

平成22年 5月14日現在

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2006 ～ 2009

課題番号：18540258

研究課題名（和文）超流動変形中性子過剰核の時間依存HFB法の開発

研究課題名（英文）Development of a time-dependent HFB method for superfluid deformed neutron-rich nuclei

研究代表者

田嶋 直樹（TAJIMA NAOKI）

福井大学・大学院工学研究科・准教授

研究者番号：50212030

研究成果の概要（和文）： 正準基底HFB法プログラムで対相関の中性子量（かさ）抑制効果を実証した。またプログラムにスピン軌道結合力を取り入れる拡張を行った。正準基底HFB法に時間依存性を取り入れるための定式化について考察を進めた。平均場法に相補的な手法である殻補正法で中性子過剰核を扱うため、連続状態に関する Kruppa の処方への根拠を明らかにし、その下での殻補正の準位密度平滑化幅依存性の低減法と修正したBCS方程式を開発した。

研究成果の概要（英文）： We have demonstrated the pairing anti-halo effect using our canonical-basis HFB program. We extended our program to include the spin-orbit force. We considered on formulations to make the canonical-basis HFB method time-dependent. In order to treat neutron-rich nuclei in the shell-correction method, which is a complementary method to the mean-field method, we clarified the grounds of the Kruppa's prescription for the continuum states and developed a method to weaken the dependence of the shell correction on the width of the smoothing of the level density and a modified BCS equations relevant to this prescription.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	1,200,000	0	1,200,000
2007年度	500,000	150,000	650,000
2008年度	500,000	150,000	650,000
2009年度	500,000	150,000	650,000
年度			
総計	2,700,000	450,000	3,150,000

研究分野：理論核物理

科研費の分科・細目：物理学・「素粒子・原子核・宇宙線・宇宙物理学」

キーワード：理論核物理、計算物理、対相関、平均場近似、密度汎関数、Skyrme 相互作用、連続状態、殻補正法

## 1. 研究開始当初の背景

近年の不安定原子核の実験的研究の急速な進展に歩調を合わせ、原子核の理論もまた進歩して行かねばならない。理論研究では、

模型（有効相互作用や近似手法等も含めて）の改良によって実験結果の再現性を高め、あるいは理論的観点から見てより良いものに模型を修正し、また、その模型を用いて実験

的に未知の原子核の諸性質を予想するなどのことを行う。

研究を開始した 2006 年当時には、理化学研究所の不安定核ビーム施設の稼働を目前に控えて、少なくとも今後十数年に亘り実験核物理学をサポートするための、新しい実験装置に見劣りのしない新しい理論的手法が必要であると思われた。実験的研究において古い実験装置をだましまし使うことに相当するのが、理論的研究においては、根柢の薄弱な仮定や極めて粗い近似を含んだ手法を改良することなくそのまま使って大規模で手間のかかる計算を実行していくことである。理論的研究における古い実験装置と言えるそのような仮定や近似はできるだけ整理していくことが望ましい。

なお、実験核物理側からの需要には、基底状態の構造と諸性質の計算がまず重要であったが、それに加えて励起スペクトルを計算することへの需要も無視できなかつた。それは研究期間の終了した今も変わらない。

さて、中性子ドリップ線近傍の核では、中性子の対相関への連続状態の寄与が重要であるが、これを平均場近似の範囲で考慮するには、平均場と対相関場を同等に扱う **Hartree-Fock-Bogoliubov(HFB)** 法が必要である。**HFB** 解を表す最も一般的な方法は **Bogoliubov** 準粒子（一核子の生成演算子および消滅演算子の線形結合）の真空として表すことであるが、この方法では、対相関を無視する **Hartree-Fock (HF)**法と較べて、数桁多い個数の一粒子状態を考慮しなければならず、変形した核を記述することには困難がある。

そこで私は、変形した中性子過剰核の対相関を正確かつ効率的に扱うための理論的枠組として、**HFB** 正準基底による **HFB** 法の解法の可能性を探求してきたが、2005 年までに、その原理の包括的な理解を達成し、同時に連続スペクトルに埋め込まれた局在軌道についての全く新しい物理的描像（対相関相互作用の有限レンジから生じる有効質量を持った核子の、対相関ポテンシャル中の束縛状態）が得られたので、論文として発表した。この手法は極めて効率が良いため、今後、中性子過剰核を平均場法で扱うための標準的な手法になる可能性がある。そこでこの手法で基底状態を求める方法を実際の場合にも確立させることが重要と考えられた。

