

スーパーコンピュータ「富岳」で炭素の起源を探る

—第一原理計算で導かれたアルファクラスターの構造—

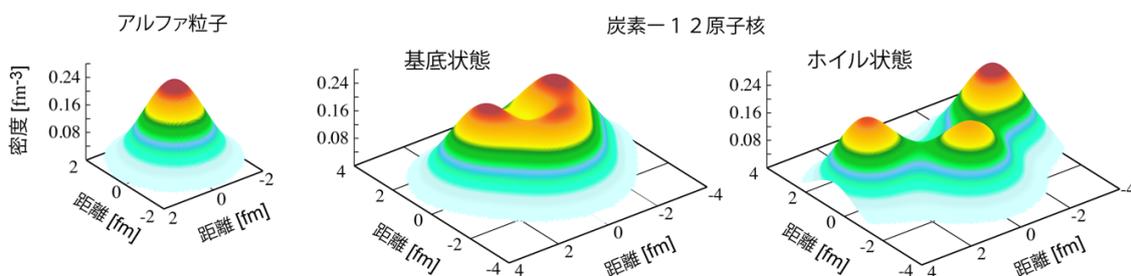
理化学研究所（理研）仁科加速器科学センター核分光研究室の大塚孝治客員主管研究員、阿部喬協力研究員、東京大学大学院理学系研究科附属原子核科学研究センターの角田佑介特任研究員（研究当時）、日本原子力研究開発機構の宇都野穰主任研究員らの国際共同研究グループ^{*}は、スーパーコンピュータ「京」と「富岳」^[1]を用いた第一原理計算^[2]により、炭素-12 (^{12}C) 原子核（陽子数 6、中性子数 6）の量子構造を明らかにしました。

本研究成果は、地球環境や生命の誕生に欠かせない炭素の起源の解明に貢献するとともに、アルファ崩壊^[3]の理解に新たな視点を与え、超重元素^[4]崩壊の予言に寄与するものと期待できます。

ヘリウム (^4He) 原子核は、陽子 2 個と中性子 2 個が強く結合した安定な原子核で、アルファ (α) 粒子とも呼ばれます。恒星の進化の過程では、3 個の α 粒子が同時に衝突・合体することで、しばしば「ホイル状態^[5]」と呼ばれる不安定な ^{12}C 原子核が形成されます。このホイル状態の ^{12}C 原子核の一部が安定な ^{12}C 原子核に遷移しますが、これまでホイル状態の量子構造は不明でした。

今回、国際共同研究グループは、 ^{12}C 原子核中の核子（陽子と中性子）の密度分布が一様ではなく、その中間段階に「 α クラスタ^[6]」と呼ばれる α 粒子に似た構造が構成要素となることを示しました。この結果は、 α クラスタの存在を仮定することなく、スパコン「京」や「富岳」を駆使した量子色力学^[7]に基づく大規模な第一原理計算により得られました。3 個の α 粒子からホイル状態が作られ、その後に基底状態へ遷移する過程が ^{12}C 原子核を作り出すことがよく説明できています。

本研究は、オンライン科学雑誌『*Nature Communications*』（4月27日付：日本時間4月27日）に掲載されます。



α 粒子、 ^{12}C 原子核の基底状態とホイル状態の核子密度分布（第一原理計算の結果）

※国際共同研究グループ

理化学研究所 仁科加速器科学研究センター 核分光研究室
客員主管研究員 大塚 孝治 (おおつか たかはる)
(日本原子力研究開発機構 客員研究員、東京大学名誉教授)
協力研究員 阿部 喬 (あべ たかし)
室長 上野 秀樹 (うえの ひでき)
一般財団法人高度情報科学技術研究機構
副主任研究員 吉田 亨 (よしだ とおる)
東京大学 大学院理学系研究科附属原子核科学研究センター
特任研究員(研究当時) 角田 佑介 (つのだ ゆうすけ)
(現 筑波大学 計算科学研究センター 研究員)
特任准教授(研究当時) 清水 則孝 (しみず のりたか)
(現 筑波大学 計算科学研究センター 准教授)
京都大学 基礎物理学研究所
准教授(研究当時) 板垣 直之 (いたがき なおゆき)
(現 大阪公立大学 教授)
日本原子力研究開発機構
主任研究員 宇都野 穰 (うつの ゆたか)
アイオワ州立大学(米国)
教授 ジェームス・ヴァリー (James Vary)
研究教授 ピーター・マリス (Pieter Maris)

