

解説 (Ⅲ)

QMD理論の進展

日本原子力研究所先端基礎研究センター

ハドロン輸送研究グループ

丸山 敏毅

1. はじめに

一般に核子当たり数 MeV の低エネルギーから数 GeV の高エネルギーでの原子核反応は、標的核入射核の組み合わせ、反応のエネルギー、また衝突径数によって非常に異なった様相をしている。大ざっぱに言って、核子当たり 10 MeV 以下の低エネルギーでは核融合反応や、核分裂、重イオン同士の弾性散乱や入射エネルギーの散逸を伴う深部非弾性散乱などがよく知られている。核子当たり約 100 MeV 以上では衝突径数に応じて原子核の一部または全部の破碎反応が起こる。この中間的なエネルギー領域では、不完全核融合のように融合反応と破碎反応の過渡的現象や多数の核子の移行を伴う深部非弾性散乱のようになり複雑な現象、核子入射の場合は前平衡の核子放出などが起こる。また反応の時間的流れに注目すると、例えば高エネルギーに特徴的な反応が起こった後に残留核からのフラグメントの蒸発のような低エネルギー現象が起こったりもする。

これまでの原子核の理論的な研究では、それぞれの現象に応じたモデルを用いて実験と理論との比較によってそのモデルの妥当性やパラメータの決定をするというのが一般的であった。例えば低エネルギーの重イオン衝突では軌道がある距離よりも近づけば完全融合し遠ければ融合しないとして融合断面積を求めたり、また高エネルギーの衝突では幾何学的に重なる部分 (participant) と重ならない部分 (spectator) とに分けて考えて、簡単な kinematics から決められるそれぞれの部分の速度と励起エネルギーをもとに統計崩壊の後の最終段階を計算するという解析が行われる。こういった現象論的な研究は、反応機構を理解するのに適しているが、反応機構そのものを仮定しないと成らない事や、より複雑な現象では模型を立てにくいという点で限界がある。

これに対して核反応を微視的シミュレーションにより研究する事が計算機の進歩によって盛んになった。シミュレーションによる研究は、核子-核子の相互

作用或いは平均場ポテンシャルを出発点とし系の時間発展を数値計算により求める。基本的に反応機構の仮定によらずに様々な現象を解析することができる事が大きな利点である。このような微視的シミュレーションには平均場の理論である time-dependent Hartree Fock (TDHF)^[1]、その半古典近似である Vlasov 方程式、それに 2 体衝突項を加えた Vlasov-Uehling-Uhlenbeck (VUU) または Boltzmann-Uehling-Uhlenbeck (BUU) 方程式^[2]、古典粒子の衝突項のみからなる cascade モデル^[3]等が用いられてきた。特に平均場と 2 体衝突項の両方の効果を含んだ VUU 方程式によるシミュレーションは低エネルギーから高エネルギーまで有効な方法として重イオン反応の理論的研究の主流となった。ところが VUU 方程式は基本的に 1 体場の理論であるため、衝突によって生じるフラグメントのように局所的な揺らぎに関連した量を扱うことが難しい。そこでフラグメンテーションを計算するために開発されたのが quantum molecular dynamics (QMD)^[4] をはじめとする分子動力学の手法である。QMD は核子の 1 粒子分布関数を Gauss 波束と仮定し、古典的なニュートン方程式と核子-核子の 2 体衝突によってその多体系の時間発展を記述する。VUU 方程式と同様に平均場の効果と 2 体衝突の効果を含んでおり、広いエネルギー領域で有効である。また核子 1 つ 1 つの運動を追いかける多体論であるため、フラグメントの生成が非常に自然な形で記述できる事が特徴である。ここでは原子核反応を記述する分子動力学の中で最も広く使われる QMD 法について取り上げ、我々のグループで進めている大きく分けて 2 つの研究、即ち QMD を汎用性の高いものにするために相対論的なエネルギー領域にも適用可能にする事と、QMD を低エネルギー領域に用いるための拡張について紹介する。

2. QMD の枠組と特徴

QMD は、Gauss 波束で表された核子多体系の時間発展を数値計算によって求めるが、これにはハミルトン方程式による古典運動とパウリ原理を考慮した確率的な 2 核子衝突の 2 つの部分から成る。

全系の波動関数は核子の 1 粒子波動関数の直積で近似し、反対称化は考えない。

$$\Psi = \prod_i \phi_i(\mathbf{r}_i), \quad (2.1)$$

$$\phi_i(\mathbf{r}_i) = (\nu\pi)^{3/4} \exp \left[-\frac{\nu}{2}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_i)^2 + \frac{i}{\hbar} \mathbf{P}_i \cdot \mathbf{r}_i \right]. \quad (2.2)$$

ここで $\mathbf{R}_i, \mathbf{P}_i$ は波束 i の位置及び運動量の中心値、 ν は波束の拡がりパラメーターで、 $0.25 \sim 0.5 \text{ fm}^{-2}$ 程度の値をとる。運動方程式を導くには時間依存変分原理から出発して、

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L} dt = 0, \quad (2.3)$$

$$\mathcal{L}(\{\mathbf{R}_i, \mathbf{P}_i, \dot{\mathbf{R}}_i, \dot{\mathbf{P}}_i\}) = \langle \Psi | i\hbar \frac{d}{dt} - \hat{H} | \Psi \rangle. \quad (2.4)$$