次に、この手法の開発においては、直交条件を自動的に満たしつつ **HFB** 正準基底を虚時間発展させるハミルトニオンを得ることが重要なステップであったのだが、その副産物として、このハミルトニオンを用いて状態の実時間発展を追える可能性が高いことに気がついた。そこで、次の目標として、対相関・連続状態・変形という困難の 3 大要素の全て

を同時に考慮に入れた線形応答関数の計算への応用に乗り出すことも価値があると考えられた。

さらに、上述の手法は **Skyrme** 平均場法(密度汎関数法)と呼ばれるものであるが、それに相補的な手法として殻補正法（微視的・巨視的法、**Strutinsky** 法）という手法がある。近年 **Skyrme** 平均場法が密度汎関数法と呼び変えられるとともに、その方法を専門とする研究者の中には「究極の現象論」という表現を宣伝文句とする者が増えてきた。しかし実情は、究極どころか、局所密度近似で得られる表式の形から一歩も踏み出すことがないのであった。例えば私の手法の場合は、正準基底 **HFB**法という解法の要請で、通常仮定される密度汎関数に、対相関相互作用に有限レンジを付与する（相対運動量依存項を導入する）、あるいは、斥力的な対相関密度依存性を導入する必要があり、そのような拡張をしているが、このような簡単な付加項さえ他の研究者は試そうとしないのであった。そのような状況を見て、核質量の平均 2 乗誤差の改善の頭打ちを打破するために現象論が求められるなら、現象論性が難点と言われてきた殻補正法にこそむしろ再訪の価値があると思われた。しかし殻補正法では連続状態の寄与の扱いが、平均場法以上に大きな困難であった。平均場法では困難は対相関に関連してのみ発生するのに対し、殻補正法では対相関に留まらないのであった。この問題の解決もまた正準基底 **HFB**法およびその時間依存版の開発に劣らぬ重要な課題であると思われた。

より広い観点からも述べておくと、不安定原子核の研究は、それ自体で閉じたものではなく、科学全体の観点からも、元素の起源・天体現象・素粒子の性質の探求等に直接結びつく重要な研究テーマである。また、将来的な産業的価値も次世代の原子力発電方式の開発等に関連して生じうるであろう。さらに、理論家的な観点からは、量子多体系の重要な一例として、その構造と運動を理解すること自体に学問的意義がある。イオン・トラップ中の原子系のボーズ縮退など他の類似系への応用も可能である。

## 2. 研究の目的

(1) 原子核の基底状態の諸性質ならびに各種線形応答関数を、中性子ドリップ線近傍の極めて中性子の過剰な核を含む核図表上のあらゆる領域の核種について系統的に計算する手法を開発し、さらにその手法を確立させた後には、その手法により核図表上で大域的な計算を実行する。その手法とは **Skyrme** 密度汎関数による **HFB** 法および時間依存 **HFB** 法である。

本研究の手法の特徴は、中性子過剰核を対象とするため連続状態の対相関の取り扱い

に適した正準基底 HFB 法を採用することである。ここで「正準基底」という形容は、通常の解法のように解を Bogoliubov 準粒子の真空として表すのではなく、最初から HFB 真空状態の正準表現の形 (BCS 変分関数と同じ形、ただし平面波ではなく任意の一体状態を想定する) で解の状態を表して求めることを意味する。Bogoliubov 準粒子は空間全体に広がっているのに対し、HFB 正準基底は原子核周辺に局在しているため、効率良く状態を表すことができる。

(2) これと並行して、平均場法と相補的な理論的枠組である殻補正法においても連続状態の扱い方を研究する。連続状態の寄与を取り入れる場合には、仮にポテンシャルが無いものとして別途計算した自由粒子の状態の寄与を差し引くという Kruppa の処方を基本に据え、その意味や根拠を考察し、対相関にも応用し、さらに所謂プラトー条件の改善を試みる。

