

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III) : 散乱断面積・偏極量の算出(略称 : CDCC_xpoladeu) : 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/10.15017/1470154>

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 (3), pp.88-106, 2008-03.
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 III): 散乱断面積・偏極量の算出 (略称: CDCC_xpoladeu)

～ 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]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

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

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）に使用されるチャンネル結合ポテンシャルを計算するためのコード「(I) CDCC核ポテンシャルの算出（略称：CDCC_cdcdeu）」を登録してある [5]。

また、登録の第2弾として、(I) で求めた結合ポテンシャルを読み込み、チャンネル結合方程式を散乱の境界条件の下に解いて、散乱のS-行列を求めるためのコード「(II) CDCC散乱S行列の算出（略称 CDCC_hicadeu）」も登録してある [6]。

今回の登録では、第3弾として、S-行列から散乱断面積や偏極量などの物理量を計算するコードを登録する（略称 CDCC_xpoladeu）。これにより、CDCC法による計算値と実験データとの直接比較ができるようになる。

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、以前の登録プログラムマニュアル [5, 6] のものと共通である。

本コード（略称 CDCC_xpoladeu）の登録により、本CDCCシリーズは完成する。

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III）：CDCC散乱断面積・偏極量の算出（略称 CDCC_xpoladeu）
英語名： Continuum-Discretized Coupled-Channels Method for Nuclear Reactions
（III）：CDCC cross section and polarization observables
- 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： 2007年9月
- 使用言語： Fortran
- ソースの公表：
 - /usr/local/cdcc/xpoladeu.f（Fortranソース）
 - /usr/local/cdcc/xpoladeu.d（入力データサンプル）
 - /usr/local/cdcc/xpoladeu.smat（入力S行列データファイルのサンプル）
 - /usr/local/cdcc/xpoladeu.outlist（出力データサンプル）
- 使用OS： UXP(PRIMEQUEST)

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く、さまざまな散乱や反応においてその寄与が確かめられている。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。

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、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 クラスター核入射反応に対しても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 章および以前の解説 [5, 6] での定式化と記号表現にならって、重陽子 (d) と標的核 (A) の散乱を CDCC 法で扱う際の処方を例に説明する。詳細はこれらの文献を参照されたい。

重陽子の分解 (breakup) 状態を扱うために、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。 A はスピン 0 で構造を持たないものとする。CDCC 法ではこの系を記述する 3 体 Hamiltonian H を

$$H = T_R + U_p(\mathbf{R} + \boldsymbol{\rho}/2, \mathbf{s}_p) + U_n(\mathbf{R} - \boldsymbol{\rho}/2, \mathbf{s}_n) + V_p^{\text{Coul}}(R) + H_{pn}(\boldsymbol{\rho}, \mathbf{s}_p, \mathbf{s}_n) \quad (1)$$

とする。ここで、 $\boldsymbol{\rho}$ は p - n 間の相対座標、 \mathbf{R} は p - n 系の重心と A の相対座標、 $\mathbf{s}_p, \mathbf{s}_n$ はそれぞれ p, n の内部スピンである。また、 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 と U_n は、それぞれ、 p と A 、 n と A の間の核力ポテンシャル、 V_p^{Coul} は p と A の間の Coulomb ポテンシャル、 H_{pn} は p - n 系の内部 Hamiltonian である。

今、標的核のスピンは 0 であるので、座標 $\mathbf{R}, \boldsymbol{\rho}$ 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} で表すことにする。すなわち、

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{j}, \quad \mathbf{j} = \ell + \mathbf{S}, \quad \mathbf{S} = \mathbf{s}_p + \mathbf{s}_n \quad (2)$$

とする。このとき、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

$$(H - E) \Psi_{JM} = 0 \quad (3)$$

を満たす。ここで、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。

$$\Psi_{JM} = \sum_{j, \gamma} \sum_L \sum_{i=0}^{N_{\max}} [\Phi_i(j, \gamma; \boldsymbol{\rho}) \otimes \chi_i(j, \gamma, L, J; \mathbf{R})]_{JM} \quad (4)$$

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、 j 以外の内部状態を区別するための index で、例えば、 ℓ, S などを含んでいる。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。

これ以降、簡単のために、 (i, j, γ, L, J) などチャンネルを区別するのに必要な index をまとめて、 c と書くことにする。 \mathbf{R} の相対運動の波動関数 $\chi_c(\mathbf{R})$ は、さらに動径部分と角運動量部分 (球面調和関数 Y_{Lm}) に分けることができる。

$$\chi_c(\mathbf{R}) = \frac{u_c^J(R)}{R} i^L Y_{Lm}(\hat{\mathbf{R}}) \quad (5)$$

動径波動関数 $u_c^J(R)$ が求めるべきもので、これを解くための CDCC 方程式は、

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu_R} \frac{d^2}{dR^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu_R} \frac{L(L+1)}{R^2} + V_p^{\text{Coul}}(R) + \epsilon_i - E \right] u_c^J(R) = - \sum_{c'} F_{cc'}^{(J)}(R) u_{c'}^J(R) \quad (6)$$

で与えられる。ここで、 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。

チャンネル c と c' 間を結んでいるのが coupling potential $F_{cc'}^{(J)}(R)$ で、

$$F_{cc'}^{(J)}(R) = \left\langle \left[\Phi_i \otimes i^L Y_L(\hat{\mathbf{R}}) \right]_{JM} \left| U_p(\mathbf{r}_p, \mathbf{s}_p) + U_n(\mathbf{r}_n, \mathbf{s}_n) \right| \left[\Phi_{i'} \otimes i^{L'} Y_{L'}(\hat{\mathbf{R}}) \right]_{JM} \right\rangle_R \quad (7)$$

で与えられる。 $\langle \cdots \rangle_R$ は、 R 以外の全ての変数での積分を表す。CDCC_cdcdeu は、この coupling potential の形状因子の項を数値的に計算し、ファイルに出力する。その詳細については、文献 [5] を参照のこと。

CDCC 方程式 (6) 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

$$u_c^J(R) \rightarrow \delta_{cc_0} U_L^{(-)}(P_c R) - \sqrt{v_{c_0}/v_c} \hat{S}_{cc_0}^J U_L^{(+)}(P_c R) \quad \text{at } R \rightarrow \infty \quad (8)$$

で、散乱の S 行列 $\hat{S}_{cc_0}^J$ を求める。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。コード CDCC_hicadeu は、CDCC 方程式を数値的に解いて、得られた S 行列をファイルに出力する。その詳細については、文献 [6] を参照のこと。

(3.2) 散乱断面積・偏極量の計算

p-n 系が (i, j, ν, γ) で指定される状態のチャンネル α で入射し、散乱後、 (i', j', ν', γ') で指定される状態のチャンネル β で放出される場合を考える。ここで、 ν, ν' は、それぞれ、 j, j' の z 成分である。この散乱における、 Ω_β の方向への散乱振幅 (scattering amplitude) は、上記の S 行列を用いて

$$\begin{aligned} f_{\beta;\alpha}(\Omega_\beta) &= \delta_{\alpha\beta} f_\alpha^{\text{Coul}}(\Omega_\beta) + \frac{2\pi i}{P_\alpha} \sqrt{\frac{v_\beta}{v_\alpha}} \sum_{J,L,L'} e^{i(\sigma_L^\alpha + \sigma_{L'}^\beta)} (\delta_{\alpha\beta} \delta_{LL'} - S_{ij\gamma L; i'j'\gamma' L'}^J) \\ &\quad \times \sum_{M,m,m'} (j\nu L m | JM) (j'\nu' L' m' | JM) Y_{Lm}^*(\hat{\mathbf{P}}_\alpha) Y_{L'm'}(\Omega_\beta) \end{aligned} \quad (9)$$

