



## 25. 分子動力学によるクォーク物質のシミュレーション

丸山敏毅<sup>1</sup>、初田哲男<sup>2</sup>

1 原研・先端基礎研究センター

2 京都大学・大学院理学研究科

### Abstract

We propose a microscopic simulation for quark many-body system based on a molecular dynamics. Using confinement potential, one-gluon exchange potential and meson exchange potentials, we can construct color-singlet nucleons, nuclei and also an infinite nuclear/quark matter. Statistical feature and the dynamical change between confinement and deconfinement phases are studied with this molecular dynamics simulation.

### 1 はじめに

クォークは物質を構成する最も基本的な粒子の1つであるが、通常は3つのクォークまたは1対のクォーク反クォークとグルーオンからなる、カラーが中性のハドロン状態でしか存在しない(カラーの閉じ込め)。最近クォークに関連した研究が理論的にも実験的にも盛んに行われていが、特に高温または高密度状態においてカラーの閉じ込めが解けたクォーク・グルーオンプラズマ(QGP)[1]が理論的に予言されてからは超高エネルギーでの重イオン衝突実験の計画が進んでいる。また天体物理の分野でも、中性子星内部でクォーク物質が存在するのではないかという予測がされ、さらに、それが球状や棒状などの特殊な構造を持つのではないかという議論がされる[2]など、様々な形で注目されている。

近年計算機の進歩にともない、微視的シミュレーションによる物質の構造、反応の研究が盛んである。原子核物理の分野でもQMD[3]やAMD[4]、FMD[5]などの分子動力学による核反応計算や、天体に於ける核物質の構造計算[6]が行われ、反応機構や物質構造の仮定に依らない新しい結果が得られるようになった。我々はこの核子多体系に於ける分子動力学の成果に着目し、クォーク多体系にも同様のシミュレーションを行う事を考えた。しかしクォーク系はSU(3)カラー力学に支配されるため、分子動力学としては新しい手法の開発が必要になる。

クォークの状態は空間的な波動関数だけでなくスピン、フレーバー、カラーで決まる。クォーク間相互作用の特徴はカラー交換力であり、そのためカラー座標の時間変化を分子動力学に取り入れた。今回はスピン、フレーバーを固定(無視)し空間座標、カラー座標の分子動力学を構築した。これは微視的シミュレーションとしては初めてダイナミカル(自動的)に閉じ込め-非閉じ込めの効果を扱うことができるものである。ここではこのモデルを無限系クォーク物質や有限系に適用し、QGP相転移や、クォーク物質の統計的性質を研究する手段としての有効性を確かめる。

### 2 クォーク系の分子動力学

通常の温度や密度ではクォークが単体の粒子として取り出すことは出来ない。これはカラーに依存した強い閉じ込めポテンシャルによって理解されている。このカラー自由度を取り扱う事がクォーク系の分子動力学を作る上で必要になる。ここでは簡単のためスピンとフレーバーを無視し、座標空間とカラー空間での時間発展の記述を行う。

全系の波動関数 $\Psi$ を1粒子波動関数 $\psi_i$ の直積で表す。反対称化はここでは無視する。

$$\Psi = \prod_i \psi_i, \quad (1)$$

$$\psi_i = \phi_i(\mathbf{r})\chi_i, \quad (2)$$

$$\phi_i(\mathbf{r}) \equiv \exp[-(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)^2/2L - i\mathbf{P}_i\mathbf{r}], \quad (3)$$

$$\chi_i \equiv \begin{pmatrix} \cos \alpha_i e^{-i\beta_i} \cos \theta_i \\ \sin \alpha_i e^{+i\beta_i} \cos \theta_i \\ \sin \theta_i e^{i\varphi_i} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

ここで $\phi_i$ は座標空間における波動関数で幅を固定したガウス波束とし、 $\chi_i$ はカラーSU(3)の状態ベクトルである。

系の時間発展は $\{\mathbf{R}_i, \mathbf{P}_i, \alpha_i, \beta_i, \theta_i, \varphi_i\}$ の運動方程式を解くことで決まる。系のラグランジアンを計算すると、

$$\mathcal{L} = \langle \Psi | i\hbar \frac{d}{dt} - \hat{H} | \Psi \rangle \quad (5)$$

$$= \sum_i \langle \phi_i | i\hbar \frac{d}{dt} | \phi_i \rangle + \sum_i \langle \chi_i | i\hbar \frac{d}{dt} | \chi_i \rangle - \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \quad (6)$$

$$= \sum_i [-\dot{\mathbf{P}}_i \mathbf{R}_i + \hbar \dot{\beta}_i \cos 2\alpha_i \cos^2 \theta_i - \hbar \dot{\varphi}_i \sin^2 \theta_i] - H \quad (7)$$

