

HPCIシンポジウム  
2014年3月3日(3-4日)  
富士ソフトビル、東京

## 課題2 大規模量子多体計算による 核物性解明とその応用

開発課題責任者  
東京大学大学院理学系研究科  
大塚孝治

# HPCI戦略分野5課題2

核力に忠実に、エキゾチック核まで含めた核構造の探求、予言

## 事業協力者リスト

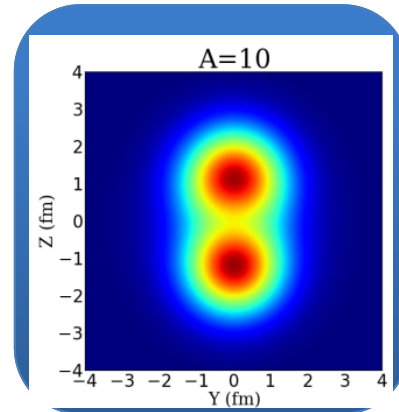
大塚 孝治 (開発課題責任者)

### 東大CNS

清水 則孝  
吉田 亨  
岩田 順敬  
富樫 智章

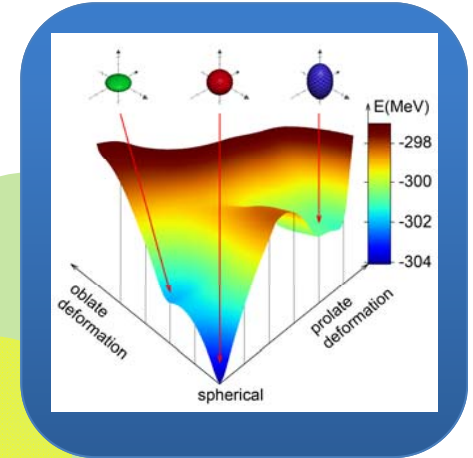
+ 公募中

阿部 喬 (東大理)  
本間 道雄 (会津大)  
宇都野 穰 (JAEA)  
角田 直文 (東大理)  
角田 佑介 (東大理)  
中務 孝 (理研)  
鈴木 俊夫 (日大)  
中田 仁 (千葉大)  
梶野 敏貴 (天文台)  
James Anderson (北京大)  
水崎 高浩 (専修大)

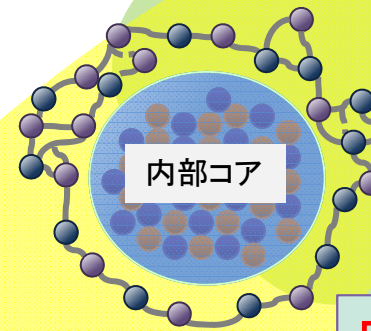


中重核の励起モードを系統的に計算

密度汎関数法

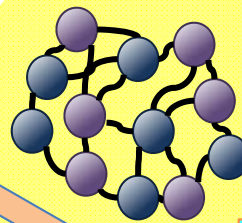


内部コアの無い (No-core) モンテカルロ殻模型  
p殻核、 $^4\text{He} \sim ^{12}\text{C}$ , sd殻核



重い核のための内部コアを設定してのモンテカルロ殻模型  
Ni, Sn, Xe, Nd, ...

