

中重質量領域における光核反応断面積のTDDFT線形応答計算

中務孝(理研、筑波大CCS)

稲倉恒法、橋本幸男、矢花一浩(筑波大CCS)

江幡修一郎(筑波大・数理物質科学研究科D2)

筑波大学計算科学研究センター・シンポジウム
「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」

光核反応断面積の重要性

- 最も基本的な反応断面積
- 広いエネルギー領域に渡って測定された原子核は安定核でもわずか
- 不安定核では皆無
- 応用的側面
 - クリーンな核変換
 - 元素合成ネットワーク計算

TDDFTに基づく線形応答

One-body density operator under a TD external potential

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho(t)=[h_K[\rho(t)]+V_{\text{ext}}(t),\rho(t)]$$

Assuming that the external potential is weak,

$$\rho(t)=\rho_0+\delta\rho(t) \quad h(t)=h_0+\delta h(t)=h_0+\frac{\delta}{\rho_0}h\cdot\delta\rho(t)$$

$$i\frac{\partial}{\partial t}\delta\rho(t)=[h_0,\delta\rho(t)]+[\delta h(t)+V_{\text{ext}}(t),\rho_0]$$

Transform this into the one with a fixed frequency ω ,

$$\omega\delta\rho(\omega)=[h_0,\delta\rho(\omega)]+[\delta h(\omega)+V_{\text{ext}}(\omega),\rho_0]$$

with the transition density expressed by forward and backward amplitudes:

$$\delta\rho(\omega)=\sum_{i=1}^A(|X_i(\omega)\rangle\langle\phi_i|+|\phi_i\rangle\langle Y_i(\omega)|)$$

Finite Amplitude Method

T.N., Inakura, Yabana, PRC76 (2007) 024318.

TDDFTの線形応答計算に現れる残留場(動力的スクリーニング効果)の計算が複雑。これを以下のように数値的に求める。

$$\delta h(\omega) = \frac{1}{\eta} (h[\langle \phi' |, | \phi \rangle] - h_0), \quad h_0 = h[\langle \phi^{(0)} |, | \phi^{(0)} \rangle]$$

$$| \phi_i \rangle = | \phi_i \rangle + \eta | X_i(\omega) \rangle, \quad \langle \phi_i | = \langle \phi_i | + \eta \langle Y_i(\omega) |$$

初期振幅 X^0 and Y^0 からスタートし、反復法を用いて以下の線型応答方程式の解となる振幅を求める。

$$\omega | X_i(\omega) \rangle = (h_0 - \varepsilon_i) | X_i(\omega) \rangle + \hat{Q} [\delta h(\omega) + V_{\text{ext}}(\omega)] | \phi_i \rangle$$

$$\omega \langle Y_i(\omega) | = -\langle Y_i(\omega) | (h_0 - \varepsilon_i) - \langle \phi_i | [\delta h(\omega) + V_{\text{ext}}(\omega)] \hat{Q}$$

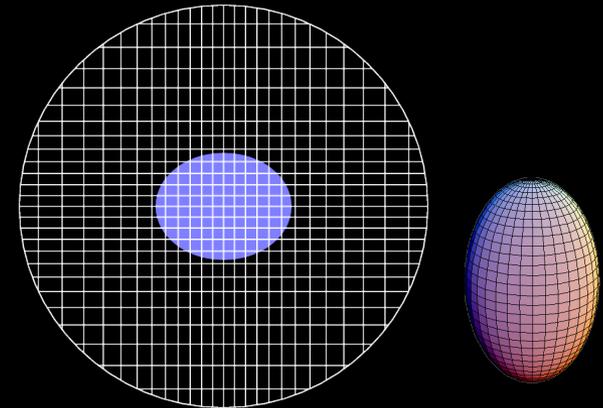
異なるブラとケットの汎関数としてコーン・シャムの一粒子ポテンシャルを計算することで、線形応答計算が可能。プログラム作成が非常に容易。

