

原子核集団現象への平均場アプローチ

第3回 QRPA

日野原 伸生

筑波大学計算科学研究センター
原子核理論研究室



講義計画

- 1. イントロダクション
 - 平均ポテンシャルと一粒子運動・集団運動
 - 対相関
- 2. 平均場理論
 - Hartree-Fock, Hartree-Fock-Bogoliubov
 - 原子核密度汎関数理論
- 3. QRPA
 - RPA, QRPA
 - 線形応答理論
 - 有限振幅法
- 4. 大振幅集団運動の理論
 - ポソン展開法
 - 生成座標法
 - 時間依存Hartree-Fock-Bogoliubov
 - 自己無撞着集団座標法

前回まで

原子核内の核子：平均ポテンシャル中を運動

平均ポテンシャル：平均場理論(Hartree-Fock)で相互作用から自己無撞着に決定

$$a_k^\dagger = \sum_l D_{lk} c_l^\dagger \quad |\Phi_{\text{HF}}\rangle = \prod_{i=1}^A a_i^\dagger |0\rangle$$

$$\hat{a}_i^\dagger = \begin{cases} \hat{d}_i^\dagger & (i > N) \\ \hat{b}_i & (1 \leq i \leq N) \end{cases}$$

HF状態は粒子・空孔に関する真空

$$\hat{d}_i |\Phi_{\text{HF}}\rangle = 0 \quad \hat{b}_i |\Phi_{\text{HF}}\rangle = 0$$

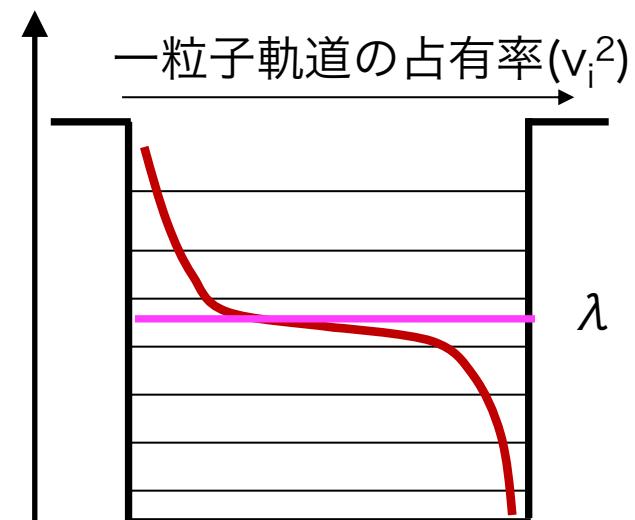
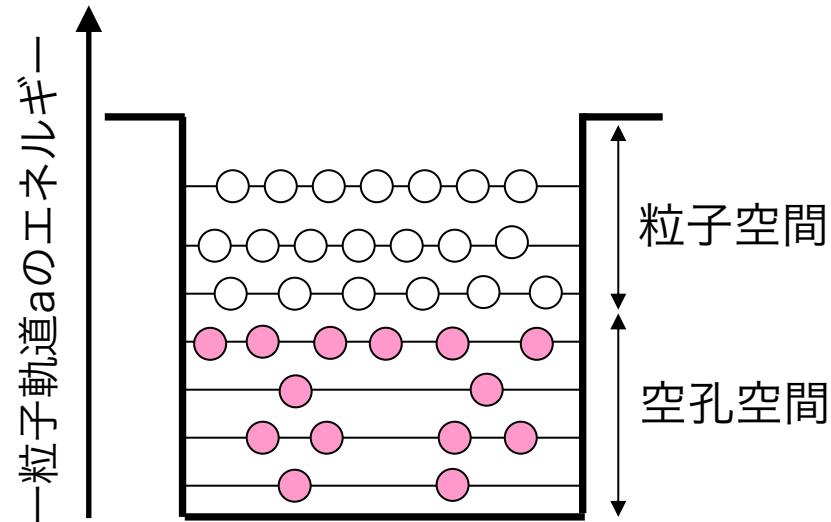
対相関はBCS、Hartree-Fock-Bogoliubovで記述。準粒子の導入

Bogoliubov変換

$$\begin{pmatrix} \alpha_\mu \\ \alpha_\mu^\dagger \end{pmatrix} = \sum_k \begin{pmatrix} U^\dagger & V^\dagger \\ V^T & U^T \end{pmatrix}_{\mu k} \begin{pmatrix} c_k \\ c_k^\dagger \end{pmatrix}$$

HFB状態は準粒子の真空

$$|\Phi_{\text{HFB}}\rangle = \prod_\mu \alpha_\mu \alpha_{\bar{\mu}} |0\rangle \quad \alpha_\mu |\Phi_{\text{HFB}}\rangle = 0$$

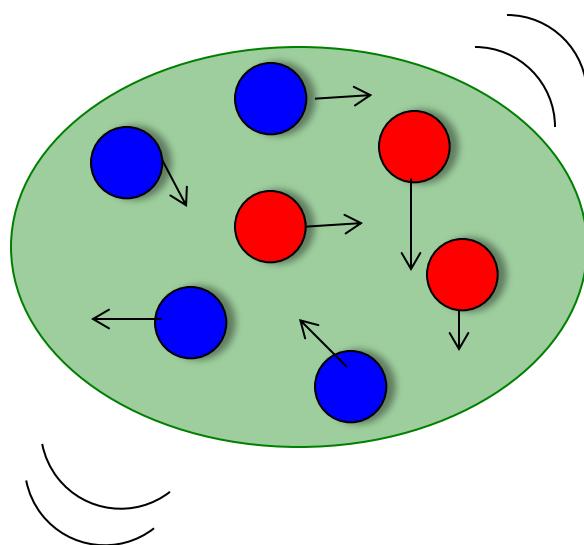


励起状態の理論

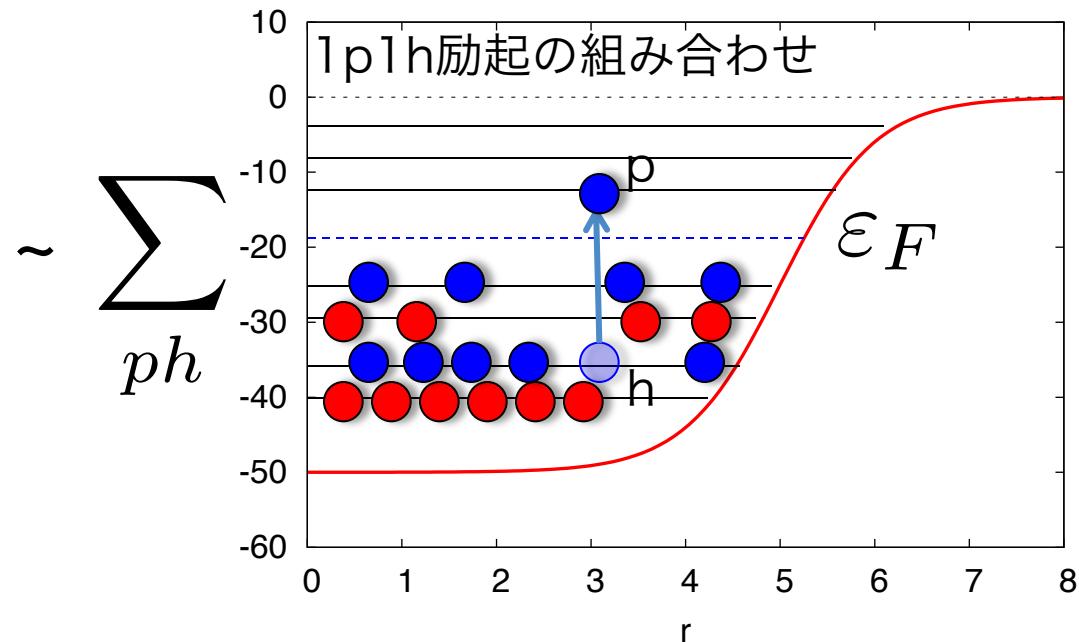
原子核の変形は実験でわかるのか？

→ 基底状態だけみてもわからない。励起状態に違いが現れる

平均ポテンシャル(密度)の集団振動



一粒子軌道でみると



- 低エネルギーの集団振動励起
- 巨大共鳴など
- pairingがない場合は1p1h励起の重ね合わせ(RPA)
- pairingがある場合は2準粒子励起の重ね合わせ(QRPA)

自由度：たとえば300個の状態に100粒子つまっている場合(100×200)=20000次元

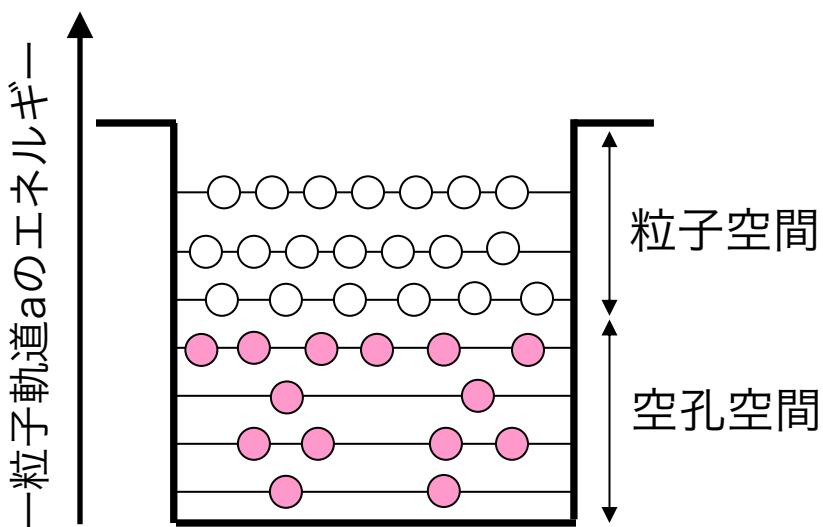
一粒子励起

HF基底状態

平均場Hamiltonian

$$\hat{h}_{\text{HF}} = E_{\text{HF}} + \sum_p \varepsilon_p d_p^\dagger d_p - \sum_h \varepsilon_h b_h^\dagger b_h$$

