

解説

中性子星合体からの電磁波放射「キロノバ」(I)

-放射の性質と重元素の原子データ-

田中雅臣

解説

中性子星合体からの電磁波放射「キロノバ」(II)

-スペクトルの解読と重元素の原子データ-

土本菜々恵

解説

放射線挙動解析コード PHITS の生命科学分野への応用

松谷悠佑, 甲斐健師, 佐藤達彦

新しい風

ミュオンと原子, ミュオンの原子

神田聡太郎

新しい風

ミュオン触媒核融合と高分解能 X 線分光

外山裕一

原子衝突学会賛助会員（五十音順）

アイオーピー・パブリッシング・リミテッド（IOP 英国物理学会出版局）

Institute *of* **Physics**

<https://iopscience.iop.org/>

アドキャップバキュームテクノロジー株式会社



<http://www.adcap-vacuum.com/>

有限会社イーオーアール



Electronics Optics Research Ltd.

<https://www.eor.jp/>

イノベーションサイエンス株式会社



<https://www.innovation-science.co.jp/>

クリムゾン・インタラクティブ・プライベート・リミテッド



<https://www.enago.jp/>

<https://www.ulatus.jp/>

<https://www.trinka.ai/jp/>

コスモ・テック株式会社



<https://www.cosmotec-co.jp/>

株式会社サイエンスラボラトリーズ



株式会社 サイエンス ラボラトリーズ

<https://scilab.co.jp/>

株式会社ジーテック



<http://www.ggg-tech.co.jp/index.html>

真空光学株式会社



<https://www.shinku-kogaku.co.jp/>

超高真空技術と光学技術を用いた設計・製作

スペクトラ・フィジックス株式会社



<https://www.spectra-physics.com/ja/>

ソーラボジャパン株式会社



<https://www.thorlabs.jp/>

株式会社テクノエーピー



<https://www.techno-ap.com/index.html>

株式会社東京インスツルメンツ



<https://www.tokyoinst.co.jp/>

株式会社ナバテック



<http://www.navatec.co.jp/>

伯東株式会社



<https://www.g5-hakuto.jp/>

フォトテクニカ株式会社



<https://www.phototechnica.co.jp/>

丸菱実業株式会社



<https://nec-marubishi.com>

原子衝突学会誌

しょうとつ

第21巻 第3号



THE ATOMIC COLLISION
SOCIETY OF JAPAN

目次

解説

- 中性子星合体からの電磁波放射「キロノバ」(I) -放射の性質と重元素の原子データ-
田中雅臣 ... R006
- 中性子星合体からの電磁波放射「キロノバ」(II) -スペクトルの解読と重元素の原子データ-
土本菜々恵 ... R007
- 放射線挙動解析コード PHITS の生命科学分野への応用
松谷悠佑, 甲斐健師, 佐藤達彦 ... R008

新しい風

- ミュオンと原子, ミュオンの原子
神田聡太郎 ... P-28
- ミュオン触媒核融合と高分解能 X 線分光
外山裕一 ... P-31

会務報告(2024.07.16~2024.09.17)

- 原子衝突学会第49回年会報告
行事委員会 ... P-34
- 原子衝突学会第49回年会優秀ポスター賞受賞者のお知らせ
顕彰委員会 ... P-36
- 第51回定期総会報告
庶務委員会 ... P-37

会務報告(2024.09.17~2024.11.15)

- 原子衝突学会第26回若手奨励賞募集のお知らせ
顕彰委員会 ... P-38
- 2024年度第5回運営委員会(文書持回)開催報告
庶務委員会 ... P-38
- 2024年度第6回運営委員会(文書持回)開催報告
庶務委員会 ... P-39
- 15th Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics (AISAMP15)参加報告
熊谷嘉晃 ... P-39

- 今後の「しょうとつ」冊子体の発行と「しょうとつメール版」について
編集委員会 ... P-41
- 「しょうとつ」原稿募集
編集委員会事務局 ... P-41
- ユーザー名とパスワード
... P-41
-

中性子星合体からの電磁波放射「キロノバ」(I) - 放射の性質と重元素の原子データ -

田中雅臣^{1*}

¹ 東北大学大学院理学研究科天文学専攻 〒980-8578 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 6-3

masaomi.tanaka@astr.tohoku.ac.jp

令和6年7月31日原稿受付

宇宙における重元素の起源、特に金やプラチナ、ウランなど速い中性子捕獲反応を必要とする元素の起源は長年にわたる物理学・天文学の未解決問題である。近年、そのような重元素の起源として最も期待されているのが「中性子星」の合体現象である。中性子星が合体すると一部の物質が放出され、速い中性子捕獲反応により重元素が合成される。さらに、新しく合成された原子核の放射性崩壊によって加熱された物質が「キロノバ」と呼ばれる電磁波放射を起こすことが予想されてきた。キロノバは、可視光・赤外線光子が重元素の束縛-束縛遷移によって放出物質と相互作用しながら系からじわじわと抜けてくる現象であり、キロノバの性質を理解するには、完全性の高い重元素の原子データが必要不可欠である。本稿では、キロノバの性質を理解するための重元素の原子データの需要と、近年の進展について紹介する。また、中性子星合体の重力波・電磁波観測の現状を紹介し、中性子星合体の重元素合成に関して何が分かっているかをまとめ、今後の展望を述べたい。

1. 宇宙における元素の起源

私たちの身の回りには様々な元素が存在している。私たちの体の大部分は水（水素と酸素）できていて、今も無意識に酸素と窒素を吸い込んでいる。地球の岩石には酸素とケイ素が多く含まれており、そんな地球の上に私たちは鉄などの金属をたくさん使って建物を立てている。指に金やプラチナの指輪をはめている方もいるかもしれない。また本記事を読んで下さる読者の中には、それら様々な元素を使った各種の実験をされている方も多いだろう。

ではこのような元素は一体どこでできたのだろうか？宇宙が約140億年前にビッグバンで始まったときには、水素とヘリウム、少量のリチウムしか存在しなかったことが知られている（図1）。それより重い元素は全て、宇宙に存在する星の内部など、極限的な環境で合成されたものである。

例えば、太陽の中心では今現在水素の核融合反応によりヘリウムが作られている。数10億年後に水素が使い尽くされると、ヘリウムの核融合で炭素や酸素が合成されるだろう。太陽よりも10倍程度重い星ではこのような核融合反応が鉄を作るまで続くことが知られている。そして、そのような星は一生の最後に「超新星爆発」という大爆発を起こし、それまでに合成した元素を宇宙空間に撒き散らす。そのガスから次の世代の星が生まれ、また爆発を起こす、というサイクルが続いて、宇宙ではじわじわ元素が増えてきたのだ。私たちの周りに様々な元素が存在するのは、そのような無数のサイクルの結果である。

では、鉄より重い元素は宇宙のどこでできたのだろうか？鉄の原子核は最も安定であるため、星の中で鉄よりも重い元素を作るのは容易ではない。例えば、鉄よりも重い元素を合成す

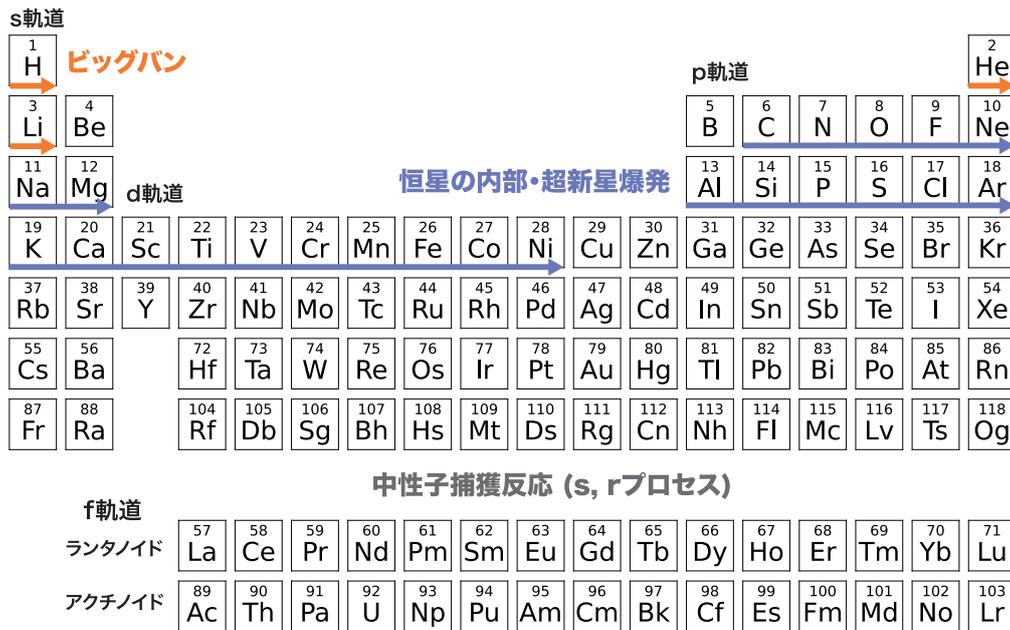


図 1: 元素の周期表と元素の起源. 鉄よりも重い元素の多くは中性子捕獲反応によって合成される.

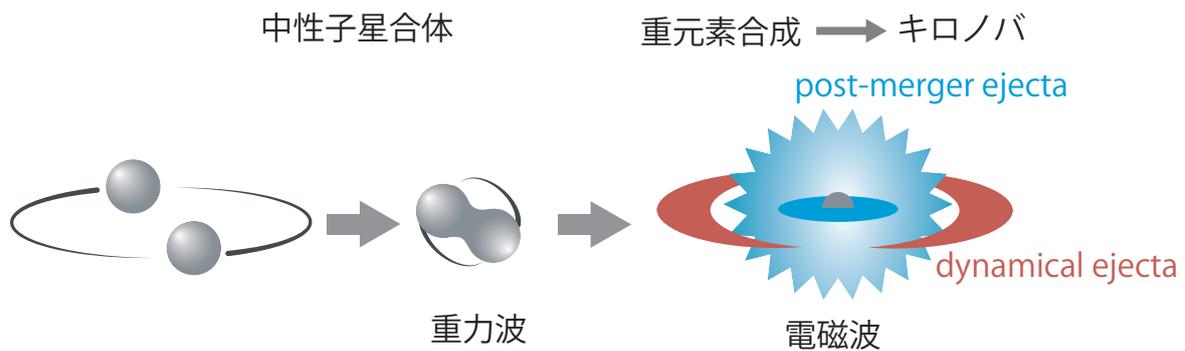


図 2: 中性子星合体とキロノバの模式図.

るには、鉄の原子核に電荷をもつ陽子やヘリウムをくっつければ良いが、星の中でそのような反応が起き得るような高温状態が達成されると、光子が鉄の原子核を壊してしまう。そのため、鉄よりも重い元素は電荷をもたない中性子との反応（中性子捕獲反応）で合成されると考えられている [1]。原子核にいったん中性子がくっついて同位体が作られ、その原子核がベータ崩壊（中性子数が減って陽子数が増える）を起こすことで原子番号が大きくなるという仕組みである。

中性子捕獲反応には「slow (*s*) プロセス」と「rapid (*r*) プロセス」の 2 種類があることが知られている。*s* プロセスは中性子捕獲が遅く、一つ中性子が捕獲されるたびにベータ崩壊が

起きる過程である。一方で、*r* プロセスでは中性子捕獲が速く、中性子が多数捕獲された後にベータ崩壊が起きる。これら二つの過程ではどちらも鉄より重い元素が作られるが、作られやすい元素の種類は異なり、バリウム (Ba, $Z = 56$) や鉛 (Pb, $Z = 82$) といった元素は主に *s* プロセスで、金 (Au, $Z = 79$) やプラチナ (Pt, $Z = 78$)、ウラン (U, $Z = 92$) などの元素は主に *r* プロセスで作られることが知られている。

中性子捕獲反応のうち、*s* プロセスは恒星の末期で起きることが知られている。その過程はやや複雑なので割愛するが、実際にそのような恒星を分光観測すると重元素の量が増えていることが確認されている。特に重要なのが、安定

な同位体をもたないテクネチウム (Tc, $Z = 43$) が発見されていることである。数 100 万年程度の時間が経つとテクネチウムは放射性崩壊でいなくなってしまうので、これは星がまさにそのような元素を作っている最中であることを意味している。

一方で、 r プロセスがどこで起きているのかはまだ分かっていない。 r プロセスには中性子が大量に必要なが、中性子自体は約 15 分程度で陽子にベータ崩壊してしまうため、中性子がどんどん供給される現場を考える必要がある。そのため、 r プロセスは中性子を多く含む「中性子星」という星が関係する現象で起きるのではないかと考えられてきた。特に、星が一生の最後に起こす超新星爆発が長年有力視されてきた。しかし、超新星爆発の天文学観測でも r プロセスが起きている証拠は得られておらず、詳細なコンピュータシミュレーションを行っても r プロセスの兆候が見られないことが問題となっていた。そこで近年、「中性子星合体」という現象に注目が集まっている。前置きが長くなってしまったが、本記事と次の土本氏の記事 [2] では、中性子星合体での重元素合成の検証の現状と、そのために必要となる原子データの需要について紹介したい。

2. 中性子星合体と「キロノバ」

中性子星とは質量が太陽の 1.5 倍程度、半径が 10 km 程度の天体である。太陽の半径は 70 万 km 程度であることを考えるとこの天体がいかに「コンパクト」かが分かるだろう。実際に、中性子星の内部の密度は原子核内部の密度 ($\rho \sim 10^{14} \text{ g cm}^{-3}$) に匹敵しており、中性子星表面の重力は地球表面の 1000 億倍程度にもなる。さらに、宇宙には二つの中性子星がお互いの周りを回っている系が知られており、このような系は一般相対性理論で予想される重力波を放出してエネルギーをじわじわと失い、軌道が縮んで最後には二つの中性子星が合体してしまうと考えられる。

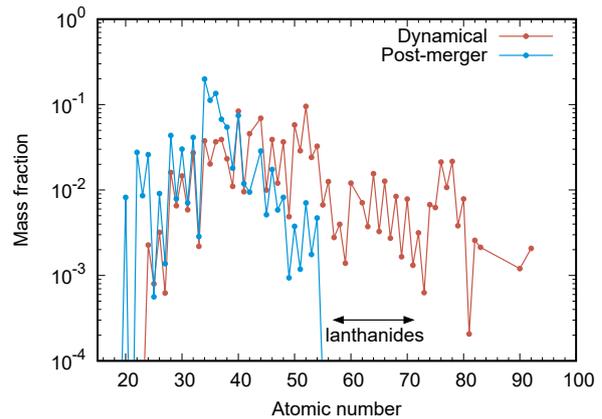


図 3: 中性子星合体で合成される重元素 [3] (藤林翔氏と和南城伸也氏より提供)。合体初期に放出される dynamical ejecta (赤) では中性子割合が高く、より重い元素が合成されやすく、その後放出される post-merger ejecta (青) では中性子割合が抑えられ、比較的軽い側の元素が合成されやすい。

