

4. 反応計算の基礎

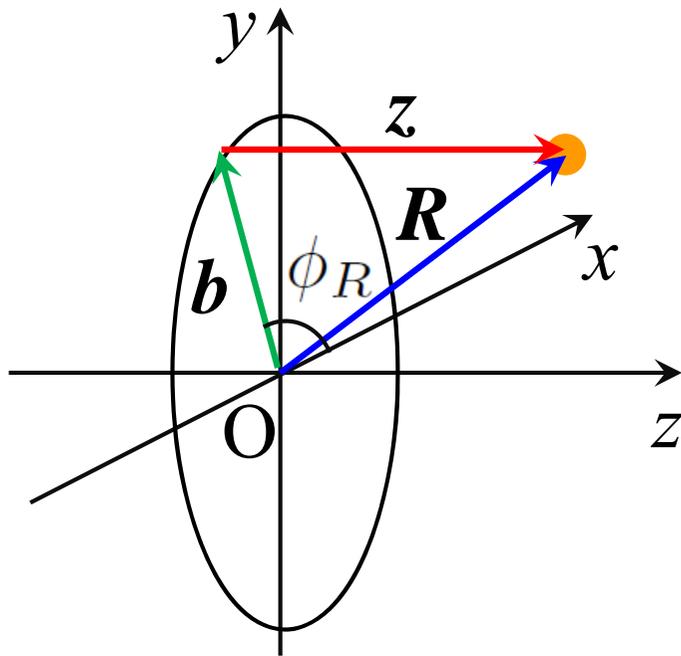
(アイコナール近似・チャンネル結合法・波束の理論)

アイコナール近似による散乱問題の解法(1/3)

シュレディンガー方程式は、ポテンシャルを U として、

$$[T_{\mathbf{R}} + U(\mathbf{R}) - E] \chi(\mathbf{R}) = 0$$

$T_{\mathbf{R}}$ は運動エネルギー演算子、 E は散乱のエネルギー。



左図のような座標系(円筒座標系)で反応を記述する。

アイコナール近似による散乱問題の解法(2/3)

散乱波に、以下の関数形を用いる。

$$\chi(\mathbf{R}) = \psi(b, z) \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R})$$

シュレディンガー方程式に代入し、 $\nabla_{\mathbf{R}}^2 \psi(b, z) \approx 0$ と近似する。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_n} 2iK \frac{\partial}{\partial z} + U(R) \right] \psi(b, z) = 0$$

“速さ” $v_n = \frac{\hbar K}{m_n}$ を導入すると、

$$\frac{\partial}{\partial z} \psi(b, z) = \frac{1}{i\hbar v_n} U(b, z) \psi(b, z)$$

これを解けば良い。

アイコナール近似による散乱問題の解法(3/3)

$$\frac{\partial}{\partial z} \psi(b, z) = \frac{1}{i\hbar v_n} U(b, z) \psi(b, z)$$

変数分離形の微分方程式なので、容易に解くことができる。

$$\psi(b, z) = C \exp \left[\frac{1}{i\hbar v_n} \int_{-\infty}^z U(b, z') dz' \right]$$

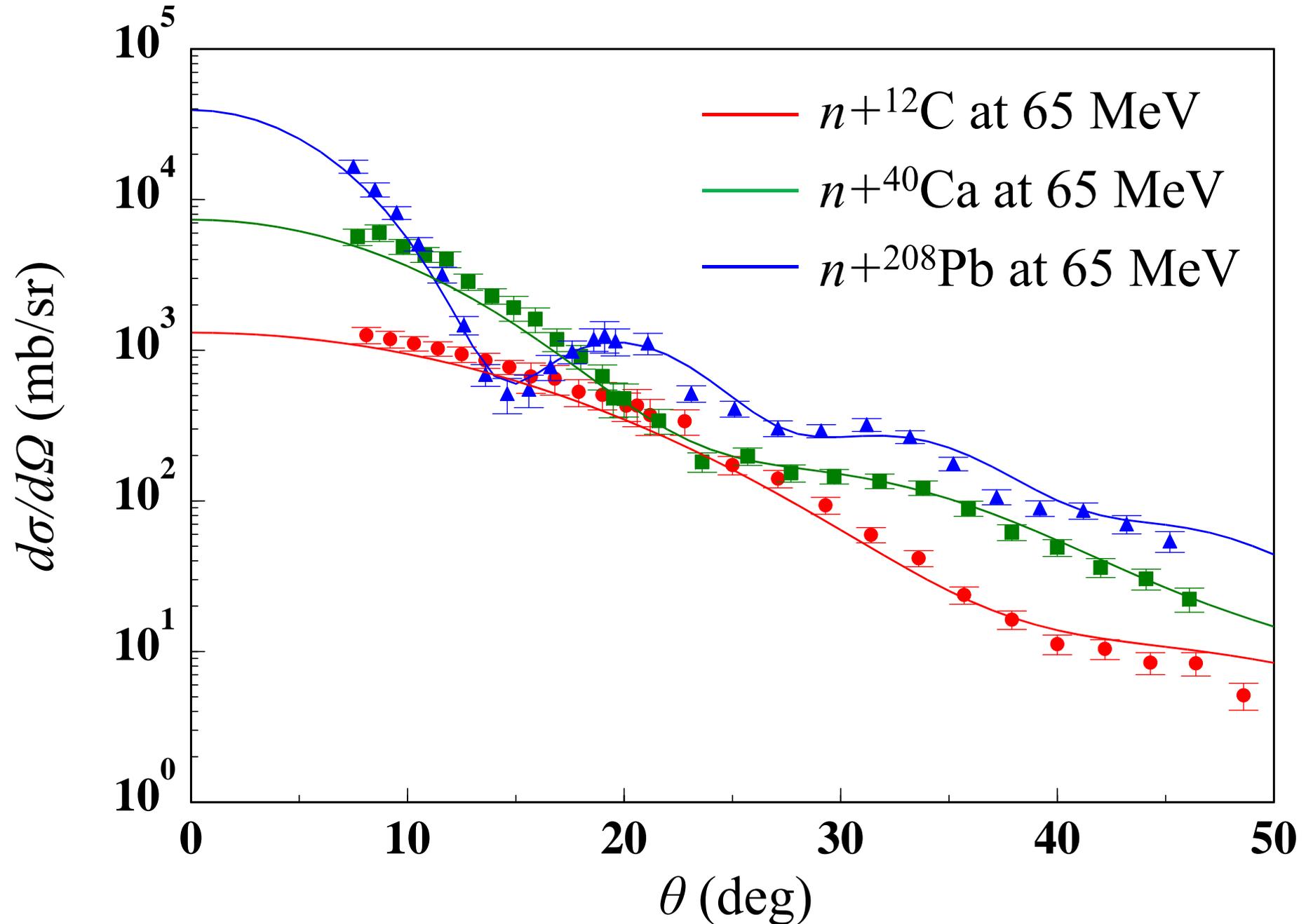
反応の初期条件 $\lim_{z \rightarrow -\infty} \psi(b, z) = 1$ (波動関数 \rightarrow 平面波) $\rightarrow C = 1$.

波動関数と S 行列

$$\chi^{\text{EK}}(b, z) = \exp \left[\frac{1}{i\hbar v_n} \int_{-\infty}^z U(b, z') dz' \right] \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R})$$

$$S^{\text{EK}}(b) = \lim_{z \rightarrow \infty} \psi(b, z)$$

アイコナール近似による断面積の解析

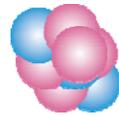


チャンネルの結合

弾性チャンネルと1つの非弾性チャンネルとの結合を考える。

入射核子の運動
エネルギー + 原子核の状態 = チャンネル


エネルギー: E_0



基底状態
エネルギー: ε_0

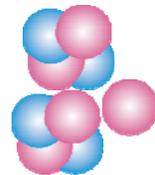
弾性チャンネル



全エネルギー

が同じなら結合


エネルギー: E_1



励起状態
エネルギー: ε_1



非弾性チャンネル

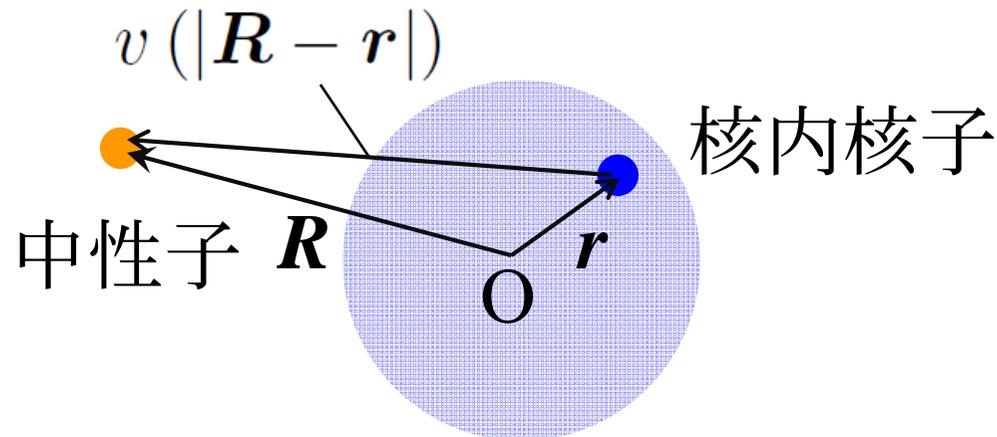
反応系の波動関数

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \equiv \chi_0(\mathbf{R}) \Phi_0(r) + \chi_1(\mathbf{R}) \Phi_1(r)$$

シュレディンガー方程式

$$[T_{\mathbf{R}} + Av(|\mathbf{R} - \mathbf{r}|) + h - E_{\text{tot}}] \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = 0$$

核内核子の数 系の全エネルギー



チャンネル結合方程式

$$[T_{\mathbf{R}} + Av(|\mathbf{R} - \mathbf{r}|) + h - E_{\text{tot}}] \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = 0$$

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \equiv \chi_0(\mathbf{R}) \Phi_0(r) + \chi_1(\mathbf{R}) \Phi_1(r)$$

