

## 実施報告書 (平成 19 年度)

### 研究課題

大型 07-20 (scskyrme)

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  
8月より、理化学研究所仁科加速器研究センター中務原子核理論研究室・准主任研究員
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
3. 橋本 幸男 (Hashimoto, Yukio)  
メンバー、筑波大学大学院数理物質科学研究科・講師
4. 矢花 一浩 (Yabana, Kazuhiro)  
メンバー、筑波大学大学院数理物質科学研究科・教授

### 使用した計算ノード

昨年度、並列による効率化の割合が悪かったため、今年度はSR11000(A)の1ノード計算を主に申請・利用した。

## 実施報告の詳細

本研究課題は2006年10月よりスタートし、2年目にあたる今年度は時間依存密度汎関数法 (TDDFT) に基づく原子核の光吸収断面積の計算を行った。

まず昨年度開発した有限振幅法 (FAM) を用い、Skyrme エネルギー汎関数を用いた実空間表示による計算で、ヘリウムからニッケルに到る  $Z \leq 28$  の核について、陽子ドリップラインから中性子ドリップラインまで系統的な計算を行った。計算法は、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まず基底状態を求める。この上で、線形応答計算の手法として我々が開発した有限振幅法 (FAM) を用い、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、線形応答計算を実行した。現実的な Skyrme 汎関数を用い、これまで困難とされた自己無撞着な TDDFT 線形応答計算を100を超える核種に対して初めて実行した。Fig. 1 に、エネルギー汎関数 SkM\* を用いた光吸収断面積の計算結果の一部として、カルシウムまでの軽い核 (偶々核) に対する結果を示す。計算には、変形の影響が完全に取り入れられており、変形によるピークの分裂や Landau 減衰、さらに近似的ではあるが逃散 (escape) 減衰による効果も取り入れられている。開殻配位の重い原子核で重要になる対相関の効果が充分取り入れられていない点が唯一の弱点であるが、主要なピークとなる巨大共鳴の性質にはあまり大きな影響はないと考えられる。基底状態の変形における対相関の効果が唯一心配な点であるが、比較的軽い原子核においてはいくつかの例外を除いて、現在のレベルの計算で定量的な議論ができると考えられる。現時点においては最も完全な (精密な) 線形応答計算であると言える。

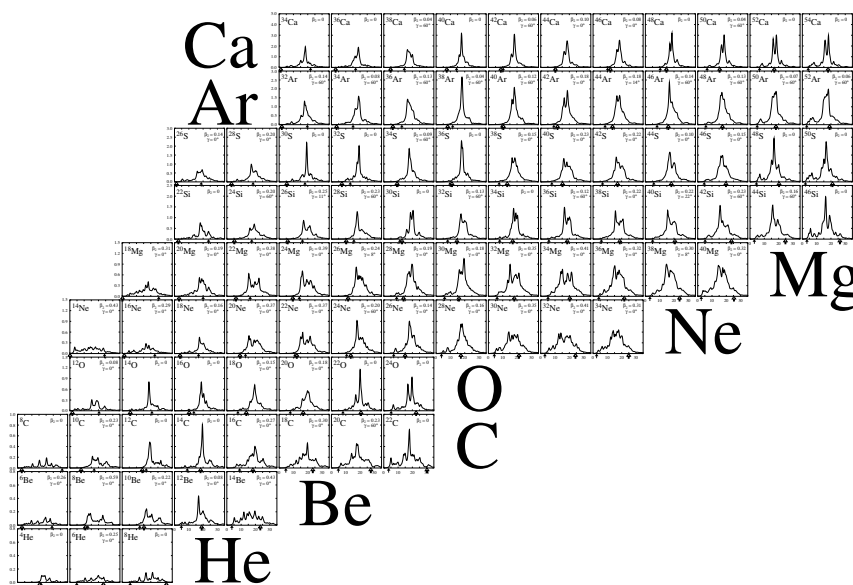


Figure 1: 偶々核における電気双極子強度分布の計算。計算には SkM\* パラメータによる Skyrme エネルギー汎関数を用いている。

このような系統的計算の結果を整理することで、新たにいくつかのことが分かってきた。例えば、計算された  $E1$  の強度関数  $S(E)$  を用いて、巨大共鳴の平均エネルギーを

$$E_{av} = \frac{\int ES(E)dE}{\int S(E)dE},$$

のように定義すると、ベータ崩壊について安定なハイゼンベルグの谷底にある原子核のみを取り出してみると、質量数の関数として良く知られた経験則  $E_{av} \approx aA^{-1/3} + bA^{-1/6}$  ( $a, b$  定数) に従うが、一般に不安定核まで含めると、質量数  $A$  の関数ではフィットできないことが分

