サマースクール「クォークから超新星爆発まで」 ---基礎物理の理想への挑戦---2014年7月24日 京大基礎物理学研究所

原子核パート

量子多体問題と密度汎関数理論の考え方

筑波大学計算科学研究センター

矢花一浩

目次

- 1. 量子多体系は、厳密に解くことが極めて難しい。
- 2. フェルミ粒子多体系(原子核、物質科学)には、1体描像が有効な多くの現象がある。
- 3. Hartree-Fock近似、密度汎関数理論の考え方。
- 4. 原子核とエネルギー密度汎関数。
- 5. 分野のクロスオーバー
 - ー個人的な経験:原子核、ナノサイエンス、光科学--

物理法則と基礎方程式



様々な物質階層のフェルミ多粒子系

原子核

核子(陽子と中性子)の多体系(フェルミ粒子) 非相対論的量子力学

物質科学(原子・分子・ナノ物質・バルク物質)

原子核と電子の多体系 電子はフェルミ粒子、非相対論的量子力学 原子核の運動は、多くの場合、古典力学的 例外:液体ヘリウム、極低温原子ガスの凝縮

非相対論的な取り扱いの妥当性

	運動エネルギー	質量	v/c
原子核(核子多体系)	ε _F =40MeV	940MeV	<0.3
物質(電子多体系)	$\epsilon_{F}=1\sim 20 eV$	511000eV	<0.01

cf: ハドロンの世界では相対論的な取り扱いが必須 核子の質量(940MeV) >> クォークの質量(u,d: 数MeV)

Nミルトニアンとシュレディンガー方程式 $H\Phi(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2, \dots, r_N\sigma_N) = E\Phi(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2, \dots, r_N\sigma_N)$

物質科学: 電子と原子核の多体系
$$H = \sum_{i} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_{a} \frac{Z_a e^2}{\left|\vec{r}_i - \vec{R}_a\right|} \right) + \sum_{i < j} \frac{e^2}{\left|\vec{r}_i - \vec{r}_j\right|}$$

1体ポテンシャル(電子と原子核のクーロンカ)と 2体力(電子間のクーロン斥力)



核子多体系としての原子核: 陽子と中性子の多体系

$$H = \sum_{i} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \sum_{i < j} v \left(\vec{r}_i \vec{p}_i \vec{\sigma}_i, \vec{r}_j \vec{p}_j \vec{\sigma}_j \right)$$

1体ポテンシャルはない。
 2体力(核力)が主、3体力も。
 核子がクォークの複合粒子であるために、
 核力は複雑な状態依存性を持つ。



量子多体系の計算の難しさ

N粒子の運動を記述する時間依存シュレディンガー方程式 $\left[\sum_{i=1}^{N} -\frac{\hbar^{2}}{2m} \Delta_{i} + V(\vec{r}_{i}) + \sum_{i< j}^{N} v(\vec{r}_{i} - \vec{r}_{j})\right] \Psi(\vec{r}_{1}, \vec{r}_{2}, \cdots, \vec{r}_{N}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}_{1}, \vec{r}_{2}, \cdots, \vec{r}_{N}, t)$

同種 (フェルミ) 粒子波動関数の対称性 $\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N, t) = -\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_N, t)$

直接計算が可能なのは、高々数粒子系(2,3,4,…)

古典力学であれば、

$$M_i \frac{d^2 \vec{R}_i(t)}{dt^2} = \sum_j \vec{F}_{ij}$$

自由度の数は、粒子数をNとして
3N

多粒子系の記述: ⇒ 何かしらの近似(例えば平均場近似)が不可避



目次

- 1. 量子多体系は、厳密に解くことが極めて難しい。
- 2. フェルミ粒子多体系(原子核、物質科学)には、1体描像が有効な多くの現象がある。
- 3. Hartree-Fock近似、密度汎関数理論の考え方。
- 4. 原子核とエネルギー密度汎関数。
- 5. 分野のクロスオーバー
 - ー個人的な経験:原子核、ナノサイエンス、光科学--

「平均場中の独立粒子運動」を支持する様々な現象

原子核(陽子と中性子の1粒子運動)

