김일성종합대학학보　　　　　　　　　　　　　　　　주체108(2019)년
물리학　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　제65권　제1호

핵의 에네르기준위들을 동시에 구하기 위한 일반화된 하트리-포크근사방법

김영성, 김태성, 오수일

경애하는 최고령도자 **김정은**동지께서는 다음과 같이 말씀하시였다.

《현시대는 과학기술의 시대이며 과학기술의 발전수준은 나라의 종합적국력과 지위를 규정하는 징표로 됩니다.》(《조선로동당 제7차대회에서 한 중앙위원회사업총화보고》 단행본 38페지)

핵의 성질은 핵력과 핵의 구조에 관계되며 핵의 성질을 밝히는데서 다체문제풀이법이 매우 중요하다.

한립자파동함수 φ_i 로부터 바닥상태 $\Psi^{(바닥)}(\xi_1, \cdots, \xi_N)$ 을 구하는 근사는 하트리-포크방법으로 진행한다.[6, 7] 이 방법은 핵의 에네르기준위를 비롯하여 특성량들을 계산하는데서 매우 많이 리용되고있다.[3－5] 이 방법에서 려기상태를 취급하자면 바닥상태에 직교하는 $N+1$번째 시험함수를 첨가하고 다시 변분방법에 의하여 $N+1$번째 함수를 구한다. 이 공정은 매우 복잡하므로 하트리-포크방법은 주로 바닥상태를 구하는데 리용된다.

론문에서는 페르미온다립자계의 바닥상태와 려기상태를 동시에 구하는 일반화된 하트리-포크근사방법을 고찰하였다.

1. N개 페르미온계파동함수의 한립자파동함수합렬에 의한 전개

일반화된 하트리-포크근사방법의 본질을 리해하자면 먼저 N개 립자계의 파동함수의 합렬전개를 편리한 형태로 변경시키는것이 필요하다. N개 립자계의 정확한 파동함수는 $\Psi(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_N)$ 으로, 한립자파동함수는 $\varphi_i(\xi)$ 라고 하자.(여기서 i는 한립자준위번호를 의미한다.)

실례로 N개 립자계에서 i번째 립자가 한립자준위 j번째에 있다고 하면 그에 대응한 한립자상태는 $\varphi_j(\xi_i)$ 로 표시한다. 이 한립자파동함수들은 물론 직교완비계를 이룬다.

$$\int \varphi_i^*(\xi)\varphi_j(\xi)d\xi = \delta_{ij} \tag{1}$$

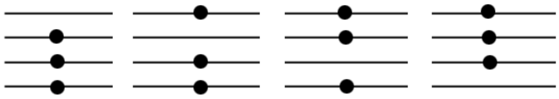
$$\sum_i \varphi_i^*(\xi')\varphi_i(\xi) = \delta(\xi - \xi') \tag{2}$$

이 한립자파동함수를 가지고 N개 립자계의 직교토대함수 $\Phi_\beta(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_N)$ 을 다음과 같이 구성한다.

$$\Phi_\beta(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_N) = A\{\varphi_{\beta_1}(\xi_1)\varphi_{\beta_2}(\xi_2)\cdots\varphi_{\beta_N}(\xi_N)\} = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P \varepsilon_P \varphi_{P\beta_1}(\xi_1)\cdots\varphi_{P\beta_N}(\xi_N) \tag{3}$$

여기서 A는 반대칭화를 의미하며 β는 N개 립자계의 량자상태번호, β_i는 i번째 립자의 준위번호, P는 β에 대한 치환연산자, ε_P는 치환 P의 우기성을 나타낸다.

실례로 $N=3$이고 상태(준위)의 수 $M=4$ ($M \ge N$)라고 하면 다음과 같은 립자배치가 가능하다.



1 상태 2 상태 3 상태 4 상태

계의 상태를 한립자파동함수들의 적으로 보면 다음과 같다.

$$\Phi_1(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = A\{\varphi_1(\xi_1)\varphi_2(\xi_2)\varphi_3(\xi_3)\}$$
$$\Phi_2(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = A\{\varphi_1(\xi_1)\varphi_2(\xi_2)\varphi_4(\xi_3)\}$$
$$\Phi_3(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = A\{\varphi_1(\xi_1)\varphi_3(\xi_2)\varphi_4(\xi_3)\}$$
$$\Phi_4(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = A\{\varphi_2(\xi_1)\varphi_3(\xi_2)\varphi_4(\xi_3)\}$$

N 개 립자계에서 한립자준위 M 개($M \ge N$)를 택할 때 가능한 계의 상태수 W 는

$$W = \frac{M!}{N!(M-N)!} = C_M^N$$

이다. 이와 같이 선택한 함수들은 서로 직교한다.

