ポスト京における大規模核構造計算

独立行政法人日本原子力研究開発機構先端基礎研究センター 宇都野 穣

大塚孝治、清水則孝、阿部喬、本間道雄、鈴木俊夫、吉田亨、 岩田順敬、角田直文、富樫智章、角田佑介

概要·意義·必要性

- (1) **必要性の観点**:自然界の基本法則と宇宙の進化過程には多くの謎が残されている。実験・観測だけでは到達できない情報 を得るための精密計算や、素粒子から宇宙まで複数の階層にまたがるシミュレーションを実現し、未解決問題を解明できる。
- (2) 有効性の観点:「京」を通じて計算機科学者、応用数学者との連携体制が確立。更なる成果創出に向けて実験・観測との連携も進んでいる。計算科学を軸として分野を横断し研究手法を超えて連携する世界にも類のない体制が構築されつつある。
- (3) 戦略的活用の観点:ポスト「京」で初めて可能になる精密計算や階層をまたぐ現象の計算を大型実験・観測のデータと合わせることで、計算科学のみならず素粒子・原子核・宇宙物理学全体にわたる物質創成史解明へのブレークスルーが得られる。

内容の詳細	<u>サブ課題A「究極の物理法則と宇宙開闢の解明」</u>	ポスト「京」利用の必要性
中 性 子	 素粒子の精密実験と呼応する精密計算を実現し、標準模型を超える物理法則の発見を目指す。実現すれば、素粒子物理全体のブレークスルーとなる。物質と時空の究極理論として期待される超弦理論を解析して、将来的に基本法則の解明につなげる。 	 計算の精密化や複数の階層をまたがる大規模計算を実現するには、「京」の能力を大幅に超える計算量が必要。 計算の高速化・効率化を進めて、ポスト「京」の能力により最大限の科学的成果を得られるようにする。
暑	<u>サブ課題B「物質創成史の解明と物質変換」</u>	・ アプリケーションの内容に応じ、HPCI全体で最適な資源
体シミロレー	 元素合成機構を明らかにするため、バリオン間相互作用、原子 核の構造・中性子星の形成、超新星爆発・中性子星合体という複 数の階層をシミュレーションで橋渡しする。放射性核廃棄物の核 変換の基礎的データを与え、社会貢献につなげる。 	配分の実現を検討。 必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定) サブ課題A 60日、サブ課題B(バリオン間相互作用60日/
ションの京都大学	 サブ課題C「現代物理学が紐解く宇宙進化の謎」 ・初代星、銀河、巨大ブラックホールなどの異なる階層をつなぐシ ミュレーションを実現し、宇宙の進化を明らかにする。 	原子核・核変換60日/超新星爆発60日)、サフ課題C 60 日、を目安。全300日のうち100日をポスト「京」で、残りは他 のHPCI資源の活用を想定。

期待される成果・波及効果

- 素粒子標準理論を超える新しい物理法則の発見や、究極理論の理解に貢献
- 多様な元素が生まれた宇宙における物質創成過程を統一的に理解
- ・ 宇宙進化において天体が階層的に形成された仕組みや、銀河中心に巨大ブラックホールが存在する起源を解明
- 核変換の基礎データ提供を通じて、放射性核廃棄物の削減に向けた社会貢献が可能





新魔法数34の発見@RIBF

- 2001年にN=34に魔法数があるとの予言 T. Otsuka et al., PRL
- 長らく議論の的だったが、54Caの励起エネルギーの測定で決着

D. Steppenbeck et al., Nature 502, 207 (2013).

doi:10.1038/nature12522

Evidence for a new nuclear 'magic number' from the level structure of $^{54}\mathrm{Ca}$

D. Steppenbeck¹, S. Takeuchi², N. Aoi³, P. Doornenbal², M. Matsushita¹, H. Wang², H. Baba², N. Fukuda², S. Go¹, M. Honma⁴, J. Lee², K. Matsui⁵, S. Michimasa¹, T. Motobayashi², D. Nishimura⁶, T. Otsuka^{1,5}, H. Sakurai^{2,5}, Y. Shiga⁷, P.-A. Söderström², T. Sumikama⁸, H. Suzuki², R. Taniuchi⁵, Y. Utsuno⁹, J. J. Valiente-Dobón¹⁰ & K. Yoneda²

2006年頃までの実験をベースにした結論

H. I

HR





Nuclear Landscape

Ab initio Configuration Interaction Density Functional Theory

平均場模型 (密度汎関数法)

設模型 126 (配位間相互作用) 第一原理 stable nuclei r-process 計算 known nuclei in the second Diolon William . terra incognita neutrons

UNEDF SciDAC Collaboration: http://unedf.org/



殻模型計算の特徴

- ・ 模型空間が良く定義されるので、有効相互作用を核力から導ける。
 → 下の階層との連携に必要な要素
- 計算能力の向上に伴って精度を系統的に改善することが可能。

