

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 原子核理論研究室
谷村雄介

Introduction

- 変分原理

下に有界なハミルトニアン H に対し

$$\frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \geq E_0$$

$$\left(\frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{\sum_n |\langle n | \Psi \rangle|^2 E_n}{\sum_n |\langle n | \Psi \rangle|^2} = E_0 + \frac{\sum_n |\langle n | \Psi \rangle|^2 (E_n - E_0)}{\sum_n |\langle n | \Psi \rangle|^2} \right)$$

$(E_n - E_0) \geq 0 \quad \forall n$ となる E_0 (基底状態) が存在する
非相対論的な量子力学の問題に適用できる。

エネルギー期待値を最小化することで(近似)解が得られる。

●変分原理に基づく原子核構造計算

原子核の形に対称性を仮定しない非相対論の核構造計算:

- 虚時間発展法(ITS method)による3次元の座標空間でのSkyrme Hartree-Fock計算 (Bonche, et al., Nucl. Phys. A443, 39 ('85))
- 反対称化分子動力学(AMD) (Kanada-En'yo, et al., Phys. Rev. C 52, 628('95))

いずれの方法も変分原理に基づき E を最小化

●相対論的アプローチ

相対論的平均場(RMF)理論

- ✓核子を中間子がつくる平均場を通じて相互作用する Dirac場として扱う
- ✓核構造計算で多くの成功を収めている
- ✓変分原理が使えないことによる計算の自由度の制限

→ ITS, AMD による3次元のRMF計算が実現されていない。

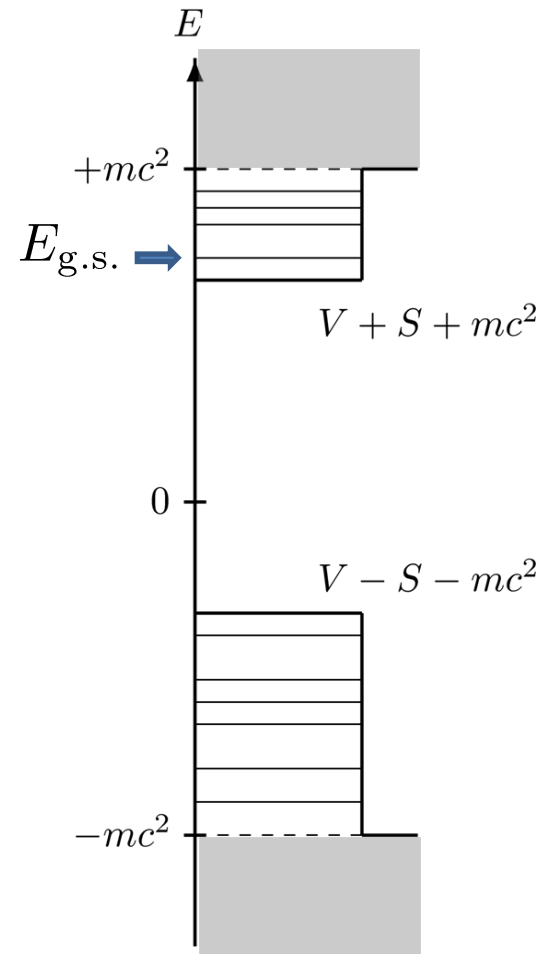
•相対論的量子力学におけるVariational collapse

$$(\vec{\alpha} \cdot \vec{p}c + V(\mathbf{r}) + \beta(mc^2 + S(\mathbf{r})))\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

H_{Dirac}

変分原理に基づく $\langle H_{\text{Dirac}} \rangle$ の最小化

$$\frac{\langle \psi | H_{\text{Dirac}} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \stackrel{?}{\geq} E_{\text{g.s.}}$$



•相対論的量子力学におけるVariational collapse

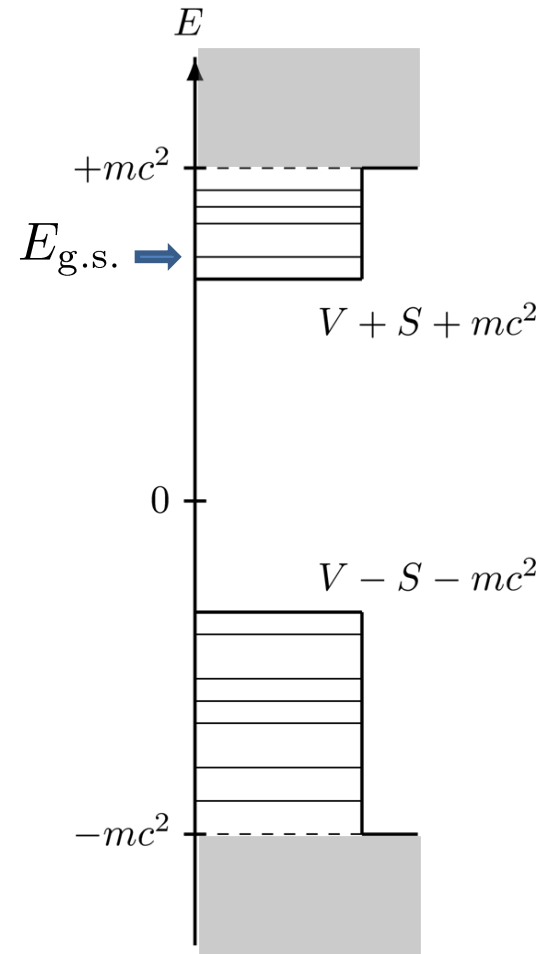
$$(\vec{\alpha} \cdot \vec{p}c + V(\mathbf{r}) + \beta(mc^2 + S(\mathbf{r})))\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

H_{Dirac}

変分原理に基づく $\langle H_{\text{Dirac}} \rangle$ の最小化

~~$$\frac{\langle \psi | H_{\text{Dirac}} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_{\text{g.s.}}$$~~

