

JAERI-Data/Code

JP9950608

99-042



JQMD(Jaeri Quantum Molecular Dynamics)コードの開発

1999年9月

仁井田浩二*・丸山敏毅・奈良寧・千葉敏・岩本昭

日本原子力研究所
Japan Atomic Energy Research Institute

本レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。
入手の問合せは、日本原子力研究所研究情報部研究情報課（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村）あて、お申し越し下さい。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費領布を行っております。

This report is issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Research Information Division, Department of Intellectual Resources, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 1999

編集兼発行 日本原子力研究所

JQMD (Jaeri Quantum Molecular Dynamics) コードの開発

日本原子力研究所先端基礎研究センター

仁井田浩二*・丸山 敏毅・奈良 寧・千葉 敏・岩本 昭⁺

(1999年8月13日受理)

QMD(Quantum Molecular Dynamics) モデルは重イオン入射反応を記述する有効なモデルとして80年代後半に提案された。原研先端基礎研究センターでは、この QMD 理論を発展させ原研版 QMD 模型を構築し、核子あたり数 10MeV から数 GeV 領域の核子や重イオン入射反応に対する有効性を示し、核物理及び核データ分野で多くの成果を挙げてきた。本報告では、原研版 QMD 模型に基づく計算コード JQMD (JAERI Quantum Molecular Dynamics) に含まれる物理モデルとプログラムの解説、利用の手引きとなるいくつかの計算例をまとめた。

日本原子力研究所(東海駐在)：〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根2-4

+ 東海研究所物質科学研究部

* (財)高度情報科学技術研究機構

Development of JQMD (Jaeri Quantum Molecular Dynamics) Code

Koji NIITA*, Toshiki MARUYAMA, Yasushi NARA,
Satoshi CHIBA and Akira IWAMOTO⁺

Advanced Science Research Center
(Tokai Site)

Japan Atomic Energy Research Institute
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received August 13, 1999)

QMD(Quantum Molecular Dynamics) model has been proposed at the latter 80's and widely used to analyze various aspects of the heavy-ion reactions. We have developed the original QMD code (JQMD; JAERI QMD) in Advanced Science Research Center of JAERI and applied it not only to the heavy-ion reactions but also to the proton-induced reactions of the energy range from several 10 MeV up to 3 GeV per nucleon. Many important results obtained by using JQMD code, which have been already published in the several papers of nuclear physics and nuclear data, show that JQMD has its originality and good quality. In this report, we summarize physical models included in JQMD, explain the source code of JQMD, and describe the method to run JQMD in computers showing some examples.

Keywords: JQMD, QMD Model, Nuclear Reaction, Microscopic Model

* Department of Materials Science, Tokai Research Establishment

* Research Organization for Information Science & Technology

目 次

1. はじめに	1
2. 物理モデル	2
2.1 QMD モデル	2
2.2 衝突項	3
2.3 相対論的修正	10
2.4 “基底状態”の作成	11
2.5 SDM モデル	12
3. プログラム	13
3.1 プログラムソース	13
3.2 入力変数	17
3.3 メインルーティン	24
3.4 主要サブルーティン	28
3.4.1 jqmd00(subroutine)	28
3.4.2 qmdevent(subroutine)	29
3.5 その他のサブルーティン	31
3.5.1 qmdsum (subroutine)	32
3.5.2 sdmsum (subroutine)	33
3.5.3 finsumry (subroutine)	34
3.5.4 jbook1 (subroutine)	35
4. 実行例	36
4.1 実行例 1	36
4.2 核反応の出力	51
4.3 基底状態の出力	56
4.4 実行例 2	61
4.5 実行例 3	68
参考文献	73

Contents

1. Introduction	1
2. Physical Models	2
2.1 QMD Model	2
2.2 Collision Term	3
2.3 Relativistic Corrections	10
2.4 Creation of "Ground State"	11
2.5 Statistical Decay Model	12
3. Program	13
3.1 Program Source	13
3.2 Input Variables	17
3.3 Main Routine	24
3.4 Main Subroutines	28
3.4.1 jqmd00 (subroutine)	28
3.4.2 qmdevent (subroutine)	29
3.5 Other Subroutines	31
3.5.1 qmdsum (subroutine)	32
3.5.2 sdmsum (subroutine)	33
3.5.3 finsumry (subroutine)	34
3.5.4 jbook1 (subroutine)	35
4. Example	36
4.1 Example 1	36
4.2 Output of Nuclear Reactions	51
4.3 Output of Ground State	56
4.4 Example 2	61
4.5 Example 3	68
References	73

1. はじめに

QMD(Quantum Molecular Dynamics) モデルによる核反応の微視的な解析は、80 年代後半から始まり、現在まで幅広く行われてきている。特に、重イオン反応(原子核-原子核反応)では、現象が複雑であるために、このような微視的モデルの計算から得られる情報が、実験結果の解析、物理の理解に大きな助けとなってきた。さらに、適用エネルギーが数 10MeV から数 GeV と広いことから、同一のモデルで、核反応を統一的に解析できるという利点があり、核子入射反応での核反応生成物の断面積評価など、核データの理論計算などにも使われている。

原研先端基礎研究センターでは、独自にこの QMD コードの開発を進めてきている。その原研版 QMD コードを用いた研究では、現在までに、核物理、核データの分野で多くの成果を発表し、その独自性と有効性を示してきた。世界の核物理の研究室では、多くの QMD コードが存在し、その幾つかは、公開コードとなっているが、原研版 QMD コード、JQMD 1.00 (Jaeri Quantum Molecular Dynamics, ver. 1.00) コードのソースコード、マニュアルを公開し、多くのユーザーの利用に供することは、十分に意味あることと考える。

2. 物理モデル

JQMD (Jaeri Quantum Molecular Dynamics) の基本的な物理モデルは、QMD¹⁾ モデルと SDM (Statistical Decay Model) モデルからなる。前者は、核反応の動力学的な過程を、特にフラグメント生成を自然にまた現実的に記述する。QMD モデルでは幾つかのコードが公開されているが、それぞれに細部が異なっている。我々のコードは、それらの中で、分かりやすいスタンダードなモデルを目指している。従って、相対論的運動学、有効相互作用についても相対論的補正を入れた単純なもの、また、核子の共鳴状態としては、 Δ と $N^*(1440)$ 、中間子はパイオンが含まれる。SDM(Statistical Decay Model : 統計崩壊) モデルとしては、 p, n, d, t, α の軽粒子蒸発と核分裂からなる簡単なものを採用した。

2.1. QMD モデル

QMD モデルは、半古典的なシミュレーションの方法で、核子は、幅 L のガウス型波束で次のように表される。

$$\phi_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi L)^{3/4}} \exp \left[-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)^2}{4L} + \frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \cdot \mathbf{P}_i \right], \quad (1)$$

ここで、 \mathbf{R}_i と \mathbf{P}_i は、 i -番目の核子の位置と運動量の中心値である。全系の波動関数は、これらの波束の直積でかけると仮定する。従って、位相空間での一体分布関数は、Wigner 変換を用いて次のように表される。

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \sum_i f_i(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \quad (2)$$

$$f_i(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = 8 \cdot \exp \left[-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)^2}{2L} - \frac{2L(\mathbf{p} - \mathbf{P}_i)^2}{\hbar^2} \right]. \quad (3)$$

\mathbf{R}_i と \mathbf{P}_i の時間発展は、ニュートン方程式と二体の衝突項で記述される。ニュートン方程式は、時間に依存する変分原理¹⁾ から求められ、次のようになる。

$$\dot{\mathbf{R}}_i = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{P}_i}, \quad \dot{\mathbf{P}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{R}_i}, \quad (4)$$

ここで、ハミルトニアン H は、質量項を含んだ粒子エネルギーと二体の相互作用エネルギーとかなる。二体の有効相互作用としては、クーロン力、対称項を含んだ Skyrme タイプの相互作用を用いる。ガウス型の波束を用いるので、それらは以下のようになる。

$$\begin{aligned} H = & \sum_i E_i \\ & + \frac{1}{2} \frac{A}{\rho_0} \sum_i < \rho_i > + \frac{1}{1 + \tau} \frac{B}{\rho_0^\tau} \sum_i < \rho_i >^\tau \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i,j(i \neq i)} c_i c_j \frac{e^2}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|} \operatorname{erf} \left(|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j| / \sqrt{4L} \right) \\ & + \frac{C_s}{2\rho_0} \sum_{i,j(i \neq i)} (1 - 2|c_i - c_j|) \rho_{ij}, \end{aligned} \quad (5)$$

ここで

$$E_i = \sqrt{m_i^2 + \mathbf{P}_i^2}, \quad (6)$$

ここで、erf は、エラー関数である。また、 c_i は、陽子に対しては 1、中性子に対しては 0 である。 $\langle \rho_i \rangle$ は、核子同士の密度のオーバーラップ関数で、

$$\begin{aligned} \langle \rho_i \rangle &\equiv \sum_{j \neq i} \rho_{ij} \equiv \sum_{j \neq i} \int d\mathbf{r} \rho_i(\mathbf{r}) \rho_j(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{j \neq i} (4\pi L)^{-3/2} \exp \left[-(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)^2 / 4L \right], \end{aligned} \quad (7)$$

ここで

$$\begin{aligned} \rho_i(\mathbf{r}) &\equiv \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} f_i(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \\ &= (2\pi L)^{-3/2} \exp \left[-(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)^2 / 2L \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

相互作用のパラメーターは、核物質の飽和条件すなわち飽和密度 $\rho = \rho_0 = 0.168$ で束縛エネルギーが 16MeV で極小になる条件から決められ、プログラムでは、スタンダードな値として、 $A = -219.4$ MeV, $B = 165.3$ MeV, $\tau = 4/3$ が使われる。このセットは、非圧縮率 $K = 237.3$ MeV を与える。これらの値は、インプットによって変えられる。ガウス型波束の幅 L は、 $L = 2.0 \text{ fm}^2$ である。

2.2. 衝突項

システムの時間発展は、式(4)のニュートン方程式に加えて、二体の衝突項でも記述される。衝突項の細部は、論文²⁾に従うので、ここでは、概要を示す。

まず、二体の衝突項は終状態のパウリ排他律のファクター $(1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t))$ を含む。

2 粒子の衝突の判定は、ローレンツ共変な衝突係数と、そのエネルギーでの断面積 σ から定義される $b_{\max} = \sqrt{\sigma/\pi}$ の大小によってなされる。二体衝突は瞬時の相互作用と考え、衝突イベントは時空間の 2 点で定義されるので、QMD の様に共通の時間軸を設定する場合は、ローレンツ共変を保つことは難しい。そこで、衝突のタイムステップを決定するのに、衝突点の平均時刻を用いることにする。

高エネルギーの核反応を記述するために、我々の QMD モデルには、 N (核子), $\Delta(1232)$, $N^*(1440)$, とパイオンが含まれる。 Δ と N^* は、対称項を除いて核子と同じ相互作用をし、パイオンは、クーロン相互作用だけをすると仮定する。これらの粒子の生成、消滅は二体衝突項で扱う。以下に、我々のモデルで扱っている衝突チャンネルを示す。ここで、 B はパイオン、 N は核子を示す。

1. $B_i + B_j \rightarrow B_i + B_j$
 2. $N + N \rightarrow N + \Delta$
 3. $N + \Delta \rightarrow N + N$
 4. $N + N \rightarrow N + N^*$
 5. $N + N^* \rightarrow N + N$
 6. $N + \pi \rightarrow \Delta$
 7. $N + \pi \rightarrow N^*$
 8. $\Delta + \pi \rightarrow N^* .$
- (9)

上式(9)のチャンネル1のバリオン-バリオン弹性散乱の断面積には、以下のようなパラメーターを用いる。

$$\sigma = \frac{C_1}{1 + 100\sqrt{s'}} + C_2 \text{ (mb)}, \quad (10)$$

ここで

$$\sqrt{s'} = \max(0, \sqrt{s} - M_i - M_j - \text{cutoff}) \text{ (GeV)}, \quad (11)$$

上式で、cutoffは核子-核子に対して0.02GeV他に対しては、ゼロである。この関数形は、Cugnonの関数形³⁾で、我々は、これを $\sqrt{s'} = 0.4286$ (GeV)まで使う。これは、エネルギーにしてちょうど1GeVである。1GeV以上では、実験のp-p and p-n弹性散乱断面積^{4,5)}を以下のようにフィットした。

$$\sigma = C_3 \left[1 - \frac{2}{\pi} \tan^{-1} (1.5\sqrt{s'} - 0.8) \right] + C_4 \text{ (mb)}. \quad (12)$$

式(10)と式(12)を滑らかに接続するために、Cugnonのパラメーター³⁾を少々変更した。実際のパラメーター C_i の値は、以下の表1に示す。弹性散乱の角分布は、Cugnonのパラメーター³⁾

表1. 弹性散乱断面積のパラメーター

	p-n	others
C_1 (mb)	28.0	35.0
C_2 (mb)	27.0	20.0
C_3 (mb)	12.34	9.65
C_4 (mb)	10.0	7.0

と同じである。

式(9)のチャンネル2と4の核子共鳴状態の生成については、VerWest and Arndt⁶⁾の考え方を採用している。彼らは、1.5GeVまでのフィットなので、我々はこれを3GeVまで拡張した。また、断面積を、初期と終状態のアイソスピン*i*と*f*によって次のように表す。

$$\sigma_{if}(s) = \frac{\pi(\hbar c)^2}{2p^2} \alpha \left(\frac{p_r}{p_0} \right)^\beta \frac{m_0^2 \Gamma^2 (q/q_0)^3}{(s^* - m_0^2)^2 + m_0^2 \Gamma^2}, \quad (13)$$

ここで

$$\begin{aligned}
 p_0^2 &= \frac{1}{4}s_0 - m_N^2, \quad s_0 = (m_N + m_0)^2, \\
 p_r^2(s) &= \frac{[s - (m_N - \langle M \rangle)^2][s - (m_N + \langle M \rangle)^2]}{4s}, \\
 q^2(s^*) &= \frac{[s^* - (m_N - m_\pi)^2][s^* - (m_N + m_\pi)^2]}{4s^*}, \\
 s^* &= \langle M \rangle^2, \quad q_0 = q(m_0^2),
 \end{aligned} \tag{14}$$

上式で、 $\langle M \rangle$ は、 Δ に対して、 $M_0 = 1220$ MeV, $\Gamma_0 = 120$ MeV としたとき、 N^* に対して、 $M_0 = 1430$ MeV, $\Gamma_0 = 200$ MeV としたときの、Breit-Wigner 分布 から得られる共鳴状態の平均質量⁶⁾である。この事より、 Δ の生成断面積は、

$$\begin{aligned}
 p + p &\rightarrow n + \Delta^{++} : \sigma_{10} + \frac{1}{2}\sigma_{11}, \\
 p + p &\rightarrow p + \Delta^+ : \frac{3}{2}\sigma_{11}, \\
 n + p &\rightarrow p + \Delta^0 : \frac{1}{2}\sigma_{11} + \frac{1}{4}\sigma_{10}, \\
 n + p &\rightarrow n + \Delta^+ : \frac{1}{2}\sigma_{11} + \frac{1}{4}\sigma_{10}, \\
 n + n &\rightarrow p + \Delta^- : \sigma_{10} + \frac{1}{2}\sigma_{11}, \\
 n + n &\rightarrow n + \Delta^0 : \frac{3}{2}\sigma_{11}.
 \end{aligned} \tag{15}$$

我々は、終状態が πd である断面積を、実効的に σ_{10} に含ませてある。

我々は、断面積 σ_{01} は N^* 生成にだけ寄与すると仮定する。従って、 σ_{01} を σ_{N^*} と書き、 N^* 生成断面積は以下のように書ける。

$$\begin{aligned}
 p + p &\rightarrow p + N^{*+} : \frac{3}{2}\sigma_{N^*}, \\
 n + p &\rightarrow p + N^{*0} : \frac{3}{4}\sigma_{N^*}, \\
 n + p &\rightarrow n + N^{*+} : \frac{3}{4}\sigma_{N^*}, \\
 n + n &\rightarrow n + N^{*0} : \frac{3}{2}\sigma_{N^*}.
 \end{aligned} \tag{16}$$

(13) 式のパラメーターを、表 2 に示す。これらのパラメーターと弾性散乱断面積のパラメーター

表 2. 非弾性散乱断面積のパラメーター

	σ_{11}	σ_{10}	σ_{N^*}
α	3.0	14.0	23.0
β	0.9	-0.3	1.5
m_0 (MeV)	1188	1245	1472
Γ (MeV)	99.02	120.0	300.0

を決定するために、実験の $p-p$ 、 $p-n$ 断面積^{4, 5)}をフィットした。この結果を図 1. に示す。ここでは、 $p-p$ (a)、 $p-n$ (b) 断面積、実線が全断面積、長い破線が弾性散乱断面積、一点鎖線が非弾性散乱断面積である。非弾性散乱断面積は、 Δ (短い破線) と N^* (点線) の和であり、式(10, 12,

13, 15, 16) から計算される。実験値⁵⁾は、丸が全断面積、三角が弾性散乱断面積、四角が非弹性散乱断面積である。 $p-p$ に関しては、1GeV付近で実験とずれているが、これは、弾性散乱断面積のフィットがあまり良くないためである。しかしながら、このずれは最終結果にほとんど影響を与えない。一方、 $p-n$ に関しては、低いエネルギーで、自由空間の断面積ではなく、Cugnon タイプの弾性散乱断面積を採用している。

図2. に、表2で与えられたパラメーターで計算される $pn \rightarrow nn\pi^+ + pp\pi^-$ チャンネルのパイオノン生成断面積をプロットする(実線)。同じ図に示されたグレイの幅広線は VerWest and Arndt⁶⁾ のオリジナルなパラメータによるものである。実験データは⁵⁾より取った。

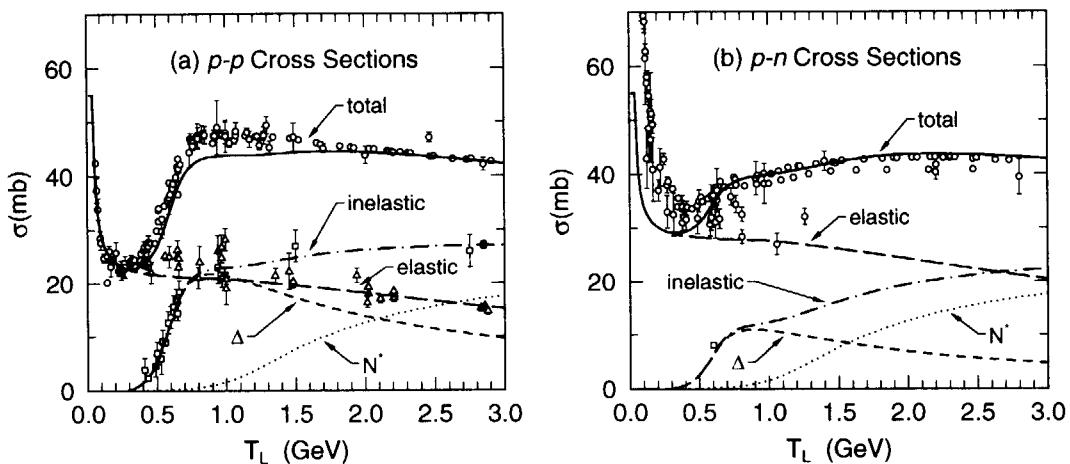


図1. $p-p$ (a)、 $p-n$ (b) 断面積、実線が全断面積、長い破線が弾性散乱断面積、一点鎖線が非弾性散乱断面積である。非弾性散乱断面積は、△(短い破線)と N^* (点線)の和であり、式(10, 12, 13, 15, 16)から計算される。実験値⁵⁾は、丸が全断面積、三角が弾性散乱断面積、四角が非弾性散乱断面積である。

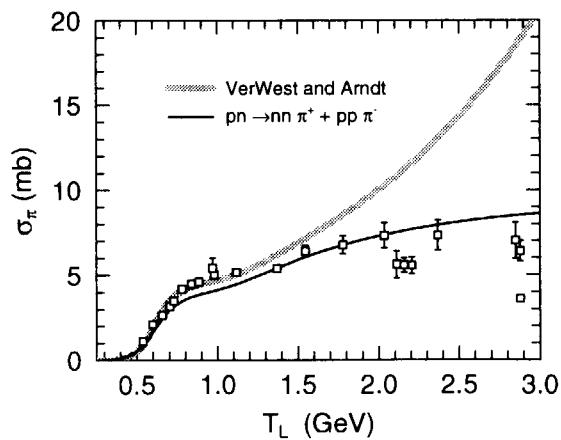


図2. 1パイオノン生成断面積。チャンネルは、 $pn \rightarrow nn\pi^+ + pp\pi^-$ (実線)。グレイの幅広線は VerWest and Arndt⁶⁾ のオリジナルなパラメータによるものである。実験データは⁵⁾より取った。

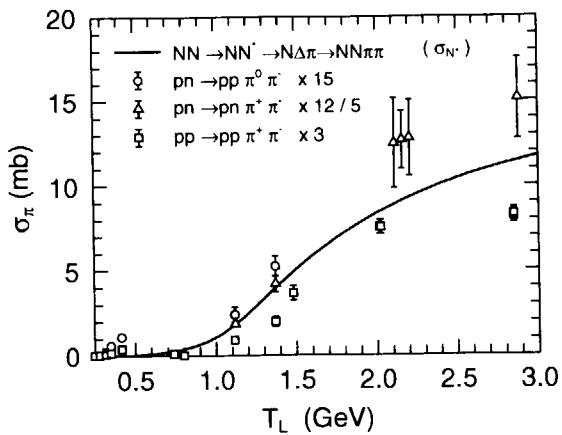


図 3. 2 パイオン生成断面積。実線は σ_{N^*} を表す。実験データ⁵⁾は、式(17)に従って、スケールしてある。

高いエネルギーでは、 N^* の役割が重要となる。特に我々の定式化では、2 パイオン生成断面積は、 σ_{N^*} とその崩壊のチャンネルにより決定される。例えば、次のようなチャンネルの断面積は、

$$\begin{aligned}\sigma(pn \rightarrow pp\pi^0\pi^-) &= \frac{1}{15}\sigma_{N^*}, \\ \sigma(pn \rightarrow pn\pi^+\pi^-) &= \frac{5}{12}\sigma_{N^*}, \\ \sigma(pp \rightarrow pp\pi^+\pi^-) &= \frac{1}{3}\sigma_{N^*}.\end{aligned}\quad (17)$$

と表される。

図 3. に、 σ_{N^*} をプロットした。実験値⁵⁾は、上の係数でスケールしてある。高いエネルギー領域では、 N^* の他に、 2Δ 生成や、より高い共鳴状態を考える必要があるが、3GeV 以下の領域であればここで採用したフィットでも大きな問題はないであろう。

パイオン生成に関しては、直接的な s-state パイオン生成は考えない。従って、全てのパイオンは、共鳴状態の崩壊から生成される。共鳴状態の質量は、運動量依存の Breit-Wigner 分布から抽出される。すなわち、

$$f(M) = \frac{0.25\Gamma^2}{(M - M_r)^2 + 0.25\Gamma^2}, \quad (18)$$

ここで

$$\Gamma = \left(\frac{q}{q_r}\right)^3 \frac{M_r}{M} \left(\frac{v(q)}{v(q_r)}\right)^2 \Gamma_r, \quad (19)$$

