

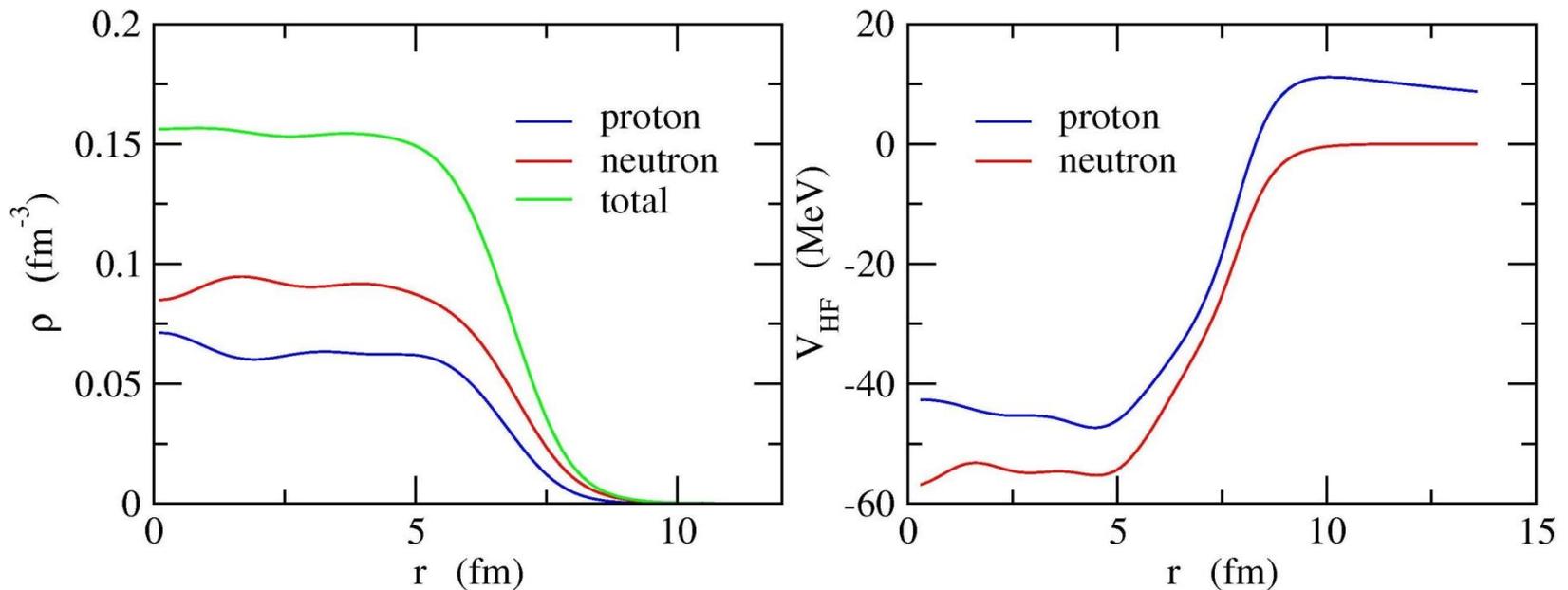
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_i(\mathbf{r}) + \int v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho_{\text{HF}}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \psi_i(\mathbf{r}) - \int \rho_{\text{HF}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi_i(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' = \epsilon_i \psi_i(\mathbf{r})$$

Iteration

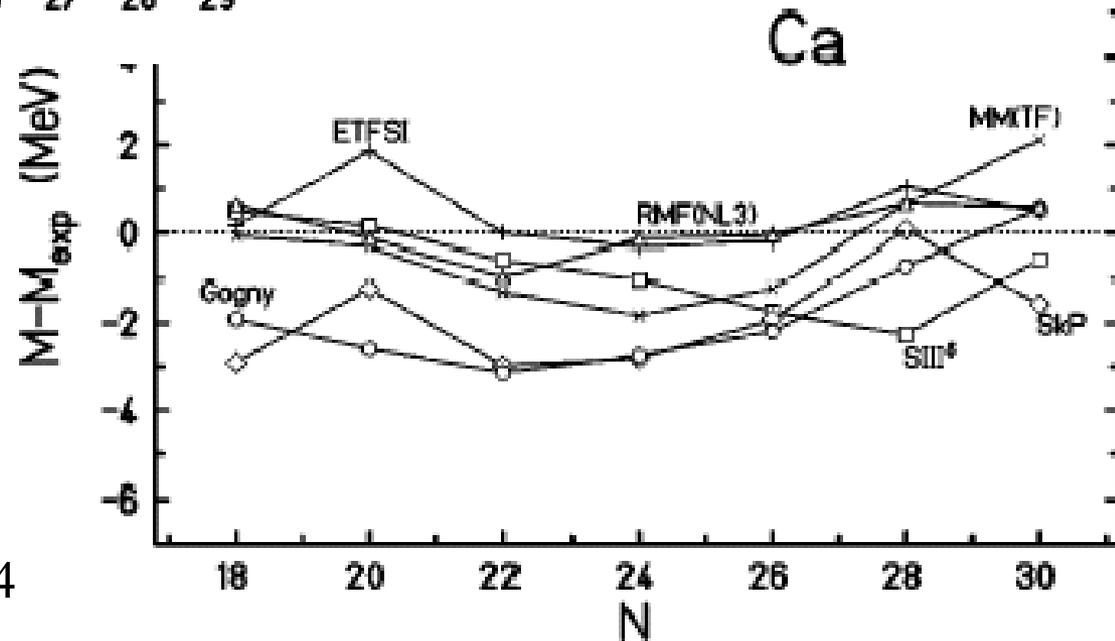
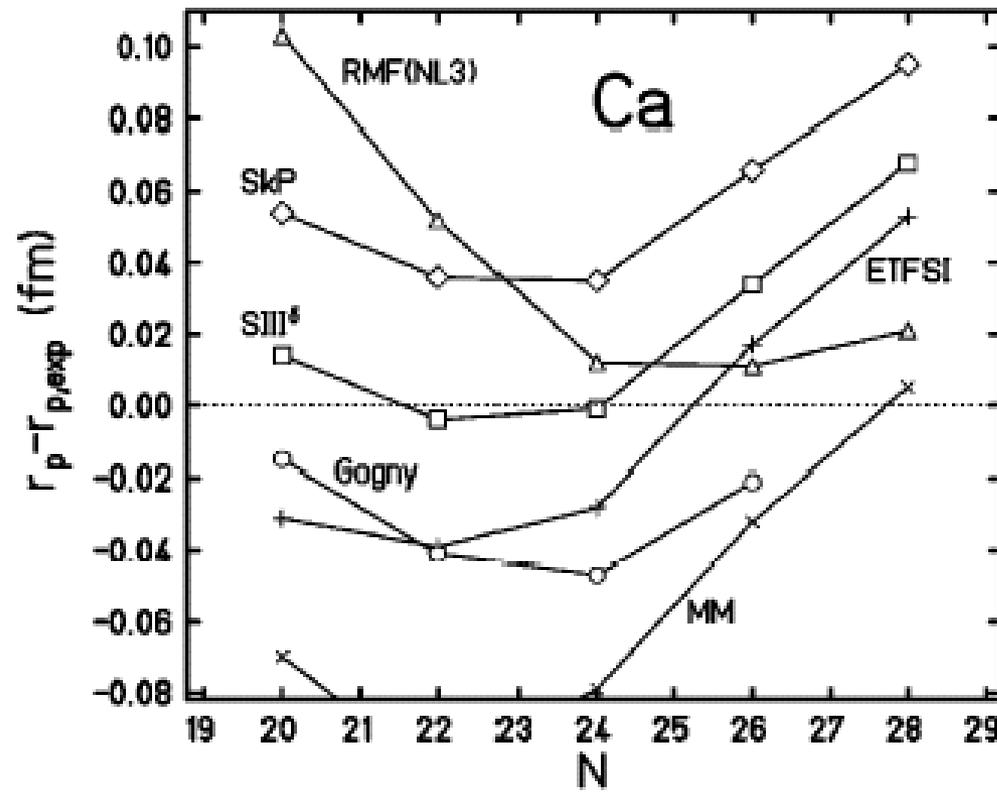
V_{HF} : depends on ψ_i ← non-linear problem

Iteration: $\{\psi_i\} \rightarrow \rho_{\text{HF}} \rightarrow V_{\text{HF}} \rightarrow \{\psi_i\} \rightarrow \dots$

^{208}Pb (Skyrme Hartree-Fock with SKM*)

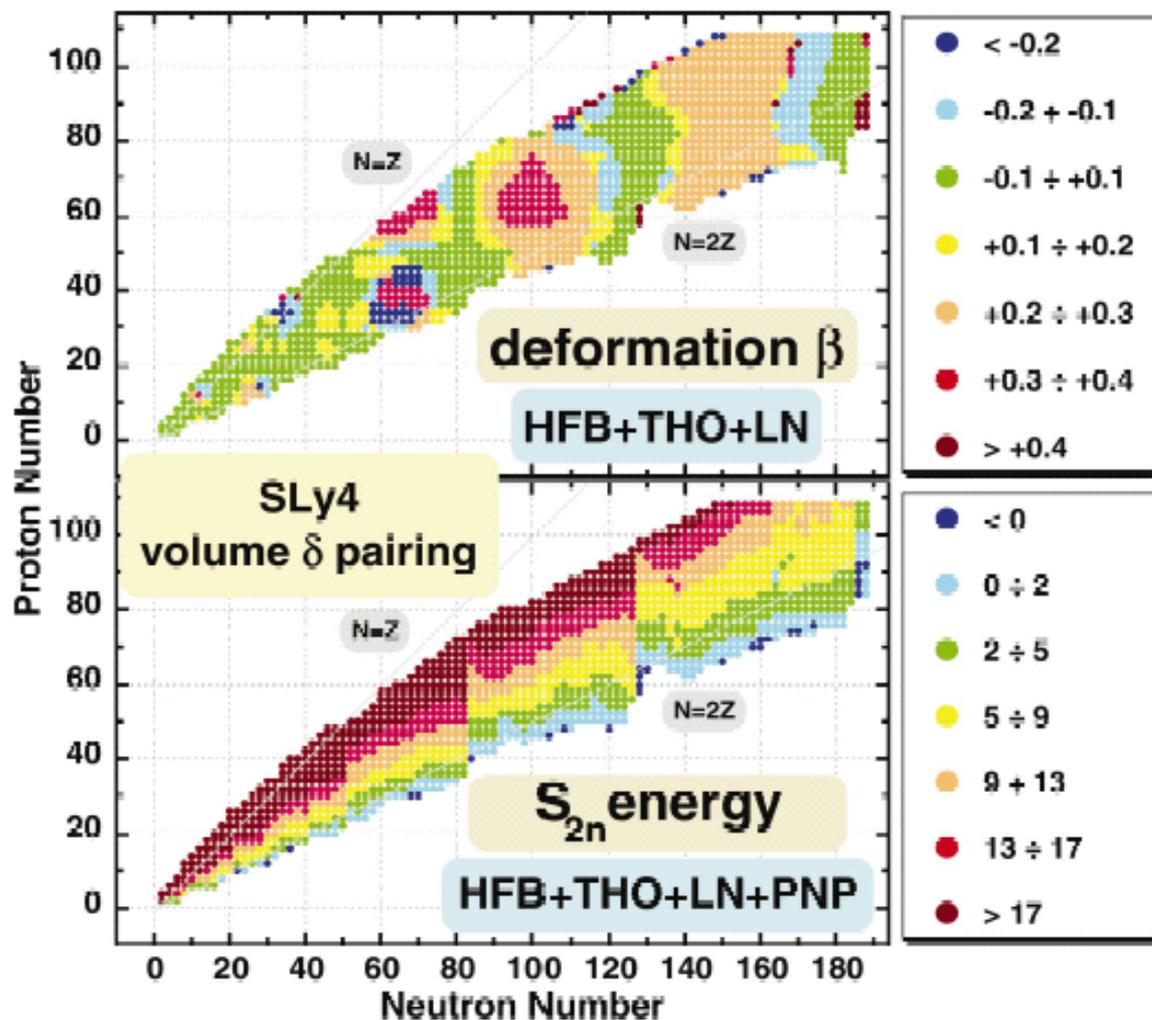


Examples of HF calculations
for masses and radii



Z. Patyk et al.,
PRC59('99)704

deformation and two-neutron separation energy



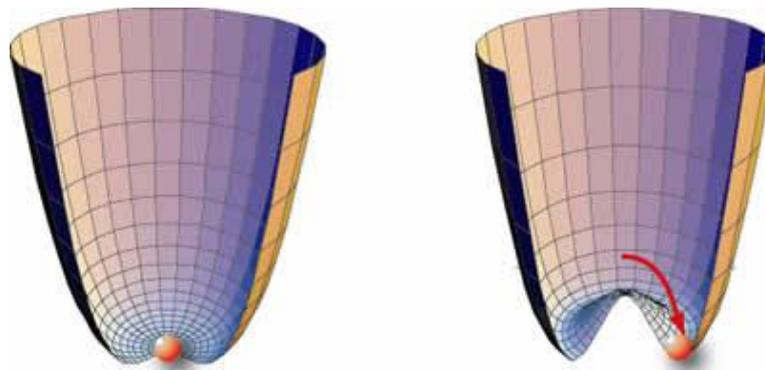
Mean-field approximation and deformation

