# 統計理論備忘録, II 光学模型とHauser-Feshbach統計理論

ロスアラモス国立研究所 / 東京工業大学 河野 俊彦 kawano@lanl.gov

# 1 はじめに

以前「統計理論備忘録,複合核反応とランダム行列の交差点」と題して Hauser-Feshbach 統計理論 [1] 並びに幅の揺らぎの補正をランダム行列に関連付ける形で紹介した [2]. で は実際にどのように核反応断面積が光学模型と Hauser-Feshbach 理論を用いて計算され, 核データの評価に利用されているのかを,もう少し具体的に紹介したいと思う.前回同 様,ここで考えるのは主に高速中性子が中重核へ入射する反応であり,原子核固有の性 質である個々の共鳴が見えるような反応は取り扱わず,そのエネルギー平均が計算され る.Figure 1 は<sup>238</sup>U の共鳴領域での全断面積で,共鳴構造を持つ線が実際に観測される 全断面積,赤い線はそれを幅 500 keV の Lorentz 曲線で平均したもの,黒い線は実際に光 学模型で計算したものである.光学模型が平均断面積をうまく再現しているのが分かる.

このような原子核反応過程は、その時間スケールによって2つに分けて考えることができる。Fig. 2のように、中性子が標的核へ入射する早い過程と、入射中性子と標的核が複合核を形成し、それが崩壊する遅い過程である。それぞれの過程が起こる確率(断面積)は、光学模型と統計崩壊模型で記述される。さらに進めてこの統計崩壊過程も光学模型で得られる粒子透過係数 *T<sub>c</sub>* で記述するのが Hauser-Feshbach 理論である。入射チャンネル *a* から複合核が形成され、それが粒子放出チャンネルを *b* へ 崩壊する断面積は次式で与えられる。

$$\sigma_{ab} = \frac{\pi}{k^2} \frac{T_a T_b}{\sum_c T_c} \tag{1}$$

分母は、可能な全てのチャンネルについての和をとる. k は入射中性子の波数であり、入 射中性子の重心系でのエネルギー  $E_n$  を用いて  $k = \sqrt{2E_n\mu}/\hbar$  と計算される.  $\mu$  は換算 質量で、中性子の質量 m と標的核の質量 M を用いて  $\mu = mM/(m+M)$  で与えられる. ちなみに  $E_n$  を MeV の単位で取ったとき、 $k \simeq 0.2\sqrt{E_n}$  [/fm] と概算できて便利である. 以後特に断らない限り、全ての物理量は重心系で定義されているものとする.



Fig. 1: <sup>238</sup>Uの共鳴領域における全断面積. 共鳴構造を示す曲線は共鳴パラメータから計 算したもの,赤線はそれを幅 500 keV の Lorentz 関数で平均したもの,黒は光学模型で計 算した結果を示す.



Fig. 2: 複合核反応の概念図.入射粒子と標的核から複合核が形成され,それが再び粒子 放出によって崩壊する.

Eq. (1) は非常に単純化されているように見えるが,GNASH [3],EMPIRE [4],TALYS [5], CCONE [6], CoH<sub>3</sub> [7] のような統計模型コードを用いた実際の断面積計算でも,こ の数式を量子力学的に許される組み合わせ毎に計算して足し合わせるだけである.最初 に光学模型での  $T_c$  の計算に触れ,その後,「許される組み合わせ」について述べていく. なお本稿で述べられている内容は,Igarasi による光学模型計算コード ELIESE-3 [8] と Young-Arthur の Hauser-Feshbach コード GNASH [3] のアイデアに基づいている.特に ELIESE-3 のマニュアルは,実践的な光学模型計算の非常に優れた教科書となっているの で,より厳密な数式はそちらを参考にして欲しい.

### 2 光学模型

#### 2.1 光学ポテンシャル

光学模型は複素ポテンシャルに対して Schrödinger 方程式を解くものであり、ポテン シャルの実数部分が入射粒子の散乱、虚部が吸収を表す.光学ポテンシャルUが距離rだけの関数のとき、極座標で表される波動関数 $\phi(r, \theta, \varphi)$ を変数分離によって半径方向の みの関数で表し、さらに入射粒子の部分波で展開することができる.その方法は多くの 教科書にかかれているので割愛し、結果だけを示すと、

$$-\frac{d^2}{dr^2}\phi(r) + \left\{\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}U(r) - k^2\right\}\phi(r) = 0$$
(2)

となる.ここで*l*は入射粒子の軌道角運動量である.また光学ポテンシャル*U*(*r*)は,複 素数で与えられる中心場部分とスピン-軌道相互作用部分から成る.荷電粒子が入射する 反応の場合は,これに Coulomb 項が加わる.

$$-U(r) = Vf(r, R_0, a_0) + i \{W_v f(r, R_v, a_v) + W_d g(r, R_d, a_d)\} + c_{so} V_{so} \frac{1}{4a_{so}r} g(r, R_{so}, a_{so})(\mathbf{l} \cdot \sigma) + V_{Coul}(r, R_C)$$
(3)

ここで*V*は中心場ポテンシャルの深さの実部,*W<sub>v</sub>*はその虚部,*W<sub>d</sub>*も虚部であるが原子 核表面付近にピークを持つ形状となっている.*V<sub>so</sub>*はスピン-軌道相互作用の強さであり, ここに虚数部を与える場合もある.*c<sub>so</sub>*は  $\pi$  中間子の質量  $m_{\pi}$  を用いて  $c_{so} = (\hbar/m_{\pi}c)^2$ で与えられ,光学模型計算コード ELIESE-3 の数値は 2.04553 となっている [8].しかし 他の光学模型計算コードはこれを 2 とする場合が多く,計算結果に僅かなずれが生じる ことがある.

