

ユニタリ模型演算子法による 中重核の第一原理的な計算

東京大学理学系研究科

宮城 宇志

素粒子・原子核・宇宙「京からポスト京に向けて」

シンポジウム@筑波大学東京キャンパス

2017年2月16-17日

Contents

- ◆ 導入
- ◆ ユニタリ模型演算子法 (UMOA)
- ◆ 有限核への応用
- ◆ まとめと今後の展望

導入

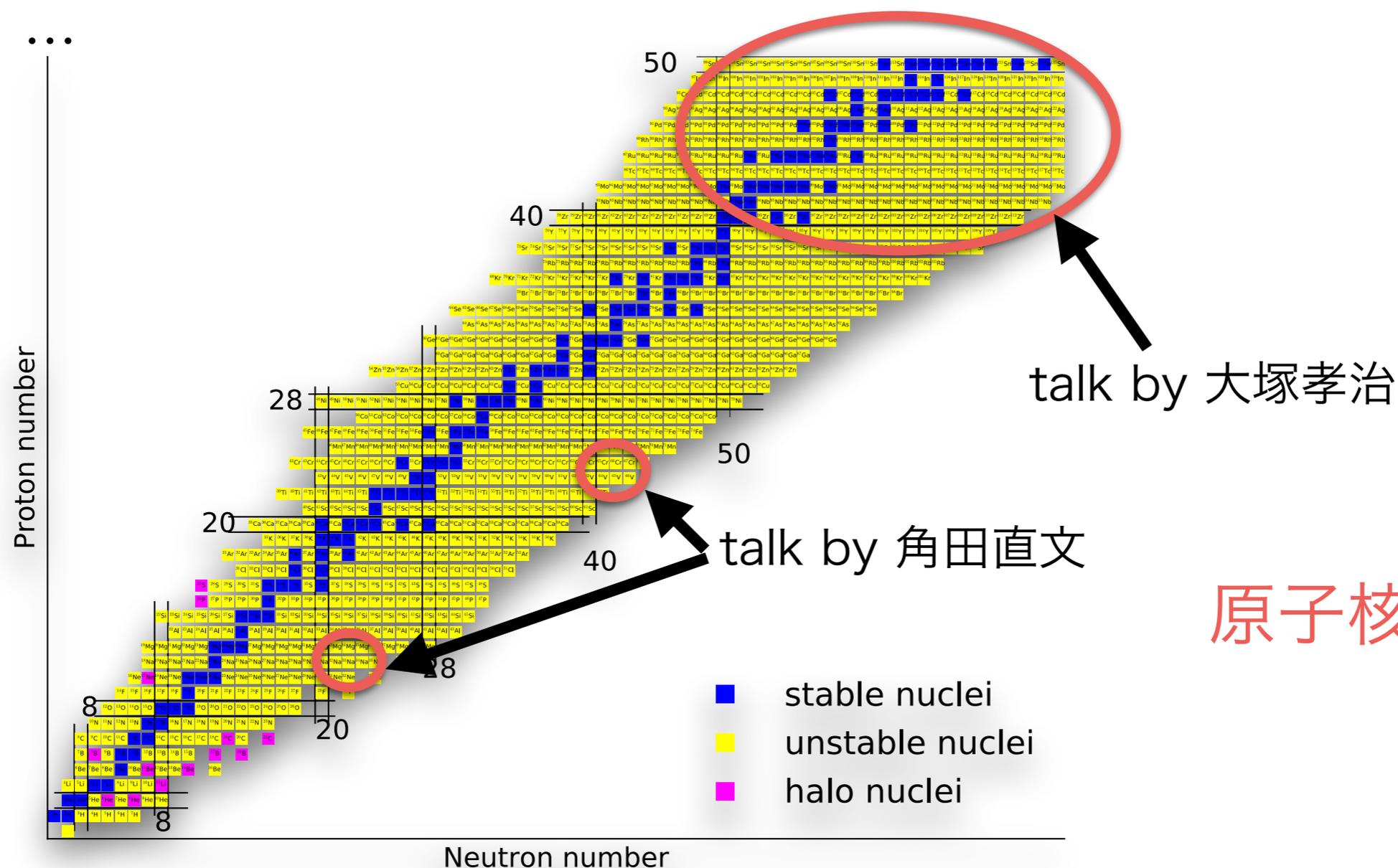
◆ 近年の研究から、原子核の新たな性質が明らかになりつつある

★ 低密度で空間的に広がった原子核(ハロー原子核)

★ 魔法数の消失と出現

★ 量子相転移

★ ...



原子核の多様性

導入

◆ 核力に基づいて原子核構造を理解することは基本的な問題の1つ

→ 2つの主要な問題点

★ 核力

→ 現象論的な取り扱いが主流(AV18, chiral EFT, ...)

→ QCDから直接得るのは進行中(重点課題9サブ課題B 格子QCD, ...)

★ 量子多体問題

→ 短距離での強い相関により数値計算が困難

V_{lowk} やSRGなどによるさらなる繰り込みが必要

→ 厳密に解けるのは通常20体系くらいまで

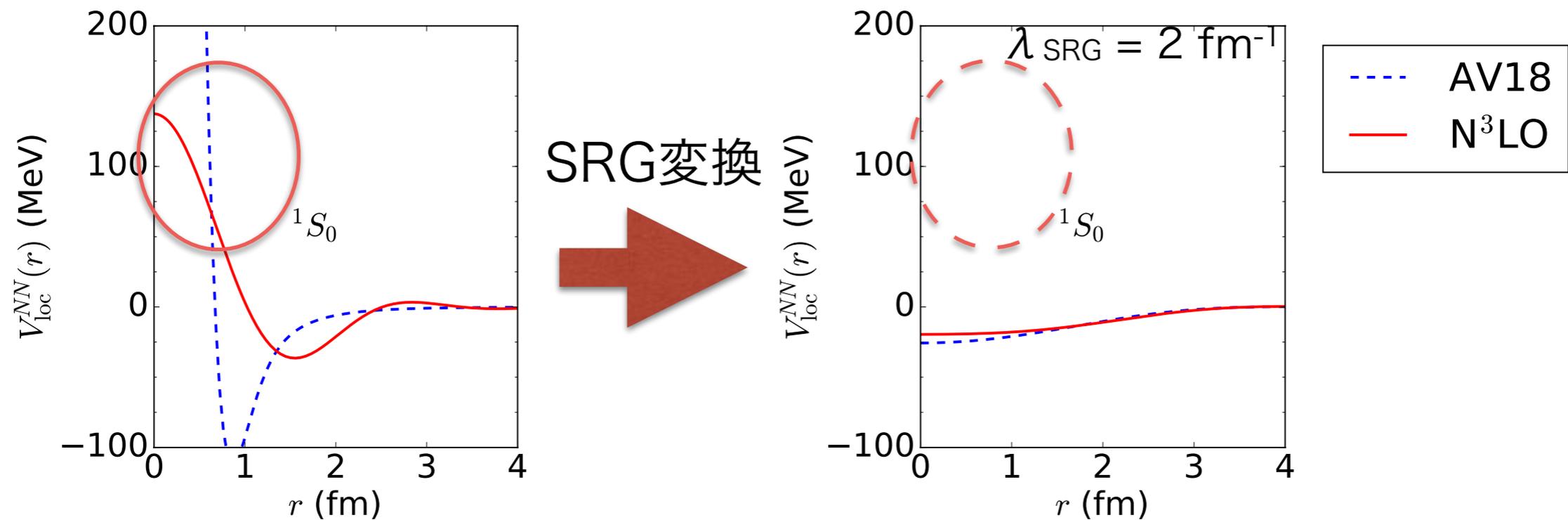
導入

◆ 核力

★ LQCDにより得られつつあるが、NNセクターではまだ十分ではない

★ chiral EFT, AV18などの現象論的な相互作用 R. B. Wiringa et al, PRC 1995
D. Entem and R. Machleidt PRC 2003

