

課題名 (タイトル) :

格子 QCD を用いた軽い原子核の直接計算

利用者氏名 : 山崎 剛*

所属 : *計算科学研究機構 研究部門 連続系場の理論研究チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

本申請で行った計算は、計算科学研究機構 連続系場の理論研究チーム 蔵増 嘉伸チームリーダー、同チーム 石川 健一客員研究員、同機構 宇川 彰副機構長と数年前から継続して行っている研究の一部である。

核子間の強い相互作用により核子少数多体系束縛状態として存在している質量数の小さな原子核の性質を、強い相互作用の第一原理計算である格子 QCD (格子量子色力学) を用いて、定量的に理解することを本研究の大きな目的とする。この研究はクォーク・グルーオン→陽子・中性子→原子核と言った異なるエネルギースケールの物理を、素粒子標準模型の強い相互作用の第一原理である QCD から理解する事を目指さず、非常に挑戦的な研究である。

しかし、この研究はまだ初期段階であり、現段階での目標は既知の軽い原子核の束縛エネルギーの再現及び、魔法数等の原子核の基本的な性質の定量的理解である。格子 QCD 計算により、束縛エネルギー等の基本的な物理量を再現できれば、格子 QCD を用いた原子核計算の信頼性が確かめられるはずである。この初期段階の目標の達成は、その後に計画している中性子過剰核等の未だに性質の良く理解されていない原子核を研究するための基礎となるため、原子核を QCD から直接計算する研究を進展させていくために、非常に重要である。

上で述べたように格子 QCD を用いた原子核直接計算はまだ新しい分野であり、2009 年以前は最も簡単な原子核である重水素の計算ですら報告されていなかった。この状況を打破し、強い相互作用の第一原理計算から定量的に原子核を理解するため、2009 年から軽い原子核に注目した研究を開始した。最初の計算は試験的なものであり、現実世界(パイ中間子質量 135MeV)よりも

クォーク質量がかなり重いパラメータ(パイ中間子質量が 800MeV)で計算を行った。その結果、この重いクォークの世界では、ヘリウム 4、ヘリウム 3、重水素が形成される事を示した[1,2]。それらの束縛エネルギーの結果は、実験値と同じオーダーであり、試験的計算としては良好の結果を得た。また、クォーク質量が重い世界では、実験では観測されていない二中性子原子核が形成されることも示唆した[2]。その後、現実のパイ中間子よりは重い、この試験的計算よりも現実に近いパラメータでの計算を行い、上記と同様の結果が得られることを確認した[3,4]。これらの結果は、異なるパイ中間子質量で計算を行ったアメリカの 2 グループ [5,6]により、定性的に正しいことが確認されている。以下に現在得られている、ヘリウム 4 原子核と重水素についての束縛エネルギーの結果をパイ中間子質量の関数として図 1、2 に示す。

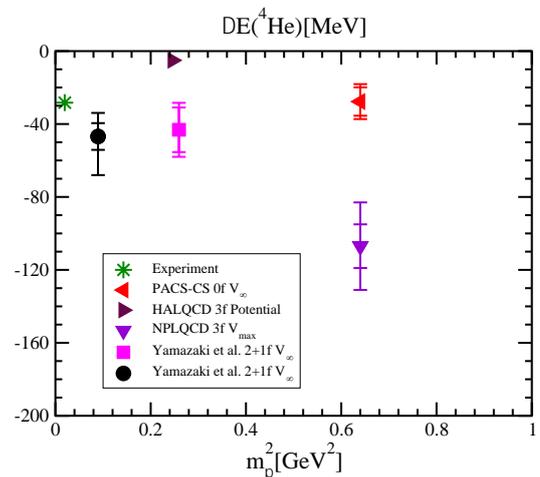


図 1. これまでのヘリウム 4 原子核束縛エネルギーの結果。横軸はパイ中間子質量の 2 乗。赤、ピンク、黒印が我々の結果。

図 1 に示したヘリウム 4 原子核の結果は、誤差が大きく、パイ中間子が軽くなると実験値から離れていくように見えるため、現実のパイ中間子質量で実験値を再現できるかは、まだ不明確である。図 2 の重水素の結果では、パイ中間子が軽くなっても実験値に近づく