粒子 空孔



$$\hat{h}_{\text{HF}} |\Phi_{\text{HF}}\rangle = E_{\text{HF}} |\Phi_{\text{HF}}\rangle$$

粒子励起(A+1系)

$$\hat{h}_{\text{HF}} d_p^\dagger |\Phi_{\text{HF}}\rangle = (E_{\text{HF}} + \varepsilon_p) d_p^\dagger |\Phi_{\text{HF}}\rangle$$

空孔励起(A-1系)

$$\hat{h}_{\text{HF}} b_h^\dagger |\Phi_{\text{HF}}\rangle = (E_{\text{HF}} - \varepsilon_h) b_h^\dagger |\Phi_{\text{HF}}\rangle$$

一粒子的励起

粒子一空孔(particle-hole)励起(A系)

$$\hat{h}_{\text{HF}} d_p^\dagger b_h^\dagger |\Phi_{\text{HF}}\rangle = (E_{\text{HF}} + \varepsilon_p - \varepsilon_h) d_p^\dagger b_h^\dagger |\Phi_{\text{HF}}\rangle$$

集団励起

残留相互作用によるph励起の重ね合わせ

集団励起

Hamiltonianはもともと二体以上

$$\hat{H} = \sum_{ij} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k$$

Hartree-Fockでは二体部分はSlater行列式を使って一体場に近似

ph励起状態間の相互作用も考慮する必要がある

残留相互作用(residual interaction) $\hat{H} - \hat{h}_{\text{HF}}$

Tamm-Dancoff近似(TDA)

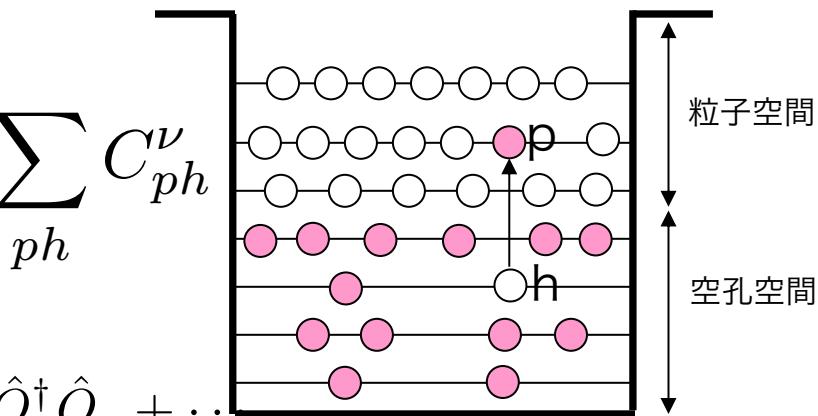
励起状態はHF状態のph励起の重ね合わせ

$$|\nu\rangle = \sum_{ph} C_{ph}^\nu d_p^\dagger b_j^\dagger |\Phi_{\text{HF}}\rangle = \hat{O}_\nu^\dagger |\Phi_{\text{HF}}\rangle$$

$$\hat{O}_\nu^\dagger = \sum_{ph} C_{ph}^\nu d_p^\dagger b_h^\dagger \quad \hat{H} = \hat{h}_{\text{HF}} + \sum_\nu E_\nu^{\text{TDA}} \hat{O}_\nu^\dagger \hat{O}_\nu + \dots$$

$$c^\dagger c^\dagger cc \sim a^\dagger a^\dagger aa \sim \binom{d^\dagger}{b} \binom{d^\dagger}{b} \binom{d}{b^\dagger} \binom{d}{b^\dagger}$$

のうちd+b+db型を取り込む



Tamm-Dancoff方程式(固有値方程式)

$$\sum_{p'h'} [(\varepsilon_{p'} - \varepsilon_{h'}) \delta_{pp'} \delta_{hh'} + \bar{v}_{p'h'h'}] C_{p'h'}^\nu = E_\nu^{\text{TDA}} C_{ph}^\nu$$

RPA

TDA: 励起状態にはph間の相互作用が取り込まれるが基底状態はHFのまま

乱雑位相近似(random-phase approximation; RPA) 基底状態にも相関を入れる

$$\hat{H}|\lambda\rangle = E_\lambda|\lambda\rangle$$

フォノン演算子の真空として基底状態を定義

$$|\lambda\rangle = \hat{\mathcal{O}}_\lambda^\dagger |0\rangle \quad \hat{\mathcal{O}}_\lambda |0\rangle = 0$$

TDAのときは

$$\hat{\mathcal{O}}_\nu^\dagger = \sum_{ph} C_{ph}^\nu d_p^\dagger b_h^\dagger \quad \text{基底状態はHF状態 } |0\rangle = |\Phi_{\text{HF}}\rangle$$

RPAでは

$$\hat{\mathcal{O}}_\lambda^\dagger = \sum_{ph} X_{ph}^\lambda d_p^\dagger b_h^\dagger - Y_{ph}^\lambda b_h d_p \quad \begin{array}{ll} \text{前方振幅} & \text{後方振幅} \end{array} \quad \text{RPAでの基底状態(真空)は } |\text{HF}\rangle \text{に相関がはいったもの}$$

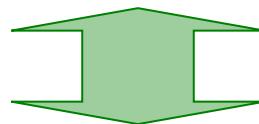
$$c^\dagger c^\dagger cc \sim a^\dagger a^\dagger aa \sim \binom{d^\dagger}{b} \binom{d^\dagger}{b} \binom{d}{b^\dagger} \binom{d}{b^\dagger}$$

のうち、d+b+db, d+d+b+b+, ddbbを取り込む

RPA/QRPA

$$\hat{O}_\lambda^\dagger = \sum_{ph} X_{ph}^\lambda d_p^\dagger b_h^\dagger - Y_{ph}^\lambda b_h d_p \quad \hat{H} = E_{\text{HF}} + \Delta E_{\text{RPA}} + \sum_\lambda \hbar \Omega_\lambda \hat{O}_\lambda^\dagger \hat{O}_\lambda$$

$$[\hat{H}, \hat{O}_\lambda^\dagger] = \hbar \Omega_\lambda \hat{O}_\lambda^\dagger \quad [\hat{H}, \hat{O}_\lambda] = -\hbar \Omega_\lambda \hat{O}_\lambda$$



調和振動子と同じ方程式

RPA方程式

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\lambda \\ Y^\lambda \end{pmatrix} = \hbar \Omega_\lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\lambda \\ Y^\lambda \end{pmatrix}$$

$$A_{php'h'} = (\varepsilon_p - \varepsilon_h) \delta_{pp'} \delta_{hh'} + \bar{v}_{ph'h'p'} \quad B_{php'h'} = \bar{v}_{pp'h'h'}$$

$$\langle \lambda | \lambda' \rangle = \delta_{\lambda \lambda'} = \langle \Phi_{\text{RPA}} | [\hat{O}_\lambda, \hat{O}_\lambda^\dagger] | \Phi_{\text{RPA}} \rangle \sim \langle \Phi_{\text{HF}} | [\hat{O}_\lambda, \hat{O}_\lambda^\dagger] | \Phi_{\text{HF}} \rangle$$

規格直交性

$$\delta_{\lambda \lambda'} = \sum_{ph} (X_{ph}^{\lambda*} X_{ph}^{\lambda'} - Y_{ph}^{\lambda*} Y_{ph}^{\lambda'})$$

$$\delta_{pp'} \delta_{hh'} = \sum_\lambda (X_{ph}^{\lambda*} X_{p'h'}^\lambda - Y_{ph}^{\lambda*} Y_{p'h'}^\lambda)$$

QRPA (quasiparticle RPA) pairingがあるとき

$$\hat{O}_\lambda^\dagger = \sum_{\mu\nu} X_{\mu\nu}^\lambda \alpha_\mu^\dagger \alpha_\nu^\dagger - Y_{\mu\nu}^\lambda \alpha_\nu \alpha_\mu \quad \text{二準粒子励起の重ね合わせ}$$

$$\hat{H} - \lambda \hat{N} = E_{\text{HFB}} + \Delta E_{\text{QRPA}} + \sum_\lambda \hbar \Omega_\lambda \hat{O}_\lambda^\dagger \hat{O}_\lambda$$

遷移強度と巨大共鳴

基底状態|0>から励起状態|λ>への演算子Fによる遷移確率

$$\langle 0 | \hat{F} | \lambda \rangle = \langle 0 | \hat{F} \hat{\mathcal{O}}_\lambda^\dagger | 0 \rangle = \langle 0 | [\hat{F}, \hat{\mathcal{O}}_\lambda^\dagger] | 0 \rangle \simeq \langle \Phi_{\text{HFB}} | [\hat{F}, \hat{\mathcal{O}}_\lambda^\dagger] | \Phi_{\text{HFB}} \rangle$$

$$\hat{F} = \sum_{\mu < \nu} F_{\mu\nu}^{20} \alpha_\mu^\dagger \alpha_\nu^\dagger + F_{\mu\nu}^{02} \alpha_\nu \alpha_\mu \quad \hat{\mathcal{O}}_\lambda^\dagger = \sum_{\mu < \nu} X_{\mu\nu}^\lambda \alpha_\mu^\dagger \alpha_\nu^\dagger - Y_{\mu\nu}^\lambda \alpha_\nu \alpha_\mu$$

$$\langle 0 | \hat{F} | \lambda \rangle = \sum_{\mu < \nu} F_{\mu\nu}^{02} X_{\mu\nu}^\lambda + F_{\mu\nu}^{20} Y_{\mu\nu}^\lambda$$

集団励起：集団演算子(多重極演算子など)で強く励起される状態

集団低励起： $\Delta N=0$ の励起

巨大共鳴(高励起) $\Delta N=2$ 励起(正parity)、 $\Delta N=1$ (負parity)
古典的な形状振動

巨大共鳴の種類

	T=0 (アイソスカラー)	T=1 (アイソベクター)
$\lambda=0$ (单極子共鳴)	ISGMR	IVGMR
$\lambda=1$ (双極子共鳴)	- (ISGDR)	IVGDR
$\lambda=2$ (四重極共鳴)	ISGQR	IVGQR

ガモフ・テラー共鳴($F=\sigma \tau$)、スピン巨大共鳴など

QRPA和則

和則(sum rule) $m_k(\hat{F}) = \sum_{\lambda} (\hbar\Omega_{\nu})^{\lambda} |\langle \lambda | \hat{F} | 0 \rangle|^2$

和則比は巨大共鳴の平均励起エネルギーとも対応

$$E_k = \sqrt{\frac{m_k}{m_{k-2}}} \quad E_{-1} \leq E_0 \leq E_1 \leq \bar{E} \equiv \frac{m_1}{m_0} \leq E_2$$

いくつかの和則は平均場から直接計算できる

Thoulessの定理($k=1$, energy-weighted sum rule)

Thouless, Nucl. Phys. 22, 78 (1961)

$$\begin{aligned} m_1(\hat{F}) &= \frac{1}{2} \langle [\hat{F}, [\hat{H}, \hat{F}]] \rangle = \frac{1}{2} \langle [\hat{F}, [\hat{T}, \hat{F}]] \rangle (1 + \kappa) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \int |\nabla f(\mathbf{r})|^2 \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} (1 + \kappa), \quad k=3,5,\dots \text{にも同様の定理が存在} \end{aligned}$$

誘電定理($k=-1$, dielectric theorem)

$$m_{-1}(\hat{F}) = \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} \mathcal{E}[\mathcal{R}(\lambda)] \right|_{\lambda=0} = \left. \frac{1}{2} \frac{\partial \langle \phi(\lambda) | \hat{F} | \phi(\lambda) \rangle}{\partial \lambda} \right|_{\lambda=0}$$

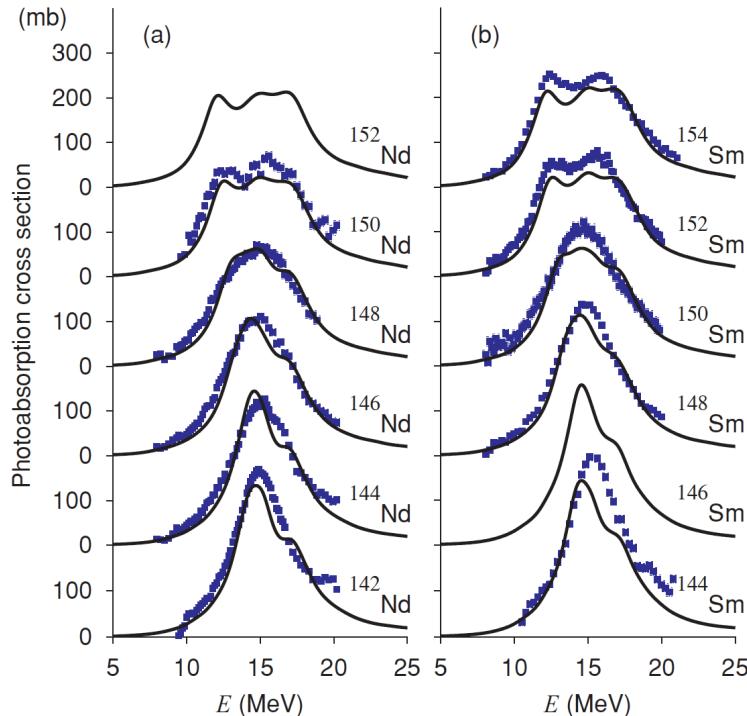
$|\phi(\lambda)\rangle$ 線形拘束- λF で計算したHFB状態

QRPAコードのチェック、近似の妥当性をみるのみも使われる

QRPA計算例

巨大共鳴

双極子巨大共鳴

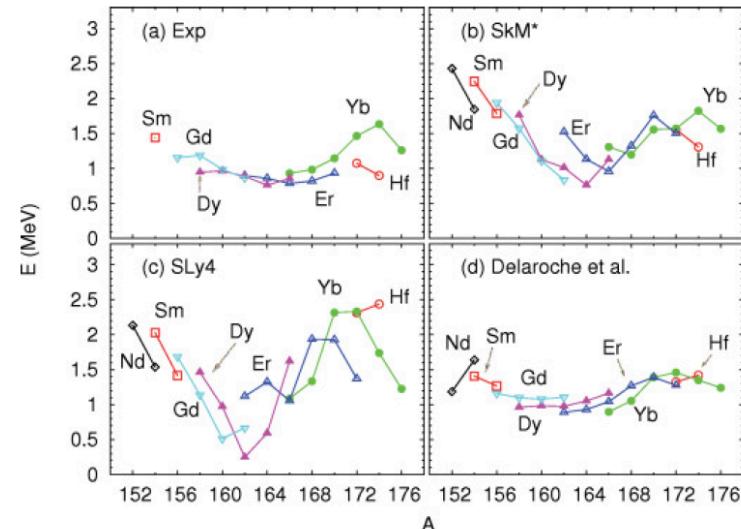


Yoshida and Nakatsukasa, Phys. Rev. C 83, 021304(R) (2011)

Skyrme SkM* functional

低励起集団状態

γ 振動



Terasaki and Engel, Phys. Rev. C 84, 014332 (2011)

QRPA解は行列の固有値・固有ベクトルで離散的



Lorentzian smearing

$$\frac{dB}{d\omega} = \frac{\gamma}{2\pi} \sum_{\lambda > 0} \left(\frac{|\langle \lambda | \hat{F} | 0 \rangle|^2}{(\Omega_\lambda - \omega)^2 + \gamma^2} - \frac{|\langle \lambda | \hat{F}^\dagger | 0 \rangle|^2}{(\Omega_\lambda + \omega)^2 + \gamma^2} \right)$$

QRPA解とHFB状態の安定性

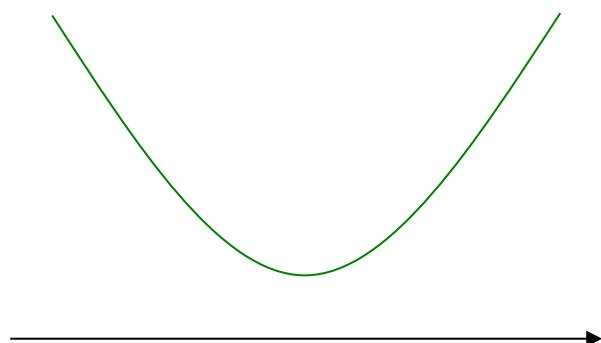
QRPA方程式の性質 X, Y, Ω が解であれば、 $Y^*, X^*, -\Omega$ も解

HFBが安定解であればすべての Ω は実数(正と負)

HFBが不安定であれば虚数となる Ω が存在

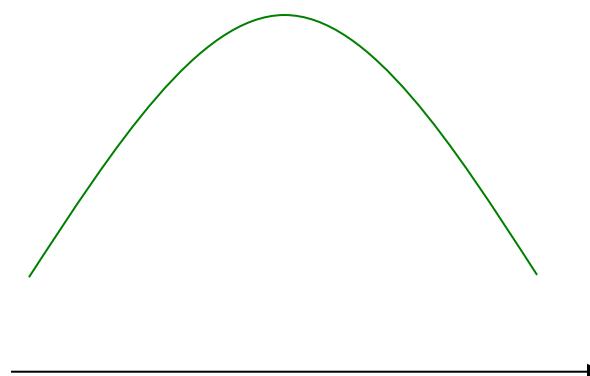
RPA解の詳細な構造：Nakada, Prog. Theor. Exp. Phys. 2016, 063D02, 2017, 023D03

安定解



任意の変位(ph自由度、変形度など)

不安定解



ある変位(ph自由度、変形度など)

例えば対称性に制限のあるコードでHFB方程式を解くと不安定解が現れる

- ・球対称コードで計算したHFB解が変形の自由度に対して不安定
- ・軸対称変形コードで計算したHFB解が非軸対称変形に対して不安定
- ・パリティ対称性を課して計算したHFB解がY30変形に対して不安定

QRPA解の性質をみることでHFB解の安定性がわかる

QRPA方程式のPQ表示

QRPA方程式 $[\hat{H}, \hat{\mathcal{O}}_\lambda^\dagger] = \hbar\Omega_\lambda \hat{\mathcal{O}}_\lambda^\dagger$ $[\hat{H}, \hat{\mathcal{O}}_\lambda] = -\hbar\Omega_\lambda \hat{\mathcal{O}}_\lambda$

調和振動子と同じ形→座標・運動量による表示が可能

$$\hat{\mathcal{P}}_\lambda = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{M_\lambda \hbar \Omega_\lambda}{2}} (\hat{\mathcal{O}}_\lambda - \hat{\mathcal{O}}_\lambda^\dagger) \quad \hat{\mathcal{Q}}_\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{2M_\lambda \Omega_\lambda}} (\hat{\mathcal{O}}_\lambda + \hat{\mathcal{O}}_\lambda^\dagger)$$

$$[\hat{\mathcal{P}}_\lambda, \hat{\mathcal{P}}_{\lambda'}] = [\hat{\mathcal{Q}}_\lambda, \hat{\mathcal{Q}}_{\lambda'}] = 0 \quad \langle \Phi_{\text{HFB}} | [\hat{\mathcal{Q}}_\lambda, \hat{\mathcal{P}}_{\lambda'}] | \Phi_{\text{HFB}} \rangle = i\hbar \delta_{\lambda\lambda'}$$

PQ表示のQRPA方程式

$$[\hat{H}, \hat{\mathcal{P}}_\lambda] = i\hbar\Omega_\lambda^2 M_\lambda \hat{\mathcal{Q}}_\lambda \quad [\hat{H}, \hat{\mathcal{Q}}_\lambda] = -\frac{i\hbar}{M_\lambda} \hat{\mathcal{P}}_\lambda$$

$$\hat{H} - \lambda \hat{N} = E_{\text{HFB}} - \frac{1}{2} \text{Tr} A + \sum_\lambda \frac{1}{2M_\lambda} \hat{\mathcal{P}}_\lambda^2 + \frac{M_\lambda}{2} \Omega_\lambda^2 \hat{\mathcal{Q}}_\lambda^2$$

P, Qはエルミート演算子

$$\hat{\mathcal{P}}_\lambda = \sum_{\mu < \nu} P_{\mu\nu}^\lambda \alpha_\mu^\dagger \alpha_\nu^\dagger + P_{\mu\nu}^{\lambda*} \alpha_\nu \alpha_\mu \quad \hat{\mathcal{Q}}_\lambda = \sum_{\mu < \nu} Q_{\mu\nu}^\lambda \alpha_\mu^\dagger \alpha_\nu^\dagger + Q_{\mu\nu}^{\lambda*} \alpha_\nu \alpha_\mu$$

$$P_{\mu\nu}^\lambda = i \sqrt{\frac{M_\lambda \hbar \Omega_\lambda}{2}} (X_{\mu\nu}^\lambda + Y_{\mu\nu}^{\lambda*}) \quad Q_{\mu\nu}^\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{2M_\lambda \Omega_\lambda}} (X_{\mu\nu}^\lambda - Y_{\mu\nu}^{\lambda*})$$

RPA方程式のPQ表示

RPA方程式

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P^\lambda \\ -P^{\lambda*} \end{pmatrix} = i\hbar\Omega_\lambda^2 M_\lambda \begin{pmatrix} Q^\lambda \\ Q^{\lambda*} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q^\lambda \\ -Q^{\lambda*} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{M_\lambda} \begin{pmatrix} P^\lambda \\ P^{\lambda*} \end{pmatrix}$$

規格化

$$(Q^{\lambda*} \quad Q^\lambda) \begin{pmatrix} P^{\lambda'} \\ -P^{\lambda'*} \end{pmatrix} = i\hbar\delta_{\lambda\lambda'}$$

A,B行列が実数のときはQRPAで対角化する行列の次元を半分にできる

$$(A + B)(A - B)Q^\lambda = \hbar^2\Omega_\lambda^2 Q^\lambda$$

QRPAと対称性

HFB解での連續対称性の破れ：平均ポテンシャル(一体場で対称性が破れている)

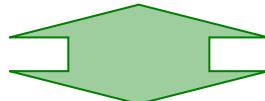
- ・並進対称性
- ・回転対称性(変形)
- ・ゲージ対称性(対相関)

もともとのHamiltonianは対称性を持っているが、一体平均場のHamiltonianでは自発的に対称性が破れる(P: 破れた対称性の演算子)

$$[\hat{H}, \hat{P}] = 0 \quad [\hat{h}_{\text{HFB}}, \hat{P}] \neq 0$$

PQ表示のQRPA方程式

$$[\hat{H}, \hat{\mathcal{P}}_\lambda] = i\hbar\Omega_\lambda^2 M_\lambda \hat{\mathcal{Q}}_\lambda \quad [\hat{H}, \hat{\mathcal{Q}}_\lambda] = -\frac{i\hbar}{M_\lambda} \hat{\mathcal{P}}_\lambda$$



$$[\hat{H}, \hat{P}] = 0$$

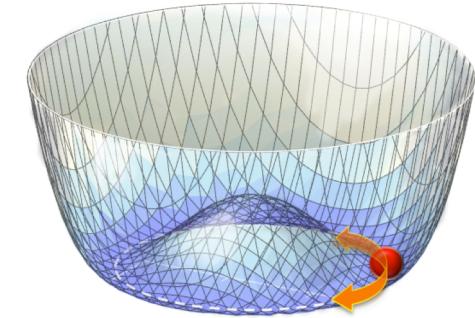
$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P \\ -P^* \end{pmatrix} = 0$$

対称性が破れた系でのPはRPAのゼロ・エネルギー解(spurious解)

HFBで自発的に破れた対称性はQRPAで回復(南部・ゴールドストーンモード)

対称性の自発的破れと南部・ゴールドストーンモード

系が自発的に対称性が破れると状態が無限に縮退する
対称性を回復するゼロ・エネルギー集団モード
(南部・ゴールドストーン)が発生



破れた対称性	平均場	南部・ゴールドストーン解 (QRPA)	K^π (量子数)
並進対称性	重心が原点に固定	重心運動	1^-
回転対称性 $SU(2)$	変形	集団回転 z軸対称: x軸 or y軸回転 非軸対称: 3次元回転	$1^+, 2^+$
粒子数保存 ($U(1)$ ゲージ対称性)	対凝縮・超伝導	対回転	0^+
アイソスピン対称性	中性子-陽子混合	アイソスピン回転	0^+

QRPAのゼロ・エネルギー解

XY表示では計算できない(規格化できない) $\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\lambda \\ Y^\lambda \end{pmatrix} = \hbar\Omega_\lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\lambda \\ Y^\lambda \end{pmatrix}$

もともとのHamiltonianは対称性を持っているが、一体平均場のHamiltonianでは自発的に対称性が破れる(P: 破れた対称性の演算子)

$$[\hat{H}, \hat{\mathcal{P}}_\lambda] = 0 \quad [\hat{H}, \hat{\mathcal{Q}}_\lambda] = -\frac{i\hbar}{M_\lambda} \hat{\mathcal{P}}_\lambda \quad \begin{array}{l} \text{P: 破れた対称性の演算子(既知)} \\ \text{Q: 対称性演算子と正準共役な座標演算子(未知)} \\ \text{M: 慣性質量(QPRA mass, 未知)} \end{array}$$

$$\langle \Phi_{\text{HFB}} | [\hat{\mathcal{Q}}_\lambda, \hat{\mathcal{P}}_\lambda] | \Phi_{\text{HFB}} \rangle = i\hbar$$

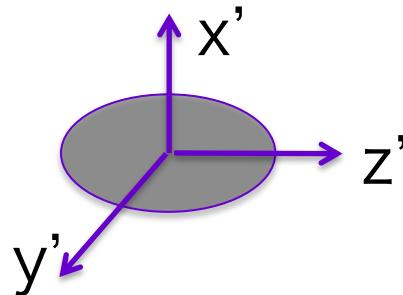
$$\hat{H} - \lambda \hat{N} = E_{\text{QRPA}} + \sum_{\lambda > 0} \hbar\Omega_\lambda \hat{\mathcal{O}}_\lambda^\dagger \hat{\mathcal{O}}_\lambda + \sum_{\mu} \frac{\hat{\mathcal{P}}_\mu^2}{2M_\mu} \leftarrow \text{NG解からのエネルギーの寄与}$$

$$M_{\text{NG}} = 2[P_{\text{NG}}^R(A+B)^{-1}P_{\text{NG}}^R + P_{\text{NG}}^I(A-B)^{-1}P_{\text{NG}}^I] \quad P_{\text{NG}} = P_{\text{NG}}^R + iP_{\text{NG}}^I$$

平均場	P	Q	M
重心を固定	重心運動量演算子	重心座標演算子	全質量(mA)
軸対称変形核(対称軸z)	角運動量演算子Jx, Jy	回転角演算子	慣性モーメント(MOI)
超伝導状態	粒子数演算子	対回転角演算子	対回転のMOI
陽子・中性子混合	アイソスピン演算子	アイソスピン回転角演算子	アイソスピン回転のMOI

回転対称性の破れの場合

対称性を破った変形状態
(物体固定系)



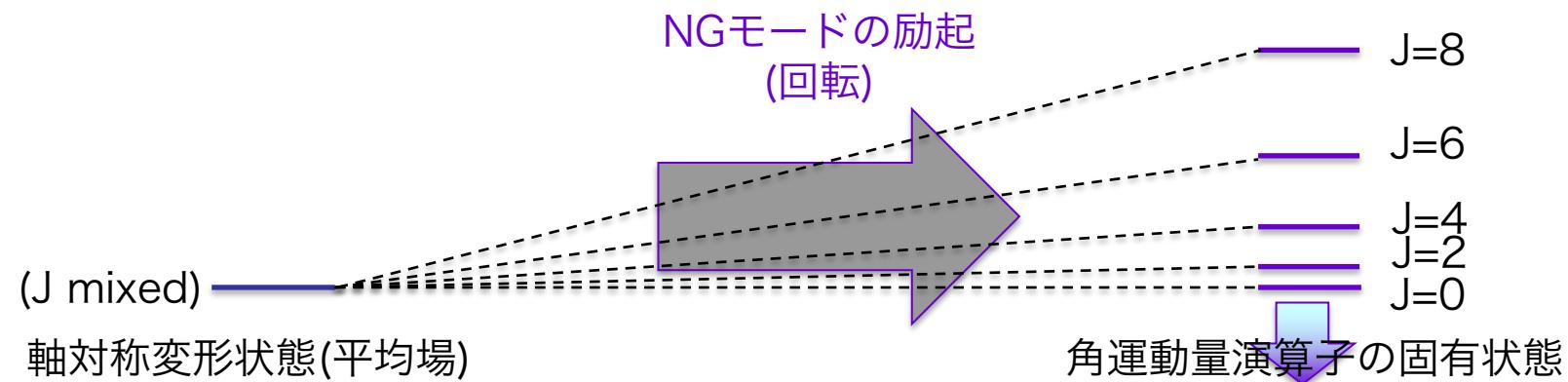
変形核の計算：主軸の固定が必須
(固定しないと反復が収束しない)

$$\begin{aligned}\langle \Phi_{\text{HFB}} | \hat{x} \hat{y} | \Phi_{\text{HFB}} \rangle &= 0 \\ \langle \Phi_{\text{HFB}} | \hat{y} \hat{z} | \Phi_{\text{HFB}} \rangle &= 0 \\ \langle \Phi_{\text{HFB}} | \hat{z} \hat{x} | \Phi_{\text{HFB}} \rangle &= 0\end{aligned}$$

主軸がずれた状態：同一エネルギーのHFB状態(縮退)

$$|\Phi'_{\text{HFB}}(\theta)\rangle = e^{i\theta \hat{J}_x} |\Phi_{\text{HFB}}\rangle$$

回転対称性が破れたHFB状態は無限に縮退



NGモードは慣性系の変換(物体固定系 \leftrightarrow 実験室系)

回転の慣性モーメント

軸対称変形核：回転対称性の破れ

南部・ゴールドストーンモード：集団回転運動(対称軸(z)と直交する軸周り(x,y))

QRPAによる慣性モーメント：Thouless-Valatinの慣性モーメント

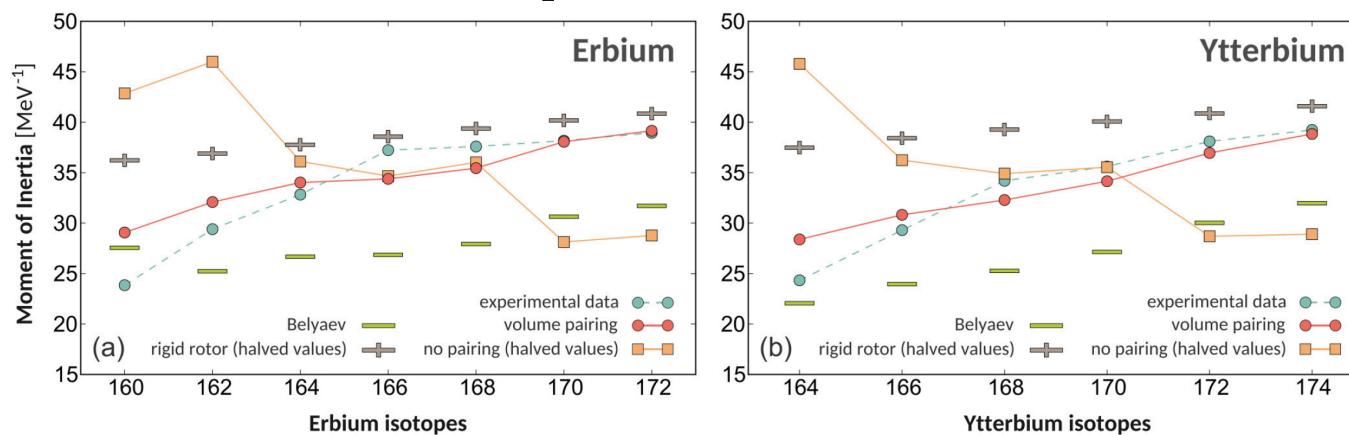
$$\mathcal{J}_{\text{TV}} = 2J_x^*(A + B)^{-1}J_x$$

Belyaevの慣性モーメント：QRPAで残留相互作用vをゼロにしたもの

$$\mathcal{J}_{\text{Belyaev}} = 2 \sum_{\mu\nu} \frac{|\langle \Phi_{\text{HFB}} | \hat{J}_x | \mu\nu \rangle|^2}{E_\mu + E_\nu}$$

$$\mathcal{J}_{\text{exp}} = \frac{3}{E(2_1^+)}$$

実験値



Petrík and Kortelainen, Phys. Rev. C 97, 034321 (2018)

対相関：慣性モーメントを小さくする(0^+ のエネルギーを相対的に下げる)
残留相互作用の効果はBelyaevと比べて30%ほど

超伝導状態とゲージ対称性

BCS状態: Bogoliubov準粒子の真空 $\alpha_\mu |\Phi_{\text{BCS}}\rangle = 0$

$$|\Phi_{\text{BCS}}\rangle = \prod_i \alpha_i \alpha_{\bar{i}} |0\rangle = \prod_i (u_i + v_i a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger) |0\rangle$$

粒子数保存を破る(軌道*i*,*i*_{bar}に粒子対がある状態とない状態の重ね合わせ)
 u_i (非占有率)と v_i (占有率)の2つの量: 相対位相(新しい自由度)
 通常のBCS/HFB計算では u_i と v_i は実数に選ぶ(位相の固定)

$$|\Phi'_{\text{BCS}}(\phi)\rangle = e^{i\phi \hat{N}} |\Phi_{\text{BCS}}\rangle = \prod_i (u_i + v_i e^{2i\phi} a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger) |0\rangle$$

$$\hat{N} = \sum_{i>0} a_i^\dagger a_i + a_{\bar{i}}^\dagger a_{\bar{i}}$$

粒子数演算子
 ϕ : ゲージ角

ゲージ回転の角運動量演算子

Bogoliubov変換 $a_i^\dagger = u_i a_i^\dagger - v_i a_{\bar{i}}$ で $(u_i, v_i) \rightarrow (u_i e^{-i\phi}, v_i e^{i\phi})$ とするのと同じ
 $a_{\bar{i}}^\dagger = u_i a_{\bar{i}}^\dagger + v_i a_i$ $(a_i^\dagger, a_i) \rightarrow (a_i^\dagger e^{i\phi}, a_i e^{-i\phi})$

反交換関係は不变

密度行列はゲージ回転不变 $\rho_{ij} = \sum_{\mu>0} (V_{i\mu}^* V_{j\mu} + V_{i\bar{\mu}}^* V_{j\bar{\mu}})$

Hartree-Fockポテンシャルも不变

対密度行列は回転

$$\kappa_{ij} = \sum_{\mu>0} (V_{i\mu}^* U_{j\mu} + V_{i\bar{\mu}}^* U_{j\bar{\mu}}) \quad \kappa_{ij}(\phi) = \langle \Phi'_{\text{HFB}}(\phi) | c_j c_i | \Phi'_{\text{HFB}}(\phi) \rangle = e^{-2i\phi} \kappa_{ij}(0)$$

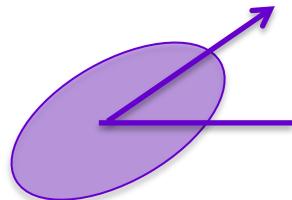
対ポテンシャルも回転

$$\Delta_{ij}[\kappa] = \frac{1}{2} \sum_{kl} \bar{v}_{ijkl} \kappa_{kl} \quad \Delta_{ij}(\phi) = e^{-2i\phi} \Delta_{ij}(0)$$

ゲージ回転はHFでは見えない。超伝導状態で初めて現れる自由度

ゲージ対称性の破れと対回転

対称性を破った超伝導状態
(物体固定系)



BCS/HFBでは u, v 波動関数を
実数としてゲージ角を固定

ゲージ回転した状態：HFB状態と縮退

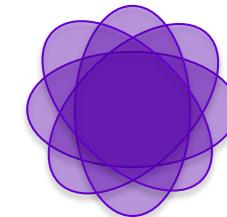
$$|\Phi'_{\text{HFB}}(\phi)\rangle = e^{i\phi\hat{N}} |\Phi_{\text{HFB}}\rangle$$

ゲージ対称性が破れたHFB状態は無限に縮退

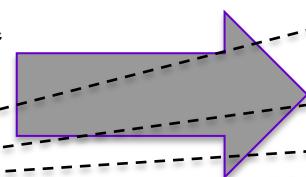
(N mixed)

超伝導状態
(複素位相がそろった状態)

対称性を回復した状態
(実験室系)



NGモード励起
(対回転)



$N=N_0 \pm 8$

$N=N_0 \pm 6$

$N=N_0 \pm 4$

$N=N_0 \pm 2$

$N=N_0$

粒子数演算子の
固有状態

$$\text{対回転エネルギー } E(N) = \frac{1}{2J_N} (N - N_0)^2 \quad \text{対回転バンド}$$

NGモードは慣性系の変換(物体固定系 \leftrightarrow 実験室系)

対回転の慣性モーメント

超伝導核(対凝縮)：ゲージ対称性の破れ

南部・ゴールドストーンモード：ゲージ回転運動($U(1)$)

QRPAによる慣性モーメント：Thouless-Valatinの慣性モーメント

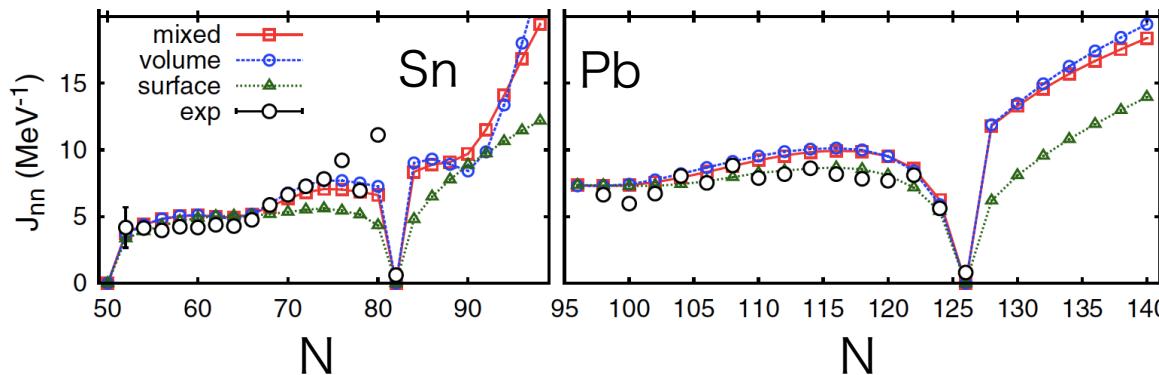
$$\mathcal{J}_{\text{TV}} = 2N(A + B)^{-1}N$$

実験値

$$E(N) = E(N_0) + \lambda(N_0)\Delta N + \frac{(\Delta N)^2}{2\mathcal{J}(N_0)}$$

$$\mathcal{J}_{\text{exp}}(N) = \frac{4}{E(N+2) - 2E(N) + E(N-2)}$$

中性子の対回転慣性モーメントの計算例

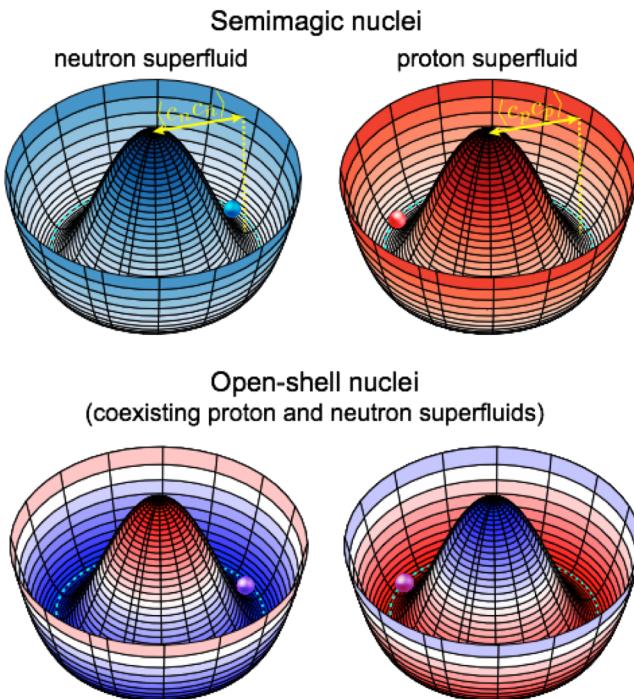


NH and Nazarewicz, Phys. Rev. Lett. 116, 152502 (2016)

対相関による対称性の破れは偶々核の二重束縛エネルギー差からも見える
魔法数N=50, 82, 126では対凝縮していない

中性子・陽子両方のゲージ対称性が破れた場合

Pairing Rotations in Atomic Nuclei



中性子と陽子のゲージ対称性が破れた場合

($\Delta n \neq 0$ and $\Delta p \neq 0$, $U(1)_n \times U(1)_p$)

$$[\hat{H}_{\text{HFB}}, \hat{N}_n] \neq 0 \quad [\hat{H}_{\text{HFB}}, \hat{N}_p] \neq 0$$



中性子の対回転エネルギー
陽子の対回転エネルギー

QRPA固有状態の南部=ゴールドストンモードは
中性子と陽子の線形結合
(中性子一陽子間の残留相互作用のため)

formal theory: Marshalek, Nucl. Phys. A 275, 416 (1977)
first calculation: NH, Phys. Rev. C 92, 034321 (2015)

$$\begin{aligned}\hat{N}_1 &= \hat{N}_n \cos \theta + \alpha \hat{N}_p \sin \theta \\ \hat{N}_2 &= -\hat{N}_n \sin \theta + \alpha \hat{N}_p \cos \theta\end{aligned}$$

$$[\hat{H}_{\text{HFB}}, \hat{N}_1] \neq 0 \quad [\hat{H}_{\text{HFB}}, \hat{N}_2] \neq 0$$

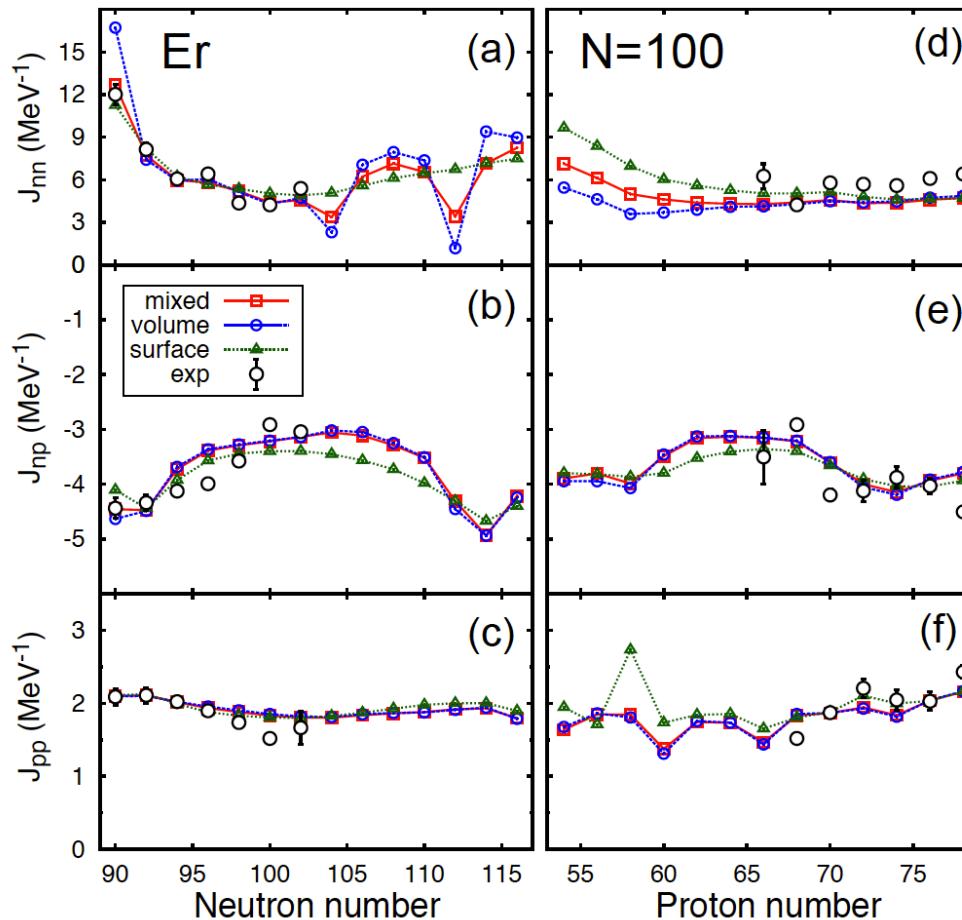
$$E(N, Z) = E(N_0, Z_0) + \lambda_1(N_0, Z_0)\Delta N_1 + \lambda_2(N_0, Z_0)\Delta N_2 + \frac{(\Delta N_1)^2}{2\mathcal{J}_1(N_0, Z_0)} + \frac{(\Delta N_2)^2}{2\mathcal{J}_2(N_0, Z_0)}$$

$$E_{\text{pairrot}}(N, Z) = \frac{(\Delta N)^2}{2\mathcal{J}_{nn}(N_0, Z_0)} + \frac{2(\Delta N)(\Delta Z)}{2\mathcal{J}_{np}(N_0, Z_0)} + \frac{(\Delta Z)^2}{2\mathcal{J}_{pp}(N_0, Z_0)}$$

陽子・中性子の空間での2次元回転

中性子・陽子のゲージ対称性が破れた場合

Er(Z=68)同位体、N=100同中性子体(すべてプロレート変形)



- 3つの慣性モーメント(J_{nn}, J_{np}, J_{pp})は実験データとよく一致

中性子と陽子の対回転モードの混合の証拠

線形応答理論

QRPAのもう一つの定式化

時間に依存する外場 $\hat{F}(t) = \eta \left(\hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{F}^\dagger e^{i\omega t} \right)$ $\hat{F} = \sum_{\mu < \nu} F_{\mu\nu}^{20} \alpha_\mu^\dagger \alpha_\nu^\dagger + F_{\mu\nu}^{02} \alpha_\nu \alpha_\mu$

F は例えばアイソベクトル双極演算子、四重極演算子など
 η は小さい数

時間変化するHFB状態(Slater行列式)を考える

準粒子が時間変化 $\alpha_\mu^\dagger(t) = \sum_k \left[U_{k\mu}(t) c_k^\dagger + V_{k\mu}(t) c_k \right]$
 $\alpha_\mu(t) = \{\alpha_\mu + \delta\alpha_\mu(t)\} e^{iE_\mu t}$

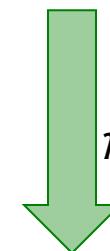
HFBでの準粒子からのずれ $\delta\alpha_\mu(t) = \eta \sum_\nu \alpha_\nu^\dagger [X_{\nu\mu}(\omega) e^{-i\omega t} + Y_{\nu\mu}^*(\omega) e^{i\omega t}]$

TDHFB(時間依存HFB)方程式

$$\delta \langle \Phi(t) | \hat{H} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \Phi(t) \rangle = 0 \quad \longrightarrow \quad i \frac{\partial \alpha_\mu(t)}{\partial t} = [\hat{H}(t) + \hat{F}(t), \alpha_\mu(t)]$$

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \eta \left[\delta \hat{H}(\omega) e^{-i\omega t} + \delta \hat{H}^\dagger(\omega) e^{i\omega t} \right]$$

$$\delta \hat{H}(\omega) = \sum_{\mu < \nu} [\delta H_{\mu\nu}^{20}(\omega) \alpha_\mu^\dagger \alpha_\nu^\dagger + \delta H_{\mu\nu}^{02}(\omega) \alpha_\nu \alpha_\mu]$$



η の 1 次の項のみ取り出す

線形応答の方程式(QRPAと同値)

$$\left[\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} - \omega \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} X(\omega) \\ Y(\omega) \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} F^{20} \\ F^{02} \end{pmatrix}$$

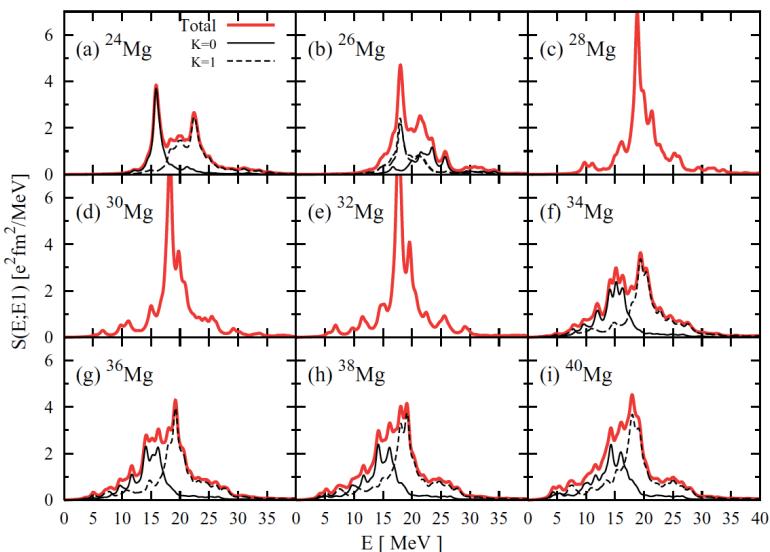
$X(\omega)$ 、 $Y(\omega)$ はQRPA解ではない

QRPAはTDHFBの小振幅近似($\eta \ll 1$)として得られる

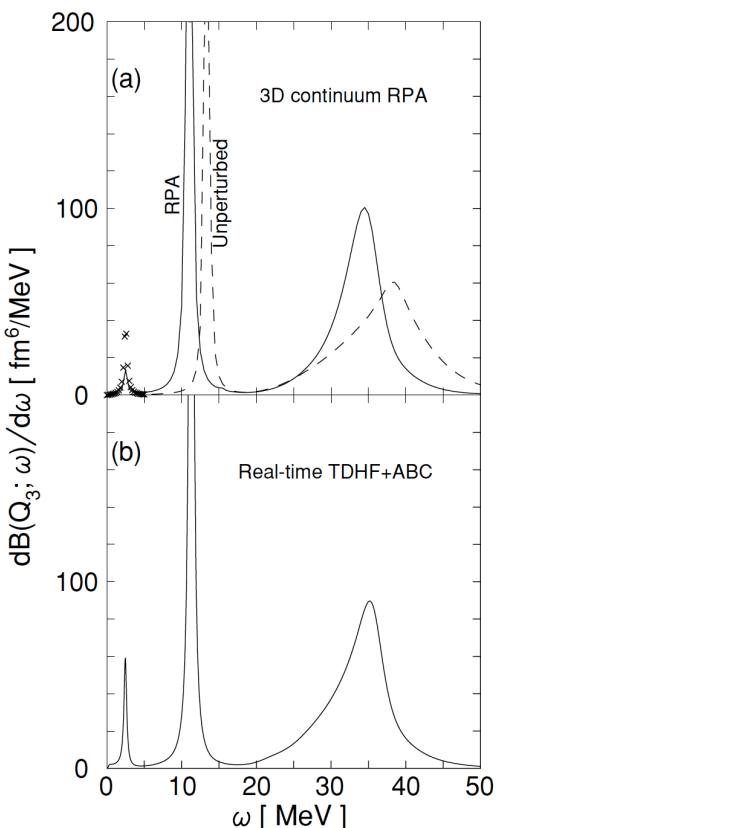
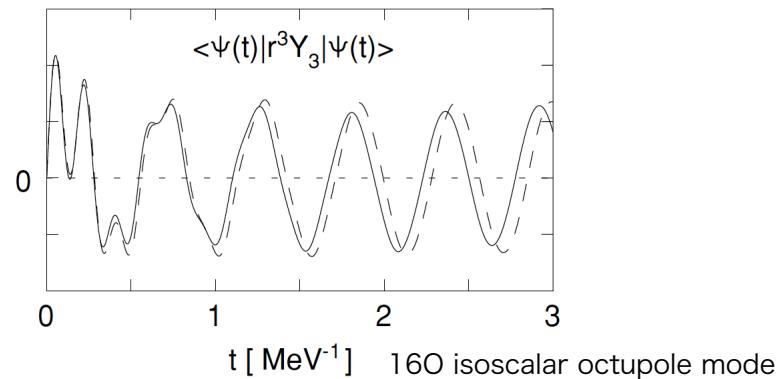
線形応答計算例

初期に外場を与える $V_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) = \eta F(\mathbf{r})\delta(t)$
 TDHFB方程式に従って時間発展

Canonical-basis TDHFB



Ebata et al., Phys. Rev. C **82**, 034306 (2010)



Nakatsukasa and Yabana, Phys. Rev. C **71**, 024301 (2005)

有限振幅法

QRPA : AB行列の計算が大変

Nakatsukasa, Inakura, Yabana, Phys. Rev. C **76**, 024318 (2007)
Avogadro and Nakatsukasa, Phys. Rev. C **84**, 014314 (2011)

$$\left[\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} - \omega \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} X(\omega) \\ Y(\omega) \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} F^{20} \\ F^{02} \end{pmatrix}$$



線形応答の方程式を反復法で解く

準粒子の変位

$X(\omega), Y(\omega)$

$$(E_\mu + E_\nu - \omega)X_{\mu\nu}(\omega) + \delta H_{\mu\nu}^{20}(\omega) = -F_{\mu\nu}^{20}$$

$$(E_\mu + E_\nu + \omega)Y_{\mu\nu}(\omega) + \delta H_{\mu\nu}^{02}(\omega) = -F_{\mu\nu}^{02}$$

(通常の線形応答の計算)

$$\delta H_{\mu\nu}^{20}(\omega) = \sum_{\mu' < \nu'} [A_{\mu\nu\mu'\nu'} - (E_\mu + E_\nu)\delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'}]X_{\mu'\nu'}(\omega) + B_{\mu\nu\mu'\nu'}Y_{\mu'\nu'}(\omega)$$

$$\delta H_{\mu\nu}^{02}(\omega) = \sum_{\mu' < \nu'} [A_{\mu\nu\mu'\nu'}^* - (E_\mu + E_\nu)\delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'}]Y_{\mu'\nu'}(\omega) + B_{\mu\nu\mu'\nu'}^*X_{\mu'\nu'}(\omega)$$

一体密度の変位を計算

$$\delta\rho(\omega) = UX(\omega)V^T + V^*Y^T(\omega)U^\dagger$$

$$\delta\kappa^{(+)}(\omega) = UX(\omega)U^T + V^*Y^T(\omega)V^\dagger$$

$$\delta\kappa^{(-)}(\omega) = V^*X^\dagger(\omega)V^T + UY^*(\omega)U^T$$

平均場Hamiltonianの
変位(一体場)

$$\delta H^{20}(\omega), \delta H^{02}(\omega)$$

Bogoliubov変換

一体平均ポテンシャルの変位を計算

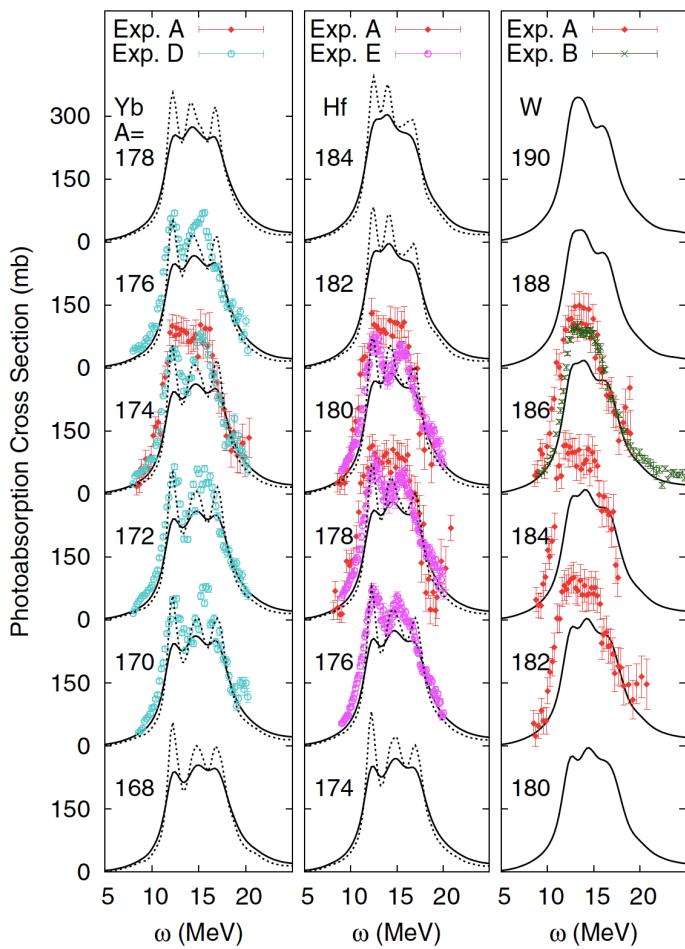
$$\delta h(\omega) = (h[\rho + \eta\delta\rho] - h[\rho])/\eta$$

$$\delta\Delta^{(\pm)}(\omega) = (\Delta[\rho + \eta\delta\rho, \kappa + \eta\delta\kappa^{(\pm)}, \kappa^* + \eta\delta\kappa^{(\mp)*}] - \Delta[\rho, \kappa, \kappa^*])/ \eta$$