→ 短距離における強い斥力芯



★ similarity renormalization group (SRG) 変換により斥力芯を処理する

導入

◆ 量子多体問題(ab initio計算手法)

★ ab initio計算手法の定義

- * 系を構成するすべての核子の自由度を陽に扱う
- * 用いる近似は制御可能であり、結果の系統的な改善が可能である

導入

◆ 量子多体問題(ab initio計算手法)

★ ab initio計算手法

- * 少数系解法(Faddeev方程式, Faddeev-Yakovsky方程式など)
- * Green's Function Monte Carlo
- * No-Core Shell Model
- * No-Core Monte Carlo Shell Model
- * Nuclear Lattice Effective Field Theory

核子数20くらいまで

-
- * Coupled-Cluster Method
 - * Self-Consistent Green's Function Method
 - * In-Medium Similarity Renormalization Group Approach
 - * Unitary-Model-Operator Approach (UMOA)
 - * ...

閉殻近傍

- ◆ 今回UMOAを使って閉殻な原子核に対して2体力を用いた系統的な計算を試みる

ユニタリ模型演算子法(UMOA)

TM, T. Abe, R. Okamoto, T. Otsuka PTEP 2015.

- ◆ 多体シュレーディンガー方程式を解くことが目標

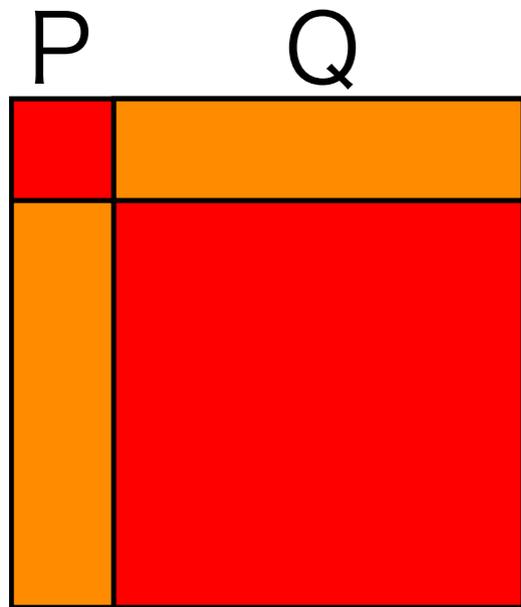
$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$$

$$H = \sum_i^A \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - T_{\text{CM}} + \sum_{i<j}^A V_{ij}^{NN}$$

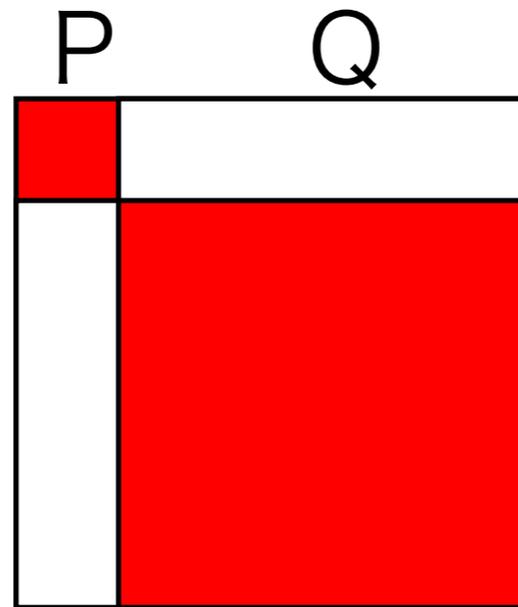
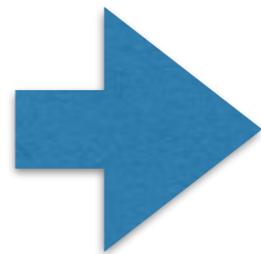
$$(U^\dagger H U)(U^\dagger |\Psi\rangle) = E(U^\dagger |\Psi\rangle)$$

近似なし

$$\tilde{H}|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle$$



H



$\tilde{H} = U^\dagger H U$

UMOAでのUの選び方

$$U = e^{S^{(1)}} e^{S^{(2)}} \dots e^{S^{(A)}}$$

$S^{(n)}$ は反エルミートn体演算子
Okubo-Lee-Suzukiの手法に
よって求める

ユニタリ模型演算子法(UMOA)

TM, T. Abe, R. Okamoto, T. Otsuka PTEP 2015.

- ◆ 多体シュレーディンガー方程式を解くことが目標

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$$

$$H = \sum_i^A \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - T_{\text{CM}} + \sum_{i<j}^A V_{ij}^{NN}$$

