

原子核物理学理論における計算機利用*

坂 倉

守**

1 はじめに

本稿では核物理学の分野において大型電子計算機がどのように利用されているか、また何故、いわゆる大型の計算の占める割合が多いか、何故計算が大型化するのか、どのような計算機の使い方をしているのかなどについて述べる。使用機種については、現存するすべての機種が使用されているといて過言でなく、どんな意味においてもひとまわり大型の機種ができるたびにわれわれの守備範囲は広がっていく。この意味で、速度と記憶容量に対する希望は無限度である。しかし計算機が IBM 370の最大のモデルより1桁大きくなったとき、そのような大型計算機にたよった姿勢で大型計算を行なうことの意味について深刻な反省がなされるだろうことは予想に難くない。現状では、各自の研究の目先きにとらわれてどんどん大型化する傾向にある。われわれにとってのジレンマは、入力データの数を制限すると、計算に必要な係数や、中間データの計算だけで非常に大きな記憶容量と時間をくってしまい、肝腎の計算にかからないまま制限時間を超えてしまうことがあり得ることで、別に計算した大量のデータを入力することになり、大きなカード・デッキを抱えて右往左往することになる。使用言語については大多数が FORTRAN で、ごく一部がアsemblerで書かれている。問題向言語としては、“SPEAK-EASY”¹⁾ という科学者向の useroriented language が ANL^{***} で IBM 360 用に開発され、使い易さで好評を博している。

2. 原子核とはどういう“モノ”なのか²⁾

まず本題にはいる前に、われわれが大型計算機を使ってそのペールを1枚ずつ剥いでいる(或はそのつもりでいる)原子核とは、一体どのような“モノ”であろうか? 原子核は平たくいえば、高々250~300個の陽子と中性子から成る少数多体の孤立系であるが、それが少数系であるというために物性論などで用いられ

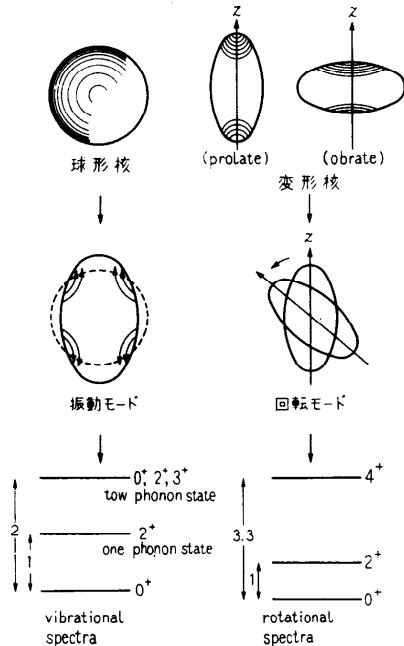


図1 核の変動と集団運動のモード

る統計的手法を個々の核子^{****}の運動に適用できない。また核子間の平均の相互作用の強さが約8 MeV^{*****}という大きなエネルギーを持っているために、核子間の相互作用をできるだけ正確に考慮してやらなければならない。その上核内の核子は約100MeVの運動エネルギーを持って運動している。

この原子核を外から見たとき、どのような形に見えるかということ、一般には球形ではなく、回転楕円体が対称軸に直角な方向に回転していたり、球形のまわり或は回転楕円体の回転に従って表面が振動していたりする。したがって核子の核内運動を考えるとときにこれらを原子核として組みあげられた波動関数は、核全体の集団運動をも説明できるものでなければならない。これらの集団運動の様相は励起単位の現れ方によって大体知ることができる。(図1参照。)しかし、これらの集団運動のモードは、純粋な形で現れることは少く、

* Computer Usage in Nuclear Therov, by Mamoru Sakakura (Computer Centre, University of Tokyo)

** 東京大学大型計算機センター

*** Argonne National Laboratory, Illinois, USA.

**** 陽子と中性子を区別しないで扱うとき核子という。

***** エネルギーの単位。1 MeV=10⁶ eV=1.602×10⁻⁶ erg=3.828×10⁻¹⁴ cal.

球形振動核といわれている核には、2 phonon state (図1参照) が3本そろっている核の方がむしろ稀であり、変形核についても完全に軸対称な回転楕円体をした核よりも、対称軸を持たなかったり(3軸非対称)、回転楕円体以外の変形モード(例えば更に高次のY4あるいはY6変形)が僅かばかりであるが混在したりすることが理解されはじめています。

このように原子核においては運動のモードが純粋な形で現れるよりも複数個の運動のモードの複雑な影響を受けて現れることの方が多く、現象を一見複雑に見せている。これらの運動モードは中重核* から重い核* での基本的な運動モードであるが、さらに重い核になると核分裂(Fission)** が起ったり α 線*** や β 線**** を出して崩壊したりする。また軽い核* では、Clusterizationの問題であるとか、1個1個の核子のそれ自身が持っている拡がりの影響であるとかの問題が重要になってくる。

