

接続法による Dirac 方程式の数値解析法

Matching Method for Dirac Equation

柴田 洋一

Yoichi Shibata

Oyama National College of Technology
771, Nakakuki, Oyama, Tochigi, 323, Japan

Abstract

Runge-Kutta method is one of the most famous method to solve a differential equation. As this method treats the initial condition problem, it is difficult to solve the boundary condition problem like bound states. 'Matching Method' which substitute the initial condition to boundary condition is applied to Dirac equation.

微分方程式を数値解析する際にルンゲクッタ法が良く用いられるが、ルンゲクッタ法は初期条件の下で問題を解くためのプログラムであるために、束縛状態のような境界値条件の問題にそのまま適用するには困難がある。接続法は、初期条件を境界条件として扱うことによって、この困難を回避するプログラムである。接続法を用いて Dirac 方程式を数値解析する形式を提示する。

1 Introduction

Dirac 方程式は、スピン 1/2 の粒子の運動を記述する相対論的方程式である。しかし Dirac 方程式でポテンシャル問題を解こうとすると、一般には解析解を得ることは容易でない。特にポテンシャルに束縛された状態を解こうとすると、特定のポテンシャルを除くと解析解は困難であり、Dirac 方程式での束縛問題では数値解析を用いることが多い。Dirac 方程式の様々な問題を解くための数値解析法は、これまで非常に数多く作り出されているが、その中で C.J.Horowitz らは、Fermi 粒子がいくつかのメソンと相互作用を行う問題を解くために「接続法」という方法を用いた [1, 2]。本論文ではこの「接続法」を Dirac 方程式におけるポテンシャル問題に適用することを試みた。なお Dirac 方程式の展開は Bjorken と Drell の形式に従っている [3]。

質量 m の粒子の運動を記述する Dirac 方程式は

$$(\gamma p - m)\psi(r) = 0 \quad (1)$$

で与えられる。この粒子がポテンシャルの影響を受けて運動するときには、方程式内にそのポテンシャルを導入する。Dirac 方程式でのポテンシャルの定義は、粒子とポテンシャルとの作用の仕方によって何種類かあるのだが、今回はそのうちベクトル型ポテンシャルとスカラー型ポテンシャルを考えることにする。ベクトル型ポテンシャル $V(r)$ は、4 次元空間で次の定義で導入する。

$$p \rightarrow p - V(r) \quad (2)$$

またスカラー型ポテンシャルは、同様に次の定義で導入する。

$$m \rightarrow m + S(r) \quad (3)$$

ポテンシャルにいくつかの条件をつける。いま簡単のためにベクトルポテンシャルは第0成分のみが有限で、第1～3成分は0であるとする。また粒子の束縛状態を考えるため、ベクトルポテンシャルもスカラーポテンシャルも粒子にとって引力とする。角度依存性を持たない中心力とする。時間的に変化しない定常状態を考える。Dirac 方程式であらわされる粒子の波動関数は元々4成分のスピンオールであるが、これらのポテンシャルを考慮して2成分の形式に書き直すと、次のようになる。

$$\psi(r) = \begin{pmatrix} i \frac{G_{lj}(r)}{r} \varphi_{jm}^l(\Omega) \\ \frac{F_{lj}(r)}{r} \sigma \cdot \frac{r}{r} \varphi_{jm}^l(\Omega) \end{pmatrix} \quad (4)$$

粒子のエネルギーを E とすると、動径方向の Dirac 方程式は次のように記述できる。

$$[\{E - V^0(r)\} - \{m + S(r)\}] G_{lj}(r) = -\frac{dF_{lj}(r)}{dr} + \frac{\kappa}{r} F_{lj}(r), \quad (5)$$

$$[\{E - V^0(r)\} + \{m + S(r)\}] F_{lj}(r) = \frac{dG_{lj}(r)}{dr} + \frac{\kappa}{r} G_{lj}(r), \quad (6)$$

$$\text{ただし } \kappa = \mp \left(j + \frac{1}{2}\right) \quad \text{for} \quad j = l \pm \frac{1}{2}.$$

