

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

原子少数系は、ミクروس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呼んでいる。本申請課題の目的は、このような原子または原子核の 3 体系の構造や反応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。今年度は、 ${}^4\text{He}-{}^4\text{He}-{}^4\text{He}$  や  ${}^4\text{He}-{}^4\text{He}-{}^3\text{He}$  などのヘリウム原子の 3 体系の幾何学構造を調べるために束縛状態の波動関数を用いて手元のパソコン上で分布関数を計算した。ここで用いた波動関数のデータは、平成 25 年度、26 年度にスパコンシステムを用いて計算されたものである。

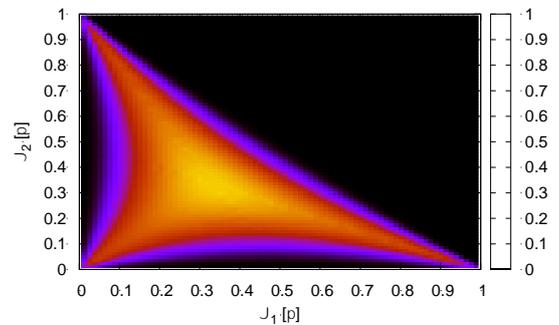
## 2. 具体的な利用内容、計算方法

粒子 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。この座標系では全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。問題を解いて得られた束縛状態の波動関数を利用して分布関数を計算した。

## 3. 結果

${}^4\text{He}-{}^4\text{He}-{}^4\text{He}$  には 2 つ、 ${}^4\text{He}-{}^4\text{He}-{}^3\text{He}$  には 1 つの束縛状態がある。得られた波動関数から分子のなす三角形の 2 つの頂角の関数として角度-角度分布関数を計算した。例として下図に  ${}^4\text{He}-{}^4\text{He}-{}^4\text{He}$  の基底状態の角度-角度分布関数を示す。この分布関数は 2 つの頂角が  $60^\circ$  となる時に最大値となるが、その他の角度でゆるやかに減少している。

これは  ${}^4\text{He}-{}^4\text{He}-{}^4\text{He}$  の基底状態は正三角形をなす確率が最も大きいものの、その他の形状をとる確率もそれに匹敵して大きくなる、すなわちランダムな三角形となることをしめしている。また、 ${}^4\text{He}-{}^4\text{He}-{}^4\text{He}$  の励起状態、 ${}^4\text{He}-{}^4\text{He}-{}^3\text{He}$  の唯一の束縛状態も同様の傾向がみられ、やはりランダムな三角形となるということがわかった。



## 4. まとめ

今年度はヘリウム原子および 3 体系の束縛状態の計算を行った。得られた分布関数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。

## 6. 利用がなかった場合の理由

波動関数のデータは平成 25 年度、平成 26 年度のスパコンの利用で得られたものであり、本年度は波動関数の計算が必要なかったためスパコンの利用がなかった。波動関数のデータからの分布関数の計算はパソコンで行なうことができるため。