物理学会北陸支部定例学術講演会

12月13日, 2014

奇粒子数系の自己無撞着 Hartree-Fock-Bogoliubov解

Self-consistent solutions of the Hartree-Fock-Bogoliubov equation for systems of odd number of particles

杉浦友章，田嶋直樹 (福井大工)

T. Sugiura, N. Tajima (Univ. of Fukui)

本研究の背景

- 原子核を核子（陽子と中性子）の量子多体系として表す際の良い近似として、自己無撞着な平均場解が広く利用されている。
- 原子核では同種核子の間の対相関を考慮することが重要である。
- 対相関を含んだ平均場解はHartree-Fock-Bogoliubov(HFB)方程式の解として得られる。
- 通常は、HFB解は粒子個数が偶数の成分の重ね合わせである。

本研究の主題

- 奇数個の粒子の系のHFB解を自己無撞着に求めるにはどうしたらよいか？

まず、下記の参考文献に基づいて理論のレビューを行う。

主な参考文献

On the Character of the Hartree-Fock-Bogoliubov solutions in a rotating frame

B. Banerjee et al., Nucl. Phys. A, 221, 564 (1974).

Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB)法

Bogoliubov変換

$$\beta_i^\dagger = \sum_{j=1}^{n} \left(c_j^\dagger U_{ji} + c_j V_{ji} \right)$$

$$\beta_i = \sum_{j=1}^{n} \left(c_j^\dagger V_{ji}^* + c_j U_{ji}^* \right)$$

$c_i^\dagger$: 一粒子基底状態ϕ_iに粒子を生成する演算子, $1 \le i \le n$, nは基底の次元

$\beta_i^\dagger$: i番目の準粒子の生成演算子, $1 \le i \le n$

行列の積で表すなら、

$$\vec{\beta}^\dagger = (\beta_1^\dagger, \cdots, \beta_n^\dagger)、\vec{\beta} = (\beta_1, \cdots, \beta_n)、\vec{c}^\dagger = (c_1^\dagger, \cdots, c_n^\dagger)、\vec{c} = (c_1, \cdots, c_n)$$

として、

$$\left(\vec{\beta}^\dagger, \vec{\beta}\right) = \left(\vec{c}^\dagger, \vec{c}\right)\mathcal{W}, \quad \mathcal{W} = \begin{pmatrix} U & V^* \\ V & U^* \end{pmatrix}$$

$\mathcal{W}$ にユニタリ性($\mathcal{W}\mathcal{W}^\dagger = \mathcal{W}^\dagger\mathcal{W} = I$)を要請すると、$\beta_i^\dagger, \beta_i$ $(1 \leq i \leq n)$も
フェルミ粒子の反交換関係を満たす：$\{\beta_i, \beta_j^\dagger\} = \delta_{ij}$, $\{\beta_i, \beta_j\} = \{\beta_i^\dagger, \beta_j^\dagger\} = 0$

変分条件

$$\delta\frac{\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}=0$$

を満たす W をきめる。

$|\Psi\rangle=\prod_{i=1}^{n}\beta_i|0\rangle$ **: 準粒子の真空(HFBの基底状態解)**

$|0\rangle$ **: 粒子の真空, $1\leq i\leq n$ について $c_i|0\rangle=0$ を満たす。**

($\because$ $1\leq i\leq n$ について, $\beta_i^2=0$ より $\beta_i|\Psi\rangle=0$ を満たす)

⇒ HFB方程式

$$\mathcal{H}\begin{pmatrix} \vec{U}_i \\ \vec{V}_i \end{pmatrix} = E_i \begin{pmatrix} \vec{U}_i \\ \vec{V}_i \end{pmatrix}, \quad \mathcal{H} = \begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix}$$

$\mathcal{H}$: $2n \times 2n$次元行列, $\mathcal{H}^\dagger = \mathcal{H}$, quasi-particle Hamiltonian

h : $n \times n$次元行列, $h^\dagger = h$, mean-field Hamiltonian

Δ : $n \times n$次元行列, $\Delta^\dagger = -\Delta$, pairing Hamiltonian

$\vec{U}_i = (U_{1i}, \cdots, U_{ni})^{\mathrm{T}}$: i番目の準粒子の粒子励起成分の振幅を列ベクトルとして配置したもの

$\vec{V}_i = (V_{1i}, \cdots, V_{ni})^{\mathrm{T}}$: i番目の準粒子の空孔励起成分の振幅を列ベクトルとして配置したもの

