

令和 5 年 6 月 13 日現在

機関番号：12608

研究種目：若手研究

研究期間：2019～2022

課題番号：19K14704

研究課題名（和文）多スレーター行列式を用いた次世代理論に基づく原子核ダイナミクスの超並列計算

研究課題名（英文）Massively-Parallel Computations for Nuclear Dynamics Based on a Next-Generation Theory with Multiple Slater Determinants

研究代表者

関澤 一之（Sekizawa, Kazuyuki）

東京工業大学・理学院・准教授

研究者番号：00820854

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,100,000円

研究成果の概要（和文）：本課題の実施期間には、従来の理論的枠組みにランダムな初期揺らぎを導入する方法（確率論的平均場理論）を採用し、並列計算コードを実装し、応用を進めた。この枠組みを多核子移行反応断面積の実験データが豊富に存在する反応に適用し、多核子移行反応断面積の記述の定量性を劇的に改善できることを示した。また、この方法を運動エネルギー分布を記述できるように拡張することに成功した。しかし、運動エネルギー分布についてはまだ実験データを完全に再現するには至っておらず、この原因を明らかにすることは今後の課題の一つである。今後、それぞれのスレーター行列式の間に関連を考慮することによってさらに記述を改善できると期待している。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究課題の実施期間には、時間依存密度汎関数法（Time-Dependent Density Functional Theory: TDDFT）に初期揺らぎを導入する枠組みの開発と応用を進めた。この方法は、原子核の反応だけでなく、励起・応答・核分裂等にも応用することが可能である。また、相互作用やスケールが異なるだけで、物性分野等で扱う他の量子多体系への応用も期待できる。また、この方法によって低エネルギー原子核反応に伴う物理量を微視的かつ定量的に記述できるようになったことで、未知の不安定核の生成や新奇なダイナミクスの予言等への更なる応用が期待でき、原子核物理学分野において高い学術的な意義を持つ。

研究成果の概要（英文）：In this project, the so-called stochastic mean-field (SMF) theory has been employed to introduce initial quantal fluctuations in the description. The SMF theory has been successfully implemented to our parallel computational code and has been applied. As a result, it has been demonstrated that the SMF theory significantly improve the quantitative description of production cross sections for multinucleon transfer processes. Moreover, the SMF theory has been extended to describe kinetic energy distribution which otherwise could not be described before. The agreement is not yet perfect, and to figure out the origin of discrepancy is one of the future works. It has been expected that the description can be further improved by introducing correlations (mixing) of Slater determinants.

研究分野：原子核理論

キーワード：原子核反応 時間依存密度汎関数法 時間依存平均場理論 多核子移行反応 深部非弾性散乱 エネルギー散逸 量子揺らぎ HPC

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

本研究は、原子核物理学に位置付けられ、原子核 2 種類のフェルミ粒子 (陽子・中性子、総称して核子と呼ばれる) から成る有限量子多体系 に発現するダイナミクスの統一的理解を与えることを目指したものである。

原子核物理における大きな目標は、核子多体系に発現する様々な現象を微視的に (核子自由度から量子論的に) かつ統一的な枠組みで記述し、理解することである。例えば、すべての核種の基底状態・励起状態及びそれらの崩壊の性質や、原子核の衝突 (核反応) や分裂 (核分裂) のダイナミクス、及び極限的な中性子過剰 “原子核” とみなすことができる中性子星の性質など、多様な空間・時間・励起エネルギーのスケールの現象が対象となる。原子核は、“核” が存在する原子・分子等とは異なり、強い相互作用に起因する単距離力 (核力) と陽子間に働くクーロン力によって自己束縛した、有限個 (数個 ~ 250 個程度) の核子から成る有限量子多体系である。その有限性は、変形・振動・回転等の自由度を生み出すと共に、それらと内部自由度との結合等、ユニークで興味深い性質をもたらす。さらに近年では、地球上に天然には存在しない、陽子数・中性子数がアンバランスで不安定な原子核の実験的・理論的研究が盛んに行われている。そのアイソスピン自由度が加わることにより、不安定核は、安定核では見られない中性子スキン・ハローや新しい魔法数の出現等、非常に奥深い様相を呈する。

