

原子核集団現象への平均場アプローチ

第2回：平均場理論

日野原 伸生

筑波大学計算科学研究センター
原子核理論研究室



講義計画

- 1. イントロダクション
 - 平均ポテンシャルと一粒子運動・集団運動
 - 対相関
- 2. 平均場理論
 - Hartree-Fock, Hartree-Fock-Bogoliubov
 - 原子核密度汎関数理論
- 3. QRPA
 - RPA, QRPA
 - 線形応答理論
 - 有限振幅法
- 4. 大振幅集団運動の理論
 - ポソン展開法
 - 生成座標法
 - 時間依存Hartree-Fock-Bogoliubov
 - 自己無撞着集団座標法

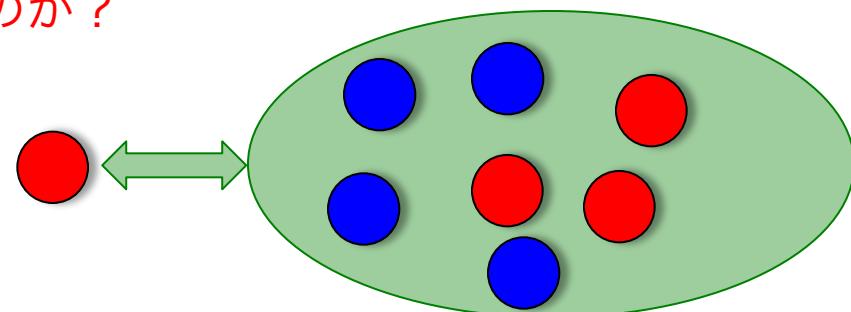
平均場理論とは

原子核はどんな形をしているか→平均ポテンシャルの形

平均ポテンシャルが核子の一粒子軌道を決める(調和振動子・Nilsson軌道など)

平均ポテンシャルはどのようにして決まるのか？

核子の配位(一粒子軌道)、密度で
平均ポテンシャルは決まる

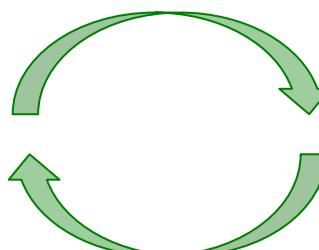


自己無撞着性(self-consistency)

平均ポテンシャル $\Gamma(r)$

核子の配位(一粒子軌道)・密度

平均ポテンシャル



原子核の有効相互作用(ハミルトニアン)

$$\hat{H} = \sum_{ij} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k$$

一体部分(運動エネルギー)

二体相互作用

第二量子化

第二量子化による記法

c_i, c_i^\dagger 既知の一粒子軌道iの粒子の生成・消滅演算子
(調和振動子の一粒子軌道と思ってよい)

反交換関係をみたす(フェルミ粒子) $\{c_i, c_j^\dagger\} \equiv c_i c_j^\dagger + c_j^\dagger c_i = \delta_{ij}$

一体場のみで対角的なHamiltonian $\{c_i, c_j\} = \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0$

$$\hat{H} = \sum_i e_i c_i^\dagger c_i \quad \longrightarrow \quad \text{一粒子軌道iのエネルギーは} e_i$$

一体系の場合

$$|k\rangle = c_k^\dagger |0\rangle \quad \begin{array}{l} \text{一粒子軌道kに粒子が入った状態は} \\ \text{一体場ハミルトニアンの固有状態} \end{array} \quad \hat{H}|k\rangle = e_k|k\rangle$$

原子核はフェルミ粒子の多体系

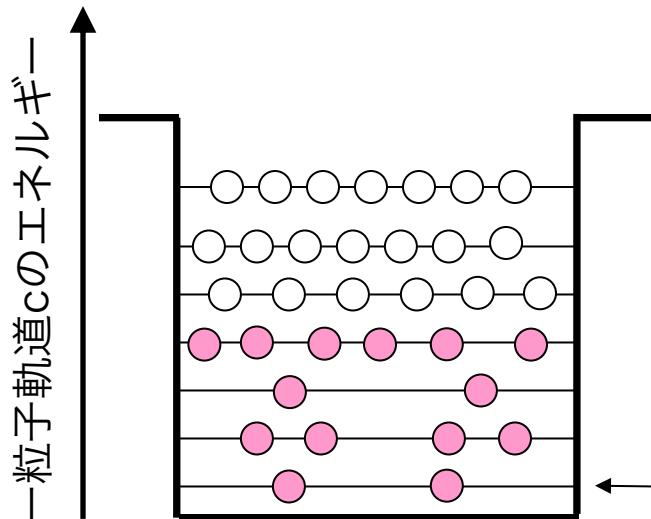
- 二粒子は同じ状態を取れない
- 粒子の入れ替えで波動関数の符号が変わる

Slater行列式 $|SD\rangle = \prod_{i=1}^A c_i^\dagger |0\rangle$

一粒子軌道1からAまでに粒子が入っている状態
 $|SD\rangle$ は一体場ハミルトニアンの固有状態

固有エネルギーは $\hat{H}|SD\rangle = \left(\sum_{i=1}^A e_i \right) |SD\rangle$

一粒子軌道i=1,2



第二量子化

非対角項がある一体場の場合 $\hat{H} = \sum_{ij} h_{ij} c_i^\dagger c_j$

一体系の場合 $|k\rangle = c_k^\dagger |0\rangle$ 一粒子軌道kに粒子が入った状態は固有状態ではない

線形結合をとって新しい一粒子軌道を考える(Dはユニタリ行列)

$$a_k^\dagger = \sum_l D_{lk} c_l^\dagger \quad \{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij} \quad \{a_i, a_j\} = \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0$$

Hamiltonianは軌道aについて対角的になるようにDを決める

$$\hat{H} = \sum_{ij} h_{ij} c_i^\dagger c_j = \sum_i e_i a_i^\dagger a_i$$

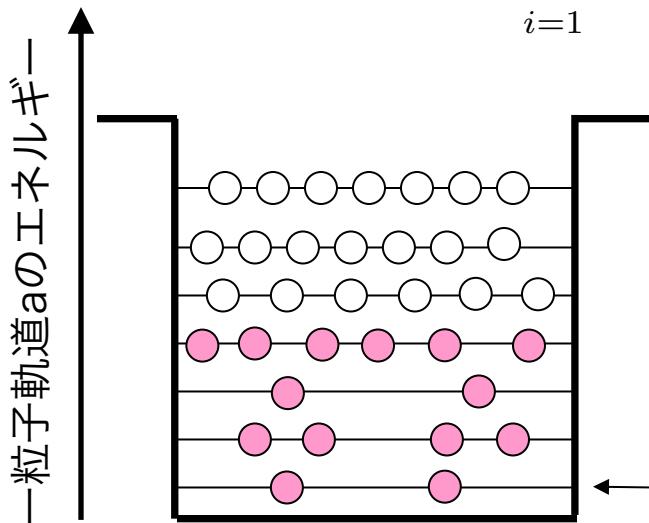
Slater行列式 $|SD\rangle = \prod_{i=1}^A a_i^\dagger |0\rangle$ ユニタリ行列Dは行列hを対角化することで得られる

$|SD\rangle$ は一体場ハミルトニアンの固有状態

固有エネルギーは

$$\hat{H}|SD\rangle = \left(\sum_{i=1}^A e_i \right) |SD\rangle$$

一粒子軌道i=1,2、ただし c ではなく a



Hartree-Fock

原子核の有効相互作用(Hamiltonian)

$$\hat{H} = \sum_{ij} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k$$

Slater行列式を使って一体場で近似

$$\hat{H}_{\text{HF}} = \sum_{ij} h_{ij} c_i^\dagger c_j$$

Slater行列式を使って
二体相互作用部分を計算

新しい一粒子軌道

$$a_k^\dagger = \sum_l D_{lk} c_l^\dagger \quad |\Phi_{\text{HF}}\rangle = \prod_{i=1}^A a_i^\dagger |0\rangle$$

HF エネルギー

$$\hat{H}_{\text{HF}} |\Phi_{\text{HF}}\rangle = \left(\sum_{i=1}^A e_i \right) |\Phi_{\text{HF}}\rangle$$

Hartree-Fock近似：波動関数をSlater行列式の形に限定することが近似二体相互作用の部分が一体場の平均ポテンシャルを与える

二体相互作用の計算

$$|\Phi_{\text{HF}}\rangle = \prod_{i=1}^A a_i^\dagger |0\rangle \quad \text{Hartree-Fock状態(Slater行列式)}$$

$$\langle \Phi_{\text{HF}} | \hat{H} | \Phi_{\text{HF}} \rangle = \sum_{ij} t_{ij} \langle \Phi_{\text{HF}} | c_i^\dagger c_j | \Phi_{\text{HF}} \rangle + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \langle \Phi_{\text{HF}} | c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k | \Phi_{\text{HF}} \rangle$$

1 体密度行列 $\rho_{ij} = \langle \Phi_{\text{HF}} | c_j^\dagger c_i | \Phi_{\text{HF}} \rangle = \sum_{i=1}^A D_{ik} D_{jk}^*$

$$\langle \Phi_{\text{HF}} | \hat{H} | \Phi_{\text{HF}} \rangle = \sum_{ij} t_{ij} \rho_{ji} + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} (\rho_{ki} \rho_{lj} - \rho_{kj} \rho_{li})$$