→ 上の階層との連携に必要な要素

現実は簡単ではない(or なかった)





モンテカルロ殻模型(MCSM)

- 良い基底を選択することで、対角化すべき行列サイズを著しく小 さくできる。 $|\Psi\rangle = \sum_{k=1}^{N_{MCSM}} f_k P^{J,\pi} |\phi_k\rangle \qquad |\phi_k\rangle = \prod_{\alpha=1}^{N} \left(\sum_{i=1}^{N_{sp}} c_i^{\dagger} D_{i\alpha}^{(k)} \right) - \rangle$
- 計算コストが模型空間に対してマイルドに増加(~3.6乗)^{最適化すべき}
 パラメータ

N₀₀

10

memory size

15



京時代におけるMCSMの発展

- 手法:より高効率、高信頼度の計算結果
 - エネルギー分散を用いた外挿法による厳密解の精度良い推定
 - 共役勾配法の実装による、より高効率な最適化
- 数値計算:計算資源のより有効的利用
 - 行列積への変換に基づく、高実効性能の達成
 - 高い並列効率の達成

レビュー論文



第一原理核構造計算への適用

T. Abe et al., Phys. Rev. C 86, 054301 (2012). 最近の発展は1日目の講演(阿部)参照。



- MCSMのフィージビリティを確認
- 模型空間の外挿、三体力の導入によって真の第一原理計算へ

Ni同位体:中性子過剰核構造への適用例

50

40

28

 $d_{5/2}$

*g*_{9/2}

 $p_{1/2}$

 $f_{\rm 5/2}$

*p*_{3/2}

 $f_{7/2}$

- ・ 中性子過剰Ni同位体:
 世界の加速器施設で 盛んに研究
 - ⁷⁸Niは二重閉殻?
- MCSM計算
 - $-20 \le Z(N) \le 56$ shell
 - 5.2 × 10¹⁵ dim. for ⁶⁸Ni
 - ⁶⁸Niにおける三重変形共存などを解明





Y. Tsunoda et al., Phys. Rev. C 89, 031301(R) (2014).

Xe,Ba同位体:中重核への適用例

N=80

(f) 0 ⁺₁

N. Shimizu et al., in preparation

- 変形などの集団運動の微視的理解
 - 50 ≤ Z(N) ≤ 82 shellで、Ba, Xeの系統的計算

N=78

- ・模型空間:中程度までの変形は表現可
- 次元: 2.2 × 10¹¹ for ¹³⁰Ba

(e) 0⁺₁

- Pairing + QQ相互作用
- 「形の相転移」を可視化

Ba

 $\langle Q_2
angle [{
m fm}^2]$

50

(d) 0_1^+

N=76



京からポスト京へ:エキゾチック核構造

	京時代のMCSM	ポスト京のMCSM
対象となる核	一部の中重核	N≤126程度までを網羅
模型空間	1主殻+α程度	3主殻程度
対象とする状態	基底状態と励起状態	強度関数を含めた励起状態も
有効相互作用	経験的 or schematic	微視的

- ポスト京の計算資源を得て、
 r-processや核変換への応
 用への道が開ける
 - 中重核のE1励起関数の記
 述に関する萌芽的研究を開
 始。詳しくは次の講演(富
 樫)にて。



r-processに必要な核構造インプット

- ベータ崩壊
 - 半減期
 - 遅発中性子
- (n, γ), (γ, n)断面積
 - ニュートリノ原子核反応

- ・高い励起状態

 ・大きな模型空間
- → 強大な計算パワーが必要
- ・ (核分裂 ← 殻模型の適用範囲外)

核変換にも資する

sdg-shellから3主殻(40 ≤ *N*(*Z*) ≤ 168)のMCSM計算をする には、Niの計算に対して(128/36)^{3.6} ≈ 100倍の計算時間 を要する



- 半減期: $1/t_{1/2} = \sum 1/t_{1/2}(i)$
 - 可能な励起状態について和を取る

 局起状態を含めた計算が必要
- 遷移の種類
 - 許容遷移:フェルミ遷移、ガモフテラー遷移
 - 禁止遷移





	ΔJ	Δπ	log <i>ft</i>
フェルミ遷移	0	+	~3
ガモフテラー遷移	0,1	+	3-6
第一禁止遷移	0,1,2	-	6-10



ガモフテラー遷移強度分布の記述



- 殻模型計算の有用性
 - *pf* shellまでは系統的に調べられており、実験との一致はかなり

K. Langanke and G. Martinez-Pinedo, Rev. Mod. Phys. 75, 819 (2003).



不安定核における最近のトピックス

- RIBF等において、不安定核のベータ崩壊のデータが蓄積
 - ⁵⁶Niのガモフテラー分布:ピークが二つに分裂=⁵⁶Niの二重閉殻構造の破れ
 - N=50近辺の系統的データ:⁷⁸Niの二重閉殻構造を示唆



