

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

クーロンポテンシャルで相互作用する 3 粒子系はまだ完全には解けていないかつ理解されていない問題である。この問題を解く時の困難な点は 3 体連続状態の波動関数を正しく記述するところにある。3 体連続状態は原子核、原子、分子物理の分野で重要な役割を果たしている。この問題の代表例はアルファ粒子 3 体系として記述される炭素 12 原子核である。この系はホイル状態と呼ばれる 3 体連続状態 (正確には共鳴状態) を示し、宇宙物理学の分野で興味を集めている。本課題の本来の目的は原子少数系であるが、用いる理論計算手法は原子核少数系と同じものである。理論計算手法の発展のため今年度は原子核 3 体系であるアルファ粒子 3 体系に着目し研究をおこなった。この系の 3 体束縛状態や共鳴状態のエネルギー準位および共鳴幅を計算し、構造を調べた。

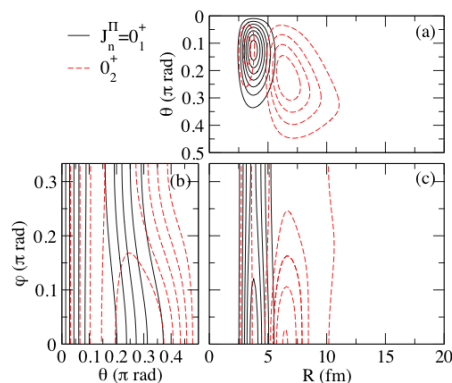
2. 具体的な利用内容、計算方法

3 体問題を解くために超球 SVD (Slow variable discretization) 法を用いた。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が、ここで Smith-Whitten 超球座標を使った。6 つの自由度についてウィグナー-D 関数、基本スプライン関数、FEM-DVR 基底を用いると、シュレーディンガー方程式は、帯状行列の一般化固有値問題に帰着する。連続状態を扱うために CAP (Complex Absorbing Potential) 法を用いた。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、束縛状態および共鳴状態のエネルギー準位、および波動関数を得た。2 体ポテンシャルには修正 Ali-Bodmer ポテンシャルを用い、3 体ポテンシャルをエネルギー準位を実験値と一致させるために用いた。

3. 結果

$J^\pi=0^+$ では束縛状態、共鳴状態をそれぞれ 1 つ、 $J^\pi=2^+$ では束縛状態を 1 つ得ることができた。0⁺の束縛状態と共鳴状態の波動関数は以下の図に示す通りである。

$J^\pi=2^+$ では束縛状態を 1 つ得ることができた。0⁺の束縛状態と共鳴状態の波動関数は以下の図に示す通りである。



4. まとめ

今年度は 3 アルファモデルで表される炭素 12 の束縛状態・共鳴状態の計算を行なった。得られたエネルギー準位は先行研究と良い一致を見た。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を、他の 3 体系に応用する計画である。ヘリウム原子とリチウム原子の混合 3 原子系を候補としてあげることができる。束縛状態、共鳴状態のみならず散乱過程断面積の計算にも応用する予定である。

6. 利用がなかった場合の理由

該当なし。