Hartree-Fock ポテンシャル $\Gamma_{ik} = \sum_{jl} \bar{v}_{ijkl} \rho_{lj}$

$$\langle \Phi_{\text{HF}} | \hat{H} | \Phi_{\text{HF}} \rangle = \sum_{ij} t_{ij} \rho_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{ik} \Gamma_{ik} \rho_{ki}$$

$$h_{ij} = \frac{\partial E_{\text{HF}}[\rho]}{\partial \rho_{ji}} = t_{ij} + \boxed{\Gamma_{ij}[\rho]} \quad \text{平均ポテンシャル}$$

$$\hat{H}_{\text{HF}} = \sum_{ij} h_{ij} c_i^\dagger c_j$$

HFエネルギー、HFポテンシャルは密度行列の汎関数

Wickの定理

Hartree-Fock法のアルゴリズム

インプット：有効相互作用、一粒子基底(調和振動子基底、座標基底など)
Slater行列式(ユニタリ行列D)の初期値

密度行列を計算 $\rho_{ij} = \sum_{i=1}^A D_{ik} D_{jk}^*$



Hartree-Fock ポテンシャルを計算

$$\Gamma_{ik} = \sum_{jl} \bar{v}_{ijkl} \rho_{lj}$$

Hartree-Fock Hamiltonianを対角化

$$h_{ij} = \frac{\partial E_{\text{HF}}[\rho]}{\partial \rho_{ji}} = t_{ij} + \Gamma_{ij}[\rho]$$

$$\sum_j h_{ij} D_{jk} = \varepsilon_k D_{ik}$$

ユニタリ行列Dを対角化より得る

- Hartree-Fockは自己無撞着(self-consistent)な方程式(反復法で解く)
- ベストな(最もエネルギーの低い)Slater行列式(あるいは一粒子軌道)を決定
- 初期値依存あり

座標表示Hartree-Fock方程式

Hartree-Fock方程式 $\sum_j h_{ij} D_{jk} = \varepsilon_k D_{ik}$ $\sum_j \left(t_{ij} + \sum_{ln} \sum_{m=1}^A \bar{v}_{injl} D_{lm} D_{nm}^* \right) D_{jk} = \varepsilon_k D_{ik}$

座標基底： $c_{\mathbf{r}}^\dagger |0\rangle = |\mathbf{r}\rangle$ $\{c_{\mathbf{r}}, c_{\mathbf{r}'}^\dagger\} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ $\{c_{\mathbf{r}}, c_{\mathbf{r}'}\} = \{c_{\mathbf{r}}^\dagger, c_{\mathbf{r}'}^\dagger\} = 0$

座標空間でのHartree-Fock方程式(簡単のためスピン・アイソスピンの自由度を無視)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi_k(\mathbf{r}) + \sum_{j=1}^A \int d\mathbf{r}' v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_j^*(\mathbf{r}') [\varphi_j(\mathbf{r}') \varphi_k(\mathbf{r}) - \varphi_j(\mathbf{r}) \varphi_k(\mathbf{r}')] = \varepsilon_k \varphi_k(\mathbf{r})$$

Hartreeポテンシャル

$$\Gamma_H(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sum_{j=1}^A |\varphi_j(\mathbf{r}')|^2 = \int d\mathbf{r}' v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}')$$

Fockポテンシャル

$$\Gamma_F(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sum_{j=1}^A \varphi_j^*(\mathbf{r}') \varphi_j(\mathbf{r}) = -v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$$

Hartree-Fock方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \Gamma_H(\mathbf{r}) \right) \varphi_k(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \Gamma_F(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_k(\mathbf{r}') = \varepsilon_k \varphi_k(\mathbf{r})$$

有効相互作用

簡単な相互作用：四重極力

原子核で最も重要な相関は四重極相関(変形)。これをモデル化

$$\hat{H}_{QQ} = -\frac{\chi}{2} \sum_{\mu=-2}^2 \hat{Q}_{2\mu}^\dagger \hat{Q}_{2\mu} \quad \hat{Q}_{2\mu} = \sum_{ij} \langle i | r^2 Y_{2\mu} | j \rangle c_i^\dagger c_j \quad c_i \text{は調和振動子基底}$$

現実的なものでよく使われているもの

- Skyrme型有効相互作用(ゼロレンジ)
- Gogny型有効相互作用(有限レンジ)
- 相対論的平均場理論

特に原子核を記述するうえで不可欠な項は

- ・スピン一軌道力：魔法数を再現するのに不可欠
- ・密度依存力：状態方程式を出すのに不可欠

有効相互作用のパラメターは原子核・核物質の性質に合わせて調整

Gogny力

$$\hat{v}_{\text{Gogny}}(\mathbf{r}_{12}) = \sum_{i=1}^2 e^{-(\mathbf{r}_{12}/\mu_j)^2} (W_j + B_j \hat{P}_\sigma - H_j \hat{P}_\tau - M_j \hat{P}_\sigma \hat{P}_\tau)$$
$$\mathbf{r}_{12} \equiv \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \quad \hat{k} = -\frac{i}{2}(\nabla_1 - \nabla_2)$$
$$\hat{P}_\sigma = \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) \quad \hat{P}_\tau = \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2)$$
$$+ t_3(1 + x_0 \hat{P}_\sigma) \delta(\mathbf{r}_{12}) \rho^\alpha \left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right)$$
$$+ i W_{ls} (\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2) \cdot \hat{k}^\dagger \times \delta(\mathbf{r}_{12}) \hat{k}$$

パラメター D1S (Decharge and Gogny, 1980), D1M (Goriely, et al., 2009)など

有効相互作用

Skyrme力

$$\begin{aligned}\hat{v}_{\text{Skyrme}}(\mathbf{r}_{12}) = & t_0(1 + x_0 \hat{P}_\sigma) \delta(\mathbf{r}_{12}) + \frac{1}{2} t_1(1 + x_1 \hat{P}_\sigma) [\hat{\mathbf{k}}'^2 + \hat{\mathbf{k}}^2] \delta(\mathbf{r}_{12}) \\ & + t_2(1 + x_2 \hat{P}_\sigma) \hat{\mathbf{k}}'^* \cdot \hat{\mathbf{k}} \delta(\mathbf{r}_{12}) + \frac{1}{6} t_3(1 + x_3 \hat{P}_\sigma) \delta(\mathbf{r}_{12}) \rho^\alpha \left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right) \\ & + iW_0(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2) \cdot [\hat{\mathbf{k}}'^* \times \hat{\mathbf{k}}] \delta(\mathbf{r}_{12}) \quad \text{スピンー軌道力} \quad \text{密度依存項} \\ & + \frac{1}{2} t_e [\hat{\mathbf{k}}'^* \cdot \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}}'^* + \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}}] \delta(\mathbf{r}_{12}) + t_o \hat{\mathbf{k}}'^* \cdot \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}} \delta(\mathbf{r}_{12}) \quad \text{テンソル力}\end{aligned}$$

$$\mathbf{r}_{12} \equiv \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \quad \hat{\mathbf{k}} = -\frac{i}{2}(\nabla_1 - \nabla_2) \quad \hat{\mathbf{k}}' = -\frac{i}{2}(\nabla'_1 - \nabla'_2)$$

$$\hat{P}_\sigma = \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) \quad \hat{P}_\tau = \frac{1}{2}(1 + \tau_1 \cdot \tau_2) \quad \hat{\mathbf{S}}^{ab} = \frac{3}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1^a \boldsymbol{\sigma}_2^b + \boldsymbol{\sigma}_1^b \boldsymbol{\sigma}_2^a) - \delta_{ab} \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2$$

パラメター

- SIII (Beiner et al., 1975)
- SkM* (Bartel et al., 1982)
- SkP (Dobaczewski et al., 1984)
- SLy4 (Chabanat et al., 1998)
- SVmin(Klupfel et al., 2009)
- UNEDF (Kortelainen et al., 2010-)

Hartree-Fockと対称性

対称性 : Hamiltonian演算子と交換する演算子で表される $[\hat{H}, \hat{S}] = 0$

多体問題の厳密解では対称性は保たれる(エネルギーと対称性の同時固有状態)

$$\hat{H} = \sum_{ij} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k$$

Hartree-Fock(平均場近似) : 二体相互作用部分をSlater行列式を使って近似

Slater行列式に厳密解が持つべき対称性を課すべきか？

原子核の有効相互作用ではJ=2の四重極相関が重要(引力)

$$-\frac{\chi}{2} \hat{Q}^\dagger \hat{Q} \sim -\frac{\chi}{2} \sum_{ijkl} r^2 Y_2(ij) r^2 Y_2(kl) [[c_i^\dagger c_j]^{J=2} [c_k^\dagger c_l]^{J=2}]^{J=0}$$

Slater行列式に回転対称性を課すとSlater行列式は角運動量の固有状態

Hartree項J=2の行列要素はゼロになる $\langle J=0 | [c_i^\dagger c_j]^{J=2} | J=0 \rangle$

対称性を破ると(この場合は回転対称性を破って変形すると)相関がとりこめる

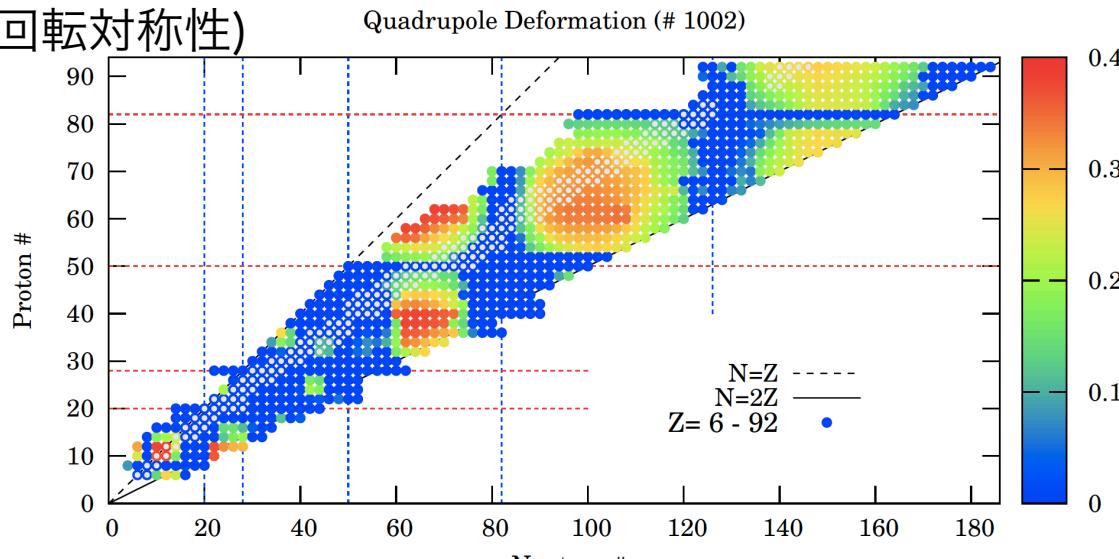
$$|\Phi_{\text{def.HF}}\rangle = c(0)|J=0\rangle + c(2)|J=2\rangle + c(4)|J=4\rangle + \dots$$

$$\langle \Phi_{\text{def.HF}} | [c_i^\dagger c_j]^{J=2} | \Phi_{\text{def.HF}} \rangle \neq 0$$

