

企画セッション（核データ部会主催・「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」

## (2) 密度汎関数理論を用いた核子多体系の記述

筑波大学

中務 孝

[nakatsukasa@nucl.ph.tsukuba.ac.jp](mailto:nakatsukasa@nucl.ph.tsukuba.ac.jp)

### 1. はじめに

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はほぼ同一視されている。BHF では、原子核の最も基本的な性質である飽和性を定性的には再現するものの定量性には困難があり、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。その最大の特徴は普遍性である。殻模型やクラスター模型等で用いられる有効相互作用では、原子核ごと、あるいは質量領域・模型空間ごとに相互作用を調整する必要があるが、全ての原子核に対して同一のエネルギー密度汎関数を用いた定量的記述が可能な点は大きな特徴・長所であろう。非自明な密度依存性がここでは本質的であり、状態依存性のない有効相互作用で平均場近似を行った場合、どんな有効相互作用でも定量的には必ず失敗することを簡単に示すことができる [2]。

### 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  $\rho_n \cdot \rho_p$  に加えて対密度  $\kappa_n \cdot \kappa_p$  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ソフトウェアが現在複数存在する。

原子核の変形はシェル・エネルギーと呼ばれる量子効果として理解できることはよく知られている [3]。フェルミ粒子特有のシェル構造と呼ばれる 1 粒子準位密度の濃淡が重要な役割を果たすものとして、原子核物理では良く知られているが、本質的なことは、量子的な零点振動としての運動エネルギーとパウリ原理の相乗効果だと言える。この点についての一般向け解説としては参考文献 [4] を参照されたい。密度汎関数計算では、この変形に関する性質は一般的に非常によく実験を説明する。1 粒子エネルギーの詳細な構造はエネルギー汎関数ごとに少しずつ異なっているが、1 粒子準位密度の濃淡という意味では信頼性の高い予言能力があると言える。

一方で、うまくいかない点も分かってきている。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閉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。1 粒子準位の詳細に依存する奇核の基底状態のスピン・パリティなどの再現性はおよそ 50% である。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。この最後の点について、最近の我々の研究で、密度汎関数と核力から微視的に導出された有効相互作用を比較することで、Gogny 型密度汎関数の密度依存相互作用が 3 体核力と同様の効果をもたらしていることを見出した [5]。3 体核力効果が核物質の飽和性に大きな影響があることも知られており、その事実とも consistent な結果である。

## 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、一般の密度汎関数に適用すると理論として破綻するという問題がある [6]。そこで、我々は調和振動子基底による CI (Configuration Interaction) 計算としての殻模型計算を密度汎関数理論と融合したハイブリッドモデルを提唱し、軽い原子核における低励起スペクトルをよく再現することを示した [5]。

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えることで、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 [7,8] と呼ばれる方法が現

在世界的に広く使われ、核図表全体に対する系統的な計算も行われている。線形応答計算は、巨大共鳴状態の実験データを高精度で再現する一方、低エネルギー状態に対しては定量性に関して満足できるレベルにない[2]。これに対して、我々は集団自由度を自己無撞着に抽出し、構築された集団ハミルトニアンを再量子化するアプローチを提唱している[2,9]。最近、5次元集団ハミルトニアンを有限振幅法を用いた手法によって構築することに成功し、これまで無視されてきた残留相互作用の効果を取り入れた集団慣性質量の計算ができるようになった[10]。これはこの方面の発展において大きなブレイクスルーだと考えている。

### 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。初期状態を適当に設定した上で時間発展を計算する手法は原子核物理では古く、1970年代から重イオン反応の記述に成功し、反応の平均的な振る舞いをうまく説明することができる。一方、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、例えば自発的核分裂の時間発展を直接追うことはできない。これに対して虚時間発展法[1]といった手法が提唱されているが、多次元空間の中の周期軌道を求める必要があり、現実的な計算例はまだ存在しない。我々は、2-2でも述べた再量子化の手法をとることでこの困難を回避している。すなわち、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し、これを再量子化して量子力学的モデルを構築する。これによって密度汎関数理論に基づいて量子力学的過程を計算できる反応モデルの構築が可能となる[11,12]。また、直接反応に対しては、線形応答計算から遷移密度を計算し、反応モデルに導入する形での計算を計画している[13]。定量的にはまだ問題が残っているが、最近、原子核内における核子対の構造に関する研究をスタートさせた。まだ解析の途中ではあるが、核内の場所によって核子対構造、特に陽子・中性子の対構造は大きく変化する可能性が示唆されている。今後、この成果を核反応模型に対するインプットとして利用できる形に整備していくことを検討中である。

### 3. まとめ

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、原子核構造・反応に対するアプローチ、計算結果、および筑波大グループの研究成果を紹介した。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することで、今後の研究方針に関してさまざまな示唆を得ることができた。筑波大においては、ここで述べた密度汎関数理論に基づく研究だけでなく、媒質中の類似繰り込み群(IM-SRG)法を活用して核力と核構造の関係を直接探索する研究も推進している。これらの研究は密度汎関数の改善にもつながる研究として重い原子核の記述に有益な情報をもたらすものと期待している。

本研究は JST/ERATO (課題番号 JPMJER2304) の助成を受けたものであり、一部の研究は  
科研費 23K25864 の助成も受けている。

### 参考文献

- [1] J. Negele, *Rev. Mod. Phys.* 54, 913 (1982).
- [2] T. Nakatsukasa, K. Matsuyanagi, M. Matsuo, and K. Yabana, *Rev. Mod. Phys.* 88, 045004 (2016).
- [3] P. Ring and P. Schuck, “The nuclear many-body problem”, Springer-Verlag (New York, 1980).
- [4] 中務孝:「未知同位体の計算核データ～原子核の形と理論計算核データ～」、ISOTOPE NEWS No.765、p.18 (2019).
- [5] K. Yoshinaga, N. Shimizu, and T. Nakatsukasa, submitted to *Particles*, arXiv:2505.01072.
- [6] J. Dobaczewski, M.V. Stoitsov, W. Nazarewicz, and P.-G. Reinhard, *Phys. Rev. C* 76, 054315 (2007).
- [7] T. Nakatsukasa, T. Inakura, and K. Yabana, *Phys. Rev. C* 76, 024318 (2007).
- [8] P. Avogadro and T. Nakatsukasa, *Phys. Rev. C* 84, 014314 (2011).
- [9] T. Nakatsukasa, *Prog. Theor. Exp. Phys.* 2012, 01A207 (2012).
- [10] K. Washiyama, N. Hinohara, and T. Nakatsukasa, *Phys. Rev. C* 109, L051301 (2024).
- [11] K. Wen and T. Nakatsukasa, *Phys. Rev. C* 94, 054618 (2016); *ibid* 96, 014610 (2017); *ibid.* 105, 034603 (2022).
- [12] K. Washiyama, N. Hinohara, and T. Nakatsukasa, *Phys. Rev. C* 103, 014306 (2021).
- [13] Y. Chazono, K. Yoshida, K. Yoshida, and K. Ogata, *Phys. Rev. C* 103, 024609 (2021).