Dirac seaの状態が存在する
ために、左辺の値に下限が
ない



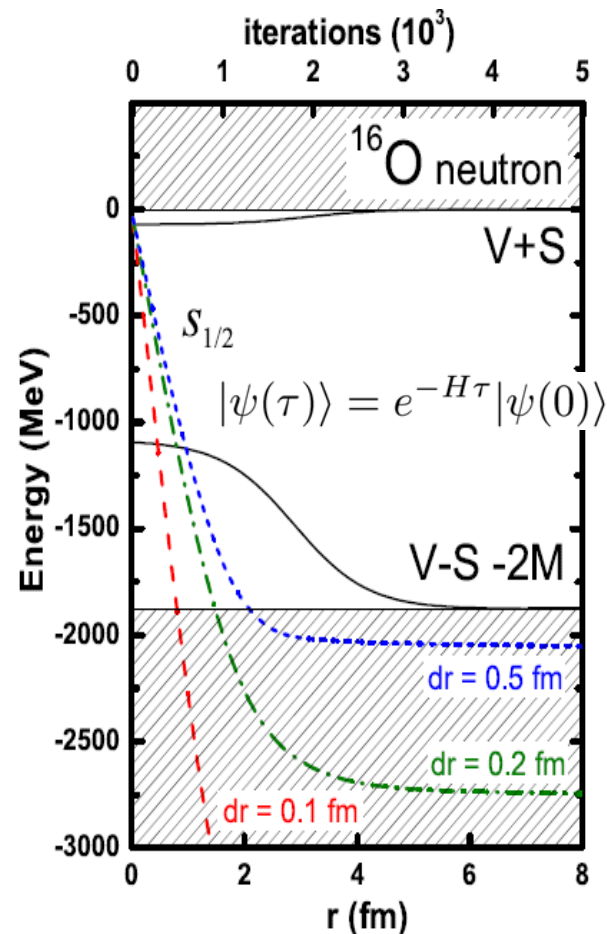
•相対論的量子力学におけるVariational collapse

$$(\underbrace{\vec{\alpha} \cdot \vec{p}c + V(\mathbf{r}) + \beta(mc^2 + S(\mathbf{r}))}_{H_{\text{Dirac}}})\psi(\mathbf{r}) = E\psi$$

変分原理に基づく $\langle H_{\text{Dirac}} \rangle$ の最小化

~~$$\frac{\langle \psi | H_{\text{Dirac}} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_{\text{g.s.}}$$~~

Dirac seaの状態が存在する
ために、左辺の値に下限が
ない



$s_{1/2}$ single particle energy in spherical W-S potential calculated with imaginary time step method Y. Zhang, et al., arXiv:0905.2505

原子分子に対する相対論的Hartree-Fock計算の分野で
variational collapseを避けるための多くの対策が提案されてきた

→ $\langle H \rangle$ の最小化の代わりに $\langle 1/H \rangle$ を最大化するという方法

本研究の目的

- $1/H$ に対する変分原理に基づく新しいDirac方程式の解法の確立
 - ✓ 簡単な場合(球対称、1粒子問題)で方法の妥当性を検証する
- 対称性を仮定しない相対論的平均場計算への応用

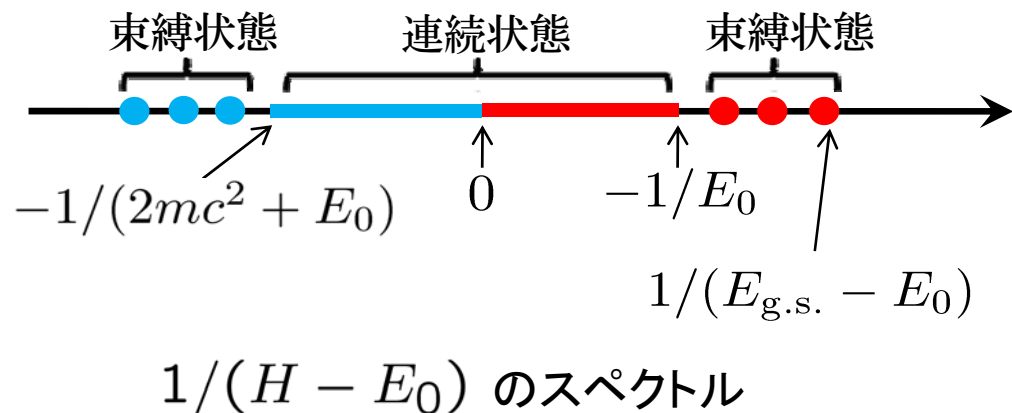
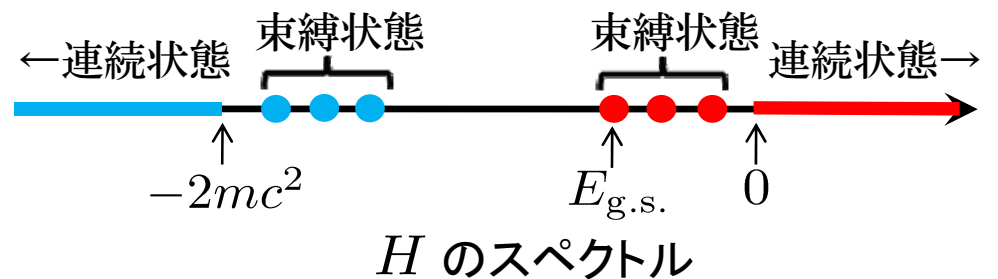
Variational collapseを避けるためには

- $\langle H \rangle$ を最小化する代わりに $\langle 1/H \rangle$ を最大化

(R. N. Hill, C. Krauthauser, Phys. Rev. Lett. 72, 2151 ('94))

$1/H$ は有界なので、
変分原理の不等式が
成り立つ:

$$\frac{\langle \psi | (H - E_0)^{-1} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \leq \frac{1}{E_{g.s.} - E_0}$$



方法

“Inverse Hamiltonian method”