Eq. (3) ではポテンシャルの半径方向の形状を f(r, R, a), g(r, R, a) で表しており, それ ぞれ Woods-Saxon 型並びに微分 Woods-Saxon 型と呼ばれる.

$$f(r, R_i, a_i) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{r - R_i}{a_i}\right)}$$
(4)

$$g(r, R_i, a_i) = \frac{4 \exp\left(\frac{r - R_i}{a_i}\right)}{\left\{1 + \exp\left(\frac{r - R_i}{a_i}\right)\right\}^2}$$
(5)

添字 i = 0, v, d, so を,それぞれ中心場ポテンシャルの実部と虚部,表面型の虚部,ス ピン-軌道相互作用項に対応させる. $a_i$ はポテンシャル表面のぼやけ具合を表現するパラ メータ. $R_i$ はポテンシャルの半径を決定するパラメータで,標的核の質量数 A を用いて  $R_i = r_i A^{1/3}$ とし, $r_i$ を実際の半径パラメータとする.g(r, R, a)は微分と名が付いてい るが,g(r, R, a)はdf(r, R, a)/drではないことに注意する.

$$g(r, R, a) = -4a \frac{df(r, R, a)}{dr}$$
(6)

と言う関係で、g(r = R, R, a) = 1となるように規格化されたものである. df/drを微分 Woods-Saxon 型と書く場合もある.



Fig. 3: Koning-Delaroche 光学ポテンシャル [9] の中心場部分.ポテンシャルパラメータは <sup>56</sup>Fe へ 10 MeV 中性子が入射した場合のもの.

Coulomb ポテンシャルは次式で与えられる.

$$V_{Coul}(r, R_C) = \begin{cases} \frac{Zze^2}{2R_C} \left(3 - \frac{r^2}{R_C^2}\right) & r \le R_C\\ \frac{Zze^2}{r} & r > R_C \end{cases}$$
(7)

ここで  $Z \ge z$  は標的核と入射粒子の電荷,  $R_C = r_C A^{1/3}$  は Coulomb 半径で, 陽子の場合,  $r_C$  は 1.2 fm 程度であるが,  $\alpha$  粒子のような複合粒子の場合はもう少し大きく取られる.

例として <sup>56</sup>Fe への 10 MeV 中性子入射反応に対する Koning-Delaroche 光学ポテンシャル [9] で計算した中心場ポテンシャルの実部と虚部を Fig. 3 に示す. 虚数部は,原子核内部ではあまり大きくなく,表面付近でピークを持つ形状で与えられている. これは原子核反応が核表面付近で起こりやすいことに対応している.

### 2.2 一次元 Schrödinger 方程式

入射粒子として中性子の場合を考える.中性子の全スピン角運動量 j は軌道角運動量 lと固有スピンi = 1/2のベクトル和 $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{i}$ である.非常に大きなlを持つ部分波は反 応に寄与しないので,適当な最大値  $l_{\text{max}}$ で部分波展開を打ち切る.Schrödinger 方程式 の解は, $l = 0 \sim l_{\text{max}}$ に対する全ての $j = l \pm 1/2$ に対して求める.ポテンシャル部分を 中心場  $V_c(r)$ とスピン軌道相互作用  $V_{so}(r)$ の項に分け, Eq. (2) に Eq. (3) を代入し,少々 変形しておくと,

$$-\frac{d^2}{dr^2}\phi_{lj}(r) + \left\{\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[V_c(r) + \binom{l+1}{-l} V_{so}(r)\right] - k^2\right\}\phi_{lj}(r) = 0 \quad (8)$$



Fig. 4: <sup>56</sup>Fe への 10 MeV 中性子入射反応に対する Schrödinger 方程式の解. l = 0 (s 波), 1 (p 波), 2 (d 波) のみを示す. 全て j = l + 1/2 の場合である.

と書ける. ここでl+1と書かれた上段はj = l + 1/2に対応し,下段はj = l - 1/2の ものである.  $V_c(r)$ と $V_{so}(r)$ の形状が与えられれば, Eq. (8)は通常の二階常微分方程式 であり,数値的に解くことができる.よく使われるのは半径方向に差分化し,原点側か ら数値積分する方法で,修正 Numerov 法や Fox-Goodwin 法 [8] などがある.積分は光学 ポテンシャル Eq. (3)が非常に小さく無視できるようになる点まで行い,ここを原子核外 部の波動関数との接続点 $r_M$ とする.差分法で解いた Schrödinger 方程式の解を Fig. 4 に 示す.まだ境界条件を与えていないので,結果は定数倍だけ不定である.見やすいよう, 図は適当にスケールしてある.

