

課題名 (タイトル) :

## 変形 QRPA 計算コードの並列化

利用者氏名 : 吉田 賢市

所属 : 和光研究所 仁科加速器研究センター 理論研究部門 中務原子核理論研究室

### 1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

理研 RIBF をはじめとする新世代の RI ビーム加速器の稼働とともに、不安定核の研究領域は大きな質量数をもった原子核へと広がっていく。この状況に鑑み、理論的には、広い質量数領域にある原子核の量子構造 (基底状態、励起状態) を統一的な枠組みでかつ定量的に記述することが求められる。

その候補の一つとして、原子核密度汎関数法が挙げられる。基底状態の系統的計算はすでに世界中で大規模計算がなされている。一方で、励起状態の系統的記述は球形核に限られている。そこで、時間に依存した密度汎関数法に基づいて、不安定原子核の励起状態の性質を系統的に計算できるコード開発のための準備が本課題の目的である。

### 2. 具体的な利用内容、計算方法

励起状態を記述するための理論的方法として、時間依存密度汎関数法の線形近似である、準粒子 RPA(QRPA)法が標準的なものとして知られている。QRPA 計算を行うためには、その出発点となる基底状態の波動関数を知る必要がある。基底状態は、密度汎関数法に基づく Kohn-Sham 方程式を解くことで得られる。原子核系では、超流動性が特に重要であり、Kohn-Sham-Bogoliubov (KSB) 方程式を解くことが標準的となっている。さらに、本課題では、原子核の変形や、中性子スキンなどの空間的に広がった構造を記述できるため、KSB 方程式を円筒座標系で直接空間メッシュに離散化して解く。

こうして得られた準粒子基底 (KSB 方程式の固有状態) を用いて、QRPA 方程式の行列要素を計算し対角化する。行列要素の計算、及び対角化計算に対して並列化を行う。この並列化計算コードは、これまでに RICC を用いて開発してきたも

のであり、すでに並列化効率等については調べてある。

### 3. 結果

本年度は、特に双極子振動モードにおける重心運動の成分の混ざり具合を調べた。重心運動は内部励起を伴わない、“見せかけ”の励起モードであるため、有限のエネルギーをもつ物理的な励起モードに対しては、なるべくその混ざりは小さい方がよい。

球形核の  $^{144}\text{Sm}$  と変形核の  $^{154}\text{Sm}$  に対して、アイソスカラー型の双極子励起遷移強度分布を求め、演算子から重心運動の成分を抜く処方箋を用いた場合と、各励起状態の波動関数から重心運動の成分を抜く処方箋を用いた場合を比較した。

形の違いにより、重心運動の混ざり具合が異なること、また変形しているときは長軸・短軸に沿った振動に応じて重心運動の混ざり具合が異なることなどが明らかになった。

### 4. まとめ

双極子振動励起モードにおける重心運動の成分を、定量的に議論することができるようになった。

### 5. 今後の計画・展望

複数のエネルギー密度汎関数を用いた場合や、別の原子核に対しても調べ、重心運動の混ざり具合を定量的に評価できるようになると、理論計算の予言能力・精度を定量的に議論できるようになる。

平成 24 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

N. Honohara, K. Sato, K. Yoshida, T. Nakatsukasa, M. Matsuo, K. Matsuyanagi, “Microscopic Analysis of Shape Coexistence/Mixing and Shape Phase Transition in Neutron-Rich Nuclei around  $^{32}\text{Mg}$ ”, Prog. Theor. Phys. Suppl. 196, 328-333 (2012).

【国際会議、学会などでの口頭発表】

1. 吉田賢市、日野原伸生、“Shape changes and large-amplitude collective dynamics in neutron-rich Cr isotopes”、日本物理学会第 67 回年次大会、関西学院大学（2012 年 3 月 24-27 日）
2. 吉田賢市、中務孝、“Giant resonances in Nd and Sm isotopes with shape evolutions”、日本物理学会 2012 年秋季大会、京都産業大学（2012 年 9 月 11-14 日）
3. K. Yoshida, “Skyrme energy density functionals for collective dynamics”, KITPC Program “From nucleon structure to nuclear structure and compact astrophysical objects”, Kavli Institute for Theoretical Physics China (June 11-29, 2012)
4. K. Yoshida, “Skyrme energy-density functional approach to collective modes of excitation in exotic nuclei”, The 5th International Conference on “Fission and properties of neutron-rich nuclei”, Sundial Beach Resort (November 4-10, 2012)
5. K. Yoshida, “Skyrme-EDF for collective modes of excitation in exotic nuclei”, Workshop on “Computational approaches to nuclear many-body problems and related quantum systems”, RIKEN (February 12-16, 2013)