

jj結合殻模型計算用プログラム(jjSMQ)

高田, 健次郎
九州大学 : 名誉教授

安本, 誠一
九州大学大学院理学府基礎粒子科学専攻

佐藤, 求
九州大学大学院理学府基礎粒子科学専攻

清水, 良文
九州大学大学院理学研究院物理学部門

<https://doi.org/10.15017/1470471>

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. 3 (1), pp.1-13, 2003-03. 九州大学情報
基盤センター
バージョン :
権利関係 :

jj 結合殻模型計算用プログラム(jjSMQ)

高田 健次郎¹ 安本 誠一² 佐藤 求² 清水 良文³

1 概要

1948年にMayerならびにJensenらが原子核構造における殻模型を提唱した。この模型は、それまでに知られていた魔法数(magic numbers: N 又は $Z=2, 8, 20, 28, 50, 82, 126$)を閉殻核子数として見事に説明するとともに、知られていたすべての(奇)核の基底状態のスピンをほとんど例外なく説明した。また、核磁気モーメントの値やアイソマーの存在領域の説明などにも成功を収めた。このように、殻模型は実験値の理論的解析に非常に有用な模型であることが知られているが、この模型を用いた数値計算は、膨大な行列の対角化(固有値問題)を含むため、数値計算にも時間がかかり、汎用的な使い易い殻模型計算のプログラムは限られているのが現状である。そこで、原子核理論および実験の解析に広く利用できるようなjj結合殻模型の汎用プログラムを開発することにした。

このたび開発した殻模型の汎用プログラムを用いると、原子核のエネルギー固有値と固有ベクトルが得られ、さらに、電気的遷移確率と電気モーメント、および磁氣的遷移確率と磁気モーメントが計算可能である。このとき、有効相互作用としてはYukawa型、Gauss型とSDI(surface-delta interaction)が選択でき、USDやFPD6などのような2体のG行列等の行列要素を数値的に入力することも可能である。実験の解析などにもかなりの汎用性が期待でき、不安定核の実験の解析にも幅広く利用できる。本プログラム群(名称:jjSMQ;名称の最後の文字“Q”は「九大」の意味)はjj結合殻模型計算を快適に行うための汎用プログラムのパッケージである。

2 jjSMQプログラムの構成とコンパイルの方法

2.1 jjSMQプログラムの入手方法

以下のURLよりダウンロードすることができる。

http://www.cc.kyushu-u.ac.jp/scp/system/library/PROGRAM_LIBRARIES/jjSMQ/

2.2 jjSMQプログラムの構成

tar形式のファイルを展開すると、以下の4つのディレクトリが作成される。

¹九州大学名誉教授

²九州大学大学院理学府基礎粒子科学専攻

³九州大学大学院理学研究院物理学部門

	内容 (files)	説明
DOC	HowToUse.tex	使用説明書
SRC	basis_sub6.f 他 15 の Fortran source files	ソースファイル
CFP	ALLSCFP_1.DATA 他 20 files	$j=1/2 - 13/2$ の全ての cfp's と その他必須の data files
SAMPLE	USD_Si28 他 6 directories	input data file

2.3 jjSMQ プログラムのコンパイルの方法

たとえば, ホストとして kyu-cc を使った場合で説明する (詳細は九州大学情報基盤センターのマニュアル“汎用 UNIX サーバにおけるプログラミング言語利用法”を参照). まず適当なディレクトリ (ここでは ~/work とする) を作成して, ソースファイル (拡張子が .f のファイル) をそこにコピーする. そして, smgmat.f, jjsmq.f, smtrans.f と smconfig.f 以外の全てのファイルの object ファイル (拡張子が .o のファイル) を作成する. この時, Fortran の翻訳時オプションで -X9 (言語使用が Fortran95) を指定すること. その後, 以下の compile & link を行う.

(1) “smgmat.e” の作成

```
kyu-cc/.../work% frt -X9 -o smgmat.e smgmat.f
```

(2) “jjsmq.e” の作成

```
kyu-cc/.../work% frt -X9 -o jjsmq.e jjsmq.f smme_pair_sub6.o
smhamil_sub7.o basis_sub6.o level_to_lcfp.o
small2.o ncfp_sub3.o racah22.o smdiag.o
smdiag_sub.o smdiag_lib.o
```

(3) “smtrans.e” の作成

```
kyu-cc/.../work% frt -X9 -o smtrans.e smtrans.f smtrans_sub3.o
smhamil_sub7.o smme_pair_sub6.o basis_sub6.o
level_to_lcfp.o small2.o ncfp_sub3.o racah22.o
```

(4) “smconfig.e” の作成

```
kyu-cc/.../work% frt -X9 -o smconfig.e smconfig.f basis_sub6.o
level_to_lcfp.o small2.o ncfp_sub3.o racah.o
```

上の (1) ~ (4) のステップの compile & link を行うと, 各々のステップにおいて出力される実行ファイルはそれぞれ, smgmat.e, jjsmq.e, smtrans.e および smconfig.e である. それぞれの実行ファイルについての説明は 3 節以下を参照のこと.

