

**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

Р6-87-203

**И.Адам*, В.Вагнер*, М.Гонусек*,
М.И.Кривоустов, В.А.Морозов**

**ОПИСАНИЕ ПРОГРАММЫ ZORKA
ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ НА ЭВМ
ФИЗИЧЕСКИХ КОНСТАНТ
ОСНОВНОГО И КВАДРУПОЛЬНЫХ
ВИБРАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ И ПЕРЕХОДОВ
В ЧЕТНО-ЧЕТНЫХ ДЕФОРМИРОВАННЫХ ЯДРАХ**

* Институт ядерной физики Чехословацкой академии наук,
Ржеж

ВВЕДЕНИЕ

В наших работах ^{/1,2/} проведено систематическое рассмотрение вопросов, относящихся к определению физических констант ядерной структуры основного и квадрупольных вибрационных состояний и переходов в четно-четных деформированных ядрах. Впервые получены общие формулы для определения приведенных вероятностей магнитных (M1)-^{/1/} и электрических (E2)^{/2/} внутриволновых и междуполосных переходов в предположении смешивания волновых функций в рамках теории возмущений.

В настоящей публикации, которая вместе с работами ^{/1,2/} составляет единый цикл, описана программа ZORKA, позволяющая на основе экспериментальных данных о значениях приведенных вероятностей $V(E2)$, $V(M1)$ или их отношений определять физические константы основного и квадрупольных вибрационных состояний и γ -переходов в четно-четных деформированных ядрах.

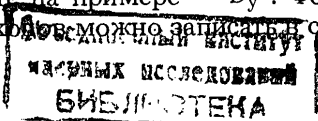
О ПРОГРАММЕ ZORKA

Сравнение экспериментальных и вычисленных данных по приведенным вероятностям E2- и M1-переходов производится с помощью составленной нами для ЭВМ программы. В первую очередь рассматриваются E2-переходы, и на основе полученных результатов можно перейти к анализу M1-переходов.

Переходы, разрывающие ротационные уровни β - и γ -вибрационных полос, обычно являются почти чистыми E2-переходами с возможной примесью M1-мультипольности, достигающей нескольких процентов. Когда эта примесь определена экспериментально, то есть установлен параметр смешивания δ , вычисляем долю E2-мультипольности по формуле

$$I_{\gamma}(E2) = I_{\gamma} \frac{\delta^2}{1 + \delta^2}. \quad (1)$$

Важность учета M1-мультипольности будет показана в настоящей работе на примере ¹⁶⁰Dy. Формулы для приведенных вероятностей E2-переходов можно записать в следующем виде:



$$Y^2 = B(E2; I_i K_{q_i} \rightarrow I_f K_{q_f}) = \langle I_i K_{q_i}^2, K_{q_f} - K_{q_i} | I_f K_{q_f} \rangle^2 Q_{q_i q_f}^2 \times (1 + (\delta_{k_i,0} - \delta_{k_f,0}) \{1 + \mathcal{F}(p_1, \dots, p_n, I_i, I_f)\})^2, \quad (2)$$

где p_i -параметры теории возмущений (Z_β, Z_γ, \dots). Если нам не известно абсолютное значение $B(E2)$, но мы знаем $I_\gamma(E2)$, тогда получим уравнение, аналогичное формуле (2), то есть

$$Y^2 = \frac{I_\gamma(E2; I_i K_{q_i} \rightarrow I_f K_{q_f})}{E_\gamma^5} = \alpha_i^2 B(E2; I_i K_{q_i} \rightarrow I_f K_{q_f}), \quad (2')$$

где α_i — нормировочный коэффициент i -того уровня.

Вычисления параметров $Q_{q_i q_f}$ (или их отношений), α_i и p_i , которые обозначим через θ , производятся методом наименьших квадратов для нелинейной функции, разлагаемой в ряд Тейлора в окрестности точки θ_0 .