RPA calculation in 3D mesh

T. Nakatsukasa, T. Inakura and K. Yabana, PRC76, 024318

T. Inakura, T. Nakatsukasa and K. Yabana, PRC80, 044301

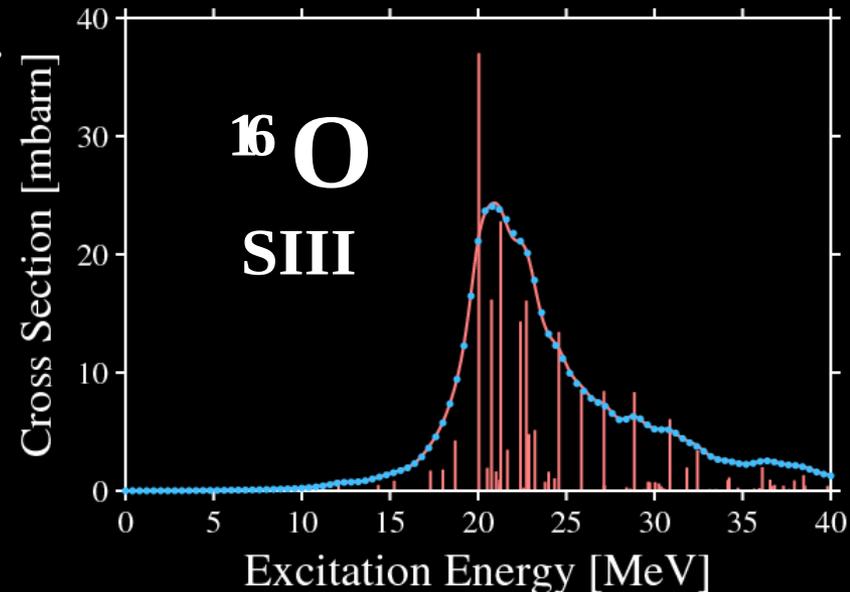
- **Fully self-consistent Skyrme-RPA**
- **3D mesh representation**
 - suitable for describing unstable nuclei.
 - deal with deformed nuclei.
 - treat particles escaping from nuclei.



