

# ポスト京における 核変換の基礎研究

東京大学 原子核科学研究センター(CNS)  
富樫 智章

共同研究者:

清水 則孝(東大CNS), 大塚 孝治(東大理,CNS),  
宇都野 穰(原子力研究開発機構)

ポスト「京」重点課題(9)「宇宙の基本法則と進化の解明」キックオフシンポジウム

2015.3.12

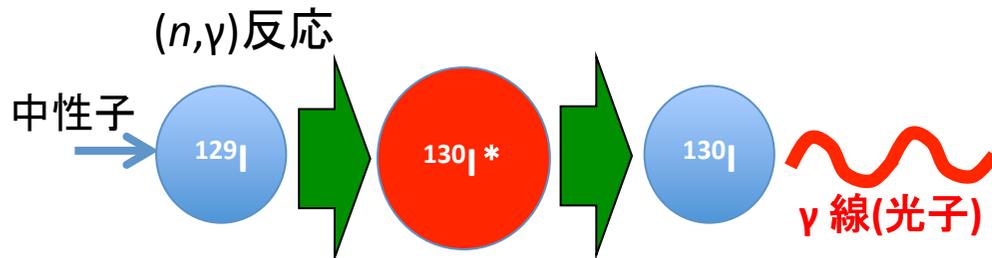
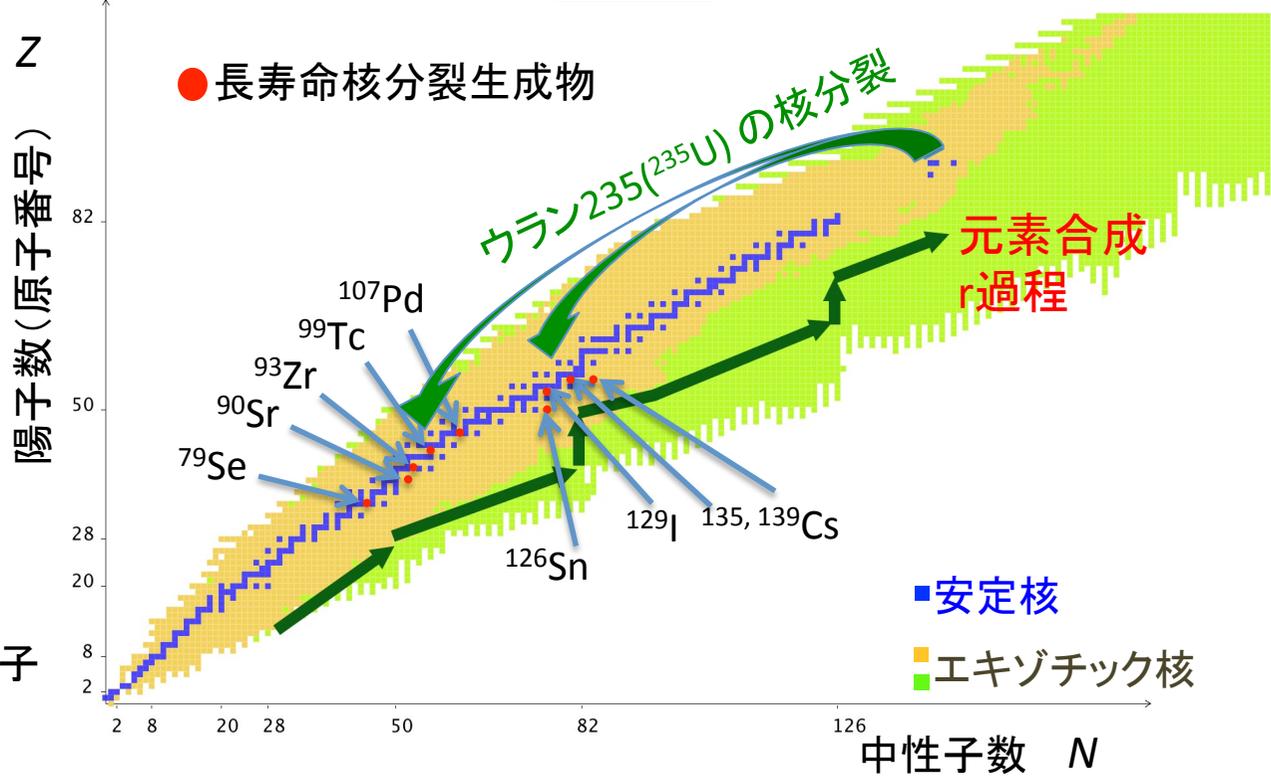
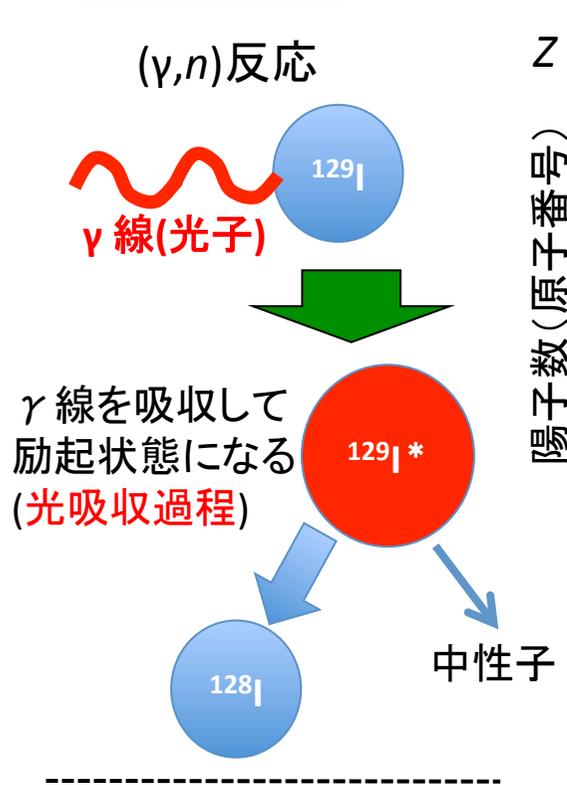
紀尾井フォーラム

