

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 25 年 5 月 23 日現在

機関番号：82110

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2009～2012

課題番号：21740204

研究課題名（和文） 大規模殻模型計算で解明する原子核の殻進化

研究課題名（英文） Shell evolution in nuclei investigated with large-scale shell-model calculations

研究代表者

宇都野 穰 (UTSUNO YUTAKA)

独立行政法人日本原子力研究開発機構・先端基礎研究センター・研究副主幹

研究者番号：10343930

研究成果の概要（和文）：不安定核における殻構造の変化を引き起こすメカニズムの解明に大きく寄与し、大規模殻模型計算を用いた核構造研究によって実証した。特に、中性子数 28 領域の中性子過剰核の構造を統一的に記述する枠組を構築し、シリコン 42 核で魔法数が消滅する起源として、テンソル力による殻構造変化が引き起こすヤーンテラー効果という新しい描像を提示した。さらに、中性子数が 28 を超える中性子過剰核の殻構造を明らかにするとともに、大規模殻模型計算を可能にするモンテカルロ殻模型計算を大きく発展させた。

研究成果の概要（英文）：We have made a large contribution to clarifying the mechanism that causes the evolution of shell structure in unstable nuclei, using large-scale nuclear-structure calculations based on the shell model. In particular, we have constructed a framework that describes the structure of unstable nuclei around neutron number, denoted N , 28, and proposed a new picture named “tensor-force driven Jahn-Teller effect” to account for the origin of the disappearance of the $N=28$ magic number. Furthermore, we have revealed the shell structure of unstable nuclei beyond $N=28$. We have also greatly advanced the Monte Carlo shell-model method to enable very large-scale shell-model calculations.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2009 年度	900,000	270,000	1,170,000
2010 年度	700,000	210,000	910,000
2011 年度	600,000	180,000	780,000
2012 年度	600,000	180,000	780,000
年度			
総計	2,800,000	840,000	3,640,000

研究分野：理論核物理

科研費の分科・細目：（分科）物理学、（細目）素粒子・原子核・宇宙線・宇宙物理

キーワード：核構造、不安定核、殻構造、魔法数、殻模型、有効相互作用

1. 研究開始当初の背景

2000 年代に入ると、世界各地の不安定核実験施設において新しい核構造実験データが次々と出始め、従来の核構造の常識が必ずしも成立しないことがわかってきた。その重要な知見の一つとして、魔法数の消滅と生成が挙げられる。研究開始当初は中性子 20 から 28 程度までの軽い不安定核の研究がとりわ

け盛んに行われ、2000 年代前半に特に深く研究された魔法数 20 の消滅に加え、魔法数 28 もシリコン核で消滅するというデータが出始めていた。また、新しい魔法数 16, 32, 34 の存在が議論され始めていた。魔法数が不安定核で出現・消滅するメカニズムを解明することは、研究開始当初における不安定核研究の中心的課題の一つであり、また、現在も

徐々に重い核へと対象が移りつつも、その流れは続いている。

魔法数の生成・消滅を引き起こすメカニズムとして、中性子ドリップ線に顕著となる弱束縛的性質と核力によるものの二つが指摘されていた。これらのメカニズムの妥当性を実証するために、精度の高い多体理論に基づく核構造研究が望まれていた。

2. 研究の目的

本研究は、核力による殻構造変化（しばしば殻進化と呼ばれる）の解明に資することを目指す。本研究の範囲内では、殻進化を統一的に記述する有効相互作用を提唱するとともに、それを殻模型の有効相互作用に適用し、精密な核構造計算を行うことによって、魔法数 20, 28, 32, 34 などの生成・消滅を核力による立場から統一的に記述することを主な目的とする。

3. 研究の方法

上記の目的の実現のため、以下の二つの研究を遂行する。一つは、殻進化を統一的に記述する有効相互作用の開発である。本研究以前では、テンソル力が殻進化に重要な役割を果たしていることが指摘されていたが、テンソル力の強さや、非テンソル力の役割など不明な点も多かった。この研究では、まず、様々な考察から、これらの不定性を極力狭め、統一的相互作用を作成する。また、それを sd-pf 殻相互作用に適用することで、その有用性を調べる。もう一つの研究は、上記の道具として、モンテカルロ殻模型を発展させることである。モンテカルロ殻模型計算法は、厳密対角化の限界を超える殻模型計算法として、1995 年から開発されてきたが、その当時のコードは現在のスーパーコンピュータに不適合であった。本研究では、研究協力者とともにスーパーコンピュータに適合したモンテカルロ殻模型計算法の開発を進める。

