法政大学学術機関リポジトリ
HOSEI UNIVERSITY REPOSITORY

PDF issue: 2025-07-08

Faddeev-Separable-Expansion法によるクローン三体束縛状態

小池, 康朗 / KOIKE, Yasuro

(出版者 / Publisher)
法政大学計算科学研究センター
(雑誌名 / Journal or Publication Title)
Bulletin of Computational Science Research Center, Hosei University / 法政大学計算科学研究センター研究報告
(巻 / Volume)
11
(開始ページ / Start Page)
43
(終了ページ / End Page)
46
(発行年 / Year)
1998-03-31
(URL)
https://doi.org/10.15002/00024809

Faddeev-Separable-Expansion 法によるクーロン三体束縛状態

小池　康郎
法政大学第一教養部

クーロン束縛状態に対する新しい解法を提案する。ここでは、有限領域の相互作用のもとでスタンダードに用いられる、Faddeev 理論を用いる。クーロン力は長距離力であるため、Faddeev 理論はそのままでは用いられない。しかしここでは、束縛状態に限っては、三体方程式がたてられることを示す。また、有限領域の相互作用に対してスタンダードに用いられる、セパラブル展開法がこの場合にも同様に用いることが可能であることを示す。最後にモデル計算での収束例を数値的に示し、この方法が計算機物理学の重要な応用分野であることを示唆する。

1. はじめに

量子力学における三体問題は、それ自身で一つの研究分野をなし、多くの仕事がこれまで成されてきた。いくつかの特徴ある問題は、解決をつけるのがとても困難な問題として有名になっている。

その中で、いわゆるクーロン三体問題は、その対象となる三体系が、素粒子、原子核、原子、分子と広範囲にわたっており、応用の範囲が非常に大きいにもかかわらず、その一般的な解を得るのが極度に困難である問題として、多くのチャレンジを受けたにもかかわらず、いまだにこれといって一般的な解法があるわけではない。クーロン三体問題は、悪名高き困難な問題である。

クーロン三体問題とは、万有引力でもおなじみの、逆二乗力を位置エネルギーになおした形のポテンシャルエネルギーのもとでの、量子力学的三体問題をいう。ポテンシャルエネルギーは、位置を rとすれば、$1/r$の関数形を持つ。この相互作用のもとで、三体問題を考えるのが困難であるわけは、ポテンシャルが rについて、積分可能でないことに基本的には基づく。二体問題を一般的に解くための積分方程式が、構成できないのである。三体問題を一般的に解けるようにするためには、その部分系であるところの、二体系に対する方程式を一般的に解いておかなければならない。

ところで、$1/r$が積分不可能であると言っても、原点での問題と、無限遠点での問題がある。このうち困難を引き起こすのは、無限遠点での問題である。原点での $1/r$ の特異性からくる問題は、ずっと取り扱いやすい。そのため、クーロン力の問題は、遠距離ポテンシャルの問題といわれる。

束縛状態では、実は、遠距離の問題は、巧妙に方程式を立ててやれば、避けることができるはずである。なぜなら、束縛状態の波動関数は、無限遠方で零となってしまうからである。たとえポテンシャルが、rの大きいところで零とならずまだ残っているとしても、波動関数が零となれば、ポテンシャルの大きさはもはや関係がなくなり、ポテンシャル自身をそこで零とおいてもよく、結局は、困難さの伴わない、短距離力の問題と置き換えることができる。このことから、クーロン三体束縛状態について、一般的に取り扱える処方箋を作ることが、本研究の目的である。次の節で、三体束縛状態に対する方程式を導く。その次の節では、ある簡単な系について、実際に数値的に解が収束することを、例証する。