各機関の役割

本研究は、理化学研究所、高度情報科学技術研究機構、東京大学、京都大学、日本原子力研究開発機構、アイオワ州立大学に所属する以上10名の国際共同研究グループにより行われました。理化学研究所が研究を統括し、理論計算の実行と論文の執筆を行いました。東京大学と高度情報科学技術研究機構は理論計算を実行しました。京都大学、日本原子力研究開発機構、アイオワ州立大学は数値計算の結果を議論しました。

研究支援

本研究での大型数値計算は、理化学研究所のスーパーコンピュータ「京」および「富岳」の計算資源の提供を受け、実施しました(課題番号: hp190160、hp200130、hp210165)。本研究は、文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム「シミュレーションで探る基礎科学: 素粒子の基本法則から元素の生成まで」(JPMXP1020200105)、文部科学省ポスト「京」重点課題9「宇宙の基本法則と進化の解明」、文部科学省HPCI戦略プログラム分野5「物質と宇宙の起源と構造」、計算基礎科学連携拠点(JICFuS)、文部科学省科学研究費補助金新学術領域研究(研究領域提案型)「動的な殻構造形成とクラスター形成(研究代表者: 大塚孝治)」「原子核におけるアルファクラスター発現の第一原理的研究(研究代表者: 大塚孝治)」による支援を受けて行いました。

1. 背景

ヘリウム (^4He) 原子核は、陽子 2 個と中性子 2 個が強く結合した安定な原子核で、アルファ (α) 粒子とも呼ばれます (図 1a)。原子核は核子 (陽子と中性子) が多数集まって塊になったものですが、特定の原子核では多数の核子が直接塊になるのではなく、一部の核子は「 α クラスター」と呼ばれる α 粒子に似た構造を形成し、場合によっては、 α クラスターの集合体として原子核が構成されるという仮説があります (図 1b,c)。

