

反対称化分子動力学による 光核励起断面積の理論計算

木村真明 (北大理, 北大核データセンター)

in collaboration with
谷口億宇(香川高専) and PANDORA project

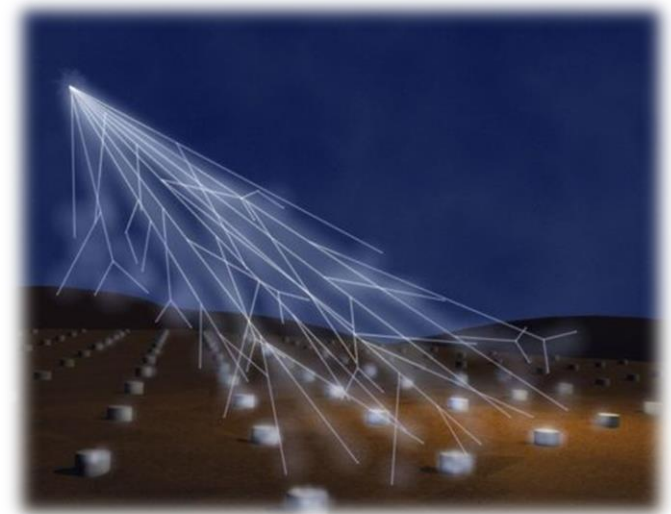
背景: 超高エネルギー宇宙線と光核反応

◎ 加速器をはるかに上回るエネルギー

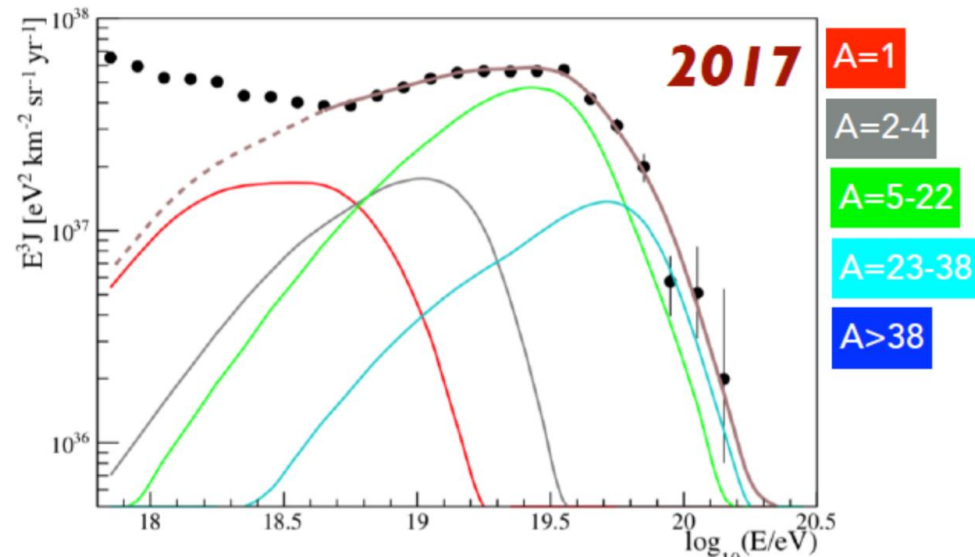
$$E > 10^{18} \text{ eV}$$

○ 発生源となる天体現象と位置の特定


宇宙線のエネルギー分布と
