



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)



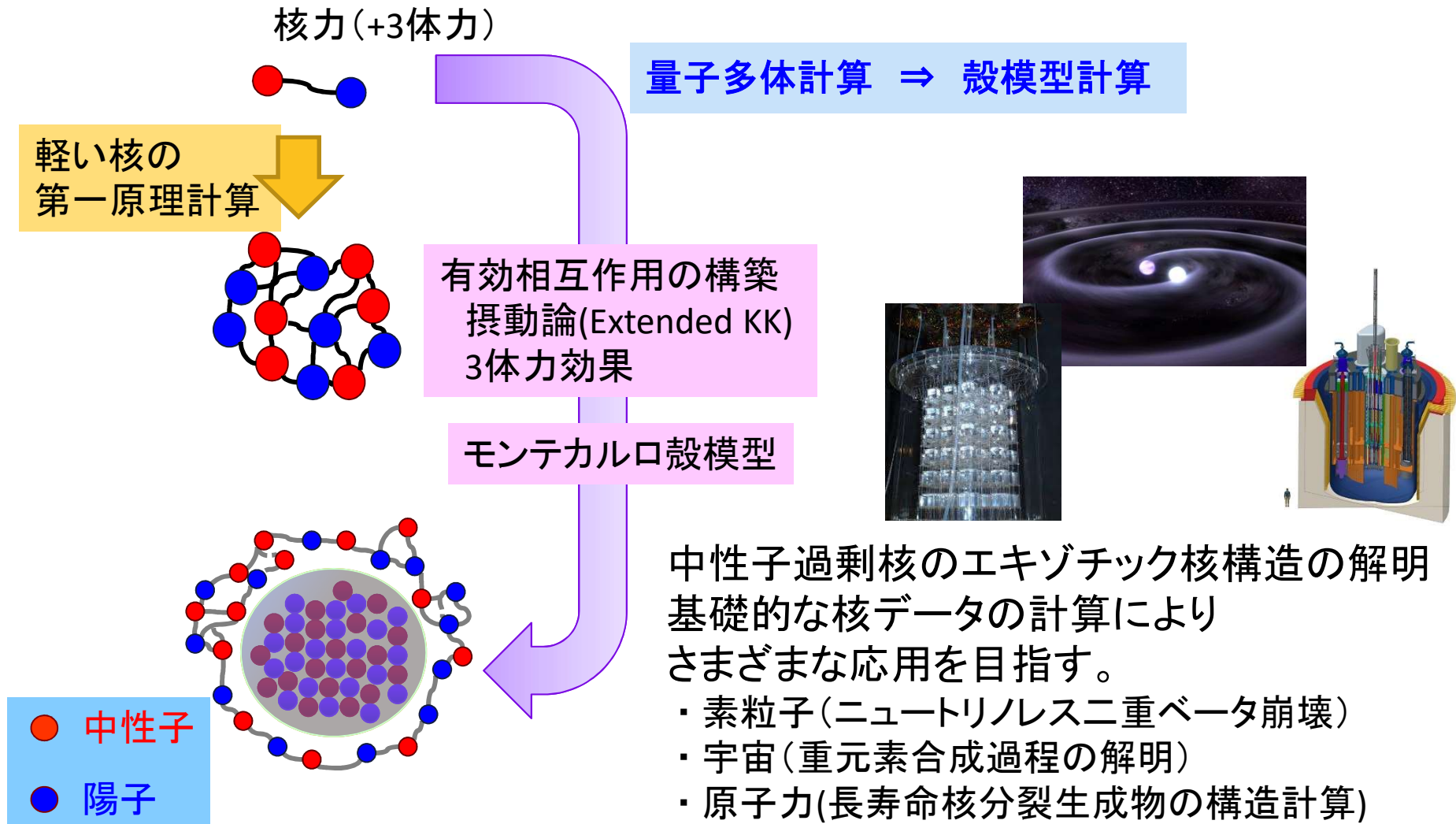
宇都野穰(JAEA), 本間道雄(会津大), 大塚孝治(理研  
仁科)

# 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
- $^{128}\text{Cs}$  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

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

## Zr領域での共著論文

- $^{96}\text{Zr}$  C. Kremer *et al.*, PRL **117**, 172503 (2016)
- $^{110}\text{Zr}$  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)
- $^{98}\text{Zr}$  P. Singh *et al.*, PRL **121**, 192501 (2018)
- $^{96}\text{Zr}$  Ł. W. Iskra *et al.*, PLB **788**, 396 (2019)



## その他質量領域での共著論文

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

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

### Zr領域での共著論文

- $^{96}\text{Zr}$  C. Kremer *et al.*, PRL **117**, 172503 (2016)
- $^{110}\text{Zr}$  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)
- $^{98}\text{Zr}$  P. Singh *et al.*, PRL **121**, 192501 (2018)
- $^{96}\text{Zr}$  Ł. W. Iskra *et al.*, PLB **788**, 396 (2018)

角田直文さん講演

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  
Rビームファクトリ(RIBF)加速器

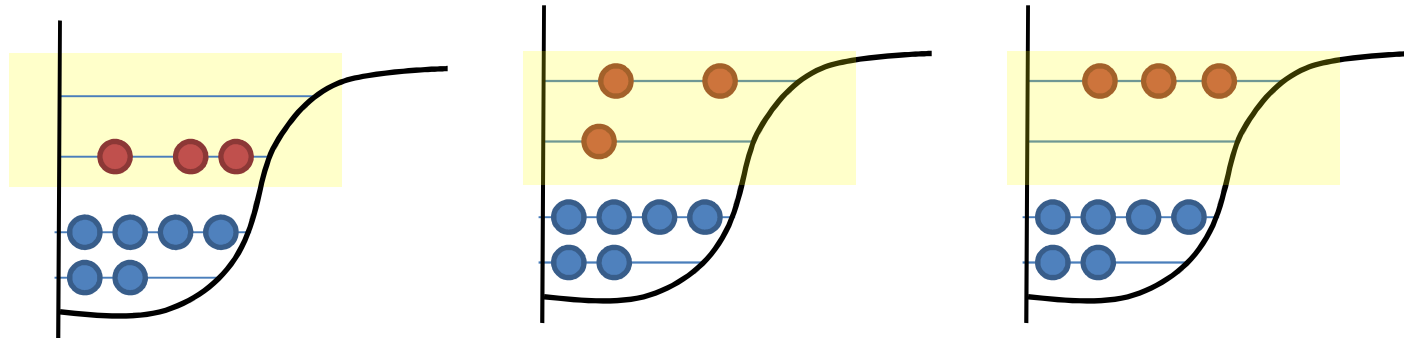


### その他質量領域での共著論文

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

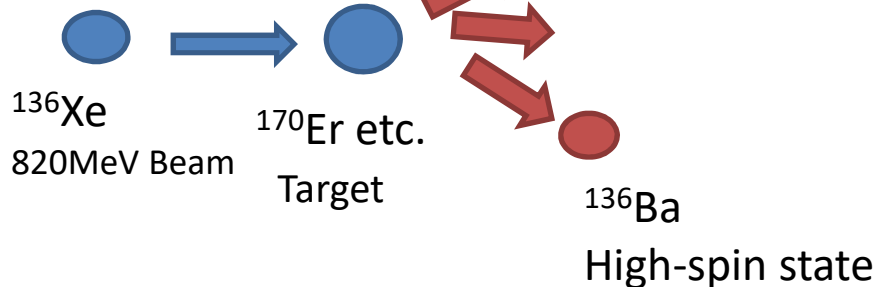
$$\sum_{m'} \langle m|H|m'\rangle v_{m'} = E v_m$$

