

企画セッション（核データ部会主催・「シグマ」調査専門委員会共催）
「三体核力研究と核データ応用への期待」

(3) 核子多体系の原子核構造の研究

東北大学
理学研究科
肥山 詠美子
hiyama@riken.jp

1. はじめに

近代物理学の興味ある課題の中には、少数粒子系（3体以上）のシュレ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。実際、「精密に」解くことによって、新しい知見を得たり、新しい予言や発見に至ることがしばしばある。従って、少数多体系のシュレディンガー方程式を、精密かつ広い適応範囲で解くことのできる計算方法を確立することが物理の理解を進展させる上で重要であるといえる。しかも、修士レベルの初学者でも理解できるような見通しのよい方法であることが望ましい。しかしながら、核子で構成される少数多体系である原子核では、そのような計算は非常に困難である。計算を困難にしている要因は、構成要素である陽子と中性子の質量がほぼ等しく、さらに、これらの粒子間の相互作用が強く複雑な核力による。

実際、4体問題を精密に解くことができる研究グループは、世界中でも10グループ程度しかなく、5体問題を解くことのできる研究グループはさらに少なくなる。

核子数が増えたときに計算が難しくなるもう一つの理由は、粒子の運動の取り得る組み合わせが粒子が増えるごとに複雑になる、ということにある。2体問題は、固く結合した状態と、緩く結合した状態の2通りしかなく、組み合わせは至ってシンプルである。粒子がもう一つ加わり3体問題となると、組み合わせの数がとたんに多くなる。3つの粒子全てが固く結合した場合と3つ全てが緩く結合した場合のほかに、2つの粒子が固く結合し、それに対して1つの粒子が緩く結合したという組み合わせが3通り存在し、それらも考慮して問題を取り扱う必要がある。さらにもう一つ粒子が加わった4体問題では、組み合わせが格段に複雑化する。全てが固く結合する場合と、全てが緩く結合する場合のほかに、2+2グループに分離した組み合わせが3通り、3+1と分離した組み合わせが4通りある。もう一つ粒子が加わった5体問題は・・・というように、粒子が増えるたびに、多体問題を解くことが複雑になっていく。

少数多体系計算のシュレディンガー方程式を精密に解く際には以下のことも要求されてくる。(1) 全系の物理的状況に適した基底関数を用いる、(2) エネルギー行列要素を求める多重

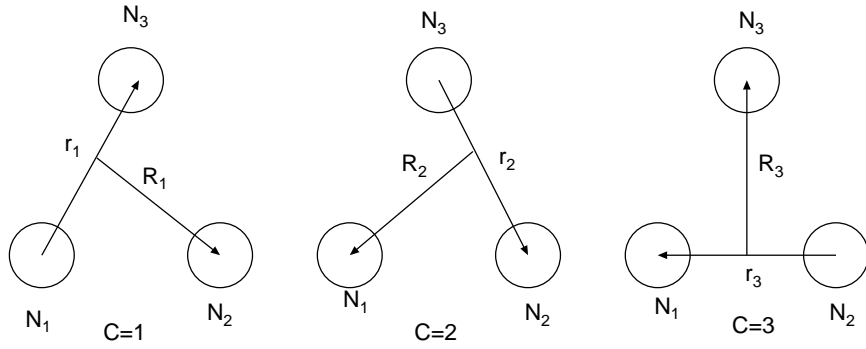


図1 3体問題のヤコビ座標

積分が容易に計算できる、(3)適用範囲が広い。このような条件を満たしつつ少数多体系問題を解くという課題は、1970年代から始まり、1980年後半からスーパーコンピュータの計算パワーの拡大に伴って急速に発展し、現在にいたるまでの30年間の原子核物理学において、重要な課題の一つとなっている。

この問題に挑むべく、筆者らを含む九大グループが提唱し、これまでに様々な分野に適用してきた計算法が、「無限小変位ガウス・ローブ基底関数を用いるガウス展開法」である。ここでは、「無限小変位ガウス・ローブ基底関数を用いるガウス展開法」について紹介する。