(3) さらに上記 2 法とは対照的な手法として、連続状態を一切考慮しないで済ませる方法の可能性も検討する。それは KUTY 質量公式での変形の扱いを取り入れた球対称平均場法である。

(4) 上述の新手法が確立するまでは、本研究用に整備する大規模数値計算システムに空き時間ができる。そのような空き時間には、殻補正法による原子核の偏長変形優勢の起源を探るための大規模な数値計算を行う。

### 3. 研究の方法

大規模数値計算の実行には以下に述べる方法をとった。

最新の CPU を搭載したパーソナル・コンピュータ (PC) を 4 年間の各年度にそれぞれ 6、3、8、2 台購入し (第 3・4 年目には校費を併用した)、それらを Giga-bit ethernet で相互に接続して PC クラスタ並列計算機システムを構築した。組立作業等の補助者として卒業研究を指導中の学部 4 年生を雇い、謝金を支払った。図 1 に 2009 年 3 月時点での PC クラスタの写真を示した。

自由自在に意図することが行えるように、PC クラスタ内のジョブ管理のスク립ト群も自作した。

最新の CPU の持つマルチ・コアという特性を計算速度の向上に活かすため、自作の正準基底 HFB 法プログラムを、陽子についての計算と中性子についての計算をそれぞれ 1 個の CPU コアに 1 個のジョブとして担当させて並列に実行する方式をとった。

これは今後の CPU のメニー (2 より多いという意味) ・コア化のトレンドの活用を狙った方針である。今後、4 コア CPU に対しては、夫々の核子の状態をさらに偶奇性 (ないし  $xy$  平面についての鏡映対称性) で 2 分

割することで、一核子の状態空間を両核子合わせて 4 セクタとし、それぞれのセクタを 4 つのジョブで並列に計算させることを計画している。将来 8 コア CPU が入手可能になれば、 $xy$ ,  $yz$ ,  $zx$  平面についての鏡映対称性を課して陽子ないしは中性子の一体状態空間を 4 セクタに分割することで、両核子合わせて 8 セクタとし、それぞれのセクタを 8 つのジョブで並列に扱うことが望ましい。

ジョブ間の通信方式には (通信をコア間に限定させたので) FIFO を利用した。HFB 法の本体は FORTRAN 言語で記述したが、それに C 言語で記述した関数をリンクさせて通信を行わせた。

このようにして改造したプログラムを使用すると、並列化しない場合より 6 割以上速く計算が完了することが示された。

また、補助金を使用して携帯に適したノートパソコンを購入し、研究関連の発表・文献閲覧・文書作成に使用した。また、紙に記した手書き計算の結果をノートパソコンで随時参照できるようにするため、ドキュメントスキャナーを購入してノートパソコンと併せて研究に活用した。



図 1. PC クラスタ並列計算システム

### 4. 研究成果

(1) まずスピン軌道力を無視した簡易版の自作正準基底 HFB 法プログラムにより、核図表 1 面の大規模な数値計算を実行させた。その結果から対相関の中性子量 (かさ) 抑制効果 (pairing anti-halo effect) を実証し、またその変形および連続状態との結合の影響を調べた。

本成果には学会発表⑩⑪が対応する。詳細は WEB 公開の講演スライドを参照されたい。論文としての発表は、次に述べるスピン軌道力を考慮したプログラムで計算をしながら行うことが適当と判断して未執筆である。

(2) 次に、自作の正準基底 HFB 法プログラムに新たにスピン軌道力を加えて、少なく

とも軽い核については現実の原子核をほぼ十分に精度よく記述できるようにした。スピン軌道力を含めると、各 HFB 正準軌道を表す波動関数の情報量は、実数値 1 成分から複素数値 2 成分へと 4 倍に増加する。これに関して本研究では、空間的対称性は一切課さないが、時間反転対称性だけは課す新方式を考案した。そして実際に、実数値 4 成分で表した 1 対の HFB 正準軌道を正しく求めることに成功した。この方法の利点は、解の表現に要する情報量の半減に加え、正準軌道対間の対応関係が数値誤差により不明瞭になる懸念を取り除くことである。

