

有限振幅法を用いた 原子核密度汎関数理論による 二重ベータ崩壊行列要素計算

日野原 伸生

筑波大学計算科学研究センター

A01逆階層領域でのニュートリノのマヨラナ性の研究 公募研究



筑波大学

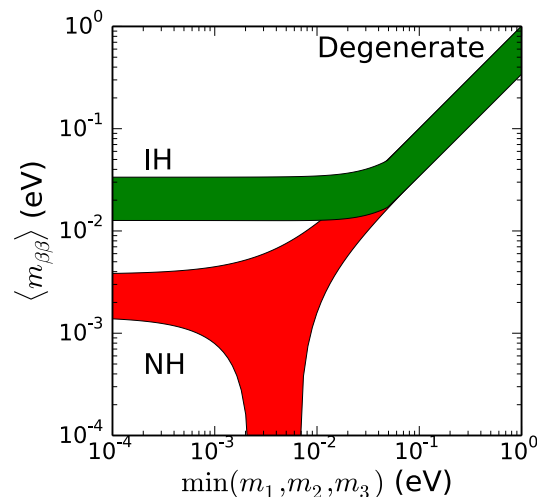
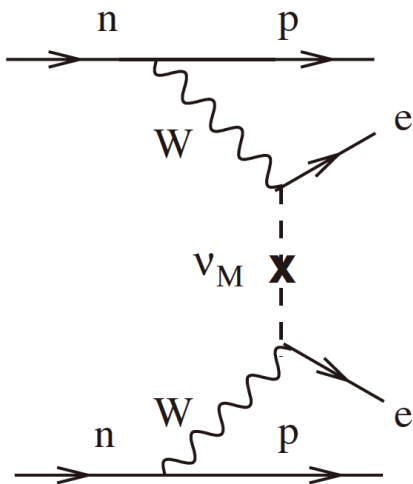
計算科学研究センター
Center for Computational Sciences

Jun 3, 2020

新学術領域「地下から解き明かす宇宙の歴史と物質の進化」
2020年オンライン領域研究会

二重ベータ崩壊と原子核行列要素

ニュートリノを放出しない二重ベータ崩壊($0\nu\beta\beta$)



二重ベータ崩壊の半減期
(実験で測定)

原子核行列要素

$$(T_{1/2}^{0\nu})^{-1} = G_{0\nu}(Q_{\beta\beta}, Z) |M_{0\nu}|^2 \langle m_{\beta\beta} \rangle^2$$