# 研究の背景と目的

長寿命核分裂生成物: 原子炉における核分裂反応の際に生じる核種のうち寿命(半減期)が長いもの(数10~数10万年)

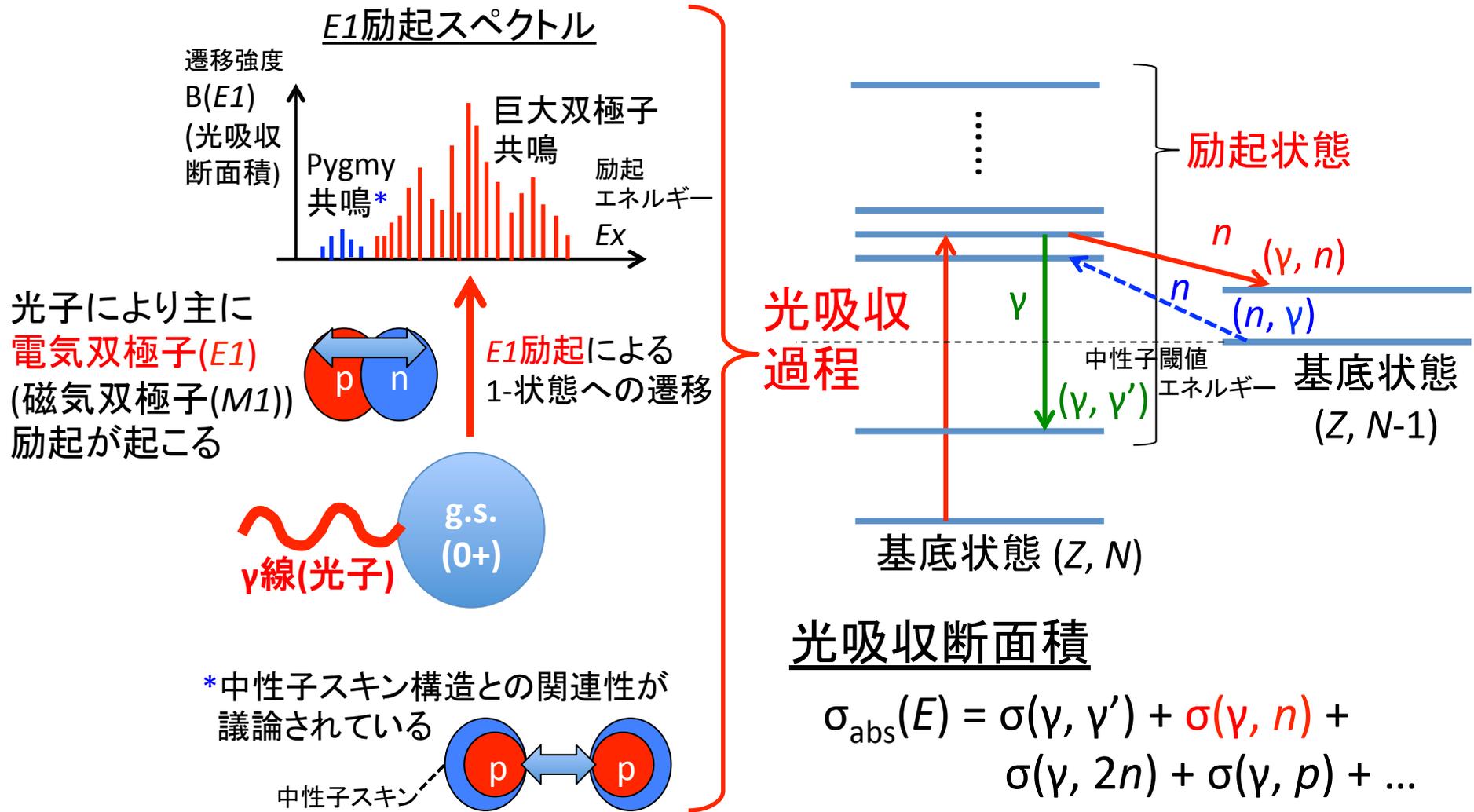
核変換反応

→ 短寿命の核種への核変換が望まれている



殻模型計算により核変換反応に関わる量子状態を精密に記述する  
→ 長寿命核分裂生成物における精度の良いデータの取得を目指す

# 核変換の基本原理



( $\gamma, n$ )反応(または( $n, \gamma$ )反応)の計算に必要な光吸収が起こる反応率(光吸収断面積)の理論計算を行う

# 殻模型計算による電気双極子(E1)励起の記述

## 殻模型計算の特徴

- 根本原理から出発した核子間相互作用(有効相互作用)を用いて計算が可能  
(そのための理論的枠組みが用意されている(角田氏講演))
