Project: NUCLDFT

原子核ダイナミクスの微視的シミュレーション

関澤 一之

(筑波大学 数理物質科学研究科)

共同研究者

矢花 一浩

筑波大学 計算科学研究センター
筑波大学 数理物質科学研究科

発表内容

発表内容

今日、ここで伝えたいこと

発表内容

今日、ここで伝えたいこと

１．導入：　我々が、何に興味をもち、何を目指して研究を進めているか

２．手法：　どんな計算をしたか

３．結果：　計算資源の利用により、どんな成果が得られたか

発表内容

今日、ここで伝えたいこと

1. 導入： 我々が、何に興味をもち、何を目指して研究を進めているか

2. 手法： どんな計算をしたか

3. 結果： 計算資源の利用により、どんな成果が得られたか

研究の分野と対象: 原子核物理学・原子核

研究の分野と対象：原子核物理学・原子核

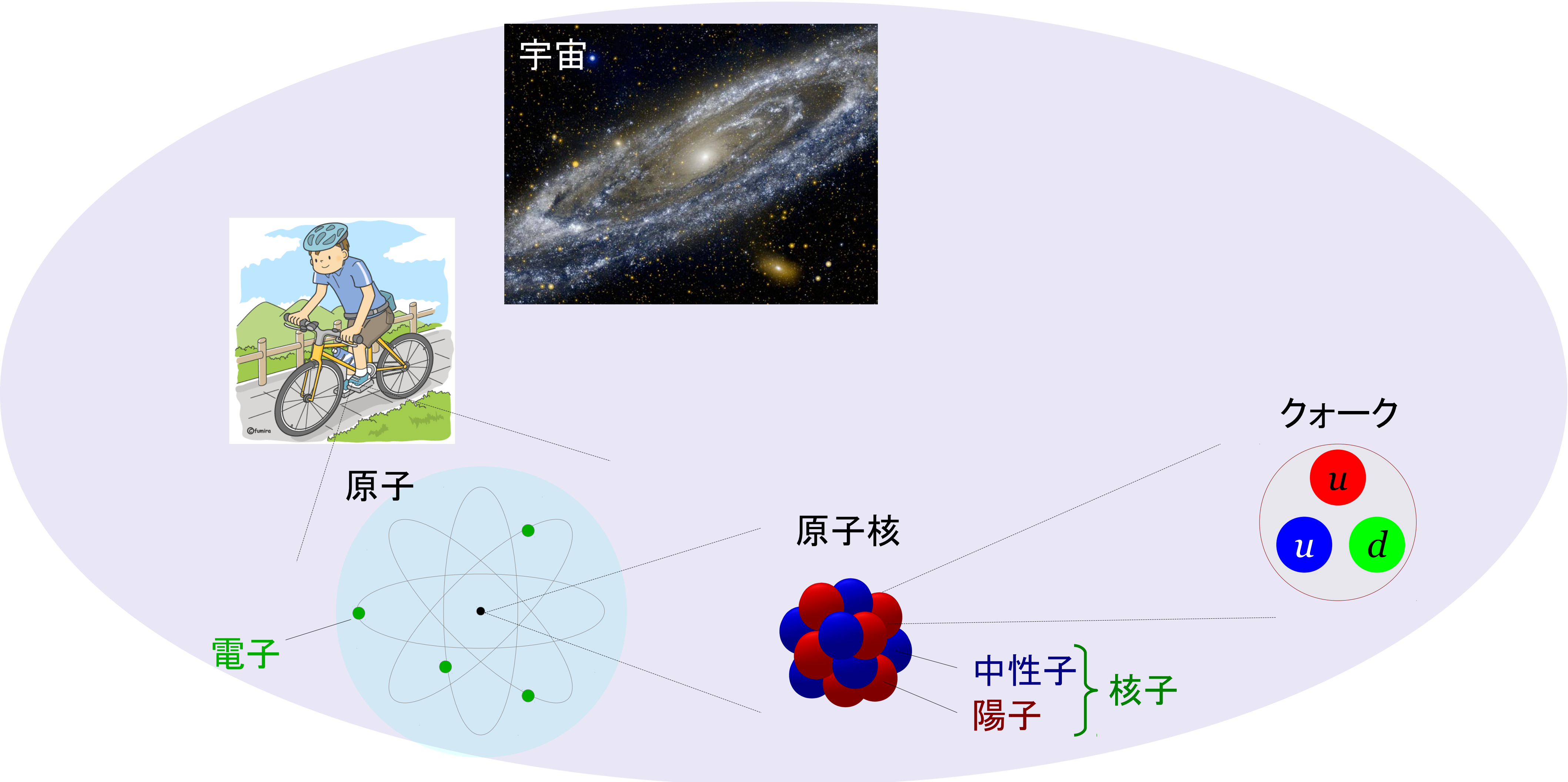
✔**研究分野:** 物理学

<u>数学を用いて自然を理解する</u>

研究の分野と対象： 原子核物理学・原子核

✔**研究分野：** 物理学

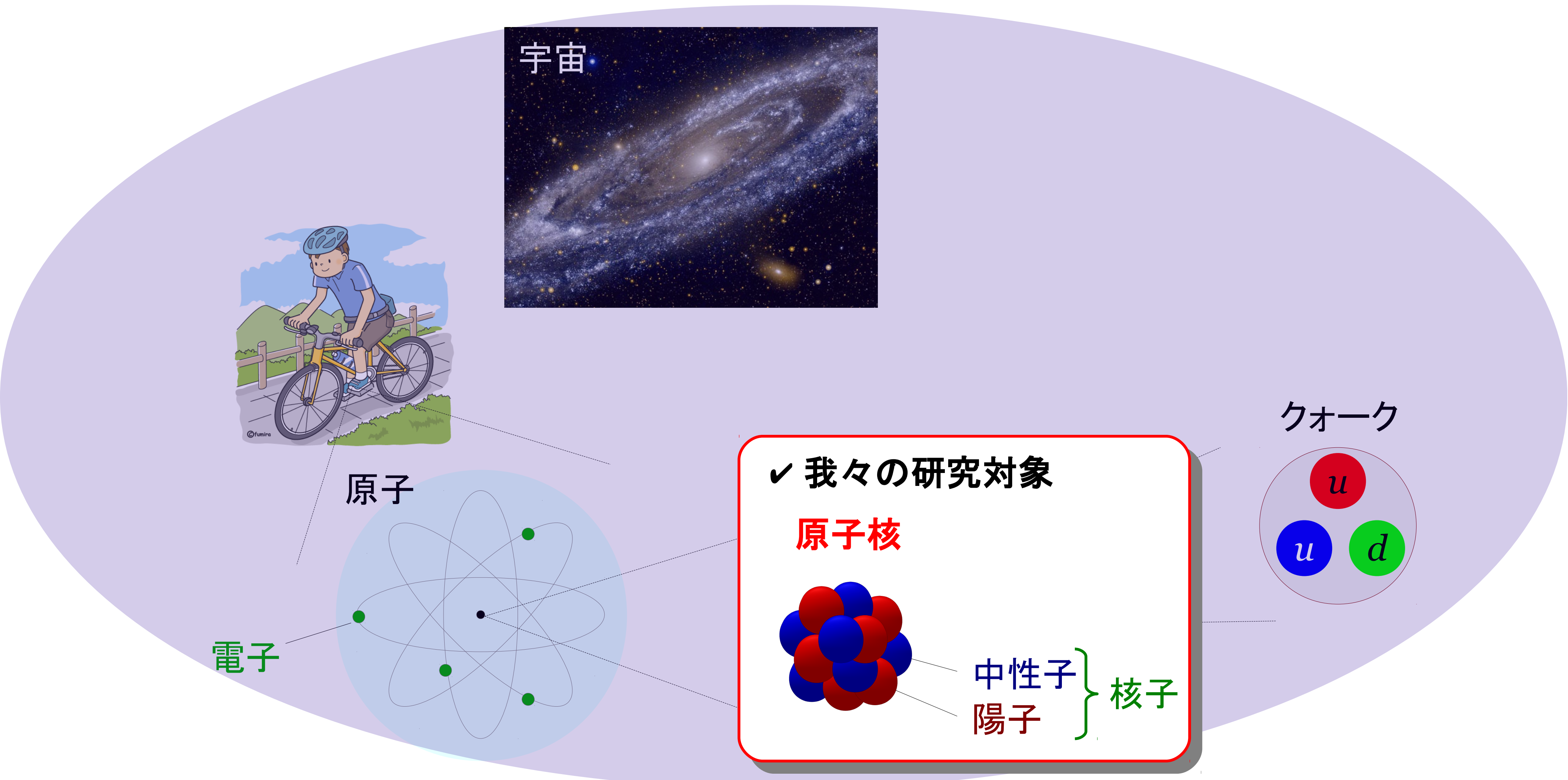
<u>数学を用いて自然を理解する</u>



研究の分野と対象： 原子核物理学・原子核

✔**研究分野：原子核物理学**

数学を用いて自然を理解する

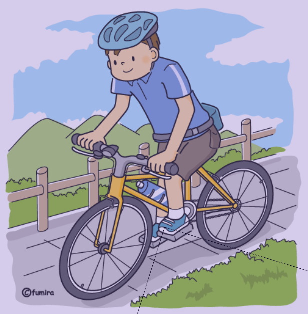


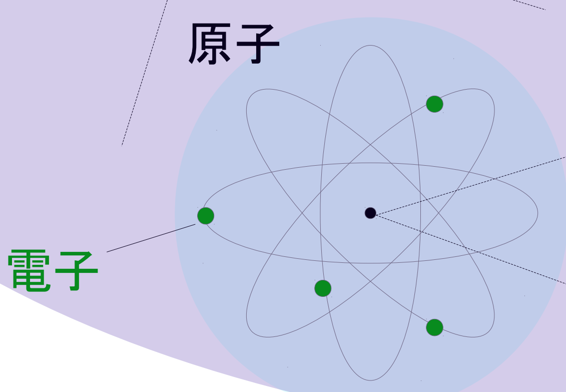
✔研究分野：原子核物理学

数学を用いて自然を理解する

※ 原子核の大きさ

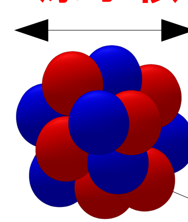
$$\sim 10^{-14}\ \mathrm{m} = \frac{1\ \mathrm{m}}{100{,}000{,}000{,}000{,}000}$$