となり、時間依存変分原理

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} = \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \quad (8)$$

から次のような運動方程式を得る。

$$\dot{\mathbf{R}}_i = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{P}_i}, \quad (9)$$

$$\dot{\mathbf{P}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{R}_i}, \quad (10)$$

$$\dot{\beta}_i = -\frac{1}{2\hbar \sin 2\alpha_i \cos^2 \theta_i} \frac{\partial H}{\partial \alpha_i}, \quad (11)$$

$$\dot{\theta}_i = \frac{1}{2\hbar \sin \theta_i \cos \theta_i} \frac{\partial H}{\partial \varphi_i}, \quad (12)$$

$$\dot{\alpha}_i = \frac{1}{2\hbar \sin 2\alpha_i \cos^2 \theta_i} \frac{\partial H}{\partial \beta_i} - \frac{\cos 2\alpha_i}{2\hbar \sin 2\alpha_i \cos^2 \theta_i} \frac{\partial H}{\partial \varphi_i}, \quad (13)$$

$$\dot{\varphi}_i = -\frac{1}{2\hbar \sin \theta_i \cos \theta_i} \frac{\partial H}{\partial \theta_i} + \frac{\cos 2\alpha_i}{2\hbar \sin 2\alpha_i \cos^2 \theta_i} \frac{\partial H}{\partial \alpha_i}. \quad (14)$$

クォーク間の相互作用には1グルーオン交換力とリニアな閉じ込めポテンシャル、核子間の中間子交換力をクォーク間に焼き直した斥力と引力を用い、ハミルトニアンは以下のように書ける。

$$\hat{H} = \sum_i \sqrt{m^2 + \hat{\mathbf{p}}_i^2} + \sum_{i,j \neq i} \hat{V}_{ij}, \quad (15)$$

$$\hat{V}_{ij} = -\frac{1}{2} \sum_{a=1}^8 \frac{\lambda_i^a \lambda_j^a}{4} [V_S(\hat{r}_{ij}) + V_L(\hat{r}_{ij})] + \frac{1}{2} V_M(\hat{r}_{ij}), \quad (16)$$

$$V_S(r) \equiv -\alpha_S \frac{e^{-\mu r}}{r}, \quad (17)$$

$$V_L(r) \equiv L_1 r, \quad (18)$$

$$V_M(r) \equiv C_\sigma \frac{e^{-\mu_\sigma r}}{r} + C_\omega \frac{e^{-\mu_\omega r}}{r}, \quad (19)$$

$$\lambda^a = \text{Gell-Mann matrices}. \quad (20)$$

ここで  $V_S$  はグルーオン交換力 [7]、 $V_L$  は閉じ込め [7]、 $V_M$  は中間子交換力 [8] である。また、 $V_L(r)$  には有限の距離  $r_{\text{cut}}$  でのカットオフを入れる。ハミルトニアン第 1 項の運動エネルギーからは、1 粒子波動関数にガウス波束を用いていることに因る運動量分散項が現れるが、今は波束の幅を固定しているためこの運動量分散項は spurious になり、運動エネルギーからは差し引いている。この計算で用いるクォーク質量及びその他のパラメータの値は以下のものを用いる。 $m = 320$  [MeV]、 $L = 0.25$  fm<sup>2</sup>、 $\alpha_S = 1.0$ 、 $\mu = 0.5$  [fm<sup>-1</sup>]、 $L_1 = 2800$  [MeV/fm]、 $r_{\text{cut}} = 3$  [fm]、 $C_\sigma = -8.94/9$ 、 $\mu_\sigma = 550$  [MeV]、 $C_\omega = 24.5/9$ 、 $\mu_\omega = 782$  [MeV]。

### 3 核子 (3 クォーク系) の性質

これまでのところ反クォーク  $\bar{q}$  の自由度は入れていないので、一番簡単な多体系は 3 つのクォークからなる核子である。カラー中性 (White) な核子をシミュレートする手順としてははじめに 3 クォーク系のカラーを White にする。すなわち

$$\sum_{i=1}^3 \langle \chi_i | \lambda^a | \chi_i \rangle = 0 \quad (a = 1, \dots, 8) \quad (21)$$