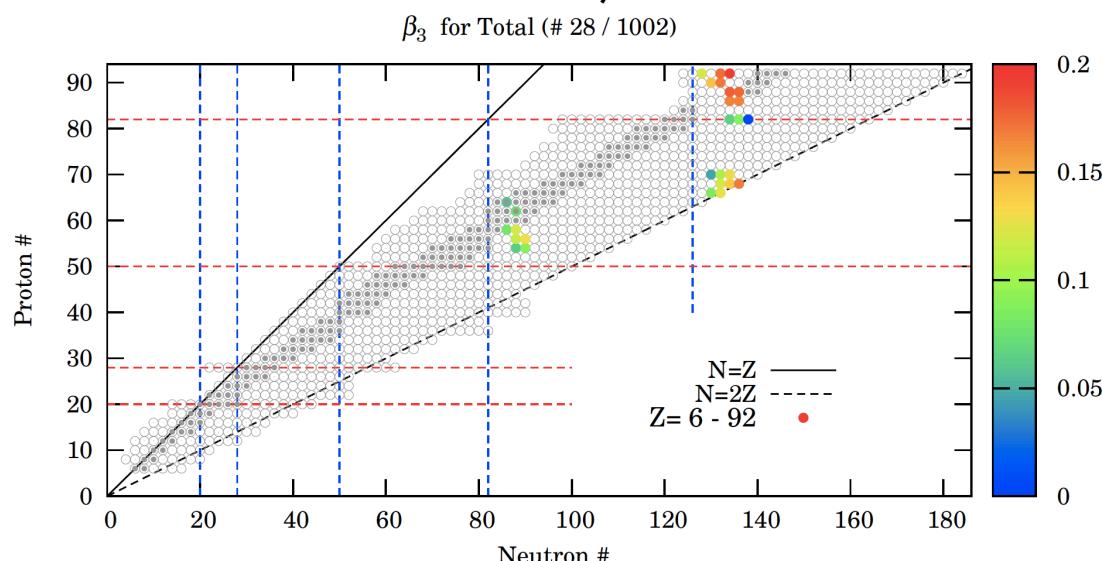
Slater行列式の範囲内(平均場近似)で四重極相関を記述するためには
回転対称性を破ることが本質的

Hartree-Fock計算で破れる対称性

四重極変形(回転対称性)



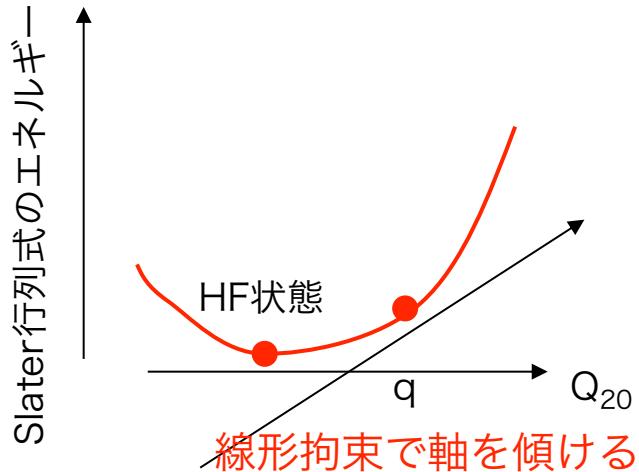
八重極変形(回転対称性 + パリティ対称性)



拘束付きHartree-Fock

Hartree-Fock: ある系(原子核)で最低エネルギーのSlater行列式(平均場)を求める
変形度を変えたときのエネルギーの振る舞いは? ($E(\beta)$)

線形拘束(linear constraint)



$$\hat{H} \rightarrow \hat{H} - \lambda \hat{Q}$$

λ : Lagrange未定定数

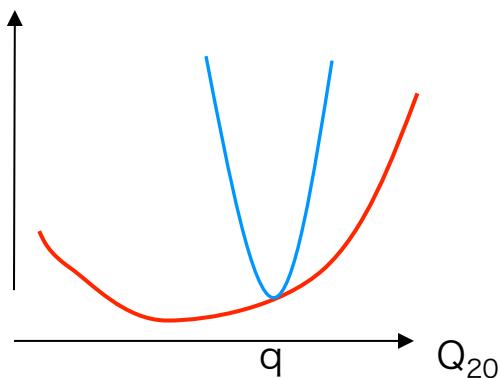
Q : 拘束する変形などの演算子(四重極変形 Q_{20} など)

$$\text{拘束条件 } \langle \Phi_{\text{CHF}} | \hat{Q}_{20} | \Phi_{\text{CHF}} \rangle = q$$

を満たすように λ は反復ごとに決定

解では拘束条件が満たされる。
収束させるのが難しいことがある

二次拘束(quadratic constraint)



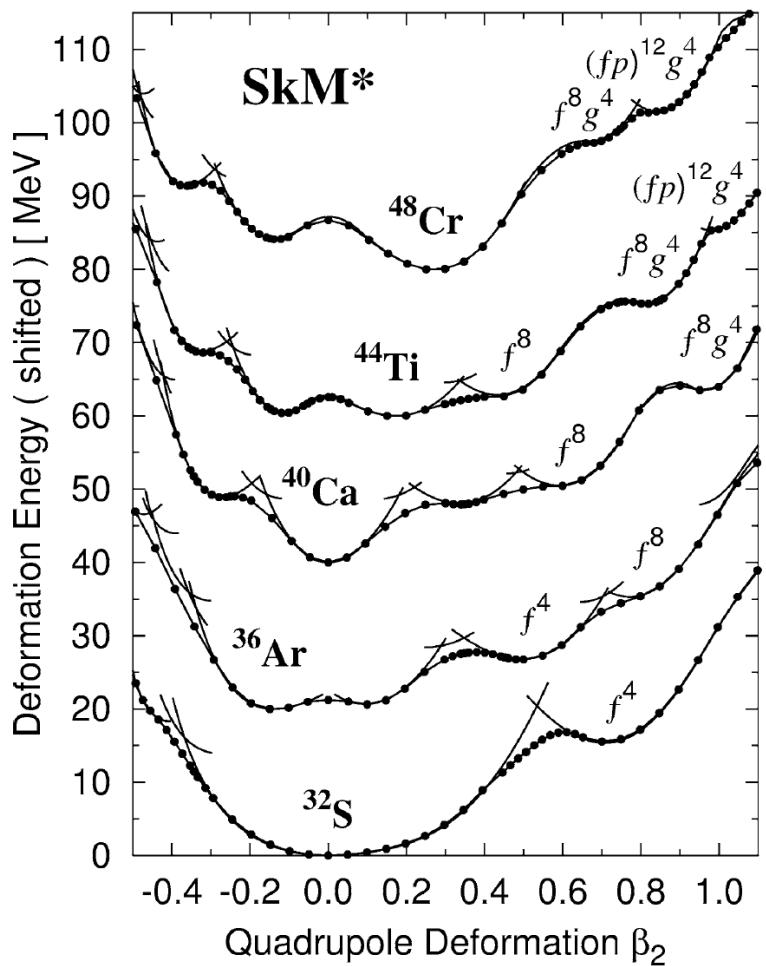
$$\hat{H} \rightarrow \hat{H} + \frac{1}{2} C (\langle \hat{Q} \rangle - q)^2$$

