原子核系における
大振幅集団運動の非経験的記述

東北大学理学研究科

松本 萌未

東北大学

宇宙創成物理学
国際共同大学院

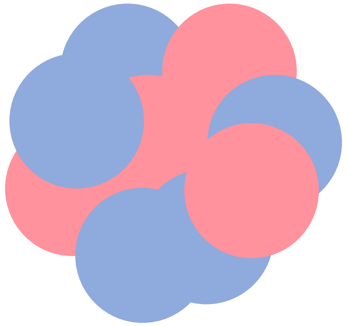
共同研究者：谷村雄介、萩野浩一

The world of mathematical sciences 2023/8/24@IPMU

原子核のかたち

原子核ってどんな形をしていると思いますか？

たんぽぽの種（cf. 石原さん）

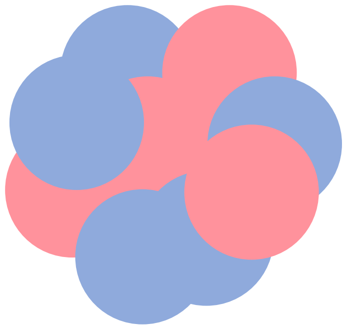


陽子と中性子

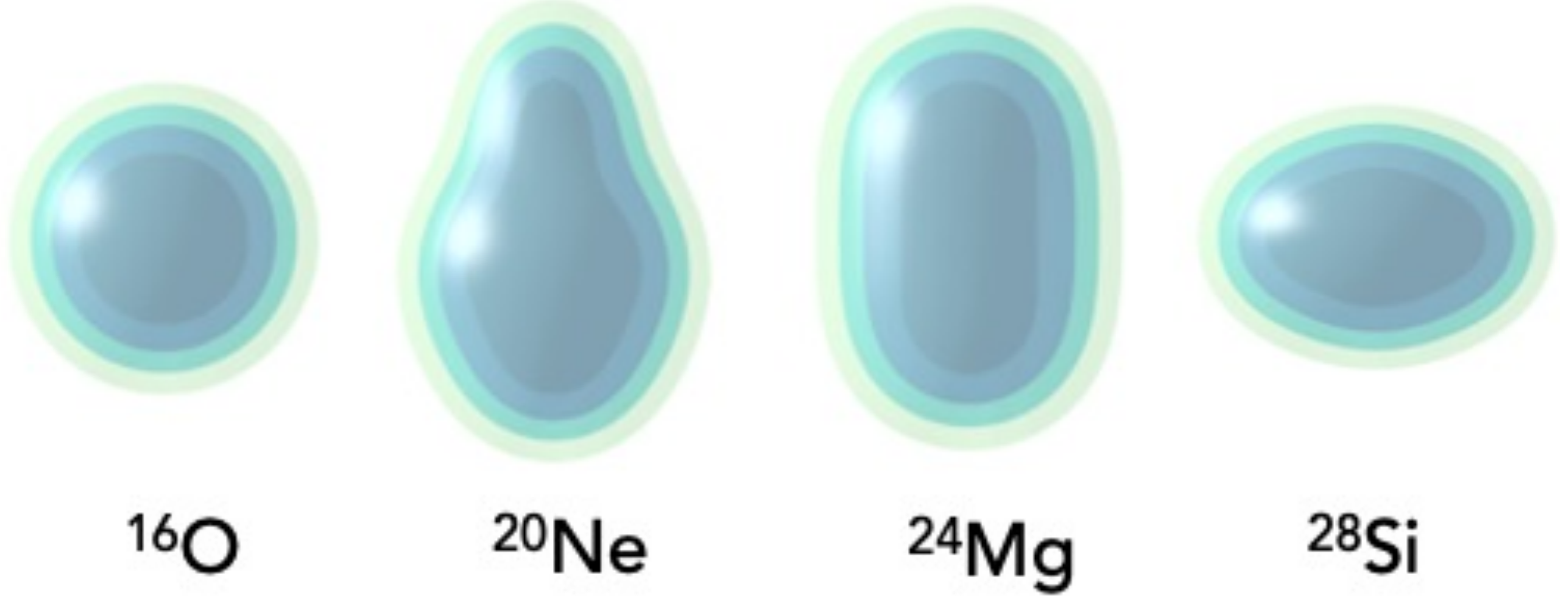
原子核のかたち

原子核ってどんな形をしていると思いますか？

実は、原子核って必ずしもまんまるじゃない！



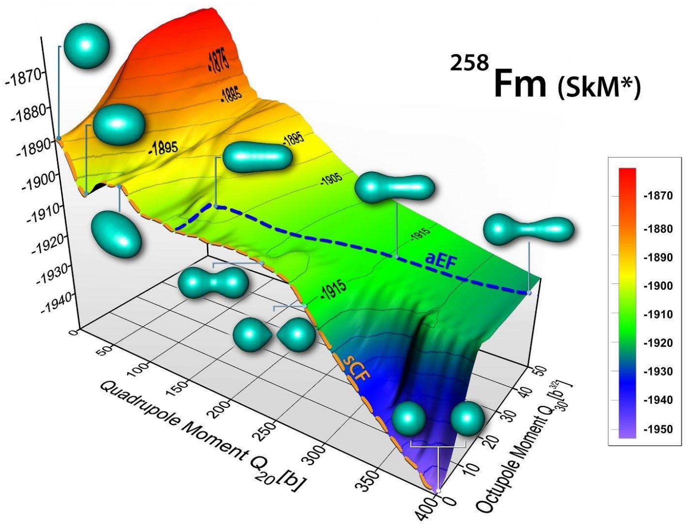
原子核の密度分布の理論計算



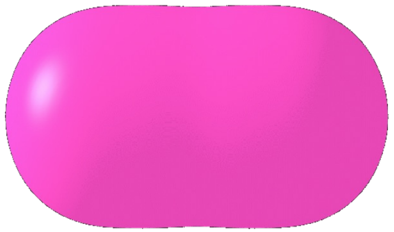
原子核の集団運動

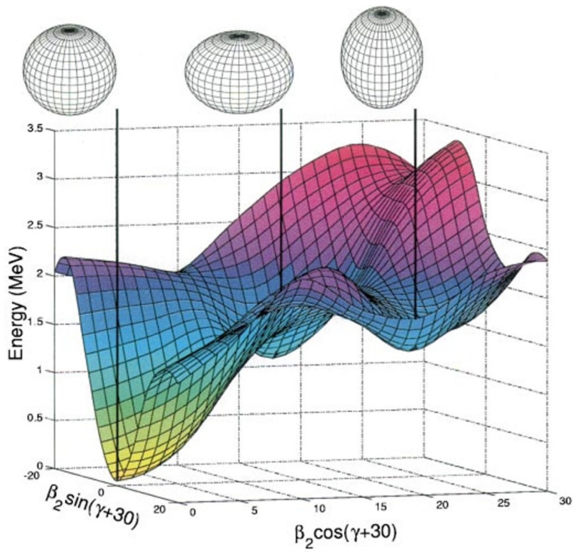
原子核系では、**大振幅の集団運動**が重要となる現象が特徴的

形が大きく変化する！



核分裂





変形共存現象

我々の目標:

集団運動を**微視的に**記述する理論手法の開発

全ての陽子・中性子を動力学的自由度として扱う

J. Dobaczewski, J. Phys.: Conf. Ser. **312** 092002 (2011). / A. N. Andreyev. *et al.* Nature **405**, 430 (2000).

集団運動の微視的理論

$$|\Psi\rangle = |\Phi\rangle$$: 単一のSlater 行列式 (Hartree-Fock近似)

変形などの揺らぎを表現できない

集団運動

集団運動の微視的理論

$$|\Psi\rangle = |\Phi\rangle$$: 単一のSlater 行列式 (Hartree-Fock近似)

変形などの揺らぎを表現できない

集団運動

生成座標法　異なる変形の状態を重ね合わせて重みを決定

基底: 事前に用意

$$|\Psi\rangle = f_1 |\quad\rangle + f_2 |\quad\rangle + f_3 |\quad\rangle + f_4 |\quad\rangle + \cdots$$