核種の分布を再現できるか

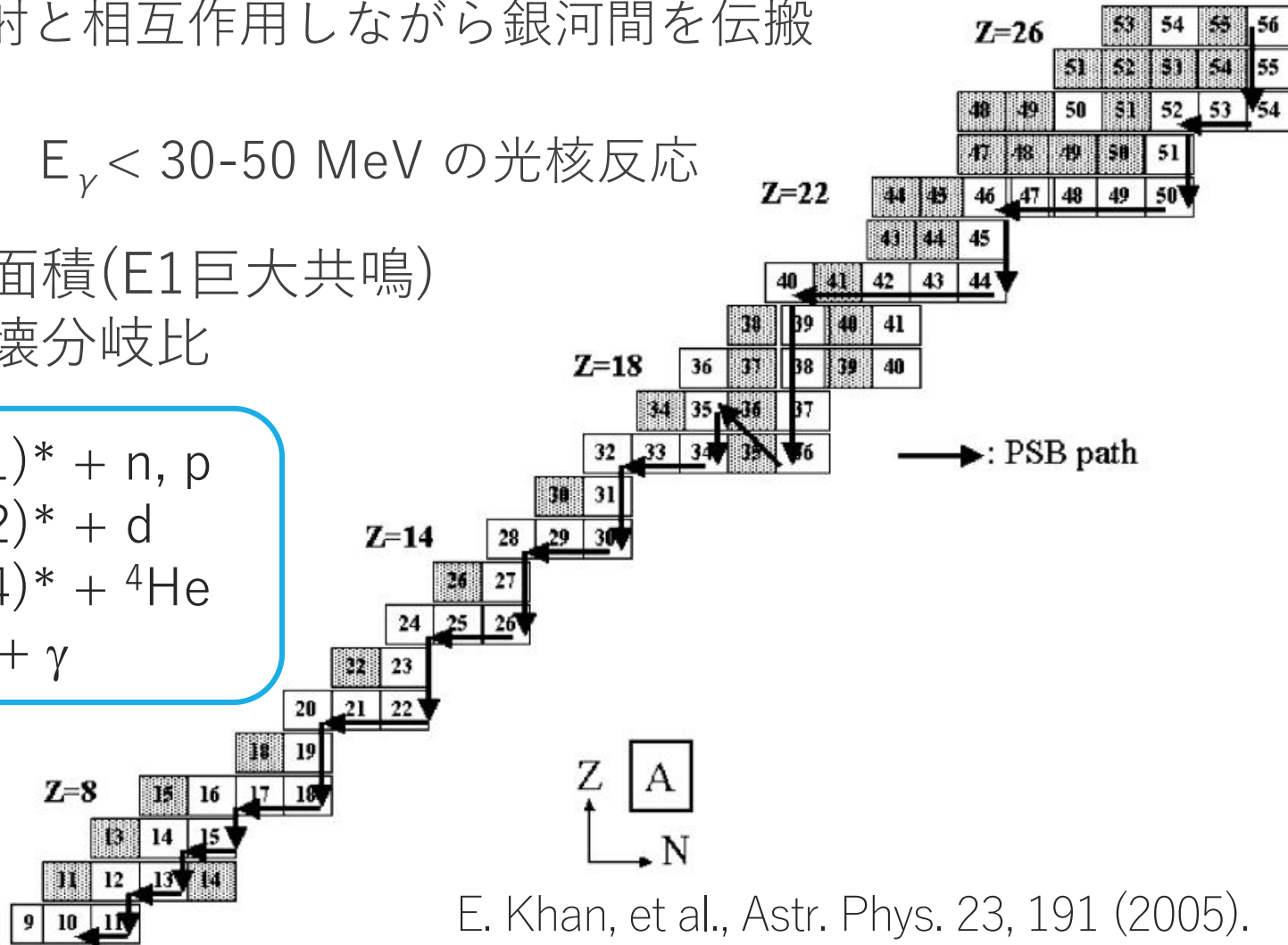
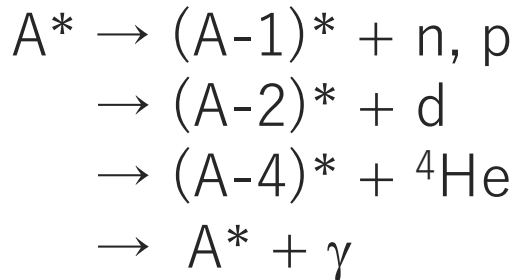


銀河間を伝搬する間の
核反応ネットワーク
計算が必要



背景: 超高エネルギー宇宙線と光核反応

- 発生源で加速された原子核 ($A < 56$) は、
宇宙背景放射と相互作用しながら銀河間を伝搬
- 典型的には、 $E_\gamma < 30\text{-}50 \text{ MeV}$ の光核反応
- 光吸収断面積(E1巨大共鳴)
 - 共鳴の崩壊分岐比
- 



