

令和 6 年 9 月 27 日現在

機関番号：12102

研究種目：国際共同研究加速基金（国際共同研究強化(A））

研究期間：2020～2023

課題番号：19KK0343

研究課題名（和文）中性子－陽子対密度汎関数の最適化

研究課題名（英文）Optimization of neutron-proton pair energy density functional

研究代表者

日野原 伸生（Hinohara, Nobuo）

筑波大学・計算科学研究センター・助教

研究者番号：80511435

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 6,300,000円

渡航期間： 6ヶ月

研究成果の概要（和文）：原子核密度汎関数理論を主に用いて中性子－陽子対相関が重要となる現象を研究した。中性子－陽子対相関を含む原子核密度汎関数理論計算コードを開発し、基底状態での中性子－陽子対凝縮を記述する枠組みの構築を行った。中性子－陽子対相関が重要な役割を果たす物理量であるニュートリノを2つ放出する二重ベータ崩壊の原子核行列要素、奇々核の低励起状態、ガモフテラー共鳴、ベータ崩壊半減期などを記述する多体理論の構築を行い、中性子－陽子対相関の影響を分析した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

原子核密度汎関数理論の中性子－陽子対相関の結合定数は他の結合定数とは異なり偶数個の陽子、中性子からなる原子核の基底状態からは決定することができず、現状では不定性が大きい。その一方で中性子－陽子対相関はベータ崩壊や二重ベータ崩壊などと強く相関することがわかっており、本研究成果によって中性子－陽子対相関と関係の深い様々な実験観測量を計算することが可能となり、今後中性子－陽子対相関の結合定数に強い制限がかけられるようになる。

研究成果の概要（英文）：Using nuclear density functional theory (DFT), we have studied phenomena in which neutron-proton pairing correlations play important roles. We developed a computational code for nuclear DFT calculation that includes neutron-proton pair correlations and constructed a framework to describe neutron-proton pair condensation in the ground states. We have developed many-body methods describing physical observables in which neutron-proton pairing correlations play important roles, such as nuclear matrix elements of two-neutrino emitting double-beta decay, low-energy excited states and magnetic transitions of odd-odd nuclei, Gamow-Teller resonances, and beta decay half-lives, and we analyzed the effect of neutron-proton pairing correlations.

研究分野：原子核理論

キーワード：原子核密度汎関数法 対相関 二重ベータ崩壊

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

原子核内の2核子是对相関によって引力化して凝縮し、超伝導状態となることが知られている。2陽子や2中性子の同種粒子対による対凝縮が基底状態で起きていることは様々な実験データから確立しているが、中性子-陽子対に関する対相関・対凝縮には2核子のスピンの1であるアイソスカラー型と、スピンの0であるアイソベクトル型の2種類があり、凝縮を示す決定的な実験データがない。特に、陽子過剰不安定核の基底状態では、中性子と陽子が対を組みやすくなることから、中性子-陽子対の凝縮相が発現している可能性があり、近年注目されている。

中性子-陽子対相関は様々な実験観測量と関係が深い。ニュートリノレス二重ベータ崩壊の観測によりニュートリノの質量およびマヨラナ性に関する情報が得られる可能性があるが、その半減期からニュートリノの質量を導出するには原子核行列要素の理論値が必要である。原子核行列要素の値には大きな不定性が存在するが、特にアイソスカラー型の中性子-陽子対相関の影響を極めて強く受けることがこれまでの研究からわかっている。二重ベータ崩壊の半減期からニュートリノの質量を精度良く決定するためには、中性子-陽子対相関の定量的な理解が必須である。また、現在宇宙に存在する元素の多くはrプロセス元素合成過程によって生成されたと考えられているが、rプロセスは現在の加速器実験では到達できない中性子過剰原子核領域を通るため、元素合成の理解のためにはrプロセス経路上の原子核の質量やベータ崩壊の半減期などの理論値が必要である。中性子-陽子対相関はベータ崩壊の半減期とも強く関連するため、中性子-陽子対相関の理解を深めることは元素合成の全貌解明のためにも必須である。