上式で q は、 πN チャンネルでの c.m. 運動量である。また、インデックス r は、質量 M_r での値を表す。

$$v(q) = \frac{\beta_r^2}{\beta_r^2 + q^2}. \quad (20)$$

この運動量依存の幅を Δ だけでなく、 $N^*(1440)$ にも適用する。ここでパラメーターの値を、表 3 に示す。

表 3. 共鳴状態の幅のパラメーター

	M_r (MeV)	Γ_r (MeV)	β_r (MeV)
Δ	1232	110	300
N^*	1440	200	523

共鳴状態生成 (式 (9) のチャンネル 2 と 4) のもうひとつの重要な情報は、その角分布である。Wolf 達は⁷⁾ 実験データ⁸⁾ を $p + p \rightarrow n + \Delta^{++}$ に対して次のようにフィットした。

$$g_R(s, \cos \theta) = a_0(s) [a_1(s) + 3a_3(s) \cos^2 \theta], \quad (21)$$

ここで

$$a_0(s) = \frac{1}{4\pi(a_1(s) + a_3(s))}. \quad (22)$$

$a_1(s)$ と $a_3(s)$ の値は、表 4 に示す。

表 4. $f_R(s, \cos \theta)$ のパラメーター

\sqrt{s} (GeV)	$\sqrt{s} \leq 2.14$	$2.14 < \sqrt{s} \leq 2.4$	$2.4 \leq \sqrt{s}$
$a_1(s)$	0.5	$29.03 - 23.75s + 4.865s^2$	0.06
$a_3(s)$	0.0	$-30.33 + 25.53s - 5.301s^2$	0.4

$\sqrt{s} > 2.4$ GeV の高いエネルギー領域、実験室系で 1.2 GeV 以上では、実験値がないため角分布は一様と仮定している。しかしながら、この仮定は良くないことが分かっており²⁾、我々は、次のように、角分布が 2 つの成分 g_R 、 g_D からなると仮定した。

$$g_A(s, \cos \theta) = \frac{1}{2} [g_R(s, \cos \theta) + g_D(s, \cos \theta)]. \quad (23)$$

ここで

$$g_D(s, \cos \theta) = b_0(s) \exp \left[-2 p^2(s) b_1(s) (1 - \cos \theta) \right], \quad (24)$$

そして

$$b_0(s) = \frac{p^2(s) b_1(s)}{\pi (1 - \exp[-4 p^2(s) b_1(s])}), \quad (25)$$

$$b_1(s) = \frac{0.14 s^2 [3.65 (\sqrt{s} - m_N - m_R)]^6}{1 + [3.65 (\sqrt{s} - m_N - m_R)]^6}, \quad (26)$$

$$p^2(s) = \frac{[s - (m_N - m_R)^2][s - (m_N + m_R)^2]}{4s}. \quad (27)$$

g_D の形は、Cugnon の NN 弹性散乱の角分布³⁾ から取ったが、共鳴状態領域では、式 (21) の形に近くなるようになっている。この角分布を Δ と $N^*(1440)$ にエネルギーを質量差だけシフト

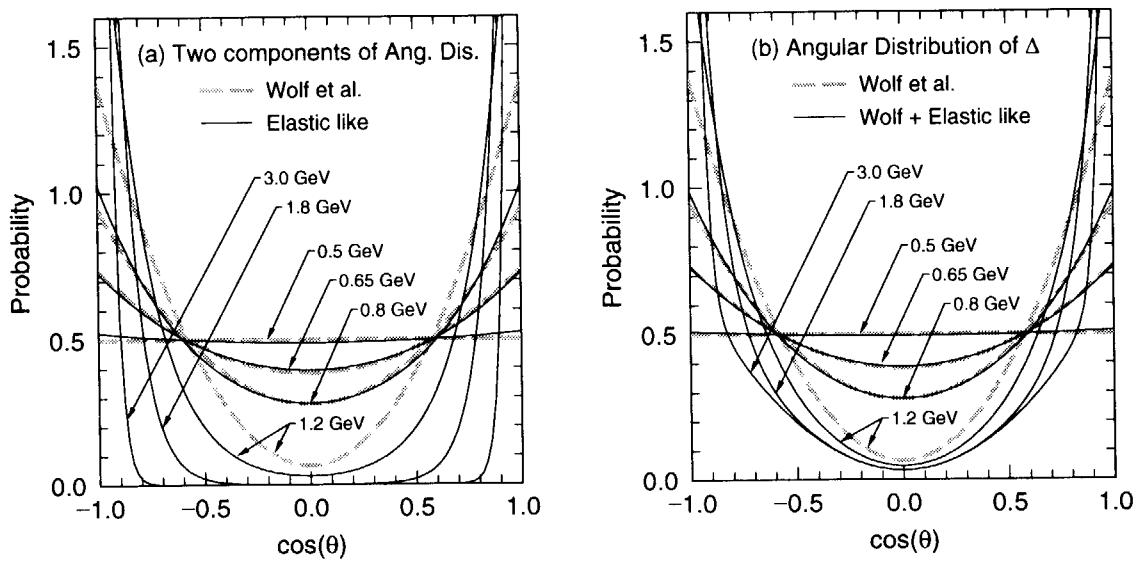


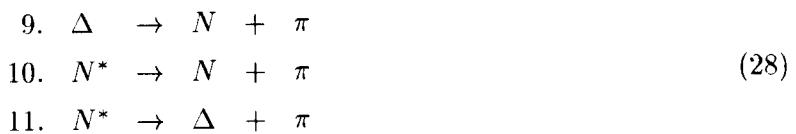
図 4. 共鳴状態生成の角分布。(a) で、グレイの太い破線は g_R 、実線が g_D 、(b) で、グレイの太い破線は g_R 、実線は g_A である。

して用いる。この角分布のエネルギー依存性を図 4. に示す。図 (a) で、グレイの太い破線は g_R 、実線が g_D 、図 (b) で、グレイの太い破線は g_R 、実線は g_A である。これらの図で、弾性散乱形の角分布は比較がしやすいように、対称にしている。すなわち、 $\frac{1}{2}[g_D(s, \cos \theta) + g_D(s, -\cos \theta)]$ である。

式 (9) のチャンネル 3、5 の断面積は、チャンネル 2、4 の断面積から詳細釣り合いの法則から決められる。その時、共鳴状態の質量依存性を考慮している。

パイオニア吸収断面積(式 (9) のチャンネル 6、7)は、particle data table⁴⁾ から最大の断面積を取り、それを Breit-Wigner 式からスケールして用いる。式 (9) のチャンネル 8 の Δ によるパイオニア吸収の断面積は、 Δ と核子の質量の差を考慮してシフトさせたチャンネル 7 の断面積を用いる。

衝突項のほかに、以下のような共鳴状態の崩壊を考慮する。



崩壊確率は、共鳴状態の運動量依存の幅、式 (19) を用いて指数型崩壊によって決定する。崩壊の角分布は、それらの静止系で等方とする。式 (28) のチャンネル 10、11 の分岐確率は、particle data table⁴⁾ より $\Gamma_{N^* \rightarrow \Delta + \pi} / [\Gamma_{N^* \rightarrow \Delta + \pi} + \Gamma_{N^* \rightarrow N + \pi}] = 0.4$ とした。その他のアイソスピンに関係した分岐確率は、Clebsch-Gordan 係数より決定する。

2.3. 相対論的修正

我々のモデルでは、運動学と式(5)のエネルギーの表式は、相対論を採用しているが、運動方程式自体は、非相対論的である。この問題は、高いエネルギーで重要になってきて、Sorge等により RQMD (Relativistic Quantum Molecular Dynamics)⁹⁾ が提唱されているが、数値的問題もあり、我々は、式(5)の変数にローレンツカラーの量を適用し、またローレンツ収縮を初期状態のブーストされた原子核に適用することにより、相対論的効果の重要な部分を近似的に取り込んでいると考える。

式(5)の相互作用の変数は、全て相対距離の2乗の形で書いている。

$$\mathbf{R}_{ij}^2 = (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)^2. \quad (29)$$

RQMD^{10, 11)} では、これらの量を squared transverse four-dimensional distance $-q_{T_{ij}}^2$ で置き換えている。すなわち、

$$-q_{T_{ij}}^2 = -q_{ij}^2 + \frac{(q_{ij} \cdot p_{ij})^2}{p_{ij}^2}, \quad (30)$$

ここで、 q_{ij} は、4次元の距離で $q_i - q_j$ 、また、 p_{ij} は、2粒子の4次元の運動量の和 $p_i + p_j$ である。2粒子 i と j の c.m.s 系では、squared covariant transverse distance $-q_{T_{ij}}^2$ は、通常の距離の2乗となる。従って、式(5)の変数 \mathbf{R}_{ij}^2 を2粒子の c.m.s. 系での距離の2乗 $\tilde{\mathbf{R}}_{ij}^2$ に置き換える。ここで、チルダは、2粒子の c.m.s 系での量を示す。

$$\tilde{\mathbf{R}}_{ij}^2 = \mathbf{R}_{ij}^2 + \gamma_{ij}^2 (\mathbf{R}_{ij} \cdot \vec{\beta}_{ij})^2, \quad (31)$$

ここで、

$$\vec{\beta}_{ij} = \frac{\mathbf{P}_i + \mathbf{P}_j}{E_i + E_j}, \quad \gamma_{ij} = \frac{1}{\sqrt{1 - \vec{\beta}_{ij}^2}}. \quad (32)$$

この置き換えによって、ハミルトニアン [式(5)] の相互作用は、運動量にも依存することになる。運動方程式 [式(4)] は、次のようになる。

$$\dot{\mathbf{R}}_i = \frac{\mathbf{P}_i}{\sqrt{m_i^2 + \mathbf{P}_i^2}} + \sum_j D_{ij} \frac{\partial \tilde{\mathbf{R}}_{ij}^2}{\partial \mathbf{P}_i}, \quad (33)$$

$$\dot{\mathbf{P}}_i = - \sum_j D_{ij} \frac{\partial \tilde{\mathbf{R}}_{ij}^2}{\partial \mathbf{R}_i}, \quad (34)$$

ここで、

$$\begin{aligned} D_{ij} = & -\frac{1}{2} \frac{A}{\rho_0} \frac{1}{2L} \rho_{ij} \\ & - \frac{1}{1+\tau} \frac{B}{\rho_0^\tau} \frac{\tau}{2} \left(\langle \rho_i \rangle^{\tau-1} + \langle \rho_j \rangle^{\tau-1} \right) \frac{1}{2L} \rho_{ij} \\ & + \frac{e^2}{2} c_i c_j \left\{ -\frac{1}{|\tilde{\mathbf{R}}_{ij}|} \operatorname{erf} \left(\frac{|\tilde{\mathbf{R}}_{ij}|}{\sqrt{4L}} \right) + 8\pi L \rho_{ij} \right\} \frac{1}{\tilde{\mathbf{R}}_{ij}^2} \\ & - \frac{C_s}{2\rho_0} (1 - 2|c_i - c_j|) \frac{1}{2L} \rho_{ij}, \end{aligned} \quad (35)$$

また、

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{R}}_{ij}^2}{\partial \mathbf{R}_i} = 2\mathbf{R}_{ij} + 2\gamma_{ij}^2 (\mathbf{R}_{ij} \cdot \vec{\beta}_{ij}) \vec{\beta}_{ij} \quad (36)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\mathbf{R}}_{ij}^2}{\partial \mathbf{P}_i} &= \frac{2\gamma_{ij}^2}{E_i + E_j} (\mathbf{R}_{ij} \cdot \vec{\beta}_{ij}) \\ &\times \left\{ \mathbf{R}_{ij} + \gamma_{ij}^2 (\mathbf{R}_{ij} \cdot \vec{\beta}_{ij}) \left(\vec{\beta}_{ij} - \frac{\mathbf{P}_i}{E_i} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (37)$$

上式で、 ρ_{ij} は、式 (7) で定義されている。

我々は、また、ローレンツスカラーの量を一体の位相空間分布関数 式 (3) にも導入する。

$$f_{ij} = 8 \cdot \exp \left[-\frac{1}{2L} \tilde{\mathbf{R}}_{ij}^2 - \frac{2L}{\hbar^2} \tilde{\mathbf{P}}_{ij}^2 \right], \quad (38)$$

ここで、 $\tilde{\mathbf{P}}_{ij}^2$ は、2 粒子 i と j の c.m.s 系での相対運動量の 2 乗である。これは、同種粒子の場合次のように表される。

$$\tilde{\mathbf{P}}_{ij}^2 = \mathbf{P}_{ij}^2 - (E_i - E_j)^2, \quad (39)$$

ここで、

$$\mathbf{P}_{ij} = \mathbf{P}_i - \mathbf{P}_j. \quad (40)$$

2.4. “基底状態”の作成

QMD モデルの重要な要素のひとつは、如何に入射核と標的核の位相空間での初期分布を決定するかということにある。基底状態としてエネルギー最低状態を採用することはこの QMD モデルではできない。なぜなら、この QMD モデルでは、フェルミオンの性質を満たしていないからである。しかしながら、束縛エネルギーや、核半径、等の性質を再現するような括弧付きの“基底状態”を定義することは必要である。そのために、以下に述べるようなランダムパッキングの方法¹²⁾を“基底状態”を作る方法として採用する。

まず、半径 $R_0 = 1.124 A^{1/3} - 0.5$ fm、表面パラメーター $a = 0.2$ fm の Woods-Saxon 形の分布を用意し、その中にガウス型波束の中心 \mathbf{R}_i をランダムに分布させる。Woods-Saxon の裾のカットオフは、 $R_{\max} = 1.124 A^{1/3}$ fm とした。この時、分布のふらつきが少なくなるように、2 粒子の中心間距離の最小値が、同種粒子で 1.5 fm、異種粒子で 1.0 fm と設定した。

次に、この空間分布より、密度分布、ポテンシャルエネルギーを計算する（この時相対論的修正は考慮しない）。局所的に Thomas-Fermi 近似を用いてフェルミ運動量を計算し、波束の運動量の中心 \mathbf{P}_i をフェルミ運動量 $p_F(\mathbf{R}_i)$ までの間でランダムに抽出する。

このサンプリングは、全エネルギーが正であったり、位相空間分布関数 $f(\mathbf{R}_j, \mathbf{P}_j)$ (式 (2)、(3)) が、パウリ原理を満たしていないときには採用されない¹²⁾。

最後に、全エネルギーが、以下の質量公式の値¹³⁾を満たしているかどうかチェックする。

$$\begin{aligned} E_{\text{bin}} = & - 15.56 A + 17.23 A^{2/3} \\ & + 46.57 \frac{(N-Z)^2}{2A} + \frac{3}{5} \frac{Z^2 e^2}{1.24 A^{1/3}}. \end{aligned} \quad (41)$$

もし、核子あたりの束縛エネルギーが、 $E_{\text{bin}} \pm 0.5$ に入っていれば、このサンプリングを“基底状態”として採用する。

2.5. SDM モデル

統計崩壊モデルとしては、優れた既存のコードが存在するが、我々は、 p, n, d, t, α の軽粒子蒸発と核分裂からなる簡単なものを採用した。フェルミガスモデルで、粒子 x の放出確率 P_x は、

$$P_x = (2J_x + 1) m_x \epsilon \sigma_x(\epsilon) \rho(E) d\epsilon, \quad (42)$$

と書ける。ここで、 J_x, m_x, ϵ は、粒子 x のスピン、質量、運動エネルギーである。また、 $\sigma_x(\epsilon)$ 、 $\rho(E)$ は、逆過程の断面積、残留核の準位密度である。 $\rho(E)$ は、

$$\rho(E) = w_0 \exp\left(2\sqrt{aE}\right), \quad (43)$$

ここで、 $a = A/8 \text{ MeV}^{-1}$ また、 w_0 は定数である。逆過程の断面積は、

$$\sigma_x(\epsilon) = \begin{cases} (1 - U_x/\epsilon) \pi R^2 & : \epsilon > U_x \\ 0 & : \epsilon \leq U_x \end{cases} \quad (44)$$

ここで、 R は、吸収半径、 U_x は、粒子 x に対するクーロン障壁。式 (43) の励起エネルギー E は、

$$E = E_0 - \epsilon - Q, \quad (45)$$

ここで、 E_0 は、親核の励起エネルギー、 Q は、質量公式 (41) から計算される Q 値である。粒子 x の全放出確率 R_x は、式 (42) をエネルギーで積分して得られる。

$$\begin{aligned} R_x &= (2J_x + 1) m_x \\ &\times \int_{U_x}^{E_0 - Q_x} \epsilon \sigma_x(\epsilon) \rho(E_0 - Q_x - \epsilon) d\epsilon. \end{aligned} \quad (46)$$

この積分は解析的にできて、放出される粒子のスペクトルは、

$$N(\epsilon_x) d\epsilon_x = \frac{\epsilon_x - U_x}{T_x^2} \exp\left\{-\frac{\epsilon_x - U_x}{T_x}\right\} d\epsilon_x, \quad (47)$$

ここで、

$$a T_x^2 = E_0 - U_x - Q_x. \quad (48)$$

上のモデルでは、 γ 崩壊、角運動量は考慮していない。

3. プログラム

3.1. プログラムソース

JQMD を実行するのに必要な主要ルーティンと解析のためのルーティンは、以下の様なファイルに含まれている。

```
jqmd00.f    qmdinit.f    ground.f    mfield00.f    coll00.f    sdm.f
qmdout1.f   qmdout2.f   qmddflt.f   utl00.f      mdp-hp.f
```

それぞれのファイルのヘッダーには、そのファイルに含まれる subroutine (s), function (f), block data (b), entry (e) のリストと簡単な説明が書かれている。次に各ファイル毎のヘッダーを示す。

jqmd00.f

表 5. jqmd00.f

```
*****
*          *
*      PART 1: Main steering routines
*
*      s  jqmd00    to control total JQMD code
*      s  qmdevent  to simulate one event by QMD
*      s  finsumry to summarize the overall events
*      s  qmdjudge  to determine the weight of one event of QMD and
*                      to judge the elastic or inelastic reaction type
*      s  qmdsum    to summarize one event of QMD
*      s  sdmsum    to summarize one event of SDM
*      s  qmdreadd  to read one event result of QMD from the file
*      s  qmdwrite  to write one event result of QMD on the file
*      s  qmdreadc  to read and check QMD results from the files
*
*****
```

qmdinit.f

表 6. qmdinit.f

```
*****
*          *
*      PART 2: Initialization of QMD part
*
*      s  readcfg   to read the input parameters from configuration file
*      s  qmdint    to initialize the QMD part
*      s  kcomp     to determine the parameters of the interactions
*      s  idname    to identifies the particle or nucleus
*      s  chname    to give the particle and Nucleus name as character
*      f  ulmass    to give the mass of the particle from kf code
*      f  luchge    to give the charge of the particle from kf code
*
*****
```

ground.f

表 7. ground.f

```
*****
*          *
*      PART 3: Ground State and Boost
*
*      s  ground    to make the ground state
*      s  packqmd   to make the ground state by random packing method
*      s  gcmang    to kill cm motion and angular momentum of the nucleus
*      s  rboost    to boost the ground state
*      s  bcoul     to determine initial position and momentum
*                      according to coulomb trajectory
*
*****
```

mfield00.f

表 8. mfield00.f

```
*****
*          *
*      PART 4: Mean Field Part
*
*      s  caldisa   to calculate the two-body quantities for all particle
*      s  caldis2   to calculate the two-body quantities for i1 and i2
*      s  gradu     to calculate the graduate of e.o.m for rkg
*      s  rk12      to propagate particles by 2th order Runge-Kutta-Gill
*      s  rkg4      to propagate particles by 4th order Runge-Kutta-Gill
*      s  pauli     to calculate the Pauli blocking factor
*      s  epotall   to calculate total potential energy
*      s  etotal    to calculate total energy of cluster
*      s  pcmcl    to calculate energy and angular momentum of cluster
*      s  cldist    to determine nuclear cluster
*
*****
```

coll00.f

表 9. coll00.f

```
*****
*          *
*      PART 5: Collision Term
*
*      s  relcol    to calculate the kinematics between two particles
*      s  crossw    to determine collision channel and final state
*      s  pionem    to calculate the decay of delta or  $\eta^*$ 
*      s  pionab    to calculate pion absorption
*      s  fpidecay  to calculate final decay of the resonances
*      s  resmas    to calculate the mass and width of Delta and  $\eta^*$ 
*      f  pideno    to calculate the correction factor
*                      of inverse cross subsection
*      f  soo       to calculate delta,  $\eta^*$  cross subsection
*
*****
```

sdm.f

表 10. sdm.f

```
*****
*          PART 6: Statistical Decay Model
*
*   s  sdmtest  a short main for test of SDM
*   s  sdment   to entry of SDM from QMD results
*   s  sdmint   to initialize SDM
*   s  sdmexec  to execute statistical particle decay / fission.
*   s  sdmwid0  to calculate decay width and decay products
*                 without angular momentum.
*   s  sdmwid1  to calculate decay width and decay products
*                 with angular momentum.
*   f  sdmlev   to calculate level density
*   s  sdjsum   to sum up angular momentum.
*   s  sdmfisw  to calculate fission width
*   s  sdmfiss  to determine the mass and charge of fission fragment
*   f  sdmfishb to determine the fission barrier.
*   s  sdmplist to list event record and particle data
*   f  bndeng   to give binding energy per baryon (MeV)
*   f  eliq     to calculate liquid drop binding energy (MeV)
*   s  sdmtable to read mass table from block data
*
*****
```

qmdout1.f

表 11. qmdout1.f

```
*****
*          PART 7: Output on file
*
*   s  sm_sumo  to write final output on file
*   s  sm_hedo  to write header, input echo and summary
*   s  sm_coll   to sum up the collision number and
*                 to write collision history
*   s  sm_grdo  to write ground state properties for masspr = 0
*   s  sm_cputime to write cputime on screen and/or file
*   s  sm_init   to initialize the summary and input echo
*   s  sm_evnt   to initialize the summary at each event
*   s  sm_timd   to output the phase space information for QMDDISP
*   s  sm_timec  to output the phase space information for summary
*   s  sm_timeq  to store some values at the time steps for summary
*   s  sm_lstp   to count the last pion number for summary
*   s  sm_coln   to count the number of collisions for summary
*   s  sm_mdis   to write mass and charge distribution of QMD / SDM
*   s  sm_mass   to store the mass distribution of the clusters
*   s  sm_norm   to normalize the cross subsection by total event number
*   s  sm_close   to close files for summary
*
*****
```

qmdout2.f

表 12. qmdout2.f

```
*****
*          PART 8: Display Utilities 1
*
* s disp01    to write all particle position and cluster contour      *
*               for ground state properties.                            *
* s disp02    to write all particle position and cluster contour      *
*               for reactions                                         *
* s disp03    to write particle position or momentum on file          *
* s disp04    to write color cluster plot of density for reactions   *
* s disp05    to write 2-d matrix on the file                         *
* s disp06    to display particle position on terminal                *
* s disp07    to write all particle momentum position and            *
*               Fermi sphere for ground state properties.             *
* s disp08    to write all particle momentum position and            *
*               Fermi sphere for reactions.                           *
* s densrr    to calculate spacial density                          *
* s cntdrw   to write contour line                                *
* s cntsub   to make contour data and write them on file          *
* s cout     to write contour data on file                         *
*
*****
```

qmddflt.f

表 13. qmddflt.f

```
*****
*          PART 9: Default Values
*
* b qmddata   to give default values for switches and parameters  *
*
*****
```

utl00.f

表 14. utl00.f

```
*****
*          PART 10: Utilities
*
* s jbooki   to initialize one-dimentional histogram                 *
* e jfill1   to fill one dimensional histogram                         *
* e jscale1  to scal one dimentional histgram data                  *
* e jprint1  to print one dimensional histogram                        *
* e jftot    to give total particle production cross subsection   *
* e jfddx    to give the double differential cross subsection      *
*               for one angel                                         *
* s ranint   to initialize the random number                         *
* s jqmdver  to store JQMD version and last reviced date          *
* s datetime to detect date and time                                *
* s cputime  to detect cpu time                                    *
* s howmany  to control multi-event runs                            *
* f pcmsr    to determine the cm momentum from energy and mass   *
* s trfram   to determine energy and momentum by Lorentz transform *
* f erf      to calculate the eror function                         *
*
*****
```

mdp-hp.f

表 15. mdp-hp.f

```
*****
*          PART 11: Machine dependent routines for HP Fortran 77
*
*   f  rn()      to get random number
*   s  date_a_time  to get current date
*   f  sect_a      to get elapse time
*   f  cput_a      to get cpu time
*
*****
```