- 核子多体相関(ペアリング,テンソル等)を精密に取り入れることができる
- 偶々核だけでなく奇核も同じように計算が可能(長寿命核分裂生成物は大半が奇核)

中重核領域(質量数100-200程度)におけるE1励起状態を通常の殻模型計算で計算しようとするとハミルトニアン行列の次元数が爆発的に増大し実行が困難

( $^{90}\text{Sr}$ では3hw励起の制限でも $8.2 \times 10^{14}$ 次元に達する)

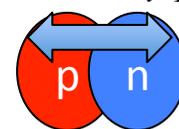


モンテカルロ殻模型による記述を行う

## 電気双極子(E1)の演算子

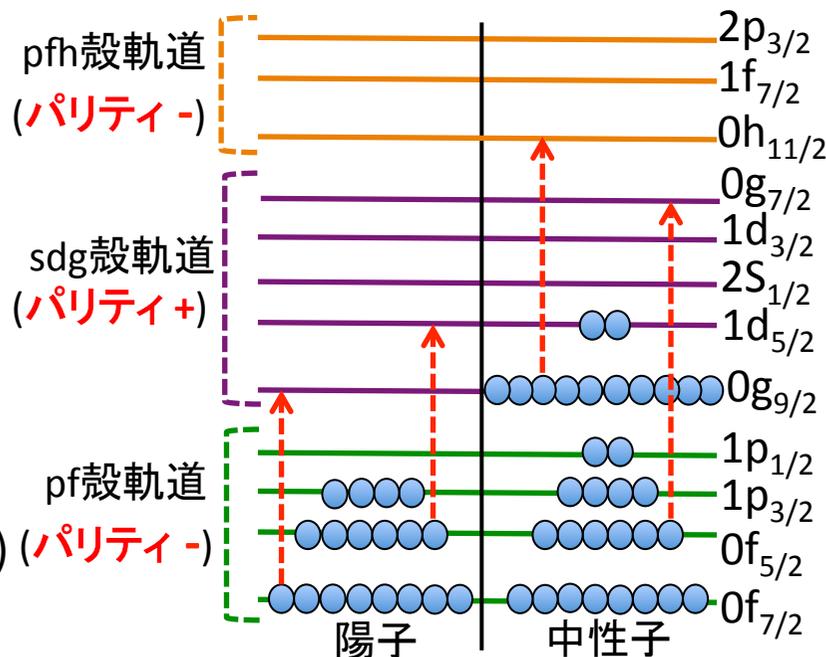
$$E1 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sum_{i=1}^A e_i \vec{r}_i$$