K. Hagino, Y. Tanimura, Phys. Rev. C 82, 057301 ('10)

- $\exp\left(\frac{T}{H-E_0}\right)$ で虚“時間”発展させる

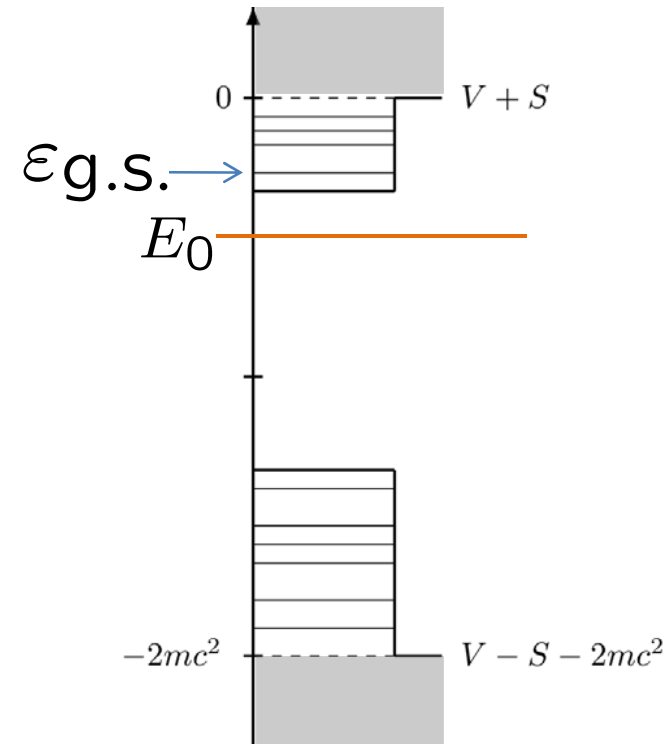
$$\lim_{T \rightarrow \infty} \exp\left(\frac{T}{H-E_0}\right) |\Psi\rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_n e^{T/(\varepsilon_n - E_0)} |\phi_n\rangle \langle \phi_n | \Psi\rangle \propto |\phi_{\text{g.s.}}\rangle$$

$T \rightarrow \infty$ の極限で

$|\phi_{\text{g.s.}}\rangle$ 以外が全て減衰する

cf. 虚時間発展法

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \exp(-H\tau) |\psi\rangle \propto |\psi_{\text{g.s.}}\rangle$$



Tを間隔 ΔT で区切って $|\Psi(n\Delta T)\rangle \equiv |\Psi^n\rangle$
とすると、小さい ΔT に対して

$$|\Psi^{n+1}\rangle \simeq \left(1 + \frac{\Delta T}{H - E_0}\right) |\Psi^n\rangle$$

時間によるSchroedinger方程式
を解くときと同様の方法で $(H - E_0)^{-1}$ を
求めることができる


(S.E. Koonin, et al., Phys. Rev. C15,1359('77))

$$|\phi^{n+1}\rangle = \frac{1 - iH \frac{\Delta t}{2\hbar}}{1 + iH \frac{\Delta t}{2\hbar}} |\phi^n\rangle = \left(\frac{2}{1 + iH \frac{\Delta t}{2\hbar}} - 1 \right) |\phi^n\rangle$$

球対称ポテンシャルに対するDirac方程式

• ポテンシャルが球対称の場合

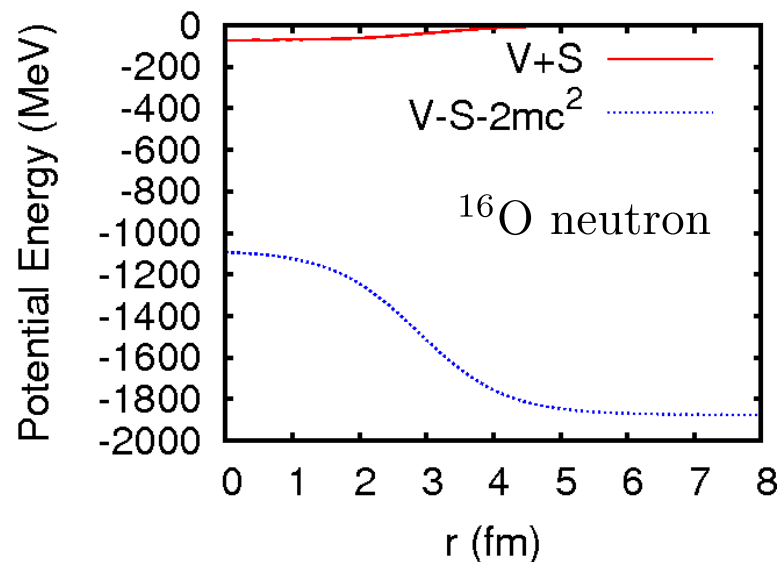
$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} g(r)\mathcal{Y}_{\ell jm} \\ if(r)\mathcal{Y}_{\ell\pm 1jm} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V(r) + S(r) & \hbar c \left(-\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r}\right) \\ \hbar c \left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r}\right) & V(r) - S(r) - 2mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G(r) \\ F(r) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} G(r) \\ F(r) \end{pmatrix}$$


 $f = F/r, \quad g = G/r$
 $\kappa = \mp(j + 1/2)$

• Woods-Saxon potential

$$V + S = \frac{U_0}{1 + \exp\left(\frac{r - R_U}{a_U}\right)}$$

$$V - S = \frac{W_0}{1 + \exp\left(\frac{r - R_W}{a_W}\right)}$$



$$U_0 = -71.28 \left(1 - 0.462 \frac{N-Z}{A}\right) \text{ MeV}$$

$$W_0 = -11.12U_0$$

$$R_U = 1.233A^{1/3} \text{ fm}$$

$$R_W = 1.144A^{1/3} \text{ fm}$$

$$a_U = 0.615 \text{ fm}$$

$$a_W = 0.648 \text{ fm}$$

計算結果(1)

1. 酸素16の束縛状態のエネルギー

		single-particle energy (MeV)	
orbit		exact	our method
Fermi sea	$1d_{3/2}$	-1.242	-1.242
	$2s_{1/2}$	-3.631	-3.631
	$1d_{5/2}$	-7.496	-7.482
	$1p_{1/2}$	-18.976	-18.969
	$1p_{3/2}$	-24.635	-24.630
	$1s_{1/2}$	-43.168	-43.167
Dirac sea	$1p_{1/2}$	-1196.277	-1196.282
	$1d_{3/2}$	-1263.326	-1263.388
	\vdots	\vdots	\vdots

