

連続状態離散化チャネル結合法(CDCC法)による原子核反応解析コード：(そのI)：cdcc 核ポテンシャルの算出：新登録プログラムライブラリの紹介

井芹, 康統
千葉経済大学短期大学部

上村, 正康
理化学研究所先端中間子研

八尋, 正信
九州大学理学研究院

櫻木, 弘之
大阪市立大学理学研究科

他

<https://doi.org/10.15017/1495398>

出版情報：九州大学情報基盤センター広報：全国共同利用版. 5 (3), pp.117-134, 2006-02. 九州大学
情報基盤センター広報
バージョン：
権利関係：

連続状態離散化チャネル結合法 (CDCC 法) による 原子核反応解析コード

(その I) : CDCC 核ポテンシャルの算出

～ 新登録プログラムライブラリの紹介 ～

井芹康統¹ 上村正康² 八尋正信³ 櫻木弘之⁴ 緒方一介⁵

1. 概要

(1-1) 原子核物理学の最新情勢

最近の原子物理学の重要課題の1つは「不安定核物理学」である。従来の安定核の研究では到達できなかった境地が拓けている。安定核（核内の陽子数と中性子数がほぼ等しい）に比べて、中性子数か陽子数の一方がかなり多い核を中性子過剰核または陽子過剰核といい、ベータ崩壊が起こり易く不安定になっているので、不安定核とも呼ぶ。不安定核は、中性子数と陽子数がかなり異なるため、安定核には見られなかった性質を見せており、新しい量子多体系として、その構造・反応を解明する研究が急速に進んでいる。不安定核は、地上には存在しないが、最近の新しい加速器によって、2次ビームとして作られるようになった。また、星の中心高温部や宇宙初期ビッグバン時や超新星爆発時にも形成される。このため、不安定核研究は最近の宇宙物理学研究の中核の1つになっている。

不安定核を含んだ実験では日本が先行し、現在、世界で実験・理論の研究の激しい競争が進行中である。不安定核で特に注目されているのは、2つまたは3つの塊り（クラスター）が極めて弱く束縛し、空間的に異常に広く分布していると見なせる核（ハロー核）である。 ${}^8\text{B}(={}^7\text{Be}+p)$ 、 ${}^{11}\text{Be}(={}^{10}\text{Be}+n)$ 、 ${}^6\text{He}(={}^4\text{He}+n+n)$ 、 ${}^{11}\text{Li}(={}^9\text{Li}+n+n)$ などが典型である。この研究の新しい課題は、弱く束縛した不安定核が入射した時に起こす核反応のメカニズムの研究である。これにより、その入射不安定核の構造の研究も進む。しかし、この反応は、入射核が2つのクラスターでできている時は標的核を入れて全体として3体系（3体問題）となり、入射核が3つのクラスターでできている時は4体系（4体問題）となるので、その研究は核物理学の中でも最も難しい計算を要するものの1つである。

(1-2) 九大の CDCC 法

上記の不安定核入射反応のように、入射核の束縛が弱く反応中に容易に分解（ブレイクアップ、breakup）するような反応を扱うには、入射核の分解（励起）の自由度を取り入れた3体問題（4体問題）としての計算が望まれる。この計算のための理論として最も優れている（近似が少ない）のは、九州大学原子核理論グループが1981年に提唱したCDCC法（Method of Continuum-Discretized Coupled-Channels、離散化連続状態チャネル結合法）である。（review papers は [1, 2]。）現在、不安定核の3体系反応計算において、最良の方法として評価され使用されており、原子核反応のスタンダードな理論の1つとして、CDCCという呼び名で既に定着している。CDCC法は、もと

¹千葉経済大学短期大学部 iseri@chiba-kc.ac.jp

²理化学研究所 先端中間子研 kami2scp@mbox.nc.kyushu-u.ac.jp

³九州大学 理学研究院 yahiro2scp@mbox.nc.kyushu-u.ac.jp

⁴大阪市立大学 理学研究科 sakuragi@ocunp.hep.osaka-cu.ac.jp

⁵九州大学 理学研究院 kazu2scp@mbox.nc.kyushu-u.ac.jp

もとは、弱く束縛した「安定核」が入射するブレークアップ反応を量子力学的 3 体問題として解くために提唱された [1, 2] のものであるが、理論の枠組み自体は、安定核でも不安定核でも同じであり、計算法としてどちらの核にも使用できる。しかし、計算の難しさから、まだ、世界でもごく少数のグループ（たとえば、九大グループとイギリスのサレイ大学グループ [3]）しか、本格的・実用的なプログラムの作成には成功していない。さらに、4 体問題の場合は、九大グループのみである [4]。そこで、このプログラムを、3 体問題に限るが、できるだけ適用範囲を広げつつ、入力法、出力法を使いやすく整備して、順次、登録公開しようとするのが本ライブラリ開発の目的である。

登録の第 1 弾として、CDCC 法のチャンネル結合方程式（連立微分方程式）に使用されるチャンネル結合ポテンシャルを計算するためのコードを、「(I) CDCC 核ポテンシャルの算出」として登録する。次年度以降、登録の第 2 弾として、チャンネル結合方程式を散乱の境界条件の下に解くコードを登録する予定である。本ライブラリにおける CDCC 法の記述は、全て文献 [1] の第 3 章に依っている。以下の式、変数記号は、以後の登録プログラムマニュアルでも引用される。

2. 登録形式

- プログラム名：

連続状態離散化チャンネル結合法（CDCC 法）による原子核反応解析コード
 （その I）：CDCC 核ポテンシャルの算出（略称 CDCC_cdcdeu）

- 英語名：

Continuum-Discretized Coupled-Channels Method for Nuclear Reactions
 (I) : CDCC Nuclear Potentials

- プログラム形式：コンプリートプログラム

- 作成者：

井芹康統（千葉経済大学短期大学部）
 上村正康（理化学研究所 先端中間子研）
 八尋正信（九州大学 理学研究院）
 櫻木弘之（大阪市立大学 理学研究科）
 緒方一介（九州大学 理学研究院）

- 作成年月：2005 年 3 月

- 使用言語：Fortran

- ソースの公表：

/usr/local/cdcc/cdcdeu.f（Fortran ソース）
 /usr/local/cdcc/cdcdeu.d（入力データサンプル）
 /usr/local/cdcc/cdcdeu.outlist（出力データサンプル）
 /usr/local/cdcc/cdcdeu.formfactor（データファイルへの出力サンプル）

- 使用 OS：UXP(VPP5000)

3. 原子核反応の CDCC 法

(3-1) 重陽子ブレークアップ反応

今回登録するコードは、実用的例題として、重陽子入射反応に特化したものであるが、計算の基本は汎用的であるので、公開の Fortran ソースを一部書き換えることで、一般の 2 クラスター核入射反応に容易に拡張可能である。書き換えポイントは以下に説明してある。

重陽子 (d) は重水素の原子核で、陽子 (p) 1 個と中性子 (n) 1 個から成っており、原子核の中で最も簡単な複合粒子である。その意味で、重水素が関与する原子核反応は、他の一般の複合粒子の核反応の基礎になるとも言える。重陽子は 1 個の束縛状態しか持たず、その状態でも陽子と中性子はかなり緩く結合しているため、それが他の原子核と衝突する際、一旦 p と n に分解 (breakup) し、その後また元に戻って d になるという仮想的分解 (virtual breakup) 過程が起こりやすいと考えられる。実際、この過程は重陽子弾性散乱などの実験データを説明する上で非常に大きな役割を果たしている。弾性散乱以外の反応でも、反応の中間過程として分解過程が与える寄与は大きい。

この重陽子の分解過程を正しく取り扱うためには、重陽子は 1 つの固まりではなく、その構成要素である p と n の 2 体系として考えるべきである。すると、簡単のために標的核 (A) はまとめて 1 粒子として扱ったとしても、全系では p+n+A の 3 体系として扱うことになる。このような量子力学的 3 体問題は、特に重陽子の分解状態のような非束縛状態 (p-n の散乱状態、連続状態) を含むとき、その取り扱いが格段に難しくなる。我々のグループでは、この問題に対して、本来連続無限の連続状態を適当な方法で有限個の状態に離散化近似し、チャネル結合方程式の枠組みの拡張版に乗せるという方法を開発した。これを「離散化連続チャネル結合法 (CDCC 法)」と名づけた。