$$(U^\dagger H U)(U^\dagger |\Psi\rangle) = E(U^\dagger |\Psi\rangle)$$

近似なし

$$\tilde{H}|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle$$

$$U = e^{S^{(1)}} e^{S^{(2)}} \dots e^{S^{(A)}}$$

$$U \sim e^{S^{(1)}} e^{S^{(2)}}$$

近似

ハミルトニアンも2体の範囲で扱う

- ◆ 観測量

$$\mathcal{O} = \langle \Phi | U^\dagger \mathcal{O} U | \Phi \rangle$$

有限核への応用

◆ 数値計算について

★ 核力

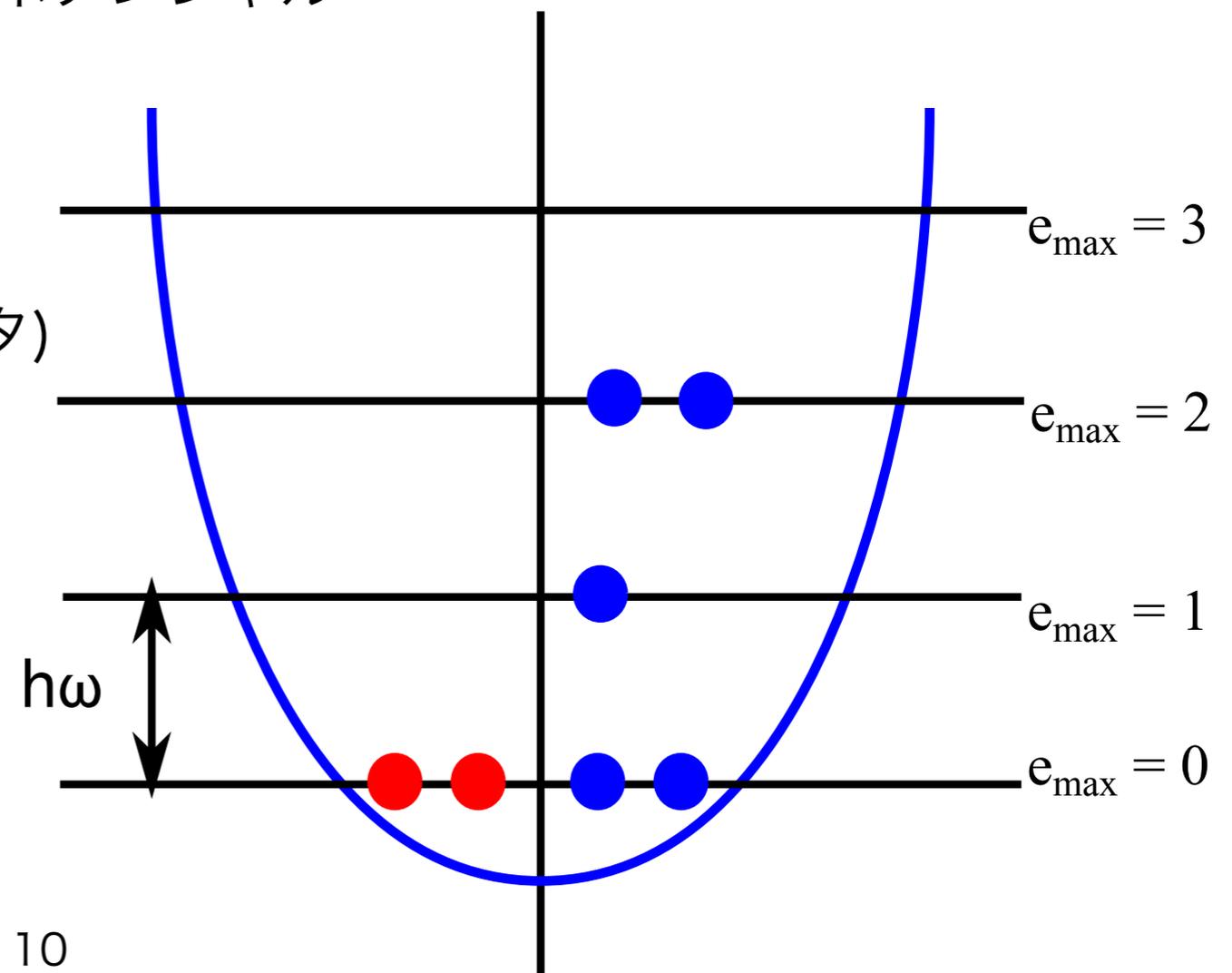
* SRG変換したchiral EFT N³LOポテンシャル

★ 基底関数

* 調和振動子基底 ($h\omega$ がパラメータ)

★ 模型空間

* e_{\max} で定義



有限核への応用

◆ 収束性：

★ 2つのパラメータ ($\hbar\omega$, e_{\max}) の依存性を調べる

→ ($\hbar\omega$, e_{\max}) に依存しなくなればok

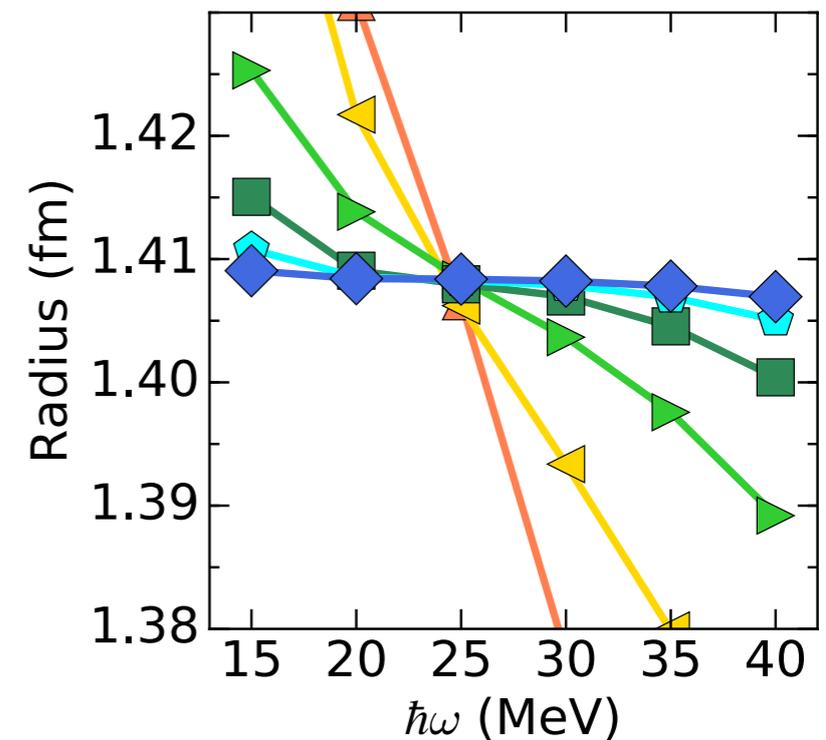
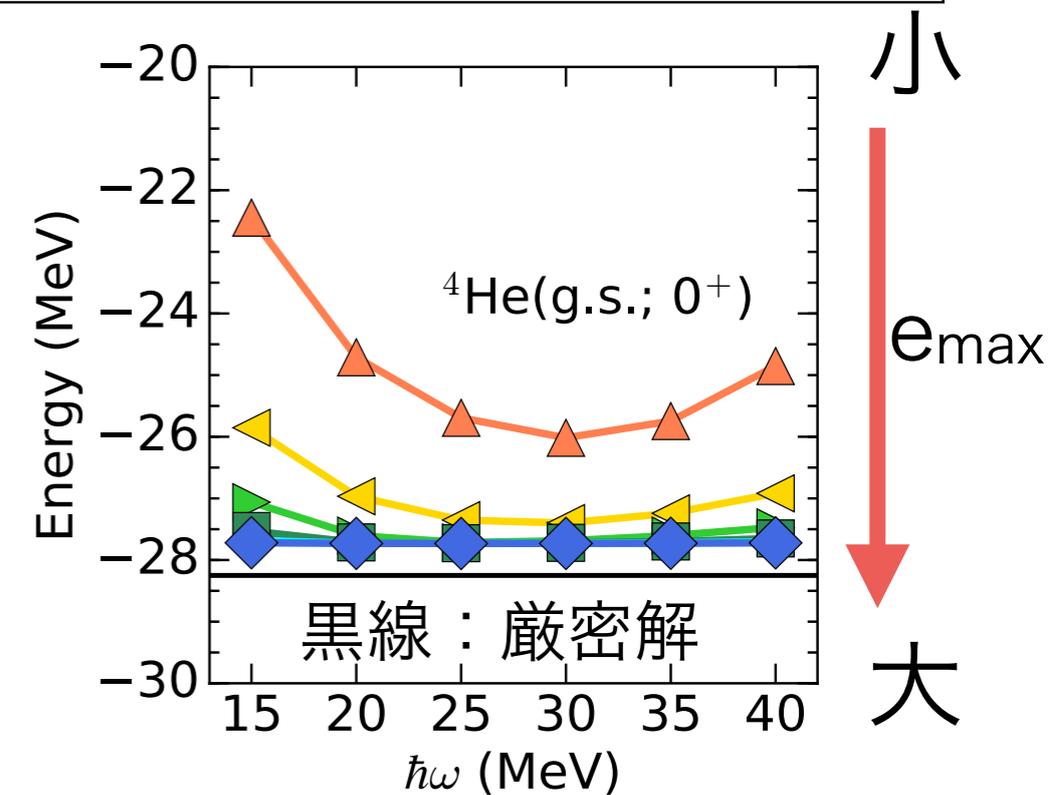
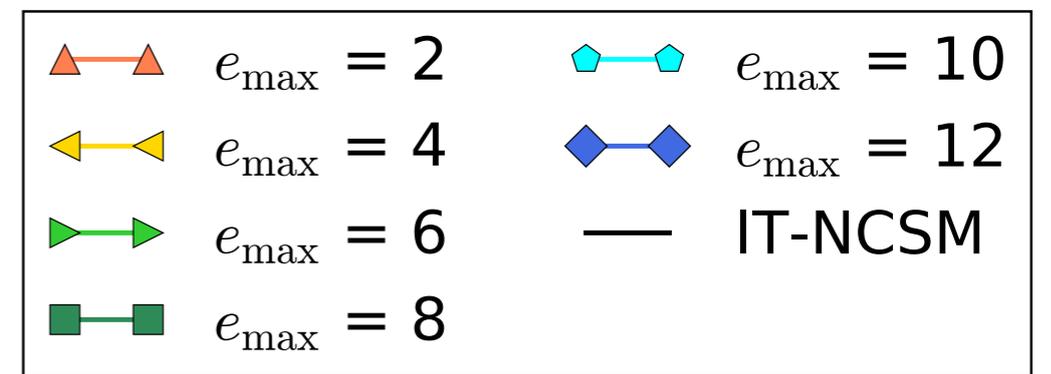
★ $e_{\max}=12$ で十分収束している

