

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, 江幡 修一郎, Lu Guo  
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昨年度より開始した。

今年度 (平成 23 年度) は、原子核大振幅集団運動の一例として、ポーア・ハミルトニアン<sup>1</sup>の微視的導出の計算、および実時間計算による核融合断面積の系統的な計算を主に行った。以下に、その内容を示す。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

有限多体系である原子核には、調和近似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、四重極振動は非調和性の高い状態であり、多くの場合、大振幅な形状変化を伴う運動として知られている。密度汎関数計算で自己無撞着に求められた状態が準安定状態を含めて複数個求められ場合もあり、この場合にはそれらの間の結合も重要になる (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<sup>2</sup>の微視的構築を行う。原子核理論ではポーア模型として知られる以下の集団ハミルトニアン

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{coll}} &= T_{\text{vib}} + T_{\text{rot}} + V(\beta, \gamma), \\ T_{\text{vib}} &= \frac{1}{2} D_{\beta\beta}(\beta, \gamma) \dot{\beta}^2 + D_{\beta\gamma}(\beta, \gamma) \dot{\beta} \dot{\gamma} + \frac{1}{2} D_{\gamma\gamma}(\beta, \gamma) \dot{\gamma}^2 \\ T_{\text{rot}} &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 \mathcal{J}_k(\beta, \gamma) \omega_k^2, \end{aligned}$$

の中にある種々のパラメータ ( $V, D, J$ ) を、変形空間 ( $\beta, \gamma$ ) の各点において、時間依存密度汎関数理論から決定する。詳細は省略するが、拘束条件付の Kohn-Sham-Bogoliubov 方程式を解き、各点において局所乱雑位相近似方程式の解を求めることで、集団ハミルトニアンに現れるこれらのパラメータを微視的に決定できる。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

集団ハミルトニアン<sup>2</sup>の微視的計算では、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<sup>3</sup>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。まず、昨年度実験データを説明することに成功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・スペクトルの詳細な解析を行った。図 1 は、 $0_+$ 、 $2_+$ 状態の変形空間における広がり<sup>4</sup>を示している。基底状態、励起状態ともに、原子核の形は非常に不安定であり、大きな揺らぎを伴っていることがわかる。この性質が実験で得られた振動・回転の中間的性質を説明する。また、理化学研究所 RI ビームファクトリーにおける大きな成果の一つである Cr アイソトープの低励起スペクトルを計算した。図 2 にその結果を示す。中性子数  $N=40$  に向かって、より回転的なスペクトルが得られており、これらのアイソトープにおいては、 $N=40$  は良い魔法数ではないことを表している。

また、Skyrme 型のエネルギー密度汎関数を用いた時間依存密度汎関数による実時間発展計算により、核融合反応シミュレーション計算を行った。核融合反応では、入射核と標的核の組み合わせによって、融合障害と呼ばれる現象が起きることが知られている。この計算では、現在の密度汎関数が、この融合障害を自動的に記述できるかどうかを調べた。結果として、原子核

の陽子数がある数を超えて大きくなると、この融合障害が現れることがわかった。この結果は実験と一致しており、重い原子核同士を衝突させて融合させるためには、extra-push エネルギーと呼ばれる余計なエネルギーが必要であることが微視的理論によってはじめて確かめられた。もともと、密度汎関数の構築には、このような反応を記述することは意図していないが、構成された密度汎関数は、自動的に核融合反応の重要な性質を見事に記述できることを示している。

