

集団運動量を考慮に入れた生成座標法 による四重極励起の計算

YITP, Kyoto Univ.

December 7-10, 2021

京都大学理学研究科D1 樋沢規宏

共同研究者 萩野浩一、吉田賢市



GRADUATE
SCHOOL OF
FACULTY OF **SCIENCE**
KYOTO UNIVERSITY

■ Outline

1. Introduction
2. DGCM の四重極励起計算への応用
3. DGCM が GCM より優れている点

■ Generator Coordinate Method (GCM)

生成座標で指定される状態の張る空間でHamiltonianを対角化

Many body Hilbert space

subspace

$|q\rangle$

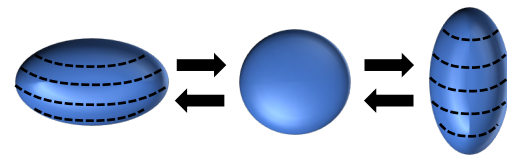
生成座標 q

$$|\psi\rangle_{\text{GCM}} = \int dq f(q) |q\rangle$$

よくやられている計算 (四重極振動)

エネルギー

四重極
モーメント
 Q_{20}



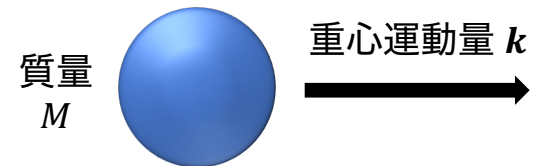
$$|\psi\rangle_{\text{GCM}} = \int dQ_{20} f(Q_{20}) |Q_{20}\rangle$$

- GCMはしばしば集団運動の記述に用いられる (生成座標 → 集団座標)
- 集団座標は直感的に選ばれることが多い

■ GCM の問題点

直感的な手法で生成された座標による単純なGCM計算を行うだけでは
集団運動の記述が**不十分**であることが知られている

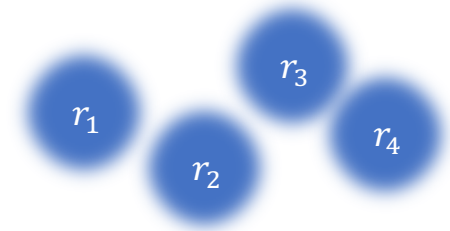
例：重心運動 $\left(E_{\text{tot}} = \frac{k^2}{2M} + \text{const.} \right)$



普通のGCM [1]

$$|\psi\rangle_{\text{PY}} = \int d^3r f(\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle$$

重心位置の**期待値**が \mathbf{r} の状態

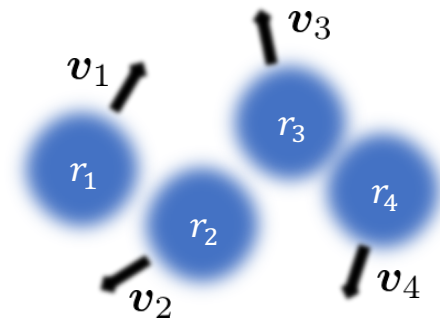


正しいエネルギー分散関係が得られない \rightarrow double projection

double projection [2]

$$|\psi\rangle_{\text{PT}} = \iint d^3v d^3r f(\mathbf{v}, \mathbf{r}) |\mathbf{v}, \mathbf{r}\rangle$$

重心位置の期待値が \mathbf{r} かつ**重心速度の期待値**が \mathbf{v} の状態



正しいエネルギー分散関係が得られる

[1] R.E. Peierls and J. Yoccoz, Proc. Phys. A **71**, 381 (1957).

[2] R.E. Peierls and D.J. Thouless, Nucl. Phys. **31**, 211 (1962).