平均場近似 = 2体場 → 1体場に近似

$$\begin{aligned} H &= \sum_{i=1}^A -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j} v(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \\ &= \sum_{i=1}^A \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_{\text{MF}}(\mathbf{r}_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} v(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) - \sum_i V_{\text{MF}}(\mathbf{r}_i) \end{aligned}$$

→ Ψ_{MF} : ハミルトニアン H が持っている対称性を持たなくてもいい

“対称性の自発的破れ”



Ψ_{MF} : ハミルトニアン H が持っている対称性を持たなくてもいい

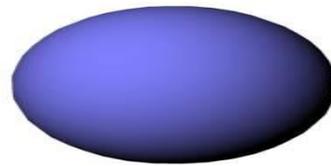
典型的な例

➤ 並進対称性: 原子核の平均場近似 (DFT) では常に破れる

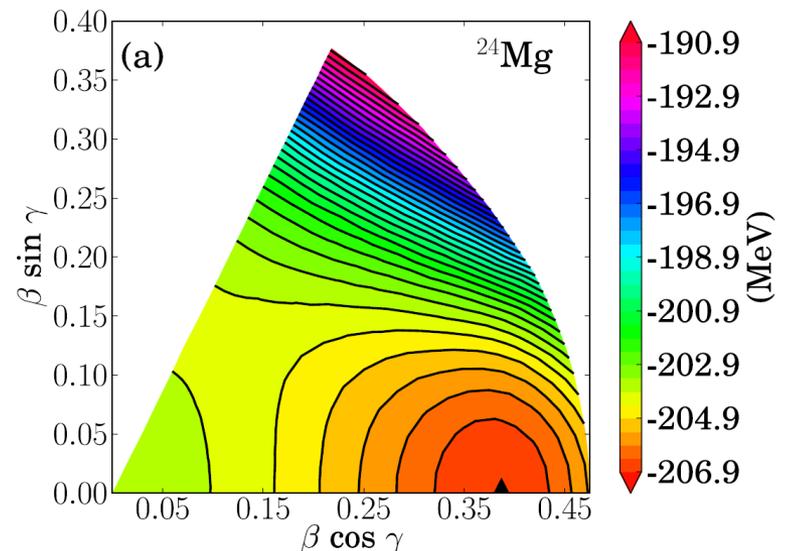
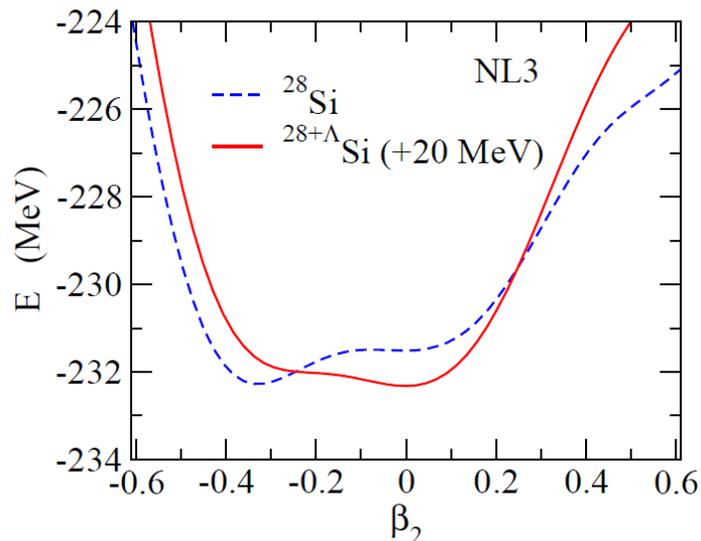
$$H = - \sum_{i=1}^A \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^A v(r_i - r_j) \rightarrow \sum_{i=1}^A \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \underline{V_{MF}(r_i)} \right)$$

➤ 回転対称性

変形した基底状態



$\rightarrow V(r, \theta)$



Nuclear Deformation

核変形の実験的な証拠

Excitation spectra of ^{154}Sm

(MeV)

0.903 ————— 8^+

0.544 ————— 6^+

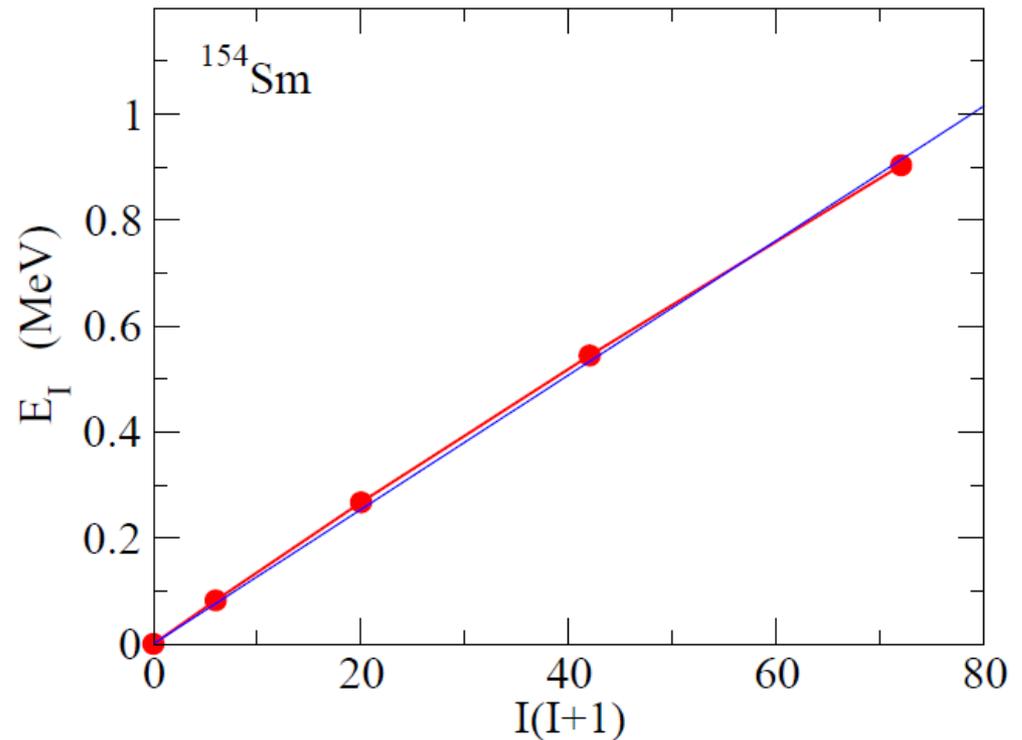
0.267 ————— 4^+

0.082 ————— 2^+

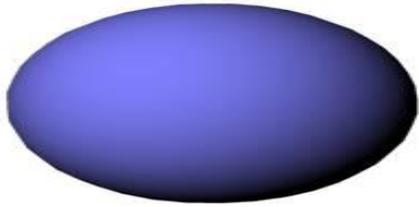
0 ————— 0^+

^{154}Sm

$$E_I \sim \frac{I(I+1)\hbar^2}{2\mathcal{J}}$$



One-particle motion in a deformed potential



$$\rightarrow V(r, \theta)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r, \theta) - E \right] \psi(\mathbf{r}) = 0$$

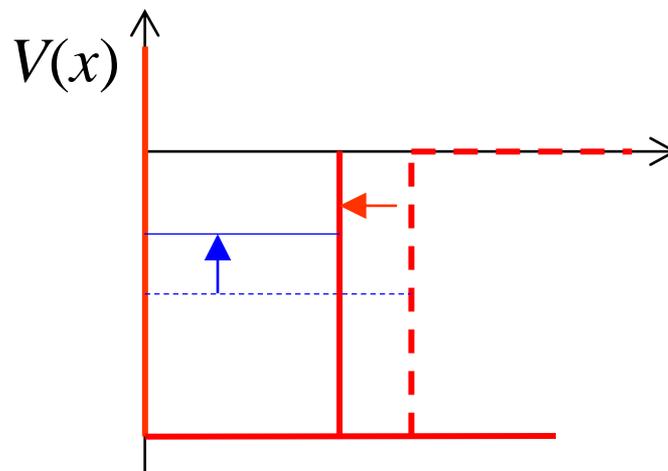
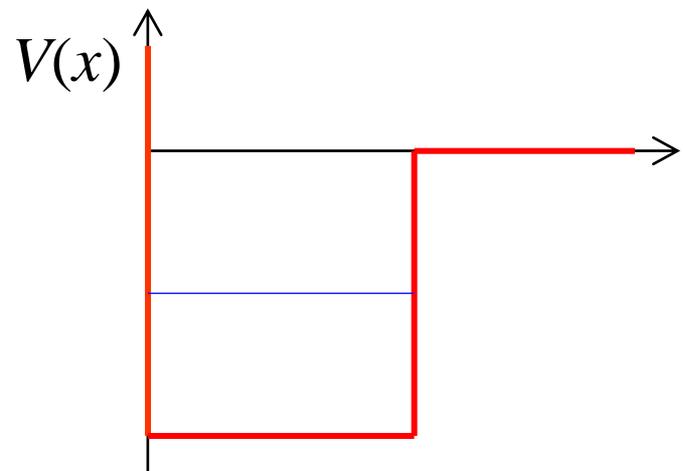
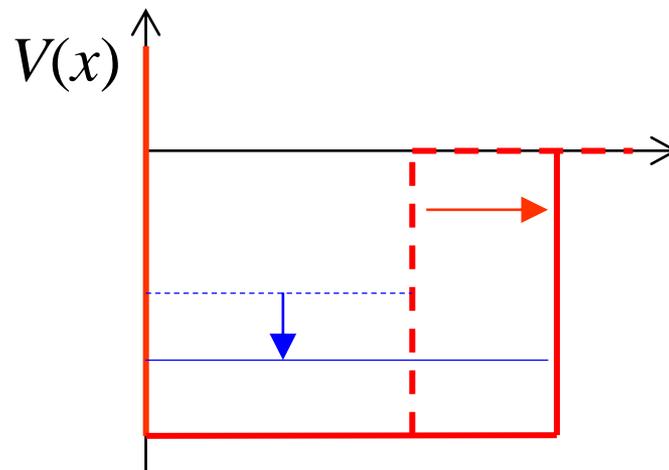
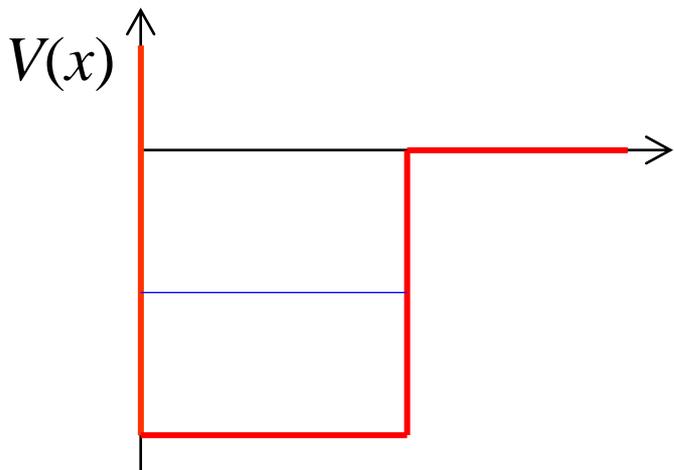
(note) $V(r, \theta) \rightarrow$ 回転対称性を持っていない
 \rightarrow 角運動量がいい量子数ではない

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \rightarrow \psi_{nK}(\mathbf{r}) = \sum_l R_{nl}(r) Y_{lK}(\hat{\mathbf{r}})$$

