J.W.Negele, Nuclear Mean-Field Theory, Physics Today 38, 24(1985)

松本侑真

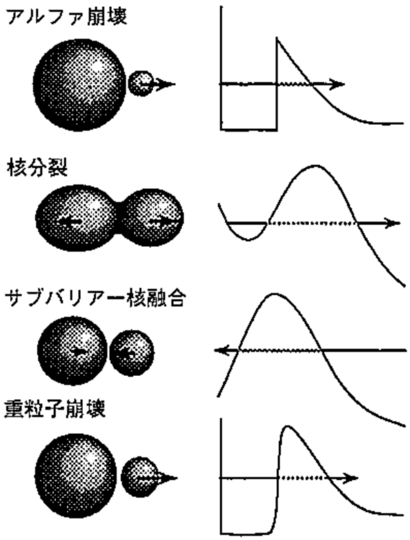
July 3, 2023

論文の目的

- 平均場理論 (TDHF) ＋経路積分でトンネル効果を記述する
- 少数核子系の核分裂反応を数値計算で再現する

背景

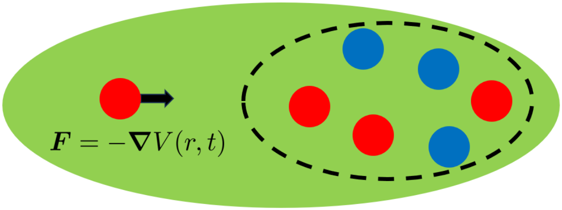
- トンネル効果による原子核反応が存在する
- 1次元模型では、ガモフによる α 崩壊の理論や WKB 近似などがある
- 実際の核分裂の計算では精度を良くすることが難しい
- 平均場理論の枠組みでこれらの反応を記述したい



平均場理論

- 多体系における相互作用を平均化して一体問題のポテンシャルとして扱う手法
- 原子核中では、平均ポテンシャルによって核子の配置が決定
- 原子核の平均ポテンシャルは、Hartree-Fock 近似によって微視的に得られる

- $V(r,t)$ と核子の波動関数は自己無撞着性を持つ
- $V(r,t)$ の収束解が系の平衡状態と考えられる



平均ポテンシャル $V(r,t)$

Hartree-Fock 近似

- 時間依存の HF 方程式（TDHF 方程式）は比較的簡単に扱える第一原理的な計算手法
- 原子核の性質を上手く説明できる

TDHF の問題点

- 多体波動関数が 1 つのスレーター行列式で表されるという近似を用いている
    - 複数のスレーター行列式の線形結合で波動関数を表すことで、より正確な状態が得られることが知られている
- 重い原子核に適用できないことがわかった
    - トンネル効果などの量子効果を正確に記述出来ていない

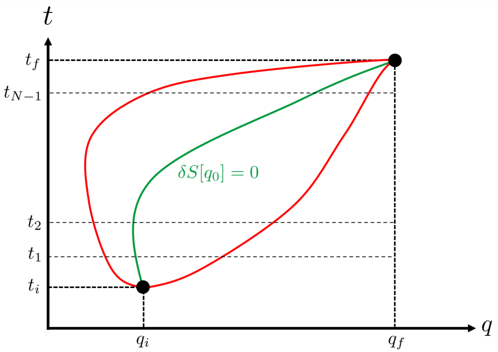
平均場理論の枠組みで核分裂反応を記述する

経路積分を使う理由

- トンネル効果を含む量子論の現象を記述できる
- 鞍点法（Stationary Phase Approximation：SPA）で近似ができる

経路積分のイメージ

- 状態の遷移確率振幅が経路積分で与えられる。
- 始状態 (q_i, t_i) から終状態 (q_f, t_f) に至るあらゆる経路の和を取る
- 作用の変分が $\delta S[q] = 0$ となる経路からの寄与が大きい



経路積分の数式表現

- 時間発展演算子 $U(t,t_0) = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}$
- 始状態を $|\psi_i\rangle$ とすると、終状態は $|\psi_f\rangle = U(t,t_0)\,|\psi_i\rangle$

$$\psi_f(q) = \int dq' \, \langle q|\, U(t,t_0)\, |q'\rangle \, \langle q'|\psi_i\rangle = \int dq' \, K(q,q'\,;t,t_0)\psi_i(q')$$

- ファインマン核 $K(q_f,q_i\,;t_f,t_i)$ の具体形

$$K(q_f,q_i\,;t_f,t_i) = \int \mathcal{D}q \int \mathcal{D}p \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt\,(p\dot{q} - H(p,q))\right]$$

$$\int \mathcal{D}q \coloneqq \prod_{j=1}^{N-1}\int dq_j\,, \qquad \int \mathcal{D}p \coloneqq \prod_{j=1}^{N}\int \frac{dp_j}{2\pi\hbar}\,, \qquad t_f = t_i + N\Delta t$$