$$\int d\xi_1 \cdots d\xi_N \Phi^*_{\beta'}(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_N)\Phi_\beta(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_N) = \delta_{\beta'\beta} \tag{4}$$

편리를 위하여 계의 상태를 유일번호로 순서를 정한다. 여러가지 방법으로 순서를 정할수 있지만 여기서는 N 개 핵자들이 차지한 준위번호 $m_1, m_2, \cdots, m_N$ 이 $m_1 < m_2 < \cdots < m_N$ 의 관계에 있다고 하고 이가운데서 아래준위를 보다 많이 차지한 순서로 번호를 붙이기로 한다. 그러면 우의 실례에서

$$\{\beta=1\} = (1,\ 2,\ 3),\ \{\beta=2\} = (1,\ 2,\ 4),\ \{\beta=3\} = (1,\ 3,\ 4),\ \{\beta=4\} = (2,\ 3,\ 4)$$

로 된다. 이때 N 개 립자계파동함수는 개별상태파동함수들의 선형결합에 의하여 다음과 같이 표시할수 있다.

$$\Psi(\xi_1, \cdots, \xi_N) = \sum_{\beta=1}^{W} b_\beta \Phi_\beta(\xi_1, \cdots, \xi_N) \tag{5}$$

파동함수 Ψ 의 규격화조건으로부터 다음의 식이 나온다.

$$\sum_{\beta}^{W} b^*_\beta b_\beta = 1 \tag{6}$$

리론적으로는 $M \to \infty$ 이지만 실천에서는 유한개로 제한하는것이 편리하다.

2. 에네르기범함수와 자체모순없는 마당방법

핵자계의 파동함수 Ψ 는 슈뢰딩거방정식을 만족시킨다.

$$\hat{H}\Psi(\xi_1, \cdots, \xi_N) = E\Psi(\xi_1, \cdots, \xi_N) \tag{7}$$

이제 한립자파동함수들의 직교성조건 (1)과 전개결수들의 규격화조건 (6)을 고려하여 슈뢰딩거방정식 (7)을 주는 에네르기범함수를 다음과 같이 구성한다.

$$J[\Psi^*, \Psi] = \langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle - \sum_{i=1}^{M}\lambda_i(\langle\varphi_i|\varphi_i\rangle - \delta_{ij}) - \mu\sum_{\beta=1}^{W}(b^*_\beta b_\beta - 1) \tag{8}$$

이 범함수를 b^*_γ 과 φ^*_l 로 변분하여 한립자파동함수에 관한 방정식과 전개결수에 관한 방정식을 얻는다. 먼저 $\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle$ 를 계산하자.

$$\left\langle \Psi \middle| \hat{H} \middle| \Psi \right\rangle = \sum_{\beta'\beta} b_{\beta'}^* b_\beta \left\langle \Phi_{\beta'} \middle| \hat{H} \middle| \Phi_\beta \right\rangle = \sum_{\beta'\beta} b_{\beta'}^* b_\beta \frac{1}{N!} \sum_{P,Q} \varepsilon_P \varepsilon_Q \left\langle \varphi_{P\beta_1'}, \cdots, \varphi_{P\beta_N'} \middle| \hat{H} \middle| \varphi_{Q\beta_1}, \cdots, \varphi_{Q\beta_N} \right\rangle =$$
$$= \sum_{\beta'\beta} b_{\beta'}^* b_\beta \sum_P \varepsilon_P \left\langle \varphi_{\beta_1'}, \cdots, \varphi_{\beta_N'} \middle| \hat{H} \middle| \varphi_{P\beta_1}, \cdots, \varphi_{P\beta_N} \right\rangle \tag{9}$$

우의 계산에서 반대칭화치환연산을 어느 한쪽만 진행하여도 결과는 달라지지 않는다는 사실[1, 2]을 고려하였다.

일반적으로 N 립자계의 전체 하밀토니안은 다음과 같이 표시된다.

