

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24年 6月 6日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2008 ～ 2011

課題番号：20740127

研究課題名（和文） 中性子過剰原子核における新たな集団運動状態の理論的探求

研究課題名（英文） Study on Novel Quadrupole Collective States in Neutron-Rich Medium-Heavy Nuclei

研究代表者

清水 則孝（SHIMIZU NORITAKA）

東京大学・大学院理学系研究科・特任准教授

研究者番号：30419254

研究成果の概要（和文）：原子核殻模型に基づいた微視的な中重核の核構造計算をおこない、サマリウムの球形—変形の変化や、キセノン、バリウムの中性子過剰同位体の非軸対称状態について議論した。中重核領域では原子核殻模型計算におけるヒルベルト空間が巨大になるため従来のランチョス法による直接対角化計算では不可能であった。その困難を克服するため、準粒子真空基底によるモンテカルロ殻模型法や、スレータ行列式基底によるモンテカルロ殻模型法のエネルギー分散外挿法による拡張による応用を試み、対相関の取り扱いが重要となる中重核領域の核構造研究に有用であることを示した。

研究成果の概要（英文）：We studied the nuclear structure of axially symmetric deformation of samarium isotopes and tri-axially deformed states of neutron-rich xenon, barium isotopes based on the nuclear shell model. In medium-heavy nuclei, the conventional diagonalization method utilizing the Lanczos method is infeasible due to the huge size of the Hilbert space. In order to overcome this difficulty, we applied the Monte Carlo shell with quasi-particle-vacuum basis and the energy-variance extrapolation in the Monte Carlo shell model with Slater-determinant basis, and demonstrated that they work well in studying the nuclear structures of medium-heavy nuclei in which the pairing correlation is important.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	1,500,000	450,000	1,950,000
2009年度	1,200,000	360,000	1,560,000
2010年度	400,000	120,000	520,000
2011年度	400,000	120,000	520,000
総計	3,500,000	1,050,000	4,550,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学、素粒子・原子核・宇宙線・宇宙物理

キーワード：原子核（理論）、原子核殻模型、4重極集団運動

1. 研究開始当初の背景

理化学研究所の RI ビームファクトリ加速器の建設が進められており、中性子過剰原子核の実験的研究が今後飛躍的に進むと期待されてきた。この状況に理論的側面から対応するため、原子核構造は質量数が100を越

えるような中重核の微視的構造計算が望まれていた。代表的な微視的構造計算である原子核殻模型計算では、取るべきバレンス殻がより軽い質量領域に比して大きくなるため、旧来型のランチョス対角化法では対角化すべきヒルベルト空間の次元が巨大になるた

め、研究対象が、バレンス核子数が少なくなるような核種に限られていた。本研究代表者によって、対相関基底と呼ばれるによる任意のフェルミオン対の凝縮状態によってあらわされる多体基底を用いたモンテカルロ殻模型法がすでに提唱されていたが、奇核には適用できず、また、計算時間の粒子数依存性が大きい、一般的な形の有効相互作用を用いることができないなどの制限があり、どの質量領域にも使えるような一般性は乏しかった。そのため、単純な形の有効相互作用しか用いることができず、核力の詳細を研究することが困難であった。

2. 研究の目的

本研究では、モンテカルロ殻模型法にさらなる拡張をほどこすことにより、一般的な形の有効相互作用をとりあつかえるようなより応用範囲が広い原子核殻模型計算手法の開発をめざす。それを用いることにより、中重核の集団運動状態の探求をめざす。

3. 研究の方法

原子核殻模型計算によって、すべての相関をとりこみながら、バレンス殻内のバレンス核子の運動を求めることにより、集団運動状態を記述する。原子核殻模型計算を実行するにあたって、直接対角化法は適用は困難であるため、モンテカルロ殻模型法の拡張などの方法論の開発も主な研究目的となる。粒子数、角運動量射影変分後射影ハートリーフォックボゴリウボフ近似も併用する。

