

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成25年 5月31日現在

機関番号：82401

研究種目：基盤研究(B)

研究期間：2009～2012

課題番号：21340073

研究課題名（和文） 密度汎関数アプローチによる全核種精密計算

研究課題名（英文） Accurate calculation of all nuclides using density functional approaches

研究代表者

中務 孝 (NAKATSUKASA TAKASHI)

独立行政法人理化学研究所・中務原子核理論研究室・准主任研究員

研究者番号：40333786

研究成果の概要（和文）：

自然界に存在しない不安定な原子核を含め、その励起・核反応ダイナミクスの解明を目的として、そのための理論手法の開発、特に（時間）依存密度汎関数理論に基づく線形応答計算、実時間発展計算、大振幅集団運動理論の開発を実施した。より精密な予言を可能にするため、对相关エネルギー汎関数の精度向上も行った。さらに、手法の開発と並行して、安定核および不安定核に対する系統的な数値解析を実行し、陽子・中性子数がアンバランスな不安定核の素励起モードの予言およびその性質・発現機構を解明した。

研究成果の概要（英文）：

In order to investigate many-body dynamics in nuclear excitations and reactions, we have developed a number of new theoretical/computational methodologies based on the (time-dependent) density functional theory; especially in the linear response calculation, the real-time calculation, and the large amplitude collective motion theory. We also improved the pairing energy functional for more reliable predictions. Utilizing these new techniques, we have performed systematic numerical analysis for stable and unstable nuclei, to study properties of exotic elementary modes of excitation in unstable nuclei with unbalanced numbers of neutron and protons.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	1,500,000	450,000	1,950,000
2010年度	5,000,000	1,500,000	6,500,000
2011年度	6,000,000	1,800,000	7,800,000
2012年度	1,400,000	420,000	1,820,000
総計	13,900,000	4,170,000	18,070,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・素粒子・原子核・宇宙線・宇宙物理

キーワード：原子核構造、原子核反応、密度汎関数理論

1. 研究開始当初の背景

原子核は強い相互作用が支配するフェルミ多体系であるが、核子自由度による核構造の微視的記述には今なお大きな困難が立ちまはだかり、広大な未開拓領域が残されている。真空中の核力をもとにして原子核を直接計算機上に構築することは、核子数が10を超えた質量領域の原子核に対してはほとんど手つかずの状況だといつてよい。一方で、実験核物理の分野では、理化学研究所のRIビームファクトリー(RIBF)の稼働をはじめ世界中で新たな放射性重イオンビーム施設の大規模計画が進行中であり、新元素・新アイソトープの大量人工生成が期待されている。RIBFは、これら欧米で計画中の施設に対して数年のアドバンテージを持つ施設であり、日本が世界のトップで大きな成果をあげる可能性がおおいにきたいされている。このため、重い原子核に対して予言能力のある微視的理論開発は急務である。

そこで密度汎関数理論を用いた理論・計算手法などを開発する本研究プロジェクトをスタートさせた。

2. 研究の目的

密度汎関数理論による原子核構造研究は、本プロジェクトをスタートさせた2008年段階で既に世界的に大きく発展しており、基底状態の計算については、汎用計算コードも一部公開されていた。しかしながら、励起状態や応答関数、核反応ダイナミクスの解明を目的とした開発はこれからの段階であり、本研究課題は、これらの理論手法の開発、特に時間依存密度汎関数理論に基づく線形応答計算、実時間発展計算、大振幅集団運動理論の開発を第一の目的としている。そのために普遍的エネルギー密度汎関数の構築も重要課題である。

さらに、これらの開発の成果をもとに、自然界には存在しない不安定核に対する系統的な数値解析によって、その応答・励起ダイナミクスを研究することを第二の目的とする。陽子・中性子数がアンバランスな一種の極限状態にある原子核の素励起モードの解析を通して、新しい核現象の予言、またはその発現のメカニズムを検証する。

