



сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

104/83

3/1-83

10-82-641

В.Б.Бруданин, М.Будзынски, О.И.Кочетов,
С.Н.Яшин

ПРОГРАММЫ ОБРАБОТКИ
ИНТЕГРАЛЬНЫХ ВОЗМУЩЕННЫХ
УГЛОВЫХ $\gamma\gamma$ -КОРРЕЛЯЦИЙ

1982

1. ВВЕДЕНИЕ

Данные экспериментов по исследованию возмущений в угловых корреляциях ядерных излучений содержат ценную информацию о взаимодействиях электромагнитных моментов возбужденных состояний атомных ядер с внеядерными магнитными и электрическими полями. Метод возмущенных угловых корреляций применяется как в ядерной физике - с целью определения электромагнитных моментов возбужденных состояний атомных ядер, так и в физике твердого тела - для исследований сверхтонких магнитных и электрических полей.

В представленной работе приведены основные расчетные формулы^{/4/} и описаны программы для обработки интегральных возмущенных угловых yy -корреляций /ИВУК/, созданные в научно-экспериментальном отделе ядерной спектроскопии и радиохимии ЛЯП ОИЯИ для случаев:

- статического взаимодействия квадрупольных электрических моментов ядер с аксиально-симметричными градиентами электрических полей /ГЭП/ в монокристаллах /программа QUDIM/;
- статического взаимодействия квадрупольных электрических моментов ядер с аксиально-симметричными случайно ориентированными градиентами электрических полей в поликристаллах /программа QUDIP/;
- статического взаимодействия магнитных дипольных моментов ядер с фиксированным магнитным полем окружения /программа MAGNI/.

Обработка ВУК ведется по методу наименьших квадратов с использованием имеющихся значений некоторых параметров и их матрицы ошибок^{/1/}.

Программы написаны на языке фортран-IV и поставлены на ЭВМ CDC-6500 ЛВТА ОИЯИ. Использование комплекса минимизирующих программ MINUIT^{/2/} обеспечивает пользователю посредством набора командных карт широкий выбор режимов обработки. Сокращенный вариант программ поставлен на ЭВМ ЕС-1010 научно-экспериментального отдела ядерной спектроскопии и радиохимии ЛЯП ОИЯИ, где в качестве основной минимизирующей программы применяется программа FUMILI^{/3/}.

2. ЗАДАЧА ОБРАБОТКИ ДАННЫХ ИЗМЕРЕНИЙ ИВУК

Взаимодействие электромагнитных моментов атомных ядер с внеядерными полями приводит к возмущению угловой корреляции каскад-

ных ядерных излучений. В общем случае выражение для функции дифференциальной по времени угловой корреляции имеет вид^{/4/}:

$$W(\vec{k}_1, \vec{k}_2, t) = \sum_{k_1 k_2} \sum_{N_1 N_2} \frac{A_{k_1} A_{k_2}}{\sqrt{(2k_1+1)(2k_2+1)}} G_{k_1 k_2}^{N_1 N_2}(t) Y_{k_1}^{N_1}(\theta_1, \phi_1) Y_{k_2}^{N_2}(\theta_2, \phi_2) / 1/$$

Влияние внеядерного возмущения на угловую корреляцию полностью описывает фактор возмущения $G_{k_1 k_2}^{N_1 N_2}(t)$. Для интегральных возмущенных угловых корреляций фактор возмущения определен следующим образом:

$$G_{k_1 k_2}^{N_1 N_2}(\infty) = \frac{1}{\tau} \int_0^{\infty} e^{-\frac{t}{\tau}} G_{k_1 k_2}^{N_1 N_2}(t) dt, \quad /2/$$

где τ - среднее время жизни ядра в возбужденном состоянии.