4. 研究成果

軸対称を仮定した平均場+粒子数、角運動量射影ハートリーフォックボゴリウボフ法を用いてサマリウムアイソトープの偶々核における中性子数増加に伴う形の相転移を変形度の大きな領域まで含めて計算することに成功した。これにより、1主殻内の一粒子軌道と角運動量差が2となる対をもつ1主殻外一粒子軌道である陽子 $2f7/2$ 、陽子 $1g9/2$ 、中性子 $0g9/2$ 、中性子 $1h11/2$ の各軌道が四重極集団運動状態の記述に重要な役割を果たすことを示した。この研究対象は、従来の殻模型計算のような1主殻計算では変形度が大きすぎて理論計算が不可能であるサマリウム 152 近傍を含んでいるため、平均場を超えた枠組みを適用するためにはモンテカルロ殻模型のような1主殻を超える模型空間を取り扱える手法が必要である。その他に研究対象とするスズ 100 やスズ 132 周辺のサマリウムやバリウムなどのアイソトープの核構造計算においては対相関の取扱が不可欠であるため、ハートリーフォックボゴリウボフ法で用いられるような準粒子真空基底が波動関数の記述に有用であると期待

できる。そのため、モンテカルロ殻模型において、波動関数を準粒子真空基底の線形結合と粒子数射影を組み合わせた方法によって表現する方法を開発した。さらに、このような準粒子真空基底を用いることにより、モンテカルロ殻模型法において用いられる補助場の生成方法を密度分解型から対分解型へ変更することを可能とした。これにより、より少数の基底の線形結合により求めるべき状態の波動関数を表現することに成功し、計算コードの効率化をはたした。(学会発表⑧、⑨)

さらに中重核領域の原子核構造を原子核殻模型の観点から研究するため、軸対称を仮定しない粒子数と角運動量の変分前射影法によるハートリーフォックボゴリウボフ計算コードを新たに開発し、スズの同位体に適用した。当時、スズの同位体の E2 遷移が実験的に計測され、陽子数と中性子数が近い領域では、E2 遷移確率が安定核近傍から予測される振る舞いとは異なり、異常に大きくなることが確認されている。

この現象を、新たに開発したプログラムで計算することによって、原子核殻模型の観点から徹底的に研究した。まず、スズ 100 を閉殻とする計算により、上記コードが厳密対角化計算の結果をほぼ再現することをたしかめた。この手法は先に開発した準粒子基底モンテカルロ法の一部に相当する。さらに、スズ 100 を閉殻とせず、ジルコニウム 80 を閉殻とするようなより広い模型空間をとる計算をおこなうため、上記計算コードが、本来不要である重心運動に相当する波動関数をラグランジュ未定乗数法により除去できることを確かめた。これにより、質量数 100 近傍のスズの同位体では、 $0g9/2$ 軌道からの粒子ホール励起が重要な役割を果たし、集団運動性が高くなるため、E2 遷移確率が大きくなることを示唆した。(学会発表⑦)

準粒子真空基底モンテカルロ法と平行して、実績のあるスレーター行列式基底によるモンテカルロ殻模型法のプログラムコードを書き直し、最新のスーパーコンピュータに使えるよう移植した。この計算プログラムは従来の2倍以上の高速化をはたし、中重核領域のみならず、軽い核の閉殻を仮定しない計算にも新たな進展が期待できる。さらにエネルギー分散を用いた外挿法を開発した。この方法では、モンテカルロ殻模型法で得られた一連の近似波動関数列各々に対し、エネルギー期待値とエネルギー分散をプロットし、2次関数でフィットする。厳密解では、エネルギー分散は0となるから、フィットをエネルギー分散が0となる点に外挿し、真のエネルギー固有値を推定する手法である。これを実際に殻模型計算に適用して、エネルギー固有値の精密な推定が可能であることを示した。

この新しい原子核殻模型計算における外挿法について、中重核領域での有効性を検証した。また、モンテカルロ殻模型法における波動関数の計算手法に共役勾配法による変分計算過程が導入されている。モンテカルロ殻模型法の基底波動関数は射影スレータ行列式で表現しており、各スレータ行列式の係数を、変分原理に基づいて、モンテカルロ的手法と共役勾配法によるエネルギー最小化により決定する。各基底は、従来のように順序づけられて一回だけ最適化されるのではなく、各基底の線形結合によって表された波動関数のエネルギーを最小化されるように繰り返し最適化する。この改良と外挿法の組み合わせをもちいることにより、スレータ行列式基底によるモンテカルロ殻模型法によって、中重核のような対相関が強い系においても精密なハミルトニアン固有値の計算が可能であることをしめした。(雑誌論文②③、学会発表①、②、③、④、⑤、⑥)