#### 2.3 散乱行列と透過係数

光学模型によって弾性散乱の角度分布など多くの物理量を計算することができるが、こ こでは統計理論計算で必要となる透過係数に目的を絞っておく、光学ポテンシャルがゼロ のとき、中性子の波動関数は無次元化された半径  $\rho = kr$ を用いて球 Neumann 関数  $n_l(\rho)$ と球 Bessel 関数  $j_l(\rho)$  に  $\rho$  をかけたもので与えられる。荷電粒子の場合も含めて、これ を一般的に Coulomb 関数  $G_l(\rho)$  と  $F_l(\rho)$  で表しておくと、Eq. (8) に対する境界条件は

$$\phi_{lj}(r) \to \{G_l(\rho) - iF_l(\rho)\} - S_{lj}\{G_l(\rho) + iF_l(\rho)\} = u^{(-)}(\rho) - S_{lj}u^{(+)}(\rho) \tag{9}$$

と書ける.ここで *S*<sub>*lj*</sub> は散乱行列要素または *S* 行列要素と呼ばれ,光学模型の計算はこの値を求めることに帰着される.

接続点  $\rho_M = kr_M$  での Coulomb 関数  $G_l(\rho_M)$ ,  $F_l(\rho_M)$  とその微分値  $G'_l(\rho_M)$ ,  $F'_l(\rho_M)$  を求める必要があるが、中性子の場合はさほど難しくはない.  $G_l(\rho)$  は  $\rho n_l(\rho)$  であり、次

の漸化式を満たす.

$$G_0(\rho) = \cos \rho \qquad G_1(\rho) = \frac{\cos \rho}{\rho} + \sin \rho \tag{10}$$

$$G_{l+1}(\rho) = \frac{2l+1}{\rho} G_l(\rho) - G_{l-1}(\rho)$$
(11)

 $G'_{l}(\rho), F_{l}(\rho), F'_{l}(\rho)$ も似たような方法で求まり,半径 $\rho_{M}$ でのこれらの値を,多くのlについて求めておく.荷電粒子の場合はCoulombポテンシャルがあるので, $G_{l}(\rho_{M}) \geq F_{l}(\rho_{M})$ の計算は少々技術を要するが,数値計算ライブラリに入っているCoulomb 関数を利用するのが簡単である.

核の内側から  $r_M$  まで数値積分したときの値  $\phi_{lj}(r_M)$  とその微分値  $\phi'_{lj}(r_M)$  を使い,  $r_M$  で Eq. (9) の両辺の対数微分  $\phi'_{lj}(r_M)/\phi_{lj}(r_M)$  が一致するとすると,

$$r_M \frac{\phi'}{\phi} = \rho_M \frac{G' - iF' - S(G' + iF')}{G - iF - S(G + iF)} = \rho_M \frac{u^{(-)'} - Su^{(+)'}}{u^{(-)} - Su^{(+)}}$$
(12)

と書くことができ (インデックスと変数は落とした),これを S について解くと,

$$S = \frac{r_M f - \rho_M g^{(-)}}{r_M f - \rho_M g^{(+)}} \cdot \frac{g^{(-)}}{g^{(+)}}$$
(13)

となる.ここで,

$$f = \frac{\phi'}{\phi}$$
,  $g^{(\pm)} = \frac{u^{(\pm)'}}{u^{(\pm)}} = \frac{G' \pm iF'}{G \pm iF}$  (14)

と置いた.

原子核が入射粒子を全く吸収しない場合,すなわち光学ポテンシャルが虚数部を持た ない場合,S行列要素の絶対値は常に1であり,入射粒子は必ず散乱されることに対応 する.虚数部を持つと $|S_{lj}|^2 \leq 1$ になり,この減少分が複合核へ消えていく割合となる. 統計模型計算に必要な透過係数 $T_{lj}$ は次式で与えられる.

$$T_{lj} = 1 - |S_{lj}|^2 \tag{15}$$

 $T_{lj}$ を全てのl, jについて和を取り、断面積の次元にするための因子  $\pi/k^2$ をかけると、複合核形成断面積が得られる.

$$\sigma_{\rm CN} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l} \sum_{j=|l-i|}^{l+i} \frac{2j+1}{2i+1} T_{lj}$$
(16)

ここで*i*は粒子の固有スピン (中性子の場合は 1/2) である.それぞれの*j*に対して磁気量 子数の異なる状態が 2j + 1 個あるので,その数をかけて和を取る.また粒子の固有スピ ンの状態数では平均を取るため、2i+1=2で割っておく.この重みはチャンネル*c*のス ピン統計因子と呼ばれ、慣習的に記号  $g_c$ が用いられる.*l*が大きくなってくると複合核 形成断面積への  $T_{lj}$ の寄与は小さくなってくるので、適当な*l*で和を打ち切り、それを*l* の最大値  $l_{\text{max}}$ とすればよい.入射粒子が中性子の場合は、*S*行列要素から全断面積  $\sigma_{\text{T}}$ と形状弾性散乱断面積  $\sigma_{\text{SE}}$  も計算できる.

$$\sigma_{\rm T} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l} \sum_{j=|l-i|}^{l+i} \frac{2j+1}{2i+1} (1 - \Re S_{lj}) = \sigma_{\rm CN} + \sigma_{\rm SE}$$
(17)

$$\sigma_{\rm SE} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l} \sum_{j=|l-i|}^{l+i} \frac{2j+1}{2i+1} |1 - S_{lj}|^2$$
(18)



Fig. 5: 核反応での詳細釣り合いの模式図.