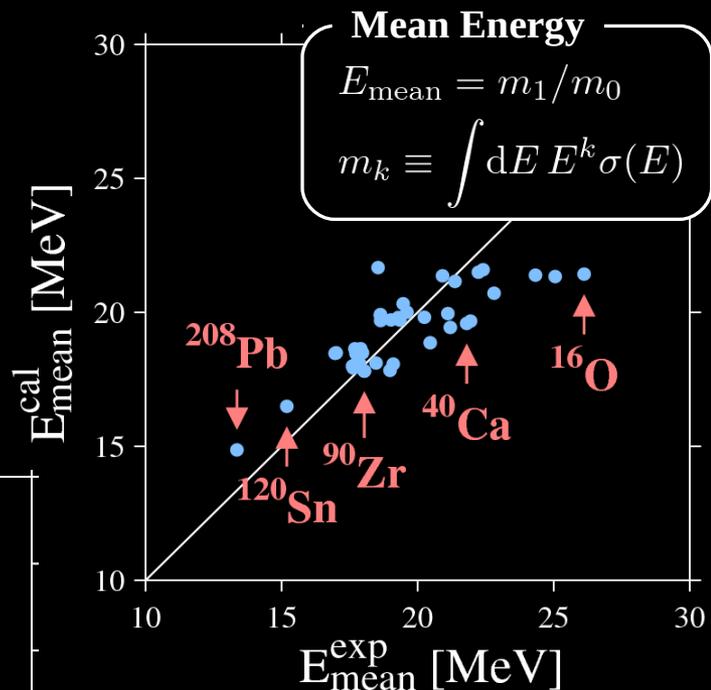
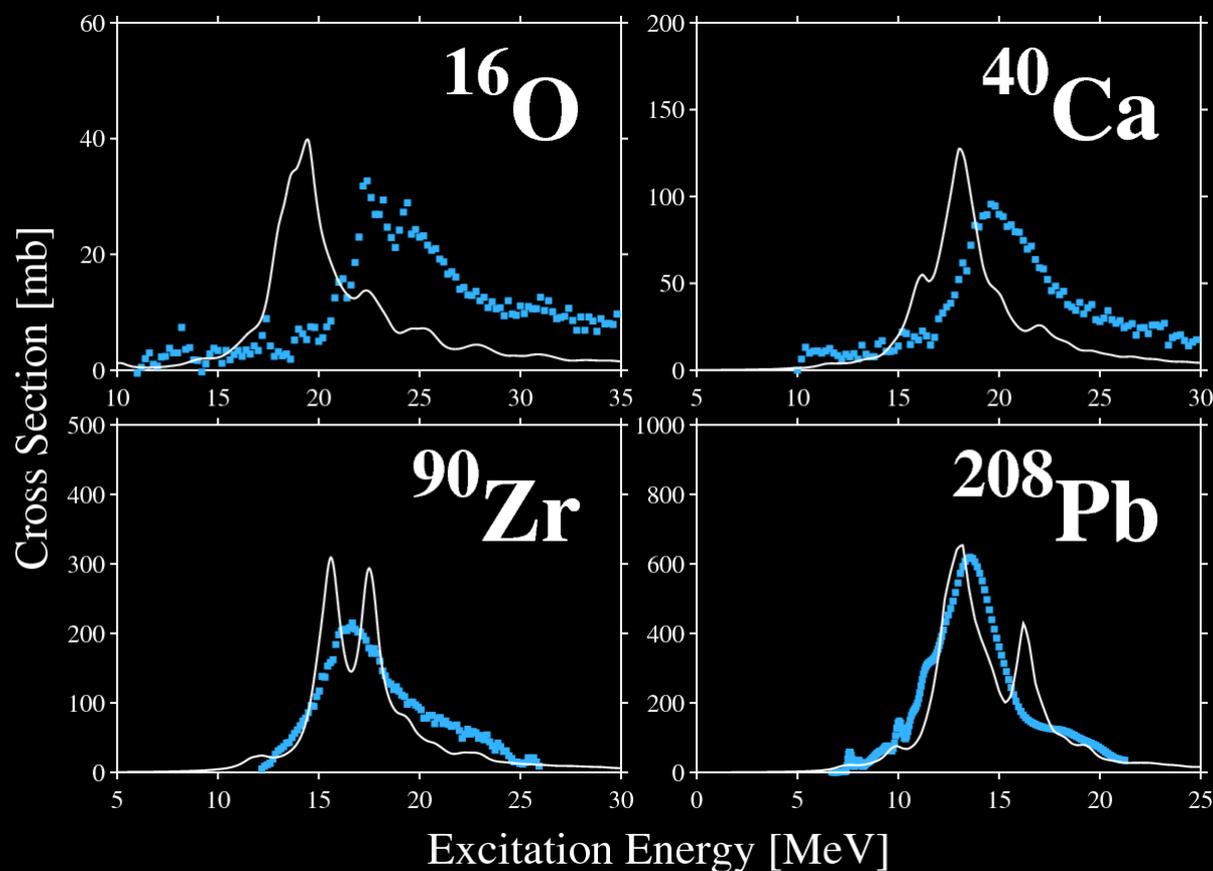
Technically...

- **Finite Amplitude Method**
numerical estimating the residual interaction.
- **Response calculation**
response functions at fixed energies.
suitable for the paralleled supercomputer.

