

サブ課題B 原子核

# 大規模殻模型計算におけるZr同位体の 形の量子相転移の研究と展望

[arxiv.org/abs/1606.09056](https://arxiv.org/abs/1606.09056)

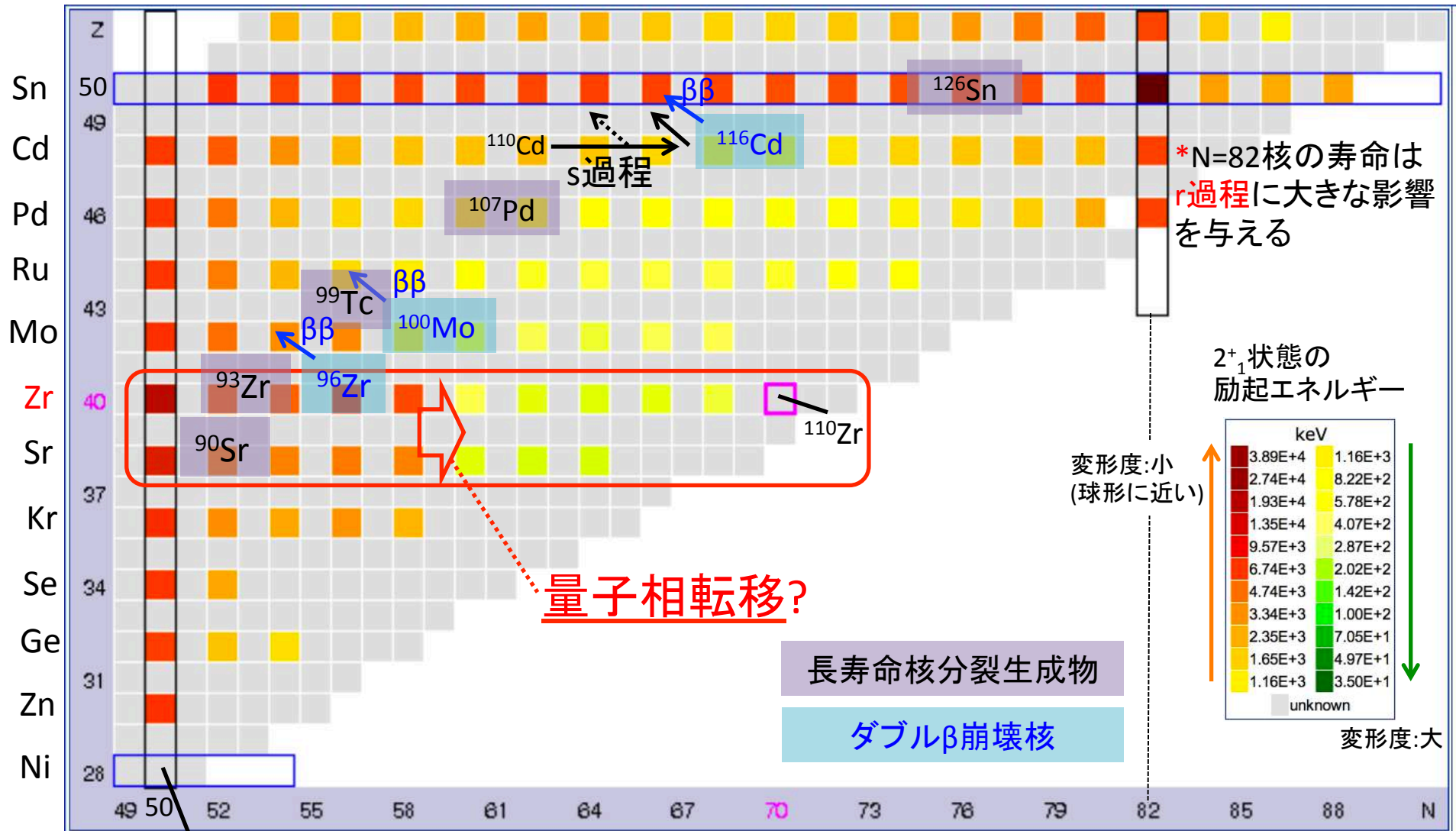
東京大学 原子核科学研究センター  
富樫 智章

共著者: 角田 佑介, 大塚 孝治, 清水 則孝

ポスト京 重点課題9 研究報告会

2016.8.5

# ポスト京における課題とZ=40-50核における物理



\*N=82核の寿命は  
r過程に大きな影響  
を与える

2+<sub>1</sub>状態の  
励起エネルギー

変形度:小  
(球形に近い)

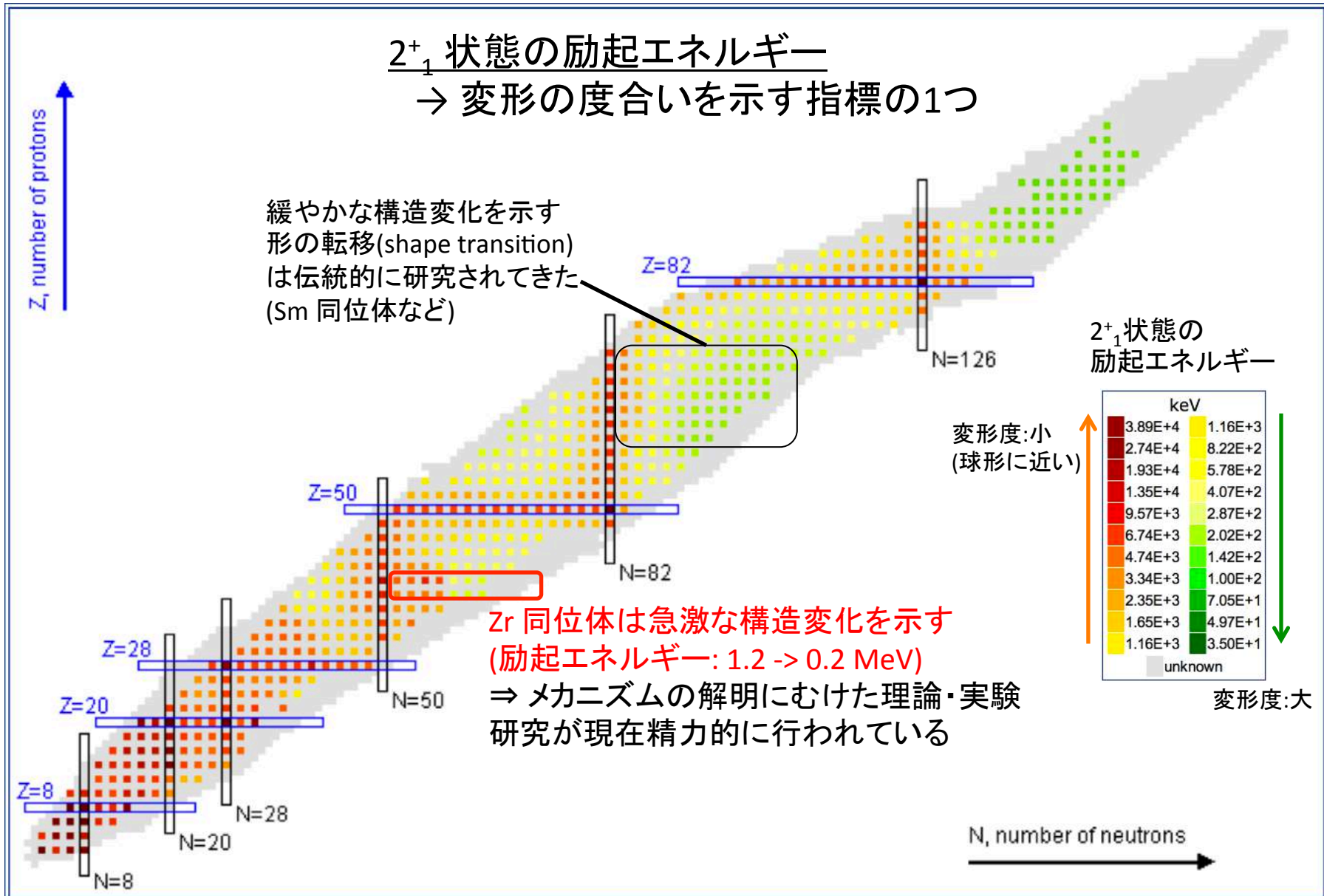
変形度:大

長寿命核分裂生成物

ダブルβ崩壊核

<sup>78</sup>Ni (これまでの研究)

