

次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム2007

並列計算による原子核における量子多体構造のシミュレーション

清水則孝、大塚孝治、本間道雄、水崎高浩

東京大学理学系研究科、東京大学 CNS、理化学研究所、会津大学総数セ、専修大学

shimizu@phys.s.u-tokyo.ac.jp

概要：量子多体論としての核構造計算の世界的な現状と進展を紹介するとともに、その手法のひとつであるモンテカルロ殻模型を用いた最新の研究成果を示す。特に、バリウムアイソトープの中性子数増加による「形の相転移」とその遷移領域における臨界点対称性(E(5)群対称性)の微視的な記述や、 ^{136}Te の中性子-陽子が分離した励起モードを議論する。

1 はじめに

原子核は陽子と中性子からなる孤立した量子多体系であり、その構造は多様である。この構造計算に平均場近似もある程度有効であるが、典型的ないくつかの集団運動状態とそれらのあいだの遷移状態の低エネルギー状態を記述するためには、さまざまな多体相関をとりこんだ微視的な記述をおこなわなければならない。原子核殻模型は微視的な記述が可能な模型のひとつであり、その進展について述べる。

2 殻模型計算と計算機の進歩

原子核殻模型ではすべての配位混合を考える必要があり、質量数がおおきくなるにつれ、考慮に入れるべき対角化すべき配位の数(ヒルベルト空間の次元)は巨大になる。

の次元と西暦年を示す。計算機の性能がムーアの法則で指数的にあがるにつれ、対角化可能な次元も指数的にあがっている。これにともない、図1の青丸で示されているように、旧来の完全対角化法の適用領域は広がりつつあるが、質量数60程度のpf殻領域の原子核にとどまっている。たとえば ^{150}Ba の次元は10の15乗近くに達し、ウラニウムなどの更なる重い原子核には、近い将来に到達する見込みはない。(現在の大規模計算機で計算可能な次元は最大10の10乗程度である。)このような中重核領域の原子核の殻模型を遂行するため、補助場法と変分原理を組み合わせたモンテカルロ殻模型法が開発された。[1]

量子多体問題の解法として、補助場量子モンテカルロ法はもっとも有用なものの一つであり、原子核の状態密度の熱的性質などを記述する。しかし、基底状態や低エネルギー励起状態を記述する場合はフェルミオン負符号問題が大きな壁となり、現実的な有効相互作用を用いるのが難しい。モンテカルロ殻模型法は、補助場を乱数にとり、それから生成された一体ハミルトニアンにより虚時間発展させた多数の多体波動関数を基底とし、それらの線形結合によって、基底状態や低エネルギー励起状態を記述する。これにより、フェルミオン負符号問題はあられわれない。多くの場合、多体基底にはスレーター行列を用いるが、中重核領域では対相関が重要となるので、粒子数保存型対相関基底を用いた。

このモンテカルロ殻模型法は、非常に大次元のハミルトニアン行列を、モンテカルロ試行によって選ばれた少数(~40程度)の多体基底による小次

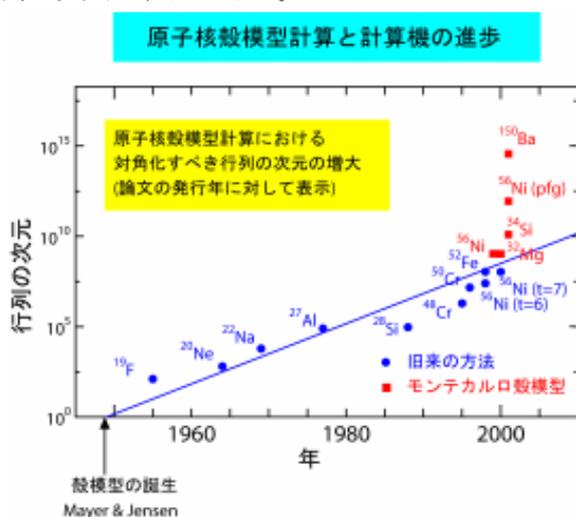


図1：原子核殻模型計算と計算機の進歩

参考文献[1]より

図1に、対角化可能な殻模型のヒルベルト空間

元行列に「圧縮」するものである。実際に計算を遂行する上では、旧来の殻模型対角化計算では次元数の巨大さからメモリーを指数的に大量に使用するのに対し、モンテカルロ殻模型ではモンテカルロ試行における浮動小数点演算に計算機資源のほとんどを費やす。この特徴は並列計算を可能にし、浮動小数点演算を性能の開発の主な指標としている近年のスーパーコンピューターに有利に働く。

