

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА



С 341a1

P4 - 11076

С - 229

651/2 - 78

6/II - 78

Ч. Стоянов, И. П. Юдин

ПРОГРАММА ВЫЧИСЛЕНИЯ СТРУКТУРЫ
И ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК
ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ

ЧЕТНО-ЧЕТНЫХ СФЕРИЧЕСКИХ ЯДЕР
В ПРИБЛИЖЕНИИ ХАОТИЧЕСКИХ ФАЗ

1977

P4 - 11076

Ч.Стойнов, И.П.Юдин

ПРОГРАММА ВЫЧИСЛЕНИЯ СТРУКТУРЫ
И ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК
ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ
ЧЕТНО-ЧЕТНЫХ СФЕРИЧЕСКИХ ЯДЕР
В ПРИБЛИЖЕНИИ ХАОТИЧЕСКИХ ФАЗ

061 институт
ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

Стоянов Ч., Юдин И.П.

P4 - 11076

Программа вычисления структуры и электромагнитных характеристик возбужденных состояний четно-четных сферических ядер в приближении хаотических фаз

Дается описание программы вычисления в приближении хаотических фаз энергий однофононных состояний, их двухквазичастичных амплитуд ψ и ϕ , а также приведенных вероятностей $B(X\lambda)^{\dagger}$ ($X=E, M$). Представлены формулы, которые реализуются в предлагаемой программе, дается описание работы программы инструкция по ее использованию. Программа написана на языке ФОРТРАН-IV применительно к ЭВМ CDC-6500.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1977

Stoyanov Ch., Yudin I.P.

P4 - 11076

Program for Calculating the Structure and Electromagnetic Characteristics of Excited States of Even-Even Spherical Nuclei in Random Phase Approximation

The program is described for calculating one-phonon state energies, their two-quasiparticle amplitudes ψ and ϕ , and the reduced transition probabilities $B(X\lambda)^{\dagger}$ ($X=E, M$) in the random phase approximation. The basic RPA formulas included in the program, its operation description and instruction for users are given. The program is written in FORTRAN language executed in the CDC-6500 computer.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1977

1. Одним из основных методов теоретического исследования коллективных состояний в сферических ядрах является приближение хаотических фаз. В настоящей работе для расчета однофононных состояний используется полумикроскопический подход, в котором остаточное взаимодействие представляется в факторизованном виде $1/\sigma$. В данном подходе гамильтониан выбирается в виде

$$H = H_{av} + H_{pair} + H', \quad (1)$$

где H_{av} - среднее поле, H_{pair} - остаточное спаривательное взаимодействие с нулевым моментом и $H' = H_{\sigma}^{\lambda} - H_{\sigma}^{\lambda}$ - остаточное мультиполь-мультипольное, $H_{\sigma}^{\lambda} = H_{\sigma}^{\lambda}$ - остаточное спин-мультиполь-спин-мультипольное взаимодействие (L_{σ} - мультипольность, λ - момент состояния. В случае $H_{\sigma}^{\lambda} = L$ и λ совпадают).

В настоящей работе дается описание программы вычисления энергий $\omega_{L\lambda i}$ (i - номер корня), амплитуд $\psi_{j_1 j_2}^{L\lambda i}$ и $\phi_{j_1 j_2}^{L\lambda i}$ однофононных возбужденных состояний, а также приведенных вероятностей переходов $B(X\lambda; 0_{g.s.}^{+} \rightarrow \lambda^{\pi})$, ($X=E, M$) в сферических четно-четных ядрах.

Энергии $\omega_{L\lambda i}$ находятся как корни секулярного уравнения

$$F(\omega) \equiv \begin{vmatrix} \frac{\kappa_0^{L\lambda} + \kappa_1^{L\lambda}}{2\lambda + 1} X_n^{L\lambda i} - 1 & \frac{\kappa_0^{L\lambda} - \kappa_1^{L\lambda}}{2\lambda + 1} X_n^{L\lambda i} \\ \frac{\kappa_0^{L\lambda} - \kappa_1^{L\lambda}}{2\lambda + 1} X_p^{L\lambda i} & \frac{\kappa_0^{L\lambda} + \kappa_1^{L\lambda}}{2\lambda + 1} X_p^{L\lambda i} - 1 \end{vmatrix} = 0. \quad (2)$$

Здесь

$$X_{n,p}^{L\lambda i} = \sum_{j_1 j_2} \frac{[f_{j_1 j_2}^{L\lambda} \cdot u_{j_1 j_2}^{(\pm)}]^2 \cdot \epsilon_{j_1 j_2}}{\epsilon_{j_1 j_2}^2 - \omega_{j_1 j_2}^2}; \quad (3)$$

