



Title	原子核密度汎関数法を用いたエキゾチック原子核における集団励起モードの系統的記述:回転運動を中心として
Author(s)	吉田, 賢市
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2023, 13, p. 17-19
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/92751
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

原子核密度汎関数法を用いたエキゾチック原子核における

集団励起モードの系統的記述：回転運動を中心として

吉田 賢市

大阪大学 核物理研究センター(RCNP)

1. はじめに

世界各地で建設中あるいは更新中の Rare Isotopes (RI) ビーム加速器が稼働を開始すると、これまで小さな質量数に限られていた不安定核の実験的研究は質量数の大きな不安定核へと拡大する。特に理研 RI Beam Factory (RIBF) のアップグレードにより質量数 100 以上の中重不安定核に対する実験データが飛躍的に増大する。理論的には、これら広い質量数領域にある 1000–2000 種類の原子核の構造・励起モードを系統的に記述すること、実験を説明するためにモデルの改良を行い原子核に対するより深い理解を得ること、さらに超重核を含む未知の原子核の性質を高信頼度で予言することが求められる。信頼性を高めるためには、核子の自由度を元にした量子多体計算が必要である。数 100 体系のシュレーディンガー方程式を厳密に解くことは未だ不可能であるが、電子系で開発された密度汎関数理論を応用・発展させることで原子核の様々な性質が記述できるようになってきた。

著者らは時間依存原子核密度汎関数法に基づいて集団的な励起モードを記述するための計算手法を開発してきた。中重不安定核の振動モードを記述するためには、弱束縛中性子の空間的広がり・非束縛状態も含めた核子超流動性・核変形の 3 要素を考慮に入れた線型応答計算が必要である。世界に先駆けてそのような計算を遂行し[1]、中性子ドリップ線近傍核に現れる新しい励起モードを予言した[2]。また、大規模並列計算により重い原子核にも適用できることを示した[3]。「京」コンピュータや京大基研・筑波大計算科学センターのスパコンを用いて系統的

計算を遂行することで、阪大 RCNP や理研 RIBF などの実験データの解釈を行ない、原子核の深い理解に大きく貢献してきた[4,5,6,7]。

これまでは世界的にも振動型の励起モードが盛んに研究されており、重い不安定核の回転励起モードはほぼ手付かずであった。その理由は、回転運動を記述するためには、空間 3 次元の計算が必要であり、計算コストが高いためである。そこで本研究課題では、空間並列化した基礎方程式を解くことで、世界に先駆けて超重核を含む重い不安定核の回転運動を記述する。

2. 集団回転運動の記述

ここでは、まず密度汎関数理論に基づいて原子核の集団的な回転運動を記述する手法を概説する。

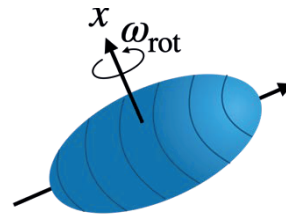


図 1：変形した原子核の集団的な回転運動

超流動状態になることも考慮に入れて、粒子密度とペア密度の汎関数で書かれたエネルギー密度汎関数 $E[\rho, \tilde{\rho}, \tilde{\rho}^*]$ が与えられたとき、それぞれの密度を変分して得られる Kohn–Sham–Bogoliubov–de Gennes (KSBDG) 方程式を解くことで、基底状態を記述する。また、角振動数 ω_{rot} で一様回転する座標系に乗ると、集団的に回転した原子核は止まっているように見える。そこで、有限の核スピン (J_x) を持つ拘束条件付きの

KSBdG 方程式を解くことで回転運動を記述する。これは、クランキングの処方として広く用いられてきた回転平均場モデルの密度汎関数法への拡張である。

3. 三次元大規模並列計算

3.1 空間並列対角化

中性子ドリップ線に近い原子核では、弱く束縛された中性子の波動関数は空間的に広がりやすい。さらに、非束縛状態にある中性子も含めた対相関を考慮する必要がある。したがって、従来の調和振動子基底では、不安定核に特有な現象を記述できない可能性がある。そこで、著者は3次元格子上で一粒子（あるいは一準粒子）軌道を表現する座標表示で KSBdG 方程式を解くコードを開発した[8]。座標表示では、KSBdG 方程式を解くことは対称行列の対角化問題に落とし込むことができる。そこで、ScaLAPACK の DSYEVX サブルーチンを使って対角化する。