## 2. 研究の目的

原子核密度汎関数理論を用いた計算により原子核基底状態での中性子-陽子の対凝縮の有無を解明する。また、二重ベータ崩壊の原子核行列要素や、中性子過剰不安定原子核のベータ崩壊半減期などの中性子-陽子対相関と深く関係する実験観測量を予測できる原子核エネルギー密度汎関数および多体理論を構築することを目的とする。

## 3. 研究の方法

軸対称変形および対相関を取り扱うことが可能なSkyrme型(局所密度型)の原子核密度汎関数計算コードである、調和振動子基底のHFBTHOおよび、ベータ崩壊、二重ベータ崩壊過程の計算が可能な中性子-陽子チャンネルの有限振幅法を主に用いる。HFBTHOコードに中性子-陽子対相関を取り入れる拡張を行い、アイソベクトル型およびアイソスカラー型の対密度汎関数を導入する。また、中性子-陽子チャンネルの有限振幅法を発展させ、二重ベータ崩壊の原子核行列要素の計算を行う。

## 4. 研究成果

### (1)中性子-陽子対相関を含む原子核密度汎関数理論計算コードの構築

原子核基底状態での対凝縮相の性質を調べるため、中性子-陽子対相関を含む原子核密度汎関数理論計算コードの構築を軸対称調和振動子基底コードのHFBTHOをベースに行った。アイソベクトル型の中性子-陽子対相関を実装し、同質量数原子核で異なるアイソスピンの方向を持つアイソバリック・アナログ状態と、陽子過剰不安定核でのアイソベクトル型の対相関・対凝縮の分析を行った。中性子、陽子両方が対凝縮状態にある原子核のアイソバリック・アナログ状態ではアイソスピン対称性のため、ゲージ回転の自由度に起因した自由度により中性子-陽子対凝縮の大きさが一意に決まらないことを示した。このアイソスピン対称性はクーロン密度汎関数を導入することであらわに破れるが、その場合でも異なる中性子-陽子対凝縮を持つ2つの解が共存することを示した。さらにこの計算コードに2核子のスピンの1であるアイソスカラー型の中性子-陽子対相関の実装を進めた。アイソスカラー型の中性子-陽子対凝縮は実験的な証拠がない未知の現象であり、本計算コードを用いることで、変形原子核を含め、陽子過剰不安定核の全質量領域においてアイソベクトル型とアイソスカラー型の対凝縮の有無や競合を調べることが可能となった。

### (2)原子核密度汎関数理論と有限振幅法を用いた二重ベータ崩壊原子核行列要素の系統的計算

ニュートリノを2つ放出する二重ベータ崩壊の原子核行列要素は中性子-陽子対相関と強く関連することが知られている。中性子-陽子チャンネルの準粒子乱雑位相近似(pnQRPA)を用いることで、原子核密度汎関数理論に基づいて中性子-陽子対相関を取り入れた原子核行列要素の計算が可能であるが、従来の行列対角化の手法では計算コストの問題により、4核種のみでの計算しか行われていなかった。pnQRPAの効率的解法である中性子-陽子チャンネルの有限振幅法の解の二重複素積分によって原子核行列要素の値が求められることを示し、この手法を用いて原子

核行列要素の値の計算を実験データの存在する全 11 核種および崩壊可能な未測定 27 核種について行った。一部の同位体では実験値と計算値の間に系統的なずれが見られ、原子核行列要素の実験値を用いることで原子核密度汎関数の中性子 - 陽子相関部分をより精密に決定できる可能性が示唆された[1]。