となるような  $\chi_i$  のパラメータを探す。具体的には、はじめ  $\chi_i$  のパラメータとしてランダムな値を採り、 $\sum_{i,j \neq i} \sum_{a=1}^8 \langle \chi_i | \lambda^a | \chi_i \rangle \langle \chi_j | \lambda^a | \chi_j \rangle$  に単調に依存する引力を与えた上でカラー空間に於ける摩擦冷却を行う。これによって 3 クォーク系がトータルで White になる。次に核子内運動に相当する運動を与える。

このようにして得られた核子の性質を挙げると、全エネルギー 1498 [MeV]、運動エネルギー 55 [MeV/q]、平均自乗半径 0.63 [fm] となる。

### 4 クォーク無限系の性質

次にクォーク無限系について考察する。無限系は実際には周期的境界条件を課した箱の中の有限系で近似する。まず上で説明した 3 クォークからなるカラー中性の核子を多数作り、これを空間にランダムにばらまく。この段階では系は「励起状態」にある。この系のエネルギー最低状態を作るには摩擦冷却を行うが、核子内での運動を許したまま冷却すると核子内運動も無くなってしまいうため、核子内での運動やカラーの時間変化を凍結しておいて、「核子」の重心運動のみの空間で摩擦冷却を行う。「核子」重心運動の空間での冷却を行った系は、「核子」は静止しているが核子内ではクォークが運動している。「核子」のフェルミ運動は今は無視する。エネルギー最低状態まで冷却しても、 $V_M$  に含まれる斥力が働いているため、系がつぶれてしまうことはない。このエネルギー最低状態の系に「核子」のランダムな運動をさせる事で系に励起エネルギーを与える。適当な時間放っておくとやがて平衡状態に達し、「閉じ込め」「非閉じ込め」状態の判定や、系の温度その他の統計的な量を議論することが出来る。

この系の初期条件はクォークが「閉じ込め」状態にある核子からなっているが平衡に達した時点でクォークが閉じ込められているかどうかを次のように判定する。

$$\left\{ \begin{array}{l} |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j| < d_{\text{cluster}} \quad (i, j = 1, 2, 3), \\ \left| \sum_i^3 \langle \chi_i | \lambda^a | \chi_i \rangle \right| < \epsilon. \end{array} \right. \quad (22)$$

つまり、「3 クォークがある距離内に存在し、それが 3 つで White になっている」というのを「閉じ込め」状態にある条件とする。この判定を全てのクォークについて順次行っていくが、「閉じ込め」状態にあると判定された組の 3 クォークは別の組と共有しないよう次の判定では除外する。

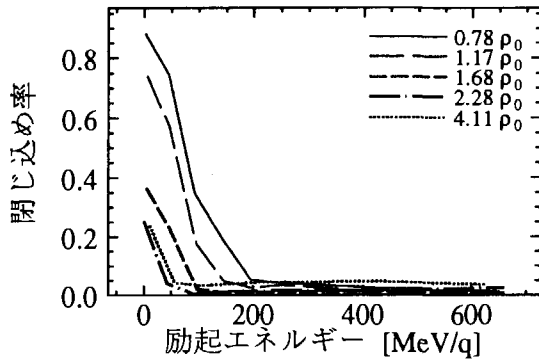


図 1. 密度及び励起エネルギーに対する閉じ込め率 (閉じ込められているクォークの割合) の変化。表示されている密度はバリオン密度。

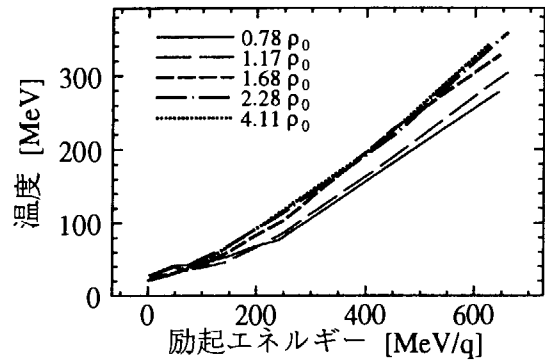


図 2. クォークの運動エネルギー分布から求めた系の温度。運動エネルギー分布はボルツマン分布でフィットされる。

図 1 は密度及び励起エネルギーを変化させたときのクォークの閉じ込め率の変化の様子である。低密度、低励起ではクォークの閉じ込め率は高いが、励起エネルギーを上げていったり密度を高くすると閉じ込められているクォークの割合は減っていく。ここで得られた結果では、常識的な相転移の密度よりもかなり低い密度で非閉じ込め状態になってしまっている。用いている相互作用パラメータを調整する必要がある。