左から $\Phi_0^*(r)$ を掛ける。

$$\Phi_0^*(r) [T_{\mathbf{R}} + Av(|\mathbf{R} - \mathbf{r}|) + h - E_{\text{tot}}] [\chi_0(\mathbf{R}) \Phi_0(r) + \chi_1(\mathbf{R}) \Phi_1(r)] = 0$$

h を固有値に置き換える。

$$\begin{aligned} & \Phi_0^*(r) [T_{\mathbf{R}} + Av(|\mathbf{R} - \mathbf{r}|) - E_0] \chi_0(\mathbf{R}) \Phi_0(r) \\ & + \Phi_0^*(r) [T_{\mathbf{R}} + Av(|\mathbf{R} - \mathbf{r}|) - E_1] \chi_1(\mathbf{R}) \Phi_1(r) = 0 \end{aligned}$$

ただし

$$E_1 = E_0 + \varepsilon_0 - \varepsilon_1$$

チャンネル結合方程式(つづき)

$$\begin{aligned} \Phi_0^*(r) [T_{\mathbf{R}} + Av(|\mathbf{R} - \mathbf{r}|) - E_0] \chi_0(\mathbf{R}) \Phi_0(r) \\ + \Phi_0^*(r) [T_{\mathbf{R}} + Av(|\mathbf{R} - \mathbf{r}|) - E_1] \chi_1(\mathbf{R}) \Phi_1(r) = 0 \end{aligned}$$

r について積分すると

$$[T_{\mathbf{R}} + v_{00}(R) - E_0] \chi_0(\mathbf{R}) + v_{01}(R) \chi_1(\mathbf{R}) = 0$$

対角ポテンシャル(の弾性チャンネル成分)

$$v_{00}(R) = A \int \Phi_0^*(r) v(|\mathbf{R} - \mathbf{r}|) \Phi_0(r) d\mathbf{r}$$

結合ポテンシャル

$$v_{01}(R) = A \int \Phi_0^*(r) v(|\mathbf{R} - \mathbf{r}|) \Phi_1(r) d\mathbf{r}$$

チャンネル結合方程式(さらにつづき)

全く同様にして

$$[T_{\mathbf{R}} + v_{11}(R) - E_1] \chi_1(\mathbf{R}) + v_{10}(R) \chi_0(\mathbf{R}) = 0$$

$$v_{11}(R) = A \int \Phi_1^*(r) v(|\mathbf{R} - \mathbf{r}|) \Phi_1(r) d\mathbf{r}$$

$$v_{10}(R) = A \int \Phi_1^*(r) v(|\mathbf{R} - \mathbf{r}|) \Phi_0(r) d\mathbf{r}$$

チャンネル結合(Coupled-Channel; **CC**)方程式

$$[T_{\mathbf{R}} + v_{00}(R) - E_0] \chi_0(\mathbf{R}) = -v_{01}(R) \chi_1(\mathbf{R})$$

$$[T_{\mathbf{R}} + v_{11}(R) - E_1] \chi_1(\mathbf{R}) = -v_{10}(R) \chi_0(\mathbf{R})$$

※ χ_0 を解くには χ_1 が必要、 χ_1 を解くには χ_0 が必要、...

アイコナールCC方程式

$$\chi_0(\mathbf{R}) = \psi_0(b, z) \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{R}) = \psi_0(b, z) \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(iK_0 z)$$

$$\chi_1(\mathbf{R}) = \psi_1(b, z) \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\mathbf{K}_1 \cdot \mathbf{R}) = \psi_1(b, z) \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(iK_1 z)$$

$$K_0 = \sqrt{2m_n E_0}/\hbar, \quad K_1 = \sqrt{2m_n E_1}/\hbar$$

$$\nabla_{\mathbf{R}}^2 \psi_0(b, z) \approx 0, \quad \nabla_{\mathbf{R}}^2 \psi_1(b, z) \approx 0$$



$$i\hbar v_0 \frac{\partial}{\partial z} \psi_0(b, z) = v_{00}(b, z) \psi_0(b, z) + v_{01}(b, z) \psi_1(b, z) \exp[i(K_1 - K_0)z]$$

$$i\hbar v_1 \frac{\partial}{\partial z} \psi_1(b, z) = v_{11}(b, z) \psi_1(b, z) + v_{10}(b, z) \psi_0(b, z) \exp[i(K_0 - K_1)z]$$

$$v_0 = \hbar K_0/m_n, \quad v_1 = \hbar K_1/m_n$$

アイコナールCC方程式の解

$$\begin{aligned}i\hbar v_0 \frac{\partial}{\partial z} \psi_0(b, z) &= v_{00}(b, z) \psi_0(b, z) + v_{01}(b, z) \psi_1(b, z) \exp[i(K_1 - K_0)z] \\i\hbar v_1 \frac{\partial}{\partial z} \psi_1(b, z) &= v_{11}(b, z) \psi_1(b, z) + v_{10}(b, z) \psi_0(b, z) \exp[i(K_0 - K_1)z]\end{aligned}$$

非斉次項

反応の初期条件: $\lim_{z \rightarrow -\infty} \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(iK_0 z) \Phi_0(\mathbf{r})$



斉次解 (※斉: 整然と並んだ、揃った、^{ひと} 斉しい)

$$\psi_0^h(b, z) = \exp\left[\frac{1}{i\hbar v_0} \int_{-\infty}^z v_{00}(b, z') dz'\right],$$

$$\psi_1^h(b, z) = 0.$$

アイコナールCC方程式の解(つづき)

$$\begin{aligned} \psi_0^{\text{ih}}(b, z) &= \exp \left[\frac{1}{i\hbar v_0} \int_{-\infty}^z v_{00}(b, z') dz' \right] \\ &\times \int_{-\infty}^z \frac{1}{i\hbar v_0} v_{01}(b, z') \psi_1^{\text{ih}}(b, z') e^{i(K_1 - K_0)z'} \exp \left[\frac{-1}{i\hbar v_0} \int_{-\infty}^{z'} v_{00}(b, z'') dz'' \right] dz' \end{aligned}$$

z で偏微分すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \psi_0^{\text{ih}}(b, z) &= \frac{1}{i\hbar v_0} v_{00}(b, z) \psi_0^{\text{ih}}(b, z) + \frac{1}{i\hbar v_0} v_{01}(b, z) \psi_1^{\text{ih}}(b, z) e^{i(K_1 - K_0)z} \\ &\times \exp \left[\frac{-1}{i\hbar v_0} \int_{-\infty}^z v_{00}(b, z') dz' \right] \exp \left[\frac{1}{i\hbar v_0} \int_{-\infty}^z v_{00}(b, z'') dz'' \right] \\ &= \frac{1}{i\hbar v_0} v_{00}(b, z) \psi_0^{\text{ih}}(b, z) + \frac{1}{i\hbar v_0} v_{01}(b, z) \psi_1^{\text{ih}}(b, z) e^{i(K_1 - K_0)z} \\ &= \text{CC方程式の右辺} \div i\hbar v_0 \rightarrow \psi_0^{\text{ih}}(b, z) \text{ は非斉次解。} \end{aligned}$$

アイコナールCC方程式の解(さらにつづき)

一般解 = 斉次方程式の一般解 + 非斉次方程式の特解

非弾性チャンネルの波動関数も同様に求めると、初期条件を満たすCC方程式の解は、

$$\psi_0(b, z) = \exp \left[\frac{1}{i\hbar v_0} \int_{-\infty}^z v_{00}(b, z') dz' \right] \\ \times \left(\int_{-\infty}^z \frac{1}{i\hbar v_0} v_{01}(b, z') \psi_1(b, z') e^{i(K_1 - K_0)z'} \exp \left[\frac{-1}{i\hbar v_0} \int_{-\infty}^{z'} v_{00}(b, z'') dz'' \right] dz' + 1 \right)$$

$$\psi_1(b, z) = \exp \left[\frac{1}{i\hbar v_1} \int_{-\infty}^z v_{11}(b, z') dz' \right] \\ \times \int_{-\infty}^z \frac{1}{i\hbar v_1} v_{10}(b, z') \psi_0(b, z') e^{i(K_0 - K_1)z'} \exp \left[\frac{-1}{i\hbar v_1} \int_{-\infty}^{z'} v_{11}(b, z'') dz'' \right] dz'$$

ただし、これらはあくまで**形式解**。

反復法による解法

CC方程式の形式解を、以下のように表記する。

$$\psi_0(b, z) = \hat{\mathcal{F}}_0 \psi_1(b, z), \quad \psi_1(b, z) = \hat{\mathcal{F}}_1 \psi_0(b, z)$$

初期解から始めて、徐々に真の解を得るのが、**反復法**。

$$\psi_0^{(0)}(b, z) = \psi_0^h(b, z), \quad \psi_1^{(0)}(b, z) = \psi_1^h(b, z)$$

$$\psi_0^{(1)}(b, z) = \hat{\mathcal{F}}_0 \psi_1^{(0)}(b, z), \quad \psi_1^{(1)}(b, z) = \hat{\mathcal{F}}_1 \psi_0^{(0)}(b, z)$$

⋮

$$\psi_0^{(i)}(b, z) = \hat{\mathcal{F}}_0 \psi_1^{(i-1)}(b, z), \quad \psi_1^{(i)}(b, z) = \hat{\mathcal{F}}_1 \psi_0^{(i-1)}(b, z)$$