# 原子核における量子相転移



# 本研究における理論計算の概要

- Zr 同位体 ( $Z=40$ ) における  $^{90-110}\text{Zr}$  ( $N=50-70$ ) の偶々核 ( $Z, N$  が偶数) について系統的な殻模型計算を行う

⇒ 従来の殻模型計算では計算不可能な巨大な模型空間を設定 (球形-変形の両方の状態を記述):  
最大で  $3.7 \times 10^{23}$  次元の対角化計算に相当

⇔  $\sim 10^{11}$  次元の対角化計算が現段階での限界



京コンピュータにおける モンテカルロ殻模型の適用

- 有効相互作用: 模型空間の各部分で精度が十分に検証されたものを

組み合わせる ⇒ **JUN45** (pf- $0g_{9/2}$ ) + **SNBG3** (sdg- $0h_{11/2}$ ) +  $V_{\text{MU}}$  (others)

M.Honma, T.Otsuka,

T.Mizusaki, *et al.*,

Phys.Rev.C80, 064323 (2009)

M.Honma, *et al.*,

RIKEN Accel. Prog.

Rep.45, 35 (2012)

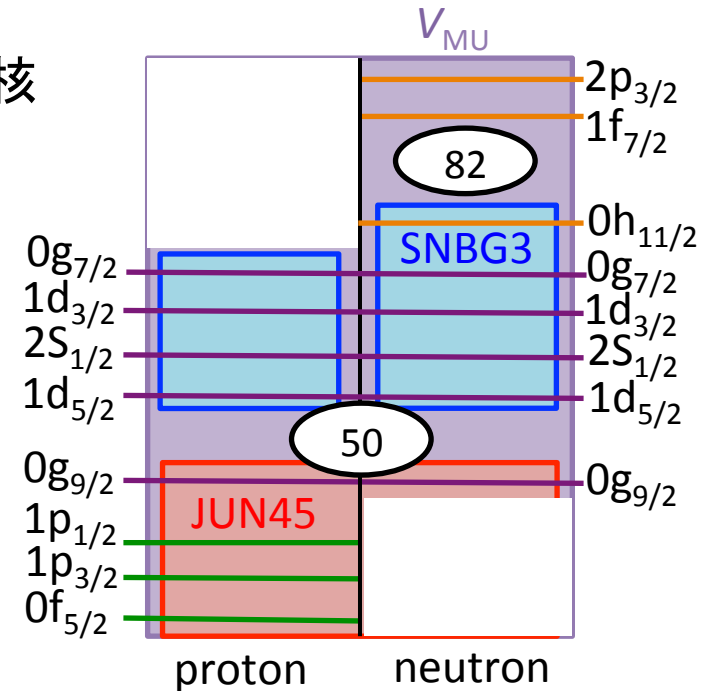
T.Otsuka, T.Suzuki, M.Honma, *et al.*,

Phys.Rev.Lett.104, 012501 (2010)

\* 定量的な記述のための現象論的補正を加える

(M.Honma, B.A.Brown, T.Mizusaki, T.Otsuka, Nucl.Phys.A704, 134c (2002))

計算資源量: 1核種あたり: 1,200ノード × 14時間 × 3状態 ( $0^+$ ,  $2^+$ ,  $4^+$ ) = 50,400 ノード時間積  
× 11核種 = 554,400 ( $\sim 50$ 万) ノード時間積



# モンテカルロ殻模型

T.Otsuka, M.Honma, T.Mizusaki, *et al.*,  
Prog. Part. Nucl. Phys.47, 319 (2001)

N.Shimizu, T.Abe, Y.Tsunoda, *et al.*,  
Prog. Theor. Exp. Phys. 2012, 01A205  
(2012)

モンテカルロ殻模型の波動関数

$$|\Psi^m\rangle = \sum_{d=1}^{N_d} f_d^m P^{J^\pi} |\Phi(q_d)\rangle, \quad |\Phi(q_d)\rangle = \prod_j \left( \sum_l^{N_s} D(q_d)_{lj} c_l^\dagger \right) |-\rangle$$

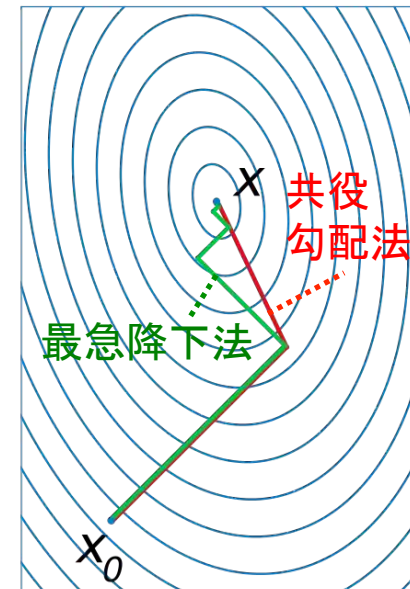
基底(次元)数  
変形スレーター行列式  
1粒子状態の生成演算子  
スピンの射影演算子

ハミルトニアン行列  $H$  の対角化を行う (次元数:  $\sim 100$ )  $\Leftrightarrow$  通常の殻模型計算 (次元数  $> \sim 10^{10}$ )

$$\sum_d \langle \Phi(q_p) | H | \Phi(q_d) \rangle \cdot f_d^m = e_m \sum_d \langle \Phi(q_p) | \Phi(q_d) \rangle \cdot f_d^m$$

エネルギー期待値を最小化するように基底を求める

- ステップ1: 補助場の表式を用いて基底の候補を生成
- $$|\Phi(\sigma)\rangle = \prod e^{\Delta\beta \cdot h(\sigma)} |\Phi^{(0)}\rangle$$
- エネルギー期待値が下がるものを選ぶ
- ステップ2:  $D(q)$  の関数として共役勾配法により最適化
- +



$H^2$ 期待値を用いた外挿\*によりエネルギー固有値を求める

\*N.Shimizu, Y.Utsuno, T.Mizusaki, *et al.*, Phys. Rev. C85, 054301 (2012)

# T-plotによる原子核の形の可視化 (by 角田佑介)

Y.Tsunoda, T.Otsuka, N.Shimizu, *et al.*,  
Phys.Rev.C 89, 031301R (2014)

モンテカルロ殻模型の波動関数:

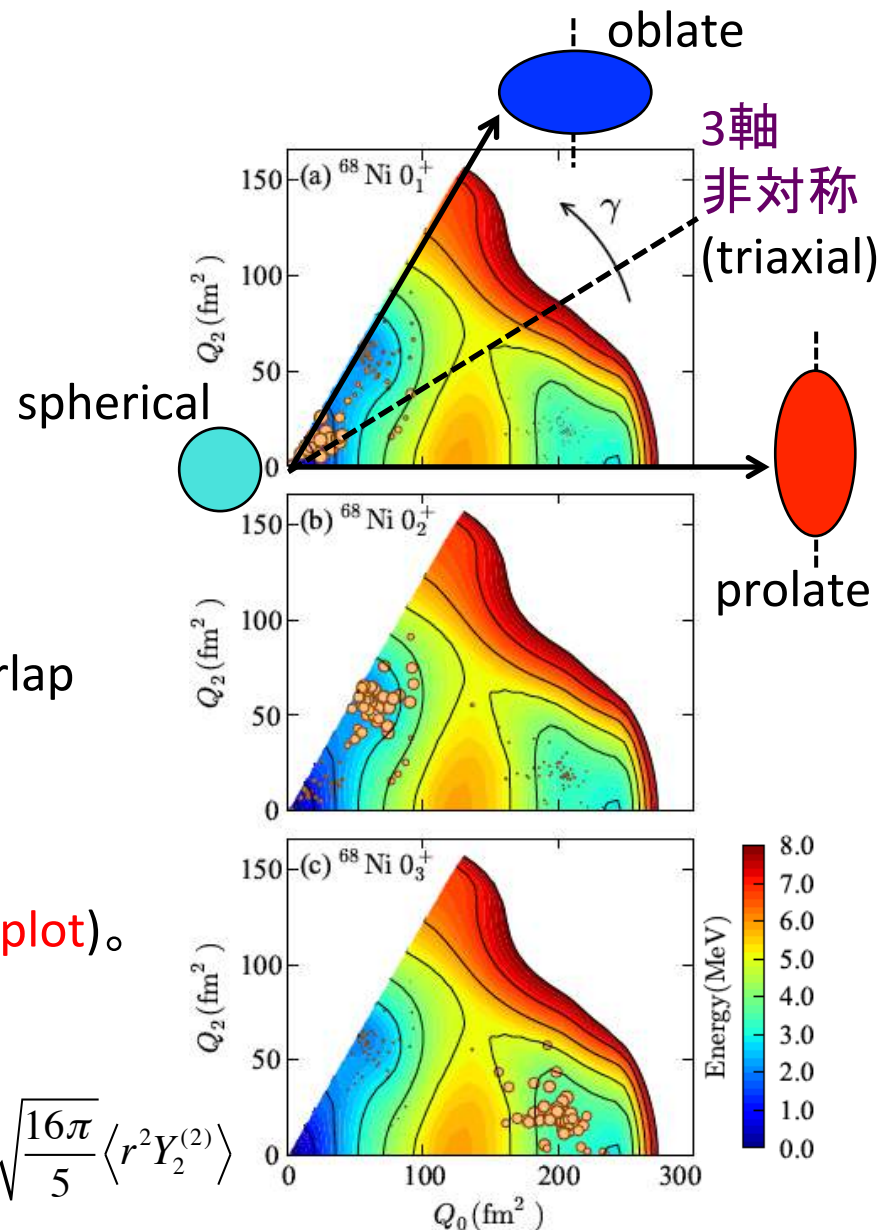
$$|\Psi\rangle = \sum_{d=1}^{N_d} f_d P^{J^\pi} |\Phi_d\rangle$$

基底(次元)数  $N_d$   
基底 (非直交)

$$\left| \langle \Phi_d | P^{J^\pi} |\Psi\rangle \right|^2$$

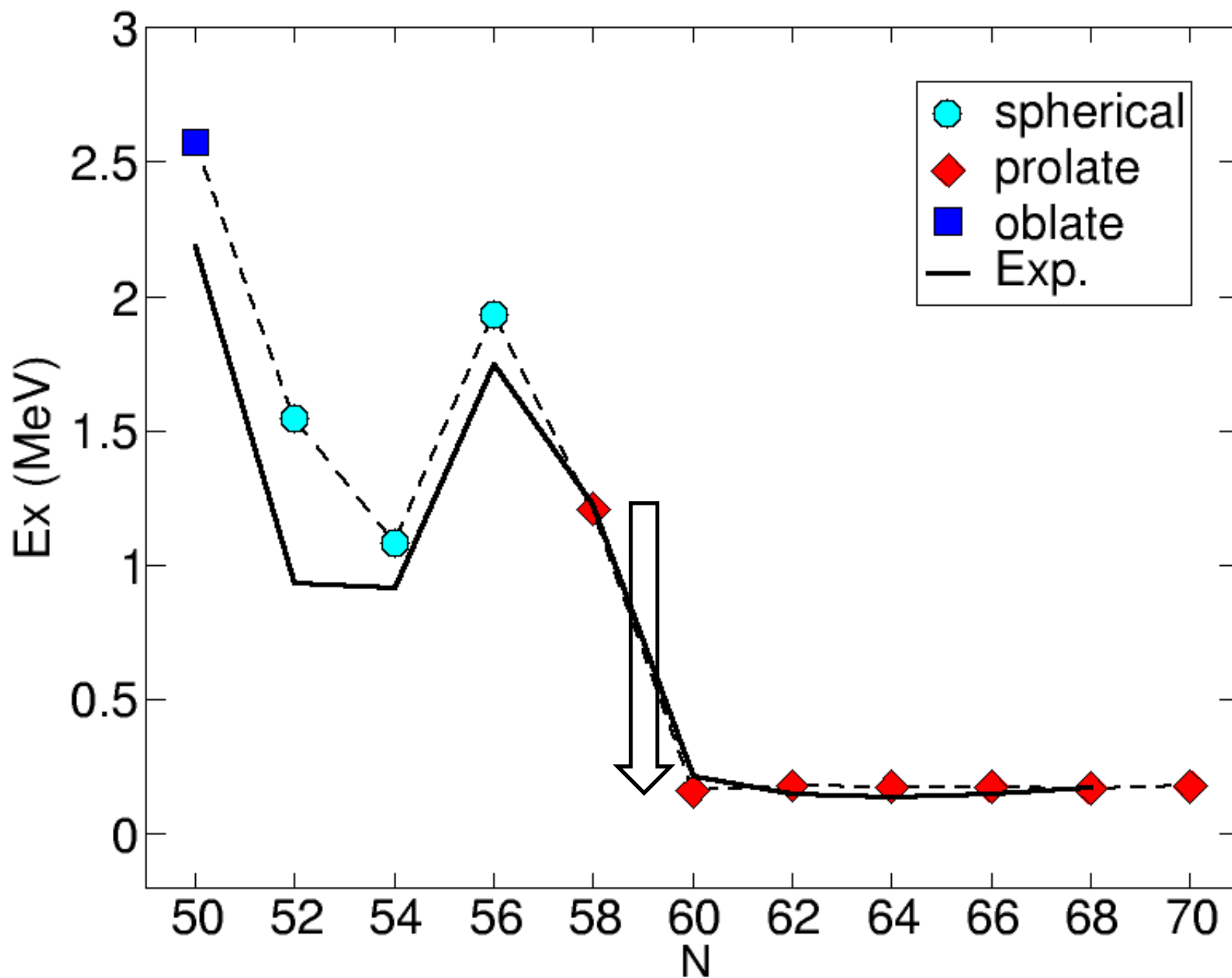
各基底  $\Phi_d$  について、波動関数  $\Psi$  との overlap (の2乗)の大きさを白丸の大きさを表し、四重極モーメントの期待値  $Q_0 - Q_2$  平面の energy surface 上にプロットすることで、その分布から原子核の形状を特定する (T-plot)。

$$Q_0 = \sqrt{\frac{16\pi}{5}} \langle r^2 Y_0^{(2)} \rangle, \quad Q_2 = \sqrt{\frac{16\pi}{5}} \langle r^2 Y_2^{(2)} \rangle$$