4. 研究成果

(1) 殻進化に関する新たな知見の獲得

一連の殻模型計算によって、殻進化を引き起こすメカニズムの解明、殻構造の現象論的理解に大きな成果が得られた。以下、その主な成果を 3 件報告する。

① sd-pf 殻の新しい有効相互作用の構築とテンソル力起源の魔法数消滅機構の提案

中心力も含んだ普遍的相互作用 (V_{MU} と呼ぶ) を提唱し、球形配位を仮定した有効一粒子エネルギーの計算から、 V_{MU} が実験で示唆されている殻進化を良く記述することを示した (論文リスト⑥)。さらに、 V_{MU} を殻模型相互作用に適用し、sd-pf 殻の殻模型計算を行った結果、中性子 28 領域における殻進化を

適切に記述されることがわかり、さらに、シリコン 42 で魔法数 28 が消滅する新しいメカニズムを提示した (論文リスト②)。

まず、殻進化を記述する普遍的相互作用を得るために、非テンソル力部分を経験的相互作用に基づいて検討した。その結果、sd 殻、pf 殻のいずれでも非テンソル力のモノポール相互作用の強さは、二つの軌道間のスピンの方向にはほとんど依存せず、二つの軌道のノードが一致するかどうかで決定されるという単純な構造を持つことがわかった。こうした性質は、ガウス型の中心力で良く記述されることがわかった。さらに、テンソル力の強さは、これまで $\pi+\rho$ 中間子交換力を仮定してきたが、その仮定は微視的な有効相互作用理論からも正当化されることがわかった。 V_{MU} はこれらの知見から導かれた普遍性を持つものとして作られ、実際、中性子 20 ギャップの変化、ニッケル同位体上の陽子軌道の変化、中性子 50 同調体の中性子軌道の変化など、球形核の殻進化を正しく記述することが示された。

sd-pf 殻の殻模型相互作用で最も不定性の大きい、sd 殻と pf 殻をつなぐ二体力に V_{MU} 相互作用を用いた。この相互作用を SDPF-MU と名付けた。SDPF-MU では、中性子数が 20 から 28 へと変化すると、中心力とテンソル力の協調的な働きにより、陽子の $d_{3/2}$ 軌道と $s_{1/2}$ 軌道間のギャップが急激に狭まるとともに、テンソル力の働きにより、スピン軌道分離エネルギーも大きく狭まる。殻模型計算によってこれらの殻進化を検証した。前者はカリウム同位体の準位の変化から示され、後者は、カルシウム 48 の 1 陽子分離反応の分光学的因子分布によって示された。テンソル力はスピン軌道分離エネルギーを変化させるのが大きな特徴であるが、スピン軌道分離エネルギーの変化を直接的に実証したのはこの研究が初めてである。これは、一粒子状態のフラグメントを正確に記述することのできる殻模型によって可能になったことである。同時に、これは V_{MU} の有用性を非常に定量的レベルで実証した成果であり、重い原子核を含む統一的理解に大きく道を開くものである。

テンソル力によって陽子のスピン軌道分離エネルギーが狭まると、変形軌道を構成する軌道混合が起こりやすくなり、変形が起こりやすくなる。実際、中性子魔法数を持つシリコン 42 では、テンソル力を入れないと球形配位が最も安定で、テンソル力を入れることによって変形が安定化することが示された。また、それによって実験の低い 2^+ 準位を説明した (図 1)。これは、変形を引き起こす新しいメカニズムであり、「テンソル力駆動のヤーンテラー効果」と名付けられた。他の領域でも見られるかどうか、普遍性の解明が