これらを連立方程式として、 $G_{lj}(r)$ と $F_{lj}(r)$ を求める。

2 Dirac 方程式における接続法

接続法とは、 $r = 0$ での境界条件を使って微分方程式を正方向に、ある点 $r = r_m$ まで積分して得られた $\psi_1(r_m)$ と、固有関数が十分0と見なせる遠方の点、 $r = r_{max}$ における $\psi_2(r_{max})$ とその微分係数 $\psi_2'(r_{max})$ を与えて、微分方程式をその点から $r = r_m$ まで積分して得られた $\psi_2(r_m)$ を滑らかに接続するようにエネルギー固有値 E を決定する方法である。

今あるエネルギー E_1 を与えて関数 $G_1(r)$ 、 $F_1(r)$ が得られ、

$$[\{E_1 - V(r)\} - \{m + S(r)\}] G_1(r) = -\frac{dF_1(r)}{dr} + \frac{\kappa}{r} F_1(r) \quad (7)$$

$$[\{E_1 - V(r)\} + \{m + S(r)\}] F_1(r) = \frac{dG_1(r)}{dr} + \frac{\kappa}{r} G_1(r) \quad (8)$$

エネルギー E_2 を与えて関数 $G_2(r)$ 、 $F_2(r)$ が得られたとしよう。

$$[\{E_2 - V(r)\} - \{m + S(r)\}] G_2(r) = -\frac{dF_2(r)}{dr} + \frac{\kappa}{r} F_2(r) \quad (9)$$

$$[\{E_2 - V(r)\} + \{m + S(r)\}] F_2(r) = \frac{dG_2(r)}{dr} + \frac{\kappa}{r} G_2(r) \quad (10)$$

(7) 式に左から $G_2(r)$ を掛けたものから、(8) 式に左から $G_1(r)$ を掛けたものを引くと

$$\begin{aligned} (E_1 - E_2) G_1(r) G_2(r) &= -G_2(r) \frac{d}{dr} F_1(r) + G_1(r) \frac{d}{dr} F_2(r) \\ &+ \frac{\kappa}{r} \{G_2(r) F_1(r) - G_1(r) F_2(r)\} \end{aligned} \quad (11)$$

を得る。同様に (9) 式に左から $F_2(r)$ を掛けたものから、(10) 式に左から $F_1(r)$ を掛けたものを引くと

$$\begin{aligned} (E_1 - E_2) F_1(r) F_2(r) &= F_2(r) \frac{d}{dr} G_1(r) - F_1(r) \frac{d}{dr} G_2(r) \\ &+ \frac{\kappa}{r} \{G_1(r) F_2(r) - G_2(r) F_1(r)\} \end{aligned} \quad (12)$$

を得る。さらに (11) 式と (12) 式を加えると、次の式が導かれる。

$$\begin{aligned} & (E_1 - E_2) \{G_1(r)G_2(r) + F_1(r)F_2(r)\} \\ &= \frac{d}{dr} \{G_1(r)F_2(r) - G_2(r)F_1(r)\} \end{aligned} \quad (13)$$

この (13) 式を、原点での境界条件

$$G_{1-}(0) = G_{2-}(0) = F_{1-}(0) = F_{2-}(0) = 0$$

の下で、 $r = 0$ から r_m まで積分し、さらに $G_{1-}(r_m)G_{2-}(r_m)$ で割ると

$$\begin{aligned} & (E_1 - E_2) \frac{\int_0^{r_m} \{G_1(r)G_2(r) + F_1(r)F_2(r)\} dr}{G_{1-}(r_m)G_{2-}(r_m)} \\ &= \frac{F_{2-}(r_m)}{G_{2-}(r_m)} - \frac{F_{1-}(r_m)}{G_{1-}(r_m)} \end{aligned} \quad (14)$$

を得る。ここで添え字-は、 r_m よりも小さな領域から得られた値であることをあらわす。

一方、 r_m の外側でも (13) 式を同様に積分する。ここでは境界条件

$$G_{1+}(r_{max}) = G_{2+}(r_{max}) = F_{1+}(r_{max}) = F_{2+}(r_{max}) = 0$$

を用いて、 $r = r_{max}$ から r_m まで積分して、同様に $G_{1+}(r_m)G_{2+}(r_m)$ で割ると

$$\begin{aligned} & (E_1 - E_2) \frac{\int_{r_{max}}^{r_m} \{G_1(r)G_2(r) + F_1(r)F_2(r)\} dr}{G_{1+}(r_m)G_{2+}(r_m)} \\ &= \frac{F_{2+}(r_m)}{G_{2+}(r_m)} - \frac{F_{1+}(r_m)}{G_{1+}(r_m)} \end{aligned} \quad (15)$$

を得る。

いま E_1 が物理的境界条件の下での正しい固有値であるとする、 $G_1(r)$ と $F_1(r)$ は正しい固有関数である。しかし関数としては正しくても、この段階ではまだ規格化が行われていないので、関数の絶対値は決まっていない。 r_m の内側と外側では、関数の絶対値にずれがある。いま $G_{1-}(r)$ と $G_{1+}(r)$ では C 倍のずれがあるとしよう。 $F_{1-}(r)$ と $F_{1+}(r)$ も C 倍ずれていることになる。 $r = r_m$ において

$$G_{1-}(r_m) = CG_{1+}(r_m)$$

$$F_{1-}(r_m) = CF_{1+}(r_m)$$

なので

$$\frac{G_{1-}(r_m)}{F_{1-}(r_m)} = \frac{G_{1+}(r_m)}{F_{1+}(r_m)} \quad (16)$$

という関係が得られる。この関係式を用いて、(14) 式と (15) 式の和を求めると、

$$\begin{aligned} E_1 = E_2 + & \left[\frac{F_{2-}(r_m)}{G_{2-}(r_m)} - \frac{F_{2+}(r_m)}{G_{2+}(r_m)} \right] \\ & \times \left[\frac{\int_0^{r_m} \{G_1(r)G_2(r) + F_1(r)F_2(r)\} dr}{G_{1-}(r_m)G_{2-}(r_m)} - \frac{\int_{r_{max}}^{r_m} \{G_1(r)G_2(r) + F_1(r)F_2(r)\} dr}{G_{1+}(r_m)G_{2+}(r_m)} \right]^{-1} \end{aligned} \quad (17)$$

となる。いま適当に与えたエネルギー E_2 は、ほとんど正しいエネルギー値 E_1 に近いとしよう。すると

$$G_2(r) \leftarrow G_1(r)$$

$$F_2(r) \leftarrow F_1(r)$$

という置き換えが可能であるとする。またこの置き換えは同時に

$$G_{2-}(r_m) \leftarrow G_{1-}(r_m)$$

$$G_{2+}(r_m) \leftarrow G_{1+}(r_m)$$

という置き換えも可能であることを表している。

これらの置き換えによって (17) 式は次のように書き換えられる。

$$E_1 = E_2 + \left[\frac{F_{2-}(r_m)}{G_{2-}(r_m)} - \frac{F_{2+}(r_m)}{G_{2+}(r_m)} \right] \times \left[\frac{\int_0^{r_m} [\{G_2(r)\}^2 + \{F_2(r)\}^2] dr}{\{G_{2-}(r_m)\}^2} - \frac{\int_{r_{max}}^{r_m} [\{G_2(r)\}^2 + \{F_2(r)\}^2] dr}{\{G_{2+}(r_m)\}^2} \right]^{-1} \quad (18)$$

この式は、適当なエネルギー E_2 を与えると、それを修正して正しいエネルギー固有値 E_1 が求まるというものである。 E_2 に対応する関数 $G_2(r)$ および $F_2(r)$ はルンゲクッタ法により求める。

