2vββ崩壊原子核行列要素の 原子核密度汎関数理論による計算

日野原 伸生

筑波大学計算科学研究センター



May 21, 2021

新学術「地下宇宙」2021年領域研究会

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(0νββ)



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



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

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



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

核子間相互作用(アイソスカラー型対相関)依存性

□ GCM計算には入っていない。QRPA・SM計算には入っている
□ 相互作用強度は原子核基底状態からは決められず不定性が大きい

0vββ行列要素のアイソスカラー型対相関依存性(QRPA計算)



Kortelainen and Suhonen, Phys. Rev. C 75, 051503 (2007)



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

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 <mark>核子対相関</mark>

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)



同種粒子対凝縮(Tz=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

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〜Zの陽子過剰核)



基底状態 アイソスカラー対凝縮(重陽子凝縮)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(β崩壊・2νββ崩壊)

QRPA計算でアイソスカラー型対相関と強く関係することが示されている β崩壊・2vββ両方に合わせて結合定数を計算した先行研究はない

原子核密度汎関数理論による先行研究

β崩壊半減期に大局的にフィット 0vββは計算していない



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

2vββ半減期に原子核ごとにフィット 0vββを計算



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

QRPAを使ってβ・2vββ崩壊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て0vββの行列要素を計算したい





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[ρ]を最小化
→基底状態のエネルギーと密度
□ 密度汎関数E[ρ]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を一つの密度汎関数で 記述できる

準粒子乱雜位相近似(QRPA,quasiparticle random-phase approximation)

- □ 励起状態を計算する手法(時間依存密度汎関数理論)
- G 低励起振動状態・巨大共鳴・β崩壊・ββ崩壊

□原子核行列要素計算でのQRPAの利点

- □ 全原子核の計算が可能(N,Zを変えるだけ)
- □ 同じ理論でβ崩壊・2vββ崩壊の半減期も計算可能

QRPAによる2vββ行列要素

$$M_{\rm GT}^{2\nu} = \sum_{n} \frac{\langle f | \sum_{a} \boldsymbol{\sigma}_{a} \tau_{a}^{-} | n \rangle \langle n | \sum_{b} \boldsymbol{\sigma}_{b} \tau_{b}^{-} | i \rangle}{E_{n} - \frac{M_{i} + M_{f}}{2}}$$

στ-: スピン1, アイソスピン1のガモフテラー演算子
μi> 崩壊始状態原子核 |n> 中間状態核 |f> 崩壊終状態原子核
En: 中間状態核のエネルギー Mi,f: 始状態、終状態のエネルギー

QRPAでの評価

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(中性子-陽子)フォノン励起で記述 $\hat{O}_n^{\dagger} = \sum X_{\mu\nu}^n a_{\mu}^{n\dagger} a_{\nu}^{p\dagger} - Y_{\mu\nu}^n a_{\nu}^p a_{\mu}^n$ 0^{+} \mathbf{Z} $|n_i\rangle = \hat{O}_{n_i}^{\dagger} |i\rangle \quad |n_f\rangle = \hat{O}_{n_f}^{\dagger} |f\rangle$ iBB フォノン演算子は行列対角化で求める(次元~10⁶) $\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^n \\ Y^n \end{pmatrix} = \Omega_n \begin{pmatrix} X^n \\ -Y^n \end{pmatrix}$ 0^{+} Z+2 $M_{\rm GT}^{2\nu} = \sum_{n+n_f} \frac{\langle f|\sum_a \boldsymbol{\sigma}_a \tau_a^-|n_f\rangle \langle n_f|n_i\rangle \langle n_i|\sum_b \boldsymbol{\sigma}_b \tau_b^-|i\rangle}{\frac{\Omega_{n_i} + \Omega_{n_f}}{2} - \frac{M_i + M_f}{2}}$ n_i, n_f 中間状態の重なり積分 $\langle n_f | n_i \rangle = \sum [X_{\mu\nu}^{f*} X_{\mu'\nu'}^i - Y_{\mu\nu}^{f*} Y_{\mu'\nu'}^i] \mathcal{O}_{\mu'\mu}^{(p)} \mathcal{O}_{\nu'\nu}^{(n)}$ $\mu\nu\mu'\nu$

有限振幅法(FAM)

QRPA:大次元行列対角化問題(次元~10⁶)

- □ 大規模数値計算(相互作用を変えるごとに対角化が必要)
- □ 実際の計算では近似で次元を30,000次元程度にまで落とす
- □ 固有値・固有ベクトル(中間状態の情報)をすべて使って原子核行列要素を計算