В каждой итерации решается уравнение

$$(\theta - \theta_0) = (A'WA)^{-1} A'W(Y - Y_0), \quad (3)$$

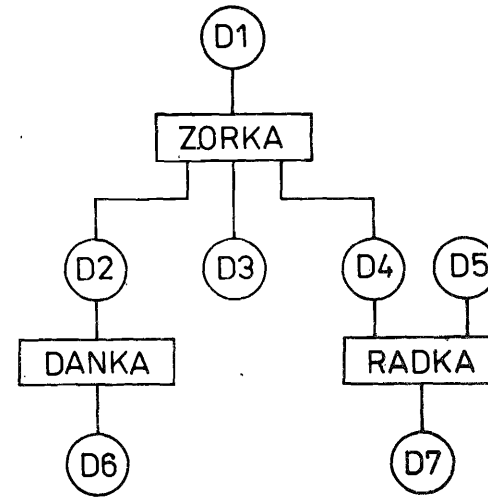
где элементы матрицы A равны $\{A\}_{ik} = \left(\frac{\partial Y_i}{\partial \theta_k}\right)_{\theta_0}$, $W_{ii} = 1/(\Delta Y_i)^2$, $W_{ij} = 0$ (если $i \neq j$) для ошибок ΔY_i величины Y_i ; Y_0 — значение Y в точке θ_0 . Следующая итерация начинается с точки $\theta_0 = \theta$. Начальные значения величины θ_0 для итерационного процесса выбираем на основе адиабатического приближения.

После вычисления параметров θ_i и матрицы ошибок $D(\theta) = (A'WA)^{-1}$ (в случае $\chi^2 > 1$ матрица $D(\theta)$ заменяется матрицей $D(\theta)$. χ^2 определяем значения Y_i и их ошибок $(\Delta Y_i)^2 = A(Y_i)D(\theta)A'(Y_i)$. Далее производим сравнение экспериментальных и вычисленных абсолютных и относительных значений приведенных вероятностей.

Для определения величин Q_{gg}, Q_β и Q_γ обычно используем экспериментальные значения: $B_{\text{exp}}(E2; 2^+O_g \rightarrow 0^+O_g)$, $B_{\text{exp}}(E2; 2^+2_\gamma \rightarrow 0^+O_g)$ и $B_{\text{exp}}(E2; 2^+O_\beta \rightarrow 0^+O_g)$.

Когда установлены значения параметров Z_q и матричных элементов $Q_{qq'}$, определяем по программе DANKA коэффициенты смешивания $\epsilon_{qq'}$ из соотношений (13) ÷ (15), приведенных в нашей работе ^{1/2/}, и таким образом конкретизируем волновую функцию $|K_q I \rangle$ (см. формулу (32) в работе ^{1/1/}). Знание параметров Z_q и $Q_{qq'}$ позволяет предсказать значения интенсивностей ненаблюдаемых переходов, установить абсолютные значения вероятностей $B(XL; I_i \rightarrow I_f)$ для всех переходов и вычислить времена жизни P, P_γ и $T_{1/2}$ рассматриваемых уровней при помощи программы RADKA. Описание величин $B(XL; I_i \rightarrow I_f)$,

$P_\gamma(XL)$, P (уровня) и $T_{1/2}$ (уровня) дано в ^{1/1/}, см. формулы (1), (2), (5) и (6).



На рис. 1 показана структура программы ZORKA, которая написана на языке Фортран и реализована на ЭВМ Хьюллет-Паккард модели 1000. Входные данные для этой программы записываются в следующем виде.

Рис. 1. Структура программы ZORKA для вычисления приведенных вероятностей, интенсивностей ненаблюдаемых переходов и времени жизни возбужденных состояний ядер.

D1 — входные данные программы. Первая строка содержит наборы параметров $NV(1) \div NV(4)$, которые определяют выбранный вариант расчета. Вариант $NV(1)$ означает, что рассматриваются приведенные вероятности $E2$ -переходов между γ -полосой и полосой основного состояния; $NV(2)$ — переходы между β -полосой и полосой основного состояния; $NV(3)$ — внутриволновые переходы; $NV(4)$ — переходы между β -полосой и γ -полосой. В табл. 1 приведены значения параметров $NV(1) \div NV(4)$, которые определяют вид формул для расчетов приведенных вероятностей. Вторая и третья строки содержат характеристики γ -переходов, полученные из экспериментальных данных: $2I_i, 2I_f, 2K_i, v_i, 2K_f, v_f, \frac{X}{E_\gamma}, s(E_\gamma), I_\gamma, s(I_\gamma), B(XL), s(B(XL)), \alpha_{tot}$, где величины v_i, v_f определяют принадлежность перехода к данной ротационной полосе и к конкретной (анализируемой) работе; $B(XL)$ — измеренные абсолютные значения приведенных вероятностей переходов; E_γ и I_γ — энергия и относительная интенсивность γ -переходов, а $s(E_\gamma), s(I_\gamma)$ и $s(B(XL))$ — ошибки в определении величин E_γ, I_γ и $B(XL)$. В случае, когда не известны значения I_γ или $B(XL)$, этим величинам присваивается значение (-1). Набор данных для всех известных переходов согласно второй и третьей строкам заканчивается числом (-2). Далее следуют характеристики возможных γ -переходов: $2I_i, 2I_f, 2K_i, v_i, 2K_f, v_f, L, E_\gamma, s(E_\gamma)$ и α_{tot} ; этот набор заканчивается числом (-1);

D2 — результаты расчета по программе ZORKA, необходимые для программы DANKA, содержащие значения параметров $\alpha_i, Q_{qq'}, P_i$, матрицу ошибок $D(\theta)$ и характеристики переходов;

нужно задать (2X)!