3. 代表的計算法の例

外から原子核を見た場合どのような“モノ”であるかの概略は以上のようなことであるが、これらの集団運動のモードがはたして個々の核子の運動とどのように関係しているかが現在の核物理学の主要なテーマである。このテーマに沿って研究がいかに大型計算機の助けを求めているかが本稿のテーマである。そもそも研究の対象が何であるにせよ、現象を知るためには実験をしなければならないし、その実験データから現象に起った現象を正確に知るためにはこのデータを解析しなければならない。原子核の場合、行なわれる実験の半数以上は、何かの原子核に適当に加速された核子や他の原子核をぶつけたとき、放出される光や核子やその他の粒子を適当な方法で観測する。この観測データを解析するには、散乱の理論とか、反応の理論の助けを借りなければならない。そこで、原子核の分野で主に使われる理論計算のうち著者がよく目にしたり、耳にしたりするもので代表的なものを選んでみると、

* 質量数(核子の数)で原子核を大ざっぱに区別すると、40前後以下を軽い核、100前後を中重核、200前後を重い核と呼んでいる。

** 質量数が250前後になると、それらの核子が1まとまりになって1個の原子核を形成するよりも、複数個の原子核に分裂した方がエネルギー的に得をするために起る現象のこと。

*** 陽子2個と中性子2個よりなる粒子、He⁴の原子核と同じものである。

**** 中性子がより安全な陽子に変わるときに出す粒子を β^- 、陽子が中性子に変わるときに出す粒子を β^+ という。これらはそれぞれ普通の電子、陽電子と同じものである。核子が β 崩壊する際には β^+ の他に電子中性微子と名付けられる質量のない(測定にかからない程小さい)粒子を同時に放出する。

次のようなものがある。

- 1) 代数計算およびよく使われる特殊関数。
- 2) 殻模型におけるテクニック。
- 3) Hartree-Fock 近似と変分法。
- 4) 散乱・反応理論での微分方程式。
- 5) 反応理論での連立微分方程式。
- 6) 有限核の多体問題と微積分方程式。
- 7) 少数多体系の変分問題と Monte-Carlo 法による多重積分。

ここに挙げた問題は本質的には1体および多体の Schrödinger 方程式*****の解き方を示している。

4. 核内の1個の核子の波動関数を

求めること

これらの具体的な話に移る前に、まず、核内にある1個の核子の波動関数を知る方法を考えてみることにする。一番簡単で、しかも解り易いのは、その1個を除く他のすべての核子(これをコア(芯)と呼ぼう)とその1個の核子との相互作用がポテンシャルという形で書けると仮定した場合であろう。これの代表的なものとしては、(イ)調和振動子型、(ロ) Woods-Saxon 型、(ハ) Nilsson 型の3種のポテンシャルがある。

ポテンシャルを $U(r)$ とすると Schrödinger 方程式は

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) - E \right\} \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (1)$$

と書き表わされる。 \hbar は Planck 定数、 m は核子の質量または換算質量、 E はエネルギーである。(1)と(ロ)については $U(\mathbf{r})$ は球対称を考えているから、極座標を用いると便利であり、動径部分と角度部分に変数分離すると解 ψ は3個の Suffix (量子数) を持って次のように書ける。

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = u_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (2)$$

$Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ は球面調和関数であり一般によく知られた関数である。 $u_{nl}(r)$ の従う方程式は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + U(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} - E_{nl} \right] \times (ru_{nl}(r)) = 0. \quad (3)$$

これに具体的なポテンシャルの形を与えて、 $u_{nl}(r)$ を求める。(1)の調和振動子(Harmonic Oscillator)の場合には、 $U(r) = -U_0 + \frac{m}{2}\omega^2 r^2$ であるが、この解は合流型超幾何関数を用いて

***** 非相対論的な量子力学の基本となる方程式で、数学的に一番簡単な形は2階の偏微分方程式である。

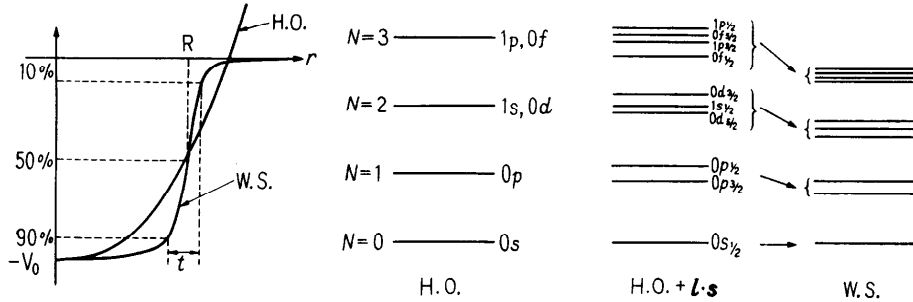


図2 ポテンシャルの形とそれによる1体のレベル (調和振動子 H.O., Wood-Saxon W.S.)

