

Shell Model Monte Carlo 法による 原子核準位密度の微視的計算

Microscopic Calculation of Nuclear Level Densities by Shell Model Monte Carlo Method

千葉大学理学部 中田 仁

E-mail: nakada@physics.s.chiba-u.ac.jp

1 Introduction

原子核の準位密度は、核反応率を理解する上で重要な核データである。特に不安定核等、反応率の測定が困難な場合には、その理論的・定量的評価のために crucial である。他方、宇宙物理学において様々な天体現象の定量的レベルでの研究が進むにつれ、不安定核も含めたほとんどあらゆる核種の精密な核データが重要になってきた。このような天体核反応の研究には多数の核種の準位密度が必要であり、我々の身の回りの元素の起源を探る元素合成過程の研究や、超新星爆発等の物理的に興味深い天体現象の理論にも大きく影響する。しかし、準位密度の実験データが得られる原子核も、核反応率の場合と同様非常に限られており、また準位密度を理論的立場から精度よく評価するのも容易でなかった。ここでは、核準位密度に関する理論として成功を収めつつある最近のアプローチを紹介し、原子核構造論の発展が核データ、さらには宇宙物理学に対してどのように寄与し得るかを示す一例としたい。

重元素は、AGB 星 (s 過程の場合) や超新星爆発 (r 過程の場合) において、主に中性子捕獲 ((n, γ) 反応) により合成されたと考えられる。この (n, γ) 反応率を理論的に与えるのに Hauser-Feshbach 公式が用いられるが、そこでは核構造の情報として中性子共鳴以下のエネルギー全体にわたる核準位密度が input となる。よく知られている通り、核準位密度のエネルギー依存性は非常に強く、backshifted Bethe formula (以下、BBF と略す) でよく表される。BBF はもともと Fermi ガス模型を基に導かれたもので [1]、例えば全準位密度について

$$\rho(E_x) = \frac{\sqrt{\pi}}{12} a^{-1/4} (E_x - \Delta + t)^{-5/4} \exp \left[2\sqrt{a(E_x - \Delta)} \right] \quad (1)$$

のように与えられる。ここで E_x は励起エネルギー、 t は $E_x - \Delta = at - t^2$ により定義される量である。従って、上の BBF は a, Δ の 2 つのパラメータを含んでいる。実際は、BBF は a と Δ を準位密度の実験値に fit した時よく成り立つのだが、パラメータ a 及び Δ の値は Fermi ガス模型から得られる値と大きく異なるばかりでなく、核種に強く依存し [1]、これらを理論的に精度よく予言するのは容易でない。それゆえ結局のところ、核

準位密度の理論的予測は困難であった。

では、我々が対象としている比較的低いエネルギー領域において、核準位密度にどんな自由度が効くのだろうか。中性子共鳴エネルギーは高々10MeV程度で、異なる major shell 間のエネルギー差の測度 $\hbar\omega$ と同程度に過ぎない。そのため、Fermi ガス模型のような描像よりむしろ major shell 内やそのごく周辺の shell structure の方が重要であろうし、また valence 核子間の 2 体相関も核準位密度に十分寄与し得る。但し、準位密度はグロスな性質なので 2 体相関の多くは大きな効果を持たず、対相関や四重極相関などの集団運動と関係した 2 体相関のみが重要と考えられる。このような shell structure や valence 核子間の 2 体相関を十分に取り入れるためには、いわゆる shell model 計算のような interacting shell model (以下、ISM と略す) が適している。しかし、中性子共鳴近くのエネルギーまでカバーするような model space は (軽い核を除いて) 通常の shell model 計算には大き過ぎ、shell model 計算を核準位密度の研究に応用するのは現実には不可能であった。

