



Title	反対称化分子動力学による核反応計算
Author(s)	小野, 章
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1999, 111, p. 21-21
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/66317
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

反対称化分子動力学による核反応計算

東北大・理 小野 章

ono@nucl.phys.tohoku.ac.jp

入射エネルギーがある程度以上高い原子核反応では、一般に多くの自由度が活性化し多彩な現象が起こる。特に、核子あたりの入射エネルギーが数十から数百 MeV の重イオン反応では、入射核と標的核が完全に壊れ、新しく多数のフラグメントが生じる（多重破砕反応）。重イオン反応の研究の目的は、このような多彩な現象を解明することのほか、核物質の高密度・低密度での性質を引き出すことである。

多様な反応機構を統一的に記述するためには、微視的シミュレーション法が有力であるが、我々は反対称化分子動力学（AMD）を用いた研究を進めてきた。AMD では、核子多体系の状態をガウス波束のスレーター行列式

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A) = \det_{ij} \left[\exp \left(-\nu (\mathbf{r}_i - \mathbf{Z}_j)^2 \right) \right], \quad \nu \text{ は定数}$$

ととる。波動関数は完全に反対称化されているので、核子はフェルミ粒子として正しく取り扱われる。波束中心を表す A 個の複素三次元ベクトル $Z = \{\mathbf{Z}_1, \dots, \mathbf{Z}_A\}$ の時間発展は時間依存変分原理から導かれる常微分方程式によって決まる。ただし、たとえひとつの Φ から出発しても、量子力学的には無数のチャンネルが終状態に出現できることに注意しなければならない。 Φ は個々のチャンネルを表現するものである。多数のチャンネルへの分岐は、その物理的な原因に基づいて Z をランダムに変える確率的な過程として、運動方程式に追加されている。その結果、AMD 計算はモンテカルロ的になり、多数のイベント計算を繰り返すことによって、物理的に出現すべき確率で様々な終状態が現れることになる。

AMD の数値計算で最も困難な点は、運動方程式に現れるハミルトニアン \mathcal{H} の評価である。 \mathcal{H} は二体相互作用を含む量子力学的ハミルトニアン \hat{H} の Φ による期待値であるが、 \mathcal{H} は A^4 個の項の和となる。二体力なのに A^4 になるのは、厳密な反対称化とガウス波束の非直交性による。ガウス波束を採用したことで、物理的に十分な波動関数を簡単に表現でき、しかも大部分の計算は解析的にできるが、その代償として重い系で急速に計算が困難になる。そこで、最近、 \mathcal{H} を A^3 に比例する計算量で近似する方法を開発した。これにより、現在では $^{197}\text{Au} + ^{197}\text{Au}$ のような重い系の計算も可能になっている。

ハミルトニアン \mathcal{H} の計算は、解析的に書き下された多数の項の和を計算するだけであるので、ベクトル化しやすく、従来からベクトル機を有効に活用して計算を行ってきた。また、先に述べたように AMD 計算は多数のイベントをモンテカルロ法により生成する。それぞれのイベントは全く独立であるので、パラレル機を用いる場合は、各プロセッサに別々のイベントを計算させればよく、プロセッサ数に比例して計算が高速化される。また、多数の項をプロセッサに振り分けることによるパラレル化も可能であり、少数のイベントだけを計算したい場合には有効である。

下図は、核子あたりの入射エネルギー 150 MeV の $^{197}\text{Au} + ^{197}\text{Au}$ 中心衝突でのあるイベントの時間発展である。衝突直後に圧縮され、それがほぼ等方的に膨張しながら多数のフラグメントが生成している。このようなイベントを多数計算することによって、フラグメントの質量数やエネルギースペクトルなどが計算できるが、結果は実験データをかなりよく再現している。また、用いる核子間有効相互作用によって計算結果は変わるので、このような重イオン反応を調べることで、核物質の状態方程式などが得られることになる。