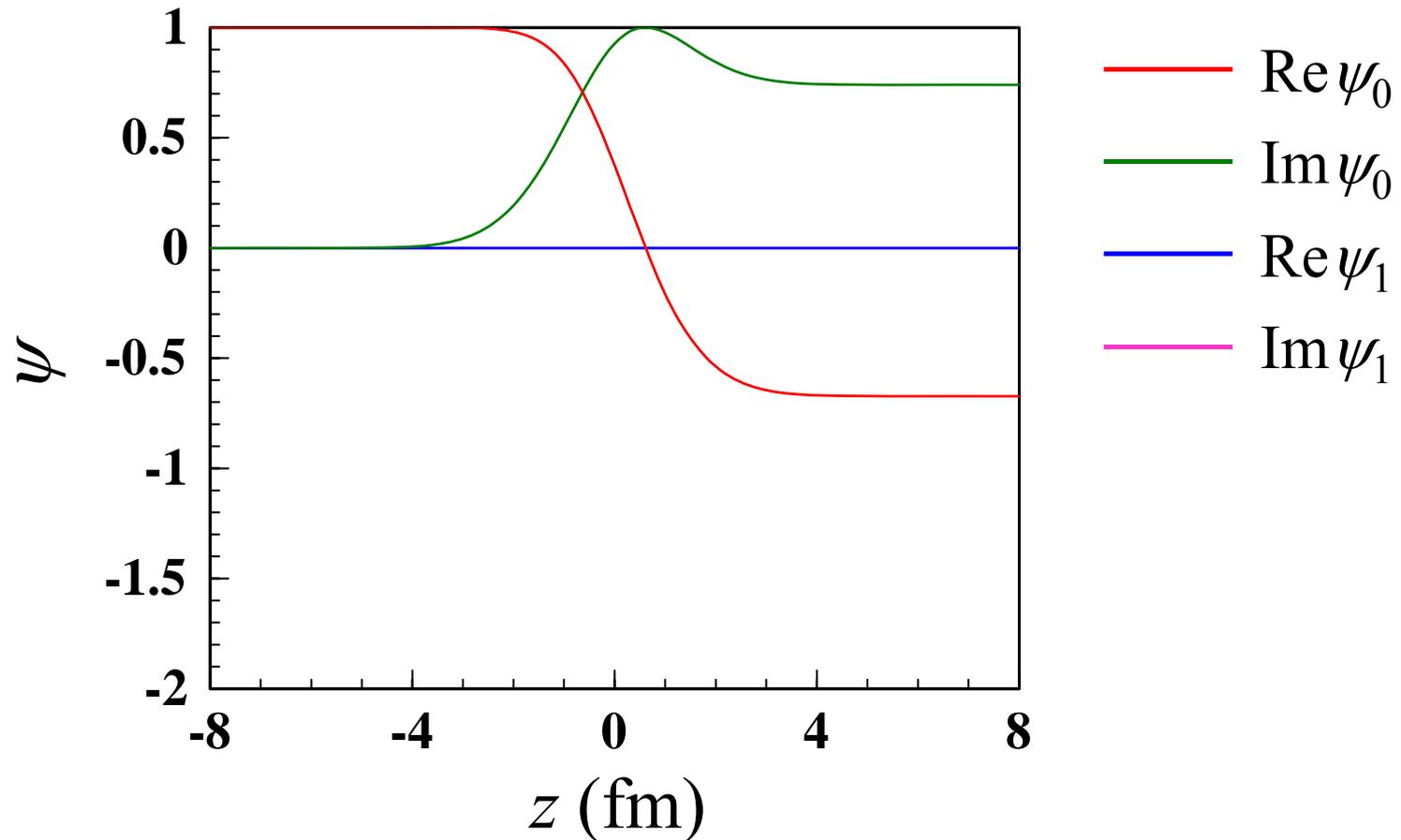
最終的に、以下の条件を満たす、**自己無撞着解**を求める。

$$\psi_0^{(i)}(b, z) \approx \psi_0^{(i-1)}(b, z), \quad \psi_1^{(i)}(b, z) \approx \psi_1^{(i-1)}(b, z)$$

解の収束の様子(at $b = 0$)

$n+^{16}\text{X}$ at 100 MeV, $\bar{v} = 250 \text{ MeV fm}^3$,
 $\varepsilon_0 = -7 \text{ MeV}$, $\varepsilon_1 = -5 \text{ MeV}$, $r_0 = 2 \text{ fm}$

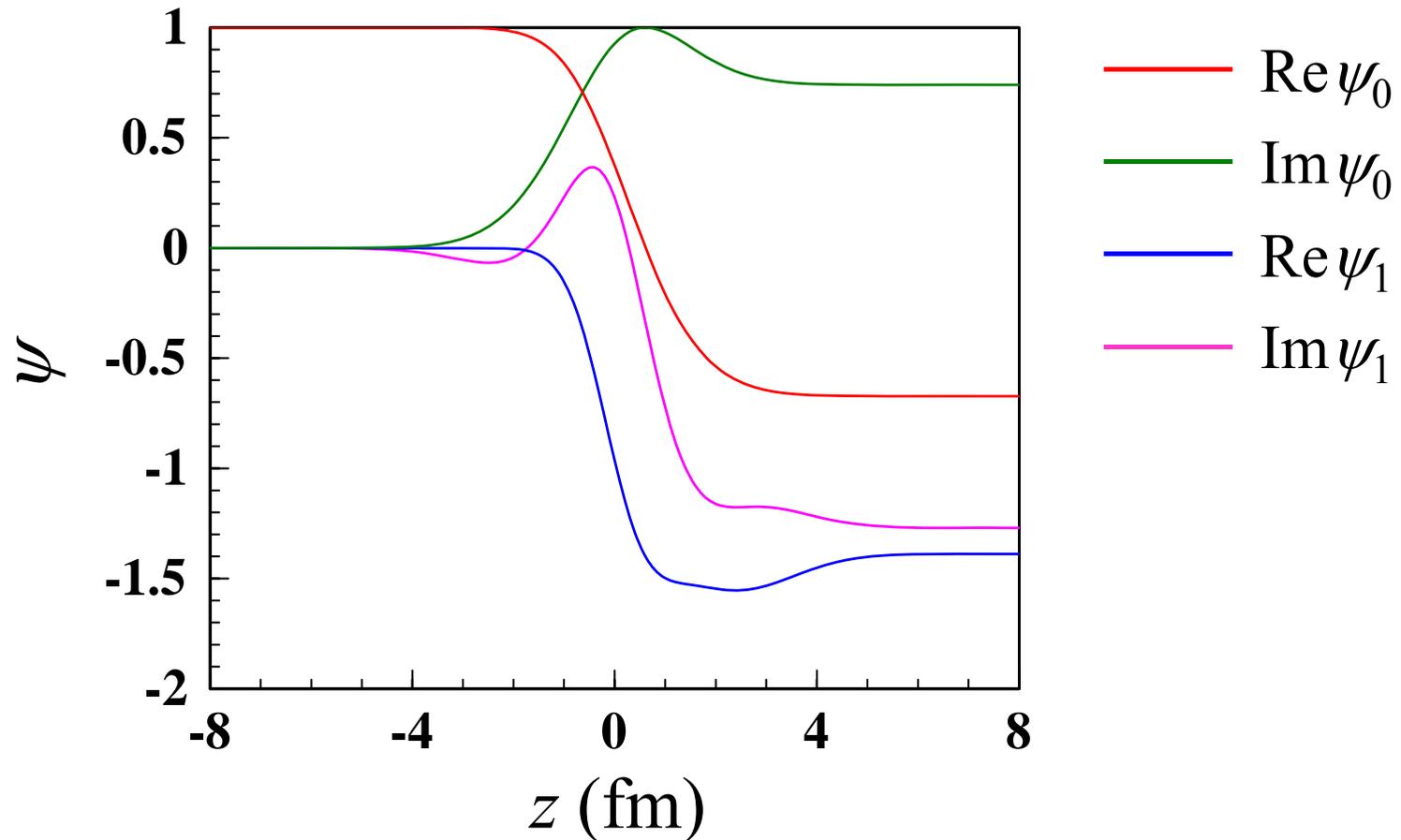
試行回数0 (初期解)



解の収束の様子(at $b = 0$)

$n+^{16}\text{X}$ at 100 MeV, $\bar{v} = 250 \text{ MeV fm}^3$,
 $\varepsilon_0 = -7 \text{ MeV}$, $\varepsilon_1 = -5 \text{ MeV}$, $r_0 = 2 \text{ fm}$

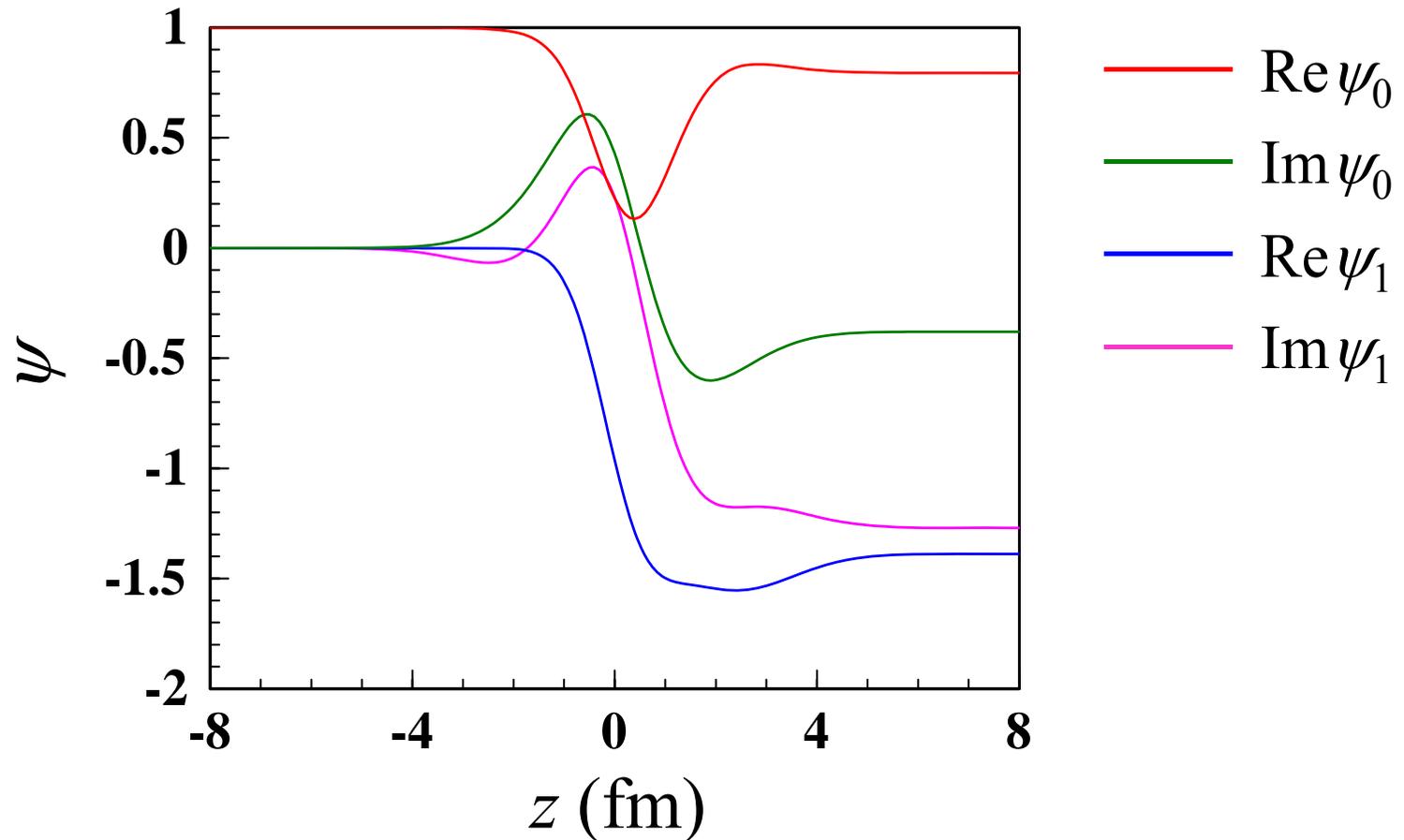
試行回数1



解の収束の様子(at $b = 0$)