中性子星が合体すると、一部の物質が宇宙空間に飛び出していくと考えられている (図 2)。合体の直後 (数 10 ミリ秒程度) には中性子星の表面が潮汐力によって飛んでいく (dynamical ejecta)。さらに、中心にできた天体の周りをガスがぐるぐると周り、そこから数秒ぐらいかけて物質が飛んでいく (post-merger ejecta)。放出された物質の典型的な全質量は 0.01 太陽質量程度であり、速度は光速の 10% 程度 (この系からの脱出速度) 程度である。

放出物質は豊富に中性子を含んでいるため、 r プロセスによって多くの重元素が合成される。図 3 は中性子星合体で合成される元素を計算した結果の一例である [3]。最初に飛び出していく dynamical ejecta はほぼ中性子星そのものなので中性子の割合が高く、より重い元素が合成されやすい。一方で、後に飛び出していく post-merger ejecta ではやや中性子の割合が低く、比較的軽い側の元素が合成される。このように、中性子星合体は自然と重元素を作り出し、宇宙空間に放出することが予想されてきた。

ここまで見てきたのは理論的な研究による予想である。では本当にこのようなことが宇宙で起きているのだろうか？そして、それを検証す

ることはできるのだろうか？答えは「イエス」である。r プロセスでは中性子過剰な原子核が合成されるため、放出物質の中で新しくできた原子核が放射性崩壊を起こし続ける。その寿命は数秒のものから数年以上のものまであり、常に複数の原子核種が放射性崩壊を起こしている状況である。放射性崩壊で放出されるガンマ線・ベータ線は物質と相互作用してエネルギーを失い、その分物質の熱エネルギーとなる。この熱エネルギーを起因として、中性子星合体からは熱的な電磁波放射が期待されるのである。この現象を「キロノバ」と呼ぶ [4]。詳細は第4節で後述するが、実際に2017年に中性子星合体が観測された際にキロノバが観測され、中性子星合体における重元素合成が検証されている。

ここで中性子星合体から放出される物質のプラズマの状態を確認しておきたい。例えば合体から1日後には放出された物質の広がりには $R \sim vt \sim 3 \times 10^{14}$ cm 程度である。放出される質量を0.01太陽質量程度とすると、このときのプラズマの質量密度は $\rho \sim 10^{-13}$ g cm⁻³ 程度である。プラズマを構成するのは重元素のイオンと電子で、両者は十分相互作用するため両者の温度は等しく、注入される放射性崩壊のエネルギーを考えると、プラズマのイオン・電子温度は数1000 K程度となる。また、合体から1日程度の放出物質は光学的に厚く、プラズマと輻射場も十分に相互作用しているため、輻射の温度もイオン・電子と同程度で数1000 Kとなる（以後、本稿ではこれら全ての温度を指して「温度」と記載する）。このため、「キロノバ」は主に可視光や赤外線で輝く。

ではこのようなプラズマから放出される電磁波放射「キロノバ」の特徴はどのようになるだろうか。上記のプラズマパラメータで Saha 平衡を考えると、合成された重元素のイオン化度はせいぜい数階電離程度である。宇宙プラズマは低密度であるため、温度の割にはイオン化が進んでいるが、それでも完全電離とは程遠い。そのため、発生した熱的な可視光・赤外線光子

は重元素の束縛-束縛遷移を通じて主に相互作用を行う。合体後10日間程度では、この相互作用で想定される光子の平均自由行程は系の大きさよりも短いため、この系は光学的に厚いと言える。つまり、光子は重元素による吸収と再放射を受けながら、じわじわと系の外に逃げ出していく。

このとき光子が系から脱出するまでの時間（拡散時間）は

$$t_{\text{diff}} = \frac{R}{c} \tau = \frac{R}{c} \kappa \rho R \quad (1)$$

と書ける。ここで、 τ は系の光学的厚み、 κ は光と物質の相互作用の度合いを表す吸収係数 (cm² g⁻¹)、 R は系の半径である。放出物質は時間とともに膨張するため ($R = v_{\text{ej}} t$, v_{ej} は放出物質の速度)、拡散時間は $t_{\text{diff}} \propto t^{-1}$ で時間とともに短くなる。この拡散時間が合体からの日数 t と同じぐらい短くなると、外にいる観測者はこの系からの光を観測できるようになるため、天体が明るく輝く典型的なタイムスケールは

$$\begin{aligned} t &= \left(\frac{3\kappa M_{\text{ej}}}{4\pi c v_{\text{ej}}} \right)^{1/2} \\ &\simeq 8 \text{ days} \left(\frac{M_{\text{ej}}}{0.01 M_{\odot}} \right)^{1/2} \\ &\quad \left(\frac{v_{\text{ej}}}{0.1 c} \right)^{-1/2} \left(\frac{\kappa(\lambda; \rho, T, X)}{10 \text{ cm}^2 \text{ g}^{-1}} \right)^{1/2} \quad (2) \end{aligned}$$

と書ける [4, 5]。ここで M_{ej} は放出物質の質量を表し、 M_{\odot} は太陽質量である。また、単純のため $M_{\text{ej}} = (4\pi/3)R^3\rho$ と仮定した。

キロノバの光り方を決める3つの量のうち、 M_{ej} と v_{ej} は中性子星合体の物理で決まる量である。一方で、 κ は原子の性質とプラズマの状態（密度 ρ 、温度 T 、元素組成 X など）で決まる量である。上式では単純のため吸収係数が波長によらず一定であることを仮定したが、実際はそれぞれの波長で吸収係数は異なり、様々な波長で異なる吸収を受けながら光が逃げていき、その逃げた光が天文学の望遠鏡で観測される。つまり、キロノバの性質を理解し、天文学の観測量から中性子星合体の物理量（質量や速度）、

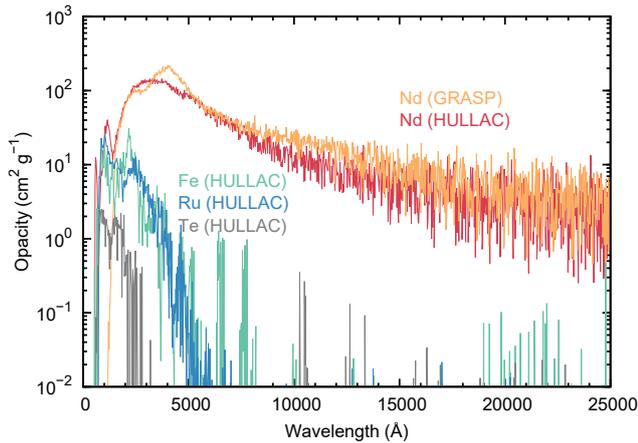


図 4: 元素ごとの吸収係数. 密度は $\rho = 10^{-13} \text{ g cm}^{-3}$, 温度は $T = 5000 \text{ K}$ の場合. Nd ($Z = 60$) は開殻 f 軌道に, Fe ($Z = 26$) と Ru ($Z = 44$) は開殻 d 軌道に, Te ($Z = 52$) は開殻 p 軌道に電子をもっており, 開殻 f 軌道に電子をもつ元素の吸収係数が高いことが分かる.

そして元素合成を正しく評価するには, この吸収係数を知ることが必要不可欠なのである.

しかし, この吸収係数を評価するための原子データが存在しないことが天文学で大きな問題となっていた. 天文学に登場するプラズマはほとんど水素, ヘリウムなどの軽元素や, 炭素や酸素から鉄までの元素で構成されるため, これまで重元素の詳細かつ完全な原子データの需要はほとんどなかったのである. そのため, キロノバのシグナルを計算するために, 波長, 密度, 温度の全てに対して一定の吸収係数を仮定するしかなく, 定量的な研究を行うことができなかった. 次節では, この状況を打開するための私たちの研究について紹介する.

3. 重元素の原子データ

キロノバで光が物質とどのように相互作用するかを理解するために, まず必要となる原子の性質 (原子データ) は何かを考えてみる. もしプラズマが熱平衡状態にあるとすると (この仮定の妥当性に関しては第 5 節に再度議論したい), 密度と温度が決まればイオン化度や励起状態の占有数は分かるため, 束縛-束縛遷移の

度合いを記述するためには, (1) 原子のエネルギー準位と (2) 遷移確率が必要となる.

今知りたいのは光がどれほど物質と相互作用するかという吸収係数なので, エネルギー準位に関しては基底状態の近くだけでなく, 多くの励起状態の情報も必要である. また束縛-束縛遷移に関しては, 遷移確率が低くてもたくさんの遷移があれば全体の吸収係数に寄与する可能性があるため, 最も強い遷移の情報だけがあれば良いというわけではない. つまり, 吸収係数の評価には極めて「完全性」の高い原子データが求められるのである. これが天文学だけでなく, 原子物理学でもそのようなデータが存在しなかった理由である.

このような状況を打開するため, 我々は 2016 年頃から原子物理学・天文学の研究者の共同研究で原子構造の理論計算 (原子構造計算) に着手した. 核融合科学研究所の加藤大治氏, Vilnius 大学の Gediminas Gaigalas 氏らの協力を仰ぎ, 周期表からいくつか代表的な元素を選んで原子構造計算を行って頂いた. 計算には, 電子間相互作用に対して局所有効ポテンシャルを導入する HULLAC コード [6] と電子間相互作用を正しく扱う GRASP コード [7] を用いた. これらのコードの詳細は小池文博氏によるしょうとつの解説記事 [8] を参照して頂きたい. 二つの異なるコードで独立な計算を行った理由は, 理論計算方法による不定性を理解・評価するためである.

図 4 はこの原子構造計算の結果を用いて評価された吸収係数である [9]. これを見ると, 可視光と赤外線領域において, 特にネオジウム (Nd, $Z = 60$) の吸収係数が鉄 (Fe, $Z = 26$) やルテニウム (Ru, $Z = 44$), テルル (Te, $Z = 52$) の吸収係数よりも高いことが分かる. ネオジウムは周期表で下にはみ出したランタノイドの 1 つで開殻 $4f$ 軌道に電子をもっている. このため, 他の元素に比べて励起エネルギー準位が多く, しかも密に詰まっているので, 束縛-束縛遷移も多く, 光の吸収係数が高くなると考えられる. ランタノイドの吸収係数が高いという結果は

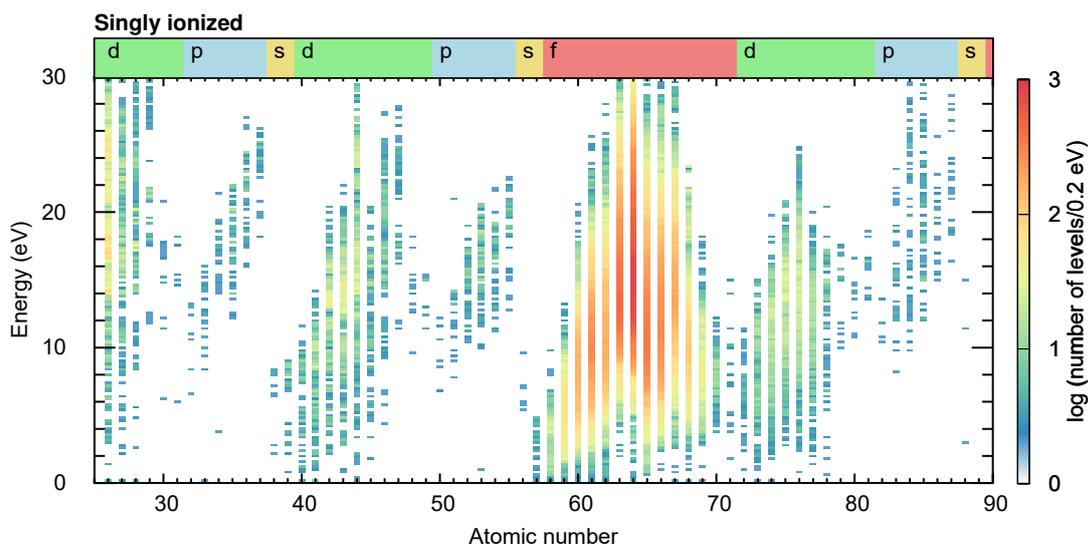


図 5: 元素ごとのエネルギー分布 (一階電離イオンの場合). 色は 0.2 eV ごとのレベルの数を表している. 開殻 4*f* 軌道に電子が入るランタノイド ($Z = 57 - 71$) のエネルギー準位が他の元素に比べて密なことが分かる.

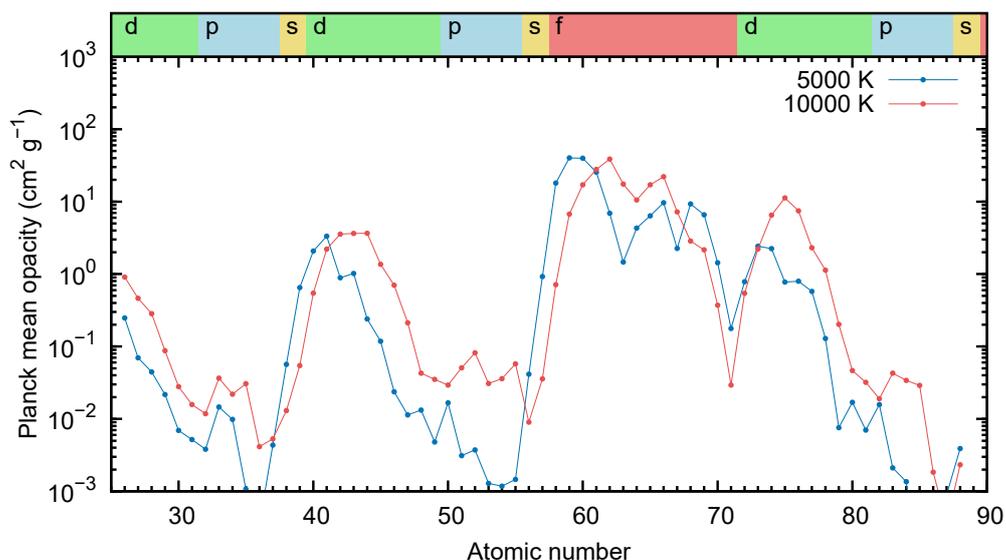


図 6: 元素ごとの Planck プランク平均吸収係数. 密度は $\rho = 10^{-13} \text{ g cm}^{-3}$ で, 温度は $T = 5000 \text{ K}$ (青色), $T = 10000 \text{ K}$ (赤色) の場合. ランタノイド ($Z = 57 - 71$) の吸収係数が他の元素より高いことが分かる. また, 最外殻の主量子数および方位量子数が同じ原子種では, 原子番号が高いほど吸収係数が低い.

HULLAC, GRASP のどちらのコードを用いても明らかに確認できる.