$\kappa_0^{L\lambda}$ и $\kappa_1^{L\lambda}$ - константы соответственно изоскалярного и изовекторного взаимодействий; $f_{j_1 j_2}^{L\lambda}$ - одночастичные приведенные матричные элементы (м.э.) мультипольного $Y_{L\lambda}$ или спин-мультипольного $Y_{L\sigma}^{L\lambda}$ операторов; $u_{j_1 j_2}^{(\pm)} = u_{j_1} \cdot v_{j_2} \pm u_{j_2} \cdot v_{j_1}$ (здесь и ниже "+" для H_Q^λ и "-" для $H_{\sigma}^{L\lambda}$), u_j, v_j - коэффициенты преобразования Боголюбова; $\epsilon_{j_1 j_2} = \epsilon_{j_1} + \epsilon_{j_2} - \text{энергия двухквантового состояния}$, $\epsilon_j = \sqrt{C_\tau^2 + (E_j - \lambda_\tau)^2}$, ($\tau = n, p$), C_τ - корреляционная функция, а λ_τ - химический потенциал основного состояния. В выражении (3) $\sum^{n,p}$ означает суммирование либо по нейтронам (n), либо по протонам (p). Если ограничиться лишь изоскалярным или изовекторным взаимодействием, то уравнение (2) переписывается как

$$1 = \frac{\kappa^{L\lambda}}{2\lambda + 1} (X_n^{L\lambda i} + X_p^{L\lambda i}). \quad (2')$$

Амплитуды $\psi_{j_1 j_2}^{L\lambda i}(\tau)$ и $\phi_{j_1 j_2}^{L\lambda i}(\tau)$ волновой функции однофононного

$$Q_i^{L\lambda \mu} = \frac{1}{2} \sum_{j_1 j_2} \{ \psi_{j_1 j_2}^{L\lambda i}(\tau) [a_{j_1}^+ a_{j_2}^+]_{\lambda \mu} - (-1)^{L-\mu} \phi_{j_1 j_2}^{L\lambda i}(\tau) [a_{j_1} a_{j_2}]_{\lambda -\mu} \}$$

состояния находятся из нижеследующих выражений:

$$\psi_{j_1 j_2}^{L\lambda i}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot Y_\tau(L\lambda i)}} \cdot \frac{f_{j_1 j_2}^{L\lambda} \cdot u_{j_1 j_2}^{(\pm)}}{\epsilon_{j_1 j_2} - \omega_{L\lambda i}}, \quad (4)$$

$$\phi_{j_1 j_2}^{L\lambda i}(\tau) = \frac{(\pm 1)}{\sqrt{2 \cdot Y_\tau(L\lambda i)}} \cdot \frac{f_{j_1 j_2}^{L\lambda} \cdot u_{j_1 j_2}^{(\pm)}}{\epsilon_{j_1 j_2} + \omega_{L\lambda i}}, \quad (4')$$

где

$$Y_{n,p}(L\lambda i) = Y_{n,p}^{L\lambda i} + Y_{p,n}^{L\lambda i} \cdot \left\{ \frac{\frac{\kappa_0^{L\lambda} - \kappa_1^{L\lambda}}{2\lambda + 1} \cdot X_{n,p}^{L\lambda i}}{1 - \frac{\kappa_0^{L\lambda} + \kappa_1^{L\lambda}}{2\lambda + 1} X_{p,n}^{L\lambda i}} \right\}^2, \quad (5)$$

$$Y_{n,p}^{L\lambda i} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \omega} X_{n,p}^{L\lambda i} \Big|_{\omega = \omega_{L\lambda i}}. \quad (6)$$

Приведенные вероятности электромагнитных переходов $B(X\lambda; 0_{g.s.}^+ \rightarrow \lambda^\pi) = \frac{1}{2 \cdot 0 + 1} \cdot |\langle Q_i(L\lambda \mu) | | \mathcal{M}(X\lambda) | | 0 \rangle_{p\hbar}|^2$ находятся из нижеследующих выражений:

$$B(E\lambda)^\dagger = \left| \frac{e_{\text{eff}} \cdot X_n^{L\lambda i}}{\sqrt{2 \cdot Y_n(L\lambda i)}} + \frac{(1 + e_{\text{eff}}) \cdot X_p^{L\lambda i}}{\sqrt{2 \cdot Y_p(L\lambda i)}} \right|^2, \quad (7)$$

$$B(M\lambda)^\dagger = \left| \sum_{j_1 j_2} \frac{(-1)^{j_1 + j_2 - \lambda} \cdot F_{j_1 j_2}^M \cdot f_{j_1 j_2}^{L\lambda} \cdot [u_{j_1 j_2}^-]^2 \cdot \epsilon_{j_1 j_2}}{\sqrt{2 \cdot Y_\tau(L\lambda i)} \cdot (\epsilon_{j_1 j_2}^2 - \omega_{L\lambda i}^2)} \right|^2. \quad (8)$$

$$F_{j_1 j_2}^M = g_{s, \text{eff}}^\tau \cdot F_{j_1 j_2}^{g_s} + g_{\phi, \text{eff}}^\tau \cdot F_{j_1 j_2}^{g_\phi} - \quad (9)$$

