

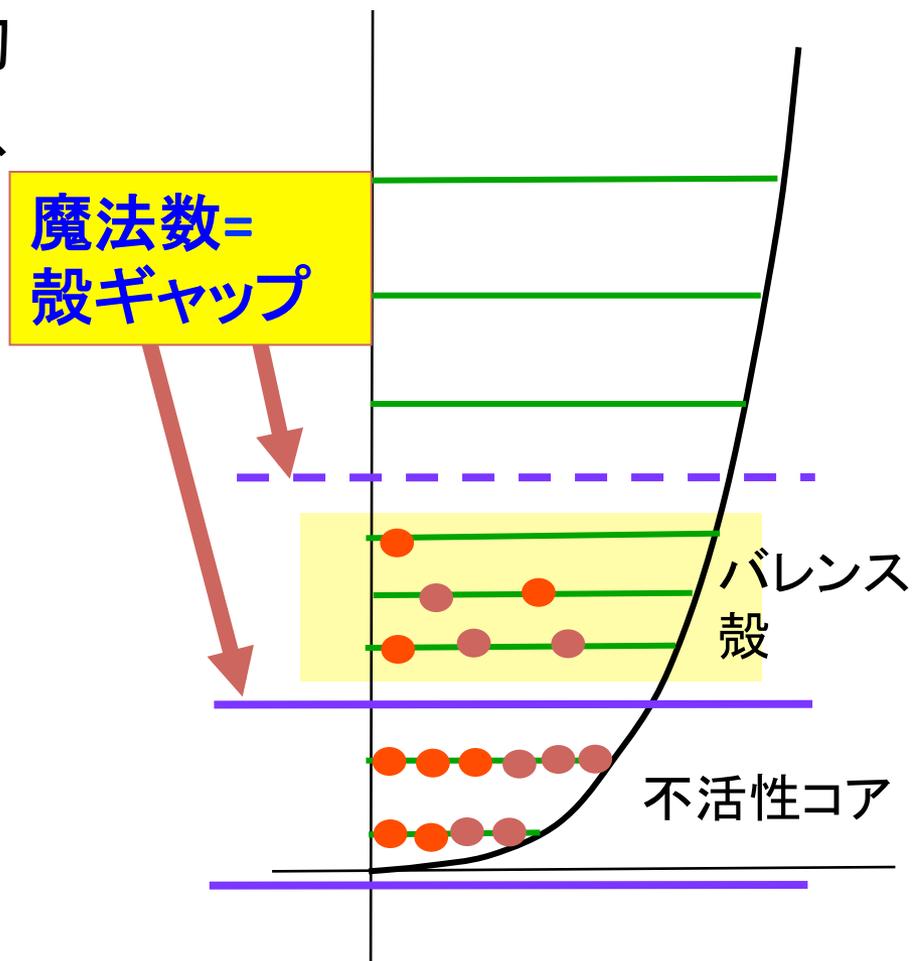
殻模型による原子核構造の記述(2)

宇都野穰

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・先端基礎研究センター
東京大学原子核科学研究センター

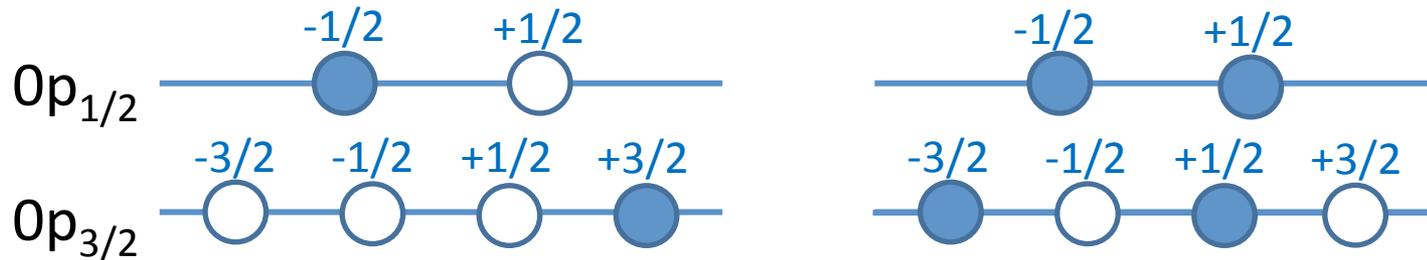
殻模型計算の手順

1. 与えられた(N, Z)核について適切なバレンス殻を決める。バレンス核子の多体問題となる。
2. バレンス殻に属する全ての異なる多体状態を考え、それを基底ベクトルとみなす。
3. バレンス殻内に作用する有効相互作用を用意する。
4. **基底ベクトルで張られるハミルトニアン行列を対角化する。**
5. 得られた固有ベクトルを用いて遷移行列要素を計算する。



基底ベクトル(スレーター行列式)の数

例: ^{10}Be in the p shell



^4He コア (不活性と仮定)

このスレーター行列式の $M(=J_z) = \{(-1/2)+(+3/2)\} + \{(-1/2)+(+1/2)+(-3/2)+(+1/2)\} = 0$

- 基底ベクトルの合計数は、組み合わせの数から、

$$D = ({}^{\blacksquare}N \downarrow s(p) @ N \downarrow p(p)) \times ({}^{\blacksquare}N \downarrow s(n) @ N \downarrow p(n))$$

ここで N_s と N_p はそれぞれ一粒子状態の数および粒子数を表す。

対称性を用いた行列のサイズの縮小

- 一般に、ハミルトニアン

$$qH \mathbf{A} q' = 0$$

→ ブロック対角化

- M スキーム

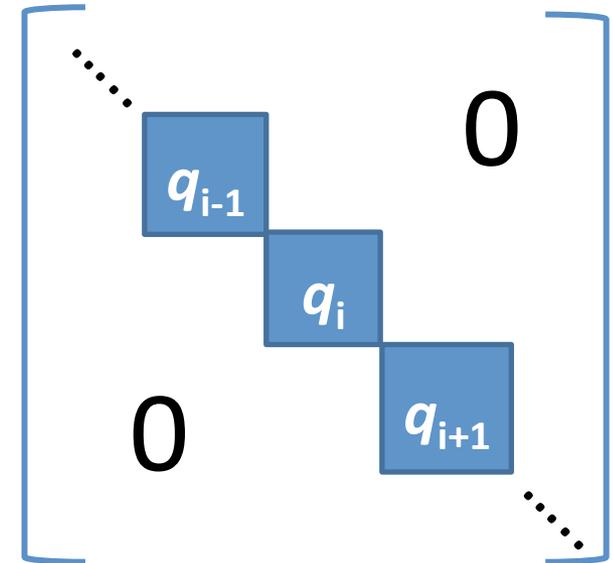
– $J_z (=M)$ を利用する。球形基底 (j, j_z が良い量子数の基底) で作られるスレーター行列式

$$c \downarrow p(1) \uparrow \uparrow \cdots c \downarrow p(N \downarrow p(p)) \uparrow \uparrow c \downarrow n(1) \uparrow \uparrow \cdots c \downarrow n(N \downarrow p(n)) \uparrow \uparrow | \text{core} \rangle$$

は $M = m(p(1)) + \cdots + m(n(N \downarrow p(n)))$ を持つ。その基底を用いた計算を M スキームという。

- J スキーム

– M スキーム基底はさらに角運動量 J によって状態を分類できる。その基底を用いた計算を J スキームという。



最も簡単な例：単一j軌道の2粒子系

- 合計基底数: $(2j+1)\{(2j+1)-1\}/2$
- $M=0$ の基底数: $\Omega=(2j+1)/2$
 - $|m_1, m_2; M=m_1 + m_2\rangle = c_{jm_1} \uparrow \dagger c_{jm_2} \uparrow \dagger |0\rangle$
 $(m_1, m_2; M=0) = (-j, +j), (-(j-1), +(j-1)), \dots, (-1/2, +1/2)$
- $M=0$ の基底を用いてJの固有状態を作る
 - $|J, M=0\rangle = (1/\sqrt{2}) \sum_{m_1} \begin{pmatrix} j & m_1 & j & -m_1 \\ J & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} c_{jm_1} \uparrow \dagger c_{j-m_1} \uparrow \dagger |0\rangle$

スレーター行列式の重ね合わせ
 - 次元数は各々のjに対して1。

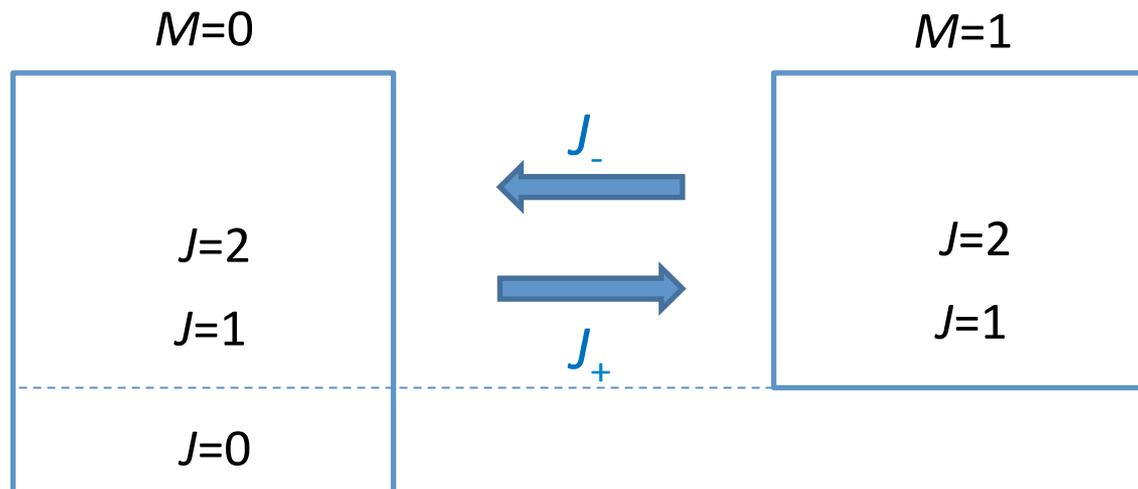
スレーター行列式

- ぱっと見は、 $J = 0, \dots, 2j$ までの 2Ω 個の状態ができ、 $M=0$ の基底数 Ω に合わないように見えるが、 $J=\text{odd}$ の状態は作れないので $M=0$ の基底数 Ω と一致する。

Mスキームの基底数とJスキームの基底数

- Jスキームの基底数は、Mスキームの基底数から導くことができる。
 - 例として、 $M=0$ の基底のセットと $M=1$ の基底のセットを考える。
 - $M=0$ の基底には、 $J=0, 1, \dots$ の状態が含まれるが、 $J=1, 2, \dots$ の状態は、昇降演算子を通じて、 $M=1$ の基底と1対1に対応している。したがって、 $M=0$ の基底数から $M=1$ の基底数を引いたものが $J=0$ の基底数である。
 - 一般に、Jスキームの基底数は、

$$D \downarrow J(I) = D \downarrow M(M=I) - D \downarrow M(M=I+1)$$



どのようにして大きな行列を対角化するか

- 一般的な D 次元行列の正攻法の対角化(等価な行列に変換する方法)
 - メモリ使用量: order of D^2
 - 浮動小数点演算回数: order of D^3
 - 例として、 $D=10^{10}$, 行列を考えると、メモリは $\approx 10^{11}$ GB, 浮動小数点演算回数 $\approx 10^{30}$
(100 GFLOPS程度の最近のワークステーションでどの程度の時間がかかるか見積もるとよい)
- 多くの物理的興味のある場面では、計算時間はLanczos法を用いて劇的に減少させることができる。
 - 実対称行列
 - 非常に疎な行列 (ほとんどの行列要素がゼロ)
 - 低いエネルギーの少数の固有状態のみに着目