回転運動に対してもdouble projectionは定義されている

J. Luis Egidio *et al.*, Phys. Rev. Lett. **116**, 052502 (2016).

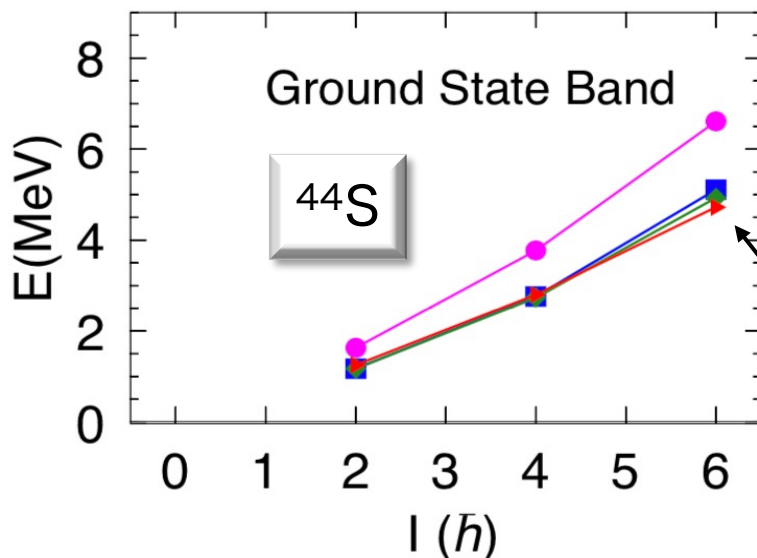
ある軸周りの回転運動におけるdouble projection

$$|\psi\rangle_{\text{PT}} = \iint d\omega d\theta f(\omega, \theta) |\omega, \theta\rangle$$

回転角の期待値が θ かつ角速度の期待値が ω の状態

- : 通常のGCM (θ のみ)
- : double projection
- ▲ : shell model
- ◆ : 実験値

θ と ω を同時に扱うことで実験値を良く再現

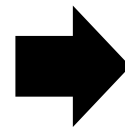


全角運動量演算子の固有値

一般の集団運動に対しては？

GCM

$$|\psi\rangle_{\text{GCM}} = \int dq f(q) |q\rangle$$



拡張版

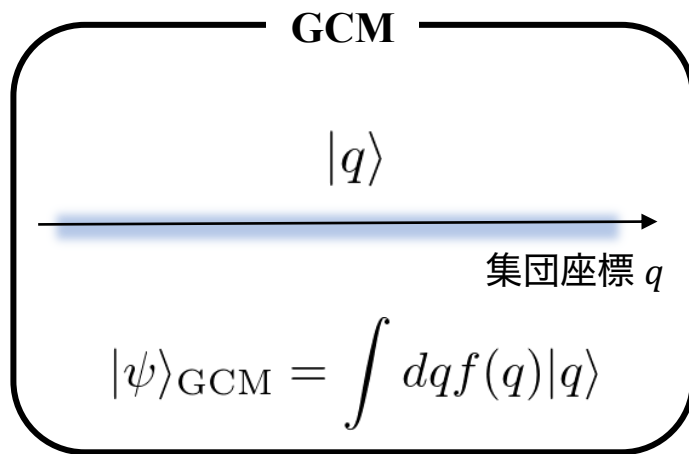
?

従来のGCM計算を改良する必要性

■ Dynamical GCM (DGCM)

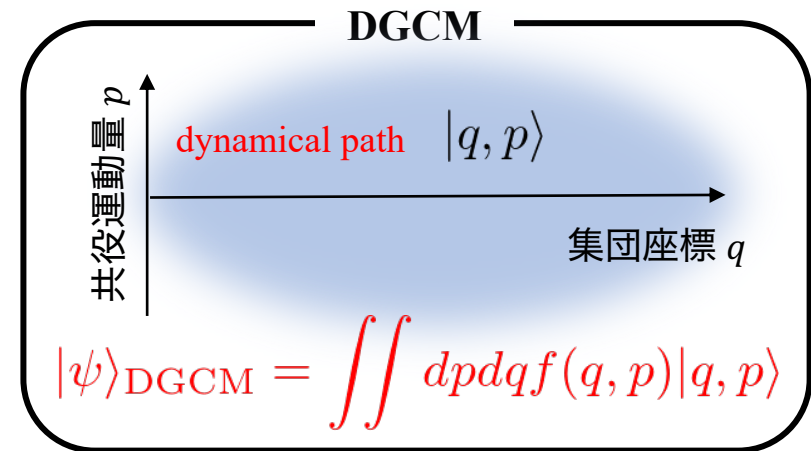
K. Goeke and P.-G. Reinhard, Ann. Phys. 124, 249 (1980).