重みf を変分原理に基づいて決定

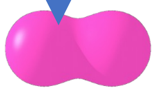
経験則に基づいて基底を準備

変形度（伸び）のパラメータQ_2

集団運動の微視的理論

生成座標法　異なる変形の状態を重ね合わせて重みを決定

基底: 事前に用意

$|\Psi\rangle = f_1 |$  $\rangle + f_2 |$  $\rangle + f_3 |$  $\rangle + f_4 |$  $\rangle + \cdots$

重みf を変分原理に基づいて決定

経験則に基づいて基底を準備

変形度（伸び）のパラメータQ_2

我々の新手法　重みと基底を同時に変分で決定

$$|\Psi\rangle = f_1 |\ ?\ \rangle + f_2 |\ ?\ \rangle + f_3 |\ ?\ \rangle + f_4 |\ ?\ \rangle + \cdots$$

大振幅集団運動の非経験的な記述→“最適”な集団運動とは？

手法

試行関数：

$$|\Psi\rangle = \sum_a f_a |\Phi_a\rangle \quad \Phi_a = \mathcal{A}[\underbrace{\varphi_1^{(a)} \varphi_2^{(a)} \cdots \varphi_N^{(a)}}_{\text{一粒子状態 (正規直交系)}}]$$

エネルギー：

$$E = \frac{\langle\Psi|H|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \frac{\sum_{ab} f_a^* f_b H_{ab}}{\sum_{ab} f_a^* f_b N_{ab}}$$

$$H_{ab} = \langle\Phi_a|H|\Phi_b\rangle$$ ：Hamiltonian kernel

$$N_{ab} = \langle\Phi_a|\Phi_b\rangle$$ ：Norm kernel

$$\rho_{\beta\alpha}^{(ab)} = \frac{\langle\Phi_a|\, a_\alpha^\dagger a_\beta \,|\Phi_b\rangle}{\langle\Phi_a|\Phi_b\rangle}$$ ：遷移密度行列

$$E^{(ab)} = E[\rho^{(ab)}]$$ ：EDF

$$h_{\alpha\beta}^{(ab)} = \frac{\delta E[\rho^{(ab)}]}{\delta \rho_{\beta\alpha}^{(ab)}}$$ ：HF Hamiltonian

手法

エネルギーの勾配を計算　　Shimizu et al. , PTEP 2012, 01A205

・一粒子状態

$$\frac{\delta E}{\delta \langle \varphi_i^{(a)} |_{ph}} = \sum_b \frac{f_a^* N_{ab} f_b}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \left(1 - \rho^{(ab)}\right) \left[E - E^{(ab)} + h^{(ab)} \rho^{(ab)}\right] |\varphi_i^{(a)}\rangle$$

・重み関数

$$\frac{\partial E}{\partial f_a^*} = \frac{1}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \sum_b (H_{ab} - E N_{ab}) f_b$$

(=0 Hill-Wheeler eq.)

エネルギーの極小値を共役勾配法で探索

$$H_{ab} = \langle \Phi_a | H | \Phi_b \rangle$$ ：Hamiltonian kernel

$$N_{ab} = \langle \Phi_a | \Phi_b \rangle$$ ：Norm kernel

$$\rho_{\beta\alpha}^{(ab)} = \frac{\langle \Phi_a | a_\alpha^\dagger a_\beta | \Phi_b \rangle}{\langle \Phi_a | \Phi_b \rangle}$$ ：遷移密度行列

$$E^{(ab)} = E[\rho^{(ab)}]$$ ：EDF

$$h_{\alpha\beta}^{(ab)} = \frac{\delta E[\rho^{(ab)}]}{\delta \rho_{\beta\alpha}^{(ab)}}$$ ：HF Hamiltonian

Set up

^{28}Si の基底状態の計算

軸対称 / 反転対称性を課した計算

- Skyrme 相互作用（time-odd部分を無視）

  SIII　M. Beiner et al., Nucl. Phys. A 238, 29 (1975).