今後期待される。

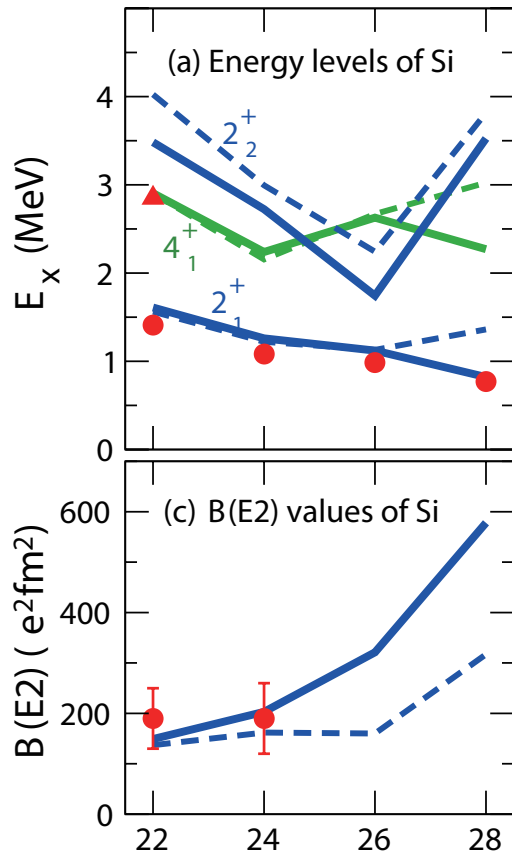


図 1 シリコン同位体におけるエネルギー準位 (上) と $B(E2)$ 値 (下)。横軸は中性子数。実験値を赤のマーク、計算値を線で示す。テンソル力を入れた計算が実線、テンソル力を入れない計算が破線に対応する。論文リスト②より。

②中性子過剰カルシウム同位体における $g_{9/2}$ 軌道の位置の決定

中性子数 28 近辺不安定核の中性子の殻構造については、カルシウム同位体で $g_{9/2}$ 軌道が pf 軌道に近いことが予想されているものの、正確な位置については全く手がかりがないとされてきた。本研究では、中性子過剰カルシウム同位体のエネルギー準位で $g_{9/2}$ 軌道に敏感なものを見出し、そこから $g_{9/2}$ 軌道の位置を決定するとともに、カルシウム同位体のエネルギー準位の統一的記述を与えた(本論文執筆中；一部の成果は論文リスト③に含まれる)。

まず、SDPF-MU 相互作用でカルシウム同位体の 3 準位を計算した結果、中性子数 28 を超えると実験値から著しくずれることを見つけた。そこで、sdg 殻に関わる二体力を V_{MU} 相互作用で与えることにより、SDPF-MU 相互作用を sdg 殻まで自然な形で拡張した。その二体力と、チタン 51 核の $9/2^+$ 準位を基に決定した $g_{9/2}$ 軌道の一粒エネルギーからな

るハミルトニアンでカルシウム同位体の 3 準位を計算すると、実験の準位と非常に良い一致が得られることがわかった。また、波動関数を解析した結果、中性子数が 28 を超えると、3 状態にかなり多くの $g_{9/2}$ 軌道成分が含まれることがわかった。この波動関数は、2 核子移行反応の性質など他の観測量も良く説明する。そこから、カルシウム同位体における $g_{9/2}$ 軌道の位置を決めることに成功するとともに、カルシウム同位体の 3 準位の統一的記述が得られた。この研究で得られた sd-pf-sdg 殻の殻模型ハミルトニアンは、pf 殻核の完全な $1\hbar\omega$ 計算を可能にするものであり、そこから巨大双極共鳴、ビッグミ双極共鳴などの E1 励起も得られる。そこで、2012 年度後半から、sd-pf-sdg 殻計算に基づくカルシウム同位体における E1 励起の系統的研究を進行させている。また、最近の理研 RIBF 実験の理論解析にも本研究結果が用いられている。

③相関エネルギーを考慮した正しい殻ギャップの必要性の指摘

従来、魔法数における殻ギャップ(殻ギャップ上下の一粒エネルギー差)の値として、中性子分離エネルギーを用いた簡単な評価値がよく用いられてきた。これは、Koopmans の定理から、独立粒子描像の極限では厳密に成り立つ。本研究では、現実的な系では、相関エネルギーの効果が大きいので、この簡単な評価値が妥当でないことを突き止めた(論文リスト⑤)。

