



Priority Issue 9
to be Tackled by Using Post K Computer
“Elucidation of the Fundamental Laws
and Evolution of the Universe”
KAKENHI grant 17K05433, 25870168

「京からポスト京に向けて」シンポジウム
2019/01/09

殻模型計算による中重核高スピン 状態の記述とカイラル二重項バンド



CENTER for
NUCLEAR STUDY

清水 則孝 (東大CNS)



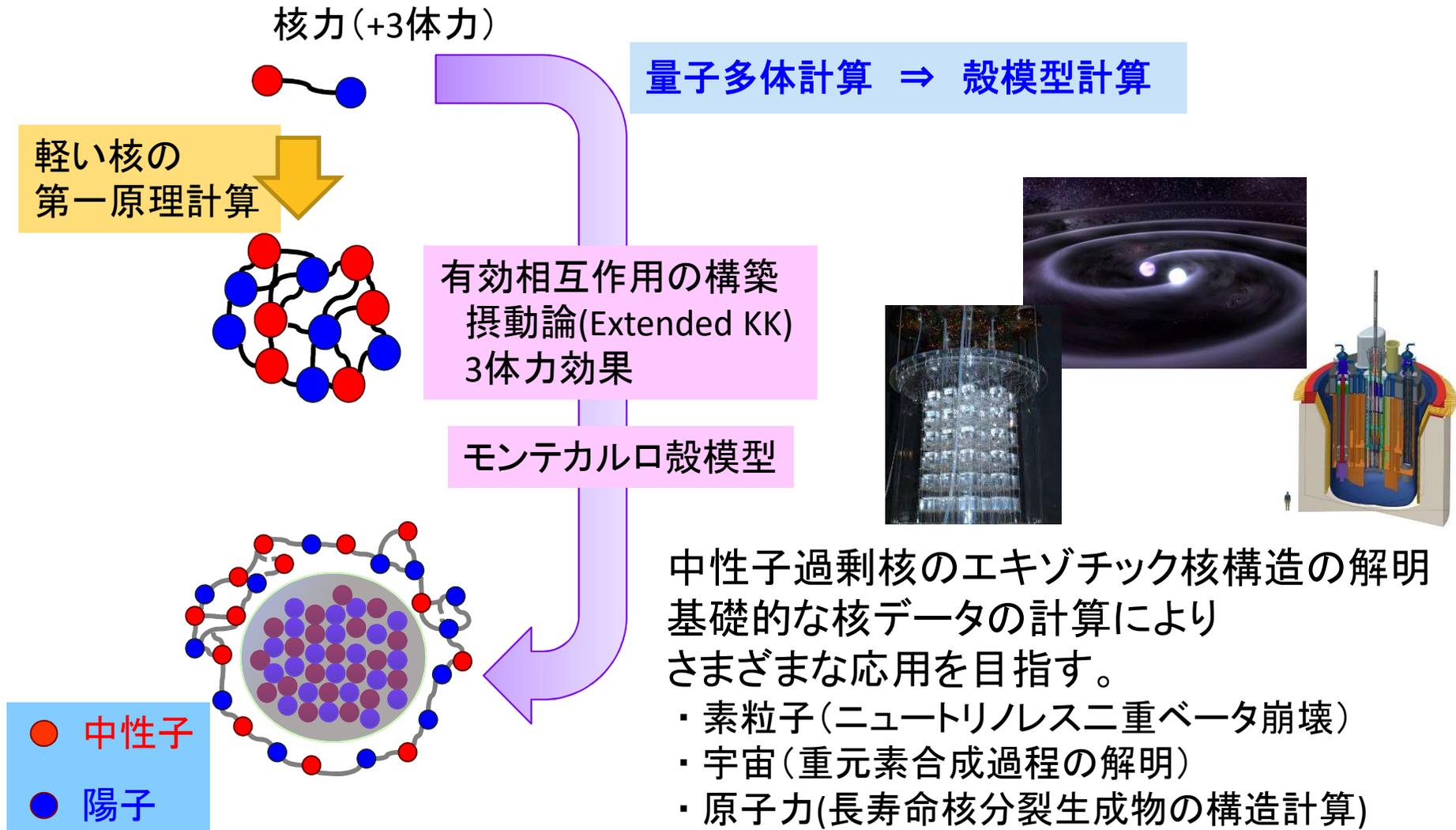
宇都野穰(JAEA), 本間道雄(会津大), 大塚孝治(理研
仁科)

Outline

- 殻模型計算とは
 - 殻模型計算コードKSHELLの開発
- 原子核構造におけるカイラル二重項バンド
- ^{128}Cs の殻模型計算
- まとめ

ポスト京重点課題9サブ課題B 原子核研究

複雑な核力から出発しつつ、大規模量子多体計算により、原子核の多体構造を明らかにし、その性質を計算する。素粒子、宇宙、エネルギーなどの問題へ応用。



サブ課題B原子核: 実験グループとの共同研究成果

(理論のみの論文は除く)

(赤字は理研RIBFの実験)

理化学研究所
仁科加速器研究センター
RIBF加速器

Ni領域での共著論文

- ^{68}Ni S. Suchyta *et al.*, PRC **89**, 021301(R) (2014)
- ^{68}Ni F. Flavigny *et al.*, PRC **91**, 034310 (2015)
- ^{70}Ni C. J. Chiara *et al.*, PRC **91**, 044309 (2015)
- $^{80,82}\text{Zn}$ Y. Shiga *et al.*, PRC **93**, 024320 (2016)
- odd-A Mn C. Babcock *et al.*, PLB **760**, 387 (2016)
- odd-A Mn H. Heylen *et al.*, PRC **94**, 054321 (2016)
- ^{70}Ni , ^{70}Co A. I. Morales *et al.*, PLB **765**, 328 (2017)
- ^{66}Ni S. Leoni *et al.*, PRL **118**, 162502 (2017)
- odd-A Zn C. Wraith *et al.*, PLB **771**, 385 (2017)
- ^{77}Cu E. Sahin *et al.*, PRL **118**, 242502 (2017)
- $^{73-78}\text{Cu}$ R. P. de Groote *et al.*, PRC **96**, 041302(R) (2017)
- ^{64}Zn M. Queiser *et al.*, PRC **96**, 044313 (2017)
- $^{82,84}\text{Zn}$ C. M. Shand *et al.*, PLB **773**, 492 (2017)
- ^{79}Cu L. Olivier *et al.*, PRL **119**, 192501 (2017)
- ^{71}Zn S. Bottoni *et al.*, PLB **775**, 271 (2017)
- ^{73}Zn X. F. Yang *et al.*, PRC **97**, 044324 (2018)
- $^{72,74}\text{Ni}$ A. I. Morales *et al.*, PLB **781**, 706 (2018)
- ^{66}Mn , ^{66}Fe , ^{66}Co , ^{66}Ni M. Stryczyk *et al.*, PRC accepted
- ^{75}Cu Y. Ichikawa *et al.*, Nat. Phys. accepted
- ^{78}Ni R. Taniuchi *et al.*, 論文投稿中
- $^{62-80}\text{Zn}$ L. Xie *et al.*, 論文準備中
- ^{75}Cu F. L. Bello Garrote *et al.*, 論文準備中

Zr領域での共著論文

- ^{96}Zr C. Kremer *et al.*, PRL **117**, 172503 (2016)
- ^{110}Zr N. Paul *et al.*, PRL **118**, 032501 (2017)
- $^{94,96,98}\text{Sr}$ J.-M. Régis *et al.*, PRC **95**, 054319 (2017)
- $^{98,100,102}\text{Zr}$ S. Ansari *et al.*, PRC **96**, 054323 (2017)
- ^{98}Zr P. Singh *et al.*, PRL **121**, 192501 (2018)
- ^{96}Zr Ł. W. Iskra *et al.*, PLB **788**, 396 (2019)



その他質量領域での共著論文

- ^{27}Ne C. Leolius *et al.*, accepted to PRL
- ^{30}Mg B. Fernandez-Dominguez *et al.*, PLB **779**, 124(2018)
- ^{31}Na , ^{31}Mg H. Nishibata *et al.*, 論文準備中
- ^{35}Mg S. Momiyama *et al.*, PRC **96**, 034328 (2017)
- ^{34}Al Z. Xu *et al.*, 論文準備中
- $^{39,40}\text{Si}$ V. Tripathi *et al.*, PRC **95**, 024308 (2017)
- ^{132}Sn D. Rosiak *et al.*, PRL **121**, 252501 (2018)
- ^{135}La Md. S. R. Laskar *et al.*,
- ^{136}Ba , ^{138}Ce C. Petrache *et al.*, 論文準備中
- $^{177-186}\text{Hg}$ B. A. Marsh *et al.*, Nat. Phys. **14**, 1163 (2018)
- $^{177-186}\text{Hg}$ S. Sels *et al.*, PRC accepted

サブ課題B原子核:

(青字は直近1年間に出版)

研究成果

(理論のみの論文は除く)

(赤字は理研RIBFの実験)

