

厳密4体理論による量子力学的4体系束縛状態のエネルギーと波動関数(そのI) : 任意中心力ポテンシャル : 新登録プログラムライブラリの紹介

肥山, 詠美子
奈良女子大学理学部物理学教室

上村, 正康
理化学研究所 | 九州大学物理学教室

<https://doi.org/10.15017/1467663>

出版情報 : 九州大学情報基盤センター広報 : 全国共同利用版. 6 (2), pp.26-35, 2006-09. 九州大学情報基盤センター
バージョン :
権利関係 :

厳密 4 体理論による量子力学的 4 体系束縛状態のエネルギーと

波動関数 (その I): 任意中心力ポテンシャル

～ 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

九大の GEM 理論 物理学には、数値計算上「少数粒子系のシュレーディンガー方程式を厳密に解くこと」に帰着する課題が多い。これにより新しい物理的知見が得られる場合もある。この目的に役立つ強力な方法の 1 つとして、筆者等の九州大学原子核理論グループが提唱し発展させて来たガウス関数展開法 (Gaussian Expansion Method, GEM) がある [1,2]。この方法を「3 体系」に適用した計算コードを既に九州大学情報基盤センターの応用ライブラリとして 4 件登録してある [3-6]。今回は、「4 体系」に適用するコードを登録する。計 2 種類のコードを登録する予定である。本件は「その I」である。GEM の特徴や GEM を用いて得られた研究成果については、上記のレビュー論文 [2] の他に、「日本物理学会誌」2006 年 1 月号の「解説」にまとめてある [7]。

GEM は一種の変分法であるが、シュレーディンガー方程式を一般化行列固有値問題に変換して解く際に、ヤコビ座標系組み替えチャネルを全て動員して全系の基底関数を作成するところが新しい。この基底関数が張る空間が非常に広いので、「行列対角化で得た固有関数系が有限領域 (相互作用領域) で実質的に完全系になる、つまり、(常識的な) 任意関数を展開できる」という強力な利点を持つ。これにより、GEM は次の特徴を示す。通常の変分法では、最低エネルギー探索を「可能な限り少ない」個数の基底関数で行うための工夫を凝らす場合が多いが、GEM での価値観はそれとやや異なっている。計算速度が速いので (ガウス型の基底関数を用いたアルゴリズムが、ベクトル機に非常に適している [2])、むしろ、初めから基底関数の個数を (必要以上に) 十分多くして関数空間を広く取り、少ない探索努力で良い収束解を手にする事の方を選ぶ。さらに重要な利点は、十分多い基底関数を採用して、上記の実質的完全系を手にできるので、これにより、GEM を高い励起状態や散乱・反応過程に広げて行くことができることである [2,7]。

4 体系の GEM コード 本計算法は、量子力学的 4 体系の研究に大変有用であるが、応用できる範囲が広いので、著者グループだけでは使い切れない。そこで、計算コードを公開し、多方面で活用してもらって GEM を広めて頂きたく、応用ライブラリとして登録する次第である。

本コード「その I」(および予定の II) は、特に原子核・ハドロン物理学の理論的研究に使われることを想定している。この分野の研究では、汎用コードを使って入力データを入れ替えるだけというタイプの計算は少なく、多くの場合、独自の目的のためにソースプログラムの書き換えを必要とする。論文 1 つ書く毎に新しいプログラムを作ることも しばしば起こる。そこで、本コードで

¹ 奈良女子大学理学部物理学教室 hiyama@cc.nara-wu.ac.jp

² 理化学研究所/九州大学 kami2sep@mbox.nc.kyushu-u.ac.jp

は、その研究スタイルに合わせた作り方をしている。即ち、様々な利用ケース（粒子の組み合わせや相互作用の種類など）に対応できるような非常に汎用なコードを作るのは不可能に近く、ミスの可能性も出てくるので、本コードでは、「最も複雑そうな例をプログラムしておく。その他の場合は、ソースを公開するので利用者が自分で書き換えるように。ポイントはマニュアルに書いておく」というスタイルを取っている。例えば、中核となる粒子間ポテンシャルの形は任意であり（常識的な範囲で）、利用者が FUNCTION プログラムを書いて追加する仕組みにしてある。利用者は、この 4 体系計算を、九大 VPP5000 上でライブラリを利用して計算してもよいし、あるいは、ソースの中身を自分流に拡張して、独自の研究に使ってもよい。