3.2. 入力変数

入力変数は、ユーザーが入力ファイルの中、もしくは、ユーザーが作るメインルーティンの中で指定する。入射核(proj)、標的核(targ)、計算イベント数(event)、時間ステップ数(tstep)、計算系(frame)、入射エネルギー(win)、最小衝突係数(bmin)、最大衝突係数(bmax)、時間ステップ(dt)は、character ベースで指定できるが、それ以外の変数は、整数型が mstq1(i)、実数型が parq1(i)の形で指定する。以下に、入力変数(mstq1, parq1)とプログラム内の common 変数([]内)、また、デフォルトの値(D=)の一覧表を示す。

入力変数一覧

表 16. 入力変数一覧

```
-----
*      Input subsection
-----

proj = 12C      # [mstq1(1-3)] projectile
targ = 40Ca     # [mstq1(4-5)] target
event = 1        # [mstq1(7)]  total number of events
tstep = 200      # [mstq1(8)]  total number of time steps
frame = cm       # [mstq1(9)]  reference frame ( lab, cm, nn )

win = 50mev     # [parq1(1-2)] beam energy ( mev, gev, mevc, gevc )
bmin = 0.0       # [parq1(3)]  minimum impact parameter [fm]
bmax = 3.5       # [parq1(4)]  maximum impact parameter [fm]
dt   = 1.0        # [parq1(5)]  time step [fm/c]

Note: for proj and targ, p, n, pi+, pi-, pi0 are available.
non for proj means the check of the ground state properties.

-----
*      Basic Input [1-9]
-----

mstq1(1) : [idnpr] (D=0)  projectile ID
            ( nucleon, nucleus = 0, pi+ = 211, pi- = -211, pi0 = 111 )

mstq1(2) : [masspr] (D=12) projectile mass number
mstq1(3) : [msprpr] (D=6)  projectile charge

mstq1(4) : [idnta] (D=0)  target ID
            ( nucleon, nucleus = 0, pi+ = 211, pi- = -211, pi0 = 111 )
```

表 16-2. 入力変数一覧

```

mstq1(5)   : [massta] (D=40) target mass number
mstq1(6)   : [mstapr] (D=20) target charge

mstq1(7)   : [iprun] (D=10) total number of events
mstq1(8)   : [ntmax] (D=100) total number of time steps
mstq1(9)   : [insys] (D=1) reference frame ( 0=lab, 1=csm, 2=nn )

*-----*

parq1(1)   : [elab] (D=0.5) beam energy in lab [ GeV per nucleon ]
parq1(2)   : [plab] (D=-1.0) beam momentum in lab [ GeV/c per nucleon ]
                    you can specify the one of elab and plab.
                    The other should be negative.

parq1(3)   : [bmin] (D=0.0) minimum impact parameter [fm]
parq1(4)   : [bmax] (D=3.5) maximum impact parameter [fm]
parq1(5)   : [dt] (D=1.0) time step [1/fm]

*-----*
*      Numerics and Control [10-29]
*-----*

mstq1(10)  : [iseed] (D=12345) seed of random number
                0 -> from date&time

mstq1(11)  : [ibch] (D=0) choice of impact parameter
                0 -> bmin-bmax proportional to b**2
                1 -> bmin-bmax uniform, devided by ibin
                2 -> only for ifin > 0,
                    bmin-bmax random, count events in each bin
mstq1(12)  : [ibin] (D=20) number of impact parameter bin
                for ibch = 1 case,
                if iprun < ibin, ibin = iprun.
                iprun = iprun / ibin * ibin

mstq1(13)  : [irkg] (D=2) choice of the method for time integration
                2 -> second order of RKG
                4 -> 4th order of RKG

mstq1(14)  : [imany] (D=0) multi run control
                0 -> no,
                1 -> write event control
                    on fname(4) (D='howmany.dat')
                    for ibch = 1 case, call howmany each ibin.

mstq1(15)  : [ifout] (D=0) write QMD results on fname(10)
                0 -> no,
                1 -> write QMD results
                    on fname(10) (D='qmdout.dat')

mstq1(16)  : [ifin] (D=0) import QMD results from files
                0 -> no,
                n -> read QMD results from n-files
                    fname(10+1)-fname(10+n), n < 50
mstq1(17)  : [ielst] (D=2) judgement of elastic reaction
                smaller cases than ielst are considered as elastic

```

表 16-3. 入力変数一覧

```

0 : elastic without collision
1 : elastic with collision
2 : inelastic without collision
3 : inelastic with collision

*-----*
*   Interaction [30-59]
*-----*

mstq1(30)  : [ipot] (D=1) choice of interaction
              1 -> soft,    rpot = 0.33333
              2 -> medium,  rpot = 0.66666
              3 -> hard,   rpot = 1.00000

mstq1(31)  : [icoul] (D=1) Coulomb interaction
              0 -> not include
              1 -> include

mstq1(32)  : [irelcr] (D=1) relativistic correction
              0 -> not include
              1 -> include

*-----*
parq1(30)  : [wl]   (D=2.0) width of wave packet (fm)
parq1(31)  : [rpot] (D=-1.0) power of density dependent part
              < 0.0 : default value determined by ipot
              > 0.0 : rpot
parq1(32)  : [esymm] (D=25.0) symmetry potential (MeV)

*-----*
*   Collision [60-89]
*-----*

mstq1(60)  : [icolt] (D=1) include collision term or not
              0 -> not include
              1 -> include

mstq1(61)  : [iavoid] (D=1) avoid collision in ground state
              0 -> allow all collisions
              1 -> avoid the collisions inside the ground state

*-----*
*   Ground state [90-119]
*-----*

mstq1(90)  : [ipchs] (D=1) method of creation of ground state
              0 -> not adjust
              1 -> adjust the energy

mstq1(91)  : [mntry] (D=1000) max try for sampling

*-----*
parq1(90)* : [saa] (D=0.2) the diffuseness parameter for the initial
               Woods-Saxon shape (fm)
parq1(91)* : [r00] (D=1.124) radius parameter rad0=r00*A**1/3 (fm)

```

表 16-4. 入力変数一覧

```

parq1(92)* : [r01] (D=0.5) radius parameter for the initial
               Woods-Saxon radius rt00=r00*A**((1/3)-r01 (fm)
parq1(93)* : [rada] (D=0.9) cutoff parameter for radius (fm)
parq1(94)* : [radb] (D=0.3) cutoff parameter for radius (fm)
               radm = rad0 - rada * ( gamm - 1.0 ) + radb
parq1(95)* : [dtg] (D=1.0) time step for frictional cooling (1/fm)
parq1(96)* : [fric] (D=-0.04) the coefficient for friction

parq1(97) : [rdist] (D=-1.0) initial distance of two nuclei
             < 0.1:
               elab < 200 MeV
               rmax0 = radta/gamta + radpr/gampr + 6.0
             200 MeV < elab < 1 GeV
               rmax0 = radta/gamta + radpr/gampr + 4.0
             elab > 1 GeV
               rmax0 = radta/gamta + radpr/gampr + 4.0
             elab > 10 GeV
               rmax0 = radta/gamta + radpr/gampr + 2.0
             > 0.1:
               rmax0 = radta/gamma + radpr/gamma + rdist

-----
*      SDM [120-149]
-----

mstq1(120) : [issdm] (D=1) Statistical Decay is Included or not
              0 -> not include
              1 -> include

mstq1(121) : [iswids] (D=0) choice of decay width
              0 -> simple decay width
              without gamma nor angular mom.

mstq1(122) : [isevap] (D=1)
              0 -> without particle evaporation
              1 -> with particle evaporation

mstq1(123) : [isfiss] (D=1)
              0 -> without fission decay
              1 -> with fission decay

mstq1(124) : [isgrnd] (D=1)
              0 -> without ground state decay
              1 -> with ground state decay

-----
parq1(120) : [sdmemin] (D=1.0) minimum energy for decay (MeV)
               This value is used also for the judgement
               of the elastic reaction of QMD.

```

表 16-5. 入力変数一覧

```

*-----*
*      Analysis [150-200]
*-----*

mstq1(150) : [jdsp(20)] (D=1) Output on fname(4) and Screen
    1 -> output
    0 -> hinder all output
    file name is fname(4) (D='jqmd') + '-all0.ang'

mstq1(151) : [jdsp(21)] (D=1) display Header and Second Page
    0 -> no, 1 -> output
    file name is fname(4) (D='jqmd') + '-head.ang'

mstq1(152) : [jdsp(22)] (D=1) display Collision History
    0 -> no, 1 -> output
    file name is fname(4) (D='jqmd') + '-col0.ang'

mstq1(153) : [jdsp(23)] (D=1) display Ground State Properties
    0 -> no, 1 -> output
    file name is fname(4) (D='jqmd') + '-grd0.ang'

*-----*
mstq1(154) : [jdsp(1)-jdsp(13)] (D=5) display R and P distribution
    0 -> Mon
    1 -> Snapshot of R-space in Threee Directions
        for Ground state.
        file name is fname(4) + '-gr00.ang'
    2 -> Snapshot of P-space in Threee Directions
        for Ground state.
        file name is fname(4) + '-gp00.ang'
    3 -> Snapshot of R and P-space in Threee
        Directions for Ground state.
        file name is fname(4) + '-grp0.ang'
    4 -> Snapshot of R-space
        file name is fname(4) + '-r000.ang'
    5 -> Time Evolution of R-Space
        file name is fname(4) + '-rt00.ang'
    6 -> Snapshot of P-space
        file name is fname(4) + '-p000.ang'
    7 -> Time Evolution of P-Space
        file name is fname(4) + '-pt00.ang'
    8 -> Snapshot of R and P-space
        file name is fname(4) + '-pr00.ang'
    9 -> Time Evolution of R and P-Space
        file name is fname(4) + '-prt0.ang'
    10 -> Snapshot R-Space with Color Plot
        file name is fname(4) + '-rc00.ang'
    11 -> Time Evolution of R-Space with Color Plot
        file name is fname(4) + '-rtc0.ang'
    12 -> Snapshot R-Space with Contour and Color Plot
        file name is fname(4) + '-rrc0.ang'
    13 -> Time Evolution of R-Space
        with Contour and Color Plot
        file name is fname(4) + '-rrtc.ang'

```

表 16-6. 入力変数一覧

```

-----
mstq1(155) : [jdsp(24)] (D=1) Display JQMD Logo CPU Time on Screen
    0 -> no, 1 -> output

mstq1(156) : [jdsp(25)] (D=1) Display Reaction on Screen
    0 -> no,
    1 -> r-space
    2 -> p-space

mstq1(157) : [jdsp(26)] (D=1) Display Reaction on file(4) + '-all0.ang'
    0 -> no,
    1 -> r-space
    2 -> p-space

mstq1(158) : [jdsp(27)] (D=1) Number of Event for Display
    for jdsp(25), jdsp(26)

mstq1(159) : [jdsp(30)] (D=1) Display Mass Distribution of QMD
    0 -> no, 1 -> file name is fname(4) + '-mqmd.ang'

mstq1(160) : [jdsp(31)] (D=1) Display Mass Distribution of SDM
    0 -> no, 1 -> file name is fname(4) + '-msdm.ang'

mstq1(161) : [jdsp(32)] (D=1) Display Mass Distribution of fission
    0 -> no, 1 -> file name is fname(4) + '-mfis.ang'

mstq1(162) : [icdp(1)] (D=1) Display Nucleon on the Color Culuster Plot
    0 -> no, 1 -> output
mstq1(163) : [icdp(2)] (D=1) Display Delta on the Color Culuster Plot
    0 -> no, 1 -> output
mstq1(164) : [icdp(3)] (D=1) Display  $\pi^*$  on the Color Culuster Plot
    0 -> no, 1 -> output
mstq1(165) : [icdp(4)] (D=1) Display Pion on the Color Culuster Plot
    0 -> no, 1 -> output

mstq1(166) : [iefw] (D=0) One File or Each File
    0 -> one file, 1 -> each file of one time.

mstq1(167) : [ised] (D=1) Direction of Display
    1 -> z-x
    2 -> z-y
    3 -> x-y

mstq1(168) : [mulg] (D=0) Number of Graphs in One Page
    0 -> default number
    n -> number of graph in one page

```

表 16-7. 入力変数一覧

```

mstq1(169) : [icpus] (D=1) detect cpu time
              0 -> no, 1 -> detect

mstq1(170) : [idatm] (D=1) detect date and time
              0 -> no, 1 -> detect

mstq1(171) : [nfreq] (D=5) time interval for time step analysis
mstq1(172) : [nfrec] (D=10) time interval for reaction display

mstq1(173) : [nfred] (D=1) time interval for QMDDISP
mstq1(174) : [jdsp(33)] (D=0) number of events for QMDDISP
              0 -> no,
              n -> data on fname(4) + '-disp.shn'

mstq1(175) : [ianal] (D=0) call user anal or not in main
              0 -> no, 1 -> call

-----
parq1(151) : [rdimg] (D=10.0) coordinate size of display (fm)
              for ground state
parq1(152) : [fdimg] (D=2.0) momentum size of display (1/fm)
              for ground state

parq1(153) : [xrmin] (D=-25.0) minimum x-coordinate of display (fm)
              for reactions
parq1(154) : [xrmax] (D= 25.0) maximum x-coordinate of display (fm)
              for reactions
parq1(155) : [yrmin] (D=-15.0) minimum y-coordinate of display (fm)
              for reactions
parq1(156) : [yrmax] (D= 15.0) maximum y-coordinate of display (fm)
              for reactions
parq1(157) : [xpmin] (D=101.0) minimum px of display (1/fm)
              >100.0 : default value
parq1(158) : [xpmax] (D=101.0) maximum px of display (1/fm)
              >100.0 : default value
parq1(159) : [ypmin] (D=101.0) minimum py of display (1/fm)
              >100.0 : default value
parq1(160) : [ypmax] (D=101.0) maximum py of display (1/fm)
              >100.0 : default value

parq1(161) : [scalo] (D=1.0) global scale for angel
parq1(162) : [scald] (D=1.0) global scale for terminal

```

3.3. メインルーティン

JQMD コードは、QMD 計算結果からいろいろなデータを取り出しやすくするために、メインルーティンをユーザーが定義するようになっているが、以下の表 17 に示すようなダミーの subroutine, entry が最低必要である。このユーザー定義の何も無いメインルーティンでの実行と出力については、次章で解説する。

メインルーティン 1

表 17. メインルーティン 1

```

1      ****
2      *      main-00.f
3      ****
4      common /swich2/ icfg, imany, icpus, idatm
5      -----
6      *      icfg = 1;  read input file of default name
7          icfg = 1
8          call jqmd00
9          end
10     ****
11     subroutine anal_int
12     *      Purpose:
13     *          user subroutine for analysis
14     ****
15     include 'param02.inc'
16     -----
17     common /summ04/ ianal
18     common /const1/ elab, rdist, bmin, bmax, ibch, ibin
19     common /const2/ dt, ntmax, iprun, iprun0
20     common /vriab3/ qmdfac, sdmfac
21     common /swich3/ ielst, jelst, kelst
22     -----
23     dimension wi(10), wt(10)
24     -----
25     if( ianal .eq. 0 ) return
26     -----
27     return
28     ****
29     entry anal_qmd(ik,jj,iz,in,id,is,ic,iq,im,
30     &           bi,px,py,pz,et,rm,ex)
31     *      Purpose:
32     *          user entry for analysis of QMD
33     ****
34     if( ianal .eq. 0 ) return
35     -----
36     *      inelastic frag and detection frame
37     -----
38     if( kelst .eq. 0 ) return
39     call trfram(px,py,pz,et,rm,0)
40     -----
41     *      nucleus( ik = 0 )
42     -----
43     if( ik .eq. 0 ) then
44         end if
45     -----
46     *      proton( ik = 1 ) and neutron( ik = 2 )
47     -----
48     if( ik .eq. 1 ) then
49         end if

```

表 17-2. メインルーティン 1

```

50         if( ik .eq. 2 ) then
51         end if
52 *-----
53 *      pions( ik = 5 )
54 *-----
55         if( ik .eq. 5 ) then
56             if( ic .eq. 1 ) then
57                 else if( ic .eq. 0 ) then
58                     else if( ic .eq. -1 ) then
59                         end if
60                     end if
61 *-----
62         return
63 ****
64         entry anal_sdm(ik,jj,iz,in,id,is,ic,iq,im,
65           &           bi,px,py,pz,et,rm,ex)
66 *      Purpose: *
67 *          user entry for analysis of SDM *
68 ****
69         if( ianal .eq. 0 ) return
70 *-----
71 *      inelastic frag and detection frame
72 *-----
73         if( kelst .eq. 0 ) return
74         call trfram(px,py,pz,et,rm,0)
75 *-----
76 *      nucleus( ik = 0 )
77 *-----
78         if( ik .eq. 0 ) then
79             end if
80 *-----
81 *      proton( ik = 1 ) and neutron( ik = 2 )
82 *-----
83         if( ik .eq. 1 ) then
84             end if
85             if( ik .eq. 2 ) then
86                 end if
87 *-----
88 *      pions( ik = 5 )
89 *-----
90         if( ik .eq. 5 ) then
91             if( ic .eq. 1 ) then
92                 else if( ic .eq. 0 ) then
93                     else if( ic .eq. -1 ) then
94                         end if
95                     end if
96 *-----
97         return
98 ****
99         entry anal_fin
100 *      Purpose: *
101 *          user entry for analysis of weight *
102 ****
103         if( ianal .eq. 0 ) return
104 *-----
105         return
106         end

```

上記の表 17 に示されているように、メインルーティンで最低必要なことは、icfg の指定と subroutine jqmd00 をコールすることだけである。icfg は、入力データのインプットの仕方を指定するパラメーターである。icfg の説明は、ファイル qmdinit.f の中の subroutine readcfg のヘッダー部にコメントがあるので、以下にそれを示す。

icfg の説明

表 18. icfg の説明

```
-----
*      icfg should be defined in user program.          *
*      icfg = 0;  no input file                         *
*      icfg = 1;  read input file of default name       *
*      icfg = 2;  read input file name from unit 5     *
*      icfg = 3;  no input file and                     *
*                  take input data from main by characters *
*      icfg = 4;  no input file and                     *
*                  take input data from main by variables   *
*-----*
*      icfg = 1, 2, 4                                     *
*      input      : content           ; variables      *
*-----*
*      'proj'     : projectile        ; mstq1(1)      *
*                  ; mstq1(2)      *
*                  ; mstq1(3)      *
*      'targ'     : target           ; mstq1(4)      *
*                  ; mstq1(5)      *
*                  ; mstq1(6)      *
*      'event'    : number of events   ; mstq1(7)      *
*      'tstep'    : total number of time step  ; mstq1(8)  *
*      'frame'    : reference frame    ; mstq1(9)      *
*      'win'      : incident energy or momentum ; parq1(1)  *
*                  ; parq1(2)      *
*      'bmin'     : minimum impact parameter ; parq1(3)  *
*      'bmax'     : maximum impact parameter ; parq1(4)  *
*      'dt'       : time step         ; parq1(5)      *
*-----*
*      'fname(i)'  : file name        ; fname(i)      *
*      'mstq1(i)'  : integer parameters ; mstq1(i)      *
*      'parq1(i)'  : real parameters  ; parq1(i)      *
*-----*
*      icfg = 3                                         *
*      projc    : projectile        (a80)      *
*      targc    : target           (a80)      *
*      framec   : reference frame (a80)      *
*      winc     : incident energy or momentum (a80)  *
*      bminc    : minimum impact parameter (a80)  *
*      bmaxc    : maximum impact parameter (a80)  *
*      dtc      : time step         (a80)      *
*      tstepc   : total number of time step (a80)  *
*      eventc   : number of events  (a80)      *
*-----*
```

メインルーティンで呼ぶ subroutine jqmd00 が JQMD のコード全体をコントロールする主要サブルーティンである。この中から、表 17 に示した subroutine anal_int を呼んでいる。この anal_int で、解析のためのルーティンの初期化を行う。詳細は、次章の実行例のところで示す。subroutine anal_int の entry として、entry anal_qmd, entry anal_sdm, entry anal_fin が必要である。これらは、それぞれ、subroutine qmdsum, subroutine sdmsum, subroutine finsumry から呼ばれ、QMD 終了後の解析、SDM 終了後の解析、それと最終的な統計処理と出力をさせるものである。

subroutine qmdsum, subroutine sdmsum の引数として渡される変数、ik, jj, iz, in, id, is, ic, iq, im, bi, px, py, pz, et, rm, ex は、次のような変数である。

qmdsum, sdmsum 変数の説明

表 19. qmdsum, sdmsum 変数の説明

```
*****
*          ik   : kind of cluster or particle
*                  = 0  : Nucleus
*                  = 1  : proton
*                  = 2  : neutron
*                  = 3  : delta
*                  = 4  :  $\Xi$  star
*                  = 5  : pions
*                  = 6  : gamma
*
*          jj   : angular momentum
*          iz   : number of proton in cluster
*          in   : number of neutron in cluster
*          id   : number of Delta in cluster
*          is   : number of  $\Xi$  star in cluster
*          ic   : charge of cluster
*          iq   : collision history of particle
*          im   : sdm history of particle
*
*          bi   : impact parameter           (fm)
*          px   : x-momentum of cluster or particle (GeV)
*          py   : y-momentum of cluster or particle (GeV)
*          pz   : z-momentum of cluster or particle (GeV)
*          et   : total energy,  $E = \sqrt{m^2 + p^2}$  (GeV)
*          rm   : rest mass of particle        (GeV)
*          ex   : excitation energy of cluster (MeV)
*
*****
```

3.4. 主要サブルーティン

ここでは、JQMD コードの主要サブルーティン、JQMD コード全体をコントロールするサブルーティン jqmd00 と、QMD による 1 イベントシミュレーションをコントロールするサブルーティン qmdevent をリストとともに解説する。

3.4.1. jqmd00 (subroutine)

JQMD 全体をコントロールするサブルーティンで、全体の初期化、イベントシミュレーションの DO ループ、全体のサマリーからなる。ここから呼んでいるサブルーティンは、初期化に関して、

```
jqmdver  readcfg  qmdint  sdmint  anal_int  sm_init
```

イベントシミュレーションに関して、

```
qmdevent  qmdreadd  qmdwrite  qmdjudge  qmdsum  sdment  sdmsum
```

サマリーに関して、

```
finsumry
```

である。

subroutine jqmd00 リスト

表 20. subroutine jqmd00 リスト

```

1      *-----
2      *      Initialization
3      *-----
4          call jqmdver( Version, Last_Revised )
5          call readcfg
6          call qmdint
7          call sdmint
8          call anal_int
9          call sm_init
10     *-----
11     *      Many Events
12     *-----
13         do 5000 ll = 1, iprun
14             llnow = ll
15         *-----
16         *      one event by QMD or from Files
17         *-----
18             if( ifin .eq. 0 ) then
19                 call qmdevent
20             else if( ifin .gt. 0 ) then
21                 call qmdreadd
22             end if
23         *-----

```

```

24      *      write one event on file
25  -----
26      if( ifout .gt. 0 ) then
27          call qmdwrite
28      end if
29  -----
30      *      one event weight and judgement of inelastic reaction
31      *      and summary of QMD
32  -----
33          call qmdjudge
34          call qmdsum
35  -----
36      *      SDM (statistical decay) of clusters and summary of SDM
37  -----
38      if( issdm .gt. 0 ) then
39          do iss = 1, issdm
40              call sdment
41              call sdmsum
42          end do
43      end if
44  -----
45      5000    continue
46  -----
47      *      Final Summary
48  -----
49          call finsumry
50  -----
51      return
52  end

```

3.4.2. qmdevent (subroutine)

