

平均場模型による奇核・奇々核の配位決定

福井大工 伊藤研人[†], 杉浦友章[†], 田嶋直樹[‡]

内容目次

1. Skyrme-HFB プログラム *HFODD* の概略
2. 奇核、奇々核, K アイソマー の平均場模型計算 の概論
3. HF 計算結果 ($^{165}\text{Ho}, ^{164}\text{Ho}$)
4. HFB 計算結果 (^{164}Dy に隣接する 8 核種) …… 卒業研究結果から (2014年2月)

伊藤[†], 杉浦[†] : 学会未加入で登壇不可。2014-2015年度 修士課程在籍、

田嶋[‡] : 登壇者

Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov program *HFODD*

1997年の公開以来改訂を重ねて来た。

利用者が多い[†]ので**バグが少なく信頼性が高い**ことが期待される。

我々も、利用者になることで、その信頼性の更なる向上に寄与できる可能性がある。

↔ 自家製プログラムの作成・使用 とは別種の意義がある。

1. Solution of the Skyrme-Hartree-Fock equations in the Cartesian deformed harmonic oscillator basis. I. The method,
J. Dobaczewski, J. Dudek, et al., *Comp. Phys. Comm.*, 102, 166 (1997).
2. J. Dobaczewski, J. Dudek, et al., *Comp. Phys. Comm.*, 102, 183 (1997).
3. J. Dobaczewski, J. Dudek, et al., *Comp. Phys. Comm.*, 131, 164 (2000).
4. J. Dobaczewski, P. Olbratowski, et al., *Comp. Phys. Comm.*, 158, 158 (2004).
5. J. Dobaczewski, P. Olbratowski, et al., *Comp. Phys. Comm.*, 167, 214 (2005).
6. ... (VI) HFODD(v2.40h): A new version of the program
J. Dobaczewski, W. Satula, et al., *Comp. Phys. Comm.*, 180, 2361 (2009).
- 6b. HFODD (v.2.40h) User's Guide, J. Dobaczewski +13, arXiv.0909.3626 (2009).
7. ... (VII) HFODD(v2.49t): A new version of the program
N. Schunck, J. Dobaczewski, et al., *Comp. Phys. Comm.*, 183, 166 (2012).

本研究では、**文献7のプログラム (ver.2.49t)**を用いた。

[†]: Web of Science によると被引用件数は、**文献1 62件, 2 45, 3 49, 4 60, 5 26, 6 26, 7 21**

HFODD の特徴 (私的な観点から)

1. 3 軸不等調和振動子基底展開: (n_x, n_y, n_z とスピン でラベルされる基底)
2. 高スピン状態も扱える
 - cranking (本研究ではオフ)
tilted axis cranking も可能
 - HF では、角運動量射影も可能
3. 対称性を全て取り払える
 - しかし、対称性は配位を操作する際に役立つので、我々は、
 - i. y 軸に関する signature (180 度回転操作)
 - ii. 偶奇性 (空間反転操作)を課して計算した。
 - 時間反転対称性: odd- A 核 あるいは crank した場合は破れる。

調和振動子基底展開の特徴

長所

- 空間的に局在 正エネルギーでの状態密度が低い。
- 主たる計算は行列操作なので、安心してライブラリにまかせられる。

短所

- × large r での波動関数の裾の関数形が正しくない。

これが重大な問題となる場合に備えて、Stoitsov の Transformed Harmonic Oscillator (THO) プログラムが含まれており、それを選択して使うことができる。しかし、THO 法で裾野が正確になるのは只一つの軌道だけである。その意味で位置座標表示 (メッシュ表現等) に劣る。

- × 高い精度を得ようとする急激に計算量が増大する。

(基底の次元) $\propto N_{\text{osc}}^3$ ($N_{\text{osc}} = n_x + n_y + n_z$ は主量子数) 次ページのグラフ参照
(計算時間) $\propto N_{\text{osc}}^6$ (\Rightarrow 行列要素数に比例することになる)

