

大振幅集団運動の微視的理論の歴史と未解決問題

松柳研一^{1,2}

¹ 理化学研究所仁科加速器研究センター ² 京都大学基礎物理学研究所

1. はじめに

量子多体系の存在と振舞いはすべて集団現象である、と言っても過言ではないでしょう。大振幅の集団現象とは、この量子系の平衡状態から遠く離れた非平衡状態にまで達する大きな量子ゆらぎが本質的な役割を果たしている現象であり、量子相転移点近傍をはじめ広範な量子系に普遍的にみられます。原子核で古くから知られている自発核分裂は超低温の極限（絶対温度ゼロ）における大振幅集団運動の典型です。自発核分裂現象自体はよく知られています。しかし、この現象は核子集団が自発的に生み出す驚くべき非平衡・非線形現象であり、また、「巨視的量子現象」ともいえるという認識は（現在のところ、残念ながら）広く共有されていると言えません。自発核分裂のダイナミクスを核子の自由度から出発して微視的に記述しようとするのは、極めて困難でチャレンジングな課題だと思います。

最近話題になっている原子核間ポテンシャル障壁以下での重イオン融合反応は超低温での核分裂の逆過程とも言え、この微視的ダイナミクスも極めてチャレンジングな課題です。誘起核分裂のように、超低温から有限温度の状況に移行するにつれて、大振幅集団運動に対する散逸の効果が重要になってきます。散逸の起源を量子多体論として微視的に解明することも原子核理論の重要な未解決問題として残されています。これらの課題については本研究会で萩野氏、阿部氏、岩本氏のレビュー講演が予定されているので、この講演では、超低温の原子核における大振幅集団運動の典型例として、最近の実験で続々と発見されている多様な変形共存現象を中心に、大振幅集団運動の微視的理論の基本概念と現在までの到達点および未解決問題をレビューします。更に、高速回転する超低温状態（イラスト線近傍の励起状態）も含めて、大振幅集団運動理論の適用が待たれている大振幅集団現象の具体例についても触れる予定です。

絶対温度ゼロの超低温状態にある原子核における低励起集団励起モードは有限量子多体系としての原子核に特有な様相を呈します。球対称性を自発的に破る4重極変形した平均場がまさに形成されようとする量子相転移の転移領域にある原子核の低励起スペクトルやオブレート変形とプロレート変形が共存し、二つの平衡点にまたがる大きな変形揺らぎが起こっている原子核の低励起スペクトルはその典型としてよく知られています。これらの集団励起モードの本質を理解するためには大振幅集団運動を記述できる微視的理論を構築することが不可欠です。量子多体理論としてしっかりとした基礎をもち、かつ、現実の実験データの分析、実験への予言能力をもった実用的な理論が求められています。そのような基礎的かつ実用的な微視的理論を構築するという目標に向かって様々な新しい概念が

提案され、これまでに着実な進展がありました。しかし、その目標は未だ達成されておらず、原子核構造物理学における極めてチャレンジングな研究分野として残されています。

ごく最近、ある雑誌 (Journal of Physics G) が Open problems in nuclear structure theory に焦点を合わせた特集号を企画し、私達は大振幅集団運動の未解決問題について簡単なレビューを寄稿しました [1]。今日はその要点を紹介したいと思います。{ この小文では講演で特に強調した点のみをやや散文的にまとめました。参考文献もほんの少ししか引用していません。レビュー論文に少し加筆した日本語版を私のホームページ [2] に公開していますので、文献を含めて詳しくはそちらをご覧ください。 }

2. 時間依存平均場の集団量子化

よく知られているように、Bohr-Mottelson は「時間変化する平均場」の概念を基本にして原子核の集団運動と 1 粒子運動を統一的に理解する道をひらきました。そのアイデアを微視的に定式化するのに適した時間依存 Hartree-Fock (TDHF) 理論は formal theory としては古くから知られており、また、現実的な数値計算も 1970 年代に始まりましたが [3]、その当時は色々な制約があり、対称性の制限を課さずに現実的な密度汎関数を用いて数値計算することが可能になったのはごく最近のことです。しかし、超低温の核構造ダイナミクスを議論するためには TDHF では不十分です。低励起集団モードの発現には対相関 (超流動性) が本質的な役割を果たしているからです。対相関を取り入れ一般化された平均場である HF-Bogoliubov 場の時間発展を記述する必要があります。時間依存 HF-Bogoliubov (TDHFB) 理論も formal theory としてはよく知られていますが、現実的な数値計算はこれまでほとんど不可能でした。数値計算が膨大になるだけでなく、実は、粒子数保存則に関するゲージ不変性など概念的な問題が残されていました。しかし、ごく最近、これらの困難を突破する道が開かれました (橋本氏と江幡氏の講演参照)。