E. Khan, et al., Astr. Phys. 23, 191 (2005).

背景: 核物理(理論)の課題

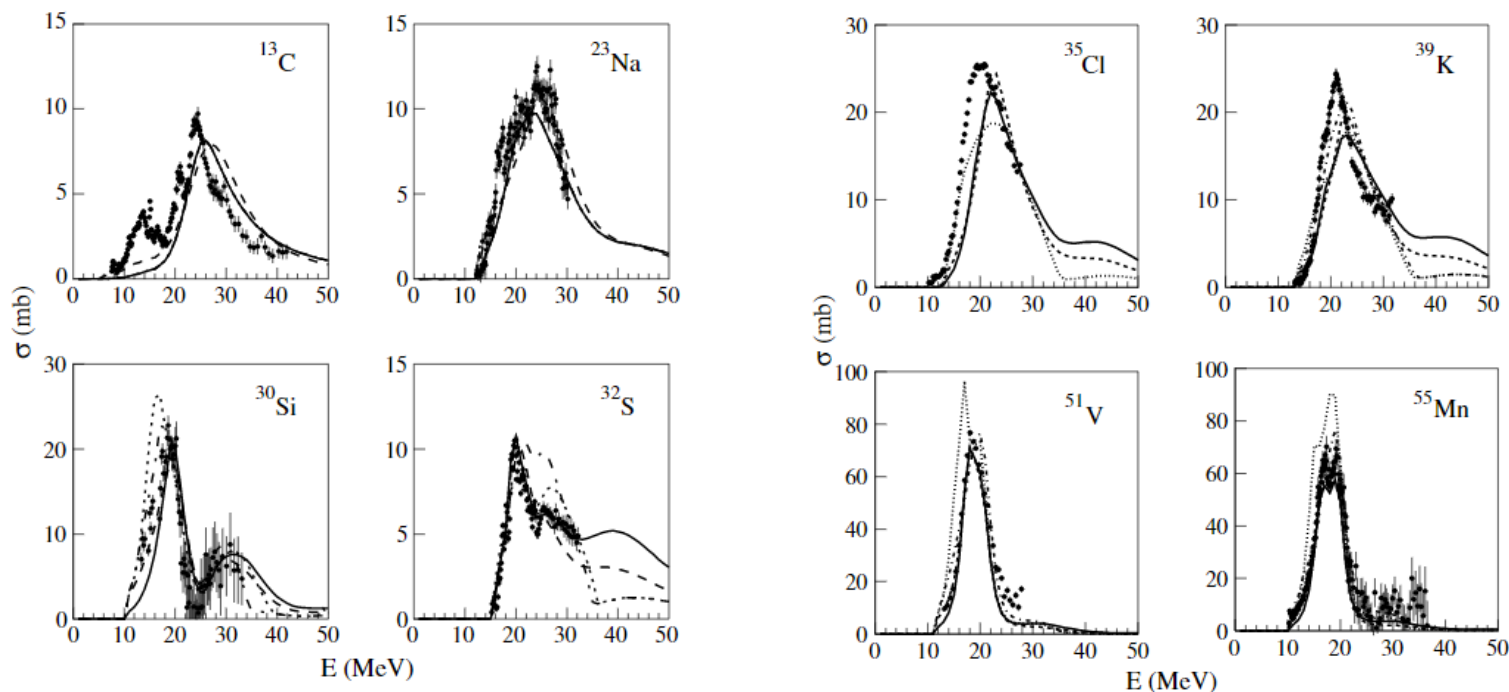
○ $E_\gamma < 30\text{-}50$ MeV の光核反応

— 光吸収断面積(E1巨大共鳴)

— 共鳴の崩壊分岐比

IAEAによるデータベース: T. Kawano, et al., Nucl. Data Sheets 163, 109 (2020)

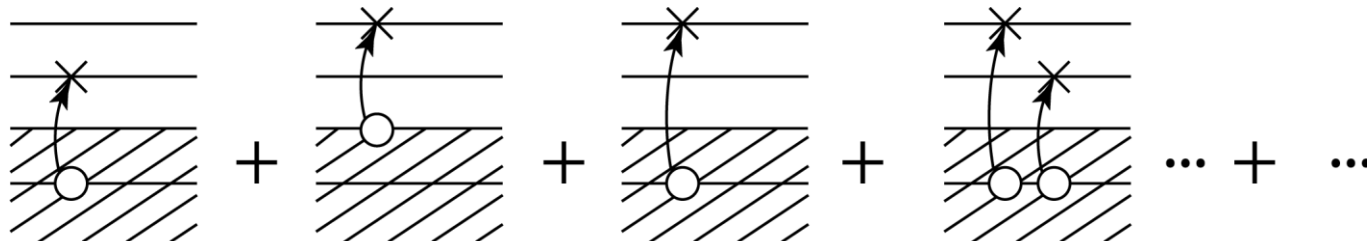
QRPA: S. Goriely et al., PRC 98, 014327 (2018) → 稲倉さんの発表



背景: 核物理(理論)の課題

- $E_\gamma < 30\text{-}50\text{ MeV}$ の光核反応
 - 光吸収断面積(E1巨大共鳴)
 - **共鳴の崩壊分岐比**

通常, 巨大共鳴は1p1h状態の重ね合わせとして記述される(RPA)



現状では, 統計崩壊模型で現象論的に記述 (TALYSなど)

アイソスピンの選択則に問題アリ → 微視的理解が望ましい

反対称化分子動力学法は, mpmhの寄与を記述し得る模型の1つ

- Shifted-basis法, Y. Kanada-En'yo, PRC89, 024302 (2014)
- **時間発展法**

時間依存 反対称化分子動力学

◎ 模型波動関数（時間依存の波束）

時間依存する波束のSlater行列式

$$\Phi(t) = \mathcal{A} \{ \phi(\mathbf{Z}_1(t)), \dots, \phi(\mathbf{Z}_A(t)) \}$$

$$\phi(\mathbf{Z}_i(t)) = \exp \{ -\nu(\mathbf{r} - \mathbf{Z}_i(t))^2 \} (\alpha_i(t) |\uparrow\rangle + \beta_i(t) |\downarrow\rangle)$$

力学変数（時間依存のパラメータ）

$\mathbf{Z}_i(t)$: 波束中心（核子の平均位置および運動量）

$\alpha_i(t) \beta_i(t)$: 核子スピン

◎ Microscopic Hamiltonian with effective/bare NN interactions

$$H = \sum_{i=1}^A t(i) - t_{cm} + \sum_{i<j}^A v(ij)$$

時間依存 反対称化分子動力学

◎ 時間依存変分原理

$$\delta \int dt \frac{\langle \Phi(t) | i\hbar d/dt - H | \Phi(t) \rangle}{\langle \Phi(t) | \Phi(t) \rangle} = 0$$

