ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Б1-15-80-543

ДЕПОНИРОВАННАЯ ПУБЛИКАЦИЯ

Дубна 1980

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Лаборатория нейтронной физики

Ю.В.Кангрополь, М.Мадея, І.М.Осетинский, А.Туровецки

ПРОГРАММА ДЛЯ НАХОЖДЕНИЯ ПО МЕТОДУ НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ ПАРАМЕТРОВ РЕЗОНАНСОВ С УЧЕТОМ ПРЯМОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Дубна, 1979

Аннотация

Программа предназначена для вычисления сечения неупругого рассеяния, вероятности спин-флипа и поляризации при неупругом рассеянии частиц со спином I/2 на четно-четных ядрах с возбуждением 2^+. В программе учитывается резонансный процесс (ф-ла Брейта - Вигнера), прямой процесс (в рамках связанных каналов или *DWBA*) и интерференцию между ними. При расчете допускаются две возможности. Первая - теоретический расчет этих величин (при введении параметров резонанса). Вторая - поиск параметров резонанса из сравнения, по методу наименьших квадратов, теоретических расчетов со всей совокупностью экспериментальных данных.

I. ВВЕДЕНИЕ.

Продолжающиеся в ОИЯИ исследования вероятности спин-флипа при взаимодействии протонов малых энергий с атомными ядрами потребовали дальнейшего развития программы " SFDR " /I/. С этой целью была составлена программа " DOALL ", предназначенная как и " SFDR " для вычисления дифференциального сечения неупругого рассеяния частиц со спином I/2 на четно-четных ядрах с возбуждением первого состояния 2^+, а также вычисления поляризации и вероятности спин-флипа этих частиц прямым образом и через резонансы. Однако, " DOALL " позволяет учитывать прямое взаимодействие не только в приближении DWBA , как это было ранее, но и в рамках метода связанных каналов, что позволило снять ограничение на параметр деформации атомного ядра.

Кроме того, феноменологическое введение резонансов с помощью формулы Брейта-Вигнера, как правило, подразумевает нахождение положения и ширин резонансов из сравнения теоретического расчета с экспериментальными данными. Такая возможность реализована в описываемой программе с помощью подпрограммы " FUMILI ", причем параметры резонансов находятся из всей совокупности экспериментальных результатов: энергетических и угловых зависимостей дифференциального сечения, поляризации и спин-флипа. Программа " DOALL " написана на алгоритмическом языке FORTRAN-IV .

П. АМПЛИТУДА НЕУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ.

Амплитуда неупругого рассеяния в общем случае может быть записана в следующем виде:

$$F^{M_a M_b m_a m_b} = -\frac{2\pi}{i k_a} \sum (l_a, m_{l_a}, s_a, m_a \,|\, j_a, m_{j_a}) \times$$
$$\times (J_A, M_A, j_a, m_{j_a} \,|\, J, M) \times (l_b, m_{l_b}, s_b, m_b \,|\, j_b, m_{j_b}) \times \qquad (I)$$
$$\times (J_B, M_B, j_b, m_{j_b} \,|\, J M) \times Y^*_{l_a, m_{l_a}}(\theta_a, \varphi_a) \times Y_{l_b, m_{l_b}}(\theta_b, \varphi_b) \times$$
$$\times S^J_{l_a, j_a, l_b, j_b} \times e^{i(\sigma_{l_a} + \sigma_{l_b})}.$$

где k_a – волновое число налетающей частицы,

$l_a, m_{l_a}, l_b, m_{l_b}$ – орбитальные моменты и их проекции налетающей и и рассеянной частиц соответственно;

s_a, m_a, s_b, m_b – спины и их проекции налетающей и рассеянной частиц соответственно;

J_A, M_A, J_B, M_B – спины и их проекции начального и конечного ядра мишени;

J, M – полный момент системы и его проекция;

$S^J_{l_a, j_a, l_b, j_b}$ – S -матрица рассеяния;

$\sigma_{l_a}, \sigma_{l_b}$ – кулоновские фазы для входного и выходного каналов соответственно.

Суммирование ведется по $l_a, m_{l_a}, l_b, m_{l_b}, j_a, m_{j_a}, j_b, m_{j_b}, J$ и M .