◆ 他の手法との比較

4He	IT-NCSM	IM-SRG	UMOA	Exp.
$E_{\text{gs}}(\text{MeV})$	-28.25	-28.27	-27.73	-28.3
$R_{\text{ch}}(\text{fm})$		1.65	1.62	1.68

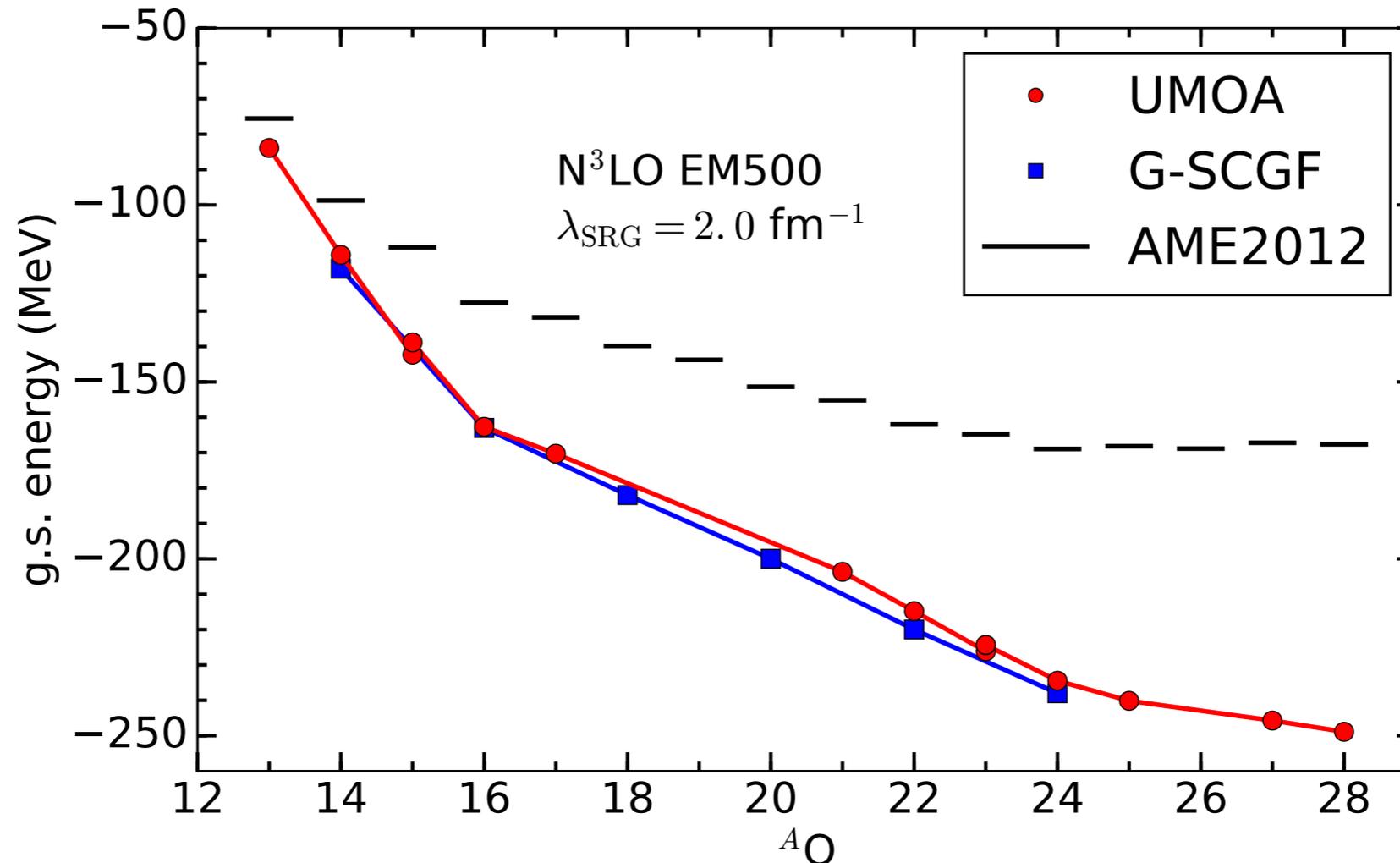
IT-NCSM: R. Roth et al., PRL 2011.

IM-SRG: H. Herbert et al., Phys. Rept. 2016.11



有限核への応用

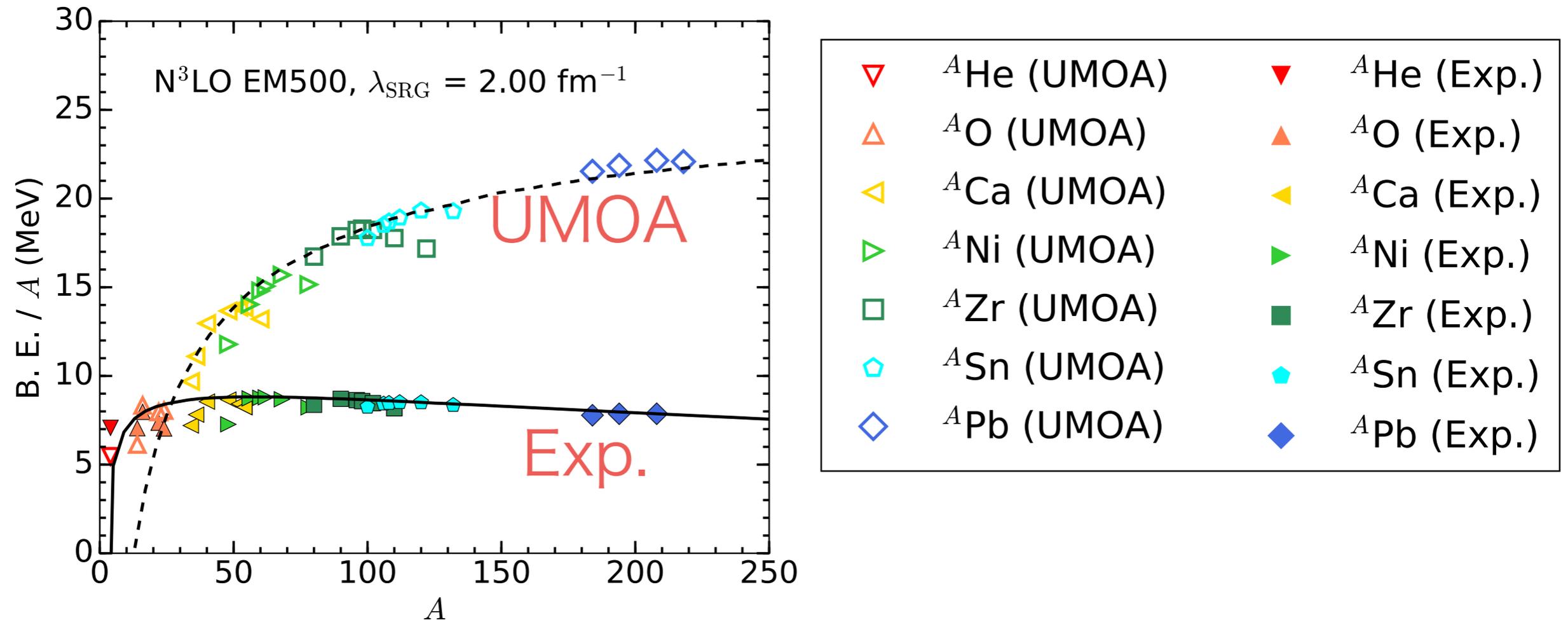
- ◆ 酸素同位体の基底状態エネルギー @ $e_{\max} = 12$, $hw = 20$ MeV