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、、、

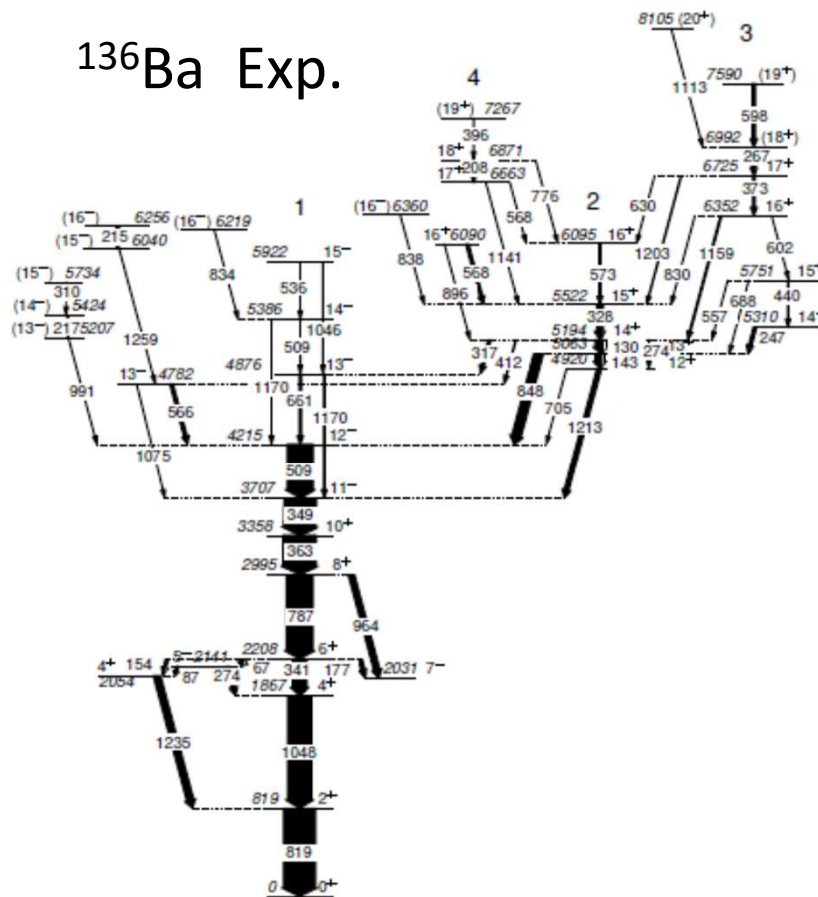
C. Petrache *et al.*, in prep.

## 1. 加速器実験

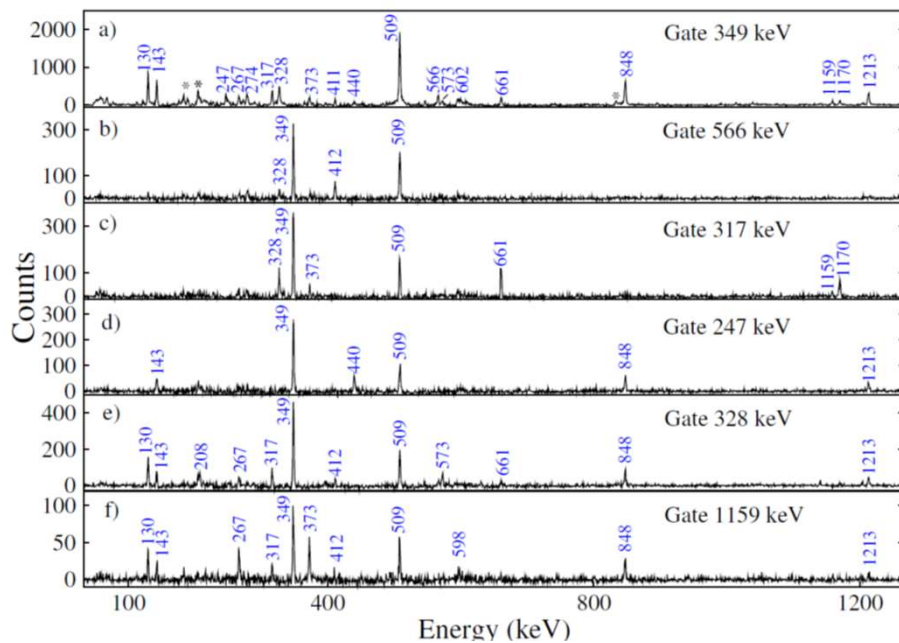


## 3. 準位を決定・議論

136Ba Exp.