Z. Y. Xu et al., Phys. Rev. Lett. 113, 032505 (2014).

重い中性子過剰核のベータ崩壊

- フェルミ面近傍の軌道が陽
 子と中性子とでずれる
 - クーロン力
 - 過剰中性子
- ガモフテラー遷移分布を記 述するには、かなり多くの軌 道を考慮しなくてはならない
- 低励起状態へは禁止遷移
 の寄与も考慮に入れなくて
 はならない









遅発中性子放出



理論計算の現状例



- 殻模型の問題:模型空間が足りているか?
- QRPAの問題:多体相関が十分か?
- 両者に共通の問題:有効相互作用?

(*n*, γ) 反応断面積の記述

- (Z, N)の標的核が中性子を捕獲し、(Z, N+1)核になる
- 安定核近傍で有効な方法
 - 統計模型(Hauser-Feshbach): (Z, N+1)核の準位に吸収された後に中性子
 を放出
 - 準位密度が重要、それぞれの準位構造には敏感でない
- ドリップライン近傍では
 - S_nが小さく、準位密度が小さいため、統計模型の前提が成り立たない



直接捕獲:ドリップライン近傍

 ・ 共鳴準位を経由せず、中性子の入 射波を標的核の準位に直接捕獲

反応断面積 =

- Σ(入射波と捕獲される準位間の電磁行列要素)
- ×(捕獲後の状態の分光学的因子) ×(位相空間(エネルギー差)のファクター
- 中性子過剰核(特に閉殻近傍)では、
 直接捕獲が主となる

核(多体)構造に起因する因子

*F*1

10¹

 10^{0}

 10^{-}

10⁻²

Cross section (mb)



DSD DSD HF × Rauscher *et al.* 125 130 135 A

cross sections of Sn isotopes

at 30 keV

直接捕獲は核構造に非常に敏感

準位構造を強く反映 中性子が偶偶核に吸収される場合 始状態(標的核+中性子) • a. 1/2+: s波 b. 1/2-, 3/2-: p波 E1遷移後の量子数 a. 1/2- or 3/2-: s波 b. 1/2+, 3/2+, or 5/2+: *p*波 S。以下の準位に該当する状態が あるかどうかで大きく変わる 一般に、一粒子準位(殻構造)が 正しいかどうかが様々な物理量の 記述能力に決定的に重要



不安定核の殻構造

- 安定核のものと大きく異なることがわかってきた
 - 魔法数の消滅、新魔法数の出現
- "殼進化":有効相互作用が殻構造を著しく変化させる
 - 現象論的なポテンシャル描像では不十分
 - 有効相互作用としては重要視されてこなかったテンソルカがスピン軌道分離エネルギーを変化させることがわかった。



T. Otsuka et al., Phys. Rev. Lett. 95, 232502 (2005).

殻進化の統一的記述に向けて

1. 半現象論的



- 現象論的中心力
- 様々な効果を繰 り込む
- 広く有用そう

T. Otsuka et al., Phys. Rev. Lett. 104, 012501 (2010).

微視的知見に

よってサポート

殻模型計算への適用例

Y. Utsuno et al., Phys. Rev. C 86, 051301(R) (2012) T. Togashi et al., Phys. Rev. C 91, 024320 (2015)

- 2. フル微視的
 - 多主殻に対する処方箋が確 立(1日目、角田)
 - 三体力によってこれまでの多 くの問題が解決されそう

Binding energies of Ca isotopes





使用済燃料中の主な長寿命核種

JAEA

			核種	半減期	線量換算係数 (<i>μ</i> Sv/kBq)	含有量 (1トン当たり)			核種	半減期	線量換算係数 (<i>μ</i> Sv/kBq)	含有量 (1トン当たり	
			U-235	7 <mark>億年</mark>	47	10kg		12	Se-79	29万5千年	2.9	6g	
			U-238	45億年	45	930kg	ŧŧ		Sr-90	28.8年	28	0.6kg	
		_						7r - 93	153万年	11	1ka		
	超 ウ ラン 元素 (TRU)		核種	半減期	線量換算係数 (<i>μ</i> Sv/kBq)	含有量 (1トン当たり)	分裂_	分裂生成物	Tc-99	21万1千年	0.64	1kg	
ア			Pu-238	87.7年	230	0.3kg	生成		Pd-107	650万年	0.037	0.3kg	
クチ			Pu-239	2万4千年	250	6kg	物		Sn-126	10万年	4.7	30g	
)-				Pu-240	6,564年	250	3kg	(FP)	P)	I-129	1,570万年	110	0.2kg
ィド			Pu-241	14.3年	4.8	1kg			Cs-135	230万年	2.0	0.5kg	
-							_		Cs-137	30.1年	13	1.5kg	
, ,			核種	半減期	線量換算係数 (<i>μ</i> Sv/kBq)	含有量 (1トン当たり)		L					
		P	Np-237	214万年	110	0.6kg	綺	量	換算係数:				
		£	Am-241	432年	200	0.4kg		1	放射性核種を人体に摂取した時の影響を 示す指標。 放射能(ベクレル)あたりの被 ばく(シーベルト)で示す。				
		イ	Am-243	7,370年	200	0.2kg							
		L ド L	Cm-244	18.1年	120	60g			科学	学技術·学術審	資料2-4 議会研究計画・i	平価分科会	
									1.1				

