

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II) : 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
九州大学理学部物理教室

上村, 正康
九州大学理学部物理教室

木野, 康志
東北大学理学部化学教室

Wallenius, Jan
ウプサラ大学量子化学教室

<https://doi.org/10.15017/1470305>

出版情報 : 九州大学大型計算機センター広報. 30 (2), pp.117-123, 1997-06. 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II）：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

木野康志³

Jan Wallenius⁴

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、vector processor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。その計算法に基づくプログラムを、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、シリーズで開発・公開しているが（第1弾、ミューオン分子[3]）、今回、その第2弾として、「任意の形をした中心力ポテンシャル（スピン非依存）による3体系の汎用コード」（Three-Body Systems 2、略称TBS2）を登録する。スピンや運動量に依存するさらに一般的なポテンシャルについては、第3弾以後に登録する。

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。この基底関数系よるハミルトニアン（運動エネルギーと2体中心力ポテンシャルの和）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。運動エネルギーの行列要素は解析積分が可能であるが、ポテンシャルについては、調和振動子型、ガウス型、湯川型、クーロン型のときのみ可能である。本プログラムは、それ以外の一般的な形をしたポテンシャルの場合に使えるのがセールスポイントであり、適用範囲が非常に広がる。

この一般化のためには、2粒子間の動径座標（ポテンシャルの座標）についての1重の精密数値積分を超多数回行うプログラミングをする必要があり、これがネックの1つとなる可能性があった。しかし、本プログラムにおいては、ガウス型基底関数の特徴（サイズパラメタを変化させて関数系を作る）を生かした巧妙な内挿法を開発した結果、行列要素積分を高速・高精度に行うことが可能となった。解析積分の速度・精度とほとんど変わらないので、調和振動子型、ガウス型、湯川型、クーロン型の場合も本プログラムを利用して差し支えない。3体系の行列要素計算は、6重の積分より成り、多重積分を解析的に行うには（上記の場合、1重の数値積分が残る）、一般には複雑な角運動量代数計算が必要であって、ノート作りが非常に煩雑である。これを、筆者らが開発した Infinitesimally-shifted Gaussian-Lobe basis functions [4-6] を使って、ガウス型基底関数を表現することにより克服している。この表現方法は、ポテンシャルがスピンや運動量・角運動量に依存する複雑な場合（次回以後登録するプログラム）において一層威力を発揮する。

本プログラムは2つの部分より構成される。1つは、利用者が用意するポテンシャルの FUNCTION プログラムである。もう1つは、メインプログラムを含むその他のすべてのプログラムである（これが九大センターの UXP のライブラリープログラムとして用意される）。利用者は、これらを合体させ

¹九州大学理学部物理教室 emie2scp@mbox.nc.kyushu-u.ac.jp

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

³東北大学理学部化学教室 kino@mail.cc.tohoku.ac.jp

⁴ウプサラ大学量子化学教室 janne@neutron.kth.se

て計算を実行する。または、本ライブラリプログラムのフォートラン ソースを公開しているので、それを取り寄せ、ポテンシャルの FUNCTION プログラムと合体させて、全体を自分自身のコンプリート プログラムとして計算を実行する。

本プログラムでは、原子核の 3 体系を想定している。ポテンシャルの数値積分を原子核の単位系に適合させているからである。その他の、原子・分子などの中心力 3 体系の場合は、本プログラムのソースを取り寄せて、単位系と数値積分範囲の変更を行えばよい。

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 体系にも絶え得る汎用プログラムを目指す、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、本ライブラリプログラムのソースを取り寄せて、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。

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 I I）：任意中心力ポテンシャル（略称 TBS2）
（英語名： Three-Body System's Energy and Wavefunction (II): Any Central Potentials)
- ・プログラム形式：コンプリートプログラム
- ・作成者：上村正康，肥山詠美子（九州大学理学部）
木野康志（東北大学理学部）
Jan Wallenius（スウェーデン・ウプサラ大学）
- ・作成年月日：1997 年 3 月
- ・使用言語：Fortran
- ・ソースの公表：'QS.LIBSC(Y3TBS2)'(MSP), /usr/local/tbs/tbs2.f(UXP)
- ・使用 OS：UXP(VPP700/56)

3. 物理量の定義

3 個の粒子に 1、2、3 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。3 組のヤコビー座標系を図 1 のように設定する（粒子 1、2、3 に関して cyclic になっている）。粒子の対称性について、つぎの 3 通りを考える。

- (a) 3 個の粒子とも別粒子。
- (b) 2 個の粒子が同種粒子で空間部分が対称。この 2 個は必ず、粒子 1 と 2 に設定する。
- (c) 3 個の粒子とも同種粒子で空間部分が対称。

