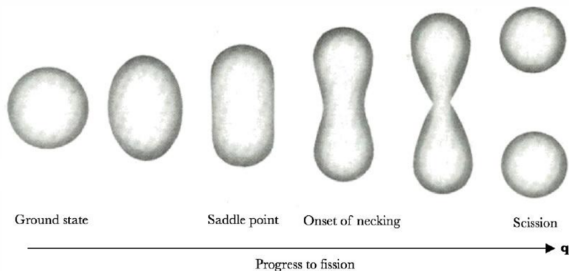


J.W.Negele, Nuclear Mean-Field Theory, Physics Today 38, 24(1985)



松本侑真
原子核理論 関澤研究室

July 10, 2023

UNIVERSITY OF CAMBRIDGE,
A new model for nuclear fission reactions at high energies published in Physical Review C,
<https://www.ceb.cam.ac.uk/news/news-list/new-model-for-nuclear-fission-physical-review-c>

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

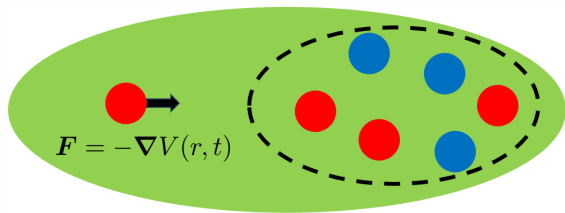
J.W.Negele, Nuclear Mean-Field Theory, Physics Today 38, 24(1985)
では

- 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 (^8Be) の核分裂に応用する

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の平均ポテンシャルとして扱う手法
- 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
- 原子核の振動・回転・変形等の励起を、**核子の自己無撞着な集団運動**として記述できる



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 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 Slater 行列式で表されるという近似を用いている
 - 複数の Slater 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と考えられる
- 自発核分裂のような**多体のトンネル現象**を記述できない
 - 平均場が 1 つしかなく、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

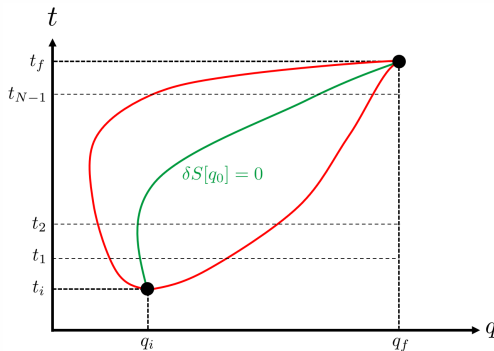
経路積分＋虚時間法で核分裂反応を記述する

経路積分を使う理由

- 虚時間法により、多体のトンネル現象を記述できる
- 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、

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

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

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

- $q(0) = q(T)$ 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（バリアを透過して核分裂を起こす状態）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。鞍点法を用いると

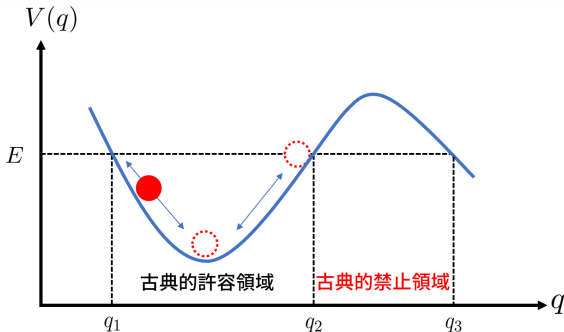
$$\begin{aligned} \int_0^\infty dT e^{iET} \underbrace{\int dq \int \mathcal{D}q e^{iS[q]}}_{\approx A e^{iS[q_0(T)]}} &\approx \int_0^\infty dT A e^{i(ET + S[q_0(T)])} \\ &\approx A \sum_{m=1}^{\infty} e^{im\pi} \left(e^{iW(T)} \right)^m \propto \frac{e^{iW(T)}}{1 + e^{iW(T)}} \end{aligned}$$

