応の解析に適応され大きな成果を上げてきました。特に、重イオン反応での多重核破碎反応（マルチフラグメンテーション）からの放出核種の質量分布に対しては、これを計算できる他の微視的モデルが無いこともあって、重要な情報を与えてきました。しかし、これらの成果は他の論文に譲ることにして、ここでは、核子入射での (p, xn) の断面積に関しての最近の結果を紹介したいと思います。実は、これまでのところ、QMD を核子入射での核データの解析に応用した例は、Peilert et al. ⁶⁾ の論文だけで、他はほとんどありません。しかも文献 ⁶⁾ では、統計崩壊の過程が計算されていません。

図 1-3 は、 (p, xn) を QMD + 統計崩壊 で計算したもので（実線）、標的核は、 ^{56}Fe と ^{12}C です。実験値は、Meier et al. ⁷⁾ と Ishibasi et al. ⁸⁾ です。同じ図に、カスケード + 蒸発コード (NUCLEUS) ⁹⁾ の結果も示してあります（破線）。全エネルギー領域、全角度にわたって、QMD の結果は非常によく実験結果を再現しています。特に、低いエネルギー領域での中性子のスペクトルの再現性の良さは、QMD のダイナミカル過程で放出される核種の励起エネルギーが正しく記述されていることを示しています。NUCLEUS の結果と比較しても、細部を除いて、それと同等もしくは、より精度良く実験を再現しています。通常、NUCLEUS などのコードでは、後方のスペクトルを過小評価する傾向があり、それを解決するために、カスケード過程と統計崩壊過程の中間に、前平衡過程を挿入したりしますが、このふたつの過程は概念的にも時間スケールのにも分離が難しく、その接続には常に大きな曖昧さが残ります。QMD では、カスケード過程と所謂 前平衡過程がダイナミカル過程として統一的に記述されているので、そのような問題はありません。113 MeV 入射の 150° のスペクトルにその差が良く表れています。また、通常のカスケードモデルでは、高エネルギー入射の場合、前方のスペクトルを過大評価する傾向があり、核破碎反応 (Spallation) の寄与などが議論されてきましたが、QMD では、核破碎 (Spallation)、多重核破碎 (Multi-Fragmentation) などの過程も、ダイナミカル過程として統一的に記述されているので、問題ありません。従って、QMD + 統計崩壊のモデルでは、これまで、カスケード、前平衡、核破碎、統計崩壊、など異なった概念を導入して理解が試みられてきた全反応過程を統一的にまた正確に記述することができます。最後に、これら QMD の計算では、絶対値を含めてフィッティングするパラメーターは、ひとつも無いことを強調したいと思います。

5. おわりに

現在、日本原子力研究所、先端基礎研究センターのハドロン輸送グループでは、上に

述べた QMD の方法を更に発展させ、核物理、特に重イオン核物理の基礎的研究を押し進めるとともに、その成果をもとに中高エネルギー核データ、炉物理、加速器工学などの応用分野で必要とされる、輸送コードの作成を行っています。上に示した結果もその成果の一端です。上の結果では、反応からのフラグメントの生成が記述できるという QMD の特徴を十分に反映している例ではありませんが、反応全過程を統一的に、かつ、微視的に記述できるパラメーターフリーのモデルで、既存の核反応モデルを上回る成果が示されていると思います。今後、より系統的な計算と、物質内輸送コードへの積極的な応用を計画していますので、基礎分野だけでなく、応用分野での成果も十分期待できると考えています。

文献

- 1) G.F. Bertsch and S. Das Gupta, *Physics Report* **160** (1988) 189
W. Cassing et al., *Physics Report* **188** (1990) 363
- 2) J. Aichelin, *Physics Report* **202** (1991) 233
- 3) J. Cugnon et al., *Nucl. Phys.* **A352** (1981) 505
- 4) Gy. Wolf et al., *Nucl. Phys.* **A517** (1990) 615
- 5) T. Maruyama et al., *Prog. Theor. Phys.* **98** (1992) 1367
- 6) G. Peilert et al., *Phys. Rev.* **C46** (1992) 1457
- 7) M.M. Meier et al., *LA-11518-MS, LANL* (1989); private communication.
- 8) K. Ishibashi et al., *JAERI-M 94-028* (1994) 66
- 9) T. Nishida et al., *JAERI-M 86-116* (1986)