初期状態: $G^{n=0} = (\text{non - relativistic } 1s_{1/2}), F^{n=0} = 0$

2. 波動関数と $\langle H \rangle$, $\langle 1/H \rangle$ の時間発展

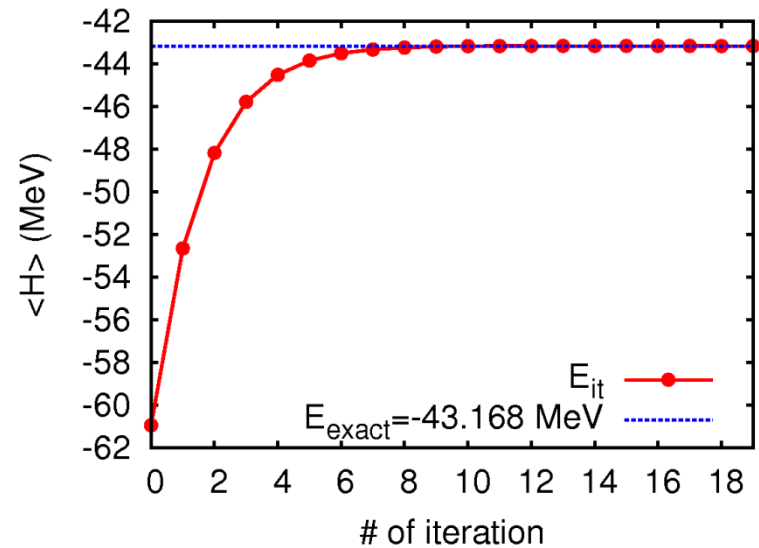
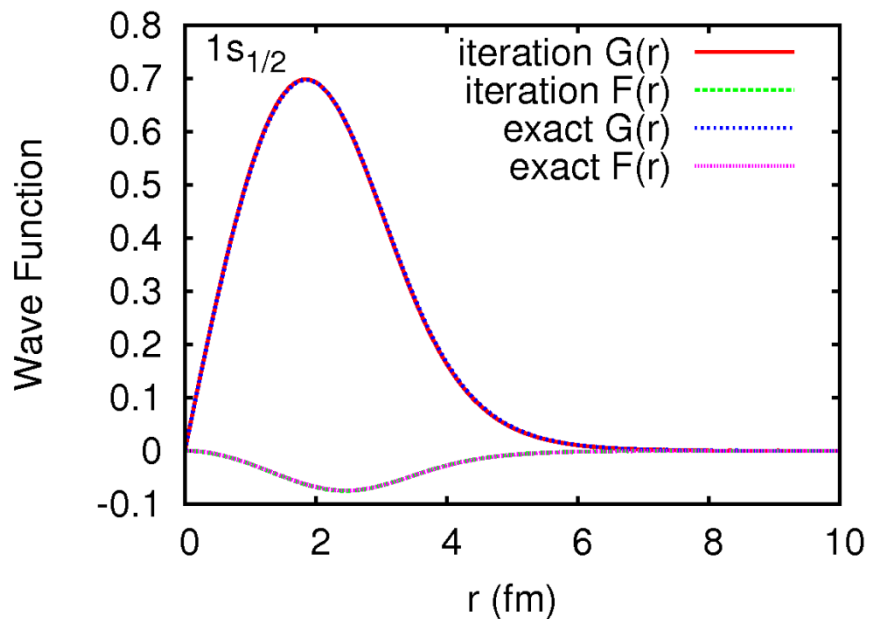
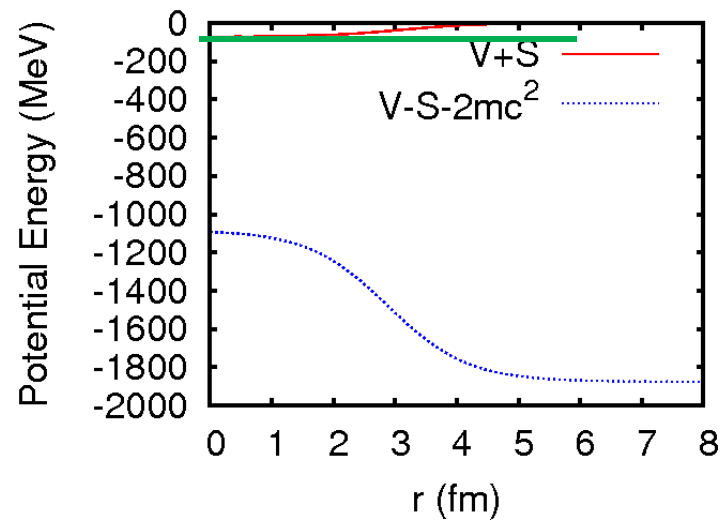
$1s_{1/2}$