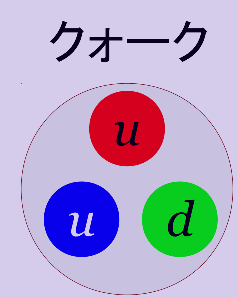
✔ 我々の研究対象

原子核



$\sim 10^{-14}$ m

中性子
陽子
核子



調べているもの： 低エネルギー原子核衝突

調べているもの：　低エネルギー原子核衝突

“高エネルギー”ではない！

調べているもの： 低エネルギー原子核衝突

"高エネルギー"ではない！

RHIC
Relativistic Heavy Ion Collider

動画：Brookhaven National Laboratory Website (http://www.bnl.gov/rhic/) より，一部抜粋

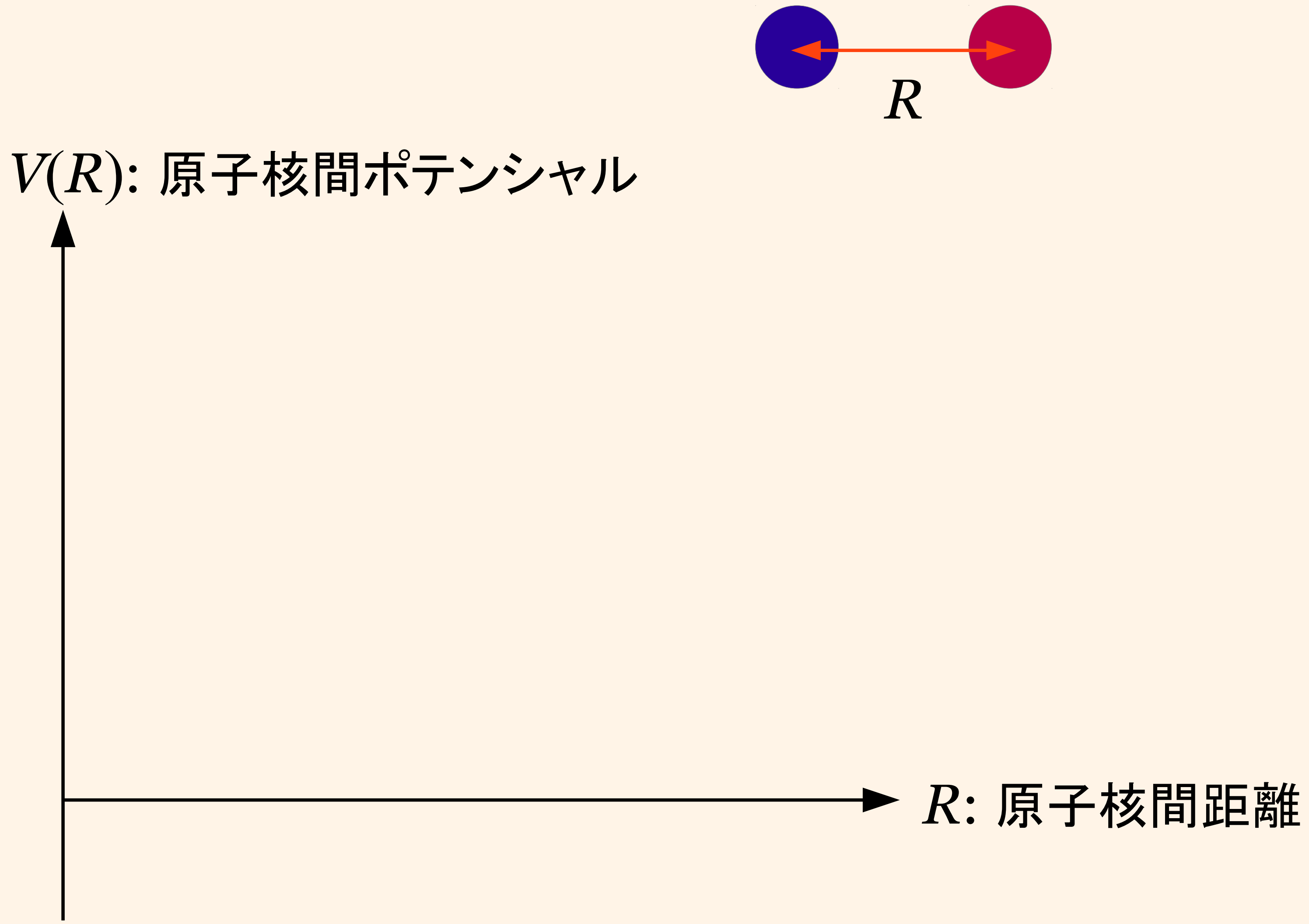
調べているもの: “低エネルギー”原子核衝突

調べているもの: “低エネルギー”原子核衝突

✔ クーロン障壁近傍のエネルギーで “そろりと” ぶつける

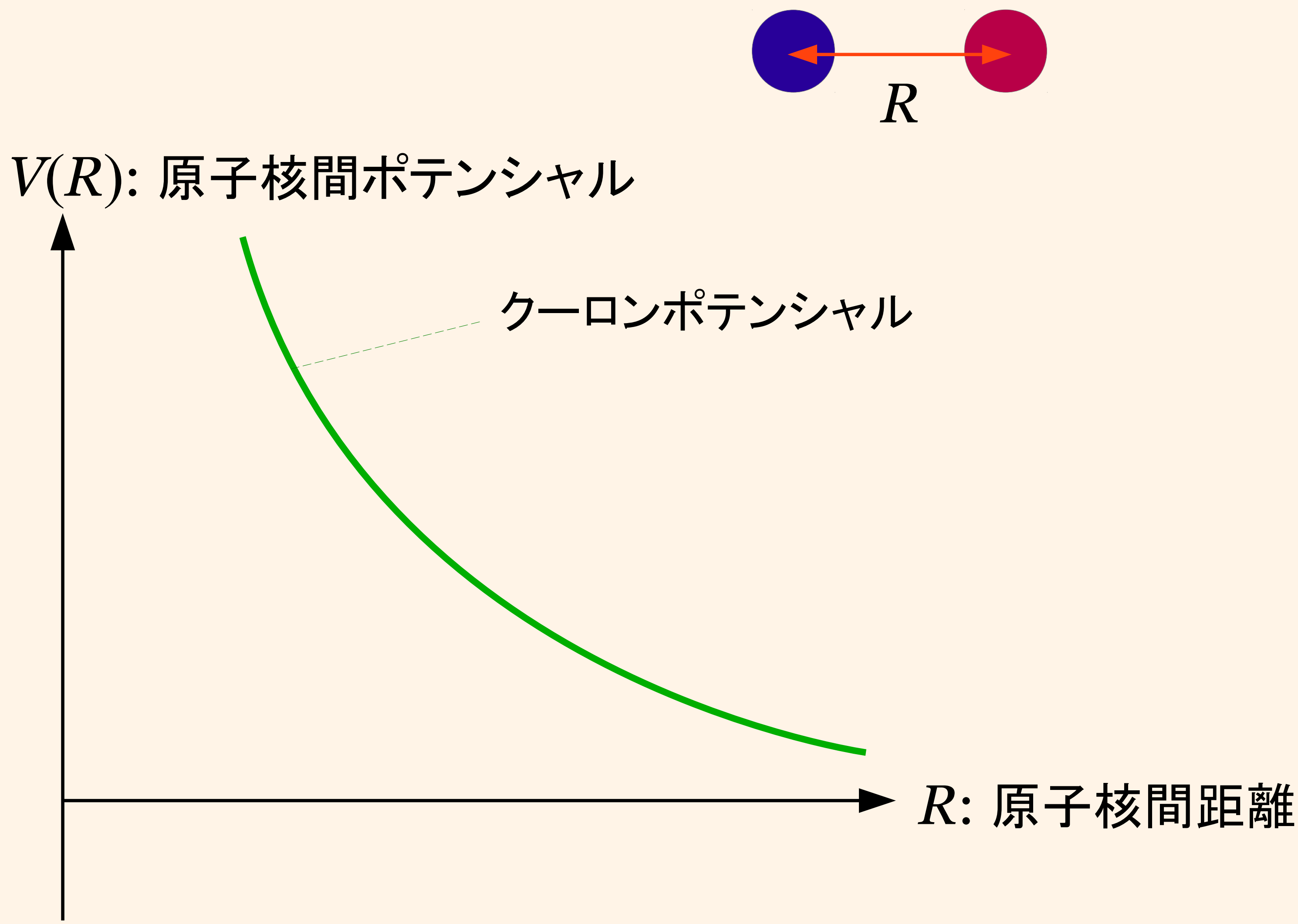
調べているもの: “低エネルギー”原子核衝突

✔ クーロン障壁近傍のエネルギーで “そろりと” ぶつける



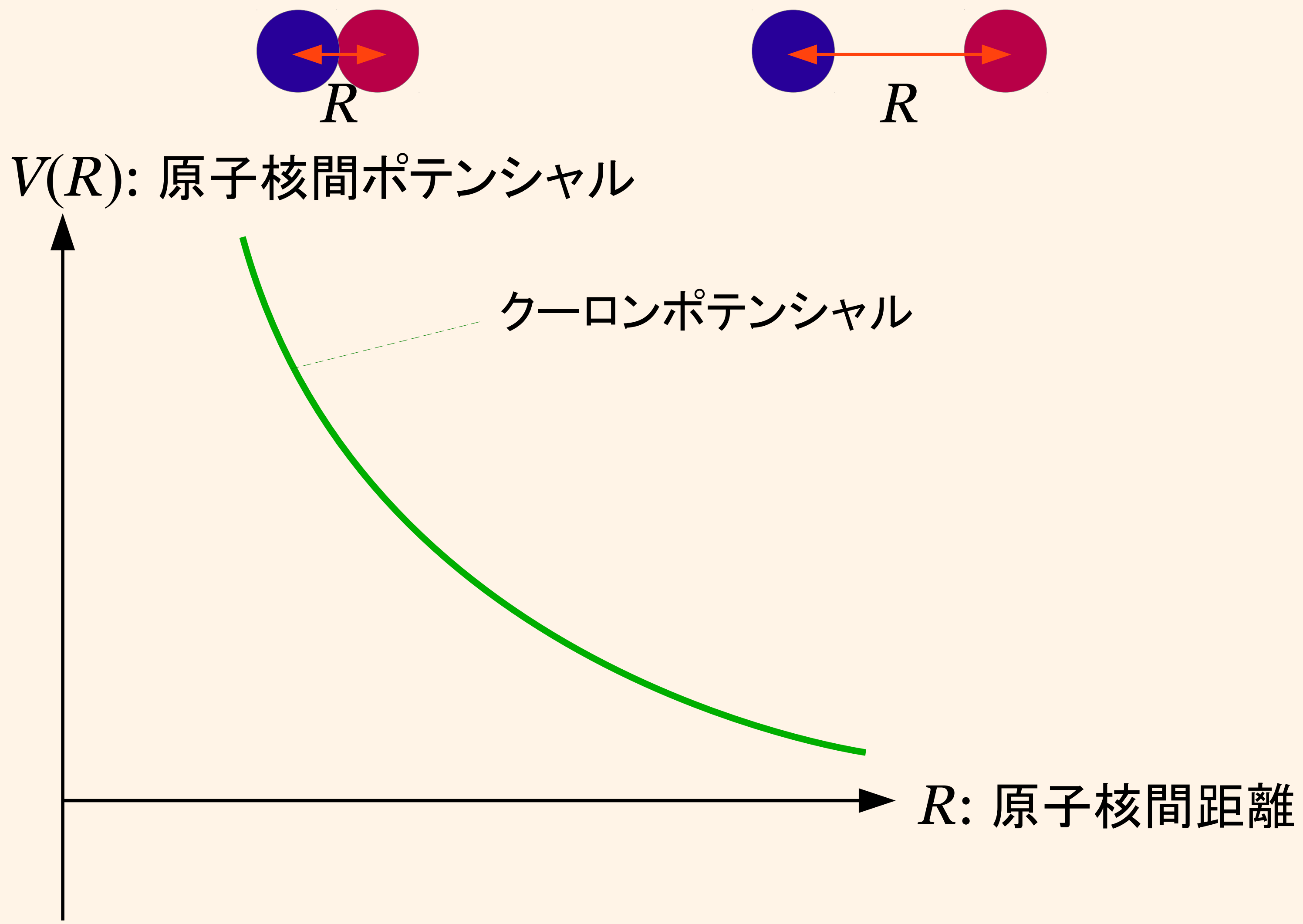
調べているもの: “低エネルギー”原子核衝突

✔ クーロン障壁近傍のエネルギーで “そろりと” ぶつける



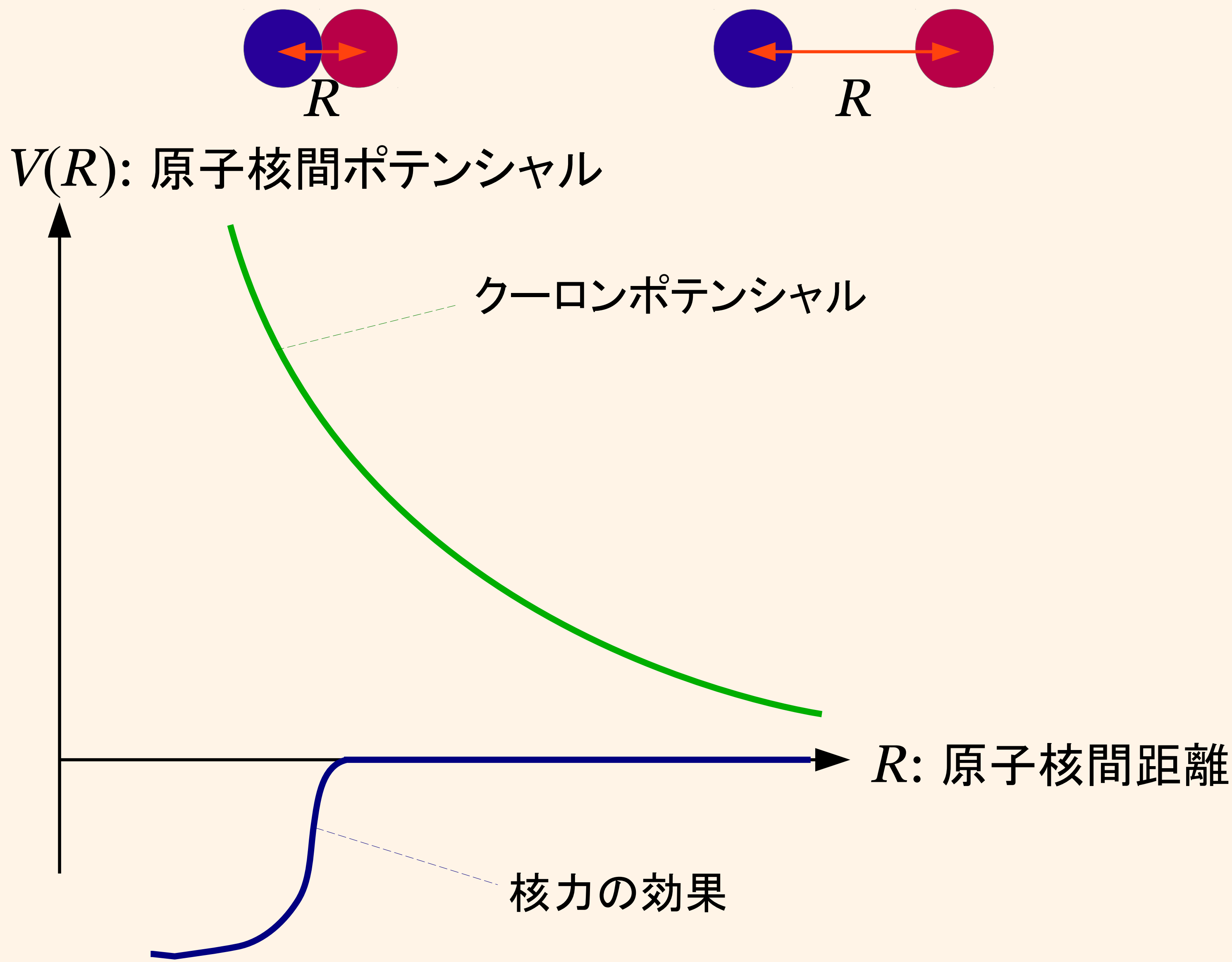