中重核領域のキセノン、バリウムの同位体について、非イラスト状態も含む低励起状態のエネルギースペクトルを殻模型の観点から微視的に研究した。これまで殻模型計算の対相互作用に四重極-四重極相互作用をもちいており、バリウム 132 から 138 まで、キセノン 130 から 136 までの偶々核の統一的記述に成功した。(学会発表②)しかしながら、バリウム 130 では励起エネルギーが実験値より過小評価する傾向にある。これは相互作用のモノポール成分が正しく記述できていないことによると考えられる。VMU 相互作用を用いてモノポール成分を評価し、これを陽にとりあつかうことにより、バリウム 130 のより適切な記述が可能になる可能性を定量的に検証した。

また、変分モンテカルロ法とエネルギー分散外挿法を組み合わせた新しい殻模型計算の方法論の応用可能性を検証し、ニッケル 56 を例にとり、中重核の殻模型計算に有効であることを示した。(雑誌論文①)

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 3 件)

- ① T. Mizusaki and N. Shimizu, "New variational Monte Carlo method with energy variance extrapolation for large-scale shell-model calculations", *Physical Review C* vol. 85, 021301(R)(2012). 査読有, DOI: 10.1103/PhysRevC.85.021301
- ② N. Shimizu, Y. Utsuno, T. Mizusaki, T. Otsuka, T. Abe, M. Honma: "Novel

Extrapolation Method in the Monte Carlo Shell Model and its Applications" *AIP Conference Proceedings* vol.1355, p.138. (2011) 査読有, DOI: 10.1063/1.3584057

- ③ N. Shimizu, Y. Utsuno, T. Mizusaki, T. Otsuka, T. Abe, M. Honma: "Novel Extrapolation Method in the Monte Carlo Shell Model" *Physical Review C* vol.82. 061305 (2010) 査読有, DOI: 10.1103/PhysRevC.82.061305

[学会発表] (計 9 件).

- ① 清水則孝, 宇都野穰, 水崎高浩, 大塚孝治, 本間道雄, 阿部喬 "多基底変分による大規模殻模型計算とその応用", 日本物理学会 2011 年秋期大会, 2011/9/18, 弘前大学
- ② N. Shimizu, "Extrapolation method in the Monte Carlo Shell Model and its application to medium heavy nuclei", RIBF ULIC and CNS Symposium on Frontier of Gamma-ray Spectroscopy (Gamma11), 2011/6/30, 理化学研究所
- ③ N. Shimizu: "Extrapolation method in the Monte Carlo Shell Model and its applications" International Symposium New Faces of Atomic Nuclei. (20101116). Okinawa Institute of Science and Technology (OIST), Okinawa, Japan:
- ④ N. Shimizu: "Extrapolation method in the Monte Carlo Shell Model" 2nd EMMI-EFES workshop on neutron-rich nuclear matter, nuclear structure and nuclear astrophysics (EENEN-10). (20100618). RIKEN, Wako-shi, Saitama, Japan
- ⑤ N. Shimizu: "Tests of the ab initio Monte Carlo Shell Model 1" EFES-Iowa mini workshop on the ab initio Monte Carlo Shell Model(MCSM). (20100226-20100227). Iowa State University, Ames, Iowa, USA
- ⑥ N. Shimizu: "Monte-Carlo Shell Model for ab initio calculation" EFES-NSCL workshop on Perspectives on the modern shell model and related experimental topics. (20100204-20100206). National Superconducting Cyclotron Laboratory,

Michigan State University, East
Lansing, Michigan, USA

- ⑦ N.Shimizu: "Shell model calculations on Sn isotopes" Third Joint Meeting of the Nuclear Physics Divisions of the APS and JPS. (20091013-20091017). Hilton Waikoloa Village, Hawaii, USA
- ⑧ 清水則孝: "大規模殻模型計算" ワークショップ「計算科学による素粒子・原子核・宇宙の融合」. (20081201). 筑波大学計算科学研究センター
- ⑨ 清水則孝: "Monte-Carlo Shell Model studies on Sm isotopes" Hokudai-TORIJIN-JUSTIPEN-EFES workshop "Perspectives in Resonances and Continua on Nuclei". (20080724). 大沼国際セミナーハウス

6. 研究組織

(1) 研究代表者

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