

♀
сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

4392 / 2-81

31/8-81

P4-81-234

Ч.Стоянов, Чан Зуй Кхыонг

ВЫЧИСЛЕНИЕ ЭНЕРГИЙ
И СТРУКТУРЫ ВОЗБУЖДЕННЫХ
СОСТОЯНИЙ И ВЕРОЯТНОСТЕЙ
ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПЕРЕХОДОВ
В НЕЧЕТНЫХ СФЕРИЧЕСКИХ ЯДРАХ

1981

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время при изучении различных характеристик сложных ядер широко используется квазичастично-фононная модель ядра. В ее рамках удалось достичь единого описания многих свойств как низколежащих состояний сферических и деформированных ядер, так и ядерных возбуждений при промежуточных и высоких энергиях /1/.

В основе модели лежит эффективный гамильтониан ядра, включающий одночастичные средние потенциалы для нейтронной и протонной систем, спаривательное взаимодействие между нейтронами с постоянным матричным элементом G_N и между протонами с постоянным матричным элементом G_Z , а также эффективные сепарабельные мультипольные и спин-мультипольные силы с изоскалярной и изовекторной компонентами. То есть для каждой мультипольности взаимодействие характеризуется двумя константами: $\kappa_0^{(\lambda)}$ и $\kappa_1^{(\lambda)}$ для состояний нормальной четности и $\kappa_0^{(\lambda L)}$ и $\kappa_1^{(\lambda L)}$ для состояний аномальной четности.

¹ В нечетном сферическом ядре модель учитывает взаимодействие нечетной квазичастицы с фононными возбуждениями четного остова. Уравнения модели были получены и проанализированы в работах /2,3/. В работе /4/ для волновой функции нечетного ядра вида

$$\Psi_{\nu}(JM) = C_{J}^{\nu} \left\{ \alpha_{JM}^{+} + \sum_{\lambda\mu i} D_j^{\lambda i}(J\nu) \left[\alpha_{jm}^{+} Q_{\lambda\mu i}^{+} \right]_{JM} \right\} \Psi_0 \quad /1/$$

были получены уравнения, в которых учитывалась фермионная структура фононных возбуждений остова, иными словами, строго учитывался принцип Паули. Уравнения, полученные в этой работе, легли в основу программы PHOQUS, описание которой составляет содержание настоящей работы.

Эти уравнения суть следующие:

1. Нормировка волновой функции /1/:

$$[C_{J}^{\nu}]^2 \left\{ 1 + \sum_{\lambda ij} [1 + \mathcal{L}(Jj\lambda i)] (D_j^{\lambda i}(J\nu))^2 \right\} = 1. \quad /2/$$

2. Уравнение для энергии состояния /1/ $\eta_{J\nu}$:

$$\epsilon_J - \eta_{J\nu} - \frac{1}{2} \sum_{\lambda ij} \frac{[1 + \mathcal{L}(Jj\lambda i)] \Gamma^2(Jj\lambda i)}{\epsilon_j + \omega_{\lambda i} - \eta_{J\nu} - R(Jj\lambda i)} = 0. \quad /3/$$

Выражение для коэффициента $D_j^{\lambda i} (J\nu)$:

$$D_j^{\lambda i} (J\nu) = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\Gamma(J\lambda i)}{\epsilon_j + \omega_{\lambda i} - \eta_{J\nu} - R(J\lambda i)} \quad /4/$$

В формулах /2/-/4/

$$\mathcal{L}(J\lambda i) = (2\lambda + 1) \sum_{j_3} \left\{ \begin{matrix} j & j_3 & \lambda \\ j & J & \lambda \end{matrix} \right\} [\psi_{j_3 j}^{\lambda i}]^2, \quad /5/$$

$$R(J\lambda i) = \frac{1}{4} \sum_{i' \tau} \frac{X_{\tau}^{\lambda i} + X_{\tau}^{\lambda i'}}{\sqrt{q_{\tau}^{\lambda i} q_{\tau}^{\lambda i'}}} \mathcal{L}(J\lambda i'), \quad /6/$$

$$\Gamma(J\lambda i) = \left(\frac{2\lambda + 1}{2J + 1} \right)^{1/2} \frac{f_{Jj}^{\lambda \tau} v_{Jj}^{(\pm)}}{\sqrt{q_{\tau}^{\lambda i}}}. \quad /7/$$

Величины $q_{\tau}^{\lambda i}$, $X_{\tau}^{\lambda i}$, $\psi_{j_1 j_2}^{\lambda i}$ являются характеристиками фонона мультипольности λ и номера i . Они рассчитываются программой RPAS, и их явный вид, равно как и описание программы, можно найти в /5/. Остальные обозначения в /4/-/10/ следующие: $f_{j_1 j_2}^{\lambda \tau}$ - приведенный одночастичный матричный элемент мультипольного ${}^{\lambda} Y_{\lambda \mu}(\theta, \phi)$ или спин-мультипольного ${}^{\lambda} Y_{\lambda-1 \mu}(\theta, \phi)$ оператора между состояниями с квантовыми числами $j_1 \equiv (n_1 \ell_1 j_1)$ и $j_2 \equiv (n_2 \ell_2 j_2)$; $v_{j_1 j_2}^{(\mp)} = u_{j_1} u_{j_2} \mp v_{j_1} v_{j_2}$, где u_j, v_j - коэффициенты преобразования Боголюбова /здесь и далее верхний знак в обозначении $v^{(\mp)}$ относится к мультипольным силам /и фононам/, а нижний - к спин-мультипольным/; индекс $\tau \equiv (p, r)$ - топический; $\epsilon_j, \omega_{\lambda i}$ - энергии одноквазичастичного состояния $j \equiv (n, \ell, j)$ и однофононного состояния λi .