3 jjSMQ の使用法

3.1 はじめに

jjSMQ を用いた *jj*-結合殻模型計算は次のような手順で行われる.

- (1) 扱う系の1粒子準位のデータと、用いる2体力のパラメーターに関するデータを `smgmat.e` に入力し、2体力の必要な行列要素を計算する。計算結果はファイルに出力される。このときの相互作用として、Yukawa 型、Gauss 型と SDI を選ぶことができる。なお、Brueckner 理論等によって得られる2体の G 行列 (K 行列) 等の行列要素を数値的に入力することも可能である。
- (2) 扱う系の粒子数 (陽子数 Z , 中性子数 N) 等の必要な入力データと、(1) で得られた2体力の行列要素のデータを `jjsmq.e` に読み込んで、 I^π (spin, parity) 毎に、独立な殻模型基底状態間のハミルトニアン全ての行列要素を計算し、固有値問題を解き、各々の I^π 毎にエネルギー固有値と固有ベクトルを計算し、ファイルに出力する。
- (3) 上記 (2) で得られた固有値、固有ベクトルの出力ファイルを `smtrans.e` に読み込んで、得られた固有状態間の $B(E\lambda)$, $B(M\lambda)$ ($\lambda = 1, 2, 3, \dots$) や、電気的モーメント、磁気モーメントを計算する。

計算を始めるには、まず適当な作業用ディレクトリ (ここでは仮に `~/work` とする) に全ての実行ファイル

`smgmat.e`, `jjsmq.e`, `smconfig.e`, `smtrans.e`

を作成する。また必要な j (1 粒子準位のスピンの) に対応する cfp 関係のデータファイルをコピーする。例えば sd-shell を扱う場合には、1 粒子準位は $1s_{\frac{1}{2}}$, $0d_{\frac{3}{2}}$ と $0d_{\frac{5}{2}}$ であるから、 $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$ の cfp 関係のデータファイル

`ALLSCFP_1.DATA`, `ALLSCFP_3.DATA`, `ALLSCFP_5.DATA`,
`DCFP_1.DATA`, `DCFP_3.DATA`, `DCFP_5.DATA`,
`REDB1.DATA`, `REDB3.DATA`, `REDB5.DATA`

を `~/work` にコピーする。なお、これら cfp 関係のデータファイルのファイル名は絶対に変更しないこと。

3.2 2 体力行列要素 (Yukawa 型, Gauss 型, SDI) の計算 (`smgmat.e` の使い方)

このプログラムでは、1 粒子波動関数として調和振動子型波動関数を使い、必要な2体力の行列要素を計算する。

最初に `~/work` において入力データファイルを作る。表 1 のサンプルは sd-shell の場合の 1 例で、仮にファイル名を `"sd12.0.5.in"` とする。表 1 (`sd12.0.5.in`) を例として、入力データファイルの作り方を説明しよう。

表 1 の第 1 行 - 第 19 行の行頭から `"!"` 記号までの間の数字等が必要な入力データであり、`"!"` 以後の桁は全て説明文であるからデータとしては不要な部分である。しかしデータファイルを分かりやすくするために、この説明文は消さないで残しておく方が便利である。残しておいても害はない。

各行の中で、データの桁位置は自由である。例えば第 1 行の様に、1 行に複数のデータがある場合には、データ間の区切 (delimiter) には 1 個以上の半角空白 (whitespace) が必要である。なお入力データファイルで日本語 (漢字; 2byte 文字) は許されない。

表 1 (sd12_0.5.in)

