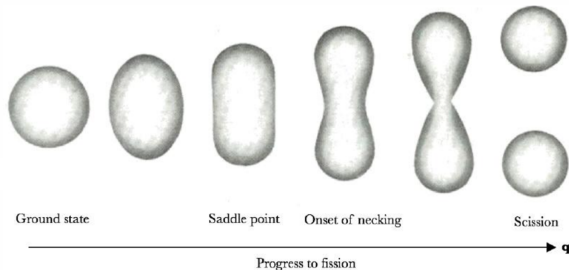


# 軸対称 Skyrme TDHF を用いた トンネル確率の計算



松本侑真

原子核理論 関澤研究室

December 11, 2023

UNIVERSITY OF CAMBRIDGE,

A new model for nuclear fission reactions at high energies published in Physical Review C,

<https://www.csb.cam.ac.uk/news/news-list/new-model-for-nuclear-fission-physical-review-c>

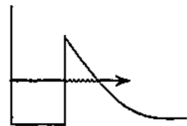
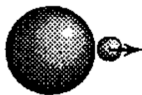
# 研究概要

- 3次元空間で軸対称性を課した原子核において、平均場理論に基づいた原子核の基底状態を求める自作プログラムを作成する。
- 完成したプログラムを用いて、実時間発展ではトンネル効果を再現できないことを確認する。
- 虚時間発展を組み込んで、平均場理論の枠組みでトンネル確率を計算することを目指す。

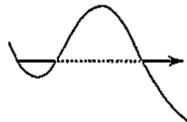
# 背景

- 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 $\alpha$ 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

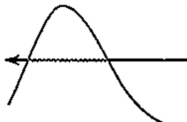
アルファ崩壊



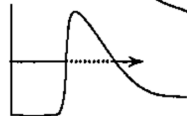
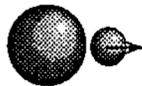
核分裂



サブバリアー核融合



重粒子崩壊



# 背景

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し、1 粒子系において WKB 近似の結果の再現
- 少数核子系 ( $^8\text{Be}$ ) の核分裂の応用

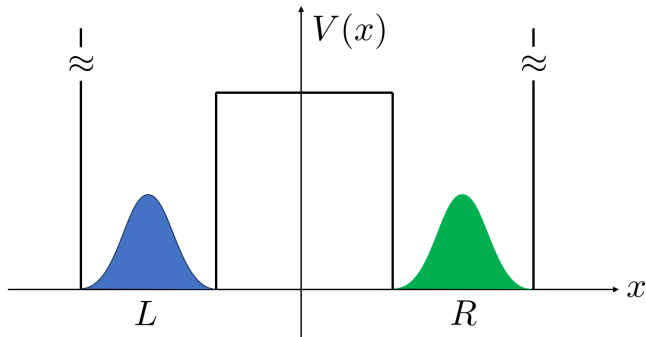
を行っている。しかし、結果の定量的な評価はしておらず、計算精度などの詳細はよくわからない。

# 背景

Patrick M. et al., Phys. Rev. C 102, 064614 (2018) では

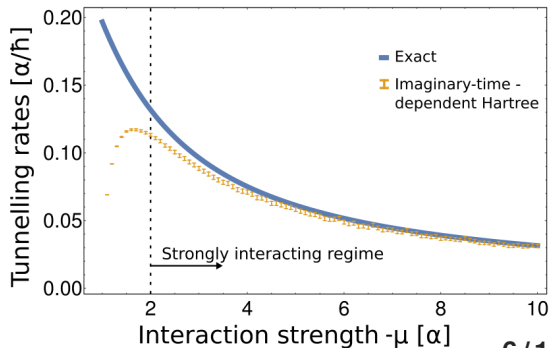
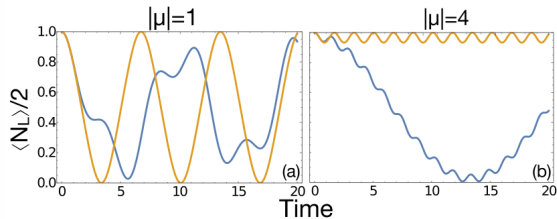
- Toy model (1次元の二重井戸モデル) において、虚時間法の平均場理論を用いたトンネル確率の計算
- 実時間発展では正しく計算できないことの確認

を行っている。



# 背景

- 実時間発展では、**厳密解**と**計算値**の結果が異なる
- 虚時間発展では、相互作用が強いほど**厳密解**に近づく
- 右図のような結果を**現実的な原子核系**で再現することが研究の目標である。



# 研究手法：基底状態の求め方

- Skyrme 型の相互作用を入れた Hartree-Fock (SHF) 方程式を解いて原子核の基底状態を求める

## SHF の解き方

- ① 一粒子波動関数（スピノル） $\psi_\alpha$  から、密度

$$\rho(r, z), \mathbf{J}(r, z), \tau(r, z) \quad (1)$$

を計算する。

- ② 各密度で表される平均場

$$U(r, z), \mathbf{W}(r, z), B(r, z) \quad (2)$$

を計算する。

- ③ 平均場で構成される一粒子ハミルトニアン  $\hat{h}_q$  を用いて、基底状態のスピノルを求める。

# 研究手法：基底状態の求め方

密度や平均場が軸対称性を持つとき、スピノルは以下のように表される。

$$\psi_{\alpha}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_{\alpha}^{+}(\mathbf{r}) \\ \psi_{\alpha}^{-}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{\alpha}^{+}(r, z) e^{im_{\alpha}\phi} \\ f_{\alpha}^{-}(r, z) e^{i(m_{\alpha}+1)\phi} \end{pmatrix} \quad (3)$$

このスピノルによって、密度は以下のように計算できる。

$$\rho(r, z) = \sum_{\alpha} \left[ |f_{\alpha}^{+}(\mathbf{r})|^2 + |f_{\alpha}^{-}(\mathbf{r})|^2 \right], \quad \mathbf{J}(r, z) = \sum_{\alpha} \text{Im}[\psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r})(\nabla \times \boldsymbol{\sigma})\psi_{\alpha}(\mathbf{r})], \quad (4)$$

$$\tau(r, z) = \sum_{\alpha} \left[ |\nabla f_{\alpha}^{+}(\mathbf{r})|^2 + |\nabla f_{\alpha}^{-}(\mathbf{r})|^2 \right] \quad (5)$$



# 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 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ことが知られている
- 核分裂反応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

# 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 ( $^{238}\text{U}$  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  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$  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 : 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：

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

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

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

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  $\hat{h}_{\text{HF}}^0$  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  $\hat{h}_{\text{HF}}^1$  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

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