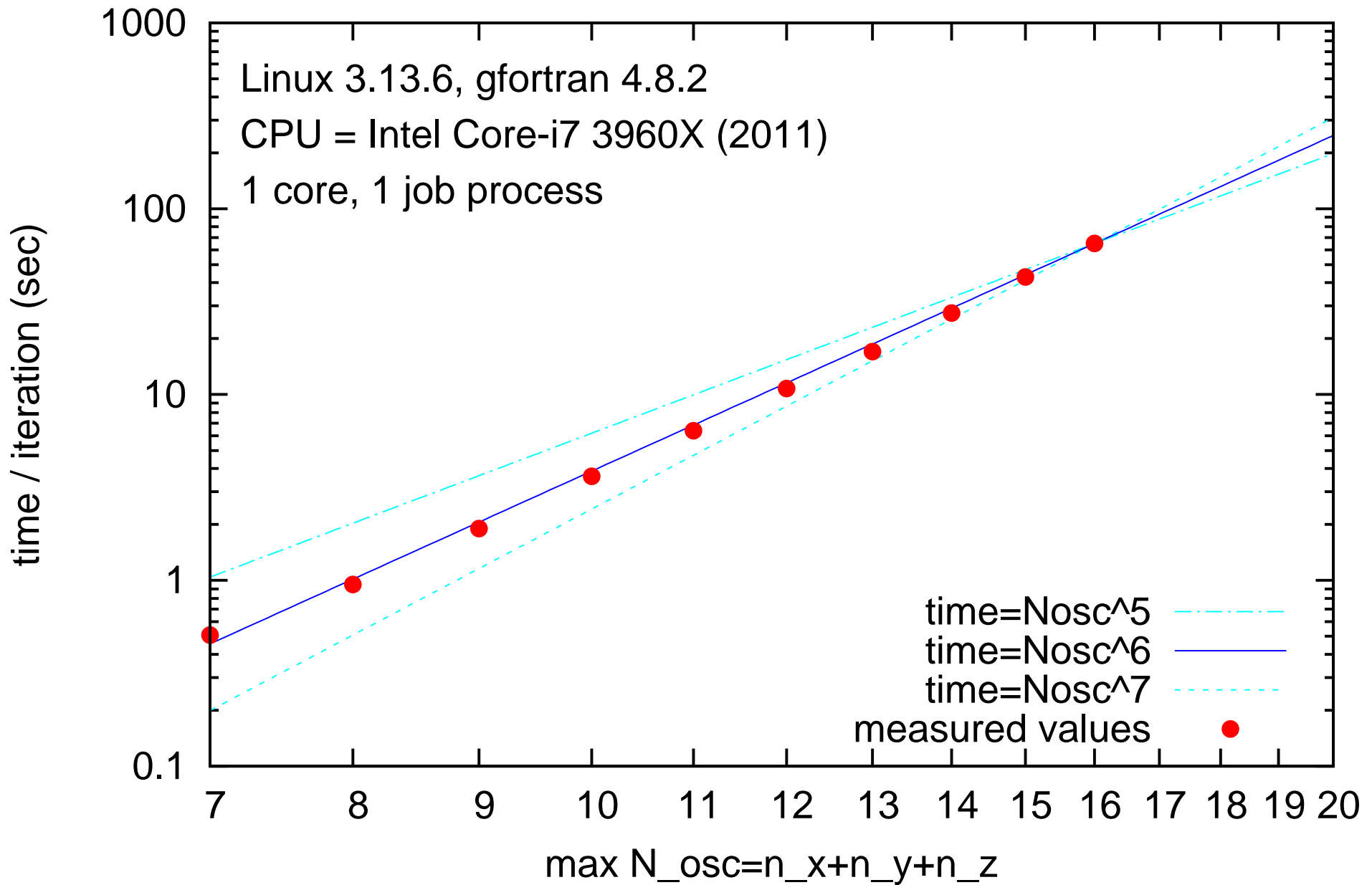
- × 基底の持つパラメータ ($\omega_x, \omega_y, \omega_z$) を計算毎に最適化することが望ましい。

以下で示す計算で用いた基底は

HF は $N_{\text{osc}} \leq 12$, (基底の次元) ≤ 301 (default set up)

HFB は、 $N_{\text{osc}} \leq 14$, (基底の次元) ≤ 680

164Dy, HFODD, HFB, parity+y_signature conserved



Source code of the Skyrme-HFB program HFODD

(#lines)(file)

88998 hf249t.f (37334 comment lines, 51664 code lines)

