

課題名 (タイトル) :

時間依存密度汎関数理論による核子多体系の量子ダイナミクスの研究

利用者氏名 : ○中務孝, 吉田賢市, 日野原伸生, 佐藤弘一

所属 : 和光研究所 仁科加速器研究センター 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

原子核物理の最近の大きな発展として、普遍的・汎用的なエネルギー密度汎関数の構築とその応用が挙げられる。基底状態の性質については、欧米を中心にした精度の高いエネルギー汎関数の構築に関わる活発な研究があり、その精度は数年前に比べて一桁程度上がってきている。我々は、この発展を踏まえて、時間依存密度汎関数の大規模数値計算を行い、励起スペクトルや光応答など、全核種を対象にした核反応データの理論的整備を目指して本プロジェクトを今年度より開始した。

今年度 (平成 22 年度) は、光吸収断面積の自己無撞着計算を中重核領域において実行できる環境を整えるためのプログラム並列化とその実行、また、大振幅集団運動の系統的計算に向けて、ボア・ハミルトニアンを微視的導出の計算に取り組んだ。以下に、その内容を示す。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

まず、重い原子核を対象にした研究で重要になる粒子相関が対相関である。すなわち、核内において核子対が束縛したクーバー対を作ることによって、バルクな物質で知られた超伝導・超流動に類似した性質が陽子・中性子にも表れる。この性質を密度汎関数理論で扱うためには対密度 (対テンソル) と呼ばれる量を汎関数に導入する必要がある。その結果として、基底状態を記述する Kohn-Sham-Bogoliubov 方程式が次のように与えられる ( $q = n$  or  $p$ )。

$$\begin{pmatrix} \hbar^q(\mathbf{r}, \sigma) - \lambda^q & \bar{\hbar}^q(\mathbf{r}, \sigma) \\ \bar{\hbar}^q(\mathbf{r}, \sigma) & -(\hbar^q(\mathbf{r}, \sigma) - \lambda^q) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_{1,i}^q(\mathbf{r}, \sigma) \\ \varphi_{2,i}^q(\mathbf{r}, \sigma) \end{pmatrix} = E_i \begin{pmatrix} \varphi_{1,i}^q(\mathbf{r}, \sigma) \\ \varphi_{2,i}^q(\mathbf{r}, \sigma) \end{pmatrix}$$

我々は原子核の基底状態の形状に軸対称性とパリティ対称性を課し、この方程式を 2 次元の座標

( $\rho, z$ ) と対称 ( $z$ ) 軸周りの磁気量子数  $K$  で表示し、自己無撞着に解く。その解が準粒子軌道と呼ばれる。この過程が第一のステップである。この計算では、磁気量子数  $K$  毎に独立な計算となるため、数十程度の並列化が可能である。

次に、線形応答計算 (第二ステップ) を行う。上で計算して求めた基底状態における準粒子を 2 つ励起させた 2 準粒子励起状態 ( $ij, kl$ ) をインデックスにした行列 ( $A, B$ ) を計算し、次の方程式を対角化する。

$$\begin{pmatrix} A_{ijkl} & B_{ijkl} \\ B_{ijkl} & A_{ijkl} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_{kl}^\lambda \\ Y_{kl}^\lambda \end{pmatrix} = \hbar\omega_\lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_{kl}^\lambda \\ Y_{kl}^\lambda \end{pmatrix}$$

ここから、規準励起モードとその励起エネルギーが求められる。光吸収断面積のような線形応答が比較的良い近似となる断面積は、この規準モードから直接計算することが可能である。この計算では、行列要素の計算が最も時間がかかるところであり、これを並列化した。

有限多体系である原子核には、この線形応答計算では記述することが難しい性質が低エネルギーの領域にしばしば現れる。たとえば、四重極振動、特に非調和性の高い状態。あるいは、上の第一ステップの計算において複数のエネルギー極小点が現れ、その間の結合が重要になる現象 (変形共存現象)。これらの線形近似では扱えない現象を記述するため、集団ハミルトニアンを微視的構築を行った。詳細は省略するが、上の第一ステップの計算を拘束条件付で行い、拘束条件を変化させた各点において第二ステップの計算を実行し、集団ハミルトニアンに現れるポテンシャル、質量といった量を微視的に決定するものである。最後に集団ハミルトニアンを再量子化することで、励起スペクトル、遷移強度確率などを計算する。