ところで、核準位密度は有限温度の核構造の問題として捉えることができる。近年 shell model Monte Carlo 法 [2] (以下、SMMC 法と略す) が開発されたが、これは有限温度の核構造を核子間の量子的多体相関を取り入れた ISM により扱うための強力な tool となる。我々は shell model Monte Carlo 法を応用することにより、ISM による微視的立場から核準位密度を理論的に評価する方法を開発し、実際に核準位密度を精度よく記述できることを示した [3, 4, 5]。以下において、SMMC 法を用いた最近の核準位密度に関する理論的研究を紹介する。

2 Shell model Monte Carlo 法と核準位密度計算

本節ではまず、SMMC 法について概説する。一般に ISM Hamiltonian は

$$H = \sum_a \epsilon_a \hat{n}_a + \sum_\alpha \frac{\kappa_\alpha}{2} \hat{\rho}_\alpha^2 \quad (2)$$

の形に表すことができる。ここで ϵ_a , $\hat{n}_a$ はそれぞれ 1 粒子軌道 a のエネルギーと粒子数演算子、 $\hat{\rho}_\alpha$ は適当な 1 体密度演算子、 α はそのラベルである。温度 T の下で、粒子数が固定された系での物理量 $\mathcal{O}$ の正準期待値は $\langle \mathcal{O} \rangle = \text{Tr}(\mathcal{O}e^{-\beta H})/Z(\beta)$ で与えられる。但し $\beta = 1/k_B T$, $Z(\beta) = \text{Tr} e^{-\beta H}$ は正準分配関数 (Tr はその粒子数での正準トレース) で、 $e^{-\beta H}$ は虚時間 β での系の発展演算子である。この虚時間 β を十分小さな $\Delta\beta$ に n 等分すると、(2) 式より次のように分解できる (Suzuki-Trotter 分解)。

$$e^{-\beta H} = (e^{-\Delta\beta H})^n; e^{-\Delta\beta H} = \prod_a e^{-\Delta\beta \epsilon_a \hat{n}_a} \prod_\alpha e^{-\Delta\beta \frac{\kappa_\alpha}{2} \hat{\rho}_\alpha^2} + O((\Delta\beta)^2). \quad (3)$$

さらに, (3) 式のうち $\hat{\rho}_\alpha^2$ を含む因子は次のように書き直せる (Hubbard-Stratonovich (HS) 変換)。

$$e^{-\Delta\beta \frac{\kappa_\alpha}{2} \hat{\rho}_\alpha^2} = \int d\sigma_\alpha \sqrt{\frac{\Delta\beta |\kappa_\alpha|}{2\pi}} e^{-\Delta\beta |\kappa_\alpha| (\frac{\sigma_\alpha^2}{2} + s_\alpha \sigma_\alpha \hat{\rho}_\alpha)}; \quad s_\alpha = \begin{cases} \pm 1 & (\text{if } \kappa_\alpha < 0) \\ \pm i & (\text{if } \kappa_\alpha > 0) \end{cases} \quad (4)$$

この HS 変換により, 各 $\hat{\rho}_\alpha$ に対応して補助場 σ_α が導入された。(3) 式と (4) 式から, 時間発展演算子 $e^{-\beta H}$ を時間に依存した補助場 σ に関する経路積分で表す HS 表示

$$e^{-\beta H} \simeq \int \mathcal{D}[\sigma] G_\sigma U_\sigma \quad (5)$$

を得る。(4) 式を (3) 式に代入する際, 時間分割毎に異なる $\sigma_\alpha(\tau_m)$ ($\tau_m = m\Delta\beta; m = 1, \dots, n$) が現れ, σ は時間に依存した補助場と見なされる。 $G_\sigma = e^{-\frac{\Delta\beta}{2} \sum_{\alpha,m} |\kappa_\alpha| \sigma_\alpha^2(\tau_m)}$ は σ についての Gauss 型因子で, 補助場 σ の自己エネルギーに関する項と見ることができる。 $U_\sigma = e^{-\Delta\beta h_\sigma(\tau_n)} \dots e^{-\Delta\beta h_\sigma(\tau_1)}$ は

$$h_\sigma(\tau) = \sum_a \epsilon_a \hat{n}_a + \sum_\alpha |\kappa_\alpha| s_\alpha \sigma_\alpha(\tau) \hat{\rho}_\alpha \quad (6)$$