q を中心として二次の拘束ポテンシャルを追加
収束した状態の変形度は q から少しずれる

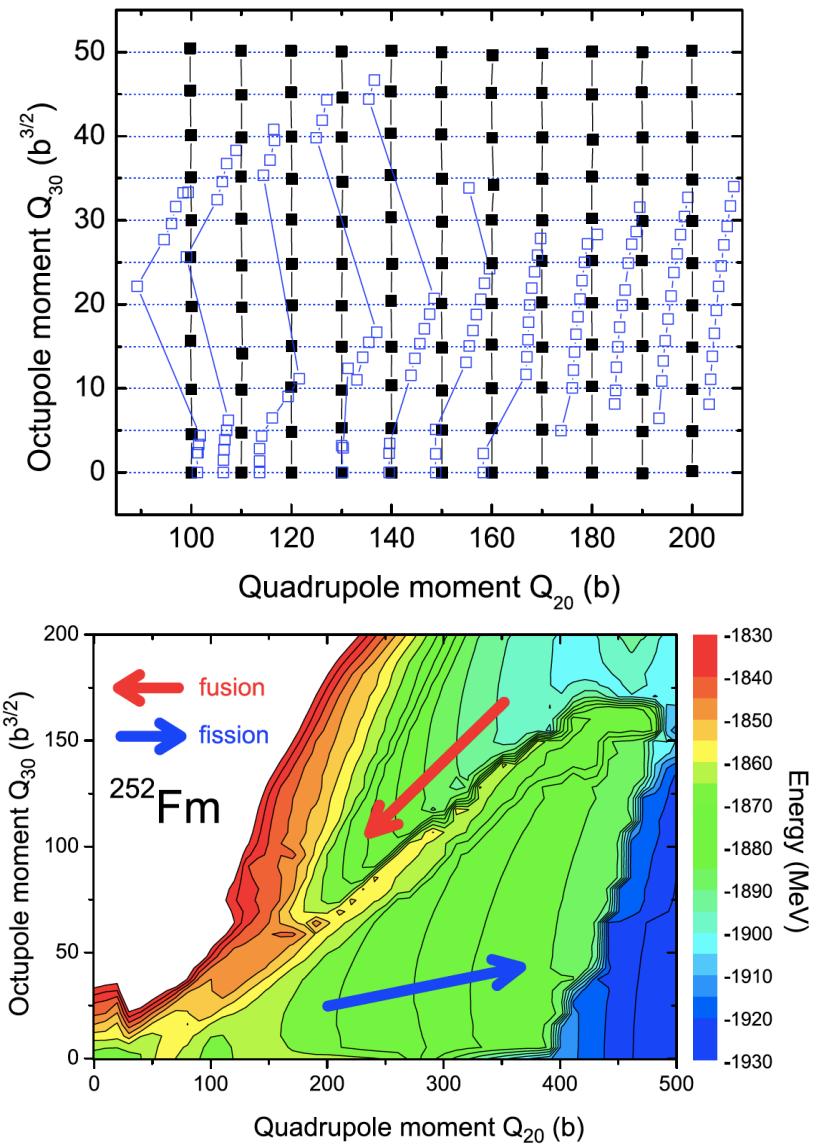
Augmented Lagrange method

線形拘束と二次拘束を組み合わせたもの

拘束付きHartree-Fock計算例



quadratic constrained Skyrme HF計算
Inakura, et al., Nucl. Phys. A 710 (2002) 261.



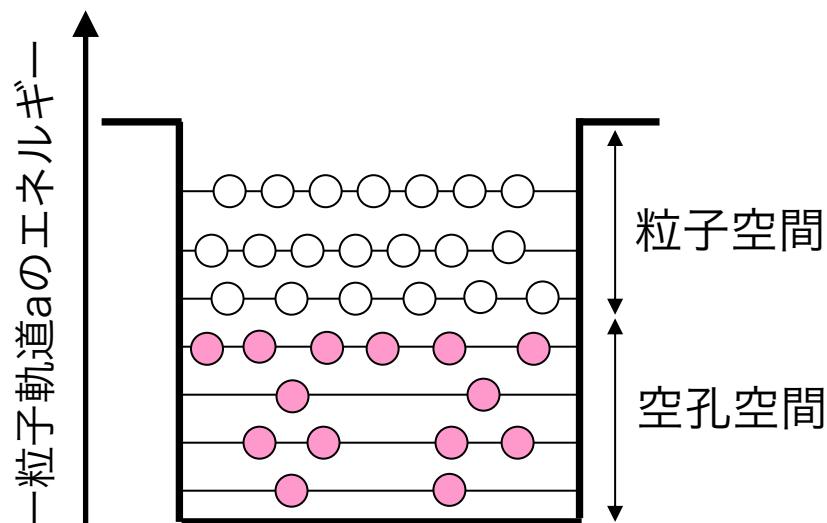
quadratic/Augmented Lagrange method (HFB)計算
Staszczak et al., Eur. Phys. J. A 46, 85 (2010)

Hartree-Fock状態と真空

Hartree-Fock状態

$$|\Phi_{\text{HF}}\rangle = \prod_{i=1}^A a_i^\dagger |0\rangle$$

Hartree-Fock軌道にA個粒子が詰まった状態



粒子・空孔演算子

$$a_i^\dagger = \begin{cases} d_i^\dagger & (i > A) \\ b_i & (1 \leq i \leq A) \end{cases}$$

d: 粒子演算子。粒子空間に粒子を生成
b: 空孔演算子。空孔空間に空孔を生成

Hartree-Fock状態は粒子・空孔演算子に関して真空

真空：消滅演算子を作用させたときにゼロとなる状態

$$d_i |\Phi_{\text{HF}}\rangle = 0 \quad b_i |\Phi_{\text{HF}}\rangle = 0$$

$$\hat{h}_{\text{HF}} = E_{\text{HF}} + \sum_p \varepsilon_p d_p^\dagger d_p - \sum_h \varepsilon_h b_h^\dagger b_h$$

対相関と対称性

対相関 : $J=0$ に組んだ粒子対による強い引力(单極子対相関)

$$-G \hat{P}^\dagger \hat{P} \sim -G \sum_{ij} \left[[c_i^\dagger c_{\bar{i}}^\dagger]^{J=0} [c_j^- c_j^+]^{J=0} \right]^{J=0}$$

相関の主要な項(時間反転状態との対)は
対称性(粒子数保存)を保ったSlater行列式では拾えない

$$\langle A | [c_i^\dagger c_{\bar{i}}^\dagger]^{J=0} | A \rangle \quad |A\rangle: \text{粒子数演算子の固有状態}$$

$c+c+$ は粒子数を2変えるので期待値はゼロになる

対称性を破るSlater行列式を考えるとこの相関を取り込める

$$|\Phi_{\text{HFB}}\rangle = \cdots + c(A-4)|A-4\rangle + c(A-2)|A-2\rangle + c(A)|A\rangle + c(A+2)|A+2\rangle + c(A+4)|A+4\rangle + \cdots$$

$$\langle \Phi_{\text{HFB}} | [c_i^\dagger c_{\bar{i}}^\dagger]^{J=0} | \Phi_{\text{HFB}} \rangle \neq 0$$

HFB状態 : 粒子数ゲージ空間での"変形"状態に対応

Slater行列式の範囲内(平均場近似)で対相関を記述するためには
粒子数に関する対称性を破ることが本質的

Bogoliubov準粒子

HF状態を作る変換は粒子数を保存 $a_k^\dagger = \sum_l D_{lk} c_l^\dagger$

HF状態：粒子・空孔演算子の真空 $d_i |\Phi_{\text{HF}}\rangle = 0$ $b_i |\Phi_{\text{HF}}\rangle = 0$

対相関をどうやって一体場に取り込むか？

“粒子”の概念を拡張 $\alpha_i^\dagger = u_i a_i^\dagger - v_i a_{\bar{i}}^\dagger$ Bogoliubov変換 $u_i^2 + v_i^2 = 1$

Bogoliubov準粒子 $\alpha_{\bar{i}}^\dagger = u_i a_{\bar{i}}^\dagger + v_i a_i^\dagger$ 粒子の生成・消滅演算子の
線形結合で準粒子を定義

準粒子も同じ反交換関係を満たす $\{\alpha_i, \alpha_j^\dagger\} = \delta_{ij}$ $\{\alpha_i, \alpha_j\} = \{\alpha_i^\dagger, \alpha_j^\dagger\} = 0$

BCS(HFB)状態：準粒子の真空

$$\alpha_\mu |\Phi_{\text{BCS}}\rangle = 0$$



$$|\Phi_{\text{BCS}}\rangle = \prod_i \alpha_i \alpha_{\bar{i}} |0\rangle$$

$|0\rangle$ は粒子の真空

$$c_i |0\rangle = 0$$

$$|\Phi_{\text{BCS}}\rangle = \prod_i \alpha_i \alpha_{\bar{i}} |0\rangle = \prod_i (u_i + v_i a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger) |0\rangle \quad (\text{BCS form})$$

HF軌道対(i)に対して

粒子が入っていない成分(u_i)と2粒子が入っている成分(v_i)の重ね合わせ

u_i^2 :非占有確率 v_i^2 :占有確率

HF+BCS

二体相互作用項をWickの定理で分解

$$\frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \langle \Phi_{\text{HFB}} | c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k | \Phi_{\text{HFB}} \rangle = \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} (\rho_{ki}\rho_{lj} - \rho_{kj}\rho_{li} + \kappa_{ij}^* \kappa_{kl}) \quad \text{対ポテンシャル}$$

対密度 $\kappa_{ij} = \langle \Phi_{\text{HFB}} | c_j c_i | \Phi_{\text{HFB}} \rangle$ Hartree-Fockポテンシャル
(a,a+を決めるときに取り込まれている)

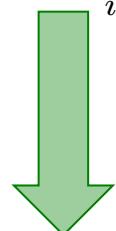
対ポテンシャルはHF基底で対角的と仮定(BCS, Bardeen Cooper Schrieffer)
対相互作用はparticle-hole相互作用とは別のものを使うことが多い(Skyrme)

$$\hat{H} = \sum_i \varepsilon_i a_i^\dagger a_i + \sum_{ij>0} \bar{v}_{i\bar{i}j\bar{j}}^{\text{pair}} a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger a_{\bar{j}} a_j$$

一体場で近似(BCSハミルトニアン)

$$\hat{h}_{\text{BCS}} = \sum_i \varepsilon_i a_i^\dagger a_i + \sum_{i>0} \Delta_{i\bar{i}}^* a_{\bar{i}} a_i + \Delta_{i\bar{i}} a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger$$

Bogoliubov変換



$$\begin{aligned} \alpha_i^\dagger &= u_i a_i^\dagger - v_i a_{\bar{i}} \\ \alpha_{\bar{i}}^\dagger &= u_i a_{\bar{i}}^\dagger + v_i a_i \end{aligned}$$

$$\hat{h}_{\text{BCS}} = \langle \Phi_{\text{BCS}} | \hat{h}_{\text{BCS}} | \Phi_{\text{BCS}} \rangle + \sum_i E_i \alpha_i^\dagger \alpha_i$$

BCS状態のエネルギー E_i : 準粒子エネルギー

対ポテンシャル

$$\Delta_{i\bar{i}} = \sum_{j>0} \bar{v}_{i\bar{i}j\bar{j}}^{\text{pair}} \langle a_{\bar{j}} a_j \rangle = - \sum_{j>0} \bar{v}_{i\bar{i}j\bar{j}}^{\text{pair}} u_j v_j$$