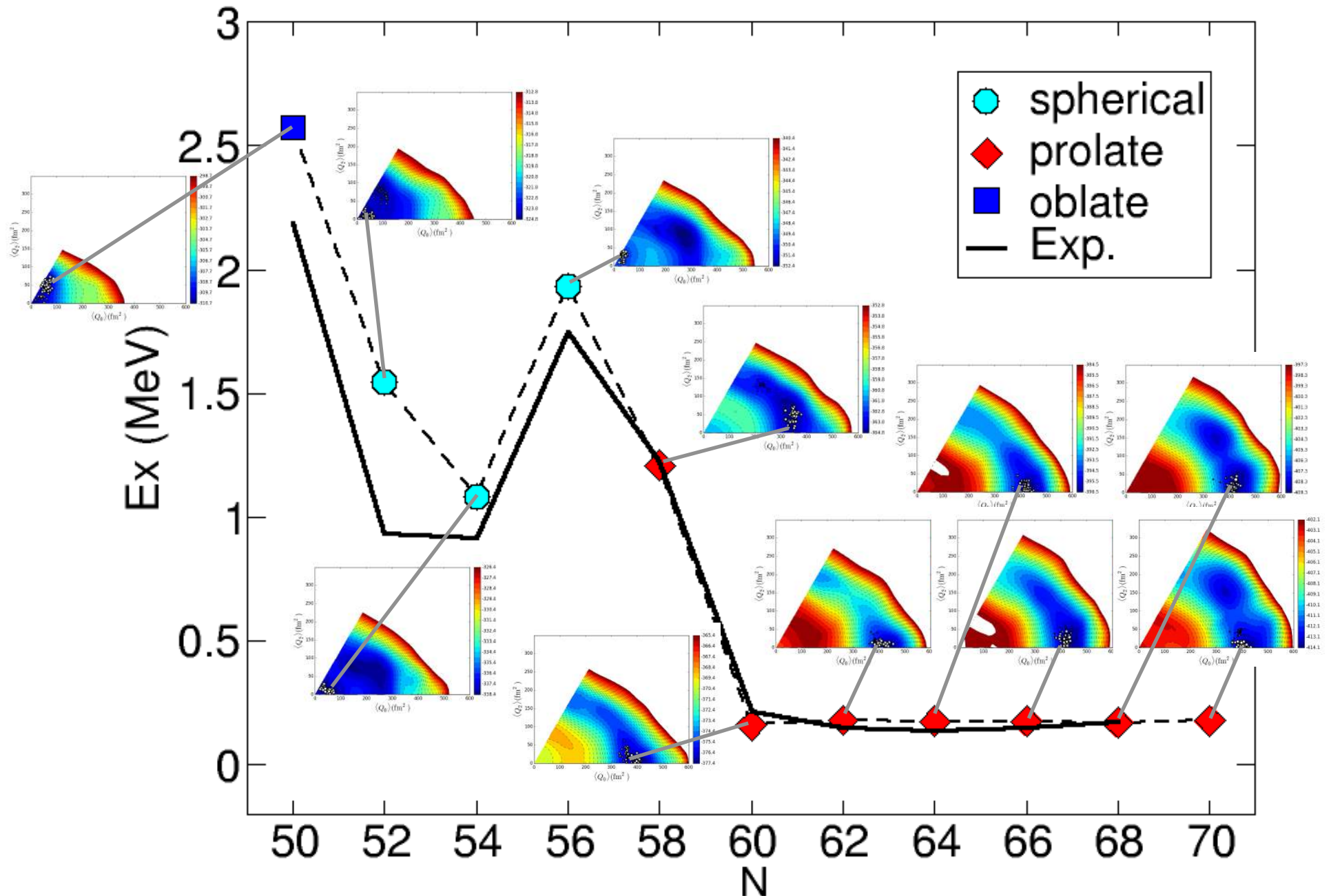




# $^{90-110}\text{Zr}$ ( $Z=40$ , $N=50-70$ )における $2^+_{1}$ の励起エネルギー

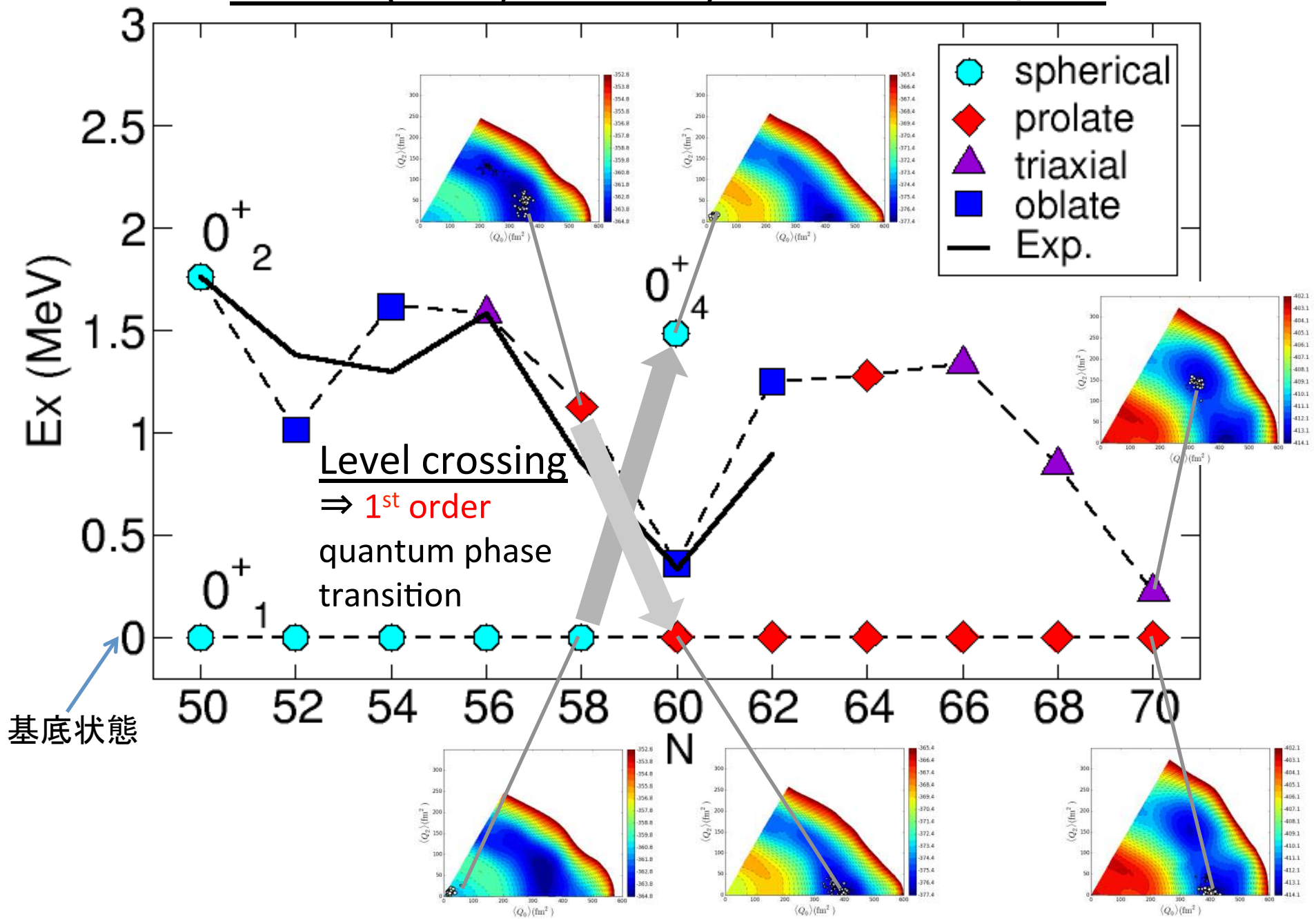


# $^{90-110}\text{Zr}$ における $2^+_{1}$ の励起エネルギーと T-plot

