素粒子・原子核・宇宙「京からポスト京に向けて」シンポジウム

サブ課題B原子核セッション
「量子多体計算に基づく原子核構造・反応研究」

軽い核の第一原理計算と核力

阿部　喬　（東大理）

ワテラスコモンホール
2016年3月30 - 31日

課題2

実施計画

研究開発課題説明資料より抜粋（一部加工）

	H23	H24	H25	H26	H27
チューニング、 アルゴリズム改良	「京」でのチューニング アルゴリズムの改良		アルゴリズムの改良		
軽い核の第一原理計算 （質量数＜30）	4主殻	p殻核 Beクラスター構造	5主殻 核力から媒質補正なしに（軽い）原子核をつくる	クラスター構造 sd殻核	6主殻 ^{12}C ホイル状態 （宇宙：元素合成）
閉殻芯を仮定した 中重核計算 （質量数 60－150）	1バレンス殻計算 有効相互作用の確立	rプロセス核 (宇宙：元素合成)	2バレンス殻 有効相互作用の確立 ⇒ 核力から作る原子核へ向けて ^{90}Sr,^{93}Zr,^{135}Cs ,..^{130}Te,^{150}Nd,... (社会：原子力ニーズ）（素粒子：２重ベータ崩壊）		
有効相互作用の構築	広い模型空間での有効相互作用理論		３体力の効果 有効核力による3体力寄与の議論		３体力フル計算

課題2 実施計画

研究開発課題説明資料より抜粋（一部加工）

	H23	H24	H25	H26	H27
チューニング、アルゴリズム改良	「京」でのチューニング アルゴリズムの改良		アルゴリズムの改良		
軽い核の第一原理計算（質量数＜30）	4主殻	p殻核	5主殻 核力から媒質補正なしに(軽い)原子核をつくる Beクラスター構造	クラスター構造 sd殻核	6主殻 ^{12}C ホイル状態（宇宙：元素合成）
閉殻芯を仮定した中重核計算（質量数 60－150）	1バレンス殻計算 有効相互作用の確立	rプロセス核（宇宙：元素合成）	2バレンス殻 有効相互作用の確立 ⇒ 核力から作る原子核へ向けて ^{90}Sr, ^{93}Zr, ^{135}Cs ,..^{130}Te, ^{150}Nd,... (社会：原子力ニーズ)(素粒子：2重ベータ崩壊)		
有効相互作用の構築	広い模型空間での有効相互作用理論		3体力の効果 有効核力による3体力寄与の議論		3体力フル計算

“Ab initio” in low-energy nuclear structure physics

- Solve the non-relativistic many-body Schroedinger eq. and obtain the eigenvalues and eigenvectors.

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$$
$$H = T + V_{\mathrm{NN}} + V_{\mathrm{3N}} + \cdots + V_{\mathrm{Coulomb}}$$

  – Ab initio: All nucleons are active, and Hamiltonian consists of realistic NN (+ 3N + …) potentials.

- Two main sources of uncertainties:
  – Nuclear forces (interactions btw/among nucleons)
    In principle, they should be obtained (directly) by QCD.
  – Many-body methods
    CI: Finite basis space (choice of basis function and truncation), we have to extrapolate to infinite basis dimensions

Shell model (Configuration Interaction, CI)

- Eigenvalue problem of large sparse Hamiltonian matirx

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} & H_{14} & H_{15} & \cdots \\ H_{21} & H_{22} & H_{23} & H_{24} & & \\ H_{31} & H_{32} & H_{33} & & & \\ H_{41} & H_{33} & & \ddots & & \\ H_{51} & & & & & \\ \vdots & & & & & \end{pmatrix}}_{\text{Large sparse matrix (in M-scheme)}} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \\ \Psi_5 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_1 & & & & \mathbf{0} \\ & E_2 & & & \\ & & E_3 & & \\ & & & \ddots & \\ \mathbf{0} & & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \\ \Psi_5 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\sim \mathcal{O}(10^{10})$$

\# non-zero MEs

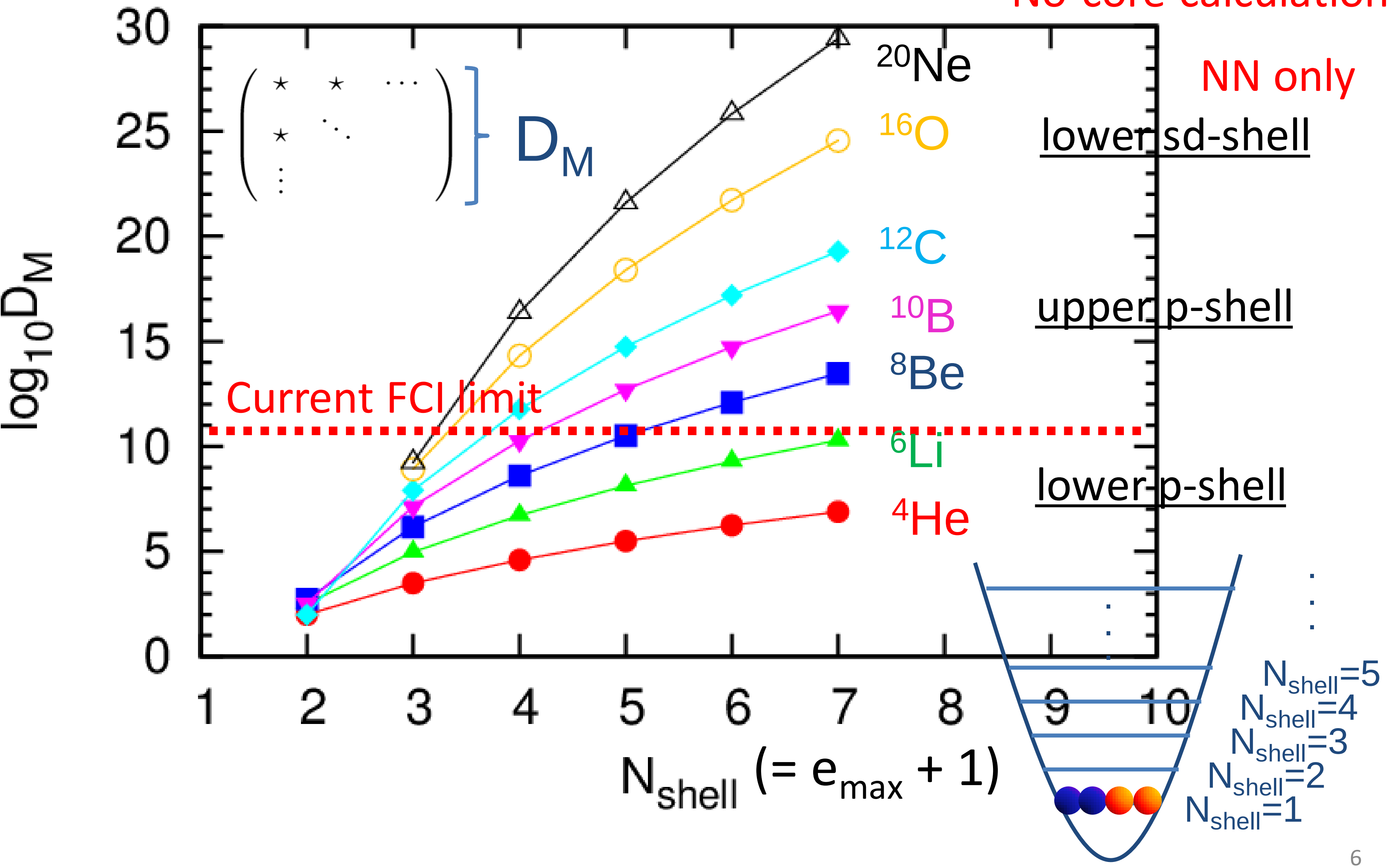
$$\sim \mathcal{O}(10^{13-14})$$

$$\left\{ \begin{array}{lcl} |\Psi_1\rangle & = & a^\dagger_\alpha a^\dagger_\beta a^\dagger_\gamma \cdots |-\rangle \\ |\Psi_2\rangle & = & a^\dagger_{\alpha'} a^\dagger_{\beta'} a^\dagger_{\gamma'} \cdots |-\rangle \\ |\Psi_3\rangle & = & \cdots \\ & \vdots & \end{array} \right.$$