### 3. 結果

線形応答による光吸収断面積の計算結果の例を図 1 に示す。これは、希土類原子核のネオジウムとサマリウムのアイソトープにおける光吸収断面積の計算と実験を比較したものである。 $^{142}\text{Nd}$  と  $^{144}\text{Sm}$  は、中性子数が 82 の原子核である。82 は原子核の魔法数として良く知られており、基底状態が安定で球形が好まれる。我々の計算においても、基底状態は球形である。中性子数を 2 個ずつ増やしていくと、中性子が 86 個から基底状態が徐々に変形を始め、中性子数の増加とともにその変形の大きさも大きくなる。このような形状相転移は、低エネルギーのスペクトルが回転的になることから確認されているが、この密度汎関数計算ではそれが自動的に再現されている。さらに、この形状転移の影響は光吸収断面積にも如実

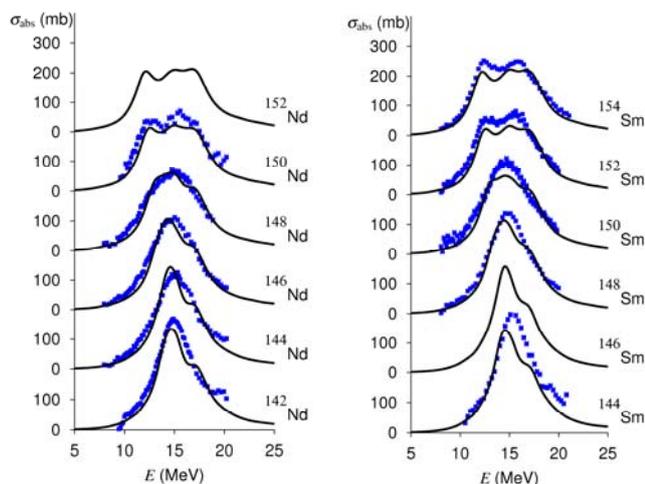


図 1：球形から変形に形状相転移する Nd 及び Sm 同位体に対する光吸収断面積。計算値（実線）及び実験値（点）。

に表れており、それが図 1 に示された共鳴ピークの幅の増加と分裂である。球形核ではピークは 15 MeV 付近にあるが、中性子数の増加とともにその幅が大きくなり、やがて中性子数が 90 に達するとピークが 2 つに分裂している。この線形応答の計算結果でもそれが見事に再現されている。エネルギー汎関数としては、SkM\* と呼ばれる汎関数を用いた。この結果については、早速論文を執筆し投稿。ごく最近になって受理された。

線形近似を超えた扱いである集団ハミルトニ

アンの微視的計算では、基底状態 1 点での計算だけでなく、多くの非平衡状態における計算も必要とされるため計算量は線形応答計算に比べて莫大に増大する。このため、現時点では準現象論的な P+Q 模型と呼ばれる模型ハミルトニアンに対する時間依存平均場近似から集団ハミルトニアンを構築している。その計算例が図 2 に示した中性子過剰なマグネシウムのアイソトープの低エネルギーの  $2_1^+$ ,  $4_1^+$  状態の性質である。実験では、これらの励起スペクトルが中性子数の増加とともに次第に回転的になっており、計算でも定性的にその性質は再現している。また、計算では、比較的大きな異なる形状の混合が基底状態において起きていることが分かった。

また、BCS 近似に類似した新たな時間依存形式の理論の開発に成功し、その理論の最初の応用として、軽い原子核の光吸収断面積計算を行った。成果リストの論文 5 で発表し、米国フィジカル・レビュー誌のハイライト論文に選ばれている。

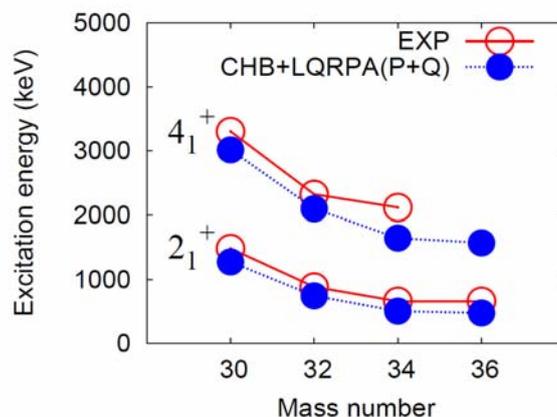


図 2：中性子過剰領域の Mg 同位体の低励起状態の励起エネルギー。計算値(青)および実験値(赤)

### 4. まとめ

今年度（平成 22 年度）は、線形応答計算に関する MP I を用いた並列計算プログラムが完成し、その本格的なプロダクトランを実行することができた点が最も大きな成果であったといえる。これにより、軽い原子核から重い原子核、ウランや超ウラン領域の原子核に関しても計算の実行可能性にめどがついた。成果リストの論文 1 と 2 の内容がこの最初の成果である。線形近似を超えた計算に関しては、準現象論的なハミルトニアンを