TDHFB は集団現象を理解するための基本的なアプローチです。しかし、困難な数値計算上の問題を克服したとしても、解決すべき基礎的な問題がまだ残っています。ごく最近、上に紹介したレビュー論文を読んだ英国のポスドクの方から「なぜ TDHF や TDHFB の数値計算だけでは低励起状態を記述できないのか」という質問を貰いました。この点は既に分かっていることなのでレビュー論文では詳しく説明しませんでした。広く知られているとは言えないようです。TDHF も TDHFB も平均場の時間発展を決める運動方程式は大次元の古典ハミルトン方程式と等価なので自発核分裂の量子トンネル現象も低励起状態の量子スペクトルも記述できません。実は TDHF や TDHFB 状態は一般化されたコーヒーレント状態に他ならないので、これらを正準形式で定式化し、正準量子化することによってボソン多体系にマッピングできることが分かっています。このボソン多体系をもととの有限フェルミオン多体系と 1:1 対応させることもできます (図 1 - 3)。このように formal theory としては美しい数学的定式化ができていますが、このままでは使い物になりません。現実の集団現象を記述するためには平均場の時間発展を司る少数の集団変数を導入する必要があります。実際、集団変数を物理的考察に基づいて導入する現象論的アプローチは核構造論でこれまで主導的な役割を果たしてきたし、大きな成果を挙げてきました。なによりも、実験で観測される低励起スペクトルが美しい規則的パターンを

示していることが、集団変数の存在を示しています。では、適切な集団変数をどのようにして理論的に導出するか。そして、これらの集団変数をいかにして量子化するか。これらの課題に答えを見出すべく大振幅集団運動の微視的理論への挑戦が始まったのは1970年代後半でした(図4)。

3. 準粒子RPA, ボソン展開と生成座標法

よく知られている通り, TDHFBの小振幅近似が準粒子RPA(QRPA)です。原子核のような有限量子系では様々な個性をもった1粒子波動関数から励起モードが生成されるので実に多様な集団励起モードが出現しますが、これらの微視的構造を系のダイナミクスに基づいて決定できることがQRPAの大きな利点です。また、平均場近似で破られた対称性を回復するAnderson-Nambu-Goldstoneモードを分離できて、それらの集団質量を計算できる点も重要です。こうして、QRPAによって平均場が破った対称性を(近似の範囲内でコンシステントに)回復できます。QRPAや(対相関を無視した)RPAは多様な巨大共鳴に適用され成功しています。

一方、低エネルギー励起で主要な役割を演じている低振動数の4重極集団モードは非調和(非線形)効果が強いので、これらの記述にはQRPAを越える必要があります。そこで、QRPAをゼロ次近似として高次効果をQRPAボソンの級数展開のかたちで取り入れるボソン展開法が開発され、大きな成果を挙げてきました[4, 5]。しかし、ボソン展開ではボソン(集団座標と集団運動量)の内部構造(微視的構造)がHFB平衡点で決定されているため、集団変数の内部構造までも変化する(核分裂のような)大振幅集団運動には適用できません。集団変数を非摂動的に取り扱える理論の構築が求められる所以です。

大振幅集団運動の微視的理論として生成座標法(GCM)が古くから良く知られており、実際、広く用いられてきました(大西氏のレビュー講演参照)。GCMは実用的で便利な方法ですが、次のような問題が残っていると思います。まず、離散化と連続極限の問題です。生成座標は連続変数ですが数値計算では離散化します。離散化の連続極限は一般には収束しないので、最適な離散化を見つけなければなりません。しかし、何が最適かは経験的に決められており、その理論的基礎づけが不十分だと思います。それから、通常は生成座標を実数としていますが、一般には複素数にする必要があるのでは、という問題が残っています。複素数にしないと重心運動に対する正しい集団質量が得られないことが証明されているからです。更に、「どのようにして最適な生成座標を見つけるか」という基礎的な問題があります。1970年代にHolzwarthとYukawaが生成座標そのものも変分の対象として最適な集団径路(collective path)を決めようと試み、この仕事が大振幅集団運動の微視的理論を構築しようとする機運を刺激しました[6](図5)。