### **3** Hauser-Feshbach 統計模型

### 3.1 複合核反応における詳細釣り合いの原理

光学模型で透過係数が得られれば,核反応断面積は Eq. (1) によって計算される.これ を非常に簡略化して模式的に書くと Fig. 5 のようになる.ここでは同じ複合核に至る経 路がa, b, cの3通りあると考えている.aが粒子入射チャンネルであり,ここから複合核 が形成される確率は透過係数 $T_a$ そのものである.形成された複合核は3つのチャンネル に分かれて崩壊する.その崩壊の強さを,それぞれのチャンネルから元の同じ複合核が 形成する強さで置き換える.例えばチャンネルbへ崩壊する分岐比は, $T_b/(T_a + T_b + T_c)$ と単純に計算する.aからbへの断面積は,複合核形成確率,分岐比,それに断面積へ 変換する因子 $\pi/k^2$ をかけ合わせたもので与えられる.

$$\sigma_{ab} = \frac{\pi}{k^2} \cdot T_a \cdot \frac{T_b}{T_a + T_b + T_c} \tag{19}$$

これで Eq. (1) が導かれる.

### 3.2 スピン・パリティ選択則とエネルギー保存

では「おなじ複合核に至る」とはどういうことであろうか.標的核として基底状態の スピンが 0,パリティが偶 (+)の <sup>58</sup>Ni を考えてみる (Fig. 6).固有スピン 1/2 の *s* 波中性 子 (軌道角運動量 l = 0)が入射すると,複合核 <sup>59</sup>Ni の状態は  $J^{\Pi} = 1/2^+$ のみに制限され る.一方、2<sup>+</sup>の励起状態に *d* 波中性子 (l = 2)が入射する場合を考える.但しそのエネ ルギーを 2<sup>+</sup> 状態の励起エネルギー分だけ減らし、形成される複合核が同じ励起エネル ギーになるようにする.標的核のスピン I = 2と粒子の固有スピン 1/2 をベクトル合成 したものをチャンネルスピン *s* と呼び、その取りうる範囲は  $|2 - 1/2| \le s \le 2 + 1/2$  か ら、s = 3/2 と 5/2 の 2 通りがある.次にこれと中性子の軌道角運動量 l = 2 を合成する と、 $|s - l| \le J \le s + l$  から、次のような *J* の値を取りうる.

s	$J_{\min} =  s - 2 $	$J_{\max} = s + 2$	J
3/2	1/2	7/2	1/2, 3/2, 5/2, 7/2
5/2	1/2	9/2	1/2, 3/2, 5/2, 7/2, 9/2

いずれのチャンネルスピンの場合でも、複合核  $(1/2)^+$  の状態を作ることができる.逆に 言えば、複合核  $(1/2)^+$  の状態は、d 波中性子を放出して  $2^+$  の励起状態へ遷移すること が可能である. なお l = 1 の p 波中性子はパリティ保存則を破るので、この場合の反応 には寄与できない.

以上のスピン・パリティ選択則を一般に書くと、次のようになる. 原子核 (*Z*, *A*) に中 性子が入射すると (*Z*, *A* + 1) の複合核ができる. この時,励起した (*Z*, *A* + 1) はスピン *J* とパリティ II で指定される固有の量子状態を持っている. 標的核 (*Z*, *A*) の基底状態の スピンが *I* のとき  $|I - i| \le s \le I + i$  を満すチャンネルスピン *s* の組を定義する. ここ で中性子なら i = 1/2 である. それぞれの *s* に対し,軌道角運動量 *l* の粒子によって生 成される複合核 (*Z*, *A* + 1) の *J* は,  $|l - s| \le J \le l + s$  の範囲を取る. 基底状態のパリ ティπ が偶 (+) のとき,偶数の *l* から形成される複合核はやはり II = + のパリティを持 つ. *l* が奇数なら複合核は奇 (-) パリティとなる. 形式的に II =  $\pi$ (-1)<sup>*l*</sup> と書く. *i*, *I*, *l* が 異なっていても,それらから同じ *J*<sup>II</sup> の組み合わせを作ることが可能であり,逆にそれ ら終状態への遷移が可能となる. もちろん系の全エネルギーは常に保存されていなけれ ばならない. 統計模型では,これら全ての異なった終状態から同じ複合核の状態 *J*<sup>II</sup> へ の透過係数を逆向きに求め,それぞれのチャンネルへの分岐比を計算する.

# 4 実際の計算手順

### 4.1 離散準位への中性子の非弾性散乱断面積計算

スピン・パリティの選択則を満たす組み合わせ計算は、当然ながら現在ではコンピュー タが自動的に行ってくれる訳だが、簡単な例として第一励起準位への非弾性散乱断面積 を実際に計算してみよう. 偶偶核なら基底状態のスピン・パリティが *I<sup>π</sup>* = 0<sup>+</sup> で簡単な



Fig. 6: 標的核 I<sup>π</sup> = 0<sup>+</sup> に s 波中性子が入射する場合の模式図.



Fig. 7: <sup>58</sup>Ni への中性子入射非弾性散乱の模式図.

ので,Fig.7のように再び<sup>58</sup>Niへの中性子入射反応を取り上げる.複合核<sup>59</sup>Niは,再び 中性子を放出して基底状態へ戻るか,あるいは1.454 MeV の励起状態へ非弾性散乱とし て遷移する.実際には複合核がγ線を放出して<sup>59</sup>Niの基底状態へ遷移する中性子捕獲反 応も起こるが,ここでは無視しておく.

入射中性子のエネルギー  $E_n$  は, 1.454 MeV よりやや高くしておき,そのエネルギーで の中性子透過係数を  $T_{lj}$  で表す.この時, <sup>59</sup>Ni は励起エネルギー  $E_n + S_n$  を持つ.ここで  $S_n$  は中性子分離エネルギーである.一方, 1.454 MeV (2<sup>+</sup>) 状態に  $E'_n = E_n - 1.454$  MeV の中性子が入射すれば,同じ励起エネルギーを持った <sup>59</sup>Ni を作ることができる.この反 応の透過係数を  $T'_{li}$  としておく.