による時間発展演算子である。この $h_\sigma(\tau)$ は虚時間 τ において補助場 $\sigma_\alpha(\tau)$ 中を運動する核子の 1 粒子 Hamiltonian を表している。HS 経路積分の計量は

$$\mathcal{D}[\sigma] = \prod_{\alpha,m} \left[d\sigma_\alpha(\tau_m) \sqrt{\frac{\Delta\beta |\kappa_\alpha|}{2\pi}} \right] \quad (7)$$

で与えられる。(5) 式の HS 表示を使うと, 物理量 $\mathcal{O}$ の熱平均は

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\text{Tr}(\mathcal{O} e^{-\beta H})}{\text{Tr} e^{-\beta H}} \simeq \frac{\int \mathcal{D}[\sigma] G_\sigma \langle \mathcal{O} \rangle_\sigma \text{Tr} U_\sigma}{\int \mathcal{D}[\sigma] G_\sigma \text{Tr} U_\sigma} \quad (8)$$

と表せる。但し, $\langle \mathcal{O} \rangle_\sigma = \text{Tr}(\mathcal{O} U_\sigma) / \text{Tr} U_\sigma$ である。

h_σ は 1 粒子 Hamiltonian なので, もし σ が与えられれば (8) 式の被積分関数は容易に計算できる。Valence 空間の 1 粒子状態に対する行列を扱うだけで済むからである。例えば U_σ の大正準トレースは, 外場 σ 中を独立に運動する Fermi 粒子の分配関数になり, (σ に依存した) 1 粒子軌道に対する Fermi-Dirac 分布関数により与えられる。正準分配関数 $\text{Tr} U_\sigma$ を得るには, これに粒子数射影を施せばよい。このようにして, それぞれの σ に対して (8) 式の被積分関数が計算できる。

しかし, 当然ながら (8) 式の経路積分の多重度は大変大きいので, 実際の計算は以下に述べるような Monte Carlo 法で取扱う。十分小さいが有限の $\Delta\beta$ を取り, 補助場 σ の値を分布関数 $W_\sigma = G_\sigma |\text{Tr} U_\sigma|$ に従って酔歩させ, 各サンプル $\sigma = \{\sigma_\alpha(\tau_m)\}$ に対して $\langle \mathcal{O} \rangle_\sigma$ を求める。これを繰返して多数の相関のないサンプルを選び, $\mathcal{O}$ の熱平均を $\langle \mathcal{O} \rangle \approx \sum \Phi_\sigma \langle \mathcal{O} \rangle_\sigma / \sum \Phi_\sigma$ により評価するのである (Φ_σ は $\text{Tr} U_\sigma$ の符号)。 $\langle \mathcal{O} \rangle_\sigma$ の分散から $\langle \mathcal{O} \rangle$ に対する統計誤差も評価できる。一般に符号 Φ_σ は常に正であるとは限らず, い

いわゆる“符号”問題を導くが、準位密度のようなグロスな性質については集団運動に関連した成分だけを引き出すことにより符号問題を持たない Hamiltonian を使うことができる [3]。

核準位密度は、SMMC 法を用いて次のように求めることができる。量子束縛系の準位密度 $\rho(E) = \text{Tr } \delta(E - H)$ は正準分配関数 $Z(\beta) = \text{Tr } e^{-\beta H}$ の逆 Laplace 変換として得られる。この逆 Laplace 変換を鞍点近似によって取扱うと、 E と β が $E(\beta) = -\frac{d}{d\beta} \ln Z(\beta)$ のように関係づけられ（これにより E と温度 $T = 1/k_B\beta$ での正準エネルギー期待値 $\langle H \rangle$ を同一視できる）、準位密度は

$$\rho(E) \simeq \frac{e^S}{\sqrt{2\pi\beta^{-2}C}}; \quad S(E) = \beta E + \ln Z, \quad C(\beta) = -\beta^2 \frac{d}{d\beta} E(\beta) \quad (9)$$