### (3) 中性子 - 陽子対振幅ゆらぎを用いた生成座標法による奇々核の磁氣的性質の分析

奇数個の陽子と中性子からなる奇々核の構造を中性子 - 陽子対相関を用いて記述する理論的な枠組みを構築した。様々な大きさのアイソスカラー型およびアイソベクトル型に組んだ中性子 - 陽子対振幅の状態を拘束付き平均場計算によって多数生成し、粒子数射影および角運動量射影を行うことによって対応する奇々核の平均場基底関数を作り、生成座標法によって平均場基底関数を重ね合わせて奇々核の基底状態および低励起状態を求めた。一軌道のみからなる厳密解が存在する  $S_0(8)$  模型を用いることで、様々なスピンの奇々核の基底状態及び励起状態のエネルギー、アイソベクトルスピン M1 遷移の厳密解を、この手法で精度良く再現できることを確認した。さらに  $^{18}\text{F}$  同位体などの sd 殻領域で中性子数と陽子数が等しい奇々核の  $0^+$ ,  $1^+$  状態のエネルギー、アイソベクトル M1 遷移強度がアイソスカラー型中性子 - 陽子対相関の強度依存性を分析した。アイソスカラー型中性子 - 陽子対相関は特に  $0^+$  状態と  $1^+$  状態のエネルギー差と強く相関する結果が得られた。また  $0^+$  状態と  $1^+$  状態間のスピン M1 遷移強度を増大させる一方、軌道 M1 との干渉項を減少させ、 $B(M1)$  のアイソスカラー型中性子 - 陽子対相関依存性は弱くなることがわかった[2]。

### (4) ガモフ・テラー強度とベータ崩壊半減期への準粒子振動結合の効果

pnQRPA はガモフ・テラー巨大共鳴の強度分布や、ベータ崩壊半減期の計算に広く用いられているが、二準粒子励起の重ね合わせで励起を記述するため、多準粒子励起への結合が理論に含まれておらず、ガモフ・テラー巨大共鳴の共鳴幅の記述などが不十分であることが以前から知られている。中性子および陽子の準粒子とフォノン振動の結合を取り入れた定式化を行い、pnQRPA の効率的な解法である有限振幅法を用いてガモフ・テラー共鳴の強度分布およびベータ崩壊強度の計算を変形核に対して初めて行った。準粒子とフォノン振動との結合を取り入れることで巨大共鳴の強度分布の記述を大幅に改善し、アイソスカラー型の中性子 - 陽子対相関を入れなくともベータ崩壊の半減期が短くなるという結果を得た。pnQRPA を超えた多体相関を理論に取り入れることにより、アイソスカラー対相関の結合定数はこれまで pnQRPA で決定されてきたものと大きく異なるものとなる可能性があることが明らかとなった[3]。

### (5) 有限振幅法エミュレータの開発

ニュートリノレス二重ベータ崩壊の計算や、様々な量子数を持つフォノン結合を取り入れた計算、核分裂の集団質量の計算、あるいはベータ崩壊や低励起状態の系統的な全核種計算を行うには QRPA の低エネルギー解を高速に計算する手法の開発が必要である。有限振幅法は QRPA を反復法によって効率的に解く方法であるが、QRPA の固有値解を求める場合、有限振幅法の解は複素エネルギー空間において QRPA 固有値エネルギーが一位の極となっていることを利用し、極周りの周回積分を用いる。しかしながら、積分経路の設定のために必要な極の位置の推定に、多くの複素エネルギー点での有限振幅法の計算が必要となる。パラメータを含む固有値問題等のエミュレータである縮減基底法を用いて複素エネルギーをパラメータとする有限振幅法のエミュレータを渡航先にて国際共同研究で開発した。低エネルギーの QRPA 解を同じエネルギー領域の複素エネルギーを用いた有限振幅法解の重ね合わせによって表現できると仮定し、その重みは Rayleigh-Ritz 法によって変分で求めた。このエミュレータを用いることで QRPA 解を精度良く、系統的かつ高速に計算できることを示した。従来の極周りの複素周回積分による手法と比べ、QRPA 固有値解の計算速度の向上が 2-3 桁見込まれ、今後 QRPA を用いた様々な大規模計算が可能になると考えられる。

[1] N. Hinohara and J. Engel, Phys. Rev. C **105**, 044314 (2022).

