

## 実施報告書

### 研究課題

Skyrme エネルギー汎関数による原子核構造と応答関数

### 研究組織

1. 中務 孝 (Nakatsukasa, Takashi)  
グループ責任者、筑波大学大学院数理物質科学研究科・講師  
分担：研究計画統括、時間依存密度汎関数理論計算と大規模並列プログラム開発
2. 稲倉 恒法 (Inakura, Tsunenori)  
メンバー、筑波大学大学院数理物質科学研究科・準研究員  
分担：座標空間 RPA 法に基づく線形応答計算とそのプログラム開発
3. 篠原 聡始 (Shinohara, Satoshi)  
メンバー、筑波大学大学院数理物質科学研究科・D5  
分担：Stochastic 配位混合計算とそのプログラム開発

## 実施報告の詳細

本研究課題は、2006年10月よりスタートし、2007年3月まで(半年)の実施状況をここに報告する。

時間依存密度汎関数法 (TDDFT) に基づく原子核の線形応答計算を行った。対称性を仮定しない3次元座標格子空間において Kohn-Sham 軌道波動関数を表現し、虚時間発展法により基底状態を求める。ここから線形応答に対して2種類のアプローチを取り、場合に応じて使い分けることにした。ひとつは、実時間発展による方法であり、弱い摂動を系に与えることで、基底状態からのずれの時間発展を数値計算により追いかける。結果をフーリエ変換することで、強度関数などを求めるものである。Fig. 1 に、中性子ドリップライン核である  $^{14}\text{Be}$  の双極子巨大共鳴状態における密度分布の時間発展の様子を陽子・中性子別々に示している。陽子密度分布が比較的ノーマルに上下に振動しているのに対して、中性子は内部と表面で逆位相の振動を示し、内部がアイソスカラー型、表面がアイソベクトル型の集団運動を示唆している。これと同様の計算で、空間の大きさにも依るが、 $^{208}\text{Pb}$  くらいまでの原子核をシステム A の SR11000・1 ノードで実行できる見込が付いた。座標空間を分割して並列化する方法については、空間の格子点数がそれほど大きくないために通信時間/計算時間が大きく、並列化のメリットが小さいと判断し、現在軌道分割による並列化を検討中である。

線形応答に対するもうひとつのアプローチとして時間にあらわに依存しない形式で計算する手法も開発した。有限振幅法 (FAM) と名付けた方法であるが、汎関数の密度に関する微分を数値的に実行し、複雑な残留相互作用の計算を避ける手法である。これにより、これまで困難であった自己無撞着な RPA(線形化 TDDFT) 計算が基底状態を求める静的 DFT プログラムの簡単な拡張により可能になった。Fig. 2 に、BKN と呼ばれる Skyrme を簡略化した汎関数を用いたテスト計算の結果を示す。残留相互作用をあらわに計算して求める通常の RPA 法と比較し完全な一致を見た。FAM に十分な精度があることを示している。BKN 汎関数は非常に簡単な形であるため残留相互作用の計算は比較的容易であるが、現実的な Skyrme 汎関数においては、複雑な残留相互作用計算が自己無撞着な計算を妨げていることが多い。Fig. 2 の破線に見えるゼロ・エネルギーにおける強いピークは対称性の破れに伴う回転モード(南部・ゴールドストーンモード)である。このようなモードが存在すると、上記の実時間計算の場合に非常に深刻な問題をもたらすが、FAM では特に大きな問題とはならない。この点は時間に依存しない形式の大きな利点と言える。

また、同様に対称性を仮定しない3次元座標格子空間において (Kohn-Sham 起動の) 波動関数を表現し、確率的に様々なスレーター行列式をランダムに生成し、一次独立性を保つように選び出した後で Skyrme のハミルトニアンを対角化するプログラムも開発した。これは最近3年ほどかけて開発してきたプログラムであるが、BKN 相互作用においてその方法論としての有用性を確認し (Shinohara et al, Phys. Rev. C 054315 (2006))、現実的な Skyrme 汎関数に拡張したものである。Fig. 3 に  $^{12}\text{C}$  の原子核の励起スペクトルを示す。汎関数のパラメータとしては核物質のランダウパラメータをフィットすることで作られた SGII を用いた非経験的計算により、実験データを見事に再現することに成功した。原子核構造におけるひとつのベンチマークとなりうる計算結果であると考えている。

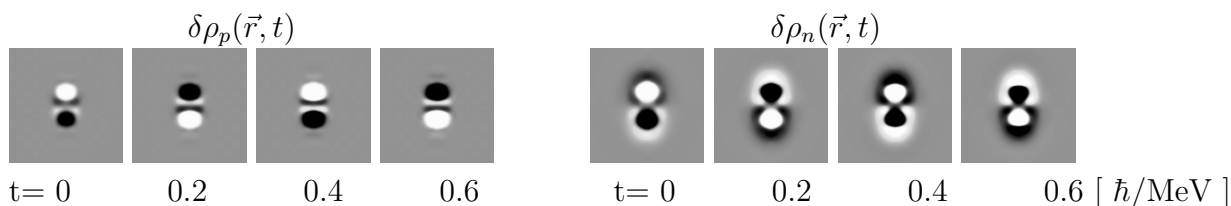


Figure 1:  $^{14}\text{Be}$  の  $E1$  巨大共鳴状態に対する  $x - y$  平面内での密度変化  $\delta\rho_\tau(\vec{r}, t)$  ( $\tau = p, n$ ) のスナップショット。白、黒はそれぞれ  $\delta\rho_\tau > 0$ 、 $\delta\rho_\tau < 0$  を表す。計算には SGII パラメータによる Skyrme エネルギー汎関数を用いている。