3. 研究の方法

時間依存密度汎関数理論の様々な核現象への応用を目的とした研究手法開発を実施した。大きく分けて以下の2つの領域の方法を用いている。

- (1) 線形応答領域
- (2) 非線形応答・大振幅集団運動

前者の線形応答計算では、我々が2007年に提唱した有限振幅法を用いた計算コード開発とその応用が中心的開発課題である。また、行列形式でのコード開発も実施した。一方、後者では、主に2つの方法をとっており、時間依存密度汎関数理論の実時間発展計算と、特定の集団運動を記述する集団空間を切り出して集団ハミルトニアンを構築する方法とを併用し、核反応や低エネルギー励起状態の解析を行った。

4. 研究成果

研究成果は理論や計算手法の開発および計算コード開発に関わるものと、その数値計算の結果から得られた原子核の励起機構・反応ダイナミクスに関する新しい知見とがある。

まず、線形応答に関する理論の開発については、有限振幅法の更なる発展があげられる。重い原子核において重要になる対相関を取り入れ、超流動状態にある原子核の線形応答計算を行えるように、これまでの理論を拡張した(Avogadro, Nakatsukasa, ①, ⑥)。これにより、質量数の大きな開殻配位の原子核に対する計算が可能になった。また、計算コードの開発では、3次元座標空間のメッシュ表示による有限振幅法計算コードを開発した(Inakura, Nakatsukasa, Yabana, ⑩)。さらには、行列表示によるコードも完成させた(Yoshida, Nakatsukasa, ⑨)。

一方、実時間発展計算では、正準座標表示におけるBogoliubov-de-Gennes方程式を導くことに成功し、これにより、これまでの計算コストを大幅に削減することが可能になった(Ebata et al, ⑩)。この結果は理化学研究所においてプレスリリースされ、またPhysical Review誌のハイライトとして取り上げられた。また、大振幅集団運動を記述する断熱型の自己無撞着集団運動理論を大きく発展させることにも成功している。その一つは、理論に潜んでいたゲージ不変性を明らかにしたことで数値計算の不安定性を一掃することができたこと、および集団ハミルトニアンの再量子化の手続きを明確化したことである(Hinohara, Nakatsukasa, Matsuo, Matsuyanagi, ⑭)。理論の完成が成就したといえる。さらに、1次元集団座標から2次元(4次元位相空間)への拡張にも取り組み、近似の範囲内ではあるが、整合性のある理論を構築することができた(Hinohara et al, ⑩)。

これらの理論開発・数値計算コード開発により、多くの数値解析が可能になった。これまでに光吸収断面積の系統的計算、中性子過剰核における低エネルギー電気双極子強度(ピグミーE1共鳴)の解析、球形・変形相転

