

- 日本物理学会年会講演 2006/3/30pWG-1 於 松山

正準基底HFB法で見る 中性子ドリップ線とその向こう

田嶋直樹 (福井大工)



正準基底HFB法

未知の核 \Rightarrow 任意の変形、任意の表面状態 (スキン、ハロー)
調和振動子等の基底展開は不利 (最適化がわずらわしい)
位置座標表現が適する (正方メッシュ表現等)

中性子過剰核 \Rightarrow フェルミ準位の上昇 (連続状態への接近)
対相関で連続状態を陽に取り入れる必要
従来の解法 (準粒子法) では困難 (状態数が過大)

正準基底HFB法 + 3次元メッシュ表現 + Skyrme 相互作用
任意の変形、任意の表面状態、連続状態の対相関 を扱える

HFB in quasi-particle method

$$|\psi\rangle = \prod_{i=1}^{\text{\#basis}} b_i |0\rangle$$

$$b_i = \sum_s \int d^3r \left\{ \phi_i^*(\vec{r}, s) a(\vec{r}, s) + \psi_i(\vec{r}, s) a^\dagger(\vec{r}, s) \right\}$$

$$\begin{pmatrix} -h & \tilde{h} \\ \tilde{h} & h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_i \\ \psi_i \end{pmatrix} = \epsilon_i \begin{pmatrix} \phi_i \\ \psi_i \end{pmatrix}$$

b_i^\dagger : quasi-particle states, including information on **excitations**.

HFB in canonical-basis method

HFB solutions can be expressed in the **BCS form**

$$|\Psi\rangle = \prod_{i=1}^{i_{\max}} (u_i + v_i a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger) |0\rangle$$

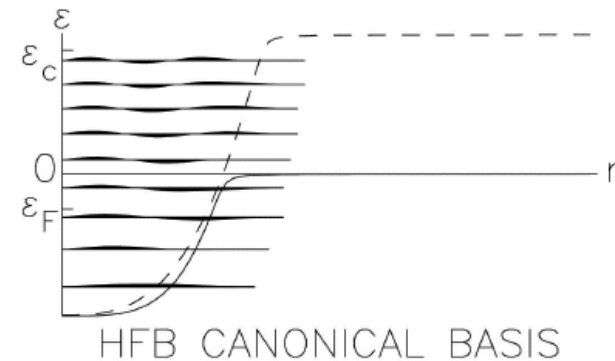
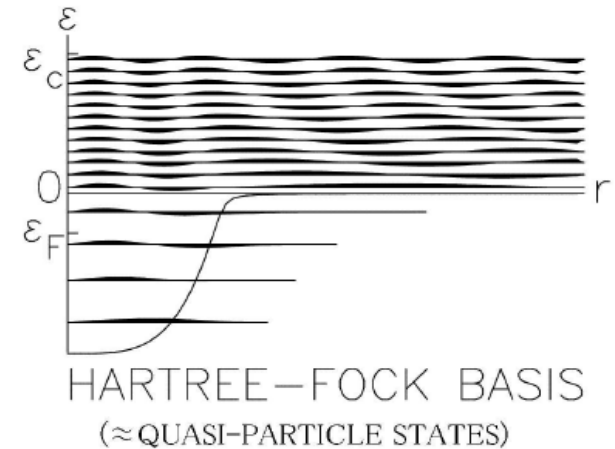
$$a_i^\dagger = \sum_s \int d^3r \psi_i(\vec{r}, s) a^\dagger(\vec{r}, s) \quad : \text{HFB canonical basis}$$

$$\frac{\delta E}{\delta \psi_i^*} = \mathcal{H}_i \psi_i = \sum_j \lambda_{ij} \psi_j, \quad \mathcal{H}_i = v_i^2 h + u_i v_i \tilde{h}$$

Exact when $i_{\max} = \frac{1}{2} \text{\#basis}$ (Bloch Messiah theorem)

One may neglect $v^2 \ll 1$ states to describe the **ground state**.

i.e., $i_{\max} = \mathcal{O}(A) \ll \text{\#basis}$ to a good approximation



h : Hartree-Fock Hamiltonian
 \tilde{h} : Pairing Hamiltonian

今回の発表の特徴

前回は:

$N=Z$ =一定のまま、相互作用を変化させて滴下線と類似の状況を作った。

滴下線と全く同じ状況か？

$N=Z$ では中性子ドリップ線で球対称になる(という傾向が強い)

← 球対称解なら従来の解法(準粒子法)で十分なので計算に有難味がない。

今回は:

$N=Z$ の制限をはずすようプログラムを改造し、1本の同位体鎖を滴下線まで計算した。

Mean-field interaction

$$\begin{aligned} \hat{v} = & t_0(1 + x_0 P_\sigma)\delta + \frac{1}{2}t_1(1 + x_1 P_\sigma)(\vec{k}^2\delta + \delta\vec{k}^2) + t_2(1 + x_2 P_\sigma)\vec{k} \cdot \delta\vec{k} \\ & + \frac{1}{6}\rho^\alpha t_3(1 + x_3 P_\sigma)\delta + iW(\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \cdot \vec{k} \times \delta\vec{k} \end{aligned}$$

Pairing interaction: different parameters assumed, only for (S=0, T=1) pairs.

$$\hat{v}_p = v_p \frac{1 - P_\sigma}{2} \left\{ \left[1 - \frac{\rho}{\rho_c} - \frac{\rho_n - \rho_p}{\rho'_c} T_z - \left(\frac{\tilde{\rho}}{\tilde{\rho}_c} \right)^2 \right] \delta - \frac{1}{2k_c^2} (\vec{k}^2\delta + \delta\vec{k}^2) \right\}$$