ここでは、重陽子入射を例にして説明しているが、重陽子を構成している p と n を、それぞれ別のクラスターとみなせば、一般の 2 クラスターで記述される核に対しても、以下の処方を容易に拡張することができる。

(3-2) CDCC 方程式

文献 [1] の第 3 章での定式化、記号表現にならって、重陽子 (d) と標的核 (A) の散乱を CDCC 法で扱う際の処方について説明する。

重陽子の分解 (breakup) 状態を陽に取り入れるために、重陽子を陽子 (p) と中性子 (n) に分けて、全系を p+n+A の 3 体模型で考える。p-n 間の相対座標を ρ 、p-n 系の重心と A の相対座標を \mathbf{R} とし (図 1 参照)、p, n の内部スピンをそれぞれ s_p, s_n で表すとき、CDCC 法で用いる 3 体 Hamiltonian H は

$$H = T_R + U_p(\mathbf{r}_p, \mathbf{s}_p) + U_n(\mathbf{r}_n, \mathbf{s}_n) + V_p^{\text{Coul}}(R) + H_{pn}(\rho, \mathbf{s}_p, \mathbf{s}_n), \quad (1)$$

と書ける。ここで、 T_R は p-n 系の重心と A の相対運動の運動エネルギー、 U_p (U_n) は p (n) と A の間の核力ポテンシャルである。 V_p^{Coul} は p と A の間の Coulomb ポテンシャルであるが、座標を r_p から R に変えている。これは、 V_p^{Coul} による Coulomb breakup 過程を無視する近似に相当するが、通常の数十～数百 MeV の入射エネルギー領域では、よい近似である。

p-n 系の内部 Hamiltonian H_{pn} は

$$H_{pn} = T_\rho + V_{pn}(\rho, \mathbf{s}_p, \mathbf{s}_n), \quad (2)$$

と表される。ここで、 T_ρ , V_{pn} は、p-n の相対運動エネルギーと相互作用ポテンシャルである。

座標 \mathbf{R} , ρ についての軌道角運動量を \mathbf{L} , ℓ で表し、p+n 系の全角運動量を \mathbf{j} 、3 体系の全角運動量を \mathbf{J} で表すとき、これらは次の関係式を持つ。

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{j}, \quad \mathbf{j} = \ell + \mathbf{S}, \quad \mathbf{S} = \mathbf{s}_p + \mathbf{s}_n \quad (3)$$

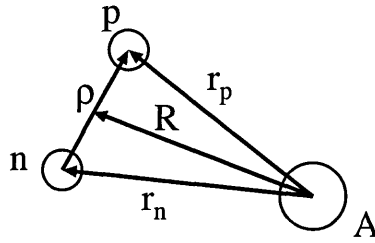


図 1: 3 体系 (p+n+A) での CDCC 法の座標系。

全エネルギー E 、全角運動量 \mathbf{J} 、その z 成分 M を持つ全系の波動関数 Ψ_{JM} は Schrödinger 方程式

$$(H - E)\Psi_{JM} = 0 \quad (4)$$

を満たす。CDCC 法では全波動関数 Ψ_{JM} が、p-n 系の内部波動関数 Φ と相対運動の波動関数 χ に分離できると仮定する。さらに p-n 系の内部状態について、有限なサイズの模型空間内で近似し、連続状態については離散化を行い数値的に扱いやすくする。

$$\Psi_{JM} = \sum_{S,j,\gamma} \sum_L \sum_{i=0}^{N_{\max}} [\Phi_i(S, j, \gamma; \rho) \otimes \chi_i(S, j, \gamma, L, J; \mathbf{R})]_{JM} \quad (5)$$

添え字 i は p-n 系のエネルギー状態を区別するためのもので、 $i = 0$ が重陽子の基底状態、 $i = 1 \sim N_{\max}$ が離散化した重陽子分解状態を表す。 γ は、 (S, j) 以外の内部角運動量状態を区別するための index である。これらが変化する範囲、すなわち模型空間の大きさは、問題にしている散乱を記述するのに十分なように取る。

重陽子の基底状態の内部波動関数 Φ_0 は、次の Schrödinger 方程式を解いて求める。

$$(H_{pn} - \epsilon_0)\Phi_0(S = 1, j = 1, \gamma_0; \rho) = 0 \quad (6)$$

ここで、 ϵ_0 は重陽子の基底状態エネルギー (約 -2.2 MeV) である。また、分解状態を表す内部波動関数 Φ_i は、連続状態の波動関数 $\Phi(k)$ を k の区間 $[k_{i-1}, k_i]$ で平均化することによって求める。

$$\Phi_i(S, j, \gamma; \rho) = \frac{1}{\sqrt{\Delta k_i}} \int_{k_{i-1}}^{k_i} \Phi(S, j, \gamma; k, \rho) dk \quad (7)$$

ここで、 k は p-n 間の相対運動量であり、 $\Delta k_i = k_i - k_{i-1}$ である。 $\Phi(k)$ は、次の Schrödinger 方程式から求められる。

$$(H_{pn} - \epsilon_k)\Phi(S, j, \gamma; k, \rho) = 0, \quad \epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2\mu_\rho \quad (8)$$

ただし、 μ_ρ は p-n 系の換算質量である。 Φ_i を角運動量部分と動径部分に分解する。

$$\Phi_i(S, j, \gamma; \rho) = \sum_\ell \phi_i(\ell, S, j, \kappa; \rho) / \rho \cdot \left[\Xi_S \otimes i^\ell Y_\ell(\hat{\rho}) \right]_{j\nu} = \sum_\ell \Phi_i(\xi; \rho) \quad (9)$$

Ξ_S はスピン部分の波動関数、 ν は j の z 成分である。 κ は、同じ (ℓ, S, j) を持ちながら異なる状態を区別する index で、 ξ は (ℓ, S, j, κ) の set をまとめて表したものである。

一般に V_{pn} にテンソル力があると、1つの j に対し複数の ℓ が couple することができる。(9)式はそのことを表している。今扱っている重陽子の場合、基底状態は 3S_1 と 3D_1 が混合した状態であることが知られており、分解状態についても同様の mixing が起きている。このプログラムでは、そのような複雑な場合も計算することができる [1, 5]。

分解状態の波動関数を具体的に求めるために、(8)を解く際、 $\Phi(S, j, \gamma; k, \rho)$ の動径部分の $\rho \rightarrow \infty$ に対する漸近形が必要である。 ℓ の mixing がない場合は

$$\phi(\ell, S, j; k, \rho) \sim \sqrt{2/\pi} \sin(k\rho - \ell\pi/2 - \delta_{\ell S j}(k)) \quad (10)$$

と取る。ここで、 $\delta_{\ell S j}$ は散乱の位相差 (phase shift) である。 ℓ の mixing がある場合は少し複雑になり、eigen phase shift を用いた表示で漸近形を表す。詳細は [5] を参照。

\mathbf{R} の相対運動の波動関数、 $\chi_i(S, j, \gamma, L, J; \mathbf{R})$ を簡単に $\chi_c(\mathbf{R})$ と表し、さらに動径部分と角運動量部分を分けて書く。

$$\chi_c(\mathbf{R}) = \frac{u_c^J(R)}{R} i^L Y_{LM_L}(\hat{\mathbf{R}}) \quad (11)$$

ここで、 c は (i, S, j, γ, L, J) などチャネルを区別するのに必要な index をまとめたものである。

(4)式の左辺から $[\Phi_i(S, j, \gamma; \rho) \otimes i^L Y_L(\hat{\mathbf{R}})]_{JM}$ を掛けて、スピン変数、 ρ 、 $\hat{\mathbf{R}}$ など R 以外の変数で積分することで、 $u_c^J(R)$ に対する CDCC 方程式を得る。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu_R} \frac{d^2}{dR^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu_R} \frac{L(L+1)}{R^2} + V_p^{\text{Coul}}(R) + \epsilon_i - E \right] u_c^J(R) = -\sum_{c'} F_{cc'}^{(J)}(R) u_{c'}^J(R) \quad (12)$$