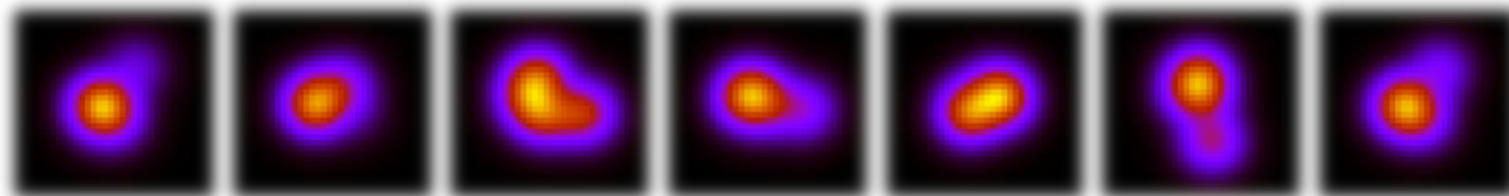
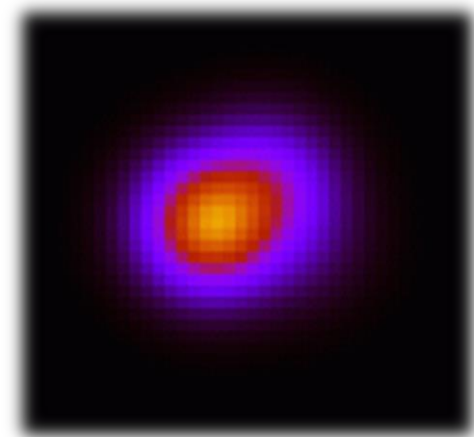
◎ 波束中心に対する運動方程式

$$i\hbar \frac{d\mathbf{Z}_i(t)}{dt} = \sum_j C_{ij}^{-1} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{Z}_j^*(t)}$$

$$\mathcal{H} = \frac{\langle \Phi(t) | H | \Phi(t) \rangle}{\langle \Phi(t) | \Phi(t) \rangle}, \quad C_{ij} = \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{Z}_i^* \partial \mathbf{Z}_j} \log \langle \Phi(t) | \Phi(t) \rangle$$

◎ 運動方程式を解き，波動関数のアンサンブルを得る

${}^6\text{He}$ (6核子系)



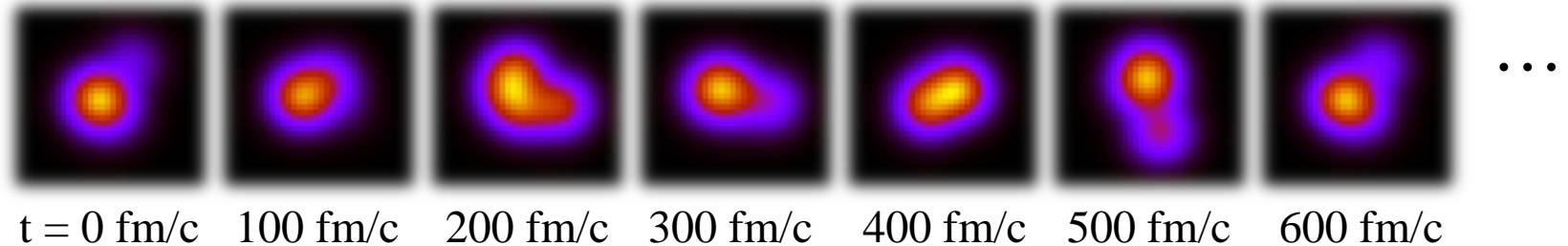
t = 0 fm/c 100 fm/c 200 fm/c 300 fm/c 400 fm/c 500 fm/c 600 fm/c

時間依存 反対称化分子動力学

◎ 運動方程式は近似的(古典的)だが、アンサンブルは正確

J. Schnack and H. Feldmeier, NPA601, 181 (1996).

A. Ono and H. Horiuchi, PRC53, 845 (1996), PRC53, 2341 (1996).



① エルゴード性を持つ

充分長い時間時間発展を行えば、すべての可能な状態が現れる



アンサンブルの波動関数を重ね合わせることで、
量子多体系を非経験的かつ正確に記述できるだろう

時間依存 反対称化分子動力学

◎ アンサンブルの波動関数を多数(数百-数千)重ね合わせることで
原子核の基底状態励起状態を記述する

$$\Psi^{J\pi} = f_1 \text{ (img1) } + f_2 \text{ (img2) } + f_3 \text{ (img3) } + f_4 \text{ (img4) } \dots$$
$$= \int_0^{T_{max}} dt f(t) \hat{P}_{MK}^J \Phi(t)$$

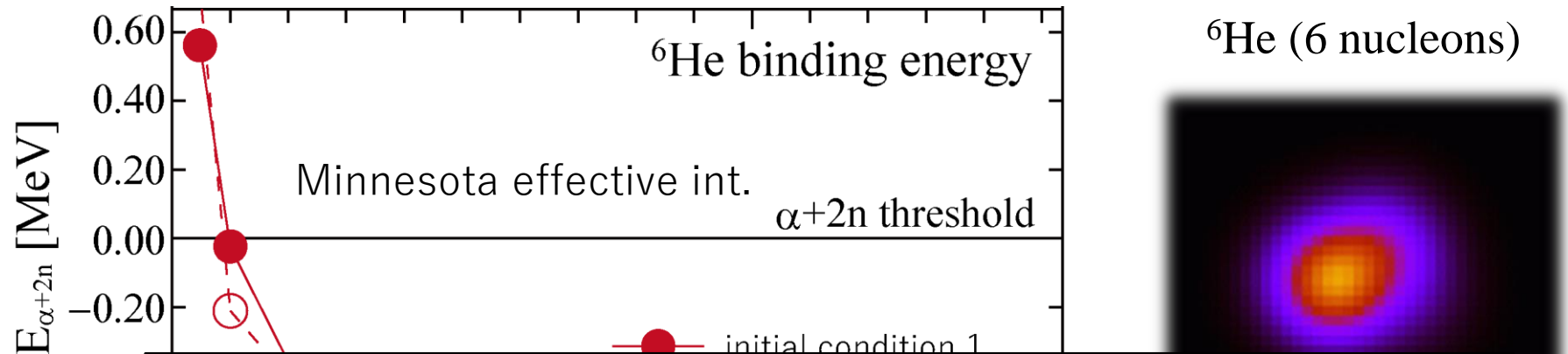
$f_1, f_2, f_3, f_4, \dots$ 重ね合わせの係数は、ハミルトニアンに対角化
によって決定

