

修士論文

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

平成30年

# 目次

1	導入	3
1.1	核融合反応の性質	3
1.2	核反応を記述する理論	3
1.3	本研究の目的と本論文の章立て	5
2	時間依存ハートリー=フォック法	7
2.1	時間依存ハートリー=フォック方程式の導出	7
2.2	時間発展の方法	10
3	時間依存生成座標法	16
3.1	概要	16
3.2	時間発展の方法	17
4	1次元系への応用	21
4.1	計算のセットアップ	21
4.2	基底状態に対する静的な計算	22
4.3	時間依存ハートリー=フォックの計算	29
4.4	時間に依存する生成座標法におけるカーネルの計算	32
4.4.1	ノルムカーネル	33
4.4.2	ハミルトニアンカーネル	39
4.4.3	ハミルトニアンカーネルに対する $\langle \Phi(a) H \Phi(a') \rangle$ の寄与	43
5	今後の展望	46
6	まとめ	47
7	謝辞	48
付録 A	時間依存のないハートリー=フォック法	49
A.1	変分法	49
A.2	ハートリー=フォック方程式の導出の準備	50
A.3	ハートリー=フォック法におけるエネルギー	52

A.4	ハートリー=フォックエネルギーの変分 . . . . .	53
A.5	数値計算の方法 . . . . .	56
付録 B	生成座標法 . . . . .	58
B.1	変分方程式の導出 . . . . .	58
B.2	ガウシアンオーバーラップ近似 . . . . .	59
B.2.1	概要 . . . . .	59
B.2.2	ノルムカーネル . . . . .	59
B.2.3	ハミルトニアンカーネル . . . . .	60
付録 C	生成座標におけるカーネルの計算法 . . . . .	64
C.1	概要 . . . . .	64
C.2	スレーター行列式同士のオーバーラップ . . . . .	65
C.3	一体の演算子の行列要素 . . . . .	66
C.3.1	余因子展開 . . . . .	66
C.3.2	行列要素の計算 . . . . .	67
C.4	二体の演算子の行列要素 . . . . .	68
付録 D	一粒子波動関数がガウス型の際のノルムカーネル . . . . .	70

# 1 導入

## 1.1 核融合反応の性質

核融合反応は物理的にとても興味深い現象である。核融合反応とは、2つの原子核が衝突し、1つのより大きな原子核にまとまる反応を指す。原子核間に働く力は短距離力で引力である核力と、遠距離力で斥力であるクーロン力がある。その二つの力の競合により、原子核の間にはクーロン障壁と呼ばれるポテンシャル障壁が存在している。核融合反応はそのポテンシャル障壁を原子核が越えることによって起こる。

核融合反応はいくつかの重要な物理に関係している。その物理の一つとして宇宙初期の元素合成が挙げられる。宇宙初期の水素だけが存在するところから、水素同士の核融合反応でヘリウム原子核が作られる。その後もリチウムまでがビッグバンで作られる。さらに時間が経った後、より重い元素も星の中の核融合反応によって作られる。ここから、核融合反応が我々を含む万物の構成過程において重要な現象であることが分かる。また他の例では、超重元素の合成などが挙げられる。現在合成されている最も重い元素は原子番号118番のオガネソンであるが、これは自然には存在しない。このような自然に存在する元素より重い超重元素は、人工的に作られている。このとき重い元素同士をぶつけて核融合反応を起こし、より重い元素を作っている。このように核融合反応は新たな物質の合成の際にも重要な役割を果たしている。

核融合反応はそれ自身も多体系の量子力学の面白さを多く含んでいる。原子核は量子力学で記述されるスケールにあり、その中には核子と呼ばれる陽子、中性子の自由度を持ち、さらにそれらの中にはクォークの自由度も持つ。クォークの自由度を無視しても、原子核は核子の多体系であり、核融合反応はそれらのダイナミクスから出てくる現象である。核融合反応は原子核全体の変形や振動などの巨視的な自由度、そして核子の運動という微視的な自由度からくる原子核の励起、どちらとも深く関係する複雑な反応である。それゆえ多体系の量子力学を深く知るための良い場でもある。

## 1.2 核反応を記述する理論

原子核中の核子の数は数個から数百個程度であり、多体の波動関数の厳密な計算も、逆に無限系の波動関数に近似することも難しい。それゆえに原子核を記述する際にまず考えられる手段は、現象論的なモデルをつくることである。原子核の変形や振動は、本来核子の自由度から出てくるものだが、それらをモデル化し実験結果を再現するようにパラメー

タを合わせることで、限られた巨視的自由度のみで現象を記述できるようになる。この手段は上手いモデル化が出来れば少ない自由度で実験を再現できることや、モデル化によって起きている現象を直感的に理解しやすいという利点がある。その反面当然得られる結果はモデルによって差異があり、どのモデルが正しいのかという議論にもなる。

もう一方の手段は、核子の自由度をそのまま扱うことである。上でも述べたように、原子核の集団的自由度も根本は核子の自由度から現われるものであり、これはより根本的な原理に基づいた計算である。しかし現実的な系を扱おうとすれば、数個から数百個の量子多体系を3次元で扱わなくてはならず計算は困難となる。ゆえに適切な近似のもとで核子の自由度を扱うこととなる [1]。

ここで単純に核融合反応といっても、反応時のエネルギーの大小で状況は大きく異なってくる。以下の図1に核融合反応の概念図を示す。原子核間のポテンシャルを越えるだけ

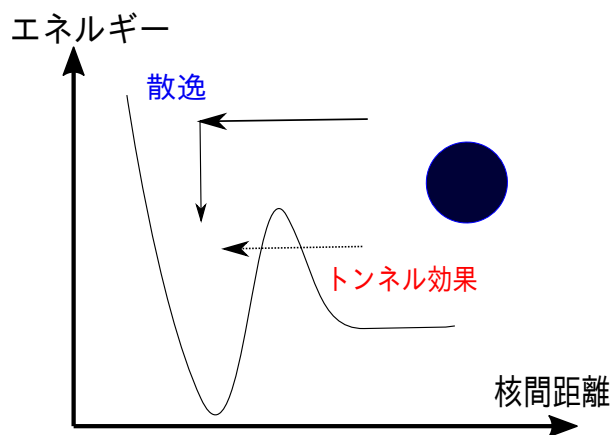


図1 核融合反応の概念図。衝突時のエネルギーがポテンシャル障壁よりも大きい場合は、障壁を越えた後原子核間の相対運動エネルギーを散逸し融合する。ポテンシャル障壁よりも低い場合は、トンネル効果によってのみ融合する。

のエネルギーを持って衝突する場合は対象は量子力学の範疇であるものの古典論的な理論を用いても、核融合反応を記述できる [2-4]。この場合、原子核はポテンシャル障壁を越えて近づいた後、原子核間の相対運動エネルギーが原子核の内部励起のエネルギーに散逸することで原子核はポテンシャル障壁の内側にトラップされ、核融合反応が起きる。この領域では、現在広く使われている微視的核反応理論である時間依存ハートリー=フォック法によっても記述できている。

その一方で、反応時のエネルギーが原子核間のポテンシャル障壁以下の場合は、トンネ

ル効果によってのみ核融合反応は起きる。古典論では、この領域における反応は禁止されており、量子力学が支配的となる。[5-7] この領域では時間依存ハートリー=フォック法を始めとする微視的核反応理論による記述が出来ていない。ここでその一例を以下の図2に示す。この図は  $^{16}\text{O}+^{208}\text{Pb}$  系の核融合反応断面積をエネルギーの関数としてプロット

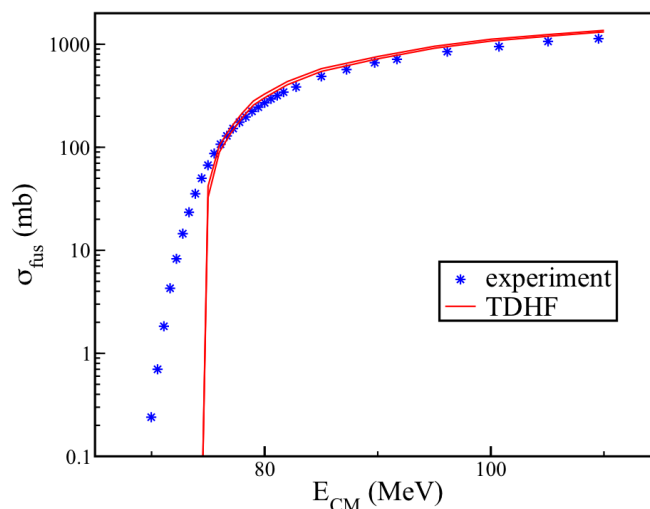


図2  $^{16}\text{O}+^{208}\text{Pb}$  系の核融合断面積の実験値と時間依存ハートリー=フォック計算の結果 [8]。時間依存ハートリー=フォック (TDHF) の計算では、あるエネルギー以下になると融合断面積が0になる。

したものである [8]。この図において点は実験データを表し、実線は時間依存ハートリー=フォック法による計算結果を表す。この図の横軸は衝突のエネルギーであり、それが小さくなるにつれて核融合断面積も小さくなっていく。ここで示したいことは、あるエネルギー以下では実験値が有限であるにも関わらず、時間依存ハートリー=フォック法での計算結果が0になっているということである。この系のポテンシャル障壁の高さは75MeVであり、これは時間依存ハートリー=フォック法では、量子力学では起こるはずのトンネル効果が記述できていないということを示している。

### 1.3 本研究の目的と本論文の章立て

前述の通り低エネルギーでの核融合反応ではトンネル効果が重要になるが、この領域に適用可能な微視的核反応理論はまだ存在していない。この欠点を解決するためには、ハートリー=フォック近似を越えた取り扱いが必要となる。この論文ではそのようなアプロー

チの一つである時間に依存する生成座標法を用いてトンネル効果の記述が可能かどうか検討を行なうための議論をする。

本論文の構成は以下の通りである。

まず 2 章で、現在広く使われており、今回の論文でも用いられる時間依存ハートリー＝フォック法について述べる。そして 3 章において時間依存ハートリー＝フォック法の拡張として考えられている、時間依存生成座標法について述べる。4 章では時間依存生成座標法をトンネル効果による核融合の記述にどのように用いるかを説明し、一次元系にこの手法を応用する。

5 章では今回できなかった計算や、今後取り組みたいより発展的な内容について述べる。最後の 6 章では本論文全体のまとめを行なう。

また、付録 A では今回の系の初期状態を作るために使用した、時間依存のないハートリー＝フォック法を説明する。付録 B では時間依存のない場合の生成座標法について説明する。

付録 C では生成座標法で必要となるスレーター行列式の状態での演算子の行列要素の導出を行なう。付録 D は生成座標法で用いられる近似であるガウシアンオーバーラップ近似に関するものである。ここではノルムカーネルが解析的にガウス型になる状況について述べる。

## 2 時間依存ハートリー＝フォック法

この章では時間依存ハートリー＝フォック法 [9] について説明する。この手法は原子核の微視的な自由度、つまり核子の自由度を用いて原子核の反応を記述するためのものである。この手法では核子の自由度を用いることで、原子核の内部励起も計算の中で自然に現れ、その核反応への寄与も考慮した計算が可能となっている。

### 2.1 時間依存ハートリー＝フォック方程式の導出

この手法で用いる近似は、多体系の波動関数の形をスレーター行列式の形に制限をするというものである。詳しくは付録 A で述べるが、波動関数の形をスレーター行列式にするということは、核子同士の直接の相互作用は無視し、核子全体が作る平均ポテンシャルを通じてのみ核子同士が相互作用をするということを意味する。この考えは静的な場合はパウリ原理によって核子同士の散乱が抑制されることから正当化される。

この平均場近似の考えは、極端に高エネルギーの反応を考えない限り、時間に依存して変化する波動関数の場合にも適用できる。具体的には一核子あたりのエネルギーが原子核のフェルミ面を越えないようなエネルギーのみを扱う場合には、静的な場合と同様にパウリ原理から既に占有された準位への遷移は禁止され、核子間の直接の相互作用を無視した平均場近似は正当化される。

ここから時間依存ハートリー＝フォック法における方程式を導出していく。まず一般にハミルトニアンが陽に時間に依らないとき、系の時間発展は以下の式で表わされる。

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\Psi(0)\rangle \quad (2.1.1)$$

このとき、時間に依存した密度行列を以下のように定義する。

$$\rho_{kl}(t) = \langle \Psi(t) | c_l^\dagger c_k | \Psi(t) \rangle \quad (2.1.2)$$

ここで  $c^\dagger, c$  はそれぞれ核子の生成消滅演算子である。そして添字の  $k, l$  は核子の一粒子状態のラベルである。この密度行列を時間微分することで、式 (2.1.1) の右辺からハミルトニアンが出てきて、以下のような交換関係が現われる。

$$i\hbar\dot{\rho}_{kl}(t) = \langle \Psi(t) | [c_l^\dagger c_k, H] | \Psi(t) \rangle \quad (2.1.3)$$



ここで以下のような二体のハミルトニアンを考える。

$$H = \sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} c_{l_1}^\dagger c_{l_2} + \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2, l_3 l_4} c_{l_1}^\dagger c_{l_2}^\dagger c_{l_4} c_{l_3} \quad (2.1.4)$$

$$\bar{v}_{l_1 l_2, l_3 l_4} = v_{l_1 l_2 l_3 l_4} - v_{l_1 l_2 l_4 l_3} \quad (2.1.5)$$

式 (2.1.5) で定義された  $\bar{v}$  は相互作用  $v$  を反対称化したものである。このハミルトニアン (2.1.4) を式 (2.1.3) に代入し、フェルミオンの生成消滅演算子の反交換関係  $\{c_i^\dagger, c_j\} = \delta_{ij}$  を用いて交換関係を展開すると以下の式となる。

$$i\hbar \dot{\rho}_{kl} - \sum_p (t_{kp} \rho_{pl} - \rho_{kp} t_{pl}) = \frac{1}{2} \sum_{prs} (\bar{v}_{kprs} \rho_{rslp}^{(2)} - \bar{v}_{rslp} \rho_{kprs}^{(2)}) \quad (2.1.6)$$

ここで二体の密度行列  $\rho^{(2)}$  を以下のように定義した。

$$\rho_{klpq}^{(2)}(t) = \langle \Psi(t) | c_p^\dagger c_q^\dagger c_l c_k | \Psi(t) \rangle \quad (2.1.7)$$

式 (2.1.6) の左辺は自由粒子の運動を記述している。それに対して右辺は相互作用によるダイナミクスを記述している。ここで式 (2.1.6) の右辺の二体密度行列は、ウィックの定理から以下のように二種類の成分に分けられる。

$$\rho_{klpq}^{(2)} = \rho_{kp} \rho_{lq} - \rho_{kq} \rho_{lp} + g_{klpq}^{(2)} \quad (2.1.8)$$

(2.1.8) 式の右辺の第一項、第二項は二体密度のうち一体密度で表現可能な項であり、第三項は一体密度では表現できない二体相関の項である。ここから式 (2.1.6) は以下のように変形できる。

$$i\hbar \dot{\rho}_{kl} - [t + \Gamma, \rho]_{kl} = \frac{1}{2} \sum_{prs} (\bar{v}_{kprs} g_{rslp}^{(2)} - \bar{v}_{rslp} g_{kprs}^{(2)}) \quad (2.1.9)$$

ここで平均場ポテンシャル  $\Gamma$  を以下のように定義した。

$$\Gamma_{kl} = \sum_{pq} \bar{v}_{kqlp} \rho_{pq} \quad (2.1.10)$$

平均場近似では (2.1.9) 式の右辺を無視する。つまり  $g^{(2)}$  を無視することで平均場近似の下での密度の時間発展方程式が次のように得られる。ここで  $t + \Gamma = h$  と置いた。

$$i\hbar \dot{\rho} = [h, \rho] \quad (2.1.11)$$

座標表示を用いると一粒子波動関数  $\varphi_i$  を用いて密度行列は以下の式で与えられる。

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}', t) = \sum_{i=1}^A \varphi_i^*(\vec{r}, t) \varphi_i(\vec{r}', t) \quad (2.1.12)$$

この密度行列の表式を用いて、スピン依存のない二体ポテンシャル  $v(\vec{r}, \vec{r}')$  を考えると、式 (2.1.11) は一粒子波動関数によって以下のように表される。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi_i(\vec{r}, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \Gamma_H(\vec{r}, t) \right) \varphi_i(\vec{r}, t) + \int d^3 r' \Gamma_{\text{ex}}(\vec{r}, \vec{r}', t) \varphi_i(\vec{r}', t) \quad (2.1.13)$$

ここでハートリーポテンシャル  $\Gamma_H$ 、交換ポテンシャル  $\Gamma_{\text{ex}}$  を以下のように定義した。

$$\Gamma_H(\vec{r}) = \int d^3 r' v(\vec{r}, \vec{r}') \sum_{j=1}^A |\varphi_j(\vec{r}')|^2 = \int d^3 r' v(\vec{r}, \vec{r}') \rho(\vec{r}') \quad (2.1.14)$$

$$\Gamma_{\text{ex}}(\vec{r}, \vec{r}') = -v(\vec{r}, \vec{r}') \sum_{j=1}^A \varphi_j(\vec{r}')^* \varphi_j(\vec{r}) = -v(\vec{r}, \vec{r}') \rho(\vec{r}, \vec{r}') \quad (2.1.15)$$

この式が時間依存ハートリー=フォック法における一粒子波動関数の時間発展方程式である。

時間依存ハートリー=フォック法によって得られた波動関数のエネルギーが保存していることは以下のように示される。ハートリー=フォック法でのエネルギーは以下のように書ける。

$$E = \langle \Phi | H | \Phi \rangle \quad (2.1.16)$$

この式 (2.1.16) に前に示したハミルトニアン (2.1.4) を代入すると分かるように、ハートリー=フォック法でのエネルギーは密度  $\rho$  に依存している (式 (A.3.6))。よって (2.1.16) 式のエネルギーに対する時間微分は密度の時間微分を使って書ける。

$$\frac{d}{dt} E = \sum_{kl} \left( \frac{\partial E}{\partial \rho_{kl}} \dot{\rho}_{kl} \right) \quad (2.1.17)$$

ここで一粒子ハミルトニアン  $h$  は以下のように定義される。

$$h_{ij} = \frac{\partial E}{\partial \rho_{ji}} \quad (2.1.18)$$

この  $h$  は式 (2.1.11) の  $h$  と対応する。式 (2.1.17) の右辺は一粒子ハミルトニアンの定義 (2.1.18) を用いれば、 $h$  と  $\rho$  のトレースの形になる。

$$\sum_{kl} \left( \frac{\partial E}{\partial \rho_{kl}} \dot{\rho}_{kl} \right) = \text{Tr}(h \dot{\rho}) \quad (2.1.19)$$

そして時間依存ハートリー=フォック方程式  $i\hbar \dot{\rho} = [h, \rho]$  から  $\dot{\rho}$  を書きなおし、トレースの中身がサイクリックに入れ替え可能であることを使うと  $[h, h] = 0$  からエネルギーの時

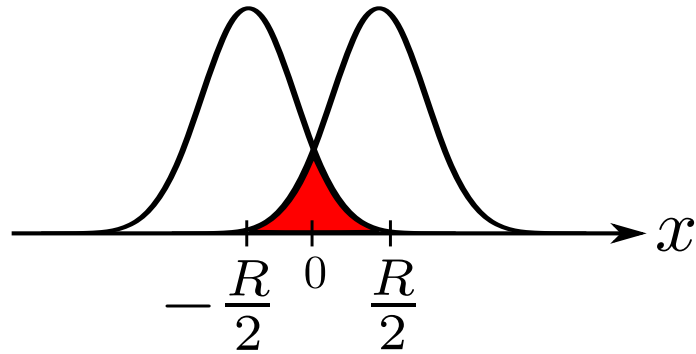


図3 オーバーラップのある波動関数。全体をまとめて反対称化すると赤く示した部分が消えてしまう。これでは重心間の距離  $R$  が小さすぎる。

間微分が 0 になる。

$$\text{Tr}(h\dot{\rho}) = \frac{i}{\hbar} \text{Tr}(h \cdot [\rho, h]) = \frac{i}{\hbar} \text{Tr}(\rho \cdot [h, h]) = 0 \quad (2.1.20)$$

これでエネルギーが時間依存ハートリー=フォック法の時間発展によって保存されることが示せた。

## 2.2 時間発展の方法

2.1 節で時間依存ハートリー=フォックでの解くべき方程式が得られたが、ここでは手法を原子核の衝突に応用する方法や、方程式を数値的に解く場合の誤差のたまりにくい計算方法、高速化の手法などを述べる。ここでは簡単のために次元の系を考える。

原子核の衝突を計算する際に、初期状態として静的なハートリー=フォック法 (付録 A) を用いて原子核の波動関数を用意する。そうすることで近似的な基底状態の原子核が用意できる。このようにして作った原子核を、互いの波動関数のオーバーラップが無視できるほど十分遠くに配置する。遠くに配置する理由は時間依存ハートリー=フォック計算で左右の一粒子波動関数をまとめて一つのスレーター行列式として扱うので、その際に左右の波動関数でオーバーラップが存在すると、反対称化によってその部分が消えてしまい、最初に用意した核子が減ってしまうからである。図 3 のように波動関数が重なると、図の赤く示した部分が反対称化によって消えてしまう。そして衝突させるために二つの原子核に互いに反対向きの運動量を与える。この運動量を与えるというのはハートリー=フォック法で作ったスレーター行列式の中の一粒子波動関数に  $\exp(\pm ipx)$  という位相をそれぞれかけるということに対応する。この状態は図 4 のよう表現できる。このときの運動量  $p$  は

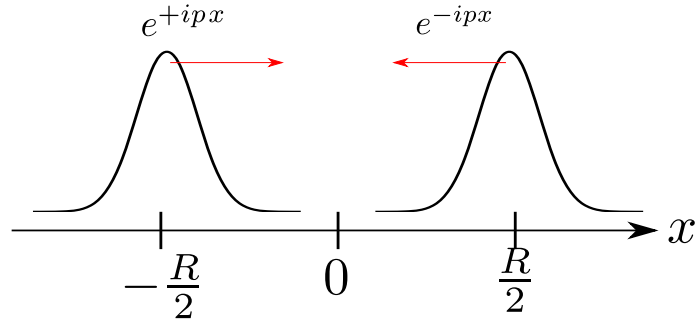


図4 用意した初期状態。左右に分けた波動関数をブーストすることを表現している。この状態から時間依存ハートリー=フォック法を用いて系の時間発展を計算し、原子核を衝突させる。この図では重心間距離が  $R$  である。

二つの原子核の相対運動エネルギーから決まる。例えば系の相対運動エネルギーを  $E_{cm}$  と決めると、そのエネルギーは各核子に等分配されるとして、一粒子波動関数にはそれぞれ以下のような運動量が割り振られる。

$$p = \frac{\sqrt{2mE_{cm}}}{A} \quad (2.2.1)$$

ここで  $m$  は二つの原子核を重心系でみたときの系の換算質量である。対称な系の場合には、 $m$  は以下の式で与えられる。

$$m = \frac{Am_n + \Delta E}{2} \quad (2.2.2)$$

$A$  は核子数、 $m_n$  は核子質量で、この式の分子は束縛エネルギー ( $-\Delta E$ ) を考慮した原子核の質量である。この束縛エネルギーは静的なハートリー=フォック計算から求められる。時間依存ハートリー=フォック法を用いた原子核の衝突の計算では、以上のような初期状態から波動関数を時間発展させる。

次に数値計算における時間発展のユニタリー性の保存について議論する。ここでは式 (2.1.13) で与えられるような、一粒子波動関数  $\varphi$  の時間発展を数値的に解く場合を考える。一般に無限小の時間発展はハミルトニアン  $H$  を用いて以下のように書ける。ここでは簡単のために  $\hbar = 1$  とする。

$$\varphi(t + \Delta t) = e^{-iH\Delta t}\varphi(t) \quad (2.2.3)$$

これはハミルトニアンが時間を陽に含まない場合の以下の時間依存シュレディンガー方程式から分かる。

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi = H\varphi \quad (2.2.4)$$

