

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

松本侑真

原子核理論 関澤研究室

July 5, 2023

背景

- トンネル効果によって生じる現象が存在する
- 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
- 実際の核分裂は多粒子系のトンネル現象かつ複雑な形状の自由度があり、微視的な計算が困難

アルファ崩壊



核分裂



サブバリアー核融合



重粒子崩壊



論文の目的

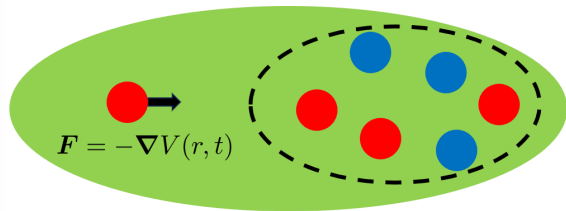
J.W.Negele, Nuclear Mean-Field Theory, Physics Today 38, 24(1985)
では

- 平均場理論＋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

ことが目的

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（集団運動模型）
 - 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

- Hartree-Fock (HF) 近似は原子核の性質（束縛エネルギーや変形度）を上手く説明できる
- 時間依存の HF 方程式（TDHF 方程式）は核子自由度から微視的に原子核ダイナミクスを記述できる

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
- 重い原子核の核分裂反応を正しく記述できない
 - 核分裂していない状態と核分裂している状態の重ね合わせが記述できない
 - 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

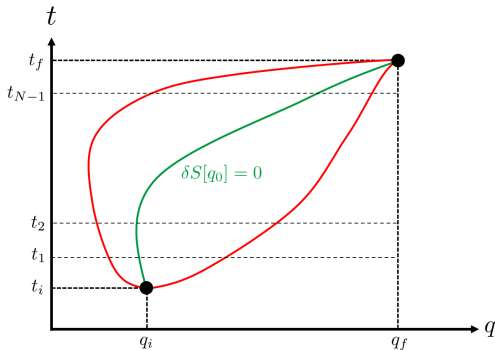
平均場理論（TDHF）で核分裂反応を記述する

経路積分を使う理由

- 多体系での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

- 始状態から終状態への遷移確率振幅が経路積分で与えられる
- 終状態に至るまでの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

ポテンシャルが一般化座標 q にのみ依存する場合を考える。
 $K(q_f, q_i; t_f, t_i)$ は (q_i, t_i) から (q_f, t_f) への遷移確率振幅であり、

$$\begin{aligned} K(q_f, q_i; t_f, t_i) &= \int \mathcal{D}q \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\frac{m}{2} \dot{q}^2 - V(q) \right) \right] \\ &= \int \mathcal{D}q \exp \left[\frac{i}{\hbar} S[q] \right] \quad \left(\int \mathcal{D}q := \prod_{j=1}^{N-1} \int dq_j \right) \end{aligned}$$

経路積分の解釈

$(q_i, t_i) \rightarrow (q_1, t_1) \rightarrow \cdots \rightarrow (q_{N-1}, t_{N-1}) \rightarrow (q_f, t_f)$ 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

- $\text{tr} (E - \hat{H})^{-1} = \sum_n \langle E_n | (E - E_n)^{-1} | E_n \rangle$ の極がエネルギー固有値

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

- $q(0) = q(T)$ 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状態（核分裂後を記述する状態）を Euler-Lagrange 方程式で計算する

エネルギー固有値を求める

周期 T の運動の経路 $q(T)$ で、 $\delta S[q(T)] = 0$ 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

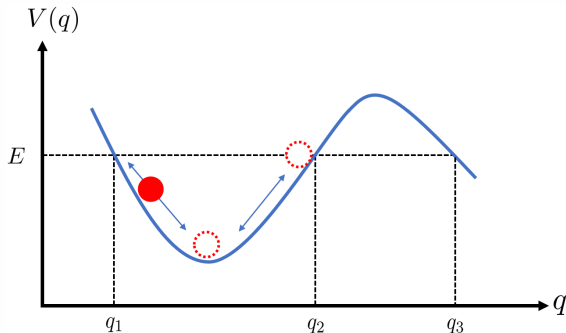
$$\begin{aligned} \int_0^\infty dT e^{iET} \underbrace{\int dq \int \mathcal{D}q e^{iS[q]}}_{\approx A e^{iS[q_0(T)]}} &\approx \int_0^\infty dT A e^{i(ET + S[q_0(T)])} \\ &\approx A \sum_{m=1}^{\infty} f_m e^{iW(mT)} = A \sum_{m=1}^{\infty} e^{im\pi} \left(e^{iW(T)} \right)^m \propto \frac{e^{iW(T)}}{1 + e^{iW(T)}} \end{aligned}$$