1058 hfodd_shell.f

292 hfodd_SLsiz.f90

441 hfodd_functional.f90

547 hfodd_interface.f90

91336 SUBTOTAL (essential part of HFODD)

9711 hfodd_hfbtho.f90 Transformed Harmonic Oscillator by M. Stoitsov

3137 hfodd_mpiio.f90 for parallel computing

454 hfodd_mpimanager.f90 for parallel computing

32006 blas.110112.f library (Basic Linear Algebra Subprograms)

33766 lapack.110112.f library (Linear Algebra PACKage)

448 linpack.110112.f library (LINear algebra PACKage)

170858 GRANDTOTAL

*.f : fixed format, with some Fortran \geq 90 statements added

例えば、配列は、古い部分では common block, 新規追加部分では allocatable array in module

*.f90 : free format

Linux+gfortran で走らせるには

浮動小数点数は、単精度と倍精度のどちらも 8 byte とみなすようにコンパイルオプションを指定すればよい。即ち `Makefile` を下記の通り修正する。

```
COMPILER = PGI
```

を

```
COMPILER = GFORTRAN
```

に変更する。

GFORTRAN に対応する if block で、

```
FORTRAN = gfortran-4.4.0
```

```
PRECISION = -fdefault-real-8
```

を

```
FORTRAN = gfortran
```

```
PRECISION = -fdefault-real-8 -fdefault-double-8
```

に変更する。

これで計算結果例が再現できた。(gfortran-4.8.2 を使用。)

奇核、奇々核の平均場解

Global microscopic calculations of ground-state spins and parities for odd-mass nuclei

L. Bonneau, P. Quentin, and P. Möller, Phys. Rev. C, **76**, 024320 (2007).

は、奇核の基底状態のスピンと偶奇性を、Nubase 2003 データにある 621 核種について SIII, SLy4, SkM* の 3 力を使った HF+BCS 法で求め、「球形核では 80% するが、変形核では 40% しか一致しない」と報告している。我々が HFODD を使ってこれをやり直す場合を考えると：

改善可能な点

○ 対相関力

この文献では対相関はフェルミ準位+6MeV 以下の狭い部分空間で seniority 力で得た。

○ HF+BCS でなく HFB

軌道をブロックする（対相関に関与させない）ことに因る自己無撞着場の変化を考慮したい。

難しい問題

× 残留相互作用として、Skyrme 力は十分か？ 奇々核の不对陽子と不对中性子の j_z の符号の異同（平行か反平行か）の区別まで信頼性をもって計算できるか？ あるいはもっと高い移行角運動量をもつ相互作用が不可欠か？

× 回転摂動の効果は、Quentin らの処方で十分か？

HFODD では、角運動量射影は HF のみでしか可能でない。

四重極変形の 5 自由度を平等に扱うため、形状のゼロ点振動も同時に考慮すべきである。

結論：やれる部分から改善していきたい。

高 K アイソマー (多粒子・多空孔励起状態、多準粒子状態)

A. Odahara +6, Phys. Rev. C, **72**, 061303(R) (2005)

は、 $N=83$ isotones で、多粒子・多空孔励起で、多数の軌道が対相関をブロックしている配位でも、対相関が弱まらないように見えるという謎を呈示した。

- ▷ 対相関以外の偶奇変動の効果がエネルギーに効いているからか？
- ▷ あるいは、現在の対相関の扱いに不適切なことがあるのか？

後者なら、**対相関力を独自のものに差し替える**ことで挑んでみたい。

様々な配位を試す**手間がかかる**という点で、我々向きのテーマであると言える。

問題点

- ▷ 励起エネルギーは出せるが、寿命は出せない。
K 禁止遷移 では 大振幅集団運動が重要な役割を果たす。
- ▷ あるいは、対称軸まわりのクランキングで yrast 状態を作成し、yrast からの配位のずれを、1 準粒子励起で指定するのでもよいか？

指標量子数 (signature)

(y 軸のまわりの) 180° の回転操作 $\hat{R}_y = e^{-i\pi\hat{J}_y}$ の固有値 は (フェルミ粒子に対しては 1 回転操作 $\hat{R}_y^2 = -1$ だから)

$$r_y = \pm i$$

指標量子数を定義する軸を y 軸に固定して、代わりに変形の対称軸を変えてみると：

▷ z 軸対称の場合 (通常の設定) \cdots ($a_{20} = \beta, a_{22} = 0$)

$$\hat{R}_y |j, m_z, r_y\rangle = r_y |j, m_z, r_y\rangle,$$

$$|j, m_z, r_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |j, m_z\rangle + r_y (-1)^{j+m_z} |j, -m_z\rangle \}.$$