原子力科学技術委員会 群分離·核変換技術評価作業部会(第2回) H25.9.9

核変換の方法

- 中性子吸収を用いたものが主に検討されている
 - アクチノイドについては(n, fission)、長寿命核分裂片(LLFP)は(n, γ)
 - 断面積(熱中性子吸収の断面積がかなり大きいものが多い)
 - コスト(核分裂でたくさん出る)
 - ADS(加速器駆動未臨界炉)、高速炉



核変換対象核種 (3/3) 核変換対象とするLLFP核種

- 公衆被ばくの観点から、I-129、Cs-135、Se-79、Zr-93が候補。
- 潜在的な有害度の観点から、Tc-99、Sn-126が追加。
- I-129: 中性子捕獲によってXeの安定同位体となる。高温 において安定で被覆管共存性の高い化学形態の選定が課 題。
- Tc-99: 中性子捕獲によってRuの安定同位体となる。発生 量が比較的大きい。
- Cs-135: 中性子捕獲によってBaの安定同位体となる。Cs-135の同位体分離が課題。

 Cs-135の核変換については有望な概念が見つかっていない。同位 体分離技術のブレイクスルーが必要である。

> 資料2-4 科学技術・学術審議会研究計画・評価分科会 原子力科学技術委員会 群分離・核変換技術評価作業部会(第2回) H25.9.9

(*n*, γ) vs. (γ, *n*)



- (*n*, γ)
 - 中性子数を増やす
 - より中性子数の少ない同位体からのfeedingが問題になりうる
- (γ, *n*)
 - 中性子数を減らす
 - より中性子の多い同位体は半減期が短いことが多く、そこからのfeedingが 問題になりにくい
 - 中性子数を減らす他の反応として、(n, 2n)もある(理研で検討されている)



- (中性子分離エネルギーよりも高いところに)ピグミー共鳴があれ
 ば、より低いエネルギーのγ線で効率よく(γ, n)反応を起こさせる可
 能性
 - → エネルギー収支を改善可能

⁴⁸Ca:フィージビリティスタディ

- ・ 殻模型をE1励起に適用した例
 はほとんどない
 - 巨大行列の対角化が要るため
- 軽い核で有用性をテスト
 - Lanczos法によって強度関数を効
 率よく求められることが知られている
 - *H*|Ψ⟩, *H*²|Ψ⟩,演算

MCSMでは、*H*|Ψ)が行えないので 同じようにはいかない。異なるアプ ローチが必要 → 次の講演(富樫)

Y. Utsuno, N. Shimizu et al., Prog. Nucl. Energy (in press); N. Shimizu et al., in preparation.

ハミルトニアン行列の次元数

	1ħω	(1+3)ħω
⁴⁴ Ca	1×10^{5}	4×10^{8}
⁴⁸ Ca	3×10^{6}	8×10 ⁹

KSHELL Code (Shimizu) run on BX900@JAEA and FX10@Tokyo



まとめ

- 大規模殻模型計算(モンテカルロ殻模型計算)は、
 - 計算能力の向上に伴って系統的に精度の改善が可能
 - 核力から導かれる有効相互作用が構築可能
 - であり、ポスト京のアプリとして望ましい性質を備える。
- ・京時代においては、モンテカルロ殻模型計算の有用性を実証し、
 中性子過剰核の低励起状態の構造の解明や第一原理核構造計
 算のフロンティア拡大に貢献した。
- ポスト京(一部京でも進行中)においては、3主殻程度まで模型空間を広げ、中重核全般の核構造を統一的に記述するとともに、強度関数(ガンマ線、ガモフテラー)等の励起状態を精度良く計算することで、元素合成や原子カへの応用にも資することを目指す。
 核力理論、有効相互作用理論やRIBF等の実験研究との密接な関係が重要

原子質量

 多体相関が十分に入っていないとある 種のsystematic errorが出る





M. Honma et al., Phys. Rev. C 69, 034335 (2004).