- ◆ 他の第一原理的な計算手法の結果と近い
- ◆ 実験値の再現には少なくとも3体力の効果が必要

有限核への応用

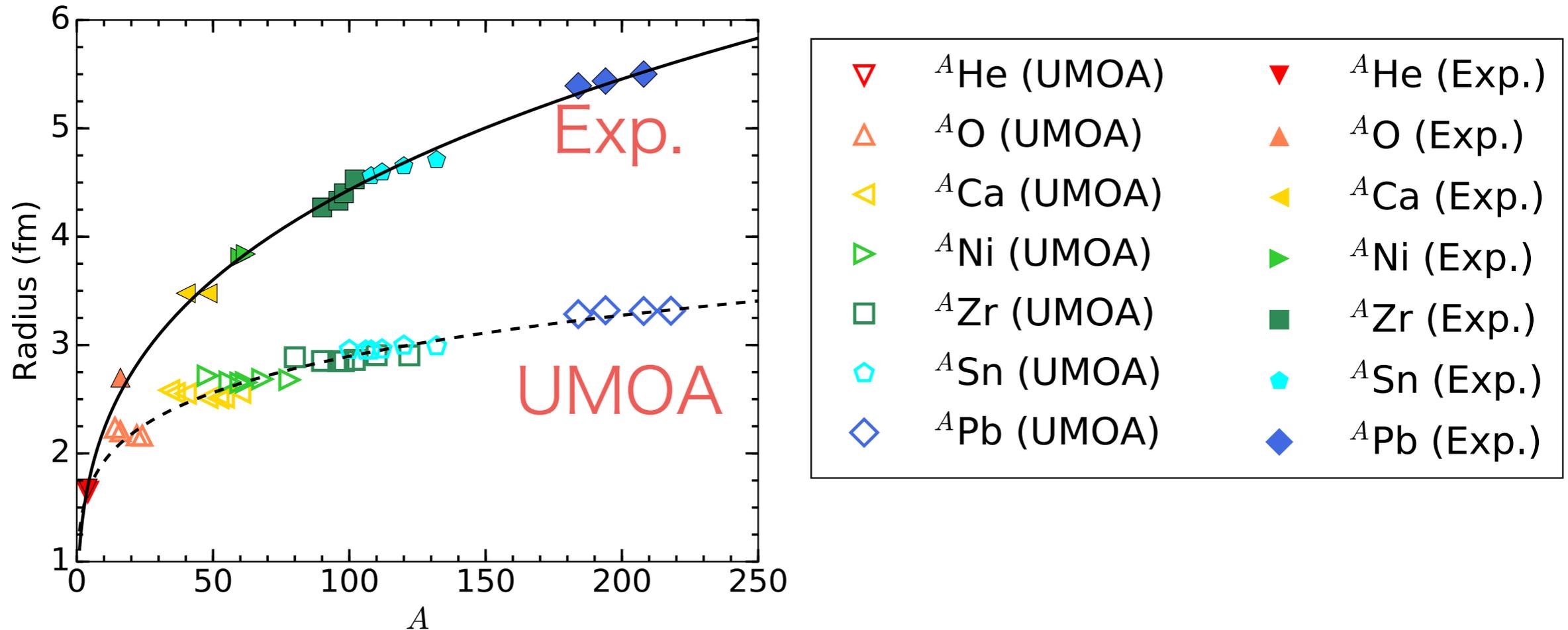
- ◆ 核子あたりの束縛エネルギー @ $e_{\max} = 12$ and $hw = 20$ MeV



- ◆ 実線, 点線 : $B/A = a_V + a_S A^{-1/3} - a_C \frac{Z^2}{A^{4/3}} - a_A \frac{(N - Z)^2}{A^2}$
- ◆ 実験値と異なり、核子数が増えるにつれて大きくなっていく

有限核への応用

- ◆ 荷電半径 @ $e_{\max} = 12$ and $hw = 20$ MeV

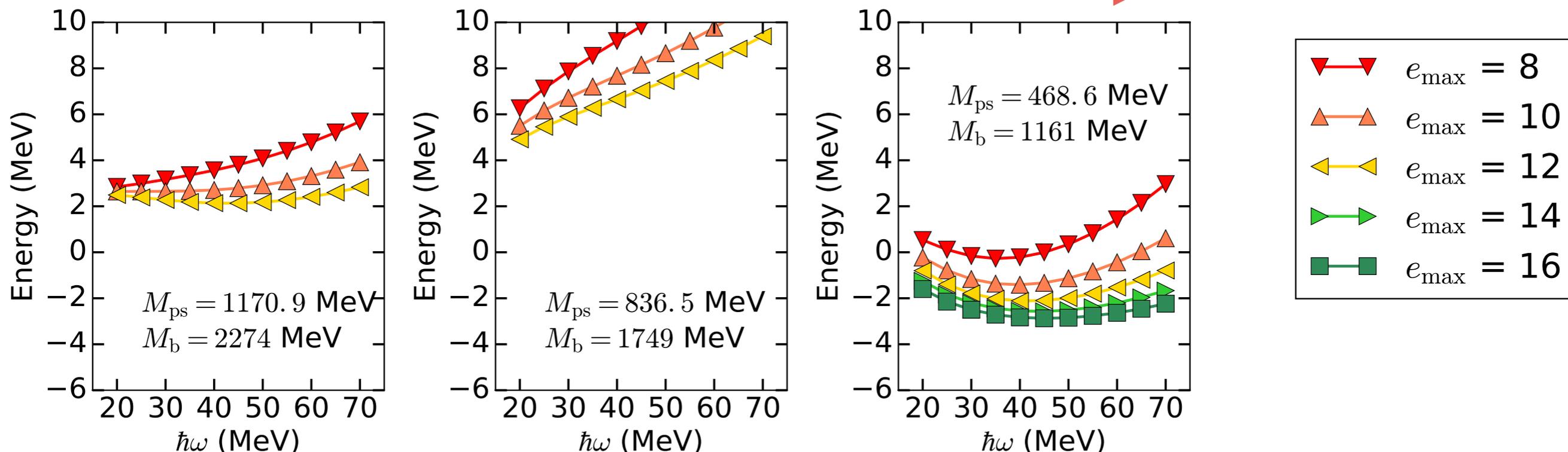


- ◆ 実線, 点線 : 経験的な公式 $R_{\text{ch}} = r_0 A^x$
- ◆ 核子数が増えるにつれ、実験値より小さくなっていく

HAL QCD potentialを用いたUMOAによるテスト計算

heavy quark mass light

flavor SU(3) limit
Thanks to T. Inoue

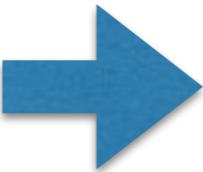


◆ クォーク質量が最も軽い場合で束縛状態が存在

${}^4\text{He}$	BHF	SV	SCGF	UMOA
$E_{gs}(\text{MeV})$	-8.1	-5.09	-4.80	-2.87

BHF: T. Inoue et al., PRC (2015).
SV: H. Nemura, Int. Jour. Mod. Phys. E (2014).
SCGF: C. McIlroy et al., arXiv:1701.0260