と書き下すことができる。ここで、 f_α^{Coul} はクーロン散乱の散乱振幅、 \mathbf{P}_α は入射粒子の運動量ベクトル、 σ_L^x は x チャンネルでのクーロン位相差である。

以下では、散乱問題で通常用いる次のような座標系を取ることにする。 \mathbf{P}_α の方向に z 軸をとり散乱平面を zx 平面とする。 y 軸は、 \mathbf{P}_β を放出粒子の運動量ベクトルとすると、 $\mathbf{P}_\alpha \times \mathbf{P}_\beta$ の方向にとる。この座標系では、散乱角 (\mathbf{P}_α と \mathbf{P}_β の間の角) θ への散乱振幅は、(9) 式より簡単に表すことができ、

$$\begin{aligned} f_{\beta;\alpha}(\theta) &= \delta_{\alpha\beta} f_\alpha^{\text{Coul}}(\theta) + \frac{i}{2P_\alpha} \sqrt{\frac{v_\beta}{v_\alpha}} (-)^{(m' - |m'|)/2} \\ &\quad \times \sum_{J,L,L'} e^{i(\sigma_L^\alpha + \sigma_{L'}^\beta)} \sqrt{(2L+1)(2L'+1)} \sqrt{\frac{(L' - |m'|)!}{(L' - m')!}} (j\nu L 0 | J\nu) (j'\nu' L' m' | J\nu) \\ &\quad \times (\delta_{\alpha\beta} \delta_{LL'} - S_{ij\gamma L; i'j'\gamma' L'}^J) \cdot P_{L'|m'}(\cos \theta) \end{aligned} \quad (10)$$

となる。ここで、 $P_{Lm}(\cos \theta)$ は Legendre 関数である。また、 $m' = \nu - \nu'$ と値が固定されている。散乱の角度微分断面積 (angular differential cross section) は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sigma(\theta) = \frac{1}{2j+1} \sum_{\nu\nu'} |f_{\beta;\alpha}(\theta)|^2 \quad (11)$$

で計算される。弾性散乱に対しては、Rutherford 散乱断面積

$$\sigma_{\text{Rut}}(\theta) = |f^{\text{Coul}}(\theta)|^2 \quad (12)$$

との比、 $\sigma(\theta)/\sigma_{\text{Rut}}(\theta)$ もよく用いられる。

入射軌道角運動量 L の部分波ごとの部分断面積 (partial cross section) は

$$\sigma_{\beta,\alpha}(L) = \frac{1}{2j+1} \frac{\pi}{P_\alpha^2} \sum_{J,L'} (2J+1) |\delta_{\alpha\beta} \delta_{LL'} - S_{ij\gamma L; i'j'\gamma' L'}^J|^2 \quad (13)$$

で、また、弾性散乱以外の反応部分断面積 (partial reaction cross section) は部分波ごとに

$$\sigma_{\text{reac}}(L) = \frac{1}{2j+1} \frac{\pi}{P_\alpha^2} \sum_J (2J+1) (1 - |S_{ij\gamma L; ij\gamma L}^J|^2) \quad (14)$$

で計算できる。CDCC_xpoladeu ではこれらの計算結果も出力できる。

スピンを持った粒子の散乱の場合、断面積だけではなくスピン偏極量も観測量となる。説明のために、(10) 式の散乱振幅の添字中でスピンの部分だけを陽に引き出して $f_{\beta;\alpha}(\theta) = f_{j',\nu';j,\nu}(\theta)$ と書くことにする。空間反転に対する対称性から、粒子の内部パリティが保存していれば、

$$f_{j',-\nu';j,-\nu}(\theta) = (-)^{j+\nu-j'-\nu'} f_{j',\nu';j,\nu}(\theta) \quad (15)$$

の関係が成立する。

まず、基本的な偏極量として t_{kq} と T_{kq} がある。 t_{kq} は、無偏極の粒子が入射したとき、放出粒子が (k, q) のスピン偏極状態で出てくる割合を表す量で、簡単に偏極 (polarization) とも呼ばれる。 T_{kq} は、入射粒子が (k, q) のスピン偏極状態で入射したとき、放出粒子がどれだけ出てくるかの割合を表す量で、簡単に分解能 (analyzing power) とも呼ばれる。ここで、 k と q はスピンの偏極の方向を球テンソル表示した際の階数と z 成分である。これらは散乱振幅を用いて、

$$t_{k,q}(\theta) = \frac{2j+1}{\sigma(\theta)} \sqrt{2k+1} \sum_{\nu,\nu',\nu''} (j\nu k q | j'\nu') f_{j,\nu';j',\nu''}(\theta) f_{j,\nu';j',\nu''}^*(\theta) \quad (16)$$

$$T_{k,q}(\theta) = \frac{2j+1}{\sigma(\theta)} \sqrt{2k+1} \sum_{\nu,\nu',\nu''} (j\nu k q | j'\nu') f_{j,\nu'';j',\nu'}(\theta) f_{j,\nu'';j',\nu'}^*(\theta) \quad (17)$$

で表される。スピン 1/2 の粒子の場合、 $k = 1$ (ベクトル) の偏極量しか存在しない。重陽子などのようにスピン 1 を持つ粒子の場合は、 $k = 1$ (ベクトル) および $k = 2$ (テンソル) の偏極量が存在する。

球テンソルの性質から

$$t_{k,-q} = (-)^q t_{k,q}^* \quad T_{k,-q} = (-)^q T_{k,q}^* \quad (18)$$

空間反転対称性から

$$t_{k,-q} = (-)^{-k+q} t_{k,q} \quad T_{k,-q} = (-)^{-k+q} T_{k,q} \quad (19)$$

が成立する。

球テンソル表示ではなく、直交座標表示の偏極量もしばしば用いられる。1階 ($k = 1$) の偏極量 (ベクトル偏極およびベクトル分解能) については

$$p_y(\theta) = \sqrt{\frac{2(j+1)}{3j}} \cdot i t_{1,1}(\theta) \quad A_y(\theta) = \sqrt{\frac{2(j+1)}{3j}} \cdot i T_{1,1}(\theta) \quad (20)$$

がよく用いられる。スピン 1 の粒子の場合、2階 ($k = 2$) のテンソル分解能に対して

$$\begin{aligned} A_{xx}(\theta) &= \frac{\sqrt{3}}{2} (T_{2,2}(\theta) + T_{2,-2}(\theta)) - \frac{1}{\sqrt{2}} T_{2,0}(\theta) \\ A_{yy}(\theta) &= -\frac{\sqrt{3}}{2} (T_{2,2}(\theta) + T_{2,-2}(\theta)) - \frac{1}{\sqrt{2}} T_{2,0}(\theta) \\ A_{xz}(\theta) &= -\frac{\sqrt{3}}{2} (T_{2,1}(\theta) - T_{2,-1}(\theta)) \end{aligned} \quad (21)$$

などもよく用いられる。

以上の他にスピン偏極に関わる物理量には、ここでは詳述しないが、偏極移行係数と呼ばれるものがある。これは入射粒子のスピン状態と放出粒子のスピン状態の相関を表すものである。CDCC_xpoladeu では、一部の偏極移行係数についても計算し出力させることができる。