- одночастичные приведенные м.э. оператора магнитного мультипольного момента

$$\mu(M\lambda, \nu) = \frac{e\hbar}{2Mc} [g_{s, \text{eff}}^\tau \cdot \hat{s} + \frac{2 \cdot g_{\phi, \text{eff}}^\tau}{\lambda + 1} \cdot \hat{p}] \cdot \nabla [r^\lambda Y_{\lambda \nu}].$$

Программа вычисляет вероятности $B(X\lambda)$ как в единицах $e^2 \cdot \text{ферми}^{2L}$ для $E\lambda$ -переходов и в единицах $\mu_N^2 \cdot \text{ферми}$ для $M\lambda$ -переходов [$\mu_N = \frac{e\hbar}{2Mc}$], так и в одночастичных единицах $B(X\lambda)_{s.p.}$. Единицей приведенной вероятности (одночастичная оценка Вайскопфа) $X\lambda$ -перехода является, как обычно, величина

$$B(E\lambda)_{s.p.} = e^2 \cdot \frac{2\lambda + 1}{4\pi} \cdot \left(\frac{3}{3 + \lambda}\right)^2 \cdot R_o^{2\lambda}, \quad (10)$$

$$R_o = 1,24 \cdot A^{1/3},$$

$$B(M\lambda)_{s.p.} = \left(\frac{e\hbar}{2Mc}\right)^2 \cdot \frac{10}{\pi} \left(\frac{3}{3+\lambda}\right)^2 \cdot R_o^{2L} \quad (11)$$

В формулах (4), (4'), (7) и (8) знак выражения $\sqrt{2 \cdot Y_p(L\lambda)}$ определяется знаком величины, стоящей в фигурных скобках выражения (5), в то время как для $\sqrt{2 \cdot Y_n(L\lambda)}$ берется его абсолютная величина.

2. Для решения секулярного уравнения необходимо иметь константы $\kappa_o^{L\lambda}$ и $\kappa_1^{L\lambda}$, м.э. $f_{j_1 j_2}^{L\lambda}$, двухквaziчастичные энергии $\epsilon_{j_1 j_2}$ и коэффициенты $u_{j_1 j_2}^{\pm}$. Константы $\kappa_o^{L\lambda}$ и $\kappa_1^{L\lambda}$ можно непосредственно задавать во входной информации или же определять внутри программы с помощью задаваемых энергий фононов, которые могут быть взяты из эксперимента. Величины $\epsilon_{j_1 j_2}$ и $u_{j_1 j_2}^{\pm}$ вычисляются внутри программы на основе вводимой информации об одночастичном спектре E_j и сверхтекучих характеристиках C_T и λ_T . В программе предусмотрен режим работы, при котором C_T и λ_T не вводятся, а вычисляются самостоятельно. Для этого входная информация дополняется константами парного взаимодействия G_T . Величины $f_{j_1 j_2}^{L\lambda}$ и E_j можно находить с помощью программы CALMEL или REDMEL. Обе эти программы имеются в библиотеке программ отдела теории атомного ядра ЛТФ ОИЯИ. В программе CALMEL^{/3/} одночастичный базис находится с помощью метода, предложенного в работе^{/2/}. Программа REDMEL, написанная одним из авторов (И.П.Ю.), для решения этой задачи использует результаты работы^{/4/}. Для вычисления $B(M\lambda)$ необходима дополнительная информация о величинах $F_{j_1 j_2}^{g_s}$, $F_{j_1 j_2}^{g_l}$, $g_{s,eff}^r$ и $g_{l,eff}^r$. Величины $F_{j_1 j_2}^{g_s}$ и $F_{j_1 j_2}^{g_l}$ можно находить с помощью программы REDMEL.

3. Настоящая программа написана на языке ФОРТРАН-IV, что позволяет использовать ее на ЭВМ, имеющих соответствующее математическое обеспечение. Программа состоит из основной программы с именем RPAS и подпрограмм ORDER, INDFC, CLAM, CLAMH,

EPSUV, RPA, XSIMPLE и SECPH. Структурная блок-схема программы дана на рис. 1.