まとめと今後の展望

- ◆ ユニタリ模型演算子法(UMOA)を用いて、中重核の基底状態に関して数値計算を行った
 - ★ UMOAは他の第一原理的な計算手法と同様に適用可能
 - ★ 実験値と比較すると、核子数の増加とともに
 - 束縛エネルギーが増大する
 - 半径が小さくなる

3体力の効果が必要
 - ★ HAL QCD potentialを用いたテスト計算を ${}^4\text{He}$ について行った
 - $M_{\text{ps}} = 469 \text{ MeV}$ の場合において束縛状態が存在
- ◆ 今後の課題
 - ★ 3体力(現在進行中)

ユニタリ模型演算子法(UMOA)

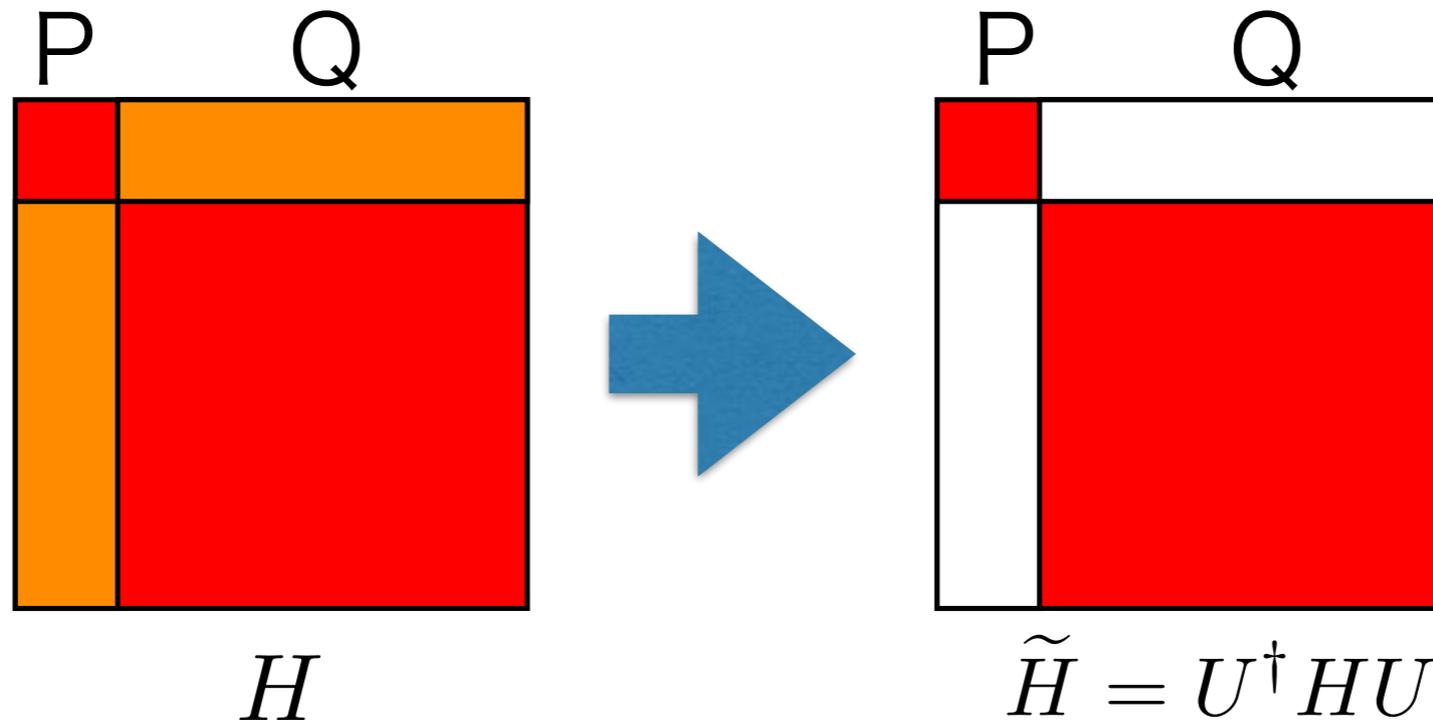
◆ハミルトニアン

$$H = \sum_i^A \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - T_{\text{CM}} + \sum_{i<j}^A V_{ij}^{NN} = \sum_i^A t_i + \sum_{i<j}^A v_{ij}$$

$$t_i = \left(1 - \frac{1}{A}\right) \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m}$$

$$v_{ij} = V_{ij}^{NN} - \frac{\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j}{mA}$$

ほとんどの場合、直接対角化は不可能



◆UMOAにおけるU

$$U = e^{S^{(1)}} e^{S^{(2)}} \quad S^{(1)} = \sum_i^A s_i, \quad S^{(2)} = \sum_{i<j}^A s_{ij} \quad S^{(1)\dagger} = -S^{(1)}, \quad S^{(2)\dagger} = -S^{(2)}$$

UMOA - correlation operator

◆ 相関演算子Sを求めるための手順

- * 固有値問題を解く

$$(P + Q)H(P + Q)|\psi_k\rangle = \epsilon_k|\psi_k\rangle$$

- * P, Qは射影演算子

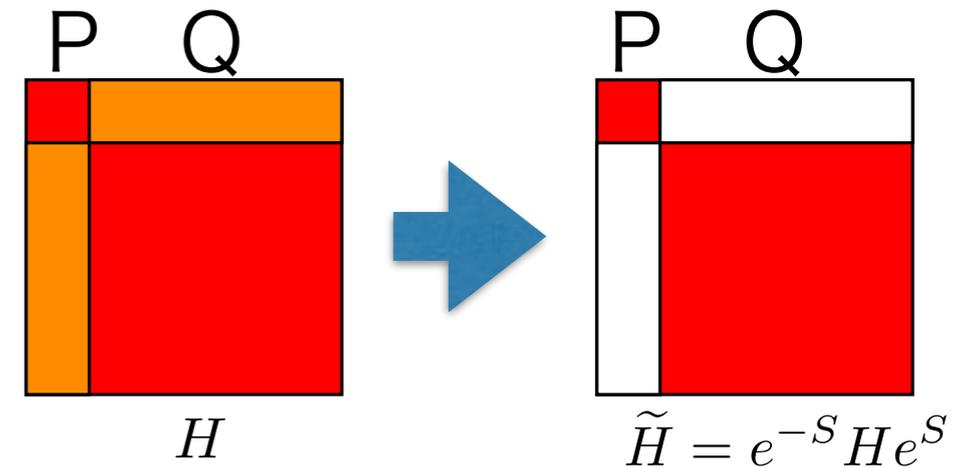
- * 固有ベクトルをP成分とQ成分に分割

$$|\phi_k\rangle = P|\psi_k\rangle, \quad \omega|\phi_k\rangle = Q|\psi_k\rangle$$

