

ゼロレンジ近似 DWBA 計算コード DWUCK4

日野原 伸生

2002年 11月 8日

1 はじめに

DWBA の計算コードである DWUCK4 を用いて本実験で必要となる (d, d) 散乱および (d, p) 散乱における断面積および偏極分解能の計算の方法に関してまとめました。DWBA 理論についてはこまかいことはいっさい触れていません。

2 DWUCK4 の入手およびインストール

DWUCK4 はゼロレンジ近似での DWBA の FORTRAN77 計算コードです。

<http://spot.colorado.edu/~kunz/DWBA.html>

から入手できます。この中から dwuck4_32.exe をダウンロードします。

このページには dw4tst.dat および dw4tst.lis というテストファイルがありますのでこの入力データ dw4tst.dat に対する出力が、dw4tst.lis と同じ結果になるか確認して下さい。計算は入力ファイル `***.dat` をドラッグ&ドロップで dwuck4_32.exe に落とすと、`***.lis` という出力ファイルが作られます。ベースとなるコンピュータシステムが異なると信頼性のない計算結果が出力される場合があります。

3 入力ファイルの書式

まず、DWUCK4 は FORTRAN77 で書かれていますので入力形式もそれに従います。4.1 入力ファイルの例をいくつか示しますので参考にして下さい。

DWUCK4 の入力ファイルは 7つの入力ブロックに分けられています。全てのブロックが 1行におさまるわけではなく、何行かにわたるブロックもあります。はじめの 4ブロックはプログラムに対しての基本的な入力です。5、6番目のブロックはそれぞれ 2行以上にわたる入力ブロックで、散乱の始状態と終状態の歪曲波に関する情報を入力します。最後の 7番目のブロックは形状因子とある反応モデルに依存する形状因子の入力について書かれます。

数値の入力型式は柔軟性にとんでいるので、入力ファイル全般に渡って入力型式が完全に一致している必要はありません。。以下にそれぞれの入力形式についての書式について書きます。

3.1 入力ブロック 1

書式は ICON(20),ALPHA FORMAT(20I1,A60) です。1行分です。

ここではプログラムの動作を決定します。詳細はマニュアル [2] を見て下さい。

ICON(1) では入力ブロック 2 の値を読むか読まないかを決めます。0 は読まない、1 は読む、です。9 の場合はプログラムを終了します。入力データの一番最後にはそこでプログラムが終わることを示すために 9 を付け足しておいて下さい。

ICON(2) =0 では粒子移行核モデルを用いて計算をします。ICON(2)=2 の場合は複合核モデルを用いて計算をします。詳しくはマニュアルを見て下さい。

ICON(6) 弾性散乱の断面積の出力を決めます。0 は出力しません。1 は出力します。

ICON(9) 非弾性散乱の断面積のグラフを出力するかどうかを決めます。0 は出力しない、その他の整数値 N の時は対数的に N の範囲にわたって出力します。

ICON(13) =1 であれば、FOR007.DAT ファイルに非弾性散乱断面積の角度分布を出力します。

ICON(16) 弾性散乱の断面積のグラフを出力するかどうかを決めます。ICON(9) とおなじ書式です。

Alpha 空白を含む任意の 60 文字を入れることができます。人間がプログラムの識別するのに使います。

3.2 入力ブロック 2

次の 1 行です。書式は NANGLES,ANGLE1,DANGLE FORMAT(3F8.4) です。計算する角度に関する入力です。

NANGLES 断面積の計算をする角度の数

ANGLE1 最初に計算する角度です。0 度でよいでしょう。単位：度

DANGLE 角度のインクリメントです。単位：度

もし角度のデータが読みこまれないというパラメータを入力ブロック 1 で指定した場合は DWUCK4 のデフォルトの角度として 0 度から 180 度まで 5 度間隔の角度を使用します。

3.3 入力ブロック 3

1 行です。書式は LMAX, NLTR,[LTR(I),I=1,NLTR], [JTR(I),I=1,NLTR] FORMAT(18I3)

LMAX 歪曲波の計算に入れる l の最大値です。プログラムの使用するメモリによる制限により極限值 $400/(2s_a + 2s_b/2) - 1$ を超えられません。ここで s_a, s_b は始状態および終状態のスピンです。