QMDによる1イベントシミュレーションをコントロールするサブルーティンで、1イベントの初期化、時間発展、1イベントのサマリーからなる。

1イベントの初期化では、衝突係数の決定、基底状態の決定、初期ブースト、サマリーの初期化等からなり、次のようなサブルーティン、エントリーを呼ぶ。

```

ground rboost
sm_evnt sm_timq sm_timc sm_timd

```

時間発展の部分は、時間ステップのDOループからなり、その中では、時間積分、パイオン崩壊、衝突項、パイオン吸収、時間ステップのサマリーの以下のようなサブルーティン、エントリーが呼ばれる。

```

rk12 rkg4 pionem relcol pionab
sm_coln sm_timq sm_timc sm_timd

```

1イベントのサマリーは、最終のパイオン崩壊、クラスター判定からなり、以下のようなサブルーティンを呼ぶ。

```
fpidecay cldist
```

subroutine qmdevent リスト

表 21. subroutine qmdevent リスト

```

1  -----
2  *      event number, initial time, and initial random seed
3  *      total collision flag
4  -----
5          ntnow = 0
6          iseed1 = iseed
7          iccoll = 0
8  -----
9  *      impact parameter and multi run control
10 -----
11         if( ibch .eq. 0 ) then
12             call howmany(1)
13             b = sqrt( max( 0.0,
14                 & bmin**2 + ( bmax**2 - bmin**2 ) * rn() ) )
15         else if( ibch .eq. 1 ) then
16             ibsf = ibsf + 1
17             if( ibsf .gt. ibin ) then
18                 call howmany(1)
19                 ibsf = 1
20             end if
21             b = bval(ibsf) - bdef / 2.0 + bdef * rn()
22         end if
23  -----
24  *      make ground state and boost
25  -----
26             call cputime(4)
27             call ground
28             call rboost
29             call cputime(4)
30  -----
31  *      Summary for the initial time
32  -----
33             call cputime(5)
34             call sm_evnt
35             call sm_timp
36             call sm_timc
37             call sm_timd
38             call cputime(5)
39  -----
40  *      Time Evolution
41  -----
42         do 100 nt = 1, ntmax
43             ntnow = nt
44  -----
45  *      time integration
46  -----
47             call cputime(2)
48             if( irkg .eq. 2 ) then
49                 call rk12(dt)
50             else if( irkg .eq. 4 ) then
51                 call rkg4(dt)
52             end if
53             call cputime(2)
54  -----
55  *      collision term
56  -----

```

表 21-2. subroutine qmdevent リスト

```

57         if( icol .eq. 1 ) then
58             call cputime(3)
59             call pionem(dt)
60             call relcol
61             call pionab
62             call sm_coln
63             call cputime(3)
64         end if
65 -----
66 *           summary at the certain time interval
67 -----
68         call cputime(5)
69         if( ( ntnow / nfreq ) * nfreq .eq. ntnow ) then
70             call sm_timq
71         end if
72         if( ( ntnow / nfrec ) * nfrec .eq. ntnow ) then
73             call sm_timc
74         end if
75         if( ( ntnow / nfred ) * nfred .eq. ntnow ) then
76             call sm_timd
77         end if
78         call cputime(5)
79 -----
80     100    continue
81 -----
82 *           Final pion decay and Final analysis of clusters
83 -----
84         call cputime(6)
85         call fpidecay
86         call cldist
87         call cputime(6)
88 -----
89     return
90     end

```

3.5. その他のサブルーティン

ここでは、まず、ユーザーの書くルーティンを呼ぶサマリーのサブルーティン、qmddsum, sdmsum, finsumry を解説する。次に、生成粒子の断面積の集計をするためのサブルーティンとそのエントリー、jbook1, jfill1, jscale1, jprint1, jftot, jfddx を解説する。

3.5.1. qmdsum (subroutine)

このサブルーティンでは、QMD の 1 イベントの終了時のサマリーをコントロールする。現在含まれているのは、QMD 終了時の生成核種の質量、荷電分布とユーザープログラムのコールである。呼ばれるサブルーティン、エントリーは、

```
sm_mass anal_qmd .
```

subroutine qmdsum リスト

表 22. subroutine qmdsum リスト

```

1      *-----
2          call cputime(5)
3      *-----
4      *      do loop for the clusters and particles of QMD
5      *-----
6          do i = 1, nclst
7              ik = iclust(i)
8              jj = jclust(0,i)
9              iz = jclust(1,i)
10             in = jclust(2,i)
11             id = jclust(3,i)
12             is = jclust(4,i)
13             ic = jclust(5,i)
14             iq = jclust(6,i)
15             im = jclust(7,i)
16             bi = qclust(0,i)
17             px = qclust(1,i)
18             py = qclust(2,i)
19             pz = qclust(3,i)
20             et = qclust(4,i)
21             rm = qclust(5,i)
22             ex = qclust(6,i)
23      *-----
24      *      store the mass distribution of the clusters
25      *      after QMD calculation only for inelastic reaction
26      *-----
27      if( kelst .eq. 1 .and. ik .le. 2 ) then
28          call sm_mass(1,iz,in,qmdfac)
29      end if
30      *-----
31      *      call user subroutine for summary of QMD
32      *-----
33          call anal_qmd(ik,jj,iz,in,id,is,ic,iq,im,
34          &                  bi,px,py,pz,et,rm,ex)
35      *-----
36      end do
37      *-----
38          call cputime(5)
39      *-----
40      return
41      end

```

3.5.2. sdmsum (subroutine)

このサブルーティンでは、SDM の 1 イベントの終了時のサマリーをコントロールする。現在含まれているのは、SDM 終了時の生成核種の質量、荷電分布とユーザープログラムのコールである。呼ばれるサブルーティン、エントリーは、

```
sm_mass anal_sdm .
```

subroutine sdmsum リスト

表 23. subroutine sdmsum リスト

```

1      *-----*
2          call cputime(5)
3      *-----*
4      *      do loop for the clusters and particles of SDM
5      *-----*
6          do i = 1, nclsts
7              ik = iclsts(i)
8              jj = jclsts(0,i)
9              iz = jclsts(1,i)
10             in = jclsts(2,i)
11             id = jclsts(3,i)
12             is = jclsts(4,i)
13             ic = jclsts(5,i)
14             iq = jclsts(6,i)
15             im = jclsts(7,i)
16             bi = qclsts(0,i)
17             px = qclsts(1,i)
18             py = qclsts(2,i)
19             pz = qclsts(3,i)
20             et = qclsts(4,i)
21             rm = qclsts(5,i)
22             ex = qclsts(6,i)
23      *-----*
24      *      store the mass distribution of the clusters
25      *      after SDM calculation
26      *-----*
27      if( kelst .eq. 1 .and. ik .le. 2 ) then
28          call sm_mass(2,iz,in, qmdfac * sdmfac )
29      end if
30      *-----*
31      *      call user subroutine for summary of SDM
32      *-----*
33      call anal_sdm(ik,jj,iz,in,id,is,ic,iq,im,
34      &                  bi,px,py,pz,et,rm,ex)
35      *-----*
36      end do
37      *-----*
38      call cputime(5)
39      *-----*
40      return
41      end

```

3.5.3. finsumry (subroutine)

JQMD全体の最終的なサマリーをコントロールするサブルーティンで、次のようなサブルーティン、エントリーを呼ぶ。

```
sm_norm  sm_grdo  sm_coll  sm_mdis  anal_fin  sm_hedo
sm_cpuo  sm_sumo  sm_clse
```

subroutine finsumry リスト

表 24. subroutine finsumry リスト

```

1      -----
2      *      normal summary
3      -----
4          call cputime(5)
5          call sm_norm
6          call sm_grdo
7          call sm_coll
8          call sm_mdis(30)
9          call sm_mdis(31)
10         call sm_mdis(32)
11         call cputime(5)
12     -----
13     *      Final Total CPU time, Date and Time
14     -----
15         call datetime(iyer1,imoni,iday1,ihori,imin1,isecl)
16         call cputime(1)
17     -----
18     *      final summary
19     -----
20         call howmany(1)
21         call sm_hedo
22         call sm_cpuo
23         call sm_sumo
24         call sm_clse
25     -----
26     *      call user subroutine for summary
27     -----
28         call anal_fin
29     -----
30     return
31     end

```

3.5.4. jbook1 (subroutine)

このサブルーティンは、1次元ヒストグラム出力の初期化を行うルーティン。
引数の意味は次のようになっている。

subroutine jbook1 リスト

表 25. subroutine jbook1 リスト

```
*****
*          subroutine jbook1(id,title,
*                            tfac,ilog,inum,ifac,nx,xmin,xmax,nw,wi,wt)
*
*          Variables:
*              id      : histogram id =< 100
*              title   : title of the histgram ( character )
*              tfac    : total factor
*              ilog    : 0=> x-linear bin, 1=> x-log bin
*              inum   : =0 ; without event number
*                      =1 ; with # event number
*                      =2 ; with 1/sqrt(#)
*                      =3 ; with Y/sqrt(#)
*              ifac   : =0 ; without implicit scaling factor
*                      =1 ; with scaling factor 1/dx 1/dw
*              nx     : number of x-bins
*              xmin   : minimum x-value
*              xmax   : maximum x-value
*              nw     : number of windows =< 10, or 20
*              wi     : edge values of window, wi(20)
*              wt     : edge values of window, wt(20)
*
*****
```

また、このjbook1のエントリーとして、jfill1は、1次元ヒストグラムへの入力を行うルーティン、jscale1は、1次元ヒストグラムのデータのスケーリングを行うルーティン、jprint1は、1次元ヒストグラムのデータをファイルに書き出すルーティン、jftotは、放出粒子の全断面積を返すルーティン、jfddxは、放出粒子のひとつの窓の微分断面積を返すルーティンである。

これらの実際の使用方法は、次章の実行例のところで示す。

4. 実行例

4.1. 実行例 1

まず、ユーザールーティンが何も定義されていない表 17 のメインルーティンで、走らせた結果を示す。

次のインプットデータで、このメインルーティンを走らせる。

インプットデータ 1-1

表 26. インプットデータ 1-1

```
proj = 40Ca      * projectile
targ = 208Pb    * target
event = 10       * iprun : total number of simulation run
tstep = 90       * ntmax : total number of time step.
frame = cm        * insys : cm, nn, lab, collider
win = 800mev     * incident energy
bmin = 4.5       * bmin : minimum impact parameter (fm).
bmax = 4.5       * bmax : maximum impact parameter (fm).
dt   = 1.0        * dt   : time step size(fm/c)
```

出力結果として、以下の 6 つのファイルが作られる。

```
jqmd-all0.ang  jqmd-col0.ang  jqmd-head.ang
jqmd-mqmd.ang  jqmd-msdm.ang  jqmd-rt00.ang
```

まず、jqmd-all0.ang ファイルには、次のような出力が得られる。

jqmd-all0.ang ファイル 1

表 27. jqmd-all0.ang ファイル 1

```

1
2           JJJ      QQQQQ      MMM      MMM      DDDDDDD
3           JJJ      QQQQQQQQQQ   MMMMM   MMMMM   DDDDDDDDD
4           JJJ      QQQ      QQQ  MMMMM  MMMMM   DDD      DDD
5           JJJ      QQQ      QQQ  MMM  MMM  MMM   DDD      DDD
6           JJJ      QQQ      QQQ  MMM  M  MMM   DDD      DDD
7           JJJ      QQQ      QQQ  MMM      MMM   DDD      DDD
8           JJJ      QQQ  QQQ  QQQ  MMM      MMM   DDD      DDD
9           JJJ      JJJ      QQQQQQQQQQ  MMM      MMM   DDD      DDD
10          JJJJJJJJJ    QQQQQQ  MMM      MMM   DDDDDDDDD
11          JJJJ      QQQ  MMM      MMM   DDDDDDDDD
12
13
14          Jaeri Quantum Molecular Dynamics
15          for Nuclear Reactions
16
17          Version = 1.00
18
19          made by
20
21          Japan Atomic Energy Research Institute
22
23          Last Revised 1998 12 03
24
25
26          *----- Input Echo -----*
27
28          proj      =  40Ca
29          targ      =  208Pb
30          event     =  1000
31          tstep      =  90
32          frame     =  cm
33          win       =  800mev
34          bmin      =  0.0
35          bmax      =  4.5
36          dt        =  1.0
37
38          *----- Input Echo -----*
39
40
41          ****
42          *
43          *      Reaction :
44          *
45          *      ^{40}Ca      on  ^{208}Pb
46          *
47          *      mass 40( 20, 20 ) ==> mass 208( 82,126 )
48          *
49          *      Beam energy =  800.00 A MeV
50          *      Beam momentum = 1463.31 A MeV/c
51          *      CM energy =  364.58 MeV
52          *
53          *      Calculated in C.M. frame :
54          *
55          *          Beam      Target
56          *          Velocity / c :  0.7626409  -.2211289

```

表 27-2. jqmd-all0.ang ファイル 1

```

57      *      Gamma factor :    1.54602      1.02538      *
58      *      p_z (MeV/c) :   1106.310     -212.752      *
59      *      r_z (fm)    :    -10.887      2.094      *
60      *
61      *      Impact Parameter Range :
62      *
63      *          0.000 < b < 4.500 (fm)      *
64      *
65      *      Time Evolution :
66      *
67      *          Number of Events =      1000      *
68      *          Number of Time Step =      90      *
69      *          Time step (fm/c) =      1.000      *
70      *          Seed of random number = 12345      *
71      *
72      *      Date :
73      *
74      *          Calculated at 1999-03-30 16:17:39      *
75      *
76      ****
77

```

次に、反応の時間発展が記される。その一部だけを下に示す。

jqmd-all0.ang ファイル 2

表 28. jqmd-all0.ang ファイル 2

```

1      *-----*
2      Event = 1th   b = 2.005 (fm),  iseed = 12345
3      *-----*
4
5
6
7
8
9          2 1
10         1      2 2 2 3 1
11        2 6 1 1      3 5 6 2 4 3
12        4 3 3 1      1 4 7 3 3 8 5 3
13        4 1 5 2      1 2 4 4 5 4 2 4 1 1
14        2 3 1       1 1 4 3 5 4 3 5 3
15          1 2 3 5 2 9 6 3
16          1 3 7 6 1 2 2 4
17          2 2 4 3 4 4
18          1 3      1
19
20
21
22
23
24 ** T = 0.00 (fm/c), Edif = 0.0000 (MeV/A), [ H, R, P ] (248, 0, 0)
25
26     1 [208] ( 82,126, 0 ) { 0.000 }
27     2 [ 40 ] ( 20, 20, 0 ) { 0.000 }
28     0 [ 1 ] ( 0, 0, 0 ) Free Particles
29
30
31
32          1
33         1 2 1
34         3 2 1 1
35         5 7 1 1 1 2 2 1
36         11 9 6 6 1 0 6 4 1
37         2 6 7 8 3 1 6 2 3
38         1 12 4 4 3 5 4 2
39         1 1 4 9 8 7 5 4
40         1 3 2 1 4 3 1 1 2
41         2 1 5 6 2 4
42         1 1 2 1
43
44
45
46
47
48
49 ** T = 10.00 (fm/c), Edif = 0.0094 (MeV/A), [ H, R, P ] (239, 9, 1)
50
51     1 [248] ( 98,141, 16 ) { 85.472 }
52     1 [ 1 ] ( 0, 0, 0, 1 ) Free Particles
53
54
55
56

```

表 28-2. jqmd-all0.ang ファイル 2

```

57
58
59
60          1      1
61      1   1 2   2 1
62      2   2   3 6 6
63      2   4 6 412 6
64      2   1 3 3 6 9 3 1
65      1 1   2 4 4 9 3 6 1
66      1 3 3 6 7 9 6 4 1
67      1 1 1 2 712 4 3
68      1 1 1 8 7 7 2   1
69      3 6 4 4 1   1
70          2 1 4 3 1
71
72
73
74
75
76 ** T = 20.00 (fm/c), Edif = 0.0073 (MeV/A), [ I, R, P ] (231, 17, 2)
77
78     1 [242] ( 96,129, 30 ) { 70.119 }
79     8 [ 1 ] ( 4, 2, 0, 2 ) Free Particles
80
81
82
83          1 1
84      1          2 1
85      1   1   1 1 2 1 1 1   1
86      1   1 3 1 3 1   2   1
87      1       2   4 2 3 4 4
88      1 2       2 3 1   2 4 2 2
89      1 3 1 2 2 2 1 3 4   3 1       1
90      2 1       3 1 3 3 3 1 5
91      2 3 3 4 2 5 1 4 5 1 1
92      1 5 6 4 8 4 5 3 1 1 1 2
93      1 1 1 2 4       1 3 2
94      3 7 1 5 4 3 2 1 1
95      4 2 3       2 1 1   1
96      1   1 1 2 2   1       1   1
97          1
98
99
100
101
102 ** T = 30.00 (fm/c), Edif =-0.0041 (MeV/A), [ I, R, P ] (243, 5, 10)
103
104     1 [221] ( 85,131, 10 ) { 59.685 }
105     2 [ 3 ] ( 1, 2, 0 ) { 11.169 }
106     3 [ 2 ] ( 2, 0, 0 ) { 0.000 }
107     32 [ 1 ] ( 17, 5, 0, 10 ) Free Particles

```

次に、計算時間のサマリーと他のグラフの情報が書かれる。

jqmd-all0.ang ファイル 3

表 29. jqmd-all0.ang ファイル 3

```

1      ****
2      * Qmd Calculation is Finished Normally *
3      -----
4      * Starting time = 1999-03-30 16:17:39 *
5      * Ending time = 1999-03-30 20:15:40 *
6      -----
7      * Elapse time = 3 h 58 m 1.91 sec *
8      * TOTAL CPU =          14266.48 sec *
9      -----
10     * Mean Field = 53 %    7657.86 sec *
11     * Collision = 41 %    5905.82 sec *
12     * Ground State = 4 %    591.73 sec *
13     * Summary = 0 %    100.40 sec *
14     * Final Decays = 0 %    7.95 sec *
15     * Others = 2 %    2.73 sec *
16     ****
17
18     -----
19     * Header, Input Echo and Summary
20     -----
21     infl: {jqmd-head.ang}
22     -----
23     * Collision History
24     -----
25     newpage:
26     infl: {jqmd-col0.ang}
27     -----
28     * Time Evolution of R-Space
29     -----
30     newpage:
31     infl: {jqmd-rt00.ang}
32     -----
33     * Mass Distribution of QMD
34     -----
35     newpage:
36     infl: {jqmd-mqmd.ang}
37     -----
38     * Mass Distribution of SDM
39     -----
40     newpage:
41     infl: {jqmd-msdm.ang}
```

この jqmd-all0.ang ファイルを ps ファイルジェネレーター AnGeL2¹にかけると、全体のアウトプットの eps ファイルが得られる。全体で 8 ページで、まず全体像は次のようにになる。左上から右に向かって、1, 2, 3, 4 ページ、左下から右に向かって、5, 6, 7, 8 ページである。

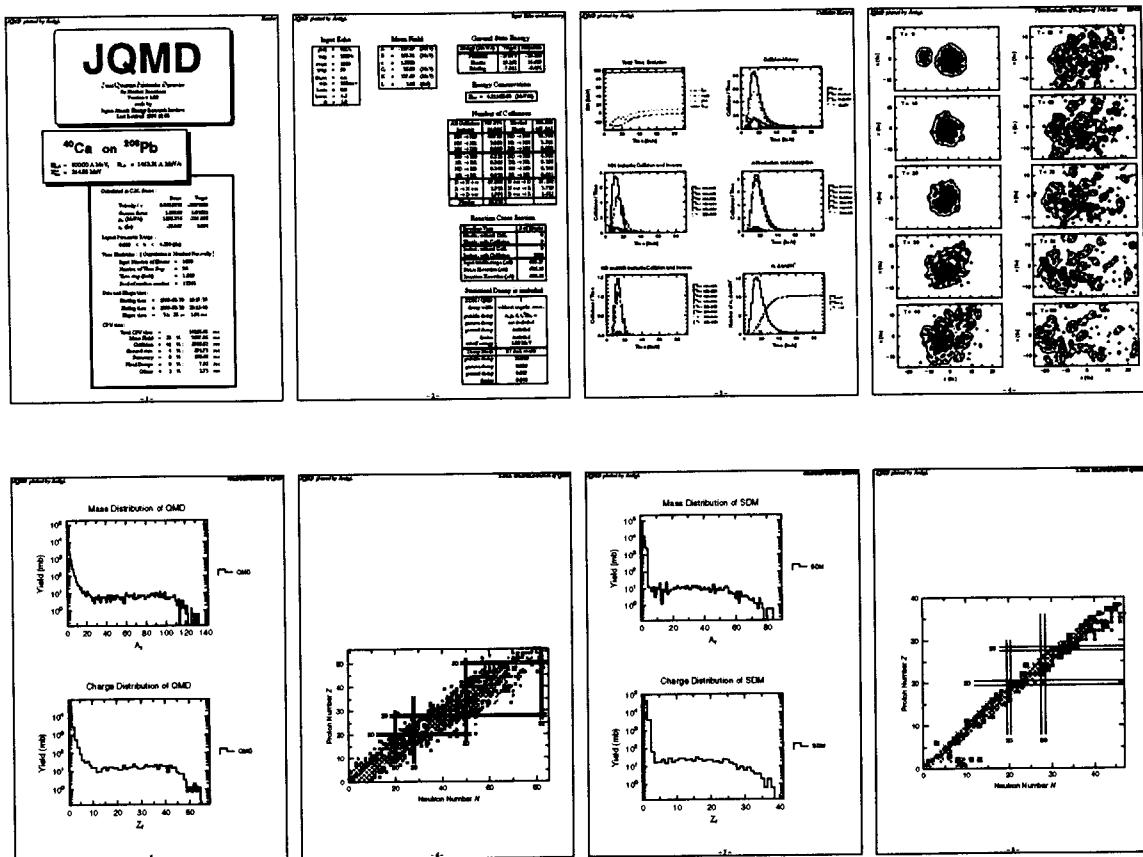


図 5. 出力 1-0

次に、これらを 1 ページごとに示す。

¹テキストファイルからポストスクリプトファイルを作成するプログラム。近日中に公開される予定。試作版を利用されたい方は仁井田 (niita@hadron03.tokai.jaeri.go.jp) まで連絡してください。