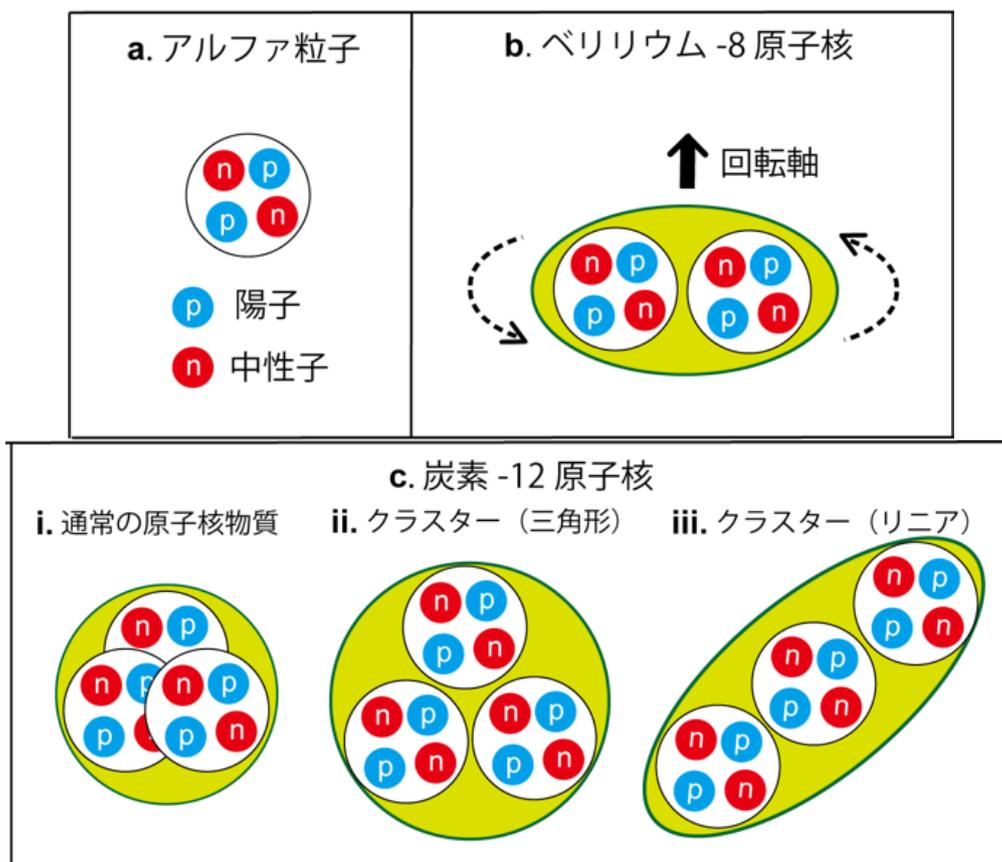


図 1 α クラスター仮説の模式図

- 通常のアルファ (α) 粒子。ヘリウム (^4He) 原子核のことで、陽子 2 個と中性子 2 個の核子から構成される。
- ある状態のベリリウム-8 (^8Be) 原子核は二つの α クラスターがつながり、原子核自体が量子的な回転をしていると考えられる。
- ある状態の炭素-12 (^{12}C) 原子核は、各核子 (陽子と中性子) が一様に分布する通常の原子核物質の構造 (i)、三つの α クラスターが三角形に集合した構造 (ii)、直線に結合した構造 (iii) などが考えられる。

この α クラスター仮説は、量子論が現在の形になった直後の 1930 年代に既に提唱されていました。しかし、実験でこの仮説を検証するのは難しく、100 年近く経った現在でも実験での検証報告はなく、この仮説に賛同しない研究者もい

ます。一方、原子核のノックアウト反応^[8]で α 粒子が叩き出されるのを観測した実験報告はいくつかあるものの、陽子や中性子が原子核の外に放出された後に α 粒子として結合したとも考えられるため、 α クラスター仮説との区別は困難です。原子核内に α クラスターが存在するという実験的検証は、量子論の基本に関わる根源的な困難を含んでいることから、将来可能になる保証はありません。

他方で、陽子 6 個と中性子 6 個からなる炭素-12 (^{12}C) 原子核に関しては、恒星の進化の過程において 3 個の α 粒子が同時に衝突・合体することで、「ホイル状態」と呼ばれる不安定な状態の ^{12}C 原子核が生成されることが知られています。このホイル状態の ^{12}C 原子核の一部は安定な基底状態の ^{12}C 原子核に遷移し、残りは 3 個の α 粒子に戻ります。この反応が恒星内で頻繁に起こることで、宇宙に炭素ができ、そこから酸素などの他の元素が合成される道筋ができます。それらが地球上にも蓄積され、地球環境を作り上げて、生命が誕生したと考えられています。しかし、これまでホイル状態の量子構造は不明でした。

そこで、国際共同研究グループは実験ではなく、第一原理計算によって α クラスター仮説の妥当性を検証した上で、ホイル状態の成り立ちを示すことに挑みました。

2. 研究手法と成果

国際共同研究グループは、核子の多体系としての原子核を核子間に働く力(核力)だけを入力して記述することにしました。すなわち、 α クラスターを含む原子核に対する物理模型的な仮定は全て排除しました。計算に用いる核力は、素粒子を記述する量子色力学に基づくカイラル摂動論^[9]と呼ばれる方法で得られた第一原理的なものです。そのような核力によって多数の核子が塊になっている量子多体系の構造を知るには、多体シュレーディンガー方程式を解く必要があります。そのために、独自に開発したモンテカルロ殻模型^[10]を用いました。モンテカルロ殻模型にはいくつかのオプションがありますが、今回の計算では、どの核子の動きも凍結したりせず、全ての核子を活性化している点に特徴があります。核力と同様に量子多体系の扱いも第一原理的なため、この計算手法は「第一原理コア無しモンテカルロ殻模型」^[11]と呼ばれます。ここで「コア無し」とは、全核子の活性化を意味しています。

第一原理コア無しモンテカルロ殻模型の計算は極めて大規模なものであり、実現するにはスーパーコンピュータが必要となります。スーパーコンピュータの性能が計算の到達限界を決めるため、ホイル状態での α クラスターの様子を調べるにはスーパーコンピュータ「京」でも足りず、スーパーコンピュータ「富岳」が使えるようになって初めて明らかになりました。