2. 無限小変位ガウス・ローブ基底関数を用いるガウス展開法

1980年代に九大グループでは、本編で紹介する計算法の前身となる「ガウス関数展開法」を提案した [1]。

図のようにヤコビ座標の可能な組み合わせ(各々をチャンネルと呼ぶことにする)をすべて考慮する。3体系の場合は3つのチャンネルを用意する。全系の波動関数について、今、スピン、アイソスピンについては考慮しないとすると、

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

のように、各チャンネルの成分和で書き表すことができる。さらに、座標ごとに基底関数系を導入し、その積の和の形に合成して、各チャンネル成分を角運動量固有状態に組み、以下のように書き表す。ここで $c = 1 \sim 3$ はチャンネルの数を表す。

$$\Phi_{JM}^{(c)}(\mathbf{r}_c, \mathbf{R}_c) = \sum_{n_c \ell_c, N_c L_c} A_{n_c \ell_c, N_c L_c}^{(c)} [\phi_{n_c \ell_c}^G(\mathbf{r}_c) \phi_{N_c L_c}^G(\mathbf{R}_c)]_{JM}. \quad (2)$$

ℓ_c, L_c は座標 $\mathbf{r}_c, \mathbf{R}_c$ に関わる角運動量である。以下のような $\mathbf{r}_c, \mathbf{R}_c$ ごとの基底関数を導入する。

$$\phi_{n \ell m}^G(\mathbf{r}) = \phi_{n \ell}^G(r) Y_{\ell m}(\hat{r}), \quad \phi_{n \ell}^G(r) = r^\ell e^{-\nu_n r^2}, \quad (3)$$

$$\phi_{N L M}^G(\mathbf{R}) = \phi_{N L}^G(R) Y_{L M}(\hat{R}), \quad \phi_{N L}^G(R) = r^L e^{-\lambda_N R^2}. \quad (4)$$

ここで、動径部分の基底関数として、式(3),(4)のようにガウス関数を導入する。さらに重要なポイントは、レンジパラメーターを以下のように等比級数にとることである。

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

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

ここで、3体系のハミルトニアンを

$$H = T + V^{(1)}(r_1) + V^{(2)}(r_2) + V^{(3)}(r_3) \quad (7)$$

で表す。ここで、 T は r と R の運動エネルギー、 $V(r)$ は各粒子間の相互作用とする。式(2)を使用して、ハミルトニアンの行列要素を計算し、一般化固有値問題を解くことによって、エネルギー固有値および、未知係数 $A_{n_c \ell_c, N_c L_c}^{(c)}$ を求める。このように、可能な限りのヤコビ座標の組み合わせを取り入れ、基底関数の動径部分をガウス型基底関数にとって変分計算を行う計算法をガウス関数展開法 (Gaussian Expansion Method) と呼ぶ。

この方法の利点は次の通りである。(1)3種類のヤコビ座標をとることによって、小さな角運動量の組み合わせ (ℓ, L) で、エネルギーが収束する。(おおよそ、 $\ell, L \leq 2$ で収束可能)。(2)短距離間相関、長い tail、粒子の clustering などの系の物理的状況をよく表現できる。(3)行列要素の手計算が比較的容易である。

この計算法を様々な3体問題へと適用し、成功をおさめてきた。

しかしながら、4体問題以上の研究を進めようとしたときに、球面調和関数の多重積分が急激に複雑になるという壁にぶつかった。例として、簡単のため、3体系において、2粒子間にガウス型の中心力が働く場合について考える。実際は、ブラとケットは $C = 1 \sim 3$ までであり、それぞれについて、2粒子間の相互作用の行列要素を計算する。わかりやすく説明するために、以下の行列要素を考える。図1について、粒子2と粒子3の間の相互作用を $v_0 e^{-\mu r_3^2}$ と仮定する。ブラ部分は $C=1$ でケット部分は $C=2$ チャンネルで行列要素を \mathbf{r}_3 と \mathbf{R}_3 で積分する。

$$\langle \Phi_{JM}^{(1)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_1) v_0 e^{-\mu r_3^2} \Phi_{JM}^{(2)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{R}_2) \rangle \quad (8)$$