他の元素の吸収係数の特徴も, 周期表における位置を見てみると分かりやすい. 鉄とルテニウムはそれぞれ 3*d*, 4*d* 軌道に電子をもち, *f* 軌

道の場合よりもエネルギー準位数が少ないため, 吸収係数が低くなる. また, この二つの元素は周期表上で上下の関係にあるため, 吸収係数が似ていることも分かる. テルルは 5*p* 軌道に電子をもち, さらにエネルギー準位数が少な

いため、 d 軌道の場合よりもさらに吸収係数が小さくなる。

2019 年頃には HULLAC コードを用いて、中性子星合体で合成される全ての重元素に対して、中性から 3 階電離イオンまでを網羅した理論原子データを構築することができた [10]*1. 図 5 は一階電離イオンのエネルギー分布を原子番号の関数として表したものである。赤い色がエネルギー準位がより密になっていることを示している。これを見ても、ランタノイドのエネルギー準位が密であることがよく分かる。

図 6 は、全ての元素に対するプランク平均吸収係数である（プランク平均は、図 4 の図吸収係数をプランク関数で重み付けして波長方向に積分したもの）。これを見ると、最外殻の主量子数および方位量子数が同じ原子種では、原子番号が大きい方が吸収係数が低いことが分かる。これは、原子番号が大きくなるほど、主に電子-電子相互作用の効果でエネルギー準位が全体的に高い側にシフトするためである。平衡状態にあるプラズマではボルツマン分布にしたがって励起状態の占有数が決まるため、より低い励起エネルギーからの束縛-束縛遷移の方が光の吸収に寄与しやすい。そのため、エネルギー準位が高い側にシフトすると、ある温度のもとでは吸収係数が低くなるのである。原子の性質が中性子星合体の放出物質中の不透明度に刻まれているのは非常に興味深い。

このように、網羅的な原子構造計算によって、元素の性質によって光の吸収係数は大きく異なることが分かった。特に、ランタノイドとそれ以外の元素は吸収係数が一桁以上異なるため、ランタノイドはキロノバの性質を左右する重要な元素である [12, 13]。ランタノイドが含まれている場合は、吸収係数が高いことから、光が抜けてくるまでの時間が長くなる（式 (2)）。その場合、その分より冷えたガスからの放射が見られるため、可視光よりも赤外線で

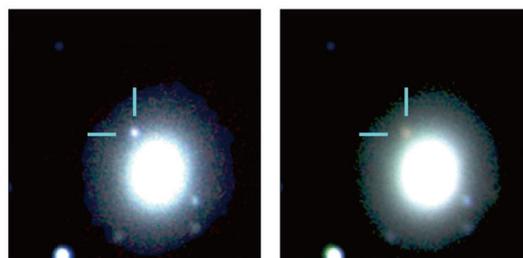


図 7: 中性子星合体 GW170817 の電磁波対応天体の画像（青線で示された天体）。左側が合体から 1 日後、右側が合体から 7 日後。すばる望遠鏡（可視光）、IRSF 望遠鏡（近赤外線）で取得された画像をカラー合成したもの [17]。右下の大きく輝いているのは中性子星合体が発生した銀河 NGC 4993 で、地球からの距離は約 1 億 3000 万光年。

明るい放射が期待される。キロノバがより「赤く」見えるというわけだ。一方で、ランタノイドが含まれない場合は、より早い時間に、明るく「青い」キロノバが予想される [14]。つまり、キロノバの性質を観測することができれば、原子の性質を通して中性子星合体の元素合成を検証することができるのである。

4. キロノバの観測

中性子星合体とキロノバの詳細な観測が初めて成功したのは 2017 年のことである。2017 年 8 月 17 日、重力波望遠鏡 LIGO と Virgo によって、中性子星合体からの重力波シグナルが観測された [15]（日付をとって、この重力波イベントは GW170817 と呼ばれている）。その情報が直ちに世界中の天文学者に送られ、電磁波で光る天体が探査された結果、図 7 にあるように中性子星合体からの電磁波放射が捉えられた [16]。

前節で紹介した通り、この観測が行われる前は天文学者の間では、キロノバは「青い」だろうか、「赤い」だろうか、という二つの予想があった。中性子星合体でランタノイドがどれほど合成されるかは分からなかったし、そもそもキロノバという現象の理解もまだまだ不十分だったためである。GW170817 で実際に観測された電磁波シグナルは、最初数日間可視光

*1 このデータは核融合科学研究所から全世界向けに公開されている [11]。 <http://dpc.nifs.ac.jp/DB/Opacity-Database/>

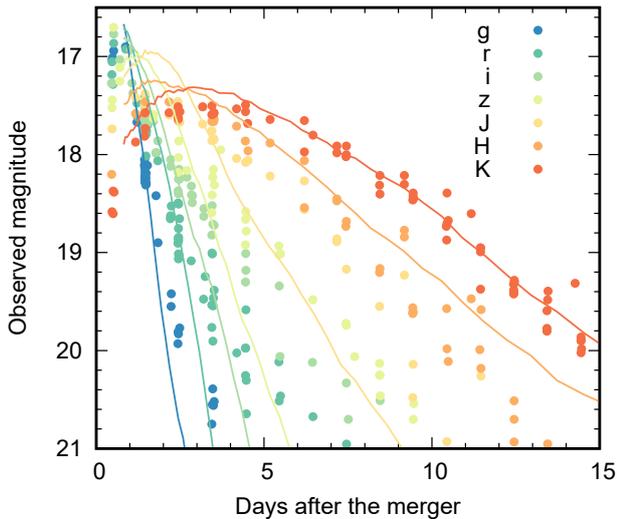


図 8: 中性子星合体 GW170817 の電磁波対応天体の明るさの時間変化 (点) と、キロノバの輻射輸送シミュレーションの結果 (線 [19]). 色の違いは観測波長帯の違いを表す (g: 4800 Å, r: 6200 Å, i: 7600 Å, z: 9100 Å, J: 12000 Å, H: 16000 Å, K: 22000 Å).

で明るく、「青い」ものだった。図 7 はすばる望遠鏡と IRSF 望遠鏡で取得されたキロノバの画像で、可視光を青色で、近赤外線を赤色で着色したものである。この画像を見ると、確かに合体後 2 日後 (左側) の見た目が青白いことが分かる [17]。一方で、その後は赤外線の放射が卓越し、「赤い」放射が見られた (右側)。つまり、キロノバは「青く」もあり「赤く」もあったのである。

青くて明るい放射は吸収係数が比較的低い物質が放出されていることを示唆している。つまり、ランタノイドをあまり含まない物質である。一方で、赤く、長く続く放射は、吸収係数が比較的高い物質、すなわちランタノイドを多く含む物質も放出されていることを示唆している。つまり、この両方の性質が観測されたということは、中性子星合体で幅広い原子番号の重元素が合成されたことを意味しているのだ [18]。

実際に、中性子星合体のシミュレーションで予想される質量放出と元素合成の結果を用いて、キロノバがどのように光るかという輻射輸

送の計算を行うと、GW170817 で観測された各波長の明るさとその時間進化を比較よく説明できることが分かっている (図 8 [19])。ちなみに、これまで見てきた通り、中性子星合体には実に様々なスケールの物理が関わっている。中性子星という超強重力天体から物質が放出され (一般相対性理論)、重元素が合成されて放射性崩壊を起こし (原子核物理)、それが原子の性質 (原子物理) を通して輝くというプロセスを全て計算した結果が、実際の天文学の観測量とこのレベルで一致しているのは非常に感慨深い。そして、重元素の原子データを構築するという基礎研究によってこのような研究が可能になったことを強調しておきたい。

このようなキロノバの重力波・電磁波観測は 2024 年現在、まだ 1 例しか行われていない。つまり、宇宙でどれほどの頻度で中性子星合体が起きており、元素が放出されているかはまだまだよく分かっていない。例えば中性子星合体 GW170817 では、理論計算と観測データの比較から 0.03~0.05 太陽質量程度の重元素が合成されたと推定されているが、宇宙には質量の異なる中性子星が存在するため、常に同じような元素が合成・放出されているとは限らない。

実際に、2019 年には二例目の中性子星合体 GW190425 が観測されているが (重力波のみで観測され、電磁波では観測ができなかった)、GW190425 の中性子星の質量は GW170817 の場合と大きく異なっていたことが知られている [20]。中性子星合体が本当に宇宙の重元素の起源であるかを検証するには、今後様々な中性子星合体からのキロノバを観測することが必要不可欠である。重力波望遠鏡の性能・感度は現在も向上し続けているため、今後より多くの中性子星合体の観測が行われることが期待されている。

5. まとめと今後の展望

本稿では宇宙における重元素の起源として注目されている、中性子星合体からの電磁波放射

キロノバと、それを理解するための重元素の原子データについて紹介した。重元素の原子データが構築された結果、キロノバの性質の定量的な理解が可能となり、天文学観測から中性子星合体における r プロセス元素合成を検証することが可能となった。そして、実際に2017年に重力波によって中性子星合体が発見され、キロノバが観測されたことで、中性子星合体が幅広い原子番号の重元素を合成していることが確認された。

今後は重力波・電磁波観測の感度向上にとともに、より多くの中性子星合体が観測されることが期待されている。そのような時代に向け、今後はさらに精緻な重元素の原子データが必要となるだろう。本稿で紹介した原子データは理論計算に基づくものであるが、多電子系の原子構造計算の精度は必ずしも高くなく、特にランタノイドでは実験値と比べるとエネルギー準位では10%程度、遷移確率では数倍程度の違いが存在している [21]。実際に本稿で示した吸収係数にも不定性があることが分かっており、キロノバの性質をより正確に理解するためには、原子構造計算を高精度化することが必要である。そして、さらなる理論計算の精度向上には、理論計算の精度を検証するための分光実験も非常に重要である。

また同様に、理論計算の精度の限界から、現状の原子データでは各元素の特定の遷移がどの波長に現れるかを正確に予言することはできなかった。実際に、GW170817では可視光から近赤外線のスเปクトルが取得されているが、本稿で紹介した「完全性」を重視した原子データだけでは、観測されたスเปクトルに見られる個々の特徴を解読するのは非常に難しい。つまり、 r プロセスが起きたこと自体は分かっても、どの元素がどれほど合成されたのかは分からないのである。キロノバのスเปクトルの解読の進展と、「正確性」を重視した原子データに関しては次の土本氏の記事 [2] を参照して頂きたい。

原子データの精度だけでなく、プラズマモデルの精緻化も重要な課題である。合体からの時

間を経つにつれて、中性子星合体によって放出された物質の密度は下がるため、プラズマの熱平衡状態からのずれは時間とともに大きくなっていく [22, 23]。そのような系からの電磁波放射を正しく理解するには、プラズマの非平衡状態の取り扱いが必要不可欠である。非平衡プラズマの状態を記述するには、エネルギー準位や放射遷移確率だけでなく、再結合係数や電子衝突断面積なども必要となる。このように重元素の様々な原子データへの需要はさらに高まるだろう。

本稿で紹介したとおり、中性子星合体から届くシグナルを読み解くためには様々な重元素の原子データが重要な役割を果たし、天文学、原子物理学、さらにはプラズマ物理学の知見を融合することが重要である。このような融合研究が進み、中性子星合体の重元素合成、そして宇宙の重元素の起源の理解が進むことを期待して本稿を閉じたい。

謝辞

本稿を執筆する機会を与えてくださった編集委員の方々に感謝致します。また、本研究に関する共同研究をしてくださっている加藤太治さん、Gediminas Gaigalas さん、Pavel Rynkun さん、Laima Kitovienė さん、中村信行さん、田沼肇さん、坂上裕之さん、村上泉さん、大石鉄太郎さんに深く感謝致します。本研究は JSPS 科研費 JP19H00694, JP23H00127, JP23H04894, JST 創発的研究支援事業 JPMJFR212Y, 核融合科学研究所共同研究 NIFS22KIIF005, NIFS24KIIQ013 の補助を受けて行われたものです。

参考文献

- [1] E. M. Burbidge, G. R., Burbidge, W. A. Fowler, and F. Hoyle, *Reviews of Modern Physics* **29**, 547 (1957).
- [2] 土本菜々恵, しょうとつ **21**, R007 (2024).
- [3] S. Fujibayashi, et al., *The Astrophysical*

- Journal **942**, 39 (2023).
- [4] B. D. Metzger, G. Martínez-Pinedo, S. Darbha, et al. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **406**, 2650 (2010).
- [5] M. Tanaka, *Advances in Astronomy* 6341974 (2016).
- [6] A. Bar-Shalom, M. Klapisch, and J. Oreg, *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer* **71**, 169 (2001).
- [7] P. Jönsson, G. Gaigalas, and J. Bieroń, *Computer Physics Communications* **184**, 2197 (2013).
- [8] 小池文博, *しょうとつ* **7**, 4 (2010).
- [9] M. Tanaka, D. Kato, G. Gaigalas, et al., *The Astrophysical Journal* **852**, 109 (2018).
- [10] M. Tanaka, D. Kato, G. Gaigalas, and K. Kawaguchi, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **496**, 1369 (2020).
- [11] D. Kato, I. Murakami, M. Tanaka, et al. “Japan-Lithuania Opacity Database for Kilonova”, <http://dpc.nifs.ac.jp/DB/Opacity-Database/>, version 1.1 (2021).
- [12] D. Kasen, N. R. Badnell, and J. Barnes, *The Astrophysical Journal* **774**, 25 (2013).
- [13] M. Tanaka and K. Hotokezaka, *The Astrophysical Journal* **775**, 113 (2013).
- [14] B. D. Metzger and R. Fernández, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **441**, 3444 (2014).
- [15] B. P. Abbott, et al., *Physical Review Letters* **119**, 161101 (2017).
- [16] B. P. Abbott, et al., *The Astrophysical Journal* **848**, L12 (2017).
- [17] Y. Utsumi, et al., *Publications of the Astronomical Society of Japan* **69**, 101 (2017).
- [18] M. Tanaka, et al., *Publications of the Astronomical Society of Japan* **69**, 102 (2017).
- [19] K. Kawaguchi, M. Shibata, and M. Tanaka, *The Astrophysical Journal* **889**, 171 (2020).
- [20] B. P. Abbott, et al. *The Astrophysical Journal* **892**, L3 (2020).
- [21] G. Gaigalas G., D. Kato, P. Rynkun, et al. *The Astrophysical Journal Supplement Series* **240**, 29 (2019).
- [22] K. Hotokezaka, M. Tanaka, D. Kato, and G. Gaigalas, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **506** 5863 (2021).
- [23] Q. Pognan, A. Jerkstrand, and J. Grumer, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **513** 5174 (2022).