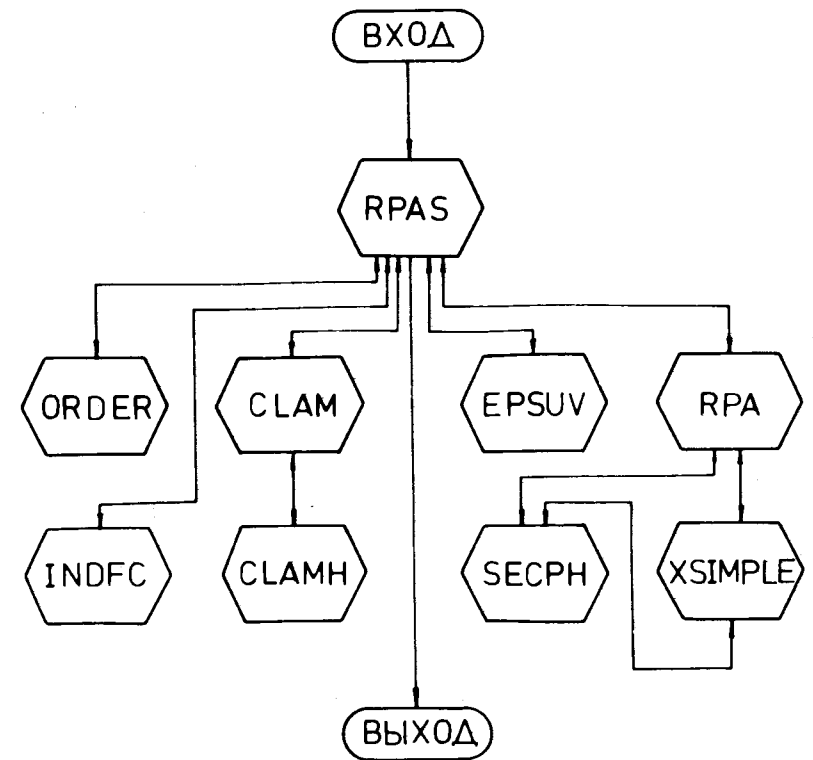


Рис. 1. Структурная блок-схема программы.

RPAS. В основной программе полностью осуществляется ввод информации (см. §§2 и 4) и организуется работа подпрограмм. Вся вводимая информация выводится на печать. Основная программа имеет общие /COMMON/ блоки: /EINDE/ E(100), INDE(100) - энергии E_j и их индексы j , /EPSUV/ EPS(100), U(100), V(100) - одноквaziчастичные энергии ϵ_j , коэффициенты u_j и v_j , /LM/ LM(5) - мультипольности $L\lambda$ (число $L \cdot 10 + \lambda$),

/W1/ F1(400), INDF1(400), W11(800) - м.э. $f_{j_1 j_2}^{L\lambda}$ и их индексы $j_1 j_2$ [W11 - свободные ячейки], /GS/ NGSSL, GS(2,10), GL(2,10), NMEM(2) - количество наборов эффективных g -факторов, g_s - и g_l -факторы и количество м.э. $F_{j_1 j_2}^M$ [1 - для нейтронов и 2 для протонов], /WM/ FGS(2,200), FGL(2,200), INDML(2,200) - м.э. $F_{j_1 j_2}^{g_s}$ и $F_{j_1 j_2}^{g_l}$ и их индексы $j_1 j_2$. /R/ IREGIME(16) - числа, управляющие режимами работы программы, /OMKAP/ OMEXP(2,5), RKAPEX(2,5) - вводимые энергии фононов $\{\omega_0, \omega_1\}$ и константы $\{\kappa_0^{L\lambda}, \kappa_1^{L\lambda}\}$.

Последовательность работы основной программы такова: вводятся E_j и их индексы j (общий блок /EINDE/), вызывается ORDER, печатаются E_j и их индексы j в виде числа $\rho = 100 \cdot n + 10 \cdot \ell + (j - 1/2)$, вводятся м.э. $f_{j_1 j_2}^{L\lambda}$ и их индексы $j_1 j_2$ (общий блок /W1/), м.э. и их индексы $j_1 j_2$ печатаются [печать $j_1 j_2$ в виде числа ρ (см. §4, п. 8)], вызывается INDFC, вводятся (если необходимо) эффективные g -факторы (общий блок /GS/) и м.э. $\{F_{j_1 j_2}^{g_s}, F_{j_1 j_2}^{g_l}\}$ (общий блок /WM/), МЛ м.э. и их индексы $j_1 j_2$ в виде числа ρ (см. §4, п.11.5) печатаются. Далее вводятся данные о конкретном ядре данной одночастичной схемы и о режимах (общий блок /R/) работы программы; эти данные печатаются; вызывается (если необходимо) CLAM, вызывается EPSUV, печатаются $E_j, \epsilon_j, U_j, V_j$, вызывается RPA; далее возможен переход к новому ядру или к новой одночастичной схеме или END RPAS.