Параметр для выбора варианта вычисления при использовании программы ZORKA

Значение параметра	-1	0	1	2	3	4	5	6
NV(1)	a	$Z_\gamma(z_\gamma) = Z_\gamma(O_g) = Z_{\beta\gamma} = 0$	$Z_\gamma(z_\gamma) = Z_\gamma(O_g)$ $Z_{\beta\gamma} = 0$	$Z_{\beta\gamma} = 0$	$Z_\gamma(z_\gamma) = Z_\gamma(O_g)$	$Z_\gamma(z_\gamma) = Z_\gamma(O_g)$ 6	5	6
NV(2)	a	$Z_\beta(O_\beta) = Z_\beta(O_g) = \xi_{\beta\gamma} = 0$	$Z_\beta(O_\beta) = Z_\beta(O_g)$ $\xi_{\beta\gamma} = 0$	$\xi_{\beta\gamma} = 0$	$Z_\beta(O_\beta) = Z_\beta(O_g)$	$Z_\beta(O_\beta) = Z_\beta(O_g)$ 6		6
NV(3)	a	$\alpha_{\beta\gamma} = \alpha_\gamma = \alpha_{\beta\gamma} = 0$	$\alpha_{\beta\gamma} = 0$	$\alpha_{\beta\gamma} \neq 0$	-	-	-	-
NV(4)	a	$Z'_\beta = Z'_\gamma = Z_{\beta\gamma}(z_\gamma) = Z_{\beta\gamma}(O_\beta) = 0$	$Z'_\beta(z_\gamma) = Z'_\beta(O_\beta) = 0$	$Z'_\beta(z_\gamma) = Z'_\beta(O_\beta) = 0$	$Z'_\beta(z_\gamma) = Z'_\beta(O_\beta) = 0$	$Z'_\beta(z_\gamma) = Z'_\beta(O_\beta) = 0$	$Q_{\beta\gamma} = 0$	при помощи $Z_\beta, Z_\gamma, Z_{\beta\gamma} \dots$

а) Вычисление параметров для данной полосы не производится.

б) С учетом поправки, рассмотренной в работе ^{/3/}.

D3 — результаты расчета по программе ZORKA, содержащие параметры α_i, Q_{qq} и P_i ; сравнение вычисленных и экспериментальных значений $B(XL)$ и вычисленные интенсивности переходов, не обнаруженных экспериментально;

D4 — результаты расчета по программе ZORKA для программы RADKA;

D5 — дополнительные данные для программы RADKA: характеристики уровней I, K, θ и E ; этот набор заканчивается числом (-1);

D6 — результаты расчета по программе DANKA, которые содержат значения матричных элементов, параметров смешивания, параметров теории возмущения и интенсивности переходов, не обнаруженных экспериментально;

D7 — результаты расчета по программе RADKA: времена жизни возбужденных состояний.

Использование программы ZORKA проиллюстрировано на примере изотопа диспрозий-160 при анализе интенсивностей γ -переходов ^{/4/}, связанных с γ -вибрационной полосой. Применяя правила Алаги, получаем $\chi^2 = 99$; при расчете $B(E2)$ с одним параметром Z_γ величина χ^2 равна 2,3. Используя данные о параметрах δ^2 , которые приведены в работе ^{/5/}, для интенсивностей всех переходов получим поправку меньше 3% (за исключением перехода с энергией 872,09 кэВ, у которого доля E2-мультипольности составляет около 30%), тогда при вычислении параметра Z_β величина χ^2 равна 8,7. Переход с энергией 872,09 кэВ имеет малую интенсивность (0,79 ед.) и находится в γ -спектре вблизи самого интенсивного (100 ед.) перехода с энергией 879,370 кэВ; поэтому можно предположить, что при вычислении параметра δ^2 (872,09 кэВ) имеет место систематическая ошибка, которая не учитывалась авторами работы ^{/5/}. С учетом этого принимаем $\delta^2(872,09 \text{ кэВ}) = \infty$, тогда при вычислении параметра Z_γ имеем $\chi^2 = 1,5$.