В случае рассеяния протонов на четно-четном ядре с возбуждением состояния 2^+, т.е. $J_A = 0$, $S_a = S_b = 1/2$, $J_B = 2$ и оси Z , направленной перпендикулярно плоскости реакции, амплитуда примет вид:

$$F^{M_B m_a m_b} = -\frac{2\pi}{i k_a} \sum (l_a, m_{l_a}, 1/2, m_a \,|\, J, M) \times$$
$$\times (l_b, m_{l_b}, 1/2, m_b \,|\, j_b, m_{j_b}) \times (2, M_B, j_b, m_{j_b} \,|\, J, M) \times \qquad (2)$$
$$\times Y^*_{l_a, m_{l_a}}(\tfrac{\pi}{2}, 0) \times Y_{l_b, m_{l_b}}(\tfrac{\pi}{2}, \varphi) \times S^J_{l_a, J, l_b, j_b} \times e^{i(\sigma_{l_a} + \sigma_{l_b})}$$

Таким образом, вычисление амплитуды рассеяния сводится к вычислению S -матрицы по той или иной модели. В частности, в приближении $DWBA$ S-матрица выражается через интегралы перекрытия следующим образом /2/:

$$ {}^{D}S^{J}_{l_a,J,l_b,j_b} = \frac{\beta\,\mu\cdot\sqrt{5}}{(\pi\cdot k_a\cdot k_b)^{1/2}\hbar^2} \times i^{l_a+l_b+1} \times (-1)^{\frac{1}{2}+J} \times (l_b,0,2,0|l_a,0) \times \tag{3} $$
$$ \times \begin{Bmatrix} 2 & l_b & l_a \\ \frac{1}{2} & j_a & j_b \end{Bmatrix} \times \int l_a\, J\, l_b\, j_b $$

где $\mu = \frac{M_я \cdot M_ч}{M_я + M_ч}$ - приведенная масса,

k_b - волновое число вылетающей частицы,

$\int l_a, J, l_b, j_b$ - интегралы перекрытия /I,2/,

β - параметр деформации ядра мишени.

В случае учета прямого процесса по методу связанных каналов, S -матрица получается из решения системы связанных уравнений /3/:

$$ -\frac{\nabla^2}{2m}\,\eta_\alpha(\bar r) + \sum_{\alpha'} \bar V_{\alpha\alpha'}(\bar r)\,\eta_{\alpha'}(\bar r) = (E - E_\alpha)\,\eta_\alpha(\bar r) $$

где $\bar V_{\alpha\alpha'}(\bar r) = \int d\xi\, \varphi^*_\alpha(\xi)\, V(\bar r,\xi)\, \varphi_{\alpha'}(\xi)$

Здесь $\varphi_\alpha(\xi)$ - собственные волновые функции ядра мишени, вычисляемые по той или иной модели (ротационной, вибрационной и т.д.);

$V(\bar r,\xi)$ - полная потенциальная энергия системы, состоящей из ядра мишени и налетающей частицы;

α - совокупность квантовых чисел и номер канала.

Асимптотическое поведение радиальных волновых функций определяет S -матрицу и имеет вид:

$$ \eta^J_{a,l_a,j_a} = \frac{k_a\cdot r}{2}\left(M^{(2)}_{l_a}(k_a,r) + {}^{D}S^{J}_{a,l_a,j_a,a,l_a,j_a} \times M^{(1)}_{l_a}(k_a,r)\right) $$

$$ \eta^J_{b,l_b,j_b} = \frac{k_b\cdot r}{2}\, {}^{D}S^{J}_{a,l_a,j_a,b,l_b,j_b}\, M^{(1)}_{l_b}(k_b,r) $$

где $M_l^{(1)}$ и $M_l^{(2)}$ – кулоновские регулярная и нерегулярная волновые функции.