M-scheme dimension in N_{shell} truncation

No-core calculations

NN only



Monte Carlo shell model (MCSM)

- Importance truncation

Standard shell model

$$H = \begin{pmatrix} \star & \star & \star & \star & \star & \cdots \\ \star & \star & \star & \star & & \\ \star & \star & \star & & & \\ \star & \star & & \ddots & & \\ \star & & & & & \\ \vdots & & & & & \end{pmatrix} \xRightarrow{\text{Diagonalization}} \begin{pmatrix} E_0 & & & 0 \\ & E_1 & & \\ & & E_2 & \\ & & & \ddots \\ 0 & & & \end{pmatrix}$$

All Slater determinants

d > O(10^{10})

Monte Carlo shell model

$$H \sim \begin{pmatrix} \star & \star & \cdots \\ \star & \ddots & \\ \vdots & & \end{pmatrix} \xRightarrow{\text{Diagonalization}} \begin{pmatrix} E_0' & & 0 \\ & E_1' & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix}$$

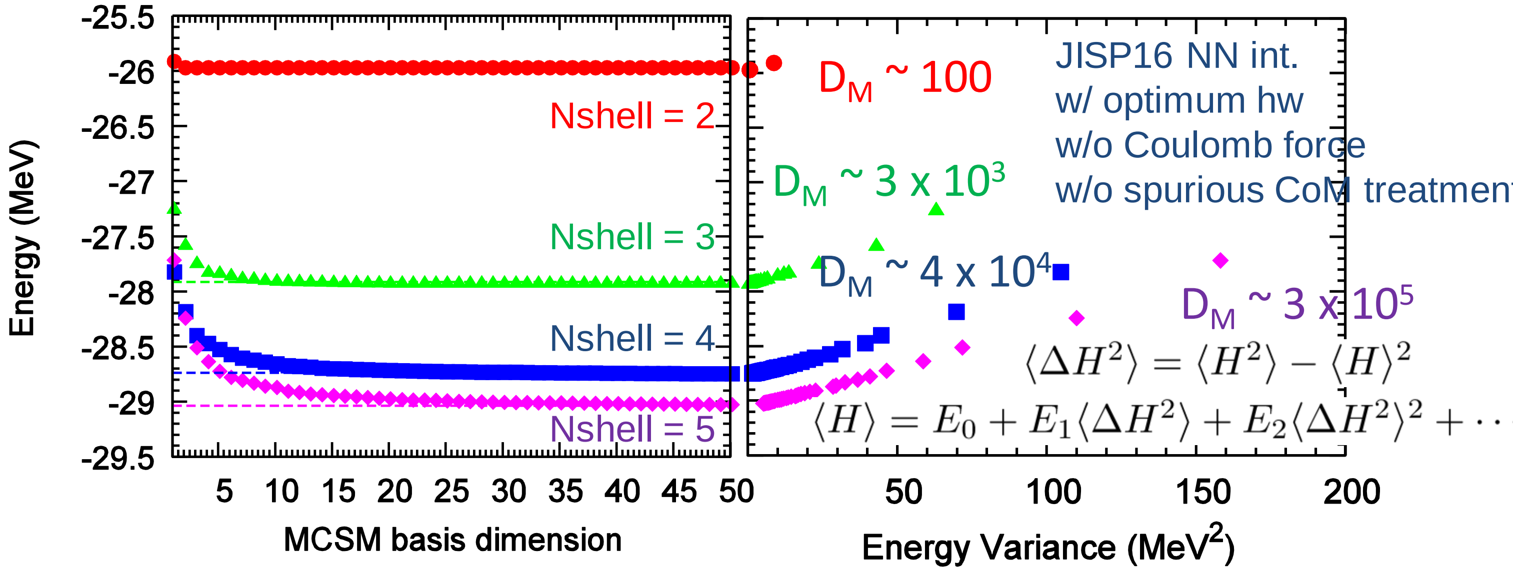
Important bases stochastically selected

$d_{MCSM} \sim O(100)$

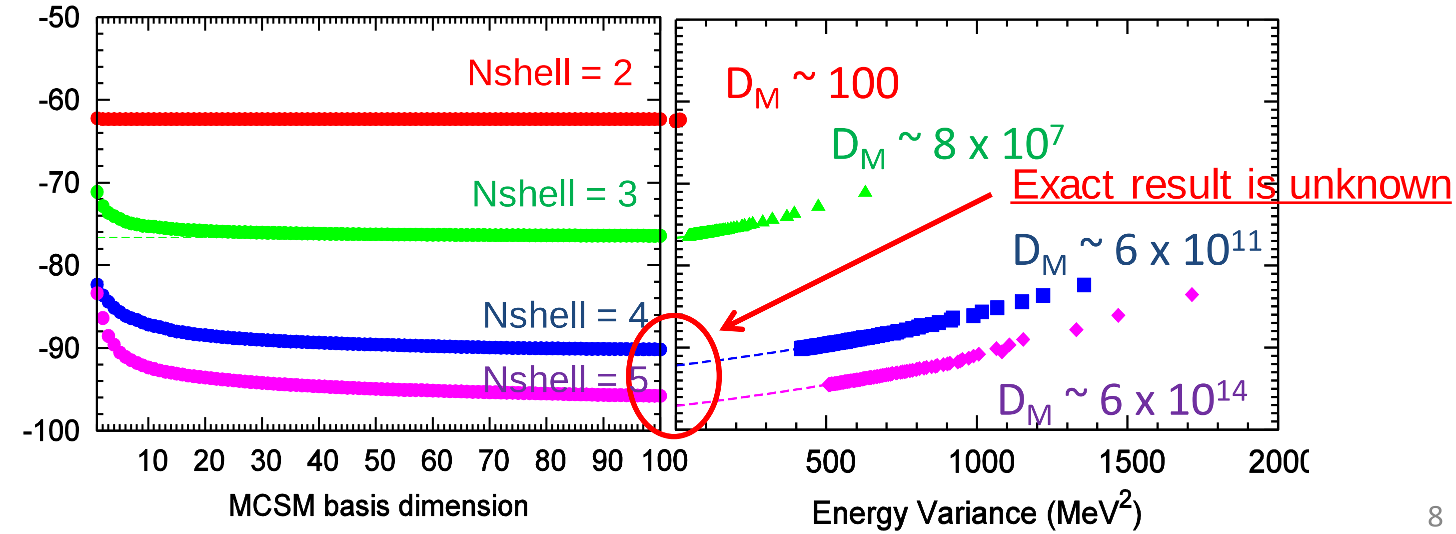
Review: T. Otsuka , M. Honma, T. Mizusaki, N. Shimizu, Y. Utsuno, Prog. Part. Nucl. Phys. 47, 319 (2001)

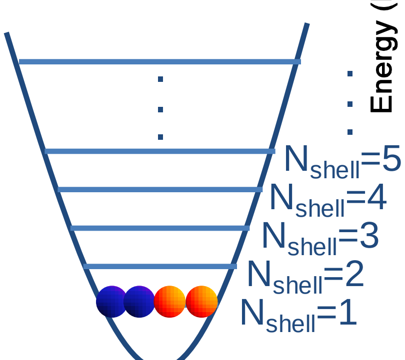
Energies wrt # of basis & energy variance

