

東京大学 計算科学アライアンス 海外派遣プログラム報告書

内藤 智也*

2019年3月8日

東京大学 計算科学アライアンス 海外派遣プログラムを用いて、2019年2月24日から3月5日までミラノ大学 物理学科 (Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Milano) および国立原子核物理学研究所ミラノ支所 (Istituto Nazionale di Fisica Nucleare Sezione di Milano) に滞在をし、共同研究を行った。昨年1月下旬の、計算科学アライアンス 海外派遣プログラムの補助によるミラノ大学の渡航で、共同研究を開始しており、本渡航は、その共同研究の継続と発展のための議論を目的とした渡航である。

物性物理学や量子化学で広く使われている密度汎関数理論 (DFT) は、原子核構造の研究にも広く用いられている。これは、電子系と核子系が、相互作用は違うものの、量子多体問題という観点では共通の性質を持つことに由来する。昨年度の海外派遣による渡航により開始した共同研究では、ミラノ大学の Xavier Roca-Maza 助教, Gianluca Colò 教授とともに、物性物理学で広く使われている一般化勾配近似 (generalized gradient approximation, GGA) 交換汎関数を、原子核構造計算における厳密交換エネルギーを再現するように改良する研究を行った [1]。しかし、過去の先行研究 [2] では、原子核の性質 (特に isobaric analog state) に対しては、陽子を点電荷に近似した上で厳密交換を取り扱うだけでなく、陽子の有限半径や真空偏極の効果が無視できないことが示されている。また、電磁気力に起因する相関エネルギーは今まであらわには取り扱われていなかったため、現象論的に様々な手法で近似的に取り扱われていた。そのため、次のステップとして、これらの研究が必要となる。

陽子の有限半径や真空偏極の効果に関する計算について、既に一部は渡航前に開始していたため、本渡航期間中に詳細な結果の議論を行った。本内容は、議論が完了次第、論文を執筆予定である。また、電磁気力に起因する相関エネルギーに関しては、本渡航期間中に、具体的な計算手法について検討を行った。今後も継続的に議論を行い、順次段階を追って論文にまとめていく予定である。これらの研究により核構造に対する電磁気力の寄与の計算精度を向上させることで、核力の荷電対称性の破れの高精度な評価が可能になると思われる。

また、本渡航期間中には、佐川弘幸氏 (会津大学)、酒井英行氏 (理化学研究所)、吉田智氏 (法政大学) もミラノ大学に集まったため、原子核構造の理論と実験の双方に関する One-day workshop が開催された。申請者も本研究に関して報告を行い、非常に活発な議論が行われた。また、佐川氏の滞在期間中には、氏も交えて核力の荷電対称性の破れそのものに関する議論も行った。

最後に、本海外渡航にかかる費用を補助していただいた、東京大学計算科学アライアンス (交通費)、ミラノ大学 (滞在費) に感謝する。

参考文献

- [1] Tomoya Naito, Xavier Roca-Maza, Gianluca Colò, and Haozhao Liang. *Phys. Rev. C* **99**, 024309 (2019).
- [2] Xavier Roca-Maza, Gianluca Colò, and Hiroyuki Sagawa. *Phys. Rev. Lett.* **120**, 202501 (2018).

*東京大学 大学院理学系研究科 物理学専攻 常行研究室