かった。中性子・陽子の数 ( $N, Z$ ) の関数として近似的な式が果たして作れるのか、現在考察中である。

また、同様の計算を時間に依存する形式で計算し、吸収境界条件法を用いて粒子崩壊 (escape) による減衰の効果を正確に扱った計算を  $Z \leq 20$  のアイソトープについて行い、安定核の実験データと比較した。その一例を Fig. 2 に示す。この計算では、 $^{24}\text{Mg}$  の基底状態は prolate の軸対称変形、 $^{26}\text{Mg}$  は 3 軸非対称の変形を持っている。このため、原子核の固有系に対する光の偏極方向により吸収断面積のピーク位置が大ききずれ、これを変形 splitting と呼ぶが、Fig. 2 で点線や破線で表したものが、偏極方向による依存性を表しており、全吸収断面積はこれらの和 (平均) となる。軽い核においては、現在の汎関数は実験に比べてピークエネルギーが  $2 \sim 3$  MeV 程低いようである。また、高エネルギー領域 ( $E > 30$  MeV) において、実験に比べて強度が足りないという特徴もあり、これらの実験とのずれは、どうやら核種が重くなるにつれて解消していくようである。例えば鉛の原子核の巨大共鳴については、ピーク位置および幅ともほぼ実験を再現できる。 $E1$  の強度分布は核物質の対称エネルギー (volume symmetry energy) に強く依存すると考えられるが、通常汎関数はこれを再現するように構成されている。軽い核の巨大共鳴のピーク位置は、volume 型の対称エネルギー以外の効果が大きく効いている可能性を示唆していると思われる。時間に依存する形式では、調和振動子基底を用いた計算により、非局所性を扱った Gogny 汎関数による計算も実行した。この計算では、陽子間に働くクーロン相互作用が無視されているが、一方で上では無視されている対相関の効果も Hartree-Fock-Bogoliubov の形式で扱われている。酸素やネオンのアイソトープについて、やはり  $E1$  の強度関数を計算したが、傾向としては、ほぼ Skyrme と類似した結果を得た。また、アイソ・スカラー型の四重極応答についても計算を実行した。

密度汎関数法と対極的な 3 体模型による応答関数の計算も実行し、 $^6\text{He}$  や  $^{11}\text{Li}$  といった中性子ハローと呼ばれる弱束縛系の  $E1$  強度関数を計算した。最近の実験データと比較したところ、 $^6\text{He}$  では良い一致を見たが、 $^{11}\text{Li}$  では強度を過小評価することが分かった。パレンス中性子の波動関数に  $s$  波が強く混ざるようにポテンシャルを変更することで、ピークの強度については改善するものの、 $E > 2$  MeV の高エネルギー領域の強度は、上記の密度汎関数計算と同様に、過小評価することが避けられないようである。 $^4\text{He}$  に対する第一原理的な計算により、通常は繰り込んでしまう高運動量成分を明示的に扱うことで、この高エネルギー領域の過小評価の問題は改善することが知られており、同様の問題が  $^{11}\text{Li}$  のこの計算にも現れていると考えられる。

以上、それぞれの結果について、現在論文を準備中である。次ページの成果発表の論文 2 および 4 に、今年度の成果の一部が公表されている。

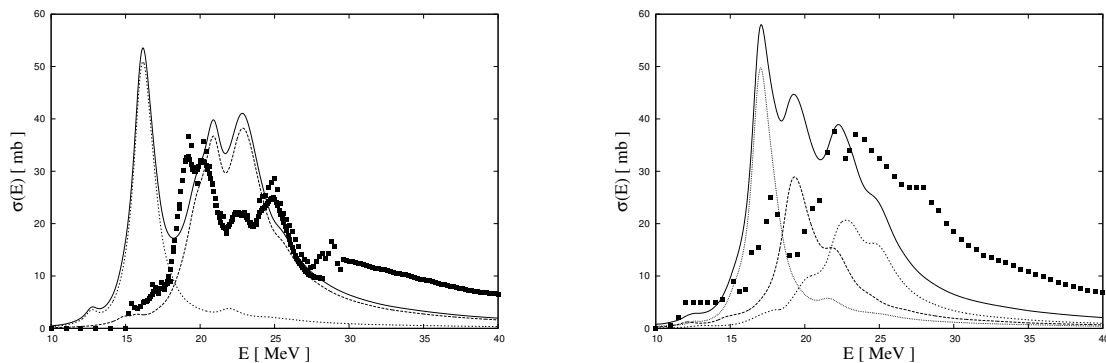


Figure 2: 吸収境界条件法を用いたマグネシウム・アイソトープにおける光吸収断面積計算 (実線) および実験値 (四角)。計算には SGII パラメータによる Skyrme エネルギー汎関数を用いている。左が  $^{24}\text{Mg}$ 、右が  $^{26}\text{Mg}$  に対する結果である。

