

# Hartree-Fock 理論

集中講義「不安定核への平均場アプローチ」資料 1

松尾正之 (新潟大学理学部)

2009 年 1 月 28 日

## 1 準備

### 1.1 基本的な定義、記法

A 核子系のハミルトニアン:

$$H = \sum_i^A \hat{t}(i) + \sum_{i<j} v(i, j) \quad (1)$$

$$\hat{t} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \quad (2)$$

局所ポテンシャル型中心力の場合:

$$v(1, 2) = v_0(r_{12}) + v_\sigma(r_{12})\sigma^{(1)}\sigma^{(2)} + v_\tau(r_{12})\tau^{(1)}\tau^{(2)} + v_{\sigma\tau}(r_{12})\sigma^{(1)}\sigma^{(2)}\tau^{(1)}\tau^{(2)} \quad (3)$$

粒子に作用する演算子:  $\mathbf{r}, \mathbf{p} = -i\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$ , スピン  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ , アイソスピン  $\boldsymbol{\tau} = (\tau_x, \tau_y, \tau_z)$

波動関数の座標表示

座標の表記:  $x \equiv (\mathbf{r}, \sigma, \tau)$  (空間座標、スピン  $\sigma = \pm\frac{1}{2}$ 、アイソスピン  $\tau = \pm\frac{1}{2} = p, n$ )

A 粒子波動関数:  $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_A) \equiv \langle x_1, x_2, \dots, x_A | \Psi \rangle$

一粒子波動関数:  $\phi_k(x_i) \equiv \langle x_i | \phi_k \rangle$

Slater 行列型 A 粒子波動関数 (A 個の粒子が異なる一粒子状態を占有し独立に運動している状態):

$$\Phi(x_1, x_2, \dots, x_A) = \langle x_1, x_2, \dots, x_A | \Phi \rangle = \frac{1}{\sqrt{A!}} \det \{ \phi_k(x_i) \} \quad (4)$$

内積

$$\int dx \equiv \int d\mathbf{r} \sum_\sigma \sum_\tau \quad (5)$$

$$\int dx_1, dx_2 \dots dx_A \equiv \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_A \sum_{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_A} \sum_{\tau_1 \tau_2 \dots \tau_A} \quad (6)$$

### 1.2 生成消滅演算子による表示

真空:  $|0\rangle$

一粒子状態 (@状態  $\phi_k$ ):  $|\phi_k\rangle = a_k^\dagger |0\rangle$

一粒子状態  $\phi_k$  に対する粒子生成演算子:  $a_k^\dagger$  消滅演算子:  $a_k$

一粒子状態 (@座標  $x$ ):  $|x\rangle = \psi^\dagger(x) |0\rangle$

座標  $x$  に対する粒子生成演算子:  $\psi^\dagger(x)$  消滅演算子:  $\psi(x)$  「場の演算子」ともいう。

Slater 行列型 A 粒子状態 (A 個の粒子が異なる一粒子状態を占有し独立に運動している状態) :

$$|\Phi\rangle = a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger \cdots a_{k_A}^\dagger |0\rangle \quad (7)$$

占有数 :

$$\langle \Phi | a_i^\dagger a_i | \Phi \rangle = n_i = \begin{cases} 1 & \text{占有状態} \\ 0 & \text{非占有状態} \end{cases} \quad (8)$$

一粒子状態に対する生成消滅演算子  $a_k^\dagger, a_k$  と場の演算子  $\psi^\dagger(x), \psi(x)$  の関係 :

$$\psi(x) = \sum_k \phi_k(x) a_k \quad (9)$$

$$\psi^\dagger(x) = \sum_k \phi_k^*(x) a_k^\dagger \quad (10)$$

A 粒子系のハミルトニアン (1 粒子状態表示) :

$$H = \sum_{ij} t_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} v_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (11)$$

2 体相互作用の行列要素 (1 粒子状態表示) :

$$v_{ijkl} = \langle \phi_i \phi_j | v | \phi_k \phi_l \rangle = \int dx_1 dx_2 dx'_1 dx'_2 \phi_i^*(x_1) \phi_j^*(x_2) \langle x_1 x_2 | v(1, 2) | x'_1 x'_2 \rangle \phi_k(x'_1) \phi_l(x'_2) \quad (12)$$

2 体相互作用の行列要素 (座標表示) :

$$\begin{aligned} \langle x_1 x_2 | v(1, 2) | x'_1 x'_2 \rangle &= \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2) \times \\ &\quad \{ v_0(r_{12}) + v_\sigma(r_{12}) \langle \sigma_1 \sigma_2 | \boldsymbol{\sigma}^{(1)} \boldsymbol{\sigma}^{(2)} | \sigma'_1 \sigma'_2 \rangle \\ &\quad + v_\tau(r_{12}) \langle \tau_1 \tau_2 | \boldsymbol{\tau}^{(1)} \boldsymbol{\tau}^{(2)} | \tau'_1 \tau'_2 \rangle + v_{\sigma\tau}(r_{12}) \langle \sigma_1 \sigma_2 | \boldsymbol{\sigma}^{(1)} \boldsymbol{\sigma}^{(2)} | \sigma'_1 \sigma'_2 \rangle \langle \tau_1 \tau_2 | \boldsymbol{\tau}^{(1)} \boldsymbol{\tau}^{(2)} | \tau'_1 \tau'_2 \rangle \} \end{aligned} \quad (13)$$

密度行列 (一粒子状態表示) :

$$\rho_{ij} \equiv \langle \Phi | a_j^\dagger a_i | \Phi \rangle \quad (14)$$

密度行列 (座標表示) :

$$\rho(x, x') \equiv \langle \Phi | \psi^\dagger(x') \psi(x) | \Phi \rangle \quad (15)$$

なお、座標表示密度行列の対角成分はいわゆる密度に他ならない

$$\rho(x) = \rho(x, x) = \langle \Phi | \psi^\dagger(x) \psi(x) | \Phi \rangle = \langle \Phi | \sum_i \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}) \delta_{\sigma_i \sigma} \delta_{\tau_i \tau} | \Phi \rangle \quad (16)$$

A 粒子系のハミルトニアン (座標表示) :

$$H = \int dx \psi^\dagger(x) \underbrace{\left( -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right)}_i \psi(x) + \frac{1}{2} \int dx_1 dx_2 dx'_1 dx'_2 \langle x_1 x_2 | v | x'_1 x'_2 \rangle \psi^\dagger(x_1) \psi^\dagger(x_2) \psi(x'_2) \psi(x'_1) \quad (17)$$

## 2 Hartree-Fock の理論的枠組み

この理論が取り入れる相関 : 核子と核力が作る平均場のなかに核子を閉じ込め、束縛した原子核を構成する。核子は共通の平均場の中を独立粒子運動している。

原理 : Slater 行列型 A 粒子波動関数に対する変分原理により、基底状態と平均場、そして一粒子軌道を、核子間の有効相互作用から導く。

## 2.1 変分原理と Hartree-Fock 方程式

Slater 行列に対する全エネルギー期待値  $E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$  の表式 :

$$E = \sum_{i, \text{occ.}} \langle \phi_i | \hat{t} | \phi_i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{ij, \text{occ.}} (\langle \phi_i \phi_j | v | \phi_i \phi_j \rangle - \langle \phi_i \phi_j | v | \phi_j \phi_i \rangle) \quad (18)$$

$$= \sum_i n_i \langle \phi_i | \hat{t} | \phi_i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{ij} n_i n_j (\langle \phi_i \phi_j | v | \phi_i \phi_j \rangle - \langle \phi_i \phi_j | v | \phi_j \phi_i \rangle) \quad (19)$$

右辺の最終項は「交換項」。

占有状態の波動関数  $\phi_i(x)$  の任意の変分

$$\phi_i(x) \rightarrow \phi_i(x) + \delta\phi_i(x) \quad (20)$$

に対する、全エネルギー期待値の変化

$$E \rightarrow E + \delta E \quad (21)$$

が停留条件

$$\delta E = \delta \langle \Phi | H | \Phi \rangle = 0 \quad (22)$$

を満たすことを要請する。ただし、拘束条件として、1粒子波動関数の規格化条件

$$\mathcal{N}_i = \langle \phi_i | \phi_i \rangle = \int dx \phi_i^*(x) \phi_i(x) = 1 \quad (23)$$

$$\delta \mathcal{N}_i = \langle \delta \phi_i | \phi_i \rangle + c.c. = \int dx \delta \phi_i^*(x) \phi_i(x) + c.c. = 0 \quad (24)$$

を課す。

全エネルギー期待値の変分から Hartree-Fock 方程式

$$\delta E = \delta \langle \Phi | H | \Phi \rangle = \sum_i n_i \langle \delta \phi_i | \hat{t} | \phi_i \rangle + \sum_{ij} n_i n_j (\langle \delta \phi_i \phi_j | v | \phi_i \phi_j \rangle - \langle \delta \phi_i \phi_j | v | \phi_j \phi_i \rangle) + c.c. \quad (25)$$

$$= \sum_i n_i \int dx \delta \phi_i^*(x) \left( \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} \phi_i(x) \right) \quad (26)$$

$$+ \underbrace{\int dx dx' \delta \phi_i^*(x) \int dx_2 dx_2' (\langle xx_2 | v | x' x_2' \rangle - \langle xx_2 | v | x_2' x' \rangle) \sum_j n_j \phi_j^*(x_2) \phi_j(x_2') \phi_i(x')}_{\equiv \langle x | \Gamma_H + \Gamma_{ex} | x' \rangle} + c.c. \quad (27)$$

拘束条件つき変分原理 :  $\delta E - \sum_i n_i e_i \delta \mathcal{N}_i = 0$  ( $e_i$  が未定乗数)

$$0 = \delta E - \sum_i n_i e_i \delta \mathcal{N}_i \quad (28)$$

$$= \sum_i n_i \int dx \delta \phi_i^*(x) \left( \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} - e_i \right) \phi_i(x) + \int dx dx' \delta \phi_i^*(x) \langle x | \Gamma_H + \Gamma_{ex} | x' \rangle \phi_i(x') + c.c. \quad (29)$$

から  $\phi_i(x)$  を決定するための方程式「Hartree-Fock 方程式」

$$\underbrace{\left( \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} \phi_i(x) + \int dx' \langle x | \Gamma_H + \Gamma_{ex} | x' \rangle \phi_i(x') \right)}_{\int dx' \langle x | h | x' \rangle \phi_i(x')} = e_i \phi_i(x) \quad (30)$$

が導かれる。

### Hartree-Fock ポテンシャルと Hartree-Fock ハミルトニアン

ここで、 $\Gamma_H$  と  $\Gamma_{ex}$  はそれぞれ「Hartree ポテンシャル (Hartree 場)」および「Fock ポテンシャル (交換ポテンシャル)」と呼ばれ、次の式で与えられる。

$$\langle x|\Gamma_H|x'\rangle = \int dx_2 dx'_2 \langle xx_2|v|x'_2 x'_2\rangle \rho(x'_2, x_2) \quad (31)$$

$$\langle x|\Gamma_{ex}|x'\rangle = - \int dx_2 dx'_2 \langle xx_2|v|x'_2 x'\rangle \rho(x'_2, x_2) \quad (32)$$

ここで  $\rho(x, x')$  は「密度行列」と呼ばれるもので

$$\rho(x, x') = \sum_i n_i \phi_i(x) \phi_i^*(x') = \sum_{i, \text{occ.}} \phi_i(x) \phi_i^*(x') \quad (33)$$

である。占有 1 粒子状態の波動関数  $\phi_i(x)$  を使って表されている。一般的定義は式 (14,15)

$$\rho(x, x') = \langle \Phi | \psi^\dagger(x') \psi(x) | \Phi \rangle$$

である。また、密度行列の対角成分

$$\rho(x) \equiv \rho(x, x) = \sum_i n_i |\phi_i(x)|^2 \quad (34)$$

は「密度」に他ならない。なお、両者を合わせた  $\Gamma_{HF} = \Gamma_H + \Gamma_{ex}$  を「Hartree-Fock ポテンシャル」、それに運動エネルギー項を加えた

$$h \equiv -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \Gamma_{HF} \quad (35)$$

を「Hartree-Fock ハミルトニアン」という。この 1 対ハミルトニアンが、平均場中で独立に運動する核子  $\phi_i(x)$  に対するシュレーディンガー方程式 (= Hartree-Fock 方程式 (30)) を支配しているハミルトニアンである。

2 体相互作用  $v(1, 2)$  が局所 2 体ポテンシャルのとき、Hartree ポテンシャル  $\Gamma_H$  は局所 1 体ポテンシャルとなる。つまり、

$$\langle x|\Gamma_H|x'\rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \sigma\tau | \Gamma_H(\mathbf{r}) | \sigma'\tau' \rangle \quad (36)$$

$$\langle \sigma\tau | \Gamma_H(\mathbf{r}) | \sigma'\tau' \rangle = \int d\mathbf{r}_2 \sum_{\sigma_2, \sigma_2'} \sum_{\tau_2, \tau_2'} \langle \sigma\tau, \sigma_2\tau_2 | v(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2) | \sigma'\tau' \sigma_2'\tau_2' \rangle \rho(\mathbf{r}_2 \sigma_2' \tau_2', \mathbf{r}_2 \sigma_2 \tau_2) \quad (37)$$

となるのが、式 (13) を式 (31) に代入してみると確認できる。これに対して、交換ポテンシャル  $\Gamma_{ex}$  は本質的に非局所ポテンシャルである。唯一の例外は 2 体相互作用が接触型 (デルタ関数型) のポテンシャル  $v(1, 2) \propto \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$  の場合のみである。Skyrme 有効相互作用はそのような例外である。その結果、Hartree-Fock ポテンシャルと現象論的な平均場模型 (たとえば Woods-Saxon 模型) との対応がつけやすく、直感を描きやすい、Hartree-Fock 方程式を座標表示で解きやすい、などの非常に大きなメリットがあり、盛んに使われている。

## 2.2 密度汎関数理論との関係

全エネルギー期待値は密度行列の汎関数

全エネルギー期待値の式 (19) に現れる 1 粒子波動関数はすべて、密度行列  $\rho(x, x')$  にまとめることができる。

$$\begin{aligned}
 E &= \int dx dx' \sum_i n_i \langle x | \hat{t} | x' \rangle \phi_i^*(x) \phi_i(x') \\
 &\quad + \frac{1}{2} \int dx_1 dx_2 dx'_1 dx'_2 \sum_{ij} n_i n_j \langle x_1 x_2 | v | x'_1 x'_2 \rangle (\phi_i^*(x_1) \phi_j^*(x_2) \phi_i(x'_1) \phi_j(x'_2) - \phi_i^*(x_1) \phi_i^*(x_2) \phi_j(x'_1) \phi_j(x'_2)) \\
 &= \int dx dx' \langle x | \hat{t} | x' \rangle \rho(x', x) \\
 &\quad + \frac{1}{2} \int dx_1 dx_2 dx'_1 dx'_2 \langle x_1 x_2 | v | x'_1 x'_2 \rangle (\rho(x'_1, x_1) \rho(x'_2, x_2) - \rho(x'_2, x_1) \rho(x'_1, x_2))
 \end{aligned} \tag{38}$$

ここで、 $\langle x | \hat{t} | x' \rangle = \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \nabla' / 2m$  である。つまり、全エネルギー期待値  $E$  は密度行列  $\rho(x, x')$  の「汎関数」である：

$$E = E[\rho] \tag{39}$$

- この事実は、偶然ではない。生成消滅演算子で表現できる任意の多体ハミルトニアンと任意の Slater 行列型波動関数に対して、その期待値は密度汎関数となることが、一般的に証明できる。証明は「Wick 定理」に基づく。生成消滅演算子で表現された多体ハミルトニアン (式 (11)) の期待値は、Wick 定理により

$$E = \sum_{ij} t_{ij} \underbrace{\langle a_i^\dagger a_j \rangle}_{\rho_{ji}} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} v_{ijkl} \underbrace{\langle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \rangle}_{\text{Wick's theorem}} = \sum_{ij} t_{ij} \rho_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} v_{ijkl} (\rho_{ki} \rho_{lj} - \rho_{li} \rho_{kj}) \tag{40}$$

または

$$\begin{aligned}
 E &= \int dx dx' \langle x | \hat{t} | x' \rangle \underbrace{\langle \psi^\dagger(x) \psi(x') \rangle}_{\rho(x', x)} + \frac{1}{2} \int dx_1 dx_2 dx'_1 dx'_2 \langle x_1 x_2 | v | x'_1 x'_2 \rangle \underbrace{\langle \psi^\dagger(x_1) \psi^\dagger(x_2) \psi(x'_2) \psi(x'_1) \rangle}_{\text{Wick's theorem}} \\
 &= \int dx dx' \langle x | \hat{t} | x' \rangle \rho(x', x) + \frac{1}{2} \int dx_1 dx_2 dx'_1 dx'_2 \langle x_1 x_2 | v | x'_1 x'_2 \rangle (\rho(x'_1, x_1) \rho(x'_2, x_2) - \rho(x'_2, x_1) \rho(x'_1, x_2))
 \end{aligned} \tag{41}$$

となり、期待値  $\langle H \rangle$  はかならず密度行列で表される。ここで、生成消滅演算子 4 つの積演算子の期待値が、Wick 定理により、

$$\langle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \rangle = \langle a_i^\dagger a_k \rangle \langle a_j^\dagger a_l \rangle - \langle a_i^\dagger a_l \rangle \langle a_j^\dagger a_k \rangle = \rho_{ki} \rho_{lj} - \rho_{li} \rho_{kj}, \tag{42}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \psi^\dagger(x_1) \psi^\dagger(x_2) \psi(x'_2) \psi(x'_1) \rangle &= \langle \psi^\dagger(x_1) \psi(x'_1) \rangle \langle \psi^\dagger(x_2) \psi(x'_2) \rangle - \langle \psi^\dagger(x_1) \psi(x'_2) \rangle \langle \psi^\dagger(x_2) \psi(x'_1) \rangle \\
 &= \rho(x'_1, x_1) \rho(x'_2, x_2) - \rho(x'_2, x_1) \rho(x'_1, x_2)
 \end{aligned} \tag{43}$$

と密度行列であらわされることがポイントである。[証明終わり]

密度汎関数の汎関数微分による Hartree-Fock 方程式の導出:

### 1) Hartree-Fock ハミルトニアンの一般的定義

密度汎関数であることを利用すると、全エネルギー期待値の変分は次のように表すことができる

$$\delta E = \delta \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \int dx dx' \underbrace{\frac{\delta E}{\delta \rho(x', x)}}_{\langle x | h | x' \rangle} \delta \rho(x', x) \tag{44}$$

ここで、汎関数微分の導関数  $\delta E/\delta\rho(x',x)$  を、ある 1 体演算子  $h$  の行列要素とみなす。

$$\langle x|h|x'\rangle \equiv \frac{\delta E}{\delta\rho(x',x)} \quad (45)$$

この 1 体演算子こそ Hartree-Fock ハミルトニアンである。Hartree-Fock ハミルトニアンを生成消滅演算子を用いて表すと

$$\hat{h} = \int dx dx' \langle x|h|x'\rangle \psi^\dagger(x)\psi(x') \quad (46)$$

である。この定義から、Hartree-Fock ハミルトニアンが満たす次の重要な性質が導かれる。

$$\delta\langle\Psi|H|\Psi\rangle = \delta\langle\Psi|\hat{h}|\Psi\rangle = 0 \quad (47)$$

(証明は、 $\hat{h}$  の定義式 (44,45) と  $\delta\rho(x',x) = \delta\langle\Psi|\psi^\dagger(x)\psi(x')|\Psi\rangle$  から自明。) この関係は、変分空間の範囲内では、オリジナルの多体ハミルトニアン  $H$  を Hartree-Fock ハミルトニアン  $\hat{h}$  に置き換えてよい ということを示している。

全エネルギー期待値に対して変分条件をみたす Hartree-Fock 波動関数  $|\Psi\rangle$  は、Hartree-Fock ハミルトニアン  $\hat{h}$  に対しても変分条件を満たすことを示している。

- 式 (45) のチェック：汎関数微分  $\delta E/\delta\rho(x',x)$  の具体形を式 (41) から求めてみると、

$$\begin{aligned} \frac{\delta E}{\delta\rho(x',x)} &= \langle x|t|x'\rangle + \int dx_2 dx'_2 \langle xx_2|v|x'_2 x'_2\rangle \rho(x'_2, x_2) - \int dx_2 dx'_2 \langle xx_2|v|x'_2 x'\rangle \rho(x'_2, x_2) \\ &= \underbrace{\langle x|t|x'\rangle + \langle x|\Gamma_H|x'\rangle + \langle x|\Gamma_{ex}|x'\rangle}_{\langle x|h|x'\rangle} \end{aligned} \quad (48)$$

であり、式 (31,32,35) で定義した  $\langle x|h|x'\rangle$  に他ならないことがわかる。

## 2) Hartree-Fock 方程式の一般的導出

全エネルギー期待値の変分  $\delta E = \int dx dx' \langle x|h|x'\rangle \delta\rho(x',x)$  に、密度行列の変分

$$\delta\rho(x',x) = \delta \sum_i n_i \phi_i(x') \phi_i^*(x) = \sum_i n_i (\delta\phi_i^*(x) \phi_i(x') + c.c.) \quad (49)$$

を代入すると、拘束条件付変分条件 (28) は

$$0 = \delta E - \sum_i n_i e_i \delta\mathcal{N}_i = \sum_i n_i \int dx \delta\phi_i^*(x) \left( \int dx' \langle x|h|x'\rangle \phi_i(x') - e_i \phi_i(x) \right) + c.c. \quad (50)$$

となり、ここから直ちに、Hartree-Fock 方程式

$$\int dx' \langle x|h|x'\rangle \phi_i(x') = e_i \phi_i(x) \quad (51)$$

を得る。

以上のことは非常に重要な内容を意味している。つまり、密度汎関数  $E[\rho]$  さえ与えられていれば、変分原理が定義できるというのである。同時に、一粒子状態を定める平均場ハミルトニアンも導けるというのである。密度汎関数の具体的な形によらず、任意の形の密度汎関数に対しても適用できるということも意味している。密度汎関数  $E[\rho]$  はハミルトニアン期待値  $\langle H \rangle$  でなくてもよい。密度汎関数の方が、ハミルトニアンよりも普遍性があるといってもよい。

密度汎関数に基づく変分原理という立場は、Hohenberg-Kohn および Kohn-Sham に始まる原子分子、凝縮系などの電子多体問題に対する密度汎関数理論で積極的に活用された。密度汎関数理論では、「系の基底状態の密度を厳密

に再現する密度汎関数が存在すること」(Hohenberg-Kohn 定理)を前提に、上述の方法によって多粒子系の波動関数を構成する (Kohn-Sham 理論)。そこで用いる密度汎関数は、2 体相互作用の直接的な評価 (式 (18,19)) ではなく、高次相関を何らかの方法で取り入れたものを採用する。そうすることで、単なる Hartree-Fock 理論よりもはるかに高精度の一種の第一原理計算を実現するのである。

原子核構造の分野においても、密度汎関数理論との関連において Hartree-Fock 計算の発展させようという潮流が近年強く意識されている。強い斥力芯をもつ裸の核力に対して式 (18,19) を適用して Hartree-Fock 計算を行うことができない。そこで従来は、Bruecker 理論での G-matrix など有効核力を導き、その有効核力に基づいて Hartree-Fock を基礎付けるという考え方が採用されてきた。しかし、この考え方を実際の有限核に適用して定量的な成功をおさめたわけではなく、第一原理にもとづく (つまり裸の核力にもとづく) Hartree-Fock 計算ははまだ発展途上であるといえる。後述するように定量的な成功を収めているのは、現象論的な有効相互作用を用いた Hartree-Fock 計算である。近年は、従来とは異なるの立場、つまり密度汎関数理論の立場から原子核平均場理論を基礎付けようという試みが多くなされている。これは、核力に対する新しい模型 (Effective Field Theory など) の発展とも連動している。そのほか、VlowK や UCOM などの有効核力に関する新しいアプローチからの研究もある。

### 2.3 Skyrme Hartree-Fock 模型：現象論的有效核力

#### Skyrme 有効相互作用

$$\begin{aligned}
 v_{ph}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = & t_0(1 + x_0 P_\sigma) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \frac{t_3}{6}(1 + x_3 P_\sigma) \rho^\alpha \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\
 & + \frac{t_1}{2}(1 + x_1 P_\sigma) \left( \overleftarrow{k}^2 + \overrightarrow{k}^2 \right) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + t_2(1 + x_2 P_\sigma) \overleftarrow{\mathbf{k}} \cdot \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \overrightarrow{\mathbf{k}} \\
 & + iW_0 \boldsymbol{\sigma} \cdot \overleftarrow{\mathbf{k}} \times \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \overrightarrow{\mathbf{k}}
 \end{aligned} \tag{52}$$

$$\begin{aligned}
 \overrightarrow{\mathbf{k}} &= \frac{1}{2i}(\overrightarrow{\nabla}_1 - \overrightarrow{\nabla}_2) \\
 \overleftarrow{\mathbf{k}} &= -\frac{1}{2i}(\overrightarrow{\nabla}_1 - \overrightarrow{\nabla}_2)
 \end{aligned}$$