

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

松本侑真

June 30, 2023

① 背景

② 目的

③ 手法

④ 結果

⑤ まとめ

⑥ アルゴリズム

① 背景

② 目的

③ 手法

④ 結果

⑤ まとめ

⑥ アルゴリズム

# 核分裂について

- 核分裂についての説明
- 図とかをいれる
- 重い元素と軽い元素どちらでも起こる？  $\text{Be}^8$  の核分裂と  $\text{U}^{235}$  の分裂の仕組みは同じ？
- トンネル効果

# 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。(Ising 模型の平均場理論や Hartree-Fock 近似)
- 時間依存の HF 方程式 (TDHF 方程式) は、時間依存 Schrödinger 方程式の制約付き変分問題として導出される。
- TDHF は比較的簡単に扱える第一原理計算手法である。

## 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。
- 重い原子核の核分裂反応を正しく記述できない。
  - 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。

① 背景

② 目的

③ 手法

④ 結果

⑤ まとめ

⑥ アルゴリズム

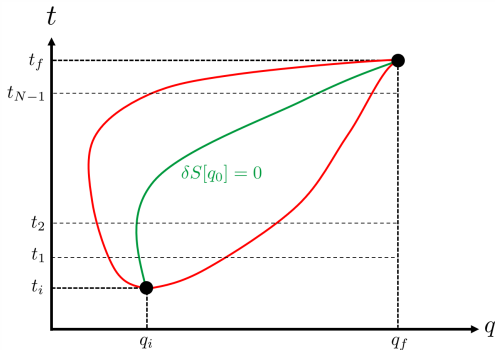
# 平均場理論の枠組みで核分裂反応を記述する

## 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
- 近似手法がある程度確立している（定常位相近似 (SPA)、鞍点法）

## 経路積分のイメージ

- 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が寄与する
- 古典的に実現する経路  $q_0(t)$  からの寄与が最も大きい
- $q_0(t)$  は Euler-Lagrange 方程式の解となっている



# 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

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

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



# 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。

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

## 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。

① 背景

② 目的

③ 手法

④ 結果

⑤ まとめ

⑥ アルゴリズム

# エネルギー固有値を求める

位置座標  $q$  に対応する状態  $|q\rangle$  を用いて

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

- SPA で右辺を計算し、極を与える  $E$  を求める。
- $\delta S[q_0] = 0$  のとき、 $q_0$  は Euler-Lagrange 方程式の解となる。
- $q(0) = q(T)$  の境界条件を満たしている。(周期運動)

# 1 粒子の 1 次元系でのトンネル効果

① 背景

② 目的

③ 手法

④ 結果

⑤ まとめ

⑥ アルゴリズム

① 背景

② 目的

③ 手法

④ 結果

⑤ まとめ

⑥ アルゴリズム

① 背景

② 目的

③ 手法

④ 結果

⑤ まとめ

⑥ アルゴリズム

# アルゴリズムサンプル

## Matrix Multiplication

```
1:  $C = O$ 
2: for  $i = 1, \dots, m$  :
3:   for  $j = 1, \dots, n$  :
4:     for  $k = 1, \dots, r$  :
5:        $C[i, j] = C[i, j] + A[i, k] \cdot B[k, j]$ 
6: return  $C$ 
```