で与えられる。ここで S はエントロピー、 C は比熱である。このように、原子核は孤立した多体系であるにもかかわらず、その準位密度は原子核の熱特性と見なせるのである。SMMC 法により β の関数として $E(\beta) = \langle H \rangle$ を計算し、 $\ln[Z(\beta)/Z(0)] = -\int_0^\beta d\beta' E(\beta')$ により分配関数を求めれば、(9) 式から準位密度が得られる。

ところで、原子核のような有限系では種々の保存則が重要な役割を果たす。核準位密度においても、例えば量子数により異なるエネルギー依存性を持つ可能性がある。このような量子数毎の準位密度は、SMMC 法による計算の際にその量子数に関する射影を行うことにより求めることができる。上述のように正準トレースを得るために粒子数（陽子数及び中性子数）射影を行う他、我々は parity 射影法を開発して核準位密度の parity による違いを明らかにした [3]（次節参照）。さらに最近 isospin 射影法を開発し [6]、その効果も調べている。

3 pf -shell 領域における結果

pf -shell 領域の核データは、超新星爆発のメカニズムを定量的に理解する上で非常に重要である。我々はまずこの領域の核準位密度を対象とし、ISM に基づく（即ち SMMC 法を用いた）理論的アプローチの有効性を確かめると同時に、parity 依存性などの核準位密度に関する物理を明らかにすることを試みた。本節では、その結果を抜粋して紹介する。

Model space 及び有効 Hamiltonian は次のように定めた。まず、中性子共鳴領域までカバーするため、full pf -shell に加えて $0g_{9/2}$ 軌道から成る model space を仮定した。1 粒子エネルギーはそれぞれの核種に対して Woods-Saxon potential を解いて定め、有効相互作用は、集団運動に関係した自由度を保持するため、1 粒子 potential と consistent な表面 peak 型の多重極相互作用と対相互作用から成るものを用いることにした。対相互作用の強さはこの領域の核種の質量における偶奇差の系統性から定めた。この有効 Hamiltonian は、準位密度のデータを直接使うことなく、この領域のそれぞれの核種に対して一意的に決定される。

さて, pf -shell 領域の安定核の幾つかについて, 実際に SMMC 法を用いて準位密度を計算した結果を図 1 に示す。図 1 の上側では, 全準位密度の計算値を実験データと比較している。全準位密度に対する直接のデータはないが, 図では実験的に得られた BBF のパラメータから再構成したものを示した。エネルギー依存性, 核種依存性のどちらの観点からも計算値が極めてよい精度で実験値を再現していることが分かる。また, 平均場近似による計算との比較を通じ [3], 平均場近似で形状相転移のため現れる核準位密度の kink は fictitious で, 量子効果により消失することが明らかになった。