Добавляя к данным об интенсивностях I_γ , полученным в работе ^{/4/}, и о параметрах δ^2 ^{/5/} ($\delta^2(872,09 \text{ кэВ}) = \infty$) сведения о средневзвешенных значениях квадрупольного момента $Q_{gg} = 7,21(10) e^6$, приведенных вероятностях $B(E2; 0^+ 0_g \rightarrow 2^+ 2_\gamma) = 0,114(8) e^2 6^2$ и $B(E2; 0^+ 0_g \rightarrow 2^+ 0_\beta) = 0,00184(15) e^2 6^2$, установленных в работе ^{/6/}, проводим вычисления некоторых физических констант (см. табл. 2). Расчеты выполнены для случая, когда переходы β - и γ -полос анализируются независимо (вариант I); если они рассматриваются совместно, то вычисления проводятся по формулам (5) и (7) (вариант II) или по формулам (5') и (7') (вариант III), которые получены в нашей работе ^{/2/}. Из табл. 2 видно, что значения для трех вариантов расчетов мало отличаются друг от друга; введение поправки в соответствии с работой ^{/3/} (вариант III) проявляется незначительно, так как рассматриваются переходы, разряжающие уровни с малым значением спина ($I_i \leq 5$ для γ -полосы, $I_i = 2$ для β -полосы).

Таблица 2

Значения параметров для различных вариантов расчета

Параметры	Номер варианта		
	I	II	III
χ^2	a	0,291	0,285
$10^3 Z_\beta$	-14 (6)	-14 (6)	-14 (6)
$10^3 Z_\gamma$	43,8 (20)	43,8 (20)	43,3 (20)
$10^3 Z_{\beta\gamma}$	-3,5 (14)	-3,5 (14)	-3,5 (17)
Q_{gg}	2,27 (3)	2,27 (3)	2,27 (3)
Q_β	0,125 (6)	0,125 (6)	0,125 (6)
Q_γ	0,251 (9)	0,252 (9)	0,252 (9)
$10^3 \epsilon_\beta$	0,79 (29)	0,79 (29)	0,79 (29)
$10^3 \epsilon_\gamma$	-0,99 (6)	-0,99 (6)	-0,98 (6)
$10^3 \epsilon_{\beta\gamma}$	2,9 (12)	2,9 (12)	3,6 (14)
$10^3 \epsilon_{\alpha\beta}$		-0,043 (15)	-0,043 (15)
$10^3 a_\gamma$		0,0182 (17)	0,0181 (16)
$10^3 a_{\beta\gamma}$			0,0031 (13)

Примечание: а) параметр $\chi^2 = 1,05$ для переходов β -полосы и $\chi^2 = 0,038$ для переходов γ -полосы.

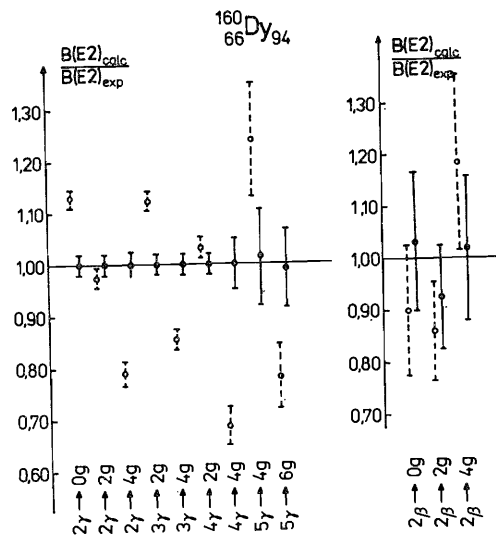


Рис. 2. Отношение вычисленных и экспериментальных значений приведенных вероятностей $B(E2)$ для переходов из β - и γ -полос. \bullet - параметры смешивания при вычислении $B(E2)$ принимали значения, указанные в табл. 2 (вариант III), \circ - вычисления с учетом правила Алаги.

В предположении, что смешивание волновых функций между β - и γ -полосами отсутствует (то есть $\epsilon_{\beta\gamma} = 0$), можно установить разницу между Q_{gg} и $Q_{\gamma\gamma}$; она равна $[Q_{\gamma\gamma} - Q_{gg}]/Q_{\gamma\gamma} = -0,16(5)$, что согласуется с данными работы [7], где получено $Q_{\gamma\gamma} = 6,6(5) \text{ e.б.}$

Отношение вычисленных величин к экспериментальным значениям приведенных вероятностей $B(E2)$

для переходов из β - и γ -полос (вариант III, табл. 2) показано на рис. 2 (черные кружки). Отношения, полученные с применением правила Алаги для вычислений приведенных вероятностей, обозначены светлыми кружками.

