

トリプルアルファ反応率の量子力学計算

矢花一浩

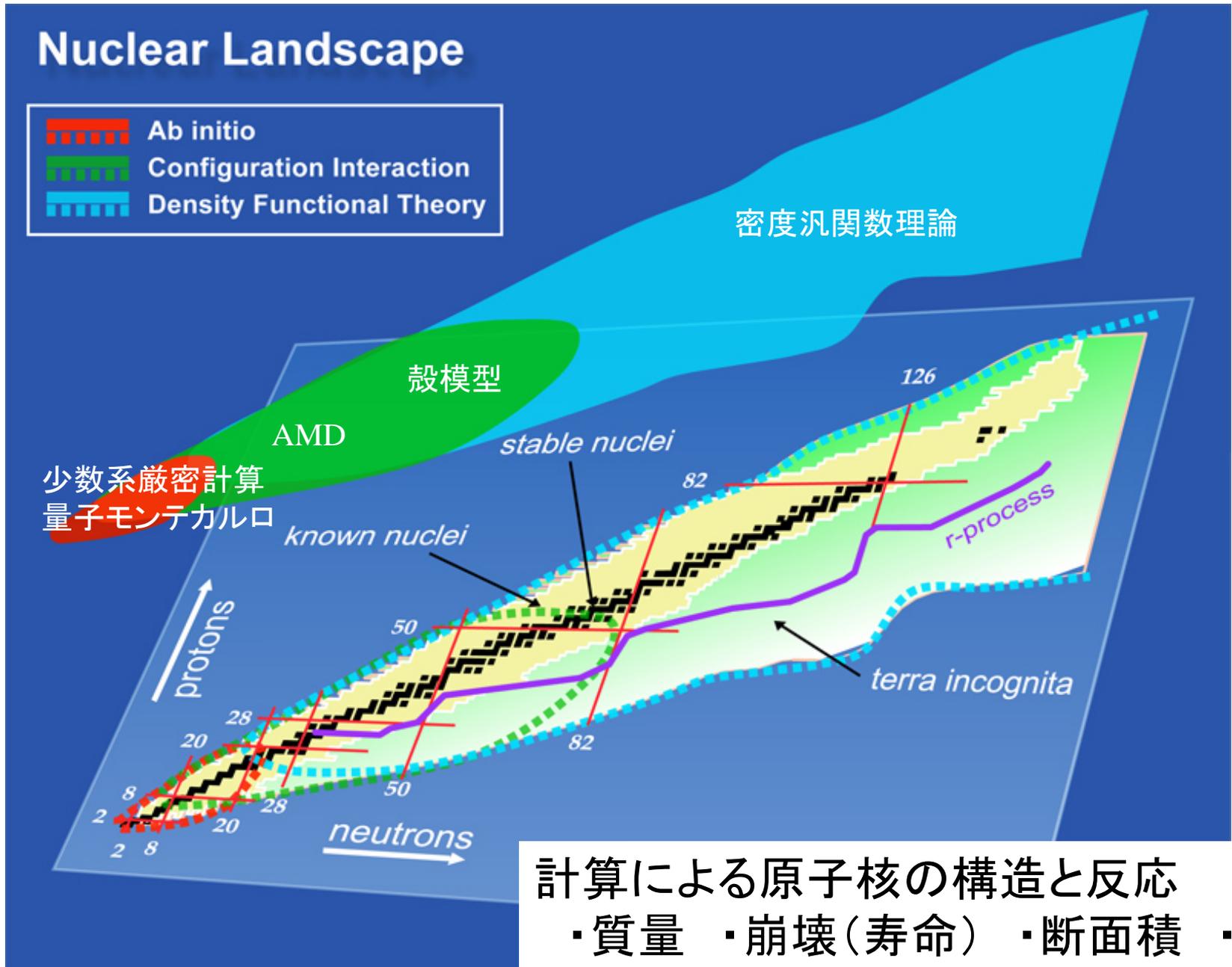
筑波大学計算科学研究センター

共同研究者:

赤堀孝彦(筑波大数理物質科学研究科→日立製作所)

船木靖郎(理化学研究所仁科加速器センター)

陽子と中性子の多体系としての原子核



元素の起源・星の構造に関わる原子核の情報

— 構造計算(基底状態、励起状態)から反応(率)へ —

- 水素燃焼
少数核子系反応の厳密計算
- ヘリウム燃焼、・・・
トリプルアルファ反応、 $^{12}\text{C}(\alpha,\gamma)^{16}\text{O}$ 、・・・
- s 過程、r 過程
原子核質量、ベータ崩壊、 (n,γ) 反応、・・・

Contents

1. トリプルアルファ反応の歴史と現状
2. 炭素原子核 - ^{12}C - の構造
3. トリプルアルファ反応率の難しさ
4. 光捕獲反応率の虚時間理論

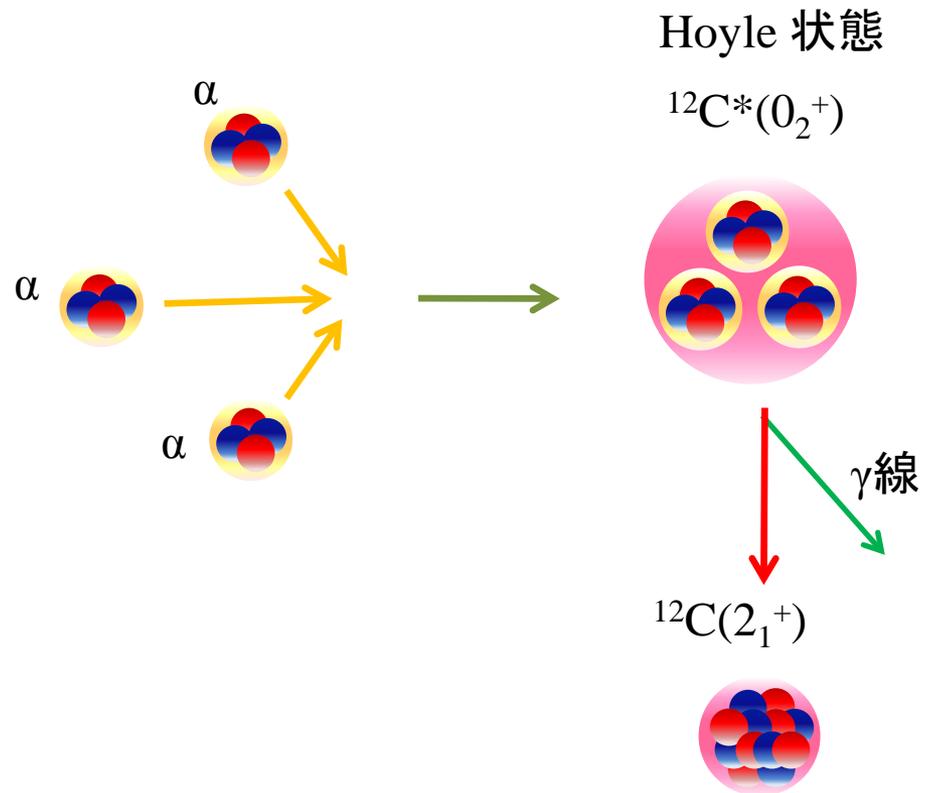
トリプルアルファ反応を巡る経緯(1)