位相空間因子

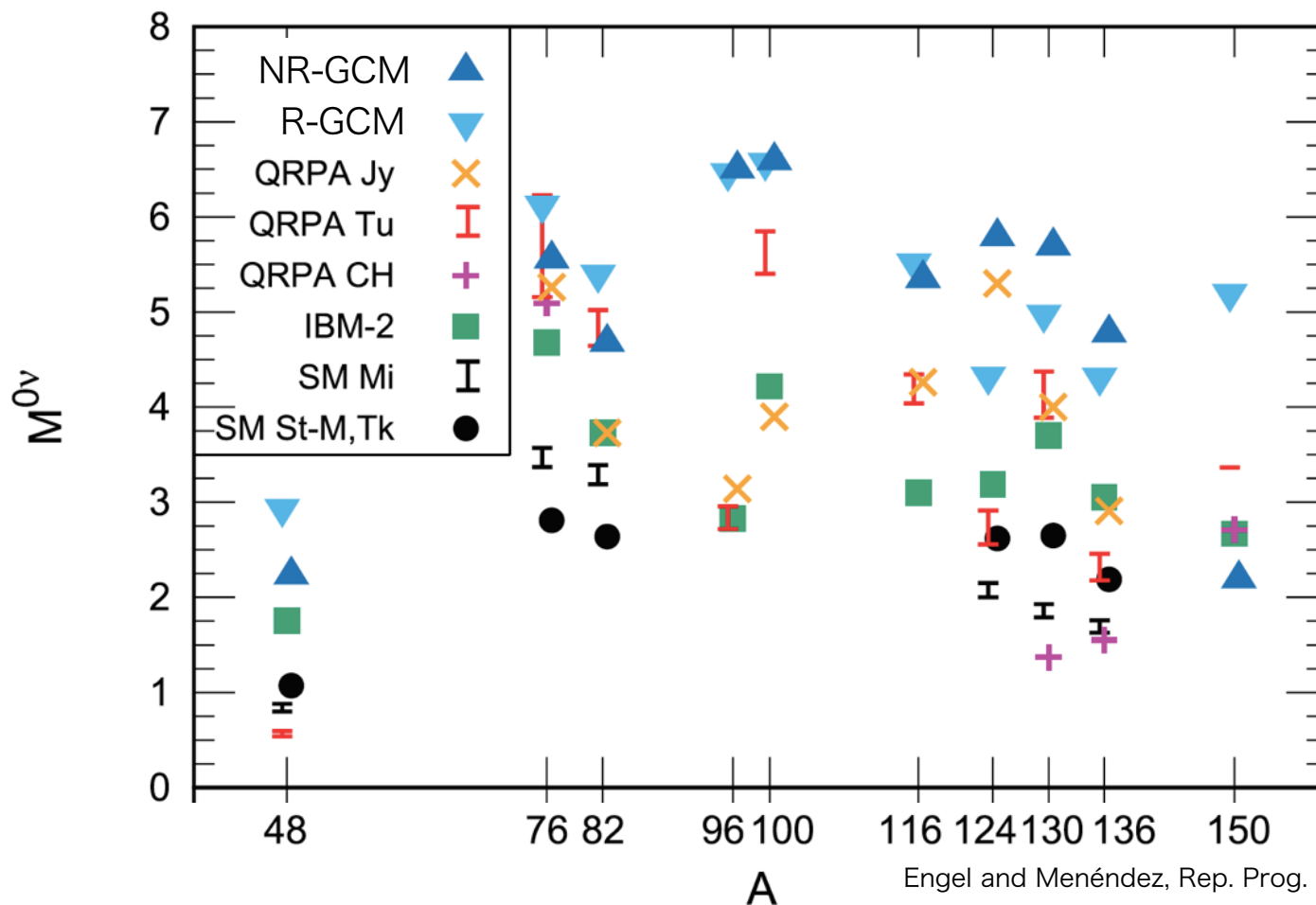
ニュートリノの有効質量

ニュートリノレス二重ベータ崩壊の半減期から
マヨラナニュートリノの質量を導くには原子核行列要素の精密な値が必要

原子核行列要素の理論計算の現状

$$(T_{1/2}^{0\nu})^{-1} = G_{0\nu}(Q_{\beta\beta}, Z) |M_{0\nu}|^2 \langle m_{\beta\beta} \rangle^2$$

NR/R GCM: 生成座標法
 QRPA: 準粒子乱雑位相近似
 IBM2: 相互作用するボソン模型
 SM: 殻模型



Engel and Menéndez, Rep. Prog. Phys. **80**, 046301 (2017)

研究グループ、理論によって値がバラバラ(2~3倍のずれ)
 半減期からニュートリノの有効質量を評価するのに問題

原子核行列要素の値が異なる理由

研究グループによって行列要素の値が異なる理由は？

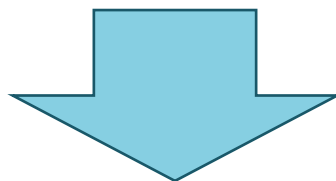
- 二重ベータ崩壊演算子の違い
- 量子多体理論(理論模型)よる違い
- 一粒子模型空間の違い
- 核子間相互作用の違い