* 軸対称変形であれば l_z は保存

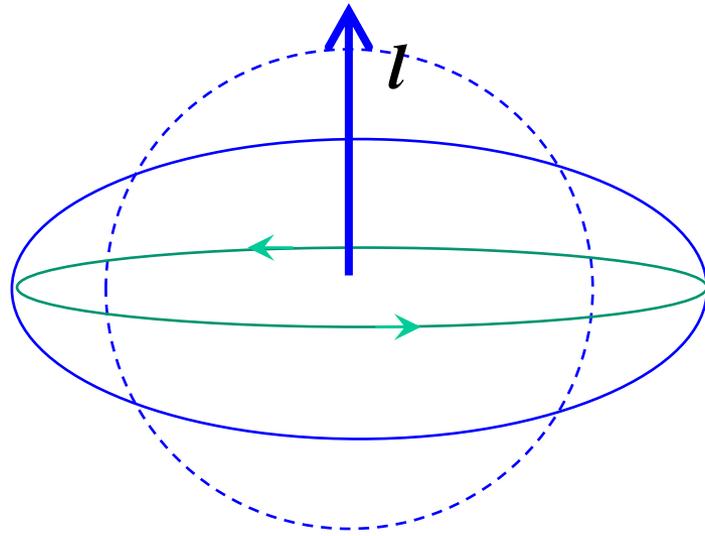
$$E_{nl} \rightarrow E_{nK}$$

(準備) 1次元井戸型ポテンシャル

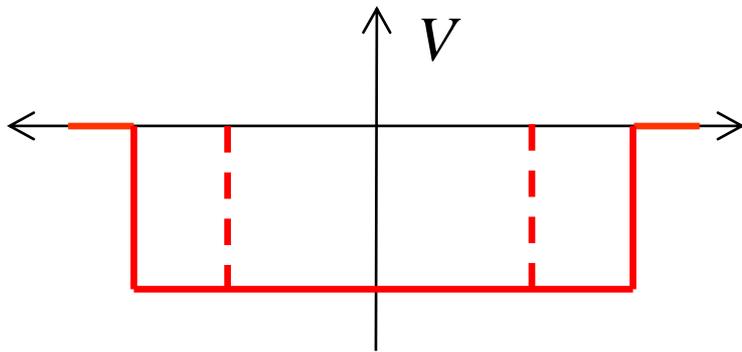
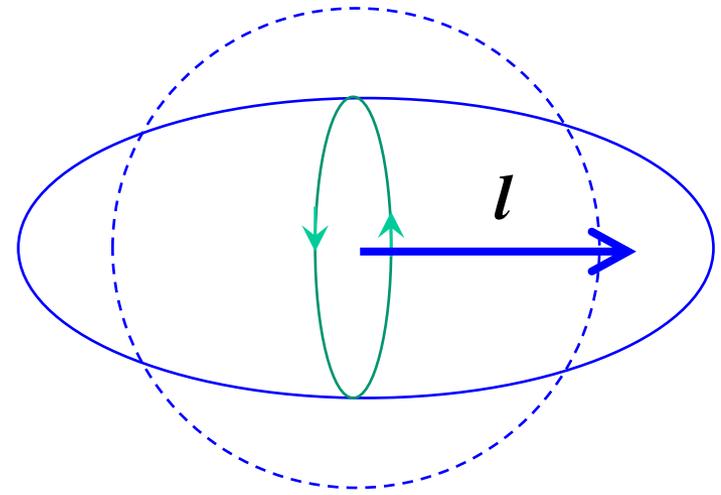