傾向が見えていない。つまり、現状では計算に用いたパイ中間子質量が現実世界と比べ大きい事による系統誤差が評価できていないため、我々のこれまでの研究で得られた束縛エネルギーと実験値との直接比較はできていない。実験との比較を行うためには、現実世界に非常に近いパイ中間子質量での計算が極めて重要である。この目的のため、本申請では、京コンピュータで生成されたゲージ配位[7]である、一辺が 8.1fm という大体積(格子サイズ 96^4)、かつ現実に極めて近い 145MeV パイ中間子質量での質量数 4 以下の軽原子核束縛エネルギー計算を行った。

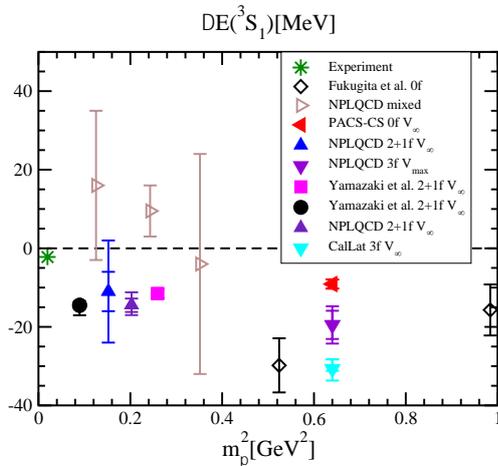


図 2. これまでの重水素束縛エネルギーの結果。横軸と我々の結果の印は図 1. と同じ。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本申請を行う以前から、様々な研究所(筑波大学計算科学研究センター、東京大学情報基盤センター、理研計算科学研究機構など)の大型計算機を用いて、本申請の目的である格子サイズ 96^4 、145MeV パイ中間子質量での軽原子核計算を続けてきた。しかし、この計算は格子 QCD を用いた原子核計算の中で、最も現実に近いパラメータを採用しているため、統計誤差を抑えることが非常に難しく、満足のできる統計精度の結果を得ることができていなかった。

そこで本申請では、前年度までに終了していた約 3 万測定から、さらに統計をあげるために、原子核束縛エネルギー測定の計算を行った。計算には超並列計算システム(GW-MPC)の 128 ノード×32 コアをフラット MPI で利用した。1 測定当たり約 1.5 時間のジョブを複数同時に実行し、平成 28 年 2 月時点で約 3000 測定を

計算した。

原子核束縛エネルギー計算には、従来の格子 QCD 計算で使われている、虚時間相関関数からハドロン質量を計算する方法を応用している。この方法は相関関数の大きな虚時間での振る舞いから、相関関数に寄与する基底状態のエネルギーを計算するという単純な方法である。しかし、この方法を原子核計算に応用する上で、いくつかの大きな困難が存在する。その一つが、クォーク伝搬関数から原子核相関関数を構成するときの膨大な計算コストである。ヘリウム 4 原子核の場合、このコストは通常のハドロンの場合と比べ、約 25 万倍になる。この困難のため、2009 年以前に原子核計算が行われてこなかった。我々は、2010 年の論文[1]で、この原子核相関関数の計算コストを十分抑える方法を提案し、実際に計算が可能であることを示した。本申請の計算でも、我々の提案した方法を採用して、原子核相関関数の計算を行った。

3. 結果

本申請の計算で行った約 3000 測定と、その他の計算機資源を利用した、これまでの計算を合わせて、約 4 万測定での暫定的な結果を報告する。ヘリウム 4、ヘリウム 3、重水素、二中性子系についての有効エネルギー差を図 3~6 にまとめる。

有効エネルギー差とは、原子核相関関数と、核子相関関数を原子数乗したもの(例えば、ヘリウム 4 原子核の場合は 4 乗)の比をとり、その比の対数を取った量である。図にはそれらを虚時間の関数として表している。虚時間 t の十分大きな領域では、それぞれの相関関数の基底状態の寄与が支配的になるため、有効エネルギー差が t に依存しない領域から、原子核の束縛エネルギーに対応する量を見積もる事ができる。

図 3 に示すヘリウム 4 原子核の結果は、まだ統計誤差が大きく、 t が大きな領域ではゼロと矛盾し無い結果になっている。一方で、実線で表した実験値とも矛盾はしていないため、今後、統計をあげることで、統計的に有意な結果を求め、実験値を再現できるかを検証することが重要である。