2. クーロン三体束縛状態に対する方程式

三体クーロン問題を一般的に考える。相互作用は、対のものだけだとする。すなわちポテンシャルは、

$$V = \sum_{i=1}^{3} V_i \tag{1}$$

ただし、式 (1) で添え字 i は、相互作用していない粒子の番号を表す。すなわち $V_1 = V_{23}$ 等である。ハミルトニアンはしたがって、

$$H = H_0 + V = H_0 + \sum_{i=1}^{3} V_i \tag{2}$$

である。ただし、ここで、H_0は運動エネルギーを表すハミルトニアンである。ポテンシャルは、クーロン力であるとするので、

$$V_1(r_{23}) = \frac{e_2 e_3}{r_{23}} \tag{3}$$

等となる。ただし r_{23}は、粒子 2 と粒子 3 の間の距離、e_2 と e_3はそれぞれ粒子 2 粒子 3 の電荷である。簡単のために、$r_{23} = r_1$等と略して書く。

さて、ここで、クーロン力に、弱いスクリーンをかけて、有限領域の相互作用とする。すなわち

$$V_i^{[R_i]} \equiv V_i e^{-r_i/R_i} \tag{4}$$

R_iは十分大きな値をとるカットオフパラメータであり、一般に i によって値が異なって良い。もちろん $V_i = V_i^{[\infty]}$ である。このスクリーンのかかったポテンシャルを用い

てハミルトニアン

$$H^{[R]} = H_0 + \sum_{i=1}^{3} V_i^{[R_i]} \tag{5}$$

のもとでの、束縛状態の方程式を最初に考える。この場合、相互作用は危険のない有限領域のものであるから、スタンダードな Faddeev 理論を直ちに用いることができる。以下にその概略をたどろう。式 (5) で表される、ハミルトニアンのもとで Schrödinger 方程式は

$$E|\Psi^{[R]}> = H^{[R]}|\Psi^{[R]}> \tag{6}$$

あるいは

$$(E - H_0)|\Psi^{[R]}> = \sum_{i=1}^{3} V_i^{[R_i]}|\Psi^{[R]}> \tag{7}$$

と書ける。グリーン関数を

$$G_0(E) \equiv \frac{1}{E - H_0} \tag{8}$$

によって定義する。すると式 (7) は、

$$|\Psi^{[R]}> = G_0 \sum_{i=1}^{3} V_i^{[R_i]}|\Psi^{[R]}> \tag{9}$$

ここで、部分波動関数

$$|\Psi_i^{[R_i]}> \equiv G_0 V_i^{[R_i]}|\Psi^{[R]}> \tag{10}$$

を定義してやると

$$|\Psi^{[R]}> = \sum_{i=1}^{3} |\Psi_i^{[R_i]}> \tag{11}$$

であり、部分波動関数は

$$|\Psi_i^{[R_i]}> = \sum_{j=1}^{3} (1 - \delta_{ij}) G_0 T_i^{[R_i]}(E)|\Psi_j^{[R_j]}> \tag{12}$$

を満たす。式 (12) が、束縛状態に対する、Faddeev 方程式であり、方程式に対するインプットは二体 t 行列と呼ばれ、次の Lippmann-Schwinger 方程式を解いて与えられる。

$$T_i^{[R_i]}(E) = V_i^{[R_i]} + V_i^{[R_i]} G_0(E) T_i^{[R_i]}(E) \tag{13}$$

すなわち、三体束縛状態を解くには、まず式 (13) によって、二体散乱方程式を解いておき、式 (12) によって、三体部分波動関数を求める。この段階で、固有値として束縛エネルギーが求まる。最後に式 (11) によって、全波動関数が求まるというのが、Faddeev 流の解き方である。

さて、スクリーニングのパラメータ R_i を無限大に持っていったら、何が起こるであろうか。物理的にはこの極限移行で、束縛状態では何も起こらないはずである。すなわち、束縛状態波動関数は自然に減衰するテールを持っているはずであるが、このテールを表すパラメータに比べて、R_i がすべて十分大きければ、実質的に、波動関数はスクリーニングを感じないはずである。したがって極限移行はスムースに行われる。