Ni領域での共著論文

- ^{68}Ni S. Suchyta *et al.*, PRC **89**, 021301(R) (2014)
- ^{68}Ni F. Flavigny *et al.*, PRC **91**, 034310 (2015)
- ^{70}Ni C. J. Chiara *et al.*, PRC **91**, 044309 (2015)
- $^{80,82}\text{Zn}$ Y. Shiga *et al.*, PRC **93**, 024320 (2016)
- odd-A Mn C. Babcock *et al.*, PLB **760**, 387 (2016)
- odd-A Mn H. Heylen *et al.*, PRC **94**, 054321 (2016)
- ^{70}Ni , ^{70}Co A. I. Morales *et al.*, PLB **765**, 328 (2017)
- ^{66}Ni S. Leoni *et al.*, PRL **118**, 162502 (2017)
- odd-A Zn C. Wraith *et al.*, PLB **771**, 385 (2017)
- ^{77}Cu E. Sahin *et al.*, PRL **118**, 242502 (2017)
- $^{73-78}\text{Cu}$ R. P. de Groote *et al.*, PRC **96**, 041302(R) (2017)
- ^{64}Zn M. Queiser *et al.*, PRC **96**, 044313 (2017)
- $^{82,84}\text{Zn}$ C. M. Shand *et al.*, PLB **773**, 492 (2017)
- ^{79}Cu L. Olivier *et al.*, PRL **119**, 192501 (2017)
- ^{71}Zn S. Bottoni *et al.*, PLB **775**, 271 (2017)
- ^{73}Zn X. F. Yang *et al.*, PRC **97**, 044324 (2018)
- $^{72,74}\text{Ni}$ A. I. Morales *et al.*
- ^{66}Mn , ^{66}Fe , ^{66}Co , ^{66}Ni M. Stryczyk *et al.*
- ^{75}Cu Y. Ichikawa *et al.*, Nat. Phys. accepted
- ^{78}Ni R. Taniuchi *et al.*, 論文投稿中
- $^{62-80}\text{Zn}$ L. Xie *et al.*, 論文準備中
- ^{75}Cu F. L. Bello Garrote *et al.*, 論文準備中

角田直文さん講演

Zr領域での共著論文

- ^{96}Zr C. Kremer *et al.*, PRL **117**, 172503 (2016)
- ^{110}Zr N. Paul *et al.*, PRL **118**, 032501 (2017)
- $^{94,96,98}\text{Sr}$ J.-M. Régis *et al.*, PRC **95**, 054319 (2017)
- $^{98,100,102}\text{Zr}$ S. Ansari *et al.*, PRC **96**, 054323 (2017)
- ^{98}Zr P. Singh *et al.*, PRL **121**, 192501 (2018)
- ^{96}Zr Ł. W. Iskra *et al.*, PLB **788**, 396 (2018)

清水講演

角田佑介さん講演

理化学研究所
仁科加速器研究センター
RIBF加速器

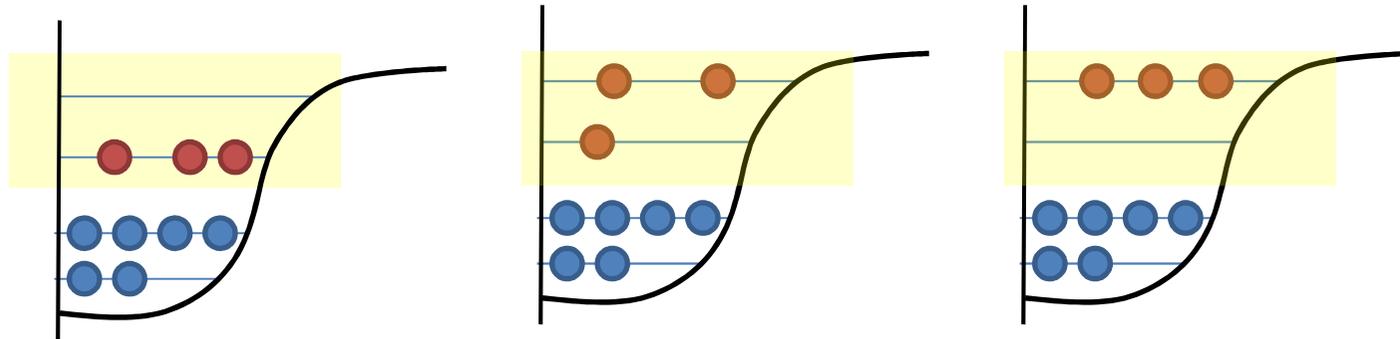


その他質量領域での共著論文

- ^{27}Ne C. Leolius *et al.*, accepted to PRL
- ^{30}Mg B. Fernandez-Dominguez *et al.*, PLB **779**, 124(2018)
- ^{31}Na , ^{31}Mg H. Nishibata *et al.*, 論文準備中
- ^{35}Mg S. Momiyama *et al.*, PRC **96**, 034328 (2017)
- ^{34}Al Z. Xu *et al.*, 論文準備中
- $^{39,40}\text{Si}$ V. Tripathi *et al.*, PRC **95**, 024308 (2017)
- ^{132}Sn D. Rosiak *et al.*, PRL **121**, 252501 (2018)
- ^{135}La Md. S. R. Laskar *et al.*, PRC accepted
- ^{136}Ba , ^{138}Ce C. Petrache *et al.*, 論文準備中
- $^{177-186}\text{Hg}$ B. A. Marsh *et al.*, Nat. Phys. **14**, 1163 (2018)
- $^{177-186}\text{Hg}$ S. Sels *et al.*, PRC accepted

原子核殻模型計算における配位混合

- 殻模型計算における波動関数



$$|\Psi\rangle = v_1|m_1\rangle + v_2|m_2\rangle + v_3|m_3\rangle + \dots$$

配位の数(Mスキーム次元)は中重核領域で急激に増加する。

シュレディンガー方程式を解く

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad |\Psi\rangle = \sum_m v_m|m\rangle$$

大次元疎行列の固有値問題に帰着

ランチョス法が効率的

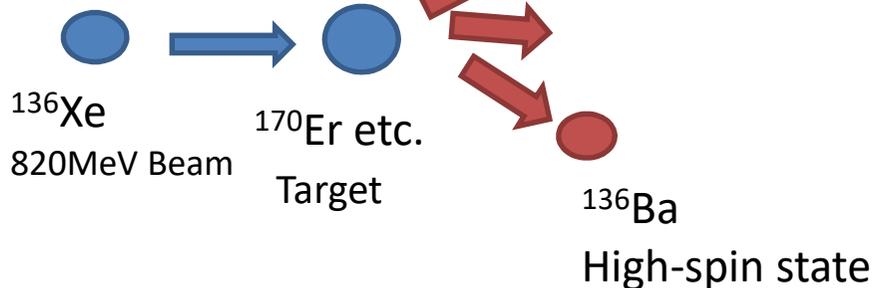
$$\sum_{m'} \langle m|H|m'\rangle v_{m'} = E v_m$$

現在のスパコンでは、1000億次元程度の計算が可能。

高スピン状態の研究： 原子核実験研究では、例えば、、、

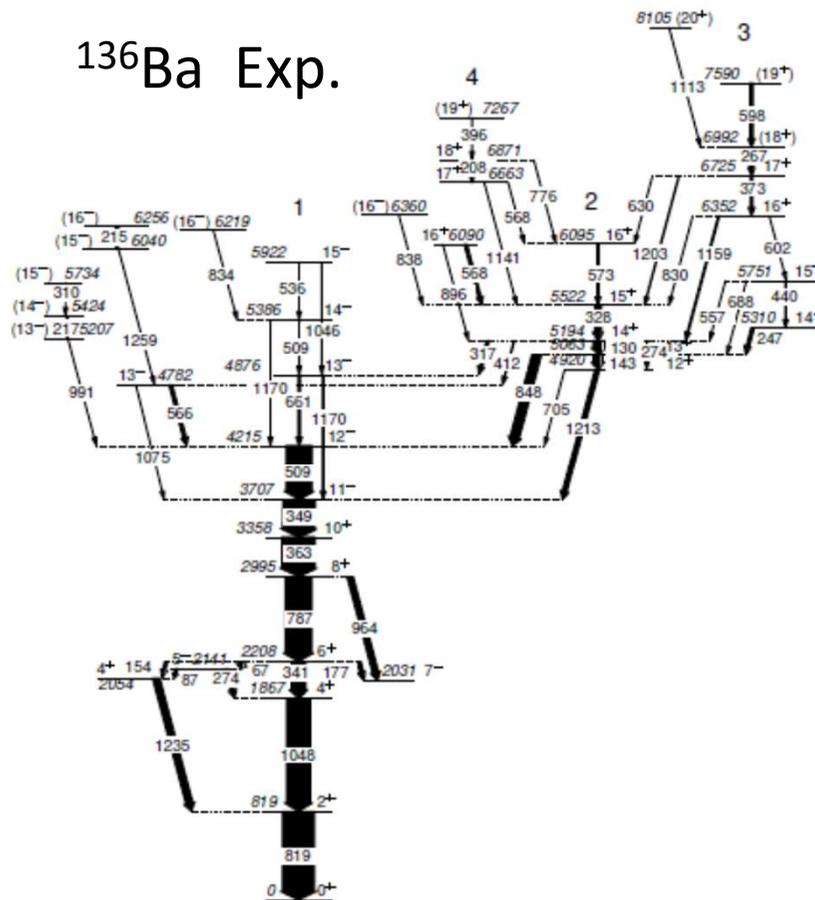
C. Petrache *et al.*, in prep.

1. 加速器実験

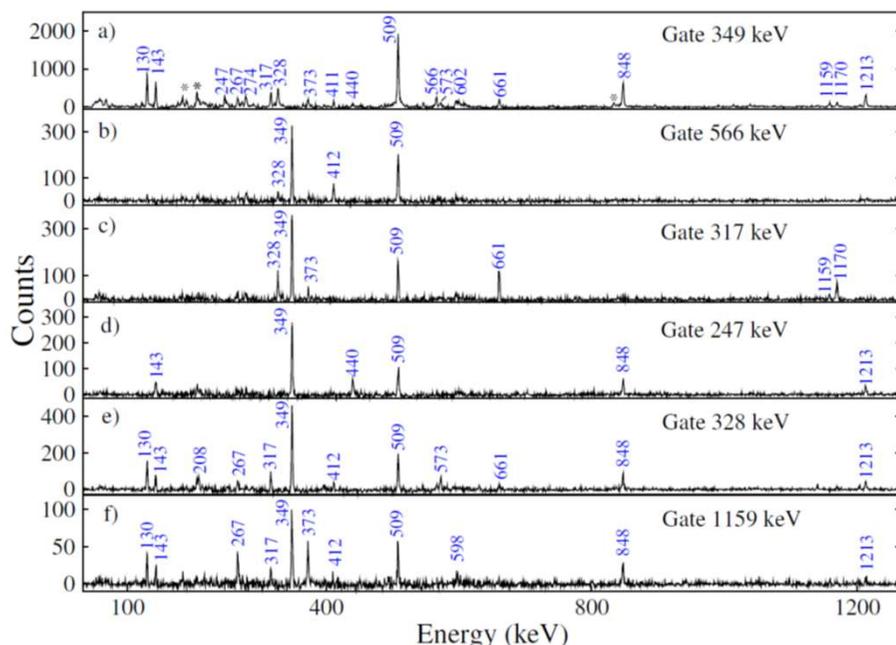


3. 準位を決定・議論

136Ba Exp.