○ 十分に長く時間発展すれば、
エネルギーと固有関数が収束する

ベンチマーク計算の例 (${}^6\text{He}$)

◎ 厳密計算 (Stochastic Variational Method) との比較

D. Mikami, W. Horiuchi and Y. Suzuki, Phys. Rev. C 89, 064303 (2014)



Benchmark: light p-shell nuclei

nuclei	GFMC		SVM		REM	
	E	$\sqrt{\langle r^2 \rangle}$	E	$\sqrt{\langle r^2 \rangle}$	E	$\sqrt{\langle r^2 \rangle}$
${}^3\text{H}$	-8.26	1.68	-8.25	1.68	-8.25	1.68
${}^4\text{He}$	-31.3	1.36	-31.4	1.41	-31.4	1.39
${}^6\text{He}$	-66.3	1.50	-66.3	1.52	-66.3	1.50
${}^7\text{Li}$	-	-	-83.4	1.68	-83.5	1.67

GFMC: Green function Monte Carlo [2] SVM: Stochastic variational method [8]

* An effective potential “Mulliet-Tjon potential V (MTV)” was used.

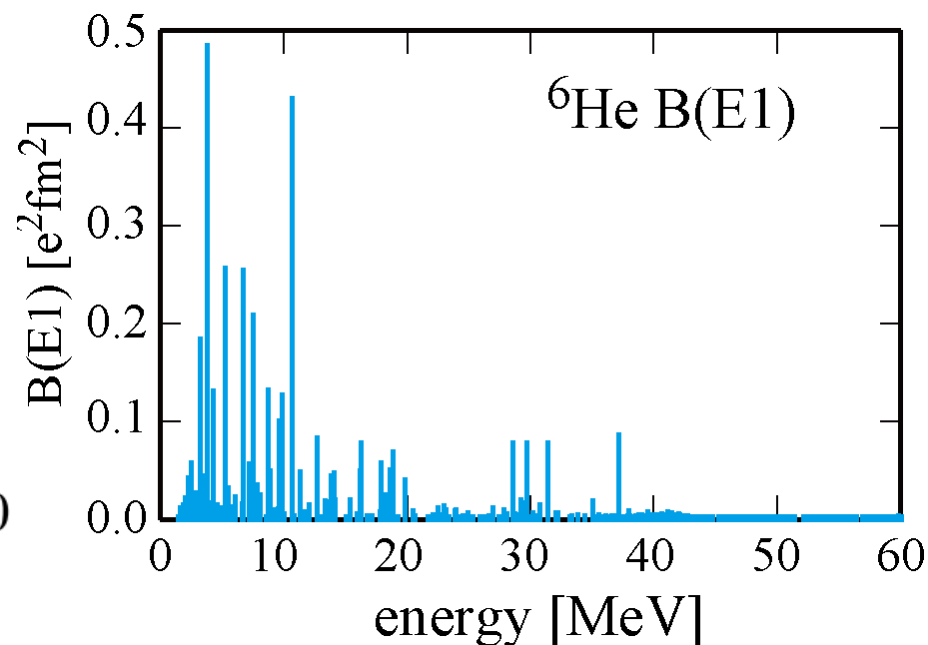
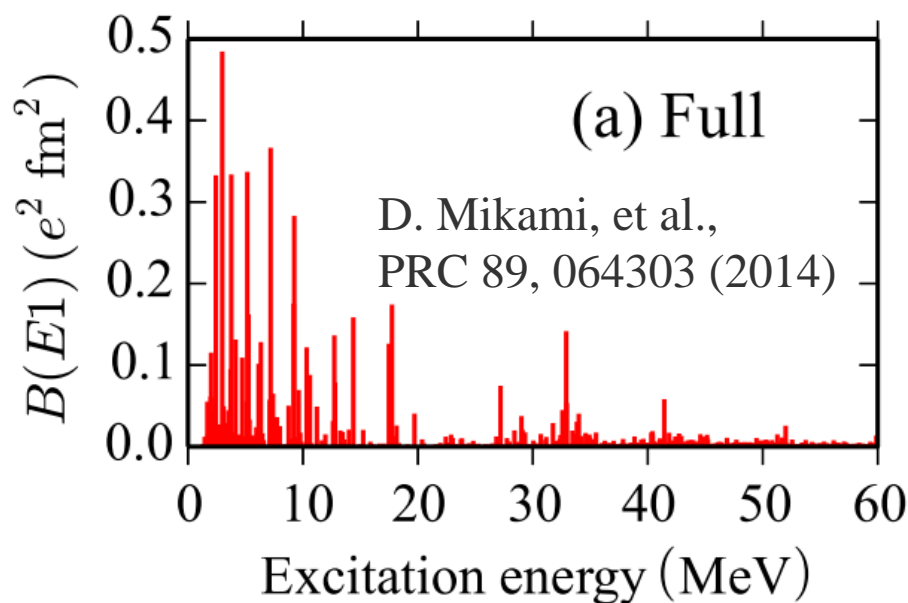
ベンチマーク計算の例 (${}^6\text{He}$)