3	3		!	Numbers of levels for protons and neutrons	(1)
0	2	2.5	0.000	!	a=(n,l,j) and E(a) [MeV] for proton (2)
1	0	0.5	0.730	!	a=(n,l,j) and E(a) [MeV] for proton (3)
0	2	1.5	5.000	!	a=(n,l,j) and E(a) [MeV] for proton (4)
0	2	2.5	0.000	!	a=(n,l,j) and E(a) [MeV] for neutron (5)
1	0	0.5	0.730	!	a=(n,l,j) and E(a) [MeV] for neutron (6)
0	2	1.5	5.000	!	a=(n,l,j) and E(a) [MeV] for neutron (7)
				!	blank line (Don't forget!) (8)
-27.0		13.50		!	NN PP int strengths (Vts, Vtt) [MeV] (<0:attractive) (9)
1				!	NN PP int type (Gauss < 0, Yukawa > 0, SDI = 0) (10)
0.66667				!	NN PP int Range [dimension-less] (11)
0.0		-35.00		!	NP int strengths (Vss, Vst) [MeV] (<0:attractive) (12)
-27.0		13.50		!	NP int strengths (Vts, Vtt) [MeV] (<0:attractive) (13)
1				!	NP int type (Gauss < 0, Yukawa > 0, SDI = 0) (14)
0.66667				!	NP int Range [dimension-less] (15)
GMAT_sd12.DATA				!	I/O file for G-MAT (interaction matrix elements) (16)
1	2			!	[smhamil] Particle numbers of (P) and (N) (17)
0.5				!	[smhamil] AI: Total spin (18)
1.0				!	[smhamil] Parity : 1.0 = even : -1.0 = odd (19)

それでは各行のデータについて説明する。

第 1 行 : “3 3” は, 1 粒子準位数 (陽子準位数が 3, 中性子準位数が 3) の意味. 陽子準位数, または中性子準位数が 0 (single-closed) も OK.

第 2 - 4 行 : この 3 行は陽子準位の n, l, j 及びその 1 粒子エネルギー. 主量子数 n は 0, 1, 2, ... の表示法により, j (半整数) は小数で表示する. 第 1 行の陽子準位数とこれらの行数とが一致しない時はエラー.

第 5 - 7 行 : この 3 行は中性子準位のデータ. 第 1 行の中性子準位数とこれらの行数とが一致しない時はエラー.

第 8 行 : 空白行 (忘れずに必ず入れること).

第 9 行 : pp, nn 力の strength. Vts : $T = 1, S = 0$, Vtt : $T = 1, S = 1$, <0 は引力, >0 は斥力

第 10 行 : pp, nn 力の関数形, <0 は Gauss 型, >0 は Yukawa 型, =0 は SDI

第 11 行 : pp, nn 力の range parameter [dimension-less]. Yukawa 型, Gauss 型の場合 $= \nu / (\sqrt{2}\mu)$. ここで μ [fm⁻¹] は force range の逆数, SDI の場合 $= R_0\nu$. R_0 は核半径 [fm]. $\nu = \sqrt{m\omega/\hbar}$ は h.o. wave function の size parameter.

第 12, 13 行 : np 力の strengths (pp, nn 力と同様).

第 14 行 : np 力の関数形 (pp, nn 力と同様).

第 15 行 : np 力の range parameter (pp, nn 力と同様).

第 16 行 : 2 体力の行列要素のデータの出力ファイル名.

以上の第 1 行 - 第 16 行が “smgmat.e” に必要な入力データである. 続く第 17 行 - 第 19 行は次の 3.3 の “jjsmq.e” に必要な入力データである. 次の 3.3 で説明する.

以上のようにして出来あがった入力データファイル (“sd12_0.5.in”) を smgmat.e に読み込む. すなわち, “sd12_0.5.in” を作業用ディレクトリ (~work) に置き, コンソール (コマンドライン) において

```
/work% ./smgmat.e < sd12_0.5.in
```

とタイプすると、全ての2体行列要素が計算され、第16行で指定したファイル名(今の場合“GMAT_sd12.DATA”)にその結果が出力される。

3.3 ハミルトニアン of 行列要素の計算と対角化 (jjsmq.e の使い方)

次に“jjsmq.e”を使ってハミルトニアンの全ての行列要素を計算し、固有値方程式を解き、エネルギー固有値と固有ベクトルを求める。入力データファイルは2.2の“smgmat.e”の時と「共通」であるから、表1(sd12.0.5.in)を使って説明する。

第16行 : 3.2のsmgmat.eから出力した2体力の行列要素のデータのファイル名(今の場合“GMAT_sd12.DATA”)。このファイルから2体力のデータを読み込む。

第17行 : “1 2”は、陽子数(Z)が1, 中性子数(N)が2を意味する。

第18行 : 計算したい状態の全スピン I ; 半整数(奇数核)の場合は小数で入力。

第19行 : 計算したい状態のパリティ π ; 偶は1.0, 奇は-1.0とする。

以上の入力データファイル(sd12.0.5.in)を“jjsmq.e”に読み込む。すなわち, “sd12.0.5.in”を作業ディレクトリ(~/work)に置き, コンソール(コマンドライン)で

```
/work% ./jjsmq.e < sd12_0.5.in > sd12_0.5_d
```

と入力する。

このプログラムではエネルギー固有値の低い方から3レベルだけ計算されるようになっている。求める固有値の数が制限されているのは、計算時間の節約と結果の精度の確保のためである。