2. 脱励起のガンマ線を測定



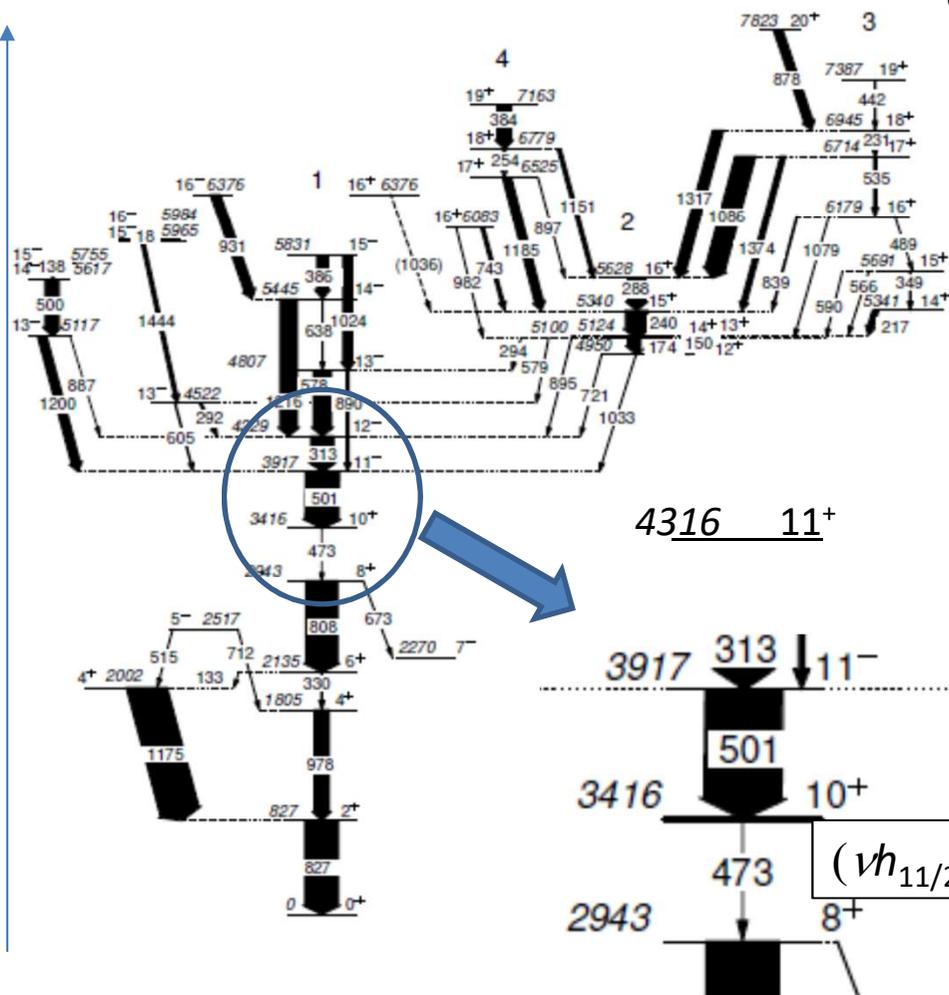
理論(殻模型)との比較・議論
実験研究者に強い需要

$^{136}_{56}\text{Ba}_{80}$: 殻模型計算 vs. 実験値

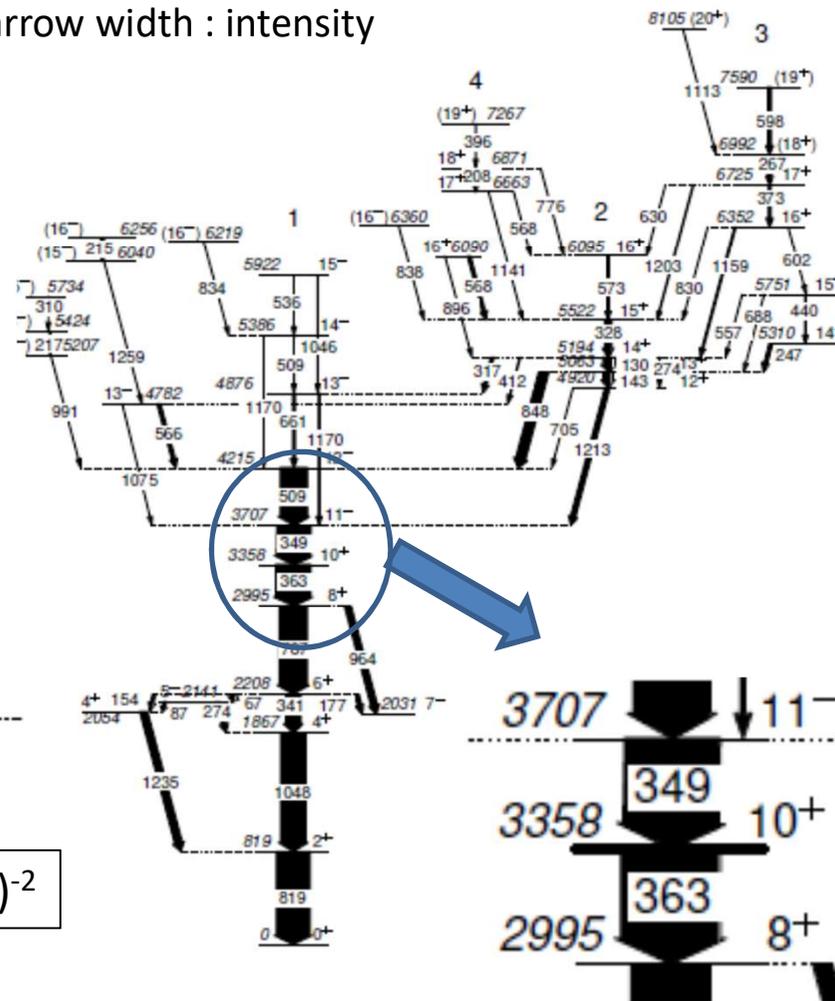
with C. Petrache *et al.*

励起エネルギー (MeV) ... 行列の固有値

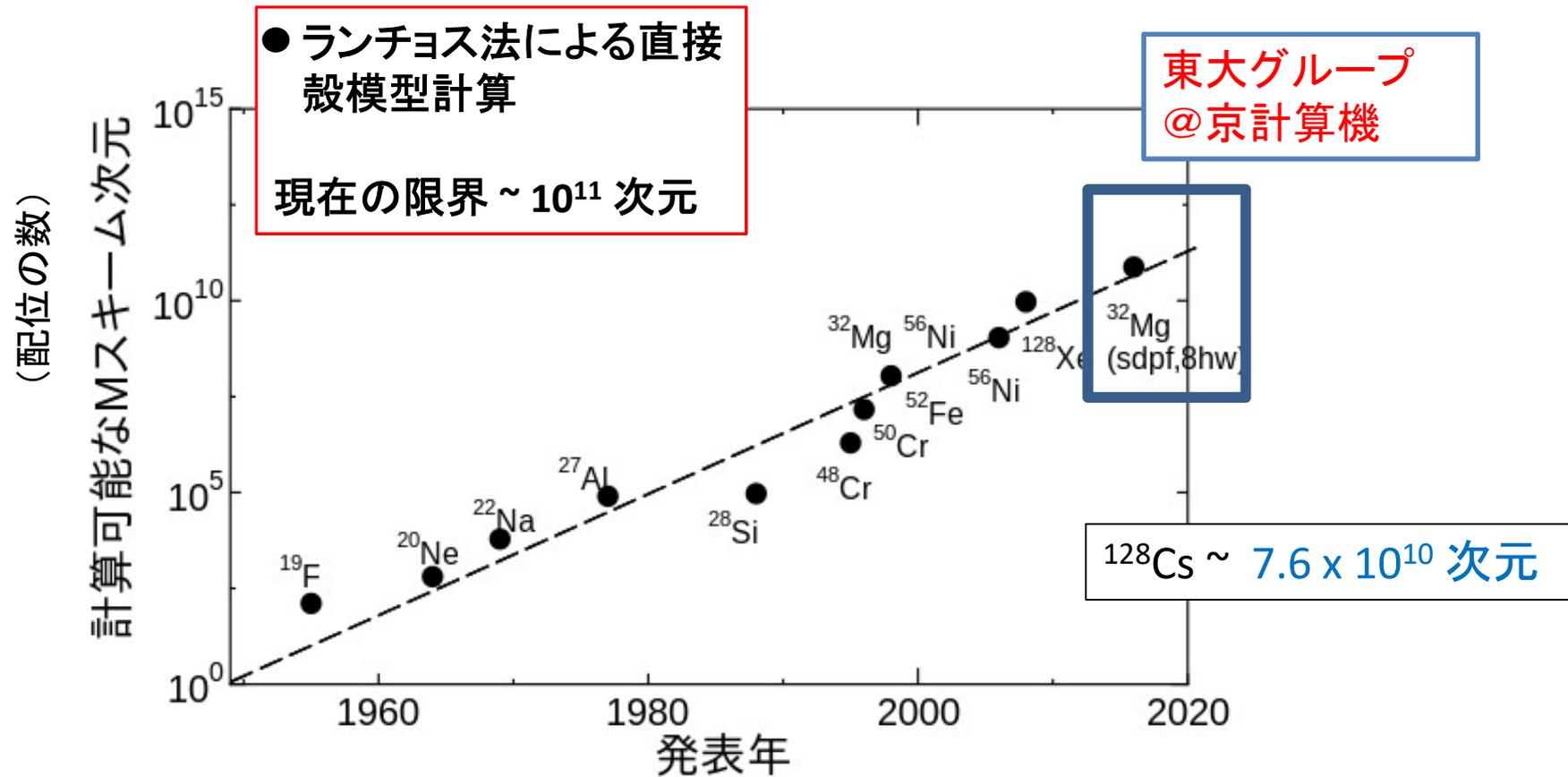
^{136}Ba - LSSM
arrow width : B(E2)