本研究では、原子核のダイナミクスのより現実的な記述を実現させることを目指した。

2. 研究の目的

本研究の目的は、複数のスレーター行列式を用いた次世代理論に基づく原子核ダイナミクスの超並列計算を可能にし、従来の枠組みの欠点を克服することである。これまでの研究用いられてきた時間依存密度汎関数法 (Time-Dependent Density Functional Theory: TDDFT) は、密度を基本自由度とした量子多体理論であり、量子多体系の厳密解を与え得る理論として様々な分野で応用が進められ、大きな成功を収めている。しかし、複雑に分岐する原子核ダイナミクスを通常の TDDFT 波動関数 (Kohn-Sham 参照系に対する単一スレーター行列式) で完全に記述することは不可能であり (例えば、多体のトンネル現象を記述することはできない)、理論的枠組みの拡張が必須である。

そこで本研究では、単一スレーター行列式ではなく、時間に依存する複数のスレーター行列式の重ね合わせによってダイナミクスを記述するように理論的枠組みを拡張することによって、TDDFT の課題である分岐やトンネル効果の記述を可能にすることを目的とした。原子核構造の研究では、生成座標法 (Generator Coordinate Method: GCM) と呼ばれる、時間に依存しないスレーター行列式を重ね合わせる手法が用いられている。この方法により、原子核の基底状態の波動関数は様々な形の混ざり合ったものとなり得ることが分かっており (変形共存現象)、その場合単一のスレーター行列式では不十分となる。即ち、本研究は、原子核構造研究で培われた原子核の描像を、動的な場合へと拡張することを提案するものとして位置付けられる。この拡張を実現させることは、原子核ダイナミクスを記述する新たな理論的枠組みと概念の創造という、重要な意義を持つ。

3. 研究の方法

本研究では、確率論的平均場理論 (Stochastic Mean-Field: SMF 法) を採用し、従来理論にランダムな初期量子揺らぎを導入した。この方法に基づく並列計算コードを開発し、スパコンを利用した数値シミュレーションを実行することで、観測の実験データとの比較を行った。

4. 研究成果

従来の枠組み (TDDFT) の並列計算コードを拡張することにより、SMF 法に基づいた原子核反応計算ができる並列計算コードを開発した。また、生成された原子核は高い励起エネルギーを持っていることがあり、その場合には核子蒸発による脱励起の影響を考慮に入れる必要がある。そのため、核子蒸発の統計模型 (GEMINI++) を組み合わせることによって SMF 計算で求めた断面積に核子蒸発の影響を取り入れることを実現させた。この方法を、多核子移行の断面積が豊富に測定されている $^{58}\text{Ni}+^{208}\text{Pb}$ 及び $^{64}\text{Ni}+^{208}\text{Pb}$ 反応に適用し、様々な核種の生成断面積を実験データと定量的に比較した。その結果、SMF 法によって初期量子揺らぎを導入したことにより、従来の枠組みと比較して、多核子移行反応断面積の記述の定量化が劇的に改善されることを明らかにした。この方法では、実験データを再現するための恣意的なパラメータは一切含んでおらず、微視的な理論に基づいて複雑な断面積を定量的に記述できたことは、特筆すべき点の一つである。そのため、今回開発した方法は予言力があると考えことができ、今後、未知の不安定核を生成するのに最適な反応を見つけ出すことへの応用が期待できる。

さらに本研究では、SMF 法に改良を加え、運動エネルギー分布 (エネルギー散逸・揺らぎ) を記述するための枠組みを開発した。従来の方法では、運動エネルギーの平均値しか計算することができず、微視的理論に基づいた運動エネルギー分布の記述は本研究で新たに実現させた。この