ここで

$$\Phi_{JM}^{(1)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_1) = \sum_{n_1 \ell_1, N_1 L_1} A_{n_1 \ell_1, N_1 L_1}^{(1)} r_1^{\ell_1} e^{-\nu r_1^2} R_1^{L_1} e^{-\lambda R_1^2} [Y_{\ell_1}(\hat{\mathbf{r}}_1) Y_{L_1}(\hat{\mathbf{R}}_1)]_{JM} \quad (9)$$

$$\Phi_{JM}^{(2)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{R}_2) = \sum_{n_2 \ell_2, N_2 L_2} A_{n_2 \ell_2, N_2 L_2}^{(2)} r_2^{\ell_2} e^{-\nu r_2^2} R_2^{L_2} e^{-\lambda R_2^2} [Y_{\ell_2}(\hat{\mathbf{r}}_2) Y_{L_2}(\hat{\mathbf{R}}_2)]_{JM} \quad (10)$$

で表される。ここで、式(9),(10)を $\mathbf{r}_3, \mathbf{R}_3$ で積分するために、座標変換を行う。

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_1 &= \alpha_{13} \mathbf{r}_3 + \beta_{13} \mathbf{R}_3, & \mathbf{R}_1 &= \gamma_{13} \mathbf{r}_3 + \delta_{13} \mathbf{R}_3, \\ \mathbf{r}_2 &= \alpha_{23} \mathbf{r}_3 + \beta_{23} \mathbf{R}_3, & \mathbf{R}_2 &= \gamma_{23} \mathbf{r}_3 + \delta_{23} \mathbf{R}_3 \end{aligned} \quad (11)$$

式(9)と式(10)に式(11)を代入する。その際、例えば、 $C = 1$ チャンネルで $r^\ell Y_{\ell_1 m_1}(\hat{\mathbf{r}})$ は、

$$\begin{aligned} r_1^{\ell_1} Y_{\ell_1 m_1}(\hat{\mathbf{r}}_1) &= \sum_{\lambda=0}^{\ell_1} \left[\frac{4\pi(2\ell_1+1)!}{(2\lambda+1)!(2\ell_1-2\lambda+1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\quad (\alpha_{13} r_3)^\lambda (\beta_{13} R_3)^{\ell_1-\lambda} [Y_\lambda(\hat{\mathbf{r}}_3) \otimes Y_{\ell_1-\lambda}(\hat{\mathbf{R}}_3)]_{\ell_1 m_1} \end{aligned} \quad (12)$$

となり、 $r_1^\ell Y_{\ell_1 m_1}(\hat{r}_1)$ から r_3, R_3 の 2 個の球面調和関数が現れる。同様に、 $R_1^{L_1} Y_{L_1 M_1}(\hat{R}_1)$, $r_2^{\ell_2} Y_{\ell_2 m_2}(\hat{r}_2)$, $R_2^{L_2} Y_{L_2 M_2}(\hat{R}_2)$ からそれぞれ 2 個ずつ球面調和関数が現れ、合計で 8 個の球面調和関数が現れる。次に式 (9), (10) に代入すると、動径のガウス関数の部分は、

$$e^{-\nu r_1^2 - \lambda R_1^2} e^{-\nu' r_2^2 - \lambda' R_2^2} = e^{-ar_3^2 - bR_3^2} \times 4\pi \sum_k \mathcal{I}_k(cr_3 R_3) [Y_k(\hat{r}_3) \otimes Y_k(\hat{R}_3)]_{00} \quad (13)$$