ORDER. Эта подпрограмма упорядочивает вводимые одночастичные нейтронные и протонные состояния E_j и их индексы j в общем блоке /EINDE/ по величине энергии, начиная со дна ямы. Сначала обрабатываются нейтронные, затем протонные состояния.

INDFC. Эта подпрограмма заполняет общий (с подпрограммой RPA) блок /FINDF/F(2,5,200), INDF(2,5,200), NF(2,5) величинами из общего блока /W1/. Массив F(K, I, M) заполняется м.э. $f_{j_1 j_2}^{L\lambda}$ следующим образом:

$K = \begin{cases} 1 & \text{- нейтронные м.э.,} \\ 2 & \text{- протонные м.э.} \end{cases}$, I - нумерует мультипольности
M - количество м.э. (нейтронных или протонных) данной мультипольности. Массив INDF(K, I, M) заполняется аналогично числами $m_1 \cdot 1000 + m_2$, где m_1 - номер одночастичного состояния j_1 в /EINDE/, а m_2 - номер состояния j_2 . $NF(K, I) = M$.

CLAM. Эта подпрограмма вычисляет C и λ основного состояния, если заданы G_n, G_p .

Подпрограмма CLAMH осуществляет промежуточные вычисления для CLAM.

EPSUV. Эта подпрограмма вычисляет ϵ_j, U_j, V_j и заполняет общий блок /EPSUV/EPS(100), U(100), V(100) этими величинами (сначала для нейтронов, затем для протонов).

RPA. Эта подпрограмма вычисляет величины $\omega_{L\lambda i}, X_n^{L\lambda i}, X_p^{L\lambda i}, Y_n^{L\lambda i}, Y_p^{L\lambda i}, y_n(L\lambda i), y_p(L\lambda i), \psi_{j_1 j_2}^{L\lambda i}, \phi_{j_1 j_2}^{L\lambda i}, B_i(E\lambda; 0_{g.s.}^+ \rightarrow \lambda^\pi), B_i(M\lambda; 0_{g.s.}^+ \rightarrow \lambda^\pi)$. Для нахождения $\omega_{L\lambda i}$ подпрограмма RPA использует процедуру Ньютона. Печать осуществляется в следующих единицах: $\kappa_0^{L\lambda}$ и $\kappa_1^{L\lambda}$ в МэВ. ферми $^{-2\lambda}$ для $E\lambda$ и в МэВ. ферми $^{-2L}$ для $M\lambda$; $\omega_{L\lambda i}$ и $\epsilon_{j_1 j_2}$ в МэВ, $B(X\lambda)$ и $B(X\lambda)_{s.p.}$ в e^2 . ферми 2L для $E\lambda$ и в μ_N^λ . ферми 2L для $M\lambda$. Печать результатов начинается с заголовка RESULT FOR HARMONIC EFFECTS, далее печатаются, последовательно для каждой мультипольности, $\kappa_0^{L\lambda}$ и $\kappa_1^{L\lambda}$, одночастичная оценка приведенной вероятности (единица Вайскопфа $B(X\lambda)_{s.p.}$), двухквaziчастичные полюса $\epsilon_{j_1 j_2}$ и их индексы $j_1 j_2$, для каждого корня $\omega_{L\lambda i}$ (при полной выдаче): а) таблица $\omega, F(\omega)$ (см. п.4), б) номер корня $i, \omega_{L\lambda i}, Y_n^{L\lambda i}, X_n^{L\lambda i}, Y_p^{L\lambda i}, X_p^{L\lambda i}, y_n(L\lambda i), y_p(L\lambda i), \psi_{j_1 j_2}^{L\lambda i}, \phi_{j_1 j_2}^{L\lambda i}$, их вклад в нормировку (в %), величина нормировки и информация о знаке величины, стоящей в фигурных скобках выражения (5): ISOSCALAR TYPE, если знак положи-

тельный, и ISOVECTOR TYPE-, если отрицательный;
 $\gamma) e_{\text{eff}}$ или эффективные g -факторы, $V_i(X\lambda)^\dagger, B_i(X\lambda)^\dagger / V(X\lambda)_{\text{с.р.}}$,
 $\omega_{L\lambda i} \cdot V_i(X\lambda)^\dagger$, вес (в %) величины $\omega \cdot V$ в без-

