

課題名 (タイトル) :

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。基底状態の系統的記述に関してはすでに世界中で大規模計算が行われている。一方で、励起状態の系統的記述は球形原子核に限られ、変形核への拡張が現在精力的に行われている。

そこで、時間に依存した密度汎関数法に基づいて、不安定核を含む多数の原子核のダイナミクスを系統的に計算できるコードを開発することが、本課題の大きな目的である。

2. 具体的な利用内容、計算方法

原子核の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るので、その効果を取り入れた Kohn-Sham-Bogoliubov (KSB)方程式を解くことが標準的となっている。

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よう、この KSB 方程式を、円筒座標系で実空間を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大規模な並列化を行

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る。

3. 結果

本年度は、魔法数である中性子数 82 から 92 まで変化させ原子核が徐々に変形するときの、希土類原子核の種々の巨大共鳴状態の性質の変化を系統的に調べた。

アイソスカラー型の四重極型励起モードでは、核変形の発達に伴って巨大共鳴のエネルギー幅が広がる。これは、角運動量の対称軸成分 (K 量子数) に依って励起エネルギーの変化の度合いが異なるためであることを、微視的理論によって定量的に明らかにした。また、アイソスカラー型単極型励起モードでは変形効果により、四重極モードの $K=0$ 成分と結合し、新たなピーク構造が発現するという結果を得た。

更に、変形効果に伴う励起モードの結合は、負パリティ励起モードやアイソベクトル型励起モードでも起こり、巨大共鳴状態は多様な微視的構造もつことを予言した。

4. まとめ

並列化 QRPA 計算コードを、中性子数の増加に伴い球形から変形へと変化する希土類原子核の巨大共鳴状態の系統的記述に適用した。形状相転移を反映し、巨大共鳴状態に多様な構造が現れることを予言した。

5. 今後の計画・展望

複数のエネルギー汎関数を用い、多数の原子核に対して系統的に計算することで、巨大共鳴の微視的エネルギー公式や核物質の特性を引き出すことを目指す。

平成 25 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】

1. K. Yoshida and T. Nakatsukasa, “Shape evolution of giant resonances in Nd and Sm isotopes”,
Physical Review C, Volume 88, 034309 (2013).