$$u_{nl}(r) = N_{nl} r^l F(-nl + 3/2, \nu^2 r^2) \times \exp\left\{-\frac{1}{2}\nu r^2\right\}. \quad (4)$$

で表わされる。νの値は、ポテンシャルの広がりを与えるもので、角振動数 ω とは、 $\nu = \sqrt{m\omega/\hbar}$ の関係があり、核の質量数を A とすると $\nu \sim 0.96 \times A^{-1/3}$ を標準の値とする。この波は Gauss 型のすそを引くため遠方の振舞は正しくないが、原子核の基本的な性質を考える上で重要な役割を果たしている。すその形を正しく与えるのは(ロ)の W-S 型のポテンシャルで、これは、

$$U(r) = V_0 f(r) + V_1 (\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}) \frac{d}{dr} f(r) + V_c(r), \quad (5)$$

$$f(r) = -[1 + \exp\{(r-R)/t\}]^{-1} \quad (6)$$

の形をしていて、一般には(6)式の形をしたものを W-S 型のポテンシャル(図2参照)という、実際には(5)式を(3)式の微分方程式に代入して数値的に E_{nl} と $U_{nl}(r)$ とが求められる。この微分方程式の解法は、例えば Ref. 3) に詳しく解説されている。V_c はクーロン力で、問題にしている核子が陽子の場合のみ必要である。V_c としては、

$$V_c(r) = \begin{cases} \frac{Z A^{-1}}{2R} (3 - \frac{r^2}{R^2}) e^2 & r \leq R \\ \frac{Z A^{-1}}{r} e^2 & r > R \end{cases}$$

が良く使われる。ここに ZA-1 は芯の電荷、R は核半径であり、e は荷電の単位で、V_c(r) は斥力である。国内で使われているのは、大阪大学の吉田弘氏が組まれたサブルーチンで、核子だけでなく、重イオンの束縛状態も解けるように工夫されていて、使用メモリー数 2283 Word、計算時間は、0.3~0.4 sec 程度で1つの状態の波動関数を求めることができる。(HITAC 50 20 E 実測。) 入力データは求めたい状態の量子数 n, l, j, V₁, m, ZA-1, R, t. 波動関数が十分小さくなる距離

R_{max}, その間のメッシュの数 n_R の他に、V₀ が E_{nl} のどちらかで、解法としては、V₀ か E_{nl} の与えられていない量を適当な方法で guess value を計算し核の中心部から解いた波と、無限遠方から解いた解が R_{max} の点でなめらかにつながるように iterate する。普通メッシュの数は 100 程度、R_{max} の値は 2R 程度の値を与える。精度は 4~6 桁程度である。(パラメータによって異なる。) このサブルーチンは東大原子核研究所および東大大型計算機センターのライブラリーに登録されているほか、各自がカードでもらって使用している。ちなみに吉田氏はプログラムの国際交流促進を強く訴えられている。

(ハ)の Nilsson 型⁴⁾ は 2 で述べた回数楕円体に変形した核を扱うのに第一近似としてポテンシャル自身を外形に似た形にしてやり (外形は質量分布を示し、

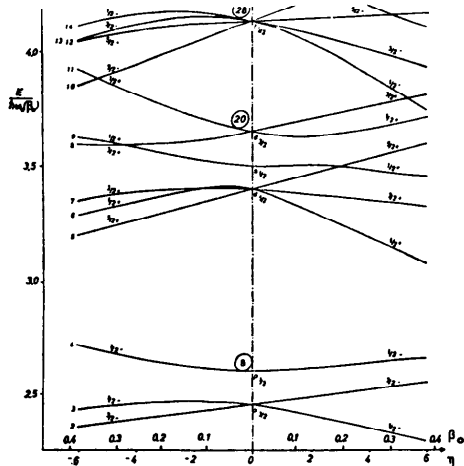


図3 Nilsson level. The energy levels of a single particle in an axially symmetric deformed well with spin orbit coupling. The energies are given in the units $\hbar\omega_0(\beta_0)$.

ポテンシャルは質量分布を反映していると考えられるから), その固有値と波動関数を変形のパラメータの関数として求める. ポテンシャルの形は(イ)の調和振動子型の角振動数 ω を座標軸によって変えてやるだけで良い.

最近では核の表面 $R(\vartheta, \varphi)$ に, より高次の項, P_4, P_6 などを考慮した計算が広く行なわれるようになってきている. また(ロ)の Woods-Saxon 型を球対称からずらせた計算⁵⁾ も行なわれているがまだ一般化はしていないようである. Nilsson の高次変形まで考慮した取り扱い, 核分裂の説明のために精力的に使われている. 当然のことながらこれらの解は角運動量はもはや良い量子数ではなく, その Z 方向成分だけが良い量子数である.

なおここにあげた一体の波動関数はそれ自身が目的であるのではなく, 目的の計算をするための1つの基本的なステップにすぎない.