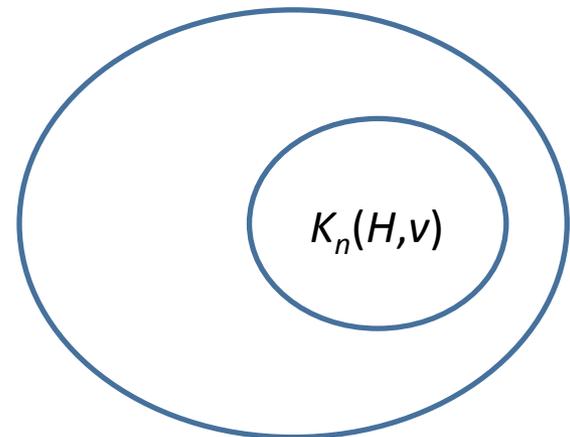
Power法

- 非常に単純なアイデアに基づく
 - 任意のベクトルを固有ベクトルによって展開する:
 $v = c_1 e_1 + c_2 e_2 + \dots$ ここで、固有値の順番は $|E_1| > |E_2| > \dots$
 - v に対し、行列 (Hamiltonianなどの) を繰り返し作用させると、
 $H^n v = E_1^n c_1 e_1 + E_2^n c_2 e_2 + \dots$
 - これは、何度か行列を作用させると、固有値の絶対値が大きいコンポーネントが増大していくことを意味する。



H を繰り返し作用させたベクトルによって Krylov 部分空間と呼ばれる空間が定義される:

$$K_n(H, v) = \text{span}\{v, Hv, \dots, H^{n-1}v\}$$



Lanczos法

- 正規直交基底で張られる Krylov 部分空間を以下のように定義する。

1. 適当な規格化された基底 $u_{\downarrow 1}$ から出発する。

$$Hu_{\downarrow 1} = \alpha_{\downarrow 1} u_{\downarrow 1} + \beta_{\downarrow 1} u_{\downarrow 2} \quad : \text{規格化された } u_{\downarrow 2} \text{ を定義する。}$$

2. 同様に、

$$Hu_{\downarrow 2} = \beta_{\downarrow 1} u_{\downarrow 1} + \alpha_{\downarrow 2} u_{\downarrow 2} + \beta_{\downarrow 2} u_{\downarrow 3} \quad : \text{規格化された } u_{\downarrow 3} \text{ を定義する。}$$

3. 一般の k に対しては、 $u_{\downarrow k}$,

$$Hu_{\downarrow k} = \beta_{\downarrow k-1} u_{\downarrow k-1} + \alpha_{\downarrow k} u_{\downarrow k} + \beta_{\downarrow k} u_{\downarrow k+1} \quad : \text{defining a normalized vector } u_{\downarrow k+1}$$

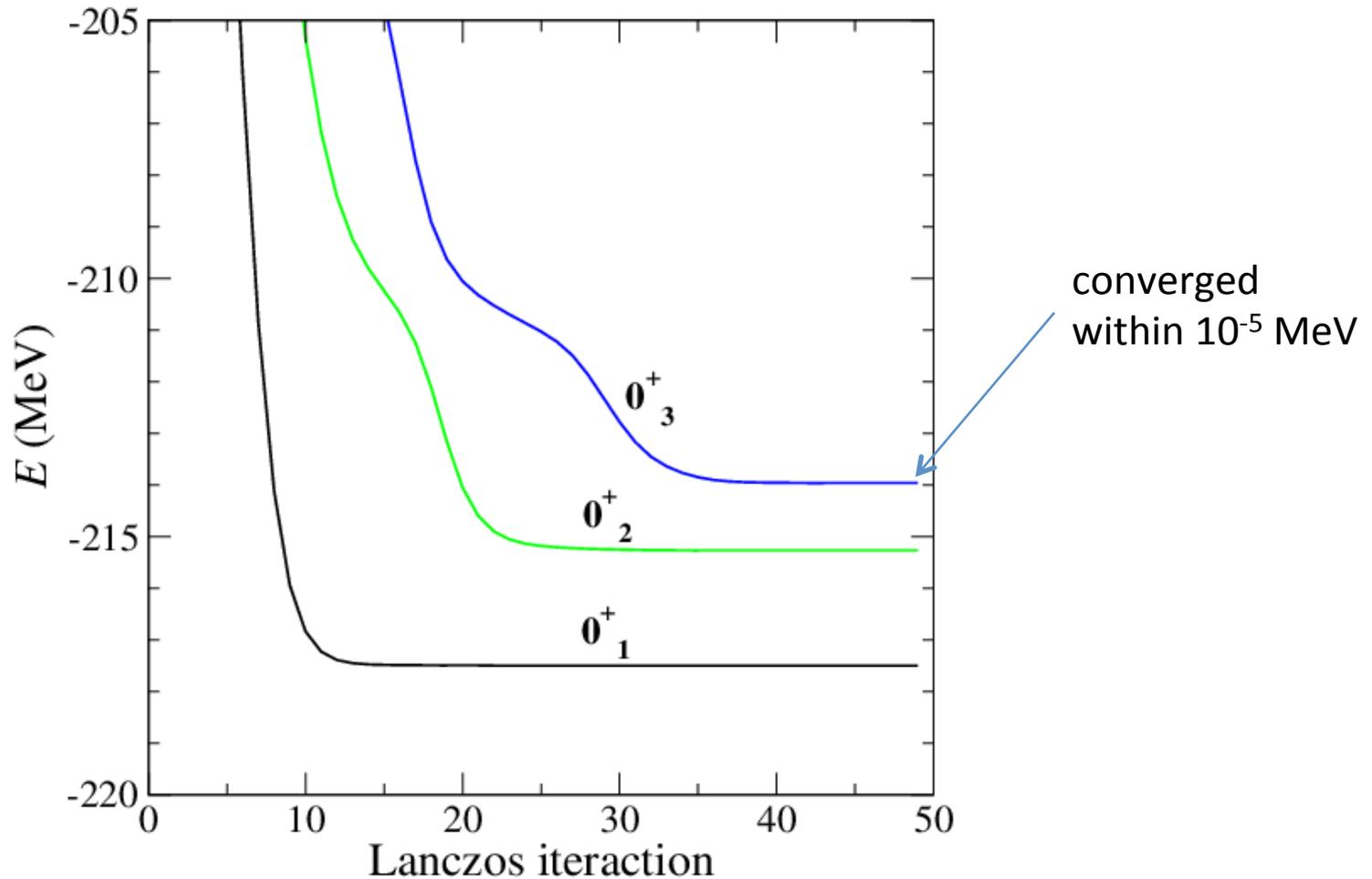
(H がエルミート行列ならば、 $Hu_{\downarrow k}$ の展開に $u_{\downarrow 1}$, $u_{\downarrow 2}$, ..., $u_{\downarrow k-2}$ は含まれない。)



$$K_{\downarrow k}(H, u_{\downarrow 1}) = \text{span}\{u_{\downarrow 1}, \dots, u_{\downarrow k}\}$$

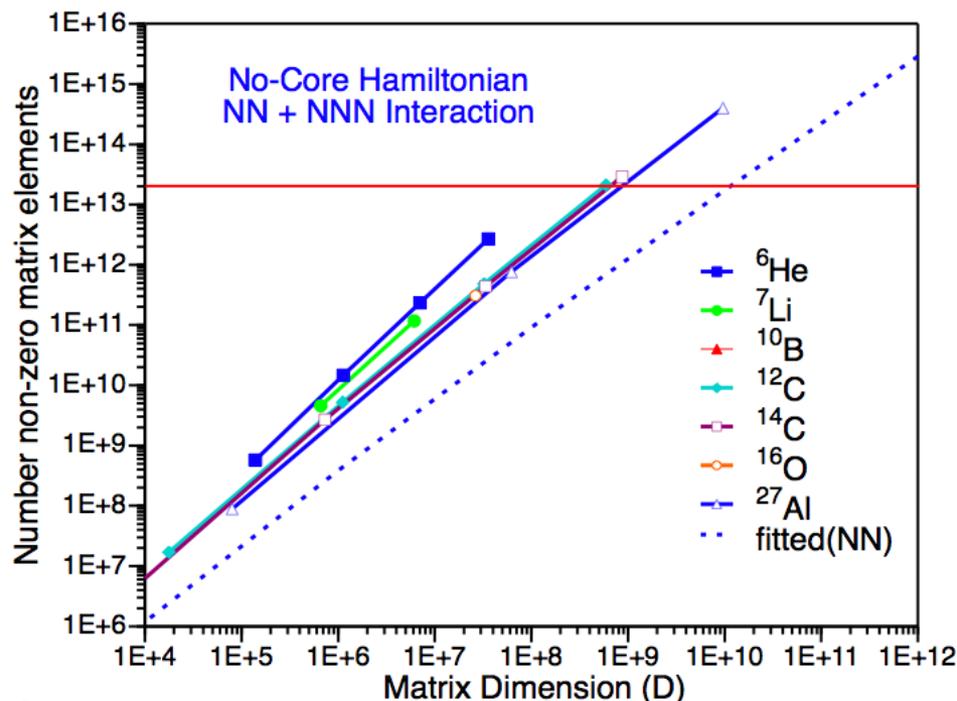
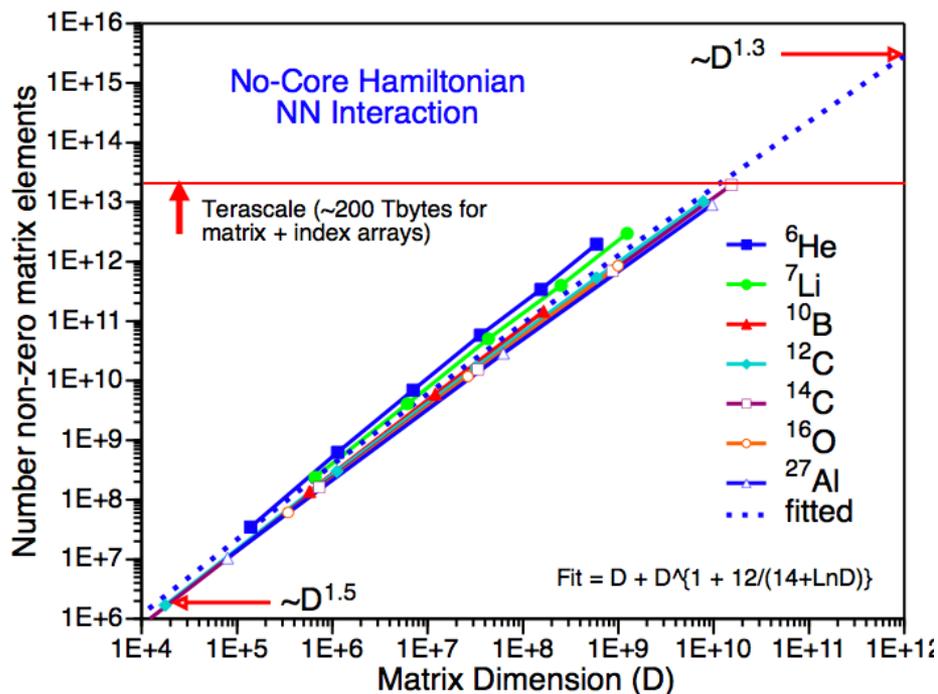
エネルギーの収束の具体例

- ^{42}Si in the sd-pf shell (但しN=20 shell gapを超えた励起は入れない)
 - Mスキーム次元: およそ 10^7



殻模型ハミルトニアンのsparsity

- ゼロとなる行列要素が圧倒的に多い
 - 二体力では、高々2粒子までの占有状態が異なる基底間の行列要素のみが非ゼロとなる。
 - 非ゼロの行列要素の数を nD とすると(D :次元数)、典型的な n は、 10^3 (二体力)、 10^{4-5} (三体力)



