# 密度汎関数法に基づく自発核分裂の記述

鷲山 広平



筑波大学計算科学研究センター

- 1. はじめに:自発核分裂の記述
- 2. 集団慣性質量の記述
- 3. 結果:<sup>240</sup>Pu, <sup>256</sup>Fm
- 4. 結果:Fm同位体

理研RIBFミニワークショップ「理論と実験で拓く中性子過剰核の核分裂, 理研, 2/16-17 2023

# 核分裂と r-process : 先行研究紹介

## r-process 環境下での新しい元素合成ネットワーク計算、BCPM DFT

 $(T = 0.9 \text{ GK}, n_n = 1.0 \times 10^{28} \text{ cm}^{-3})$ 

S.A. Giuliani, G. Martinez-Pinedo, L.M. Robledo, PRC 97, 034323 (2018)



核分裂が元素合成ネットワーク計算に与える影響

- 元素の存在量の変化
- 核分裂片からの中性子放出

核分裂と r-process : 先行研究紹介

r-process 環境下での新しい元素合成ネットワーク計算、BCPM DFT



## <sup>240</sup>Pu fission barrier



#### **WKB** approximation

$$P = (1 + \exp(2S))^{-1}$$
  $T_{1/2} = \ln 2/(nP)$ 

#### Action S

$$S = \int_{s_1}^{s_2} ds \sqrt{2M(s)(V(s) - E)}/\hbar$$

Note: Inertia *M* は原子核の質量、 または分裂片の換算質量ではない。

## <sup>264</sup>Fmの自発核分裂半減期の記述

Path	S(L)	$\log_{10}(T_{1/2}/yr)$
Static + $\mathcal{M}^{C}$	23.4	-7.7
Static + $\mathcal{M}^{C^{p}}$	20.8	-10.0

$$S = \int_{s_1}^{s_2} ds \sqrt{2M(s)(V(s) - E)}/\hbar$$

自発核分裂半減期の不定性

慣性質量 **M** の不定性

Sadhukhan et al, PRC88, 064314 (2013)

慣性質量 M を正確に記述して 不定性を無くしたい

**6**/20

自発核分裂ダイナミクスの理解のために

- 核分裂経路上の集団慣性質量 M を評価する
   信頼性の高い方法の開発
- 集団慣性質量に対する核分裂の動的な効果の
   正しい評価
- 中性子過剰核への応用、同位体依存性

## 集団慣性:集団運動に付随する質量

集団運動:原子核内の核子が多数参加・協力した運動

# 並進運動に対する慣性 = 物体の質量

$$R(\theta,\phi) = R_0(1 + \sum_{\lambda\mu} \alpha^*_{\lambda\mu} Y_{\lambda\mu}(\theta,\phi))$$
$$T = \frac{1}{2} \sum_{\lambda\mu} B_\lambda \left| \frac{d\alpha_{\lambda\mu}}{dt} \right|^2$$

 $\lambda = 2$  四重極振動

原子核の表面振動



#### → 原子核の変形しやすさ

# 密度汎関数法 Density functional theory (DFT)

**8**/20

量子多体問題 → 一体ポテンシャル中の <sup>Kohn, S</sup> 相互作用のない自由粒子の問題

Hohenberg, Kohn, Phys. Rev. 136 (1964) B864 ~19000 citations Kohn, Sham, Phys. Rev. 140 (1965) A1133 ~24000 citations

Bender, Heenen, Reinhard, Rev. Mod. Phys. 75 (2003) 121 Nakatsukasa, Matsuyanagi, Matsuo, Yabana, RMP88(2016) 045004

 $E[\rho] \leftrightarrow \rho$ 

エネルギー密度汎関数 Skyrme, Gogny, Covariant, etc. 核図表全体の記述 束縛エネルギー、殻構造、変形など 予言能力

r-process 原子核の記述に最適

# 集団慣性質量の計算手法

# 密度汎関数法 + Cranking 近似

Prochniak et al., NPA730 (2004) 59; Niksic et at., PRC79 (2009) 034303; Delaroche et al., PRC81 (2010) 014303, etc.

- 多くの先行研究 (Skyrme, Gogny, Relativistic, etc.)
- Cranking 近似の問題点

動的効果 (Time-odd terms) を無視、計算量は少ない

## Local QRPA Hinohara et al., PRC82 (2010) 064313

- QRPAで動的効果を考慮
- 計算量が多い

P + Q force,  $\beta$ – $\gamma$  plane Skyrme DFT, axial symmetry Adiabatic SCC

(self-consistent collective coordinate)

Matsuo, Nakatsukasa, Matsuyanagi, PTP103 (2000)

Adiabatic TDDFT

Dobaczewski, Skalski,

NPA369,123(1981)

Hinohara et al., PRC84 (2011) 061302; 85 (2012) 024323 Sato, Hinohara, NPA849 (2011) 53

Yoshida, Hinohara, PRC83 (2011) 061302

# QRPAを用いて慣性 M を計算するイメージ

刺激



0

1.5

ω (MeV)