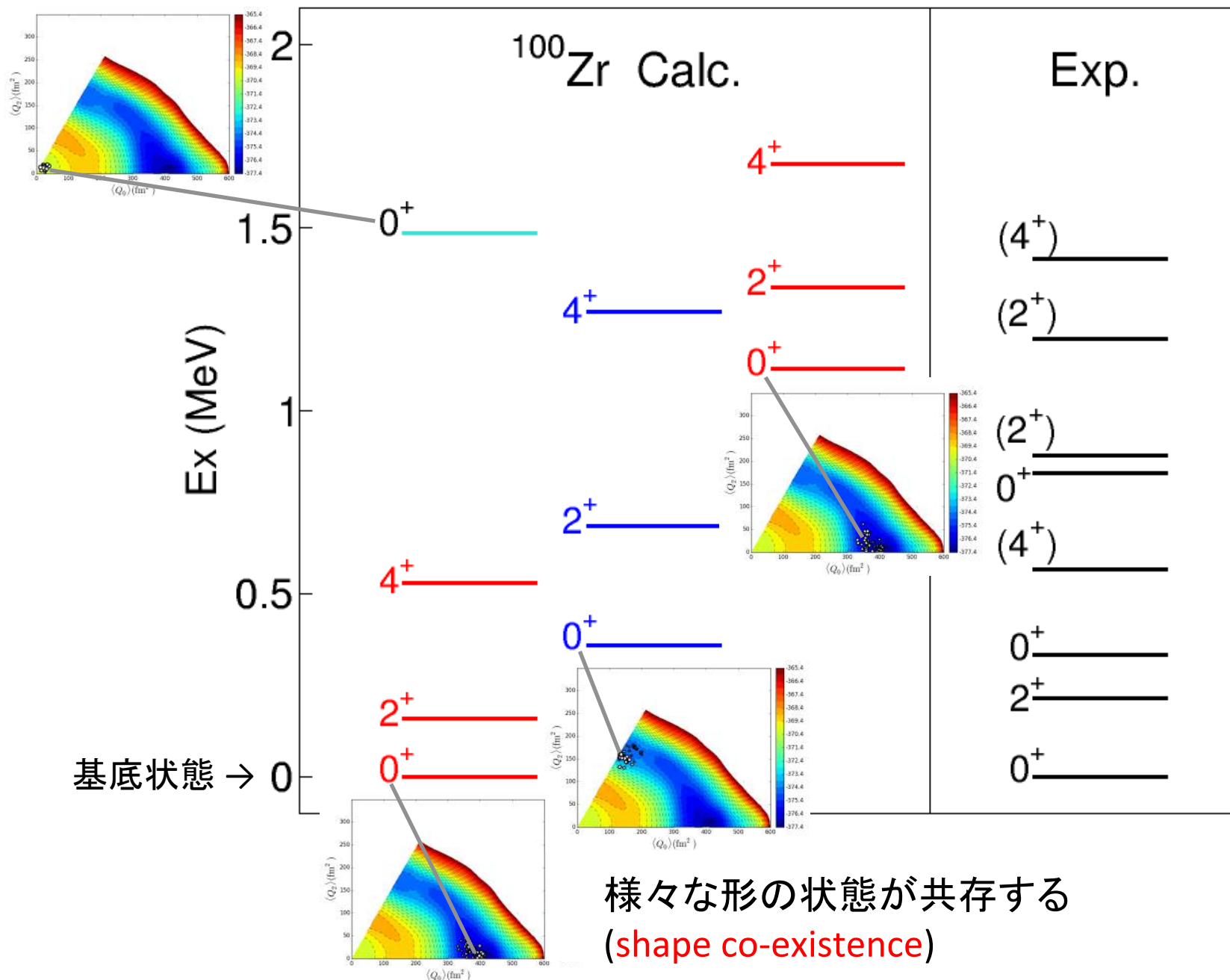




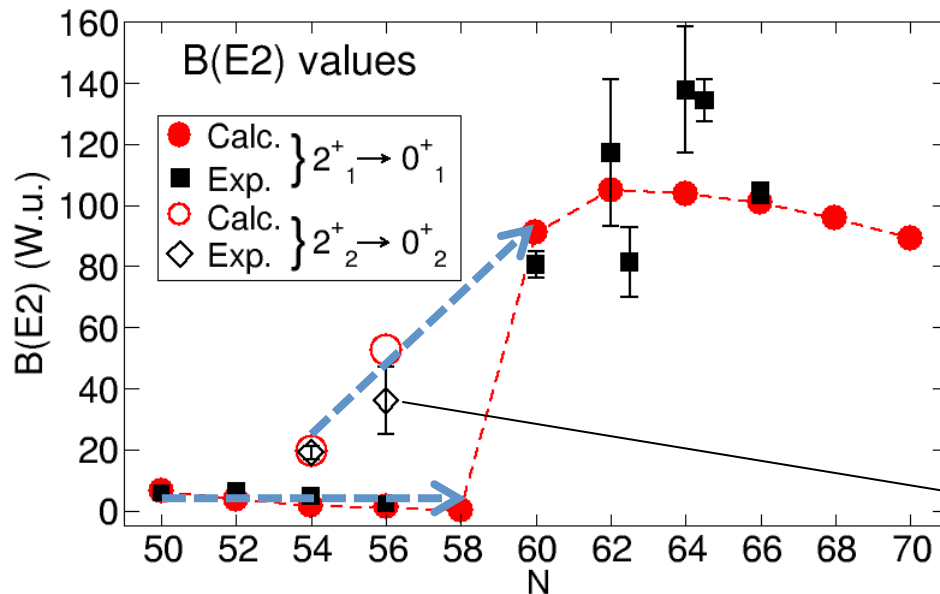
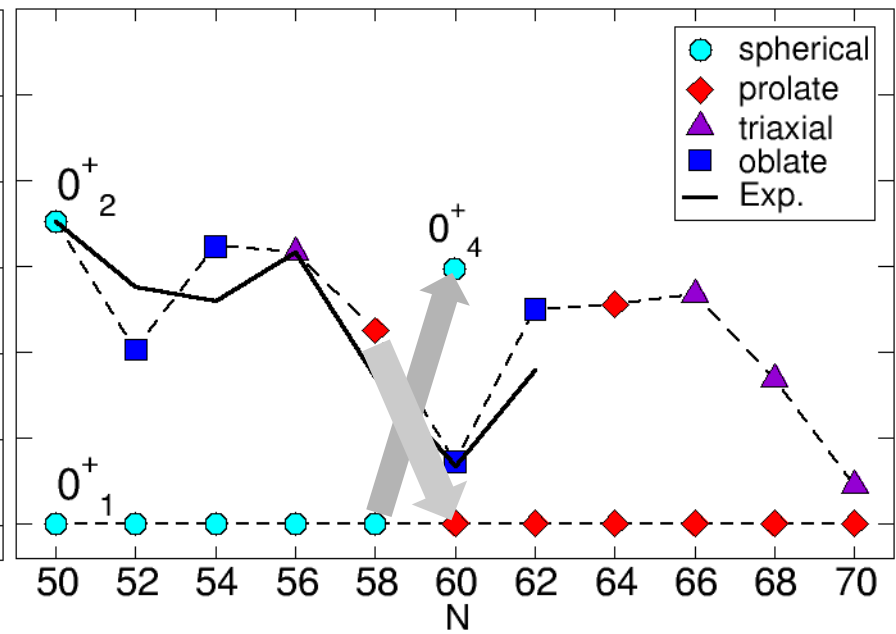
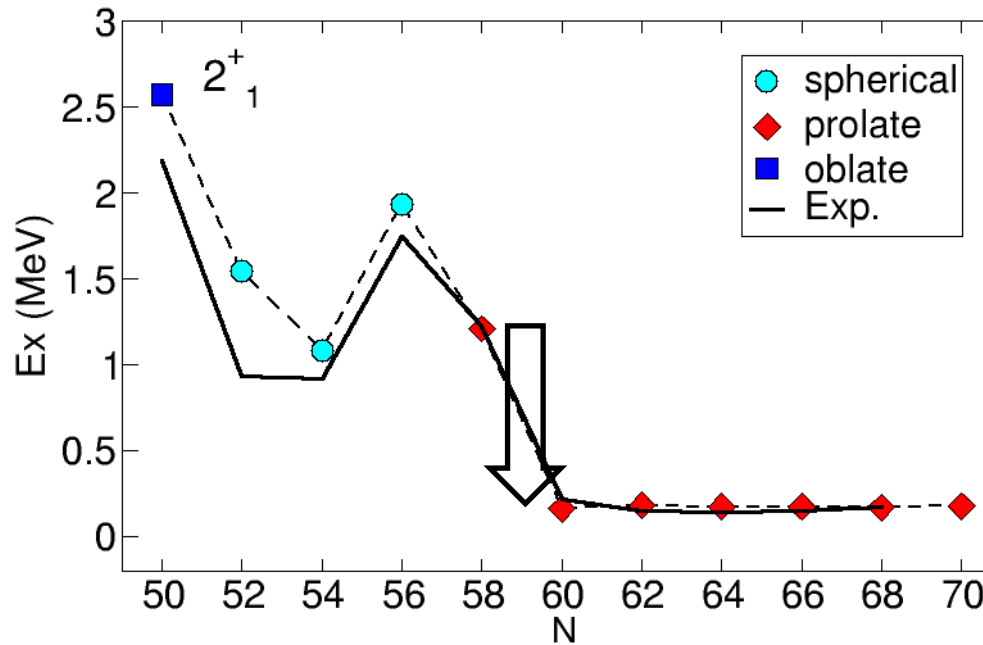
# $^{90-110}\text{Zr}$ ( $Z=40$ , $N=50-70$ )における $0^+$ の状態