В случае, когда фононные и одноквазичастичные возбуждения предполагаются независимыми, то есть коммутатор $[a_{jm}^+, Q_{\lambda \mu i}^+] = 0$, функции $R(J\lambda i)$ и $\mathcal{L}(J\lambda i)$ обращаются в 0. Возможность расчета по таким более простым формулам также предусмотрена в программе PNOQUS. Для того чтобы избежать неправильной симметризации компонент "квазичастица + фонон", в программе предусмотрена так называемая процедура учета принципа Паули. Эта процедура исключает из волновой функции /1/ компоненты $a_{jm}^+ Q_{\lambda \mu i}^+$ с неправильной симметризацией квазичастицы a_{jm}^+ и пары квазичастиц $[a_{j_1 m_1}^+ a_{j_2 m_2}^+]_{\lambda \mu}$, составляющих наибольшую компоненту в волновой функции фонона. Проверка на правильность симметризации проводится только для тех компонент $a_{jm}^+ Q_{\lambda \mu i}^+$, в которых фонон $Q_{\lambda \mu i}^+$ неколлективный. Для определения "неколлективности" фонона в программе задается чис-

ло, определяющее допустимую величину вклада максимальной компоненты в нормировку волновой функции фонона. Фононы, в которых вклад максимальной компоненты в нормировку больше заданного, считаются неколлективными.

Помимо точного решения уравнений /2/-/4/ в программе PNOQUS предусмотрена возможность расчета силовой функции $S_J(\eta)$, описывающей зависимость от энергии усредненной по интервалу Δ величины $C_{J\nu}^2$. Функция $S_J(\eta)$ определена следующим образом:

$$S_J(\eta) = \frac{\Delta}{2\pi} \sum_{\nu} C_{J\nu}^2 \frac{1}{(\eta - \eta_{J\nu})^2 + \Delta^2/4}. \quad /8/$$

Для величины $S_J(\eta)$ можно получить /3/ замкнутое выражение, не зависящее явно от $C_{J\nu}^2$ и $\eta_{J\nu}$:

$$S_J(\eta) = \frac{\Delta}{2\pi} \frac{1 + \Gamma(\eta)}{[\epsilon - \eta - \gamma(\eta)]^2 + [1 + \Gamma(\eta)]^2 \Delta^2/4}. \quad /9/$$

Приведенные вероятности электромагнитных переходов мультипольностью λ вычисляются по формуле

$$\begin{aligned} B(X\lambda, I \rightarrow J) &= (2I + 1)^{-1} [C_J^\nu C_I^\rho]^2 \times \\ &\times \{e_r^{(\lambda)} F_{IJ}^{\lambda r} v_{IJ}^{(\pm)} + \sum_i \left[\sqrt{\frac{2I+1}{2\lambda+1}} D_J^{\lambda i} (I\rho)(1 + \mathcal{F}(J\lambda i)) \pm \right. \\ &\left. \pm (-1)^{I-J+\lambda} \sqrt{\frac{2J+1}{2\lambda+1}} D_I^{\lambda i} (J\nu)(1 + \mathcal{F}(J\lambda i)) \right] \times \\ &\times \sum_r e_r^{(\lambda)} S^r(\lambda i) \}^2, \end{aligned} \quad /10/$$

где

$$S^r(\lambda i) = \frac{1}{\sqrt{2g_r^{\lambda i}}} \sum_{j_1 j_2} \frac{F_{j_1 j_2}^{\lambda r} f_{j_1 j_2}^{\lambda r} (u_{j_1 j_2}^{(\pm)})^2 \epsilon_{j_1 j_2}^2}{\epsilon_{j_1 j_2}^2 - \omega_{\lambda i}^2}.$$

Матричный элемент $F_{j_1 j_2}^{\lambda r}$ равняется

$$F_{j_1 j_2}^{\lambda r} = \begin{cases} f_{j_1 j_2}^{\lambda r} & \text{для E}\lambda \text{-переходов,} \\ g_s^{(n,p)} F_{j_1 j_2}^{g s} + g_\rho^{(n,p)} F_{j_1 j_2}^{g \rho} & \text{для M}\lambda \text{-переходов,} \end{cases}$$

где $F_{j_1 j_2}^g$ - матричный элемент магнитного мультипольного оператора.

