

## 1 はじめに

原子核は、強い相互作用によって核子が互いに結合した有限量子多体系である。低エネルギー領域の原子核物理は、核子を基本的な自由度として記述する枠組みが伝統的に取られており、大きな成功をおさめている。一方で、重イオン衝突など高エネルギー領域の実験の解析から、量子色力学 (QCD) が強い相互作用の基礎理論であることは疑いのないものとなっている。原子核物理の理論的研究は、クォーク・グルーオンの力学を直接扱うものから少数核子多体系、安定核での魔法数の出現、クラスター物理、中性子・陽子過剰核 (不安定核) の存在、高密度核物質 (中性子星)、ストレンジネスなど、強い相互作用にまつわる多様な現象を、各階層に応じて多様な手法を駆使して進められてきた。

近年コンピューターの急速な発展と新しい計算アルゴリズムの開拓などに伴い、各分野の研究は、精密化の方向に進むとともに、各分野をまたいだ研究も活発に行われつつある。今後の計算核物理が進むべき重要な方向のひとつは、こうした各階層をより密接にかつ定量的に紡いでいくことによる、QCD を基礎理論とした核子および核子多体系の理解を通じて、宇宙の進化における元素合成や超新星爆発現象の理解を確立していくことにある。このレポートでは、とりわけ日本で活躍する研究者を中心とした最近の原子核物理の理論的研究の現状分析をまず行い、続いて将来の計算核物理として具体的に取り組むべき課題について、すでに具体的な活動をすすめてつつある計算基礎科学連携拠点 (JICFuS)[1]、HPCI 戦略分野 5 などの紹介も交えて、報告する。

## 2 現状分析

### 2.1 クォーク・グルーオン多体系

#### 2.1.1 格子 QCD によるハドロン構造

原子核は、有限個の核子の自己束縛系であり、核子どうしを結び付けている相互作用の基礎はクォークとグルーオンの力学を記述する量子色力学 (QCD) であると考えられている。高エネルギーの原子核反応への QCD の摂動的解析の成功に対して、原子核の基底状態近傍の現象への QCD の直接的な解析は、摂動論が使えないために非常に難しい。そのため、低エネルギーの原子核現象を理論的に調べるためには、有効模型もしくは QCD 和則、格子 QCD 計算が用いられる。このうち、格子 QCD は Wilson によって提案された、QCD を解析する強力な手法である。4 次元連続時空上の非可換ゲージ理論である QCD を、ユークリッド化した 4 次元格子点上のクォーク場とその格子点をつなぐリンク変数をゲージ場とすることにより、ゲージ対称性を保持した有限自由度の場の理論として定式化する。こうして QCD を正則な理論として解析可能とするだけでなく、経路積分表示によって具体的な数値計算を可能とした。その一つの重要な応用が、高性能の計算機を駆使することによって様々な物理量を QCD を基礎として計算することである。この節ではこの格子 QCD 計算の最近の成果を概説する。

格子 QCD の具体的な数値計算を実行するためには、いくつか克服すべき課題がある。(i) 計算機の演算速度及びメモリ容量の制限から、時空点の数 (格子サイズ) を大きくとることができない。(ii) クォーク伝搬関数を求めるための線型方程式の解の収束性を良くするため (条件数を大きくしないため) クォーク質量を軽くすることができない。(iii) 動的クォーク (クォークの真空偏極) の効果を正しく評価するためには数値コストがかかる。これらの課題は、様々な工夫を凝らすことにより、次第に克服され、現在では、ストレンジ ( $s$ ) クォーク質量を現実の値 (物理点) に固定し、アップ ( $u$ )・ダウン ( $d$ ) クォーク質量は  $s$  クォークよりも軽くかつ互いに等しいとし、これらのクォークの真空偏極も正しく評価した  $2+1$  フレーバ格子 QCD 計算が主流となっている。例えば、物理的な空間サイズ約  $2-3$  fm (空間の格子サイズ  $16^3$  もしくは  $32^3$ )、 $u$ 、 $d$  クォークを  $\pi$  中間子の質量に換算して 200-300 MeV 程度の軽さまで近づけたシミュレーションが 2006 年に報告されている。[2, 3, 4] さらに、最近では、 $u$ 、 $d$  クォークの質量差まで考慮し、3 種類の動的クォーク  $u$ 、 $d$ 、 $s$  を全て物理的なクォーク質量上 (物理点) で扱ったシミュレーションも可能となりつつある。こうした格子 QCD 計算が狙う物理的課題のひとつは、原子核を構成する粒子 (ハドロン) の基本的な性質を QCD に基づいて再現することである。現在、擬スカラー中間子やベクター中間子、並びに重粒子 8 重項、10 重項などの軽いハドロンの基底状態の質量が、数%の精度で格子 QCD 計算によって再現されることが示されており、低エネルギー領域においても、QCD が強い相互作用の基礎理論であることは疑いのないものとなっている。さらに中間子の弱崩壊に関

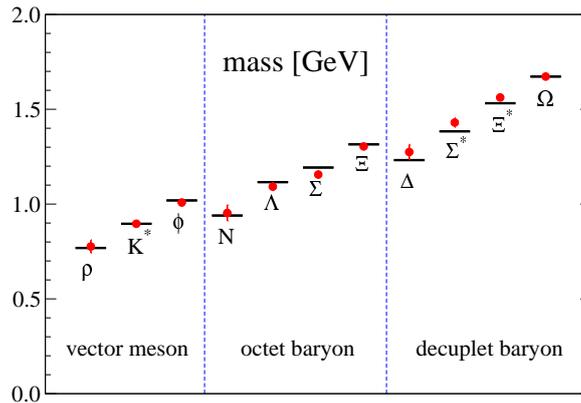


図1 PACS-CS グループによって計算された軽いハドロンスペクトル。  $m_\pi, m_k, m_\Omega$  の実験値をインプットとして使っている。文献 [4] より引用。

するハドロン遷移行列 (例えば  $\pi, K$  中間子のレプトン崩壊や非 CP 対称な弱崩壊に関係する中性  $K$  中間子の非レプトン崩壊) においては、非常に高い精度で実験値との比較がなされている。[5, 6, 7, 8] また小林-益川理論のユニタリティの精密検証においても格子 QCD 計算の結果が決定的な役割を果たしている。[9, 10] 一方、核子やその他の重粒子の構造に関する研究は精力的に行われているものの、前述のような中間子系において達成されてきた精度の精密計算には未だ至っていない。[11, 12, 13] これらのハドロンには、基底状態だけでなく多様な励起状態やエキゾチック状態の存在が実験的に観測され、もしくは理論的に示唆されている。これらは単なるハドロンの 1 粒子状態に留まらず、2 粒子の共鳴状態としてのより精密な取り扱いが求められる。このような QCD に基づくハドロン構造の理解の深化は、自ずとハドロン少数多体系研究の発展へとつながるものである。以下ではこれらの研究の進展について記す。

### 2.1.2 格子 QCD によるハドロン少数多体系

まず、ハドロン 2 粒子からなる系では、相互作用の到達距離よりも大きな空間体積を持った格子の中では漸近状態が定義できるため、ハドロン-ハドロン散乱のエネルギーを計算することにより、低エネルギーの散乱位相を求めることが可能である。[14, 15] このようなハドロン間相互作用における散乱位相の研究は、筑波大グループを初めとして日本の研究者によって精力的に行われ、現在では世界中のグループでも行われるようになっている。最近の特筆すべき研究としては、散乱位相の研究を進展させ、 $\rho$  中間子を強い相互作用で 2 つの  $\pi$

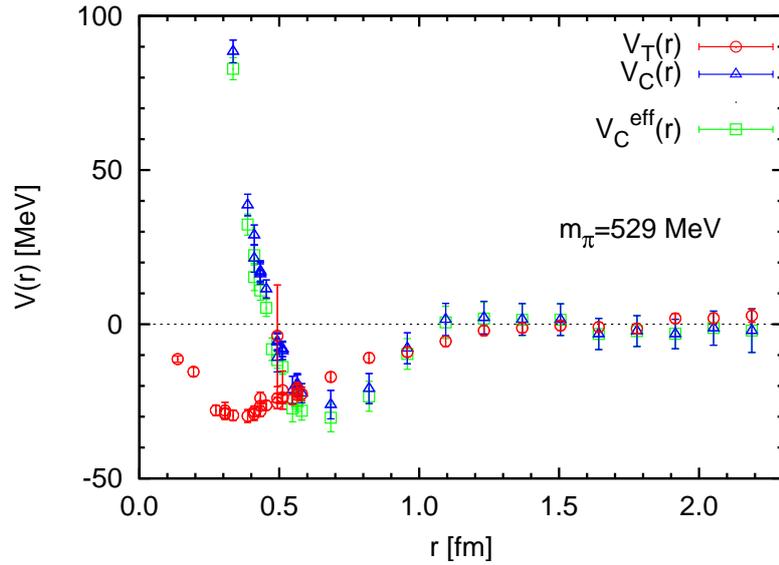


図2  $m_\pi = 529\text{MeV}$  に対応するクォーク質量を持った格子 QCD 計算から得られたスピン三重項状態の核力ポテンシャル。三角が中心力、丸がテンソル力であり、四角はテンソル力を繰り込んだ場合の有効中心力ポテンシャル。文献 [18] より引用。