F. Hoyle, 1952

^{12}C 核の 3α 閾値近傍に
共鳴状態の存在を予測。

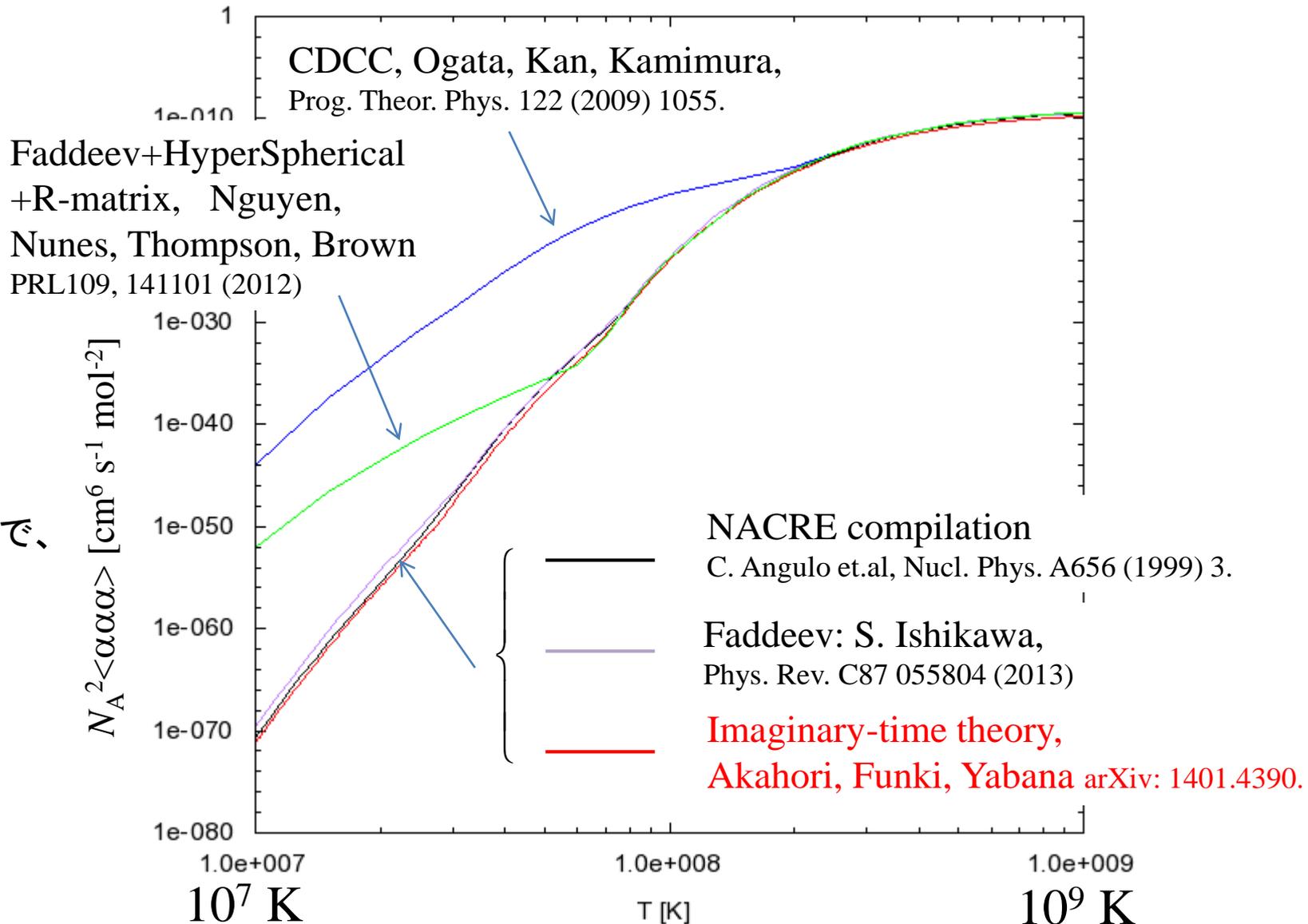


後にFowlerらにより
共鳴状態が発見される。



トリプルアルファ反応を巡る経緯(3)

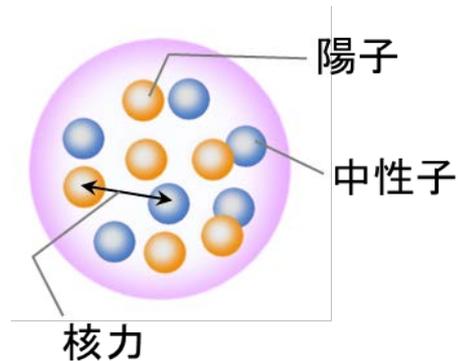
量子3体計算に基づく反応率、2009~



Contents

1. トリプルアルファ反応の歴史と現状
2. 炭素原子核 - ^{12}C - の構造
3. トリプルアルファ反応率の難しさ
4. 光捕獲反応率の虚時間理論

原子核の中の、陽子・中性子の独立粒子運動



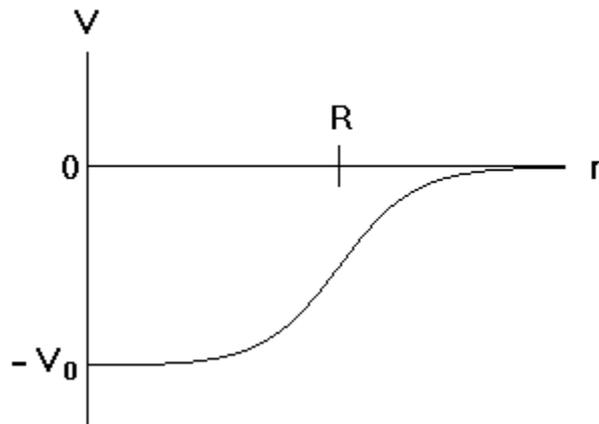
基本的な見方

- 1体近似
- 独立粒子運動
- 平均場ポテンシャル

陽子と中性子が原子核の中で勝手に動いている。



魔法数、殻模型、密度汎関数理論、...



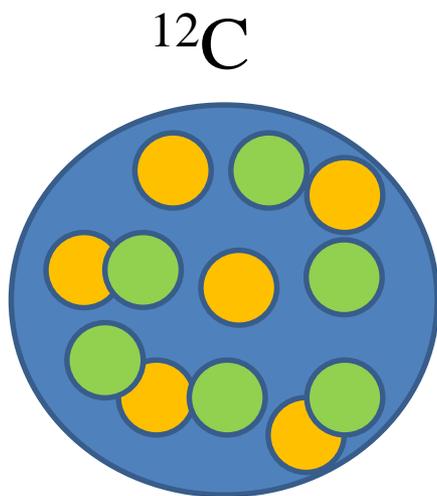
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \phi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\vec{r})$$

