

東大教養 田嶋 直樹、大西 直毅、高原 哲士

## Hartree-Fock Calculation in Cartesian Mesh Representation

University of Tokyo, Komaba

Naoki TAJIMA, Naoki Onishi, Satoshi Takahara

Hartree-Fock 解を求める一般的な方法は、調和振動子基底などを truncate して張った部分空間の中で、Hartree-Fock ポテンシャル中の一粒子運動の対角化を自己無撞着になるまで反復することである。この場合、行列の対角化が基底数の 2 乗に比例する記憶領域と 3 乗に比例する計算時間を消費するので、あまり大きな基底を用いることができない。ところが、相互作用が Skyrme 力のようにゼロレンジのときは、Hartree-Fock 場が局所的になるので、対角化によらなくても一粒子状態を求めることが出来る。たとえば、球形核の場合には、動径方向に関する一変数常微分方程式の固有値問題を（離散化して = 1 次元メッシュ表現で）解けばよい。これは 20 年以上前から実行されている。変形核を扱う場合には、計算量は激増するが、例えば、Bonche らによる、ベクタ計算機向きの「正方メッシュ上で表現された波動関数を、虚時間発展法で求める手法」[Nucl.Phys.**A443** (1985)39] を用いれば、実用的な速度で解を得ることが出来る。本講演では、まず、この手法の特徴を説明する。飽和性がメッシュ表現に有利に働くこと、形状への偏見がないこと、計算式が簡潔でバグが紛れ込みにくいこと、メッシュは意外に粗くて良いことが重要である。次に彼らの計算機プログラム ev8 を東大の大型計算機センターのスーパー機に移植したときの計算速度の向上について報告し、計算例を示す。最後に、この手法で、今後どのような種類の核物理の研究が可能かを議論する。本研究のための計算機使用料は、大阪大学核物理学研究センターから補助された。