

原子核の質量公式における
対エネルギー項の改良

2001年2月

福井大学 工学部 応用物理学科

池田 智也 清澤 聡

目次

1 原子と原子核の質量と束縛エネルギー	4
1.1 質量とは	4
1.2 原子と原子核の質量について	5
1.2.1 原子質量	5
1.2.2 原子質量超過	6
1.2.3 原子の束縛エネルギー	6
1.3 原子核の束縛エネルギー	7
1.4 評価済み原子質量データ	9
1.5 データファイルの読み込み	11
1.6 既知の原子核と未知の原子核	12
2 質量公式のフィッティング	14
2.1 液滴模型について	14
2.2 質量公式について	15
2.2.1 体積エネルギー	15
2.2.2 表面エネルギー	15
2.2.3 対称エネルギー	15
2.2.4 クーロンエネルギー	16
2.2.5 対エネルギー	16
2.3 質量公式で求める値	18
2.4 質量公式の簡易化	18
2.5 最小2乗法の解法	19
2.5.1 方程式の導出	19
2.5.2 方程式の解法	19
2.6 E_{symvol} を加えた質量公式	20
2.6.1 方程式の解	20
2.6.2 平均2乗誤差	20

2.7	液滴模系から得た値と実験値との比較	21
2.7.1	魔法数について	21
2.8	対称エネルギーについて	23
3	中性子、陽子の対相関ギャップの算出	24
3.1	対相関エネルギー	25
3.2	対相関ギャップの計算式	26
3.3	3点公式の導出	27
3.3.1	3点公式を使った対相関ギャップ	27
3.3.2	4点公式と5点公式の導出	29
3.4	対相関ギャップの計算	30
3.5	陽子の対相関ギャップのグラフ	31
3.6	中性子の対相関ギャップのグラフ	33
3.7	それぞれの対相関ギャップのグラフからの結果	34
4	対相関ギャップのフィット	35
4.1	対相関ギャップ	35
4.2	ペアリングギャップが質量数のみの関数であるとき	35
4.3	ペアリングギャップが成分比の関数でもあるとき	38
4.3.1	Vogel が考えた公式	38
4.3.2	ペアリングギャップが $A^{-1/3}$ の冪乗の関数の足し合わせに比例する とき	38
4.4	自由度を増やしての考察	41

序章

近年、我々の身の回りには原子力発電や放射線による各種の測定機器などの原子核の関与する現象を利用する科学が急激に発展して来た。しかし発展とともに危険な事故も多数起こるようになった。いい意味でも悪い意味でも原子核は、我々の身近なものとなって来ている。そこでもっと原子核の特徴を知る必要があるだろう。

原子核の持つもっとも基本的な量を表すものとして原子質量がある。エネルギーが質量と密接な関係を持つことを示す式にアインシュタインの $E = mc^2$ という式がある。この関係式を利用すると原子、原子核の質量を知ることがエネルギー保存則を通じて、 α 線や β 線の放出エネルギーや核子分離エネルギーを知ることと直接つながる。このように質量はエネルギーと同等に扱うことができる大切な量である。

現在質量が知られている原子核は約 1840 種類である。しかし理論的には何千という数の原子核が存在しうると考えられる。今現在我々が未知の原子核の質量を予想する手段としてヴァイゼッカーベータ (Weizäcker-Bethe) の質量公式がある。これは現在確認されている原子核のエネルギーを元に最小 2 乗誤差を用いて原子核の束縛エネルギーの関係を式に表したものである。この式を使えば中性子、陽子の数さえ分かれば今まで未知とされて来た原子核の質量も知ることができる。

そこで本研究では質量公式についてヴァイゼッカーベータの質量公式より精密度の高い式を考える。そして確認されている 1844 個の原子核質量と比較して公式と実験値ではどのような誤差がありそれがどのようなときに大きくなるか考える。

また特に対エネルギーと呼ばれる項の持つべき関数形に付いて詳しく調べるため、質量公式のフィッティングの結果の一部として対エネルギー項を求めるのではなく、個々の原子核ごとに対エネルギーを計算してそれが陽子数、中性子数に対してどのように変化するかをグラフ化し、対エネルギー項を単独でフィットすることを行う。

第 1 章

原子と原子核の質量と束縛エネルギー

1.1 質量とは

$E = mc^2$ という式がある。これは、質量がエネルギーと関係していることをあらわしている。よって原子、原子核の質量を知ることがエネルギー保存則を通じて、 α 線や β 線の放出エネルギーや原子核の束縛エネルギーなど知ることに直接つながる。だから、以下では c^2 を省略して m をエネルギーの単位で考える。[1]

N は中性子数 (neutron number)、 Z は陽子数 (proton number) すなわち、原子番号 (atomic number) を表すものとする。また、質量数とは一つの原子核を構成する核子の数を表すことばで中性子数と陽子数の和となる。質量数は通常 A で表し $A = N + Z$ の関係がある。

またこの論文での記号の付け方の約束として、tilde 記号 (波線) を上につけた文字は原子の質量に関する量を表し、tilde 記号を上につけない文字は原子核の質量に関する量を表すことにする。

1.2 原子と原子核の質量について

以下では原子と原子核の質量について述べる。

1.2.1 原子質量

原子質量 (atomic mass) とは、原子核のまわりに電子がついて電氣的に中性となった原子の質量のことを指し、原子核質量 (nuclear mass) とは、電子が全くついていない裸の原子核の質量のことをさす。[2] [3]

この論文では、原子番号 Z 、質量数 $N + Z$ の原子の質量を表すのに $\tilde{M}(N, Z)$ という記号を用い、陽子数 Z 、中性子数 N の原子核の質量を表すのに $M(N, Z)$ という記号を用いることにする。

$\tilde{M}(N, Z)$ と $M(N, Z)$ との間には、下記の関係式が成立する。

$$\tilde{M}(N, Z) = M(N, Z) + Z \times M_e - a_{el} \times Z^{2.39} \quad (1.1)$$

これは、原子核質量に陽子と同じ数の電子質量 (electron mass) をたして、電子の束縛エネルギー (binding energy) を引いたものである。ここで、電子の束縛エネルギーは $a_{el} \times Z^{2.39}$ で非常によく近似され、比例定数の値は

$$a_{el} = 1.433 \times 10^{-5} \text{ [MeV]} \quad (1.2)$$

である。そして、電子質量 (electron mass) は M_e と表してあり

$$M_e = 0.5110 \text{ [MeV]} \quad (1.3)$$

である。

例として (1.1) 式を最も軽い原子である水素原子に適用してみよう。この原子の原子核は1個の陽子 (proton) である。水素原子の質量 \tilde{M}_H は陽子質量 M_p と下式のように関係付けられる。

$$\tilde{M}_H = M_p + M_e - a_{el} \times 1^{2.39} = M_p + M_e - a_{el} \quad (1.4)$$

$$M_p = 938.2720 \text{ MeV}$$

ただし、水素原子の束縛エネルギーは正確には 13.6eV であり、 $a_{el} = 14.33\text{eV}$ とはわずかながら誤差があるがこの論文の議論では無視できる。

1.2.2 原子質量超過

原子質量はほとんど質量数に比例するのでその比例関係からのズレの部分をデータとして与える習慣がある。これを質量超過と呼び、この論文では $\tilde{M}_X(N, Z)$ で表し、下式で定義される。

$$\tilde{M}_X(N, Z) = \tilde{M}(N, Z) - (N + Z) \times u \quad (1.5)$$

ここで、 u は原子質量単位 (atomic mass unit) とよばれる量で質量数 12 の炭素原子 1 個の質量の $\frac{1}{12}$ で定義され、

$$u = 931.4939 \text{ MeV} \quad (1.6)$$

である

1.2.3 原子の束縛エネルギー

粒子が集まって束縛系をつくっているとき、これらの粒子を引き離してばらばらにしてしまうために必要なエネルギーを束縛エネルギーという。束縛系の全質量を M 、それを構成する各粒子の質量を M_i とすると、束縛エネルギー B は、

$$B = \sum_{i=1}^n M_i c^2 - M c^2 \quad (1.7)$$

である。ここで、束縛系は n 個の粒子から成るとし、光速を c と表した。例えば、重陽子は陽子と中性子の質量より 2.22(MeV) だけ軽くなっている。

そして、原子の束縛エネルギー (atomic binding energy) とは、中性原子を N 個の中性子と Z 個の中性な水素原子にバラバラに分けるのに必要なエネルギーであり、この論文では $\tilde{B}(N, Z)$ で表す。式で表すと、

$$\tilde{B}(N, Z) = N \times M_n + Z \times \tilde{M}_H - \tilde{M}(N, Z) \quad (1.8)$$

と表される。ここで、 M_n は中性子質量 (neutron mass) で

$$M_n = 939.5652 \text{ MeV}$$

であり、 \tilde{M}_H は水素原子質量 (hydrogen atom mass) で

$$\tilde{M}_H = 938.7829 \text{ MeV}$$

である。

1.3 原子核の束縛エネルギー

一方、原子核の束縛エネルギー (nuclear binding energy) とは、電子のついていない裸の原子核を N 個の中性子と Z 個の陽子に分けるのに必要なエネルギーのことであり、この論文では $\tilde{B}(N, Z)$ と書き表すことにする。式で表すと、

$$B(N, Z) = N \times M_n + Z \times M_p - M(N, Z) \quad (1.9)$$

さて原子核の構造に直接関係するのは、原子核の束縛エネルギー $B(N, Z)$ である。しかし実験値は原子に関係する量 $\tilde{B}(N, Z)$, $\tilde{M}(N, Z)$, $\tilde{M}_X(N, Z)$ などと考えられる。そこで、 B を \tilde{B} , \tilde{M} , \tilde{M}_X を使って表す式を求めよう

$$\tilde{B}(N, Z) = N \times (M_n - u) + Z \times (\tilde{M}_H - u) - (\tilde{M}(N, Z) - (N + Z) \times u) \quad (1.10)$$

とすることが出来る。(1.5) 式を代入することによって、

$$\tilde{B}(N, Z) = N \times \tilde{M}_X(1, 0) + Z \times \tilde{M}_X(0, 1) - \tilde{M}_X(N, Z) \quad (1.11)$$

となる。

次に (1.8) 式に (1.1) 式を代入する。

$$\tilde{B}(N, Z) = N \times M_n + Z \times \tilde{M}_H - M(N, Z) - Z \times M_e + a_{el} \times Z^{2.39}$$

ここで \tilde{M}_H は $\tilde{M}(0, 1)$ と直せるので \tilde{M}_H についても (1.1) 式を代入することができ、

$$\tilde{B}(N, Z) = N \times M_n + Z \times (M_p + M_e - a_{el}) - M(N, Z) - Z \times M_e + a_{el} \times Z^{2.39}$$

$$\tilde{B}(N, Z) = N \times M_n + Z \times M_p - M(N, Z) + a_{el}(Z^{2.39} - Z)$$

となる。ここで、(1.9) 式を代入すると、

$$\tilde{B}(N, Z) = B(N, Z) + a_{el}(Z^{2.39} - Z)$$

よって、

$$B(N, Z) = \tilde{B}(N, Z) - a_{el}(Z^{2.39} - Z) \quad (1.12)$$

さらに核の質量公式で表されるのは $B(N, Z)$ で、一方実験値は \tilde{M} , \tilde{M}_X , \tilde{B} の原子の質量で表されているので、(1.8) 式を (1.12) 式に代入すると、

$$B(N, Z) = N \times M_n + Z \times \tilde{M}_H - \tilde{M}(N, Z) - a_{el}(Z^{2.39} - Z) \quad (1.13)$$

ここで (1.5) 式より、

$$\tilde{M}(N, Z) = \tilde{M}_X(N, Z) + (N + Z) \times u \quad (1.14)$$

が求まり (1.14) 式を (1.13) 式に代入すると、

$$B(N, Z) = N \times M_n + Z \times \tilde{M}_H - \tilde{M}_X(N, Z) - (N + Z) \times u - a_{\text{el}}(Z^{2.39} - Z) \quad (1.15)$$

よって原子核の束縛エネルギー $B(N, Z)$ は、原子の束縛エネルギー $\tilde{B}(N, Z)$ 、原子質量 $\tilde{M}(N, Z)$ 、原子の質量超過 $\tilde{M}_X(N, Z)$ のいずれか一つの実験値から下記の関係式を用いて求めることができる。

$$B(N, Z) = \tilde{B}(N, Z) - a_{\text{el}}(Z^{2.39} - Z)$$

$$B(N, Z) = N \times M_n + Z \times \tilde{M}_H - \tilde{M}(N, Z) - a_{\text{el}}(Z^{2.39} - Z)$$

$$B(N, Z) = N \times M_n + Z \times \tilde{M}_H - \tilde{M}_X(N, Z) - (N + Z) \times u - a_{\text{el}}(Z^{2.39} - Z)$$

この論文では、

$$B(N, Z) = N \times M_n + Z \times \tilde{M}_H - \tilde{M}_X(N, Z) - (N + Z) \times u - a_{\text{el}}(Z^{2.39} - Z)$$

を使用していく。

ちなみに、軽い原子核は一般に束縛エネルギーが小さいが、ヘリウム (^4He)、炭素 (^{12}C)、酸素 (^{16}O)、ネオン (^{20}Ne) などは例外で大きい。1 核子当たりの束縛エネルギーは鉄 (Fe) やニッケル (Ni) で最大になり、約 8.7MeV に達する。この B/A は質量数が 250 になると、だいたい 7.5MeV ぐらいまで減るが、平均は 8MeV ぐらいとみられる。これは、原子核内で 1 核子が持つ束縛エネルギーは質量数によらないことを意味している。この現象を、原子核内の束縛エネルギーの飽和性という。

1.4 評価済み原子質量データ

原子質量の実験値としては G.Audi と A.H.Wapstra によりまとめられた評価済み原子質量データ表 [4] の値が広く用いられている。

この論文では彼らが公開しているデータファイルのうち『mass_rmd.mas95』(1995年版原子質量推奨値表)を用いる。図 1.1 にデータファイルの一部を示す。その各コラムの表す量について、左端から順番に以下で説明する。