軽い原子核では、独立粒子描像で理解できない状態が多数ある。

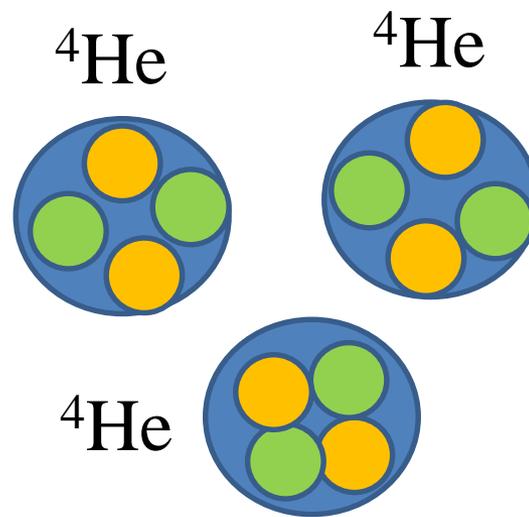
^{12}C 核のHoyle状態もその一つ

小さなエネルギー(7.27 MeV)で、 ^{12}C を3つの α 粒子に分解できるため、**クラスター構造**が発達する。

cf: 16.0 MeV 陽子の分離エネルギー
18.7 MeV 中性子の分離エネルギー

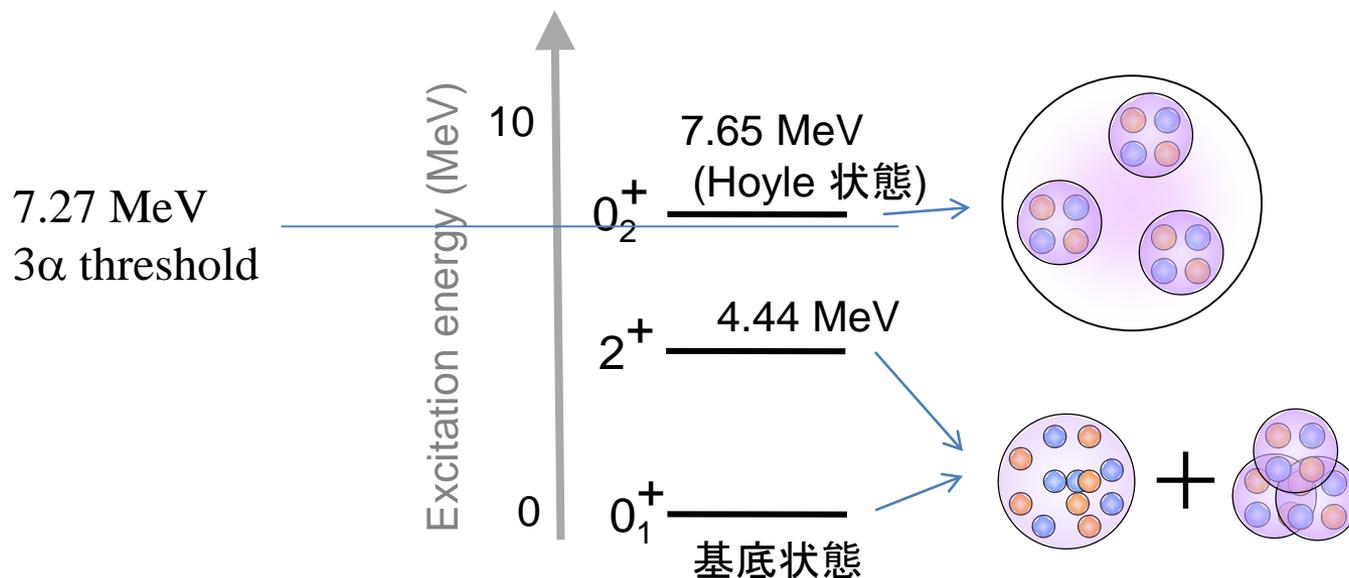


結合エネルギー
92.16 MeV



$28.29 \text{ MeV} * 3 = 84.87 \text{ MeV}$

^{12}C 原子核の基底状態とHoyle状態の構造 (模型による理解)



Hoyle状態の現在の理解: α 粒子がボーズ凝縮を起こした、空間的に広がった状態

Tohsaki, Horiuchi, Schuck, Roepke, PRL87, 192501 (2002).

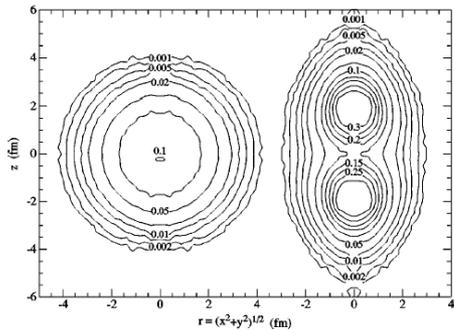
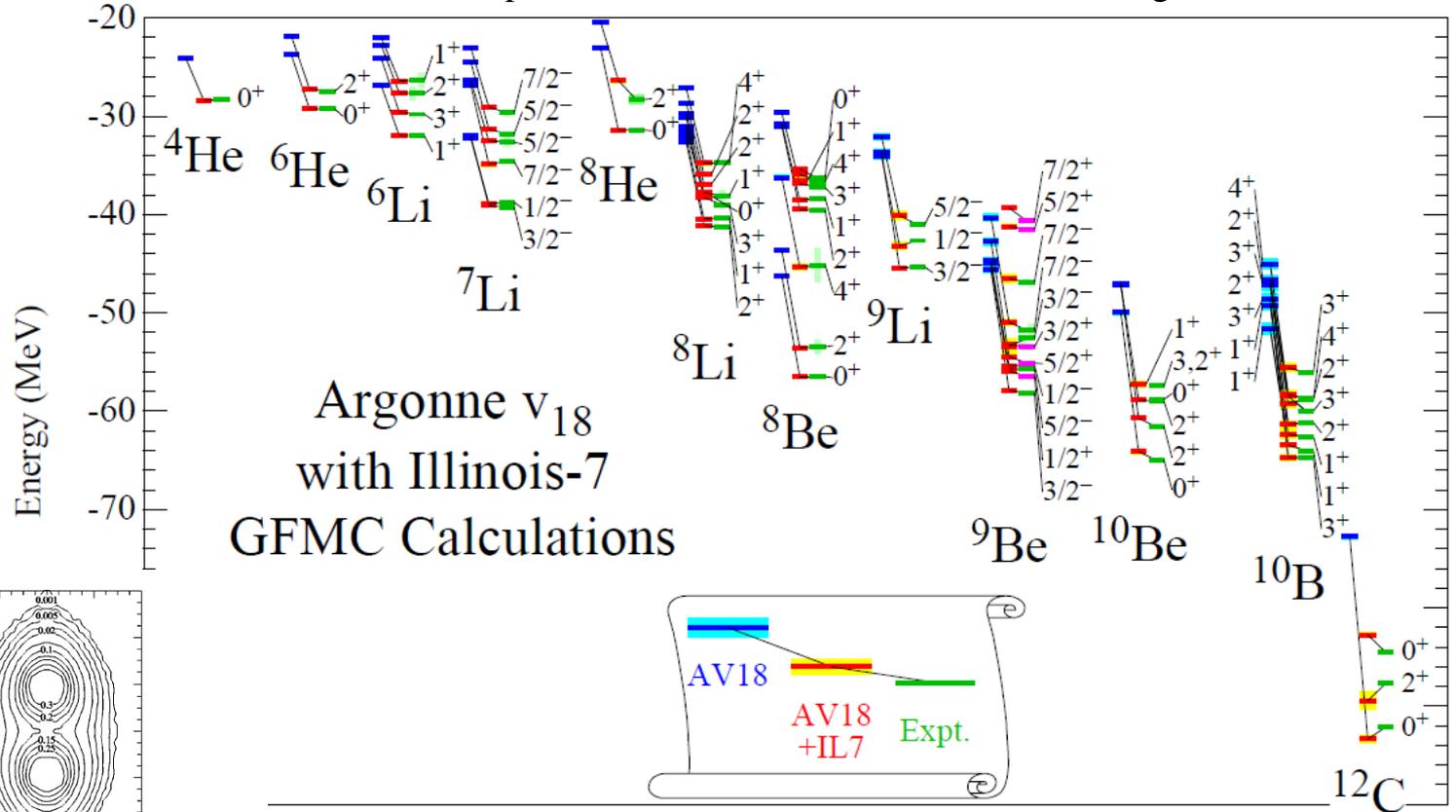
Funaki, Tohsaki, Horiuchi, Schuck, Roepke, PRC67, 051306 (2003).

$$\Phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{12}) = A \left[\prod_{i=1,3} f(\vec{R}_i) \phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_4) \phi(\vec{r}_5, \dots, \vec{r}_8) \phi(\vec{r}_9, \dots, \vec{r}_{12}) \right]$$

^{12}C の構造： 原子核構造の大規模「非経験」計算の舞台(1)

量子モンテカルロ法(現実的な核力から出発した原子核構造計算)

J. Carlson, S. Gandolfi, F. Pederiva, S.C. Pieper, R. Schiavilla, K.E. Schmidt, R.B. Wiringa, arXiv:1412.3081



^8Be 原子核に現れる
 2α 構造

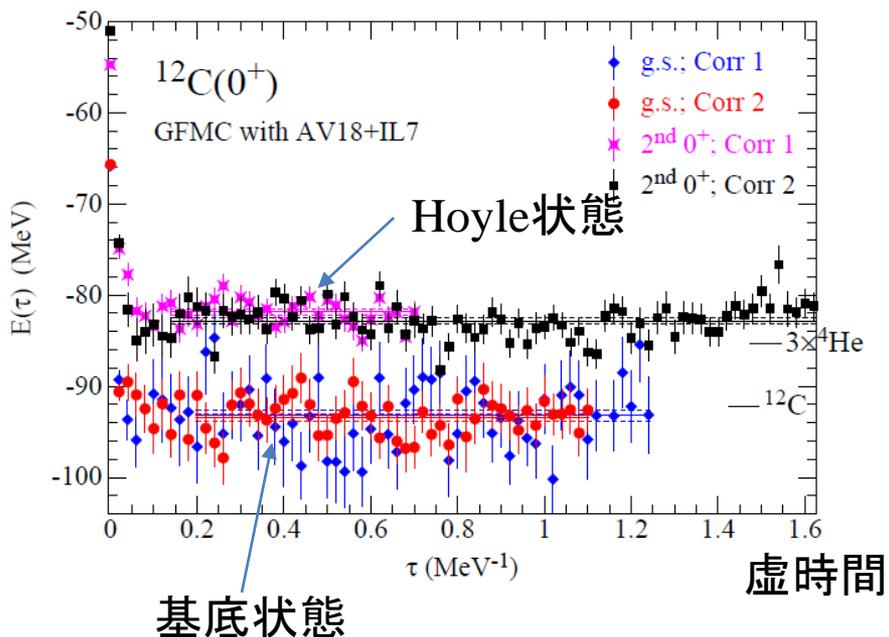
FIG. 15. Contours of constant density, plotted in cylindrical coordinates, for $^8\text{Be}(0^+)$. The left side is in the "laboratory" frame while the right side is in the intrinsic frame.