スピン軌道力を含むポテンシャルによる魔法数の説明 核子弾性散乱に対する光学ポテンシャルの成功

物質中の電子の1粒子運動

- 原子: 周期律(魔法数としての希ガス元素)
- 分子: 分子軌道理論の成功。 自然界に存在する分子は、電子が閉殻となっている。
- 固体: バンド理論の成功(金属と絶縁体の区別、光応答)

多くの物質の基本的な性質が独立粒子運動により理解できることから、 平均一体ポテンシャルの中の運動を考えることに意味がある。

多体ハミルトニアンから1体ハミルトニアンを得るにはどうしたら良いか?

原子核の魔法数 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126

ポテンシャル中の1粒子軌道を パウリ排他率が満たされるように 陽子と中性子を詰めていくことで 原子核の魔法数が得られる。



 $\left|-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right]\phi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i\phi_i(\vec{r})$



物質構造における1粒子軌道の重要性

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right]\phi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i\phi_i(\vec{r})$$

原子の電子配置と周期律

希ガスの原子番号=原子の魔法数 2,10,18,36,54,86,(118)



分子: 共有結合による安定化



固体のエネルギーバンド構造

導体か絶縁体か 光に対して透明か、不透明か



目次

- 1. 量子多体系は、厳密に解くことが極めて難しい。
- 2. フェルミ粒子多体系(原子核、物質科学)には、1体描像が有効な多くの現象がある。
- 3. Hartree-Fock近似、密度汎関数理論の考え方。
- 4. 原子核とエネルギー密度汎関数。
- 5. 分野のクロスオーバー
 - ー個人的な経験:原子核、ナノサイエンス、光科学--

「平均場中の独立粒子運動」を支持する様々な現象

原子核(陽子と中性子の1粒子運動)

スピン軌道力を含むポテンシャルによる魔法数の説明 核子弾性散乱に対する光学ポテンシャルの成功

物質中の電子の1粒子運動

- 原子: 周期律(魔法数としての希ガス元素)
- 分子: 分子軌道理論の成功。 自然界に存在する分子は、電子が閉殻となっている。
- 固体: バンド理論の成功(金属と絶縁体の区別、光応答)

多くの物質の基本的な性質が独立粒子運動により理解できることから、 平均一体ポテンシャルの中の運動を考えることに意味がある。

多体ハミルトニアンから1体ハミルトニアンを得るにはどうしたら良いか?

Hartree近似(原子の場合)

i番目の電子に着目すると、その電子は、 原子核からのクーロン引力と、他の電子からの クーロン斥力を受ける。

$$V(r) = -\frac{Ze^{2}}{r} + \int d\vec{r}' \frac{e^{2}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \rho_{i}(\vec{r}')$$

 $\rho_i(\vec{r}')$ は、i番目の電子を除く他の全ての電子の密度を表す。 j番目の電子の軌道関数を $\phi_j(\vec{r})$ と書けば、

$$\rho_i(\vec{r}) = \sum_{j \neq i} \left| \phi_j(\vec{r}) \right|^2$$

軌道関数の満たすHartree方程式(密度と軌道は自己無撞着となるよう解くことが必要)

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 - \frac{Ze^2}{r} + \int d\vec{r} \cdot \frac{e^2}{\left|\vec{r} - \vec{r}\right|} \rho_i(\vec{r})\right\} \phi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\vec{r})$$



Hartree-Fock近似(1)

まず、量子力学の変分原理の復習から: あらゆる波動関数で変分を行うと、 時間に依存しないシュレディンガー方程式が得られる。

$$E[\Psi] = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$$
$$\frac{\delta}{\delta \Psi^*} \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = 0 \qquad \Longrightarrow \qquad H | \Psi \rangle = E | \Psi \rangle$$

$$H\Phi(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2, \cdots, r_N\sigma_N) = E\Phi(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2, \cdots, r_N\sigma_N)$$
$$\Phi(\vec{r}_1\sigma_1, \cdots, \vec{r}_i\sigma_i, \cdots, \vec{r}_j\sigma_j, \cdots, \vec{r}_N\sigma_N) = -\Phi(\vec{r}_1\sigma_1, \cdots, \vec{r}_j\sigma_j, \cdots, \vec{r}_i\sigma_i, \cdots, \vec{r}_N\sigma_N)$$