移と巨大共鳴、変形共存現象・形状揺らぎとその励起スペクトルの解析などにおいて大きな成果をあげることができた。この中からいくつかについて報告する。

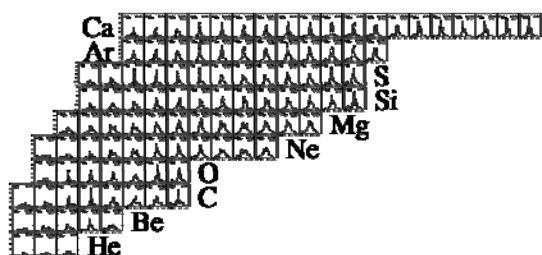


図1：有限振幅法による軽・中重核のE1強度分布。核図表と同じように、中性子数(横軸)、陽子数(縦軸)として並べたもの。

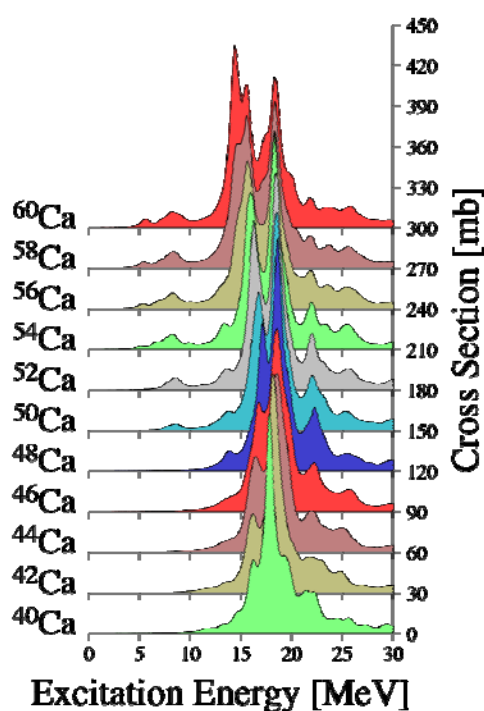


図2：カルシウムアイソトープの光吸収断面積。ピグミー共鳴状態が中性子数50を超えると強く出現することがわかる。

まず、系統的な光吸収断面積の計算が実施できたことが大きな成果である。MPIによる大規模並列計算によって、これまでに、陽子数 $Z=40$ 以下の偶々核(陽子数・中性子数がともに偶数である核)について、ほぼすべての原子核の断面積を計算した(Nakatsukasa et al, ⑤、図1)。また、基底状態の形状相転移が発現する希土類の原子核において、光吸収断面積を計算し、変形による強度幅への影響、さらにはピークの分裂などが得られ、実験データを見事に説明することを示した(Yoshida, Nakatsukasa, ⑨)。また、これらの系統的な計算結果を解析することで、低

エネルギーのピグミー共鳴についても非常に興味深い結果が得られている。その一つは、強い中性子の殻効果である。ある特定の中性子数になると、低エネルギーのE1強度は大きく増大することがわかった(Inakura, Nakatsukasa, Yabana, ⑦、図2)。ピグミー共鳴は元素合成などにも大きな影響があると考えられており、強い関心を引く現象であるが、このような殻効果を指摘したのは我々がはじめてである。また、さらに低エネルギーのE1強度と中性子スキン厚あるいは核物質状態方程式との関係について、強い相関があることがわかってきた。これは、将来実験によって状態方程式へ制限をつける可能性があることを示唆している。

次に、集団ハミルトニアンを微視的に構築し、質量数60-80領域の陽子過剰核(Hinohara et al, ⑩, ⑭)、および中性子過剰のマグネシウム・アイソトープ(Hinohara et al, ⑧)、クロム・アイソトープ(Sato et al, ③)の低エネルギースペクトルの理論解析の結果を報告する。まず、低エネルギー励起状態では、大きな形状揺らぎが重要な役割を果たしていることが明らかとなった。基底状態において原子核の形を球形や変形として分類できない原子核が数多く存在することがわかった。これは多くの質量領域において普遍的に現れる現象であるといえる。一方で、原子核に角運動量を付与することで、形状揺らぎは抑制され、原子核の形は比較的よく定義できることも明らかになった。これも普遍的にいろいろな原子核において起きているようである。これらの結果は、我々の開発した断熱型の自己無撞着集団座標理論によって得られたものであり、回転の慣性率と形状振動の集団質量などを正確・精密に計算できる理論であることが重要である。我々の理論においては、重心運動の質量などの自明な値を再現するが、広く用いられているランキング公式で計算されたものでは再現できない。このため、低励起スペクトルについても実験データを再現できないという問題があったが、この問題を解決し、原子核の大振幅集団運動に対する新しいアプローチを確立することができた。マグネシウムやクロムの中性子過剰なアイソトープは、最近の実験で多くのデータが得られており、単純な核模型では理解できない不思議な性質を示していた。これらの問題も、同様の手法で数値解析を実行し、多くの謎を解明することができた。マグネシウムでは、球形状態と変形状態が基底状態と励起状態に共存しており、これらがアイソトープによって入れ替わるという解釈が実験で示唆されていた。これに対して我々の結果は、特定の形を持たない揺らぎの大きな状態が現れることが本質的であることを示している(図3)。また「反転