- クーロン力はなし

初期状態のSD: 異なる変形度の変形Woods-Saxonポテンシャルにより決定

結果 ^{28}Si

Hartree-Fock	$\|\Psi\rangle = \|\Phi\rangle$	-272.63 MeV
		1.3MeV
生成座標法（従来手法）	$\|\Psi\rangle = \sum_a f_a \|\Phi_a\rangle$	-273.95 MeV
		1MeV
本手法（基底も最適化）	$\|\Psi\rangle = \sum_a f_a \|\Phi_a\rangle$	-275.00 MeV

基底の選び方：“通常行われる方法”で選択
（次のスライドで詳しく）

“通常行われる方法”では集団運動の記述は十分でない！

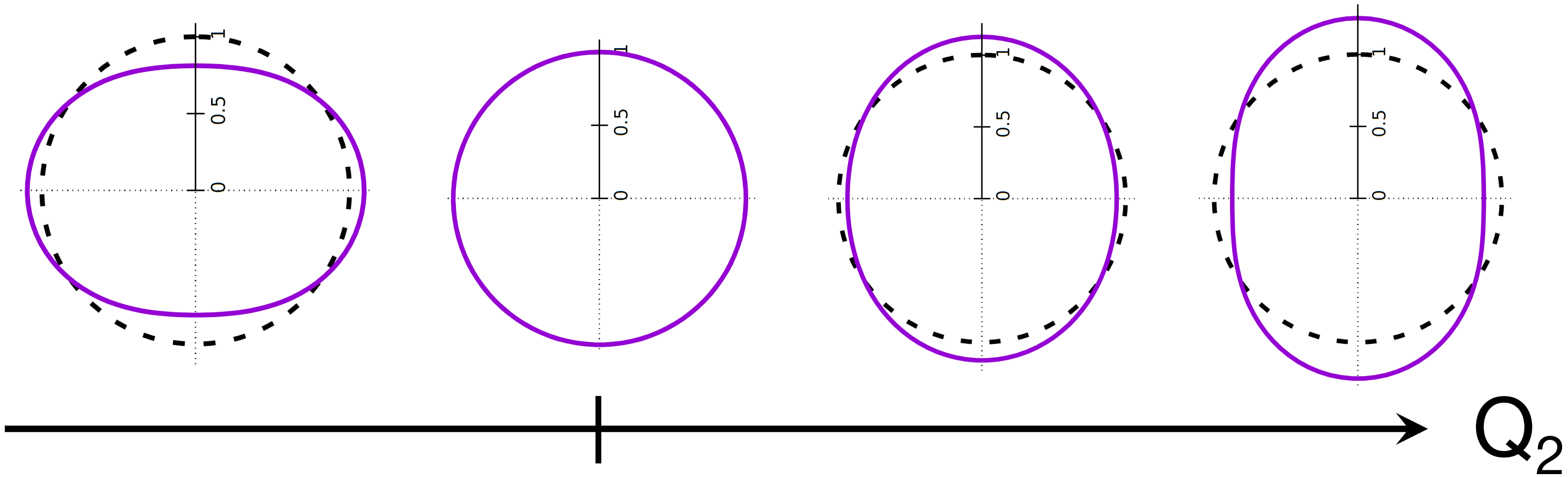
結果 ^{28}Si

“通常行われる方法”

色々な変形度に対し、その変形度であるような
エネルギー最小の状態を基底として重ね合わせる

$$Q_\lambda = \int d^3r\ r^2 Y_{\lambda 0}(\hat{\boldsymbol{r}})\rho(\boldsymbol{r})$$