▷ y 軸対称の場合 (奇々核で必要になる) \cdots ($a_{20} = -\frac{1}{2}\beta, a_{22} = -\sqrt{\frac{3}{8}}\beta$)

$$\hat{R}_y |j, m_y\rangle = r_y |j, m_y\rangle,$$

$$r_y = +i \text{ for } m_y = \cdots, \quad -\frac{5}{2}, \quad -\frac{1}{2}, \quad \frac{3}{2}, \quad \frac{7}{2}, \cdots$$

$$r_y = -i \text{ for } m_y = \cdots, \quad -\frac{7}{2}, \quad -\frac{3}{2}, \quad \frac{1}{2}, \quad \frac{5}{2}, \quad \cdots$$

平均場解の対称性として r_y の保存を課せば、 $|j, \pm m_y\rangle$ は混ざり合わず、区別して指定できる。

奇々核の基底状態の全角運動量と偶奇性

不対陽子が $|j_p \pm m_p\rangle$ 準位、不対中性子が $|j_n \pm m_n\rangle$ 準位にあるとする ($m_p > 0, m_n > 0$ とする)。

対称軸についての指標量指数で区別するならば、
全角運動量の対称軸成分 $K = \pm m_p \pm m_n$ が、

- ▷ $K_> = m_p + m_n$ (同方向を向いた配位)
- ▷ $K_< = |m_p - m_n|$ (逆方向を向いた配位)

の2種の配位を区別して指定できる。

$|K|$ が原子核の全スピンを与える。[†]

原子核全体の偶奇性は、不対陽子の軌道の偶奇性と不対中性子の軌道の偶奇性との積である。

[†]: ただし、奇々核は(対相関が弱いため)非軸対称変形(γ 変形)が大きいので、 m_p, m_n は2飛びで値が混ざってしまう。

奇核 ^{165}Ho の HF 計算

この核種を選んだ理由： **深い理由はない**

- ▷ $50 \leq Z \leq 82$ 殻の中心値 $Z = \frac{1}{2}(50 + 82) = 66(\text{Dy})$ を選んだ。
- ▷ $82 \leq Z \leq 126$ 殻の中心値 $N = \frac{1}{2}(82 + 126) = 104(^{170}\text{Dy})$ を選ぶと、隣接全 8 核の実験データが揃っていない。
- ▷ 代わりに Dy 同位体で存在比最大の ^{164}Dy ($N=98$) を選んだ。
- ▷ ^{164}Dy に隣接する奇核・奇々核を試行計算の対象として選んだ。

となる。

対相関相互作用：

- ▷ $V_0^{(n \text{ or } p)} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$, (HFODD の default setup では、密度依存性がオフであることに従った。)
- ▷ 準粒子励起エネルギーカットオフは **60 MeV** (Dobaczewski's choice since 1984)
- ▷ ^{164}Dy の実験的対相関ギャップ $\Delta_n=0.825$ MeV $\Delta_p=0.879$ MeV を再現するように $V_0^{(n)} = -201, V_0^{(p)} = -212(\text{MeV fm}^3)$ と決定した。

計算結果

$(P, \frac{r_y}{i}) = (++, (+-), (-+), (--))$ の 4 セクターに詰める陽子の個数の組み合わせ毎に安定な HF 解が求まる。
 $Z = 66$ の HFB 解には (17,17,16,16) 個入っている。67 番目の陽子をどのセクターに追加するか？

指標が違ってエネルギーは同じなので、どちらの偶奇性のセクターに入れるかで 2 通りの安定な HF 解を得た。

| | 実験値 | | ニルソン軌道 | HF(SLy4) | | | |
|-----------|-------------|-----------------|-------------------------------------|-------------|---------|-----------------|---------------------------|
| | E^* (keV) | | | E^* (keV) | β | γ (deg.) | 4 セクタに詰めた陽子数 |
| 基底状態 | 0 | $\frac{7}{2}^-$ | $5, 2, 3, \frac{7}{2} \rangle$ | 0 | 0.335 | 8.0 | (17,17, 17 ,16) |
| 第 1 励起 BH | 361 | $\frac{3}{2}^+$ | $4, 1, 1, \frac{3}{2} \rangle^{-1}$ | | | | 同一セクタ内の p-h 励起が必要 (収束困難?) |
| 第 2 励起 BH | 429 | $\frac{1}{2}^+$ | $4, 1, 1, \frac{1}{2} \rangle$ | 126 | 0.331 | 5.1 | (18 ,17,16,16) |