調べているもの：“低エネルギー”原子核衝突

✔ クーロン障壁近傍のエネルギーで “そろりと” ぶつける



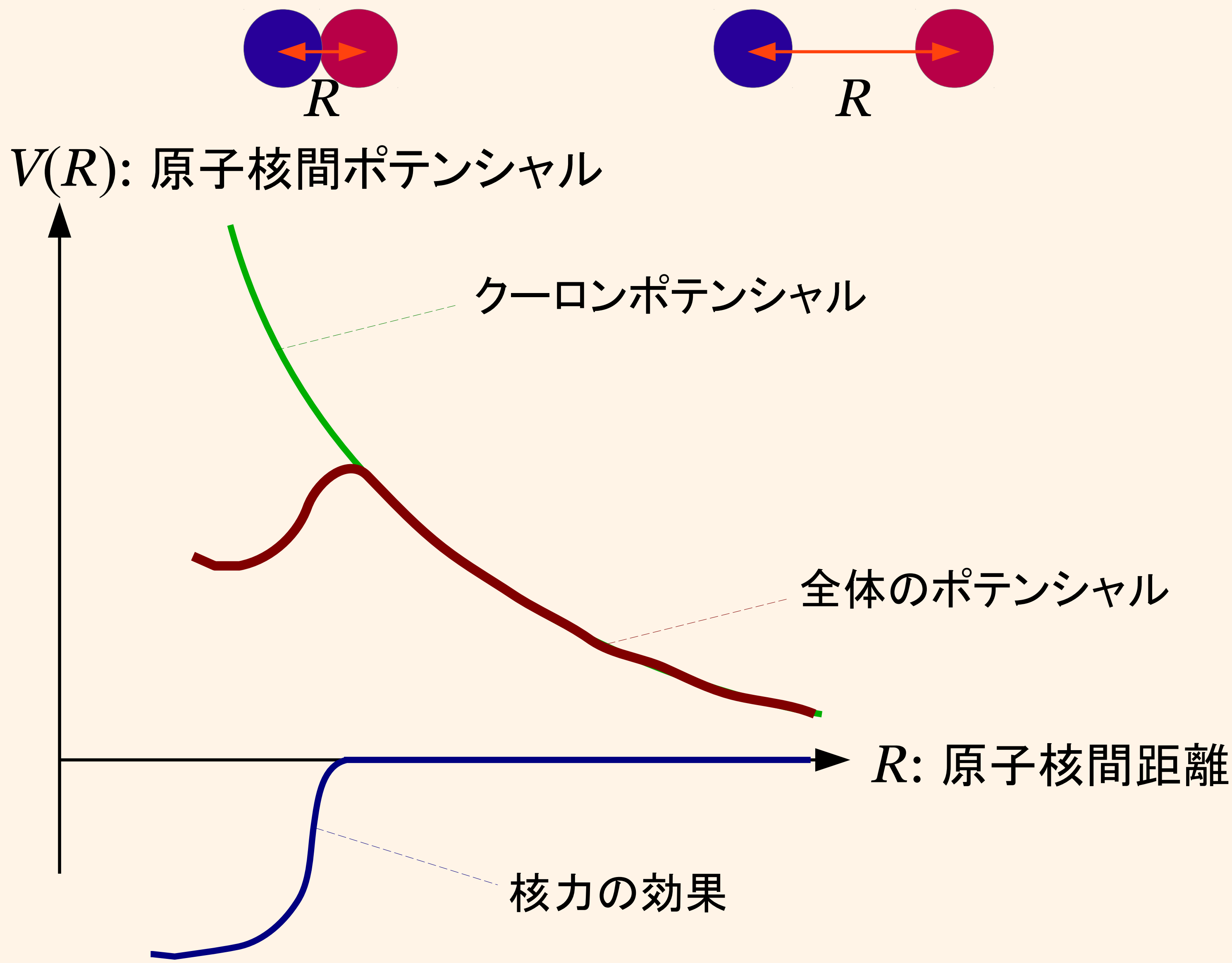
調べているもの: “低エネルギー”原子核衝突

✔ クーロン障壁近傍のエネルギーで “そろりと” ぶつける



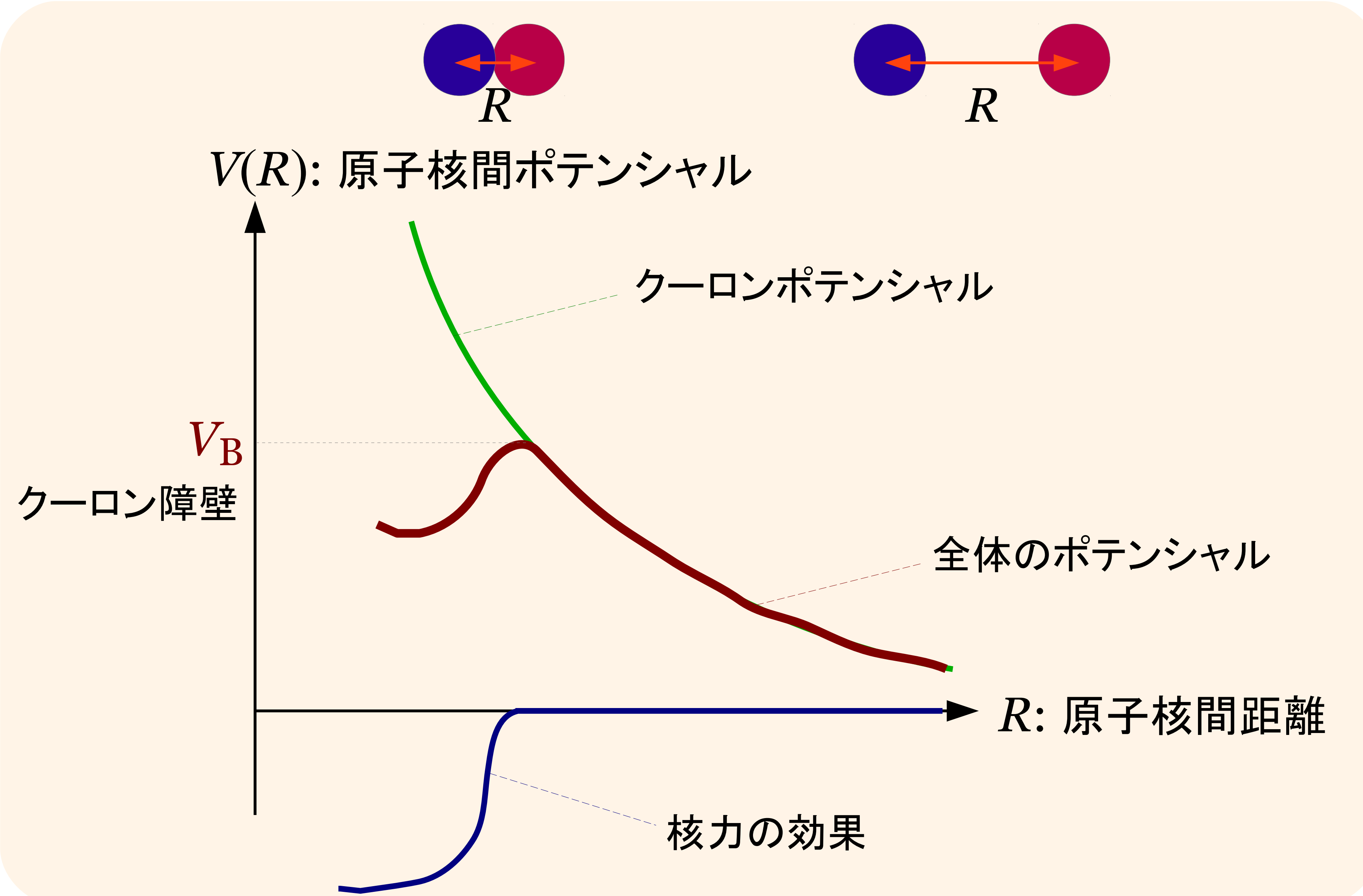
調べているもの: “低エネルギー”原子核衝突

✔ クーロン障壁近傍のエネルギーで “そろりと” ぶつける



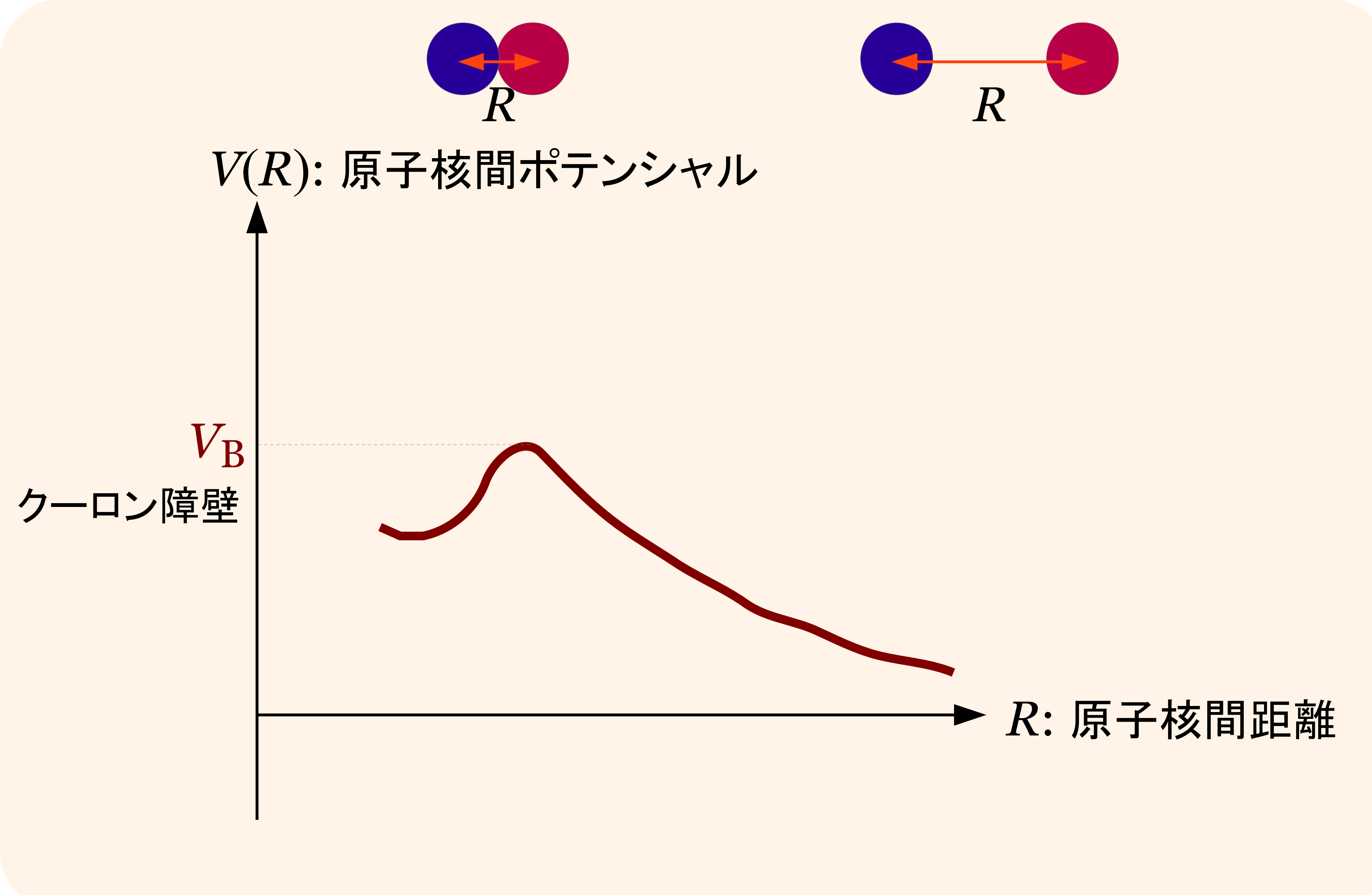
調べているもの：“低エネルギー”原子核衝突

✔ クーロン障壁近傍のエネルギーで“そろりと”ぶつける



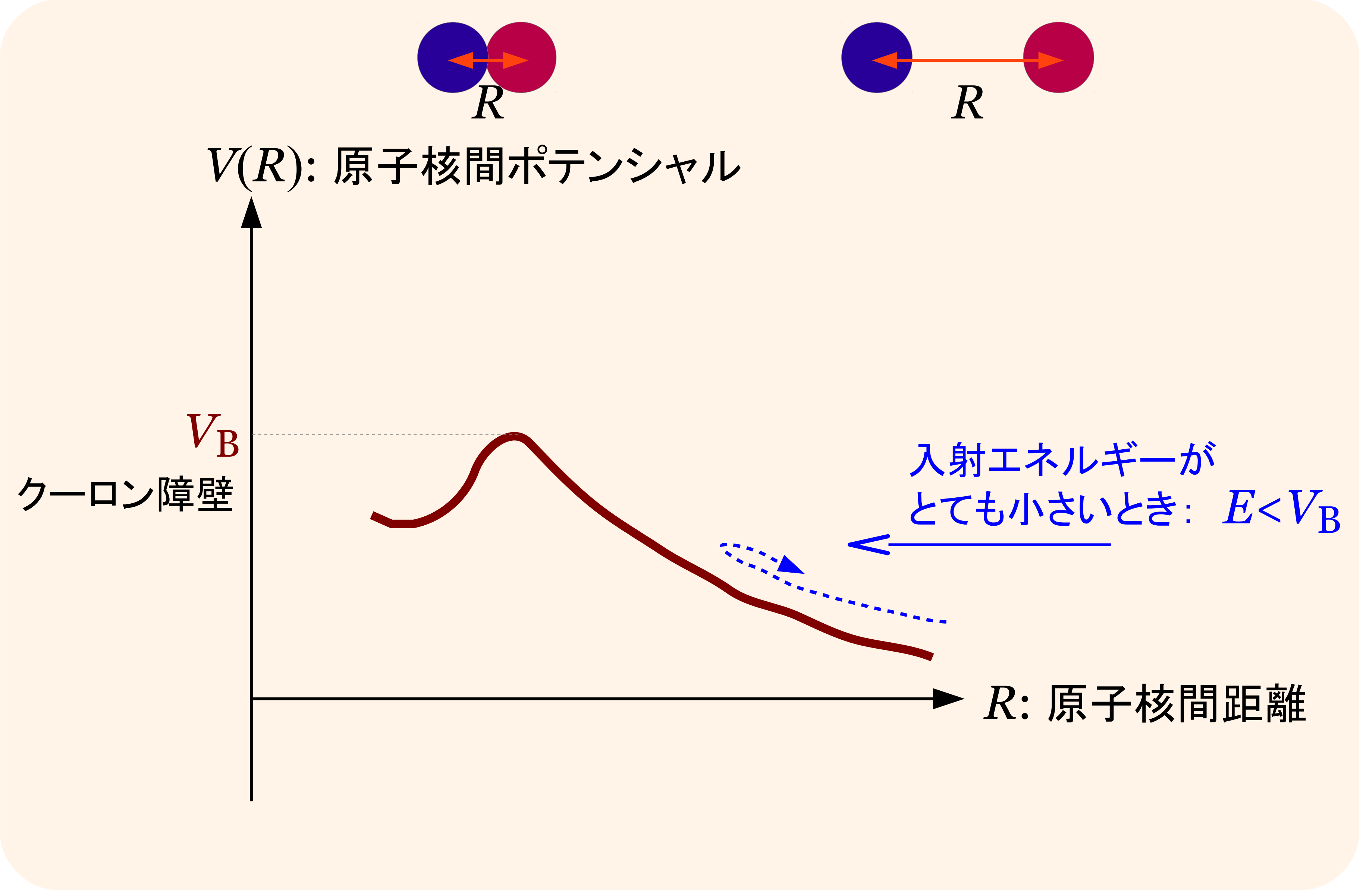
調べているもの: “低エネルギー”原子核衝突

✔ クーロン障壁近傍のエネルギーで “そろりと” ぶつける



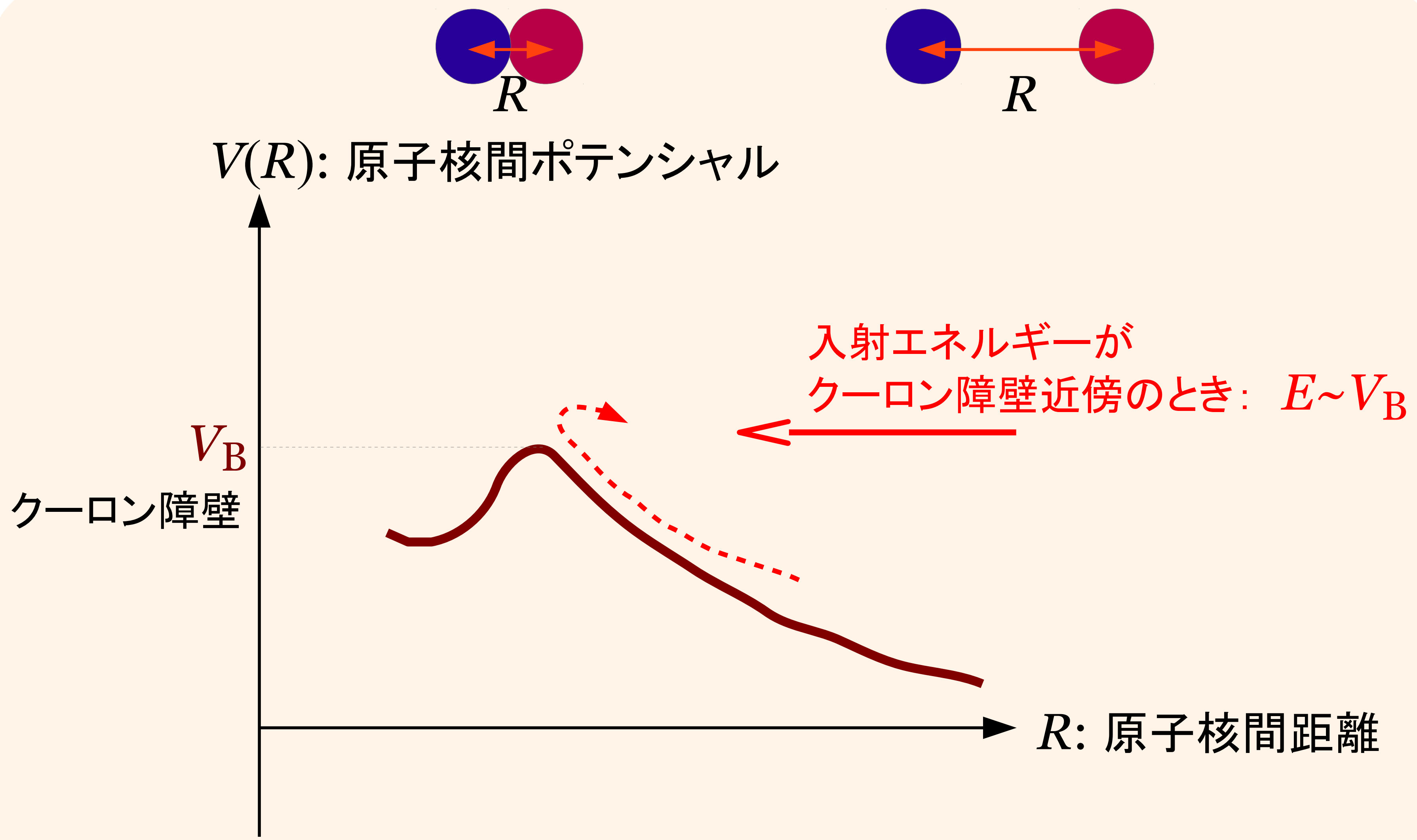
調べているもの：“低エネルギー”原子核衝突

✔ クーロン障壁近傍のエネルギーで “そろりと” ぶつける



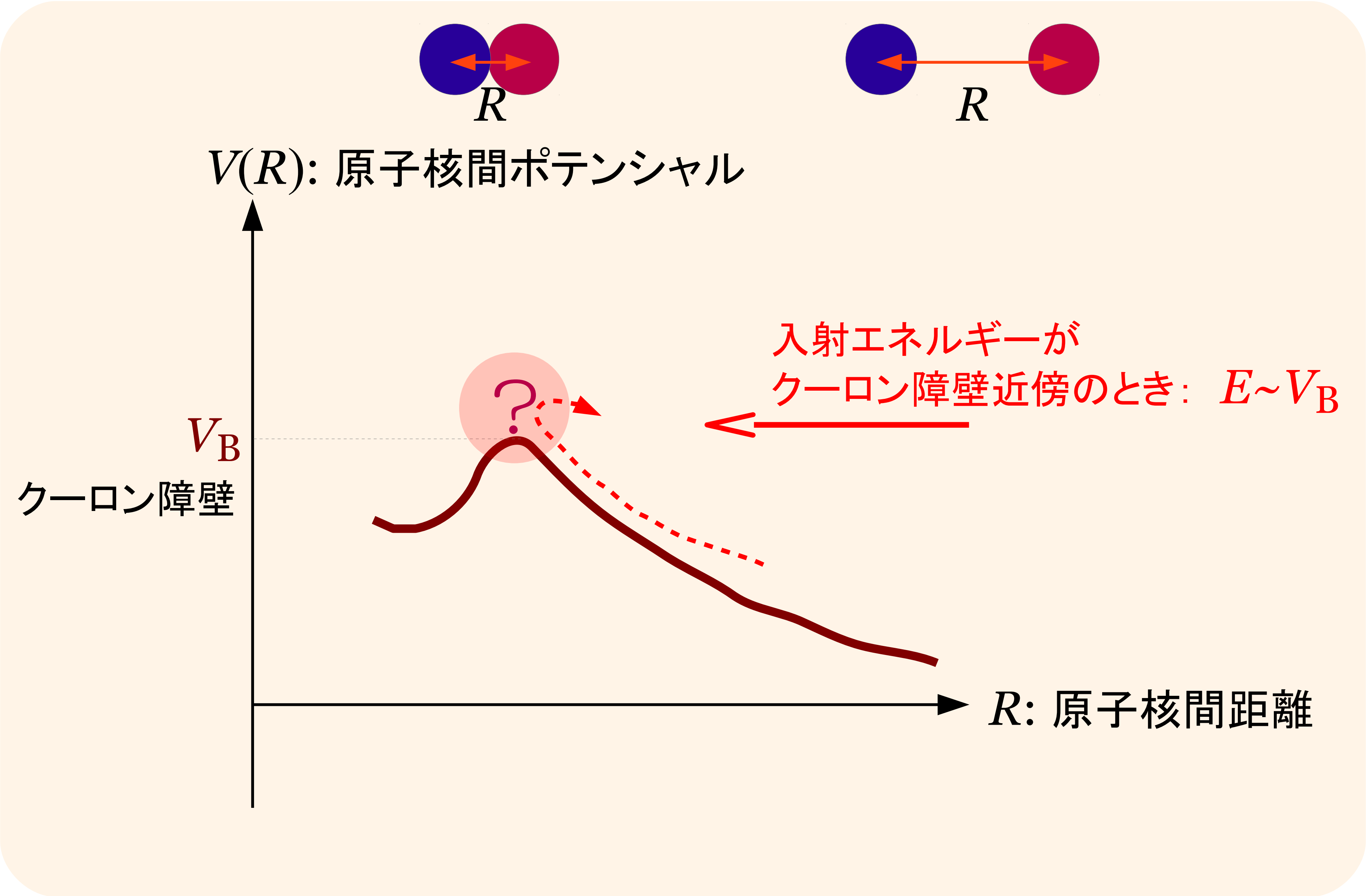
調べているもの：“低エネルギー”原子核衝突

✔ クーロン障壁近傍のエネルギーで“そろりと”ぶつける



調べているもの: “低エネルギー”原子核衝突