結局波束の位置および運動量の中心値のパラメータのハミルトン方程式を得る。

$$\dot{\mathbf{R}}_i = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{P}_i}, \quad \dot{\mathbf{P}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{R}_i}. \quad (2.5)$$

$$H = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle. \quad (2.6)$$

ハミルトニアン (の期待値) からは波束の運動量分散項は spurious なので差し引いておく。

$$H = \langle \Psi | \sum_i -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \hat{H}_{\text{int}} | \Psi \rangle \quad (2.7)$$

$$= \sum_i \frac{\mathbf{P}_i^2}{2m} + H_{\text{int}}. \quad (2.8)$$

有効相互作用には色々なものがあるが、我々は Skyrme 力、symmetry エネルギー及び、クーロン力を用いている。

$$H_{\text{int}}(\{\mathbf{R}_{ij}\}) = H_{\text{Skyrme}} + H_{\text{Coulomb}} + H_{\text{Symmetry}}. \quad (2.9)$$

系の時間発展を決めるもうひとつの要素である 2 体衝突項 (2p-2h 励起) は、終状態の Pauli-blocking を考慮した確率的な核子-核子散乱として現象論的に取り入れる。2 核子が核子-核子断面積内に入射すると、まず散乱角を核子-核子の微分断面積に従って確率的に決定し、全エネルギーと全運動量を保存する様に

散乱の終状態を選ぶ。終状態において衝突粒子 1,2 の位相空間の占有率 f'_1, f'_2 を計算し、パウリ排他律による禁止確率

$$P_{\text{block}} = 1 - (1 - f'_1)(1 - f'_2), \quad (2.10)$$

にしたがってその散乱を採用するか取り止めるか決定する。これは VUU 方程式を数値的に解く際に用いる test particle 法における衝突項の取り扱いや、カスケード法の衝突項の取り扱いと同様のものである。

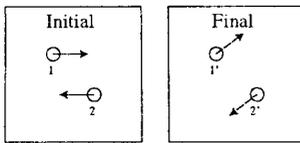


図 1. QMD の 2 体衝突。散乱角を $d\sigma/d\Omega$ に従いサンプリングして、Energy、Momentum を保存する様に終状態を決定する。終状態でのパウリ禁止確率でこの衝突を取り止める。

QMD を用いた核反応のシミュレーションでは、統計精度を良くするために非常に多数の衝突イベント (数千~数万) を計算する。また衝突のイベント事に、QMD 計算で生成されたフラグメントの統計崩壊による最終的なフラグメントを計算する [5]。これは、一般に核反応は、衝突後にダイナミカルな過程が約 100 fm/c のオーダーで起こり、その後その数オーダー長い時間をかけて蒸発のような統計崩壊過程が起こるが、QMD のようなシミュレーションを非常に長時間の後にまで適用することは有限の CPU 時間の範囲では無理であるし、QMD のような古典的な取り扱いが、蒸発過程のように量子力学的な現象を完全に記述するとは期待できないからである。従ってダイナミカルな過程がほぼ終了して (熱平衡に達して) しかもあまり温度が低くなりすぎないうちに統計崩壊コードに接続するのである。

$t = 0$	$t = t_c$	$t = \infty$
Dynamical process	Equilibrated process	
QMD calc.	Stat. Decay calc.	

このようなシミュレーションと統計崩壊計算との接続によってフラグメント質量数分布や放出粒子のエネルギースペクトルをはじめとする物理量の再現性が非常に向上した。

3. QMD の相対論的領域への拡張 (“QMDrel”)

統計崩壊計算と接続した QMD によって核子当たり数 10 MeV から数 100 MeV のエネルギー領域で精度の良いシミュレーションが可能になったが、さらに高いエネルギー領域にも QMD シミュレーションを適用したい。高エネルギーでは平均場があまり重要でなくなり、カスケードのような 2 体衝突のみの記述が良い近似になるのだが、実際の核-核または核子-核の衝突の全過程を考えると、反応に関与しない spectator の部分や、残留核においては平均場の寄与が重要であり、高いエネルギーで放出される粒子以外の観測量まで記述するにはやはり QMD+統計崩壊のような枠組が適している。

QMD を核子当たり約 1 GeV から上のエネルギー領域に適用するには非相対論的な運動方程式では不都合である。これを完全に Lorentz-covariant な枠組にしたのが RQMD(相対論的 QMD)^[6]である。運動方程式の上では低エネルギーから超相対論的エネルギーまで近似なしに解くことができるが、構成粒子数の 3 乗(通常の QMD では 2 乗)に比例した計算時間が必要となる点などが制約となる。そこで完全に Lorentz-covariant ではないが相対論的 kinematics と、距離と運動量の相対論的補正をした相互作用を用いる事によって、近似的に相対論的な枠組にすることができる^[7]。

$$H = \sum_i \frac{\mathbf{P}_i^2}{2m} + H_{\text{int}}$$

$$\Downarrow$$

$$H = \sum_i E_i + H_{\text{int}} \quad (3.1)$$

$$= \sum_i \sqrt{\mathbf{P}_i^2 + m_i^2} + H_{\text{int}} , \quad (3.2)$$

$$H_{\text{int}}(\mathbf{R}_{ij}) \Rightarrow H_{\text{int}}(\tilde{\mathbf{R}}_{ij}) , \quad (3.3)$$

$$\tilde{\mathbf{R}}_{ij}^2 \equiv \mathbf{R}_{ij}^2 + \gamma_{ij}^2 (\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\beta}_{ij})^2 , \quad (3.4)$$

$$\boldsymbol{\beta}_{ij} = \frac{\mathbf{P}_i + \mathbf{P}_j}{E_i + E_j}, \quad \gamma_{ij} = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta_{ij}^2}} . \quad (3.5)$$