$$\Delta T = 10 \text{ MeV}$$

$$E_0 = U_0$$

$$E_{\text{ex}} = -43.167 \text{ MeV}$$

$$E_{\text{it}} = -43.168 \text{ MeV}$$



2. 波動関数と $\langle H \rangle$, $\langle 1/H \rangle$ の時間発展

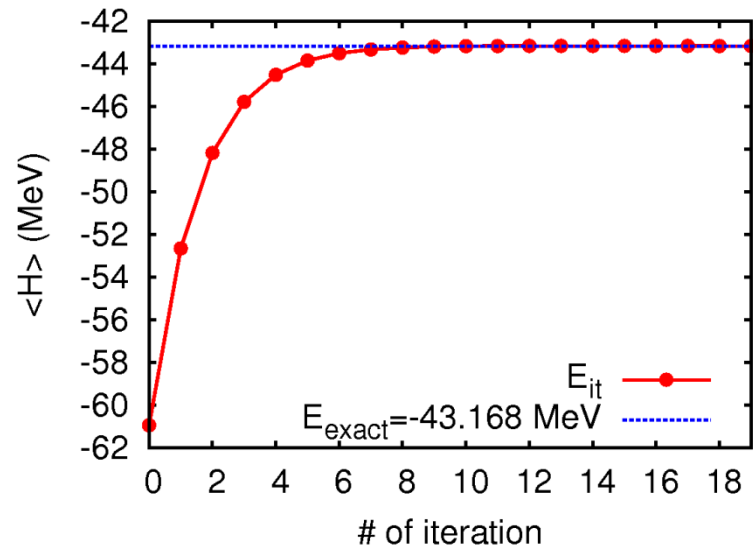
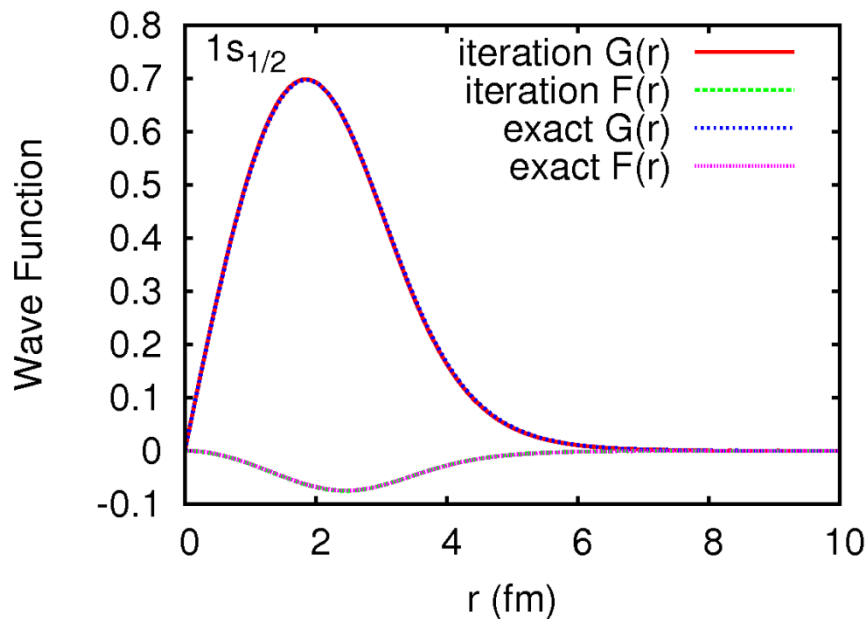
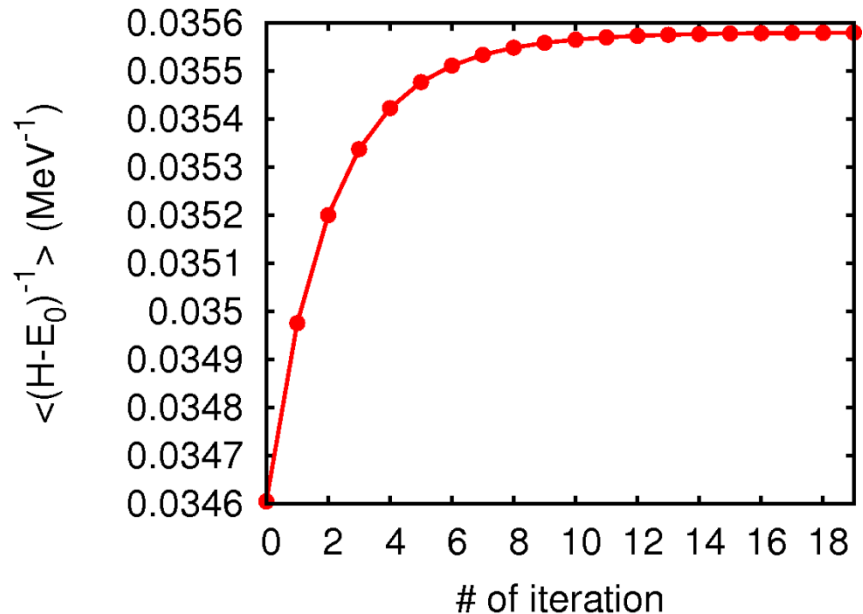
$1s_{1/2}$