One-particle motion in a deformed potential

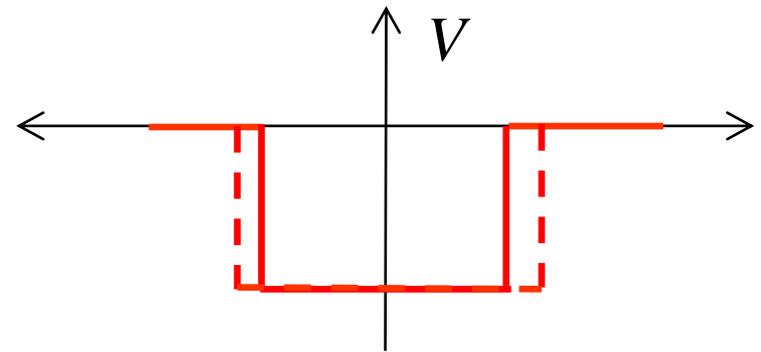
長軸に沿った運動



短軸に沿った運動



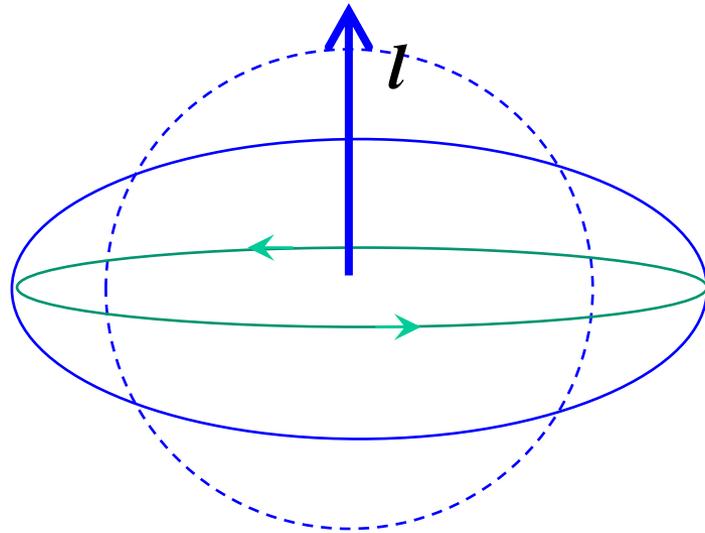
$E \rightarrow$ 小



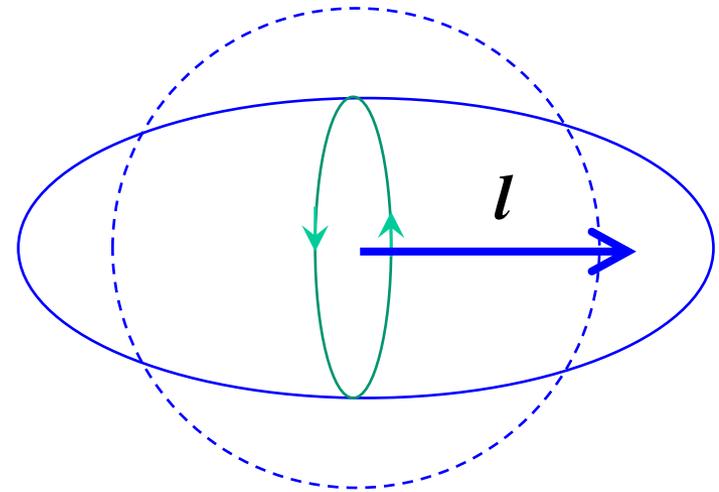
$E \rightarrow$ 大

One-particle motion in a deformed potential

長軸に沿った運動

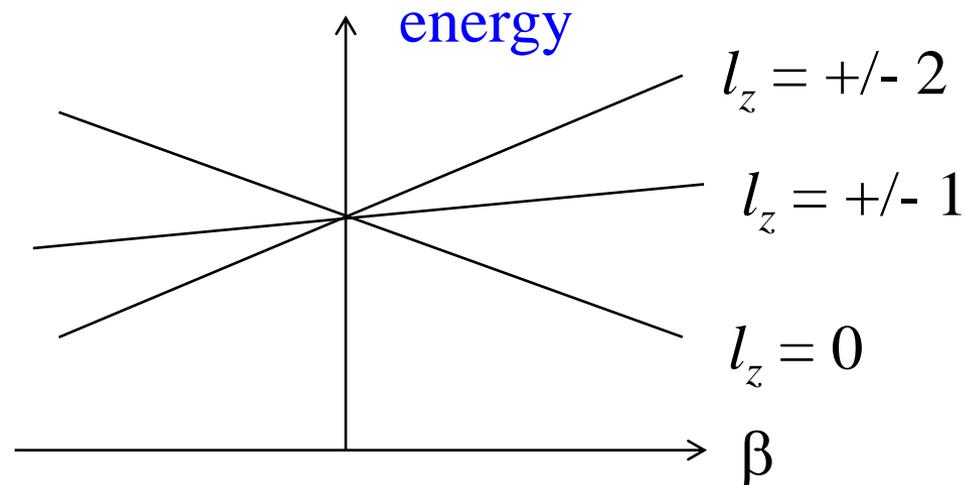


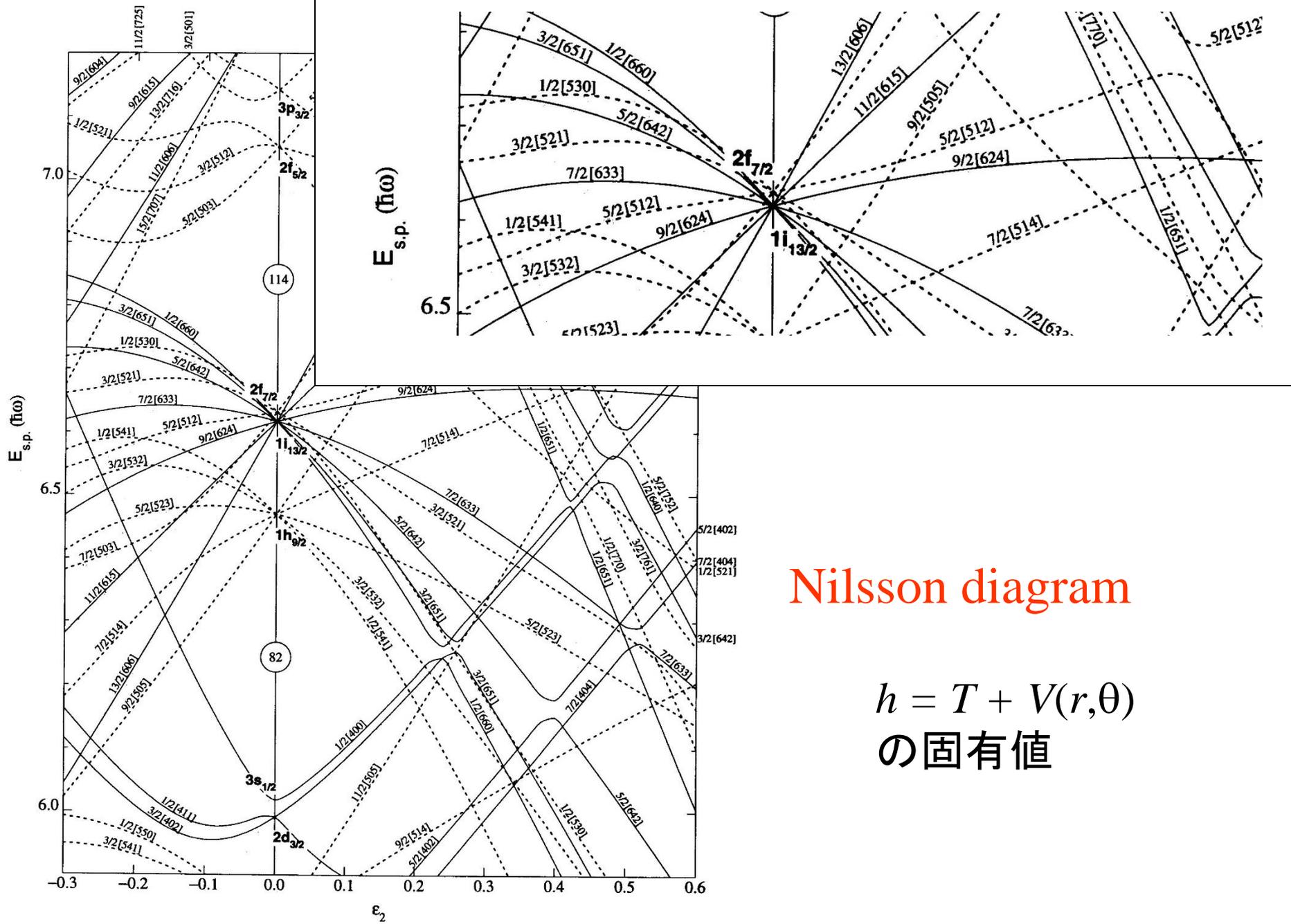
短軸に沿った運動



→ z軸

軌道が
スプリット



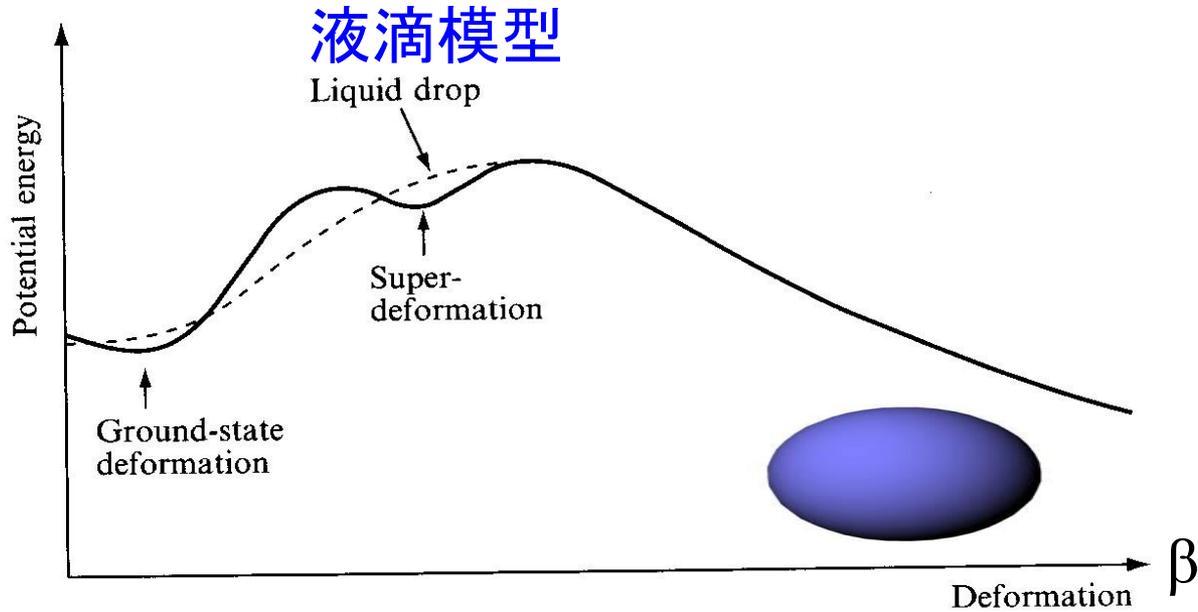


Nilsson diagram

$h = T + V(r, \theta)$
 の固有値

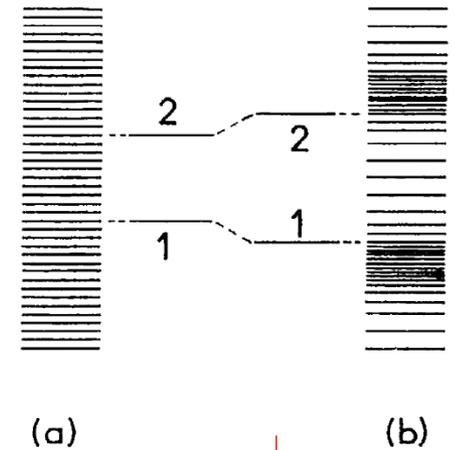
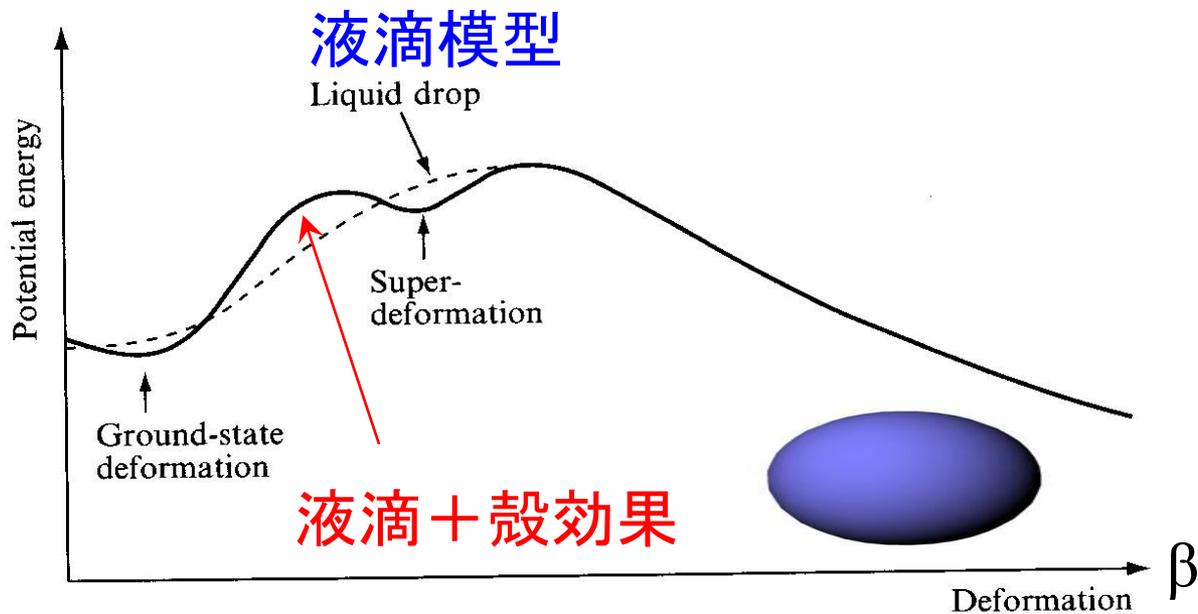
Figure 13. Nilsson diagram for protons, $Z \geq 82$ ($\epsilon_4 = \epsilon_2^2/6$).

原子核の変形と殻効果



$$E(\beta) = E_{LDM}(\beta) + E_{shell}(\beta)$$

液滴模型→常に球形が基底状態



準位にギャップ
が開くと原子核が
安定になる

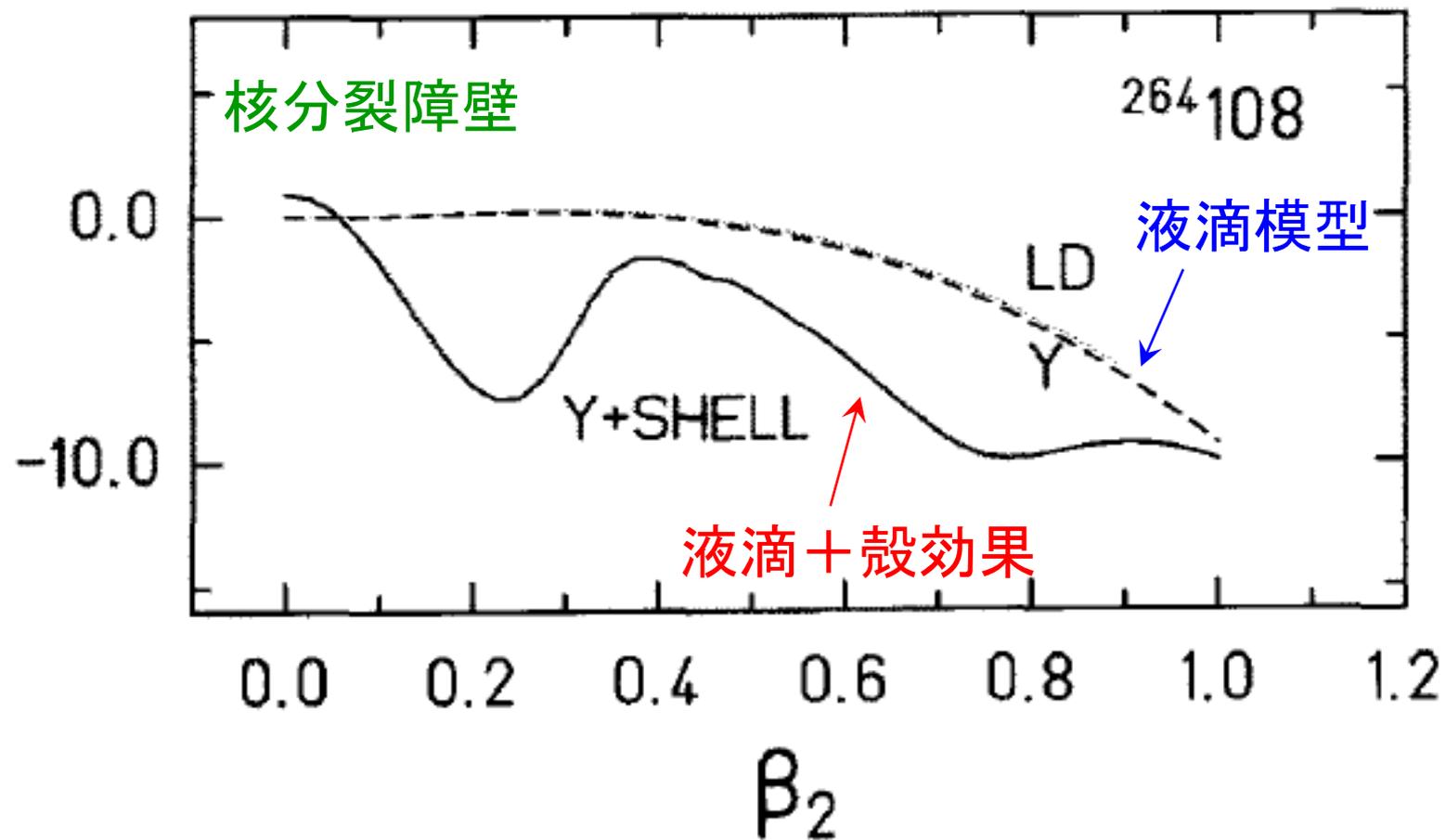
$$E(\beta) = E_{LDM}(\beta) + E_{shell}(\beta)$$

原子核が変形

→ 核子が感じるポテンシャルも変形

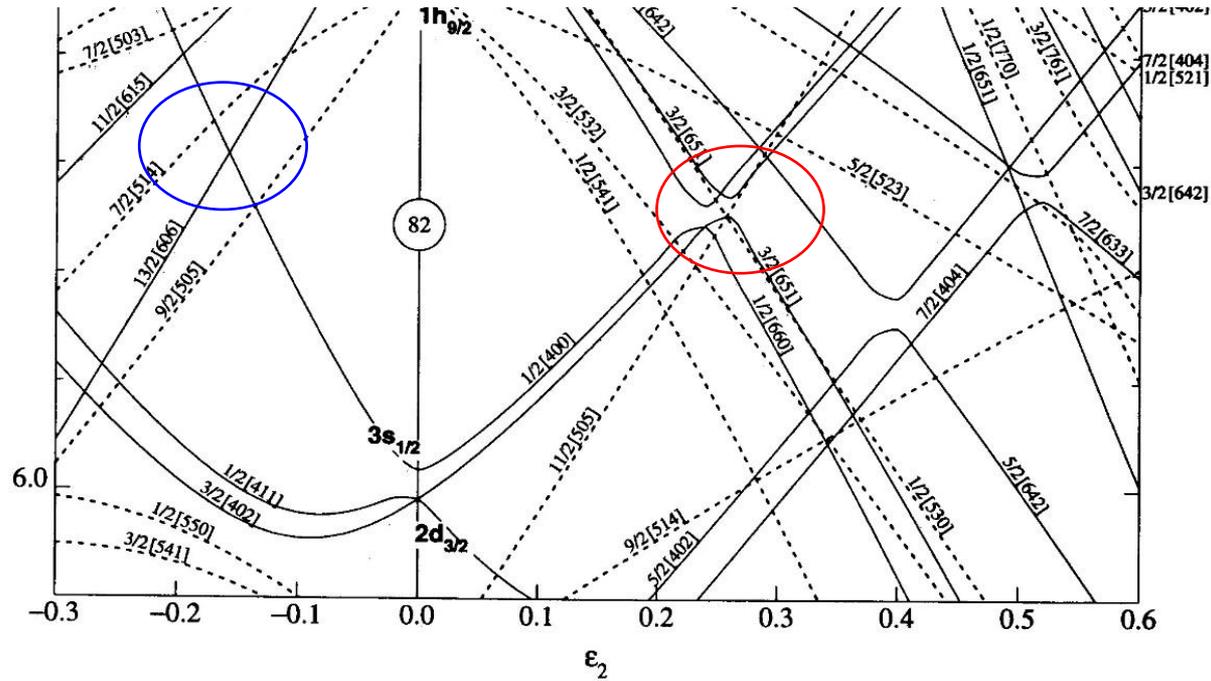
→ 変形度によって異なる量子力学的補正(殻効果)

殻構造の帰結：超重核の安定化

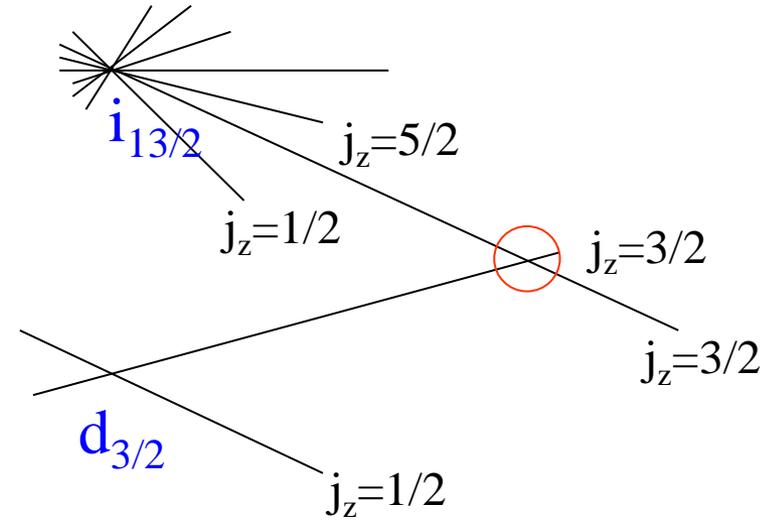
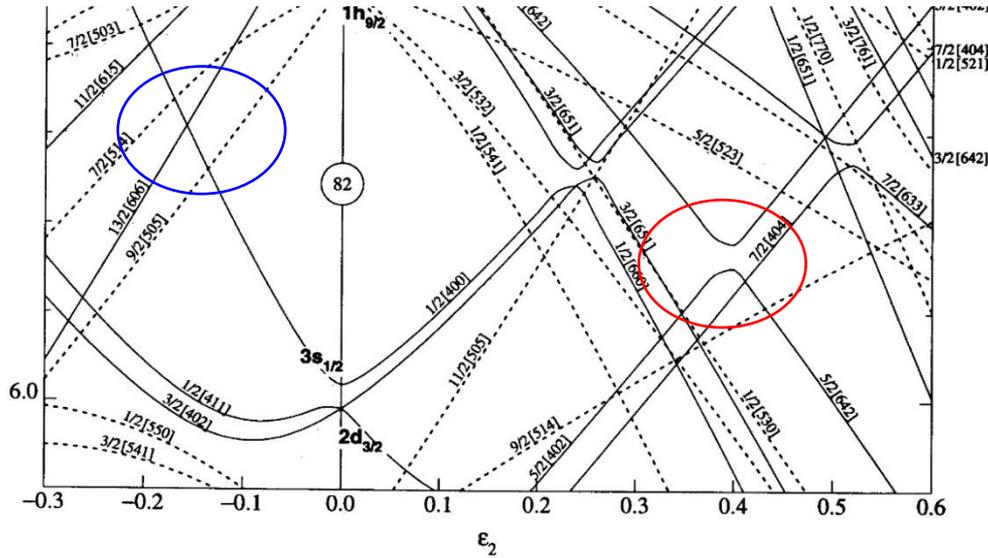