モンテカルロ殻模型により、図1に示すように10の15乗次元や、それを越すような模型空間を持つ原子核の構造を殻模型計算で扱うことが可能となった。実際にバリウム近傍のアイソトープへ適用した計算結果を次章で議論する。

3 モンテカルロ殻模型による中重核の構造計算

^{132}Sn 近傍の殻模型計算はバレンス殻を十分に大きくとらなくてはならず、旧来の方法では限られた原子核でしか実行できなかったが、モンテカルロ殻模型の登場により系統的な研究が可能となった。この結果を図2に示す。

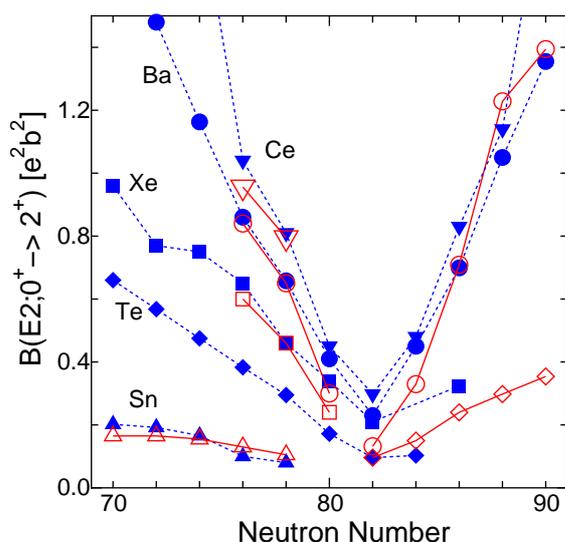


図2: Sn, Te, Xe, Ba, Ce アイソトープの E2 遷移確率(青:実験値 赤:モンテカルロ殻模型) 参考文献[2]より

図2は基底状態から第一励起状態への E2 遷移確率を示している。全領域で理論値は実験値の再現に成功している。まず、中性子数 82 は魔法数であり、そのアイソトープは球形となるのが安定であり、遷移確率は小さい。

中性子数が 82 から増加していくとバレンス核子数の増加とともに E2 遷移確率も緩やかに増加していく。これは、プロレイト変形した軸対象ローター模型がよくなっていくことを反映している。

この球形から軸対称ローターへのゆるやかな相転移は有限量子多体系に特有の現象であり、「形の相転移」として知られ、平均場近似では表現できず、殻模型のような微視的な記述が必須である。また、中性子数 84 である ^{136}Te の E2 遷移確率の実験値は他のアイソトープの傾向と比してあきらかに小さく、興味もたれている。従来の殻模型計算では大きすぎる結果を与えていたが、我々の計算は実験値をほぼ再現することに成功した。我々の計算によると ^{136}Te の第一励起状態は陽子と分離した中性子励起が主になっており、そのために E2 遷移確率が小さくなっている。

中性子数 82 から減らしていくと、やはり E2 遷移確率は増加していくのだが、増加の程度は前述のケースと比べてわずかに緩やかとなっている。この領域では非軸対称変形が起きていることが低エネルギースペクトルの計算で明らかになった。さらに非軸対称変形と球形の中間状態である ^{134}Ba は相転移の臨界点における力学的対称性として E(5)群対称性をもつ典型的例である。この原子核の微視的な構造を議論する。

4 まとめ

モンテカルロ殻模型計算により、多体相関を完全にとりこんだ原子核構造の微視的な記述が可能となった。この方法は浮動小数点演算が中心で並列計算が容易であり、スーパーコンピューティングに適した方法となっている。

これを ^{132}Sn 近傍の領域の原子核構造計算に適用し、系統的な実験値の再現、予言を得た。特に、有限量子多体系に特徴的な、「相転移の中間領域」の記述に威力を発揮している。

モンテカルロ殻模型の基底を粒子数保存型対相関基底から、粒子数を保存しない準粒子真空基底に変更するなどの方法論の発展と、次世代システムの利用により、ウランウム領域など従来の方法では到達不可能な領域での微視的構造計算に挑戦していきたい。

参考文献

- [1] T. Otsuka, T. Honma, M. Mizusaki, N. Shimizu, Y. Utsuno, “Monte Carlo Shell Model for atomic nuclei”, Prog. Part. Nucl. Phys. **47**, 319, (2001)
- [2] N. Shimizu, T. Otsuka, T. Honma, M. Mizusaki, “Monte Carlo Shell Model calculations of Xe and Ba isotopes”, J. Phys. Conf. Ser. **49**, 178 (2006)