^{4}He(0^{+};gs)



^{12}C(0^{+};gs)

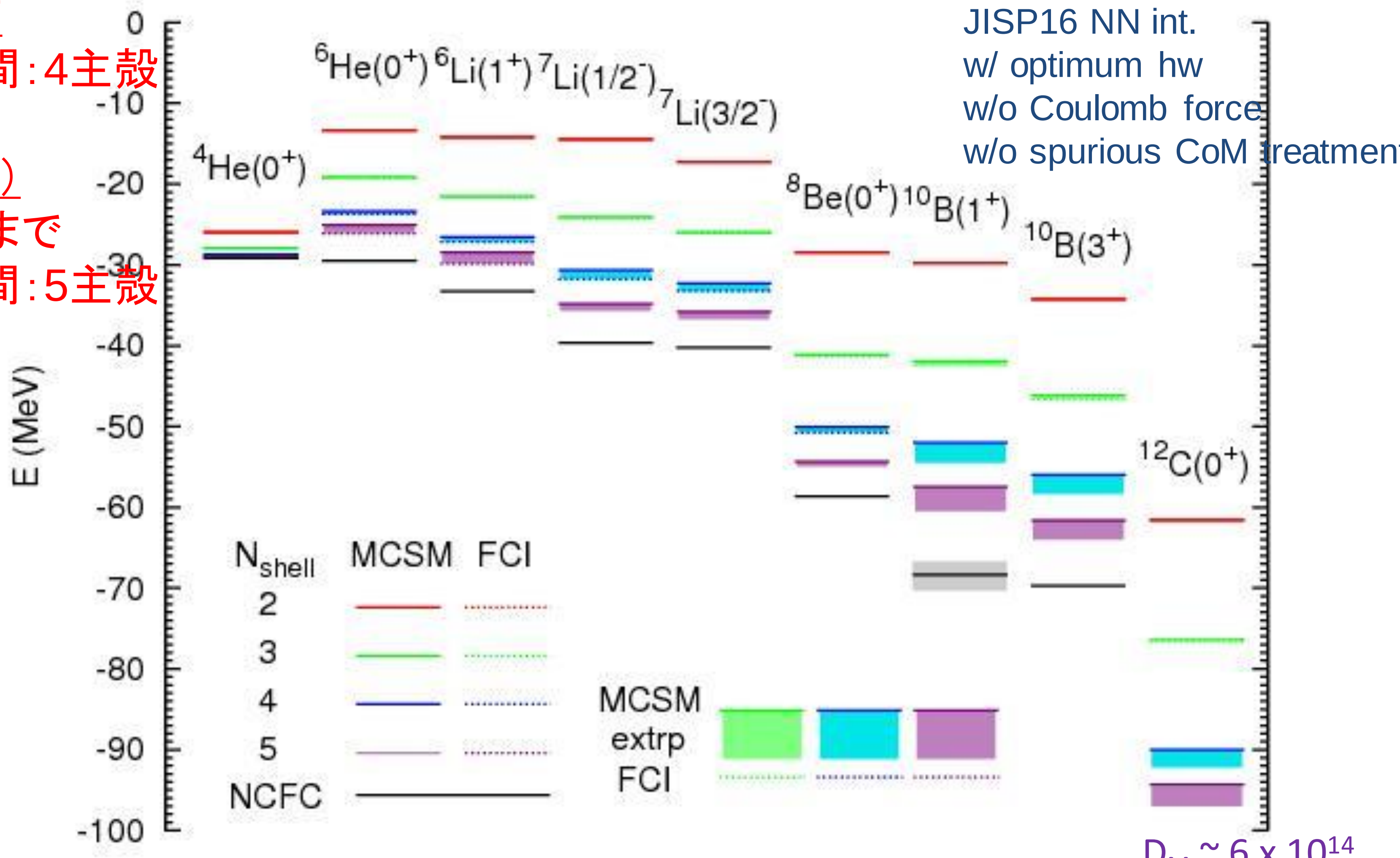




Energies of the Light Nuclei

京より前
模型空間:4主殻

京(初期)
A = 12 まで
模型空間:5主殻



$D_M \sim 6 \times 10^{14}$

Some MCSM results are not reachable in the current FCI

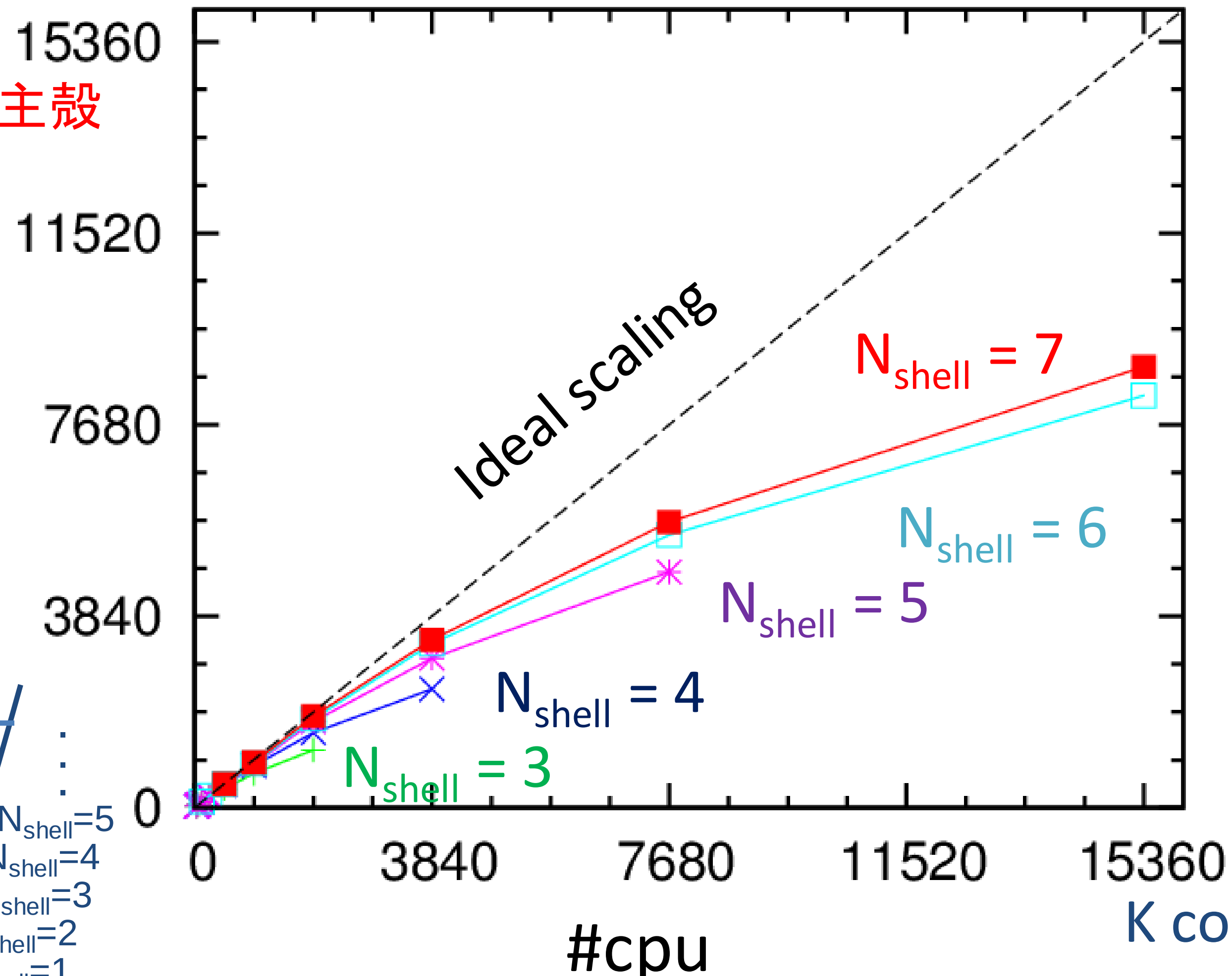
T. Abe, P. Maris, T. Otsuka, N. Shimizu, Y. Utsuno and J. P. Vary, Phys. Rev. C **86**, 054301 (2012)