E_i : i番目の準粒子の励起エネルギー

得られた$2n$個の準粒子演算子をn個の生成演算子とn個の消滅演算子とに分ける

行列$\mathcal{H}$の構造に起因して、絶対値が同じで符号が正負のエネルギーを持つ準粒子の対がn対得られる。

すなわち、

$\beta_i^\dagger = \sum_{j=1}^{n} \left(c_j^\dagger U_{ji} + c_j V_{ji} \right)$ が固有値 E_i を持つなら

$\beta_{\bar{\imath}}^\dagger = \sum_{j=1}^{n} \left(c_j^\dagger V_{ji}^* + c_j U_{ji}^* \right)$ は固有値 $-E_i$ を持つ。

準粒子の生成演算子は反対符号のエネルギーの準粒子の消滅演算子に等しい:

$\beta_{\bar{\imath}}^\dagger = \beta_i$、$\beta_i^\dagger = \beta_{\bar{\imath}}$

従って、

$2n$ 個の準粒子状態の候補から n 個を準粒子として選ぶ必要があり、
残りの n 個はそれらの消滅演算子に過ぎない。

また、

負のエネルギーを持つ準粒子が存在するような解(真空)は、
その準粒子の励起に対して不安定であるから、
通常は、正のエネルギーを持つ準粒子を選んで、「$1 \leq i \leq n$ で $E_i > 0$」とする。

粒子の個数の偶奇性(number parity)

HFB解 $|\Psi\rangle = \prod_{i=1}^{n} \beta_i |0\rangle$ は粒子の個数の異なる状態の重ね合わせであるが、
個数の偶奇性は混ざらず、作用させる準粒子の消滅演算子（β_i）の個数 n の偶奇性と一致する。

素朴に考えると…

通常は一粒子基底には時間反転対を揃えるので、基底の次元 n は偶数である。
従って、HFB解は偶数粒子系を表すはずである。

しかし、

高スピン状態を求めるため、系を一定角速度で回転させる(cranking)と,
特定の角速度範囲でHFBの基底状態解が奇数粒子系になってしまうことがある。
(Banerjee et al., 1974)

これは
n 個の正エネルギーの準粒子の消滅演算子のうち
$n-1$ 個を $|0\rangle$ に作用させて $|\Psi\rangle = \prod_{i=1}^{n-1} \beta_i |0\rangle$ とすれば、
$|\Psi\rangle$ は既に残りの1個の準粒子の真空にもなっている $(\beta_n|\Psi\rangle = 0)$ ためである。

この場合、
奇数粒子系の基底状態が、変分解として正確に求まったことになる。

一般的な状況でも、奇数粒子系の基底状態を、正確に自己無撞着に求めるにはどうしたらよいだろうか。

準粒子状態のブロック

詳しい考察によると、
エネルギーの絶対値が等しい準粒子演算子の
対のどちらを生成演算子に指定するかを一ヶ所変える度に、
HFB 解の number parity が反転することが示せる。(Banerjee et al., 1974)

HFB の真空は「BCS 変分関数に何個かの一粒子生成演算子を乗じた形」、
例えば「何個か」が「１個」なら

$$|\Psi\rangle = a_1^\dagger \prod_{i=2}^{n/2} (u_i + v_i a_i^\dagger a_{\bar{i}}^\dagger)|0\rangle$$

と表せるという Bloch-Messiah の定理 (1962 年) が成り立つ。
証明はこの定理を活用して行われる。

ある準粒子状態の生成と消滅の定義を入れ替えることを、
理解の容易なBCS変分関数で言い表すと、
一粒子状態の時間反転対 $i, \bar{\imath}$ の片方だけに、１個の粒子を入れることに対応する。

粒子が１個入ることにより、
number parity が反転するとともに、その状態対は対相関に利用できなくなる。
⇒ その状態対をブロックする。

これにならい、ある準粒子状態の生成と消滅の定義を入れ替える。
⇒ その準粒子状態をブロックする。

ブロックすることで平均場が変化するので、ブロックの仕方を同一に保ちつつ
反復計算を行い自己無撞着性を達成する必要がある。

反復で解に収束するのか?