В формуле /10/ $\epsilon_{j_1 j_2} = \epsilon_{j_1} + \epsilon_{j_2}$, а $u_{j_1 j_2}^{(\pm)} = u_{j_1} v_{j_2} \pm u_{j_2} v_{j_1}$.
 В /10/ знак "+" относится к ЕЛ-переходам, а "-" - к МЛ-переходам. Программа вычисляет вероятности $B(X\lambda)$ в единицах $e^2 \cdot \Phi_m^{2\lambda}$ для ЕЛ-переходов и в единицах $\mu^2 \cdot \Phi_m^{(2\lambda-2)}$ для МЛ-переходов ($\mu_N = \frac{eh}{2Mc}$). Величина $e_r^{(\lambda)}$ - эффективный заряд для ЕЛ-переходов $/e_r^{(\lambda)} = 1$ при расчетах МЛ-переходов/.

Для решения уравнения /3/ необходимо иметь квазичастичные ϵ_j и фоновые ω_{λ_i} энергии, коэффициенты $v_{j_1 j_2}$, матричные элементы $f_{j_1 j_2}^{\lambda r}$, а также значения $y_r^{\lambda_i}$, характеризующие коллективность фононов. Величины ϵ_j и $v_{j_1 j_2}$ вычисляются программой на основе вводимой информации об одночастичном спектре E_j и сверхтекучих характеристиках C_r и λ_r . В программе предусмотрен и режим работы, при котором C_r и λ_r не вводятся, а вычисляются самостоятельно. Для этого входная информация дополняется константами парного взаимодействия G_r . Величины $f_{j_1 j_2}^{\lambda r}$ и E_j можно вычислить, например, с помощью программы REDMEL или CAMEL. Обе эти программы имеются в библиотеке отдела теории атомного ядра ЛТФ ОИЯИ.

При переходе к нечетным ядрам энергии фононов и прочие их характеристики считаются известными /они берутся из соседних четно-четных ядер/. Однако их можно вычислить и программой PHOQUS. Для этого в нее включена подпрограмма RPA из /5/.

II. СТРУКТУРА ПРОГРАММЫ PHOQUS

Программа PHOQUS состоит из основной программы и 21 подпрограммы. Структурная блок-схема программы показана на рисунке.

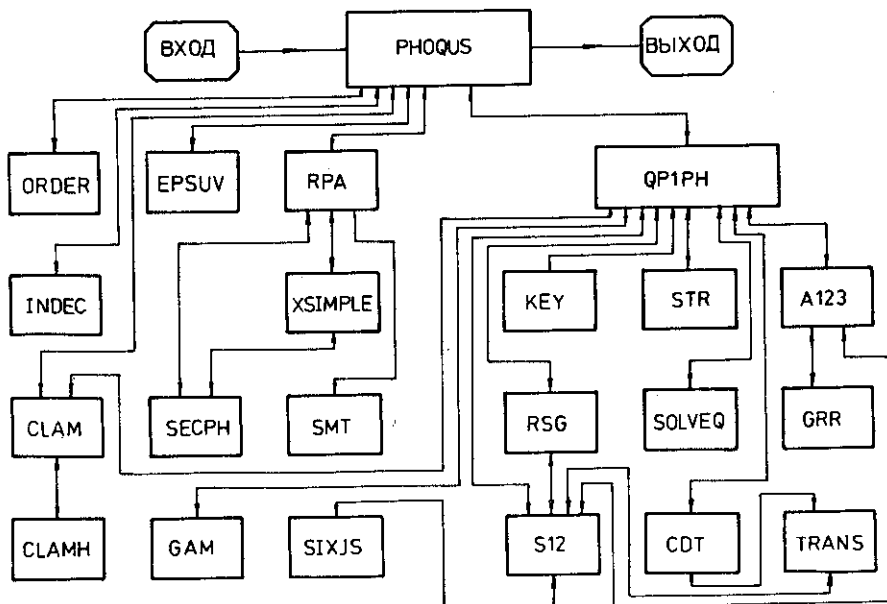
1. PHOQUS. В основной программе полностью осуществляется ввод информации /см. ниже/ и организуется работа подпрограмм. Вся входная информация выводится на печать. Основная программа имеет общие (COMMON) блоки:

/LMKRE/ LM(15), KRE(15) - величины мультипольностей и количества фоновых корней, соответствующих данной мультипольности.

/OMKAP/ OMEXP (2,15), RKAPEX (2,15) входные энергии фононов $[\omega_0, \omega_1]$ и константы $[\kappa_0^{(\lambda)}, \kappa_1^{(\lambda)}]$ /по 2 значения на одну мультипольность/.

/EINDE/ E(100), INDE(100) - одночастичные энергии E_j и их индексы /квантовые числа $N\ell_j$ /.

/EPSUV/ EPS(100), U(100), V(100) - одноквазичастичные энергии ϵ_j , коэффициенты u_j и v_j ;



Структурная блок-схема программы PHOQUS

/FH/FH (400), INDFH(400) - величины одночастичных приведенных мультипольных /спин-мультипольных/ матричных элементов /м.э./ и их индексы $(N_1 l_1 j_1, N_2 l_2 j_2)$. Максимальное число м.э. 400 для каждой мультипольности /по 200 для $r = p, p$ /.

/FGSL/ FGS(2,200), FGL(2,200); INDML(2,200), NMEM(2) - магнитные м.э., их индексы и число.

/IREG/ IREGIME (16) - числа, управляющие режимами работы всей программы.