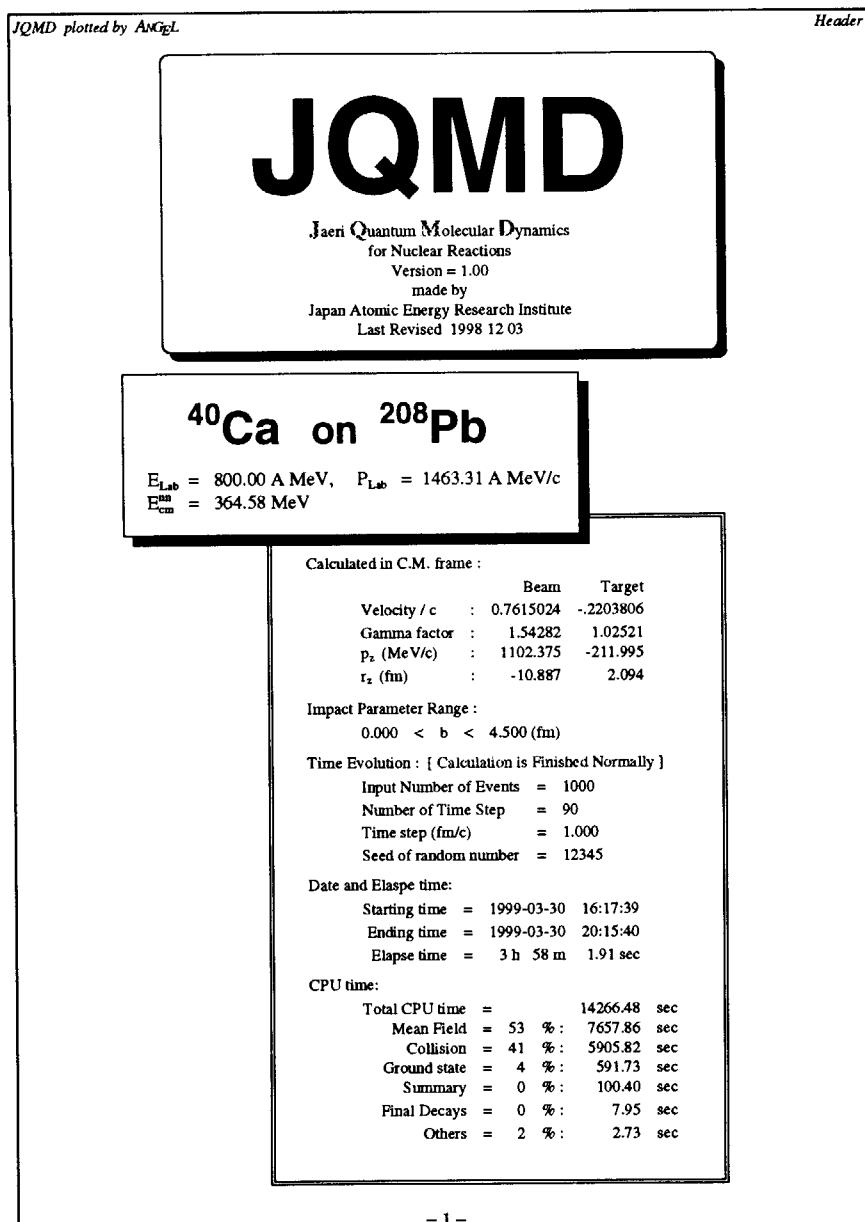


図 6. 出力 1-1

まず 1 ページ目には、JQMD のロゴと反応のシステム、エネルギー、衝突係数、イベント数、タイムステップ、乱数の初期値、計算時間のサマリーなどが記される。

<i>JQMD plotted by ANGEL</i>		<i>Input Echo and Summary</i>																																																																					
Input Echo		Mean Field																																																																					
<pre> proj = 40Ca targ = 208Pb event = 1000 tstep = 90 frame = cm win = 800mev bmin = 0.0 bmax = 4.5 dt = 1.0 </pre>		<table border="1"> <tr><td>A</td><td>= -219.39 (MeV)</td></tr> <tr><td>B</td><td>= 165.31 (MeV)</td></tr> <tr><td>τ</td><td>= 1.3333</td></tr> <tr><td>C₁</td><td>= 25.00 (MeV)</td></tr> <tr><td>K</td><td>= 237.69 (MeV)</td></tr> <tr><td>L</td><td>= 2.00 (fm²)</td></tr> </table>		A	= -219.39 (MeV)	B	= 165.31 (MeV)	τ	= 1.3333	C ₁	= 25.00 (MeV)	K	= 237.69 (MeV)	L	= 2.00 (fm ²)																																																								
A	= -219.39 (MeV)																																																																						
B	= 165.31 (MeV)																																																																						
τ	= 1.3333																																																																						
C ₁	= 25.00 (MeV)																																																																						
K	= 237.69 (MeV)																																																																						
L	= 2.00 (fm ²)																																																																						
		Ground State Energy																																																																					
		<table border="1"> <thead> <tr><th>Energy (MeV/A)</th><th>Target</th><th>Projectile</th></tr> </thead> <tbody> <tr><td>Potential</td><td>-27.073</td><td>-23.180</td></tr> <tr><td>Kinetic</td><td>19.262</td><td>14.689</td></tr> <tr><td>Binding</td><td>-7.811</td><td>-8.491</td></tr> </tbody> </table>		Energy (MeV/A)	Target	Projectile	Potential	-27.073	-23.180	Kinetic	19.262	14.689	Binding	-7.811	-8.491																																																								
Energy (MeV/A)	Target	Projectile																																																																					
Potential	-27.073	-23.180																																																																					
Kinetic	19.262	14.689																																																																					
Binding	-7.811	-8.491																																																																					
		Energy Conservation																																																																					
		$E_{\text{diff}} = 4.2114 \times 10^{-3} (\text{MeV/A})$																																																																					
		Number of Collisions																																																																					
		<table border="1"> <tr><td>All Collisions</td><td>707.874</td><td>Blocked</td><td>148.963</td></tr> <tr><td>Inelastic</td><td>91.096</td><td>Elastic</td><td>467.815</td></tr> <tr><td> </td><td> </td><td> </td><td> </td></tr> <tr><td>NN → ND</td><td>40.789</td><td>ND → NN</td><td>31.743</td></tr> <tr><td>NN → NR</td><td>3.083</td><td>NR → NN</td><td>3.518</td></tr> <tr><td>NN → DD</td><td>0.000</td><td>DD → NN</td><td>0.000</td></tr> <tr><td> </td><td> </td><td> </td><td> </td></tr> <tr><td>ND → DD</td><td>6.216</td><td>DD → ND</td><td>4.986</td></tr> <tr><td>NR → DR</td><td>0.366</td><td>DR → NR</td><td>0.266</td></tr> <tr><td>ND → RD</td><td>0.348</td><td>RD → ND</td><td>0.348</td></tr> <tr><td>NR → RR</td><td>0.020</td><td>RR → NR</td><td>0.011</td></tr> <tr><td> </td><td> </td><td> </td><td> </td></tr> <tr><td>D → N + π</td><td>67.896</td><td>N + π → D</td><td>57.142</td></tr> <tr><td>R → N + π</td><td>2.923</td><td>N + π → R</td><td>3.729</td></tr> <tr><td>R → D + π</td><td>1.991</td><td>D + π → R</td><td>1.611</td></tr> <tr><td> </td><td> </td><td> </td><td> </td></tr> <tr><td>Final π</td><td>10.328</td><td> </td><td> </td></tr> </table>		All Collisions	707.874	Blocked	148.963	Inelastic	91.096	Elastic	467.815					NN → ND	40.789	ND → NN	31.743	NN → NR	3.083	NR → NN	3.518	NN → DD	0.000	DD → NN	0.000					ND → DD	6.216	DD → ND	4.986	NR → DR	0.366	DR → NR	0.266	ND → RD	0.348	RD → ND	0.348	NR → RR	0.020	RR → NR	0.011					D → N + π	67.896	N + π → D	57.142	R → N + π	2.923	N + π → R	3.729	R → D + π	1.991	D + π → R	1.611					Final π	10.328		
All Collisions	707.874	Blocked	148.963																																																																				
Inelastic	91.096	Elastic	467.815																																																																				
NN → ND	40.789	ND → NN	31.743																																																																				
NN → NR	3.083	NR → NN	3.518																																																																				
NN → DD	0.000	DD → NN	0.000																																																																				
ND → DD	6.216	DD → ND	4.986																																																																				
NR → DR	0.366	DR → NR	0.266																																																																				
ND → RD	0.348	RD → ND	0.348																																																																				
NR → RR	0.020	RR → NR	0.011																																																																				
D → N + π	67.896	N + π → D	57.142																																																																				
R → N + π	2.923	N + π → R	3.729																																																																				
R → D + π	1.991	D + π → R	1.611																																																																				
Final π	10.328																																																																						
		Reaction Cross Section																																																																					
		<table border="1"> <tr><td>Reaction Type</td><td># of Events</td></tr> <tr><td>Elastic. without Coll.</td><td>0</td></tr> <tr><td>Elastic. with Collision</td><td>0</td></tr> <tr><td>Inelast. without Coll.</td><td>0</td></tr> <tr><td>Inelast. with Collision</td><td>1000</td></tr> <tr><td> </td><td> </td></tr> <tr><td>Input total b-range (mb)</td><td>636.17</td></tr> <tr><td>Beam X-section (mb)</td><td>636.18</td></tr> <tr><td>Reaction X-section (mb)</td><td>636.18</td></tr> </table>		Reaction Type	# of Events	Elastic. without Coll.	0	Elastic. with Collision	0	Inelast. without Coll.	0	Inelast. with Collision	1000			Input total b-range (mb)	636.17	Beam X-section (mb)	636.18	Reaction X-section (mb)	636.18																																																		
Reaction Type	# of Events																																																																						
Elastic. without Coll.	0																																																																						
Elastic. with Collision	0																																																																						
Inelast. without Coll.	0																																																																						
Inelast. with Collision	1000																																																																						
Input total b-range (mb)	636.17																																																																						
Beam X-section (mb)	636.18																																																																						
Reaction X-section (mb)	636.18																																																																						
		Statistical Decay is included																																																																					
		<table border="1"> <tr><td>SDM / QMD</td><td>1</td></tr> <tr><td>decay width</td><td>without angular mom.</td></tr> <tr><td>particle decay</td><td>n, p, d, t, ^3He, α</td></tr> <tr><td>gamma decay</td><td>not included</td></tr> <tr><td>ground decay</td><td>included</td></tr> <tr><td>fission</td><td>included</td></tr> <tr><td>cutoff energy</td><td>1.00 MeV</td></tr> <tr><td> </td><td> </td></tr> <tr><td>Decay Mode</td><td># / inel. events</td></tr> <tr><td>particle decay</td><td>35.030</td></tr> <tr><td>gamma decay</td><td>0.000</td></tr> <tr><td>ground decay</td><td>0.827</td></tr> <tr><td>fission</td><td>0.040</td></tr> </table>		SDM / QMD	1	decay width	without angular mom.	particle decay	n, p, d, t, ^3He , α	gamma decay	not included	ground decay	included	fission	included	cutoff energy	1.00 MeV			Decay Mode	# / inel. events	particle decay	35.030	gamma decay	0.000	ground decay	0.827	fission	0.040																																										
SDM / QMD	1																																																																						
decay width	without angular mom.																																																																						
particle decay	n, p, d, t, ^3He , α																																																																						
gamma decay	not included																																																																						
ground decay	included																																																																						
fission	included																																																																						
cutoff energy	1.00 MeV																																																																						
Decay Mode	# / inel. events																																																																						
particle decay	35.030																																																																						
gamma decay	0.000																																																																						
ground decay	0.827																																																																						
fission	0.040																																																																						

- 2 -

図 7. 出力 1-2

2ページ目には、インプットパラメーター、相互作用のパラメーター、基底状態のエネルギー、全体のエネルギー保存、各粒子粒子衝突の個数のサマリー、反応断面積、含まれているのなら統計崩壊のサマリーが含まれる。

