

課題名 (タイトル) :

原子・原子核の 3 体系の理論研究

利用者氏名 : 数納 広哉

所属 : 計算科学研究機構 連続系場の理論研究チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

量子力学的な 3 体問題は、原子物理学や原子核物理学における基礎的課題として過去数十年にわたり注目を集めている。ヘリウム原子を含む少数体系は弱いファンデルワールス力で結合し、マクロな超流動現象などのユニークな量子性を示すことから大きな関心を呼んでいる。本申請課題の目的は、ヘリウム原子を含む 3 体系の構造や反応機構を量子力学に基づいた数値計算により解明することである。本申請課題の目的は量子力学的な 3 体系を記述するシュレーディンガー方程式の数値的に解き、束縛状態および散乱状態などの物理量の計算を行い、エネルギー構造や反応機構を解析することである。本年度は、従来おこなってきたヘリウム原子の 3 体系 He-He-He に関する計算コードを拡張して、ヘリウム原子 (He) 2 個とリチウム原子 (Li) からなる 3 原子系 He-He-Li に関する計算コードの開発を行なった。He-He-Li 系のエネルギー構造や反応機構に関してはまだ解明が行なわれていないが、最近これに関する実験研究が行なわれるようになってきた。これに係る計算コード開発をアプリケーション演算サーバにて行った。

2. 具体的な利用内容、計算方法

原子 3 体問題を解くために超球座標を用いた理論手法を用いた。原子 3 体系は質量中心運動を除くと 6 つの座標で記述される。これら 6 つの座標として超球座標系を採用した。超球座標で記述されたシュレーディンガー方程式を基底関数を用いて展開すると、複素エルミート疎行列に関する一般化固有値問題に帰着する。ARPACK ライブラリおよび計算システムに用意されているインテル MKL ライブラリを用いてこの問題を解く数値計算コードの開発を行い、スレッド並列化機能の強化を行なった。

3. 結果

計算コードの開発は終了し、アプリケーション演算サーバにおけるテスト計算を行なってきた。妥当な計算結果が得られ、スレッド並列計算に関しても 12 コア程度で妥当な計算性能が得られた。

4. まとめ

本年度は計算コードの開発および高度化を中心に行なったためあまり計算資源を消費しなかった。計算コードの開発・高度化に関しては順調に進行した。

5. 今後の計画・展望

今後、開発・高度化した計算コードを用いてプロダクトランを行ない、論文発表等を行なう予定である。