(3.3) near-side/far-side 分解

散乱現象のメカニズムを直感的に理解する手法の一つとして、near-side/far-side 分解がある。[7, 8] これは、入射運動量や入射粒子の質量がある程度大きく、さらにポテンシャルなどによる強い吸収があって、古典的な散乱軌道を near-side と far-side に分けることができる場合に使うことができる。量子力学的には、散乱振幅を near-side 成分 $f^{(N)}(\theta)$ と far-side 成分 $f^{(F)}(\theta)$ に分離し、全体の散乱振幅はこれらの coherent sum によって作られていると考える。 $f^{(N)}(\theta)$ と $f^{(F)}(\theta)$ は、(10) 式内の $P_{Lm}(\cos \theta)$ を

$$Q_{Lm}^{(\pm)}(\cos \theta) = \frac{1}{2} \left[P_{Lm}(\cos \theta) \mp i \frac{2}{\pi} Q_{Lm}(\cos \theta) \right] \quad (22)$$

で置き換えることで得られる。ここで、 $Q_{Lm}(\cos \theta)$ は第 2 種の Legendre 陪関数である。クーロン散乱の散乱振幅 f_{α}^{Coul} については、そのまま全体を near-side 成分とする扱い方と、これをさらに near-side/far-side の成分に分ける扱い方がある。CDCC_xpoladeu では、文献 [8] に倣って後者の処方を取っている。

(11,16,17) 式中の散乱振幅 $f_{j,\nu'';j',\nu'}(\theta)$ を near-side 散乱振幅 $f^{(N)}(\theta)$ または far-side 散乱振幅 $f^{(F)}(\theta)$ と置き換えることで、near-side の断面積や偏極量、far-side 断面積や偏極量を得ることができる。偏極量の場合、(16, 17) 式中の分母の断面積 $\sigma(\theta)$ と取り方として次の 2 種類が考えられる。

- (a) near-side (far-side) の偏極量のときは、near-side (far-side) の断面積を取る。この場合、near-side または far-side ごとに規格化された偏極量の値となり、これらの値を直接加えることには意味がない。
- (b) near-side および far-side の偏極量、どちらにも total の断面積を取る。この場合、計算された near-side および far-side の偏極量は共通の規格化をされていることになり、total の偏極量に占める割合を比較することができる。

本コードではどちらの形式かを選んで計算できる。

(3.4) 不変振幅の方法

散乱振幅のスピンの性質を理解するために、振幅をスピン空間の階数で分解し、分類する方法がある。これは、得られた振幅が空間回転に対して不変なものになるので、不変振幅の方法と呼ばれる。[8]

たとえば、重陽子のようなスピン 1 の粒子がスピン 0 の標的核で弾性散乱する場合、次のような 4 種類の独立な不変振幅がある。

$$\begin{aligned}
 U &= f_{1;1} + f_{0;0} + f_{-1;-1} \\
 S &= f_{1;0} - f_{0;1} \\
 T_\alpha &= f_{1;0} + f_{0;1} \\
 T_\beta &= f_{1;-1} + \frac{1}{2\sqrt{2}}(f_{1;0} + f_{0;1}) \cot \theta
 \end{aligned} \tag{23}$$

ここで、 $f_{\nu';\nu}$ は $f_{\beta;\alpha}(\theta)$ のことで、簡単のためにスピン z 成分だけを添字にしたものである。不変振幅 U はスピン空間のスカラー振幅で、中心力の相互作用の目安となる。また、不変振幅 S はスピン空間のベクトル振幅で、スピン軌道力の相互作用の目安となる。残りの T_α 、 T_β はスピン空間の 2 階のテンソル振幅で、前者は T_R 型テンソル力的、後者は T_L 型テンソル力的な相互作用を代表するものになる。これらの不変振幅の大きさを見ることで、散乱における各相互作用の寄与を知ることができる。不変振幅を使った重陽子弾性散乱の分析の例には、文献 [10] がある。

4. 入力データ

CDCC_xpoladeu 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「2 . 登録形式」で述べた入力サンプルファイル xpoladeu.d の例を使って説明する。

(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:  _****_XPOLADEU_CONTROL_DATA_***
2:  _06:new_::xpoladeu.outlist
3:  _21:old_::xpoladeu.smat
4:  _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 - 4 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

- 上記例では、機番 21 に、コード CDCC_hicadeu で出力した S 行列ファイル (サンプルでは、xpoladeu.smat) を指定している。これが CDCC_xpoladeu で読み込むデータファイルとなる。

この機番番号は 21 に固定ではなく、変更できる。次の subsection の項を参照。

- 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。

(4.2) INPUT DATA 部

断面積等を計算する際のパラメータの入力を行う。

```

1:  INPUT DATA
2:  21 3 0 KIBANR IPOLA IADON
3:  -1 2 2 5 1 KEISAN(PX,ELX,BUX,IA,N/F)
4:  5 5 5 5 0 0 KTLOUT(S,AX,ELX,BUX,ELF,BUF)
5:  0.00 180.0 1.0 THMIN THMAX THDEL
6:  //END

```

- 各行の 41 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: KIBANR, IPOLA, IADON FORMAT(10I3)
ファイル機番や計算法を指定する。

KIBANR: 読み込む S 行列ファイルの機番を指定する。(4.1) のファイル割り当て部で、ここで指定した機番にファイルを割り当てなければいけない。

IPOLA: 読み込む S 行列ファイルの形式を指定する。これは、S 行列を計算するコード(例えば、CDCC_hicadeu など)の種類が複数あって、出力する S 行列ファイルの形式が異なるときに、読み込み側で対応するためのものである。公開済の CDCC_hicadeu から出力された S 行列ファイルを読み込む場合は、3 を指定する。

IADON: CDCC_hicadeu で断熱近似を行った場合 (JSON>0) に、内部エネルギーなどを縮退値から真値に再計算するために指定する。

= 0: 再計算しない。(CDCC_hicadeu で断熱近似していない場合もこれにする。)

= 1: 内部エネルギーなどの再計算をする。位相空間体積の補正はしない。

= 2: 内部エネルギーなどの再計算をする。位相空間体積の補正も行う。

3 行目: KEISAN FORMAT(10I3)

どのような量を計算するか指定する。

- 基本的に、各 KEISAN の値が 0 のときは、その量を計算しない。
- KEISAN のどれがどの量に対応するかは、入力補助のメモを参考にする。

PX: 部分断面積を計算するかどうか指定する。

= 0: 部分断面積を計算も出力もしない。

> 0: 部分断面積を計算し出力する。

< 0: 部分断面積を計算し出力する。合わせて、弾性散乱の S 行列の絶対値と位相差を整形して出力する。

- 出力は入射軌道角運動量 L を縦軸に出力するが、その際、指定した値の絶対値を出力の刻みとする。

ELX: 弾性散乱について計算するかどうか指定する。

= 0: 計算も出力もしない。

= 1: 断面積だけ計算し出力する。

= 2: 断面積と偏極量を計算し出力する。

BUX: 分解状態(断線散乱以外)について計算するかどうか指定する。

= 0: 計算も出力もしない。

= 1: 断面積だけ計算し出力する。

= 2: 断面積と偏極量を計算し出力する。

IA: 弾性散乱の不変振幅を計算するかどうか指定する。

= 0: 計算も出力もしない。

> 0: 弾性散乱の不変振幅 (U, S, T_α, T_β) を計算し出力する。また同時に、各種の偏極移行係数も計算し出力する。角度ごとに出力する際、指定した値を出力の刻みとする。

