



密度汎関数理論 (Density functional theory)

中務 孝 (理研・仁科センター)

原子核の多くの性質が (変形した Nilsson 模型も含めて) 殻模型の 1 粒子運動でうまく説明できることは、原子核物理のどの教科書にも書かれた“常識”となっています。このことは、ナイーブには平均場ポテンシャルに閉じ込められた近似的なフェルミ気体を連想させますが、単純な平均場では、核の飽和性 (圧力ゼロで核子数に比例した体積と束縛エネルギーをもつこと) という最も基本的な性質を理解することが困難です。まずこのことを説明したいと思います。簡単のため一様核物質を考えて、平均場ポテンシャルを $V < 0$ 、核子のフェルミエネルギーを $\epsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / (2m) > 0$ としましょう。飽和性から束縛エネルギーは核子数に比例するので、1 核子あたり束縛エネルギー B/A は核子分離エネルギー $S = -(\epsilon_F + V)$ に等しいはずですが、2 体の核力から作られた平均場が V だとすると、 $B/A = -(V/2 + 3\epsilon_F/5)$ と書けるので、 $S = B/A$ の飽和関係は $S = V/4 < 0$ を要求します。これでは核子はこぼれだしてしまい原子核が存在できません¹。

ところが、“平均場模型”は核物理において大きな成功を収め、軽い核から重い核 (核物質) までを統一的に高精度で記述できます。この矛盾するような話の裏には、「有効核力が密度に依存する」というトリックが隠されているのです。この密度依存性は、G 行列の状態依存性を表現するという形で当初導入されましたが、この結果 1 粒子軌道に関する変分計算が可能になり、再配置効果と呼ばれる重要な寄与の取り込みに成功しました。これが核の飽和性と矛盾しない“平均場模型”のミソと言えます。また、この計算は結果的に、エネルギー密度汎関数 $E[\rho]$ から出発して、これを最小にする密度の表現 $\rho = \sum_{i=1}^N |\phi_i\rangle\langle\phi_i|$ を求めるという問題に帰着します [2]。この考えは、次に述べる密度汎関数理論の Kohn-Sham (KS) スキームと完全に同一であり、再配置効果を含め様々な相関を内包しているという意味でも、密度汎関数理論 (模型) と呼ぶのが適切だと思います。現在、Skyrme 型、Gogny 型、共変 (相対論) 型の密度汎関数が主流ですが、1 つの汎関数であらゆる原子核が対象にでき、核半径や変形とともに核質量を平均 1 MeV 程度の誤差で記述可能です。重い核の束縛エネルギーは 1 GeV を優に超えるので、この精度は核の飽和性を再現できない理論では絶対に到達不可能です。

ここまでは前置きとして、密度汎関数理論の解説に移ります。その基本理念は、相互作用した多体系を 1 体密度を用いて厳密に記述することであり、以下の 2 つの基本定理に拠っています。

1. あらゆるオブザーバブルの基底状態での期待値は、密度の汎関数で書ける。
2. 相互作用する (現実の) 系の密度は、密度の汎関数で与えられる一体ポテンシャル中を運動する (仮想的な) 自由粒子系の密度として計算できる。

これらはそれぞれ、Hohenberg-Kohn の定理、Kohn-Sham (KS) の定理と呼ばれ、2 の有効一体ポテンシャルを Kohn-Sham (KS) ポテンシャルと呼びます。つまり、“原理的には”、KS ポテンシャル中

¹ここでは簡単のため V に状態依存性がない議論を紹介しましたが、文献 [1] の 2 章では、平均場ポテンシャル V に速度依存性があるとした議論があります。この場合には非常に小さい有効質量 ($m^*/m \sim 0.4$) を仮定する必要があり、この値は実験データとは 2 倍ものずれがあって、定量的にはやはり問題が残ります。

の自由粒子系を自己無撞着に解くだけで、系の基底状態の密度が求まり、基底状態における物理量が計算できることとなります。ただし、定理 1 も 2 も厳密な基底状態を再現する普遍的な密度汎関数の存在のみを保証していて、その具体的な形については教えてくれないので、「特殊な厳密解や実験データを通してこれらの密度汎関数を決定する」というやや泥臭い作業を必要とします。特に、その基本となる KS ポテンシャルの改善は中心課題であり、日々進展しています。計算コストは平均場計算と同レベルなので、粒子数 N が大きくなっても爆発的に計算量が増大することはありません。逆に弱点は主に 2 つあります。(1) 究極の KS ポテンシャルは存在するが、実際に使っているのは近似的なものであること、(2) 励起状態や時間に依存する現象の記述には無力だということ。

