

座標表示 HFB 法による中性子過剰核の対相関

田嶋 直樹 (福井大学・工学部)

1. 序

中性子滴下線近傍の原子核では、中性子の対相関により、基底状態波動関数への連続状態成分の混入が増え、その効果は核の諸性質に大きな影響を与えるだろうと予想されている。

これらの核を対相関を含む平均場法である Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) 法で扱うには、これらの核に特有な広くひろがった密度分布に配慮しなければならない。このため、調和振動子などの基底で張られた配位空間での対角化による解法は、簡便なようだが、実は非能率的であり、正方メッシュ点上の値で波動関数を表現するなどの座標空間での解法 [1] が適していると思われる。

しかし、波動関数を座標空間で表現すると、連続スペクトル中の一体状態は核のまわりに局在せず規格化箱全体に広がって膨大な状態密度を持つことになる。このことは、局在した状態のみを対象としてきたこれまでの平均場の解法には大きな困難となる [2, 3]。

私は HFB 正準基底による HFB の解法がこの困難を解消する切札であると考え、これまでも研究会等でその詳細を報告してきたが [3, 4, 5]、本講演では、私の研究の最近の進展から特にカットオフに関する件と、この手法で実際の中性子過剰核の性質が問題なく計算されることに絞って報告を行なった。本報告書に載録するのは、その講演内容のうち、カットオフの必要性および (他所にはあまり書いていない) 相互作用への状態依存因子の導入によるカットオフの導入方法の得失についての説明である。実際に計算が問題なく行なえることの検証結果は執筆中の論文 [6] に載録することにしたい。

なお連続状態の対相関への寄与は核子滴下線近傍という限定された核の記述にのみ必要なのではない。存在可能とされる 10^4 もの核種の約半数では、中性子のフェルミ準位から連続スペクトルの始まるエネルギー準位 ($=0$) までの間隔が主殻の間隔 ($\hbar\omega = 41A^{-1/3}\text{MeV}$) の半分以下しかない。殻補正法では、殻効果を定量的に取り入れるには一主殻以上の配位空間が必要であると言われる。対相関の計算は一主殻より小さい空間でされることが多いが、それでも主殻の半分は必要というのが経験の教えるところである。したがって、全原子核の半数について、対相関を精度良く扱おうとすると連続状態を取り入れる必要があることになる。

2. HFB の正準基底表現による解法

座標空間での HFB の解法は文献 [7] にさかのぼる。そこでは準粒子状態の座標空間での波動関数を用いて HFB 解を表した：

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

$$b_i = \sum_s \int d\vec{r} \left\{ \phi_i^*(\vec{r}, s) a_s(\vec{r}) + \psi_i(\vec{r}, s) a_s^\dagger(\vec{r}) \right\} \quad : \text{準粒子状態.} \quad (2)$$

この方法は Skyrme 型の相互作用¹ を用いて球形核への適用されたが、その変形核への適用は準粒子状態数の膨大さのために難しい。一方、Bloch-Messiah 定理により上記の解は BCS 変分関数の形にも表すことができる：

$$|\psi\rangle = \prod_{i=1}^K \left(u_i + v_i a_i^\dagger a_i^\dagger \right) |0\rangle, \quad K = (\#\text{basis})/2, \quad (3)$$

$$a_i^\dagger = \sum_s \int d\vec{r} \psi_i(\vec{r}, s) a_s^\dagger(\vec{r}) \quad : \text{HFB 正準基底}. \quad (4)$$

偶々核の基底状態では時間反転対称性のため ψ_i は ψ_i を時間反転操作したものになる。この表現による解法は文献 [9] で導入され球形核に適用された。私はこれを変形核に適用した [3, 4, 5]。私の手法の特徴を下記に箇条書きする。

- i) 「変形」と「連続状態の対相関」とを共に扱える新しい手法である。
- ii) 調和振動子などの基底関数による展開によらず 3 次元正方メッシュによって波動関数を表すので変形やハロー発生に合わせた基底の最適化という微妙な調整操作が不要である。
- iii) 必要な一体波動関数の数は、準粒子による表現では規格化箱の体積に比例するのに対し、正準基底による解の表現では核の体積に比例するので計算量が数十分の一に軽減できる。
- iv) 波動関数のスケーリングによる最急降下法の加速と、それに適応した直交性拘束条件のためのラグランジュ乗数の汎関数形を見出した。
- v) 到達距離が零の力を用いる場合、正準基底数の制限はカットオフの完全な代用にならないことを見出した。高エネルギーの正準基底状態の波動関数が点状に収縮して対相関エネルギーの発散が起きるのである。最善の回避策として対相関密度依存相互作用の導入を提案した。