# $^{100}\text{Zr}$ (N=60) のエネルギー準位



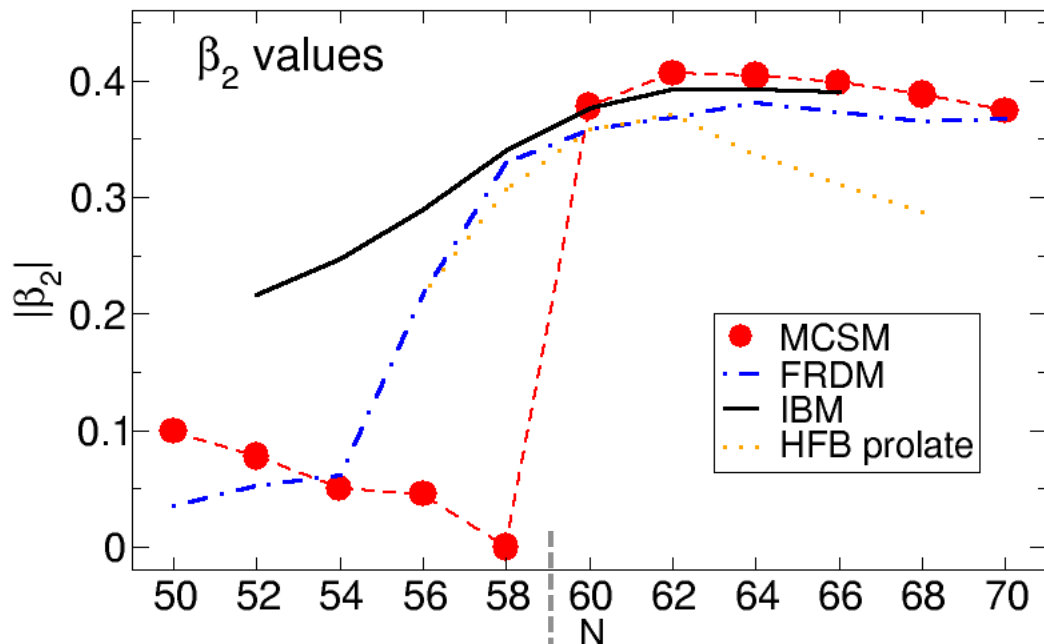
# $^{90-110}\text{Zr}$ ( $Z=40$ , $N=50-70$ )における $B(E2)$



\* $B(E2)$  は変形の大きさと関連付けられる:  
 変形度  $|\beta_2| = (4\pi/3 Z R_0^2) [B(E2; 0^+ \rightarrow 2^+)]^{1/2}$   
 $R_0 = 1.2A^{1/3}$ ,  $Z=40$

New data: C.Kremer, S.Aslanidou, S.Bassauer, *et al.*,  
[arxiv.org/abs/1606.09057](https://arxiv.org/abs/1606.09057)

# 他の理論計算との比較

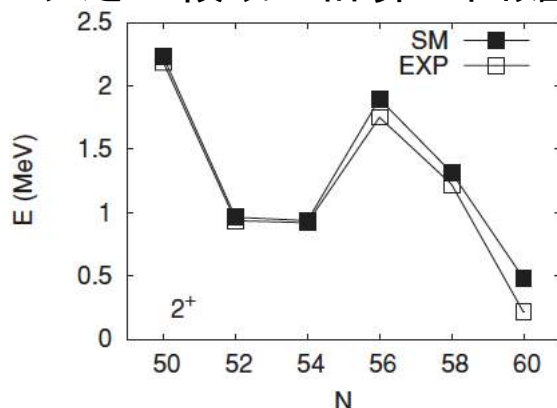


本研究での理論計算:  
球形-変形状態の入れ替わりが  
 $N=58-60$ でabruptに起こる



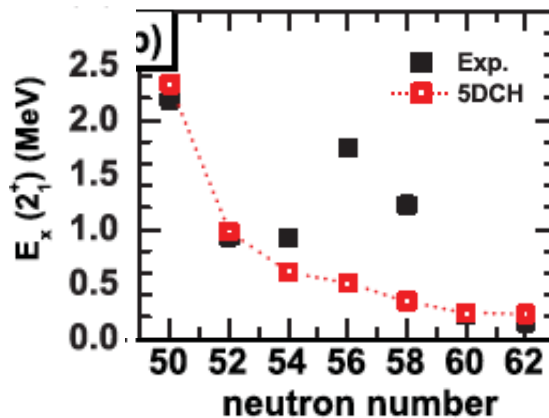
他の理論計算:  
 $N$ が少ない領域から徐々に変形  
が大きくなっていく

従来通りの殻模型計算  
では $N \geq 60$ の変形が  
大きい領域の計算が困難



K.Sieja, F.Nowacki, K.Langanke, G.Martinez-Pinedo, Phys.Rev.C 79, 064310 (2009)