中性子星合体からの電磁波放射「キロノバ」(II) - スペクトルの解読と重元素の原子データ -

土本菜々恵^{1*}

¹ 東北大学大学院理学研究科天文学専攻 〒980-8578 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 6-3

n.domoto@astr.tohoku.ac.jp

令和6年7月31日原稿受付

宇宙における重元素の起源、特に金やプラチナ、ランタノイドなどの速い中性子捕獲反応により合成される元素の起源として、中性子星の合体現象が注目されている。中性子星が合体すると中性子過剰な放出物質中で元素合成が起き、合成された原子核の放射性崩壊によって電磁波放射「キロノバ」が引き起こされる。中性子星合体で合成された個々の元素の情報を引き出すためには、キロノバのスペクトルを理解することが必要不可欠である。本稿では、キロノバの可視光・赤外線スペクトルを理解するために必要な正確性の高い重元素の原子データの需要と、スペクトル解読における近年の進展について紹介する。

1. はじめに

我々の身の回りに存在する全ての元素は宇宙のどこかで作られてきたものである。それぞれの元素がどのように生まれ、どのように増えてきたかという元素の起源を理解することは、天文学・宇宙物理学の重要な課題の1つである。中でも鉄より重い元素の約半数、特に金 (Au, $Z = 79$) やプラチナ (Pt, $Z = 78$)、ランタノイド ($Z = 57-71$) などの「速い中性子捕獲反応 (r プロセス)」を必要とする元素の起源は未だ明らかでない [1]。

近年、 r プロセス元素の起源天体として、中性子星の合体現象が注目されている。中性子星が合体すると中性子過剰な物質が宇宙空間に放出され、放出物質の中で r プロセスにより重元素が合成される [2, 3]。さらに、合成された r プロセス元素の放射性崩壊で放出されるガンマ線・ベータ線によって放出物質が熱化され、可視光や赤外線で熱的に光る現象「キロノバ」が見られる [4, 5]。実際、2017年に中性子星合体からの重力波が初めて直接検出され (GW170817) [6]、さらに世界中の望遠鏡を用

いた追観測によって電磁波対応天体が発見された [7]。観測された電磁波対応天体の光は予想されていたキロノバの光り方と見事に一致し、確かに中性子星合体で r プロセス元素が合成されていることが確認されている [1, 8]。

しかし、中性子星合体が本当に宇宙の r プロセス元素の起源であるかどうかはまだ明らかではない。元素の起源を考える上で重要なのは、一度の中性子星合体で実際に合成される元素の種類や量だが、GW170817ではこれがほとんどわかっていないのだ。中性子星合体からの放出物質で発生した可視光・赤外線光子は、重元素の束縛-束縛遷移を介して物質と相互作用しながら抜け出してくる。そのため、キロノバの光り方 (明るさの時間変化) は放出物質にどのような元素が含まれているかによって変化する。予想されていたキロノバの光り方から、観測されたキロノバでは比較的軽い元素を含む物質とランタノイドを多く含む物質の両方の存在が、つまり中性子星合体で広い原子番号の重元素が合成されたことが示唆された [1]。言い換えれば、このように明るさの時間変化から「 r プロ

セスが起きたこと」はわかって、詳細な元素の情報までは得られないのである。

合成された個々の元素の情報を引き出す最も直接的な方法の1つは、スペクトルにおける元素の同定である。個々の元素は束縛-束縛遷移により決まった波長の光を吸収するため、スペクトルに現れる吸収特徴を調べることで、個々の元素を特定することができる。2017年に観測されたキロノバでは、可視光から赤外線にかけての詳細なスペクトルが取得された [9, 10]。図1に矢印で示す通り、観測されたスペクトルには幅の広い吸収特徴がいくつも見られる。つまり、これらの吸収特徴を生み出した元素を特定できれば、その元素が中性子星合体で合成された証拠になると言える。本稿ではこのキロノバのスペクトルに着目し、中性子星合体での重元素合成の証拠を得るために必要な原子データと、スペクトル解読における進展について紹介したい。

2. 重元素の原子データ

2.1 正確な原子データの重要性

中性子星合体で放出される物質は、典型的には 0.01 太陽質量程度の質量が光速の 10% 程度の速度で膨張している。合体後 1 日程では放出物質は $R \sim vt \sim 3 \times 10^{14}$ cm 程度に広がっており、このときプラズマの質量密度は $\sim 10^{-13}$ g cm⁻³ 程度である。また放射性崩壊により注入されるエネルギーを考えると、プラズマの温度は数 1000 K 程度となる（合体後 1 日程ではプラズマは熱平衡状態にあり、電子温度、イオン温度、および輻射温度は全て等しいと仮定できる）。キロノバはこのようなプラズマ—Saha 平衡を考えると、重元素は数階電離状態のイオンとなって混ざり合っている—が放つ可視光・赤外線の放射である [1]。発生した熱的な可視光・赤外線光子は、重元素の束縛-束縛遷移を介して物質と相互作用する。よって様々な重元素の束縛-束縛遷移のうち、特に吸収度合いの強い遷移がスペクトルに特徴

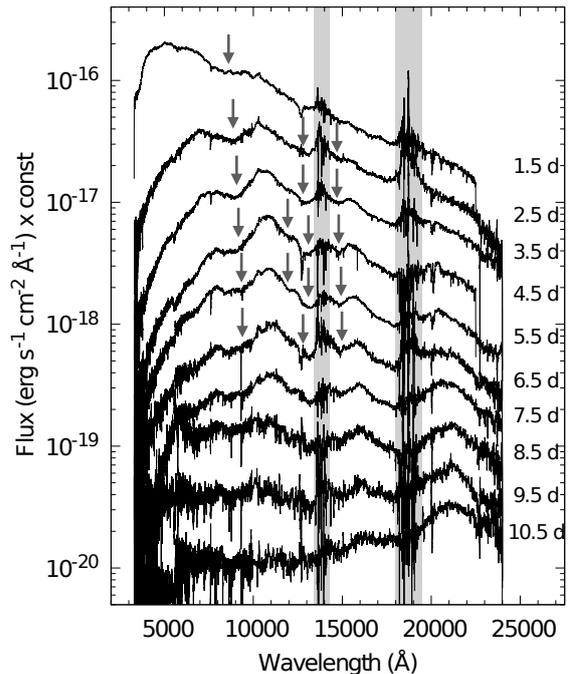


図 1: 2017 年に観測されたキロノバのスペクトル [9]。右の数字は中性子星合体後の日数を表す。主な吸収特徴を矢印で示した。スペクトルは見やすいように縦方向にずらしてある。影付きの領域 (14000 Å 付近, 18000~19000 Å 付近) は地球大気の影響を受けている。

を作ることになる。

スペクトルの特徴から元素の種類を特定するには、それぞれの元素がどのようなエネルギー準位を持っていて、どの波長の光（遷移波長）をどのような確率（遷移確率）で吸収できるのかを知っておかなければならない。 r プロセスでは鉄より重い元素が多く合成されるため、それらすべての元素のさまざまなイオン化状態での情報が必要になる。しかし、そのような実験的な原子データは存在しておらず、実験的にどの元素がキロノバの物理状況で強い吸収度合いを示すか、つまり、スペクトルにどのような吸収線が現れるかがわからない状況が続いていた。

実験的な重元素の原子データは限られているため、これまでは原子構造計算コード（HULLAC など）を用いた理論計算によって重元素の性質が調べられてきた [11]。これにより、各元素がもつエネルギー準位の分布や遷移確率の

1 H																	2 He															
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne															
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar															
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr															
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe															
55 Cs	56 Ba											72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn						
87 Fr	88 Ra											104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Nh	114 Fl	115 Mc	116 Lv	117 Ts	118 Og						
																		57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
																		89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

図 2: 元素の周期表. キロノバのスペクトルにおける吸収特徴を考える上で重要な元素を色で囲んである (図 3 の各特徴に対応).

低い遷移を含む, 「完全性」の高い原子データが構築されてきた. 元素がどれだけ光を吸収するかという吸収係数の評価には, 「完全性」の高い原子データが極めて重要であり, これによりキロノバの光り方の理解が大きく進められてきた [1]. しかし吸収係数の評価と異なり, スペクトルの特徴を調べるためには, どの波長にどの程度強い遷移があるのかという正確な情報が必要である. 理論計算による原子データでは実験値を再現できるほどの精度はなく, スペクトルを直接調べることに使えない. 一方で, 一部の特に強い遷移がスペクトルに特徴を作ることを考えると, そのような最も強い遷移だけについて「正確性」の高い情報があれば良いということになる.

2.2 正確な原子データの構築

ここで, 上記のような状況を打開するべく行った筆者らの研究を紹介する [12]. プラズマが熱平衡状態にあると仮定すると, 密度と温度を仮定すればイオン化状態や励起状態の占有

数はわかるため, 各遷移による光の吸収度合いを評価することができる. そこで我々はまず, 完全性の高い理論原子データを用い, キロノバの物理状況でそれぞれの重元素が光をどの程度吸収できるのかを調べた. スペクトルに吸収特徴を作り出せる候補となる, 強い吸収度合いを示す元素を特定するためである. これはすべての元素の性質を網羅している, 「完全性」の高い原子データの強みと言える. その結果, カルシウム (Ca, $Z = 20$), ストロンチウム (Sr, $Z = 38$), ランタン (La, $Z = 57$), セリウム (Ce, $Z = 58$) が光を強く吸収する傾向があることが明らかになった (正確には, カルシウムとストロンチウムは一階電離イオン, ランタンとセリウムは二階電離イオンが重要である).

この結果をもとに周期表を見てみると, 光を強く吸収する傾向がある元素はすべて周期表上で左側の族に属していることがわかる (図 2). これは元素の原子構造がよく似ていることを示している. 例えば, 第 2 族に属しているカルシ

ウムとストロンチウムは、一階電離している場合、最外殻に1つ電子を持っている。ランタンやセリウムはランタノイドの中で原子番号の小さい元素であり、二階電離している場合、ランタンは1つ、セリウムは2つの最外殻電子を持っている。

ある原子の束縛-束縛遷移の数はエネルギー準位が多いほど多くなるが、この場合振動子強度の総和則により、各遷移の振動子強度は平均的に小さくなる傾向がある。上記の元素（イオン）は比較的単純な原子構造をしており、束縛-束縛遷移の数はそこまで多くないため、各遷移の振動子強度（遷移確率）は比較的大きくなりやすいと言える。さらに、ある周期では原子番号が大きいほど原子半径が小さくなり、電子-電子相互作用とスピン-軌道相互作用の効果でエネルギー準位が全体的に高い方向にシフトする。周期表の左側（ある周期で原子番号が小さい側）の元素はこの効果が小さく、基底状態から近いところに励起状態が存在する。熱平衡状態における励起状態の占有数（ボルツマン分布）を考えると、このようなエネルギーの低い励起状態の電子占有数は大きくなりやすく、したがってそのようなエネルギー準位に関わる束縛-束縛遷移が起きやすい。このように、上記の元素（イオン）が強い光の吸収源になることは、(1) 原子構造が比較的単純で、特定の波長のみでの遷移が起こりやすい、かつ(2) 低いエネルギー状態に励起準位が存在し、電子占有数が大きくなりやすいという原子物理的性質に起因するものとして理解できる。

実は、これは太陽のスペクトルでも同じである。有名なフラウンホーファー線はナトリウム (Na, $Z = 11$) やマグネシウム (Mg, $Z = 12$)、カルシウムによる吸収線を含んでいるが、周期表(図2)を見ると、これらの元素も周期表の左側の族に属していることがわかる。太陽組成によると、これらの元素は炭素 (C, $Z = 6$) や酸素 (O, $Z = 8$) より量が多いわけではない(図5参照)。つまり、太陽スペクトルにおける強い吸収線も、最外殻電子の数が少

なく、また低いエネルギーに励起状態を持つ元素によって作られていると理解できる。

以上のような解析は、たとえ原子データにおける遷移波長が正しくなくても行うことができる。しかし、スペクトルと直接比較して吸収特徴を議論するには、実験的に正確な波長データが必要である。幸い、以上の解析で発見した重要な元素はエネルギー準位や遷移波長の実験的なデータが存在していたため [13]、これらを実験のデータベースから構築し直した。また、カルシウムやストロンチウムの遷移は実験的な遷移確率データが存在したが [14]、ランタンやセリウムの赤外線遷移にはそのようなデータが存在していない。そこで、我々は理論原子データ [11] を用いることでこの部分を補った(理論的な遷移確率の妥当性については後ほど再度議論する)。つまり、実験的に正確な遷移波長およびエネルギー準位と、理論計算から得られた遷移確率を合わせ、利用できる原子データのいいところ取りをすることで、キロノバのスペクトルの吸収特徴を調べるための新しい「正確な」原子データを構築することができた。

3. キロノバのスペクトルと元素の同定

これで、キロノバのスペクトルで元素を特定するために必要な準備は整った。では、実際にスペクトルからどのように元素を同定することができるだろうか。候補となる強い遷移の遷移波長と観測スペクトルを並べてみるだけでは元素を同定することができない。なぜなら、中性子星合体からの放出物質は高速(典型的には光速の10-20%)で膨張しており、ドップラー効果によって光の波長がずれてしまうためである。これによって個々の元素の吸収する光の波長がずれ、さまざまな元素の吸収線がさまざまな波長(速度)で混ざってしまう。結果、図1の観測スペクトルから見て取れるように、吸収線の幅は非常に広がる。

そこで、キロノバの詳細な輻射輸送シミュレーションによって、スペクトルの計算を行っ

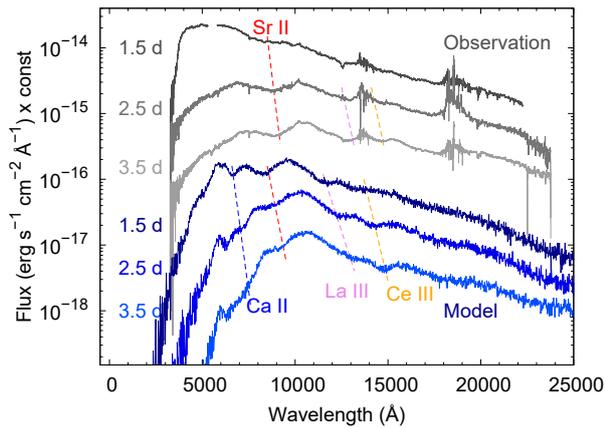


図 3: 2017 年に観測されたキロノバのスペクトル (上, 図 1) とモデルスペクトル (下). 左の数字は中性子星合体後の日数を表す. 破線で吸収特徴と, それらの特徴を作る元素名を示した. スペクトルは見やすいように縦方向にずらしてある. 観測スペクトルの 14000 Å 付近, 18000~19000 Å 付近は地球大気の影響を受けている.