- 第1コラムは、印刷時のページおくりの指示 (フォートラン書式) であり、データではない。
- 第2コラムは、『N - Z』で中性子数から陽子数をひいたものである。
- 第3コラムは、『N』で中性子数 (neutron number) という。
- 第4コラムは、『Z』で陽子数 (proton number) という。
- 第5コラムは、『A』で原子核を構成する核子の数であり質量数 (mass number) という。
- 第6コラムは、『EL』で元素記号である。
- 第7コラムは、『O』
- 第8コラムは、『MASS EXCESS』で(原子の)質量超過であり、この論文では $\tilde{M}_X(N, Z)$ と表すことにする。
- 第10コラムは、『BINDING ENERGY』で(原子の)束縛エネルギーであり、この論文では $\tilde{B}(N, Z)$ と表すことにする。
- 第12コラムは、 β 崩壊のことで $-\beta$ 崩壊と $+\beta$ 崩壊がある。
- 第13コラムは『BETA-DECAY ENERGY』で β 崩壊エネルギーだが今回は使わないので無視することにする。
- 第15コラムは、『ATOMIC MASS』で原子質量のことで、この論文では $\tilde{M}(N, Z)$ と表される。

第9コラム、第11コラム、第14コラムはそれぞれ『MASS EXCESS』、『BINDING ENERGY』、『ATOMIC MASS』の誤差である。

1.5 データファイルの読み込み

原子質量表データの『MASS EXCESS』、『BINDING ENERGY』、『ATOMIC MASS』など中にある#がついているデータは実験データではなく、G.Audi と A.H.Wapstra が精度があやしいというので予測データで置き換えたものである。今回の研究では飛ばすことにする。

これらの条件をつけて『mass_rmd.mas95』を読み込むと、1844 個の (N,Z) のデータが得られる。

ここで原子質量 $\tilde{M}(N, Z)$ 、原子質量超過 $\tilde{M}_X(N, Z)$ 、原子の束縛エネルギー $\tilde{B}(N, Z)$ から出した原子核の束縛エネルギー $B(N, Z)$ の最大誤差と平均誤差を下に表す。

表 1.1: それぞれの最大誤差

$\tilde{M}(N, Z)$ と $\tilde{B}(N, Z)$	0.601804 (keV)
$\tilde{M}(N, Z)$ と $\tilde{M}_X(N, Z)$	0.592804 (keV)
$\tilde{M}_X(N, Z)$ と $\tilde{B}(N, Z)$	0.140000 (keV)

表 1.2: それぞれの平均誤差

$\tilde{M}(N, Z)$ と $\tilde{B}(N, Z)$	0.172529 (keV)
$\tilde{M}(N, Z)$ と $\tilde{M}_X(N, Z)$	0.170577 (keV)
$\tilde{M}_X(N, Z)$ と $\tilde{B}(N, Z)$	0.006979 (keV)

最大誤差、平均誤差ともに 1keV 以下であった。

この誤差の原因としては、切捨て誤差によるものだと考えられる。

1.7 既知の原子核と未知の原子核

次章で説明する液滴模型のパラメータを図 1.2 に示した実験データのある核種の質量から決める。それを用いると陽子、中性子ドリップ線および r 過程経路は図のようになる。[5]

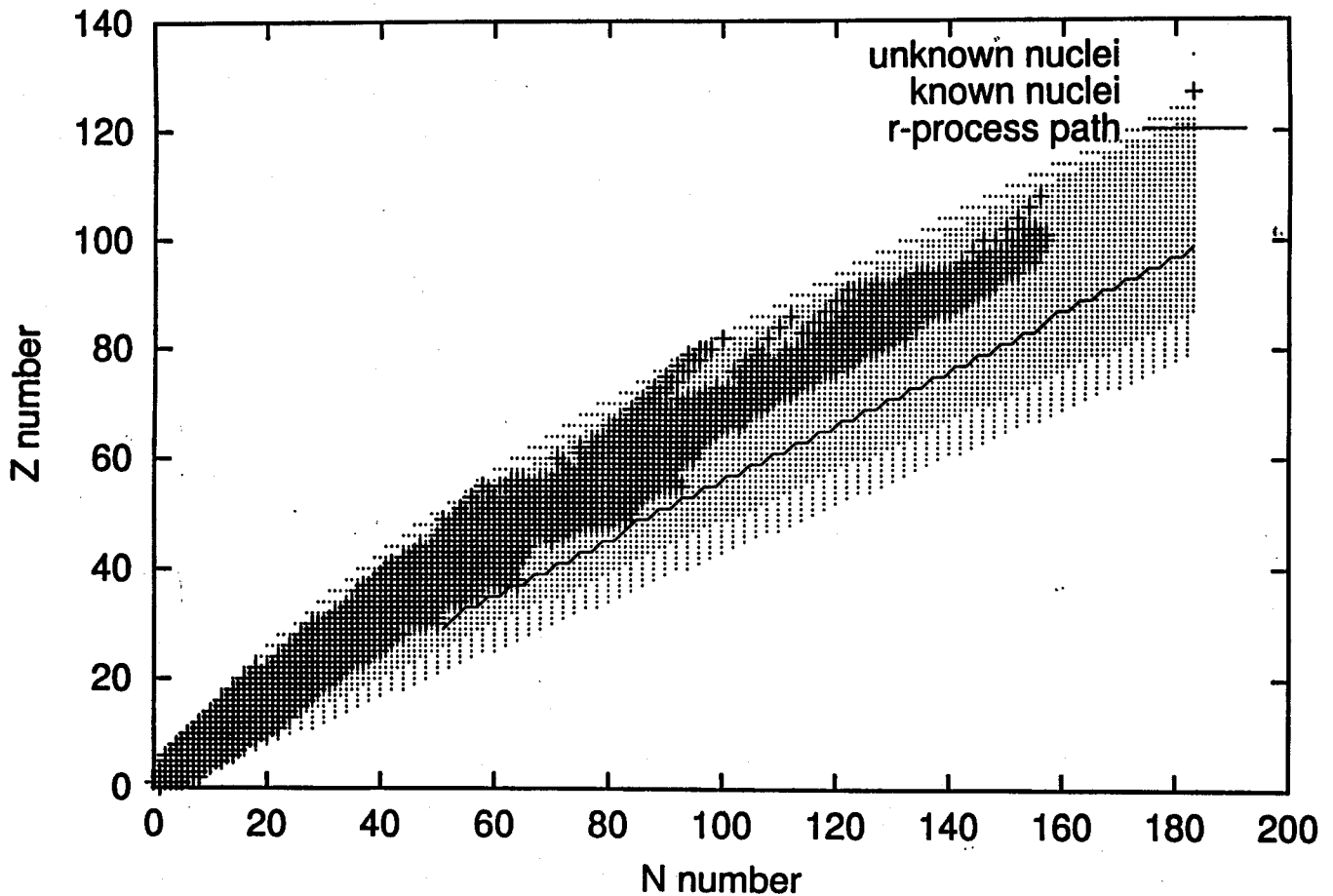


図 1.2: 既知の原子核と未知の原子核 X 軸:中性子数, Y 軸:陽子数

+ 印はデータのある 1844 個の核を示す。

• 印は液滴模型で存在すると予想される核

ここで陽子ドリップ線と中性子ドリップ線に囲まれている範囲は、理論的に原子核が存在すると予測できる。核子分離エネルギー (separation energy) を $S_n(N, Z)$ 、 $S_p(N, Z)$ と書くと

$$S_n(N, Z) = B(N, Z) - B(N - 1, Z)$$

$$S_p(N, Z) = B(N, Z) - B(N, Z - 1)$$

と書け $S_n(N, Z)$ 、 $S_p(N, Z)$ がそれぞれ 0 になる所がドリップ線である。

r 過程経路とは、超新星爆発時の β 崩壊より速い中性子捕獲反応で重元素の合成がおこる (N, Z) 平面上の経路である。これは、 $S_n(N, Z)$ が約 2MeV のところでおきる。よって、r 過程経路は

$$S_p(N, Z) \sim 2 \text{ (MeV)}$$

で書き表される。

第 2 章

質量公式のフィッティング

2.1 液滴模型について

1 章で求めた結合エネルギーを用いて 1 核子あたりの束縛エネルギーを求めると質量数との関係は図のようになる。

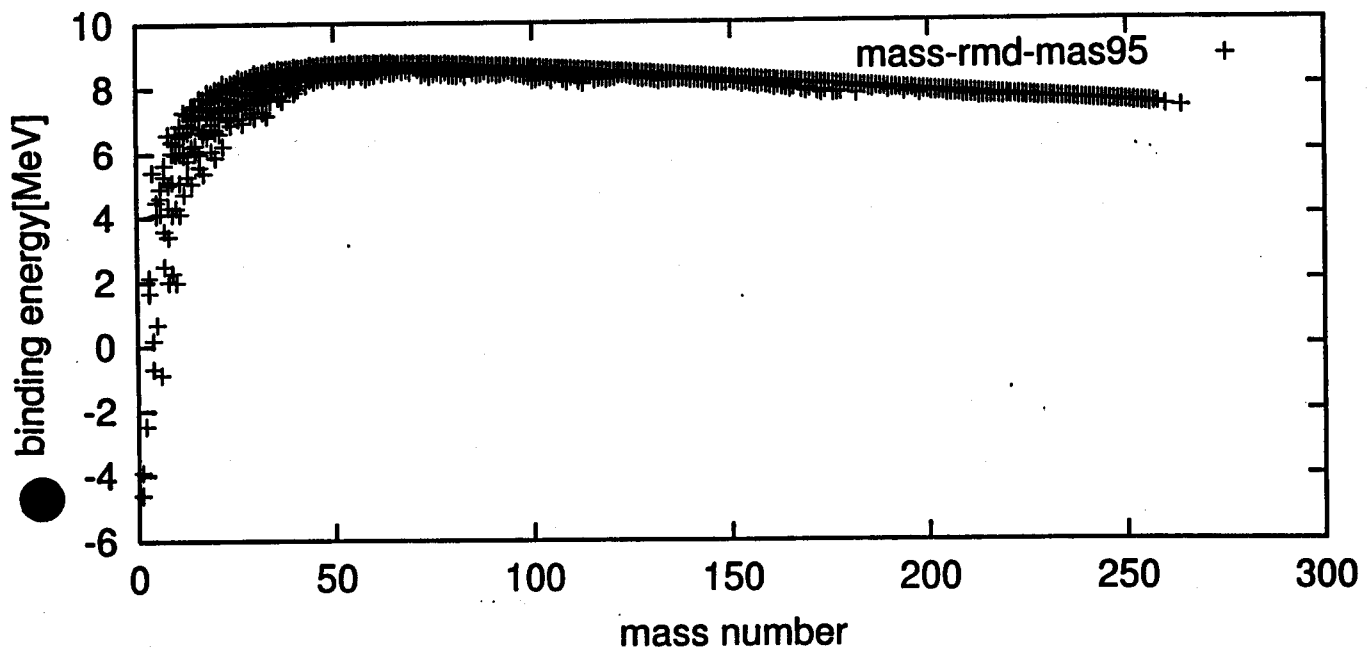


図 2.1: 1 核子あたりの束縛エネルギーの質量数への依存性

核内で 1 核子が持つ束縛エネルギーはほぼ 8MeV である。このことは 1 核子あたりの束縛エネルギーは質量にほとんどよらないことを意味している。この現象を結合エネルギーの飽和現象という。[6]

自然界で飽和性を示す最も簡単な系は液滴である。このことから原子核を考えると液滴模型が用いられこのような模型を原子核の液滴模型という。この液滴模型を使って束縛エネルギー (Binding energy) を表す公式を考えてみる。

2.2 質量公式について

束縛エネルギーを表す有名な公式にヴァイゼッカーベータ公式がある。ヴァイゼッカーベータの公式では結合エネルギーは以下の5つのエネルギーからなる。

体積エネルギー B_{vol} 、表面エネルギー B_{surf} 、対称エネルギー B_{sym} 、クーロンエネルギー B_{c} 、対エネルギー B_{pair} の5つである。

$$B = B_{\text{vol}} + B_{\text{surf}} + B_{\text{sym}} + B_{\text{c}} + B_{\text{pair}}$$

以下ではベータヴァイゼッカーの公式に新たに1項追加することを考える。追加する項は対称エネルギーを細分化した項である。

$$B_{\text{sym}} = B_{\text{symvol}} + B_{\text{symsurf}}$$

2.2.1 体積エネルギー

原子核の体積は、 $V = (4\pi/3)r_0^3 A$ 、 $R = r_0 A^{1/3}$ で表せる。このことから V は A に比例することがいえる。体積エネルギーを求めると
(ただし b_{vol} は体積に比例する比例定数とする。)

$$B_{\text{vol}} = b_{\text{vol}} A^{1/3} \quad (2.1)$$

2.2.2 表面エネルギー

表面エネルギーは (表面張力) \times (表面積) で表せる。
表面積は $S = 4\pi R^2$ で表せる。さらに $R = r_0 A^{1/3}$ なので、これを代入すると表面積 S は $A^{2/3}$ に比例することが分かる。 b_{surf} を比例定数として表面エネルギーを表す。

$$B_{\text{surf}} = b_{\text{surf}} A^{2/3} \quad (2.2)$$

2.2.3 対称エネルギー

液滴モデルは1成分系であるが実際の原子核は中性子と陽子の2成分系である。このことにより対称エネルギーが考えられる。

核子間の力は同種核子間よりも中性子-陽子間の方が強い。また同じ種類の核子が多くなると、後から来る核子はエネルギーの高い状態にはいることがパウリの禁止則により

強制されている。そこで中性子の数と陽子の数の差を小さくした方がエネルギーは低い。これらの効果によるエネルギーを対称エネルギーと言う。

内部の対称エネルギー B_{symvol} と表面の対称エネルギー B_{symsurf} に分けて考える。

体積エネルギーの係数が成分比に依存すると考えると

$$b_{\text{vol}} \left\{ 1 - b \left(\frac{N-Z}{A} \right)^2 \right\} A^{4/3} = b_{\text{vol}} A - b_{\text{vol}} b \frac{(N-Z)^2}{A} \quad (2.3)$$