いま扱っている系がどんなものであるかを調べるためにクォークの運動エネルギー分布を見ると、特に高エネルギーではボルツマン分布で非常に良くフィットされる。従ってこの場合系は古典ガスとして振る舞っていることが分かる。ボルツマン分布のフィットから系の温度を求めたのが図 2 である。高密度の場合は励起エネルギーに対してほぼ直線的に温度が依存しているが、低密度の場合低励起の領域で一旦温度の上昇が止まる様子が現れている。これはちょうど図 1 の閉じ込め率の変化する領域であり、核子クラスターが解けるのにエネルギーが使われたためと思われる。これがはっきりした相転移を示しているのかは今の所明らかでない。また、この枠組みには  $q\bar{q}$  の対生成過程が取り入れられていないので、系が高温でボルツマンガスの振る舞いをするが、対生成の過程を取り入れることで系の統計性は別のものになると思う。

## 5 有限系 (原子核)

この分子動力学を原子核衝突のシミュレーションに用いるには、まず衝突させる原子核をつくる。無限系のエネルギー最低状態を作るときと同様に、“3q 核子” を空間にばらまき、核子内自由度を凍結した上で摩擦冷却により、系を安定させるとほぼ球形の束縛系 (原子核) ができる。これを 2 つ boost し時間発展させることで原子核衝突のシミュレーションが出来る。

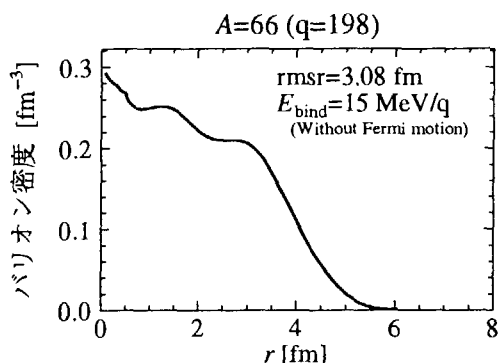


図3. 得られた質量数66の“原子核”の密度分布。

図3はクォーク198体系(バリオ数66)の原子核の密度分布である。平均自乗半径3.08fmで中心付近の密度が通常核の1.5倍もあり束縛エネルギーがクォーク当たり15MeVと深すぎる。これは相互作用の調整を行っていないのと、核子のフェルミ運動を入れてないのが原因である。将来的には改善したい。

図3の原子核同士を衝突させたときのクォークの閉じ込め率の時間発展を示したのが図4である。 $\beta_{CM}$ は重心系での原子核の速度を表している。衝突とともに非閉じ込めのクォークが現れ、時間と共に減衰しているのがわかる。高エネルギーの衝突( $\beta_{CM}=0.842$ )の方が非閉じ込めクォークがより多く現れる。また、非閉じ込めクォークの存在する時間が常識的なQGPのタイムスケールに比べて長続きしすぎるが、 $q\bar{q}$ 対生成過程が取り入れられていないのと、閉じ込めポテンシャルにカットオフを用いているのが原因と思われる。これらを改善すればより早く非閉じ込め状態は減衰するだろう。

原子核衝突の様子を可視化したのが図5である。原子核の接触領域で非閉じ込めクォークが現れている様子や、核物質のフロー、高エネルギーでのすり抜けの様子等も定性的にはよく表されている。