NLTR 角運動量移行計算の最大値です。NLTR ≤ 8 を満たしていなければいけません。

LTR(I) I 番目の形状因子の角運動量移行量です。

JTR(I) I 番目の動径形状因子の全角運動量移行量の 2 倍です。

3.4 入力ブロック 4

1 行です。書式は DR,RMIN,RMAX,COUEX,FNRNG,FORMAT(10F8.4) です。ここでは動径積分に関する値を入力します。

DR 積分を実行するときの動径座標に関する微小量 dr の大きさです (単位：fm)

RMIN 動径積分における積分区間の下限値 (単位：fm)

RMAX 動径積分における積分区間の上限値 (単位: fm)。もし RMAX が負の場合は RMAX の値はプログラムの中で自動的に調整されて RMAX の絶対値が使われますこのプログラムのメモリの配置の関係で、 $\text{INT}(\text{RMAX}/\text{DR}) \leq 400$ という制限を受けます。

COUEX Coulomb 励起のスケール因子です

FNRNG 有限レンジの補正因子です

3.5 入力ブロック 5

始状態の歪曲波に対する入力を行います。2行以上です。1行目は書式が E,MP,ZP,MT,ZT, r_{0c} ,AC,PNLOC,2*FS FORMAT(10F8.4) で始状態の歪曲波の運動学的なパラメータを入力します。

2行目以降は歪曲波の受けるポテンシャルに関する入力です。1行で1つのポテンシャルを表します。ポテンシャルの行が複数行ある場合はそれらの和が全ポテンシャルとして扱われます。

E 始状態入射核の実験室系での運動エネルギー (単位: MeV)

MP 入射核の質量 (単位: AMU)

ZP 入射核の電荷 (e 単位)

MT 標的核の質量 (単位: AMU)

ZT 標的核の電荷 (e 単位)

r_{0c} 換算電荷半径 ($R_c = r_{0c}A^{1/3}$)(単位: fm)

PNLOC 非局所的パラメータ

2*FS 入射核のスピン の 2 倍

2行目以降の書式は OPTION,VR, r_{0R} ,AR,VSOR,VI, r_{0I} ,AI,VSOI,POWER FORMAT(10F8.4) です。

OPTION どのポテンシャルを使うかを選びます。(後述)

VR ポテンシャルの実部の大きさ V_R (単位: MeV)

r_{0R} 実ポテンシャルの換算半径 ($R_R = r_{0R}A^{1/3}$) (単位: fm)

AR 実ポテンシャルの diffuseness (単位: fm)

VSOR 実ポテンシャルのスピン-軌道因子 (次元なし)

VI 虚ポテンシャルの強さ (単位: fm)

r_{0I} 虚ポテンシャルの換算半径 ($R_I = r_{0I}A^{1/3}$)(単位: fm)

AI 虚ポテンシャルでの diffuseness(単位: fm)

VSOI 虚ポテンシャルのスピン-軌道因子 (次元なし)

POWER その他のパラメータ。いくつかのポテンシャルや形状因子のオプションとして使われます。

複数のポテンシャルを使う場合は最終的なポテンシャルは個々のポテンシャルの重ね合わせになります。もし OPTION が負の数であるときはその OPTION が最後のポテンシャル (つまり入力ブロック 5 の最後) となります。そしてプログラムは次の行を入力ブロック 6 と解釈します。OPTION がゼロであれば、ポテンシャルは計算されず、プログラムはそのまま次の入力ブロックを読みこむプロセスへと移ります。

3.6 入力ブロック 6

ここでは終状態歪曲波に関する入力を行います。書式は入力ブロック 5 とまったく同じです。ただ違うのは一番はじめの値は E ではなく QCODE で、これは核反応の Q-value(MeV) となります。

3.7 入力ブロック 7

粒子移行反応における動径形状因子についての入力です。(d,p) 反応では核の中に残された中性子の一粒子状態として考えてもよいです。書式は入力ブロック 5、6 と幾どおなじです。2 行以上にわたります。