この拡張によって基底状態核に相対論的な 6 次元 boost をしても Lorentz 収縮した核が安定性を保ったまま衝突することができる。ここではこの拡張した

QMD(の計算コード)を、QMDrelと呼ぶことにする。QMDrelは非相対論的なエネルギー領域では通常のQMDに一致し、かつ核子当たり数GeVまで適用可能である。但しこれはRQMDのようにLorentz-covariantではないので、例えば重心系で計算するか実験室系で計算するかによって結果に影響をうける。

高いエネルギーでの計算をするためには、核子-核子の弾性衝突を考慮するだけでは不十分で、バリオンの励起状態や、パイオン生成まで取り入れなくてはならない。われわれのQMDrelのコードでは、以下のようなチャンネルを入れている。

$$\begin{aligned}
1. & B_i + B_j \longrightarrow B_i + B_j \text{ (elastic) ,} \\
2. & N + N \longrightarrow N + \Delta , \\
3. & N + \Delta \longrightarrow N + N , \\
4. & N + N \longrightarrow N + N^* , \\
5. & N + N^* \longrightarrow N + N , \\
6. & N + \pi \longrightarrow \Delta , \\
7. & N + \pi \longrightarrow N^* , \\
8. & \Delta + \pi \longrightarrow N^* , \\
9. & \Delta \longrightarrow N + \pi , \\
10. & N^* \longrightarrow N + \pi , \\
11. & N^* \longrightarrow \Delta + \pi ,
\end{aligned} \tag{3.6}$$

$$N(938), \Delta(1232), N^*(1440), \pi(138) .$$

また、核子-核子の弾性散乱断面積には1 GeV以下でCugnonのパラメーターフィット^[8]、1 GeV以上で実験値のフィットを用いている。

$$\sigma = \frac{C_1}{1 + 100(\sqrt{s} - M_i - M_j - C_3)} + C_2 \text{ [mb]} \\
(E_{\text{lab}}(\text{N-N}) < 1 \text{ GeV : Cugnon parameterization) ,} \tag{3.7}$$

$$\sigma = C_4 \left[1 - \frac{2}{\pi} \tan^{-1} (1.5(\sqrt{s} - M_i - M_j - C_3) - 0.8) \right] + 7 \text{ [mb]} \\
(E_{\text{lab}}(\text{N-N}) \geq 1 \text{ GeV : parameterization from exp.) .} \tag{3.8}$$

非弾性の断面積は、VerWest-Arndtのパラメーターフィット^[9]と、パイオン生成断面積の実験値をもとに決めた。

$$\begin{aligned}
p + p &\longrightarrow n + \Delta^{++} : \sigma_{10} + \frac{1}{2}\sigma_{11} , \\
p + p &\longrightarrow p + \Delta^+ : \frac{3}{2}\sigma_{11} , \\
n + p &\longrightarrow p + \Delta^0 : \frac{1}{2}\sigma_{11} + \frac{1}{4}\sigma_{10} , \\
n + p &\longrightarrow n + \Delta^+ : \frac{1}{2}\sigma_{11} + \frac{1}{4}\sigma_{10} , \\
n + n &\longrightarrow p + \Delta^- : \sigma_{10} + \frac{1}{2}\sigma_{11} , \\
n + n &\longrightarrow n + \Delta^0 : \frac{3}{2}\sigma_{11} , \\
p + p &\longrightarrow p + N^{*+} : \frac{3}{2}\sigma_{01} , \\
n + p &\longrightarrow p + N^{*0} : \frac{3}{4}\sigma_{01} , \\
n + p &\longrightarrow n + N^{*+} : \frac{3}{4}\sigma_{01} , \\
n + n &\longrightarrow n + N^{*0} : \frac{3}{2}\sigma_{01} .
\end{aligned} \tag{3.9}$$

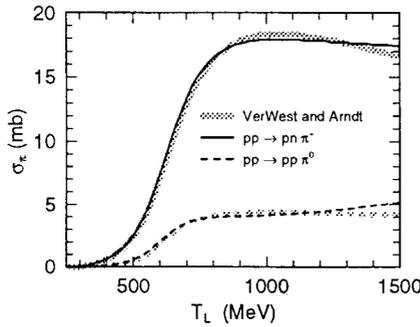


図2. パイオン生成断面積。

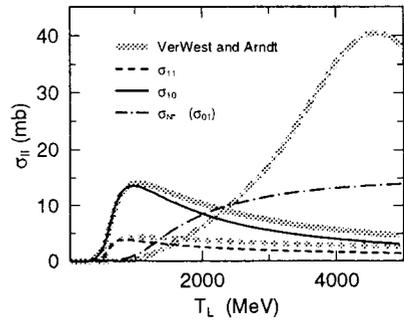


図3. 各非弾性チャンネルの断面積。

次にQMDrelによる核子入射反応の解析結果を紹介する。図4~7は、 ^{27}Al , ^{56}Fe , ^{208}Pb を標的とした113 MeV~3.17 GeV陽子入射反応での、中性子、陽子、パイオンのエネルギースペクトルの実験値^[10~12]との比較の一例である。低い入射エネルギーでの前方高エネルギー側ピーク(準弾性散乱ピーク)は多少のずれがあるものの、約100 MeVから数GeVの入射エネルギー領域ですべての角度すべてのエネルギー領域の断面積を非常に良い精度で再現することができる。複合核からの蒸発過程から、いわゆる前平衡の核子放出に至るまで、基本的にQMD+統計崩壊という1つの枠組でパラメータによる調節無しで記述することができる。