- * マッピング演算子 ω は形式的に $\omega = \sum_{k=1}^d Q|\psi_k\rangle\langle\tilde{\phi}_k|P$

$$S = \text{arctanh}(\omega - \omega^\dagger) \longrightarrow \tilde{H} = e^{-S} H e^S$$

- ◆ 変換後のハミルトニアンの性質 $Q\tilde{H}P = P\tilde{H}Q = 0$



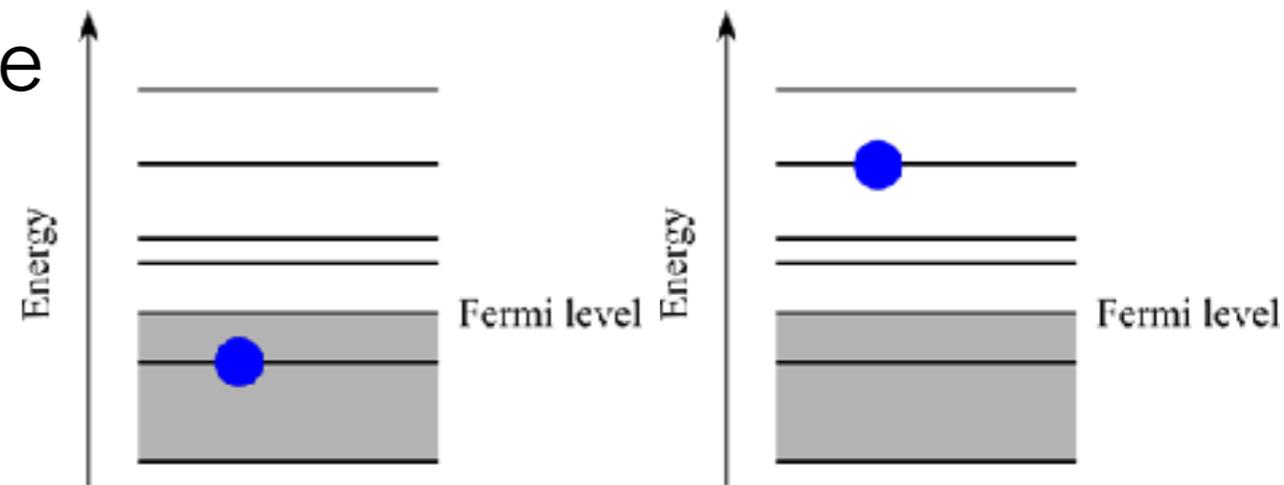
UMOA - particle-hole classification

◆ 実際の応用では

★ S1のためのP space Q space

$$P^{(1)} = \sum_{a \leq \text{Fermi level}} |a\rangle\langle a|$$

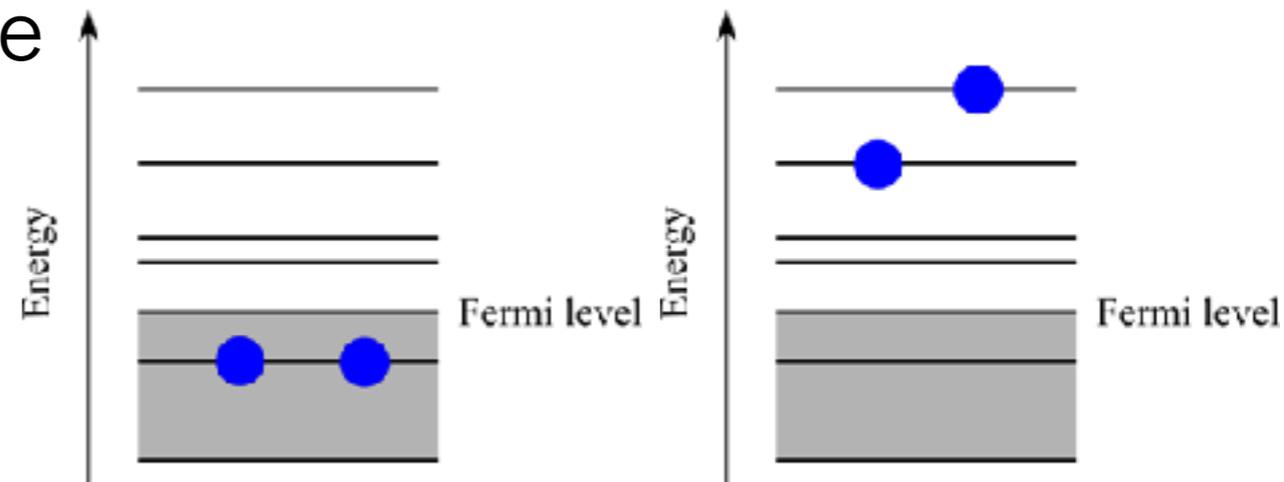
$$Q^{(1)} = \sum_{a > \text{Fermi level}} |a\rangle\langle a|$$



★ S2のためのP space Q space

$$P^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{ab \leq \text{Fermi level}} |ab\rangle\langle ab|$$

$$Q^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{ab > \text{Fermi level}} |ab\rangle\langle ab|$$