^{136}Ba - exp
arrow width : intensity



どのくらいの配位を直接とりあつかえるか？



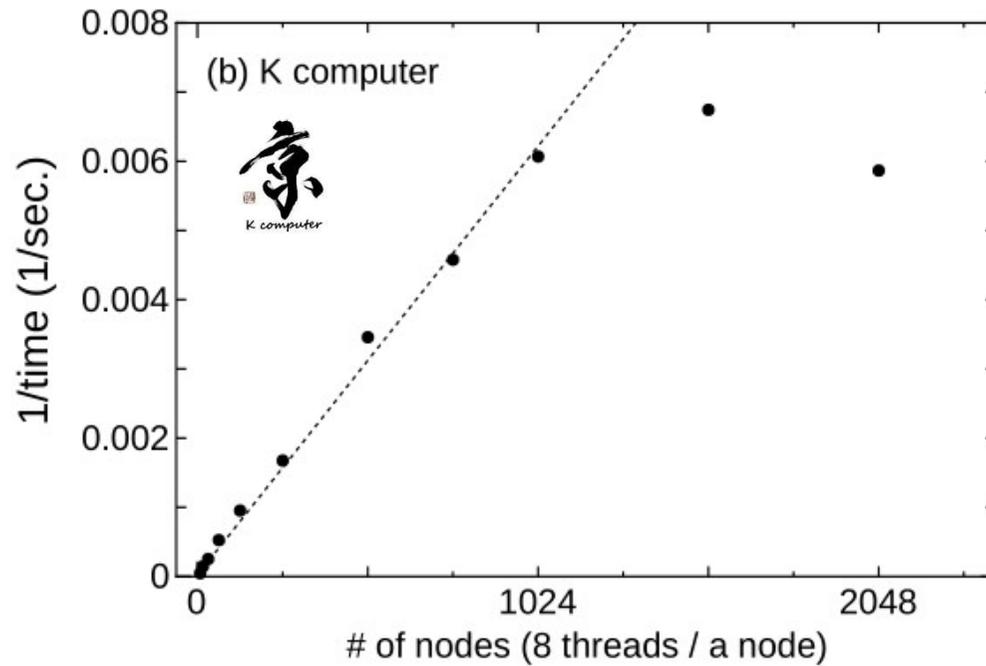
世界最大級の大次元対角化計算 (10^{11} 次元) に成功！

N. Tsunoda, T. Otsuka, N. Shimizu, M. H.-Jensen, K. Takayanagi, and T. Suzuki, Phys. Rev. C 95, 021304R (2017)

殻模型計算コードKSHELLの開発と公開

- 大次元・実対称・疎行列の固有値問題を解く。最小固有値近傍のみが必要
 - ランチョス法、(クリロフ部分空間法)
- 大次元の問題にチャレンジ
 - 1000億次元行列の固有値問題を解くことに成功
- PCから京・ポスト京まで単一のコード。かつてない使い勝手の良さを実現
- 講習会を随時開催
 - 実験研究者からの需要が強い。

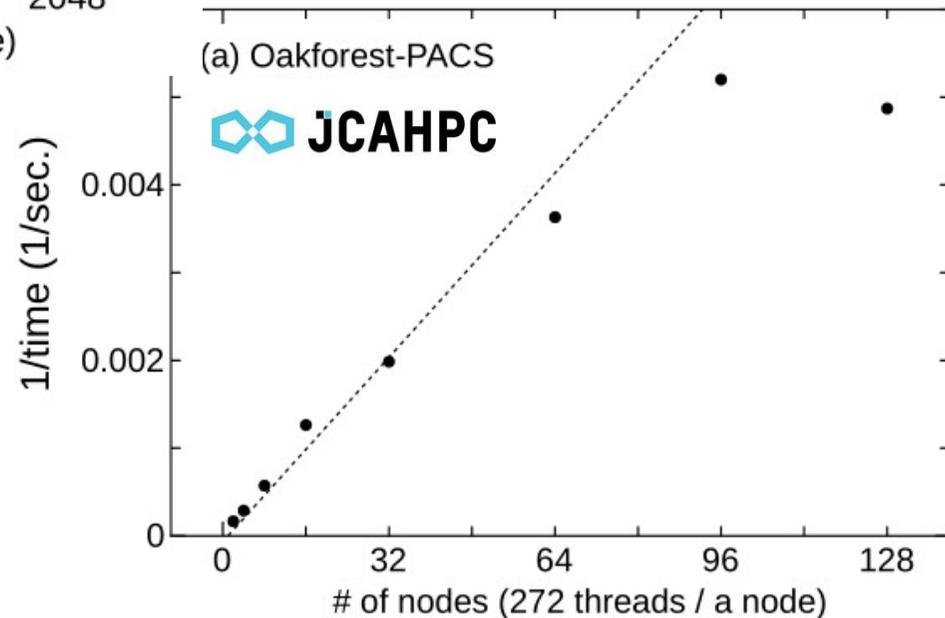
KSHELLコードの並列性能(ストロングスケーリング)



^{56}Ni , pf-shell
 10^9 dimension

数分で計算することが
可能。

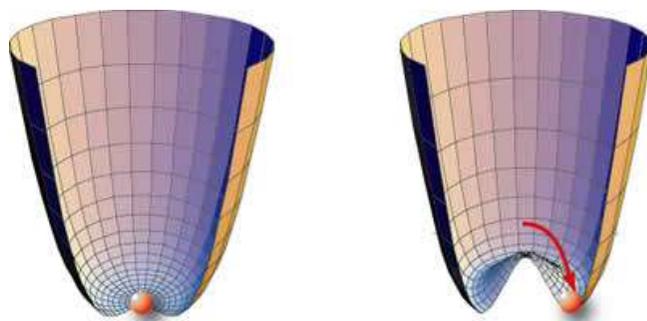
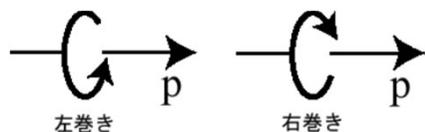
10^5 スレッド並列までの
良好な並列性能