第1項目が体積エネルギーとなる。第2項目の係数を新たに b_{symvol} とおくと2項目は

$$B_{\text{symvol}} = b_{\text{symvol}} (N-Z)^2 / A \quad (2.4)$$

これが体積対称項となる。同様に2成分形で表面エネルギーを考えると表面对称項が求まる。

$$B_{\text{symsurf}} = b_{\text{symsurf}} (N-Z)^2 / A^{4/3} \quad (2.5)$$

ただし B_{symsurf} はベーテヴァイゼッカー公式には含まれていなかった項である

2.2.4 クーロンエネルギー

陽子間にはクーロン斥力が働きそれによるエネルギーは

$$B_c = \frac{Z(Z-1)}{2} \frac{e^2}{R_e} = \frac{b_c Z^2}{A^{1/3}} \quad (2.6)$$

ここで R_e は2陽子間の平均距離である。 R_e は $A^{1/3}$ に比例するがその比例定数を $\frac{e^2}{2B_c}$ とあらわし、また $Z(Z-1)/2$ のかわりに $Z^2/2$ で近似すると右辺が得られる。

2.2.5 対エネルギー

原子核内の核子をもつ軌道角運動量の総和を L 、スピン核運動量の総和を S とすると原子核のスピン¹の全核運動量 I は $I = L + S$ となる。

基底状態で2陽子(2中性子)は必ず対になってお互いを打ち消しあっている²ので合成角運動量は0となる。よって N, Z が共に偶数のとき原子核のスピンは例外なく0となる。2つの同種核子間に働く角運動量を0にするような力を対相関相互作用と呼んでいる。この力による束縛エネルギーへの寄与が対エネルギー項である。

N, Z ともに偶のとき

$$B_{\text{pair}} = b_{\text{pair}} A^{-1/2} \quad (2.7)$$

N, Z どちらか1つが偶数のとき

$$B_{\text{pair}} = 0 \quad (2.8)$$

N, Z ともに奇数のとき

$$B_{\text{pair}} = -b_{\text{pair}} A^{-1/2} \quad (2.9)$$

2.3 質量公式で求める値

質量公式の方程式はヴァイゼッカーベータの公式に B_{symsurf} を足しあわせたものとなる。計算式で示すと以下ようになる。

$A = N + Z$ として

$$B(N, Z) = b_{\text{vol}}A + b_{\text{surf}}A^{2/3} + \frac{b_{\text{symvol}}(N - Z)^2}{A} + \frac{b_{\text{symsurf}}(N - Z)^2}{A^{4/3}} + \frac{b_c Z^2}{A^{1/3}} + B_{\text{pair}} \quad (2.10)$$

前で与えられた質量公式において A, N, Z はもとより与えられている。このことにより $B_{\text{vol}}, B_{\text{surf}}, B_{\text{symvol}}, \dots$ の1部分を求めることはできる。ただしそれぞれの係数 $b_{\text{vol}}, b_{\text{surf}}, b_{\text{symvol}}, b_{\text{symsurf}}, b_c, b_{\text{pair}}$ は未知数である。

よってこれらの係数 $b_{\text{vol}}, b_{\text{surf}}, b_{\text{symvol}}, \dots$ を決定する必要がある。

2.4 質量公式の簡易化

計算で求めやすいようにそれぞれの係数を $c_0, c_1, c_2, c_3, c_4, c_5$ とする。

以上の係数 c_k ($0 \leq k < K = 6$) を用いて質量公式を書き直すと

$$B(N, Z) = c_0A + c_1A^{2/3} + \frac{c_2(N - Z)^2}{A} + \frac{c_3(N - Z)^2}{A^{4/3}} + \frac{c_4Z^2}{A^{1/3}} + \begin{cases} +c_5A^{-1/2} \\ 0 \\ -c_5A^{-1/2} \end{cases} \quad (2.11)$$

1844 個の原子核の束縛エネルギーデータに通し番号をふり i 番目 ($0 \leq i < I = 1844$) の核の束縛エネルギーを $f(i)$, 中性子数を N_i , 陽子数 Z_i 質量数を $A_i = N_i + Z_i$ と表すものとする。

$f_0(i) = A_i, f_1(i) = A_i^{2/3}, f_2(i) = \frac{(N_i - Z_i)^2}{A_i}, f_3(i) = \frac{(N_i - Z_i)^2}{A_i^{4/3}}, f_4(i) = \frac{Z_i^2}{A_i^{1/3}}, f_5(i) = A_i^{-1/2}(N_i, Z_i \text{ がともに偶のとき})$
 $f_5(i) = A_i^{-1/2}(N_i, Z_i \text{ がともに奇のとき})$
 $f_5(i) = 0$ (それ以外) と定義すると

$$f(i) = c_0f_0(i) + c_1f_1(i) + c_2f_2(i) + c_3f_3(i) + c_4f_4(i) + c_5f_5(i) = \sum_{k=0}^{K-1} c_k f_k(i) \quad (2.12)$$

次節からは最小2乗法をつかってこれらの係数を求めていく

2.5 最小2乗法の解法

2.5.1 方程式の導出

i 番目 ($0 \leq i < I$) の原子核の束縛エネルギー (binding-energy) の計算値を $f(i)$ 、実験値を y_i とし $f(i)$ と y_i の誤差が最小のときの $f(i)$ を知りたい。ここで最小2乗法を用いる。最小2乗法とは

$$S = \sum_{i=0}^{I-1} \{f(i) - y_i\}^2 = \sum_{i=0}^{I-1} \left\{ \sum_{k=0}^{K-1} c_k f_k(i) - y_i \right\}^2 = 0$$

の S が最小になるような $f(i)$ を与えるように c_k ($0 \leq k \leq K-1$) を定める方法である。 S のグラフは下に凸のグラフだから最小値は微分値が0になるところである。つまり

$$\frac{\partial S}{\partial c_l} = 2 \sum_{i=0}^{I-1} \left\{ \sum_{k=0}^{K-1} c_k f_k(i) - y_i \right\} f_l(i) = 0$$

これを变形して

$$\sum_{k=0}^{K-1} \left\{ \sum_{i=0}^{I-1} f_k(i) f_l(i) \right\} c_k = \sum_{i=0}^{I-1} y_i f_l(i) \quad (2.13)$$

行列 A 、ベクトル X 、 D を行列を以下のように定義する。

$$\begin{aligned} A_{lk} &= \sum_{i=0}^{I-1} f_k(i) f_l(i) \\ X_k &= c_k \\ D_l &= \sum_{i=0}^{I-1} y_i f_l(i) \end{aligned} \quad (2.14)$$

これらを用いると変形された式 (2.13) は以下のようなになる

$$\sum_{k=0}^{K-1} A_{lk} X_k = D_l \quad (2.15)$$

2.5.2 方程式の解法

以下の手順で上の方程式を求める

- 1、 A_{lk} 、 D_l を I 個のデータから求める。
- 2、1で求めた A_{lk} 、 D_l を用いて未知ベクトル X を求める。

ここで A_{lk} 、 D_l はそれぞれ多数の数字が出て来る。その値を計算するためにプログラムをつくる。手順2の連立方程式の解を求めるには、文献 [7] のライブラリプログラム `gauss.c` を利用した。

2.6 E_{symvol} を加えた質量公式

2.6.1 方程式の解

前章の方程式を解いて係数を求めると

$$\begin{aligned} b_{\text{vol}} &= 15.6793848 \\ b_{\text{surf}} &= -17.7150904 \\ b_{\text{symvol}} &= -27.8140279 \\ b_{\text{symsurf}} &= 25.9571393 \\ b_{\text{c}} &= -0.7021743 \\ b_{\text{pair}} &= 10.7944178 \end{aligned} \tag{2.16}$$

これらの値を元の式に代入して新たに式を求めると

$$B = 15.679A - 17.715A^{2/3} - \frac{27.814(N-Z)^2}{A} + \frac{25.957(N-Z)^2}{A^{4/3}} - \frac{0.702Z^2}{A^{1/3}} + \begin{cases} +10.794A^{-1/2} \\ 0 \\ -10.794^{-1/2} \end{cases} \tag{2.17}$$

上の式がヴァイゼッカー-ベータの公式を対称エネルギー部分で1項 (E_{symbol}) 増やした質量公式となる

2.6.2 平均2乗誤差

上の式を用いて再び束縛エネルギー (binding energy) = $f(i)$ を求め、実際の値 y_i との平均2乗誤差を求めると

$$\sqrt{\frac{\sum_{i=0}^N (f(i) - y_i)^2}{N}} = 2.93 \text{ MeV} \tag{2.18}$$

となる。

2.7 液滴模系から得た値と実験値との比較

2.7.1 魔法数について

結合エネルギーの計算値と実験値の誤差を y 軸、中性子数を x 軸にとったグラフを書く。さらに陽子数を x 軸にとったグラフも作ってみる。

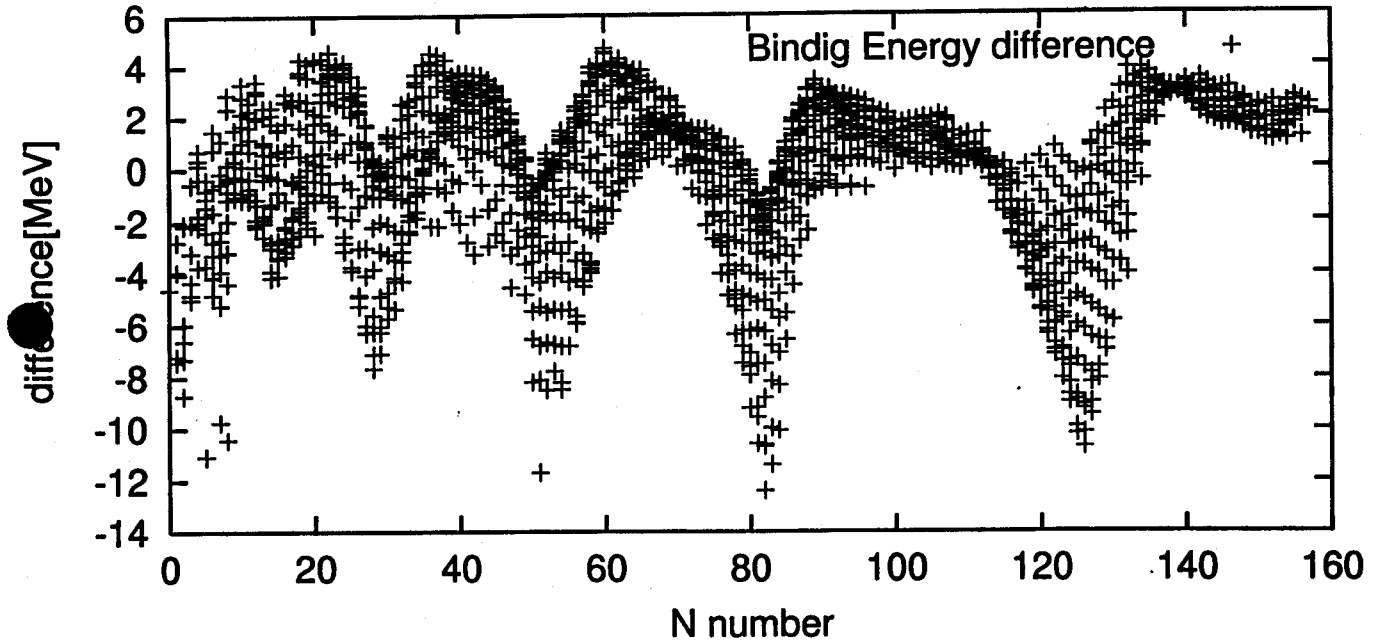


図 2.2: 結合エネルギー誤差 x 軸:中性子数、y 軸:計算値と実験値の誤差

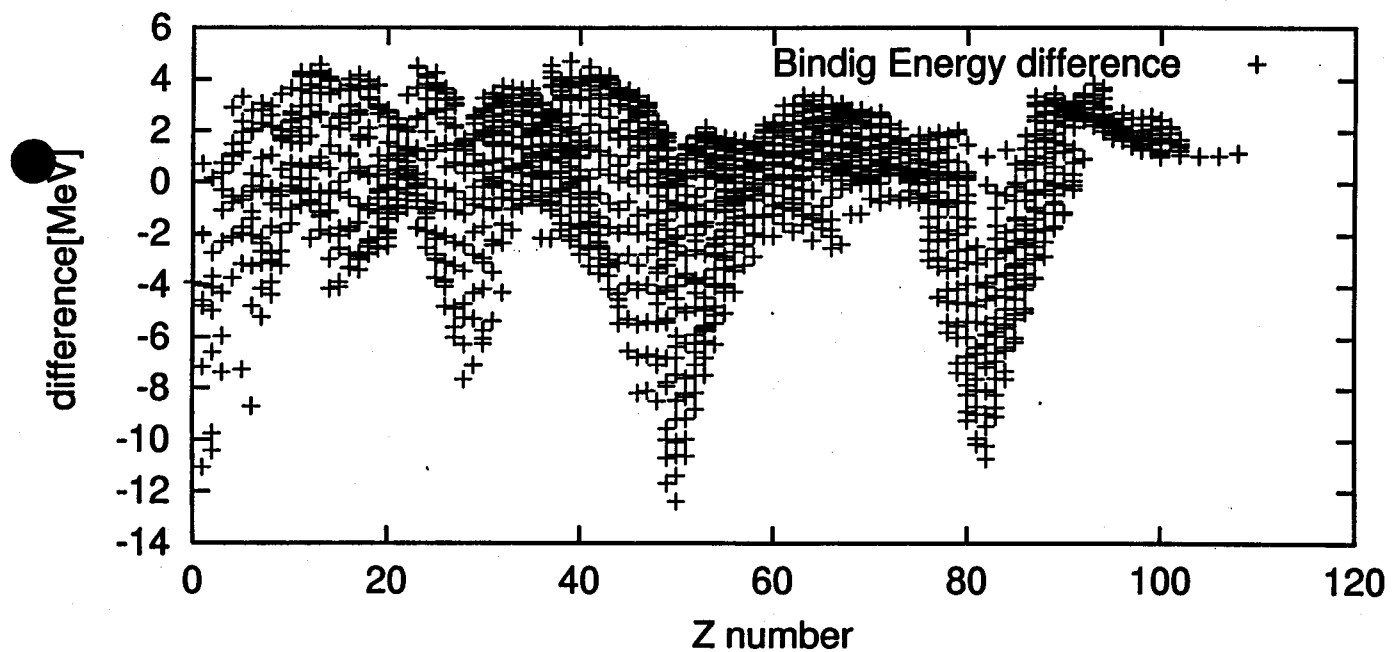


図 2.3: 結合エネルギー誤差 x 軸:陽子数、y 軸:計算値と実験値の誤差

2つのグラフを見るといくつかの点で急激な変化を見せ誤差が負の方向に存在している。これは実験値の結合エネルギーが計算値より実際は高くなっているからである。つまりその中性子数 ($N = 2, 8, 20, 28, 50 \dots$) のところでは原子核エネルギーが大幅に減少しているといえる。