集団座標に加え共役運動量も同時に考慮した GCM



conjugation condition

拡張
➔



$$\langle q, p | \overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q | q, p \rangle = i$$

- DGCMは double projection の拡張版を含む理論になっている
- 今まで具体的な数値計算が行われたことがなかった

■ Outline

1. Introduction

2. DGCM の四重極励起計算への応用

3. DGCM が GCM より優れている点

■ motivation

従来のGCM計算をDGCMの立場から再検討する

例えば4重極振動

$$|\psi\rangle_{\text{GCM}} = \int dQ_{20} f(Q_{20}) |Q_{20}\rangle$$

$$|\psi\rangle_{\text{DGCM}} = \iint dQ_{20} dp_{20} f(Q_{20}, p_{20}) |Q_{20}, p_{20}\rangle$$

■ DGCMの平均場理論に基づいた実装法

N. Hizawa, K. Hagino, and K. Yoshida, Phys. Rev. C **103**, 034313 (2021).

$$|\psi\rangle_{\text{DGCM}} = \iint dq dp f(q, p) \underline{e^{ip\hat{Q}}} |q\rangle, \quad \langle q | \hat{Q} | q \rangle = q$$

➡ 実際にどのように計算するか？

■ Hartree Fock 近似 $|q\rangle = \prod_{i=1}^A \hat{c}_i^\dagger |0\rangle, \quad \langle q|\hat{Q}|q\rangle = q$

■ One body operator を仮定 $\hat{Q} = \sum_{ij} Q_{ij}^c \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j$

➔ $e^{ip\hat{Q}}|q\rangle = \prod_{i=1}^A \left\{ \sum_{j_i} \left(\underline{e^{ipQ^c}} \right)_{j_i, i} \hat{c}_{j_i}^\dagger \right\} |0\rangle$
unitary 変換

■ e^{ipQ^c} の計算方法

$$Q^c = U\Lambda U^\dagger = U \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots) U^\dagger$$

$$e^{ipQ^c} = e^{ipU\Lambda U^\dagger} = U e^{ip\Lambda} U^\dagger$$

- ✓ 実際の計算では行列の和を model space に限定
- ✓ 従来のGCMのプログラムがそのまま転用可能
- ✓ HFBへの拡張は容易

■ Gogny force

$$\begin{aligned}
 V(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = & \sum_{\nu=1}^2 e^{-(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2 / \mu_\nu^2} (W_\nu + B_\nu P_\sigma - H_\nu P_\tau - M_\nu P_\sigma P_\tau) \\
 & + t_3 (1 + x_0 P_\sigma) \delta^3(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \rho^\alpha \left(\frac{\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j}{2} \right) \\
 & + i W_{\text{LS}} \overleftarrow{\nabla}_{ij} \delta^3(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \times \overrightarrow{\nabla}_{ij} \cdot (\boldsymbol{\sigma}_i + \boldsymbol{\sigma}_j) \\
 & + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \delta_{\tau_i, 1/2} \delta_{\tau_j, 1/2}.
 \end{aligned}$$

■ 変分方程式

$$\delta \langle \hat{H} - \lambda(\hat{Q} - q) \rangle = 0$$

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^A \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{V}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) - \frac{1}{2mA} \left(\sum_i \hat{\mathbf{p}}_i \right)^2$$

