

原子核および中性子星の量子ダイナミクス

Quantum dynamics in nuclei and neutron stars

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。特に、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)による記述が近年目覚しく発展している。また、重力波による中性子星合体の観測と重元素合成を示唆するデータの観測など、中性子星の観測データも近年大きな発展を見せている。そこで本研究プロジェクトでは、DFT に基づく原子核の励起構造・反応機構の研究を進め、ミクロな原子核の研究をマクロな中性子星パルサーの観測データと結びつけ、核子多体系の量子ダイナミクスに対する理解を深めることを目的とする。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、中性子星インナー・クラストの構造と自由中性子の対相関・超流動ダイナミクスの研究を進める。この目的のため、メニーコア・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

中性子星の有限温度でのクラストを対象とした数値計算を実行した。同じ密度・温度において、これら fcc 配位と bcc 配位でのエネルギー差はわずかであり、高精度な計算が求められる。また、密度を固定した有限温度の計算では、自由エネルギーを最小化することで最適な配位が決まることになるが、ここでエントロピーの計算が必要となる。エントロピーの計算には固有エネルギーが必要となり、ハミルトニアンに対角化が全計算時間のかなりの部分を占めていた。そこで、(4)式で固有エネルギーの代わりにハミルトニアン演算子を導入し、多項式近似を採用することにより、対角化を用いずに計算する方法を試すことにした。その結果、計算時間を大きく短縮することができることが分かった。

また、2020 年度では、渦糸 (vortex) の計算を開始した。中性子物質内において、対密度 $\kappa(\mathbf{r})$ の位相をある直線の周りで 2π 変化させた初期状態から計算を始めること

で、渦糸の入った中性子物質の計算を行うことが可能であることが分かった。自己無撞着解に向けた反復によって、自動的に対密度 $\kappa(\mathbf{r})$ は渦糸の近傍でゼロとなることが確かめられ、より精密な計算の実行に向け、Oakforest-PACSにおけるコードのチューニング等を現在行っている。

3. 学際共同利用が果たした役割と意義

2020年度も2019年度に引き続き、HPCI一般利用課題のプロジェクトとしてもOakforest-PACSを用いたプロジェクトが採択された。2019年度には、これによって、十分な計算資源を確保することができ、大きな進展を達成することができた。2020年度は、コロナ禍でプロダクトランを中心的に実行していた大学院生が体調を崩すなど、思った通りの利用ができず、学際共同利用プログラムでMCRP-Lクラスとして採択され提供を受けたリソースのほとんどが未使用となってしまった。

4. 今後の展望

2020年度に計算を開始した渦糸 (vortex) の計算をさらに押し進め、さまざまな密度・温度における渦糸ダイナミクスの解明を進めていきたい。この研究は、パルサー・グリッチの謎解明にも直結する課題となる。また、コロナ禍に関係して、グループ体制が弱体化しているため、2021年度の申請では大幅に希望リソースを削減し、MCRP-Mクラスにおいて申請し、体制の立て直しをはかることにする。

5. 成果発表

(1) 学術論文

- ① Takashi Nakatsukasa, Yu Kashiwaba, Fang Ni, Kouhei Washiyama, Kai Wen, Nobuo Hinohara, “Nuclear structure and reaction with quantum shape fluctuation”, JPS Conf. Proc. 32, 010024 (2020).
- ② Yu Kashiwaba, Takashi Nakatsukasa, “Coordinate-space solver for finite-temperature Hartree-Fock-Bogoliubov calculations using the shifted Krylov method”, Phys. Rev. C 101, 045804 (2020).
- ③ Yue Shi, Nobuo Hinohara, Bastian Schuetrumpf, “Implementation of nuclear time-dependent density-functional theory and its application to the nuclear isovector electric dipole resonance”, Phys. Rev. C 102, 044325

(2020).

- ④ J. Ha, T. Sumikama, F. Browne, N. Hinohara, et. al., “Shape evolution of neutron-rich $^{106,108,110}\text{Mo}$ isotopes in the triaxial degree of freedom”, Phys. Rev. C 101, 044311 (2020).
- ⑤ Kouhei Washiyama, Nobuo Hinohara, Takashi Nakatsukasa, “Finite-amplitude method for collective inertia in spontaneous fission”, Phys. Rev. C 103, 014306 (2021).

(2) 学会発表

- ① Nobuo Hinohara, “Calculation of double-beta decay nuclear matrix elements using QRPA”, 12th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Online, Oct. 6, 2020.
- ② Takashi Nakatsukasa, “Quantum dynamics in nuclei and neutron stars”, 12th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, Online, Oct. 6, 2020.
- ③ 中務 孝、「Microscopic collective inertial masses in nuclear reaction」、第3回クラスター階層領域研究会、オンライン、2020年5月18日。
- ④ 日野原伸生、「ニュートリノレス二重ベータ崩壊原子核行列要素計算の現状」、ニュートリノを伴わない二重ベータ崩壊とその周辺、オンライン、2021年2月21日（招待講演）。
- ⑤ 日野原伸生、「Effect of pairing and deformation on nuclear charge distribution」、ELPH 研究会 C028 「電子散乱による原子核研究 一原子核の電荷密度・陽子・中性子の分布と半径一」、オンライン、2021年3月21日（招待講演）。
- ⑥ 日野原伸生、「原子核密度汎関数法による対振動・対移行反応の記述」、日本物理学会第76回年次大会、オンライン、2021年3月12-15日。

(3) その他

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
Cygnus	○	2500	
Oakforest-PACS	○	400000	
※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。			