Hoyle状態に対する量子モンテカルロ計算(継続中)

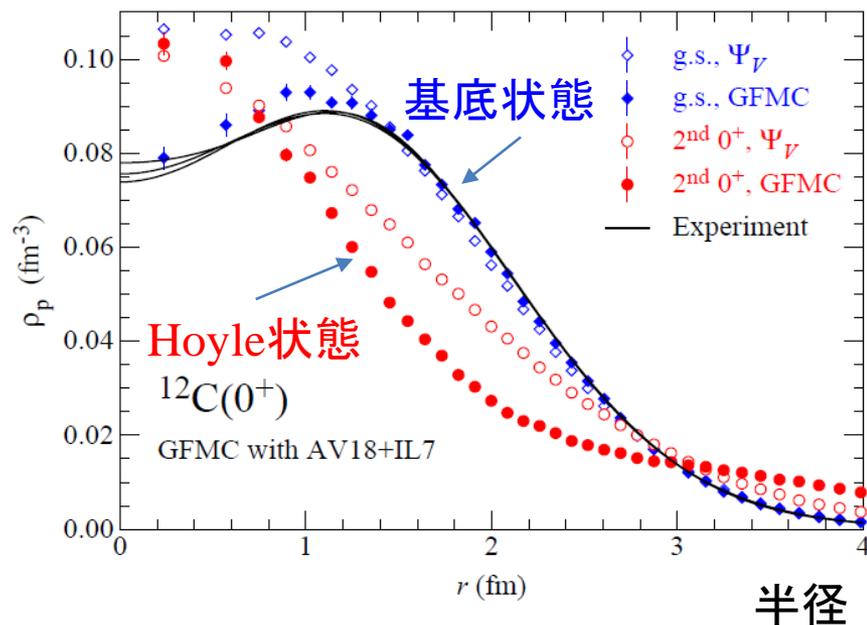
J. Carlson, S. Gandolfi, F. Pederiva, S.C. Pieper, R. Schiavilla, K.E. Schmidt, R.B. Wiringa, arXiv:1412.3081

実験: 7.65MeV、計算: 10.5MeV

エネルギーの収束性

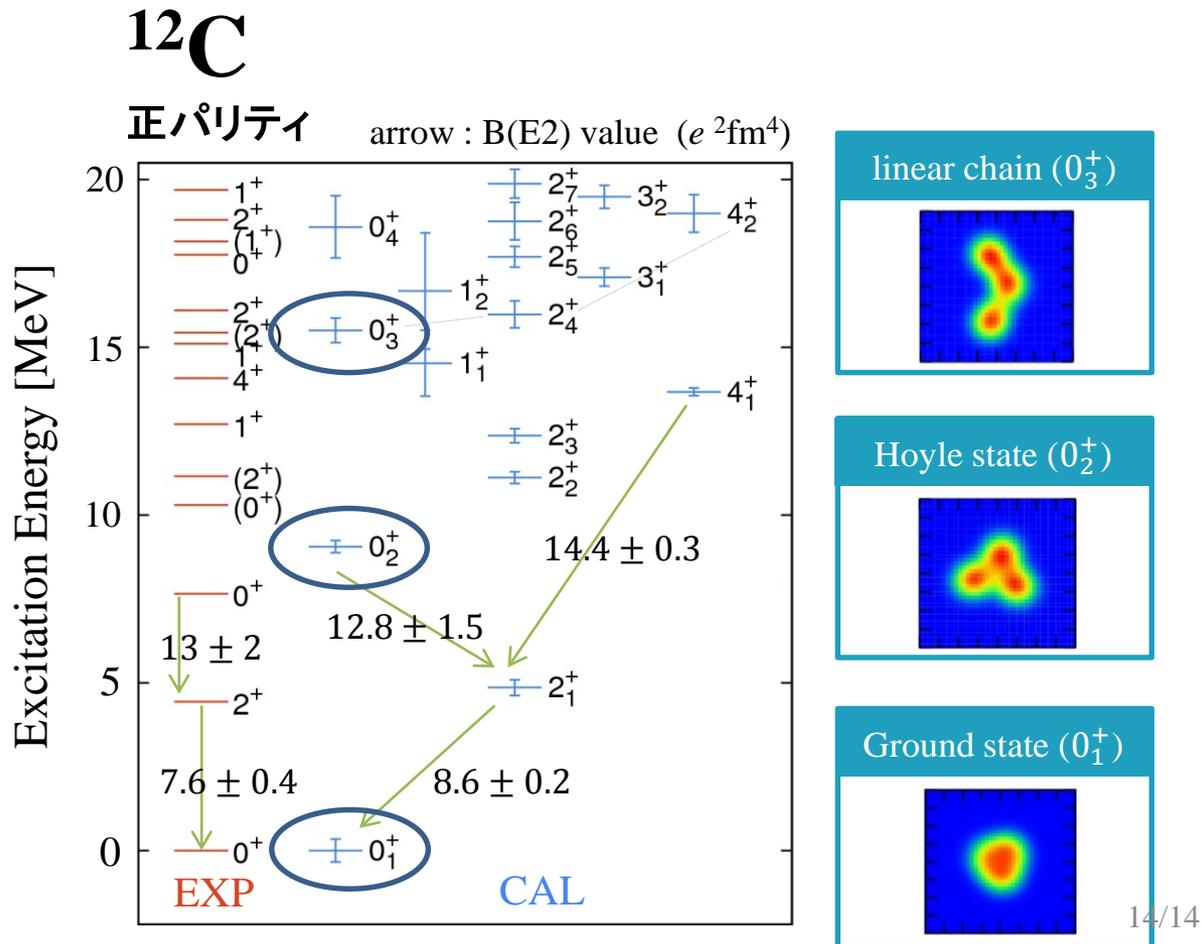


原子核の密度分布



^{12}C の構造： 原子核構造の大規模「非経験」計算の舞台(2)

「経験的な核力」を用いているが、それ以外の入力パラメータは、陽子=6、中性子=6のみ。
 (Skyrme力) Y. Fukuoka, S. Shinohara, Y. Funaki, T. Nakatsukasa, KY, Phys. Rev. C88, 014321 (2013).