物質科学:
電子と原子核の多体系
$$H = \sum_{i} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_{a} \frac{Z_a e^2}{\left|\vec{r}_i - \vec{R}_a\right|} \right) + \sum_{i < j} \frac{e^2}{\left|\vec{r}_i - \vec{r}_j\right|}$$

核子多体系としての原子核: 陽子と中性子の多体系 $H = \sum_{i} -\frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla_{i}^{2} + \sum_{i < j} v \left(\vec{r}_{i} \vec{p}_{i} \vec{\sigma}_{i}, \vec{r}_{j} \vec{p}_{j} \vec{\sigma}_{j} \right)$

Hartree-Fock近似(2)

波動関数に対して1粒子軌道の積の形を仮定する。 波動関数の反対称性を満たすようにする。 $\Phi(\vec{r}_{1}\sigma_{1},...,\vec{r}_{i}\sigma_{i},...,\vec{r}_{j}\sigma_{j},...,\vec{r}_{N}\sigma_{N}) = \phi_{1}(\vec{r}_{1}\sigma_{1})\phi_{2}(\vec{r}_{2}\sigma_{2})...\phi_{N}(\vec{r}_{N}\sigma_{N})$ $\Phi(\vec{r}_{1}\sigma_{1},...,\vec{r}_{i}\sigma_{i},...,\vec{r}_{j}\sigma_{j},...,\vec{r}_{N}\sigma_{N}) = -\Phi(\vec{r}_{1}\sigma_{1},...,\vec{r}_{j}\sigma_{j},...,\vec{r}_{i}\sigma_{i},...,\vec{r}_{N}\sigma_{N})$ $A \nu - p - f \eta dt$ $\Phi(x_{1}...x_{N}) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \phi_{i}(x_{j})$ $\Phi(x_{1},x_{2}) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \phi_{1}(x_{1}) & \phi_{1}(x_{2}) \\ \phi_{2}(x_{1}) & \phi_{2}(x_{2}) \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2!}} \{\phi_{1}(x_{1})\phi_{2}(x_{2}) - \phi_{1}(x_{2})\phi_{2}(x_{1})\}$

スレーター行列式によるエネルギー期待値が最小になるように、 変分原理から軌道関数を決める。(軌道関数に規格直交性を課す)。

$$\frac{\delta}{\delta \phi_i^*} \left\{ \frac{\langle \Phi | H | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} - \sum_{ij} \lambda_{ij} \langle \phi_i | \phi_j \rangle \right\} = 0 \quad \Longrightarrow \quad \text{Hartree-Fockの方程式}$$

Hartree-Fock近似(3)

$$\frac{\delta}{\delta\phi_{i}^{*}} \left\{ \frac{\langle \Phi | H | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} - \sum_{ij} \lambda_{ij} \langle \phi_{i} | \phi_{j} \rangle \right\} = 0$$

$$\Phi(x_{1} \cdots x_{N}) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \phi_{i}(x_{j})$$

$$H = \sum_{i} \left(-\frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla^{2} + V(x_{i}) \right) + \sum_{i < j} v(x_{i}, x_{j})$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla^{2} + V(x) \right\} \phi_{i}(x) + V_{H}(x) \phi_{i}(x) + \int dx' V_{F}(x, x') \phi_{i}(x') = \varepsilon_{i} \phi_{i}(x)$$

$$V_{H}(x) = \int dx' v(x, x') \rho(x')$$
Hartree-Fock \overline{D} 程式

$$V_{F}(x, x') = v(x, x') \rho^{(1)}(x, x')$$

$$\rho(x) = \sum_{i} |\phi_{i}(x)|^{2}$$

$$\rho^{(1)}(x, x') = \sum_{i} \phi_{i}(x) \phi_{i}^{*}(x')$$

1

- ·変分的な基礎がある(基底状態エネルギーの上限値を与える)。
- ・1粒子ハミルトニアンは、軌道に対して共通であり、軌道は互いに直交する。
- ・ハミルトニアンは解である軌道を含むので、自己無撞着に解くことが必要。