DFTではAB行列が出てくる二体行列要素の計算を回避することができる

有限振幅法の計算例

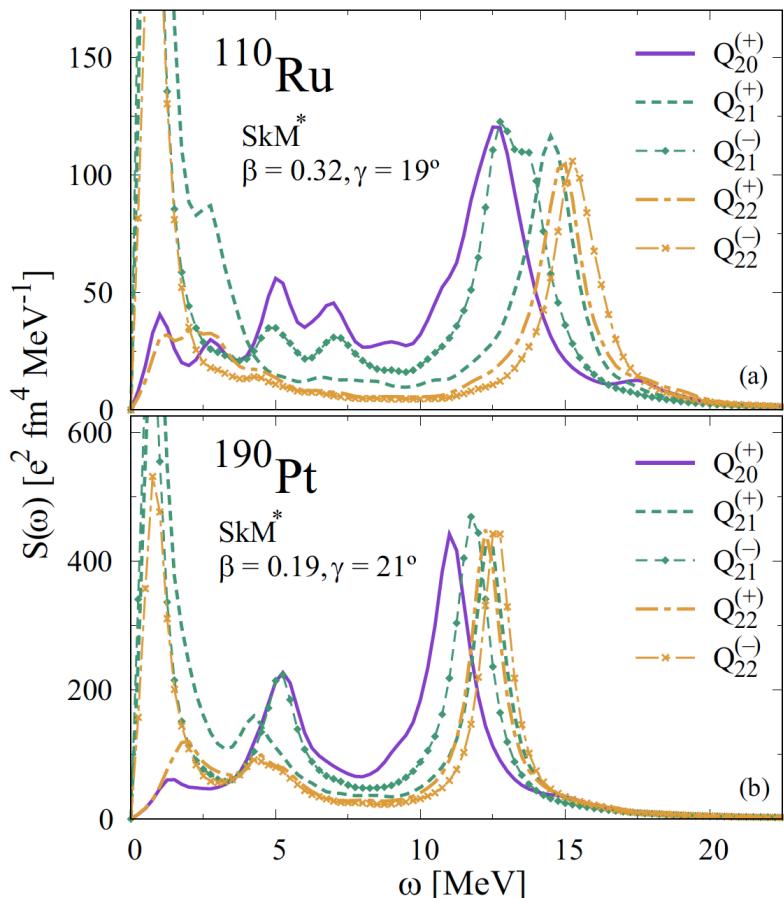
双極子巨大共鳴



Oishi et al., Phys. Rev. C 93, 034329 (2016)

行列対角化によるQRPA計算 : $O(N^6)$ (N は準粒子の次元~ 10^3 程度)
有限振幅法によるQRPA計算 : $O(N^2)$ の反復計算

四重極巨大共鳴(非軸対称原子核)



Washiyama and Nakatsukasa, Phys. Rev. C 96, 014304(R) (2017)

pnQRPA

$$[\hat{H}', \hat{\mathcal{O}}_\lambda^\dagger] = \Omega_\lambda \hat{\mathcal{O}}_\lambda^\dagger \quad [\hat{H}', \hat{\mathcal{O}}_\lambda] = -\Omega_\lambda \hat{\mathcal{O}}_\lambda$$

フォノン演算子として中性子・陽子準粒子対の形を考える

$$\hat{\mathcal{O}}_\lambda^\dagger = \sum_{\mu < \nu} X_{\mu\nu}^\lambda \alpha_\mu^{(n)\dagger} \alpha_\nu^{(p)\dagger} - Y_{\mu\nu}^\lambda a_\nu^{(p)} a_\mu^{(n)}$$

pnQRPA励起状態：基底状態が(N,Z)なら励起状態は(N±1, Z±1)

ベータ崩壊、ガモフ＝テラー巨大共鳴、二重ベータ崩壊など

残留相互作用：中性子一陽子相互作用のみ

原子核密度汎関数法の場合は中性子一陽子混合密度の導入が必要

対相関：中性子一陽子対相関

アイソベクトル型($T=1, S=0$)

アイソスカラー型($T=0, S=1$)

アイソベクトル型はアイソスピン対称性が使える($V_n = V_p = V_{np}$)

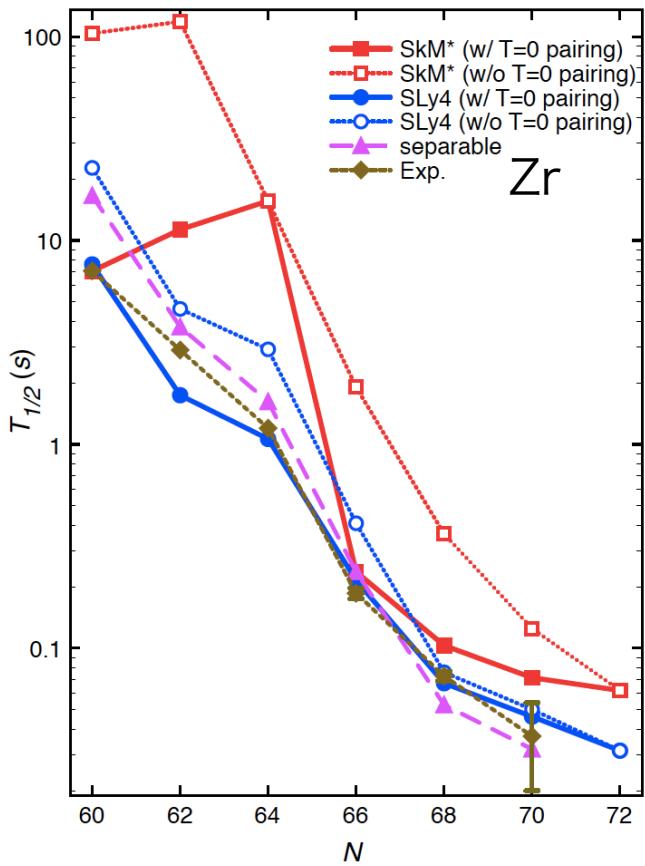
アイソスカラー型の対相関については(対凝縮の存在も含めて)よくわかっていない

最近のレビュー：Frauendorf and Macchiavelli Prog. Part. Nucl. Phys. 78, 24 (2014)

pnQRPA計算例

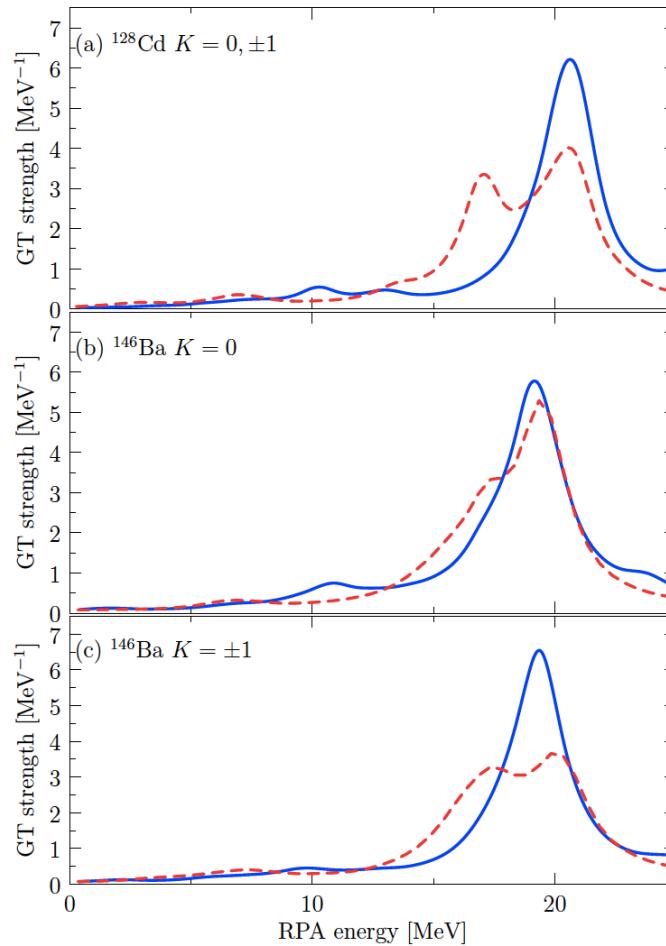
β 崩壊の半減期

Yoshida, PTEP 2013, 113D02



ガモフ＝テラー共鳴

Mustonen et al., Phys. Rev. C 90, 024308 (2014)



まとめ

- 励起状態の記述
 - 平均場の集団励起は残留相互作用によっておこる
 - 集団励起を扱う理論
 - Tamm-Dancoff近似
 - RPA, QRPA(準粒子乱雑位相近似)
 - 1p1hまたは二準粒子励起の重ね合わせで集団励起を記述
 - 遷移強度と巨大共鳴・和則
 - QRPAとHFB解の安定性
 - 対称性の破れとQRPA
 - 平均場近似で破れた対称性はQRPAレベルで回復
 - QRPAにゼロエネルギー解が発生(南部・ゴールドストーンモード)
 - 回転対称性の破れと集団回転運動、慣性モーメント
 - ゲージ対称性の破れと対回転、二重束縛エネルギー差
 - 線形応答理論・有限振幅法
 - 時間依存平均場理論の小振幅近似としてのQRPA
 - 行列対角化より効率的
 - pnQRPA (β 崩壊、ガモフテラー遷移)