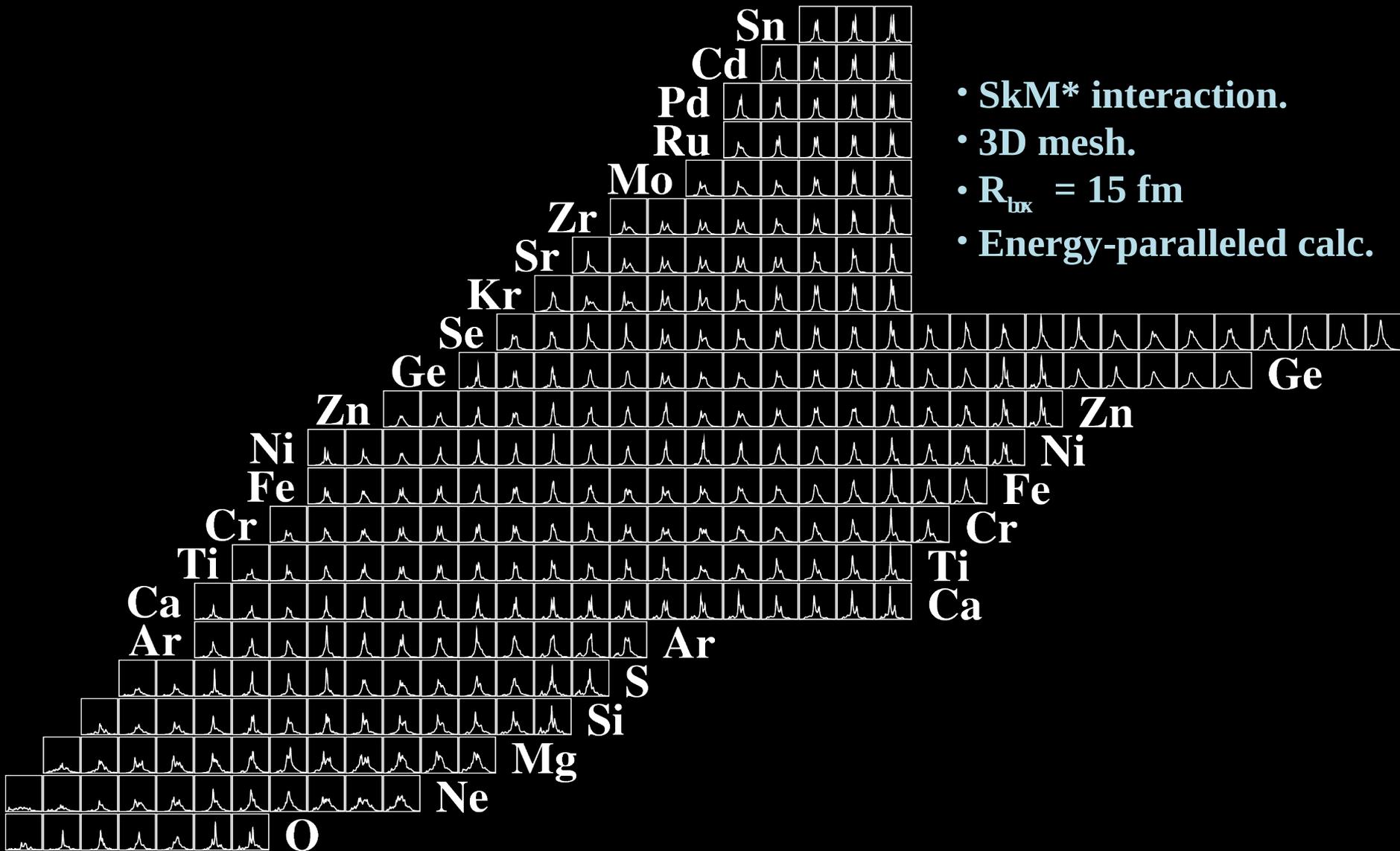
Method	CPU	Time
Diagonalization	1 CPU	3 months
Response calc.	128CPU	4 hours