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

1 粒子系での例

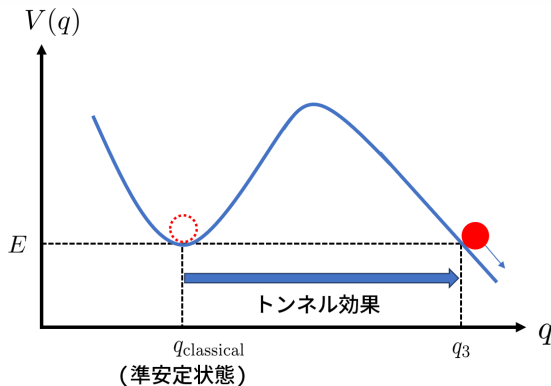
1つの極小値を持つポテンシャル $V(q)$ 内を全エネルギー E の元で運動する1粒子について考える

- $m \frac{d^2 q_0}{dt^2} = -\nabla V(q_0)$
- $E - V(q) \geq 0$ の領域で周期 $T(E)$ の運動
- $W(T) = (2n + 1)\pi$ を満たす周期 T の運動がエネルギー固有値を与える
- $T(E) = 2 \int_{q_1}^{q_2} dq \sqrt{\frac{m}{2(E - V(q))}}$
から $E = E_n^0$ が求まる



1 粒子系での例

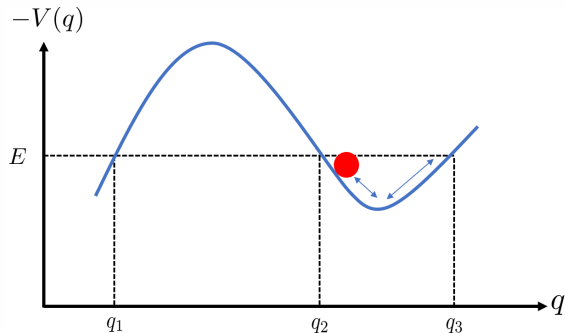
- 先ほどは $V(q)$ の極小値まわりの周期運動のみを考えていた
- 量子力学の結果では、トンネル効果によってポテンシャル障壁を乗り越える
- ポテンシャル極小値の位置 $q_{\text{classical}}$ は安定でない



1 粒子系での例

t を準虚数として、 $it \rightarrow \tau$ という変換を考えるとトンネル効果が考慮できる

- $m \frac{d^2 q_0}{d\tau^2} = -\nabla[-V(q_0)]$
- 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
- $q_{\text{classical}}$ 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 $\text{tr}(E - \hat{H})^{-1}$ の計算をする
 $W_2(E)$ は虚時間方向での $W(E) = ET + S[q_0(T)]$

$$\text{tr} \frac{1}{E - \hat{H} + i\eta} \propto \frac{-3e^{iW_1} - e^{-W_2}}{1 + e^{iW_1} + e^{-W_2}}$$

- $1 + e^{iW_1(E)} = -e^{-W_2(E)}$ が極となる (先ほどは $1 + e^{iW_1(E_n^0)} = 0$)
- $E = E_n^0 + \Delta E_n$ 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

$$\Delta E_n = -i \frac{\omega(E_n^0)}{2\pi} e^{-W_2(E_n^0)} \quad \text{を得る計算}$$

極を与えるエネルギーは $1 + e^{iW_1(E)} = e^{-W_2(E)}$ を満たしていた。
また、 $1 + e^{iW_1(E_n^0)} = 0$ に注意すると