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \left[-\frac{1}{2m} \Delta_i + V(\xi_i) \right] + \sum_{i=1}^{N} \sum_{j>i}^{N} U(\xi_i, \xi_j) = \sum_{i=1}^{N} \hat{f}_i + \sum_{i=1}^{N} \sum_{j>i}^{N} \hat{g}_{ij} = \hat{F} + \hat{G} \tag{10}$$

여기서 $\hat{f}_i$ 와 $\hat{g}_{ij}$ 는 i 번째 립자에 대한 한립자연산자, i, j 번째 립자들사이 호상작용연산자이다. 식 (10)을 식 (9)에 대입하면 다음과 같이 계산된다.

$$\left\langle \Psi \middle| \hat{H} \middle| \Psi \right\rangle = \sum_{\beta'\beta} b_{\beta'}^* b_\beta \sum_P \varepsilon_P \left(\sum_{i=1}^{N} \left\langle \varphi_{\beta_i'} \middle| \hat{f}_i \middle| \varphi_{P\beta_i} \right\rangle \prod_{k \neq i}^{N} \delta_{\beta_k', P\beta_k} + \sum_{i=1}^{N} \sum_{j>i}^{N} \left\langle \varphi_{\beta_i'} \varphi_{\beta_j'} \middle| \hat{g}_{ij} \middle| \varphi_{P\beta_i} \varphi_{P\beta_j} \right\rangle \prod_{k \neq i,\, j}^{N} \delta_{\beta_k', P\beta_k} \right) \tag{11}$$

한립자파동함수 $\left| \varphi_{\beta_i} \right\rangle$ 를 간단히 $\left| \beta_i \right\rangle$ 로 표시하면 우의 결과를 대입한 범함수에 관한 식 (8)은 다음과 같이 된다.

$$J[\Psi^*, \Psi] = \sum_{\beta'\beta} b_{\beta'}^* b_\beta \sum_P \varepsilon_P \left(\sum_{i=1}^{N} \left\langle \beta_i' \middle| \hat{f}_i \middle| P\beta_i \right\rangle \prod_{k \neq i}^{N} \delta_{\beta_k', P\beta_k} + \sum_{i=1}^{N} \sum_{j>i}^{N} \left\langle \beta_i' \beta_j' \middle| \hat{g}_{ij} \middle| P\beta_i P\beta_j \right\rangle \prod_{k \neq i, j}^{N} \delta_{\beta_k', P\beta_k} \right) -$$
$$- \sum_{i=1}^{M} \lambda_i (\langle i | i \rangle - \delta_{ij}) - \mu \sum_{\beta=1}^{W} (b_\beta^* b_\beta - 1) \tag{12}$$

이제 웃식을 b_γ^* 과 φ_l^* 에 관하여 변분하자.

$$\frac{\delta J}{\delta b_\gamma^*} = \sum_\beta b_\beta \sum_P \varepsilon_P \left(\sum_{i=1}^{N} \left\langle \gamma_i \middle| \hat{f}_i \middle| P\beta_i \right\rangle \prod_{k \neq i}^{N} \delta_{\gamma_k, P\beta_k} + \sum_{i=1}^{N} \sum_{j>i}^{N} \left\langle \gamma_i \gamma_j \middle| \hat{g}_{ij} \middle| P\beta_i P\beta_j \right\rangle \prod_{k \neq i, j}^{N} \delta_{\gamma_k, P\beta_k} \right) - \mu b_\gamma = 0$$

즉

$$\sum_\beta b_\beta H_{\gamma\beta} = \mu b_\gamma \tag{13}$$

이다. 여기서

$$H_{\gamma\beta} = \left\langle \Phi_\gamma \middle| \hat{H} \middle| \Phi_\beta \right\rangle = \sum_P \varepsilon_P \left(\sum_{i=1}^{N} \left\langle \gamma_i \middle| \hat{f}_i \middle| P\beta_i \right\rangle \prod_{k \neq i}^{N} \delta_{\gamma_k, P\beta_k} + \sum_{i=1}^{N} \sum_{j>i}^{N} \left\langle \gamma_i \gamma_j \middle| \hat{g}_{ij} \middle| P\beta_i P\beta_j \right\rangle \prod_{k \neq i, j}^{N} \delta_{\gamma_k, P\beta_k} \right) \tag{14}$$

이다.

$$\frac{\delta J}{\delta \varphi_l^*} = \sum_{\beta'\beta} b_{\beta'}^* b_\beta \sum_P \varepsilon_P \left(\sum_{i=1}^{N} \hat{f}_i \middle| P\beta_i \right\rangle \delta_{\beta_i' l} \prod_{k \neq i}^{N} \delta_{\beta_k', P\beta_k} + \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \neq i}^{N} \left\langle \cdot\, \beta_j' \middle| \hat{g}_{ij} \middle| P\beta_i P\beta_j \right\rangle \delta_{\beta_i' l} \prod_{k \neq i,\, j}^{N} \delta_{\beta_k', P\beta_k} \Bigg) -$$
$$- \lambda_l | l \rangle = 0$$

여기서

$$\left\langle \cdot\, \beta'_j \left|\hat{g}_{ij}\right| P\beta_i P\beta_j \right\rangle \equiv \int d\xi' \varphi^*_{\beta'_j}(\xi')\hat{g}_{ij}\varphi_{P\beta_i}(\xi)\varphi_{P\beta_j}(\xi')$$

를 의미한다.

