

宇宙の重元素の起源に迫る光の分析を可能に — 最高精度の原子過程データを計算 —

加藤 太治

核融合科学研究所では、核融合炉のプラズマや材料の中に含まれる重元素について、高精度な原子過程データを構築する研究を進めています。ここで、原子過程データとは、原子核の周りの電子が取り得るエネルギーの値（エネルギー準位）、原子が放射・吸収できる電磁波の波長や放射・吸収確率など、それぞれの元素に固有のデータのことです。本稿では、宇宙の重元素起源の解明に向けた、重元素の原子過程データに関する、核融合分野と天文分野、そしてリトアニアの研究者との分野融合的な国際共同研究について紹介します。

およそ1億3000万年前、地球から遠く離れた宇宙で二つの中性子星が合体して生じた重力波が2017年8月17日に初めて検出されたというニュースは、まだ皆さんの記憶にも新しいと思います。この天体からは重力波とともに、キロノバと呼ばれる爆発現象による光が観測されたことはご存知だったでしょうか？宇宙において、プラチナや金など、鉄より重い元素がどこでどのように作られたのかは、まだよく分かっていません。鉄より重い元素は、原子核が中性子を取り込んでベータ崩壊（電子放出）することにより形成されます。このうち、ベータ崩壊するよりも速く中性子を大量に取り込み、中性子過剰な不安定核を経てベータ崩壊する場合を r (rapid) プロセスと呼びます。宇宙に存在するプラチナや金、またレアアースなどの重元素の大部分は、この r プロセスで形成されたと考えられています。このような r プロセス元素

の起源の一つとして注目されているのが、中性子星の合体なのです。合体により放出された物質内部では、r プロセスによる不安定核の放射性崩壊のエネルギーで電磁波が生じます。この電磁波の放射が「キロノバ」と呼ばれています。観測されたキロノバの光解析には r プロセス元素の原子過程データが必要ですが、世界基準で広く用いられているものが極めて少ないという問題がありました。そこで、筆者らの研究グループは、r プロセス元素の原子過程データを独自に計算によって構築する研究を開始しました。

r プロセスによって合成される重元素は、原子番号30~92まで広く分布しています。その中で、ランタノイド元素（原子番号57~71）は4f軌道をもつため、密に詰まった無数の励起エネルギー準位が存在し（図1）、光の吸収線の数も膨大なものになります。例えば、ランタノイド元素の一つであるネオジム（原子番号60）には紫外から赤外領域にかけて非常にたくさんの吸収線があり、際立って高い光吸収係数をもつことが筆者らの研究グループの計算によっても示されました（図2）。一方、4d軌道をもつルテニウム（原子番号44）、5p軌道をもつテルル（原子番号52）の光吸収係数はそれより桁違いに低く、紫外から可視領域に集中しています。このように、光の吸収特性は元素の種類によって大きく異なりますので、キロノバの光の明るさや色（波長）は、中性子星合体によって合成された重元素の種類や量を推定する手

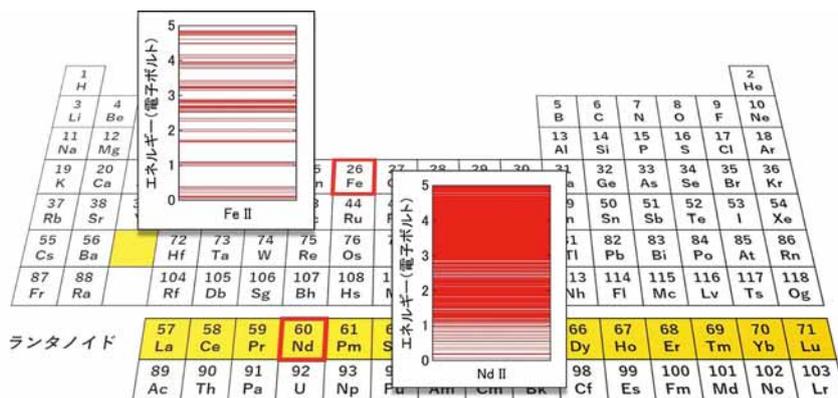


図1. ランタノイド元素の一覧（黄色で表記）とネオジムのエネルギー準位の分布。比較のために、鉄のエネルギー準位の分布も示しています。Fe IIは鉄の1価の正イオン（原子から1個の電子が剥がれた状態）、Nd IIはネオジムの1価の正イオンのこと。縦軸は基底状態の最低エネルギー準位からの励起エネルギー（1電子ボルトは約 1.602×10^{-19} ジュール）。赤色の水平線は、原子の中の電子が取り得るとびとび（離散的）の励起エネルギー準位を表しています。

がかりを与えてくれるはずですが。筆者らは、キロノバに特に重要な影響を与えるネオジムの1価～3価の正イオンが吸収する約300万通りの波長の光に関して、原子過程データの計算精度をこれまでより更に高める研究を行いました。この研究のポイントは、効率良く高精度な計算を行うために、量子力学に基づく計算方法を最適化することでした。そして、この計算方法を用いて得られたエネルギー準位の一部をアメリカの国立標準技術研究所（NIST）で公開されている実験データと比較した結果、誤差が10%程度と、世界最高精度であることが確かめられました。