軌道角運動量  $l=1$   
 パリティ = -1



$$e_i = \begin{cases} N/A & (\text{proton}), \\ -Z/A & (\text{neutron}) \end{cases}$$

$^{90}\text{Sr}$



$^{40}\text{Ca}$

# モンテカルロ殻模型

モンテカルロ殻模型の波動関数

$$|\Psi^m\rangle = \sum_{d=1}^{N_d} f_d^m P^{J^\pi} |\Phi(q_d)\rangle, \quad |\Phi(q_d)\rangle = \prod_j \left( \sum_l D(q_d)_{lj} c_l^\dagger \right) |-\rangle$$

基底(次元)数

変形スレーター行列式

スピンのパリティ射影演算子

1粒子状態の生成演算子

ハミルトニアン行列の対角化を行う (次元数: ~10-100)  $\Leftrightarrow$  通常の殻模型計算 (次元数 > ~10<sup>10</sup>)

$$\sum_d \langle \Phi(q_p) | H | \Phi(q_d) \rangle \cdot f_d^m = e_m \sum_d \langle \Phi(q_p) | \Phi(q_d) \rangle \cdot f_d^m$$

エネルギー期待値(の和)を最小化するように基底を求める  $E_n = \sum_{m=1}^n e_m$  (m番目の状態のエネルギー期待値)

ステップ1: 補助場モンテカルロ法により基底の候補を生成

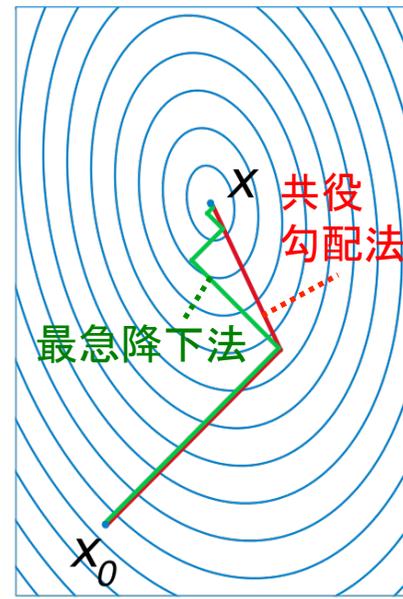
$$|\Phi(\sigma)\rangle = \prod e^{\Delta\beta \cdot h(\sigma)} |\Phi^{(0)}\rangle$$

$E_n$  が下がるものを選ぶ

ステップ2:  $E_n$  を  $D(q)$  の関数として共役勾配法により最適化

上記の方法は基底状態近傍の低励起状態のみを記述可能

広範なエネルギー領域におけるE1励起スペクトルを記述する手法を検討し、原理実証計算を行った。(今年度の重点課題)



# モンテカルロ殻模型による E1 励起スペクトルの記述

ステップ1: 基底状態をモンテカルロ殻模型により求める  $|\Psi(g.s.)\rangle = \sum_i f_i |\Phi_i^{g.s.}\rangle$

ステップ2: 基底状態の基底に演算子  $\exp(i\varepsilon \cdot E1)$  を作用させる 対角化

$$|\Phi_i^{E1}\rangle = \exp(i\varepsilon \cdot E1) |\Phi_i^{g.s.}\rangle \quad (i=1, 2, \dots)$$