プログラムHFODDでは

1. 「全準粒子状態 から 平均場 を計算すること」

2. 「平均場 から 全準粒子状態を求めること」

を繰り返すことで自己無撞着解を求める。

しかし、この反復により解に収束するとは限らない。プログラムには、収束しない場合の対処法が２つ用意されている。

1. 減衰因子

2. Broyden法
   収束を速める効果がある。振動を止める効果もあるか？ 現在、試そうとしている。

減衰因子を使った計算結果

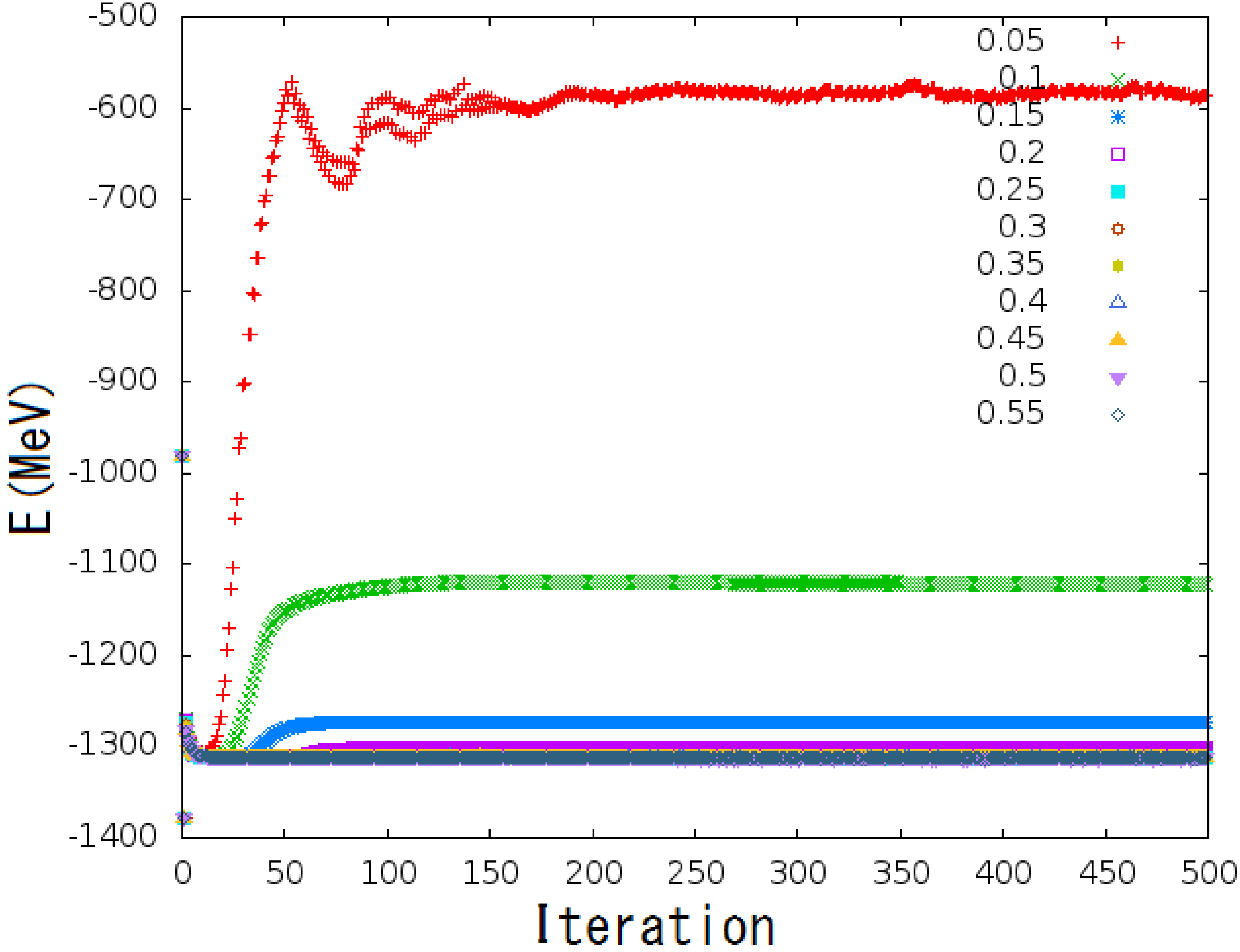
n番目のpotentialをV_nとすると減衰因子はプログラムHFODDでは

$$V_{n+1} = (1-\epsilon)V_n + \epsilon V'_{n+1}$$

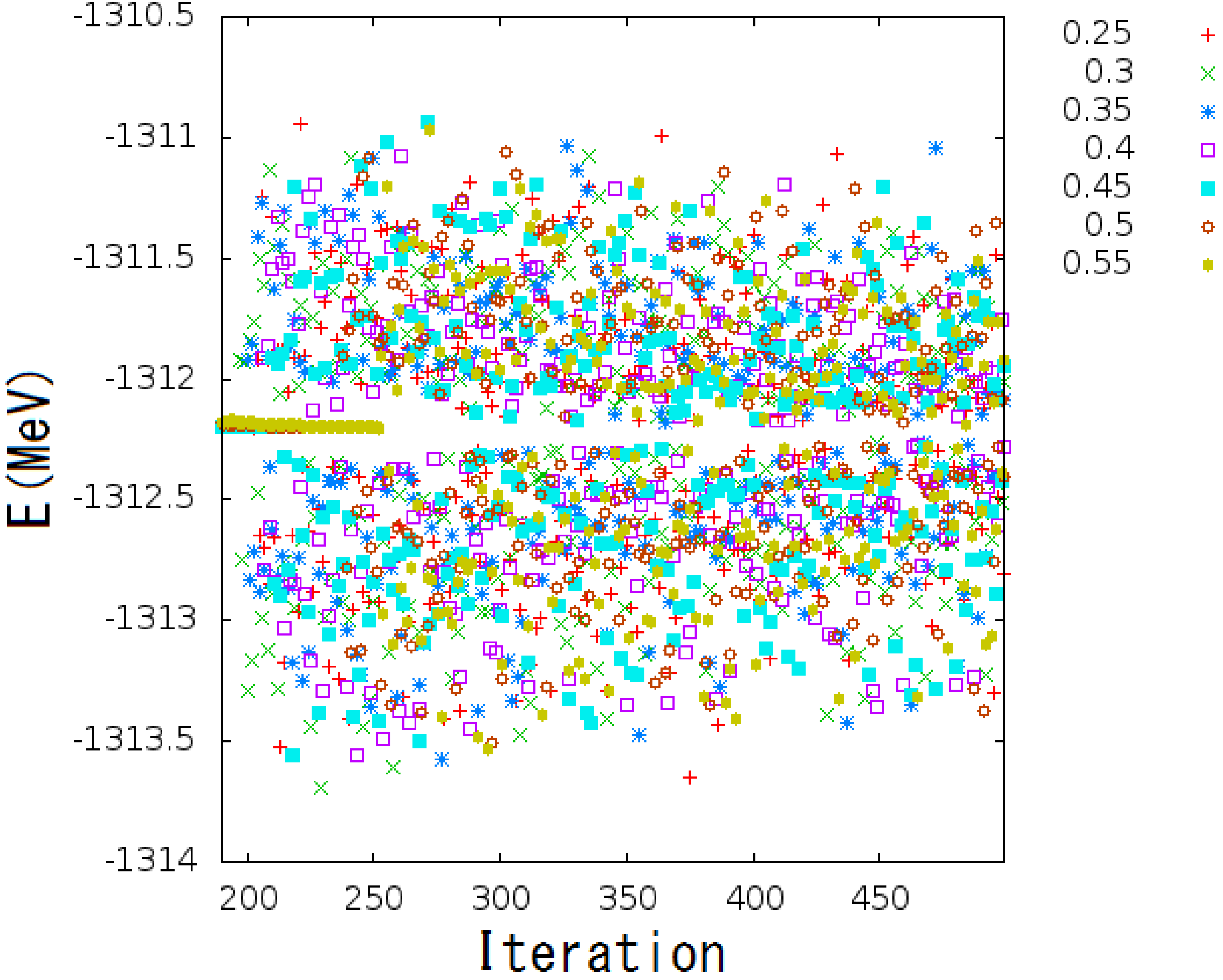
の1-ϵの部分にあたり、ϵの値を変更することによって減衰因子を
大きくまたは、小さくできる。