では、以下に今回の計算の詳細について説明します。原子は基底状態と励起状態のエネルギー準位の差に相当する波長の光を吸収します。このような光吸収の原子過程データの高精度な計算には、基底状態と励起状態での原子の中の電子の相互作用をどちらも正確に表す必要があります。量子力学では、電子は同時に何通りもの配置を取り得ますが、基となる電子配置と、そこから仮想的に配置換えをして得られる電子配置との重ね合わせ（数学的には線形結合や線形和と呼ばれる）によって、電子の相互作用（電子相関）の効果を表すという方法があります。筆者らは、光吸収に係わる基底状態と励起状態の電子相関効果をバランスよく計算に取り込むために、基底状態と励起状態の基となる電子配置（参照空間）と、そのそれぞれから得られる仮想的な電子配置（活性空間）とにグループ分けをしました（図3）。このような方

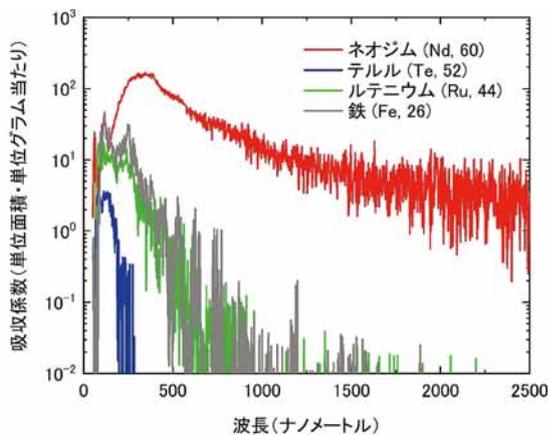


図2. rプロセス元素と鉄の光吸収係数。物質中の光の透りにくさを表す量。中性子星合体からの放出物質の典型的な物理状態（密度1立方センチメートル当たり10兆分の1グラム、絶対温度5000ケルビン）を仮定して計算したもの。ナノメートルは100万分の1ミリメートル。目に見える波長領域はおよそ400～800ナノメートル。

法は多参照配置間相互作用法と呼ばれます。活性空間の電子配置は無限に考えられ、それを多く取り入れるほど計算は高精度になりますが時間がかかります。そこで、活性空間から取り入れる電子配置を、電子相関効果が特に大きなものに限りしました。それは、参照空間の電子配置の最外殻軌道から1個ないし2個の電子を配置換えしたものです。このようにして、参照空間と活性空間に含まれる電子配置の組み合わせを幾つか試して計算を行い、現実的な時間内で最も精度の高い結果が得られる組み合わせを見つけました。そして、この計算方法を用いて、ネオジムの原子過程データを最高精度で構築することができたのです。

現在、同じ方法で残るすべてのランタノイド元素についても計算を進めています。今後、高精度の原子過程データを用いることによって、宇宙の重元素起源の解明に向けた研究が更に加速されると期待しています。

本稿で紹介した内容は、ピリニウス大学（リトアニア）理論物理・天文学研究所のGediminas Gaigalas教授、Pavel Rynkun博士、Lima Radžiūtė博士、東北大学天文学教室の田中雅臣准教授との共同研究によるものです。

（核融合システム研究系 准教授）

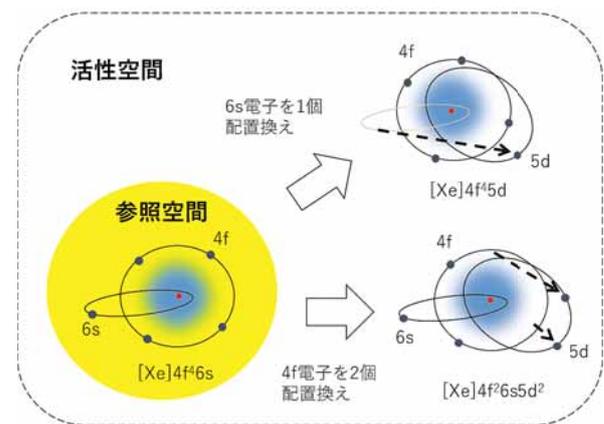


図3. 参照空間と活性空間の電子配置のイメージ図。この図の参照空間の電子配置は、ネオジムの1価の正イオンの基底状態（4f軌道に4個の電子、6s軌道に1個の電子が配置）を表しています。活性空間の電子配置の例は、基底状態の電子配置の軌道から1個または2個の電子を空いた5d軌道に配置換えして得られるものです。[Xe]は内殻の電子配置を表しており、ネオジムに最も近い原子番号の希ガスであるキセノンの基底状態の電子配置（ $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6$ ）と同じです。参照空間の電子配置に活性空間の電子配置を重ね合わせることによって、参照空間の電子配置での電子相関効果を表すことができます。