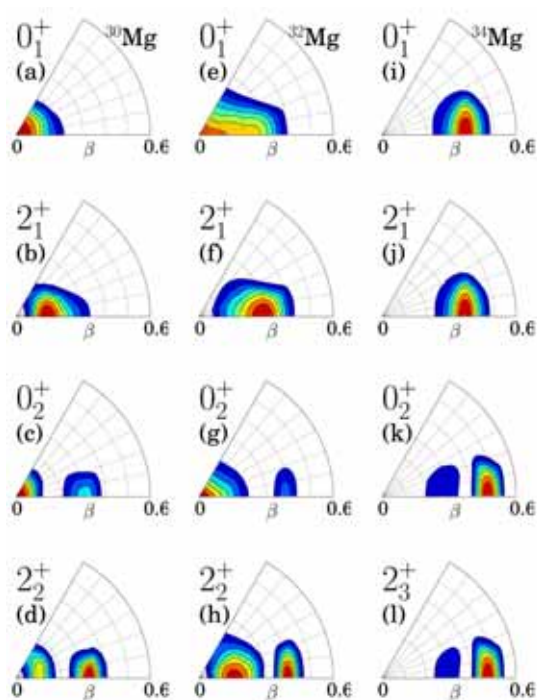


図 1 : Mg アイソトープ 30,32,34Mg の集団波動関数の変形空間(  $\beta$  )における広がり。

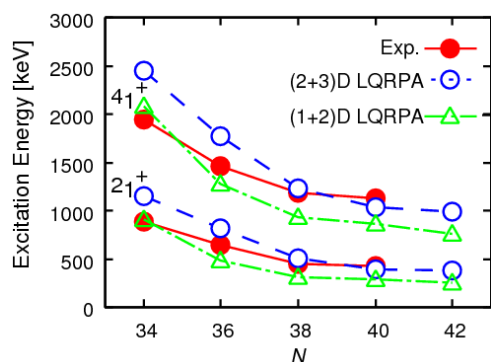


図 2 : Cr アイソトープにおける 2+, 4+ 状態の励起エネルギーの中子数依存性。

#### 4. まとめ

今年度(平成 23 年度)は、集団ハミルトニアンを微視的に決定に大きな成果があった。変形空間の各点での計算は独立であるため、比較的容易に並列計算プログラムを開発することができた。その本格的なプログラムから、原子核の集団運動に対する理解に大きな成果が得られた。

実時間発展計算による核融合反応シミュレーションでも、融合障害と呼ばれる実験の経験則が計算で見事にシミュレートできることを示すことができた。この結果の内容、特に障害のミクロな原因の追究はこれからの重要な課題である。

#### 5. 今後の計画・展望

上記の成果をもとに、一層の発展が期待される。特に、エネルギー汎関数の改良が望まれる。ボア模型の微視的パラメータ導出においては、現実的なエネルギー汎関数の利用に向けたコード開発が重要であろう。これは、軸対称性を仮定しないコードの新たな開発が必要のため、時間がかかると考えられる。一方で、実時間計算では、時間依存 BCS 理論を利用した対相関を考慮した汎関数への拡張が比較的容易に可能だと考えている。

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

上記の成果の発展が期待されるため継続利用を希望するが、研究室の人員が大幅に入れ替わったため、来年度は一般利用の申請を取り下げ、まずは簡易利用で、どの程度の演算資源が現実的か見極めることにする。

#### 7. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由

今年度、震災による影響、外国人ポスドクの帰国と転出、日本人ポスドクの年度途中での転出などが重なり、予定していた利用が進まず、50%程度の利用にとどまった。

## 平成 23 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. "Shape fluctuations in the ground and excited  $0^+$  states of  $^{30, 32, 34}\text{Mg}$ ", N. Hinohara, K. Sato, K. Yoshida, T. Nakatsukasa, M. Matsuo, and K. Matsuyanagi, *Phys. Rev. C* **84**, 061302(R) (2011) [5 pages].
2. "Development of axial asymmetry in the neutron-rich nucleus  $^{110}\text{Mo}$ " H. Watanabe, K. Yamaguchi, A. Odahara, T. Sumikama, S. Nishimura, K. Yoshinaga, Z. Li, Y. Miyashita, K. Sato, L. Próchniak, H. Baba, J.S. Berryman, N. Blasi, A. Bracco, F. Camera, J. Chiba, P. Doornenbal, S. Go, T. Hashimoto, S. Hayakawa, C. Hinke, N. Hinohara, E. Ideguchi, T. Isobe, Y. Ito, D.G. Jenkins, Y. Kawada, N. Kobayashi, Y. Kondo, R. Krücker, S. Kubono, G. Lorusso, T. Nakano, T. Nakatsukasa, M. Kurata-Nishimura, H.J. Ong, S. Ota, Zs. Podolyák, H. Sakurai, H. Scheit, K. Steiger, D. Steppenbeck, K. Sugimoto, K. Tajiri, S. Takano, A. Takashima, T. Teranishi, Y. Wakabayashi, P.M. Walker, O. Wieland, H. Yamaguchi, *Phys. Lett. B* **704** (2011) 270 - 275.
3. "Finite amplitude method for the quasiparticle random-phase approximation", P. Avogadro and T. Nakatsukasa, *Phys. Rev. C* **84** (2011) 014314 [7 pages].
4. "Emergence of pygmy dipole resonances: Magic numbers and neutron skins", T. Inakura, T. Nakatsukasa, and K. Yabana, *Phys. Rev. C* **84** (2011) 021302(R) [4 pages].
5. "Shape fluctuations in the ground and excited  $0^+$  states of  $^{30,32,34}\text{Mg}$ ", N. Hinohara, K. Sato, K. Yoshida, T. Nakatsukasa, M. Matsuo, and K. Matsuyanagi, *Phys. Rev. C* **84** (2011) 061302(R) [5 pages].
6. "Skyrme energy-density functional approach to collective dynamics", K. Yoshida, N. Hinohara, and T. Nakatsukasa, *J. Phys. Conf. Ser.* **321** (2011) 012017 [4 pages].
7. "Linear response calculations using the canonical-basis TDHFB with a schematic pairing functional", S. Ebata, T. Nakatsukasa, and K. Yabana, *J. Phys. Conf. Ser.* **312** (2011) 092923 [6 pages].
8. "Shape changes and large-amplitude collective dynamics in neutron-rich Cr isotopes", K. Yoshida and N. Hinohara, *Phys. Rev. C* **83**, 061302(R) (2011).

