

猿まねで ECIS97+JLM 使用法

M. Takashina
RCNP, Osaka Univ.

version 0.0: July 13. 2008

version 1.0: July 25. 2008

version 1.1: Oct. 30. 2008

概要

JLM single-folding potential と ECIS97 を使って、陽子非弾性散乱を計算する方法を解説する。

1 はじめに

実験を解析する際に、(半)微視的な方法を使ったらいいのにと考えていたので作ってみました。

2 計算コード

計算プログラム名 : minc_jlm2ecis_vxx.f (FORTRAN)

原子核の密度を与えれば、JLM ポテンシャルを使った single-folding 計算を行い、ECIS97 の input file を出力する計算プログラムである。出力のフォーマットは、基本的に下浦さんの「みようみまね ECIS97」の中の SAMPLE3_dat を基に作成している。

execute_file < input_file

で実行される。

計算内容は single-folding

$$V_{\alpha,\beta}(\mathbf{R}) = \int \rho_{\alpha,\beta}(\mathbf{r}) v_{NN}(\mathbf{R} - \mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (1)$$

の動径部分を計算している。 v_{NN} として JLM を使っている。

version 1.1 の段階では、 $0_{gs}^+ \rightarrow J^\pi$ (J は任意の整数) の遷移のみの計算である。基底状態がスピンを持つ場合や、より多くのチャンネルが結合する場合の計算は、今後の課題である。

3 密度の定義

始状態 (終状態) のスピン、z 成分を I', M' (I, M) とすると、原子核密度は一般に、

$$\begin{aligned}\rho_{II'M'}^q(\mathbf{r}) &= \langle \phi_{IM}^q(\xi) | \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) | \phi_{I'M'}^q(\xi) \rangle \\ &= \sum_{\lambda\mu} (I'M'\lambda\mu | IM) \rho_{II'}^{q(\lambda)}(r) Y_{\lambda\mu}^*(\hat{\mathbf{r}})\end{aligned}\quad (2)$$

と定義される (q は、 p もしくは n を表す)[1]。 λ が multipolarity である。この $\rho_{II'}^{q(\lambda)}(r)$ が minc の input である。

Normalization は、diagonal かつ $\lambda = 0$ (核子密度) の場合、

$$\int \rho_{II}^{p(0)}(r) r^2 dr = \frac{Z}{\sqrt{4\pi}} \quad (3)$$

$$\int \rho_{II}^{n(0)}(r) r^2 dr = \frac{N}{\sqrt{4\pi}} \quad (4)$$

である。また、proton transition density の場合は、 $B(E\lambda)$ の値と関係しており、

$$\frac{2I+1}{2I'+1} \left| \int \rho_{II'}^{p(\lambda)}(r) r^{\lambda+2} dr \right|^2 = B(E\lambda) \quad (e^2 fm^{2\lambda}) \quad (5)$$

となっている。neutron transition density の場合は、 $B(E\lambda)$ に対応するものを $B_n(\lambda)$ とすると、同様に、

$$\frac{2I+1}{2I'+1} \left| \int \rho_{II'}^{n(\lambda)}(r) r^{\lambda+2} dr \right|^2 = B_n(\lambda) \quad (fm^{2\lambda}) \quad (6)$$

である。ちなみに、よく議論に使われる nuclear matrix element M_p , M_n は、

$$M_p = \sqrt{2I+1} \int \rho_{II'}^{p(\lambda)}(r) r^{\lambda+2} dr \quad (7)$$

$$M_n = \sqrt{2I+1} \int \rho_{II'}^{n(\lambda)}(r) r^{\lambda+2} dr \quad (8)$$

と定義され [2]、 $B(E\lambda)$, $B_n(\lambda)$ との関係は、

$$B(E\lambda) = \frac{|M_p|^2}{(2I' + 1)} \quad (9)$$

$$B_n(\lambda) = \frac{|M_n|^2}{(2I' + 1)} \quad (10)$$

である。核構造屋から density をもらった場合、定義が必ずしもここに書いている $\rho_{II'}^{q(\lambda)}(r)$ と一致しないと思いますので、 $B(E\lambda)$, $B_n(\lambda)$ もしくは、 M_p , M_n の値を聞いて、minc のインプットとして正しい normalization を持つように適当に normalize してください。

density のファイルは、proton, neutron 別です。表 1 に、 $^{58}\text{Ni}(0_{\text{gs}} \rightarrow 2_1^+)$ の場合のファイルの例を示します。表 2 に解説を示しています。 $0_{\text{gs}} \rightarrow J^\pi$ の場合、

```
no= 1      ka= 1      kb= 1      lam= 0
```