4. Adiabatic TDHF と Self-consistent collective coordinate

TDHF描像に基づいて集団変数を導入し、Adiabatic TDHF(ATDHF)理論を構築しようという試みは1970年代後半から始まりましたが、それは挫折の歴史でもあります[7, 8]。一口にATDHFと言っても二つの流儀があります—集団運動が断熱的と仮定し、集団運

動量に関して幕展開する点では共通ですが(図6右側). Baranger-Veneroni のアプローチ [9] が最も有名ですが実は最適な集団座標, 集団運動量を微視的に導出する論理をもっていない. 現実の低励起スペクトルに適用された事例もないと思います(この理論に基づいて集団運動の慣性関数を計算していないという意味で). Villars のアプローチ [10] は集団変数の微視的構造も自己無撞着に決めようとしたという意味で Baranger-Veneroni より野心的です. しかし, 集団運動量に関する 1 次までの近似では集団経路がユニークに決まらないという困難に遭遇しました.

1980 年に丸森らによって提案された Self-consistent collective coordinate (SCC) 法は断熱近似を仮定せず, 集団ハミルトニアンを微視的かつ自己無撞着に導出しようという大変野心的な試みです [11]. この研究の中で「集団運動とは何か」という問いに関する全く新しい概念が得られました. それは集団座標の概念自体の革新です. 集団運動理論の目標は多次元 TDHFB 空間の中に埋め込まれ, 他の自由度と近似的に decouple した集団多様体(集団超曲面)を抽出することである—客観的に実在するのはこの多様体であって, 集団座標はこの多様体上に局所的に張られる便宜上のものにすぎない, という認識です(図7). SCC 法は非調和ガンマ振動 [12] や 4 重極変形への量子相転移現象 [13] に適用され, その有効性が確かめられました. これらの仕事では QRPA から出発して非線形効果を(集団振動の)振幅展開というかたちで取り込みました(図6左側). この解法は非線形振動の取り扱いに適していますが, 核分裂のような大振幅の集団現象には使えません. そのような状況も取り扱える新しい解法が求められていましたが 2000 年に松尾氏と中務氏が中心となってその目的にかなう解法が開発されました [14]. それは SCC 法を基礎にしつつ ATDHFB の成果も継承するアプローチで Adiabatic SCC (ASCC) 法と名付けられました(図8).

5. ASCC と local QRPA

大振幅集団運動の微視的理論の目標は集団座標と集団運動量を微視的・非摂動的・自己無撞着に決定し, 量子的集団ハミルトニアンと集団シュレーディンガー方程式を導出することです. この際, 小振幅の極限で QRPA に帰着するように理論を構築することが望まれます. ASCC 法はこれらの要請を満たしています. その基本方程式は平衡点での HFB と QRPA を時間変化する平均場に付随する動的座標系に拡張したものとみなせます. ASCC 法とその実用的近似法としてごく最近開発した local QRPA 法については日野原君と佐藤君の講演で紹介されますので, ここではその意義について少しかコメントしておきたいと思います.

- この新しい理論は超伝導状態の平衡点まわりの小振幅振動に対する QRPA をあらゆる非平衡点に拡張することによって非線形・大振幅の集団運動を微視的かつ自己無撞着に記述できる枠組みになっています. 量子相転移点近傍, 自発核分裂, 障壁以下の重イオン融合反応をはじめ物理学の広範な分野での大振幅集団運動への適用が期待されます.
- 大振幅集団運動は化学反応などでも普遍的ですが, 原子核の場合には反応の多次元ポテンシャルエネルギー曲面の性質だけでなく, 集団運動の運動エネルギーを規定

する集団質量（慣性関数）を微視的に導出しなければなりません。この課題に対してはこれまで断熱摂動近似に基づくクランキング公式が用いられてきましたが、この場合、実験データが示唆する集団質量の値よりかなり小さい値しか出せないこと、時間的に変動する平均場によって誘起された（時間反転対称性を破る）time-odd 項が無視されており自己無撞着性を破ってしまうなどの深刻な問題を抱えていました。ASCC 法によってこの困難を解決することが出来ます。それだけでなく、集団質量（慣性関数）を決定する微視的ダイナミクスに対する理解を深めることが出来ます。

