

3次元実空間 RPA 方程式の 現実的相互作用への適用

牟田 淳

1. はじめに

コンピュータシミュレーション方法の開発並びに計算機の高速化に伴い、これまでは不可能であった様々な物理シミュレーションが次々と可能になりはじめている。例えば低励起状態を求める手段の一つである殻模型計算に目を向けると、これまでは酸素、マグネシウムといった比較的質量数が小さい原子核しか殻模型計算ができなかったが、量子モンテカルロ計算方法 [1] の開発並びに高速なクラスタ化した (70 台, 140 CPU) アルファサーバを用いることにより、比較的重い鉄、ニッケル領域の殻模型計算も始められている。励起状態を求める方法として、殻模型以外に RPA (Random Phase Approximation) 法といったものがある。この方法は、多体問題を解く手法としてはスレーター近似を行なっているので殻模型より優れているとはいえないが、その一方で一粒子波動関数は殻模型より (現段階では) より正確に求められるといった利点がある。よって着目している物理によって殻模型を使うか RPA を使うか選ぶ必要がある。

さて、計算機の高速化に伴い RPA 方程式も、計算時間を節約するために対称性を仮定するといったことなしにコンピュータシミュレーションができるようになりつつある。しかしながら、方法論にいくつかの困難があった。一つは、RPA 方程式を解く際、しばしば調和振動子基底、もしくは HF 解等の基底関数を用いて解かれる場合が多いが、このようにした場合、連続状態の波動関数をどう扱うべきかという問題点が生じる。二つ目の問題点はゼロモードの問題点である。ゼロモードの解析的な解は HF 解と HF 解の勾配から与えられる。しかしながら、解析的ゼロモード解は規格化できないため、Schmidt の直交化法によってはゼロモード解に直交した物理的モードを求められないといった問題点があった。

我々は先の論文で、初めてこれらの問題に取り組んだ研究成果を論文発表

した [2]。まず、一つ目の問題を、RPA 方程式を解く際に基底関数を使わないで解くことにより解決した。更に二つ目の問題はメッシュ間隔を細かくしていくに従い、求められた物理的モードが解析的なゼロモードと直交していくことを確かめていくことにより解決した。具体的な計算としては、テスト計算であったため HF ポテンシャルを核子密度の二次関数と仮定して計算を行なった。

今回の論文では新たに現実的なポテンシャルで計算を行なった。また、ゼロモードとの直交性を考慮するにあたり、はじめから解析的なゼロモードをつくり、それに直交するようにして物理モードを作ることにより解を求めたので、その内容をまとめて報告する。

2. 基底関数を用いない座標基底 RPA 方程式

基底関数を用いない座標基底 RPA 方程式は調和振動子波動関数等の基底を用いて書かれた RPA 方程式をユニタリ変換することによって得られるが、ここでは TDHF 方程式の線形化から座標基底 RPA 方程式を導出する。まず、TDHF 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_i(t) = h(\rho(t)) \psi_i(t)$$

を考える。簡単のため、HF ポテンシャルは密度の関数と考える。一般には $\text{div}J$ 等が HF ポテンシャルに入ってくるが、導出の仕方は密度のみの場合と全く同じなので、一般の場合は省略する。さて、RPA 方程式を導出するためハートリーフォック解

$$h_0 = h(\rho_0) \quad h_0 \phi_i = \varepsilon_i \phi_i \quad \rho_0(\vec{r}) = \sum_i |\phi_i|^2$$

を用いて TDHF 方程式を線形化する。

$$\psi_i(t) = (\phi_i + \delta\psi_i(t)) e^{-i\varepsilon_i t/\hbar}$$

このとき、線形化された波動関数に対して RPA 近似の仮定を行なう。

$$\delta\psi_i(t) = \delta\psi_i^{(+)}(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar} + \delta\psi_i^{(-)}(\vec{r}) e^{iEt/\hbar}$$

ここから以下の座標基底 RPA 方程式を得る。

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + h(\rho) - \varepsilon_i \right) \psi_i^{(+)} + \sum_j \frac{\delta h}{\delta \rho} \delta\rho \psi_j^{(-)} = E \psi_i^{(+)}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + h(\rho) - \varepsilon_i \right) \psi_i^{(-)} + \sum_j \frac{\delta h}{\delta \rho} \delta\rho \psi_j^{(+)} = E \psi_i^{(-)}$$

