

# 数値計算法最終レポート

1SC15016W 後藤輝一

2/1

## 1 目的

重陽子結合エネルギーを数値計算によって求める.

## 2 原理

- レイリー・リッツの変分法

定常状態のシュレーディンガー方程式

$$(H - E)\Phi = 0$$

の解をレイリー・リッツの変分法を用いて求める. $\Phi \rightarrow \Phi + \delta\Phi$  と変化させた時, 汎関数  $\epsilon[\Phi]$  が停留値となるような  $\Phi$  を求めれば良い.

波動関数の動径方向成分  $u_l$  は  $N$  個の独立な基底  $\phi_{jl}(l: \text{角運動量})$  を用いて

$$u_l(r) = \sum_{j=1}^N C_j^{(l)} \phi_{jl}(r)$$

と表すことができる. また単純な中心力ポテンシャルを考えた時, ハミルトニアンは

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r)$$

と書ける. この時, 汎関数は

$$\epsilon[u_l] = \frac{\langle u_l | H | u_l \rangle}{\langle u_l | u_l \rangle}$$

となる. これを  $C_j^{(l)}$  を変分パラメータとし, 変分すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial C_i^{(l)*}} \epsilon[u_l] &= \frac{\langle \phi_{il} | H | \sum_j C_j^{(l)} \phi_{jl} \rangle}{\sum_{ij} C_i^{(l)*} C_j^{(l)} \langle \phi_{il} | \phi_{jl} \rangle} - \frac{\sum_{ij} C_i^{(l)*} C_j^{(l)} \langle \phi_{il} | H | \phi_{jl} \rangle}{\sum_{ij} C_i^{(l)*} C_j^{(l)} \langle \phi_{il} | \phi_{jl} \rangle} \frac{\langle \phi_{il} | \sum_j C_j^{(l)} \phi_{jl} \rangle}{\sum_{ij} C_i^{(l)*} C_j^{(l)} \langle \phi_{il} | \phi_{jl} \rangle} \\ &= \frac{1}{\sum_{ij} C_i^{(l)*} C_j^{(l)} \langle \phi_{il} | \phi_{jl} \rangle} \left[ \langle \phi_{il} | H | \sum_j C_j^{(l)} \phi_{jl} \rangle - \frac{\sum_{ij} C_i^{(l)*} C_j^{(l)} \langle \phi_{il} | H | \phi_{jl} \rangle}{\sum_{ij} C_i^{(l)*} C_j^{(l)} \langle \phi_{il} | \phi_{jl} \rangle} \langle \phi_{il} | \sum_j C_j^{(l)} \phi_{jl} \rangle \right] \\ &= 0 \end{aligned}$$

より

$$\langle \phi_{il} | H | \sum_j C_j^{(l)} \phi_{jl} \rangle - E \langle \phi_{il} | \sum_j C_j^{(l)} \phi_{jl} \rangle = 0 \quad \left( E = \frac{\sum_{ij} C_i^{(l)*} C_j^{(l)} \langle \phi_{il} | H | \phi_{jl} \rangle}{\sum_{ij} C_i^{(l)*} C_j^{(l)} \langle \phi_{il} | \phi_{jl} \rangle} \right)$$

と書け, 一般の固有値問題として解くことができる.

$$\left[ \left( H_{ij}^{(l)} \right) - E \left( N_{ij}^{(l)} \right) \right] \left( C_j^{(l)} \right) = 0$$

それぞれの行列要素は

$$H_{ij}^{(l)} = \int_0^\infty \phi_{il}(r) H \phi_{jl}(r) dr, \quad N_{ij}^{(l)} = \int_0^\infty \phi_{il}(r) \phi_{jl}(r) dr,$$

と計算できる.

今回の数値計算では試行関数として, 次のような実レンジガウス型基底関数を用いる.

$$\phi_{jl} = N_{jl} r^{l+1} e^{-(\frac{r}{r_j})^2}$$

ここでレンジパラメータ  $r_j$  は

$$r_j = r_1 a^{j-1}$$

の等比数列の形で与える.

- 重陽子

重陽子は軌道角運動量  $L=0$  の S 波と  $L=2$  の D 波の混合状態となっている. またスピン角運動量は  $S=1$  である. したがって, 重陽子の波動関数を次のように書くことができる.

$$|\Phi\rangle = |\Phi_S\rangle + |\Phi_D\rangle = U(r) |^3S_1\rangle + W(r) |^3D_1\rangle$$

動径方向の波動関数を gauss 関数で展開すると,

$$\begin{aligned} U(r) &= \sum_n C_n^{(L=0)} r \exp[-b_n r^2] = \sum_n C_n^{(L=0)} g_{L=0,n} \\ W(r) &= \sum_n C_n^{(L=2)} r^3 \exp[-b_n r^2] = \sum_n C_n^{(L=2)} g_{L=2,n} \\ b_n &= \frac{1}{r_j}, r_j = r_1 a^{j-1} \end{aligned}$$