新しい枠組みも並列計算コードに実装し、比較的新しい実験データのある $^{136}\text{Xe}+^{208}\text{Pb}$ 反応に適用し、実験データとの比較を行った。その結果、SMF 法により、運動エネルギー分布の大まかな広がりを記述することに成功した。しかし、励起エネルギーの低い反応過程（準弾性散乱）の運動エネルギー分布を過小評価している傾向があり、この原因はまだ特定できておらず、今後改善させる必要がある。また、この方法を用いると、原子核衝突によって生成されたフラグメントの角運動量の分布も同様にして計算することができ（既にコードに実装済み）、微視的理論に基づいて、実験データと直接、定量的に比較できる、現実的な記述が可能になった。

ただし、現状の方法では、用意した多数のスレーター行列式は各々独立に時間発展しており、統計的な扱いによって、観測量の幅を計算している。そのため、従来と同様、トンネル現象の記述にはまだ応用することができない。この点については、本研究の当初の目標であった、多数のスレーター行列式を重ね合わせた（相関・混合を含んだ）理論的枠組みへと拡張することで、解決の糸口がつかめると期待している。本課題の実施期間には、計算コードへの実装は完了しなかったものの、定式化については開発を進めることができた。今後、SMF 法とスレーター行列式間の混合を含んだ式を組み合わせることによって、トンネル現象も記述できる、より現実的な記述が得られると期待している。