### 【国際会議などの予稿集、proceeding】

1. "Microscopic description of large-amplitude shape-mixing dynamics with local QRPA inertial functions", N. Hinohara, K. Sato, K. Yoshida, T. Nakatsukasa, and M. Matsuo, *Proceedings of International Symposium New Faces of Atomic Nuclei*, Nov. 15 - 17, 2010, AIP Conf. Proc. 1355 (2011), 200-205.

### 【国際会議、学会などでの口頭発表】

1. T. Nakatsukasa, "Finite amplitude method for RPA and QRPA calculations", Invited talk at the 5th LACM-EFES-JUSTIPEN workshop, Oak Ridge, Tennessee, USA (March 15-17, 2011).
2. T. Nakatsukasa, "Systematic calculation of photo-response with the Skyrme functional", Invited talk at 3rd Workshop on Level Density and Gamma Strength, Oslo, Norway (May 23-27, 2011).]
3. T. Nakatsukasa, "Microscopic theory of large-amplitude collective motion", Invited talk at International conference on Advances in Radioactive Sciences (ARIS-2011), Leuven, Belgium (May 29-June 3, 2011).
4. T. Nakatsukasa, "Finite amplitude method for nuclear response function", Invited talk at International

- conference on Advances in Nuclear Many-Body Theory, Primosten, Croatia (June 7-10, 2011).
5. T. Nakatsukasa, "Time-dependent mean-field approaches to nuclear response and reaction", Invited talk at INT workshop on Interfaces between structure and reactions for rare isotopes and nuclear astrophysics, Seattle, USA (August 8 - Sep.2, 2011).
  6. T. Nakatsukasa, "Single-particle and collective motions in nuclei", Lecture in International Summer School on Subatomic Physics (ISSSP), Beijing, China (August 27-31, 2011).
  7. T. Nakatsukasa, "Time-dependent density functional theory for nuclear dynamics", Invited talk at Korean Physical Society Meeting, Busan, Korea (October 17-21, 2011).
  8. T. Nakatsukasa, "Real-time calculations of many-body dynamics in quantum systems", Invited talk at Conference on Computational Physics (CCP2011), Gatlinburg, USA (October 30-November 3, 2011).
  9. T. Nakatsukasa, "Recent developments in linear response calculations with the time-dependent density-functional theory", Invited talk at OMEG11, Wako, Japan (November 14-17, 2011).
  10. T. Nakatsukasa, "Density functional approaches to atomic nuclei", Invited talk at XXXV Symposium on Nuclear Physics, Cocoyok, Mexico (January 3-6, 2012).
  11. T. Nakatsukasa, "Recent developments in studies of low-energy dipole states", Invited talk at First Topical Workshop on Modern Aspects in Nuclear Structure: Advances in Nuclear Structure with arrays including new scintillator detectors, Bormio, Italy (February 22-25, 2012).
  12. T. Nakatsukasa, "Finite amplitude method for TDDFT", Talk at YIPQS long-term workshop on Dynamics and Correlations in Exotic Nuclei, Kyoto, Japan (September 20-October 28, 2011).
  13. 中務孝、サマースクール「クォークから超新星爆発まで」講義、基礎物理学研究所、京都市 (2011年8月5日).
  14. 中務孝、北大シミュレーションサロン(HSS)・ワークショップ招待講演、「計算機で原子核を見る」、北海道大学、札幌市 (2012年2月17日).
  15. 吉田賢市、中務孝、"Dipole responses in Nd and Sm isotopes with shape transitions"、日本物理学会2011年秋季大会、弘前大学 (2011年9月16日 19日)
  16. K. Yoshida, "Collective modes of excitation in exotic nuclei", Symposium on Frontier of Gamma-ray Spectroscopy: gamma11, RIKEN, Wako, Saitama (30 June - 2 July, 2011).
  17. K. Yoshida, "Skyrme energy-density functional approach to collective dynamics with HPC", Annual UNEDF Collaboration Meetings, Michigan State University, Michigan, USA (19 - 24 June, 2011).
  18. K. Yoshida, "Collective modes of excitation in deformed neutron-rich nuclei", the first International Conference on Advances in Radioactive Isotope Science, Leuven, Belgium (29 May - 3 June, 2011).
  19. N. Hinohara, "Microscopic description of shape coexistence and shape transition," Advances in Nuclear Many-Body Theory, Primosten, Croatia (Jun.7-10, 2011).
  20. N. Hinohara, "Large-amplitude deformation dynamics in low-lying states of magnesium isotopes around island of inversion," CNS-RIKEN Joint International Symposium on Frontier of gamma-ray spectroscopy (gamma11), RIKEN (Jun.30-Jul.2, 2011).
  21. N. Hinohara, "On the microscopic theory of large-amplitude collective motion," L'Espace de Structure Nuclaire Thorique, "Restored broken symmetries within the nuclear Energy Density Functional method," CEA/SPhN, Saclay, France (Sep.13-15, 2011).
  22. N. Hinohara, "Extraction of collective coordinates by means of adiabatic theory of large-amplitude collective motion," YIPQS Long-term workshop "Dynamics and Correlations in Exotic Nuclei"