5. よく使われる代数計算と特殊関数

核は孤立系であるため回転不変性は厳密に議論される. したがって角運動量の合成⁶⁾に必要な係数 Clebsch-Gordan 係数*, Racah 係数**, $9-j$ 係数*** などは非常に良く使われる. これらの係数は半整数の引数を持ち, 例えば一番基本的なクレブシュを例にとれば,

$$\begin{aligned} (j_1 m_1 j_2 m_2 | j m) &= \delta(m_1 + m_2, m) \\ &\times \left[\frac{(j_1 + m_1)! (j_1 - m_1)! (j_2 + m_2)! (j_2 - m_2)!}{(2j + 1) \cdot (j_1 + j_2 - j)! (j + j_1 - j_2)! (j + j_2 - j_1)!} \right. \\ &\times \left. \frac{(j - m)!}{(j + j_1 + j_2 + 1)!} \right]^{-1/2} \\ &\times \sum_Z (-)^Z [z! (j_1 + j_2 - j - z)! (j_1 - m_1 - z)! (j_2 + m_2 - z)! (j - j_2 + m_1 + z)! \\ &\times (j - j_1 - m_2 + z)!]^{-1} \\ &\left(z \text{ は全ての項が負にならない範囲の正整数,} \right. \\ &\left. \delta(a, b) = \begin{cases} 1 & \text{if } a=b \\ 0 & \text{others} \end{cases} \right) \end{aligned}$$

のように整数の階乗の積和の平方根という形をしており, 1個の係数を計算するのにも結構な時間****がかり, このような係数は実際の計算には何十回となく現れるのが普通である.

(ハ)で求めた波動関数の場合には角運動量 j は良い

* 2個の角運動量 j_1, j_2 を合成した結果角運動量 j をつくるときに必要な係数. それぞれの Z 方向成分を m_1, m_2, m とした.

** 3個の角運動量を合成するときに必要な変換係数.

*** 4個の角運動量を合成するときに必要な変換係数.

**** 一般に使われているのは予め整数の階乗の \log を計算しておいてそれを使うので, 引数にもよるが, 10~100 msec 程度かかる(東大ライブラリー実測). 精度5桁程度.

量子数でなかったから, この波動関数を A 個掛けたものから求める角運動量の状態を写影して, さらに規格化してやらなければならない. このとき必要な写影演算子は D -関数と呼ばれる関数で, 球面調和関数 Y_{LM} と同じ変換性を持つ関数である. これは, 3次元の Euler 角 α, β, γ による座標軸の回転を考慮してもらえば良い. 詳しい話は省略するが, 最後に必要になるのは, β に関する関数 $d_{K'M}^J(\beta)$ である. これは

$$\begin{aligned} d_{K'M}^J(\beta) &= \sqrt{(J+K)! (J-K)! (J+M)! (J-M)!} \\ &\times \sum_Z (-)^{J-K-Z} [(J-K-Z)! (J-M-Z)! Z! \\ &\quad (M+K+Z)!]^{-1} \\ &\times \left(\cos \frac{\beta}{2} \right)^{2Z+M+K} \cdot \left(\sin \frac{\beta}{2} \right)^{2J-M-K-2Z} \end{aligned}$$

のような関数である.

このほか一般的に良く知られていて, よく使われる関数には, 球ベッセル関数 $j_\lambda(x)$, 球ノイマン関数 $n_\lambda(x)$, 球ハンケル関数 $h_\lambda^{(1)}(x), h_\lambda^{(2)}(x)$, ラゲールの陪多項式 $L_n^p(x)$, ルジャンドルの多項式 $P_L(x)$ など量子力学の教科書によく出てくる関数類などがある.

代数計算で忘れてはならないのは行列の計算であろう. 行列式の値を求めたり, 行列の対角化を行なったりするものは, どの分野でも重要なテクニックになっている. 核の分野でも特に行列の対角化は重要であり, 著者は現在 600 次元の行列の対角化を何百となく行なう準備をしている. 近い将来には 1000 次元程度までの行列を扱うつもりである. これについては名取氏の解説にもある, Lanczos 法⁷⁾ と bisection 法を使って行なう一般的なサブルーチンを完成している. 著者が扱っている問題では, 4の(イ)の波動関数を基にして $N=2$ の領域を sd Shell といい, (ここに属する核としては $^{17}\text{O} \sim ^{39}\text{Ca}$ までの約 60 個におよぶ原子核がある) この Shell に核子をつめていったとき, 求めたい state に現われる独立な状態の数は最大 6000 を超える. もちろん, これらすべての状態が同じように重要なのではなく, 適当なふるいにかけて重要な状態を選び, それらの状態間で Hamiltonian (エネルギー) の行列要素を計算し, これを対角化して固有値の低いものから数本の固有ベクトルを求める. このベクトルの要素は, 対応する basic wave function の振幅を表わしている. この波動関数を用いて各 state の物理的な性質, 例えば, Magnetic moments, Quadrupole moments, decay rate, transition probability など種類の反応を起す確率や角分布などを計算し, 実験値と比較することによって, 核構造の詳細を調べようとし