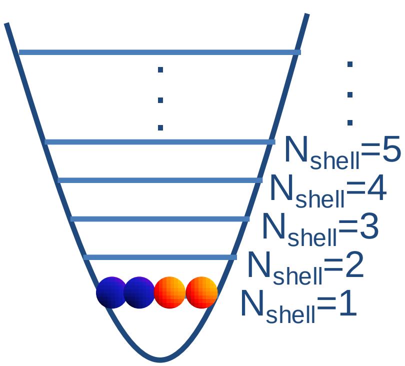
Strong scaling (eigen functions & eigenvalues)

- Wave function (100 CG iterations @ 100th basis)

Scales up to ~ 60,000 cores @ N_{shell} = 7 (^{4}He) on K computer

京（現在）
模型空間:7主殻





8 cores/cpu

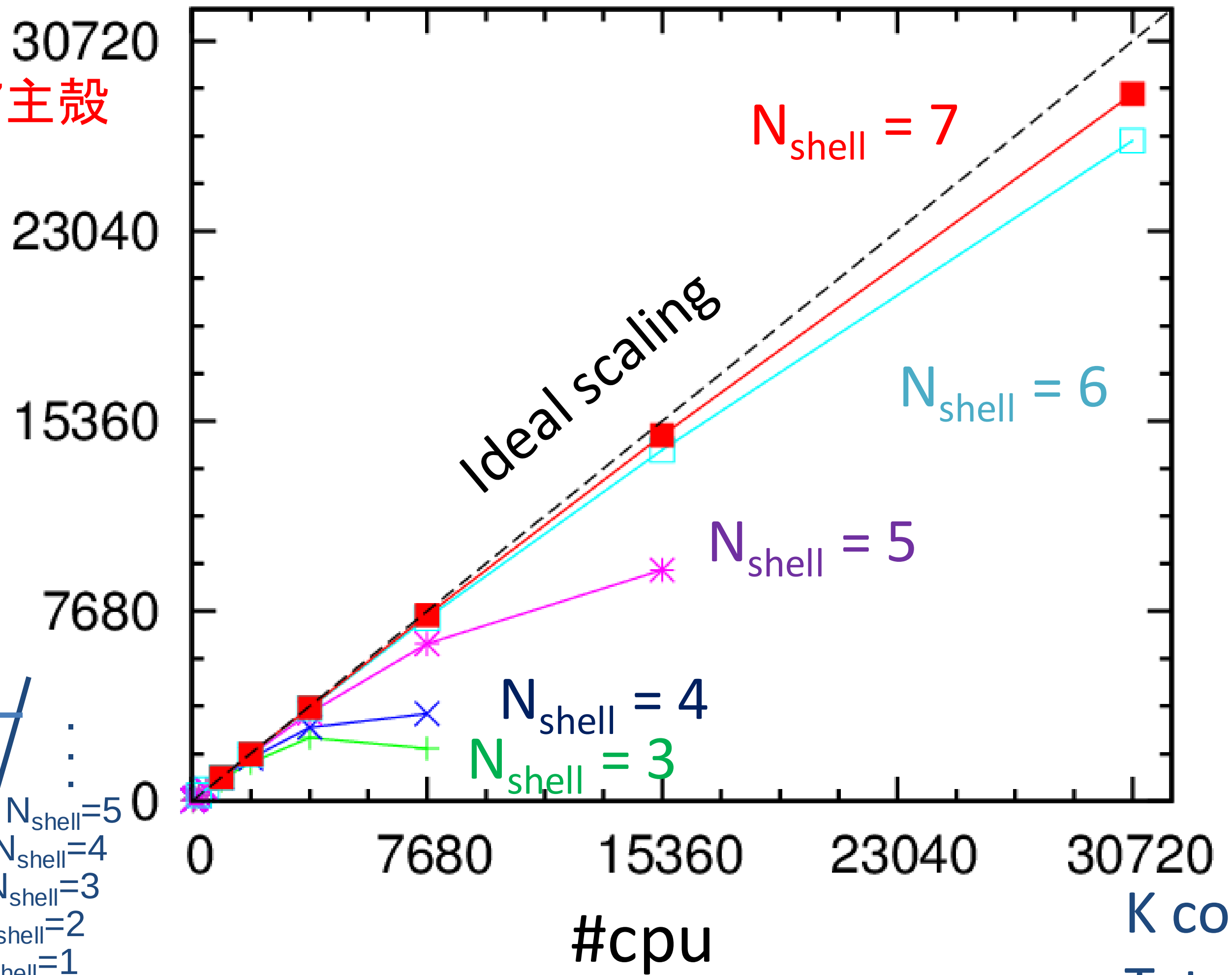
K computer
Total: 88,128 cpus

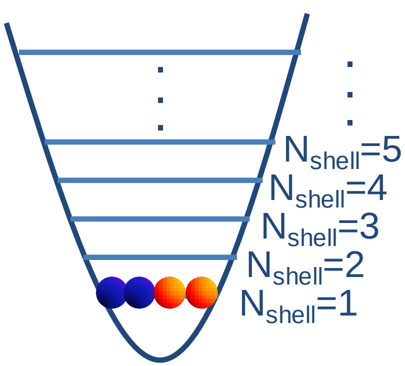
Strong scaling (energy variances)

- Energy variance (1st – 100th bases)