그러면 우의 변분결과는 다음과 같이 된다.

$$\sum_{\beta'\beta} b^*_{\beta'} b_\beta \sum_P \varepsilon_P \left(\sum_{i=1}^N \hat{f}_i \left| P\beta_i \right\rangle \delta_{\beta'_i l} \prod_{k\neq i}^N \delta_{\beta'_k,\, P\beta_k} + \sum_{i=1}^N \sum_{j\neq i}^N \left\langle \cdot\, \beta'_j \left|\hat{g}_{ij}\right| P\beta_i P\beta_j \right\rangle \delta_{\beta'_i l} \prod_{k\neq i,\, j}^N \delta_{\beta'_k,\, P\beta_k} \right) = \lambda_l \left| l \right\rangle \tag{15}$$

따라서 방정식 (13)과 (15)를 련립하여 결수 b_β와 $\varphi_l(\xi)$, 고유값 μ, λ_l을 구한다.

이 련립방정식의 풀이는 자체모순없는 마당방법으로 구할수 있다.

자체모순없는 마당방법의 알고리듬은 다음과 같다.

① 먼저 적당한 초기 한립자파동함수 $\varphi_l(\xi)$ ($l = 1 \cdot M$)을 가정한다.

② 식 (14)에 의해 하밀토니안의 행렬원소 $H_{\beta'\beta}$를 구한다.

③ 다음 방정식 (13)을 풀어 결수 b_β와 고유값 μ를 구한다.

④ 다음 방정식 (15)를 풀어 새로운 파동함수 $\varphi_l(\xi)$와 고유값 λ_l을 구한다.

⑤ 초기 파동함수들과 새 파동함수들사이의 차가 일정한 오차범위내에 들어가지 않으면 다시 ②부터 우의 과정을 반복한다.

⑥ 수렴하면 우에서 얻은 $\varphi_l(\xi)$, λ_l, μ로부터 계의 전체 파동함수와 에네르기준위들을 계산한다.

다음 라그랑쥬미정결수 λ_l과 μ의 물리적의미를 밝히자.

식 (13)의 량변에 b^*_γ을 곱하고 γ에 관하여 다 더하면

$$\mu \sum_\gamma b^*_\gamma b_\gamma = \mu = \sum_{\gamma\beta} b^*_\gamma H_{\gamma\beta} b_\beta = \sum_{\gamma\beta} b^*_\gamma \left\langle \Phi_\gamma \left| \hat{H} \right| \Phi_\beta \right\rangle b_\beta = \left\langle \Psi \left| \hat{H} \right| \Psi \right\rangle = E$$

가 얻어진다. 즉 μ는 계의 에네르기준위의 의미를 가진다.

다음 식 (15)의 량변에 $\left| l \right\rangle$을 스칼라적하면

$$\lambda_l = \sum_{\beta'\beta} b^*_{\beta'} b_\beta \sum_P \varepsilon_P \left(\sum_{i=1}^N \left\langle l \left| \hat{f}_i \right| P\beta_i \right\rangle \delta_{\beta'_i l} \prod_{k\neq i}^N \delta_{\beta'_k,\, P\beta_k} + \sum_{i=1}^N \sum_{j\neq i}^N \left\langle l\, \beta'_j \left|\hat{g}_{ij}\right| P\beta_i P\beta_j \right\rangle \delta_{\beta'_i l} \prod_{k\neq i,\, j}^N \delta_{\beta'_k,\, P\beta_k} \right)$$

가 얻어진다.

다음 l에 관하여 다 합하고 식 (11)과 비교하면

$$E = \sum_{l=1}^M \lambda_l - \frac{1}{2} \sum_{\beta'\beta} b^*_{\beta'} b_\beta \sum_P \varepsilon_P \sum_{i=1}^N \sum_{j\neq i}^N \left\langle \beta'_i \beta'_j \left|\hat{g}_{ij}\right| P\beta_i P\beta_j \right\rangle \prod_{k\neq i,\, j}^N \delta_{\beta'_k,\, P\beta_k} =$$

$$= \sum_{l=1}^M \sum_{\beta'\beta} b^*_{\beta'} b_\beta \sum_P \varepsilon_P \left(\sum_{i=1}^N \left\langle l \left| \hat{f}_i \right| P\beta_i \right\rangle \delta_{l\beta'_i} \prod_{k\neq i}^N \delta_{\beta'_k,\, P\beta_k} + \sum_{i=1}^N \sum_{j> i}^N \left\langle l\, \beta'_j \left|\hat{g}_{ij}\right| P\beta_i P\beta_j \right\rangle \delta_{l\beta'_i} \prod_{k\neq i,\, j}^N \delta_{\beta'_k,\, P\beta_k} \right)$$