上記の v) について次節以降で説明する。

3. HFB 正準基底数の制限はカットオフを代用するか

正準基底による HFB 方程式の解法とは、正準基底 (4) の波動関数 $\{\psi_i\}$ を変分させることで、BCS 型状態 (3) を HFB 解へと収束させようとするアプローチである。

(3) 式の乗積 Π で掛け合わせる項の数 K は、原理的には一粒子波動関数 ψ_i を定義する空間の次元の半分となるが、実際の計算では、それより遥かに小さい数 (例えば粒子数と同数) に設定できるはずであり、そう設定できることがこの解法の最大の利点である [3]。

さて、到達距離が零である相互作用を用いるときには対相関にカットオフを導入する必要がある [10]。しかし、もし、正準基底の数を有限個に制限すれば、カットオフがなくても対相関は発散せず物理的に意味のある基底状態が得られるのではないか、という期待も湧くであろう。しかし (3) 式の変分関数でのハミルトニアン²の期待値を最急降下法で極小化するコンピュータプログラムを実際に作製し多種多様な場合に適用した結果対相関ギャップが異常に大きくなるケースが散見されたのである。即ち長ステップにわたって最急降下法²による発展を続ける

¹ 相互作用の到達距離が零であるため平均場が局所的になることが座標表示解を求めるのに決定的な利点となる。もし到達距離が有限ならば交換項が非局所的なポテンシャルを作り、その結果、考慮する一粒子軌道の対の数だけの交換ポテンシャルが必要になる。これはごく軽い核以外では実質的に実行不可能な計算量を要求する。[8]

² 最急降下²の方向は、変分空間が同じでも、それを定義するパラメータの設定のしかたに依存して変わるが、設定方法を変えても、同様の現象が起きる。

と、収束したように見えたエネルギーなどの量に急にジャンプがおきることがある。その原因を調べてみると、高いエネルギー期待値を持った HFB 正準軌道の波動関数が、あるとき急激に点状³ に縮小する現象のためだと分った。

このような収縮が起きる理由は単純である。ハミルトニアン密度は、運動エネルギー密度 τ 、密度 ρ 、対密度 $\tilde{\rho}$ などを用いて書けるが、 i 番目の正準基底軌道の占拠振幅 v_i 、 u_i に対するそれぞれの密度の依存性は、

$$\tau, \rho \propto v_i^2, \quad \tilde{\rho} \propto u_i v_i, \quad (5)$$

である。高いエネルギーの状態については、 $v_i \ll 1, u_i \doteq 1$ であるから $u_i v_i \gg v_i^2$ が成り立つ。点状収縮による運動エネルギーの損失は v_i^2 に比例し、 $u_i v_i$ に比例する対相関エネルギーでの利得より遥かに小さいので、点状収縮が起き得るのである。

一部ではあっても一粒子波動関数が点状に収縮しているような解は物理的に無意味である。ただし、ほとんどの場合、点状収縮の前に、ほぼ安定な解が得られている⁴ ので、そのような準安定状態が得られた場合には、それで解を代用すればよいという考え方もあるであろう。しかし、この平均場模型の解法が広く利用されるような信頼性のあるものになるためには、解を求めることに頻繁に失敗するようなものでは不十分で、確実に物理的に意味のある解が求まるようにしておかねばならないと思う。そこで、カットオフをうまく導入して、多くの場合に現れる準安定状態に近い真の安定な解を作ることを目標に研究を進めることにした。

そこで、Skyrme 力のように到達距離が零の有効相互作用にどのようにしてカットオフを導入するかについて下記の 3 通りの方法を考えて。

1) 相互作用に波数依存性を状態依存因子で近似して導入する。

2) 相互作用に対密度依存性を導入する。

有効相互作用の密度依存性の考え方を対密度依存性にまで拡張しようとするものである。対相互作用のエネルギー密度を下記のように拡張する。

$$\tilde{\mathcal{H}}_c = \frac{1}{8} v_p \left(1 - \frac{\rho(\vec{r})}{\rho_c} - \left(\frac{\tilde{\rho}(\vec{r})}{\tilde{\rho}_c} \right)^2 \right) \{ \tilde{\rho}(\vec{r}) \}^2 \quad (6)$$