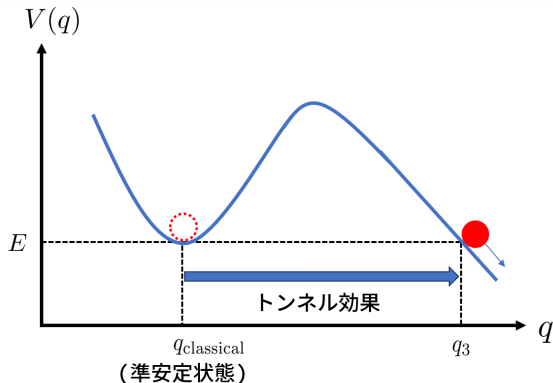
$$1 + e^{iW_1(E_n^0 + \Delta E_n)} = -e^{-W_2(E_n^0 + \Delta E_n)}$$

$$1 + \underbrace{e^{iW_1(E_n^0)}}_{=-1} \left(1 + i \frac{\partial W_1(E_n^0)}{\partial E} \Delta E_n \right) = -e^{-W_2(E_n^0)}$$

$$\Delta E_n = -i \frac{1}{T(E_n^0)} e^{-W_2(E_n^0)} = -i \frac{\omega(E_n^0)}{2\pi} e^{-W_2(E_n^0)}$$

1 粒子系での例（まとめ）

- 古典的な基底状態 $q_{\text{classical}}$ は準安定状態
- 虚時間方向を考えることで、トンネル効果が考慮できる
- q_3 にトンネリングした後は q が増大する方向へ時間発展

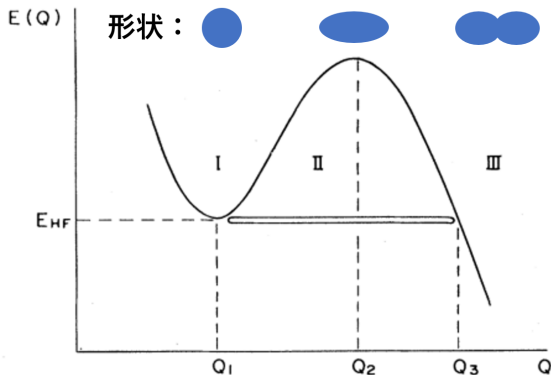


時刻 t で $q_{\text{classical}}$ の状態にいる確率 $P(t)$ は、 $E = E_n^0 - i\Gamma_n/2$ より

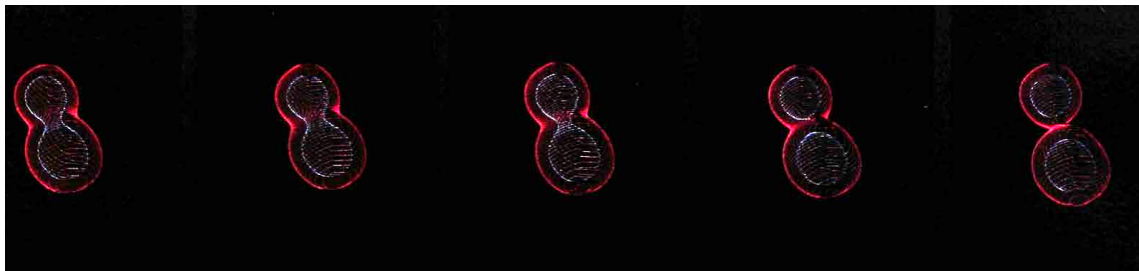
$$P(t) = |\langle q_{\text{classical}} | \psi(t) \rangle|^2 = \left| \langle q_{\text{classical}} | e^{-iEt/\hbar} | q_{\text{classical}} \rangle \right|^2 = e^{-\Gamma_n t/\hbar}$$

核子多体系に適用する

- 原子核の四重極モーメント Q は変形度を表す
- Q に対する HF エネルギーは Q_1 で極小値 (\neq 最小値)
- 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
- EL 方程式は HF 方程式になっている



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



- トンネリング後の状態は、2つの粒子に分かれた状態
- Negele の他の論文にも図は載っているが、定量的な評価は見つけれない
- 現在に至るまで、虚時間法の応用があまりされていない
- 卒研で1次元のHF計算を行い、虚時間法でトンネル現象を再現する予定

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り、工夫が必要
 - 波動関数が各粒子の座標 $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \dots, \boldsymbol{r}_N$ に依存する
 - 多次元のポテンシャル面による透過問題 (1次元ではない)
 - 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

Appendix : 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

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

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

Appendix にいれたいもの

- 経路積分の途中計算
- 2次元のポテンシャル面が虚時間上で極小値に落ちていく図をのせる
- tr の計算過程
- α 崩壊の理論や WKB 近似の理論についての説明
- HF 方程式を載せる
- スレーター行列式とは