를 얻는다.

n번째 한립자준위에 핵자가 없는 경우의 에네르기준위를 $E(N_n = 0)$로, 핵자가 있는 경우의 에네르기준위를 $E(N_n = 1)$로 표시하고 $E(N_n = 0)$를 계산하면 다음과 같다.

$$
\begin{aligned}
E(N_n=0) &= \\
&= \sum_{l\neq n}^{M}\sum_{\beta'\beta} b^*_{\beta'} b_\beta \sum_P \varepsilon_P \left(\sum_{i=1}^{N} \langle l|\hat{f}_i|P\beta_i\rangle \delta_{l\beta'_i} \prod_{k\neq i}^{N} \delta_{\beta'_k,\, P\beta_k} + \sum_{i=1}^{N}\sum_{j>i}^{N} \langle l\,\beta'_j|\hat{g}_{ij}|P\beta_i P\beta_j\rangle \delta_{l\beta'_i} \prod_{k\neq i,\ j}^{N} \delta_{\beta'_k,\, P\beta_k} \right) = \\
&= \sum_{l=1}^{M}\sum_{\beta'\beta} b^*_{\beta'} b_\beta \sum_P \varepsilon_P \left(\sum_{i=1}^{N} \langle l|\hat{f}_i|P\beta_i\rangle \delta_{l\beta'_i} \prod_{k\neq i}^{N} \delta_{\beta'_k,\, P\beta_k} + \sum_{i=1}^{N}\sum_{j>i}^{N} \langle l\,\beta'_j|\hat{g}_{ij}|P\beta_i P\beta_j\rangle \delta_{l\beta'_i} \prod_{k\neq i,\ j}^{N} \delta_{\beta'_k,\, P\beta_k} \right) - \\
&\quad - \sum_{\beta'\beta} b^*_{\beta'} b_\beta \sum_P \varepsilon_P \left(\sum_{i=1}^{N} \langle n|\hat{f}_i|P\beta_i\rangle \delta_{n\beta'_i} \prod_{k\neq i}^{N} \delta_{\beta'_k,\, P\beta_k} + \sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N} \langle n\,\beta'_j|\hat{g}_{ij}|P\beta_i P\beta_j\rangle \delta_{n\beta'_i} \prod_{k\neq i,\ j}^{N} \delta_{\beta'_k,\, P\beta_k} \right) = \\
&= E(N_n=1) - \lambda_n
\end{aligned}
$$

이 결과로부터 λ_n 은 n 번째 준위에 있는 핵자의 분리에네르기라는것을 알수 있다. 이것은 쿠프만스정리[1]와 본질상 같으며 바닥상태뿐만아니라 려기상태에 있는 핵의 경우에까지 일반화한것이다.

맺 는 말

1) 핵의 파동함수를 한립자파동함수들의 적으로 표시된 각이한 상태파동함수들의 선형결합으로 표시할수 있다는것을 론증하고 선형결합결수들의 성질을 밝혔다.

2) 에네르기범함수를 구성하고 변분원리에 의하여 결수방정식과 파동함수방정식계를 얻었으며 이 방정식계를 풀수 있는 자체모순없는 마당방법을 제기하였다.

참 고 문 헌

[1] 김광일, 김남혁; 량자력학 2, 김일성종합대학출판사, 132～154, 주체92(2003).

[2] 김남혁; 량자력학, 김일성종합대학출판사, 333～339, 주체100(2011).

[3] K. H. Schmidt et al.; Nuclear Data Sheets, 131, 107, 2016.

[4] C. M. Baglin; Nuclear Data Sheets, 134, 149, 2016.

[5] N. Schunck et al.; Nuclear Data Sheets, 123, 115, 2015.

[6] P. K. Raina et al.; Phys. Atom. Nucl., 67, 2021, 2004.

[7] S. Stoica; Phys. Lett., B 350, 152, 1995.

주체107(2018)년 9월 5일 원고접수

Generalized Hartree-Fock Approximation to Obtain Energy Levels of a Nucleus Simultaneously

Kim Yong Song, Kim Thae Song and *O Su Il*

In our paper, we proposed a generalized Hartree-Fock Approximation to obtain the wave functions and energy levels of the ground, and excited states of a nucleus simultaneously.

Key words: Hartree-Fock approximation, many-body problem, self-consistent field method