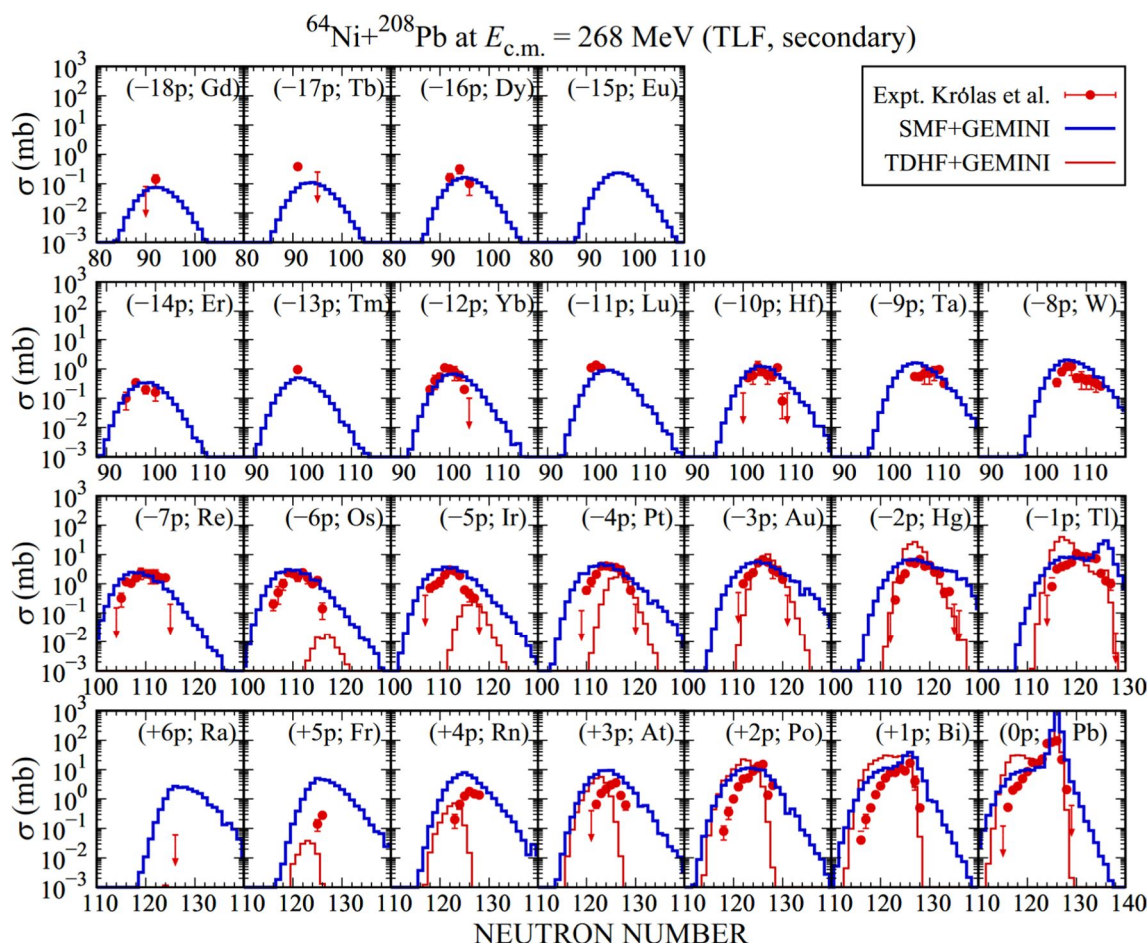


図 1. $^{64}\text{Ni}+^{208}\text{Pb}$ 反応 ($E_{c.m.}=268$ MeV) における、様々な原子核の生成断面積。各パネル上部に ($\pm xp$; X) として、移行した陽子の数 x , 対応する元素名 X が明示されている。赤い点が実験データ。赤いヒストグラムが従来理論 (TDDFT+GEMINI) による計算値。青いヒストグラムが、本研究で開発した SMF+GEMINI の計算値。この図から、移行した核子数が増大するにつれ、従来理論で過小評価されていた断面積が定量的に記述できている様子が見て取れる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計8件（うち査読付論文 8件/うち国際共著 7件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Biswas Rohan, Nath S., Gehlot J., Gonika, Kumar Chandra, Parihari A., Madhavan N., Vinayak A., Mahato Amritraj, Noor Shoaib, Sherpa Phurba, Sekizawa Kazuyuki	4. 巻 59
2. 論文標題 Determination of 1p- and 2p-stripping excitation functions for $^{16}\text{O}+^{142}\text{Ce}$ using a recoil mass spectrometer	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The European Physical Journal A	6. 最初と最後の頁 60
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1140/epja/s10050-023-00975-z	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Roy B. J., Santra S., Pal A., Kumawat H., Pandit S. K., Parkar V. V., Ramachandran K., Mahata K., Sekizawa K.	4. 巻 105
2. 論文標題 Reaction mechanism study for multinucleon transfer processes in collisions of spherical and deformed nuclei at energies near and above the Coulomb barrier: The $^{160}\text{Sm}+^{14}\text{C}$ reaction	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 44611
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.105.044611	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Biswas Rohan, Nath S., Gehlot J., Gonika, Kumar Chandra, Parihari A., Madhavan N., Vinayak A., Mahato Amritraj, Noor Shoaib, Sherpa Phurba, Sekizawa Kazuyuki	4. 巻 59
2. 論文標題 Determination of 1p- and 2p-stripping excitation functions for $^{16}\text{O}+^{142}\text{Ce}$ using a recoil mass spectrometer	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The European Physical Journal A	6. 最初と最後の頁 60
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1140/epja/s10050-023-00975-z	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Roy B. J., Santra S., Pal A., Kumawat H., Pandit S. K., Parkar V. V., Ramachandran K., Mahata K., Sekizawa K.	4. 巻 105
2. 論文標題 Reaction mechanism study for multinucleon transfer processes in collisions of spherical and deformed nuclei at energies near and above the Coulomb barrier: The $^{160}\text{Sm}+^{14}\text{C}$ reaction	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 44611
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.105.044611	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Ayik Sakir, Sekizawa Kazuyuki	4. 巻 102
2. 論文標題 Kinetic-energy dissipation and fluctuations in strongly damped heavy-ion collisions within the stochastic mean-field approach	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 64619
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.102.064619	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Sekizawa Kazuyuki, Ayik Sakir	4. 巻 102
2. 論文標題 Quantal diffusion approach for multinucleon transfer processes in the Ni58,64+Pb208 reactions: Toward the production of unknown neutron-rich nuclei	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 14620
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.102.014620	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Albers H.M. et al.	4. 巻 808
2. 論文標題 Zeptosecond contact times for element Z=120 synthesis	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physics Letters B	6. 最初と最後の頁 135626
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.physletb.2020.135626	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Washiyama Kouhei, Sekizawa Kazuyuki	4. 巻 8
2. 論文標題 TDHF and a Macroscopic Aspect of Low-Energy Nuclear Reactions	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Frontiers in Physics	6. 最初と最後の頁 93
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3389/fphy.2020.00093	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計11件（うち招待講演 5件 / うち国際学会 6件）