/NUCREG/NUCR(15) - числа, управляющие режимами работы подпрограммы RPA.

/J/JMAX, JG(10) - количество и индексы состояний /числа p , см. ниже/ нечетного ядра, рассчитываемого с помощью данной одночастичной схемы.

Последовательность работы основной программы такова:

- вводится число INF, в зависимости от которого одночастичная схема /энергии E_j , м.э. $f_{j_1 j_2}^\Lambda$ вместе с их индексами/ либо полностью вводится с перфокарт, либо целиком читается с магнитного диска /если она на нем записана/, либо выполняется промежуточный вариант; спектр вводится с перфокарт, а м.э. $f_{j_1 j_2}^\Lambda$ и их индексы читаются с магнитного диска;

- вводятся число и величины мультипольностей, используемых в данной задаче /число KLM и массив /LMKRE/ /;
- вводятся с перфокарт или читаются с магнитного диска значения энергии и их индексы /массив /EINDE/ /, вызывается ORDER, печатаются E_j и их индексы в виде числа $\rho = N.100 + \ell.10 + (j - 1/2)$;
- вводится число MPFH, в зависимости от которого м.э. $f_{j_1 j_2}^{\lambda r}$ и их индексы печатаются или не печатаются;
- вводятся на перфокартах или читаются с магнитного диска м.э. $f_{j_1 j_2}^{\lambda r}$ и их индексы /блок /FH/ /, затем они печатаются /о печати чисел $j_1 j_2$ см. ниже/, вызывается INDEC;
- вводится число MLT, указывающее, будет или не будет производиться расчет электромагнитных переходов в данной задаче;
- вводятся /если необходимо/ Мл - м.э. $[F_{j_1 j_2}^{\lambda s}, F_{j_1 j_2}^{\lambda \ell}]$, их индексы и число /массив /FGSL//;
- далее вводятся данные о конкретном ядре для данной одночастичной схемы и о режимах работы программы /остальные массивы/. Эти данные печатаются; вызывается CLAM /если необходимо/, вызывается EPSUV, печатаются E_j , ϵ_j , u_j и v_j ; вызывается RPA, а также QP1PH, связанная с нечетными ядрами;
- после этого возможен переход к новому ядру или к новой одночастичной схеме, или же к окончанию работы программы.

2. Работа подпрограмм, входящих в левую часть блок-схемы /за исключением GAM и SIXJS, связанных с подпрограммой QP1PH, см. рисунок/, подробно описана в^{5/}. Поэтому не будем здесь останавливаться на них. Отметим лишь, что в нашей программе RPA нет части, относящейся к печати структуры фононов и вычислению $X\lambda$ -переходов в четно-четных ядрах, а часть, вычисляющая суммы $S^r(\lambda_i)$, выделяется в самостоятельную подпрограмму с именем SMT.

3. QP1PH. Эта подпрограмма целиком относится к нечетным сферическим ядрам. Она вычисляет сверхтекучие характеристики нечетных ядер с учетом эффекта блокировки /если необходимо, в противном случае эти характеристики она берет из соседних четных ядер/, формирует полюса "квазичастица + фонон" /величины $\epsilon_j + \omega_i$ или $\epsilon_j + \omega_{\lambda_i} - R(J\lambda_i)$ /, упорядочивает и печатает их значения и индексы, регулирует и коррелирует остальные подпрограммы. Кроме знакомых массивов, здесь появляются следующие новые блоки:

- /GA/ GAMMA(1000) - величины функции $\Gamma(J\lambda_i)$ /7/;

- /PHQP/POLE(1000), IPOLE(1000)- значения полюсов "квазичастица + фонон" и их индексы /числа $(\lambda \cdot 10^3 + i) \cdot 10^3 + j'$; j' - порядковый номер ϵ_j в данной схеме/;

- /SBS/SJGP(1000) - величины $\mathcal{L}(Jj\lambda i)$ /см. /5//.

В QP1PH при формировании полюсов "квазичастица + фонон" проводится либо приближенная, либо точная проверка на принцип Паули /подробное описание см. в /4/ /.

Подпрограмма SOLVEQ решает секулярное уравнение для нечетных сферических ядер. При решении применяется итерационная процедура Ньютона.

CDT вычисляет коэффициенты C_j^ν и $D_j^{\lambda i}(J\nu)$ волновой функции /7/, а также их вклады /в %/ в нормировку последней.

Основной массив /CDID/CD(501), ID(501) - коэффициенты $C_I^\rho, D_j^{\lambda i}(I\rho)$ и их индексы. Массив хранится только для $\rho=1, \lambda=LMT$.

TRANS вычисляет вероятности электромагнитных переходов из основного состояния на возбужденные в нечетном ядре, то есть перехода $(\alpha^+ + \alpha^+ Q^+)_1 \rightarrow (\alpha^+ + \alpha^+ Q^+)_2$ либо $\alpha^+ + \alpha^+ Q^+ \rightarrow \alpha^+$.

A123 строит гистограммы силовых функций для $[C_j^\nu]^2, B(E\lambda)$ и $B(M\lambda)$.

GRR осуществляет промежуточные вычисления для A123 /вычисляет величины $\Gamma(\eta), \gamma(\eta)$ (см. /9/)/.