この方程式には基底関数が使われていないことがわかる。

3. 数値計算法

座標基底 RPA 方程式は一般化された固有値問題

$$A\tilde{x} = kB\tilde{x}$$

となる。この固有値方程式を解く方法として虚時間発展法、ランチョス法等様々な方法があるが、我々がこれまで調べたところ共役勾配法と呼ばれる反復法が有用であることがわかった。ここでは共役勾配法を説明する。固有値問題を解くことは汎関数 $f(\tilde{x}) = \frac{\langle \tilde{x} | A | \tilde{x} \rangle}{\langle \tilde{x} | B | \tilde{x} \rangle}$ を最小化する事と同等である。そこで、この汎関数を最小化するため、勾配ベクトル $\nabla f(\tilde{x}) = \tilde{g} = 2(A\tilde{x} - fB\tilde{x}) / \langle \tilde{x} | B | \tilde{x} \rangle$ および以下で定義される p_i を用いて反復計算

$$x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i$$

を行う。

$$p_i = -g_i + \beta_{i-1} p_{i-1}$$

$$\beta_{i-1} = \langle g_i | g_i \rangle / \langle g_{i-1} | g_{i-1} \rangle$$

$$a\alpha^2 + b\alpha + c = 0$$

$$a = \langle p | A | p \rangle \langle x | B | p \rangle - \langle x | A | p \rangle \langle p | B | p \rangle$$

$$b = \langle p | A | p \rangle \langle x | B | x \rangle - \langle x | A | x \rangle \langle p | B | p \rangle$$

$$c = \langle x | A | p \rangle \langle x | B | x \rangle - \langle x | A | x \rangle \langle x | B | p \rangle$$

この反復計算を解の残差が十分小さくなるまで行う。

4. ゼロモード

実際の物理系では並進対称性といったものがある。しかしながら、ハートリーフォック近似の範囲内ではこの対称性は壊れてしまい、その結果として RPA 方程式を解いた時、固有値ゼロのゼロモード解なるものが出てくる。また、軸対称変形核では更に x , y 軸に関する回転対称性もなくなり、 x , y 回転に起因するゼロモードが出てくる。さて、ゼロモード解は座標基底 RPA 方程式では運動量演算子 p を用いて以下のように与えられる（以下は x 方向並進に関するゼロモード）。

$$\begin{bmatrix} X_j \\ Y_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vdots \\ p_x \phi_i \\ \vdots \\ p_x \phi_i \\ \vdots \end{bmatrix}$$

RPA 方程式における規格直交性は

$$X_i^* X_j - Y_i^* Y_j = \delta_{ij}$$

で与えられるので、明らかにゼロモードは上記の意味で規格化できない。そこで、解析的なゼロモードを

$$X^* X = Y^* Y = 1$$

と規格化する。ゼロモードは X および Y のノルム $X^* X$, $Y^* Y$ については任意なので、このような規格化を行なってもよい。このようにして得られた解析的ゼロモードを用いて以下の二つの方法を考える。

- (1) 全ての解を数値計算で求める。その後、得られた物理的モードが解析的なゼロモードと直交しているかを確認する。
- (2) 解析的ゼロモード解に直交するにはじめから物理的モードを求める。

我々はこれまで (1) の方法で計算をしてきた [2]。ここでも、現実的核力である SkyrmeIII 力の場合は (1) の方法を用いる。(2) は最近我々が考案した方法であり、ゼロモードを対角化によって求める数値計算時間がほぼ省略できるといった利点を持つ。この方法の結果についても議論する。

5. 相互作用

今回は以下の相互作用とそれから導出される HF ポテンシャルを用いた

- (1) BKN-LIKE 相互作用による HF ポテンシャル, HF 方程式

$$U(r) = \frac{3}{4} t_0 \rho + \frac{3}{16} t_3 \rho^2$$

$$\left\{ -\Delta \frac{\hbar^2}{2m(r)} + U(r) \right\} \varphi(r) = \varepsilon \varphi$$

$$t_0 = -1132.4 \text{ MeV fm}^3; \quad t_3 = 23610.4 \text{ MeV fm}^6;$$

- (2) 現実的核力である SkyrmeIII 相互作用による HF ポテンシャル, HF 方程式

$$U(r) = \frac{3}{4} t_0 \rho + \frac{3}{16} t_3 \rho^2 + \frac{1}{16} (3t_1 + 5t_2) \tau + \frac{1}{32} (5t_2 - 9t_1) \Delta \rho - \frac{3}{4} W_0 \vec{\nabla} \cdot \vec{J}$$

$$m^*(r) = m \left(\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{16} (3t_1 + 5t_2) \rho \right)^{-1}$$

$$\vec{W}(\vec{r}) = \frac{3}{4} W_0 \nabla \rho$$

$$\left\{ -\nabla \frac{\hbar^2}{2m^*(r)} \nabla + U(r) + \vec{W} \frac{1}{i} (\nabla \times \sigma) \right\} \varphi(r) = \varepsilon \varphi$$

$$\begin{aligned}
t_0 &= -1128.75 \text{ MeVfm}^3; & t_1 &= 395.0 \text{ MeVfm}^5; \\
t_2 &= -95.0 \text{ MeVfm}^5; & t_3 &= 14000.0 \text{ MeVfm}^6; \\
W_0 &= 120 \text{ MeVfm}^5; & x_0 &= 0.45
\end{aligned}$$