アイソスカラー型対相関の扱いが異なる

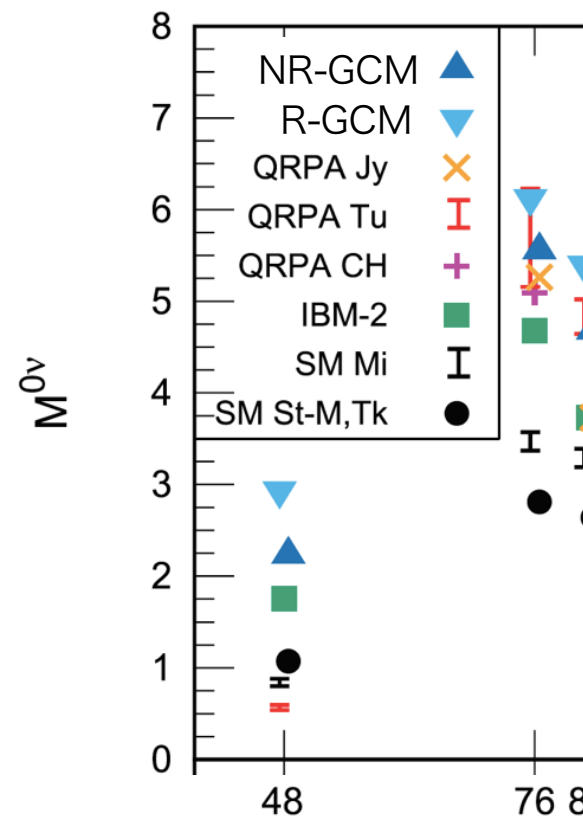
- GCM計算には入っていない
- QRPA・SM計算には入っている

アイソスカラー型対相関をGCM計算に導入

- 同一のハミルトニアン(相互作用)を使った計算ではGCMとQRPA・SMは近い行列要素の値を出す



(核子間有効相互作用)アイソスカラー型中性子-陽子対相関に関する不定性が大きい
アイソスカラー型対相関の結合定数を他の実験データから決定したい



中性子-陽子対相関

対相関

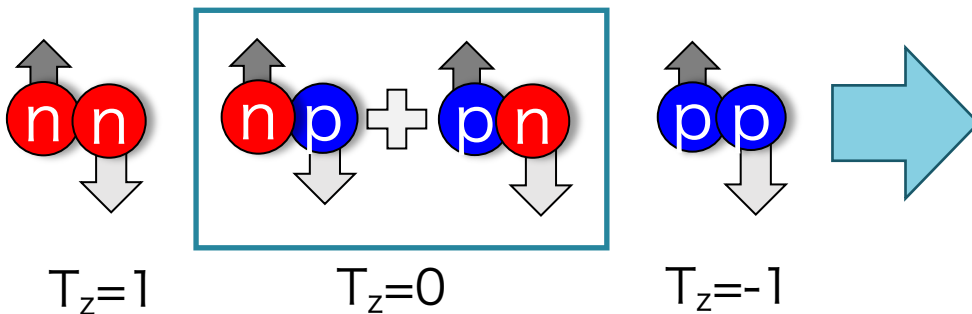
電子系の超伝導：電子が時間反転軌道の電子とクーパー対を形成して凝縮

核子対相関

核内核子がクーパー対を形成して凝縮し超伝導状態になる

核子：スピン $S=1/2$ 、アイソスピン $T=1/2$ (中性子 $T_z=1/2$ 、陽子 $T_z=-1/2$)

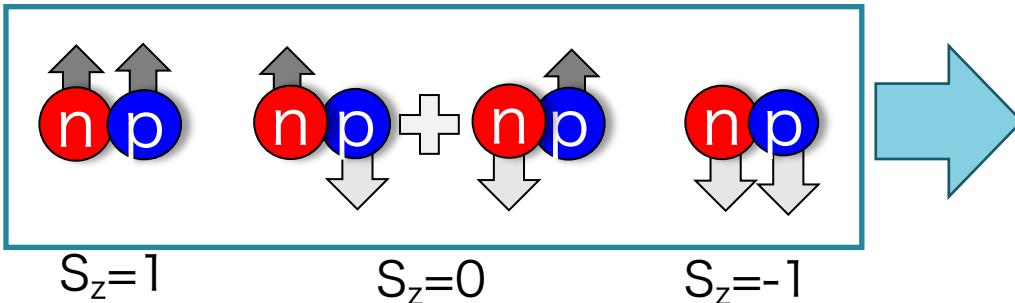
アイソベクトル型($T=1, S=0$)