と書き表すことができる.// また, ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H &= T + V \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V_c(r) + V_T(r) S + V_{LS}(r) \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} \end{aligned}$$

と書ける. 第一項は運動エネルギー,  $\mu$  は換算質量, 第二項から第四項は核力ポテンシャルである. 第二項は中心力, 第三項はテンソル力, 第四項は LS 力によるポテンシャルである. テンソル力は全角運動量を保存した状態で軌道角運動量を混ぜる作用を持ち, この効果によって重陽子は束縛されている. 具体的な計算を行うと

$$\begin{aligned} \langle g_{L',i} | g_{L,j} \rangle &= N_{ij} = \begin{cases} \sqrt{\frac{\pi}{b_i + b_j}} \frac{1}{4} \frac{1}{b_i + b_j} & (L = L' = 0) \\ \sqrt{\frac{\pi}{b_i + b_j}} \frac{15}{16} \frac{1}{(b_i + b_j)^3} & (L = L' = 2) \end{cases} \\ \langle g_{L',i} | T | g_{L,j} \rangle &= T_{ij} = \begin{cases} \sqrt{\frac{\pi}{b_i + b_j}} \frac{-3}{2} \frac{b_i b_j}{(b_i + b_j)^2} & (L = L' = 0) \\ \sqrt{\frac{\pi}{b_i + b_j}} \frac{-105}{8} \frac{b_i b_j}{(b_i + b_j)^4} & (L = L' = 2) \end{cases} \end{aligned}$$

ポテンシャルの動径方向成分を gauss 関数で展開し,

$$V_X(r) = \sum_n V_{X,n} \exp[-a_{X,n} r^2]$$

$$\langle g_{L',i} | V_X | g_{L,j} \rangle = V_{X,ij} = \sum_n V_{X,n} \begin{cases} \sqrt{\frac{\pi}{b_i + b_j + a_{X,n}}} \frac{1}{4} \frac{1}{b_i + b_j + a_{X,n}} & (L = L' = 0) \\ \sqrt{\frac{\pi}{b_i + b_j + a_{X,n}}} \frac{3}{8} \frac{1}{(b_i + b_j + a_{X,n})^2} & (L = 0, L' = 2) \\ \sqrt{\frac{\pi}{b_i + b_j + a_{X,n}}} \frac{15}{16} \frac{1}{(b_i + b_j + a_{X,n})^3} & (L = L' = 2) \end{cases}$$

となる．角度方向についての計算を行うと次のようになる．

L'\L	0	2
0	$V_c$	$\sqrt{8}V_T$
2	$\sqrt{8}V_T$	$V_c - 2V_T - 3V_{LS}$

今回の数値計算では参考文献 2 の現象論的なポテンシャル (G3RS-1) を用いる．動径方向成分の各パラメータを次の表に示す．現象論的なポテンシャルであるので今回の計算では LS 力については計算を行わない．