今回使用したϵの値は、0.05〜0.55まで0.05ずつおきの11個である。

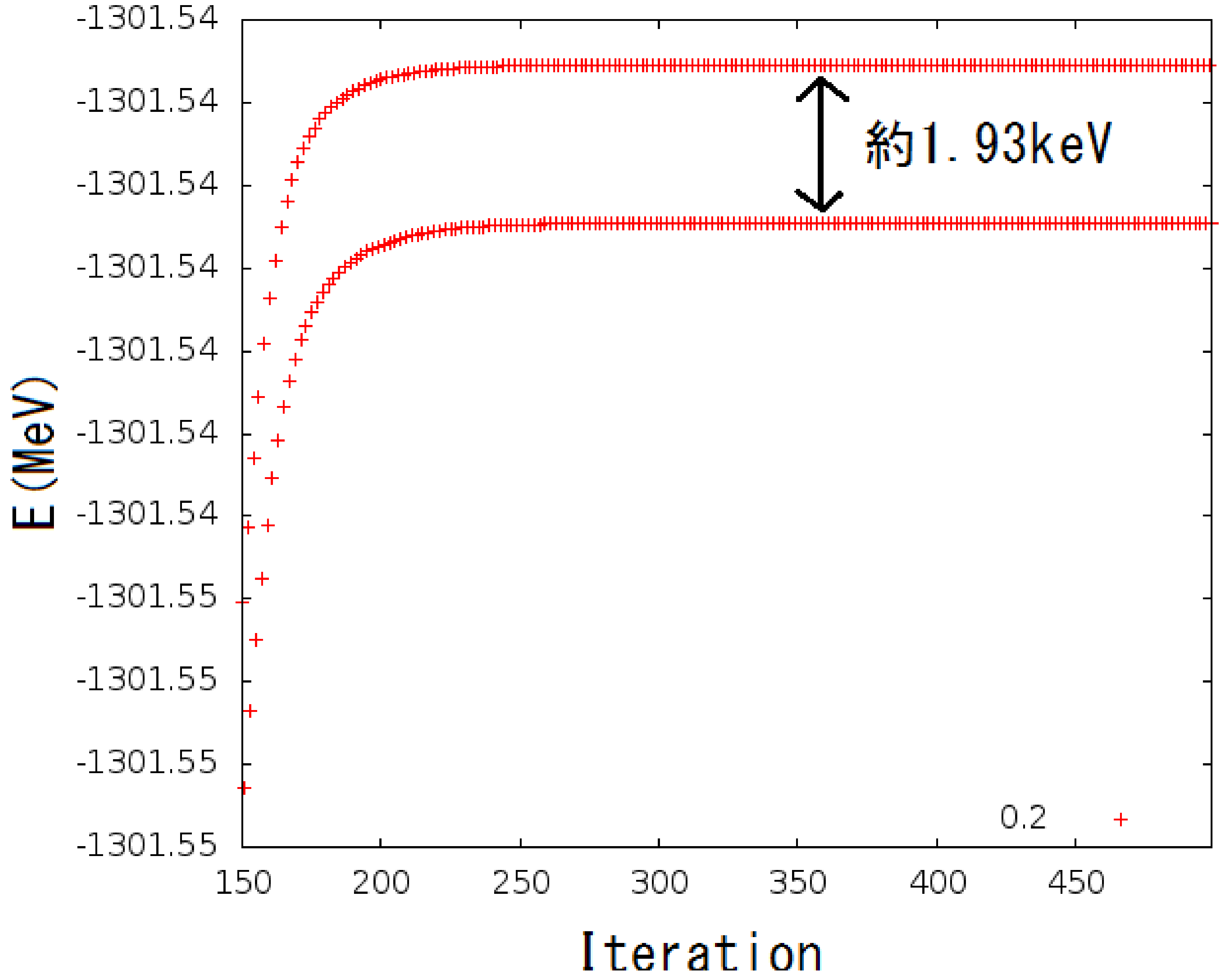
また、計算対象とした核は$^{162}_{65}\mathrm{Tb}_{97}$で、Skyrme力にSLy4を使い
中性子$|6,4,2,\frac{5}{2}+\rangle$, 陽子$|5,3,2,\frac{5}{2}-\rangle$をブロックした。