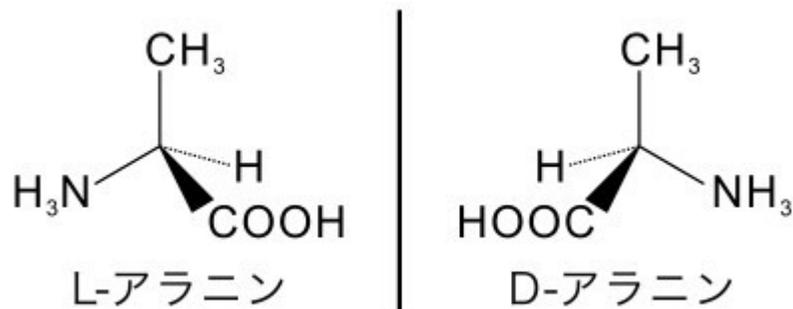
カイラル対称性とその破れ

E. Grodner 2005

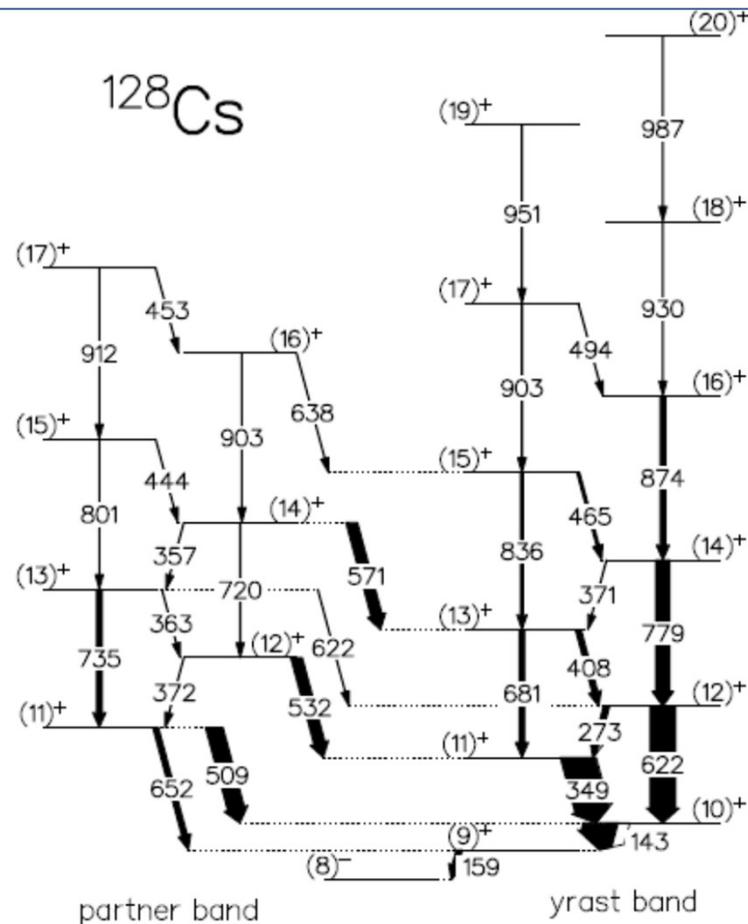
量子色力学



キラル分子



原子核:カイラル二重項バンド



ほぼ縮退した同じパリティの、強い遷移でつながった二つのバンドが見られる。
 カイラル二重項？

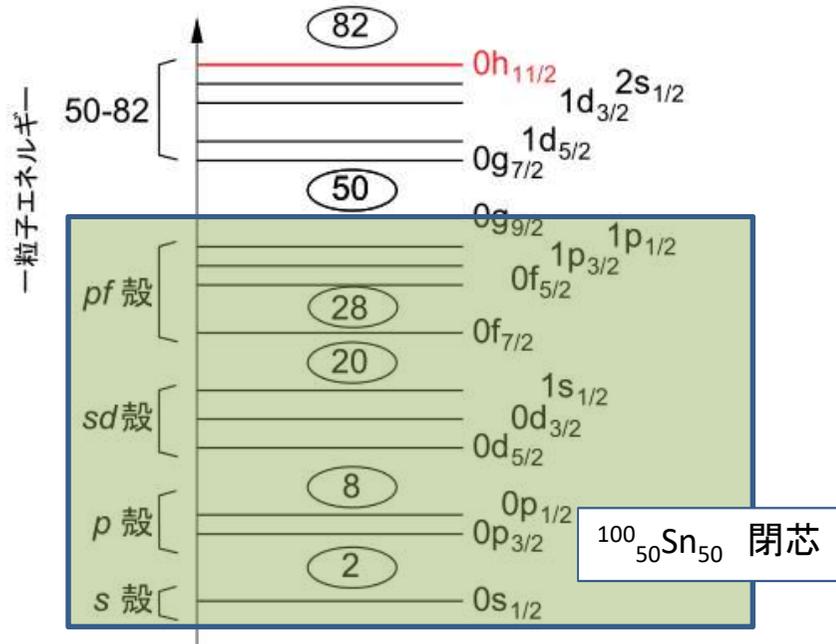
原子核構造におけるカイラル対称性の破れ

質量数130近傍の奇々核を考える

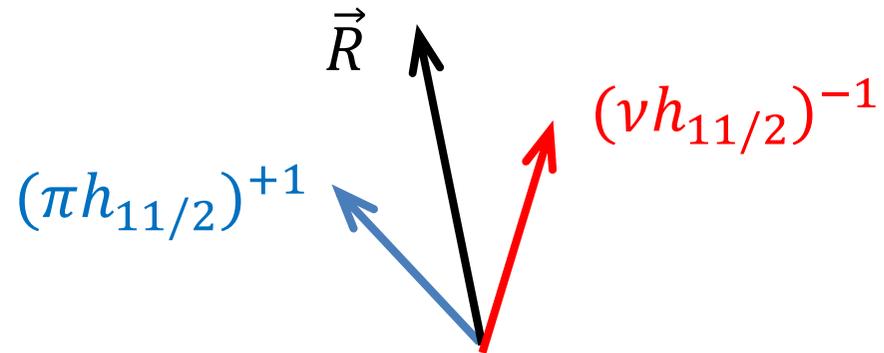
例: ^{128}Cs ($Z=55, N=73$)

$\Rightarrow ^{128}\text{Xe}$ ($Z=54, N=74$) + 陽子 + 中性子ホール
 角運動量 \vec{R} $(\pi h_{11/2})^{+1}$ $(\nu h_{11/2})^{-1}$

3つの部分系のスピンを合成して高スピンの励起状態を作る。

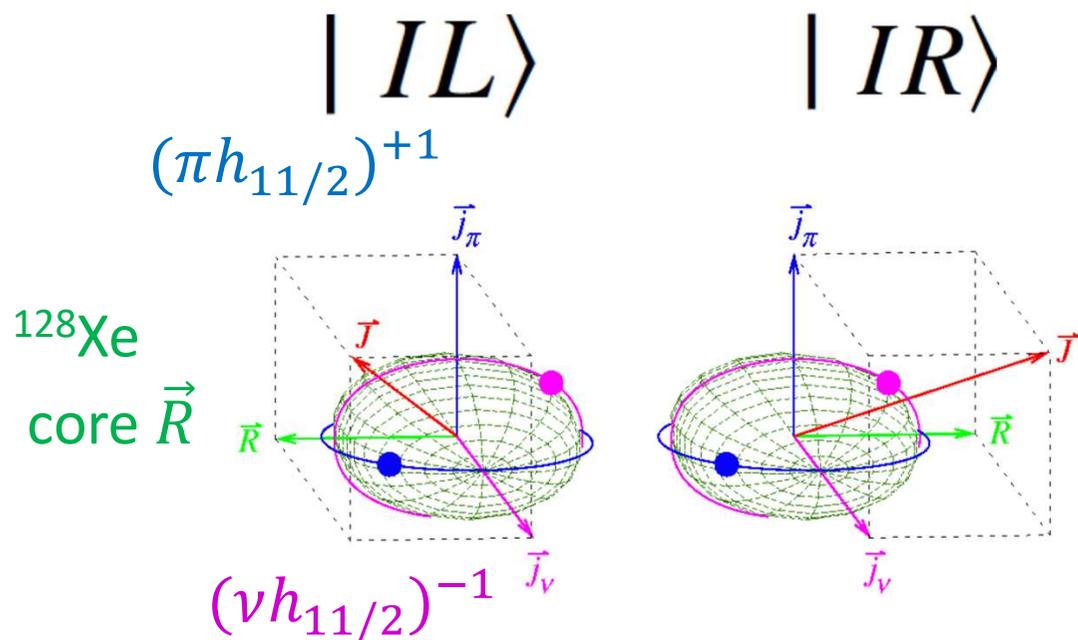


$$\vec{I} = \vec{R} + \vec{j}_\pi + \vec{j}_\nu$$

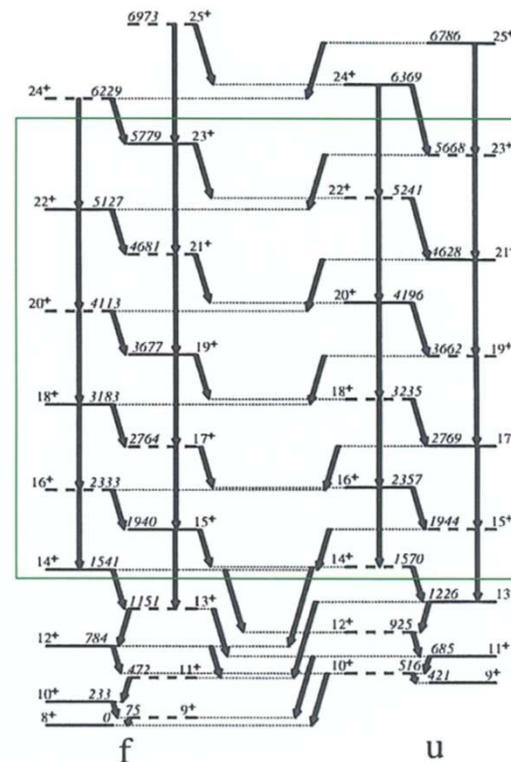


コアとなる核が非軸対称変形をすると、
 3つの角運動量が互いに直交しうる
 \Rightarrow カイラル対称性の破れ

原子核におけるカイラル二重項バンド



カイラル二重項を仮定したエネルギー準位



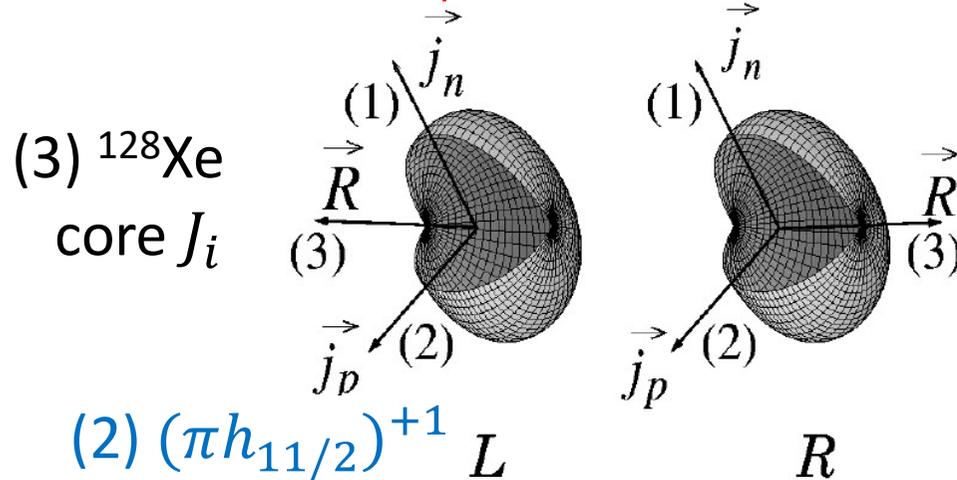
もし $|IL\rangle$ と $|IR\rangle$ にトンネリングがないならば、
下記の二つの状態が縮退して現れる

$$|I+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|IL\rangle + |IR\rangle),$$

$$|I-\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(|IL\rangle - |IR\rangle),$$

カイラル二重項バンド

(1) $(\nu h_{11/2})^{-1}$



- 理論提案

S. Frauendorf and J. Meng (1997)

- 質量数~ 130領域

- 非軸対称変形核が多い
- $\pi(h_{11/2})^1 \nu(h_{11/2})^{-1}$ 配位
⇒ カイラル二重項が期待される

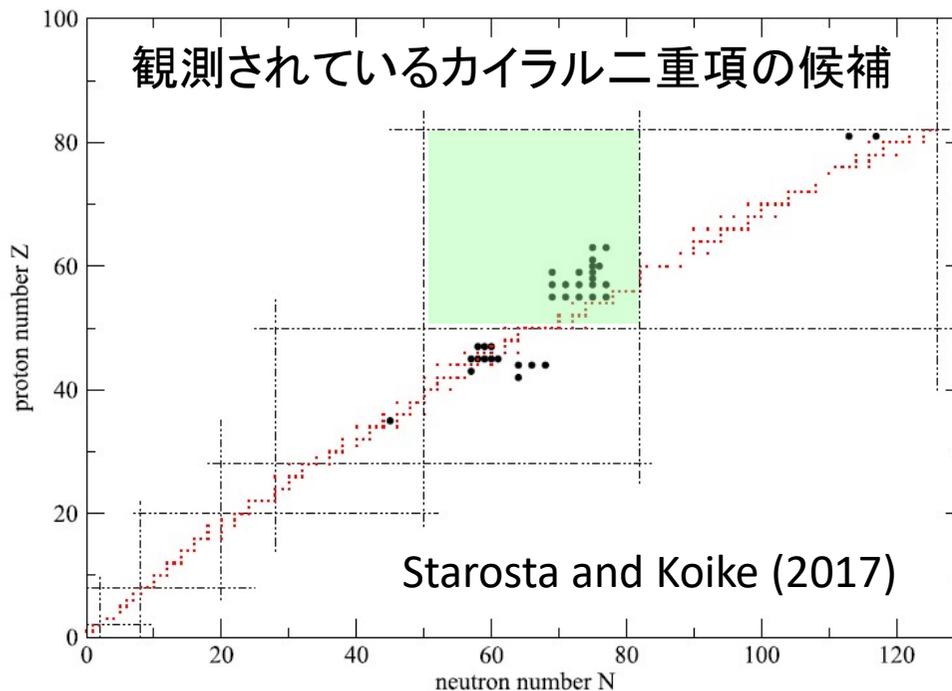
- 理論の先行研究

- Tilted axis cranking (TAC)
- Particle-rotor model (PRM)
- IBM, DFT, etc.