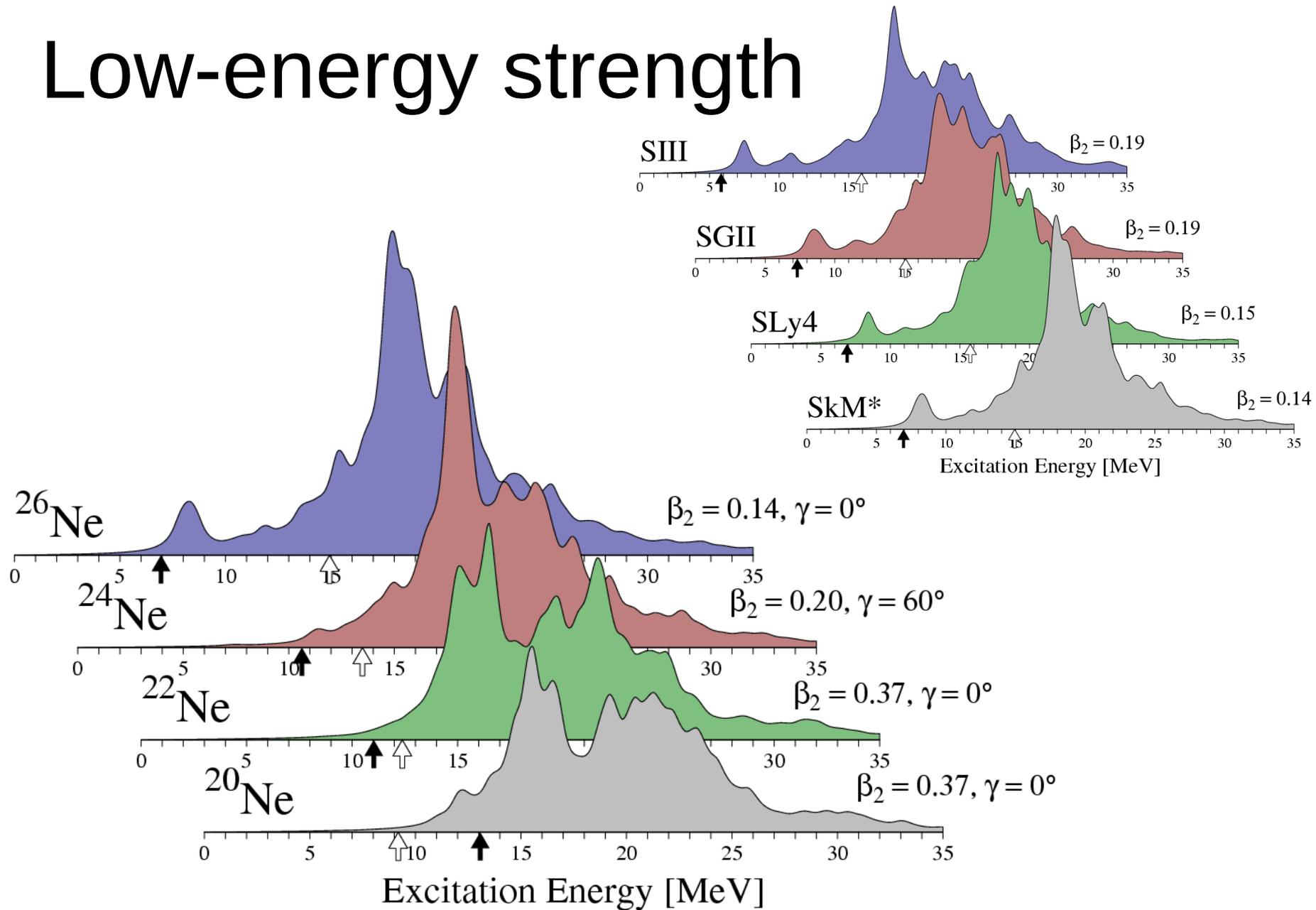
Calculation vs. Experiment



Systematic calculation of E1 mode up to mass $A=100$ region