N/F: 弾性散乱の near-side/far-side 分解 (N/F 分解) 計算を行うかどうか指定する。

= 0: 計算も出力もしない。

= 1: N/F 分解計算を行い、結果を出力する。偏極量の N/F 分解の際、(3.3) 節の (a) の計算を行う。

= 2: N/F 分解計算を行い、結果を出力する。偏極量の N/F 分解の際、(3.3) 節の (b) の計算を行う。

4 行目: KTLOUT FORMAT(10I3)

計算結果を機番 6 に出力するかどうか指定する。

- 基本的に、各 KTLOUT の値が 0 以外で出力、0 で未出力になる。

- KTLOUT 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。

S: 読み込んだ S 行列を出力する。指定した値を出力の刻みとする。

AX: 各状態への角度微分断面積を整形した形で出力する。指定した値を出力の刻みとする。

ELX: 弾性散乱の角度微分断面積と偏極量を出力する。指定した値を出力の刻みとする。

BUX: 分解状態への角度微分断面積と偏極量を出力する。指定した値を出力の刻みとする。

ELF: 弾性散乱の散乱振幅を出力する。指定した値を出力の刻みとする。

BUF: 分解状態への散乱振幅を出力する。指定した値を出力の刻みとする。

5 行目: THMIN THMAX THDEL FORMAT(4F10.0)

計算する散乱角 (重心系) のメッシュを指定する。

THMIN: 計算する角度 θ の最小値。単位は degree。

THMAX: 計算する角度 θ の最大値。単位は degree。

THDEL: 計算する角度 θ のメッシュ間隔値。単位は degree。

6 行目: BLANK FORMAT(A40)

入力データの区切り。

- 先頭から 5 桁分が '//END' の文字だと、この計算をした後、プログラムは終了する。この場合、これ以降の行は読み込まないので、ファイル後半にメモを書くことができる。

- それ以外のとき (たとえば、1 行空白) 計算終了後また次の計算を行う。この場合、次の計算のために、INPUT DATA 部の 2-6 行をこの後に追加しておく。

5. 出力データ

CDCC_xpoladeu からの出力は、全て機番 6 (標準出力、またはファイル割り当てしていれば指定したファイル) に出力される。ここでは、xpoladeu.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 xpoladeu.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 S 行列ファイルの情報
- (4) CDCC_xpoladeu 見出し、散乱チャンネル一覧
- (5) 読み込んだ S 行列要素の値
- (6) 弾性散乱チャンネル S 行列の表
- (7) L ごとの部分断面積の値、全断面積の値

- (8) 弾性散乱の角度微分断面積、偏極量の値
- (9) near-side/far-side 分解された断面積、偏極量の値（弾性散乱の場合）
- (10) 不変振幅の値（スピン 1 粒子の弾性散乱の場合）
- (11) 偏極移行係数の値（スピン 1 粒子の弾性散乱の場合）
- (12) 弾性散乱以外のチャンネルの角度微分断面積、偏極量の値
- (13) チャンネルごとの角度微分断面積のまとめ

(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。(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ので、ここでの説明は省略する。(4), (5) は、読み込んだ S 行列ファイルから得た値を基にまとめを出力したものである。(6) 以降が、このコードで計算した結果になる。入力データの指定によって、出力 / 出力なしを選べるものもある。また、各チャンネルごとの散乱振幅の計算結果も出力できるが、出力が膨大になるのでこの例では省略する。

以下、(4)–(13) について説明する。

(5.1) 見出しと散乱チャンネル一覧

CDCC_hicadeu で行ったチャンネル結合計算の際のチャンネル情報は、S 行列ファイルに記録されている。この情報を基に CDCC_xpoladeu では、各チャンネルの断面積などの計算を行う。ここでは、読み込んだチャンネル情報をまとめて出力する。

まず、見出しとして散乱の系が出力される。

```

***** < CROSS SECTION CALCULATION > *****
d( 2) + Ni( 58) reaction at ELAB(d) = 56.000 MEV
      : d( 2) = p( 1) + n( 1)

PMASS1= 1.000000 PMASS2= 1.000000 TMASS= 58.000000
PZ1 = 1.000 PZ2 = 0.000 TZ = 28.000
AMPROJ= 2.000000
ECM = 54.133333 MEV KTLREL= 0
*****
<< xpoladeu test >>

===== SCATTERING CONDITION =====
INITIAL CHANNEL : ( LP , SP ) JP , PAI = ( 0 , 1 ) 1 (+) NP= 1
NCHMAX= 39 FM= 9.2500D-02

```

各項目の意味は次のとおりである。

- 散乱の入射核と標的核を元素記号で表示している。

PMASS1, PMASS2: 入射粒子（構成粒子ごと）の質量数。

TMASS: 標的核の質量数。

PZ1, PZ2: 入射粒子（構成粒子ごと）の荷電数。

TZ: 標的核の荷電数。

AMPROJ: 入射粒子の質量数。

ECM: 重心系での入射エネルギー。[単位 MeV]

KTLREL: 散乱計算の際の相対論的補正の有無。

<<...>>: コントロールデータで入力したコメント。

LP, SP, JP, PAI: 入射粒子の入射チャンネルでの (l, S, j, π) 。 π はパリティのこと。

NP: 入射粒子の入射チャンネルでの状態番号。

NCHMAX: チャンネル総数。

FM: $2\mu_R/\hbar^2$ の値。[単位 fm^{-2}]

次に、各チャンネルの情報が表になって出力される。表は、相対運動 (relative motion) に関する量、入射粒子の状態 (projectile states) に関する量、標的核の状態 (target states) に関する量の3つの部分に分けられている。

----- RELATIVE MOTION -----					----- PROJECTILE STATES -----					----- TARGET STATES-----					
CHANNEL/	ECM	FKAY	ETA	IOPEN	SCATL	(L, S)	J ,PAI	NP	FKINT	EINTP	DELK	J	PAI	NT	EINTT
1 :	54.13333	2.23771	0.83333	1	-1	(0, 1)	1 ,(+)	1	0.2307	-2.2246	1.0000	0 (+)	1	0.0000	
2 :	48.45612	2.11712	0.88080	1	-1	(0, 1)	1 ,(+)	2	0.2874	3.4526	0.5000	0 (+)	1	0.0000	
3 :	27.74041	1.60187	1.16411	1	-1	(0, 1)	1 ,(+)	3	0.7604	24.1683	0.5000	0 (+)	1	0.0000	
4 :	54.13333	2.23771	0.83333	1	0	(0, 1)	1 ,(+)	1	0.2307	-2.2246	1.0000	0 (+)	1	0.0000	
5 :	48.45612	2.11712	0.88080	1	0	(0, 1)	1 ,(+)	2	0.2874	3.4526	0.5000	0 (+)	1	0.0000	
6 :	27.74041	1.60187	1.16411	1	0	(0, 1)	1 ,(+)	3	0.7604	24.1683	0.5000	0 (+)	1	0.0000	
7 :	54.13333	2.23771	0.83333	1	1	(0, 1)	1 ,(+)	1	0.2307	-2.2246	1.0000	0 (+)	1	0.0000	
8 :	48.45612	2.11712	0.88080	1	1	(0, 1)	1 ,(+)	2	0.2874	3.4526	0.5000	0 (+)	1	0.0000	
9 :	27.74041	1.60187	1.16411	1	1	(0, 1)	1 ,(+)	3	0.7604	24.1683	0.5000	0 (+)	1	0.0000	
10 :	48.45612	2.11712	0.88080	1	-1	(0, 1)	1 ,(+)	7	0.2874	3.4526	0.5000	0 (+)	1	0.0000	
:	:	:	:	:	(以下略)	:	:	:	:	:	:	:	:	:	