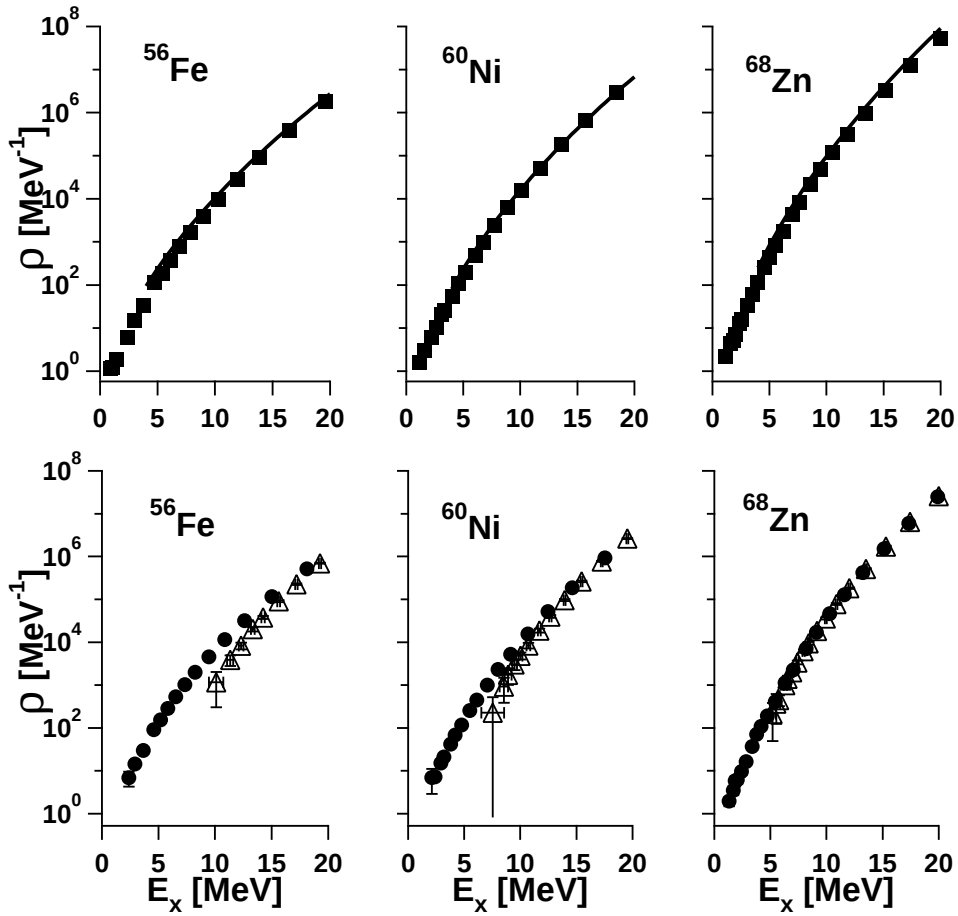


図 1: 上側: SMMC を用いた計算 (黒い四角) 及び実験的に (実線) 得られた全準位密度。実験値は [7] (^{56}Fe , ^{60}Ni に対して) と [8] (^{68}Zn に対して) に与えられた BBF パラメータによる。下側: SMMC を用いた計算による parity 毎の核準位密度。偶 parity 準位の密度は黒丸, 奇 parity 準位の密度は白抜き三角で表している。

図 1 の下側には, parity の偶奇毎の準位密度を示した。Parity 縮退のある Fermi ガス模型に限らず, 多くの核準位密度に関する理論は parity 依存の可能性を考慮していない。宇宙物理学における計算でも核準位密度の parity による違いを考慮に入れたものはなかつ

た。しかし、偶々核では低エネルギー領域で parity により対相関の影響が異なる [9]。さらに、原子核の subshell 構造がそれ以上に大きな影響をもたらす [3, 4]。これは物理的に期待される効果であると同時に、我々の realistic な計算でも明らかである。偶々核の奇 parity 状態は $0g_{9/2}$ 軌道への核子の励起を必要とするが、 ^{56}Fe では $0g_{9/2}$ 軌道は Fermi エネルギーから 5MeV 以上離れていると考えられる。そのため、励起エネルギー 10MeV 程度でも奇 parity 状態を偶 parity 状態ほど数多く作ることができず、parity の偶奇により準位密度は大きく異なるのである。このような parity 依存性が元素合成等の宇宙物理学の理論にどう影響するか、今後の研究に興味を持たれる。

ここで採用している model space は $0f_{7/2}$ 軌道と $0g_{9/2}$ 軌道の両方を含んでいる。このような model space で ISM を扱うと重心運動による spurious state を生じることが知られている。しかし、この spurious state は $0f_{7/2}$ 軌道から $0g_{9/2}$ 軌道への励起を含むため低エネルギー領域にはごく少数しか現れず、準位密度に対する影響は定量的に negligible である。このことは実際の数値計算によっても確認されている。