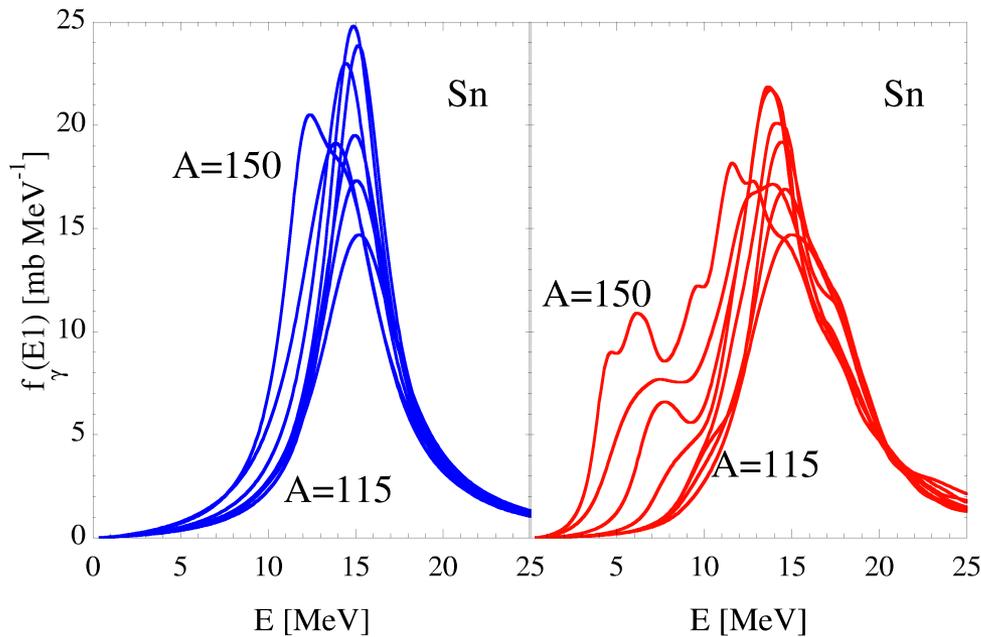


Low-energy strength



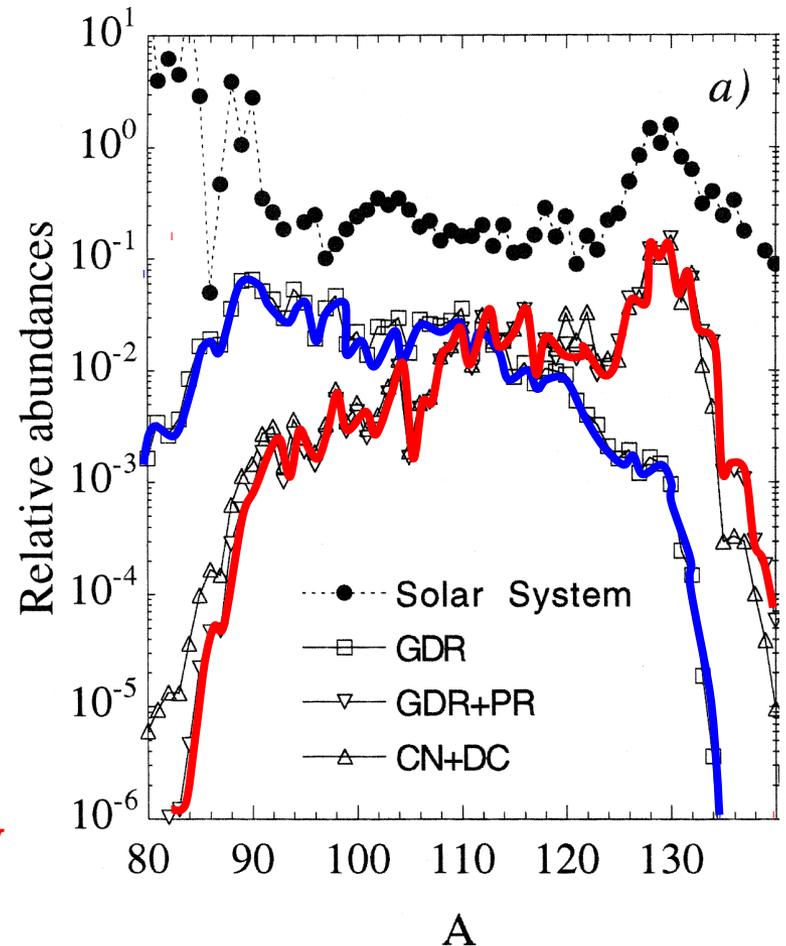
ピグミー共鳴:r過程に強い影響