相互作用がi,jによらない場合は定数になる

$$\begin{aligned} \bar{v}_{i\bar{i}j\bar{j}}^{\text{pair}} &= -G \\ \Delta &= G \sum_{j>0} u_j v_j \end{aligned}$$

$\alpha + \alpha +$ や $\alpha \alpha$ の項(危険な項)が消滅するようにBogoliubov変換を選ぶ

HF+BCS

BCS：粒子数を保存しないため粒子数の平均を拘束する必要がある

$$\hat{h}'_{\text{BCS}} = \hat{h}_{\text{BCS}} - \lambda \hat{N} = \sum_{i>0} (\varepsilon_i - \lambda)(a_i^\dagger a_i + a_{\bar{i}}^\dagger a_{\bar{i}}) + \sum_{i>0} \Delta_{i\bar{i}}^* a_{\bar{i}} a_i + \Delta_{i\bar{i}} a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger$$

BCS Hamiltonianを準粒子で書いたとき $\alpha + \alpha +$ 、 $\alpha \alpha$ の項がない



2x2の固有値問題

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_i - \lambda & \Delta_{i\bar{i}} \\ -\Delta_{i\bar{i}} & \varepsilon_i - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_i \\ v_i \end{pmatrix} = E_i \begin{pmatrix} u_i \\ v_i \end{pmatrix}$$

非占有率 $u_i^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\varepsilon_i - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_i - \lambda)^2 + \Delta_i^2}} \right]$

占有率 $v_i^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\varepsilon_i - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_i - \lambda)^2 + \Delta_i^2}} \right]$

$$u_i^2 + v_i^2 = 1$$

準粒子のエネルギー $E_i = \sqrt{(\varepsilon_i - \lambda)^2 + \Delta_i^2}$

λ は粒子数の平均値の拘束条件 $\langle \Phi_{\text{BCS}} | \hat{N} | \Phi_{\text{BCS}} \rangle = 2 \sum_i v_i^2 = N_0$

を満たすように反復ごとに決定

BCSの計算アルゴリズム

HF方程式を解く(HF軌道が求まる)

Δ_i に初期値を設定

粒子数拘束条件 $\langle \Phi_{\text{BCS}} | \hat{N} | \Phi_{\text{BCS}} \rangle = 2 \sum_i v_i^2 = N_0$

を満たすように λ を決定

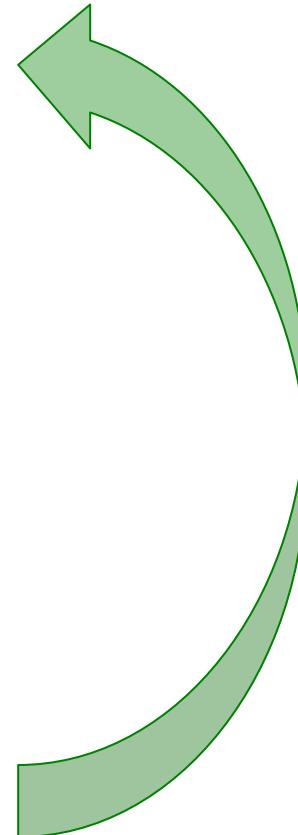
u,v(波動関数)を計算

$$u_i^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\varepsilon_i - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_i - \lambda)^2 + \Delta_i^2}} \right]$$

$$v_i^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\varepsilon_i - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_i - \lambda)^2 + \Delta_i^2}} \right]$$

Δ_i をアップデート

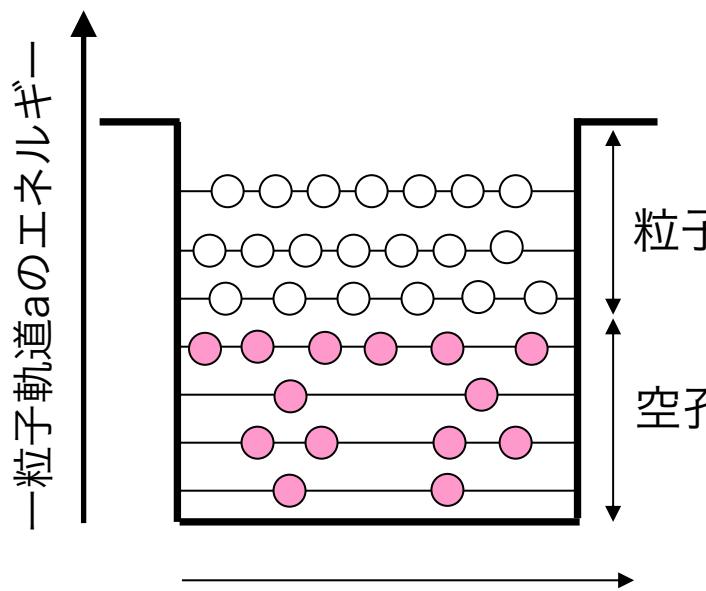
$$\Delta_{i\bar{i}} = \sum_{j>0} \bar{v}_{i\bar{i}j\bar{j}}^{\text{pair}} \langle a_{\bar{j}} a_j \rangle = - \sum_{j>0} \bar{v}_{i\bar{i}j\bar{j}}^{\text{pair}} u_j v_j$$



BCS状態

$$|\Phi_{\text{HF}}\rangle = \prod_{i=1}^A a_i^\dagger |0\rangle$$

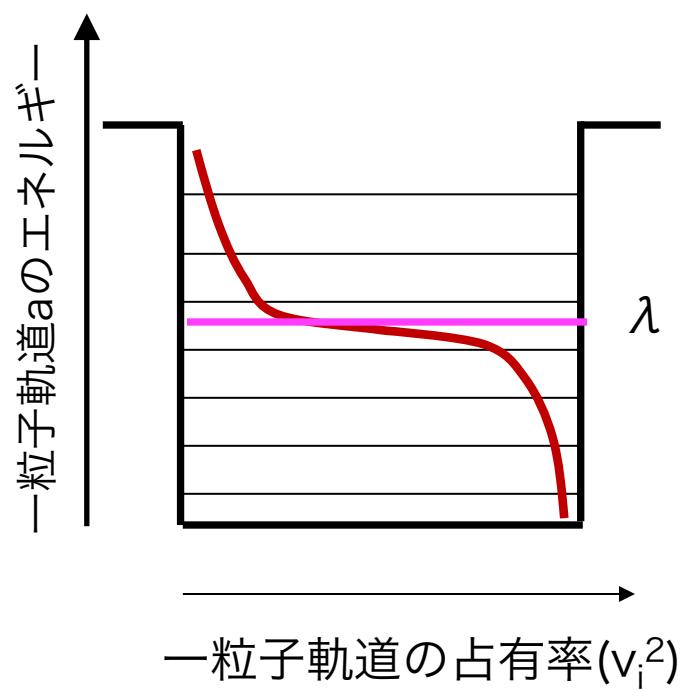
Hartree-Fock状態



Hartree-Fock状態では
エネルギーの低い順に軌道に粒子を詰める
占有率は1(空孔空間)か0(粒子空間)

$$|\Phi_{\text{BCS}}\rangle = \prod_i \alpha_i \alpha_{\bar{i}} |0\rangle = \prod_i (u_i + v_i a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger) |0\rangle$$

BCS(HFB)状態



BCS状態では
すべての一粒子軌道は部分占有

HFBとBogoliubov変換

HF+BCS: 対相関はHF軌道の性質を変えない

HFB(Hartree-Fock-Bogoliubov)

HF部分と対相関部分をまとめて解く

Bogoliubov変換 $\alpha_\mu^\dagger = \sum_k U_{k\mu} c_k^\dagger + V_{k\mu} c_k$ c: 基底の生成消滅演算子

$$\begin{pmatrix} \alpha_\mu \\ \alpha_\mu^\dagger \end{pmatrix} = \sum_k \begin{pmatrix} U^\dagger & V^\dagger \\ V^T & U^T \end{pmatrix}_{\mu k} \begin{pmatrix} c_k \\ c_k^\dagger \end{pmatrix}$$

ユニタリ行列 $\mathcal{W} = \begin{pmatrix} U & V^* \\ V & U^* \end{pmatrix}$

$$\mathcal{W}\mathcal{W}^\dagger = \mathcal{W}^\dagger\mathcal{W} = 1$$



$$U^\dagger U + V^\dagger V = 1, \quad UU^\dagger + V^*V^T = 1$$
$$U^T V + V^T U = 0, \quad UV^\dagger + V^*U^T = 0$$

Bloch-Messiahの定理

ユニタリ行列Wは左の形に分解できる

$$W = \begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & D^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{U} & \bar{V} \\ \bar{V} & \bar{U} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C & 0 \\ 0 & C^* \end{pmatrix}$$

D, Cはユニタリ行列

$$U = D\bar{U}C, \quad V = D^*\bar{V}C$$

$$\bar{U} = \begin{pmatrix} u_1 & 0 & & & \\ 0 & u_1 & & & \\ & & u_2 & 0 & \\ & & 0 & u_2 & \\ & & & \ddots & \\ & & & & u_n & 0 \\ & & & & 0 & u_n \end{pmatrix}$$

$$\bar{V} = \begin{pmatrix} 0 & v_1 & & & \\ -v_1 & 0 & & & \\ & & 0 & v_2 & \\ & & -v_2 & 0 & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 0 & v_n \\ & & & & -v_n & 0 \end{pmatrix}$$

Bloch-Messiahの定理によるとBogoliubov変換は3つの部分に分けられる

$$(c, c^\dagger) \xrightarrow[D]{\bar{U}, \bar{V}} (a, a^\dagger) \xrightarrow{\bar{U}, \bar{V}} (\beta, \beta^\dagger) \xrightarrow[C]{\bar{U}, \bar{V}} (\alpha, \alpha^\dagger)$$

基底 正準基底 準粒子 準粒子の組み換え
(調和振動子など)

変換DはHFで行ってきたようなもの。正準基底→準粒子はBCS

変換Cは状態は変えないが($\beta |HFB\rangle = \alpha |HFB\rangle = 0$)