## 2. 脱励起のガンマ線を測定



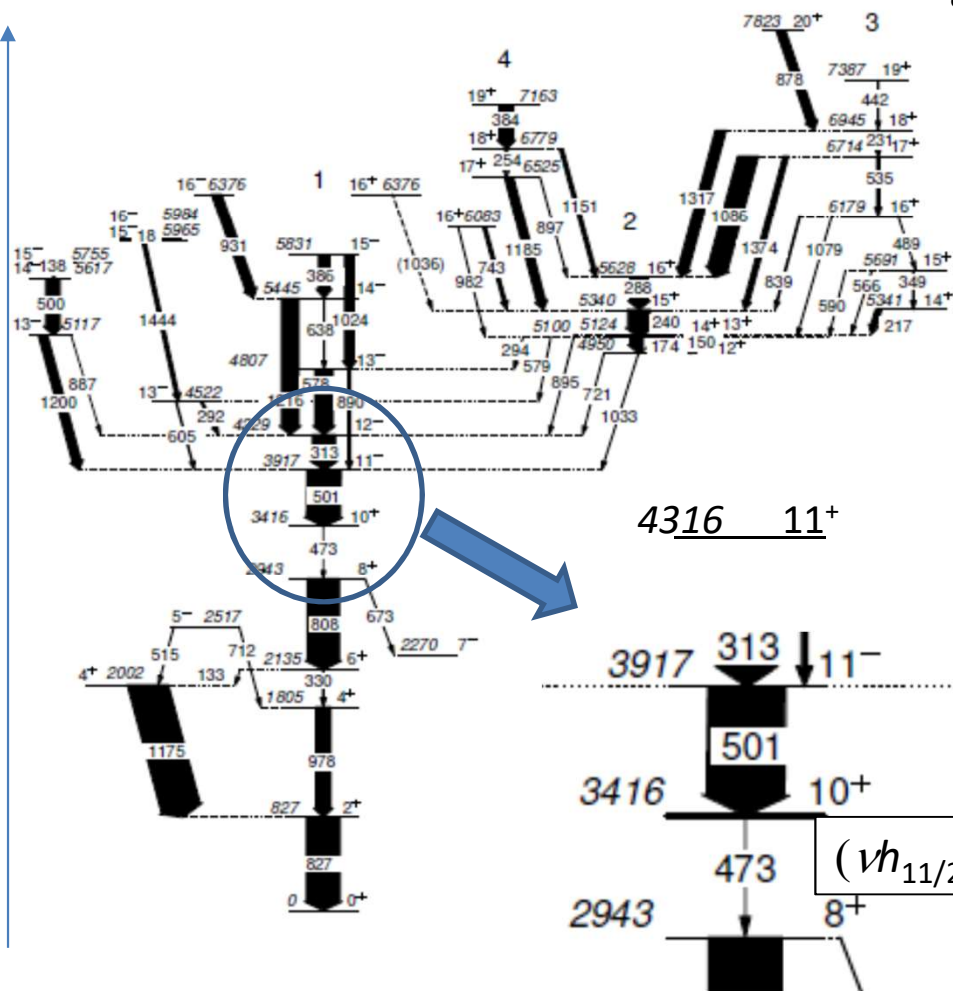
理論(殻模型)との比較・議論  
実験研究者に強い需要

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

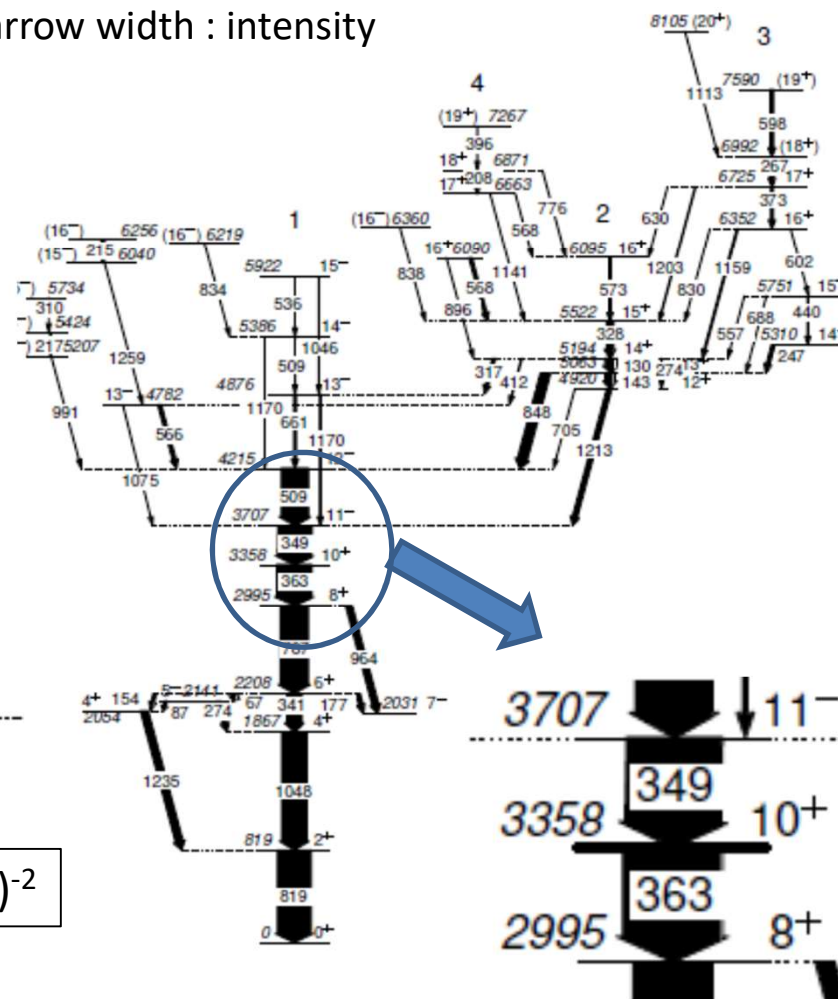
with C. Petrache *et al.*

励起エネルギー (MeV) ... 行列の固有値

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

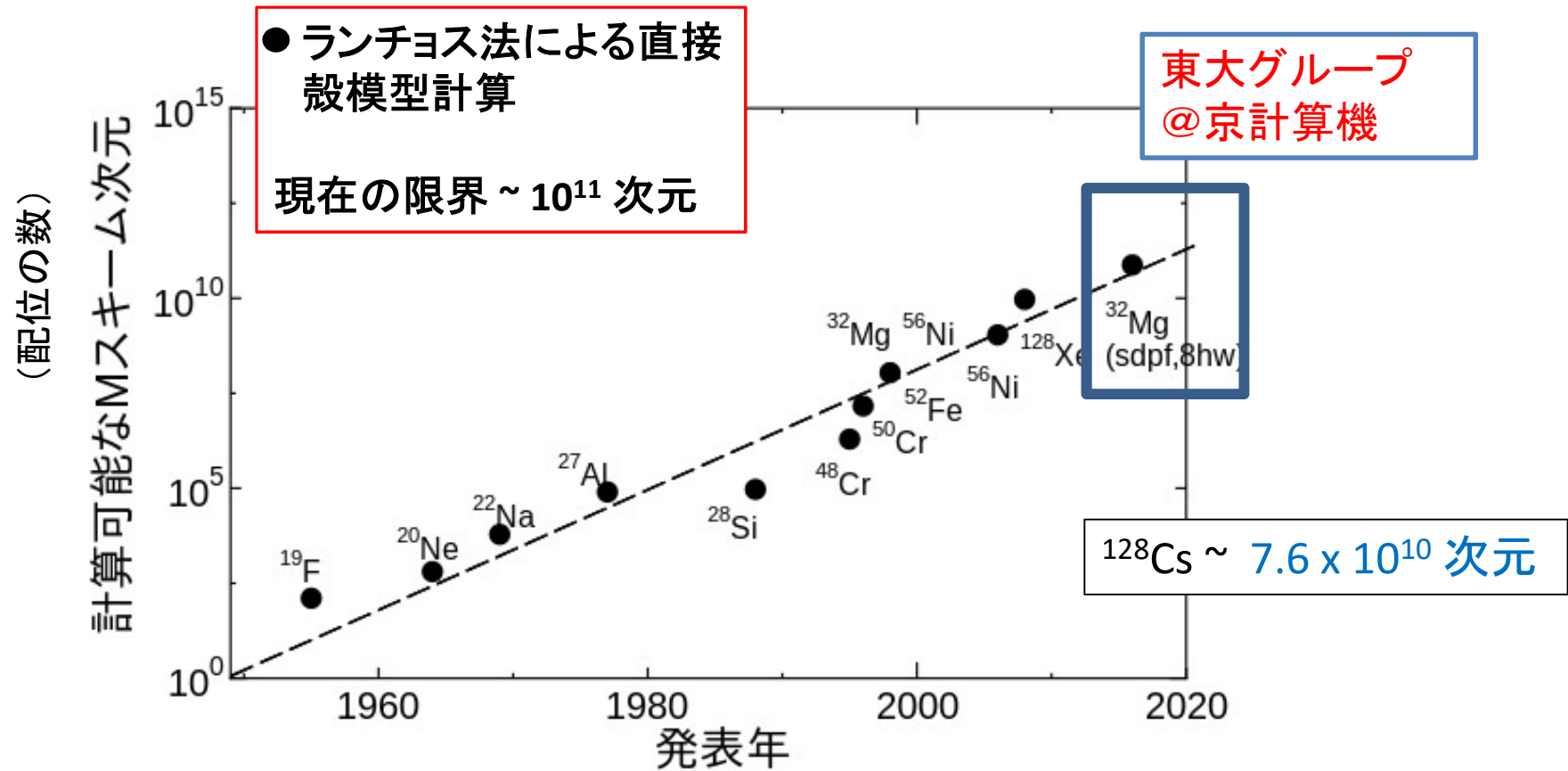


$^{136}\text{Ba}$  - exp  
arrow width : intensity





# どのくらいの配位を直接とりあつかえるか？



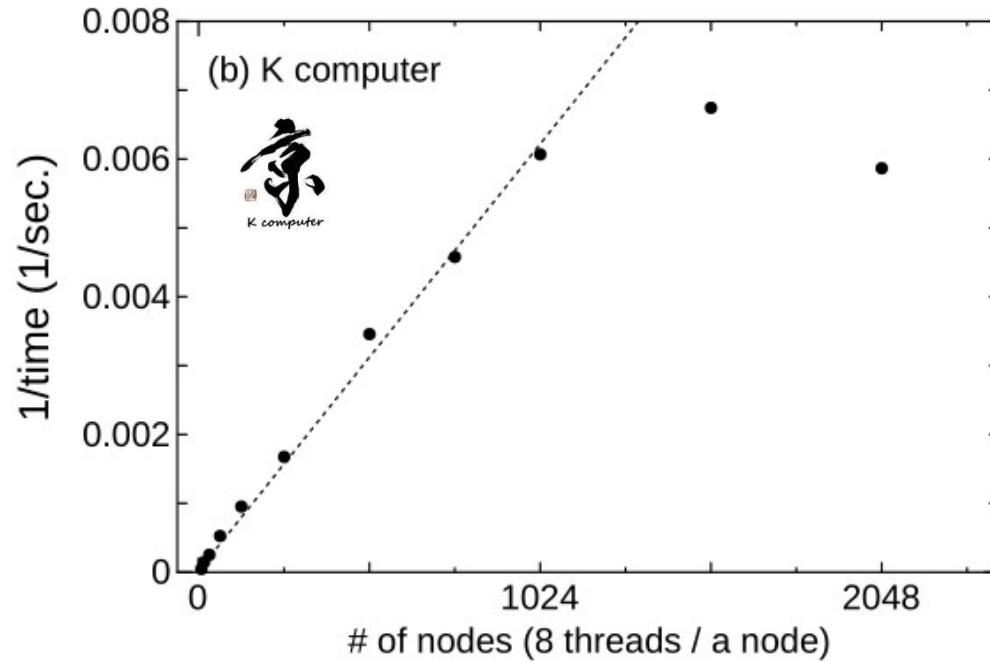
世界最大級の大次元対角化計算 ( $10^{11}$ 次元) に成功！

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。

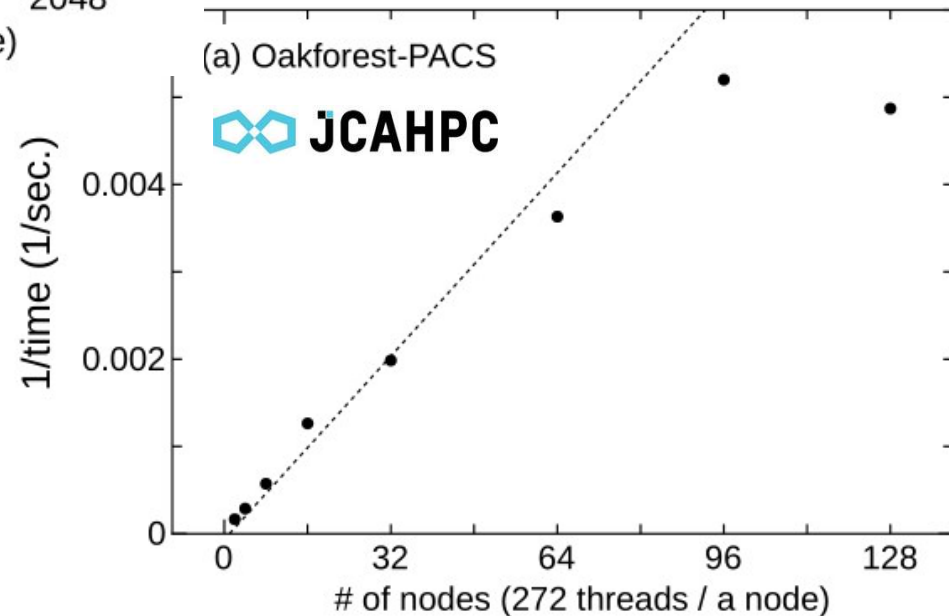
# KSHELLコードの並列性能(ストロングスケールリング)