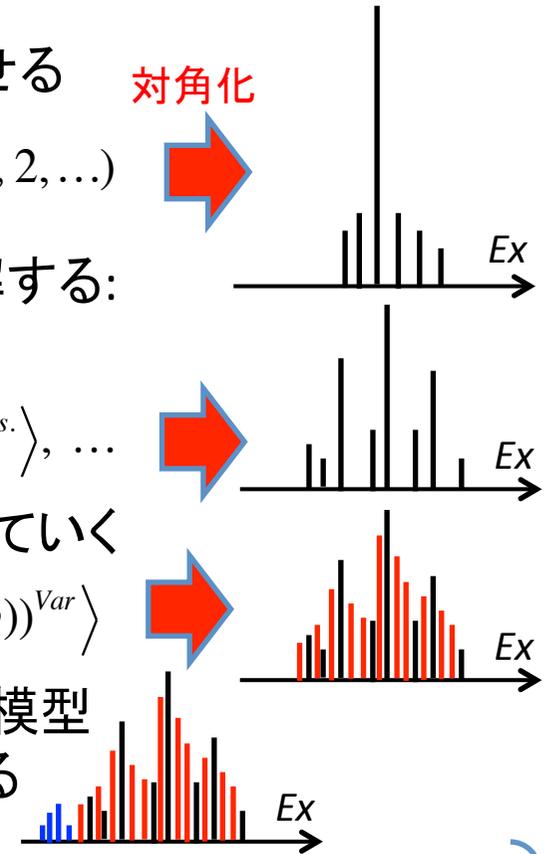
※実際には  $\exp(i\varepsilon \cdot E1)$  を軌道の励起の仕方で分解する:  
 $\exp(i\varepsilon \cdot E1(a \rightarrow b)), \exp(i\varepsilon \cdot E1(c \rightarrow d)), \dots$

$$\exp(i\varepsilon \cdot E1(a \rightarrow b)) |\Phi_i^{g.s.}\rangle, \exp(i\varepsilon \cdot E1(c \rightarrow d)) |\Phi_i^{g.s.}\rangle, \dots$$

ステップ3: ステップ2の基底を変分したものを重ね合わせていく

$$\exp(i\varepsilon \cdot E1(a \rightarrow b)) |\Phi_i^{g.s.}\rangle \xrightarrow{\text{共役勾配法による変分}} |\Phi_i(E1(a \rightarrow b))^{var}\rangle$$

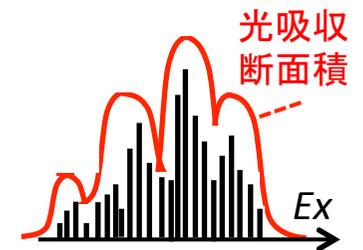
ステップ4: 低励起状態については独立にモンテカルロ殻模型により求め、最終的にステップ2.-4.の基底を重ね合わせる



E1遷移強度(B(E1))から光吸収断面積が求められる

$$\sigma(E) [\text{fm}^2] = \frac{16\pi^3 e^2}{9 \hbar c} \sum_{J_n^f} \frac{1}{\pi} \frac{\gamma}{(E - \underbrace{Ex(J_n^f)}_{\text{励起エネルギー}})^2 + \gamma^2} \cdot \underbrace{Ex(J_n^f)}_{\text{励起エネルギー}} \cdot \underbrace{B(E1; J^i \rightarrow J_n^f)}_{\text{E1遷移強度}}$$

ローレンツ幅:  $\gamma = \Gamma/2$  (調整パラメーター)



# 長寿命核分裂生成物への適用

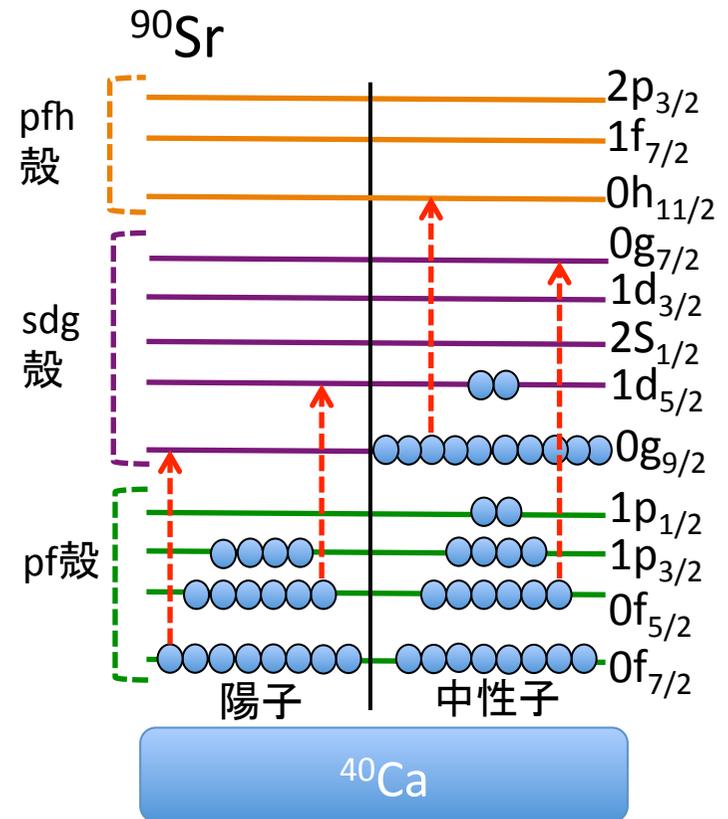
## 光吸収断面積の計算:

$^{88}\text{Sr}$ ,  $^{90}\text{Sr}$  (陽子数=38, 中性子数=50, 52),

$^{92}\text{Zr}$ ,  $^{93}\text{Zr}$  (陽子数=40, 中性子数=52, 53)

- 模型空間: pf - sdg - pfh(0h11/2, 1f7/2, 2p3/2)  
 バランス陽子数: 18, バランス中性子数: 30( $^{88}\text{Sr}$ ), 32( $^{90}\text{Sr}$ )  
 バランス陽子数: 20, バランス中性子数: 32( $^{92}\text{Zr}$ ), 33( $^{93}\text{Zr}$ )

- 有効相互作用:  $*V_{\text{MU}}(+M3YLS)$   
 上記の核種の低励起エネルギーレベルを再現する  
 ように調整(中心力を0.55倍) \* Y.Utsuno et al.,  
 PRC86, 051301(R) (2012)



## 1核種(偶々核)あたりの基底数と京の計算資源量

ステップ1: 基底状態の計算(50基底) => ~10,000ノード時間積

ステップ2: 200基底(基底状態の始めの20基底×10演算子)を生成

ステップ3: 400基底をステップ2の基底を変分して生成 => ~70,000ノード時間積

ステップ4: 低励起状態の計算(300基底) => ~100,000ノード時間積

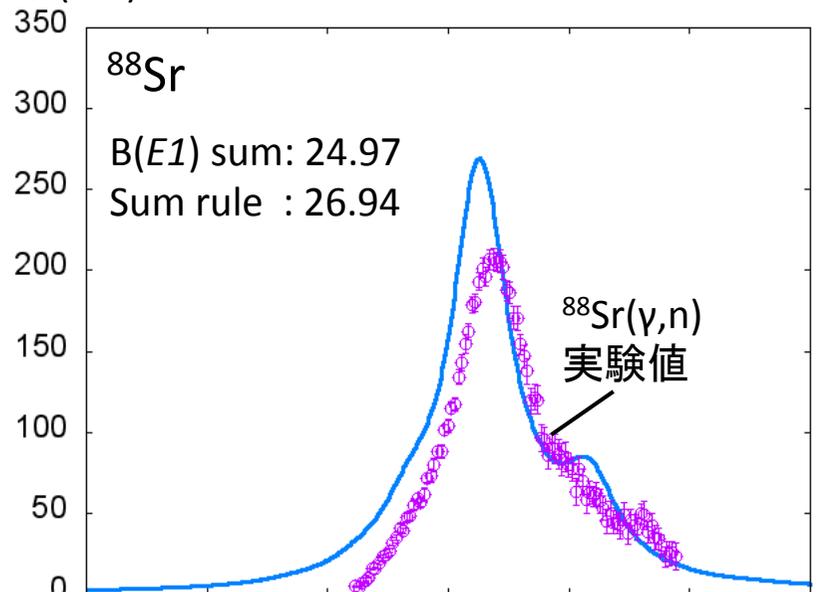
ステップ2-4の基底を用いた対角化計算 => ~20,000ノード時間積

4核種で~1,200,000  
ノード時間積

➡ E1励起スペクトルの記述に900基底, ステップ1-4合わせて~200,000ノード時間積

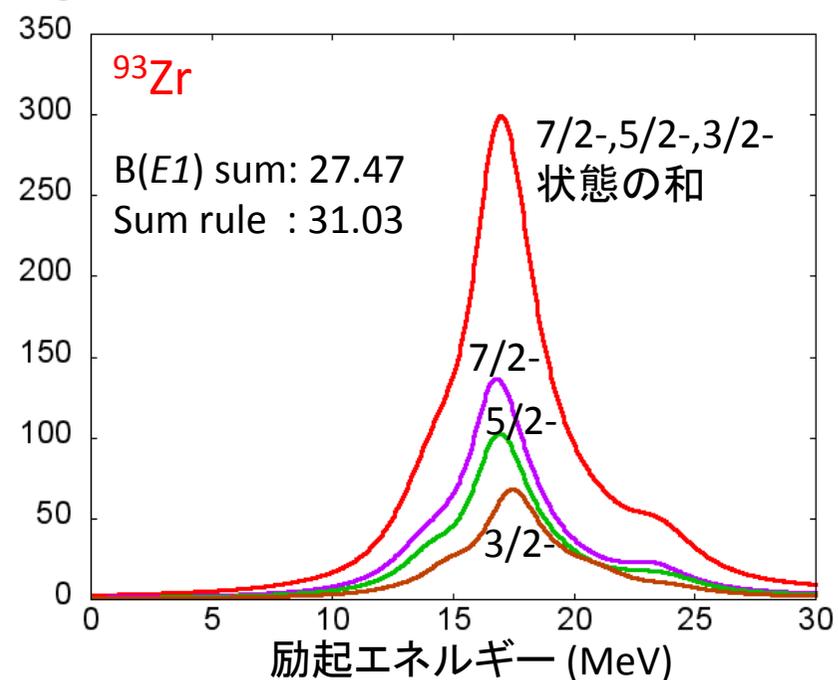
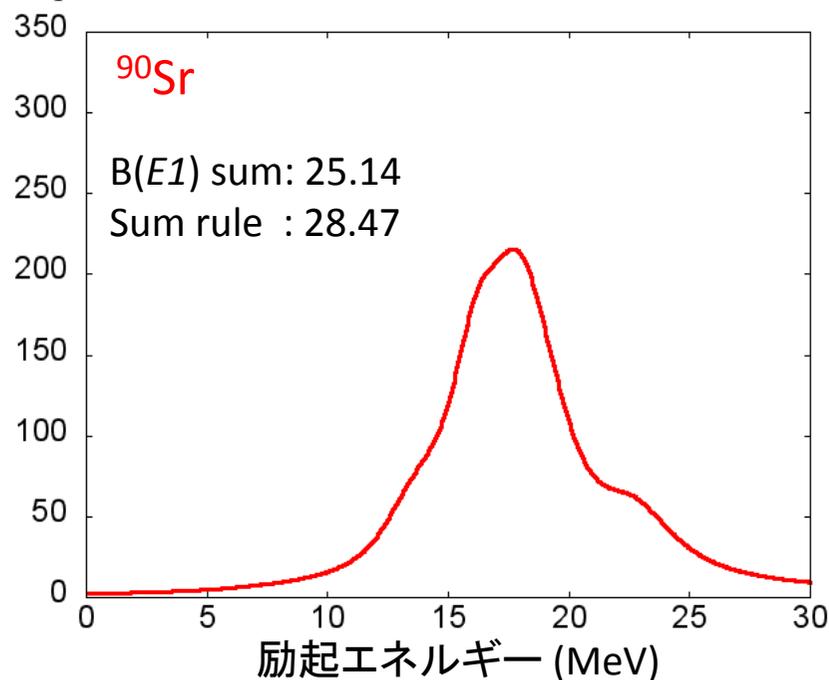
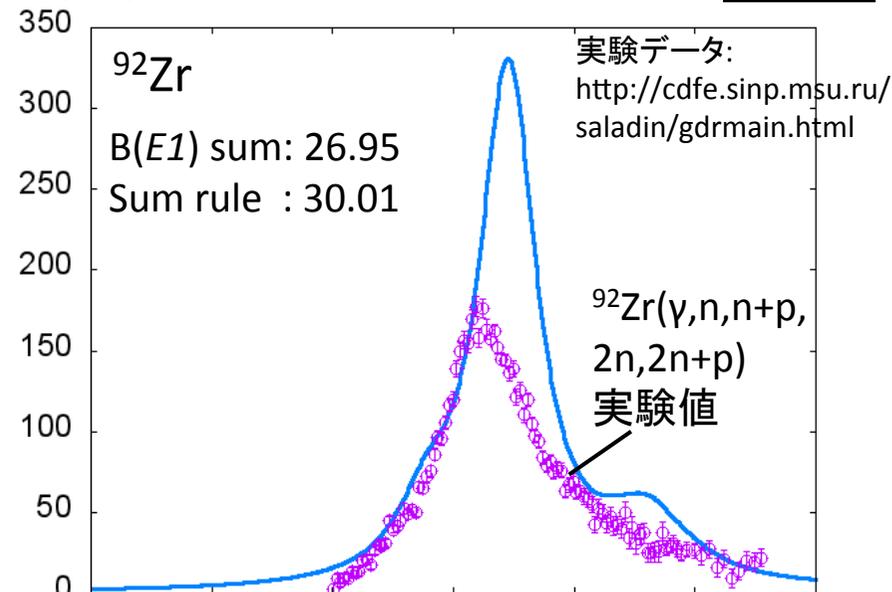
# 光吸収断面積の結果