$n+^{16}\text{X}$ at 100 MeV, $\bar{v} = 250 \text{ MeV fm}^3$,
 $\varepsilon_0 = -7 \text{ MeV}$, $\varepsilon_1 = -5 \text{ MeV}$, $r_0 = 2 \text{ fm}$

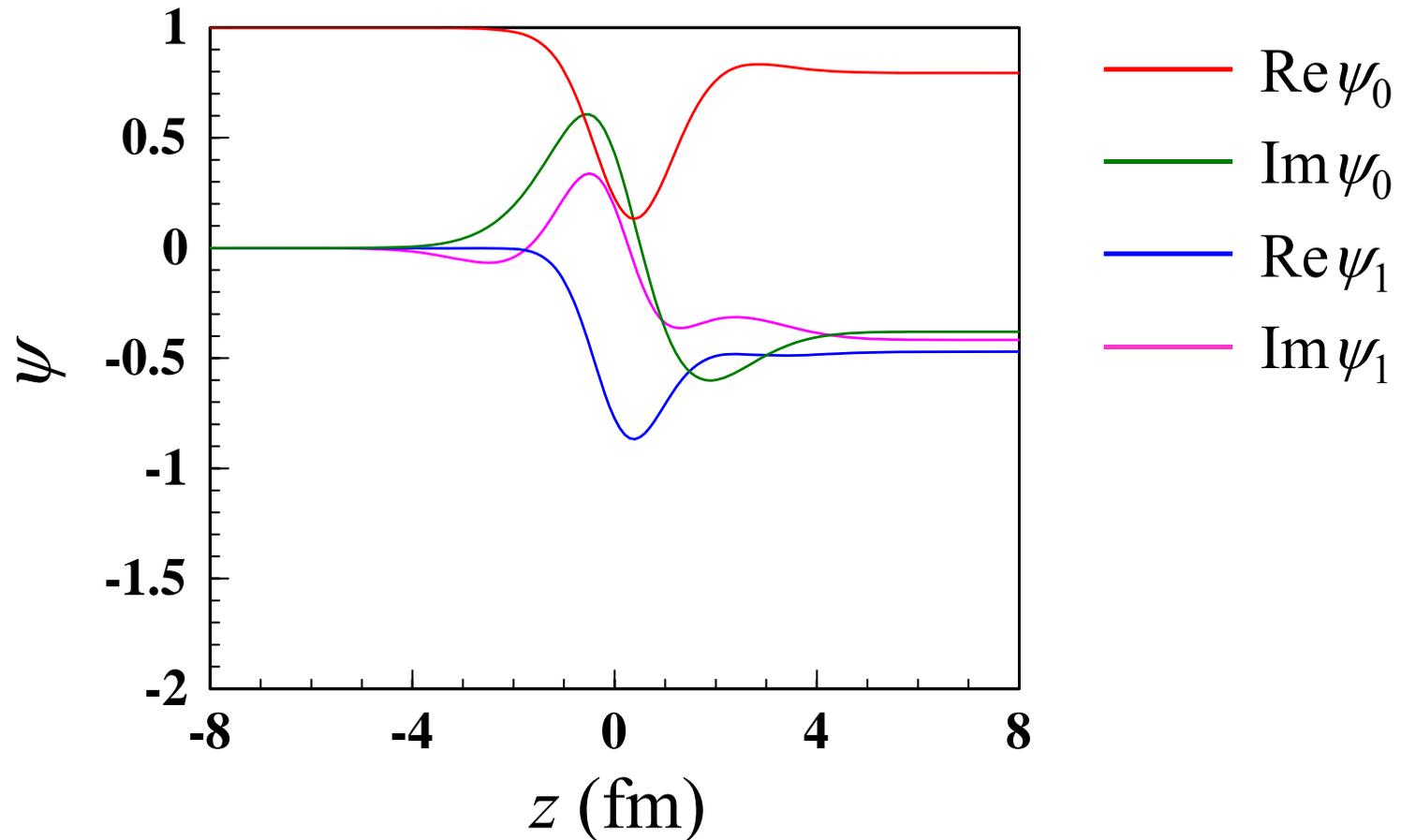
試行回数2



解の収束の様子(at $b = 0$)

$n+^{16}\text{X}$ at 100 MeV, $\bar{v} = 250 \text{ MeV fm}^3$,
 $\varepsilon_0 = -7 \text{ MeV}$, $\varepsilon_1 = -5 \text{ MeV}$, $r_0 = 2 \text{ fm}$

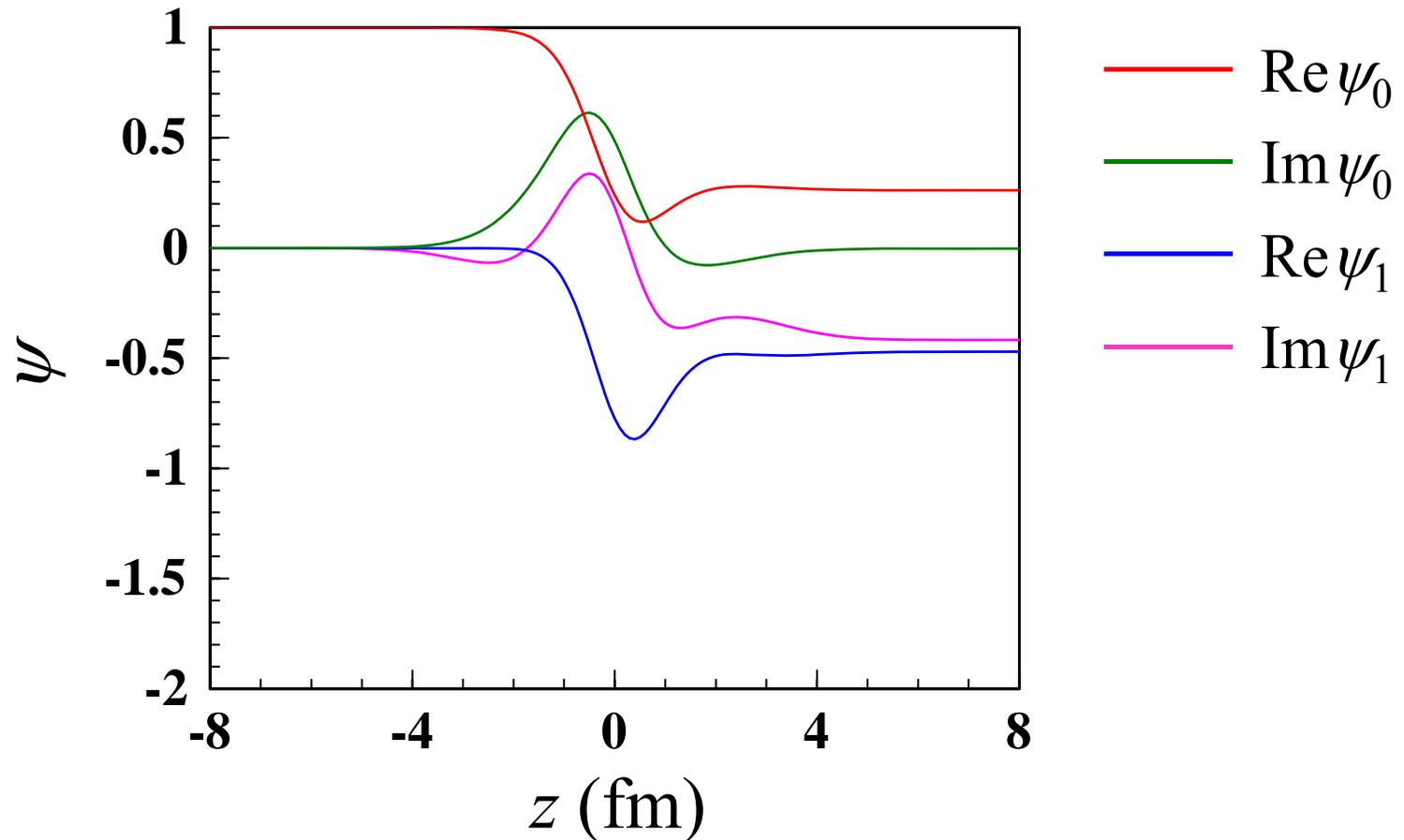
試行回数3



解の収束の様子(at $b = 0$)

$n+^{16}\text{X}$ at 100 MeV, $\bar{v} = 250 \text{ MeV fm}^3$,
 $\varepsilon_0 = -7 \text{ MeV}$, $\varepsilon_1 = -5 \text{ MeV}$, $r_0 = 2 \text{ fm}$