ところで、励起した核へ中性子が入射する反応の計算は簡単ではない.何故なら一般 に光学ポテンシャルは核の基底状態に対して与えられており、励起状態の核のポテンシャ ルは不明だからである.そのため、原子核は常に基底状態であると仮定し、入射エネル ギーを核の励起エネルギーで補正する近似  $T'_{lj}(E'_n) = T_{lj}(E_n - 1.454 \text{ MeV})$ を導入する.

標的核のスピン・パリティが  $I^{\pi} = 0^+$  なので,複合核の J は入射中性子の j と等しく, パリティ  $\Pi$  は  $(-1)^l$  となる.  $J^{\Pi}$  を作ることができる  $T_{lj}$  と  $T'_{lj}$  の組み合わせを, Table 1 にまとめている. l が大きくなってくると組み合わせも複雑になるので,  $J^{\Pi}$  が小さな値 の場合のみを示している.また軌道角運動量は数字では無く,シンボル s = 0, p = 1, $d = 2, \ldots$  で表してある.

この表の各行に対して部分的な断面積が計算され、それを総和することで最終的な断面積となる。部分断面積の計算は、単純に Eq. (1) に従う。 $\pi/k^2$ の項は共通なので後回しにし、表の各行に対する数式を書いてみると、

$$\sigma_{(1/2)+} = \frac{T_{s1/2}T'_{d3/2}}{T_{s1/2} + T'_{d3/2} + T'_{d5/2}} + \frac{T_{s1/2}T'_{d5/2}}{T_{s1/2} + T'_{d3/2} + T'_{d5/2}}$$
(20)

$$\sigma_{(1/2)-} = \frac{T_{p1/2}T_{p3/2}}{T_{p1/2} + T'_{p3/2} + T'_{f5/2}} + \frac{T_{p1/2}T_{f5/2}}{T_{p1/2} + T'_{p3/2} + T'_{f5/2}}$$
(21)

Table 1: 複合核  $J^{\Pi}$  を生成することができる  $T_{lj}$  と  $T'_{lj}$  の組み合わせの例. 軌道角運動量 l はシンボル  $s, p, d, \ldots$  で表してある.

$J^{\Pi}$	ground state	excited state
$(1/2)^+$	$T_{s1/2}$	$T_{d3/2}', T_{d5/2}'$
$(1/2)^{-}$	$T_{p1/2}$	$T_{p3/2}', T_{f5/2}'$
$(3/2)^{-}$	$T_{p3/2}$	$T'_{p1/2}, T'_{p3/2}, T'_{f5/2}, T'_{f7/2}$
$(3/2)^+$	$T_{d3/2}$	$\hat{T'_{s1/2}}, \hat{T'_{d3/2}}, \hat{T'_{d5/2}}, \hat{T'_{q7/2}}$
$(5/2)^+$	$T_{d5/2}$	$T'_{s1/2}, T'_{d3/2}, T'_{d5/2}, T'_{g7/2}, T'_{g9/2}$

$$\sigma_{(3/2)-} = \frac{T_{p3/2}T'_{p1/2}}{T_{p3/2} + T'_{p1/2} + T'_{p3/2} + T'_{f5/2} + T'_{f7/2}} + \dots$$
(22)

$$\sigma_{(3/2)+} = \frac{T_{d3/2}T_{s1/2}}{T_{d3/2} + T'_{s1/2} + T'_{d3/2} + T'_{d5/2} + T'_{g7/2}} + \dots$$
(23)

と続く.これらを,光学模型計算の場合と同様,スピン統計因子

$$g_c = \frac{2J+1}{(2I+1)(2i+1)} = J + 1/2 \tag{24}$$

を重みとして総和する.非弾性散乱断面積は,次式で与えられる.

$$\sigma_{n,n'} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{J\Pi} g_J \sigma_{J\Pi} = \frac{\pi}{k^2} \left\{ \sigma_{(1/2)+} + \sigma_{(1/2)-} + 2\sigma_{(3/2)+} + 2\sigma_{(3/2)-} + \dots \right\}$$
(25)

lが大きくなると $T_{lj}$ は非常に小さくなってくるので、この和は収束する.手計算でもできる簡単な例であるが、これが実際のHauser-Feshbach模型の計算である.

#### 4.2 連続領域の準位密度

先の例では,原子核の励起状態を一つだけ考慮した.入射中性子のエネルギーが高く なるとさらに多くの離散準位への遷移がエネルギー的に可能になり,やがて個々の準位 は実験的に分離できなくなってくる.このような領域を連続領域と呼び,原子核の状態 に関する統計を導入する.離散準位を個別に扱うのでは無く,準位数の分布とそれらの スピン・パリティの分布を利用する.連続領域が含まれる場合の非弾性散乱反応を模式 的に Fig. 8 の左側 (a) に表示している.