GAM вычисляет величину $\Gamma(Jj\lambda i)$ /см. /7//.

S12, RSG вычисляют функции $\mathcal{L}(Jj\lambda i)$ и $R(Jj\lambda i)$.

KEY, STR, SIXJS имеют вспомогательный характер.

KEY, STR проводят вычисления в связи с проверкой на принцип Паули. SIXJS вычисляет $6j$ -символы.

III. ИНСТРУКЦИЯ ПО ИСПОЛЬЗОВАНИЮ ПРОГРАММЫ

A. Ввод информации

Как было отмечено выше /II, 1/, ввод исходных данных можно осуществлять исключительно с перфокарт или с использованием магнитного диска. Ввод осуществляется в описанном ниже порядке:

1. По формату I3 вводится число INF, которое может принимать 3 значения: 0; 77; 99. Если INF=0, ввод информации осуществляется с перфокарт; если INF=77, то одночастичные энергии вводятся с перфокарт, а матричные элементы читаются с магнитного диска; если INF=99, то вся схема вводится с магнитного диска.

2. По формату I3 вводится число / ≤ 15 / мультипольностей KLM.

3. По формату 15I3 вводятся мультипольности в порядке возрастания в виде чисел $\lambda \cdot 10 + \lambda$ для мультипольных сил и $(\lambda \pm 1) \cdot 10 + \lambda$ для спин-мультипольных сил ($\lambda = 1, 8$).

4. По формату I3 вводится число / ≤ 50 / нейтронных уровней среднего поля KEN.

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

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

7. Для протонов повторяются пункты 4-6 по тем же форматам. Если INF=99, то не надо вводить п.4-7.

8. По формату I3 вводится число MPFH. Если MPFH=0, матричные элементы не печатаются. При MPFH≠0 печатаются матричные элементы $f_{j_1 j_2}^\lambda$.

9. По формату I3 вводится количество нейтронных м.э. $f_{j_1 j_2}^\lambda$ для I-й мультипольности KFT (≤ 200).

10. По формату 3(E12.0, 1X, I10, 1X) вводятся нейтронные м.э. $f_{j_1 j_2}^\lambda$ и их индексы j_1, j_2 в виде числа

$$\rho_{12} = N_2 \cdot 10^7 + \ell_2 \cdot 10^6 + (j_2 - 1/2) \cdot 10^5 + N_1 \cdot 10^4 + \ell_1 \cdot 10^3 + (j_1 - 1/2) \cdot 10^2 + L \cdot 10 + \lambda.$$

Для мультипольных м.э. $L=\lambda$, для спин-мультипольных $L=\lambda \pm 1 (\lambda=1,8)$.

11. Для протонов - повторение пунктов 9-10.

12. Для каждой мультипольности повторяются п.9-11.

Если INF≠0, то не надо вводить п.9-12.

13. По формату I3 вводится число MLT, управляющее вводом информации для Mλ-перехода. Если MLT=0 /пустая карта/, не надо вводить п.14-16, при MLT≠0 вводятся п.14-16 с информацией, необходимой для вычисления Mλ-перехода.

14. По формату I3 вводится количество магнитных м.э. Mλ-перехода для нейтронов NMEM (≤ 200).

15. По формату 2(2(E12.5, 1X), I9, 1X) вводятся приведенные м.э. оператора магнитного мультипольного момента, а также их индексы в виде числа ρ_{11} с $L=\lambda$.

16. Для протонов - повторение п.14-15.

17. По формату 6I4, 2F10.0 вводятся данные о конкретном четно-четном ядре-остове; величина заряда Z , атомный вес A , число обрезанных снизу нейтронных NCORE и протонных IZCORE-уровней, индекс основного одночастичного состояния нейтронной системы IGRSTN /число $\rho = N \cdot 100 + \ell \cdot 10 + j - 1/2$ /, индексы основного одночастичного состояния протонной системы IGRSTP, константы G_n и G_p .

18. По формату 16I5 вводится карта с режимами /описание режимов см. ниже/.

19. По формату 4F10.0 вводится интервал табуляции /в пределах которого формируются полюса "квазичастица + фонон"/

EMIN, EMAX и интервал, в котором ищутся решения $\eta_{J\lambda}$ секулярного уравнения /3/ для нечетного ядра EMINI, EMAXI.

20. Если режим 1=0, то по формату 8F10.0 вводятся пары значения энергии фононов $[\omega_0, \omega_1]$ /МэВ/, то есть значения энергии для определения изоскалярной и изовекторной констант для первой мультипольности, затем следующая пара для второй мультипольности /на той же карте/ и т.д. Если режим 1 \neq 0, то по формату 4E10.6 задаются константы мультипольных и спин-мультипольных сил $[\kappa_0^{(\lambda)}, \kappa_1^{(\lambda)}]$ в соответствии с числом и порядком ввода мультипольностей. Ввод $[\kappa_0^{(\lambda)}, \kappa_1^{(\lambda)}]$ происходит таким же образом, как и $[\omega_0, \omega_1]$. Размерность констант мультипольных сил - МэВ.Фм^{-2 λ} ; спин-мультипольных - МэВ.Фм^{-2(λ +1)}.