次に、 $A = 55$ の isobar である ^{55}Mn , ^{55}Fe , ^{55}Co の全準位密度を比較しよう (図 2)。核準位密度の BBF パラメータの系統性を論じる際、しばしば奇核でパラメータ Δ は 0 となり、パラメータ a は質量数だけで決まると仮定されてきた。このような仮定の下では、 $A = 55$ の 3 つの核種の準位密度は完全に一致することになる。しかし、図 2 に見られるように、この 3 つの核種の準位密度がかなり異なっていることは実験的に明らかで、上述のような仮定は受け入れられないことが分かる。また我々の計算結果は、計算を加速するための近似により図 1 に比べると実験値との一致が悪いが、核種による違いをよく再現していると言えよう。

4 課題と展望

前節に示した通り、 pf -shell 領域の安定核に対する計算を通じて、核準位密度が interacting shell model により精確に記述できること、またその上で SMMC 法が非常に有効であることが確認できた。さらに、核準位密度の parity 依存性や様々な shell effect の存在 [4] が明らかになった。ISM に基づく計算を行う上で、model space を十分大きく取ること、また集団運動に関与する 2 体相関を十分に含んだ適切な有効 Hamiltonian を選ぶことが重要と考えられる。この有効 Hamiltonian は我々が既に持っている核構造の知識から決定することができ、それぞれの核種に対して一意的に定められる。それゆえ、この手法の予言性は十分に高いと期待され、不安定核を含むより多くの核種に対する適用が待たれている。

SMMC 法を用いた核準位密度計算を extensive に実行する上で、解決すべき問題が幾つか存在する。その一つは、陽子過剰核、特に $Z = N$ 核における準位密度計算である。 $Z < N$ 核では isospin によるエネルギー分離のため低エネルギー領域に isospin の高い状態がほとんど存在しないのに対し、 $Z = N$ 核では $T = 0$ 状態と $T = 1$ 状態の分離がよくない。他方、前節で扱った有効 Hamiltonian が isospin によるエネルギー分離を適切に