と表される。ここで、 a, b, c は座標変換で表される係数である。 $\mathcal{I}_k(z)$ は変形ベッセル関数であり、 $\mathcal{I}_k(z) = (-i)^k j_k(iz)$ で表される。この動径ガウス関数からも 2 個の球面調和関数が現れ、総計で 10 個の球面調和関数が現れ、その角度積分を解析的に行う必要がある。この作業は、初心者が行うには大変面倒である。今、簡単な 3 体系の中心力の場合で説明したが、原子核の場合に取り扱う核力は、中心力のほかに、テンサー力やスピン軌道力など複雑な演算子を含む相互作用が存在する。その際の 3 体系行列要素を計算する場合は、10 数個以上の球面調和関数が現れる。4 体系の場合は、比較的行列要素の簡単な中心力の場合でも 24 個の球面調和関数が現れ、たとえ、少数多体計算法に熟練した研究者でもその 4 体系行列要素の計算は容易ではない。

このような難点を解決し、少数多体系計算を初めて行う初心者でも見通しよく行列要素積分計算を可能にしたのが、「無限小変位ガウスローブ基底関数」である。最大のネックとなっていた球面調和関数を使わないで、無限小変位ガウスローブ関数と呼ばれる次のような基底関数を提案する。

$$r^\ell e^{-\nu r^2} Y_\lambda(\hat{r}) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(\nu\epsilon)^\ell} \sum_{k=1}^{k_{\max}} C_{\ell m, k} e^{-\nu(\mathbf{r} - \epsilon \mathbf{D}_{\ell m, k})^2} \quad (14)$$

図 2 のように丸いガウス関数を多方向に瘤 (Lobe) のようにずらし、重ね合わせて角度依存性を表わす。ずれが無限小の時、式 (14) の左辺と右辺が一致する。ずれの定数 $C_{\ell m, k}, \mathbf{D}_{\ell m, k}; k = 1 \sim k_{\max}$ の決め方は一意的ではないが、簡単な一例として、 $\ell = 1, m = 0$ の場合を挙げる。 $\ell = 1, m = 0$ の場合、その基底関数は $e^{-\nu r^2} r Y_{10}(\hat{r})$ を x, y, z 座標で表すと、 $\sim z e^{-\nu r^2}$ である。これは、 z 軸方向に ϵ と $-\epsilon$ だけずらした 2 個のガウス関数で以下のように表すことができる。

$$z e^{-\nu r^2} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{4\epsilon\nu} e^{-\nu(x^2+y^2)} [e^{-\nu(z-\epsilon)^2} - e^{-\nu(z+\epsilon)^2}] \quad (15)$$

式 (15) の右辺をまとめて、ガウスの肩をテイラー展開をすると次のようになる。

$$\frac{1}{4\epsilon\nu} e^{-\nu(r^2+\epsilon^2)} [e^{2\nu\epsilon z} - e^{-2\nu\epsilon z}] = \frac{1}{4\epsilon\nu} e^{-\nu(r^2+\epsilon^2)} [4\epsilon\nu z + \frac{2}{3!} (2\epsilon\nu z)^3 + \dots] \quad (16)$$

ここで ϵ^3 以降の高次の項は、 $\ell = 3$ 以上の角運動量の混じりである。従って、この混じりをなくするために、 $\epsilon = 0$ の極限操作をする。その際に、 $\frac{1}{4\epsilon\nu}$ の係数のため ϵ^1 の項が抜き出され、結果的に $z e^{-\nu r^2}$ の項が残ることになる。ここで、 $C_{10, k} = \frac{(-1)^{k-1}}{8\nu} \sqrt{\frac{3}{\pi}}$ 、 $\mathbf{D}_{10, k} = (-1)^{k-1} \mathbf{e}_z$ であり、 \mathbf{e}_z は z 方向の単位ベクトル、 $k_{\max} = 2$ である。

一般の ℓ, m においては、

$$r^\ell Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \left[\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{4\pi(\ell+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} r^\ell P_\ell^m(\cos\theta) e^{im\phi}$$