2. 登録形式

- ・プログラム名：厳密 4 体理論による量子力学的 4 体系束縛状態のエネルギーと波動関数（その I）：任意中心力ポテンシャル（略称 FBS1）
（英語名：Four-Body System's Energy and Wavefunction (I): Any Central 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（奈良女子大学理学部物理学教室）
上村正康（理化学研究所/九州大学）
- ・作成年月日：2006 年 3 月
- ・使用言語：Fortran
- ・ソースの公表：
/usr/local/fbs/fbs1.f（Fortran ソース）
/usr/local/fbs/fbs1-pot.f（入力ポテンシャル Fortran ソース サンプル）
/usr/local/fbs/fbs1.d（入力データ サンプル）
/usr/local/fbs/fbs1.outlist（出力データ サンプル）
- ・使用 OS：UXP(VPP5000)

3. 物理量の定義

4 個の粒子に 1、2、3、4 という名前をつける。本プログラムではスピンを陽には考えない。全 18 組のヤコビ座標系を図 1 のように設定する。 c はチャンネル番号を表す。変分法の枠組みでは、粒子の対称性によっては、 $c = 16, 17, 18$ の基底関数は (r と R を入れ替えれば) $c = 13, 14, 15$ の基底関数と同じものになるので、不要となる場合もある（但し、必要な情報はプログラムされている）。