- $\delta S[q_0(T)] = 0$ 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

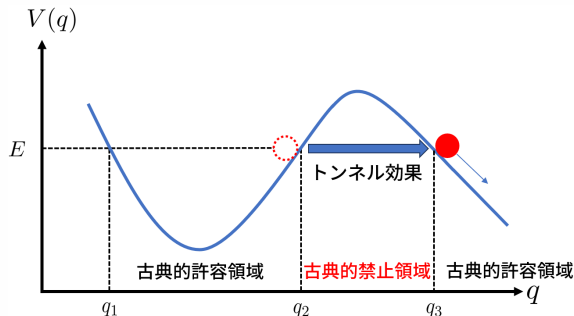
1つの極小値を持つポテンシャル $V(q)$ 内を全エネルギー E の元で運動する1粒子について考える

- $m \frac{d^2 q_0}{dt^2} = -\nabla V(q_0)$
- $E - V(q) \geq 0$ の古典的許容領域で周期 $T(E)$ 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

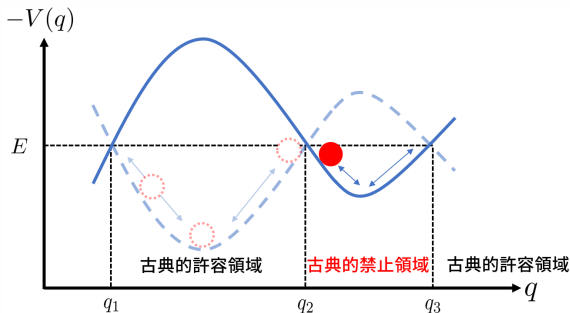
- 先ほどは $V(q)$ の極小値まわりの周期運動のみを考えていた
- 量子力学的には、トンネル効果によってポテンシャル障壁（**古典的禁止領域**）を透過する
- トンネル効果を記述するために虚時間法を用いる



1 粒子系での例

時間 t を純虚数にする $it \rightarrow \tau \in \mathbb{R}$ という変換 (Wick rotation, i は虚数単位) を導入するとトンネル効果が考慮できる (虚時間法)

- $m \frac{d^2 q_0}{d\tau^2} = -\nabla[-V(q_0)]$
- 反転したポテンシャル内で
古典的禁止領域 $q_2 \leq q \leq q_3$
を運動しているように見える
- 虚時間で $\delta S[q_0] = 0$ が成立しており、鞍点法では考慮する必要がある



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

$W_1(E)$ は実時間、 $W_2(E)$ 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

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

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

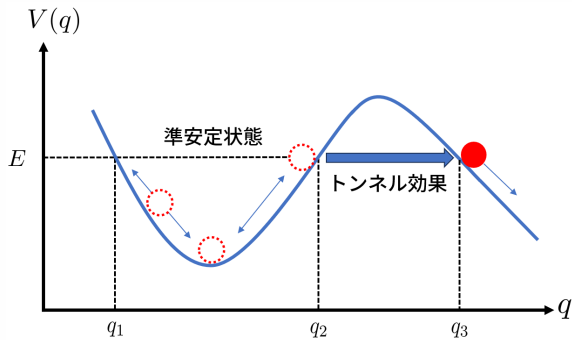
1 次の Taylor 展開で近似

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

1 粒子系での例（まとめ）

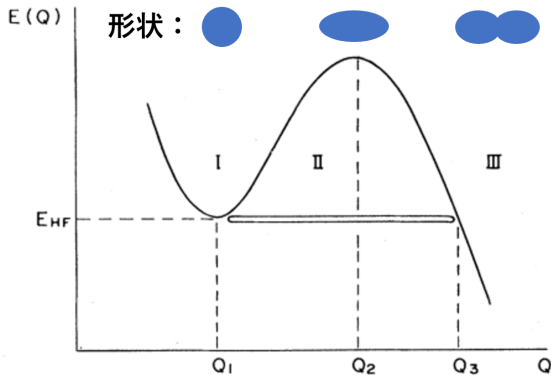
- 古典的な基底状態は**準安定状態**
- 虚時間に経路積分を適用するとトンネル効果が記述できる
- q_3 にトンネリングした後は q が増大する方向へ実時間発展
- 時刻 t の状態 $|\psi(t)\rangle$ が準安定状態 $|q\rangle$ で観測される確率 $P(t)$ は、 $E = E_n^0 - i\Gamma_n/2$ より