ここでは具体的な系として、相関エネルギー

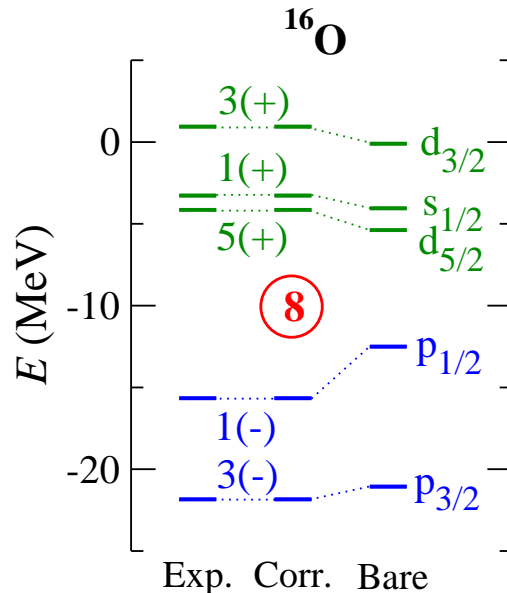


図 2 酸素 17 (緑、粒子準位) と酸素 15 (青、空孔準位) 準位 (左)。左が実験値で、中が相関エネルギーを取り入れた計算値、右が相関を含まない一粒エネルギーによる値。論文リスト⑤より。

一を殻模型によって厳密に計算できる、魔法数 8 に対する殻ギャップを評価した。核子が p 殻から sd 殻に励起することで得られる相関エネルギーを酸素 16 周辺核で計算した結果、二重閉殻である酸素 16 で最大となることがわかった。従って、相関エネルギーを取り入れると、酸素 16 の中性子分離エネルギー $S_n(^{16}\text{O})$ が増大し、酸素 17 のそれ $S_n(^{17}\text{O})$ が減少することから、独立粒子描像での殻ギャップエネルギーに対応する、 $S_n(^{16}\text{O}) - S_n(^{17}\text{O})$ は相関エネルギーの効果によって増大する。このことは、相関エネルギーの影響で増大した $S_n(^{16}\text{O}) - S_n(^{17}\text{O})$ を実験値に合わせるには、図 2 で示されるように、殻ギャップ（一粒子エネルギー差）を小さくしなくてはならないことを意味する。このようにして、相関エネルギーを考慮して一粒子エネルギー差を決め直した殻模型ハミルトニアンで酸素 16 周辺核の励起状態を計算した結果、4 粒子 4 空孔状態とされる酸素 16 の第一励起状態など多くの励起状態を統一的かつ自然な枠組みとして記述することに成功した。sd 殻と pf 殻間のギャップである魔法数 20 でも同様の性質が見られるはずであり、今後、sd 殻から pf 殻への励起を取り入れた一般的な sd-pf 殻相互作用を SDPF-MU 相互作用に基づいて構築する際の重要な指針となる成果である。

(2)モンテカルロ殻模型の発展

新しいモンテカルロ殻模型計算コード開発の過程で、以下の方法論的成果が得られた。これらは、より大規模計算を行う際に必要不可欠な要素となっている。

①エネルギー分散に基づく外挿法の提案と実装

モンテカルロ殻模型では、多体波動関数を精練された少数の量子数射影されたスレーター行列式で表現するが、その波動関数のエネルギー期待値は、厳密解（エネルギー固有値）よりも常にいくらか高い。従来のモンテカルロ殻模型では、厳密解からのエネルギーのずれを評価する方法が存在しないという問題点があった。本研究では、そのずれをエネルギー分散を用いた外挿法によって評価するという手法を提案し、その有用性を実証した（論文リスト⑦、より最近の発展については論文リスト④）。

エネルギー分散は、 $\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$ で与えられ、固有状態であればその値はゼロとなる。新しい外挿法は、その性質を利用する。すなわち、モンテカルロ殻模型で得られた波動関数の近似列を用意し、そのエネルギー分散とエネルギー期待値を 2 次元グラフにプロットし、さらにエネルギー分散をゼロへ外挿することによってエネルギー固有値が評価される（図 3）。この手法自体は、物性物理や殻模型

の厳密対角化法で既に取り入れられていたものであるが、モンテカルロ殻模型では、 $\langle H^2 \rangle$ の計算に多大な数値計算を要するため、これまで実装されてこなかった。本研究では、 $\langle H^2 \rangle$ の新しい定式化により数値計算の分量を二桁以上軽減することに成功し、現実的計算が可能となった。また、厳密解の得られる系で手法をテストした結果、非常に良い評価値が得られることがわかった（図 3）。