は基底状態の密度、

```
no= 2      ka= 2      kb= 1      lam= J
```

は $0_{\text{gs}} \rightarrow J^\pi$ の遷移密度、

```
no= 3      ka= 2      kb= 2      lam= 0
```

は励起状態の密度となります。実際には、今の version の minc の計算ではこの励起状態の密度の情報は要らないのですが、一応、この no=3 のところには基底状態と同じ密度を入れておいてください。これ以降の

```
no= 4      ka= 2      kb= 2      lam= 2
```

の成分などは、入力しなくても大丈夫です。

minc での計算を行うと、標準出力の中に、

```
0----- density(diagonal)= 27.9992645 29.9992414 57.9985059
```

というのが出てきます。これは、それぞれ、陽子数、中性子数、質量数に対応するはずのものです。(わずかにずれているのは、数値誤差) これが陽子数、中性子数、質量数と違えば、核子密度の定義が間違っているということになります。次に、その下に

lam= 2 Mp= -26.33490 Mn= -28.21573

lam= 2 Bp(up)= 693.52682 Bn(up)= 796.12749

というのが出て来ます。lam, Mp, Mn はわかると思います。Bp(up) というのは、 $B(E\lambda, \text{up})$ [$\text{e}^2 \text{fm}^{2\lambda}$] で、Bn(up) というのは、中性子側の $B(E\lambda, \text{up})$ に対応する量です。核構造屋から聞いたそれぞれの値と、ここで計算された値が違っていれば、遷移密度の定義が間違っていることになります。

表 1: density file の例。proton density of $^{58}\text{Ni}(0_{\text{gs}} \rightarrow 2_1^+)$.

```
Ni58      nkaku= 2      irmax = 51  dr=    0.200
  1  0.0    +    1      0.00
  2  2.0    +    1      1.45
no=   1      ka= 1    kb= 1    lam= 0
0.000  2.9450E-01
0.200  2.9443E-01
0.400  2.9433E-01
...
... 以下省略
no=   2      ka= 2    kb= 1    lam= 2
0.000 -2.9118E-05
0.200 -4.2151E-05
0.400 -6.1006E-05
...
... 以下省略
no=   3      ka= 2    kb= 2    lam= 0
0.000  2.9450E-01
0.200  2.9443E-01
0.400  2.9433E-01
...
... 以下省略
no=   4      ka= 2    kb= 2    lam= 2
0.000  0.0000E+00
0.200  0.0000E+00
0.400  0.0000E+00
...
... 以下省略
```

表 2: density file の例。proton density of $^{58}\text{Ni}(0_{\text{gs}} \rightarrow 2_1^+)$.

```

line 01: Symbol, nkaku=number of states, irmax, dr

line 02-03: nn、J(spin), pi(parity), nth J pi, Excitation energy
           nn=1,nkaku

line 04- : no=通し番号、ka,kb = nn で指定された状態, lambda
           ka=1,nkaku
           kb=1,ka

           以下、r, density が並ぶ
           rは 0.0 から始まり、等間隔にしてください。

```

4 Input file

Input file の例を表 3 に示す。これは、 $E_p=40$ MeV における ^{58}Ni の陽子非弾性散乱で必要な、陽子- ^{58}Ni 間ポテンシャルを計算するための input である。陽子は入射粒子に設定してある。不安定核実験の場合は標的となるが、問題ないでしょう。適当に入れ換えてください。

表 3 の解説は、表 4 に示してある。(表 4 は最後のページに飛んでいるかも)

表 4 における注意事項

1. line 05 の 'idens' は、0 であれば、密度のインプットはガウス展開されたものの、レンジパラメータ、展開係数であり、 $\text{abs}(\text{idens})=1$ であれば、密度のインプットは密度分布そのものになる。密度をいちいちガウス展開するのは面倒なので、通常は密度そのものをインプットにする。(version 0 の時と、idens を入力する位置が変わりました) $\text{idens}=1$ の時は、インプットは dens (密度の値) のみ。このとき、(d12.4) の format 付き。 $\text{idens}=-1$ の時、インプットは、r, dens (座標、密度の値) となる。この場合、特に format は指定していない。
2. line 06 の最初は、入射粒子 (陽子、中性子) の symbol である。format は (a5) で、 $\text{ipn}=1$ の時 'h1'、 $\text{ipn}=0$ の時、'n' を書くこと。ここを間違えるとプログラムは止まります。面倒ですが、チェックのため…。