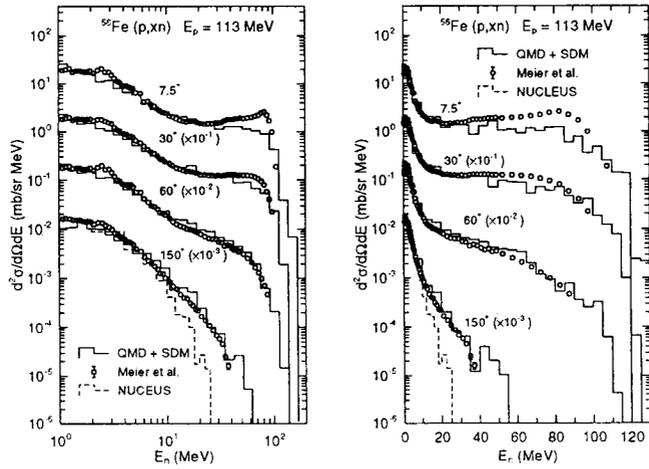


図4. $p(113 \text{ MeV}) + {}^{56}\text{Fe}$ での中性子スペクトル。左は横軸を対数目盛りで表してあり、右図は同じものを線型目盛りでかいたもの。白丸が実験値で実線ヒストグラムがQMDrel+統計崩壊によるもの。150度での破線はNUCLEUSコードによる結果^[13]。

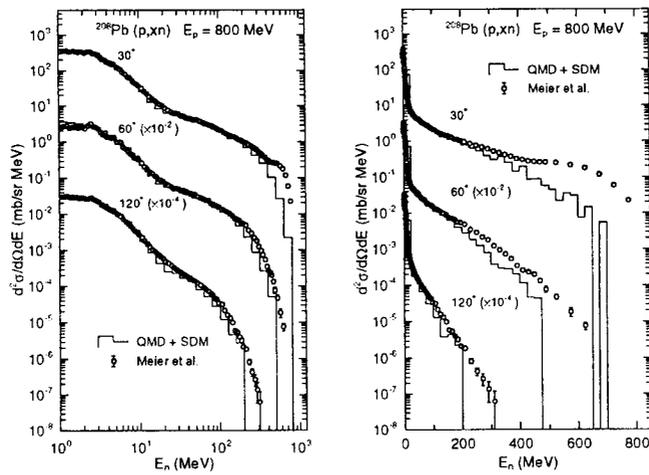


図5. $p(800 \text{ MeV}) + {}^{208}\text{Pb}$ での中性子スペクトル。

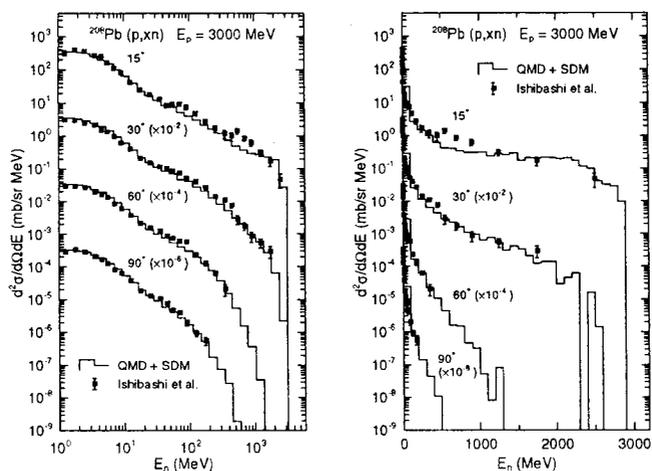


図6. $p(3\text{ GeV}) + {}^{208}\text{Pb}$ での中性子スペクトル。

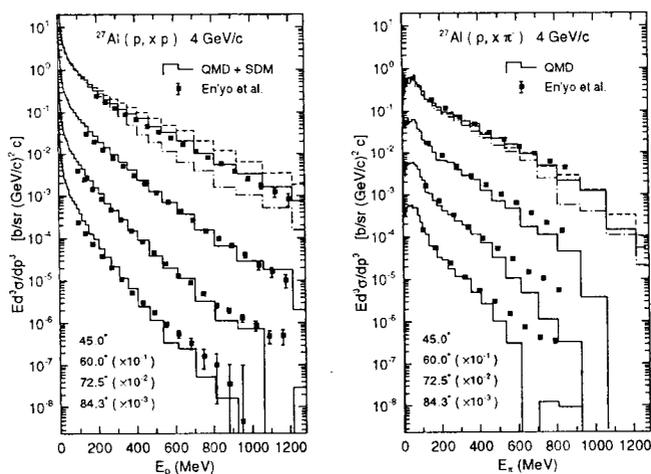


図7. $p(4\text{ GeV}/c = 3.17\text{ GeV}) + {}^{27}\text{Al}$ での陽子(左)、パイオン(右)スペクトル。