(1) の問題は常に残りますが、(2) の方は解決されました。上記の定理が、任意の初期状態 $|\Psi(t_0)\rangle$ と時間に依存する外場 $v(\vec{r}, t)$ が存在する系においても、そっくりそのまま成立することが示されたのです [3]。まず、外場 $v(\vec{r}, t)$ と密度 $\rho(\vec{r}, t)$ の間に 1 対 1 対応が付けられることが証明できます。この証明をここで紹介することはできませんが、文献 [3] もしくは拙著 [4] を参照ください。これによって、密度は外場の、外場は密度の汎関数であることが保証されます ($\rho[v](t)$ 、 $v[\rho](t)$)。またこの対応は、現実の相互作用がある多体系でも成立しますし、仮想的な相互作用がない系においても成立するので、図 1 のように考えられます。外場 $v(\vec{r}, t)$ のある現実の系の密度の時間発展が $\rho[v](\vec{r}, t)$ で与えらるるとき、図 1 で $\rho_s(t) = \rho(t)$ と取ることで、同じ $\rho(\vec{r}, t)$ を作り出す (仮想) 自由粒子系における外場が一つ対応します。これが時間依存 KS ポテンシャル $v_s[\rho](\vec{r}, t)$ です。つまり、外場 $v(\vec{r}, t)$ のもとで時間発展する現実の系の密度は、KS ポテンシャル $v_s[\rho](\vec{r}, t)$ 中の自由粒子系として記述できるのです。時間依存ポテンシャル中の自由粒子系なので、

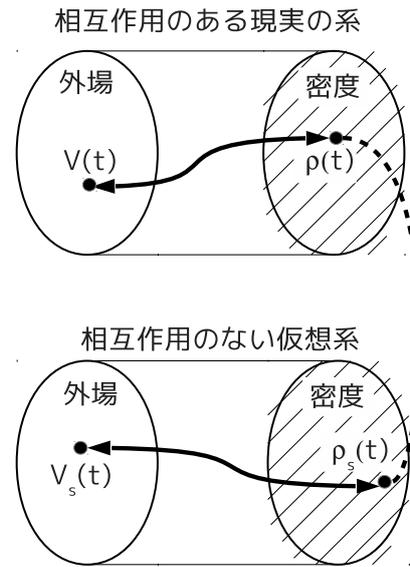


図 1: $v(\vec{r}, t)$ と $\rho(\vec{r}, t)$ の 1 対 1 対応。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_i(\vec{r}, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + v_s[\rho](\vec{r}, t) \right\} \phi_i(\vec{r}, t), \quad \rho(t) = \sum_i^N |\phi_i(t)\rangle \langle \phi_i(t)|, \quad (1)$$

を両立させるように解けばよく、これを時間依存 KS (TDKS) 方程式と呼びます。核物理では TDHF と呼ばれ、基本定理 [3] より以前から核ダイナミクスの研究に用いられてきました [2]。原子核でも重要な対相関による超伝導・超流動現象を記述するためには、図 1 において、対ポテンシャル $\Delta(\vec{r}, t)$ 、と対密度 $\kappa(\vec{r}, t)$ を加えることで同様の 1 対 1 対応が議論ができ、Bogoliubov-de-Gennes-Kohn-Sham (BdGKS) 方程式となります [5]。BdGKS スキームは、核物理では TDHFB の名で知られ、大振幅集団運動、核分裂機構の解明に向けた開発が進行中です [4]。この場合、模型空間の次元と同数の軌道を扱う大規模計算になるため、計算核物理の挑戦的研究課題の一つとなっています。

- [1] A. Bohr and B.R. Mottelson, Nuclear Structure Vol. 1 (W.A. Benjamin, 1969).
- [2] J.W. Negele, Rev. Mod. Phys. **54**, 913 (1982).
- [3] E. Runge and E.K.U. Gross, Phys. Rev. Lett. **52**, 997 (1984).
- [4] T. Nakatsukasa, Prog. Theor. Exp. Phys. **2012**, 01A207 (2012).
- [5] O.-J. Wacker, R. Kümmel, and E.K.U. Gross, Phys. Rev. Lett. **73**, 2915 (1994).