軽い核の第一原理計算



中重核の微視的記述を系統的に行う

有効相互作用の構築  
3体力効果、Extended KK

核力



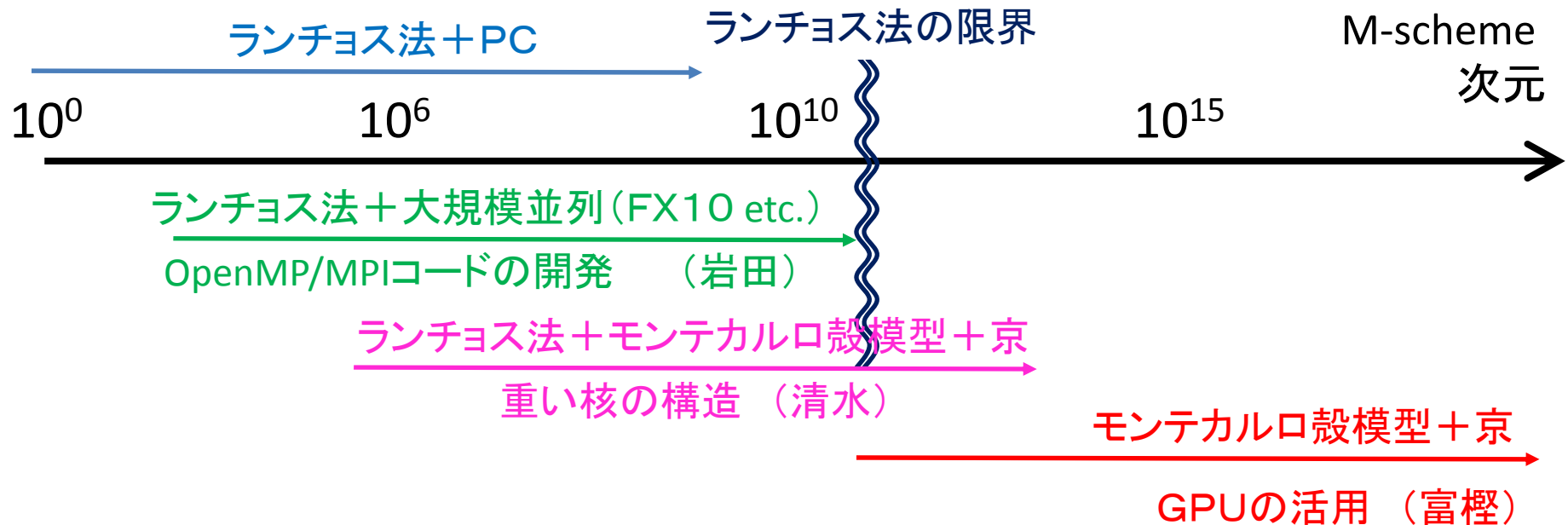
# 殻模型計算による核構造研究

原子核構造計算: 陽子・中性子の多体問題を解く

シュレディンガー方程式  $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$

大次元疎行列の固有値問題に変換  $|\Psi\rangle = \sum_m v_m |m\rangle$   
Slater 行列式

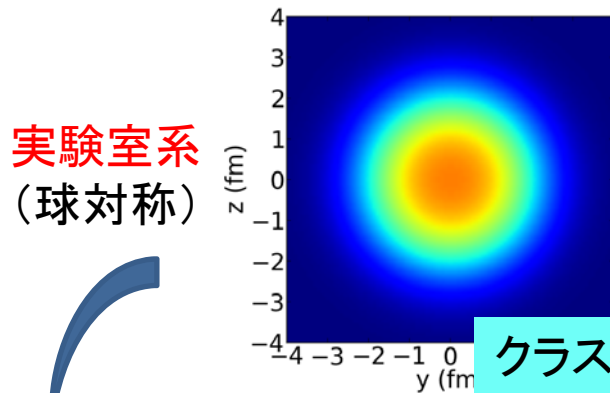
$$\sum_{m'} \langle m|H|m'\rangle v_{m'} = E|m\rangle$$