[2] K. Uzawa, N. Hinohara, and T. Nakatsukasa, Prog. Theor. Exp. Phys. **2024**, 053D02 (2024).

[3] Q. Liu, J. Engel, N. Hinohara, and M. Kortelainen, Phys. Rev. C **109**, 044308 (2024).

## 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 4件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Gil Hana, Hinohara Nobuo, Hyun Chang Ho, Yoshida Kenichi	4. 巻 81
2. 論文標題 KIDS density functional for deformed nuclei: examples of the even-even Nd isotopes	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the Korean Physical Society	6. 最初と最後の頁 113 ~ 120
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s40042-022-00504-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 Hinohara Nobuo, Engel Jonathan	4. 巻 105
2. 論文標題 Global calculation of two-neutrino double- decay within the finite amplitude method in nuclear density functional theory	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 44314
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.105.044314	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 Nakatsukasa Takashi, Hinohara Nobuo	4. 巻 108
2. 論文標題 Local -removal strength in the mean-field approximation	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 14318
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.108.014318	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 -
1. 著者名 Gil Hana, Hinohara Nobuo, Hyun Chang Ho, Yoshida Kenichi	4. 巻 108
2. 論文標題 Nuclear mass table in density functional approach inspired by neutron-star observations	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 44316
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.108.044316	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 Hinohara Nobuo, Oishi Tomohiro, Yoshida Kenichi	4. 巻 109
2. 論文標題 Triplet-odd pairing in finite nuclear systems: Even-even singly closed nuclei	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 34302
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.109.034302	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 -

1. 著者名 Liu Qunqun, Engel Jonathan, Hinohara Nobuo, Kortelainen Markus	4. 巻 109
2. 論文標題 Effects of quasiparticle-vibration coupling on Gamow-Teller strength and decay with the Skyrme proton-neutron finite-amplitude method	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 44308
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.109.044308	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, Hinohara Nobuo, Nakatsukasa Takashi	4. 巻 109
2. 論文標題 Five-dimensional collective Hamiltonian with improved inertial functions	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 L051301
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.109.L051301	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 -

1. 著者名 Uzawa K, Hinohara N, Nakatsukasa T	4. 巻 2024
2. 論文標題 Generator Coordinate Method with Proton-Neutron Pairing Fluctuations and Magnetic Properties of $N = Z$ Odd-Odd Nuclei	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Progress of Theoretical and Experimental Physics	6. 最初と最後の頁 053D02
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1093/ptep/ptae072	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22件（うち招待講演 12件 / うち国際学会 14件）

1. 発表者名 Nobuo Hinohara
2. 発表標題 Current status and future perspective of nuclear structure calculation for nuclear matrix element
3. 学会等名 Unraveling the History of the Universe and Matter Evolution with Underground Physics (UGAP2022) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 日野原 伸生
2. 発表標題 0 崩壊半減期の原子核構造計算の現状と展望
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 日野原 伸生
2. 発表標題 二重ベータ崩壊核行列要素と中性子 陽子対相関
3. 学会等名 二重ベータ崩壊核行列要素に関する実験理論合同研究会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Nobuo Hinohara
2. 発表標題 Systematic calculation of double-beta decay and double electron capture nuclear matrix elements with the finite amplitude method
3. 学会等名 The 30th Anniversary Symposium of the Center for Computational Sciences at the University of Tsukuba (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Nobuo Hinohara
2. 発表標題 Nuclear structure calculation for double-beta decay
3. 学会等名 GPPU Seminar (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Nobuo Hinohara
2. 発表標題 Recent progress in nuclear DFT
3. 学会等名 YITP Workshop "Fundamentals in density functional theory" (DFT2022) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 日野原 伸生
2. 発表標題 2ニュートリノ二重ベータ崩壊原子核行列要素を用いたアイソスカラー型対相関結合定数の決定
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 Nobuo Hinohara
2. 発表標題 Calculation of double-beta decay nuclear matrix elements using QRPA
3. 学会等名 12th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 日野原 伸生
2. 発表標題 ニュートリノレス二重ベータ崩壊原子核行列要素計算の現状
3. 学会等名 ニュートリノを伴わない二重ベータ崩壊とその周辺 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Nobuo Hinohara
2. 発表標題 Reduced basis method for DFT linear response
3. 学会等名 2023 NUCLEI Collaboration Meeting (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Nobuo Hinohara
2. 発表標題 Nuclear pairing and related phenomena in nuclear dynamics
3. 学会等名 FRIB Theory Seminar (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Nobuo Hinohara
2. 発表標題 Recent development and application of finite-amplitude method for QRPA
3. 学会等名 DNA-OMEG Workshop on Nuclear structure, reaction and astrophysics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年