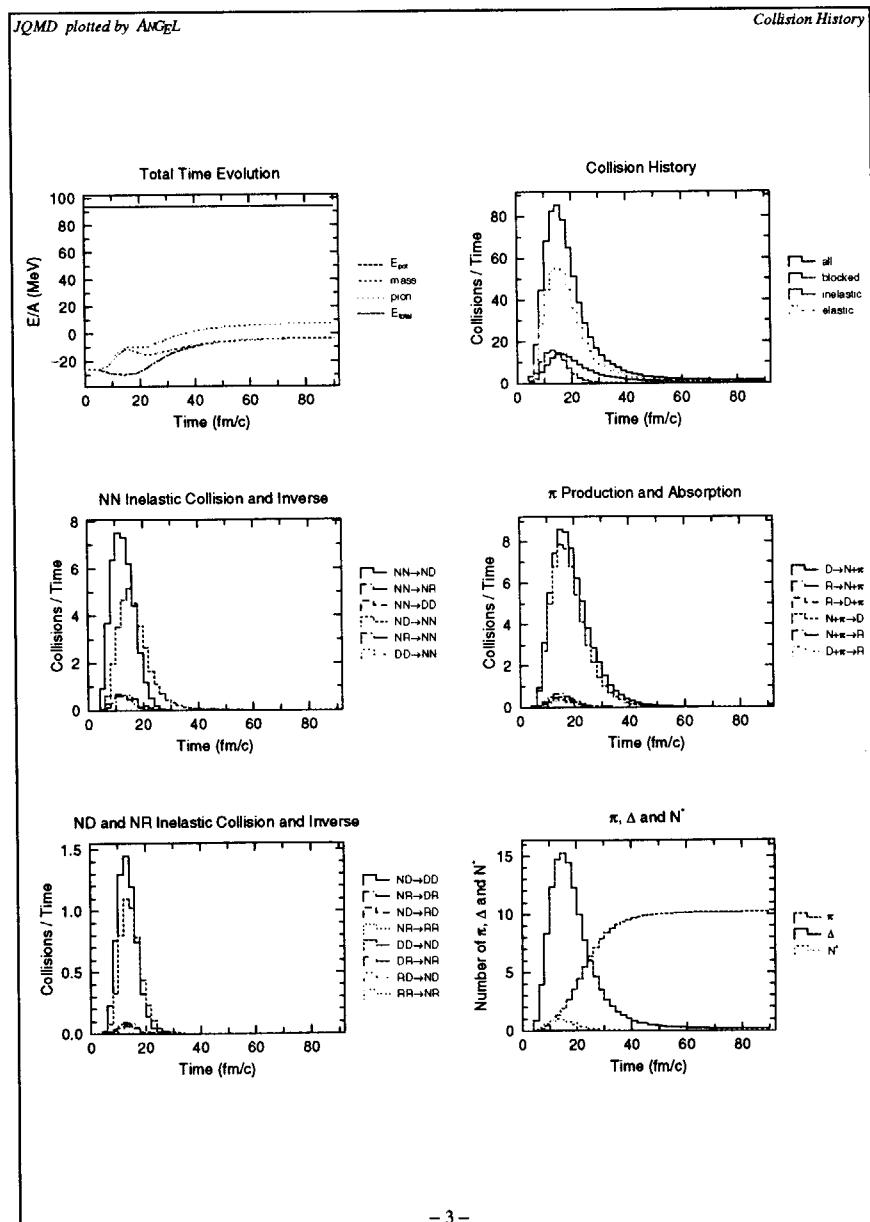


図 8. 出力 1-3

3 ページ目には、系の時間発展、各粒子粒子衝突の時間発展のグラフが示される。

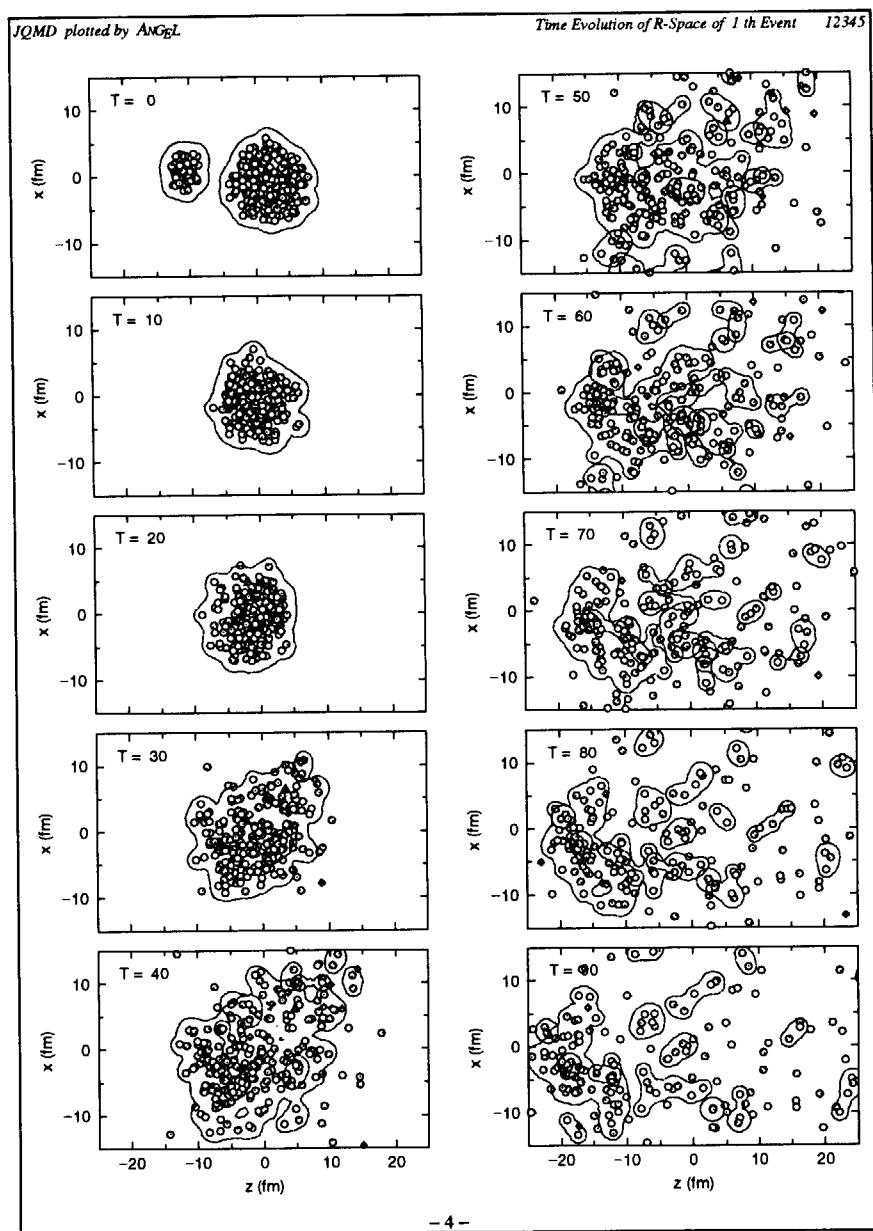


図 9. 出力 1-4

4 ページ目には、系の空間座標での時間発展がグラフで示される。

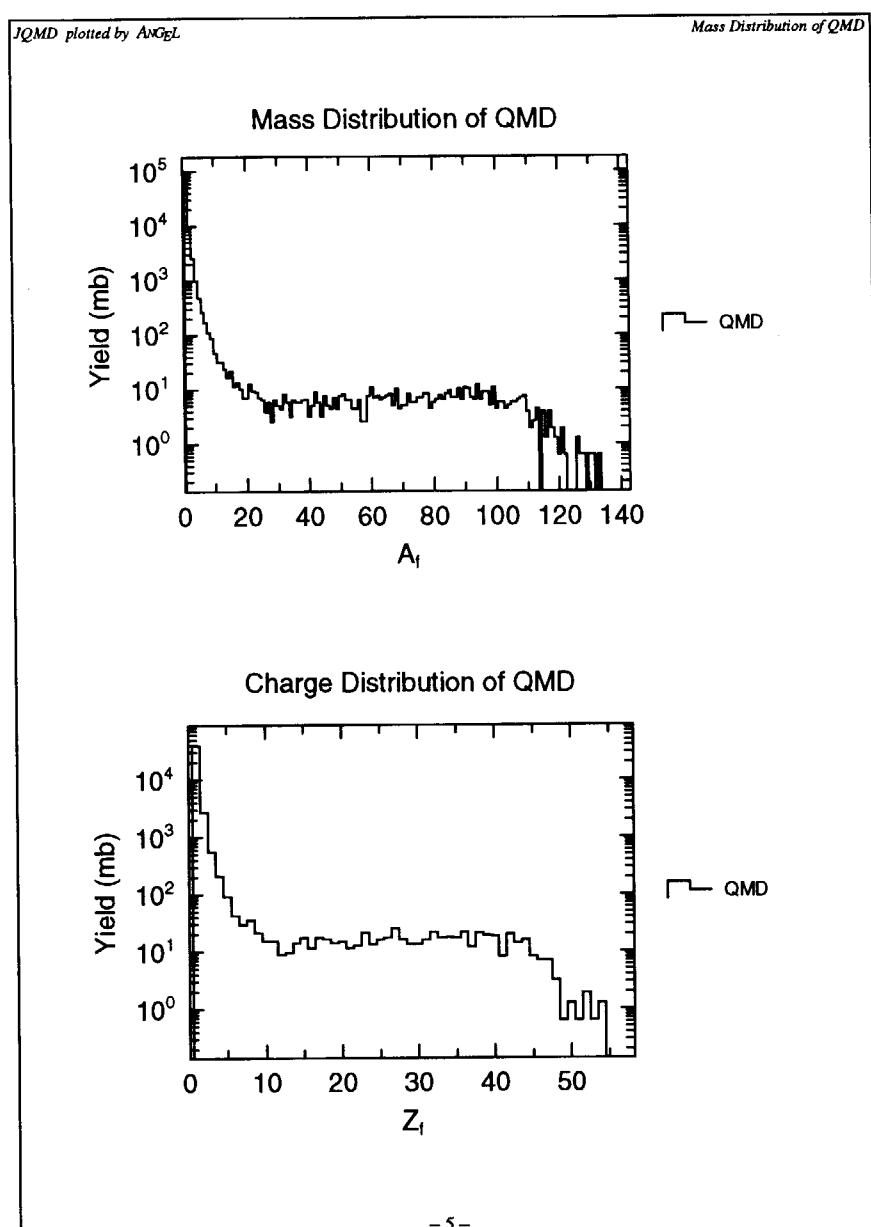


図 10. 出力 1-5

5 ページ目には、QMD 計算後の質量分布と電荷分布がヒストグラフで示される。

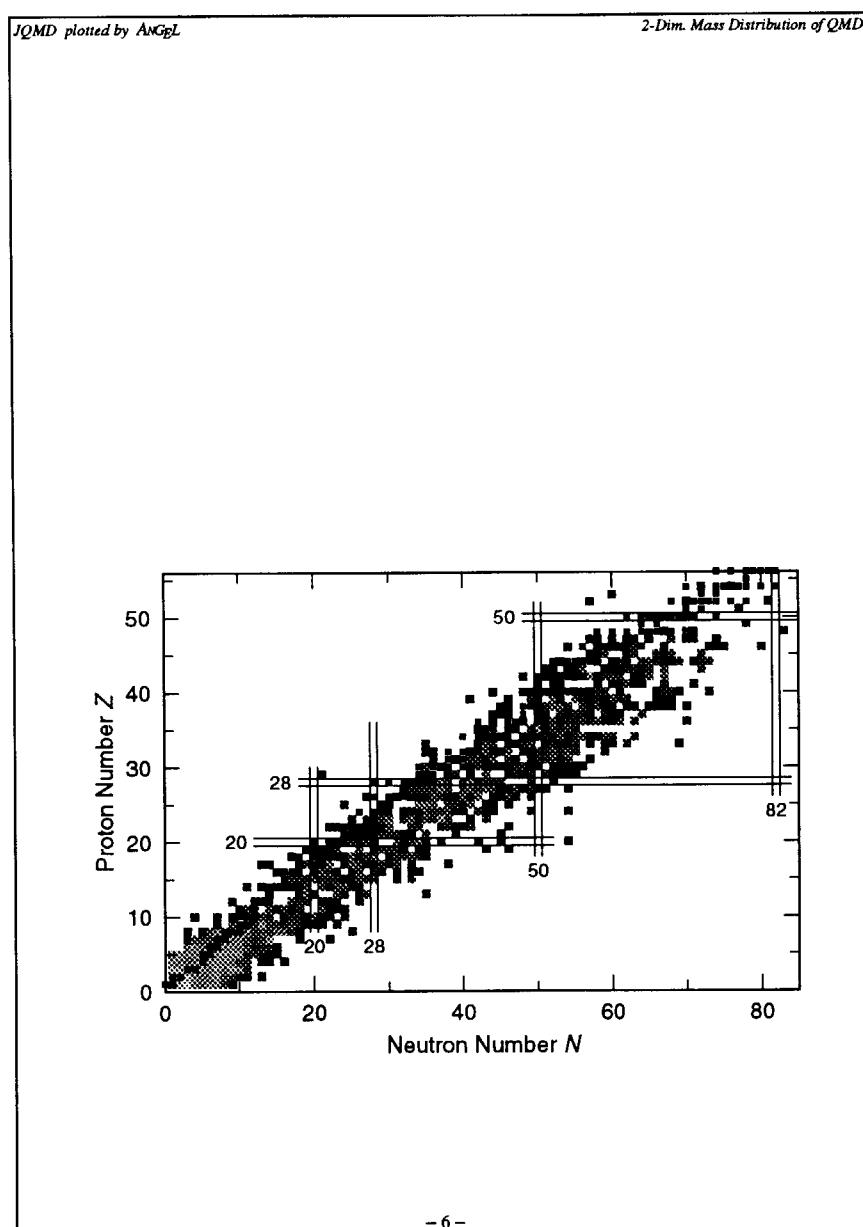


図 11. 出力 1-6

6 ページ目には、QMD 計算後の質量分布と電荷分布がクラスター プロットで示される。

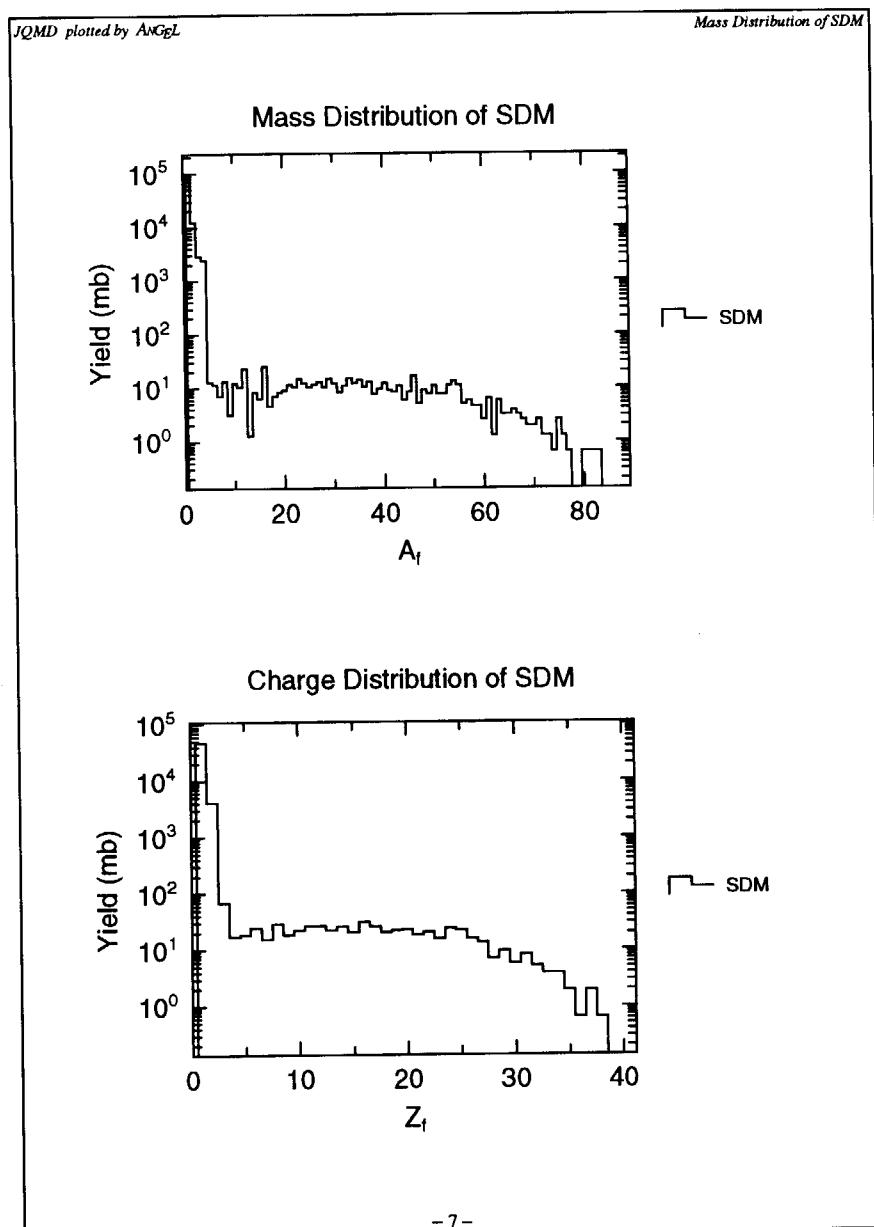


図 12. 出力 1-7

7 ページ目には、SDM 計算後の質量分布と電荷分布がヒストグラフで示される。

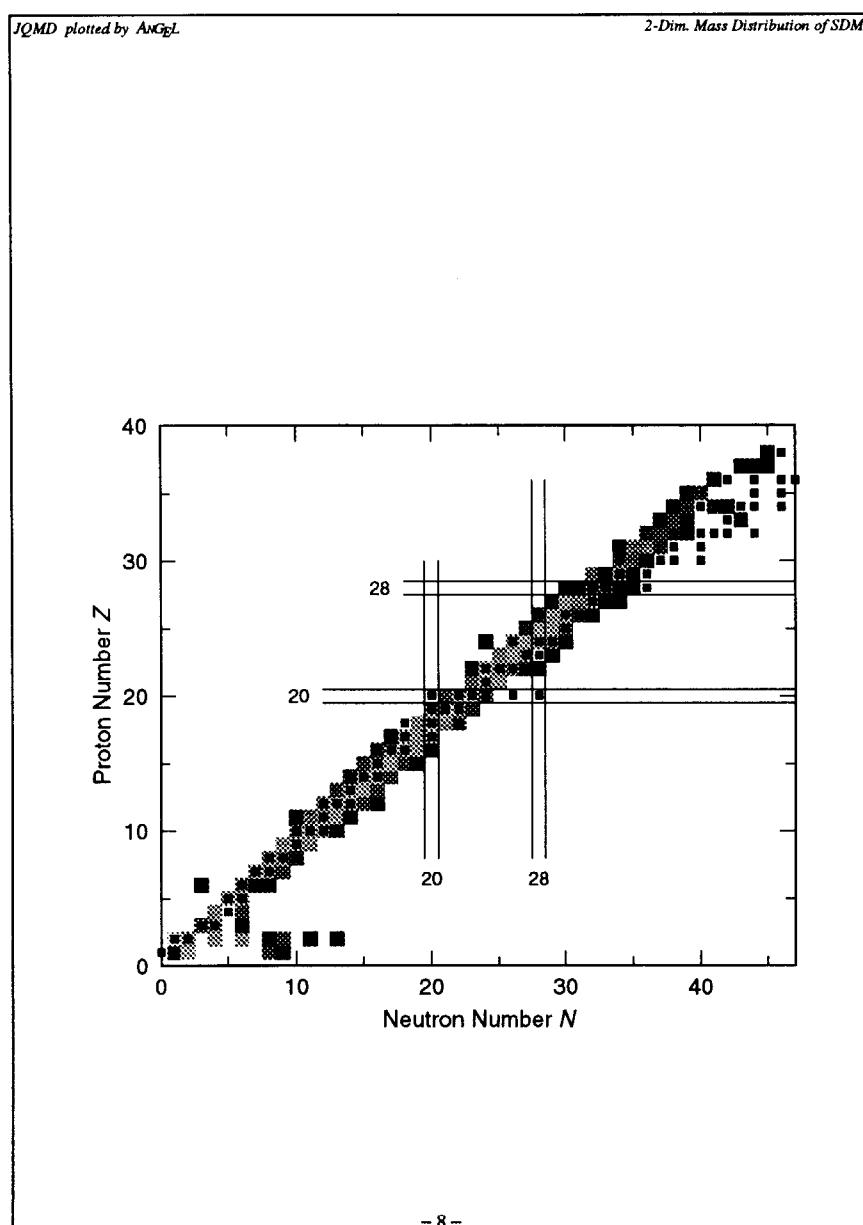


図 13. 出力 1-8

8 ページ目には、SDM 計算後の質量分布と電荷分布がクラスター プロットで示される。

4.2. 核反応の出力

前記の4ページの出力は、デフォルトの mstq1(154)=5 の出力であるが、この mstq1(154) のインプットパラメーターによって以下のような出力が得られる。

mstq1(154)

表 30. mstq1(154)

```

1   mstq1(154) : [jdsp(1)-jdsp(13)] (D=5) display R and P distribution
2
3   0 -> Mon
4       1 -> Snapshot of R-space in Threee Directions
5           for Ground state.
6               file name is fname(4) + '-gr00.ang'
7
8   2 -> Snapshot of P-space in Threee Directions
9           for Ground state.
10          file name is fname(4) + '-gp00.ang'
11
12  3 -> Snapshot of R and P-space in Threes
13      Directions for Ground state.
14          file name is fname(4) + '-grp0.ang'
15
16  4 -> Snapshot of R-space
17          file name is fname(4) + '-r000.ang'
18
19  5 -> Time Evolution of R-Space
20          file name is fname(4) + '-rt00.ang'
21
22  6 -> Snapshot of P-space
23          file name is fname(4) + '-p000.ang'
24
25  7 -> Time Evolution of P-Space
26          file name is fname(4) + '-pt00.ang'
27
28  8 -> Snapshot of R and P-space
29          file name is fname(4) + '-pr00.ang'
30
31  9 -> Time Evolution of R and P-Space
32          file name is fname(4) + '-prt0.ang'
33
34  10 -> Snapshot R-Space with Color Plot
35          file name is fname(4) + '-rc00.ang'
36
37  11 -> Time Evolution of R-Space with Color Plot
38          file name is fname(4) + '-rtc0.ang'
39
40  12 -> Snapshot R-Space with Contour and Color Plot
41          file name is fname(4) + '-rrc0.ang'
42
43  13 -> Time Evolution of R-Space
44          with Contour and Color Plot
45          file name is fname(4) + '-rrtc.ang'

```

mstq1(154) の値が 1, 2, 3 の時が基底状態の出力で、それ以後が反応の出力に適している。ここでは、mstq1(154) = 4 以降について出力例を示す。mstq1(154) の値が 4 以降で偶数の時の出力は、その次の時間発展の出力を時刻毎に 1 ページの出力にしたものなので、ここでは省略する。mstq1(154) = 5 は、既に示したデフォルトの出力の 4 ページ目のものである。

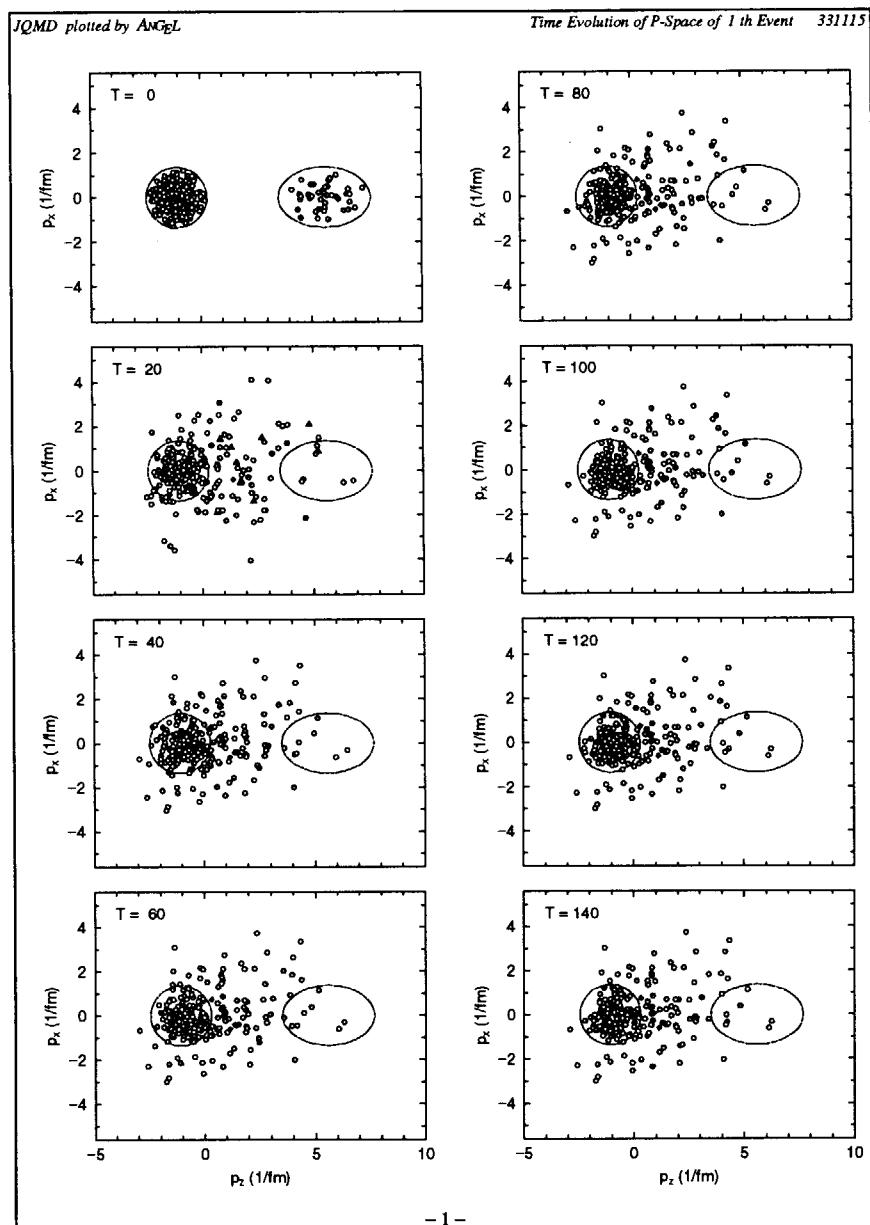


図 14. mstql1(154)=7

図 14. は、運動量空間での時間発展を示す。核子が丸、円もしくは楕円は初期状態のフェルミ球を示す。

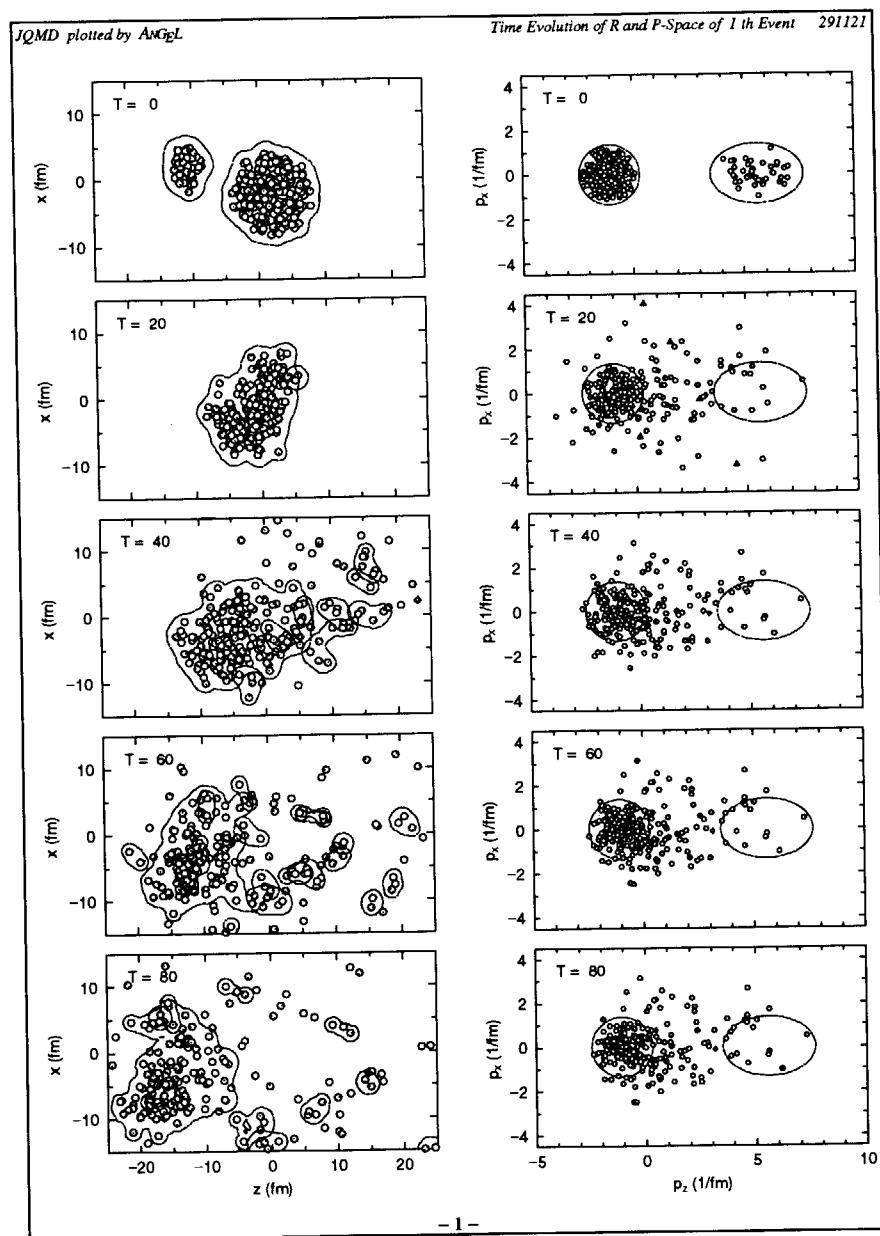
図 15. $mstq1(154)=9$

図 15. は、座標空間と運動量空間での時間発展を左右にならべて示したものである。

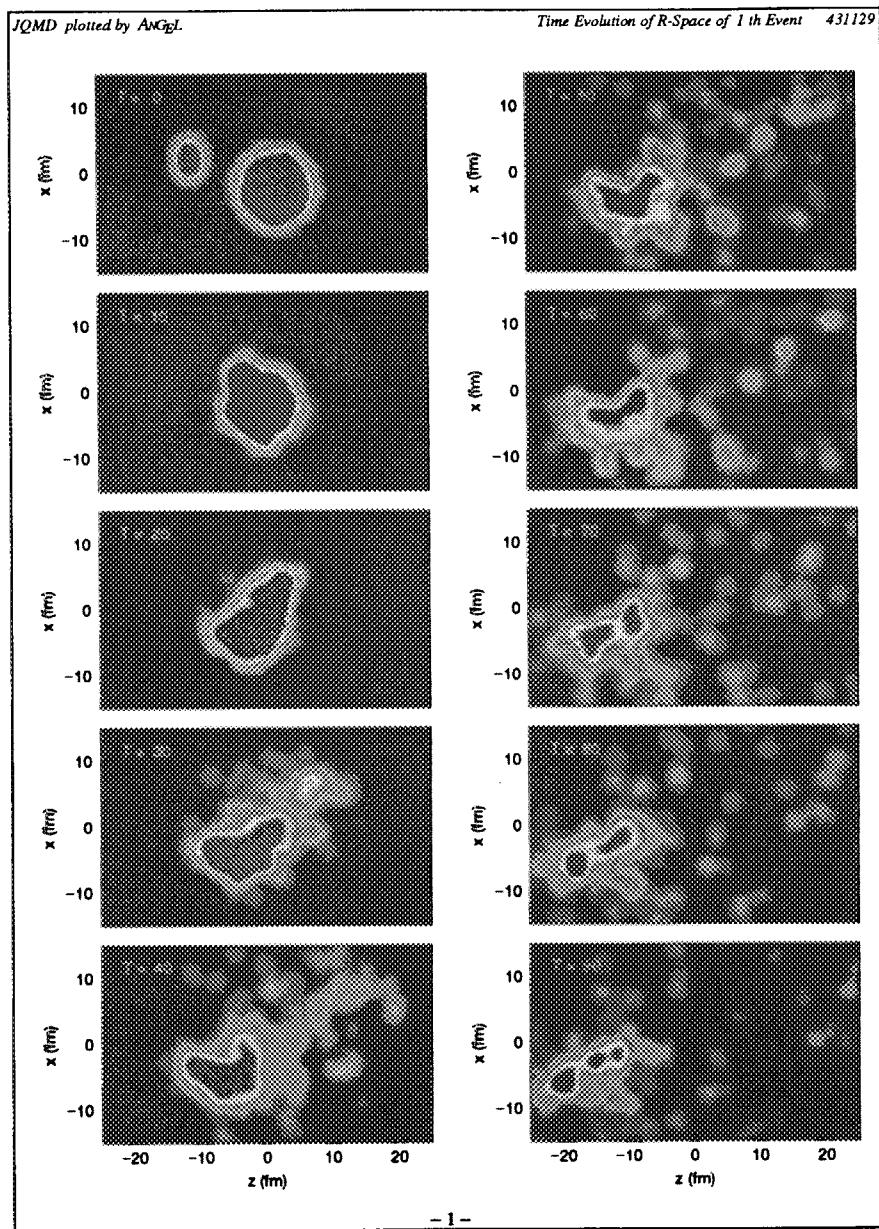


図 16. mstq1(154)=11

図 16. は、座標空間での時間発展をカラーのクラスター プロットで示したものである。この上に核子の位置を丸で示すこともできる。このオプションは、mstq1(162), mstq1(163), mstq1(164), mstq1(165)である。