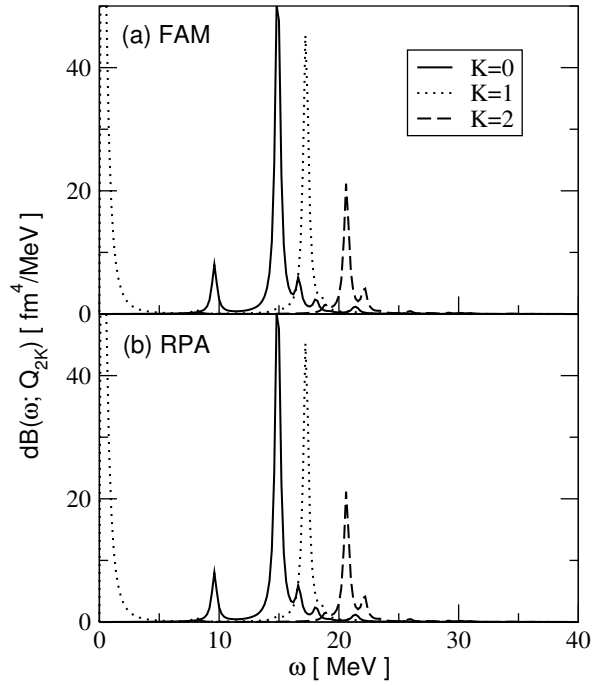


Figure 2: BKN 汎関数を用いて計算された  $^{20}\text{Ne}$  のアイソスカラー型四重極強度分布。(a) 有限振幅法 (FAM) による計算。(b) 通常の RPA による計算。

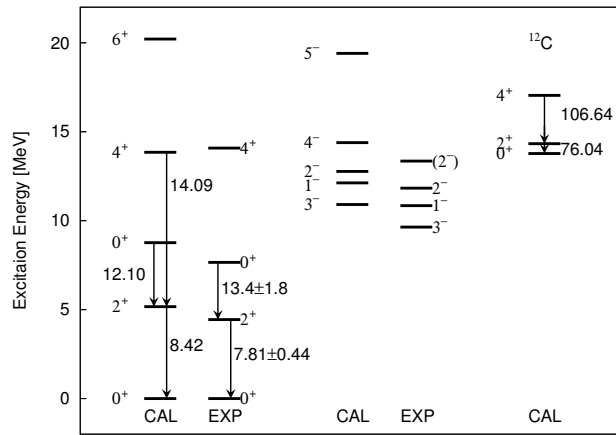


Figure 3: SGII 汎関数を用いて計算された  $^{12}\text{C}$  の励起スペクトルおよび  $E2$  遷移強度 ( $\text{e}^2 \text{fm}^4$ )。

## 成果発表 論文

1. T. Nakatsukasa, T. Inakura, and K. Yabana, Preprint: nucl-th/0703100; submitted to Phys. Rev. C.

## 口頭発表

1. T. Nakatsukasa, “Convergent configuration-mixing calculation for light nuclei with mean-field Hamiltonian”, 2nd German-Japanese Workshop on Nuclear Structure and Astrophysics (RIKEN, Japan, Oct. 4-7, 2006).
2. T. Nakatsukasa, “Variation before and after projection with the Skyrme interaction”, JUSTIPEN meeting on mass formula and gamma deformation of nuclear systems (RIKEN, Japan, Dec. 11, 2006).
3. T. Inakura, “Collectivity of pigmy resonance in spherical Ni isotopes and deformed Fe nucleus” The international workshop Joint JUSTIPEN-LACM Meeting (Oak Ridge, Tennessee, USA, March 5-8, 2007).
4. T. Nakatsukasa, “Complete Spectroscopy with the Skyrme Functional Beyond Mean Field” The international workshop Joint JUSTIPEN-LACM Meeting (Oak Ridge, Tennessee, USA, March 5-8, 2007).
5. T. Nakatsukasa, “Time-dependent approaches for reactions and responses of unstable nuclei”, Theoretical Nuclear Physics School “Exotic Nuclei: New Challenges” (Les Houches, France, May 7-18, 2007).
6. T. Nakatsukasa, “Time-dependent method for structure and reaction”, International Workshop on Many-body open quantum systems: From atomic nuclei to quantum dots (Trento, Italy, May 14-18, 2007).
7. 中務孝、「Skyrme 相互作用を用いた配位混合計算」、基研研究会「原子核クラスター物理の現状と展望」(京都大学基礎物理学研究所、2006年12月18日－23日).
8. 中務孝、「HF 計算プログラムによる RPA 計算」、日本物理学会秋の分科会 (首都大学東京、2007年3月25日－28日).
9. 篠原聡始、「Skyrme 相互作用を用いた配位混合計算による低励起状態の収束解」、日本物理学会秋の分科会 (首都大学東京、2007年3月25日－28日).