このときの状態 ($N = 2, 8, 20, 28, 50 \dots$) を一般に魔法数と呼んでいる。ではなぜ魔法数が存在するのか理論的に考えてみることにする。魔法数は中性子または陽子で閉核となった状態に生じる。ここでは細かい説明は省略するが強いスピン軌道力が存在していれば魔法数は説明ができる。

簡単に説明すると、はじめは2個の核子(陽子、中性子)で閉核となる。これを量子力学的に説明すると基底状態では量子数が $(n_x, n_y, n_z) = (0, 0, 0)$ で $\epsilon = (3/2)\hbar\omega$ をもつ。この状態に上下2方向のスピンが入るので基底状態では2個の核子で閉核になるといえる。

1つエネルギーの高い状態を考えると、次は核子数が6個で閉核となり、あわせて8個が魔法数となるそのように考えていくと次は核子の数が12個加えられた状態で閉核となる。つまり8+12の20個のときに魔法数となる。20個以降では相互作用も考えていく(相互作用を詳しく説明すると長くなるのでここでは図のみの説明とする)と2, 8, 20, 28, 50, 82, 126のところでは魔法数が得られることが分かる。図で表すとこのようになる。

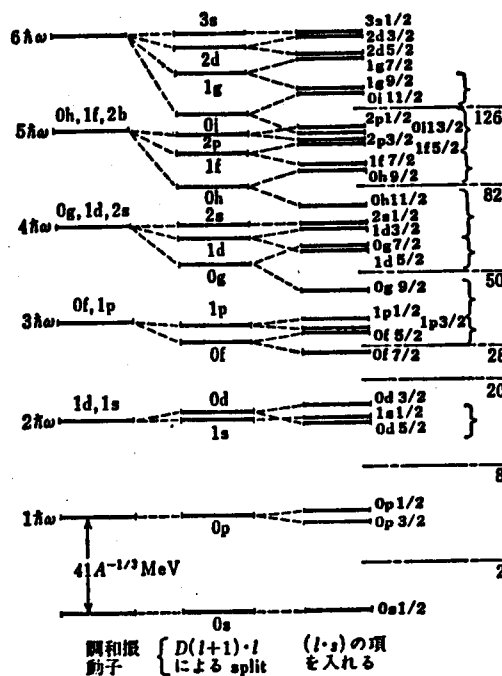


図 2.4: 魔法数の構造 (文献: [6] より)

これらのことにより実験的に得られた魔法数は理論的にも説明することができる。3章以降を考えるとときも魔法数に注意して考えなければならない。

2.8 対称エネルギーについて

前章まででヴァイゼッカーベーテの式より対称エネルギーについて項を一つ増やして考えてきた。

ここで対称エネルギー ($B_{\text{symsurf}}, B_{\text{symbol}}$) の有無がどのように質量公式へ影響を及ぼすか考える。そこでそれぞれの対称エネルギー $B_{\text{symsurf}}, B_{\text{symbol}}$ のそれぞれがあるときと無いときの4通りの平均2乗誤差を調べる。

以下がその表である。

対称エネルギーの状態	平均2乗誤差
なし	25.97 MeV
B_{symsurf}	11.12 MeV
B_{symvol}	3.91 MeV
$B_{\text{symsurf}} + E_{\text{symvol}}$	2.93 MeV

上の表から質量公式において B_{symbol} への依存性が B_{symsurf} への依存性より高いことが分かる。またどちらの対称エネルギーも考えないとき、つまり原子核を完全な1成分系と考える(中性子、陽子の存在を無視する)と誤差が 25.97 MeV と大きくはね上がった。これは原子核が2成分系ということが大きく質量公式に大きな影響を及ぼしていることを示している。とくに体積の対称エネルギー (B_{symvol}) はなくてはならないものだと考えられる。

ちなみに E_{symbol} だけがある状態がヴァイゼッカーベーテの質量公式にあてはまる。ヴァイゼッカーベーテの質量公式は以下のようなになる。

$$B = 15.44A - 16.66A^{2/3} - 45.08 \frac{(N-Z)^2}{A} - 0.70 \frac{Z^2}{A^{1/3}} + \begin{cases} 10.86A^{-1/2} & N, Z \text{ ともに偶数} \\ 0 & N, Z \text{ どちらかが偶数} \\ -10.86A^{-1/2} & N, Z \text{ ともに奇数} \end{cases} \quad (2.19)$$

まとめとして質量公式で深く対称項について考えた結果 B_{symsurf} という新しい項が得られた。これを質量公式に加えることによって、元となるヴァイゼッカーベーテの公式より平均2乗誤差において約 1MeV、割合にすると 24.9% も小さな値が求まった。ただし対称エネルギーをより細分化しても完全に平均2乗誤差が 0 とすることはなかった。これは、魔法数で大きく見られるように原子核には液滴模型では表せることができない殻効果が働いているためであると考えられる。

第 3 章

中性子、陽子の対相関ギャップの算出

この章では、前章で述べた質量公式の中の一つの項である対エネルギーについて中性子、陽子に分けて考える。

質量公式の項の中で対エネルギーの項の (N, Z) 依存性、特に $N - Z$ 依存性について確実に分かっていることはほとんどない。不安定核の実験的研究が進みつつある中、不安定核で対エネルギーがどう変わるかを予想することも大切である。[9] [10]

3.1 対相関エネルギー

前章で質量公式は対エネルギーを含むことを簡単に示した。核子の数によって対エネルギーの値が変化することもやったがこの章ではそのことをより詳しく調べる。

原子核の質量には陽子数と中性子数の偶、奇によって変化する部分が現れる。つまり、補正項として $A = N + Z$ (N は陽子数 Z は中性子数) とすると、

$$\delta(N, Z) = \begin{cases} -\Delta(N, Z) & (Z = \text{偶}, N = \text{偶}) \\ 0 & (A = \text{奇}) \\ +\Delta(N, Z) & (Z = \text{奇}, N = \text{奇}) \end{cases}$$

なる項が存在する。これは、核子の対相関によって生じるエネルギーである。核子は二つで一組の対をつくる性質がある。同じ種類の核子が偶数個あれば全部の核子が対をつくることができるが、奇数個のときは、一個だけ対をつくれず余ってしまう。一方、完全に対をつくった偶数個の核子の中から一個取り出すためには、対を壊さなければならない。このように、核子が偶数個のときと奇数個のときとは、 $\Delta(N, Z)$ だけ質量に差があるといってもよい。この $\Delta(N, Z)$ を、対相関エネルギーという。

質量公式では $\Delta(N, Z)$ を N と Z の滑らかな関数であるとして決定しようとする。この論文でも4章でそのようなアプローチをとるが、そのまえにこの章では個々の原子核についてその近隣の核との束縛エネルギーの比較から $\Delta(N, Z)$ を定め、 Δ がどの N, Z の関数としてどのくらい滑らかであるか調べることにする。また陽子の対エネルギーと中性子の対エネルギーが異なる場合を考えてそれぞれ $\Delta_p(N, Z)$ 、 $\Delta_n(N, Z)$ と表し区別することにする。この場合質量公式の対エネルギー項は次式のように修正される。

$$\delta(N, Z) = \begin{cases} 0 - \bar{\delta}(N, Z) & (N = \text{偶}, Z = \text{偶}) \\ \Delta_n(N, Z) - \bar{\delta}(N, Z) & (N = \text{奇}, Z = \text{偶}) \\ \Delta_p(N, Z) - \bar{\delta}(N, Z) & (N = \text{偶}, Z = \text{奇}) \\ \Delta_n(N, Z) + \Delta_p(N, Z) - \bar{\delta}(N, Z) & (N = \text{奇}, Z = \text{奇}) \end{cases} \quad (3.1)$$

$$\bar{\delta}(N, Z) = \frac{1}{2} \{ \Delta_n(N, Z) + \Delta_p(N, Z) \} \quad (3.2)$$

原子核の低い励起状態では、平均1体場に取り込めない同種粒子間に働く対相関が存在している。具体的にある核子が状態 $\varphi_\alpha(r)$ にあったとする。この時同種粒子の別の核子は、状態 $\varphi_\alpha(r)$ の波動関数と空間的に大きな重なりを持った状態を好む。このような相関が対相関である。[8]

$\varphi_\alpha(r)$ と一番大きな重なりを持った状態を持つ状態とは $\varphi_\alpha(r)$ の時間反転状態である。な

ぜなら、反転状態は同じ軌道を逆向き運動していると古典的にはいえるからである。

対相関ギャップは原子核の励起状態に出現する。原子核内の核子の一体運動に取り込めない相互作用のなかに短距離力の代表として対相互作用がある。これによって原子核において、特に偶偶核の励起スペクトルにギャップが現れる。

3.2 対相関ギャップの計算式

この論文で3点公式と呼ぶものは、ある偶偶核 (N, Z) の中性子対相関ギャップ $\Delta_n(N, Z)$ を求めるのに、その核と近隣の核 $(N-1, Z)$, $(N+1, Z)$ の束縛エネルギーを用いる式であり、下記のようにあらわせる。

$$\Delta_n^{(3)} = \frac{-B(N-1, Z) + 2B(N, Z) - B(N+1, Z)}{2}$$

陽子の対相関ギャップも同様である。

$$\Delta_p^{(3)} = \frac{-B(N, Z-1) + 2B(N, Z) - B(N, Z+1)}{2}$$

次にこの3点公式の導出を説明し、さらに精度を高めた4点公式、5点公式を説明する。

3.3 3点公式の導出

3点公式とは、求めたい関数の値が交互にバラバラできれいなグラフにならないとき、ある一点を取ってその周りの点の値を補正しきれいなグラフにするための公式である。

3.3.1 3点公式を使った対相関ギャップ

3点公式で求めたい対相関ギャップを Δ_3 とおく。

2次関数 $F(x)$ 上の3点を $F(-1), F(0), F(+1)$ とおき直線 $F(+1), F(-1)$ と点 $F(0)$ の距離を求めたい。その距離が Δ_3 である。

$$\begin{cases} F(-1) = f(-1) + \Delta_3 \\ F(0) = f(0) \\ F(+1) = f(+1) + \Delta_3 \end{cases}$$

において $f(-1), f(0), f(+1)$ を通る二次関数 $F(x)$ の傾きができるだけ小さな値つまり0になれば良いのである。そのための関数 $f(x)$ を求める。

まず $f(x)$ を以下の3つの関数 $h_{-1}(x), h_0(x), h_{+1}(x)$ で表す。

$$f(x) = Ah_{-1}(x) + Bh_0(x) + Ch_{+1}(x) \quad (A, B, C \text{ は定数})$$

$h_{-1} = (x+1)x$ つまり $x=0, x=-1$ を通る2次関数

$h_0 = (x+1)(x-1)$ つまり $x=1, x=-1$ を通る2次関数

$h_1 = (x-1)x$ つまり $x=0, x=1$ を通る2次関数

このことより $f(-1), f(0), f(+1)$ を計算するとそれぞれ

$$f(-1) = Ah_{-1}(-1) + 0 + 0, \text{ つまり } A = \frac{f(-1)}{h_{-1}(-1)}$$

$$f(0) = 0 + Bh_0(0) + 0, \text{ つまり } B = \frac{f(0)}{h_0(0)}$$

$$f(+1) = 0 + 0 + Ch_{+1}(+1), \text{ つまり } C = \frac{f(+1)}{h_{+1}(+1)}$$

$h_{-1}(-1), h_0(0), h_{+1}(+1)$ をそれぞれを代入すると $2, -1, +2$ となるので

$$A = f(-1)/2, B = -f(0), C = f(+1)/2$$

これより $f(x)$ を求めると

$$f(x) = \frac{f(-1)}{2}(x+1)x + f(0)(x+1)(x-1) + \frac{f(+1)}{2}(x-1)x$$

$f(x)$ を x について 2 階微分したものが 0 となれば良いので以下が成り立つ。

$$\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} = f(-1) - 2f(0) + f(+1) = 0$$

ここで、

$$\begin{cases} f(-1) + \Delta_3 = F(-1) \\ f(0) = F(0) \\ f(+1) + \Delta_3 = F(+1) \end{cases}$$

を代入しなおす。すると

$$0 = \frac{-F(-1) + \Delta_3}{2} + F(0) + \frac{-F(+1) + \Delta_3}{2}$$

これを簡単にして、 Δ_3 の式で表すと、

$$\Delta_3 = \frac{-F(-1) + 2F(0) - F(+1)}{2}$$

これが 3 点公式を使った対相関ギャップである。

3.3.2 4点公式と5点公式の導出

4点公式を使った対相関ギャップとは3点公式を使った対相関ギャップを発展させたものであり、基本的には3点公式を使った対相関ギャップの解法と同じである。4点公式を使った対相関ギャップの場合には

$$\begin{cases} F(-1) = f(-1) + \Delta_4 \\ F(0) = f(0) \\ F(+1) = f(+1) + \Delta_4 \\ F(+2) = f(+2) \end{cases}$$

と置く。ここから、 $f(-1), f(0), f(+1), f(+2)$ を通る3次関数 $F(x)$ の傾きができるだけ小さな値つまり0になる所をもとめる。

そのため、 $f(x)$ を以下の4つの関数 $k_{-1}(x), k_0(x), k_{+1}(x), k_{+2}(x)$ で表す。

$$f(x) = Ak_{-1}(x) + Bk_0(x) + Ck_{+1}(x) + Dk_{+2}(x) \quad (A, B, C, D \text{ は定数})$$