BH は bandhead(回転励起バンドの下端の状態)。

基底状態のスピンのパリティが合ったのはよかった。

奇々核 ^{164}Ho の HF 計算

- ▷ 不対中性子の入る各偶奇性セクタの最上位の軌道: $|6, 4, 2, \frac{5}{2}\rangle \uparrow$ および $|5, 2, 1, \frac{1}{2}\rangle \downarrow$
- ▷ 不対陽子の入る各偶奇性セクタの最上位の軌道: $|4, 1, 1, \frac{1}{2}\rangle \downarrow$ および $|5, 2, 3, \frac{7}{2}\rangle \uparrow$

\uparrow と \uparrow は s_z と $l_z(= \Lambda)$ が同符号、 \downarrow と \downarrow は s_z と $l_z(= \Lambda)$ が異符号であることを強調するために付した。

中性子と陽子を組み合わせると、両核子の入る軌道の指標量指数の異同により、2つの別の状態が作れる。

| HF (SLy4) | | | | | | |
|-----------------|-----------------|-------|-------------------|---------|-----------------------|----------------------|
| 中性子軌道 | 陽子軌道 | J^P | $E^*(\text{keV})$ | β | $\gamma(\text{deg.})$ | スピン状態 |
| $\frac{5}{2}^+$ | $\frac{1}{2}^+$ | 3^+ | 0 | 0.325 | 7.3 | $\uparrow\downarrow$ |
| $\frac{5}{2}^+$ | $\frac{7}{2}^-$ | 1^- | 19 | 0.332 | 11.6 | $\uparrow\downarrow$ |
| $\frac{5}{2}^+$ | $\frac{7}{2}^-$ | 6^- | 53 | 0.332 | 11.6 | $\uparrow\uparrow$ |
| $\frac{5}{2}^+$ | $\frac{1}{2}^+$ | 2^+ | 61 | 0.325 | 7.3 | $\uparrow\uparrow$ |
| $\frac{1}{2}^-$ | $\frac{1}{2}^+$ | 1^- | 302 | 0.313 | 0.6 | $\uparrow\uparrow$ |
| $\frac{1}{2}^-$ | $\frac{1}{2}^+$ | 0^- | 416 | 0.313 | 0.4 | $\uparrow\downarrow$ |
| $\frac{1}{2}^-$ | $\frac{7}{2}^-$ | 4^+ | 939 | 0.319 | 7.3 | $\uparrow\downarrow$ |
| $\frac{1}{2}^-$ | $\frac{7}{2}^-$ | 3^+ | 1014 | 0.319 | 7.2 | $\uparrow\uparrow$ |

バンドヘッドの実験値: 1^+ 0.0keV, 6^- 140keV, (6^+) 191keV, (3^-) 234keV, (5^+) 342keV 一致は 6^- の存在だけ

$K_>$ と $K_<$ の分裂では、 $\frac{1}{2}^- \frac{1}{2}^+$ 配位を除いて、スピン反平行 ($\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow$) が低くなった。分裂幅は 34 ~ 114 keV 程度である。これは専ら「残留相互作用」SLy4によるもので、更に回転摂動を加味する必要がある。

奇核・奇々核に対するHFB計算法

HFODD manual より抜粋

The code performs the neutron quasiparticle blocking calculations... The blocked quasiparticle state is selected by having the largest overlap with the INSIGN(=an input parameter)-th neutron single-particle eigenstate of the HFB mean-field Routhian in a given parity-signature block.