同種粒子対凝縮($T_z=1, -1$)
は基底状態で実現している

SU(2)アイソスピン対称性より
対相関の結合定数は3つともほぼ同じ

アイソスカラー型($T=0, S=1$)



結合定数は不明

対凝縮が起きるかも不明
(起きるとすると $N \sim Z$ の陽子過剰核)

アイソスカラー型対相関の結合定数をどう決めるか

基底状態

アイソスカラー対凝縮が起きているか不明なので
基底状態からは決められない

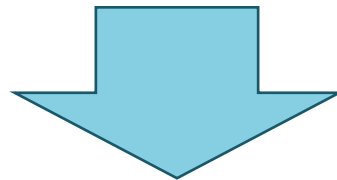
励起状態・遷移(ベータ崩壊)

ベータ崩壊のGamow-Tellerの崩壊レートと強く相関

ニュートリノを2つ放出する二重ベータ崩壊($2\nu\beta\beta$)

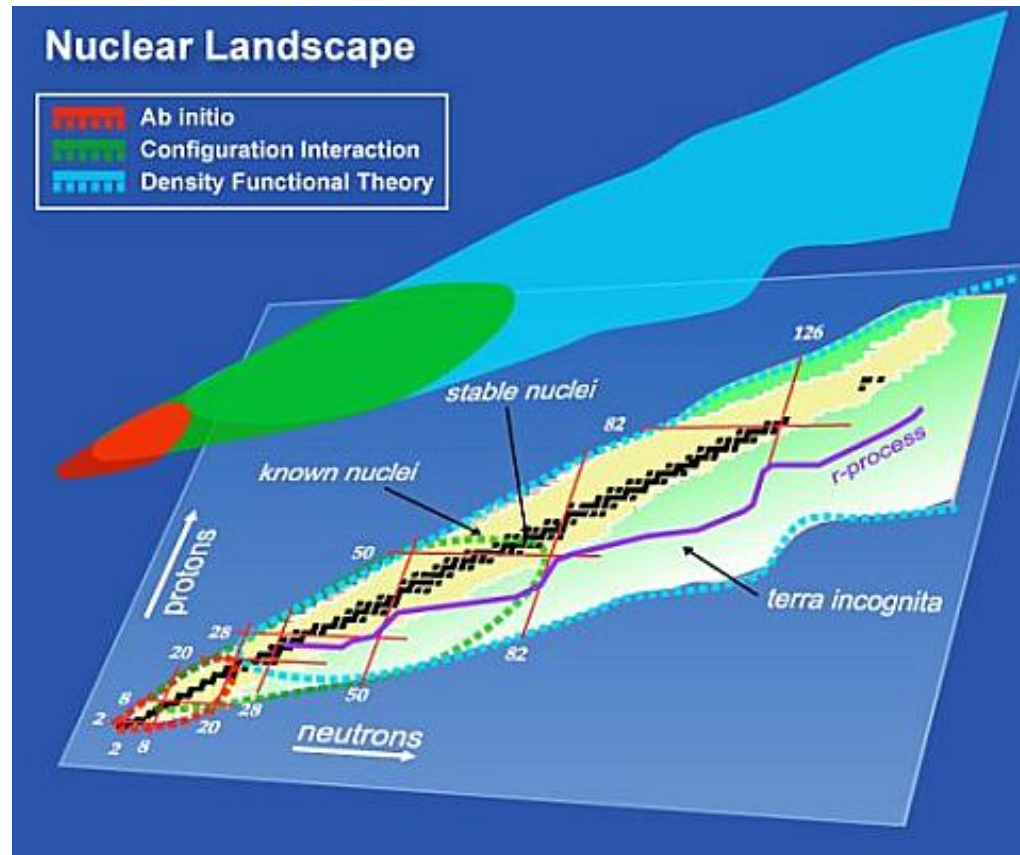
QRPA計算で強く相関することが示されている

Vogel and Zirnbauer, Phys. Rev. Lett. **57**, 3148 (1986)



