計算基礎科学連携拠点
JICFuS Joint Institute for Computational Fundamental Science

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
2016/03/30　ワテラスコモンホール

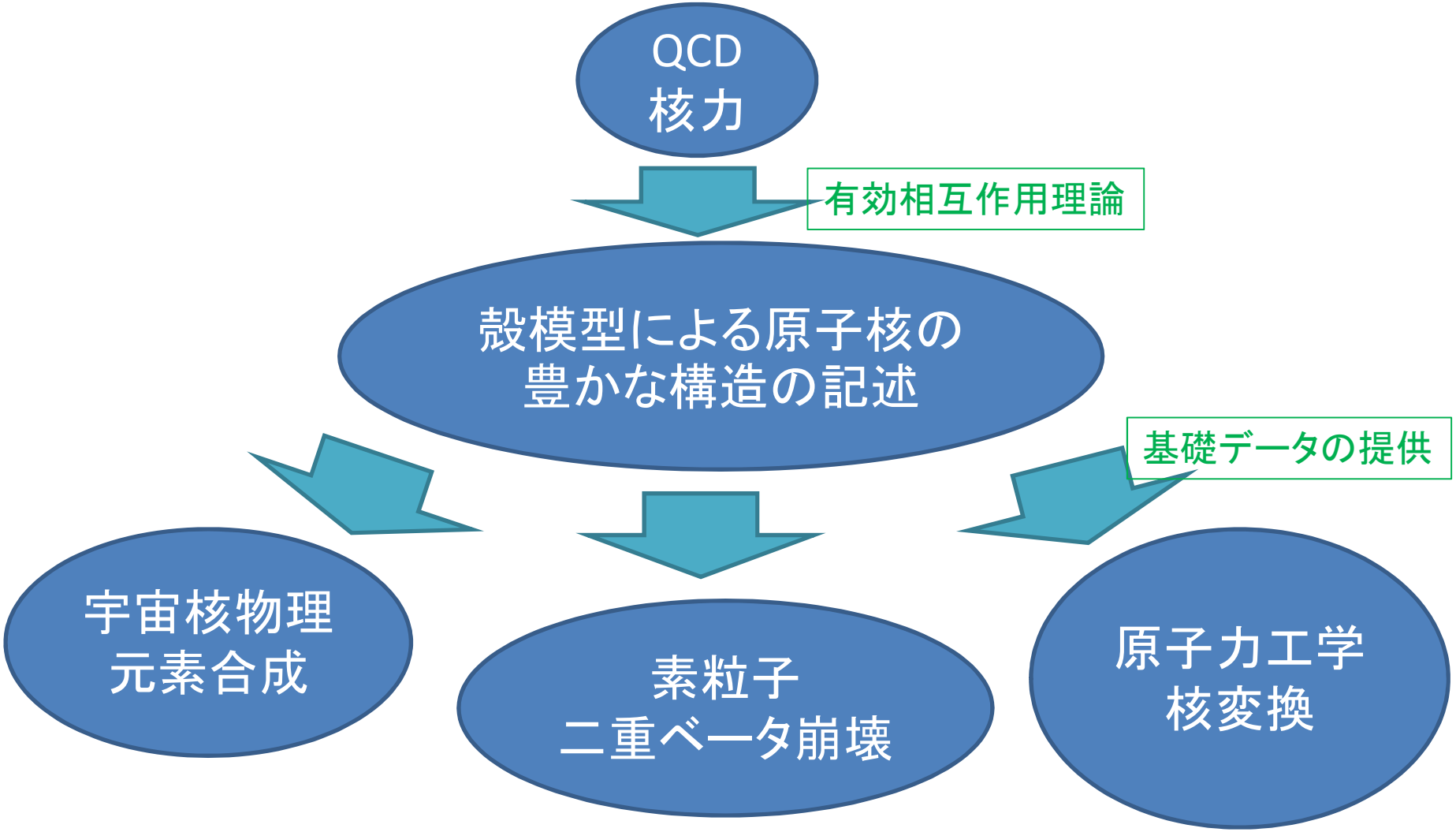
大規模殻模型計算のインパクト
-ダブルベータ崩壊と核変換を例題に-

原子核科学研究センター

東大CNS　清水則孝

阿部喬（東大CNS)、岩田順敬（東大CNS）、
宇都野穣（JAEA/東大CNS)、大塚孝治（東大理）、
J. Menendez(東大理)、富樫智章（東大CNS）、
角田祐介（東大CNS）、本間道雄（会津大）

重点課題9　中重核の構造研究による基礎データの提供とその応用へ



Plan of talk

- 殻模型計算手法
- 原子核準位密度の計算

  ⇒　中性子捕獲反応へ、元素合成・核変換
- 二重ベータ崩壊の核行列要素

  ⇒　ニュートリノ質量、マヨラナ粒子？
- 光核反応

  ⇒　核変換・元素合成

殻模型による原子核構造研究：二つの計算手法

旧来型殻模型計算

量子多体問題を、大次元疎行列の固有値問題に変換して解く

☺取り扱いが簡単、精密

☹行列の次元が莫大

モンテカルロ殻模型(MCSM)

