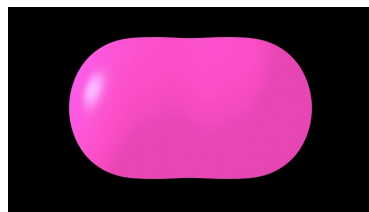


核分裂ダイナミックスの理論

:ポテンシャル中の準安定状態の熱的崩壊

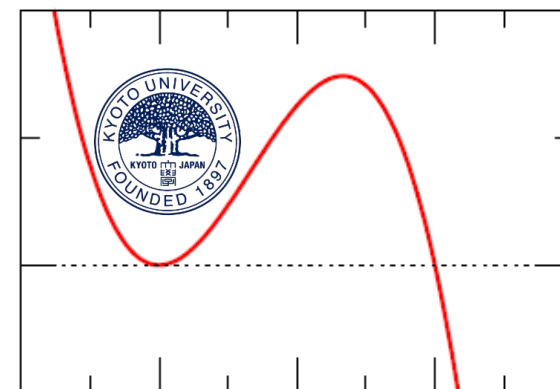


萩野浩一

京都大学大学院理学研究科

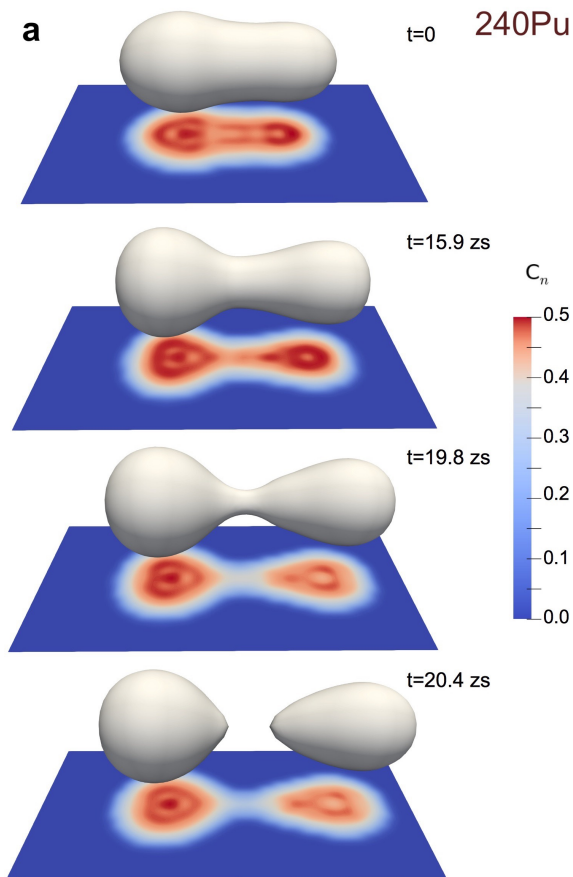
鵜沢浩太郎(原研)

G.F. Bertsch (ワシントン大)



1. イントロダクション: 核分裂のオーバービュー
2. 誘起核分裂に対する遷移状態理論と熱的ホッピング
3. 非平衡グリーン関数を用いた誘起核分裂の記述
4. まとめ

はじめに: 核分裂



G. Scamps and C. Simenel,
Nature 564 (2018) 382

- ハーンとシュトラスマンがウランに中性子を照射するとバリウムができることを発見(1938年)
 - マイトナーとフリッシュはそれが核分裂であることを見抜く
- それから約90年たつが、核分裂の微視的記述は未だに原子核理論の残された最難問の一つ



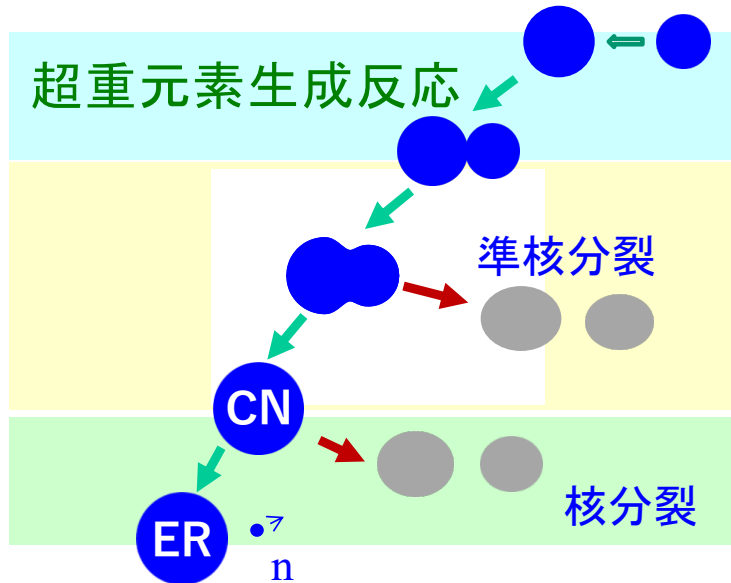
Wikipedia

はじめに: 核分裂

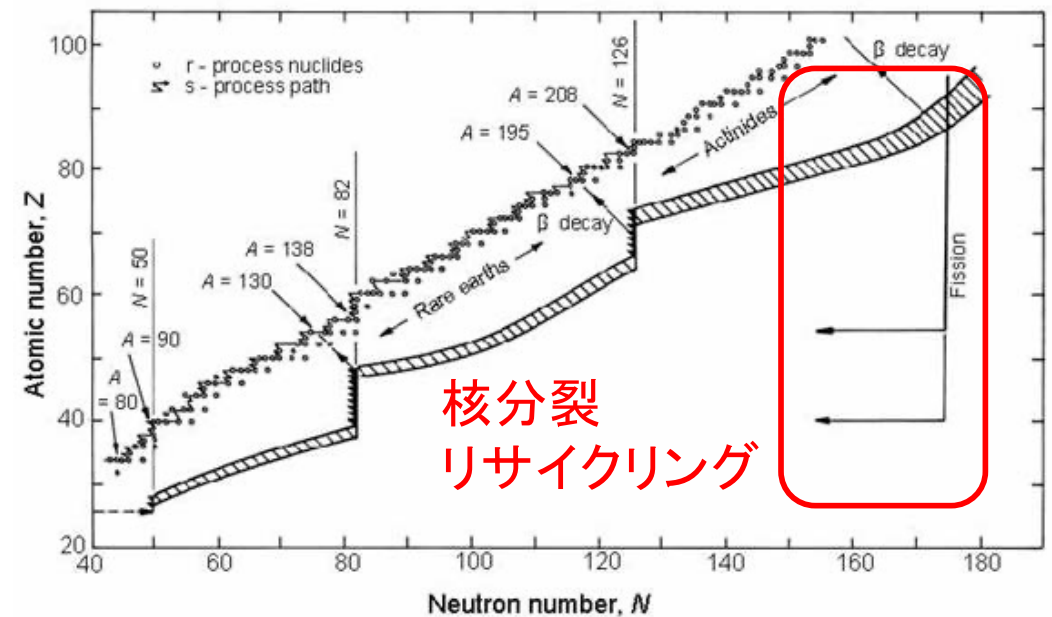
➤ 重い原子核の主要な崩壊モードの一つ

➤ 原子核物理の様々な場面で重要となる現象

- 核エネルギー(原子力発電)
- 超重元素生成反応
- r-プロセス元素合成
- 中性子過剰核の生成 など



r-プロセス元素合成

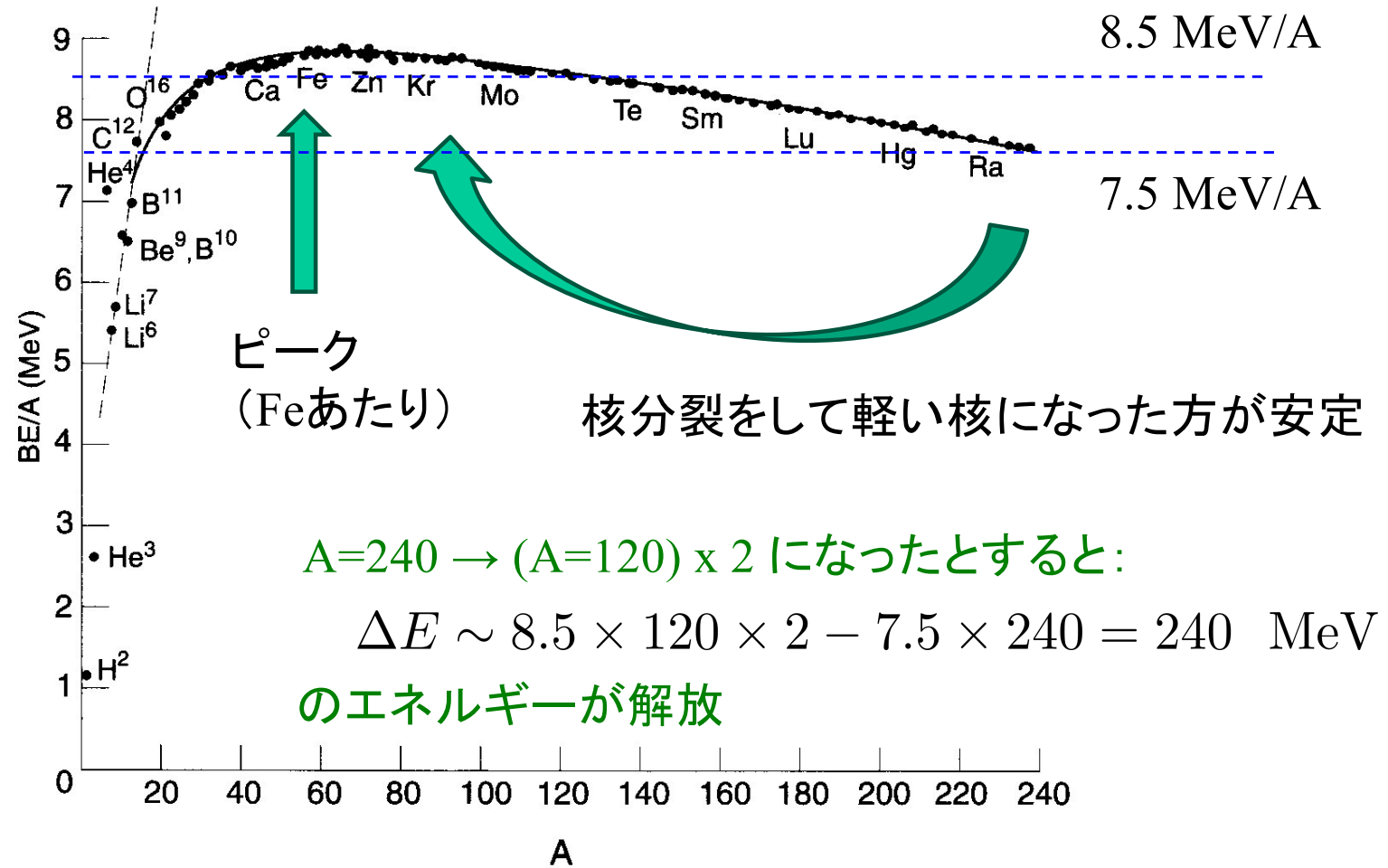


はじめに: 核分裂

なぜ起こるのか？

核子1つあたりの
束縛エネルギー

より束縛
(より安定)



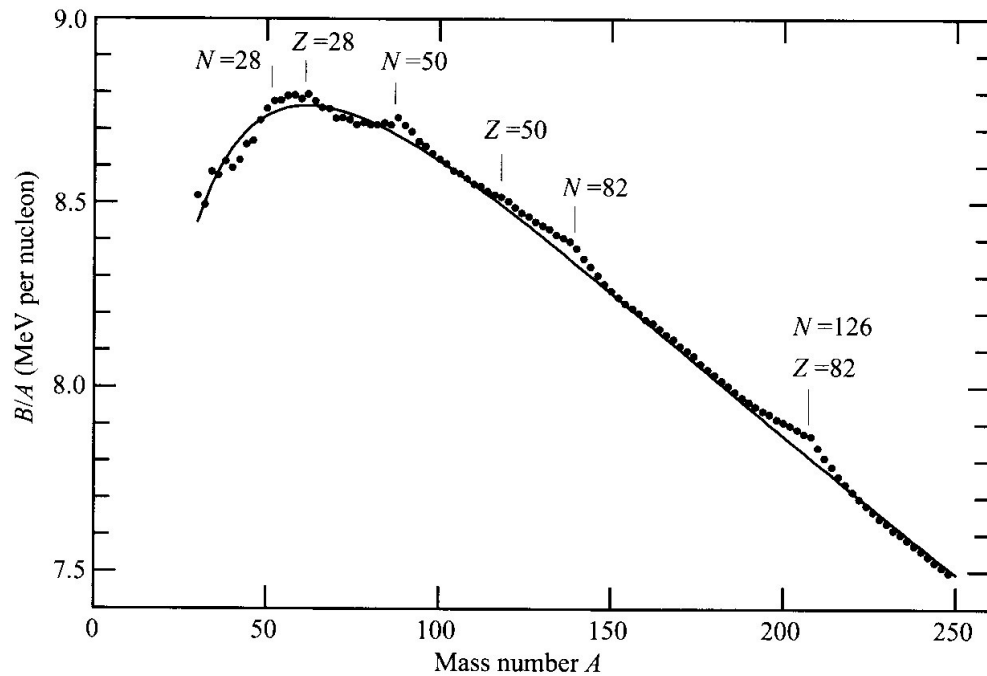
はじめに: 核分裂障壁



原子核の液滴模型(ベータ・ワイゼッカー質量公式)

$$B(N, Z) = a_v A - a_s A^{2/3} - a_C \frac{Z^2}{A^{1/3}} - a_{\text{sym}} \frac{(N - Z)^2}{A}$$

$$A = N + Z$$



- 体積項
- 表面項
- クーロン項
- 対称エネルギー

はじめに: 核分裂障壁



原子核の液滴模型(ベーテ・ワイゼッカー質量公式)

$$B(N, Z) = a_v A - a_s A^{2/3} - a_C \frac{Z^2}{A^{1/3}} - a_{\text{sym}} \frac{(N - Z)^2}{A}$$

$$A = N + Z$$

原子核を**体積一定のまま**変形してみる

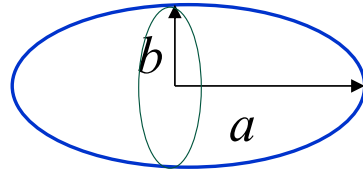


変形したときのエネルギー変化:

- 体積項、対称エネルギー項: 変化せず
 - クーロン項
 - 表面項
- } 変化

$\left\{ \begin{array}{ll} \text{表面項} & \rightarrow \text{球形になる傾向} \\ \text{クーロン項} & \rightarrow \text{変形になる傾向} \end{array} \right\} \rightarrow \text{2つの力の競合}$

はじめに: 核分裂障壁



$$a = R \cdot (1 + \epsilon)$$

$$b = R \cdot (1 + \epsilon)^{-1/2}$$

$$ab^2 = R^3 = \text{一定}$$

□ 表面項

$$E_S(\epsilon) = \sigma \int_S dS \sim E_S^{(0)} \left(1 + \frac{2}{5}\epsilon^2 - \frac{4}{105}\epsilon^3 + \dots \right)$$

損

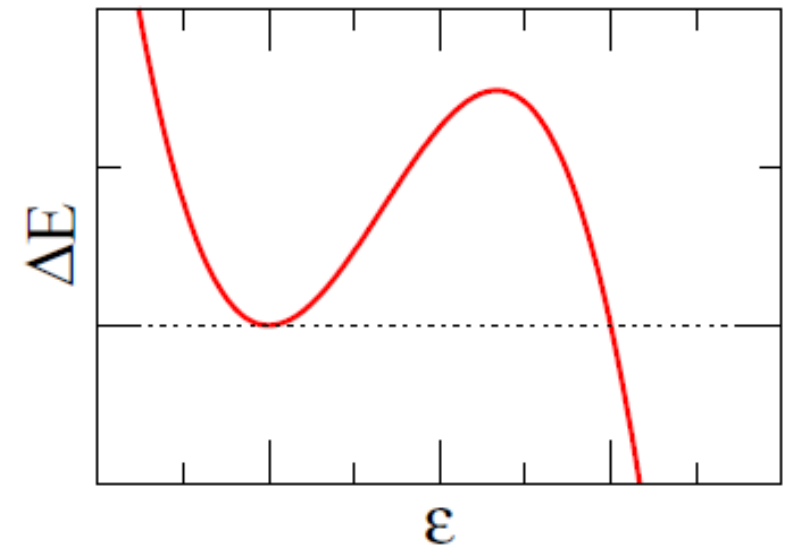
□ クーロン項(一様帯電体)

$$E_C(\epsilon) \sim E_C^{(0)} \left(1 - \frac{1}{5}\epsilon^2 - \frac{4}{105}\epsilon^3 + \dots \right)$$

得

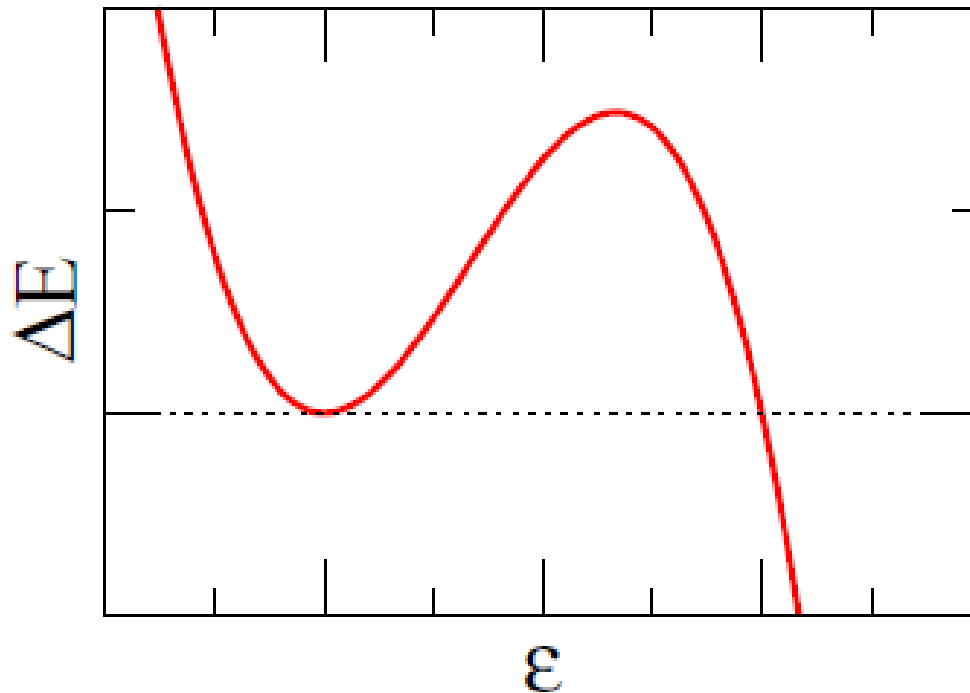
$$E_S(\epsilon) + E_C(\epsilon) = \text{const.} + \left(\frac{2}{5}E_S^{(0)} - \frac{1}{5}E_C^{(0)} \right) \epsilon^2 - \frac{4}{105}(E_S^{(0)} + E_C^{(0)})\epsilon^3 + \dots$$