✔ クーロン障壁近傍のエネルギーで “そろりと” ぶつける

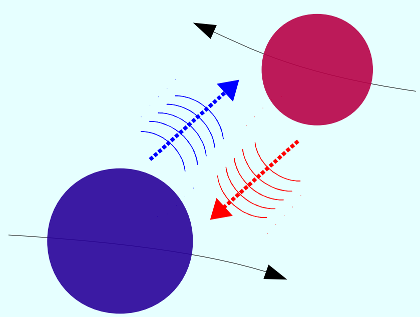


理解したいこと： 量子多体ダイナミクス

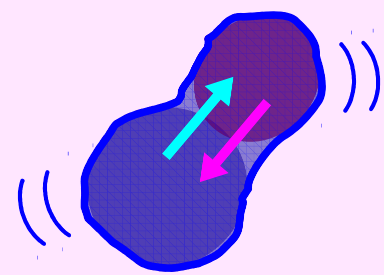
✔ クーロン障壁近傍のエネルギーで “そろりと” ぶつける

2つの有限量子多体系（原子核）が、近づき、離れていく間に起こる、量子ダイナミクス（核子の移行・変形・励起・散逸など）を理解したい

量子トンネル効果



くびれ構造の形成と断裂



目指していること: 衝突後に生成される原子核の予言

- ✔ 箱の一つ一つが異なる原子核に対応(異なる陽子数・中性子数を持つ)
- ✔ 自然に存在しない原子核を調べるためには、人工的に作り出す必要がある

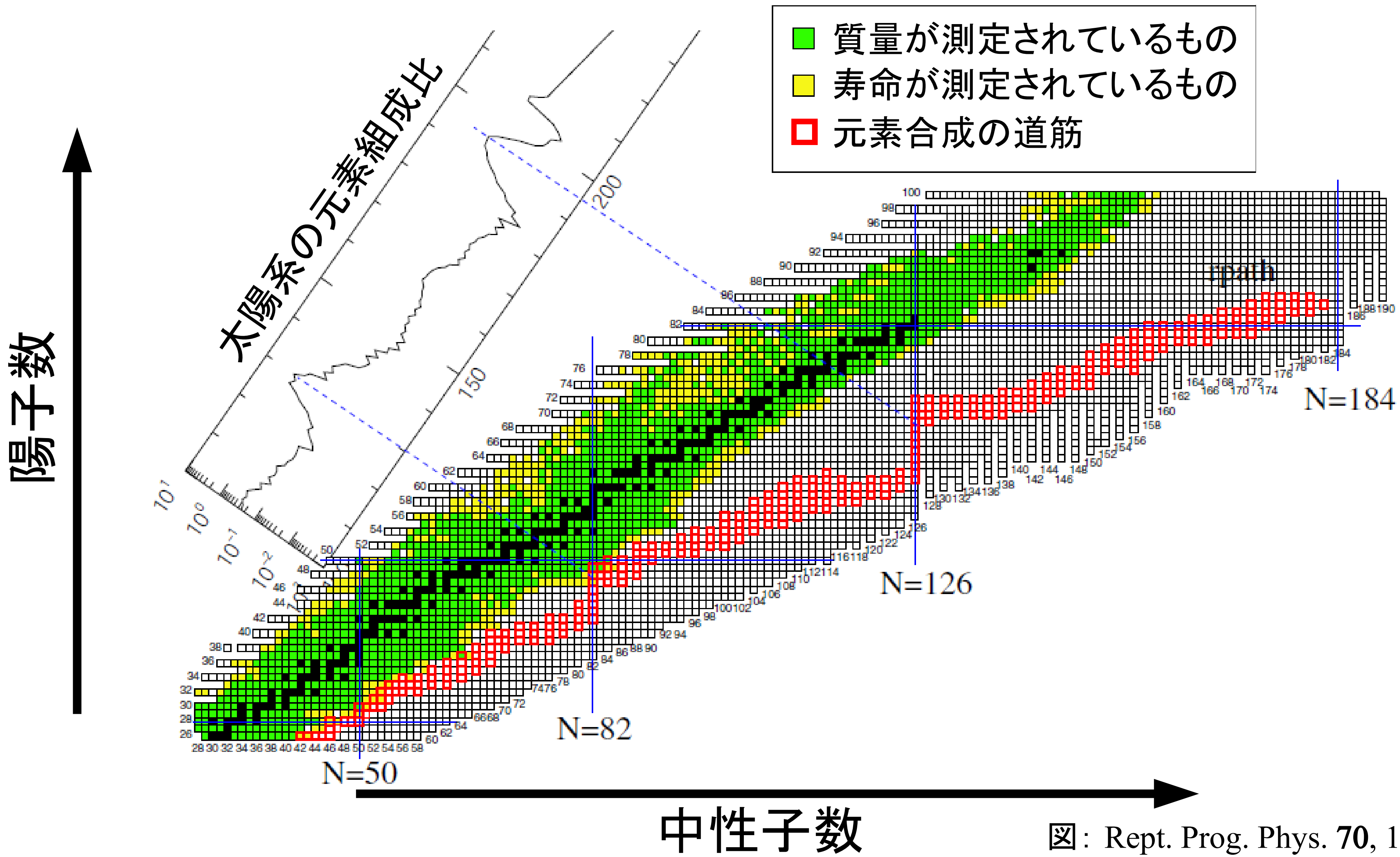


図: Rept. Prog. Phys. **70**, 1525 (2007)

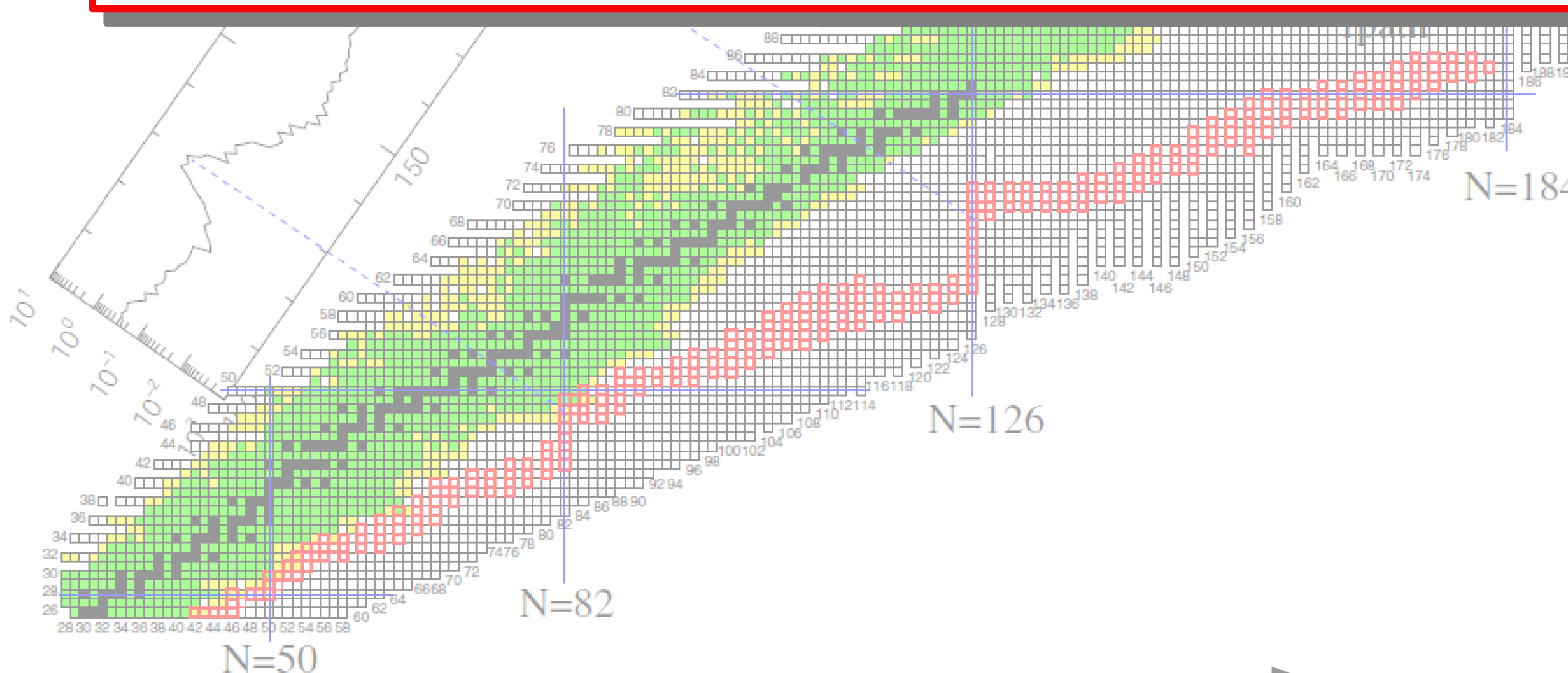
目指していること: 衝突後に生成される原子核の予言

- ✔ 箱の一つ一つが異なる原子核に対応(異なる陽子数・中性子数を持つ)
- ✔ 自然に存在しない原子核を調べるためには、人工的に作り出す必要がある

どの原子核を入射核と標的核に選び、どのようなエネルギーで衝突させれば、目的の原子核を生成できるか?