$k_{-1} = (x-1)(x-2)x$ つまり $x=0, x=+1, x=+2$ を通る3次関数

$k_0 = (x+1)(x-1)(x-2)$ つまり $x=+1, x=-1, x=+2$ を通る3次関数

$k_1 = (x+1)(x-2)x$ つまり $x=0, x=-1, x=+2$ を通る3次関数

$k_2 = (x-1)(x+1)x$ つまり $x=0, x=+1, x=+1$ を通る3次関数

これより $f(-1), f(0), f(+1), f(+2)$ を計算するとそれぞれ次のようになる

$$f(-1) = Ak_{-1}(-1)$$

$$f(0) = Bk_0(0)$$

$$f(+1) = Ck_{+1}(+1)$$

$$f(+2) = Dk_{+2}(+2)$$

ここから3点公式を使った対相関ギャップと同様に解いてくと

$$-\Delta_{4a} = \frac{-F(-1) + 3F(0) - 3F(+1) + F(+2)}{4}$$

と書ける。これは、前進型公式と呼ばれる。下記の後退型公式も同様にして導くことが出来る。

$$-\Delta_{4b} = \frac{F(-2) - 3F(-1) + 3F(0) - F(1)}{4}$$

同様に 5 点公式を使った対相関ギャップは

$$-\Delta_5 = \frac{F(-2) - 4F(-1) + 6F(0) - 4F(1) + F(2)}{8}$$

と書ける。他に Δ_5 は 4 点公式を使った対相関ギャップを $F(-2), F(-1), F(0), F(1)$ で取った Δ_{4b} と Δ_{4a} を使って

$$\Delta_5 = \frac{\Delta_{4a} + \Delta_{4b}}{2}$$

とも書ける。

3.4 対相関ギャップの計算

第 1 章で読み込んだ原子質量のデータファイルを原子核の束縛エネルギーに換算して、対相関ギャップを計算する。この場合、陽子と中性子は共に偶数だけについて計算する。陽子に対する対相関ギャップと中性子に対する対相関ギャップをそれぞれ求める。

しかし、同じ点で 3 点公式と 4 点公式、5 点公式を使うため 4 点公式、5 点公式の一部にはデータがないため計算できないところが出てきてしまう。これを解消するため計算できるところだけで対相関ギャップを求める。

よって、全データの数は約 350 個程度になり、それを図にしたのが以下である。

3.4 陽子の対相関ギャップのグラフ

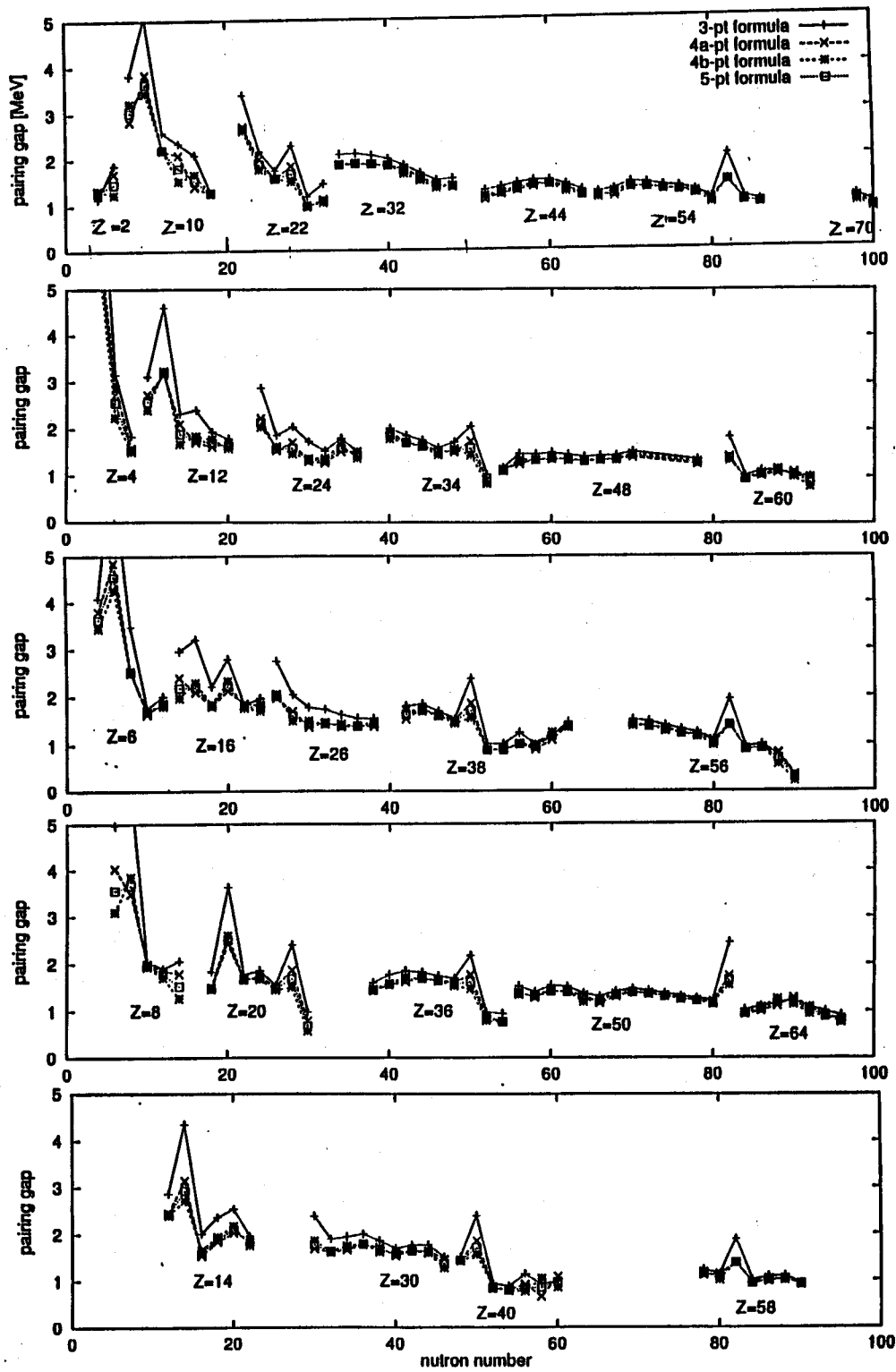


Figure 3.1: 陽子の対相関ギャップのグラフ X軸:陽子数 Y軸:対相関ギャップ (中性子数を固定)

このグラフは縦軸に中性子の対相関ギャップ、横軸に中性子の数を取り、アイソトープのチェーンを表したものである。

また、3点公式は他の公式に比べて誤差が大きく精度が悪いことが分かる。

そして、魔法数のところで誤差が見受けられることが分かる。

3.5 中性子の対相関ギャップのグラフ

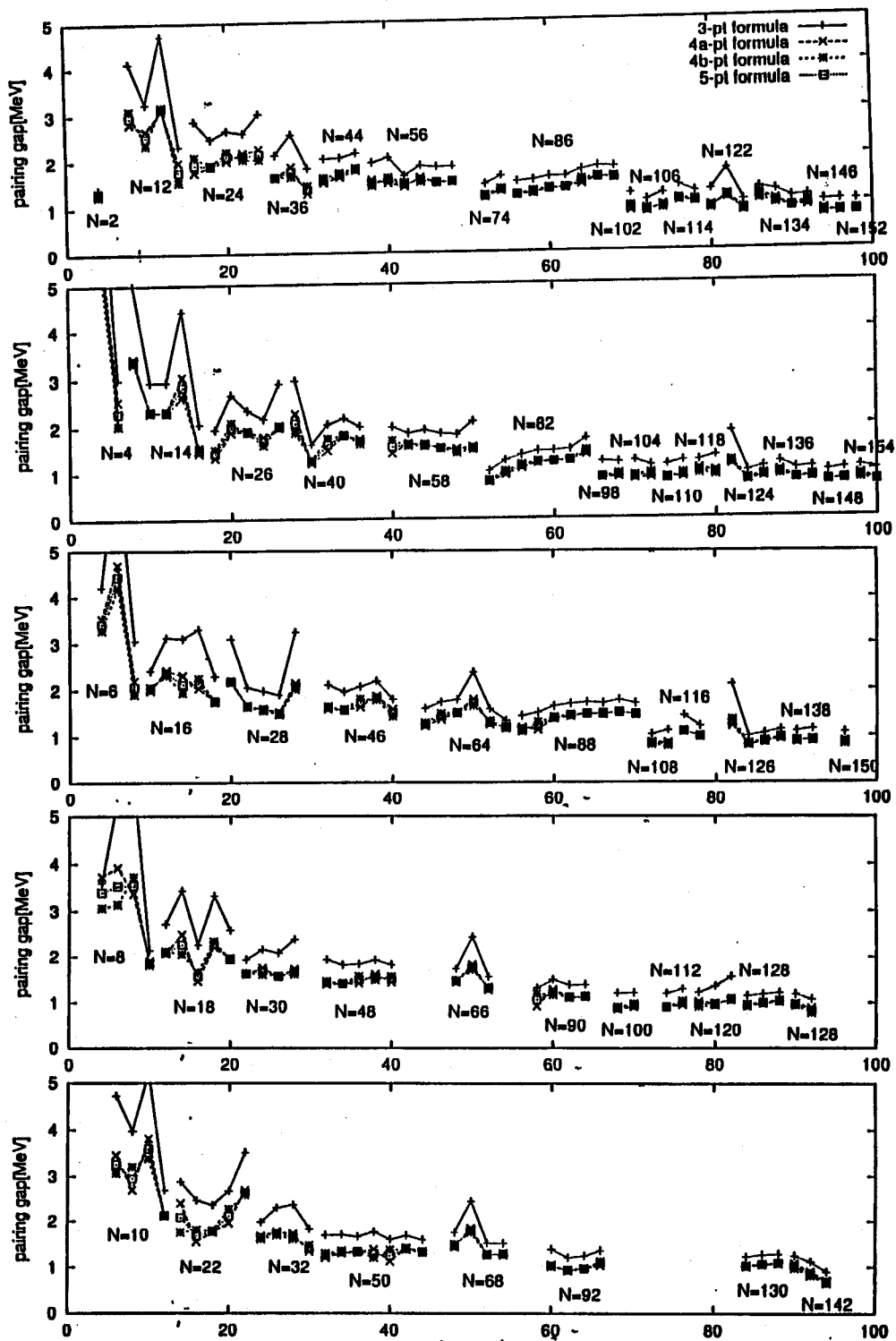


Figure 3.2: 中性子の対相関ギャップのグラフ X軸:中性子数 Y軸:対相関ギャップ (陽子数を固定)

このグラフは縦軸に陽子の対相関ギャップ、横軸に陽子の数を取り、今度は中性子の数が同じところをつないだものを表したものである。

このグラフも陽子の対相関ギャップのグラフと同様に3点公式は他の公式に比べて誤差が大きく精度が悪いことが分かる。

これもまた同様に、魔法数のところで誤差が大きくなることが分かる。

3.7 それぞれの対相関ギャップのグラフからの結果

この二つのグラフの結果から閉殻核では3点公式など公式はどの公式も適用できないことがわかる。この理由として下の図のようなところでは、原子核の束縛エネルギーが滑らかでないため対相関ギャップもうまく出せないからである。

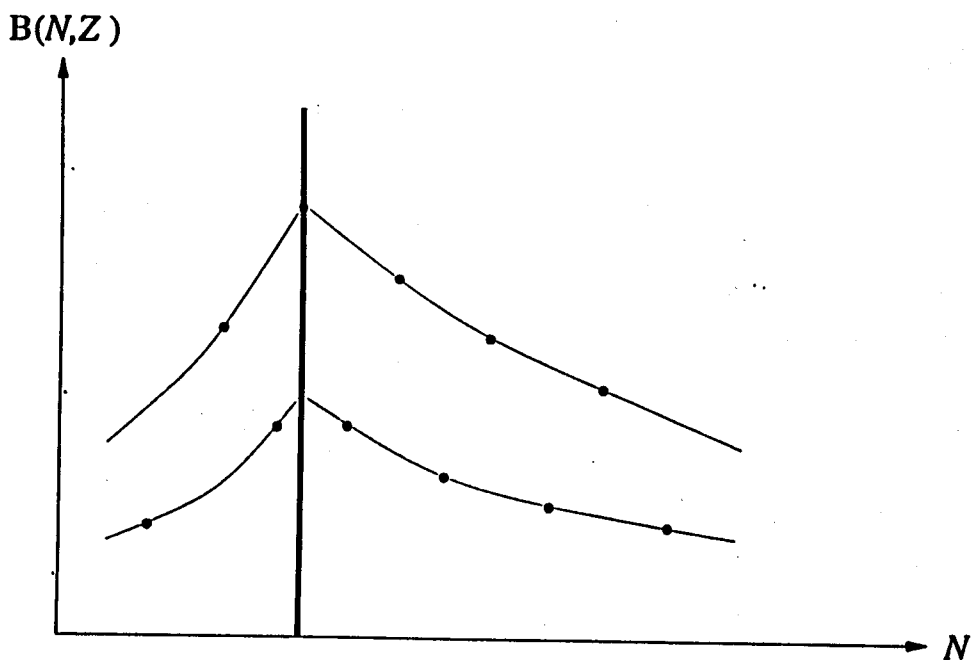


図 3.3: 閉殻核時の原子核の束縛エネルギー X 軸:中性子数 Y 軸:原子核の束縛エネルギー (陽子数を固定)

しかし、閉殻核以外では4点以上の公式はよく一致するため、十分な精度が得られることがわかる。また、これにより逆に公式の導出において前提とされた対エネルギー概念の正しさが証明されるとも言うことができる。