中間子に崩壊する不安定粒子（共鳴状態）として取り扱い、その崩壊幅を計算することにも成功している。[16]

また別の発展としては、ハドロン 2 粒子の散乱位相だけでなく、ハドロン 2 粒子の南部・ベレー・サルペーター散乱振幅から定義される散乱状態の波動関数を格子 QCD により数値的に求め、その波動関数からハドロン間相互作用のポテンシャルを引き出す方法が提唱されている。その画期的な方法により、格子 QCD 計算から核力ポテンシャルを引き出すことに成功した。[17] この方法で得られた核力ポテンシャルは、従来の現象論的ポテンシャルの形を定性的に再現し、中心力およびテンソル力はクォーク質量を軽くする（現実に近い）と相互作用が強くなる（テンソル力も増大する）傾向を示している。エネルギー依存性や角運動量依存性に加えて、三体力への試みもすでに計算が進められている。[?] とりわけ、ストレンジネスを含んだハイペロン力への拡張はハイペロン散乱実験が困難であるだけに、大きな期待が寄せられている。

さらに最近では、QCD に基づく原子核の直接構成とその諸性質の解明に向けた研究も始まっている。2010 年筑波大グループは 原子核構造論において最も基本となる  $^4\text{He}$  原子核の格子 QCD による直接構成に世界で初めて成功している。[19]

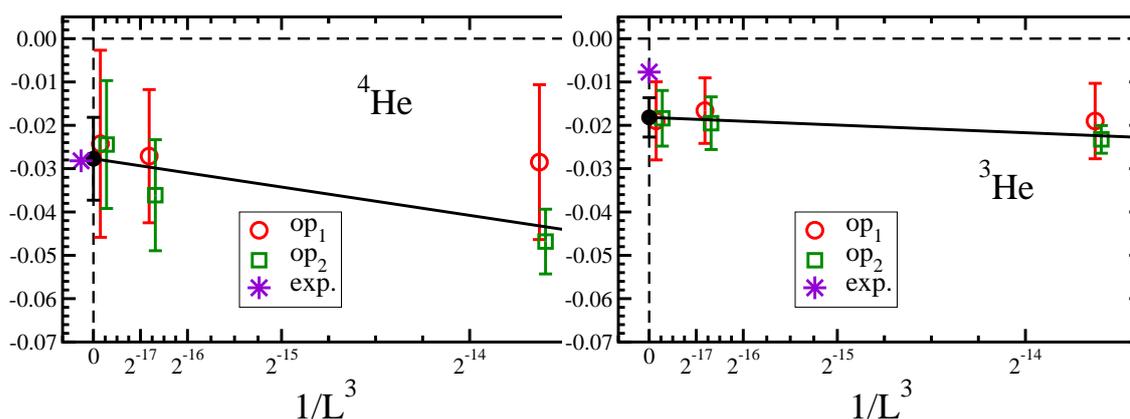


図3  ${}^4\text{He}$  (左図) と  ${}^3\text{He}$  (右図) 原子核に対するエネルギーシフト  $\Delta E_n = M({}^n\text{He}) - nM(N)$  [GeV] の空間体積  $L^3$  依存性。ここでは2種類の生成演算子に対する結果をプロットしている。黒丸と星印はそれぞれ空間体積無限大極限への外挿値と実験値を表す。文献 [19] 参照。

### 2.1.3 高温高密度でのQCD物性

QCDの極限状態に目を転じてみると、QCDの有限温度相転移の解明を目指した高エネルギー重イオン衝突実験が現在ブルックヘブンのRHICやCERNのLHCで行われている。そこで得られた実験データを曖昧さ無く解析するためには、QCDの相転移に関する、理論計算による基本的な情報が不可欠である。まずは、これまでの格子QCDの数値シミュレーションによる研究によって、着実な成果をあげてきている高温ゼロ密度でのQCD物性について述べる。初期の研究段階では、現実よりも重いクォーク質量領域でのクエンチ近似計算が多く行われたが、最近では(比較的計算時間のかからない)スタッガード型クォーク作用を用いた計算が、すでに現実世界とほぼ同じクォーク質量を用いて行われている。□そのため、相転移温度や状態方程式(熱力学量間の関係式)の計算は十分に精密物理の段階に入ってきており、もう一つの代表的なクォークの定式化であるウィルソン型クォークによる研究を進めることにより、格子上での異なるクォークの定式化による系統誤差を検証していこうとしている段階にある。また、より進んだ研究として、ハドロンの質量スペクトルの温度変化や、QCD物質の流体力学的性質を決める輸送係数(ずり粘性や体積粘性など)の計算も現在行われている。□これらは、計算コストなどの理由で今のところクエンチ近似による研究段階に留まっているが、計算機性能のさらなる向上に伴い現実的な計算が可能となることにより、今後の研究の進展が多いに期待される分野である。

一方、高エネルギー重イオン衝突反応過程で生成された物質は、それ自体が時空発展する動的な系なので、虚時間を用いた有限温度定式化を利用した格子 QCD に基づく第一原理計算だけでは、直接記述するのは難しい。そのため、まずは格子 QCD から、静的な情報である状態方程式を決定し、その情報を元に現象論として相対論的流体力学を介して、実験結果の解析を行ってきた。従来、流体数値シミュレーションは重イオン衝突反応で生成された局所熱平衡物質の平均的な振る舞いを記述してきており、計算時間はそれほどかからなかった。しかし、近年、RHIC や LHC で測定された生成粒子の方位角分布の揺らぎの実験結果は、事象ごとの揺らぎを含む流体数値シミュレーションの必要性を示唆している。□ 今後、極限状態、特に RHIC や LHC で達成されるような高温低密度における QCD 物質の精密物理を展開するためには、揺らぎ入りの流体数値シミュレーションの定式化を行い、実験と同程度のイベントを貯めるための大規模数値計算が必要になる。

前述の高温ゼロ密度領域の進展と比べると、高密度領域での QCD 物性の理解はまだ進んでいない。これまでの現象論的な研究から、高密度での臨界点の存在や、複雑な相構造が予想されている。□ もし臨界点が存在すれば、高エネルギー重イオン衝突実験で観測されるはずである。また、そういった高密度の QCD 相転移の詳細な情報は、超新星の爆発メカニズムの解明や中性子星のような超高密度天体の内部の状態を知るために不可欠である。このように高密度状態の QCD 物性研究のための第一原理計算が期待されているが、高温状態の研究とは対照的に、本格的な研究はまだ始まったばかりである。QCD のシミュレーションの基礎であるモンテカルロ法には、クォークの化学ポテンシャル  $\mu$  の導入により符号問題を引き起こすという根源的問題が内在している。その難問を克服するために、いろいろな計算方法の改良が試行錯誤で試されている。これまでは動的クォークの効果を取り入れた計算の難しさに伴って種々の試行錯誤による計算方法の開発自体が難しい状態にあったが、最近になって低密度領域から徐々に研究を進めることができるようになりつつある。現在広く用いられている方法の一つは、 $\mu = 0$  の周りで  $\mu$  について級数展開をして物理量を評価する方法である。しかしながら、この方法は収束半径の制約によって低密度領域でしか有効な方法とならない。謎の多い QCD の高密度領域を研究するためには新しい計算方法の開発が不可欠である。それが確立されれば物理学の新しい研究領域が立ち上がると期待される。