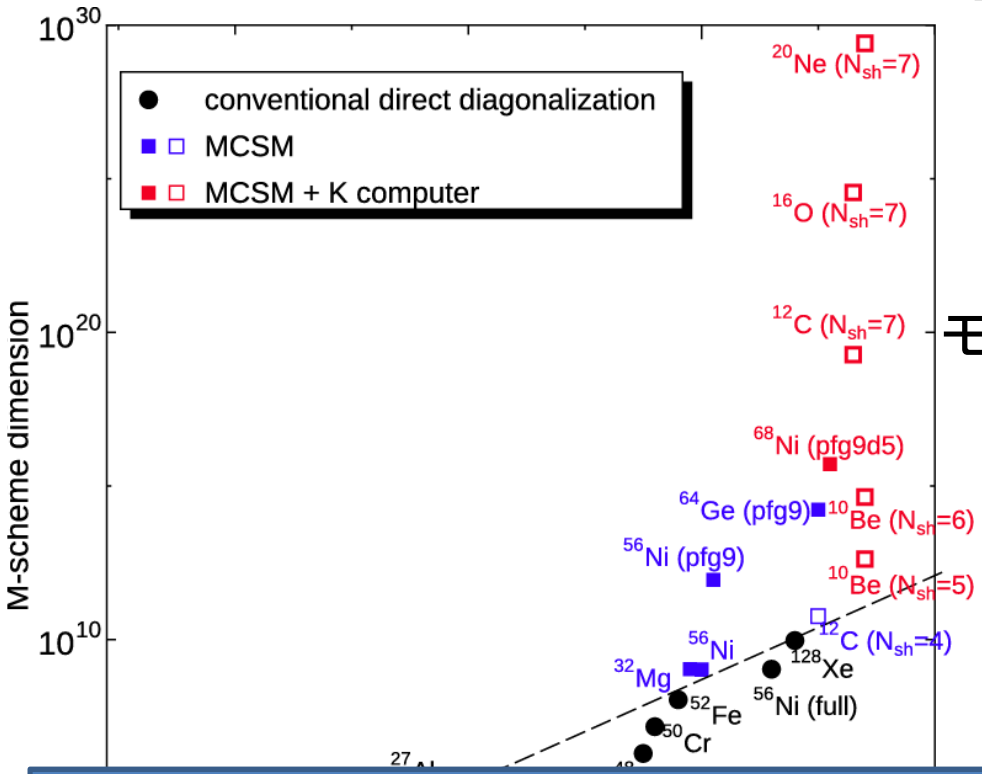
少数（~100)の変形スレーター行列式で波動関数を表現

☺ 行列の次元に縛られない

☹ 高励起状態の強度関数は計算できなかった。

⇒☺可能に！（後述）

殻模型による原子核構造研究：二つの計算手法



ランチョス対角化計算コードKSHELL
＋　京計算機
～10^{10}次元まで計算可能
KSHELL コードは公開

モンテカルロ殻模型
次元の制約を超える最も「精密な」計算

10^{10}次元までは、ランチョス対角化計算
それ以上は、モンテカルロ殻模型

原子核構造計算の応用へ向けた「基礎データ」の提供

- 質量（束縛エネルギー）
- ベータ崩壊・半減期
- 遅発中性子放出
- 光吸収断面積
- 中性子捕獲反応
- 準位密度
- 強度関数
- 二重ベータ崩壊の核行列要素
- etc. etc…