粒子の対称性について、つぎの 2 通りを考える。

- (a) 4 個の粒子とも別粒子。
- (b) 4 個の粒子とも同種粒子で空間部分が対称。

その他のケースは、(a),(b) を見習って、利用者がプログラムを僅かに変更すれば可能である。

4体系のハミルトニアンは次式で与えられる。以下、理論の詳細は、文献 [2] を参照されたい。

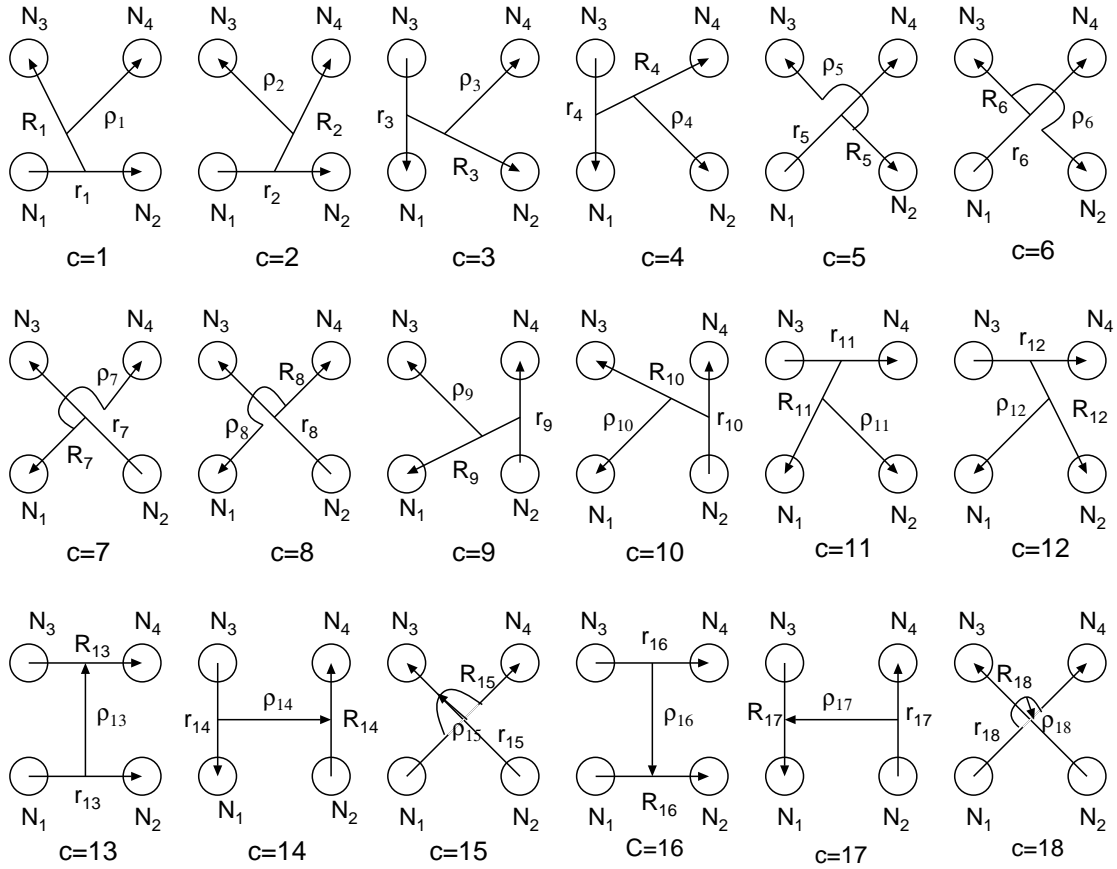


Figure 1: 4体系のヤコビ座標

$$\begin{aligned}
 H = & -\frac{\hbar^2}{2\mu_{r_c}} \nabla_{\mathbf{r}_c}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu_{R_c}} \nabla_{\mathbf{R}_c}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu_{\rho_c}} \nabla_{\boldsymbol{\rho}_c}^2 \\
 & + V_{12}(r_{12}) + V_{13}(r_{13}) + V_{14}(r_{14}) + V_{23}(r_{23}) + V_{24}(r_{24}) + V_{34}(r_{34})
 \end{aligned} \quad (1)$$

中心力ポテンシャル $V_{12}(r_{12}), V_{13}(r_{13}), V_{14}(r_{14}), V_{23}(r_{23}), V_{24}(r_{24}), V_{34}(r_{34})$ の関数形は、利用者がFUNCTIONプログラムで任意に設定する(後述)。クーロンポテンシャルもそれに含める(従って、粒子の電荷は入力データには打ち込まない)。

4体系の全波動関数を Ψ_{JM} とすると、シュレーディンガー方程式は

$$(H - E)\Psi_{JM} = 0 \quad (2)$$

となる。 Ψ_{JM} を全チャンネル成分の重ね合わせとして

$$\Psi_{JM} = \sum_{c=1}^{15} \Psi_{JM}^{(c)}(\mathbf{r}_c, \mathbf{R}_c, \boldsymbol{\rho}_c) \quad (3)$$

と書く。各チャネル成分 ($c = 1 \sim 15$) は、4体の基底関数 $\Phi_{\alpha_c, JM}^{(c)}(\mathbf{r}_c, \mathbf{R}_c, \boldsymbol{\rho}_c)$ の和として表す。

$$\Psi_{JM}^{(c)}(\mathbf{r}_c, \mathbf{R}_c, \boldsymbol{\rho}_c) = \sum_{\alpha_c} A_{\alpha_c}^{(c)} \Phi_{\alpha_c, JM}^{(c)}(\mathbf{r}_c, \mathbf{R}_c, \boldsymbol{\rho}_c). \quad (4)$$

4体の基底関数は、3つのヤコビ座標の基底関数の積で角運動量の固有状態を作って表す。

$$\Phi_{\alpha_c, JM}^{(c)}(\mathbf{r}_c, \mathbf{R}_c, \boldsymbol{\rho}_c) = \left[\left[\phi_{n_c l_c}^G(\mathbf{r}_c) \psi_{N_c L_c}^G(\mathbf{R}_c) \right]_{I_c} \chi_{\nu_c \lambda_c}^G(\boldsymbol{\rho}_c) \right]_{JM}. \quad (5)$$

ここで、左辺の代表記号 α_c は、

$$\alpha_c \equiv \{n_c l_c, N_c L_c, I_c, \nu_c \lambda_c\} \quad (6)$$

を表す。各座標に関する基底関数は、ガウス型基底関数であり、下のように定義する [2]。チャネル番号 c を省略する。

$$\phi_{nlm}^G(\mathbf{r}) = \phi_{nl}^G(r) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}), \quad \phi_{nl}^G(r) = N_{nl} r^l e^{-\nu_n r^2} \quad (n = 1 - n_{\max}), \quad (7)$$

$$\psi_{NLM}^G(\mathbf{R}) = \psi_{NL}^G(R) Y_{LM}(\hat{\mathbf{R}}), \quad \psi_{NL}^G(R) = N_{NL} R^L e^{-\lambda_N R^2} \quad (N = 1 - N_{\max}), \quad (8)$$

$$\chi_{\nu\lambda\mu}^G(\boldsymbol{\rho}) = \chi_{\nu\lambda}^G(\rho) Y_{\lambda\mu}(\hat{\boldsymbol{\rho}}), \quad \chi_{\nu\lambda}^G(\rho) = N_{\nu\lambda} \rho^\lambda e^{-\omega_\nu \rho^2} \quad (\nu = 1 - \nu_{\max}). \quad (9)$$

