

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*, 佐藤 弘一, 江幡 修一郎**, Liang Haozhao

所属 : 中務原子核理論研究室, *新潟大学自然科学系, **北海道大学知識メディアラボラトリー

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

原子核の普遍的・汎用的な計算法として、世界的に、エネルギー密度汎関数法が現在の主流となっている。計算の簡便さに加えて、軽い核から重い核までを、一つのエネルギー密度汎関数を用いて高精度に再現することができる。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・光核反応・重イオン反応断面積など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平成 23 年度より開始した。昨年度は、研究室メンバーの多くが転出したため、一般利用から簡易利用に切り替えて計算を実施し、今年度も簡易利用で研究を実施した。

今年度 (平成 25 年度) は、陽子・中性子間の相関を取り入れた新しいエネルギー密度汎関数理論の計算について、今後の発展に向けた成果が得られたため、この内容を報告する。

2. 具体的な利用内容、計算方法

通常原子核におけるエネルギー密度汎関数は、陽子密度 r_p と中性子密度 r_n の汎関数として与えられる。

$$E(r_p, r_n)$$

ところが、このエネルギー密度汎関数は、クーロン力を無視した極限においても、荷電空間 (アイソスピン空間) における回転に対して不変性をもたない。その意味において不完全な形だといえる。密度 (r_p, r_n) は、

アイソスカラー密度 r_0 およびアイソベクトル密度

$$\vec{r} = (r_1, r_2, r_3)$$

$$r_p = \frac{1}{2}(r_0 - r_3), \quad r_n = \frac{1}{2}(r_0 + r_3)$$

と書けるが、これは明らかに荷電空間回転不変ではない。そこで、エネルギー汎関数を拡張し、

$$E(r_0, \vec{r})$$

の形の密度汎関数を用いた計算を実行した。

これは、計算コードに大きな変更を要求する。すなわち、Kohn-Sham 方程式に現れる Kohn-Sham 軌道はもはや中性子と陽子には分類されず、一般的にその混合状態となる。

$$(h[r_0, \vec{r}] - \vec{T} \times \vec{t}) y_i = e_i y_i, \quad i = 1, \dots, A$$

ここで、アイソスピン \vec{t} の前のラグランジュ係数 \vec{T} は、系のアイソスピンの方向をコントロールするためのパラメータであり、これを変化させることで、様々なアイソスピン状態を作り出すことができる。このベクトル \vec{T} は荷電空間における「回転振動数」に対応し、isocranking frequency とも呼ばれる。

数値計算は、ワルシャワ大学を中心に開発された調和振動子基底での計算である HFODD と呼ばれる汎用計算コードに、上記の陽子・中性子混合を取り入れたコードを新たに開発した。

3. 結果

主に A=48 の同重体 (アイソバー) について計算を実行した。まず、クーロン力がない場合の計算において回転振動数ベクトル \vec{T} を変化させ、アイソスピンの方向によらず、完全な荷電空間における回転対称性があることを確かめた。

続いてクーロン力を含めた現実的な計算を行い、A=48 の同重体における基底状態および励起アイソバリック類似状態 (アイソバリック・アナログ状態) の計算を実行した。図 1 にその結果を示す。アイソスピン $T=0$ の青点が示しているのが、計算された ^{48}Cr の基底状態を表す。 $N = Z = 24$ の原子核である。一方、緑の点

は $T = 2$ の状態を表しており、右端の点が ^{48}Ti 、左端が ^{48}Fe の基底状態である。アイソスピン $T = 4$ の赤点においては、右端が ^{48}Ca 、左端が ^{48}Ni の基底状態である。これらの状態は通常のエネルギ密度汎関数 $E[\rho_p, \rho_n]$ を使った計算結果と一致する。

一方、 \vec{I} の方向や大きさを变化させることでこれまでの密度汎関数では計算できなかった荷電類似状態が計算できる点が、この計算の新しい点である。例えば、 ^{48}Cr の基底状態 ($T = 0$) の上には励起状態として、 $T = 2$ (緑) と 4 (赤) の状態が計算されている。これらは、エネルギー密度汎関数を荷電空間回転不変な形に拡張したことではじめて計算が可能になった。