6. 現実的核力による計算結果

この節では現実的核力である SkyrmeIII を用いた計算結果を示す。ゼロモードの扱いは4章で書かれた (1) の方法を用いる (詳細は前回の論文 [1], [2] 参照)。

6.1. 球形核

球形核 ^{16}O の場合の結果を表1に示す。1番目から3番目までのエネルギーレベルがメッシュ間隔を 0.1 fm 小さくするだけで急激に減少していることがわかる。これらのレベルは並進運動に関するゼロモードである。その一方で、4番目から10番目までの7個のモードはメッシュ間隔を小さくしても、エネルギーレベルはほとんど変わらない。これらは実際の物理モードである。縮退度が7であるのはこの状態のスピンパリティが 3^- であるからである。表2がゼロモードとのオーバーラップの計算結果である。事実上オーバーラップがゼロであり、解析的ゼロモードとも直交していることがわかる。

表1 エネルギーレベル (MeV)

エネルギーレベル	メッシュ間隔	
	dx=0.9(fm)	dx=0.8(fm)
1	1.2766	0.6633
2	1.2779	0.6798
3	1.2816	0.6933
4	6.6344	6.6287
5	6.6611	6.6399
6	6.6613	6.6400
7	6.6614	6.6404
8	6.6616	6.6413
9	6.6617	6.6414
10	6.6617	6.6415

表 2

解析的ゼロモード	オーバーラップ
p_x	0.000005
p_y	0.000008
p_z	0.000002

6.2. 軸対称変形核

次に軸対称核 ^{24}Mg を例に挙げる。1 番目から 5 番目までのエネルギーレベルが 6 番目からのエネルギーレベルに比べて十分小さいことがわかる。これらのエネルギーレベルは並進のゼロモード (3 個) と回転のゼロモード (2 個) である。5 番目のレベルと解析的ゼロモードとのオーバーラップを表 4 に載せた。表 4 から、このモードは近似的に y 方向並進に関するゼロモード解であることがわかる。さらに、物理的モードの中で最もエネルギーが低い 6 番目の軌道と解析的ゼロモードとのオーバーラップも表 4 に示す。解析的ゼロモードとのオーバーラップが充分小さいことがわかる。以上から、現実的核力、かつ軸対称変形核においても我々の方法がうまく使えることがわかる。

表 3 エネルギーレベル (MeV)

エネルギーレベル	エネルギー
1	0.4064
2	0.5270
3	0.6479
4	0.7741
5	0.8760
6	3.8907
7	3.8917
8	3.9083
9	3.9184
10	3.9324
11	3.9324
12	4.4256
13	4.4261
14	5.1196
15	5.1224
16	5.5397
17	5.5400
18	6.1831

表 4

5 番目の軌道		6 番目の軌道	
解析的ゼロモード	オーバーラップ	解析的ゼロモード	オーバーラップ
p_x	0.112865	p_x	0.000008
p_y	1.284803	p_y	0.000011
p_z	0.020278	p_z	0.000006
j_x	0.004539	j_x	0.000199
j_y	0.012970	j_y	0.000524

7. ゼロモードの扱いの改良

これまでの計算はメッシュ間隔を十分小さくしていけば、数値的にもとまるゼロモード解は解析的なゼロモード解に近づいていく事を利用し、数値的にもとまった物理的モードが解析的なゼロモードと十分に直交していることを持って収束したとみなしていたわけである。しかしながら数値計算上、ゼ