用いた計算の成果として論文 3 と 4 があるが、今後は現実的な汎関数への応用を進めていきたい。

## 5. 今後の計画・展望

線形応答計算は、核図表全体にわたる系統的な計算を行うことで、計算核データの整備に向けて必要な準備は整ったと考えている。R I ビームファクトリーなどの世界最高レベルの実験施設でも届かない多くの核種に関するデータを整備していきたい。また、線形近似を超えた計算については、現時点では現代的なエネルギー汎関数を用いるところまで達しておらず、今後更なる発展・改良が期待される。また、成果リストの論文 5 で我々が提案した超流動系に対する正準基底を用いた時間依存理論の枠組みは、これまでのところ線形領域でその有用性を見たレベルであるが、今後非線形領域の様々な核反応などへの応用を考えており、核融合・核分裂反応などの微視的解明が期待される。

## 6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況（どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか）や、継続して利用する際に行う具体的な内容

今年度は、核データ整備の初年度としてその成果が出始めたところであり、来年度も継続利用を希望する。線形応答計算では、希土類核と中性子過剰 Zr 核において並列計算プログラムの有用性、パフォーマンスを確認することができたが、今後は戦略的に重要な核領域から、更に同様の数値計算を進めていく。また、今年度は、リソース割当ては十分であったのにも関わらず、ある時期に集中的に R I C C の利用を進めたために優先順位が下がり、期待したレベルの計算の進展が得られなかった。そのため、筑波大の T 2 K、P A C S - C S などのリソースに相当頼ることとなった。来年度は、利用の時期・頻度のマネジメントを考えてプロジェクトを実行したい。

## 平成 22 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, "Roles of deformation and neutron excess on the giant monopole resonance in neutron-rich Zr isotopes", *Physical Review C*, Volume 82, Issue 3, 034324 (2010).
2. K.Yoshida and T.Nakatsuaksa, "Dipole responses in Nd and Sm isotopes with shape transitions", *Physical Review C*, Volume 83, Issue 2, 021304 (2011).
3. N. Hinohara, K. Sato, T. Nakatsukasa, M. Matsuo, and K. Matsuyanagi, "Microscopic description of large-amplitude shape-mixing dynamics with inertial functions derived in local quasiparticle random-phase approximation," *Physical Review C*, Volume 82, Issue 6, 064313 (2010).
4. N. Hinohara and Y. Kanada-En'yo, "Triaxial quadrupole deformation dynamics in *sd*-shell nuclei around  $^{26}\text{Mg}$ ", *Physical Review C*, Volume 83, Issue 1, 014321 (2011).
5. S. Ebata, T. Naktsukasa, T. Inakura, K. Yoshida, Y. Hashimoto, K. Yabana, "Canonical-basis time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov theory and linear-response calculations", *Physical Review C* 82, 034306 (2010).

## 【国際会議、学会などでの口頭発表】

1. T. Nakatsukasa, "Time-dependent approaches to quantum dynamics of many-body systems", Invited talk at Workshop on Decoherence in Quantum Dynamical Systems, Trento, Italy (26-30 Apr. 2010)
2. T. Nakatsukasa, "Time-dependent approaches to structure and reactions", Invited talk at UNEDF Annual Meeting, East Lansing, USA (21-25 June, 2010).
3. T. Nakatsukasa, "Self-consistent description of nuclear photoabsorption cross sections", Invited talk at Zakopane Conference on Nuclear Physics, Zakopane, Poland (30 Aug.-5 Sep., 2010).
4. T. Nakatsukasa, "Complex absorbing potential for the continuum in real-space calculations", Invited talk at Japan-Italy workshop on Correlations in Reactions and Continuum, Torino, Italy (6-8 Sep., 2010).
5. T. Nakatsukasa, "Large-scale numerical simulations of nuclear many-body dynamics using the time-dependent density-functional theory", Invited talk at International workshop on Nuclear Structure: Recent developments, Dubna, Russia (14-16 Oct. 2010).
6. T. Nakatsukasa, "Density functional approaches to atomic nuclei", Invited talk at International symposium on Nanoscience and Quantum Physics 2011, Tokyo, Japan (26-28 Jan., 2011).
7. T. Nakatsukasa, S. Ebata, K. Yabana, "Linear response calculation using the canonical-basis TDHFB with a schematic pairing functional", International Nuclear Physics Conference 2011, Vancouver, Canada (4-9 July, 2010).
8. K. Yoshida, "Pygmy resonance and giant resonance in deformed nuclei", Second EMMI-EFES Workshop on Neutron-Rich Exotic Nuclei, RIKEN, Wako, Saitama (16-18 June, 2010).
9. K. Yoshida, "Exotic modes of excitation in deformed neutron-rich nuclei", Nuclear Structure 2010, University of California Berkeley, California, USA (8-13 August, 2010).
10. K. Yoshida, "Skyrme energy-density functional approach to collective excitations in medium-mass to heavy nuclei", JAPAN-ITALY EFES Workshop on Correlations in Reactions and Continuum, INFN Torino, Italy (6-8 September, 2010).
11. K. Yoshida, "Skyrme-QRPA approach to collective modes of excitation in deformed nuclei",