核分裂障壁



3次ポテンシャルの準安定状態と崩壊

$$V(x) = ax^2 - bx^3$$



decay of a false vacuum

- ・宇宙論(インフレーション)
- ・素粒子論
- ・生物物理
- ・核分裂
- ・化学反応

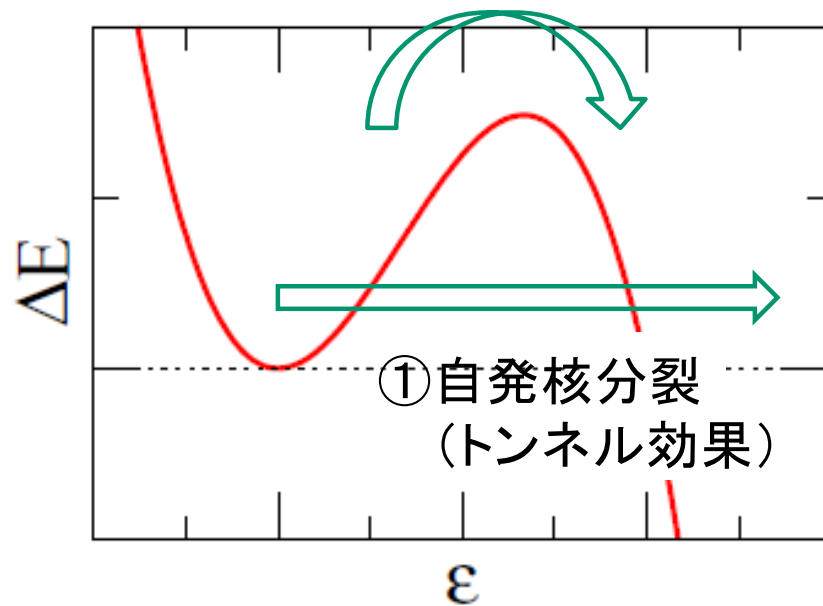
- ・巨視的量子トンネル現象
(カルデラ・レゲット模型)
- ・クラマース速度論

など

はじめに: 核分裂障壁

2種類の核分裂

②誘起核分裂(熱的崩壊)



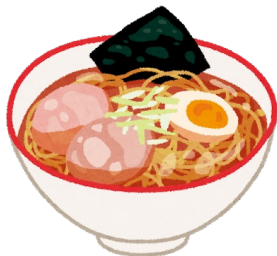
①自発核分裂
(トンネル効果)

熱場の量子論

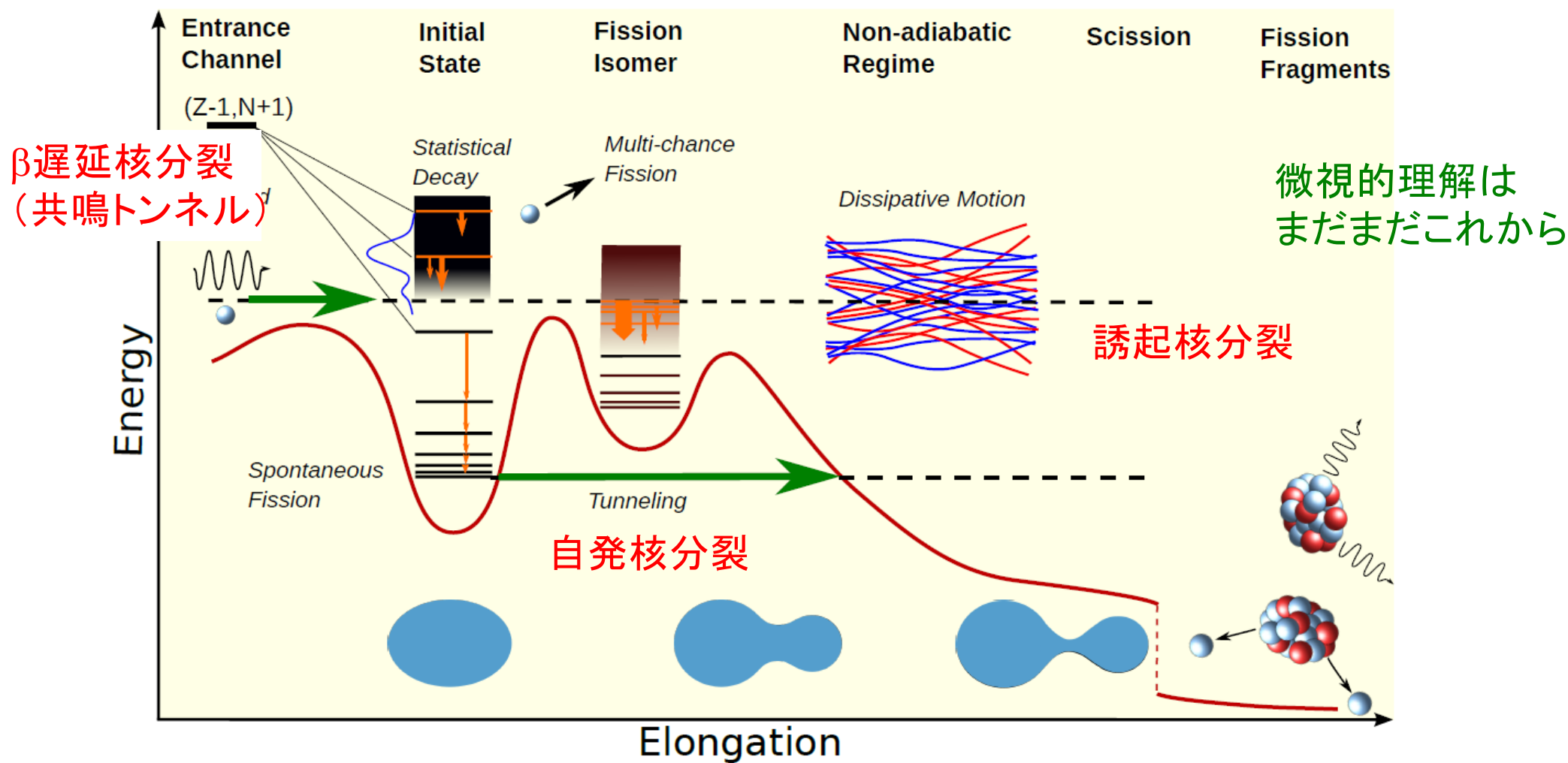
基底状態

中性子や
光子など

励起状態



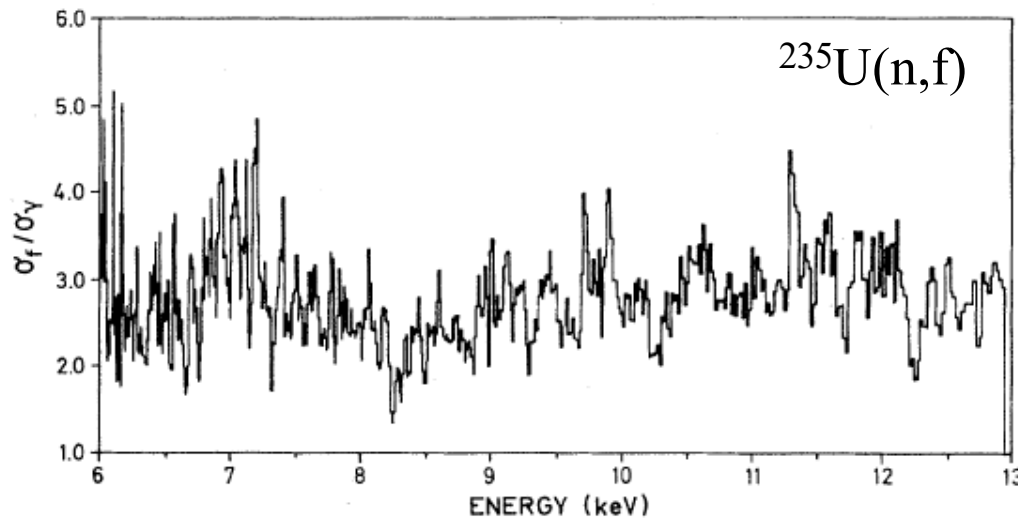
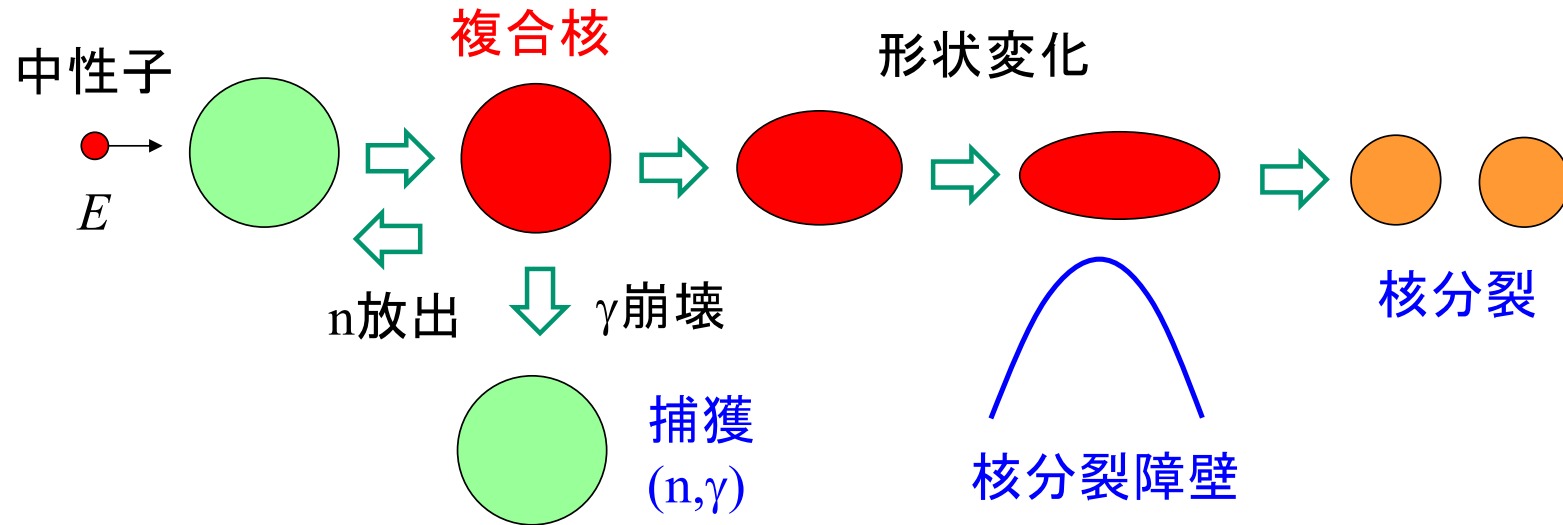
冷たいのも熱いのも
あるよ by 藤倉浩平



M. Bender et al., J. of Phys. G47, 113002 (2020)

誘起核分裂

どういう問題を考えたいか



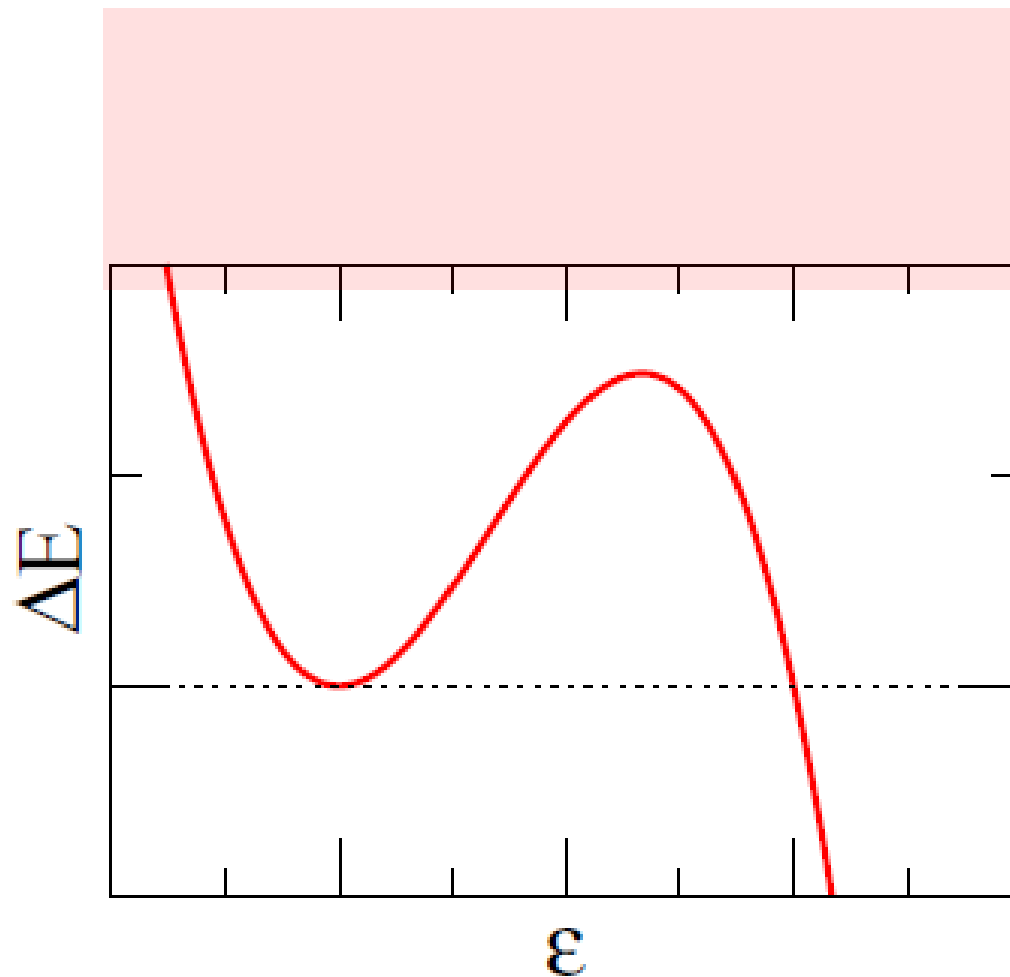
核分裂と捕獲の分岐比

$$\alpha^{-1} = \frac{\sigma_f}{\sigma_\gamma}$$

* r-プロセスでも重要な物理量

M.S. Moore et al. PRC30 ('84) 214

誘起核分裂



まず初めに、励起エネルギー
が大きい場合の核分裂を考える



統計模型 / 動的模型(ランジュバン)

核分裂と内部環境

原子核は孤立系 → 本来の意味での環境との結合はない

しかし:

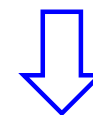
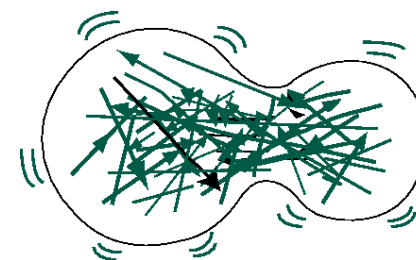
多核子系のハミルトニアン

$$H = \sum_{i=1}^A t_i + \sum_{i<j}^A v_{ij}$$

から核分裂の座標(「集団座標」)を抜き出せたとすると:

$$H = H_{\text{fis}} + H_{\text{int}} + V_{\text{coup}}$$

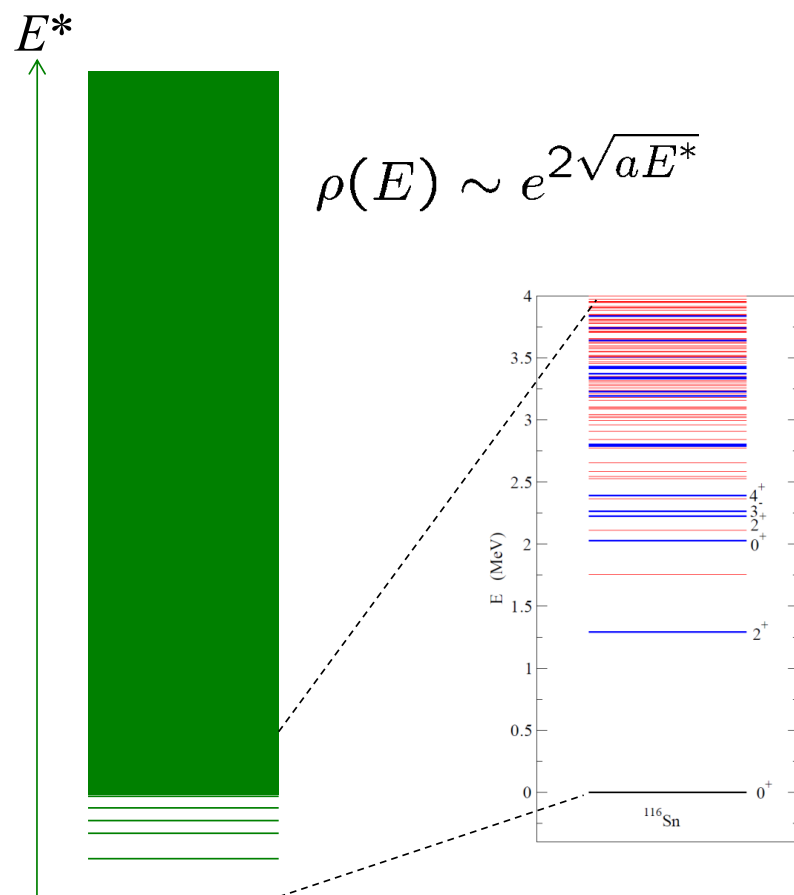
→ 核分裂の最中に、内部自由度(核子自由度)が核分裂に影響を及ぼす



原子核の内部自由度:「環境」
「内的環境自由度」

→ 量子開放系の物理

核温度



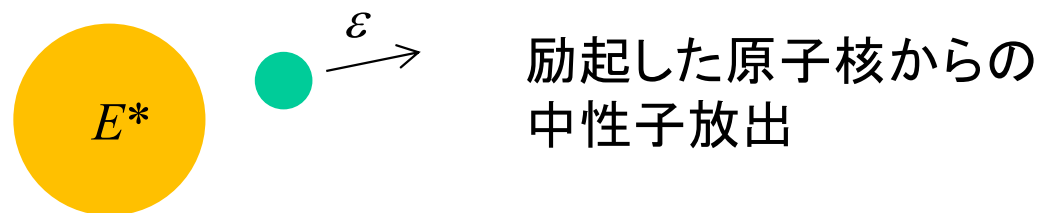
原子核のスペクトル

原子核は孤立系:

→本来はミクロカノニカル分布 (N, E^*) を考えるべきだが、

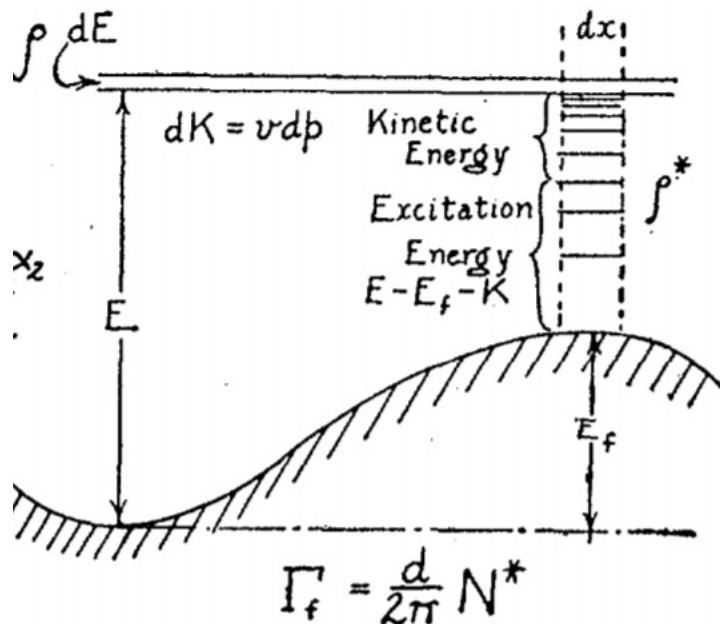
E^* が大きいと準位密度は指数関数的に増大して準連続的になるので、カノニカル分布で近似する。

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E^*} = \frac{\partial}{\partial E^*} \ln \rho(E^*) \quad \rightarrow E^* = aT^2$$



放出中性子のエネルギー分布
→近似的に温度 T のボルツマン分布に従う

誘起核分裂:統計模型



Bohr-Wheeler の式 (遷移状態理論)

$$\Delta E \int_0^{E^* - B_f} \frac{v dp}{2\pi\hbar} \rho_{sd}(E^* - B_f - K) = \Delta E \frac{\Gamma_f}{\hbar} \rho_{gs}(E^*)$$

K : 核分裂の自由度に対する運動エネルギー

N. Bohr and J.A. Wheeler,
Phys. Rev. 56, 426 (1939)

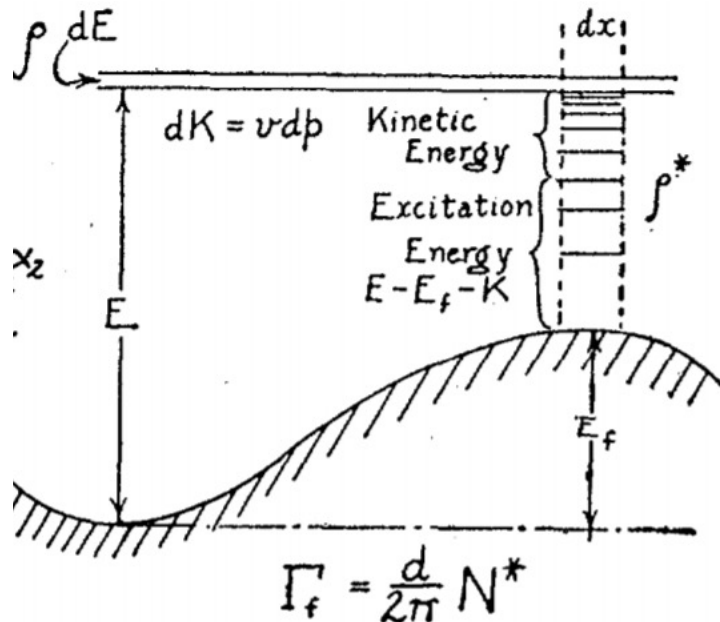
障壁直上に何個の状態があるか

$$\Gamma_f = \frac{1}{2\pi\rho_{gs}(E^*)} \int_0^{E^* - B_f} \rho_{sd}(E^* - B_f - K) dK = \frac{1}{2\pi\rho_{gs}(E^*)} \sum_c T_c$$

K : 核分裂自由度の
運動エネルギー

複合核(基底状態)に何個の状態があるか

誘起核分裂:統計模型



Bohr-Wheeler の式 (遷移状態理論)

fission の確率は障壁 (transition state) でのダイナミクスで全て決まり、障壁の外でのダイナミクスには依存しない。

N. Bohr and J.A. Wheeler,
Phys. Rev. 56, 426 (1939)

障壁直上に何個の状態があるか

$$\Gamma_f = \frac{1}{2\pi\rho_{gs}(E^*)} \int_0^{E^* - B_f} \rho_{sd}(E^* - B_f - K) dK = \frac{1}{2\pi\rho_{gs}(E^*)} \sum_c T_c$$

K : 核分裂自由度の運動エネルギー

複合核(基底状態)に何個の状態があるか

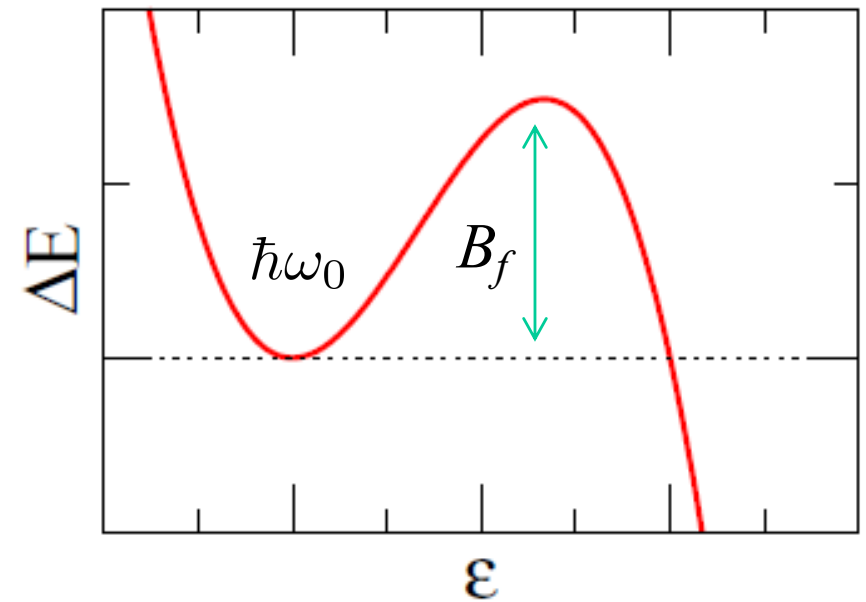
$E^* \gg B_f$ で成り立つ近似式

フェルミガス模型による準位密度: $\rho(E^*) \propto e^{2\sqrt{aE^*}}; \quad E^* = aT^2$

+調和振動子による補正(基底状態)

$$\Gamma_f = \frac{1}{2\pi\rho_{\text{gs}}(E^*)} \int_0^{E^* - B_f} \rho_{\text{sd}}(E^* - B_f - K) dK \sim \frac{\hbar\omega_0}{2\pi} e^{-B_f/T}$$

K.-H. Schmidt, arXiv: 0808.1541
Int. Mod. Phys. E18, 850 (2008)



$E^* \gg B_f$ で成り立つ近似式

フェルミガス模型による準位密度: $\rho(E^*) \propto e^{2\sqrt{aE^*}}; \quad E^* = aT^2$

+調和振動子による補正(基底状態)

$$\Gamma_f = \frac{1}{2\pi\rho_{\text{gs}}(E^*)} \int_0^{E^* - B_f} \rho_{\text{sd}}(E^* - B_f - K) dK \sim \frac{\hbar\omega_0}{2\pi} e^{-B_f/T}$$

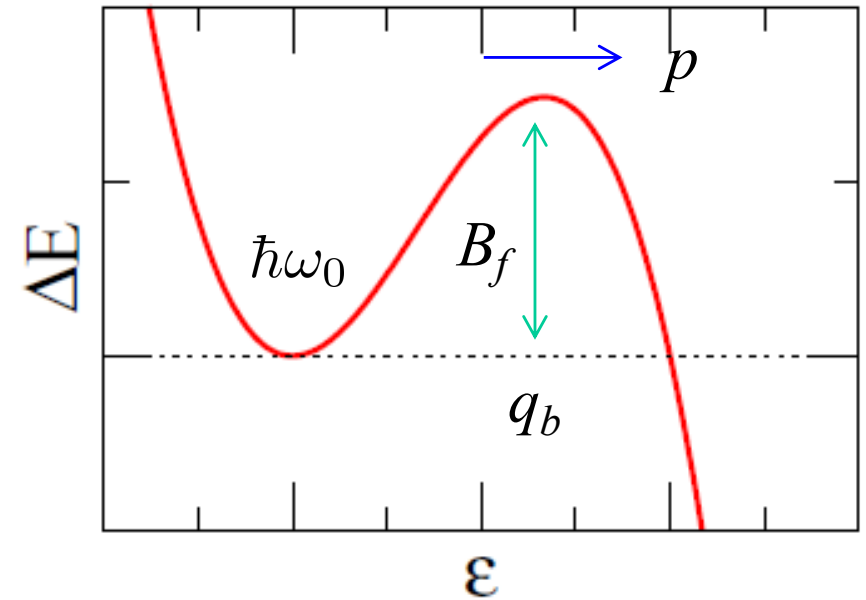
K.-H. Schmidt, arXiv: 0808.1541
Int. Mod. Phys. E18, 850 (2008)

古典的な導出法

: サドル点におけるフラックスを計算する

I. Affleck, PRL46, 388 (1981).

$$\begin{aligned} \Gamma &= \frac{\int dp dq e^{-\beta(\frac{p^2}{2m} + V(q))} \delta(q - q_b) \frac{p}{m} \theta(p)}{\int dp dq e^{-\beta(\frac{p^2}{2m} + V(q))}} \\ &\sim \frac{\hbar\omega_0}{2\pi} e^{-\beta B_f} \end{aligned}$$

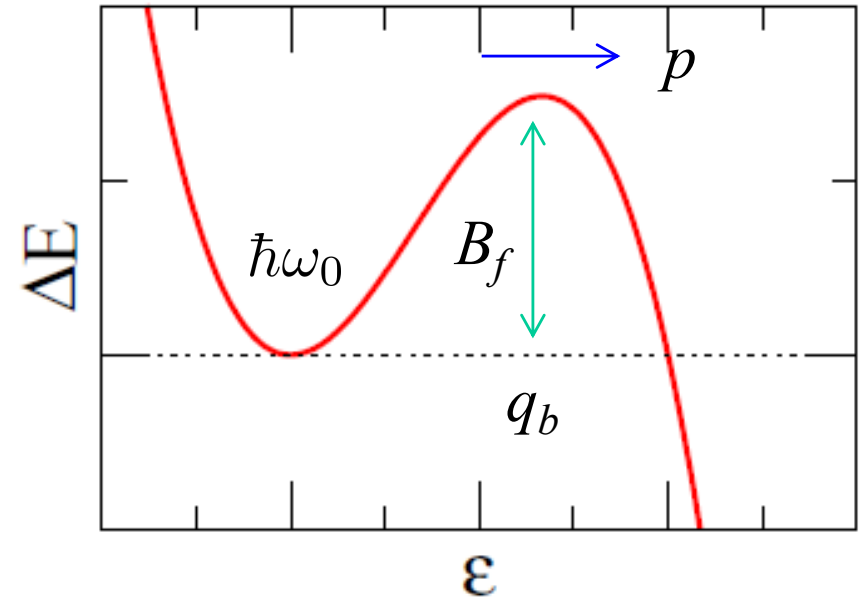


古典的な導出法

: サドル点におけるフラックスを計算する

I. Affleck, PRL46, 388 (1981).

$$\Gamma = \frac{\int dp dq e^{-\beta(\frac{p^2}{2m} + V(q))} \delta(q - q_b) \frac{p}{m} \theta(p)}{\int dp dq e^{-\beta(\frac{p^2}{2m} + V(q))}} \\ \sim \frac{\hbar\omega_0}{2\pi} e^{-\beta B_f}$$



自由エネルギーとの関係

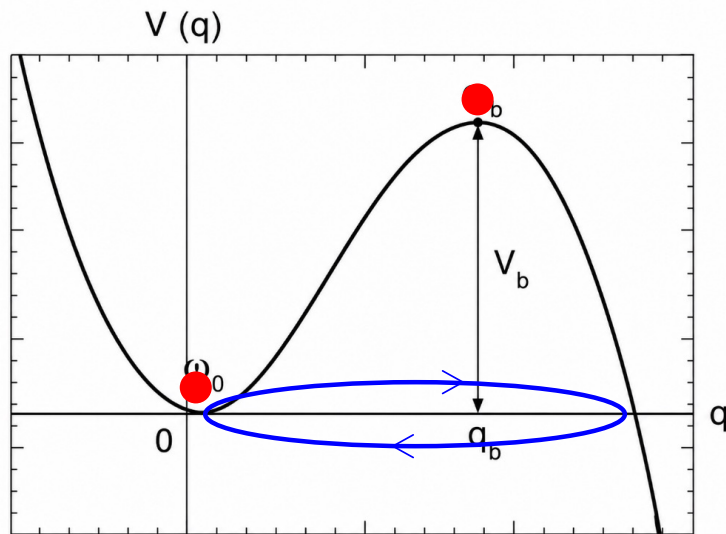
分配関数: $Z = \int dp dq e^{-\beta(\frac{p^2}{2m} + V(q))} = \sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}} \int dq e^{-\beta V(q)}$

$$\rightarrow \text{Im}F = \text{Im} \left(-\frac{\ln Z}{\beta} \right) = -\frac{\omega_0}{2\omega_b\beta} e^{-\beta B_f} \quad \longrightarrow \quad \Gamma = -\frac{\hbar\omega_b\beta}{\pi} \text{Im}F = -\frac{2}{\hbar} \frac{T_c}{T} \text{Im}F \\ \left(k_B T_c = \frac{\hbar\omega_b}{2\pi} \right)$$

ランガーの方法

$$\Gamma = -\frac{\hbar\omega_b\beta}{\pi}\text{Im}F = -\frac{2}{\hbar}\frac{T_c}{T}\text{Im}F \quad \left(k_B T_c = \frac{\hbar\omega_b}{2\pi}\right)$$

J.S. Langer, Ann. Phys. 41, 108 (1967), I. Affleck, PRL46, 388 (1981),
C. G. Callan, Jr. and S. Coleman, PRD16, 1762 (1977)



$$Z(\beta) = \text{Tr}(e^{-\beta H}) = \int_{q(0)=q(\beta\hbar)} \mathcal{D}[q(\tau)] e^{-S_E[q(\tau)]/\hbar}$$

$$S_E[q(\tau)] = \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left(\frac{1}{2} M \dot{q}^2 + V(q(\tau)) \right)$$

停留位相近似で経路積分を評価する

古典解: $q_1(\tau) = 0$, $q_2(\tau) = q_b$, $q_3(\tau) = \text{バウンス解}$

(バウンス解は $T > T_c$ で消失)

$$\rightarrow \Gamma = \frac{\hbar\omega_0}{2\pi} f_q e^{-\beta B_f}; \quad f_q = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{\nu_n^2 + \omega_0^2}{\nu_n^2 - \omega_b^2} \leftarrow \text{量子補正} \quad \left(\nu_n = \frac{2\pi n}{\beta\hbar} \right) \quad \text{松原周波数}$$

* 量子補正は $T=T_c$ で発散(停留位相近似の破綻)

ランガーの方法:この方法は散逸がある場合に拡張できる

カルデラ・レゲット模型

$$L = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - V(q) + \sum_i \frac{1}{2}m_i(\dot{x}_i^2 - \omega_i^2 x_i^2) - \sum_i c_i x_i q + \sum_i \frac{c_i^2 q^2}{2m_i \omega_i^2}$$

経路積分を使って環境の自由度 $\{x_i\}$ を積分 $\rightarrow Z(\beta) = \int_{q(0)=q(\beta\hbar)} \mathcal{D}[q(\tau)] e^{-S_{\text{eff}}[q(\tau)]/\hbar}$

Ohmic dissipation: $J(\omega) \equiv \frac{\pi}{2} \sum_i \frac{c_i^2}{m_i \omega_i} \delta(\omega - \omega_i) = \gamma \omega \quad \left(\rightarrow m \frac{d^2 q}{dt^2} = -\frac{dV(q)}{dq} - \gamma \frac{dq}{dt} \right)$

