

## 第一原理大規模殻模型計算による核構造の微視的記述

### Microscopic description of nuclear structure by ab initio large-scale shell-model calculations

清水 則孝

筑波大学 計算科学研究センター

#### 1. 研究目的

大規模殻模型計算を用いた量子多体計算により、陽子と中性子を構成要素とする原子核の構造の解明を進める。軽い核では、芯を仮定しない殻模型計算を用いた第一原理計算により精密な核構造の記述をおこなう。中重核領域では芯を仮定した殻模型計算や・HFB+GCM 法により現象論的要素を持つ有効相互作用を構築し、四重極集団運動の微視的記述をおこなう。これらの成果をもとに、世界中の加速器施設で精力的におこなわれている最新の実験研究活動と連携して核構造解明に資する。

#### 2. 研究成果の内容

軽い核では、モンテカルロ殻模型計算の GPU 対応コード開発の主要部を完了した。カイラル有効場理論による 3 体力を含んだ核力から出発し、正規順序化によって 2 体力に近似したハミルトニアンを採用し、自然軌道と呼ばれる手法によって最適化された一粒子波動関数に関するハミルトニアン行列要素を用意した。これを用いて、Miaybi-G でのモンテカルロ殻模型計算をおこない、ヘリウム 4、ベリリウム 8、炭素 12、酸素 16、ネオン 20 の基底状態波動関数を求めた。模型空間を主殻 2 から 8 まで変化させて、さらに模型空間無限大まで外挿することにより、第一原理的な束縛エネルギーを評価し、実験値と無矛盾な値を得られることを確かめた。

また、sd 殻領域、pf 殻領域で Gogny 型、M3Y 型の密度汎関数を殻模型の有効相互作用に用いる殻模型計算と密度汎関数法の融合的アプローチを開発し、模型の有効性をたしかめた。sd 殻領域ではどちらの汎関数も妥当な結果を示すが、pf 殻領域では M3Y 型の一つである M3Y-P6 がもっとも有望な結果を示すことを明らかにした。この成果を査読論文として出版し、参加者 1 名の博士号取得につながった。

中性子過剰領域では、Valence-Space In-Medium Similarity Renormalization Group (VS-IMSRG)法による第一原理的な殻模型有効相互作用に、最小限の現象論的補正を施した有効相互作用を中性子過剰  $N=50$  同位体とその近傍核に適用して、核構造を議論・予言をおこなった。

中重核領域において、主殻内だけでなく下の殻（芯）からの励起、および上の殻への集団的な励起・相関を取り込むため、PMMU 相互作用（pairing+QQ 力と

monopole 力から構成) を用いた Hartree-Fock-Bogoliubov + Generator Coordinate Method (HFB+GCM)による計算を行った。これにより、代表的な現象論的模型として知られている IBM (相互作用するボゾン模型) と PMMU 模型に密接な関係があることを確認した。また、単一閉殻のスズ同位体は球形状態と変形状態が共存する変形共存を示すことで知られている。PMMU 相互作用を用いた HFB+GCM 計算により、スズ同位体の変形共存は、芯から陽子の励起による変形状態と主殻内の球形状態が共存することにより記述できることを微視的観点から明らかにした。これらの成果を論文として取りまとめ出版し、そのうちの 1 本は Phys. Rev. C の Editor' s selection に選定された。また、これらの成果を基に実験グループとの共著論文を出版した。

### 3. 学際共同利用プログラムが果たした役割と意義

原子核殻模型計算では、多様な相関を取り込んだ複雑な波動関数を表現する必要がある。特にモンテカルロ殻模型法や HFB+GCM 法に現れる角運動量射影では、あらゆる方向のオイラー角へと回転した波動関数のかさねあわせで原子核の状態を表現するため、回転対称性を厳密に取り扱うことができるが、大きな計算機資源を要求する。学際共同利用が提供する Miyabi-G が持つ GPGPU の性能を活用することによって、この適用領域を飛躍的に広げることができた。特に芯を仮定しないモンテカルロ殻模型計算でこれまで 7 主殻模型空間が限界であったが、Miyabi-G を用いることで 8 主殻模型空間の計算が可能となり、より精密な模型空間無限大への外挿が可能となった。

### 4. 今後の展望

軽い核では、今後、励起状態を含めた系統的な軽い核のモンテカルロ殻模型計算をすすめ、p 殻核の荷電半径の系統性など未解明な課題に挑戦していく。また、VS-IMSRG 法によって構築された殻模型計算により中性子過剰領域の中重核構造解明を進めており、カルシウム近傍の中性子過剰核に関する論文を準備中である。

中重核領域から、さらに重い核や超重核に PMMU 相互作用を用いた HFB+GCM 計算を適用しその微視的記述を行っていく。特に、超重核における安定の島などの未開拓な領域における微視的構造の解明を目指す。

### 5. 成果発表

#### (1) 学術論文

- [1] K. Yoshinaga, N. Shimizu, and T. Nakatsukasa, Prog. Theor. Exp. Phys. **2026**, 033D04 (2026).
- [2] S. Pascu, K. Kaneko, C. Qi, Y. Sun, N. Shimizu, T. Mizusaki, C. Mihai, M. Boromiza, D. Bucurescu, C. Costache, S. Calinescu, C. Clisu, A. Coman, I.

Dinescu, D. Filipescu, N.M. Florea, I. Gheorghe, A. Ionescu, R. Lica, N. Marginean, R. Marginean, R.E. Mihai, A. Mitu, A. Negret, C.R. Nita, C. Petrone, L. Stan, S. Toma, A.E. Turturica, G. Turturica, and S. Ujeniuc, Phys. Rev. C **113**, 034314 (2026).

- [3] A. Kumar, N. Shimizu, T. Miyagi, Y. Utsuno and Y. Tsunoda, Phys. Lett. B **874**, 140184 (2026).
- [4] K. Kaneko, Y. Sun, T. Mizusaki, and N. Shimizu, Phys. Rev. C **113**, 014327 (2026). Selected as “Editor’s suggestion”.
- [5] D. Patel, P. C. Srivastava, N. Shimizu, and Y. Utsuno, Phys. Rev. C **111**, 064303 (2025).

(2) 学会発表

- [1] 清水則孝, 宮城宇志, A. Kumar, 角田佑介, 「芯を仮定しないモンテカルロ殻模型計算による  $p$  殻核の研究」日本物理学会第 80 回年次大会、広島大学、2025/9/16
- [2] 清水則孝, 「芯のないモンテカルロ殻模型による原子核の第一原理計算と GPU コード開発」第 25 回 High Performance Computing Physics (HPC-Phys) 勉強会, 理化学研究所計算科学研究センター、2025/9/3

(3) その他

使用計算機	使用計算機に○	配分リソース*		
		当初配分	移行*	一般利用による追加
Pegasus	○	17,600		
Miyabi-G	○	49,500	-9,000	
Miyabi-C	○	7,040	+10,800	14,400
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。 *バジェット移行を行った場合、「+2000」「-1000」のように記入				