ϵ_i は p-n 系の内部エネルギーで、重陽子の基底状態に対しては ϵ_0 、離散化された分解状態に対しては区間 $[k_{i-1}, k_i]$ での ϵ_k の平均値 $\epsilon_i = (\hbar^2/2\mu_\rho) \cdot [(k_i^3 - k_{i-1}^3)/3\Delta k_i]$ とする。 $F_{cc'}^{(J)}(R)$ はチャネル c と c' の間の coupling form factor で、

$$F_{cc'}^{(J)}(R) = \left\langle \left[\Phi_i \otimes i^L Y_L(\hat{\mathbf{R}}) \right]_{JM} \left| U_p(\mathbf{r}_p, \mathbf{s}_p) + U_n(\mathbf{r}_n, \mathbf{s}_n) \right| \left[\Phi_{i'} \otimes i^{L'} Y_{L'}(\hat{\mathbf{R}}) \right]_{JM} \right\rangle_R \quad (13)$$

で与えられる。 $\langle \cdots \rangle_R$ は、 R 以外の変数での積分を表す。

CDCC 方程式 (12) はチャネルの個数だけの連立微分方程式になっている。適当な境界条件を与えて $u_c^J(R)$ を解き、その漸近形から散乱の S 行列を求めることができる。CDCC 方程式の解法とそのプログラムは次回以降に登録・紹介する予定である。今回登録するプログラム CDCC_cdcdeu は、この CDCC 方程式を解くために必要な coupling form factor を計算するものである。

(9)式で示されるように Φ_i は一般に複数の ℓ 成分が混合し得るので、coupling form factor $F_{cc'}^{(J)}(R)$ も複数の ℓ の項の和となる。そのため、form factor を計算する段階では ℓ の値まで指定した各項ごとに計算しておき、CDCC 方程式 (12) を実際に解く際に、チャネル c, c' に応じて複数の ℓ の項を足し込むことが必要になる。

(3-3) coupling form factor

(13)式に含まれる核子の核力ポテンシャル U_N ($N=p, n$) には、入射エネルギー $E/2$ に対応する核子光学ポテンシャルを用いる。核子光学ポテンシャルは、一般に、中心力 (central force; CE) とスピン軌道力 (spin-orbit force; SO) から成っている。

$$U_N(\mathbf{r}_N, \mathbf{s}_N) = U_N^{(\text{CE})}(r_N) + U_N^{(\text{SO})}(r_N) \ell_N \cdot \mathbf{s}_N \quad (14)$$

r_N から \mathbf{R}, ρ に座標を変換するために多重極展開を行う。

$$U_N^{(\alpha)}(r_N) = \sum_{\lambda} v_N^{(\alpha)}(\lambda; R, \rho) P_{\lambda}(\cos \theta_{R\rho}) \quad (15)$$

ここで、 α は CE または SO であり、 P_{λ} は Legendre 関数、 $\theta_{R\rho}$ は、 \mathbf{R} と ρ のなす角度である。 $v_N^{(\alpha)}(\lambda; R, \rho)$ は上式を逆に解いて、

$$v_N^{(\alpha)}(\lambda; R, \rho) = \frac{2\lambda + 1}{2} \int_{-1}^1 U_N^{(\alpha)}(r_N) P_{\lambda}(\cos \theta_{R\rho}) d(\cos \theta_{R\rho}) \quad (16)$$

で求められる。後の便利のために、

$$U_{\pm}^{(\alpha)} = U_p^{(\alpha)}(r_p) \pm U_n^{(\alpha)}(r_n), \quad v_{\pm}^{(\alpha)}(\lambda; R, \rho) = v_p^{(\alpha)}(\lambda; R, \rho) \pm v_n^{(\alpha)}(\lambda; R, \rho) \quad (17)$$

を定義しておく。

中心力に対する coupling form factor は、

$$\begin{aligned} F^{(CE)}(i, \xi, L; i', \xi', L'; J; R) \\ = \left\langle \left[\Phi_i(\xi, \rho) \otimes i^L Y_L(\hat{\mathbf{R}}) \right]_{JM} \left| U_+^{(CE)} \right| \left[\Phi_{i'}(\xi', \rho) \otimes i^{L'} Y_{L'}(\hat{\mathbf{R}}) \right]_{JM} \right\rangle_R \\ = \sum_{\lambda} Z^{(CE)}(\xi, L; \xi', L'; \lambda, J) f^{(CE)}(i, \xi; i', \xi'; \lambda; R) \end{aligned} \quad (18)$$

と分解することができる。上式の F はチャネル内部の ℓ まで指定した coupling である。 Z は角運動量のみから出てくる幾何学的因子、 f は p-n 間の内部波動関数から出てくる形状因子で、その具体形は

$$\begin{aligned} Z^{(CE)}(\xi, L; \xi', L'; \lambda, J) = i^{L-L'+\ell-\ell'} (-)^{J-S+\lambda} \hat{L} \hat{L}' \hat{j} \hat{j}' \hat{\ell} \hat{\ell}' (2\lambda + 1)^{-1} \delta_{SS'} \\ \times (L0L'0|\lambda0)(\ell0\ell'0|\lambda0)W(LL'jj'; \lambda J)W(\ell\ell'jj'; \lambda S) \end{aligned} \quad (19)$$

$$f^{(CE)}(i, \xi; i', \xi'; \lambda; R) = \int_0^{\infty} d\rho \phi_i(\xi; \rho) v_+^{(CE)}(\lambda; R, \rho) \phi_{i'}(\xi', \rho) \quad (20)$$

と書き下せる。ここで、 $\hat{a} = \sqrt{2a + 1}$ などであり、 $(abcd|ef)$ は Clebsh-Gordan 係数、 $W(abcd; ef)$ は Racah 係数と呼ばれる角運動量に関する係数である。

スピン軌道力については、まず核子光学ポテンシャルの SO 部分を次のように書き直しておく。

$$\begin{aligned} U_p^{(SO)}(r_p) \boldsymbol{\ell}_p \cdot \mathbf{s}_p + U_n^{(SO)}(r_n) \boldsymbol{\ell}_n \cdot \mathbf{s}_n = \\ \frac{1}{4} U_+^{(SO)} (\mathbf{L} + \boldsymbol{\ell}) \cdot \mathbf{S}_+ - \frac{i}{2} U_-^{(SO)} (\mathbf{R} \times \nabla_{\rho} + \boldsymbol{\rho} \times \nabla_R/4) \cdot \mathbf{S}_+ \\ + \frac{1}{4} U_-^{(SO)} (\mathbf{L} + \boldsymbol{\ell}) \cdot \mathbf{S}_- - \frac{i}{2} U_+^{(SO)} (\mathbf{R} \times \nabla_{\rho} + \boldsymbol{\rho} \times \nabla_R/4) \cdot \mathbf{S}_- \end{aligned} \quad (21)$$

ここで、 $\mathbf{S}_{\pm} = \mathbf{s}_p \pm \mathbf{s}_n$ である。

(21) 式の中で、散乱への寄与が大きな項を取り入れる。本プログラムでは、第 1 項 $((\mathbf{L} + \boldsymbol{\ell}) \cdot \mathbf{S}_+$ の項)、第 2 項の一部 $((\boldsymbol{\rho} \times \nabla_R) \cdot \mathbf{S}_+$ の項)、第 3 項の一部 $(\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}_-$ の項) を扱うことができる。以下これらの各項についての具体的な表式を示す。