Courtesy of J. P. Vary

Lanczos法で必要な浮動小数点演算回数 のまとめ

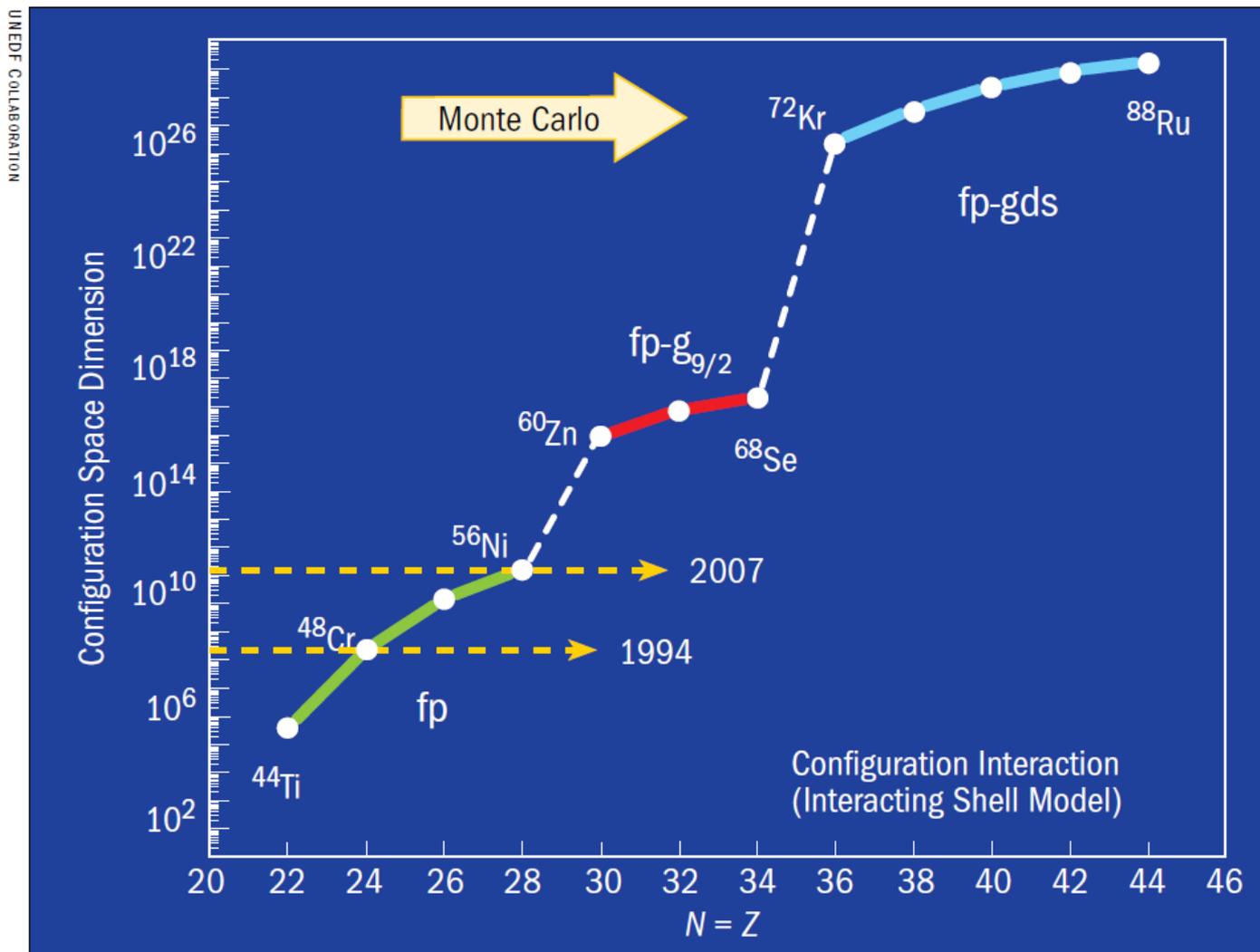
- 例: $D=10^{10}$ 次元
- 行列の等価な変形による普通の対角化
 $\approx D^3 = 10^{30}$ 回
 - 100 GFLOPS計算機で 10^{19} 秒 \approx 3000億年
- Lanczos法
 $\approx 2 \times D \times n \times k = 10^{15}$ 回 ($n=10^3, k=50$ を仮定)
 - 100 GFLOPS計算機で 10^4 秒 \approx 3時間
(実際は、多くの実装ではその100倍くらいの時間がかかる)

Mスキーム計算

- 長所: 比較的小さなメモリ(PC、ワークステーション)でも時間をかければ大規模計算ができる。← ハミルトニアン H の行列要素をメモリにストアする必要がない。
 - 2つのスレーター行列式 $|\Phi\rangle = c_{\downarrow 1} \uparrow \uparrow c_{\downarrow 2} \uparrow \uparrow c_{\downarrow 3} \uparrow \uparrow \dots c_{\downarrow n} \uparrow \uparrow |0\rangle$ と $|\Phi'\rangle = c_{\downarrow 1'} \uparrow \uparrow c_{\downarrow 2'} \uparrow \uparrow c_{\downarrow 3} \uparrow \uparrow \dots c_{\downarrow n} \uparrow \uparrow |0\rangle$ の間(1,2番目だけ異なり、3番目以降は同じ)の二体演算子 $V = (1/4) \sum_{\uparrow \downarrow} v_{\downarrow \uparrow \downarrow \uparrow} c_{\downarrow \uparrow \downarrow \uparrow} \uparrow \uparrow c_{\downarrow \uparrow \downarrow \uparrow} \uparrow \uparrow c_{\downarrow \uparrow \downarrow \uparrow} \uparrow \uparrow c_{\downarrow \uparrow \downarrow \uparrow} \uparrow \uparrow$ の行列要素は、 $\langle \Phi | V | \Phi' \rangle = v_{\downarrow 1 2 1' 2'}$ と非常に簡単になる。したがって、 $\langle \Phi | V | \Phi' \rangle$ をメモリに入れる必要はない。
 - これは、Mスキームの基底がスレーター行列式のためである。
- Lanczosベクトル2本(ハミルトニアンに作用させる前後)メモリに載せれば計算可能。
 - 10^{10} 次元でも、 $2 \times 4 \times 10 \times 10^9 = 80$ GBのメモリしか占有しない。

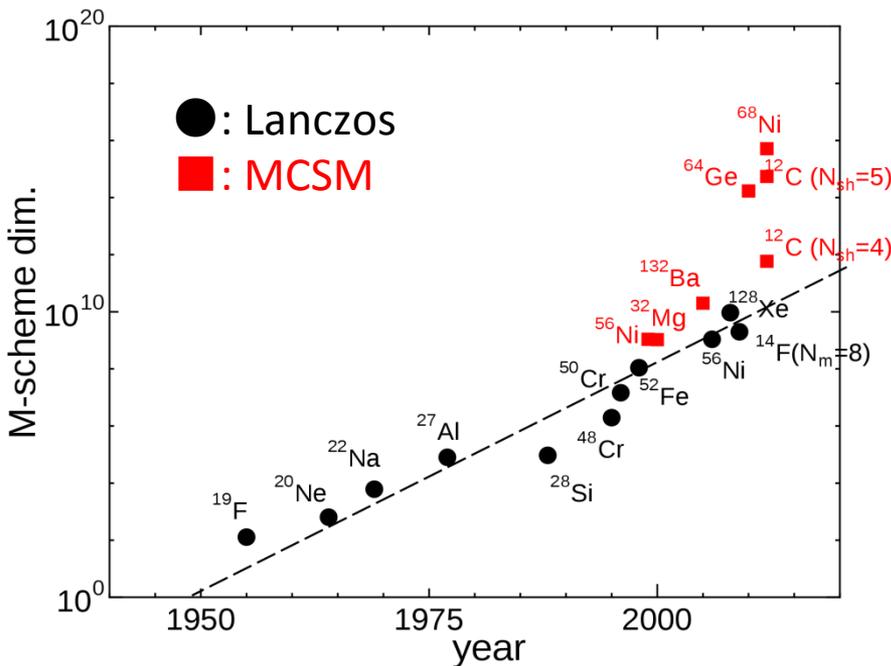
Lanczos法の展望 : Exponential wall

N=Z核における次元数 (対称性を考慮に入れない次元数)

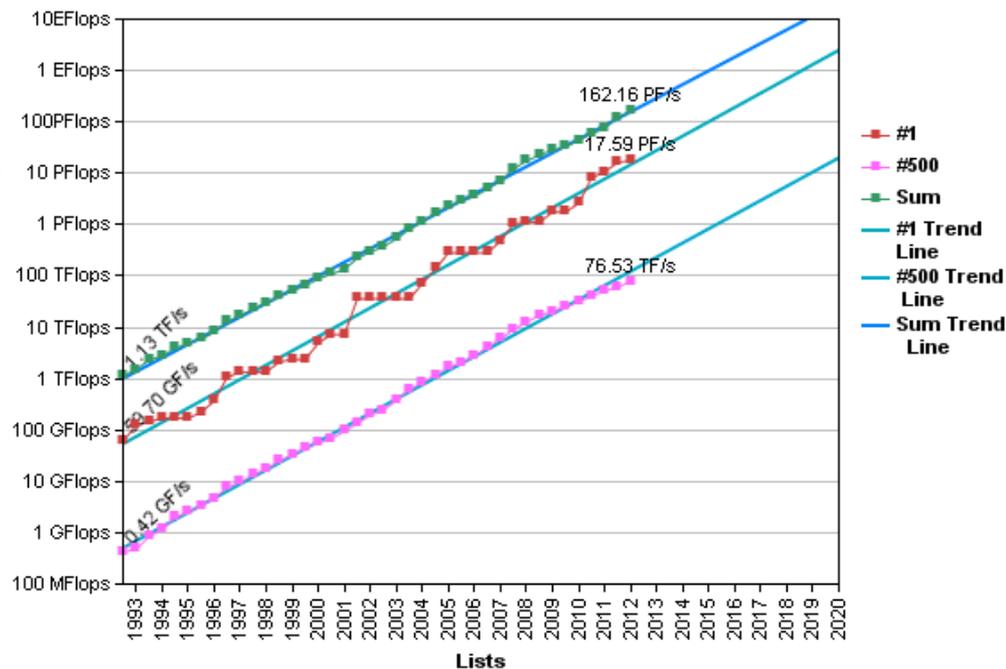


Lanczos法のフロンティア

大規模殻模型計算の発展



Projected Performance Development



- 指数関数的に計算能力と限界の次元数が向上している
- 現在の限界点 $\approx 10^{11}$ (2000年頃の予想と一致)