◎ E1強度関数の計算

離散化された非束縛状態も同じアンサンブルから求められる。

基底状態から、非束縛状態へのE1遷移強度を直接計算する

$$B(E1; 0_1^+ \rightarrow 1_n^-) = \sum_{\mu} |\langle \Psi_n^{1-\mu} | \mathcal{M}_{\mu}(E1) | \Psi_1^{0+0} \rangle|^2$$



光吸収断面積と崩壊分岐比(^{16}O & ^{17}O)

◎ ^{16}O と ^{17}O の比較 (断面積)

Hamiltonian: Minnesota Pot. + 有限レンジLS + 有限レンジ3体力

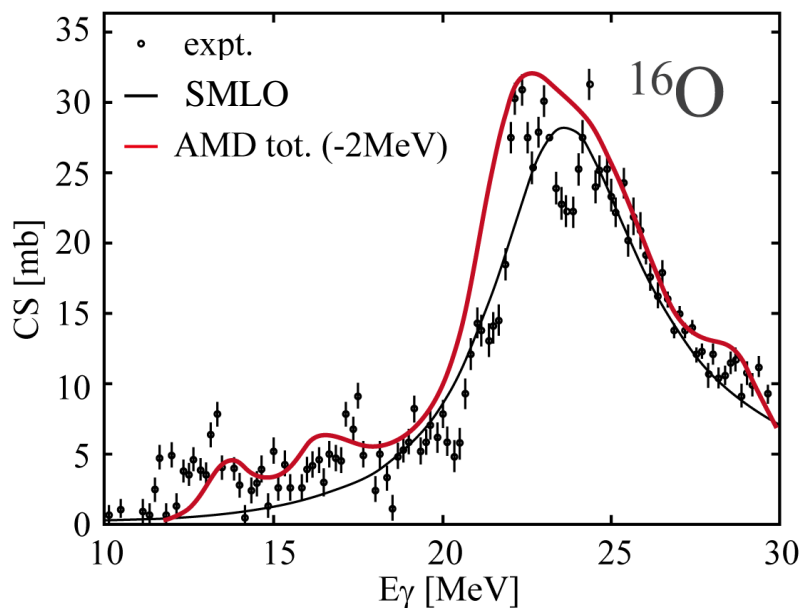
「 ^{17}O のsd-shellの準位」と
「巨大共鳴の和則と位置」
を再現するように、パラメータをrefit.

D.R. Thompson et al., NPA286, 53 (1977).

N. Yamaguchi et al., PTP62, 1018 (1979).

Y. Kanada-En'yo et al., PRC69, 034306 (2004).

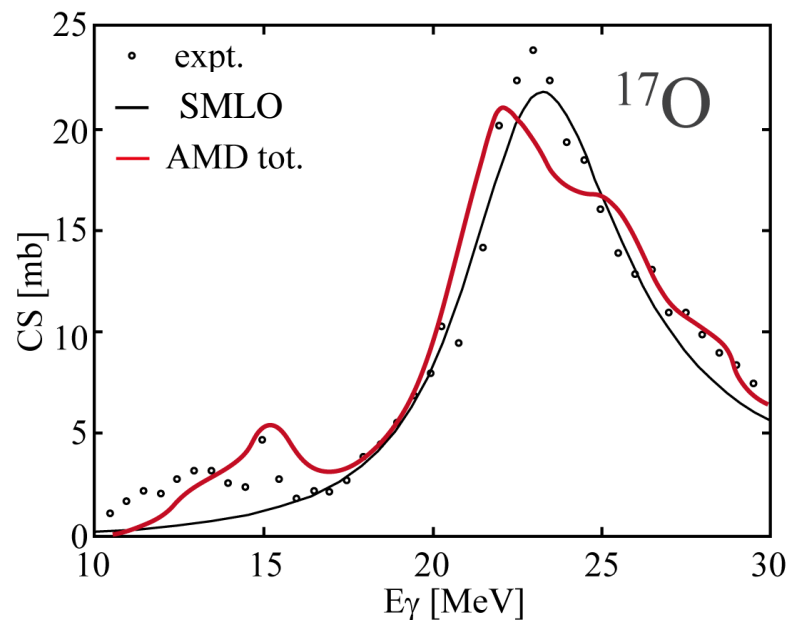
時間発展させ、波動関数を生成



onian
化



分布



光吸収断面積と崩壊分岐比(^{16}O & ^{17}O)

◎ ^{16}O と ^{17}O の比較 (崩壊分岐比)