た. この結果を実際の観測スペクトルと比較することで, どの吸収特徴がどの元素で説明できるのかを特定できるというわけである. このシミュレーションを行うには, やはり光が物質にどの程度吸収されながら抜け出してくるかを評価する必要がある. スペクトルの吸収特徴を調べるには, 重要な元素 (特に強い遷移) の「正確な」原子データが肝心である. 同時に, 放出物質全体としての元素の吸収係数も評価する必要がある, 依然として「完全性」の高い理論原子データが欠かせない. そこで, 両者の原子データを組み合わせた計算を行うことで, これまでにない現実的なキロノバのスペクトルの計算を可能にした. シミュレーションで得られたキロノバのスペクトル (図 3) には, 破線で示したようにいくつかの吸収特徴が見られる. これらの特徴はそれぞれ, カルシウム, ストロンチウム, ランタン, セリウムによるものである. 現実的なキロノバの計算からも, これらの元素が実際に吸収特徴を作り出すことが確認できたと言える.

では, 計算スペクトルを実際の観測スペクトルと比較してみる. 実は, 9000 Å 付近の吸収特徴だけはすでにストロンチウムで説明できる

ことが報告されており [15], 筆者らの計算結果もそれを裏付けていることがわかる. さらに赤外線では, ランタンとセリウムの作る吸収特徴が観測スペクトルに見られる吸収特徴と一致することがわかった. これにより, この中性子星合体でストロンチウム, ランタン, セリウムが合成されていたことが特定できた.

なお, 我々のモデルではカルシウムが強い吸収特徴を示している. カルシウムとストロンチウムは原子構造が非常によく似ているため, 両者が同時に吸収特徴を作ることは原子物理的な性質から自然であると言える. しかし, 観測スペクトルにはカルシウムによる特徴は見られない. これは 2017 年の中性子星合体ではカルシウムの合成量が少なかったことを示唆している.

4. 「プラズマ実験室」としての恒星

ここまでで紹介したように, 天体の観測スペクトルから元素を同定するには, 実験的に構築された「正確性」の高い束縛-束縛遷移データが必要不可欠である. 筆者らは理論計算による原子データの「完全性」の高さを利用し, まずキロノバの物理状況で強い吸収度合いを示す元素を特定することができた. さらに, 実験的な遷移確率が存在しないランタンとセリウムの束縛-束縛遷移については理論計算による値を用いることで, 最も強い束縛-束縛遷移に対する「正確な」原子データを構築し, 結果, キロノバの観測スペクトルにおける吸収特徴を説明できる元素を特定することができた.

しかし, 我々は何をもって「元素を同定した」と言えるのかを改めて考えたい. まず, 中性子星合体における物質の膨張速度によるドップラーシフトを考慮したときに, (1)「妥当な速度でその束縛-束縛遷移の遷移波長が吸収特徴と整合的である」必要がある. これは既に述べた, 観測スペクトルとモデルスペクトルとの比較で十分検証できている. 次に, (2)「与えられた物理状況 (温度・密度) でその束縛-束縛

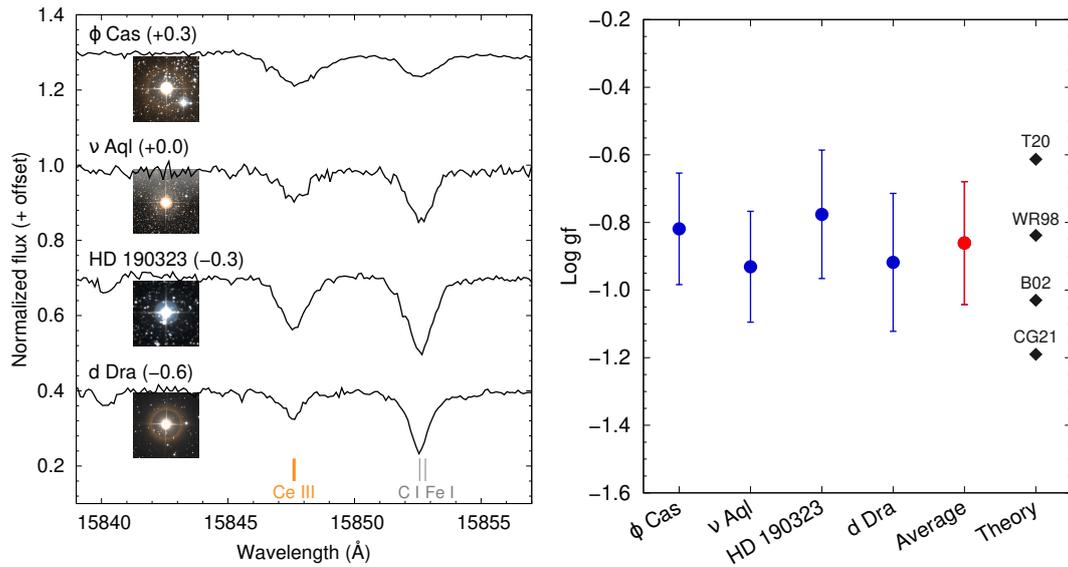


図 4: 左: セリウム (2 階電離イオン) の吸収線を示す恒星スペクトルと天体写真. セリウムの吸収線の位置をオレンジ線で示してある. 右: 左に示す恒星スペクトルの吸収線から推定した束縛-束縛遷移の gf 値 (青) とその平均値 (赤). 黒点は文献における理論計算からの値を示す (T20 [11]; WR98 [19]; B02 [20]; CG21 [21]).

遷移が十分強い吸収を起こす」必要がある. これを検証するには, 実験的な遷移確率が必要である. そして最後に, その波長帯において (3) 「それ以外に強い吸収を起こす束縛-束縛遷移が存在しない」ことが言えて初めて, 我々は元素の同定を確たるものに行うことができる. つまり, 本当に観測スペクトルの吸収特徴から元素を同定したと宣言するには, ここまでの解析では (2)(3) の観点で不定性が残っていることになる.

4.1 天体物理学的 gf 値

ここで, 確たる元素の同定のために筆者らが行った別の研究も紹介したい. ここでは, 図 3 における 14500 Å あたりの吸収特徴を生み出している, セリウムの 3 本の束縛-束縛遷移 (静止波長 ~ 16000 Å) に着目する. 既に述べたとおり, これらの束縛-束縛遷移の遷移確率は実験的に測られた値が存在していない. そのため, 上記の (2) の観点で, これらが本当に強い吸収特徴を示すかを実験的に検証する必要がある.

我々は, 宇宙にある恒星のスペクトルにこれ

らの束縛-束縛遷移による吸収線が見られることに気づき, 地上における実験の代わりに恒星を「プラズマ実験室」として用いることを考えた [16]. 恒星大気は歴史的によく研究されてきており, 表面温度, (ガスの圧力や密度を決める) 表面重力, 金属量といった恒星大気パラメータによって, スペクトルをよくモデル化することができる. そのため対象の恒星の大気パラメータを事前に知っていれば, ある束縛-束縛遷移の遷移確率のみを未知の変数として吸収線をモデル化することで, 遷移確率を推定することができるのだ [17, 18]. 実用的には, 遷移確率を表す量として, 振動子強度 f を遷移の下準位の統計的重み g で重み付けした値 (gf 値) が用いられる. よって以上のように天体を用いて推定した遷移確率, すなわち gf 値を, しばしば天体物理学的 gf 値と呼ぶ. 対象とした恒星の大気パラメータは, 可視光スペクトルを用いた文献で求められていたため, 我々は文献値を採用して赤外線スペクトルのモデリングを行った. 結果, 推定された値は元の理論計算による値 [11] から全体的に 1.8 倍程度小さいものの,

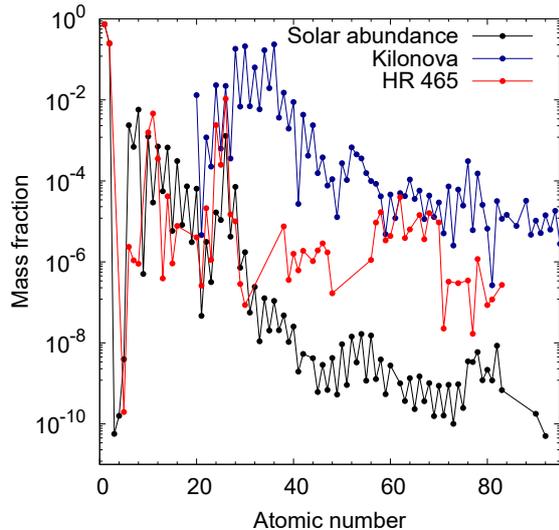


図 5: キロノバにおける元素組成の理論モデル (青) [12, 22], 化学特異星 HR 465 における元素組成 (赤) [24], および太陽系における元素組成 (黒) [25].

不定性の範囲で大まかに一致しており、キロノバのスペクトルに吸収特徴を生み出すには十分強いことが明らかになった (図 4).

恒星スペクトルのモデル化は手法が確立しているとは言え、原子物理学の実験に比べれば、大気パラメータの決定精度は非常に悪い。ここで推定した遷移確率には大気パラメータによる不定性が乗ってしまうため、結局 2 倍程度の不定性が残っている。正確な遷移確率を求めるには、やはり地上での実験が必要であることに変わりはないことを強調したい。

4.2 強い遷移の完全なリスト

これでセリウムの吸収特徴は (1)(2) の条件を満たしていると言える。では (3) をどう検証すればいいだろうか。これには、中性子星合体の放出物質に存在しうる全ての重元素の全ての束縛-束縛遷移について、赤外線域における「正確な」情報が必要である。実験的にそのような原子データを全て用意することは現実的ではない。

我々はこれにも恒星スペクトルを用いることを考えた [23]. 宇宙には「化学特異星」と呼ばれる、通常の恒星より 10 倍以上の重元素の

存在量を示す恒星が存在している。中でも HR 465 という化学特異星は、太陽組成と比べて 1 万倍も多いランタノイドの存在量を示すことが知られており、その質量割合はキロノバにおけるランタノイドの質量割合 (理論的にあり得るとされるもの) とよく似ている (図 5, $Z = 57 \sim 71$). HR 465 の恒星大気のパラメータの状態は密度 $\sim 10^{-10} \text{ g cm}^{-3}$ 程度、温度 11000 K 程度であり、キロノバの物理状況 (密度 $\sim 10^{-13} \text{ g cm}^{-3}$ 程度、数 1000 K 程度) とは異なる。しかし、プラズマが熱平衡状態にあると仮定すると、イオン化状態の分布はキロノバと似た状態を示す。つまり、HR 465 のスペクトルにおける吸収線を調べることで、キロノバで強い吸収を示しうるランタノイドの束縛-束縛遷移の完全なリスト — 実験室では測られたことのない未知の束縛-束縛遷移を含む — を構築することができるのだ。

16000 Å 付近に注目すると、HR 465 の高分解能赤外線スペクトル (図 6) は強いセリウムの吸収線 (赤線) を示している。同時に、スペクトルには未同定の吸収線 (黒線) も存在している。ここで強調すべきは、セリウムと同じ波長帯に、セリウムと同程度に強い未同定の吸収線が無いことである。黒線で示した吸収線がセリウムよりも強い吸収度合いを示すならば、それは恐らく何らかのランタノイドの束縛-束縛遷移であり、キロノバのスペクトルにも特徴を作る可能性が高い。しかし、HR 465 のスペクトルは、我々の知らない束縛-束縛遷移にはそこまで強い束縛-束縛遷移は存在せず、やはりセリウムのみが特別であるということを示唆している。つまり、キロノバのスペクトルにおけるセリウムの吸収特徴は (3) の条件も満たしていることがわかった。これにより、我々は自信を持ってセリウムを「同定した」と言える。

もちろん、既に述べたとおり、恒星大気とキロノバのプラズマの物理状況は全く同じではない。例えば HR 465 の恒星大気の方が温度は高いため、イオン化状態は偶然似ていても、熱平衡状態における励起状態の占有数は異なる。

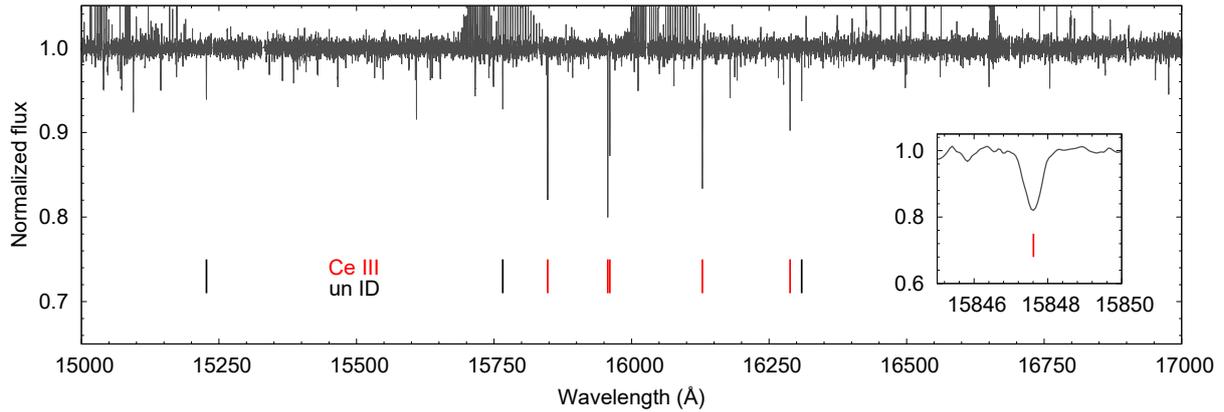


図 6: HR 465 の赤外線スペクトルの一部 [23]. 赤線, 黒線はセリウム (2 階電離イオン) および未同定の吸収線の位置を示す. 挿入図はセリウムの吸収線の 1 つの拡大図.

さらに, ランタノイドの存在量は両者の間で似ているが, 他の元素については必ずしもそうではない. 筆者らは他の化学特異星を同様に赤外線観測し, これをさらに検証することを計画しているが, 地上での実験による重元素の遷移データの構築が重要であることに変わりはない.

5. まとめと展望

本稿では宇宙における重元素の起源として注目されている, 中性子星合体からの電磁波放射キロノバについて, スペクトル解読の観点から必要な原子データと近年の進展について紹介した. 吸収特徴を生み出す強い束縛-束縛遷移についての「正確性」の高い原子データの構築によって, 2017 年に観測されたキロノバのスペクトルの吸収特徴をストロンチウム, ランタン, セリウムで説明できることが明らかになった. さらに恒星をプラズマ実験室として用いることで, セリウムの束縛-束縛遷移の遷移確率を“実験的”に推定したほか, セリウムの他に同程度強い束縛-束縛遷移が存在しないという唯一性が示されたことで, セリウムの同定が確たるものになった.

なお, 我々の研究 [12] ではランタンの束縛-束縛遷移に関しても理論計算による値を用いていたため, セリウムと同様の検証が必要である. しかし, 吸収特徴を作るランタンの

束縛-束縛遷移は静止波長で 14000 Å 付近にあり, これはちょうど地球の大気吸収が強い波長域にあたるため, セリウムのように恒星スペクトルを用いて検証することは不可能である (キロノバでは光速の 10% 程度でドップラーシフトした波長 ~ 12500 Å に吸収特徴が現れている). ランタンの同定を確たるものにするには, やはり地上での実験による遷移確率の測定が必要である.