ρ_c は相互作用が quench されてちょうど零になる核子密度を表すパラメータであり、 $\tilde{\rho}_c$ は同様のことを対密度にも拡張したパラメータである。通常の密度依存項では、原子核中の密度とパラメータ ρ_c は同程度の大きさになるが、対密度依存項では、パラメータ $\tilde{\rho}_c$ は原子核中の対密度 $\tilde{\rho}$ より一桁大きい値で十分に点状収縮の阻止⁵ の役割を果たすことができることがわかっている。

3) 運動量依存性によりカットオフをより自然なものに近づける。

Skyrme 相互作用の $\frac{1}{2} t_1 (\vec{k}^2 \delta + \delta \vec{k}^2)$ 項は、高い運動量の状態間の遷移に対して斥力的な寄与を

³ メッシュサイズが有限なので実際には点にはならず、メッシュサイズで収縮は止まる。なお、プログラムではフーリエ基底に基づく微積分の扱いをしているためこのような波動関数も正当に扱われている。なお、多項式近似による微分値を用いると、高波数状態のエネルギーが過小評価されるため点状収縮は助長されるはずである。

⁴ しかし、最急降下法の取り方によって、安定性に大きな変動が見られる。また、準安定状態が得られない場合もあるかもしれない。状況によっては、いくつかの正準基底波動関数が点状に収縮した物理的に無意味な解と有意な状態の間にエネルギー上の障壁があるかもしれない。その場合は、有意な空間のみを考えればよいので、カットオフは不要であろう。しかし、計算結果からわかったように、障壁がない場合が多い。あるいは、全ての場合に障壁がなく、長い最急降下法による発展をさせれば、必ず点状収縮への崩壊が起きている可能性もある。

⁵ この項の作用で点状収縮解はエネルギーがむしろ高くなるので、異常な解への転落を止めるというより異常な解をなくしてしまうと考えたほうがよい。

する。この項と真のカットオフとの併用により相互作用到達距離による自然なカットオフに類似したものを実現できる可能性が期待される [10]。

案 1) で点状収縮問題は解決できたが定式化に不満な点があった。これは他所で詳述していないので次節で説明することにする。。その後 案 2) でほぼ完全に満足の行くカットオフ法を得ることができた。これに関しては文献 [5] に詳述したのでそれを参照されたい。さらにいずれ案 3) も検討する予定である。

4. 相互作用到達距離の有限性を状態依存因子で近似する

Seniority 力の場合、カットオフは下記のように導入すると解法の変更がほとんど不要なので便利である。

$$V_{\text{pair}} = -G \left(\sum_{i>0} a_i^\dagger a_i^\dagger \right) \left(\sum_{j>0} a_j a_j \right) \Rightarrow -G \left(\sum_{i>0} f_i a_i^\dagger a_i^\dagger \right) \left(\sum_{j>0} f_j a_j a_j \right) \quad (7)$$

上式で f_i は i 番目の正準軌道の対相関相互作用の減衰因子であり、(対相関を含まない Hartree-Fock 場だけの) 平均場近似の一粒粒子ハミルトニアンエネルギー準位 ϵ_i の関数として高エネルギーで零になるようにとることが多い⁶。接触力の場合に、これと同様の方法でカットオフを導入することは対密度の定義にカットオフ因子を導入することに他ならない⁷。

$$\tilde{\rho}(\vec{r}) = \sum_{i>0} u_i v_i |\psi_i(\vec{r})|^2 \Rightarrow \tilde{\rho}_c(\vec{r}) = \sum_{i>0} f_i u_i v_i |\psi_i(\vec{r})|^2. \quad (8)$$

波動関数の点状収縮を回避するという目的に照らすと、 f_i が波動関数に依存することからくる変分を無視せずに正確に取り入れることが肝要であると思われる。そのために、エネルギー ϵ_i によって f_i を決めたのでは変分の停留条件を表す方程式に非常に複雑な項が出現するので、むしろ波数ベクトル大きさの期待値 $k_i^2 = -\int \psi_i^*(\vec{r}) \Delta_{\vec{r}} \psi_i(\vec{r}) d\vec{r}$ への依存性を採用するのが賢明である。即ち、

$$f_i = f(k_i^2) = \exp \left(-\frac{\mu^2}{4} k_i^2 \right). \quad (9)$$

上式で μ は、対相互作用を定量的に正しく記述すると言われる Gogny D1 力 [11] の長距離引力の動径依存性と同じ、1.2fm にとった。点状収縮した波動関数はメッシュ点間隔程度の波数を持つので、非常に高い波数がカットされることで、解の崩壊が抑止できると期待できる。実際、この形でカットオフを導入し変分計算を正確な最急降下路を用いて行なったところ、解は点状に崩壊することなく、物理的に尤もな解が得られることが示された。