ここで問題になるのはQMD計算から統計崩壊計算に接続する時刻に対する依存性である。反応のダイナミカルな部分が終了していて且つ残留核が十分励起している限り、どの時刻で切り替えても結果に影響が無ければ望ましい。図8は切り替え時刻 t_{sw} を50, 100, 150 fm/cの3つについて最終結果を比較したものであるが、 $t_{sw}=100\text{ fm}/c$ と $150\text{ fm}/c$ にはあまり差が無いの対し、50

fm/c では差が表れる。つまりこの反応では、100 fm/c の時刻ですでに反応のダイナミカルな過程が終了しており、 t_{sw} をこれ以降にとれば良いことを示している。

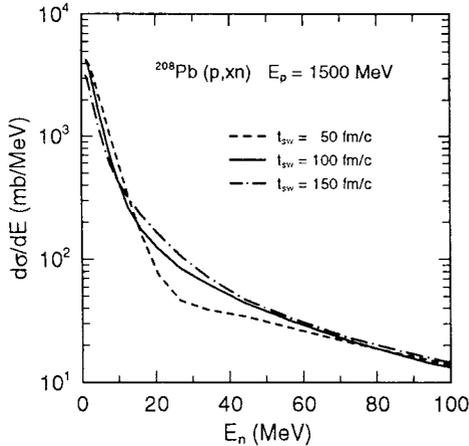


図 8. p (1.5 GeV) + ^{208}Pb での中性子スペクトル。統計崩壊計算への切り替え時刻を 50, 100, 150 fm/c について比較したもの。

4. QMD の低エネルギー領域への拡張 (“EQMD”)

次に QMD を低エネルギー現象に適用する可能性を考える。低エネルギー現象を分子動力学で扱うには、例えば波動関数の反対称化を取り入れた Fermionic molecular dynamics (FMD)^[14] や antisymmetrized molecular dynamics (AMD)^[15] のような精密なモデルがありその有効性が明らかになりつつあるが、これらのモデルは計算時間が系の構成粒子数の 4 乗に比例するため、質量数の非常に大きな系の計算は現在のところ不可能である。従って QMD の枠組 (反対称化をしない) のままで低エネルギーに適用する手法を開発する必要がある。

QMD を用いた核融合反応の解析はすでに試みられているが^[16]、初期条件が不安定なために余計に核子を放出してしまうという不都合が指摘されている。これまで分子動力学の適用例のない超低エネルギーの現象にも将来的に取り組んで行くためには、初期条件の安定性の問題をまず解決しなくてはならない。この QMD 初期条件の不安定性は、それがエネルギー最低状態ではない事が主な原因である。仮に初期条件をエネルギー最低状態まで冷却すると、パウリ原理の破れた状態に陥り束縛が深くなりすぎると、核子を表す波束の運動量分散に由来したエネルギーが固定された spurious なものとなっているために実質的な結合エネルギーが深くなってしまふ為、エネルギー最低状態を初期条件として採用できないのである。

そこで、系のエネルギー最低状態をシミュレーションの初期条件に採用する為、現象論的なパウリポテンシャルを用いてフェルミオン系の性質を近似的に取り入れる^[17]。また、核子波束の幅を時間依存の変数とする^[18]事によって、波束の運動量分散項に由来するエネルギーを他の自由度と移り変わることのできる実質的なものとしてハミルトミアンに加え、系の束縛エネルギーが深くなりすぎるのを防ぐ。この QMD の拡張を EQMD と呼ぶことにする。

まず系の波動関数を Gauss 波束の直積で表す。

$$\Psi = \prod_i \phi_i(\mathbf{r}_i), \quad (4.1)$$

$$\phi_i(\mathbf{r}_i) = \left(\frac{\nu_i + \nu_i^*}{2\pi} \right)^{3/4} \exp \left[-\frac{\nu_i}{2} (\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_i)^2 + \frac{i}{\hbar} \mathbf{P}_i \cdot \mathbf{r}_i \right], \quad (4.2)$$

$$\nu_i = \frac{1}{\lambda_i} + i\delta_i. \quad (4.3)$$

ここで \mathbf{R}_i , \mathbf{P}_i は波束 i の位置及び運動量の中心値、複素数 ν_i は波束の拡がりパラメーターである。ハミルトミアンには通常の QMD の場合と異なり、波束の運動量分散項が含まれる。

$$H = \langle \Psi | \sum_i \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \hat{H}_{\text{int}} \right] | \Psi \rangle \quad (4.4)$$

$$= \sum_i \left[\frac{\mathbf{P}_i^2}{2m} + \frac{3\hbar^2(1 + \lambda_i^2 \delta_i^2)}{4m\lambda_i} \right] + H_{\text{int}}. \quad (4.5)$$

運動方程式は、時間依存変分原理

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L} dt = 0, \quad (4.6)$$

$$\mathcal{L}(\{\mathbf{R}_i, \mathbf{P}_i, \lambda_i, \delta_i, \dot{\mathbf{R}}_i, \dot{\mathbf{P}}_i, \dot{\lambda}_i, \dot{\delta}_i\}) = \langle \Psi | i\hbar \frac{d}{dt} - \hat{H} | \Psi \rangle, \quad (4.7)$$