係数 N は、 $\langle \phi_{nl}^G | \phi_{nl}^G \rangle = N_{nl}^{-2}$ などの規格化定数。ガウスレンジパラメタは、次のように等比数列で定義する。

$$\nu_n = 1/r_n^2, \quad r_n = r_1 a^{n-1} \quad (n = 1 - n_{\max}), \quad (10)$$

$$\lambda_N = 1/R_N^2, \quad R_N = R_1 A^{N-1} \quad (N = 1 - N_{\max}), \quad (11)$$

$$\omega_\nu = 1/\rho_\nu^2, \quad \rho_\nu = \rho_1 \alpha^{\nu-1} \quad (\nu = 1 - \nu_{\max}). \quad (12)$$

実際の計算では、ガウス型基底関数は、次のような無限小変位ガウスローブ型基底関数によって計算する [2]。

$$\phi_{nlm}^G(\mathbf{r}) = N_{nl} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(\nu\varepsilon)^l} \sum_{k=1}^{k_{\max}} C_{lm,k} e^{-\nu_n(\mathbf{r} - \varepsilon \mathbf{D}_{lm,k})^2}, \quad (13)$$

$$\psi_{NLM}^G(\mathbf{R}) = N_{NL} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(\lambda\varepsilon)^L} \sum_{K=1}^{K_{\max}} C_{LM,K} e^{-\lambda_N(\mathbf{R} - \varepsilon \mathbf{D}_{LM,K})^2}, \quad (14)$$

$$\chi_{\nu\lambda\mu}^G(\boldsymbol{\rho}) = N_{\nu\lambda} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(\omega_\nu\varepsilon)^\lambda} \sum_{\kappa=1}^{\kappa_{\max}} C_{\lambda\mu,\kappa} e^{-\omega_\nu(\boldsymbol{\rho} - \varepsilon \mathbf{D}_{\lambda\mu,\kappa})^2}. \quad (15)$$

シュレーディンガー方程式 (2) を次のようにして解く。

- i) (4) 式の4体基底関数 $\Phi_{\alpha_c, JM}^{(c)}$ を用いて、ハミルトニアン行列要素 H_{α_c, α'_c} とノルム行列要素 N_{α_c, α'_c} を計算する:

$$H_{\alpha_c, \alpha'_c} = \langle \Phi_{\alpha_c, JM}^{(c)} | H | \Phi_{\alpha'_c, JM}^{(c)} \rangle, \quad (16)$$

$$N_{\alpha_c, \alpha'_c} = \langle \Phi_{\alpha_c, JM}^{(c)} | 1 | \Phi_{\alpha'_c, JM}^{(c)} \rangle. \quad (17)$$

ii) 次の一般化固有値問題を解いて、エネルギー固有値 E と波動関数の係数 $A_{\alpha_c}^{(c)}$ を求める:

$$\sum_{\alpha', c'} (H_{\alpha_c, \alpha'_{c'}} - E N_{\alpha_c, \alpha'_{c'}}) A_{\alpha'_{c'}}^{(c')} = 0. \quad (18)$$

全系の波動関数は、上記の4粒子の対称性 (a), (b) に対応して、

$$\Psi_{JM} = \sum_{c=1}^{18} \sum_{\alpha} A_{\alpha}^{(c)} \Phi_{\alpha}^{(c)}, \quad (a) \quad (19)$$

$$\Psi_{JM} = \sum_{\alpha_1} A_{\alpha_1} \left(\sum_{c=1}^{12} \Phi_{\alpha_1}^{(c)} \right) + \sum_{\alpha_2} B_{\alpha_2} \left(\sum_{c=13}^{18} \Phi_{\alpha_2}^{(c)} \right), \quad (b) \quad (20)$$