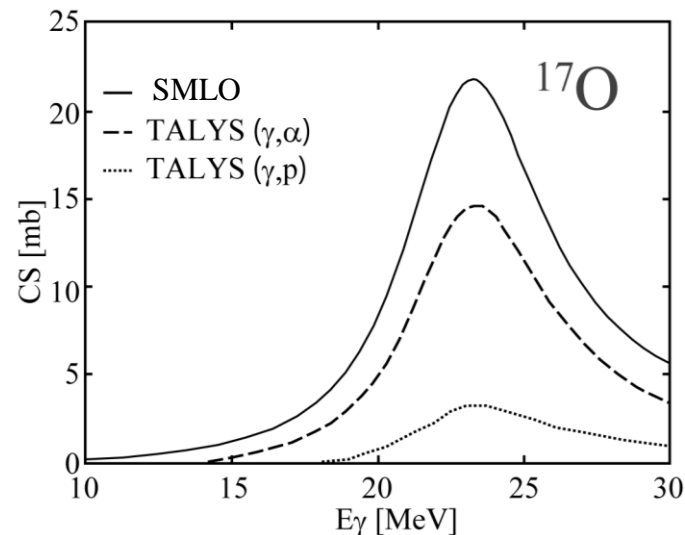
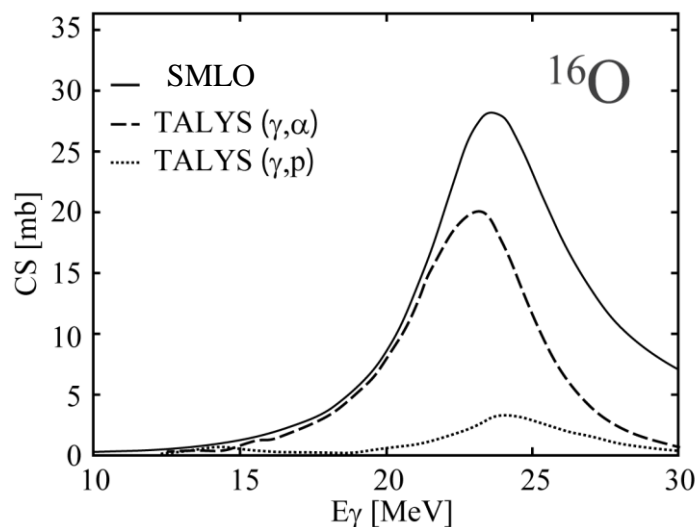
○ 多粒子崩壊を統計的に求める際に用いられる準位密度は、
重い核でfitされたもの

○ アイソスピン選択則

^{16}O のE1励起は $^{16}\text{O}^*(T=1)$ を作るため $^{12}\text{C} (T=0) + \alpha (T=0)$ 崩壊は禁止
 $^{12}\text{C}^*(T=1) + \alpha (T=0)$ はOK

TALYSオリジナルのアウトプットは問題が多い.

→ 微視的な計算によって、軽い核の傾向を見られないか



崩壊幅と分岐比の見積もり

◎ 換算幅振幅を微視的に求め、崩壊幅と分岐比を見積もる

$$A \rightarrow A_1 + A_2 \text{ 崩壊に対する部分幅} \quad \Gamma = 2 \underbrace{P_\ell(a)}_{\text{透過率}} \frac{\hbar^2}{2\mu a} \underbrace{|ay_\ell(a)|^2}_{\text{換算幅振幅}}$$

透過率

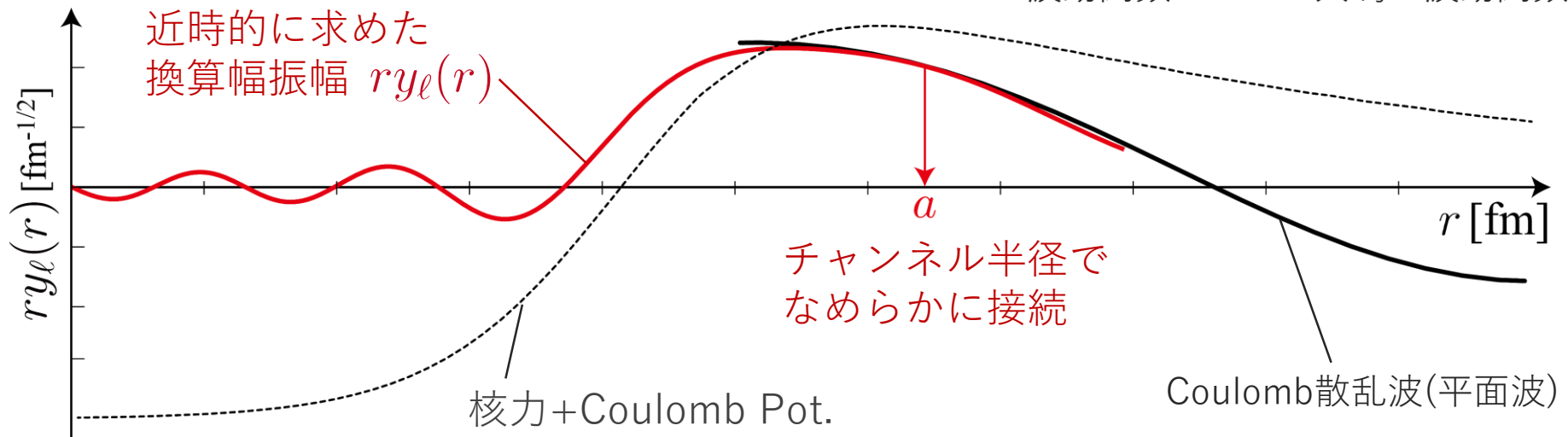
$$P_\ell(a) = \frac{ka}{F_\ell^2(ka) + G_\ell^2(ka)}$$