本成果には学会発表⑧が対応する。詳細は WEB 公開の講演スライドを参照されたい。今後解への収束を今より高速で、かつ、確実なものに改良するための工夫を考案し、試行した上で論文発表を行う計画である。

(3) 時間依存正準基底 HFB 法の理論的一貫性に関する考察も研究期間を通じて進めた。ただし未だ発表できる段階ではない。

(4) 当初の研究目的を補完する相補的なアプローチとして、KUTY 質量公式(Koura et al., Nucl. Phys. A674, 47 (2000))で提唱された「変形核は球形核の重ね合わせで表現できる」という大胆な仮定を取り入れた平均場模型を提唱した。この模型においては、球対称性を課された対相関を含まない平均場解のみを用いて、変形し対相関のある原子核の基底状態のエネルギーを求めることができる。主たる研究目的である「(一粒子状態空間の) 連続スペクトル部分空間での対相関を含む任意の形状に変形した平均場解を求めること」のために克服すべき 2 大困難である「連続状態」と「変形」がこのアプローチには全く出現しないことに注目すれば、この新しい手法と正準基底 HFB 法ないしは Woods-Saxon-Kruppa-Strutinsky 法とで結果を比較することに大きな興味を持たれる。このテーマに第 3 年目の研究エフォートの過半を費やした理由には、大学院修士課程の学生の修士論文のために主たる研究目的とは独立した課題に取り組む必要があったという副次的な理由もあったが、主たる理由は、中性子過剰核に関する研究として、本筋の研究の厚みを増すことであった。

本成果には学会発表⑥が対応する。詳細は WEB 公開の講演スライドを参照されたい。

(5) 殻補正法からのアプローチに関しては、Woods-Saxon-Kruppa-Strutinsky 法によって中性子過剰核および連続状態を扱うための処方の研究を進めたところ、重要な発見をしたので、その発表を優先して第 4 年目のほとんどを費やして長編の論文を執筆し現在投稿目前の段階にある。

殻補正法では特に中性子過剰核の扱いが困難であったが、その原因は連続状態の効果

の取り入れ方にあった。この問題に関して我々が明らかにし得たことは以下の①～⑤である。

① 有限な調和振動子基底の張る空間内で連続状態の効果を取り入れるための Kruppa の処方の根拠を、oscillator-basis Thomas-Fermi 法と命名した同種フェルミ粒子系に対する新たな古典近似法の観点から明らかにした。この近似法は、空間内の各点において、運動エネルギーに最大値を設定するという修正を加えた Thomas-Fermi 近似法である。ここで必要となる「位置の関数としての運動エネルギーの最大値」は、対角化に使用する基底がなんらかの一体ハミルトニアン固有状態をエネルギーの低い順に選んだものである場合には、選ばれた状態の持つエネルギー固有値の最大値およびハミルトニアン質量項とポテンシャル項から定まる。この近似法を使うと、有限の調和振動子基底での対角化で得られた準位密度の概形を見事に再現できる。

② Strutinsky の平滑化法をフーリエ変換(エネルギー→時間)による新しい視点で見直すことで、低域(短時間成分)透過フィルターとしても再定義できることを発見した。また、平滑化関数の幅  $\gamma$  と、曲率補正多項式の次数  $p$  との間に密接な関係があり、 $\gamma$  の値を  $\sqrt{p}$  に比例してとることでフィルターのカット・オフの位置が一定の位置に保たれ、結果として平滑化結果がほとんど変化しないことを示した。この低域透過フィルターという新しい解釈により、Nilsson 模型においてプラトーの良く発達する機構を明らかにし、逆に Woods-Saxon ポテンシャルにおいてはプラトー条件を追求することの無益なことを示すことができた。