と表現される。ケース (b) では、同種粒子のため粒子間相対運動の角運動量 l_c は偶数である。

4. ポテンシャルの FUNCTION プログラムの作り方

中心力ポテンシャル $V_{12}(r_{12}), V_{13}(r_{13}), V_{14}(r_{14}), V_{23}(r_{23}), V_{24}(r_{24}), V_{34}(r_{34})$ の関数形は、利用者が任意に設定できる。ただし、そのための FUNCTION プログラム (倍精度) を自分で作成し、ライブラリプログラムに合体させる必要がある。プログラム本体の方で、この FUNCTION プログラムの名前を既に決めてあり、それを呼んでいるので、必ず次の6つの FUNCTION 名でなければならない。また、対称性から同じポテンシャルがあっても、6つとも FUNCTION を作らなければならない。

(1) $V_{12}(r_{12})$:

```
FUNCTION VPOT12(R)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
.....
RETURN
END
```

(2) $V_{13}(r_{13})$:

```
FUNCTION VPOT13(R)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
.....
RETURN
END
```

以下、VPOT34 まで同様である。

ポテンシャルに関わる行列要素の数値積分 (1次元) は、ガウス積分法 (24分点) を多区間に分けて高精度 (12桁程度) で行なわれている。座標原点から最も遠い分点は 60 fm にあり、クーロンポテンシャルに対しても十分である。分点の取り方を変更したい場合は、SUBROUTINE CEMAKE

を修正すればよい。行列要素の数値積分を高速度に行なうための工夫（一種の内挿法）については文献 [2] の Appendix で述べてある（ガウス型ポテンシャルのような解析積分可能なポテンシャルの場合に比べても精度・計算時間において遜色ない）。

5. 入力データの意味

コンプリート プログラムであるので、利用者はジョブコントロールファイルと入力データファイルを作り、さらに上記のポテンシャルを FUNCTION プログラムで作って追加し、バッチジョブとしてサブミットする。

全角運動量 J とパリティ (+, -) 毎にジョブを走らせる。チャンネル番号 c , 角運動量 l_c, L_c, I_c, λ_c を指定したワンセット ($c, l_c, L_c, I_c, \lambda_c$) 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 ($n_{\max}, N_{\max}, \lambda_{\max}$) と range の下限 (r_1, R_1, ρ_1) と上限 ($r_{n_{\max}}, R_{N_{\max}}, \rho_{\nu_{\max}}$) 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。プログラムに用いられている入力用変数名の意味、物理量との対応は次の通りである。

AM1,AM2,AM3,AM4 : 粒子 1、 2、 3、 4 の質量数

IEENERG : エネルギーを求める固有状態の数、下から数えて 200 以下

IVECT : 波動関数ベクトルを出力する固有状態の数 (IVECT は IEENERG 以下)

ISYM : 粒子の対称性。 (a): ISYM=1, (b): ISYM=2

J : 全角運動量 (4 以下)

NCONF : 採用する configuration の数 (24 以下)

IPARI: 状態のパリティ指定。 + パリティ : IPARI=1、 - パリティ : IPARI=-1.

ICHAN(i) : i-th configuration のチャンネル番号 $c = 1 - 18$ (対称性条件に留意)

LSM(i) : i-th configuration のガウス関数の l_c (4 以下)

LLG(i) : 同じく L_c (4 以下)

LOH(i) : 同じく λ_c (4 以下) [かつ、 $l_c + L_c + \lambda_c = 6$ 以下]

LAMBDA(i) : 同じく I_c

ISMAX(i) : 同じく n_{\max} (30 以下)

ILMAX(i) : 同じく N_{\max} (30 以下)

IOMAX(i) : 同じく ν_{\max} (30 以下)

RSMIN(i) : 同じく r_1 (fm)

RSMAX(i) : 同じく $r_{n_{\max}}$ (fm)

RLMIN(i) : 同じく R_1 (fm)

RLMAX(i) : 同じく $R_{N_{\max}}$ (fm)

ROMIN(i) : 同じく ρ_1 (fm)

ROMAX(i) : 同じく $\rho_{\nu_{\max}}$ (fm)