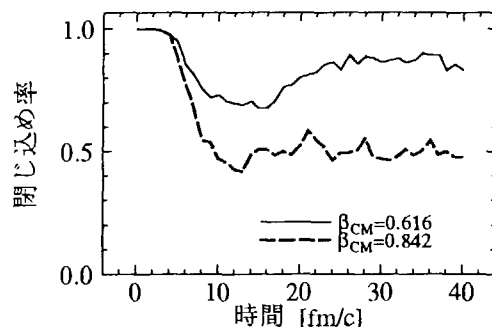


図4. クォークの閉じ込め率の時間変化。

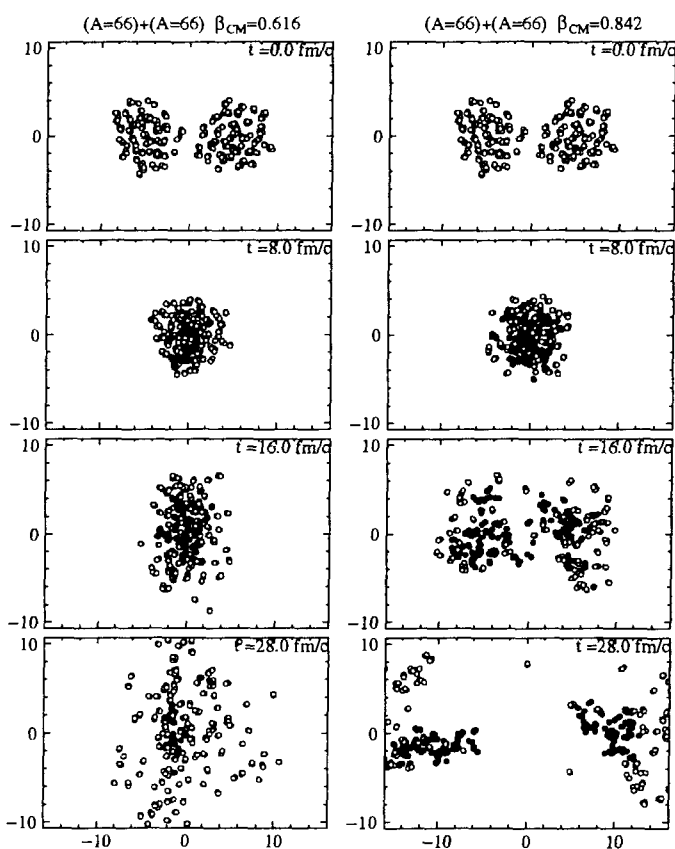


図5. 原子核同士の衝突の様子。白い粒子が閉じ込め状態のクォークで黒い粒子が非閉じ込め状態のもの。

## 6 まとめ

我々は座標空間とカラー空間における分子動力学をつくり、クォーク系のシミュレーションを行った。これはクォークの閉じ込め非閉じ込めのダイナミカル(自動的)な記述が可能な初めての分子動力学である。まだ定性的な議論の段階だがこれによって分子動力学によるクォーク物質の研究が可能になった。

周期的境界条件の下でのクォーク無限系にこの枠組みを適用し密度、励起エネルギーに対する系の応答を調べたところ、低密かつ度低エネルギーではクォークの閉じ込めが実現しているが、高密度や高エネルギーになると閉じ込め状態に無いクォークが現れることが分かった。また系の温度と励起エネルギーとの関係からは、系が高温や高密度で古典ガスとして振る舞うこと、低密度では励起エネルギーが上がるときに温度の上昇が抑えられる領域があり、相転移的な様相を示すことなどが分かった。

有限系にこの分子動力学を適用しクォークからなる核子が束縛系をつくることを確かめた。定量的にはまだ不十分だが、原子核衝突のシミュレーションにこの分子動力学を適用することが出来ることが分かった。原子核衝突のシミュレーションでは、衝突とともに閉じ込めじょうたいから非閉じ込め状態への転移や、衝突のエネルギーに応じた核物質のフロー、原子核のすり抜けなどの現象が定性的に記述できることも分かった。

今後は相互作用の調節や、 $q\bar{q}$ 対生成過程の導入等によって無限系の計算、原子核衝突の計算ともに定量的な議論が可能になるのではないかと思う。

## 参考文献

- [1] J. Harris and B. Müller, *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.* **46** (1996) 71; W. Greiner and D. Rischke, *Phys. Rep.* **264** (1996) 183; C. Y. Wong, *Introduction to High-Energy Heavy-Ion Physics*, World Scientific Publ. Singapore, 1994.
- [2] G. Baym, *Nucl. Phys.* **A590** (1995) 233.
- [3] J. Aichelin and H. Stöcker, *Phys. Lett. B* **176** (1986) 14; J. Aichelin, *Phys. Rep.* **202** (1991) 233; D. H. Boal and J. N. Glosli, *Phys. Rev. C* **38** (1988) 1870; T. Maruyama, A. Ohnishi and H. Horiuchi, *Phys. Rev. C* **42** (1990), 386.
- [4] A. Ono, H. Horiuchi, T. Maruyama and A. Ohnishi, *Phys. Rev. Lett* **68** (1992) 2898, *Prog. Theor. Phys.* **87** (1992) 1185, *Phys. Rev. C* **47** (1993) 2652.
- [5] H. Feldmeier, *Nucl. Phys.* **A515** (1990) 147.
- [6] T. Maruyama, K. Niita, K. Oyamatsu, T. Maruyama, S. Chiba and A. Iwamoto, *Phys. Rev. C* **57** (1998) 655.
- [7] T. Hatsuda, *Prog. Theor. Phys.* **70** (1983) 1685.
- [8] K. Saito, K. Tsushima and A.W. Thomas, nucl-th/9901084; and references therein.