これを数値的に解こうとすれば、 $\exp$  の部分を近似的に  $(1 - iH\Delta t)$  として以下を再帰的に解くことが出来る。

$$\varphi(t + \Delta t) = (1 - iH\Delta t)\varphi(t) \quad (2.2.5)$$

しかし、この計算方法では本来保存されるノルムが保たれない。つまりある時点で1に規格化された状態  $\varphi(t)$  ( $\langle\varphi(t)|\varphi(t)\rangle = 1$ ) があっても、時間発展させると以下のように時間幅  $(\Delta t)$  の二乗に比例した分だけノルムが変化する。

$$\langle\varphi(t + \Delta t)|\varphi(t + \Delta t)\rangle = \langle\varphi(t)|(1 - iH\Delta t)(1 + iH\Delta t)|\varphi(t)\rangle \quad (2.2.6)$$

$$= \langle\varphi(t)|\varphi(t)\rangle + \langle\varphi(t)|H^2(\Delta t)^2|\varphi(t)\rangle \quad (2.2.7)$$

そのため、数値計算ではノルムを時間発展中に保つような工夫をする。具体的には以下のようにシュレディンガー方程式にある時刻  $t$  での状態の代わりに時刻  $t$  と  $t + \Delta t$  の状態の平均を用いる。この手法はクランク=ニコルソン法と呼ばれる [10]。

$$i\frac{\varphi(t + \Delta t) - \varphi(t)}{\Delta t} = H\frac{(\varphi(t + \Delta t) + \varphi(t))}{2} \quad (2.2.8)$$

この方程式を  $\varphi(t + \Delta t)$  について解くと

$$\varphi(t + \Delta t) = \frac{1}{1 + i\frac{1}{2}H\Delta t} \left(1 - i\frac{1}{2}H\Delta t\right) \varphi(t) \quad (2.2.9)$$

この手法を用いると以下にみるように  $\Delta t$  の全オーダーでユニタリー性は保たれる。ここで  $H$  はエルミートであることを想定している。

$$\begin{aligned} \langle\varphi(t + \Delta t)|\varphi(t + \Delta t)\rangle &= \langle\varphi(t)|\frac{1}{1 - i\frac{1}{2}H\Delta t} \left(1 + i\frac{1}{2}H\Delta t\right) \frac{1}{1 + i\frac{1}{2}H\Delta t} \left(1 - i\frac{1}{2}H\Delta t\right) |\varphi(t)\rangle \\ &= \langle\varphi(t)|\varphi(t)\rangle = 1 \end{aligned} \quad (2.2.10)$$

数値計算のためには空間を離散化するのが通常であるが、その際の微分方程式の効率的な計算方法についてみていく。空間を有限の空間幅  $\Delta x$  で離散化すると、ハミルトニアン  $H$  は離散化された空間座標でラベルされた行列の形をしている。さらにポテンシャルは一体ポテンシャルのみの場合を考え、空間二階微分を以下の式 (2.2.11) ような三点公式で表現した場合は三重帯行列の形になっている。

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} \simeq \frac{\varphi(x + \Delta x) - 2\varphi(x) + \varphi(x - \Delta x)}{(\Delta x)^2} \quad (2.2.11)$$

ポテンシャル項も含めたハミルトニアン行列は具体的に以下の (2.2.12) ようになる。対角成分の隣の成分はハミルトニアンの中の空間二階微分からきている。

$$H = \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & -2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V(x_1) & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & V(x_2) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & V(x_3) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V(x_4) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & V(x_N) \end{pmatrix} \quad (2.2.12)$$

式 (2.2.9) から分かる通り、時間発展の 1 ステップには逆行列の計算や行列同士の積が必要となり、一般の行列では、それらの計算コストは  $\mathcal{O}(N^3)$  となる。しかしハミルトニアンが式 (2.2.12) のような帯行列である場合は、以下に示す方法を用いて計算コストを  $\mathcal{O}(N)$  に減らすことが可能である。

シュレディンガー方程式に話を戻すと、上付き文字を時間の添字として波動関数の時間発展は以下となる。

$$\varphi^{n+1} = \frac{1 - i\frac{1}{2}H\Delta t}{1 + i\frac{1}{2}H\Delta t} \varphi^n \quad (2.2.13)$$

$$= \left( \frac{2}{1 + i\frac{1}{2}H\Delta t} - 1 \right) \varphi^n \equiv \chi - \varphi^n \quad (2.2.14)$$

$$\chi = \frac{2}{1 + i\frac{1}{2}H\Delta t} \varphi^n \quad (2.2.15)$$

$\varphi^n$  は時刻  $t_n$  での波動関数を表している。ここで  $\chi$  は定義から以下の方程式を満たす。

$$\left( 1 + i\frac{1}{2}H\Delta t \right) \chi = 2\varphi^n \quad (2.2.16)$$

この方程式のハミルトニアンに上の具体的な形を入れると空間成分において以下の漸化式を得る。下付き文字を空間の添字とした。

$$-\frac{i\Delta t}{2(\Delta x)^2} \chi_{j+1} + \left( 1 + \frac{i\Delta t}{(\Delta x)^2} + \frac{i\Delta t}{2} V_j \right) \chi_j - \frac{i\Delta t}{2(\Delta x)^2} \chi_{j-1} = 2\varphi_j^n \quad (2.2.17)$$

この式 (2.2.17) はより一般的に書くとと次のように書ける。

$$A_i^- \chi_{i-1} + A_i^0 \chi_i + A_i^+ \chi_{i+1} = b_i \quad (2.2.18)$$

ここで式 2.2.17 と比較すると係数は以下である。

$$A_i^- = -\frac{i\Delta t}{2(\Delta x)^2} \quad (2.2.19)$$

$$A_i^0 = \left(1 + \frac{i\Delta t}{(\Delta x)^2} + \frac{i\Delta t}{2} V_j\right) \quad (2.2.20)$$

$$A_i^+ = -\frac{i\Delta t}{2(\Delta x)^2} \quad (2.2.21)$$

$$b_i = 2\varphi_j^n \quad (2.2.22)$$

この漸化式を解くために、 $\chi_{i+1}$  が  $\chi_i$  だけの情報で書けるという仮定をする。つまり以下の関係があるとする。

$$\chi_{i+1} = \alpha_i \chi_i + \beta_i \quad (2.2.23)$$

これを仮定すると式 (2.2.18) は次のようになる。

$$A_i^- \chi_{i-1} + A_i^0 \chi_i + A_i^+ (\alpha_i \chi_i + \beta_i) = b_i \quad (2.2.24)$$

ここでこの式を  $\chi_i$  について解くと以下になる。

$$\chi_i = \gamma_i A_i^- \chi_{i-1} + \gamma_i (A_i^+ \beta_i - b_i) \quad (2.2.25)$$

ここで  $\gamma_i$  を以下で定義した。

$$\gamma_i = -\frac{1}{A_i^0 + A_i^+ \alpha_i} \quad (2.2.26)$$

ここで式 (2.2.23) と (2.2.25) を比較すれば  $\alpha_{i-1}, \beta_{i-1}$  と  $i$  番目との繋がりが以下のように分かる。

$$\alpha_{i-1} = \gamma_i A_i^- \quad (2.2.27)$$

$$\beta_{i-1} = \gamma_i (A_i^+ \beta_i - b_i) \quad (2.2.28)$$

この関係式より、境界条件によって  $\alpha_{N-1} = 0, \beta_{N-1} = \varphi_N$  ( $N$  は離散化した空間の端のインデックス) と定めれば  $\alpha_i, \beta_i$  がすべて分かる。さらにそれらと式 (2.2.23) を用いてすべての  $\chi$  が分かり、解きたかった式 (2.2.18) が解けたことになる。そしてある時刻での  $\chi$  が得られたことで、式 (2.2.14) を用いて時間のステップを一つ進めることが出来る。

ここまでの議論はハミルトニアンが陽に時間に依らない場合に成り立つが、時間依存ハートリー=フォック法での計算では、各時刻で決まる一粒子波動関数によって、そこから作られる密度分布を通してその時刻でのポテンシャルが決まる (式 (2.1.13))。つまりポテンシャルが各時刻で変化することで、ハミルトニアンも時間に依存してしまう。従って時間依存ハートリー=フォック計算の際には、上で述べた時間発展の式 (2.2.13) を次の式 (2.2.29) のように拡張する [11]。

$$\varphi^{n+1} = \frac{1 - i\frac{1}{2}H^{n+1/2}\Delta t}{1 + i\frac{1}{2}H^{n+1/2}\Delta t}\varphi^n \quad (2.2.29)$$

ここで  $H^{n+1/2}$  は次のように作られる。

まず時刻  $t_n$  でのハミルトニアン  $H^n$  を用いて、以下のように時刻  $t_{n+1}$  での一粒子波動関数  $\bar{\varphi}^{n+1}$  を求める。

$$\bar{\varphi}^{n+1} = \frac{1 - i\frac{1}{2}H^n\Delta t}{1 + i\frac{1}{2}H^n\Delta t}\varphi^n \quad (2.2.30)$$

この一粒子波動関数  $\bar{\varphi}^{n+1}$  を用いて時刻  $t_{n+1}$  でのハミルトニアン  $\bar{H}^{n+1}$  が計算できる。ここから式 (2.2.29) で用いた  $H^{n+1/2}$  を次のように定義する。

$$H^{n+1/2} = \frac{H^n + \bar{H}^{n+1}}{2} \quad (2.2.31)$$

式 (2.2.8) で時刻  $t$  での波動関数  $\varphi(t)$  を使う代わりに  $(\varphi(t + \Delta t) + \varphi(t))/2$  を使っており、そこでの時間発展に使うハミルトニアンを  $H^n$  ではなく  $H^{n+1/2}$  を使うという拡張 (2.2.29) は自然であるといえる。

このように時刻  $t_n$  でのハミルトニアンと時刻  $t_{n+1}$  でのハミルトニアンの平均をとった  $H^{n+1/2}$  を用いて時間発展を計算することで、各時刻  $t_n$  でハミルトニアン  $H^n$  を用いて計算するよりも、より良い精度でノルムやエネルギーなどの保存量を保ちながら時間発展を計算できる。この手法を用いる際には時間を 1 ステップ進むために二回の時間発展の計算 (2.2.9) が必要になるが、時間間隔  $\Delta t$  を通常の時発展の計算のときの二倍にすることで、計算にかかる時間は変わらなくなる。また、 $\Delta t$  を二倍にして式 (2.2.29) を用いるときも、通常の方法 (2.2.13) を時間幅  $\Delta t$  で計算したときよりも保存量がより良く保たれることが知られている [11]。

以上のように、時間依存ハートリー=フォック計算では式 (2.2.29) を用いて各時刻での一粒子波動関数を計算し、そこから得られる密度分布によって (2.2.12) のポテンシャルの部分各時刻ごとに更新しながら時間発展をしていく。



### 3 時間依存生成座標法

1章で述べた通り時間依存ハートリー=フォック法には多体の波動関数のトンネル効果を表現できないという欠点がある。それを解決するための方法として、本論文では時間依存生成座標法を考える。

#### 3.1 概要

時間依存生成座標法は、その名の通り時間依存を考慮した生成座標法である。時間依存のない生成座標法については付録 B で詳しく議論するが、生成座標法の目的はハートリー=フォック近似によって失われた量子的な効果を回復させることである。

時間依存生成座標法で考える波動関数は時間に依存する複数のスレーター行列式  $|\Phi_a(t)\rangle$  を重ねあわせたもので、以下で与えられる。

$$|\Psi(t)\rangle = \int da f(a, t) |\Phi_a(t)\rangle \quad (3.1.1)$$

ここで  $a$  は生成座標と呼ばれ、通常は原子核の変形度や衝突する原子核の相対運動エネルギーなどの巨視的な量を選ぶ。  $f(a, t)$  は重み関数と呼ばれ、時間に依存するスレーター行列式の重ね合わせの係数である。この時間に依存するスレーター行列式  $|\Phi_a(t)\rangle$  は一般に直交していない。

ここで重み関数  $f(a, t)$  とスレーター行列式  $|\Phi_a(t)\rangle$  はどちらも時間に依存する変分パラメータであると考え、式 (3.1.1) で与えられた関数を試行関数として変分法を用いる。このとき作用は以下の通りである。

$$S = \int dt \langle \Psi(t) | H - i\partial_t | \Psi(t) \rangle \quad (3.1.2)$$

$$= \int dt \int da \int da' f^*(a, t) \langle \Phi_a(t) | H - i\partial_t | f(a', t) \Phi_{a'}(t) \rangle \quad (3.1.3)$$

この作用に対し、重み関数の変分  $\frac{\delta S}{\delta f^*} = 0$  をとると以下の式が得られる。

$$\int da' \langle \Phi_a(t) | H - i\partial_t | f(a', t) \Phi_{a'}(t) \rangle = 0 \quad (3.1.4)$$

この式を変形すれば以下の方程式が得られる。

$$\int da' \langle \Phi_a(t) | H - i\partial_t | \Phi_{a'}(t) \rangle f(a', t) = i \int da' \langle \Phi_a(t) | \Phi_{a'}(t) \rangle \frac{\partial f(a', t)}{\partial t} \quad (3.1.5)$$

これで解くべき方程式が一種類求まった。この時間依存生成座標法では、変分を取るべきは重み関数だけではなく、以下のような各スレーター行列式に属する一粒子波動関数  $\varphi$  に対しても必要となる。

$$\frac{\delta S}{\delta \varphi^*} = 0 \quad (3.1.6)$$

ただし本論文では、簡単のために  $|\Phi_a(t)\rangle$  は既知として  $f(t)$  の従う方程式のみを取り扱う。具体的には一粒子波動関数に関する変分を解いてその時間発展を求める代わりに、各スレーター行列式が独立に時間依存ハートリー=フォック法によって時間発展していくという近似を用いる [18]。この近似では一粒子波動関数の時間発展に重み関数の変化による影響が入らない。これは別の見方をすれば時間に依存した基底を用いた基底展開であるともみなせる。

文献 [12–15] などでは同じ時間依存生成座標法という名前で以下の試行関数が用いられた。

$$|\Psi(t)\rangle = \int da f(a, t) |\Phi_a\rangle \quad (3.1.7)$$

これは (3.1.1) 式を試行関数とする時間依存生成座標法と異なり、 $|\Phi_a\rangle$  は静的ハートリー=フォック法によって作られる時間に依存しないスレーター行列式であり、各  $a$  に対して通常は基底状態のものが用いられる。つまり時間依存性があるのは重み関数だけで、基底となる  $|\Phi(a)\rangle$  は時間によらないスレーター行列式である。重ね合わせに用いるスレーター行列式がもし完全系をはっていたなら、任意の波動関数はそれらの重ね合わせでかけるので重みの時間発展のみを考えれば十分である。しかし実際上は完全系をはるようなスレーター行列式の集合をすべて考えるのは不可能である。よって問題は如何にして効率的な基底を選んでくるかというものになる。そこで式 (3.1.7) と (3.1.1) との違いが現われる。今回考えるような時間依存ハートリー=フォック法の解の重ね合わせでは、各軌道が近似的ではあるが核反応における一粒子波動関数の励起を含んでいるので、静的なスレーター行列式では入れることのできない基底を入れることができると考えられる。

## 3.2 時間発展の方法

(3.1.5) 式を数値的に解く際に時間微分を単純に差分になおして解くとすると時間依存ハートリー=フォック法のときに述べたように  $e^{-iH\Delta t}$  のテイラー展開で生じる誤差により全体の波動関数のノルムが保存しなくなってしまう。そこでここでもクランク=ニコルソン法を用いたい [16, 17](2.2 節)。そのために以下のように、重み関数の変分から得られた方程式をシュレディンガー方程式の形に変形する。そのためにノルムカーネル、ハミル

トニアンカーネルを次のように定義する。

$$\mathcal{N}(a, a') = \langle \Phi_a(t) | \Phi_{a'}(t) \rangle \quad (3.2.1)$$

$$\mathcal{H}(a, a') = \langle \Phi_a(t) | H - i\partial_t | \Phi_{a'}(t) \rangle \quad (3.2.2)$$

すると方程式 (3.1.5) は以下の形に簡略化できる。

$$\hat{\mathcal{H}}f = i\hat{\mathcal{N}}\dot{f} \quad (3.2.3)$$

ここでハットは積分を含めた演算子であるという意味でつけた。この形のままだでも数值的に計算は可能だが、クランク=ニコルソン法を用いるために以下に続く変形を行なう。

まずノルムカーネルはその固有値が半正定値であるため、その二乗根を用いて分解できる。

$$\mathcal{N}(a, a'; t) = \int dQ \mathcal{N}^{\frac{1}{2}}(a, Q; t) \mathcal{N}^{\frac{1}{2}}(Q, a'; t) \quad (3.2.4)$$

すると方程式 (3.2.3) はノルムカーネルが正則であれば以下のように変形できる。

$$\mathcal{N}^{-\frac{1}{2}} \mathcal{H} \mathcal{N}^{-\frac{1}{2}} \mathcal{N}^{\frac{1}{2}} f = i \mathcal{N}^{\frac{1}{2}} \dot{f} \quad (3.2.5)$$

ここで重み関数に  $\mathcal{N}^{\frac{1}{2}}$  をかけたものを以下のように定義する。

$$g(a, t) = \int da' \mathcal{N}^{\frac{1}{2}}(a, a', t) f(a', t) = \hat{\mathcal{N}}^{\frac{1}{2}} f \quad (3.2.6)$$

そして積の微分公式を用いて  $\hat{\mathcal{N}}^{\frac{1}{2}} \dot{f} = \partial_t (\hat{\mathcal{N}}^{\frac{1}{2}} f - \dot{\hat{\mathcal{N}}^{\frac{1}{2}}} f)$  とすると式 (3.2.5) は以下となる。

$$\left( \hat{\mathcal{N}}^{-\frac{1}{2}} \mathcal{H} \hat{\mathcal{N}}^{-\frac{1}{2}} \hat{\mathcal{N}}^{\frac{1}{2}} + i \dot{\hat{\mathcal{N}}^{\frac{1}{2}}} \hat{\mathcal{N}}^{-\frac{1}{2}} - i\partial_t \right) g = 0 \quad (3.2.7)$$

これで実効ハミルトニアンを以下の式 (3.2.9) で定義すれば、次のシュレディンガー方程式 (3.2.8) が得られる。

$$(H - i\partial_t)g = 0 \quad (3.2.8)$$

$$H = \hat{\mathcal{N}}^{-\frac{1}{2}}(t) \mathcal{H} \hat{\mathcal{N}}^{-\frac{1}{2}}(t) + i \dot{\hat{\mathcal{N}}^{\frac{1}{2}}}(t) \hat{\mathcal{N}}^{-\frac{1}{2}}(t) \quad (3.2.9)$$

これでクランク=ニコルソン法が使える形へと変形できた。

ハミルトニアンがエルミートでなければ時間発展がユニタリーでないが、(3.2.9) 式の  $H$  がエルミートであることは以下のように示される。まず  $H$  のハミルトニアンカーネル、ノルムカーネルを用いての表式は以下であった。

$$H = \mathcal{N}^{-\frac{1}{2}} \mathcal{H} \mathcal{N}^{-\frac{1}{2}} + i \dot{\mathcal{N}}^{\frac{1}{2}} \mathcal{N}^{-\frac{1}{2}} \quad (3.2.10)$$

ハミルトニアンカーネルやノルムカーネルの二乗根はエルミート共役をとると以下となる。

$$\left(\mathcal{N}^{-\frac{1}{2}}\right)^\dagger = \mathcal{N}^{-\frac{1}{2}} \quad (3.2.11)$$

$$(\mathcal{H})^\dagger = \mathcal{H} + i\dot{\mathcal{N}} \quad (3.2.12)$$

ここで式 (3.2.11) はノルムカーネルがエルミートであることから示せる。エルミート行列はユニタリ行列によって対角化可能であるので、そのようにノルムカーネルを対角化すれば以下のようなになる。

$$\mathcal{N} = \Lambda^{-1} \text{diag}(n_1, \dots, n_N) \Lambda \quad (3.2.13)$$

ここで  $\Lambda$  は  $\mathcal{N}$  を対角化するユニタリ行列、 $n_i$  はノルムカーネルの各固有値である。ここでノルムカーネルの固有値は非負の実数となる。ここから二乗根を考えると以下のようなになる。

$$\mathcal{N}^{\frac{1}{2}} = \Lambda^{-1} \text{diag}(\sqrt{n_1}, \dots, \sqrt{n_N}) \Lambda \quad (3.2.14)$$

これは  $\mathcal{N}^{\frac{1}{2}} \mathcal{N}^{\frac{1}{2}} = \mathcal{N}$  を満たしている。このように書けば  $\mathcal{N}^{\frac{1}{2}}, \mathcal{N}^{-\frac{1}{2}}$  などもエルミートであることが分かる。

また式 (3.2.12) は以下のように示される。

$$\mathcal{H}^\dagger = (\langle a | H - i\partial_t | a' \rangle)^\dagger \quad (3.2.15)$$

$$= (\langle a' | H | a \rangle)^* + i (\langle a' | \partial_t | a \rangle)^* \quad (3.2.16)$$

$$= \langle a | H | a' \rangle + i \langle \dot{a} | a' \rangle \quad (3.2.17)$$

$$= \langle a | H | a' \rangle + i (\partial_t \mathcal{N} - \langle a | \dot{a}' \rangle) \quad (3.2.18)$$

$$= \mathcal{H} + i\dot{\mathcal{N}} \quad (3.2.19)$$

この式 (3.2.11)、(3.2.12) を用いて  $H$  のエルミート性は以下のように示される。

$$H^\dagger = \mathcal{N}^{-\frac{1}{2}} (\mathcal{H} + i\dot{\mathcal{N}}) \mathcal{N}^{-\frac{1}{2}} - i\mathcal{N}^{-\frac{1}{2}} \dot{\mathcal{N}}^{\frac{1}{2}} \quad (3.2.20)$$

$$= \mathcal{N}^{-\frac{1}{2}} \mathcal{H} \mathcal{N}^{-\frac{1}{2}} + i\mathcal{N}^{-\frac{1}{2}} (\dot{\mathcal{N}}^{\frac{1}{2}} - \mathcal{N} \dot{\mathcal{N}}^{-\frac{1}{2}}) - i\mathcal{N}^{-\frac{1}{2}} \dot{\mathcal{N}}^{\frac{1}{2}} \quad (3.2.21)$$

$$= \mathcal{N}^{-\frac{1}{2}} \mathcal{H} \mathcal{N}^{-\frac{1}{2}} - i\mathcal{N}^{\frac{1}{2}} \dot{\mathcal{N}}^{-\frac{1}{2}} \quad (3.2.22)$$

$$= \mathcal{N}^{-\frac{1}{2}} \mathcal{H} \mathcal{N}^{-\frac{1}{2}} + i\dot{\mathcal{N}}^{\frac{1}{2}} \mathcal{N}^{-\frac{1}{2}} \quad (3.2.23)$$

$$= H \quad (3.2.24)$$

ここで1行目から2行目、そして3行目から4行目への式変換は以下の式を用いている。

$$\partial_t \left( \mathcal{N} \mathcal{N}^{-\frac{1}{2}} \right) = \dot{\mathcal{N}} \mathcal{N}^{-\frac{1}{2}} + \mathcal{N} \dot{\mathcal{N}}^{-\frac{1}{2}} = \dot{\mathcal{N}}^{\frac{1}{2}} \quad (3.2.25)$$

$$\partial_t \left( \mathcal{N}^{\frac{1}{2}} \mathcal{N}^{-\frac{1}{2}} \right) = \dot{\mathcal{N}}^{\frac{1}{2}} \mathcal{N}^{-\frac{1}{2}} + \mathcal{N}^{\frac{1}{2}} \dot{\mathcal{N}}^{-\frac{1}{2}} = \partial_t 1 = 0 \quad (3.2.26)$$

ここまでくれば式(3.2.8)と式(3.2.6)を解いて重み関数  $f$  が求まり、スレーター行列式の重ねあわせである今回の試行関数が各時刻で求まる。つまり重み関数の初期値さえ与えてしまえば、試行関数が時間によってどのように変化するかを追えるということである。

## 4 1次元系への応用

今回の計算では前章で述べた時間依存生成座標法を用いて、多体のトンネル効果の記述を試みる。原子核の衝突を例に考えると、1章で述べたように原子核間にはポテンシャル障壁が存在する。そして時間依存ハートリー=フォック法を用いた計算では入射のエネルギーが、そのポテンシャル障壁よりも高ければポテンシャルを透過し、低ければ量子トンネル効果は起きず、ポテンシャル障壁によって反射される。