Примечание. Если имеется только одно значение ω для какой-либо мультипольности, то нужно задавать $\omega_1=0$. То же самое необходимо делать и для κ_1 .

21. По формату 16I5 вводится карта с режимами (NUCR(I), I=1, KLM), используемыми в RPA при решении секулярного уравнения, определяющего энергии фононов. Если NUCR(I)=0 - уравнение для мультипольности с порядковым номером I /порядковый номер определяется в зависимости от ввода в п. 3/, решается только с изоскалярной либо только изовекторной константой. Если NUCR(I)=10, то учитываются обе компоненты взаимодействия.

22. Если режим 3 \neq 0, по формату 4F10.0 вводятся значения корреляционных функций и химических потенциалов $C_n, C_p, \lambda_n, \lambda_p$ /МэВ/. Если режим 3=0, то не нужно вводить эту карту /в этом случае C_T и λ_T вычисляются программой по заданным значениям констант спаривания C_T /МэВ//.

23. По формату I5, F12.5 вводятся величины IPERC и BOUND. Число IPERC является критерием степени коллективности фононов. Если в фононе с каким-то номером максимальная компонента имеет процентный вклад в нормировке, который больше IPERC, то фонон с этим номером считается неколлективным /рекомендуемые значения IPERC=40-50 /. Число BOUND указывает максимальное значение энергии, по которому ищутся энергии фононов.

24. Если режим 10 или режим 12 \neq 0, вводится значение мультипольности E λ /число $\lambda \cdot 10 + \lambda$ / или M λ /число $(\lambda-1) \cdot 10 + \lambda$ / перехода по формату I3.

25. Если режим 10 \neq 0, вводится по формату F10.0 величина эффективного нейтронного заряда $e_n^{(\lambda)}$, соответствующего E λ -переходу. Если режим 10=0, а режим 12 \neq 0, вместо $e_n^{(\lambda)}$ вводятся спиновые и орбитальные гиромагнитные факторы для нейтронов и протонов, GSN, GSP, GLN, GLP /по формату 4F10.3 /. Если переходы E λ и M λ не будут считаться, то п.24-25 не надо выполнять.

26. Количество JMAX (≤ 10) и индексы состояний JG(I) нечетного ядра, для которых будут рассчитываться энергии и струк-

тура, в виде $n,100 + \ell,10 + j-1/2.JMAX$ и $JG(I)$ вводятся по формату 1115. При вычислении электромагнитных переходов на первом месте /после JMAX / должно стоять начальное состояние, и программа считает переходы типа $JG(1) \rightarrow JG(I)$ / $I = 2, 10$ /, то есть не считает перехода между состояниями, начиная со второго. В случае, когда переходы не считаются /режимы 10 и 12=0 /, порядок следования состояний несуществен.

27. По формату 1615 вводятся номера фононов мультипольности $LM(I)$, которые необходимо сохранить /не подвергая проверке на принцип Паули/ при образовании полюсов "квазичастица + фонон" независимо от величины их коллективности. На каждую рассчитываемую мультипольность приходится одна карта, а количество сохраняемых фононов этой мультипольности не должно превышать 16 ($INDCOL(I, J); I=1,16; J=1, KLM$).

28. По формату 2E15.6 вводятся обрезания снизу по $\Gamma(Jj\lambda_i)$ и $\mathcal{L}(Jj\lambda_i)$ /числа GAMMIN и SPL /. Смысл этих обрезаний состоит в том, что при формировании полюсов "квазичастица + фонон" не учитываются полюса, для которых либо $\Gamma(Jj\lambda_i)$ по абсолютной величине меньше, чем GAMMIN /слабые полюса/, либо $\mathcal{L}(Jj\lambda_i) \leq SPL$ /то есть полюса, нарушающие принцип Паули/. Рекомендуется задавать $SPL = -0,9$. Если режим 14=0 /принцип Паули приближенно учитывается/, то не нужно вводить SPL /то есть на этой карте пробивается только число GAMMIN /.

29. В зависимости от значения режимов 7,10,12 вводятся по формату (4F10.0,2I5) параметры для построения гистограмм силовых функций. Эти параметры следующие: DEL, HDEL, ETA1, ETA2, NSTEP, NHDL:
DEL - начальное значение параметра размазки Δ /МэВ//см.11/;
HDEL - увеличение DEL /МэВ/;
ETA1, ETA2 - энергетический интервал, для которого строятся гистограммы /МэВ/;
NSTEP - число шагов, на которые делится интервал (ETA1, ETA2);
NHDL - число гистограмм с разными DEL. Например, если $DEL=0,3$, $HDEL=0,2$ и $NHDL=2$, то при прочих значениях /ETA1, ETA2 / и NSTEP для каждого состояния $JG(1)$ строится по 2 гистограммы с $\Delta_1 = \Delta = 0,3$ и $\Delta_2 = \Delta + \delta\Delta = 0,5$.

30. Если режим $6 \neq 0$, то по формату I3 вводится количество уровней нейтронной или протонной квазичастицы MAXEO / ≤ 50 /. Если же режим $6 = 0$, то информация, содержащаяся в п.30-31, не нужна.