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

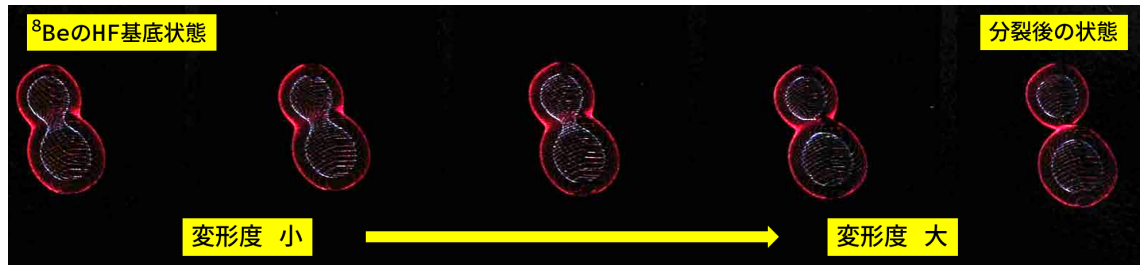


核子多体系に適用する

- 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つの粒子に分裂した状態
- 本論文では、具体的な議論がなされていない
- 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

まとめと今後の展望

- **平均場理論＋経路積分でトンネル効果を記述できる**
- 1 粒子系での例では、WKB 近似の結果を再現できた
- 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
- 卒研で 1 次元の HF 計算を行い、虚時間法でトンネル現象の記述を試みる

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 : Slater 行列式について

- 同一の N 個 ($N \geq 2$) の粒子からなる全体系の波動関数は、 i 番目の粒子の状態 $|\phi_i\rangle$ を用いて $|\phi_1\rangle|\phi_2\rangle\cdots|\phi_N\rangle$ と表される。
- 構成粒子が Fermi 粒子の場合、全体系の波動関数 $|\Psi\rangle_A$ は任意の 2 つの粒子の入れ替えに対して反対称になるという要請から、 N 次置換群を \mathfrak{S}_N として、

$$|\Psi\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_N} \text{sgn}(\sigma) |\phi_{\sigma(1)}\rangle^{(1)} |\phi_{\sigma(2)}\rangle^{(2)} \cdots |\phi_{\sigma(N)}\rangle^{(N)}$$

と表される。これは、行列式を用いて表現することができる：

$$|\Psi\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{bmatrix} |\phi_1\rangle^{(1)} & |\phi_2\rangle^{(1)} & \cdots & |\phi_N\rangle^{(1)} \\ |\phi_1\rangle^{(2)} & |\phi_2\rangle^{(2)} & \cdots & |\phi_N\rangle^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ |\phi_1\rangle^{(N)} & |\phi_2\rangle^{(N)} & \cdots & |\phi_N\rangle^{(N)} \end{bmatrix}$$

この行列式を Slater 行列式と呼ぶ。

Appendix : Hartree-Fock 変分問題

エネルギー変分問題

N 体 Fermi 粒子系 X の Hilbert 空間 $\mathcal{H}_A^{(N)}$ の任意の規格化された状態 $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_A^{(N)}$ に対して、エネルギー汎関数 $E[|\Psi\rangle]$ を系 X の Hamilton 演算子 \hat{H} の期待値として定義する：

$$E[|\Psi\rangle] := \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \quad \left(|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_A^{(N)}, \langle \Psi | \Psi \rangle = 1 \right)$$

規格化された状態 $|\Psi\rangle$ を $\mathcal{H}_A^{(N)}$ 全体で動かして、エネルギー汎関数 $E[|\Psi\rangle]$ が $|\Psi\rangle = |\Psi_*\rangle$ で最小値を取ったならば、 $|\Psi_*\rangle = |\Psi_g\rangle$, $E[|\Psi_*\rangle] = E_g$ が成立する。
(系の厳密な基底状態を $|\Psi_g\rangle$ 、基底エネルギーを E_g とした。)

HF 変分問題

変分に用いる状態 $|\Psi\rangle$ を、互いに直交している規格化された N 個の 1 粒子状態 $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \dots, |\phi_N\rangle \in \mathcal{H}_{\text{single}}$ を用いた 1 つの Slater 行列式 $|\Psi\rangle_A$ に制限したエネルギー変分問題が HF 変分問題であり、 $|\Psi_*\rangle = |\Psi^{\text{HF}}\rangle$ を HF 状態と呼ぶ。