第 4 章

対相関ギャップのフィット

4.1 対相関ギャップ

3章で求めた対相関ギャップを2章で使った最小2乗法を使ってフィットする。前でペアリングギャップは経験的には $A^{-1/2}$ に比例すると考えられて来たということを述べた。また理論的には仮定の仕方によりペアリングギャップは $1/R$ に比例しているとも $\frac{1}{R^2}$ に比例するとも考えることが出来る。 $R \propto A^{1/3}$ と言うことは以前に述べた通りである。つまりペアリングギャップは $A^{-1/3}$ や $A^{-2/3}$ に比例しているとも考えられる。そこでまずはじめにこれらの単一関数をつかって対相関ギャップのフィットを試みる。

4.2 ペアリングギャップが質量数のみの関数であるとき

Δ_5 が単一関数 A^{-k} に比例すると考える。

$$\Delta_\tau = CA^{-k} \text{ [MeV]} \quad (4.1)$$

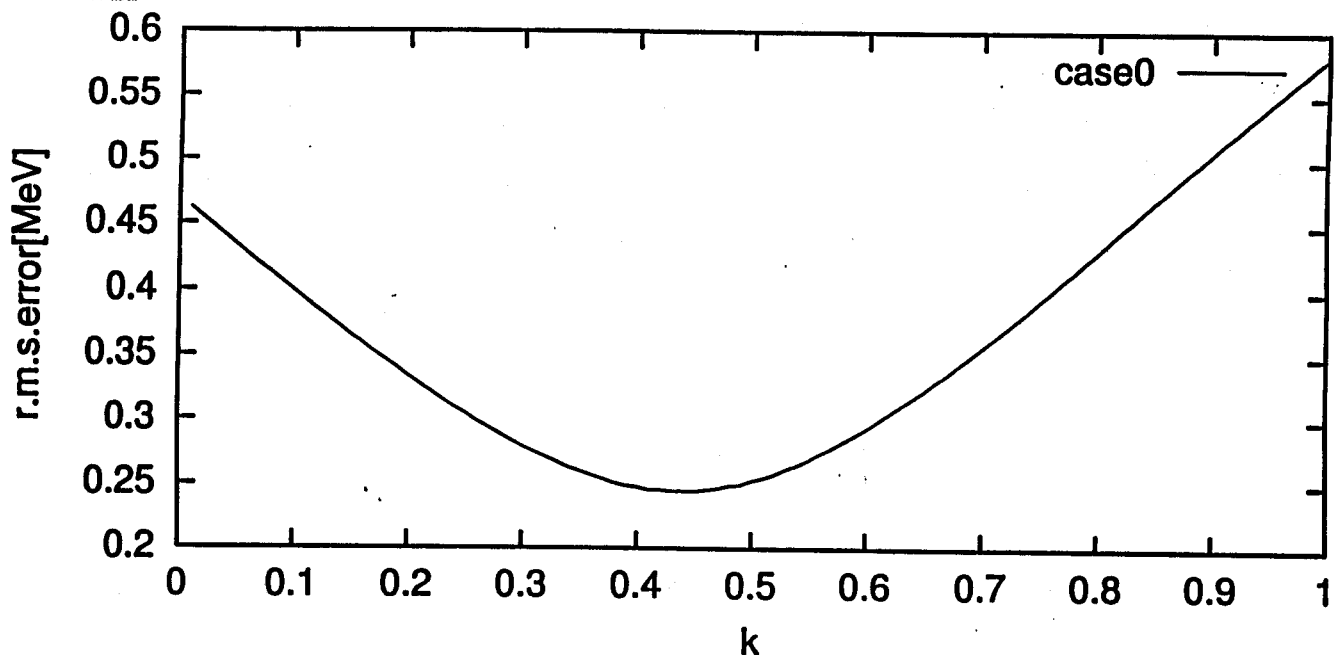


図 4.1: case0 のグラフ x 軸:冪乗, y 軸:平均2乗誤差

(4.1) は、3章でもとめた陽子対相間ギャップ、中性子対相間ギャップを読み込んで2章と同様に最小2乗法を使って係数 C を計算する。なおここでは詳しい計算方法は省略する。

また指数を k とおいた。この論文では k を指数として扱う。この式を case0 とする。グラフは case0 において k を変化させたときの平均2乗誤差の変移を表している。グラフから読みとれるように平均2乗誤差がもっと小さくなるときは $k = -0.440$ のときでこのときの式は

$$\Delta_{\tau} = 9.86A^{-0.440} \text{ [MeV]} \quad (4.2)$$

となる。

以下の式 case1,2,3 では (4.1) において指数 (k) が $-1/2$, $-1/3$, $-2/3$ のときを考えている。

case1 場合の計算結果は式は次のようになり平均2乗誤差は 0.253 MeV となる。

$$\Delta_{\tau} = 12.718A^{-1/2} \text{ [MeV]} \quad (4.3)$$

このときのグラフを中性子、陽子のペアリングギャップとともに示すと下のグラフのようになる。

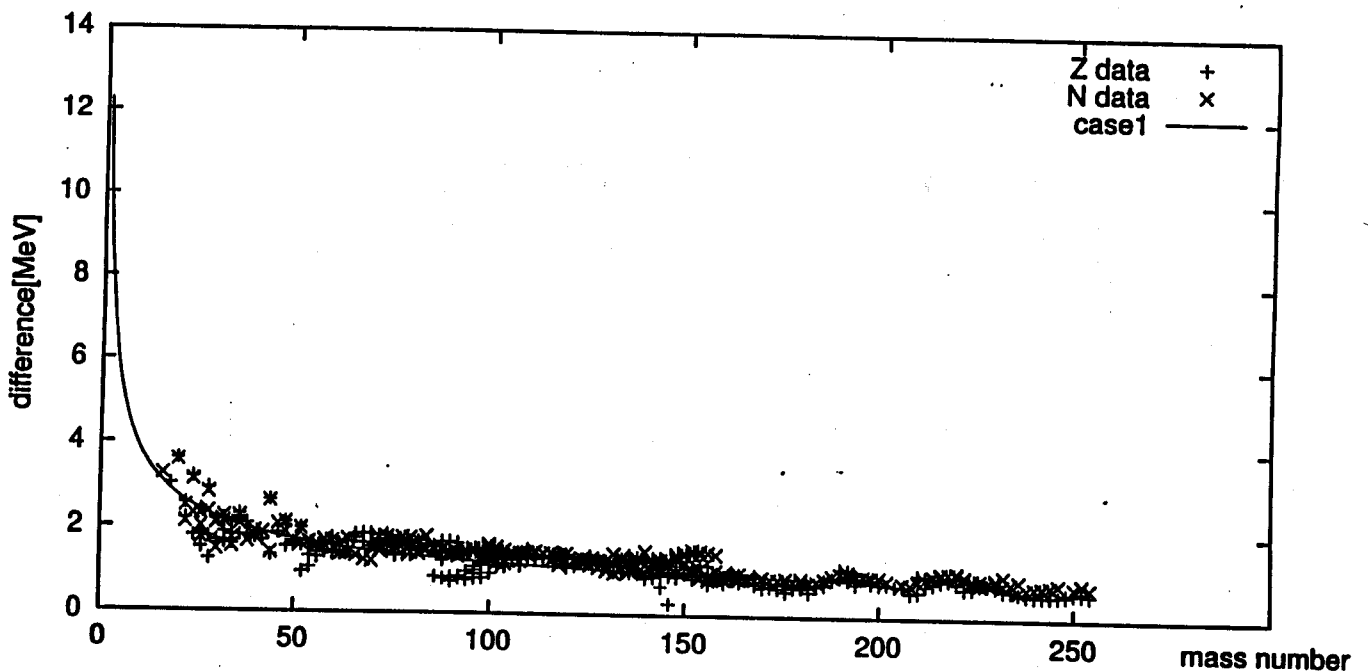


図 4.2: case1 のグラフ 質量数, y 軸:平均2乗誤差

case2 の場合の計算結果は式は次のようになり平均 2 乗誤差は 0.265 MeV となる。

$$\Delta_{\tau} = 6.186A^{-1/3} \text{ [MeV]} \quad (4.4)$$

case3 の場合の計算結果は式は次のようになり平均 2 乗誤差は 0.334 MeV となる。

$$\Delta_{\tau} = 25.023A^{-2/3} \text{ [MeV]} \quad (4.5)$$

次にペアリングギャップが質量数依存の複数項に比例するときを考える。

ここでは $A^{-1/3}$ と $A^{-2/3}$ のふたつの関数に依存すると考え、以下の式が成り立つとする。この式を case0a とする。

$$\Delta_{\tau} = 4.328A^{-1/3} + 7.827A^{-2/3} \text{ [MeV]} \quad (4.6)$$

となり平均 2 乗誤差は 0.250 MeV となる。

この値は、 $\Delta_{\tau} = CA^{-k}$ [MeV] で C と k をパラメータとしたときの平均 2 乗誤差の最小値と 0.245 MeV と非常に近い値になっていることに注目されたい。冪指数をパラメータとした場合その最適化には連立 1 次方程式は利用できないため、必要な計算量が非常に多くなる。したがって次節で更に成分比依存性も含んだ式のフッティングをするにあたっては、質量数依存性として $A^{-1/3}$ と $A^{-2/3}$ の 1 次結合型を採用することで計算量を少なく保つことにする。

4.3 ペアリングギャップが成分比の関数でもあるとき

4.3.1 Vogel が考えた公式

今まで述べて来たようにペアリングギャップが A に依存するということは経験則として広く認められている。原子核は2成分系であるので A を介さない N, Z への直接の依存性も考えられる。

そこで Vogel[11] はペアリングギャップは $\frac{N-Z}{A}$ と $A^{-1/3}$ へ依存する関数と考えて以下の式を作った。

$$\Delta = \left\{ 7.2 - 44 \left(\frac{N-Z}{A} \right)^2 \right\} A^{-1/3} \text{ [MeV]} \quad (4.7)$$

この式の $\frac{N-Z}{A}$ 依存性は $A^{-1/3}$ であるときに得られたもので、 A 依存性の自由度を増やしたときに $\frac{N-Z}{A}$ 依存性の形が変わってしまうのではないかという疑念があったため、あまり広く受け入れられていない。そこで A 依存性の自由度を増やすと、式と平均2乗誤差は、どのように変化するか調べる。

4.3.2 ペアリングギャップが $A^{-1/3}$ の冪乗の関数の足し合わせに比例するとき

質量数及び成分比の関数として以下の6項を考える。

$$\begin{aligned} f_1(A, R_\tau) &= A^{-1/3} \\ f_2(A, R_\tau) &= A^{-1/3} R_\tau \\ f_3(A, R_\tau) &= A^{-1/3} R_\tau^2 \\ f_4(A, R_\tau) &= A^{-2/3} \\ f_5(A, R_\tau) &= A^{-2/3} R_\tau \\ f_6(A, R_\tau) &= A^{-2/3} R_\tau^2 \end{aligned} \quad (4.8)$$

ただし $\tau = n, p$ とあらわす。 $R_n = (N - Z)/A$, $R_p = -(N - Z)/A$ となる。以上の関数、係数 C_i をもちいて求めたい式を以下の3つで表す。

case5

$$\Delta_\tau = C f_1 + C f_2 + C f_4 + C f_5 \text{ [MeV]} \quad (4.9)$$

case6

$$\Delta_\tau = C f_1 + C f_3 + C f_4 + C f_6 \text{ [MeV]} \quad (4.10)$$

case7

$$\Delta_\tau = \sum_{i=1}^6 C_i f_i(A, R_\tau) \text{ [MeV]} \quad (4.11)$$

case5 では $(\frac{N-Z}{A})^2$ の依存性が仮定さ case6 では $(\frac{N-Z}{A})^2$ の依存性が仮定されている。そして case7 では $(\frac{N-Z}{A})$, $(\frac{N-Z}{A})^2$ 両辺の依存性を含んでいる。いずれの式も Vogel の公式において質量数依存性が $A^{-1/3}$ 項だけだったのに対して $A^{-2/3}$ へも依存させると言うように自由度を1つ増やしてみた。自由度を増やしたことによりどのような変化が生じるかを知りたいのである。自由度を増やしても変化が小さければ Vogel の式の信頼性を現在より高く評価してよいであろう。

case5,6,7 のときのそれぞれの係数を求めて実際のペアリングギャップとの平均2乗誤差を求めると以下ようになる。

case5

$$\Delta_{\tau} = 4.464A^{-1/3} + 0.028A^{-1/3}R_{\tau} + 7.402A^{-2/3} + 11.393A^{-2/3}R_{\tau} \quad [\text{MeV}] \quad (4.12)$$

となり平均2乗誤差は 0.230 MeV となる。

case6

$$\Delta_{\tau} = 6.729A^{-1/3} - 58.141A^{-1/3}R_{\tau}^2 + 1.334A^{-2/3} + 99.452A^{-2/3}R_{\tau}^2 \quad [\text{MeV}] \quad (4.13)$$

となり平均2乗誤差は 0.221 MeV となる。

case7

$$\begin{aligned} \Delta_{\tau} = & 6.692A^{-1/3} - 0.544A^{-1/3}R_{\tau} - 53.608A^{-1/3}R_{\tau}^2 + 1.432A^{-2/3} - \\ & 12.996A^{-2/3}R_{\tau} + 87.419A^{-2/3}R_{\tau}^2 \quad [\text{MeV}] \end{aligned} \quad (4.14)$$

となり平均2乗誤差は 0.206 MeV となる。

case5, 6, 7 の平均2乗誤差を見るかぎり case7 が1番誤差が少なく、より正確な式と考えることができる。

case5,6,7 の式を表したグラフを次のページに示す。ここではペアリングギャップが質量数へ依存する場合のグラフとここではペアリングギャップが $N-Z$ へ依存するときの2つのグラフを示す。