結果のエネルギー固有値と関連するデータは出力ファイル“sd12_0.5_d”に書かれる。この出力ファイル名の命名は自由である。この出力ファイルとは別に、固有ベクトルの詳細なデータは、固有値と共に自動的に命名されるファイル“@EV_0.5p_GMAT_sd12.DATA”に出力される。このファイル名はjjsmq.eが自動的に命名する。その意味を文字列の先頭から順に説明しよう。

- (1) “@EV_” : jjsmq.eからの出力には全てこの記号が付く。固有値(E: eigenvalue)と固有ベクトル(V: eigenvector)の意。
- (2) “0.5p_” : 計算した状態の I^π (spin, parity)が $I = 0.5, \pi = +$ を意味する。 $I = 0.5, \pi = -$ なら“0.5m_”となる。
- (3) “GMAT_sd12.DATA” : 読みこんだ2体行列要素のファイル名。

この出力ファイル名“@EV_0.5p_GMAT_sd12.DATA”からその内容は容易に推定できる筈である。

表 2 (@EV_0.5p_GMAT_sd12.DATA)

@EV_0.5p_G_sd12.DATA				(1)
				(2)
3 3			! Numbers of levels for protons and neutrons	(3)
0 2 2.5 0.000000			! a=(n,l,j) and E(a) for proton	(4)
1 0 0.5 0.730000			! a=(n,l,j) and E(a) for proton	(5)
0 2 1.5 5.000000			! a=(n,l,j) and E(a) for proton	(6)
0 2 2.5 0.000000			! a=(n,l,j) and E(a) for neutron	(7)
1 0 0.5 0.730000			! a=(n,l,j) and E(a) for neutron	(8)
0 2 1.5 5.000000			! a=(n,l,j) and E(a) for neutron	(9)
				(10)
-27.000000 13.500000			! (NN,PP) int strengths (Vts, Vtt) [MeV]	(11)
1			! (NN,PP) I-type (Gauss < 0, Yukawa > 0, SDI = 0)	(12)
0.666667			! (NN,PP) Range [dimension-less]	(13)
				(14)
0.000000 -35.000000			! (NP) int strengths (Vss, Vst) [MeV]	(15)
-27.000000 13.500000			! (NP) int strengths (Vts, Vtt) [MeV]	(16)
1			! (NP) I-type (Gauss < 0, Yukawa > 0, SDI = 0)	(17)
0.666667			! (NP) Range [dimension-less]	(18)
				(19)
1 2			! Particle numbers of (P) and (N)	(20)
0.5			! AI: Total spin	(21)
1.0			! Parity : 1.0 = even : -1.0 = odd	(22)
5 6			! Numbers of J in G-MAT (PP,NN) (NP)	(23)
0 1 2 3 4				(24)
0 1 2 3 4 5				(25)
				(26)
19			! Dimension of eigenvalue equation	(27)
3			! Number of eigenstates calculated	(28)
				(29)
Eigenvalues and eigenvectors				(30)
	-12.3029254	-8.1416670	-4.3744678	(31)
				(32)
1	0.1496523	0.0510475	0.1066869	(33)
2	0.5550111	-0.7916075	0.0441011	(34)
3	0.4208014	0.2861712	0.5509731	(35)
4	-0.0013463	-0.0006876	0.0145440	(36)
5	0.0030666	0.0013084	-0.1356793	(37)
.
.
.

表 2 は jjSMQ.e を実行した結果得られる出力データ "@EV_0.5p_GMAT_sd12.DATA" である。但し、行末の番号はここでの説明のために仮に付けたもので、実際には無い。第 (1) - (30) 行の説明は省略する。第 (31) 行が "jjsmq.e" で求められた固有値を低い順に 3 つ出力している。第 (33) 行以下がその 3 つの固有値に対応する固有ベクトルである。左端の番号 "1, 2, ..." が基底ベクトルに付した通り番号である。それぞれの基底ベクトルがどのような配位 (configuration) であるかを知る方法は、次節 3.4 で説明する。

もう一つの出力ファイル “sd12_0.5_d” を見れば、得られた固有値や、今行った計算に関するさまざまな情報、計算時間等が見やすく得られる。ただしその大部分の情報は出力ファイル “@EV_0.5p_GMAT_sd12.DATA” にも書きこまれている。

3.4 出力された固有ベクトルの見方 (smconfig.e の使い方)

前節で説明した smdiag.e からの出力ファイル “@EV...” (表 2) に書きこまれた固有ベクトルの配位 (configurations) を知るためのプログラム “smconfig.e” の使用法を説明する。それにはコマンドラインから

```
/work% ./smconfig.e < @EV_0.5p_GMAT_sd12.DATA > sd12_0.5_c
```

