

2019 年度計算物理学 2 第 2 回レポート課題

授業のページに掲載した “48carho.dat” ファイルは ^{48}Ca 原子核 (中性子数 28, 陽子数 20) の中性子と陽子の密度を Hartree-Fock 法で計算した値である。このデータファイルには 3 列に実数が並んでおり、1 列目に原点 (重心) からの距離 $r(\text{fm})$ 、2 列目にその距離 r での中性子の密度 $\rho_n(r)(\text{fm}^{-3})$ 、3 列目に陽子の密度 $\rho_p(r)(\text{fm}^{-3})$ の値がリストされている (r は等間隔)。また、この原子核は球対称なので密度は球座標の角度 θ, ϕ には依存せず、 $\rho(\mathbf{r}) = \rho(r)$ となる ($r = |\mathbf{r}|$)。

1. Gnuplot を用いて ^{48}Ca の中性子と陽子の密度を r の関数として一枚のグラフに描け。グラフは 2 つの線種を変える、縦軸と横軸に名前をつける、描画範囲を設定する、などして見やすく整形すること。
2. 密度の r に関する一階微分 $d\rho_n(r)/dr$ と $d\rho_p(r)/dr$ を 5 点公式で計算し、一枚のグラフに描け。グラフの作成にあたっては 1. と同様の注意を払うこと。
3. 密度の空間積分 $\int \rho_n(r)dr$ と $\int \rho_p(r)dr$ を台形公式で計算し、その値を出力せよ。

1, 2 で作成したグラフと 2, 3 を計算するプログラム、3 の積分値をプリントして提出してください。

■ ヒント

- 1. や 2. では 2 つの曲線を一枚のグラフにプロットするので、グラフには凡例をつけること。また x 軸と y 軸が何の量かの説明とその単位をつけること。このグラフだけを見た人が何のグラフなのかがある程度わかるように、必要な情報をグラフ中に入れておくこと。グラフは pdf にして印刷し、白黒で印刷されても判別できるように 2 つの曲線の線種を変更すること。描画する範囲も適切に設定する。例えば計算は比較的大きな r までされているが、あまり密度に変化がない領域はグラフにするとき描画する必要はない。
- 微分積分を実行するためにはまずはデータファイルの内容を配列に取り込む。READ 文では上から一行ずつファイルの中身を読み取れるので DO 文でファイルの行数分だけカウンタの値を変えながら実行し、配列に値を代入する。データの行数を数えて配列のサイズと DO 文での繰り返し回数を決定する。データの行数は Δr から計算しても出せるし、emacs でデータファイルを開いて調べてもよいし、Linux にはファイルの行数などを教えてくれる wc というコマンドもある。
- 微分の 5 点公式を使うためには、微分を計算したい点の両隣 2 点ずつでの関数の値が必要となる。データファイルでの r の最小値と最大値付近ではデータの範囲外となって隣に必要な点がないことがある。いま密度 $\rho(r_i)$ が等間隔の座標点 $r_i = i\Delta r (i = 0, 1, \dots, N)$ で定義されている場合、 r の大きいところでは、密度は十分に小さくなっていることから、 $\rho(r_i) = 0, (i > N)$ としてよく、データを外挿する。原点付近では r を負の値にはできないが、 $\rho(\mathbf{r})$ が球対称であることから $\rho(-r_i) = \rho(r_i)$ として、5 点公式に必要な点が与えられる。これで、 $r_0 = 0$ や $r_1 = \Delta r$ でも 5 点公式が適用できる。
- 球対称な関数の 3 次元積分は

$$\int \rho_n(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \int d\Omega \int_0^\infty \rho_n(r)r^2 dr = 4\pi \int_0^\infty \rho_n(r)r^2 dr \quad (1)$$