相対運動に関する各項目の意味は次のとおりである。

CHANNEL: チャンネルの通し番号。

ECM: 相対運動の重心系でのエネルギー。[単位 MeV]

FKAY: 相対運動の運動量 (波数)。[単位 fm^{-1}]

ETA: ゾンマーフェルトパラメータの値。

IOPEN: 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。

SCATL: 軌道角運動量と全角運動量との差、 $(L - J)$ 。

入射粒子の状態に関する各項目の意味は次のとおりである。

L,S,J,PAI: p-n 系の角運動量 l, S, j とパリティ π 。

NP: form factor で付けた p-n 系の状態の通し番号。

FKINT: p-n 系の内部運動量 (波数)。[単位 fm^{-1}]

EINTP: p-n 系の内部エネルギー。[単位 MeV]

DELK: 離散化した k 区間の幅。[単位 fm^{-1}]

標的核の状態に関する各項目の意味は次のとおりである。

J,PAI: 標的核のスピンとパリティ。

NT: 標的核の状態の通し番号。

EINTT: 標的核の励起エネルギー。[単位 MeV]

続けて、チャンネルの情報のまとめが出力される。

===== (L,S)J,PAI 'S ARE SUMMED UP =====									
	I	LSJSET	(L, S)	J	PAI	LSJCHN	NUMSCL	NPSTMX	NUMLSJ= 4
	1 :	1000202	(0, 1)	1	(+)	1	3	3	
	2 :	1000202	(0, 1)	1	(+)	10	3	2	
	3 :	1020204	(2, 1)	2	(+)	16	5	2	
	4 :	1020206	(2, 1)	3	(+)	26	7	2	

入射粒子の (l, S, j, π) で分類されている。

NUMLSJ: (l, S, j, π) のセットの個数。

LSJSET: (ℓ, S, j, π) を1つの整数で表すための変数。LSJ = $\pi * (1000000 + \ell * 10000 + S * 2 * 100 + j * 2)$ で決める。

LSJCHN: その (ℓ, S, j, π) が始まるチャンネルの番号。

NUMSCL: 相対軌道角運動量 L のスプリットによるサブチャンネルの個数。

NPSTMX: p-n 系の内部状態の個数。

最後に、角運動量情報のまとめも出力される。

```
*****
KKLMAX=   121  TOTJMX=   40.00
LIMAX=    41  LFMAX=    43  MFMAX=    4
*****
```

S 行列ファイルを読み込みながら、必要な角運動量の情報を計算している。これらは、クーロン位相差 σ_L や Legendre 関数 P_{Lm} などの計算に利用される。

KKLMAX: S 行列の通し番号の最大値。S 行列セットの個数。

TOTJMX: 系の全角運動量 J の最大値。

LIMAX: 入射チャンネルでの相対軌道角運動量 L の最大値。

LFMAX: 放出チャンネルでの相対軌道角運動量 L' の最大値。

MFMAX: 放出チャンネルでの相対軌道角運動量 L' の z 成分 m' の最大値。

入力データで KTLOUT(1) の値を 1 以上にしている場合、この出力より先に (5.2) の S 行列要素の値が出力されるので注意。

(5.2) 読み込んだ S 行列要素の値

入力データで KTLOUT(1) の値を 1 以上にすると、読み込んだ S 行列要素の値を、S 行列の通し番号 (KKL) 順に KTLOUT(1) の値を刻み幅として出力する。

```
===== S-MATRIX =====
--- KKL=   1:  TOTJ=   0.0 (-)  INIT.CH.=   7  -----
S(  1,  7)= 0.0000D+00  0.0000D+00 S(  2,  7)= 0.0000D+00  0.0000D+00 S(  3,  7)= ...
S(  5,  7)= 0.0000D+00  0.0000D+00 S(  6,  7)= 0.0000D+00  0.0000D+00 S(  7,  7)= ...
S(  9,  7)= 1.6915D-02  4.7042D-02 S( 10,  7)= 0.0000D+00  0.0000D+00 S( 11,  7)= ...
S( 13,  7)= 0.0000D+00  0.0000D+00 S( 14,  7)=-1.0650D-02  2.1900D-02 S( 15,  7)= ...
S( 17,  7)= 0.0000D+00  0.0000D+00 S( 18,  7)= 0.0000D+00  0.0000D+00 S( 19,  7)= ...
S( 21,  7)= 0.0000D+00  0.0000D+00 S( 22,  7)= 0.0000D+00  0.0000D+00 S( 23,  7)= ...
S( 25,  7)= 0.0000D+00  0.0000D+00 S( 26,  7)= 0.0000D+00  0.0000D+00 S( 27,  7)= ...
S( 29,  7)= 0.0000D+00  0.0000D+00 S( 30,  7)= 0.0000D+00  0.0000D+00 S( 31,  7)= ...
S( 33,  7)= 0.0000D+00  0.0000D+00 S( 34,  7)= 0.0000D+00  0.0000D+00 S( 35,  7)= ...
S( 37,  7)= 0.0000D+00  0.0000D+00 S( 38,  7)= 8.8133D-03  1.8006D-04 S( 39,  7)= ...
:           :           :           (以下略)           :           :           :
```

各項目の意味は次のとおりである。

KKL: S 行列の通し番号。J, L の組み合わせによる。

TOTJ: 系の全角運動量、J。

INIT.CH.: 入射チャンネルのチャンネル番号。

S(i, j): j チャンネルから i チャンネルへの S 行列要素。複素数である。

(5.3) 弾性散乱チャンネル S 行列の表

入力データで KEISAN(3) の値を -1 以下にすると、弾性散乱の S 行列要素の絶対値と散乱位相差が表形式で出力される。

```

=== ELASTIC S-MATRIX ELEMENTS ===
LI =      J - 1      J - 1      J - 1      J      J      J      J ...
LF =      J - 1      J      J + 1      J - 1      J      J      J + 1 ...
J
0.0      0.00000D+00      0.00000D+00      0.00000D+00      0.00000D+00      0.00000D+00      0.00000D+00 ...
1.0      1.11690D-01      0.00000D+00      8.58196D-03      0.00000D+00      1.07029D-01      0.00000D+00 ...
2.0      1.10128D-01      0.00000D+00      9.19164D-03      0.00000D+00      1.03399D-01      0.00000D+00 ...
3.0      1.07763D-01      0.00000D+00      9.16490D-03      0.00000D+00      9.77186D-02      0.00000D+00 ...
4.0      1.02938D-01      0.00000D+00      9.54926D-03      0.00000D+00      9.50342D-02      0.00000D+00 ...
5.0      1.00265D-01      0.00000D+00      9.29858D-03      0.00000D+00      9.39857D-02      0.00000D+00 ...
:      :      :      (中略)      :      :      :      :
=== ELASTIC PHASE-SHIFT ===
LI =      J - 1      J - 1      J - 1      J      J      J      J ...
LF =      J - 1      J      J + 1      J - 1      J      J      J + 1 ...
J
0.0      0.000000      0.000000      0.000000      0.000000      0.000000      0.000000 ...
1.0      155.982614      0.000000      165.156381      0.000000      112.696309      0.000000 ...
2.0      116.196310      0.000000      132.178689      0.000000      84.790971      0.000000 ...
3.0      91.028096      0.000000      107.838156      0.000000      61.162205      0.000000 ...
4.0      70.414985      0.000000      84.954926      0.000000      37.885842      0.000000 ...
5.0      50.358670      0.000000      64.062043      0.000000      14.580198      0.000000 ...
:      :      :      (以下略)      :      :      :      :