ベリリウム-8 (^8Be : 陽子数 4、中性子数 4)、ベリリウム-10 (^{10}Be : 陽子数 4、中性子数 6)、ベリリウム-12 (^{12}Be : 陽子数 4、中性子数 8)、 ^{12}C の原子核に対して第一原理計算を行った結果、それぞれに違った様相で α クラスターが現れることが分かりました。例えば、 ^8Be は図 1b で示したように、2 個の α クラスターがつながっていることが示されました。

一方、 ^{12}C 原子核の結果は伝統的な予想とは異なっていました。図 2a に、 ^{12}C 原子核の第一励起状態とホイル状態から基底状態への電磁遷移（ガンマ崩壊）と励起エネルギーについて、今回得られた計算結果と実験データの比較を示しました。赤で示された第一原理計算は、黒で示された実験データを良く再現しています。また、図 2b に示すように、基底状態では ^8Be 原子核は 100% α クラスタから成る構造であるのに対し、 ^{12}C 原子核は通常の原子核物質（量子液体）^[12] の構造がほとんどで、一部 α クラスタの成分が混ざっていることが分かりました。一方、ホイル状態では、 α クラスタと通常原子核物質の各構造の比率がおよそ 2 : 1 になることも示されました。

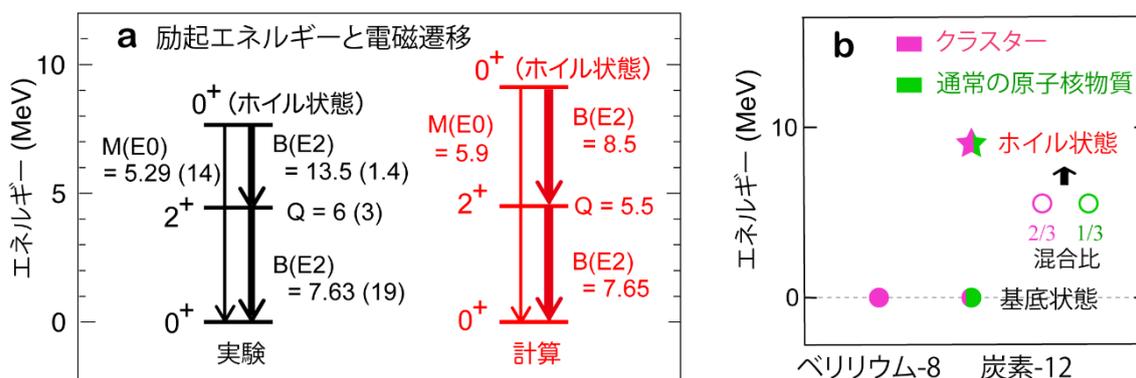


図 2 炭素-12 原子核の励起エネルギーと電磁遷移の計算と実験の比較

- a 炭素-12 (^{12}C) 原子核に関して得られた計算結果 (赤) を実験データ (黒) と比べたもの。一番上がホイル状態、その下が第一励起状態、一番下が基底状態。B(E2)やM(E0)は電磁遷移の強度の指標である。
- b α クラスタ構造の現れ方を示した概念図。基底状態では、ベリリウム-8 (^8Be) 原子核は 100% α クラスタから成る構造であるのに対し、 ^{12}C 原子核は通常原子核物質の構造がほとんどで、一部 α クラスタの成分が混ざっている。ホイル状態 (星印) では、 α クラスタと通常原子核物質の各構造の比率がおよそ 2 : 1 になるのを色分けで示している。

原子核は量子論的には常に動いており、核子の密度分布はある瞬間のスナップショットに相当します。多くの原子核では、スナップショットが表す量子状態がグルグルと回転していると考えられています。実験室で原子核を観測して「写真」を撮る場合は、回転運動のために露光時間が長すぎる写真のようになってしまい、核子密度分布がぼやけてしまいます。一方、この回転の効果量子論の回転体理論^[13]によって分離することで、 ^8Be 原子核や ^{12}C 原子核のスナップショットを得ることが可能です。この方法で、 α クラスタの発生を核子密度分布から解明することに成功しました。