- v_p : overall strength, to be adjusted depending on the cutoff.
Cutoff can be controlled by the number of (explicitly considered) canonical basis with $v^2 > 0$.
- $\rho_c = 0.32 \text{ fm}^{-1}$, $\rho'_c = \tilde{\rho}_c = \infty$: density dependence, insufficient information
- $k_c = 2 \text{ fm}^{-1}$: momentum dependence (=finite range effect), prevents the point collapse

Hamiltonian density for even-even nuclei

$$\begin{aligned}
 E = \int \mathcal{H} d\vec{r}, \quad \mathcal{H} = & \frac{\hbar^2}{2m} (\tau_n + \tau_p) \\
 & + C_1 (\rho_n^2 + \rho_p^2) + C'_1 \rho_n \rho_p \\
 & + C_2 (\rho_n \tau_n + \rho_p \tau_p) + C'_2 (\rho_n \tau_p + \rho_p \tau_n) \\
 & + C_3 (\rho_n \vec{\nabla}^2 \rho_n + \rho_p \vec{\nabla}^2 \rho_p) + C'_3 (\rho_n \vec{\nabla}^2 \rho_p + \rho_p \vec{\nabla}^2 \rho_n) \\
 & + C_4 \rho^\alpha (\rho_n^2 + \rho_p^2) + C'_4 \rho^\alpha \rho_n \rho_p \\
 & + C_5 (\rho_n \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n + \rho_p \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p) + C'_5 (\rho_n \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p + \rho_p \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n) \\
 & + C_6 \tilde{\rho}_n^2 + C_7 \rho_n \tilde{\rho}_n^2 + C'_7 \rho_p \tilde{\rho}_n^2 + C_8 \tilde{\rho}_n^4 + C_9 \tilde{\rho}_n (\tilde{\tau}_n - \vec{\nabla}^2 \tilde{\rho}_n) \\
 & + C_6 \tilde{\rho}_p^2 + C_7 \rho_p \tilde{\rho}_p^2 + C'_7 \rho_n \tilde{\rho}_p^2 + C_8 \tilde{\rho}_p^4 + C_9 \tilde{\rho}_p (\tilde{\tau}_p - \vec{\nabla}^2 \tilde{\rho}_p) \\
 & + C_{10} V_C \rho_p + C_{11} \rho_p^{4/3}
 \end{aligned}$$

where

$$\begin{aligned}
 C_1 &= \frac{1}{4} t_0 (1 - x_0) & C'_1 &= \frac{1}{2} t_0 (2 + x_0) \\
 C_2 &= \frac{1}{8} (t_1 (1 - x_1) + 3t_2 (1 + x_2)) & C'_2 &= \frac{1}{8} (t_1 (2 + x_1) + t_2 (2 + x_2)) \\
 C_3 &= \frac{3}{32} (t_1 (x_1 - 1) + t_2 (x_2 + 1)) & C'_3 &= \frac{1}{32} (-3t_1 (2 + x_1) + t_2 (2 + x_2)) \\
 C_4 &= \frac{1}{24} t_3 (1 - x_3) & C'_4 &= \frac{1}{12} t_3 (2 + x_3) \\
 C_5 &= -W & C'_5 &= -\frac{1}{2} W \\
 C_6 &= \frac{1}{4} v_P & & \\
 C_7 &= -\frac{1}{4} v_P \left(\frac{1}{\rho_c} + \frac{1}{\rho'_c} \right) & C'_7 &= -\frac{1}{4} v_P \left(\frac{1}{\rho_c} - \frac{1}{\rho'_c} \right) \\
 C_8 &= -\frac{1}{4} \frac{v_P}{\rho_c^2} & C_9 &= -\frac{1}{4} \frac{v_P}{k_c^2} \\
 C_{10} &= \frac{1}{2} & C_{11} &= -\frac{3}{4} e^2 \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3}
 \end{aligned}$$

Densities ($q = n, p$)

$$\tau_q(\vec{r}) = 2 \sum_{i>0,\sigma} v_{qi}^2 |\vec{\nabla} \psi_{qi}(\vec{r}, \sigma)|^2, \quad \tilde{\tau}_q(\vec{r}) = 2 \sum_{i>0,\sigma} u_{qi} v_{qi} |\vec{\nabla} \psi_{qi}(\vec{r}, \sigma)|^2,$$

$$\rho_q(\vec{r}) = 2 \sum_{i>0,\sigma} v_{qi}^2 |\psi_{qi}(\vec{r}, \sigma)|^2, \quad \tilde{\rho}_q(\vec{r}) = 2 \sum_{i>0,\sigma} u_{qi} v_{qi} |\psi_{qi}(\vec{r}, \sigma)|^2$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_q = \frac{2}{i} \sum_{i>0,\sigma,\sigma'} v_{qi}^2 \vec{\nabla} \psi_{qi}^*(\vec{r}, \sigma) \times \vec{\nabla} \psi_{qi}(\vec{r}, \sigma') \cdot \langle \sigma | \vec{\sigma} | \sigma' \rangle$$

Effective masses and single-particle potentials

$$B_n = \frac{\hbar^2}{2m} + C_2 \rho_n + C'_2 \rho_p$$

$$\tilde{B}_n = C_9 \tilde{\rho}_n$$

$$V_n = 2C_1 \rho_n + C'_1 \rho_p + C_2 \tau_n + C'_2 \tau_p + 2C_3 \vec{\nabla}^2 \rho_n + 2C'_3 \vec{\nabla}^2 \rho_p \\ + \rho^{\alpha-1} \left[(\alpha + 2) C_4 \rho_n^2 + (\alpha C_4 + C'_4) \rho_p^2 + (2C_4 + (\alpha + 1) C'_4) \rho_n \rho_p \right] \\ + C_5 \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n + C'_5 \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p + C_7 \tilde{\rho}_n^2 + C'_7 \tilde{\rho}_p^2$$

$$\vec{W}_n = -C_5 \vec{\nabla} \rho_n - C'_5 \vec{\nabla} \rho_p$$

$$\tilde{V}_n = 2C_6 \tilde{\rho}_n + 2C_7 \rho_n \tilde{\rho}_n + 2C'_7 \rho_p \tilde{\rho}_n + 4C_8 \tilde{\rho}_n^3 + C_9 (\tilde{\tau}_n - 2\vec{\nabla}^2 \tilde{\rho}_n)$$