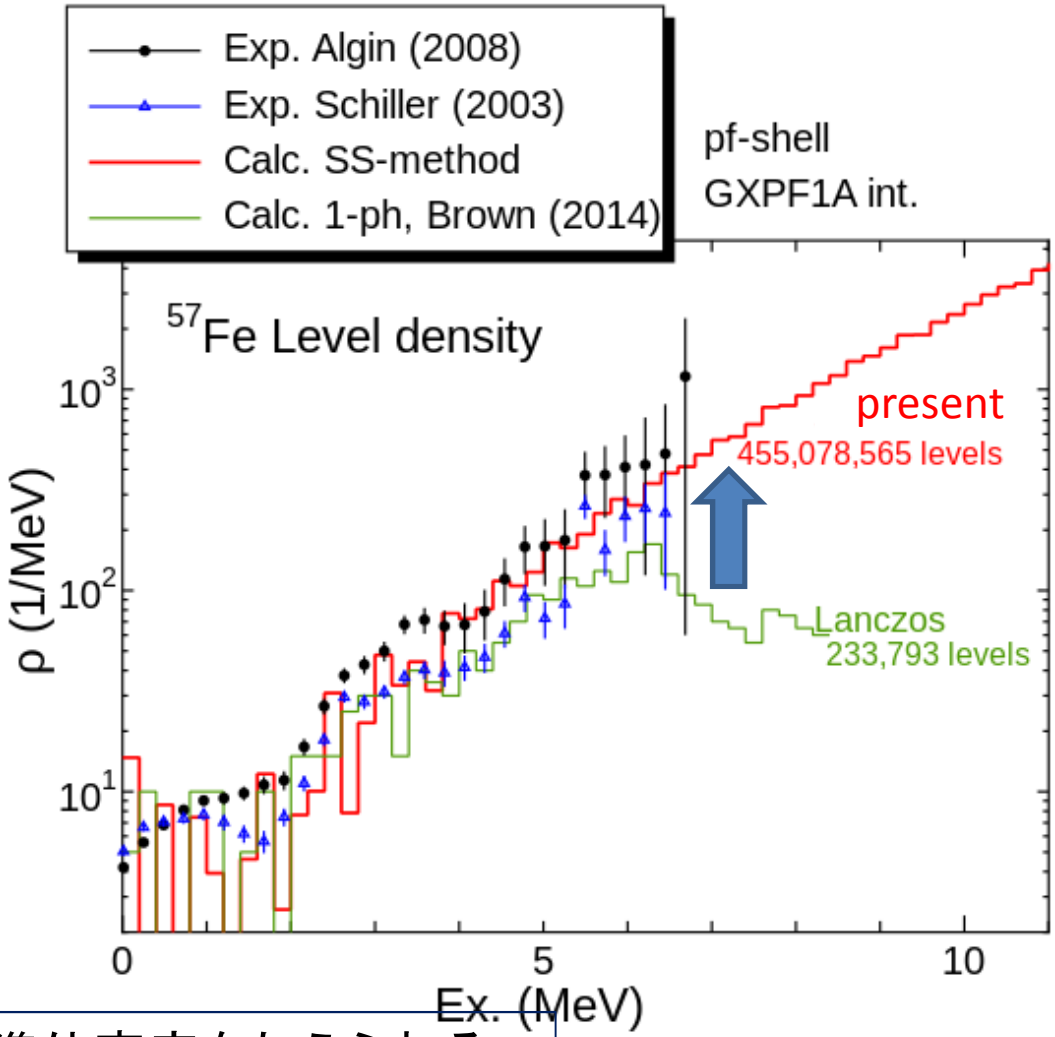
大規模殻模型計算による準位密度計算

原子核の準位密度

中性子捕獲反応などを
統計的に扱う際に必要

大次元疎行列の固有値密度
すべての固有値を求める事は
非現実的

確率的固有値密度推定法を採用
by 筑波大　櫻井・二村氏



殻模型計算によって、高精度の準位密度を与えられる。

N. Shimizu, Y. Utsuno, Y. Futamura, T. Sakurai, T. Mizusaki, and T. Otsuka, Phys. Lett. B 753, 13 (2016)

ニュートリノレス二重ベータ崩壊

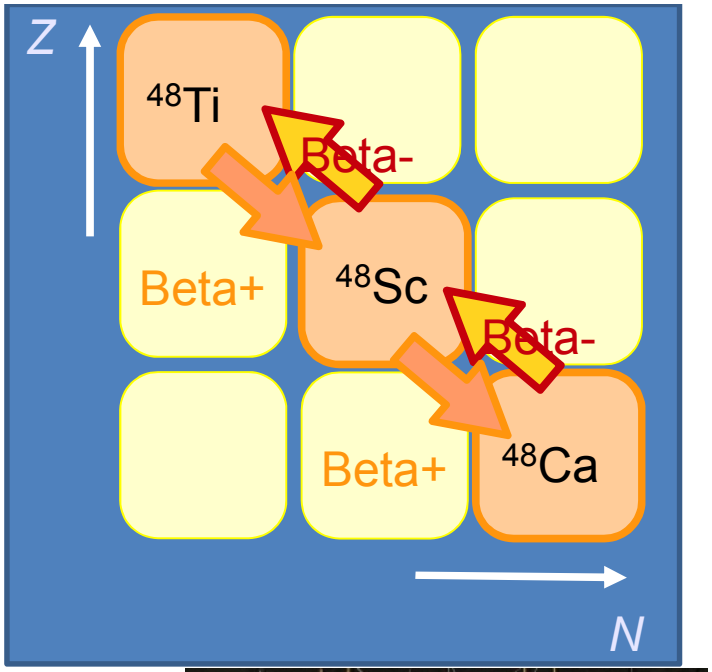
ニュートリノはマヨラナ粒子か？

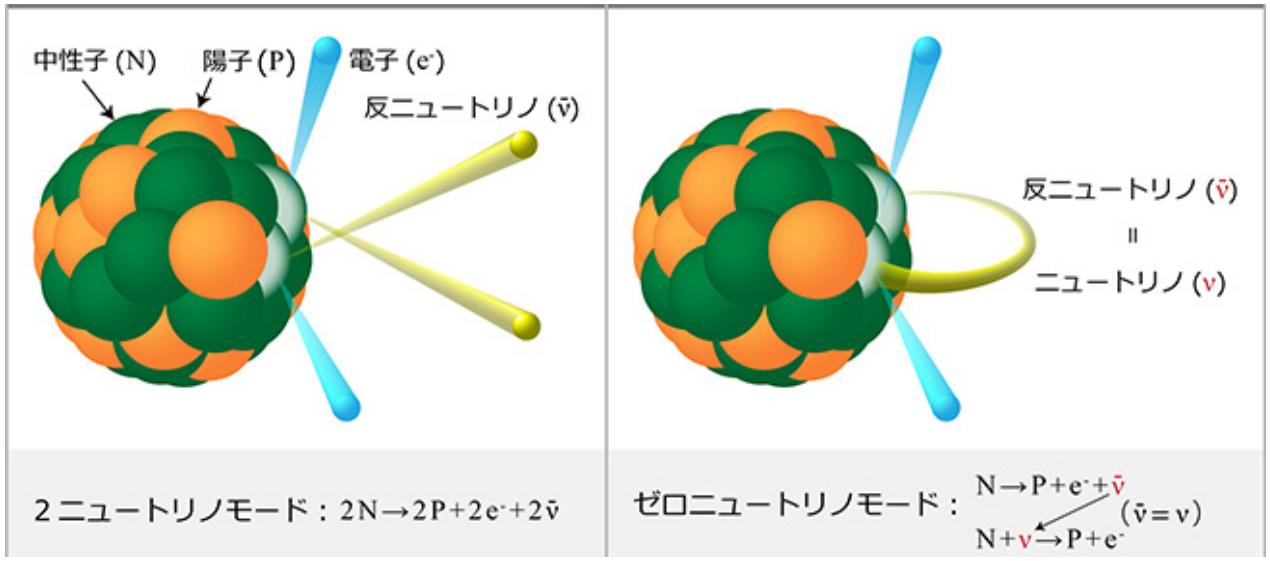
ベータ崩壊 $\mathrm{n} \rightarrow \mathrm{p}^{+} + \mathrm{e}^{-} + \bar{\nu}_{\mathrm{e}}$

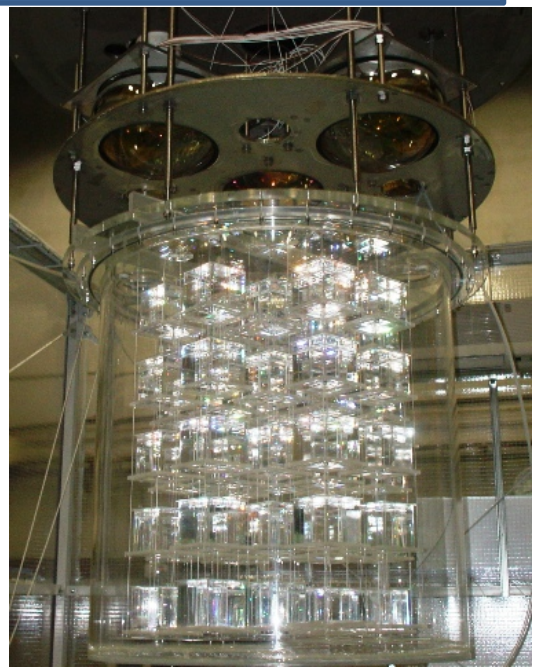
二重ベータ崩壊 $^{48}\mathrm{Ca} \rightarrow {}^{48}\mathrm{Ti} + 2e^{-} + 2\bar{\nu}_{e}$

