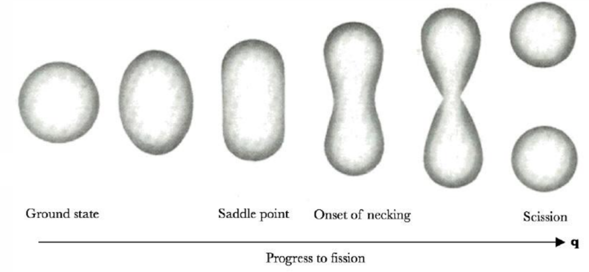
軸対称 Skyrme TDHF を用いたトンネル確率の計算

松本侑真
原子核理論 関澤研究室

December 15, 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

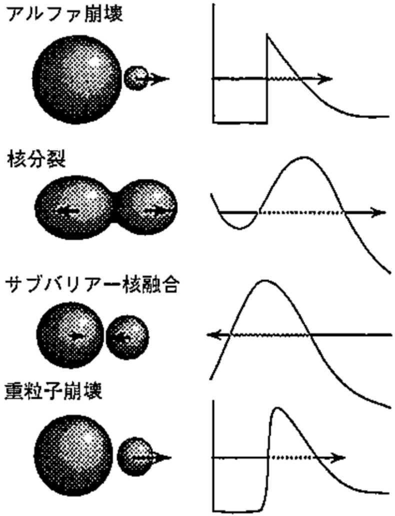
研究概要

- 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 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

- **本研究の目的：** 平均場理論に虚時間法を適用し、核子自由度から微視的に多体のトンネル現象を記述すること



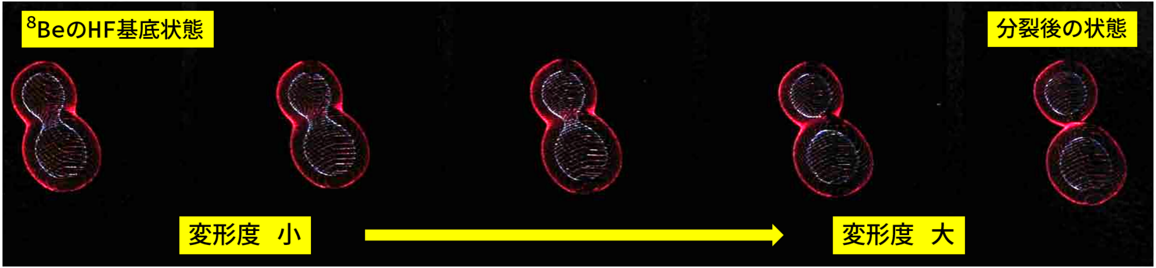
日本原子力研究開発機構 岩本昭 基礎科学ノート Vol.5 No.1(1998)

背景

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

- 平均場理論＋虚時間法の経路積分を用いて、1 粒子系のトンネル現象で WKB 近似の結果を再現
- 少数核子系（^{8}Be）の α 崩壊の計算に応用

を行っている。しかし、結果の定量的な評価はしておらず、詳細は述べられていない。

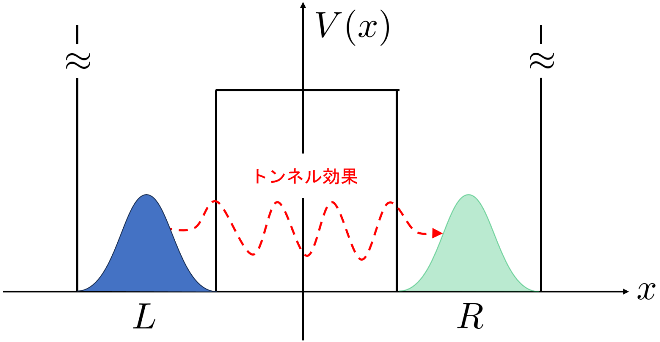


背景

P. McGlynn and C. Simenel, 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、$L \to R$ へのトンネル確率を虚時間法の平均場理論を用いて計算
  - 2 粒子系が L もしくは R の領域に束縛される場合を考えている
- 実時間発展ではトンネル確率を正しく計算できないことの確認