回転の慣性モーメントは核子の超流動性に敏感であることが知られている。そこで、中性子過剰核も含めて大局的に原子核の対相関を記述できるように開発された YSN 型の pairing エネルギー汎関数[9]を用いる。また、particle-hole チャネルには、原子核変形の記述能力の高い SkM* 汎関数[10]を用いる。

3.2 慣性モーメント

不安定核も含めて、偶々核（中性子数、陽子数ともに偶数の原子核）の 2^+ 状態のエネルギーが精力的に測定されている。核スピン I をもった状態の回転エネルギーは $I(I+1)/2J$ であるから、 2^+ 状態が回転励起によるものであるとすると、慣性モーメントは $J = 3/E(2^+)$ と見積もることができる。またクランキング近似の元では、慣性モーメントは $\lim_{\omega_{\text{rot}} \rightarrow 0} \langle J_x \rangle / \omega_{\text{rot}}$ のように評価できる。

これまで実験的には 657 個の偶々核の 2^+ 状態のエネルギーが測定されている。原子番号が小さい原子核では集団的なモードが現れにくいので、今回の解析では $Z < 10$ の軽い原子核 22 個を除く。

また、球形の原子核では回転運動は起こり得ない。そこで計算された慣性モーメントが 0.1 MeV^{-1} より小さい 273 個の原子核も除くことにする。図2には残り 362 個の原子核に対して、計算値と実験値の比を取ったものを分布として示す。多くの原子核に対して、励起 2^+ 状態は一樣回転する集団的回転バンドのメンバーであることがわかる。

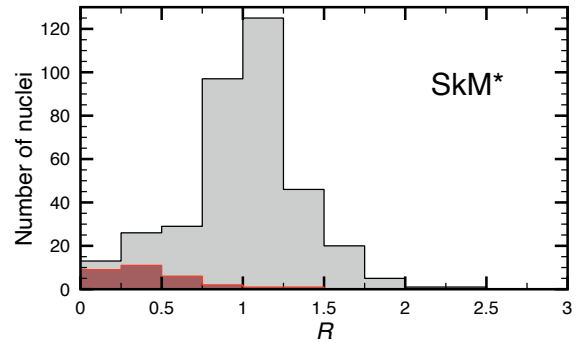


図2：エネルギー汎関数 SkM*+YSN を用いて得られた慣性モーメントと実験値(362 個)との比

$$R = J_{\text{th}}/J_{\text{exp}} \text{ の分布}$$

さらに、変形の度合いが小さいとき（長軸が短軸よりも 10% 以下程度長い場合で図2中では赤色の部分）では、計算は実験をあまり良く再現しないことがわかった。これは、変形の度合いが強くなるほど回転の描像がよく成り立つことを示している。また実験的にも知られている、変形度とサイズ（質量数）が大きいほど、慣性モーメントも大きくなることが計算で確かめられた。

4. 系統的な計算により予言される不安定核での特異な性質

3章で述べたように、原子核密度汎関数法の枠組みでのクランキング近似は、ある程度変形の発達した中重原子核に対しては実験データをよく再現することがわかった。そこで、この手法を未知の不安定核に適用し、安定核では見えない新しい性質が現れるかどうかをシミュレーションする。

そこで、陽子ドリップ線から中性子ドリップ線にわたる原子番号 120、中性子数 184 までのおよそ 1700 個の偶々核に対して計算を遂行した。

図 3 に実験値とともにその結果を示す。この図からも、魔法数を持つ原子核およびその周辺では変形が弱いため実験値を過小評価していることが読み取れる。このような変形の弱い原子核では振動的な励起モードが低励起状態として現れるため、クランキングの描像が成り立たない。一方、中性子数 100 程度のランタノイドなど魔法数から離れた開殻の原子核では、計算値は実験値をよく再現していることもみてとれる。