Задача обработки ИВУК состоит в определении частоты сверхтонкого взаимодействия. В случае статических квадрупольных взаимодействий с аксиально-симметричными ГЭП в моно- и поликристаллах частота квадрупольного взаимодействия описывается формулой

$$\omega_Q = \frac{e Q V_{zz}}{4hI(2I-1)}, \quad /3/$$

где Q - спектроскопический квадрупольный момент ядра со спином I , V_{zz} - ГЭП в местах расположения ядер в образце. Угловая частота ω_0 , характеризующая наименьшую величину квадрупольного расщепления, равна:

$$\omega_0 = \begin{cases} 3\omega_Q & \text{для целых } I, \\ 6\omega_Q & \text{для полуцелых } I. \end{cases} \quad /4/$$

В случае статического магнитного сверхтонкого взаимодействия определяется частота ларморовской прецессии:

$$\omega_L = -\frac{\mu H}{h}, \quad /5/$$

которая является произведением μ -магнитного момента возбужденного состояния ядра и действующего на него магнитного поля H .

3. РАСЧЕТНЫЕ ФОРМУЛЫ, ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ПРИ ОБРАБОТКЕ ИВУК

а/ QUDIM. В случае интегральных угловых корреляций, возмущенных статическим квадрупольным взаимодействием с аксиальной симметрией в монокристалле, измеряется число совпадений $N_i(\theta_{1i}, \phi_{1i}, \theta_{2i}, \phi_{2i})$ для определенных взаимных положений монокристалла и детекторов, которые связаны с функцией угловой корреляции соотношением

$$N_i(\theta_{1i}, \phi_{1i}, \theta_{2i}, \phi_{2i}) = N_0 W(\theta_{1i}, \phi_{1i}, \theta_{2i}, \phi_{2i}). \quad /6/$$

Для проведения расчетов эту формулу согласно работе^{/5/} преобразуют к виду:

$$\begin{aligned} N_i(\theta_{1i}, \phi_{1i}, \theta_{2i}, \phi_{2i}) &= N_0 \left[1 + A_{22} \sum_{N=0}^2 f_{22}^{NN}(\theta_{1i}, \phi_{1i}, \theta_{2i}, \phi_{2i}) \times \right. \\ &\times \sum_{n \geq 0}^{n_{\max}} \frac{S_{NN}^{22}}{1 + (n\omega_0\tau)^2} + A_{24} \sum_{N=0}^2 f_{24}^{NN}(\theta_{1i}, \phi_{1i}, \theta_{2i}, \phi_{2i}) \times \\ &\times \sum_{n \geq 0}^{n_{\max}} \frac{S_{NN}^{24}}{1 + (n\omega_0\tau)^2} + A_{42} \sum_{N=0}^2 f_{42}^{NN}(\theta_{1i}, \phi_{1i}, \theta_{2i}, \phi_{2i}) \times \\ &\left. \times \sum_{n \geq 0}^{n_{\max}} \frac{S_{NN}^{42}}{1 + (n\omega_0\tau)^2} + A_{44} \sum_{N=0}^4 f_{44}^{NN}(\theta_{1i}, \phi_{1i}, \theta_{2i}, \phi_{2i}) \sum_{n \geq 0}^{n_{\max}} \frac{S_{NN}^{44}}{(1 + n\omega_0\tau)^2} \right], \quad /7/ \end{aligned}$$

где

$$n_{\max} = \max_{\langle N \rangle} \begin{cases} |N| (2I - |N|) & \text{для целых } I, \\ \frac{1}{2} |N| (2I - |N|) & \text{для полуцелых } I. \end{cases}$$

Информация о взаимном расположении детекторов и оси "с" монокристалла содержится в коэффициентах $f_{k_1 k_2}^{NN}$. Аналогично работе^{/5/} мы приняли систему координат, в которой ось z сферической системы координат направлена вдоль оси симметрии кристалла "с". Коэффициенты $S_{nN}^{k_1 k_2}$ рассчитываются по формулам^{/6/}

$$S_{nN}^{k_1 k_2} = (2 - \delta_0) \begin{pmatrix} I & I & k_1 \\ m-N & -m & N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & I & k_2 \\ m-N & -m & N \end{pmatrix} \sqrt{(2k_2+1)(2k_2+1)} \quad /8/$$

для $N \neq 0$

и

$$S_{nN}^{k_1 k_2} = \delta_{n0} \delta_{k_1 k_2} \quad \text{для } N=0, \quad /9/$$