まず、 $(\mathbf{L} + \ell) \cdot \mathbf{S}_+$ を含む第 1 項から生じる coupling form factor は、

$$\begin{aligned}
 & F^{(\text{LS})}(i, \xi, L; i', \xi', L'; J; R) \\
 &= \left\langle \left[\Phi_i(\xi, \rho) \otimes i^L Y_L(\hat{\mathbf{R}}) \right]_{JM} \left| U_+^{(\text{SO})}(\mathbf{L} + \ell) \cdot \mathbf{S}_+ \left[\Phi_{i'}(\xi', \rho) \otimes i^{L'} Y_{L'}(\hat{\mathbf{R}}) \right]_{JM} \right\rangle_R \\
 &= \sum_{\lambda} \left[Z^{(\text{LS})}(\xi, L; \xi', L'; \lambda, J) + Z^{(\ell\text{S})}(\xi, L; \xi', L'; \lambda, J) \right] f^{(\text{LS})}(i, \xi; i', \xi'; \lambda; R) \quad (22)
 \end{aligned}$$

と分解でき、

$$\begin{aligned}
 Z^{(\text{LS})}(\xi, L; \xi', L'; \lambda, J) &= i^{L-L'+\ell-\ell'} (-)^{\ell+j'-J} \hat{L} \hat{L}' \hat{j} \hat{j}' \hat{\ell} \hat{\ell}' (2\lambda + 1)^{-1} \delta_{SS'} \\
 &\quad \times (L0L'0|\lambda 0)(\ell 0\ell'0|\lambda 0) \sqrt{S(S+1)(2S+1)} \\
 &\quad \times \sum_{\Lambda} (2\Lambda + 1) W(LL'jj'; \Lambda J) \begin{Bmatrix} S & \ell & j \\ S' & \ell' & j' \\ 1 & \lambda & \Lambda \end{Bmatrix} \\
 &\quad \times \left[\sqrt{L(L+1)(2L+1)} W(1\lambda LL'; \Lambda L) \right. \\
 &\quad \left. + (-)^{\lambda+1+\Lambda} \sqrt{L'(L'+1)(2L'+1)} W(1\lambda L'L; \Lambda L') \right] / 2 \quad (23)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Z^{(\ell\text{S})}(\xi, L; \xi', L'; \lambda, J) &= i^{L-L'+\ell-\ell'} (-)^{J-S+\lambda} \hat{L} \hat{L}' \hat{j} \hat{j}' \hat{\ell} \hat{\ell}' (2\lambda + 1)^{-1} \delta_{SS'} \\
 &\quad \times (L0L'0|\lambda 0)(\ell 0\ell'0|\lambda 0) W(LL'jj'; \lambda J) W(\ell\ell'jj'; \lambda S) \\
 &\quad \times [\{j(j+1) - \ell(\ell+1) - S(S+1)\} + \{j'(j'+1) - \ell'(\ell'+1) - S(S+1)\}] / 2 \quad (24)
 \end{aligned}$$

$$f^{(\text{LS})}(i, \xi; i', \xi'; \lambda; R) = \int_0^{\infty} d\rho \phi_i(\xi; \rho) v_+^{(\text{SO})}(\lambda; R, \rho) \phi_{i'}(\xi'; \rho) \quad (25)$$

と計算できる。ここで、 $\{ \}$ は角運動量の 9j 係数である。また、対称性を確保するために $[U_+^{(\text{SO})} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}_+ + \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}_+ U_+^{(\text{SO})}]$ のように書き換えてから matrix element を計算していることに注意。この書き換えは以下も同様である。

次に、 $(\rho \times \nabla_R) \cdot \mathbf{S}_+$ の項については、角運動量の組み合わせがある特殊な場合、その表式が簡単になり、計算することができる。 $j = j' = 1, S = S' = 1, \ell = \ell' = 0$ のとき、

$$\begin{aligned}
 & F^{(\text{LS1})}(i, \xi, L; i', \xi', L'; J; R) \\
 &= \left\langle \left[\Phi_i(\xi, \rho) \otimes i^L Y_L(\hat{\mathbf{R}}) \right]_{JM} \left| -i U_-^{(\text{SO})}(\rho \times \nabla_R) \cdot \mathbf{S}_+ \left[\Phi_{i'}(\xi', \rho) \otimes i^{L'} Y_{L'}(\hat{\mathbf{R}}) \right]_{JM} \right\rangle_R \\
 &= Z^{(\text{LS1})}(\xi, L; \xi', L'; J) f^{(\text{LS1})}(i, \xi; i', \xi'; R) \quad (26)
 \end{aligned}$$

$$Z^{(\text{LS1})}(\xi, L; \xi', L'; J) = [J(J+1) - L(L+1) - j(j+1)] \delta_{LL'} \delta_{jj'} \quad (27)$$

$$f^{(\text{LS1})}(i, \xi; i', \xi'; R) = \frac{1}{6R} \int_0^{\infty} d\rho \rho \phi_i(\xi; \rho) v_-^{(\text{SO})}(1; R, \rho) \phi_{i'}(\xi'; \rho) \quad (28)$$

最後に、 $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}_-$ の項については、

$$\begin{aligned}
 & F^{(\text{LSP})}(i, \xi, L; i', \xi', L'; J; R) \\
 &= \left\langle \left[\Phi_i(\xi, \rho) \otimes i^L Y_L(\hat{\mathbf{R}}) \right]_{JM} \left| U_-^{(\text{SO})} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}_- \left[\Phi_{i'}(\xi', \rho) \otimes i^{L'} Y_{L'}(\hat{\mathbf{R}}) \right]_{JM} \right\rangle_R \\
 &= \sum_{\lambda} Z^{(\text{LSP})}(\xi, L; \xi', L'; \lambda, J) f^{(\text{LSP})}(i, \xi; i', \xi'; \lambda; R) \quad (29)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 f^{(\text{LSP})}(\xi, L; \xi', L'; \lambda, J) &= i^{L-L'+\ell-\ell'} (-)^{J+\ell+S'+j+1} \hat{L} \hat{L}' \hat{j} \hat{j}' \hat{\ell} \hat{\ell}' \hat{S} \hat{S}' (2\lambda + 1)^{-1} \\
 &\times (L0L'0|\lambda 0)(\ell 0\ell'0|\lambda 0) [1 - (-)^{S+S'}] / 2 \\
 &\times \sum_{\Lambda} (2\Lambda + 1) W(LL'jj'; \Lambda J) \begin{Bmatrix} S & \ell & j \\ S' & \ell' & j' \\ 1 & \lambda & \Lambda \end{Bmatrix} \\
 &\times \left[\sqrt{L(L+1)(2L+1)} W(1\lambda LL'; \Lambda L) \right. \\
 &\quad \left. + (-)^{\lambda+\Lambda+1} \sqrt{L'(L'+1)(2L'+1)} W(1\lambda L'L; \Lambda L') \right] / 2 \tag{30}
 \end{aligned}$$

$$f^{(\text{LSP})}(i, \xi; i', \xi'; \lambda; R) = \int_0^\infty d\rho \phi_i(\xi; \rho) v_{-}^{(\text{SO})}(\lambda; R, \rho) \phi_{i'}(\xi'; \rho) \tag{31}$$

と表される。ここで、 S_{-} は p-n 系の全スピンの大きさ S を変える operator であることに注意する。すなわち、上記の LSP の coupling は、 $S \neq S'$ のチャンネルを結びつけるものになる。

本プログラムは、coupling form factor 中の形状因子の部分を実算することに特化したものである。核子の光学ポテンシャル U_p, U_n と、計算したい p-n 系の内部状態 (i, ℓ, S, j, γ) の指定を入力すると、上記の $f^{(\text{CE})}, f^{(\text{LS})}, f^{(\text{LS1})}, f^{(\text{LSP})}$ を数値的に計算し、ファイルに出力する。上記の説明では、陽子 (p) 由来部と中性子 (n) 由来部を合わせて書いてあるが、実際の計算は両者を分けて行い、別々のファイルに出力する。この出力結果は、その後、実際に散乱を解くステップで必要な入力データとなる。

