

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III) : 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 : 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

木野, 康志
東北大学理学部化学教室

Jan, Wallenius
スウェーデン中性子研究所

<https://doi.org/10.15017/1470338>

出版情報 : 九州大学大型計算機センター広報. 31 (4), pp.199-206, 1998-12. 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Ⅲ）：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

～ 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、ベクトル計算機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。即ち、

第1弾、「ミューオン分子」[3]

第2弾、「任意中心力ポテンシャル」[4]

これらは、スピンに依存しない相互作用系についてであった。今回は、第3弾として、スピン依存力を取り上げ、その典型例として、「スピン軌道型、テンサー型のスピン依存演算子を持ち、動径関数は（第2弾の時と同じように）、任意の関数形を許す2体ポテンシャル」を採用することができる計算コード「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」を登録する（Three-Body Systems 3、略称 TBS3）。

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2体力ポテンシャルの和）の行列要素とオーバーラップ行列要素を計算し、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、ポテンシャルの動径依存性については、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も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、前回の解説にも書いたように、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

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

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

⁴スウェーデン中性子研究所 janne@neutron.kth.se

ある。これを、筆者らが開発した Infinitesimally-shifted Gaussian-Lobe basis functions [5-8] 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、今回のように、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、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。本来、このライブラリプログラムのねらいは、相互作用の行列要素計算の内の、複雑な空間座標多重積分の部分を実行するサブルーチンを提供することであるが、しかし、3体系の基底関数の並べ方、行列要素の並べ方などが大変煩雑なので、もっとも複雑なケースのコンプリートプログラムの形にして提供している、と理解していただきたい。

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。行列要素のスピン部分は容易に計算できるので、その部分の結果 (factor) は、メインプログラムに明示的に書かれており、それを変更すればよい。

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 III) : 中心力型、スピン軌道型およびテンサー型の任意関数形2体ポテンシャル (略称 TBS3)
(英語名: Three-Body System's Energy and Wavefunction(III): Any Central, Spin-orbit and Tensor 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)、木野康志 (東北大学理学部)、J. Wallenius (スウェーデン・中性子研究所)
- ・作成年月日：1998 年 10 月
- ・使用言語：Fortran
- ・ソースの公表：/usr/local/tbs/tbs3.f および /usr/local/tbs/tbs3pot.f
- ・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（メイン）のスピン部分の行列要素係数を少し書き換えればよい（上述）。

3個の粒子に1、2、3という名前をつける。3組のヤコビ座標系を図1のように設定する（粒子1、2、3に関して周期的になっている、論文[2]とは、ベクトルの向きが逆）。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。

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_c} \nabla_{\mathbf{x}_c}^2 - \frac{\hbar^2}{2M_c} \nabla_{\mathbf{y}_c}^2 + V(x_1) + V(x_2) + V(x_3).$$

ポテンシャル $V(x)$ は、中心力、スピン軌道力、テンサー力の和からなる。定義は、

$$\text{中心力: } V_{00}(r)P_{00} + V_{01}(r)P_{01} + V_{10}(r)P_{10} + V_{11}(r)P_{11}.$$

$$\text{スピン軌道力: } V_0^{LS}(r)P_0(L \cdot S) + V_1^{LS}(r)P_1(L \cdot S)$$

$$\text{テンサー力: } V_0^{TEN}(r)P_0S_{12} + V_1^{TEN}(r)P_1S_{12}$$

ここで、 P_{TS} は、2核子間のアイソスピン T 、スピン S を射影する演算子である。また、 P_T は、2核子間のアイソスピン T を射影する演算子、 $(L \cdot S)$ 、 S_{12} は通常のスピン軌道演算子、テンサー演算子である。

ポテンシャルの動径関数は、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はプログラムに内蔵されており、3核子系の、 ^3H と ^3He の区別は入力データの ICOUL で行なう（後述）。