もし、ニュートリノがマヨラナ粒子なら、
ニュートリノレスモードがありうる。（未観測）

$^{48}\mathrm{Ca} \rightarrow {}^{48}\mathrm{Ti} + 2e^{-}$







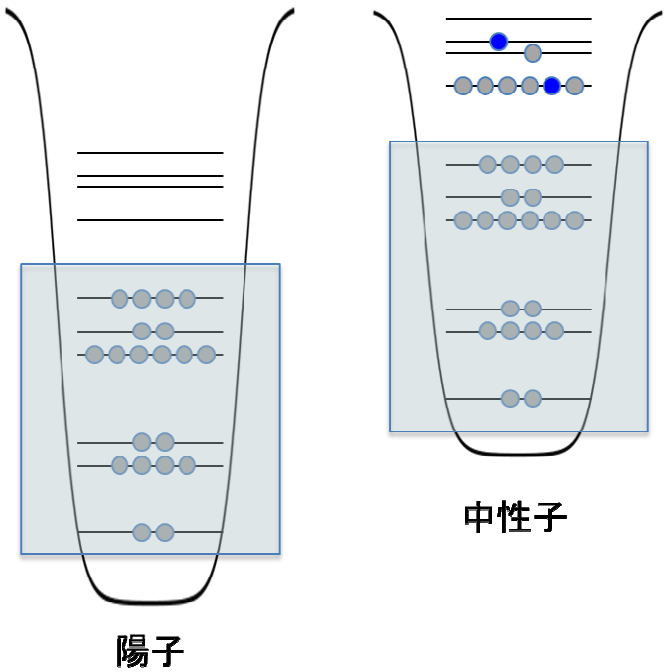
CANDLES III 実験　CaF_2液体シンチレータタンク

^{48}Ca ニュートリノレス二重ベータ崩壊の核行列要素の計算

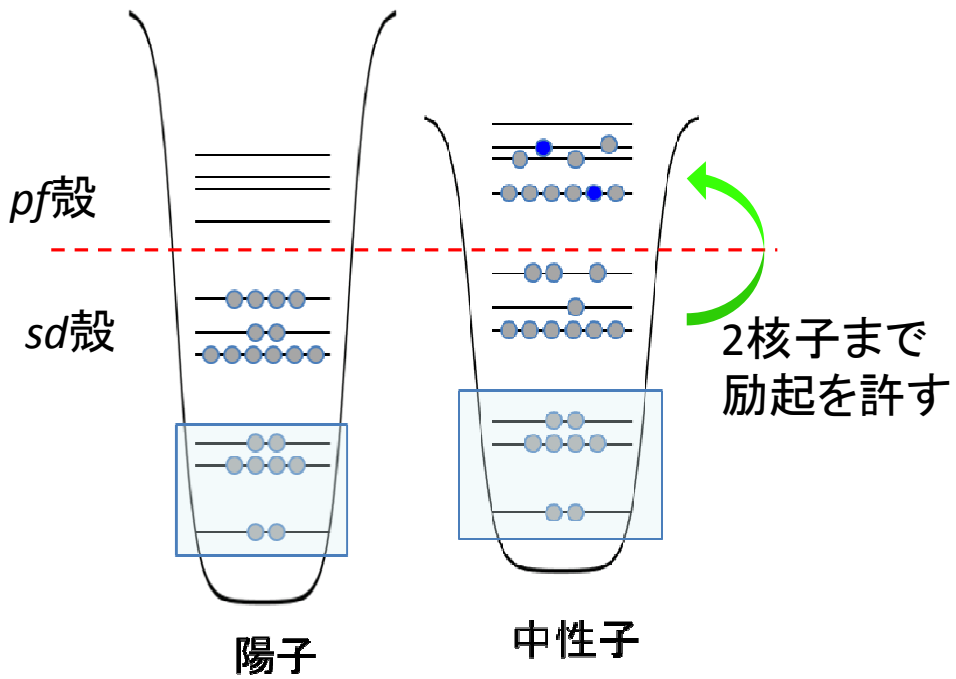
$$[T^{0\nu}_{1/2}]^{-1} = G^{0\nu}_{1} \boxed{|M^{0\nu}|^2} \left(\frac{<m_{\beta\beta}>}{m_e} \right)^2$$