現在計算可能な、p-n 系の状態は、spin triplet 状態が、 ${}^3S_1, {}^3D_1, {}^3D_2, {}^3D_3$ 、すなわち、 $(\ell, S, j) = (0, 1, 1), (2, 1, 1), (2, 1, 2), (2, 1, 3)$ の各状態、spin singlet 状態が 1P_1 、すなわち $(\ell, S, j) = (1, 0, 1)$ の状態である。重陽子の基底状態が ${}^3S_1 + {}^3D_1$ から成っていることを考えると、これらの状態だけでも、核力による分解過程を見る限りは十分な模型空間を作ることができる。また、p-n 間の相互作用は Reid Soft Core[6] を基本に組み込んであり、 3S_1 と 3D_1 の間の tensor 力を入れることができる。これによって、重陽子散乱におけるスピン偏極量についても定量的な議論ができる。

4. 入力データ

cdcdeu の入力データは 7 つの部分に分かれている。これを一括して 1 つのファイルとして入力する。ここでは、それらの各部分ごとに cdcdeu.d の例を使って説明する（「2. 登録形式」で述べた入力サンプルファイル cdcdeu.d 参照）。

(4.1) ファイル割り当て部

入力データの最初は、このプログラムで入出力に使用するファイルの割り当てを指定する。Fortran の入出力機番と実ファイルの対応を記述する。

```

1:  UU****_CDCdeu_control_data_****
2:  UU06:newUUUUU::cdcdeu.outlist
3:  UU71:newUUUUU::VPC.d
4:  UU73:newUUUUU::WPC.d
5:  UU74:newUUUUU::VPS.d
6:  UU75:newUUUUU::VPS1.d
7:  UU81:newUUUUU::VNC.d
8:  UU83:newUUUUU::WNC.d
9:  UU84:newUUUUU::VNS.d
10: UU85:newUUUUU::VNS1.d
11:  UU999:

```

- 1 行目: コメント。60 文字以内の任意のコメントを書くことができる。
- 2 - 10 行目: OFF, IUNIT, STA, FNAME FORMAT(A1,I3,1X,A8,2X,A50)
読み込み及び書き出しをするファイルの指定を行う。
各変数の意味は次のとおりである。
- OFF: 読み取りスイッチ。空白以外の文字を記入すると、その行はコメント扱いになる。
- IUNIT: 入出力機番。0 ~ 99 の数字。それ以外の数字を指定すると、ファイル割り当て部の入力を終了する。
- STA: ファイルを open するときの status。NEW, OLD など。
- FNAME: path も含めた実ファイル名
- ファイル指定する個数は、計算する form factor の種類と個数によって変わる。
 - 機番 6 についての指定を行わないと、出力は全て標準出力に送られる。
 - 計算を行うポテンシャル (後続の指定で KEYPOT=1 としたもの) については、全て指定しておく必要がある。
 - form factor を書き出すファイルについては、form factor の種類によって機番が以下のように決められているので、対応する番号を指定しなければならない。

機番	種類	略号
	[陽子 (p) - 標的核 (A) 間ポテンシャル]	
71	real central	VPROCE
72	real Coulomb	COUPRO
73	imaginary central	WPROCE
74	real spin-orbit LS+ls	VPROLS
75	real spin-orbit LS1	VPROLS1
76	imaginary spin-orbit LS+ls	WPROLS
77	imaginary spin-orbit LS1	WPRPLS1
78	real spin-orbit LSP	VPROLSP
79	imaginary spin-orbit LSP	WPROLSP
	[中性子 (n) - 標的核 (A) 間ポテンシャル]	
81	real central	VNEUCE
82	real Coulomb	COUNEU
83	imaginary central	WNEUCE
84	real spin-orbit LS+ls	VNEULS
85	real spin-orbit LS1	VNEULS1
86	imaginary spin-orbit LS+ls	WNEULS
87	imaginary spin-orbit LS1	WNEULS1
88	real spin-orbit LSP	VNEULSP
89	imaginary spin-orbit LSP	WNEULSP

(4.2) INPUT DATA 部

システムの指定や歪曲ポテンシャルパラメータの入力等を行う。ポテンシャルを指定する個数は、どの種類を計算させるかによって変わる。

```

1:  ----INPUT DATA-----
2:  IREID=2 58Ni Ed=56MeV Becchetti-Greenlees
3:  58.0 28.0 28.0 AMTAG_ZTAG_TP
4:  1.0 48.7600 1.1700 0.7500 KT_VOP_RORP_ARP
5:  2.0 46.5100 1.1700 0.7500 KT_VON_RORN_ARN
6:  3.0 3.4600 5.2140 1.3200 0.5341 KT_WOP_WDP_ROIP_AIP
7:  4.0 4.6000 5.5860 1.2600 0.5800 KT_WON_WDN_ROIN_AIN
8:  5.0 6.2000 1.0100 0.7500 KT_VSP_RORSP_ARSP
9:  6.0 6.2000 1.0100 0.7500 KT_VSN_RORSN_ARSN
10:
    
```

- 各行の 50 桁目以降の文字は、入力補助のためのメモである。

1 行目: 入力部の区切りのためのコメント。

2 行目: IREID, COMENT FORMAT(9X,I1,A60)
各変数の意味は次のとおりである。

IREID: 計算する deuteron のシステムを指定する。

=0: S-D coupling なし。

p-n interaction は 1-range Gauss(central) にとる。

=1: 束縛状態にだけ S-D coupling を入れる。

p-n interaction は

s- and d-states: 1-range Gauss (central)

p-state : Reid soft core pot.

=2: 束縛状態・分解状態共に S-D coupling を入れる。

p-n interaction は Reid soft core pot.

COMENT: コメント

- 計算のメモなどを書いておくことができる。

3 行目: AMTAG, ZTAG, TP FORMAT(5F10.0)
各変数の意味は次のとおりである。

AMTAG: 標的核の mass number

ZTAG: 標的核の原子番号

TP: 入射核子の、核子あたりの入射エネルギー。ただしこれは、Dirac 現象論ポテンシャルを読み込む場合のチェックにしか関係しない。

4 行目以降: (A(i), i=1,5) FORMAT(5F10.0)

N-A ポテンシャルのパラメータを指定する。

- A(1) でポテンシャルの種類を指定する。
- blank 行 (A(1)=0.0) で INPUT DATA 部の終了を知らせる。
- 同じ概念のものを複数与えると、原則として後で指定したもの (下の行にある方) が優先される。
- 計算に必要なポテンシャルのみ与えればよい。
- 核子のスピン軌道力については、通常 $\ell_N \cdot \sigma_N$ でパラメータを与えることが多いので、ここでもそれに従う。(14) 式とは 2 倍異なるので注意。

A(1) の値による場合分けと、そのときの A(2)–A(5) の意味は次のとおりである。

1.0: p-A の real central part (Woods-Saxon 形: volume 型)

2.0: n-A の real central part (Woods-Saxon 形: volume 型)

- Woods-Saxon 形の potential のときに用いる

A(2): WS pot. の深さ、 V_0

A(3): 半径 parameter、 r_{0R}

A(4): diffuseness parameter、 a_R

3.0: p-A の imaginary central part (Woods-Saxon 形: volume 型+surface 型)

4.0: n-A の imaginary central part (Woods-Saxon 形: volume 型+surface 型)

- Woods-Saxon 形で volume 型と surface 型の geometry が一致する場合に用いる。

A(2): volume 型の深さ、 W_0

A(3): surface 型の深さ、 W_D

A(4): 半径 parameter、 r_{0I}

A(5): diffuseness parameter、 a_{0I}

3.1: p-A の imaginary central part (Woods-Saxon 形: volume 型)

4.1: n-A の imaginary central part (Woods-Saxon 形: volume 型)