とタイプする。このときの出力結果 “sd12_0.5_c” は表 3 のようになる。

表 3 (sd12_0.5_c)

```
<<< Input data >>>

@EV_0.5p_GMAT_sd12.DATA

(1) General
Single-particle levels
Protons (n, l, j, E [MeV])
  0  2  2.5  0.00000
  1  0  0.5  0.73000
  0  2  1.5  5.00000
Neutrons (n, l, j, E [MeV])
  0  2  2.5  0.00000
  1  0  0.5  0.73000
  0  2  1.5  5.00000
Numbers of particles
Proton = 1 ; Neutron = 2
Total spin and parity
Total I = 0.5 ; Parity = +

<<< Output data >>>

Dimension of eigenvalue eq. =          19

Configurations of basis vectors
  1 (p) 0.5+  2.5 0 0.0   0.5 1 0.5   1.5 0 0.0
    (n) 0.0+  2.5 0 0.0   0.5 0 0.0   1.5 2 0.0
  2 (p) 0.5+  2.5 0 0.0   0.5 1 0.5   1.5 0 0.0
    (n) 0.0+  2.5 0 0.0   0.5 2 0.0   1.5 0 0.0
  3 (p) 0.5+  2.5 0 0.0   0.5 1 0.5   1.5 0 0.0
    (n) 0.0+  2.5 2 0.0   0.5 0 0.0   1.5 0 0.0
  4 (p) 0.5+  2.5 0 0.0   0.5 1 0.5   1.5 0 0.0
    (n) 1.0+  2.5 0 0.0   0.5 1 0.5   1.5 1 1.5
  5 (p) 0.5+  2.5 0 0.0   0.5 1 0.5   1.5 0 0.0
    (n) 1.0+  2.5 1 2.5   0.5 0 0.0   1.5 1 1.5
.      .      .      .
.      .      .      .
.      .      .      .
```


表3において, “Configurations of basis vectors” 以降の行が, 各基底ベクトルの配位 (configuration) を示している. 左端の番号 1, 2, ... が基底ベクトルに付した通し番号で, 表2で説明したものに对应している.

表3で分かるように, 例えば通し番号 “1” の基底ベクトルの配位の見方は, 左から陽子空間 (p) の total spin, parity が 0.5+, 第1レベル ($j = 2.5 = \frac{5}{2}$) の陽子数は0個で, そのレベルの total spin は 0.0, 第2レベル ($j = 0.5 = \frac{1}{2}$) の陽子数は1個でそのレベルの total spin は 0.5, 第3レベル ($j = 1.5 = \frac{3}{2}$) の陽子数は0個, そのレベルの total spin は 0.0 となる. 中性子空間 (n) も同様で, 通し番号 “1” では第3レベル ($j = 1.5 = \frac{3}{2}$) に中性子が2個の configuration を示している.

表4 (sd12_trans.in)

4	!	NUMBER OF INPUT DATA FILES	(1)
@EV_0.5p_GMAT_sd12.DATA	!	DATA FILE (1)	(2)
@EV_1.5p_GMAT_sd12.DATA	!	DATA FILE (2)	(3)
@EV_2.5p_GMAT_sd12.DATA	!	DATA FILE (3)	(4)
@EV_3.5p_GMAT_sd12.DATA	!	DATA FILE (4)	(5)
2	!	LAMBDA (E > 0), (M < 0)	(6)
0.603342	!	nu : H.O. SIZE PARAM. [fm ⁻¹]	(7)
1.5 0.5	!	EFFECTIVE CHARGES FOR (P) AND (N)	(8)
0.88 4.70	!	ISOSCALAR AND ISOVECTOR SPIN g-FACTORS	(9)
0.50 0.50	!	ISOSCALAR AND ISOVECTOR ORBITAL g-FACTORS	(10)

3.5 $B(E\lambda), B(M\lambda)$ の計算 (smtrans.e の使い方)

3.3で得られた固有値, 固有ベクトルのデータ @EV_0.5p_GMAT_sd12.DATA などを使って電氣的遷移確率 $B(E\lambda)$ と電氣的モーメント, および磁氣的遷移確率 $B(M\lambda)$ と磁氣モーメントが求められる.

まず, 表4のような入力データを用意し, このファイル名を仮に “sd12_trans.in” としておく.

表4(sd12_trans.in) を例として, 入力データファイルの作り方を説明しよう.

第1行 : smtrans.e に入力したいファイル “@EV_...” の数. 最大20ファイルまで入力可能. このサンプルでは, 第2-5行で4つのファイルを入力しているので, “4” となっている.

第2-5行 : 入力したいファイルのファイル名. これらの入力ファイルは同じディレクトリ (今の場合 ~/work) になくてはならない.