時間依存密度汎関数理論(TDDFT)による微視的シミュレーション

陽子数



中性子数

図: Rept. Prog. Phys. **70**, 1525 (2007)

発表内容

今日、ここで伝えたいこと

1．導入：　我々が、何に興味をもち、何を目指して研究を進めているか

2．手法：　どんな計算をしたか

3．結果：　計算資源の利用により、どんな成果が得られたか

発表内容

今日、ここで伝えたいこと

1. 導入:　我々が、何に興味をもち、何を目指して研究を進めているか

2. 手法:　どんな計算をしたか

3. 結果:　計算資源の利用により、どんな成果が得られたか

計算について: 原子核衝突の実時間・実空間 TDDFT 計算

基底状態の計算

Kohn-Sham方程式

$$\hat{h}[\rho]\phi_i(\mathbf{r},\sigma,q) = \varepsilon_i\phi_i(\mathbf{r},\sigma,q)$$

Slater行列式

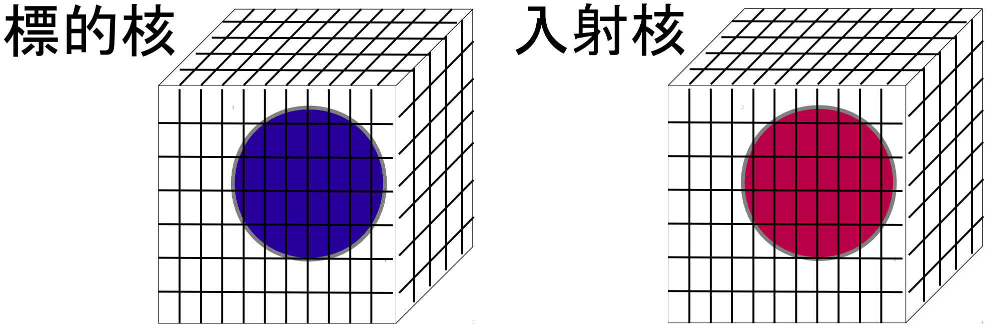
$$\Phi(x_1,\cdots,x_N,t) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\det\{\phi_i(x_j,t)\}$$

$$x \equiv \{\mathbf{r},\sigma,q\}$$

格子点の数: 30×30×30=27,000

メッシュ幅: 0.8 fm → 一辺 24 fm

虚時間法により逐次的に解を求める



計算について: 原子核衝突の実時間・実空間 TDDFT 計算

基底状態の計算

Kohn-Sham方程式

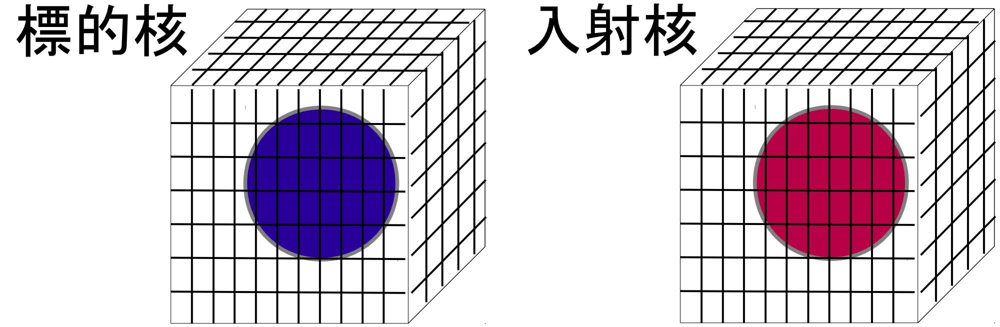
$$\hat{h}[\rho]\phi_i(\mathbf{r},\sigma,q)=\varepsilon_i\phi_i(\mathbf{r},\sigma,q)$$

Slater行列式

$$\Phi(x_1,\cdots,x_N,t)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\det\{\phi_i(x_j,t)\}$$

$$x\equiv\{\mathbf{r},\sigma,q\}$$

格子点の数: 30×30×30=27,000
メッシュ幅: 0.8 fm → 一辺 24 fm
虚時間法により逐次的に解を求める



原子核衝突の計算

計算について: 原子核衝突の実時間・実空間 TDDFT 計算

基底状態の計算

Kohn-Sham方程式

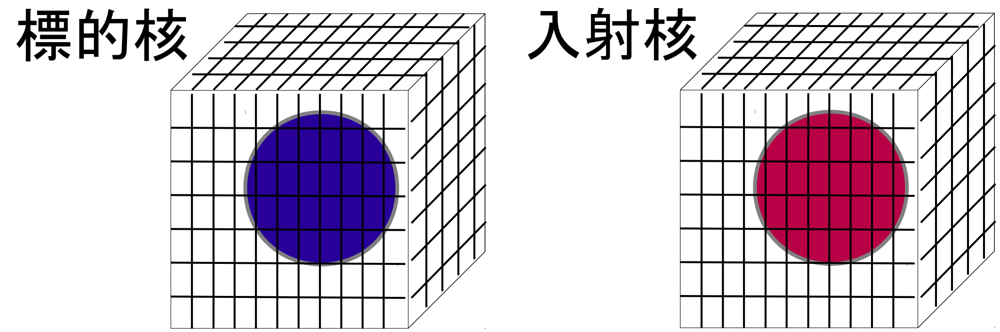
$$\hat{h}[\rho]\phi_i(\mathbf{r},\sigma,q)=\varepsilon_i\phi_i(\mathbf{r},\sigma,q)$$

Slater行列式

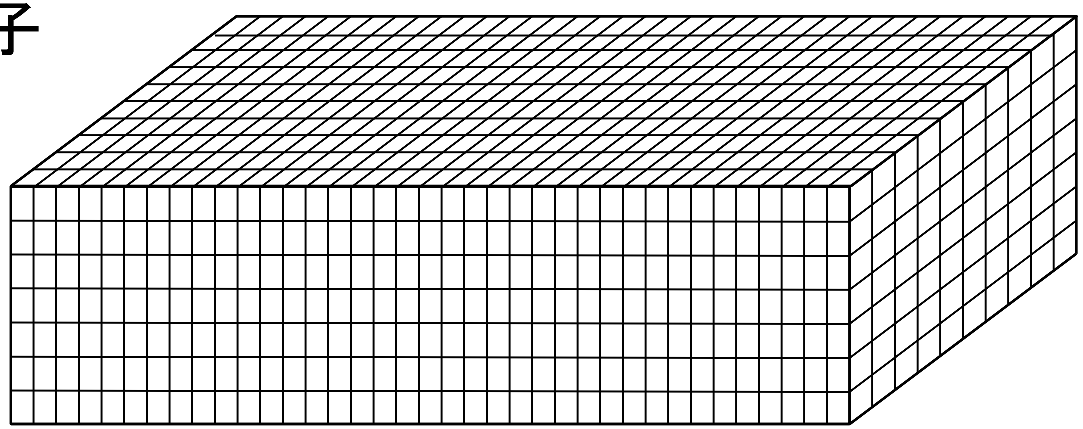
$$\Phi(x_1,\cdots,x_N,t)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\det\{\phi_i(x_j,t)\}$$

$$x\equiv\{\mathbf{r},\sigma,q\}$$

格子点の数: 30×30×30=27,000
メッシュ幅: 0.8 fm → 一辺 24 fm
虚時間法により逐次的に解を求める



原子核衝突の計算



計算について：原子核衝突の実時間・実空間 TDDFT 計算

格子点の数：30×30×30=27,000
メッシュ幅：0.8 fm → 一辺 24 fm
虚時間法により逐次的に解を求める

基底状態の計算

Kohn-Sham方程式

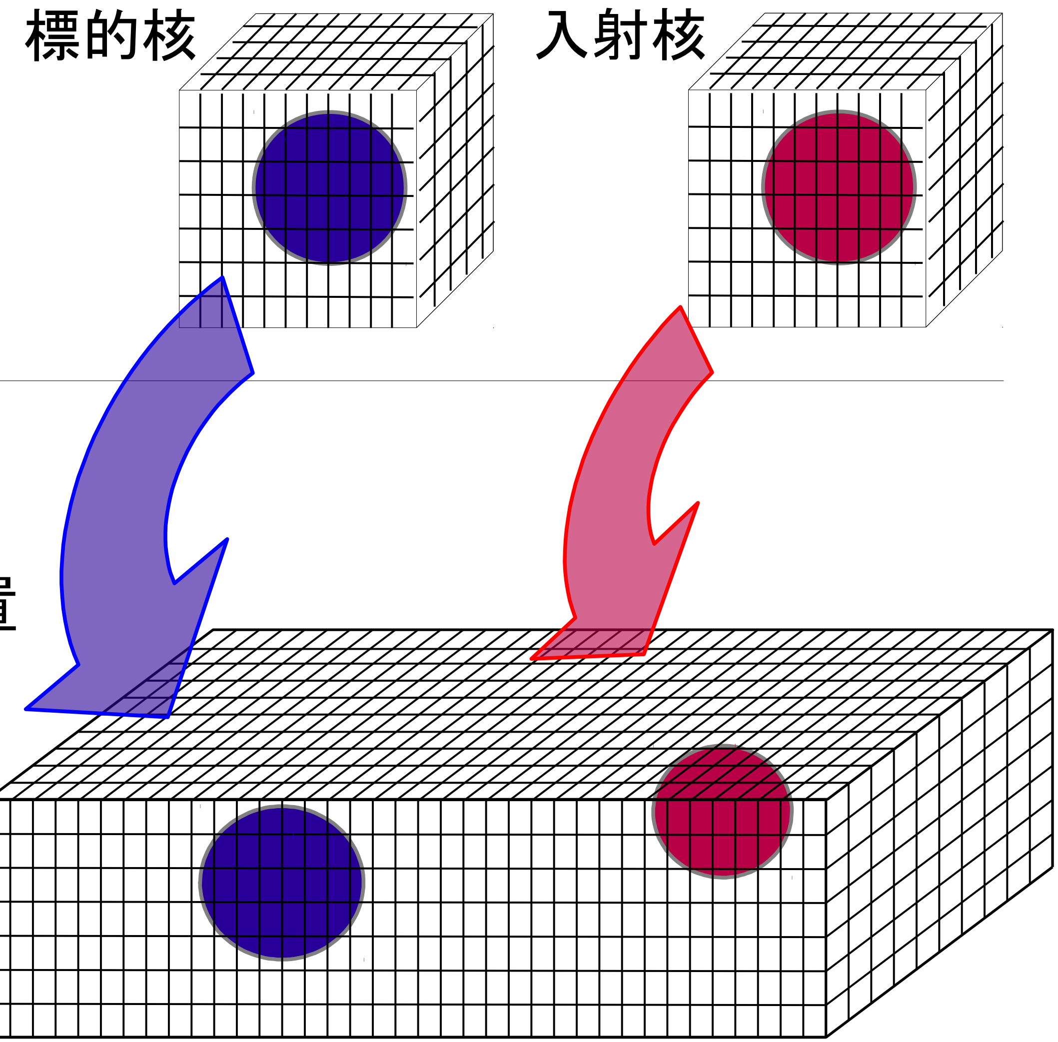
$$\hat{h}[\rho]\phi_i(\mathbf{r},\sigma,q) = \varepsilon_i\phi_i(\mathbf{r},\sigma,q)$$

Slater行列式

$$\Phi(x_1,\cdots,x_N,t) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\det\{\phi_i(x_j,t)\}$$

$$x \equiv \{\mathbf{r},\sigma,q\}$$

原子核衝突の計算



計算について: 原子核衝突の実時間・実空間 TDDFT 計算

基底状態の計算

Kohn-Sham方程式

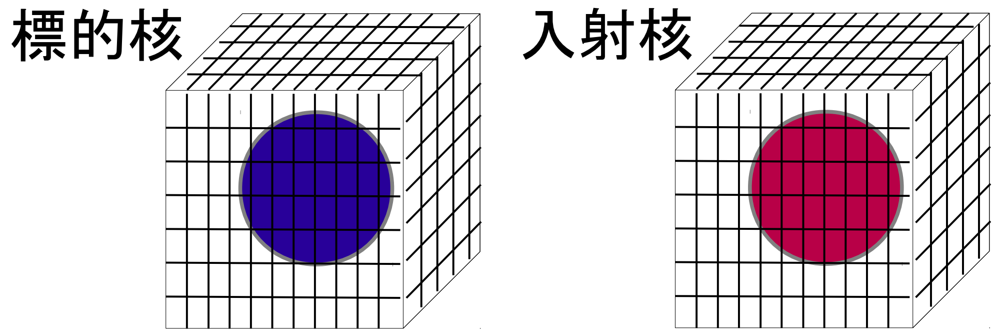
$$\hat{h}[\rho]\phi_i(\mathbf{r},\sigma,q) = \varepsilon_i\phi_i(\mathbf{r},\sigma,q)$$

Slater行列式

$$\Phi(x_1,\cdots,x_N,t) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\det\{\phi_i(x_j,t)\}$$

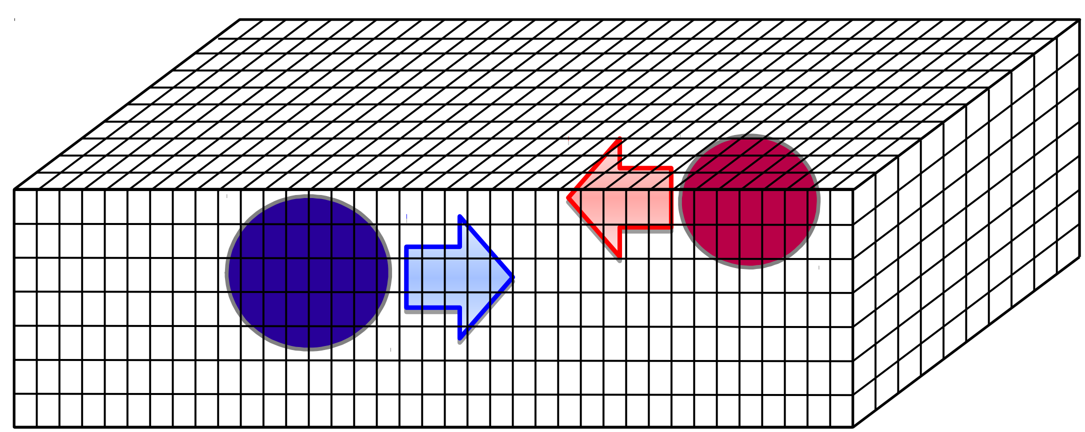
$$x \equiv \{\mathbf{r},\sigma,q\}$$

格子点の数: 30×30×30=27,000
メッシュ幅: 0.8 fm → 一辺 24 fm
虚時間法により逐次的に解を求める



原子核衝突の計算

それぞれの原子核に重心運動の運動量を与える



計算について：原子核衝突の実時間・実空間 TDDFT 計算

基底状態の計算

Kohn-Sham方程式

$$\hat{h}[\rho]\phi_i(\mathbf{r},\sigma,q) = \varepsilon_i\phi_i(\mathbf{r},\sigma,q)$$