β 崩壊・ $2\nu\beta\beta$ の実験データを再現するように
アイソスカラー型対相関を決めたい

原子核密度汎関数法



密度汎関数法

- 物性物理・量子化学で広く使われる
- エネルギー密度汎関数 $E[\rho]$ を最小化→基底状態のエネルギーと密度
- 密度汎関数 $E[\rho]$ は実験データを再現するように現象論的に決める
- 原理的には全原子核領域を一つの密度汎関数で記述できる

QRPA(準粒子乱雑位相近似)

原子核密度汎関数理論の時間依存版への拡張→励起状態、遷移などが記述可

QRPA(quasiparticle random-phase approximation)

β 崩壊先の核(中間状態核)を始状態あるいは終状態からの二準粒子フォノン励起で記述

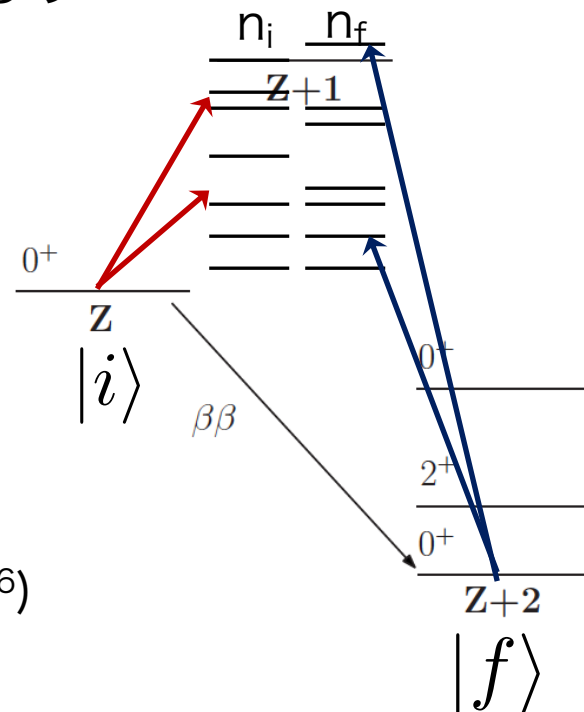
$$\hat{O}_n^\dagger = \sum_{\mu\nu} X_{\mu\nu}^n a_\mu^{n\dagger} a_\nu^{p\dagger} - Y_{\mu\nu}^n a_\nu^p a_\mu^n$$

$$|n_i\rangle = \hat{O}_{n_i}^\dagger |i\rangle$$

$$|n_f\rangle = \hat{O}_{n_f}^\dagger |f\rangle$$

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^n \\ Y^n \end{pmatrix} = \Omega_n \begin{pmatrix} X^n \\ -Y^n \end{pmatrix}$$

フォノン演算子は行列対角化で求める(次元 $\sim 10^6$)



QRPAによる $2\nu\beta\beta$ 二重ベータ崩壊行列要素計算

$$M_{GT}^{2\nu} = \sum_{n_i, n_f} \frac{\langle f | \sum_a \sigma_a \tau_a^- | n_f \rangle \langle n_f | n_i \rangle \langle n_i | \sum_b \sigma_b \tau_b^- | i \rangle}{E_{n_i, n_f} - \frac{M_i + M_f}{2}}$$