Scales over ~ 240,000 cores @ N_{shell} = 7 (^{4}He) on K computer

京（現在）
模型空間:7主殻



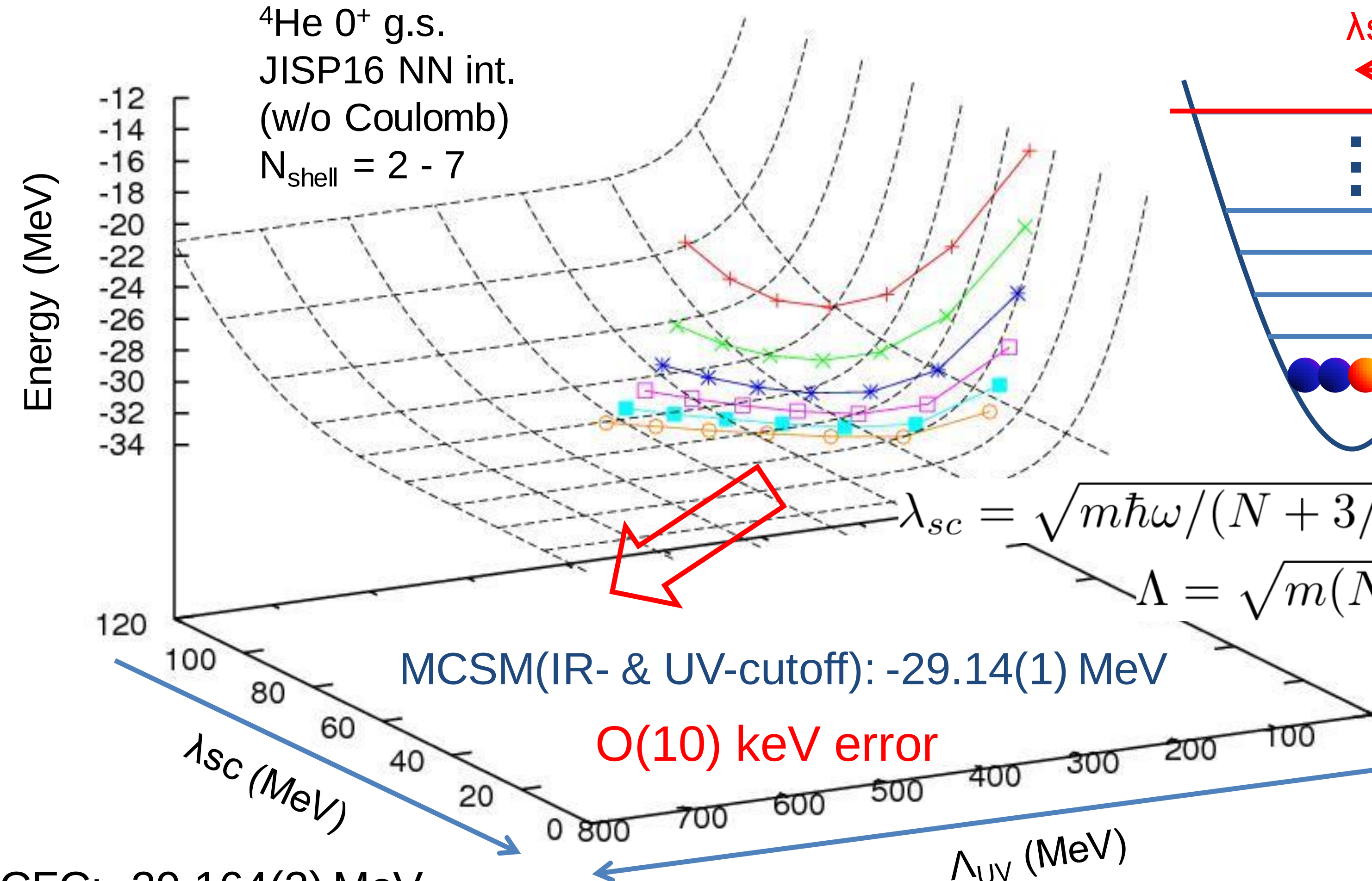


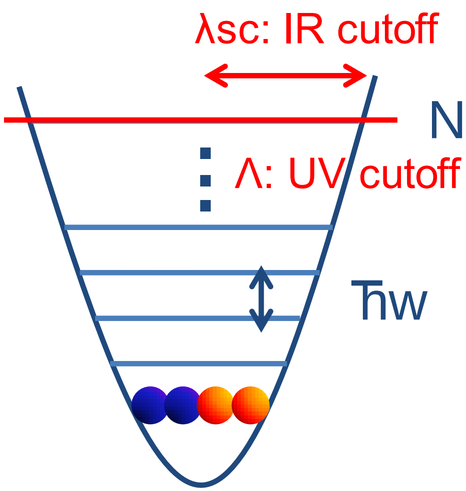
8 cores/cpu

K computer
Total: 88,128 cpus

IR & UV-cutoff extrapolation

$$E(\lambda, \Lambda) = E(\lambda = 0, \Lambda = \infty) + a\exp(-b/\lambda) + c\exp(-\Lambda^2/d^2)$$





$$\lambda_{sc} = \sqrt{m\hbar\omega/(N+3/2)} = \lambda^2/\Lambda$$

$$\Lambda = \sqrt{m(N+3/2)\hbar\omega}$$

MCSM(IR- & UV-cutoff): -29.14(1) MeV

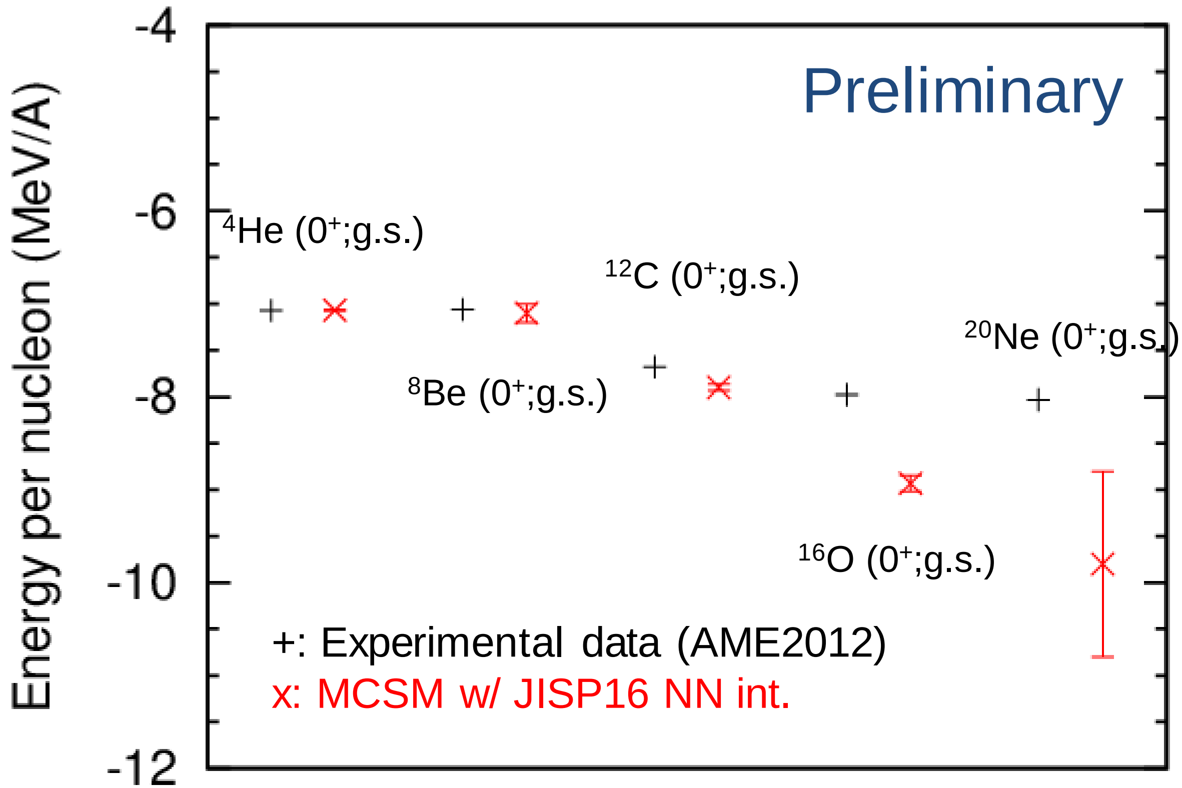
O(10) keV error

c.f.) NCFC: -29.164(2) MeV

Extrapolated results to infinite N_{max} space

(N, ħω) <-> (λ, Λ)

Comparison of MCSM results w/ experiments



JISP16 NN int.
(w/ perturbative Coulomb)

京（現在）
２体力のみ
模型空間：7主殻
ネオン20（sd殻核）まで

MCSM results are obtained by traditional extrapolation
w/ optimum harmonic oscillator energies.
Coulomb interaction is included perturbatively.

MCSM results show good agreements w/ experimental data up to ^{12}C, slightly overbound for ^{16}O, and clearly overbound for ^{20}Ne.

課題2

実施計画

研究開発課題説明資料より抜粋（一部加工）

	H23	H24	H25	H26	H27
チューニング、 アルゴリズム改良	「京」でのチューニング アルゴリズムの改良		アルゴリズムの改良		
軽い核の第一原理計算 （質量数＜30）	4主殻	p殻核	5主殻 核力から媒質補正なしに（軽い）原子核をつくる Beクラスター構造	クラスター構造 sd殻核	6主殻 ^{12}C ホイル状態 （宇宙：元素合成）
閉殻芯を仮定した 中重核計算 （質量数 60－150）	1バレンス殻計算 有効相互作用の確立	rプロセス核 （宇宙：元素合成）	2バレンス殻 有効相互作用の確立 ⇒ 核力から作る原子核へ向けて ^{90}Sr,^{93}Zr,^{135}Cs ,..^{130}Te,^{150}Nd,... （社会：原子力ニーズ）	（素粒子：2重ベータ崩壊）	
有効相互作用の構築	広い模型空間での有効相互作用理論		3体力の効果 有効核力による3体力寄与の議論		3体力フル計算

Density distribution from ab initio calc.