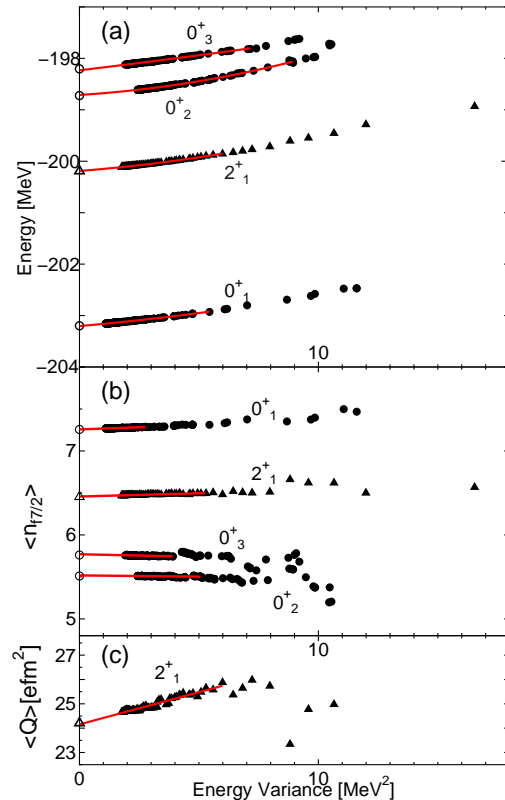


図 3 (a)エネルギー、(b)占有粒子数、(c)四重極モーメントのモンテカルロ殻模型による計算値と厳密解との比較。横軸がエネルギー分散を示す。黒マークで示されるモンテカルロ殻模型の計算値からの外挿線が赤線で、横軸がゼロとなるところの縦軸の値が外挿値となる。厳密解は白抜きマーク。論文リスト⑦より。

②非直交スレーター行列式間の行列要素を高速計算する手法の発見と実装

モンテカルロ殻模型は従来の厳密対角化では計算できない大次元のハミルトニアンを有する系にも適用可能であるが、それでも膨大な数値計算を要する。その多くの部分は、非直交スレーター行列式間のハミルトニアン行列要素（ハミルトニアンオーバーラップと呼ばれる）の計算に費やされる。従って、その計算の高速化は、直接、計算全体の高速化につながる。本研究では、ハミルトニアンオーバーラップを高速計算する数値計算手法を発見し、その効力を最新の計算機上で示

した (論文リスト①)。

ハミルトニアンオーバーラップの計算には、疎な配列の演算が主であるため、これまでは非ゼロの配列のインデックスを用意する、いわゆるリストベクトルを用いた数値計算が行われてきた。リストベクトルではメモリの参照回数が多いため、計算機の理論性能に対して 1,2 割程度の浮動小数点演算しか行うことができない。本研究では、ハミルトニアンオーバーラップの再定式化を行い、その心臓部が密行列とベクトルの積に帰せられることを発見した。また、量子数射影など多くの場合は、密行列積に書き直すことが可能である。密行列積は、メモリのアクセス回数が相対的に少ないため、非常に高い実効性能が得られる。この新しい定式をモンテカルロ殻模型コードに実装し、ハミルトニアンオーバーラップに関して 8 割程度の実行効率を得ることに成功した (図 4)。

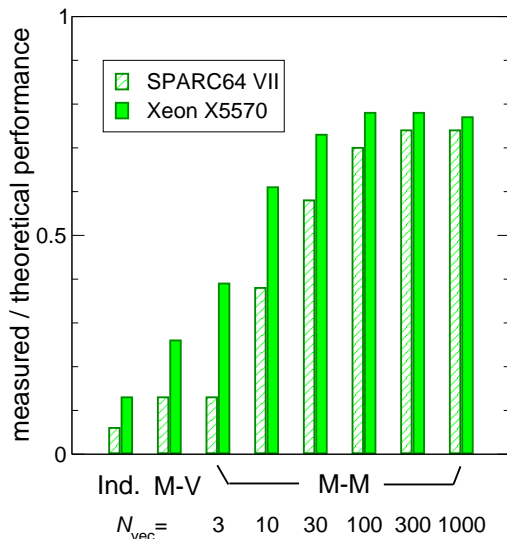


図 4 ハミルトニアンオーバーラップの数値計算の実効効率 (実行性能の理論性能比) をリストベクトル法 (Ind.) と行列積の定式化を実装したもの (M-M) とで比較したもの。 N_{vec} は行列の列のサイズを表し、SPARC64、Xeon ベースの異なる二つのプラットフォームで測定した。論文リスト①より。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 23 件)