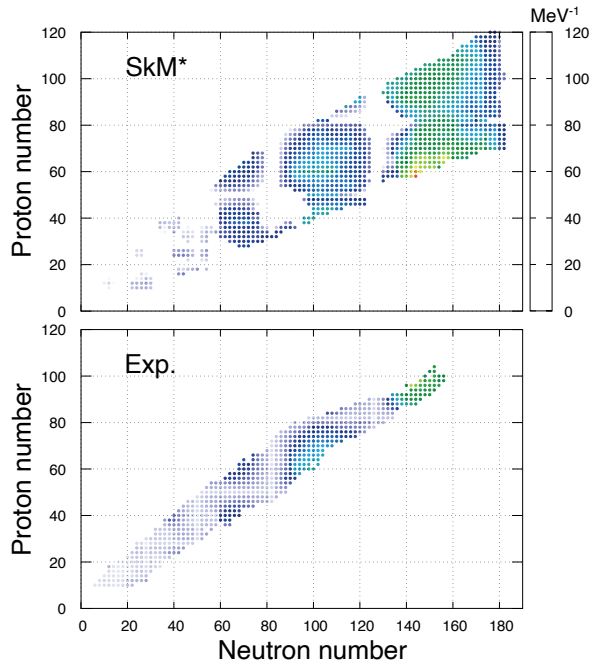


図 3 : 慣性モーメントの計算値と実験値

この計算結果から見られる特徴は、中性子ドリップ線に近いランタノイド原子核の慣性モーメントはアクチノイド原子核のそれと同程度に大きいことである。変形の大きさはどちらも同程度であるが、系のサイズはランタノイドの方がずっと小さい。したがって、中性子過剰なランタノイド核がアクチノイド核と同程度の慣性モーメントを持つことはこれまでの常識、すなわち 3 章で確かめられた安定核に対する回転モードの性質に反する。分析から分かったことは、これら中性子過剰核では対相関が弱くなっていることである。超流動体は回転に寄与すること

ができないため、その成分が高いほど慣性モーメントは古典的な値に比べて減少する。Pairing エネルギー汎関数に含まれるアイソベクトル密度依存性: $\rho_1 = \rho_n - \rho_p$ および変形の殻構造が相乗的に効いて、ドリップ線近傍のランタノイド核では対相関が弱まっていることが分かった。

対照として、アイソベクトル密度依存性を含まない単純な pairing エネルギー汎関数を用いた場合には、中性子ドリップ線近傍では対相関が強いままで、慣性モーメントは大きくならないという結果が得られた。

5. おわりに

一様回転する原子核という描像のもとで密度汎関数法を拡張し、集団的な回転運動が記述できる枠組みを構築した。魔法数近傍の球形および弱く変形した原子核を除いては、慣性モーメントの実験値をよく再現することが示された。また、中性子過剰核や超重核を含む系統的な計算を行ったところ、対相関のアイソスピン依存性や殻構造の効果で、慣性モーメントに特異な振る舞いが現れることが予言された。なお、本課題の詳細は文献[11]で公表されている。

参考文献

- (1) K. Yoshida and N. V. Giai, Phys. Rev. C **78**, 064316 (2008).
- (2) K. Yoshida, Phys. Rev. C **80**, 044324 (2009).
- (3) K. Yoshida and T. Nakatsukasa, Phys. Rev. C **83**, 021304R (2011).
- (4) Y. K. Gupta, et al., Phys. Lett. B **748**, 343 (2015).
- (5) H. Watanabe, et al., Phys. Lett. B **760**, 641 (2016).
- (6) H. Fujita, et al., Phys. Rev. C **100**, 034618 (2019).
- (7) A. Yagi, et al., Phys. Rev. C **105**, 044325 (2022).
- (8) K. Yoshida, Phys. Rev. C **105**, 024313 (2022).
- (9) M. Yamagami, et al., Phys. Rev. C **80**, 064301 (2009).
- (10) J. Bartel, et al., Nucl. Phys. A **386**, 79 (1982).
- (11) K. Yoshida, Phys. Lett. B **834**, 137458 (2022).