ている。これらの計算をするときに、先ず重要な状態をふるいにかけ選び出す技術としては、群論的な手法がよく用いられる。その上で cfp* (coefficients of fractional parentage)⁹⁾ という係数を使って行列要素を計算する。

cfp は、数学的には、連立1次方程式の解であり、一般には10桁以上の精度がないと心配である。連立させる式の数、せいぜい100程度である。精度が問題にならないことが予めわかっているときには漸化式を使って求められることもある。

著者たちが共通の財産として持っている cfp は、カード1枚当たり5個のデータを打ったもので約4万枚に達している。これらの準備の後計算機で行なう計算は、核力などのパラメータ1セットに対して10~20個の行列を対角化し波動関数を求める。これらのパラメータセットは通常数種類用意されているか、または、この波動関数を用いて計算する物理量やエネルギー固有値と実験値とを比較して、 χ^2 -fit させて最終的な結論を得ている。

χ^2 -fit は到底行なえないのであきらめて、前者の方法での計算の例として、FOPTRAN 約3000枚のプログラムで図4の結果を出すのに時間で約40分**かかっている。これらを論文にまとめるのに同機種約60時間使用した。この例では full space 230次元であるが、60次元まで truncate した。米国の同業者は600次元までをハウスホルダー法で解いて IBM 360 の full set に近いもので約100時間以上使ったと報告している。

核構造の計算のもう一つの代表的な手法として、Hartree-Fock の方法では、4で求めた1体の波動関数を n 個用意して、これを反対称化するのに cfp を用いなくて、まず Slater 行列式をつくる。この行列式(波動関数)をつくるとき、とり込んでくる1体の波動関数や核力のパラメータを変分パラメータとして、Iteration によってエネルギーを最小にするこれらのパラメータを決定してゆくやり方で、種々の方法がある。1例として Deformed Hartree の方法を紹介します。1体の波動関数は Nilsson のものを使用し、A 体系のエネルギーを、2体のエネルギーの積み重ねで表現する。この2体の演算子は非常に複雑で、簡単な

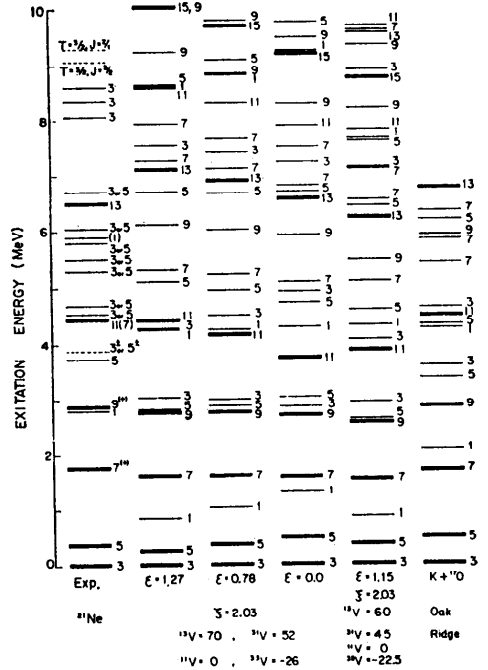


図4 Level structure of ²¹Ne. Experimentally observed excitation energies and spin-parity assignments are taken from the following references: M. B. Burbank *et al.*, Nucl. Phys. A 119 (1968) 184; A. J. Howard *et al.*, Phys. Rev. 184 (1969) 1095. Spin values, are shown in the twice of their values, e.g., 3 should mean $J = \frac{3}{2}$.

ために次のように書く。(Shell Model でも同様のものを使っている。)

$$v(ij) = f_0(r_{ij})Ll_0 + f_1(r_{ij})U_1 + f_2(r_{ij})U_2.$$

U_n は r_{ij} , l_{ij} , spin 演算子 σ_i, σ_j からつくられる n 階のテンソルからできているスカラー演算子を表わす。ここに isospin 演算を含んだ項は省略してある。A 体系の波動関数を $|\varphi\rangle$ で表わし、1体の波動関数 $|\lambda\rangle$ を適当な性質のよくわかった関数 $|j\rangle$ で展開する。展開係数を c_j^* と書くとして、変分方程式は、

$$\frac{\partial}{\partial c_j^*} [\langle \varphi | H | \varphi \rangle - e \lambda \sum_j C_j^* c_j^*] = 0.$$

j はすべての量子数を代表するものとする。この方程式を連立1次方程式に変換して、すべての係数 c_j^* が収束するまで Iteration を行なう。でき上がった波動関数の形は等高線的に書けば図5のようになる。実際にはこれより角運動量の良い固有状態を D 関数を用いて

* 核子は Fermi 統計に従う Fermion であるため、核は核子 i と j の入れ換えに対して反対称になっていなければならない。 n 体系の波動関数でこれを完全に行うのはけっこうやっかいな問題であり、cfp を使うとこの点が楽に行なえるようになる。