## 2.2 核子多体系

### 2.2.1 第一原理計算

前節で述べたように、QCD に基づくより基本的な立場では、原子核およびその構成要素である陽子や中性子 (核子) は、クォークやグルーオンの複合系であり、QCD の固有状態である。しかしながら、クォークは単体では取り出すことができない。そのため、構造や反応など、低エネルギー領域での原子核の現象の見通しの良い記述としては、常にクォーク・グルーオンの自由度をあからさまに持ち込むよりも、核子を基本的な自由度として考え、その量子力学的多体系として原子核を扱う枠組が、依然として有効であると期待される。即ち、原子核理論の重要な研究課題として、核子間の相互作用 (核力) を高い精度で記述する枠組みを構築すること、およびその上でそのような高精度の核力の観点から、原子核の性質を、核子多体系として理解すること、を挙げることができる。このような核子多体系の統一的理解には、理論に確かな実験再現性およびそれに伴う予言力が期待されるが、そのような多粒子系の量子力学的状態を精度良く求めることは、核力の複雑さに加え多体問題の難しさを克服する必要がある。ここでは、まず核力の理解の現状、および比較的少数の核子多体系の原子核の研究の現状について述べる。

核力の理解は、歴史的には、短距離部分を除いてそのクォークによる内部構造には目をつむり、核子の間の中間子の交換によって核力を記述することによって進められてきた。これまでの研究で、核力の構造は、その二核子間の距離によって分類することが有効であるとされており、とりわけ、遠方での振る舞いは湯川秀樹博士のパイ中間子交換理論による説明が確立していると言ってよい。一方多重パイ中間子交換やより重い中間子の交換が効くような中短距離部分は、現在でも完全には理解されておらず、模型に依存している。今日、膨大な核子 - 核子散乱の実験データを  $\chi^2 \approx 1$  の精度で再現し、重陽子の束縛エネルギー、半径、電気四重極モーメントなどを再現する二核子間力の模型が提唱されている。これらはその精度の高さからいわゆる現実的核力と呼ばれ、その代表的な例として、CD-Bonn、Nijmegen、Argonne といったポテンシャル模型や、カイラル有効場の理論による核力模型などがある。

近年の計算機の性能向上および計算手法の開発によって、こうした現実的核力を用いた核構造・核反応の計算が、精力的に行われるようになってきている。三 (四) 核子系の場合には、厳密解を求める処方箋として Faddeev (Faddeev-Yakubovsky) 方程式が知られており、その計算を具体的に実行するために、(特に四核子系を解くために) 高性能の計算機が用いら

れている。また、束縛状態の計算では各種の変分法も有効な手法であり、 $^4\text{He}$  原子核の場合には、現実的核力のうち特に重要な成分を抜き出した AV8 ポテンシャルを用いて、様々な方法で (Faddeev-Yakubovsky 方程式を解いた場合とほぼ同じ) 精度の高い解が得られることがベンチマーク計算 [20] によって示されている。

現実的核力は核子-核子散乱や重陽子などの二核子系の実験データを再現するように決められているが、これだけで三核子系以上の原子核の性質が正確に再現できるかどうかは自明ではない。特に、上で述べた核力の長距離部分がパイ中間子交換によって記述できることを基礎として、三核子が互いに長距離にあるときに二核子間の核力に加えて余計な引力 (藤田宮沢型三体力) が働くことが指摘されている。[21] 実際に、これまでの三核子系・四核子系の精密計算と実験データとの比較が、Faddeev 法もしくは変分法による束縛状態の計算や、Faddeev 法による核子・重陽子反応など三体散乱問題の分析などによって行われ、 $^3\text{He}$  や  $^3\text{H}$ 、 $^4\text{He}$  原子核の束縛エネルギーや陽子・重陽子散乱を再現するためには、三核子系で数百 keV、四核子系で数 MeV の引力的効果を与える三核子間力の存在が必要であることが確認されている。[23] 現在までに、弾性散乱断面積や偏極分解能などの直接測定が可能な領域における実験値との比較が行われ、入射粒子のエネルギーが高くなるにつれて三体力の重要性が明らかになりつつある。[22] \*<sup>1</sup> ここまで述べた原子核の第一原理計算では、束縛状態についてはエネルギーだけでなく波動関数も求められるため、各種物理量を計算したり、軽い複合核の反応計算などに用いいることができる。四核子を超えた質量数の原子核の第一原理計算としては、変分法が用いられているが、フェルミ粒子の多体系では粒子数  $A$  に対して反対称化のために  $A!$  個の置換を扱う必要があり、計算を困難にしている。そのため、核子数が四を越えるような核子多体系における構造計算では、まずは精密な固有関数を求めることはひとまず置いておいて、固有状態のエネルギーを正確に求めるための計算が、いくつか行われている。これらには、グリーン関数モンテカルロ法、閉殻を仮定しない殻模型、カイラル有効場の理論による格子計算手法などがある。これらの手法では、核子数 16 程度の p 殻近傍の原子核まで構造計算が行われており、多くの成果を挙げている。また、結合クラスター法では、 $^{16}\text{O}$ 、 $^{40}\text{Ca}$ 、 $^{56}\text{Ni}$  など、閉殻やその近傍の原子核を中心に計算が行われている手法もあ

---

\*<sup>1</sup> ここでは正味の引力を与える三体力について述べたが、これは三核子が互いに比較的離れていて、三核子中の任意の二核子間の相互作用としてパイ中間子交換描像が有効な場合に寄与する力と考えられている。中距離、短距離での二核子力がまだ完全には理解されていないように、三核子がより近づいている状況での三核子力も、まだ良くわかっていない。現象論的には、たとえば核物質の性質を再現するためや、観測されている中性子星の質量を説明するためには、短距離で斥力的に働く三体力が必要であると考えられている。

り、今後、さらなる発展が期待される。また、グリーン関数モンテカルロ法ではエネルギー以外の物理量を計算するための試みが行われているものもある。[24] さらに、閉殻を仮定しない殻模型では、原子核反応論へも応用され、原子核構造と反応の統一的研究に向け注目を集めている。□

こうした四核子以上の原子核では、三体力を越える多体力の存在も考えられるが、より多体力になるにつれその大きさが小さくなるというカイラル有効場の理論からの示唆がある。これら二体核力を越える多核子間力は、核子の内部構造に起源を置いているため、微視的な理論に基づいた多体力を導くのは容易ではない。

引き続き、現実的核力に基づく有効相互作用を用いた手法の発展について述べる。自由空間で決められた核力が持つ短距離での強い斥力を、物理量を不変に保ちながら、ユニタリー変換 (Lee-鈴木変換) などにより模型空間に繰り込むことにより、弱めた有効核力が導出される。このようなソフトな有効核力を用いる利点は、短距離での強い斥力を直接扱わない点で、閉殻を仮定しない殻模型では、模型空間に対する計算の収束性が生の核力を直接用いた計算と比較して非常によくある。ただし調和振動子基底関数を用いているため、次節で触れるような原子核の分子的状态 (クラスター) の記述は困難である。一方、核反応計算でいえば、現実的核力から導出された複素  $G$  行列有効核力を用いて、パウリ原理や三体力などの効果を密度依存性として有効核力に繰りこみ、微視的核反応模型に適用することで、一定の成果を挙げている。

ラムダ ( $\Lambda$ ) 粒子をはじめとするハイペロンを含む原子核 (ハイパー核) の研究の現状について、ここで簡単に触れておく。上で述べたような (通常核についての) 研究を、ストレンジネスを含めた原子核へと拡張することにより、一般化された核力ならびにそれに基づくよりひろい原子核の統一記述を目指すことができればよいが、このような拡張を進める上で大きな障害は、ハイペロン散乱実験が難しいために散乱データの情報が限られていることである。これは、現実的核力模型の構築において、豊富な実験データの蓄積を利用できることとは対照的である。ストレンジネスを含む中間子やハイペロンの関係する相互作用に現れる結合定数などのパラメータをフレーバ対称性を手がかりに決めることや、ハイパー核のガンマ線分光実験などのデータと多体の核構造論を組み合わせ、そこから間接的にハイペロン核子相互作用の情報を引き出し、現実的核力をハイペロンを含むように拡張する試みもなされているが、まだまだ発展途上中である。この分野は、むしろ、格子 QCD によるハイペロンポテンシャルの導出や、最大質量の観測データについて近年話題となっている中性子星の内部構造の解明などと密接に関連しており、今後の飛躍的発展が期待される分野である。