今回用いる時間依存生成座標法では、試行関数を作る際の重ね合わせの基底として用いるスレーター行列式の時間発展を、時間依存ハートリー=フォック法によって代用する [18]。この近似のもとでの計算では、重み関数  $f(a)$  の時間発展は各スレーター行列式  $|\Phi_a\rangle$  の時間発展に影響しない。これは、各スレーター行列式の時間発展は今回の手法でも時間依存ハートリー=フォック法と変わらないということである。それゆえ各スレーター行列式に対しポテンシャル障壁の透過の有無は変化しない。しかし、試行関数はそれらのスレーター行列式に適当な重さをかけて重ね合わせたものであり、以下に示すように系の初期状態に与える運動エネルギーが異なるスレーター行列式を重ね合わせることで、単一のスレーター行列式では表現できなかったトンネル効果の記述ができる可能性がある。このような系の重ね合わせを考えた場合、系に与えたエネルギーによって各スレーター行列式がポテンシャル障壁を透過するかどうかが決まり、障壁を透過するスレーター行列式と透過しないスレーター行列式の係数を比較することでトンネル確率が定義できる。

### 4.1 計算のセットアップ

今回の計算では1次元での  ${}^4\text{He} + {}^4\text{He}$  ( $\alpha + \alpha$ ) の衝突を考える。この系のハミルトニアンとして以下のものを用いる [18]。静的なハートリー=フォック計算及び時間依存ハートリー=フォック法を用いて、

トリー=フォック計算はこのエネルギー  $\langle \Phi | H | \Phi \rangle$  を用いて行なわれる。

$$\langle \Phi | H | \Phi \rangle = \int dx \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \tau(x) + \frac{t_3}{3} \rho(x)^3 + \frac{t_0}{2} \rho(x) \int dx' \rho(x') \frac{b}{\sqrt{\pi}} e^{-(x-x')^2/b^2} + \frac{\alpha \hbar c}{2} \rho_p(x) \int dx' \frac{\rho_p(x')}{\sqrt{(a^2 + (x-x')^2)}} \right\} \quad (4.1.1)$$

$$\tau(x) = \sum_i \left( \frac{d}{dx} \varphi_i^*(x) \right) \left( \frac{d}{dx} \varphi_i(x) \right) = \sum_i \left| \frac{d}{dx} \varphi_i(x) \right|^2 \quad (4.1.2)$$

$$\rho(x) = \sum_i \varphi_i^*(x) \varphi_i(x) = \sum_i |\varphi_i|^2 \quad (4.1.3)$$

$\rho_p$  は陽子だけで計算した密度  $\rho$  である。 $\alpha$  は微細構造定数であり、今回の計算では  $\alpha \hbar c \simeq 197.329/137 \simeq 1.44$  MeV fm としている。ここに使われているパラメータの値はそれぞれ以下の通りである。

$$t_0 = -12.5 \text{ MeV/fm} \quad (4.1.4)$$

$$t_3 = 8.8 \text{ MeV/fm}^2 \quad (4.1.5)$$

$$a = 1.0 \text{ fm} \quad (4.1.6)$$

$$b = 2.0 \text{ fm} \quad (4.1.7)$$

また核子の質量は陽子、中性子の差を無視し以下の値を用いた。

$$m = 938.16 \text{ MeV}/c^2 \quad (4.1.8)$$

なお、ここに行く計算では時間、空間を有限の幅のメッシュに切り、有限の大きさの箱の中で行なうがその幅  $c\Delta t, \Delta x$  と箱の大きさ  $x_{max}$  は以下の値を用いた。

$$c\Delta t = 0.024 \text{ fm} \quad (4.1.9)$$

$$\Delta x = 0.10 \text{ fm} \quad (4.1.10)$$

$$x_{max} = 30 \text{ fm} \quad (4.1.11)$$

## 4.2 基底状態に対する静的な計算

ここでは衝突させる原子核の初期状態として用いる静的なハートリー=フォック計算の結果を示す。静的なハートリー=フォック計算で求めた  ${}^4\text{He}$  の基底状態における一粒子エネルギーは、中性子では一番低い準位から  $\epsilon = -23.693$  MeV、 $-11.907$  MeV、

-1.9015 MeV を得た。陽子ではクーロン力によって中性子より少し束縛エネルギーが小さくなっているため、一番低い準位から  $\epsilon = -21.883$  MeV、 $-10.496$  MeV、 $-0.96884$  MeV となる。これらの波動関数は準位のラベルを  $k$  として、以下のハートリー= フォック方程式を満たす。

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + v_\tau(x) \right) \varphi_\tau^{(k)}(x) = \epsilon_k \varphi_\tau^{(k)}(x) \quad (4.2.1)$$

一粒子ポテンシャルの形を一粒子エネルギーとともに図 5、6 に示す。一粒子ポテンシャルは以下の式で定義される。パラメータの値は前に与えた式 (4.1.4)-(4.1.7) と同じである。

$$v_\tau(x) = \int dx \left\{ t_3 \rho(x)^2 + t_0 \int dx' \rho(x') \frac{b}{\sqrt{\pi}} e^{-(x-x')^2/b^2} + \delta_{\tau,p} \alpha \hbar c \int dx' \frac{\rho_p(x')}{\sqrt{(a^2 + (x-x')^2)}} \right\} \quad (\tau = p, n) \quad (4.2.2)$$

$\tau$  はアイソスピンを表しており、 $p, n$  は陽子と中性子を意味している。式 (4.2.2) の最後の項はクーロン力なので、陽子だけに作用する。図 5、6 の紫の線は中性子、陽子それぞれのポテンシャルを表しており、直線は各エネルギー準位を表している。また、各準位の波動関数をエネルギーの直線の上に適当にスケールしてのせた。今回考えている系は  ${}^4\text{He}$  原子核であり、スピン、アイソスピンが異なる四個の核子が一番下の準位を占有する。図 7 に一番低い準位の一粒子波動関数から得られる密度を示す。

${}^4\text{He}$  原子核の一粒子波動関数をガウス関数でフィットしたものを以下の図 8、9 に示す。フィットに用いたガウス関数は  $ae^{(-x^2/\sigma)}$  の形であり、中性子の一粒子波動関数は、 $a = 0.549 \text{ fm}^{\frac{1}{2}}$ 、 $\sigma = 7.02 \text{ fm}^2$  のパラメータをもったガウス関数、陽子の一粒子波動関数は  $a = 0.544 \text{ fm}^{\frac{1}{2}}$ 、 $\sigma = 7.26 \text{ fm}^2$  のパラメータを持ったガウス関数で上手くフィットできている。このことは後の 4.4.1 節で使う。

上で求めた  ${}^4\text{He}$  の基底状態から、Frozen Density 近似と呼ばれる方法で、二つの原子核の間に働くポテンシャルを計算することが出来る。Frozen Density 近似におけるポテンシャルは、その系のすべての一粒子波動関数をまとめて反対称化しスレーター行列式としたときの全エネルギーから相対距離無限大のときの系の全エネルギーを引いたものである。すなわち、核子数を  $A$  として、全系の波動関数を

$$|\Phi(R)\rangle = \mathcal{A} \left[ \varphi_l^{(1)} \varphi_l^{(2)} \dots \varphi_l^{(A)} \varphi_r^{(1)} \varphi_r^{(2)} \dots \varphi_r^{(A)} \right] (R) \quad (4.2.3)$$

で定義して、

$$E(R) = \frac{\langle \Phi(R) | H | \Phi(R) \rangle}{\langle \Phi(R) | \Phi(R) \rangle} - 2E_0 \quad (4.2.4)$$



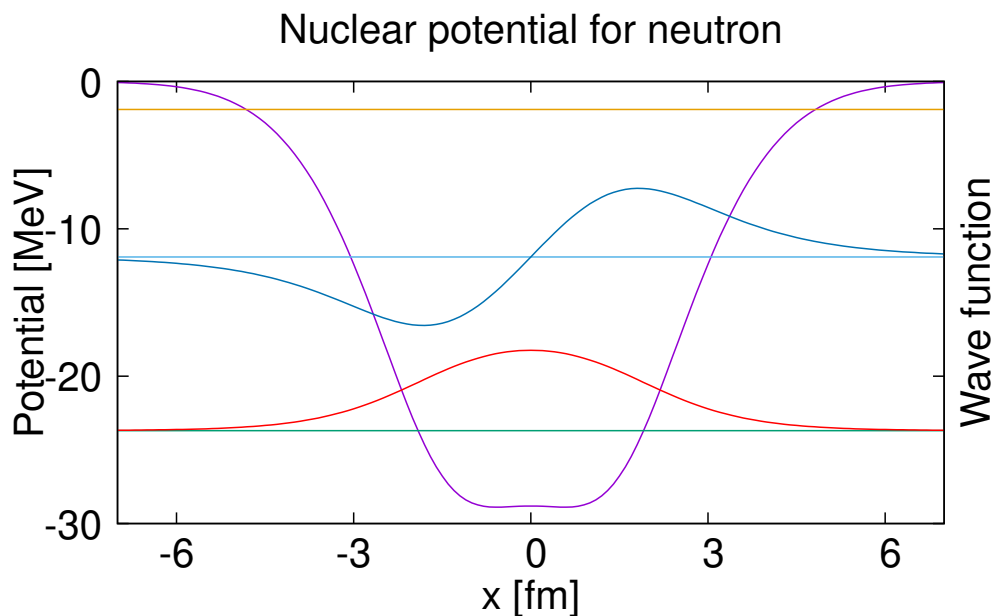


図5 静的ハートリー=フォック計算で得られた中性子のポテンシャルと各エネルギー準位での波動関数の概形。波動関数は適当にスケールしたものである。各準位のエネルギーは低い方から  $-23.693$  MeV、 $-11.907$  MeV、 $-1.9015$  MeV である

でポテンシャルを定義する。(4.2.3) 式の  $\varphi_l, \varphi_r$  はそれぞれ、左右に配置した原子核の一粒波動関数であり、原点に重心を置いた  ${}^4\text{He}$  原子核の各準位  $k$  の一粒波動関数を  $\varphi^{(k)}$  とすると、以下のように表せる。

$$\varphi_l^{(k)}(x) = \varphi^{(k)}\left(x + \frac{R}{2}\right) \quad (4.2.5)$$

$$\varphi_r^{(k)}(x) = \varphi^{(k)}\left(x - \frac{R}{2}\right) \quad (4.2.6)$$

$\mathcal{A}$  は反対称化の演算である。式 (4.2.4) の第一項の分母は規格化定数であり、これによって二つの原子核のオーバーラップが大きくなったときに、系全体を反対称化することで失われた核子の分を補正する。相対距離無限大のときには二つの原子核は独立とみなせるので、そのときに残るエネルギー  $E_0$  は静的ハートリー=フォック計算で一つの原子核を作ったときのエネルギーである。 $R$  は重心間の距離である。 $E$  は重心間の距離の関数としてのエネルギー、 $H$  はハミルトニアンである。Frozen Density 近似によって求めたポテンシャルを図 10 に示す。実際の核反応では原子核が近づくと変形したり内部励起が起

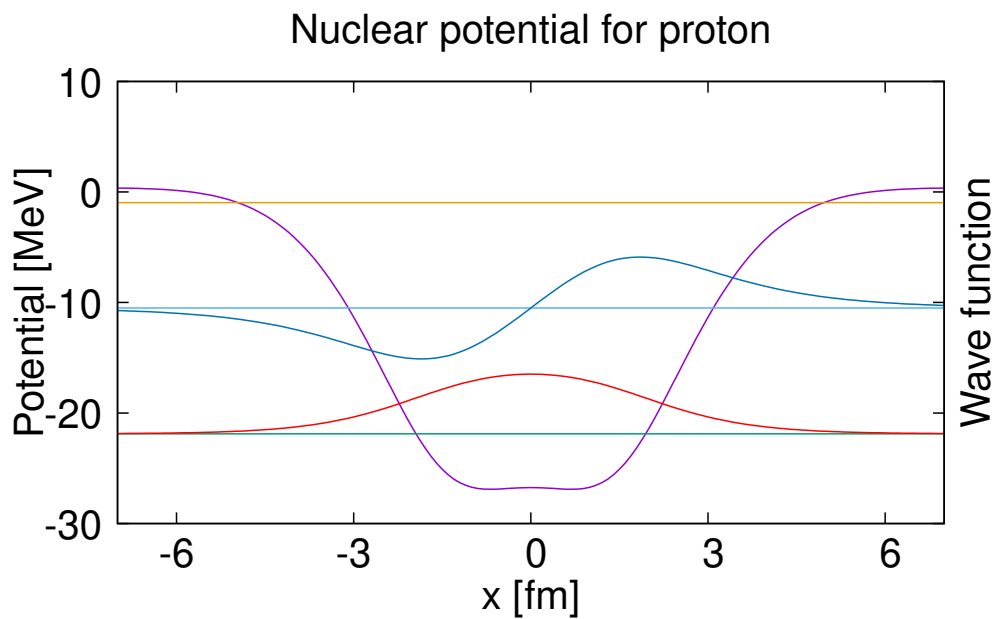


図6 静的ハートリー=フォック計算で得られた陽子のポテンシャルと各エネルギー準位での波動関数の概形。波動関数は適当にスケールしたものである。各準位のエネルギーは低い方から  $-21.883$  MeV、 $-10.496$  MeV、 $-0.96884$  MeV である

きるが、この方法はそれを無視しているためこのポテンシャルは正確には核反応におけるポテンシャルを再現していない。しかし原子核間のポテンシャル障壁の大体の大きさはこの図10から分かり、この系のポテンシャル障壁の高さは  $0.6$  MeV 程度である。

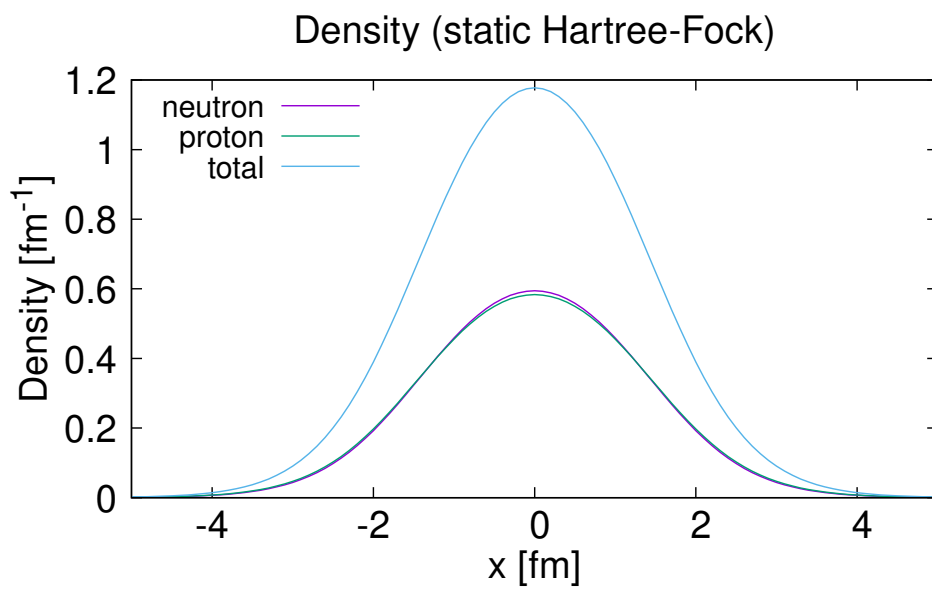


図7 静的ハートリー=フォック計算で得られた陽子、中性子の密度分布とそれらを合わせた密度分布。紫の線が中性子、緑の線が陽子、水色の線が合計した密度分布を表している。

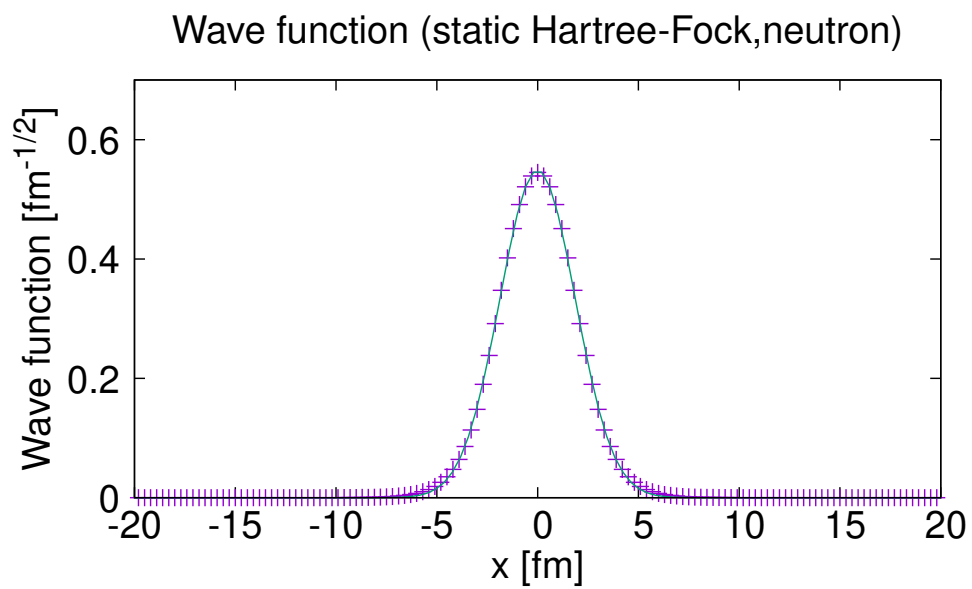


図 8  ${}^4\text{He}$  中の中性子の一粒子波動関数とガウス関数との比較。+ は波動関数の値を表し、実線はそれをガウス関数  $ae^{(-x^2/\sigma)}$  でフィットしたもの。このときフィットしたパラメータは  $a = 0.549 \text{ fm}^{1/2}$ 、 $\sigma = 7.02 \text{ fm}^2$  である。

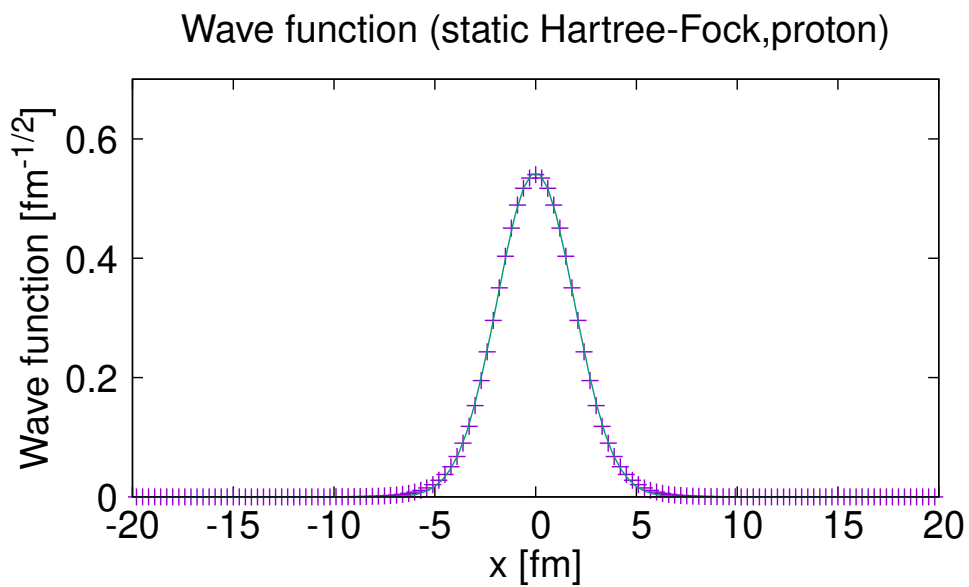


図9  ${}^4\text{He}$  中の陽子の一粒波動関数とガウス関数との比較。+ は波動関数の値を表し、実線はそれをガウス関数  $ae^{(-x^2/\sigma)}$  でフィットしたもの。このときフィットしたパラメータは  $a = 0.544 \text{ fm}^{\frac{1}{2}}$ 、 $\sigma = 7.26 \text{ fm}^2$  である。

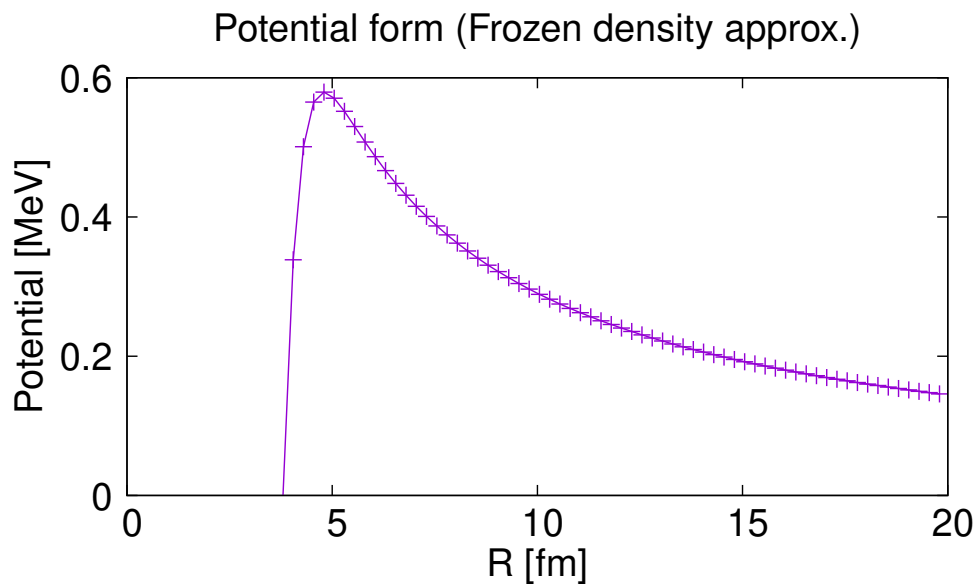


図10 frozen density 近似での核間ポテンシャル。+ は計算したポテンシャルで実線はそれを繋いだもの

### 4.3 時間依存ハートリー=フォックの計算

次に  ${}^4\text{He} + {}^4\text{He}$  系の衝突を時間依存ハートリー=フォック法で計算した結果を示す。静的ハートリー=フォック法で用意した基底状態の原子核を、それぞれの重心が  $x = \pm 20$  fm の位置になるように配置し、双方を原点方向に等しい運動量でブーストし、以下の方程式 (4.3.1) に従って各一粒子波動関数を  $\varphi_\tau^{(k)}$  を時間発展させた。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi_\tau^{(k)}(x, t) = h_\tau \varphi_\tau^{(k)}(x, t) \quad (4.3.1)$$

ここで  $h$  は以下の式 (4.3.2) で定義される一粒子ハミルトニアンである。 $\tau$  はアイソスピンを意味し、式 (4.3.2) の最後の項はクーロン力なので  $\tau = p$  のとき、つまり陽子のみに作用する。

$$h_\tau = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \int dx \left\{ t_3 \rho(x)^2 + t_0 \int dx' \rho(x') \frac{b}{\sqrt{\pi}} e^{-(x-x')^2/b^2} + \delta_{\tau,p} \alpha \hbar c \int dx' \frac{\rho_p(x')}{\sqrt{(a^2 + (x-x')^2)}} \right\} \quad (4.3.2)$$

原子核の相対距離の時間発展の結果を図 11 に示す。横軸は時間経過、縦軸は原子核の相対距離 (の半分) である。軌道毎に与えた相対運動量は図に書いてあるとおりである。この図 11 の縦軸である  $|x|_{cm}$  は密度を用いて以下の式で定義される。

$$|x|_{cm} = \frac{\int dx |x| \rho(x)}{\int dx \rho(x)} \quad (4.3.3)$$

この図 11 のようにある程度大きなエネルギーをもって衝突をさせると原子核同士は衝突した後一体となったまま振動している。この現象を時間依存ハートリー=フォック計算では核融合反応とみなす。衝突時のエネルギーが低ければクーロンポテンシャルの障壁に阻まれ、融合はせずに離れていく。この図 11 では  $p = 10.08$  MeV/c と  $p = 10.28$  MeV/c がポテンシャル障壁を越えるかどうかの境目になっており、これは重心のエネルギーに直すと  $E_{cm} = 0.44$  MeV と  $E_{cm} = 0.45$  MeV であり (式 (2.2.1) 参照)、先程の図 10 でのポテンシャルの大きさと大体同じである。逆にいえばこのポテンシャル障壁の大きさのずれが原子核の励起を考慮しているかどうかの差であるとも言える。

