変分原理に基づく Dirac 方程式の解法

東北大学大学院理学研究科物理学専攻 谷村雄介, 萩野浩一

変分原理は量子力学の諸問題を解く際に広く利用されている原理である。この原理は、非相対論的なハミルトニアンの任意の状態についての期待値が、基底状態のエネルギーよりも必ず大きいということを保証している。非相対論的な系において、この原理は 1 粒子系から多体系まで、また精密計算にも近似計算にも適用が許される汎用性の高い原理である。もちろん、量子多体系として記述される原子核もその例外ではない。

相対論的な系には正のエネルギーと負のエネルギー両方の状態があり、物理的な基底状態は正エネルギーの状態のうち一番エネルギーが小さなものである。非相対論のときと同じようにエネルギーを最小化して基底状態を求めようとすると、負のエネルギーの状態が変分の解に混ざることにより、しばしばエネルギーが真の固有値を下回ってしまう。この現象は量子化学の分野において "variational collapse" または "finite basis-set disease" とよばれ、およそ 50 年前から知られていた。80 年代を中心に、原子や分子に対する相対論的 Hartree-Fock 計算の分野で、この問題を避けるための対策について盛んに研究がおこなわれてきた [1, 2]。

原子核物理の分野でも相対論的平均場 (RMF) 計算は広く積極的に利用され、多くの成功を収めている。しかしその一方で、variational collapse の存在によって、非相対論的な枠組みに比べて計算の自由度が制限されているのも事実である。非相対論的な平均場計算では、原子核の形に対称性を仮定しない、座標表示を用いた 3 次元実空間における計算が実現されている [3]。その際、虚時間発展法を用いたエネルギーの最小化がおこなわれているが、相対論的平均場計算では variational collapse のために同じ方法が使えず、3 次元の計算が難しいのが現状である。

本研究では、$1/H$ に対して成り立つ厳密な変分原理 ([2] および図 1 参照) に基づき、$\langle H^{-1}\rangle$ を最大化することにより variational collapse を回避する Dirac 方程式の解法を開発した。本講演では、この方法で中心力ポテンシャル中の Dirac 方程式を解いた結果を紹介し、3 次元の RMF 計算への応用可能性を議論する。

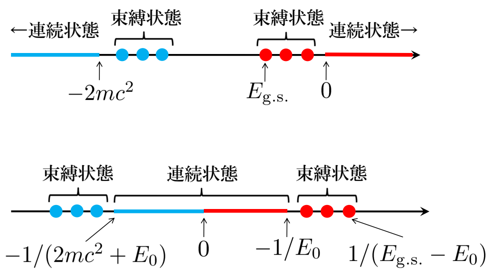

図 1: H（上）と $1/(H-E_0)$（下）の典型的なスペクトル。赤は Fermi sea、青は Dirac sea の状態を表す。H そのものとは異なり $1/(H-E_0)$ は有界なスペクトルを持つ。

参考文献

[1] H. Wallmeier and W. Kutzelnigg, Chem. Phys. Lett. **78**, 341 (1981) ; H. Wallmeier and W. Kutzelnigg, Phys. Rev. A **28**, 3092 (1983) ; R. E. Stanton and S. Havriliak, J. Chem. Phys. **81**, 1910 (1984) ; Y. Ishikawa, R. C. Binning, Jr., K. M. Sando, Chem. Phys. Lett. **101**, 111 (1983)

[2] R. N. Hill and C. Krauthauser, Phys. Rev. Lett. **72**, 2151 (1994)

[3] K. T. R. Davies, H. Flocard, S. Krieger, and M. S. Weiss, Nucl. Phys. **A342**, 111 (1980)

[4] K. Hagino and Y. Tanimura, Phys. Rev. C **82**, 057301 (2010)