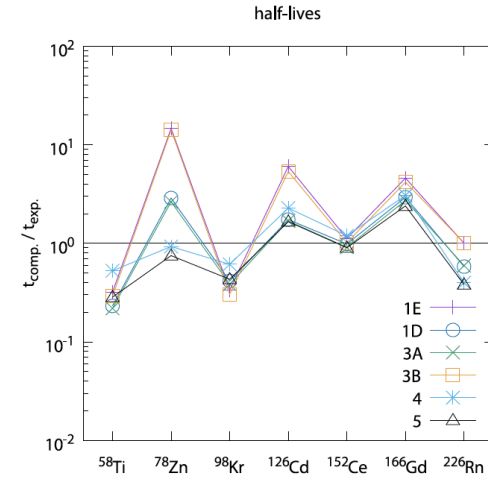
QRPAを用いたアイソスカラー対相関の決定(先行研究)

ベータ崩壊、ガモフ・テラー、スピン双極子巨大共鳴を大局的にフィットした汎関数

アイソスカラー対相関・time-oddアイソベクトル汎関数をまとめて決定

→二重ベータ崩壊計算には使われていない

Mustonen and Engel, Phys. Rev. C **93**, 014304 (2016)

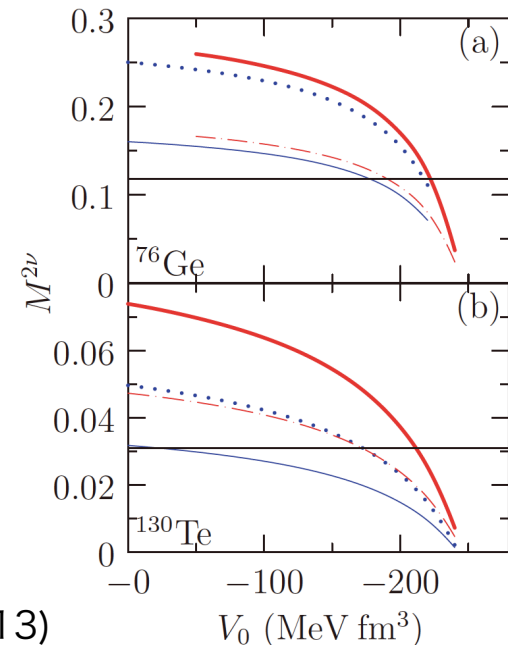


$2\nu\beta\beta$ の半減期を再現するアイソスカラー対相関

二重ベータ崩壊核ごとにアイソスカラー対相関を決定
大規模計算のため ^{76}Ge , ^{130}Te , ^{136}Xe , ^{150}Nd のみ

→ $0\nu\beta\beta$ のみ計算

Mustonen and Engel, Phys. Rev. C **87**, 064302 (2013)



有限振幅法(FAM)

QRPA : 大次元行列対角化問題(次元 $\sim 10^6$)

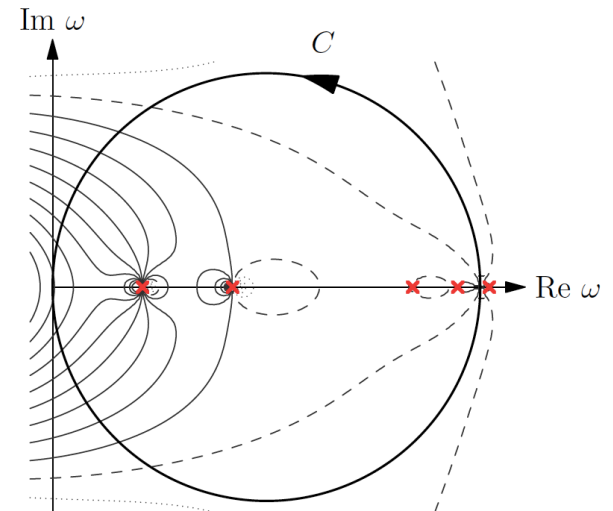
- 大規模数値計算
- 実際の計算では二準粒子模型空間のサイズに制限
- ($10^6 \rightarrow$ 近似で30,000次元程度まで落とす)

FAM : 外場(ガモフ・テラー演算子)による線形応答計算

- FAM(finite-amplitude method): QRPAと形式的に同一の理論
- 二準粒子のベクトル(次元 $\sim 10^6$)を反復法で求める(行列の計算なし)
- 応答関数から遷移強度を計算