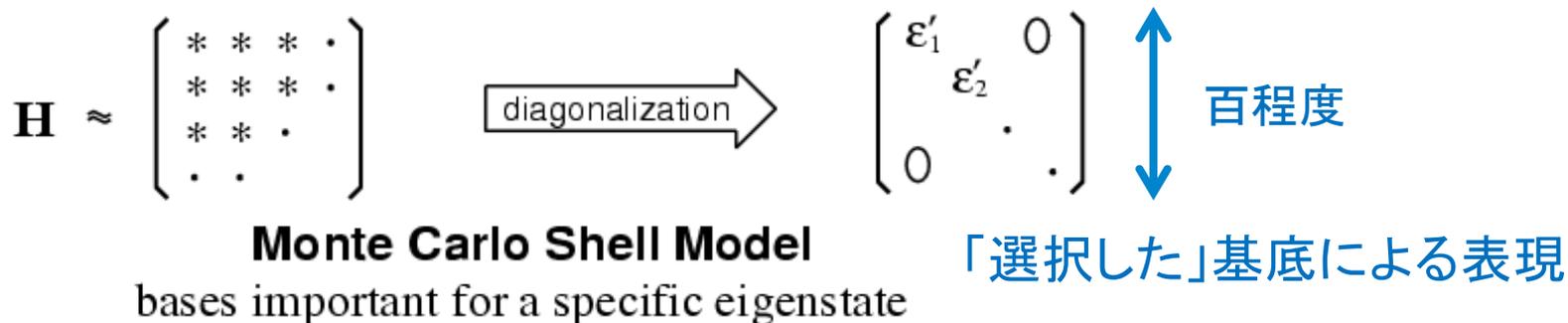
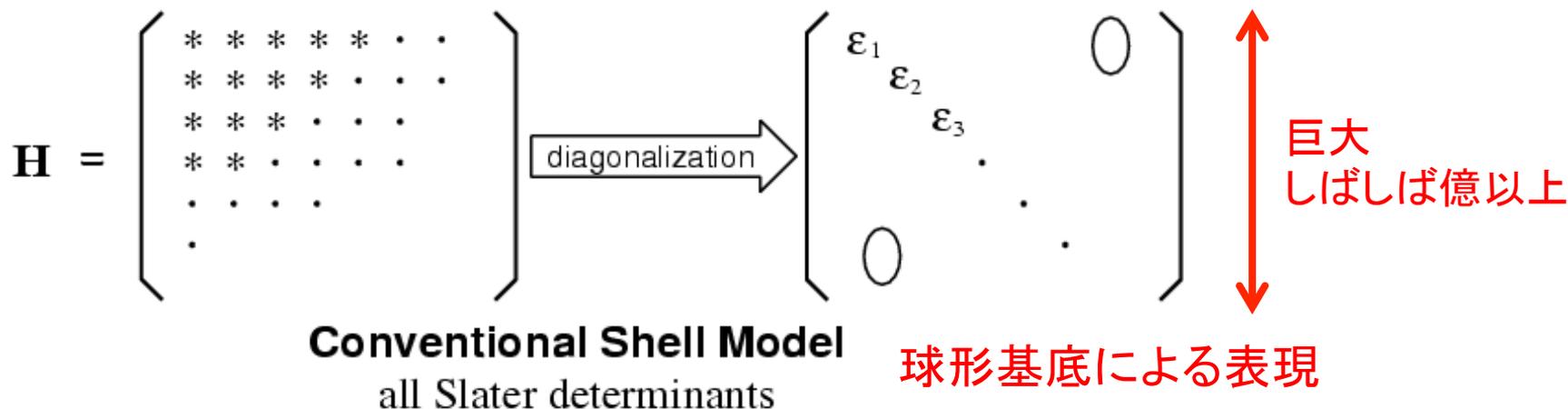
➡ しかし 10^{20} は遠い

目指すもの

- 大次元ハミルトニアン行列を伴う殻模型に対し、
 - 波動関数のサイズ
 - 計算時間が模型空間のサイズや粒子数に**指数関数的にスケールしない**近似的解法
- 全ての多体問題に通用する万能な方法は(おそらく)ない。
- ここでは、核子多体系に向いている方法として、モンテカルロ殻模型(MCSM)と呼んでいる方法を紹介する。
 - もともとは量子モンテカルロ法からアイデアを得たものであったため、その名がついているが、現在の観点からは、平均場近似の拡張と考えた方がわかりやすいので、その方向から説明する。

モンテカルロ殻模型(MCSM)の概念図

- 効率的な基底を選択することによって、少数の基底によって固有状態を精度良く表現したい



球形 vs. 変形基底

- 球形基底

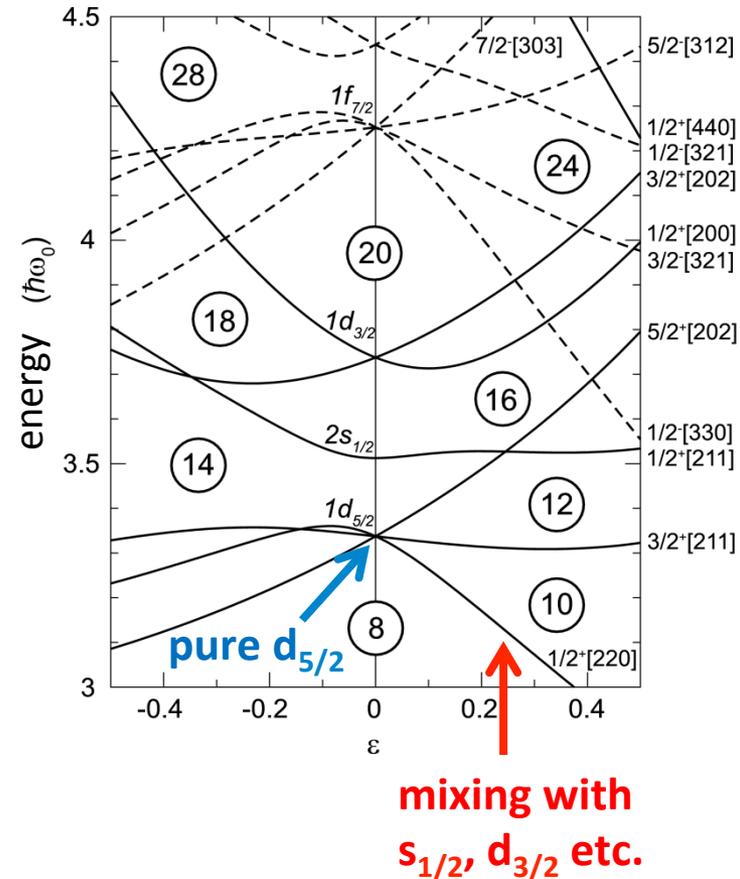
$c \downarrow p(1) \downarrow \uparrow \uparrow \cdots c \downarrow p(N \downarrow p(p)) \downarrow \uparrow \uparrow$
 $c \downarrow n(1) \downarrow \uparrow \uparrow \cdots c \downarrow n(N \downarrow p(n)) \downarrow \uparrow \uparrow |$
 core)

- $c \downarrow p(i) \downarrow \uparrow \uparrow$ or $c \downarrow n(i) \downarrow \uparrow \uparrow$ で生成される状態は良い量子数 j と m を持つ。

- 変形基底

$a \downarrow p(1) \downarrow \uparrow \uparrow \cdots a \downarrow p(N \downarrow p(p)) \downarrow \uparrow \uparrow$
 $a \downarrow n(1) \downarrow \uparrow \uparrow \cdots a \downarrow n(N \downarrow p(n)) \downarrow \uparrow \uparrow |$
 core)

- $a \downarrow p(i) \downarrow \uparrow \uparrow$ or $a \downarrow n(i) \downarrow \uparrow \uparrow$ で生成される状態は必ずしも良い量子数 j と m を持たない。
- それぞれの粒子生成演算子は球形基底によって展開され、2次元配列 D によって



D の性質

- 生成演算子 $a_{i\uparrow}$ は、フェルミオンの反交換関係を満たす。

$$\{a_{i\uparrow}, a_{j\downarrow}\} = \delta_{ij}$$

$a_{i\uparrow} = \sum_k D_{ki} c_{k\uparrow}$ より、上の関係式は、

$$\sum_k D_{ki} D_{kj}^* = \delta_{ij}$$

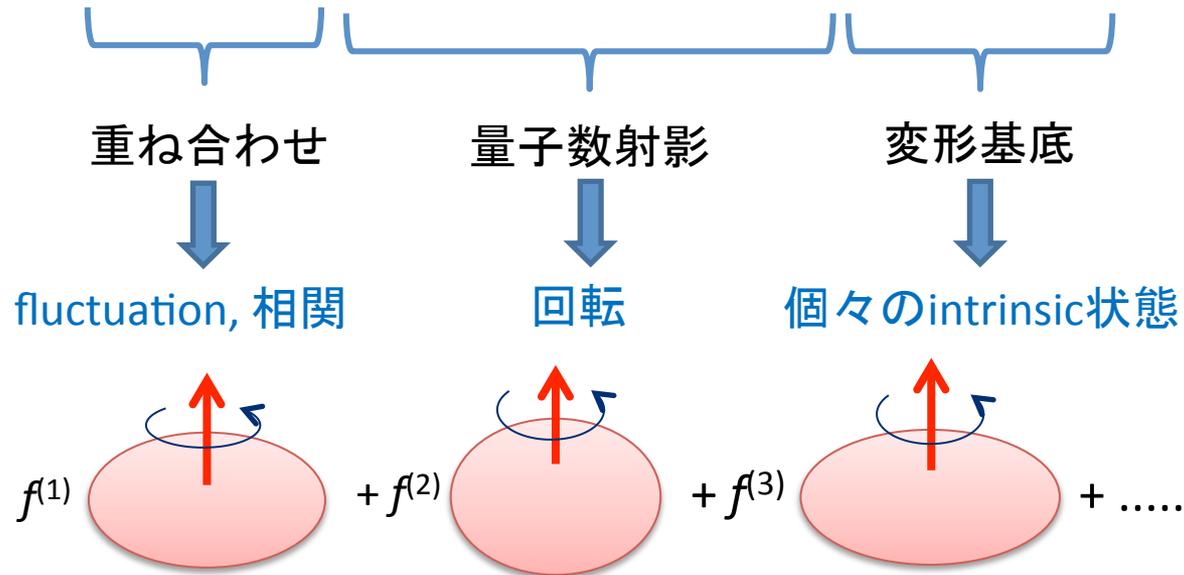
となる。つまり、 D はユニタリ行列となる。

モンテカルロ殻模型のアウトライン

- 殻模型波動関数を有限個の対称性を回復したintrinsic状態で表現

$$|\Psi\rangle = \sum_{d=1}^{\infty} f(d) \sum_{K=-I}^I g(K, d) P \uparrow \pi P \downarrow MK \uparrow I |\Phi(D \uparrow (d))\rangle$$

MCSM基底次元
 ≈ 100



ある意味GCMに近いが、個々のintrinsic状態をエネルギー一面以外からも採ることができることに重要な違いがある。

変形基底の最適化: まずは1基底から

- 以下では、ハミルトニアンとして、二体演算子までからなる

$$H = \sum_{ll'} t_{ll'} c_{l\downarrow}^\dagger c_{l'\downarrow} + 1/4 \sum_{ll'kk'} c_{l\downarrow}^\dagger c_{l'\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow} c_{k'\downarrow} + \sum_{ll'} v_{ll'} c_{l\downarrow}^\dagger c_{l'\downarrow}$$

を考える。

- 最も簡単な問題として、

「**一つのスレーター行列**で表される多体波動関数 $|\Phi\rangle = \prod_i a_{li}^\dagger | \text{core} \rangle$ のエネルギー期待値 $\langle \Phi | H | \Phi \rangle$ が最小となる a_{li}^\dagger のセット、すなわち行列 D を求めよ」

が考えられる。これは、**ハートリーフォック近似**と呼ばれる。

- 一粒子密度行列

$$\rho_{ll'} = \langle \Phi | c_{l\downarrow}^\dagger c_{l'\downarrow} | \Phi \rangle = \sum_i D_{li} D_{l'i}^*$$

を定義しておくとも便利。 $\rho^2 = \rho$ を満たす。

(エネルギー) 勾配法 (gradient method)