```

- 前半は S 行列要素の絶対値、 $|S_{\beta,\alpha}|$ 、後半は散乱位相差、 $\arg(S_{\beta,\alpha})/2$ [単位 degree]、である。
- 縦方向は、全角運動量 J の値で並んでいる。
- 横方向は、始状態と終状態の相対軌道角運動量、 L, L' の組み合わせで並べてある。

(5.4) 部分断面積と全断面積の値

入力データで KEISAN(3) の値を 0 以外にすると、部分波ごとの部分断面積の値が計算・出力される。大きく 4 つの部分に分けられる。以下で、断面積の単位は全て mb である。

```

=====
Summed Partial X-Section (mb)
=====
LI      LI/FK      REAC      ELAST-X      BU-total      S-BU      P-BU      ...
0      0.000      6.19522D+00      5.41554D+00      5.59444D-02      4.09851D-02      0.00000D+00 ...
1      0.447      1.85977D+01      2.17865D+01      1.74747D-01      1.20991D-01      0.00000D+00 ...
2      0.894      3.10202D+01      3.81344D+01      3.11094D-01      1.97984D-01      0.00000D+00 ...
3      1.341      4.34789D+01      4.91920D+01      4.67813D-01      2.60234D-01      0.00000D+00 ...
4      1.788      5.59313D+01      5.50824D+01      6.39700D-01      3.04919D-01      0.00000D+00 ...
5      2.234      6.83802D+01      5.97700D+01      8.11961D-01      3.14489D-01      0.00000D+00 ...
:      :      :      (中略)      :      :      :      :
<TOTAL>      1.73983D+03      1.40860D+03      1.27989D+02      4.76756D+01      0.00000D+00 ...

```

反応断面積、弾性散乱断面積、分解反応断面積などをまとめている。全体的な分析に有用である。

LI: 入射チャンネルでの相対軌道角運動量、 L 。

LI/FK: 入射チャンネルでの相対軌道角運動量を入射波数で割った値。衝突係数 (impact parameter) の目安となる。 [単位 fm]

REAC: 反応断面積。

ELAST-X: 弾性散乱断面積。クーロン散乱の部分は含まないことに注意。

BU-total: 分解反応断面積。S, P, D, F 波への分解反応の和。

S-BU: S 波分解反応 (終状態が $\ell = 0$) 断面積。

P-BU: P 波分解反応 (終状態が $\ell = 1$) 断面積。

D-BU: D 波分解反応 (終状態が $\ell = 2$) 断面積。

F-BU: F 波分解反応 (終状態が $\ell = 3$) 断面積。

<TOTAL>: L について和を取った値。

=== Partial X-section for All Individual States === (mb)						
INITIAL:	1000202 (1)	1000202 (1)	1000202 (1)	1000202 (1)	1000202 (1)	...
FINAL :	1000202 (1)	1000202 (2)	1000202 (3)	1000202 (7)	1000202 (8)	...
LI	LI/FK					
0	0.000	5.41554D+00	1.89453D-02	1.91372D-02	2.11531D-04	2.69112D-03 ...
1	0.447	2.17865D+01	5.72604D-02	5.28928D-02	2.28283D-03	8.55447D-03 ...
2	0.894	3.81344D+01	9.62265D-02	7.76518D-02	9.00262D-03	1.51031D-02 ...
3	1.341	4.91920D+01	1.28227D-01	8.57553D-02	2.26248D-02	2.36263D-02 ...
4	1.788	5.50824D+01	1.39450D-01	8.84392D-02	4.49813D-02	3.20485D-02 ...
5	2.234	5.97700D+01	1.02703D-01	9.15800D-02	7.80312D-02	4.21741D-02 ...
:	:	:	(中略)	:	:	:
<TOTAL>		1.40860D+03	2.98195D+01	1.26337D+00	1.54183D+01	1.17450D+00 ...

入射粒子の各分解状態ごとの断面積を出力している。各励起エネルギーの状態にどの程度分解しているかを知ることができる。

INITIAL: 入射チャンネルの状態を $LSJ = \pi * (1000000 + \ell * 10000 + S * 2 * 100 + j * 2)$ と () 内の NP の値で表している (π はパリティ)。

FINAL: 放出チャンネルの状態を同様の形式で表している。

=== Total X-section for All Individual States === (mb)		
channel	LSJ	total-X
1 :	1000202	1.40860D+03
2 :	1000202	2.98195D+01
3 :	1000202	1.26337D+00
4 :	1000202	1.54183D+01
5 :	1000202	1.17450D+00
6 :	1020204	3.27511D+01
:	:	(以下略)

各分解状態ごとの全断面積を出力している。すぐ上で出力した部分断面積の<total>と一致する。

=== Total X-section for All sub-channel === (mb)						
channel	j	ell	s	del-L	n	total-X
1 :	1.0	0	1.0	-1.0	1	5.31893D+02
2 :	1.0	0	1.0	-1.0	2	1.15733D+01
3 :	1.0	0	1.0	-1.0	3	5.93460D-01
4 :	1.0	0	1.0	0.0	1	4.78396D+02
5 :	1.0	0	1.0	0.0	2	9.71561D+00
6 :	1.0	0	1.0	0.0	3	4.01656D-01
7 :	1.0	0	1.0	1.0	1	3.98308D+02
:	:	:	(以下略)	:	:	:

L のスプリットまで考慮したサブチャンネルごとの全断面積を出力している。分解の詳細を知ることができる。

channel: 終状態のサブチャンネルの通し番号。

j, ell, s: 終状態のサブチャンネルの j, ℓ, S 。

del-L: 終状態のサブチャンネルの $SCATL = L' - J$ の値。

n: 終状態のサブチャンネルの NP の値。

(5.5) 弾性散乱の角度微分断面積、偏極量

入力データで KEISAN(2) と KTLOUT(3) の値を 1 以上にすると、弾性散乱の角度微分断面積と各種偏極量の値が計算・出力される。出力は、断面積および偏極の出力と分解能の出力の 2 つに分かれている。

```

=== X-SECTION & POLARIZATION ===
      ( L, S ) J PAI NPROJ
INITIAL : ( 0, 1 ) 1 (+) -- 1
FINAL   : ( 0, 1 ) 1 (+) -- 1 ; PY= 115.4701 * iT11P
Theta  q(fm^-1)  AXS (mb/sr)  AX/RX  RX (mb/sr)  PY (%)  THETA  iT11P  ...
0.0000 0.0000 3.46713D+59 1.0000D+00 3.46713D+59 0.0000 0.0000 0.000000 ...
5.0000 0.1952 5.63093D+04 5.87934D-01 9.57749D+04 1.1317 5.0000 0.009801 ...
10.0000 0.3901 4.71716D+03 7.85046D-01 6.00878D+03 -2.8751 10.0000 -0.024899 ...
15.0000 0.5842 1.14934D+02 9.62206D-02 1.19448D+03 18.5350 15.0000 0.160518 ...
20.0000 0.7771 4.13516D+02 1.08443D+00 3.81320D+02 1.7612 20.0000 0.015252 ...
: : (中略) : : : : : :
=== ANALYZING POWER ===
      ( L, S ) J PAI NPROJ
INITIAL : ( 0, 1 ) 1 (+) -- 1
FINAL   : ( 0, 1 ) 1 (+) -- 1 ; AY= 115.4701 * iT11A
Theta  q(fm^-1)  AY (%)  AYY (%)  AXX (%)  AXZ (%)  X2 (%)  THETA  iT11A  ...
0.0000 0.0000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 0.0000 0.000000 ...
5.0000 0.1952 1.13172 0.28522 0.00053 -0.01642 0.16528 5.0000 0.0098010 ...
10.0000 0.3901 -2.87510 6.32101 -6.94309 0.73177 -4.36776 10.0000 -0.0248991 ...
15.0000 0.5842 18.53499 -19.53028 24.45559 -6.32469 16.96307 15.0000 0.1605177 ...
20.0000 0.7771 1.76116 0.88370 -1.16487 0.36216 -0.83487 20.0000 0.0152521 ...
: : (以下略) : : : : : : : :

```

出力の前半が断面積および偏極の出力、後半が分解能の出力である。

- 入力データで KEISAN(2) の値が 1 のときは、偏極量を計算しないので、出力結果は 0 となってしまふことに注意。
- 出力される角度は、KTLOUT(3) の値を刻みとする。

THETA: 重心系での散乱角度、 θ 。入射粒子（分解状態の場合は p-n 系）の重心が放出される角度であることに注意。[単位 degree]

q: 散乱前後での移行運動量、 $q = |\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_f|$ 。[単位 fm^{-1}]

AXS: 角度微分断面積。[単位 mb/sr]

AX/RX: 角度微分断面積と Rutherford 散乱断面積の比。

RX: Rutherford 散乱断面積。[単位 mb/sr]

PY: ベクトル偏極、 p_y 。値が百分率 (%) であることに注意。

iT11P: ベクトル偏極、 it_{11} 。百分率ではないことに注意。

t20P, t21P, t22P: テンソル偏極、 t_{20}, t_{21}, t_{22} 。百分率ではないことに注意。

AY: ベクトル分解能、 A_y 。値が百分率 (%) であることに注意。

AYY, AXX, AXZ: テンソル分解能、 A_{yy}, A_{xx}, A_{xz} 。値が百分率 (%) であることに注意。

X2: テンソル分解能の一種、 $X_2 = (2A_{xx} + A_{yy})/\sqrt{3}$ 。 T_R 型テンソル力の目安として使われることがある。値が百分率 (%) であることに注意。

iT11A: ベクトル分解能、 iT_{11} 。百分率ではないことに注意。

T20A, T21A, T22A: テンソル分解能、 T_{20}, T_{21}, T_{22} 。百分率ではないことに注意。

(5.6) near-side/far-side 分解された断面積と偏極量

入力データで KEISAN(5) の値を 1 または 2 にすると、弾性散乱の角度微分断面積と各種偏極量を near-side/far-side 分解した値が計算・出力される。


```

=== NEAR/FAR DECOMPOSITION OF X-SECTION ===
      ( L, S ) J PAI NPROJ
INITIAL : ( 0, 1 ) 1 (+) -- 1
FINAL   : ( 0, 1 ) 1 (+) -- 1
THETA  AX (TOTAL) AX (NEAR) AX (FAR) THETA AX/RX (TOT) AX/RX (NEAR) AX/RX (FAR) ...
0.00   3.46713D+59 2.33536D+63 2.39035D+63 0.00 1.00000D+00 6.73571D+03 6.89431D+03 ...
5.00   5.63093D+04 6.54912D+04 1.94746D+03 5.00 5.87934D-01 6.83804D-01 2.03338D-02 ...
10.00  4.71716D+03 2.77508D+03 5.20571D+02 10.00 7.85046D-01 4.61838D-01 8.66352D-02 ...
15.00  1.14934D+02 4.06044D+02 2.25059D+02 15.00 9.62206D-02 3.39933D-01 1.88416D-01 ...
20.00  4.13516D+02 9.78848D+01 1.10377D+02 20.00 1.08443D+00 2.56700D-01 2.89460D-01 ...
:      : (中略) : : : : : :

```

```

=== NEAR/FAR DECOMPOSITION OF A.P. ===
      ( L, S ) J PAI NPROJ
INITIAL : ( 0, 1 ) 1 (+) -- 1
FINAL   : ( 0, 1 ) 1 (+) -- 1
THETA  AY (NEAR) AY (FAR) AYY(NEAR) AYY(FAR) AXX(NEAR) AXX(FAR) ...
0.0000 -0.13709 -0.13539 1.16805 1.15127 1.13386 1.11766 ...
5.0000 0.19653 -4.18362 2.17801 12.93073 -2.37125 -11.24854 ...
10.0000 0.51959 -5.69640 2.47173 6.22726 -2.80695 -4.05401 ...
15.0000 0.20373 -2.87411 2.22087 2.24257 -3.03089 -0.63066 ...
20.0000 -0.45187 2.88764 2.27988 0.74587 -3.42124 -0.42367 ...
:      : (以下略) : : : : : :

```

出力の前半が断面積の出力、後半が分解能の出力である。

- AX は角度微分断面積、AX/RX は Ruthford 散乱断面積との比の値である。
- AY, AYY, ... は (5.5) と同じベクトルおよびテンソル分解能である。
- NEAR が near-side 成分、FAR が far-side 成分、TOT は両者の coherent sum を表す。

(5.7) 不変振幅

入力データで KEISAN(4) の値を 1 以上にすると、入射粒子がスピン 1 の場合 (例: 重陽子) 弾性散乱の不変振幅が計算・出力される。

```

=== INVARIANT AMPLITUDE FOR DEUTERON SCATTERING ===
THETA  U          S          TA          ...
0.0000 (-5.13678D+29,-2.19493D+29) ( 0.00000D+00, 0.00000D+00) ( 0.00000D+00, 0.00000D+00) ...
5.0000 ( 8.87926D+01, 2.06855D+02) ( 1.09669D+00, 2.66826D-01) (-1.74404D-02, 3.04280D-04) ...
10.0000 ( 6.46895D+01,-7.42512D+00) ( 6.92149D-01, 5.76913D-01) ( 9.86719D-02,-2.77811D-02) ...
15.0000 (-8.66100D+00,-5.02649D+00) (-4.24083D-01, 5.78764D-01) ( 1.36015D-01,-1.89111D-02) ...
20.0000 (-1.92315D+01, 1.51108D-01) (-8.54622D-01, 1.32793D-01) (-1.22288D-02, 2.03673D-02) ...
:      : (中略) : : : : : :

```

```

=== INVARIANT AMPLITUDE FOR DEUTERON SCATTERING ===
THETA  |U|          |S|          |TA|          |TB|
0.0000 5.58607D+29 0.00000D+00 0.00000D+00 0.00000D+00
5.0000 2.25107D+02 1.12868D+00 1.74431D-02 4.65835D-01
10.0000 6.51142D+01 9.01054D-01 1.02508D-01 3.11319D-01
15.0000 1.00139D+01 7.17506D-01 1.37323D-01 1.31818D-01
20.0000 1.92321D+01 8.64878D-01 2.37565D-02 4.34035D-02
:      : (以下略) : : : : :