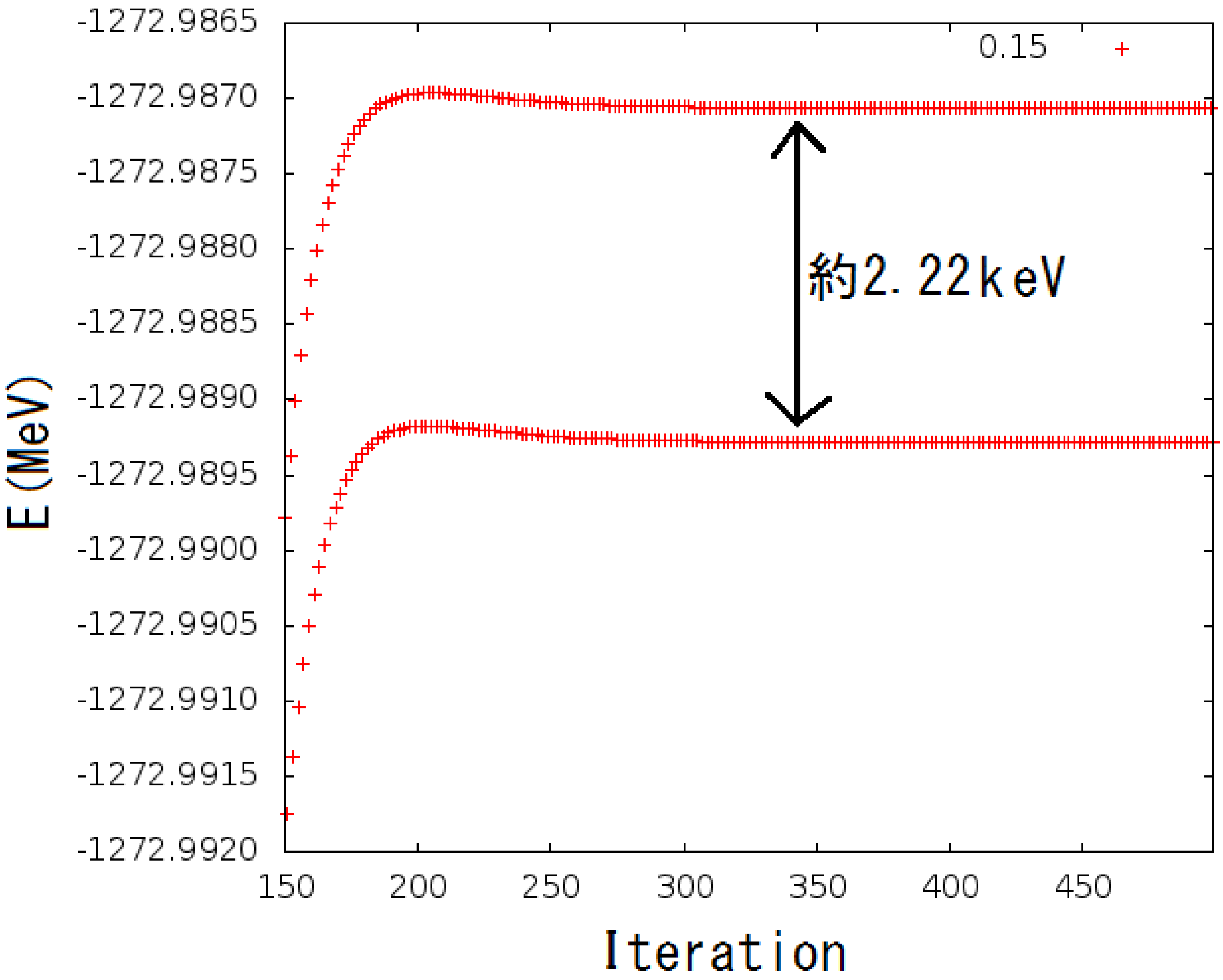
-500
-600
-700
-800
-900
-1000
-1100
-1200
-1300
-1400
E (MeV)
0
50
100
150
200
250
300
350
400
450
500
Iteration
0.05
0.1
0.15
0.2
0.25
0.3
0.35
0.4
0.45
0.5
0.55