State dependent Hamiltonian

$$h_q = -\vec{\nabla} \cdot B_q \vec{\nabla} + V_q + i\vec{W}_q \cdot \vec{\sigma} \times \vec{\nabla} \quad : \text{mean-field Hamiltonian}$$

$$\tilde{h}_q = -\vec{\nabla} \cdot \tilde{B}_q \vec{\nabla} + \tilde{V}_q \quad : \text{pairing Hamiltonian}$$

$$\mathcal{H}_{qi} = v_{qi}^2 h_q + u_{qi} v_{qi} \tilde{h}_q \quad : \text{Hamiltonian of } i\text{th canonical orbital}$$

Approach to the drip line (and beyond)

isotope chain:

Si($Z=14$), $6 \leq N \leq 32$ have bound states

Mean field:

SIII force, ls and Coulomb excluded.

Pairing force:

$$k_c = 2 \text{ fm}^{-1}, \rho_c = 0.32 \text{ fm}^{-3}.$$

$v_p(\text{MeV fm}^3)$	-680	-780	-880
$\Delta_n(N = 28)(\text{MeV})$	1.4	2.0	3.0

Mainly, $v_p = -780$ is used.

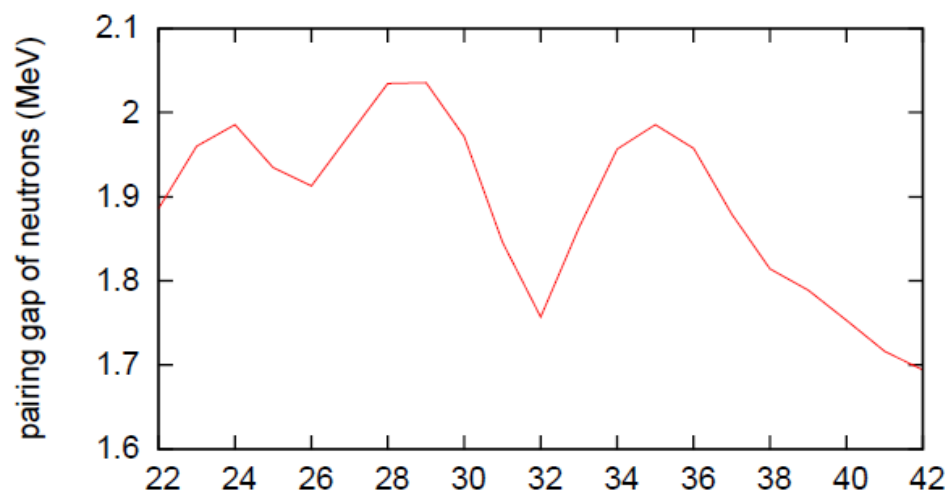
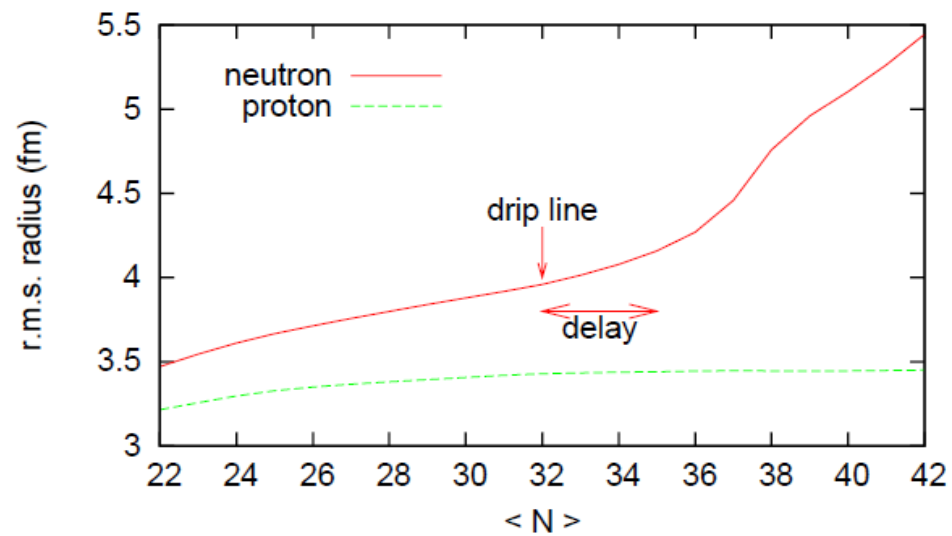
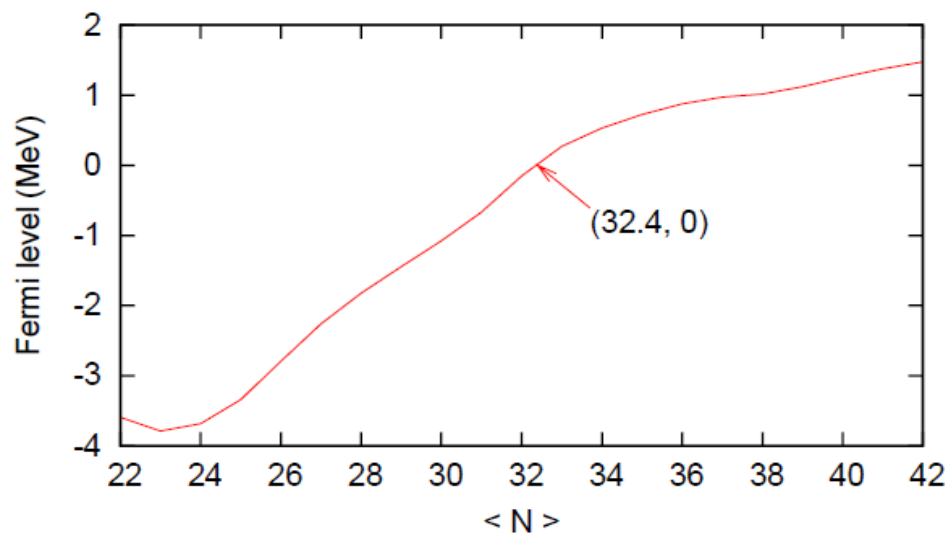
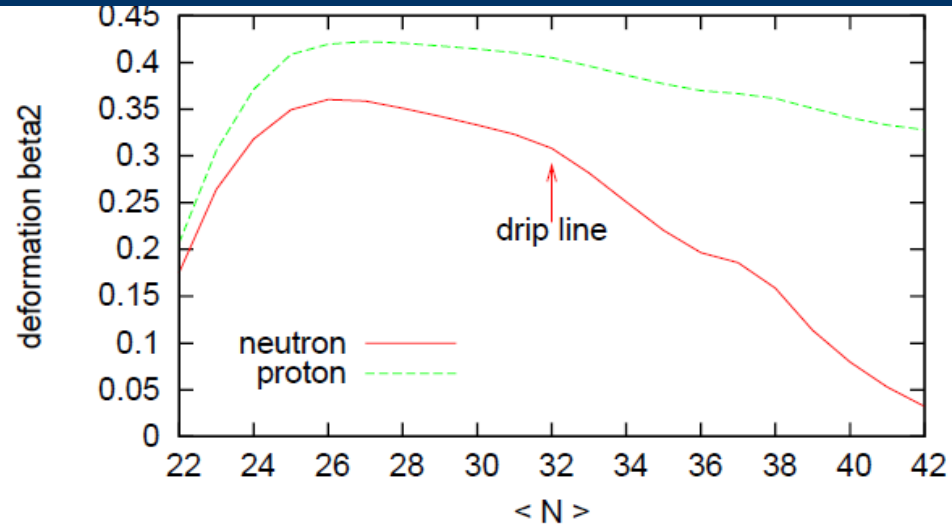
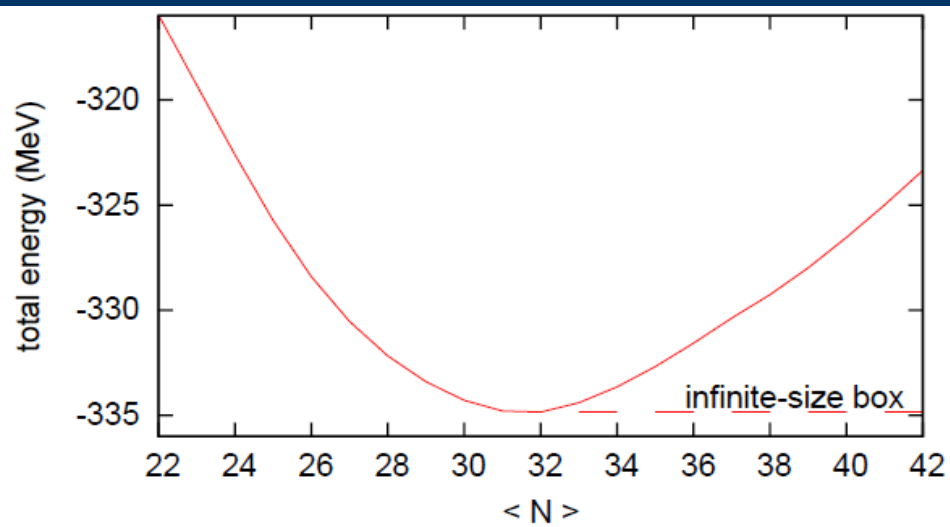
Box:

$$L = 32 \text{ fm}, \Delta x = 0.8 \text{ fm}$$

The number of canonical basis states:

neutrons : 60×2 (2 for spin \uparrow and \downarrow)

protons : $21 \times 2 \rightarrow$ mostly in the normal state



フェルミエネルギー

正準基底HFB法には現れない(拘束条件はグラジエント法で満たす)ので、解が求まった後で計算する:

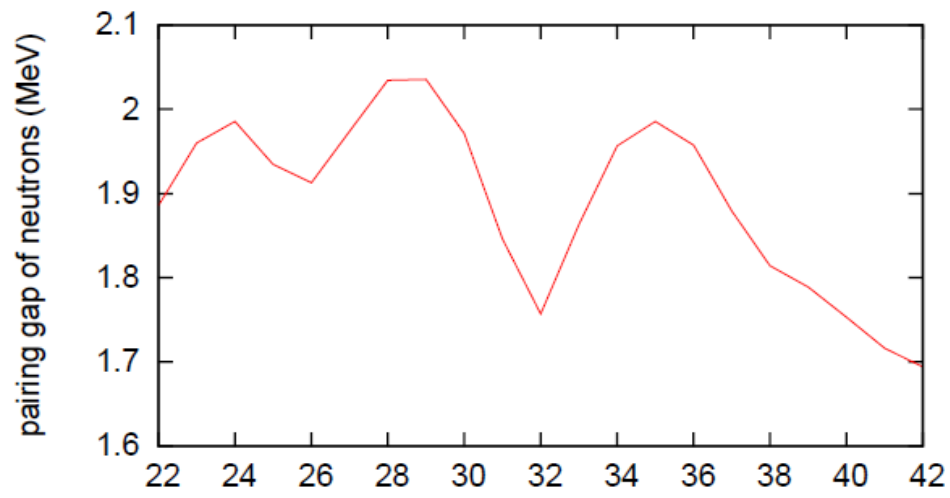
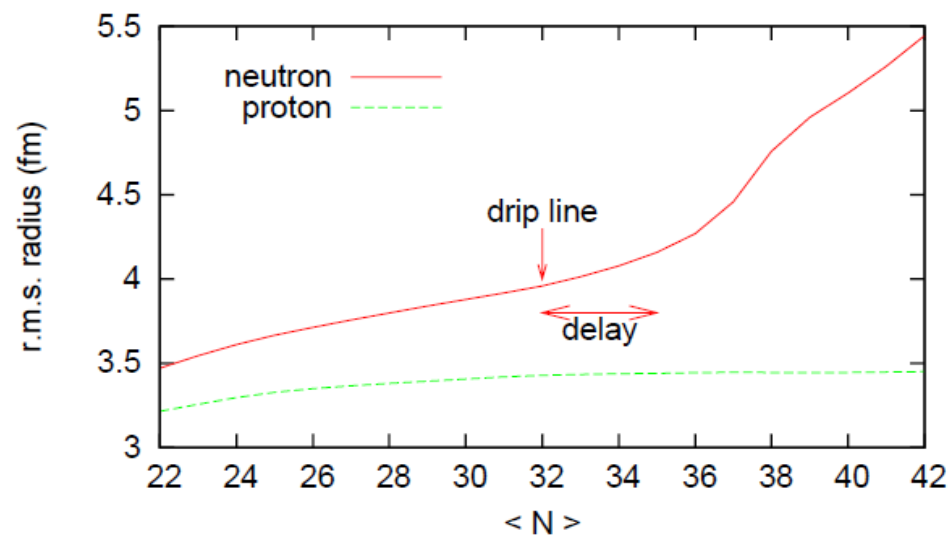
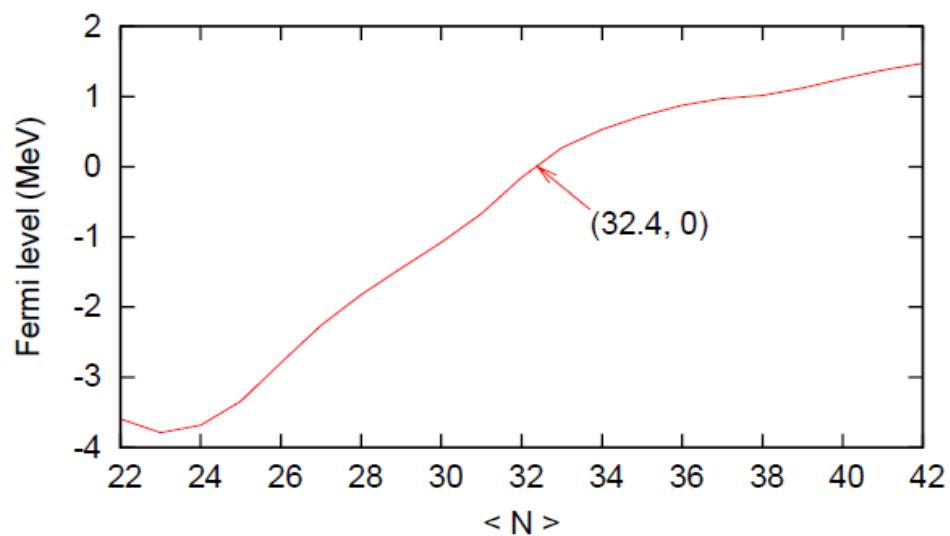
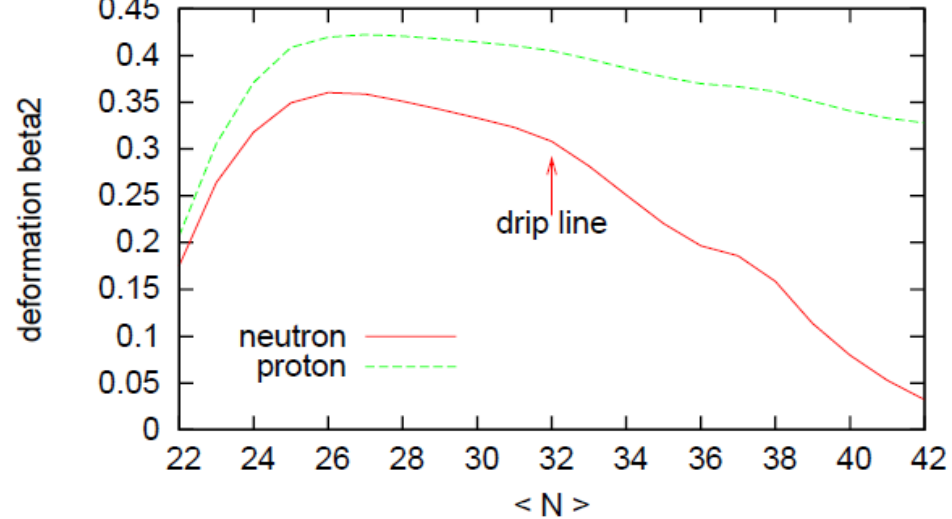
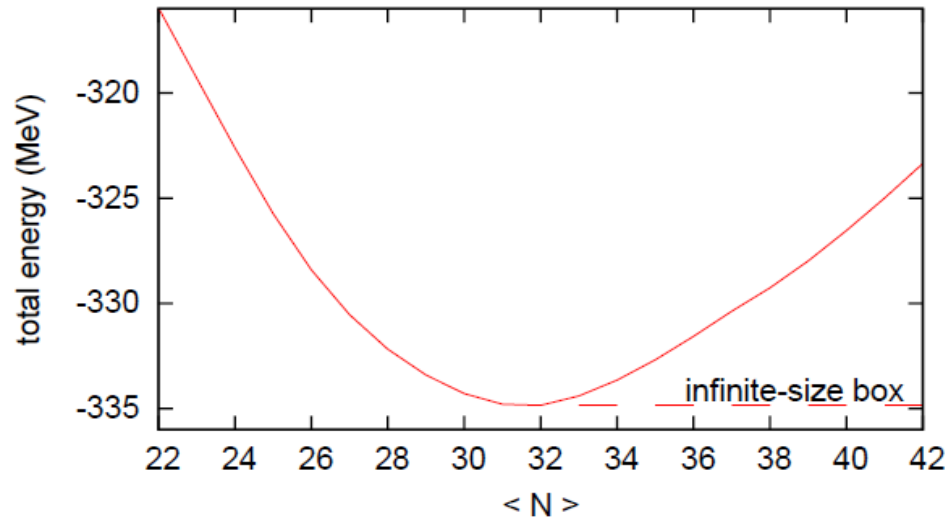
$$\lambda = \partial E / \partial \langle N \rangle$$