から求められ、波束の中心座標 \mathbf{R}_i , \mathbf{P}_i に対するニュートン方程式と、波束の幅

の実数部と虚数部に対するニュートン方程式が得られる。

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{R}}_i &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{P}_i}, & \dot{\mathbf{P}}_i &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{R}_i}, \\ \frac{3\hbar}{4}\dot{\lambda}_i &= -\frac{\partial H}{\partial \delta_i}, & \frac{3\hbar}{4}\dot{\delta}_i &= \frac{\partial H}{\partial \lambda_i}.\end{aligned}\quad (4.8)$$

相互作用ハミルトニアンには、通常のQMDで用いているものと、フェルミオン系の性質(位相空間で同種粒子と重ならない)を現象論的に取り入れるためのいわゆるパウリポテンシャルを用いる。

$$H_{\text{int}} = H_{\text{Skyrme}} + H_{\text{Yukawa}} + H_{\text{Coul.}} + H_{\text{Symm.}} + H_{\text{Pauli}}, \quad (4.9)$$

$$H_{\text{Pauli}} = \frac{c_P}{2} \sum_i (f_i - f_0)^2 \theta(f_i - f_0), \quad (4.10)$$

$$f_i \equiv \sum_j \delta(S_i, S_j) \delta(T_i, T_j) |\langle \phi_i | \phi_j \rangle|^2. \quad (4.11)$$

f_i は同種粒子とのoverlap(自分自身を含む)で、 $f_0 \approx 1$ とする。これは同種粒子とのoverlapが数居値 f_0 を越えると斥力によりそれを抑えるものである。パウリポテンシャルの強度、数居値パラメータを適当にとり、その他の相互作用のパラメータには良く使われるものを用いる。

核反応のシミュレーションを行う為には、初期条件として採用するエネルギー最低状態が現実的な原子核の性質をある程度再現していなくてはならない。初期条件の基底状態核は、系のエネルギー最低状態を次の減衰方程式を解くことにより求める。

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{R}}_i &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{P}_i} + \mu_{\mathbf{R}} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{R}_i}, & \dot{\mathbf{P}}_i &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{R}_i} + \mu_{\mathbf{P}} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{P}_i}, \\ \frac{3\hbar}{4}\dot{\lambda}_i &= -\frac{\partial H}{\partial \delta_i} + \mu_{\lambda} \frac{\partial H}{\partial \lambda_i}, & \frac{3\hbar}{4}\dot{\delta}_i &= \frac{\partial H}{\partial \lambda_i} + \mu_{\delta} \frac{\partial H}{\partial \delta_i}.\end{aligned}\quad (4.12)$$

ここで $\mu_{\mathbf{R}}$, $\mu_{\mathbf{P}}$, μ_{λ} , μ_{δ} は減衰係数で、負の値であれば良い。我々のモデルによる基底状態原子核の結合エネルギーは軽い系で多少のずれがあるものの軽イオンから質量数200程度の重イオンまでをかなりよく再現する。

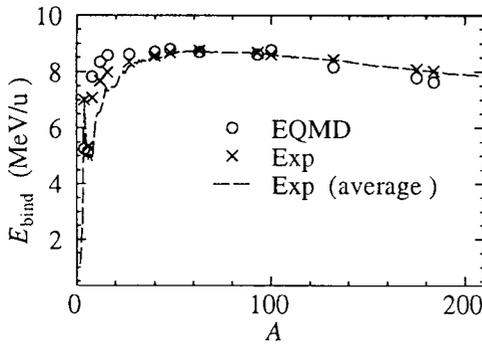


図9. 拡張したQMDによる基底状態結合エネルギーの質量数依存性。白丸がQMD、バツ印が対応する核の実験値、波線が安定な同重体についての平均値。

また原子核の密度分布については、図10のように ^{12}C の様な軽い核に特有の α クラスター構造を再現することができるし、重い系については平均的な密度の値や表面の厚さも適当な値である(図11上)。波束の幅は核子毎に自動的に決まるのだが、中心付近の波束ほど空間的に広がっているが表面付近では比較的狭い幅になって表面の厚さが丁度良い値になっていることが図11下からわかる。

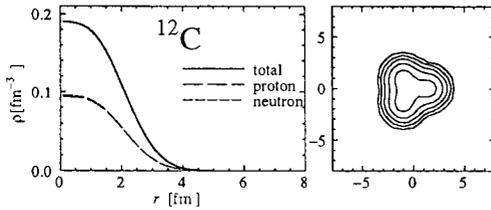


図10. ^{12}C の密度分布。左が中心からの距離 r に対する値で、右が或る平面に射影した密度等高線。

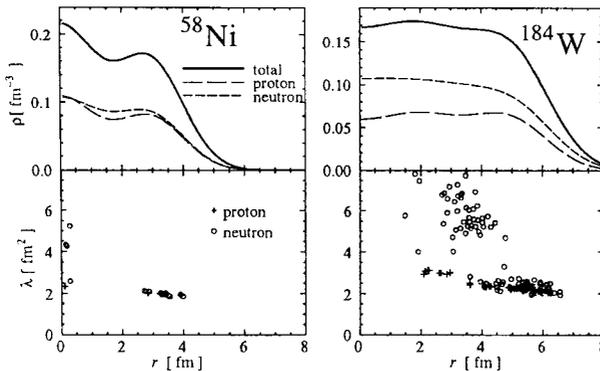


図11. ^{58}Ni と ^{184}W の密度分布(上)、波束の幅パラメータの実部の値(下)。横軸はともに中心からの距離 r 。

次に低エネルギー領域に拡張されたQMDを実際の核反応に適用してみる。衝突の計算では用意した初期条件をboostし、運動方程式を解きながら衝突項の計算も通常のQMDと同様に行う。ただし、パウリポテンシャルの運動量依存性によって、散乱で運動量の方向が変わただけでエネルギーが保存しないため、2核子の相対運動量でエネルギーが保存をする値をいちいちiterationで探す必要がある。