FAMの β 崩壊への定式化

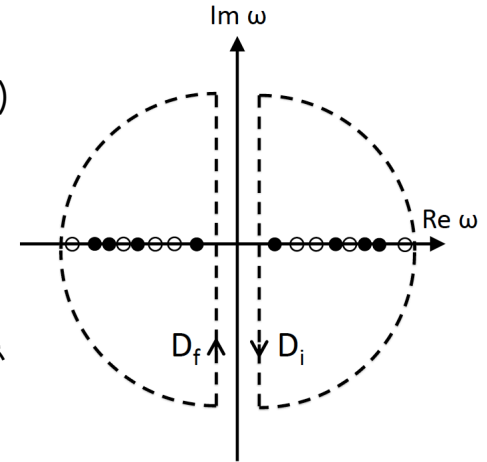
- 複素振動数の外場
- 複素積分で興味のある β 崩壊(極)からのみの寄与を拾う



FAMによる二重ベータ崩壊原子核行列要素計算

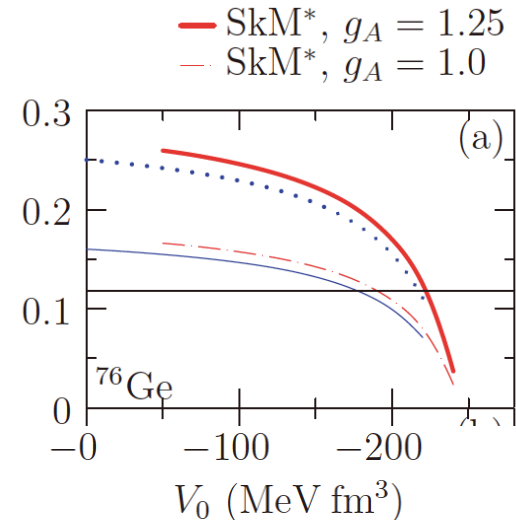
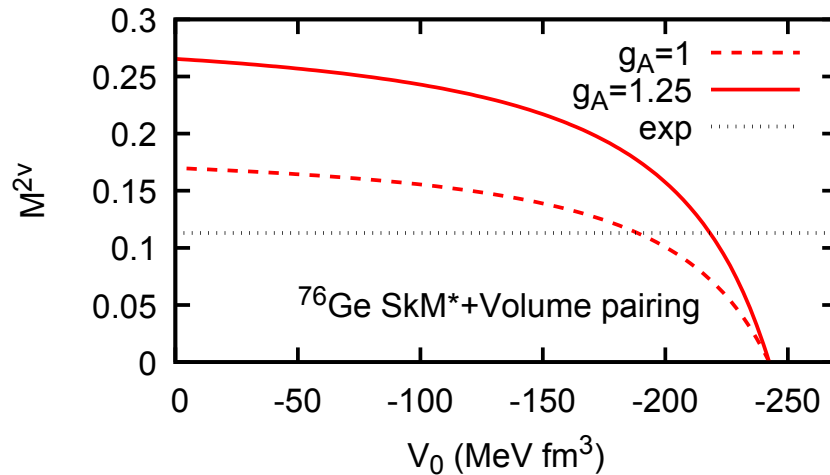
二重複素積分の手法 NH, AIP Conf. Proc. 2165, 020010 (2019)

- 正の実軸上の極：崩壊始状態からみた中間状態
- 負の実軸上の極：崩壊終状態からみた中間状態



始状態・終状態からの線形応答計算を組み合わせることで $2\nu\beta\beta$ の行列要素を二重複素積分で計算

先行研究とのベンチマーク



先行研究：2次元座標空間HFB + QRPA (~30000次元行列対角化)
FAM: 調和振動子20主量子数基底+FAM (積分経路は100点で離散化)

