

受付 ID	17a44
分野	原子核

原子核・フェルミ多体系の量子ダイナミクス

Quantum dynamics in nuclear and fermion many-body systems

中務 孝

筑波大学 計算科学研究センター

1. 研究目的

核子多体系である原子核を、核子の自由度から量子力学的に理解する微視的研究は、最近の計算機能力の発展に伴い質的な変貌を遂げている。軽い原子核に対する第一原理的アプローチに加えて、重い原子核から中性子星内部の巨大原子核・無限核物質を対象にできる密度汎関数理論(DFT)による記述が発展している。我々は、DFTに基づく原子核の励起構造・反応機構の研究を進め、これら核子多体系の量子ダイナミクスを微視的観点から理解することを目標に、本研究課題を推進している。特に、時間依存密度汎関数理論(TDDFT)に基づく核分裂・核融合・移行反応過程の研究、また、強相関フェルミ多体量子系として共通する課題であるトラップ中の冷却原子ガスの対相関・超流動ダイナミクスの研究を進め、フェルミ粒子多体系の統一的観点から理解することを目的としている。この目的のため、GPUやメニーコア(コ)プロセッサを用いた高効率のコード開発を行う。

2. 研究成果の内容

HA-PACS/TCA

対称性の制限を一切無くした3次元実空間表示の対凝縮相に対するTDDFTコード(TDSLDA; GPGPUコード)を用いた研究を推進し、低エネルギー核反応における核子超流動性の新たな効果を検証した。エネルギー密度汎関数としてはSkyrme型の密度汎関数を用いている。対凝縮相にある2つの原子核による重イオン衝突シミュレーションにおいて、対ポテンシャルがソリトンの励起を引き起こすことをデモンストレートし、これによって原子核衝突現象に定性的な変化が現れることを予言した。ソリトン励起は集団エネルギーの散逸を阻害し、これによって核融合断面積が小さくなることを示した。また、実験で観測されるフラグメントの全運動エネルギー分布の起源について、超流動原子核特有の効果を示唆した。

また、中性子星のインナークラストのシミュレーションとして、中性子流体中の原子核のダイナミクスを研究した。原子核の有効質量や超流動中性子との結合効果

などを主な対象として、計算結果を得た。現在、詳細な内容について解析中である。

COMA

対凝縮相にある原子核同士の衝突における核子移行について研究を進めた。昨年まで開発を進めてきた Gogny エネルギー汎関数を用いた対凝縮相に対する TDDFT コード (TDHFB、MPI 並列) に対し、相対ゲージ角に関する平均化を導入することで、近似的に破れたゲージ対称性を回復させた。また、核子移行反応を解析するため、3重粒子数射影法を開発・導入した。これらの手法の妥当性を検証するため、厳密解が求められる簡単な模型を用いた解析を行い、その後、 $^{20}\text{O}+^{20}\text{O}$ や $^{14}\text{O}+^{20}\text{O}$ といった比較的軽い原子核の衝突シミュレーションを実行した。

また、核融合・核分裂現象の解析において重要となるポテンシャル・エネルギー面 (Gogny 汎関数) の微視的計算を実行するため、様々な形状の原子核を正確に計算できる ALM (augmented Lagrangian method) と呼ばれる拘束条件付き計算の HFB コードを開発した。これを用いて、 ^{32}S の原子核を対象に、四重極変形・八重極変形の混在した形の原子核を計算することに成功した。まだコードの計算効率や収束の遅さなどに問題があるが、これまで数値計算の対象にできなかったパリティと軸対称性を同時に破った変形状態に対する数値計算を可能にすることを目標としており、コードの改良を進めている。