図 3 に、 ^{12}C 原子核の基底状態、ホイル状態、その上の励起状態である「リニア状態」の核子密度分布を示します。基底状態では 94% の確率で、 α クラスタはつぶれていて、一定の密度領域から成る通常の原子核物質になっていますが、いくらか三角形になっているのは α クラスタの名残といえます (図 3f)。一方、残りの 6% の確率で、 α 粒子に近い α クラスタが三つ、距離を保ちつつ、三角形に結合しています (図 3g)。同様の α クラスタの三角形の配置が、ホイル状態では 61% の確率で見られます (図 3i)。ホイル状態の残りの確率のう

ち 33%では、基底状態の通常原子核物質よりも α クラスターがつぶれて、三角形がより円形に近くなっています (図 3h)。リニア状態では、三つの α クラスターがほぼ直線上に結合しています (図 3e)。

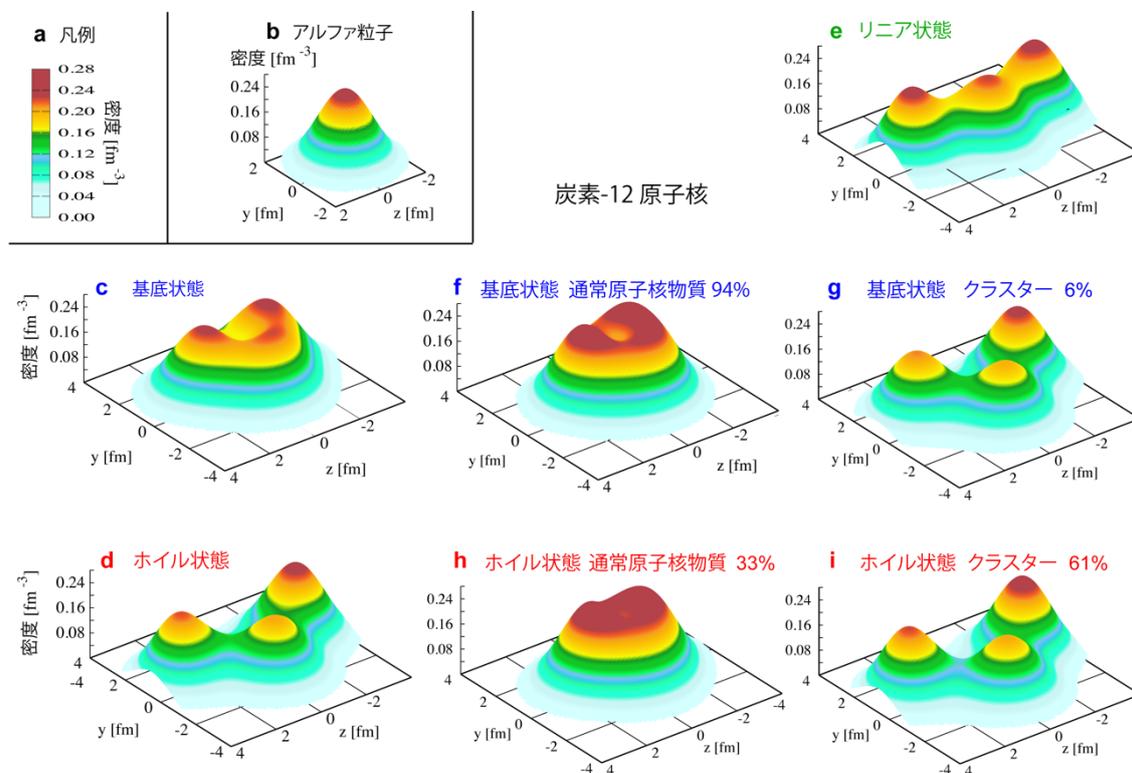


図 3 炭素-12 原子核のさまざまな核子密度分布

炭素-12 (^{12}C) 原子核の核子密度分布を、基底状態 (c)、ホイル状態 (d)、リニア状態 (e) に対して示したもの。f、g は基底状態の二つの主成分の核子密度分布。h、i はホイル状態の二つの主成分の核子密度分布。パネル b は α 粒子の核子密度分布。