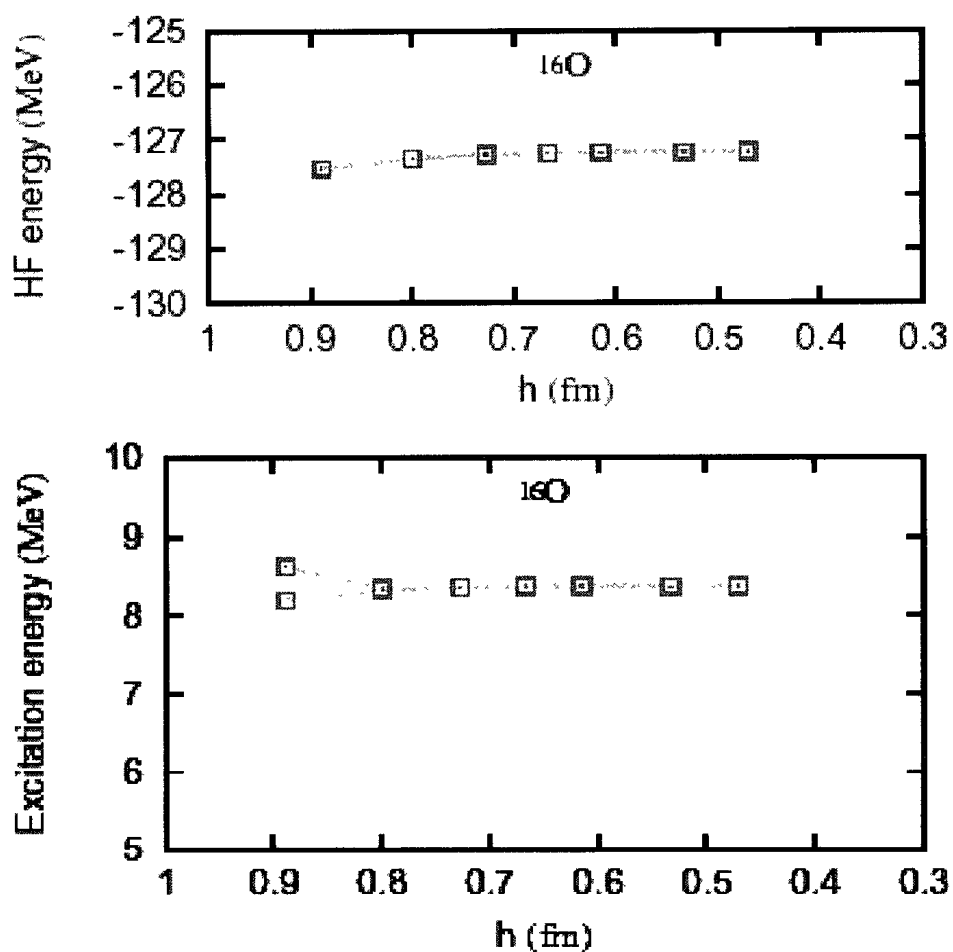


図 1

ロモードの計算はとても大変であるので、解析的ゼロモードをあらかじめ求め、この解析的ゼロモードに直交するように物理的モードを求めた。こうすると、ゼロモードを求める計算時間は事実上ゼロである。簡単のため、相互作用は BKN—Like 力を用いた。図 1 にその結果を示す。励起エネルギー (Excitation Energy) は 3^- であるので、7 本あるが、メッシュ間隔 dx が 0.8 fm くらいのところで縮退していることがわかる。よって、この方法は充分 RPA 解を求めていく上で適用できることがわかる。

8. まとめ

今回の研究により、座標基底 RPA 方程式を現実的な相互作用を用いていくつかの原子核について計算を行い、うまく計算できることがわかった。また、ゼロモードの扱いをより正確にした方法を簡単な相互作用を用いて球形核に対して行なった。将来的には改良されたゼロモードを用いて、現実的な Skyrme 力における変形核に対してもシミュレーションを行なう予定である。

我々が 3 次元 RPA 計算を始めた後、別のグループも別の方法で 3 次元 RPA 計算を始めている。また、これらの方法はこれまで FRLDM に基づいたマクロスコピックな立場からの天体核物理における元素合成の研究を、ミクロスコピックな立場からのより進んだ研究に置き換えていく可能性も秘めている。

原子核の励起状態を調べる上で有用な方法の一つである RPA 方程式の 3 次元の解法が確立したことは、原子核物理の研究対象が大きく広がったことを示し、これからこの方面の研究が様々なグループを巻き込み大きく発展していくことが期待される。

今回の研究における計算は、大阪大学核物理学研究センター (RCNP) のスーパーコンピュータ SX 5, 基礎物理学研究所の共同利用計算機, 並びに東京工芸大学女子短期大学部校費による Gateway パソコンによって行われた。

参考文献

- [1] 例えば M. Honma, T. Mizusaki and T. Otsuka, Phys. Rev. Lett. 75, 1284 (1995), 77, 3315 (1996)
- [2] A. Muta, K. Yabana, J. Iwata and Y. Hashimoto Progress of Theoretical Physics, vol. 108 No 6 (2002)