3 体系のハミルトニアンは次式で与えられる。

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_c} \nabla_{\mathbf{r}_c}^2 - \frac{\hbar^2}{2M_c} \nabla_{\mathbf{R}_c}^2 + V_1(r_1) + V_2(r_2) + V_3(r_3).$$

ポテンシャル $V_1(r_1), V_2(r_2), V_3(r_3)$ 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）。

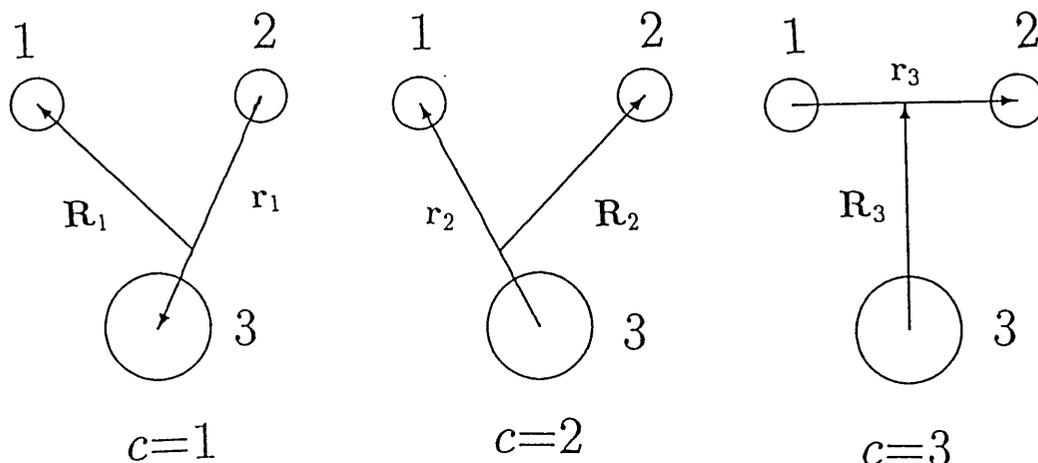


図1. 3体系のヤコビー座標

チャンネル c の3体ガウス型基底関数を

$$\Phi_{JM, \alpha_c}^{(c)} = \phi_{l_c i_c}^{(c)}(r_c) \chi_{L_c I_c}^{(c)}(R_c) [Y_{l_c}(\mathbf{r}_c) \otimes Y_{L_c}(\mathbf{R}_c)]_{JM}, \quad (\alpha_c \equiv JM, l_c L_c i_c I_c).$$

と定義する。動径のガウス型関数は（添字 c を略して）

$$\phi_{li}(r) = N_{li} r^l \exp\left\{-\left(\frac{r}{\bar{r}_i}\right)^2\right\},$$

$$\chi_{LI}(R) = N_{LI} R^L \exp\left\{-\left(\frac{R}{\bar{R}_I}\right)^2\right\}$$

係数 N は規格化定数、 $\langle \phi_{li} | \phi_{li} \rangle = N_{li}^{-2}$ 。ガウス関数の range は、等比級数として

$$\bar{r}_i = \bar{r}_1 a^{i-1} \quad (i = 1 \sim n),$$

$$\bar{R}_I = \bar{R}_1 A^{I-1} \quad (I = 1 \sim N).$$

で与える [1,2]。

全系の波動関数は、上記の粒子の対称性 (a), (b), (c) に対応して、

$$\Psi_{JM} = \sum_{\alpha_1} A_{\alpha_1}^{(1)} \Phi_{\alpha_1}^{(1)} + \sum_{\alpha_2} A_{\alpha_2}^{(2)} \Phi_{\alpha_2}^{(2)} + \sum_{\alpha_3} A_{\alpha_3}^{(3)} \Phi_{\alpha_3}^{(3)}, \quad (a)$$

$$\Psi_{JM} = \sum_{\alpha_1} A_{\alpha_1} (\Phi_{\alpha_1}^{(1)} + (-)^{l_1} \Phi_{\alpha_1}^{(2)}) + \sum_{\alpha_3} A_{\alpha_3} \Phi_{\alpha_3}^{(3)}, \quad (b)$$

$$\Psi_{JM} = \sum_{\alpha} A_{\alpha} (\Phi_{\alpha}^{(1)} + \Phi_{\alpha}^{(2)} + \Phi_{\alpha}^{(3)}), \quad (c)$$

と表現される。(b) 式の $(-)^{l_1}$ の phase は、ベクトル \mathbf{r}_1 と \mathbf{r}_2 の向きの違いを補正して粒子1と2の空間部分を対称にするために入れてある。対称化のため、(b) 式では、 α_3 の中の l_3 は偶数である。同じく、(c) 式では、 α の中の l は偶数である。