### 2.2.2 クラスタモデル

比較的軽い質量領域の核構造理論の長年のテーマとして、クラスタ構造のようなエキゾチックな構造、の研究を挙げることができる。さらに、中性子過剰核に特徴的な現象である一粒子準位の異常や逆転といった、最近実験サイドからも大きな興味を持たれている物理現象に対しては、従来提案されてきたモデルに改善の余地がある。第一原理的な計算手法によっていかにしてクラスタ構造などのエキゾチックな構造を記述できるかは、大きなオープンプロブレムになっている。なぜならば、現実的な核力は原点付近に強い斥力コアを持つために大変扱いが難しく、単純な一粒子波動関数の積 (スレーター行列式) では核子間の相関を取り扱えない。そのため、これまでの多くの原子核モデルでは、この斥力コアの効果および原子核の核内媒質効果をたくみに繰り込んだ、より扱いやすい有効核力を核構造計算に用いてきた。たとえば芯を仮定しない殻モデル計算の様なモデル空間が数学的に明確に定義されたモデルでは、前述のように Lee-鈴木変換による有効核力を用いることができる。

クラスタ構造のような、多核子が強い相関を持って原点から離れて空間的に局在した配位を記述するためには、核子の一粒子波動関数として空間的に局在したローカルガウスなどを用いるのが効果的である。ローカルガウスの波動関数は非直交基底であり、数学的に厳密にモデル空間を定義し、現実的核力からモデル空間で用いる核力へ一意的にマッピングすることが難しくなる。そのため、現実的核力を用いてクラスタ構造を記述しようとする場合、現実的核力からモデル空間で用いる核力へのマッピングを厳密に行うのではなく、2つの核子が接近した際に核力の斥力コアが低くなるようにユニタリー変換を与え、さらに少数核子系の性質を再現するようにパラメータを調節する方法が有効である。このような考え方に基づく、ドイツで発達しつつあるユニタリ相関演算子法は、ローカルガウス基底に対する現実的核力の適用を可能とし、幅広い質量数領域のクラスタ構造を研究できる現在ほとんど唯一の方法である。しかしそのユニタリー変換は、上記の理由により一意的に定まる厳密なものではなく、さらに、ユニタリー変換されたハミルトニアンをどう簡単な既存の演算子で表現するかについても、特にそのテンソル相関の部分に関してはまだ改善の余地が残されている。このように、現実的核力を用いたクラスタ的構造の研究には、方法論の開拓が重要である。同時に、ひとたび相互作用が設定された後でも、ハミルトニアンの行列要素の計算に膨大な数値計算が必要となる。

また中性子過剰核においては、中性子数の変化とともに原子核がどのようなクラスタ・シェル競合を見せるのかを明らかにすることが物理の課題として重要であり、さらに、原子

核の基底状態ではシェル模型的成分が優勢な場合でも、励起状態にはクラスター構造が現れる可能性もあり、統一的なモデルの構築が求められている。

これらの核構造情報は、核反応理論を通じて直接実験結果と比較される。特に、励起状態や共鳴状態にクラスター構造が発達する原子核においては、それらの状態がさまざまな観測量にダイナミカルに影響を与えられることが知られる。そのために、励起状態のみならず閾値を超えた連続状態を精密に取り扱う必要性がある。それらの状態を核反応の観点から精密に取り扱うために、連続状態離散化チャネル結合 (CDCC) 法が九州大学のグループを中心に開発されてきた。この CDCC 法は、先の Faddeev 方程式のように完全な厳密解を与えるものではないが、クラスターに分解するような反応を取り扱うときには非常に良い精度で反応現象を記述することが可能である。さらに、近年では非常に大きなモデル空間をとることも可能となり、核反応分析を行うモデルとしては非常に精度の高い核反応モデルである。

また、その原子核内で発達したクラスターの一部が標的核に移行するような多核子移行反応も話題として取り上げられる。しかし、現段階において日本国内では、直接反応過程としての核子移行反応計算は不十分なものがあり、今後の発展・改善が必要である。

### 2.2.3 殻模型

質量数 20 を超えるようなより重い原子核では、現象論的補正なしの第一原理計算は困難となるため、原子核殻模型計算と密度汎関数法による計算が選択肢としてあげられるが、この節では、原子核殻模型計算の話題を挙げる。

原子核殻模型計算では、まず、核子多体系を魔法数をもつ閉殻と、バレンス殻内のバレンス核子の運動に分離する。バレンス核子の波動関数を、取り得る全ての多粒子配置を表現するスレータ行列式 (配位) の線形結合によって記述することにより、設定したモデル空間の配位混合を完全に取り入れた高精度の計算を可能とする。バレンス殻内のバレンス核子のすべての配位で張られるヒルベルト空間をモデル空間と呼ぶ。通常 1 主殻をバレンス殻ととり、モデル空間外からの寄与は、有効相互作用理論によって、バレンス核子間の残留相互作用に繰り込まれる。この手法により、閉殻近傍の原子核の低エネルギースペクトルを精度良く再現することができ、ガンマ線分光によって得られた励起エネルギー、遷移確率、磁気能率などの多数の実験値と、広範な質量領域で簡便に比較することができる理論計算手法であり、有用性は確立されている。また、理論的にも、有効相互作用の構築に実験値による現象論的補正が必要なため、実験と理論の二人三脚ですすんできた手法である。

このモデルには、主に 2 つの現実的な制限がある。一つは、モデル空間の指数関数的増加であ

り、中重核領域では対角化すべきハミルトニアン行列の次元が  $10^{10}$  を超えることも珍しくな  
ない。通常この行列の直接対角化はランチョス法を用いておこなわれ、最新の並列計算機を用  
いても  $10^{11}$  次元程度が限界となる。今の計算機の発展を外挿すると 10 年後にはおよそ  $10^{14}$   
次元のハミルトニアン行列が対角化可能となるが、質量数 100 を超える重核領域の原子核構  
造を計算するには不十分であり、なんらかの形の近似が必要となる。さまざまな手法が試み  
られているが、日本ではモンテカルロ殻模型法により直接対角化の限界を超えた計算がなさ  
れており [26]、HPCI 戦略分野の一部としての活動が平成 23 年度から始まっている。今後  
10 年で外挿法など、近似手法のさらなる発展も見込まれ、計算機の発展と両輪をなし、殻模  
型計算の適用範囲を大きく広げていくと期待される。

もう一つの制限は有効相互作用における現象論的補正である。核子間の核力から出発して  
模型空間内における有効相互作用を求めるのが理想ではあるが、現在の閉殻を仮定した殻模  
型計算ではそのような精度に達していない。この原因に 3 体力の効果や連続状態との結合が  
考えられ、これらの寄与の定量的な評価が始まっている。UMOA 法などの有効相互作用理  
論の発展と組み合わせることにより、現象論的補正を必要としない有効相互作用の構築とい  
う理想に近づいていくであろう。

#### 2.2.4 密度汎関数

密度汎関数理論は、厳密かつ普遍的汎関数の存在定理 (Hohenberg-Kohn) と実用的汎関  
数の構成を可能にする Kohn-Sham の方法によって基礎づけられた理論である。原子核にお  
いては、その発展の歴史的経緯から平均場模型とも呼ばれるが、原子核のバルクな特徴であ  
る飽和性を再現するためには、密度依存有効核力が必要であり、密度汎関数理論と同一のも  
のと考えてよい。密度汎関数理論の大きな特徴の一つとして、特定の原子核 (質量領域) を記  
述する模型ではなく、すべての原子核を包括的かつ定量的に記述することが可能であること  
があげられる。

この普遍的な汎関数の存在は原理的には保障されている。しかし実際にどうこの厳密な  
汎関数を構成するかは自明でなく、我々がこれまで手にしたものはすべて近似的であり、  
Kohn-Sham の方法に基づくものである。Kohn-Sham 法は、運動エネルギーにおける量子  
的效果をうまく取り込むスキームを与えており、結果的には平均場理論に類似した自己無撞  
着な非線形方程式となる。特に、基底状態においてもフェルミ運動が重要な役割を担うフェ  
ルミ粒子多体系に対しては、Kohn-Sham スキームに基づく汎関数の構成法が現在のところ  
ほぼ唯一の方法とって良いであろう。

現在、全核種の質量を平均 1 MeV 以下の誤差で再現する汎関数が報告されているが、その精度をさらに向上させる研究は精力的に行われている。質量について言えば、閉殻配位の原子核と開殻配位の原子核との系統的な差、特定の原子核における特殊な相関 (例えば  $N = Z$  核のウィグナー・エネルギー)、偶核と奇核の対相関の違いなどが未解決である。これらの問題は、現在のエネルギー汎関数に明らかに欠けている相関の存在を示しているが、その取り込みの方法については多くの研究がある中、決定的なものがまだ現れていない。解決に向けて、汎関数の最適化に向けた新たな研究が進められており、第一原理計算を用いて汎関数の形を探索するなど、他のアプローチによる大規模核構造計算との共同研究も進められている。