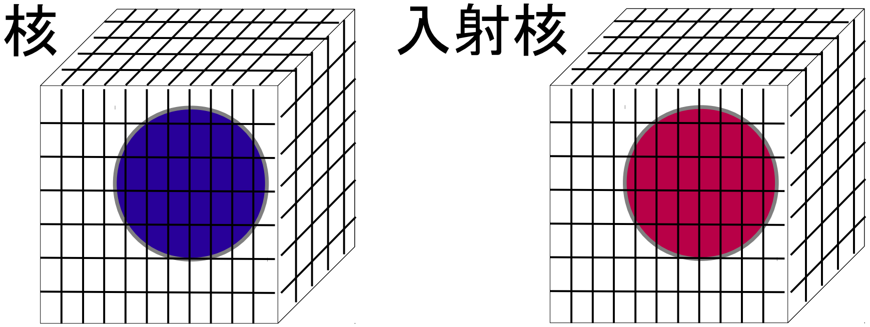
Slater行列式

$$\Phi(x_1,\cdots,x_N,t) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\det\{\phi_i(x_j,t)\}$$

$$x \equiv \{\mathbf{r},\sigma,q\}$$

格子点の数：30×30×30=27,000
メッシュ幅：0.8 fm → 一辺 24 fm
虚時間法により逐次的に解を求める

標的核　　入射核



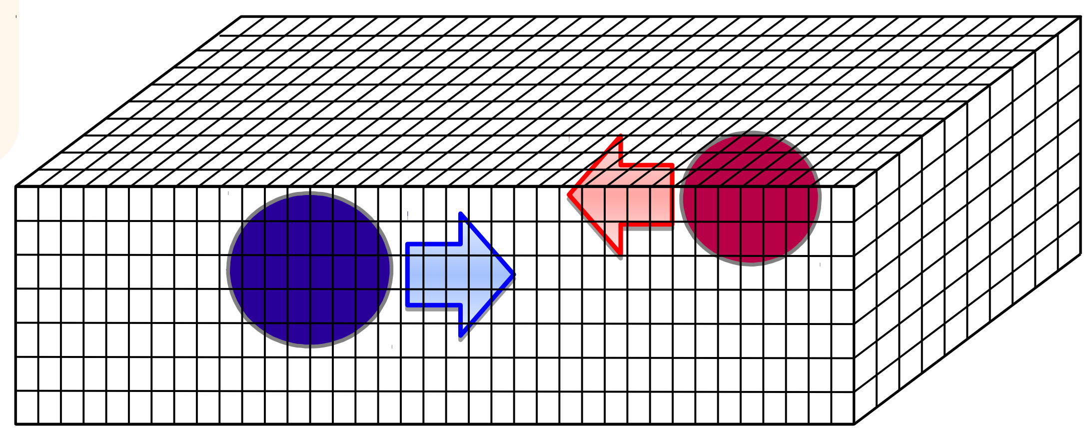
原子核衝突の計算

時間依存Kohn-Sham方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi_i(\mathbf{r},\sigma,q,t) = \hat{h}[\rho]\,\phi_i(\mathbf{r},\sigma,q,t)$$

格子点の数：70×70×30=147,000
時間発展演算子：4次のTaylor展開

時間発展を計算する



並列化方法： 軌道関数についての MPI & OpenMP 並列

原子核衝突の計算

時間依存Kohn-Sham方程式

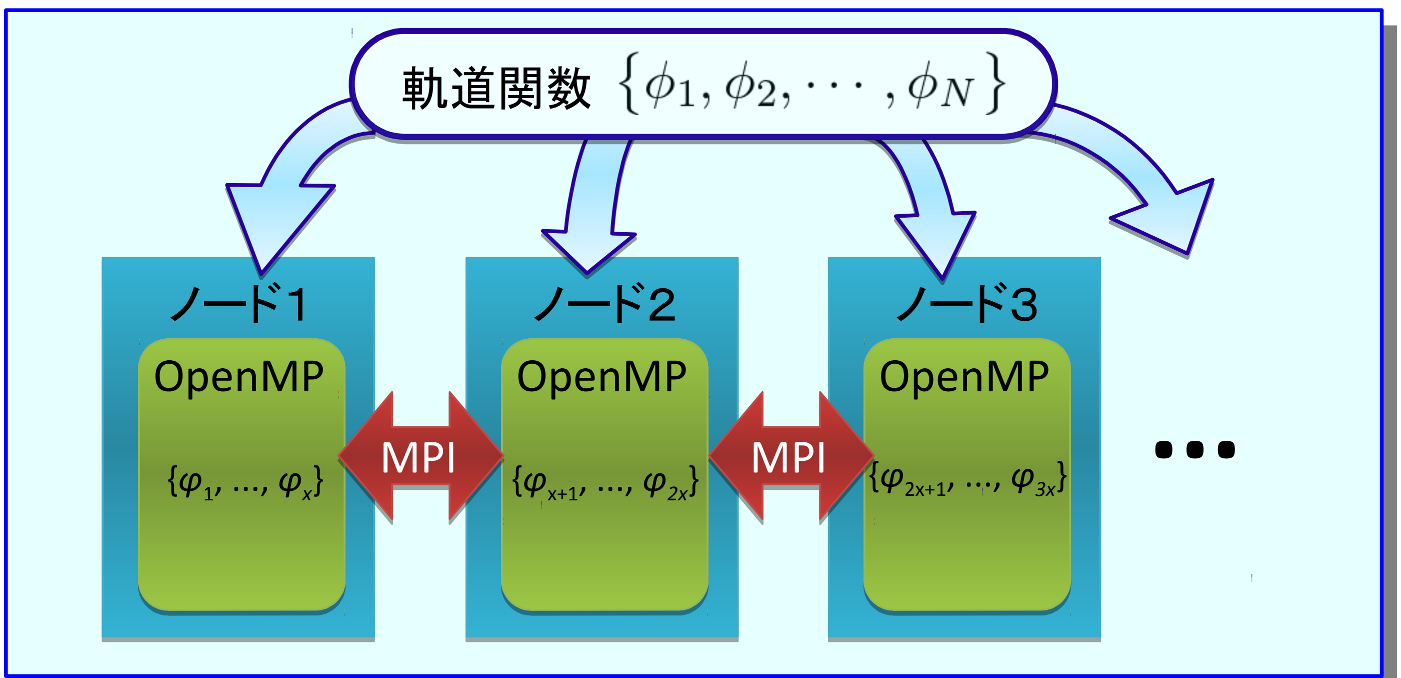
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi_i(\mathbf{r},\sigma,q,t) = \hat{h}[\rho]\,\phi_i(\mathbf{r},\sigma,q,t)$$

Slater行列式

$$\Phi(x_1,\cdots,x_N,t) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\det\{\phi_i(x_j,t)\}$$

$$x \equiv \{\mathbf{r},\sigma,q\}$$

- ✔ 軌道関数の束を各ノードに割り当て、その中でOpenMPによる並列処理を実行
- ✔ 密度（例えば $\rho(\mathbf{r},t) = \sum_{i,\sigma,q}|\phi_i(\mathbf{r},\sigma,q,t)|^2$）を計算するために、毎ステップ、通信が必要



発表内容

今日、ここで伝えたいこと

1．導入： 我々が、何に興味をもち、何を目指して研究を進めているか

2．手法： どんな計算をしたか

3．結果： 計算資源の利用により、どんな成果が得られたか

発表内容

今日、ここで伝えたいこと

1. 導入： 我々が、何に興味をもち、何を目指して研究を進めているか

2. 手法： どんな計算をしたか

3. 結果： 計算資源の利用により、どんな成果が得られたか

計算結果： ウラン原子核(^{238}U)と錫原子核(^{124}Sn)の衝突

➢大きく変形したウラン原子核の向きを変えた衝突計算

入射核（ウラン，^{238}U ）: ラグビーボール型に大きく変形
標的核（　錫，^{124}Sn）: みかん型に小さく変形

計算結果： ウラン原子核(^{238}U)と錫原子核(^{124}Sn)の衝突

➢大きく変形したウラン原子核の向きを変えた衝突計算

入射核（ウラン，^{238}U ）：ラグビーボール型に大きく変形

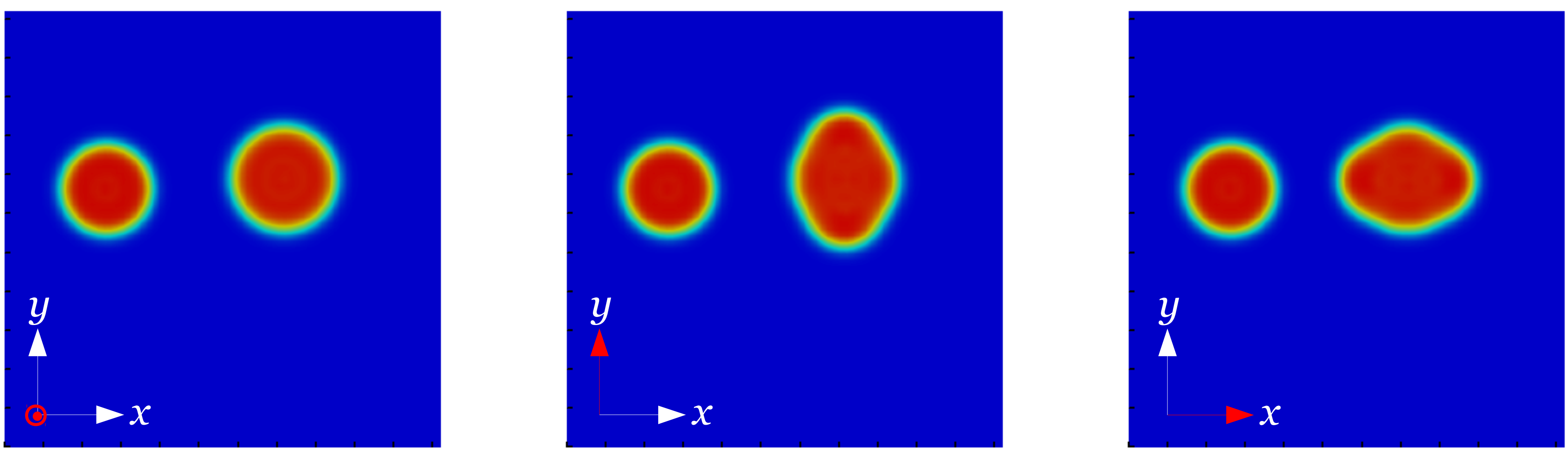
標的核（　 錫，^{124}Sn）：みかん型に小さく変形

例） 衝突径数 1 fm の場合

グリッド数：70×70×30 (56 fm×56 fm×24 fm)，メッシュ幅：0.8 fm

汎関数：SLy5，Δt: 0.2 fm/c，計算した衝突径数：$0 \leqq b \leqq 10$ fm

対称軸の向き：z軸方向　　y軸方向　　x軸方向



計算結果：ウラン原子核(^{238}U)と錫原子核(^{124}Sn)の衝突

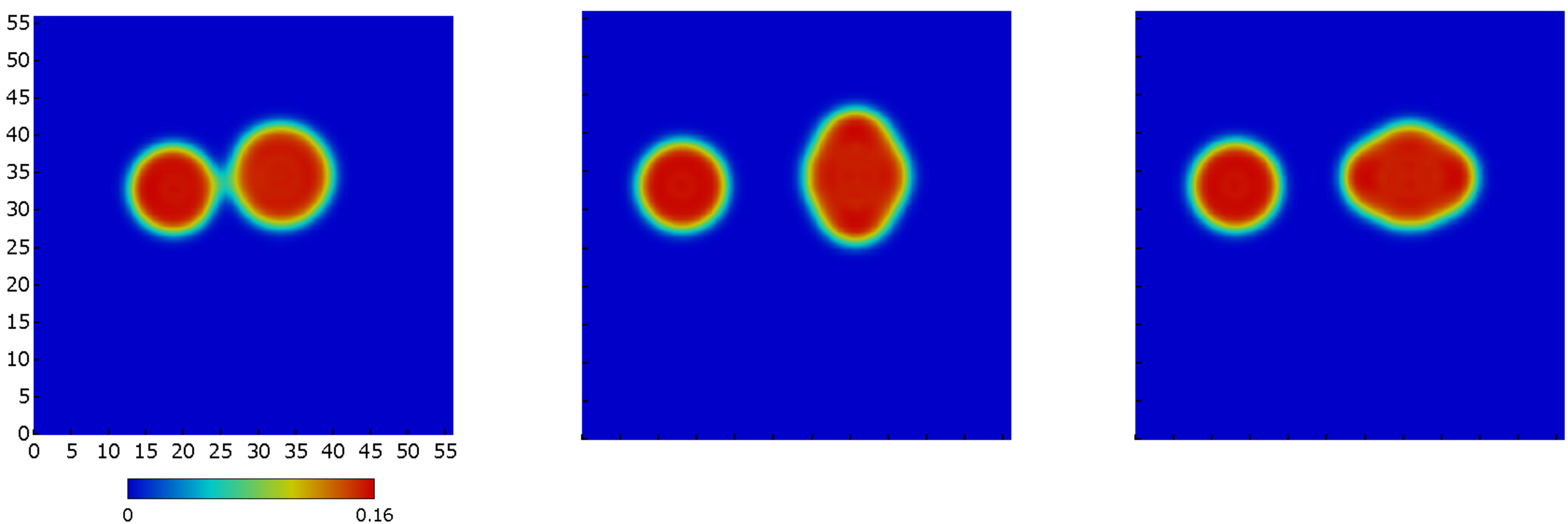
➢大きく変形したウラン原子核の向きを変えた衝突計算

入射核（ウラン，^{238}U）：ラグビーボール型に大きく変形
標的核（　錫，^{124}Sn）：みかん型に小さく変形

例）衝突径数 1 fm の場合

グリッド数：70×70×30 (56 fm×56 fm×24 fm)，メッシュ幅：0.8 fm
汎関数：SLy5，Δt: 0.2 fm/c，計算した衝突径数：$0 \leqq b \leqq 10$ fm

対称軸の向き：z軸方向　　y軸方向　　x軸方向



計算結果：ウラン原子核(^{238}U)と錫原子核(^{124}Sn)の衝突

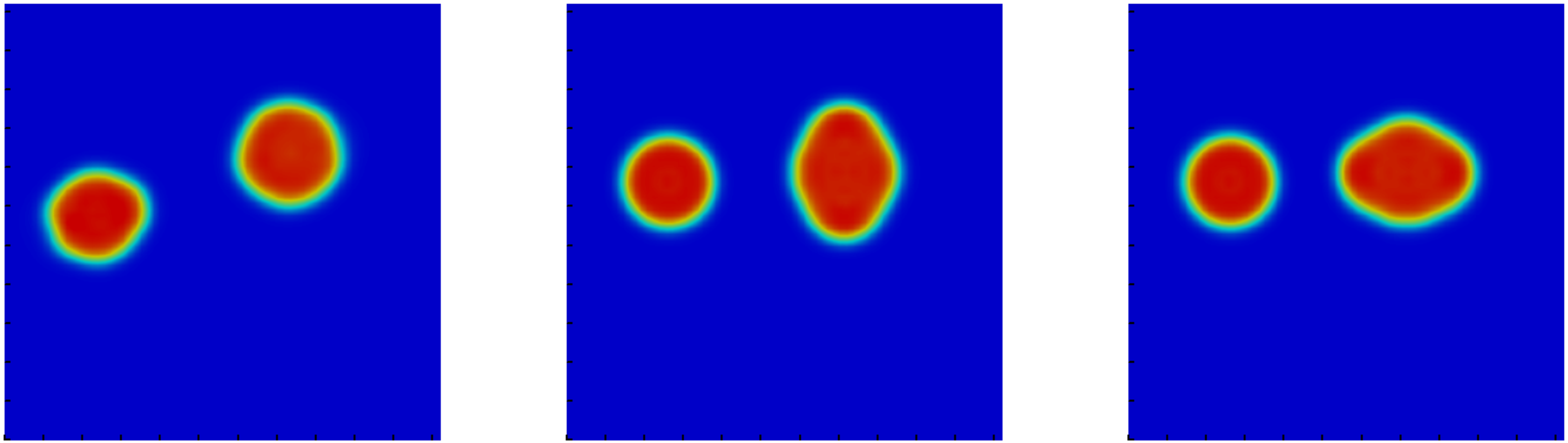
➢大きく変形したウラン原子核の向きを変えた衝突計算

入射核（ウラン，^{238}U）：ラグビーボール型に大きく変形
標的核（　錫，^{124}Sn）：みかん型に小さく変形


例）衝突径数 1 fm の場合

グリッド数：70×70×30 (56 fm×56 fm×24 fm)，メッシュ幅：0.8 fm
汎関数：SLy5，Δt：0.2 fm/c，計算した衝突径数：$0 \leqq b \leqq 10$ fm