第6行 : multipole の order. このサンプルでは “2” としているので, E2 遷移確率と電氣的四重極モーメントが求まることになる. 磁氣的遷移確率, 磁氣モーメントを求めたいときは “-” 符号を付ける. 例えば, “-1” とすると M1 遷移確率 $B(M1)$ と磁氣モーメントが求まる.

第7行 : 調和振動子型波動関数の size parameter . 3.2 の表1を参照.

第8行 : 陽子と中性子の effective charges. 磁氣的遷移確率の場合 (第6行のデータが <0 の場合), この行はダミーとなり, 何でもかまわない. (空白行でもかまわない. 空白行でも忘れずに入れること.)

第9,10行 : g -factors のデータ. 電氣的遷移 $B(E\lambda)$ の場合は不必要.

第9行 : Iso-scalar (IS) および iso-vector (IV) の spin g -factors.

$$g(\text{IS}; \text{spin}) = \frac{1}{2}[g(\text{P}; \text{spin}) + g(\text{N}; \text{spin})],$$

$$g(\text{IV}; \text{spin}) = \frac{1}{2}[g(\text{P}; \text{spin}) - g(\text{N}; \text{spin})], \quad \text{P: proton, N: neutron}$$

第10行 : Iso-scalar (IS) および iso-vector (IV) の orbital g -factors.

$$g(\text{IS}; \text{orbital}) = \frac{1}{2}[g(\text{P}; \text{orbital}) + g(\text{N}; \text{orbital})],$$

$$g(\text{IV}; \text{orbital}) = \frac{1}{2}[g(\text{P}; \text{orbital}) - g(\text{N}; \text{orbital})], \quad \text{P: proton, N: neutron}$$

以上の入力データファイル (sd12_trans.in) を “smtrans.e” に読み込む. すなわち, “sd12_trans.in” を作業用ディレクトリ (~/work) に置き, コンソール (コマンドライン) で

```
/work% ./smtrans.e < sd12_trans.in > sd12_t
```

とタイプすると, 入力データファイル (sd12_trans.in) に対応する E2 遷移と四重極モーメントが計算され, 結果がファイル “sd12_t” に出力される.

3.6 その他 (制限値等)

このプログラムで取り扱える系に関して, 以下の制限がある:

(1) 1粒子レベル数の制限

取り扱える1粒子準位の数, 陽子, 中性子それぞれ4レベルまでである. 従って, sd-shell や pf-shell は原理的にすべて取り扱い可能である.

(2) 次元数に関する制限 (jjsmq.e)

一般に殻模型空間は大変広大で, 例えば pf-shell に陽子を10個, 中性子を10個つめると, 4^+ 状態での独立な基底状態の数 (次元数) は 216,162,227 となる. 本プログラムでは, 上のような巨大な次元数の場合を取り扱うことはできない. (本プログラム jjsmq.e では, 現在, 一応 15,400 次元を超えると stop するようにしてある. ちなみに, sd-shell の最大はこの制限以下である).

(3) ハミルトニアンに対角化に関する制限

本プログラムパッケージに同梱されている固有値問題の対角化は, Lanczos 法を使用している. 本パッケージの jjsmq.e で解けるのは, 約 16,000 次元を目安としている. (殻模型の場合, 経験的にスパース度が約 20~25% であることを考慮して.) 従って, sd-shell はすべて解くことができる.

(4) 制限についての補足

(1) の制限については, 私たちが開発したプログラムに用いた「理論」上の制限であるので, 4レベルより多い1粒子準位を取ることはできない. しかしながら, (2) と (3) の制限はコンピューターのハード資源 (主メモリーの) 問題であるから, 使用するハード資源が許す限り制限が緩和できる. それを行うにはソースファイルの parameter 文や 配列宣言文の dimension の値を変える必要がある.

4 2体力行列要素を数値的に入力する方法

4.1 jjismq.e への入力ファイルの作り方

本プログラムでは、3.2 で扱った Yukawa 型, Gauss 型, SDI の2体力の他に, Brueckner 理論等によって得られる2体の G 行列 (K 行列) 等の行列要素を数値的に入力することもできる。以下でその方法を説明しよう。

jjismq.e には2つの入力ファイルがある。(1) は標準入力ファイル, (2) は標準入力ファイルの中で指定された2体力行列要素のデータを与えるファイルである。

2体力行列要素を数値的に入力するには, これらの2つの入力ファイルを手で作る。基本的には3節の例における sd12_0.5.in, GMAT_sd12.DATA と大差ない。要するに sd12_0.5.in, GMAT_sd12.DATA における2体力のパラメーターの部分が消去して, 代わりに“****”で置きかえた形である。下に1例を挙げる。