(DCEN2011), YITP, Kyoto Univ. (Sep.20-Oct.28, 2011).

23. N. Hinohara, "Microscopic analysis of shape coexistence/mixing and shape phase transition in neutron-rich nuclei around  $^{32}\text{Mg}$ ," YKIS2011 Symposium Frontier Issues in Physics of Exotic Nuclei (YKIS2011), YITP, Kyoto Univ. (Oct.11-15, 2011).

24. 日野原伸生、Dario Vretenar, "Xe, Ba 同位体における変形相転移の微視的記述," 日本物理学会 2011 年秋季大会, 弘前大学 (2010 年 9 月 16 日 - 19 日).

25. K. Sato, N. Hinohara, T. Nakatsukasa, M. Matsuo and K. Matsuyanagi, "Microscopic approach to collective dynamics in neutron-rich nuclei around  $^{64}\text{Cr}$ ", The International Symposium on Physics of Unstable Nuclei 2011 (ISPUN11), Hilton Hanoi Opera, Hanoi, Vietnam (November 23- 28, 2011).

26. K. Sato, N. Hinohara, T. Nakatsukasa, M. Matsuo and K. Matsuyanagi, "Microscopic approach to large-amplitude deformation dynamics with local QRPA inertial functions", YIPQS Long-term workshop "Dynamics and Correlations in Exotic Nuclei" (DCEN2011), YITP, Kyoto Univ. (Sep.20-Oct.28, 2011).

27. K. Sato, N. Hinohara, T. Nakatsukasa, M. Matsuo and K. Matsuyanagi, "Microscopic approach to large-amplitude deformation dynamics with local QRPA inertial masses", Rutherford Centennial Conference on Nuclear Physics, University of Manchester, (Aug. 8 - 12, 2011).

28. K. Sato, N. Hinohara, T. Nakatsukasa, M. Matsuo and K. Matsuyanagi, "Microscopic analysis of development of deformation in neutron-rich Cr isotopes", CNS-RIKEN Joint International Symposium on Frontier of gamma-ray spectroscopy (gamma11), RIKEN (Jun. 30- Jul. 2, 2011).

29. K. Sato, N. Hinohara, T. Nakatsukasa, M. Matsuo and K. Matsuyanagi, "Microscopic approach to large-amplitude shape mixing dynamics with local QRPA inertial masses", The 5th LACM-EFES-JUSTIPEN Workshop, JHIR, ORNL, Oak Ridge, TN, USA (Mar. 15-17, 2011)

30. 佐藤弘一、日野原伸生、中務孝、松尾正之、松柳研一、「 $N=40$  付近の中性子過剰 Cr 核における変形転移の研究」、『日本物理学会 2011 年秋季大会』、弘前大学 (2011 年 9 月)

### 【その他】

1. 日野原伸生、"集団 Hamiltonian を用いた四重極大振幅集団運動の微視的記述", 千葉大学原子核理論研究室セミナー, 千葉大学 (2011 年 7 月 15 日).