通常の密度汎関数計算では、一体密度  $\rho(\vec{r})$  が多体系を記述するので、計算量はオーダーだいたい  $M^3$  に比例する。ここで、 $M$  は一粒子状態を記述する空間の次元。質量数  $A$  に対して  $M$  はだいたい線形に依存すると考えてよいので、計算量は質量数に対して  $A^3$  で増加する。通常の多粒子系の量子力学の計算量と比較すれば、圧倒的にゆるやかな粒子数依存性であり、これが大きな原子核を扱うことを容易にしている。密度汎関数理論を用いた通常の計算 (Kohn-Sham-Bogoliubov) に対しては、汎用的なプログラムも開発・公開されており、これを用いて、原子核基底状態の質量・半径等を求め、自発的な核変形を決定することができ、今や誰でも中性子数 ( $N$ ) と陽子数 ( $Z$ ) を指定することでこれらの情報をパソコンから簡単に得ることができる。大規模並列計算と組み合わせれば、1 万個程度のプロセッサを用いた並列計算によって、1 日程度ですべての原子核の基底状態を計算することが可能である。今のところ、原子核の形状に軸対称性と反転対称性が仮定されたプログラムが主流であり、特に調和振動子基底の計算コードが収束の速さなどにおいて優れている。一方で、ドリップライン近傍の中性子過剰核等を扱うためには連続状態との結合を考慮し適切な境界条件を課すため、実空間基底での計算コード開発も進んでいる。この場合、空間の大きさや収束のスピードが遅く、一般的に上記の調和振動子基底よりも 1、2 桁大きな計算コストが要求される。

時間依存密度汎関数理論に基づく線形応答計算は、最近数年でもっとも大きく進んだ研究分野の一つである。日本と欧米の複数のグループが、変形した基底状態上の線形応答計算を可能にする計算コード開発にしのぎを削り、いくつかのコードが既に完成している。通常の線形応答計算では、 $M^6$  の計算量と  $M^4$  のメモリ容量が必要とされ、一つの原子核の応答を調べるのに、1 万コア程度のプロセッサを用いた大規模並列計算が行われている。しかし、最近国内で開発された有限振幅法では、 $M^3$  の計算と  $M^2$  のメモリで同一の計算が可能である。この手法の優位性を生かした系統的な光反応断面積の計算が現在進行中である。

## 2.3 天体核物理

ここでは、原子核物理と宇宙物理にまたがる天体核物理のうち、超新星に関連する分野を中心に述べる。宇宙論や素粒子物理に関する課題については、さらに広く議論をする必要がある。超新星物理の分野では、大まかに分けて中性子星、超新星爆発、重元素合成が重要な課題として残されている。中性子星では核物質やエキゾチック物質の解明、超新星では状態方程式やニュートリノ反応、重元素合成では $r$ プロセスでの核データが原子核との接点として課題となっている。このうち、中性子星誕生や重元素合成の現場として、超新星爆発のダイナミクスを解明するのが将来にわたる大きな課題である。

1990年代より理化学研究所を代表とする不安定原子核ビーム実験により、宇宙物理における核データ研究が大きく進展した。安定線から離れた領域で不安定核の質量・半径・反応の系統的な測定がなされ、中性子過剰な領域での核子間相互作用、核構造・反応についての理解が進んだ。実験をもとに中性子過剰な核物質の状態方程式や不安定核における核反応レートなどの研究が精力的に行われ、それらが中性子星・超新星・元素合成の研究において鍵となる役割が明らかになり、核物理が宇宙・星で活躍する道筋が具体的に作られた。一方、高温・高密度領域では核子以外の粒子を含むエキゾチックな物質が現れると期待されており、中性子星コアでの研究が進むとともに、エキゾチックな相を研究する手段としての爆発天体現象の研究も進みつつある。こうした原子核物理実験・理論と宇宙物理への連携は、 $r$ プロセスや超新星といった大きな未解決問題において不可欠であり、これらの連携した研究活動を活発に行っていく必要がある。

超新星爆発メカニズム解明には、原子核ニュートリノ物理を詳細につぎ込んだ大規模な数値シミュレーションが必要である。日本では、不安定原子核物理と連携した超新星の数値シミュレーションによる研究が発展しており、核物理の影響が定量的に明らかにされるようになってきた。近年、球対称の範囲では一般相対論のもとでニュートリノ輻射流体計算が行なわれるようになり、ダイナミクスとしては第一原理計算を行なうことが可能になってきたため、核物理の詳細な検証が可能になってきた。日本を含む世界の数グループの計算結果により、実験データで検証された範囲での核物理を用いた上で、球対称計算では爆発しない、ということが判ってきた。このため、多次元的な効果（流体不安定性など）が爆発メカニズムとして必要であると考えられている。しかし、2次元3次元では、大規模計算によるシミュレーション結果は一握りしかなく、爆発メカニズムは諸説に分かれている。また、ニュート

リノ輻射輸送の扱いは近似的な方法に依っていて、系統的な研究および近似のないニュートリノ輻射輸送計算による研究が待たれる。

ここより後ろの文章は、まだ完成に程遠い状態のものであり、現在は、WG 内で作成した文書や議論したものの単なる羅列になっています。文章として読みづらい部分があるかもしれませんが、申し訳ありません。今後書き直していく予定です。みなさまからご意見頂ければ幸いです。

### 3 5～10年後の展望

ここでは、5～10年後程度の将来にわたっての日本の計算核物理の研究が進む方向についてまとめる。次世代大型計算機（京速コンピュータ）の運用開始に伴って計画されている研究や、さらにその先（次々世代）の大型計算機利用を見据えた活動が既に始まっている。[25]

前節で紹介した最近の成果をふまえて、今後特に重要と思われるいくつかの研究課題について、まず述べる。その後、5～10年後をめどに進めるべき研究課題について触れる。

#### 3.1 Lattice QCD からの He 原子核の直接構成

現状分析で紹介したように、2010年筑波大グループは、原子核構造論において最も基本となる $^4\text{He}$ 原子核の格子QCDによる直接構成に世界で初めて成功している[19]が、この計算はクエンチ近似（動的クォークを無視する近似）かつ重いクォーク質量で行われたものである。そのため、現実的な（より軽い）クォーク質量でのフルQCD計算を実行し、これらの系統誤差を取り除いていくことが重要である。格子QCDによる原子核の直接構成という、基本原理に忠実ではあるが挑戦的な課題を実行するためには、解決すべき固有の問題がある。有限体積の箱の中に引力相互作用を行う2粒子が閉じ込められている場合、束縛状態であっても散乱状態であっても負のエネルギーシフトを生じる。両者を区別するものは、エネルギーシフトの空間体積依存性である。束縛状態の場合は負のエネルギーシフトが空間体積無限大の極限でも有限の値で残るが、散乱状態の場合はエネルギーシフトが空間体積の逆数に比例し、空間体積無限大の極限で消失してしまう。束縛状態と散乱状態を区別するためには空間体積依存性を調べなければならず、そのための計算コストは大きい。この問題はペタ

スケールからエクサスケールへと計算機的能力が増大していくことによって解決していくと予想される。もう一つの大きな課題はクォーク・ダイアグラムの数である。格子 QCD ではクォーク場を用いて原子核の量子数を持つ生成・消滅演算子を組みその縮約を取ったクォーク・ダイアグラムを考えるが、質量数が多くなるにつれて縮約の“場合の数”は急激に増大する。例えば炭素  $^{12}\text{C}$  の場合は  $u$  クォーク 18 個、 $d$  クォーク 18 個から構成されるので、単純に考えればクォーク・ダイアグラムの数は  $(18!)^2 \sim 4 \times 10^{31}$  という天文学的数字となる。この膨大な数のダイアグラムをどのようにして計算するかという問題が、QCD を用いて原子核を取り扱う場合の大きな困難である。この点に関してはアルゴリズム的に解決するためのアイデアが必要である \*2。

### 3.2 QCD 相転移の critical point の位置を定める

これまで有限温度 QCD の計算の多くは格子 QCD 作用の定式化としてスタッガード型を用いて行われていた。現在では、現実世界と同じクォーク質量を持つウィルソン型クォーク作用を用いた格子 QCD 計算が、筑波大学を中心とするグループによって、ゼロ温度での研究から有限温度領域の研究へと進められようとしている。このようなウィルソン型とスタッガード型を比較しながら計算を進めることによって、格子 QCD 計算の系統誤差の評価がより精密となり、熱力学量や相転移温度の研究の精度の向上が期待される。有限温度でのハドロンスペクトルや輸送係数の研究についても、計算精度向上の鍵となるのは格子間隔のより細かくし、かつ統計誤差を減らすことである。従って、今後の計算機の性能の進歩によって改善されるはずである。今後は、(クエンチ近似ではない) クォークの真空偏極を正しく評価した計算が主流となり、LHC での重イオン衝突実験の結果が出そろうまでに、相当の進展が見込まれるであろう。