殻効果により核分裂障壁が高くなり原子核が安定化する

➤ ニルソン図で準位が反発しているように見えるのは何ですか？

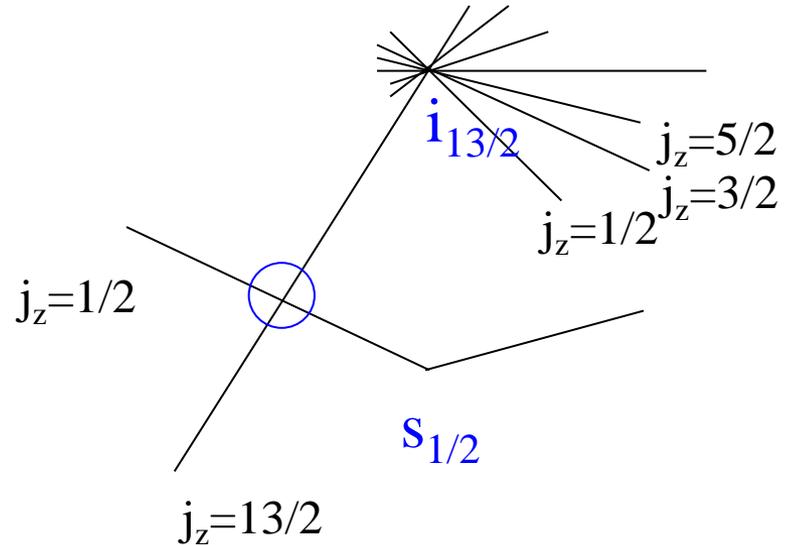


➤ ニルソン図で準位が反発しているように見えるのは何ですか？



同じ量子数を持つ準位は交わらない
(量子数が違うと交わってもよい)

「ノイマン-ウィグナーの定理」

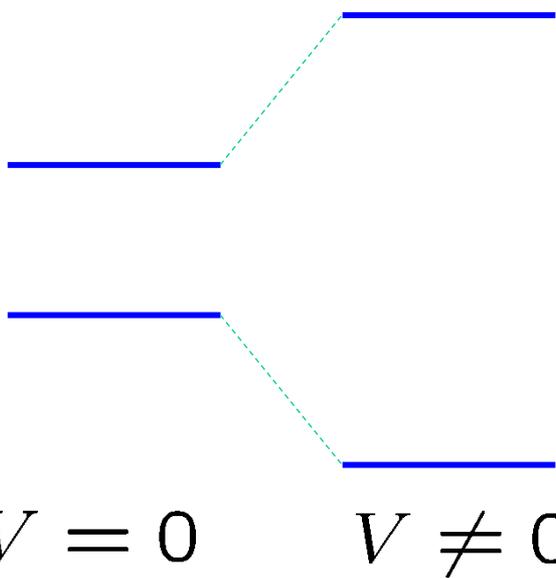


準位交差の問題：同じ量子数を持つ2つの状態は交差しない

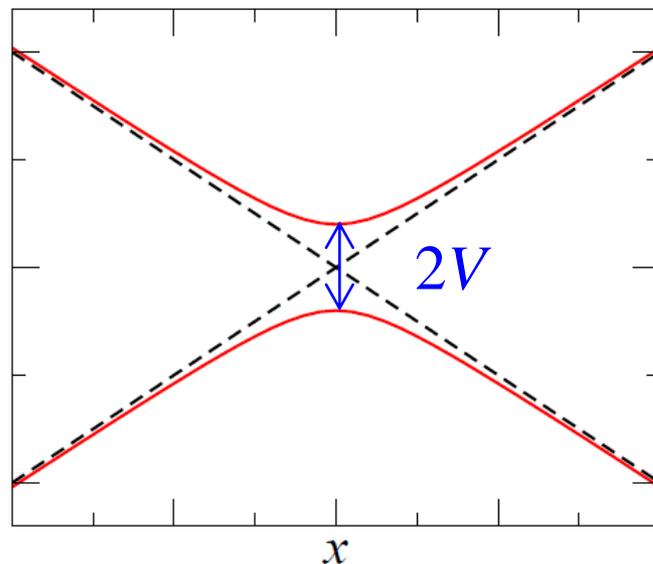
「ノイマン-ウィグナーの定理」

$$\begin{pmatrix} -\epsilon x & V \\ V & \epsilon x \end{pmatrix}$$

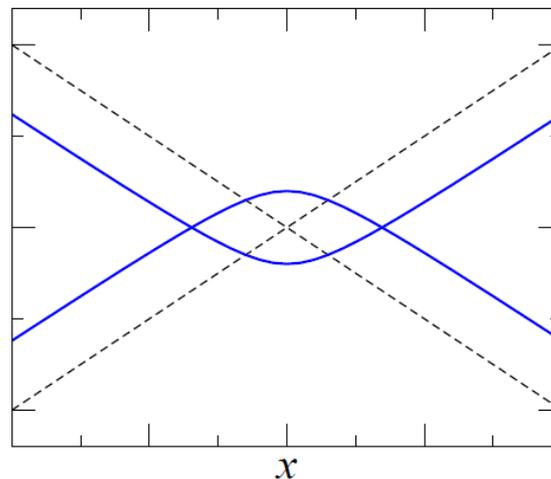
対角化 $\rightarrow \lambda_{\pm}(x) = \pm \sqrt{\epsilon^2 x^2 + V^2}$



V の符号によらず必ず反発

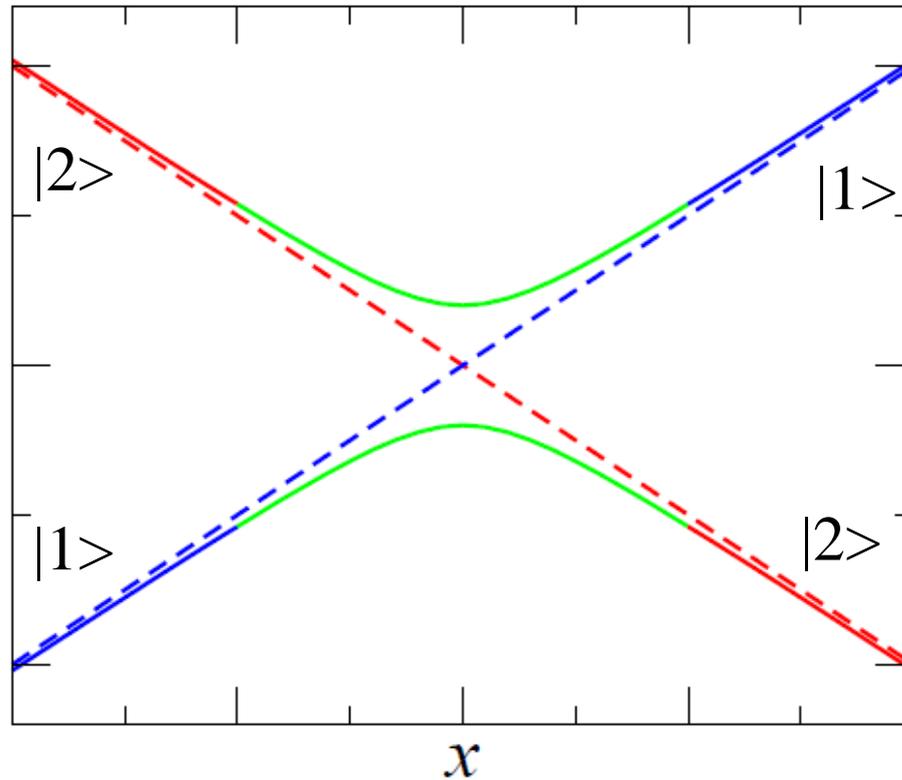


「疑似交差」、「準位反発」



このようになることはない

x がゆっくりと変化すると断熱的に状態が $|1\rangle$ から $|2\rangle$ へ変化
(断熱遷移)



Landau-Zener の式:

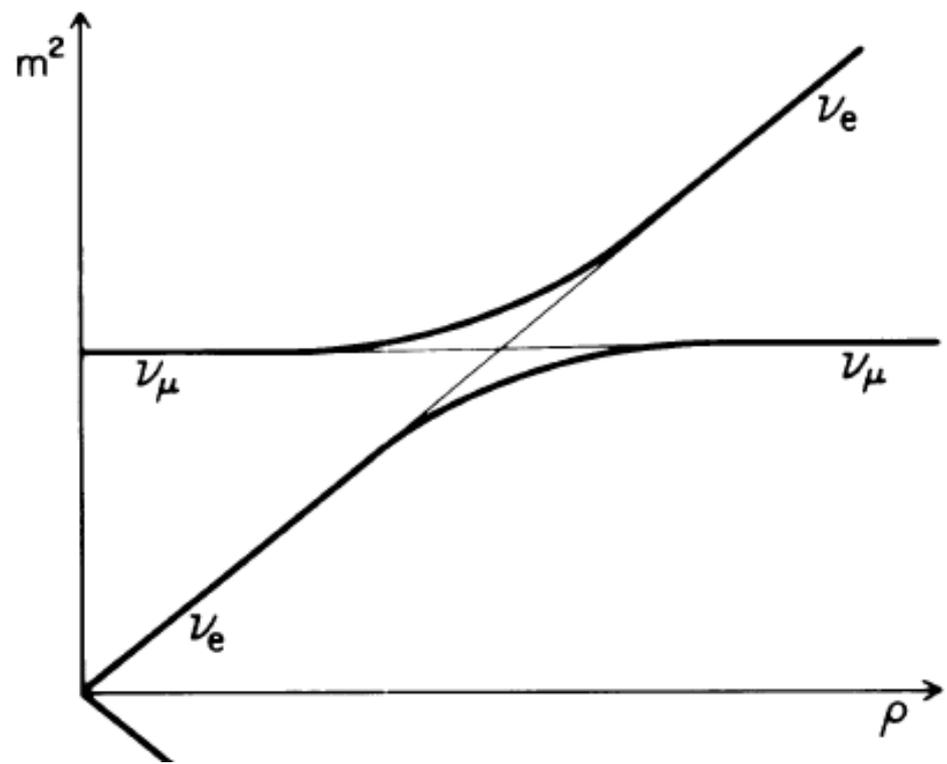
$$P(|1\rangle \rightarrow |1\rangle) = \exp\left(-\frac{2\pi V^2}{\hbar|\dot{x}| \cdot 2\epsilon}\right)$$

cf. ニュートリノ振動と準位交差問題

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \Psi_e \\ \Psi_\mu \end{pmatrix} = \left[\begin{pmatrix} E + A(r) & 0 \\ 0 & E \end{pmatrix} + a \begin{pmatrix} -\cos 2\theta & \sin 2\theta \\ \sin 2\theta & \cos 2\theta \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \Psi_e \\ \Psi_\mu \end{pmatrix}$$

$$E = \frac{1}{2}(m_1^2 + m_2^2), \quad a = \frac{1}{2}(m_2^2 - m_1^2)$$

電子ニュートリノと物質中の電子との相互作用



物質中で共鳴的にニュートリノ振動が起こる = MSW 効果

Ref.
H.A. Bethe, PRL56('86)1305,
W.C. Haxton, PRL57('86)1271

レポート問題5

3次元非等方調和振動子

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2 + \frac{1}{2}m\omega_{\perp}^2(x^2 + y^2)$$

$$\begin{aligned}\omega_x = \omega_y \equiv \omega_{\perp} &= \omega_0 \left(1 + \frac{\epsilon}{3}\right) \\ \omega_z &= \omega_0 \left(1 - \frac{2}{3}\epsilon\right)\end{aligned}$$