表 3: Input file の例。 $^{58}\text{Ni}(p,p')$ at $E_p=40$ MeV.

```

58Ni(p,p') at 40 MeV using Negele's formula & vibration model
ni58nglvibp2                                :denst p
ni58nglvibn2                                :denst n
jlm_ni58nglvibe40_2                          :output file
-1      1                                    :idens, ipn ipn=1-p,0-n
h1  1.0  1.0      1
1  0.0      +      1      0.0
Ni58 58.0 28.0      2
1  0.0      +      1      0.00
2  2.0      +      1      1.45
40.0      0.2      0.2      180.0      30      :E/A thmin,dth,thmax,Lmax
1.00      1.0                                :v0 tv
0.80      1.0                                :w0 tw
1.25                                            :rc0
NCCMAX= 2      RMAX= 10.0      DR= 0.100      --(7X,I2 ,8X,F10.0 ,3X,F10.0)
NCC= 1 (NP,NT)=( 1, 1 )      J=0.0
NCC= 2 (NP,NT)=( 1, 2 )      J=2.0
//

```

3. line 07 では、核子のスピンを 0.0 として入れてください。(LS 力を入れていないので)
4. line 08 の最初には標的核の symbol を書く。この symbol の format は上と同じく (a5) である。密度のインプットファイルの最初に書いた symbol と全く一致するよう to do。 (大文字、小文字) でないと、止まります。これもチェックのため…。
5. line 11 の incident proton energy は、proton 入射の場合に置き換えたエネルギーを入れること。(E/A そのままですが…)
6. line 12, 13 の、normalization factor は、それぞれ、 λ_v , λ_w の意味である。通常は、 $\lambda_v=1$, $\lambda_w=0.8$ がもっともよく用いられる。また、同じく line 11, 12 の range parameter は、 t_v , t_w の意味である。通常、 $(t_v, t_w)=(1.0, 1.0)$ や、 $(t_v, t_w)=(1.2, 1.75)$ などが用いられる。
7. 表 4 の解説に、フォーマットらしきものを書いています。実際にはフォーマット

は、line 14 より上の行では指定してありません。整数か、実数かだけ気をつけてください。

5 今後の課題

基本的に、高階が ECIS をよく理解していないことからくる課題であるが…、

1. 非弾性チャネルのポテンシャルは、弾性チャネルと同じものを使うようにしている。
弾性チャネル、非弾性チャネルでポテンシャルを変えるには？
2. reorientation term を取り入れるには？
3. 何チャネルまで取り入れられるか？(CDCC 計算の可能性)

6 最後に

何か問題があったら、高階まで連絡ください。

この計算プログラムを使って論文を書いた場合は、高階も著者に入れていただけるとありがたいです(と言うか、入れてください)。サポートは惜しみません。

参考文献

- [1] M. Kamimura, Nucl. Phys. **A351** (1981) 456.
- [2] A.M. Bernstein et al., Phys. Lett. 103B (1981) 255; Phys. Rev. Lett. 42 (1979) 425.

表 4: 表 3 に示した input file の解説。*1: The running number for the states included in this calculation *2: for example, this number is 2 when 3_2^- .

```

line 01: comment
line 02: file name of proton density          (a40)
line 03: file name of neutron density        (a40)
line 04: output file name                    (a40)
line 05: idens,ipn                          (integer)
        idens=0 --> Gaussian input
        idens=1 --> numerical input (only dens, d12.4)
        idens=-1 --> numerical input (r, dens, no format)
        ipn=1   --> proton scattering
        ipn=0   --> neutron scattering

line 06-07 information for the projectile
line 06: symbol, mass #, proton #, # of state (a5,2f5.1,i5)
        symbol: ipn=1 -> 'h1'
                ipn=0 -> 'n'
line 07: information for the 1st state
        *1, spin, parity, *2, excitation energy (i5,f5.0,a5,i5,f10.0)
        (In this calculation, p/n spin is 0.0,
         because LS force is not included.)

line 08-10 information for the target
line 08: symbol, mass #, proton #, # of state (a5,2f5.1,i5)
line 09: information for the 1st state
        *1, spin, parity, *2, excitation energy (i5,f5.0,a5,i5,f10.0)
line 10: information for the 2nd state
        *1, spin, parity, *2, excitation energy (i5,f5.0,a5,i5,f10.0)

line 11: incident proton energy
        min. value of theta, mesh of theta
        max. value of theta, max. value of L (4f10.0,i5)

line 12: normalization factor for V(r),
        range parameter

line 13: normalization factor for W(r),
        range parameter

line 14: radius parameter for Coulomb potential

line 15-17: 見た通りです。

```