где

$$m = \begin{cases} \frac{N}{2} + \frac{n}{2N} & \text{для целых } I, \\ \frac{N}{2} + \frac{n}{N} & \text{для полуцелых } I. \end{cases}$$

б/ QUDIP. Для случая аксиально-симметричных случайно ориентированных ГЭП в поликристалле формула, связывающая число совпадений при определенном угле между детекторами θ с функцией возмущений угловой корреляции, имеет вид^{/4/}

$$N_i(\theta) = N_0 \left[1 + A_{22} \sum_{n=0}^{n_{\max}} S_{2n} \frac{1}{1 + (n\omega_0 \tau)^2} \cdot \frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta - 1) + \right. \\ \left. + A_{44} \sum_{n=0}^{n_{\max}} S_{4n} \frac{1}{1 + (n\omega_0 \tau)^2} \cdot \frac{1}{8} (35 \cos^4 \theta - 30 \cos^2 \theta + 3) \right] \quad /10/$$

Коэффициенты s_{kn} вычисляются по формуле^{/6/}

$$s_{kn} = \frac{1}{2k+1} \sum_{N=0}^{k=2,4} (2 - \delta_{n0}) S_{nN}^{kk} \quad /11/$$

где S_{nN}^{kk} определяются по формулам /8/ и /9/.

в/ MAGNI. В методе ИВУК для случая преобладающего статического магнитного взаимодействия измеряется угловая корреляция γ -квантов для двух противоположных направлений магнитного поля, приложенного перпендикулярно плоскости детекторов^{/4/}:

$$N_i(\theta_i, \pm H) = N_0 \left\{ 1 + \frac{1}{4} A_{22} G_{22} \left[1 + \frac{3 \cos 2(\theta \mp \Delta\theta_{22})}{\sqrt{1 + (2\omega_L \tau G_{22})^2}} \right] + \right. \\ \left. + \frac{1}{64} A_{44} G_{44} \left[9 + \frac{20 \cos 2(\theta \mp \Delta\theta_{24})}{\sqrt{1 + (2\omega_L \tau G_{44})^2}} + \frac{35 \cos 4(\theta \mp \Delta\theta_{44})}{\sqrt{1 + (4\omega_L \tau G_{44})^2}} \right] \right\}, \quad /12/$$

где $\Delta\theta_{nk} = \frac{1}{n} \arctg(n\omega_L \tau G_{kk})$; $0 < \Delta\theta_{nk} < \frac{\pi}{2k}$; $n = 2, 4$. G_{kk} - факторы ослабления угловой корреляции, вызванного взаимодействиями, отличными от статического магнитного.

4. Q МЕТОДЕ ОБРАБОТКИ

Как правило, при измерении ИВУК экспериментатор имеет значения коэффициентов угловой корреляции /а в некоторых случаях и

матрицу ошибок этих коэффициентов/, полученные из независимо проведенных измерений. Обычно избыток числа экспериментальных точек над числом варьируемых параметров невелик, поскольку в силу длительности измерения одной точки, достигающего нескольких десятков часов, экспериментатор стремится ограничиться минимально возможным числом измеряемых точек и таким образом уменьшает статистическую достоверность результатов своих измерений.

Изложенный Д.Хорватом^{/1/} метод одновременной оценки параметров в задаче нелинейного метода наименьших квадратов позволяет использовать результаты ранее проведенных экспериментов в качестве независимо измеренных значений, дополняя минимизируемую сумму квадратов

$$S_1(a, b) = \sum_{i=1}^N W_i [Y_i - f(x; a, b)]^2 \quad /13/$$

членом

$$S'_2(b, \hat{b}) = \sum_{k, \ell} [Q_{b}^{-1}]_{k\ell} (b_k - \hat{b}_k)(b_\ell - \hat{b}_\ell). \quad /14/$$

Там же показывается, что задача

$$S_2(a, b) = S_1(a, b) + \sum_{j=1}^k V_j [Z_j - g(t_j, b)]^2 = \min \quad /15/$$