③ 全エネルギーの殻補正值の平滑化関数の幅への依存性を減ずるために参照密度法という手法を開発した。この手法を使うと、結果として、エネルギーの値によって平滑化の幅を変えたのと同様の効果をあげることができる。重要なことは、単純に平滑化の幅をエネルギーの関数としたのでは、準位密度に人為的な凹凸が発生するという好ましくない副作用を被ることになるが、それを参照密度ととらえて、元の密度の参照密度からのずれに対して通常の(幅が一定の)平滑化を再び行うならば、この副作用をほぼ消すことができることである。Kruppa の状態密度がエネルギーゼロ付近に持つピークは、oscillator-basis Thomas-Fermi 近似でも存在するので古典的な起源を持つものであり、従って、量子力学的起源を持つ揺らぎを消すためになされる平滑化によって崩してはならない。しかし、急峻であるため、通常の平滑化法ではどうしても崩れてしまう。そして平滑化関数の幅によって崩れる度合いが違

うため、プラトー条件を破る原因となる。参照密度法を用いれば、このピークが、平滑化により崩れるのを防ぐことができる。

④ 殻補正法においても平均場法の持つような微視的部分と巨視的部分の首尾一貫性を可及的に実現することの重要性を指摘し、球対称でスピン軌道結合を無視した Thomas-Fermi 近似で両部分のフェルミ準位が一致するようにポテンシャルの深さを調節するという簡易な方法で、ポテンシャルにスピン軌道結合があり原子核の表面が変形している場合も含めて、一貫性がほぼ実現できることを多数の核図表計算により実証した。

⑤ 連続状態の効果を取り入れる方法として Kruppa-BCS 法と命名した方法を開発した。Kruppa の処方に従うと、離散的な一粒子準位を対象とする対相関強度の計算をする際にも、自由粒子の離散的な準位から負の寄与があると付加項を BCS 方程式の総和から差し引くのが自然である。これらの負の寄与を考慮することで、BCS 方程式の解が、対角化の基底のサイズの増加に対して、発散せず収束するようになる。

この成果は近日中に学術誌に投稿予定の論文 N. Tajima, Y. R. Shimizu, and S. Takahara, “Microscopic-macroscopic approach with continuum spectrum” に既にまとめてあり、この論文が受理され出版され次第、研究成果発表報告書(様式 C-24)で追加報告する。また、学会講演①②⑤⑦⑨⑩はこの結果に対応する。学会講演①⑤の講演スライドはWEB公開しているので、論文出版以前でも、それらを参照すれば詳細を知ることができる。

(6) 原子核の偏長変形優勢の起源を考察するための大規模な数値計算を Woods-Saxon-Kruppa-Strutinsky 法により実行した。原子核の多くは基底状態において球形ではなく、変形しているが、その形状は扁平 (oblate) なものはごくわずかで、圧倒的に偏長 (prolate) なものが多い。この原因は、一体ポテンシャルの動径依存性が、平坦な底と急峻な表面をもった井戸型ポテンシャルに似たものであることだと言われていたが、以前我々が Nilsson-Strutinsky 法で得た結論では、実はスピン軌道力も重要な働きをしており、スピン軌道力が実際の原子核の半分の強さでは、扁平変形した核と偏長変形した核の割合がほとんど等しくなる。さらにスピン軌道力が強まり、実際の原子核と同じ値になると、再び偏長変形した核が圧倒的に多くなるのである。本研究での大規模な数値計算により、より現実の原子核の一核子ポテンシャルに近い Woods-Saxon potential でも同じ結果が得られることが結論された。

この成果には学会講演③⑩が対応する。論

文は 2010 年中に完成する見込みである。投稿・受理・出版が完了され次第、研究成果発表報告書(様式 C-24)で追加報告する。

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 0 件)

[学会発表] (計 13 件)

① 田嶋直樹、清水良文、高原哲士、  
「Strutinsky 法と Kruppa の処方」、日本物理学会第 65 回年次大会、2010 年 3 月 21 日 (21pBC-1)、岡山大学

② 小野寿哉、清水良文、田嶋直樹、高原哲士、  
「連続状態の効果を取り入れた Kruppa 処方による不安定核の研究」、日本物理学会第 65 回年次大会、2010 年 3 月 21 日 (21pBC-2)、岡山大学

③ 高原哲士、大西直毅、清水良文、田嶋直樹、  
「プロレート優勢におけるスピン軌道力の役割」、日本物理学会第 65 回年次大会、2010 年 3 月 21 日 (21pBC-3)、岡山大学

