

厳密3体理論による量子力学的3体系束縛状態のエネルギーと波動関数(そのIV) : 中心力型、スピン軌道型、テンサー型、(LS)²型、運動量依存型ポテンシャル : 新登録プログラムライブラリの紹介

肥山, 詠美子
理化学研究所ミュオン科学研究室

上村, 正康
九州大学理学部物理教室

<https://doi.org/10.15017/1470357>

出版情報 : 九州大学大型計算機センター広報. 32 (4), pp.189-193, 1999-12. 九州大学大型計算機センター
バージョン :
権利関係 :

厳密3体理論による量子力学的3体系束縛状態のエネルギーと波動関数

(そのIV)：中心力型，スピン軌道型，テンサー型，
(LS)²型，運動量依存型ポテンシャル

～新登録プログラムライブラリの紹介～

肥山詠美子¹

上村正康²

1. 概要

原子核や原子・分子などにおける3体系束縛状態を非常に厳密に解く方法として、「ヤコビー座標系ガウス型基底関数による組み替えチャンネル結合変分法」[1,2]が、九州大学理学部原子核理論研究室によって提唱・開発され、多くの成果を上げてきた。用いる基底関数が物理的に優れているという特徴の他に、その関数形を利用して、大量の行列要素が、ベクトルプロセッサの利点を極限まで活かして計算されているという特徴がある。この計算法の利用希望が多いので、計算プログラムを、九州大学大型計算機センターの応用ライブラリープログラムとして、シリーズで公開している。即ち、

第1弾、「ミュオン分子」[3]

第2弾、「任意中心力ポテンシャル」[4]

第3弾、「中心力型，スピン軌道型およびテンサー型の任意関数形ポテンシャル」[5]

今回は、これらに追加して、さらに(LS)²型，運動量依存型ポテンシャルを含むものを登録する(Three-Body Systems 4, 略称TBS4)。

3体系束縛状態を解くために、波動関数を3体系のガウス型基底関数系によって展開する。この基底関数系によるハミルトニアン(運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの和)の行列要素とoverlap行列要素を計算し、一般固有値問題を解いて固有値(エネルギー)と固有ベクトル(展開係数)を求めるのが本プログラムの役割である。座標や物理量の定義は前回のコードTBS3と同じである。計算の道筋も含め、その解説[5]を見ていただきたい。

本計算法は応用が広く、各種の3体系に適用可能だが、いかなる3体系にも耐え得る汎用プログラムを目指すとは、余りにも煩雑となって能率的でなく、ミスも起こり易い。特殊な系に適用したい場合は、むしろ、利用者が、本ライブラリープログラムのソース(公開)を取り寄せて、各自の具体的な3体系に合わせて、自由に(主としてメイン)プログラムを書き換えて使用して構わない。本プログラムは、スピンをもつ3体系としては最も複雑な系といえる3核子系の例について作成してある。これを、他の系に変更することは容易である。相互作用も、最も複雑な(LS)²型，運動量依存型を含め通常使用する全ての型を採用している。それらを組み合わせた核子間相互作用として有名な“Paris potential”[6]，“Bonn A potential”[7]，“Bonn B potential”[7]，“Argonne potential”[8]の4通りを選択して使えるようにしてある。

2. 登録形式

- ・プログラム名：厳密3体理論による量子力学的3体系束縛状態のエネルギーと波動関数
(そのIV)：中心力型，スピン軌道型，テンサー型，(LS)²型，

¹ 理化学研究所 ミュオン科学研究室 hiyama@postman.riken.go.jp

² 九州大学理学部物理教室 kami2scp@mbox.nc.kyushu-u.ac.jp

運動量依存型ポテンシャル (略称 TBS4)

(英語名: Three-Body System's Energy and Wavefunction (IV):

Central, Spin-orbit, Tensor, $(LS)^2$ and Momentum-Dependent Potentials)

- プログラム形式: コンプリートプログラム
- 作成者: 肥山詠美子 (理化学研究所ミュオン科学研究室), 上村正康 (九州大学理学部)
- 作成年月日: 1999年10月
- 使用言語: Fortran
- ソースの公表: /usr/local/tbs/tbs4.f (UXP)
- 使用OS: UXP(VPP700/56)

3. 物理量の定義

スピンを持つ場合の3粒子の組み合わせは膨大であるので, 本プログラムでは, 汎用な形ではなく, 3粒子が3つともスピンを持つ最も複雑な3核子を例として作ってある. その他の組み合わせのときは, 本ソースプログラムを少し書き換えればよい.

3個の粒子に1, 2, 3という名前をつける. 3組の組替えヤコビー座標系の図は前回の解説 [5] の図と同じである (粒子1, 2, 3に関して cyclic になっている). 3粒子は全反対称になっている.