- ハートリーフォック近似の解き方の一つとして、勾配法がある。これは、行列 D で決まるスレーター行列式のエネルギー期待値

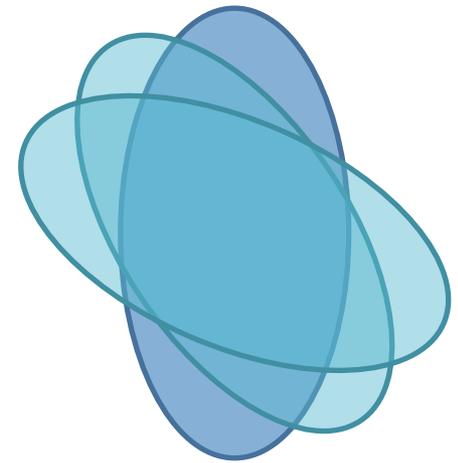
$$\Phi H \Phi = E[\rho] = \sum_{l_1, l_2} \langle t_{l_1 l_2} | \rho_{l_1 l_2} \rangle + 1/2 \sum_{l_1, l_2, l_3, l_4} \langle v_{l_1 l_2, l_3 l_4} | \rho_{l_3 l_1} \rho_{l_4 l_2} \rangle$$

($\rho_{ll'} = \sum_i \langle D_{li} | D_{l'i} \rangle^*$) を行列要素 D_{li} に対する多変数関数とみなし、その最も急な勾配をグラジエントベクトルを計算することによって与える方法。

- 計算が煩雑なので詳細は省略。

対称性の回復：より良い基底

- 変形基底によるスレーター行列式は一般にハミルトニアンを持つ量子数(角運動量、パリティ)を持たない。したがって、スレーター行列式から、目的の量子数成分に射影(対称性の回復)することによって、エネルギー準位がつけられる。
- 対称性の破れた状態から対称性を回復するには、例えば、回転対称性の場合を例にとると、状態を回転させた状態を生成し、それらを適切な重みをつけて重ね合わせることによって行うことができる。並進対称性や粒子数などについても、同様の操作によって対称性の回復が可能である。



角運動量射影

- 前ページの議論から、角運動量の射影(合計角運動量 I 、その z 成分 M への)は、オイラー角 $\Omega=(\alpha, \beta, \gamma)$ に関する積分

$$P \downarrow MK \uparrow I = \frac{2I+1}{8\pi^2} \int \uparrow \text{D} \downarrow MK \uparrow I \uparrow^* (\Omega) R(\Omega) d\Omega$$

ここで、 $R(\Omega) = e^{i\alpha J_z} e^{i\beta J_y} e^{i\gamma J_z}$ 、 $D \downarrow MK \uparrow I (\Omega)$ は D 関数 $D \downarrow m' m \uparrow j (\Omega) = j m' R(\Omega) j m$ を表す。

- K は、射影前の状態の角運動量の z 成分を表し、その自由度が残っている。すなわち、

$$\sum K \uparrow \text{D} \downarrow g \downarrow K P \downarrow MK \uparrow I$$

と、 K に関する重みを好きに取ることが可能である。多くの場合、エネルギーを最適化する $g \downarrow K$ が取られる。

射影後の変分 (Variation After Projection)

- 変形基底からなる波動関数を量子数射影した状態を最適化するには、二つの方法が考えられる。
 - ハートリーフォックのようにまず変形基底を最適化し、その後量子数射影を行う方法。変分が射影前に行われるので、**射影前の変分** (Variation Before Projection; **VBP**) と呼ばれる。
 - 量子数射影した状態を直接最適化する、つまり、 $|\Psi \uparrow IM \rangle = \sum_{K \uparrow} g \downarrow K P \downarrow MK \uparrow | \Phi \rangle$ のエネルギー期待値 $E \uparrow IM [\rho] = \Psi \uparrow IM H \Psi \uparrow IM$ を最適化する方法。射影後の状態に対する変分のため、**射影後の変分** (Variation After Projection; **VAP**) と呼ばれる。
- 射影後の変分は、射影前の変分に比べて非常に効率良くエネルギーを最適化することができる。例えば、 ^{16}O を p-sd shell で計算する場合には、VAP では、p shell から sd shell への励起を取り入れることができ、相当の相関エネルギーを得ることができる。

モンテカルロ殻模型の波動関数

- 量子数射影したスレーター行列式の重ね合わせで表現

$$|\Psi(N, M, \pi, N_b)\rangle = \sum_{d=1}^{N_b} f(d) \sum_{K=-M}^M g(K, d) P(M, K, \pi) |\Phi(D(d))\rangle$$

MCSM basis dimension ≈ 100

ここで、 $|\Phi(D(d))\rangle = \prod_{i \in \text{core}} a(D(d), i) |i\rangle$ および $a(D(d), i) = \sum_{l \in D(d)} D(d, l, i) c(l)$

重ね合わせ
射影
変形基底

- VAP ($N_b=1$ で最適化) の自然な拡張である。
- エネルギーは、 $D^{(d)}$ ($d=1, \dots, N_b$) が与えられれば決まる: $\{D(1), \dots, D(N_b)\} \rightarrow \text{yields } E(N_b)$ 。最適な f と g_K はハミルトニアンを対角化することによって決まるため。
- 理想的には、 d 個の行列 $D^{(d)}$ を変分原理によって同時最適化するのが望ましい (行ったことはある) が大変なため、逐次最適化をしている。

多基底の逐次最適化

- ほとんどの場合、 $D^{(k)}$ ($k=1, \dots, N_b$)を逐次最適化、即ち、 $D^{(1)}, D^{(2)}, \dots$ を順に最適化するが、一度決めたものについては基底を増やしても固定する。
 - 最初の $D^{(1)}$ は角運動量射影したハートリーフック法で得る。
 - $D^{(2)}$ で特徴づけられる2番目の基底の最適化には、最初の $D^{(1)}$ は既に得たものを使う。固定された1番目の基底と重ね合わせた状態のうちで最もエネルギーを下げるものを探す。
 - 同様に、 $D^{(k)}$ で特徴づけられる k 番目の基底の最適化には、既に (i.e., $D^{(1)}, D^{(2)}, \dots, D^{(k-1)}$)は固定する。これらと重ね合わせた状態のうち、最もエネルギーの下がる基底 $D^{(k)}$ を見つける。
- N_b 個の基底で得られたエネルギー $E^{(N_b)}$ は、 N_b の関数として単調減少する。

最適化法の実装

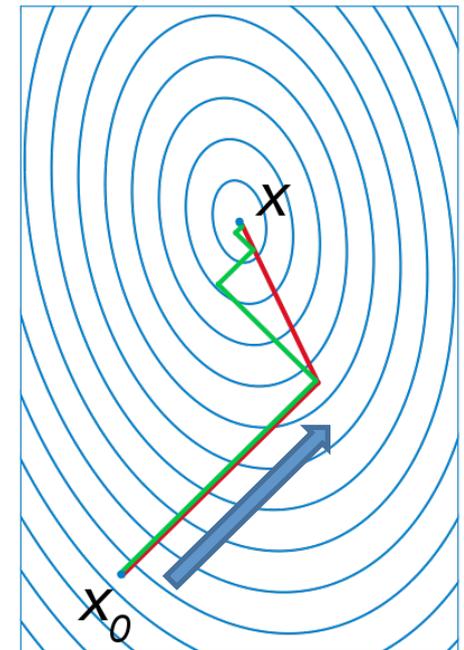
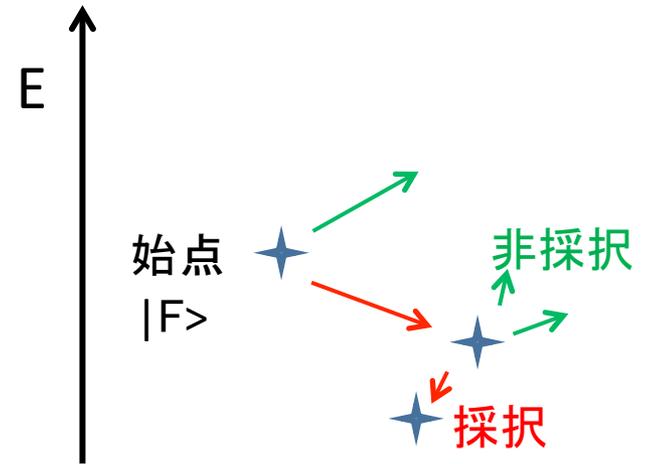
- 以下の二つのどちらかを用いる:

1. 確率的最適化(初期のMCSM)

- ある始点 D から D を少し適当に変化させる。
- エネルギーが下がれば採択、下がらなければ非採択。採択されたものは始点とみなし、同じ手順を繰り返す。

2. 決定論的最適化(最近導入)

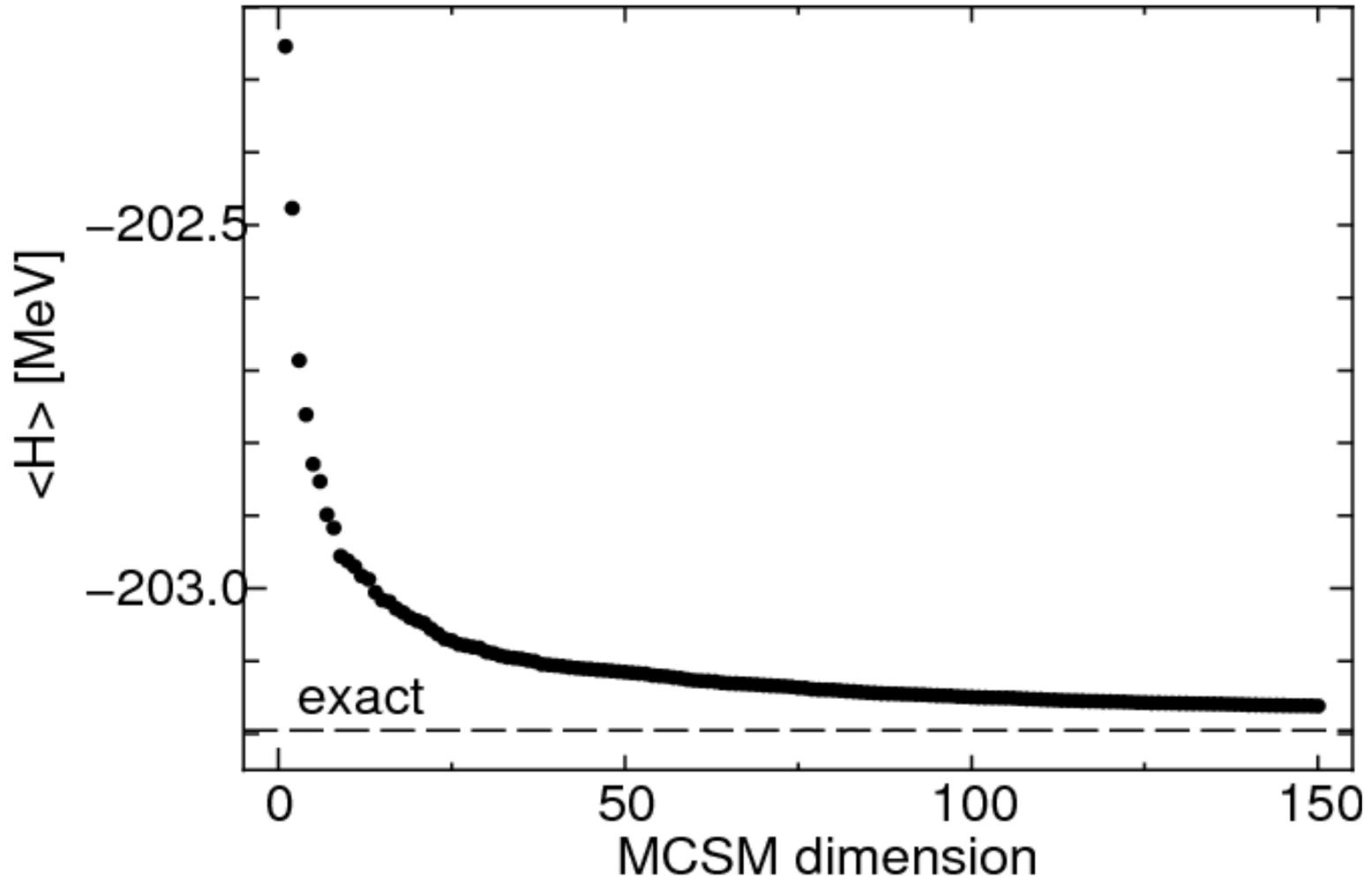
- D に対するエネルギー面に関する共役勾配ベクトルを計算する(勾配ベクトルより効率が良い)。
- 共役勾配ベクトルに沿って進み、極小点に到達するまで同じ操作を繰り返す。