Skyrme 型エネルギー汎関数による計算では、3次元空間上での密度汎関数法に基づく線形応答計算 (QRPA、OpenMP) のコードを開発した。基底状態に鏡映対称性を仮定しているが、軸対称性を破ったいわゆるガンマ変形を持つ三軸非対称状態においても使えるコードである。開発したコードを用いて非軸対称原子核の多重極モードの線形応答計算を行なった。次に、開発したコードを応用して集団ハミルトニアン模型の回転の慣性モーメントの計算を任意の四重極変形に対して行なった。OpenMP による並列計算で各エネルギー、各変形度当たり10分程度で計算できるコードであり、今後、集団ハミルトニアン (ボア模型) の中に含まれるパラメータを微視的に導出するために利用する予定である。理研における実験で最近得られた中性子過剰 Zr, Mo, Ru 原子核の低励起状態に関するデータに対して、5次元四重極ハミルトニアンによる系統的な解析を進めており、複数の原子核密度汎関数 (SkM*, SLy4, SLy5+T) を出発点とした計算を比較。特にガンマ振動バンドを系統的に分析した。これは理化学研究所の実験グループとの共同研究である。また、基底状態の軸対称性を仮定した QRPA 計算コードを用いて、中性子過剰核におけるスピン・アイソスピン応答を系統的に計算し、荷電交換反応に新しいタイプのモードが出現することを予言した。

Oakforest-PACS

OFP 利用の初年度となる平成 29 年度では、メニーコアプロセッサ (Knights Landing アーキテクチャ) に対する新たなコード開発に取り組んだ。COMA を用いた計算でこれまで用いてきた HFB 計算は、準粒子軌道を大量に求めることから密度・対密度を構成し、自己無撞着に状態を決定する従来の手法を用いてきた。しかしながらこの手法では、対称性の制限を一切排除したフル 3 次元実空間基底のコードがうまく収束しないことがわかってきた。これを解決するため、準粒子軌道を用いない新たな HFB 計算コードを開発し、メニーコアプロセッサ用にチューニングを行った。この方法では、最大で空間格子点の数までのノード数において、これまでにない高い並列効率が得られ、これまでの開発で、スピン・軌道相互作用を無視した HFB 計算のコード開発が終了している。このコードを用いて、いくつかのテスト計算に加えて、中性子星のクラストを対象とした pasta 相と呼ばれるエキゾチック相の完全自己無撞着 HFB 計算を実行した。アウター・クラストに対しては現状の周期境界条件コードにおいても正確な計算が可能であるが、インナー・クラストに対して精密な計算を実行するためには Bloch 境界条件を課す必要があり、このためのコード開発を進めている。

3. 学際共同利用として実施した意義

学際共同利用を通じたスパコンの無償利用によって、これまで様々な対称性の制限を付けて行ってきた計算を、フル 3 次元に拡張することについて目処がついてきている。有限振幅法を用いた線形応答計算 (COMA) や、準粒子軌道を求めずにグリーン関数から直接密度を計算する新しい HFB 計算 (OFP) の開発が大きく進んだ。これらの開発で重要であったのが、国際的な協力関係であり、学際共同利用の中でポーランド・ワルシャワ工科大グループと進めてきた共同研究は特に重要な寄与をしている。HA-PACS/TCA の利用は平成 29 年度が最終年度となるが、GPU コードである TDSLDA によって、重イオン反応の新しい様相を明らかにするなど、多くの重要な成果をあげることができた。平成 30 年度は、東工大 TSUBAME 3.0 の HPCI プロジェクトとして採択され、引き継がれている。

4. 今後の展望

Oakforest-PACS の利用に向けて、これまで COMA の利用で開発してきたコードを Knights Landing 用にチューニングすることを進めていきたいと考えている。現状では、3 次元実空間基底 HFB 計算コードのみがチューニングを済ませているが、他のコードは COMA を用いた利用の方が高速で実行可能な状態である。平成 30 年度では、将来に向けて、この現状を変えていくよう努力する。その先には、核構造・核反応・中性子星において、核子超流動性がもたらす様々な集団的現象を微視的・統一的観点から