- Woods-Saxon 形で volume 型と surface 型の geometry が異なる場合に、3.2, 4.2 と組み合わせて用いる。

- A(2): volume 型の深さ、 W_0
- A(3): volume 型の半径 parameter、 r_{0I}
- A(4): volume 型の diffuseness parameter、 a_{0I}
- 3.2: p-A の imaginary central part (Woods-Saxon 形 : surface 型)
- 4.2: n-A の imaginary central part (Woods-Saxon 形 : surface 型)
 - Woods-Saxon 形で volume 型と surface 型の geometry が異なる場合に、3.1, 4.1 と組み合わせて用いる。
- A(2): surface 型の深さ、 W_D
- A(3): surface 型の半径 parameter、 r_{0ID}
- A(4): surface 型の diffuseness parameter、 a_{0ID}
- 5.0: p-A の real spin-orbit part
- 6.0: n-A の real spin-orbit part
 - Thomas 型の potential のときに用いる。
- A(2): SO pot. の深さ、 V_{SO}
- A(3): 半径 parameter、 r_{0RS}
- A(4): diffuseness parameter、 a_{RS}
- 7.0: p-A の imaginary spin-orbit part
- 8.0: n-A の imaginary spin-orbit part
 - Thomas 型の potential のときに用いる。
- A(2): SO pot. の深さ、 W_{SO}
- A(3): 半径 parameter、 r_{0IS}
- A(4): diffuseness parameter、 a_{IS}
- 9.0: ポテンシャルを外部ファイルから読み込む。
 - potential が Woods-Saxon 形などで表されないときに用いる。読み込む値が入っているファイルの機番を指定する。
 - ポテンシャルファイルの書式については、subroutine PREAD を参照。
- A(2): p-A ポテンシャルのファイルの機番、KIBANP
- A(3): n-A ポテンシャルのファイルの機番、KIBANN
- 9.1: 読み込んだ p-A ポテンシャルに掛ける定数。
- 9.2: 読み込んだ n-A ポテンシャルに掛ける定数。
 - 9.0 により読み込んだポテンシャルに定数を掛けたい場合に指定する。
- A(2): real central への係数、PFACTR1
- A(3): imaginary central への係数、PFACTR2
- A(4): real spin-orbit への係数、PFACTR3
- A(5): imaginary spin-orbit への係数、PFACTR4

(4.3) KEYPOT 部

それぞれの相互作用を計算するかどうかを指定する。

```

1: ----KEYPOT--
2:  VPROCE=1 VNEUCE=1 WPROCE=1 WNEUCE=1 71 81 73 83
3:  VPROLS=1 VNEULS=1 WPROLS=0 WNEULS=0 74 84 76 86
4:  VPROLS1=1 VNEULS1=1 WPROLS1=0 WNEULS1=0 75 85 77 87
5:  VPROLSP=0 VNEULSP=0 WPROLSP=0 WNEULSP=0 78 88 79 89
6:  COUPRO=0 COUNEU=0 72 82
```

- 各行の数字以外の文字は、入力補助のためのメモである。また、各行の 45 桁目以降の数字は、機番指定補助のためのメモである。

1 行目: 入力部の区切りのためのコメント。

2-6行目: (KEYPOT(i), i=1, 18) FORMAT(4(9X, I1))

- 各 KEYPOT(i) の値が、
 = 0: form factor を計算しない。
 = 1: form factor を計算する。
- KEYPOT(i) のどれがどの form factor に対応するかは、入力補助のメモを参考にするとよい。
- 計算する form factor については、対応する機番のファイルを先頭部で指定して、割り当てておく必要あり。

(4.4) RRMAX 部

それぞれの form factor を何 fm まで計算するか (R について) を指定する。

```

1: ----RRMAX_--
2: VPROCE=15.0_VNEUCE=15.0_WPROCE=15.0_WNEUCE=15.0
3: VPROLS=15.0_VNEULS=15.0_WPROLS=15.0_WNEULS=15.0
4: VPRLS1=15.0_VNELS1=15.0_WPRLS1=15.0_WNELS1=15.0
5: VPRLSP=15.0_VNELSP=15.0_WPRLSP=15.0_WNELSP=15.0
6: COUPRO=40.0_COUNEU=40.0
    
```

- 各行の数字以外の文字は、入力補助のためのメモである。

1行目: 入力部の区切りのためのコメント。

2-6行目: (RRMAX(i), i=1, 18) FORMAT(4(7X, F8.0))

- 各 RRMAX(i) の値が、計算する form factor の R の最大値となる。最小値は常に 0 である。ただし、R は入射 deuteron の重心と標的核の相対座標である。
- RRMAX(i) のどれがどの form factor に対応するかは、入力補助のメモを参考にするとよい。

(4.5) DRR 部

それぞれの form factor を何 fm 間隔で計算するか (R について) を指定する。

```

1: ----DRR_--
2: VPROCE=_1.0_VNEUCE=_1.0_WPROCE=_1.0_WNEUCE=_1.0
3: VPROLS=_1.0_VNEULS=_1.0_WPROLS=_1.0_WNEULS=_1.0
4: VPRLS1=_1.0_VNELS1=_1.0_WPRLS1=_1.0_WNELS1=_1.0
5: VPRLSP=_1.0_VNELSP=_1.0_WPRLSP=_1.0_WNELSP=_1.0
6: COUPRO=_1.0_COUNEU=_1.0
    
```

- 各行の数字以外の文字は、入力補助のためのメモである。

1行目: 入力部の区切りのためのコメント。

2-6行目: (DRR(i), i=1, 18) FORMAT(4(7X, F8.0))

- 各 DRR(i) の値が、計算する form factor の R の間隔となる。
- DRR(i) のどれがどの form factor に対応するかは、入力補助のメモを参考にするとよい。

(4.6) PHIHAT 部

deuteron(p-n 間) の波動関数をどのように用意するかを指定する。

```

1: ----PHIHAT_--
2: DRHOHT=_0.10_NRHMAX=_401_KIZAMI=10_PRANGE=_15.000
    
```

- 各行の数字以外の文字は、入力補助のためのメモである。

1 行目: 入力部の区切りのためのコメント。

2 行目: DRHOHT, NRHMAX, KIZAMI, PRANGE

FORMAT(7X,F8.0,7X,I4,4X,7X,I2,6X,7X,F8.0)

DRHOHT: 入射粒子の内部座標 ρ のメッシュ間隔。

NRHMAX: ρ のメッシュ個数。 ρ の最大値は $RHOMAX=(NRHMAX-1)*DRHOHT$ となる。ここで指定するのは、form factor を計算する際に現れる ρ 積分の刻みと個数である。

KIZAMI: 内部波動関数そのものを計算する際には、DRHOHT を KIZAMI で分割した値を ρ のメッシュ間隔とする。

PRANGE: 核子-標的核ポテンシャルのレンジ。form factor を計算する際に、 ρ の積分範囲を、ポテンシャルの short-range 性によって制限して計算の効率を上げる。

- ρ の数値積分は $max(R - PRANGE, 0) \leq \rho/2 \leq R + PRANGE$ の範囲で行われる。そのため、RHOMAX は $(RMAX+PRANGE)*2$ 以上にしておく必要がある。

(4.7) LSJ 部

計算に取り入れる deuteron(p-n 間) の内部状態を指定する。

```
1:  (FROM1*)1*11111*11111*11111*11111*11111*11111*11111*11111*
2:  NOJSLS1(1)114.0
3:  SJALL1(2)111.0111.0111.0112.0113.0
4:  LSALL1(3)110.0112.0112.0112.0
5:  SPALL1(4)111.0111.0111.0111.0
6:  NBOUND1(5)111.0110.0110.0110.0
7:  KMESH1(6)112.0112.0112.0112.0
8:  FKMINC1(7)110.0110.00110.00110.00
9:  FKMAXC1(8)111.00111.00111.00111.00
10: (FROM1*)1*1111*11111*11111*11111*11111*11111*11111*11111*
```

- 1 行目と 10 行目は区切りおよび入力補助のためのガイドである。

2-9 行目: A1, (A(I), I=1, 8) FORMAT(A6,4X,8F7.0)