При низких энергиях в канале неупругого рассеяния наблюдается большое количество изолированных резонансов, которые могут быть учтены при расчетах сечения, поляризации и спин-флипа путем добавления к S –матрице прямого процесса S –матрицы в виде Брейта-Вигнера /4/:

$$ {}^{R}S^{J_R}_{l_R J_R l_b j_b} = \frac{g^{in}_{l_R J_R} \cdot g^{out}_{l_b j_b} \cdot e^{-i\varphi_{l_b j_b}}}{E - E_R + i\,\Gamma_R/2} \qquad (4) $$

где E_R – энергия резонанса,

Γ_R – полная ширина резонанса,

$g^{in}_{l_R J_R}$ – амплитуда образования резонанса,

$g^{out}_{l_b J_b}$ – парциальная амплитуда распада резонанса,

$\varphi_{l_b j_b}$ – фаза,

J_R, l_R – спин и орбитальный момент резонанса.

Из унитарности полной S –матрицы следует, что $g^{in}_{l_R J_R}$ и $g^{out}_{l_b j_b}$ не являются независимыми величинами и связаны друг с другом соотношением:

$$ g^{in}_{l_R J_R} = {}^{D}S^{J_R}_{a\, l_R J_R\, a\, l_R J_R} \times g^{outEL}_{l_R J_R} \times e^{i\varphi_{l_R J_R}} \times e^{i 2\sigma_{l_R}} + $$

$$ + \sum_{b, l_b, j_b} {}^{D}S^{J_R}_{a\, l_R J_R\, b\, l_b j_b} \times g^{out}_{l_b j_b} \times e^{i\varphi_{l_b j_b}} \times e^{i(\sigma_{l_R} + \sigma_{l_b})} $$

где $g^{outEL}_{l_R J_R}$ – амплитуда распада резонанса во входной канал.

Ш. СЕЧЕНИЕ, ПОЛЯРИЗАЦИЯ И СПИН-ФЛИП.

В случае оси z , направленной перпендикулярно плоскости реакции, сечение, поляризация и спин-флип могут быть выражены через сечения, отвечающие определенным проекциям спина налетающей и рассеянной частиц:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}^{m_a m_b} = \sum_{M_B} |F^{M_B m_a m_b}|^2 \tag{5}$$

При отсутствии поляризации у налетающих частиц, для сечения, поляризации и спин-флипа имеем:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2} \sum_{m_a m_b} \frac{d\sigma}{d\Omega}^{m_a m_b} \tag{6}$$

$$P = \frac{\sum_{m_a m_b} (-1)^{m_b - \frac{1}{2}} \cdot \frac{d\sigma}{d\Omega}^{m_a m_b}}{\frac{d\sigma}{d\Omega}} \tag{7}$$

$$S = \frac{\sum_{m_a} \frac{d\sigma}{d\Omega}^{m_a, -m_a}}{\frac{d\sigma}{d\Omega}} \tag{8}$$

Для правильного описания экспериментальных результатов в области энергий, в которой в функции возбуждения присутствуют довольно узкие резонансы, необходимо учитывать конечную толщину мишени и немонохроматичность по энергии налетающих частиц. Закон $f(E)$, по которому распределены энергии частиц к моменту взаимодействия с ядрами мишени, сложен, но с достаточной точностью в качестве него может быть взята функция в виде трапеции, представленной на рис.I.

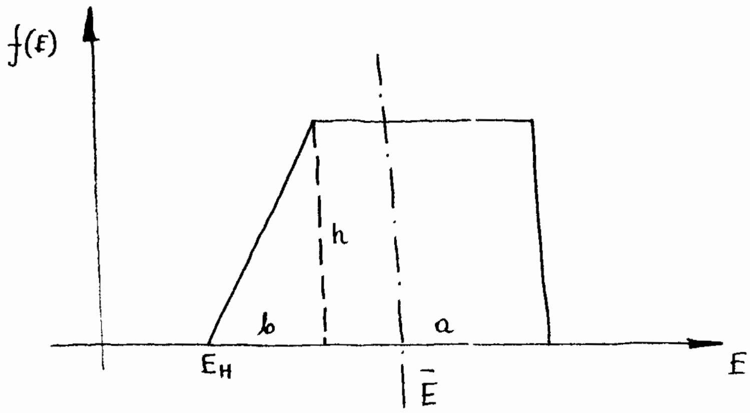

рис. 1

Из нормировки $f(E)$ на единицу следует, что величины a, b, h, E_H и $\bar{E}$ связаны между собой соотношениями

$$h = \frac{2}{2a+b} \qquad\qquad \bar{E} = E_H + \frac{(b+a)^2 - b^2/3}{2a+b}$$

Таким образом, наблюдаемое сечение $\overline{d\sigma}^{m_a m_b}/d\Omega$ будет иметь вид:

$$\frac{\overline{d\sigma}^{m_a m_b}}{d\Omega} = \int\limits_{E_H}^{E_H+a+b} f(E)\cdot\frac{d\sigma^{m_a m_b}}{d\Omega}\,dE$$