HFB Hamiltonianの準粒子エネルギー部分の対角化に必要

HFB方程式

$$\hat{H} = \sum_{ij} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k$$

一体場Hamiltonianで近似(粒子数に関する線形拘束も追加)

$$\text{HFポテンシャル} \quad \Gamma_{ij}[\rho] = \sum_{kl} \bar{v}_{ikjl} \rho_{lk} \quad \rho_{ij} = \langle \Phi_{\text{HFB}} | c_j^\dagger c_i | \Phi_{\text{HFB}} \rangle$$

$$\text{対ポテンシャル} \quad \Delta_{ij}[\kappa] = \frac{1}{2} \sum_{kl} \bar{v}_{ijkl} \kappa_{kl} \quad \kappa_{ij} = \langle \Phi_{\text{HFB}} | c_j c_i | \Phi_{\text{HFB}} \rangle$$

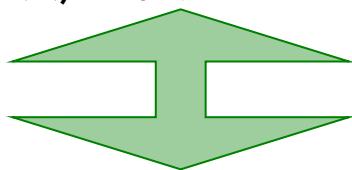
$$\hat{h}_{\text{HFB}} = \hat{h} - \lambda \hat{N} = \sum_{ij} \left[(t_{ij} + \Gamma_{ij}[\rho] - \delta_{ij} \lambda) c_i^\dagger c_j + \Delta_{ij}[\kappa] c_i^\dagger c_j^\dagger + \Delta_{ij}^*[\kappa] c_j c_i \right]$$

$$\text{Bogoliubov変換} \quad \begin{pmatrix} \alpha_\mu \\ \alpha_\mu^\dagger \end{pmatrix} = \sum_k \begin{pmatrix} U^\dagger & V^\dagger \\ V^T & U^T \end{pmatrix}_{\mu k} \begin{pmatrix} c_k \\ c_k^\dagger \end{pmatrix}$$

HFB状態のエネルギー Ei: 準粒子エネルギー

$$\hat{h}_{\text{HFB}} = \langle \Phi_{\text{HFB}} | \hat{h}_{\text{HFB}} | \Phi_{\text{HFB}} \rangle + \sum_{\mu>0} \left(E_\mu \alpha_\mu^\dagger \alpha_\mu + E_{\bar{\mu}} \alpha_{\bar{\mu}}^\dagger \alpha_{\bar{\mu}} \right)$$

$\alpha + \alpha +$ や $\alpha \alpha$ の項(危険な項)が消滅するようにBogoliubov変換を選ぶ



$$\text{HFB方程式} \quad \begin{pmatrix} h - \lambda & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_\mu \\ V_\mu \end{pmatrix} = E_\mu \begin{pmatrix} U_\mu \\ V_\mu \end{pmatrix}$$

HFB方程式を解くアルゴリズム

ρ 、 κ 行列に初期値を設定

HF, 対ポテンシャルを計算 $\Gamma_{ij}[\rho] = \sum_{kl} \bar{v}_{ikjl} \rho_{lk}$ $\Delta_{ij}[\kappa] = \frac{1}{2} \sum_{kl} \bar{v}_{ijkl} \kappa_{kl}$

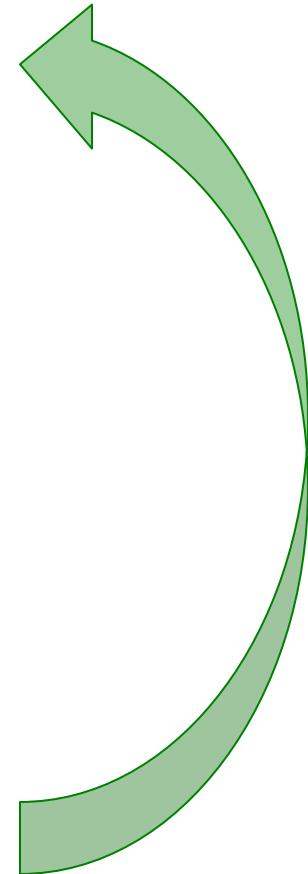
粒子数拘束条件 $\langle \Phi_{\text{HFB}} | \hat{N} | \Phi_{\text{HFB}} \rangle = 2 \sum_{k,\mu>0} V_{k\mu}^* V_{k\mu} = N_0$
を満たすようにHFB方程式の λ を決定

$$\begin{pmatrix} t + \Gamma[\rho] - \lambda & \Delta[\kappa] \\ -\Delta^*[\kappa] & -t^* - \Gamma^*[\rho] + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_\mu \\ V_\mu \end{pmatrix} = E_\mu \begin{pmatrix} U_\mu \\ V_\mu \end{pmatrix}$$

U, V (固有ベクトル)を使って粒子密度、対密度をアップデート

$$\rho_{ij} = \langle \Phi_{\text{HFB}} | c_j^\dagger c_i | \Phi_{\text{HFB}} \rangle = \sum_{\mu>0} (V_{i\mu}^* V_{j\mu} + V_{i\bar{\mu}}^* V_{j\bar{\mu}})$$

$$\kappa_{ij} = \langle \Phi_{\text{HFB}} | c_j c_i | \Phi_{\text{HFB}} \rangle = \sum_{\mu>0} (V_{i\mu}^* U_{j\mu} + V_{i\bar{\mu}}^* U_{j\bar{\mu}})$$



HFB方程式の性質

$$\begin{pmatrix} h - \lambda & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_\mu \\ V_\mu \end{pmatrix} = E_\mu \begin{pmatrix} U_\mu \\ V_\mu \end{pmatrix}$$

(U, V) , E が解であれば (V^*, U^*) , $-E$ も解

$$\begin{pmatrix} h - \lambda & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_\mu & V_\mu^* \\ V_\mu & U_\mu^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_\mu & V_\mu^* \\ V_\mu & U_\mu^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_\mu & 0 \\ 0 & -E_\mu \end{pmatrix}$$

準粒子 α と $\alpha+$ を入れ替える対称性に対応

対相互作用

単極子対相関力

$$\hat{V}_0^{\text{pair}} = -G_0 \hat{P}_0^\dagger \hat{P}_0$$

$$\hat{P}_0^\dagger = \sum_{i>0} c_i^\dagger c_{\bar{i}}^\dagger$$

四重極対相関力

$$\hat{V}_2^{\text{pair}} = -G_2 \sum_{\mu=-2}^2 \hat{P}_{2\mu}^\dagger \hat{P}_{2\mu}$$

$$\hat{P}_{2\mu}^\dagger = \sum_{ij} \langle i | r^2 Y_{2\mu} | j \rangle c_i^\dagger c_j^\dagger$$

Gogny：同じGogny型有効相互作用から対ポテンシャルを導出

Skyrme: 対ポテンシャルは以下の形のデルタ型対相互作用から導出することが多い
(SkPを除く)

$$\hat{v}_{\text{pair}}(\mathbf{r}_{12}) = \frac{V_0}{2} (1 - \hat{P}_\sigma) \left[1 - \eta \left(\frac{\rho_0(\mathbf{r})}{\rho_c} \right)^\beta \right] \delta(\mathbf{r}_{12})$$

密度依存

$\eta=0$: volume pairing

$\eta=1$: surface pairing

$\eta=0.5$: mixed pairing

ゼロレンジの対相関は一粒子空間を増やすと発散：準粒子エネルギーなどにcutoffを導入
有限レンジでは収束する

密度汎関数理論(density functional theory)

Hohenberg-Kohnの定理

基底状態のエネルギー(やその他の観測量)は(核子の)密度の汎関数で書ける

$$E[\rho] \quad \rho(\mathbf{r}) \leftrightarrow |\Psi\rangle \leftrightarrow v(\mathbf{r}) \quad \text{密度から相互作用が決定できる}$$

エネルギー汎関数を最小にする密度は基底状態の密度

$$\delta \left\{ E[\rho] - \mu \left[\int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) - N \right] \right\} = 0 \quad E_{\text{gs}} = \min_{\rho} E[\rho]$$

Kohn-Shamの定理

$$E[\rho] = T_s[\rho] + (E[\rho] - T_s[\rho]) = T_s[\rho] + V[\rho]$$

相互作用する系の密度は一体ポテンシャル中の自由粒子系の密度として計算できる。

$$T_s[\rho] = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d\mathbf{r} \varphi_k^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \varphi_k(\mathbf{r}) \quad \text{自由粒子系での運動エネルギー}$$

Kohn-Sham方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{\delta V[\rho]}{\delta \rho}(\mathbf{r}) \right) \varphi_k(\mathbf{r}) = \varepsilon_k \varphi_k(\mathbf{r})$$

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^N \varphi_k^*(\mathbf{r}) \varphi_k(\mathbf{r}) \quad \varphi_k(\mathbf{r}) \quad \text{Kohn-Sham軌道}$$

Hartree-Fock方程式と同じ形 : HFは近似なのに対しDFTは厳密なエネルギーを与える
Kohn-Sham軌道 : 物理的に意味はない

エネルギー密度汎関数(energy density functional)

エネルギー密度汎関数(EDF)：電子系の場合

$$E[\rho] = T_s[\rho] + V[\rho] = T_s[\rho] + \int d\mathbf{r} v_{\text{ext}}(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + E_{\text{xc}}[\rho]$$

外場(原子核-電子のポテンシャル)

$$\frac{\delta V[\rho]}{\delta \rho} = v_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + v_{\text{H}}(\mathbf{r}) + v_{\text{xc}}(\mathbf{r})$$

電子間ポテンシャル(Hartree項) $v_{\text{H}}(\mathbf{r}) = e^2 \int d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$

相関-交換ポテンシャル

$$v_{\text{xc}}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{\text{xc}}}{\delta \rho}$$