- Green’s function Monte Carlo (GFMC)
  - “Intrinsic” density is constructed by aligning the moment of inertia among samples

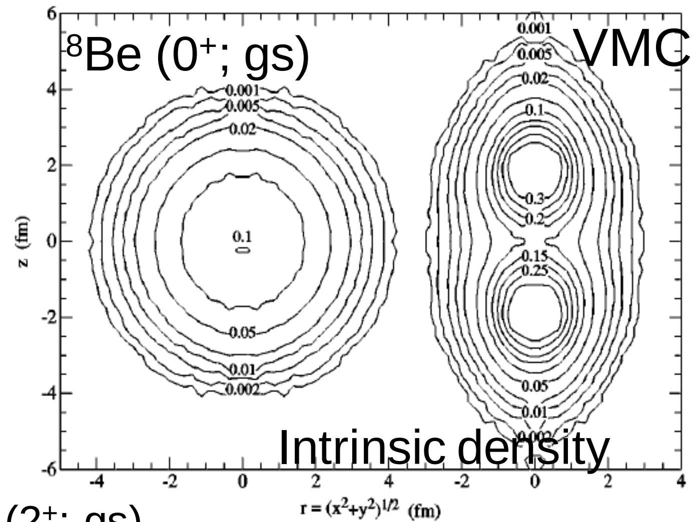
    R. B. Wiringa, S. C. Pieper, J. Carlson, & V. R. Pandharipande, Phys. Rev. C62, 014001 (2000)

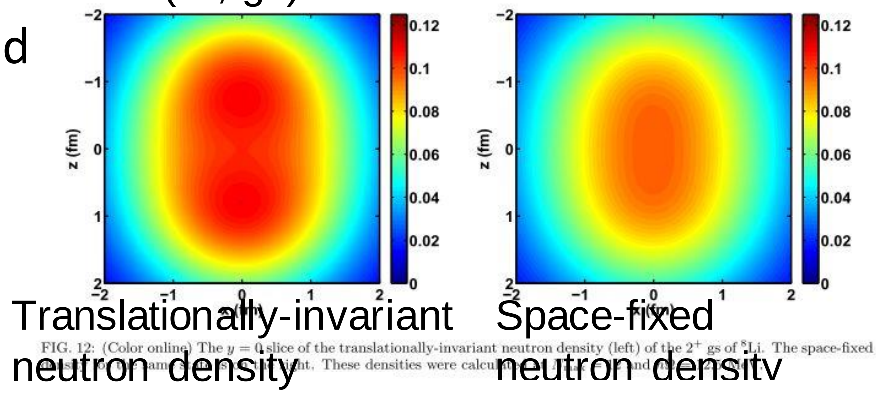
- No-core full configuration (NCFC)
  - Translationally-invariant density is obtained by deconvoluting the intrinsic & CM w.f.

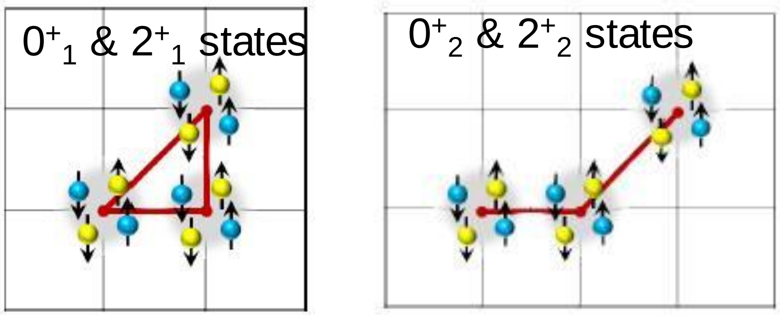
    C. Cockrell J. P. Vary & P. Maris, Phys. Rev. C86, 034325 (2012)

- Lattice EFT
  - Triangle structure in carbon-12

    E. Epelbaum, H. Krebs, T. A. Lahde, D. Lee, & U.-G. Meissner, Phys. Rev. Lett. 109, 252501 (2012)

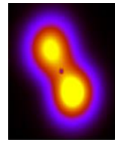
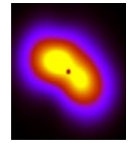
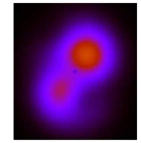
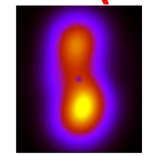






Density distribution in MCSM

吉田亨 (CNS)

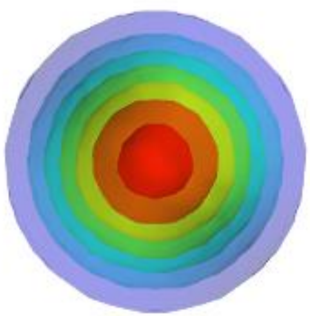
$$|\Phi\rangle = \sum_{i=1}^{N_{basis}} c_i|\Phi_i\rangle = c_1$$  $+ c_2$  $+ c_3$  $+ c_4$  $+ \ldots$

Angular-momentum projection

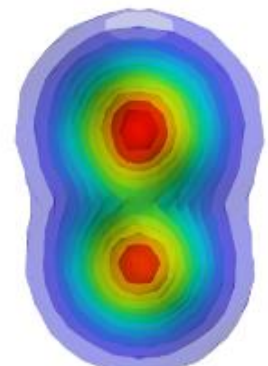
$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{N_{basis}} c_i P^J P^\pi |\Phi_i\rangle$$

Rotation of each basis by diagonalizing Q-moment

$$|\Phi'\rangle = \sum_{i=1}^{N_{basis}} c_i R(\Omega_i)|\Phi_i\rangle$$



^{8}Be 0^+ ground state



Laboratory frame

“Intrinsic” (body-fixed) frame

Densities in lab. & body-fixed frames can be constructed by MCSM

N. Shimizu, T. Abe, Y. Tsunoda, Y. Utsuno, T. Yoshida, T. Mizusaki, M. Honma, T. Otsuka, Progress in Theoretical and Experimental Physics, 01A205 (2012)

Density distribution of Be isotopes

2-α structure is vanishing as A increases

Preliminary
吉田亨 (CNS)