対称軸の向き：z軸方向　　y軸方向　　x軸方向



Sn ← U, 約 3 核子移行

計算結果：ウラン原子核(^{238}U)と錫原子核(^{124}Sn)の衝突

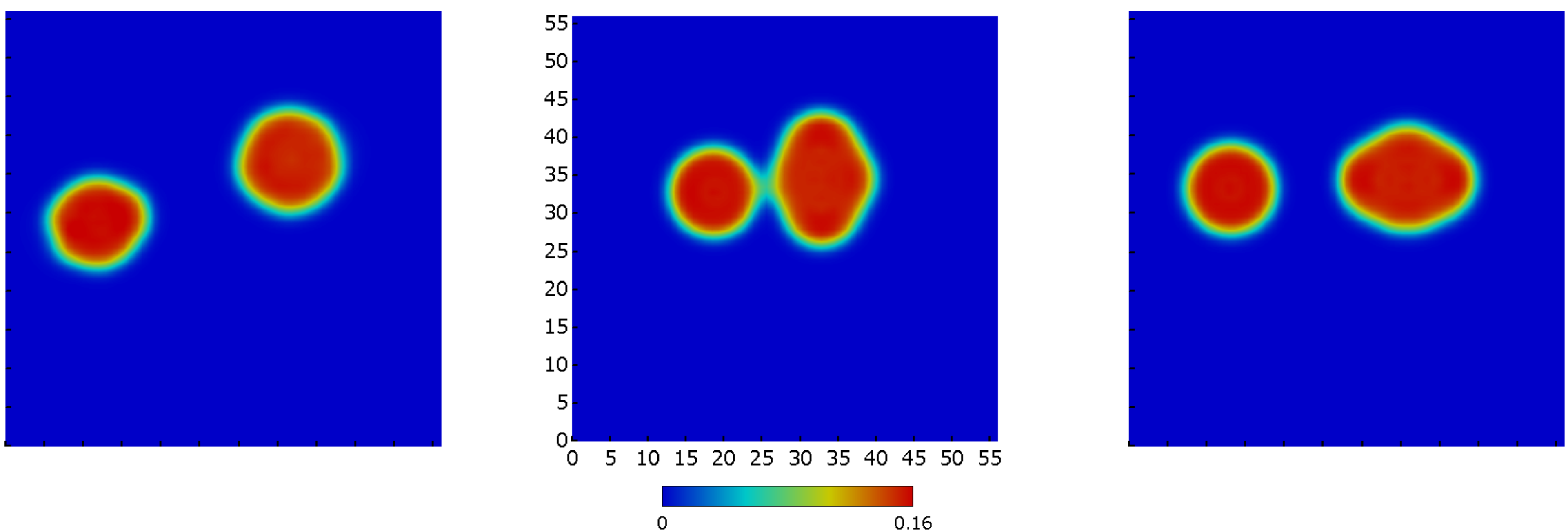
➢大きく変形したウラン原子核の向きを変えた衝突計算

入射核（ウラン，^{238}U）：ラグビーボール型に大きく変形
標的核（　錫，^{124}Sn）：みかん型に小さく変形

例）衝突径数 1 fm の場合

グリッド数：$70 \times 70 \times 30$ (56 fm×56 fm×24 fm)，メッシュ幅：0.8 fm
汎関数：SLy5，Δt: 0.2 fm/c，計算した衝突径数：$0 \leqq b \leqq 10$ fm

対称軸の向き：z軸方向　　y軸方向　　x軸方向



計算結果： ウラン原子核(^{238}U)と錫原子核(^{124}Sn)の衝突

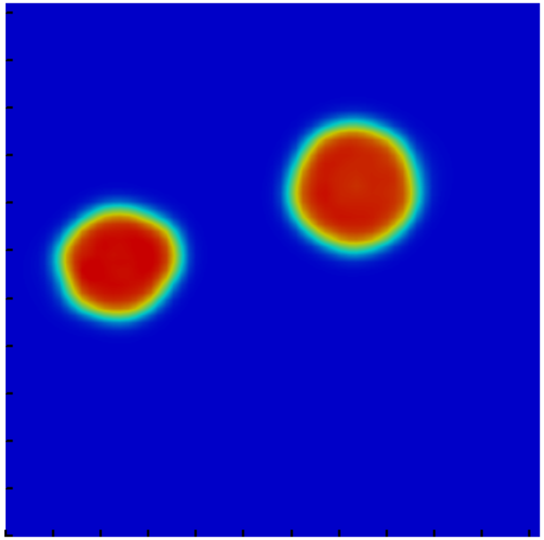
➢大きく変形したウラン原子核の向きを変えた衝突計算

入射核（ウラン，^{238}U）：ラグビーボール型に大きく変形
標的核（　　錫，^{124}Sn）：みかん型に小さく変形

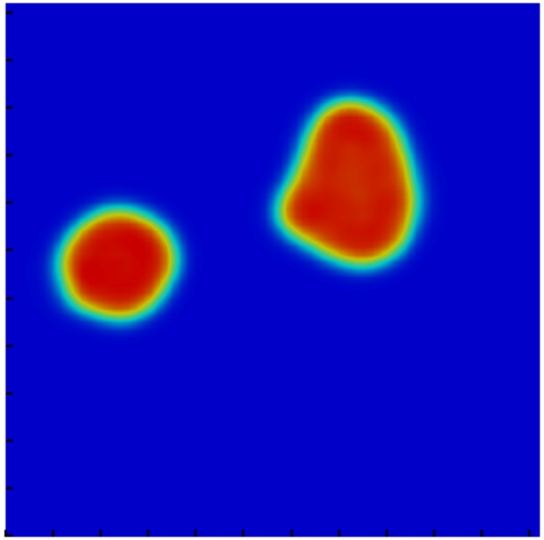
例）衝突径数 1 fm の場合

グリッド数：70×70×30 (56 fm×56 fm×24 fm)，メッシュ幅：0.8 fm
汎関数：SLy5，Δt：0.2 fm/c，計算した衝突径数：$0 \leqq b \leqq 10$ fm

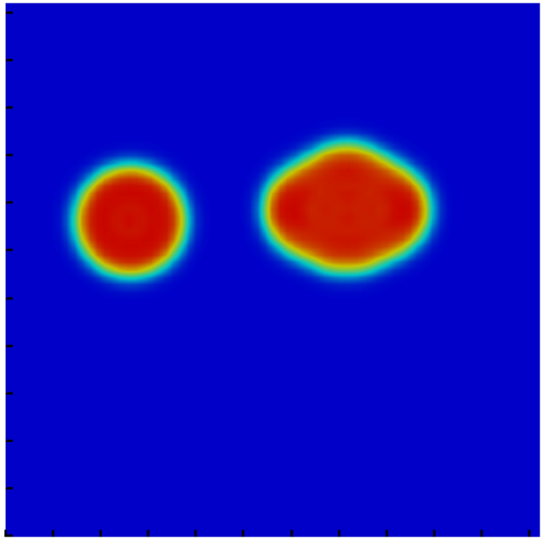
対称軸の向き：z軸方向



y軸方向



x軸方向



ほとんど移行せず

計算結果： ウラン原子核(^{238}U)と錫原子核(^{124}Sn)の衝突

➢大きく変形したウラン原子核の向きを変えた衝突計算

入射核（ウラン，^{238}U ）：ラグビーボール型に大きく変形

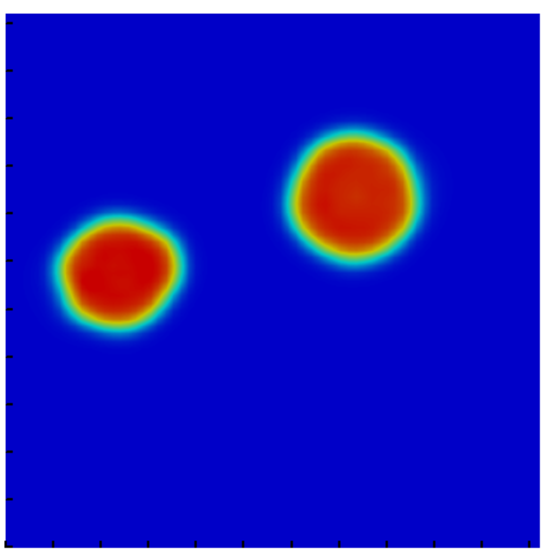
標的核（　　錫，^{124}Sn）：みかん型に小さく変形

例）衝突径数 1 fm の場合

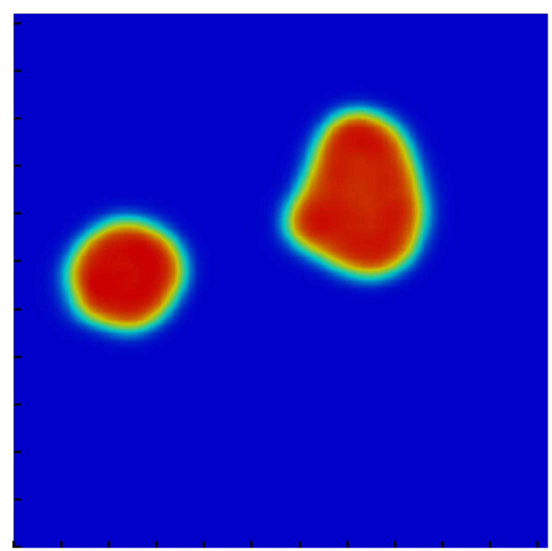
グリッド数：70×70×30 (56 fm×56 fm×24 fm)，メッシュ幅：0.8 fm

汎関数：SLy5，Δt: 0.2 fm/c，計算した衝突径数：$0 \leqq b \leqq 10$ fm

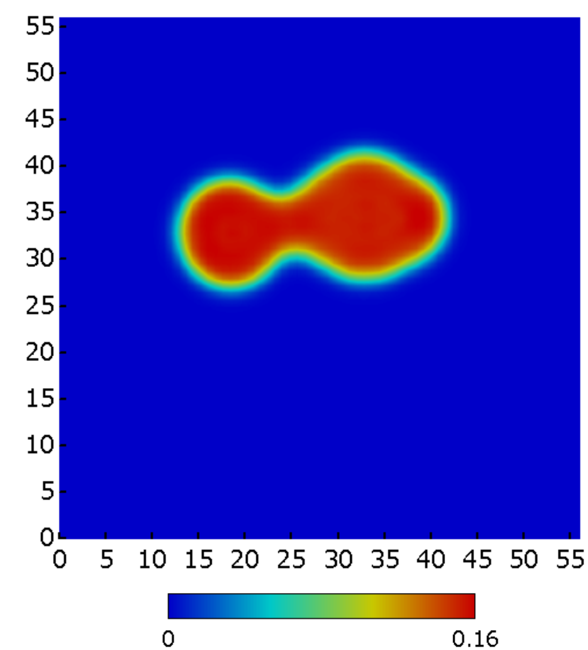
対称軸の向き：z軸方向



y軸方向



x軸方向



計算結果： ウラン原子核(^{238}U)と錫原子核(^{124}Sn)の衝突

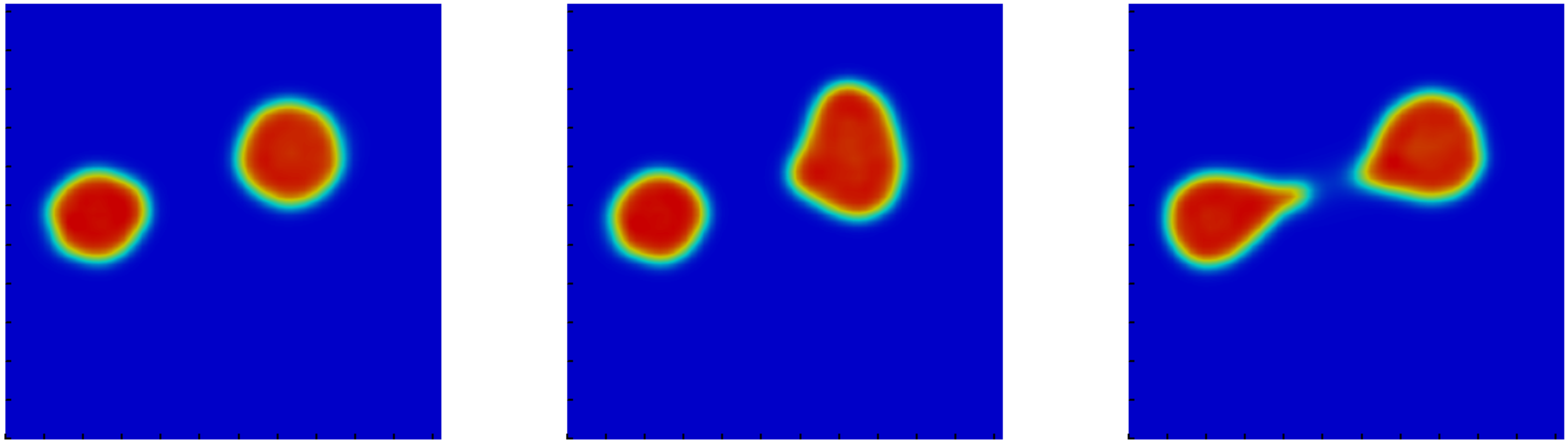
➢大きく変形したウラン原子核の向きを変えた衝突計算

入射核（ウラン，^{238}U）：ラグビーボール型に大きく変形
標的核（　　錫，^{124}Sn）：みかん型に小さく変形

例）衝突径数 1 fm の場合

グリッド数：70×70×30 (56 fm×56 fm×24 fm)，メッシュ幅：0.8 fm
汎関数：SLy5，Δt：0.2 fm/c，計算した衝突径数：$0 \leqq b \leqq 10$ fm