модельном правиле сумм (для $V(M\lambda)$ за безмодельное правило сумм взято "абстрактное" число 777) и только для $\omega_1 < \omega$
 $V(M\lambda)$ - сумма $f_n(\omega) = \sum_{i=1}^{\omega_1 < \omega} \omega_{L\lambda i} \cdot V_i(M\lambda)^\dagger$ для каждого набора эффективных g -факторов. После того, как напечатаны а)-г) для последнего корня i_{max} , будет напечатано вычисленное (модельное) правило сумм в приближении хаотических фаз, причем для $E\lambda$ это правило сумм печатается для $e_{\text{eff}} = 0$, а для $M\lambda$ правило сумм $f_{\text{max}} = \sum_{i=1}^{i_{\text{max}}} \omega_{L\lambda i} \cdot V_i(M\lambda)^\dagger$ печатается для первого эффективного g -фактора из введенного набора эффективных g -факторов, далее печатается безмодельное правило сумм и отношение (в %) модельного правила сумм к безмодельному. Затем будут напечатаны отдельно все (от $i=1$ до $i=i_{\text{max}}$) $\omega_{L\lambda i}$ и $\gamma_r(L\lambda i)$.

4. Ввод исходных данных осуществляется исключительно с перфокарт в следующем порядке:

п.1. По формату I3 вводится количество (≤ 5) мультипольностей для генерирования однофононных состояний.

п.2. По формату 5I3 вводятся величины мультипольностей для генерирования однофононных состояний [$\lambda \cdot 10 + \lambda$ - для мультиполь-мультипольного взаимодействия, либо $L \cdot 10 + \lambda$ - для спин-мультипольного-спин-мультипольного]. Вводятся в порядке возрастания.

п.3. По формату I3 вводится количество (≤ 50) нейтронных энергий E_j^N .

п.4. По формату 2I3, 4F10.0 вводятся параметры нейтронного одночастичного потенциала Саксона-Вудса; атомный вес A , величина заряда Z , константа для вычисления радиуса ядра ($R = r_0 \cdot A^{1/3}$) r_0 , глубина потенциала V_0 (МэВ), константа спин-орбитального взаимодействия k и параметр диффузности a :

п.5. По формату 5(F7.0, 1X, I3, 1X) вводятся E_j^N (МэВ) и их индексы j в виде числа $\rho = 100 \cdot n + 10 \cdot \ell + j - 1/2$. Здесь n - радиальное, а ℓ - орбитальное квантовые числа, j - полный момент одночастичного состояния.

п.6. Для протонов повторение пп. 3-5.

п.7. По формату I3 вводится количество нейтронных м.э. $f_{j_1 j_2}^{L\lambda}$ для 1-й мультипольности (≤ 200).

п.8. По формату 3(E12.0, 1X, I10, 1X) вводятся нейтронные м.э. $f_{j_1 j_2}^{L\lambda}$ и их индексы $j_1 j_2$ в виде числа $\rho = n_2 \cdot 10^7 + \ell_2 \cdot 10^6 + (j_2 - 1/2) \cdot 10^5 + n_1 \cdot 10^4 + \ell_1 \cdot 10^3 + (j_1 - 1/2) \cdot 10^2 + L \cdot 10 + \lambda$. Для мультиполь-мультипольных м.э. $L = \lambda$. Программа рассчитана на ввод $\ell_1, \ell_2, L, \lambda < 10$.

п.9. Для протонов повторение пп. 7-8.

п.10. Пункты 7-9 повторяются для каждой мультипольности.

п.11.11.1 По формату I3 вводится число наборов (≤ 10) $\{g_s^N, g_s^Z, g_\ell^N, g_\ell^Z\}$ эфф.

11.2. По формату 4F10.0 вводятся величины $\{g_s^N, g_s^Z, g_\ell^N, g_\ell^Z\}$ эфф.

11.3. По формату I3 вводится величина ($\lambda \cdot 10 + \lambda$) мультипольности магнитных переходов $M\lambda$.

11.4. По формату I3 вводится количество (≤ 200) нейтронных магнитных м.э. $F_{j_1 j_2}^M$.

11.5. По формату 2(2(E12.5, IX), I9, 1X) вводятся нейтронные магнитные м.э. $F_{j_1 j_2}^{g_s}$, $F_{j_1 j_2}^{g_\ell}$ и их индексы $j_1 j_2$ в виде числа ρ (см. п.8, здесь $L = \lambda$).