ところが、式 (11) から式 (13) に到る Faddeev 理論はこのままでは使えない。一番の問題は実は二体方程式 (13) にある。良く知られていることであるが、Lippmann-Scwinger の散乱理論は、クーロンのような無限領域のポテンシャルでは、そのままでは使用できないのである。もちろん、三体系の散乱にたいしても Faddeev 理論はそのままでは使えない。二体ではクーロンに対しては、どの量子力学の教科書を開いても書いてあるとおり、解析的な解法が存在するので、Lippmann-Schwinger 方程式を使わずに済むが、三体散乱ではそうはいかない。これが、三体クーロン問題の難しさのもとである。

ところで、束縛状態では、物理的に極限移行をしても、何の違いも起こらないはずであることを、指摘しておいた。それは、束縛状態波動関数の有限性のためであった。そのことを利用した理論を構築できないものだろうか。

実はヒントは式 (11) から式 (13) までにある。三体方程式は式 (12) である。そこでは、二体 t 行列には部分波動関数がかかっており、無限遠方ではその積自身はゼロになることが保証されている。そこで式 (13) で裸の二体 t 行列を求めるのではなく、式 (13) 自身を変形し、t 行列と部分波動関数の積に対する方程式にしてみよう。これは簡単にできる。すなわち

$$\begin{aligned} & T_i^{[R_i]}(E)|\Psi_j^{[R_j]}> \\ = \; & V_i^{[R_i]}|\Psi_j^{[R_j]}> \\ & + V_i^{[R_i]} G_0(E) T_i^{[R_i]}(E)|\Psi_j^{[R_j]}> \end{aligned} \tag{14}$$

式 (12) と (15) が、我々のアプローチの基本方程式である。そこでは、二体方程式を先に解いておき、三体方程式に代入するのではなく、二体方程式は、与えられた三体方程式の条件の下でのみ（この場合は束縛状態という条件であるが、更に詳しくは、束縛エネルギーも条件に入っている）意味を持つ。

さて、そうすれば、我々は極限操作をすることができる。式 (12) は

$$|\Psi_i> = \sum_{j=1}^{3} (1 - \delta_{ij}) G_0 T_i(E)|\Psi_j> \tag{15}$$

また式 (15) は

$$\begin{aligned} T_i(E)|\Psi_j> \; = \; & V_i|\Psi_j> \\ & + V_i G_0(E) T_i(E)|\Psi_j> \end{aligned} \tag{16}$$

3. セパラブル展開法

まだ我々の方程式は解きやすいとは言い難い。解きやすくするために、核力を取り扱うときによく使われるセパラブル展開法を用いる。これは基本的に Lippmann-Schwinger 方程式を解くのに用いられる方法であるが、我々はこれを式 (17) を解くために用いる。

出発点となる式は Adhikari-Sloan の関係式である。すなわち二体ポテンシャルVが与えられたとき、二体ヒルベルト空間内で、任意の基底関数$|B_i>, i=1,2,\ldots,N$を考えると

$$V|B_i>=V^{[N]}|B_i> \tag{17}$$

ただし

$$V^{[N]}=\sum_{i,j=1}^{N} V|B_i>\lambda_{ij}<B_j|V \tag{18}$$

ここに

$$\sum_{k=1}^{N}\lambda_{ik}<B_k|V|B_j>=\delta_{ij} \tag{19}$$

式 (18) の形で与えられるポテンシャルを rank$N$のセパラブルポテンシャルという。

セパラブルポテンシャルに対しては、Lippmann-Schwinger 方程式の形式解が求められ

$$T^{[N]}(E)=\sum_{i,j=1}^{N} V|B_i>\tau_{ij}(E)<B_j|V \tag{20}$$

ただし、$\tau_{ij}(E)$ は次式で与えられる、行列 $\mathrm{T}(E)$ の ij要素である。すなわち

$$[\mathrm{T}(E)]_{ij}=\tau_{ij}(E) \tag{21}$$

ここに

$$\begin{aligned} & [\mathrm{T}^{-1}(E)]_{ij} \\ = \quad & [\Lambda^{-1}]_{ij}-<B_i|VG_0(E)V|B_j> \end{aligned} \tag{22}$$