- ASCC 法は粒子数保存則に関するゲージ不変性を満たすように定式化されています。したがって、具体的な数値計算においてはゲージ固定が必要となり、これをちゃんとやらないと数値計算が収束しません。
- TDHFB 空間に埋め込まれた（4 重極集団運動に対応する）集団多様体を（ \mathcal{H} , \mathcal{G} ）変形空間にマッピングすることにより Bohr-Mottelson 集団ハミルトニアンを微視的に導出することが出来ます。最近、Bohr ハミルトニアンと称して、5 次元調和振動子に対するシュレーディンガー方程式におけるポテンシャルエネルギーだけを一般化し、運動エネルギー演算子はこれをそのまま使っている（6 個の慣性関数をすべて同じ定数とする）論文が実に多いですが、4 重極集団ダイナミクスにそのような近似は正当化出来ないと思います。

6. これからの課題

今後ぜひやりたいと思っている課題をいくつか列挙します。

- 現代的な密度汎関数（あるいは任意の有効相互作用）から出発して 5 次元 (Bohr-Mottelson) 集団ハミルトニアンを微視的かつ自己無撞着に導出すること。そして、オプレート-プロレート変形共存現象など多彩な 4 重極変形ダイナミクスを系統的に分析すること。
- 大振幅集団運動の微視的理論の自発核分裂への適用、特に、核分裂経路の決定と経路上での集団質量（慣性質量）の微視的かつ自己無撞着な計算。
- 高スピン状態での大振幅集団現象、例えば、超変形状態から通常変形状態への巨視的トンネル崩壊、大振幅の Wobbling モードおよびカイラル振動の記述、空間反転対称性が弱く破れた量子相転移領域での大振幅振動など。

この他にも多くの興味深くやりがいのある研究テーマが若手の挑戦を待ち受けています。

参考文献

- [1] K. Matsuyanagi, M. Matsuo, T. Nakatsukasa, N. Hinohara and K. Sato, Special issue on “Open problems in nuclear structure theory”, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* 37 (2010), 064018. (arXiv:1001.2956)
- [2] <http://www2.yukawa.kyoto-u.ac.jp/~kenmat/index-j.html>
- [3] J.W. Negele, *Rev. Mod. Phys.* 54 (1982), 913.
- [4] A. Klein and E.R. Marshalek, *Rev. Mod. Phys.* 63 (1991), 375.
- [5] H. Sakamoto and T. Kishimoto, *Nucl. Phys. A* 528 (1988), 73.
- [6] G. Holzwarth and T. Yukawa, *Nucl. Phys. A* 219 (1974), 125.
- [7] Felix M.H. Villars, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* 74/75 (1983), 184.
- [8] G. Do Dang, A. Klein and N.R. Walet, *Phys. Rep.* 335 (2001), 93.
- [9] M. Baranger and M. Vénéroni, *Ann. Phys.* 114 (1978), 123.
- [10] F. Villars, *Nucl. Phys. A* 285 (1977), 269.
- [11] T. Marumori, T. Maskawa, F. Sakata and A. Kuriyama, *Prog. Theor. Phys.* 64 (1980), 1294.
- [12] M. Matsuo and K. Matsuyanagi, *Prog. Theor. Phys.* 74 (1985), 1227; 76 (1986), 93; 78 (1987), 591.
- [13] K. Yamada, *Prog. Theor. Phys.* 89 (1993), 995.
- [14] M. Matsuo, T. Nakatsukasa and K. Matsuyanagi, *Prog. Theor. Phys.* 103 (2000), 959.

ボソン・コヒーレント状態

$$\begin{aligned}
 |z\rangle &= e^{z(t)b^\dagger - z(t)^*b} |0\rangle \\
 &= e^{i(p(t)\hat{Q} - q(t)\hat{P})} |0\rangle
 \end{aligned}$$

$$z(t) = z(0)e^{-i\omega t}$$

$$\hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(b^\dagger + b), \quad \hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}}(b^\dagger - b)$$

$$\begin{aligned}
 q(t) &= \langle z(t)|\hat{Q}|z(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(z^*(t) + z(t)), \\
 p(t) &= \langle z(t)|\hat{P}|z(t)\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(z^*(t) - z(t))
 \end{aligned}$$

★ このような大局的な演算子 \hat{Q}, \hat{P} が存在するのはボソン系の特徴
フェルミオン多体系では一般には存在しない

図 1:

時間依存HFB (TDHFB)状態 = 一般化されたコヒーレント状態

$$\begin{aligned}
 |\phi(t)\rangle &= e^{i\hat{G}(t)} |\phi(t=0)\rangle \\
 \hat{G}(t) &= \sum_{ij} (g_{ij}(t)a_i^\dagger a_j^\dagger + g_{ij}^*(t)a_j a_i)
 \end{aligned}$$

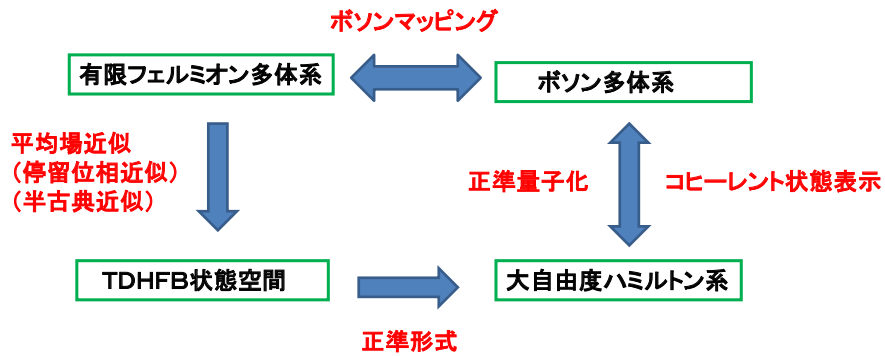
時間依存変分原理

$$\delta \langle \phi(t) | i \frac{\partial}{\partial t} - H | \phi(t) \rangle = 0$$

$$\begin{aligned}
 |\phi(t=0)\rangle &= |\phi_0\rangle & a_i(t) &= e^{i\hat{G}(t)} a_i e^{-i\hat{G}(t)} \\
 a_i |\phi_0\rangle &= 0 & a_i(t) |\phi(t)\rangle &= 0
 \end{aligned}$$

図 2:

全ヒルベルト空間に対する理論



コメント



現実の集団現象を記述するためには
集団部分空間に対する理論の構築が求められる

図 3:

大振幅集団運動の微視的理論の歴史

1960	準粒子RPA (qRPA) (丸森, Baranger, Arvieu-Veneroni)
1962-1964	ボソン展開 (Belyaev-Zelevinsky, 丸森-山村-徳永)
1966	生成座標法の実体化 (大西-吉田)
1972	Skyrme-Hartree-Fock (Vautherin-Brink)
1970-1980年代	TDHF法の発展と広汎な適用 (Bonche-Koonin-Negele, et al.) ボソン展開法の発展と広汎な適用 (岸本-田村-坂本)
1976-1978	大振幅集団運動理論への試み (Rowe-Basserman, Villars, 丸森, Baranger-Veneroni, Goeke-Reinhard, et al.)
1980	SCC法 (丸森-益川-坂田-栗山)
1985-1987	準粒子SCC法と非調和振動への適用 (松尾, 山田, et al.)
1991	Generalized Valley Theory (Klein-Walet-Dang)
2000	断熱的SCC法 (松尾-中務) (これ以降の発展については日野原くん佐藤くんのTalks)

図 4:

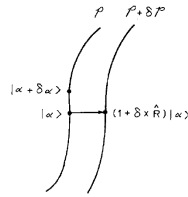
生成座標法(GCM)は有用な方法であるが、
なぜ生成座標法(GCM)では満足できないのか

$$|\psi\rangle = \int_{\mathcal{P}} F(\alpha)|\alpha\rangle d\alpha.$$

▲ 離散化と連続極限の問題

▲ 生成座標を複素数にしないよいか

▲ どのようにして最適な生成座標を見つけるか



CHOICE OF THE CONSTRAINING OPERATOR IN THE CONSTRAINED
HARTREE-FOCK METHOD

G. HOLZWARTH[†] and T. YUKAWA
Nuclear Physics A219 (1974) 125

To determine the path \mathcal{P} and the unknown weight function $F(\alpha)$ along the path in the ansatz (2) we consider variations of $|\psi\rangle$ with respect to both \mathcal{P} and F :

$$|\delta\psi\rangle = \int_{\mathcal{P}+\delta\mathcal{P}} (F(\alpha)+\delta F(\alpha))|\alpha\rangle d\alpha - \int_{\mathcal{P}} F(\alpha)|\alpha\rangle d\alpha.$$

図 5:

QRPAの利点を保ちながら小振幅近似を越えたい

$$|\phi(t)\rangle \Rightarrow |\phi(\eta, \eta^*)\rangle = e^{i\hat{G}(\eta, \eta^*)}|\phi_0\rangle \quad |\phi(t)\rangle \Rightarrow |\phi(q, p)\rangle = e^{i\hat{G}(q, p)}|\phi_0\rangle$$

Self-consistent Collective Coordinate (SCC)

$$\hat{G}(\eta, \eta^*) = \sum_{mn} \hat{G}_{mn}(\eta^*)^m \eta^n$$

$$\delta\langle\phi(\eta, \eta^*)|i\frac{\partial}{\partial t} - H|\phi(\eta, \eta^*)\rangle = 0.$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \dot{\eta}\frac{\partial}{\partial\eta} + \dot{\eta}^*\frac{\partial}{\partial\eta^*}$$

Adiabatic TDHFB (ATDHFB)

$$|\phi(q, p)\rangle = e^{ip\hat{Q}(q)}|\phi(q)\rangle$$

$$|\phi(q + \delta q)\rangle = (1 - i\delta q\hat{P}(q))|\phi(q)\rangle$$

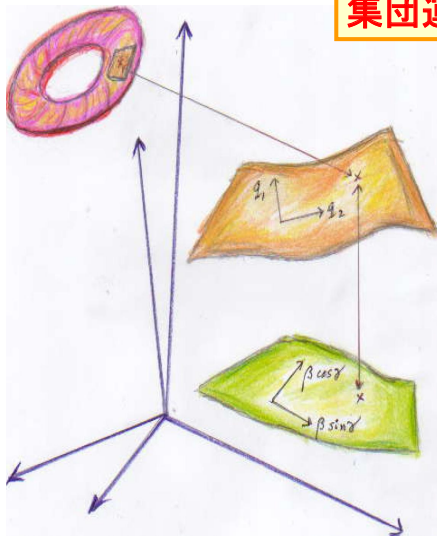
$$\delta\langle\phi(q, p)|i\frac{\partial}{\partial t} - H|\phi(q, p)\rangle = 0.$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \dot{q}\frac{\partial}{\partial q} + \dot{p}\frac{\partial}{\partial p}$$

$$\frac{1}{M(q)} = \langle\phi(q)|[[H, i\hat{Q}(q)], i\hat{Q}(q)]|\phi(q)\rangle$$

図 6:

集団運動の新しい概念



集団多様体の抽出

集団座標はこの多様体上に局所的に張られる便宜上のもの。客観的に実在するのはこの多様体。

集団多様体を β, γ 変形空間にマッピングすることによりBohr-Mottelsonの集団ハミルトニアンを微視的に導出することができる。

多次元TDHFB空間

図 7:

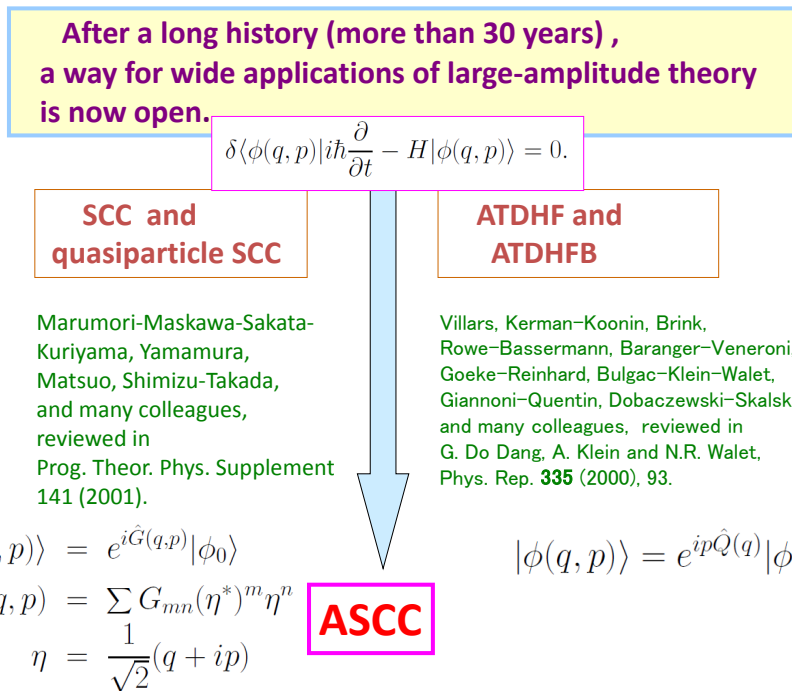


図 8: