

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II) : CDCC散乱S行列の算出(略称 : CDCC_hicadeu) : 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究室

八尋, 正信
九州大学大学院理学研究院

櫻木, 弘之
大阪市立大学大学院理学研究科

他

<https://doi.org/10.15017/1470146>

出版情報 : 九州大学情報基盤研究開発センター全国共同利用システム広報. 1 (1), pp.16-28, 2007-05.
九州大学情報統括本部広報委員会
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II): CDCC 散乱S行列の算出 (略称: CDCC_hicadeu)

～ 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

不安定核の研究が原子核物理学の新しい地平を切り拓きつつある。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。

ここ2, 3年の間に、不安定核研究にとっての第2世代とも言うべき新しい加速器が世界で幾つか稼動し始めるのに対応して、理論的にも一層進んだ研究法の開発が期待されている。特に、入射核が「弱く束縛した3つのクラスター」でできている場合の核反応解析の開発が急務である。しかし、この反応は、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、もともとは、弱く束縛した「安定核」が入射するブレイ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]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、

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

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。すでに、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）に使用される計算するためのコードを、「(I) CDCC核ポテンシャルの算出（略称：CDCC_cdcdeu）」として登録してある。

今回の登録では、第2弾として、「第1弾で求めたチャンネル結合ポテンシャルを入力として、チャンネル結合方程式を散乱の境界条件の下に解き、散乱のS-行列を求めるコード」を登録する。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。また、以下の式および変数記号は、前回の登録プログラムマニュアル [5] のものと共通である。

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II）：CDCC散乱S行列の算出（略称 CDCC_hicadeu）

- 英語名：

Continuum-Discretized Coupled-Channels Method for Nuclear Reactions
(II) : CDCC S-matrix elements (CDCC_hicadeu)

- 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：2006年12月

- 使用言語：Fortran

- ソースの公表：

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

- 使用OS：UXP(VPP5000)

3. 原子核反応の CDCC 法

重陽子や不安定核などのように束縛エネルギーが小さい原子核を入射粒子とした原子核反応においては、それらが反応の中間状態で分解 (breakup) する過程が起こりやすいと考えられる。実際、この過程は重陽子や不安定核の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。

そのような分解過程を量子力学的にできるだけ正しく取り扱うための処方の一つが、「離散化連続チャンネル結合法 (CDCC 法)」である。前回公開したコード (cdccdeu) は、この CDCC 方程式に現れる核ポテンシャルを計算するためのものであった。今回公開するコードはそれに続く計算を行うもので、cdccdeu で計算・出力された核ポテンシャルを読み込み、散乱の境界条件の下で CDCC 方程式を解いて散乱 S 行列を計算・出力する。

今回も、実用的例題として重陽子入射反応を例に取り上げるが、計算の基本は汎用的であるので、一般の 2 クラスター核入射反応に対しても、それに対応する核ポテンシャルを計算して読み込ませれば、散乱の計算が可能である。

(3.1) CDCC 方程式と S 行列

文献 [1] の第 3 章および前回の解説 [5] 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。詳細はこれらの文献を参照されたい。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容易に拡張することができる。

全エネルギー E 、全角運動量 J を指定したとき、今回解くべき CDCC 方程式は、文献 [5] 中の式 (12) で与えられる。

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

ここで、 R は p-n 系の重心と A の相対座標であり、 μ_R は d-A 系の換算質量である。 ϵ_i は p-n 系の内部エネルギーでチャンネルごとに決まった値を取る。また、 V_p^{Coul} は p と A の間の Coulomb ポテンシャルであるが、簡単のために、座標を R に変えている。 c は種々の角運動量や p-n 系の内部状態などチャンネルを区別するのに必要な index をまとめたものである。

チャンネル c と c' 間を結んでいるのが coupling potential $F_{cc'}^{(J)}(R)$ で、文献 [5] の (13) 式より、

$$F_{cc'}^{(J)}(R) = \left\langle \left[\Phi_i \otimes i^L Y_L(\hat{\mathbf{R}}) \right]_{JM} \left| U_p(\mathbf{r}_p, \mathbf{s}_p) + U_n(\mathbf{r}_n, \mathbf{s}_n) \right| \left[\Phi_{i'} \otimes i^{L'} Y_{L'}(\hat{\mathbf{R}}) \right]_{JM} \right\rangle_R \quad (2)$$

で与えられる。 $\langle \dots \rangle_R$ は、 R 以外の全ての変数での積分を表す。この coupling potential $F_{cc'}^{(J)}(R)$ の具体的な表式については、文献 [5] を参照のこと。coupling potential は、種々の角運動量に依存する幾何学的係数の部分と、それらにあまり依存しない形状因子 (form factor) の部分に分けることができる。cdccdeu は、形状因子の項を数値的に計算し、ファイルに出力する。

CDCC 方程式 (1) はチャン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 行列を求めることになる。これが今回の問題である。境界条件としては、 $E - \epsilon_i > 0$ の open チャンネルに対しては、 $R = 0$ の原点で

$$u_c^J(0) = 0 \quad \text{for all } c \quad (3)$$

および、 $R \rightarrow \infty$ の漸近領域で、

$$u_c^J(R) \rightarrow \delta_{cc_0} U_L^{(-)}(P_c R) - \sqrt{v_{c_0}/v_c} \hat{S}_{cc_0}^J U_L^{(+)}(P_c R) \quad (4)$$

と取る。ここで、 $U_L^{(\pm)}(P_c R)$ は、チャンネル c での、波数 P_c 、角運動量 L に対する外向き (+) および内向き (-) の Coulomb 波動関数である。また、 c_0 は入射チャンネルを表しており、 v_c はチャンネル c での p-n の重心と A の相対速度である。漸近領域での係数 $\hat{S}_{cc_0}^J$ が S 行列で、これから様々な物理量を計算することができる。 $E - \epsilon_i < 0$ の closed チャンネルに対しては、原点で 0 とするのは同じだが、漸近領域で指数関数的に減少する負エネルギーの Coulomb 関数に接続するような境界条件とする。

(3.2) 数値計算

連立 2 階微分方程式を数値的に解く際には、 R を有限の幅 ΔR で区切り、Störmer の方法を用いて差分で解く。それぞれのチャンネルの解を原点で 0 とし、2 番目の点に有限の値を適宜与え、外向きに解いていくことで、必要な独立解のセットを得る。それらの数値解のセットに対して、coupling potential が十分小さくなるような $R = R_m$ で漸近形と滑らかに接続するという条件を課して、正しい波動関数の解と S 行列を求めることができる。

計算時間は、 R のメッシュ数 $N_R = R_m/\Delta R$ に比例し、同時に結合するチャンネル数 N_c の 3 乗に比例する。また、計算させる全角運動量 J の個数 N_J にも比例する。

$$\text{計算時間} \propto N_R \times N_c^3 \times N_J \quad (5)$$

今回公開するコード hicideu は、こうして得られた S 行列の値をファイルに出力する。また、指定すれば波動関数を出力させることもできる。

(4) 式の S 行列 $\hat{S}_{cc_0}^J$ は、弾性散乱に対してはそのままよい

$$S_{c_0c_0}^J = \hat{S}_{c_0c_0}^J \quad (6)$$

が、breakup 状態に対しては、CDCC で用いている breakup 状態は k について有限の幅 Δk を持った状態として扱われていることから、この区間内での density

$$S_{cc_0}^J = \hat{S}_{cc_0}^J / \sqrt{\Delta k} \quad (7)$$

として考える方が都合がよい場合がある。hicideu からファイル出力されるのは、 \hat{S}_{cc_0} ではなく S_{cc_0} であることに注意。

(3.3) 運動学の相対論的補正

入射エネルギーが数百 MeV 以上になると、散乱計算の際、運動学 (kinematics) の相対論的補正が必要になる。この code では、計算は非相対論的 Schrödinger 方程式に基づいて行うが、運動量や運動エネルギーに対して 2 つのタイプ (Type I と Type II) の相対論的補正を行うことができる。以下、使用している補正式について説明する。

入射粒子を a、標的核を A とし、それらの質量をそれぞれ M_a 、 M_A とする。実験室系での粒子 a の運動エネルギー (入射エネルギー) を T_a^L 、重心系 (a, A の 3 元運動量の和が 0 となるような系) での 3 元運動量の大きさを K で表す。以下では、簡単のため光速 $c = 1$ とする。

このとき、 K は

$$K = P_a^L M_A / E_{\text{tot}}^C \quad (8)$$

で求めることができる。ただし、 P_a^L は粒子 a の実験室系での 3 元運動量の大きさ、 E_{tot}^C は重心系での a, A を合わせた全エネルギーで、

$$P_a^L = \sqrt{(E_a^L)^2 - M_a^2}, \quad E_{\text{tot}}^C = \sqrt{M_a^2 + M_A^2 + 2M_A E_a^L} \quad (9)$$

と書ける。 E_a^L は実験室系での粒子 a のエネルギーで、 $E_a^L = M_a + T_a^L$ である。

Type I と Type II どちらでも、計算に使う a と A の相対運動の運動量は K とする。ただし、重心系での運動エネルギーの取り方が異なっており、それに伴い運動量と運動エネルギーの関係式の係数である換算質量の取り方も異なることになる。それぞれ表にまとめると以下のようになる。

Type	I	II
運動エネルギー	$\frac{K^2}{2E_a^C} + \frac{K^2}{2E_A^C}$	$\frac{K^2}{E_a^C + M_a} + \frac{K^2}{E_A^C + M_A}$
換算質量	$\frac{E_a^C E_A^C}{E_a^C + E_A^C}$	$\frac{1}{2} \frac{(E_a^C + M_a)(E_A^C + M_A)}{E_a^C + M_a + E_A^C + M_A}$

ここで、 E_i^C は粒子 i の重心系での全エネルギーで、 $E_i^C = \sqrt{K^2 + M_i^2}$ で与えられ、 $E_{\text{tot}}^C = E_a^C + E_A^C$ の関係がある。

4. 入力データ

hicadeu の入力データは 2 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 hicadeu.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 hicadeu.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:  ___****_HICADEU_control_data_****
2:  06:new_____::hicadeu.outlist
2:  03:new_____::smat.d
3:  71:old_____::VPC.d
4:  73:old_____::WPC.d
5:  74:old_____::VPS.d
6:  75:old_____::VPS1.d
7:  81:old_____::VNC.d
8:  83:old_____::WNC.d
9:  84:old_____::VNS.d
10: 85:old_____::VNS1.d
11: 999:

```

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 - 11 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, replace, unknown など。

FNAME: path も含めた実ファイル名

- 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。
- 機番 3 には、計算した S 行列を書き出すファイルを指定する。
- 70 番、80 番台のファイルの個数は、用いる form factor の種類と個数によって変わる。計算に用いる form factor(後続の指定で KEY=1 としたもの)については、全て指定しておくことが必要である。

W: imaginary central
 VLS: real spin-orbit (LS+ls)
 WLS: imaginary spin-orbit (LS+ls)
 VS1: real spin-orbit (LS1)
 WS1: imaginary spin-orbit (LS1)
 VSP: real spin-orbit (LSP)
 WSP: imaginary spin-orbit (LSP)
 COU: real Coulomb
 STL: effective TL tensor
 STR: effective TR tensor

4 行目: KAKU FORMAT(8I5)

計算の途中の情報を機番 6 に出力するかどうか指定する。

- 基本的に、各 KAKU の値が 1 以上で出力、0 以下で未出力になる。
 - KAKU のどれがどの出力に対応するかは、入力補助のメモを参考にする。
- FF: 読み込んだ form factor を出力する。指定した値を出力の刻みとする。
- NOTB: 読み込んだ form factor の番号付けの表を出力する。
- ZFAC: form factor に掛ける幾何学的係数 Z-factor の値を出力する。全ての場合で出力すると大量になるので、指定した値と全角運動量 J が一致した場合のみ出力する。
- V: 現在は使っていない。
- S: 計算した S 行列の値を出力する。1 を指定すると入射チャンネルからの S 行列要素のみ、2 を指定すると全チャンネルからの S 行列要素を出力する。

5-7 行目: FACV ~ FSWTR FORMAT(4F10.0)

読み込んだ coupling の大きさを変えるために係数を掛けたい場合に係数を指定する。

- 係数の対応は、入力補助のメモを参考にする。

FACV: real central に掛ける係数

FACW: imaginary central に掛ける係数

FACVLS: real spin-orbit (LS+ls) に掛ける係数

FACWLS: imaginary spin-orbit (LS+ls) に掛ける係数

FACVS1: real spin-orbit (LS1) に掛ける係数

FACWS1: imaginary spin-orbit (LS1) に掛ける係数

FACCOU: real Coulomb に掛ける係数

FSVTL: real effective TL tensor に掛ける係数

FSWTL: imaginary effective TL tensor に掛ける係数

FSVTR: real effective TR tensor に掛ける係数

FSWTR: imaginary effective TR tensor に掛ける係数

8 行目: RMAX, DR, ROCL, RWFMAX FORMAT(5F10.0)

動径座標に関する計算 parameter の値を指定する。

RMAX: 波動関数を漸近形と接続する R の値、 R_m 。単位は fm。

DR: 差分で解く際の R のメッシュ間隔、 ΔR 。単位は fm。

ROCL: Coulomb ポテンシャルの半径 parameter、 r_0^{CL} 。単位は fm。

RWFMAX: 計算した波動関数を出力する際の R の上限値。単位は fm。

9 行目: EINPUT, KTLREL, IWAVE, NCWFMX FORMAT(F10.0,6I5)

入射エネルギーなどの値を指定する。

EINPUT: 実験室系での入射エネルギー。単位は MeV。

KTLREL: 入射エネルギーが高い場合、運動量とエネルギーの関係に相対論的補正を行うかどうか指定する。

- = 0: 相対論的補正を行わない。
 - = 1, 2: 相対論的補正を行う。1, 2 は、それぞれ、(3.3) 節の Type I, II の補正式に対応している。
- IWAVE: 波動関数を出力するかどうか指定する。
- = 0: 波動関数を出力しない。
 - > 0: 機番 4 のファイルに、指定した値の刻みで波動関数を出力する。
- NCWFMX: どのチャンネル番号までの波動関数を出力するか指定する。
- = 0: 全チャンネルの波動関数を出力する。
 - > 0: 指定した値のチャンネル番号までの波動関数を出力する。
- 10 行目: JMIN, JMAX, JDEL FORMAT(5F10.0)
計算をする全角運動量 J の範囲を指定する。
- JMIN: J の最小値。
JMAX: J の最大値。
JDEL: J の刻み値。
- 11 行目: JSON, NCCUT, NCTRAN, KTL DST, KTLOPM FORMAT(8I5)
計算法や近似法を指定する。
- JSON: 断熱近似を行うかどうか指定する。
- = 0: 断熱近似を行わない。
 - > 0: 断熱近似を行う。全チャンネルの内部エネルギーを、ここで指定した値の番号のチャンネルの内部エネルギーに縮退させた計算を行う。
- NCCUT: 計算に取りこむチャンネル数を制限するかどうか指定する。
- = 0: チャンネル数を制限しない。coupling のファイルから読み込んだチャンネルを全て取り入れる。
 - > 0: チャンネル数の制限を行う。ここで指定した値の番号のチャンネルまでしか取り入れない。
- NCTRAN: チャンネル数の制限をもっと細かく指定する。
- = 0: チャンネル数の制限をしない。
 - > 0: チャンネル数の制限を行う。ここで指定した個数のチャンネルを計算から除く。どの番号のチャンネルを除くかは、続く行の NCOFF で決める。
 - =-10: チャンネル数の制限はしないが、one-step 計算を行う。
 - =-20: チャンネル数の制限はしないが、連続状態間の coupling を切った計算を行う。
- KTL DST: 計算する deuteron のシステムを指定する。cdcdcu で form factor を計算した際の IREID の値と同じ値にする。
- =0: p-n 間のテンソル力による S-D coupling なし。
 - =1: 束縛状態にだけ、p-n 間のテンソル力による S-D coupling を入れる。
 - =2: 束縛状態・分解状態共に、p-n 間のテンソル力による S-D coupling を入れる。
- KTLOPM: deuteron の現象論的光学ポテンシャルによる計算を指定する。
- =0: 現象論的光学ポテンシャルは使わない。
 - > 0: 現象論的光学ポテンシャルによる計算を行う。この場合、form factor の読み込みは行わず、ここで指定した値の機番のファイルからポテンシャル parameter を読み込む。parameter の詳細は subroutine FFOPM を参照。
- 12 行目: NCOFF FORMAT(13I3)
計算に取り入れないチャンネルの番号を並びで指定する。
- 11 行目で指定した NCTRAN の個数だけ指定する。

5. 出力データ

CDCC_hicadeu からの出力は、

- (a) S 行列要素や波動関数をファイルに出力したもの、
- (b) 散乱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 である断面積などの散乱物理量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、hicadeu.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 hicadeu.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) 読み込んだ form factor の情報
- (4) 生成された散乱用の内部チャンネル一覧
- (5) 計算された S 行列要素の値

(1), (2) については、入力データと対応しているため、ここでの説明は省略する。(3) についても、読み込んだファイル情報の確認出力であるため、ここでの説明は省略する。(5) が、このコードで求める最終結果で、計算を指定した全角運動量 J の個数だけ出力が繰り返される。

以下、(4), (5) について説明する。

(5.1) 散乱用内部チャンネル一覧

form factor 計算時に cdcdeu で作成した p-n 系の内部チャンネルの個数と、今回 hicadeu で散乱計算を行う際に結合させるチャンネルの個数は一般に異なる。それは、散乱計算の際は角運動量の組み合わせのために、p-n 系の内部状態は同じでも散乱の軌道角運動量が異なるというサブチャンネルが存在するからである。たとえば、p-n 系の全角運動量 (全スピン) を j とすると、p-n の重心と標的核の間の軌道角運動量 L は、全系の全角運動量 J の一つの値に対して、

$$L = J - j, J - j + 1, \dots, J, \dots, J + j - 1, J + j$$

の $2j + 1$ 個の値を取り得る。このうち実際に同時に結合するのはパリティが等しいチャンネル同士に限られる。hicadeu で散乱計算に使用し、入出力に用いているチャンネル番号はこのサブチャンネルも含んだ通し番号であることに注意すること。

以下に、出力例を示す。

```
===== CHANNEL INFORMATION =====
NGMAX= 39      INITMX= 7
DR= 0.0500 NRCC= 401  RCC= 20.0000
ELAB= 56.00000 ECM= 54.13333 ETOTAL= 51.90873
COULOMB RADIUS : RCOUL= 4.8386 ROCL= 1.25000
```

- 各項目の意味は次のとおりである。

NGMAX: チャンネル総数。

INITMX: 入射チャンネルの中で、チャンネル番号が最大のもののチャンネル番号。

DR: R についての差分のメッシュ間隔。

NRCC, RCC: 漸近形につなぐメッシュ点番号とそこでの R の値。

ELAB,ECM,ETOTAL: 実験室系での入射エネルギー、重心系での入射エネルギー。

ETOTAL: 全エネルギー。

RCOUL,ROCL: Coulomb ポテンシャルの半径パラメータ値。

次に、各チャンネルでの入射粒子の情報が表になって出力される。

NG	EINCC	FKINT	DKCC	ETRUE	SJCC	LSCC	SPCC	NBF	NBF2	KPLD	...
1 :	-2.22460	0.23069	1.00000	-2.22460	1.00	0	1.00	1	4	1	...
2 :	3.45262	0.28739	0.50000	3.45262	1.00	0	1.00	2	5	2	...
3 :	24.16832	0.76037	0.50000	24.16832	1.00	0	1.00	3	6	3	...
4 :	-2.22460	0.23069	1.00000	-2.22460	1.00	0	1.00	1	4	4	...
5 :	3.45262	0.28739	0.50000	3.45262	1.00	0	1.00	2	5	5	...
6 :	24.16832	0.76037	0.50000	24.16832	1.00	0	1.00	3	6	6	...
:	:	:	(以下略)	:	:	:	:	:	:	:	:

- 各項目の意味は次のとおりである。

EINCC: p-n 系の内部エネルギー (断熱近似をすると縮退した値になる)。

FKINT: p-n 系の内部運動量 (波数)。

DKCC: 離散化した k 区間の幅。

ETRUE: p-n 系の内部エネルギー (断熱近似をしても正しい値を保持する)。

SJCC, LSCC, SPCC: p-n 系の角運動量 j, ℓ, S 。

NBF, NBF2: form factor で付けた p-n 系の状態の通し番号。

KPLD: S-D 結合状況を管理するための指標。

さらに続けて、各チャンネルでの重陽子と標的核の相対運動の情報が表になって出力される。

NG	ECMCC	FKREL	ETACC	INIT	IOPN	DL2	RMASS	ZZC	FFMM
1 :	54.1333	2.23771	0.83333	1	1	-2	1.93333	28.0000	0.092500
2 :	48.4561	2.11712	0.88080	0	1	-2	1.93333	28.0000	0.092500
3 :	27.7404	1.60187	1.16411	0	1	-2	1.93333	28.0000	0.092500
4 :	54.1333	2.23771	0.83333	1	1	0	1.93333	28.0000	0.092500
5 :	48.4561	2.11712	0.88080	0	1	0	1.93333	28.0000	0.092500
6 :	27.7404	1.60187	1.16411	0	1	0	1.93333	28.0000	0.092500
:	:	:	(以下略)	:	:	:	:	:	:

- 各項目の意味は次のとおりである。

ECMCC: 相対運動のエネルギー。

FKREL: 相対運動の運動量 (波数)。

ETACC: ゾンマーフェルトパラメータの値。

INIT: 入射チャンネルであるかどうかを表す指標。そのチャンネルが入射チャンネルになりうるとき 1、そうでないとき 0 の値を取る。

IOPN: open チャンネルであるかどうかを表す指標。そのチャンネルが open チャンネルのとき 1、closed チャンネルのとき 0 の値を取る。

DL2: 軌道角運動量と全角運動量との差の 2 倍の値、 $(L - J) \times 2$ 。

RMASS: amu 単位での換算質量。

ZZC: 入射粒子と標的核の電荷の積。

FFMM: $2\mu_R/\hbar^2$ の値。

(5.2) 計算された S 行列要素の値

全系の全角運動量 J ごとに S 行列要素の値を出力する。以下では、 $J = 10$ の場合を例に説明する。

まず、 J の値を見出しとして出力し、続けて、結合しているチャンネル番号を示す。

```

*****
TOTALJ= 10.00
*****
N : - 1- 2- 3- 4- 5- 6- 7- 8- 9-10-11-12-13-14-15-16-17-18-19-20-21-22-23- ...
NOTCC: 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 ...
IPARCC: -1 -1 -1 1 1 1 -1 -1 -1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 1 1 -1 -1 ...

```

- 各項目の意味は次のとおりである。

TOTALJ: 全系の全角運動量、 J 。

N: チャンネル番号。

NOTCC: そのチャンネルが結合しているか(計算に取り入れられているか)どうかを示す。
1で結合し、0で結合していない。NCCUTやNCTTRANでチャンネルを除くとこの値が変わる。

IPARCC: そのチャンネルのパリティ。パリティ保存則のため、この値が異なるチャンネル同士は結合しない。

次に、チャンネル結合方程式を解いて得られたS行列の値を出力する。

```

nccmax= 22  numini= 2
nchanl= 1  2  3  7  8  9 10 11 14 15  18 19 22 23 26 27 30 31 34 35  38 39

----- Nuclear S-matrix Elements -----
--- ECM( 1)= 54.13333, J= 10.0 ---
J      I      LJ      ECMJ      | S |      delta      S-MATRIX      S2/DK
1<--  1:    9  54.1333  8.856058D-02  122.253  (-3.811864D-02, -7.993713D-02)  7.842976D-03
2<--  1:    9  48.4561  8.582604D-02   90.844  (-8.578879D-02, -2.528505D-03)  1.473222D-02
3<--  1:    9  27.7404  3.157878D-02    4.999  ( 3.109920D-02,  5.482604D-03)  1.994439D-03
7<--  1:   11  54.1333  5.164410D-03   81.586  (-4.943262D-03,  1.495088D-03)  2.667113D-05
8<--  1:   11  48.4561  1.407673D-03  166.542  ( 1.255182D-03, -6.372293D-04)  3.963085D-06
9<--  1:   11  27.7404  1.721247D-03  127.481  (-4.466216D-04, -1.662293D-03)  5.925381D-06
10<-- 1:    9  48.4561  1.759449D-02  140.557  ( 3.391318D-03, -1.726456D-02)  6.191320D-04
:      :      :      (途中略)      :      :      :
UNITARITY= 3.4426291D-02

```

- 各項目の意味は次のとおりである。ここで出力しているS行列は、 $S_{cc_0}^J$ ではなく $\hat{S}_{cc_0}^J$ の値であることに注意。

nccmax: 同時に結合しているチャンネルの個数。

numini: その中にある始チャンネル(入射チャンネル)の個数。

nchanl: 同時に結合しているチャンネルの番号一覧。

J, I: 終チャンネル番号と始チャンネル番号。

LJ: 終チャンネルの軌道角運動量、 L' 。

ECMJ: 終チャンネルの相対運動エネルギー。

|S|: 始チャンネルから終チャンネルへ行くS行列要素の絶対値。

delta: 始チャンネルから終チャンネルへ行くS行列要素の偏角の1/2。degree単位。弾性チャンネルの場合、散乱の位相差(phase shift)に相当する。

S-MATRIX: 始チャンネルから終チャンネルへ行くS行列要素の値。実部と虚部がある。

S2/DK: 終チャンネルが離散化されたbreakup状態の場合、S行列要素の絶対値2乗を離散化の幅 Δk で割った値。breakup状態でない場合は、単に行列要素の絶対値2乗の値。

UNITARITY: S行列要素の絶対値2乗を全終チャンネルについて和を取った値。全てのcoupling potentialが実数であれば、この値は保存則のために1となるはずである。potentialの虚数部による吸収の効果を示す指標となる。

- これらの結果が、始チャンネルの個数だけ、またパリティごとに出力される。

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。連立 1 次方程式を解く subroutine として、LAPAC の ZGESV が使われている。

このプログラムの実行可能ファイルが hicaudeu.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、hicaudeu.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名を mydir として、hicaudeu.vp の中身を、次の [A],[B] の場合に分けて記す。

[A] 既に CDCC_cdcdeu を使って form factor が求まっている場合

入力データは hicaudeu.d に作る（サンプル参照）。form factor を収めた file 名を書き込む。

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

出力データは hicaudeu.outlist に書き込まれる。さらに、出力の S -行列は、smat.d にも書き込まれる（この情報は、登録予定の第 3 段のコードで読み込まれ、断面積の計算などに使われる）。（hicaudeu.d の中身を書き換えることで、これらの出力用のファイル名を変更できる。）

[B] 初めに CDCC_cdcdeu で form factor を作り、続けて CDCC_hicaudeu を動かす場合

前段の CDCC_cdcdeu のために入力データを cdcdeu.d に作る（サンプル参照）。form factor を収める file 名を書き込む。後段の CDCC_hicaudeu のための入力データを hicaudeu.d に作る（サンプル参照）。form factor を収めた file 名は、前段のものと同じにする。

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

前段の出力については、[1] を参照。後段については、[A] と同じである。

このようにして作った hicaudeu.vp を、例えば

```
kyu-vpp% qsub -q s hicaudeu.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。ソースは約 5000 行の長さである。

コピー例：

```
kyu-vpp% cp /usr/local/cdcc/CDCC_hicaudeu.f hicaudeu.f
```

コンパイル例：LAPAC の ZGESV が使われているので、例えば、

```
f90 -Oe -Ps -Z list -Wv,-m3 -o hicaudeu.x hicaudeu.f -llapackvp -lblasvp
```

のようにコンパイルする。

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）入射原子核や入射エネルギーに合わせて、チャンネル数や入力パラメータ値をチューニングする必要がある。

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、あ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 計算や散乱計算の際の R のメッシュ幅、漸近形に接続する R の位置も、CDCC 方程式を数値的に解く上で十分な精度を持つような値にしなければいけない。

テスト用のサンプル file は、前節 [B] の場合用に作ってある。ここでの `cdcdeu.d` は、マニュアル [1] の `cdcdeu.d` と少し変えてある（ S -行列を十分な精度で計算するために、form factor を計算する r の刻みと上限を変えてある）。

本プログラム内部で宣言している配列のサイズは、例題を扱える程度のものに抑えてある。より現実的な計算を行おうとした際に、配列のサイズエラーのメッセージが出力される場合は、ソースプログラム内の該当する配列のサイズを増やせばよい。

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 (`hicadeu.d`) の小規模計算で、約 10 秒である。

本プログラムおよび入力サンプルでは、重陽子分解の場合を扱えるように調整してあるが、ソースを一部書き直すことで一般の 2 クラスタ分解問題に拡張することができる。

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_hicadeu`) 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。

本プログラムは、VPP5000 用に作られているが、その I、その II 共に、同機の次期機で利用できるように取り計らう。

【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 体ブレー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] 井芹康統, 上村正康, 八尋正信, 櫻木弘之, 緒方一介, 九州大学情報基盤センター「広報」**5**, 117 (2006).