1D06

ICI 法による相対論的ディラック方程式、ディラック-クーロン方程式の解析的解法

（京大院工*, 京大福井セ**）中嶋 浩之*, 中辻 博*,**

1.緒言

本研究では非相対論シュレーディンガー方程式の解析的な解法として中辻により提案されている ICI 法を [1,2]、相対論的ディラック方程式及びディラック-クーロン方程式の解法へ拡張した [3]。相対論的方程式に対しても ICI 法の基礎原理は非相対論方程式と同様に成立する。ところが、相対論的方程式では非相対論方程式にはない、いわゆる変分崩壊の問題が起こりうる。変分的な解法においてこのような変分崩壊を起こす大きな要因は、相対論的方程式が要求する多成分波動関数の互いの関係を無視して変分を行なってしまうことにある。しかし、ICI 法によって生成される波動関数はハミルトニアンが波動関数の中に陽に含まれるため、このような相対論的方程式が要求する解のバランスを自動的に満足させることができる可能性があり、その結果正しく解を求められることが期待できる。また一方、逆ハミルトニアンを用いることも変分崩壊を起こさないための方法である [4,5]。正エネルギー解と負エネルギー解を正領域、負領域に分けて逆数を取ることにより我々の求めたい正エネルギー解は最大値となり、Ritz 型の変分原理が成立する。今回我々は、水素型原子(1 電子系)と He 型原子(2 電子系)の計算を行い、相対論的方程式における ICI 法の有用性を確かめた。さらに、ベクトルポテンシャルを含む磁場下の計算にも応用した。

2.理論

ICI 波動関数は、非相対論の場合と同様に次のように定義される。ただし、N 電子系では波動関数は 4^N 成分となる。

$$\psi_{n+1} = \left(1 + C_{n+1} g\left(H - E_n\right)\right)\psi_n \tag{1}$$

ここで、g(>0)は g 関数と呼びハミルトニアンの特異点を除くために用い、通常ポテンシャル関数の逆数とする。また、C は変分パラメータである。(1)式を変分し変分原理に当てはめると、収束したとき H-square 方程式と等しい式が得られ、正確な解が求められたことになる。また、収束の加速のため Free-ICI 法という手法を用い、生成された波動関数を互いに独立な関数に分けてそれぞれに変分パラメータを与える。逆ハミルトニアンを用いるときは、逆ハミルトニアンの演算を避けるため、(1)式により生成する ICI 波動関数に対しさらにハミルトニアンをかけた関数を用いる。このようにすれば H^{-1} の積分は必要でなく H^2 の積分さえ計算できれば良い [5]。

$$\psi'_{n+1} = H\psi_{n+1} \tag{2}$$

(1)式の波動関数が正確な解であるとき(2)式の波動関数も正確な解となることは簡単に証明できる。

相対論的方程式の要求する波動関数の各成分の関係は、

$$\psi^s \supset \left(c\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}/\left(E - V + c^2\right)\right)\psi^l \quad \text{近似的には} \quad \psi^s \supset \bigcup_k \left(cr^k\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}\right)\psi^l \tag{3}$$

である。一方、ICI 波動関数はハミルトニアンを陽に含むため、

$$\psi^s_{n+1} \supset \left(cg\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}\right)\psi^l_n \tag{4}$$

が成立する。(4)式の関係式はまさに(3)式と同等で、ICI 波動関数は自動的に相対論的方程式の要求する波動関数の各成分の関係を満たすことになる。我々はこれを ICI バランスと名付ける。

3.結果

Table1,Table2 にそれぞれ水素型原子(1 電子系)、He 型原子(2 電子系)の計算結果を示す。ここで、"Inverse"は逆ハミルトニアンを用いた手法、"Regular"は通常のハミルトニアンを用いた手法であることを表し、n は ICI 法の繰り返し回数、M は Free-ICI 法の次元、w はエネルギーシフト値である。また、ベクトルポテンシャルを含む定磁場下の計算も行い、Table3 に結果を示した。

Table1.水素型原子（$g = r^{99/100}, \psi_0 = \exp(-1.5Zr)$）

n	M	Energy (Z=1)	Energy (Z=26)
0	2	-0.375 033 696	-268. 305 478
1	6	-0.493 381 703	-336. 985 790
2	12	-0.499 822 155	-340. 983 737
5	42	-0.500 006 656	-341. 097 836
Exact		-0.500 006 656	-341. 097 836

Table2. He 型原子（$g = 1 + r_1 + r_2 + r_{12}, \psi_0 = r_1^{\gamma-1} r_2^{\gamma-1} \exp(-Zr_1)\exp(-Zr_2)\cdot Angular$）

n	Inverse (w=c)			Regular		
	M	Energy (Z=2)	Energy (Z=90)	M	Energy (Z=2)	Energy (Z=90)
0	3	-2.75 008 563	-9166. 575 433	8	-2.75 011 497	-9166. 696 708
1	12	-2.88 771 973	-9166. 809 415	32	-2.88 786 145	-9166. 924 096
2	38	-2.90 307 277	-9166. 858 084	76	-2.90 309 958	-9166. 930 884
5	482	-2.90 385 116	-9166. 903 050	603	-2.90 385 326	-9166. 929 132
6	852	-2.90 385 405	-9166. 907 227			
Ref. 6,7		-2.90 385 7	-9166. 927 2		-2.90 385 7	-9166. 927 2

Table3.定磁場下の計算（水素:n=14,M=675, He:n=2,M=534）

水素 (Z=1)			He (Z=2)		
B	Energy	Ref.8	B	Energy (Inverse)	Ref.9 (非相対論)
1	-0.831 173 225 929	-0.831 173 226	0.5	-2.85 628 511	-2.85 585 9
500	-6.25 703 258 764	-6.25 703 26	1	-2.73 017 320	-2.72 950 8
5000	-11.8 730 884 465	-11.8 730 8	5	-0.550 498 994	-0.574 877

このように、ICI 法を用いることで正しく解が求められことが確かめられた。また、2 電子系においても逆ハミルトニアンを用いると Ritz 型の変分原理が成立することも確かめた。磁場下の計算でも特に問題なく正しく解が求められた。強磁場下 He(2 電子系)原子の非常に正確な相対論計算はこれまでほとんど報告がない。これは天文物理学の分野などからも興味が持たれているため、さらに計算を進めてより精密な結果を当日発表したいと思っている。

4.結論

本研究により、ICI 法が相対論的方程式を正確に解く場合にも非常に有用であることが分かった。ICI 法を用いることで ICI バランスが満たされ、あるいは逆ハミルトニアンを用いることでも正確な解に収束させられることを確かめた。

5.Ref.

(1) H.Nakatsuji, J.Chem.Phys., 113, 2949, 2000. (2) H.Nakatsuji, Phys.Rev.Lett., 93, 030403, 2004. (3) H.Nakatsuji, H.Nakashima, Phys.Rev.Lett.,95, 050407, 2005. (4) H.Nakatsuji, Phys.Rev.A, 65, 052122, 2002. (5) R.N.Hill, C.Krauthauser, Phys.Rev.Lett., 58, 83, 1987. (6) A.Kolakowska, J.Phys.B.:At.Mol.Opt.Phys., 30, 2773 1997. (7) A.Kolakowska, J.D.Talman, K.Aashamar, Phys.Rev.A, 53, 168, 1996. (8) Z.Chen, S.P.Goldman, Phys.Rev.A, 45, 1722, 1992. (9) W.Becken, P.Schmelcher, F.K.Diakonos, J.Phys.B.:At.Mol.Opt.Phys., 32, 1557 1999.