シュレーディンガー方程式

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

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。

なお、波動関数を他に利用するときは、座標系のベクトルの矢印の向きに注意。

4. ポテンシャルの FUNCTION プログラムの作り方

上記のポテンシャル $V_1(r_1), V_2(r_2), V_3(r_3)$ の関数系を利用者は任意に設定できる。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。ライブラリプログラム本体の方で、このプログラムの名前を EXTERNAL 文で既に宣言しているの、必ず次の 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、3つとも FUNCTION を作らなければならない。

```
(1) V1(r1):
      FUNCTION VPOT1(R)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      .....
      RETURN
      END
```

```
(2) V2(r2):
      FUNCTION VPOT2(R)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      .....
      RETURN
      END
```

```
(3) V3(r3):
      FUNCTION VPOT3(R)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      .....
      RETURN
      END
```

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、バッチジョブとしてサブミットする。

チャンネル番号 c , 角運動量 l_c と L_c を指定したワンセット (c, l_c, L_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, 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。

フォートラン プログラム（ソースを公表）に用いられている入力用変数名の意味は次のとおり。

AM1,AM2,AM3: 粒子 1, 2, 3 の質量数

IENERG: 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 IENERG 以下)

ISYM: 粒子の対称性。(a):ISYM=1, (b):ISYM=2, (c):ISYM=3

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 $c = 1, 2, 3$ (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)
 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)

3 粒子の対称性が (b):ISYM=2 の場合は、チャンネル $c=1,3$ の configuration についてのみ入力し、 $c=2$ については不要なので入力しない (すればエラーとなって計算しない)。

また、対称性が (c):ISYM=3 の場合は、 $c=1$ についてのみ入力し、 $c=2,3$ については不要なので入力しない (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

入力データの並べ方は次のように並べなければならない。

1 行目: AM1, AM2, AM3 (3F10.0)
 2 行目: IENERG, IVECT, ISYM (2I5)
 3 行目: NCONF, J, IPARI (3I5)
 4 行目: ICHAN(1), LSM(1), LLG(1), ISMAX(1), RSMIN(1), RSMAX(1),
 ILMAX(1), RLMIN(1), RLMAX(1) (I1,I4,I5,I10,2F10.0,I10,2F10.0)
 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。

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 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) AM1, AM2, AM3 の出力
- 2) IENERG, IVECT, ISYM の出力
- 3) NCONF, J, IPARI の出力
- 4) ICHAN(i), LSM(i), LLG(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)
```

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 kyu-cc(M-1800/20U) の /usr/local/tbs/tbs2.o という名前で登録されている。各自コピーし、利用されたい。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、pot.f とする) とを合体させた実行ファイル (例えば、tbs2.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、tbs2.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、tbs2.vp の中身は次のようになる。

```
#
cd mydir
frc -Ob -Ps -Wv, -m3 -o tbs2.x tbs2.o pot.f -lssl2vp
tbs.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-cc% qsub -q s tbs2.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、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) のパラメータについて、いくつかのセットで計算し、エネルギーの収束を見ることになる。したがって、1つのパラメータセットについて十分に高速である必要があるが、本計算法はそれを満足している。

利用者の参考になるよう、標準的な入力データ、ポテンシャルプログラムとして、原子核の3核子間に調和振動子ポテンシャルが働く場合のものを、本ソースプログラムの最終部に、コメント行の形で付けてある（左端のCの字を削除して全体を一字分左に寄せる）。テストケースとして使ってみるとよい。計算結果が、さらにその後コメント行として付けてある。解析積分可能な調和振動子ポテンシャルであることを意識せず、数値積分が行われている。

$J = 2$ 状態について (IENERG=20, IVECT=0, ISYM=3)、基底関数の総数 NOMAX=312 で、VPP を使い、パラメータの1セット当たり、行列要素計算に12秒、一般化固有値問題の解に0.7秒である。行列要素計算の大部分は、ポテンシャル数値積分内挿のための準備計算であるので、基底関数総数 NOMAX が増えても増加率は鈍い。一般化固有値問題の時間は NOMAX のほぼ3乗で増加する。

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3000以下に制限されている。通常、3体系中心力の場合、1000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る。開発用計算費が同センターから援助されている。また、Wallenius が使用した計算費は「大型計算機センターを利用する国際共同研究」より援助された [7]。共に、深く感謝いたします。

【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, p.78.
- [4] M. Kamimura, Y. Kino and E. Hiyama, Proceedings of the International Symposium on Frontiers of Nuclear Structure physics (World Scientific), Tokyo, 1994, p.166.
- [5] E. Hiyama and M. Kamimura, Nucl. Phys. A588 (1995) 35c.
- [6] E. Hiyama, M. kamimura, T. Motoba, T. Yamada and Y. Yamamoto, Phys. Rev. C53 (1996), 2075.
- [7] 高田健次郎、上村正康、九州大学大型計算機センター広報、Vol.30, No.1, p.48.