- 文字列 A1 で読み込むデータの種類を区別する。

NOJSLS: p-n 系の内部状態を (j, l, S) で分類したとき、計算に取り入れるセットの個数。

- 以下の各行では、上記で指定した NOJSLS 個の数値を横に並べる。

SJALL: p-n 系の全角運動量 j を指定する。

LSALL: p-n 系の軌道角運動量 l を指定する。

SPALL: p-n 系の全内部スピン S を指定する。

NBOUND: p-n 系の束縛状態の個数を指定する。

- IREID=0 のときは、 S 波のみ束縛状態を 1 個指定できる。
- IREID=1 のときは、 3S_1 , 3D_1 それぞれに束縛状態を 1 個指定できる。
- IREID=2 のときは、 3S_1 だけに束縛状態を 1 個指定する。(tensor 力で couple している 3D_1 状態は、 3S_1 から自動的に生成される。)

KMESH: 連続状態をいくつの離散状態で表現するか。離散化する個数を指定する。

FKMINC: 連続状態を計算する際の運動量の下限 (fm^{-1} 単位)。

FKMAXC: 連続状態を計算する際の運動量の上限 (fm^{-1} 単位)。

この例題では、 (j, l, S) について 4 つの set を使うことを指定している (NOJSLS= 4.0)。各状態は、 $(j, l, S) = (1, 0, 1), (1, 2, 1), (2, 2, 1), (3, 2, 1)$ と取る。すなわち、 3S_1 , 3D_1 , 3D_2 , 3D_3 の状態である。このうち、 3S_1 に束縛状態を 1 個指定している (NBOUND= 1.0)。ただし、IREID=2 としているので、 3D_1 状態にも自動的に束縛状態が生成される。また全ての状態において、 $k = 0.0 fm^{-1}$ から (FKMINC= 0.0)、 $k = 1.0 fm^{-1}$ まで (FKMAXC= 1.0) の連続状態区間を 2 分割 (KMESH= 2.0) して離散化するように指定している。

5. 出力データ

CDCC_cdcdeu からの出力は、

- (a) 各 form factor をファイルに出力したもの、
- (b) cdc 計算の途中経過と最終結果を出力したもの

の2種類に分けられる。(a)はCDCC計算の次のstepである散乱計算、(12)式の計算、の際の入力となる(次回登録予定のコード参照)。ここでは、(b)の内容について、cdcdeu.dを入力として計算させた出力例をもとに説明する(「2.登録形式」で述べた出力サンプルファイルcdcdeu.outlist参照)。

出力は、大きく分けて次のような順序で並んでいる。

- (1) ファイル割り当て確認
- (2) 入力パラメータ確認
- (3) 生成された内部チャネル一覧
- (4) 生成された波動関数
- (5) form factor 番号付け対応表
- (6) 計算されたform factorの値

(1), (2)については、入力データと対応しているので、ここでの説明は省略する。(5), (6)は、KEYPOTによって計算すると指定したpotentialのタイプごとに出力される。すなわち、計算を指定したタイプの個数だけ出力が繰り返される。

以下、(3)以降について説明する。

(5.1) 内部チャネル一覧

入力で指定した値に基づいて、計算するp-n間の内部状態を数え上げ、それに番号付けを行う。その結果を一覧にして出力する。

---- CHANNEL NUMBERING --- NCCMAX= 14									
NC	SJ	LS	SP	KCPL	NBOU	FKMN	FKMX	DK	
1	: 1.0	0	1.0	103	1	0.000	0.000	1.000	
2	: 1.0	0	1.0	103	0	0.000	0.500	0.500	
3	: 1.0	0	1.0	103	0	0.500	1.000	0.500	
	:		:	(途中略)	:	:	:	:	
12	: 2.0	2	1.0	0	0	0.500	1.000	0.500	
13	: 3.0	2	1.0	0	0	0.000	0.500	0.500	
14	: 3.0	2	1.0	0	0	0.500	1.000	0.500	

- この例では、全部で14個の内部チャネルが生成されている。各変数の意味は次のとおりである。

NC: 通し番号

SJ,LS,SP: 内部チャネルの j, l, S

KCPL: tensor 力による S-D coupling があるとき、区別のためにつける。

NBOU: bound state か (=1)、否か (=0)

FKMN: 離散化した k 区間の下限

FKMX: 離散化した k 区間の上限

DK: 離散化した k 区間の幅

(5.2) 波動関数

上記の内部チャネルごとに、p-n系の波動関数 $\phi_i(l, S, j, \kappa; \rho)$ の情報を出力する。

まず、各チャンネルごとに波動関数を解いた際に、簡単な情報を出力する。(その出力例は省略する。)次に、各チャンネルの情報をまとめて表にして出力する。

-- INFORMATION OF CHANNEL IS SUMMED UP ----									
NC	EINT	FKINT	PHASE(DK/2)	EPS	DK	ID	JJ	LL	SS
1	-2.22460	0.231719	0.00000	0.00000	1.000	0	1.00	0	1.00
2	3.45262	0.288675	117.84272	0.78743	0.500	100	1.00	0	1.00
3	24.16832	0.763763	64.24588	2.42486	0.500	100	1.00	0	1.00
:	:	(途中略)	:	:	:	:	:	:	:
12	24.16832	0.763763	8.93439	0.00000	0.500	100	2.00	2	1.00
13	3.45262	0.288675	0.00168	0.00000	0.500	100	3.00	2	1.00
14	24.16832	0.763763	0.28475	0.00000	0.500	100	3.00	2	1.00

- 各変数の意味は次のとおりである。

NC: 通し番号

EINT: チャンネルの内部エネルギー

FKINT: チャンネルの内部運動量 (波数)

PHASE: 散乱状態の場合、離散化した k 区間の中央での phase shift

EPS: S-D 混合している場合、混合率を表す phase shift

DK: 離散化した k 区間の幅

ID: 離散化した k 区間内で平均するために取った分割数

JJ,LL,SS: チャンネルの j, l, S

次に、各チャンネルの波動関数の値を表にする。

----- WAVE FUNCTION OF EACH CHANNEL -----								
R	NC= 1	NC= 2	NC= 3	NC= 4	NC= 5	NC= 6	NC= 7	...
0.000	0.0000D+00	0.0000D+00	0.0000D+00	0.0000D+00	0.0000D+00	0.0000D+00	0.0000D+00	...
5.000	2.7489D-01	-1.3750D-01	-4.7873D-01	-3.9314D-02	-1.9626D-02	-1.4086D-02	9.3301D-03	...
10.000	8.6574D-02	-3.2627D-01	1.5090D-01	-6.4705D-03	-9.6643D-04	6.7322D-04	-2.1302D-03	...
15.000	2.7196D-02	-3.9439D-02	2.2559D-03	-1.5062D-03	4.2566D-03	1.6700D-03	-8.5251D-04	...
20.000	8.5408D-03	-1.1058D-01	5.7559D-02	-4.0054D-04	-8.5640D-04	3.8700D-03	1.2392D-03	...
25.000	2.6822D-03	-6.3108D-02	-2.9797D-02	-1.1299D-04	6.4818D-04	-2.0190D-03	-1.4234D-03	...
:	:	(以下略)	:	:	:	:	:	...

