

生成座標法に基づく核分裂の微視的記述

鵜沢 浩太郎

京都大学 大学院理学研究科

1. はじめに

核分裂は原子核が大きく変形して分裂する現象である。分裂時に発生する大きなエネルギーは原子力エネルギーとして利用されているほか、分裂時に生成される不安定な原子核は RI ビームを生成するための主要な方法の一つである。以上のような工学的な重要性に加え、r 過程と呼ばれる天体中での元素合成過程では、中性子過剰なアクチノイド原子核の核分裂特性が元素合成の収率に大きく影響することが知られている。これらの目的のためにも核分裂現象の正確な理解と精度の良い理論予測が必要とされている。

2. 核分裂の微視的定式化

原子核は陽子と中性子の複合体であるため、核分裂現象を記述するためには陽子と中性子の多体系に対するシュレディンガー方程式を解く必要がある。しかし、核分裂においては

- ① 原子核の形状が大きく変化するため摂動論や線形応答理論を適用できない
- ② 集団運動と一粒子運動の間に発生する複雑な相互作用の取り扱いが困難
- ③ 原子核の変形を記述する核構造理論の結果を核分裂断面積にコヒーレントに接続する方法が確立していない

という課題があった。これらの問題を解決するため、本研究では生成座標法+非平衡グリーン関数法に基づく核分裂モデルを開発した[1]。非平衡グリーン関数法はナノデバイスにおける電流やコンダクタンスを微視的に計算するために使われる手法である。文献[2]では非平衡グリーン関数法の核分裂反応への適用可能性が指摘された。しかし、現実の核分裂

では原子核が高エネルギーに励起するため、自由度が膨大になり、数値計算が不可能であると考えられていた。本研究では以下で述べる定式化上の工夫と数値計算手法の改良によって、235 ウランの核分裂断面積の微視的計算を初めて実現した。

3. 非平衡グリーン関数法の計算ステップ

3.1 基底の生成とハミルトニアン行列の計算

核分裂の過程では原子核の変形と内部励起の効果を取り入れることが重要となる。そのためハートリーフォック波動関数 $|HF(Q, E)\rangle$ を用いて多体の波動関数 $|\Psi\rangle$ を以下のように用意する：

$$|\Psi\rangle = \int_{Q=14b}^{Q=83b} dQ \int_0^{E_{max}-V(Q)} dE f(Q, E) |HF(Q, E)\rangle \dots (1)$$

図1は式(1)で定められた模型空間を表したものであり、変形度 Q ごとに、 E_{max} までの励起状態を基底として採用している。

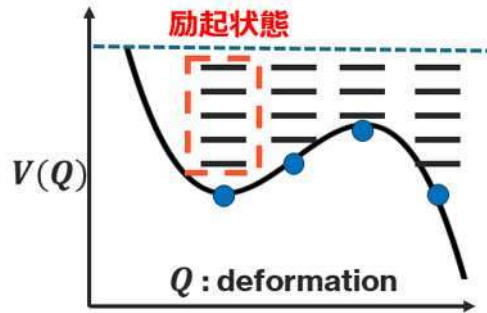


図1：模型空間の模式図

以上の定式化により、変形と励起の効果を整合的に取り入れている。

続いて、生成座標法[3]の手続きに従い、基底間の重なり行列 N とハミルトニアン行列 H を計算する：

$$N_{ij} = \langle Q, E | Q' E' \rangle \dots (3)$$

$$H_{ij} = \langle Q, E | H | Q' E' \rangle \dots (4)$$

3.2 グリーン関数と核分裂断面積

非平衡グリーン関数法では行列 N, H を用いてグリーン関数

$$G(E) = (EN - H)^{-1} \dots (5)$$

を計算する。ここで、 E は励起エネルギーを表す外部パラメータであり、 -1 は逆行列計算を表す。グリーン関数を用いて、核分裂断面積は

$$\sigma_{n,f}(E_n) = \text{Tr}[G(E_n)\Gamma_n G^\dagger(E_n)\Gamma_{fis}] \dots (6)$$

と導かれる。ここで Γ_n と Γ_{fis} は H に含まれる崩壊幅行列である。核分裂断面積 $\sigma_{n,f}(E_n)$ は E_n の運動エネルギーをもつ中性子が入射した際に核分裂が起こる確率に相当する。なお、本研究で使用するハミルトニアン行列はランダム項を含むため、 $\sigma_{n,f}(E_n)$ を繰り返し計算し、アンサンブル平均をとる必要がある。

3.3 E_{max} の決定と核分裂断面積の収束性

式(1)で導入された E_{max} はエネルギーのカットオフを表し、 E_{max} が大きいほど計算結果は正確になる。しかし、ハミルトニアン行列の次元は E_{max} の大きさに対し指数関数的に増加する。そのため、適切な値の E_{max} を決定する必要がある。図2は E_{max} と行列次元の関係をプロットしたものであり、核分裂における典型的なエネルギーでは $O(10^5)$ となる。