また本稿では吸収特徴に着目した研究結果を紹介したが, 中性子星合体からの時間が経つにつれて放出物質の密度は下がるため, 光学的に薄くなると輝線特徴が見え始める. この時期には禁制線が重要な役割を果たすようになる. 2017 年に観測されたキロノバでは, 合体後 7 日頃からのスペクトルにおける輝線特徴からテルル (Te, $Z = 52$) の同定が報告されている [26] (図 1, ~21000 Å) が, やはり全ての重元素に対して実験データが存在しているわけではなく, (LS 結合による) 選択則と解析的な遷移確率による独自のデータ構築に基づいている [27]. また物質の密度が下がるとプラズマの熱平衡状態からのずれは大きくなっていくため, この時期の電磁波放射を正しく理解するには, 再結合定数や電子衝突断面積などの原子データも必要となる. このような様々な原子データの理論的・実験的な整備はこれからますます重要になるだろう.

2023年5月から行われている第4期重力波観測では中性子星合体からのシグナルは検出されていないものの、今後はさらなる重力波・電磁波観測の感度の向上により、より多くの中性子星合体が観測されることが期待されている。今後の研究によって、宇宙における重元素の起源の理解が進むことが期待される。

謝辞

本稿の執筆の機会を与えてくださった編集委員の方々に感謝いたします。また、本研究に関して原子物理学の観点から議論して下さる加藤太治さんをはじめ、多くのことを一緒に議論して下さっている全ての共同研究者の皆さまに感謝いたします。なお筆者は日本学術振興会特別研究員制度、および東北大学宇宙創成物理学国際共同大学院（GP-PU）の支援を受けています。

参考文献

- [1] 田中雅臣, しょうとつ **21**, R006 (2024).
- [2] D. Eicher, M. Livio, T. Piran, and D. N. Schramm, *Nature* **340**, 126 (1989).
- [3] C. Freiburghaus, S. Rosswog, and F.-K. Thielemann, *Astrophys. J.* **507**, L59 (1999).
- [4] L.-X. Li and B. Paczyński, *Astrophys. J.* **507**, L59 (1998).
- [5] B. D. Metzger, G. Martínez-Pinedo, S. Darbha, et al., *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **406**, 2560 (2010).
- [6] B. P. Abbott, R. Abbott, T. D. Abbott, et al., *Phys. Rev. Lett.* **119**, 161101 (2017).
- [7] B. P. Abbott, R. Abbott, T. D. Abbott, et al., *Astrophys. J.* **848**, L12 (2017).
- [8] M. Tanaka, Y. Utsumi, P. A. Mazzali, et al., *Publ. Astron. Soc. Jpn.* **69**, 102 (2017).
- [9] E. Pian, P. D’Avanzo, S. Benetti, et al., *Nature* **551**, 67 (2017).
- [10] S. J. Smartt, T.-W. Chen, A. Jerkstrand, et al., *Nature* **551**, 75 (2017).
- [11] M. Tanaka, D. Kato, G. Gaigalas, and K. Kawaguchi, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **496**, 1369 (2020).
- [12] N. Domoto, M. Tanaka, D. Kato, et al., *Astrophys. J.* **939**, 8 (2022).
- [13] A. Kramida, Y. Ralchenko, J. Reader, and NIST ASD Team, NIST Atomic Spectra Database, <https://physics.nist.gov/asd>, (2024).
- [14] N. E. Piskunov, F. Kupka, T. A. Ryabchikova, et al., *Astron. Astrophys. Sup.* **112**, 525 (1995).
- [15] D. Watson, C. J. Hansen, J. Selsing, et al., *Nature* **547**, 497 (2019).
- [16] N. Domoto, J.-J. Lee, M. Tanaka, et al., *Astrophys. J.* **956**, 113 (2023).
- [17] S. Hasselquist, M. Shetrone, K. Cunha, et al., *Astrophys. J.* **833**, 81 (2016).
- [18] K. Cunha, V. V. Smith, S. Hasselquist, et al., *Astrophys. J.* **844**, 145 (2017).
- [19] J.-F. Wyart and P. Palmeri, *Phys. Scr.* **58**, 368 (1998).
- [20] E. Biémont, P. Quinet, and T. A. Ryabchikova, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **486**, 2075 (2002).
- [21] H. Carvajal Gallego, P. Palmeri, and P. Quinet, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **501**, 1440 (2021).
- [22] N. Domoto, M. Tanaka, S. Wanajo, and K. Kawaguchi, *Astrophys. J.* **913**, 26 (2021).
- [23] M. Tanaka, N. Domoto, W. Aoki, et al., *Astrophys. J.* **953**, 17 (2023).
- [24] K. E. Nielsen, K. G. Carpenter, G. V. Kober, and G. M. Wahlgren, *Astrophys. J.* **899**, 166 (2020).
- [25] M. Asplund, N. Grevesse, A. J. Sauval, and P. Scott, *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* **47**, 481 (2009).

- [26] K. Hotokezaka, M. Tanaka, D. Kato, and G. Gaigalas, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **526**, L155 (2023).
- [27] K. Hotokezaka, M. Tanaka, D. Kato, and G. Gaigalas, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **515**, L89 (2022).

放射線挙動解析コード PHITS の生命科学分野への応用

松谷悠佑^{1,2*}, 甲斐健師², 佐藤達彦²¹ 北海道大学 保健科学研究所 〒 060-0812 北海道札幌市北区北 12 条西 5 丁目² 日本原子力研究開発機構 原子力基礎工学研究センター 放射線挙動解析研究グループ 〒 319-1195 茨城県那珂郡東海村大字白方 2-4

matsuya.yusuke@hs.hokudai.ac.jp

令和 6 年 9 月 4 日原稿受付

放射線挙動解析コード PHITS は、放射線の挙動をコンピュータで模擬するモンテカルロコードであり、2018 年以降、生体の主成分である水中における原子との個々の衝突過程を再現できる飛跡構造解析モードが開発され、高空間分解能な放射線の飛跡構造解析が可能となった。一方、飛跡構造解析モードで計算される電離や電子励起の空間パターン(密度分布)の情報を活用し、様々なタイプの DNA 損傷数を効率的かつ高精度に推定する解析コードの開発にも成功している。本稿では、最新版 PHITS に搭載されている飛跡構造解析モード及び DNA 損傷推定手法について概説し、PHITS の生命科学分野への応用例を紹介する。

1. はじめに

放射線挙動解析コード PHITS (Particle and Heavy Ion Transport code System)とは、計算機を使用して、任意形状の 3 次元体系内における様々な放射線の挙動をシミュレート可能な汎用モンテカルロコードである[1]。モンテカルロコードとは、乱数による数値解析法(モンテカルロ法)を使用した計算コードを意味し、その手法を放射線の挙動解析に応用した代表的なコードとして、PHITS の他、FLUKA [2], MCNP [3], Geant4 [4]などがある。それらコードの中で PHITS は、国立研究開発法人日本原子力研究開発機構(JAEA)が主体となり研究開発を進める国産コードであり、2010 年に公開されて以降、機能拡張や利便性向上のために様々な改良が進められてきた[1,5]。同コードは、国内外に無償提供しており、PHITS のホームページ(<https://phits.jaea.go.jp/>)より利用申請することで、入手可能である。現在までに、約 10,000 名のユーザーに利用され、原子力分野のみならず工学、医学、理学などの多様な分野における研究開発に使用された実績を持つ[6-12]。

従来、PHITS コードは遮蔽設計や加速器デザ

インのような巨視的な体系における物理量(例、粒子フラックスや吸収線量など)の計算を得意としてきた。その巨視的計算では condensed-history method[13]に基づき、電離損失モデルである ATIMA (<http://web-docs.gsi.de/~weick/atima/>) や Electron Gamma Shower version 5 (EGS5) [14]を使用することで、イオン線や電子線の飛跡をシミュレートすることが可能であった。しかし、condensed-history method では、電離や電子励起といった相互作用の種類を考慮せず、阻止能(単位長あたりの付与エネルギー)に従い、物質中における膨大な数の衝突を一つのステップに近似した、離散的ではない連続的なエネルギー付与分布を再現してきた。DNA 損傷や DNA 構造変化を追跡する際には、ナノメートルの空間分解能が必要であるため、生命科学分野の研究に応用することができなかった。そこで、2018 年以降、生体物質の主成分である液相水を対象に、個々の相互作用(弾性散乱、電離、電子励起、解離性電子付着、分子励起など)を再現可能な飛跡構造解析モードが開発され、PHITS に実装されてきた[15,16]。本モードにより、1 meV までの電子挙動の追跡が可能となり、放射線化学分野における水

和電子の初期生成位置の正確な解析が可能となった[17]. また, 解離性電子付着は, OH ラジカルの生成[18]やその後の DNA 損傷発生[19]に深く関わるため, 放射線化学ならびに放射線生物学的にも重要な役割を果たす. 今日までの PHITS 開発により, 電子線をはじめ, 様々なイオン線による相互作用の再現が可能となり[16,20,21], 生命科学分野への応用研究も進んでいる[22-25]. このような飛跡構造解析は, 生命科学のみに限らず, 検出器応答などの様々な研究分野におけるメカニズム解明に有効な手法となっている. それら応用研究の中で, 2019 年以降, 放射線被ばく後に発生する早期の生物影響である DNA 損傷を効率よく予測可能な解析ツールの開発にも成功し, PHITS パッケージに内包してきた[16,26,27].

本解説では, 最新版 PHITS (バージョン 3.34) に実装されている飛跡構造解析モードならびに PHITS パッケージに内包されている DNA 損傷予測モデルについて概説するとともに, 同モード・モデルを利用した計算例を紹介する.

2. PHITS 飛跡構造解析モード

液相水中を標的物質として詳細な放射線トラックを計算する際には, 3 種類の飛跡構造解析モデルが利用できる. 水中の電子線を模擬する飛跡構造解析モデルは, PHITS-ETS (electron track structure) [16]と呼ぶ. また, 同物質中のイオン線のモデルには 2 種類あり, PHITS-KURBUC (Kyushu University RadioBiology Unit Code) [20]ならびに PHITS-ITSART (Ion Track Structure model for Arbitrary Radiation and Targets)モデル [21]である. これらモデルについて, 以下で概説する.

2.1. 電子線飛跡構造解析モデル

液相水中の電子線飛跡構造解析モデルである PHITS-ETS は, 動的モンテカルロコード Dynamic Monte Carlo Code (DMCC) [28-33]に使用されている衝突断面積を PHITS コードに組み込むことで実現した. 従来の EGS5 モデルでは輸送下限エネルギーが 1 keV であったが, この PHITS-ETS の実装により, 1 meV までの低速電子の輸送ができるようになった. これまで, 世界中の研究者

が独自の電子線輸送計算コード (例, PARTRAC[34], KURBUC[35], TRACEL[36], WLTrack[37], RITRACK[38], Geant 4-DNA[39])を開発してきたが, それらコードは下限エネルギーが約 1 eV であり, PHITS は 1 eV 以下の電子輸送が可能なユニークなコードであると言える.

図 1a と図 1b に PHITS-ETS に実装されている

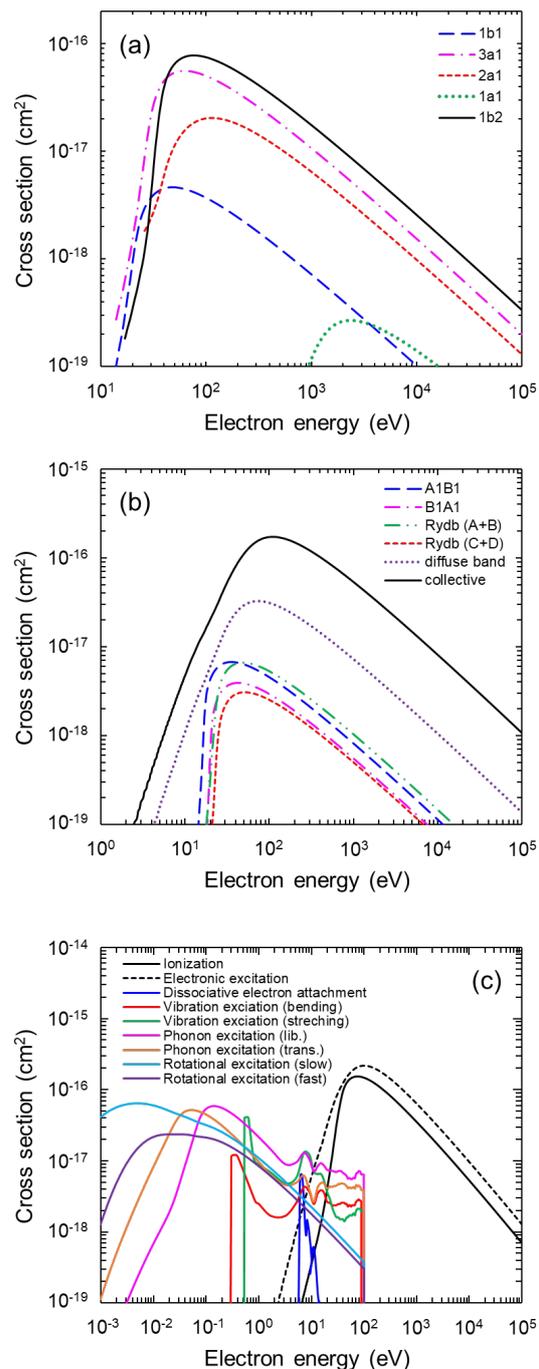


図 1: PHITS-ETS に実装される電離断面積 (図 1a), 電子励起断面積 (図 1b), その他断面積 (分子励起や解離性電子付着) (図 1c).