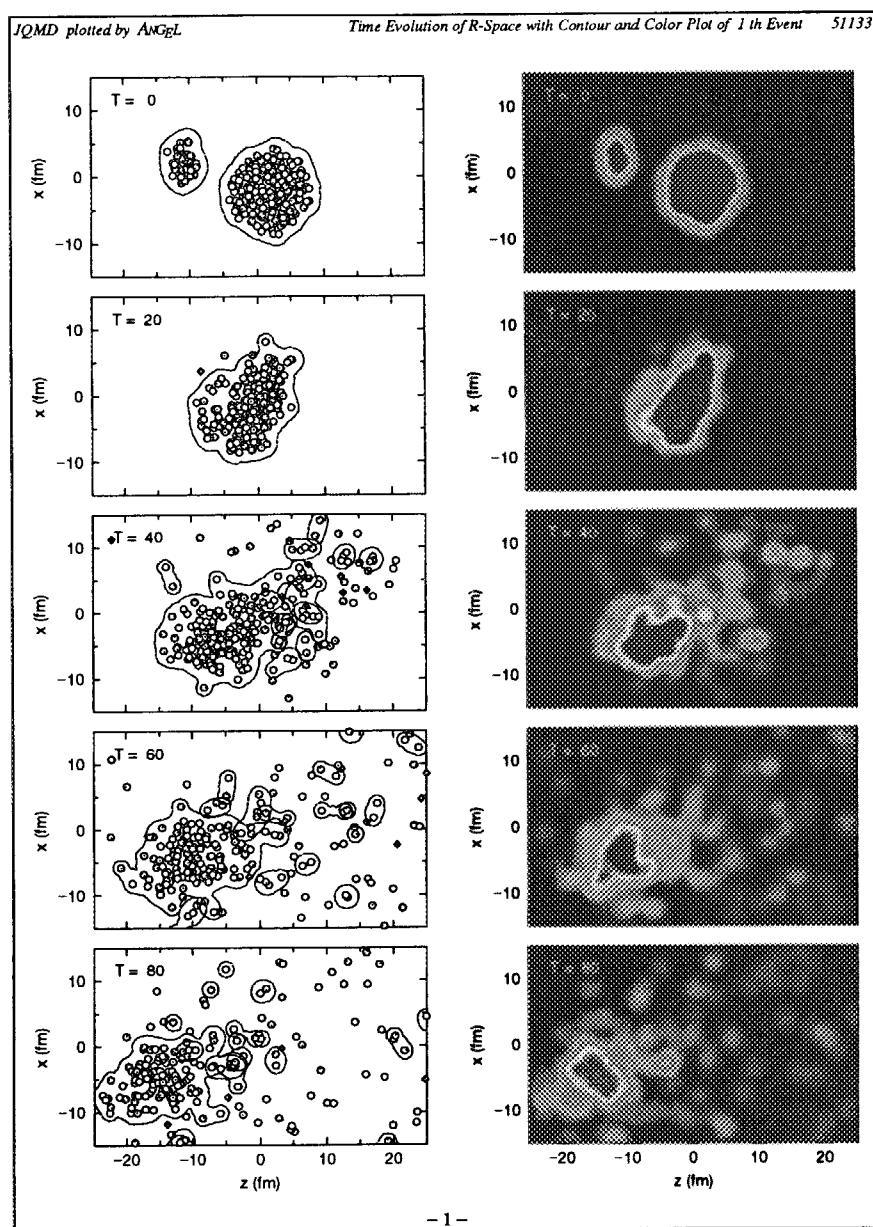
図 17. $mstq1(154)=13$

図 17. は、座標空間での時間発展を左に核子の丸と等高線、右にカラーのクラスター プロットで示すものである。

4.3. 基底状態の出力

インプット入力パラメーターで、proj=non とすると標的核の基底状態の情報が得られる。その時、核反応の時と違って以下の2つの出力が得られる。

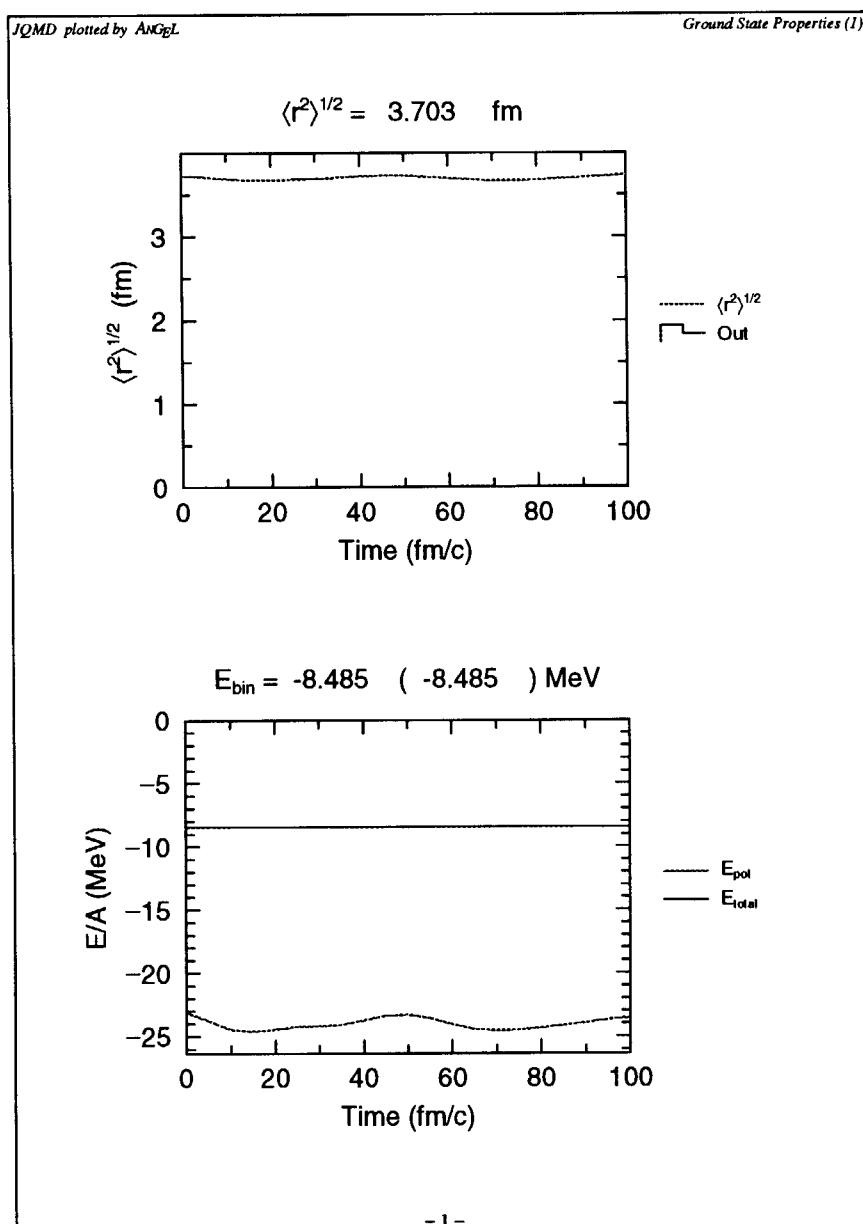
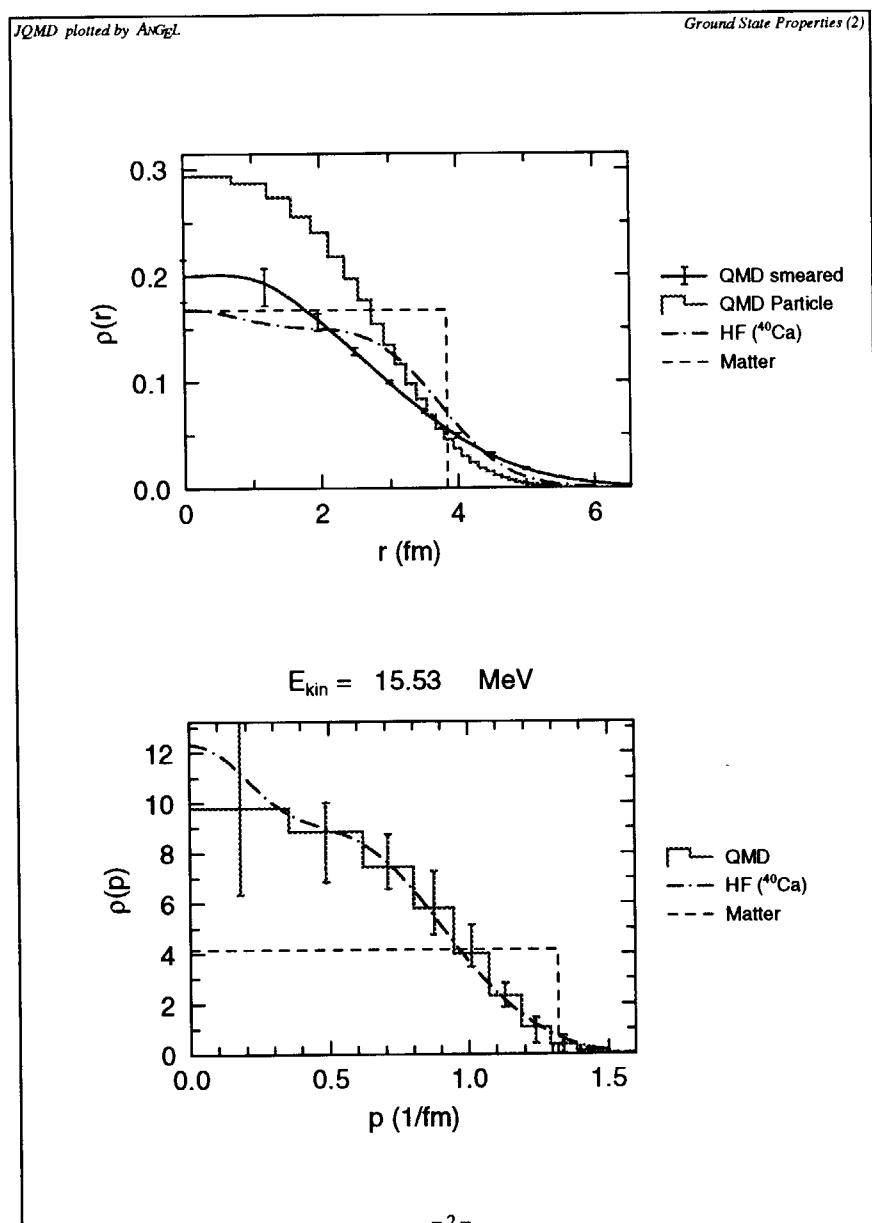


図 18. ${}^{40}\text{Ca}$ 基底状態 (1)

まず、1ページ目には、標的核の平均2乗半径、放出核子数、の時間発展と、全エネルギー、運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの時間発展が示される。

図 19. ^{40}Ca 基底状態 (2)

2 ページ目には、標的核の密度分布と運動量分布が示される。 ^{40}Ca の場合は、加えて、HF の結果も示される。

mstq1(154)が1, 2, 3までが基底状態の出力に適している。この3つの例を以下に示す。

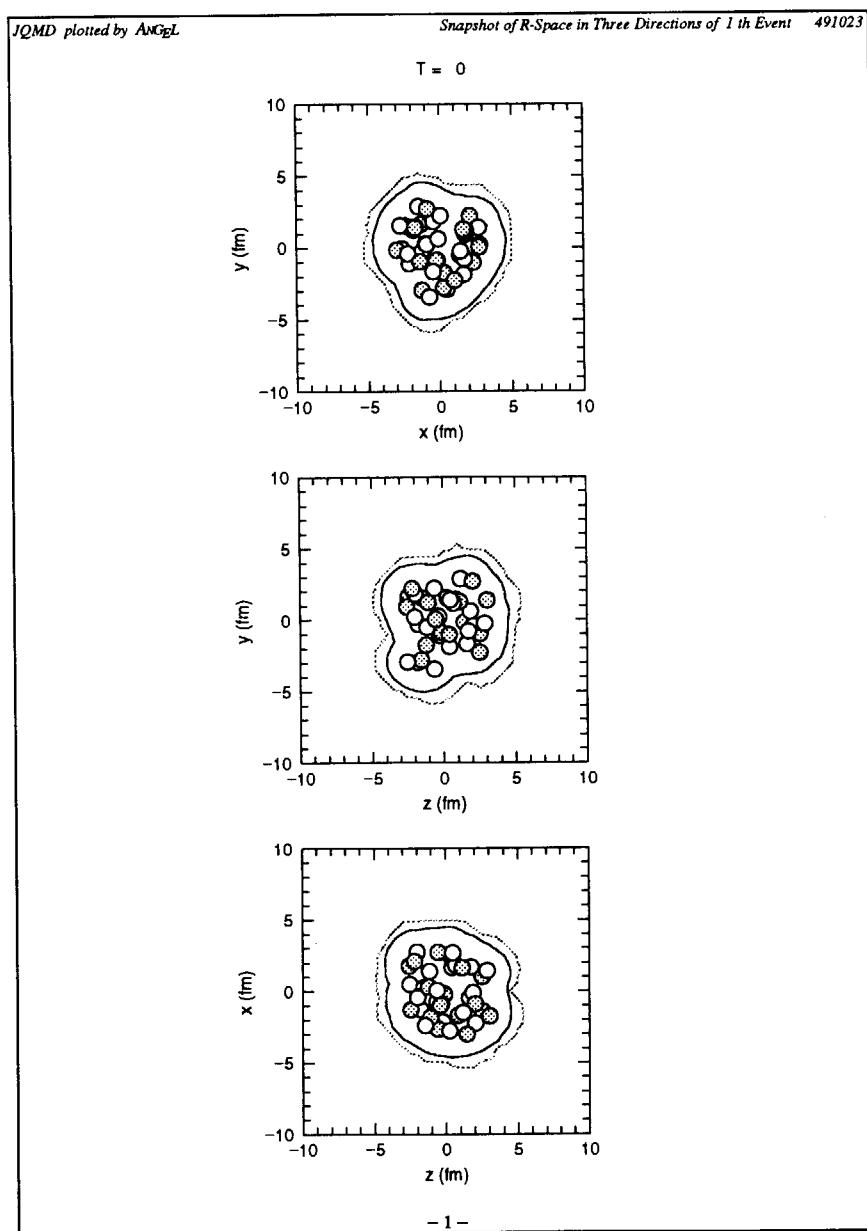
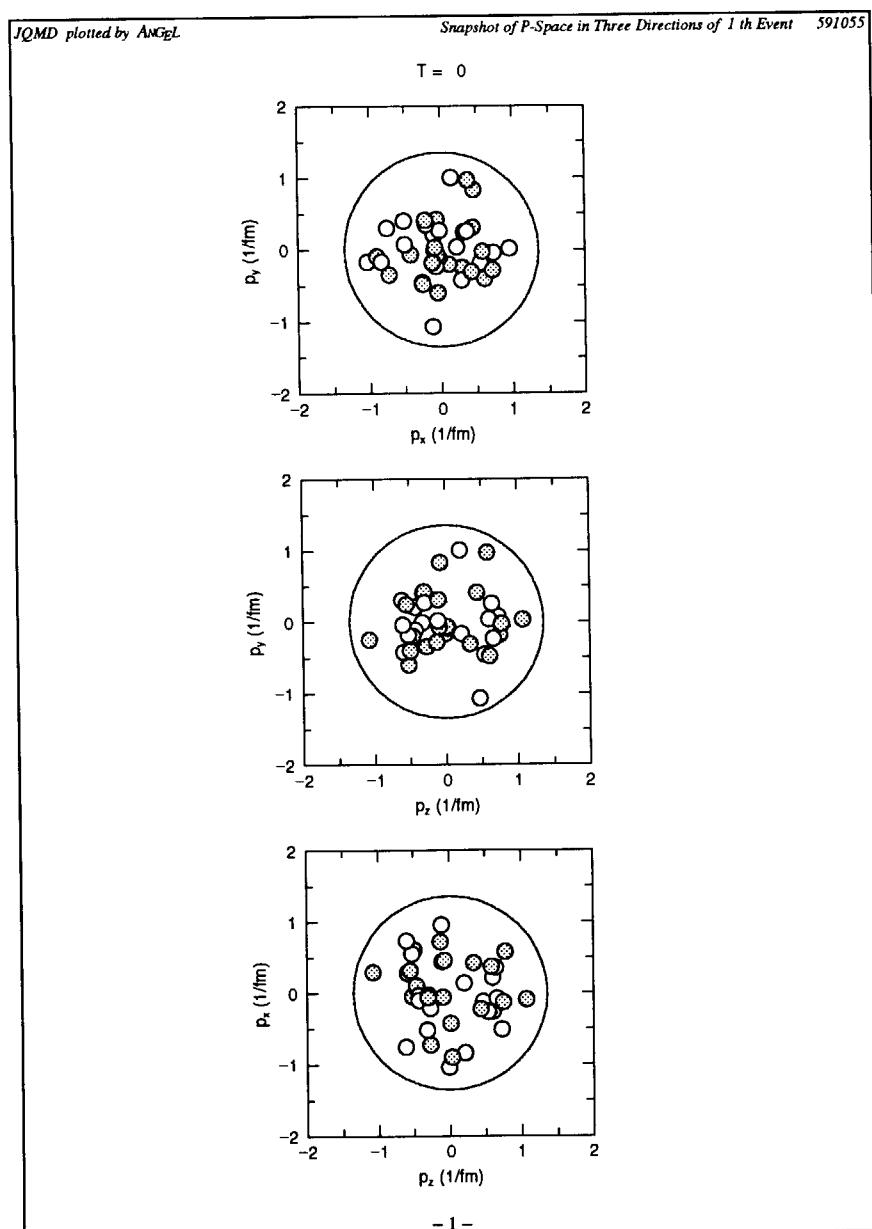
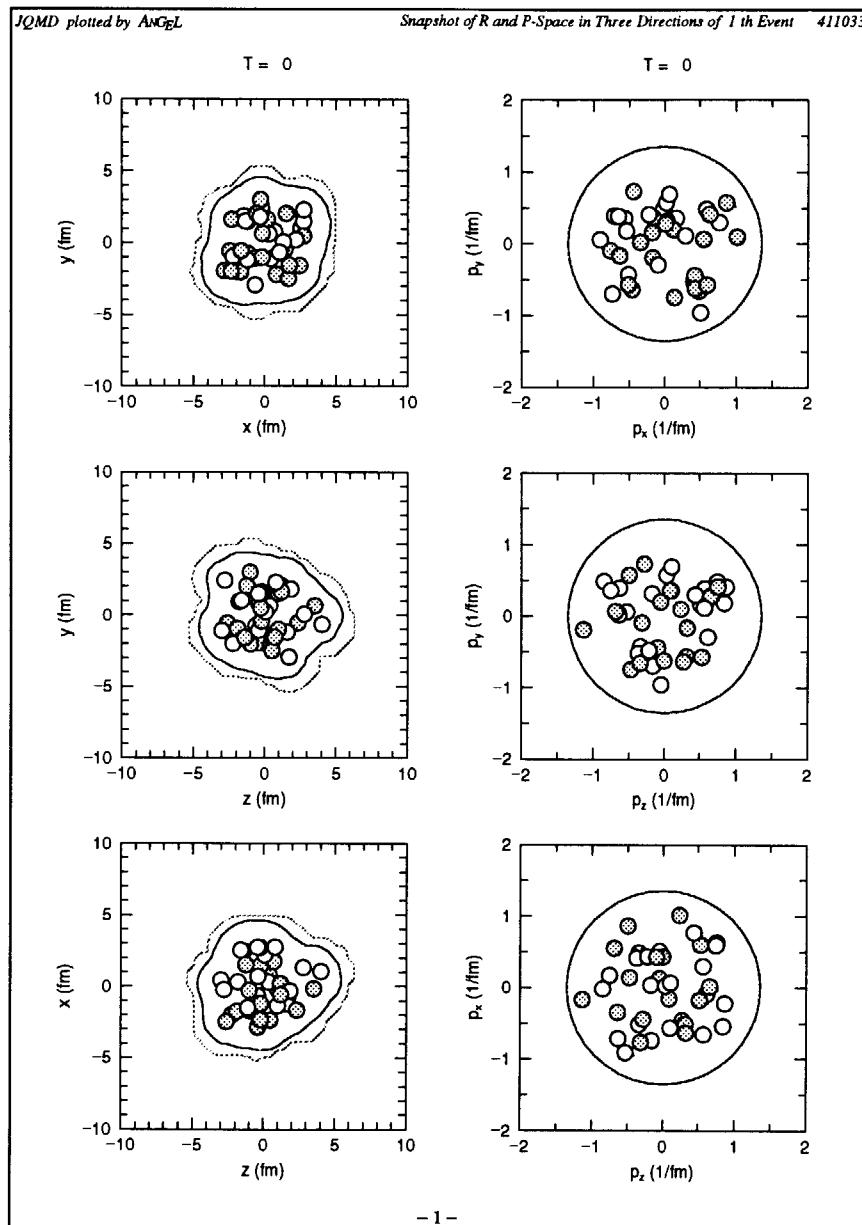


図 20. ^{40}Ca 基底状態, mstq1(154)=1

これは、mstq1(154)=1の時で、標的核の座標空間での分布を3方向から見た図である。

図 21. ^{40}Ca 基底状態, mstq1(154)=2

これは、mstq1(154)=2 の時で、標的核の運動量空間での分布を 3 方向から見た図である。

図 22. ^{40}Ca 基底状態, mstq1(154)=3

これは、mstq1(154)=3 の時で、標的核の座標空間での分布、運動量空間での分布を 3 方向から見た図を左右に並べた図である。

4.4. 実行例 2

次に、反応から放出される中性子の2重微分断面積の出力を得るメインルーティンを解説する。まずリストを次に示す。

メインルーティン 2

表 31. メインルーティン 2

```

1  ****
2  *      main-01.f
3  ****
4  common /switch2/ icfg, imany, icpus, idatm
5  -----
6  *      icfg = 1;  read input file of default name
7  -----
8      icfg = 1
9      call jqmd00
10     end
11 ****
12     subroutine anal_int
13  *          Purpose:
14  *          user subroutine for analysis
15  ****
16     include 'param02.inc'
17  -----
18     common /summ04/ ianal
19     common /const1/ elab, rdist, bmin, bmax, ibch, ibin
20     common /const2/ dt, ntmax, iprun, iprun0
21     common /vriab3/ qmdfac, sdmfac
22     common /switch3/ ielst, jelst, kelst
23  -----
24     dimension wi(10), wt(10)
25  -----
26     if( ianal .eq. 0 ) return
27  -----
28     inum   = 1
29     ifac   = 1
30     nw    = 4
31     wi(1) = cos( 2.5 * pi / 180.0 )
32     wt(1) = cos( 12.5 * pi / 180.0 )
33     wi(2) = cos( 25.0 * pi / 180.0 )
34     wt(2) = cos( 35.0 * pi / 180.0 )
35     wi(3) = cos( 55.0 * pi / 180.0 )
36     wt(3) = cos( 65.0 * pi / 180.0 )
37     wi(4) = cos( 115.0 * pi / 180.0 )
38     wt(4) = cos( 125.0 * pi / 180.0 )
39     tfac   = 1.0
40     ilog   = 0
41     ix    = 30
42     xmin  = 0.0
43     xmax0 = elab * 1000.0
44     xmax1 = xmax0 * 1.3
45     dx    = ( xmax0 - xmin ) / float( ix )
46     nx    = nint( ( xmax1 - xmin ) / dx )
47     xmax  = xmin + dx * float( nx )
48     call jbook1(1,'SDM linear',

```

表 31-2. メインルーティン 2

```

49      *          tfac,ilog,inum,ifac,nx,xmin,xmax,nw,wi,wt)
50      ilog = 1
51      ix   = 30
52      xmin = 1.0
53      xmax0 = elab * 1000.0
54      xmax1 = xmax0 * 1.3
55      dx   = log( xmax0 / xmin ) / float( ix )
56      nx   = nint( log( xmax1 / xmin ) / dx )
57      xmax = xmin + exp( dx * float( nx ) )
58      call jbook1(2,'SDM log',
59      *          tfac,ilog,inum,ifac,nx,xmin,xmax,nw,wi,wt)
60  -----
61      return
62 ****
63      entry anal_qmd(ik,jj,iz,in,id,is,ic,iq,im,
64      *          bi,px,py,pz,et,rm,ex)
65      *      Purpose: *
66      *          user entry for analysis of QMD *
67 ****
68      if( ianal .eq. 0 ) return
69  -----
70      *      inelastic frag and detection frame
71  -----
72      if( kelst .eq. 0 ) return
73      call trfram(px,py,pz,et,rm,0)
74  -----
75      *      nucleus( ik = 0 )
76  -----
77      if( ik .eq. 0 ) then
78      end if
79  -----
80      *      proton( ik = 1 ) and neutron( ik = 2 )
81  -----
82      if( ik .eq. 1 ) then
83      end if
84      if( ik .eq. 2 ) then
85      end if
86  -----
87      *      pions( ik = 5 )
88  -----
89      if( ik .eq. 5 ) then
90      if( ic .eq. 1 ) then
91      else if( ic .eq. 0 ) then
92      else if( ic .eq. -1 ) then
93      end if
94      end if
95  -----
96      return
97 ****
98      entry anal_sdm(ik,jj,iz,in,id,is,ic,iq,im,
99      *          bi,px,py,pz,et,rm,ex)
100     *      Purpose: *
101     *          user entry for analysis of SDM *
102 ****
103     if( ianal .eq. 0 ) return
104  -----
105     *      inelastic frag and detection frame
106  -----

```

表 31-3. メインルーティン 2

```

107         if( kelst .eq. 0 ) return
108         call trfram(px,py,pz,et,rm,0)
109     *-----
110     *      nucleus( ik = 0 )
111     *-----
112         if( ik .eq. 0 ) then
113             end if
114     *-----
115     *      proton( ik = 1 ) and neutron( ik = 2 )
116     *-----
117         if( ik .eq. 1 ) then
118             end if
119         if( ik .eq. 2 ) then
120             ekin = ( et - rm ) * 1000.0
121             pl2 = px**2 + py**2 + pz**2
122             if( pl2 .eq. 0 ) then
123                 cosa = 1.0
124             else
125                 cosa = pz / sqrt(pl2)
126             end if
127             call jfill1(1,ekin,cosa,sdmfac,1.0/2.0/pi*qmdfac)
128             call jfill1(2,ekin,cosa,sdmfac,1.0/2.0/pi*qmdfac)
129         end if
130     *-----
131     *      pions
132     *-----
133         if( ik .eq. 5 ) then
134             if( ic .eq. 1 ) then
135                 else if( ic .eq. 0 ) then
136                     else if( ic .eq. -1 ) then
137                         end if
138                     end if
139     *-----
140         return
141 ****entry anal_fin
142     entry anal_fin
143     *      Purpose: *
144     *      user entry for analysis of weight *
145 ****
146         if( ianal .eq. 0 ) return
147     *-----
148         open( 90, file = 'pal-sdml.dat' , status = 'unknown' )
149         open( 91, file = 'pal-sdmg.dat' , status = 'unknown' )
150         fac = 1.0 / float(iprun)
151         call jscale1(1,fac)
152         call jscale1(2,fac)
153         call jprint1(1,90)
154         call jprint1(2,91)
155         close(90)
156         close(91)
157     *-----
158         return
159     end