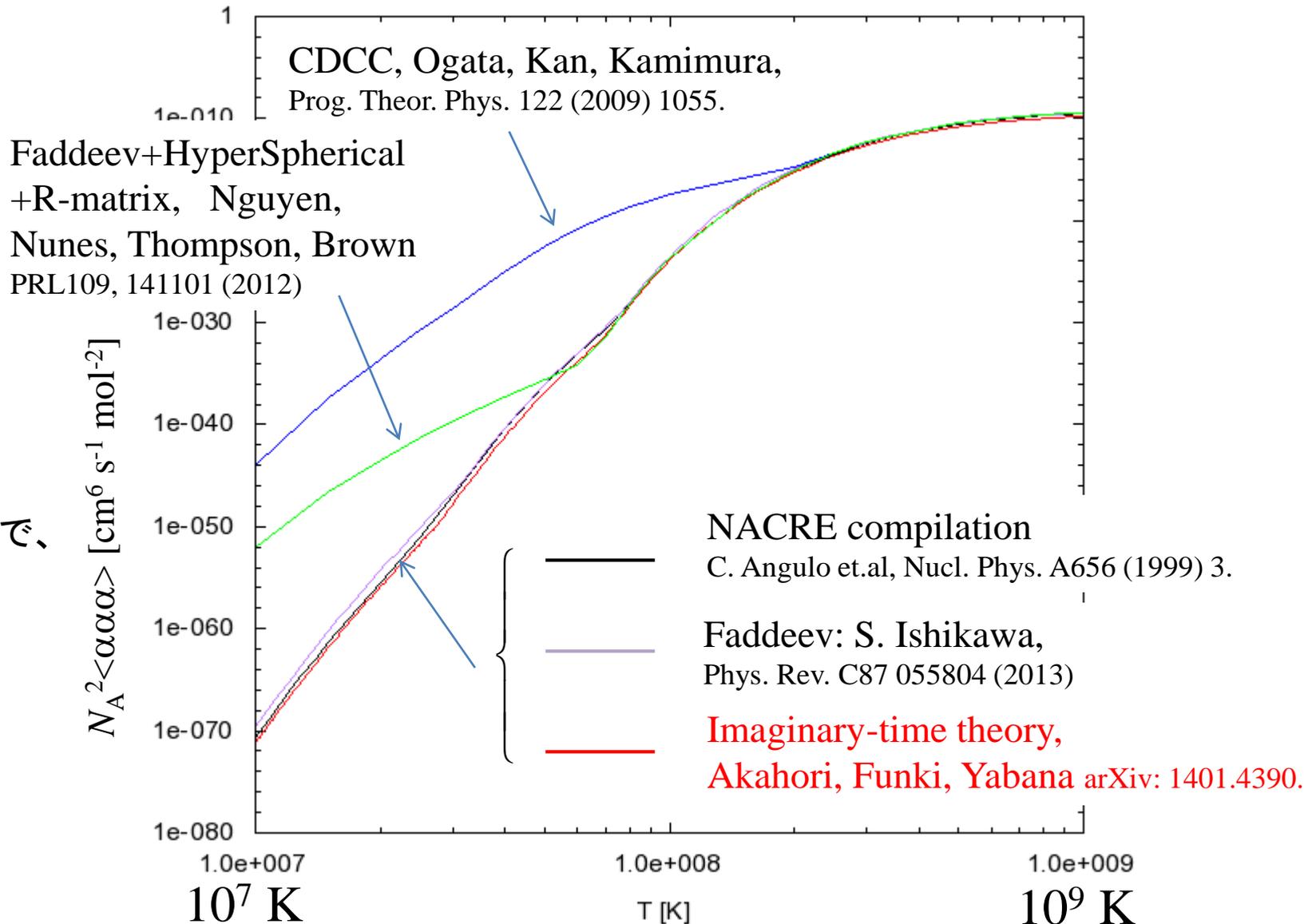


Contents

1. トリプルアルファ反応の歴史と現状
2. 炭素原子核 - ^{12}C - の構造
3. トリプルアルファ反応率の難しさ
4. 光捕獲反応率の虚時間理論

トリプルアルファ反応を巡る経緯(3)

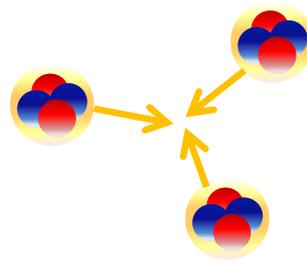
量子3体計算に基づく反応率、2009~



トリプルアルファ反応率： 3つの α 粒子が、核力の作用する範囲まで接近する確率が鍵

最後の融合過程を除けば、クーロン3体問題

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{\nabla}_1^2 + \vec{\nabla}_2^2 + \vec{\nabla}_3^2) + \frac{4e^2}{r_{12}} + \frac{4e^2}{r_{23}} + \frac{4e^2}{r_{31}} \right] \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) = E\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3)$$



クーロン3体問題： 構造の計算は難しくない

ヘリウム原子の結合エネルギーの場合

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{\nabla}_1^2 + \vec{\nabla}_2^2) + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} \right] \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

Neue Berechnung der Energie des Heliums im Grundzustande, sowie des tiefsten Terms von Ortho-Helium.

Von Egil A. Hylleraas in Oslo.

(Eingegangen am 22. Februar 1929.)

1929年、Hylleraas
5桁の精度

wird die Energie:

$$E = -1,45182 \cdot 4 R_{\text{He}} h,$$

die wir mit der berechneten Energie

$$E = -1,45162 \cdot 4 R_{\text{He}} h$$

PRL 101, 240406 (2008)

PHYSICAL REVIEW LETTERS

week ending
12 DECEMBER 2008

How Accurately Does the Free Complement Wave Function of a Helium Atom Satisfy the Schrödinger Equation?

Hiroyuki Nakashima and Hiroshi Nakatsuji*

Quantum Chemistry Research Institute, JST, CREST,

Kyodai Katsura Venture Plaza 106, Goryo Oohara 1-36, Nishikyō-ku, Kyoto 615-8245, Japan

(Received 10 September 2008; published 12 December 2008)

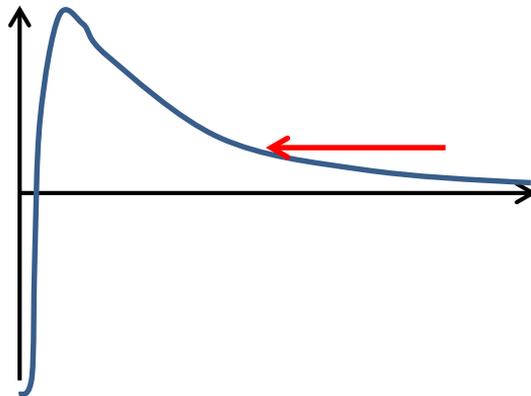
2008年、
中辻(京大)
32桁の精度

The local energy defined by $H\psi/\psi$ must be equal to the exact energy E at any coordinate of an atom or molecule, as long as the ψ under consideration is exact. The discrepancy from E of this quantity is a stringent test of the accuracy of the calculated wave function. The H -square error for a normalized ψ , defined by $\sigma^2 = \langle \psi | (H - E)^2 | \psi \rangle$, is also a severe test of the accuracy. Using these quantities, we have examined the accuracy of our wave function of a helium atom calculated using the free complement method that was developed to solve the Schrödinger equation. Together with the variational upper bound, the lower bound of the exact energy calculated using a modified Temple's formula ensured the definitely correct value of the helium fixed-nucleus ground state energy to be $-2.9037243770341195983111592451944$ a.u., which is correct to 32 digits.

$-2.9037243770341195983111592451944$ a.u.

トリプルアルファ反応率計算の難しさ

- 実験は(ほぼ)不可能。
- 3つの電荷を持つ粒子の散乱問題の定式化が不明。
(3つの電荷を持つ粒子の「クーロン波動関数」の解析形がない)
- 3つの電荷を持つ粒子に対するトンネル現象を扱うことが必要。
反応率は温度とともに 10^{60} も変化する。
数値計算の精度に細心の注意を払う必要。



クーロン透過率(2体反応)

$$P_l(E, R) = \frac{kR}{F_l^2(kR) + G_l^2(kR)}$$

クーロン波動関数

Contents

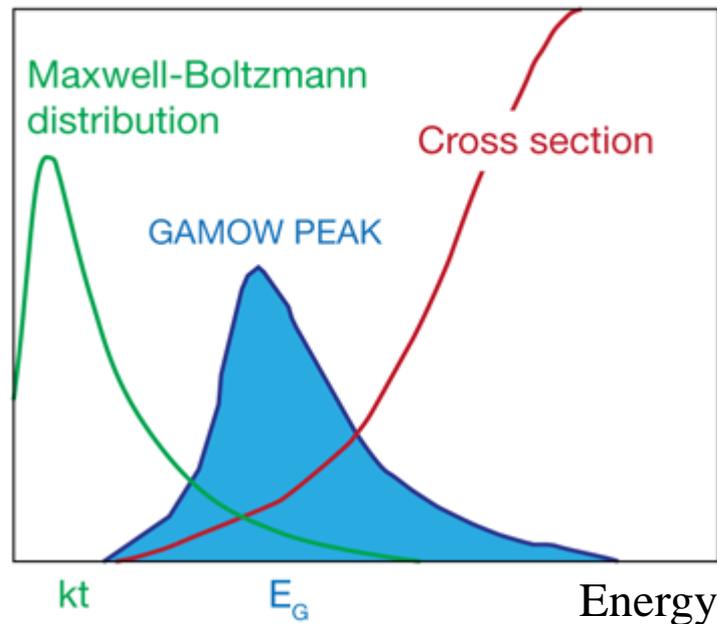
1. トリプルアルファ反応の歴史と現状
2. 炭素原子核 - ^{12}C - の構造
3. トリプルアルファ反応率の難しさ
4. 光捕獲反応率の虚時間理論