2020年度計画：2v $\beta\beta$ の計算、結合定数決定

2v $\beta\beta$ 計算コード開発

- FAMコードのMPI並列化(完了)→20調和振動子基底広い模型空間での計算
 - FAM計算(被積分関数計算) (Oakforest PACS)
1ノード26並列で積分経路上のFAM計算(100点)は1時間程度
中間状態の波動関数はGamow-Teller外場の場合で2.4GB
 - 二重積分計算時間 ~1時間(並列なし)
- 行列対角化による先行研究の計算とのベンチマーク(進行中)
- β 崩壊に大域的に合わせた汎関数(先行研究)を使った2v $\beta\beta$ 崩壊半減期の計算
- 2v $\beta\beta$ 崩壊全核種での計算

アイソスカラー対相関の結合定数決定

- 標準的な原子核密度汎関数汎関数SLy4やSkM*, UNEDFなどでアイソスカラー対相関の結合定数を決定

2021年度計画：0νββの計算

2νββと0νββの違い

$$\hat{M}_{\text{GT}}^{2\nu} \sim \sum_a \sigma_a \tau_a^- \cdot \sum_b \sigma_b \tau_b^-$$

演算子が分離型(スピンの3つの和を除く)
始状態・終状態での外場に分割できる

$$\hat{M}_{\text{GT}}^{0\nu} \sim \int dq \sum_{ab} V(q) j_0(qr_{ab}) \sigma_a \cdot \sigma_b \tau_a^- \tau_b^-$$

演算子が分離できない構造
(ニュートリノのプロパゲータのため)
ニュートリノの運動量に関する積分も存在

$$j_0(qr_{ab}) = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} j_l(qr_a) j_l(qr_b) \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\hat{r}_a) Y_{lm}(\hat{r}_b)$$

を使えばニュートリノの運動量、l,m, スピンの方向それぞれについては分離型



難しそうなら行列対角化を行う

アイソスカラー対相関の拡張

これまでの議論ではアイソスカラー型対相関はone parameter
 g_{pp} = アイソスカラー型対相関の強さ / アイソベクトル型対相関の強さ

運動量の2次(空間微分2回)まで含めた局所密度のアイソスカラー対相関の一般形

$$\begin{aligned} \check{\chi}_0(\mathbf{r}) = & \check{C}_0^s [\rho_0] |\check{\mathbf{s}}_0|^2 + \check{C}_0^{\Delta s} \text{Re}(\check{\mathbf{s}}_0^* \cdot \Delta \check{\mathbf{s}}_0) + \check{C}_0^T \text{Re}(\check{\mathbf{s}}_0^* \cdot \check{\mathbf{T}}_0) + \check{C}_0^j |\check{\mathbf{j}}_0|^2 \\ & + \check{C}_0^{\nabla j} \text{Re}[\check{\mathbf{s}}_0^* \cdot (\nabla \times \check{\mathbf{j}}_0)] + \check{C}_0^{\nabla s} |\nabla \cdot \check{\mathbf{s}}_0|^2 + \check{C}_0^F \text{Re}(\check{\mathbf{s}}_0^* \cdot \check{\mathbf{F}}_0) \end{aligned}$$

6つの結合定数(局所ゲージ対称性を使えば独立なものは4つ)
β崩壊、2νββ崩壊などで大域的に決定できないか？

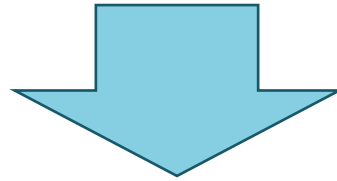
まとめ

- $0\nu\beta\beta$ 崩壊の原子核行列要素は研究グループによってばらつき
- 中性子-陽子対相関の扱い、結合定数の違いが不定性の大きな原因

中性子-陽子対相関の結合定数を β 崩壊、 $2\nu\beta\beta$ 崩壊から決定

多体理論：原子核密度汎関数法によるQRPA(準粒子乱雑位相近似)計算

従来手法：大次元行列対角化



有限振幅法(反復法)による効率的な解法→結合定数決定へ