これらの結果から、 ^{12}C 原子核の基底状態とホイル状態の両方で、 α クラスターがつぶれた通常原子核物質と典型的な α クラスター構造が現れることが示されました。典型的な α クラスター構造は 1930 年代から想像されていた古典的な α クラスターのイメージにやや近いですが、ホイル状態における通常原子核物質との大きな混ざりは従来予想されていませんでした。基底状態における α クラスターの混ざりも従来予測からずれています。このような通常原子核物質と α クラスターの混合や結合は「クロスオーバー^[14]」の概念に近く、一部で議論されていた「相転移^[14]」という概念は相当しないと考えられます。

一方、このようなクロスオーバーのために、ホイル状態から ^{12}C 原子核の第一励起状態、さらには基底状態に電磁遷移で落ちる頻度が十分な大きさになります。仮にこれらの電磁遷移がないと仮定すると、炭素は星の進化において生成されなくなり、炭素生成から始まる生命系のシナリオはなくなります。以上述べて

きた通常原子核物質と α クラスター構造の関わりは、データサイエンスでの「教師なしの統計学習^[15]」の手法でも独立に解析し、同じ結論に達しました。

本研究では、第一原理計算からシュレーディンガー方程式の解を求め、その解が持つ回転体の性質から核子密度分布を求めるという新しい手法によって α クラスター構造を解明しました。特に、¹²C原子核の α クラスターがどのように発現するのかが初めて明らかになり、その構造が従来予想されていたものと大きく異なることが分かりました。

3. 今後の期待

本研究により、 α クラスター構造は核力によって発生し、クラスターのない通常原子核物質（量子液体）と混ざることが示されました。このことから、 α クラスター構造が多かれ少なかれ、どの状態の原子核にも含まれていると考えるのが妥当です。この考え方は、 α クラスター構造は α 粒子の放出が起こりやすい場合に特徴的に発現するとしてきた、池田ダイアグラム^[16]などの旧来の考え方とは異なります。

今回得られた知見は、未知の側面が多い原子核の構造解明に重要な指針を与えると考えられます。例えば、ホイル状態と天体での元素合成の関係は未解明の問題ですが、本研究で得られた波動関数などを用いて研究が進めば、炭素をはじめとする生命の誕生につながる諸元素の起源などの解明に貢献すると期待できます。また、今回明らかになった原子核構造の一般的側面は、原子核からの α ノックアウト反応や、超重元素崩壊で重要な α 崩壊の研究に新たな展開をもたらすことが期待できます。さらに、 α クラスター構造が他種の原子核構造とも結合するという知見は、例えば中性子星^[17]の構造や進化の研究にも影響を与える可能性があります。

4. 論文情報

<タイトル>

α -Clustering in Atomic Nuclei from First Principles with Statistical Learning and the Hoyle State character

<著者名>

T. Otsuka, T. Abe, T. Yoshida, Y. Tsunoda, N. Shimizu, N. Itagaki, Y. Utsuno, J. Vary, P. Maris, and H. Ueno

<雑誌>

Nature Communications

<DOI>

10.1038/s41467-022-29582-0

5. 補足説明

[1] スーパーコンピュータ「京」と「富岳」

「京」は文部科学省が推進する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 (HPCI) の中核システムとして、理化学研究所と富士通株式会社が共同で開発を行い、2012年9月に共用を開始した、計算速度10ペタフロップス級のスーパーコンピュータ。「富岳」はスーパーコンピュータ「京」の後継機。2021年3月に共用を開始し、計算速度400ペタフロップス以上の性能を誇る。

[2] 第一原理計算

一般に、基本的・根源的なところから出発し、物理模型的な仮定などを入れずに結果を出す計算方法。多くの場合、基本的なものに関しては曖昧さが少ないので、計算の途中で近似や模型的な仮定などを入れないで得られた結果は信頼度が高いと考えられている。実験データを得ることが難しく、結果の検証が困難な場合などには特に意義が高くなる。

[3] アルファ崩壊

原子核がアルファ (α) 粒子を放出して、別の原子核に変わる過程を指す。重い原子核では最もよく起こる崩壊様式の一つである。原子核の3大崩壊モード (他はベータ崩壊とガンマ崩壊) の一つでありながら他の二つとは違って、アルファ崩壊の起こるメカニズムや崩壊強度の理解は進んでいない。