光捕獲反応の反応率の計算： ふつうは、

まず断面積 $\sigma_\gamma(E)$ を求め、次にマクスウェル分布で統計平均をする。

$$\langle v\sigma \rangle \propto \int dE E e^{-E/kT} \sigma_\gamma(E)$$

ガモフピーク

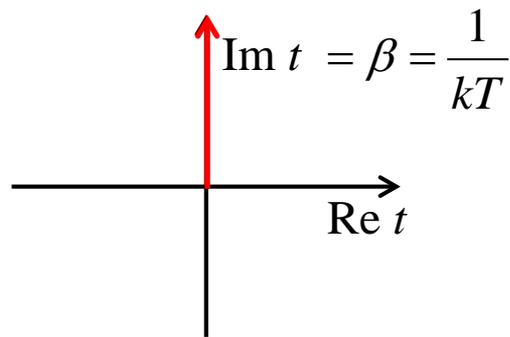


$$\langle v\sigma \rangle \propto \int dE E e^{-E/kT} \sigma_\gamma(E)$$

断面積 $\sigma_\gamma(E)$ を経ずに、直接反応率を求める。 \Rightarrow 虚時間理論

KY and Y.Funaki. PRC85,055803(2012)

温度の逆数を
虚数の時間軸とみなす。



虚時間法(2体散乱の場合)

光捕獲断面積の表式

$$v\sigma_{fi} \propto \left(\frac{E_{\vec{k}} - E_f}{\hbar c} \right)^{2\lambda+1} \left| \int d\vec{r} \phi_f^*(\vec{r}) M_{\lambda\mu} \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) \right|^2$$

束縛状態(終状態)

$$\int d\vec{r} |\phi_f(\vec{r})|^2 = 1$$

散乱状態(初期状態)

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{r}) \rightarrow e^{i\vec{k}\vec{r}} + f(\vec{r}) \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r} \quad (2\text{-body})$$

$$M_{\lambda\mu} = \sum_{i \in p} r_i^\lambda Y_{\lambda\mu}(\hat{r}_i)$$

λ フォトンの多重度

統計平均: 温度 $\beta = 1/k_B T$

$$\langle v\sigma \rangle \propto \int d\vec{k} e^{-\beta E_k} v\sigma_{fi}$$

(ハミルトニアンの特値表現)

$$\langle v\sigma_{fi} \rangle \propto \langle \phi_f | M_{\lambda\mu} e^{-\beta \hat{H}} \left(\frac{\hat{H} - E_f}{\hbar c} \right)^{2\lambda+1} \hat{P} M_{\lambda\mu}^\dagger | \phi_f \rangle$$

$$\hat{P} = 1 - \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n|$$

散乱状態を消去できる。そのかわり、指数演算子 $\exp[-\beta H]$ が現れる。

指数演算子 $\exp[-\beta H]$ の計算 \Rightarrow 虚時間発展

$$\langle \nu \sigma_{fi} \rangle \propto \langle \phi_f | M_{\lambda\mu} e^{-\beta \hat{H}} \left(\frac{\hat{H} - E_f}{\hbar c} \right)^{2\lambda+1} \hat{P} M_{\lambda\mu}^+ | \phi_f \rangle \quad \beta = \frac{1}{kT}$$

出発点は、光放出後の束縛波動関数
に、光遷移演算子を掛けたもの。

$$\psi(\beta=0) = M_{\lambda=2,\mu}^+ \phi_f$$

虚時間軸に沿って、時間発展計算。

$$-\frac{\partial}{\partial \beta} \psi(\beta) = H \psi(\beta)$$

期待値として反応率が得られる。

$$\langle \nu \sigma \rangle \propto \left\langle \psi\left(\frac{\beta}{2}\right) \left| \left(\frac{\hat{H} - E_f}{\hbar c} \right)^{2\lambda+1} \right| \psi\left(\frac{\beta}{2}\right) \right\rangle$$