経路積分の数式表現

ポテンシャルが位置にのみ依存する場合、運動量積分が計算できる。

$$K(q_f, q_i\,; t_f, t_i) = \int \mathcal{D}q \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt \left(\frac{m}{2}\dot{q}^2 - V(q)\right)\right]$$
$$= \int \mathcal{D}q \exp\left[\frac{i}{\hbar}S[q]\right]$$

経路積分の解釈

$(q_i, t_i) \to (q_1, t_1) \to \cdots \to (q_{N-1}, t_{N-1}) \to (q_f, t_f)$ を経たときの遷移確率振幅を考えて、中間状態に関して全ての経路の和を取ると、$|q_i\,; t_i\rangle$ から $|q_f\,; t_f\rangle$ への遷移確率振幅となる。

トンネリング解を計算する方法

1. トンネリング解に対応するエネルギー固有値を求める
   - $\mathrm{tr}\,(E-\hat{H})^{-1} = \sum_n \langle E_n|(E-E_n)^{-1}|E_n\rangle$ の極がエネルギー固有値

$$\mathrm{tr}\,\frac{1}{E-\hat{H}+i\eta} = -i\int_0^\infty dT\, e^{iET}\int dq\,\langle q|\,e^{-i\hat{H}T}\,|q\rangle$$
$$= -i\int_0^\infty dT\, e^{iET}\int dq\int \mathcal{D}q\, e^{iS[q]}$$

   - $q(0)=q(T)$ の境界条件（周期運動）を満たした経路積分
   - あらゆる周期解の中で、$\delta S[q(T)]=0$ となるものを足し合わせる
2. エネルギー固有値に対応する波動関数（核分裂後を記述する状態）を計算する

エネルギー固有値を求める

周期 T を満たす運動のうち、$\delta S[q(T)] = 0$ を満たす $q_0(T)$ について $W(T) = ET + S[q_0(T)]$ とする。SPA を用いると

$$\int_0^\infty dT\, e^{iET} \int dq \int \mathcal{D}q\, e^{iS[q]} \approx \int_0^\infty dT\, A e^{iET + iS[q_0(T)]}$$

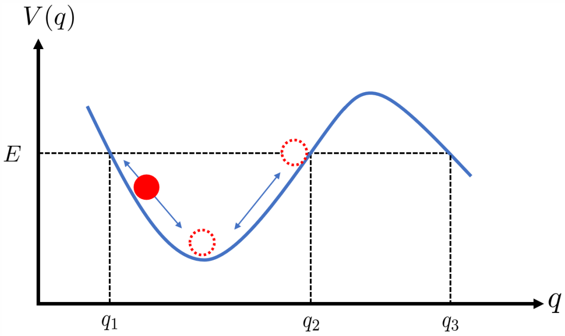
$$\approx A \sum_{m=1}^{\infty} f_m e^{iW(T_m)} = A \sum_{m=1}^{\infty} e^{im\pi} \left(e^{iW(T)}\right)^m = \frac{-Ae^{iW(T)}}{1 + e^{iW(T)}}$$

- $\delta S[q_0(T)] = 0$ であり、$q_0(T)$ は Euler-Lagrange 方程式を満たす
- 周期 $T(E)$ に対して、$W(mT) = mW(T)$ を満たしている
- $1 + e^{iW(T)} = 0 \Leftrightarrow W(T) = (2n+1)\pi$ は Bohr-Sommerfeld の量子化条件に対応

1粒子系での例

1つの極小値を持つポテンシャル $V(q)$ 内を運動する粒子について考える

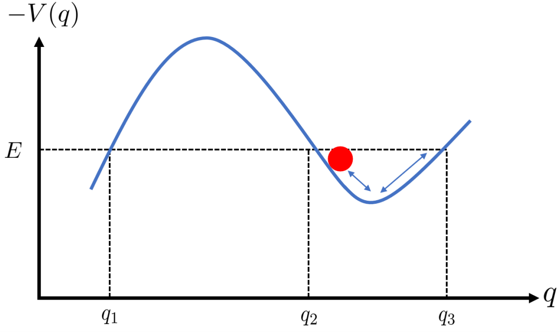
- $m\frac{\mathrm{d}^2 q_0}{\mathrm{d}t^2} = -\nabla V(q_0)$
- $E - V(q) \geq 0$ の領域で周期運動
- 実際には $W(T) = (2n+1)\pi$ を満たす周期 T の運動が実現する
- $T(E) = 2\int_{q_1}^{q_2} dq \sqrt{\frac{m}{2(E-V(q))}}$ から $E = E_n^0$ が求まる



1粒子系での例

ここで、t を準虚数として、$it \to \tau$ という変換を考える。

- $m\frac{\mathrm{d}^2 q_0}{\mathrm{d}\tau^2} = -\boldsymbol{\nabla}[-V(q_0)]$
- 反転したポテンシャル内で $q_2 \leq q \leq q_3$ を運動しているように見える
- 虚時間方向では $\delta S[q_0] = 0$ が成立しており、SPA では考慮する必要がある
- $E = E_n^0$ は準安定状態であることが計算からわかる