4 粒子の対称性が (b): ISYM=2 の場合は、チャンネル $c = 1$ と 13 の configuration についてのみ

入力し、その他については、プログラム内で対称的に処理しているので、不要であり入力しない（すればエラーとなって計算しない）。

6. 入力データの並べ方

入力データは次のように並べなければならない（9節に例を載せている）。
プログラム内では、すべて

READ(5,*) AM1,AM2,AM3,AM4

のように「FORMATなし」で読んでいるので、下の各行について、データをブランクで区切って並べればよい。

1行目：AM1, AM2, AM3, AM4

2行目：IENERG, IVECT, ISYM

3行目：NCONF, J, IPARI

4行目：ICHAN(1), LSM(1), LLG(1), LAMBDA(1), LOH(1),
ISMAX(1), RSMIN(1), RSMAX(1),
ILMAX(1), RLMIN(1), RLMAX(1),
IOMAX(1), ROMIN(1), ROMAX(1)

5行目～：以下、同様のものが、その他の configuration に対して並ぶ（4行目を含め、すべて順不同でよい）

別のセットについても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ってもよい。データが尽きるか、または、冒頭のAM1に負数が入っていたら終了する。

7. 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4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) AM1, AM2, AM3, AM4 の出力

2) IENERG, IVECT, ISYM の出力

3) NCONF, J, IPARI の出力

4) ICHAN(i), LSM(i), LLG(i), LAMBDA(i), LOH(i), ISMAX(i), RSMIN(i), RSMAX(i),
ILMAX(i), RLMIN(i), RLMAX(i), IOMAX(i), ROMIN(i), ROMAX(i),
i=1~NCONF の出力

5) 基底関数の総数 NOMAX と行列要素（下三角）の総数 NAAMAX

6) 行列要素の計算時間（秒）、行列対角化の計算時間（秒）

7) エネルギー固有値（下から IENERG 個）

8) IVECT > 0 の時、波動関数の係数ベクトルの出力。大量にあるので、ファイル (名前 fort.77) に出力する。次の形で行われる。

```
DO 1 IV=1,IVECT
WRITE(77,100) IV,E(IV),NOMAX
100 FORMAT(I5,1PD15.6,I5)
WRITE(77,200) (VEC (NO,IV),NO=1,NOMAX)
200 FORMAT(1H ,1P3D22.12)
1 CONTINUE
```

上記の基底関数の 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)
DO 1 IO=1,IOMAX(N)
NO=NO+1
1 CONTINUE
NOMAX=NO ... (基底関数の総数)
```

8. 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 UXP 上で利用できる。このプログラムのオブジェクト ファイルが fbs1.o という名前で登録されている。これと、利用者が用意するポテンシャルのプログラムが入ったファイル (例えば、fbs1-pot.f とする) とを合体させた実行ファイル (例えば、fbs1.x とする) を発生させ、かつ、これを実行するバッチリクエストファイル (例えば、fbs1.vp とする) を作成する。入力データのファイルを fbs1.d とする。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、fbs1.vp の中身は次のようになる。

```
#
cd mydir
frt -Ob -Ps -Wv, -m3 -o fbs1.x tbs1.o fbs1-pot.f -lssl2vp
fbs1.x < fbs1.d
```

上の -lssl2vp コマンドで、富士通 SSLII の DGSEG2、DLAX、DALU、DLUIV をリンクしている。この fbs1.vp を、例えば