原子核密度汎関数

$$E[\rho, \tilde{\rho}, \tilde{\rho}^*] = \frac{\hbar^2}{2m} \tau_0(\mathbf{r}) + \sum_{k=0}^1 \chi_k^{\text{ph}}[\rho] + \sum_{t=n,p} \tilde{\chi}_t^{\text{pp}}[\rho, \tilde{\rho}, \tilde{\rho}^*]$$

密度(中性子・陽子)と対密度の汎関数

Skyrme型EDF(particle-hole)

原子核密度汎関数

$$E[\rho, \tilde{\rho}, \tilde{\rho}^*] = \frac{\hbar^2}{2m} \tau_0(\mathbf{r}) + \sum_{k=0}^1 \chi_k^{\text{ph}}[\rho] + \sum_{t=n,p} \tilde{\chi}_t^{\text{pp}}[\rho, \tilde{\rho}, \tilde{\rho}^*]$$

$$\chi_k^{\text{ph}}(\mathbf{r}) = C_k^\rho [\rho_0] \rho_k^2 + C_k^{\Delta\rho} \rho_k \Delta \rho_k + C_k^\tau \rho_k \tau_k + C_k^{J0} J_k^2 + C_k^{J1} \mathbf{J}_k^2 + C_k^{J2} \underline{\mathbf{J}}_k^2 + C_k^{\nabla J} \rho_k \nabla \cdot \mathbf{J}_k$$

$$C_k^s [\rho_0] \mathbf{s}_k^2 + C_k^{\Delta s} \mathbf{s}_k \cdot \Delta \mathbf{s}_k + C_k^T \mathbf{s}_k \cdot \mathbf{T}_k + C_k^j \mathbf{j}_k^2 + C_k^{\nabla j} \mathbf{s}_k \cdot (\nabla \times \mathbf{j}_k) + C_k^{\nabla s} (\nabla \cdot \mathbf{s}_k)^2 + C_k^F \mathbf{s}_k \cdot \mathbf{F}_k$$

k=0:アイソスカラー(n+p), k=1 アイソベクター(n-p)

密度行列

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}st, \mathbf{r}'s't') = \langle \Psi | c_{\mathbf{r}'s't'}^\dagger c_{\mathbf{r}st} | \Psi \rangle$$

非局所密度

$$\rho_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{st} \hat{\rho}(\mathbf{r}st, \mathbf{r}'st) \tau_{tt}^k$$

$$\mathbf{s}_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{ss't} \hat{\rho}(\mathbf{r}st, \mathbf{r}'s't) \hat{\sigma}_{s's} \tau_{tt}^k$$

$$\tau^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \tau^1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

tensor density

density

$$\rho_k(\mathbf{r}) = \rho_k(\mathbf{r}, \mathbf{r})$$

$$\mathbf{J}_k(\mathbf{r}) = \frac{1}{2i} (\nabla - \nabla') \otimes \mathbf{s}_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}$$

kinetic density

$$\tau_k(\mathbf{r}) = (\nabla \cdot \nabla') \rho_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}$$

$$J_k(\mathbf{r}) = \sum_a \mathbf{J}_{kaa}(\mathbf{r})$$

$$\mathbf{J}_{ka}(\mathbf{r}) = \sum_{bc} \varepsilon_{abc} \mathbf{J}_{kbc}(\mathbf{r})$$

$$\underline{\mathbf{J}}_{kab}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \mathbf{J}_{kab}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \mathbf{J}_{kba}(\mathbf{r}) - \frac{1}{3} J_k(\mathbf{r}) \delta_{ab}$$

局所密度(time-odd)

current density

$$\mathbf{j}_k(\mathbf{r}) = \frac{1}{2i} (\nabla - \nabla') \rho_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}$$

spin density

spin-kinetic density

tensor-kinetic density

$$\mathbf{s}_k(\mathbf{r}) = \mathbf{s}_k(\mathbf{r}, \mathbf{r})$$

$$\mathbf{T}_k(\mathbf{r}) = (\nabla \cdot \nabla') \mathbf{s}_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}$$

$$\mathbf{F}_k(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} (\nabla \otimes \nabla' + \nabla' \otimes \nabla) \mathbf{s}_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}$$

Skyrme型EDF(pairing)

原子核密度汎関数

$$E[\rho, \tilde{\rho}, \tilde{\rho}^*] = \frac{\hbar^2}{2m} \tau_0(\mathbf{r}) + \sum_{k=0}^1 \chi_k^{\text{ph}}[\rho] + \sum_{t=n,p} \tilde{\chi}_t^{\text{pp}}[\rho, \tilde{\rho}, \tilde{\rho}^*]$$

t=n or p

$$\tilde{\chi}_t^{\text{pp}}(\mathbf{r}) = \tilde{C}_t^\rho[\rho_0]|\tilde{\rho}_t|^2 + \tilde{C}_t^{\Delta\rho}\text{Re}\tilde{\rho}_t^*\Delta\tilde{\rho}_t + \tilde{C}_t^\tau\text{Re}\tilde{\rho}_t^*\tilde{\tau}_t + \tilde{C}_t^{J0}|\tilde{J}_t|^2 + \tilde{C}_t^{J1}|\tilde{\mathbf{J}}_t|^2 + \tilde{C}_t^{J2}|\underline{\tilde{\mathbf{J}}}_t|^2 + \tilde{C}_t^{\nabla J}\text{Re}\tilde{\rho}_t^*\nabla \cdot \tilde{\mathbf{J}}_t$$

密度行列

$$\hat{\tilde{\rho}}(\mathbf{r}st, \mathbf{r}'s't') = -2s' \langle \Psi | c_{\mathbf{r}'-s't'} c_{\mathbf{r}st} | \Psi \rangle$$

非局所密度

$$\tilde{\rho}_t(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_s \hat{\tilde{\rho}}(\mathbf{r}st, \mathbf{r}'st) \quad \tilde{\mathbf{s}}_t(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{ss'} \hat{\tilde{\rho}}(\mathbf{r}st, \mathbf{r}'s't) \boldsymbol{\sigma}_{s's}$$

局所密度

density

$$\tilde{\rho}_t(\mathbf{r}) = \tilde{\rho}_t(\mathbf{r}, \mathbf{r})$$

$$\text{kinetic density } \tilde{\tau}_t(\mathbf{r}) = (\nabla \cdot \nabla') \tilde{\rho}_t(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}$$

tensor density

$$\tilde{\mathbf{J}}_t(\mathbf{r}) = \frac{1}{2i} (\nabla - \nabla') \otimes \tilde{\mathbf{s}}_t(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}$$

$$\tilde{\mathbf{J}}_t(\mathbf{r}) = \sum_a \tilde{\mathbf{j}}_{taa}(\mathbf{r})$$

$$\tilde{\mathbf{J}}_{ta}(\mathbf{r}) = \sum_{bc} \varepsilon_{abc} \tilde{\mathbf{j}}_{tbc}(\mathbf{r})$$

$$\tilde{\mathbf{j}}_{tab}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{j}}_{tab}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{j}}_{tba}(\mathbf{r}) - \frac{1}{3} \tilde{J}_t(\mathbf{r}) \delta_{ab}$$

neutron-proton pairingを考えるとcurrent, spin pair densityなども現れる

有効相互作用と密度汎関数との対応

Skyrme有効相互作用

$$\begin{aligned}\hat{v}_{\text{Skyrme}}(\mathbf{r}_{12}) = & t_0(1 + x_0 \hat{P}_\sigma) \delta(\mathbf{r}_{12}) + \frac{1}{2} t_1(1 + x_1 \hat{P}_\sigma) [\hat{\mathbf{k}}'^2 + \hat{\mathbf{k}}^2] \delta(\mathbf{r}_{12}) \\ & + t_2(1 + x_2 \hat{P}_\sigma) \hat{\mathbf{k}}'^* \cdot \hat{\mathbf{k}} \delta(\mathbf{r}_{12}) + \frac{1}{6} t_3(1 + x_3 \hat{P}_\sigma) \delta(\mathbf{r}_{12}) \rho^\alpha \left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right) \\ & + i W_0(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2) \cdot [\hat{\mathbf{k}}'^* \times \hat{\mathbf{k}}] \delta(\mathbf{r}_{12}) \\ & + \frac{1}{2} t_e [\hat{\mathbf{k}}'^* \cdot \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}}'^* + \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}}] \delta(\mathbf{r}_{12}) + t_o \hat{\mathbf{k}}'^* \cdot \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{k}} \delta(\mathbf{r}_{12}) \\ \hat{v}_{\text{pair}}(\mathbf{r}_{12}) = & \frac{V_0}{2} (1 - \hat{P}_\sigma) \left[1 - \left(\frac{\rho_0(\mathbf{r})}{\rho_c} \right)^\beta \right] \delta(\mathbf{r}_{12})\end{aligned}$$

Skyrme EDF

$$\begin{aligned}\chi_k^{\text{ph}}(\mathbf{r}) = & C_k^\rho [\rho_0] \rho_k^2 + C_k^{\Delta\rho} \rho_k \Delta \rho_k + C_k^\tau \rho_k \tau_k + C_k^{J0} J_k^2 + C_k^{J1} \mathbf{J}_k^2 + C_k^{J2} \underline{\mathbf{J}}_k^2 + C_k^{\nabla J} \rho_k \nabla \cdot \mathbf{J}_k \\ & C_k^s [\rho_0] \mathbf{s}_k^2 + C_k^{\Delta s} \mathbf{s}_k \cdot \Delta \mathbf{s}_k + C_k^T \mathbf{s}_k \cdot \mathbf{T}_k + C_k^j \mathbf{j}_k^2 + C_k^{\nabla j} \mathbf{s}_k \cdot (\nabla \times \mathbf{j}_k) + C_k^{\nabla s} (\nabla \cdot \mathbf{s}_k)^2 + C_k^F \mathbf{s}_k \cdot \mathbf{F}_k\end{aligned}$$

$$\tilde{\chi}_t^{\text{pp}}(\mathbf{r}) = \tilde{C}_t^\rho [\rho_0] |\tilde{\rho}_t|^2 + \tilde{C}_t^{\Delta\rho} \text{Re} \tilde{\rho}_t^* \Delta \tilde{\rho}_t + \tilde{C}_t^\tau \text{Re} \tilde{\rho}_t^* \tilde{\tau}_t + \tilde{C}_t^{J0} |\tilde{\mathbf{J}}_t|^2 + \tilde{C}_t^{J1} |\tilde{\mathbf{J}}_t|^2 + \tilde{C}_t^{J2} |\tilde{\underline{\mathbf{J}}}_t|^2 + \tilde{C}_t^{\nabla J} \text{Re} \tilde{\rho}_t^* \nabla \cdot \tilde{\mathbf{J}}_t$$