断面積(mb)



断面積(mb)

※ローレンツ幅  $\Gamma = 2.5\text{MeV}$



# ポスト京に向けた展望

京～ポスト京まで: 核変換技術に必要な核データを計算するための  
理論的枠組み・原理の確立

- 光吸収断面積から $(\gamma, n)$ ,  $(n, \gamma)$ 反応断面積へ
- 寿命(life time)の精密計算

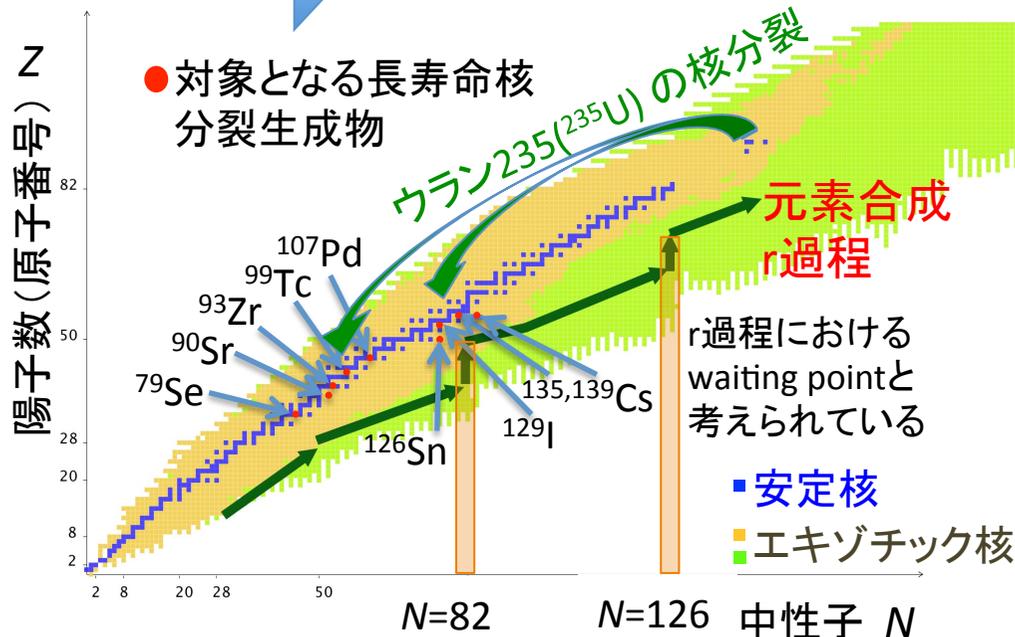
ポスト京:

実際に高精度な核データを取得  
=> 高精度な有効相互作用が必要(理論計算のインプット)

※系統的な理論計算(数10核種)により実験データとの整合性を計る必要がある(数10-数100回の試行計算)

京では数核種で1回の試行計算で年間の~10%計算資源量

ポスト京(京の~100倍の計算能力)で可能となる



今後の実験研究  
(理研のRIBFやKEKのKISS)の  
進展とともにエキゾチック核  
の研究、核変換研究や元素  
合成の理解に大きな寄与を  
与えることが期待できる