

SkyAx の実装のためのメモ

20B01392 松本侑真

2023 年 11 月 15 日

概要

SkyAx では、平均場理論を用いて原子核の基底状態における様々な性質を計算することができる。SkyAx は Hartree-Fock 方程式を軸対称性を課した 2 次元の空間自由度の元で計算するプログラムである。本稿では、SkyAx の実装にあたってのメモを記す。

目次

1	The Skyrme-Hartree-Fock theory	2
1.1	Local densities and currents	2
2	コードの実装のために	3
2.1	spin-orbit density	3
3	式変形など	3
4	初期波動関数の配置方法	5
4.1	Nillson モデルについて	6

1 The Skyrme-Hartree-Fock theory

The single-particle basis

平均場理論では、1 粒子波動関数 ψ_α と、占有確率振幅 v_α の組

$$\{\psi_\alpha, v_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, \Omega\} \quad (1.1)$$

によって、原子核の基底状態を記述する。ここで、 Ω は 1 粒子波動関数と、占有確率振幅 $0 \leq v_\alpha \leq 1$ の個数である。非占有確率は $u_\alpha = \sqrt{1 - v_\alpha^2}$ と定義される。BCS の多体状態は、

$$|\Phi\rangle = \prod_{\alpha>0} (u_\alpha + v_\alpha a_\alpha^\dagger a_{\bar{\alpha}}^\dagger) |0\rangle \quad (1.2)$$

と構成される。ここで、 $\bar{\alpha}$ は α の時間反転対称な状態である。 a_α^\dagger は、 ψ_α の状態にあるフェルミオンの生成演算子である。

1.1 Local densities and currents

Skyrme-energy-density functional は、いつかの局所的な密度と流れに依存する。これらの密度と流れは、1 粒子波動関数 ψ_α と、占有確率振幅 v_α の組によって決定される。今回は、時間反転対称性を課しているため、time-odd な項 (current, spin density) は無視する。密度と流れは、

$$\rho_\alpha(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha \in q} \sum_s v_\alpha^2 |\psi_\alpha(\mathbf{r}, s)|^2 \quad \text{density} \quad (1.3)$$

$$\mathbf{J}_\alpha(\mathbf{r}) = -i \sum_{\alpha \in q} \sum_{ss'} v_\alpha^2 \psi_\alpha^*(\mathbf{r}, s) \nabla \times \boldsymbol{\sigma}_{ss'} \psi_\alpha(\mathbf{r}, s) \quad \text{spin-orbit density} \quad (1.4)$$

$$\tau_q(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha \in q} \sum_s v_\alpha^2 |\nabla \psi_\alpha(\mathbf{r}, s)|^2 \quad \text{kinetic energy density} \quad (1.5)$$

$$\xi_q(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha \in q} \sum_s w_\alpha u_\alpha v_\alpha \psi_{\bar{\alpha}}(\mathbf{r}, s) \psi_\alpha(\mathbf{r}, s) \quad \text{pairing density} \quad (1.6)$$

と定義される。 w_α は対相関の soft cutoff であり、 q は原子核の種類のラベルである。 $q = p$ は陽子、 $q = n$ は中性子である。変数 $s \in \pm 1$ は波動関数のスピノル部分である。今後、全密度や全流束をよく用いるが、これは核子のラベルがない物理量で表す。例えば、全局所密度は

$$\rho = \rho_p + \rho_n \quad (1.7)$$

である。

Skyrme-Hartree-Fock の実装について

Skyrme-Hartree-Fock は以下の式である：

$$\hat{h}\psi_\alpha = \varepsilon_\alpha \psi_\alpha \quad (1.8)$$

$$\hat{h}_q = U_q(\mathbf{r}) - \nabla \cdot [B_q(\mathbf{r}) \nabla] + i \mathbf{W}_q \cdot (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla) \quad (1.9)$$