```

この例題では、QMD、SDM 計算の最後に放出される中性子の 2 重微分断面積を出力する。測定する中性子の角度、エネルギーは、ユーザー サブルーティン anal_int で定義される。ここでは、測定角度が、7.5, 30, 60, 120 度で角度幅が 10 度である。エネルギー幅は、x 軸がリニアで 0 から入射エネルギーまでを 30 等分、x 軸が対数で 1MeV から入射エネルギーまでをこれも 30 等分である。それに応じて出力は 2 つである。測定中性子は、統計崩壊後の終状態の中性子であるから、QMD のあとのサマリー anal_qmd では何も定義されていない。SDM の後のサマリー anal_sdm で測定条件に見合った中性子の生成量を jfill1 を呼んで測定している。最後に、anal_fin でファイルを開くと、断面積の規格化、ここでは、全体のイベント数で規格化して、次に、ファイルに出力している。

2 つの出力ファイルは、pal_sdmg.dat, pal_sdml.dat であるが、前者は、x 軸が対数で等間隔、後者がリニアで等間隔である。出力ファイルは、以下のようなフォーマットである。

pal_sdmg.dat

表 32. pal_sdmg.dat

```

1   #
2   #      JBOOK: SDM log
3   #
4   #      Histogram ID : 2
5   #      No. of entries : 93570.59
6   #      Date: 1999-04-06 17:21:46
7   #
8   #      x           y01       n01       y02       n02       y03       n03       y04       n04
9   #
10   1.000     5.246     23.50     4.764     84.60     4.624    134.4     3.790     111.8
11   1.203     4.946     26.50     5.263    110.1     4.369    160.9     3.337     120.0
12   1.448     4.205     31.60     4.584    119.5     4.147    187.6     3.466     149.8
13   1.742     4.844     37.60     4.129    128.4     3.910    204.8     2.833     154.3
14   2.095     4.123     40.30     4.127    159.7     3.694    240.0     2.965     186.8
15   2.521     3.757     45.60     3.699    165.2     3.377    274.8     2.649     211.6
16   3.033     3.060     49.40     3.413    187.6     3.213    302.1     2.227     211.8
17   3.650     2.905     47.60     2.988    211.1     2.621    318.7     2.050     225.9
18   4.391     2.581     56.10     2.521    209.0     2.322    332.9     1.776     238.9
19   5.283     2.167     59.40     2.321    230.7     1.983    347.4     1.444     231.9
20   6.356     1.650     55.80     1.840    234.5     1.753    355.7     1.173     231.2
21   7.648     1.520     63.90     1.535    236.7     1.198    314.9     0.8127    209.5
22   9.201     1.222     58.40     1.127    216.8     1.001    310.7     0.6359    190.6
23   11.07    1.038     60.80     0.9704   212.3     0.7899   299.5     0.4815    166.6
24   13.32    0.8710   60.70     0.7673   214.3     0.7533   337.1     0.3537    147.7
25   16.03    0.6536   55.20     0.8016   251.0     0.5439   291.2     0.2677    126.8
26   19.28    0.5661   61.90     0.5796   234.5     0.4973   324.5     0.2085    121.2
27   23.20    0.5785   75.80     0.6000   289.0     0.4116   316.0     0.1435    106.3
28   27.91    0.5913   71.90     0.5562   286.9     0.4219   371.4     8.0117E-02  75.20
29   33.58    0.4674   80.50     0.4902   311.2     0.3878   391.4     7.0532E-02  85.70
30   40.40    0.3897   74.00     0.4206   305.7     0.3138   388.9     4.4382E-02  55.40
31   48.61    0.3079   67.10     0.4066   343.1     0.2823   389.0     2.3132E-02  35.00
32   58.48    0.3208   84.00     0.3490   369.0     0.2244   411.0     2.1207E-02  33.00
33   70.37    0.2492   95.00     0.3212   382.0     0.2171   424.0     7.2659E-03  16.00
34   84.66    0.1719   78.00     0.2953   421.0     0.1585   384.0     2.9961E-03  9.000
35   101.9    0.1624   76.00     0.2625   405.0     0.1223   340.0     9.6078E-04  3.000
36   122.6    0.1480   85.00     0.2863   521.0     6.4944E-02 217.0     6.5207E-04  2.000
37   147.4    0.1259   77.00     0.2545   517.0     2.1631E-02 97.00     0.000     0.000
38   177.4    0.1768   111.0     0.1744   426.0     2.3528E-03 17.00     0.000     0.000
39   213.4    0.2856   186.0     6.1425E-02 166.0     6.0811E-04 3.000     0.000     0.000
40   256.8    1.9712E-02 18.00     4.0412E-05 1.000     0.000     0.000     0.000     0.000
41   309.0    0.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.000
42   #
43   #      total = 93.07 # = 93570.59
44   #      under = 8.319
45   #      over  = 0.000
46   #
47   #      win:      y01      #01      y02      #02      y03      #03      y04      #04
48   #
49   #      total = 94.87   2122.    98.55    8370.    60.03    9155.    26.29    3986.
50   #      under = 5.044   108.9   5.044    415.0   4.730    666.7   3.696    527.6
51   #      over  = 0.000   0.000   0.000    0.000   0.000   0.000    0.000   0.000
52   #

```

この出力に対して、次のような AnGel ファイルを用意すると、実験結果と比較した図が得られる。

pal-256.ang

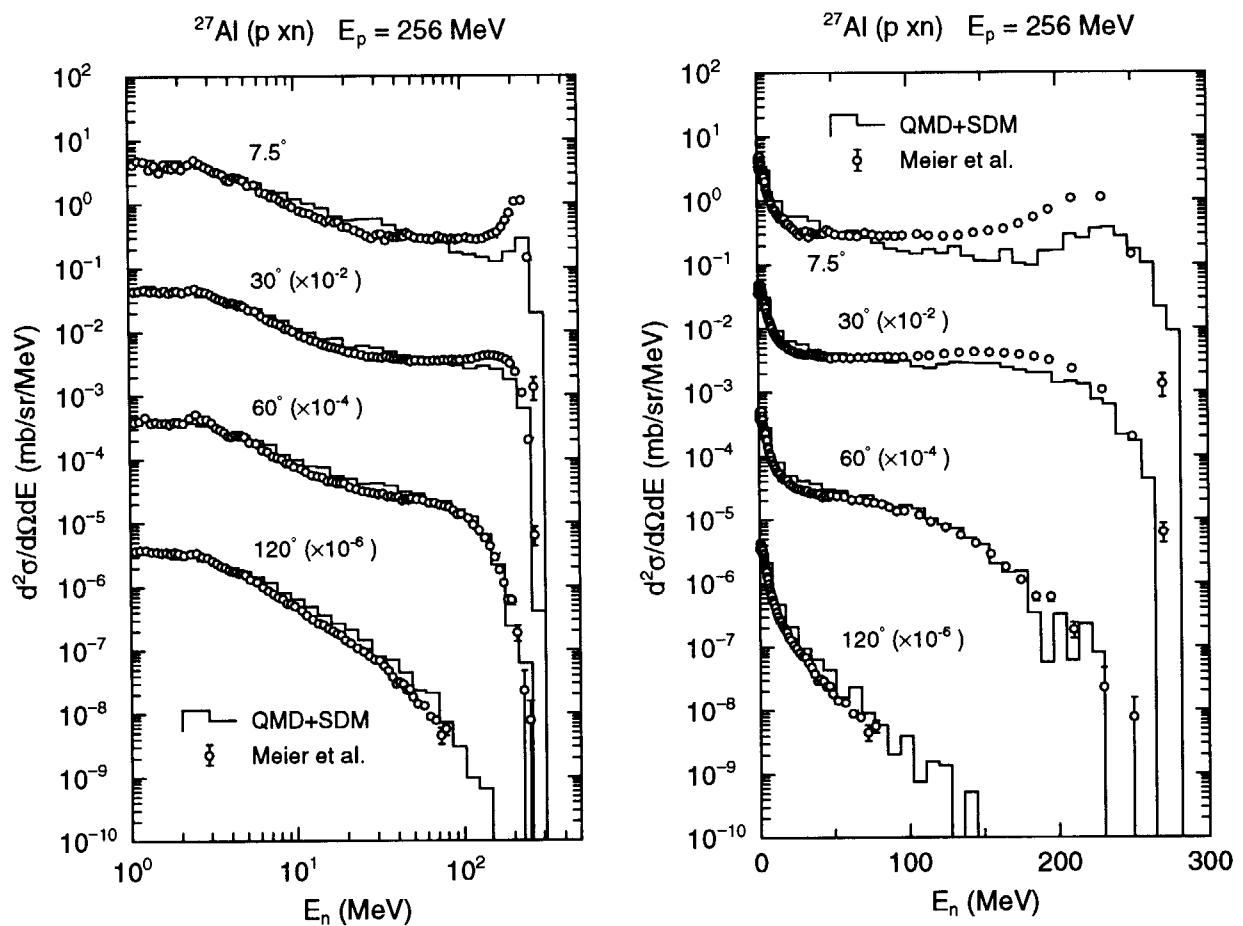
表 33. pal-256.ang

```

1      c: Differential Cross subsection for Al at 256 MeV
2
3      '^{27}Al (p xn)   E_{p} = 256 MeV'
4
5      X: E_{n} (MeV)
6      Y: d^2\sigma/d\Omega\omega dE (mb/sr/MeV)
7
8      p: ylog ymin(1.e-10) xmax(500) ymax(100) nosp xlog xmin(1)
9      p: legx(2) legy(8.e-9) legs(1.2)
10     w: 7.5^{\circ}/ x(5) y(5) s(1.2)
11     w: 30^{\circ}/ (\times 10^{-2}) / x(5) y(5.0e-2) s(1.2)
12     w: 60^{\circ}/ (\times 10^{-4}) / x(5) y(5.0e-4) s(1.2)
13     w: 120^{\circ}/ (\times 10^{-6}) / x(5) y(3.0e-6) s(1.2)
14
15     p: form(1.7) scal(0.6) xorg(0.15) yorg(0.05) afac(1.) nofr noms
16
17     C:    7.500E+00 3.000E+01 6.000E+01 1.200E+02
18
19     h: x  y(QMD+SDM),lh0 n  y*0.01,lh0 n y*0.0001,lh0 n y*1.e-6,lh0 n
20     infl: {pal-sdmg.dat}
21
22     infl: {pal-mei.dat}
23
24     c:-----
25
26     z: xorg(1.4) yorg(0)
27
28     '^{27}Al (p xn)   E_{p} = 256 MeV'
29
30     X: E_{n} (MeV)
31     Y: d^2\sigma/d\Omega\omega dE (mb/sr/MeV)
32
33     p: ylog ymin(1.e-10) xmax(300) ymax(100) nosp xlin
34     p: legx(50) legy(15) legs(1.2)
35     w: 7.5^{\circ}/ x(30) y(8.0e-2) s(1.2)
36     w: 30^{\circ}/ (\times 10^{-2}) / x(50) y(1.0e-2) s(1.2)
37     w: 60^{\circ}/ (\times 10^{-4}) / x(50) y(7.e-5) s(1.2)
38     w: 120^{\circ}/ (\times 10^{-6}) / x(50) y(1.0e-7) s(1.2)
39
40     C:    7.500E+00 3.000E+01 6.000E+01 1.200E+02
41
42     h: x  y(QMD+SDM),lh0 n  y*0.01,lh0 n y*0.0001,lh0 n y*1.e-6,lh0 n
43     infl: {pal-sdml.dat}
44
45     infl: {pal-mei.dat}
46

```

ここで、pal-mei.dat は、実験データ¹⁴⁾の入ったファイルである。これを AnGel で処理すると eps ファイルが得られ、その図を次に示す。

図 23. $^{27}\text{Al}(p,n)$ $E_p=256\text{MeV}$

4.5. 実行例 3

ここでは、反応から放出される陽子、 π^- の invariant cross subsection ($E d^3\sigma/dp^3$) を得るメインルーティンを解説する。まずリストを次に示す。

メインルーティン 3

表 34. メインルーティン 3

```

1  ****
2  *      main routine
3  ****
4  common /switch2/ icfg, imany, icpus, idatm
5  -----
6  *      icfg = 1;  read input file of default name
7  -----
8      icfg = 1
9      call jqmd00
10     end
11 ****
12     subroutine anal_int
13  *      Purpose: *
14  *          user subroutine for analysis *
15 ****
16     include 'param02.inc'
17  -----
18     common /summ04/ ianal
19     common /const1/ elab, rdist, bmin, bmax, ibch, ibin
20     common /const2/ dt, ntmax, iprun, iprun0
21     common /vriab3/ qmdfac, sdmfac
22     common /switch3/ ielst, jelst, kelst
23  -----
24     dimension wi(10), wt(10)
25  -----
26     if( ianal .eq. 0 ) return
27  -----
28     inum   = 3
29     ifac   = 1
30     nw    = 4
31     wi(1) = 0.8
32     wt(1) = 0.6
33     wi(2) = 0.6
34     wt(2) = 0.4
35     wi(3) = 0.4
36     wt(3) = 0.2
37     wi(4) = 0.2
38     wt(4) = 0.0
39     tfac   = 1.0
40     ilog   = 1
41     ix    = 30
42     xmin  = 1.0
43     xmax0 = elab * 1000.0
44     xmax1 = xmax0 * 1.3
45     dx    = log( xmax0 / xmin ) / float( ix )
46     nx    = nint( log( xmax1 / xmin ) / dx )
47     xmax  = xmin + exp( dx * float( nx ) )
48     call jbook1(1,'pprt log',

```

表 34-2. メインルーティン 3

```

49      &          tfac,ilog,inum,ifac,nx,xmin,xmax,nw,wi,wt)
50      &          call jbook1(2,'ppim log',
51      &          tfac,ilog,inum,ifac,nx,xmin,xmax,nw,wi,wt)
52  -----
53      return
54 ****
55      entry anal_qmd(ik,jj,iz,in,id,is,ic,iq,im,
56      &          bi,px,py,pz,et,rm,ex)
57  *      Purpose:
58  *          user entry for analysis of QMD
59 ****
60      if( ianal .eq. 0 ) return
61  -----
62  *      inelastic frag
63  -----
64      if( kelst .eq. 0 ) return
65      call trfram(px,py,pz,et,rm,0)
66  -----
67  *      nucleus
68  -----
69      if( ik .eq. 0 ) then
70      end if
71  -----
72  *      nucleons
73  -----
74      if( ik .eq. 1 ) then
75      end if
76  -----
77  *      pions
78  -----
79      if( ik .eq. 5 ) then
80          if( ic .eq. 1 ) then
81              else if( ic .eq. 0 ) then
82                  else if( ic .eq. -1 ) then
83                      end if
84                  end if
85  -----
86      return
87 ****
88      entry anal_sdm(ik,jj,iz,in,id,is,ic,iq,im,
89      &          bi,px,py,pz,et,rm,ex)
90  *      Purpose:
91  *          user entry for analysis of SDM
92 ****
93      if( ianal .eq. 0 ) return
94  -----
95  *      inelastic frag
96  -----
97      if( kelst .eq. 0 ) return
98      call trfram(px,py,pz,et,rm,0)
99  -----
100 *      nucleus
101  -----
102      if( ik .eq. 0 ) then
103      end if
104  -----
105 *      nucleons
106  -----

```

表 34-3. メインルーティン 3

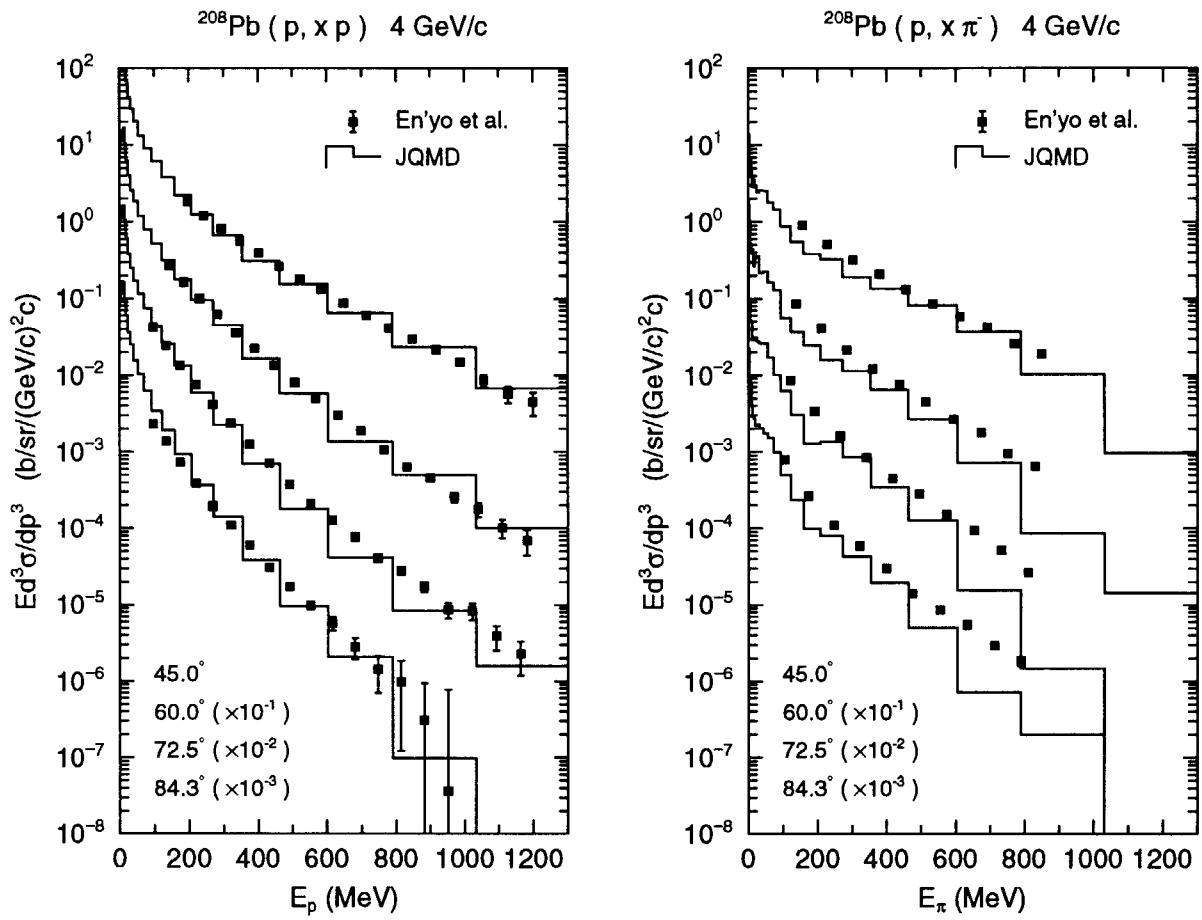
```

107      if( ik .eq. 1 ) then
108          ekin = ( et - rm ) * 1000.0
109          pl2 = px**2 + py**2 + pz**2
110          pla = sqrt(pl2)
111          if( pl2 .eq. 0 ) then
112              cosa = 1.0
113          else
114              cosa = pz / sqrt(pl2)
115          end if
116          call jfill1(1,ekin,cosa,smdfac,1.0/2.0/pi*qmdfac/pla)
117      end if
118      if( ik .eq. 2 ) then
119      end if
120  -----
121 *      pions
122  -----
123      if( ik .eq. 5 ) then
124          if( ic .eq. 1 ) then
125          else if( ic .eq. 0 ) then
126          else if( ic .eq. -1 ) then
127              ekin = ( et - rm ) * 1000.0
128              pl2 = px**2 + py**2 + pz**2
129              pla = sqrt(pl2)
130              if( pl2 .eq. 0 ) then
131                  cosa = 1.0
132              else
133                  cosa = pz / sqrt(pl2)
134              end if
135              call jfill1(2,ekin,cosa,smdfac,1.0/2.0/pi*qmdfac/pla)
136          end if
137      end if
138  -----
139      return
140 ****
141      entry anal_fin
142 *      Purpose: *
143 *          user entry for analysis of weight *
144 ****
145      if( ianal .eq. 0 ) return
146  -----
147      open( 90, file = 'ppb4gprt.dat' , status = 'unknown' )
148      open( 91, file = 'ppb4gpim.dat' , status = 'unknown' )
149      fac = 1.0 / float(iprun)
150      call jscale1(1,fac)
151      call jscale1(2,fac)
152      call jprint1(1,90)
153      call jprint1(2,91)
154      close(90)
155      close(91)
156  -----
157      return
158      end

```

この例題では、QMD、SDM 計算の最後に放出される陽子、 π^- の invariant cross subsection の 2 重微分断面積 ($E d^3\sigma/dp^3$) を出力する。測定する陽子、 π^- の角度、エネルギーは、ユーザーサブルーティン anal_int で定義される。ここでは、測定角度が、cos の値で 0.1, 0.3, 0.5, 0.7 で cos 幅が 0.2 である。エネルギー幅は、x 軸が対数で 1MeV から入射エネルギーまでを 30 等分である。測定粒子は、統計崩壊後の終状態のものであるから、QMD のあとのサマリー anal_qmd では何も定義されていない。SDM の後のサマリー anal_sdm で測定条件に見合った粒子の生成量を jfill1 を呼んで測定している。最後に、anal_fin でファイルをオープンし、断面積の規格化、ここでは、全体のイベント数で規格化して、次に、ファイルに出力している。

この出力に対して、ケース 2 と同様に実験値¹⁵⁾ と AnGel ファイルを用意することにより、次のような図が得られる。

図 24. $^{208}\text{Pb(p,}xp\text{) (p,}x\pi^-\text{) } P_p=4\text{GeV/c}$

参考文献

- 1) J. Aichelin, Phys. Rep. **202** 233 (1991); and references therein.
- 2) K. Niita, S. Chiba, Tosh. Maruyama, Tomo. Maruyama, H. Takada, T. Fukahori, Y. Nakahara, and A. Iwamoto, Phys. Rev. C **52**, 2620 (1995)
- 3) J. Cugnon, T. Mizutani, and J. Vandermeulen, Nucl. Phys. **A352**, 505 (1981); J. Cugnon, Phys. Rev. C **22**, 1885 (1980).
- 4) Particle Data Group, Phys. Lett. B **239**, 1 (1990).
- 5) Landolt-Börnstein, vol. 12, Springer-Verlag, Berlin, (1988).
- 6) B. J. VerWest and R. A. Arndt, Phys. Rev. C **25**, 1979 (1982).
- 7) Gy. Wolf, G. Batko, W. Cassing, U. Mosel, K. Niita, and M. Schäfer, Nucl. Phys. **A517**, 615 (1990).
- 8) F. Shimizu, H. Koiso, Y. Kubota, F. Sai, S. Sakamoto, and S. S. Yamamoto, Nucl. Phys. **A389**, 445 (1982).
- 9) H. Sorge, H. Stöcker, and W. Greiner, Ann. of Phys. **192**, 266 (1989).
- 10) E. Lehmann, R. K. Puri, A. Faessler, T. Maruyama, G. Q. Li, N. Ohtsuka, S. W. Huang, D. T. Khoa, and M. A. Matin, Prog. Part. Nucl. Phys. **30**, 219 (1993).
- 11) T. Maruyama, S. W. Huang, N. Ohtsuka, G. Q. Li, and A. Faessler, Nucl. Phys. **A534**, 720 (1991).
- 12) S.R. Souza, L. de Paula, S. Leray, J. Nemeth, C. Ngô, and H. Ngô, Nucl. Phys. **A571**, 159 (1994).
- 13) A. Bohr and B. R. Mottelson, Nuclear Structure vol.1 W. A. Benjamin, New York, (1969).
- 14) W. B. Amian, B. C. Byrd, C. A. Goulding, M. M. Meier, G. L. Morgan, C. E. Moss, and D. A. Clark, Nucl. Sci. and Eng. **112**, 78 (1992)
- 15) H. En'yo et al., Phys. Lett. B **159** 1 (1985).

This is a blank page.