## 成果発表 論文

1. T. Nakatsukasa, T. Inakura, and K. Yabana, “Finite amplitude method for solution of the random-phase approximation”, *Phys. Rev. C* **76** (2007) 024318 (9 pages).
2. T. Nakatsukasa, K. Yabana, and M. Ito, “Time-dependent approaches for reaction and response in unstable nuclei” *Eur. Phys. J. Special Topics* **156** (2008) 249-256.
3. T. Nakatsukasa, S. Shinohara, K. Yabana, H. Ohta, “Stochastic approach to correlation beyond the mean field with Skyrme interaction”, to be published in Proceedings of the international nuclear physics conference (INPC2007).
4. T. Nakatsukasa, T. Inakura, K. Yabana, “Linear response calculations with the time-dependent Skyrme density functional”, to be published in Proceedings of the international symposium on *Physics of Unstable Nuclei* (ISPUN07).

## 口頭発表

1. T. Nakatsukasa, S. Shinohara, K. Yabana, H. Ohta, “Stochastic approach to correlation beyond the mean field with Skyrme interaction”, Talk at the international nuclear physics conference 2007 (Tokyo, Japan, June 3-8, 2007).
2. T. Nakatsukasa, “Time-dependent method for nuclear dipole response”, Invited Talk at 4-th JUSTIPEN-EFES Workshop on *shell structure of exotic nuclei* (RIKEN, Wako, Japan, June 22, 2007).
3. T. Nakatsukasa, T. Inakura, K. Yabana, “Linear response calculations with the time-dependent Skyrme density functional”, Talk at the international symposium on *Physics of Unstable Nuclei* (ISPUN07) (Hoi An, Vietnam, July 3-7, 2007).
4. T. Nakatsukasa, “Dipole response calculations with the Skyrme density functional”, Invited talk at UNEDF Workshop (Pack Forest, Washington, USA, August 13-17, 2007).
5. T. Nakatsukasa, “Nuclear response function calculated with the time-dependent Skyrme density functional”, Invited talk at 3rd Japanese-German Workshop on *Nuclear structure and astrophysics* (Chiemsee, Germany, September 29-October 2, 2007).
6. K. Yabana, “Time-dependent description for nuclear reaction dynamics in the continuum”, Invited Talk at 20th European Conference on *Few-Body Problems in Physics* (Pisa, September 10-14, 2007).
7. T. Nakatsukasa, “Time-dependent approaches to nuclear many-body problems”, Invited talk at 2008 APCTP-BLNP JINR Joint Workshop on *Quarks and Mesons in Nuclear Physics* (APCTP, Pohang, Korea, April 20-24, 2008).
8. 稲倉恒法、中務孝、矢花一浩、「有限振幅法を用いた Skyrme-RPA 計算」日本物理学会第 62 回年次大会 (北海道大学、2008 年 9 月 21 日 - 24 日).
9. 江幡修一郎、中務孝、稲倉恒法、橋本幸男、矢花一浩、「TDHF+BCS を用いた実時間応答関数の計算」

10. 野出木健一、橋本幸男、中務孝、矢花一浩、「Gogny 相互作用を用いた時間依存 HFB の計算」、
11. 中務孝、「核構造大規模計算と密度汎関数法による数値シミュレーション」、日本物理学会第 63 回年次大会 (シンポジウム「原子核物理学における大規模計算の現在と未来」、近畿大学、2008 年 3 月 22 日 - 26 日)。
12. 稲倉恒法、中務孝、矢花一浩、「Electric dipole mode の系統的計算」、日本物理学会第 63 回年次大会 (近畿大学、2008 年 3 月 22 日 - 26 日)。
13. 江幡修一郎、中務孝、稲倉恒法、橋本幸男、矢花一浩、「TDHF+BCS を用いた実時間応答関数の計算 II」日本物理学会第 63 回年次大会 (近畿大学、2008 年 3 月 22 日 - 26 日)。
14. 野出木健一、橋本幸男、中務孝、矢花一浩、「Gogny 力を用いた時間依存 HFB 計算による軽い変形核の応答」、日本物理学会第 63 回年次大会 (近畿大学、2008 年 3 月 22 日 - 26 日)。