(18) 式が正しい値に十分収束したかどうかを判定するには、次の式を用いる。

$$\left| \frac{E_1 - E_2}{E_1} \right| < \epsilon \quad (19)$$

ここで ϵ はあらかじめ設定しておく条件値である。

もしこの収束条件を満たしていなければ、まだ E_2 は E_1 から離れた値である。この場合は (18) 式で求めた E_1 をあらたな E_2 として、再び $G_2(r)$ と $F_2(r)$ を求める計算に戻る。このプロセスを数回繰り返すことによって E_2 が十分 E_1 に近づくと、収束条件 (18) 式は満足される。

正しいエネルギー値が求められても、 r_m の内側の関数 $G_-(r)$ 、 $F_-(r)$ と外側の関数 $G_+(r)$ 、 $F_+(r)$ では、その接続点 r_m で

$$G_{1-}(r_m) = CG_{1+}(r_m)$$

$$F_{1-}(r_m) = CF_{1+}(r_m)$$

のずれがあるため連続関数になっていない。そこでこのずれ c を計算し内側の関数を C 倍してやれば、これらの関数は r_m で連続な関数となる。

$$C = \frac{G_-(r_m)}{G_+(r_m)}$$

または

$$C = \frac{F_-(r_m)}{F_+(r_m)}$$

次に関数を規格化する。これはまず次のように全空間での積分値 N を求める。

$$N = 4\pi \left[\int_0^{r_m} [\{G_-(r)\}^2 + \{F_-(r)\}^2] dr - \left\{ \frac{G_-(r_m)}{G_+(r_m)} \right\}^2 \int_{r_{max}}^{r_m} [\{G_+(r)\}^2 + \{F_+(r)\}^2] dr \right] \quad (20)$$

この値でそれぞれの関数を割ることにより、規格化された関数が得られる。

$$G(r) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{N}} G_-(r) & 0 \leq r < r_m \\ \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{G_-(r_m)}{G_+(r_m)} G_+(r) & r \geq r_m \end{cases} \quad (21)$$

$$F(r) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{N}} F_-(r) & 0 \leq r < r_m \\ \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{F_-(r_m)}{F_+(r_m)} F_+(r) & r \geq r_m \end{cases} \quad (22)$$

これらが規格化された固有関数である。

3 今後の課題

ルンゲクッタ法は計算方法が簡単であるために、微分方程式を解くプログラムとしてよく用いられている。しかし初期値を与えて解いて行く方法なので、境界値問題の場合にはしばしば困難を生ずる。今回のように束縛状態を問題にする場合、境界条件は $r = \infty$ において $\psi \rightarrow 0$ である。ルンゲクッタ法では、 $r = 0$ の値 $\psi(0)$ およびその微分値 $\psi'(0)$ を与えて解くのだが、その初期値によっては $r = \infty$ で $\psi = 0$ とならず、無限大へ発散あるいは大きな振動を生ずる。また逆に $r = \infty$ の初期値 $\psi(\infty)$ および $\psi'(\infty)$ を与えて解いて行く方法に切り替えたとしても、今度は原点での不定性が残る。「接続法」は、これら不安定な値を生じやすい点をあらかじめ境界条件として設定して、あまり不安定を生じにくい中間点で接続してしまう方法である。

この接続法を用いてまず行うべきは、クーロンポテンシャル問題を解くことである。Dirac 方程式での束縛問題では、唯一クーロンポテンシャルのみが解析解を持っているためである [3]。この解析解と接続法によるエネルギー固有値および固有関数を比較する。次に調和振動子などのポテンシャルを解いて行く予定である。

参考文献

- [1] C.J.Horowitz, D.P.Murdock and B.D.Serot, ϕ S 7; 'The Relativistic Impulse Approximation' of the Book 'Computational Nuclear Physics 1' (Springer-Verlag)
- [2] 鈴木 公, '一次元ポテンシャルによる束縛状態' (東京理科大学物理学教室編)
- [3] J.D.Bjorken and S.D.Drell, 'Relativistic Quantum Mechanics' (McGraw-Hill Book Co., 1964)

(受理年月日 1996年 9月30日)