- University of Aizu-JUSTIPEN-EFES Symposium "Cutting-Edge Physics of Unstable Nuclei", University of Aizu, Fukushima (10-13 November, 2010).
- 1 2. K. Yoshida, "Pygmy and giant resonances in neutron-rich nuclei", SAMURAI workshop 'Towards first experiments', RIKEN, Wako, Saitama (22-23 November, 2010).
  - 1 3. K. Yoshida, "Nuclear density-functional theory for collective dynamics", International Symposium 'From Quarks to Supernovae', Izu, Shizuoka (28-30 November, 2010).
  - 1 4. K. Yoshida, "Skyrme energy-density functional approach to collective dynamics", International EFES-IN2P3 conference 'Many body correlations from dilute to dense nuclear systems', Paris, France (15-18 February, 2011).
  - 1 5. 吉田賢市, "Skyrme energy-density functional approach to nuclear collective dynamics", 基研研究会「大振幅集団運動の微視的理論」, 京都大学, 2010 年 10 月 24 日 - 26 日.
  - 1 6. T. Inakura, T. Nakatsukasa, and K. Yabana, "Systematic calculations of electric dipole responses with fully self-consistent Skyrme-HF+RPA", Second EMMI-EFES Workshop on Neutron-Rich Exotic Nuclei, RIKEN, Wako, Saitama (16-18 June, 2010).
  - 1 7. T. Inakura, T. Nakatsukasa, and K. Yabana, "Systematic calculations of electric dipole responses with fully self-consistent SkyrmeRPA", Workshop on Gamma Strength and Level Density in Nuclear Physics and Nuclear Technology, Dresden-Rossendorf, Germany (Aug. 30-Sep. 3, 2010)
  - 1 8. T. Inakura, T. Nakatsukasa, and K. Yabana, "Systematic calculations of electric dipole response with fully self-consistent SkyrmeRPA", University of Aizu-JUSTIPEN-EFES Symposium "Cutting-Edge Physics of Unstable Nuclei", University of Aizu, Fukushima (10-13 November, 2010).
  - 1 9. T. Inakura, "Recent progress of nuclear density functional calculations -towards to next-generation supercomputer", LIA Symposium 2011 French-Japanese Symposium on Nuclear Structure Problems, RIKEN, Wako, Saitama (4-8, January, 2011).
  - 2 0. N. Hinohara, "Microscopic description of large-amplitude shape dynamics in neutron-rich Mg isotopes," Second EMMI-EFES Workshop on Neutron-Rich Nuclei (EENEN10), RIKEN, Wako, Saitama (16-18, Jun. 2010).
  - 2 1. N. Hinohara, "Local QRPA vibrational and rotational inertial functions for large-amplitude quadrupole collective dynamics," Zakopane Conference on Nuclear Physics Extremes of the Nuclear Landscape, Zakopane, Poland (30 Aug-5 Sep. 2010).
  - 2 2. 日野原伸生、佐藤弘一、中務孝、松尾正之、松柳研一, "中性子過剰 Mg 核の大振幅変形ダイナミクスの微視的記述," 日本物理学会 2010 年秋季大会, 九州工業大学戸畑キャンパス, 2010 年 9 月 11 日-14 日.
  - 2 3. N. Hinohara, "Large-amplitude shape mixing dynamics with local QRPA inertial functions," University of Aizu-JUSTIPEN-EFES Symposium on "Cutting-Edge Physics of Unstable Nuclei," University of Aizu, Fukushima (10-13, Nov. 2010).
  - 2 4. N. Hinohara, "Microscopic description of large-amplitude shape-mixing dynamics with local QRPA inertial functions," International Symposium New Faces of Atomic Nuclei, OIST, Okinawa (15-17, Nov. 2010).
  - 2 5. N. Hinohara, "Shape coexistence/mixing in Mg isotopes," Further understanding of 'Island of Inversion' via nuclear moments and inelastic reactions, RIKEN, Wako, Saitama (20-21, Dec. 2010).
  - 2 6. N. Hinohara, "Large-amplitude quadrupole collective dynamics in neutron-rich Mg and Cr isotopes," French-Japanese Symposium on Nuclear Structure Problems, RIKEN, Wako, Saitama (5-8, Jan. 2011)..

**【その他】**

吉田賢市, “Skyrme energy-density functional approach to collective excitations in medium-mass to heavy nuclei”, 京都大学基礎物理学研究所セミナー, 京都大学, 2010 年 10 月 22 日

稲倉恒法, “ピグミー共鳴状態の性質”, KEK 理論セミナー, KEK, 2010 年 5 月 12 日