Z



$Q_2 < 0$
パンケーキ

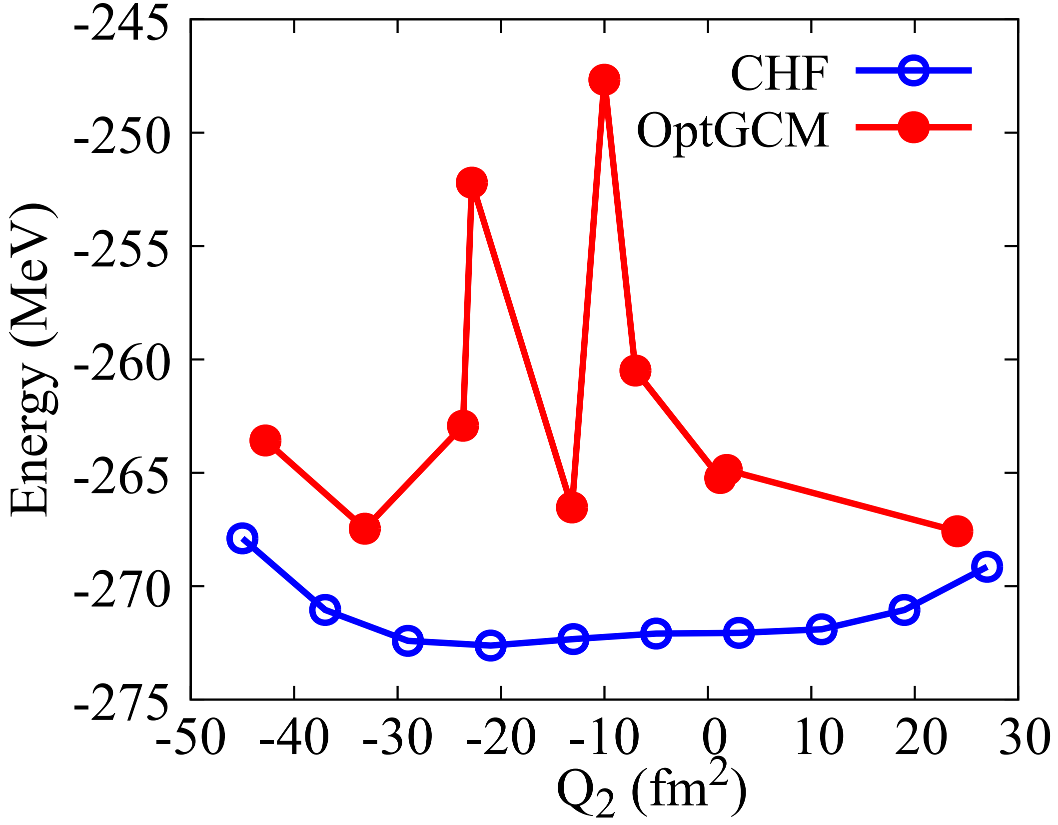
$Q_2 = 0$
球形

$Q_2 > 0$
ラグビーボール

結果 ^{28}Si

“通常行われる方法”