④ 大井万紀人、水崎高浩、大西直毅、田嶋直樹、  
「HFB 状態に対する 3 次元角運動量射影における位相問題」、日本物理学会第 65 回年次大会、2010 年 3 月 21 日 (21pBC-8)、岡山大学

⑤ 田嶋直樹、清水良文、高原哲士、大西直毅、  
「核図表計算のための新しい Woods-Saxon Strutinsky 法」、日本の核データ～天と地の核エネルギー、2009 年 7 月 28 日、理化学研究所

⑥ 山田昌平、田嶋直樹「相対論的平均場模型と KUTY 流の近似的な変形の扱いに基づく原子核質量公式」、日本物理学会第 64 回年次大会、2009 年 3 月 30 日 (30aXF-10)、立教大学

⑦ 高原哲士、田嶋直樹、清水良文、「中性子過剰核における Woods-Saxon Strutinsky 法の大域的計算」、日本物理学会 2008 年秋季大会、2008 年 9 月 22 日 (22aSA-3)、山形大学

⑧ 田嶋直樹、「スピン軌道力を取り入れた正準基底 HFB 法プログラムの開発」、日本物理学会第 63 回年次大会、2008 年 3 月 26 日 (26aZH-10)、近畿大学

⑨ 高原哲士、田嶋直樹、清水良文、「Woods-Saxon-Strutinsky 法による連続状態の扱い II」、日本物理学会第 63 回年次大会、2008 年

3月26日(26pZH-2)、近畿大学

⑩高原哲士、田嶋直樹、清水良文  
「Woods-Saxon Strutinsky 法における連続状態の扱い」、日本物理学会 62 回年次大会、2007 年 9 月 23 日(23pYE3)、北海道大学

⑪田嶋直樹、「対相関の中性子暈抑制効果と核変形 II」、日本物理学会第 62 回年次大会 2007 年 9 月 23 日(23pYE5)、北海道大学

⑫田嶋直樹、「対相関の中性子暈抑制効果と核変形」、日本物理学会 2007 年春季大会、2007 年 3 月 26 日(26aSB-13)、首都大学東京

⑬高原哲士、田嶋直樹、清水良文、「核変形における prolate 優勢の起源 —Woods-Saxon ポテンシャルでの解析 II—」、日本物理学会 2006 年秋季大会、2006 年 9 月 23 日～23 日(23pSC-5)、奈良女子大学

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

[その他]

研究代表者のホームページ

<http://serv.apphy.u-fukui.ac.jp/~tajima/index.html>

学会発表①の講演スライド :

[http://serv.apphy.u-fukui.ac.jp/~tajima/jpsm10sp\\_slide.pdf](http://serv.apphy.u-fukui.ac.jp/~tajima/jpsm10sp_slide.pdf)

学会発表⑤の講演スライド :

[http://serv.apphy.u-fukui.ac.jp/~tajima/riken09a\\_slide.pdf](http://serv.apphy.u-fukui.ac.jp/~tajima/riken09a_slide.pdf)

学会発表⑥の講演スライド :

[http://serv.apphy.u-fukui.ac.jp/~tajima/jpsm09sp\\_slide.pdf](http://serv.apphy.u-fukui.ac.jp/~tajima/jpsm09sp_slide.pdf)

学会発表⑧の講演スライド :

[http://serv.apphy.u-fukui.ac.jp/~tajima/jpsm08sp\\_slide.pdf](http://serv.apphy.u-fukui.ac.jp/~tajima/jpsm08sp_slide.pdf)

学会発表⑩の講演スライド :

[http://serv.apphy.u-fukui.ac.jp/~tajima/jpsm07fl\\_slide.pdf](http://serv.apphy.u-fukui.ac.jp/~tajima/jpsm07fl_slide.pdf)

学会発表⑫の講演スライド :

<http://serv.apphy.u-fukui.ac.jp/~tajima>

/jpsm07sp\_slide.pdf

6. 研究組織

(1) 研究代表者

田嶋 直樹 (TAJIMA NAOKI)  
福井大学・大学院工学研究科・准教授  
研究者番号 : 50212030

(2) 研究分担者 無し

(3) 連携研究者 無し