例えば ENSDF(Evaluated Nuclear Structure Data File) のような原子核構造データベース に含まれる離散準位の励起エネルギーを横軸に,その準位の番号を縦軸にとってプロッ トしたものを,準位の積み上げ図と呼ぶ. <sup>58</sup>Ni の場合は, Fig. 8 の右側 (b) で示すような 階段になる.励起エネルギーがあまり高くないとき,この階段は片対数グラフで大体直 線になる.低励起状態の原子核の準位密度  $\rho(E_x)$  は

$$\rho(E_x) = \frac{1}{T} \exp\left(\frac{E - E_0}{T}\right) \tag{26}$$

のような簡単な式で表せることが知られている.ここで*T*は温度であり,*E*<sub>0</sub>によって 励起エネルギーを横方向にずらしている.これを Gilbert-Cameron の定温度模型と呼ぶ [10]. この式をある励起エネルギーまで積分すると,積み上げ図に相当するものが得られる.

$$N(E_x) = \int_0^{E_x} \rho(E) dE = \exp\left(\frac{-E_0}{T}\right) \left\{ \exp\left(\frac{E_x}{T}\right) - 1 \right\}$$
(27)

e<sup>-E<sub>0</sub>/T</sup> の項があるので実際には片対数グラフで直線にはならないが,この項による歪み はゼロ近傍のみである.離散準位の積み上げ図から適当に T と E<sub>0</sub>を決め,それを図の 赤の実線で示している.エネルギーが高くなると直線からずれてくるが,これは実験で 見落とされた離散準位 (missing level) が増加してくるためである.

励起エネルギー $E_x$ でのスピン・パリティの分布関数 $R(J,\Pi)$ は一般に

$$R(J,\Pi) = \frac{1}{2} \cdot \frac{2J+1}{\sigma^2} \exp\left(-\frac{(J-1/2)^2}{2\sigma^2}\right)$$
(28)

の形で書ける.パリティの分布は +/- ともに 50%とし,スピンの分布は

$$\int \{R(J,+) + R(J,-)\} \, dJ = 1 \tag{29}$$

と規格化されている. σ<sup>2</sup> はスピンカットオフパラメータと呼ばれ,スピン分布の分散を 表す.核の励起エネルギーが上昇するにつれて σ<sup>2</sup> も増加し,スピン分布の幅が広がって くる.

統計模型による断面積計算では,確実な離散準位のデータが得られる領域 (Fig. 8 (b) の 場合は 4.5 MeV 程度以下) ではそのデータを用いる.より高いエネルギー領域では準位密 度 $\rho(E_x)$ とスピン分布  $R(J,\Pi)$ による表現を用いることで,エネルギー的に可能な全ての 競合チャンネルを連続的に計算に取り込むことができる.ここでは $\rho(E_x)$ に対する一番単 純な模型を紹介したが,実際には数多くの準位密度模型がある.例えば Gilbert-Cameron の準位密度公式 [10] では,エネルギーがさらに高くなってくると定温度模型から Fermi 気体模型へ滑らかに移っていくように設計されている.準位密度公式の話題は本稿の範 囲外なので割愛する.



Fig. 8: 連続領域へ非弾性散乱が起こる場合の<sup>58</sup>Niの中性子入射反応 (a) と,<sup>58</sup>Ni の離散 準位の積み上げ図 (b).



Fig. 9: Koning-Delaroche 光学ポテンシャルを用いた <sup>58</sup>Ni に対する中性子透過係数のエネルギー依存性. *s* 波以上の部分波に対しては,透過係数を  $\overline{T}_l = (l+1)T_{l,l+1/2} + lT_{l,l-1/2}$ と平均している.

### 4.3 ポピュレーション

非弾性散乱によって連続領域が励起される反応では、連続領域を狭いエネルギービン 幅  $\Delta E$  で離散化し、透過係数の総和計算を積分計算に置き換える (Fig. 8 (a)).便宜上<sup>58</sup>Ni の離散準位に下から番号を振っておく、基底状態が k = 0,第一励起状態が k = 1,のよ うにしておき、計算には最大数  $k = k_{\text{max}}$ まで含める、連続領域は細いビンで分け、それ らも  $c = 1, 2, \ldots, c_{\text{max}}$ とインデックスを付けておく、

各離散準位から複合核 JII を生成できるチャンネルに相当する透過係数は  $T'_k(E_n - E_k)$  で与えられる.中性子の軌道角運動量 l とスピン j は表示から落としたが,スピン・パリティ保存則を満たすチャンネルのみが計算に含まれるようにする.一方連続領域では  $\rho(E_c)R(J',\Pi')T'_c(E_n - E_c)\Delta E$ が,離散化したビンに対する実効的な透過係数となる.こ こで  $J',\Pi'$  は連続領域のスピン・パリティ,  $E_c$  はビンの励起エネルギーである.

先程と同様,励起状態からの透過係数をエネルギーをずらした基底状態に対する透過 係数  $T(E_n - E_k)$  で近似する.全ての透過係数は基底状態に対するもので置き換えられ るので,光学模型計算で多くの入射エネルギー  $E_n$  における  $T_{lj}(E_n)$  を計算しておき,適 宜それを補間して使えば,任意のエネルギーでの透過係数が簡単に得られる.<sup>58</sup>Ni に中 性子が入射する反応での透過係数のエネルギー変化を Koning-Delaroche ポテンシャル [9] で計算し,Fig.9 に示している.実際多くの Hauser-Feshbach 模型計算コードではこの方 法が採られているが,CoH<sub>3</sub> [7] だけは常に必要なエネルギー点での透過係数を光学模型 によって計算する.