** HITAC 5020 E CPU 時間。

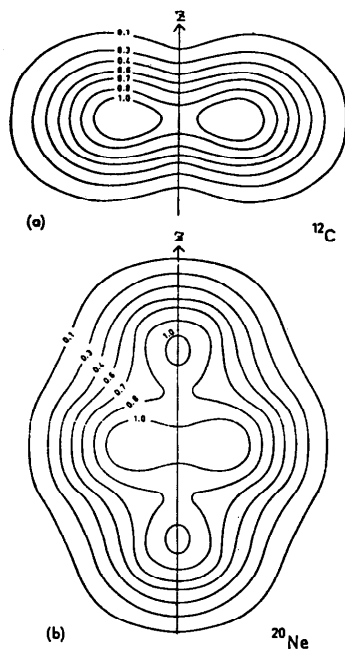


図5 Cross sections of equidensity surfaces cut by a plane containing the symmetry axis (vertical line) of axially symmetric H. F. solutions. Sections a to b represent, respectively, the oblate solution of ^{12}C , the prolate solution of ^{20}Ne .

写影する。

核構造の波動関数を求める方法は、これらのほかにも種々ある¹¹⁾が、このあたりで核反応の問題に移る。

6. 散乱, 反応での問題

次に非常に複雑な式の数値計算を必要とする例として、標的核 A と入射粒子の散乱問題を考える。簡単のために両者の相互作用は球対称なポテンシャルで表わされるとすると、解くべき Schrödinger 方程式(1)は4で述べたように極座標を使って変数分離ができ、動径方向の方程式(3)を解けば良い。ポテンシャルの形は(4)式の V_0, V_1 を複素数にしたものが用いられている。これらの実数部は単なる散乱を起し、虚数部(吸収項)は非弾性散乱や他の反応を引き起す。このポテンシャルを光学ポテンシャルといい、この模型を光学模型という。この波動関数を部分波に展開しておいて、Fox-Goodwin, Runge-Kutta, Cowell, Noumerov の方法などで求める。この解法の詳細は文献 12) にゆずることとする。計算に要する時間は7094 で $500 \sim 2000 \mu \text{sec}$ 程度である。解は

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{J=|L-S|}^{L+S} \sum_{M=-J}^J \alpha(L, J, M) \times \frac{\Psi_{LJ}(\rho)}{\rho} y_{LS}^{JM},$$

$$Y_{LS}^{JM} = \sum_{m_l'} (L m_l' S m' | JM) Y_l^{m_l'}(\vartheta, \varphi) \chi_{s m'},$$

$$\alpha(L, J, M) = \sqrt{4\pi(2L+1)} i^L (L O S m | JM) \times \exp(i\sigma_L),$$

$$\sigma_L = \text{erg } l'(1+i\eta+L),$$

$$\eta = \frac{Z_A \cdot Z_a e^2 \cdot \mu}{\hbar^2 k}, \quad \mu = \frac{M_A \cdot M_a}{M_A + M_a},$$

$$\rho = kr, \quad k = \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar} E_{aA}}.$$

E_{aA} ; a と A の重心系での入射エネルギー。

$\Psi_{LJ}(\rho)$ は遠方で \sin と \cos の関係式と $\exp(i\sigma_L)$ の積に書けるようにつながれている。 L についての和は上限は適当に定められるが、 M_a が大きく、 E_{aA} が高い程上限をあげる必要がある。決めるべきものはこの Ψ_{LJ} と $\alpha(L, J, M)$ である。この波動関数を使って散乱の断面積(再分布)や Spin-Polarization の角分布などを合せられるようにポテンシャルのパラメータを決めてやる。高級なことをすれば χ^2 検定をしてパラメータの automatic search をする。さて反応の例であるが、例えば標的核 A に粒子 a をぶつけて、残留核が B になり粒子 b が放射される反応、 $A(a, b)B$, について DWBA¹³⁾ (Distorted Wave Born Approximation) を使う。 a が b と x とからできていると B は A と x からできていることになる。この反応は b と x の相互作用で起こるものとし、この相互作用を V_{bx} と書くことにする。反応の断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\mu_a \mu_b}{2\pi \hbar^2 k_a} \frac{\sum m_a \cdot m_b \cdot m_A \cdot m_B \cdot |T_{\text{DWBA}}|^2}{(2S_a+1) \cdot (2I_A+1)}$$

$$T_{\text{DWBA}} = J \int_0^\infty \int_0^\infty \phi_{bB}^{(-)}(\mathbf{k}_b, \mathbf{r}_{bB}) \langle |V_{bx}| \rangle \times \phi_{aA}^{(+)}(\mathbf{k}_a, \mathbf{r}_{aA}) d\mathbf{r}_{aA} \cdot d\mathbf{r}_{bB}.$$