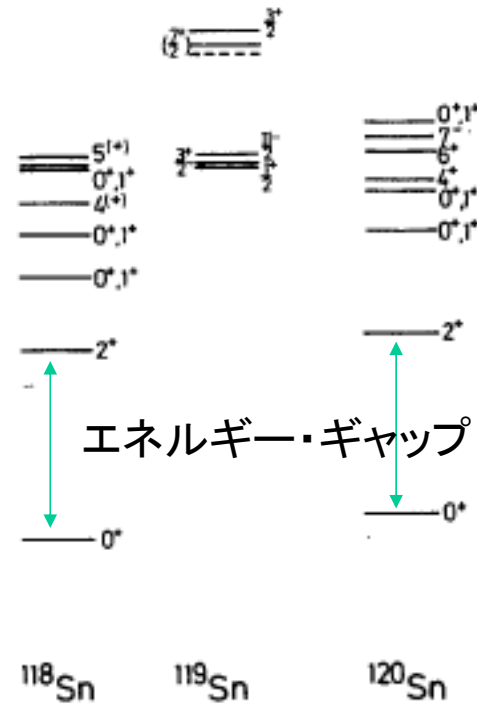
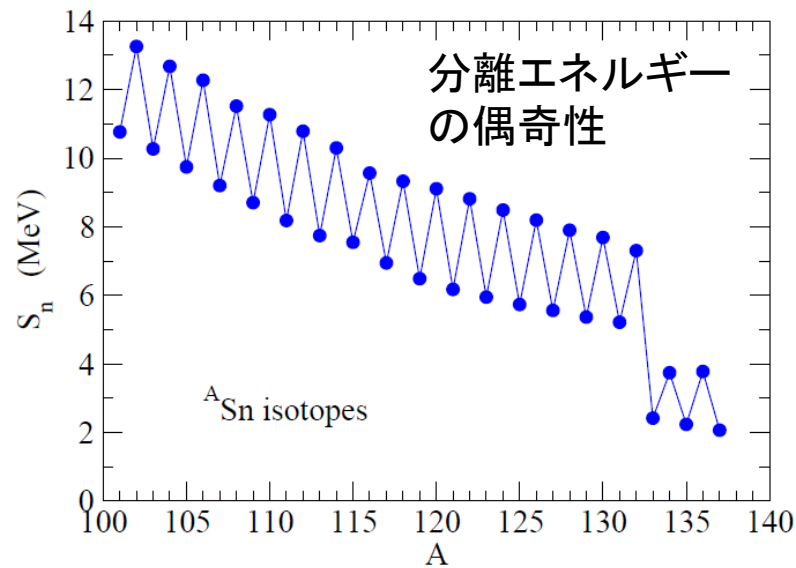
$$\rightarrow \Gamma = f_q \frac{\hbar \omega_0}{2\pi} \underbrace{(\sqrt{1 + \eta^2} - \eta)}_{\text{Kramers因子}} e^{-\beta B_f} \quad \text{クラマースの式+量子補正}$$

Kramers因子 $(\eta = \gamma/2m\omega_b)$

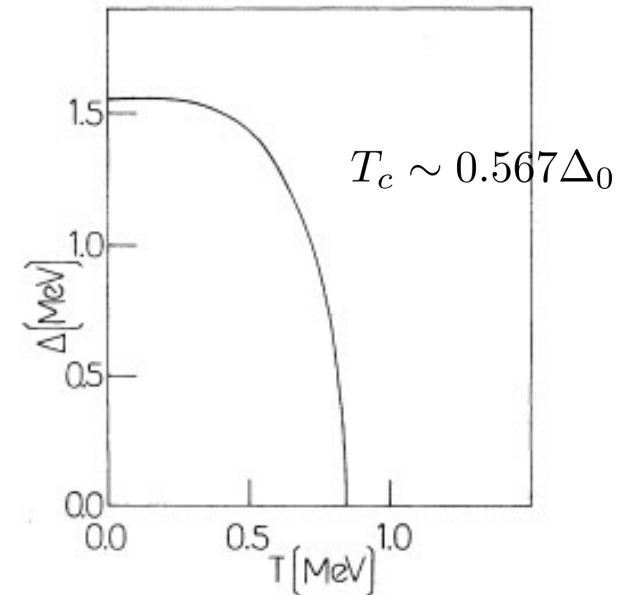
$$f_q = \prod_{k=\pm} \frac{\Gamma(1 - \lambda_b^{(k)}/\nu)}{\Gamma(1 - \lambda_0^{(k)}/\nu)} \quad \left(\nu = \frac{2\pi}{\beta\hbar} \right), \lambda_i^{(\pm)} = -\frac{\gamma}{2m} \pm \sqrt{\frac{\gamma^2}{4m^2} + \omega_i^2}$$

ランガーの方法:この方法は散逸がある場合に拡張できる

原子核:対相関が重要な役割を果たす

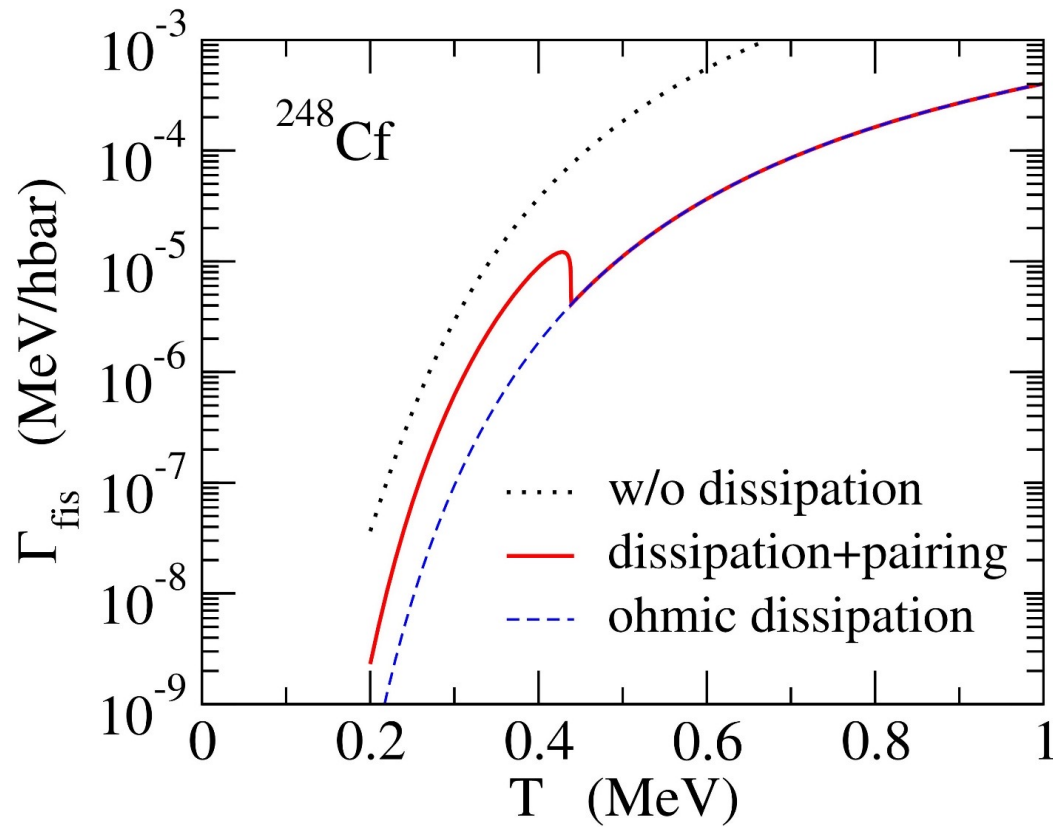


Δ の温度依存性

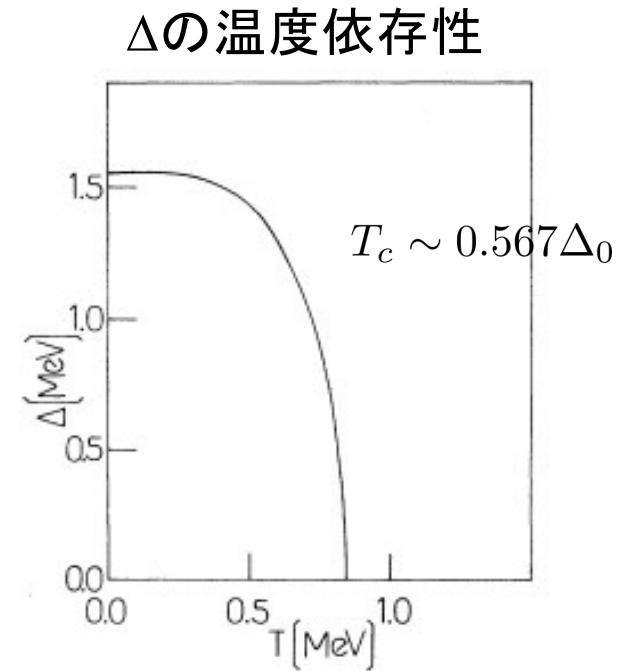


F. Alasia et al.,
PRC35, 812 ('87)

$$J(\omega) \equiv \frac{\pi}{2} \sum_i \frac{c_i^2}{m_i \omega_i} \delta(\omega - \omega_i) = \gamma \omega \rightarrow \gamma(\omega - \omega_c) \theta(\omega - \omega_c); \omega_c = 2\Delta(T)/\hbar$$



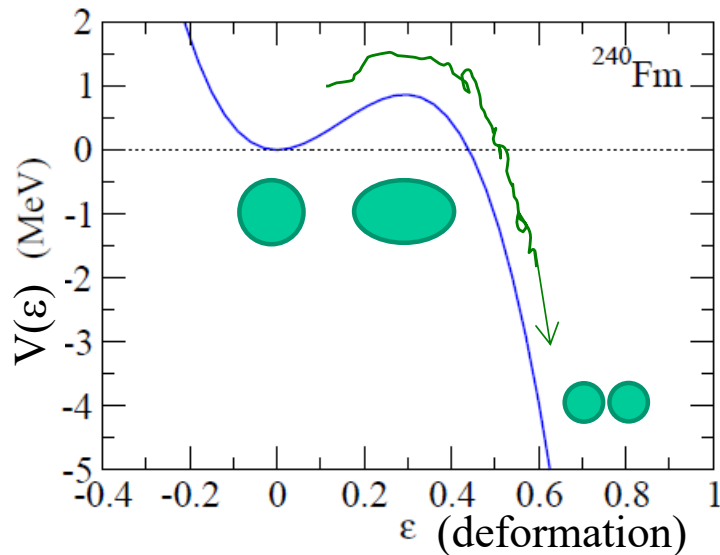
K. Hagino, N. Takigawa, and M. Abe, PRC53, 1840 (1996).



F. Alasia et al.,
PRC35, 812 ('87)

$$J(\omega) \equiv \frac{\pi}{2} \sum_i \frac{c_i^2}{m_i \omega_i} \delta(\omega - \omega_i) = \gamma \omega \rightarrow \gamma(\omega - \omega_c) \theta(\omega - \omega_c); \omega_c = 2\Delta(T)/\hbar$$

誘起核分裂：動的模型



ランジュバン法(ブラウン運動)

$$m \frac{d^2 q}{dt^2} = - \frac{dV(q)}{dq} - \gamma \frac{dq}{dt} + R(t)$$

$$\langle R(t)R(t') \rangle = \frac{2\gamma T}{m^2} \delta(t - t')$$

1次元2次関数障壁: $V(q) = -\frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \rightarrow$ 解析解

時刻 t における確率分布

$$W(q, t; q_0, p_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma(t)^2}} \exp\left(-\frac{(q - \langle q(t) \rangle)^2}{2\sigma(t)^2}\right)$$

障壁通過確率 (over damped + 長時間極限)

$$P(t; q_0, p_0) = \int_0^\infty dq W(q, t; q_0, p_0) \\ \sim \frac{1}{2} \text{erfc} \left(\sqrt{\frac{B}{T}} - \frac{m\omega}{\gamma} \sqrt{\frac{K}{T}} \right) \\ B = \frac{1}{2}m\omega^2 q_0^2, K = \frac{1}{2}mp_0^2$$

q_0, p_0 の熱分布 $\rightarrow P \propto e^{-\bar{B}/T}$

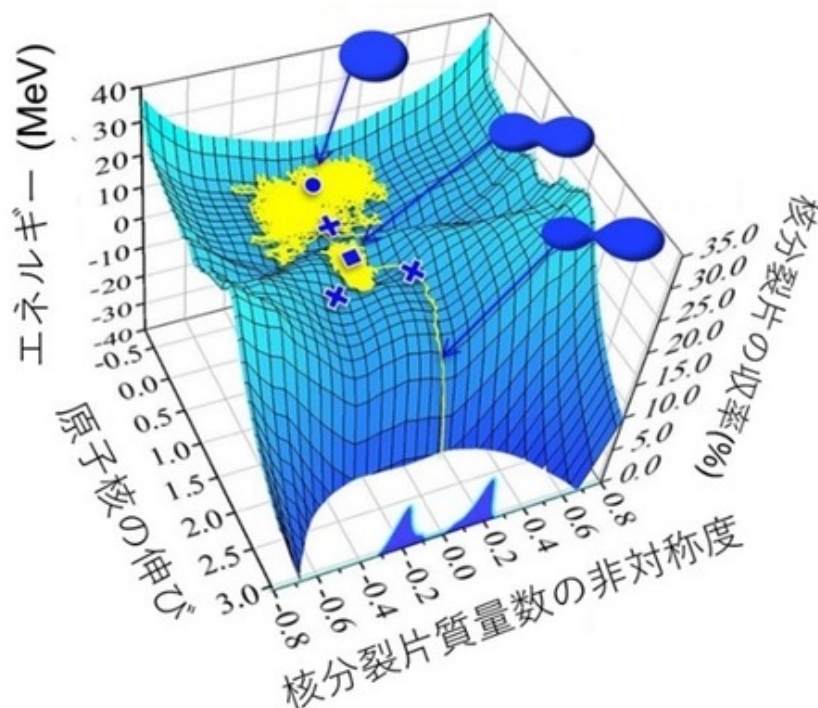
Y. Abe et al., PRE61, 1125 (2000)
D. Boilley, EPJA18, 627 (2003).

誘起核分裂: 動的模型

多次元化

- q :
 - ・2つのフラグメント間の距離
 - ・各フラグメントの変形
 - ・2つのフラグメントの質量比

質量数が257以下の原子核



質量数が257を超える原子核

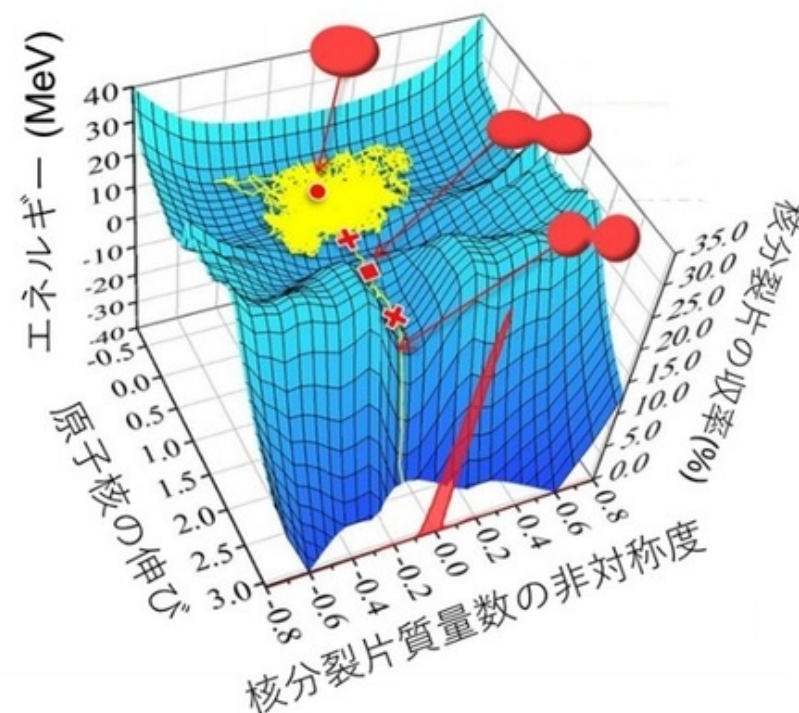
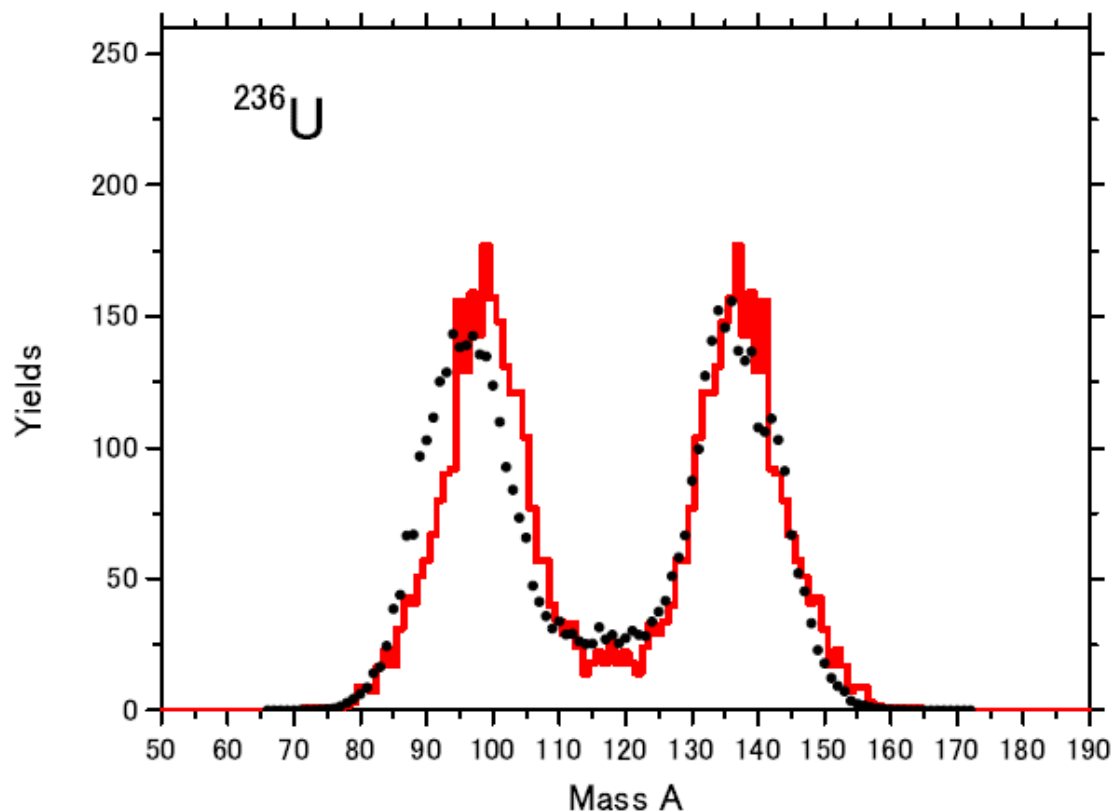


図: 有友嘉浩氏(近大)