密度汎関数理論:現実の物質で今日最も成功しているアプローチ

$$E[\phi_i,\phi_i^*] \equiv \sum_i \langle \phi_i | -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 | \phi_i \rangle + \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) v[\rho(\vec{r})] \qquad \rho(\vec{r}) = \sum_i |\phi_i(\vec{r})|^2$$

ー様無限な物質(核物質、電子ガス)を再現するようにエネルギーを用意する。

$$\frac{\delta}{\delta \phi_i^*} \left\{ E\left[\phi_i, \phi_i^*\right] - \sum_{ij} \lambda_{ij} \left\langle \phi_i \middle| \phi_j \right\rangle \right\} = 0$$
$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) \right\} \phi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\vec{r}) \quad \text{Kohn-Sham} \mathbf{5} \mathbf{E} \mathbf{I} \mathbf{I}$$

・無限一様系に対しては、定義から厳密になる。 (Hartree-Fock近似では、無限一様系でも近似にしかならない)。

・軌道関数の導入により、軌道効果(殻効果)を取り入れることができる。

・局所密度近似のもとでは、ポテンシャルは局所的になり、解くのが容易。 (Hartree-Fock近似では交換ポテンシャルが非局所)

局所密度近似から系統的に近似を上げる指針がない。

原子核の場合:エネルギー密度を現象論的に決めている。

Skyrme-Hatree-Fock法

H =

ハミルトニアンは、デルタ関数からなる2体力と3体力を用いる。 3体力は、多体効果から現れるものが主で、3つの核子間に働く力ではない。

$$\sum_{i} -\frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla^{2} + \frac{1}{2} \sum_{ij} v_{ij}^{(2)} + \frac{1}{6} \sum_{ijk} v_{ijk}^{(3)} \qquad \begin{aligned} & v_{ij}^{(2)} = t_{0} (1 + x_{0} P_{\sigma}) \delta(\vec{r}_{i} - \vec{r}_{j}) + \frac{1}{2} t_{1} \left[\delta(\vec{r}_{i} - \vec{r}_{j}) k^{2} + k^{\prime 2} \delta(\vec{r}_{i} - \vec{r}_{j}) k^{2} + k^{\prime$$

このハミルトニアンから得られるエネルギー期待値の表式

$$E = \int d\vec{r} H(\vec{r}) = \frac{\langle \Phi | H | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \qquad \Phi(x_1 \cdots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \phi_i(x_j)$$

$$H(\vec{r}) = \frac{\hbar^{2}}{2m} \tau(\vec{r}) + \frac{1}{2} t_{0} \left[\left(1 + \frac{1}{2} x_{0} \right) \rho^{2} - \left(x_{0} + \frac{1}{2} \right) \left(\rho_{n}^{2} + \rho_{p}^{2} \right) \right] + \frac{1}{4} (t_{1} + t_{2}) \rho \tau + \frac{1}{8} (t_{2} - t_{1}) \left(\rho_{n} \tau_{n} + \rho_{p} \tau_{p} \right)$$

$$\rho_{q}(\vec{r}) = \sum_{i,\sigma} |\phi_{i}(\vec{r},\sigma,q)|^{2}$$

$$\tau_{q}(\vec{r}) = \sum_{i,\sigma} |\nabla\phi_{i}(\vec{r},\sigma,q)|^{2}$$

$$\tau_{q}(\vec{r}) = \sum_{i,\sigma} |\nabla\phi_{i}(\vec{r},\sigma,q)|^{2}$$

$$\tau_{q}(\vec{r}) = \sum_{i,\sigma} |\nabla\phi_{i}(\vec{r},\sigma,q)|^{2}$$

$$\frac{1}{2} W_{0} \left(\rho \nabla \cdot \vec{J} + \rho_{n} \nabla \cdot \vec{J}_{n} + \rho_{p} \nabla \cdot \vec{J}_{p} \right)$$