準粒子を求める際に $\langle N \rangle$ を制御するための未定乗数としても得られる:

$$R = H - \lambda N$$

正準基底HFB法で容易に手に入る準粒子は
有限個の正準基底の張る部分空間内での近似的なもの

しかし、両者はよく一致している \Rightarrow 後者で代用してよい



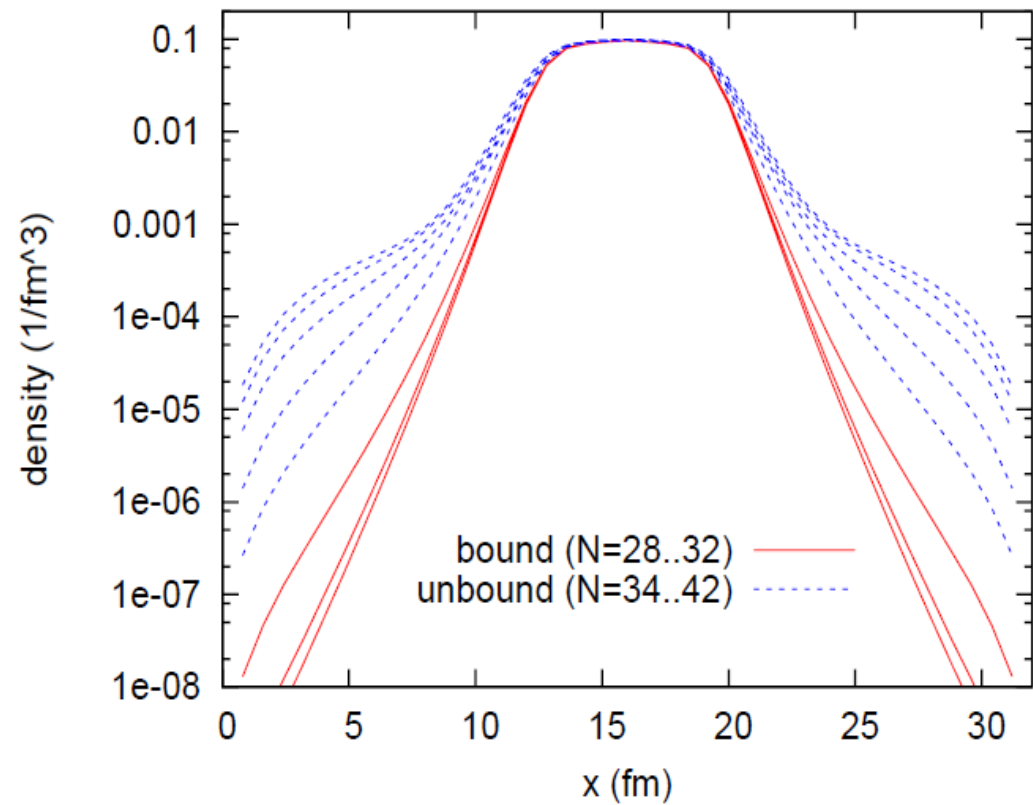
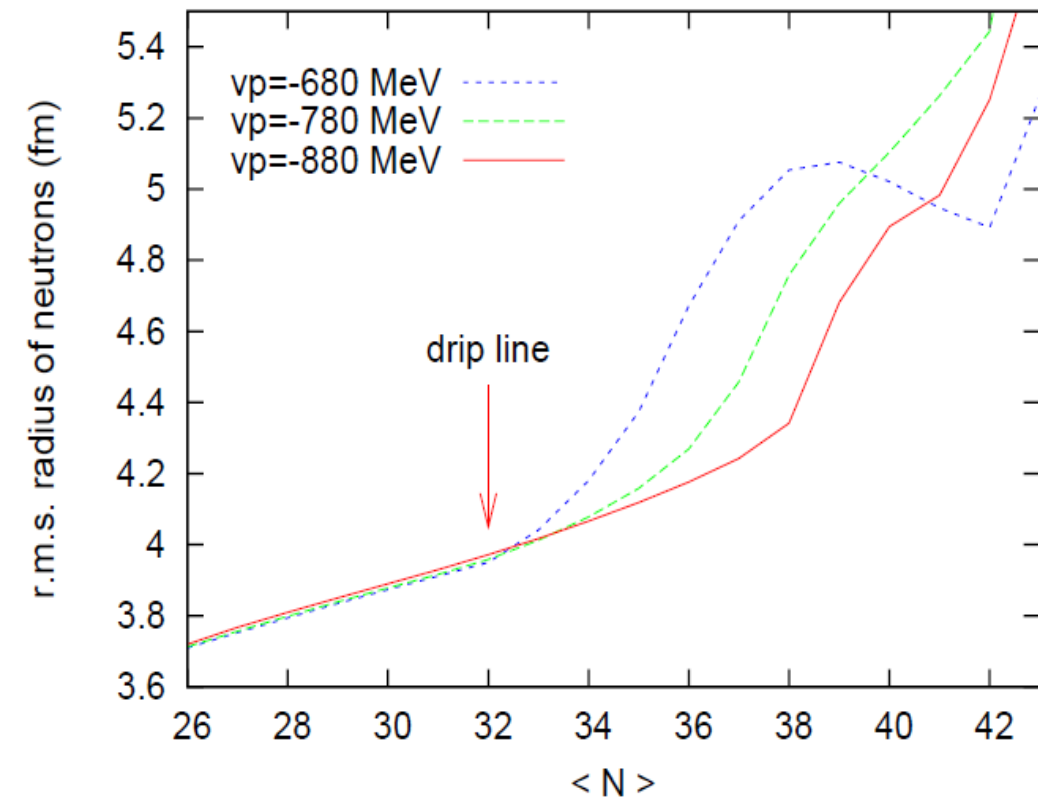
平均二乗半径の動きに注目