しかしながら、この形でのカットオフ導入の短所として、状態依存したハミルトニアン密度を設定したことに起因して、すべての一準粒子状態をその固有状態として与える一準粒子ハミルトニアンが存在しないことが挙げられる。一準粒子ハミルトニアンとは、運動エネルギーと

⁶ Pairing channel における相互作用が状態の波動関数に無関係に決まるとき、たとえば、seniority 力のようにあるときに Hartree-Fock-Bogoliubov 方程式は HF+BCS 方程式に簡略化できる。しかし、 f_i が $\epsilon_i = \langle i|h|i \rangle$ の関数であるとすれば、相互作用の行列要素は状態の波動関数 $|i\rangle$ に依存するので、カットオフ因子付の相互作用の場合には HFB の HF+BCS への置き換えは近似的なものに過ぎない。

⁷ このような修正後のエネルギー密度汎関数をあたえる相互作用は非常に人為的なものになるであろう。しかし、エネルギー密度汎関数は相互作用から決定されるものであるが、計算はもっぱらエネルギー密度汎関数を経由して行われるため、解を求めるにあたっては元にある相互作用がどのようなものであるかを思い悩む必要はない。

Hartree-Fock ポテンシャルからなる h と、対相関ポテンシャルからなる \tilde{h} を 2×2 の行列にまとめたものであり、下記のような形で与えられる⁸。

$$h_{qp} = \begin{pmatrix} h & \tilde{h} \\ \tilde{h} & h \end{pmatrix} \quad (10)$$

HFB 解を求めるにあたっては、最急降下法による変分に加えて、一準粒子ハミルトニアンに対角化を併用することが解への収束を早めたり、局所解へのトラップを防止するのに有効であることが経験的に分かっているのだが、その対角化が正確にはできなくなるのである⁹。

なお、このような準粒子ハミルトニアンの不定性は、実は文献 [7] においても既に、準粒子の真空として HFB 解を表したとき準粒子をエネルギーで選別することで内包されていたのである [12]。

上記の不満から、私は対密度依存性によるカットオフの導入を思いつき、それがむしろ好ましいと考えるように到ったのである。

References

- [1] P. Bonche, H. Flocard, P.-H. Heenen, S.J. Krieger, and M.S. Weiss, Nucl. Phys. **A443** (1985) 39.
- [2] J. Terasaki, Heenen, Flocard and Bonche, Nucl. Phys. **A600** (1996) 371.
- [3] N. Tajima, proc. XVII RCNP Int. Sym. on Innovative Computational Methods in Nuclear Many-Body Problems, Osaka, 1997, edited by H. Horiuchi, M. Kamimura, H. Toki, F. Fujiwara, M. Matsuo, and Y. Sakuragi, (1998) World Scientific (Singapore) , pp. 343-351
- [4] N. Tajima, proc. of a workshop at YITP in January 19-21, 1998, 素粒子論研究 97 巻 2 号 (1998 年 5 月) pp.B9-B12
- [5] N. Tajima, proc. Int. Sym. on Models and Theories of the Nuclear Mass, Wako, Japan, 1999, RIKEN Review No.26 (2000.1) pp. 87-94.
- [6] N. Tajima, in preparation.
- [7] J. Dobaczewski, Flocard and Treiner, Nucl. Phys. **A422** (1984) 103.
- [8] T. Matsuse, proc. XVII RCNP Int. Sym. on Innovative Computational Methods in Nuclear Many-Body Problems, Osaka, 1997, edited by H. Horiuchi, M. Kamimura, H. Toki, F. Fujiwara, M. Matsuo, and Y. Sakuragi, (1998) World Scientific (Singapore) , pp. 369-371
- [9] P.-G. Reinhard, Bender, Rutz and Maruhn, Z. Phys. **A358** (1997) 277.
- [10] S. Takahara, N. Onishi, and N. Tajima, Phys. Lett. **B331** (1994) 261.
- [11] J. Dechargé and D. Gogny, Phys. Rev. **C21** (1980) 1568.
- [12] P. Ring, comment in discussion time after N. Tajima's talk in Int. Sym. on Models and Theories of the Nuclear Mass, RIKEN, Wako, Saitama, Japan, July, 1999.

⁸ 時間反転不変性を仮定して、時間反転対のうち片方のみを考えるように簡略化してあるので Hermite な行列になっている。

⁹ 平均的な一準粒子ハミルトニアンを定義すれば、低精度な解の段階では役に立つが、高精度な解になると、対角化によってむしろ解から遠ざかる結果になる。