Appendix : Hartree-Fock 方程式

Lagrange の未定乗数 $\lambda_{ij} \in \mathbb{C}$ ($i \leq i, j \leq N$) を導入して書き換えた HF 変分問題

$$\frac{\delta}{\delta |\Psi\rangle} \left[\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \underbrace{\lambda_{ij} (\langle \phi_i | \phi_j \rangle - \delta_{ij})}_{\text{拘束条件}} \right] = 0$$

を満たす解 $|\Psi^{\text{HF}}\rangle$ が HF 方程式で与えられる。変分計算により、以下の HF 方程式を得る：

$$\int d\mathbf{r}' \hat{h}_{\text{HF}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_i(\mathbf{r}') = \varepsilon_i \phi_i(\mathbf{r})$$

$\hat{h}_{\text{HF}} \in \mathcal{H}_{\text{single}}$ は Fock 演算子と呼ばれる。

Fock 演算子は、1 粒子演算子 $\hat{t}(\mathbf{r})$ 、Hartree 項 $\hat{\Gamma}_{\text{H}}(\mathbf{r})$ 、Fock 項 $\hat{\Gamma}_{\text{F}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ を用いて

$$\hat{h}_{\text{HF}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') := \left[\hat{t}(\mathbf{r}') + \hat{\Gamma}_{\text{H}}(\mathbf{r}') \right] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \hat{\Gamma}_{\text{F}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$$

と定義される。

Appendix : Hartree-Fock 方程式

1 粒子演算子 $\hat{t}(\mathbf{r})$ 、Hartree 項 $\hat{\Gamma}_H(\mathbf{r})$ 、Fock 項 $\hat{\Gamma}_F(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ は、HF 方程式の解 $\phi_i(\mathbf{r})$ ($1 \leq i \leq N$) に依存する：

$$\hat{\Gamma}_H(\mathbf{r}) := \int d\mathbf{r}' \hat{v}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}'), \quad \hat{\Gamma}_F(\mathbf{r}, \mathbf{r}') := \hat{v}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$$

$$\rho(\mathbf{r}) := \sum_{i=1}^N |\phi_i(\mathbf{r})|^2, \quad \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') := \sum_{i=1}^N \phi_i(\mathbf{r}) \phi_i^*(\mathbf{r}')$$

したがって、

- ❶ 初期波動関数 $\phi_i^0(\mathbf{r})$ ($1 \leq i \leq N$) を与えて \hat{h}_{HF}^0 を計算し、HF 方程式を解く。
- ❷ HF 方程式の解 $\phi_i^1(\mathbf{r})$ ($1 \leq i \leq N$) から \hat{h}_{HF}^1 を計算し、HF 方程式を更新する。
- ❸ 解が収束するまで更新を繰り返し、所望の精度で収束したときの解 $\phi_i(\mathbf{r})$ ($1 \leq i \leq N$) を用いた Slater 行列式が HF 状態 $|\Psi^{\text{HF}}\rangle$ となる。

Appendix : 鞍点法を用いたトレースの計算過程

$$\begin{aligned}
 \text{tr} \frac{1}{E - \hat{H} + i\eta} &\propto \sum_{klm} \underbrace{f_{klm}}_{=(-1)^{k+l+m}} e^{ikW_1(T) - lW_2(T) + imW_3(T)} \\
 &= \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ -e^{iW_1} \sum_{l=0}^{\infty} \left[-e^{-W_2} \sum_{m=0}^{\infty} (-e^{iW_3})^m \right]^l \right\}^k \\
 &\quad + \sum_{l=1}^{\infty} \left\{ -e^{-W_2} \sum_{m=0}^{\infty} \left[-e^{iW_3} \sum_{k=0}^{\infty} (-e^{iW_1})^k \right]^m \right\}^l \\
 &\quad + \sum_{m=1}^{\infty} \left\{ -e^{iW_3} \sum_{k=0}^{\infty} \left[-e^{iW_1} \sum_{l=0}^{\infty} (-e^{-W_2})^l \right]^k \right\}^m \\
 &= \frac{-2e^{i(W_1+W_3)} - e^{iW_1} - e^{-W_2} - e^{iW_3}}{(1 + e^{iW_1})(1 + e^{iW_3}) + e^{-W_2}} \xrightarrow{W_3 \rightarrow 0} \frac{-3e^{iW_1} - e^{-W_2}}{1 + e^{iW_1} + e^{-W_2}}
 \end{aligned}$$