

核データ部会セッション[「シグマ」調査専門委員会共催]

三体核力研究と核データ応用への期待

Study of Three-body Nuclear Force and its Expectations for Nuclear Data Production

(2) 密度汎関数理論を用いた核子多体系の記述

(2) Description of Nucleon Many-body Systems using Density Functional Theory

中務 孝

筑波大学 計算科学研究センター

1. 緒言

密度汎関数理論は、原子・分子や固体などの多電子系の第一原理計算として有名であるが、原子核物理においては、Brueckner Hartree-Fock (BHF) theory に対して局所密度近似と密度行列展開を実行し導出される Density-Dependent Hartree-Fock (DDHF) theory として知られる理論と同一視されている。BHF では、原子核の最も基本的な性質である飽和性を定量的に再現することが困難であり (cf, Coester band)、三体力の必要性に絡めて様々な議論がなされてきた[1]。一方 DDHF では、密度行列展開から導出されるエネルギー密度に対して、飽和性を再現するように密度依存性を調整することで、原子核の定量的な記述が可能となり、DDHF と実質的に同等な現象論的エネルギー密度汎関数である Skyrme エネルギー密度汎関数計算、密度依存 Gogny 相互作用を用いた計算、相対論的平均場理論から発展した共変型エネルギー密度汎関数計算が幅広く用いられている。現在、これらはどれも原子核密度汎関数理論として知られている。

2. エネルギー密度汎関数による原子核の記述

2-1. 基底状態

原子核基底状態の性質については、実験的には質量や荷電半径、反応断面積などの測定が行われる。これらの物理量に対して、密度汎関数理論は定量的な記述を与え、例えば質量に関しては平均誤差で 3 MeV を切るエネルギー汎関数も開発されている。荷電密度分布などに対しても実験データの再現性は高い。開殻配位の原子核を含めた計算を実施するためには、エネルギー密度汎関数として通常密度の ρ_n 、 ρ_p に加えて対密度 κ_n 、 κ_p を加えた密度汎関数を用意する必要があり、また変形を取り入れて自己無撞着に決定する必要がある。これらを有限核に対して実行できるオープンソースウェアが複数存在する。一方で、うまくいかない点も分かっている。例えば質量に関しては、陽子・中性子数が魔法数に対応する開殻配位の原子核の質量を再現させると、開殻配位の核種の質量を過大評価してしまうことが知られている。また、現在の汎関数は核力とのリンクが切れてしまっているため、核力から核構造を理解するという観点では不満足な点が残されている。

2-2. 励起状態

励起状態の記述には、主に二つの方法が採用される。一つは、配位混合を考慮することで基底状態に対して相関エネルギーを導入するとともに、励起状態を計算する方法である。生成座標法 (GCM) などが良く知られている。この方法は量子力学的な手法で分かりやすい一方、エネルギー密度汎関数のコンセプトとの整合性に問題がある。また、密度依存性からくる数値的な不安定性も大きな問題である。

もう一つの手法は時間依存密度汎関数理論に基づく手法である。基底状態の周りでの線形応答を考慮することで、励起状態の情報を得ることができる。魔法数周辺の球形の原子核に対する計算が系統的に実施され、最近では変形核を含めた開殻配位の核種に対する計算も行われるようになってきた。これに対しては、有限振幅法[2,3]と呼ばれる方法が現在世界的に広く使われ、系統的な計算も行われている。巨大共鳴状態の実験データを高精度で再現することが知られている。低エネルギー状態に対しては、集団ハミルトニアンからアプローチする手法が取られている[3]。

核反応に対しても時間依存密度汎関数計算が広く行われている。平均的な振る舞いをうまく説明することが知られる一方で、レアイベントの記述はできない。また、量子力学的なトンネル効果をフルに取り入れた記述ができないため、自発的核分裂などの計算を直接行うことができない。これに対して、時間依存密度汎関数理論に基づき、低エネルギー核反応の模型ハミルトニアンを微視的に導出するアプローチが取られている[4]。また、直接反応に対しては、上記の線形応答計算から遷移密度を計算し、反応模型に導入する形で計算が行われている[5]。

2-3. 核反応

核反応に対しても時間依存密度汎関数計算が広く行われている。この手法は古くは1970年代から用いられ重イオン反応の平均的な振る舞いをうまく説明することが知られる一方、レアイベントの記述はできないとされてきた。また、量子力学的なトンネル効果をフルに取り入れた記述ができないため、自発的核分裂の時間発展を直接追うことができない。虚時間発展法[1]といった手法が提唱されているが、現実的な計算例はまだ存在しない。これに対して我々は、時間依存密度汎関数理論に基づき、低エネルギー核反応の模型ハミルトニアンを微視的に導出するアプローチが取ることで一定の成功を収めた[4,5]。また、直接反応に対しては、定量的に必ずしも成功しているとは言い難いが、上記の線形応答計算から遷移密度を計算し、反応模型に導入する形で計算が行われている[6]。

3. 結語

本講演では、原子核密度汎関数理論の最近の発展を簡単にレビューし、上記の内容に関する原子核構造・反応に対するアプローチ、計算結果を紹介する。成功した点に加えて、うまくいかない点や問題点についても議論したい。また、時間が許せば中性子星物質を対象にした研究についても紹介する。

謝辞 本研究はJST/ERATO（課題番号JPMJER2304）の助成を受けたものである。

参考文献

- [1] J. Negele, Rev. Mod. Phys. 54, 913 (1982).
- [2] T. Nakatsukasa, T. Inakura, and K. Yabana, Phys. Rev. C 76, 024318 (2007).
- [3] T. Nakatsukasa, K. Matsuyanagi, M. Matsuo and K. Yabana, Rev. Mod. Phys. 88, 045004 (2016).
- [4] K. Wen and T. Nakatsukasa, Phys. Rev. C 94, 054618 (2016); *ibid* 96, 014610 (2017); *ibid*. 105, 034603 (2022).
- [5] K. Washiyama, N. Hinohara, and T. Nakatsukasa, Phys. Rev. C 103, 014306 (2021).
- [6] Y. Chazono, K. Yoshida, K. Yoshida, and K. Ogata, Phys. Rev. C 103, 024609 (2021).