	1	2	3
$V_{c,n}[MeV]$	-5	-230	2000
$a_{c,n}[fm]$	2.5	0.942	0.447

	1	2	3
$V_{T,n}[MeV]$	-7.5	-67.5	67.5
$a_{T,n}[fm]$	2.5	1.2	0.447

それぞれのポテンシャルを描くと次のようになる．

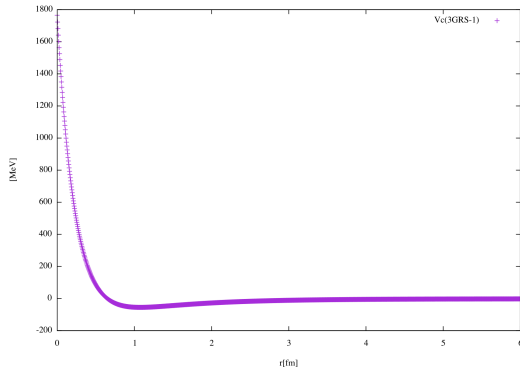


図 1  $V_c(3GRS-1)$

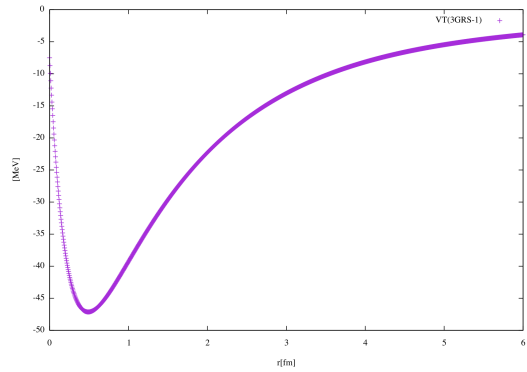


図 2  $V_T(3GRS-1)$

以上について計算を行うと

$$\begin{aligned} \left[ \left[ T_{ij}^{(0)} + V_{c_{ij}}^{(0)} \right] - E^{(0)} \left[ N_{ij}^{(0)} \right] \right] \left( C_j^{(0)} \right) + \left[ \sqrt{8} V_{T_{ij}}^{(02)} \right] \left( C_j^{(2)} \right) &= 0 \\ \left[ \left[ T_{ij}^{(2)} + V_{c_{ij}}^{(2)} - 2V_{T_{ij}}^{(2)} \right] - E^{(2)} \left[ N_{ij}^{(2)} \right] \right] \left( C_j^{(2)} \right) + \left[ \sqrt{8} V_{T_{ij}}^{(20)} \right] \left( C_j^{(0)} \right) &= 0 \end{aligned}$$

となる．テンソル力によって角運動量の異なる状態にそれぞれ遷移していることがわかる．

### 3 結果・解析

$b_{min} = 0.1[\text{fm}]$ ,  $b_{max} = 20[\text{fm}]$  の時の基底関数の数  $N$  についての束縛エネルギーの変化を次に示す.

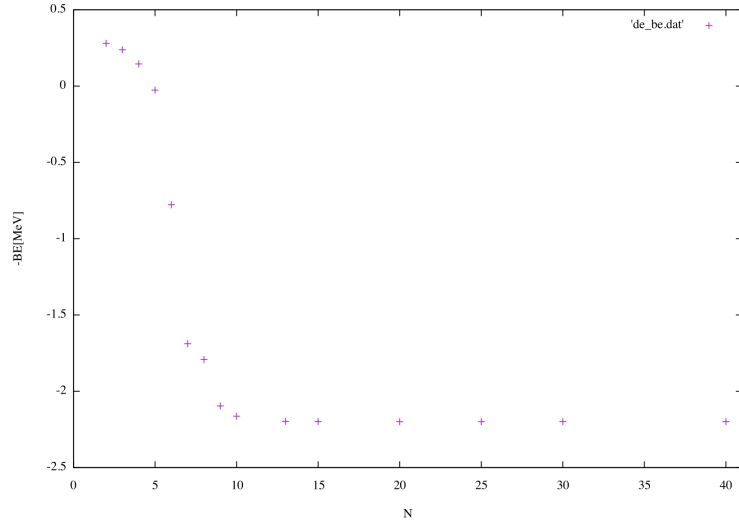


図3 基底関数の数  $N$  と結合エネルギーの関係

$N=40$  の時の  $S$  波,  $D$  波それぞれの波動関数を次に示す.

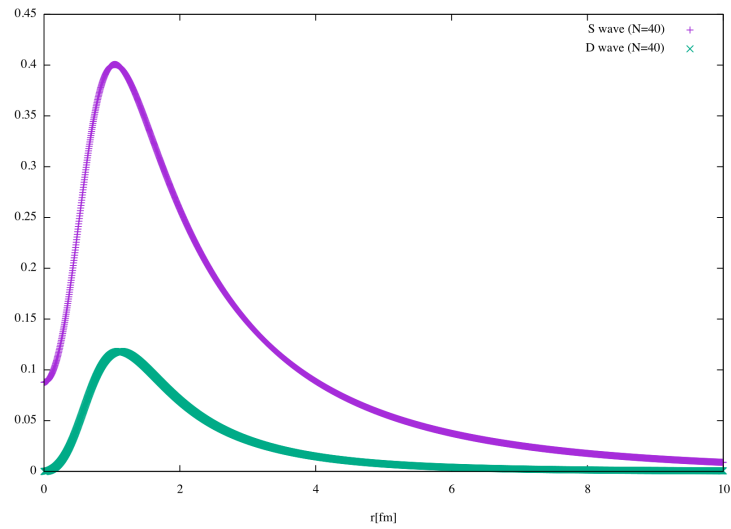


図4  $S, D$  波の波動関数 ( $N=40$ )

$S$  波,  $D$  波の比率  $r=10[\text{fm}]$  で十分収束していると考え,  $r=10[\text{fm}]$  までにおいて  $N=40$  の時の  $S, D$  波についての存在比を求めると,

$$\langle \Phi_S | \Phi_S \rangle / \langle \Phi | \Phi \rangle \equiv P_S = 93.493 \dots \%$$

$$\langle \Phi_D | \Phi_D \rangle / \langle \Phi | \Phi \rangle \equiv P_D = 6.5069 \dots \%$$

$N$  についての収束性は次のようになった.