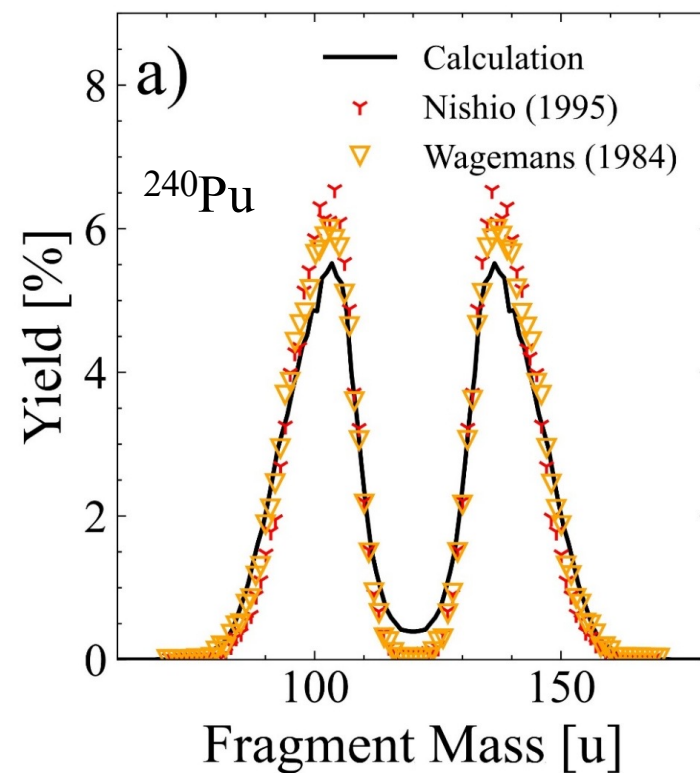
誘起核分裂: 動的模型

多次元化

q :
・2つのフラグメント間の距離
・各フラグメントの変形
・2つのフラグメントの質量比

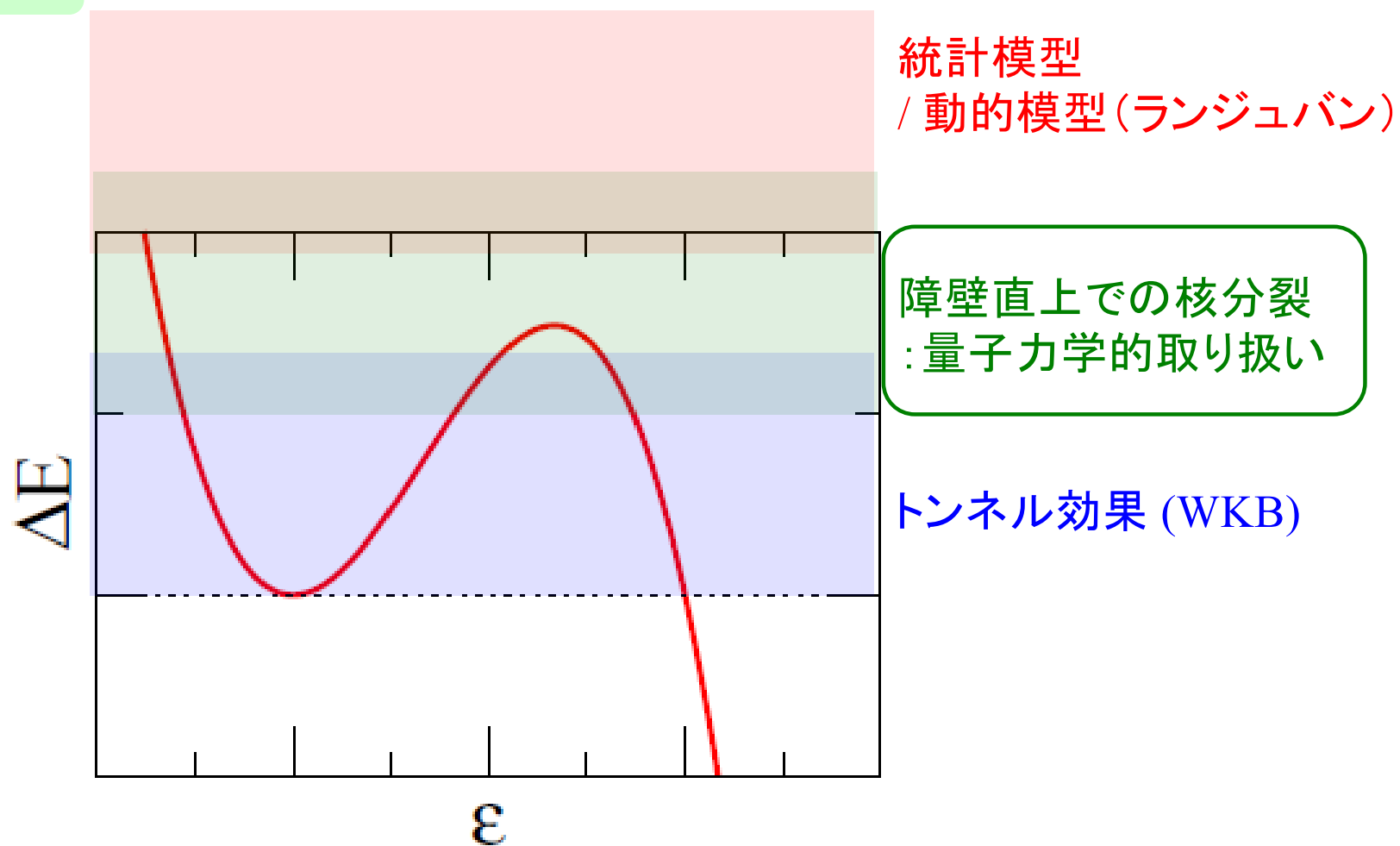


Y. Aritomo and S. Chiba, PRC88, 044614 (2013)

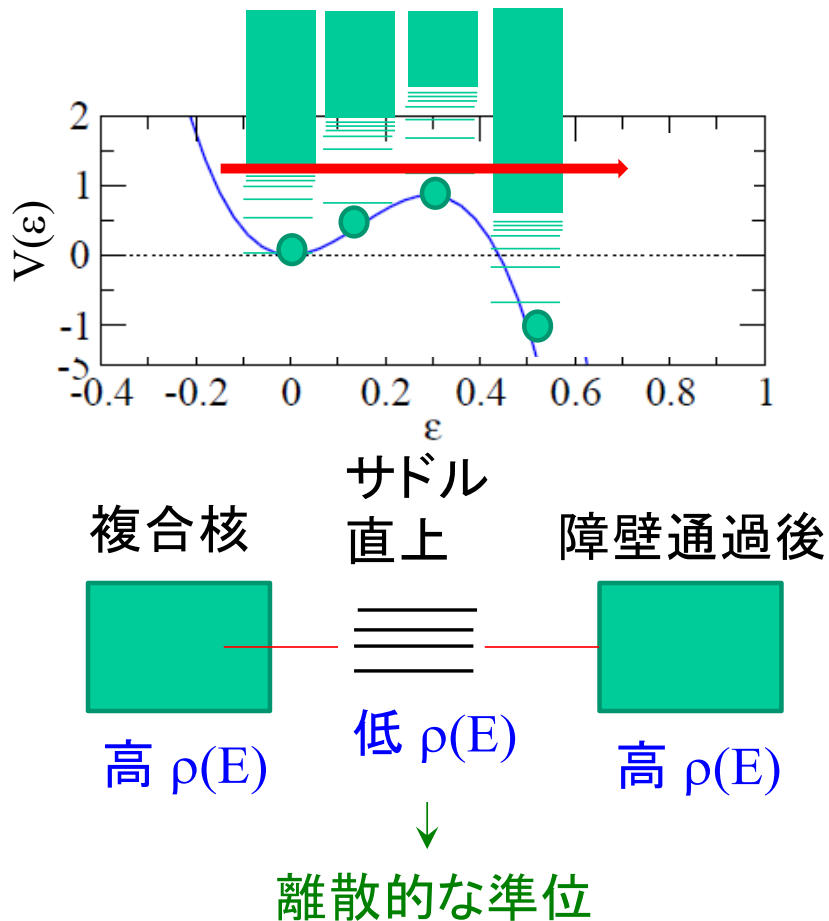


S. Takagi, Y. Aritomo, et al.,
PRC112, 014608 (2025)

誘起核分裂

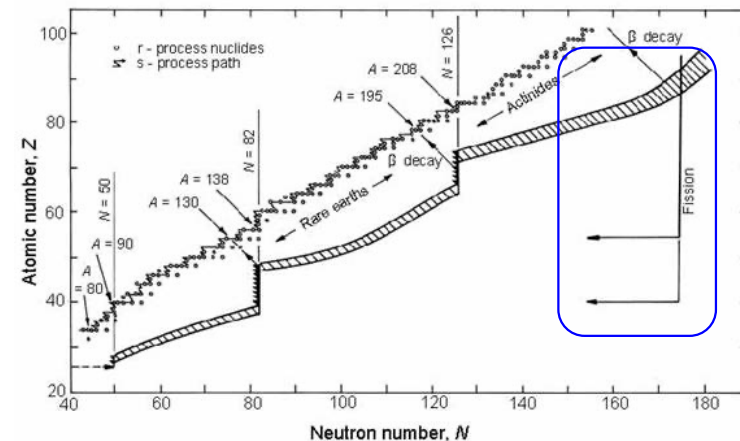


障壁直上の核分裂



量子力学に基づく微視的な取り扱いが重要

cf. r-プロセス元素合成



中性子過剰核の核分裂

→ 低い E^* 、低い $\rho(E^*)$

- ✓ 統計模型は妥当か?
- ✓ ランジュバンを使ってもいいのか?
- ✓ 経験に依らない記述が欲しい

低エネルギー核分裂の微視的記述：我々の取り組み



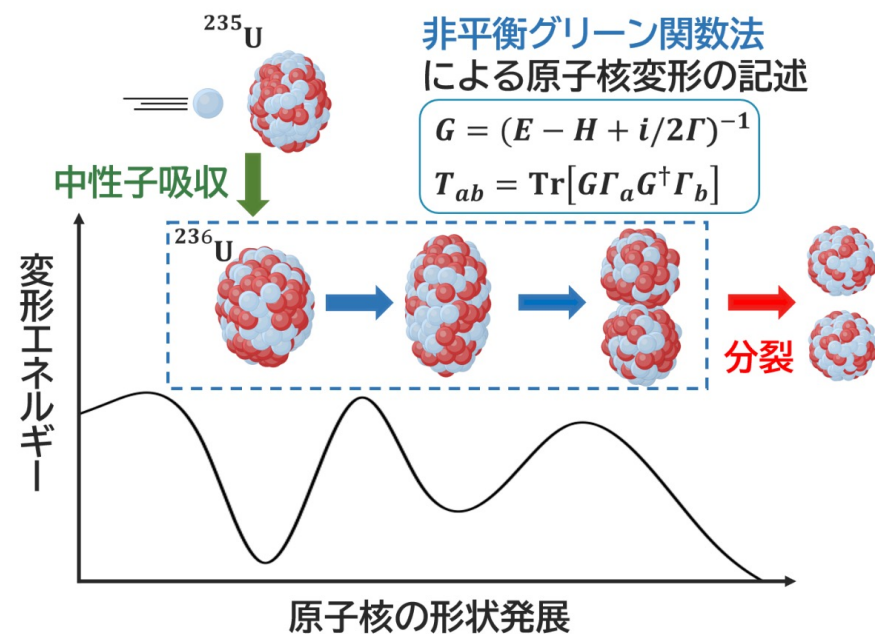
最近の研究から

核分裂における非平衡ダイナミクス ——非平衡グリーン関数法による解析

鷗沢浩太郎 〈日本原子力研究開発機構 uzawa.kotaro@jaea.go.jp〉

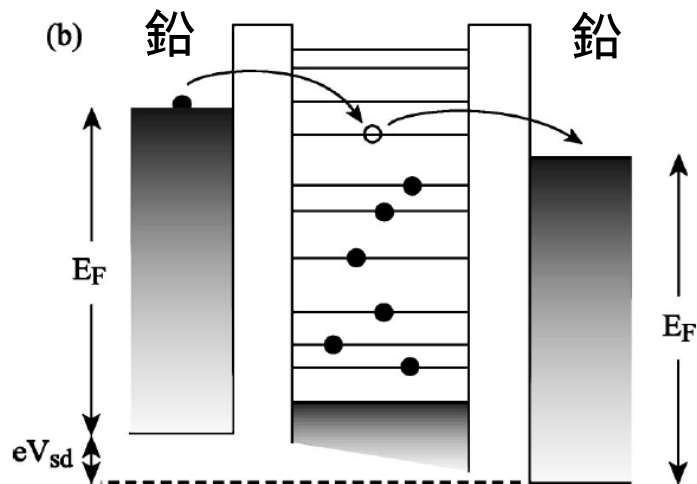
萩野浩一 〈京都大学大学院理学研究科 hagino.kouichi.5m@kyoto-u.ac.jp〉

日本物理学会誌
2026年6月号

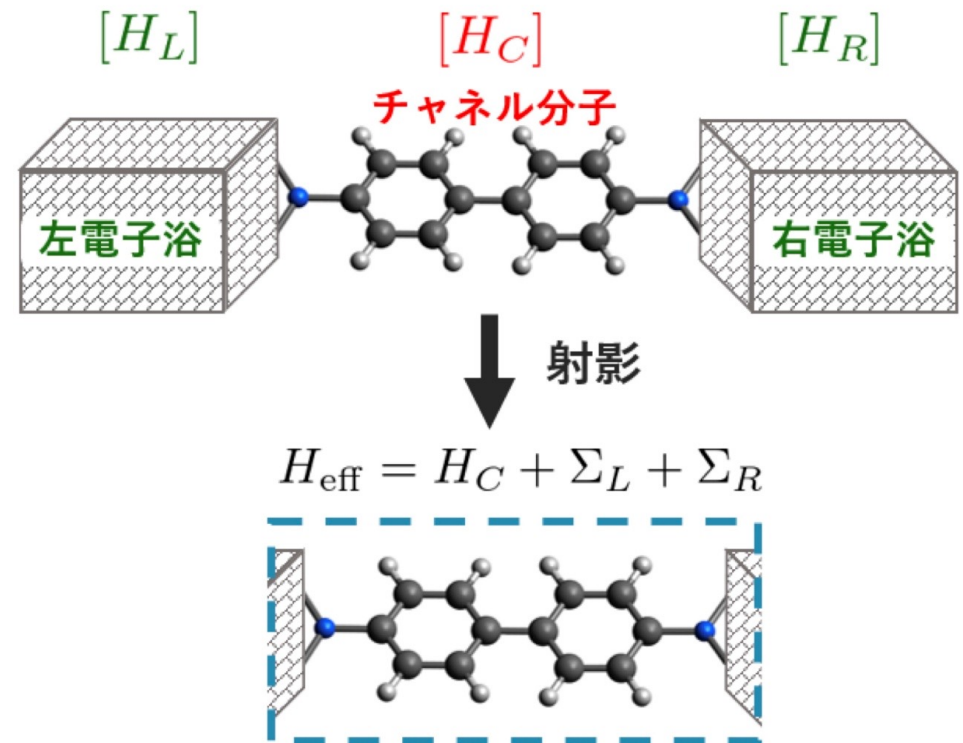


電子輸送の問題と核分裂

量子ドットなどの
ナノデバイス



リード電極の間に電圧をかけると
電流が流れる



Y. Alhassid, Rev. Mod. Phys. 72, 895 (2000).

電子輸送の問題と核分裂

$$I = \frac{e}{h} \int dE (f_L(E) - f_R(E)) \times \text{Tr}[\Gamma_L G(E) \Gamma_R G(E)^\dagger]$$

$$f_k(E) = \frac{1}{1 + e^{(E - \mu_k)/k_B T}}$$

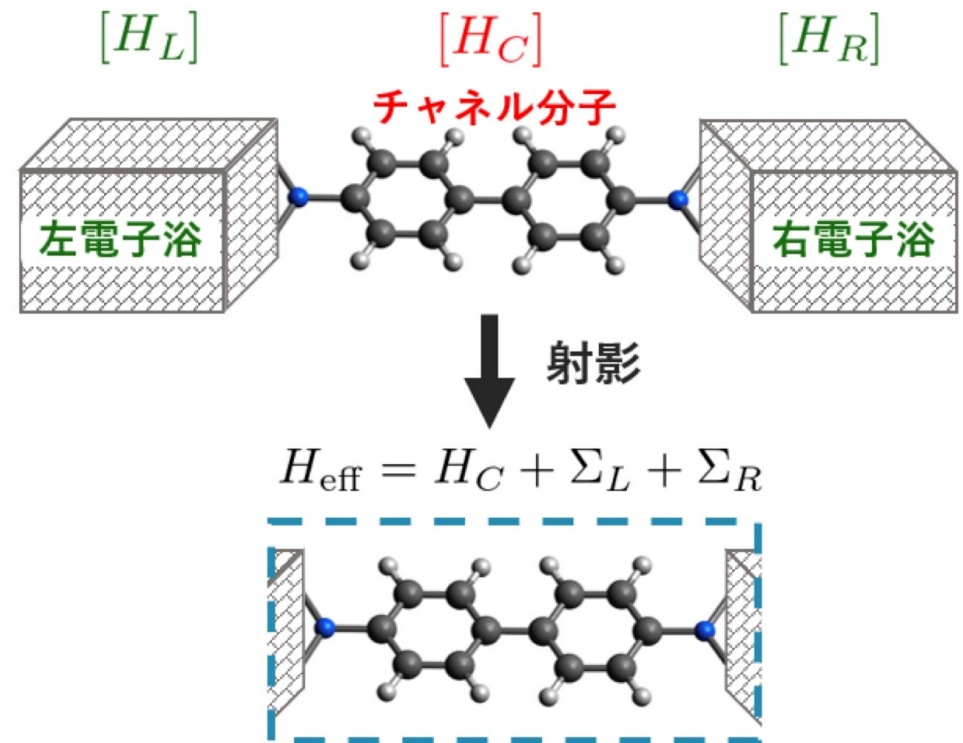
$$G(E) = (H_{\text{eff}} - E)^{-1}$$

$$T(E) = \text{Tr}[\Gamma_L G(E) \Gamma_R G(E)^\dagger]$$

非平衡グリーン関数法

P.S. Samle, A.W. Ghosh, and S. Datta,
PRB64, 201403 (2001).