トリプルアルファ反応の計算: ハミルトニアン

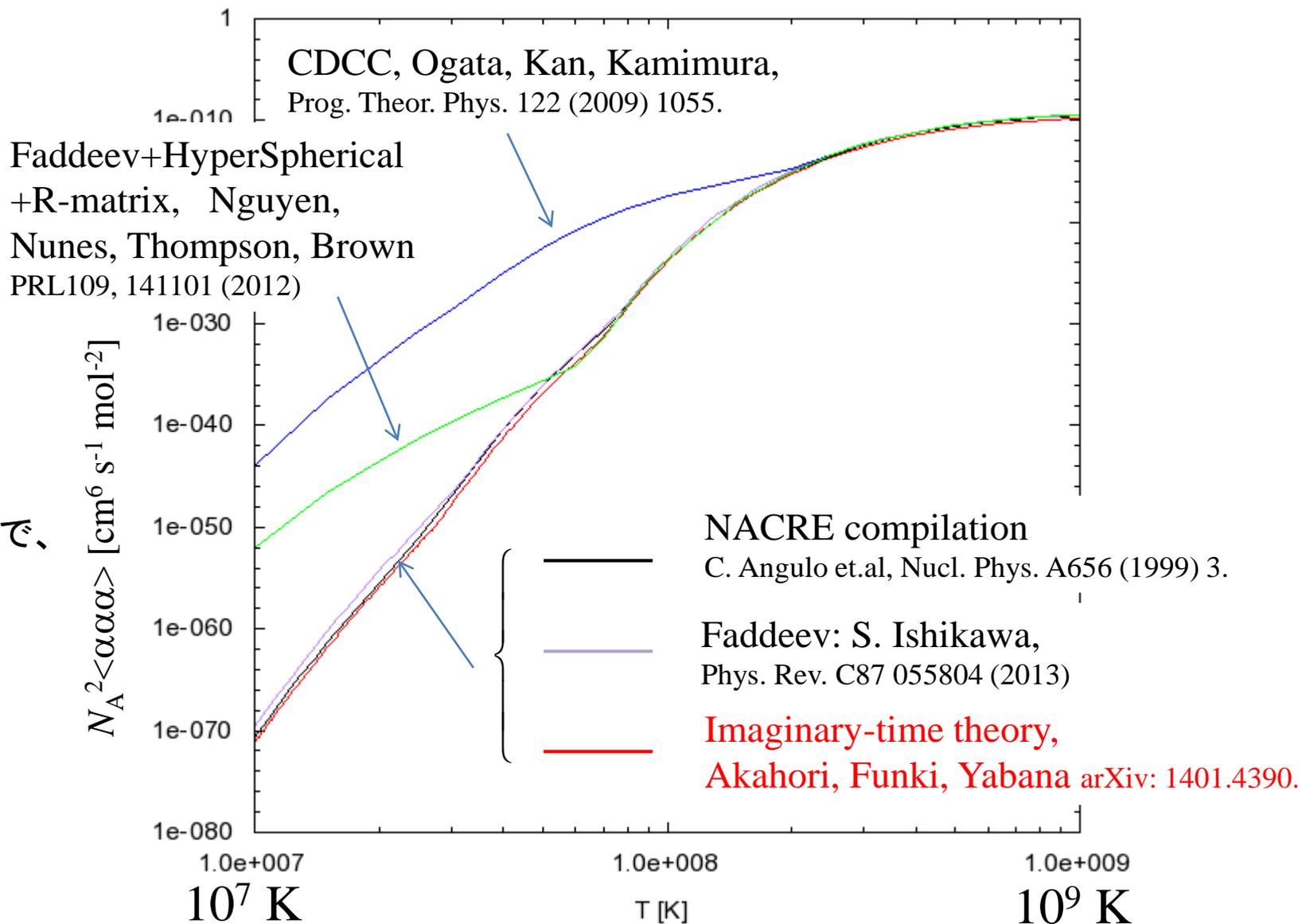
- α 粒子は点粒子として扱う。
- ハミルトニアンは現象論的に作る。

$$H = T + V_{12} + V_{23} + V_{31} + V_{123}$$

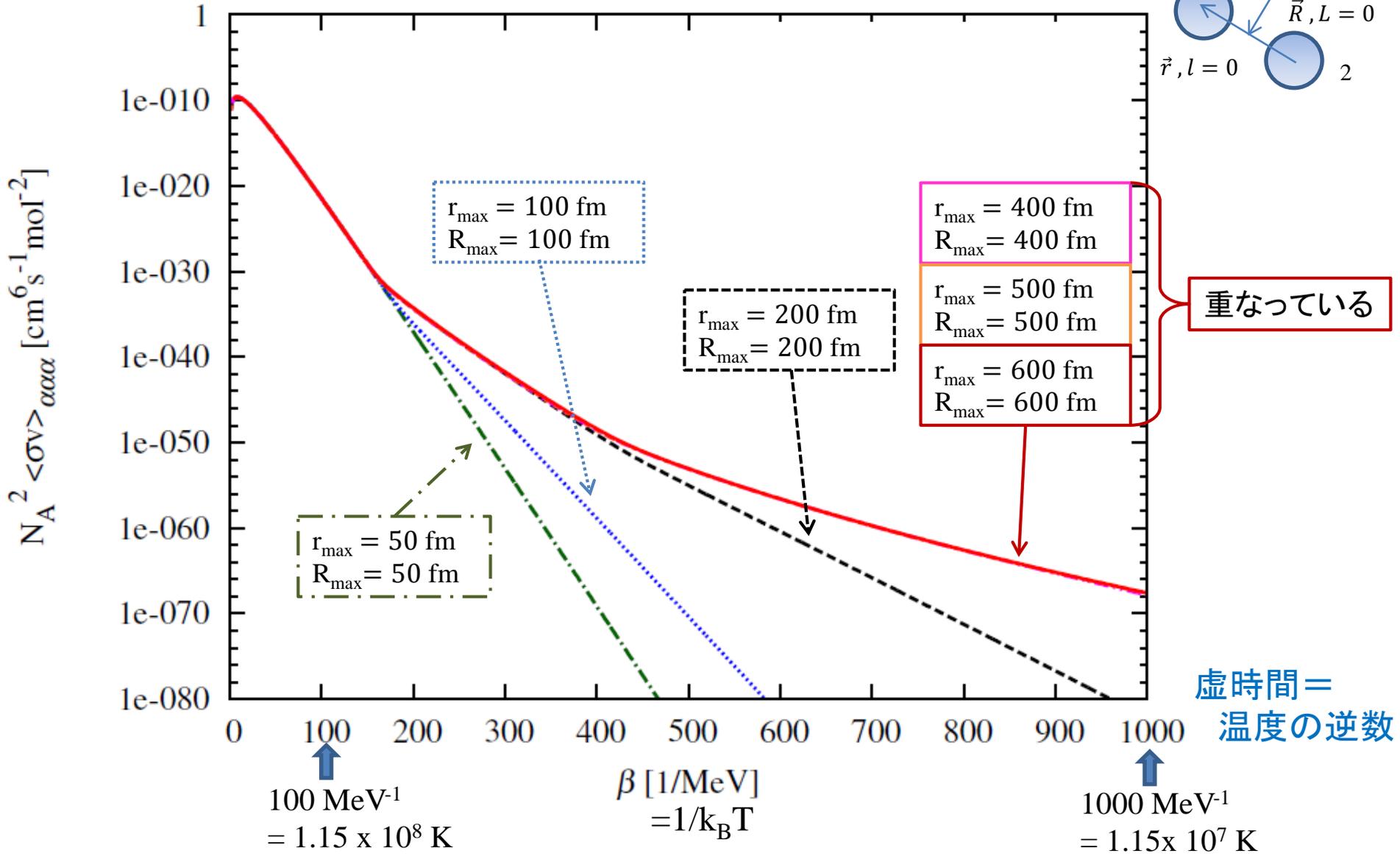
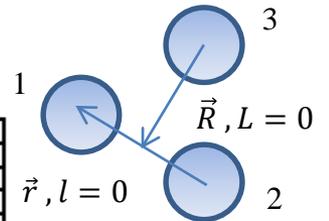
- α - α 間のポテンシャルは、 ${}^8\text{Be}$ の共鳴状態を再現
- α - α - α 間の3体ポテンシャルを導入、Hoyle状態を再現

トリプルアルファ反応を巡る経緯(3)

量子3体計算に基づく反応率、2009~



計算に用いる空間領域 (α 粒子間の距離)に関する収束性

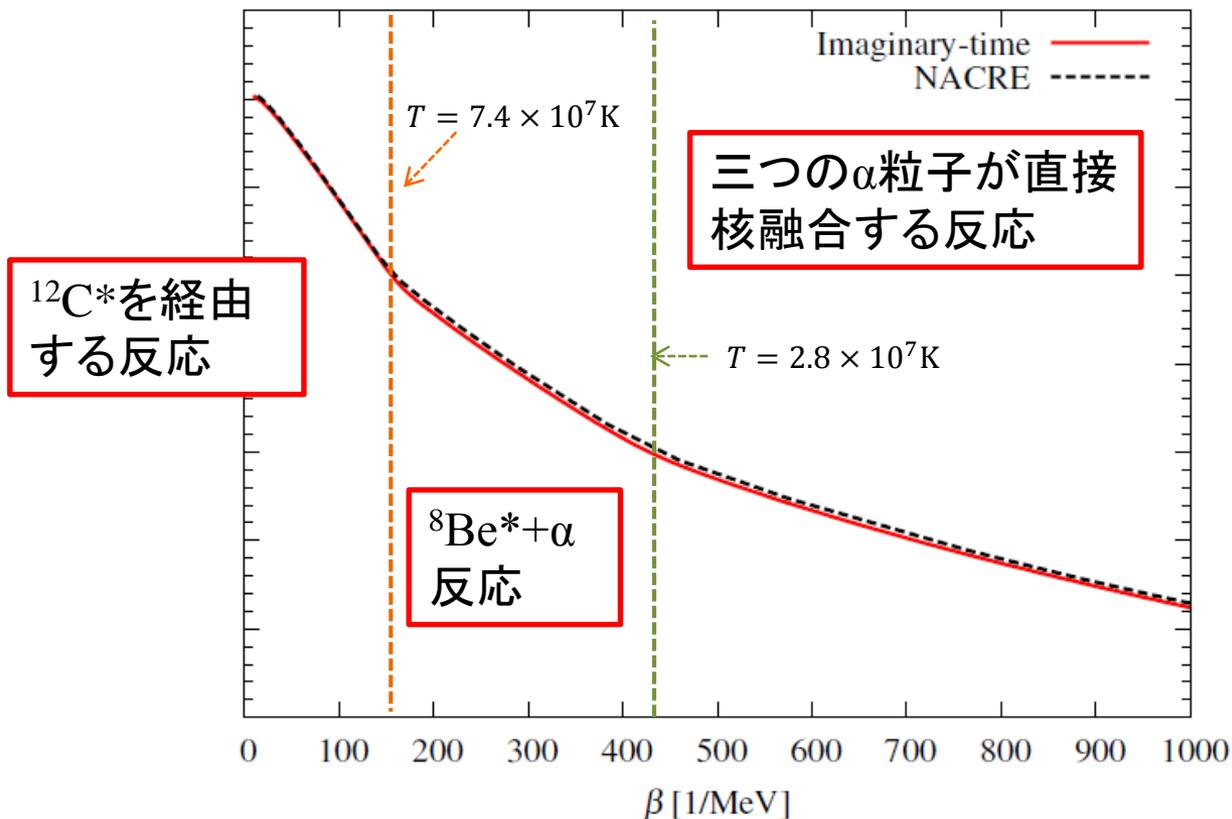


虚時間計算とNACRE反応率は、高い精度で定量的に一致
 反応メカニズムが切り替わる温度も一致している。

$$\hat{r}_{\text{Be}+\alpha} \equiv \frac{\langle \sigma v \rangle_{\text{NR}}}{\langle \sigma v \rangle_{\text{R}}} \Big|_{\text{Be}+\alpha} > 1 \quad (T \lesssim 7.4 \times 10^7 \text{K})$$

$$\hat{r}_{\alpha+\alpha} \equiv \frac{\langle \sigma v \rangle_{\text{NR}}}{\langle \sigma v \rangle_{\text{R}}} \Big|_{\alpha+\alpha} > 1 \quad (T \lesssim 2.8 \times 10^7 \text{K})$$