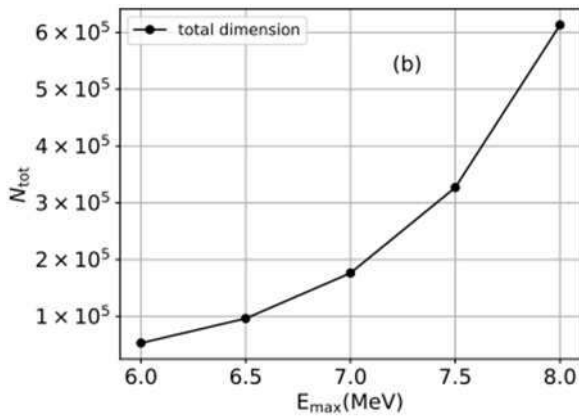


図2: E_{max} と行列次元の関係

このことから、 $O(10^5)$ 次元の線型方程式を繰り返し解き、サンプル数と E_{max} 両方に対し収束性を確認する必要がある。以上のような大規模な

数値計算は通常のスーパーコンピュータを使用しても困難である。

そのため、SQUIDのGPUノードの高い計算能力に着目し、以下の計算上の工夫を行った。

- ① 取り扱うハミルトニアン行列 H は巨大次元かつ疎行列であるため、GPUのメモリ上に直接載せることができる
- ② 式(2)の線型方程式のソルバーとして `cupyx.scipy.sparse.linalg.lsmr` を使用した。本ソルバーはクリロフ部分空間法的一种であるLSMR法のGPU実装であり、本研究で扱う行列に対し高いパフォーマンスを示す
- ③ SQUIDのGPUノードには8台のNVIDIA A100 GPUが搭載されているため、それらをMPI並列で使用することで、異なる乱数で得られる8サンプルを同時に計算した。

以上により現実的な時間内での核分裂断面積の計算を実現した。計算結果の詳細について次章で説明する。

4. 計算結果

図3に E_{max} を変化させ計算した $\sigma_{n,f}(E_n = 10\text{keV})$ を示す。

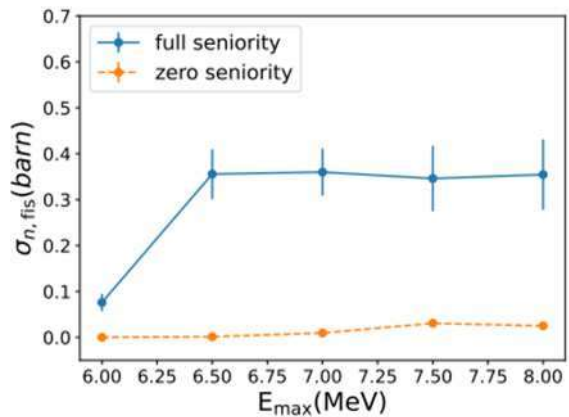


図3: E_{max} と $\sigma_{n,f}$ の関係

統計平均に使用したサンプル数は80である。青線が主要な計算結果であり、橙線は先行研究で使用されたzero-seniority近似を用いた場合であ

る。近似なしの計算結果（full seniority）と大きな差異があることがわかる。

この図から、 $7\text{MeV} \leq E_{\text{max}}$ の領域で断面積の値が収束しており、用いた模型空間が十分であることがわかる。 $E_{\text{max}} = 8\text{MeV}$ での断面積の値を JENDL-5[4]の評価値とともにプロットした結果が図4である。図から、計算結果と評価値のずれは1桁であることが確認できる。

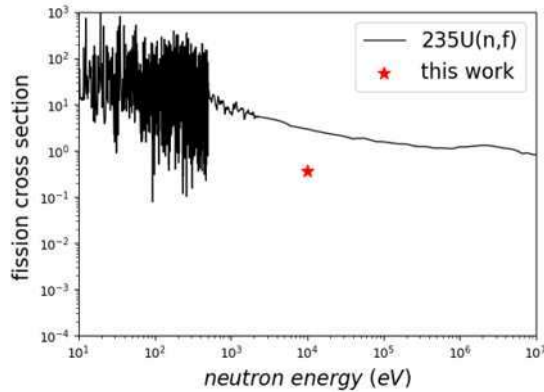


図4：本手法により得られた $\sigma_{n,f}$ と JENDL-5 の評価値との比較

5. おわりに

本研究課題では、核分裂断面積を微視的に導出するために、生成座標法＋非平衡グリーン関数法に基づく核分裂模型の定式化を行った。本手法ではグリーン関数を得るための逆行列計算に多大な計算コストが必要となるが、SQUID の GPU ノードに搭載されている NVIDIA A100 GPU を 8 台 MPI 並列で使用し LSMR 法で線型方程式を解くことで、核分裂断面積の計算を現実的な時間内で実現した。断面積の値は $7\text{MeV} \leq E_{\text{max}}$ の領域で収束することが確認でき、評価値との誤差は1桁であった。以上の結果は微視的なレベルで核分裂断面積を計算可能であることを示した初めての研究結果であり、今後の微視的核分裂理論の発展において重要な視点を与えられとされる。

参考文献

- (1) K. Uzawa and K. Hagino, arXiv:2504.01572

(accepted in Phys. Rev. C).

- (2) Y. Alhassid, G. F. Bertsch, and P. Fanto, Annals of Physics 424, 168381 (2021).
- (3) P. Ring and P. Schuck, The Nuclear Many-Body Problem (Springer-Verlag, Berlin, 2000).
- (4) O. Iwamoto et al., Nucl. Sci. Technol., 60(1), 1-60 (2023).