の島」(Island of inversion)として知られる変形した基底状態が現れるメカニズムについても、形状揺らぎが大きく、必ずしも良い変形状態とはいえないことが示唆される。これらの結果を確かめるためには、新たな実験データが必要であり、今後重要になる実験データを指摘した。現在、関連した実験のプロポーザルが進行中である。

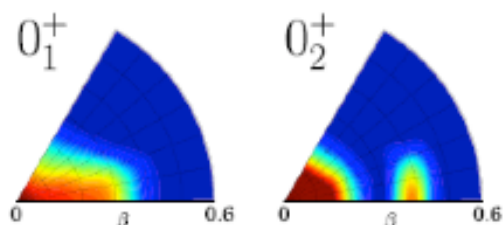


図3： ^{32}Mg の集団(変形)空間における波動関数。基底状態の波動関数が横軸方向に大きく広がっている。

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 68 件)

- ① P. Avogadro and T. Nakatsukasa, “Efficient calculation for the quasiparticle random-phase approximation matrix”, *Physical Review C* 87, 14331 (2013), 査読有.
- ② T. Nakatsukasa, “Density functional approaches to collective phenomena in nuclei: Time-dependent density functional theory for perturbative and non-perturbative nuclear dynamics”, *Progress of Theoretical and Experimental Physics*, 2012, 011A207 (2012), 査読有.
- ③ K. Sato, N. Hinohara, K. Yoshida, T. Nakatsukasa, M. Matsuo, K. Matsuyanagi, “Shape transition and fluctuations in neutron-rich Cr isotopes around $N=40$ ”, *Physical Review C* 86, 24316 (2012), 査読有.
- ④ M. Tohyama and T. Nakatsukasa, “Fragmentation of electric dipole strength in $N=82$ isotones”, *Physical Review C* 85, 31302 (2012), 査読有.
- ⑤ T. Nakatsukasa, P. Avogadro, S. Ebata, T. Inakura, K. Yoshida, “Self-consistent description of nuclear photoabsorption cross sections”, *Act. Phys. Pol. B* 42, 609-618 (2011), 査読有.
- ⑥ P. Avogadro and T. Nakatsukasa, “Finite amplitude method for the quasi-particle-random-phase approximation”, *Physical Review C* 84, 014314 (2011), 査読有.
- ⑦ T. Inakura, T. Nakatsukasa, K. Yabana, “Emergence of pygmy dipole resonances: Magic numbers and neutron skins”, *Physical Review C* 84, 021302 (2011), 査読有.
- ⑧ N. Hinohara, K. Sato, K. Yoshida, T. Nakatsukasa, M. Matsuo, K. Matsuyanagi, “Shape fluctuations in the ground and excited 0^+ states of $^{30,32,34}\text{Mg}$ ”, *Physical Review C* 84, 061302 (2011), 査読有.
- ⑨ K. Yoshida and T. Nakatsukasa, “Dipole responses in Nd and Sm isotopes with shape transitions”, *Physical Review C* 83, 021304 (2011), 査読有.
- ⑩ N. Hinohara, K. Stao, T. Nakatsukasa, M. Matsuo, K. Matsuyanagi, “Microscopic description of large-amplitude shape-mixing dynamics with inertial functions derived in local quasiparticle random-phase approximation”, *Physical Review C* 82, 064313 (2010), 査読有.
- ⑪ S. Ebata, T. Nakatsukasa, T. Inakura, K. Yoshida, Y. Hashimoto, K. Yabana, “Canonical-basis time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov theory and linear-response calculations”, *Physical Review C* 82, 034306 (2010), 査読有.
- ⑫ M. Yamagami, T. Nakatsukasa, Y.R. Shimizu, “Optimal pair density functional for description of nuclei with large neutron excess”, *Physical Review C* 80, 064301 (2009), 査読有.
- ⑬ T. Inakura, T. Nakatsukasa, K. Yabana, “Self-consistent calculation of nuclear photoabsorption cross sections: Finite amplitude method with Skyrme functionals in the three-dimensional real space”, *Physical Review C* 80, 044301 (2009), 査読有.
- ⑭ N. Hinohara, T. Nakatsukasa, M. Matsuo, K. Matsuyanagi, “Microscopic description of oblate-prolate shape mixing in proton-rich Se isotopes”, *Physical Review C* 80, 014305 (2009), 査読有.