表 5 (Si28_0.in)

3 3		! Numbers of levels for protons and neutrons	(1)
0 2	1.5 1.646580	! a=(n,l,j) and E(a) for proton	(2)
0 2	2.5 -3.947800	! a=(n,l,j) and E(a) for proton	(3)
1 0	0.5 -3.163540	! a=(n,l,j) and E(a) for proton	(4)
0 2	1.5 1.646580	! a=(n,l,j) and E(a) for neutron	(5)
0 2	2.5 -3.947800	! a=(n,l,j) and E(a) for neutron	(6)
1 0	0.5 -3.163540	! a=(n,l,j) and E(a) for neutron	(7)
*****			(8)
G_Si28.DATA		! I/O file for G-MAT (interaction matrix elements)	(9)
6 6		! [smhamil] Particle numbers of (P) and (N)	(10)
0.0		! [smhamil] AI: Total spin	(11)
1.0		! [smhamil] Parity : 1.0 = even : -1.0 = odd	(12)

表 5 が上で述べた jjismq.e への標準入力ファイルで, 表 6 がもう1つの2体力行列要素を与える入力ファイルの例である。これらのファイルの第(1) - (7)行は3.2の例(表1)と同様であるから説明の必要は無いであろう。第(8)行は, これらが「2体力行列要素を数値的に入力する目的である」ということを明示するためのもので, 1個以上の任意の個数の“*”印(半角の asterisk)を第1 - 40桁の間の任意の位置に書き込む。

表 5 の(9) - (12)は表 1 の(16) - (19)と同じ意味であるから3.3を参照すること。

表 6 の(9)以下が2体力行列要素 $G(L1, L2, L3, L4; J)$ のデータである。L1, L2, L3, L4 はレベル番号で, 陽子に対しては3つのレベル(上の(2), (3), (4)行のレベル)に通し番号をそれぞれ1, 2, 3と付けている。同様に中性子に対しても3つのレベル(上の(5), (6), (7)行のレベル)に通し番号がそれぞれ1, 2, 3と付けられている。この様に本プログラムでは陽子, 中性子別々にレベル番号(通し番号)を付けている。

$T_z = -1, 1, 0$ がそれぞれ PP 力, NN 力, NP 力を表す。PP 力, NN 力に関しては問題は無いが, NP 力については L1, L3 が中性子レベル, L2, L4 が陽子レベルとしてあるので注意すること。

表 6 (G_Si28.DATA)

3	3							! Numbers of levels for protons and neutrons	(1)
0	2	1.5	1.646580					! a=(n,l,j) and E(a) for proton	(2)
0	2	2.5	-3.947800					! a=(n,l,j) and E(a) for proton	(3)
1	0	0.5	-3.163540					! a=(n,l,j) and E(a) for proton	(4)
0	2	1.5	1.646580					! a=(n,l,j) and E(a) for neutron	(5)
0	2	2.5	-3.947800					! a=(n,l,j) and E(a) for neutron	(6)
1	0	0.5	-3.163540					! a=(n,l,j) and E(a) for neutron	(7)

L1	L2	L3	L4	J	T	Tz		G-MAT	(9)
1	1	1	1	0	1	-1		-1.91331461	(10)
1	1	1	1	2	1	-1		-0.05824464	(11)
1	1	1	2	2	1	-1		0.38082358	(12)
1	1	1	3	2	1	-1		0.31920064	(13)
1	1	2	2	0	1	-1		-2.79013735	(14)
1	1	2	2	2	1	-1		-1.42073135	(15)
.
.
.

以上の入力データファイル (Si28_0.in) を “jjsmq.e” に読み込む。すなわち, “Si28_0.in” と “G_Si28.DATA” を作業用ディレクトリ (~/work) に置き, コンソール (コマンドライン) で

```
./work% ./jjsmq.e < Si28_0.in > Si28_0_d
```

とタイプすると, 入力データファイル (Si28_0.in) に対応するハミルトニアン全ての行列要素が計算され, エネルギー固有値と固有ベクトルが求められる。その結果が, 自動的に命名される出力ファイル “@EV_0.0p_G_Si28.DATA” に出力される。それとは別にこの計算に関するさまざまな情報が “Si28_0_d” に出力される。

なお, 2体力行列要素を数値的に入力した場合, これ以後の計算 jjsmq.e と smtrans.e からの出力においては, 2体力に関するパラメータは全て “0.00000” となるので, これによって 2体力を数値的に入力したことが分かる。

4.2 2体力行列要素の定義について

本プログラムにおける 2体力行列要素は, 以下に示す第 2 量子化されたハミルトニアンの表式に現れる係数 $G(abcd; J)$ で定義される。従って, 2体系の shell model states での行列要素とは少し異なるので注意が必要である。

$$H = \frac{1}{2} \sum_{JM} \sum_{abcd} G(abcd; J) [c_a^\dagger c_b^\dagger]_{JM} [c_d c_c]_{JM}$$