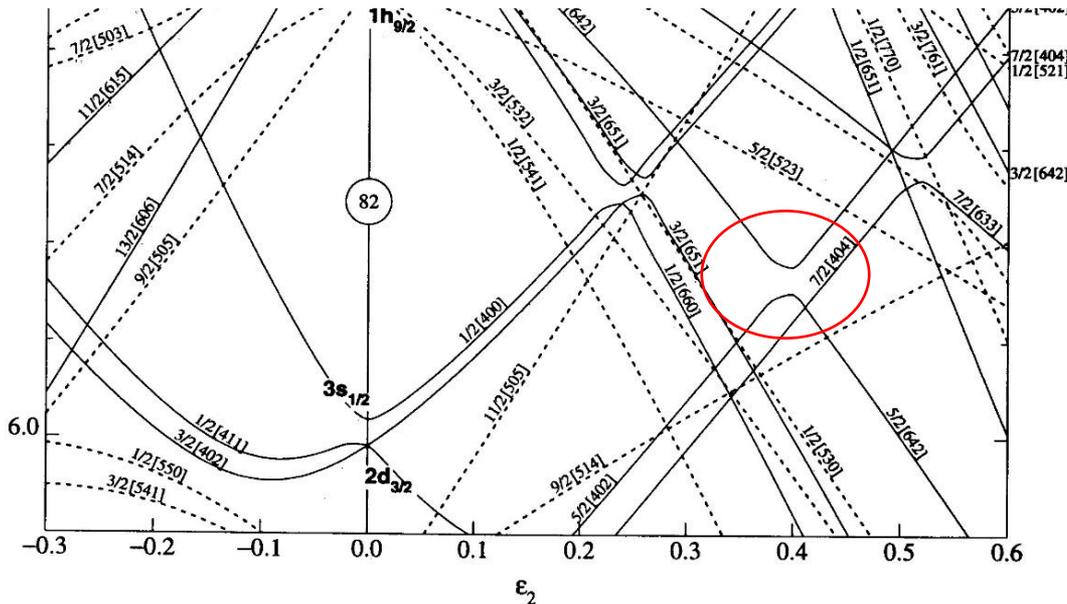
を考える。 ϵ を -1 から 1 まで変化させるとき、 $\epsilon = 0$ の時の基底状態、第一励起状態、第二励起状態のエネルギーはどのように変化するか図示せよ。

レポート問題6

$E_0 = -\epsilon, E_1 = \epsilon$ のエネルギーをもつ2つの状態が強さ V で相互作用しているとする。このときの固有状態は 2×2 行列

$$\begin{pmatrix} -\epsilon & V \\ V & \epsilon \end{pmatrix}$$

を対角化して得られる。2つの固有エネルギーの差が必ず 2ϵ ($V=0$ のときのエネルギー差) より大きくなることを示せ。



*これを「ノイマン-ウィグナーの定理」といい、ニルソンレベルで準位反発が見られる理由である。

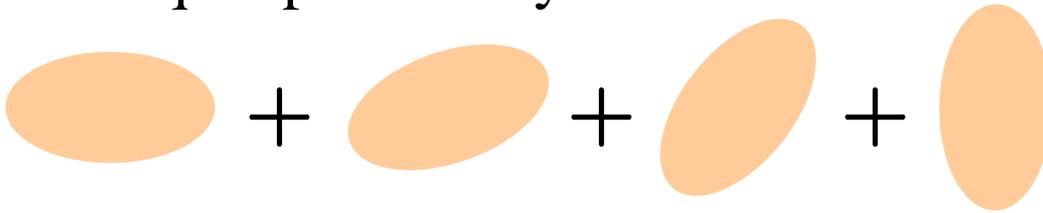
Angular Momentum Projection

- ✓ 変形→角運動量が混ざる(角運動量の固有状態になっていない)
- ✓ 観測される状態→角運動量の固有状態

→角運動量射影

0^+ : no preference of direction (spherical)

→ Mixing of all orientations with an equal probability



$$|\psi_{0^+}\rangle = \int d\Omega |\psi_{\Omega}\rangle$$

other states:

$$|\psi_{IM}\rangle = \int d\Omega Y_{IM}(\Omega) |\psi_{\Omega}\rangle$$

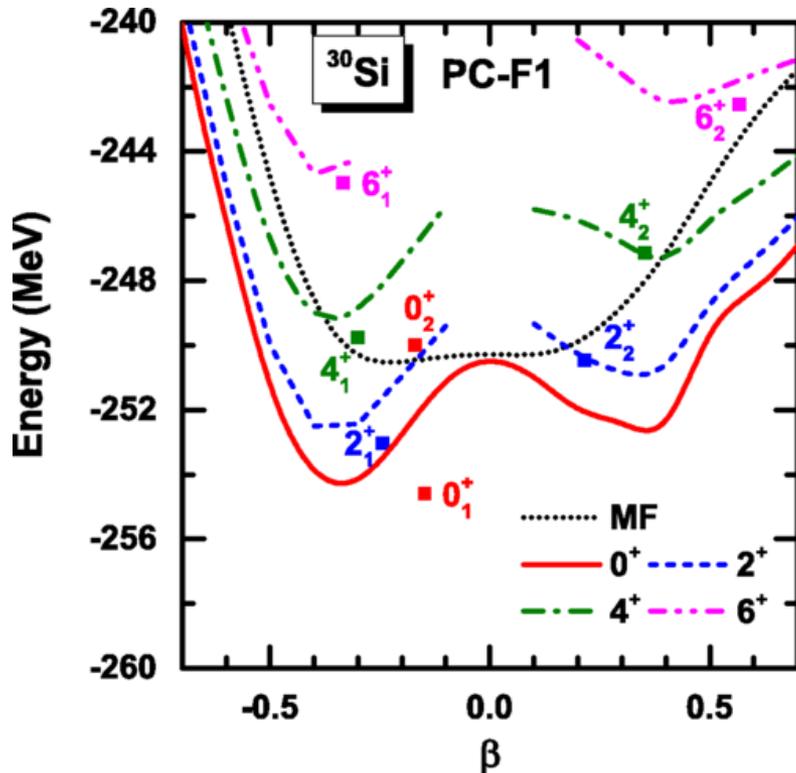
(for $K=0$)

Projected wave function:

$$|\Psi_{IM}\rangle = \hat{P}_{MK}^I |\Psi\rangle = \frac{2I+1}{8\pi^2} \int d\Omega D_{MK}^{I*}(\Omega) \hat{\mathcal{R}}(\Omega) |\Psi\rangle$$

→ Projected energy surface:

$$E_I = \frac{\langle \Psi_{IM} | H | \Psi_{IM} \rangle}{\langle \Psi_{IM} | \Psi_{IM} \rangle} = \frac{\langle \Psi | \hat{P}_{KM}^I H \hat{P}_{MK}^I | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \hat{P}_{KM}^I \hat{P}_{MK}^I | \Psi \rangle}$$



----- Constrained MF

— 0^+

- - - 2^+

- · - 4^+

H. Mei, K. Hagino, J.M. Yao,
T. Motoba, PRC97, 064318 (2018)

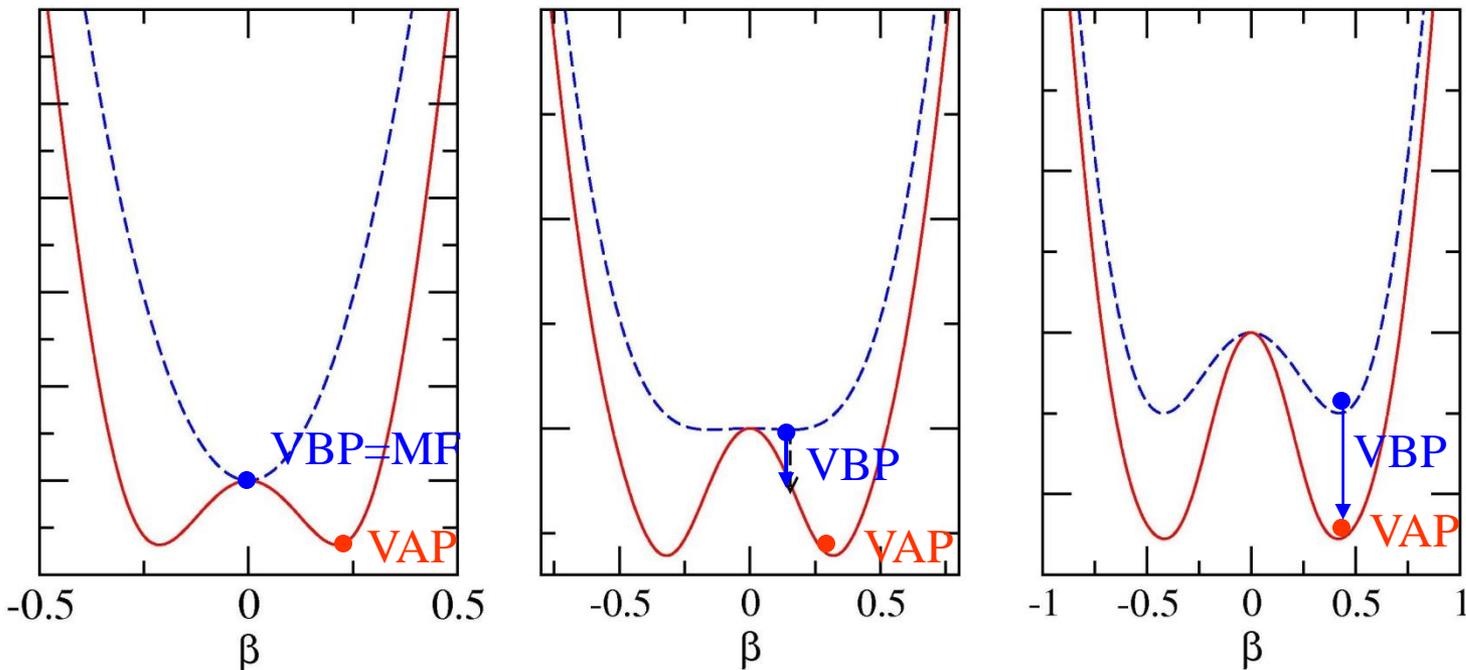
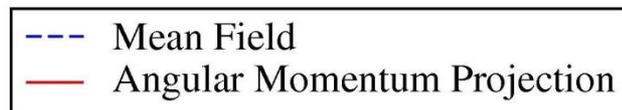
VAP v.s. VBP

➤ Variation Before Projection (VBP)

$$\text{minimize } \langle \Psi | H | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle \longrightarrow |\Psi_{IM}\rangle = \hat{P}_{MK}^I |\Psi\rangle$$

➤ Variation After Projection (VAP)

$$|\Psi_{IM}\rangle = \hat{P}_{MK}^I |\Psi\rangle \longrightarrow \text{minimize } \langle \Psi_{IM} | H | \Psi_{IM} \rangle / \langle \Psi_{IM} | \Psi_{IM} \rangle$$



VBP:

simple, but does not work for small deformation. Also, a discontinuity problem

VAP:

robust, but very expensive

レポート問題7

多体系の波動関数 $|\Psi\rangle$ が角運動量の固有状態 $|\Psi_{IK}\rangle$ の重ね合わせとして

$$|\Psi\rangle = \sum_I C_I |\Psi_{IK}\rangle$$

で与えられているとする。ここで、 I は多体系全体の角運動量の大きさ、 K はその z 成分である (K は保存しているとする)。この状態を角度 Ω だけ回転した様態を考える。

$$|\Psi_\Omega\rangle = \hat{\mathcal{R}}(\Omega)|\Psi\rangle = \sum_{I,M} C_I |\Psi_{IM}\rangle \langle \Psi_{IM} | \hat{\mathcal{R}}(\Omega) | \Psi_{IK}\rangle$$

ここで、 $\hat{\mathcal{R}}(\Omega)$ は回転の演算子である。WignerのD関数の定義

$$D_{MK}^I(\Omega) = \langle \Psi_{IM} | \hat{\mathcal{R}}(\Omega) | \Psi_{IK}\rangle$$

及び直交性
$$\int d\Omega D_{MK}^{I*}(\Omega) D_{M'K'}^{I'}(\Omega) = \frac{8\pi^2}{2I+1} \delta_{I,I'} \delta_{M,M'} \delta_{K,K'}$$

を用いて
$$|\Psi_{\text{proj}}\rangle = \int d\Omega D_{MK}^{I*}(\Omega) |\Psi_\Omega\rangle$$

が $|\Psi_{IK}\rangle$ に比例することを示せ。

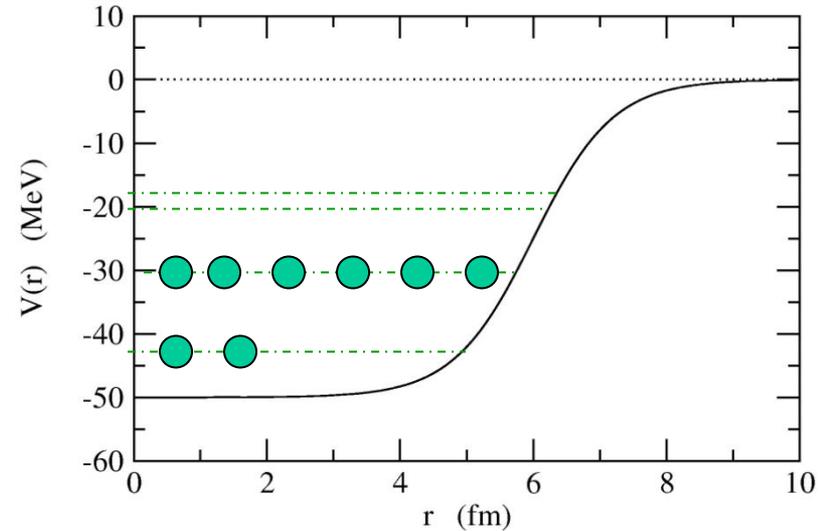
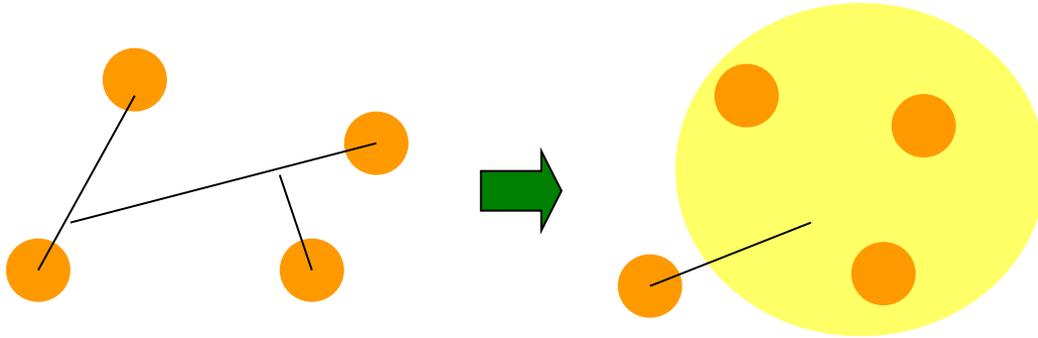
Pairing Correlation (対相関)