```

出力の前半が複素数表示、後半が絶対値表示である。

- U, S, TA, TB は、それぞれ、(23) 式の不変振幅 U, S, T_α, T_β に対応している。

(5.8) 偏極移行係数

入力データで KEISAN(4) の値を 1 以上にすると、入射粒子がスピン 1 の場合 (例: 重陽子) 弾性散乱の種々の偏極移行係数が計算・出力される。

ここでは、出力の詳細は省略するが、 $K(X:Z)$, $K(Y:ZZ)$ などの出力は、それぞれ、 K_x^z, K_y^{zz} などの量に対応している。

(5.9) 弾性散乱以外のチャネルの角度微分断面積と偏極量

入力データで KEISAN(3) と KTLOUT(4) の値を 1 以上にすると、弾性散乱以外のチャンネル、すなわち分解反応についての角度微分断面積と各種偏極量の値が計算され、チャンネルごとに出力される。出力形式は (5.5) の弾性散乱の場合と同じであるので、ここでは出力例は省略する。

(5.10) 角度微分断面積のまとめ

入力データで KTLOUT(2) の値を 1 以上にすると、弾性散乱および分解反応の角度微分断面積のまとめを整形した形で出力する。断面積の単位は mb/sr である。

Summed Differential X-section (mb/sr)							
THETA	AX/RX	ELAST-X	BU-total	S-BU	P-BU	D-BU	F-BU
0.0000	1.00000D+00	3.46713D+59	9.46233D+02	8.31950D+02	0.00000D+00	1.14282D+02	0.00000D+00
5.0000	5.87934D-01	5.63093D+04	4.40594D+02	2.51810D+02	0.00000D+00	1.88784D+02	0.00000D+00
10.0000	7.85046D-01	4.71716D+03	4.05166D+02	9.49830D+01	0.00000D+00	3.10183D+02	0.00000D+00
15.0000	9.62206D-02	1.14934D+02	1.72897D+02	6.47317D+01	0.00000D+00	1.08166D+02	0.00000D+00
20.0000	1.08443D+00	4.13516D+02	6.84802D+01	2.19801D+01	0.00000D+00	4.65001D+01	0.00000D+00
:	:	(以下略)	:	:	:	:	:

弾性散乱、分解反応の角度微分断面積をまとめている。全体的な分析に有用である。

THETA: 重心系での散乱角度、 θ 。入射粒子（分解状態の場合は p-n 系）の重心が放出される角度であることに注意。[単位 degree]

AX/RX: 弾性散乱断面積の Rutherford 散乱断面積に対する比。

ELAST-X: 弾性散乱断面積。

BU-total: 分解反応断面積。S, P, D, F 波への分解反応の和。

S-BU: S 波分解反応（終状態が $\ell = 0$ ）断面積。

P-BU: P 波分解反応（終状態が $\ell = 1$ ）断面積。

D-BU: D 波分解反応（終状態が $\ell = 2$ ）断面積。

F-BU: F 波分解反応（終状態が $\ell = 3$ ）断面積。

=== Differential X-section for All Individual States === (mb/sr)						
INITIAL:	1000202 (1)	1000202 (1)	1000202 (1)	1000202 (1)	1000202 (1)	1000202 (1) ...
FINAL :	1000202 (1)	1000202 (2)	1000202 (3)	1000202 (7)	1000202 (8)	1020204 (11) ...
THETA						
0.0000	3.46713D+59	7.88448D+02	5.05096D+00	3.60023D+01	2.44917D+00	5.31589D+01 ...
5.0000	5.63093D+04	2.10104D+02	2.57411D+00	3.68142D+01	2.31809D+00	7.73856D+01 ...
10.0000	4.71716D+03	3.06548D+01	2.27135D-01	6.20999D+01	2.00121D+00	1.36030D+02 ...
15.0000	1.14934D+02	3.94887D+01	1.11894D+00	2.28206D+01	1.30345D+00	4.68639D+01 ...
20.0000	4.13516D+02	1.17070D+01	1.43990D+00	8.19131D+00	6.41873D-01	1.87400D+01 ...
:	:	(以下略)	:	:	:	:

入射粒子の各分解状態ごとの角度微分断面積を出力している。各励起エネルギーの状態ごとの角分布を知ることができる。

INITIAL: 入射チャンネルの状態を $LSJ = \pi * (1000000 + \ell * 10000 + S * 2 * 100 + j * 2)$ と () 内の NP の値で表している (π はパリティ)。

FINAL: 放出チャンネルの状態を同様の形式で表している。

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 FUJITSU PRIMEQUEST 上で利用できる。

先の2つのコード CDCC_cdcdeu と CDCC_hicadeu は、FUJITSU VPP5000 用に登録されたが、既に、PRIMEQUEST 用に移植されている。センターのホームページの「スーパーコンピュータシステム利用法」の中の「ソフトウェア一覧」における「原子核物理学 (Nuclear Physics)」の「CDCC」の項に有る。

CDCC_xpoladeu の実行可能ファイルが /usr/local/cdcc/xpoladeu.x という名前で登録されている。xpoladeu.x は、

```
tatara% frt -o poladeu.x xpoladeu.f
```

で 翻訳・結合編集されている。その他のオプションを指定する場合は、ソースプログラムをコピーして再翻訳する。

入力データは xpoladeu.d に作る (サンプル参照)。そこに、CDCC_hicadeu が出力した S 行列を収めた file 名 (サンプルでは xpoladeu.smat)、および出力データを収める file 名を書き込む (サンプルでは xpoladeu.outlist)。

利用者の入力データ xpoladeu.d および xpoladeu.smat が入っている directory において、これらを読み込んで実行するコマンドは

```
tatara% xpoladeu.x < xpoladeu.d
```

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：

```
tatara% cp /usr/local/cdcc/xpoladeu.f xpoladeu.f
```

7. 制限事項および注意事項

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。大規模サイズの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 4MB。CDCC 計算において、CDCC_xpoladeu が担当する S 行列から断面積、偏極などを求めるための計算時間は短い。テスト計算用サンプルの小規模計算で、1 秒程度である。

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_xpoladeu) 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研究開発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] 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 **5**, 117 (2006).
<http://www.cc.kyushu-u.ac.jp/publish/kohobkno/genkoVol15No3/cdcdeu-2.pdf>
- [6] 井芹康統, 上村正康, 八尋正信, 櫻木弘之, 緒方一介, 九州大学情報基盤研究開発センター 全国共同利用システム「広報」**1**, 16 (2007).
http://www.cc.kyushu-u.ac.jp/publish/kohobkno/koho_Vol1No1/hicadeu.pdf
- [7] R. C. Fuller, Phys. Rev. C **12**, 1561 (1975).
- [8] G. R. Satchler, “Direct Nuclear Reactions”, Oxford University Press, Sect.11.3., (1983).
- [9] M. Tanifuji and K. Yazaki, Prog. Theor. Phys. **40**, 1023 (1968).
- [10] Y. Iseri, M. Tanifuji, H. Kameyama, M. Kamimura, M. Yahiro, Nucl. Phys. **A533**, 574 (1991).