1 行目の書式は E,MP,ZP,MT,ZT, r_{0c} ,AC,PNLOC,2*FS FORMAT(10F8.4) で、これは運動学的な入力となります。

E 1 粒子束縛エネルギー (単位: MeV)
MP 1 粒子の質量 (単位: AMU)
ZP 1 粒子の電荷 (e 単位)
MT 核の質量 (単位: AMU)
ZT 核の電荷 (e 単位)
 r_{0c} 換算電荷半径 ($R_c = r_{0c}A^{1/3}$)(単位: fm)
AC 電荷半径の diffuseness(実装されていません)
PNLOC 非局所的パラメータ
2*FS 形状因子のスピン移行量の 2 倍

2 行目以降の書式は OPTION,VR, r_{0R} ,AR,VSOR,VI, r_{0I} ,AI,VSOI,POWER FORMAT(10F8.4) です。

基本的に入力ブロック 5、6 と同じ形式をとっています。

1 行目のパラメータ E がゼロでないときは、2 行目以降で定義されたポテンシャルを使ってプログラムは固有関数の解を計算します。この場合、以後の行で量子数などの必要なパラメータを加える必要があります。

3.8 追加入力ブロック

この行では形状因子の固有関数を計算します。書式は FNODE,FL,2*FJ,2*FS,VTRIAL,FISW,FORMAT(10F8.4) です。

FN 動径関数の原点と無限遠点を除いた節の数
FL 動径関数の軌道角運動量
2*FJ 動径関数の全角運動量の 2 倍
2*FS 動径関数のスピンの 2 倍
VTRIAL 動径関数を決定するポテンシャルのスケリング因子。もし VTRIAL がゼロであればデフォルト値の +60.0 が使われます。
FISW 動径関数の積分のサーチ方法を決定します。=0. の時、束縛エネルギー E を固定してポテンシャルスケール因子 VTRIAL の大きさをサーチします。=1. の時、ポテンシャルの大きさ VTRIAL を固定して束縛エネルギー E をサーチします。=2. の時はサーチを行いません。(これは $E > 0$ の時のみ有効)

動径波動関数は計算した位相シフト量を用いて漸近解とマッチするようにある束縛エネルギーおよび VTRIAL の大きさに対して計算されます。

全ポテンシャルは VTRIAL と 2 行目以降のパラメータで計算された形との積になっています。一般的な束縛状態関数を与えるために結果はかならず負になります。つまり OPT=1.0 の場合、VTRIAL*VR はゼロよりも小さくなります。

3.9 ポテンシャルオプション

入力ブロック 5、6、7 のパラメータ OPTION で、計算に使うポテンシャルの形状を決めることが出来ます。そのなかでよく使うオプションについて説明します。

OPT = 0.0 ポテンシャルを使う計算を行いません。

OPT = 1.0 体積 Wood-Saxon 型ポテンシャルです。

$$V(r) = V_R f(x_R) + iV_I f(x_I)$$

ここで

$$f(x_i) = \frac{1.0}{1 + \exp(x_i)}; x_i = \frac{r - r_{0i}MT^{\frac{1}{3}}}{A_i}$$

である。実部が引力で、吸収的な虚部を持つ場合は VR と VI はともに負になります。

OPT = 2.0 表面 Wood-Saxon 型ポテンシャル (微分型)

$$V(r) = V_R g(x_R) + iV_I g(x_I); g(x) = \frac{df(x)}{dx}$$

x の定義は OPT = 1.0 とおなじです。よく使われる W_D との間には $V_I = 4W_D$ の関係にあります。ポテンシャルが引力で吸収的であるためには V_R と V_I は正でなければいけません。

OPT = 4.0 Wood-Saxon 型スピン-軌道ポテンシャル

$$V_{LS}(r) = \left[-V_R \frac{1}{r} \frac{df(x_R)}{dr} - iV_I \frac{1}{r} \frac{df(x_I)}{dr} \right] \mathbf{L} \cdot \mathbf{s}$$

です。このポテンシャルでは $\mathbf{L} \cdot \mathbf{s}$ の項で $(\hbar/m\pi c)^2 \sim 2$ が入っていません。通常の表記では

$$V_{LS}(r) = \left(\frac{\hbar}{m\pi c} \right)^2 \left[-V_{so} \frac{1}{r} \frac{df(x_R)}{dr} - iW_{so} \frac{1}{r} \frac{df(x_I)}{dr} \right] \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}$$