4. まとめ

荷電空間回転不変な形に拡張されたエネルギー密度汎関数を用いて、陽子・中性子混合を取り入れた Kohn-Sham 方程式を解く計算コードを開発し、 $A = 48$ 同重体を計算することに成功した。荷電空間の回転振動数ベクトル \vec{I} を適切に選ぶことで、励起荷電類似状態についても安定して収束解を求めることができた。この成果は世界ではじめての試みである。

一をアイソスピンの z 成分 $\langle T_z \rangle$ の関数として図示したもの。挿図に、計算に用いた回転振動数 \vec{I} を図示している。(b) 一粒子エネルギーを $\langle T_z \rangle$ の関数としてプロット。色の変化は中性子 (青) と陽子 (赤) を意味しており、左右の両端の点を除いて、陽子と中性子が混合した一粒子状態を表している。

5. 今後の計画・展望

この成果は、陽子・中性子間の対相関を取り入れる方向にむけた第一ステップだといえる。今後、この方向にむけた開発を進めて行く予定である。また、現在の汎関数において問題の一つとされる鏡映核のエネルギー差についても、今回開発したコードで計算が可能であり、これについても現在研究を進めている。

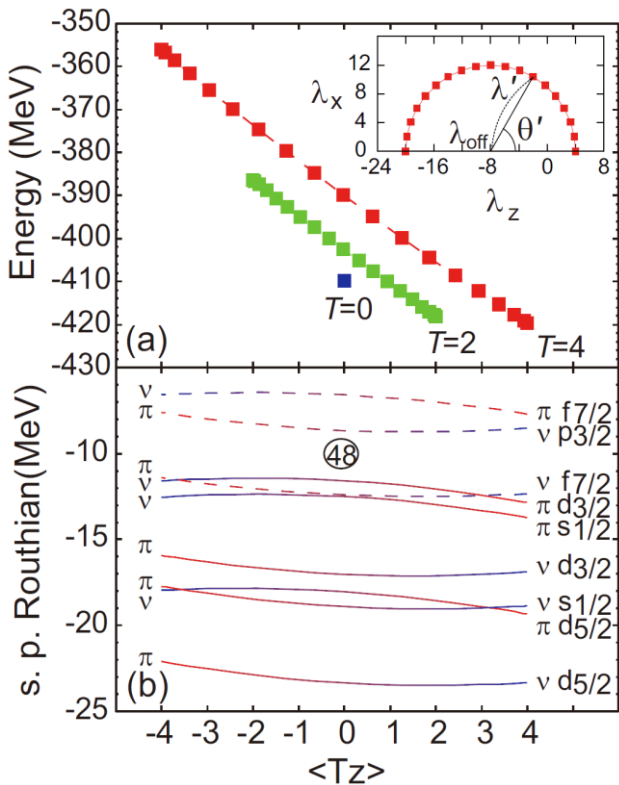


図 1 (a) Skyrme 型のエネルギー密度汎関数に基づき計算されたアイソスピン $T = 0, 2, 4$ 状態のエネルギー

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】

K. Sato, J. Dobaczewski, T. Nakatsukasa, W. Satula,
"Energy-density-functional calculations including proton-neutron mixing"
Phys. Rev. C 88, 061301(R) (2013) [5 pages]

K. Yoshida and T. Nakatsukasa,
"Shape evolution of giant resonances in Nd and Sm isotopes"
Phys. Rev. C 88, 034309 (2013) [15 pages]

【国際会議などの予稿集、proceeding】

S. Ebata, T. Nakatsukasa, T. Inakura,
"Systematic investigation of E1 strength for the isotopes from Z = 28 to 50"
Journal of Physics Conf. Ser. 445, 012021 (2013) [4 pages]

S. Ebata,
"Simulation of heavy ion collision using time-dependent density functional theory including nuclear superfluidity"
Journal of Physics Conf. Ser. 454, 012054 (2013) [4 pages].