✓ exact Coulomb, two-body CoM correction あり

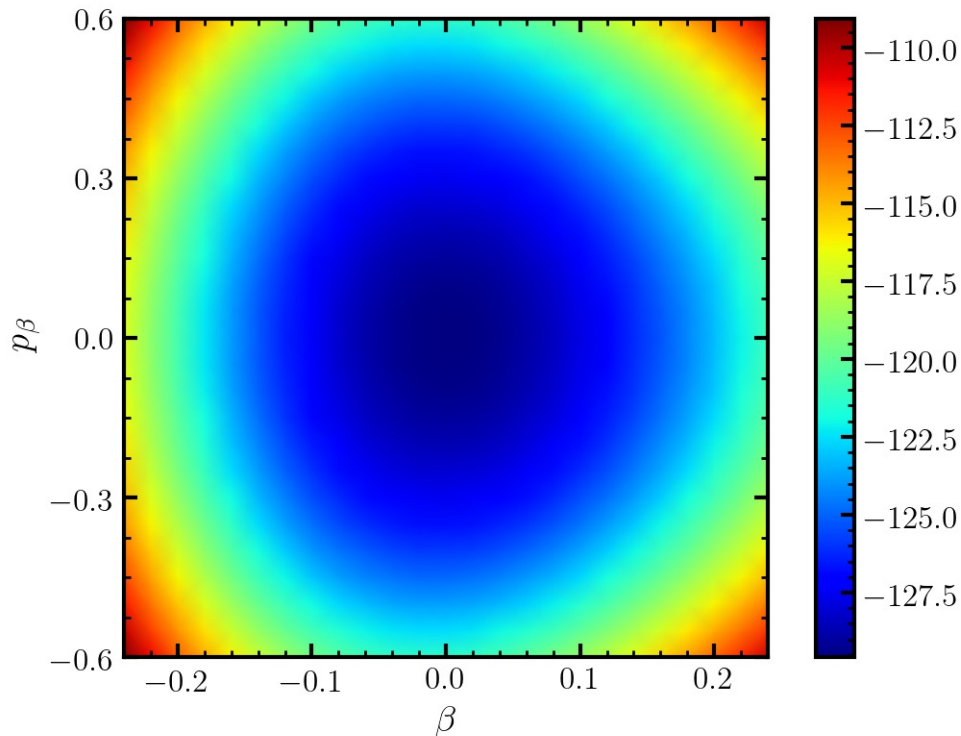
■ ^{16}O の四重極振動

$$\hat{Q}_{20} = \int d^3r r^2 Y_{20}(\Omega) \sum_{\sigma, \tau} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, \sigma, \tau) \hat{\psi}(\mathbf{r}, \sigma, \tau)$$

有効相互作用	Gogny D1S
波動関数	Hartree Fock (3D, pairing なし)
1 粒子基底	3次元調和振動子 ($10\hbar\omega$ まで, oscillator length = 1.457 fm)
従来GCM	$ \psi\rangle_{\text{GCM}} = \int dQ_{20} f(Q_{20}) Q_{20}\rangle$
DGCM	$ \psi\rangle_{\text{DGCM}} = \iint dQ_{20} dp_{20} f(Q_{20}, p_{20}) e^{ip_{20}\hat{Q}_{20}} Q_{20}\rangle$

■ Dynamical path \mathcal{D} energy surface

$$E(\beta, p_\beta) = \langle \beta, p_\beta | \hat{H} | \beta, p_\beta \rangle$$



$$|\beta, p_\beta\rangle = |p_{20}, Q_{20}\rangle = e^{ip_{20}\hat{Q}_{20}} |Q_{20}\rangle$$

$$\beta = \frac{\sqrt{20\pi}}{3(1.2 \text{ fm})^2 A^{5/3}} Q_{20} =: f Q_{20}$$

$$p_\beta := \frac{p_{20}}{2\pi f}$$



$$p_{20} Q_{20} = 2\pi p_\beta \beta$$

- ✓ $\beta = -0.24, -0.22, \dots, 0.24$ $p_\beta = -0.6, -0.55, \dots, 0.6$ の計625点
- ✓ 時間反転対称性によって p_β 方向に関して対称

■ DGCM のエネルギー

- ✓ GCM : $\beta = -0.24, -0.22, \dots, 0.24$ $p_\beta = 0$ の 25点
- ✓ DGCM : $\beta = -0.2, -0.1, \dots, 0.2$ $p_\beta = -0.6, -0.3 \dots, 0.6$ の 25点