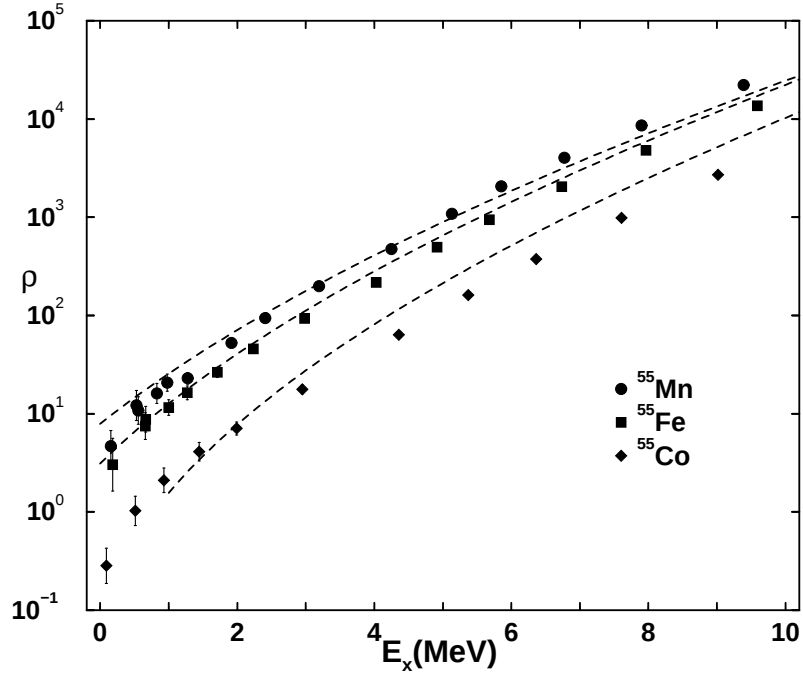


図 2: $A = 55$ 核の全準位密度 ([5] より引用)。記号は SMMC 法を用いた計算値，破線は実験値 [8]。

与える保証はなく，これが $Z = N$ 核の準位密度に大きな影響を及ぼし得ることが指摘されていた [10]。この問題に対し，最近我々は効率よい isospin 射影法を開発し，それを用いてエネルギー分離を適切に補正できることを示した [6]。これにより， $Z = N$ 核でもその周辺核と同程度の信頼性を持った準位密度計算が可能になった。

核準位密度の parity による違いと同様，核 spin による違いも考え得る。核準位密度の spin 依存性は，従来 Gauss 型の因子を仮定して扱われてきたが，微視的計算により調べることに興味を持たれるし，宇宙物理学等への応用上も重要である。しかし，SMMC において spin 射影を実行するのは非常に time-consuming で，現状では現実的と言えない。新たな手法の開発もしくは計算機のさらなる高速化が必要であろう。

SMMC 法を用いた核準位密度計算を進める上で，より重い核への応用が特に重要であることは言うまでもなからう。核データとして大きな weight を占め，宇宙物理学への impact も大きい。 pf -shell より重い質量領域では，低エネルギーにおいて原子核の四重極変形が顕著になる。しかし，原子核の変形が準位密度にどのような影響を及ぼすかは十分明らかになっていない。これを微視的立場から調べることは，核構造論，核データ，宇宙物理学に共通して重要である。変形核の準位密度を計算するには 1 major shell を超える model space を取る必要があり計算量が大幅に増大するが，全準位密度の計算は現在の計算機でも可能と考えている。我々は既に希土類領域での計算を始めており，遠からずその結果を報告できるものと期待している。

ところで、最近の不安定核の構造に関する実験から、中性子ドリップ・ライン近傍では shell structure が安定核と大きく異なることが示唆されている。このような shell structure の変化は核準位密度にも大きく影響し得る。そのメカニズムを正しく理解することは、(準位密度の問題をも含んだ)核構造論全般に関わる非常に重要な課題であることを付言しておきたい。

本稿で述べた研究は、全般について Y. Alhassid (Yale 大学) との共同研究として行っており、部分的に S. Liu (Yale 大学), G. F. Bertsch (Washington 州立大学) とともに協力している。数値計算には、原子力研究所計算科学技術推進センターの IBM SP3, 同タンデム加速器施設の PC クラスタ Helios, 理化学研究所の富士通 VPP700, 筑波大学計算物理学センターの CP-PACS を用いた。

参考文献

- [1] A. Bohr and B. R. Mottelson, *Nuclear Structure* vol.1 (Benjamin, New York, 1969), p. 152, 281.
- [2] S. E. Koonin, D. J. Dean and K. Langanke, Phys. Rep. **278** (1997) 1.
- [3] H. Nakada and Y. Alhassid, Phys. Rev. Lett. **79** (1997) 2939.
- [4] H. Nakada and Y. Alhassid, Phys. Lett. **B436** (1998) 231.
- [5] Y. Alhassid, S. Liu and H. Nakada, Phys. Rev. Lett. **83** (1999) 4265.
- [6] H. Nakada and Y. Alhassid, in preparation.
- [7] C. C. Lu, L. C. Vaz, J. R. Huizenga, Nucl. Phys. **A190**, 229 (1972).
- [8] W. Dilg, *et al.*, Nucl. Phys. **A217**, 269 (1973).
- [9] Y. Alhassid, G. F. Bertsch, S. Liu and H. Nakada, Phys. Rev. Lett. **84** (2000) 4313.
- [10] W. E. Ormand, Phys. Rev. C **56** (1997) R1678; K. Langanke, Phys. Lett. **B438** (1998) 235.