Half life (exp.) ↑ 核行列要素 ↑ effective neutrino mass ↑

旧来の殻模型計算 ~10^6 次元



今回の殻模型計算 ~10^9 次元

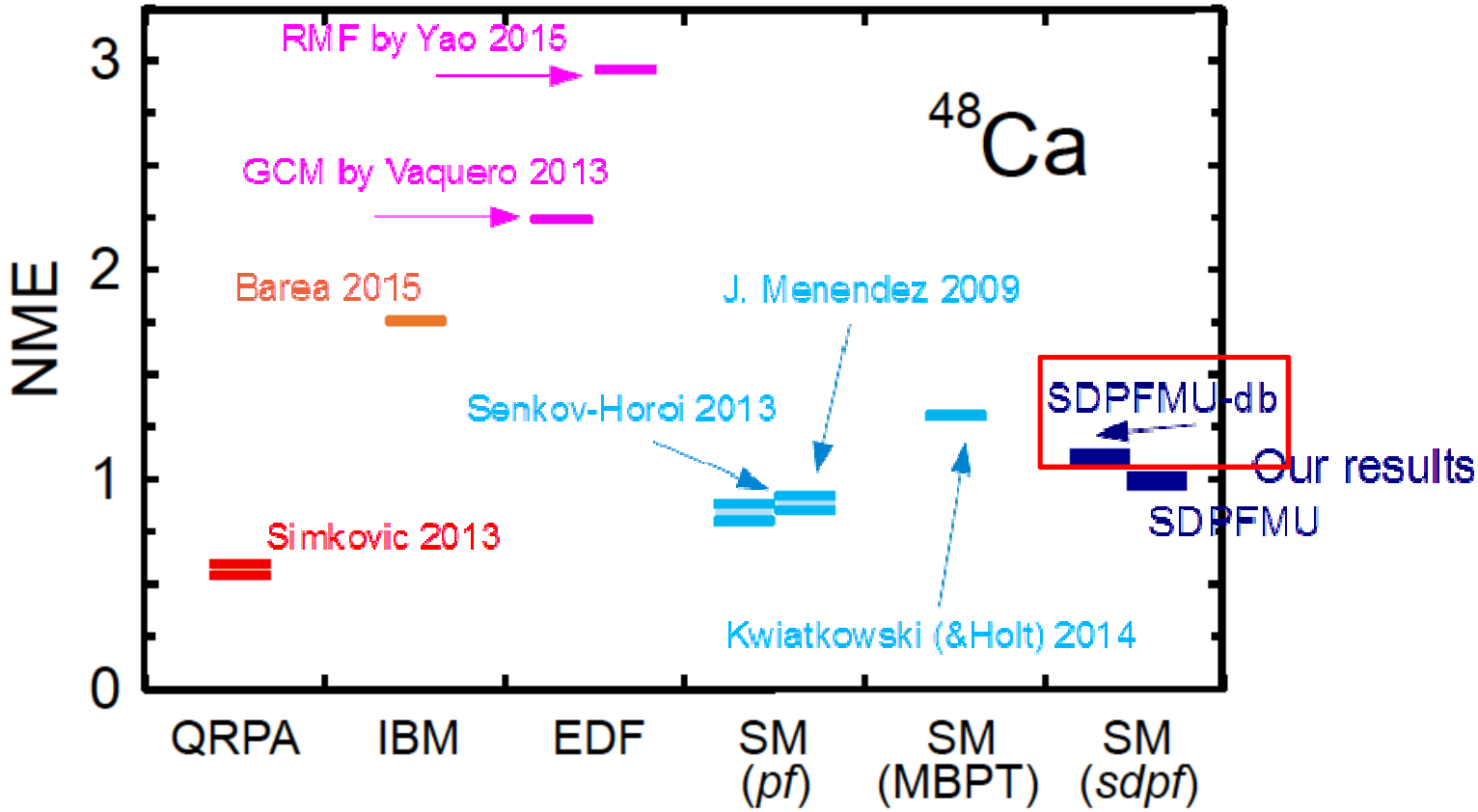


これ以上の励起、上の殻の効果は小さい

^{48}Ca ニュートリノレス二重ベータ崩壊の核行列要素の計算結果

Y. Iwata, N. Shimizu, T. Otsuka, Y. Utsuno, J. Menendez, M. Honma and T. Abe,
Phys. Rev. Lett. **116**, 112502 (2016)

日経産業新聞 2016/03/17



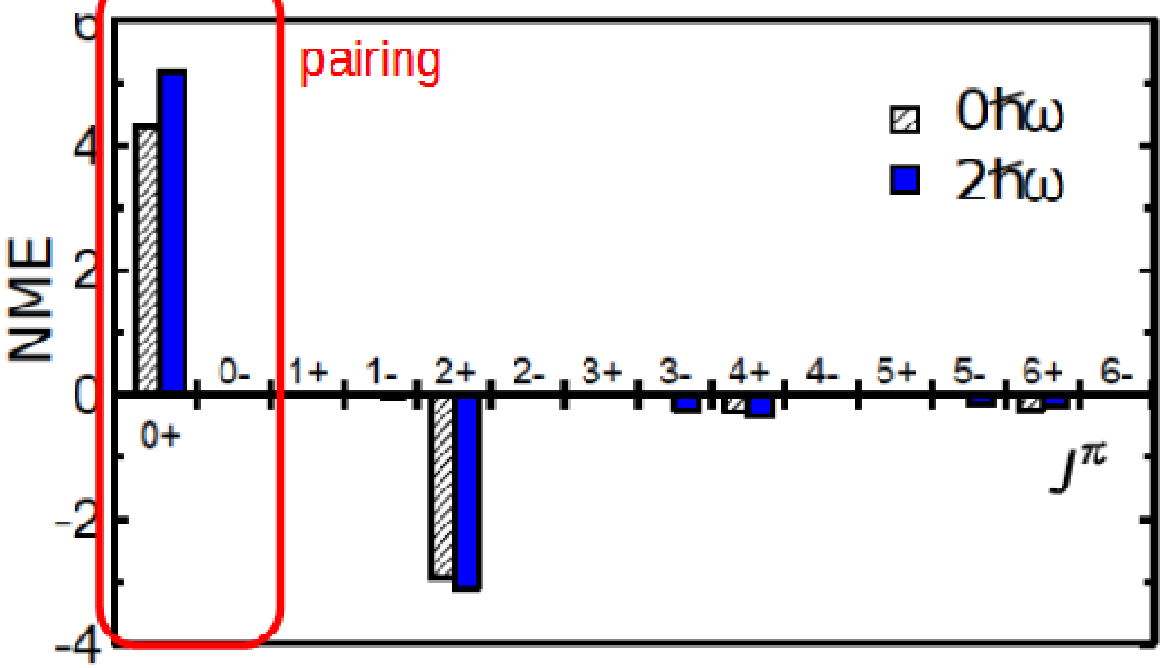
30%増 … 半減期50%減

Future plan: Nuclear matrix elements of ^{76}Ge, ^{82}Se, … , ステライルニュートリノの寄与
double charge-exchange reaction 48Ca(12C,12Be(02+)), 加速器施設との連携