3体系のハミルトニアンは次式で与えられる.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_c} \nabla_{x_c}^2 - \frac{\hbar^2}{2M_c} \nabla_{y_c}^2 + V(x_1) + V(x_2) + V(x_3).$$

ポテンシャル $V(x)$ は, 一般に, 中心力, スピン軌道力, テンサー力, $(LS)^2$ 力, 運動量依存力の和からなる.

全系の波動関数は [2],

$$\Psi_{JMTT_z} = \Phi_{JMTT_z}(x_1, y_1) + \Phi_{JMTT_z}(x_2, y_2) + \Phi_{JMTT_z}(x_3, y_3),$$

と表現される. チャンネルの amplitude を

$$\Phi_{JMTT_z}(x_i, y_i) = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}(x_i, y_i) \mathcal{Y}_{\alpha}(jk, i),$$

$$\mathcal{Y}_{\alpha}(jk, i) = \left[[Y_{l_{\alpha}}(x_i) Y_{L_{\alpha}}(y_i)]_{\Lambda_{\alpha}} [\chi_{S_{\alpha}}(jk) \chi_{1/2}(i)]_{\Sigma_{\alpha}} \right]_{JM} [\eta_{t_{\alpha}}(jk) \eta_{1/2}(i)]_{TT_z}$$

と展開する. 動径波動関数は更にガウス型基底関数によって

$$\psi_{\alpha}(x_i, y_i) = \sum_{n_{\alpha}=1}^{n_{\alpha}^{\max}} \sum_{N_{\alpha}=1}^{N_{\alpha}^{\max}} A_{\alpha n_{\alpha} N_{\alpha}} \phi_{n_{\alpha} l_{\alpha}}(x_i) \psi_{N_{\alpha} L_{\alpha}}(y_i)$$

と展開する. 動径のガウス型関数は (添字 α を略して)

$$\phi_{nl}(x) = N_{nl} x^l \exp\left\{-\left(\frac{x}{\bar{x}_n}\right)^2\right\}$$

$$\psi_{NL}(R) = N_{NL} y^L \exp\left\{-\left(\frac{y}{\bar{y}_N}\right)^2\right\}$$

で与える. 係数 N は規格化定数, $\langle \phi_{nl} | \phi_{nl} \rangle = N_{nl}^{-2}$. ガウス関数の range は, 等比級数として

$$\bar{x}_n = \bar{x}_1 a^{n-1} \quad (n = 1 \sim n^{\max}),$$

$$\bar{y}_N = \bar{y}_1 A^{N-1} \quad (N = 1 \sim N^{max}).$$

で与える [1,2].

シュレーディンガー方程式

$$(H - E)\Psi_{JMTT_z} = 0$$

を、通常のように、レイリー・リッツの変分法で解き（大次元行列の一般固有値問題となる）、波動関数の未知係数 A_α と固有エネルギー E を決定する。

4. 入力データの意味

コンプリートプログラムであるので、利用者はジョブスクリプトファイルと入力データファイルを作り、バッチジョブとしてサブミットする。

角運動量 $l_\alpha, L_\alpha, \Lambda$ とスピン S_α, Σ_α を指定した組である $(l_\alpha, L_\alpha, \Lambda, S_\alpha, \Sigma_\alpha)$ を1つの“configuration”と呼ぶことにする。それぞれの configuration に対して、ガウス基底関数の項数 (n, N) と range の下限 (r_1, R_1) と上限 (r_n, R_N) を入力データとして与える必要がある。range の単位は fm である。

Fortran プログラムに用いられている入力用変数名の意味は次の通り。

PONAME	:	核力ポテンシャルの種類。文字型変数 (A5)。Paris, Bonn A, Bonn B, Argonne V14 potential をそれぞれ, PARIS BONNA BONNB AV14 という文字として (左詰めで A5 型) 打ち込む。
IENERG	:	エネルギーを求める固有状態の数, 下から数えて 100 以下
IVECT	:	下から IVECT 番目 (IVECT は IENERG 以下) の固有状態に対して, 波動関数ベクトルを出力し, かつ, S-波, P-波, D-波の確率を出力する。
NCONF	:	採用する configuration の数 (24 以下)
ICOUL	:	ICOUL=0 は triton 用, ICOUL=1 は helium-3 用。
IX(i)	:	configuration の通し番号 (1 から NCONF)。
LSM(i)	:	i -th configuration のガウス関数の l_α (2 以下)
LLG(i)	:	同じく L_α (2 以下)
LAMBDA(i)	:	同じく Λ_α
ISPIN(i)	:	同じく S_α
ISIG(i)	:	同じく Σ_α の 2 倍の数 (Σ_α は半奇数ゆえ)。
ISMAX(i)	:	同じく n (30 以下)
ILMAX(i)	:	同じく N (30 以下)
RSMIN(i)	:	同じく \bar{r}_1 (fm)
RSMAX(i)	:	同じく \bar{r}_n (fm)
RLMIN(i)	:	同じく \bar{R}_1 (fm)
RLMAX(i)	:	同じく \bar{R}_N (fm)