ここに J は重心座標から相対座標への変換の Jacobian である。 A, a, B, b 各粒子のスピンを I_A, S_a, I_B, S_b , これらの軸方向成分をそれぞれ m_A, m_a, m_B, m_b とする。 $\phi_{bB}^{(-)} \phi_{aA}^{(+)}$ は前記光学模型で求めた波動関数で、(+), (-) はそれぞれ内向, 外向進行波の境界条件に従うことを示す。 T の積分を実行するためには、まず $\langle |V_{bx}| \rangle$ をもとめなければならない。これは、

$$J \cdot \langle |V_{bx}| \rangle = \sum_{i_1, i_2} \langle I_A m_A m_B - m_A | I_B m_B \rangle \times \langle I m_s m_a - m_b | j m_B - m_A \rangle \cdot \langle S_a m_a S_b - m_b | s m_a - m_b \rangle \times (-)^{S_b - m_b - i_1} \cdot A(Bb, Aa)$$

$$\times f_{i,j,m}(\mathbf{r}_{bB}, \mathbf{r}_{aA}),$$

ここに $\langle \dots \rangle$ と書いたのは5に述べた Clebsch-Gordan 係数である。 $A_{i,j}$ は核の構造に関係した量で、

$$A_{i,j} = \iint \int \Psi^*_{IBB}(\xi, \mathbf{r}_{zA}) \Psi_{IAM}(\xi) d\xi.$$

ξ は標的核のすべての座標と量子数を代表した。一番簡単な模型では次のようになる。

$$A_{i,j} = \sum_l \langle I_{AM} l m | I_{BM} \rangle J_{BA}(l) U_{nl}(\mathbf{r}_{zA}) i^l \times Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}_{zA}).$$

ここで $J_{BA}(l)$ は未知の定数で、実験値を合せることに依り決定されるパラメータである。また最後の量、

$$f_{e,s,j,m} = \int \phi^* S_{bmb}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{bB}) V_{bz} \times (\mathbf{r}_{bz}) \phi S_{ama}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) d\mathbf{r} d\mathbf{r}' d\mathbf{r}_{bz}$$

の積分を実行しなければならない。 V_{bz} は一般的には5で述べた $v(i,j)$ と同じようなものである。 \mathbf{r}, \mathbf{r}' はそれぞれ b, a を構成している核子のすべての座標を代表している。この他に Polarization, Depolarization などの量を計算する。このプログラムは核研および東大センターのライブラリーとして合計4個登録されていて、そのうち代表的な DWBA 2 は、FORTRAN で約 6000 枚のプログラムであり、非常に頻繁に訂正拡張が行なわれている。詳細は核研発行のマニュアルを参考にされたい。

Coupled Channel¹⁴⁾ というのは、initial から final への反応の前後で非弾性散乱や再散乱を同時に起すような反応機構を解く方法で、6で述べた方程式を連立させて解かれていて、非常に大変な計算になっている。

7. SPEAKEASY 概要

まずこのプログラム言語の外部仕様は IBM 360 FORTRAN の大幅な拡張になっているが、データは 10 進数とリテラルのみであり、われわれにとってはこれで十分である。また純虚数をデータとして許し、これは数字の後に I を入れる、複素数は実数±純虚数の形で表現する。整数型と実数型の整数の区別は一切行っていない。(例. 2.1, 2.1 I, 5 I, 4.3-2 I.) またこれらは 1.05 IE-3 のような E 型表現も可能である。変数の名前のつけ方は、FORTRAN と同じであるが、文字数は 8 文字まで許している。非常に有難いのは、変数名に階級を定義できて、Scalars, Vectors, Matrices, Arrays 1, Arrays 2 の 5 階級が指定でき、それぞれ [S], [V], [M], [A 1], [A 2] と書くことにする。[A 1] と [A 2] はそれぞれ 1 次元および 2 次元の通常の Array である。これらの属性は、最初に

どれか 1 つを定義しておけば、あとは計算の前後関係から自動的に、場合場合に応じ dynamic に変化してゆく。使い方としては例えば 4 次元のベクトル変数を定義するには、

$$X = \text{VECTOR}(4:5, 4+1.2 I, 3 I, 1.2)$$

とすれば良い。次元数だけ、ままは要素だけを定義するには、上のステートメントのカッコの中:(コロン)の前だけまたは後だけ書けば良い。[M]に属する変数の定義には m 行 n 列の任意のマトリックスがベクトル変数と同様に定義できる。また対称行列、対角行列、反対称行列がそれぞれ同様に一番簡単な方法で定義できる。例えば、

$$A = \text{MATRIX}(3, 3:1, 2, 3, 4, 5, 6, 7)$$

$$B = \text{SYNNAT}(3:1, 2, 3, 4, 5)$$

$$C = \text{DIAGMAT}(1, 2, 3)$$

$$\equiv \text{DIAGMAT}(3:1, 2, 3)$$

$$D = \text{ASYMMAT}(4: -1, -2, -3, 1)$$

はそれぞれ次の行列を定義したことになる。

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 2 & 3 & 5 \\ 4 & 5 & 0 \end{pmatrix}$$

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

$$D = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & 3 & 0 \\ -2 & -3 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