2-α-cluster structure

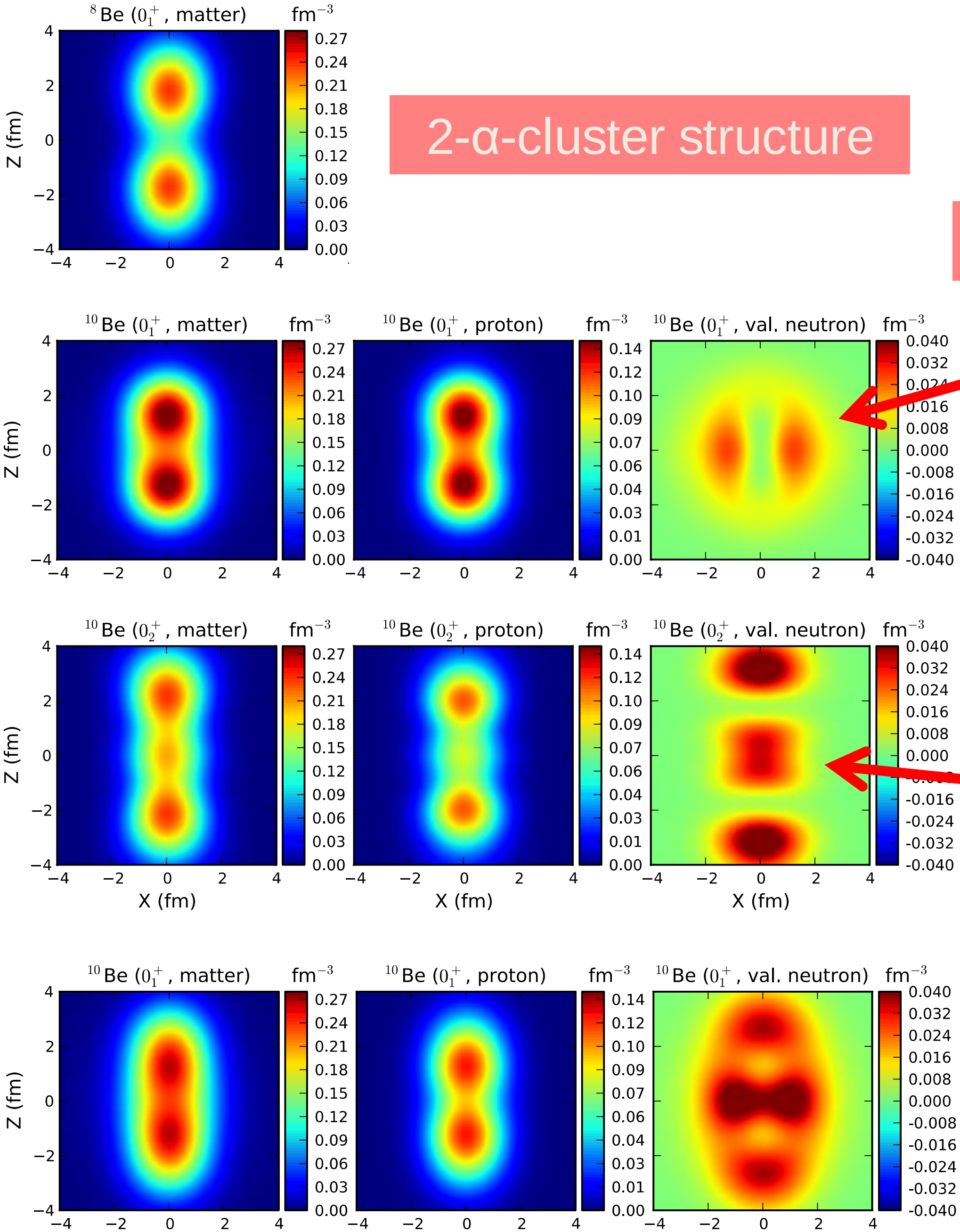
Molecular-orbital states

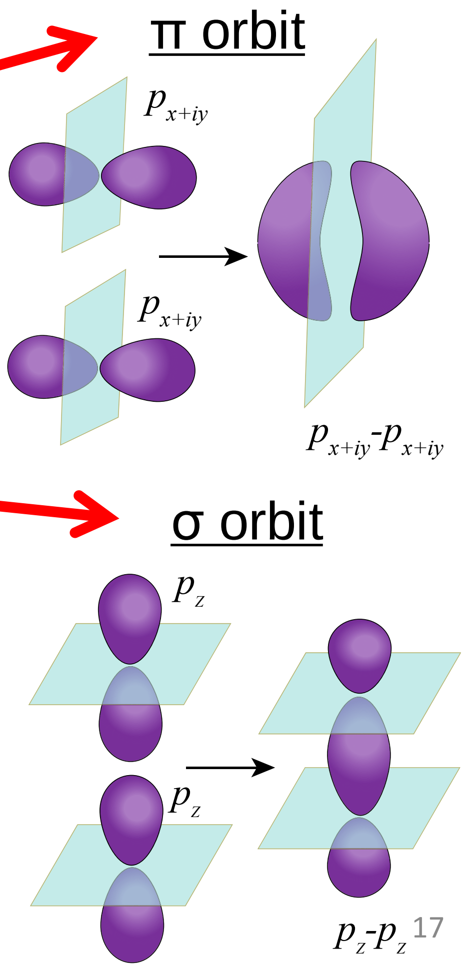
^{8}Be (0^+;gs)

^{10}Be (0^+;gs)

0_2^+

^{12}Be (0^+;gs)





課題2

実施計画

研究開発課題説明資料より抜粋（一部加工）

	H23	H24	H25	H26	H27

チューニング、アルゴリズム改良

「京」でのチューニング
アルゴリズムの改良
アルゴリズムの改良

軽い核の第一原理計算（質量数＜30）

4主殻
p殻核
5主殻
6主殻
核力から媒質補正なしに（軽い）原子核をつくる
Beクラスター構造
クラスター構造
sd殻核
^{12}C ホイル状態
（宇宙：元素合成）

閉殻芯を仮定した中重核計算（質量数 60－150）

1バレンス殻計算
有効相互作用の確立
2バレンス殻
有効相互作用の確立 ⇒ 核力から作る原子核へ向けて
rプロセス核
(宇宙：元素合成)
^{90}Sr, ^{93}Zr, ^{135}Cs ,.. ^{130}Te, ^{150}Nd,...
(社会：原子力ニーズ) (素粒子：2重ベータ崩壊)