核行列要素が大きくなった要因は？

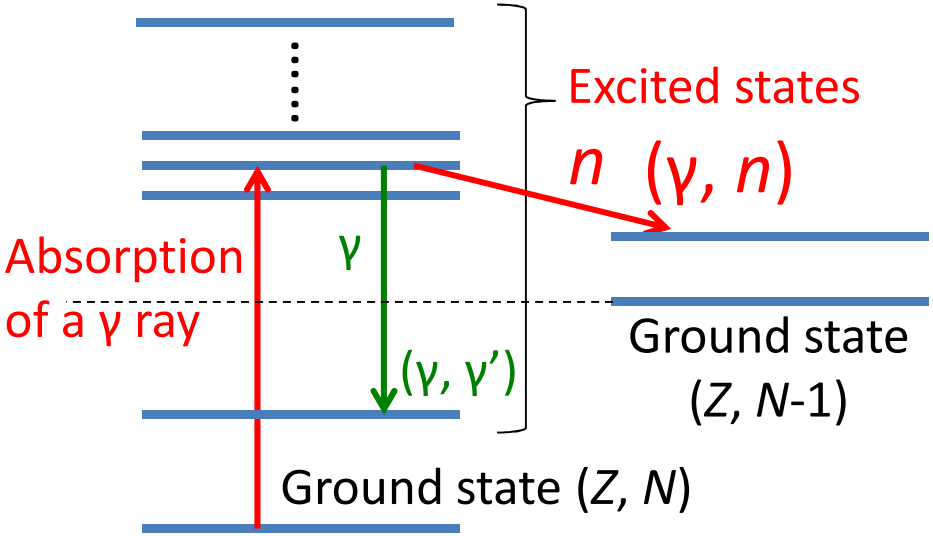
We decompose this sum

$$M^{0\nu} = \sum_J \langle 0_f^+ | \sum_{i\le j,\ k\le l} M^J_{ij,kl} [(a_i^\dagger a_j^\dagger)^J (a_k a_l)^J]^0 | 0_i^+ \rangle$$



- Independent of the size of the model space, 0+ have the largest positive contribution, and 2+ have the negative contribution。
- By enlarging the model space, 30% increase in 0+ (pos.), subtle increase in 2+ (neg.).

(γ, n)反応による核変換にむけた基礎データの提供



低エネルギー領域に現れるピグミー共鳴
核変換開発にむけた基礎データの提供
サイエンスとしても興味がある。

巨大双極子共鳴

ピグミー共鳴

$$\underbrace{(\gamma,\gamma')}\quad\underbrace{(\gamma,n)}\quad\underbrace{(\gamma,2n)}$$

すべての励起状態は求められない (求める必要もない)
⇒ 遷移強度が大きい状態を拾うような近似を考える

MCSMによる電気双極子励起スペクトルの記述

換算遷移確率: $B(E1;J_i \to J_f) = \frac{1}{\sqrt{2J_i+1}} \left| \langle J_i \| E1 \| J_f \rangle \right|^2$

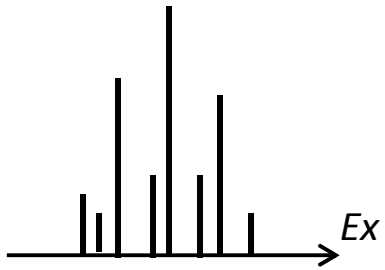
基底状態の波動関数は通常通り求める。

$$|J_i\rangle = \sum_{k=1}^{N_{MCSM}} f_k P^{J,\pi} |\phi_k\rangle \qquad |\phi_k\rangle = \prod_{\alpha=1}^{N} \left(\sum_{i=1}^{N_{sp}} c_i^\dagger D_{i\alpha}^{(k)} \right) |-\rangle$$

exp(*iε*・*E1*) による基底の生成

$$|\psi_1\rangle = \exp(i\varepsilon \cdot E1(0f_{7/2} \to 0g_{9/2}))|\phi_k\rangle,$$
$$|\psi_2\rangle = \exp(i\varepsilon \cdot E1(0g_{9/2} \to 0h_{11/2}))|\phi_k\rangle, \ldots$$

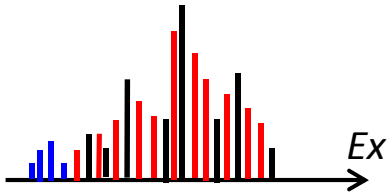
和則を満たすような部分空間を生成 $E1|J_i\rangle$



軌道の組み合わせで分解し、
対応する遷移のピークを記述

エネルギー変分計算による基底の追加

エネルギー分解能の向上



これらの基底による部分空間で対角化する。

Lorentzian width: γ = Γ/2 (adjusted parameter)