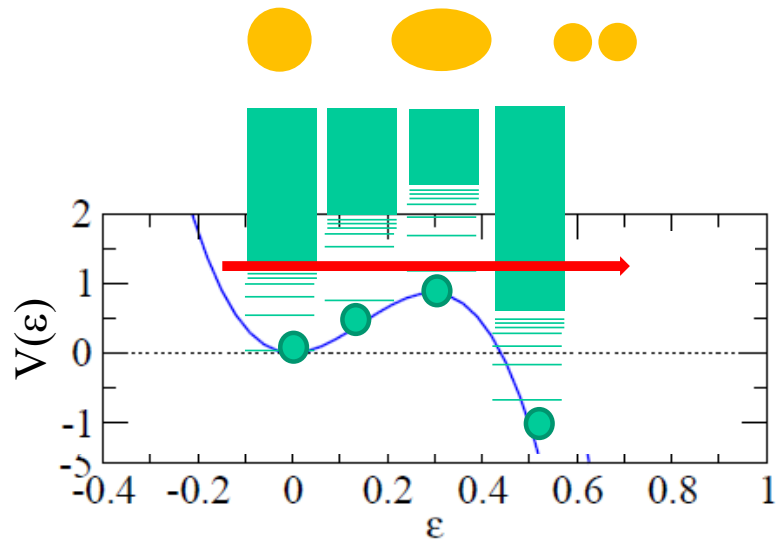
cf. 星野さん(佐賀大)ポスター



$$I = \frac{ie}{h} \sum_{k,n} [V_{k,n} \langle c_k^\dagger d_n \rangle - V_{k,n}^* \langle d_n^\dagger c_k \rangle]$$

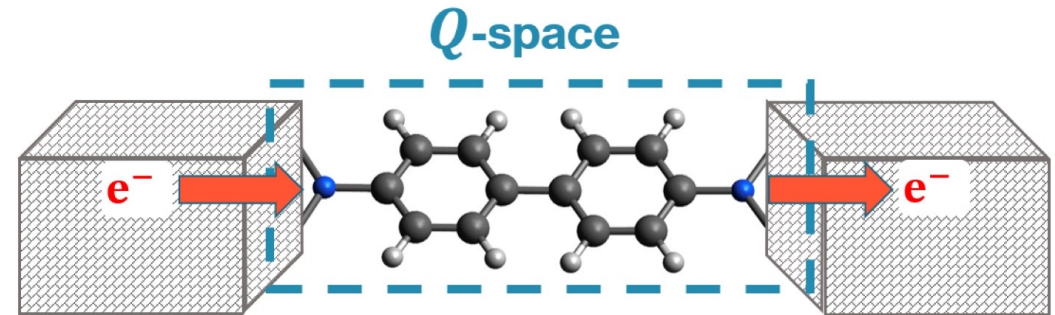
$$= \frac{e}{h} \sum_{k,n} [V_{k,n} G_{n,k}(t) - V_{k,n}^* G_{k,n}(t)]$$

電子輸送の問題と核分裂

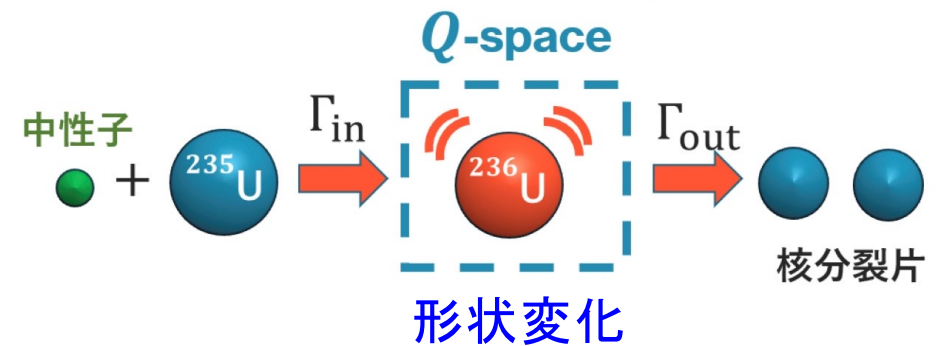


原子核の形状発展
＝形状自由度の「フロー」

ナノデバイス中の電子輸送



核分裂反応

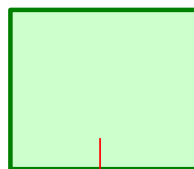


$$T_{\text{fis}}(E) = \text{Tr}[\Gamma_{\text{in}} G(E) \Gamma_{\text{out}} G(E)^\dagger]$$

電子輸送の問題と核分裂

問題を単純化すると:

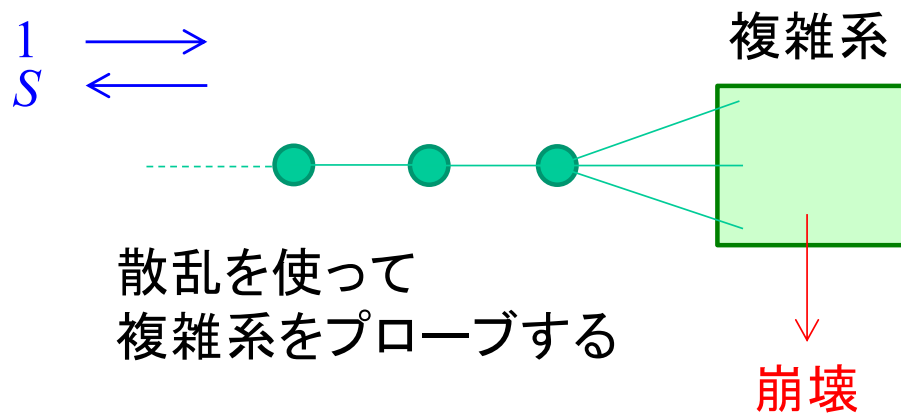
複雑系



崩壊

電子輸送の問題と核分裂

問題を単純化すると:

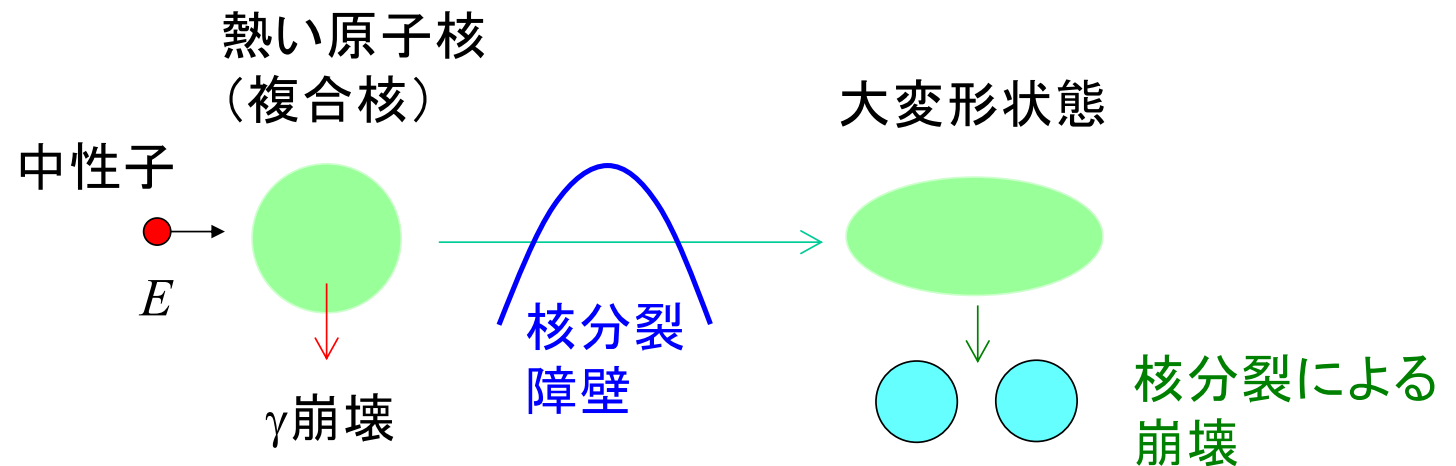
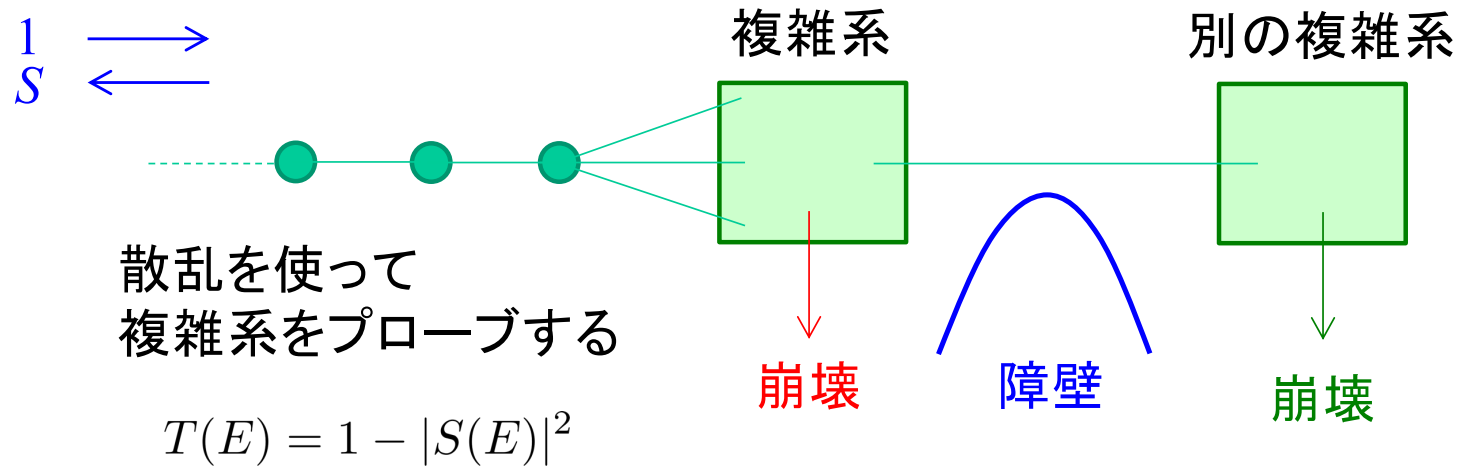


散乱を使って
複雑系をプローブする

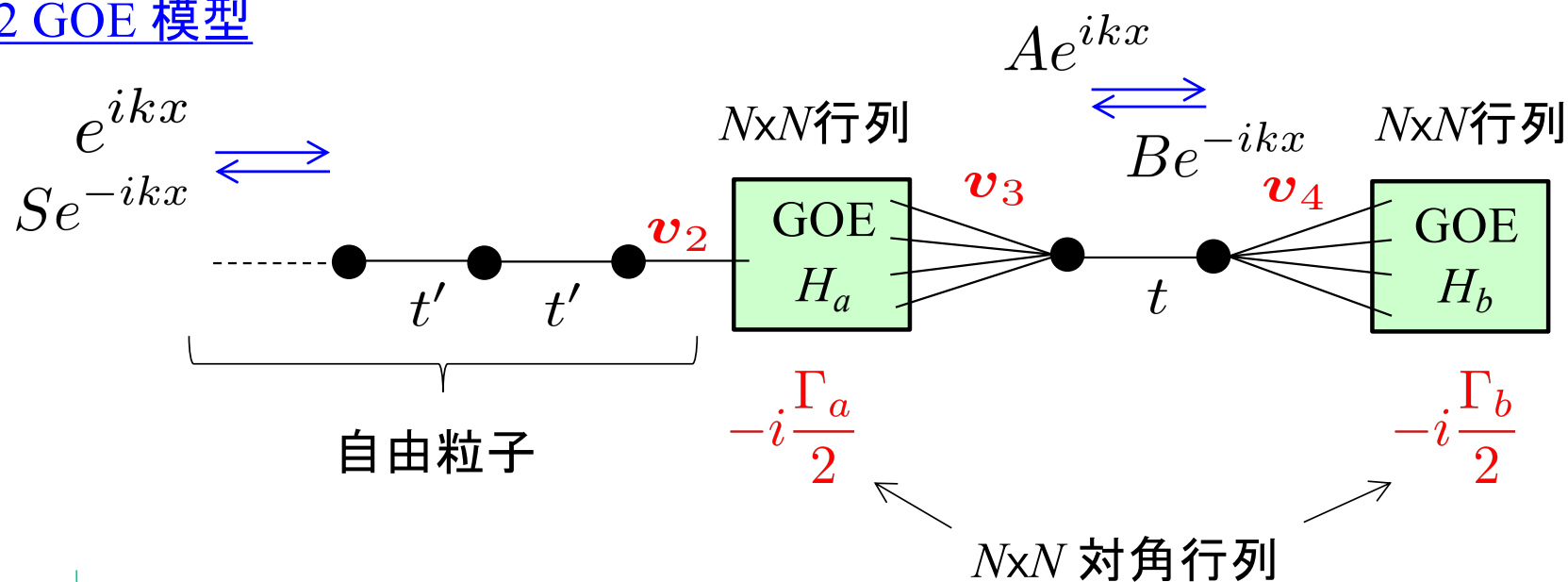
$$T(E) = 1 - |S(E)|^2$$

電子輸送の問題と核分裂

問題を単純化すると:



2 GOE 模型



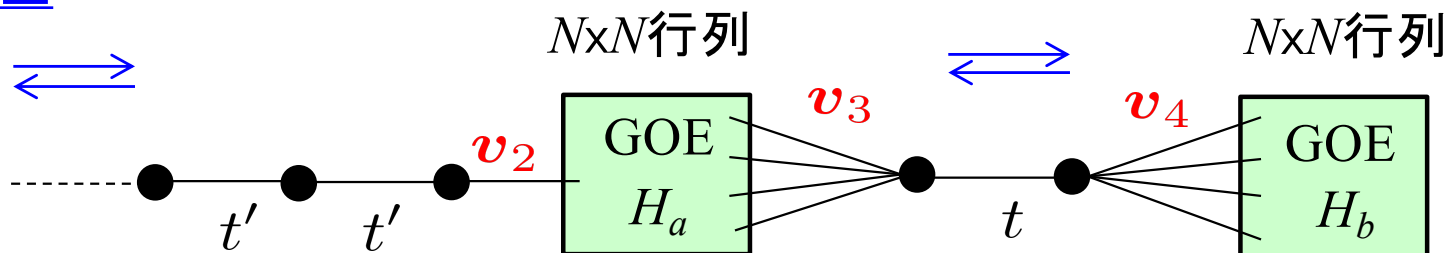
$$T(E) = T_a(E) + T_b(E) = 1 - |S(E)|^2 \quad H_{\text{tot}}$$

$$T_a(E) = 1 - |S(E)|^2 - |A(E)|^2 + |B(E)|^2 \propto \sum_{k \in a} |(H_{\text{tot}} - E)_{k1}^{-1}|^2 \Gamma_a$$

$$T_b(E) = |A(E)|^2 - |B(E)|^2 \propto \sum_{k \in b} |(H_{\text{tot}} - E)_{k1}^{-1}|^2 \Gamma_b$$

G.F. Bertsch and K. Hagino, JPSJ90, 11405 (2021).

2 GOE 模型



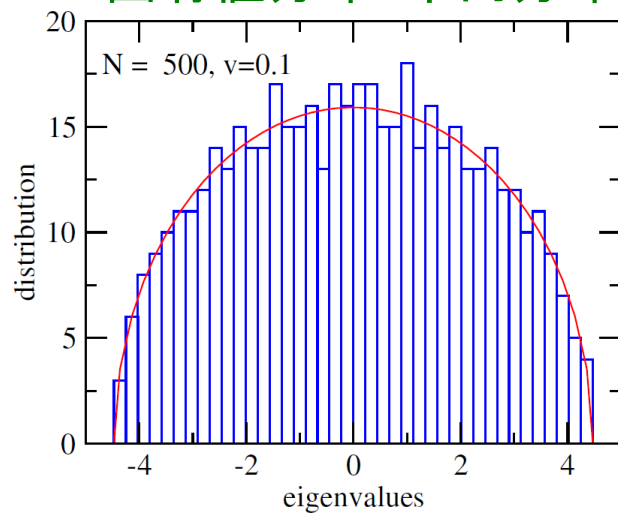
ランダム行列 (GOE): $(H_i)_{kk'} = v_i r_{kk'} \sqrt{1 + \delta_{k,k'}}; \quad \langle r_{kk'}^2 \rangle = 1$