\hat{h}_q の内訳として、

$$\begin{aligned} U_q(\mathbf{r}) = & b_0 \rho - b'_0 \rho_q + b_1 \tau - b'_1 \tau_q - b_2 \Delta \rho + b'_2 \Delta \rho_q + b_3 \frac{\gamma + 2}{3} \rho^{\gamma+1} - b'_3 \frac{2}{3} \rho^\gamma \rho_q \\ & - b'_3 \frac{\gamma}{3} \rho^{\gamma-1} \sum_{q'} \rho_{q'}^2 - b_4 \nabla \cdot \mathbf{J} - b'_4 \nabla \cdot \mathbf{J}_q + \delta_{pq} \left(U_C \frac{e^2}{2} \int dV' \frac{\rho_p(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - e^2 \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \rho_p^{1/3} \right) \end{aligned} \quad (1.10)$$

$$B_q(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{2m_q} + b_1\rho - b'_1\rho_q \quad (1.11)$$

$$\mathbf{W}_q(\mathbf{r}) = b_4\nabla\rho + b'_4\nabla\rho_q - 2c_1\mathbf{J} + 2c'_1\mathbf{J}_q \quad (1.12)$$

である。

2 コードの実装のために

2.1 spin-orbit density

spin-orbit density の ss' の和について考える。まず、

$$\nabla \times \boldsymbol{\sigma}_{ss'} = \begin{pmatrix} \sigma_{ss'}^z \frac{\partial}{\partial y} - \sigma_{ss'}^y \frac{\partial}{\partial z} \\ \sigma_{ss'}^x \frac{\partial}{\partial z} - \sigma_{ss'}^z \frac{\partial}{\partial x} \\ \sigma_{ss'}^y \frac{\partial}{\partial x} - \sigma_{ss'}^x \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

$$\sum_{ss'} \psi_\alpha^*(\mathbf{r}, s) \nabla \times \boldsymbol{\sigma}_{ss'} \psi_\alpha(\mathbf{r}, s) = \quad (2.2)$$

3 式変形など

$$\hat{h}_q = U_q(\mathbf{r}) - \nabla \cdot [B_q(\mathbf{r})\nabla] + i\mathbf{W}_q \cdot (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla) \quad (3.1)$$

U_q を求めるためには $\nabla \cdot \mathbf{J}_q$ の計算が必要。そのための計算は波動関数の 1 階微分のみで計算できる。 $m_\alpha^{(-)} = m_\alpha^{(+)} + 1 = m_\alpha + 1$ として、

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_q = \sum_{\alpha \in q} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \psi_\alpha)^\dagger (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \psi_\alpha) - \tau_q \quad (3.2)$$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \psi_\alpha = \begin{pmatrix} \nabla_z \psi_\alpha^{(+)} + (\nabla_r + m_\alpha^{(-)}/r) \psi_\alpha^{(-)} \\ [-\nabla_z \psi_\alpha^{(-)} + (\nabla_r - m_\alpha^{(+)} / r) \psi_\alpha^{(+)}] e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{im\phi} \quad (3.3)$$

$$\tau_q = \sum_{\alpha \in q} (\nabla \psi_\alpha)^\dagger \cdot (\nabla \psi_\alpha) = \sum_{\alpha, \pm} \left\{ \left| \nabla_z \psi_\alpha^{(\pm)} \right|^2 + \left| \nabla_r \psi_\alpha^{(\pm)} \right|^2 + \left(\frac{m_\alpha^{(\pm)}}{r} \right)^2 \left| \psi_\alpha^{(\pm)} \right|^2 \right\} \quad (3.4)$$

パウリ行列との外積

$$(\nabla \times \boldsymbol{\sigma})_r \psi_\alpha = (\nabla_\phi \sigma_z - \nabla_z \sigma_\phi) \psi_\alpha = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} \partial_\phi \psi^+ e^{im\phi} \\ -\partial_\phi \psi^- e^{i(m+1)\phi} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \partial_z (-i\psi^- e^{im\phi}) \\ \partial_z (i\psi^+ e^{i(m+1)\phi}) \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

$$= \begin{pmatrix} i\frac{m}{r} \psi^+ e^{im\phi} + i\partial_z \psi^- e^{im\phi} \\ -i\frac{m+1}{r} \psi^- e^{i(m+1)\phi} - i\partial_z \psi^+ e^{i(m+1)\phi} \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

$$= \begin{pmatrix} i(\frac{m}{r} \psi^+ + \partial_z \psi^-) e^{im\phi} \\ -i(\frac{m+1}{r} \psi^- + \partial_z \psi^+) e^{i(m+1)\phi} \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