多くの理論計算(密度汎関数  
法など)では $N \leq 58$ の記述が  
上手いいかないことが多い



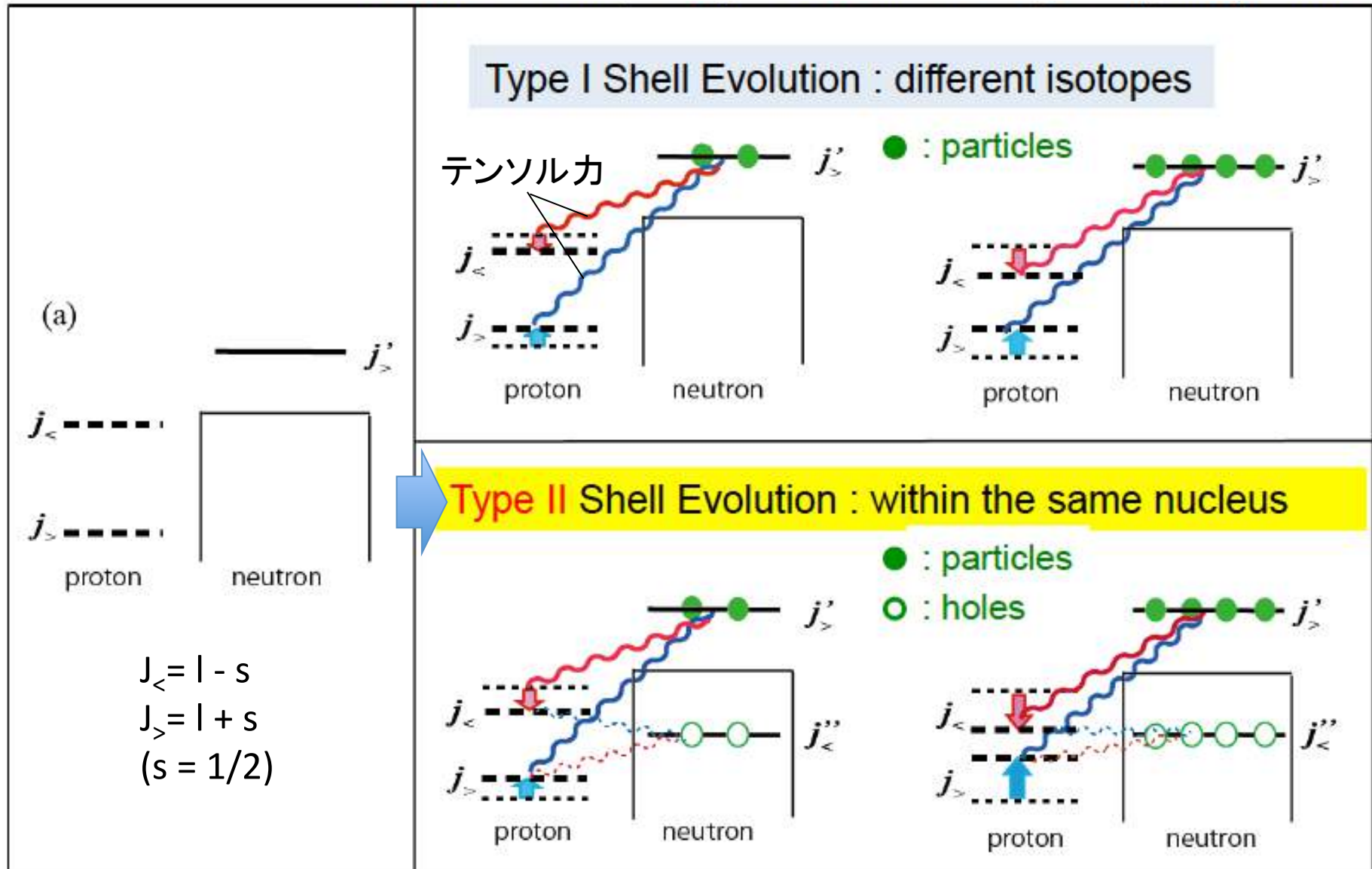
H.Mei, J.Xiang, J.M.Yao, et al., Phys.Rev.C 85, 034321 (2012)

## What's new.

殻模型計算の立場から  
初めて統一的に $N=50-70$   
までの状態を記述  
⇒  $N=58-60$ での  
(1<sup>st</sup> order) quantum phase  
transitionを示した。

# 殻進化(Shell evolution)

T.Otsuka and Y.Tsunoda, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 43 (2016) 024009



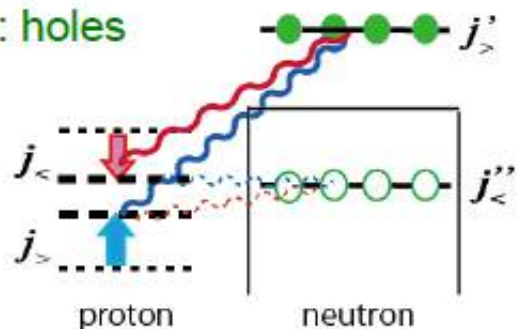
# Type II Shell evolution による shape transition

## Type II Shell evolution

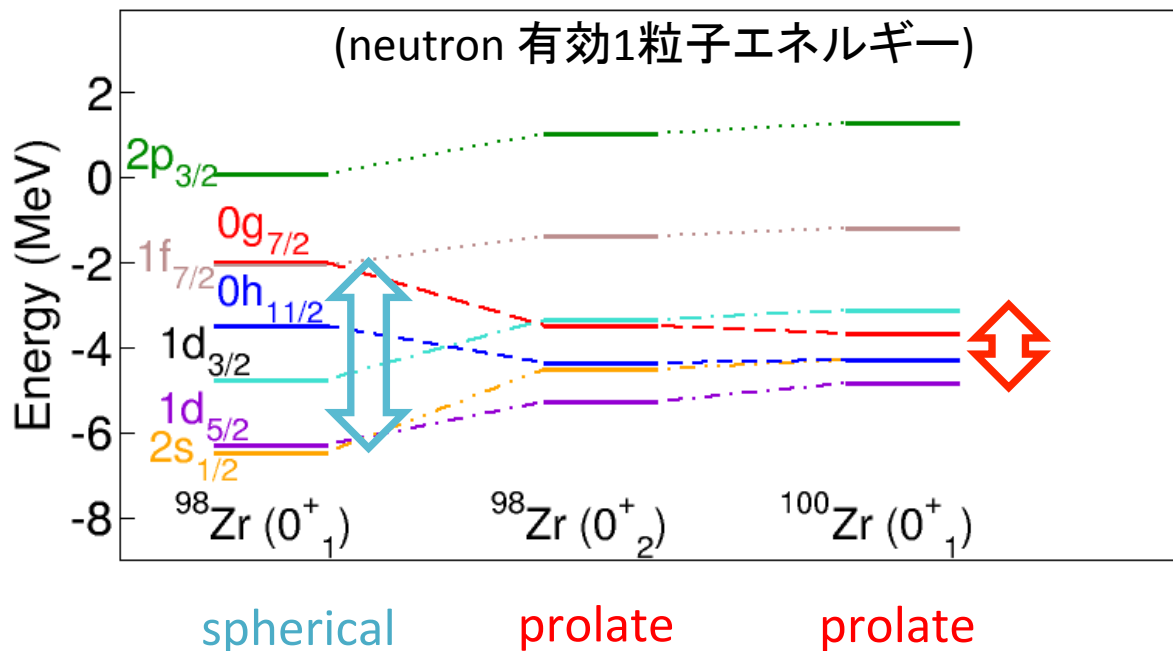
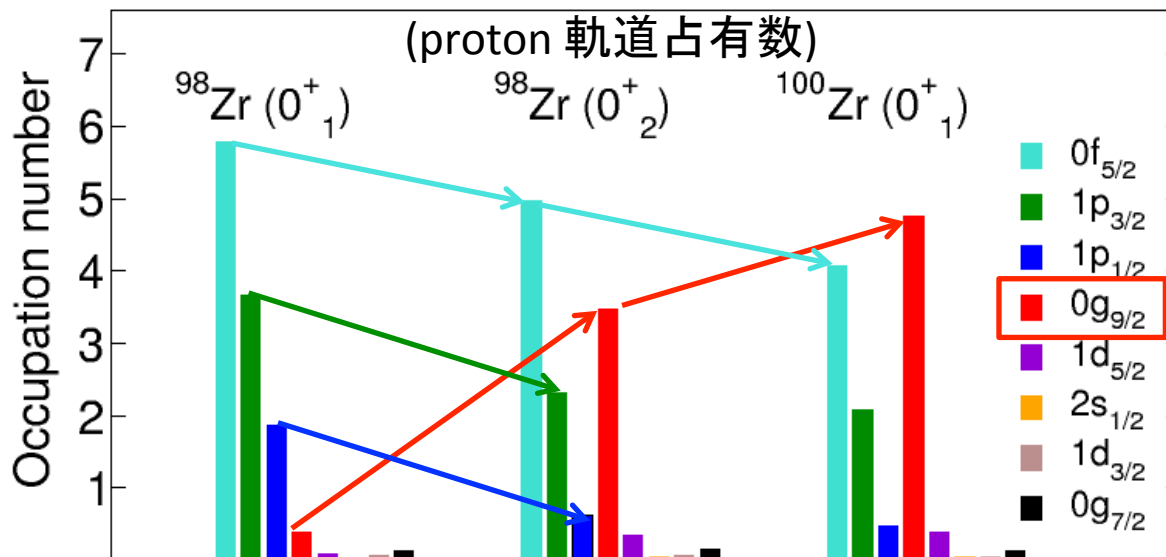
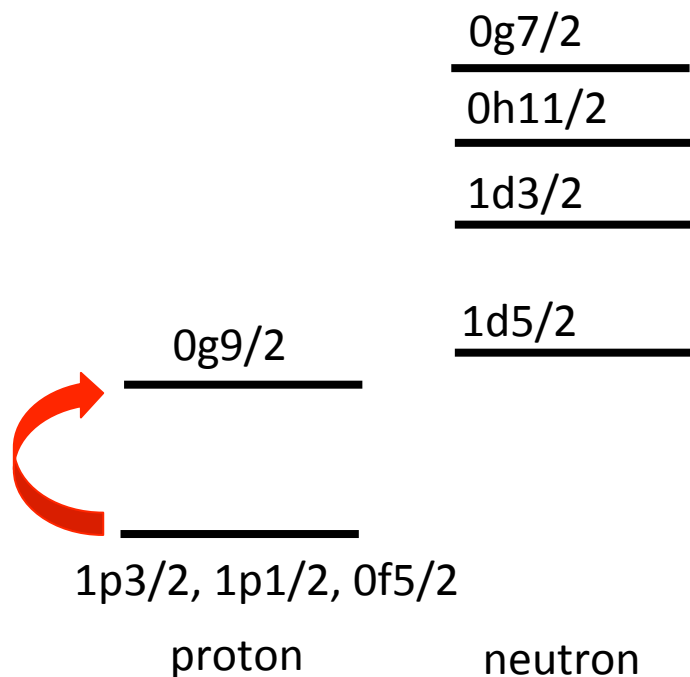
- : particles
- : holes