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

数分で計算することが  
可能。

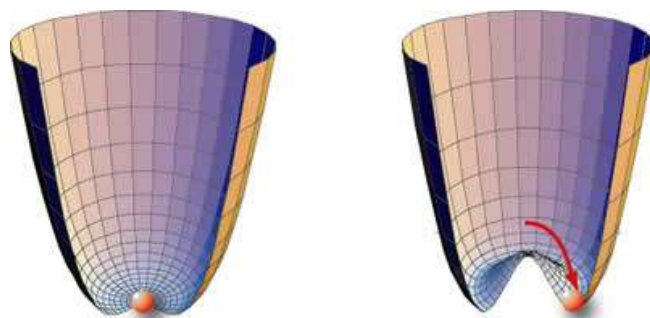
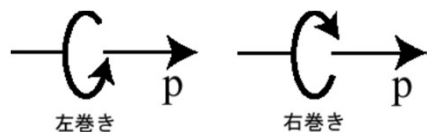
$10^5$  スレッド並列までの  
良好な並列性能



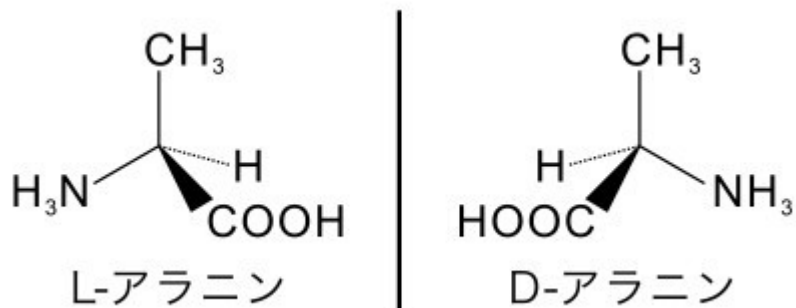
# カイラル対称性とその破れ

E. Grodner 2005

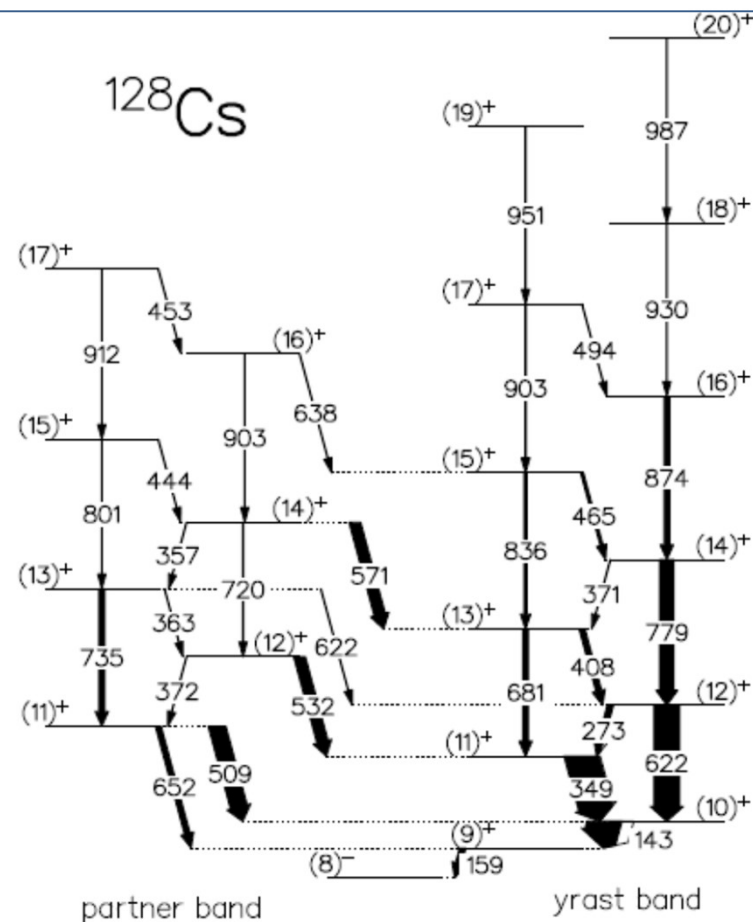
## 量子色力学



## 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？

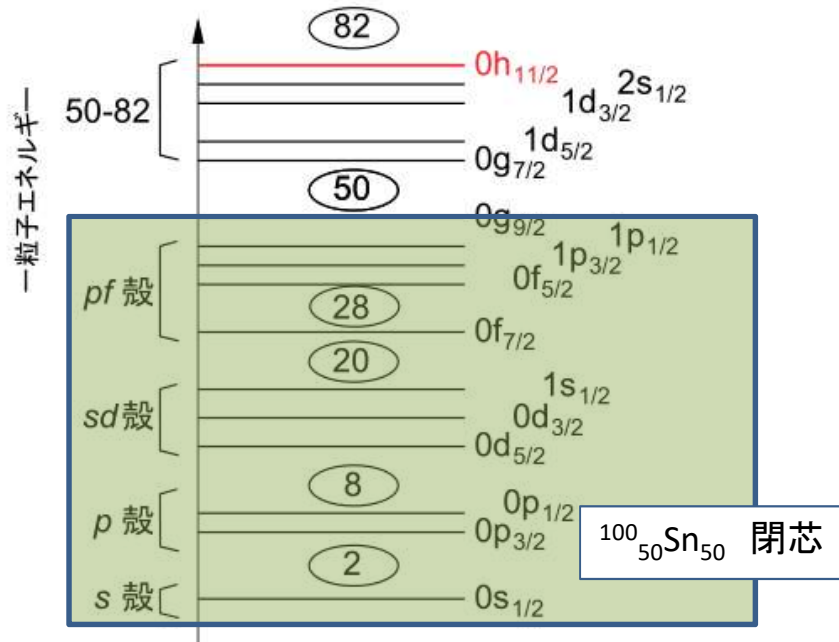
# 原子核構造におけるカイラル対称性の破れ

質量数130近傍の奇々核を考える

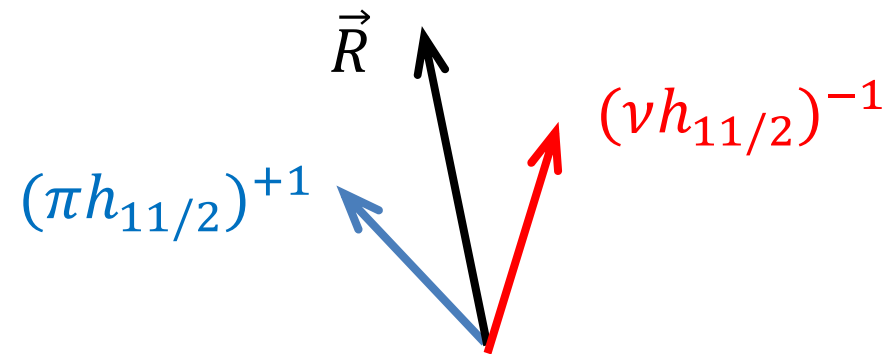
例:  $^{128}\text{Cs}$  ( $Z=55, N=73$ )

$\Rightarrow ^{128}\text{Xe}$  ( $Z=54, N=74$ ) + 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。