また時間依存ハートリー=フォック法での密度の時間発展を以下の図 12 に示した。オレンジと青が反射される軌道、緑と赤が融合する軌道である。反射されたときの密度は初期状態からほとんど形を変えずに離れていくのに対して、融合した場合の密度は大きな振

### Trajectories of each Slater Determinant

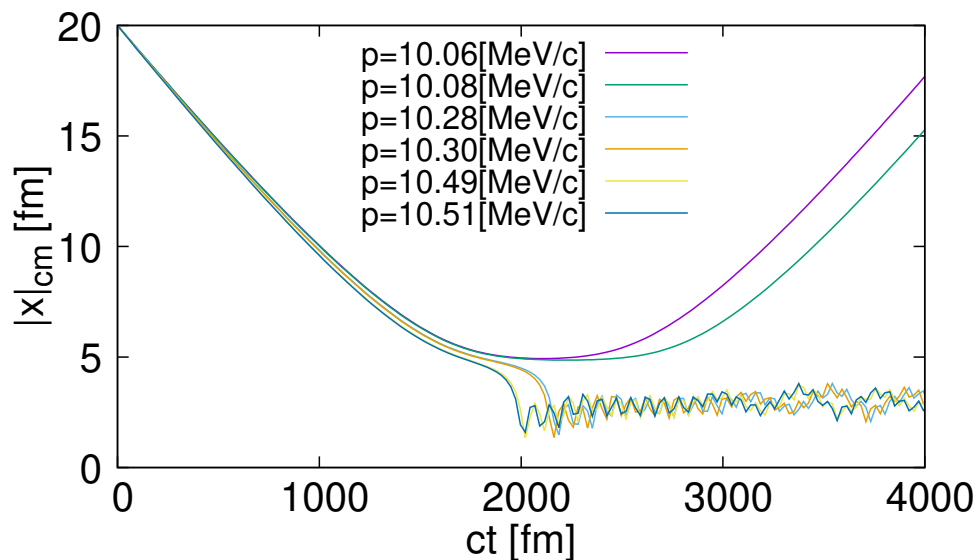


図 11 一次元時間依存ハートリー=フォック計算での原子核の相対距離の時間変化。初期条件として与えた運動量によって反射される場合と融合する場合がある。紫と緑の線は反射され、他の線は融合する軌道である。

幅で運動する一つの原子核とみなせるようになる。この密度分布の結果を見ても、個々の時間依存ハートリー=フォック計算の結果の波動関数は、融合する波動関数と反射する波動関数の重ね合わせ状態にはなっていない。これはつまり、時間依存ハートリー=フォック計算ではトンネル確率は0か1になってしまうということである。

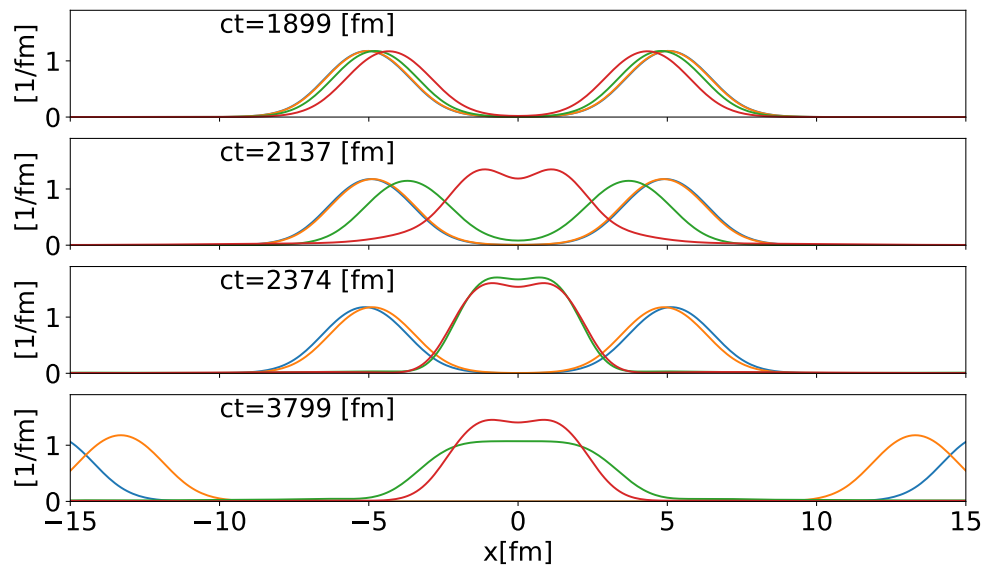


図 12 融合する軌道、反射する軌道それぞれの密度分布の時間発展の様子。縦軸は密度を表す。それぞれの色は初期運動量が異なり、オレンジが 10.06 MeV/c、青が 10.08 MeV/c、緑が 10.25 MeV/c、赤が 10.47 MeV/c の運動量の軌道に対応している



#### 4.4 時間に依存する生成座標法におけるカーネルの計算

ここでは 4.3 節で述べた時間依存ハートリー=フォック計算の結果を用いて、3 章で定義したノルムカーネル、ハミルトニアンカーネルを計算した結果を示す。生成座標法では計算の簡単化のためにガウシアンオーバーラップ近似 (B.2) という近似がしばしば用いられるが、この近似ではノルムカーネル、ハミルトニアンカーネルがそれぞれガウス型、ガウス × 二次の多項式の形であることを仮定している。この節では  ${}^4\text{He} + {}^4\text{He}$  の系に与える初期相対運動量  $p_i$  を生成座標とし、この系についてガウシアンオーバーラップ近似が良い近似になるのかを議論する。

実際の計算に用いた相互作用の形を  $\langle \Phi | H | \Psi \rangle$  の形で以下に示す。相互作用は時間依存ハートリー=フォックのときと同じだが、複数のスレーター行列式を用いるのでより一般的な形になっている。[19]

$$\begin{aligned} \langle \Phi | H | \Psi \rangle = \langle \Phi | \Psi \rangle \times \int dx \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \tilde{\tau}(x) + \frac{t_3}{3} \tilde{\rho}(x)^3 \right. \\ \left. + \frac{t_0}{2} \tilde{\rho}(x) \int dx' \tilde{\rho}(x') \frac{b}{\sqrt{\pi}} e^{-(x-x')^2/b^2} + \frac{\alpha \hbar c}{2} \tilde{\rho}_p(x) \int dx' \frac{\tilde{\rho}_p(x')}{\sqrt{(a^2 + (x-x')^2)}} \right\} \end{aligned} \quad (4.4.1)$$

ここで  $\tilde{\tau}, \tilde{\rho}$  は遷移運動エネルギー密度、遷移密度を意味し、その定義は以下の通りである。

$$\tilde{\tau}(x) = \sum_{i,j} \left( \frac{d}{dx} \varphi_i^*(x) \right) \left( \frac{d}{dx} \psi_j(x) \right) (B^{-1})_{ij} \quad (4.4.2)$$

$$\tilde{\rho}(x) = \sum_{i,j} \varphi_i^*(x) \psi_j(x) (B^{-1})_{ij} \quad (4.4.3)$$

$$B_{ij} = \langle \varphi_i | \psi_j \rangle \quad (4.4.4)$$

$\tilde{\rho}_p$  は陽子だけで計算した遷移密度  $\tilde{\rho}$  である。ここで  $\varphi, \psi$  はそれぞれ、スレーター行列式  $|\Phi\rangle, |\Psi\rangle$  に属する一粒子波動関数を意味している。またノルムカーネル  $\langle \Phi | \Psi \rangle$  は一粒子波動関数を用いて以下のように表現できる。(付録 C)

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \frac{\det \{ \langle \phi | \psi \rangle \}}{(\det \{ \langle \phi | \phi \rangle \} \det \{ \langle \psi | \psi \rangle \})^{\frac{1}{2}}} \quad (4.4.5)$$

(4.4.1) 式は  $\Psi = \Phi$ 、つまり同じスレーター行列式のときには時間依存ハートリー=フォック法でのエネルギーに一致する。またパラメータの値は 4.1 節と同じである。

#### 4.4.1 ノルムカーネル

■初期状態におけるノルムカーネル 以下の計算で考える系は2章の時間依存ハートリー＝フォック計算と同様の  ${}^4\text{He} + {}^4\text{He}$  の衝突である。この段落で計算されるノルムカーネルや、次の段落で計算されるハミルトニアンカーネルは、各成分が二つの異なる初期相対運動量を持ったスレーター行列式を用いて定義される行列である。例えば初期相対運動量  $p_i, p_j$  をそれぞれ持った、系全体を反対称化したスレーター行列式  $|\Phi_{p_i}\rangle, |\Phi_{p_j}\rangle$  を用意すると、ノルムカーネル  $\mathcal{N}$  の成分は以下で定義される。

$$\mathcal{N}(p_i, p_j) = \langle \Phi_{p_i} | \Phi_{p_j} \rangle \quad (4.4.6)$$

この量について、以下に結果を示していく。以下では次のように定義されるスレーター行列式間の初期相対運動量の差  $\Delta p$ , 初期相対運動量の平均  $p_{av}$  を使う。 $p_i, p_j$  は各  ${}^4\text{He} + {}^4\text{He}$  系を表すスレーター行列式に与えた相対運動量である。

$$\Delta p = p_i - p_j \quad (4.4.7)$$

$$p_{av} = \frac{p_i + p_j}{2} \quad (4.4.8)$$

まずはすべて原子核が初期状態にあるとき、時刻  $t = 0$  におけるノルムカーネルの計算結果を図 13 に示す。この図は横軸にスレーター行列式間の相対運動量の差をとったときの、ノルムカーネルの値である。× は計算した値、実線はその結果を  $\exp(-(\Delta p)^2/4\mu)$  でフィットしたものである。これを見ると  $t = 0$  ではノルムカーネルはガウス型でのフィットからほとんどずれていないことが分かる。また一般にガウス幅  $\mu$  は各スレーター行列式の初期運動量の平均  $p_{av}$  によるが、ノルムカーネルのガウス幅は  $t = 0$  では  $p_{av}$  依存性は見られなかった。

付録 D で詳しく述べるが、一粒子波動関数の形がガウス型になっているときには、今回の系の設定では、左右二つのスレーター行列式の距離が十分に離れていればノルムカーネルもガウス型であることが解析的に示される。そして今回用いた He 原子核の一粒子波動関数は 4.2 節で示した通り、ガウス型に近いものであることから、 $t = 0$  での結果は妥当なものである。

■ノルムカーネルの時間発展 用意した初期状態をそれぞれ独立に時間依存ハートリー＝フォックによって時間発展させ、その結果を用いてノルムカーネルの時間発展を計算した。以下の図 14 にノルムカーネルの時間発展の様子を示す。図中の ×、□、○ はそれぞれ時刻  $ct = 0, 47.520 \text{ fm}, 71.291 \text{ fm}$  の時のノルムカーネルを初期相対運動量の差  $\Delta p$  の

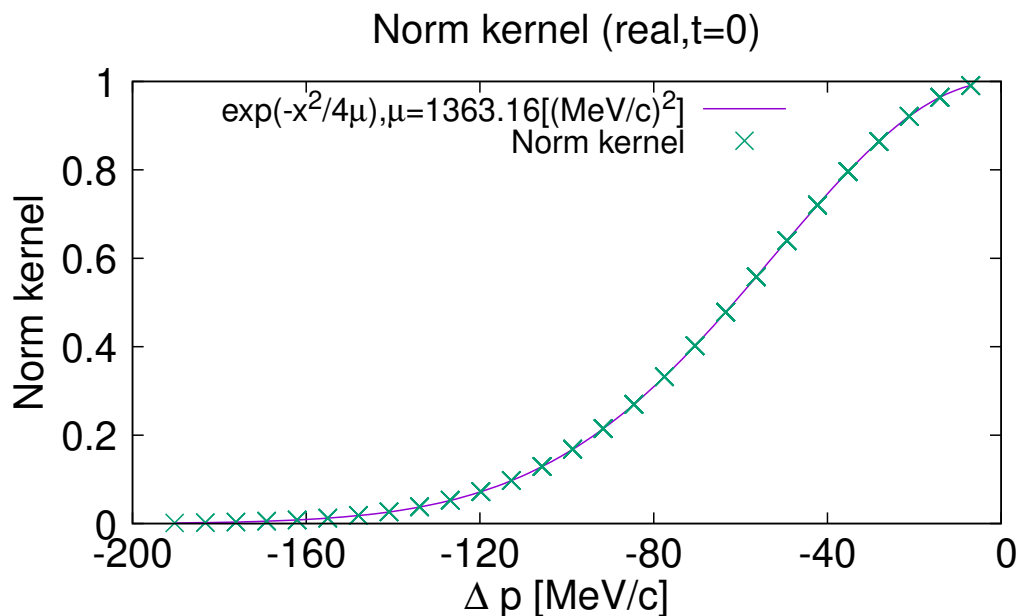


図 13 時刻  $t = 0$  におけるノルムカーネル。× はノルムカーネルの値、実線はそれをガウス関数でフィットしたもの。ガウス関数によるフィットからのずれはほとんど見られない。

関数として表したときの値であり、実線はそれらの値を  $\exp(-(\Delta p)^2/4\mu)$  でフィットしたものである。このときの  $\mu$  の値は時間の早い順で  $1363 (\text{MeV}/c)^2$ 、 $459.8 (\text{MeV}/c)^2$ 、 $154.6 (\text{MeV}/c)^2$  であり、ガウス幅が時間とともに小さくなっていく。このガウス幅の値を時間の関数として  $ct = 300 \text{ fm}$  までの範囲を図 15 に示す。このような時間発展は各スレーター行列式の空間的距離が広がっていくことで理解できる。各スレーター行列式は異なる初期運動量を持っており、時間が経つごとにそれらの相対距離は離れていく。それによって特に相対運動量の大きなところからスレーター行列式のオーバーラップであるノルムカーネルは小さくなっていく。それを以下の図 16 で示す。

次に原子核の衝突が始まる前と後でのノルムカーネルをそれぞれ以下の図 17、18 に示す。図 18 の同じ  $\Delta p$  での値のずれは初期運動量の平均値  $p_{av}$  の違いによる。すなわち衝突後のノルムカーネルには  $p_{av}$  依存性が現れる。また衝突前のノルムカーネルには実部しか含まれなかったものが、衝突後には虚部も含まれるようになった。

ここからガウス型の幅  $\mu$  が一般に  $p_{av}$  に依り、さらに複素数であると仮定してデータをフィットするとどうなるかを議論する。ここでガウス幅が複素数であるとき、ノルムカー

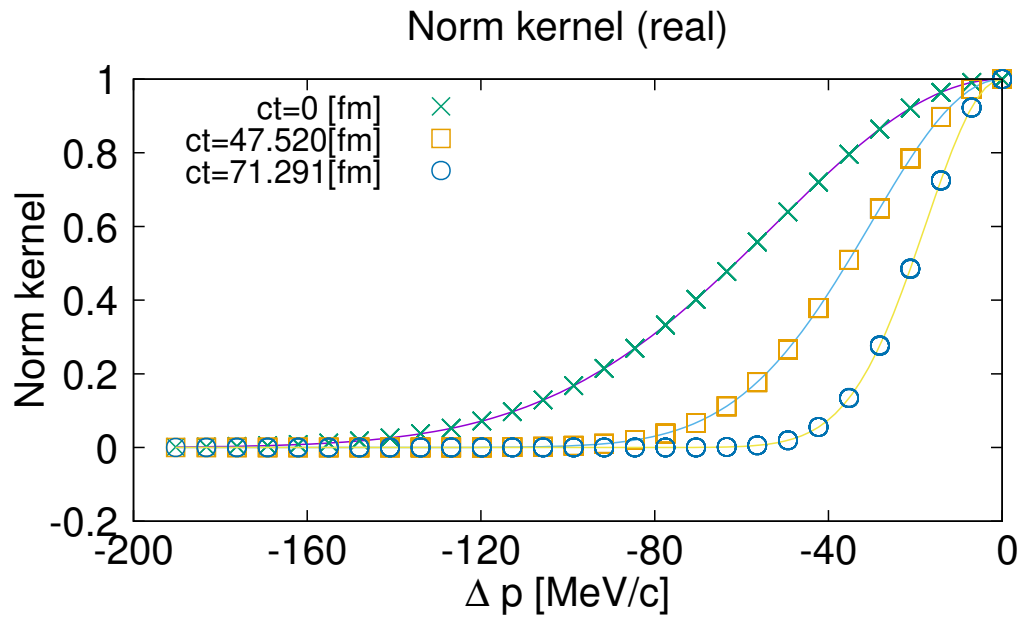


図 14 原子核が衝突するまでのノルムカーネルの時間発展。時間が経つごとにガウスの幅が狭くなっている。

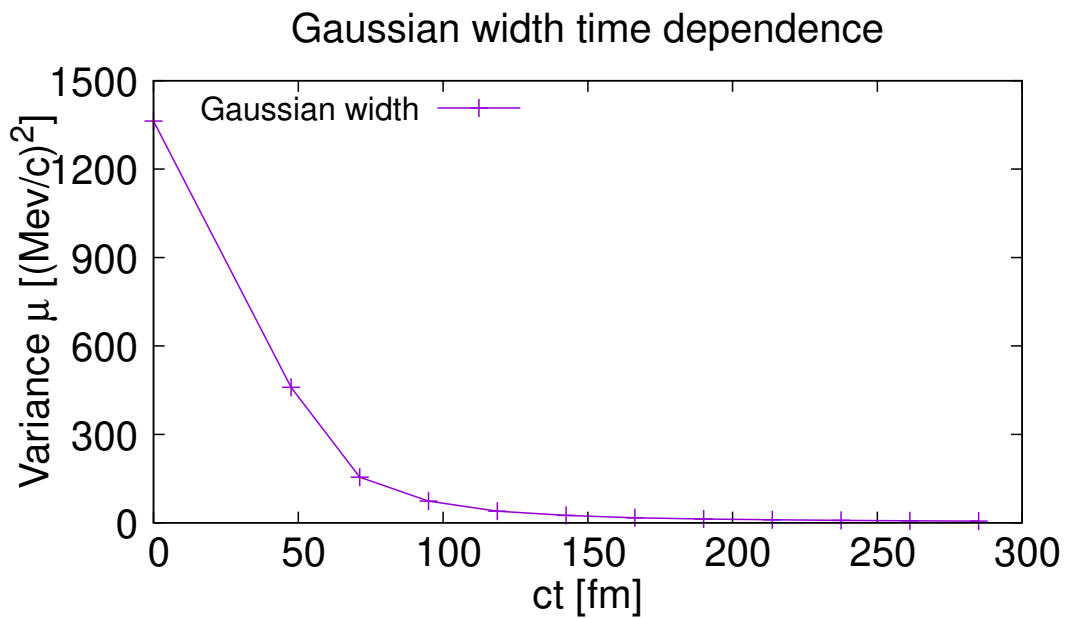


図 15 原子核が衝突するまでのノルムカーネルのガウス幅の時間依存性

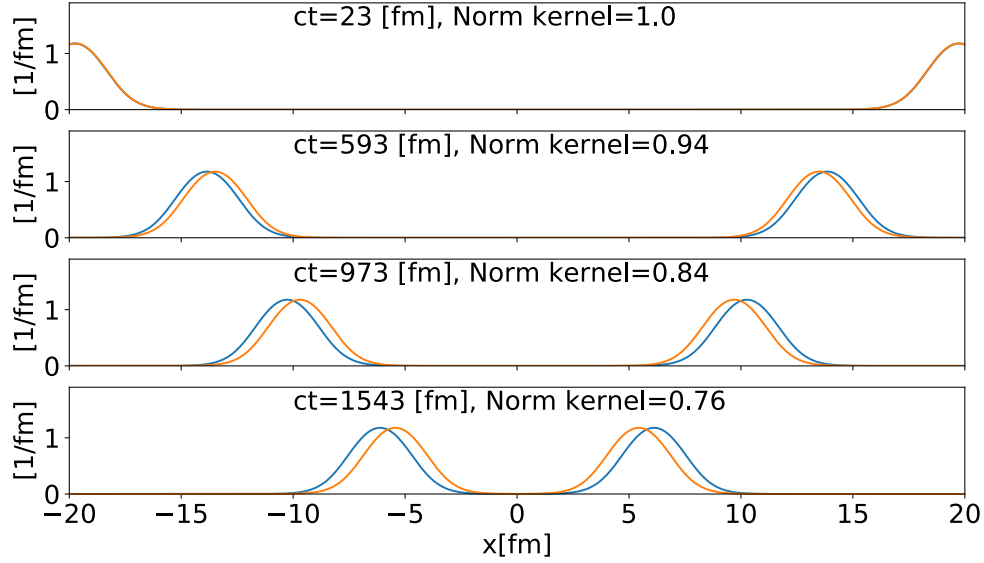


図 16 二つのスレーター行列式の密度の時間発展とノルムカーネルの値。初期運動量はそれぞれ青の線が 10.06 MeV/c、オレンジの線が 10.63 MeV/c に対応している。密度分布が空間的に離れていくほどノルムカーネルの値は小さくなっていく。

ネルの実部、虚部をそれぞれ見てもガウス型ではないが、その絶対値を見れば実のガウス関数である。

$$|e^{-\frac{(\Delta p)^2}{4\mu}}| = \sqrt{\exp\{-(\Delta p)^2/4(\mu_R + i\mu_I)\} \exp\{-(\Delta p)^2/4(\mu_R - i\mu_I)\}} = \exp\left\{-\frac{(\Delta p)^2}{4} \frac{\mu_R}{|\mu|^2}\right\} \quad (4.4.9)$$

ここで  $\mu_R, \mu_I$  はガウス幅  $\mu$  の実部、虚部を意味している。この式 (4.4.9) ノルムカーネルの絶対値がガウス関数かどうかを見ればガウスの幅が複素数に拡張されたのか、そもそもガウスからずれているのかが分かる。

以下に衝突後のノルムカーネルの絶対値の時間変化を図 19、20 に示す。ノルムカーネルが  $p_{av}$  に依存していたので、異なる  $p_{av}$  のノルムカーネルを二つ選んだ。図 19、20 はそれぞれ  $p_{av} = 10.29$  MeV/c、10.35 MeV/c のときの結果である。これを見ると分かる通り衝突してしばらくはガウス型になっているが、さらに時間が経ったときにはガウス型から大きくずれている。

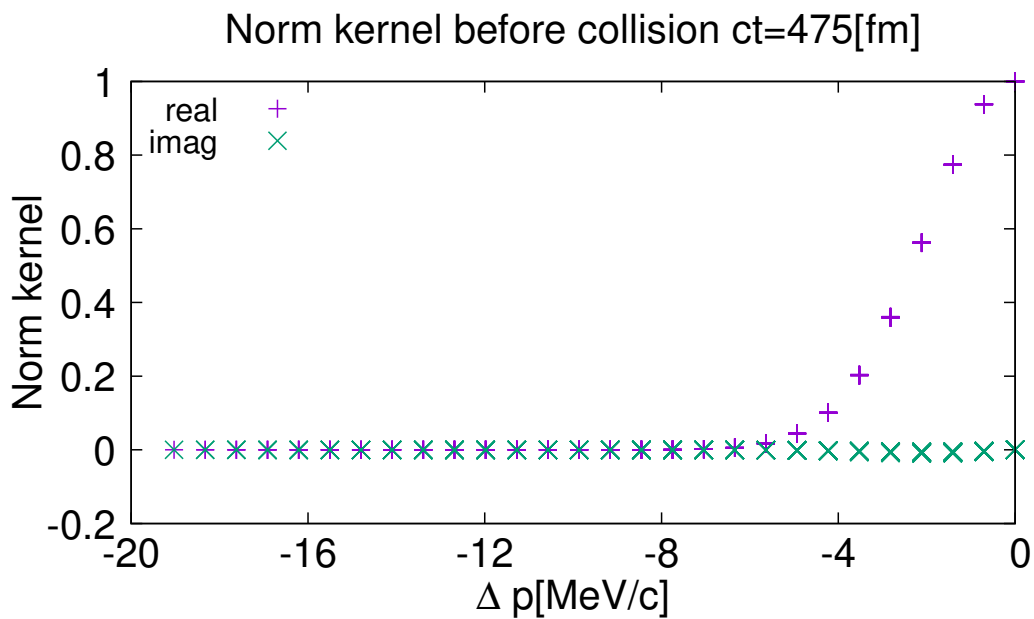


図 17 原子核の衝突が起きる前のノルムカーネルの実部と虚部を + と × で示した。同じ  $\Delta p$  で異なる  $p_{av}$  をもつ点も同時にプロットしているが、ほとんど重なっている。つまりこの時のノルムカーネルに  $p_{av}$  依存性はみられない。

