

課題名 (タイトル) :

量子計算による原子少数多体系の研究

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

弱く結合した原子少数多体系は、ミクロスケールからバルクに至る物質の進化を理解するための助けとなることから、過去数十年にわたり注目を集めている。特に、ヘリウム原子を含む結合の弱い少数多体系は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持っている。本申請課題の目的は、ヘリウム原子を含む 3 体系、4 体系などの少数多体系を量子力学に基づいた数値計算を用いることより解明することである。本申請課題では、少数多体系を記述するシュレーディンガー方程式の数値解を求め、これらの束縛状態および散乱状態などの物理量の計算を行う。今年度は、純粋なヘリウム原子の 3 体系に加えて、ヘリウム原子 ${}^4\text{He}$ とトリチウム (三重水素) T 原子の混合 3 体系、さらにトリチウム原子の純粋 3 体系の束縛状態の計算を行った。これに係るプロダクトランを RICC にて行った。

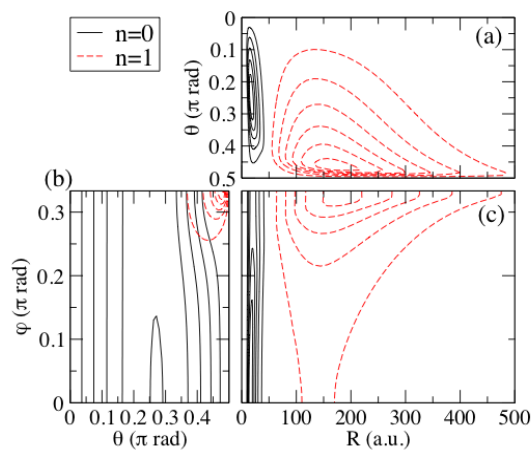
2. 具体的な利用内容、計算方法

原子 3 体問題を解くために断熱超球座標表示と呼ばれる手法を用いた。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 つの座標に超球座標系を導入した。この座標系では 3 体角運動量がゼロの場合には 3 つの座標で表される。これら 3 つの座標のそれぞれに基本スプライン関数を用いると、3 原子系のシュレーディンガー方程式は、実対称帯状行列の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 Lapack ライブラリを用いてこの問題を解き、束縛状態エネルギー準位および波動関数を得た。

3. 結果

${}^4\text{He}_3$ には 2 つ、 ${}^4\text{He}_2{}^3\text{He}$ 、 ${}^4\text{He}_2\text{T}$ 、 T_3 にはそれぞれ 1 つ束縛状態が存在することがわかった。 ${}^4\text{He}_3$ の束縛状態エネルギー準位は -9.287×10^{-2} 、 $-1.937 \times$

10^{-3}cm^{-1} 、 ${}^4\text{He}_2{}^3\text{He}$ 、 ${}^4\text{He}_2\text{T}$ 、 T_3 の束縛状態エネルギー準位はそれぞれ -1.197×10^{-3} 、 -2.299×10^{-3} 、 -3.267×10^{-3} であった。 HeT_2 には束縛状態が見つからなかった。また、 ${}^4\text{He}_3$ の励起状態はボーア半径の 500 倍にもわたる巨大な波動関数を示すことがわかった。下図に ${}^4\text{He}_3$ の基底状態 (黒線) および励起状態 (赤線) を示す。



4. まとめ

今年度はヘリウム原子およびトリチウム原子の純粋/混合 3 体系の束縛状態の計算を行った。得られた束縛状態のエネルギー準位は先行研究による結果と良い一致を見た。これにより本研究で用いている数値計算手法の妥当性が示された。

5. 今後の計画・展望

本研究で用いている数値計算法である断熱超球座標表示を、他の 3 体系に応用する計画である。ヘリウム原子とトリチウム原子の混合 3 原子系や、原子核分野でのアルファ粒子 3 体系がこれらの候補としてあげることができる。また以上の研究では束縛状態のみの計算を行ってきたが、散乱状態の計算にも応用する予定である。