と書かれています。ここで、陽子、中性子に対しては

$$\mathbf{s} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$$

deuteron に対しては

$$\mathbf{s} = \boldsymbol{\sigma}$$

の関係にあります。

LS ポテンシャルをこの型で導入するもう 1 つの方法があります。OPT=1.0 で VSOR、VSOI パラメータを入力すると、下の型のポテンシャルが追加されます。ただし、 r_0, a の値は OPT=1.0 で入力したものをそのまま使います。

$$V_{LS}(r) = \left[-V_R \frac{VSOR}{45.2} \frac{df(x_R)}{rdr} - iV_I \frac{VSOI}{45.2} \frac{df(x_I)}{rdr} \right] \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}$$

4 (d,p) 反応の計算

サンプルにも $^{40}\text{Ca}(d,p)$ がありますのでこれを参照しつつ、 $^{90}\text{Zr}(d,p)$ を $E_d = 56\text{MeV}$ の ^{91}Zr の基底状態について計算をしました。光学ポテンシャルパラメータは過去に RCNP で行われた実験 [3] のものを用いました。(deuteron のパラメータは D1 set を使用しました)

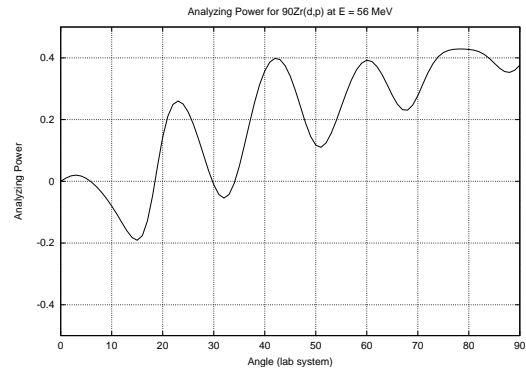
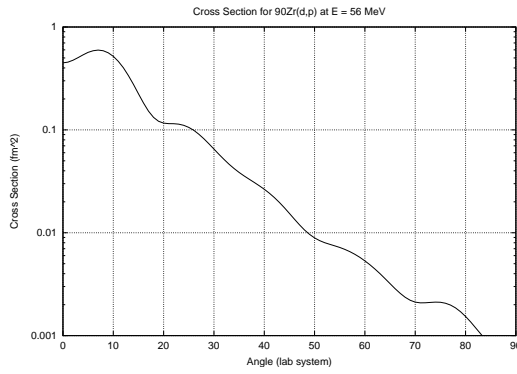
deuteron のスピンは 1 です。また、 ^{90}Zr の基底状態の角運動量は 0、 ^{91}Zr の基底状態の j^π は $5/2^+$ なので角運動量移行量は 2 となります。中性子の束縛状態の節の数は一粒子状態の主量子数を n とすると $n-1$ です。この場合は励起される一粒子軌道は $2d5/2^+$ なので節の数は 1 です。そのほかのパラメータは論文に書かれているものをそのまま使用しました。

4.1 入力データ例

```
1001010030000000    Zr90(d,p)Zr91 g.s.(5/2+) E = 56 MeV using D1 set
+100.    +00.    +01.
+20+01+02+05
+00.1    +00.    +20.            +0.621
+56.00 +02.    +01.    +90.    +40.    +01.30            +0.54    +02.
+01.    -82.83 +01.17 +00.804    -03.47 +01.325 +00.804
+02.            +01.17 +00.804    +38.76 +01.325 +00.804
-04.    -11.4  +01.07 +00.66            +01.07 +00.66
+04.970 +01.    +01.    +91.    +40.    +01.25            +0.85    +01.
+01.    -40.73 +01.17 +00.750    -10.71 +01.320 +00.588
-04.    -24.8  +01.01 +00.750            +01.320 +00.588
-07.195 +01.    +00.    +90.    +40.    +01.25            +0.85    +01.
-01.    -01.    +01.24 +00.65 +26.
+01.    +02.    +05.    +01.    +58.
9
```

4.2 計算結果

比較的よく再現されていることがわかります。



参考文献

- [1] K.Langanke J.A.Maruhn S.E.Koonin Computational Nuclear Physics 2 Nuclear Reactions (Springer-Verlag)
- [2] Norman Austern Direct Nuclear Reaction Theories (Wiley-Interscience)
- [3] K.Hatanaka *et al* Nucl. Phys. **A419** 530(1984)