**10**/20

2.5

3

#### Constrained HFB+ Local QRPA

Skyrme SkM\* EDF + volume pairing 3次元空間 (13.2 fm x 13.2 fm x 19.6 fm) x 2  $E_{OP} \le 60 \text{ MeV}$ 



### QRPA:TDHFBの小振幅近似

Finite amplitude method (FAM) で計算

FAM: 少ない計算コストで QRPA strength function

Nakatsukasa et al., PRC76 (2007) 024318 Avogadro & Nakatsukasa, PRC84(2011)014314 Stoitsov et al., PRC84 (2011) 041305

Hinohara et al., PRC87(2013)06430

Washiyama, Nakatsukasa, PRC96, 041304(R) (2017)



作用積分 S
$$S = \int_{s_1}^{s_2} ds \sqrt{2M(s)(V(s) - E)}/\hbar$$

注意点:四重極モーメントのみを考慮、 質量非対称度=0に固定 ● 作用積分 S を過大評価

Washiyama, Hinohara, Nakatsukasa, PRC103, 014306 (2021)

結果:M(慣性)とペアリング





## 非摂動的なクランキング近似と比較

Baran et al., PRC884, 054321 (2011)

• 大きさの違い

non-perturbative cranking  

$$\frac{F^{i}}{\dot{s}_{i}} = U^{\dagger} \frac{\partial \rho}{\partial s_{i}} V^{*} + U^{\dagger} \frac{\partial \kappa}{\partial s_{i}} U^{*} - V^{\dagger} \frac{\partial \rho^{*}}{\partial s_{i}} U^{*} - V^{\dagger} \frac{\partial \kappa^{*}}{\partial s_{i}} V^{*},$$
密度を座標で微分

Washiyama, Hinohara, Nakatsukasa, PRC103, 014306 (2021)

## 結果:核分裂障壁、中性子過剰Fm 同位体



SkM\* + volume pairing 25x25x35 fm<sup>3</sup>, dx=1.0 fm

基底状態 Q~ 30 b (β~0.26) 核分裂障壁 Q~70-80 b (β~0.61-0.67) 核分裂障壁の高さ 258Fm > 260Fm > 262Fm > 264Fm

#### 慣性質量:同位体間の比較



基底状態近傍で最大 障壁近傍では極小 同位体依存性 258Fm > 260Fm > 262Fm > 264Fm



結果:慣性質量、Fm 同位体



トンネル領域で 1.2-2倍増加 障壁近傍では増加の割合は小さい <sup>258</sup>Fm<sup>-</sup> <sup>260</sup>Fm ..... <sup>262</sup>Fm <sup>264</sup>Fm

20

40

60

Q<sub>20</sub> [b]

80

100

120

**17**/20

## 結果:自発核分裂半減期、Fm 同位体



実験值: N. E. Holden and D. C. Hoffman, Pure Appl. Chem. 72, 1525 (2000)  $P = (1 + \exp(2S))^{-1}$   $S = \int_{s_1}^{s_2} \sqrt{2M(s)(V(s) - E)} / \hbar$   $\approx 2.86 \times 10^{-21} \times (1 + \exp(2S)) \quad (s) \quad [1]$ 半減期の同位体依存性  $QRPA \& Cranking \mathcal{O} \textsterling$   $fg性 \mathcal{O} \geqq \mathcal{O} \rightarrow \textbf{数 ho + 減期 O} \geqq \mathcal{O}$   $t_{QRPA} / t_{crank} \sim \exp[2(S_{QRPA} - S_{crank})]$ 

実験値とのずれ

Triaxial shape

#### Zero-point correction

▶ 半減期を減少させる

[1] A. Baran et al., Nucl. Phys. A 361, 83 (1981).



実験值: N. E. Holden and D. C. Hoffman, Pure Appl. Chem. 72, 1525 (2000)

 $P = (1 + \exp(2S))^{-1}$  $S = \int_{a}^{s_2} ds \sqrt{2M(s)(V(s) - E)}/\hbar$  $T_{1/2} = \ln 2/(nP)$  $\approx 2.86 \times 10^{-21} \times (1 + \exp(2S))$  (s) [1] 半減期の同位体依存性 QRPAとCrankingの差 慣性の違い → 数桁の半減期の違い  $t_{ORPA} / t_{crank} \sim exp[2(S_{ORPA} - S_{crank})]$ 実験値とのずれ

Triaxial shape

#### Zero-point correction

▶ 半減期を減少させる

[1] A. Baran et al., Nucl. Phys. A 361, 83 (1981).

コメント

中性子過剰核領域の系統的計算

多次元集団座標への拡張

簡単な模型とその補正



まとめ

#### 原子核の集団運動と慣性

自発核分裂

→ 半減期の不定性 → 慣性 M の不定性

## CHFB+Local QRPAによる M の評価 既存の手法より正確な記述 M の増大

中性子過剰 Fm isotopes 258--264Fm 自発核分裂半減期の減少

#### 今後の課題

中性子過剰核の系統的解析 多自由度を考慮した核分裂経路