## ベリリウム同位体におけるクラスター構造の発現及び消滅

実験室系では球対称である偶々核の基底状態の微視的計算結果から  
物体固有座標系における密度分布を引き出す独自の手法を開発

ベリリウム同位体の物体固定座標系における密度分布解析

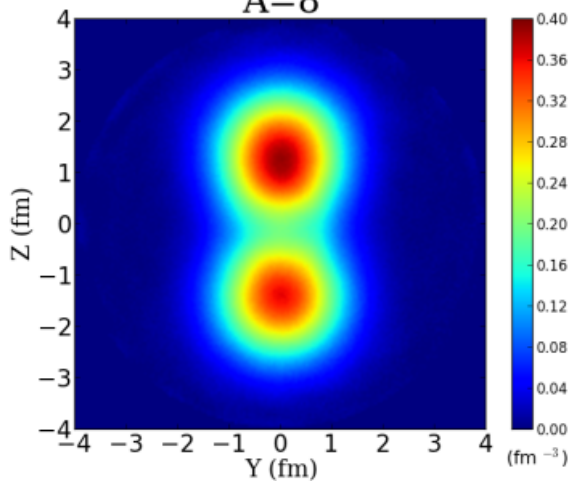


クラスター構造の発現

中性子過剰領域における  
クラスター構造の消滅

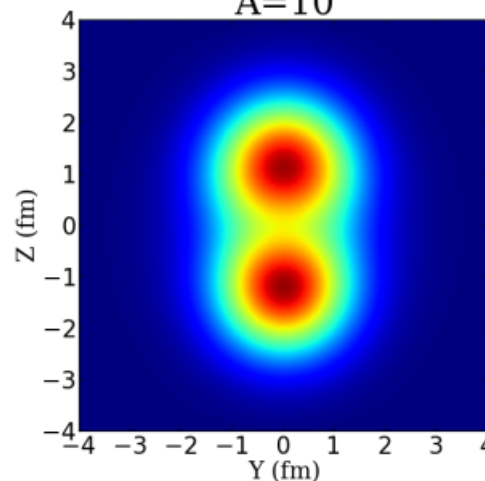
ベリリウム8

A=8



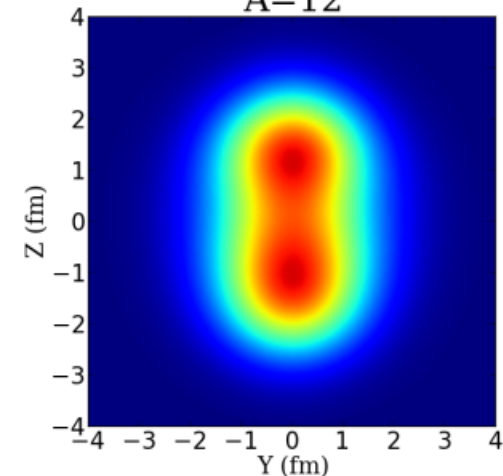
ベリリウム10

A=10



ベリリウム12

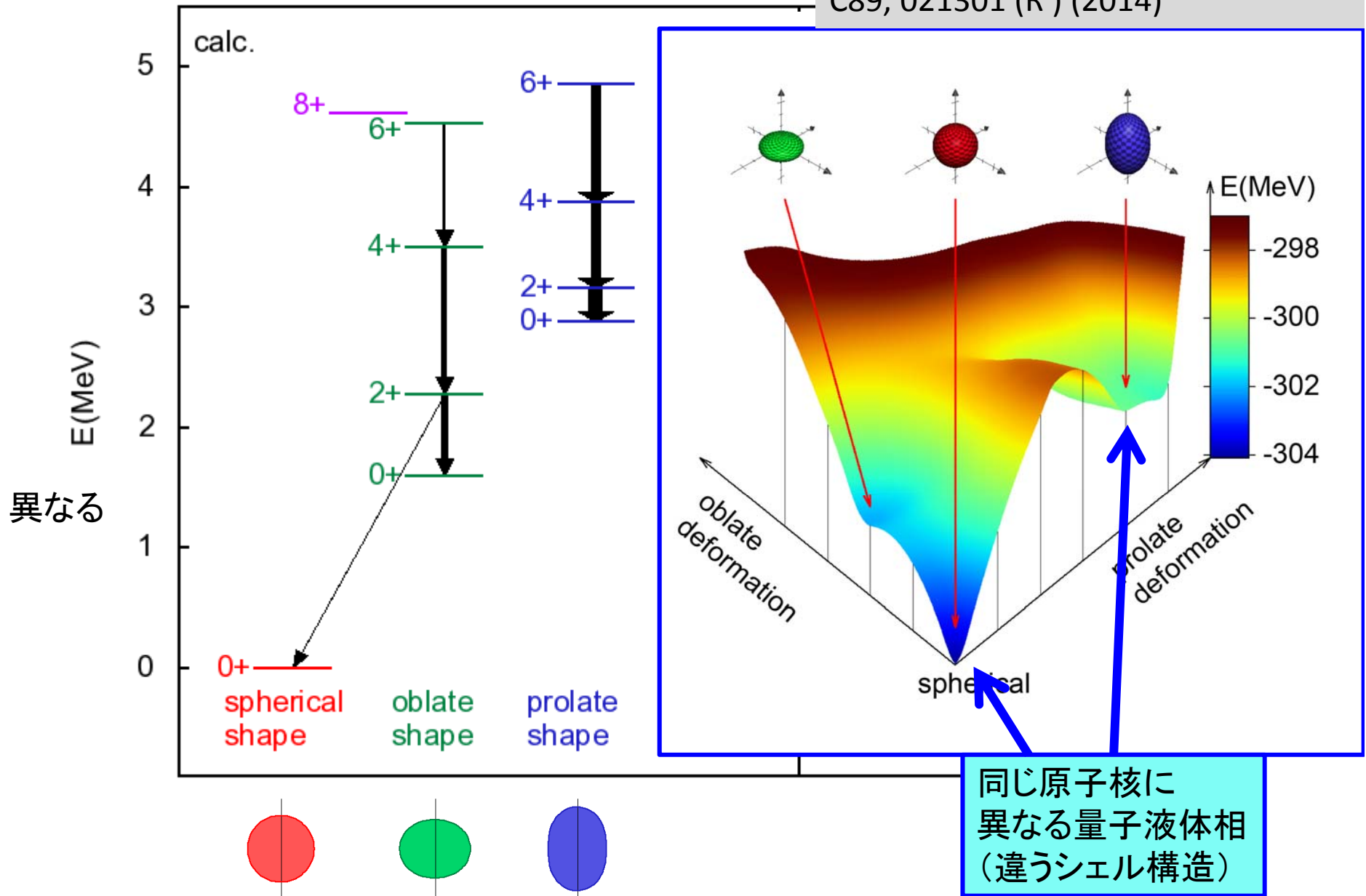
A=12



物体固有  
座標系

# Band structure of $^{68}\text{Ni}$

Taken from Suchyta *et al.*, Phys. Rev. C89, 021301 (R) (2014)



## 核変換に関する基礎データ

当初から、原子力発電で発生する放射性廃棄物の処理に関わる基礎データの計算を目的の一つとしてきた。