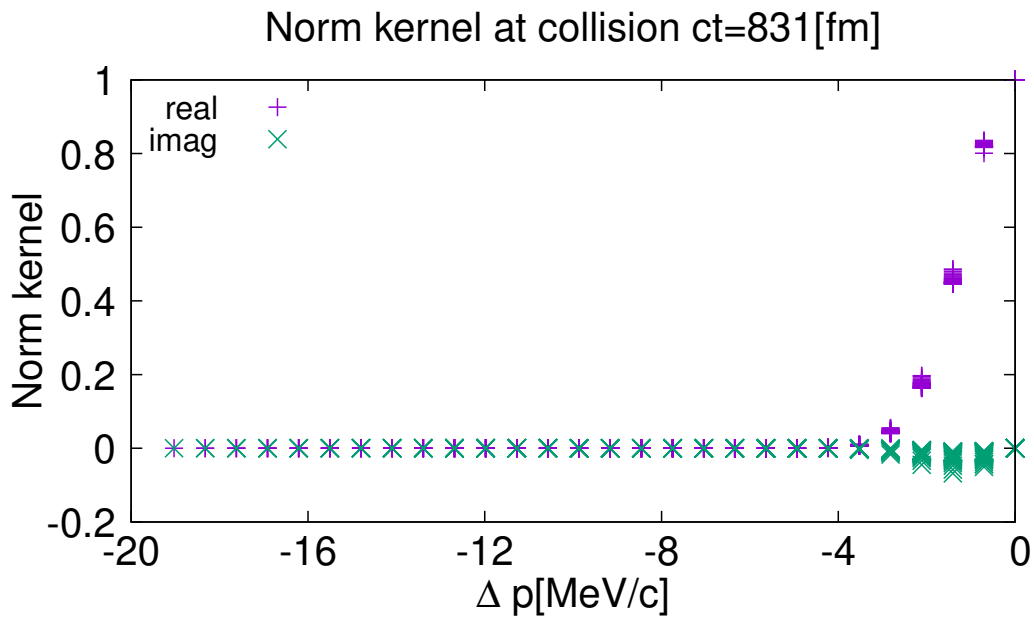


図 18 原子核の衝突が起きた時のノルムカーネルの実部と虚部を + と × で示した。図 17 と異なり、有限の虚部の値が現れる。そして同じ  $\Delta p$  の値でも異なるノルムカーネルの値がある。これはノルムカーネルの結果に  $p_{av}$  依存性が現れたからである。

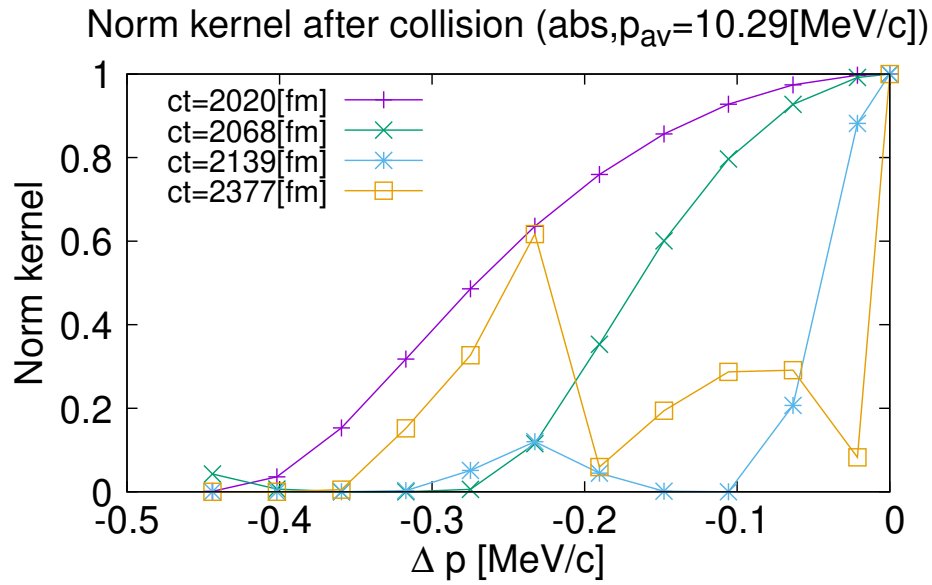


図 19 原子核が衝突した後のノルムカーネルの絶対値の時間変化。 $p_{av} = 10.29$  MeV/c のときの結果を示す。

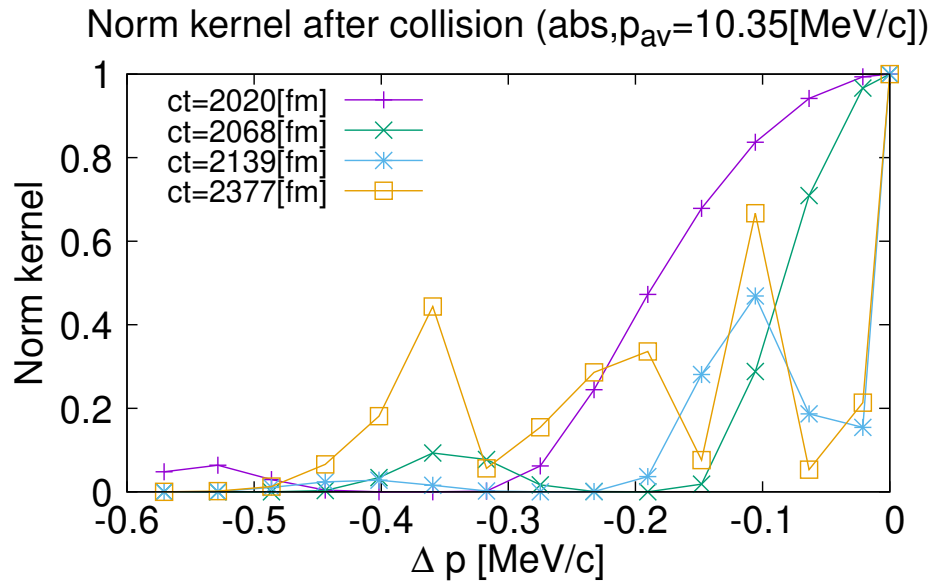


図 20 原子核が衝突した後のノルムカーネルの絶対値の時間変化。 $p_{av} = 10.35$  MeV/c のときの結果を示す。

#### 4.4.2 ハミルトニアンカーネル

■初期状態におけるハミルトニアンカーネル ノルムカーネルのときと同様の議論をハミルトニアンカーネルに対しても行なう。例えば初期相対運動量  $p_i, p_j$  をそれぞれ持った、系全体を反対称化したスレーター行列式  $|\Phi_{p_i}\rangle, |\Phi_{p_j}\rangle$  を用意すると、ハミルトニアンカーネル  $\mathcal{H}$  の各成分は以下で定義される。

$$\mathcal{H}(p_i, p_j) = \langle \Phi_{p_i} | H - i\partial_t | \Phi_{p_j} \rangle \quad (4.4.10)$$

まずは初期状態におけるハミルトニアンカーネルの結果を以下の図 21 に示す。ハミルトニアンカーネルは初期状態から  $p_{av}$  依存性があったため、異なる  $p_{av}$  での結果を二つ示す。図中では  $p_{av}=102.2$  MeV/c、 $81.04$  MeV/c のときの結果を、それぞれ  $\times, \square$  で表している。それぞれの点を繋ぐ紫と水色の実線は  $p_{av}=102.2$  MeV/c、 $87.57$  MeV/c のときのハミルトニアンカーネルをガウス  $\times$  二次の多項式 ( $\exp(-(\Delta p)^2/4\mu) \times (H_0 + H_2(\Delta p)^2)$ ) でフィットしたものである。図 21 ではハミルトニアンカーネルのフィットからのずれはほとんど見られない。

■ハミルトニアンカーネルの時間発展 次にハミルトニアンカーネルの時間発展を以下の図 22、23 に示す。ここでも  $p_{av}$  依存性のために、異なる二つの  $p_{av}$  での結果を示す。図 22、23 はそれぞれ  $p_{av}=87.57$  MeV/c、 $102.2$  MeV/c のときの結果である。図の  $+$ 、 $*$ 、 $\square$  はそれぞれ時刻  $ct = 47.520$  fm、 $71.291$  fm、 $95.063$  fm のときの結果である。実線はハミルトニアンカーネルの値を  $\exp(-(\Delta p)^2/4\mu) \times (H_0 + H_2(\Delta p)^2)$  でフィットしたものである。この図からハミルトニアンカーネルもノルムカーネルと同様にガウス  $\times$  二次の項式で表現できていることが分かる。

次にノルムカーネルがガウス型からずれたときと同じ時刻、すなわち原子核の衝突後でのハミルトニアンカーネルの値を示す。そのときのハミルトニアンカーネルもノルムカーネルと同様に虚部が現れたために、絶対値の二乗で結果を示す。ハミルトニアンカーネルのパラメータ ( $\mu, H_0, H_2$ ) が複素数であっても、その絶対値の二乗は以下のようなガウス  $\times$  多項式の形になる。

$$|\exp(-x^2/4\mu) \times (H_0 + H_2x^2)|^2 = \exp\left(\frac{x^2}{4} \frac{\mu_R}{|\mu|^2}\right) (|H_0|^2 + (H_{0R}H_{2R} + H_{0I}H_{2I})x^2 + |H_2|^2x^4) \quad (4.4.11)$$

ここで  $H_{0R,I}$  や  $H_{2R,I}$  は  $H_0, H_2$  の実部、虚部を意味している。この図では衝突前までのハミルトニアンカーネルはガウス  $\times$  二次の多項式の形でよくフィットできているが、



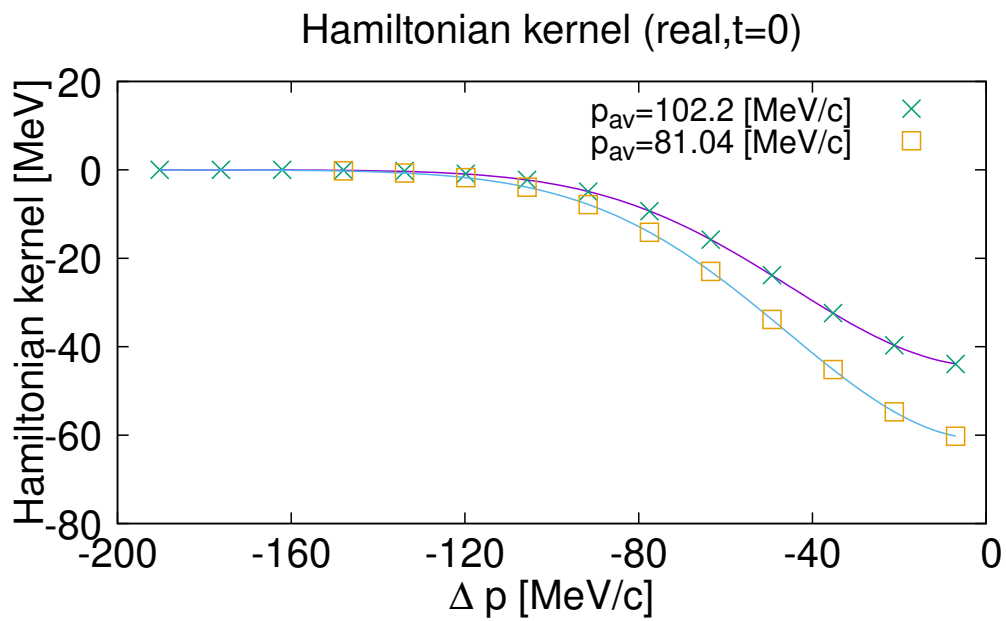


図 21 時刻  $t = 0$  におけるハミルトニアンカーネル。× と □ はそれぞれ初期運動量の平均が  $p_{av}=102.2$  MeV/c、 $81.04$  MeV/c のときの結果。実線はガウス関数 × 二次の多項式でフィットしたもの。ハミルトニアンカーネルの値とフィットとのずれは、ほとんど見られない。

ノルムカーネルと同様に衝突後ある程度時間が経つと同じようなフィットは出来なくなっていた。

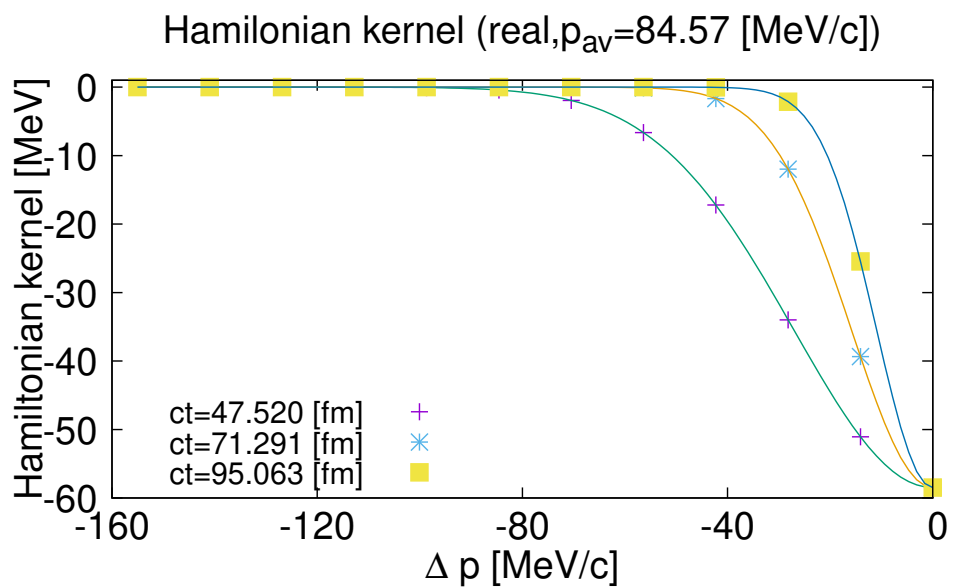


図 22 原子核の衝突が起きる前のハミルトニアンカーネルの時間発展  $p_{av} = 84.57$  MeV/c での結果。ガウス × 二次の多項式できれいにフィットできている。

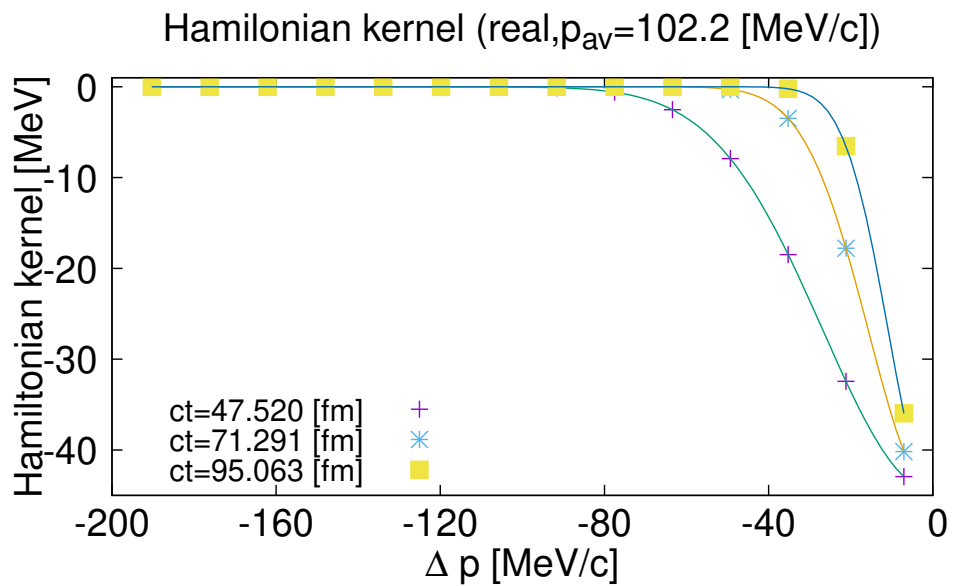


図 23 原子核の衝突が起きる前のハミルトニアンカーネルの時間発展  $p_{av} = 102.2$  MeV/c での結果。異なる  $p_{av}$  の値においてもガウス × 二次の多項式できれいにフィットできている。

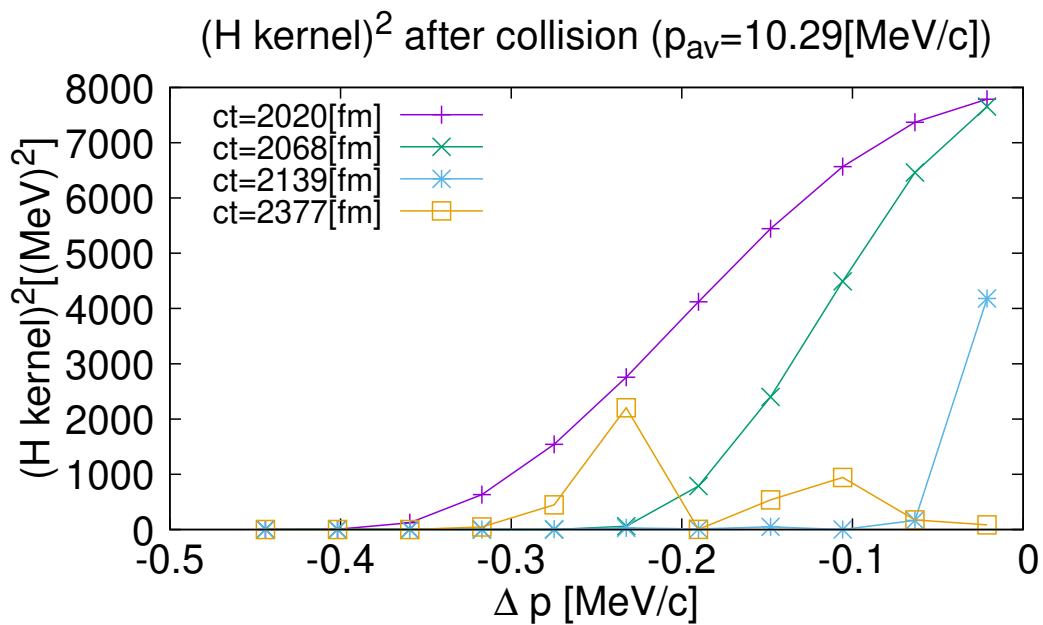


図 24 原子核が衝突した後のハミルトニアンカーネルの二乗の時間発展。  $p_{av} = 10.29$  MeV/c での結果

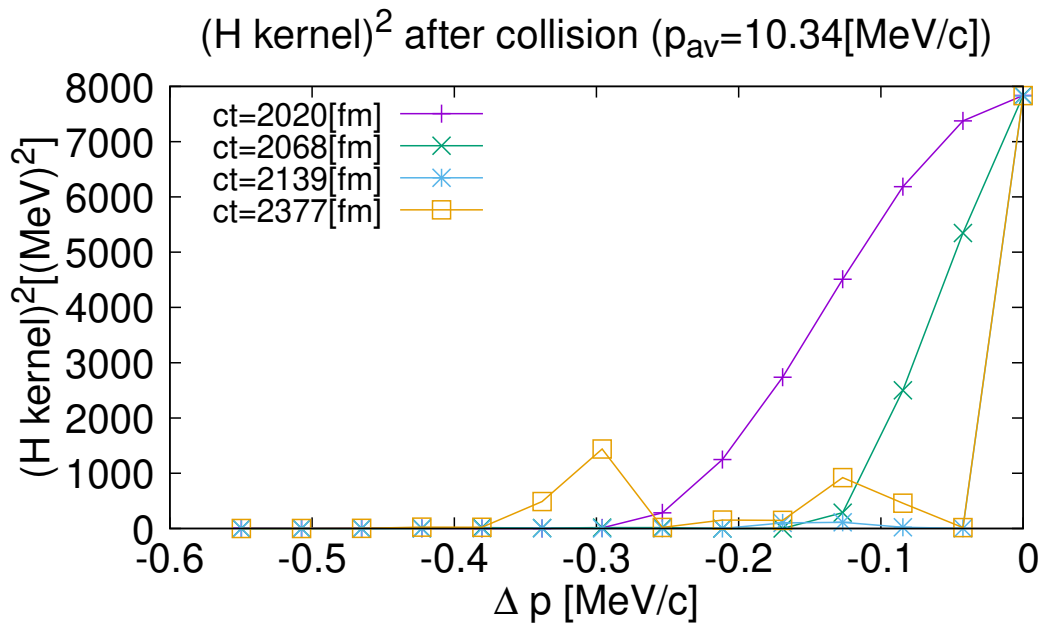


図 25 原子核が衝突した後のハミルトニアンカーネルの二乗の時間発展。  $p_{av} = 10.34$  MeV/c での結果

#### 4.4.3 ハミルトニアンカーネルに対する $\langle \Phi(a)|H|\Phi(a') \rangle$ の寄与

最後にハミルトニアンカーネル

$$\mathcal{H}(a, a') = \langle \Phi_a(t)|H - i\partial_t|\Phi_{a'}(t) \rangle \quad (4.4.12)$$

に対する最初の項

$$\mathcal{H}_H(a, a') = \langle \Phi_a(t)|H|\Phi_{a'}(t) \rangle \quad (4.4.13)$$

の寄与のふるまいを議論する。この時間発展を以下の図 26、27 に示す。この項にも時刻  $t = 0$  から  $p_{av}$  依存性があったため、異なる二つの  $p_{av}$  での結果を示す。図 26、27 はそれぞれ  $p_{av} = 87.57$  MeV/c、 $102.2$  MeV/c のときの結果である。図中の +、\*、□ はそれぞれ

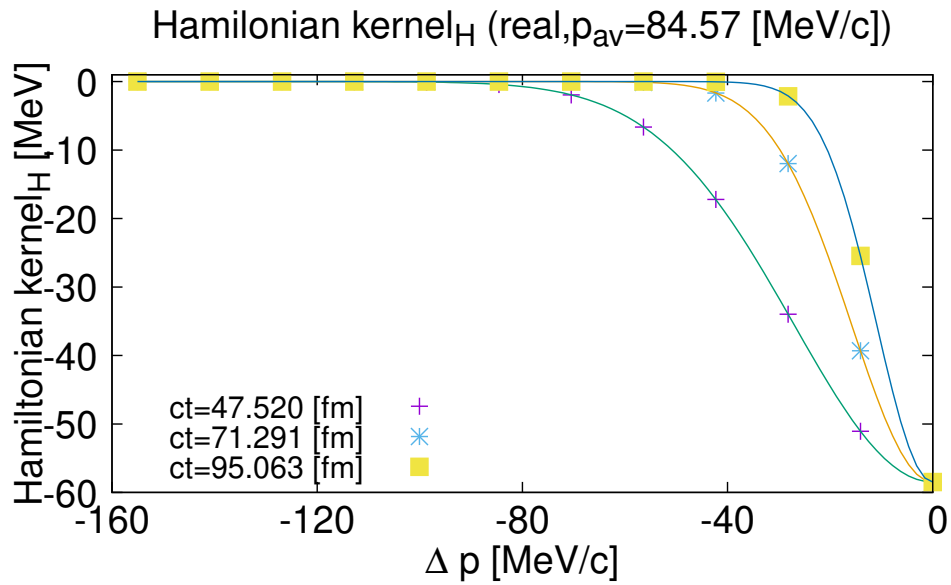


図 26 原子核の衝突が起きる前の  $\mathcal{H}_H$  の時間発展。  $p_{av} = 84.57$  MeV/c での結果

れ時刻  $ct = 47.520$  fm、 $71.291$  fm、 $95.063$  fm のときの結果である。実線は  $\mathcal{H}_H$  の値を  $\exp(-(\Delta p)^2/4\mu) \times (H_0 + H_2(\Delta p)^2)$  でフィットしたものである。この図から  $\mathcal{H}_H$  もハミルトニアンカーネルと同様にガウス × 二次の多項式で表現できていることが分かる。次に原子核が衝突する前後での  $\mathcal{H}_H$  の結果を以下の図 28、29 に示す。  $\mathcal{H}_H$  も上での結果と同様に虚数の成分が現れたために、絶対値の二乗で結果を示す。この図では衝突前までの  $\mathcal{H}_H$  はガウス × 二次の多項式の形でよくフィットできているが、時間依存生成座標