При усреднении мы будем считать, что в области энергии от E_H до E_H+a+b, которая обычно не превосходит 100 кэВ, прямой процесс не зависит от энергии. В этом приближении

$$\frac{\overline{d\sigma}^{m_a m_b}}{d\Omega} = \sum_{M_B}\Big\{\big|{}^D F^{M_B m_a m_b}\big|^2 + \mathrm{Re}\sum_{RR'} B_R B_{R'}^{*}\frac{A_{R'}^{*} - A_R}{\left(E_{R'}+i\frac{\Gamma_{R'}}{2}\right)-\left(E_R - i\frac{\Gamma_R}{2}\right)} + \qquad (9)$$

$$+ 2\,\mathrm{Im}\,{}^D F^{M_B m_a m_b}\sum_{R} A_R B_R\Big\}$$

где ${}^D F^{M_B m_a m_b}$ – амплитуда прямого взаимодействия, а R и R' пробегают значения по всем учитываемым резонансам. Для величин A_R и B_R имеем:

$$A_R = \frac{h}{b}\left[b + \left(E_R - E_H - i\frac{\Gamma_R}{2}\right)\cdot \ln\left(1+\frac{b}{E_H - E_R + i\frac{\Gamma_R}{2}}\right) + b\cdot \ln\left(1+\frac{a}{E_H - E_R + i\frac{\Gamma_R}{2} + b}\right)\right]$$

$$B_R = -\frac{2\pi}{ika}\sum_{m_{l_b} l_b j_b} (l_R\, m_{l_R}\, \tfrac{1}{2}\, m_a \,|\, J_R\, M_{J_R})(l_b\, m_{l_b}\, \tfrac{1}{2}\, m_b \,|\, j_b\, m_{j_b}) \times \qquad \text{(IO)}$$

$$\times (2\, M_B\, j_b\, m_{j_b} \,|\, J_R\, M_{J_R})\, Y_{l_R m_{l_R}}(\tfrac{\pi}{2}, 0)\, Y_{l_b m_{l_b}}(\tfrac{\pi}{2}, \theta) \times$$

$$\times e^{-i\varphi_{l_b j_b}} \cdot g^{in}_{l_R J_R} \cdot g^{out}_{l_b j_b} .$$

НАХОЖДЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ РЕЗОНАНСОВ ИЗ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ.

Параметры резонансов могут быть найдены из сравнения экспериментальных результатов с теоретическими расчетами по методу "наименьших квадратов", т.е. минимизацией величины

$$\chi^2 = \frac{1}{n-m}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{f_э(x_i, y_i, \ldots) - f_T(x_i, y_i, \ldots, \alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_m)}{\Delta f_э(x_i, y_i)}\right)^2$$

где n – число экспериментальных точек,

m – число параметров,

$f_э(x_i, y_i)$ – значение экспериментальной величины при аргументах x_i, y_i, ...,

$\Delta f_э(x_i, y_i, \ldots)$ – значения ошибок экспериментальной величины

$f_T(x_i, y_i, \ldots, \alpha_1, \alpha_2, \ldots \alpha_m)$ – теоретическое значение, вычисленное при аргументах x_i, y_i, ... и параметрах α_1, α_2, ..., α_m.