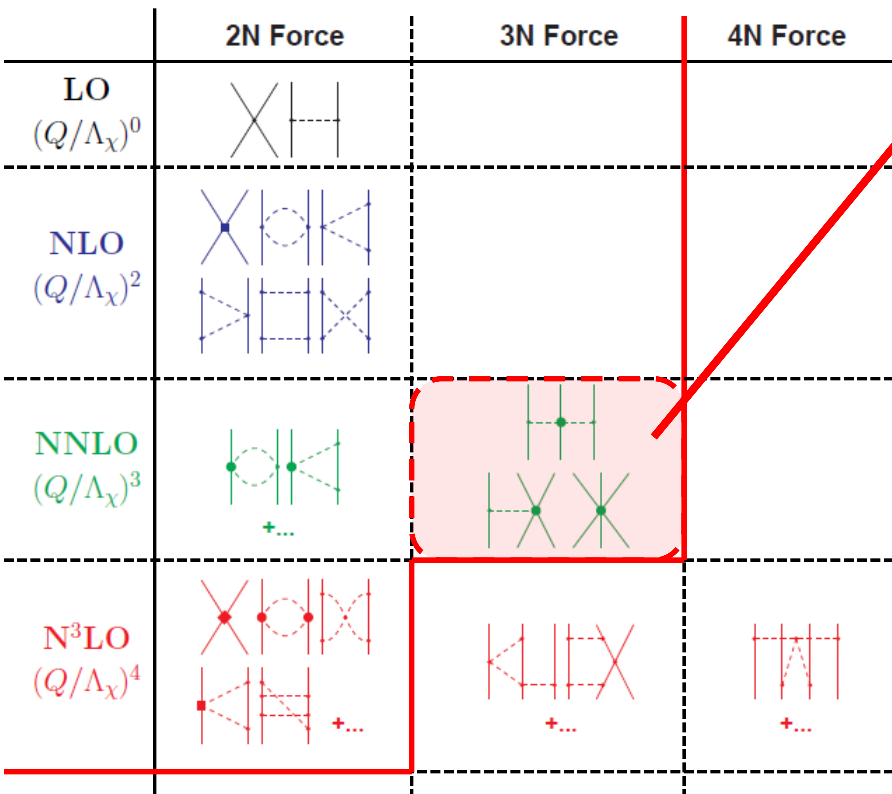
有効相互作用の構築

広い模型空間での有効相互作用理論
3体力の効果
有効核力による3体力寄与の議論
3体力フル計算

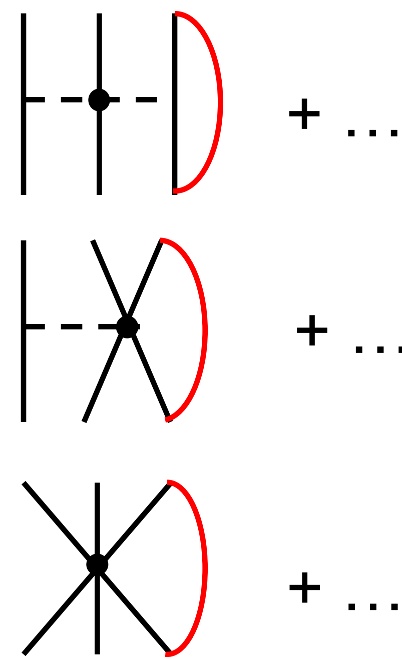
Nuclear force from chiral EFT

E. Epelbaum, Prog. Part. Nucl. Phys. **57**, 654 (2006).
R. Machleidt and D. R. Entem, Phys. Rep. **503**, 1 (2011).

- Current standard input potential: χEFT N3LO NN + N2LO 3N
  - ✓ Renormalization technique: SRG, $V_{\mathrm{low}\,k}$
  - ✓ 3N interaction: Full, NO2B approx., …
  - ✓ Other input potentials: $\mathrm{NNLO}_{\mathrm{opt}}$, $\mathrm{NNLO}_{\mathrm{sat}}$, JISP16 NN, AV18 NN + IL7 3N, …



<u>Effective NN forces from 3N forces</u>



K. Hebeler, H. Krebs, E. Epelbaum, J. Golak, & R. Skibinski, arXiv:1502.02977

Effective 2N force from 3N force

^{4}He 0^+ g.s. energy calculated by FCI & no-core MCSM w/ χEFT N3LO NN (+ "N2LO 3N") potential

<u>Effective 2N potential from initial 3N potential in momentum space</u>

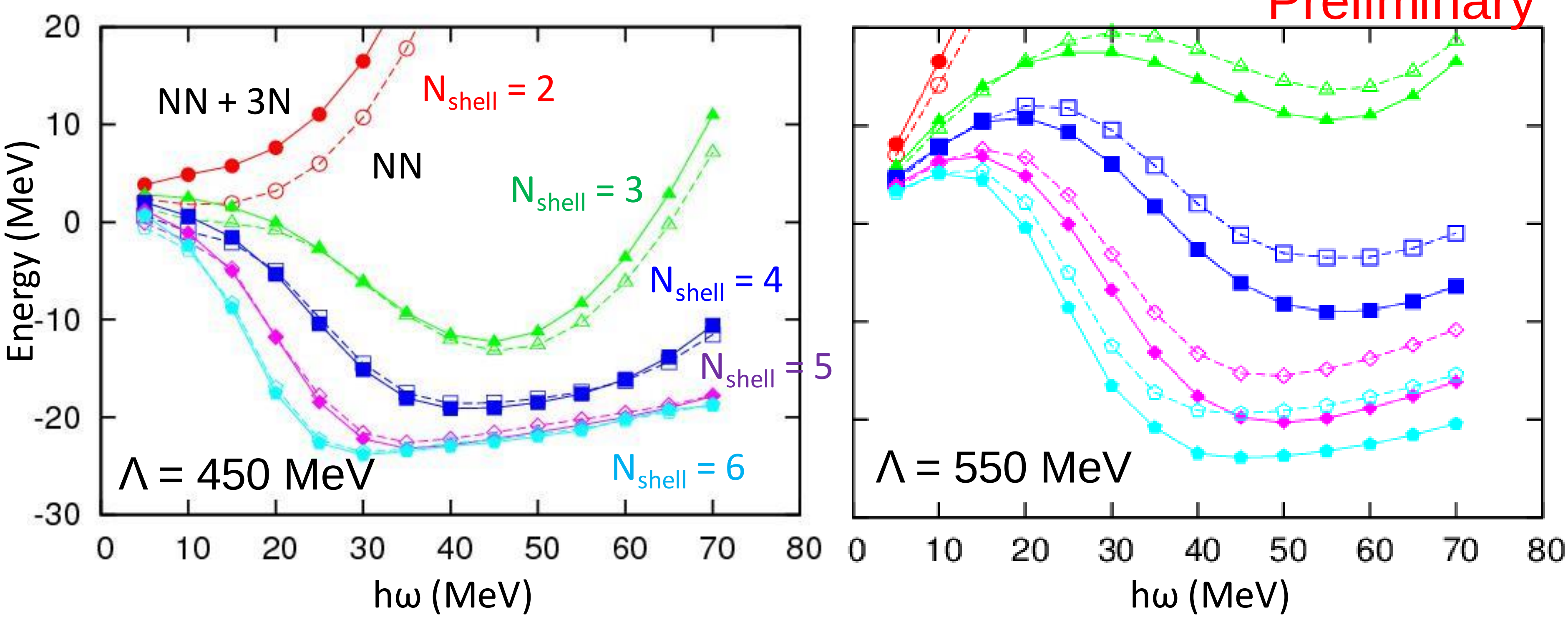
$$\langle k_1', k_2' | V_{12(3)} | k_1, k_2 \rangle_A \equiv \sum_{k_3} \langle k_1', k_2', k_3 | V_{123} | k_1, k_2, k_3 \rangle_A ,$$

A: antisymmetrized matrix element

$$\frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2} \langle k_1 k_2 | V_{12} | k_1 k_2 \rangle_A + \frac{1}{3!} \sum_{k_1 k_2 k_3} \langle k_1 k_2 k_3 | V_{123} | k_1 k_2 k_3 \rangle_A$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2} \langle k_1 k_2 | V_{12} + \frac{1}{3} V_{12(3)} | k_1 k_2 \rangle_A .$$

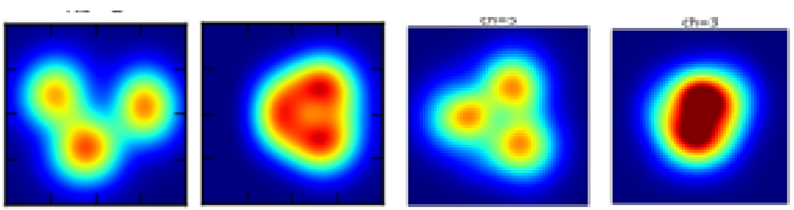
Preliminary



Energies with 3NF in the different cutoff scales are consistent in a sufficiently large basis space

モンテカルロ殻模型による第一原理計算のまとめと今後の展望

- 京より前
  - A = 4 – 12 (^{4}He – ^{12}C) ← p殻核の全般
  - 模型空間:4 主殻まで
  - 二体力のみ
- 京で完了したこと
  - A = 20 (^{20}Ne)まで ← sd殻核の始め
  - 模型空間:7主殻(当初予定は6主殻)まで → 模型空間無限大への外挿が可能
  - ベリリウム同位体のクラスター構造の可視化(分子軌道状態も)
  - 有効二体化した三体力のテスト → 三体力の部分的な導入
- 引き続き京でやっていること
  - ^{12}CのHoyle状態
  - 三体力の本格的な導入



…

- ポスト京で
  - A ~ 40(sd殻核)、模型空間:8主殻
  - 炭素同位体(Hoyleを含む)のクラスター構造の解析
  - 三体力の本格的な導入 → χEFTや格子QCDによる核力

→ 軽・中重核の構造の核力に基づく第一原理計算による解明

Collaborators

- 東京大学
  - 大塚孝治 (物理、CNS)
  - 清水則孝 (CNS)
  - 吉田亨 (CNS)
  - 宮城宇志 (物理)
  - 吉田聡太 (物理)
- 原子力機構
  - 宇都野穣
- Iowa State U
  - James P. Vary
  - Pieter Maris
- 九州工業大学
  - 岡本良治
- 大阪大学RCNP
  - 河野通郎