[4] 超重元素

未知の重い元素を指すこともまれにあるが、専門的には原子番号104のラザホージウム (Rf) 以降の元素を指す。原子番号114のフレロビウム (Fl) の中性子数184付近の同位体に安定な超重元素があるのではないかと考えられ、探索の努力が続けられている。理研が発見した原子番号が113のニホニウム (Nh) も超重元素の一つである。

[5] ホイル状態

^{12}C 原子核の2番目の励起状態で、3個の α 粒子が合体して形成される。英国の天文学者フレッド・ホイルが、天体での原子核反応で現在量の炭素原子が生成されるには、ホイル状態が存在するはずだと予言した。それが後に原子核物理の実験で確認されたのでこの名前が付いている。ホイル状態の原子核はほとんどの場合、3個の α 粒子に戻ってしまうが、一部は ^{12}C の第一励起状態に遷移する。それはさらに基底状態に遷移し、安定な ^{12}C 原子核となる。これが、地球上に大量にある炭素の起源である。

[6] α クラスター

アルファ (α) 粒子によく似た構造を持つ陽子2個、中性子2個の塊。原子核の中に混ざっており、状況に応じて構造は多少変化する。以前からこのような仮説や模型はあったが、本研究がその存在と現れ方を初めて明確に示した。例えば、ベリリウム-8原子核 (^8Be) は2個の α クラスターからできているが、2個が互いに引っ張り合っているため、どちらもアルファ粒子からは少し歪んでいる。

[7] 量子色力学

素粒子と呼ばれる粒子の中には、クォークやグルーオンからできている一群のものがある。それらはハドロンと呼ばれ、陽子や中性子、パイ中間子などが含まれる。ハドロンの性質を支配している原理が量子色力学である。量子色力学によって発生する力を解明し、1個～複数個のハドロンから構成される物理系の性質を明らかにするのは容易ではない。格子量子色力学計算によって、陽子や中性子の質量が計算できるようになったが、それらの間に働く力は十分な精度では求められていない。

[8] ノックアウト反応

原子核に衝撃を与えると、一般に原子核から、構成要素である陽子や中性子が飛び出してくる。衝撃が大きければ、それが原子核全体に伝わる前に、その衝撃を最初に受けた陽子または中性子が飛び出す。もし、 α クラスターが元々原子核内にかたい塊として存在していれば、それが衝撃を引き受けてそのまま飛び出してくると考えられる。このような反応を一般にノックアウト反応と呼ぶ。

[9] カイラル摂動論

量子色力学が持つ対称性を満たしつつ、陽子と陽子の散乱、陽子と中性子の散乱などを記述できるように、理論に含まれるいくつかのパラメータを決め、ハドロン間の力を導出する手法。ある種の展開が収束することを前提にしているため、摂動論と呼ばれる。量子色力学から出発した場合、陽子や中性子を含むハドロンの中に働く力を導くことを可能にする、現在利用可能で定量性のある唯一の方法論である。

[10] モンテカルロ殻模型

原子核の中の多数の陽子と中性子から成る多体系の量子構造を解明する方法の一つ。他の分野におけるCI (Configuration Interaction) 計算と原子核物理での殻模型計算は本質的には同じである。モンテカルロ殻模型は殻模型計算に含まれるが、通常の方法では扱えない非常に大きな系も扱える。東京大学を中心に発展してきた。

[11] 第一原理コア無しモンテカルロ殻模型

モンテカルロ殻模型の中でも、全ての陽子と中性子を活性化し、十分に大きな一粒子軌道の空間 (model space) をとり、第一原理的に求められた核子間相互作用 (核力) を用いて、原子核の構造を求める計算を指す。

[12] 通常原子核物質、量子液体

原子核内での核子 (陽子と中性子) は、表面の内側ではほぼ一定の密度で、すなわちほぼ一様に分布している、という説明が多くの原子核で成り立つ。それが満たされている場合を、本研究では通常原子核物質と呼んでいる。専門的には、量子液体に属するものである。クラスター構造がある場合には、密度は特定の場所に集中するので場所によって大きく変わり、通常原子核物質とは異なる。