量子カオスの文脈
でよく使われる

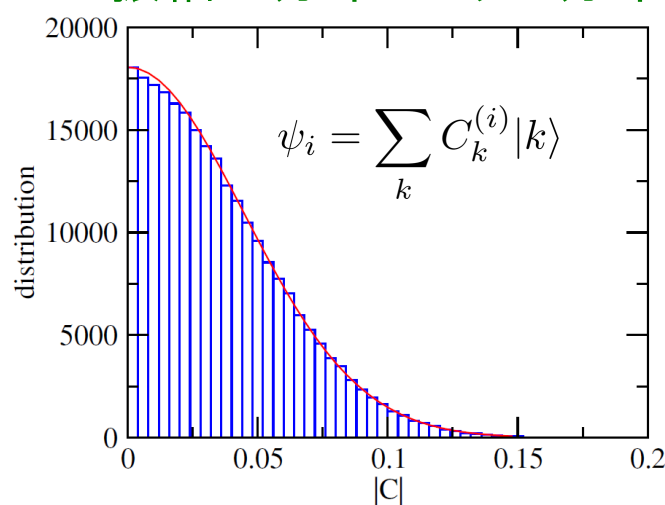
ランダム結合: $(v_i)_k = v_i r_k; \quad \langle r_k^2 \rangle = 1$

cf. 林さん(理科大)ポスター

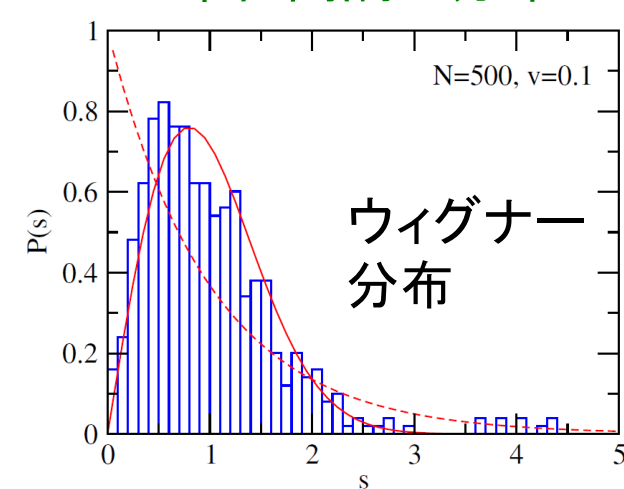
固有値分布: 半円分布



振幅の分布: ガウス分布

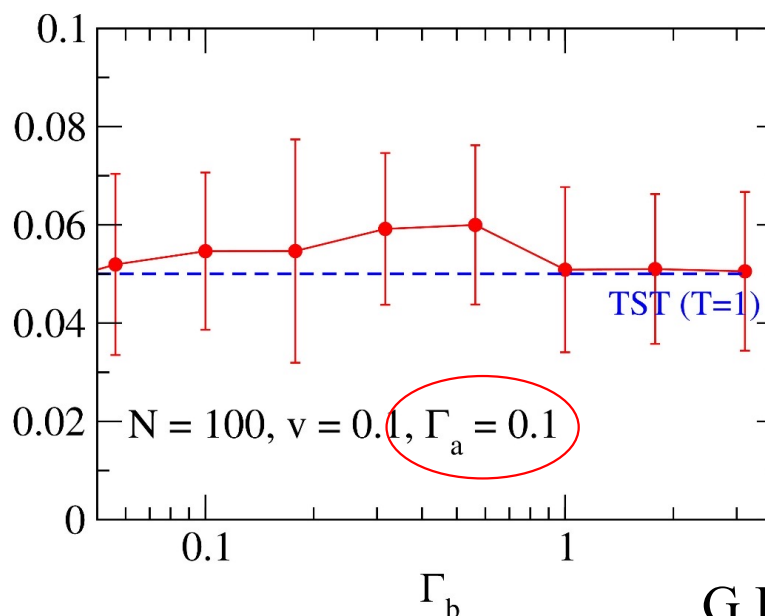
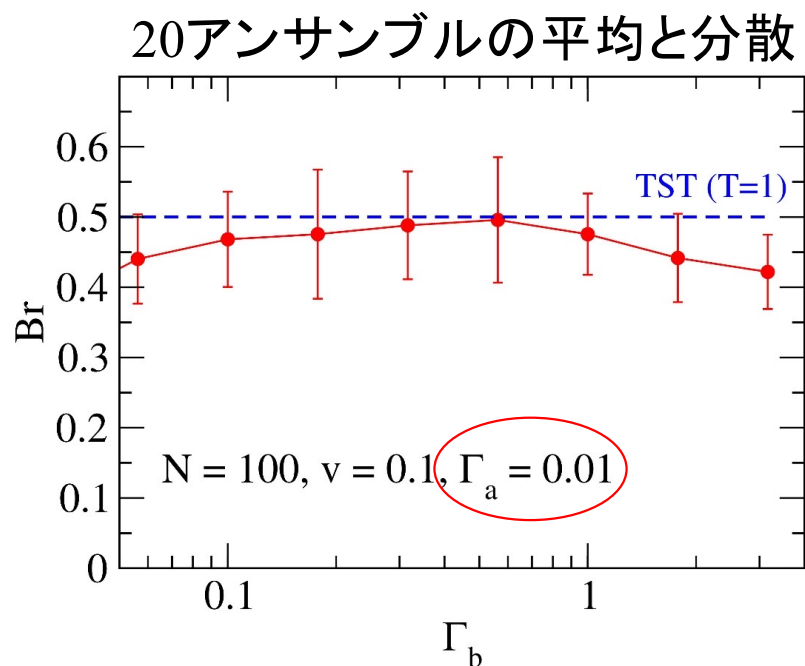
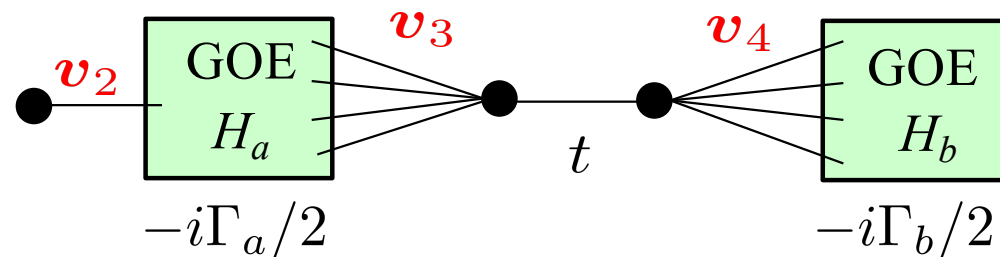


準位間隔の分布



2 GOE 模型

分岐比:
$$Br = \frac{\int dE T_b(E)}{\int dE T_a(E)}$$



$$Br_{\text{TST}} = \frac{1}{2\pi\rho_0} \cdot \frac{1}{\Gamma_a}$$

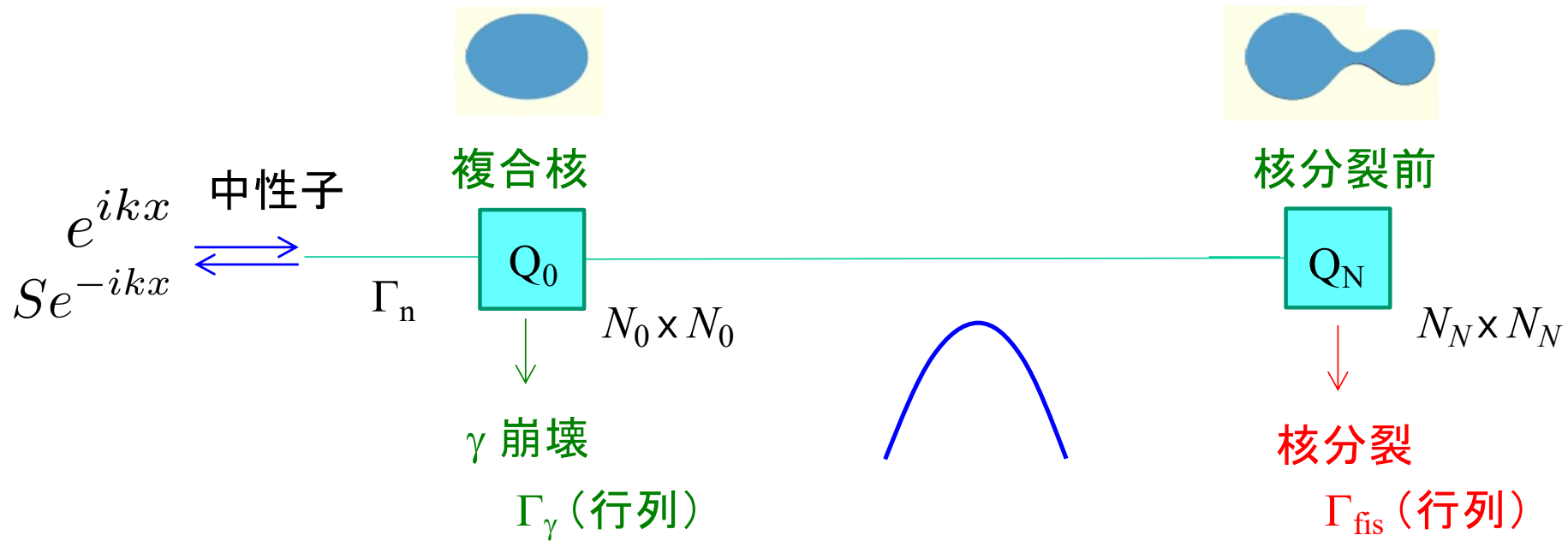
$$\rho_0 = \frac{\sqrt{N}}{\pi v}$$

G.F. Bertsch and K. Hagino,
JPSJ90, 11405 (2021).

分岐比は Γ_a に大きく依存するが Γ_b にはあまり依存しない

→ 遷移状態理論の仮定(崩壊は障壁の位置のフラックスで決まる)を初めて微視的に実現

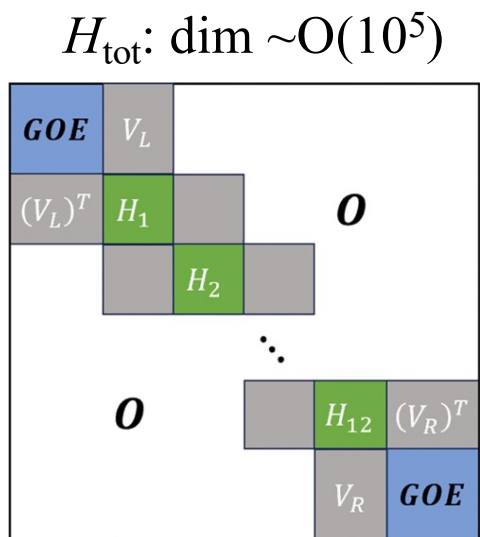
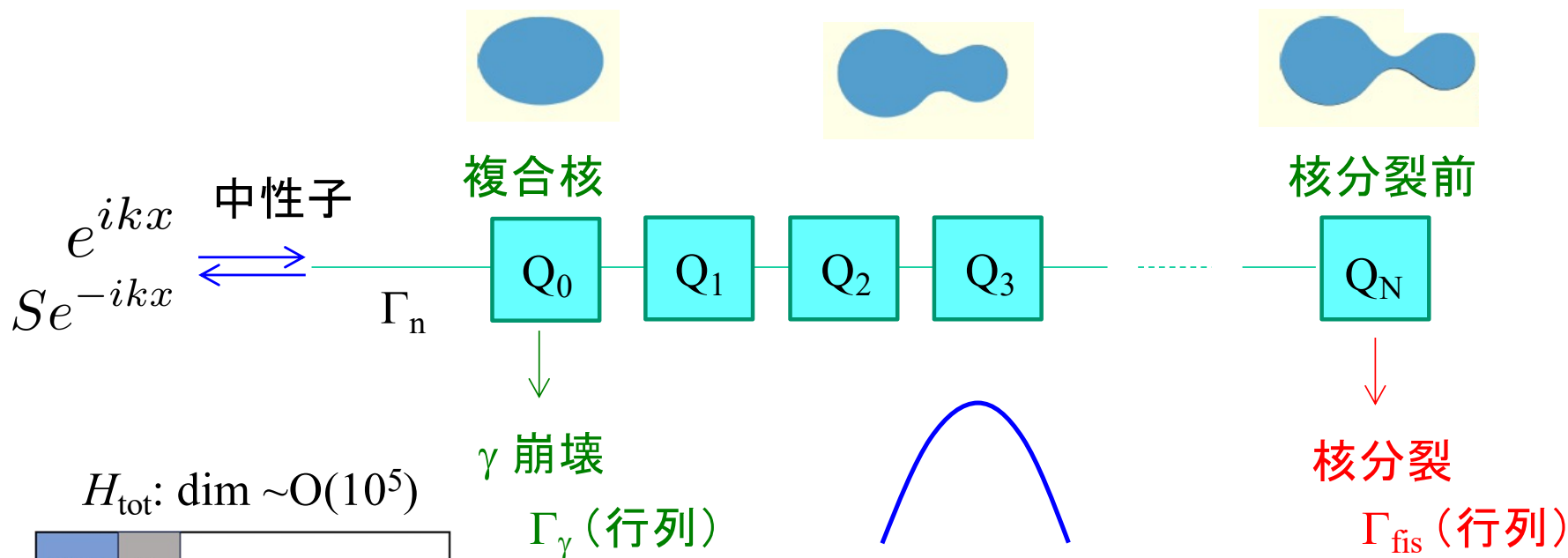
現実の核分裂現象への応用



Q_0 から Q_N へのフロー(ホッピング)を計算する

$$T_{CN \rightarrow \text{fis}} = \text{Tr}[\Gamma_n G \Gamma_{\text{fis}} G^\dagger]; \quad G = (H_{\text{tot}} - NE)^{-1}$$

現実の核分裂現象への応用



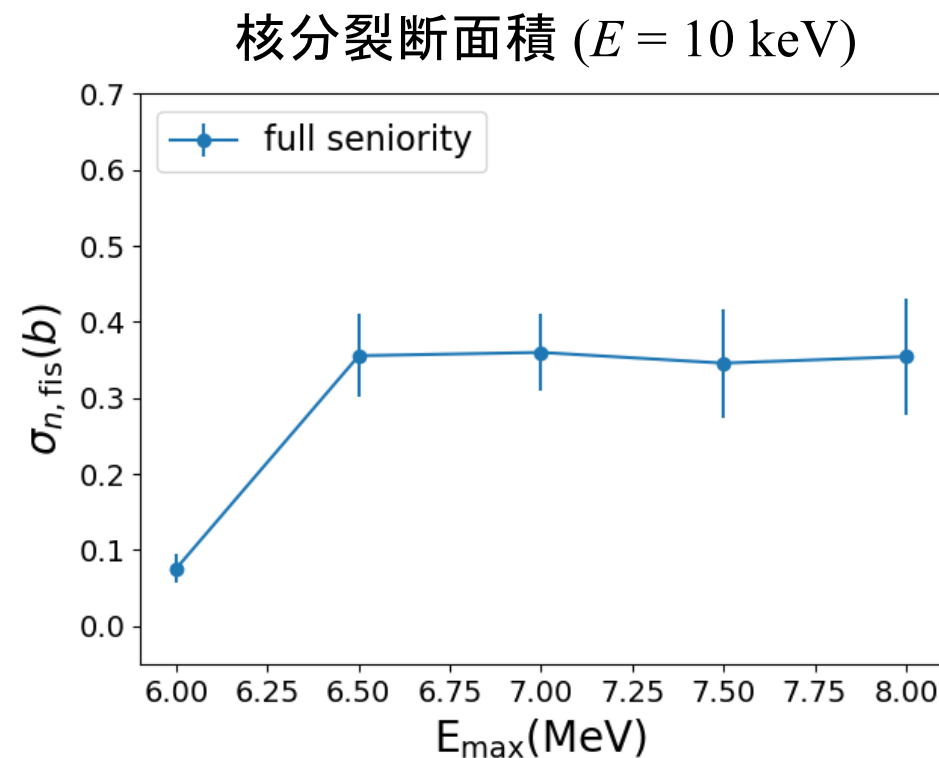
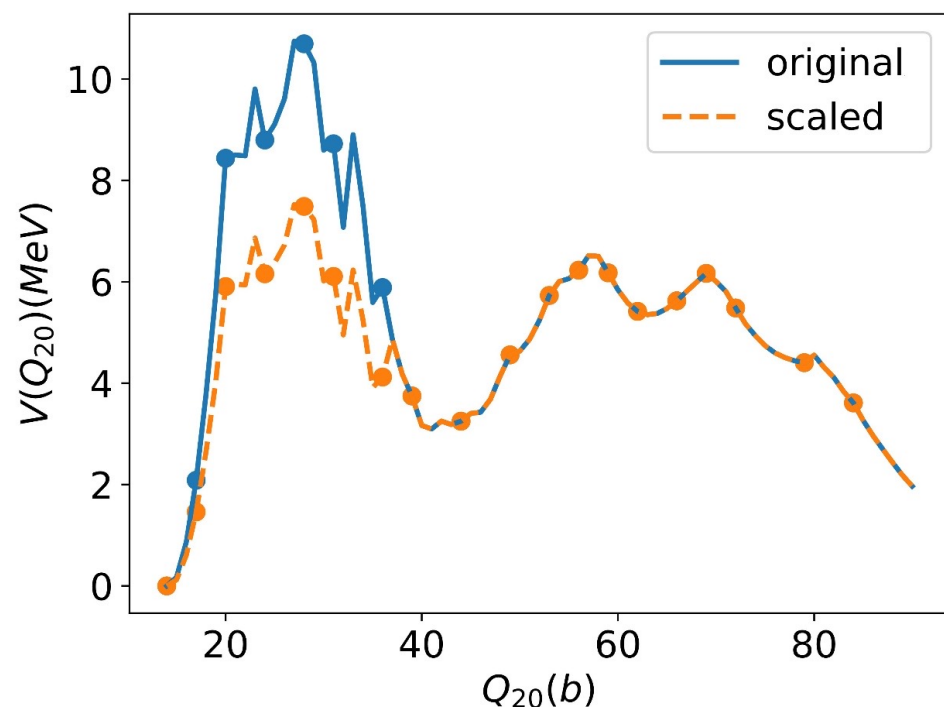
- 経路に沿っていくつかに分割 ($\leftarrow$ 原子核の形状を少しずつ変える)
- それぞれの形状ごとに異なる平均場ポテンシャルを作り、そこに核子を詰める (詰め方を変えていろいろな励起状態を作る)
- 異なる形状の間の結合ポテンシャルも作る

$$T_{CN \rightarrow \text{fis}} = \text{Tr}[\Gamma_n G \Gamma_{\text{fis}} G^\dagger]; \quad G = (H_{\text{tot}} - NE)^{-1}$$