- 縦に ρ のメッシュ (リスト上は R と記述)、横に最大 10 チャンネルごとに並んで出力される。
- 出力する ρ の間隔を変更するには、ソースプログラムを書き換える。

(5.3) form factor 番号とチャンネルの対応表

計算する coupling form factor $f^{(\alpha)}(i, \xi; i', \xi'; \lambda)$ は、左側のチャンネル (i, ξ) と右側のチャンネル (i', ξ') と λ の組み合わせの個数だけある。 $(\alpha = \text{CE, LS, LS1, LSP})$ である。)しかし、角運動量などで禁止される組み合わせもあるので、全てが値を持つわけではない。また、左右のチャンネルで対称化されているので、独立な組み合わせの個数はさらに減る。

組み合わせの数を配列で扱いやすくするために、まず左右のチャンネルをそれぞれ一つの通し番号 I, K で区別する。内部チャンネル一覧の通し番号 NC に相当するものである。これにより、form factor は、 (I, K, λ) の組み合わせだけあることになるが、さらに配列を compact にするために、値が非 zero の場合だけを 1 からの通し番号で並べる。この通し番号と、実際の (I, K, λ) の対応表 (NOTB) を出力する。


```

===== NUMBER TABLE OF COUPLINGS =====
LAMFLP= 0 SPNFLP= 0.0 KNTLLS= 0

I= 1 K= 1 NOTB= 1
I= 2 K= 1 NOTB= 2
I= 2 K= 2 NOTB= 3
: : (途中略) :
I= 4 K= 2 NOTB= -999 -999 8
I= 4 K= 3 NOTB= -999 -999 9
: : (途中略) :
I=13 K= 9 NOTB= -999 -999 111 -999 112
I=13 K=10 NOTB= -999 -999 113 -999 114
I=13 K=11 NOTB= -999 -999 115 -999 116
I=13 K=12 NOTB= -999 -999 117 -999 118
: : (途中略) :
I=14 K=14 NOTB= 144 -999 145 -999 146
LAMMN1= 1 LAMMX1= 5 LAMDEL= 2
ITBMAX= 146
    
```

- 各変数の意味は次のとおりである。
 - I: 左側のチャンネル番号
 - K: 右側のチャンネル番号
 - NOTB: $\lambda = 0, 1, 2, \dots$ に対応する form factor の通し番号
 - coupling が可能な λ の範囲は チャンネル I, K によって決まる。NOTB の値が-999 の部分は、coupling がない (zero である) ことを表す。
- ITBMAX: NOTB の最大値 (可能な coupling の個数)

(5.4) 計算された form factor

計算された form factor を出力する。

まず、計算に用いた N-A potential の値を出力する。

```

===== FORM FACTOR =====
: : (途中略) :
VO=-48.76000 RO= 1.1700 AO= 0.7500 RR= 4.5289
AT, ZT, TP= 58.00000000 28.00000000 28.00000000
RX= 0.0000 VPROCE=-4.86440D+01
RX= 1.0000 VPROCE=-4.83228D+01
RX= 2.0000 VPROCE=-4.71419D+01
RX= 3.0000 VPROCE=-4.31422D+01
: : (以下略) :
    
```

- 入力したポテンシャルパラメータの値が出力されている。
- $R = RX$ の点での、N-A ポテンシャルの値が出力されている。(この例の場合は、p-A central real potential である。)

次に、出力される form factor の R についての mesh を出力し、それに続けて form factor の値を出力する。

```

----- POTENTIAL TYPE = VPROCE -----
<< 58Ni Ed=56MeV Becchetti-Greenlees ....
R= 0.000 1.000 2.000 3.000 4.000 ....
10.000 11.000 12.000 13.000 14.000 ....
I= 1 K= 1 LAM= 0 NO= 1
-4.2934D+01 -4.2274D+01 -3.9905D+01 -3.4651D+01 -2.5702D+01 ....
-1.0601D-01 -3.4520D-02 -1.1222D-02 -3.6575D-03 -1.1984D-03 ....
I= 2 K= 1 LAM= 0 NO= 2
-3.6032D+00 -3.9106D+00 -4.5363D+00 -4.5753D+00 -3.0926D+00 ....
1.6594D-01 6.7049D-02 2.7789D-02 1.2617D-02 6.1224D-03 ....
: : (以下略) :
    
```

- 先頭 (R= の部分) に出力されている R の値に対応した form factor の値が出力されている。
- I, K, LAM は前述の (I, K, λ) の値、NO は 通し番号 NOTB の値である。

- form factor は ITBMAX 個出力される。
- また、これらの値は対応するファイルにも出力されている。

6. ジョブ制御文（バッチリクエスト文）の作り方

本ライブラリプログラムは VPP5000 上で利用できる。パラレル化はされていない。このプログラムの実行可能ファイルが `cdcdeu.x` という名前で登録されているので、これを実行するバッチリクエストファイル（例えば、`cdcdeu.vp` とする）を作成する。これらの利用者ファイルがあるディレクトリを `mydir` とすると、`cdcdeu.vp` の中身は次のようになる。

```
#
cd mydir
cdcdeu.x < cdcdeu.d
```

入力データは `cdcdeu.d` に作っておく。出力データは `cdcdeu.outlist` に書き込まれる。（`cdcdeu.d` の中身を書き換えることで、出力データのファイル名を変更できる。）出力 form factor は、(4-2) の冒頭表の入力データに指定したファイルに書き込まれる。これを、例えば

```
kyu-vpp% qsub -q s cdcdeu.vp
```

とサブミットする。もちろん、公開されているソースファイルを取り寄せ、すべてを手元で行ってもよい。コピー例：

```
kyu-vpp% cp /usr/local/cdcc/CDCC_cdcdeu.f cdcdeu.f
```

手元で行う際は、`cdcdeu.f` の中で、一般化行列固有値問題を解くために、富士通 SSL-II の DGSEG2 が呼ばれていることに注意。

7. 制限事項および注意事項

本プログラムで扱うような計算をするには、対象としている（分解させる）原子核の内部波動関数を正しく解く必要があり、そのためにはその原子核ごとにチューニングを行う必要がある。本プログラムでは、重陽子の分解を realistic に扱えるように調整してある。そのため、以下の制限がある。

- 標的核は任意の原子核を指定できるが、入射核は重陽子に限られる。入射した重陽子が p と n に分解する過程を扱うことができる。
- 計算可能な p - n 系の状態は、 3S_1 , 3D_1 , 3D_2 , 3D_3 , 1P_1 である。
- 分解状態（励起状態）については、一様な連続状態として扱う。共鳴などの特殊な構造がある場合は考慮していない。
- 主に核力で分解する場合の結合ポテンシャルを計算する。Coulomb 力による分解のポテンシャルについては、指定は可能であるが、その長距離性のため、精度や取り扱いについて注意が必要である。

これらの制限は、ソースを一部書き直すことで拡張することができる。書き直す際のポイントは、分解した2クラスター間の相互作用に適切なものを与えることである。

プログラム内部で宣言している配列のサイズにも制限がある。実行後、サイズエラーのメッセージが出力される場合は、該当する配列のサイズを増やせばよい。

サンプルで与えてある入力データは、出力結果が少なくなるようにしたもので、飽くまでテスト計算用サンプルである。現実の核反応に適用する際には、 k の最大値、区間幅などを調整して、十分に大きな模型空間を取っておく必要がある。また、form factorを計算する R のメッシュ幅も、CDCC方程式を数値的に解く上で十分な精度を持つ程度に小さくしておかなければいけない。

プログラムのメモリサイズは約400MB。計算時間は、入力データに大きく依存するが、テスト計算用サンプル(cdcdeu.d)の小規模計算で、60秒である。

本プログラムを使った計算で論文を発表する場合は、プログラム名(CDCC_cdcdeu)と作成者名を明記すること。教育・学術研究の目的に限ってソースの変更を認める。また変更したプログラムによる成果を発表する場合も、本プログラム名と作成者名を明記すること。

【謝辞】

本プログラムは、筆者らが九州大学情報基盤センターのプログラムライブラリ開発計画「CDCC法による原子核3体ブレイクアップ反応解析コード」において作成している一連のプログラムの一つであり、開発用計算費が同センターから援助されている。

参考文献

- [1] M. Kamimura, M. Yahiro, Y. Iseri, Y. Sakuragi, H. Kameyama, and M. Kawai, Prog. Theor. Phys. Suppl. **89** (1986).
- [2] N. Austern, Y. Iseri, M. Kamimura, M. Kawai, G. Rawitscher, and M. Yahiro, Phys. Rep. **154**, 125 (1987).
- [3] J. A. Tostevin, F. M. Nunes, and I. J. Thompson, Phys. Rev. C **63**, 024617 (2001).
- [4] T. Matsumoto, E. Hiyama, K. Ogata, Y. Iseri, M. Kamimura, S. Chiba and M. Yahiro, Phys. Rev. C **70**, 061601(R) (2004).
- [5] Y. Iseri, M. Tanifuji, Y. Aoki, and M. Kawai, Phys. Letters **B265** 207 (1991).
- [6] R. V. Reid, Ann. of Phys. **50** 411 (1968).