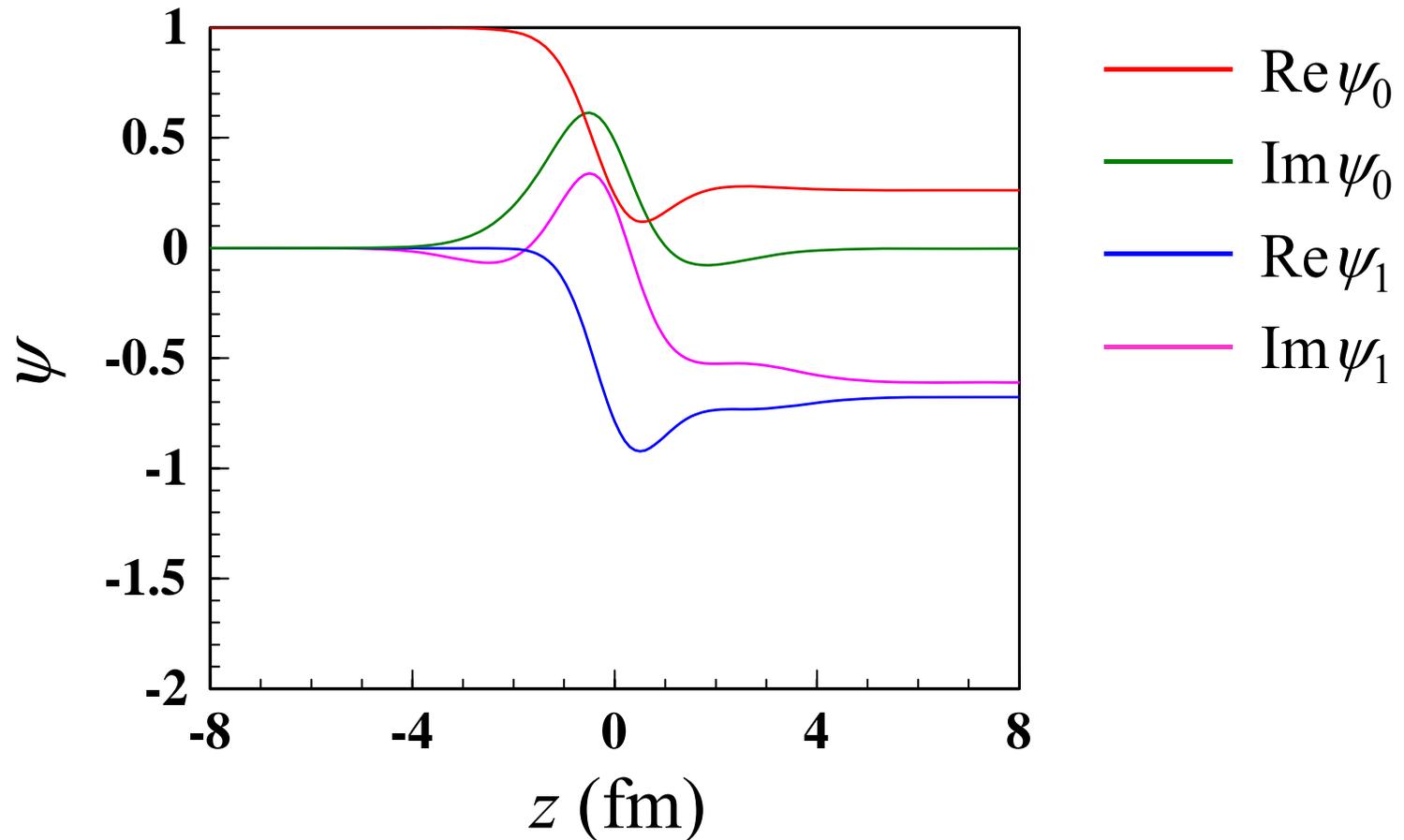
試行回数4



解の収束の様子(at $b = 0$)

$n+^{16}\text{X}$ at 100 MeV, $\bar{v} = 250 \text{ MeV fm}^3$,
 $\varepsilon_0 = -7 \text{ MeV}$, $\varepsilon_1 = -5 \text{ MeV}$, $r_0 = 2 \text{ fm}$

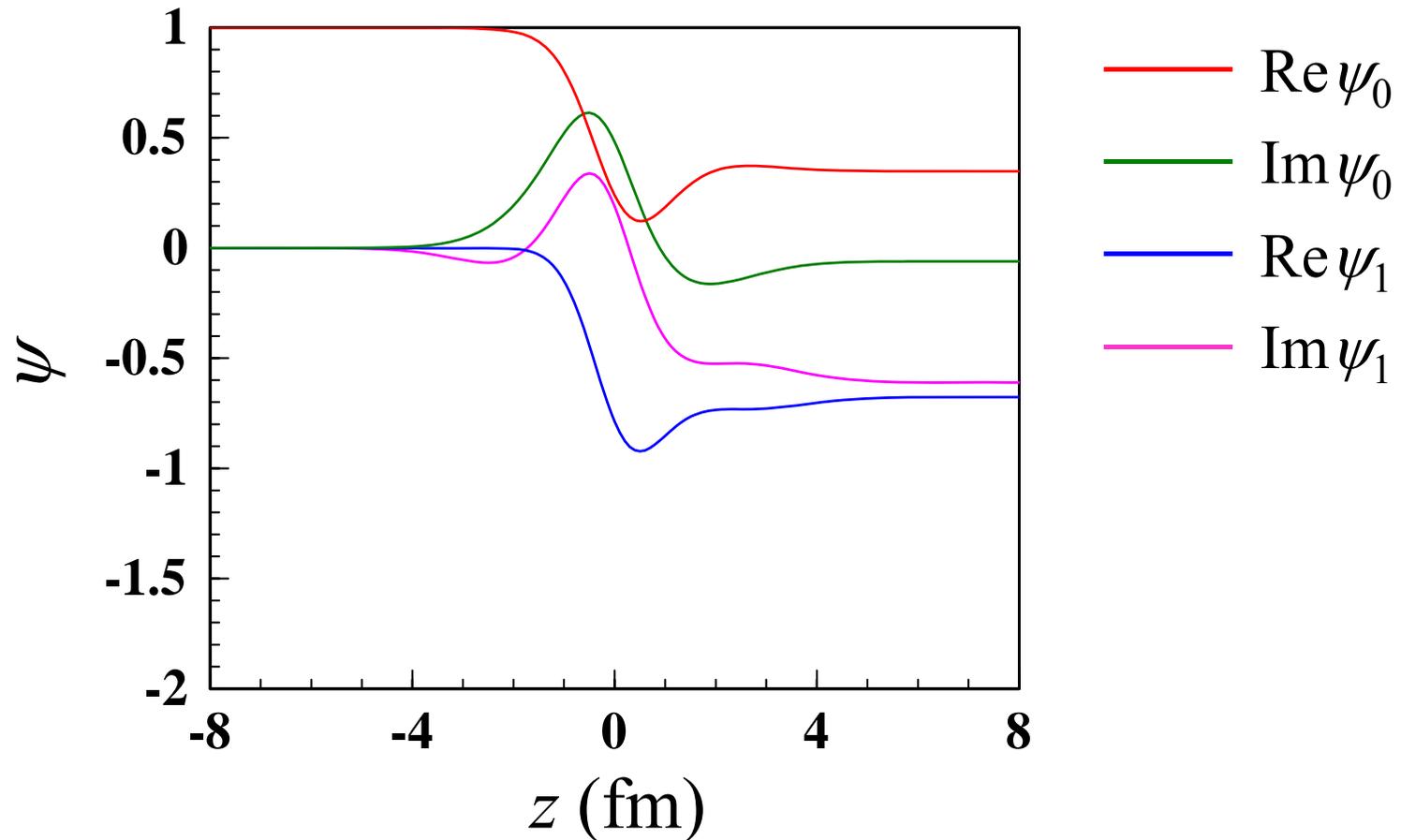
試行回数5



解の収束の様子(at $b = 0$)

$n+^{16}\text{X}$ at 100 MeV, $\bar{v} = 250 \text{ MeV fm}^3$,
 $\varepsilon_0 = -7 \text{ MeV}$, $\varepsilon_1 = -5 \text{ MeV}$, $r_0 = 2 \text{ fm}$