### 3.3 クラスタを含む励起状態の第一原理計算

宇宙の進化における元素合成の真の理解においては、原子核が織り成す階層構造を基本原理から理解することが欠かせない課題である。具体的には、恒星内部での水素の燃焼からへ

---

\*2 実際には様々な対称性を駆使して独立なクォーク・ダイアグラムの数を減らすことが可能であるが、困難の度合いは本質的には変わらない。

リウムが作られる課程 (CNO サイクル) にとっては、炭素の存在が必要である。ビッグバン直後の炭素がほとんど存在しない時代から、CNO サイクルが可能となる恒星が誕生するまでに、 $3\alpha$  の反応によって炭素が大量に生成されたと考えられている。Hoyle 状態と呼ばれる  $^{12}\text{C}$  の励起状態が  $^8\text{Be} + \alpha$  閾値付近に存在すると予言され、実験的には見つかった。しかしながら、この状態を核子 12 体系のダイナミクスとして理論的に導き出すことには、まだ成功していない。核子を基本自由度とした第一原理計算において、この Hoyle 状態を正確に導出することは、原子核の階層構造を正確に理解し、元素合成や宇宙の進化のモデルに確実な根拠を与える上で、非常に重要な課題である。スーパーコンピュータを使うことによってこの問題を解決しようとしている研究が既に発表される段階に入っており、この課題は、喫緊に進展することが求められている。

### 3.4 第一原理計算に consistent な DFT、Shell model、cluster model

核子を基本自由度として原子核構造や反応を第一原理的に理解しようとする試みは、反応については 3 核子もしくは 4 核子系まで、構造については 12 体程度までが限界である。従ってそれより質量数の大きな原子核領域を研究するためには、核子自由度を自由空間において扱ったのと全く同じようにあからさまに扱うのではなく、系を記述するのにより適した自由度を持つモデルを導入して原子核を記述することが必要となる。質量数の増加とともに系を記述するために本質的な自由度がどのように現れるかを理解するために、第一原理計算とモデル計算のそれぞれが有効な境界領域の質量数の原子核において、このようなモデルの基礎付けを与えるために、必要な課題である。

### 3.5 drip line を予言する dft

### 3.6 爆発的天体現象

上に挙げたものに加えて、クォーク・グルーオン多体系、原子核、天体核物理の各分野において計算核物理として進めるべき課題について述べる。

### 3.7 クォーク・グルーオン多体系

#### 3.7.1 格子 QCD によるハドロン構造の精密化

ハドロン原子核分野に関連して「ハドロン 1 粒子系」の物理として残された問題は、格子 QCD による核子の静的な諸性質の再現である。現状では核子の質量を除いて格子 QCD 計算が実験値を再現できているとは言い難い。中間子系の研究において弱崩壊に関する遷移行列計算がすでに大きな成功を収めているのに対して、重粒子系において相当する弱崩壊の遷移行列、例えば中性子  $\beta$  崩壊に伴う軸性電荷  $g_A$  において格子 QCD 計算が実験値を精密に再現するには至っていない。これは核子などの重粒子の計算が  $\pi$ 、 $K$  中間子など計算に比べてより高い統計精度を必要とするという技術的な問題ばかりでなく、重粒子が中間子よりもクォーク多体系の複合粒子として、その構造が複雑であることと密接に関係していると思われる。特に現在深刻な問題として、現時点で核子の平均二乗半径に対して格子 QCD 計算が実験値の約 75% 程度しか再現できない、「核子の大きさの問題」が挙げられる。現象論的には所謂パイオンの雲の効果と直接関係していると考えられる。実際、核子を含むカイラル摂動論において、核子の平均二乗半径が  $\pi$  中間子の質量が零となるカイラル極限で対数赤外発散することが知られている。つまりこの問題の解決にはより軽いクォーク質量 ( $\pi$  中間子の質量で 200 MeV 以下) でより大きな空間サイズ (4 fm 以上) の格子 QCD 計算が必要不可欠といえる。現在、いくつかの研究グループにおいてそのような QCD ゲージ配位の生成が始まり、かなり近い将来、核子系の物理量においても、カイラル摂動論などとの整合性なども含め、より精密な実験値との比較が可能となることが予測される。また今後は、ハドロン構造の包括的な理解のために、実験で観測できる物理量のみを格子 QCD 計算の研究対象とするに留まらず、カイラル摂動論を代表とした有効理論のアプローチ (QCD 和則や重いクォークの有効理論などを含む) において、これまで実験からしか決めることのできなかった有効理論内のパラメータなどの格子 QCD による精密決定など、より広範な格子 QCD 計算の活用が望まれる。

#### 3.7.2 格子 QCD によるハドロン少数多体系

また、ムーアの法則を信じれば向こう 10 年でコンピューターの性能向上も 100 倍程度見込まれるため、ハドロン 1 粒子系の計算よりもはるかに計算資源を必要とするハドロン少数多体系の研究分野においても、さらなる発展がなされることは想像に難くない。例えば、そ

のような目標としては物理点における軽原子核の構成である。次のステップは魔法数の導出であろう。この場合は現状分析で述べたように膨大な数のクォーク・ダイアグラムの計算をどう扱うかを解決することが必要である。更にその後は、実験的に生成困難な中性子過剰核などを格子 QCD で直接取り扱うことを目指したい。格子 QCD から通常核の構成に道が開かれた暁には、格子 QCD を用いて大きく進展が期待される研究分野として、ストレンジネスを含む原子核の研究が挙げられる。これまでは、実験の難しさから、ハイペロンを含む広義の核力の低エネルギー領域での性質は明らかでなかったが、格子 QCD によって、そのスピン・フレーバ構造の全体像が明らかになると期待される。これらの成果は、後で述べる軽いハイパー核や中性子星の中心部などの高密度核物質領域への波及効果も期待できる。また、格子 QCD 計算においても共鳴状態の研究は非常に難しいが、 $K-\pi$  散乱をはじめとして、今後具体的な研究が進むと予想される。現在盛んに議論されている  $\Lambda(1405)$  状態とそれに関連するエキゾチックな状態の研究は、J-PARC での新たな実験による進展が期待され、そのような実験の進展を理論的に解釈するための手法として、格子 QCD による共鳴状態の研究は重要な研究テーマになっていると予想される。

### 3.7.3 Lattice QCD からのエキゾチックハドロン原子核（ストレンジネスを含むもの）の探索

### 3.7.4 極限状態での QCD 物性

数値シミュレーションによる格子 QCD の研究は計算機の性能によってできることが決まる。現実世界と同じクォーク質量をもつウィルソン型クォークによるゼロ温度の研究が、現在、筑波大学を中心とするグループによって行われている。その延長として、ウィルソン型クォークによる有限温度、現実のクォーク質量の研究も始まる予定である。ウィルソン型とスタッガード型を比較しながら、今後も熱力学量や相転移温度の研究の精度が向上するはずである。有限温度でのハドロンスペクトルや輸送係数の研究についても、困難の源となっているものは格子間隔の粗さと統計誤差であるため、計算機の性能の進歩によって改善されるはずである。クエンチ近似を取り除き、LHC での重イオン衝突実験の結果が出そろうまでに、ある程度の結果を出さなければならない。

さらに、質的な進歩が期待される研究は有限密度での QCD の研究である。標準的なモンテカルロ法が有限密度では使えないため、いろいろな試行錯誤が必要である。以前は動的クォークの効果を取り入れた計算自体にコストがかかるためできなかったが、最近になって、有限密度の計算方法の開発にも時間をさけるようになった。計算機の性能の向上は、計算精

度を高めるだけでなく、試行錯誤を要する方法の開発の速度をあげ、適用できる計算方法の幅も広げる。実際、今までの格子 QCD の研究の歴史を見ても、計算機の性能に合わせて新しい計算法が開発され、一昔前には考えられなかったような計算ができるようになっている。

重イオン衝突実験が進行中の現在、格子 QCD の研究者に期待されていることは、実験結果をどう理解すべきか議論するときに必要な基礎的かつ正確な理論からの情報を提供することである。高温高密度 QCD の研究には長い研究の歴史があるが、ついに理論を実験で検証できるかもしれない時期にきている。