核分裂生成物(FP)の内、半減期が長いものを、別のアイソトープに変える「核変換」が社会的重要性を増している。

半減期の計算を目標としていた当初計画から、核変換に必要なデータの計算へとスコープを拡大しようとしている。重い核を記述出来るハミルトニアンを、現実的核力と整合性を持って構築する。それによって、ガンマ線による( $\gamma$ , n)反応の断面積計算などを行う計画。

# 京におけるチューニング状況

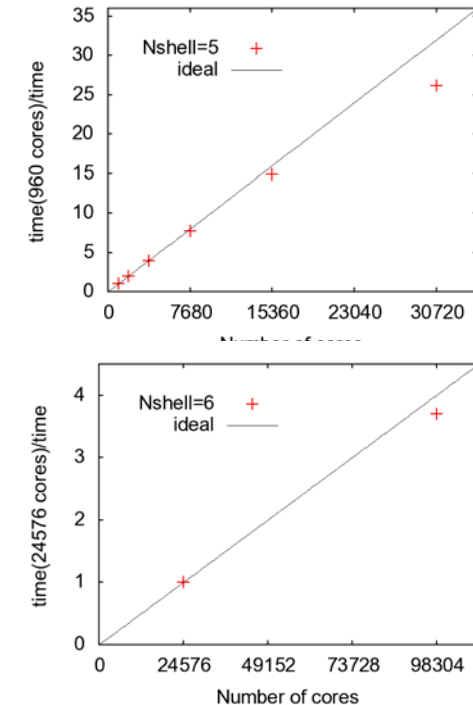
- 軽い核の第一原理計算

- 5主殻模型空間の系統的計算  
3840ノードでストロングスケーリング90%、  
実行効率～35%
- 6主殻模型空間でのベンチマーク的計算  
12000ノードでストロングスケーリング90%、  
実行効率～40%

- 中重核の殻模型計算

- 中性子過剰領域の系統的計算  
1920ノードでストロングスケーリング90%、  
3800ノードでストロングスケーリング85%、  
実行効率～15%

京でのストロングスケーリング



2013年8月実績では、全体で18.9%の実行効率

(京全体(他課題平均): およそ5%)

# 実施計画(5カ年)

現在

