

量子3体系・3体系精密計算コードのライブラリ開発 と応用研究：そのI：世界初の≡ハイパー核発見の 可能性の理論予測

肥山，詠美子
奈良女子大学理学部物理学科

<https://doi.org/10.15017/1467672>

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. 72-75, 2006-09. 九州大学情報基盤センター
バージョン：
権利関係：



肥山詠美子 (奈良女子大学 理学部物理学科)

九州大学原子核理論グループでは、1996 年以来、九州大学情報基盤センターのライブラリ開発の一環として、量子力学的 3 体系・4 体系の束縛状態のエネルギーと波動関数を精密に計算するコードを開発し登録して来た [1-5]。また、それらを利用し、発展させて、原子核、ハイパー核、クオーク系、エキゾチック原子分子など各種の応用研究を行って来た。

今回の無料キャンペーン期間には、新たな応用研究や準備的研究、VPP5000 と eServer-p5 との比較などを行った。それらの概要を、本稿 (I. 肥山) および引き続く 2 編 (II. 木野、III. 上村) の報告書で記す。

1. 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精密に解くこと」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、筆者を含む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 [6,7]。量子力学的な 3 体系・4 体系の精密計算方法として、計算精度、速度、適用範囲の広さ、使い易さにおいて、最も高い評価を受けている方法の 1 つである。

この方法を「3 体系」に適用した計算コードを既に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 [1-4]。また、「4 体系」に適用するコードを登録中である [5]。GEM の特徴や GEM を用いて得られた研究成果については、レビュー論文 [6] 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り、シュレーディンガー方程式

$$(H - E)\Psi_{JM} = 0 \quad (1)$$

を、one set の基底関数 (試行関数) を用いて、一般化行列固有値問題に変換して解く。この際に、ヤコビ座標系組み替えチャネル (3 体系の場合は Fig.1) 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 [6])、むしろ、初めから基底関数の個数を (必要以上に) 十分多く

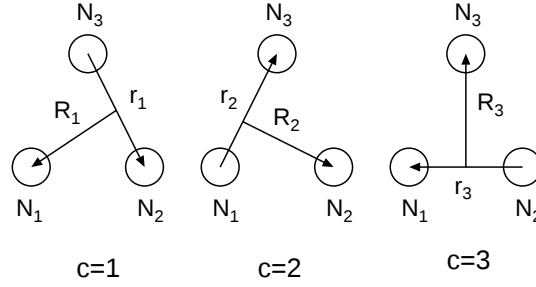


Figure 1: 3 体系のヤコビ座標.

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ものの方を選ぶ。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 [6,7]。

3 体系を例にとって GEM の大略を記すと（簡単のためスピン自由度を略す）

i) すべてのヤコビ座標系を用いる（Fig. 1）。全系の波動関数を、各チャンネル成分の和で表す。

$$\Psi_{JM} = \sum_{c=1}^3 \Phi_{JM}^{(c)}(\mathbf{r}_c, \mathbf{R}_c). \quad (2)$$

ii) 座標毎に基底関数系を導入し、その積の和の形に合成して、角運動量固有状態に組み、各チャンネルでの 3 体基底関数とする。

$$\left[\phi_{n_c l_c}^G(\mathbf{r}_c) \psi_{N_c L_c}^G(\mathbf{R}_c) \right]_{JM}.$$

l_c, L_c は座標 $\mathbf{r}_c, \mathbf{R}_c$ に関わる角運動量である。記号 $[l_c L_c]_{JM}$ は、角運動量 l_c と L_c を Clebsch-Gordan 係数を使って合成角運動量 JM に組むことを表す。

iii) これらを重ね合わせて (2) 式の各チャンネル成分を作る。重ね合わせ係数とエネルギー固有値はレイリー・リッツの変分法（一般化行列固有値問題）で解く。

$$\Phi_{JM}^{(c)}(\mathbf{r}_c, \mathbf{R}_c) = \sum_{n_c l_c, N_c L_c} A_{n_c l_c, N_c L_c}^{(c)} \left[\phi_{n_c l_c}^G(\mathbf{r}_c) \psi_{N_c L_c}^G(\mathbf{R}_c) \right]_{JM}.$$

iv) 各座標の基底関数をガウス型動径関数と球面調和関数の積で表す（チャンネル名 c を略す）。

$$\phi_{nlm}^G(\mathbf{r}) = \phi_{nl}^G(r) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}), \quad \phi_{nl}^G(r) = r^l e^{-\nu_n r^2}, \quad (3)$$

$$\psi_{NLM}^G(\mathbf{R}) = \psi_{NL}^G(R) Y_{LM}(\hat{\mathbf{R}}), \quad \psi_{NL}^G(R) = R^L e^{-\lambda_N R^2}. \quad (4)$$

v) ガウス関数のレンジパラメタを等比数列にとる。

$$\nu_n = 1/r_n^2, \quad r_n = r_1 a^{n-1} \quad (n = 1 - n_{\max}), \quad (5)$$

$$\lambda_N = 1/R_N^2, \quad R_N = R_1 A^{N-1} \quad (N = 1 - N_{\max}). \quad (6)$$