$$(\nabla \times \boldsymbol{\sigma})_\phi \psi_\alpha = (\nabla_z \sigma_r - \nabla_r \sigma_z) \psi_\alpha = \begin{pmatrix} \partial_z \psi^- e^{im\phi} \\ \partial_z \psi^+ e^{i(m+1)\phi} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \partial_r (\psi^+ e^{im\phi}) \\ \partial_r (-\psi^- e^{i(m+1)\phi}) \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

$$= \begin{pmatrix} \partial_z \psi^- e^{im\phi} - \partial_r \psi^+ e^{im\phi} \\ \partial_z \psi^+ e^{i(m+1)\phi} + \partial_r \psi^- e^{i(m+1)\phi} \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

$$= \begin{pmatrix} (\partial_z \psi^- - \partial_r \psi^+) e^{im\phi} \\ (\partial_z \psi^+ + \partial_r \psi^-) e^{i(m+1)\phi} \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

$$(\nabla \times \boldsymbol{\sigma})_z \psi_\alpha = (\nabla_r \sigma_\phi - \nabla_\phi \sigma_r) \psi_\alpha = \begin{pmatrix} \partial_r (-i\psi^- e^{im\phi}) \\ \partial_r (i\psi^+ e^{i(m+1)\phi}) \end{pmatrix} - \frac{1}{r} \begin{pmatrix} \partial_\phi \psi^- e^{im\phi} \\ \partial_\phi \psi^+ e^{i(m+1)\phi} \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

$$= \begin{pmatrix} -i(\partial_r + m/r) \psi^- e^{im\phi} \\ i(\partial_r - (m+1)/r) \psi^+ e^{i(m+1)\phi} \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

すなわち、 $A, B \in \mathbb{R}$ として、 r, z 成分は

$$(\nabla \times \boldsymbol{\sigma})_{r,z} \psi_\alpha = \begin{pmatrix} iAe^{im\phi} \\ iBe^{i(m+1)\phi} \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

の形になっており、 ϕ 成分のみ

$$(\nabla \times \boldsymbol{\sigma})_\phi \psi_\alpha = \begin{pmatrix} Ae^{im\phi} \\ Be^{i(m+1)\phi} \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

の形になっている。したがって、

$$\psi_\alpha^\dagger (\nabla \times \boldsymbol{\sigma})_\phi \psi_\alpha = (\psi_{\alpha,\uparrow}^* (r, z) e^{-im\phi} \quad \psi_{\alpha,\downarrow}^* (r, z) e^{-i(m+1)\phi}) \begin{pmatrix} Ae^{im\phi} \\ Be^{i(m+1)\phi} \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

$$= \psi_{\alpha,\uparrow} A + \psi_{\alpha,\downarrow} B + \psi_{\alpha,\uparrow} B e^{i\phi} + \psi_{\alpha,\downarrow} A e^{-i\phi} \quad (3.16)$$

となる。

$$\mathbf{J}_q(\mathbf{r}) = \frac{1}{2i} \sum_{\alpha \in q} (\psi_\alpha^\dagger (\nabla \times \boldsymbol{\sigma}) \psi_\alpha - \psi_\alpha^\top (\nabla \times \boldsymbol{\sigma}) \psi_\alpha^*) = \text{Im} \left\{ \sum_{\alpha \in q} (\psi_\alpha^\dagger (\nabla \times \boldsymbol{\sigma}) \psi_\alpha) \right\} \quad (3.17)$$

であるため、計算をすると

$$J_{r,z} = \text{Im} + (\psi_\uparrow B + \psi_\downarrow A) \cos \phi \quad (3.18)$$

$$J_\phi = (\psi_\uparrow B + \psi_\downarrow A) \sin \phi \quad (3.19)$$

となる。

4 初期波動関数の配置方法

原子核の半径 R は核子数 A について、 $r_0 = 1.2 \text{ fm}$ とすると

$$R = r_0 A^{1/3} \quad (4.1)$$

と表される。したがって、各核子の中心位置 (r_i, z_i) を半径 R の円内にランダムに配置するには、

$$r_i = R\sqrt{v_i} \cos(2\pi u_i), \quad z_i = R\sqrt{v_i} \sin(2\pi u_i) \quad (4.2)$$