- Particle-rotor modelのような仮定をせずに、多様な自由度を取り込んだ殻模型計算により記述できるか？

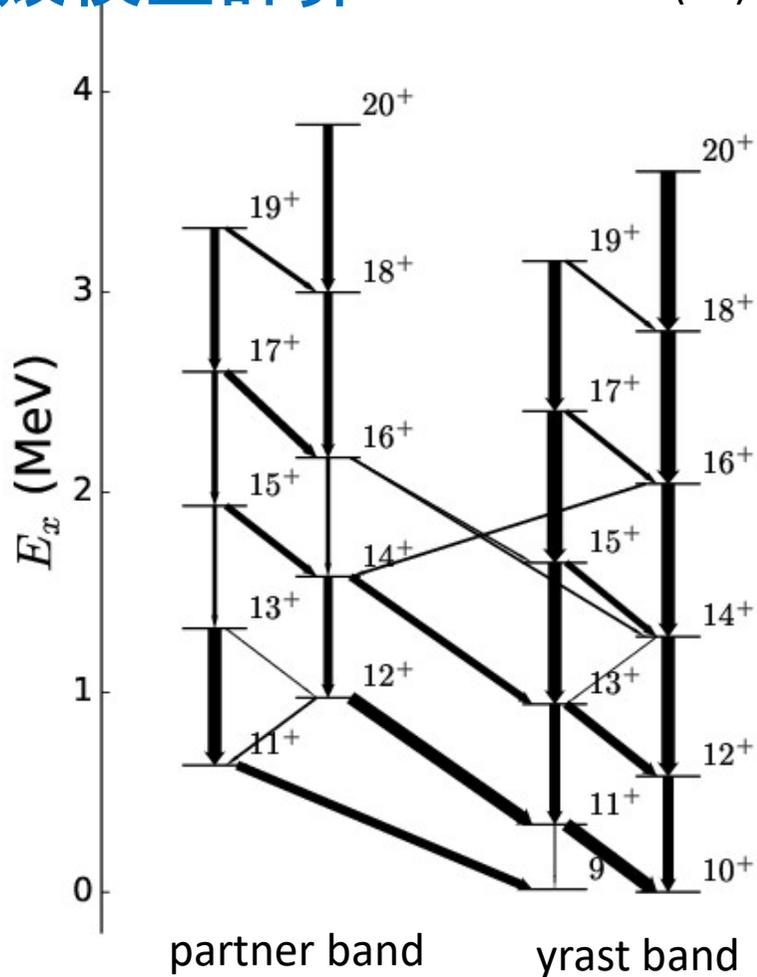
$^{128}\text{Cs} \sim 7.6 \times 10^{10}$ 次元

Oakforst-PACS で計算可能に！



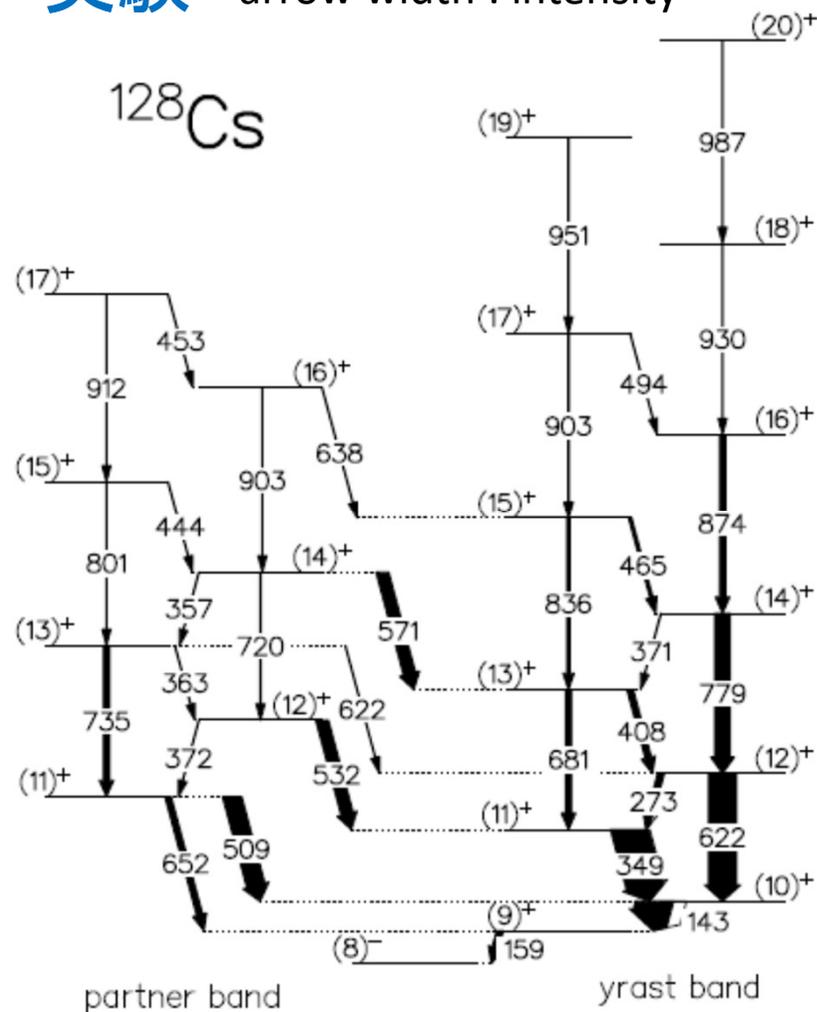
^{128}Cs : エネルギー準位

殻模型計算 arrow width : B(E2)



$\pi(h_{11/2})^1 \nu(h_{11/2})^{-1}$ configuration
 Remarkable agreement with exp.
 Level spacing suppressed by $\sim 20\%$

実験 arrow width : intensity



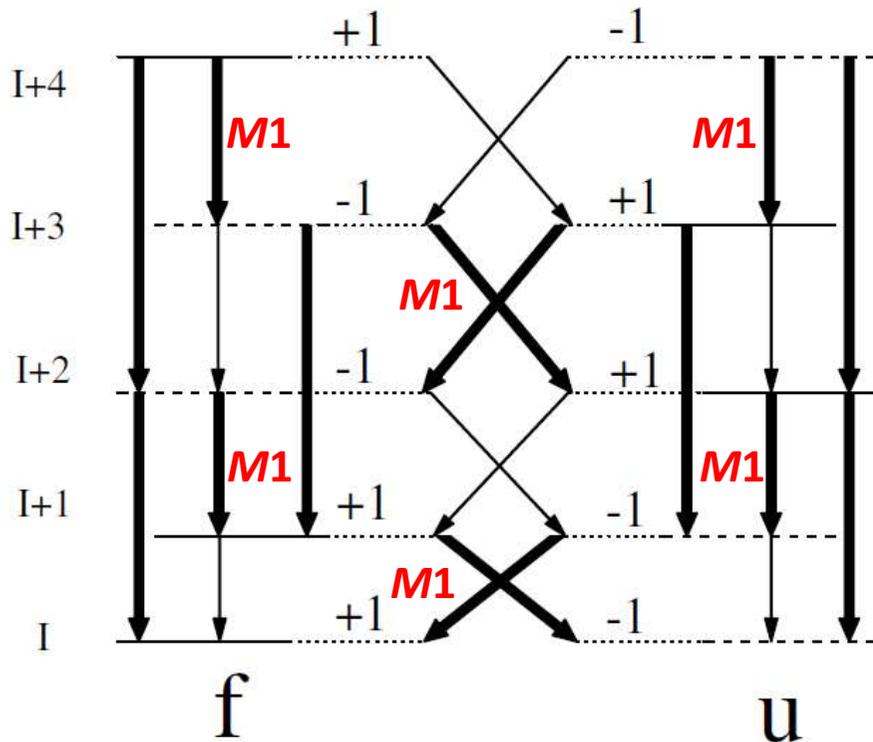
E. Grodner *et al.*, IJMPA 14, 347 (2005)

検証： ^{128}Cs のバンドはカイラル二重項の現れか？

$$|I+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|IL\rangle + |IR\rangle),$$