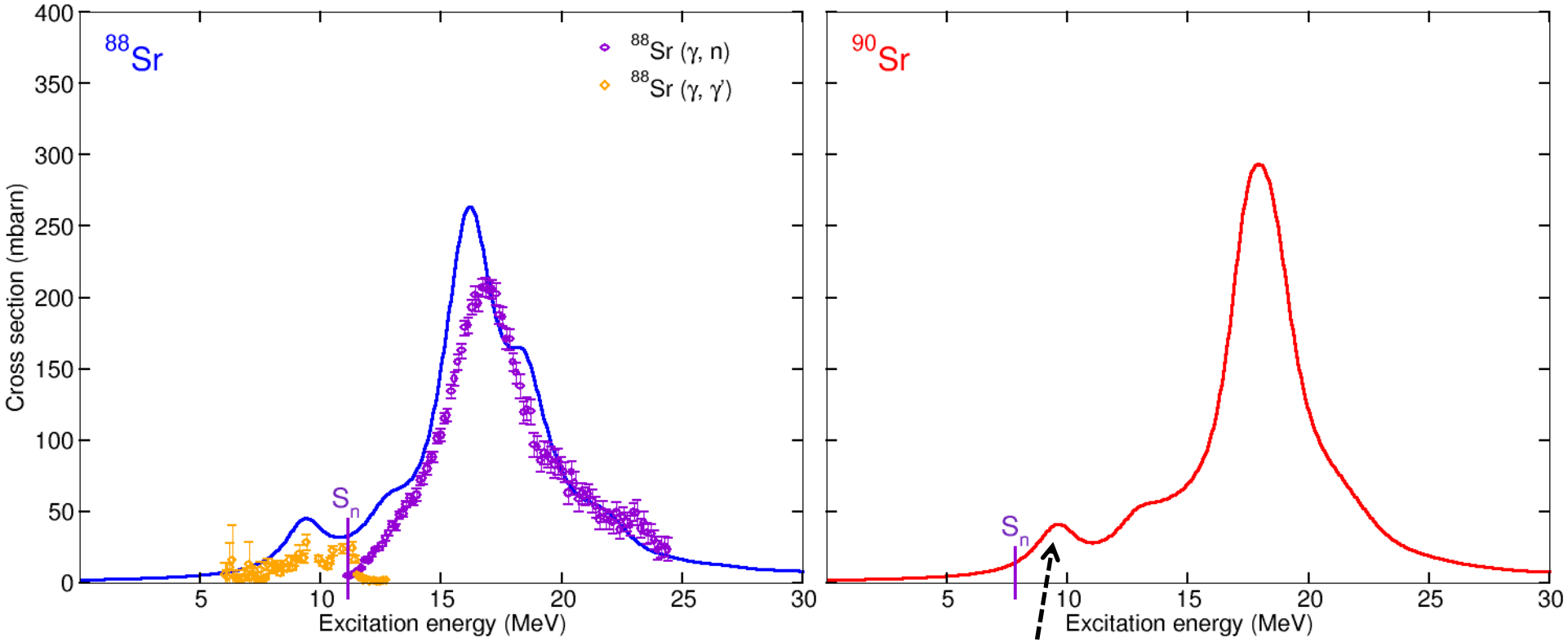
B(*E1*)から光吸収断面積を計算: $\sigma(E)[\mathrm{fm}^2] = \frac{16\pi^3}{9}\frac{e^2}{\hbar c}\sum_{J_n^f}\frac{1}{\pi}\frac{\gamma}{(E-Ex(J_n^f))^2+\gamma^2}\cdot Ex(J_n^f)\cdot B(E1;J^i \to J_n^f).$

(Lorentzianによるsmearing)

Excitation energy

B(*E1*) strength

Photoabsorption cross section of ^{88}Sr(Z=38,N=50), ^{90}Sr(Z=38,N=52)