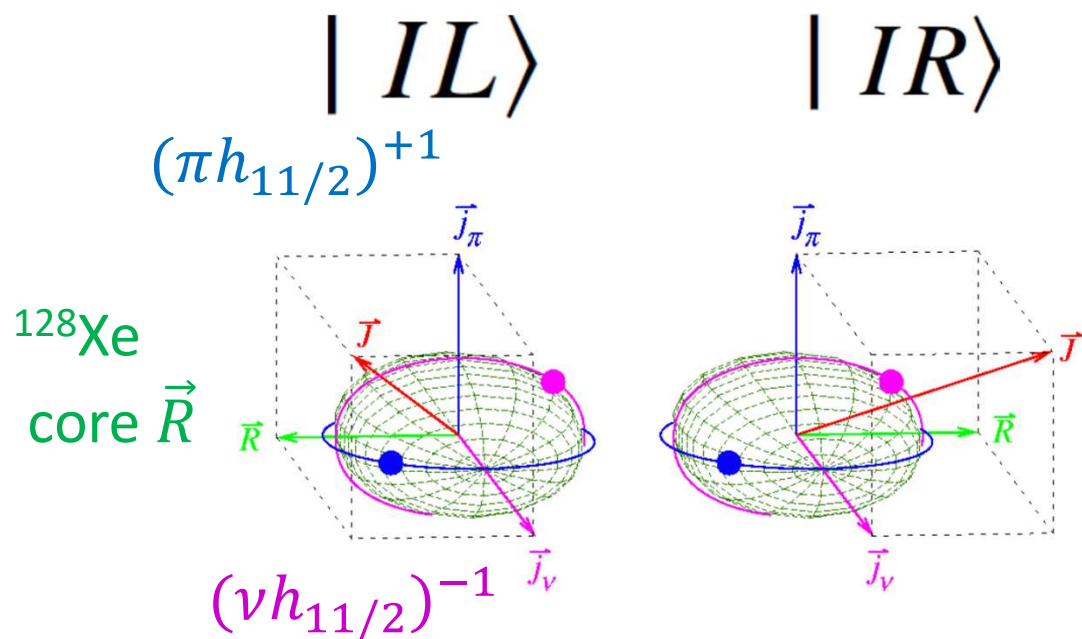


$$\vec{I} = \vec{R} + \vec{j}_\pi + \vec{j}_\nu$$

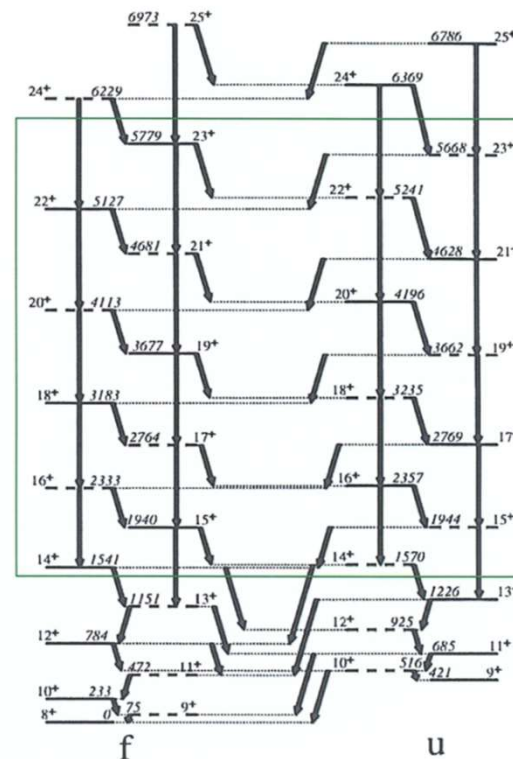


コアとなる核が非軸対称変形をすると、  
 3つの角運動量が互いに直交しうる  
 $\Rightarrow$  カイラル対称性の破れ

# 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



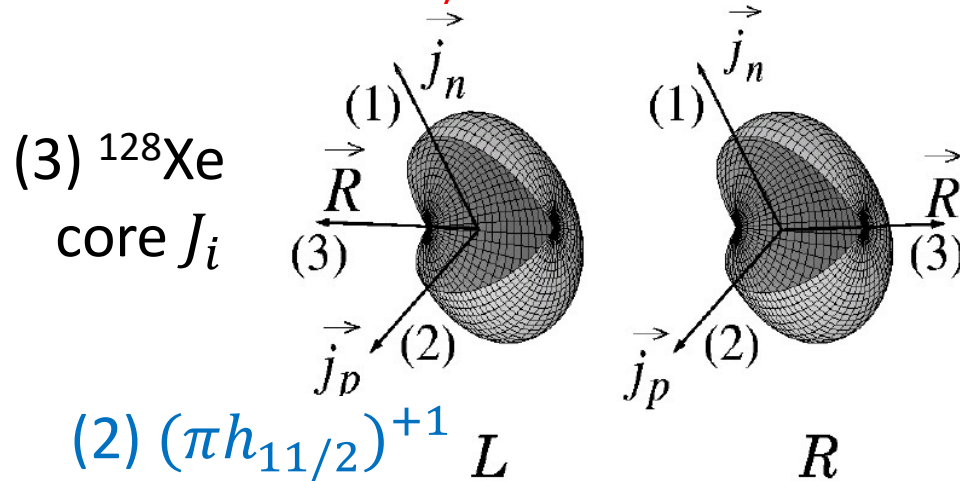
もし $|IL\rangle$ と $|IR\rangle$ にトンネリングがないならば、  
下記の二つの状態が縮退して現れる