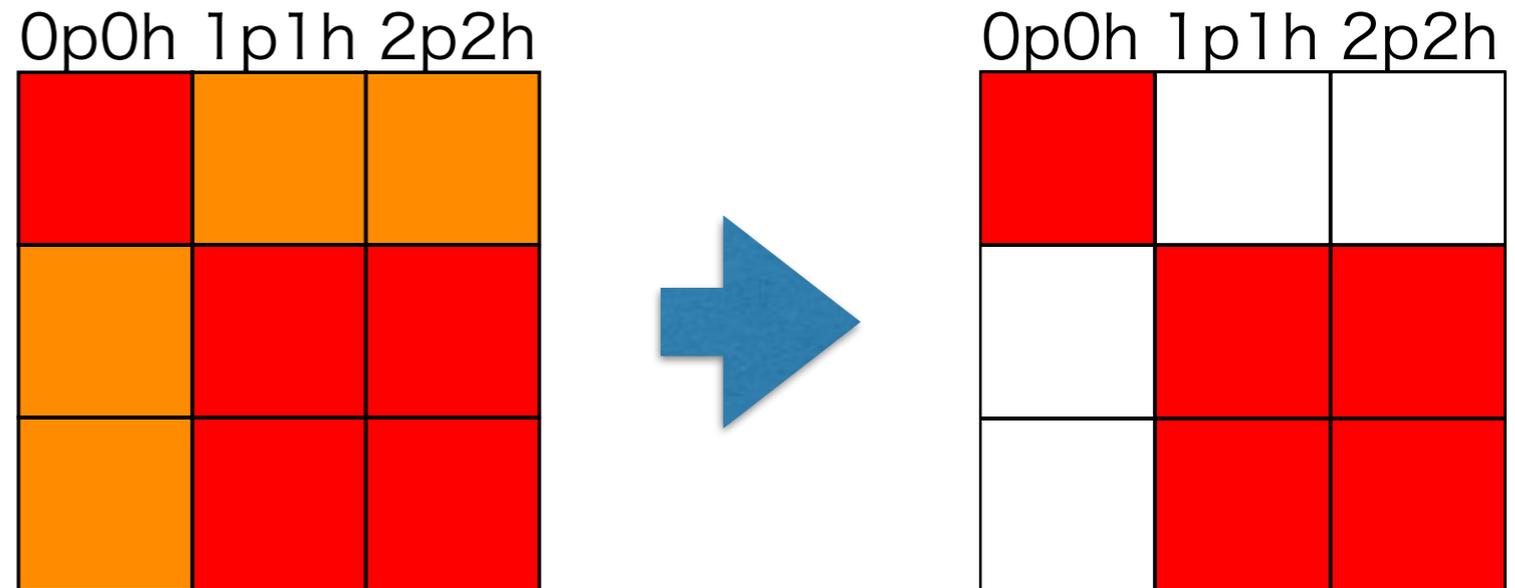


UMOA - observables

◆ ハミルトニアン

★ 1p1h励起しない

★ 2p2h励起しない



UMOAによる変換

◆ 基底状態エネルギー

$$E_{\text{g.s.}} = \langle \Phi | \tilde{H} | \Phi \rangle$$

2体の範囲で取り扱う

◆ その他の観測量

$$\mathcal{O} = \langle \Phi | U^\dagger \mathcal{O} U | \Phi \rangle$$

UMOA - cluster expansion

- ◆ 変換後のハミルトニアンは多体演算子

$$\tilde{H} = \tilde{H}^{(1)} + \tilde{H}^{(2)} + \tilde{H}^{(3)} + \dots$$

$$\tilde{H}^{(1)} = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | \tilde{h}_1 | \beta \rangle c_\alpha^\dagger c_\beta, \quad \tilde{h}_1 = \tilde{t}_1 + \tilde{w}_1 = e^{-s_1} (t_1 + w_1) e^{s_1}$$

$$\tilde{H}^{(2)} = \left(\frac{1}{2!} \right)^2 \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | \tilde{v}_{12} | \gamma\delta \rangle c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma - \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | \tilde{w}_1 | \beta \rangle c_\alpha^\dagger c_\beta$$

$$\tilde{H}^{(3)} = \left(\frac{1}{3!} \right)^2 \sum_{\alpha\beta\gamma\lambda\mu\nu} \langle \alpha\beta\gamma | \tilde{v}_{123} | \lambda\mu\nu \rangle c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\gamma^\dagger c_\nu c_\mu c_\lambda - \left(\frac{1}{2!} \right)^2 \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | \tilde{w}_{12} | \gamma\delta \rangle c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma$$

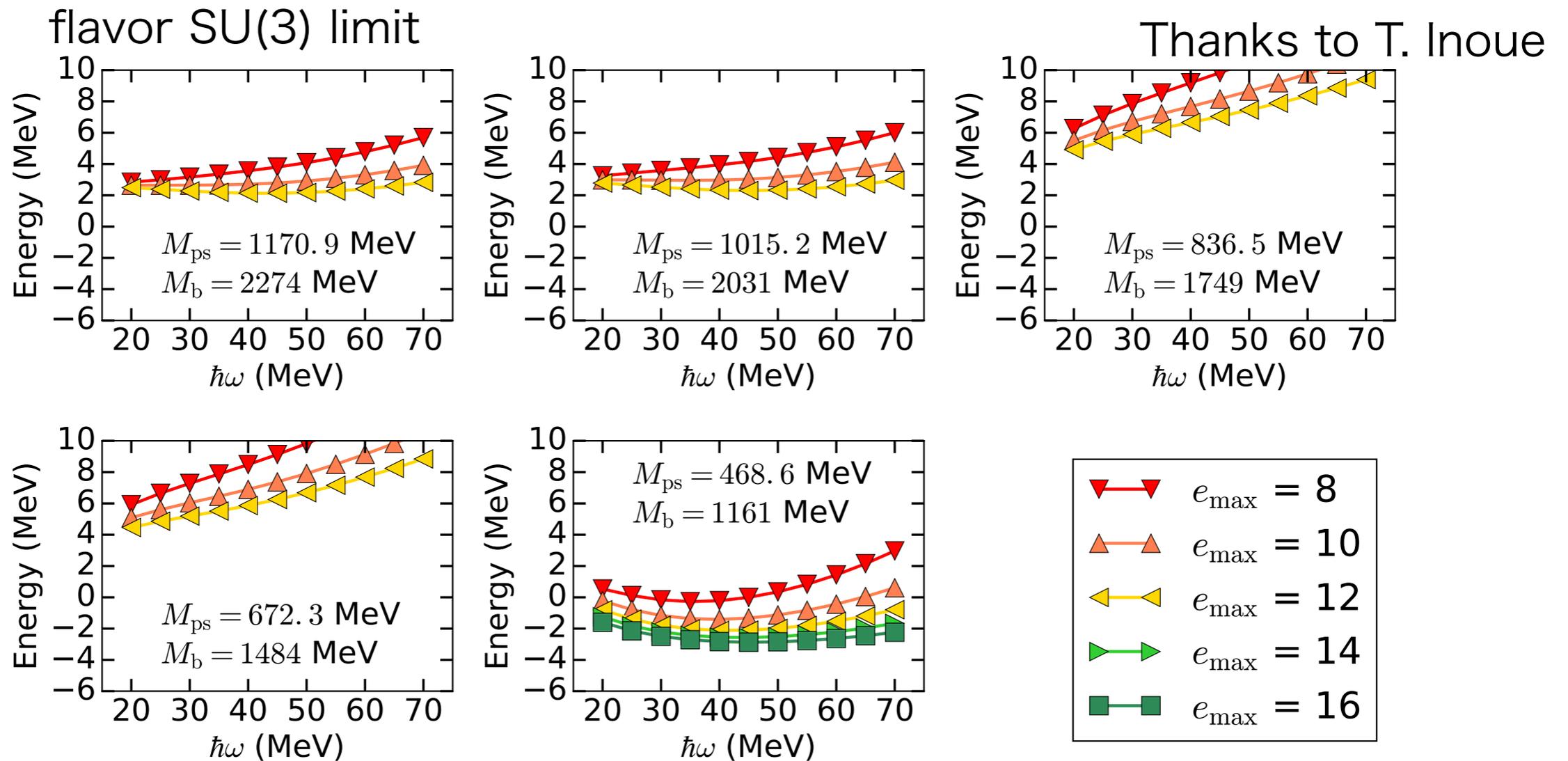
$$\tilde{v}_{12} = e^{-s_{12}} e^{-(s_1+s_2)} (h_1 + h_2 + v_{12}) e^{s_1+s_2} e^{s_{12}} - (\tilde{h}_1 + \tilde{h}_2)$$

$$\begin{aligned} \tilde{v}_{123} = & e^{-(s_{12}+s_{23}+s_{31})} e^{-(s_1+s_2+s_3)} (h_1 + h_2 + h_3 + v_{12} + v_{23} + v_{31}) e^{s_1+s_2+s_3} e^{s_{12}+s_{23}+s_{31}} \\ & - (\tilde{h}_1 + \tilde{h}_2 + \tilde{h}_3 + \tilde{v}_{12} + \tilde{v}_{23} + \tilde{v}_{31}) \end{aligned}$$

$$\langle \alpha | \tilde{w}_1 | \beta \rangle = \sum_{\lambda \leq \rho_F} \langle \alpha\lambda | \tilde{v}_{12} | \beta\lambda \rangle$$

$$\tilde{w}_{12} = e^{-s_{12}} (w_1 + w_2) e^{s_{12}} - (w_1 + w_2)$$

HAL QCD potentialを用いたUMOAによる ^4He 計算



◆ クォーク質量が最も軽いケースにおいて束縛状態が存在

BHF: T. Inoue et al., PRC 91 (2015). SV: H. Nomura, Int. Jour. Mod. Phys. 23 (2014).

SCGF: C. McIlroy et al., arXiv:1701.0260

^4He	BHF	SV	SCGF	UMOA
$E_{gs}(\text{MeV})$	-8.1	-5.09	-4.80	-2.87