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と形式的に同じ理論
- □ 外場に対する二準粒子振幅(次元~10⁶)を線形方程式を反復法で解いて求める (行列要素の計算なし)
- □ 固有値・固有ベクトルからなる二準粒子振幅のみを効率的に計算
- □ 巨大共鳴などに応用(強度関数は二準粒子振幅で書ける)

$$X_{\mu\nu}^{i}(\omega,\sum_{a}\boldsymbol{\sigma}_{a}\boldsymbol{\tau}_{a}^{-}) = -\sum_{n} \left\{ \frac{X_{\mu\nu}^{n}\langle n|\sum_{a}\boldsymbol{\sigma}_{a}\boldsymbol{\tau}_{a}^{-}|i\rangle}{\Omega_{n}-\omega} + \frac{Y_{\mu\nu}^{n*}\langle i|\sum_{a}\boldsymbol{\sigma}_{a}\boldsymbol{\tau}_{a}^{-}|n\rangle}{\Omega_{n}+\omega} \right\}$$
$$Y_{\mu\nu}^{i}(\omega,\sum_{a}\boldsymbol{\sigma}_{a}\boldsymbol{\tau}_{a}^{-}) = -\sum_{n} \left\{ \frac{Y_{\mu\nu}^{n}\langle n|\sum_{a}\boldsymbol{\sigma}_{a}\boldsymbol{\tau}_{a}^{-}|i\rangle}{\Omega_{n}-\omega} + \frac{X_{\mu\nu}^{n*}\langle i|\sum_{a}\boldsymbol{\sigma}_{a}\boldsymbol{\tau}_{a}^{-}|n\rangle}{\Omega_{n}+\omega} \right\}$$

二準粒子振幅は中間状態のエネルギー(±Ω_n)で1位の極を持つ → 組み合わせた量をω(外場のエネルギー)で複素積分すれば 個々の固有値・固有ベクトルを計算せずに原子核行列要素が計算できる FAMによる二重ベータ崩壊原子核行列要素計算

NH, AIP Conf. Proc. 2165, 020010 (2019)



$$M_{\rm GT}^{2\nu} = \sum_{n_i,n_f} \frac{\langle f | \sum_a \boldsymbol{\sigma}_a \tau_a | n_f \rangle \langle n_f | n_i \rangle \langle n_i | \sum_b \boldsymbol{\sigma}_b \tau_b | i \rangle}{\frac{\Omega_{n_i} + \Omega_{n_f}}{2} - \frac{M_i + M_f}{2}}$$
$$= \left(\frac{1}{2\pi i}\right)^2 \oint_{O_i} d\omega_i \oint_{O_f} d\omega_f \sum_{\mu\nu\mu'\nu'} \frac{2 \left[Y_{\mu'\nu'}^f(\omega_f, \boldsymbol{\sigma}\tau^-) X_{\mu\nu}^i(\omega_i, \boldsymbol{\sigma}\tau^-) - X_{\mu\nu}^f(\omega_f, \boldsymbol{\sigma}\tau^-) Y_{\mu'\nu'}^i(\omega_i, \boldsymbol{\sigma}\tau^-)\right] \mathcal{O}_{\mu\mu'}^{(p)} \mathcal{O}_{\nu\nu'}^{(n)}}{\omega_i - \omega_f}$$

始状態・終状態からのFAMの二準粒子振幅を組み合わせることで 2vββの行列要素を二重複素積分で計算 (対角化なし、もとの自由度を近似なしで計算)

積分経路(DからO)と離散化の方法(原点付近で多めに取る)の改良

和則のチェック

Re ω

和則 遷移強度をすべての中間状態に対して足し上げたものの値は既知

$$\sum_{n>0} |\langle n| \sum_{a} \tau_{a}^{-} |i\rangle|^{2} - |\langle n| \sum_{a} \tau_{a}^{+} |i\rangle|^{2} = N - Z,$$

$$\sum_{K=-1}^{1} \sum_{n>0} |\langle n| \sum_{a} \sigma_{a}^{K} \tau_{a}^{-} |i\rangle|^{2} - |\langle n| \sum_{a} \sigma_{a}^{K} \tau_{a}^{+} |i\rangle|^{2} = 3(N - Z)$$

和則の二重複素積分による評価



2vββに用いるのものと同じ二重複素積分で和則を計算

-Teller Gamow-Teller $/3(N-Z)$
84 0.9996
92 0.9997
70 0.9996
73 0.9996
94 0.9999
87 0.9998
78 0.9998
84 0.9998

中間状態の重なり積分(<nf|ni>、和則では単位行列)以外の部分のチェック

先行研究との2vββ行列要素の比較

Re ω



同じ密度汎関数 (SkM* + volume pairing) 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(260,000次元、近似なし) (0.5-120MeVの極の足し上げ, 202点でOi, Ofを離散化)



先行研究よりも少し大きめの行列要素(<2倍) 計算時間:X,Y振幅の計算 Oakforest-PACSで3時間弱(2ノード・25並列/ノード) 二重複素積分:15分程度

まとめと今後の計画

まとめ

Ονββ崩壊原子核行列要素値の不定性を減らすため アイソスカラー型対相関の強度を既知のβ・2νββ崩壊の半減期で決定したい

□ コード実装(並列化)、先行研究との比較を完了

今後の計画

□ 2vββ崩壊全核種での計算

□ β崩壊に大域的にフィットした汎関数(先行研究)で2vββ崩壊半減期の計算

□ 標準的な汎関数でアイソスカラー対相関の結合定数を決定

□ アイソスカラー対相関の拡張(1パラメータから複数へ)、パラメータ最適化

□ 0vββ崩壊行列要素への拡張