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

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

# 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)

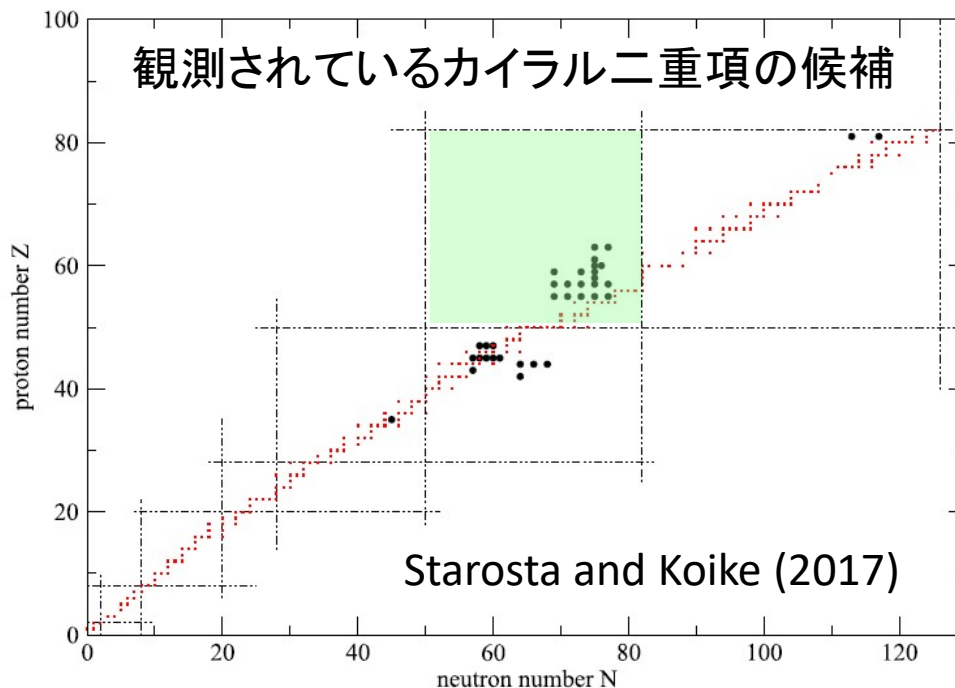
- 質量数~ 130領域

- 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？

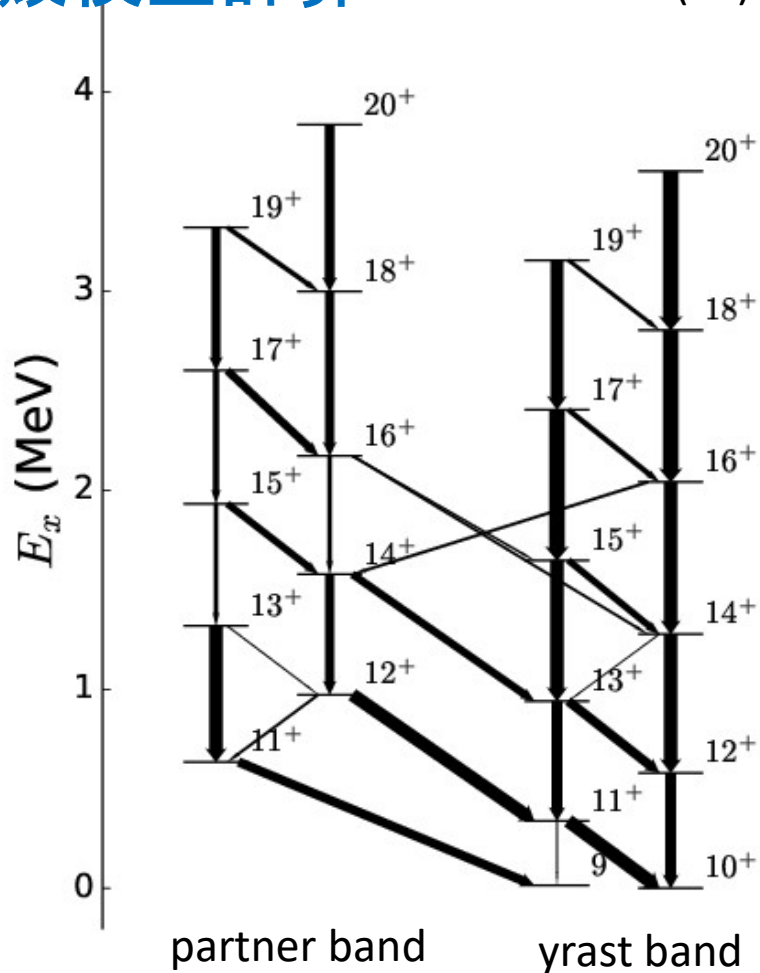


$^{128}\text{Cs} \sim 7.6 \times 10^{10}$  次元

Oakforst-PACS で計算可能に！

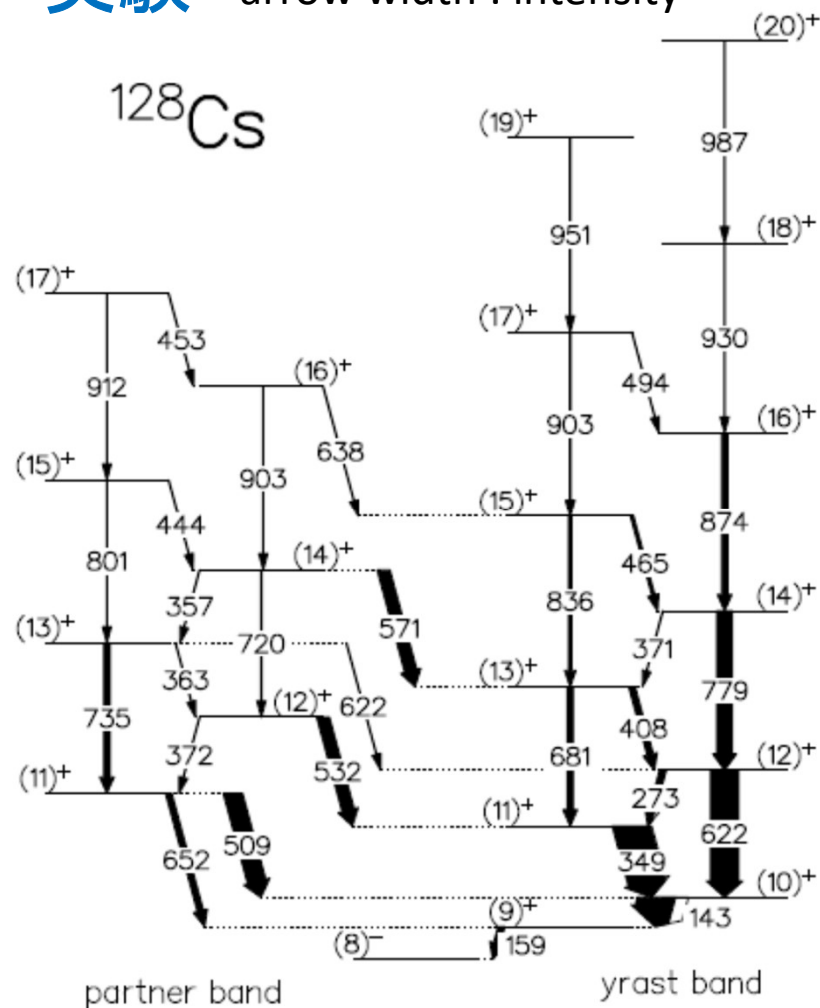
# $^{128}\text{Cs}$ : エネルギー準位

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.*, IJME 14, 347 (2005)

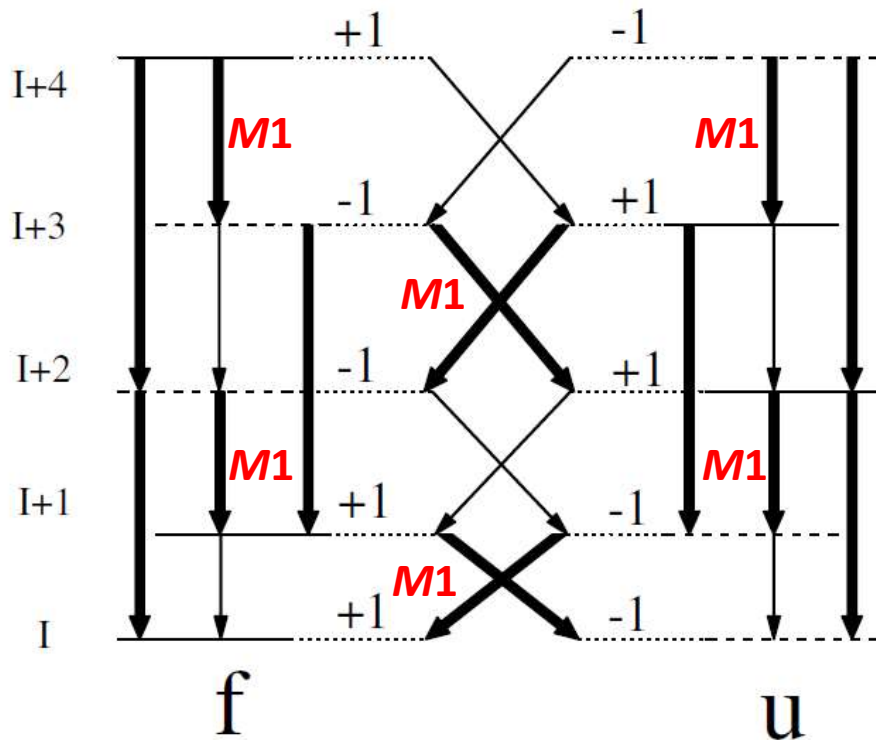


# 検証： $^{128}\text{Cs}$ のバンドはカイラル二重項の現れか？

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

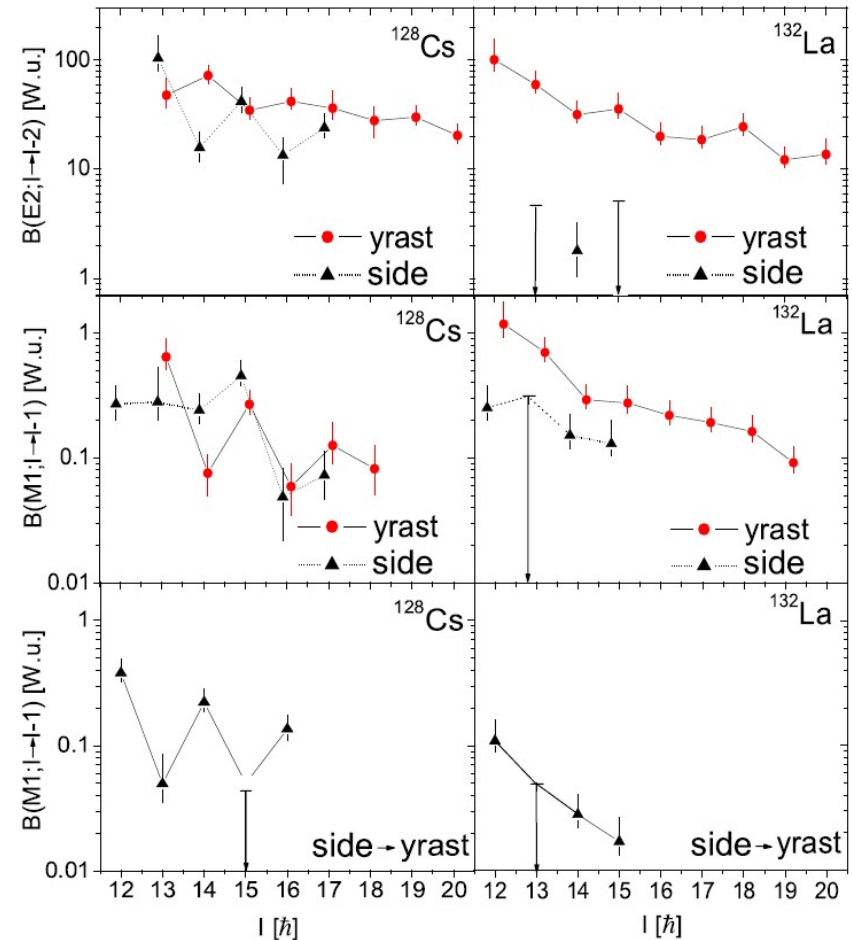
$$|I-\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(|IL\rangle - |IR\rangle),$$