1. 発表者名 関澤一之, Sakir Ayik
2. 発表標題 確率論的平均場理論によるエネルギー散逸と揺らぎの記述
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 関澤 一之
2. 発表標題 フェルミ粒子系超流動ダイナミクスの数値シミュレーション
3. 学会等名 第76回日本物理学会年次大会 素粒子論領域・理論核物理領域合同シンポジウム「富岳・ポスト富岳時代の素粒子原子核物理学」（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 関澤 一之
2. 発表標題 確率論的平均場理論による重イオン多核子移行反応の記述
3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 関澤 一之
2. 発表標題 時間依存密度汎関数法による原子核ダイナミクスの研究：最近の進展
3. 学会等名 KEK理論センターオンラインミーティング（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 関澤 一之
2. 発表標題 時間依存バンド理論による中性子星内殻スラブ相における反エンタレインメント効果
3. 学会等名 日本物理学会 2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 K. Sekizawa
2. 発表標題 ime-Dependent Hartree-Fock Theory and Its Extensions for Low-Energy Nuclear Reactions: Recent Progress
3. 学会等名 The 64th DAE-BNRS Symposium on Nuclear Physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Sekizawa
2. 発表標題 Time-Dependent Density Functional Theory and Its Extensions for Nuclear Dynamics
3. 学会等名 International Workshop on "New Generation Nuclear Density Functionals" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Sekizawa
2. 発表標題 Time-Dependent Hartree-Fock Theory and Its Extensions for the Superheavy Element Synthesis
3. 学会等名 Heavy Ion Accelerator Symposium on Fundamental and Applied Science (HIAS2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Sekizawa, K. Hagino, and A. Wakhle
2. 発表標題 Time-Dependent Hartree-Fock Theory and Its Extensions for the Superheavy Element Synthesis
3. 学会等名 The 4th International Symposium on Superheavy Elements (SHE2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Sekizawa
2. 発表標題 Time-Dependent Hartree-Fock Theory and Its Extensions for the Superheavy Element Synthesis
3. 学会等名 YITP international molecule-type workshop on "Nuclear Fission Dynamics 2019" (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Sekizawa
2. 発表標題 Time-Dependent Hartree-Fock Theory and Its Extensions for Low-Energy Heavy-Ion Reactions
3. 学会等名 China-Japan Collaboration Workshop on "Nuclear Mass and Life for Unraveling Mysteries of R-process" (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>Kazuyuki Sekizawa's blog https://kazuyuki-sekizawa.tumblr.com/post/638261725202874368/how-do-kinetic-energy-fluctuations-emerge-in 量子多体理論に基づく原子核衝突における観測量分布の定量的記述 https://www.jsps.go.jp/j-grantsinaid/37_topics/data/00187-13101-00820854.pdf たとえばケーキ作りのように！？原子核から世界の成り立ちを探求する http://hotozero.com/?p=16955 Kazuyuki Sekizawa's Homepage http://sekizawa.fizyka.pw.edu.pl Kazuyuki SEKIZAWA Niigata University http://sekizawa.fizyka.pw.edu.pl/english/activities.html</p>
--

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------