31. По формату 5(F7.0,1X,I3,1X) вводится спектр нечетной /нейтронной или протонной/ квазичастицы EPSO(I), IEP SO(I) ($I=1, MAXEO$). Массив EPSO(I) содержит значения энергий, а массив IEP SO(I) - их индексы /числа $\rho = N,100 + \ell,10 + j-1/2$ /.

32. Набор карт типа п.17-31 повторяется для каждого последующего ядра /столько раз, сколько ядер считается с помощью данной одночастичной схемы/.

33. Карта с числом 777 /формат I4 / указывает на конец счета ядер первой одночастичной схемой и переход к следующей схеме или, если имеется всего одна схема, к окончанию работы программы.

34. Набор карт типа п.1-33 повторяется до последней схемы с соответствующими ядрами.

35. Карта с числом 777 /формат I3 / указывает на окончание работы программы.

Б. Описание режимов

1. $\left\{ \begin{array}{l} 0 - \text{читает однофоновые энергии } [\omega_0, \omega_1]; \\ 99 - \text{не читает } [\omega_0, \omega_1]. \text{ Для определения фоновых ха-} \\ \text{рактеристик вводятся } [k_0^{(\lambda)}, k_1^{(\lambda)}] \text{ для каждой} \\ \text{мультипольности.} \end{array} \right.$
2. $\left\{ \begin{array}{l} 0 - \text{считает одноквазичастичный спектр нечетного} \\ \text{ядра без учета блокировки. Спектр берется} \\ \text{прямо из соседнего четно-четного ядра;} \\ 99 - \text{считает одноквазичастичный спектр нечетного} \\ \text{ядра с учетом блокировки.} \end{array} \right.$
3. $\left\{ \begin{array}{l} 0 - \text{вычисляет } C_p, C_r, \lambda_n, \lambda_r \text{ программой по за-} \\ \text{даваемым значениям } C_n \text{ и } C_p; \\ 99 - \text{читает } C_n, C_p, \lambda_n, \lambda_r \text{ с перфокарты.} \end{array} \right.$
4. $\left\{ \begin{array}{l} 0 - \text{считает нечетное N-ядро;} \\ 99 - \text{считает нечетное Z-ядро.} \end{array} \right.$
5. $\left\{ \begin{array}{l} 0 - \text{печатает только компоненты волновой функции} \\ \text{с вкладом в общую нормировку, большим 1\%;} \\ 99 - \text{печатает все компоненты волновой функции. Их} \\ \text{максимальное число } \leq 50, \text{ в противном случае пе-} \\ \text{чатает только 50 самых больших компонент.} \end{array} \right.$
6. $\left\{ \begin{array}{l} 0 - \text{не читает спектра нечетной квазичастицы, а вы-} \\ \text{числяет его программой;} \\ 99 - \text{читает спектр нечетной квазичастицы с перфокарт.} \end{array} \right.$
7. $\left\{ \begin{array}{l} 0 - \text{решает точно секулярное уравнение для нечетного} \\ \text{ядра;} \\ 77 - \text{строит гистограммы для } [C_1^Z]^2; \\ 99 - \text{выполняет оба варианта последовательно: то есть} \\ \text{выдает точное решение и гистограммы.} \end{array} \right.$

8. $\begin{cases} 0 & - \text{ не выдает перфорацию;} \\ 99 & - \text{ выдает перфорацию для компонент волновой функции } /1/: \text{ индексы } j \text{ в виде числа } \rho / , \nu \text{ и значения } C_j^\nu; \text{ индексы } \lambda, i, j \text{ и значения коэффициентов } D_j^{\lambda i}(J\nu). \text{ Для } D_j^{\lambda i}(J\nu) \text{ вместо квантовых чисел квазичастиц } j=(N\ell j) \text{ выдает порядковые номера их уровней в одноквазичастичном спектре.} \end{cases}$
9. $\begin{cases} 0 & - \text{ не печатает двухквазичастичных полюсов } \epsilon_{j_1 j_2}; \\ 99 & - \text{ печатает } \epsilon_{j_1 j_2} \text{ и индексы } j_1 j_2. \end{cases}$
10. $\begin{cases} 0 & - \text{ не считает } E\lambda \text{-переходы;} \\ 77 & - \text{ строит гистограммы для } B(E\lambda, I \rightarrow J) \text{ с размазанным } [C_j^\nu]^2; \\ 99 & - \text{ считает точные вероятности } E\lambda \text{-переходов типа } (a^+ + a^+ Q^+)_{1 \rightarrow 2} \text{ или } (a^+ + a^+ Q^+) \rightarrow a^+ \text{ /в зависимости от режима } 11/. \end{cases}$
11. $\begin{cases} 0 & - \text{ считает переход } a^+ + a^+ Q^+ \rightarrow a^+ + a^+ Q^+ \text{ при режиме } 10/12/=99; \\ 99 & - \text{ считает переход } a^+ + a^+ Q^+ \rightarrow a^+ \text{ при режиме } 10/12/=99. \end{cases}$
12. $\begin{cases} 0 & - \text{ не считает } M\lambda \text{-переходов;} \\ 77 & - \text{ строит гистограммы для } B(M\lambda, I \rightarrow J) \text{ с размазанным } [C_j^\nu]^2; \\ 99 & - \text{ считает точные вероятности } M\lambda \text{-перехода типа } (a^+ + a^+ Q^+)_{1 \rightarrow 2} \text{ или } a^+ + a^+ Q^+ \rightarrow a^+ \text{ /в зависимости от режима } 11/. \end{cases}$
13. $\begin{cases} 0 & - \text{ не считает переходов между состояниями с одинаковыми } J, \text{ но разными } \nu \text{ для } JG(1); \\ 99 & - \text{ считает переходы между состояниями с одинаковыми } J, \text{ но разными } \nu \text{ для } JG(1) \text{ /при этом считает только переходы типа } \eta_{J1} \rightarrow \eta_{J\nu} (\nu=2,3,\dots) /. \end{cases}$
14. $\begin{cases} 0 & - \text{ учитывает принцип Паули приближенно;} \\ 99 & - \text{ учитывает принцип Паули точно.} \end{cases}$
- Режимы 15-16 свободны.