とすればよい。ここで、 u_i, v_i は $[0, 1]$ の一様乱数である。次に、波動関数の形を決定する。ガウス型の波動関数を用いて、

$$\psi_i = \exp\left(-\frac{1}{2a_0^2} [(r - r_i)^2 - (z - z_i)^2]\right) \quad (4.3)$$

と表す。 a_0 は波動関数の広がりを表すパラメータになる。

4.1 Nillson モデルについて

軸対称の調和振動子模型のハミルトニアンは

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + \frac{1}{2} \mu \omega^2 (r^2 + z^2) \quad (4.4)$$

と表される。これを円筒座標系で考えると、 $\alpha = \sqrt{\mu\omega/\hbar}$ として一般解が

$$R_{n_r}(r) = N_{n_r} r^{|m|} e^{-\alpha^2 r^2/2} L_{n_r}^{|m|}(\alpha^2 r^2) \quad (4.5)$$

$$Z_{n_z}(z) = N_{n_z} e^{-\alpha^2 z^2/2} H_{n_z}(\alpha z) \quad (4.6)$$

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \quad (4.7)$$

として、

$$\Psi_{n_r, n_z, m} = R_{n_r}(r) Z_{n_z}(z) \Phi_m(\phi) \quad (4.8)$$

と表される。 L_n^m は Laguerre 多項式、 H_n は Hermite 多項式である。 N_{n_r}, N_{n_z} は規格化定数である。Hermite 多項式の規格化は

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) dx = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{nm} \quad (4.9)$$

である。したがって、 $Z_{n_z}(z)$ の規格化条件は

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left| N_{n_z} e^{-\alpha^2 z^2/2} H_{n_z}(\alpha z) \right|^2 dz = N_{n_z}^2 \sqrt{\pi} 2^{n_z} n_z! = 1 \quad (4.10)$$

となる。また、Hermite 多項式の漸化式は

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x) \quad (4.11)$$

である。これを用いると、

$$\begin{aligned} Z_{n_z+1}(z) &= N_{n_z+1} e^{-\alpha^2 z^2/2} H_{n_z+1}(\alpha z) = N_{n_z+1} e^{-\alpha^2 z^2/2} (2\alpha z H_{n_z}(\alpha z) - 2n_z H_{n_z-1}(\alpha z)) \\ &= \frac{N_{n_z+1}}{N_{n_z}} \times 2\alpha z \times Z_{n_z}(z) - \frac{N_{n_z+1}}{N_{n_z-1}} \times 2n_z \times Z_{n_z-1}(z) \\ &= \sqrt{\frac{2}{n+1}} \alpha z Z_{n_z}(z) - \sqrt{\frac{n_z}{n_z+1}} Z_{n_z-1}(z) \end{aligned} \quad (4.12)$$

を得る。これで、すべての n_z についての波動関数が求まる。

また、Laguerre 多項式の規格化は

$$\int_0^{\infty} e^{-x} x^m L_n^m(x) L_m^m(x) dx = \frac{(n+m)!}{n!} \delta_{nm} \quad (4.13)$$

動径方向について

動径方向の波動関数は、 $\Phi_m(\phi) \propto e^{im\phi}$ なので

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{m^2}{r^2} \right) R_{n_r}(r) + \frac{1}{2} \mu \omega^2 r^2 R_{n_r}(r) = E_{n_r} R_{n_r}(r) \quad (4.14)$$

となる。 $x = \alpha r$ と変数変換をすると

$$\left[-\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{m^2}{x^2} \right) + x^2 \right] R_{n_r}(x) = \frac{2E_{n_r}}{\hbar\omega} R_{n_r}(x) \quad (4.15)$$

となる。

$$R_{n_r}(x) = \frac{u_{n_r}(x)}{x} \quad (4.16)$$

とおくと、

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \left(\frac{m^2}{x^2} + x^2 - \frac{2E_{n_r}}{\hbar\omega} \right) \right] u_{n_r}(x) = 0 \quad (4.17)$$

を得る。この一般解は

$$u(x) = x^{m+1} \quad (4.18)$$

動径方向わからない