11.6. Для протонов повторение пп. 11.4-11.5. [Если информация 11.1-11.6 не необходима, то вместо карт 11.1-11.6 вводится одна пустая карта].

п.12. По формату 6I4, 2F10.0 вводятся данные о конкретном ядре: величина заряда Z , атомный вес A , число обрезанных снизу нейтронных уровней NCORE, число

обрезанных снизу протонных уровней ZCORE, индекс (число $p \cdot 100 + l \cdot 10 + j - 1/2$) основного состояния нейтронной системы GRSTN, индекс основного состояния протонной системы GRSTP, константы G_n и G_p (МэВ).

п.13. По формату 1415 вводится карта с режимами (см. описание режимов ниже).

п.14. По формату 4F10.0 вводятся парами энергии фононов $\{\omega_0, \omega_1\}$ (МэВ), т.е. изоскалярная и изовекторная энергии для первой мультипольности, затем следующая пара для второй мультипольности (на той же карте) и т.д. Если режим $5=0$, то нужно задавать $\omega_1=0$, а ω_0 вводить как изоскаляр либо как изовектор.

п.15. Если режим $6 \neq 0$ (см. п.13 и описание режимов), то по формату 4F10.0 вводятся $C_n, C_p, \lambda_n, \lambda_p$ (МэВ).

п.16. Если режим $1=0$, то по формату I5 вводится количество $(i_{max}+1)$ гармонических корней. Если же режим $1=99$, то по формату F10.0 вводится энергия ω_{max} (МэВ), до которой надо считать фононы (всех мультипольностей).

п.17. Если режим $2 \neq 0$, то по формату 4E15.6 вводится карта с величинами мультипольных констант $\{k_0, k_1\}$ в соответствии с числом и порядком ввода мультипольностей. Ввод пар $\{k_0, k_1\}$ такой же, как в п.14 для $\{\omega_0, \omega_1\}$. Размерность k :

- 1) мультиполь-мультипольная [МэВ. ферми^{-2L}],
- 2) спин-мультипольная [МэВ. ферми^{-2L}].

п.18. Либо новый вариант пп.12-17, либо ввод карты п.12 с Z=7777, если нужен переход к новой схеме пп.1-18.

п.19. Если в п.18 ввелась одна карта с Z=7777, то: либо повторение пп.1-18 (счет с новой схемой), либо ввод числа 777 (формат п.1).

777 - конец программы.

Описание режимов

1. { 0 - читает количество корней.
99 - читает ω_{max} (МэВ).
2. { 0 - не читает k . Для определения k будут использованы из п.14 $\{\omega_0, \omega_1\}$.
99 - читает k . Размерность k см. п.17.
3. { 0 - считает мультиполь-мультиполи.
99 - считает спин-мультиполи.
4. { 0 - считает RPA.
99 - не считает RPA.
5. { 0 - считает только изоскаляр либо только изовектор.
99 - считает со смешиванием.
6. { 0 - не читает $C_n, C_p, \lambda_n, \lambda_p$.
99 - читает $C_n, C_p, \lambda_n, \lambda_p$ (МэВ).
7. { 0 - без таблицы.
99 - с таблицей: будет напечатана таблица значений $F(\omega)$ в 10 точках между полюсами в случае, если режим $5 \neq 0$. Если режим $5=0$, то печатаются величины $X_n + X_p$ в тех же точках.
8. { 0 - не печатаются слабые переходы; для Ел печатаются только $V(E\lambda)^\dagger$, дающие вклад более 1% в безмодельное правило сумм; для Мл печатаются $V(M\lambda) > 0.05 \cdot V(M\lambda)_{s.p.}$.
99 - печатаются все $V(X\lambda)^\dagger$.
9. { 0 - печатаются $\psi, \phi \geq 1\%$ нормировки.
99 - не печатаются ψ, ϕ .
10. { 0 - считает $V(E\lambda)^\dagger [e^{2L} \text{ ферми}^{-2L}]$.
99 - не считает $V(E\lambda)^\dagger$.
11. { 0 - считает $V(M\lambda)^\dagger [\mu_N^{2L} \text{ ферми}^{2L}]$.
99 - не считает $V(M\lambda)^\dagger$.

Режимы 12-14 - свободны.

12. { 0 - не задается отклонение $x_1^{(N)}/x_0^{(N)}$ 4F10.0
99 - задается отклонение $q: x_1^{(N)}/x_0^{(N)}$
13. { 0 - не задается
99 - для расчета $x_0^{(N)}$ зад. расстояния от 1^{го} полюса (коэф. " - " если $\omega_1 \neq \omega_0$)

Если
13 ≠ 0
вводится
Δω

всего 4
если 12 ≠ 0

Диагностика

В случае неверного задания информации программа заканчивает работу и печатается следующая диагностика.