図 4 に示すヘリウム 3 の結果は、ヘリウム 4 よりも

統計誤差が小さく、 t が大きな領域で統計的にゼロとは離れた結果が得られている。有効エネルギー差の t 依存性が小さくなる $t > 8$ では、統計誤差が大きい、実線の実験値よりも大きな束縛エネルギーの結果になっている。統計誤差を小さくしたときに、この違いが顕著になるか、または無くなるかを、今後確かめることが必要である。

重水素の結果を図 5 に示す。重水素の統計誤差は、ヘリウム原子核の場合と比べ、よく抑えられている。有効エネルギー差の t 依存性が小さくなる $t > 8$ でも、有限の値の結果が得られているが、実験値を表す実線とは矛盾しているように見える。この原因の一つは、重水素の束縛エネルギーは約 2MeV と非常に小さく、本計算で用いた一辺が 8.1fm という大きな体積を用いても、束縛エネルギーに対する有限体積効果が大きいためであると考えられる。重水素束縛エネルギーの有限体積効果の大きさは解析的に見積もることができるので、有限体積効果を取り除き、無限体積での束縛エネルギーを見積もる解析を今後行っていく予定である。

図 6 は二中性子系の結果である。統計誤差は、重水素と同様に良い精度で計算されている。実験では二中性子原子核は存在しないので、無限体積ではこの系のエネルギー差はゼロになるはずである。しかし、有限体積効果により、二体散乱の大きさに依存したエネルギー差が生じることが知られている。原理的には、このエネルギー差から二中性子散乱の散乱長を見積もることができるが、まだ統計精度が不足しているため、その見積もりには至っていない。また、重いパイ中間子を用いた計算で存在していた二中性子原子核が、この質量では実験と同じく存在しないかどうかについての検証も行っていく予定である。