## 3.8 原子核

質量数の軽い原子核から重い領域までのそれぞれでの今後の研究の方向性を述べる。

### 3.8.1 軽い核の第一原理計算

強い斥力芯を持つような核力ポテンシャルを直接扱える少数系では、核子数を増やしていくことが考えられる。複雑な相互作用を用いた多体方程式の精度のよい解を得るには、あらわに相関した基底での変分計算が有効である。しかしながら基底関数の反対称化操作が粒子数の階乗に比例するため、核子数を増やすのは困難である。そこで反対称化が自動的に考慮されるスレーター行列式基底の適用を行う。殻的状態だけでなく、クラスター状態も同時に記述するため、新たに相関を含んだガウス波束を導入し、多体相関を取り入れる。ただし斥力芯を持つ相互作用には適用できないので、それを除去するような有効相互作用の開発も同時に行う。また、これまでの研究において、三核子以上の原子核の構成において、現状の 2 体力だけでは不十分であり、3 体力が必要なことがわかっている。現実的核力は核子 - 核子散乱を再現するが、起源の違うポテンシャル模型 (例えばクォーク模型ポテンシャル) を用いると、必要な 3 体力の強さは伝統的なポテンシャルと異なる。多体力の定量的な議論に向けて、様々なポテンシャル模型を用いて 4 体系以上の計算を行う。また  $\Delta$  粒子を含んだヒルベルト空間に拡張し、別の角度から多体力の起源を調べる。このような研究の進展は、格子 QCD 計算からの新しい結果をよってより信頼性の増した、ハイペロン力の理解に基づいたハイパー核の研究と並行して進んでいくことが期待される。すなわち、ハイパー核では  $\Lambda N - \Sigma N$  結合のようなチャンネル結合が重要であり、これが模型空間の選択によっては三体力効果の起源となっていると考えられているが、これらのより定量的な理解が今後進むであろう。さらに結合チャンネルを直接扱った少数多体問題を  $p$ -殻ハイパー核にまで適用で

きるような方法の確立が期待される。また、質量数の軽い原子核領域では、連続状態を含んだ核子多体系の記述の進展も期待される。軽い核に限られてはいるが、現実的核力から出発した波動関数が得られるようになった。それらの多くは2乗可積分関数から得られており、そのまま連続状態へ適用することは難しい。近年2乗可積分関数の散乱問題への適用が活発に行われている。それは比較的取扱いが容易で、束縛状態を解く計算コードが利用できるという大きな利点がある。そのような低エネルギー核反応理論の開発にも取り組む。これらの少数多体系の成果は、精密な波動関数を扱えるという利点があり、またそのことによって見えてくる課題もある。例えば、まず微視的核反応モデルの改良が必要となる。現在進められている現実的核力に基づいた微視的核反応モデルの構築はすでに多くの成果を挙げているが、これまでの核反応理論研究として掲げてきた“精密核物理”の立場からすればまだ十分とは言えない。そのため、現在進められている現実的核力に基づいた微視的核反応モデルのさらなる改良・精密化が第一にすべき研究計画である。その微視的核反応モデルを安定核や不安定核の反応現象に適用させ系統的に解析を進めモデルの信頼性を得る。

一方精密な波動関数を扱えるという利点を生かして、10年後の研究計画として、精密核構造、反応理論を駆使した不安定核の予言、実験の困難な宇宙核物理学(ニュートリノ反応、中性子捕獲等)への応用が期待される。

### 3.8.2 クラスタ

現状分析で述べたように、原子核物理においてクラスタ的構造は、現象論的には重要な概念であるが、現実的核力を用いたクラスタ的構造の研究には、方法論の開拓が重要である。同時に、ひとたび相互作用が設定された後でも、ハミルトニアン行列要素の計算に膨大な数値計算が必要となる。また中性子過剰核においては、中性子数の変化とともに原子核がどのようなクラスタ・シェル競合を見せるのかを明らかにすることが物理の課題として重要であり、さらに、原子核の基底状態ではシェル模型的成分が優勢な場合でも、励起状態にはクラスタ構造が現れる可能性もあり、統一的なモデルの構築が求められている。

### 3.8.3 芯を仮定しない殻モデル

続いて、芯を仮定しない殻モデルによる第一原理計算に焦点を絞って今後5~10年に亘る将来について概観する。現在、 $p$ 殻核までは、安定核において基底状態や低励起状態の束縛エネルギー、半径、電磁気モーメント、遷移確率などの物理量に関して計算が行われている。ただし、 $p$ 殻核でも重い方の原子核では、さらに模型空間を広げた計算を行い、より収束し

た解を得る必要がある。

今後、安定核近傍では、sd 殻核のようにより重い原子核へと殻模型による第一原理計算が適用されていくものと思われる。また、現状では、安定核近傍の原子核までしか適用されていないが、今後、中性子過剰核や陽子過剰核のような不安定核での計算も期待される。さらに、励起状態にみられるクラスター的な状態に関しても、殻模型による第一原理計算による理解が必要とされている。

このように、さらに重く、安定線から離れた原子核へ、また、励起状態にみられるクラスター的なエキゾチックな状態の解明へと第一原理計算の適用領域が拡大していくことが考えられる。今後の課題としては、計算機性能の向上だけでなく、いかに殻模型による第一原理手法で不安定核にみられるハロー構造や励起状態にみられるクラスター構造を効果的に記述できるのかという、手法自体のブレイクスルーが必要とされる。

#### 3.8.4 クラスターを含む励起状態の第一原理計算

#### 3.8.5 閉殻を仮定した殻模型

一方、旧来型の閉殻を仮定した原子核殻模型計算の将来について述べると、この模型には、主に 2 つの現実的な制限がある。一つは、模型空間の指数関数的増加であり、中重核領域では対角化すべきハミルトニアン行列の次元が  $10^{10}$  を超えることも珍しくない。通常この行列の直接対角化はランチョス法を用いておこなわれ、最新の並列計算機を用いても  $10^{11}$  次元程度が限界となる。今の計算機の発展を外挿すると 10 年後には  $10^{14}$  次元のハミルトニアン行列が対角化可能となるが、質量数 100 を超える重核領域の原子核構造を計算するには不十分であり、なんらかの形の近似が必要となる。さまざまな手法が試みられているが、日本ではモンテカルロ殻模型法により直接対角化の限界を超えた計算がなされている。今後 10 年で外挿法など、近似手法のさらなる発展も見込まれ、計算機の発展と両輪をなし、殻模型計算の適用範囲を大きく広げていくと期待される。

今後 10 年のうちに現象論的補正なしの有効相互作用の構築がおこなわれるのではないだろうか。加えて、2 主殻を模型空間にとることで、 $^{100}\text{Sn}$  など 2 重魔法数をもつ原子核の構造を調べることを可能とし、2 重閉殻構造のやぶれの研究がすすむであろう。

また、 $^{132}\text{Sn}$  や  $^{208}\text{Pb}$  近傍の中性子過剰側領域は、元素合成プロセスで重要であるにもかかわらず殻模型計算がおこなわれていない。これは、現象論的補正に十分な実験データが存在しないためであり、RIBF などの加速器の発展により、実験データがそろい始めるにつれ、旧来型の有効相互作用の構築と殻模型計算がなされていくと思われる。また、二重ベータ崩

壊の研究や放射性廃棄物への応用が期待される質量数 100 前後の原子核のより精密な殻模型計算も期待される。

### 3.8.6 密度汎関数理論

密度汎関数理論については、今のところ、原子核の形状に軸対称性と反転対称性が仮定されたプログラムが主流ですが、今後はこれらの仮定も取り除かれた“完全”な計算に向けた開発が進むことでしょう。また、今後数年程度で、時間依存密度汎関数理論に基づく線形応答計算についても同様のことが可能になり、励起スペクトルなども解析できる汎用コードが公開される時代が来ると考えられます。