MCSMの有用性のデモ

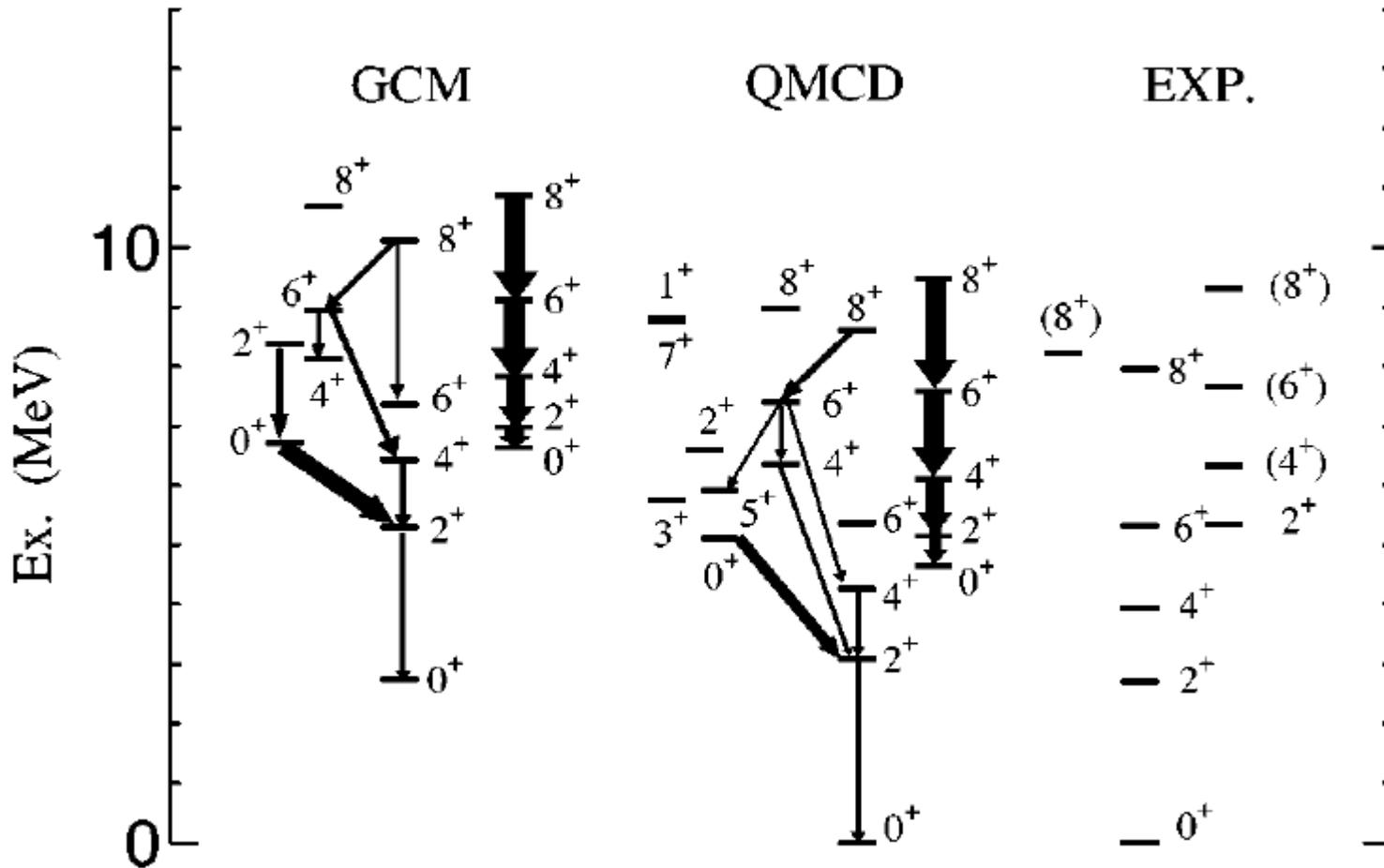
- Example: ^{56}Ni in the pf shell with M -scheme dimension about 10^9

— 確率的最適化を用いた



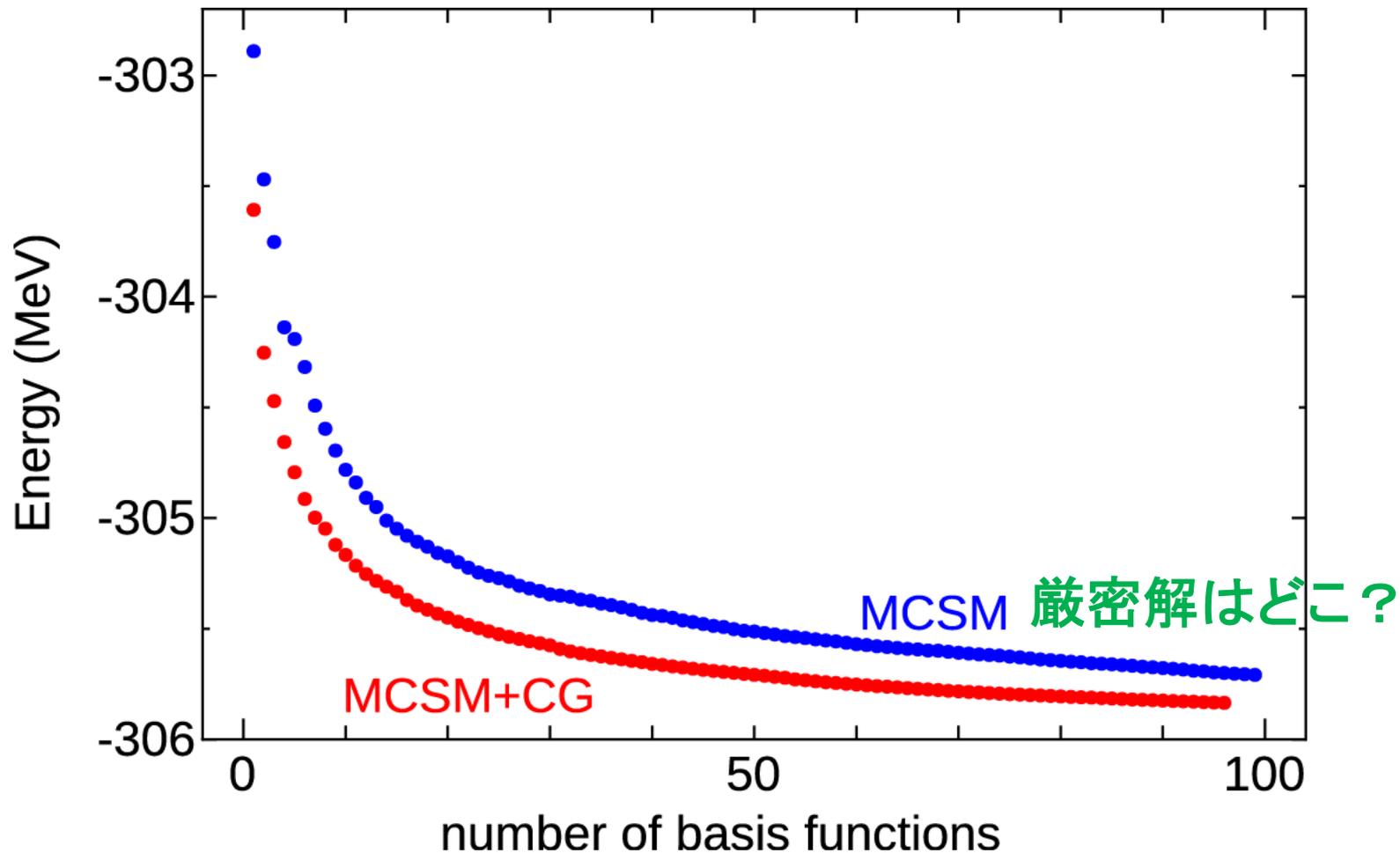
変形状態を含めた統一的記述

- ^{56}Ni in the pf shell
- 球形・変形共存を殻模型で初めて「まともに」解いた。



確率的的と決定論的手法の比較

- Example: ^{64}Ge in the pf- $g_{9/2}$ shell (10^{14} dimension, beyond current limit)



エネルギー分散：厳密解との近さの指標

- 固有状態の満たす性質

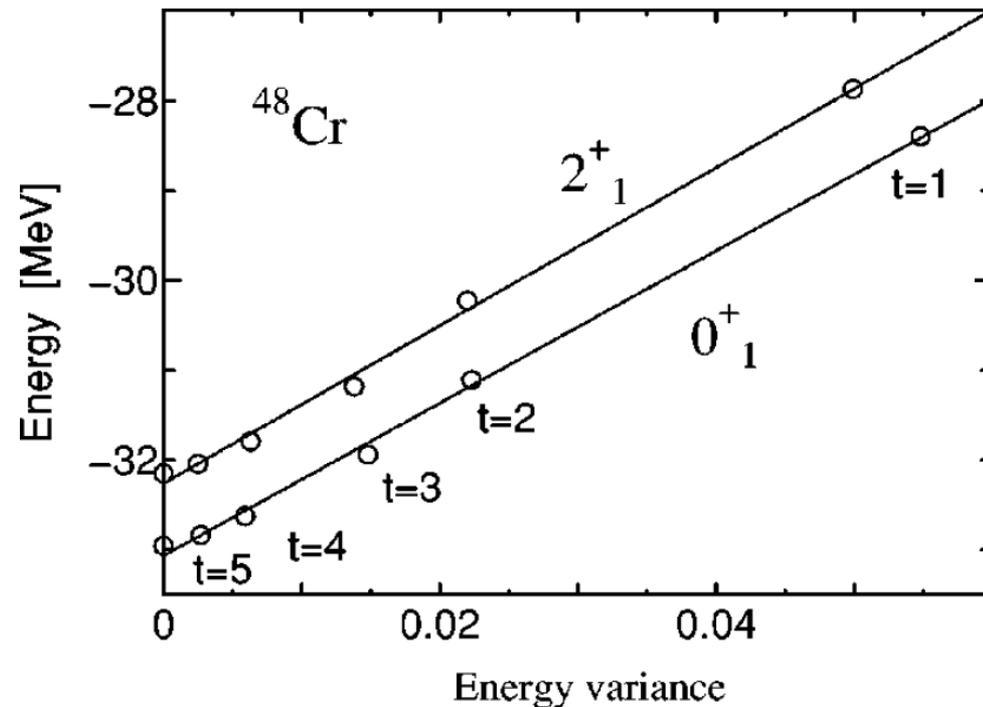
$$\langle \Psi | H^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | H | \Psi \rangle^2 = E^2 - E^2 = 0$$

- $\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$ は、固有状態からどれくらい離れているかの指標として使える。

- エネルギー分散を用いた外挿法

- 物性では今田グループが使い、水崎らが初めて殻模型に応用
- 何らかの**系統的な近似解の列**を用意し、そのエネルギー vs. エネルギー分散のプロットからエネルギー分散=0へ外挿する。

殻模型のp-h truncationへの例



エネルギー分散の計算

- エネルギー分散の計算は、Lanczos法では(比較的)容易
 - $\langle H^2 \rangle$ を計算するのに、 $|\Psi'\rangle = H|\Psi\rangle$ を計算し、そのオーバーラップ $\langle \Psi' | \Psi \rangle$ を求めればよい。
- MCSMの基底は射影されたスレーター行列式だが、スレーター行列式 $|\Phi\rangle$ に対し $H|\Phi\rangle$ はスレーター行列式とならないので、直接 Ψ $H^2 \Psi$ を求めなくてはならない。 H^2 は四体演算子。
 - 四体演算子の行列要素の計算は8重ループを伴い、現実的ではなかった。
 - H^2 に関しては、6重ループ相当にできる定式化を見つけ、現実的計算の実行が可能となった。