まず形成される複合核形成断面積を  $J^{\Pi}$ のみで表しておく. 軌道角運動量とスピン l, jを持つ入射中性子が,励起エネルギー  $E_0$ の複合核状態  $J^{\Pi}$ を形成する断面積は

$$\sigma_{lj}^{J\Pi}(E_0) = \frac{\pi}{k^2} g_c T_{lj}(E_n) \tag{30}$$

で与えられ,その*lj*の和を取ったもの

$$P_{\rm CN}(J,\Pi,E_0) = \sum_{lj} \sigma_{lj}^{J\Pi}(E_0)$$
(31)

を初期ポピュレーションと定義しておく.ここで $E_0 = E_n + S_n$ である.ポピュレーションには適当な和訳が無いが,励起エネルギーとスピン・パリティで指定される状態を持つ複合核の生成断面積のようなものである.

次に  $P_{\text{CN}}(J,\Pi, E_0)$  が粒子放出によって崩壊したときの,残留核のポピュレーションを 計算する.まず Hauser-Feshbach 理論の分母計算に必要な全ての透過係数の和を求める.

$$N(J,\Pi,E_0) = \sum_{klj} T_{lj}(E_n - E_k) + \sum_{J'\Pi' lj} \int \rho(E_c) R(J',\Pi') T_{lj}(E_n - E_c) dE_c$$
  

$$\simeq \sum_{klj} T_{lj}(E_n - E_k) + \sum_{J'\Pi' lj} \sum_c \rho(E_c) R(J',\Pi') T_{lj}(E_n - E_c) \Delta E_c$$
(32)

ここで和はスピン・パリティ保存則が許す全てのチャンネルについて行う. 複合核状態 *J<sup>II</sup>*を経由して*k*番目の離散準位へ非弾性散乱を起こすとき,その離散準位に付与される ポピュレーションは,

$$P(E_k) = \sum_{J\Pi} P_{\rm CN}(J,\Pi,E_0) \sum_{lj} \frac{T_{lj}(E_n - E_k)}{N(J,\Pi,E_0)}$$
(33)

と計算される.また連続領域の *c* 番目のビンへの遷移で生成されるポピュレーションは 次式で与えられる.

$$P(J',\Pi',E_c) = \sum_{J\Pi} P_{\rm CN}(J,\Pi,E_0) \sum_{lj} \frac{T_{lj}(E_n - E_c)\rho(E_c)R(J',\Pi')}{N(J,\Pi,E_0)} \Delta E_c$$
(34)

 $P(E_k) \geq P(J\Pi, E_c)$ も断面積の次元を持つポピュレーションであるが、少々注意を要する. ここで計算した  $P(E_k)$  は複合核反応における離散準位への非弾性散乱断面積であるが、離散準位の生成断面積ではない. なぜなら連続領域やk+1番目より上の準位が  $\gamma$ 線を放出してk番目の離散準位を生成する場合があるからである. 計算時には、粒子 放出によるポピュレーションと  $\gamma$ 線崩壊によるポピュレーションを分けて考えるが、最 終的な状態生成断面積もやはり単純にポピュレーションと呼ばれるように、さほど厳密 に定義された単語では無くて、断面積計算上の便宜的な量である.

### 4.4 多段階 Hauser-Feshbach 理論

ここまでは標的核に中性子が衝突し,再び中性子が放出される反応過程のみを考えた. 入射中性子エネルギーが高くなると,陽子や重陽子,三重水素, $\alpha$ 粒子,<sup>3</sup>He なども放 出可能になってくるが,最初の複合核からの粒子放出計算手法は今まで述べたものと全 く同じである.荷電粒子の透過係数を光学模型で計算し,それらを Hauser-Feshbach 公 式に入れるだけである.しかし粒子放出後に残った残留核の励起エネルギーがまだ十分 高いので,そこから更に別の粒子が放出される.20 MeV 程度の中性子入射エネルギーで 起こりうる反応は,(n,n'),(n,p), $(n,\alpha)$ ,(n,2n),(n,np), $(n,n\alpha)$ ,(n,2p), $(n,p\alpha)$ ,...等,



Fig. 10: <sup>58</sup>Ni への高エネルギー中性子入射における多粒子放出反応.中性子放出は緑,陽子は青, α粒子はオレンジの矢印で示している.

多岐に渡る.<sup>58</sup>Niから中性子,陽子,α粒子が放出される反応を Fig. 10 に示している. この過程を計算するのにポピュレーションが役に立つ.

まず最初の複合核の生成断面積である初期ポピュレーションを, Eq. (31)のように入射 粒子の透過係数を用いて計算する.これを中性子,陽子,α粒子などを放出した後にでき る原子核の励起状態へ Eq. (33) と (34) を用いて分配し,その残留核の各々の励起状態で のポピュレーションとする.例えば Fig. 10 で陽子が放出される場合,<sup>58</sup>Coの赤い線で示 した部分のポピュレーションの計算である.ここで陽子の透過係数であるが,<sup>58</sup>Coへの 陽子入射反応として計算することに注意する.得られたポピュレーションを次の粒子放 出での初期ポピュレーションとして使うことにより,多粒子放出を同じ Hauser-Feshbach 理論の枠組みで計算することができる.Figure 10 では<sup>58</sup>Co はさらに中性子を放出して <sup>57</sup>Co の赤い線となる.ここのポピュレーションは,異なる <sup>58</sup>Co の中間状態の和,並び に <sup>59</sup>Ni が最初に中性子を放出してできた <sup>58</sup>Ni が陽子を放出する過程の和である.