空間一様で、陽子数と中性子数が等しい場合 エネルギー密度は

$$E = \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) \varepsilon(\vec{r}) \qquad \qquad \rho(\vec{r}) = \sum_{i,\sigma,q} |\phi_i(\vec{r},\sigma,q)|^2 \\ \tau(\vec{r}) = \sum_{i,\sigma,q} |\vec{\nabla}\phi_i(\vec{r},\sigma,q)|^2$$

$$\varepsilon = \frac{\hbar^{2}}{2m} \frac{\tau}{\rho} + \frac{3}{8} t_{0} \rho + \frac{1}{16} t_{3} \rho^{2} + \frac{1}{16} (3t_{1} + 5t_{2}) \tau \quad \tau \propto \rho^{5/3}$$
運動
エネルギー 2体力 3体力





目次

- 1. 量子多体系は、厳密に解くことが極めて難しい。
- 2. フェルミ粒子多体系(原子核、物質科学)には、1体描像が有効な多くの現象がある。
- 3. Hartree-Fock近似、密度汎関数理論の考え方。
- 4. 原子核とエネルギー密度汎関数。
- 5. 分野のクロスオーバー
 - ー個人的な経験:原子核、ナノサイエンス、光科学--

原子核の結合エネルギー=質量欠損 に対する計算

原子核の質量公式(Bethe-Weizsaker mass formula)

$$B(N,Z) = a_v A + a_s A^{\frac{2}{3}} + a_C \frac{Z^2}{A^{\frac{1}{3}}} + a_I \frac{(N-Z)^2}{A} - \delta(A)$$



鉄(Fe)のあたりで結合が一番強い



原子核は、電気を帯びた液滴のようなもの(液滴模型)

液滴は、表面積が小さい方が安定。
電気を帯びた球は、大きくなると2つ以上の球に分裂した方がエネルギーが下がる。
大きくなるので、不安定になる。
(大きな原子核が核分裂を起こす原因)

両者の兼ね合いから、中間の大きさの鉄が最も安定になっている。

様々な理論による原子核の質量(結合エネルギー)予測

Model	r.m.s. error	# of nuclei	# of parameters	References
Bethe-Weizsäcker formula	2.97 MeV	1768	5	Lunney et al., RMP 75 (2003) 1021
Finite-Range Droplet Model	0.609 MeV	1654	30	Möller, Mix et al., At. Data Nucl. Data Tables 59, 185(1995)
KUTY	0.68 MeV	2921	34	Koura, Uno, Tachibana, Yamada, NPA 674 (2000) 47
DZ	0.375 MeV	1571	28	Duflo, Zucker, PRC52 (1995) R23
Extended Thomas-Fermi + Strutinsky integral	0.709 MeV	1719		Goriely, AIP Conf. Prec. No. 529 (2000), p. 287
Hartree-Fock + BCS	2-3 MeV	1029	About 10	Tajima et al., NPA603 (1996) 23
Relativistic Mean-Field	2.6 MeV	1315		Lalazissis et al., At. Data Nucl. Data Tables 71, 1 (1999)
HFB-8	0.635 MeV	2149	About 15	Samyn and Goriely et al., PRC70, 044309 (2004)
HFB-15	0.678 MeV	2149	About 15	Gorirly and Samyn et al., PRC77, 031301 (2008)



密度汎関数計算(Hartree-Fock-Bogoliubov計算)からのずれ



原子核の密度分布





J.W. Negele, Rev. Mod. Phys. 54, 913 (1982) 26

原子核の形に対する平均場計算(HFB)



Ζ



Distortion parameter η

エネルギーギャップをつくることで 物質は安定化する。 粒子の数が異なると、ギャップが無くなる。 その粒子数でギャップが生じるように「変形」 が生じる。



原子核のハミルトニアンが持つ対称性

$$H = \sum_{i} -\frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla_{i}^{2} + \sum_{ij} v_{ij}$$
$$[H, P] = 0$$
$$[H, \vec{J}] = 0$$
$$[H, N] = 0$$