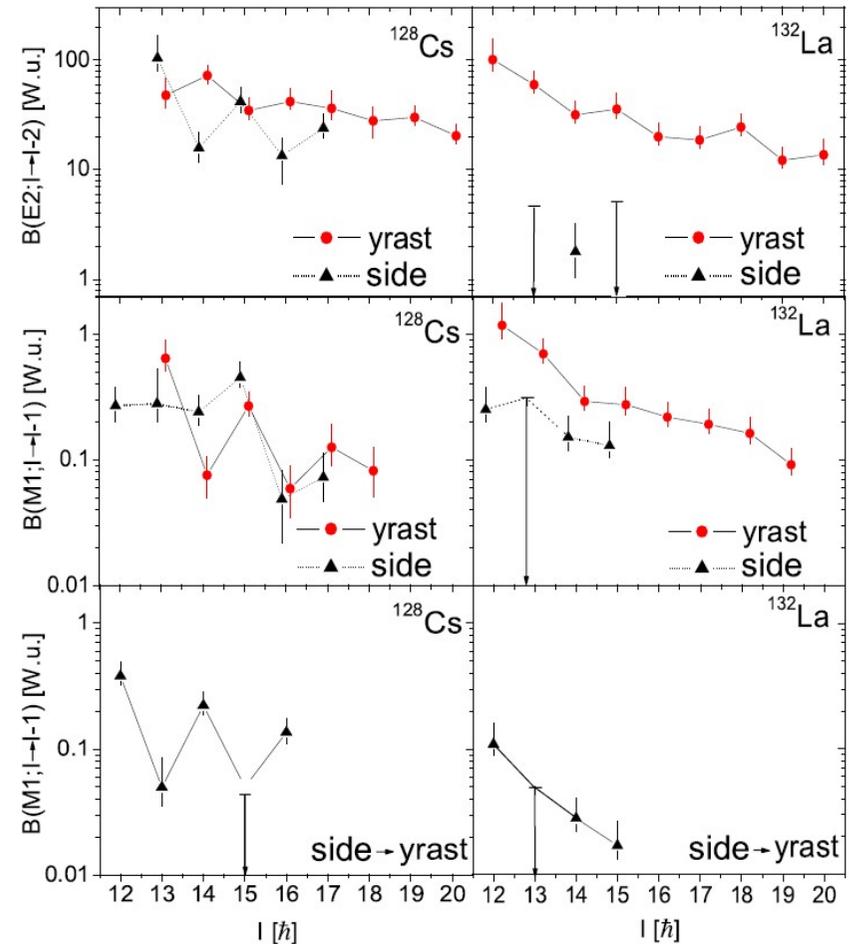
$$|I-\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(|IL\rangle - |IR\rangle),$$

遷移確率に選択則が期待される



T. Koike, K. Starosta, I. Hamamoto,
Phys. Rev. Lett. 93, 172502 (2004).

遷移確率(実験値)

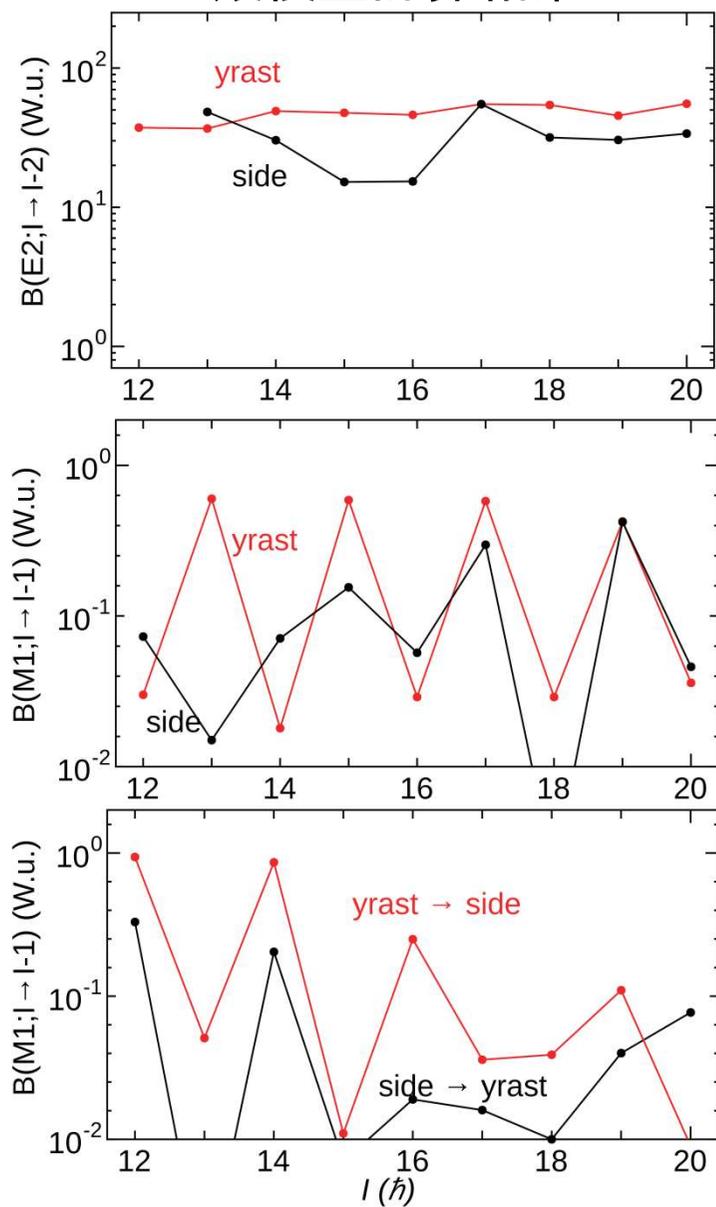


^{128}Cs : a best candidate

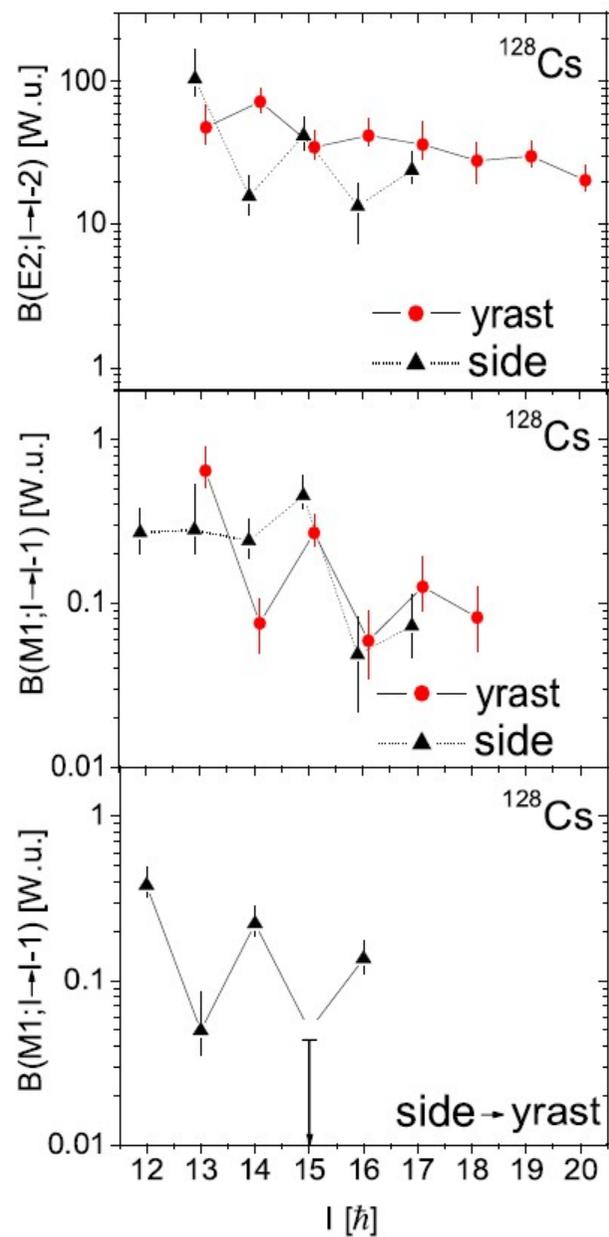
E. Grodner *et al.*,
Phys. Rev. Lett 97, 172501 (2006).