反応の経路が複雑になってくると、反応断面積を計算する上で少々厄介なことが起こ り始める. (*n*,*np*)反応と (*n*,*d*)反応は残留核が同じものになるため、計算されるポピュ レーションの行き先が重なってしまう. それぞれの反応断面積を計算するには、それら を分けるためのテクニックが少々必要となる. さらにエネルギーが高くなると、(*n*,*α*)と (*n*,2*n*2*p*)反応, (*n*,2*d*)反応, (*n*,*npd*)反応等,同じ残留核が生成する反応経路が数多く 出てくる. CoH<sub>3</sub>では異なった反応経路で生成する残留核は全て異なる原子核として扱 うことで、全ての反応断面積を正確に分離しているが、高エネルギー入射反応計算では あまりに多くの原子核を取り扱うことになり、計算が極端に遅くなる.

核反応模型計算コードを用いて核データ評価を行う場合,計算の主たる部分はここで 述べた方法とさほど変わらない.実際にはγ線放出や核分裂のチャンネルへの分岐も考 慮されること,直接反応のような複合核反応以外の反応も計算される点などが異なる. 例えば Fig. 10 の左側に示しているように,前平衡過程は複合核 <sup>59</sup>Ni を形成することな く,直接 <sup>58</sup>Ni の励起状態を作る.入射中性子が前平衡過程で再び放出する断面積  $\sigma_{PE}$  を 全複合核形成断面積  $\sigma_{CN}$  から差し引き,それを複合核反応での初期ポピュレーションと する.実用的にはこれで十分であるが,この単純な方法ではスピンを保存せず,量子力 学的な効果を取り入れることができない問題がある [11].

# 5 おわりに

中重核における原子核反応理論として光学模型と Hauser-Feshbach 統計模型を取り上 げ,それらが具体的にどのように計算されるのかを概説した.複雑な計算をしているよ うに見えるが,透過係数を光学模型で求めさえすれば,統計模型計算で面倒なのはスピ ン・パリティ保存を考慮する点だけであることが理解できたと思う.原子核構造の統計的 性質である準位密度についても触れたが,簡便に留めておいた.またγ線放出チャンネ ルも無視したが,これらは中性子捕獲反応計算では非常に重要な要素となる.次回,機 会があればこの点についての解説記事を書きたいと思っている.

本稿では触れなかったが,低エネルギー中性子入射反応では直接過程も重要である.原 子核に衝突した中性子の一部は,複合核を形成すること無く散乱され,そのエネルギー の一部を標的核に渡す.このような過程もやはり光学模型の枠組みの中で計算されるが, その場合の光学ポテンシャルは変形したものとして記述され,チャンネル結合法と呼ば れる手法が用いられる.チャンネル結合法による光学模型計算と Hauser-Feshbach 統計 理論の厳密な統合は,ようやく緒に就いたばかりである [12].

# 謝辞

本稿は著者が東京工業大学科学技術創成研究院に滞在中、大学院生並びに博士研究員 向けに用意した資料を記事としてまとめたものである.このような機会を与えてくださっ た千葉敏教授ならびに東京工業大学 World Reseach Hub Initiative に感謝します.また統 計模型コード GNASH の作成により核データ分野に多大なる貢献をなさり、本年惜しま れつつ他界された Phil Young 氏に感謝するとともに哀悼の意を表します.

# References

- [1] W. Hauser, H. Feshbach, Phys. Rev. 87, 366 (1952).
- [2] 河野 俊彦, 核データニュース "統計理論備忘録 複合核反応とランダム行列の交差点,"
   110, 39 (2015);

http://wwwndc.jaea.go.jp/JNDC/ND-news/pdf110/No110-06.pdf

[3] P.G. Young, E.D. Arthur, Tech. Rep. LA-6947, Los Alamos National Laboratory (1977).

- [4] M. Herman, R. Capote, B. Carlson, P. Oblozinský, M. Sin, A. Trkov, H. Wienke, V. Zerkin, Nuclear Data Sheets 108, 2655 (2007).
- [5] A. J. Koning, S. Hilaire, M.C. Duijvestijn, EPJ Web of Conferences pp. 211–214 (2008), proc. Int. Conf. on Nuclear Data for Science and Technology, 22 – 27 Apr., 2007, Nice, France, Ed. O. Bersillon, F. Gunsing, E. Bauge, R. Jacqmin, and S. Leray.
- [6] O. Iwamoto, J. Nucl. Sci. Technol. 44, 687 (2007).
- [7] T. Kawano, P. Talou, M.B. Chadwick, T. Watanabe, J. Nucl. Sci. Technol. 47, 462 (2010).
- [8] S. Igarasi, "Program ELIESE-3; Program for Calculation of the Nuclear Cross Sections by Using Local and Non-Local Optical Models and Statistical Model," JAERI 1224, Japan Atomic Energy Research Institute (1972).
- [9] A. J. Koning, M. C. Duivestijn, Nucl. Phys. A 744, 15 (2004).
- [10] A. Gilbert, A. G. W. Cameron, Can. J. Phys. 43, 1446 (1965).
- [11] D. Dashdorj, T. Kawano, P. E. Garrett, J. A. Becker, U. Agvaanluvsan, L. A. Bernstein, M. B. Chadwick, M. Devlin, N. Fotiades, G. E. Mitchell, R. O. Nelson, W. Younes, Phys. Rev. C 75, 054612 (2007).
- [12] T. Kawano, R. Capote, S. Hilaire, P. Chau Huu-Tai, Phys. Rev. C 94, 014612 (2016).