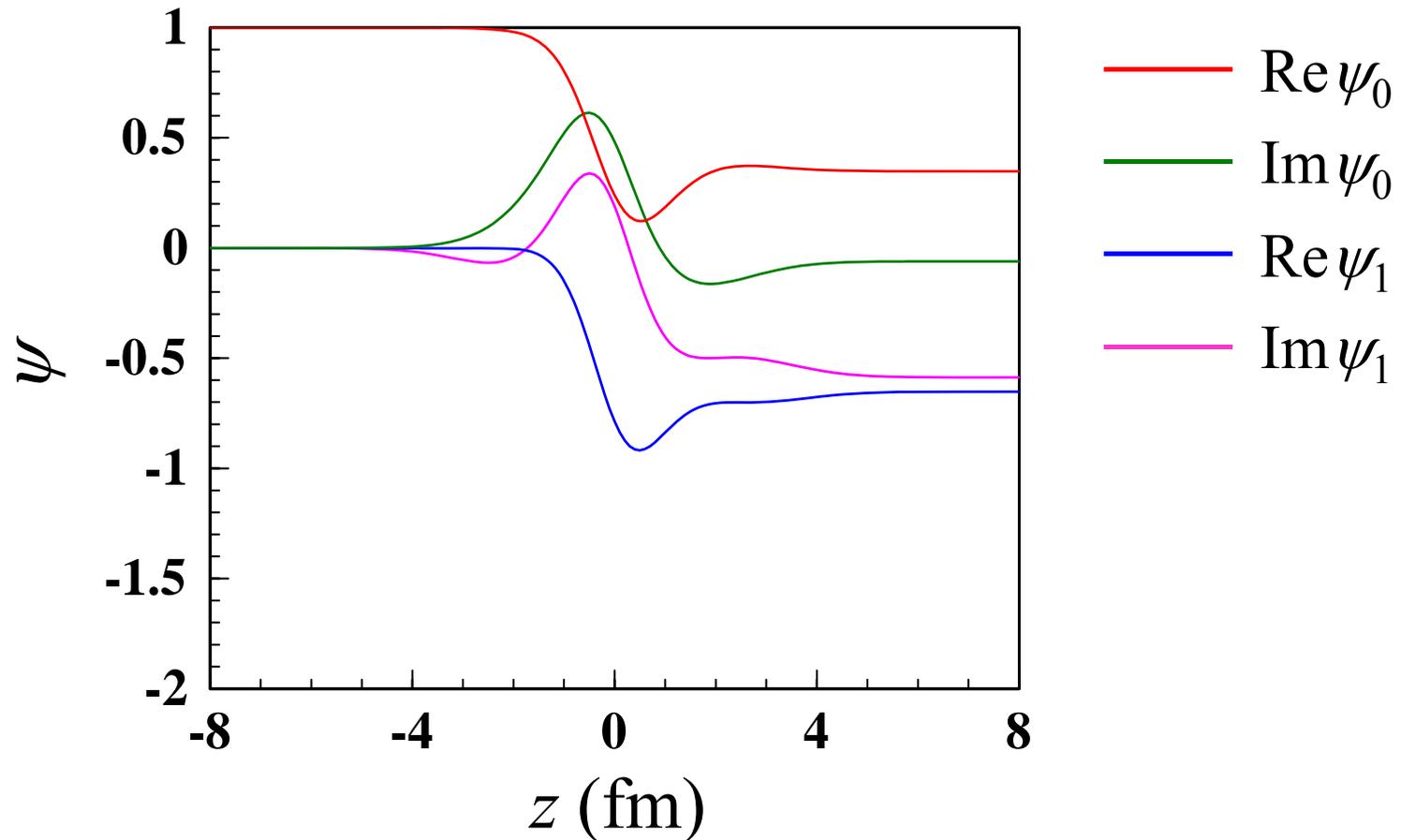
試行回数6



解の収束の様子(at $b = 0$)

$n+^{16}\text{X}$ at 100 MeV, $\bar{v} = 250 \text{ MeV fm}^3$,
 $\varepsilon_0 = -7 \text{ MeV}$, $\varepsilon_1 = -5 \text{ MeV}$, $r_0 = 2 \text{ fm}$

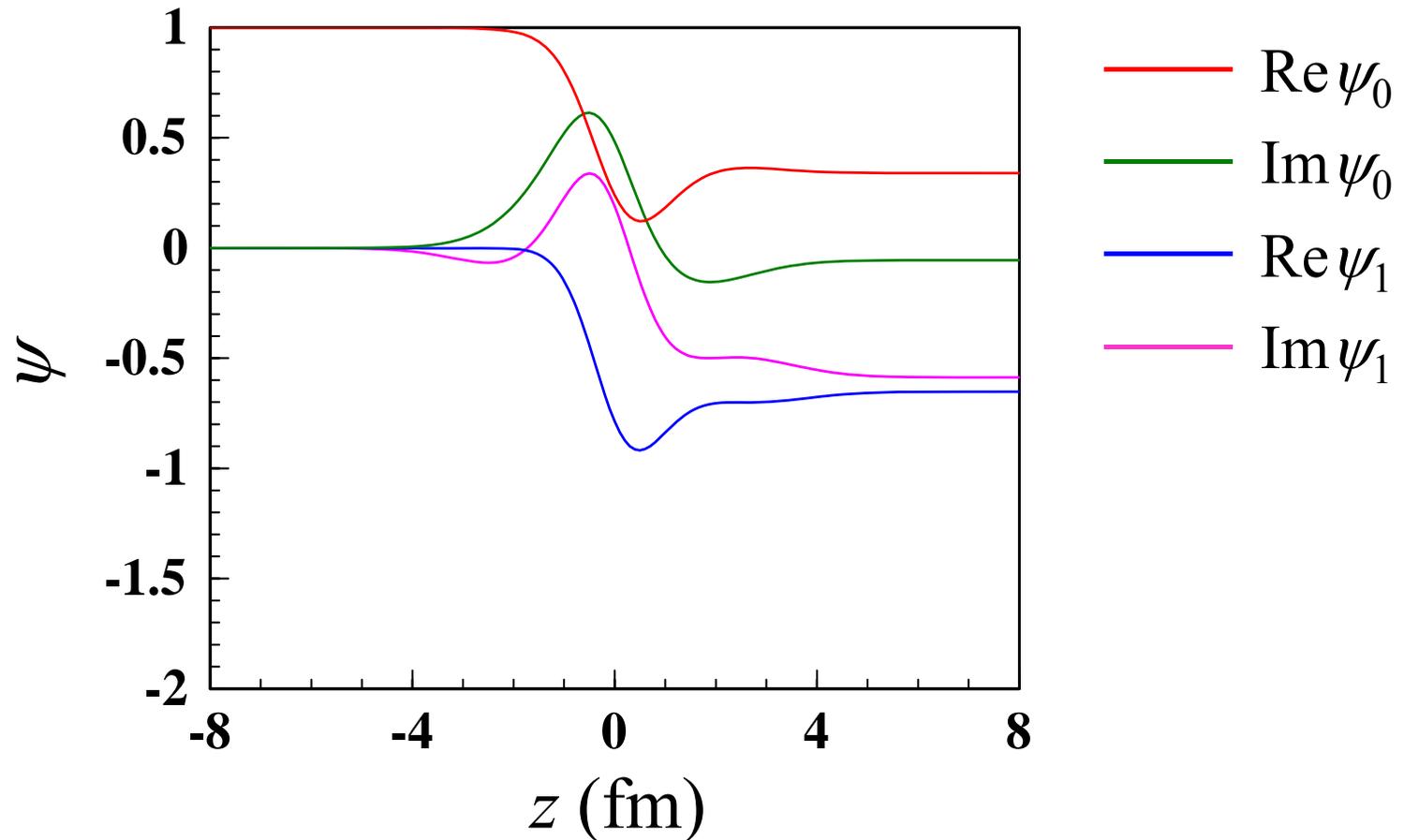
試行回数7



解の収束の様子(at $b = 0$)

$n+^{16}\text{X}$ at 100 MeV, $\bar{v} = 250 \text{ MeV fm}^3$,
 $\varepsilon_0 = -7 \text{ MeV}$, $\varepsilon_1 = -5 \text{ MeV}$, $r_0 = 2 \text{ fm}$

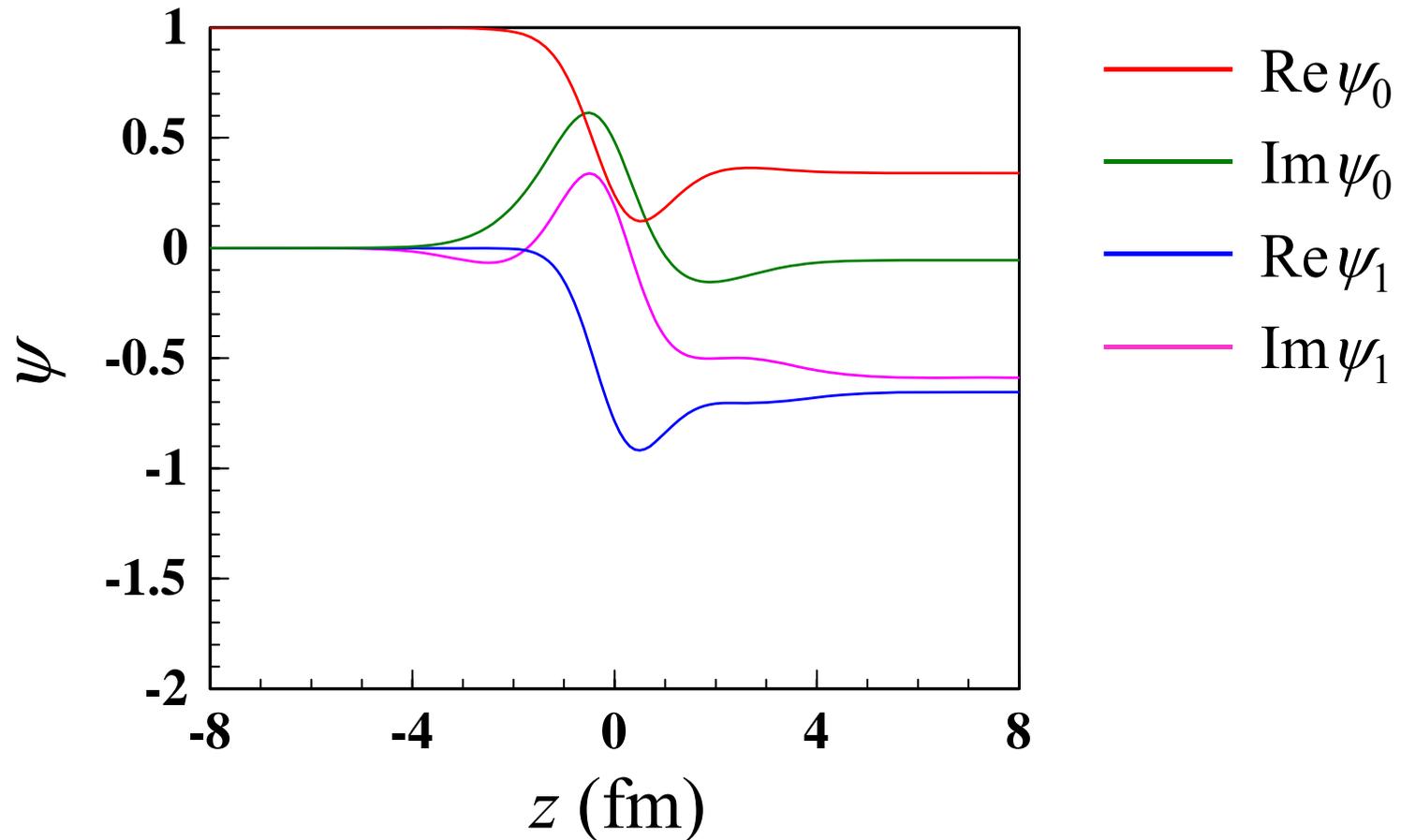
試行回数8



解の収束の様子(at $b = 0$)