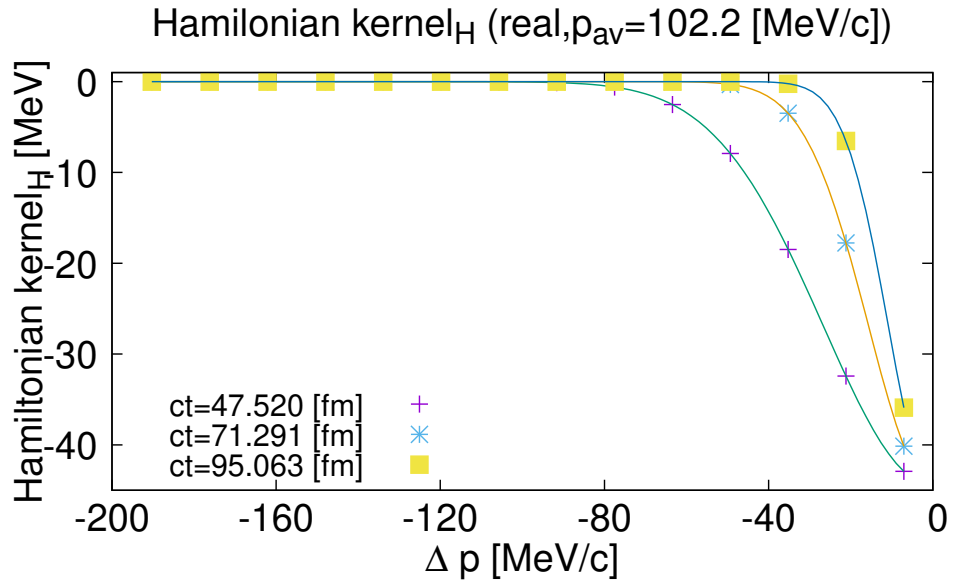


図 27 原子核の衝突が起きる前の  $\mathcal{H}_H$  の時間発展。  $p_{av} = 102.2$  MeV/c での結果

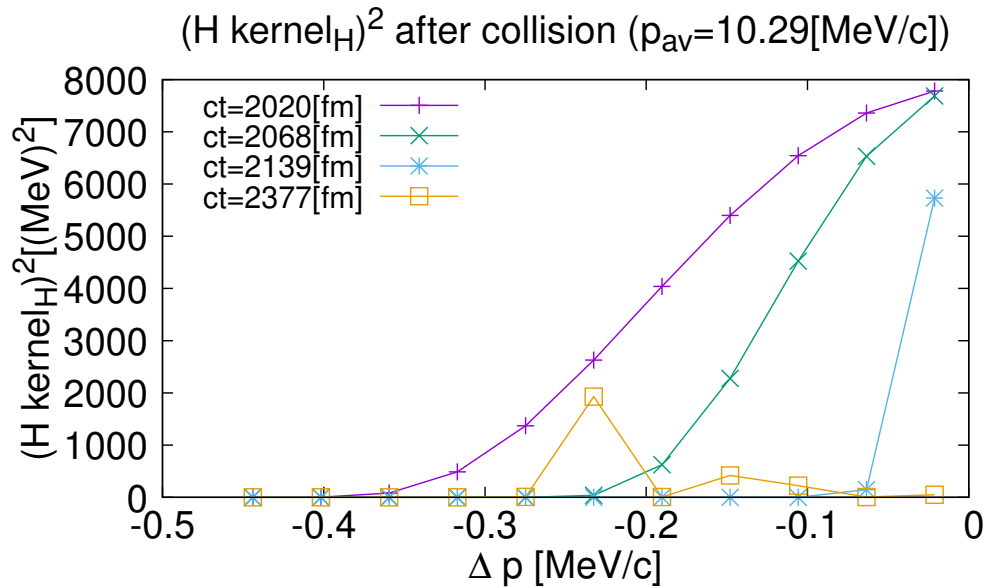


図 28 原子核が衝突した後の  $\mathcal{H}_H$  の二乗の時間発展。  $p_{av} = 10.29$  MeV/c での結果

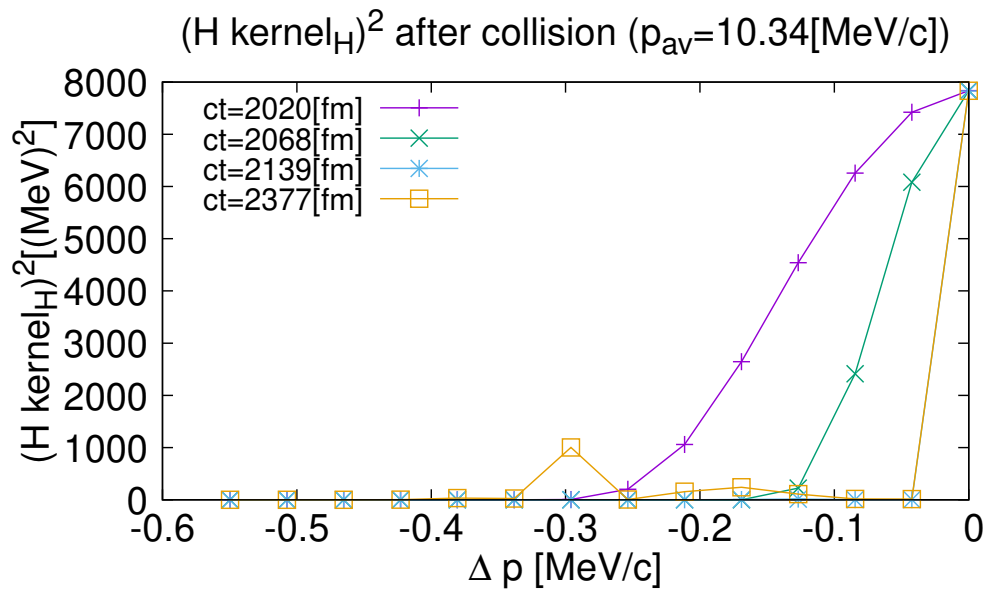


図 29 原子核が衝突した後の  $\mathcal{H}_H$  の二乗の時間発展。  $p_{av} = 10.34 \text{ MeV}/c$  での結果

法でのハミルトニアンカーネルと同様に衝突後ある程度時間が経つと同じようなフィットは出来なくなっていた。 $\mathcal{H}_H$  の図 28,29 とハミルトニアンカーネルの図 24,25 を見比べると、ハミルトニアンカーネルの中で  $\mathcal{H}_H$  が大部分を占めていることが分かる。

ここまでの結果から今回の系の設定ではガウシアンオーバーラップ近似は原子核の衝突が起きるまではよく成り立つが、二つの原子核が重なるようなところではよい近似になっていないことが分かった。

## 5 今後の展望

この章では今回の計算をふまえて次にやるべきことを述べる。ノルムカーネルとハミルトニアンカーネルが求まったので、次にやるべきなのは (3.2.8) 式を用いて重み関数の時間発展を計算することである。今回得られた結果を見るとガウシアンオーバーラップ近似を用いることは適切では無い可能性が高い。今回考えた系である  ${}^4\text{He} + {}^4\text{He}$  の一次元の衝突は、現実的な 3 次元の系と比べて相当に単純化された系であるため、ガウシアンオーバーラップ近似を用いなくとも式 (3.2.8) をそのまま解いて、重み関数を求めることは比較的簡単である。したがって、ガウシアンオーバーラップ近似を用いた計算した結果と、ガウシアンオーバーラップ近似を用いずに計算した結果を比較することは、今回の系においては容易にできると考えられる。

このような計算を実行した後に次のステップとしては、重ね合わせの基底となるスレーター行列式はいくつ用意する必要があるのか、また時間依存生成座標法の計算結果は重み関数の初期値の選び方にどれだけ依存するのかなどの検討を行なう。また今回の計算結果はガウシアンオーバーラップ近似の妥当性について否定的なものだったが、実際に重み関数をガウシアンオーバーラップ近似を使って計算した場合と正確に解いた場合を比べて結果の精度がどれだけ変わるのか検討することも重要な課題である。

そして大きな目標としては今回用いた近似の一つである、一粒子波動関数の時間発展を時間依存ハートリー=フォック法の解で置き換えるというものを取り除きたいと考えている。つまり今回は解かなかった一粒子波動関数での変分 (3.1.6) を解き、重み関数の変分方程式 3.1.5 と同時に解くということである。この計算が出来れば今回の計算より信頼できる計算が可能となり、多体系の量子トンネル現象を記述できる微視的反応理論の構築に向けた大きな一歩となる。しかしそのような手法はまだ確立しておらず、今後の大きな課題である。

## 6 まとめ

本論文で目的としていたのは核融合反応を含む原子核反応の微視的計算手法の改良である。低エネルギーの核融合反応ではトンネル効果によってその反応がおきる。しかし現在の微視的計算手法では多体のトンネル効果を記述できるものは確立されていない。そこで本論文では現在広く使われている時間依存ハートリー=フォック法の拡張である時間依存生成座標法を用いて原子核のトンネル効果を再現しようと試みた。本論文ではその第一歩として、ノルムカーネルとハミルトニアンカーネルの議論を行なった。

時間依存生成座標法はスレーター行列式をいくつも重ね合わせたものが試行関数となる。今回は簡単のために各スレーター行列式の時間発展は既知として、独立な時間依存ハートリー=フォック法で計算したが [18]、それでも考えるべき自由度は多く、数値計算で大きなコストがかかる。そこで計算量を減らす近似としてガウシアンオーバーラップ近似が他の論文ではしばしば用いられるが [16, 17, 20]、この近似がどのような系と生成座標の選び方においても正しいとは限らない。そこで今回の論文では一次元の  ${}^4\text{He} + {}^4\text{He}$  反応を考え、 ${}^4\text{He}$  間の相対運動量を生成座標にとり、この近似の妥当性を議論した。その際ノルムカーネルとハミルトニアンカーネルの時間発展だけを計算し、ガウシアンオーバーラップ近似の前提であるノルムカーネルがガウス型、ハミルトニアンカーネルがガウス  $\times$  二次の多項式で表現できるかを試した。

結果としては原子核の衝突が起きるまではノルムカーネル、ハミルトニアンカーネルともにガウシアンオーバーラップ近似がよく成り立つものの、衝突して少し時間が経つと大きなずれが見られた。この結果から今回用いた系で  ${}^4\text{He}$  間の相対運動量を生成座標に選んだ計算においてはガウシアンオーバーラップ近似はよい近似ではないと結論づけた。

この結果をうけて今後はガウシアンオーバーラップ近似を用いずに計算を試みたい。

将来の展望としては、時間依存生成座標法を一粒子波動関数に関する変分も含め完全な形で解くことが目標である。また今回は核融合におけるトンネル効果の計算を行なったが、他の原子核のダイナミクスについても計算を行ないたい。

また今回用いた時間依存生成座標法と同様の考えに基づいた手法が主に量子化学の分野において発展しており [21-23]、最近では原子核への応用も考えられている多配置時間依存ハートリー法という手法がある。それについてもどちらのアプローチが優れているのかも含めて今後検討していきたい。



## 7 謝辞

本論文の作成にあたり、多くの方々のご協力に感謝致します。

萩野浩一先生には研究課題の選択から、研究の進行、本論文の執筆に至るまで多くの助力を頂きました。心から感謝致します。

佐々木勝一先生、小野章先生、谷村雄介先生、遠藤晋平先生には研究室セミナーの際などに鋭いご指摘をいただきました。特に谷村先生には何度も議論に付き合ってくださいました。

Orsay 原子核研究所の Denis Lacroix 氏, David Ragnier 氏, Guillaume Hupin 氏にはフランスへの出張の際に短い期間ながら何度も議論を重ね、多くのアイデアをいただきました。

原子核理論研究室の皆様にも様々な方面で助けていただきました。

宇宙創成物理学国際共同大学院プログラム様には海外出張や日常での経済的な援助をいただきました。

直接、間接に関わった多くの方々にこの場を借りて感謝いたします。

## 付録 A 時間依存のないハートリー＝フォック法

この章ではハミルトニアンが時間に依らない場合のハートリー＝フォック法 [9] についてまとめる。ハートリー＝フォック法では変分法を用いて近似を行なうため、まずは変分法の説明をする。

### A.1 変分法

変分法とはシュレディンガー方程式が直接解けない場合に、近似的にその解を求める際に有効な方法である。変分法では、なにか作用という量が停留値をとるように波動関数を定める。作用  $S$  は通常、波動関数を  $\Psi$  として以下のように定義される。

$$S = \langle \Psi | H - i\partial_t | \Psi \rangle \quad (\text{A.1.1})$$

ハミルトニアンが時間に陽に依らない場合、作用 (A.1.1) は系のエネルギー  $E$  と一致するので変分法で解くべき方程式は以下のものである。

$$\delta E[\Psi] = 0 \quad (\text{A.1.2})$$

ここで系のエネルギーは以下の式で定義される。

$$E[\Psi] = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (\text{A.1.3})$$

この式 (A.1.2) に式 (A.1.3) を代入することによって以下の方程式が得られる。

$$\langle \delta\Psi | H - E | \Psi \rangle + \langle \Psi | H - E | \delta\Psi \rangle = 0 \quad (\text{A.1.4})$$

ここで  $\delta\Psi$  は任意であるために、 $\delta\Psi \rightarrow i\delta\Psi$  の置き換えを行なうことで次の式

$$-i \langle \delta\Psi | H - E | \Psi \rangle + i \langle \Psi | H - E | \delta\Psi \rangle = 0 \quad (\text{A.1.5})$$

も同時に得られ、式 (A.1.4),(A.1.5) から以下の式が得られる。

$$\langle \delta\Psi | H - E | \Psi \rangle = 0 \quad (\text{A.1.6})$$

ここでも  $\delta\Psi$  は任意なので、式 (A.1.6) はシュレディンガー方程式

$$H | \Psi \rangle = E | \Psi \rangle \quad (\text{A.1.7})$$

に一致する。

ここで波動関数になんの制限も加えなければ、正しい系のエネルギーと波動関数が式 (A.1.6) から得られる。しかし波動関数に制限を加えた場合は系の真のエネルギー固有値は一般に求まらない。しかし波動関数に任意の制限を加えても、そこから得られるエネルギーは真の基底状態のエネルギーより小さくなることはないことが知られている。すなわち

$$E[\Psi] \geq E_0 \quad (\text{A.1.8})$$

となる。これを示すために、状態をエネルギー固有関数の基底で展開する。

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} a_n |\Psi_n\rangle \quad (\text{A.1.9})$$

$$H |\Psi_n\rangle = E_n |\Psi_n\rangle \quad (\text{A.1.10})$$

そうすると出てくるエネルギーの最小値は基底状態のエネルギー  $E_0$  となるので以下の不等式が成り立つ。

$$E[\Psi] = \frac{\sum_{m,n} a_n^* a_m E_n \delta_{nm}}{\sum_n |a_n|^2} = \frac{\sum_n |a_n|^2 E_n}{\sum_n |a_n|^2} = E_0 + \frac{\sum_n |a_n|^2 (E_n - E_0)}{\sum_n |a_n|^2} \geq E_0 \quad (\text{A.1.11})$$

これで任意の状態のエネルギーより基底状態のエネルギーが小さくなることが示せた。

## A.2 ハートリー=フォック方程式の導出の準備

上述の変分法を用いれば、多体系に対するシュレディンガー方程式を導くことが出来る。しかし実際の計算では、計算機の性能の限界や数値計算の誤差などによって核子がある程度多い原子核を直接計算することは現実的ではない。このようなときに使われる手段として、変分原理に用いる波動関数に制限を与えるというものがある。変分原理は無限の大きさのヒルベルト空間から波動関数を持ってくれば、厳密にシュレディンガー方程式と等価だが、有限の大きさのヒルベルト空間に制限した場合は一般にはそうならない。このとき制限されたヒルベルト空間からもってくる波動関数のことを試行関数と呼ぶ。ハートリー=フォック法はその試行関数としてスレーター行列式に波動関数の形を限定して、近似的な基底状態を求めるという手法である。ここでいうスレーター行列式というのは各核子の波動関数を考えて、それらが交換に対して反対称になるように (つまりフェルミオンの条件を満たすように) 積状態を重ね合わせたものである。これは真空  $|-\rangle$  とフェルミオンの生成演算子  $a_i^\dagger$  を用いて

$$|HF\rangle = |\Phi(1\dots A)\rangle = \prod_{i=1}^A a_i^\dagger |-\rangle \quad (\text{A.2.1})$$

と表される。HF はハートリー=フォック (Hartree-Fock) を意味する。このように多体の波動関数をスレーター行列式の形に仮定することには正当性がある。それは原子核の中で核子は近似的に自由粒子のようにふるまうからである。通常核子同士は強い力由来の核力によって相互作用しているが、フェルミオンに対するパウリ原理から相互作用の終状態が制限され、結果として平均的なポテンシャル中を動く自由粒子のようにふるまう。

この事実から原子核内部のポテンシャルは近似的に一体ポテンシャルによって表される。するとハミルトニアンもまた以下のように分離可能となる。

$$H^{HF} = \sum_{i=1}^A h(i) \quad (\text{A.2.2})$$

ここで  $h(i)$  は一粒子ハミルトニアンと呼ばれ、一粒子波動関数に対して以下を満たす。

$$h(i)\varphi_k(i) = \epsilon_k\varphi_k(i), \quad i = \{r_i, s_i, t_i\} \quad (\text{A.2.3})$$

ここで  $r_i, s_i, t_i$  はそれぞれ各一粒子波動関数の位置、スピン、アイソスピンを表している。このように分離可能なハミルトニアンの固有状態は一般に一粒子波動関数の積状態の任意の重ね合わせによって表される。このときにフェルミオンが満たすべき性質として反対称化を考慮すれば、このハミルトニアンの固有状態はスレーター行列式となり、ハートリー=フォック法の正当性が確認できる。

ここからハートリー=フォック方程式の導出を行なう。まず  $\Phi$  をスレーター行列式の状態として、ハートリー=フォックのエネルギーは以下の式で書ける。

$$E^{HF}[\Phi] = \frac{\langle \Phi | H | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \quad (\text{A.2.4})$$

この変分が 0 になることから、方程式を導出する。核子の波動関数  $\varphi$  を他の完全直交基底で展開することもあるので、一般の完全直交基底で考える。まず  $\varphi$  から他の基底  $\chi$  への変換を以下で定義する。

$$\varphi_k = \sum_l D_{lk} \chi_l \quad (\text{A.2.5})$$

これは生成消滅演算子の表示で書くと以下である。

$$a_k = \sum_l D_{lk} c_l \quad (\text{A.2.6})$$

$a_k$  は  $\varphi$ 、 $c_l$  は  $\chi$  に対応する消滅演算子である。ここで変換  $D$  はユニタリーである。

$$D^\dagger D = D D^\dagger = 1 \quad (\text{A.2.7})$$

またここで、一粒子密度行列を導入する。これはスレーター行列式と密度行列には一対一の関係があり、密度行列の方が今後扱いやすいからである。密度行列は以下で定義される。

$$\rho_{ll'} = \langle \Phi | c_l^\dagger c_{l'} | \Phi \rangle \quad (\text{A.2.8})$$

ここで  $a_k$  の基底では、定義から密度行列は対角的であり、その対角成分はホール状態で1、粒子状態で0である。ここで粒子状態、ホール状態とはフェルミ面の下か上かの順位のことで、ホール状態は粒子によって占有されている順位の状態を差し、粒子状態は逆に粒子がない空の順位の状態を差し。ここでホール状態のラベルを  $i \leq A$  とすると、以下のように表わせる。

$$\rho_{ll'} = \sum_{kk'} D_{lk} D_{l'k'} \langle \Phi | a_k^\dagger a_{k'} | \Phi \rangle = \sum_{i=1}^A D_{li} D_{l'i}^* \quad (\text{A.2.9})$$

ここで多体の波動関数がスレーター行列式であるという条件は、密度行列がホール状態への射影になっていることに対応する。

$$\rho^2 = \rho \quad (\text{A.2.10})$$

また粒子状態への射影も以下のように定義できる。

$$\sigma = 1 - \rho \quad (\text{A.2.11})$$

### A.3 ハートリー=フォック法におけるエネルギー

以下ではハートリー=フォック法におけるエネルギーを密度行列によって書いていく。ハートリー=フォック法でのエネルギーは以下の式である。

$$E^{HF} = \langle \Phi | H | \Phi \rangle \quad (\text{A.3.1})$$

ハミルトニアンは第二量子化の表示では以下の式となる。

$$H = \sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} c_{l_1}^\dagger c_{l_2} + \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2, l_3 l_4} c_{l_1}^\dagger c_{l_2}^\dagger c_{l_4} c_{l_3} \quad (\text{A.3.2})$$

ここで  $\bar{v}$  は反対称化した相互作用で、定義は以下の通りである。

$$\bar{v}_{l_1 l_2, l_3 l_4} = v_{l_1 l_2 l_3 l_4} - v_{l_1 l_2 l_4 l_3} \quad (\text{A.3.3})$$

これより、エネルギーは式 (A.3.1) に式 (A.3.2) を代入することで得られる。

$$E^{HF}[\rho] = \sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} \langle \Phi | c_{l_1}^\dagger c_{l_2} | \Phi \rangle + \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2, l_3 l_4} \langle \Phi | c_{l_1}^\dagger c_{l_2}^\dagger c_{l_4} c_{l_3} | \Phi \rangle \quad (\text{A.3.4})$$

$$= \sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} \rho_{l_2 l_1} + \frac{1}{2} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \rho_{l_3 l_1} \bar{v}_{l_1 l_2, l_3 l_4} \rho_{l_4 l_2} \quad (\text{A.3.5})$$

$$= \text{Tr}(t\rho) + \frac{1}{2} \text{Tr}_1 \text{Tr}_1(\rho \bar{v} \rho) \quad (\text{A.3.6})$$

ここで  $\text{Tr}_1 \text{Tr}_1$  はひとつ上の式の第二項の和の簡略表現である。このエネルギーは一粒子波動関数  $\varphi$  の基底では、密度行列が対角的であるために以下のように単純化される。

$$E^{HF} = \sum_{i=1}^A t_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^A \bar{v}_{ij,ij} \quad (\text{A.3.7})$$

#### A.4 ハートリー=フォックエネルギーの変分

前の節で導出したエネルギーを変分することで、ハートリー=フォック方程式を導く。この節では密度行列を対角化する基底で計算をしていく。まずハートリー=フォックエネルギーの  $\rho$  に対する変分をとると以下の式になる。

$$\delta E = E[\rho + \delta\rho] - E[\rho] = \sum_{kk'} h_{kk'} \delta\rho_{k'k} \quad (\text{A.4.1})$$

$h$  は以下のように定義される。

$$h = \frac{\partial E}{\partial \rho} \quad (\text{A.4.2})$$

式 (A.4.1) での  $\rho$  の変分は  $\delta\rho$  は多体の波動関数をスレーター行列式の形に制限するという条件の下で行なう。この条件を密度行列  $\rho$  で表現すると、密度行列  $\rho$  は少し変化させても射影の性質を保つということである。

$$(\rho + \delta\rho)^2 = \rho + \delta\rho \quad (\text{A.4.3})$$

この式 (A.4.3) から以下の関係が分かる。

$$\delta\rho = \rho\delta\rho + \delta\rho\rho \quad (\text{A.4.4})$$

この式にさらに  $\rho$  をかけることで、次の関係式が得られる。

$$\rho(\delta\rho)\rho = 0 \quad (\text{A.4.5})$$

これと同様のやり方によって粒子状態への射影  $\sigma$  に対しても同様の関係式が得られる。

$$\sigma(\delta\sigma)\sigma = 0 \quad (\text{A.4.6})$$

これらの式 (A.4.5)、(A.4.6) は  $\delta\rho$  を粒子状態ではさんだものが 0 になることを示している。(  $\delta\sigma$  の場合はホール状態ではさんだものが 0) これらの関係式から式 (A.4.1) は次のように書ける。

$$\delta E = E[\rho + \delta\rho] - E[\rho] = \sum_{kk'} h_{kk'} \delta\rho_{k'k} = \sum_{mi} h_{mi} \delta\rho_{im} + c.c. \quad (\text{A.4.7})$$