эквивалентна

$$S_3(a, b) = S_1(a, b) + S'_2(b, \hat{b}) = \min, \quad /16/$$

где $\{Y_i\}_{i=1, N}$ - экспериментальные данные, полученные в текущем эксперименте; $x \equiv \{x_i\}_{i=1, N}$ - переменные текущего эксперимента; $\{Z_j\}_{j=1, k}$ - экспериментальные данные независимо проведенного эксперимента; $t \equiv \{t_j\}_{j=1, k}$ - переменные независимо проведенного эксперимента; W_i, V_j - веса соответствующих данных в соответствующем эксперименте, выбранные как $1/\sigma_{y_i}^2$ и $1/\sigma_{z_j}^2$; $a \equiv \{a_f\}_{f=1, F}$ - варьируемые параметры, общие для двух экспериментов; $\{b_\ell\}_{\ell=1, r}$ - оценки параметров, полученные в независимо проведенном эксперименте; $[Q_b]_{\ell p}$ $\ell, p = 1, r$ - ковариантная матрица вектора параметров

"b", полученная в независимо проведенном эксперименте; $g(t, b)$, $f(x; a, b)$ - модельные функции соответствующих экспериментов; $m = r + f$ - полное число варьируемых параметров.

Задача /16/ обладает $N - f$ степенями свободы. Когда корреляции между элементами вектора \hat{b} малы, то можно приближенно записать дополнительную сумму квадратов S'_3 как

$$\sum_{k=1}^r \frac{1}{\sigma_{bk}^2} (b_k - \hat{b}_k)^2. \quad /17/$$

5. ОПИСАНИЕ ПРОГРАММ

Для работы с минимизирующим комплексом MINUIT^{12/} для каждого из вышеперечисленных 3 случаев составлены FCN-подпрограммы. Каждая FCN-подпрограмма осуществляет:

1. Ввод экспериментальных данных, ошибок и других величин, необходимых для вычисления функций угловой корреляции. Производится при первом обращении к FCN /в начале каждого нового блока данных/.

2. Вычисления величины $S_3(a, b)$ и производных от нее по всем параметрам для "промежуточных" обращений к FCN.

3. Вывод результатов подгонки в виде таблицы в конце блока данных либо по специальному вызову с помощью командной карты CALL FCN. Ввод начальных данных значений параметров, их ошибок и пределов изменения проводится на картах параметров /см. таблицу/. Номера параметров при вводе на картах параметров принято обозначать следующим образом:

Обозначения параметров, принятые в расчетных формулах	Номера параметров		
	QUDIM	QUDIP	MAGNI
N_0	1	1	1
ω	2	2	2
τ	3	3	3
A'_{22}	4	4	4
A'_{24}	5	-	-
A'_{42}	6	-	-
A'_{44}	7	5	5
G_{22}	-	-	6
G_{44}	-	-	7

Все параметры формально являются варьируемыми. Пользователь может фиксировать любую их комбинацию с помощью командной карты.

Во всех вышеприведенных расчетных формулах для возмущенных угловых корреляций коэффициенты $A_{k\ell}$ определяются как

$$A_{k\ell} = A_k(1) \cdot A_\ell(2) = A'_{k\ell} Q_k(1) Q_\ell(2), \quad /18/$$

где $Q_k(1)$ и $Q_\ell(2)$ - поправки на конечные телесные углы детекторов, регистрирующих первый и второй γ -кванты. Расчет поправок на конечный телесный угол детекторов проводится по методу, изложенному в работах^{17,8/}, для следующих типов детекторов:

1. Ge(Li) /коаксиальный с двумя открытыми концами/,
2. Ge(Li) /коаксиальный с одним открытым концом/,
3. Ge(Li) /плоско-параллельный/,
4. Ge(Li),
5. Ge(Li),
6. NaI(Tl).

Каждому типу детекторов присвоен условный код /номер/. Коды 4,5 зарезервированы для других типов Ge(Li)-детекторов. Линейные коэффициенты поглощения γ -излучения в Ge, приведенные в работе^{18/}, интерполируются в двойном логарифмическом масштабе в интервале энергии от 30 до 1500 кэВ. Линейные коэффициенты поглощения для NaI взяты из работы^{19/}. Интегрирование при расчетах поправок производится по методу Гаусса.