1粒子系での例

虚時間方向での周期運動を考慮して $\mathrm{tr}(E-\hat{H})^{-1}$ の計算をする

$$\mathrm{tr}\,\frac{1}{E-\hat{H}+i\eta} \propto \frac{-2e^{i(W_1+W_3)}-e^{iW_1}-e^{-W_2}-e^{iW_3}}{(1+e^{iW_1})(1+e^{iW_3})+e^{-W_2}}$$

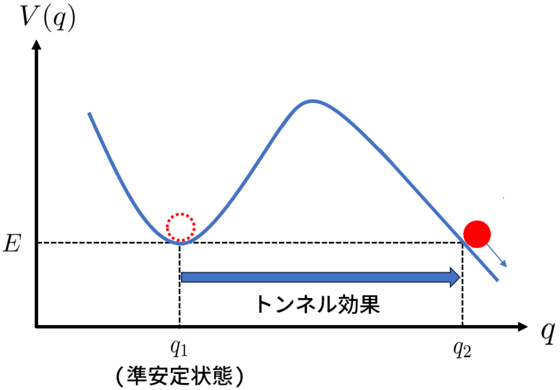
- e^{iW_3} からの寄与は小さく、$1+e^{iW_1(E)}=-e^{-W_2(E)}$ を満たす
- $E={E_n}^0+\Delta E_n$ として、補正項 ΔE_n を求めると

$$E={E_n}^0-\frac{i\Gamma_n}{2}, \quad \Gamma_n=2\frac{\omega({E_n}^0)}{2\pi}e^{-W_2({E_n}^0)}$$

- Γ_n は寿命の逆数であり、準安定状態がトンネル効果で崩壊する WKB 近似の式として知られている

1粒子系での例

- 単純な HF 方程式で得られる基底状態 q_1 は準安定状態
- q_2 までトンネリングした後は q が増大する方向へ運動する

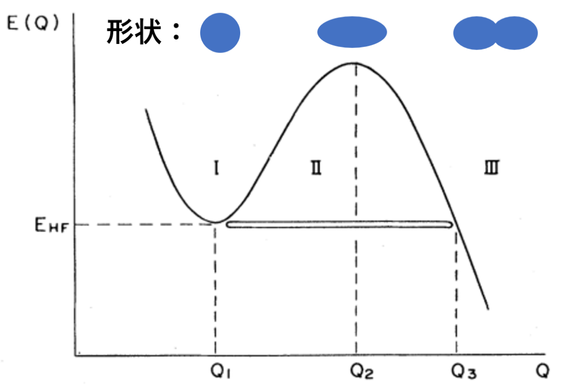


時刻 t で q_1 の状態にいる確率 $P(t)$ は、$E = E_n^0 - i\Gamma_n/2$ より

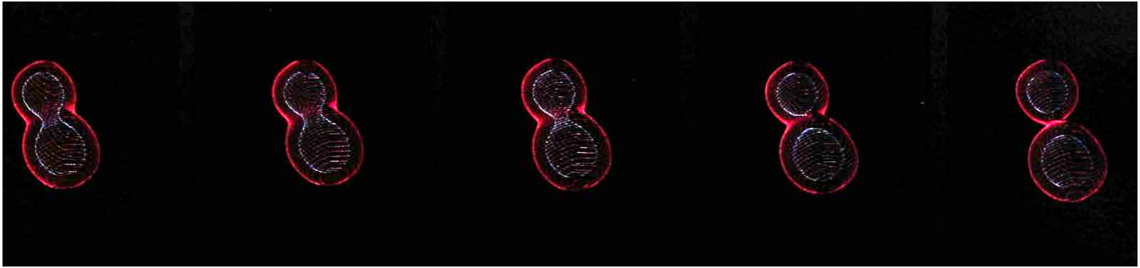
$$P(t) = |\langle q_1|\psi(t)\rangle|^2 = \left|\langle q_1| e^{-iEt/\hbar} |q_1\rangle\right|^2 = e^{-\Gamma_n t/\hbar}$$

核子多体系に適用する

- 原子核のポテンシャルが先程と同じ形状
- Ⅱのポテンシャル障壁をトンネリングしてⅢの領域へ時間発展
- 波動関数はHartree-Fock方程式によって求められる
- 核子の四重極モーメント Q が大きいほど原子核が変形



$^{8}\mathrm{Be} \longrightarrow {}^{4}\mathrm{He} + {}^{4}\mathrm{He}$ の計算結果



- 原子核が変形し、最終的に２つの粒子に分かれている
- この時間発展の様子はどのように計算してる？ $Q_1 \to Q_3$ の時間発展は追うことができない？

まとめ

- 平均場理論＋経路積分でトンネル効果を記述できる
- HF 方程式を解くことでトンネリング解の状態を得ることができる
- 重い核（^{238}U など）に適用するためには、計算コストや精度の問題がある
    - 波動関数が各粒子の座標 $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots, \boldsymbol{r}_N$ に依存する
    - 精度を上げるためには空間、時間のメッシュ数を多くする必要がある
    - 現在のコンピュータでは計算可能