色々な変形度に対し、その変形度であるような
エネルギー最小の状態を基底として重ね合わせる

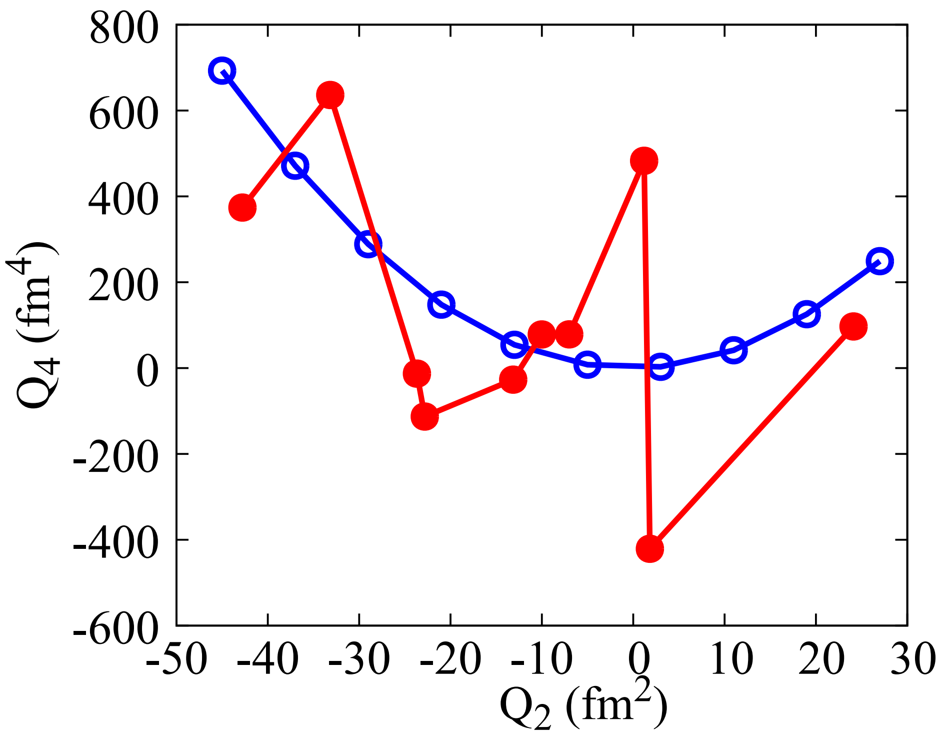


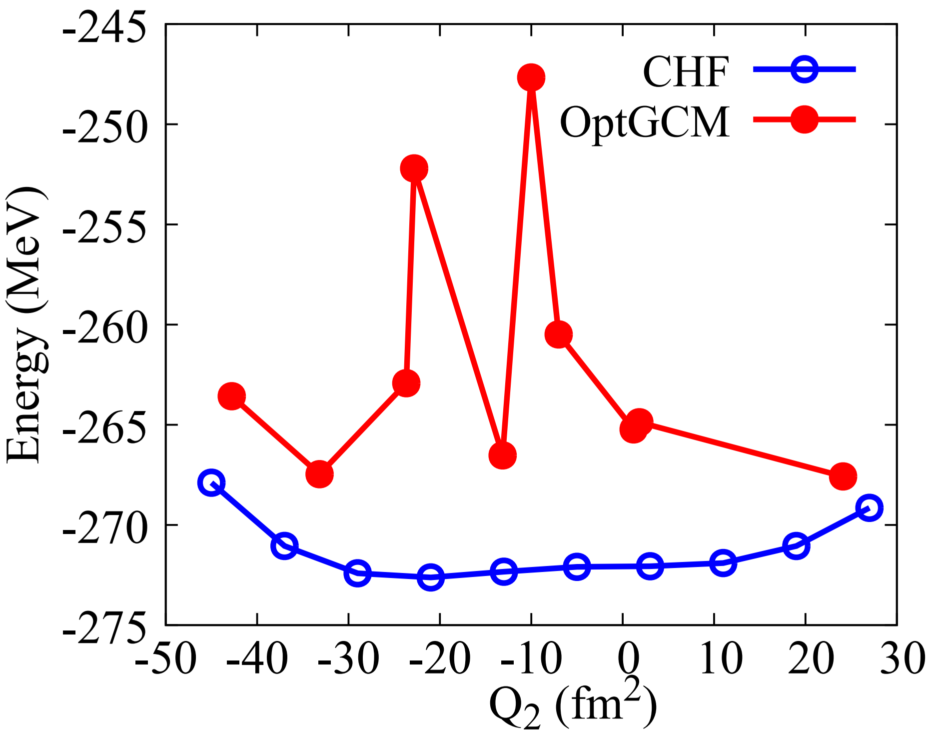
青い線：従来手法
赤い線：本手法

“最適”な基底は、
その変形度の基底状態ではない！

結果 ^{28}Si

得られた基底でのQ_4（次に高次のモーメント）を計算してみた





Q_2・Q_4両方を考慮してエネルギー最小の状態を基底として取っても、
最適化で含まれたような励起状態は含まれない。

まとめ

✓ 基底の変分を伴う生成座標法を開発
→ 経験によらない集団運動の記述が可能に

✓ ^{28}Siの解析では、高い励起エネルギーの状態も基底として得られた

✓ 大振幅集団運動の記述は、従来仮定していた方法よりも複雑なこと
を考える必要がありそう

これからやりたいこと

＊ 集団励起状態の解析
＊ 既存の集団運動の模型計算との関係の議論