ここでラベル  $k$  は一般の状態、ラベル  $i, m$  はそれぞれホール、粒子状態を意味している。ここで式 (A.3.4) と式 (A.4.7) の比較から

$$h = t + \Gamma \quad (\text{A.4.8})$$

が分かる。 $\Gamma$  の定義は以下のものである。

$$\Gamma_{kk'} = \sum_{ll'} \bar{v}_{kl'l} \rho_{ll'} \quad (\text{A.4.9})$$

ここで式 (A.4.5)、(A.4.6) から  $\delta\rho$  の粒子-粒子行列要素、ホール-ホール行列要素は 0 となり、 $\delta\rho$  の粒子-ホール行列要素は任意なので、式 (A.4.1) から  $h$  の粒子-ホール行列要素は 0 になることが分かる。

$$h_{mi} = t_{mi} + \sum_{j=1}^A \bar{v}_{mjij} = 0 \quad (\text{for } i \leq A, m > A) \quad (\text{A.4.10})$$

この式がハートリー=フォック法の解くべき方程式といえる。ここでは  $\rho$  を対角化する基底をとっている。式 (A.4.10) を別の表現にすると、以下の関係となる。

$$[h, \rho] = [t + \Gamma[\rho], \rho] = 0 \quad (\text{A.4.11})$$

この式 (A.4.11) から、 $\rho$  を対角化する基底で、同時に  $h$  も対角化できることが分かる。つまり  $\rho$  と  $h$  を同時に対角化する基底をとることによって、式 (A.4.10) は固有値問題になる。

$$h_{kk'} = t_{kk'} + \sum_{i=1}^A \bar{v}_{kik'i} = \epsilon_k \delta_{kk'} \quad (\text{A.4.12})$$

これは一粒子波動関数の基底だが、一般の基底では変形 D を用いて、

$$\sum_{l'} h_{ll'} D_{l'k} = \sum_{l'} \left( t_{ll'} + \sum_{i=1}^A \sum_{pp'} \bar{v}_{pl'p'l} D_{pi} D_{p'i}^* \right) = \epsilon_k D_{lk} \quad (\text{A.4.13})$$

となる。この方程式から求まる  $D$  によって一粒子波動関数  $\varphi_k$  は決まる。またハートリー＝フォックエネルギーは単純に求まる固有値  $\epsilon$  の和ではなく、

$$H^{HF} = \sum_{kk'} h_{kk'} a_k^\dagger a_{k'} = \sum_{kk'} (t + \Gamma)_{kk'} a_k^\dagger a_{k'} \quad (\text{A.4.14})$$

$$= \sum_{kk'} (t_{kk'} + \sum_{j=1}^A \bar{v}_{kj k'j}) a_k^\dagger a_{k'} = \sum_k \epsilon_k a_k^\dagger a_k \quad (\text{A.4.15})$$

$$E_0^{HF} = \sum_{i=1}^A \epsilon_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^A \bar{v}_{ijij} \quad (\text{A.4.16})$$

となることに注意する。



## A.5 数値計算の方法

この章では時間依存のないハートリー=フォック法の実際の解き方について議論する。ハートリー=フォック法において特徴的な点は、エネルギーを最小化するという条件のもとでハートリー=フォック法での一粒子波動関数が求まるが、その一粒子波動関数から作られる密度行列によって一粒子ポテンシャルが決まるという点である。これはつまり自己無撞着な方程式を解くということである。これを数値的に計算するには以下の手順になる。

1. 一粒子ポテンシャルを仮定する
2. そのポテンシャルに対する固有関数を求める
3. 求めた一粒子波動関数から密度を作る
4. 得られた密度から新たな一粒子ポテンシャルを計算する
5. 以下 2 から 4 をエネルギーが収束するまで繰り返す

つまりエネルギーの密度に依存している部分であるポテンシャルを何度も更新し、エネルギーが変化しなくなる極小点を探す。波動関数から密度を作ることや、密度からポテンシャルを作るとはハートリー=フォック法にのっとれば自明だが、得られたポテンシャルに対し、その固有関数を求める際にはいくつかの方法がある。まず一つとして虚時間発展である。この手法の基本的な考えとして時間  $t$  を虚時間  $i\tau$  に変えた上で時間発展演算子  $e^{iH(i\tau)} = e^{-H\tau}$  を波動関数にかけることで基底状態や励起状態を抜きだしてくるというものである。虚時間発展における時間発展演算子はもはや位相だけ変わるというのではなく、波動関数  $\Psi$  をエネルギーの固有状態  $\Phi$  で展開し、この演算子をかけると以下のようなになる。

$$e^{-H\tau} |\Psi\rangle = \sum_n e^{-H\tau} |\Phi_n\rangle = \sum_n e^{-E_n\tau} |\Phi_n\rangle \quad (\text{A.5.1})$$

ここで  $\tau$  を大きくとれば、エネルギーが相対的に高い状態から順に 0 に近づいていくので、基底状態のみを抜きだせる。ここで元の波動関数から基底状態と直交するような状態を作り、同じことをすれば第一励起状態から順に励起状態も得ることが可能である。実際の計算ではハミルトニアンを何度も状態にかけることで特定の状態が抜きだせる。もう一つの手法としては様々なエネルギーに対してシュレディンガー方程式を解き、解となる波動関数が収束するエネルギーを見つけるというものである。一般にエネルギーがポテンシャルより小さいときの波動関数は  $e^{+\kappa x}, e^{-\kappa x}$  の重ね合わせで表現され、解析的に解けば  $e^{+\kappa x}$  の項は消えて波動関数は急激に減衰するが、固有エネルギーではないエネルギー

を与えて数値的にシュレディンガー方程式を解くと  $e^{\kappa x}$  の項が消えずに残り、 $x$  が大きいところで発散する。これが発散しないようなエネルギーを探すことで固有エネルギーと対応した固有状態が得られる。実際の計算では波動関数の節の数が増える時のエネルギーを探していくことで、基底状態から励起状態まで順に求めていく。

## 付録 B 生成座標法

### B.1 変分方程式の導出

この章では時間に依存しない生成座標法 [9] についてまとめる。この手法は原子核の静的な性質を記述するのに用いられる。生成座標法はハートリー=フォック近似によって失われた量子ゆらぎを回復させる手法である。生成座標法では通常、原子核の何かしらの巨視的自由度を座標にとり、その座標でラベルされたスレーター行列式の重ねあわせを多体の波動関数として仮定する。この時の座標のことを生成座標と呼ぶ。式にすれば以下のようなになる。

$$|\Psi\rangle = \int da f(a) |\Phi(a)\rangle \quad (\text{B.1.1})$$

ここで  $a$  は生成座標、 $f$  は重ね合わせの重み、 $|\Phi(a)\rangle$  は生成座標でラベルされたスレーター行列式を意味している。、 $|\Phi(a)\rangle$  は例えば変形度を生成座標としてとれば、変形度を固定した静的ハートリー=フォック法で作られる基底状態のスレーター行列式の集合であり、それらを重ね合わせることで基底状態の原子核の変形に対する量子ゆらぎを回復させる。この重み関数  $f$  は、この重ね合わせの波動関数から作られるエネルギーの変分をとることで決定される。

$$\delta \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = 0 \quad (\text{B.1.2})$$

$f^*$  に対してこの式 (B.1.2) を適用すると次の方程式が得られる。

$$\int da' \langle \Phi(a) | H | \Phi(a') \rangle f(a') = E \int da' \langle \Phi(a) | \Phi(a') \rangle f(a') \quad (\text{B.1.3})$$

この方程式はヒル=ホイラー方程式と呼ばれ

$$\mathcal{H}(a, a') = \langle \Phi(a) | H | \Phi(a') \rangle \quad (\text{B.1.4})$$

$$\mathcal{N}(a, a') = \langle \Phi(a) | \Phi(a') \rangle \quad (\text{B.1.5})$$

という様にハミルトニアンカーネル ( $\mathcal{H}$ )、ノルムカーネル ( $\mathcal{N}$ ) を定義すると以下のように書ける。

$$\mathcal{H}f = E\mathcal{N}f \quad (\text{B.1.6})$$

これが生成座標法において解くべき方程式であり、一般化固有値方程式である。

## B.2 ガウシアンオーバーラップ近似

### B.2.1 概要

生成座標法では見たい集団的自由度を座標軸にとり、原理的には連続の座標においてスレーター行列式の重ね合わせをとる。数値計算上は離散的な生成座標で計算するが、多くの座標点におけるスレーター行列式を用意するとその計算量は膨大になってしまう。前節で考えたハミルトニアンカーネル、ノルムカーネルは座標を離散化すれば行列であり、それらの生成にかかる時間や行列の計算をする際には用意した点の数を  $N$  とすると単純計算で  $\mathcal{O}(N^2)$  は時間がかかることになる。このため生成座標法ではガウシアンオーバーラップ近似 [9] という近似がしばしばとられる。この近似によって計算すべき行列要素は対角成分、及びその近傍に限られる。

ガウシアンオーバーラップ近似では前節で定義したノルムカーネルをガウス型、ハミルトニアンカーネルをガウス  $\times$  多項式の形に近似を行なう。そうして解析的な形で表現したうえで各核子の微視的な自由度より少ない集団的自由度で表現される集団的ハミルトニアン  $H_{coll}$  を導出し、このハミルトニアンに対する方程式を解くことで近似的な答えを得ることができる。

### B.2.2 ノルムカーネル

ガウシアンオーバーラップ近似ではノルムカーネルを生成座標の差のガウス型であると仮定する。ある二つの生成座標の点を  $a, a'$  とすると以下の式となる。

$$\mathcal{N}(a, a') = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \gamma \left( \frac{a+a'}{2} \right) (a-a')^2 \right\} = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \gamma(q) s^2 \right\} \quad (\text{B.2.1})$$

ここで  $a, a'$  の平均と差  $q = (a+a')/2, s = a-a'$  を導入した。さらに今後の計算の簡単のために変数のスケール変換を以下のように行なう。

$$\gamma_0(d\alpha)^2 = \gamma(q)(da)^2 \quad (\text{B.2.2})$$

この変換を具体的に用いれば以下のようにガウスの形がかかる。

$$\mathcal{N}(a, a') = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \gamma(q) (a-a')^2 \right\} = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \gamma_0(\alpha - \alpha')^2 \right\} \quad (\text{B.2.3})$$

### B.2.3 ハミルトニアンカーネル

上述のスケール変換を考慮して、ノルムカーネルをその二乗根で表現すると以下のようになる。

$$\mathcal{N}(a, a') = \int dq \sqrt{\gamma_0} \mathcal{N}^{\frac{1}{2}}(a, q) \mathcal{N}^{\frac{1}{2}}(q, a') \quad (\text{B.2.4})$$

ここで  $\mathcal{N}$  にガウス型を仮定すると  $\mathcal{N}^{\frac{1}{2}}$  は以下である。

$$\mathcal{N}^{\frac{1}{2}}(a, q) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4} \exp(-\gamma_0(a-q)^2) \quad (\text{B.2.5})$$

ここで生成座標法におけるエネルギーを考えると以下の定義である。

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \int da \int da' f^*(a) \mathcal{N}(a, a') h(a, a') f(a') \quad (\text{B.2.6})$$

$$= \int da \int da' f^*(a) \int dq \sqrt{\gamma_0} \mathcal{N}^{\frac{1}{2}}(a, q) h(a, a') \mathcal{N}^{\frac{1}{2}}(q, a') f(a') \quad (\text{B.2.7})$$

ここで  $h$  の定義は以下の通り。

$$h(a, a') = \frac{\mathcal{H}(a, a')}{\mathcal{N}(a, a')} \quad (\text{B.2.8})$$

そして  $\mathcal{N}^{\frac{1}{2}}$  もまたガウス型であることから、式 (B.2.7) において  $h$  は  $a, a'$  が  $q$  の近傍であるときのみ積分に寄与する。このことから  $h$  を  $a = a' = q$  の周りで二次まで展開すると以下のようになる。

$$h(a, a') = h + h_x(a-q) + h_y(a'-q) + \frac{1}{2} (h_{xx}(a-q)^2 + 2h_{xy}(a-q)(a'-q) + h_{yy}(a'-q)^2) \quad (\text{B.2.9})$$

この式で用いた記法の定義は以下の通りである。

$$\begin{aligned} h &= h(q, q) = \langle q | H | q \rangle, & h_x &= \frac{\partial}{\partial a} h(a, a')|_{a=a'=q}, & h_y &= \frac{\partial}{\partial a'} h(a, a')|_{a=a'=q}, \\ h_{xx} &= \frac{\partial^2}{\partial a^2} h(a, a')|_{a=a'=q}, & h_{yy} &= \frac{\partial^2}{\partial a'^2} h(a, a')|_{a=a'=q}, & h_{xy} &= \frac{\partial^2}{\partial a \partial a'} h(a, a')|_{a=a'=q} \end{aligned} \quad (\text{B.2.10})$$

ここでノルムカーネル、ハミルトニアンカーネルは生成座標の軸における平行移動の演算子  $P = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}$  を用いて以下のように書ける。

$$\mathcal{N}(a, a') = \langle q | e^{i(a-q)P/\hbar} e^{-i(a'-q)P/\hbar} | q \rangle = \langle q | e^{i(a-a')P/\hbar} | q \rangle \quad (\text{B.2.11})$$

$$\mathcal{H}(a, a') = \langle q | e^{i(a-q)P/\hbar} H e^{-i(a'-q)P/\hbar} | q \rangle \quad (\text{B.2.12})$$

このように変形すると  $\mathcal{H}, \mathcal{N}$  に対する  $a, a'$  での微分は以下ようになる。以下の式では省略したが、すべての微分のあとには  $|_{a=a'=q}$  がついているものとする。

$$\partial_a \mathcal{H} = \langle q|PH|q \rangle, \quad \partial_{a'} \mathcal{H} = -\langle q|HP|q \rangle \quad (\text{B.2.13})$$

$$\partial_a \mathcal{N} = \langle q|P|q \rangle, \quad \partial_{a'} \mathcal{N} = -\langle q|P|q \rangle = 0 \quad (\text{B.2.14})$$

$$\partial_a^2 \mathcal{H} = \langle q|P^2 H|q \rangle, \quad \partial_{a'}^2 \mathcal{H} = \langle q|HP^2|q \rangle, \quad \partial_a \partial_{a'} \mathcal{H} = \langle q|PHP|q \rangle \quad (\text{B.2.15})$$

$$\partial_a^2 \mathcal{N} = \langle q|P^2|q \rangle, \quad \partial_{a'}^2 \mathcal{N} = \langle q|P^2|q \rangle, \quad \partial_a \partial_{a'} \mathcal{N} = \langle q|P^2|q \rangle \quad (\text{B.2.16})$$

ここで時間反転対称性から  $\langle q|P|q \rangle = 0$  である。そして自明だが以下も成り立つ。

$$\mathcal{N}|_{a=a'=q} = 1 \quad (\text{B.2.17})$$

$$\mathcal{H}|_{a=a'=q} = \langle q|H|q \rangle \quad (\text{B.2.18})$$

これらの式から  $h_x, h_y$  は以下のように分かる。

$$h_x = \frac{\partial}{\partial a} \left( \frac{\mathcal{H}(a, a')}{\mathcal{N}(a, a')} \right) \Big|_{a=a'=q} = \frac{(\partial_a \mathcal{H})\mathcal{N} - \mathcal{H}(\partial_a \mathcal{N})}{\mathcal{N}^2} \Big|_{a=a'=q} = \frac{i}{\hbar} \langle q|PH|q \rangle \quad (\text{B.2.19})$$

これと同様に  $h_y$  も計算すると以下の形になる。

$$h_y = \frac{\partial}{\partial a'} \left( \frac{\mathcal{H}(a, a')}{\mathcal{N}(a, a')} \right) \Big|_{a=a'=q} = -\frac{i}{\hbar} \langle q|HP|q \rangle \quad (\text{B.2.20})$$

ここからさらにもう一回  $x, y$  方向に微分を行なえば  $h_{xx}, h_{xy}, h_{yy}$  も得られる。

$$h_{xx} = \partial_a \partial_a h(a, a') \Big|_{a=a'=q} \quad (\text{B.2.21})$$

$$= \partial_a \frac{(\partial_a \mathcal{H})\mathcal{N} - \mathcal{H}(\partial_a \mathcal{N})}{\mathcal{N}^2} \Big|_{a=a'=q} \quad (\text{B.2.22})$$

$$= ((\partial_a^2 \mathcal{H})\mathcal{N} - \mathcal{H}(\partial_a^2 \mathcal{N})) \frac{1}{\mathcal{N}^2} \Big|_{a=a'=q} + (\text{分子}) \times (-2) \frac{\partial_a \mathcal{N}}{\mathcal{N}^2} \quad (\text{B.2.23})$$

$$= \langle q|P^2 H|q \rangle - \langle q|H|q \rangle \langle q|P^2|q \rangle \quad (\text{B.2.24})$$

これと同様の計算で  $h_{xy}, h_{yy}$  も以下のように求まる。

$$h_{xy} = \langle q|HP^2|q \rangle - \langle q|H|q \rangle \langle q|P^2|q \rangle \quad (\text{B.2.25})$$

$$h_{yy} = \langle q|PHP|q \rangle - \langle q|H|q \rangle \langle q|P^2|q \rangle \quad (\text{B.2.26})$$

ここでエネルギーの表式に話を戻すと、エネルギーの中の  $h$  の部分に  $a = a' = q$  の周りで展開したものを代入できる。すると以下となる。

$$\langle \Psi|H|\Psi \rangle = \int da \int da' f^*(a) \int dq \sqrt{\gamma_0} \mathcal{N}^{\frac{1}{2}}(a, q) h(a, a') \quad (\text{B.2.27})$$

$$\times \left( h + h_x(a - q) + h_y(a' - q) + \frac{1}{2} (h_{xx}(a - q)^2 + \dots) \right) \quad (\text{B.2.28})$$

$$\times \mathcal{N}^{\frac{1}{2}}(q, a') f(a') \quad (\text{B.2.29})$$

ここで  $(a-q)\mathcal{N}^{\frac{1}{2}}, (a-q)^2\mathcal{N}^{\frac{1}{2}}$  などが出てくるが、ここに  $\mathcal{N}^{\frac{1}{2}}$  の表式 (B.2.5) をいれると、この  $(a-q)$  の多項式が  $q$  の微分によって表現できることが分かる。具体的には以下のようなことである。

$$(a-q)\mathcal{N}^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2\gamma_0}\partial_q\mathcal{N}^{\frac{1}{2}} \quad (\text{B.2.30})$$

$$(a-q)^2\mathcal{N}^{\frac{1}{2}} = \left( \frac{1}{4\gamma_0^2}\partial_q^2 + \frac{1}{2\gamma_0}\mathcal{N}^{\frac{1}{2}} \right) \quad (\text{B.2.31})$$

すると  $h$  は微分を含んだ形で以下のように書ける。

$$h_{aa'} = h - h_x \left( \frac{1}{2\gamma_0}\partial_q \right) + h_y \left( \frac{1}{2\gamma_0}\partial_q \right) \quad (\text{B.2.32})$$

$$+ \frac{1}{2} \left( h_{xx} \left( \frac{1}{4\gamma_0^2}\partial_q^2 + \frac{1}{2\gamma_0} \right) + h_{yy} \left( \frac{1}{4\gamma_0^2}\partial_q^2 + \frac{1}{2\gamma_0} \right) - 2h_{xy} \left( \frac{1}{4\gamma_0^2}\partial_q^2 \right) \right) \quad (\text{B.2.33})$$

$$= h - \left( \frac{1}{2\gamma_0}\partial_q \right) (h_x - h_y) \quad (\text{B.2.34})$$

$$+ \frac{1}{2} \left( \frac{1}{4\gamma_0^2}\partial_q^2 \right) (h_{xx} - 2h_{xy} + h_{yy}) + \frac{1}{\gamma_0}(h_{xx} + h_{yy}) \quad (\text{B.2.35})$$

ここでまとめた係数について個別に計算すると、以下ようになる。

$$h_x - h_y = \langle q|PH + HP|q \rangle = 0 \quad (\text{B.2.36})$$

$$h_{xx} - 2h_{xy} + h_{yy} = -\langle q|P^2H|q \rangle + \langle q|H|q \rangle \langle q|P^2|q \rangle \quad (\text{B.2.37})$$

$$- 2(\langle q|PH P|q \rangle - \langle q|H|q \rangle \langle q|P^2|q \rangle) - \langle q|P^2H|q \rangle + \langle q|H|q \rangle \langle q|P^2|q \rangle \quad (\text{B.2.38})$$

$$= -\langle q|P^2H|q \rangle - \langle q|HP^2|q \rangle + 4\langle q|H|q \rangle \langle q|P^2|q \rangle - 2\langle q|PH P|q \rangle \quad (\text{B.2.39})$$

$$= -\langle q|\{P, \{H, P\}\}|q \rangle + 4\langle q|H|q \rangle \langle q|P^2|q \rangle \quad (\text{B.2.40})$$

ここで  $\{\cdot, \cdot\}$  は反交換関係である。この係数の計算から最終的に以下のように単純化される。

$$\langle \Psi|H|\Psi \rangle = \int \sqrt{\gamma}dqg^*(q)\mathcal{H}_{coll}(q, \partial_q)g(q) \quad (\text{B.2.41})$$

ここで  $\mathcal{H}_{coll}, g$  はそれぞれ以下の定義である。

$$g(q) = \int \mathcal{N}^{\frac{1}{2}}(q, a)f(a)da \quad (\text{B.2.42})$$

$$\mathcal{H}_{coll} = \frac{1}{\sqrt{\gamma}}\partial_q\sqrt{\gamma}\frac{\hbar^2}{2M(q)}\partial_q + V(q) \quad (\text{B.2.43})$$

集団的ハミルトニアン  $\mathcal{H}_{coll}$  に含まれる慣性パラメータ  $M$  とポテンシャル  $V$  は以下で定義される。

$$\frac{1}{M(q)} = -\frac{1}{2\gamma}(h_{xx} - h_{xy}) = \frac{\langle q|\{P, \{H, P\}\}|q\rangle + \langle q|H|q\rangle \langle q|P^2|q\rangle}{4 \langle q|P^2|q\rangle} \quad (\text{B.2.44})$$

$$V(q) = \langle q|H|q\rangle - \epsilon_0(q) \quad (\text{B.2.45})$$

$$\epsilon_0 = \frac{h_{xy}}{2\gamma} = \frac{\langle q|P^2|q\rangle}{2M(q)} + \frac{\hbar^2}{8 \langle q|P^2|q\rangle} \partial_q^2 \langle q|H|q\rangle \quad (\text{B.2.46})$$

このように集団的ハミルトニアンが生成座標のうえで運動項に値するものとポテンシャルに値するもので書ける。するとシュレディンガー方程式を解くような手順で生成座標法の方程式を解くことが出来るようになる。



## 付録 C 生成座標におけるカーネルの計算法

### C.1 概要

この章ではスレーター行列式型の波動関数で演算子をはさんだときの行列要素の計算法を示す [24]。まずスレーター行列式とは一粒子波動関数  $\varphi$  を使って、以下のように定義されるものである。

$$|\Phi\rangle = N_{\Phi} \det(A) = \frac{1}{n!} \sum_{\mathbf{P}} \epsilon(\alpha\beta\cdots\delta) \phi_1(x_{\alpha}) \phi_2(x_{\beta}) \cdots \phi_n(x_{\delta}) \quad (\text{C.1.1})$$

これ以降はスレーター行列式を  $\Phi, \Psi$  で表現し、その中の一粒子波動関数を  $\phi, \psi$  とかく。ここで  $\sum_{\mathbf{P}} \epsilon(\alpha\beta\cdots\delta)$  は  $\alpha, \beta, \dots, \delta$  の可能な全ての並び換えに対して和をとることを意味しており、 $\epsilon$  は  $\alpha, \beta, \dots, \delta$  の交換に対して完全反対称で 1 か  $-1$  をとる。また  $A$  は以下のように定義される行列である。

$$A = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{pmatrix} \phi_1(x_1) & \phi_1(x_2) & \cdots & \phi_1(x_n) \\ \phi_2(x_1) & \phi_2(x_2) & \cdots & \phi_2(x_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_n(x_1) & \phi_n(x_2) & \cdots & \phi_n(x_n) \end{pmatrix} \quad (\text{C.1.2})$$

$N_{\Phi}$  は規格化定数であり、各一粒子波動関数が規格化されていて、同一スレーター行列式内の一粒子波動関数同士が直交している場合は  $N_{\Phi}$  は 1 となる。しかし前述の二つの条件のうち片方でも満たしていない場合は一般に  $N_{\Phi}$  は 1 ではない。このようにスレーター行列式が定義されることで、一粒子の交換に対して完全反対称な多体の波動関数が表現されている。ここからこのスレーター行列式を二つ用意し、それらでどのように演算子の行列要素を計算していくのかを示す。ここではスレーター行列式のオーバーラップ、一体演算子、二体演算子までの行列要素を考える。