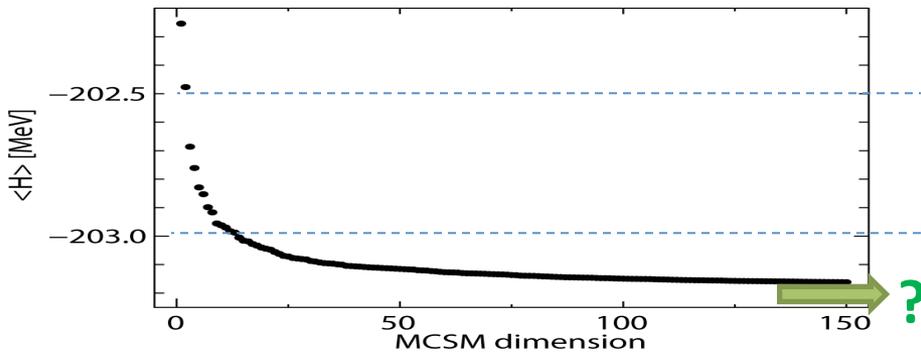
$$\frac{\langle \phi | H^2 | \psi \rangle}{\langle \phi | \psi \rangle} = \sum_{i < j, \alpha < \beta} \left(\sum_{k < l} v_{ijkl} [(1 - \rho)_{k\alpha}(1 - \rho)_{l\beta} - (1 - \rho)_{l\alpha}(1 - \rho)_{k\beta}] \right) \left(\sum_{\gamma < \delta} v_{\alpha\beta\gamma\delta} (\rho_{\gamma i} \rho_{\delta j} - \rho_{\delta i} \rho_{\gamma j}) \right) + \text{Tr}[(t + \Gamma)(1 - \rho)(t + \Gamma)\rho] + \left(\text{Tr} \left[\rho \left(t + \frac{1}{2} \Gamma \right) \right] \right)^2,$$

MCSMにおけるエネルギー分散外挿法

- 系統的な近似波動関数の列として、 $|\Psi \uparrow IM \pi (N \downarrow b)\rangle$ ($N_b = 1, 2, \dots$)を使うことができる。
 - N_b を増やすほど近似が良くなる。
 - N_b 個もの、かなり多くの波動関数の列が取れる

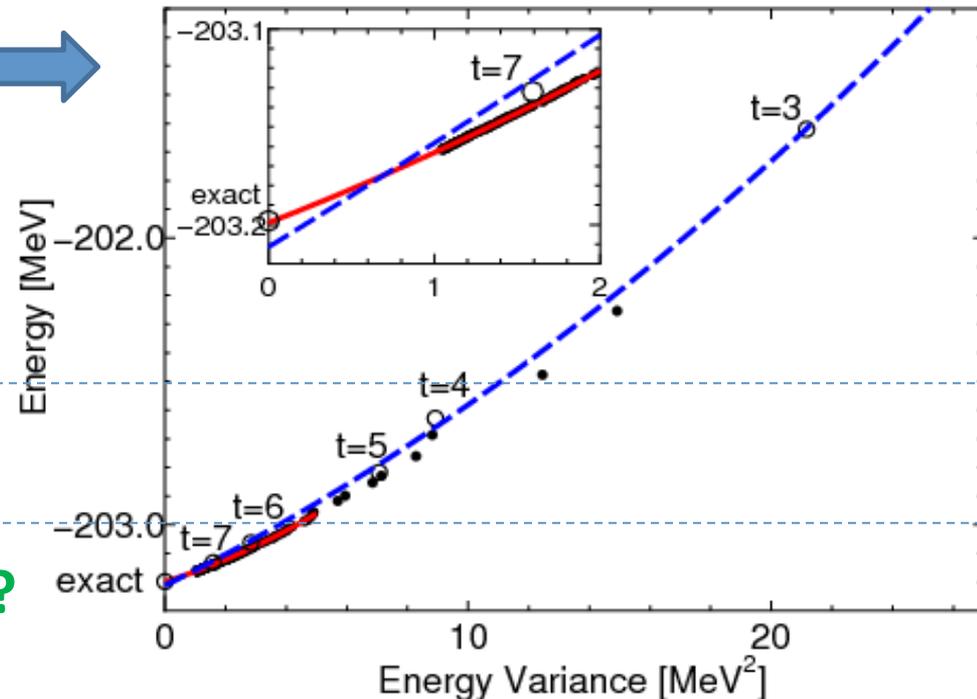
^{56}Ni , pf shellでのテスト

次元数の関数



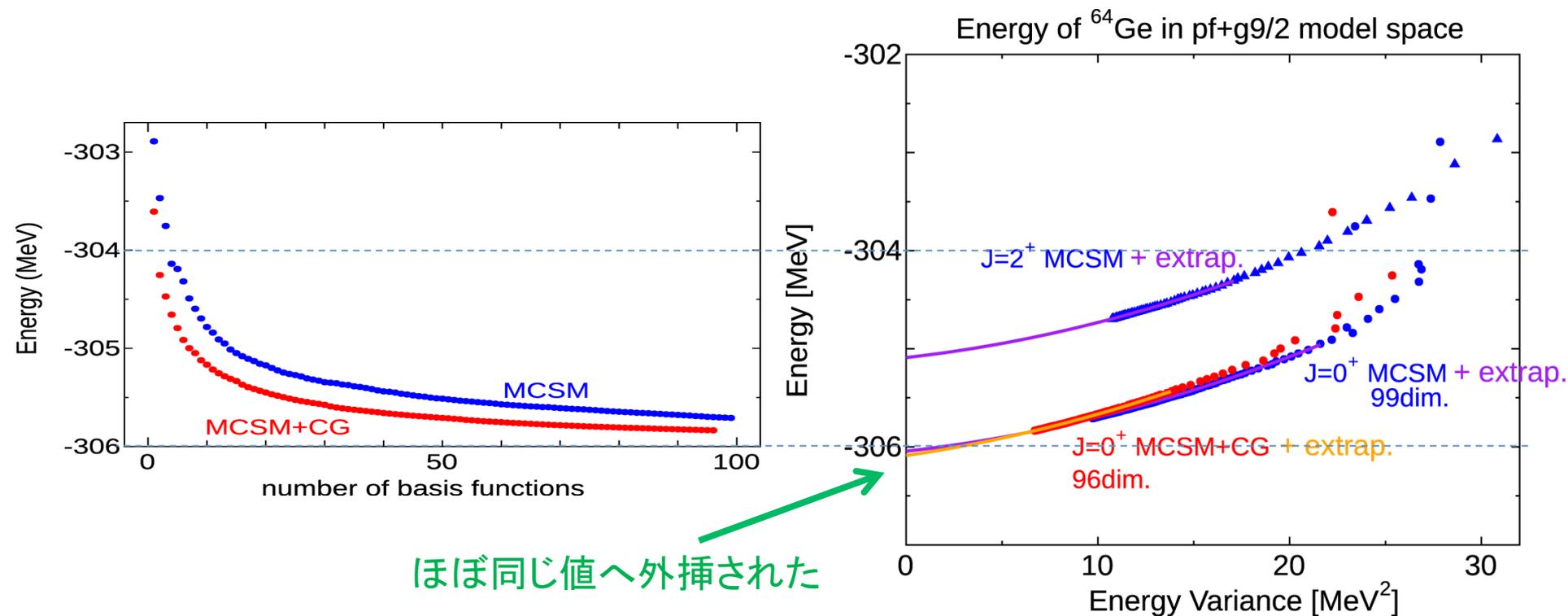
N. Shimizu et al., Phys. Rev. C 82, 061305(R) (2010).

エネルギー分散の関数



2つの独立なプロットからの外挿

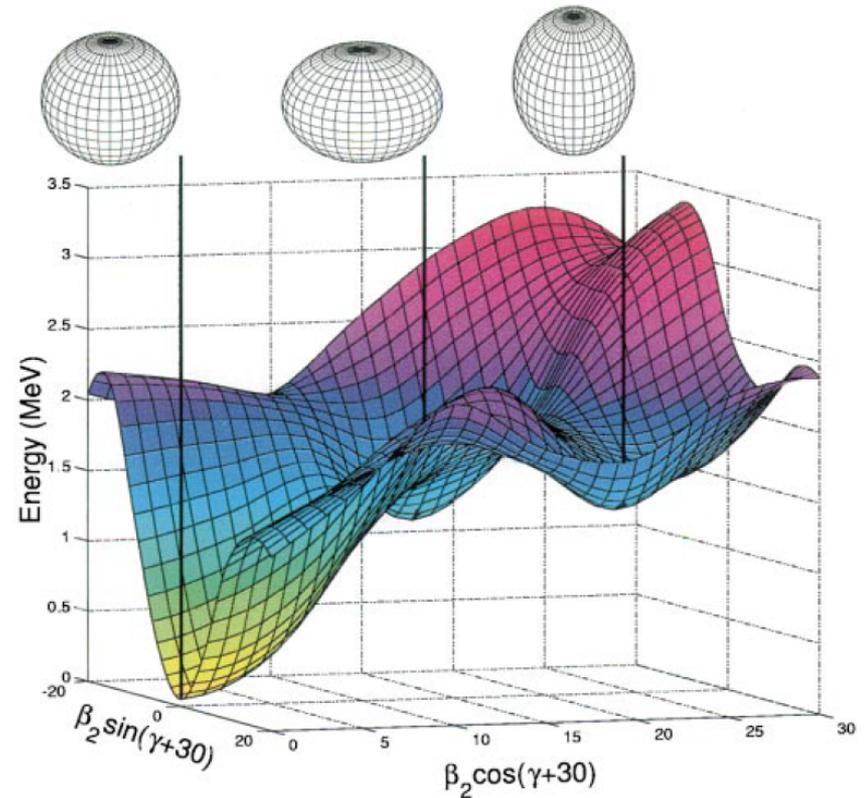
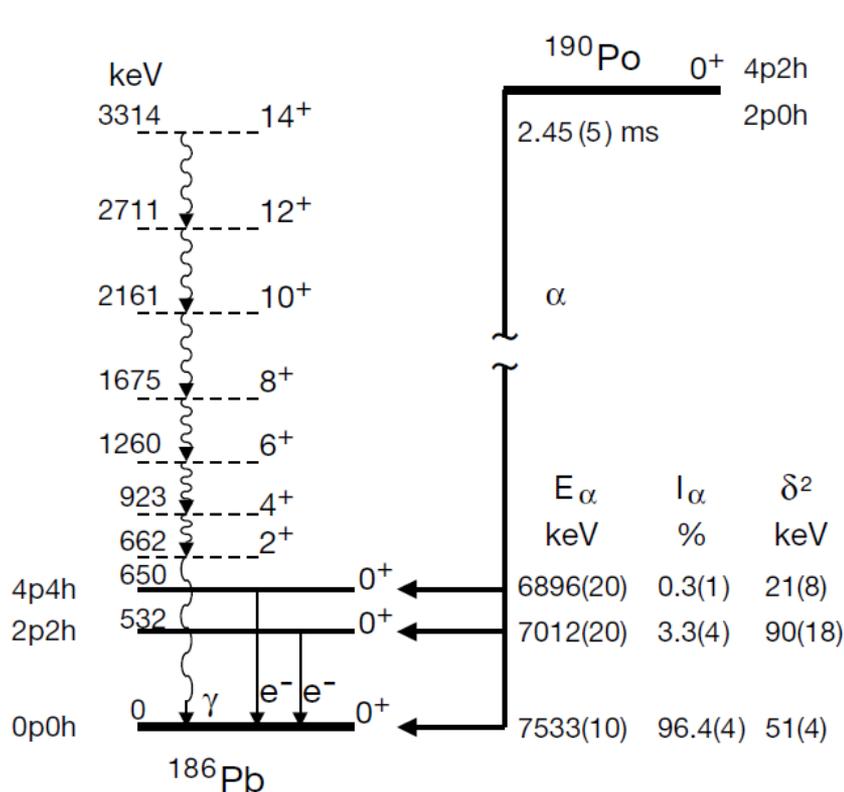
- ^{64}Ge , pfg shellの例では、確率論的最適化と決定論的最適化で次元数に対して異なるエネルギーの収束具合が見られた。しかし、真の固有値は決まっているため、どちらのカーブからも同じ固有値へと外挿されなくてはならない。