準粒子状態を block するとは：準粒子の生成演算子と消滅演算子を入れ替えること

問題点

- ▶ 一粒子状態（平均場の固有状態）と準粒子状態（HFB 準粒子ハミルトニアンの固有状態）の対応があいまいになることがある。
- ▶ 指定した一粒子状態に対応する準粒子状態が存在しない場合がある。
- ▶ 異なる一粒子状態に対応する準粒子状態をブロックした2つの計算の結果が同一のエネルギーを持つ（即ち同じ）状態へ収束することがある。

基底状態のスピン・パリティの実験値と理論値の比較

| $^{164}_{67}\text{Ho}_{97}$ | | | |
|-----------------------------|------|------|------|
| exp. | Nil. | SLy4 | SIII |
| | 5+ | 6+ | 4- |
| 1+ | 1+ | 1+ | 3- |

| $^{165}_{67}\text{Ho}_{98}$ | | | |
|-----------------------------|----------------|----------------|----------------|
| exp. | Nil. | SLy4 | SIII |
| | | | |
| $\frac{7}{2}-$ | $\frac{7}{2}-$ | $\frac{5}{2}+$ | $\frac{7}{2}+$ |

| $^{166}_{67}\text{Ho}_{99}$ | | | |
|-----------------------------|------|------|------|
| exp. | Nil. | SLy4 | SIII |
| | 7- | 6+ | 3+ |
| 0- | 0- | 1+ | 2+ |

| $^{163}_{66}\text{Dy}_{97}$ | | | |
|-----------------------------|----------------|----------------|----------------|
| exp. | Nil. | SLy4 | SIII |
| | | | |
| $\frac{5}{2}-$ | $\frac{5}{2}-$ | $\frac{7}{2}+$ | $\frac{7}{2}+$ |

| $^{164}_{66}\text{Dy}_{98}$ | | | |
|-----------------------------|------|------|------|
| exp. | Nil. | SLy4 | SIII |
| | | | |
| 0+ | 0+ | 0+ | 0+ |

| $^{165}_{66}\text{Dy}_{99}$ | | | |
|-----------------------------|----------------|----------------|----------------|
| exp. | Nil. | SLy4 | SIII |
| | | | |
| $\frac{7}{2}+$ | $\frac{7}{2}+$ | $\frac{5}{2}-$ | $\frac{5}{2}-$ |

| $^{162}_{65}\text{Tb}_{97}$ | | | |
|-----------------------------|------|------|------|
| exp. | Nil. | SLy4 | SIII |
| | 3- | 5+ | 5+ |
| (1-) | 0- | 2+ | 2+ |

| $^{163}_{65}\text{Tb}_{98}$ | | | |
|-----------------------------|----------------|----------------|----------------|
| exp. | Nil. | SLy4 | SIII |
| | | | |
| $\frac{3}{2}+$ | $\frac{3}{2}+$ | $\frac{3}{2}+$ | $\frac{7}{2}+$ |

| $^{164}_{65}\text{Tb}_{99}$ | | | |
|-----------------------------|------|------|------|
| exp. | Nil. | SLy4 | SIII |
| | 5+ | 6+ | 7- |
| (5+) | 2+ | 1+ | 0- |

exp. は実験値、Nil. はニルソン模型 (Bohr-Mottelson の教科書の図を使用。 には SLy4 の値を使用)、SLy4 と SIII はそれぞれの Skyrme 力を使用した HFB 法での計算結果を表す。奇々核では、 $K_>$ と $K_<$ の低い方だけをとらず、両方ともに可能性があるとした。赤色の文字は実験値と一致したものを示す。伊藤・杉浦の卒業論文 (2014 年 2 月) より。

まとめ

1. Skyrme-HFB 法プログラム *HFODD* を使い始めた。その注目点を私的観点から列挙した。皆が使える標準的なプログラムが存在することは核構造分野にとって大変好ましいことだと思うので、私としても今後長期に渡り使い続けたいと思う。使うことが（プログラムのバグ取り等で）貢献になる。
2. 奇核・奇々核の HF 解について、 ^{164}Ho と ^{165}Ho の計算結果を例にして、考察を述べた。
3. ^{164}Dy に隣接する 8 核種の奇核・奇々核の HFB 解を求め、スピン・パリティの実験値と比較した。（伊藤・杉浦卒業論文（2014 年 2 月）より。）教科書の Nilsson ダイアグラムを見て配位を決めると 7 核で実験と一致した。SLy4 では 2 核が一致した。SIII ではひとつも一致しなかった。なお、準粒子状態のブロッキングは、意図したとおりに動作しないことがよくある。
4. 修士論文の課題としては、自作のプログラムを作成するより、HFODD の利用者としてその使用法に熟練する道を進むほうが、より意義深いと考えている。地道な作業をまず行い、その経験に基づいて最終的にその作業を自動化していくという課題設定が第一・第二講演者にとって教育的意義が高いと思っている。HFODD を使って出来る地道な仕事を、他にも探したい。