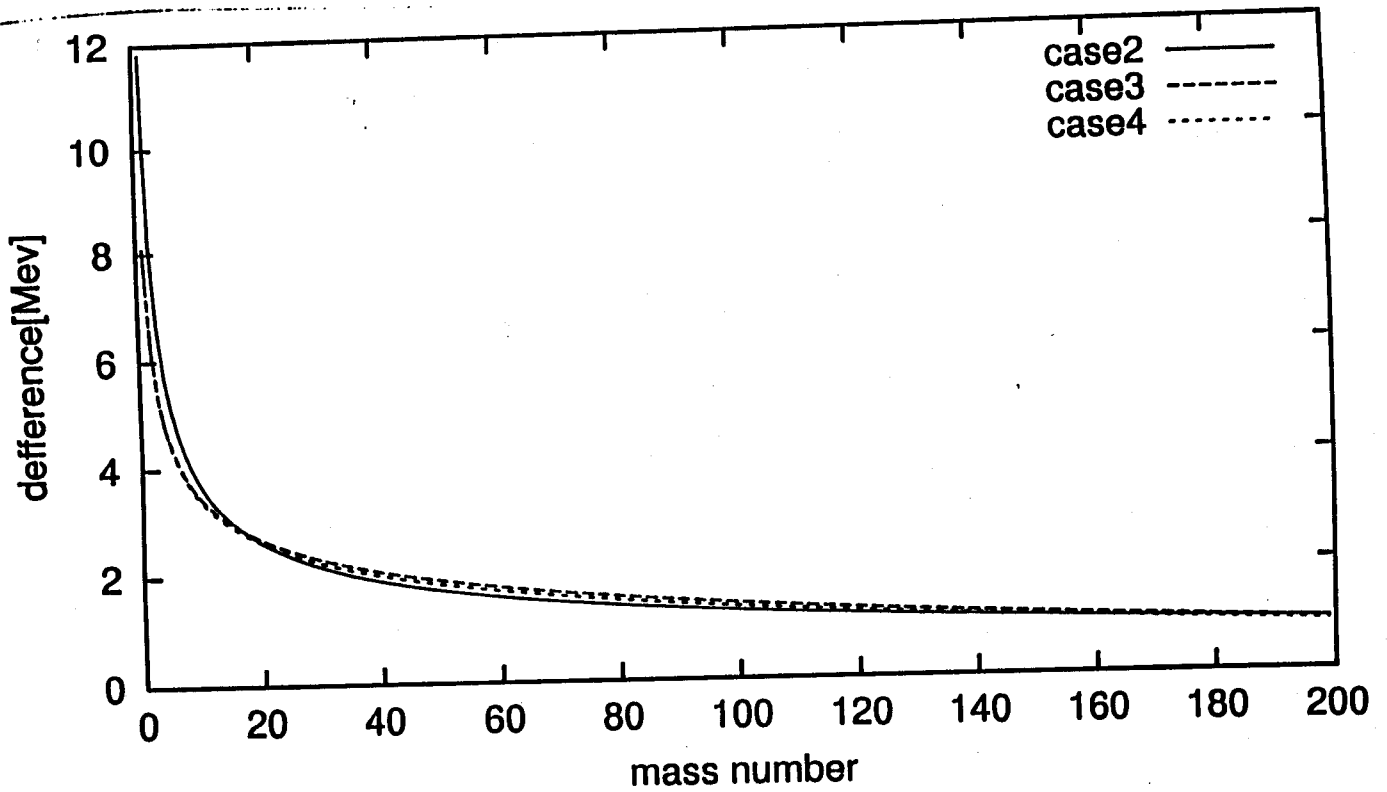


図 4.3: case5,6,7 のグラフ x 軸:質量数, y 軸:平均 2 乗誤差

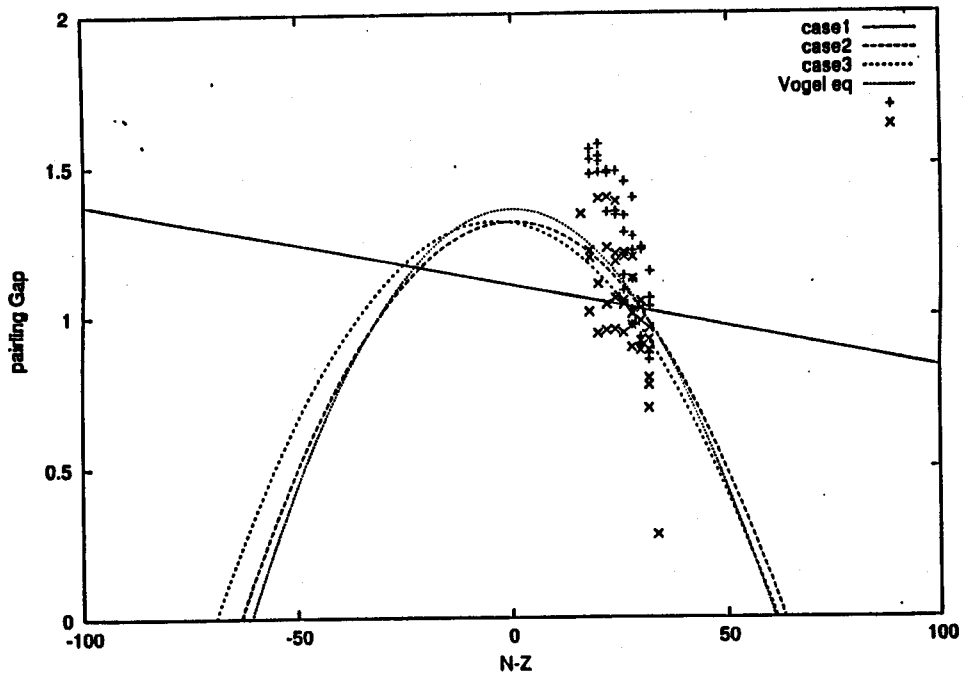


図 4.4: $A = 150$ での Vogel の式、case5,6,7 のグラフ x 軸:陽子数と中性子数の差, y 軸:平均 2 乗誤差

+ 印は陽子のペアリングギャップ。* 印は中性子のペアリングギャップ。

4.4 自由度を増やしての考察

平均2乗誤差から言えば case1($\frac{N-Z}{A}$ の関数) より case2($(\frac{N-Z}{A})^2$ の関数) の方が2つを組み合わせた case3 により近い式となったといえる。また $N-Z$ への依存性のグラフを見てもそれはいえる。

このことはペアリングギャップにおいて $\frac{N-Z}{A}$ より $(\frac{N-Z}{A})^2$ の依存性の方が強いと言うことが出来る。

つぎに Vogel の式と case2 を比較する。case2 は、 R^2 が $A^{-1/3}$, $A^{-2/3}$ へ依存している関数であった。つまり Vogel の式に自由度を一つ加えたものである。グラフを見ると分かるが2つの式はあまり変化が見られないことが分かる。このことから Vogel の式は自由度をあげても大きな変更を受けないことが分かった。

まとめ

- ヴァイゼッカーベーテの質量公式において表面对称エネルギーをふやすと、より精度の高い式が求まる
- 原子核には殻効果が働いているため、液滴模型だけでは正確な束縛エネルギーを求めることはできない。魔法数 ($N, Z = 2, 8, 20, 28, \dots$) では閉殻となるため特に大きな殻効果が働く。
- $B(N, Z)$ は殻効果の影響により対相関ギャップを生じる。これは閉殻以外では5点公式を用いると十分な精度が得られる。
- 対相関ギャップのフィットにあたり $\frac{N-Z}{A}$ への依存性を考え、より精度の高い式を得た。成分比依存性に関しては Vogel の式の A 依存性の自由度を増やしても Vogel の得た成分比依存性は変更は受けないことがいえる。

参考文献

- [1] 原子核質量の評価データと予測 (日本原子核研究所核データニュース) 橘孝博、宇野正宏
- [2] 原子核 野中到 責任編集 共立出版株式会社
- [3] 原子核物理学 八木浩輔 朝倉書店
- [4] G.Audi and A.H.Wapstra : Nuclear Physics, A595, 409-480 (1995)
<http://www-csns.in2p3.fr/amdc/>
- [5] 物理学辞典 倍風館
- [6] 原子と原子核 有馬朗人 著 朝倉書店
- [7] C言語による最新アルゴリズム事典 奥村晴彦 著 技術評論社
- [8] 原子核物理 影山誠三郎 著 朝倉書店
- [9] 原子核の一般的性質 宮島龍興 共立出版株式会社
- [10] 原子核モデルと核力の統一理論 香村俊武 訳 講談社
- [11] P.Vogel, B.Jonson, and P.G.Hansen, Physics Letters **139B**, 227-230(1984)

謝辞

本論文の作成に当たり、御指導を頂いた鈴木敏男先生、林明久先生、田嶋直樹先生、長谷川健二先生、高木丈夫先生に厚く御礼申し上げます。特に田嶋先生、鈴木先生、林先生、には最初から最後まで懇切丁寧な御指導を賜わり感謝の念に堪えません。また、大学院の川尻、北嶋先輩方を始めとする先輩方にもいろいろな助言を頂き、有難うございました。

最後になりましたが、応用物理学科の諸先生方に対しましても、日頃の御指導に感謝し、謝辞の言葉と致します。

2001年2月

池田智也 清澤聡

プログラム

本論文で計算のために使ったプログラムをしめす。

なおここで示すプログラムは分かりやすいように示したものでこれを動かしても実行はできない。

1章で用いたプログラム

G.Audi と A.H.Wapstra のまとめた『mass_rmd.mas95』原子質量表データファイルを読み込む

```
/*
readmass.c : read mass data file mass_rmd.mas95 of Audi-Wapstra

2000/11/28 : debug
2000/11/28 : created by T. Ikeda
*/

/*これは Audi と Wapstra がまとめた原子質量表を読み込み三つの計算値が一致すること
を確かめるためのプログラムです*/

#include<stdio.h>
#include<stdlib.h>
#include<ctype.h>
#include<string.h>
#include<math.h>
#define L 128
#define MXN 184
#define MXZ 126
#define NO_DATA 999999999.0 /* データの与えられないときこの値を入れる */

int read_mass(double nbe[][MXZ+1])
{
    char buff[L];
    FILE *fin;

    int ld=0; /*#が付いていないライン数*/
    int ls=0; /*#が付いているライン数*/
    int lh=0; /*読み飛ばす文章のライン数*/

    char j; /*印刷時のページおくりの指示 (フォートラン書式)*/
```

```

char f[4]; /*原子記号*/
char g[5]; /*0*/
char m[2]; /* B- */
int b; /*中性子数と陽子数の差*/
int b2; /*中性子数*/
int d; /*陽子数*/
int e; /*中性子数と陽子数の和*/
int p; /*中性子数と陽子数の和*/
int a;

double h; /*質量超過 (keV)*/
double i; /*質量超過の誤差 (keV)*/
double k; /*原子の束縛エネルギー (keV)*/
double k1; /*原子質量から求めた原子の束縛エネルギー (keV)*/
double k2; /*質量超過から求めた原子の束縛エネルギー (keV)*/
double l; /*原子の束縛エネルギーの誤差 (keV)*/
double n; /* $\beta$ 崩壊エネルギー (keV)*/
double o; /* $\beta$ 崩壊エネルギーの誤差 (keV)*/
double q; /*原子質量 (micro-u)*/
double r; /*原子質量の誤差*/

double B1; /*原子の束縛エネルギーから求めた原子核の束縛エネルギー (keV)*/
double B2; /*原子質量から求めた原子核の束縛エネルギー (keV)*/
double B3; /*質量超過から求めた原子核の束縛エネルギー (keV)*/

char c;

double u; /*原子質量単位*/
double Mh; /*水素原子質量*/
double Me; /*電子質量*/
double Mn; /*中性子質量*/
double ael; /*電子の束縛エネルギー*/

double EB12,EB23,EB13; /*それぞれの誤差*/

```



```

double  EBX12,EBX23,EBX13;/* 最大誤差*/
double  EBt12,EBt23,EBt13;/* 誤差の合計*/
double  EBv12,EBv23,EBv13;/* 平均誤差*/

u=931.4939;/* 原子質量単位*/
Mh=938.7829;/* 水素原子質量 (MeV)*/
Me=0.5110;/* 電子質量 M(MeV)*/
Mn=939.5652;/* 中性子質量 (MeV)*/
ael=1.433*1.0e-5;/* 電子の束縛エネルギー*/

EBX12=0;
EBX23=0;
EBX13=0;

EBt12=0;
EBt23=0;
EBt13=0;

fin = fopen("mass_rmd.mas95","r");
/*Audi と Wapstra がまとめた原子質量表を読み込みます*/
while(fgets(buff,L,fin) !=NULL){
    lh++;
    buff[42]='\0';
    if(strstr(buff+35,"(keV)") !=NULL) break;
}

while (fgets(buff,L,fin) !=NULL){
    j=1; c=buff[j];buff[j]='\0';a=atoi(buff);  buff[j]=c;
    j=4; c=buff[j];buff[j]='\0';b=atoi(buff+1);buff[j]=c;
    j=9; c=buff[j];buff[j]='\0';b2=atoi(buff+4);  buff[j]=c;  j=14;c=buff[j];buff[j]=c;
    j=19; c=buff[j];buff[j]='\0';e=atoi(buff+14);  buff[j]=c;
    j=23;c=buff[j];buff[j]='\0';f[0]=buff[20],f[1]=buff[21],f[2]=buff[22],f[3]=buff[23];
    j=27; c=buff[j];buff[j]='\0';g[0]=buff[23],g[1]=buff[24],g[2]=buff[25],g[3]=buff[26];
}

```

```

j=39;c=buff[j];buff[j]='\0';
if(strchr(buff+27,'#')!=NULL){ls++;continue;}
ld++;
h=atof(buff+27);buff[j]=c;
j=48; c=buff[j];buff[j]='\0';i=atof(buff+39); buff[j]=c;
j=59;c=buff[j];buff[j]='\0';k=atof(buff+48);buff[j]=c;
j=68;c=buff[j];buff[j]='\0';l=atof(buff+59);buff[j]=c;
j=74; c=buff[j];buff[j]='\0';m[0]=buff[72],m[1]=buff[73]; buff[j]=c;
j=85;c=buff[j];buff[j]='\0';
n=atof(buff+74);buff[j]=c;
j=94; c=buff[j];buff[j]='\0';o=atof(buff+85); buff[j]=c;
j=99;c=buff[j];buff[j]='\0';p=atoi(buff+94);buff[j]=c;
j=119;c=buff[j];buff[j]='\0';r=atof(buff+110);buff[j]=c;