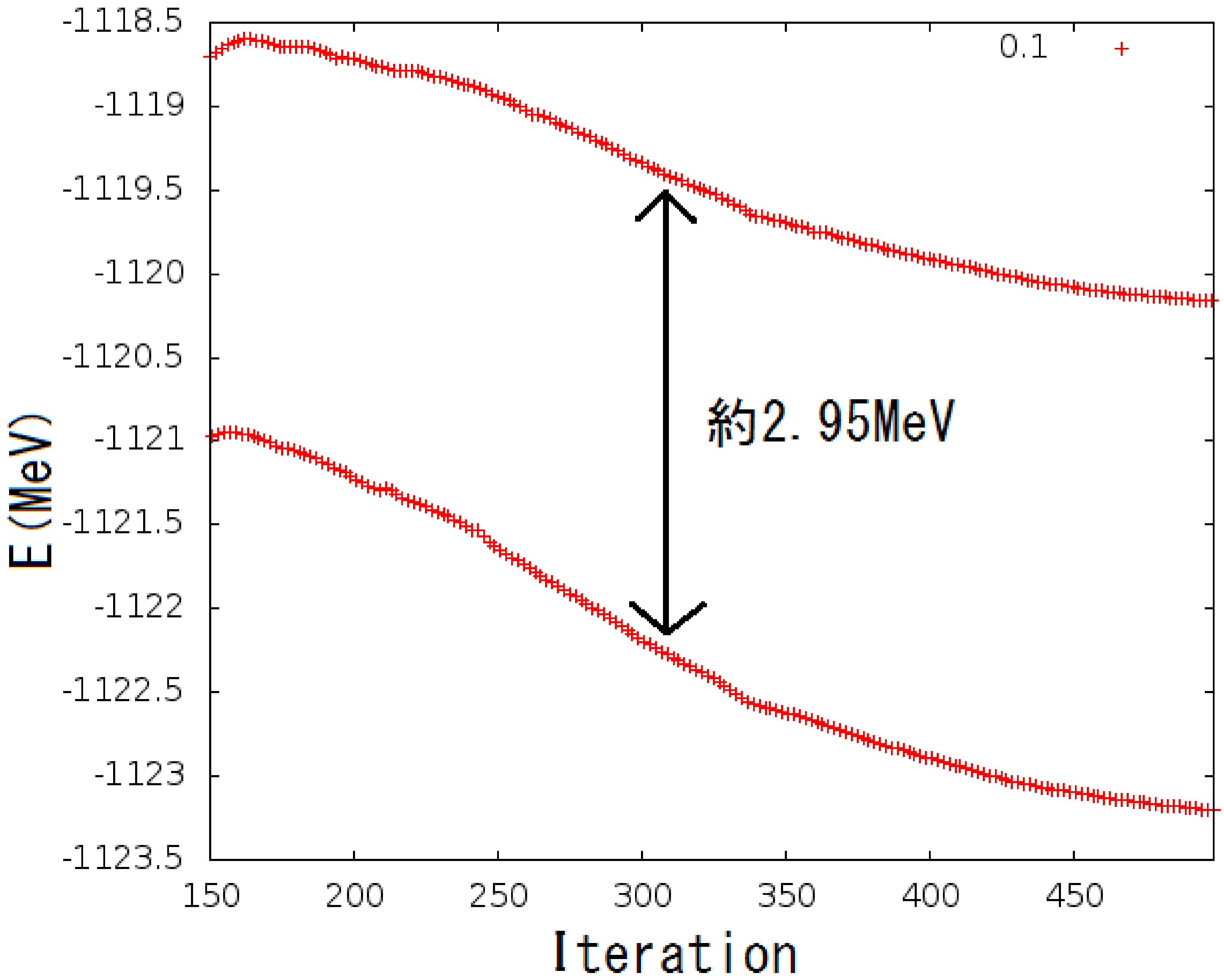
-1310.5
-1311
-1311.5
-1312
-1312.5
-1313
-1313.5
-1314
E (MeV)
200
250
300
350
400
450
Iteration
0.25
0.3
0.35
0.4
0.45
0.5
0.55



-1301.54
-1301.54
-1301.54
-1301.54
-1301.54
-1301.54
-1301.54
-1301.55
-1301.55
-1301.55
-1301.55
E (MeV)
150
200
250
300
350
400
450
Iteration
約1.93keV
0.2



-1272.9865
-1272.9870
-1272.9875
-1272.9880
-1272.9885
-1272.9890
-1272.9895
-1272.9900
-1272.9905
-1272.9910
-1272.9915
-1272.9920
E (MeV)
150
200
250
300
350
400
450
Iteration
0.15
約2.22keV



0.1
約2.95MeV
E (MeV)
Iteration
-1118.5
-1119
-1119.5
-1120
-1120.5
-1121
-1121.5
-1122
-1122.5
-1123
-1123.5
150
200
250
300
350
400
450

まとめ

1. 奇数粒子数のHartree-Fock-Bogoliubov解について、reviewをした。

2. 減衰因子を大きくとったからといって、振動の幅が小さくなるとは限らないことと、収束先が変わることがわかった。

3. Skyrme HFB法プログラムHFODDで奇数粒子数の自己無撞着な解を求める際の問題の解決を目指して研究を続けている。