Карты, вводимые подпрограммой FCN:

а/ QUDIM

1. Спин уровня, для которого наблюдаем возмущение, $I \leq 10$ /F10.3/.

2. IDCOD, Q2INP, Q4INP - условный код детектора, регистрирующего первый γ -квант, и соответствующие значения поправок на телесный угол ($\neq 0$), если они не будут вычисляться.

3. EGAMM - энергия гамма-кванта в кэВ /F10.3/.

4. DISTA - расстояние от источника до поверхности кристалла детектора в см /F10.3/.

5. RINTR, REXTR, DETLN, SMALD - размеры детектора в см /4F10.3/.

Пункты 2÷5 повторяются для детектора, регистрирующего второй γ -квант.

6. VALUE, ERROR, ANP01, ANAZ1, ANP02, ANAZ2 - число совпадений, их статистическая ошибка, полярный и азимутальный углы первого и второго детекторов /6 10.3/.

Пункт 6 повторяется до тех пор, пока не будет введено значение $VALUE \leq 0$. Допускается ввод не более чем 20 экспериментальных значений.

7. INDEP, ESTMA - номер параметра, имеющего оценку, под которым он проходит в карте параметров /110, F10.3/; пункт 7 повторяется до тех пор, пока не будет введено значение $INDEP \leq 0$. Если число параметров, имеющих оценки, не равно 0, то вводится

8. COVAR /I, Y/ - матрица ошибок параметров /7F10.3/.

б/ QUDIP

Ввод карт FCN - как в программе QUDIM за исключением п.6, где вводится: VALUE, ERROR, THETA /THETA - угол между осями детекторов, регистрирующих 1 и 2 излучение в градусах /3F 10.3//.

в/ MAGNI

Ввод карт FCN такой же, как в программе QUDIP, только сначала вводятся числа совпадений для одного, а потом для второго направления поляризуемого магнитного поля.

При выводе информации, полученной с помощью программ QUDIP, MAGNI, используя вызов CALL FCN, можно получить графики угловой корреляции с нанесенными экспериментальными точками.

Ниже приведен список и показано назначение основных используемых функций и подпрограмм:

1. TAUGE - функция, вычисляющая значения линейного коэффициента поглощения γ -излучения в Ge.
2. TAUNA - функция, вычисляющая значения линейного коэффициента поглощения γ -излучения в NaI.
3. JORDK - подпрограмма, вычисляющая компоненты J_k поправок на конечный телесный угол детектора $Q_k = J_k / J_0$.
4. QUADR - значения функции угловой корреляции и ее производных по параметрам в программе QUDIM.
5. QUADP - значения функции угловой корреляции и ее производных по параметрам в программе QUDIP.
6. MAGNO - значения функции угловой корреляции и ее производных по параметрам в программе MAGNI.
7. ALONS - подпрограмма, вычисляющая значения коэффициентов $f_{k_1 k_2}^{N_1 N_2}$.
8. ANDSQR - подпрограмма, вычисляющая дополнительный член /14/ к сумме квадратов и производные от него по параметрам.
9. SBIGC - подпрограмма, вычисляющая значения коэффициентов $S_{N_1 N_2}^{k_1 k_2}$ по формулам /8/ и /9/ для $I \leq 10$.
10. SKNLO - подпрограмма, вычисляющая значения коэффициентов s_{kn} по формуле /11/ для $I \leq 10$.
11. CHIQM - функция, вычисляющая значения величины /16/ и ее производные по параметрам для программы QUDIM.
12. CHIQP - функция, вычисляющая значения величины /16/ и ее производные по параметрам для программы QUDIP.
13. CHIMA - функция, вычисляющая величины /16/ и ее производные по параметрам для программы MAGNI.