フェルミエネルギーが正になる \Rightarrow 密度の非局在化 \Rightarrow 半径の急激な増大

のはずが . . .

しばらくは中性子の密度は **局在** したままである

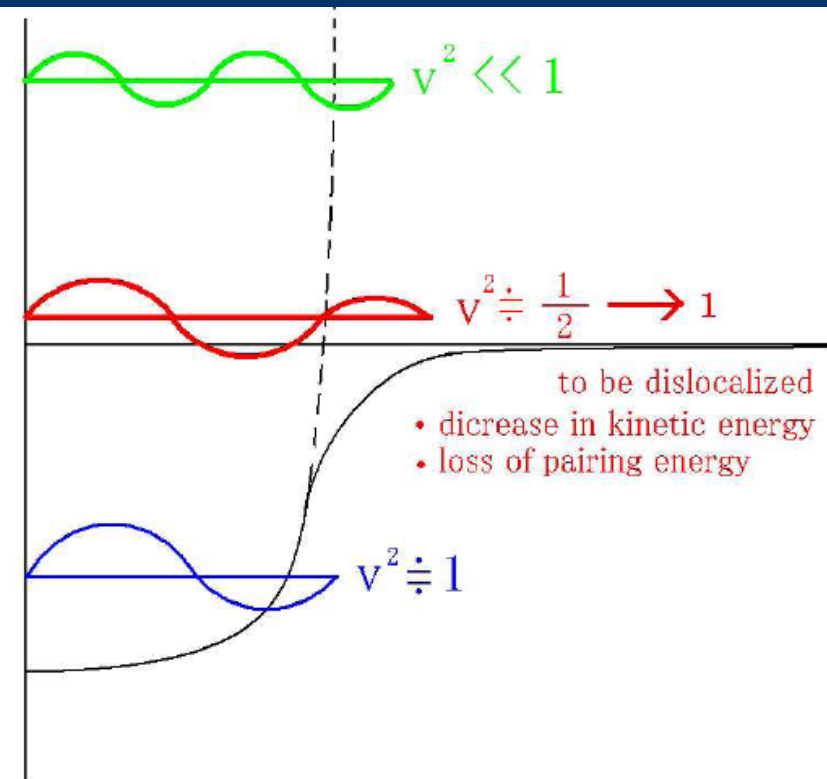
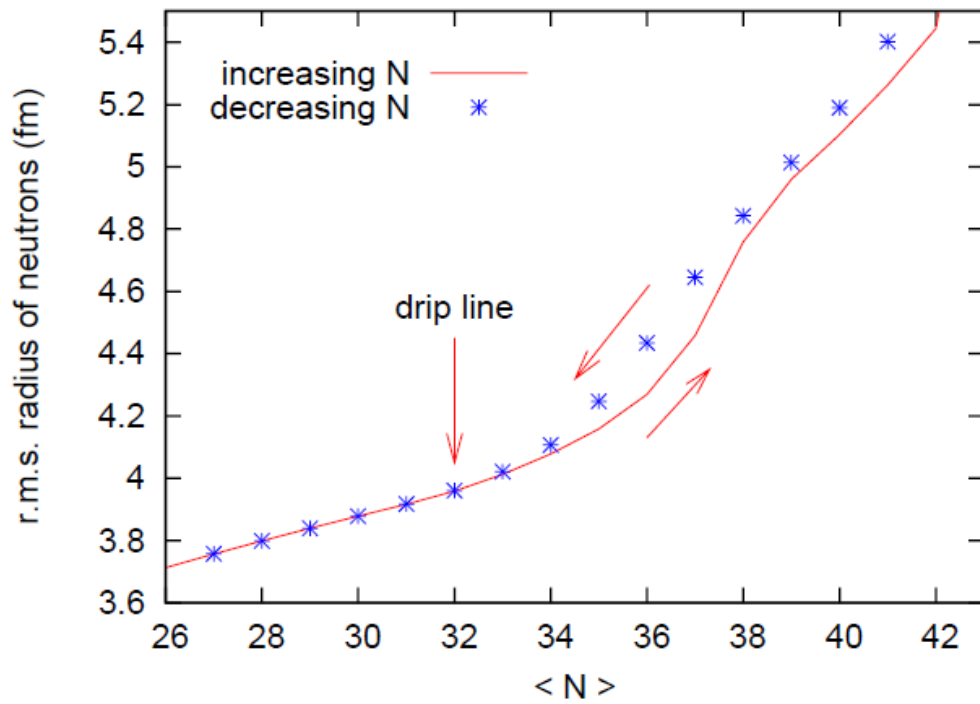