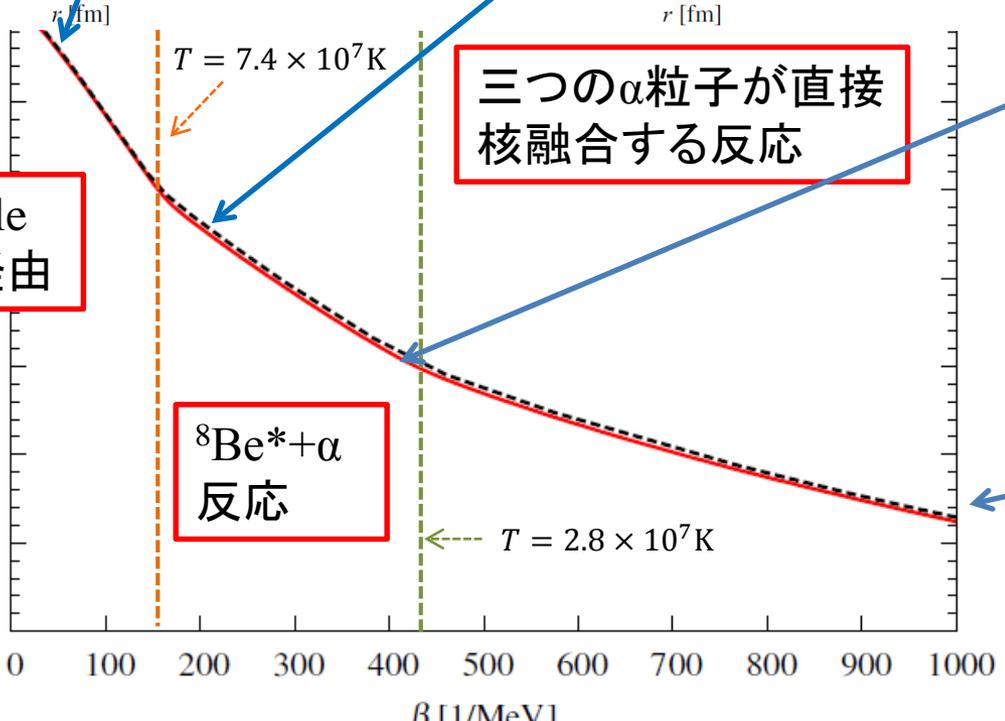
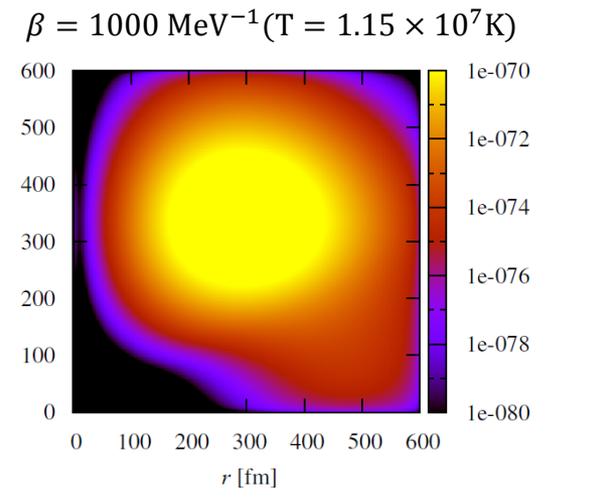
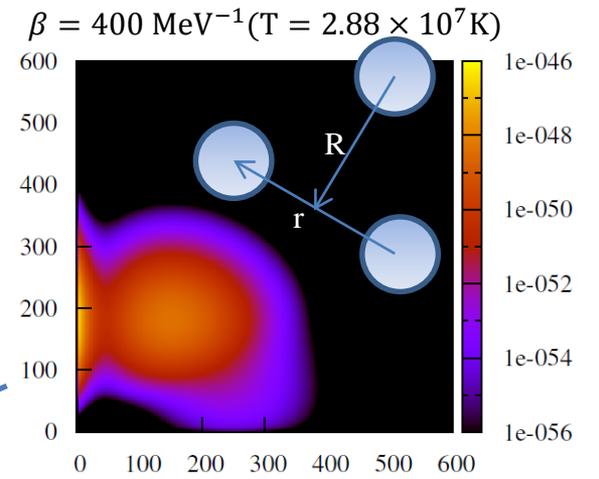
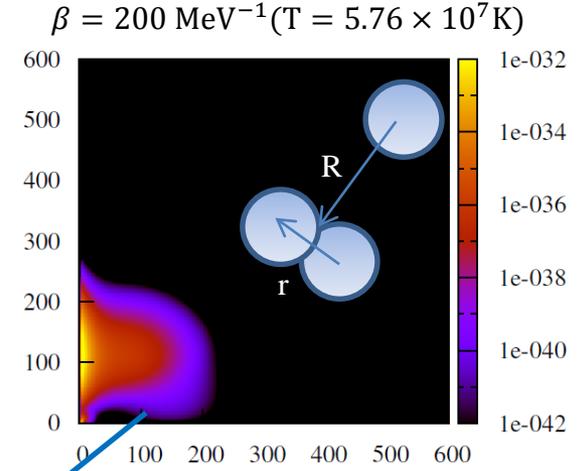
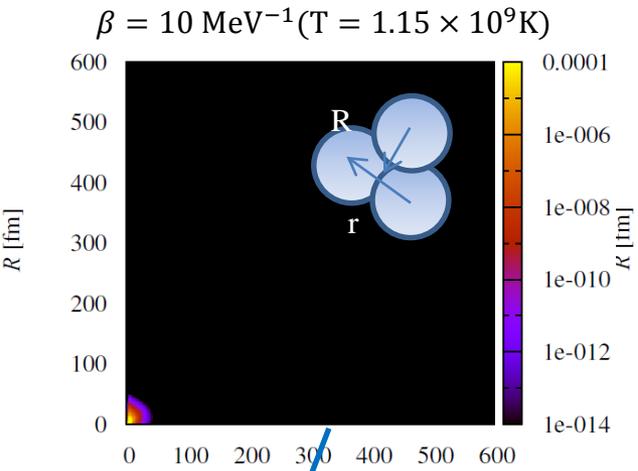
(K.Nomoto, AJ253(1982)798)



虚時間発展した波動関数 $\psi(R, r, \beta)$ から、反応メカニズムが分かる。

反応率

$$r(\beta) \propto \left\langle \Psi \left(\frac{\beta}{2} \right) \left| \left(\frac{\hat{H} - E_f}{\hbar c} \right)^{2\lambda+1} \right| \Psi \left(\frac{\beta}{2} \right) \right\rangle$$



$^{12}\text{C}^*$ (Hoyle 状態) を経由

三つの α 粒子が直接核融合する反応

$^8\text{Be}^* + \alpha$ 反応

虚時間理論から、NACRE(～野本)の式を導くことができる

必要とされる仮定

1. 3体ハミルトニアンが、 α - α と α - ^8Be の部分に分解できる(分離型仮定)

$$H = H_{\alpha\alpha} + H_{\alpha\text{Be}}$$

2. Hoyle状態が、 α - α と α - ^8Be の共鳴状態の積で記述できる

$$\Phi_H \simeq \phi_r^{\alpha\alpha}(\vec{r}) \phi_r^{\alpha\text{Be}}(\vec{R})$$

虚時間理論とR行列理論を組み合わせ、

$$\begin{aligned} \langle \alpha\alpha\alpha \rangle &= 6 \cdot 3^2 \left(\frac{2\pi\hbar^2}{M_\alpha kT} \right)^3 \\ &\times \int dE_{\alpha\alpha} \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma_\alpha(^8\text{Be}; E_{\alpha\alpha})}{(E_r(^8\text{Be}) - E_{\alpha\alpha})^2 + \Gamma_\alpha(E_{\alpha\alpha})/4} \\ &\times \int dE_{\alpha^8\text{Be}} \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma_\alpha(^{12}\text{C}; E_{\alpha^8\text{Be}})}{(E_r(^{12}\text{C}) - E_{\alpha^8\text{Be}})^2 + \Gamma_\alpha(E_{\alpha^8\text{Be}})/4} \\ &\times \exp\left[-\frac{E_{\alpha\alpha} + E_{\alpha^8\text{Be}}}{kT}\right] \cdot \Gamma_\gamma(^{12}\text{C}) \left(\frac{E_{\alpha\alpha} + E_{\alpha^8\text{Be}} - E(^{12}\text{C}; 2^+)}{E(^{12}\text{C}; 0_2^+) - E(^{12}\text{C}; 2^+)} \right)^{2\lambda+1} \end{aligned}$$

この結果は、ほぼNACREで用いられている式に一致

まとめ

軽い原子核の構造の非経験的に記述が可能に。
基底状態から励起状態へ、構造から反応へ、発展途上。

トリプルアルファ反応の、量子3体理論に基づく計算は2009年から始まった。
低温で、収束した答えが出ていない。

クーロン3体系のクーロン波動関数の欠如が困難の原因。
我々は、光捕獲反応率の虚時間理論を提案した ⇒ NACRE(野本理論)を支持

10–20年のレンジで、元素合成で必要とされる反応率の信頼できる非経験的計算を行うことが目標。