解明していく予定である。

5. 成果発表

(1) 学術論文 12 件

- ① S. Ebata and T. Nakatsukasa, “Octupole deformation in the nuclear chart based on the 3D Skyrme Hartree-Fock plus BCS model”, *Phys. Scr.* 92, 64005 (2017).
- ② K. Wen and T. Nakatsukasa, “Adiabatic self-consistent collective path in nuclear fusion reactions”, *Phys. Rev. C* 96, 14610 (2017).
- ③ K. Washiyama and T. Nakatsukasa, “Multipole modes of excitation in triaxially deformed superfluid nuclei”, *Phys. Rev. C* 96, 041304(R) (2017).
- ④ K. Yoshida, “Charge-exchange dipole excitations in neutron-rich nuclei: $-1\hbar\omega_0$, anti-analog pygmy and anti-analog giant resonances”, *Phys. Rev. C* 96, 051302(R) (2017).
- ⑤ G. Scamps and Y. Hashimoto, “Transfer probabilities for the reactions $^{14,20}\text{O} + ^{20}\text{O}$ in terms of multiple time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov trajectories”, *Phys. Rev. C* 96, 031602(R) (2017).
- ⑥ P. Baczyk, J. Dobaczewski, M. Konieczka, W. Satula, T. Nakatsukasa, and K. Sato, “Isospin-symmetry breaking in masses of $N=Z$ nuclei”, *Phys. Lett. B* 778, 178-183 (2018).
- ⑦ P. Magierski, K. Sekizawa, G. Wlazlowski, “Novel Role of Superfluidity in Low-Energy Nuclear Reactions”, *Phys. Rev. Lett.* 119, 042501 (2017).
- ⑧ P. Magierski, K. Sekizawa, and G. Wlazlowski, “Solitonic excitations in collisions of superfluid nuclei: a qualitatively new phenomenon distinct from the Josephson effect”, *EPJ Web Conf.* 163, 51 (2017).
- ⑨ K. Sekizawa, P. Magierski, and G. Wlazlowski, “Solitonic Excitations in Collisions of Superfluid Nuclei”, *PoS(INCP2016)* 214 (2017).
- ⑩ K. Washiyama and T. Nakatsukasa, “Multipole modes for triaxially deformed superfluid nuclei”, *JPS Conf. Proc.*, in press; arXiv:1803.06828.
- ⑪ K. Wen and T. Nakatsukasa, “Nuclear reaction path and requantization of TDDFT”, *JPS Conf. Proc.*, in press; arXiv:1802.03124.
- ⑫ F. Ni and T. Nakatsukasa, “Comparative study of requantization of time-dependent mean-field for pairing dynamics”, *Phys. Rev. C*, in press; arXiv:1712.02954.

(2) 学会発表 46 件

- ① T. Nakatsukasa, “Nuclear structure physics and time-dependent

approaches”, School cum collaboration meeting on nuclear structure and reaction, 2018.1.1-22, Kolkata, India.

- ② T. Nakatsukasa, “Nuclear structure physics in RIBF”, International symposium on RI beam physics in the 21st century: 10th anniversary of RIBF, 2017.12.4-5, Wako, Japan.
- ③ T. Nakatsukasa, “Isospin symmetry breaking effect on nuclear mass”, KLFTP/CAS-BLTP/JINR Joint Workshop on Physics of Strong Interaction, 2017.11.26-12.1, Shenzhen, China.
- ④ T. Nakatsukasa, “Nuclear reaction path and requantization of TDDFT”, Ito international research center (IIRC) symposium “Perspectives of the physics of nuclear structure”, 2017.11.1-4, Tokyo, Japan.
- ⑤ T. Nakatsukasa, “Quantization of mean-field dynamics”, Huzhou-CUSTIPEN workshop on Spectroscopy and reactions of exotic nuclei, 2017.7.3-9, Huzhou, China.
- ⑥ T. Nakatsukasa, “Quantized TDDFT dynamics”, Interdisciplinary symposium on modern density functional theory, 2017.6.19-23, Wako, Japan.
- ⑦ T. Nakatsukasa, “Collective coordinate, reaction path, and inertial mass in large-amplitude nuclear collective motion”, Probing fundamental interactions by low energy excitations, 2017.6.5-9, Stockholm, Sweden.
- ⑧ K. Washiyama, “Isospin symmetry breaking effect on nuclear mass”, KLFTP/CAS-BLTP/JINR Joint Workshop on Physics of Strong Interaction, 2017.11.26-12.1, Shenzhen, China.
- ⑨ G. Scamps, “Study of the effect of the superfluidity on the fusion barrier”, KLFTP/CAS-BLTP/JINR Joint Workshop on Physics of Strong Interaction, 2017.11.26-12.1, Shenzhen, China.

以上、課題参加者による国際会議での招待講演のみ記載。これ以外に 37 件。

使用計算機	使用計算機 に○	配分リソース*	
		当初配分	追加配分
HA-PACS/TCA	○	19,000	
COMA	○	4,3200	21,600
Oakforest-PACS	○	163,840	40,960
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			