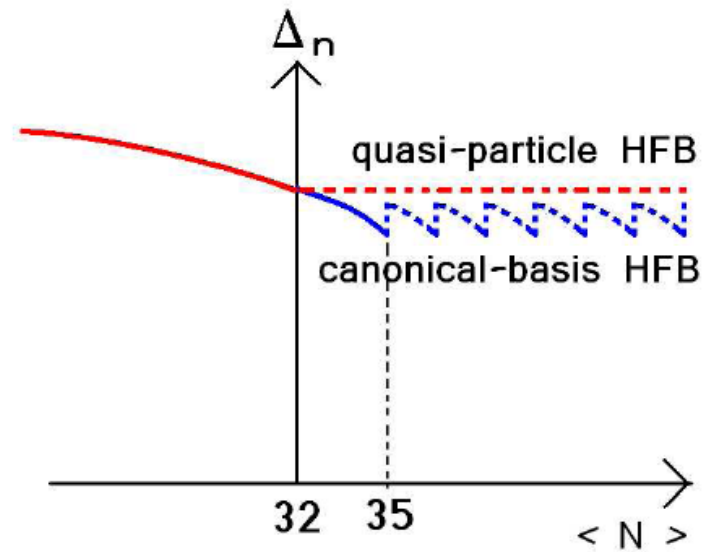
Stronger pairings lead to longer delays of dislocalization.

$$v_p = -780 \text{ MeV fm}^3$$

対相関が強いほど、中性子ドリップ線を越えても密度の局在が保たれる区間は長くなる。 \Rightarrow 局在の原因は対相関



- global minimum
- local minimum
- localized state
- states with dilute gas of dripped neutrons



中性子数の増加に伴う中性子の正準基底の変化

各点は正準座標を表す

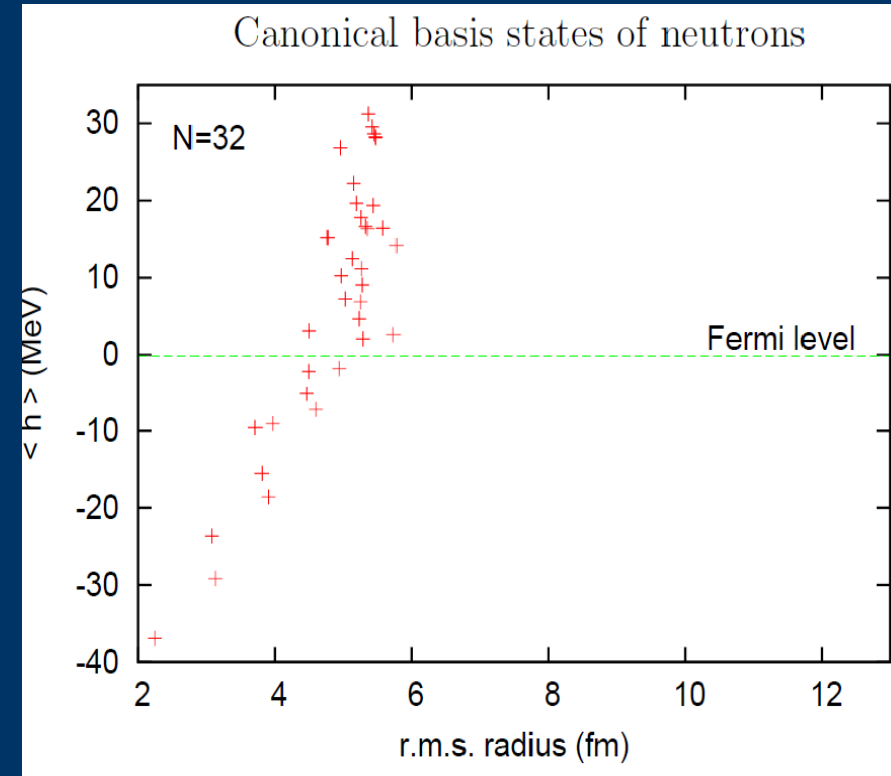
横軸の座標: 平均二乗半径 (fm)

縦軸の座標: Hartree-Fock
Hamiltonian の期待値 (MeV)

水平線はフェルミ エネルギー を表す

N=32は滴下線上の核。

⇒ 全基底が局在。



N=1 → 50 自動 ・ 手動



job8_fig1.plt



job8_fig2.plt

結果のまとめ

正準基底(Skyrme-)HFB法とは:

座標空間表現(任意の変形・任意の表面の状況の記述ができる)
で連続状態を含む対相関が扱える方法

$N \neq Z$ 状態が扱えるよう正準基底HFB法のプログラムを改造

⇒ $Z=14$ 同位体鎖の解をドリップ線まで
何らの困難なく求めることができた。

対相関が強い場合、

ドリップ線を越えてもしばらくは局在した解を得ることができる。

(一方、準粒子法では非局在化した最低エネルギー状態にジャンプしてしまう。)

⇒ わずかに束縛し損ねた核子系の近似的解として
利用できるだろう。

今後の展望

スピン軌道力、クーロン力の部分を早期に完成させたい(研究時間を確保して)

(近況報告)Fortran 77の標準規格からの逸脱を認めることにした。
移植性は損なわれたが、プログラミングが楽で効率的で楽しくなった。

CPUの dual/many core 化を利用できる並列化プログラムに改造していく

現在 dual CPU : proton, neutron → quad core なら $\sigma_x = \pm 1$ 等でさらにわけると
現在 fifo (socket, like MPI) → shared memory に変えたい

複数の CPU を使用する大規模並列計算なら何ができるか

Woods Saxon Strutinsky法なら

核図表1面をPC1台で数時間で計算できる【計算例】



NZ_beta2_color.plt

28aWF-6 高原哲士, 田嶋直樹, 清水良文

核変形におけるprolate優勢の起源 --Woods-Saxonポテンシャルでの解析--

連続状態の取り扱いに改善の余地 / 平均場のパラメータ化の任意性

正準基底 Skyrme HFB法で取って代わるには、まだ計算規模が過大