残留相互作用の果たす役割

$$\begin{aligned} H &= \sum_{i=1}^A -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j} v(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \\ &= \sum_{i=1}^A \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_{\text{MF}}(\mathbf{r}_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} v(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) - \sum_i V_{\text{MF}}(\mathbf{r}_i) \end{aligned}$$

Pairing Correlation (対相関)

平均場近似

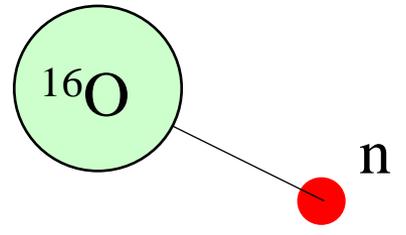
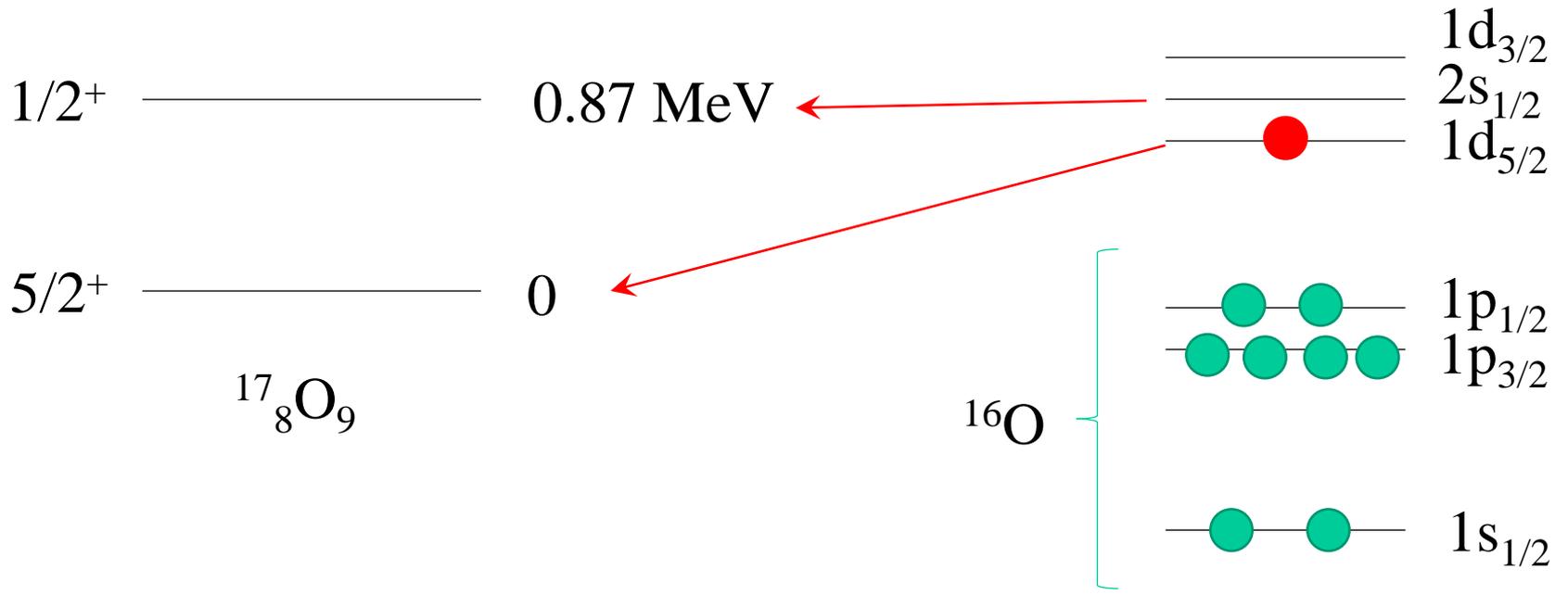


ポテンシャルの中での
独立粒子描像

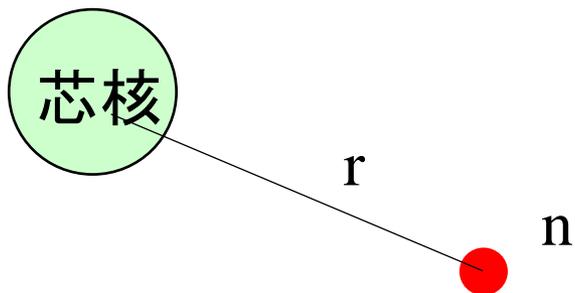
核子間の相互作用：
核子の感じるポテンシャル
としてのみ



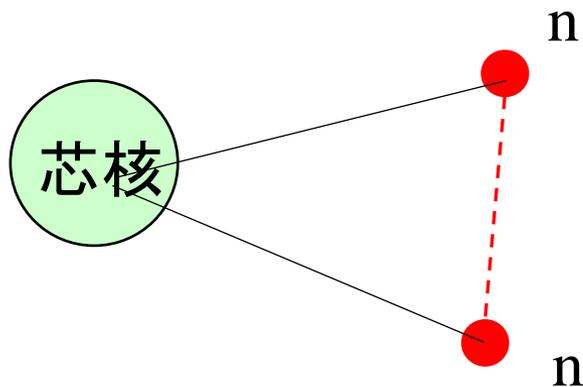
魔法数の説明



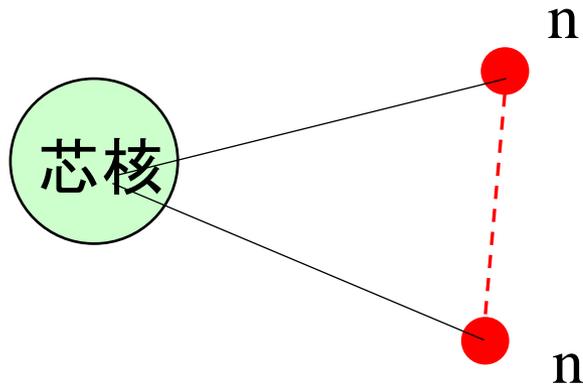
対相関



芯核のまわりに中性子が2個あるとどうなる？

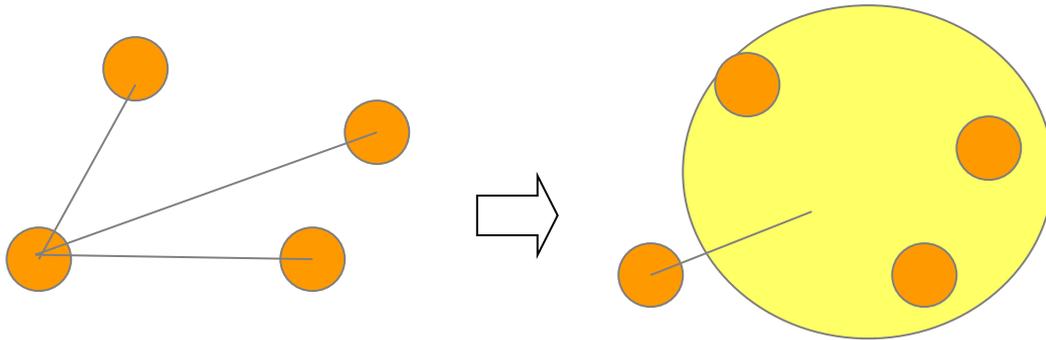


2中性子間に働く相互作用の影響は？



2中性子間に働く相互作用の影響は？

平均場理論

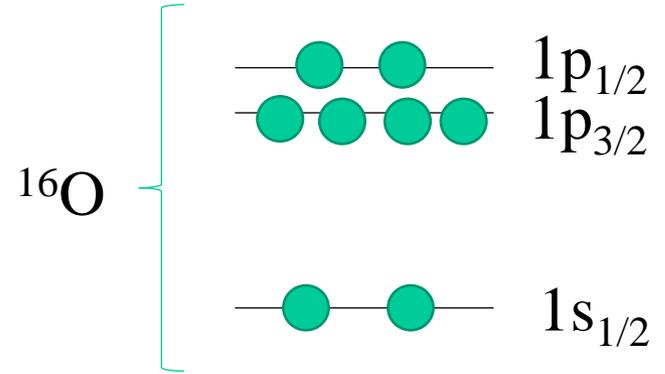
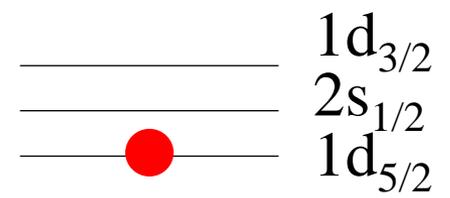


他の核子との相互作用を平均的に取り扱う

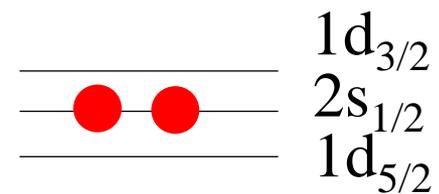
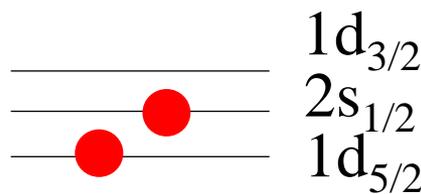
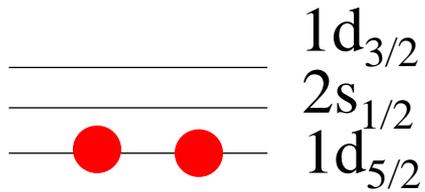
単純な平均場近似 → 2中性子が独立に運動
(2中性子間の相互作用は平均ポテンシャル
にのみ反映される)

$1/2^+$ ————— 0.87 MeV

$5/2^+$ ————— 0
 $^{17}_8\text{O}_9$



→ ^{18}O の状態を予想すると。。。



$E = 0$

$I^\pi = d_{5/2} \times d_{5/2}$
 $= 0^+, 2^+, 4^+$

$E = 0.87 \text{ MeV}$

$I^\pi = d_{5/2} \times s_{1/2}$
 $= 2^+, 3^+$

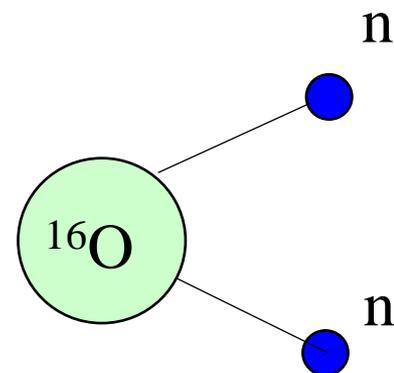
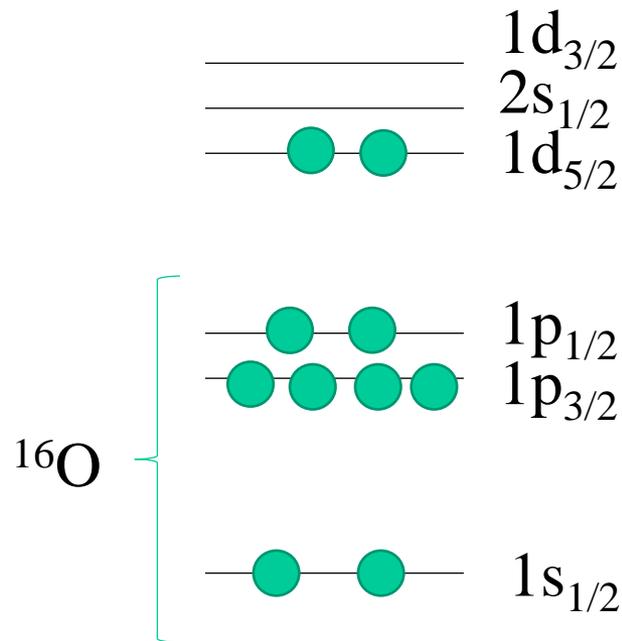
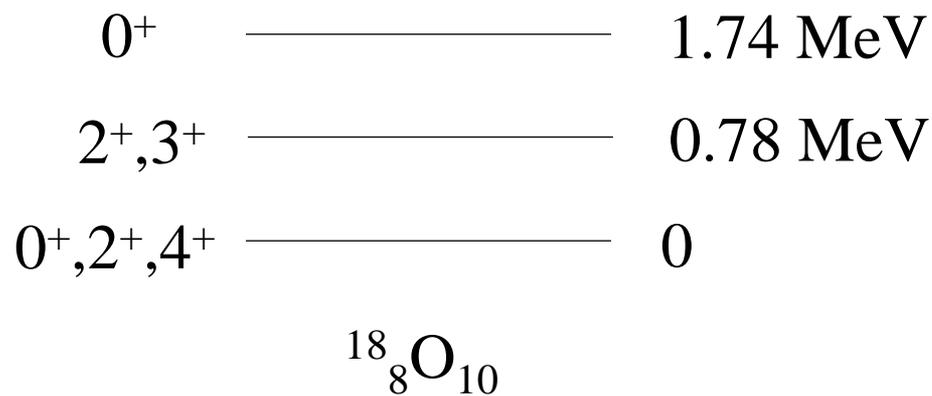
$E = 0.87 \times 2 = 1.74 \text{ MeV}$