```
kyu-cc% qsub -q s fbs1.vp
```

とサブミットする。実行段階のメモリは、1.2 GB である (10,000 次元の対角化に備えている)。

もちろん、公開されているソースファイルを取り寄せ、ポテンシャル用ファイルと合体させて、すべてを手元で行ってもよい。

9. 例題、計算時間

この方法は変分法であるので、基底関数（試行関数）のパラメタについて多数のセットで計算し、エネルギーの収束を見ることになる。したがって、1つのパラメタ・セットについて十分に高速である必要があるが、本計算法はその点について満足できるものである。

次の例題のテスト計算を掲げておく。

「 ${}^4\text{He}$ 原子核を4核子系として4体問題を解く。核子間に調和振動子ポテンシャル $V_{ij} = \frac{1}{4}m\omega^2 r_{ij}^2$

が働くとする。スピン、アイソスピンは考えず、空間対称の解を求める」

調和振動子ポテンシャルの場合、よく知られているように、4体系のシュレーディンガー方程式は、4体系の独立粒子殻模型（1体ポテンシャルは $V_i = \frac{1}{2}m\omega^2 x_i^2$ 、 x_i は座標原点からの各粒子の距離）のシュレーディンガー方程式と等価になる（重心運動は除去）。従って、エネルギー固有値は解析的に求まり、4粒子が空間対称（ISYM=2）で全角運動量 $J = 0$ の場合、縮退も入れて、下から ($\hbar\omega$) 単位で、

4.5, 6.5, 8.5 (3個縮退), 10.5 (6個縮退), 12.5 (11個縮退),

である。本コードでは、ポテンシャルの行列要素は、すべて数値積分に依っているので、調和振動子ポテンシャルの特殊性は使っていない。また、基底関数は調和振動子ポテンシャルの固有関数で構成されているわけではないので、本コードにより、上記の固有値がどの程度正確に求まるかは、非常にテストになる。

このテストに使った粒子間6個のポテンシャルのFUNCTIONプログラム、入力データ、出力データを2節（ソースの公表）の形で登録してある。入力データは、

```
938.904  938.904  938.904  938.904
30  0  2
 6  0  1
 1  0  0  0  0  12  0.3  15.0  10  0.5  12.0  10  0.6  10.0
13  0  0  0  0  12  0.3  15.0  12  0.2  13.0  10  0.6  10.0
 1  0  1  1  1  10  0.3  12.0  10  0.3  10.0  8  0.6  10.0
13  2  2  0  0  6  0.5  10.0  6  0.4  8.0  6  0.6  10.0
13  2  0  2  2  6  0.5  10.0  6  0.3  8.0  6  0.8  10.0
13  0  2  2  2  6  0.5  10.0  6  0.4  9.0  6  0.8  10.0
```

である。基底関数の数は4088個。ポテンシャルの強さは、 $\hbar\omega = 10$ MeV で与えているので、出力の固有エネルギーは、MeV単位で、上記の $\hbar\omega$ 単位の正解値(4.5, 6.5)の10倍の数値で求まるべきである。得られた出力(MeV単位)は、下から20個について、

4.500000d+01	6.500000d+01	8.500000d+01	8.500001d+01	8.500003d+01
1.050000d+02	1.050001d+02	1.050001d+02	1.050005d+02	1.050006d+02
1.050015d+02	1.250005d+02	1.250005d+02	1.250007d+02	1.250014d+02
1.250016d+02	1.250022d+02	1.250045d+02	1.250063d+02	1.250070d+02
1.250159d+02	1.250203d+02	1.450018d+02	1.450041d+02	1.450054d+02

である。前述の解析解と比べてみると、(通常は必要がない) 80MeV 励起の非常に高いエネルギー状態まで、縮退性を含め、高精度で求まっていると言える。計算時間は、行列要素計算に 233 秒、固有値解法(下から 30 個の固有値、固有ベクトル)に 66 秒である。実用的な計算では、入力データの上 2 行だけで十分である。

10. 制限事項

本計算実行における制限事項は、上の「5. 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 10000 以下に制限されている。

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、筆者らが九州大学情報基盤センターのライブラリ開発計画として作成しているプログラムの一つである。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] E. Hiyama, Y. Kino and M. Kamimura, Prog. Part. Nucl. Phys. **51** (2003) 223.
- [3] 肥山詠美子, 上村正康, 木野康志, J.Wallenius, 九州大学大型計算機センター広報 **29**(1996),78.
- [4] 肥山詠美子, 上村正康, 木野康志, 九州大学大型計算機センター 広報 **30** (1997) 117.
- [5] 肥山詠美子, 上村正康, 木野康志, 九州大学大型計算機センター 広報 **31** (1998) 199.
- [6] 肥山詠美子, 上村正康, 九州大学大型計算機センター 広報 **32** (1999) 189.
- [7] 肥山詠美子, 木野康志, 上村正康, 日本物理学会誌 Vol. 61, No.1 (2006) 27.
- [8] H. Kamada *et al.*, Phys. Rev. C **64** (2001) 044001.
- [9] E. Hiyama, B.F. Gibson and M. Kamimura, Phys. Rev. C **70** (2004) 031001(R).