^{128}Cs : 遷移確率

殻模型計算結果

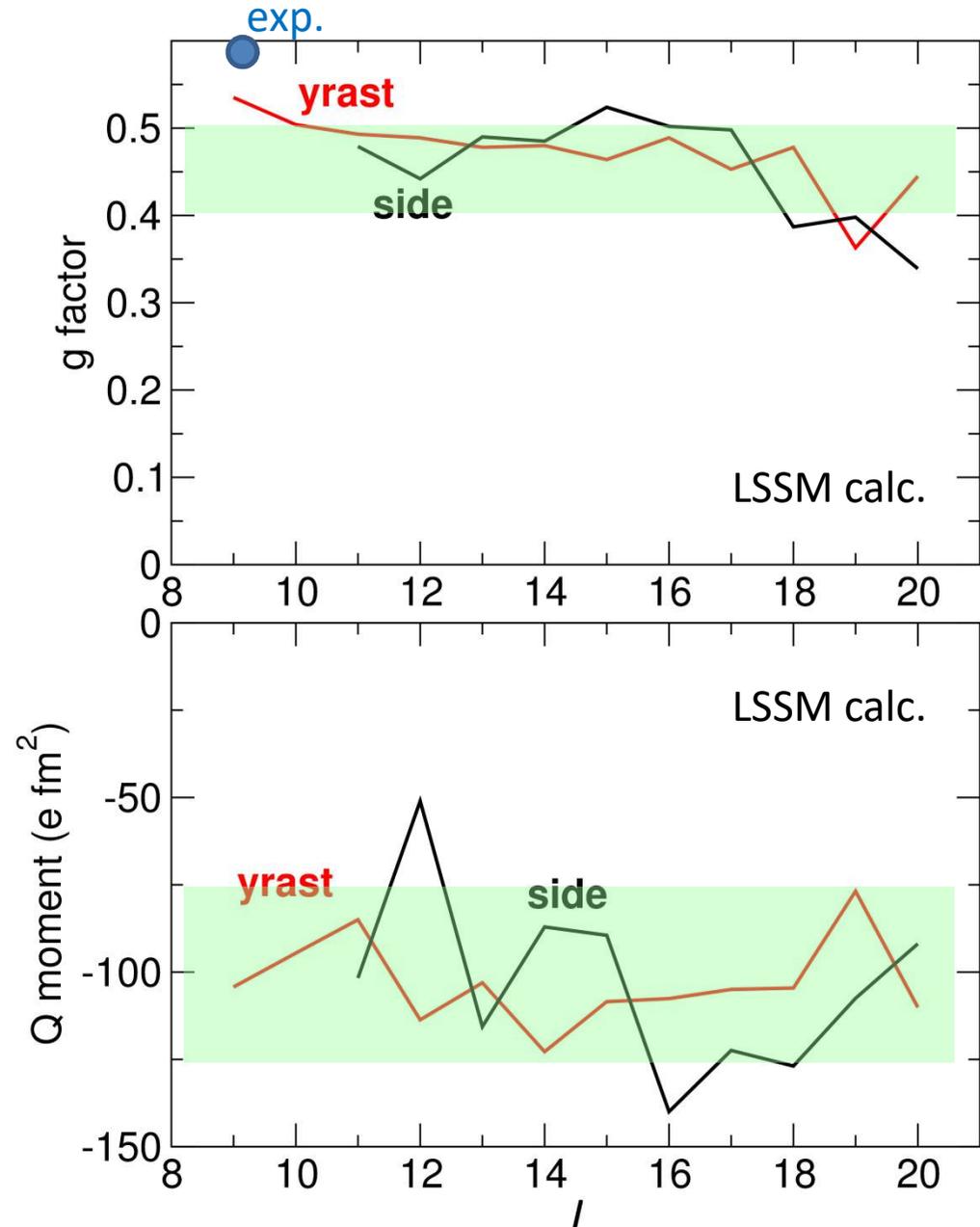


実験値 (Grodner *et al.*)



^{128}Cs : moments

- g因子 (磁気能率)、四重極能率によって、二重項バンドがパートナーであるか議論。
- g 因子
 - Exp. $g=+0.59(1)$ for 9^+ state (Grodner 2018)
 - イラストバンドとサイドバンドでほぼ同じ、
 - 0.4-0.5 でコンスタント
 - カイラル描像と無矛盾
- 四重極能率
 - 2つのバンドで同程度の大きさ
 - イラストバンドはスピンに対して安定
 - サイドバンドでは $\pm 25\%$ の揺らぎ



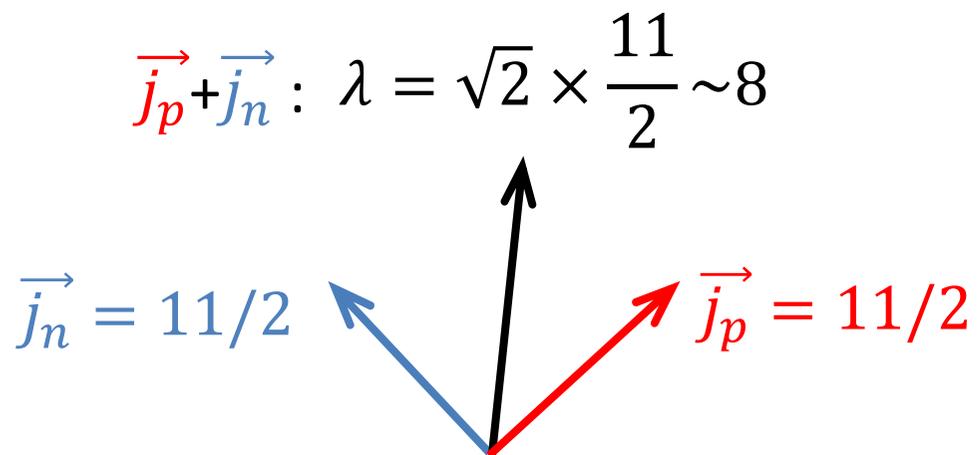
殻模型計算による検証:カイラル二重項バンドか?

- ^{128}Cs の二重項状態に対して:

- $\left\langle ^{128}\text{Cs}, In_1 \left| \left[a_{\pi h11/2}^\dagger \times a_{\nu h11/2} \right]^\lambda \right| ^{128}\text{Xe}, Rn_2 \right\rangle$ という行列要素を計算する。

- In_1 と Rn_2 は、各々 ^{128}Cs と ^{128}Xe の角運動量、状態を表す。 λ は陽子と中性子ホールが組んだ角運動量を表す。

- もし \vec{j}_p と \vec{j}_n が直交していれば、上記行列要素の最大値は λ が $\sqrt{2} \times \frac{11}{2} \sim 8$ に近いと期待される。

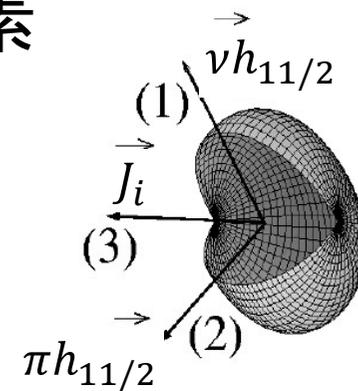


3軸が直交しているか？

^{128}Cs と ^{128}Xe との間の一体既約行列要素

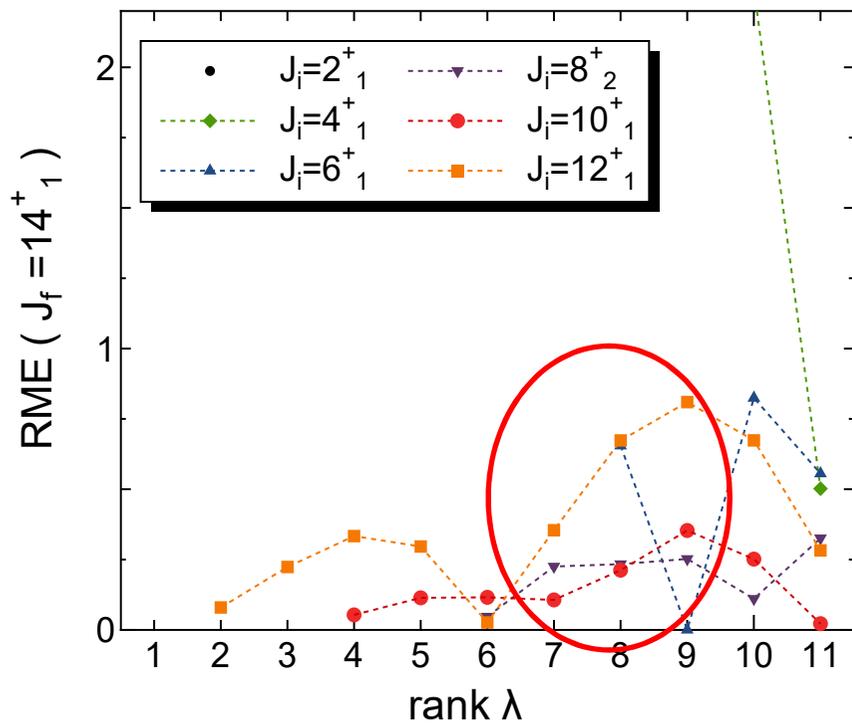
$J_f = 14^+$ 準位 ^{128}Cs

$$\langle ^{128}\text{Cs}; J_f n_f || [c_{\pi h_{11/2}}^\dagger \otimes c_{\nu h_{11/2}}]^{(\lambda)} || ^{128}\text{Xe}; J_i n_i \rangle$$

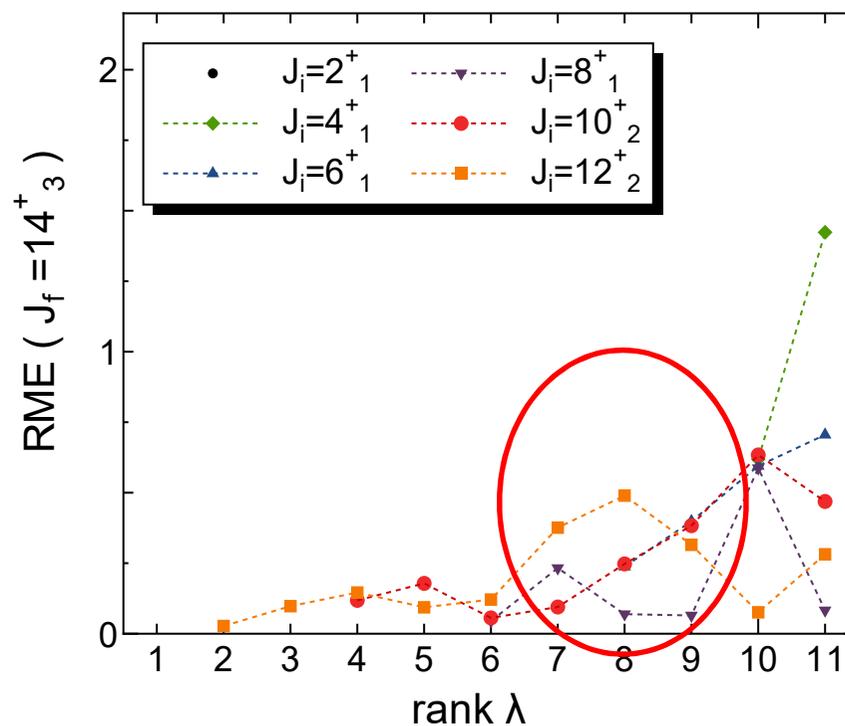


\vec{j}_p と \vec{j}_n が直交していれば $\lambda = \sqrt{2} \times \frac{11}{2} \sim 8$ で行列要素が大きくなると期待される

^{128}Cs 14^+ yrast state



^{128}Cs 14^+ chiral partner



Summary

- 原子核殻模型計算コード KSHELLの開発・公開
 - 原子核の微視的構造、励起準位を記述。
 - 殻模型計算・コードは実験研究者含め多岐にわたる需要
 - 1000億次元規模の計算に成功、中重核の高スピン状態の記述が可能に
- カイラル二重項バンドと期待される ^{128}Cs
 - ^{128}Cs の二重項バンドとその遷移確率、磁気能率などが、模型の仮定なしに殻模型計算によって再現された。
 - カイラル二重項の寄与が確認された。さらなる検証を。