В описываемой программе минимизация χ^2 реализована с помощью библиотечной подпрограммы FUMILI, причем в качестве аргументов используются энергия налетающих частиц и угол, при которых измерялись сечение, поляризация и спин-флип. Параметрами являются величины:

$$g_{l_R j_R l_b j_b} = e^{-i\varphi_{l_b j_b}} \cdot g^{in}_{l_R j_R} \cdot g^{out}_{l_b j_b} \quad ; \tag{I3}$$

а также положения и полные ширины резонансов. Если предположить, что распад резонанса идет только в упругий канал и канал с возбуждением состояния 2^+ ядра мишени, т.е.:

$$\Gamma_R^{*} = \left(g_{l_R j_R}\right)^2 + \sum_{l_b j_b} \left(g^{out}_{l_b j_b}\right)^2 \tag{I4}$$

и известно $\left(g^{out\,EL}_{l_R j_R}\right)^2$, то величины $g^{out}_{l_b j_b}$ и $\varphi_{l_b j_b}$ могут быть найдены по следующим формулам:

$$g^{out}_{l_b j_b} = \frac{|g_{l_R j_R l_b j_b}| \sqrt{\Gamma_R - \left(g^{out\,EL}_{l_R j_R}\right)^2}}{\sqrt{\sum_{l_b j_b} |g_{l_R j_R l_b j_b}|^2}} \; ; \quad \varphi_{l_b j_b} = -\arg\left(g_{l_R j_R l_b j_b}\right) \tag{I5}$$

В том случае, если известна S -матрица упругого рассеяния, $g^{out\,EL'}_{l_R j_R}$ может быть найдена из формул (5) и (I5).

ОПИСАНИЕ ПРОГРАММЫ.

В программе "DOALL" на основе формул 2 - II вычисляются сечение, поляризация и спин-флип с учетом как прямого взаимодействия протонов с ядром, так и через резонансы, причем в специальном режиме она на основе метода наименьших квадратов находит параметры резонансов из сравнения теоретических расчетов с экспериментальными данными. В качестве экспериментальных данных могут быть взяты угловые и энергетические зависимости дифференциального сечения, поляризации и спин-флипа. Метод наименьших квадратов реализован на основе подпрограммы " FUMILI ". Прямое взаимодействие считается независящим от энергии в интервале, в котором заданы экспериментальные данные.

Программа содержит следующие подпрограммы:

AMPL, AMPLE – предназначены для вычисления амплитуд резонансного рассеяния и их производных по параметрам резонансов в случае отсутствия и наличии усреднения по энергии соответственно;

AMPLS – вычисляет амплитуды прямого взаимодействия;

INTS – пересчитывает по формуле 3 интегралы перекрытия в S -матрицу;

DSECH – вычисляет сечение, поляризацию и спин-флип и их производные по параметрам резонансов;

FFUN – вычисляет A_R и их производные по E_R и Γ_R ;

WIDTH – вычисляет параметры резонансов и их ошибки;

CLEBSH – вычисляет коэфф. Клебша-Гордана вида $(2M, jm_j|JM_J)$;

FACTR – предназначена для вычисления $\ln(n!)$, $\ln(2n!!)$ и $\ln((2n+1)!!)$;

SPHER – вычисляет $Y_{lm}(\pi/2, 0)$;

ARITHM – подпрограмма, предназначенная для работы " FUMILI ".

НАЧАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ И ПОРЯДОК ПЕРФОКАРТ.

I п/к – 50 произвольных символов (эти символы будут отпечатаны и поэтому с помощью их можно отличать один вариант от другого);

2 п/к $JBMAX$ – максимальный удвоенный полный момент вылетающей частицы при прямом взаимодействии ($JBMAX \leqslant 50$), формат I2;

$0 < NR \leqslant 8$ – количество учитываемых резонансов, формат I1 ;

NT – количество экспериментальных точек, формат I3;

KLU – при $KLU = 0$ прямое взаимодействие вычисляется в рамках связанных каналов, при $KLU \neq 0$ прямое взаимодействие учитывается в приближении $DWBA$. В случае $JBMAX = 0$ прямое взаимодействие не учитывается, формат I1 ;

$KLU1$ – при $KLU1 = 0$ будут вычислены $\Gamma_{p_0}^{out}$, при $KLU1 = 1$ $\Gamma_{p_0}^{out}$ считаются заданными. Формат I1 ;

$KLU2$ – всегда равно нулю. Формат I1 ;

3 п/к AP – масса налетающей частицы в единицах массы протона. Формат F 3.I;

AT – масса ядра мишени в единицах массы протона. Формат F 5.I;

a и b – параметры функции распределения частиц по энергиям (кэВ), формат 2F 7.3 при $a = b = 0$ усреднения не производится. В случае $a \neq 0$ значение b не может равняться нулю.