$$\Delta T = 10 \text{ MeV}$$

$$E_0 = U_0$$

$$E_{\text{ex}} = -43.167 \text{ MeV}$$

$$E_{\text{it}} = -43.168 \text{ MeV}$$



$1p_{3/2}$

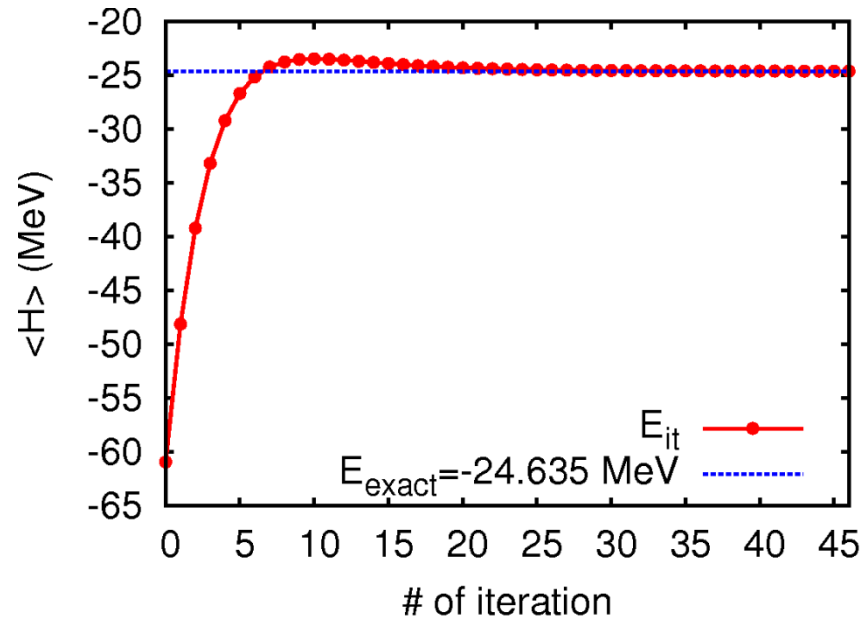
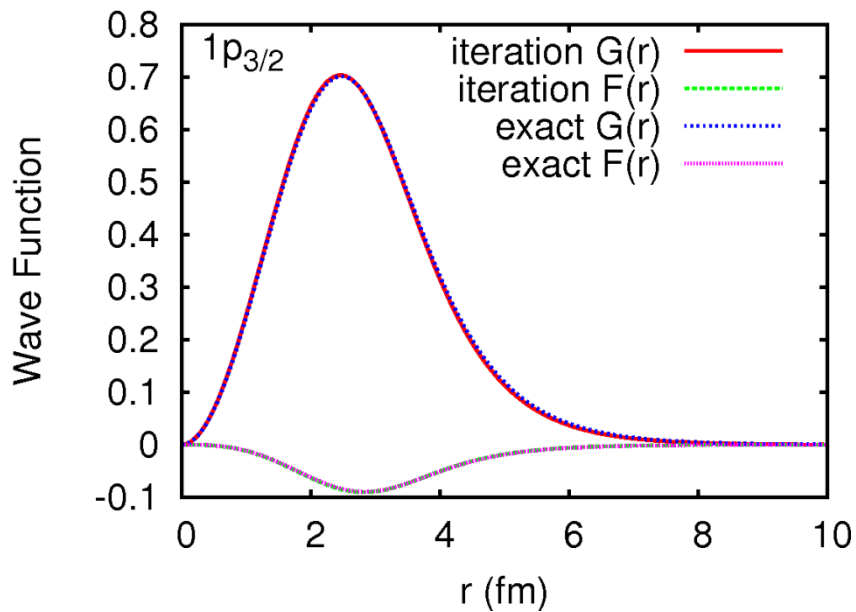
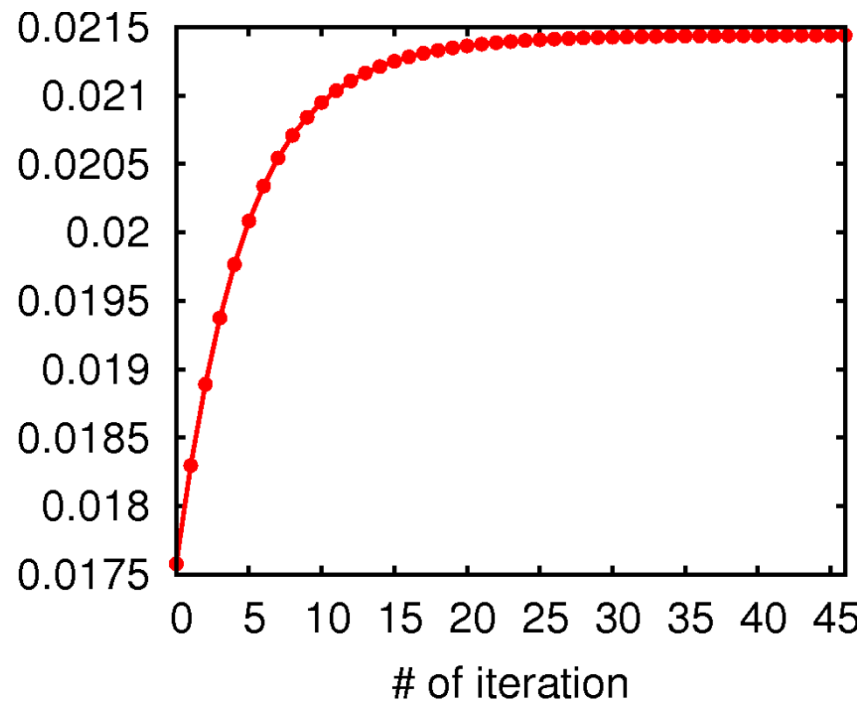
$$\Delta T = 10 \text{ MeV}$$

$$E_0 = U_0$$

$$E_{\text{ex}} = -24.635 \text{ MeV}$$

$$E_{\text{it}} = -24.630 \text{ MeV}$$

$$\langle (H-E_0)^{-1} \rangle \text{ (MeV}^{-1}\text{)}$$

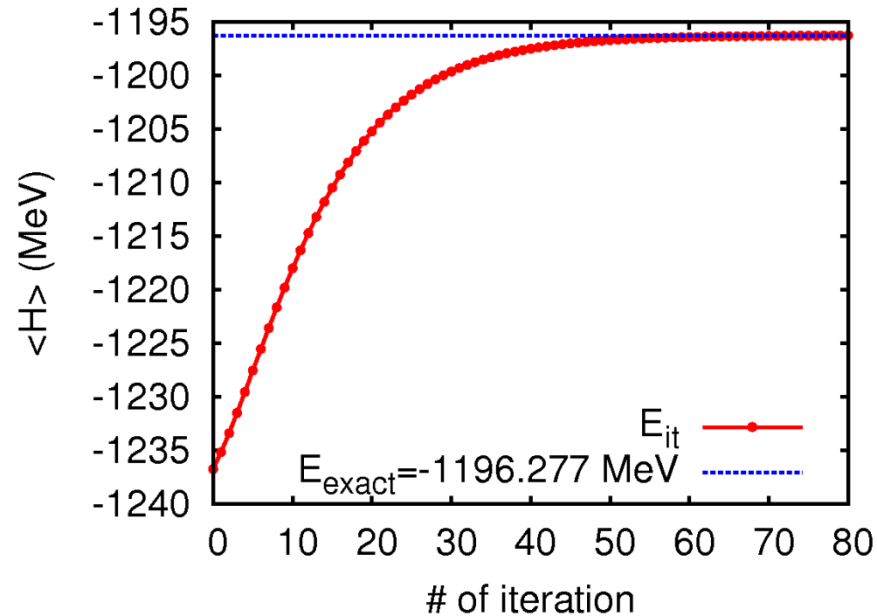
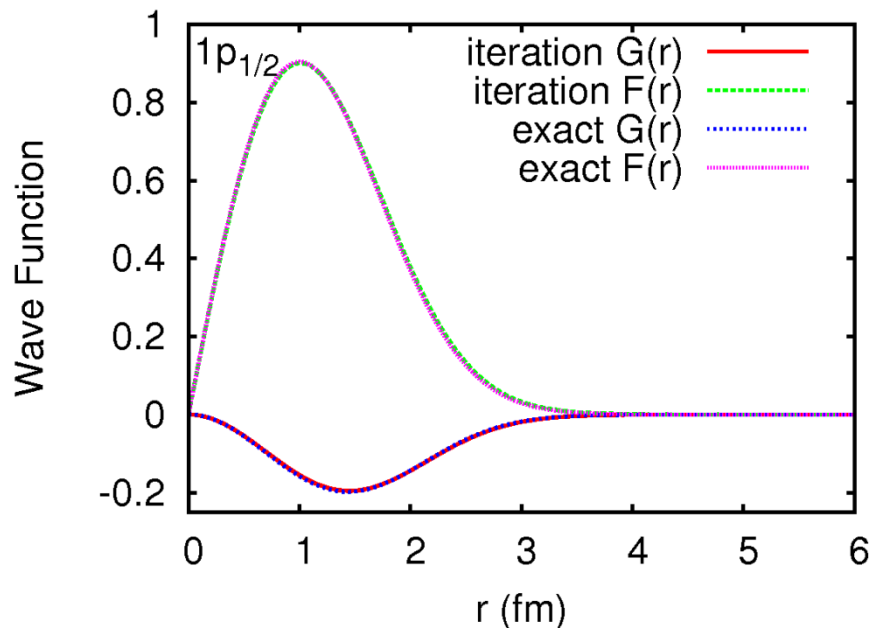
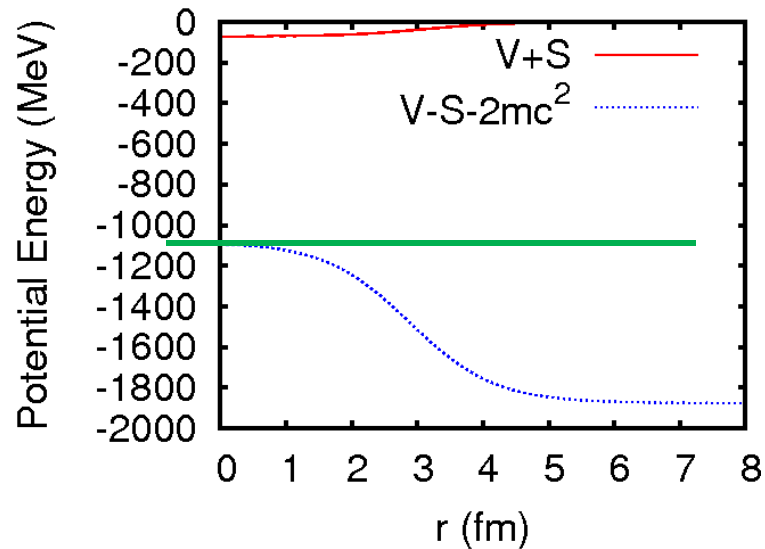


