時間に依存する生成座標法による
核融合反応の記述に向けて

Towards microscopic description of nuclear fusion reactions based on the time-dependent generator coordinate method

東北大学大学院理学研究科
物理学専攻

長谷川 直人

本研究の目的は低エネルギー領域での核融合反応に対する微視的な記述法の開発である。核融合反応とは原子核間に存在するポテンシャル障壁を越えて二つの原子核が接近し一つの原子核となる反応のことである。原子核間の相互作用には二種類あり、短距離の引力である核力と遠距離の斥力であるクーロン力である。その二つの相互作用の競合によりポテンシャル障壁とその内側にポテンシャルのポケットが現れる。

原子核に含まれる核子は数個から数百個であり、そのすべての自由度を厳密に扱うことは現実的には不可能だが、適切な近似のもとで核子の自由度をそのまま扱うような理論は確立されている。その一つが現在広く使われている時間依存ハートリー=フォック法である。これは全系の波動関数がスレーター行列式である、つまり核子の波動関数の積状態で表現できるという近似である。これはつまりハミルトニアンが各核子に対するものに分離可能であり、核子同士の直接的な相互作用を無視するという近似になっている。

この時間依存ハートリー=フォック法には欠点があることも既に知られている。それは本来あるはずの多体のトンネル効果が記述できていないという点である。低エネルギー領域での核融合反応はトンネル効果によってポテンシャル障壁を透過することで起きるので、この欠点は重大である。

そこで本研究では時間依存生成座標法という手法を用いてトンネル効果を記述できる微視的核反応理論の構築を目指す。時間依存ハートリー=フォック法では系の波動関数は単一のスレーター行列式で近似したが、この手法では複数のスレーター行列式の重ね合わせによって系の波動関数を表現する。式で表せば以下の通りである。

$$|\Psi(t)\rangle = \int da f(a,t)\,|\Phi_a(t)\rangle \tag{1}$$

ここで f は重ね合わせの重み関数であり、$|\Phi_a\rangle$ は生成座標 a でラベルされたスレーター行列式である。本論文の計算では生成座標を反応初期における原子核の重心の運動量にとる。

本論文の計算では問題の単純化のために (1) 式の $|\Phi_a(t)\rangle$ は既知であるとして、重み関数 f の時間発展のみを考えた。ここで $|\Phi_a(t)\rangle$ は独立な時間依存ハートリー=フォック法の解を用いた。この近似では各時刻での系の波動関数 $|\Psi(t)\rangle$ を時間依存ハートリー=フォックの解 $\{|\Phi_a(t)\rangle\}$ が張る空間で展開することに相当する。

本論文では以上の手法によってトンネル効果を記述する計算の前準備にあたる計算を行なった。時間依存生成座標法では時間依存変分原理に基づき以下の方程式を解くことで重み関数を求める。

$$\mathcal{H}f = i\mathcal{N}\dot{f} \tag{2}$$

ここで ノルムカーネル $\mathcal{N}$, ハミルトニアンカーネル $\mathcal{H}$ はそれぞれ以下で定義される。

$$\mathcal{N}_{aa'} = \langle \Phi_a | \Phi_{a'} \rangle , \qquad \mathcal{H}_{aa'} = \langle \Phi_a | H - i\partial_t | \Phi_{a'} \rangle \tag{3}$$

離散化された生成座標のうえでは $\mathcal{N}, \mathcal{H}$ は行列であり、(2) 式は連立微分方程式である。

時間依存生成座標法の計算ではしばしばガウシアンオーバーラップ近似 (Gaussian Overlap Approximation, 以下 GOA) が用いられる。この近似は $\mathcal{N}, \mathcal{H}$ の各成分が生成座標 a の相対値の関数として、それぞれガウス型、ガウス × 二次の多項式の形であることを仮定し、(2) 式を単純化する。しかしこのような仮定は常に成り立つわけではないため、本論文ではトンネル効果を再現する際にこの近似が適切がどうかを議論した。

本論文で考えた系は一次元系における ^{4}He + ^{4}He の衝突である。静的なハートリー= フォック法によって基底状態の ^{4}He 原子核を作り、それを左右に一つずつ配置し、衝突するように反対向きに同じ大きさの初期運動量を与えた。原子核に運動量を与えるとは一粒子波動関数すべてに $\exp(\pm i p_i x)$ という位相をかけることである。ここで p_i は与える運動量であり、ここの値を変化させせたスレーター行列式を重ね合わせて全系の波動関数とした。

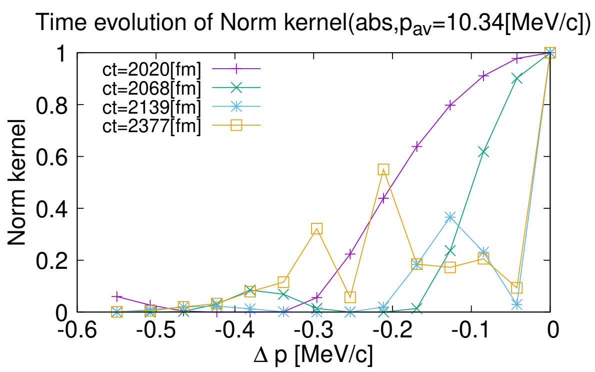

図 1　ノルムカーネルの絶対値の時間変化。$p_{av} = (p_a + p_{a'})/2 = 10.34$[MeV/c] での結果

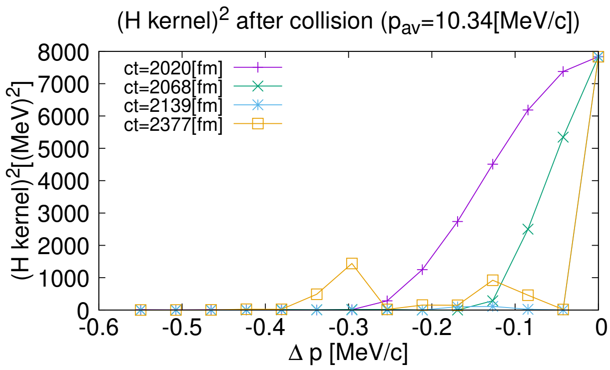

図 2　ハミルトニアンカーネルの絶対値の二乗の時間変化。$p_{av} = (p_a + p_{a'})/2 = 10.34$[MeV/c] での結果

結果として以上のようなノルムカーネル、ハミルトニアンカーネルの時間発展を得た。この図 1,2 はこの系におけるノルムカーネルの絶対値、ハミルトニアンカーネルの絶対値の二乗を $\Delta p = p_a - p_{a'}$ の関数としていくつかの時刻においてプロットしたものである。これらの図では原子核が十分に離れているとき ($ct = 2020$[fm] 及び 2068[fm]) にはノルムカーネル、ハミルトニアンカーネルは GOA の仮定する形になっているが、原子核同士がオーバーラップする領域 ($ct = 2139$[fm] 及び 2377[fm]) になると GOA の仮定する形からのずれが見られる。これにより今回の系では原子核が十分に離れている時は GOA は有効だが、原子核同士が重なりあうような状況においては適さないと結論づけた。

本論文ではノルムカーネル、ハミルトニアンカーネルの計算まで行なったが、次に行なうべきは (2) 式を解いて重み関数を求めることである。本論文で GOA が今回の系では適切でないことが分かったが、今回用いた一次元の ^{4}He + ^{4}He の系では、GOA を用いない計算も比較的簡単である。将来的には一粒子波動関数の変分方程式まで含めた時間依存生成座標法の計算も行ないたい。これはまだ計算方法が確立していないため今後の大きな課題である。