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)

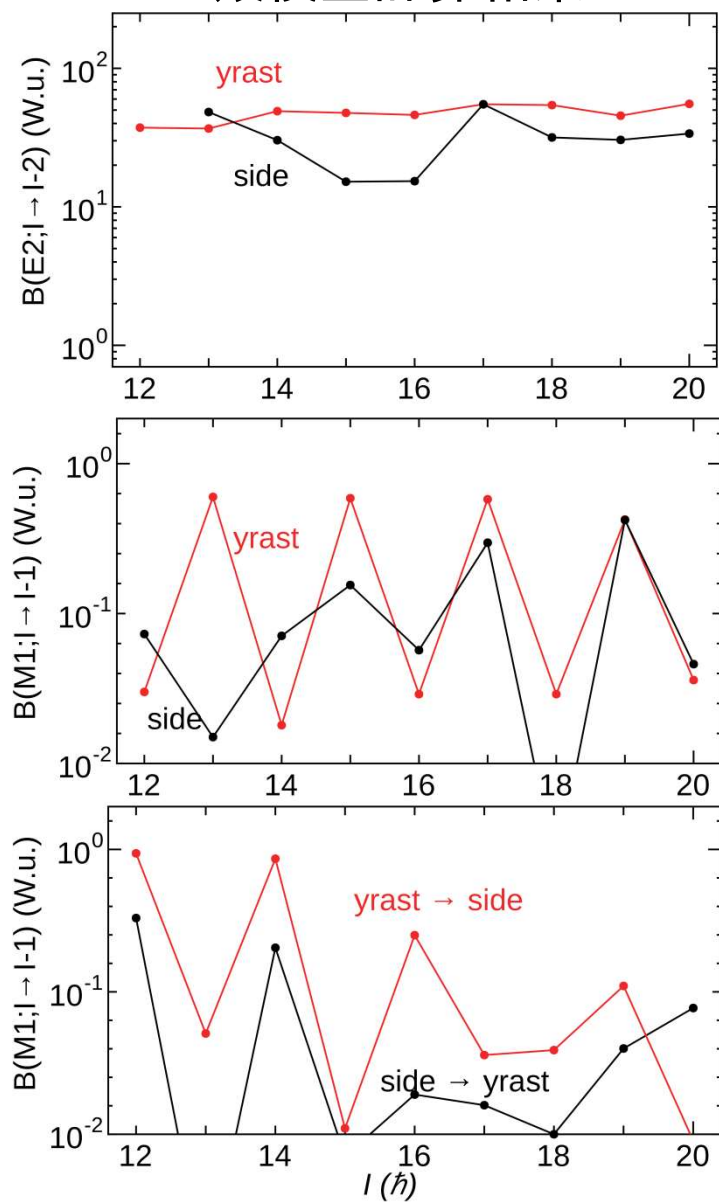


$^{128}\text{Cs}$ : a best candidate

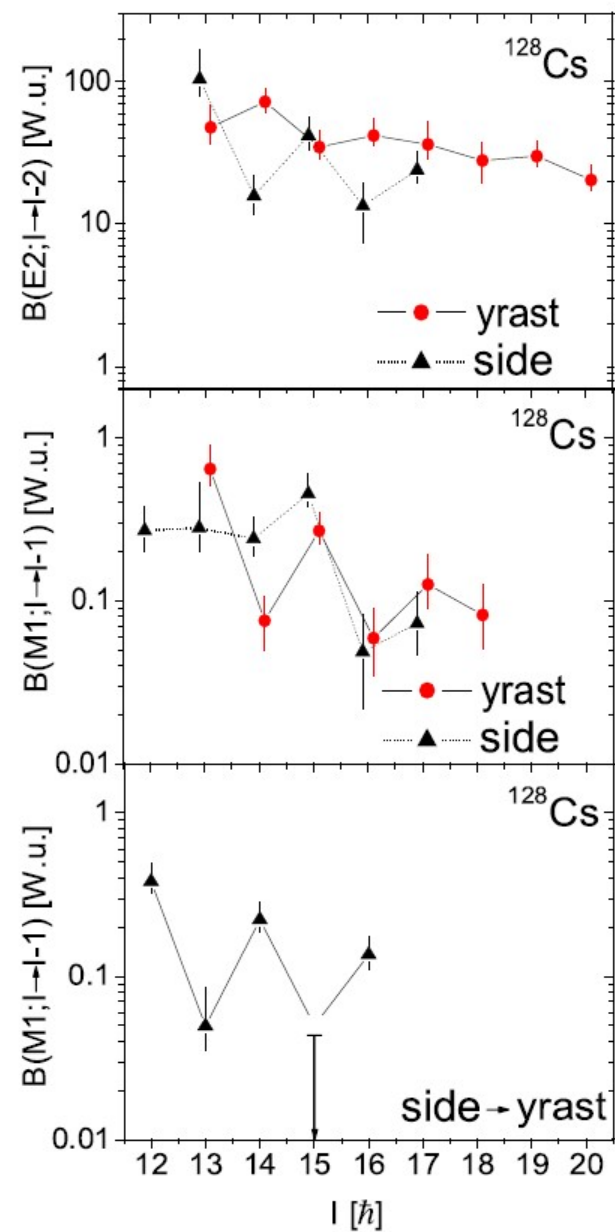
E. Grodner *et al.*,  
Phys. Rev. Lett 97, 172501 (2006).