В настоящее время продолжается использование описанной программы ZORKA для систематики $B(E2)$ -переходов, связанных с β - и γ -полосами и полосой основного состояния изотопов эрбия ($Z = 68$) и изотопов с $N = 94$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ экспериментальных значений приведенных вероятностей $B(E2)$ - и $B(M1)$ -переходов, разряжающих ротационные уровни β - и γ -вибрационных полос в рамках теории, которая учитывает смешивание волновых функций этих состояний, позволяет определить физические константы переходов и состояний. Знание физических констант имеет важное значение при исследовании структуры четно-четных деформированных ядер.

Измерение параметров смешивания с хорошей точностью для большого числа γ -переходов, идущих из β -, γ - и g -ротационных полос, необходимо для корректного сравнения вычисленных и экспериментальных значений $B(E2)$, а также для нахождения $B(M1)$.

С помощью недавно созданной многодетекторной установки угловых корреляций МУК^{8/} в ряде других задач можно эффективно проводить определение параметров смешивания для большого числа γ -переходов одновременно. Поэтому рассмотренные в публикациях [1, 2] и в настоящей работе вопросы, включая программу ZORKA для ЭВМ, помогут планированию и обоснованию экспериментов, предлагаемых для выполнения на установке МУК по программе ЯСНАПП-2 на фазотроне Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ. Оценки времени жизни отдельных γ -переходов, полученные с помощью программы ZORKA, будут использованы с целью выбора некоторых из них для измерения методом доплеровского смещения энергий γ -квантов на пучке ионов циклотрона У-120М Института ядерной физики ЧСАН (Ржеж).

В заключение один из авторов (М.И.К.) выражает признательность Мосинцевой Л.П. за помощь в оформлении работ [1, 2] и настоящей публикации. Авторы благодарят К.Я.Громова, Ц.Вылова, В.Г.Калинина за внимание и поддержку.

ЛИТЕРАТУРА

1. Адам И. и др. Сообщение ОИЯИ Р6-87-201, Дубна, 1987.
2. Адам И. и др. Сообщение ОИЯИ Р6-87-202, Дубна, 1987.
3. Rud N. et al. - Nucl. Phys., 1971, A167, p.401.

4. Адам И. и др. — В сб.: Тезисы докладов XXXVI Совещания по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра (Харьков). Л.: Наука, 1986, с.119.
5. Громова И.И. и др. — Известия АН СССР, сер. физ., 1979, 43, с.26.
6. Бегжанов Р.Б., Беленький Б.М. Гамма-спектроскопия атомных ядер. Ташкент: ФАН, 1980.
7. Forker M. et al. — Nucl. Phys., 1969, A138, p.97.
8. Абросимов В.Н. и др. Сообщение ОИЯИ Р6-86-320, Дубна, 1986;
Абросимов В.Н. и др. В сб.: Ядерная спектроскопия и структура атомного ядра (тезисы докладов XXXVII совещания, Юрмала, апрель 1987 г.). Л.: Наука, 1987, с.539.

Рукопись поступила в издательский отдел
31 марта 1987 года.

Адам И. и др. P6-87-203
Описание программы ZORKA для вычисления на ЭВМ физических констант основного и квадрупольных вибрационных состояний и переходов в четно-четных деформированных ядрах

Разработана программа ZORKA, позволяющая на основе экспериментальных данных о значениях приведенных вероятностей $B(E2)$, $B(M1)$ или их отношений определять физические константы основного и квадрупольных вибрационных состояний и γ -переходов в четно-четных деформированных ядрах. Предполагается смешивание волновых функций ротационных уровней основного, β - и γ -вибрационных состояний. Расчеты по программе ZORKA проводятся с использованием метода наименьших квадратов.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ.
Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод авторов

Adam J. et al. P6-87-203
The Description of the ZORKA Program for the Computer Calculation of the Physical Constants of the Ground State and Quadrupole Vibrational States and Transitions in Even-Even Deformed Nuclei

The program is described for calculation (from experimental values of reduced probabilities $B(E2)$, $B(M1)$ or their ratios) of the "physical constants" of the ground and quadrupole vibrational states and of gamma-transitions in even-even deformed nuclei. There was assumed the mixing of the wave function of ground, β - and γ -vibrational states. Calculations in the program ZORKA are based on the least-square method.

The investigation has been performed at the Laboratory of Nuclear Problems, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987