$$J_{<} = l - 1/2$$

$$J_{>} = l + 1/2$$

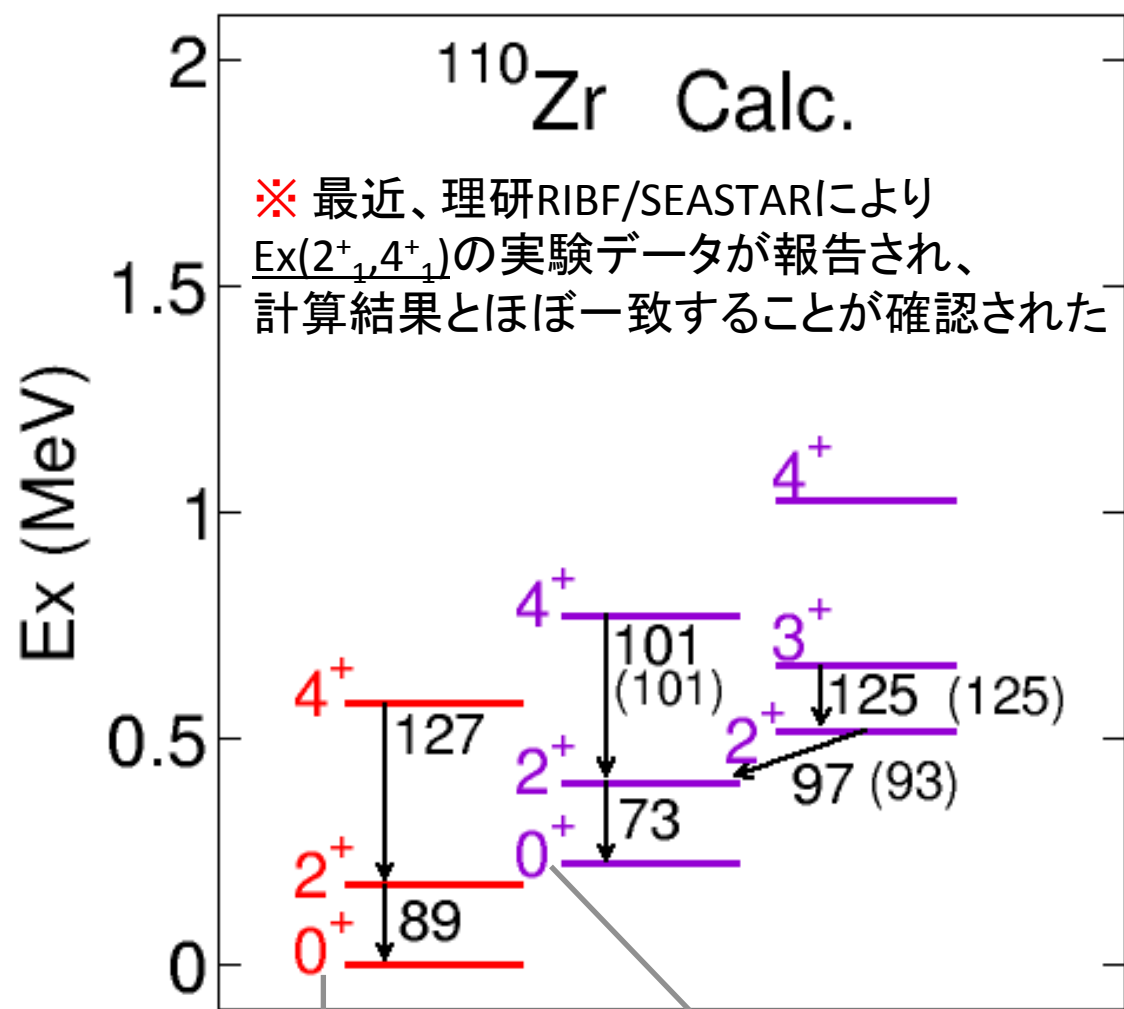


\*proton と neutron を読み替える





# $^{110}\text{Zr}$ (N=70)のエネルギー準位



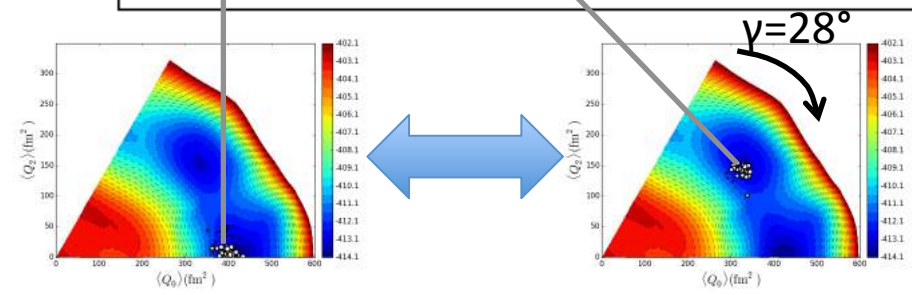
下矢印↓右の数値は B(E2) (W.u.)を表す

( )付きの数値はある特定の3軸非対称の自由度( $\gamma$ )のみを取る(rigid) triaxial 変形を仮定したときの推定値\*

\*A.S.Davydov and G.F.Filippov, Nucl.Phys.8, 237 (1958),  
A.S.Davydov and V.S.Rostovsky, Nucl.Phys.12, 58 (1959)



サイドバンドはrigid triaxialであることを示唆



★  $^{110}\text{Zr}$  はprolate と rigid triaxial の変形共存状態であることを理論的に示唆

# 本研究のまとめと展望

- 殻模型計算の立場から統一的にZr同位体( $Z=40, N=50-70$ )の計算を行うことで、Zr同位体における $N=58-60$ での量子相転移を理論的に示した。
- 上記の量子相転移では球形と変形状態とのlevel crossingが起こることを示し、それがtype II shell evolutionから理解できることを示した。
- $^{110}\text{Zr}$ における $2^+_{1, 4^+_{1}}$ のエネルギーレベルの予言に成功し、 $^{110}\text{Zr}$ がprolateとrigid triaxialの変形共存状態であることを理論的に示唆した。

## 今後の展望

本研究で用いた模型空間・有効相互作用は $Z=40-50$ 核に広く適用することが可能

- 系統的な構造計算
- 元素合成(s,r過程)に関わる状態・物理量の計算
- $\beta\beta$ 崩壊への適用