- ① Y. Utsuno, N. Shimizu, T. Otsuka, and T. Abe, Efficient computation of Hamiltonian matrix elements between non-orthogonal Slater determinants, *Computer Physics Communications* 184, 2013, 102-108, 査読有

DOI:10.1016/j.cpc.2012.09.002

- ② Y. Utsuno, T. Otsuka, B. A. Brown, M. Honma, T. Mizusaki, and N. Shimizu, Shape transitions in exotic Si and S isotopes and tensor-force-driven Jahn-Teller effect, *Physical Review C* 86, 2012, 051301(R)-1-6, 査読有
DOI: 10.1103/PhysRevC.86.051301
- ③ Y. Utsuno, T. Otsuka, B. A. Brown, M. Honma, T. Mizusaki, and N. Shimizu, Shell evolution around and beyond $N=28$ studied with large-scale shell-model calculations, *Progress of Theoretical Physics Supplement* 196, 2012, 304-309, 査読有
DOI:10.1143/PTPS.196.304
- ④ N. Shimizu, Y. Utsuno, T. Mizusaki, M. Honma, Y. Tsunoda, and T. Otsuka, Variational procedure for nuclear shell-model calculations and energy-variance extrapolation, *Physical Review C* 85, 2012, 054301-1-6, 査読有
DOI:10.1103/PhysRevC.85.054301
- ⑤ Y. Utsuno and S. Chiba, Multiparticle-multihole states around ^{16}O and correlation-energy effect on the shell gap, *Physical Review C* 83, 2011, 021301(R)-1-5, 査読有
DOI:10.1103/PhysRevC.83.021301
- ⑥ T. Otsuka, T. Suzuki, M. Honma, Y. Utsuno, N. Tsunoda, K. Tsukiyama, and M. Hjorth-Jensen, Novel feature of nuclear forces and shell evolution in exotic nuclei, *Physical Review Letters* 104, 2010, 012501-1-4, 査読有
DOI:10.1103/PhysRevLett.104.012501
- ⑦ N. Shimizu, Y. Utsuno, T. Mizusaki, T. Otsuka, T. Abe, and M. Honma, Novel extrapolation method in the Monte Carlo shell model, *Physical Review C* 82, 2010, 061305(R)-1-4, 査読有
DOI: 10.1103/PhysRevC.82.061305

[学会発表] (計 32 件)

- ① Y. Utsuno (invited), Shell evolution in neutron-rich calcium isotopes, 7th Italy-Japan Symposium on Nuclear Physics, Nov. 20-23, 2012, Milan, Italy
- ② 宇都野穰 (招待講演)、RIBF と RCNP 実験から引き出される殻構造の進化、日本物理学会 2011 年秋季大会、2011 年 9 月 16-19 日、弘前
- ③ Y. Utsuno (invited), Shell-model approach to exotic nuclei—description by monopole-based universal interaction and development of a new MCSM code, ECT* Workshop “Reactions and Nucleon Properties in Rare Isotopes, Apr. 5-9, 2010, Trento, Italy

- ④ Y. Utsuno (invited), Evolution of shell and nuclear structure in the neutron-rich region, 3rd Joint Meeting of the Nuclear Physics Divisions of the APS and JPS, Oct. 13-16, 2009, Hawaii, USA

6. 研究組織

(1)研究代表者

宇都野 穰 (UTSUNO YUTAKA)
独立行政法人日本原子力研究開発機構・先端基礎研究センター・研究副主幹
研究者番号：10343930

(2)研究分担者

なし。

(3)連携研究者

なし。

(4)研究協力者

清水 則孝 (SHIMIZU NORITAKA)
東京大学・理学系研究科・特任准教授
研究者番号：30419254

大塚 孝治 (OTSUKA TAKAHARU)
東京大学・理学系研究科・教授
研究者番号：20201379