Courtesy of N. Shimizu

変形共存

- 異なる変形をもった状態が同じ原子核内に共存している現象。

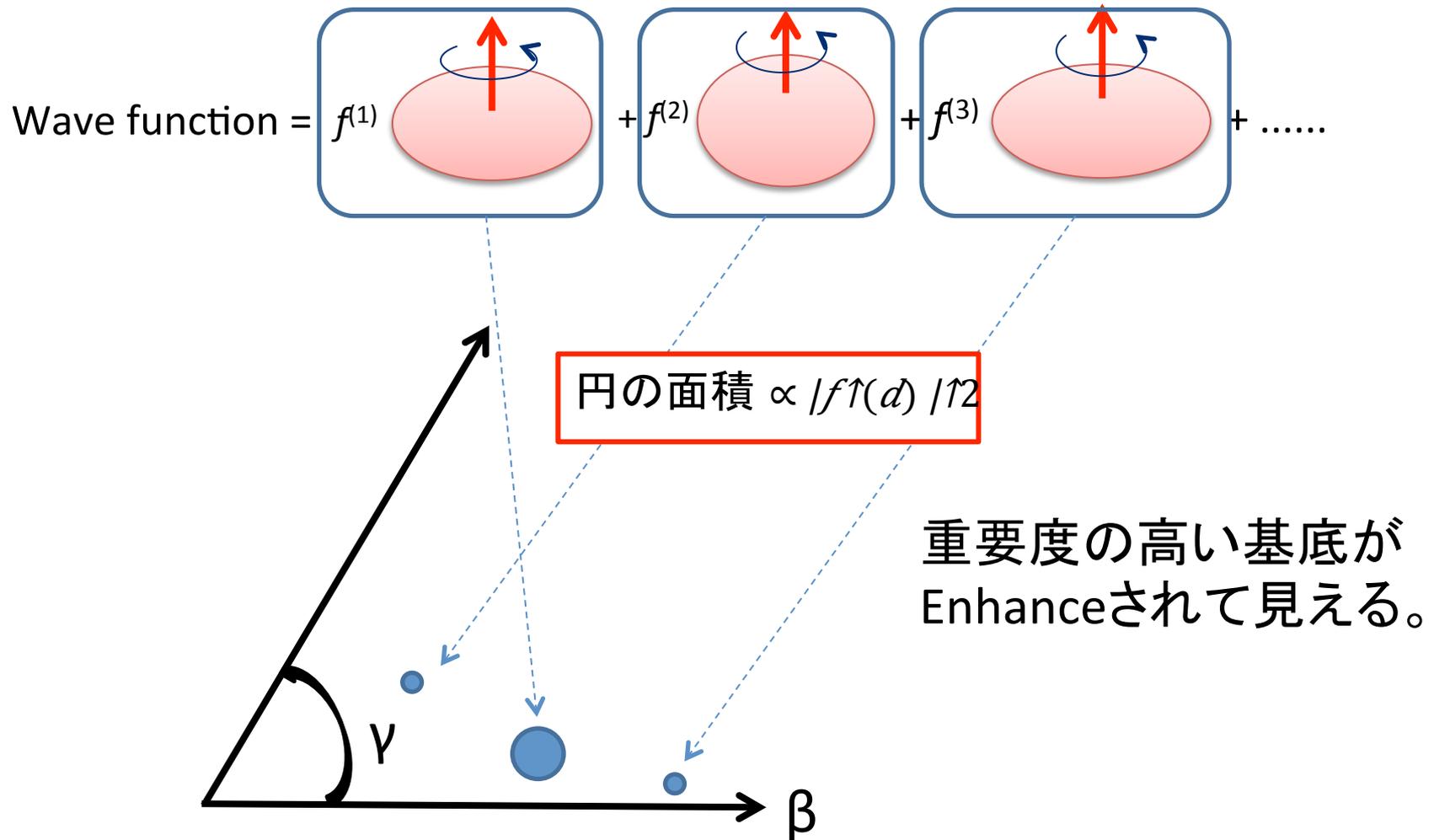


A. N. Andreyev et al., Nature 405, 430 (2000).

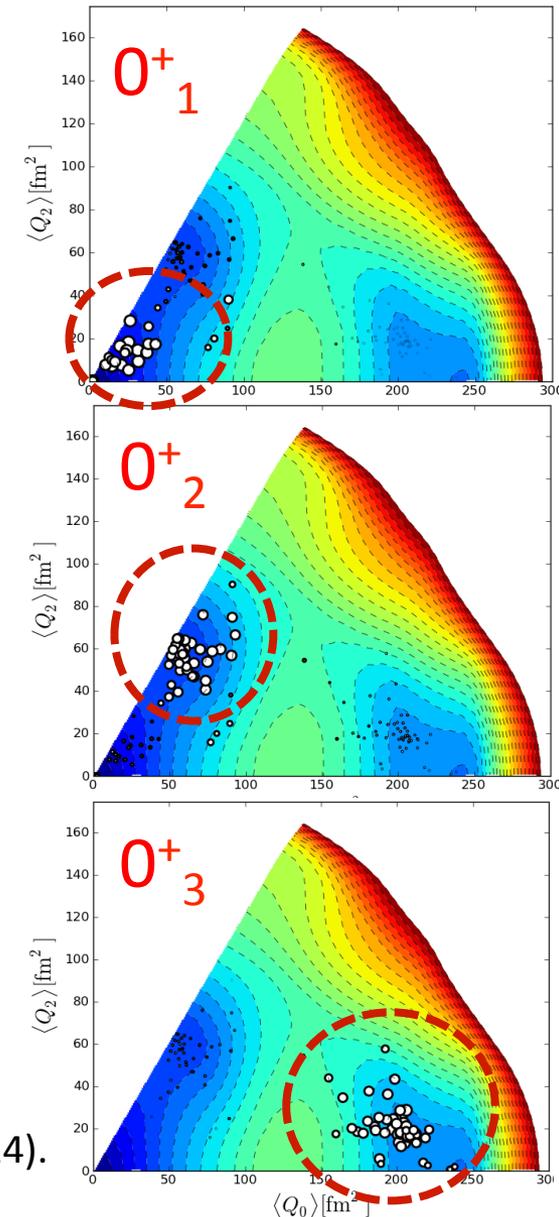
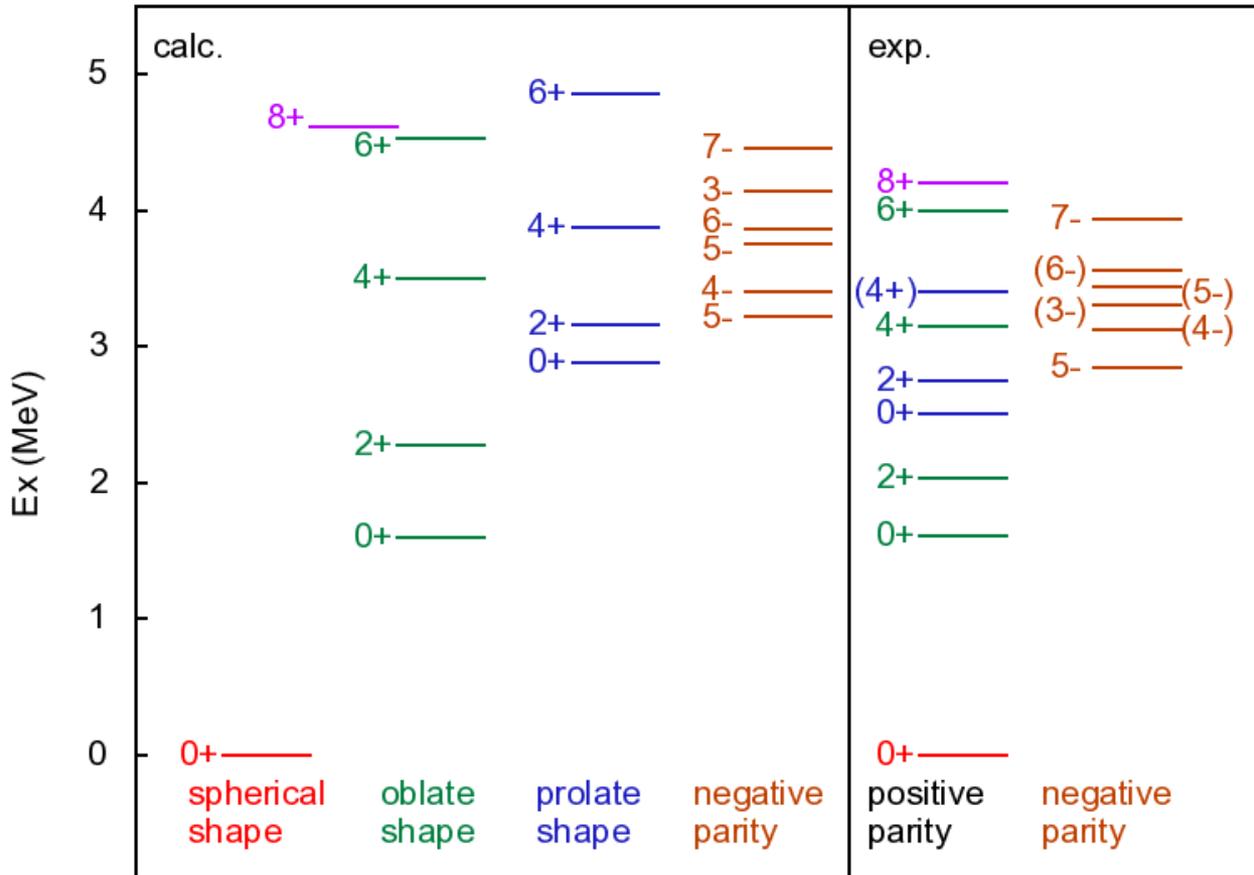
実際は、異なる変形間のmixingや形のfluctuationも重要。

T-plot: MCSMの波動関数の視覚化

- MCSM波動関数: 様々なintrinsic stateの重ね合わせ



T-plot for ^{68}Ni : 2番目の三重変形共存



- 複雑な準位構造が3つの変形状態によって分類される。 Y. Tsunoda et al., Phys. Rev. C 89, 031301(R) (2014).

まとめ

- 大規模殻模型計算の方法について、ランチョス法による直接対角化とモンテカルロ殻模型の二つの手法を紹介した。
- ランチョス法
 - Krylov部分空間法的一种。限られた固有状態しか必要でない、実対称行列（あるいはエルミート行列）に対して極めて有用。疎行列に対してはさらに有用。
- モンテカルロ殻模型
 - “exponential wall”に対処する有力な方法の一つ。
 - ある意味、beyond mean-field methodを殻模型に取り込んだ手法。（ただし、open spaceではここまでのものは実装されてはいない）
 - エネルギー分散による外挿法：厳密解を推定可能。
 - T-plot：変形共存、fluctuation解析可能。MCSMの波動関数の特性を活かす。