```

```

/*B1 from B~

```

```

B1=B~(keV)-ael(meV)(Z2.39-Z)*/

```

```

B1=k-ael*(pow(d,2.39)-d)*1.0e+3;/(keV)*/

```

```

/*B2 from M~

```

```

bigining out B~

```

```

B~=N*Mn+Z*Mh~-M~

```

```

atomic mass= (p+q*1.0e-6)*u(MeV)*/

```

```

k1=b2*Mn+d*Mh-(p+q*1.0e-6)*u;/(MeV)*/

```

```

B2=(k1-ael*(pow(d,2.39)-d))*1.0e+3;/(keV)*/

```

```

/*B3 from Mx~ */

```

```

k2=b2*8071.323+d*7288.969-h;/(kev)*/

```

```

B3=k2-ael*(pow(d,2.39)-d)*1.0e+3;/(keV)*/

```

```

if((b2 >= 0) && (b2 <= MXN) && (d >= 0) && (d <= MXZ)) {

```

```

/* 原子質量超過値から計算した原子核束縛エネルギーを MeV 単位で返す */

```

```

nbe[b2][d]=B3*1.0e-3;

```

```

}

```

```

else {

```

```

/* fprintf(stderr,"Error: input data for N=%d Z=%d\n",b2,d);*/
}

/*
printf("nuclear binding energy \nfrom B~{atomic binding ena}(B1)=%f\nfrom M~{nat
*/

/*out uncertnly*/
EB12=fabs(B1-B2);
EB23=fabs(B2-B3);
EB13=fabs(B3-B1);

/*max of uncertenly*/
if(EB12>EBX12){EBX12=EB12;}
if(EB23>EBX23){EBX23=EB23;}
if(EB13>EBX13){EBX13=EB13;}

/*total of uncertenly*/
EBt12=EBt12+EB12;
EBt23=EBt23+EB23;
EBt13=EBt13+EB13;

/*avrage of uncertenly*/
EBv12=EBt12/ld;
EBv23=EBt23/ld;
EBv13=EBt13/ld;
}
fclose(fin);
printf("use line number is=%d\n\n",ld);

printf("uncertenly max between\nB1&B2=%f(keV),B2&B3=%f(keV),B3&B1=%f(keV),\n",l

printf("avrage of uncertenly between\nB1&B2=%f(keV),B2&B3=%f(keV),B3&B1=%f(keV),'
}

```

2章 でもちいたプログラム

質量公式の係数を求めるための最小2乗法を行う

先ずこのプログラムを説明する前に `matitul.c`, `lu.c` という2つのプログラムが前提となっていることを頭にいれておく。ただし `lu.c` のなかに `matitul.c` が含まれているだけなのでプログラムでは以下のように `lu.c` だけ読み込む。

`matitul.c` 内では、成分の型 `SCALAR` をあらかじめ定義する。そして `SCALAR` へのポインタを意味するのに `vector` を用いてる。その `vector` へのポインタを意味するのに `matrix` (行列) をもちいてる。

`vector`、`matrix` を定義したら次に計算する必要がある。そこで使うプログラムが `lu.c` である。まず `new_vector`, `new_matrix` でベクトル、行列の記憶量域を確保する。そして実際計算を解くために `gauss` を用いて Gauss 法をつかっている。(参考文献 [7])

```
#include "lu.c"
/*AB からベクトル X をもとめる。*/
int main(){
    int l,k,N; /*l 列 k 行行列*/
    double nbe[MXN+1][MXZ+1]; /*束縛エネルギー*/
    int n,z,ld; /*n,z はそれぞれ中性子数、陽子数*/
    double a=0;
    double c = 0;
    double e,d,f,b,g,S;

    matrix A, Asave; /*A は行列*/
    vector B, Bsave, X; /*B はベクトル.X は AB から求まるベクトル*/
    double s, det; /*det は係数を意味している */

    N=MXK;
    A=new_matrix(N,N); Asave=new_matrix(N,N);
    B=new_vector(N); Bsave=new_vector(N);
    X=new_vector(N);
    for(n=0; n<=MXN; n++){
        for(z=0; z<=MXZ; z++){
            nbe[n][z]=NO_DATA;
        }
    }
}
```

```

repairAB(A,B);/*repair から A,B を読み込む*/
read_mass(nbe);/*read_mass から nbe を読み込む*/

det=gauss(N,A,B,X);/*ベクトル X を計算*/
ld=0;
for (l= 0; l < N; l++) {
    s = Bsave[l];
    for (k = 0; k < N; k++) s -= Asave[l][k] * X[l];
    printf("%4d: %12.7f %11.2e\n", l, X[l], s);
}

for(n=0; n<MXN; n++){ /*それぞれの誤差の 2 乗値を 1 8 4 4 個足す*/
    for(z=0; z<MXZ; z++){
        if(nbe[n][z] !=NO_DATA){
for (l= 0; l < N; l++) {
    a+=term(l,n,z)*X[l];
}
/*f は計算値を質量数で割った。d は実値を質量数で割ったもの。*/
        ld++;
        b=n+z;
        d=nbe[n][z]/b;
        f=a/b;
        S=a-nbe[n][z];
/*g は f と d の差*/
        g=fabs(nbe[n][z]-a);
        printf("%d %d\n",n,z);
        a=0;
        }
    }
}
}

```

```

/*以下では read_mass から nbe(binding enaergy) を読み込み
  行列 A, ベクトル B を計算する。*/
int repairAB(matrix A,vector B){

  double nbe[MXN+1][MXZ+1] ; /* nuclear binding energy [MeV] */
  int n, z ;/* n : 中性子数  z: 陽子数 */
  double s,t;/*A = s00 + s01 + ... つまり s は A の各成分を示す。どうように t は B
  の各成分を示す*/

  int l,k;/*l は A の行,k は A の列*/

  for(n=0; n<=MXN; n++){
    for(z=0; z<=MXZ; z++){
      nbe[n][z]=NO_DATA;
    }
  }
  read_mass(nbe);/*read_mass から nbe を読み込む*/

  for(l=0;l<MXK;l++){
    for(k=0;k<MXK;k++){
      s=0;
      t=0;
      for(n=0;n<=MXN;n++){ /*l,k ループのなか s(t) それぞれ足しあわせる*/
for(z=0;z<=MXZ;z++){
      if(nbe[n][z] !=NO_DATA){
        s+=term(k,n,z)*term(l,n,z);
        t+=term(l,n,z)*nbe[n][z];
      }
}
      }
      A[l][k]=s;/*A[l][k] は S を足しあわせたもの*/
    }
    B[l]=t;/*B[l] は t を足しあわせたもの*/
  }
}

```

}
}

3章で用いたプログラム

5点公式でペアリングギャップを求めた

```
int main(){
    double nbe[MXN+1][MXZ+1] ; /* nuclear binding energy [MeV] */
    int n,z,A; /* n : 中性子数  z: 陽子数 */
    int i,ld;
    double s;
    double Gap3,Gap4a,Gap4b,Gap5,GapDiff_4a_4b,GapDiff_3_5;

    for(n=0; n<=MXN; n++){
        for(z=0; z<=MXZ; z++){
            nbe[n][z] = NO_DATA;
        }
    }

    /*
    原子質量のデータファイルを読み込み、原子核の束縛
    エネルギーに換算して配列 nbe に格納する
    データのない核は nbe に値 NO_DATA が入っている
    */
    read_mass(nbe);

    /*
    配列の使用例として、以下ではデータの与えられた核の数と一核子あたり
    の束縛エネルギーの平均値を計算している。
    */

    ld = 0;
    /*z を基準に回していく*/
    for(z=0; z<=MXZ; z+=2){
        for(n=0; n<=MXN; n+=2){
            if(n >= 2                &&
n <= MXN-2                &&
```



```

nbe[n-2][z] != NO_DATA &&
nbe[n-1][z] != NO_DATA &&
nbe[n][z] != NO_DATA &&
nbe[n+1][z] != NO_DATA &&
nbe[n+2][z] != NO_DATA){
    /*if(n==2|n==8|n==20|n==28|n==50|n==82|n==126)continue;*/
/*Zが偶数のとき*/
Gap3=(-nbe[n-1][z]+2*nbe[n][z]-nbe[n+1][z])/2;
Gap4a=(nbe[n-2][z]-3*nbe[n-1][z]+3*nbe[n][z]-nbe[n+1][z])/4;
Gap4b=(-nbe[n-1][z]+3*nbe[n][z]-3*nbe[n+1][z]+nbe[n+2][z])/4;
Gap5=(Gap4a+Gap4b)/2;
A=n+z;

    GapDiff_4a_4b = fabs(Gap4a-Gap4b)/(12.0/sqrt((double)A));
    GapDiff_3_5    = fabs(Gap3 -Gap5 )/(12.0/sqrt((double)A));

ld++;
printf("%3d %3d %3d %3d %8.5f %8.5f %8.5f %8.5f %8.5f %8.5f\n"
        ,ld,z,n,A,Gap3,Gap4a,Gap4b,Gap5,GapDiff_4a_4b,GapDiff_3_5);

/* printf("%3d %3d %3d %3d %8.5f\n" ,ld,z,n,A,Gap5);*/
    }
}
}
}
}

```

4章で用いたプログラム

case1 を求めたプログラム case2,3... は求め方は変わらないのでここでは省略。
ここでも 2 章と同じ定義で matrix,vector... を用いている。

```
#define MXK 1
double termN(int k,int n,int z);
double termZ(int k,int n,int z);

/*サブルーティン int repair で求めたベクトル、マトリックスから係数を計算*/
int main(){
    int l,k,N,ld;      /*ld は行列の列と行, Nはその最大値, ld はデータノイズをカ
    ウント */
    matrix A,Asave;   /* A は行列*/
    vector B,Bsave,X; /* B はベクトル */
    double s,det;
    double GAP5N [MXN+1] [MXZ+1],GAP5Z [MXN+1] [MXZ+1];
    double aN=0,aZ=0,cN=0,cZ=0,e; /*平均 2 乗誤差を求めるときに用いる*/
    int n,z; /*中性子数, 陽子数 */
    N=MXK;
    /*行列, ベクトルの範囲を示している */
    A=new_matrix(N,N); Asave=new_matrix(N,N);
    B=new_vector(N); Bsave=new_vector(N);
    X=new_vector(N);
    /*全ての束縛エネルギーを NO_DATA にする*/
    for(n=0; n<=MXN; n++){
        for(z=0; z<=MXZ; z++){
            GAP5N [n] [z]=NO_DATA;
            GAP5Z [n] [z]=NO_DATA;
        }
    }

    /*それぞれのサブルーチンから値を読み込む */
    read_nGAP(GAP5N);
    read_zGAP(GAP5Z);
    repairNZ( A, B);
```

```

det=gauss(N,A,B,X);

/*ベクトルX(係数)を計算する*/
ld=0;
for (l= 0; l < N; l++) {
    s = Bsave[l];
    for (k = 0; k < N; k++) s -= Asave[l][k] * X[l];
    printf("%4d: %12.7f %11.2e\n", l, X[l], s);
}

/*以下では平均2乗誤差を求める*/
for(n=0; n<=MXN; n++){
    for(z=0; z<=MXZ; z++){
if(GAP5N[n][z] !=NO_DATA){
    for (l=0;l<N; l++) {
        aN+=termN(l,n,z)*X[l];
    }
    cN+=pow(GAP5N[n][z]-aN,2)
    aN=0;
    ld++;
}
if(GAP5Z[n][z] !=NO_DATA){
    for (l=0;l<N; l++) {
        aZ+=termZ(l,n,z)*X[l];
    }
    cZ+=pow(GAP5Z[n][z]-aZ,2);
    aZ=0;
    ld++;
}
    }
}

e=sqrt((cN+cZ)/ld);
printf("%d, heikin2gosa=%f\n",ld,e);

```

```
}
```

```
int repairNZ(matrix A, vector B ){ /*行列 A, ベクトル B 求める */
```

```
double GAP5N [MXN+1] [MXZ+1], GAP5Z [MXN+1] [MXZ+1];
```

```
double sN,sZ,tN,tZ,s;
```

```
/* double AN,BN,AZ,BZ;*/
```

```
int n,z,ld,iP,iN; /*ldは用いた全てのデータ数,ip,isはz,nギャップで用いた数*/
```

```
int l,k;
```

```
for (n=0; n<=MXN ;n++){
```

```
    for (z=0; z<=MXZ ;z++){
```

```
        GAP5N [n] [z]=NO_DATA;
```

```
        GAP5Z [n] [z]=NO_DATA;
```

```
    }
```

```
}
```

```
read_nGAP(GAP5N);
```

```
read_zGAP(GAP5Z);
```

```
for(l=0; l<MXK ;l++){
```

```
    for(k=0; k<MXK ;k++){
```

```
        iN=0;
```

```
        iP=0;
```

```
        ld=0;
```

```
        sN=0;
```

```
        tN=0;
```

```
        sZ=0;
```

```
        tZ=0;
```

```
        for (n=0; n<=MXN ;n++){
```

```
for (z=0; z<=MXZ ;z++){
```

```
    if(GAP5N [n] [z] !=NO_DATA) { /*GAP 5 Nが値を持っているとき */
```

```
        sN+=termN(k,n,z)*termN(l,n,z);
```

```
        tN+=termN(l,n,z)*GAP5N [n] [z];
```

```
        ld++;
```

```

    iN++;
    }
if(GAP5Z[n][z] !=NO_DATA) { /*GAP 5 Zが値を持っているとき */
    sZ+=termZ(k,n,z)*termZ(1,n,z);
    tZ+=termZ(1,n,z)*GAP5Z[n][z];
    ld++;
    iP++;
}
}
    }
    A[1][k]=sN+sZ;
    /* printf("%6.3f,%6.3f,%10.6f\n",sN,sZ, A[1][k]);*/
}
    B[1]=tN+tZ;
}
printf("%d,%d,%d\n",ld,iN,iP);
}
/*ここで3章から求めたペアリングギャップを読み込む
サブルーティン
int read_nGAP
int read_zGAP
*/

double termN(int k,int n,int z)
{
    double A=n+z;
    double Rn=(n-z)/A;
    switch(k)
    {
        case 0: return pow(A,-1.0/2.0);
    }
}
double termZ(int k,int n,int z)
/*double termN(int k,int n,int z)と同様の式をつくる*/

```