1粒子ハミルトニアン(平均場ハミルトニアン)は、 多くの対称性を破る。

対相関とHartree-Fock-Bogoliubov近似

$$H = \sum_{i} -\frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla^{2} + \frac{1}{2} \sum_{ij} v_{ij}$$

= $-\frac{\hbar^{2}}{2m} \int dx \psi^{+}(x) \nabla^{2} \psi(x) + \frac{1}{2} \int dx dx \psi^{+}(x) \psi^{+}(x') v(x, x') \psi(x') \psi(x)$

変分空間 Hartree-Fock Hartree-Fock-Bogoliubov $|\Phi\rangle = \prod_{k=1}^{N} a_k^+ |0\rangle$ $\left|\Phi\right\rangle = \prod_{k=1}^{N/2} \left\{ u_k + v_k a_k^+ a_{\bar{k}}^+ \right\} \left|0\right\rangle$ $a_k^+ = \int dx \,\phi_k(x) \psi^+(x)$ $a_k^+ = \int dx \,\phi_k(x) \psi^+(x)$ $|\mathbf{A}|\mathbf{U}|\mathbf{A}\rangle$ $\Phi(x_1 \cdots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \phi_i(x_j)$

$$E = \int d\vec{r} H(\vec{r}) = \frac{\langle \Phi | H | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle}$$

密度 $\rho(x) = \langle \psi^+(x)\psi(x) \rangle$ に加え、 対凝縮密度 $\tilde{\rho}(x) = \langle \psi^+(x)\psi^+(x) \rangle$ を含む汎関数となる。

目次

- 1. 量子多体系は、厳密に解くことが極めて難しい。
- 2. フェルミ粒子多体系(原子核、物質科学)には、1体描像が有効な多くの現象がある。
- 3. Hartree-Fock近似、密度汎関数理論の考え方。
- 4. 原子核とエネルギー密度汎関数。
- 5. 分野のクロスオーバー

ー個人的な経験:原子核、ナノサイエンス、光科学-

基底状態と動力学



古典力学:質点系

平均場近似 (HF、密度汎関数理論)

エネルギーの最小化問題(基底状態)

基底状態=つりあいの位置 min $V(x_1, x_2, \dots, x_N)$ $\min E[\phi_i]$ $\int d\vec{r} \,\phi_i^*(\vec{r}) \phi_j(\vec{r}) = \delta_{ij}$

基底状態(つりあい)の方程式

$$\frac{\partial}{\partial x_i} V(x_1, x_2, \cdots, x_N) = 0$$

$$\frac{\delta}{\delta \phi_i^*} E[\phi_i] = \frac{\vec{p}^2}{2m} \phi_i + v[\rho(\vec{r})]\phi_i = \varepsilon_i \phi_i$$
$$\rho(\vec{r}) = \sum_i |\phi_i(\vec{r})|^2$$

運動方程式

$$m_i \ddot{x}_i = -\frac{\partial}{\partial x_i} V(x_1, x_2, \cdots, x_N)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_i(\vec{r}, t) = \frac{\vec{p}^2}{2m} \psi_i(\vec{r}, t) + v[\rho(\vec{r}, t)] \psi_i(\vec{r}, t)$$
$$\rho(\vec{r}, t) = \sum_i |\psi_i(\vec{r}, t)|^2$$

原子核衝突の時間依存平均場理論によるシミュレーション

17

時間依存Hartree-Fock法による核融合反応 3次元実空間・実時間で方程式を解く。 空間格子30x28x16,時間ステップ 4x10²

H. Flocard, S.E. Koonin, M.S. Weiss, Phys. Rev. 17(1978)1682.

私が大学院に入学したのが1982年

$^{16}O - ^{16}O$ collision at E=16 MeV





FIG. 2. Contour lines of the density integrated over the coordinate normal to the scattering plane for an ${}^{16}\text{O} + {}^{16}\text{O}$ collision at $E_{1ab} = 105$ MeV and incident angular momentum $L = 13\hbar$. The times t are given in units of 10^{-22} sec.

THREE DIMENSIONAL TIME DEPENDENT HARTREE FOCK...