1. 発表者名 Nobuo Hinohara, Sylvester Agbemava, Kyle Godbey, Witold Nazarewicz, Ante Ravlic, Jhilm Sadhukhan
2. 発表標題 Local QRPA inertia for symmetric-asymmetric fission dynamics
3. 学会等名 International Conference on Heavy-Ion Collisions at near-barrier energies (FUSION23) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Nobuo Hinohara
2. 発表標題 Alpha-particle formation and nuclear pairing
3. 学会等名 Workshop on Nuclear Cluster Physics (WNCP2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 日野原 伸生
2. 発表標題 スピン三重項対相関と関連実験量
3. 学会等名 原子核におけるスピン自由度の織り成すダイナミクス (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Nobuo Hinohara
2. 発表標題 Recent progress in the nuclear matrix element calculation using the finite-amplitude method for QRPA
3. 学会等名 Theoretical and experimental approaches for nuclear matrix elements of double-beta decay (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Nobuo Hinohara
2. 発表標題 Collective phenomena related to neutron-proton pairing in the ground and excited states around $N=Z$
3. 学会等名 Advancing physics at next RIBF (ADRI24) (招待講演)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Nobuo Hinohara
2. 発表標題 Spin-triplet pairing in nuclear DFT
3. 学会等名 RIKEN Symposium Second Workshop on Fundamentals in Density Functional Theory (DFT2024) (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Nobuo Hinohara
2. 発表標題 Pairing rotation and pairing properties in ground states
3. 学会等名 Reimei Workshop "Intersection of Nuclear Structure and Direct Reactor" (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Nobuo Hinohara
2. 発表標題 Nuclear matrix element for double-beta decay within density functional theory
3. 学会等名 Unraveling the History of the Universe and Matter Evolution with Underground Physics (UGAP2024) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 日野原 伸生, Xilin Zhang, Jonathan Engel
2. 発表標題 有限振幅法のエミュレータ
3. 学会等名 日本物理学会2024年春季大会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Nobuo Hinohara, Tomohiro Oishi, Kenichi Yoshida
2. 発表標題 Energy-weighted sum rule for multipole and spin-M1 transitions and ground-state properties
3. 学会等名 The workshop on frontier nuclear studies with gamma-ray spectrometer arrays (gamma24) (国際学会)
4. 発表年 2024年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

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
主たる渡航先の主たる海外共同研究者	ナザレヴィッチ ヴィトルド  (Nazarewicz Witold)	ミシガン州立大学・FRIB・John A. Hannah Distinguished Professor	

	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
その他の研究協力者	エンゲル ジョナサン  (Engel Jonathan)		

6. 研究組織（つづき）

	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
その他の研究協力者	中務 孝  (Nakatsukasa Takashi)		
その他の研究協力者	鶴沢 浩太郎  (Uzawa Kotaro)		
その他の研究協力者	コルテライネン マルクス  (Kortelainen Markus)		
その他の研究協力者	チャン シリン  (Zhang Xilin)		

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		
米国	ミシガン州立大学	ノースカロライナ大学	
フィンランド	ユバスキュラ大学		