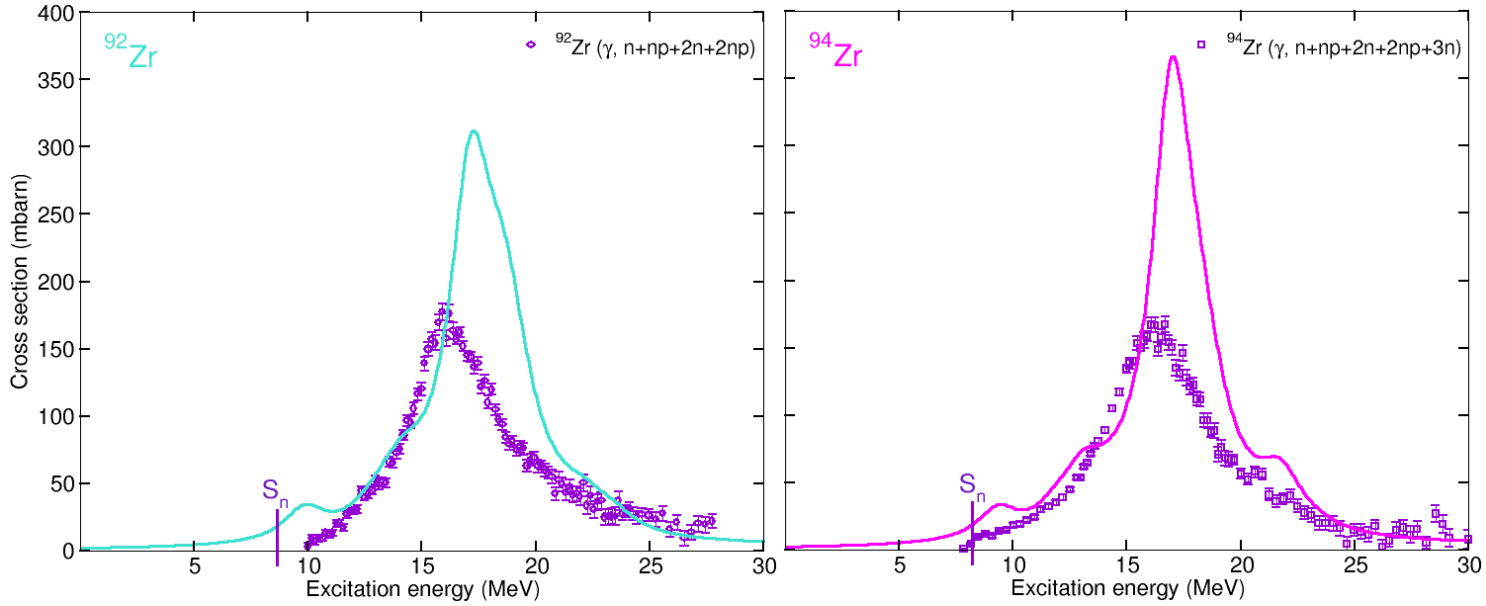


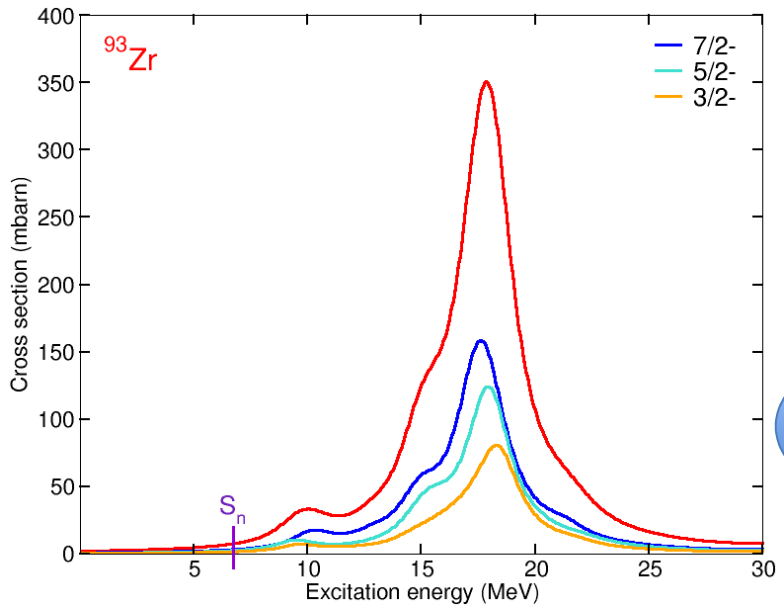
(γ,n) EXP data:
Vopr.Teor.Yad.Fiz.8, 121 (1982)

(γ,γ') EXP data:
Phys.Rev.C 76, 034321 (2007)

Neutron threshold
近傍(少し上)にPDR
の存在を示唆

Photoabsorption cross section of ^{92}Zr(Z=40,N=52), ^{93}Zr(Z=38,N=53), ^{94}Zr(Z=40,N=54)





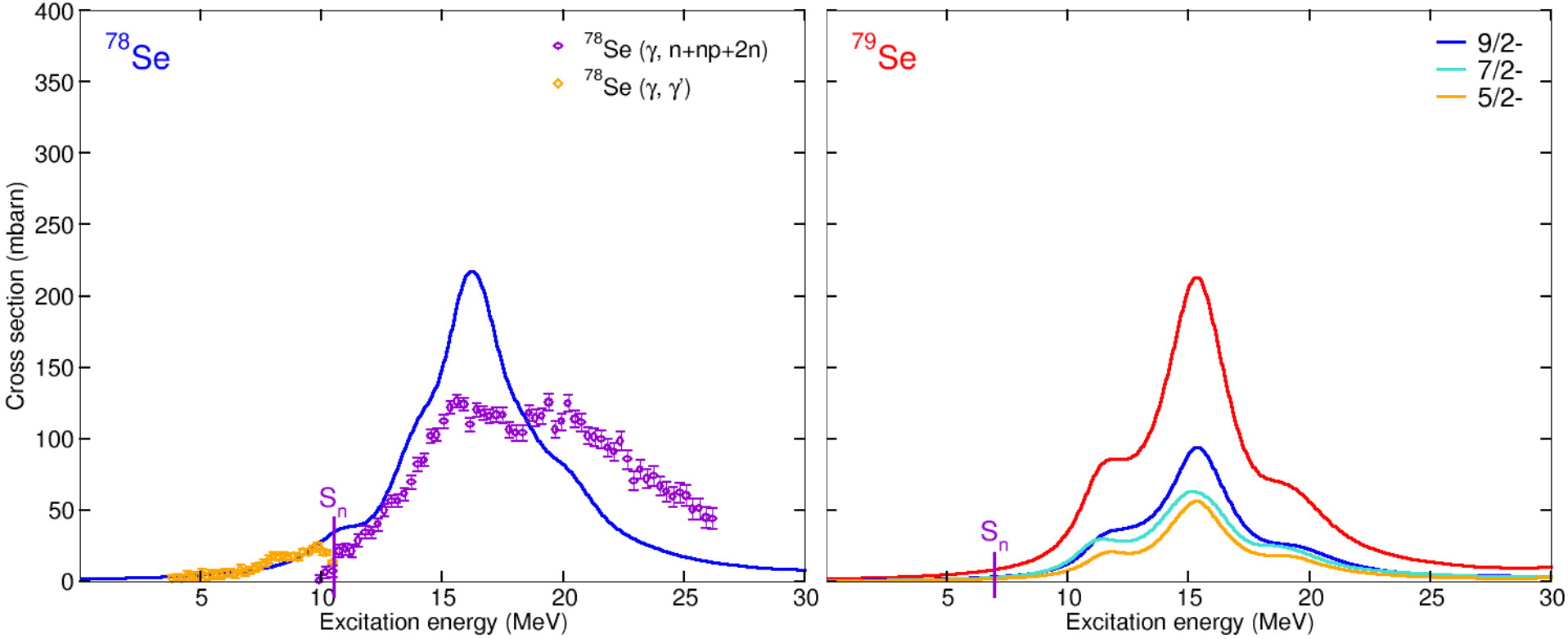
(γ,n+…) EXP data: Phys.Rev.162, 1098 (1967)

奇核も計算可能

Snに関わらず
Ex~10 MeV近傍に
PDRが存在すること
を示唆

Photoabsorption cross section of ^{78}Se(Z=34,N=44), ^{79}Se(Z=34,N=45)

基底状態(30基底)
=> 演算子による生成(30基底x20演算子 = 600基底)
+ 演算子のvariational shift (15基底×10演算子×2 iteration = 300基底)
+ MCSM変分(45状態, 100基底) = 1,000基底



(γ,n+…) EXP data: Nucl.Phys.A 258, 365 (1976)

(γ,γ') EXP data: Phys.Rev.C 85, 014311 (2012)

Zr と同様にEx~10 MeV
近傍にPDRが存在

Summary

- 殻模型計算は、これまでは低エネルギースペクトルが主な適用範囲だったが、準位密度、強度関数など比較的高励起状態へも大きく応用を広げている。

- ^{48}Caのニュートリノレス二重ベータ崩壊核行列要素計算を2主殻で評価。従来の計算から30%の増加がみられた。より重い核種へ応用を進めている。

- 長寿命核分裂生成物の光吸収断面積計算は、^{79}Se, ^{90}Sr, ^{93}Zr の原理実証研究をおこなった。精度の向上とより重い核種への応用を着実に進めている。