1980年代:原子核物理学とナノサイエンスのクロスオーバー

1980年代、真空中に超微粒子を生成し、サイズ選別する技術が確立。 ・金属クラスターの電子設構造(1984)、フラーレンの発見(1985)

アルカリ金属クラスター: 魔法数、電子の殻構造



原子核: 2,8,20,28,50,82,126、...

原子核(核子多体系)と物質科学(電子多体系)

	$H = \sum_{i} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \sum_{i < j} v_{ij}$	$H = \sum_{i} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_{a} \frac{Z_a e^2}{\left \vec{r}_i - \vec{R}_a\right } \right) + \sum_{i < j} \frac{e^2}{\left \vec{r}_i - \vec{r}_j\right }$
	原子核(核子)	原子·分子(電子)
大きさ	10 ⁻¹⁵ m	10 ⁻¹⁰ m
エネルギー	1MeV	1eV
時間	10 ⁻²³ s	10 ⁻¹⁷ s
質量	10 ⁹ eV	5x10 ⁵ eV
相互作用	核力(強い相互作用	引) クーロンカ
統計性	フェルミ粒子	フェルミ粒子



球形ポテンシャルに閉じ込められた 有限個のフェルミ粒子系



金属クラスター



私が原子クラスターの分野に参入したのは 1992年。 分野が立ち上がってから数年たち、面白いが「複雑で難しい」問題が多かった。

- 金属原子からなるクラスターでも、LiとNaでは 光を吸収する様子が違うのはなぜか?
- 巨視的な性質(例えば誘電率)は、どのくらい 小さな物質まで意味があるのか?

どうやって光吸収を記述しようか?

- 数百個の電子の運動。

- だいたい球形だが、表面はでこぼこしている。



Absorption spectrum (Mie plasmon) of Alkali-metal clusters, Li and K

金属クラスターのプラズマ振動と光吸収スペクトル

K. Yabana, G.F. Bertsch, Phys. Rev. B54, 4484 (1996).

物質科学の第一原理ハミルトニアン+原子核分野のシミュレーション法

瞬間的な電場 $E(t) \propto \delta(t)$ を加えた後の電子密度変化



Assume Icosahedral shape



3-5-61 多層正二十面体構造(MIC)の概念図⁵⁰⁰ nは MICの層の数であり、N は全原子数である。1 層構 造(n=1)では原子数 N=13 に対応し、2 層構造(n=2)で は N=55、3 層構造(n=3)では N=147…となる。









金属クラスターの光吸収スペクトル: Li₁₄₇+

K. Yabana, G.F. Bertsch, Phys. Rev. B54, 4484 (1996).



分子の光吸収:TDDFTが有効な例



Si結晶にパルス光を入射した際に起こる電子ダイナミクス









短い光

1eV(赤外から可視領域)の光の周期と同程度のパルス光

フェムト・アト秒ダイナミクス

アト秒X線パルスを用いた レーザーパルス波形の実時間記録



Joint LMU-MPQ Laboratory of Attosecond



NATUREJOBS Marine biology



光パルスは物質中をどのように伝播していくのか? —量子論の第一原理計算から巨視的電磁気学へ— I=10¹⁰W/cm²



強い光(レーザー)の科学:原子核・素粒子現象への展開も視野に



FIG. 1: Maximum laser intensity as a function of time and fields of research accessible with these intensities.

太陽光の地表での強度: 0.1 W/cm²

G. Mourou Optik & Photonik December 2010 No. 4

まとめ

原子核の密度汎関数理論

- ・ 量子多体系は、厳密に解くことが極めて難しい。
- 一方で、フェルミ粒子多体系では1体描像が有効となる現象が顕著にみられる。
- ・ 密度汎関数理論に基づく1体描像は、原子核・物質科学で極めて強力な手段。

分野間のクロスオーバー

- 研究のフロンティアでは、常に起きている。
- 楽しく知識を増やせる良い機会。
- 自分のフィールド(特徴・強み)を持った上で、交流が成立する。
- 「幅広く」か「奥深く」かは、研究のスタイルの違い。異なるタイプの研究者がいて 科学は発展する。(「奥深い」研究者は、「幅広い」知識を持っているもの。)