【国際会議、学会などでの口頭発表】

T. Nakatsukasa
"Stochastic generation of low-energy configurations and configuration mixing calculation"
INT workshop on Computational and theoretical advances for exotic isotopes in medium mass region, Seattle, USA, Mar.24-Apr.19, 2013

T. Nakatsukasa,
"Finite amplitude method in linear response TDDFT calculations"
XX International School on Nuclear Physics, Neutron Physics and Applications
Varna, Bulgaria, Sep. 16 – 21, 2013

T. Nakatsukasa,
"Basic Issues in Theories of Large Amplitude Collective Motion"
INT workshop on Quantitative Large Amplitude Shape Dynamics: fission and heavy ion fusion
□INT, Seattle, USA, Oct. 30th, 2013

□

中務 孝

「TDDFT 計算による原子核の集団励起と反応」

異分野交流会「量子多体系のダイナミクス計算」、分子科学研究所 2013年11月13日

中務 孝

平成 25 年度 RICC 利用報告書

「原子核の量子的集団ダイナミクス」

卓越した大学院拠点形成シンポジウム、早稲田大 2013年12月3日

K. Sato, J. Dobaczewski, T. Nakatsukasa, W. Satula,

"Energy-density-functional calculations including the proton-neutron mixing"

2nd Topical Workshop on Modern Aspects in Nuclear Structure, Bormio, Italy, 19-22 Feb. 2014.

K. Sato, J. Dobaczewski, T. Nakatsukasa, W. Satula,

"Energy-density-functional calculations including the proton-neutron mixing"

JUSTIPEN-JUSEIPEN Workshop, Wako, Japan, Dec. 9 - 12, 2013.

K. Yoshida,

"Shape evolution in Skyrme energy-density-functional method"

IN2P3-BLTP Workshop "Recent Achievements in Nuclear Theory"

Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, JINR, Dubna (22-27 July, 2013).

K. Yoshida,

"Collective mass parameters in Skyrme EDF"

INT program on Quantitative Large Amplitude Shape Dynamics: fission and heavy ion fusion

Institute for Nuclear Theory, University of Washington, USA (23 September - 4 October, 2013).

K. Yoshida,

"Spin-isospin modes of excitation and beta-decay properties of neutron-rich Zr isotopes"

JUSTIPEN-JUSEIPEN Workshop

RIKEN, Wako, Saitama (9 - 12 December, 2013).

佐藤弘一、 Jacek Dobaczewski、中務孝、Wojciech Satula,

「陽子-中性子混合密度汎関数による $T=1$ アイソバリックアナログ状態の系統的計算」

『日本物理学会 2014 年年次大会』、東海大学、2014 年 3 月（予定）

佐藤弘一、 Jacek Dobaczewski、中務孝、Wojciech Satula,

「中重核における陽子-中性子混合を含んだ拘束 Hartree-Fock 計算」

『日本物理学会 2013 年秋季大会』、高知大学、2013 年 9 月

S. Ebata and T. Nakatsukasa,

"Time-dependent mean-field theory including pairing correlations and applications to linear response calculation"

ECT* workshop on Advances in time-dependent methods for quantum many-body system, Trento, Italy, 2013.10.14 - 10.18

S. Ebata,

"Systematic study of electric dipole excited states utilizing the linear response method"

平成 25 年度 RICC 利用報告書

The 4th Asian Nuclear Reaction Database Development Workshop, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan, 2013.10.23 -10.25

S.Ebata and T.Nakatsukasa,

“Pairing Effects in Nuclear Fusion Reaction”

The 12th Asia Pasific Physics Conference(APPC12), Makuhari Messe Int. Conf. Hall Chiba, 2013.07.14-19

江幡 修一郎

「重い核種のガンマ線強度関数の理論的研究」

The 1st JCPRG-RNC Joint Workshop on Nuclear Data、理研、 2013.08.08 - 08.09

江幡 修一郎

「Properties of finite nuclear system and the systematics of E1 response」

研究会「対称エネルギーと原子核-原子核衝突シミュレーション」、理研, 2013.07.02 - 07.04