水分子の電子衝撃による電離と電子励起の断面積をそれぞれ示す。図 1 に示すように、PHITS-ETS には、5 つの電離断面積 ($1b_1$, $3a_1$, $1b_2$, $2a_1$, $1a_1$) と 6 つの励起断面積 (A^1B_1 , B^1A_1 , Rydberg ($A + B$), Rydberg ($C + D$), Diffuse bands, Collective) が考慮されている。また、1 meV までの輸送を実現するために、図 1c に示すように、解離性電子付着や分子励起 (回転励起, フォノン励起, 振動励起) も考慮されてきた。これら物理モデルの詳細については、DMCC の原著論文[28-33] やレビュー誌[40]を参照いただきたい。PHITS-ETS モデルの妥当性は、国際放射線単位測定委員会により報告される飛程の推奨値 (ICRU レポート No. 37) [41] や Konovalov らの報告する物理過程の実測値[42]と比較し、良好な一致を示すことから確かめられた。また、PHITS-ETS 専用の化学シミュレーションコード (PHITS-Chem) も開発しており、そのベンチマークにおいて水の放射線分解生成物の収量 (特に、OH ラジカルや水と電子の G 値) の測定値を精度よく再現することを確認しており、電離や励起する水分子の数が妥当であることも示されてきた[43]。これら電子線が引き起こす物理過程や化学過程に由来した反応生成物収量などの実測値との比較の中で、PHITS-ETS モデルの妥当性を確認してきた。

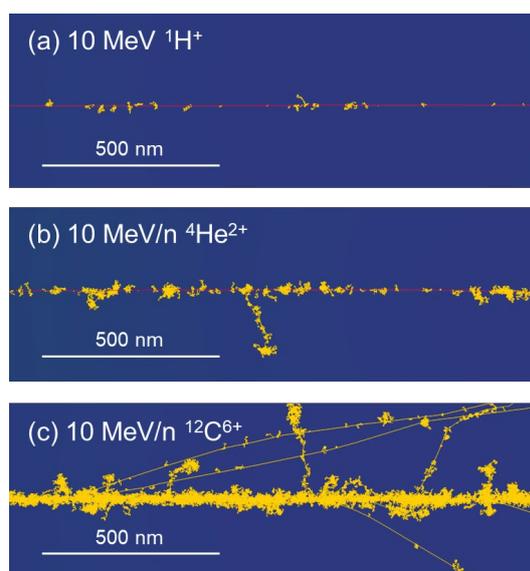


図 2: PHITS 飛跡構造解析モードにより描写された 10 MeV 陽子線 (図 2a), 10 MeV/n α 線 (図 2b), 10 MeV/n 炭素線 (図 2c)。赤線は一次イオン線, 黄色線は二次電子線を意味する。

2.2. イオン線飛跡構造解析モデル

イオン線飛跡構造解析モデルには、液相水中の相互作用を詳細に考慮した PHITS-KURBUC モデル[20]と、汎用的な ITSART モデル[21]が存在する。これらのモデルを使用することで、図 2a, 2b, 2c に示すような陽子線, α 線, 炭素線の詳細な飛跡構造計算が可能となった。図 2 における飛跡図は、近年開発した PHITS 専用 3 次元画像描画ソフト PHIG-3D[44]により描写した。

まず、PHITS-KURBUC モデルは、世界的に有名で計算精度の高い KURBUC コードに組み込まれている陽子・炭素線の粒子輸送に係るアルゴリズム[45-47]が導入され、一次陽子線や一次炭素線周辺で発生される低エネルギー二次電子の詳細な再現が可能となっている。PHITS-KURBUC には、電子線にも考慮されている弾性散乱, 電離, 電子励起過程の 3 種類に加えて、イオン線特有の電子捕獲, 電子損失, 二重電離も考慮されている。ただし、PHITS-KURBUC においてイオン線の輸送下限エネルギーは 1 keV/n となっている。詳細な物理モデルについては、KURBUC の原著論文[45-47]を参照いただきたい。

一方、PHITS-ITSART は、PHITS-KURBUC に考慮されていない様々なタイプの一次イオン線 (例, α 線や Fe イオンなど) の輸送計算も可能で、対象物質として水以外も適用可能である。ただし、PHITS-ITSART には、イオン線の弾性散乱・電離・電子励起断面積や二次電子放出モデルが組み込まれているが、電荷交換などのイオン線特有の相互作用の考慮は今後の開発課題である。PHITS-ITSART による計算精度は、微視的線量付与分布の計算を通じて検証されており[21,48], その結果を応用することで、1 μm 以下のサイズにおける微視的線量付与分布を高速に計算可能な計算機能 (t-sed タリー) が更新された[48]。また、PHITS-ITSART における様々な物質に適用可能なアドバンテージにより、今日までに、シリコンや蛍光体の検出器応答の理論解析にも活用されている[49,50]。PHITS-ITSART の物理モデルの詳細は、原著論文[45-47]を参照いただきたい。

3. DNA 損傷予測モデル

放射線により発生する細胞死や染色体異常などの後発の生物学的影響は、放射線飛跡上で生じる DNA 損傷に主に起因すると考えられている。ナノメートルサイズの空間分解能において、放射線の相互作用にともなう DNA 構造変化を実験的に直接観測するのは困難であったため、1990 年代以降、計算科学的アプローチによる解析が進められてきた[51,52]。具体的には、シミュレーション体系中に DNA を模擬した円柱ターゲット(例、直径 2 nm, 高さ 14 nm)内のエネルギー付与を試算し、DNA 損傷収率を計算するアプローチ[51]や、エネルギー付与による損傷発生と水の放射線分解により発生するラジカル収量に基づく予測アプローチ[53,54]などが存在する。しかしながら、上記の DNA ターゲットはそのサイズが非常に小さいために十分な統計量をもって DNA 損傷パターンを評価するのは難しく、またラジカル収量を計算するシミュレーションは計算コストが莫大となってしまう問題点が存在した。

そこで、PHITS では、効率的に DNA 損傷を推定することを目指し、DNA 損傷を生じる相互作用として電離と電子励起を仮定し、それらの数密度を飛跡上で網羅的に解析する手法に着想することで、様々な種類の DNA 損傷数を予測可能な解析モデルを開発した[16,26,27]。以下では、PHITS パッケージに内包されてきた DNA 損傷予測モデルについて概説する。

3.1. DNA 一本鎖・二本鎖切断の推定

PHITS コードにおける DNA 損傷予測モデルでは、図 3 に示すように、放射線飛跡上で発生する電離や電子励起の密度分布を活用し、DNA 損傷収量を予測している。具体的には、電離と電子励起の数(図 3a)ならびにその発生箇所間の距離(図 3b)を解析している。距離の解析においては、3.4 nm 以内に近接する 2 個の組合せをリンケージと定義し、電離と電子励起の数とリンケージは、発生する DNA 一本鎖切断(single-strand break: SSB)数と DNA 二本鎖切断(double-strand break: DSB)数にそれぞれ比例すると仮定している。生物実験において、主鎖切断を誘導するには約 9.5 eV 以上の比較的大きな付与エネルギーが必要である

ことが報告されており[55]、本仮定はその誘導条件に合理的に一致する。また、リンケージの距離を 10 bp 以内と定義しているが、これは相補鎖上の 10 塩基以内に 2 つの SSB が生じた場合を DSB と定義しているためである。これらの仮定や定義に基づき、SSB 収量 Y_{SB} と DSB 収量 Y_{DSB} (/Gy/Da) は、それぞれ (1) 式ならびに (2) 式により表現した。

$$Y_{SB} = k_{SB} \frac{N_{event}}{E_{dep}} \quad (1)$$

$$Y_{DSB} = k_{DSB} \frac{N_{link}}{E_{dep}} \quad (2)$$

ここで、 N_{event} は電離と電子励起数、 N_{link} はリンケージ数、 E_{dep} は付与エネルギー (keV)、 k_{SB} と k_{DSB} はそれぞれ SSB と DSB 数に対する比例係数 (keV/Gy/Da) を意味する。(1) 式と (2) 式における N_{event} 、 N_{link} 、 E_{dep} は PHITS 飛跡構造計算モードによる計算で取得可能である。ただし、最新版 PHITS においては、 k_{SB} と k_{DSB} は、220 kVp X 線照射後の SSB と DSB 収量の実測値[56,57]を再現するように決定され、 $k_{SB} = 6.46 \times 10^{-12}$ 、 $k_{DSB} = 1.48 \times 10^{-13}$ (keV/Gy/Da) を採用している[27]。本モデルは放射線飛跡上にランダムに DNA が存在することを仮定し、(1) 式と (2) 式を使用して電離や電子励起の数密度から DNA 損傷収量を計算するため、DNA ターゲットを計算体系として考慮する必要がない特徴を持つ。

PHITS における DNA 損傷予測結果の例を図

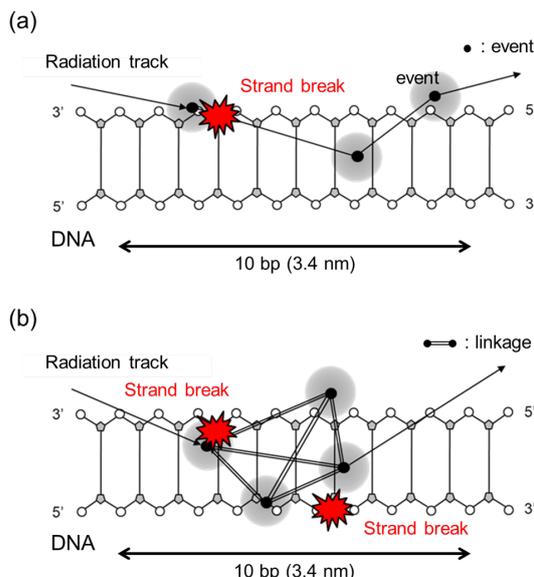


図 3: PHITS パッケージに含まれる DNA 損傷予測の概念図: (a) DNA 一本鎖切断の発生, (b) DNA 二本鎖切断の発生。

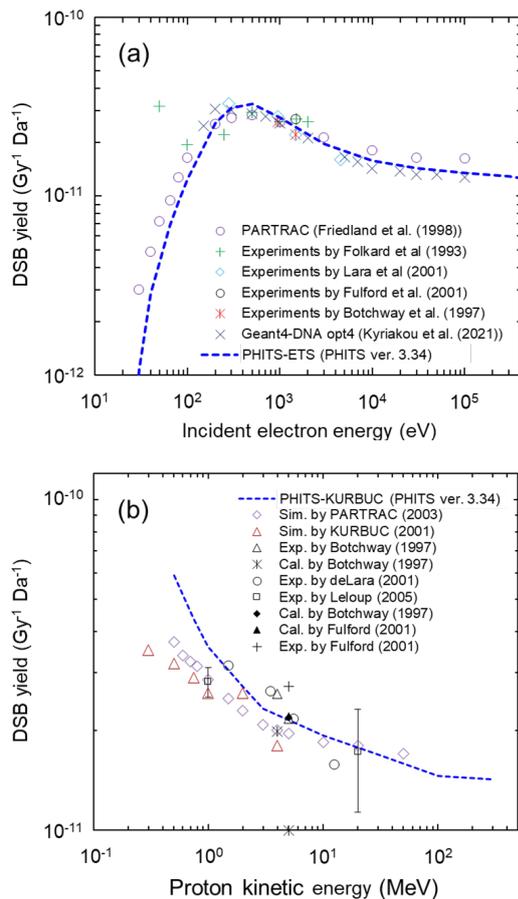


図 4: PHITS パッケージに内包される DNA 損傷予測モデルを使用して予測した DSB 収量: (a) 電子線照射, (b) 陽子線照射.

4 に示す. 図 4a と図 4b は, それぞれ電子線照射後および陽子線照射後に発生する複雑な損傷の一種である DSB 収量である[16,26,27]. 図 4a および図 4b では, 電子線輸送に PHITS-ETS モデルを, 陽子線輸送に PHITS-KURBUC を使用し, それらコードに基づいた DSB 収量の予測結果は PARTRAC や Geant4-DNA などの他のシミュレーションコードによる予測値[54,58]や複数の実測値[59-62]と一致することが確認されている. 電子線照射に注目すると, PHITS による推定においても入射エネルギーが約 400 eV の電子線による DSB 収量が最大となることが確認された. 一方, 陽子線についても実測値[60-62]と非常に良い一致を示し, 陽子線の運動エネルギーの低下に伴い DSB 収量が増加する傾向が確認できる. 以上より, 電離や電子励起の空間分布を解析することで, 電子線や陽子線による DNA 損傷を効率的に予測することができることがわかってきた.

図 4 に示す DSB 以外にも, SSB 収量について

も様々なエネルギーの電子線ならびに陽子線に対して, 開発したモデルが精度よく生物実測値を再現できることを確認してきた. しかし, 現状で精度検証された放射線は, 単位長あたりの付与エネルギーである線エネルギー付与 (Linear Energy Transfer: LET) が 30 keV/ μm 以下 (電子線および 1 MeV 以上の陽子線) に限定されている[27]. α 線や炭素線などの高 LET 放射線照射時には, 電離や電子励起の距離が非常に近づくことにより, 化学過程においてラジカルが DNA にヒットする前にラジカル同士 (特に SSB や DSB を主に生成する OH ラジカル[43,63]) の化学反応 ($\cdot\text{OH} + \cdot\text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2$) が発生し, 直接効果 (エネルギー付与による切断) に対して間接効果 (ラジカル反応による切断) の寄与率が低下することが考えられる. したがって, 今後の研究では, 現状のモデルに陽に考慮していない間接効果の寄与と LET の関係性を数学もしくは解析モデルにより表現し, DNA 損傷予測モデルを高 LET 放射線に適用できるよう更なる開発が必要である. さらに, 図 4a および図 4b における低エネルギー電子線および陽子線による DNA 損傷数の実験値と予測結果の不一致は, DNA 損傷予測モデルの更新の必要性だけでなく, 低エネルギー領域における電子衝突断面積がきわめて重要であることを示している.

3.2. 複雑な二本鎖切断の推定

PHITS の DNA 損傷予測モデルでは, SSB ならびに DSB の推定に加えて, DSB 末端に追加の主鎖切断が生じる複雑な損傷も予測可能である. DSB 末端から約 10 塩基対以内に, 追加の主鎖切断がある損傷を複雑な DSB と呼び, DSB 末端に 1 個の SSB が存在する複雑な損傷を DSB+, DSB 末端に 2 個の追加の SSB が存在する損傷は DSB++ と定義されている[53]. PHITS における予測モデルでは, 図 5 に示すように, リンケージ (DSB 発生位置) の重心を中心とした半径 3.4 nm の球内の電離・電子励起数 N_{el} をカウントし, $2 \leq N_{el} \leq 14$ の場合に孤立 DSB, $14 \leq N_{el} < 26$ の場合に DSB+, $26 \leq N_{el}$ の場合に DSB++ というシンプルな判定基準を使用することで, 複雑な DSB の収率を予測している. 本判定基準は, SSB の予測モデルより, 主鎖切断を引き起こすのに必要な電

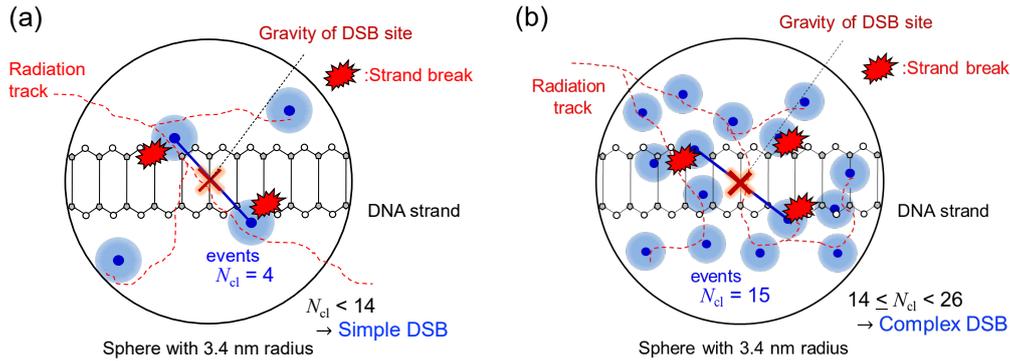


図 5: 複雑な DSB 収率の予測モデルの概要: (a) シンプルな DSB の判定基準, (b) 複雑な DSB (DSB+) の判定基準. シンプルな DSB: $2 \leq N_{cl} \leq 14$, DSB+: $14 \leq N_{cl} < 26$, DSB++: $26 \leq N_{cl}$.