低エネルギーの反応ではないが、 $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}(29\text{ MeV/u})$ での生成フラグメント質量数分布をいくつかの計算と比較したのが図 12 である。まず通常の QMD(QMDstd) と波動関数の反対称化をした AMD の結果^[15]を比較してみる。ちなみに AMD の結果は特に軽いフラグメントについては実験と非常に良く一致している。実線が最終結果で破線が統計崩壊の前の分布である。統計崩壊の後の最終結果は似た形をしているが、統計崩壊の前の段階では質量数 A_f が 4 と 8 の所に AMD ではピークがあるのに対し QMDstd ではそれがまったく見られない。これは初期条件である ^{12}C が、 $3\text{-}\alpha$ のクラスター構造をしていることを AMD では再現しているが QMDstd では記述できていない事が主な原因と思われる。次に拡張した QMD(EQMD) の結果を見ると、AMD ほどではないが A_f が 4 と 8 のところにピークが見られ、QMDstd と AMD の中間的な分布をしている。

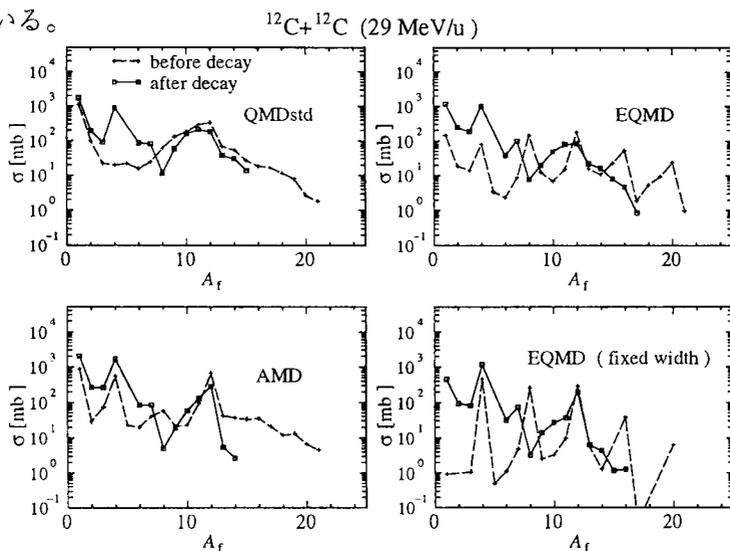


図 12. $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}(29\text{ MeV/u})$ での生成フラグメント質量数分布。破線が統計崩壊の前の分布で実線が統計崩壊の後の最終結果である。

次に波束の幅を時間依存の物理的変数とした効果を調べる。図 12 の右下は初期条件には EQMD の枠組で作成したものをを用いて、系の時間発展の計算では波束の幅 λ_i, δ_i を固定したまま $\mathbf{R}_i, \mathbf{P}_i$ の運動方程式だけを解いたものである。ただし初期条件が EQMD のものであったり、パウリポテンシャルを用いている点で QMDstd の計算とは異なる。この波束の幅を固定した計算では $A_f = 4N$ のフラグメントだけに分布のピークが集中しており、 α クラスターの分解するような核子放出がほとんど起こらない。full-EQMD で核子放出が起こるのは、核子が親フラグメントから放出される際に、波束の運動量分散によるエネルギーを解放することができるためである。

更に低いエネルギーの重い核同士の衝突の計算が拡張した QMD の目的であり特徴になり得る点であるが、現在のところ実験との比較のような定量的な計算には至っていない。そこで波束幅を可変にした効果を見るために、 $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$ (29 MeV/u) 計算のときと同様に、波束幅を固定した計算と通常の EQMD 計算を $^{63}\text{Cu}+^{63}\text{Cu}$ (5 MeV/u) に対して行った例を図 13 に示す。EQMD 計算では融合反応が起こっているのに対し、波束幅を初期値に固定した拘束のある計算では、系が融合せずに散乱している。低エネルギーの計算をする場合、入射エネルギーを内部励起に散逸するためには、幅一定の Gauss 波束の重ね合わせで系を表現した枠組では自由度が不足しており、今回の拡張は模型空間の拡張という点で何らかの改善となっているものと期待している。ただし波束の幅を可変にするだけでどの程度十分であるのかははっきりしない。