換算幅振幅

$$ry_\ell(r) = r \sqrt{\frac{A!}{A_1!A_2!}} \langle Y_\ell(\hat{r}) \phi_{A_1} \phi_{A_2} | \Psi \rangle$$

崩壊チャンネルの
波動関数

近似的に求めた
共鳴の波動関数



崩壊幅と分岐比の見積もり

◎ 換算幅振幅を微視的に求め、崩壊幅と分岐比を見積もる

換算幅振幅 $ry_\ell(r) = r \sqrt{\frac{A!}{A_1!A_2!}} \langle Y_\ell(\hat{r}) \phi_{A_1} \phi_{A_2} | \Psi \rangle$

崩壊チャンネルの波動関数 近似的に求めた共鳴の波動関数

◎ Laplace展開法を用いることで、
任意の崩壊チャンネルに対して換算幅振幅を計算可能

Y. Chiba and M.K., PTEP2017, 053D01 (2017)



◎ 最も大きな不定性は、崩壊のQ値

$$P_\ell(a) = \frac{ka}{F_\ell^2(ka) + G_\ell^2(ka)} \quad k = \sqrt{2\mu E_Q}/\hbar$$

まとめと展望

◎ 研究の動機付け

- 超高エネルギー宇宙線と核の光吸収断面積
- 巨大共鳴のエネルギー，強度，崩壊分岐比
- 崩壊分岐比の議論は既存の枠組みを超える挑戦的課題

◎ 「時間依存する反対称化分子動力学法」によるアプローチ

- 波束に対する運動方程式を解くことで，原子核を非経験的かつ精度よく解く

$$i\hbar \frac{d\mathbf{Z}_i(t)}{dt} = \sum_j C_{ij}^{-1} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{Z}_j^*(t)} \quad \Psi^{J\pi} = \int_0^{T_{max}} dt \, f(t) \hat{P}_{MK}^J \Phi(t)$$

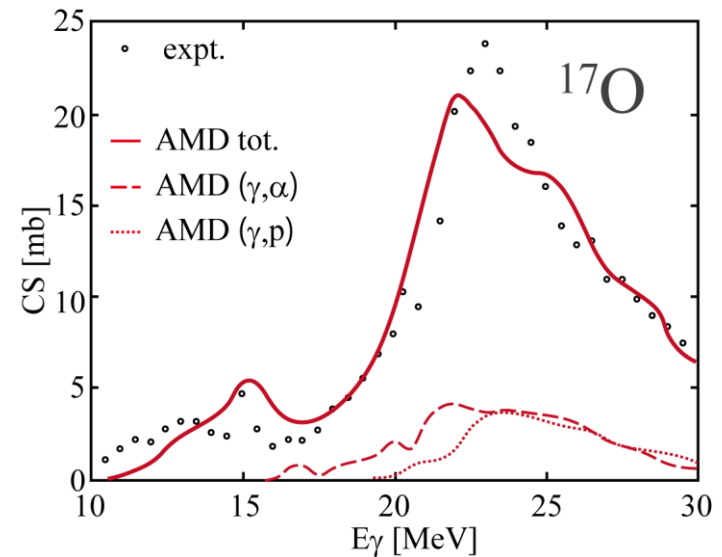
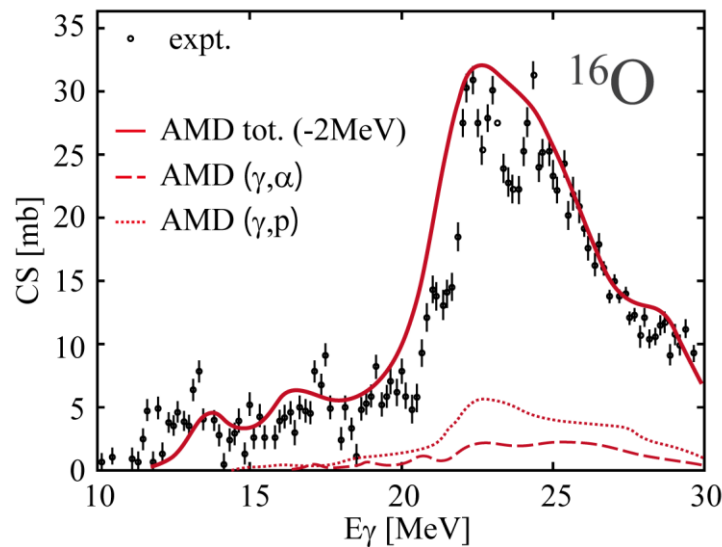
- 換算幅振幅を用いた崩壊分岐比の見積もり

$$\Gamma = 2P_\ell(a) \frac{\hbar^2}{2\mu a} |ay_\ell(a)|^2 \quad ry_\ell(r) = r \sqrt{\frac{A!}{A_1!A_2!}} \langle Y_\ell(\hat{r}) \phi_{A_1} \phi_{A_2} | \Psi \rangle$$

まとめと展望

◎ 予備的結果

- 少数系でのベンチマーク
- 酸素同位体の光吸収断面積と分岐比
- 分岐比はTALYSと大きく異なる結果



◎ 展望と課題

- 軽い核に対する系統的な評価 → 分岐比に対する大まかな知見
- 観測との比較による, 分岐比の精度向上