[学会発表] (計 94 件)

- ① T. Nakatsukasa, “Time-dependent density-functional studies on strength functions in neutron-rich nuclei”, Fission and properties of neutron-rich nuclei, 2012.11.4-10, Sanibel Island, USA.
- ② T. Nakatsukasa, “Time-dependent density-functional calculation of nuclear response and collective motion”, Collective motion in Nuclei under extreme condition (COMEX2012), 2012.10.22-26, Hayama, Japan.
- ③ K. Yabana, “Ab-initio description for the interaction of intense laser pulses with solids”, Frontiers in Intense Laser-Matter Interaction Theory, 2012.9.19-21, Garching, Germany.
- ④ M. Matsuo, “Continuum dipole response near the threshold and the (n, gamma) direct capture cross section at astrophysical energies”, The nuclear dipole polarizability and its impact on nuclear structure and astrophysics, 2012.6.21-21, Trento, Italy.
- ⑤ T. Nakatsukasa, “Real-time calculations of many-body dynamics in quantum systems”, Conference on Computational Physics (CCP2011), 2011.10.30-11.3, Gatlinburg, USA.
- ⑥ K. Yabana, “Real-time TDDFT simulation for ultrafast electron dynamics in dielectrics”, Density Functional Theory 11, 2011.8.29-9.2, Athens, Greece.
- ⑦ T. Nakatsukasa, “Microscopic theory of large-amplitude collective motion”, Advances in Radioactive Sciences (ARIS2011), 2011.5.29-6.3, Leuven, Belgium.
- ⑧ M. Matsuo, “Pair correlation and pair collectivity in neutron-rich nuclei”, Nordic conference on Nuclear Physics 2011, 2011.6.13-17, Stockholm, Sweden.
- ⑨ T. Nakatsukasa, “Finite amplitude method for nuclear response function”, Advances in Nuclear Many-Body Theory, 2011.6.7-10, Primosten, Croatia.
- ⑩ T. Nakatsukasa, “Density functional approaches to atomic nuclei”, Nanoscience and quantum physics 2011, 2011.1.26-28, Tokyo, Japan.

- ⑪ T. Nakatsukasa, “Large-scale numerical simulations for nuclear many-body dynamics using the time-dependent density functional theory”, Nuclear structure: recent developments, 2010.10.14-16, Dubna, Russia.
- ⑫ T. Nakatsukasa, “Linear response calculations using the canonical-basis TDHFB with a schematic pairing functional”, International Nuclear Physics Conference, 2010.7.4-9, Vancouver, Canada.

[図書] (計 1 件)

K. Yabana, Y. Kawashita, T. Nakatsukasa, J.-I. Iwata, CRC Press, “Charged particle and photon interactions with matters”, 2011, 1045 pages, この中の第4章(pp. 65-86)を担当。

6. 研究組織

(1) 研究代表者

中務 孝 (NAKATSUKASA TAKASHI)
独立行政法人理化学研究所・中務原子核理論研究室・准主任研究員
研究者番号: 40333786

(2) 研究分担者

矢花 一浩 (YABANA KAZUHIRO)
筑波大学・数理物質科学研究科・教授
研究者番号: 70192789

松尾 正之 (MATSUO MASAYUKI)
新潟大学・自然科学系・教授
研究者番号: 70212214

(3) 連携研究者

稲倉 恒法 (INAKURA TSUNENORI)
千葉大学・理学部・研究員
研究者番号: 20436249

吉田賢市 (YOSHIDA, KENICHI)
新潟大学・自然科学系・助教
研究者番号: 00567547
(H22 に連携研究者として追加)