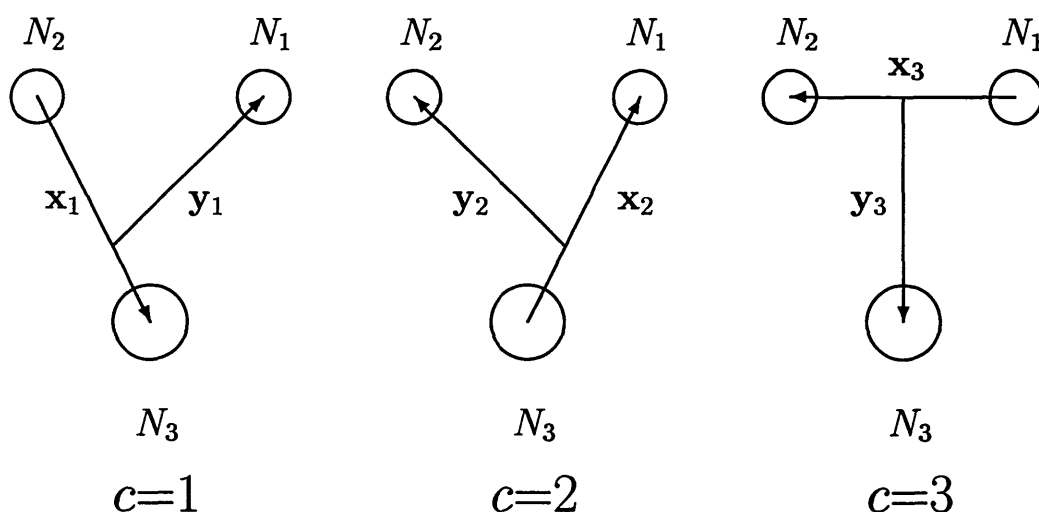


図1. 3体系のヤコビ座標

全系の波動関数は [2]、

$$\Psi_{JMTT_z} = \Phi_{JMTT_z}(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1) + \Phi_{JMTT_z}(\mathbf{x}_2, \mathbf{y}_2) + \Phi_{JMTT_z}(\mathbf{x}_3, \mathbf{y}_3),$$

と表現される。チャネルの amplitude を

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

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

と展開する。 χ はスピン関数、 η はアイソスピン関数である（論文 [2] とは、空間部分とスピン部分の組み方が逆になっている）。

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。

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の動径部分

中心力： $V_{00}(r), V_{01}(r), V_{10}(r), V_{11}(r)$ 、スピン軌道力： $V_0^{LS}(r), V_1^{LS}(r)$ 、テンサー力： $V_0^{TEN}(r), V_1^{TEN}(r)$ の具体的な関数形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 FUNCTION プログラムの名前を指定しているので、必ず次の FUNCTION 名でなければならない。

(1) 中心力 $V_{00}(r)$:

```

FUNCTION VCEN00(R)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
.....
RETURN
END

```

同様に、 $V01(r)$, $V10(r)$, $V11(r)$ については、FUNCTION 名は、それぞれ、VCEN01(R), VCEN10(R), VCEN11(R) である。

(2) スピン軌道力 $V_0^{LS}(r)$:

```

FUNCTION VLS0(R)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
.....
RETURN
END

```

同様に、 $V_1^{LS}(r)$ については、FUNCTION 名は、VLS1(R) である。

(3) テンサー力 $V_0^{TEN}(r)$:

```

FUNCTION VTEN0(R)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
.....
RETURN
END

```

同様に、 $V_1^{TEN}(r)$ については、FUNCTION 名は、VTEN1(R) である。

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。

角運動量 l_α , L_α , Λ とスピン S_α , Σ_α を指定したワンセット (l_α , L_α , Λ , S_α , Σ_α) 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通り。

IEENERG : 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 IEENERG 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
 ILMAX(i): 同じく N ($n*N$ が 225 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)

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 : IENERG, IVECT (2I5)
 2 行目 : NCONF, ICOUL (2I5)
 3 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))
 4 行目 ~ (NCONF+2) 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) IENERG, IVECT の出力
- 2) ICOUL, NCONF の出力
- 3) 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
- 4) 基底関数の総数 NOMAX と行列要素の総数 NAAMAX
- 5) 行列要素の計算時間 (秒)
- 6) エネルギー固有値 (下から IENERG 個)
- 7) 固有値問題を解くのに要した時間 (秒)
- 8) 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)
```

9) S-, P-, D- 波の確率

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 tbs3.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、pot.f とする）とを合体させた実行ファイル（例えば、tbs3.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、tbs3.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、tbs3.vp の中身は次のようになる。

```
#
cd mydir
frt -Ob -Ps -Wv, -m3 -o tbs3.x tbs3.o pot.f -lssl2vp
tbs3.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 tbs3.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、ポテンシャルプログラムとして、3核子間に いわゆる Argonne AV8 ポテンシャルが働く場合のものを、tbs3pot.f としてライブラリに登録してある。上記のバッチリクエストファイルで、pot.f の代わりに tbs3pot.f とすればこれを利用できる。入力データの例とそれを使って計算した時の出力が、tbs3pot.f の最後の所に、コメント行の形でつけてある（左端の C の字を削除して全体を 1 字分左に寄せる）。tbs3pot.f のソースプログラム

をライブラリから copy して、テスト計算してみるとよい。VPP を使った計算時間は、この例では、基底関数の総数 NOMAX=656 で、パラメターの 1 セット当たり、行列要素計算に 33 秒、一般化固有値問題の解に 3 秒である。実行ファイル tbs3.x のサイズは、164KB 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 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 [9]。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 (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] M. Kamimura, Y. Kino and E. Hiyama, Proceedings of the International Symposium on Frontiers of Nuclear Structure physics (World Scientific), Tokyo, 1994, p.166.
- [6] E. Hiyama and M. Kamimura, Nucl. Phys. A588 (1995) 35c.
- [7] E. Hiyama, M. Kamimura, T. Motoba, T. Yamada and Y. Yamamoto, Phys. Rev. C53 (1996), 2075.
- [8] E. Hiyama, M. Kamimura, T. Motoba, T. Yamada and Y. Yamamoto, Prog. Theor. Phys. 97 (1997), 881.
- [9] 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.