$$1p_{1/2} \quad \Delta T = -10 \text{ MeV}$$

$$E_0 = W_0 - 2mc^2$$

$$E_{\text{ex}} = -1196.404 \text{ MeV}$$

$$E_{\text{it}} = -1196.273 \text{ MeV}$$

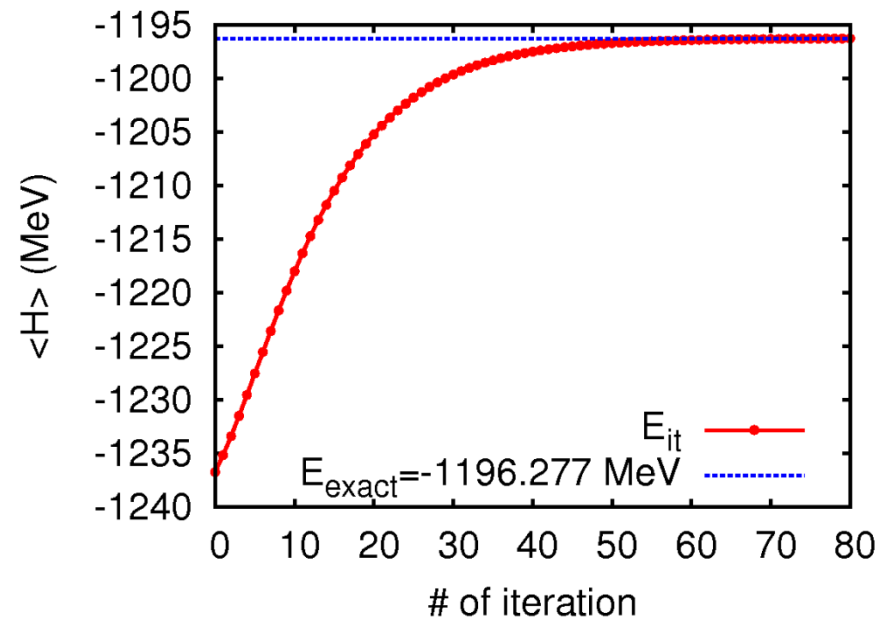
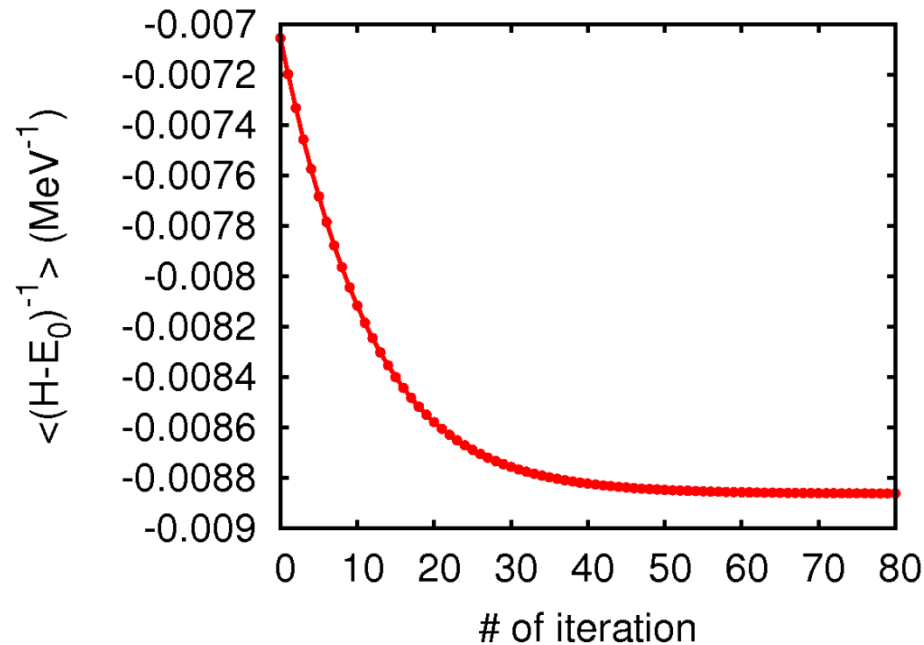
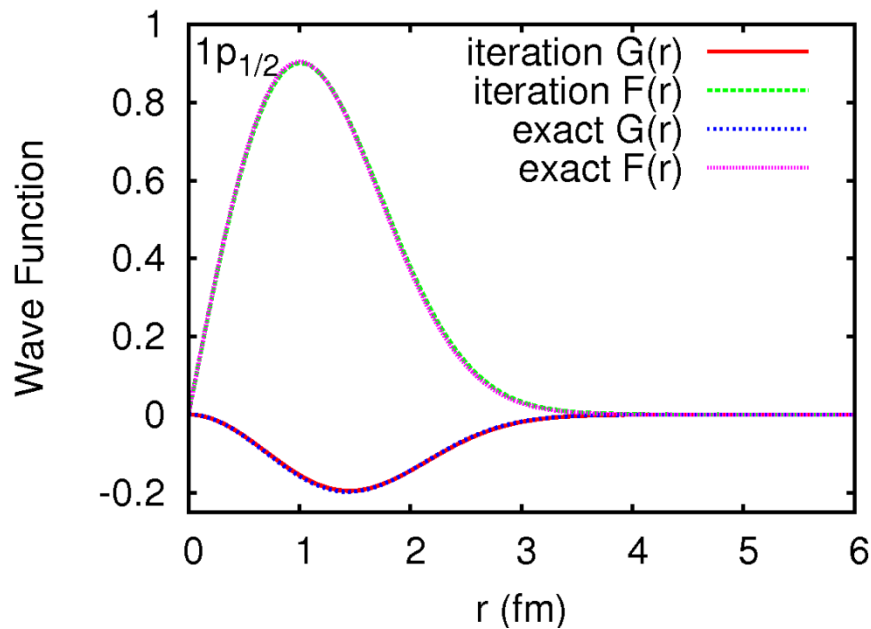