5. 入力データの並べ方

入力データの並べ方は次のように並べなければならない。

- 1 行目: PONAME (A5)
 2 行目: IENERG, IVECT (2I5)
 3 行目: NCONF, ICOUL (2I5)

研究開発

4 行目 : IX(1), LSM(1), LLG(1), LAMBDA(1), ISPIN(1), ISIG(1), ISMAX(1), RSMIN(1),
RSMAX(1), ILMAX(1), RLMIN(1), RLMAX(1) (6I5,2(I5,2F10.0))
5 行目 ~ (NCONF+3) 行目 : 以下同様のものが i=2 から i=NCONF について並ぶ

別のセットについて1回のジョブで連続的に計算する時は, 上記と同様のものを作り, 後ろに付ける.
何セットでもよい. セットの切れ目にブランク行が入ると次のセットは読まない.

6. 出力データ

固有エネルギーと波動関数ベクトルが主たる計算出力である. 固有エネルギーは3体の breakup threshold から計ってある.

出力データは次のように並ぶ.

- 1) PONAME の出力
- 2) IENERG, IVECT の出力
- 3) ICOUL, NCONF の出力
- 4) ICHAN(i), LSM(i), LLG(i), LAMBDA(I), ISPIN(i), ISIG(i), ISMAX(i), RSMIN(i), RSMAX(i),
ILMAX(i), RLMIN(i), RLMAX(i), i=1-NCONF の出力
- 5) 基底関数の総数 NOMAX と行列要素の総数 NAAMAX
- 6) 行列要素の計算時間 (秒)
- 7) エネルギー固有値 (下から IENERG 個)
- 8) 固有値問題を解くのに要した時間 (秒)
- 9) 波動関数の係数ベクトルの出力が次の順序で行われる (IVECT>0 のとき).

```
DO 1 K=1, IVECT  
WRITE K  
WRITE (VEC(NO,K), NO=1, NOMAX)  
1 CONTINUE
```

基底関数の1次元化通し番号 NO は次で定義されている.

```
NO=0  
DO 1 N=1, NCONF  
DO 1 IS=1, ISMAX(N)  
DO 1 IL=1, ILMAX(N)  
NO=NO+1  
1 CONTINUE  
NOMAX=NO ... (基底関数の総数)
```

- 10) S-, P-, D-波の確率

7. ジョブ制御文 (バッチリクエスト文) の作り方

本ライブラリプログラムはスーパーコンピュータ VPP700/56 で利用できる。このプログラムのオブジェクトファイルが tbs4.o という名前で登録されている。科学計算用ライブラリ SSLII を用いるのをリンクして実行ファイル (tbs4.x とする) を作る。かつ、これを実行するバッチリクエストファイル (例えば, tbs4.vp とする) を作成する。これらの利用者ファイルがあるディレクトリを mydir とすると, tbs4.vp の中身は次のようになる。

```
#
cd mydir
frt -Ob -Ps -Wv, -m3 -o tbs4.x tbs4.o -lssl2vp
tbs4.x < input.d > output.d
```

入力データは input.d に書き込む。出力データは output.d に書かれる。これを、例えば

```
kyu-vpp% qsub -q s tbs4.vp
```

とサブミットする。もちろん、公開されているソースファイルを取り寄せ、すべてを手元で行ってもよい。

8. 制限事項

本計算実行における制限事項は、上の「4. 入力データの意味」の欄で、述べてあるが、この他に、基底関数の総数 NOMAX は 3000 以下に制限されている。通常、3 体系の場合、3000 次元程度を超えることはないであろう。

本プログラムを使った計算で論文を発表する場合は、プログラム名、作成者名を明記すること。

【謝辞】

本プログラムは、筆者らが九大大型計算機センターのライブラリ開発計画として作成している一連のプログラムの一つであり、開発用計算費が同センターから援助されている。

【参考文献】

- [1] M. Kamimura, Phys. Rev. A38 (1988), 621.
- [2] H. Kameyama, M. Kamimura and Y. Fukushima, Phys. Rev. C40 (1989), 974.
- [3] 上村正康, 肥山詠美子, 木野康志, Jan Wallenius, 九州大学大型計算機センター広報, Vol.29, No.2 (1996), p.78.
- [4] 肥山詠美子, 上村正康, 木野康志, Jan Wallenius, 九州大学大型計算機センター広報, Vol.30, No.2 (1997), p.117.
- [5] 肥山詠美子, 上村正康, 木野康志, Jan Wallenius, 九州大学大型計算機センター広報, Vol.31, No.4 (1998), p.199.
- [6] M. Lacombe, et al., Phys. Rev. C21 (1980) 861.
- [7] R. Machleidt, Adv. Nucl. Phys. 19 (1989) 189.
- [8] R.B. Wiringa, R.A. Smith and T.L. Ainsworth, Phys. Rev. C29 (1984) 1207.