離・電子励起数が 12 であることに基づく. この判定基準の妥当性については, 複雑な DNA 損傷予測に関する原著論文[64,65]を参照いただきたい. 本モデルの検証においては, DSB+ならびに DSB++に関する実測値の直接測定が困難であるため[65], 比較データが存在しない. これに対して, 近年, 原子間力顕微鏡 (Atomic Force Microscope: AFM) を使用して, DSB 末端に誘導される塩基損傷 (Base Damage: BD) の直接観測が可能になった[66]. そこで, PHITS コードでは主鎖切断の代わりに BD に着目することで, 複雑な DSB 予測モデルの精度検証を行った.

まず, DSB 末端に BD を含むクラスター損傷を

予測するために, BD と SSB 比率の実測結果 (BD/SSB = 1.3)[67]に基づき, 判定基準をスケールリングし, $2 \leq N_{cl} \leq 11$ の場合に孤立 DSB, $11 \leq N_{cl} < 20$ の場合に DSB+BD, $20 \leq N_{cl}$ の場合に DSB+2BD が誘導されると仮定した. 本モデルを使用した複雑な DSB 収率の予測結果は図 6a のようになり, Xu らが AFM で測定した DSB+BD ならびに DSB+2BD の実測値 (図 6b)[66]とよく一致することが確認された. したがって, 図 4 同様に, 電離や電子励起の空間パターン(密度)が複雑な DSB を決定する重要な因子であることが明らかとなった. しかしながら, 先に議論したように, 本予測モデルでは, 複雑な DSB 収率の判定基準に化学過程を陽に考慮していない. 今日までに, 世界中において様々な化学コードが開発されてきたが, あらゆるイオン線に対して OH ラジカル同士の再結合ならびに G 値を予測可能な公開コードは, 著者の知る限り存在しない. そのため, PHITS-Chem コードの一層の開発を進め, 化学シミュレーションコードで裏付けられた間接効果予測モデルを開発することが急務である. このような化学コードや間接効果予測モデルの開発を進めることで, α 線や炭素線をはじめとした重粒子線による生物学的効果の正確な理解につながると考えられる.

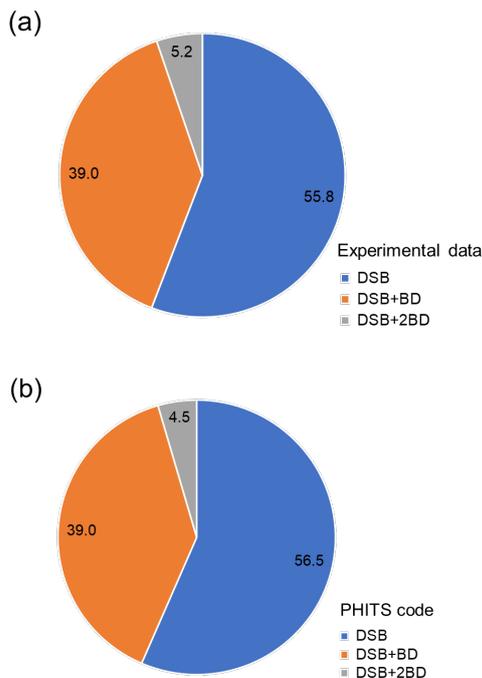


図 6: 光子線 (150 kVp X 線) 照射時における複雑な DSB 収率の予測値と実測値[66]の比較.

4. まとめと今後の展望

本解説では, 放射線輸送解析コード PHITS の飛跡構造解析モードならびに DNA 損傷予測モデルについて紹介した. 本モードおよびモデルを活用することで, 生体物質の主成分である水中での個々の相互作用を追跡し, 様々なタイプの DNA 損傷の予測が可能となった. 一方で, 現

DNA 損傷予測モデルにおける適応可能な粒子は、PHITS-ETS と PHITS-KURBUC モデルにより得られる電子線と陽子線に限られ、 α 線や炭素線などの高 LET 重粒子線には未だ応用できない。近年、薬剤を使用した腫瘍選択的放射線治療法である標的アイソトープ治療[68,69]やホウ素中性子捕捉療法 (Boron Neutron Capture Therapy: BNCT) [70,71]が注目され、その生物学的効果の解明が求められている。今後、本解説で紹介した汎用的飛跡構造解析モード PHITS-ITSART を DNA 損傷予測モデルに接続することによって、様々なタイプの放射線による生物影響の解明につながり、生命科学分野への応用がより一層期待される。

謝辞

本稿にて紹介した PHITS 飛跡構造解析モードならびに DNA 損傷予測コードの開発に際し、Hooshang Nikjoo 教授 (Karolinska Institutet), Thiansin Liamsuwan 博士 (Chulabhorn Royal Academy), Alessio Parisi 博士 (Mayo Clinic), 吉井勇治 博士 (北海道科学大学), 小川達彦 博士 (日本原子力研究開発機構), 平田悠歩 博士 (日本原子力研究開発機構), 中野敏彰 博士 (量子科学技術研究開発機構), 赤松憲 博士 (量子科学技術研究開発機構), 鹿園直哉 博士 (量子科学技術研究開発機構) にもご協力いただきました。この場を借りて、改めて感謝いたします。

参考文献

- [1] T. Sato et al., *J. Nucl. Sci. Technol.* **61**, 127–135 (2024)
- [2] S. Mark et al., *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **572**, 929–934 (2007).
- [3] X-5 Monte Carlo Team. Los Alamos, USA: Los Alamos National Laboratory (2003).
- [4] J. Allison et al., *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **835**, 186–225 (2016).
- [5] Y. Iwamoto et al., *Nucl. Sci. Technol.* **59**, 665–675 (2022).
- [6] L. Sihver et al., *Radiat. Environ. Biophys.* **49**, 351 (2010).

- [7] A. Sukegawa et al., *Prog. Nucl. Sci. Technol.* **1**, 36–39 (2011).
- [8] S. Yonai et al., *Med. Phys.* **39**, 5028–5039 (2012).
- [9] K. Tanaka et al., *Prog. Nucl. Sci. Technol.* **4**, 201–208 (2014).
- [10] T. Sato et al., *Space Weather* **16**, 924 (2018).
- [11] K. Takada et al., *J. Radiat. Res.* **59**, 91–99 (2018).
- [12] Y. Iwamoto et al., *J. Nucl. Mat.* **538**, 152261 (2020).
- [13] I. Kawrakow, *Med. Phys.* **27**, 485–498 (2000).
- [14] H. Hirayama et al., *SLAC-R-730 and KEK Report 2005–8* (2005).
- [15] T. Sato et al., *J. Nucl. Sci. Technol.* **55**, 684–690 (2018).
- [16] Y. Matsuya et al., *J. Appl. Phys.* **126**, 124701 (2019).
- [17] T. Kai et al., *RSC. Adv.* **13**, 32371–32380 (2023).
- [18] M. A. Bernal et al., *Phys. Med.* **31**, 861–874 (2015).
- [19] B. Boudaïffa, P. Cloutier, D. Hunting, M. A. Huels, and L. Sanche, *Science* **287**, 1658–1660 (2000).
- [20] Y. Matsuya et al., *Phys. Med. Biol.* **66**, 06NT02 (2021).
- [21] T. Ogawa et al., *Sci. Rep.* **11**, 24401 (2021).
- [22] H. Tsuchida et al., *Eur. Phys. J. D.* **74**, 212 (2020).
- [23] H. Nakano et al., *BJR Open.* **2**, 20200072 (2021).
- [24] A. Papadopoulos et al., *Appl. Sci.* **12**, 8950 (2022).
- [25] Y. Yachi et al., *Sci. Rep.* **12**, 1641 (2022).
- [26] Y. Matsuya et al., *Int. J. Radiat. Biol.* **98**, 148–157 (2022).
- [27] Y. Matsuya et al., *Phys. Med. Biol.* **67**, 215017 (2022).
- [28] T. Kai et al., *Radiat. Phys. Chem.* **102**, 16–22 (2014).
- [29] T. Kai et al., *Radiat. Phys. Chem.* **108**, 13–17 (2015).

- [30] T. Kai et al., *Radiat. Phys. Chem.* **115**, 1–5 (2015).
- [31] T. Kai et al., *Int. J. Radiat. Biol.* **92**, 654–659 (2016).
- [32] T. Kai et al., *J. Phys. Chem. A* **120**, 8228–8233 (2016).
- [33] T. Kai et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 2838 (2018).
- [34] W. Friedland et al., *Mutat. Res.* **711**, 28–40 (2011).
- [35] S. Uehara and H. Nikjoo, *J. Radiat. Res.* **47**, 69–81 (2006).
- [36] H. Tomita et al., *Radiat. Environ. Biophys.* **36**, 235–241 (1998).
- [37] H. Date et al., *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **265**, 515–20 (2007).
- [38] I. Plante and F. A. Cucinotta, *New J. Phys.* **10**, 1–15 (2008).
- [39] S. Incerti et al., *Int. J. Model. Sim. Sci. Comput.* **01**, 157–178 (2010).
- [40] T. Kai et al., *Jpn. Soc. Radiat. Chem.* **101**, 3–11 (2016).
- [41] ICRU Report 37, Bethesda, MD (1984).
- [42] V. V. Kononov, A. M. Raitsimring, and Y. D. Tsvetkov, *Radiat. Phys. Chem.* **32**, 623–632 (1998).
- [43] Y. Matsuya et al., *Phys. Med. Biol.* **69**, 035005 (2024).
- [44] S. Ohnishi, *SoftwareX* **14**, 100681 (2021).
- [45] T. Liamsuwan, S. Uehara, D. Emfietzoglou, and H. Nikjoo, *Int. J. Radiat. Biol.* **87**, 141–160 (2011).
- [46] T. Liamsuwan and H. Nikjoo, *Phys. Med. Biol.* **58**, 641–672 (2013).
- [47] T. Liamsuwan and H. Nikjoo, *Phys. Med. Biol.* **58**, 673–701 (2013).
- [48] T. Sato et al., *Phys. Med. Biol.* **68**, 155005 (2023).
- [49] Y. Hirata et al., *Jpn. J. Appl. Phys.* **61**, 106004 (2022).
- [50] Y. Hirata et al., *Jpn. J. Appl. Phys.* **62**, 106001 (2023).
- [51] D. T. Goodhead et al., *Radiat. Prot. Dos.* **52**, 217–223 (1994).
- [52] B. Grosswendt, S. Pszona, and A. Bantsar, *Radiat. Prot. Dos.* **126**, 432–444 (2007).
- [53] H. Nikjoo et al., *Int. J. Radiat. Biol.* **71**, 467–483 (1997).
- [54] W. Friedland et al., *Radiat. Res.* **150**, 170–182 (1998).
- [55] M. Lobrich, B. Rydberg, and P. K. Cooper, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **92**, 12050–12054 (1995).
- [56] M. Lobrich, P. K. Cooper, and B. Rydberg, *Int. J. Radiat. Biol.* **70**, 493–503 (1996).
- [57] M. Ljungman et al., *Radiat. Res.* **127**, 171–176 (1991).
- [58] I. Kyriakou, I. Tremi, A. G. Georgakilas, and D. Emfietzoglou, *Appl. Radiat. Isot.* **172**, 109654 (2021).
- [59] M. Folkard et al., *Int. J. Radiat. Biol.* **64**, 651–658 (1993).
- [60] J. Fulford, H. Nikjoo, D. T. Goodhead, and P. O’Neill, *Int. J. Radiat. Biol.* **77**, 1053–1066 (2001).
- [61] C. M. de Lara et al., *Radiat. Res.* **155**, 440–408 (2001).
- [62] S. W. Botchway et al., *Radiat. Res.* **148**, 317–324 (1997).
- [63] H. Tomita, M. Kai, T. Kusama, and A. Ito, *Radiat. Environ. Biophys.* **36**, 235–241 (1998).
- [64] Y. Matsuya et al., *Int. J. Mol. Sci.* **21**, 1701 (2020).
- [65] Y. Yachi et al., *Int. J. Mol. Sci.* **24**, 1386 (2023).
- [66] W. Xie et al., *Radiat. Prot. Dos.* **156**, 283–288 (2013).
- [67] T. Shiina et al., *Radiat. Environ. Biophys.* **52**, 99–112 (2013).
- [68] T. Sato et al., *EJNMMI Phys.* **8**, 4 (2021).
- [69] A. Jang et al., *Int. J. Mol. Sci.* **24**, 11626 (2023).
- [70] T. Sato, S-I. Masunaga, H. Kumada, and N. Hamada, *Sci. Rep.* **8**, 988 (2018).
- [71] Y. Matsuya et al., *Sci. Rep.* **14**, 1669 (2024).

2024 年度 役員・委員会

会長

渡部直樹（北海道大学）

幹事

久間晋（理化学研究所）

日高宏（北海道大学）

穂坂綱一（量子科学技術研究開発機構）

中井陽一（理化学研究所）〔副会長〕

藤田奈津子（日本原子力研究開発機構）

運営委員

足立純一（高エネルギー加速器研究機構）

大橋隼人（富山大学）

北島昌史（東京工業大学）

熊谷嘉晃（奈良女子大学）

中井陽一（理化学研究所）

羽馬哲也（東京大学）

日高宏（北海道大学）

穂坂綱一（量子科学技術研究開発機構）

石井邦和（奈良女子大学）

歸家令果（東京都立大学）

久間晋（理化学研究所）

佐甲徳栄（日本大学）

中野祐司（立教大学）

彦坂泰正（富山大学）

藤田奈津子（日本原子力研究開発機構）

常置委員会

編集委員会

委員長：穂坂綱一（量子科学技術研究開発機構）

行事委員会

委員長：藤田奈津子（日本原子力研究開発機構）

広報渉外委員会

委員長：久間晋（理化学研究所）

顕彰委員会

委員長：中井陽一（理化学研究所）

庶務委員会

委員長：日高宏（北海道大学）

編集委員

石井邦和, 沖野友哉, 奥村拓馬, 鬼塚侑樹, 歸家令果,
田沼肇, 鳥居寛之, 羽馬哲也, 樋山みやび, 穂坂綱一



原子衝突学会誌しょうとつ

第 21 巻 第 3 号（通巻 118 号）

Journal of Atomic Collision Research

©原子衝突学会 2024

<http://www.atomiccollision.jp/>

発行: 2024 年 11 月 15 日

配信: 原子衝突学会事務局 <acr-post@as.bunken.co.jp>