$I^\pi = s_{1/2} \times s_{1/2} = 0^+$

2 MeV 以下に少なくとも6本の状態(?)

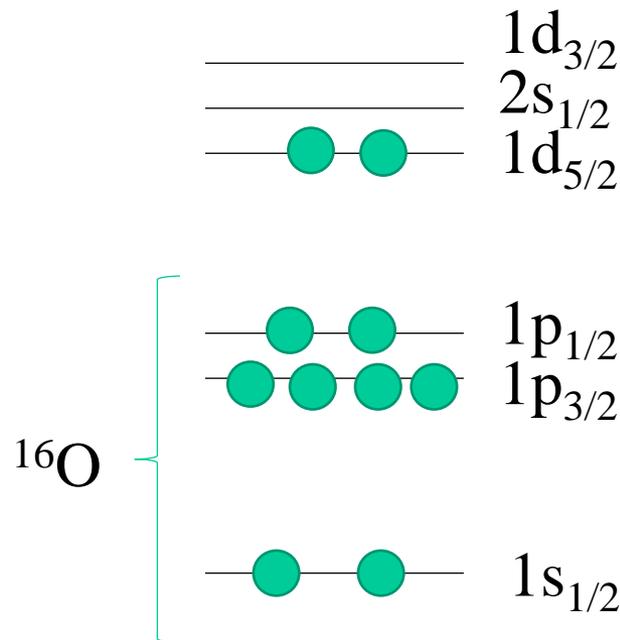
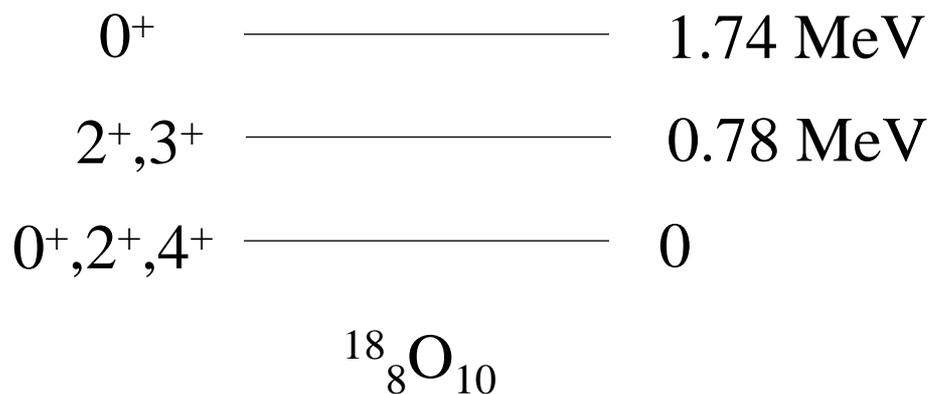
単純な平均場近似:

6 levels

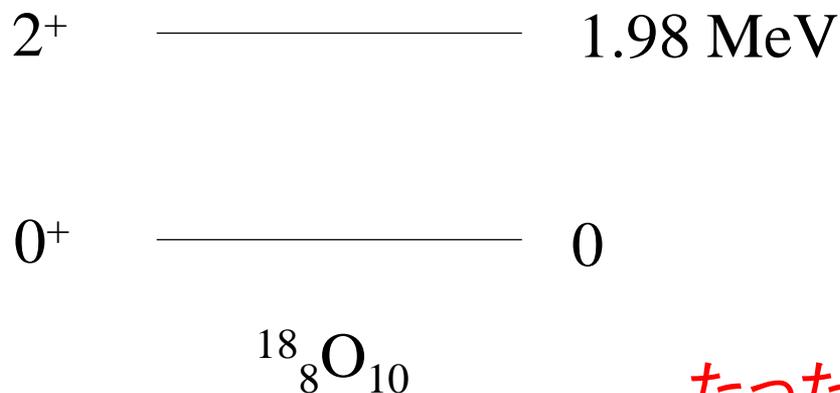


単純な平均場近似:

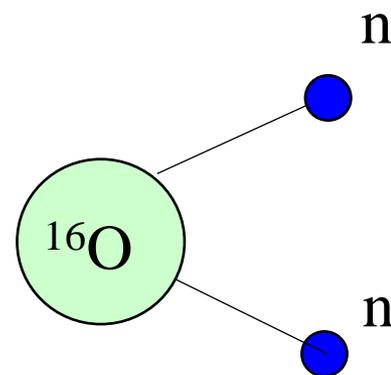
6 levels



実際には:



たったの2本!



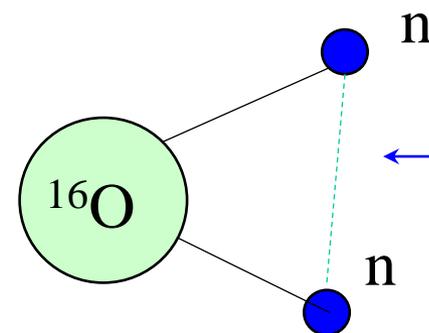
$$H = \sum_i T_i + \sum_{i < j} v_{ij} \rightarrow H = \sum_i (T_i + V_i) + \underbrace{\sum_{i < j} v_{ij} - \sum_i V_i}_{\text{平均からのずれ (残留相互作用)}}$$

平均からのずれ
(残留相互作用)

残留相互作用は完全に無視してもよいのか?

答え: no

開殻原子核では重要な役割を果たす
ことが知られている(ペアリング)



(note) 摂動論がよい条件

$$H = H_0 + \Delta V$$

$$H_0 |\phi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\phi_n^{(0)}\rangle$$

$$\rightarrow |\phi_n\rangle = |\phi_n^{(0)}\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m^{(0)} | \Delta V | \phi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\phi_m^{(0)}\rangle$$



$$|\langle \phi_m^{(0)} | \Delta V | \phi_n^{(0)} \rangle| \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|$$

なら ΔV を無視できる

$$H = H_0 + \Delta V$$

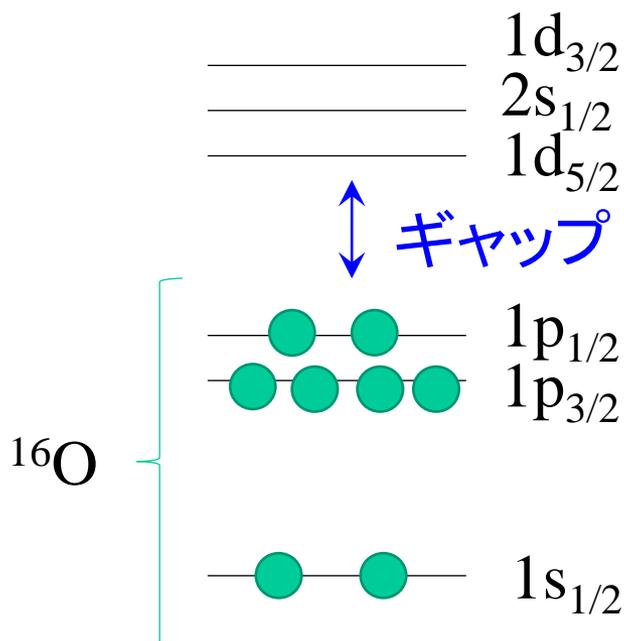


$$|\langle \phi_m^{(0)} | \Delta V | \phi_n^{(0)} \rangle| \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|$$

なら ΔV を無視できる

$$H = \sum_i T_i + \sum_{i < j} v_{ij} \rightarrow H = \sum_i (T_i + V_i) + \underbrace{\sum_{i < j} v_{ij} - \sum_i V_i}_{\text{平均からのずれ (残留相互作用)}}$$

平均からのずれ
(残留相互作用)



閉殻核:

ギャップのために ΔE が大きい
→ 残留相互作用を無視できる

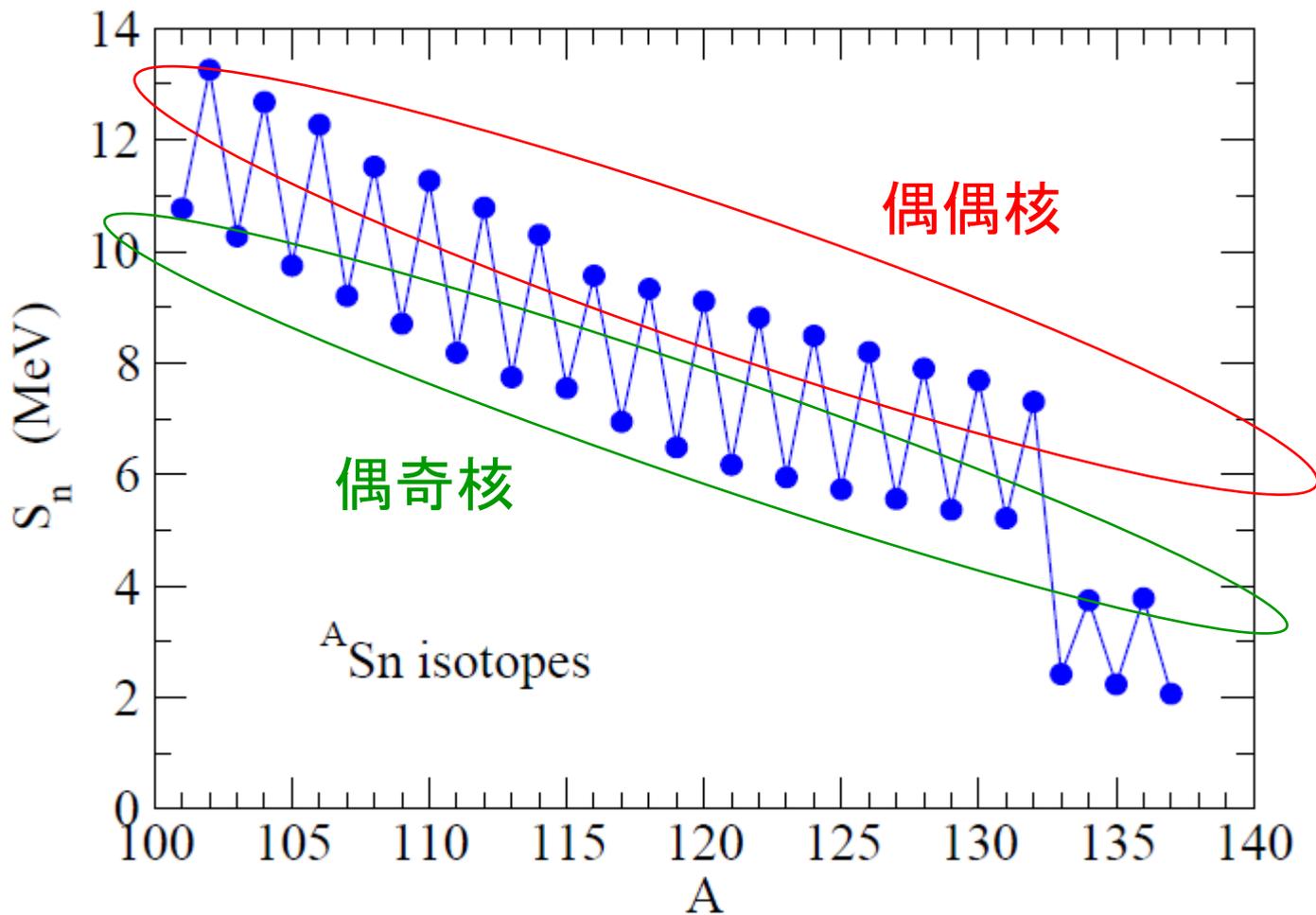
開殻核: ΔE が小さい

→ 残留相互作用を無視できない

対相関エネルギー

偶数個の中性子から1つ中性子
を取る方が奇数個から取るより
大きなエネルギーが必要: 対相関

even-odd staggering



1n separation energy: $S_n (A,Z) = B(A,Z) - B(A-1,Z)$

(参考)カムランド禅

^{136}Xe の2重 β 崩壊