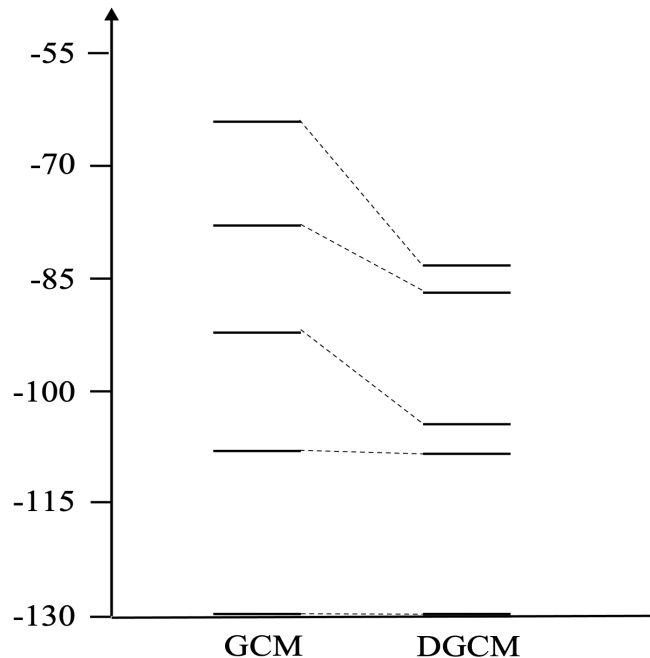


表1 GCM and DGCM energy

	GCM (MeV)	DGCM (MeV)
1	-129.682	-129.765
2	-107.993	-108.140
3	-92.260	-104.479
4	-77.913	-87.020
5	-64.103	-83.070

$$\min_{\beta, p_\beta} E(\beta, p_\beta) = E(0, 0) = -129.569 \text{ MeV}$$

- ✓ DGCM の方が効率よく異なる状態を用意できる

■ DGCM のエネルギー

- ✓ GCM : $\beta = -0.24, -0.22, \dots, 0.24$ $p_\beta = 0$ の 25点
- ✓ DGCM : $\beta = -0.2, -0.1, \dots, 0.2$ $p_\beta = -0.6, -0.3 \dots, 0.6$ の 25点