$n+^{16}\text{X}$ at 100 MeV, $\bar{v} = 250 \text{ MeV fm}^3$,
 $\varepsilon_0 = -7 \text{ MeV}$, $\varepsilon_1 = -5 \text{ MeV}$, $r_0 = 2 \text{ fm}$

試行回数9

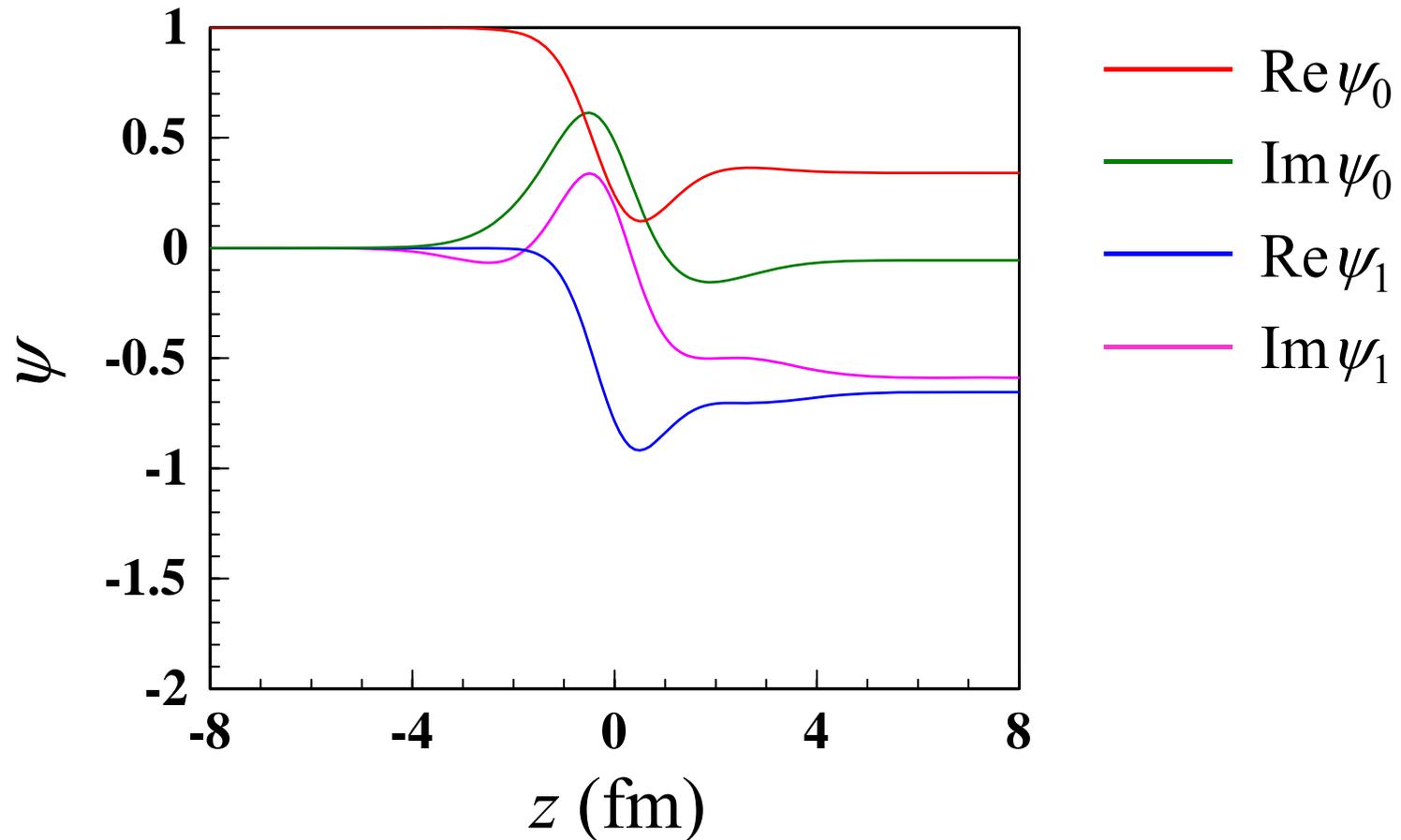


解の収束の様子(at $b = 0$)

$n+^{16}\text{X}$ at 100 MeV, $\bar{v} = 250 \text{ MeV fm}^3$,

$\varepsilon_0 = -7 \text{ MeV}$, $\varepsilon_1 = -5 \text{ MeV}$, $r_0 = 2 \text{ fm}$

試行回数10 (収束解)



光学ポテンシャルの“起源”

弾性チャネルの波動関数が満たすシュレディンガー方程式

$$i\hbar v_0 \frac{\partial}{\partial z} \psi_0(b, z) = v_{00}(b, z) \psi_0(b, z) + v_{01}(b, z) \psi_1(b, z) \exp[i(K_1 - K_0)z]$$

非斉次項に、 $\psi_1(b, z)$ の形式解を代入。 Folding
畳み込みポテンシャル
 $U_{\text{fold}}(b, z)$

$$i\hbar v_0 \frac{\partial}{\partial z} \psi_0(b, z) = v_{00}(b, z) \psi_0(b, z)$$

Dynamical Polarization
動的偏極
ポテンシャル
(演算子)
 $\hat{U}_{\text{DP}} \psi_0(b, z)$

$$\begin{aligned} &+ v_{01}(b, z) \exp \left[\frac{1}{i\hbar v_1} \int_{-\infty}^z v_{11}(b, z') dz' \right] \\ &\times \int_{-\infty}^z \frac{1}{i\hbar v_1} v_{10}(b, z') \psi_0(b, z') e^{i(K_0 - K_1)z'} \\ &\times \exp \left[\frac{-1}{i\hbar v_1} \int_{-\infty}^{z'} v_{11}(b, z'') dz'' \right] dz' e^{i(K_1 - K_0)z} \end{aligned}$$

動的偏極ポテンシャルの解釈

整理すると:

z において、ポテンシャル v_{01} により弾性チャンネルに戻る。

z' から z まで、ポテンシャル v_{11} の中を伝播
(グリーン関数と同等であることが証明可能)

$$\hat{U}_{\text{DP}}\psi_0(b, z) e^{iK_0 z} = \int_{-\infty}^{\infty} \theta(z - z') v_{01}(b, z) \left[\frac{1}{i\hbar v_1} \exp \left[\frac{1}{i\hbar v_1} \int_{z'}^z v_{11}(b, z'') dz'' \right] e^{iK_1(z-z')} \right] \times v_{10}(b, z') \psi_0(b, z') e^{iK_0 z'} dz'$$

$z = z'$ において、弾性チャンネルの散乱波が v_{10} によって非弾性チャンネルに遷移

エネルギー依存する、非局所型の複素ポテンシャル

Reaction calc. with the cPVC method

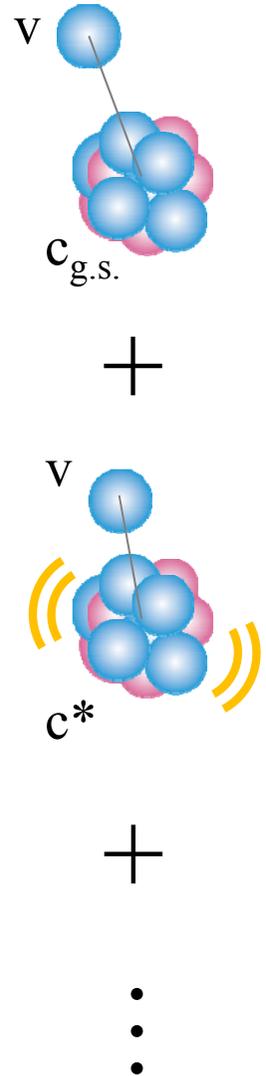
K. Mizuyama and O, Phys. Rev. C **86**, 041603 (2012).

$$\begin{aligned} \Psi_{\text{PVC}}^{(+)}(\mathbf{r}\sigma, \mathbf{k}) &= \phi_F(\mathbf{r}\sigma, \mathbf{k}) + \sum_{\sigma'\sigma''} \iint d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' G^{(+)}(\mathbf{r}\sigma, \mathbf{r}'\sigma'; E) \\ &\times [v(\mathbf{r}'\sigma')\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'')\delta_{\sigma'\sigma''} + \Sigma(\mathbf{r}'\sigma', \mathbf{r}''\sigma''; E)] \\ &\times \phi_F(\mathbf{r}''\sigma'', \mathbf{k}), \end{aligned}$$

HF mean field potential (real)