S. Goriely, Phys. Lett. **B436**, 10.

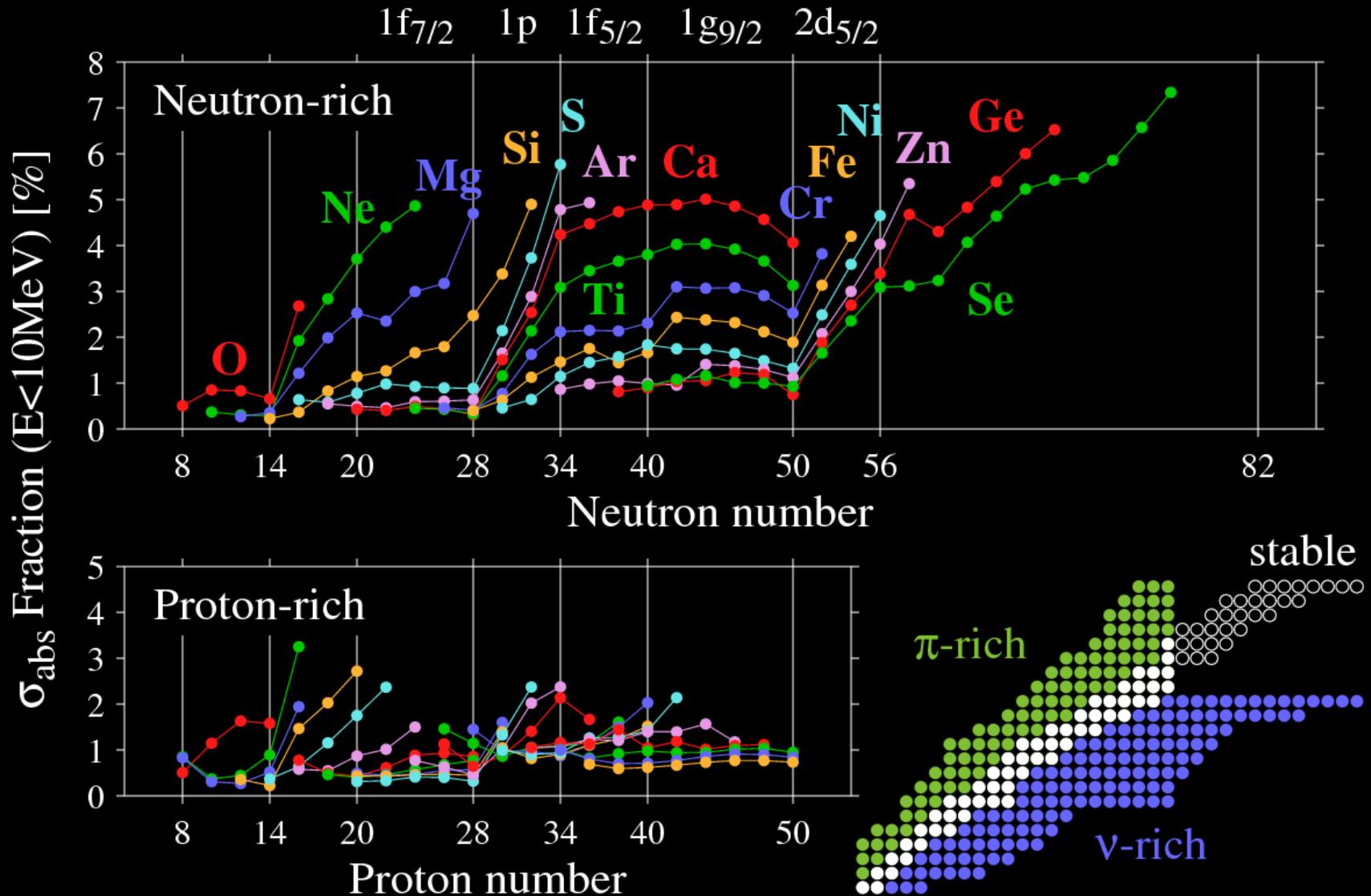


GDR
(phenom.)

GDR + pygmy
(microscopic)