- 1) *****TOO MANY MULTP.
если введено число мультипольностей [см. §4 п.1] > 5).
- 2) *****TOO MANY ENERGY LEVELS FOR. ___
если введено число нейтронных (___=N) или протонных (___=Z) состояний более 50.
- 3) *****INCORRECT GROUND STATE N=0, Z = 0.
если индекс основного состояния не введен вообще, либо введен равным 0.
- 4) *****TOO MANY MATR. ELEM. FOR MULT. =n AND FOR NZ=m
если м.э. введено более 200 для нейтронной системы (m=1), либо для протонной системы (m=2). n - номер мультипольности (n < 5). Для м.э. магнитных переходов n > 10 и равно n = λ · 10 + λ.
- 5) ** TOO MANY GS, GL **
если введено число наборов {g_S^N, g_S^Z, g_ρ^N, g_ρ^Z}_{φφ} более 10.
- 6) ** МЛ MATR. ELEM. IS ABSENT **
если необходимы, но не введены наборы {g_S, g_ρ}_{φφ} и м.э. магнитных переходов.

В следующих случаях программа будет продолжать работу, но будет напечатана такая диагностика:

- а) в основной программе
- 1) *****MATR. ELEM. FOR MULT. = Lλ ARE UNNECESSARY
если введены м.э. f_{j₁j₂}^{Lλ}, Lλ которых не совпадает ни с одной из введенных (см. §4 п.2) величин Lλ ;
- б) в подпрограмме RPA
- 1) *****KAPPA IS NOT FOUND FOR MULT. = Lλ
в режиме 2=0 RPA находит {κ₀, κ₁} с помощью {ω₀, ω₁} путем решения системы двух линейных уравнений, может оказаться, что система несовместна ;
- 2) *****NUMB. OF ITER. IS GT. 30 FOR KAPPA n BETWEEN POLES
ε_{j₁j₂} ε_{j₁'j₂'}
если корень уравнения (2) между соседними полюсами ε_{j₁j₂} и ε_{j₁'j₂'} не существует или же корень находится в малой окрестности одного из полюсов и итерационный

процесс сходится крайне медленно или вообще не сходится из-за выхода за пределы точности, поэтому итерационный процесс ограничен 30 итерациями, n=0 или 1;

- в) в подпрограмме XSIMPLE
- 1) *****SIMPLE SOLUT. IS NOT FOUND BETWEEN POLES
ε_{j₁j₂} ε_{j₁'j₂'} FOR KAPPA=κ (см. п. 8, 2).

Ограничение программы

1. Одночастичный спектр не должен превышать 50 нейтронных и 50 протонных состояний (величина орбитального момента l < 10).

2. Для генерирования однофоновых состояний м.э. f_{j₁j₂}^{Lλ} может вводиться не более 5 различных мультипольностей (L, λ < 10). М.э. должно быть не более 200 для нейтронной и столько же для протонной систем. Для данной одночастичной схемы могут быть вычислены магнитные переходы лишь одного сорта, т.е. только M1 или только M2 и т.д.

3. Число различных наборов эффективных g-факторов не должно превышать 10.

4. С помощью данной одночастичной схемы можно считать электромагнитные переходы только одного типа: либо Еλ, либо Мλ.

Текст программы, контрольный вариант для счета и печать результатов контрольного варианта (выдача ЭВМ CDC-6500) находятся в библиотеке программ отдела теории атомного ядра ЛТФ ОИЯИ. Программа написана на языке ФОРТРАН-IV применительно к ЭВМ CDC-6500 (операционная система NOS/BE1). Программа занимает память 67600В ячеек, счетное время ≈ 0,2 с на одно состояние ω_{Lλi}.

Авторы благодарны профессору В.Г.Соловьеву за постоянное внимание к работе, Л.А.Малову и А.И.Вдовину за полезные обсуждения и замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Соловьев В.Г. Теория сложных ядер. "Наука", М., 1971; Малов Л.А., Нестеренко В.О., Соловьев В.Г. ТМФ, 1977, 32, с.134.
2. Калинин Б.Н., Грабовский Я., Гареев Ф.А. ОИЯИ, Р-2682, Дубна, 1966.
3. Ширикова Н.Ю. ОИЯИ, Р5-3712, Дубна, 1968.
4. Гиззаткулов М.Х., Пузынин И.В., Ямалеев Р.М. ОИЯИ, Р11-10029, Дубна, 1976.

Рукопись поступила в издательский отдел
10 ноября 1977 года.