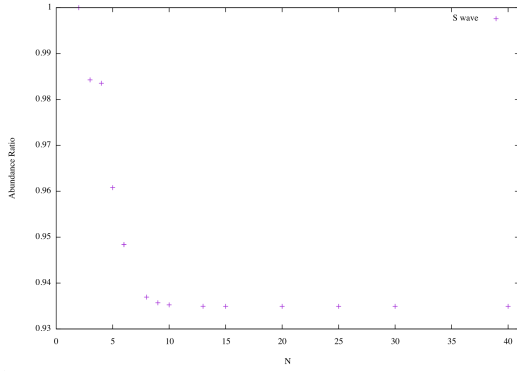


図5 S波の存在比

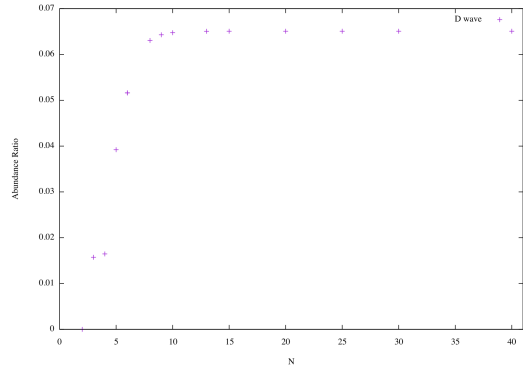


図6 D波の存在比

参考文献4より電磁四重極モーメントは次のように与えられる.

$$Q = \frac{1}{20} [2\sqrt{2} \int_0^\infty U(r)W(r)r^4 dr - \int_0^\infty W^2(r)r^4 dr]$$

したがって,Nについての収束性は次の図ようになった.

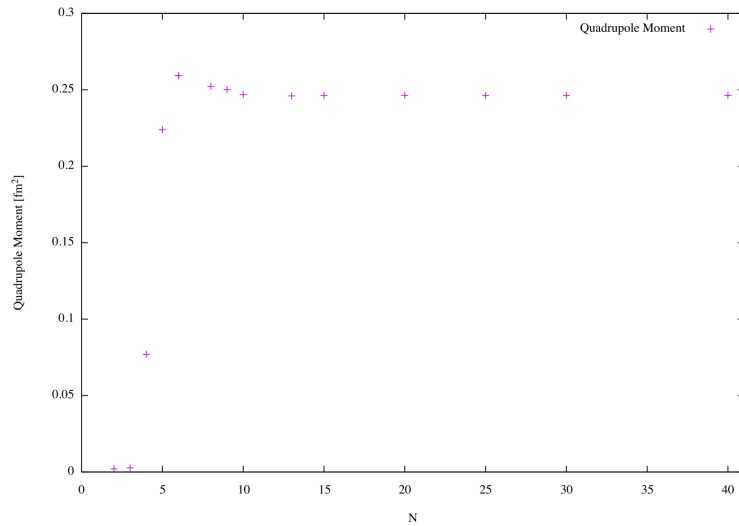


図7 四重極モーメント

また N=40 の時の四重極モーメントは

$$Q = 0.246344 \dots [fm^2]$$

となった.

## 4 考察

参考文献5より重陽子の物理量として, 次の値を得る.

表1 重陽子の物理量 (文献値)

結合エネルギー $E_{lv}$ [MeV]	2.225
電磁四重極モーメント $Q_{lv}$ [fm <sup>2</sup> ]	0.286

N=40 の時の数値計算の結果について, 次の表にまとめる.

表 2 重陽子の物理量 (計算値)

結合エネルギー E[MeV]	2.199
電磁四重極モーメント Q[fm <sup>2</sup> ]	0.246

文献値との間に 10 – 20% 程度の誤差が存在するが, 基底の数 N に対して十分収束しているため, 計算によるものではなく, 現象論的なポテンシャルや計算機による差異であると考えられる. 図 4 の波動関数については中心斥力の影響によって  $r = 0[\text{fm}]$  で 0 に近い値となっており,  $r$  の遠方で十分収束しているが, テンソル力の影響で急速な減衰ではなく比較的緩やかな減衰となっていることがわかる.

## 5 参考文献

1. A.Dote, 重陽子を数値的に解いてみる!, 2010, 高エネルギー加速器研究機構, [http://ruby2.scphys.kyoto-u.ac.jp/summer-school2010-nuclear-part/transparency/dote/Summer2010\\_Dote\\_part4.pdf](http://ruby2.scphys.kyoto-u.ac.jp/summer-school2010-nuclear-part/transparency/dote/Summer2010_Dote_part4.pdf)
2. R.Tamagaki, Potential Models of Nuclear Forces at Small Distances, Prog.Theor.Phys.39,91(1968)
3. 物理学ゼミナール講義資料
4. S.Nishimura, 重陽子原子核の四重極子モーメントの部分波解析, 2014.2.17, 九州工業大学, <http://www.mns.kyutech.ac.jp/kamada/10111035.pdf>
5. 原子核物理学講義資料