norm kernel $\langle \beta, p_\beta | \beta', p'_\beta \rangle$ の固有値の絶対値

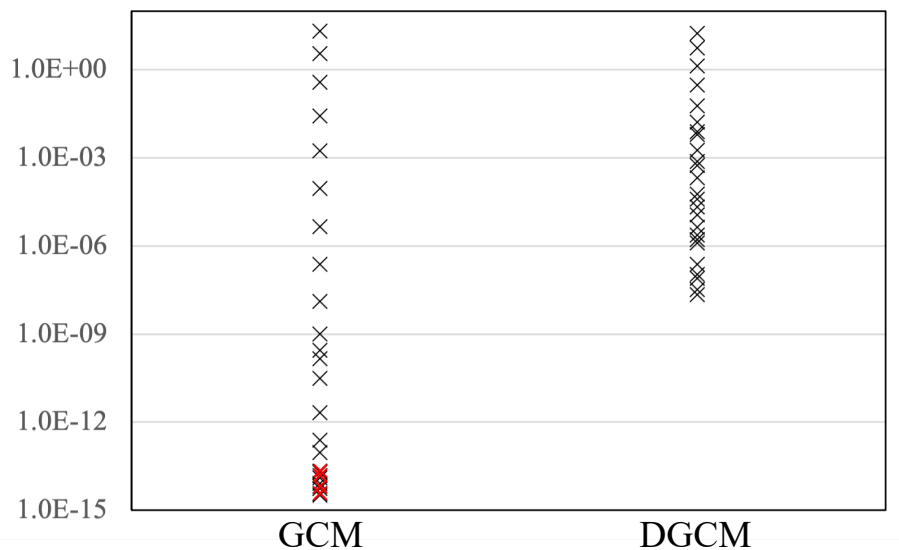


表1 GCM and DGCM energy

	GCM (MeV)	DGCM (MeV)
1	-129.682	-129.765
2	-107.993	-108.140
3	-92.260	-104.479
4	-77.913	-87.020
5	-64.103	-83.070

$$\min_{\beta, p_\beta} E(\beta, p_\beta) = E(0, 0) = -129.569 \text{ MeV}$$

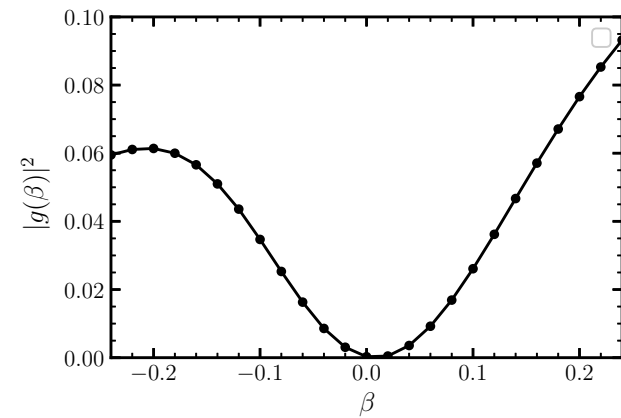
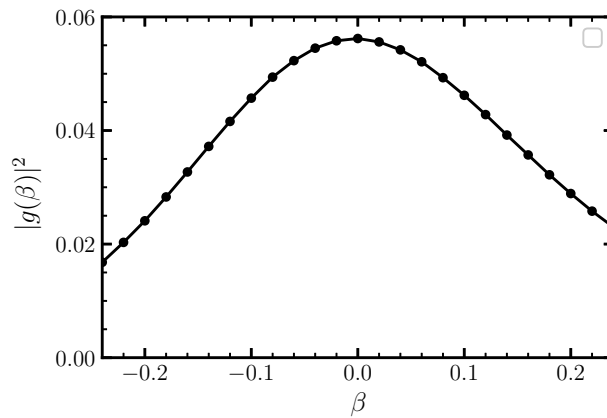
- ✓ DGCM の方が効率よく異なる状態を用意できる

■ collective wave function $|g(\beta)|^2$, $|g(\beta, p_\beta)|^2$

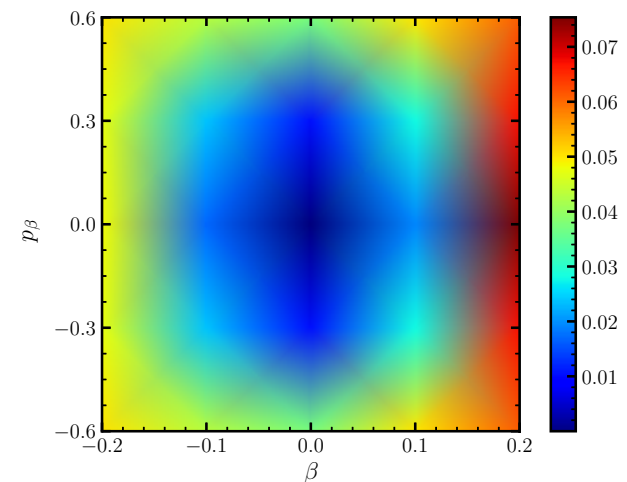
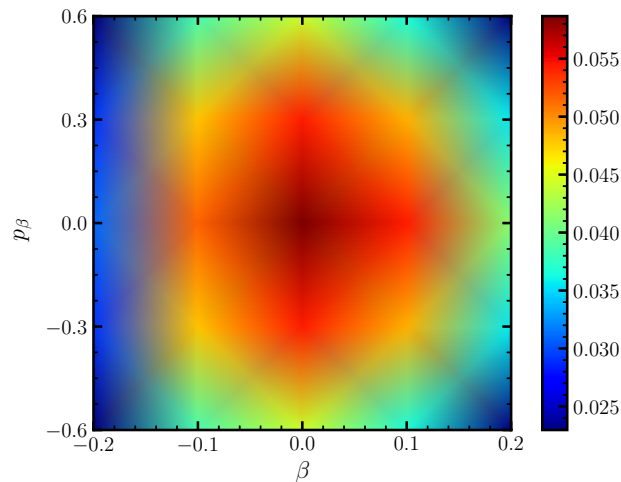
基底状態