- 有効相互作用からEDFの結合定数を導出できる
- 逆はできない場合もある(パラメータの数)
- EDFは一般にHamiltonian演算子と対応していない
- Skyrmeの場合はphとppチャネルで異なる相互作用：Hamiltonianとの対応していない

公開HFB計算コード(Fortran 90)

- Langanke, Maruhn, Koonin: Computational Nuclear Physics I (textbook)
Chap. 2 Skyrme Hartree-Fock (P.-G. Reinhard) (Fortran77コード)
- HFBRAD: 球対称(1次元)座標表示HFBコード
Bennaceur and Dobaczewski, Comp. Phys. Commun. 168, 96 (2005)
- HOSPE: 1次元調和振動子基底HFBコード
Carlsson et al., Comp. Phys. Commun. 181, 1641 (2010)
- HFBTHO: 軸対称(2次元)調和振動子基底HFBコード
Navarro Perez et al., Comp. Phys. Commun. 220, 363 (2017) v3.00
- HFODD: 3次元調和振動子基底HFBコード
Schunck et al., Comp. Phys. Commun. 216, 145 (2017) v.2.73y

論文にダウンロードページへのリンクあり

課題：HFBTHOを動かしてみよう

HFBTHO: 軸対称(2次元)調和振動子基底HFBコード

Navarro Perez et al., Comp. Phys. Commun. 220, 363 (2017) v3.00

ダウンロード：<https://data.mendeley.com/datasets/c5g2f92by3/1>

解凍：`tar zxvf HFBTHO_V300.tgz`

sources/にソースファイル

MakefileのFortranコンパイラを指定(gfortran, ifortなど),
MPI, OpenMPを使うかをUSE_MPI, USE_OPENMPで指定

LAPACK/BLASが必要

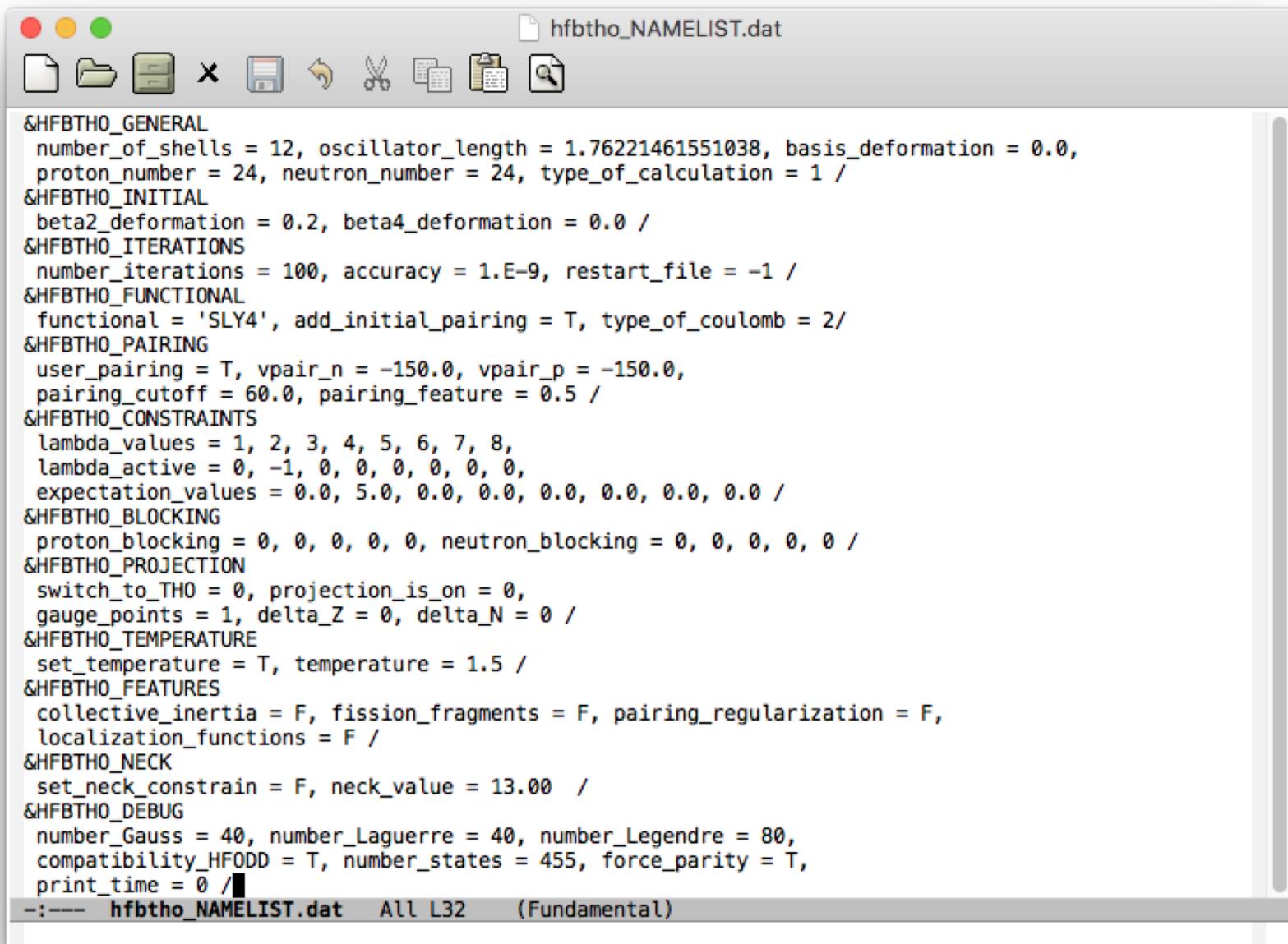
コンパイル `make` で実行ファイルhfbtho_mainを作る

入力ファイル例はruns/

入力ファイルはhfbtho_NAMELIST.datという名前にして実行ファイルを実行

課題：HFBTHOを動かしてみよう

入力ファイル：hfbtho_NAMELIST.dat



The screenshot shows a file browser window with a title bar "hfbtho_NAMELIST.dat". The main area displays the contents of the file, which is an input script for the HFBTHO code. The script uses parameter blocks (blocks starting with "&") and contains various parameters for the calculation. The parameters include shell numbers, oscillator length, basis deformation, proton and neutron numbers, type of calculation, initial deformations, iterations, functional, pairing, constraints, blocking, projection, temperature, and features like collective inertia and neck constraints. The file ends with a compatibility section and a print time section.

```
&HFBTHO_GENERAL
  number_of_shells = 12, oscillator_length = 1.76221461551038, basis_deformation = 0.0,
  proton_number = 24, neutron_number = 24, type_of_calculation = 1 /
&HFBTHO_INITIAL
  beta2_deformation = 0.2, beta4_deformation = 0.0 /
&HFBTHO_ITERATIONS
  number_iterations = 100, accuracy = 1.E-9, restart_file = -1 /
&HFBTHO_FUNCTIONAL
  functional = 'SLY4', add_initial_pairing = T, type_of_coulomb = 2/
&HFBTHO_PAIRING
  user_pairing = T, vpair_n = -150.0, vpair_p = -150.0,
  pairing_cutoff = 60.0, pairing_feature = 0.5 /
&HFBTHO_CONSTRAINTS
  lambda_values = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8,
  lambda_active = 0, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0,
  expectation_values = 0.0, 5.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0 /
&HFBTHO_BLOCKING
  proton_blocking = 0, 0, 0, 0, 0, neutron_blocking = 0, 0, 0, 0, 0, 0 /
&HFBTHO_PROJECTION
  switch_to_THO = 0, projection_is_on = 0,
  gauge_points = 1, delta_Z = 0, delta_N = 0 /
&HFBTHO_TEMPERATURE
  set_temperature = T, temperature = 1.5 /
&HFBTHO_FEATURES
  collective_inertia = F, fission_fragments = F, pairing_regularization = F,
  localization_functions = F /
&HFBTHO_NECK
  set_neck_constraint = F, neck_value = 13.00 /
&HFBTHO_DEBUG
  number_Gauss = 40, number_Laguerre = 40, number_Legendre = 80,
  compatibility_HFODD = T, number_states = 455, force_parity = T,
  print_time = 0 /
:-:--- hfbtho_NAMELIST.dat All L32 (Fundamental)
```

HFB計算のデータベース

Gogny HFB : (フランス、CEA)
AMEDEE database (Gogny D1S)

http://www-phynu.cea.fr/science_en_ligne/carte_potentiels_microscopiques/carte_potentiel_nucleaire_eng.htm

mass explorer (アメリカ、MSU)
Skyrme HFB・相対論的平均場理論
<http://massexplorer.frib.msu.edu/>

まとめ

- 平均場理論
 - 平均ポテンシャルを自己無撞着に決定
 - Hartree-Fock近似：二体相互作用を一体場で近似
 - 一体場に相関を取り入れるために対称性を破るのが本質的
 - 回転対称性の破れ→変形解
 - BCS近似：粒子数保存の破れ→準粒子の導入
- 有効相互作用
- Hartree-Fock-Bogoliubov近似：HF部分と対部分をまとめて決定
- 原子核密度汎関数理論
- 公開コード HFBRAD, HFBTHO, HFODD, HOSPHEなど