ただし

$$[\Lambda]_{ij}=\lambda_{ij} \tag{23}$$

式 (23) で与えられる t 行列をセパラブルな t 行列というが、三体問題で広く用いられてきた。そのわけは三体問題が解きやすくなるからである。そこで我々もクーロン束縛状態の解を求めるためにセパラブル t 行列を使うことを考える事にする。

そのための鍵となるのが、二体方程式 (17) である。三体波動関数がかかっているので、減衰する因子がかかっていることは前述の通りである。式 (17) で V_iは二度表れる。$V_i|\Psi_j>$ と $V_iG_0(E)T_i(E)|\Psi_j>$とである。最初の項は部分波動関数そのもので、減衰する事は当然である。第二項も注意深く吟味してやると、減衰していくことが解る。さて、その減衰の速さをきちんと解明できれば、以下の議論での展開の収束がずっと速まることが期待されるが、ここでは簡単のために減衰の速さはパラメータとしておこう。

基底関数$|B_k>, k=1,2,\ldots,N$によって、上述のV_iのかかった項が十分展開できるとする。ただし

$$B_k(r)=L_k(r)e^{-\mu r} \tag{24}$$

ここに $L_k(r)$ は多項式であり、

$$<B_k|\frac{1}{r}|B_l>=\delta_{kl} \tag{25}$$

の直交条件を満たすようにしておく。この直交条件は、形式的に必要なものではないが、数値的な安定を得るためにあった方がよい。この条件の下で $L_k(r)$ は Laguerre の多項式であることがわかる。

Laguerre 多項式は、完備であり、指数関数的に減衰していく任意の関数を、この多項式を用いて展開することができる。その減衰のための指数は、式 (24) のμと一致していればそれにこしたことはないが、多少のズレは問題ないはずである。したがって、我々はμを適当なパラメータとして固定しておく。すると Adhikari-Sloan の関係式から、この基底関数を用いた rank$N$のセパラブルポテンシャルが構成され、それは展開が充分であれば、もとのポテンシャルと同等になるはずである。こうして我々は、クーロン三体束縛状態を、セパラブル展開法で解くという、我々の解法に導かれるのである。

4. 数値例

この方法による数値例を、以下に示す。モデルとして、ヘリウム原子をとったが、簡単のために相互作用は s 波にのみ働くとした。したがって、実際の値と多少のずれがある。

Table-1
Binding energy of a model He atom with s-wave interaction.

rank	B.E.(a.u.)	rank	B.E.(a.u)
2	2.9058201	9	2.9365458
3	2.9334726	10	2.9365390
4	2.9365185	11	2.9365348
5	2.9366673	12	2.9365322
6	2.9366233	13	2.9365304
7	2.9365796	14	2.9365295
8	2.9365577	15	2.9365292

present result : 2.936529 a.u.
Experiment 2.9033 a.u.

なお、この結果は昨年１１月に大阪で開かれた Innovative computational methods in nuclear physics という国際会議での招待講演で報告された。報告集が World Scientific 社から出版されるはずである。

キーワード.

法政大学, 計算物理学、クーロン三体問題

Summary.

Coulombic three-body bound state problems in the framework of Faddeev-Separable-Expansion method

Yasuro Koike
Physics Department, Hosei University

A new method for solving Coulombic three-body bound states is proposed. It will be shown that a standard method, Faddeev-Separable-Expansion method, for the three-body problems can be used for Coulombic three-body bound states, even though Coulomb interaction is not of finite range. A numerical example for a model three-body problem is given which suggest this method is a promising application field for computational physics.

Keywords.

Hosei University, Computational Physics, Coulombic three-body problem