BETTA – в том случае, если прямое взаимодействие учитывается в приближении $DWBA$ BETTA = $0.097552 \times \beta \cdot \left(\frac{AP}{\sqrt{E_a \cdot E_b}}\right)^{1/2}$, где β – параметр деформации ядра мишени, E_a – энергия в ЛСК налетающей частицы (МэВ), E_b – энергия в ЛСК рассеянной частицы (МэВ). В остальных случаях значение BETTA безразлично. Формат F 7.3;

4 п/к и т.д. SEL – S –матрица упругого рассеяния для l и j, равных угловому и полному моментам резонансов в той же последовательности, что и резо-

нансы. Число элементов -матрицы, таким образом, должно равняться числу резонансов. Для каждого элемента пробиваются сначала реальная часть, а затем мнимая. Формат IO F 8.6;

5 - если $JBMAX \neq 0$, то далее должны быть заданы значения S -матрицы или интегралы перекрытия в зависимости от значения параметра KLU . Величины $S^{J}_{l_a j, l_b j_b}$ и $f_{l_a j, l_b j_b}$ должны быть заданы в следующем порядке: каждая перфокарта содержит S или f для заданного l_b и j_b , причем $l_b \geqslant 0$ и $j_b \geqslant 0$ изменяются от меньших к большим. На заданной перфокарте должно находиться IO чисел для $j_b - 2 \leqslant j \leqslant j_b + 2$, причем для каждого набора $l_b j_b l_a j$ - сначала реальная часть, а затем мнимая. Если j удовлетворяет неравенству и меньше нуля, то значение S и f нужно положить равными нулю. Формат IO F 8.6. Количество перфокарт должно равняться $JBMAX$.

6 При $KLU1 = 1$ должны быть заданы Γ_S для всех резонансов и их погрешности (кэВ). Формат 8 F 6.2. Все Γ_S записываются на одной перфокарте, а на следующей - их погрешности. Если $KLU1 = 2$, то задаются Γ_{p_0} и их погрешности (кэВ) по тому же формату, что и Γ_S .

7 Для каждого резонанса задаются $Re\,g$, $Im\,g$, Γ_R , E_R , l_R , j_R и их погрешности в следующем порядке:

I п/к $(Reg)_{j_b=j_R-2}$, $(Img)_{j_b=j_R-2}$, $(Reg)_{j_b=j_R-1}$, $(Img)_{j_b=j_R-1}$, ..., $(Reg)_{j_b=j_R+2}$, $(Img)_{j_b=j_R+2}$;

2 п/к погрешности этих величин в том же порядке.

Обе перфокарты в формате I0 F 8.6.

3 п/к Γ_R (кэВ) (F 6.2), E_R (МэВ) (F 6.4), ℓ_R (F 3.I); j_R (F 3.I);

4 п/к погрешности полной ширины и положения резонанса в формате 2 F 6.3.

Погрешности могут буть равными нулю, причем для варьируемых параметров их значение не играет роли, так как они будут вычислены в процессе работы программы.

8. IV - массив длиной I2 x NR в формате 50I1. Этот массив содержит информацию о том, какие параметры резонансов изменять при работе программы „FUMILI", а какие нет. Каждые двенадцать элементов этого массива соответствуют I2 параметрам резонанса: I0 величинам Reg и Img в том порядке, как они вводятся, Γ_R и E_R. Если параметр варьируется, то $IV = 1$, иначе $IV = 0$. Число варьируемых параметров не должно превосходить 50.

9. Если варьируется по крайней мере один параметр, то далее должны быть заданы экспериментальные результаты. Каждая перфокарта соответствует одному экспериментальному значению и

EPS – точность для "*FUMILI*". Формат *F* 4.2;

Оба числа пробиваются на одной перфокарте.

Литература

I. Ван Сын Чан, К.А.Гриднев, Ю.В.Кангрополь, Л.В.Краснов, М.Мадея, Г.М.Осетинский. Сообщёние ОИЯИ, IO-IO340, I977.

2. Satchler G.K. Nucl.Phys., 1964, 55, 1

3. T.Tamura Rev. of Modern Phys 17(1) 1963, 679

4. Дж.Тейлор. "Теория рассеяния", изд. "Мир", I975.г.Москва.