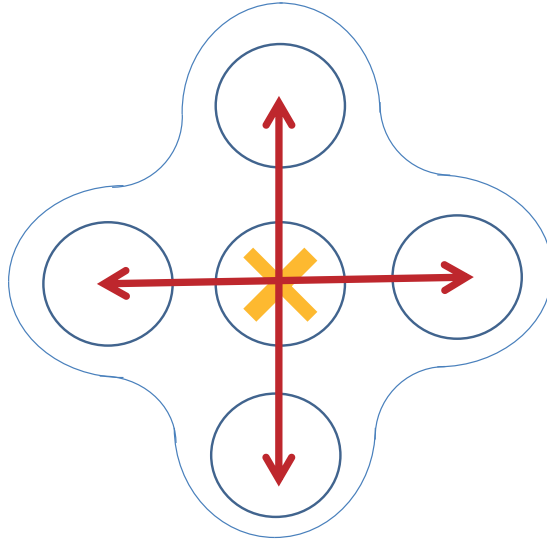


図 2 丸を 1 個のガウス関数と仮定し、いろいろな方向にずらす

$$\begin{aligned}
&= \left[\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{(l+m)!}{2^m} r^l (\sin\theta e^{i\phi})^m \sum_{j=0}^{\lfloor \frac{l-m}{2} \rfloor} \frac{(-)^j \cos^{l-m-2j}\theta \sin^{2j}\theta}{4^j j!(m+j)!(l-m-2j)!} \\
&= (x+iy)^m \sum_{j=0}^{\lfloor \frac{l-m}{2} \rfloor} A_{lm,j} z^{l-m-2j} (x^2+y^2)^j \\
&= \sum_{j=0}^{\lfloor \frac{l-m}{2} \rfloor} A_{lm,j} z^{l-m-2j} (x+iy)^{m+j} (x-iy)^j \tag{17}
\end{aligned}$$

と表すことができる。ここで、 $A_{lm,j}$ は、

$$A_{lm,j} = \left[\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{(l+m)!}{2^m} \frac{(-)^j}{4^j j!(m+j)!(l-m-2j)!} \tag{18}$$

である。任意の l と m についてのずれの定数 $C_{lm,k}, D_{lm,k}; k = 1 \sim k_{\max}$ の求め方は、論文 [2] の 295 ページを参照されたい。ただし、先ほども述べたが、このずれの定数は、一意的に決まるわけではない。

このような関数について、 ϵ が有限の場合が、「ガウスローブ基底関数」として量子化学の世界で 1960 年代に知られていたが、 ϵ を有限の値にすると、角運動量が混じるという問題が生じ、一方で、 ϵ を小さくすると数値計算上の桁落ちが起きるために、活用されることはなかった。我々のアプローチでは、この 2 つの難点を以下の方法で解決した。(i) ϵ が有限であっても、 $\sum_{k=1}^{k_{\max}} C_{lm,k}$ で $(\nu\epsilon)^l$ よりも低次の項は消える。(ii) $\epsilon \rightarrow 0$ の処理は、行列要素の積分を解析的に行った後で行う。

本計算法のおかげで、研究分野が一気に拡大し、これまでに少数核子系、ハイパー核や量子化学分野など、様々な分野へと適用できるようになった。

3. おわりに

このように「無限小変位ガウス・ローブガウス展開法」を精密3体問題、4体問題へと発展させてきた。世界では、精密有限多体系計算法を発展させていくことが大きな課題の一つである。このような気運の中で、ERATO「3体核力」を発足し、信頼できる核力と3体力を活用し、本計算法を10体問題まで確立することを目指す。「富岳」コンピュータを活用し、まずはボゾン系の5体問題以上を実現しており、さらに6体問題へと目指している。今後の研究発展を期待されたい。

参考文献

- [1] M. Kamimura, Phys. Rev. A **38**, 621 (1988).
- [2] E. Hiyama, Y. Kino and M. Kamimura, Prog. Part. Nucl. Phys. **51**, 223 (2003).