第1励起状態

GCM



DGCM



✓ GCM, DGCM 両者共に調和振動子的になっている

■ Outline

1. Introduction

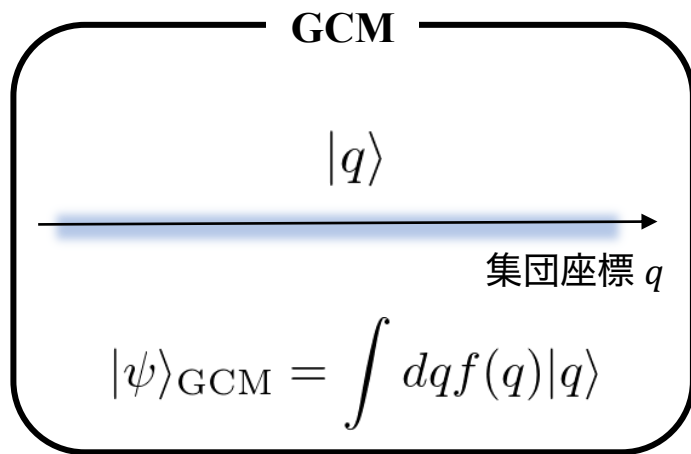
2. DGCM の四重極励起計算への応用

3. DGCM が GCM より優れている点

■ Dynamical GCM (DGCM)

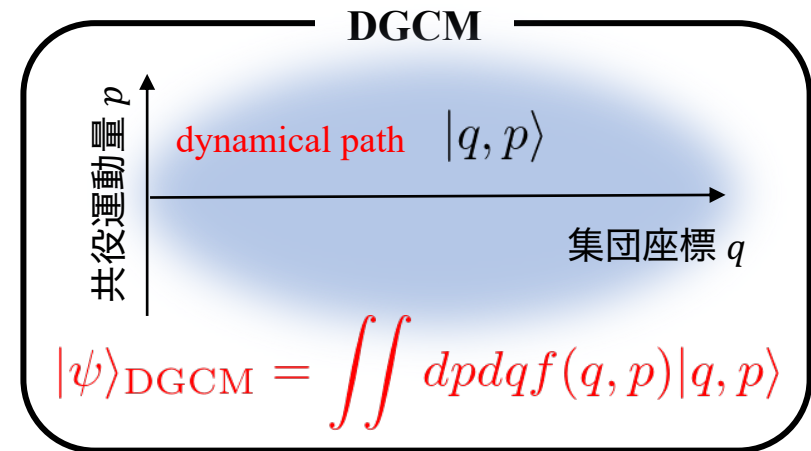
K. Goeke and P.-G. Reinhard, Ann. Phys. 124, 249 (1980).

集団座標に加え共役運動量も同時に考慮した GCM



conjugation condition

拡張
➔



$$\langle q, p | \overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q | q, p \rangle = i$$

- DGCMは double projection の拡張版を含む理論になっている
- 今まで具体的な数値計算が行われたことがなかった

■ Dynamical path の symplecticity

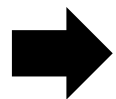
Berry connection (d : 外微分)

$$A := i\langle q, p | d | q, p \rangle = i\langle q, p | \partial_q | q, p \rangle dq + i\langle q, p | \partial_p | q, p \rangle dp$$

Berry curvature

$$B := dA = i\langle q, p | \overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q | q, p \rangle dq \wedge dp$$

conjugation condition



$$B = -dq \wedge dp \quad \text{symplectic form !}$$

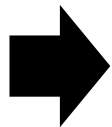
DGCM とは path に symplectic な構造を入れたGCM

■ Trivial collective motion

対称性や自由度のスケール分離によって collective な自由度とそれ以外が分離可能な集団運動を考える

$$\text{Hamiltonian} : \hat{H}_{\text{tot}} = \hat{H}_C \otimes \hat{1}_{NC} + \hat{1}_C \otimes \hat{H}_{NC}$$