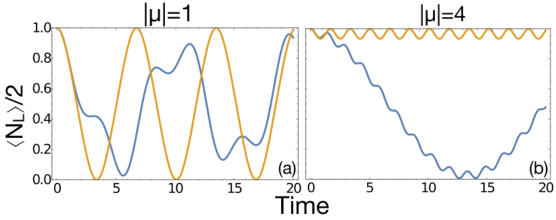
を行っている。

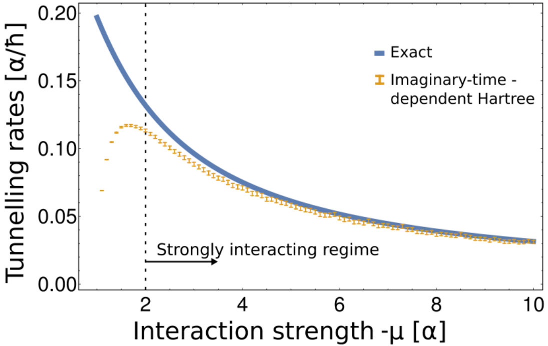


- あとでトンネル確率の式を説明するスライドを作成する

背景

- 実時間発展（上図）では、厳密解と計算値の結果が異なる
- 虚時間発展（下図）では、相互作用が強いほど厳密解に近づく
    - μ は 2 粒子の波動関数が同じ井戸に存在する場合の引力相互作用の強さ
- 下図のような結果を**現実的な原子核系**で再現することが研究の目標である。





理論的枠組み：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

トンネル現象を記述するためには何らかの工夫をする必要があり、そのための手法を開発することが研究の目標である。

- 経路積分＋虚時間法のことも説明する

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. 核子の一粒子波動関数（スピノル）ψ_α から、密度

$$\rho(r,z),\ \boldsymbol{J}(r,z),\ \tau(r,\ z) \tag{1}$$

を計算する。

2. 各密度で表される平均場

$$U(r,z),\ \boldsymbol{W}(r,z),\ B(r,z) \tag{2}$$

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 $\hat{h}_\mathrm{q}$ を用いて、基底状態のスピノルを求める。
4. あとで Skyrme HF の式を載せる。多分虚時間発展の前にする
5. セルフコンシステントに解くことをいう

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、核子のスピノルは以下のように表される。

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

このスピノルによって、密度は以下のように計算できる：

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

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

- 密度が求まるとポテンシャルが求まり、一粒子ハミルトニアンが求まることをかｋ

研究手法：基底状態の求め方

- ここの虚時間法とトンネルの虚時間は別ものということに注意して話す

本プログラムでは、虚時間法によって基底状態を求める。虚時間法では、一粒子波動関数と平均場ポテンシャルの反復更新によって、系の全エネルギーが最小化される。系の Hamiltonian を $\hat{H}$、固有エネルギーを E_n とする：

$$\hat{H}\left|\Psi_n\right\rangle = E_n\left|\Psi_n\right\rangle \quad (E_0 \le E_1 \le E_2 \le \cdots)\text{。} \tag{6}$$

このとき、任意の状態 $|\xi\rangle$ は

$$|\xi\rangle = \sum_{n\ge 0} C_n \left|\Psi_n\right\rangle \tag{7}$$

と展開される。このとき、$\tau > 0$ として $e^{-\hat{H}\tau/\hbar}|\xi\rangle$ という状態を考えると、

$$e^{-\hat{H}\tau/\hbar}|\xi\rangle = \sum_{n\ge 0} C_n e^{-E_n\tau/\hbar}\left|\Psi_n\right\rangle = e^{-E_0\tau/\hbar}\left(C_0\left|\Psi_0\right\rangle + \sum_{n\ge 1} C_n e^{-(E_n-E_0)\tau/\hbar}\left|\Psi_n\right\rangle\right) \tag{8}$$

と表される。$\tau \to \infty$ のとき、$C_0\left|\Psi_0\right\rangle$ の項のみが残り、基底状態を得ることができる。

背景：トンネル確率の計算（題名後で考える）背景にいれるものなのであとでかえる

- Patrick M, Microscopic Models of Nuclear Reactions Near the Coulomb Barrier, Ph.D. thesis, Australian National University (2023) では、Toy model での手法を 3 次元の核子多体系へ応用しようと試みたが、失敗していることが示されている。
- 具体的に何を試みているのか、どこが失敗しているのかは未調査だが、系の虚時間発展における**数値計算の安定性**が問題となっているようである。
- 卒論では、Patrick(2023) での手法を参考にしながら、計算方法を考えていく予定である。

スケジュール感をかく