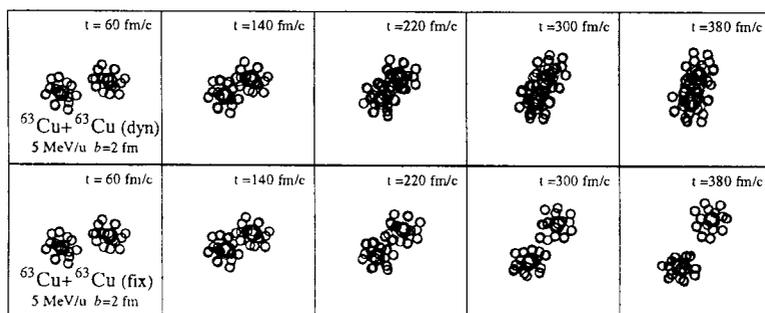


図 13. $^{63}\text{Cu}+^{63}\text{Cu}$ (5 MeV/u) 衝突の例。上は $8N$ 次元の通常の EQMD を解いたもので、下は核子の波束の幅を固定して $6N$ 次元の運動方程式を解いた場合。

5. まとめ

ここでは核反応の微視的シミュレーションである QMD 法と、われわれが取り組んでいる QMD の拡張について紹介した。QMD は統計崩壊計算と接続することで、複雑な核反応を広いエネルギー領域にわたって精度よく記述することができる。また少ないパラメータで反応機構に対する仮定を殆ど用いずに統一的な記述が可能となる点が大きな特徴である。この QMD を相対論的領域に適用するために相互作用と kinematics を近似的に相対論的な表式に拡張し、バリオンの励起状態やそれらのパイオン崩壊のチャンネルを取り入れることで核子当たり数 GeV のエネルギーまで用いることを可能にした。これを核子入射反応に適用し、放出粒子のエネルギースペクトルを高い精度で再現することができた。現在、ポテンシャル中での核子-核子衝突とそれに引き続く蒸発過程という描像で核子入射反応の理解を進めている。また低エネルギー領域に QMD を適用するために、波束幅を時間依存の物理変数とし、現象論的なパウリポテンシャルを用

い、エネルギー最低状態を初期条件の基底状態核に採用する拡張を行った。この枠組では、基底状態の結合エネルギーや密度分布をかなり良く再現する事ができる。特に軽い核では α クラスター構造のように、これまで反対称化を取り入れた精密な模型でないとも再現できなかった構造まで記述することができるようになった。軽い核同士の反応の解析を行ってみると、 α クラスターの放出のような、系の反対称化をした計算に特徴的な現象をある程度記述していることが分かった。現在、低エネルギーの重い系の反応にどの程度適用可能かを検討している。

ここで紹介した結果は、原研・先端基礎研究センター・ハドロン輸送研究グループでの共同研究に基づいている。また本研究では、グループ所有のワークステーション、原研の並列ベクター計算機のほかに理化学研究所の並列ベクター計算機を使用させていただいた。

References

1. 例えば J. W. Negele, Rev. Mod. Phys. **54** (1982) 913.
2. 例えば G. F. Bertsch and S. Das Gupta, Phys. Rep. **160** (1988) 189. 及びその参考文献
3. 例えば Y. Yariv and Z. Fraenkel, Phys. Rev. C **20** (1979) 2227.
4. 例えば J. Aichelin, Phys. Rep. **202** (1991) 233. 及びその参照論文
5. T. Maruyama, A. Ono, A. Ohnishi and H. Horiuchi, Prog. Theor. Phys. **87** (1992) 1367.
6. 例えば H. Sorge, H. Stöcker, and W. Greiner, Ann. of Phys. **192** (1989) 266; T. Maruyama, S.W. Huang, N. Ohtsuka, G.Q. Li, and A. Faessler, Nucl. Phys. **A534** (1991) 720.
7. K. Niita, S. Chiba, T. Maruyama, H. Takada, T. Fukahori, Y. Nakahara and A. Iwamoto, submitted to Phys. Rev. C.
8. J. Cugnon, Phys. Rev. C **22** (1980) 1885.
9. B. J. VerWest and R. A. Arndt, Phys. Rev. C **25** (1982) 1979.
10. W. B. Amian, B. C. Byrd, C. A. Goulding, M. M. Meier, G. L. Morgan, C. E. Moss and D. A. Clark, Nucl. Sci. and Eng. **112** (1992) 78. 及び私信
11. K. Ishibashi et al., to be published in J. Nucl. Sci. Technol. 及び私信
12. H. En'yo, S. Sasaki, T. Nagae, K. Tokushuku, M. Sano, M. Sekimoto, J. Chiba, K. Ichimura, T. Mori, T. Katsumi, H. Yokota, R. Chiba and K. Nakai, Phys. Lett. B **159** (1985) 1.
13. T. Nishida et al., JAERI-M 86-116 (1986). 及び私信
14. H. Feldmeier, Nucl. Phys. **A515** (1990) 147.
15. A. Ono, H. Horiuchi, T. Maruyama and A. Ohnishi, Prog. Theor. Phys. **87** (1992) 1185.
16. T. Maruyama, A. Ohnishi and H. Horiuchi, Phys. Rev. **C42** (1990) 386.
17. A. Ohnishi, T. Maruyama and H. Horiuchi, Prog. Theor. Phys. **87** (1992) 417. と類似した方法
18. P. Valta, J. Konopka, A. Bohnet, J. Jaenicke, S. Huber, C. Hartnack, G. Peilert, L. W. Neise, J. Aichelin, H. Stöcker and W. Greiner, Nucl. Phys. **A538** (1992) 417c.