$$\text{Hilbert space} : \mathcal{H}_{\text{tot}} = \mathcal{H}_C \times \mathcal{H}_{NC}$$



$$\text{eigen energy} : E_{\text{tot}}^{n,\mu} = E_C^n + E_{NC}^\mu$$

$$\text{eigenstate} : |n, \mu\rangle = |n\rangle_C \otimes |\mu\rangle_{NC} \quad \text{separable state}$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_C |n\rangle_C &= E_C^n |n\rangle_C, \quad |n\rangle_C \in \mathcal{H}_C \\ \hat{H}_{NC} |\mu\rangle_{NC} &= E_{NC}^\mu |\mu\rangle_{NC}, \quad |\mu\rangle_{NC} \in \mathcal{H}_{NC} \end{aligned}$$

DGCM (GCM) によりこの separable な構造を記述できるのか？

■ Collective subspace

生成座標で指定される状態の線型結合により張られる空間

DGCM だと

$$\mathcal{H}_{\text{DGCM}} := \text{Span}\{|q, p\rangle \mid (q, p) \in \mathcal{M}\}$$

$\mathcal{M} : (q, p)$ のなす多様体

理想的には low energy の固有状態が全て含まれていて欲しい
しかし、一般に **GCM に基づいてこのことを保証する術は現状ない**



Hill-Wheeler 方程式の解として、low energy 側で、できる限り separable な構造が生じやすい collective subspace であって欲しい

■ Double projection form of the DGCM

N. Hizawa, K. Hagino, and K. Yoshida, *Phys. Rev. C* **103**, 034313 (2021).

\hat{Q} が collective な自由度に対する演算子であると仮定

$$\blackrightarrow |\Psi\rangle_{\text{DGCM}} = \iint dqdq' f(q; q') \hat{P}(\hat{Q}; q) |q'\rangle$$

$|q'\rangle : \langle q' | \hat{Q} | q' \rangle = q'$ $\hat{P}(\hat{Q}; q) : \hat{Q}$ の固有値 q をもつ固有状態への射影演算子

■ Fiber

$$\hat{P}(\hat{Q}; q) |q'\rangle := |q\rangle_C \otimes |q; q'\rangle_{NC}, \quad |q\rangle_C \in \mathcal{H}_C, \quad |q; q'\rangle_{NC} \in \mathcal{H}_{NC}$$

$$\blackrightarrow \mathcal{H}_C = \text{Span}\{|q\rangle_C \mid q \in \mathcal{M}_q\} \quad \cdots \quad \hat{Q} \text{ が collective という仮定より}$$

$$\mathcal{H}_q := \text{Span}\{|q, q'\rangle_{NC} \mid q' \in \mathcal{M}_{q'}\} \subset \mathcal{H}_{NC} \quad \mathcal{M}_{q, q'} : q, q' \text{ のなす多様体}$$

■ collective な部分の Hilbert 空間は被覆される

■ 内部自由度の空間は collective な部分に依存する

■ どのような \mathcal{H}_q が望ましいのか？

Hill-Wheeler 方程式の解として、low energy 側で、できる限り separable な構造が生じやすい collective subspace であって欲しい

\mathcal{H}_q の共通部分

$$\mathcal{H}_\cap := \bigcap_q \mathcal{H}_q$$

が内部自由度における low energy 部分を被覆していて欲しい

■ なぜ DGCM は良いのか？

$|q'\rangle : \langle q'|\hat{Q}|q'\rangle = q'$ より、内部自由度の座標 q' を collective な自由度の拘束条件付き変分計算で生成することで、内部自由度に関して low-energy 側で似たような状態が生成されやすい

■ まとめ

- ✓ DGCMの平均場理論に基づいた実装法の開発
- ✓ 四重極演算子に対する計算
- ✓ DGCM では効率よく異なる基底関数を用意できる
- ✓ DGCM は separable な構造を記述しやすい

■ 今後の展望

- ✓ 電磁遷移強度の計算
- ✓ ^{238}U のような重い原子核への適用
- ✓ 四重極以外の変形モードに対する適用
- ✓ Berry connection という観点から見た GCM