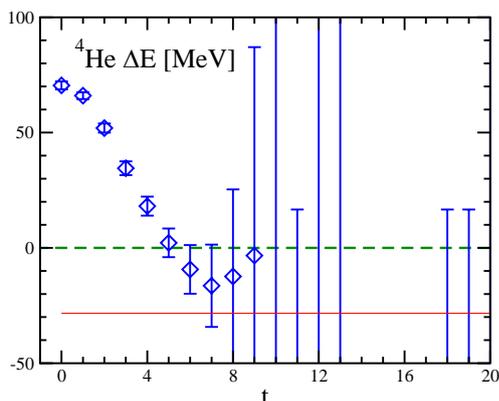


図 3. ヘリウム 4 原子核の有効エネルギー差。横軸は虚時間。赤線は実験値を表す。

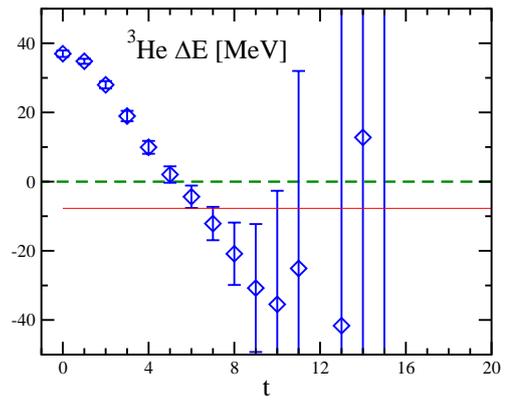


図 4. ヘリウム 3 原子核の有効エネルギー差。横軸、赤線は図 5 と同じ。

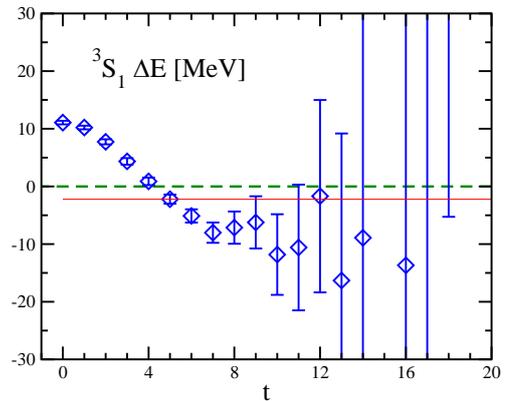


図 5. 重水素の有効エネルギー差。横軸、赤線は図 5 と同じ。

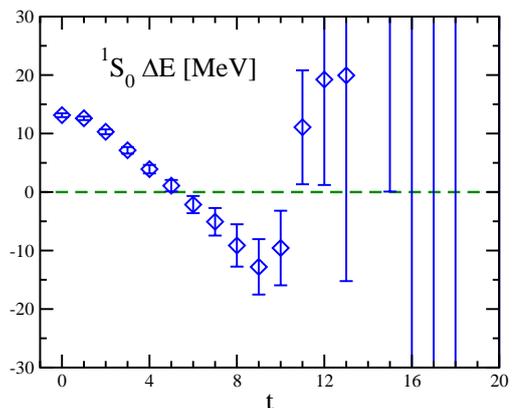


図 6. 二中性子系の有効エネルギー差。横軸は虚時間。

4. まとめ

強い相互作用の第一原理計算である格子 QCD を用いて、軽原子核の基本的な性質を数値的に理解するための研究を行っている。これまでの格子 QCD を用いた原子核計算よりも現実に近いパラメータを採用した計算から、ヘリウム 4、ヘリウム 3 と重水素の束縛エネルギー

一、及び二中性子系の物理量の実験値を再現できるかの検証を行うことが本申請の目的である。現時点では、統計精度が足りていないため、結論は出ていないが、今後も計算を継続していく予定である。

5. 今後の計画・展望

特にヘリウム 4 原子核束縛エネルギーについて、統計的に有意な結果を得るためには、原子核測定計算を継続する必要がある、来年度も継続計算のための申請を行う予定である。直近の目標は、測定数を 2 倍の約 8 万測定にすることである。しかし、超並列計算システム (GW-MPC) の一般利用だけでは計算機資源が十分ではないため、この目標は達成できない。そこで、全国共同利用施設の大型計算機を利用して、この目標達成を目指す。二核子系はヘリウム原子核に比べると統計精度が良いので、二核子系の計算から十分な精度で結果が得られた場合、その時点で二核子系の成果を論文としてまとめ、科学雑誌へ投稿する予定である。ヘリウム原子核については、その後も継続計算を行い、意味のある結果が得られれば、成果をまとめる方針である。

参考論文

1. T. Yamazaki, Y. Kuramashi, and A. Ukawa (PACS-CS Collaboration), Physical Review D81, 111504(R) (2010)
2. T. Yamazaki, Y. Kuramashi, and A. Ukawa (PACS-CS Collaboration), Physical Review D84, 054506 (2011)
3. T. Yamazaki, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, and A. Ukawa, Physical Review D86, 074514 (2012)
4. T. Yamazaki, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, and A. Ukawa, Physical Review D92, 014501 (2015)
5. S. Beane et al. (NPLQCD Collaboration), Physical Review D87, 3, 034506 (2013)
6. E. Berkowitz et al. (Callat Collaboration), arXiv:1508.00886
7. K.-I. Ishikawa et al. (PACS Collaboration), PoS LATTICE2015 (2015) 075

平成 27 年度 利用研究成果リスト

【国際会議、学会などでの口頭発表】

- 1) Lattice Nuclei Nuclear physics and QCD - Bridging the gap -
July 6-10, 2015, European Centre for Theoretical Studies in
Nuclear Physics and Related Areas (ECT*), Trento, Italy,
Takeshi Yamazaki, “Light nuclei from 2+1 flavor lattice QCD”

- 2) The 33rd International Symposium on LATTICE FIELD THEORY (LATTICE 2015)
July 14-18, 2015, Kobe International Conference Center, Kobe, Japan
Takeshi Yamazaki, “Light nuclei and nucleon form factors in $N_f=2+1$ lattice QCD”

- 3) 5th International Workshop on Lattice Hadron Physics (LHPV),
July 20-24, 2015, Conference Centre of the Cairns Colonial Club Resort, Cairns, Australia,
Takeshi Yamazaki for PACS Collaboration, “Light nuclei and nucleon form factors in $N_f=2+1$ lattice
QCD”

- 4) Long-term and Nishinomiya-Yukawa Memorial International Workshop on “Computational Advances in
Nuclear and Hadron Physics” (CANHP2015), September 21-October 30, 2015, Yukawa Institute of Theoretical
Physics (YITP), Kyoto University, Kyoto, Japan,
Takeshi Yamazaki for PACS Collaboration, “Light nuclei and nucleon form factors in $N_f=2+1$ lattice
QCD”

- 5) Symposium on Quarks to Universe in Computational Science (QUCS 2015)
November 4-8, 2015, Nara Kasugano International Forum IRAKA, Nara, Japan,
Takeshi Yamazaki for PACS Collaboration, “Light nuclei and nucleon form factors from lattice QCD”