# $^{128}\text{Cs}$ : 遷移確率

殻模型計算結果

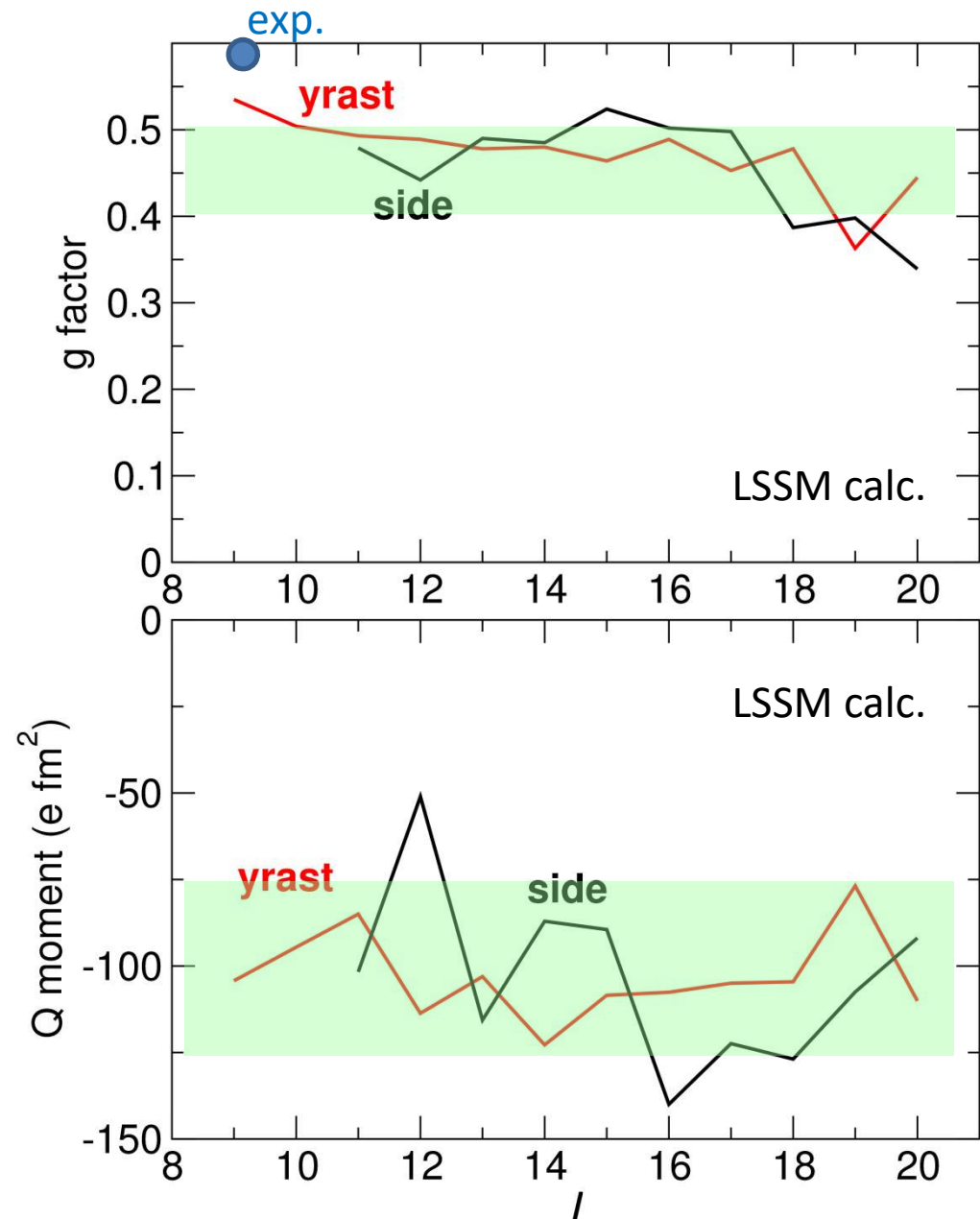


実験値 (Grodner *et al.*)



# $^{128}\text{Cs}$ : 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



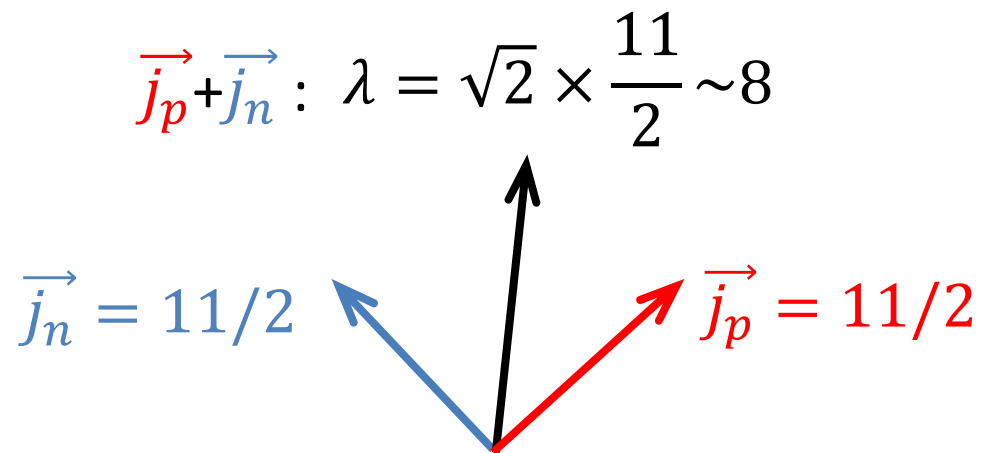
# 殻模型計算による検証:カイラル二重項バンドか?

- $^{128}\text{Cs}$ 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 $^{128}\text{Cs}$ と $^{128}\text{Xe}$ の角運動量、状態を表す。 $\lambda$ 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 $\lambda$ が $\sqrt{2} \times \frac{11}{2} \sim 8$ に近いと期待される。

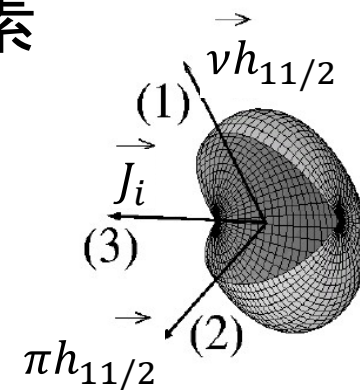


# 3軸が直交しているか？

$^{128}\text{Cs}$ と $^{128}\text{Xe}$ との間の一体既約行列要素

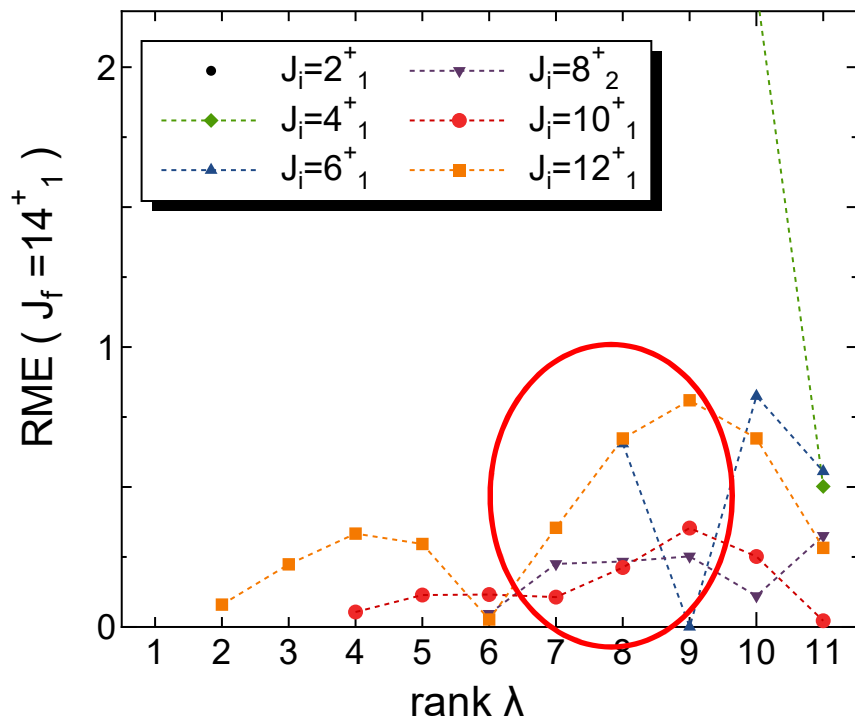
$J_f = 14^+$  準位  $^{128}\text{Cs}$

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

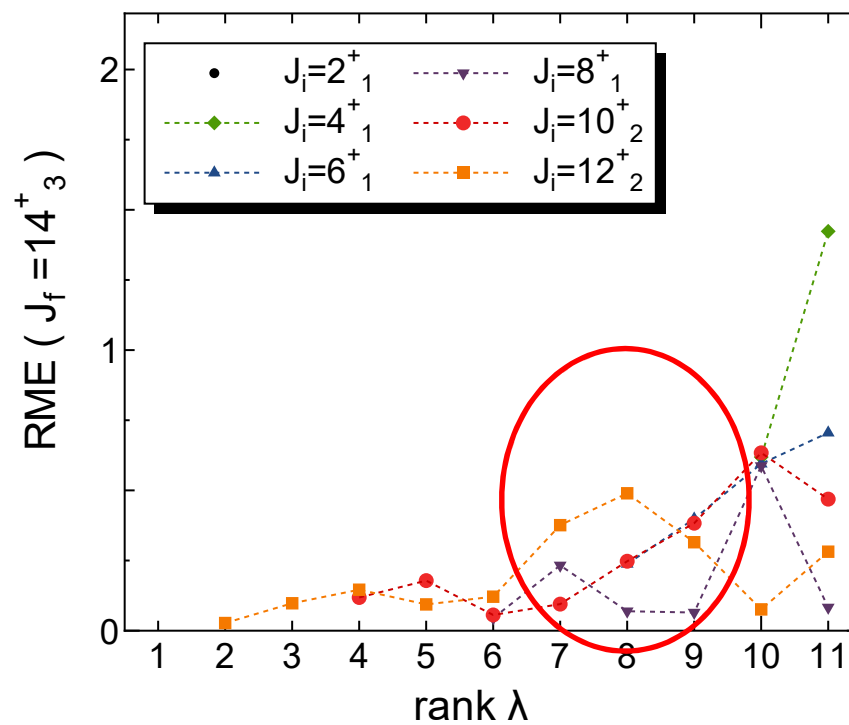


$\vec{j}_p$  と  $\vec{j}_n$  が直交していれば  $\lambda = \sqrt{2} \times \frac{11}{2} \sim 8$  で行列要素が大きくなると期待される

$^{128}\text{Cs}$   $14^+$  yrast state



$^{128}\text{Cs}$   $14^+$  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 $^{128}\text{Cs}$ 
  - $^{128}\text{Cs}$  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。