核変換による高レベル放射性廃棄物の大幅な低減・資源化
(5-5) 密度汎関数計算による核構造データ

Reduction and Resource Recycling of High-level Radioactive Wastes through Nuclear Transmutation
(5-5) Nuclear structure data with density functional calculations

*中務 孝[1,2]，江幡修一郎[3]、鷲山公平[4]
[1]筑波大、[2]理研仁科センター、[3]東工大、[4]九大

これまで ImPACT 藤田プログラムで進められてきた LLFP 安定核種化・短寿命化研究の基礎として、これら LLFP とその周辺核の構造を理解することは重要である。理論的・実験的に、LLFP の多くは原子核の形が大きく揺らいだ状態にあると予想されるため、形の量子ゆらぎを取り入れるため集団模型を採用し、原子核密度汎関数理論に基づいて模型パラメータを微視的に計算した。これらは大規模な数値計算を必要とするため、限られた核種においてのみ実行した。しかしながら、核変換シミュレーションでは、LLFP 以外の核種に対する反応断面積も重要となるであろう。そこで、様々な核種に対する基本的な性質を求めるため、形の量子ゆらぎを無視した近似のもと、密度汎関数理論に基づく計算から核構造データを整備した。さらに、これをウェブ上 (InPACS) に公開し、専門家のニーズに答えるとともに、一般向けの解説も掲載した。

キーワード：ImPACT，密度汎関数理論，計算核データ，InPACS

1. 目的

原子核密度汎関数理論を用いた系統的計算[1]から、LLFP 核種の特徴の一つとして、原子核形状が非常に不安定な領域、すなわち球形と変形の境目に多く存在することがわかった。このような LLFP の特異な性質は、核図表の広い領域に関する計算を行うことでより鮮明に理解できる。そこで今回は、このような系統的な計算を実施し、理論計算核構造データを整備する。特に基底状態の性質を中心に整備するが、将来的には励起状態まで拡張したデータを整備したいと考えている。

2. 方法および結果

原子核密度汎関数理論では、広い質量領域の原子核を普遍的エネルギー密度汎関数によって記述することが可能であり、実験データの希少な原子核構造・核反応の計算に用いられている。本研究では、３次元座標空間ハートレー・フォック＋BCS 法に基づく基底状態の性質、および１次元動径座標表示のハートレー・フォック・ボゴリューボフ法による密度分布などを系統的に計算した。この結果を整備し、以下のウェブサイト InPACS に公開した（URL: http://wwwnucl.ph.tsukuba.ac.jp/InPACS/）。このサイトにおいて、原子核それぞれの形状を視覚的に理解できるようにするとともに、専門家向けの核構造データのダウンロード、一般向けの原子核・核変換に関する解説などを整備した。今回はこれらの成果について報告する。

3. 付記

本研究は、総合科学技術・イノベーション会議が主導する革新的研究開発推進プログラム（ImPACT）の一環として実施したものです。

参考文献

[1] S. Ebata and T. Nakatsukasa, Phys. Scr. 92, 064005 (2017).

*Takashi Nakatsukasa[1,2], Shuichiro Ebata[3], Kohei Washiyama[4]
[1]Univ. of Tsukuba, [2]RIKEN Nishina Center, [3]Tokyo Inst. Tech., [4]Kyushu Univ.