## C.2 スレーター行列式同士のオーバーラップ

このように定義したスレーター行列式に対して、オーバーラップを計算すると以下になる。

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = N_{\Phi} N_{\Psi} \left( \frac{1}{n!} \right)^2 \left\langle \sum_{\mathbf{P}} \epsilon(\alpha \cdots \delta) \phi_1(x_{\alpha}) \cdots \phi_n(x_{\delta}) \left| \sum_{\mathbf{P}} \epsilon(\xi \cdots \eta) \psi_1(x_{\xi}) \cdots \psi_n(x_{\eta}) \right. \right\rangle \quad (\text{C.2.1})$$

$$= N_{\Phi} N_{\Psi} \frac{1}{n!} \sum_{\mathbf{P}} \epsilon(\alpha \cdots \delta) \langle \phi_1(x_1) \cdots \phi_n(x_n) | \psi_1(x_{\alpha}) \cdots \psi_n(x_{\delta}) \rangle \quad (\text{C.2.2})$$

ここでオーバーラップの左右の一粒子波動関数をみると、例えば  $\langle \phi_1(x_a) | \phi_2(x_a) \rangle, \langle \phi_1(x_b) | \phi_2(x_b) \rangle$  などが出てくるが、ここで  $a, b$  というのは同じ 1 から  $n$  までを走るダミーの添字なので重複がある。それを考慮するとそういった重複は  $n!$  個あり、ちょうど片方の反対称化がとれる形になり式 (C.2.2) になる。そして式 (C.2.2) の  $1/n!$  以降の部分は行列式の定義になっているため、以下のように表現できる。

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = N_{\Phi} N_{\Psi} \frac{1}{n!} \det \{ \langle \phi | \psi \rangle \} \quad (\text{C.2.3})$$

このとき考えた行列は以下のもので、これを  $B$  と表記する。

$$B = \begin{pmatrix} \langle \phi_1 | \psi_1 \rangle & \langle \phi_1 | \psi_2 \rangle & \cdots & \langle \phi_1 | \psi_n \rangle \\ \langle \phi_2 | \psi_1 \rangle & \langle \phi_2 | \psi_2 \rangle & \cdots & \langle \phi_2 | \psi_n \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \phi_n | \psi_1 \rangle & \langle \phi_n | \psi_2 \rangle & \cdots & \langle \phi_n | \psi_n \rangle \end{pmatrix} \quad (\text{C.2.4})$$

そして同じスレーター行列式のオーバーラップをとれば以下のように規格化定数が求まる。

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = N_{\Phi}^2 \frac{1}{n!} \det \{ \langle \phi | \psi \rangle \} = 1 \quad (\text{C.2.5})$$

この式を  $N_{\Phi}$  についてとけば

$$N_{\Phi} = \sqrt{n!} (\det \{ \langle \phi | \psi \rangle \}) \quad (\text{C.2.6})$$

全く同様に  $N_{\Psi}$  も求まるので、結局スレーター行列式同士のオーバーラップは以下の形となる。

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \frac{\det \{ \langle \phi | \psi \rangle \}}{(\det \{ \langle \phi | \phi \rangle \} \det \{ \langle \psi | \psi \rangle \})^{\frac{1}{2}}} \quad (\text{C.2.7})$$

### C.3 一体の演算子の行列要素

スレーター行列式同士のオーバーラップが計算できたので、次に一体の演算子を異なるスレーター行列式ではさんだときの行列要素を計算する。この節以降に余因子展開とその性質を用いるため、先にそれについて述べる。

#### C.3.1 余因子展開

余因子展開によって一般に行列は以下のように展開される。

$$\det(A) = \sum_j a_{ij} c_{ij} \quad (\text{C.3.1})$$

ここで  $a$  は行列  $A$  の要素であり、 $c$  は行列  $A$  の余因子である。余因子とは例えば  $c_{ij}$  であれば元の行列から  $i$  番目の行と  $j$  番目の列を消去した行列の行列式である。例えば上の式 (C.3.1) で  $i$  を 1 ととると、行列の線形性から以下の形に分解できる。

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad (\text{C.3.2})$$

$$= a_{11} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad (\text{C.3.3})$$

$$+ a_{12} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} + \cdots \quad (\text{C.3.4})$$

ここで両辺の行列式をとれば余因子展開の公式が得られる。また余因子には以下の性質がある。

$$\sum_j a_{ij} c_{kj} = \det(A) \delta_{kj} \quad (\text{C.3.5})$$

$$(\text{C.3.6})$$

ここから余因子は行列式を用いて以下のように表されることが分かる。

$$c_{ij} = (a^{-1})_{ji} \det(A) \quad (\text{C.3.7})$$

また拡張した余因子展開も存在し、行列式は以下のようにも展開できる。

$$\det(A) = \sum_{k,l} a_{ik} a_{jl} c(ij, kl) \quad (\text{C.3.8})$$

ここで  $c(ij, kl)$  は拡張された余因子であり、以下の性質を持つ。

$$\sum_{kl} a_{ik} a_{jl} c(i'j', kl) = \det(A) [\delta_{ii'} \delta_{jj'} - \delta_{ij'} \delta_{ji'}] \quad (\text{C.3.9})$$

ここから逆に  $c(ij, kl)$  は以下で表される。

$$c(ij, kl) = \det(A) ((a^{-1})_{ki} (a^{-1})_{lj} - (a^{-1})_{li} (a^{-1})_{kj}) \quad (\text{C.3.10})$$

これ以降は余因子展開のこれらの性質を用いながら計算を行なっていく。

### C.3.2 行列要素の計算

ここでは一体の演算子を以下のように定義する。

$$T = \sum_i t_i \quad (\text{C.3.11})$$

この演算子は位置  $x_i$  にいる波動関数のみに作用する。このときのスレーター行列式による行列要素は以下となる。

$$\langle \Phi | T \Psi \rangle = N_\Phi N_\Psi \left( \frac{1}{n!} \right)^2 \left\langle \sum_{\mathbf{P}} \epsilon(\alpha \cdots \delta) \phi_1(x_\alpha) \cdots \phi_n(x_\delta) \left| T \sum_{\mathbf{P}} \epsilon(\xi \cdots \eta) \psi_1(x_\xi) \cdots \psi_n(x_\eta) \right. \right\rangle \quad (\text{C.3.12})$$

$$= N_\Phi N_\Psi \frac{1}{n!} \sum_i \sum_{\mathbf{P}} \epsilon(\xi \cdots \eta) \langle t_i \phi_1(x_1) \cdots \phi_n(x_n) | \psi_1(x_\xi) \cdots \psi_n(x_\eta) \rangle \quad (\text{C.3.13})$$

ここまではスレーター行列式同士のオーバーラップと同様の議論である。このときも反対称の和は重複を考慮すると片方が消える。違うのは一粒子波動関数のオーバーラップ  $\langle \phi | \psi \rangle$  を考える代わりに  $\langle t\phi | \psi \rangle$  を考えるということである。

ここで余因子展開を式 (C.3.13) に対して行なう。ここで式 (C.3.13) の  $\sum_{\mathbf{P}} \epsilon$  以降はある行列の行列式になっており、その行列は以下のようなものである。この行列を  $B'$  と表記する。

$$\begin{pmatrix} \langle \phi_1 | \psi_1 \rangle & \langle \phi_1 | \psi_2 \rangle & \cdots & \langle \phi_1 | \psi_n \rangle \\ \langle \phi_2 | \psi_1 \rangle & \langle \phi_2 | \psi_2 \rangle & \cdots & \langle \phi_2 | \psi_n \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle t\phi_i | \psi_1 \rangle & \langle t\phi_i | \psi_2 \rangle & \cdots & \langle t\phi_i | \psi_n \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \phi_n | \psi_1 \rangle & \langle \phi_n | \psi_2 \rangle & \cdots & \langle \phi_n | \psi_n \rangle \end{pmatrix} \quad (\text{C.3.14})$$

この  $B'$  の  $i$  行目に対して余因子展開を行なうと  $B'$  は  $B'$  の余因子  $B'^{co}$  を用いてその行列式は以下のように書ける。

$$\det(B') = \sum_i \langle t\phi_i | \psi_j \rangle B'_{ij}{}^{co} \quad (\text{C.3.15})$$

ここで  $B'_{ij}{}^{co}$  は  $B'$  の  $i$  行と  $j$  列を除いた行列の行列式であり、一体演算子は  $i$  行にのみ影響していたので、式 (C.2.4) の余因子  $B_{ij}{}^{co}$  と一致する。つまり一体の演算子のかかっていない元の行列  $B$  の余因子を用いて以下で書ける。

$$\det(B') = \sum_i \langle t\phi_i | \psi_j \rangle B_{ij}{}^{co} \quad (\text{C.3.16})$$

ここで余因子の性質 (C.3.1) を用いれば、元の行列の成分と行列しきで以下のように書ける。

$$\det(B') = \sum_i \langle t\phi_i | \psi_j \rangle \det(B) (B_{ji}^{-1}) \quad (\text{C.3.17})$$

ここで最初に考えたかった式 (C.3.12) に戻ると、一体演算子の行列要素が得られる。

$$\langle \Phi | T \Psi \rangle = N_\Phi N_\Psi \frac{1}{n!} \sum_i \sum_P \epsilon(\xi \cdots \eta) \langle t_i \phi_1(x_1) \cdots \phi_n(x_n) | \psi_1(x_\xi) \cdots \psi_n(x_\eta) \rangle \quad (\text{C.3.18})$$

$$= \frac{\det \{ \langle \phi | \psi \rangle \}}{(\det \{ \langle \phi | \phi \rangle \} \det \{ \langle \phi | \phi \rangle \})^{\frac{1}{2}}} \sum_{ij} \langle t\phi_i | \psi_j \rangle (B^{-1})_{ji} \quad (\text{C.3.19})$$

$$= \langle \Phi | \Psi \rangle \sum_{ij} \langle t\phi_i | \psi_j \rangle (B^{-1})_{ji} \quad (\text{C.3.20})$$

ここで  $\det(B) = \det \{ \langle \phi | \psi \rangle \}$  を用いた。

#### C.4 二体の演算子の行列要素

次に二体演算子の行列要素を考える。基本的な考えは一体の演算子のときと同様である。まず二体演算子を以下のように定義する。

$$V = \sum_{i < j} v_{ij} \quad (\text{C.4.1})$$

この演算子は位置  $x_i, x_j$  にある波動関数にのみ作用する。この演算子のスレーター行列式に対する行列要素は以下の式になる。

$$\langle \Phi | V \Psi \rangle = N_\Phi N_\Psi \left( \frac{1}{n!} \right)^2 \left\langle \sum_{\mathbf{P}} \epsilon(\alpha \cdots \delta) \phi_1(x_\alpha) \cdots \phi_n(x_\delta) \left| V \sum_{\mathbf{P}} \epsilon(\xi \cdots \eta) \psi_1(x_\xi) \cdots \psi_n(x_\eta) \right. \right\rangle \quad (\text{C.4.2})$$

$$= N_\Phi N_\Psi \frac{1}{n!} \sum_{ij} \sum_{\mathbf{P}} \epsilon(\xi \cdots \eta) \langle v_{ij} \phi_1(x_1) \cdots \phi_n(x_n) | \psi_1(x_\xi) \cdots \psi_n(x_\eta) \rangle \quad (\text{C.4.3})$$

ここでは拡張された余因子展開 (C.3.8) を用いて変形をすると以下の式となる。

$$\langle \Phi | V \Psi \rangle = \frac{1}{2} N_\Phi N_\Psi \frac{1}{n!} \sum_{ijkl} \langle \phi_i \phi_j | v_{ij} | \psi_k \psi_l \rangle B^{co(2)}(ij, kl) \quad (\text{C.4.4})$$

ここで  $B^{co(2)}$  は  $B$  の拡張された余因子である。この式を性質 (C.3.10) を用いて変形すれば二体演算子の行列要素が分かる。

$$\langle \Phi | V \Psi \rangle = \frac{1}{2} N_\Phi N_\Psi \frac{1}{n!} \sum_{ijkl} \langle \phi_i \phi_j | v_{ij} | \psi_k \psi_l \rangle \det(B) \left( (B^{-1})_{ki} (B^{-1})_{lj} - (B^{-1})_{li} (B^{-1})_{kj} \right) \quad (\text{C.4.5})$$

$$= \frac{1}{2} \langle \Phi | \Psi \rangle \sum_{ijkl} \langle \phi_i \phi_j | v_{ij} | \psi_k \psi_l \rangle \left( (B^{-1})_{ki} (B^{-1})_{lj} - (B^{-1})_{li} (B^{-1})_{kj} \right) \quad (\text{C.4.6})$$

## 付録 D 一粒子波動関数がガウス型のときのノルムカーネル

ガウシアンオーバーラップ近似ではノルムカーネルをガウス型に近似したが、その近似が正しい時の例として一粒子波動関数がガウス型のときのノルムカーネルを計算する。今回考える生成座標は重心の運動量とし、各一粒子波動関数には重心の運動量が等分配される。またスレーター行列式は左右  $x = \pm R$  を初期位置として配置するとする。このような状況ではノルムカーネルは厳密に生成座標の差を変数としたガウス型になることが示せる。

ここでは簡単のために二つのスレーター行列式のみを考える。そのときノルムカーネルは以下の形となる。

$$\mathcal{N} = \begin{pmatrix} \langle \Phi | \Phi \rangle & \langle \Phi | \Psi \rangle \\ \langle \Psi | \Phi \rangle & \langle \Psi | \Psi \rangle \end{pmatrix} \quad (\text{D.0.1})$$

ここで  $\Phi, \Psi$  はスレーター行列式である。そして付録 C からスレーター行列式のオーバーラップはそれらの一粒子波動関数から成る行列の行列式である。ここで各スレーター行列式には二つの一粒子波動関数のみが含まれているとすると、スレーター行列式のオーバーラップは一粒子波動関数を用いて以下で書ける。

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \det \begin{pmatrix} \langle \phi_1 | \psi_1 \rangle & \langle \phi_1 | \psi_2 \rangle \\ \langle \phi_2 | \psi_1 \rangle & \langle \phi_2 | \psi_2 \rangle \end{pmatrix} \quad (\text{D.0.2})$$

$\phi_i, \psi_i$  はそれぞれスレーター行列式  $\Phi, \Psi$  に属する一粒子波動関数である。今はノルムカーネルの 1 成分のみを示したが、他の成分も同様に表せる。ここで一粒子波動関数はガウス型であり、今回はそれに運動量を与えたものと分かっているので、それらのオーバーラップは以下のように計算できる。ここでは  $\phi_1, \psi_1$  を左に配置され右向き運動量  $p_1, p_2$  を持つものとし、 $\phi_2, \psi_2$  を右に配置され左向き運動量  $p_1, p_2$  を持つものとする。式で表せば以下の通り。

$$\phi_1(x) = e^{-(x-R)^2} \times e^{+ip_1(x-R)} \quad (\text{D.0.3})$$

$$\phi_2(x) = e^{-(x+R)^2} \times e^{-ip_1(x+R)} \quad (\text{D.0.4})$$

$$\psi_1(x) = e^{-(x-R)^2} \times e^{+ip_2(x-R)} \quad (\text{D.0.5})$$

$$\psi_2(x) = e^{-(x+R)^2} \times e^{-ip_2(x+R)} \quad (\text{D.0.6})$$

ここで運動量の添字 1,2 はスレーター行列式の添字であって、一粒子波動関数の添字でないことに注意する。また運動量を与える項  $e^{(\pm ip_i(x \mp R))}$  に入っている定数の位相  $e^{-ip_i R}$

はノルムカーネル全体の位相を変えるが、今回はノルムカーネルが実になるようにとっている。

$$\langle \phi_1 | \psi_1 \rangle = \int dx \left( e^{-(x+R)^2 + ip_1(x+R)} \right)^* \times e^{-(x+R)^2 + ip_2(x+R)} \quad (\text{D.0.7})$$

この式では  $(x+R)$  が多くあるので、変数変換  $y = (x+R)$  を行なうと  $\exp$  の中は以下のように変形できる。

$$-y^2 - ip_1 y - y^2 + ip_2 y = -2y^2 - i(p_1 - p_2)y = -2 \left( y + \frac{i}{4} \Delta p \right)^2 - \frac{(\Delta p)^2}{8} \quad (\text{D.0.8})$$

ここで  $\Delta p = p_1 - p_2$  を定義した。ここからガウス積分を実行すれば式 (D.0.7) は以下となる。

$$\langle \phi_1 | \psi_1 \rangle = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \exp \left\{ -\frac{(\Delta p)^2}{8} \right\} \quad (\text{D.0.9})$$

これと同様に以下も計算できる。

$$\langle \phi_2 | \psi_2 \rangle = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \exp \left\{ -\frac{(\Delta p)^2}{8} \right\} \quad (\text{D.0.10})$$

次に  $\langle \phi_1 | \psi_2 \rangle$  を計算していく。これは  $\langle \phi_1 | \psi_1 \rangle$  のときと符号の組合せが異なり以下のようにになる。

$$\langle \phi_1 | \psi_2 \rangle = \int dx \left( e^{-(x+R)^2 + ip_1(x+R)} \right)^* \times e^{-(x-R)^2 - ip_2(x-R)} \quad (\text{D.0.11})$$

ここでは変数変換はせずに  $\exp$  の中を展開していくと以下のように変形できる。

$$-x^2 - R^2 - ip_1 x - ip_1 R - x^2 - R^2 - ip_2 x + ip_2 R \quad (\text{D.0.12})$$

$$= -2x^2 - i(p_1 + p_2)x - i(p_1 - p_2)R - 2R^2 \quad (\text{D.0.13})$$

$$= -2 \left( x - \frac{i}{4} \bar{p} \right)^2 - \frac{\bar{p}}{8} - i\Delta p R - 2R^2 \quad (\text{D.0.14})$$

ここで  $\bar{p} = p_1 + p_2$  を定義した。ここからガウス積分を実行すれば以下の結果が得られる。

$$\langle \phi_1 | \psi_2 \rangle = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \exp \left\{ -2R^2 - i\Delta p R - \frac{\bar{p}}{8} \right\} \quad (\text{D.0.15})$$

これと同様の計算によって以下も分かる。

$$\langle \phi_2 | \psi_1 \rangle = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \exp \left\{ -2R^2 - i\Delta p R - \frac{\bar{p}}{8} \right\} \quad (\text{D.0.16})$$



これですべての一粒子波動関数同士のオーバーラップが計算できたので、これらの計算結果からノルムカーネルの一分を計算できる。

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \det \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \exp \left\{ \frac{(\Delta p)^2}{8} \right\} & \sqrt{\frac{\pi}{2}} \exp \left\{ -2R^2 - i\Delta p R - \frac{\bar{p}}{8} \right\} \\ \sqrt{\frac{\pi}{2}} \exp \left\{ -2R^2 - i\Delta p R - \frac{\bar{p}}{8} \right\} & \sqrt{\frac{\pi}{2}} \exp \left\{ \frac{(\Delta p)^2}{8} \right\} \end{pmatrix} \quad (\text{D.0.17})$$

$$= \frac{\pi}{2} \left( \exp \left\{ \frac{(\Delta p)^2}{4} \right\} - \exp \left\{ -4R^2 - 2i\Delta p - \frac{\bar{p}^2}{4} \right\} \right) \quad (\text{D.0.18})$$

ここでノルムカーネルの他の成分は  $\mathcal{N}_{12} = \mathcal{N}_{21}^*$  であり、 $\mathcal{N}_{11}, \mathcal{N}_{12}$  は上の計算で一粒子波動関数の  $p$  の添字が変化するだけなので同様に計算が可能である。結局ノルムカーネルは以下の形になる。

$$\mathcal{N} = \begin{pmatrix} \frac{\pi}{2} (1 - \exp \{-4R^2 - p_1\}) & \frac{\pi}{2} \left( e^{\frac{(\Delta p)^2}{4}} - e^{-4R^2 - 2i\Delta p - \frac{\bar{p}^2}{4}} \right) \\ \frac{\pi}{2} \left( e^{\frac{(\Delta p)^2}{4}} - e^{-4R^2 + 2i\Delta p - \frac{\bar{p}^2}{4}} \right) & \frac{\pi}{2} (1 - \exp \{-4R^2 - p_2\}) \end{pmatrix} \quad (\text{D.0.19})$$

$$\xrightarrow{R \gg 1} \frac{\pi}{2} \begin{pmatrix} 1 & e^{-\frac{(\Delta p)^2}{4}} \\ e^{-\frac{(\Delta p)^2}{4}} & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{D.0.20})$$

ここから初期位置  $R$  が十分に大きいときにはノルムカーネルの各成分はガウス型であることが示せた。(1 は  $\Delta p = 0$  のガウス)

以上の計算はスレーター行列式の数に二つに制限して行なったが、スレーター行列式の数が増えても運動量の差の部分のスレーター行列式  $i, j$  の間で  $\Delta p_{ij} = p_i - p_j$  と拡張するだけで同様にノルムカーネルの各成分がガウス型であることが示せる。また今回は一粒子波動関数の数も二つに制限した。しかしスピン、アイソスピンの自由度を加えて左に4つ右に4つ配置した系においてもスピン、アイソスピンが異なる波動関数同士は直交するため同様の結果となる。

ここでの計算は4章において参照される。

## 参考文献

- [1] K. R. Sandhya Devi, M. R. Strayer and J. M. Irvine, *J. Phys. G* Vol.5 ,No.2 (1979).
- [2] P. Fröbrich and I. I. Gontchar, *Phys. Rep.* 292, 131 (1998).
- [3] V. Zagrebaev and W. Greiner, *J. Phys. G* 31, 825 (2005).
- [4] V. Zagrebaev and W. Greiner, *Nucl. Phys. A* 944, 257 (2015).
- [5] K. Hagino and N. Takigawa, *Prog. Theor. Phys.* 128, 1061 (2012).
- [6] K. Hagino, N. Rowley, and A. T. Kruppa, *Comput. Phys. Commun.* 123, 143 (1999).
- [7] M. Tokieda and K. Hagino, *Phys. Rev. C* 95, 054604 (2017).
- [8] C. Simenel, *Eur. Phys. J. A* 48, 152 (2012).
- [9] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem*, Springer (1980).
- [10] S. E. Koonin and D. C. Meredith, *computational physics fortran version*, Addison Wesley (1990).
- [11] P. Bonche, S. Koonin, and J. W. Negele, *Phys. Rev. C* 13,3 (1976).
- [12] R. Bernard, H. Goutte, D. Gogny and W. Younes, *Phys. Rev. C* 84,044308 (2011).
- [13] D. Regnier, N. Dubray, N. Schunck and M. Verrière, *Phys. Rev. C* 93, 054661 (2016).
- [14] A. Zdeb, A. Dobrowolski, and M. Warda, *Phys. Rev. C* 95, 054608 (2017).
- [15] H. Tao, J. Zhao, Z. P. Li, T. Nikšić and D. Vretenar, *Phys. Rev. C* 96, 024319 (2017).
- [16] H. Goutte, J. F. Berger, P. Casoli, and D. Gogny, *Phys. Rev. C* 71, 024316 (2005).
- [17] E. Orestes, K. Capelle, A. B. F. da Silva, and C. A. Ullerich, arxiv0704.2855v1 (2018).
- [18] P.-G. Reinhard, R.Y. Cusson, and K. Goeke, *Nucl. Phys. A* 398 141 (1983).
- [19] H. Flocard and D. Vautherin, *Nucl. Phys. A* 264, 197 (1976).
- [20] K. Hagino, P. -G. Reinhard, and G. F. Bertsch, *Phys. Rev. C* 65, 064320 (2002).
- [21] M. H. Beck, A. Jäckle, G. A. Worth, and H. -D. Meyer , *Phys. Rep.* 324, 1-105 (2000).
- [22] H. -D. Meyer, U. Manthe and L. S. Cederbaum, *Chem. Phys. Lett.* 165, 1 (1990).
- [23] S. Ndengue, R. Dawes, F. Gatti, and H. -D. Meyer, *Chem. Phys. Lett.* 668, 42-46

(2017).

[24] D. M. Brink, Proc. Int. Sch. Phys. Enrico Fermi Course, 36, 272 (1966).