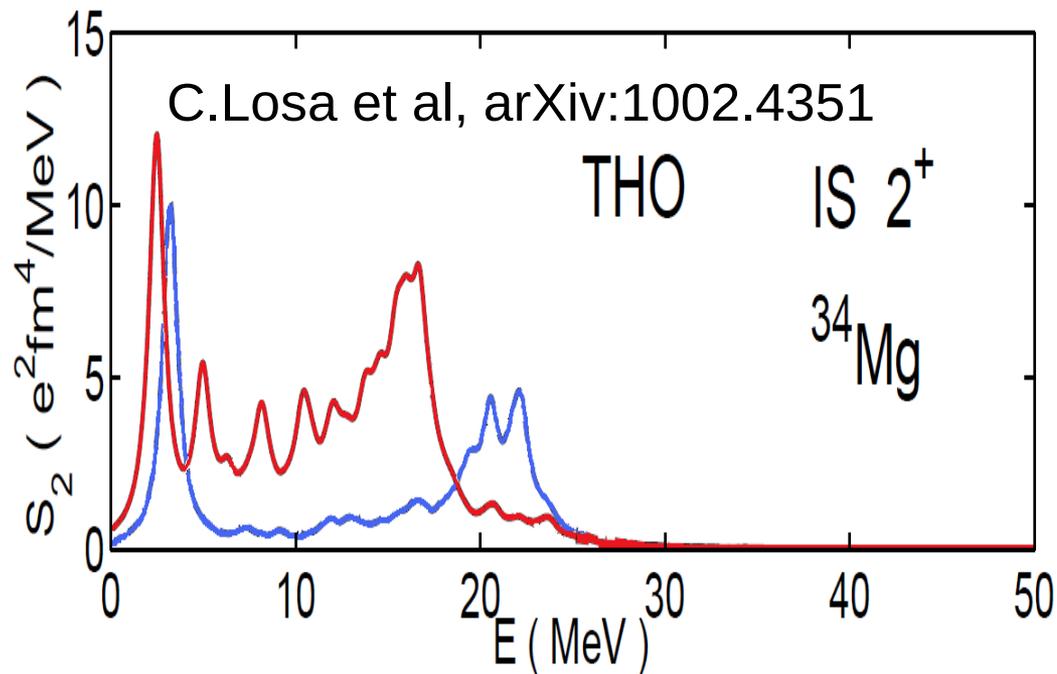
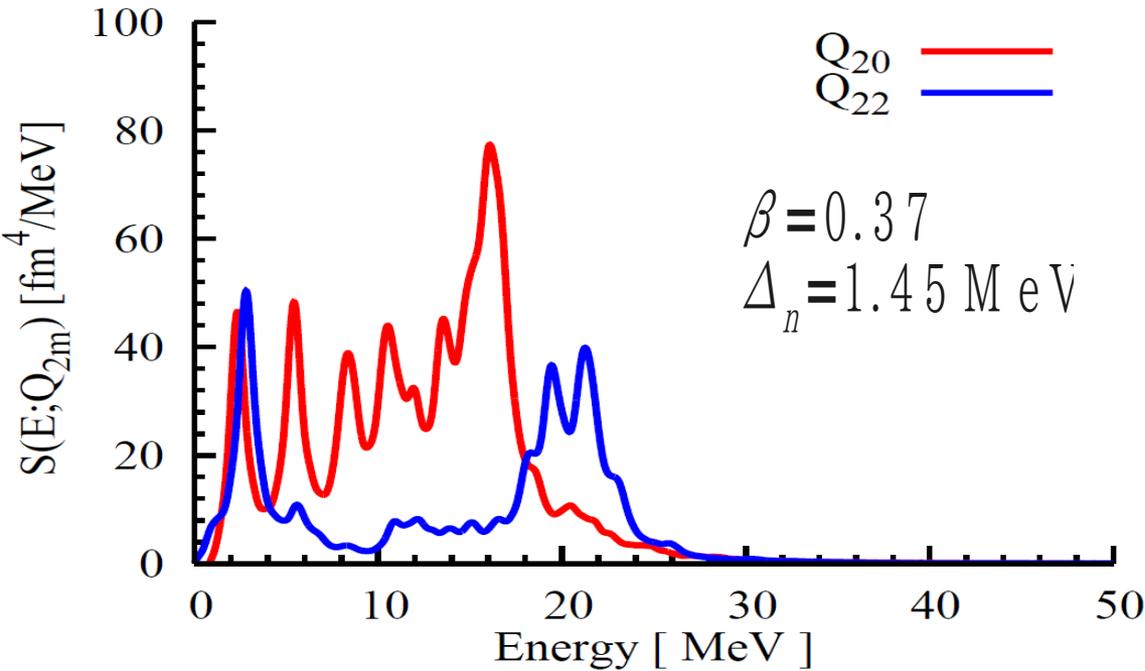
Low-lying dipole strengths (pygmy dipole resonance)



Summary

- 有限振幅法に基づく光核反応のTDDFT計算
 - 質量数100領域までの偶々核の光吸収断面積をはじめて系統的に計算
 - 通常 of 行列形式では大変なプログラミング作業が必要
 - 有限振幅法では、プログラミング作業が非常に小さい
 - 光子エネルギーを固定することで、単純な並列化が可能
 - 重い核ではほぼ実験データを再現
 - ピークエネルギーに殻効果
 - 元素合成過程(n, γ)に大きな影響を与える低エネルギーの双極子強度分布にも特徴的な殻効果
- さらに大きな質量数領域に向けて
 - 超流動原子核を扱える準粒子形式に拡張

超流動核の 応答



- BCS型に拡張されたTDDFT計算
- 調和振動子基底を用いた計算と一致