GEM を 4 体系に拡張することは、筆者等による無限小変位ガウスローブ型基底関数の導入によって、容易に遂行された [8]。

GEM の基底関数は、量子力学的 3 体系・4 体系を記述するために非常に有用であり（文献 [6,7] に詳述してある）、次のような望ましい特徴を備えている。

- a) 系の物理的状況をよく表現できる（短距離相関、長い tail、粒子の clustering など）
- b) 3 体系以上で座標変換が容易であり、式 (2) の積分が複雑な相互作用についてもできるだけ 解析的に行える。
- c) 基底関数間の非直交性が大きくない（行列対角化で ill-condition を起こさない）
- d) ハミルトニアンに対角化で得た固有関数系が有限領域（相互作用領域）で完全系になる、つまり、（常識的な）任意関数を展開できる。

2. 世界初の Ξ ハイパー核発見の可能性 — 4 体 GEM 計算による予言

無限小変位ガウスローブ関数を導入した GEM を最も活用したのは、肥山等によるハイパー核の 3 体・4 体構造の研究である（文献は [7] 参照）。ハイパー核とは、通常の原子核にハイペロン (Λ, Σ, Ξ など。 Y と総称) を付加した原子核である。核子 (N) とハイペロン (Y) の多体系の構造研究や YN 、 YY 相互作用の研究が盛んに行われている。これは、素粒子間相互作用の研究の中心テーマの 1 つであり、かつ、現在進行中の素粒子・原子核分野の「新加速器による J-PARC プロジェクト」の中心テーマの 1 つでもある。今後、J-PARC で行われるであろう多くの double Λ ハイパー核や Ξ ハイパー核の実験に対して、3 体・4 体 GEM 計算が結果の予言や解析で貢献することが期待されている。

そこで、筆者は、今回の無料キャンペーン期間に行う計算として、次のハイパー核 4 体計算を選んだ。即ち、J-PARC での最初のハイパー核実験と期待されている $^{12}\text{C}(K^-, K^+)$ 反応実験において、終状態に束縛状態が発見される（世界最初の Ξ ハイパー核の発見）可能性があるかどうかの予測計算を行った。そのためには、次の 4 体計算を行えばよい。標的核 ^{12}C 核は、3 つの α 粒子できていると、十分よく近似できる。1 つの α 粒子に K^- 中間子が当たると、 t (三重陽子) と Ξ^- ハイペロンができ、 K^+ 中間子が放出される。残留核の終状態はアイソスピン $T = 1$ となる。従って、Fig. 2 のような $\alpha + \alpha + t + \Xi^-$ という残留核 4 体系が $T = 1$ の束縛状態を持つかどうかを計算すればよい。

計算の基礎となる核子-核子間、核子- Ξ 間の粒子の間に働く相互作用には、ESC04d-potential、Ehime-potential と呼ばれる 2 種類の互いにかなり異質な potential を用いる。どちらを用いても束縛状態が導出されれば、理論予言の信頼性が増すと考える。

計算の詳細は省くが、4 体計算の結果は、束縛エネルギーが、 $^{11}\text{B} + \Xi$ の敷居値から見て、 -0.20 MeV (Ehime) と -1.66 MeV (ESC04d) となった。どちらの相互作用を使っても、最も低い分解敷居エネルギーよりも低い位置に固有状態（つまり束縛

状態)が存在することを示している。そこで、筆者は「 $^{12}C(K^-, K^+)$ 反応実験により、束縛状態として三ハイパー核が発見される可能性がある。大いに期待して実験を行うべし」と予言し、4月下旬に、実験家に伝えた。今後の経過が楽しみである。

謝辞

冒頭で述べた量子論的3体系・4体系の精密計算法の開発[1-6]とその応用研究[6,7]により、筆者は、第2回(18年度)文部科学大臣表彰 若手科学者賞および第21回(18年度)西宮湯川記念賞を受賞しました。九州大学情報基盤センターは、この開発を、2件計7年間に亘るプログラムライブラリ開発として採用して下さい、筆者らは多大な開発計算費と諸便宜を戴きました。ここに深く感謝申し上げます。

参考文献

- [1] 上村正康, 肥山詠美子, 木野康志, J. Wallenius, 九州大学大型計算センター 広報 **29**(1996) 78.
- [2] 肥山詠美子, 上村正康, 木野康志, 九州大学大型計算センター 広報 **30** (1997) 117.
- [3] 肥山詠美子, 上村正康, 木野康志, 九州大学大型計算センター 広報 **31** (1998) 199.
- [4] 肥山詠美子, 上村正康, 木野康志, 九州大学大型計算センター 広報 **32** (1999) 188.
- [5] 肥山詠美子, 上村正康, 九州大学情報基盤センター 広報 全国共同利用版 **6** (2006) No.1 (in press).
- [6] E. Hiyama, Y. Kino and M. Kamimura, Prog. Part. Nucl. Phys. **51** (2003) 223.(GEMのレビュー論文)
- [7] 肥山詠美子, 木野康志, 上村正康, 日本物理学会誌 **61** (2006) No.1, 29. (GEMの解説記事)