$$1p_{1/2} \Delta T = -10 \text{ MeV}$$

$$E_0 = W_0 - 2mc^2$$

$$E_{\text{ex}} = -1196.404 \text{ MeV}$$

$$E_{\text{it}} = -1196.273 \text{ MeV}$$



まとめと今後の課題

- $1/H$ に対し成り立つ変分原理を利用することによりVariational collapseを避け、Dirac方程式を解く方法を開発、検証した。
- この方法で正確にDirac方程式を解けることを確かめた。

- 原子核の相対論的平均場(RMF)計算の応用範囲を広げる
 - ✓ 1つ目の方法を3次元に拡張し、座標空間の3次元の格子の上でRMF方程式を解けるようになる
 - ✓ 2つ目の方法をAMD波動関数のようなものを用いたRMF計算に応用する。

試行関数

変分パラメーターは b, g

$$\begin{aligned}
 |\tilde{\Psi}\rangle &= \begin{pmatrix} r^\ell e^{-r^2/2b^2} \mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\mathbf{r}}) \\ g \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{2mc} r^\ell e^{-r^2/2b^2} \mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\mathbf{r}}) \end{pmatrix} \\
 &= \begin{cases} \begin{pmatrix} r^\ell e^{-r^2/2b^2} \mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\mathbf{r}}) \\ -i \frac{g}{b^2} \frac{\hbar}{2mc} r^{\ell+1} e^{-r^2/2b^2} \mathcal{Y}_{\ell+1, jm}(\hat{\mathbf{r}}) \end{pmatrix} & \text{for } j = \ell + \frac{1}{2} \\ \begin{pmatrix} r^\ell e^{-r^2/2b^2} \mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\mathbf{r}}) \\ -i \frac{g}{b^2} \frac{\hbar}{2mc} [r^2 - b^2(2\ell + 1)] r^{\ell-1} e^{-r^2/2b^2} \mathcal{Y}_{\ell-1, jm}(\hat{\mathbf{r}}) \end{pmatrix} & \text{for } j = \ell - \frac{1}{2} \end{cases} \\
 &\equiv \frac{1}{r} \begin{pmatrix} \tilde{G}(r) \mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\mathbf{r}}) \\ i \tilde{F}(r) \mathcal{Y}'_{\ell' jm}(\hat{\mathbf{r}}) \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 |\Psi\rangle &= (H - E_0) |\tilde{\Psi}\rangle \\
 &= \begin{cases} \begin{pmatrix} \left\{ U(r) - E_0 + \frac{g}{b^2} \frac{\hbar^2}{2m} \left[(2\ell + 3) - \frac{r^2}{b^2} \right] \right\} r^\ell e^{-r^2/2b^2} \mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\mathbf{r}}) \\ -i \frac{\hbar c}{b^2} \left(1 + g \frac{W(r) - 2mc^2 - E_0}{2mc^2} \right) r^{\ell+1} e^{-r^2/2b^2} \mathcal{Y}_{\ell+1, jm}(\hat{\mathbf{r}}) \end{pmatrix} & \text{for } j = \ell + \frac{1}{2} \\ \begin{pmatrix} \left\{ U(r) - E_0 + \frac{g}{b^2} \frac{\hbar^2}{2m} \left[(2\ell + 3) - \frac{r^2}{b^2} \right] \right\} r^\ell e^{-r^2/2b^2} \mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\mathbf{r}}) \\ -i \frac{\hbar c}{b^2} \left(1 + g \frac{W(r) - 2mc^2 - E_0}{2mc^2} \right) [r^2 - b^2(2\ell + 1)] r^{\ell-1} e^{-r^2/2b^2} \mathcal{Y}_{\ell-1, jm}(\hat{\mathbf{r}}) \end{pmatrix} & \text{for } j = \ell - \frac{1}{2} \end{cases} \\
 &\equiv \frac{1}{r} \begin{pmatrix} G(r) \mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\mathbf{r}}) \\ i F(r) \mathcal{Y}'_{\ell' jm}(\hat{\mathbf{r}}) \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$