[13] 回転体理論

原子核は量子的な回転運動をすることがある。理想的な回転運動を、原子核に固定された物体固定座標系で見た場合にはいつも同じ量子状態が見える。実験室系でその原子核を見ると、その量子状態がクルクルと回っている。本当に欲しいものは回っているものの、スナップショットである。そこで、原子核が回転状態にあることを確認し、

回転体理論を用いて物体固定座標系での量子状態を求め、それから密度分布のスナップショット（図3）を得たのが本研究である。

[14] クロスオーバー、相転移

あるパラメータ x の変化に応じて、着目している量子系の性質が変化する場合に、ある値 x_1 ではエネルギーが低く安定な A という状態と、エネルギーが高く不安定な B という状態が現れ、別の値 x_2 では、A が不安定、B が安定になるとする。クロスオーバーとは、 x_1 と x_2 の中間の値のとき、A と B の中間的な状況になることを指す。一方、水が氷になる例をはじめ、多くの物質は相転移を起こす。相転移の場合は x が x_1 から x_2 に向かって変化し、境目の値 x_3 を超えると A と B の関係が入れ替わり、中間的な状況は基本的に現れない。 α クラスターから通常原子核物質への遷移に関しては、相転移であるという報告がいくつかあるが、実際はクロスオーバーであることを本研究で示した。

[15] 教師なしの統計学習

機械学習は大きく「教師なし統計学習」と「教師あり統計学習」に分けられ、前者の中に「クラスタリング」という手法がある。本研究の主題のクラスターと同じ語源であるが、実際の意味は異なる。機械学習での「クラスタリング」とは多くのデータを似た性質のもの集まりに分けることを指す。本研究では「クラスタリング」の技法の一つの樹状図（dendrogram）を用いて、通常原子核物質とクラスター構造に分ける解析を行い、機械学習とは関係のない本来の方法と同じ結論に至った。

[16] 池田ダイアグラム

α クラスターの形成に関する概念。原子核にエネルギーを与えて励起し、エネルギーがある閾（しきい）値を越えると α 粒子が飛び出してくる。池田ダイアグラムでは、いくつかの原子核に対して、どのエネルギーで α 粒子の放出が起きるかを示している。さらに、 α 粒子の放出が起こりやすくなるエネルギーで、 α クラスターが原子核中に現れやすくなると提唱している。

[17] 中性子星

太陽と同程度の質量を持ちながら、その半径が 10km 程度しかない奇妙な天体であり、その主成分は中性子であると考えられている。中性子以外に、5%程度の陽子などが混合していると考えられているが、詳細についてはまだ未解明である。2017 年には、二つの中性子星が衝突し合体する事象が重力波により観測された。この中性子星合体现象が、宇宙における鉄より重い元素の合成過程（r プロセス）の有力な候補とされ、その解明が待たれている。

6. 発表者・機関窓口

<発表者> ※研究内容については発表者にお問い合わせください。

理化学研究所 仁科加速器科学研究センター 核分光研究室

客員主管研究員 大塚 孝治 （おおつか たかはる）

協力研究員 阿部 喬 （あべ たかし）

TEL：090-7219-7624（大塚）

E-mail：otsuka[at]phys.s.u-tokyo.ac.jp（大塚）

東京大学 大学院理学系研究科附属原子核科学研究センター
特任研究員（研究当時） 角田 佑介 （つのだ ゆうすけ）

日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター
主任研究員 宇都野 穰 （うつの ゆたか）
TEL : 029-282-6901
E-mail : utsuno.yutaka[at]jaea.go.jp



大塚 孝治



阿部 喬



角田 佑介



宇都野 穰

<機関窓口>

* 今般の新型コロナウイルス感染症対策として、理化学研究所では在宅勤務を実施しておりますので、メールにてお問い合わせ願います。

理化学研究所 広報室 報道担当
E-mail : ex-press[at]riken.jp

東京大学大学院理学系研究科・理学部 広報室
E-mail : kouhou.s[at]gs.mail.u-tokyo.ac.jp

日本原子力研究開発機構 広報部 児玉 猛
E-mail : kodama.takeshi[at]jaea.go.jp

※上記の[at]は@に置き換えてください。