ここで c_a^\dagger はレベル $a = (n, l, j, q)$ における核子の生成演算子で, 陽子に対して $q = 1$ と中性子に対して $q = 0$ である。従って,

$$G(abcd; J) = \langle ab; J, T = 1 | V | cd; J, T = 1 \rangle \quad \text{for PP and NN force,}$$

$$G(abcd; J) = \frac{1}{2} \{ \langle ab; J, T = 1 | V | cd; J, T = 1 \rangle + \langle ab; J, T = 0 | V | cd; J, T = 0 \rangle \}$$

for NP force,

である。但し、上の $\langle ab; J, T | V | cd; J, T \rangle$ は反対称化された行列要素である。この行列要素 $\langle ab; J, T | V | cd; J, T \rangle$ は 2 体系の規格化された shell model states での通常の行列要素とは異なり、その間の関係は

$$\langle ab; J, T | V | cd; J, T \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{1 + \delta_{ab}} \sqrt{1 + \delta_{cd}} \langle ab; J, T | V | cd; J, T \rangle_{(\text{shell-model})}$$

である。

Kuo-Brown の論文などでは $\langle ab; J, T | V | cd; J, T \rangle_{(\text{shell-model})}$ が与えられている。

4.3 Wildenthal の “USD” の行列要素を使った計算

Sd-shell の殻模型計算で 2 体力の行列要素としてしばしば使われるものに、Wildenthal の “USD” がある (B. A. Brown and B. H. Wildenthal, Ann. Rev. Nucl. Sci. 38 (1988) 29). SAMPLE ディレクトリの中のサブディレクトリ, USD_Ne20, USD_Mg24, および USD_Si28, にこれを用いた入力ファイルが置いてある。

また、2 体力行列要素を数値的に入力する他のデータ例も SAMPLE ディレクトリに置いてある。Kuo_Na22 と Kuo_Ne21 は Kuo による 2 体力の行列要素であり、Ne20 は Inoue, Sebe, Hagiwara and Arima の論文 (Nucl. Phys. 59 (1964) 1-32) で使われた Yukawa 型の 2 体力の入力データのサンプルである。

5 使用言語について

本パッケージに同梱のソースプログラムは、Fortran 90/95 対応で作成されている。一部に Fortran 90 以上でのみ許される言語仕様を使っているので、FORTRAN 77 でコンパイルすることはできない。

6 計算時間

本プログラムでは、Fujitsu Fortran に標準装備されているプロセス時間 (CPU time: 経過時間ではなくプログラムの実行のために CPU が使われる時間=真の計算時間) を測る subroutine “CLOCKM” を使って msec 単位で測定できるようになっている。

7 謝辞, 著作権, その他

本プログラムを開発するにあたって、多くの方々に御教示・御協力をお願いした。なかでも九大の上村正康氏および九大原子核理論研究室のメンバー各位には色々と相談にのっていただいた。感謝申し上げたい。また、小川建吾氏 (千葉大), 水崎高浩氏 (東大) にはプログラムのチェックのためのデータを送っていただいたり、両氏のプログラムとの計算時間の比較のためのデータを頂いたりして、御協力をお願いした。

本プログラムパッケージ中のソースプログラム smgmat2.f において、Gauss 型, Yukawa 型の 2 体力の行列要素を計算する subroutine は、ずいぶん以前東大原子核理論研究室で作成

されたものである。上村氏が九大大型計算機センターのライブラリーに登録されたものを、同氏の上承を得て使用させていただいた。また、`racah.f`, `racah22.f` の中の `racah` 係数と `9-j` 記号を高速計算する function は、上村氏によって作成されたものを、同氏の上承を得て使わせていただいた。また `smdia_lib.f` 中のプログラムは、Householder 法, 2分法, 逆反復法を用いて固有値問題を解く subroutines だが、これらは 森 正武 氏によって公開されているソースプログラム (森 正武 著:「FORTRAN77 数値計算プログラミング」, 岩波書店) を使わせていただいた。記して感謝の意を表したい。

本パッケージにおけるソースプログラムのうち、上記の Gauss 型, Yukawa 型の 2 体力の行列要素を計算する subroutines, `racah` 係数と `9-j` 記号を計算する functions, ならびに `smdia_lib.f` 中の全ての subroutines 以外の部分は、全て私達 (高田, 佐藤, 安本) が独自に作成したものである。従って、それらの著作権は 高田健次郎, 佐藤 求, 安本誠一 (九大理) に帰属する。