[A 1], [A 2] も同様である。これをつかった計算式は、数学の教科書通りに書けば、左辺は、数学の定義通り [s] になったり [v], [M] になったりするが、それをユーザーが知っていればよく、計算機に 1 つ 1 つ定義してやる必要はない。このように数学さえ知っていればプログラムを書くのは簡単である。その 1 例として sin curve を書かせるプログラムは表 1 で良く、この結果は図 6 である。われわれの使い方としては、FORTRAN で書くと数万枚になるプログラムがこの言語の System の中に組み込まれていて、表 2 のようなデータを入れると、これだけで図 4 のようなスペクトラムが図ともちろん数値で出力される。

8. あとがき

4~6 で述べたような方法のほかにも 3 に挙げたような面白い問題があるが、これらについては参考文献

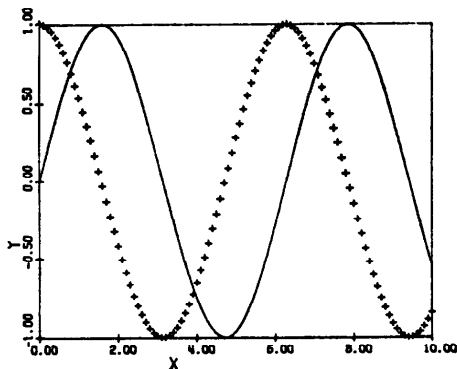


図6 表1のプログラムによる出力例

```

INPUT---- SCHEDULE 36. A SAMPLE OF THE USE OF THE GRAPHICAL FEATURES
INPUT---- OF THE LANGUAGE.
INPUT----
INPUT---- X=GRID(0,10) ; Y=SIN(X)
INPUT---- D=DERIV(Y,X)
INPUT---- THE DESIGN FEATURES ARE SETUP HERE.
INPUT----
INPUT---- HSIZE(5) ; VSCALE(-1,1) ; MSCALEEMIN(X),MAX(X) ; VSIZE(4)
INPUT---- GRAPH(Y,X)
INPUT---- SETPLDT(POINTS)
INPUT---- ADDGRAPH(D,X)
    
```

表1 SPEAKEASY による簡単なプログラム例

```

% PRINT SPECTRA
% SPECTRUM
% DIAGONALIZE: SPE (251/2 = 0.87, 1D3/2 = 5.06)
% EMATS
% INTERACTION: CENTRAL YUKAWA RANGE = 0.64
N = 3, J = 5/2* ANDLOWER: N = 1
% BARS: LEVELS (1D5/4, 281/2, 1D3/2) N = 4, J = 4* ANDLOWER T = 1; N = 3;
    
```

表2 SPEAKEASY によってつくられたプログラムの入力例

12)などを参照されたい。

参考文献

1) S. Cohen & C. M. Vincent, "An Introduction to SPEAKEASY," Informal Report PHY-1968 E, ANL, 1968.
 2) A. Bohr & B. Mottelson, "Nuclear Structure," vol. 1, Benjamin, 1969.
 J. M. Eisenberg & W. Greiner, "Nuclear

Models," North-Holland Pub. Comp., 1970.
 3) B. Buck & P. E. Hodgson, Phil. Mag. 6 (1961), 1371.
 4) S. G. Nilsson, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 29(1955), No. 16.
 S. G. Nilsson et al., Nucl. Phys. A131(1969), 1.
 5) A. Faessler & R. K. Sheline, Phys. Rev. 148 (1966), 1003.
 6) A. R. Edmond, "Angular Momentum in Quantum Mechanics."
 A. De-Shalit & I. Talmi, "Nuclear Shell Theory," Academic Press, 1962.
 7) T. Sebe & J. Nachamkin, Ann. of Phys. 15 (1969), 100.
 8) P. J. Redmond, Proc. Roy. Soc. A 222 (1954), 84.
 9) Y. Akiyama, A. Arima & T. Sebe, Nucl. Phys. A 137 (1969), 273, A. Arima, M. Sakakura & T. Sebe, Nucl. Phys. A 170 (1971), 273.
 10) E. C. Halbert et al., "Advances in Nuclear Physics," vol. 4.
 11) M. Bouten et al., Nucl. Phys. A 94 (1967), 687.
 W. H. Bassichis & G. Ripka, Phys. Lett. 15 (1965), 320.
 12) M. A. Melkanoff & T. Sawada, "Nuclear Optical Model Calculations," in "Methods in Computational Physics," vol. 6, Academic Press. (この叢書は現在までに10巻発行されていて、物理学の各分野の計算法および計算機利用法が述べられている)
 13) W. Tobocman, "Theory of Direct Nuclear Reactions," Oxford Univ. Press, 1961.
 K. Kikuchi & M. Kawai, "Nuclear Matter and Nuclear Reactions," North-Holland Pub. Com. 1968.
 14) T. Tamura, Rev. Mod. Phys. 37 (1965), 679.
 (昭和47年5月22日受付)
 (昭和47年6月29日再受付)