^{236}U の低エネルギー核分裂への応用

Skyrme 型密度汎関数法 (UNEDF1) を使った計算

K. Uzawa and K. Hagino, Phys. Rev. C112, 014326 (2025).



実験データ: $\sigma_{n, \text{fis}} = 3.116$ b

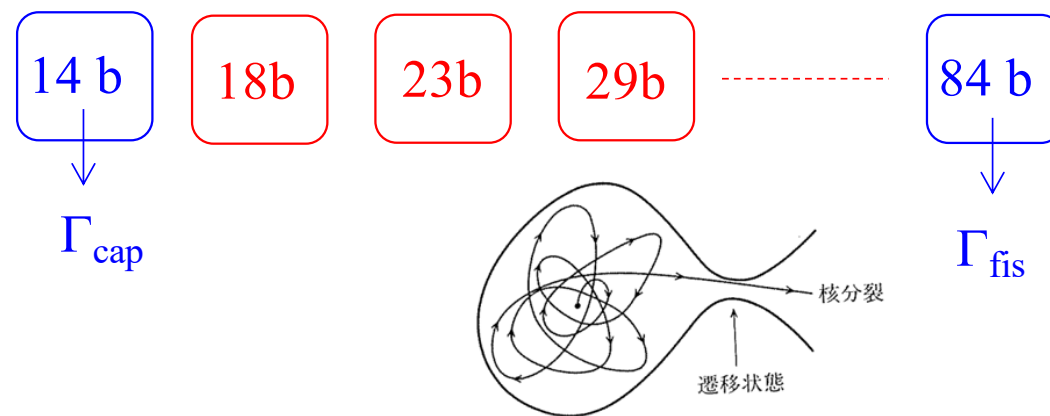
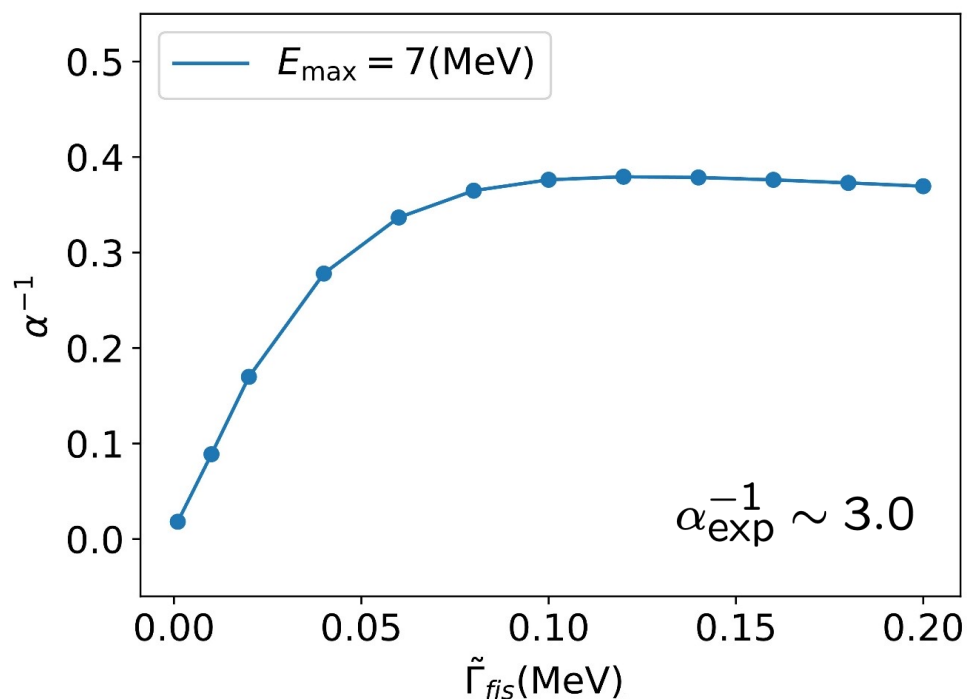
(ファクター 10 の精度で再現に成功)

^{236}U の低エネルギー核分裂への応用

Skyrme 型密度汎関数法 (UNEDF1) を使った計算

K. Uzawa and K. Hagino, Phys. Rev. C112, 014326 (2025).

核分裂とガンマ崩壊の分岐比



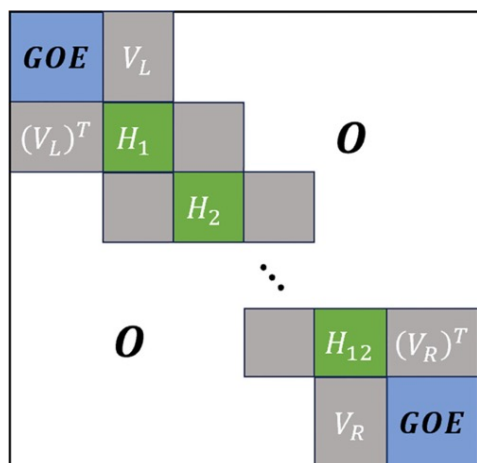
Γ_{fis} (障壁後のダイナミクス) にあまり依らない
→ 遷移状態理論の主要な仮定

大規模計算への対処法

K. Uzawa and K. Hagino, PRE110, 055302 (2024).



H_{tot} : $\text{dim} \sim O(10^5)$



大次元ハミルトニアン行列の基底状態

→ランチョス法で効率よく求められる(が、今は別の問題)

シフト逆べきランチョス法 (shift-invert Lanczos method)

$$G(E) = \frac{1}{H - i\Gamma/2 - E} = \sum_{\alpha} \frac{|\phi_{\alpha}\rangle \langle \tilde{\phi}_{\alpha}|}{E_{\alpha} - E}$$

← $\text{Re}(E_{\alpha}) \sim E$ となる数本の状態のみが寄与

一般にこのような状態はスペクトルの中間に位置する
→ シフト逆べきランチョス法

$$\begin{aligned} T(E) &= \text{Tr}[\Gamma_n G(E) \Gamma_{\text{fis}} G(E)^{\dagger}] \\ G(E) &= (H_{\text{tot}} - NE)^{-1} \end{aligned}$$

$$H\phi_{\alpha} = E_{\alpha}\phi_{\alpha} \rightarrow \underbrace{(H - \sigma)^{-1}\phi_{\alpha}}_{\text{Lanczos}} = (E_{\alpha} - \sigma)^{-1}\phi_{\alpha}$$

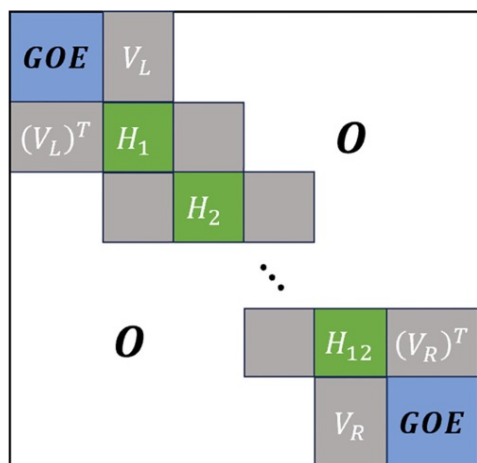
$E = \sigma$ に近い状態の固有値、固有関数を順々に求められる

大規模計算への対処法

K. Uzawa and K. Hagino, PRE110, 055302 (2024).



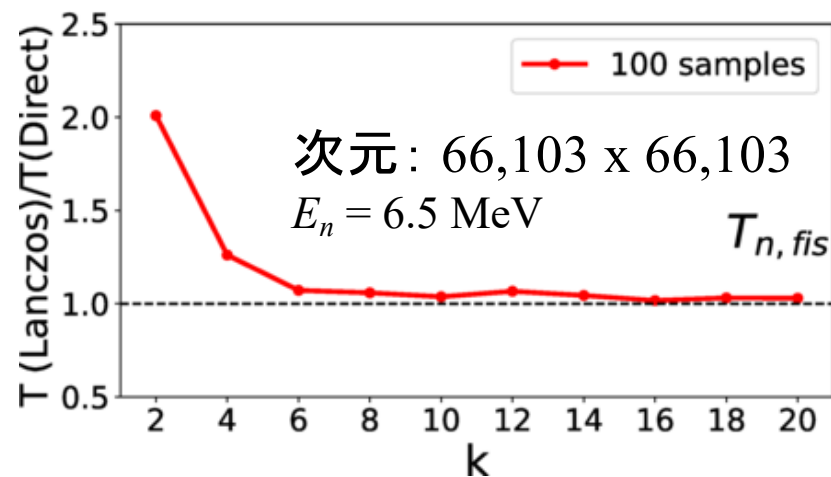
H_{tot} : dim $\sim O(10^5)$



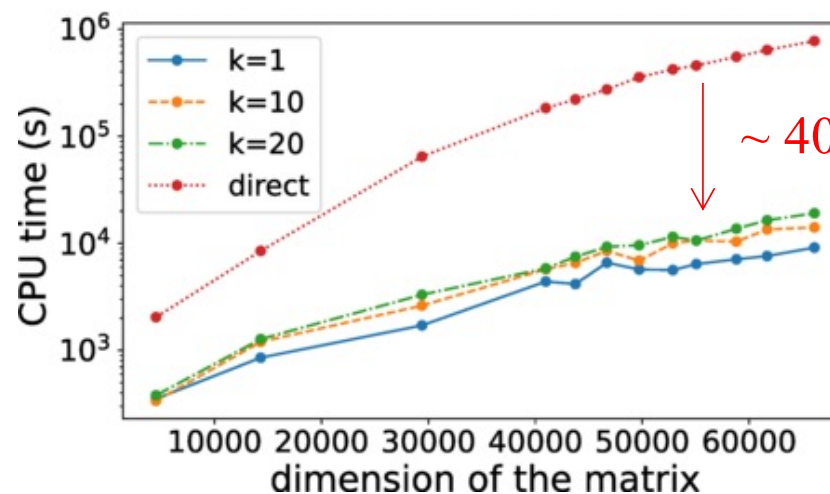
シフト逆べきランチョス法

$$(H - \sigma)^{-1} \phi_\alpha = (E_\alpha - \sigma)^{-1} \phi_\alpha$$

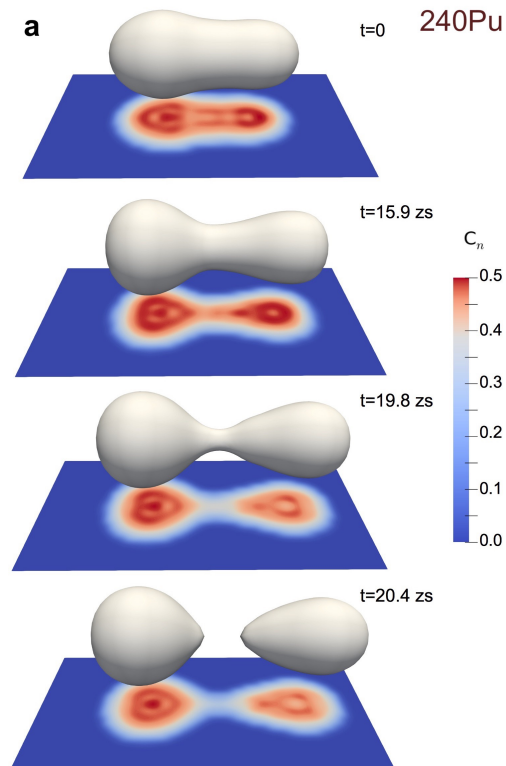
Lanczos



←iterationの回数

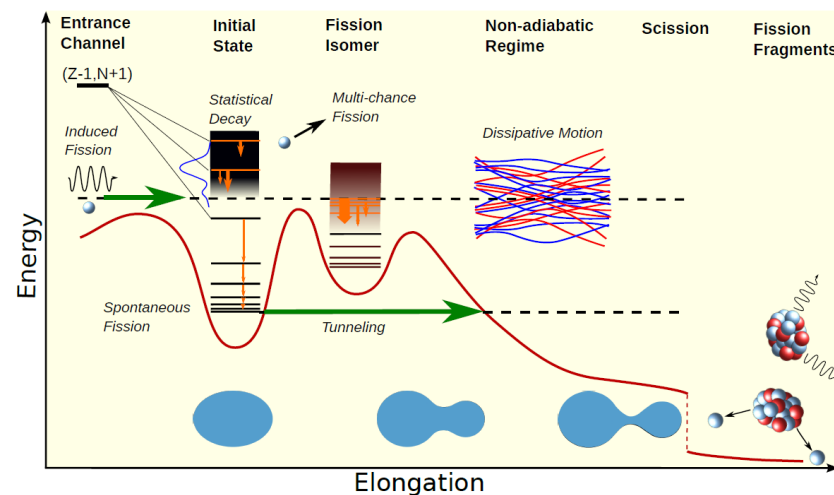


まとめ



核分裂＝強い相互作用する
多体系の大振幅運動

- 多次元量子トンネル現象
- 散逸、量子開放系
- 量子複雑系
- 熱的崩壊現象



- 超重元素
- r-プロセス元素合成
- 中性子過剰核の生成

$$T_{CN \rightarrow \text{fis}} = \text{Tr}[\Gamma_n G \Gamma_{\text{fis}} G^\dagger]$$

✓ 非平衡グリーン関数法を用いた新しい試みの紹介



(補足) $E^* \gg B_f$ で成り立つ近似式

$$\Gamma_f = \frac{1}{2\pi\rho_{\text{gs}}(E^*)} \int_0^{E^*-B_f} \rho_{\text{sd}}(E^* - B_f - K) dK$$

フェルミガス模型による準位密度: $\rho(E^*) \propto e^{2\sqrt{aE^*}}; \quad E^* = aT^2$

$$\Gamma_f = \frac{1}{2\pi e^{2\sqrt{aE^*}}} \int_0^{E^*-B_f} e^{2\sqrt{a(E^*-B_f-K)}} dK$$

$$\sim e^{2\sqrt{a(E^*-B_f)}(1-\frac{K}{2(E^*-B_f)})} = e^{2\sqrt{a(E^*-B_f)}} e^{-\sqrt{\frac{a}{E^*-B_f}}K}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{E^*-B_f}{a}} e^{-2\sqrt{aE^*}} e^{2\sqrt{a(E^*-B_f)}} (1 - e^{-\sqrt{a(E^*-B_f)}})$$

$$\sim \sqrt{\frac{E^*}{a}} \sim e^{2\sqrt{aE^*}(1-\frac{B_f}{2E^*})} \sim 1$$

$$\sim \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{E^*}{a}} e^{-\sqrt{\frac{a}{E^*}}B_f} \rightarrow \Gamma_f = \frac{T}{2\pi} e^{-B_f/T}$$

V.M. Strutinsky: PLB47, 121 (1973)

$$\Gamma_f \rightarrow \frac{\hbar\omega_0}{T} \frac{T}{2\pi} e^{-B_f/T} = \frac{\hbar\omega_0}{2\pi} e^{-B_f/T}$$

(補足) $E^* \gg B_f$ で成り立つ近似式

$$\Gamma_f = \frac{1}{2\pi e^{2\sqrt{aE^*}}} \int_0^{E^*-B_f} e^{2\sqrt{a(E^*-B_f-K)}} dK \sim \frac{T}{2\pi} e^{-B_f/T} \rightarrow \frac{\hbar\omega_0}{2\pi} e^{-B_f/T}$$

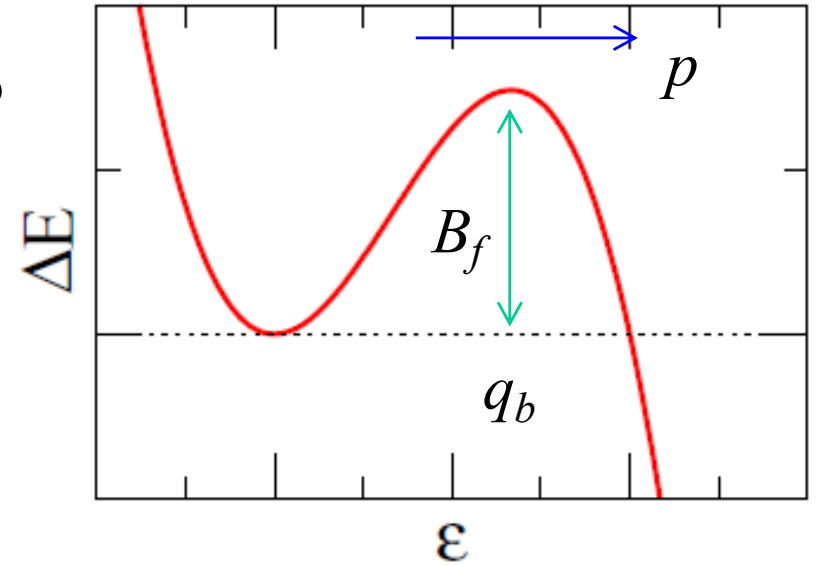
古典的な導出法: サドル点におけるフラックスを計算する

$$\Gamma = \frac{\int dp dq e^{-\beta(\frac{p^2}{2m} + V(q))} \delta(q - q_b) \frac{p}{m} \theta(p)}{\int dp dq e^{-\beta(\frac{p^2}{2m} + V(q))}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-\beta p^2/2m} = \sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}}, \quad \int_0^{\infty} dp p e^{-\beta p^2/2m} = \frac{m}{\beta},$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq e^{-\beta V(q)} \delta(q - q_b) = e^{-\beta B_f}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{-\beta V(q)} \sim \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{-\beta \frac{1}{2} m \omega_0^2 (q - q_0)^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{m\beta\omega_0^2}}$$

$$\rightarrow \Gamma_f = \frac{\hbar\omega_0}{2\pi} e^{-\beta B_f}$$



自由エネルギーとの関係

分配関数: $Z = \int dp dq e^{-\beta(\frac{p^2}{2m} + V(q))} = \sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}} \int dq e^{-\beta V(q)}$

$$\rightarrow \text{Im}F = \text{Im} \left(-\frac{\ln Z}{\beta} \right) = -\frac{\omega_0}{2\omega_b\beta} e^{-\beta B_f} \quad \longrightarrow \quad \Gamma = -\frac{\hbar\omega_b\beta}{\pi} \text{Im}F = -\frac{2}{\hbar} \frac{T_c}{T} \text{Im}F$$
$$\left(k_B T_c = \frac{\hbar\omega_b}{2\pi} \right)$$

自由エネルギーとの関係

分配関数: $Z = \int dp dq e^{-\beta(\frac{p^2}{2m} + V(q))} = \sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}} \int dq e^{-\beta V(q)}$

$q=q_0$ からの寄与: $\int_{-\infty}^{\infty} dq e^{-\beta V(q)} \sim \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{-\beta \frac{1}{2} m \omega_0^2 (q-q_0)^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{m\beta\omega_0^2}}$

$q=q_b$ からの寄与: $\int_{-\infty}^{\infty} dq e^{-\beta V(q)} \sim \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{-\beta(B_f - \frac{1}{2} m \omega_b^2 (q-q_b)^2)}$

複素 q へ解析接続 $= e^{-\beta B_f} \cdot i \int_0^{\infty} dq' e^{-\beta \frac{1}{2} m \omega_b^2 q'^2} = e^{-\beta B_f} \cdot \frac{i}{2} \sqrt{\frac{2\pi}{m\beta\omega_b^2}}$

$\rightarrow Z = \sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}} \left(\sqrt{\frac{2\pi}{m\beta\omega_0^2}} + \frac{i}{2} \sqrt{\frac{2\pi}{m\beta\omega_b^2}} e^{-\beta B_f} \right) = \frac{2\pi}{\beta\omega_0} \left(1 + \frac{i}{2} \frac{\omega_0}{\omega_b} e^{-\beta B_f} \right)$

$\left(k_B T_c = \frac{\hbar\omega_b}{2\pi} \right)$

$\rightarrow \text{Im} F = \text{Im} \left(-\frac{\ln Z}{\beta} \right) = -\frac{\omega_0}{2\omega_b\beta} e^{-\beta B_f} \rightarrow \Gamma = -\frac{\hbar\omega_b\beta}{\pi} \text{Im} F = -\frac{2}{\hbar} \frac{T_c}{T} \text{Im} F$