対称軸の向き：z軸方向　　y軸方向　　x軸方向



Sn ← U, 約 17 核子移行

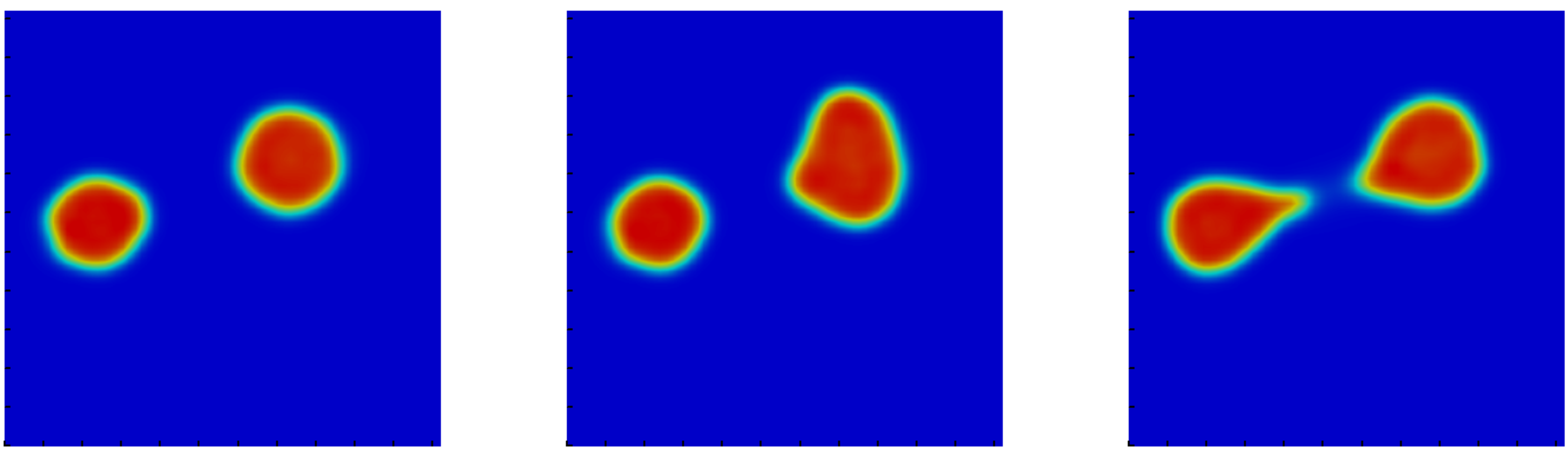
計算結果: ウラン原子核(^{238}U)と錫原子核(^{124}Sn)の衝突

✔衝突の際の移行核子数は、変形した原子核の向きに強く依存

例) 衝突径数 1 fm の場合

グリッド数: 70×70×30 (56 fm×56 fm×24 fm), メッシュ幅: 0.8 fm
汎関数: SLy5, Δt: 0.2 fm/c, 計算した衝突径数: $0 \leqq b \leqq 10$ fm

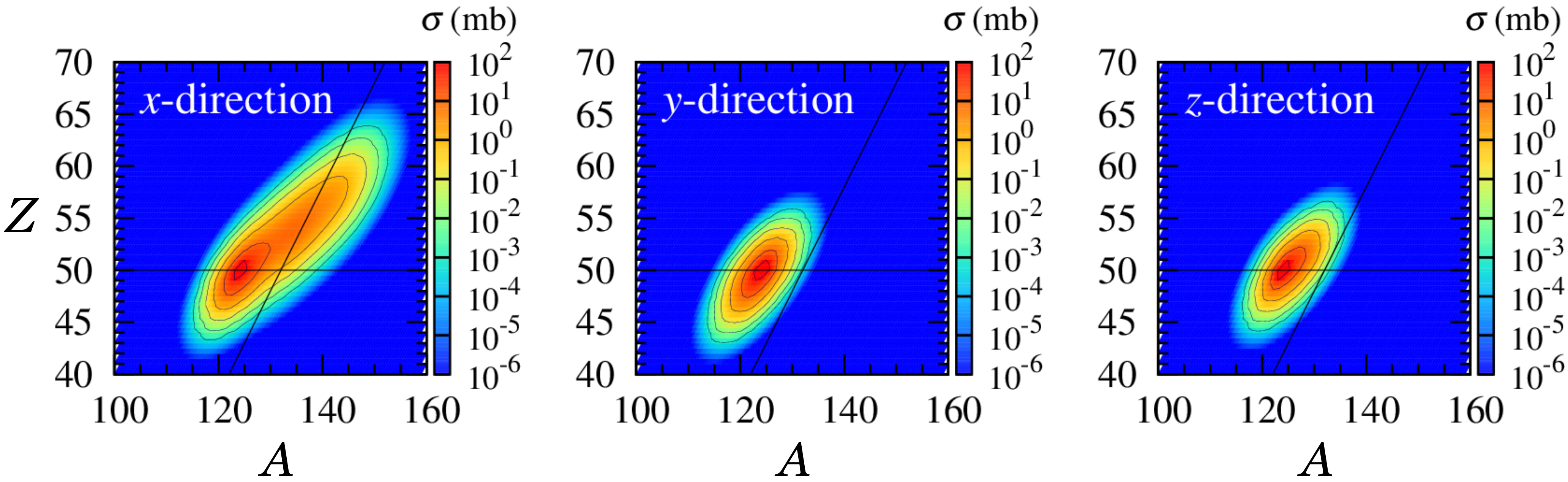
対称軸の向き: z軸方向 / y軸方向 / x軸方向



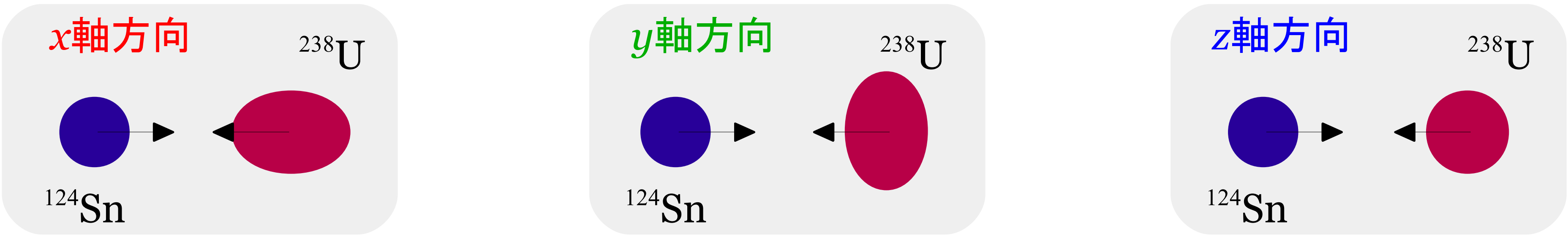
Sn ← U, 約 3 核子移行 / ほとんど移行せず / Sn ← U, 約 17 核子移行

衝突後に生成される原子核の実験値との比較

衝突後にどの原子核がどのくらい生成されるか（反応断面積）

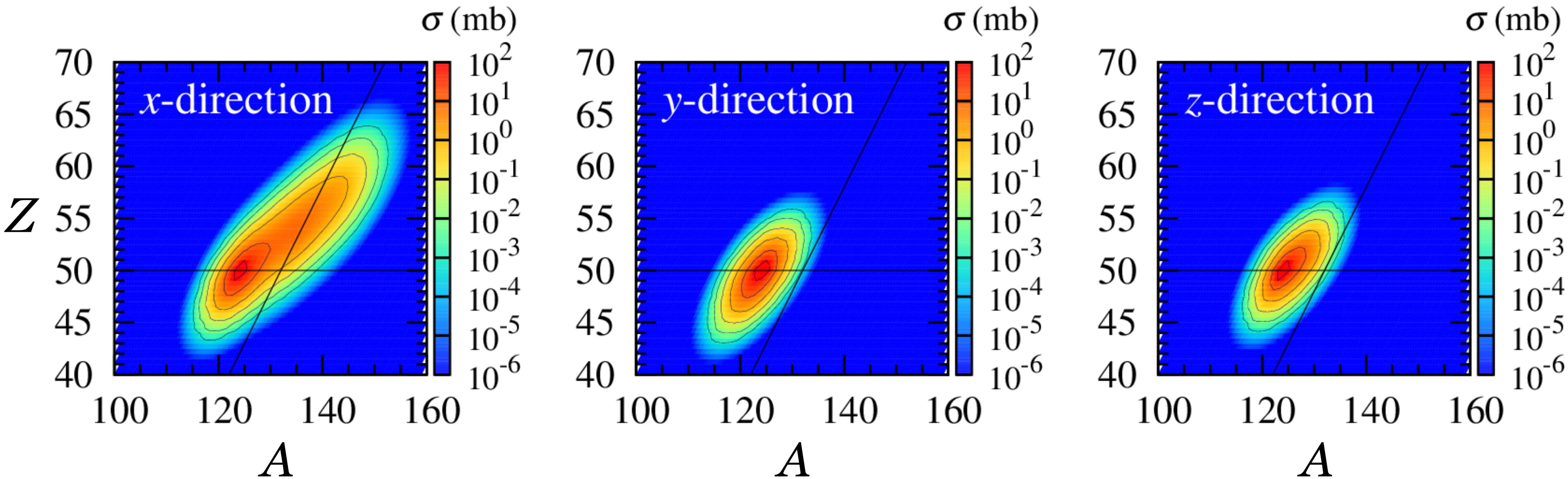


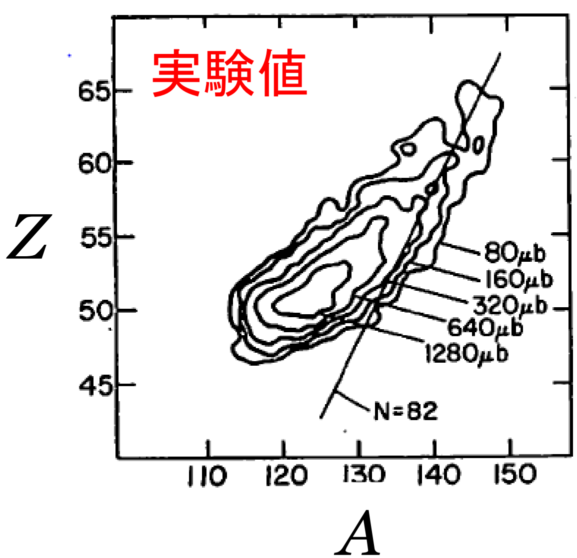
A: 質量数（陽子数+中性子数）
Z: 陽子数



衝突後に生成される原子核の実験値との比較

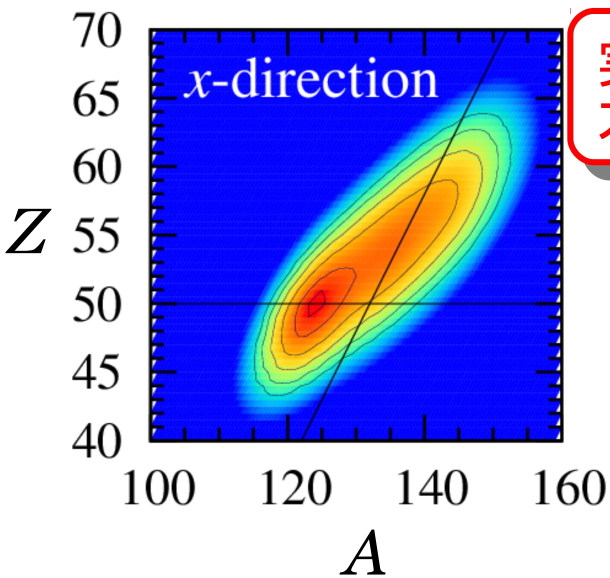
衝突後にどの原子核がどのくらい生成されるか（反応断面積）

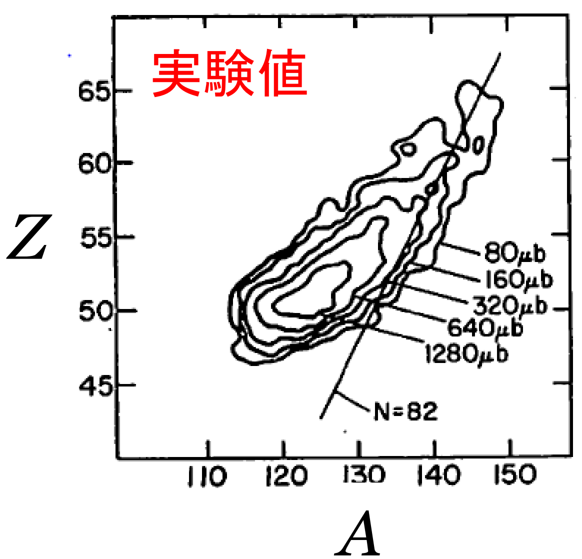




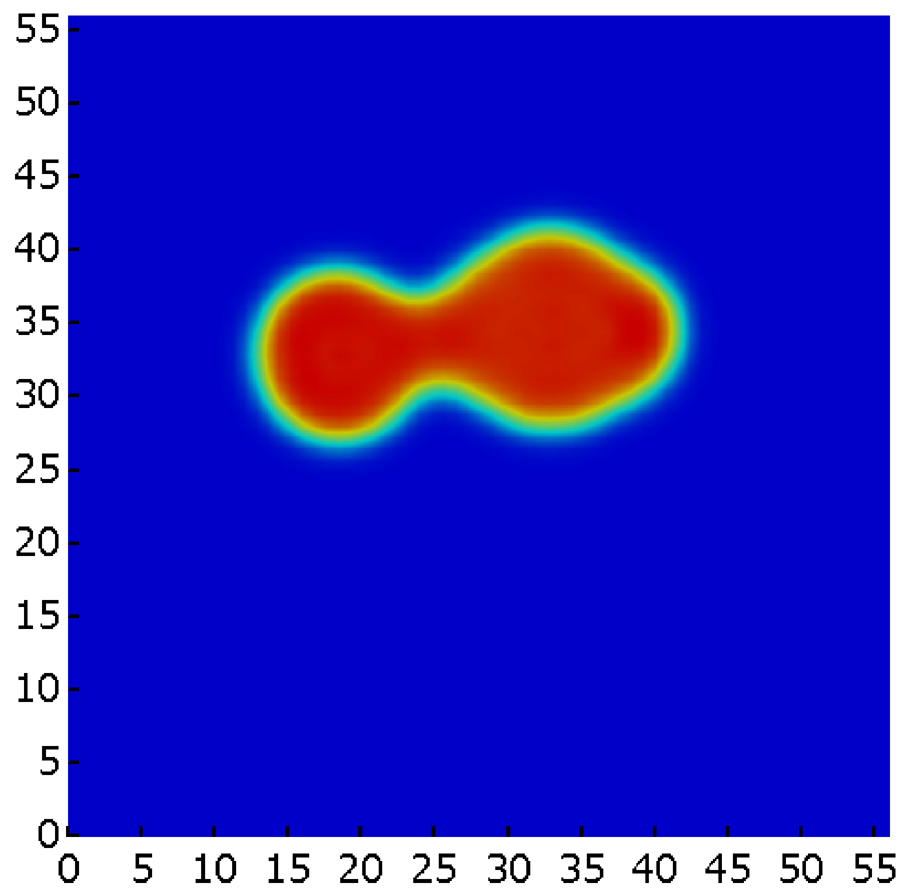
衝突後に生成される原子核の実験値との比較

衝突後にどの原子核がどのくらい生成されるか（反応断面積）





実験で測定されたウランから錫への多数の核子の移行は、
太い“くびれ”構造の形成と断裂を伴う反応ダイナミクスによるもの



発表内容のまとめ

今日、ここで伝えたかったこと

1．導入：　我々が、何に興味をもち、何を目指して研究を進めているか

✔低エネルギー原子核衝突・量子多体ダイナミクスの理解

2．手法：　どんな計算をしたか

✔実時間・実空間 TDDFT・原子核衝突の微視的シミュレーション

3．結果：　計算資源の利用により、どんな成果が得られたか

✔実験で測定されていた多核子の移行を、太い“くびれ”構造を伴う量子ダイナミクスとして理解できることを明らかにした

About me:

Kazuyuki SEKIZAWA

Nuclear Theory Group

Graduate School of Pure and Applied Sciences, University of Tsukuba, Japan

Research Fellow of the JSPS (DC2)

E-mail: sekizawa @ nucl.ph.tsukuba.ac.jp

URL: http://wwwnucl.ph.tsukuba.ac.jp/~sekizawa/english/

Thank you for your attention.