

原子核殻模型計算における固有値問題と外挿法

清水 則 孝†

原子核殻模型計算に現れる大次元ハミルトニアン行列の固有値問題において、この問題を取り扱う標準的な手法と、モンテカルロ殻模型法におけるエネルギー分散を用いた外挿法という新たな手法について紹介する。

Eigenvalue problem and extrapolation method in the nuclear shell-model calculations

NORITAKA SHIMIZU†

In the nuclear shell-model calculations, we need to evaluate some low-lying eigenenergies and their eigenvectors of the huge-dimension Hamiltonian matrix efficiently. I introduce a standard way to solve this problem, and a novel extrapolation method in the Monte Carlo Shell Model.

原子核構造研究において興味を持たれる低励起状態の準位構造、遷移確率を求めるためには殻模型計算がもっとも適した方法である。直接実験値との比較出来る物理量を計算できることも大きな利点である。しかしながら、質量数が100を超えるような中重核領域では次元が指数関数的に増加し、ハミルトニアン行列の厳密対角化による固有エネルギーの計算が困難となる。たとえば、 ^{40}Ca を開殻と仮定した ^{56}Ni の基底状態の計算では、おおよそ 10^9 次元のハミルトニアン行列の対角化を必要とする。実際に完全対角化は必要ではなく、エネルギーが低い少数の固有値と固有状態を得れば十分であるため、ランチョス法が用いられることが多い。しかしながら、ランチョス法をもってしても、 10^{10} 次元を超えるようなハミルトニアン行列の固有値計算は難しい。

このような困難を克服するため、1995年、本間道雄らによりモンテカルロ殻模型法が提唱された。これは、多数の配位の線形結合であらわされるべき波動関数を、射影法によって適切な対称性を持った、比較的少数のスレーター行列式を基底とし、この基底の線形結合で近似するものである。多くの場合この手法は厳密対角化に対する良い近似を与えるが、どの程度近似がよいかの指標は基底数に対するエネルギーの収束性しかなく、エラーの評価に曖昧さが残る。このため、近似が十分によいかどうかは経験による判断が必要で

あった。しかしながら、エネルギー分散を用いた外挿法をモンテカルロ殻模型に導入することにより、このような曖昧さを取り除くことができる。

ここで、エネルギー分散を用いた外挿法について述べる。まず、一つの近似手法であるが、近似の程度が異なる一連の状態ベクトルのセットを用意する。この一連の状態ベクトルのエネルギーを、エネルギー分散の関数としてプロットすると、2次関数としてフィットできる。状態ベクトルが厳密にハミルトニアン行列の固有状態ならばエネルギー分散が0となることを利用して、フィットされた関数を外挿してエネルギー分散が0となるエネルギーを評価するのである。この手法は、2000年に今田正俊らによってスピン系の計算に用いられ、2003年に水崎高浩らによりランチョス法を用いた原子核殻模型計算への応用がなされた。

本講演では、モンテカルロ殻模型によって得られた一連の近似固有ベクトルを用い、エネルギー固有値やその他の観測量を外挿することによって、精度良く求められることを示す。さらに、ランチョス法のような厳密対角化では不可能であるような大次元行列となる問題に応用できることを報告する。

† 東京大学理学系研究科

Department of Physics, University of Tokyo