10年先、20年先といった将来の課題として以下のような課題があげられます。まず、今後 RI ビーム施設における研究の中心になると考えられる中性子過剰核、さらに実験的には10年、20年スケールでは届かないと考えられる安定線からはるかに離れた中性子過剰核の精密計算です。特に原子核の存在限界を決定することは非常に重要です。このためには複雑な相関を取り入れた高精度なエネルギー汎関数が必要であり、その構築と計算法の確立が求められます。またこれは、非対称核物質の精密計算にもつながり、核物質の状態方程式や中性子星の構造の決定に大きな役割を果たすと考えられます。次に、核反応理論と融合させた理論・計算手法の開発があげられます。ニュートリノと原子核の弾性・非弾性散乱、2重ベータ崩壊といったニュートリノ核反応の精密計算は他分野から強く求められており、比較的近い将来に大きな進展が見込まれます。また、古典的な近似が適用できない低エネルギーにおける核反応を、(時間依存)密度汎関数理論で記述する方法の開発も将来の重要な課題だと考えます。これに関連した課題として、非調和・非線形・非断熱といった原子核の集団ダイナミクスの特徴を記述することが可能な微視的理論の開発も将来の大きな課題です。特に、核分裂現象に密度汎関数理論を適用して微視的計算を確立することです。核分裂は、原子核集団運動理論に携わってきた研究者の長年の目標ですが、散逸、チャンネル分岐、多体量子トンネル現象などの難しい課題が複雑に絡み合う現象です。この中には大規模計算によって克服される可能性が見えてきた課題もあり、今後大きな発展が期待されます。

核反応物理学として期待されることは、第一に不安定核特有の反応現象は存在するのか？という点である。不安定核ならではの反応現象としてすでに弱束縛系による分解反応が分かっているが、今後他にどのような反応現象が観測、または、予言されるかが期待される。第二に、エネルギー依存性である。核反応は閾値を超えたエネルギー領域における現象であるが、そのエネルギー領域は核構造と違い制限がない。すでに少数粒子系の陽子-重水素弾性

散乱ではエネルギー依存性と三体力の関係が問題になりつつある。この問題は重イオン核反応でも起きると予想され、三体力の本質的理解と共に新たな核反応物理の発展に繋がると期待される。

### 3.9 天体核物理

最終的な爆発メカニズムの確定には、高温高密度での核データを可能な限り信頼できるものにする、そして、それらをシミュレーションに組み込み3次元ニュートリノ輻射流体計算を行なうことが必要である。これらの両者が今後10年、20年の課題となる。近年の計算技術の発展により、多次元での系統計算や3次元での輻射流体計算が可能になると予測する。その際には、インプットとなる核物質状態方程式や核図表の広い範囲におけるニュートリノ核反応のデータを確立しておくことが重要である。例えば、中性子過剰核の半径・非圧縮率の系統的な測定や不安定核のニュートリノ電子捕獲反応などを通じて、原子核ハドロン分野による実験と理論解析の最先端成果をつぎ込むことが将来的な課題となる。また、核物質状態方程式を確立するための三体力の解明や核子多体理論計算の発展、クォーク物質への相転移などの物理も高密度天体の理解に必要不可欠である。

多次元での超新星爆発計算については、神戸の次世代スーパーコンピュータにおける課題の一つとして数グループが連携して計算機資源をつぎ込んだ研究を計画しており、その中で筆者は3次元ニュートリノ輻射輸送計算コードを開発して、超新星爆発計算への適用を行なっている所である。これらは5年から10年のスケールで進み、大規模な並列計算の数値シミュレーション実行により超新星爆発メカニズムの解明に迫ることとなるであろう。rプロセス元素合成などの詳細なダイナミクス、大質量星の重力崩壊現象の系統的な解明は、さらに10年先の大きな計算機資源を必要とすることが予測される。加えて、今から10~20年の間には天体観測の大型計画（超新星ニュートリノ Hyper-Kamiokande、重力波 LCGT、超大型望遠鏡 TMT など）も進行しており、観測による天体核物理への知見にも大きな進展が予想されることを考慮すべきであろう。すなわち、今から10~20年後には観測データとの比較を通じ、超新星が爆発するかどうかの議論を越えて、爆発エネルギーの定量的理解とともに高密度状態方程式・ニュートリノ核反応・不安定核での魔法数変化等、核物理の大きな課題を解くための手段としても爆発天体現象の研究が進むであろう。

### 3.9.1 r プロセス元素合成の詳細なダイナミクスの解明

## 4 今後の研究に必要な計算機資源の見積り

利用者数、主要な研究課題、基本性能

- 京速
- KEK
- t2k(東大、筑波、京都)
- 基研
- RCNP
- 九大

## 5 まとめ

### 参考文献

- [1] 革新的ハイパフォーマンスコンピューティングインフラ戦略プログラム分野5「物質と宇宙の起源と構造」<http://www.jicfus.jp/field5/jp/>; 計算基礎科学連携拠点 (Joint Institute for Computational Fundamental Science) <http://www.jicfus.jp/jp/>
- [2] Y. Kuramashi *et al.* [PACS-CS Collaboration], PoS **LAT2006**, 029 (2006) [arXiv:hep-lat/0610063].
- [3] T. Ishikawa *et al.* [JLQCD Collaboration], Phys. Rev. D **78**, 011502 (2008) [arXiv:0704.1937 [hep-lat]].
- [4] S. Aoki *et al.* [PACS-CS Collaboration], Phys. Rev. D **79**, 034503 (2009) [arXiv:0807.1661 [hep-lat]].
- [5] Y. Aoki *et al.*, Phys. Rev. D **84**, 014503 (2011) [arXiv:1012.4178 [hep-lat]].
- [6] Y. Aoki *et al.* [RBC Collaboration and UKQCD Collaboration], Phys. Rev. D **83**, 074508 (2011) [arXiv:1011.0892 [hep-lat]].

- [7] C. Allton *et al.* [RBC-UKQCD Collaboration], Phys. Rev. D **78**, 114509 (2008) [arXiv:0804.0473 [hep-lat]].
- [8] D. J. Antonio *et al.* [RBC Collaboration and UKQCD Collaboration], Phys. Rev. Lett. **100**, 032001 (2008) [arXiv:hep-ph/0702042].
- [9] P. A. Boyle *et al.*, Phys. Rev. Lett. **100**, 141601 (2008) [arXiv:0710.5136 [hep-lat]].
- [10] C. Albertus *et al.*, light Phys. Rev. D **82**, 014505 (2010) [arXiv:1001.2023 [hep-lat]].
- [11] Y. Aoki *et al.*, domain wall Phys. Rev. D **82**, 014501 (2010) [arXiv:1003.3387 [hep-lat]].
- [12] T. Yamazaki *et al.*, fermions,” Phys. Rev. D **79**, 114505 (2009) [arXiv:0904.2039 [hep-lat]].
- [13] T. Yamazaki *et al.* [RBC+UKQCD Collaboration], wall Phys. Rev. Lett. **100**, 171602 (2008) [arXiv:0801.4016 [hep-lat]].
- [14] M. Luscher, Theories. Commun. Math. Phys. **105**, 153 (1986).
- [15] M. Luscher, Nucl. Phys. B **354**, 531 (1991).
- [16] S. Aoki *et al.* [CS Collaboration], Phys. Rev. D **84**, 094505 (2011) [arXiv:1106.5365 [hep-lat]].
- [17] N. Ishii, S. Aoki and T. Hatsuda, Phys. Rev. Lett. **99**, 022001 (2007) [arXiv:nucl-th/0611096].
- [18] S. Aoki, T. Hatsuda and N. Ishii, Prog. Theor. Phys. **123**, 89 (2010) [arXiv:0909.5585 [hep-lat]].
- [19] T. Yamazaki, Y. Kuramashi, A. Ukawa, Phys. Rev. D **81**, 111504(R) (2010) [arXiv:0912.1383 [hep-lat]].
- [20] H. Kamada *et al.*, Phys. Rev. C **64**, 044001 (2001) [arXiv:nucl-th/0104057].
- [21] J. Fujita and H. Miyazawa, Prog. Theor. Phys. **17**, 360 (1957).
- [22] T. Furumoto, Y. Sakuragi and Y. Yamamoto, Phys. Rev. C **79**, 011601 (2009).
- [23] K. Sekiguchi *et al.*, Phys. Rev. C **65**, 034003 (2002).
- [24] L. E. Marcucci, M. Pervin, S. C. Pieper, R. Schiavilla and R. B. Wiringa, Phys. Rev. **78**, 065501 (2008); arXiv:0810.0547 [nucl-th].
- [25] 「今後のハイパフォーマンス・コンピューティング技術の研究開発について」の報告書のとりまとめ、文部科学省;  
[http://www.mext.go.jp/b\\_menu/houdou/23/07/1308508.htm](http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/23/07/1308508.htm)

[26] N. Shimizu, Y. Utsuno, T. Mizusaki, T. Otsuka, T. Abe and M. Honma, *Phys. Rev. C* **82**, 061305(R) (2010) [arXiv:1012.1167 [nucl-th]].

[27]