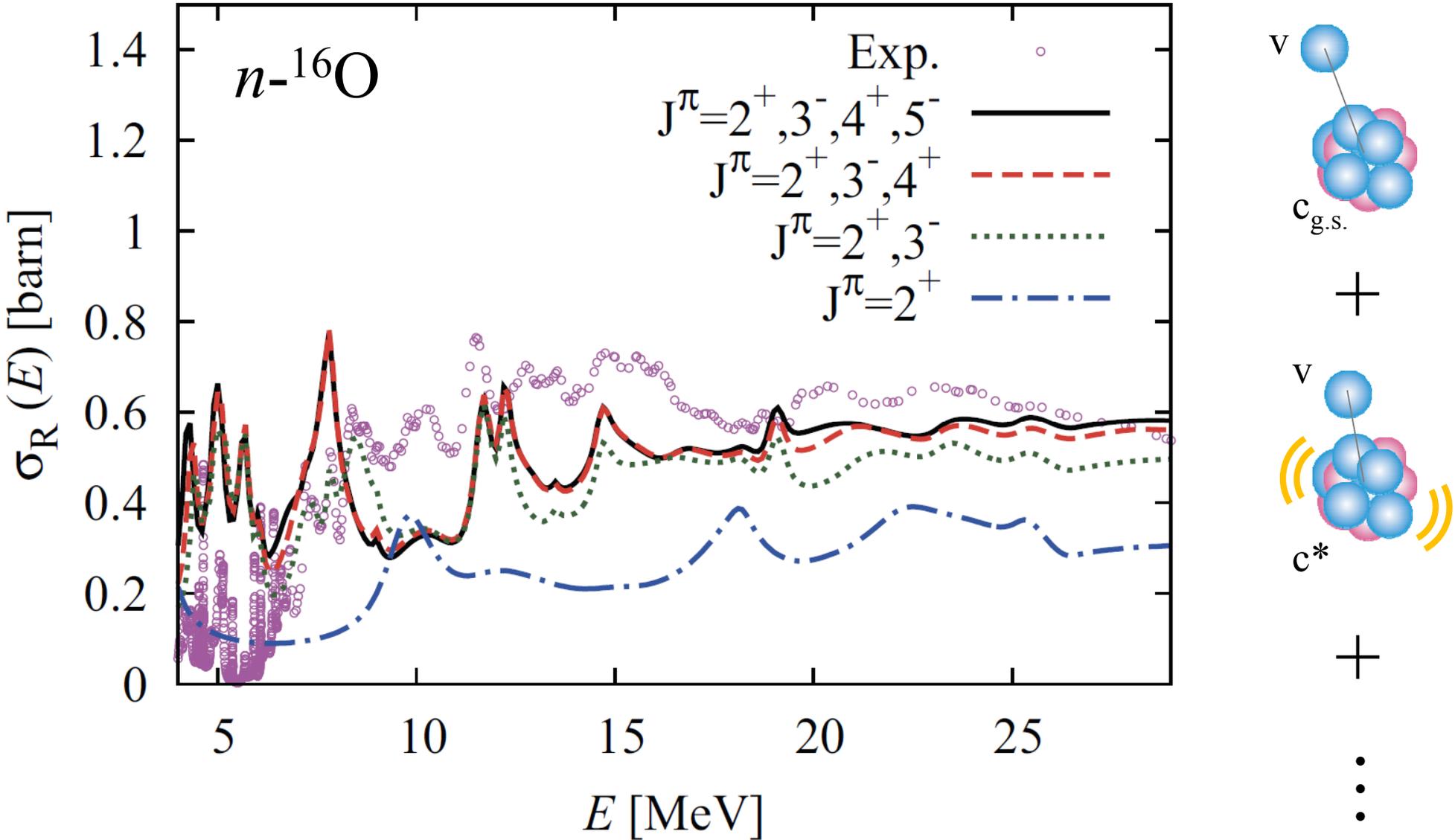
Self energy

(1)



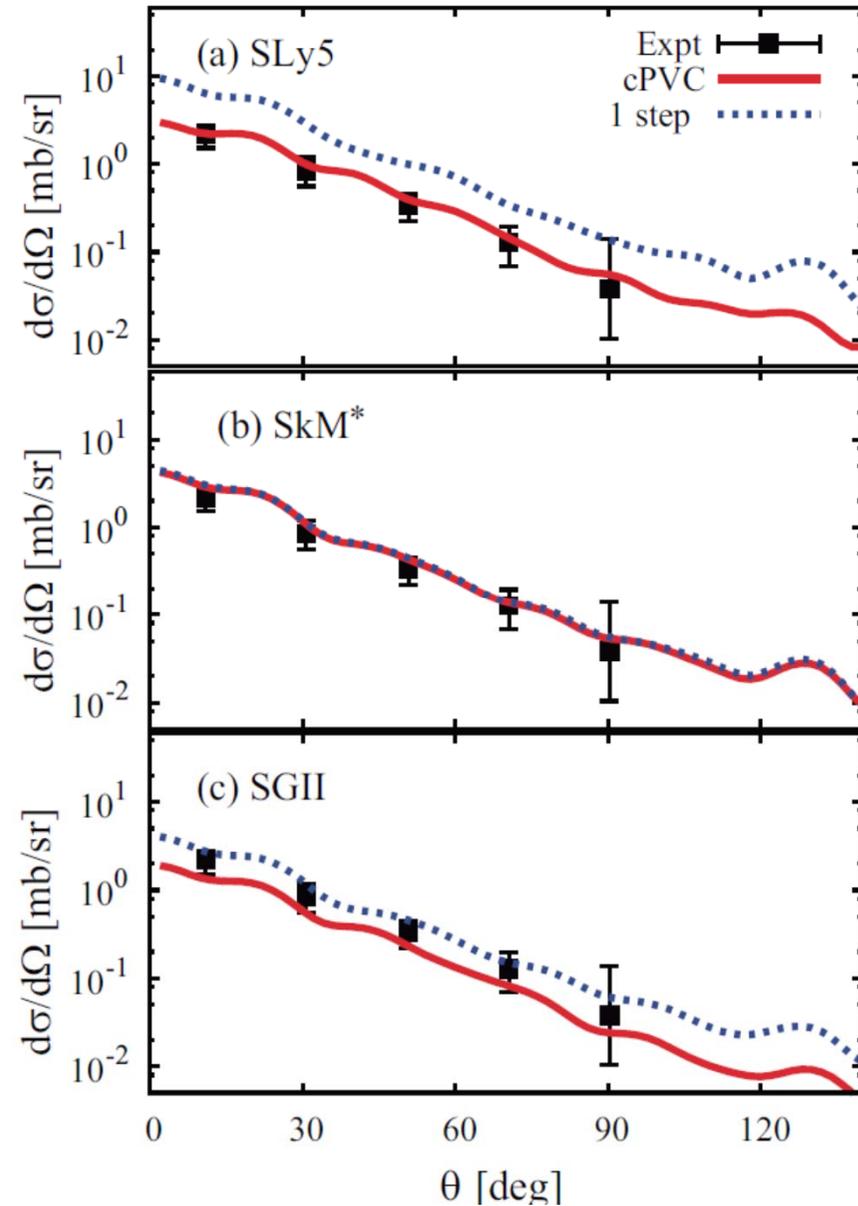
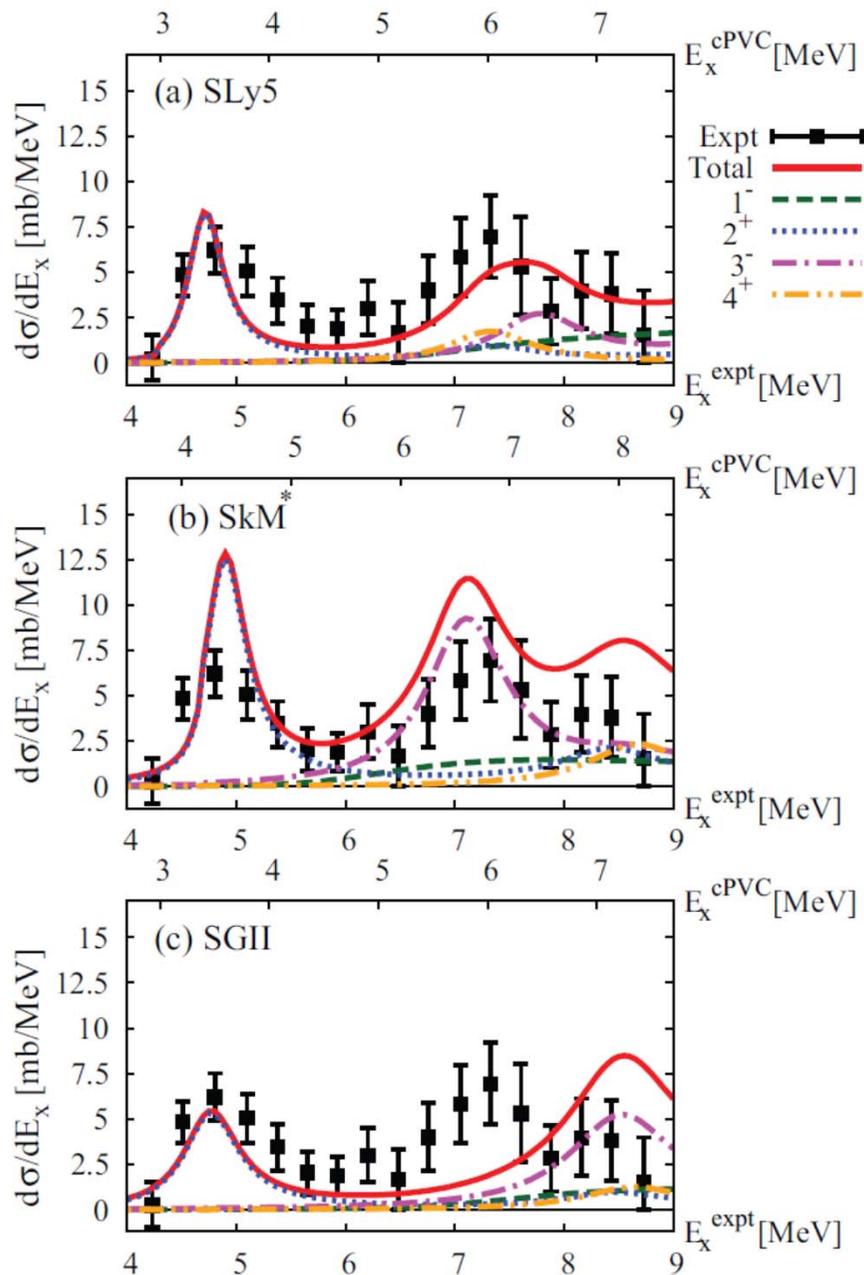
Reaction calc. with the cPVC method

K. Mizuyama and O, Phys. Rev. C **86**, 041603 (2012).



Application to $^{24}\text{O}(p,p')@62\text{ A MeV}$

K. Mizuyama and O, Phys. Rev. C **89**, 034620 (2014).



アイコナール近似・チャンネル結合法のまとめ

- 散乱問題を近似的に解く手法として、アイコナール近似を紹介した。この近似は、比較的エネルギーが高いときに有効である。
- アイコナール近似の結果、散乱問題は、 z 軸方向についての微分方程式に帰着する。
- 微分断面積の計算も容易に可能。その結果は、中性子の弾性散乱角分布(~ 65 MeV)を、後方までかなり良く再現する。
- アイコナール近似を用いたチャンネル結合方程式の導出と、その解法(反復法)について学んだ。
- 理想化されたチャンネル結合問題は、光学ポテンシャルの起源を理解するために有用。