Карты, входящие в блок данных программы MINIUT:

1. Карта-заголовок /комментарий/.
2. Карты параметров /по одной карте на каждый параметр/.
3. Карта-признак конца карт параметров.
4. Карты, вводимые программой FCN /если таковые имеются/.
5. Командные карты /последняя карта-признак конца блока данных/.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Программы для обработки ИВУК достаточно универсальны. Они могут работать как в диалоговом /сокращенный вариант на ЕС-1010/, так и в автоматическом /CDC-6500/ режиме. Опробованы на тестовых и экспериментальных данных. Коэффициенты $S_{nN}^{k_1 k_2}$ и s_{kn} , вы-

числяемые соответственно по формулам /8-9/ и /11/, совпадают со значениями, приведенными в работе /6/, с точностью 10^{-5} .

Результаты измерений ИВУК ^{152}Sm в образцах Gd и GdF_3 обработаны с помощью программ QUDIP и QUDIM. Полученные значения ГЭП $3,25/24 \cdot 10^{21} \text{ В/м}^2$ и $9,5/7 \cdot 10^{21} \text{ В/м}^2$ находятся в хорошем согласии с данными работ /10/ и /11/: $3,43/14 \cdot 10^{21} \text{ В/м}^2$ и $9,97/7 \cdot 10^{21} \text{ В/м}^2$ соответственно. Программа MAGNI использовалась при обработке ИВУК ^{152}Sm в Co^{12} наряду с другими методами обработки. Результаты совпадают между собой.

ЛИТЕРАТУРА

1. Horwath D. Preprint KFKI-73-53, Budapest, 1973.
2. James F., Roos M. Comp.Phys.Comm., 1975, 10, p.343.
3. Соколов С.Н., Силин И.Н. ОИЯИ, Д-810, Дубна, 1961.
4. Фраунфельдер Г., Стеффен Р. В кн.: Альфа-, бета- и гамма-спектроскопия /под ред. К.Зигбана/. Атомиздат, М., 1969, с.211.
5. Alonso C.T., Grodzins L. Phys.Rev., 1972, C5, p.728.
6. Dafni E. et al. Atomic Data and Nuclear Data Table, 1979, 23, p.315.
7. Camp D.C., Van Lehn A.L. Nucl.Instr. and Meth., 1969, 76, p.192; 1970, 87, p.147.
8. Krane K.S. Nucl.Instr. and Meth., 1972, 98, p.205.
9. Гродстейн Г. В кн.: А.Фергюсон. Методы угловых корреляций в гамма-спектроскопии. Атомиздат, М., 1969, с.240.
10. Hausser O. et al. Nup.Int., 1980, 8, p.271.
11. Barton W.A., Cashion J.D. J.Phys.C: Solid State Phys., 1979, 12, p.2897.
12. Будзынски М. и др. ОИЯИ, P19-81-564, Дубна, 1981.

Рукопись поступила в издательский отдел
30 августа 1982 года.

Бруданин В.Б. и др.

10-82-641

Программы обработки интегральных возмущенных
угловых $\gamma\gamma$ -корреляций

Приведены основные расчетные формулы и описаны программы для обработки интегральных угловых гамма-гамма-корреляций, возмущенных статическим квадрупольным взаимодействием в аксиально-симметричных моно- и поликристаллах, а также магнитным взаимодействием в ферромагнитных образцах. Расчет поправок на конечные телесные углы проводится для Ge(Li)- и NaJ(Tl)-детекторов с привлечением обычно применяемых коэффициентов линейного поглощения гамма-излучения. Программы написаны на языке фортран-IV. Приведено несколько примеров использования программ для обработки угловых корреляций, возмущенных сверхтонким взаимодействием.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Brudanin V.B. et al.

10-82-641

Programs for Treatment of Integral Perturbed Angular
Gamma-Gamma Correlations

The basic calculation formulas and description of the program for fragment angular correction perturbed by static quadrupole interaction in axially symmetrical mono- and polycrystals, and by magnetic interaction in ferromagnetic samples are given. Calculation correction of finite solid angle is made for Ge(Li) and NaJ(Tl)-detectors with application of common linear absorber coefficient of γ -radiation. Programs are written in fortran-IV language. The description of the application of the program for treatment of angular correlations perturbed by hyperfine interaction and some examples are presented.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1982

Перевод О.С.Виноградовой.