В. Диагностика

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

***** MAX.NUMB. OF MULTP. MUST BE LESS THAN 16,
если введено количество мультипольностей $KLM > 15$ /см. IIIA, п. 2/;
***** TOO MANY ENERGY LEVELS,

если введено больше 50 нейтронных KEN или протонных KEP состояний;

***** TOO MANY MATR. ELEM.,

если число матричных элементов KFT, соответствующих какой-либо мультипольности, больше 200 для нейтронной или протонной системы;

***** INCORRECT GROUND STATE $N=j_1$, $Z=j_2$,

если индекс основного состояния не введен вообще ($j_1=j_2=0$) либо среди уровней среднего поля E_j нет такого уровня с $j=j_1$ или $j=j_2$;

***** MATR. ELEMENTS FOR MULT. = LM ARE ABSENT,

если м.э., соответствующих какой-либо из введенных мультипольностей, нет в записанной на магнитном диске одночастичной схеме /случай $INF \neq 0$ /;

***** MANY MAGN. MATR. ELEM. FOR $NZ=r$,

если при вычислении $M\lambda$ -перехода количество магнитных матричных элементов для нейтронов ($r=1$) или протонов ($r=2$) больше 200;

***** MAX. NUMB. OF STATE MUST BE LESS THAN 11,

если введено больше 10 рассчитываемых состояний нечетного ядра.

2. Программа также прекращает работу в следующих случаях:

а/ в подпрограмме QP1PH:

***** POLE QUASIPART. + PHONON ARE GT. 1000,

если число полюсов "квазичастица + фотон" получается больше 1000 /переполнение массива /PHQP/ POLE (1000), IPOLE (1000) /;

***** POLES ONE PHONON + QUASIPARTICLE IS ABSENT,

если в данном интервале энергии (EMIN, EMAX) /см. IIIA, п.19/ нет ни одного полюса "квазичастица + фотон";

б/ в подпрограмме CDT:

***** NUMBER OF D COEFFICIENTS IS GT. 500 FOR $LMT=\lambda$,

если число коэффициентов $D_j^{\lambda 1}(\rho)$ при $\lambda=LMT$ и $\rho=1$, нужных для вычисления электромагнитного перехода мультипольности $\lambda=LMT$, больше 500 /переполнение массива /CDID/ /.

Остальная диагностика, связанная с подпрограммами, расположенными в левой части рисунка, такая же, как и в программе RPAS^{/5/}.

Г. Ограничения программы

Кроме ограничений, упомянутых в частях А и Б, следует указать еще следующие:

1. С помощью данной одночастичной схемы можно считать электромагнитные переходы только одного типа: либо $E\lambda$, либо $M\lambda$.

2. Для данной одночастичной схемы могут быть вычислены переходы лишь одного сорта, то есть переходы одной мультипольности с одним значением $e_f^{(\lambda)}$ или одним набором g_{eff} .

Текст программы и контрольный вариант для счета, а также печать результатов контрольного варианта /выдача ЭВМ/ находятся в библиотеке программ Лаборатории теоретической физики ОИЯИ. Программа написана на языке FORTRAN-IV применительно к ЭВМ CDC-6500 /операционная система NOS/BE1 /. Необходимая память $\approx 137\ 000$ В ячеек, время счета одного спина до энергий 15-20 МэВ ≈ 10 с. При точном учете принципа Паули время счета увеличивается в 5-20 раз /в зависимости от массы ядер/.

В заключение авторы выражают благодарность проф. В.Г.Соловьеву за внимание к данной работе. Особенно признательны они Д.Дамбасурену, написавшему часть программы, вычисляющую гистограммы коэффициента $[C_j^2]^2$. Они благодарны также А.И.Вдовину и В.В.Воронову за стимулирование публикации программы, а также В.Ю.Пономареву за помощь в оформлении рукописи.

ЛИТЕРАТУРА

1. Соловьев В.Г. Теория сложных ядер. "Наука", М., 1971; Соловьев В.Г. ЭЧАЯ, 1978, 9, с.580.
2. Вдовин А.И., Соловьев В.Г. ТМФ, 1974, 19, с.275.
3. Dambasuren D. et al. J.Phys.G: Nucl.Phys., 1976, 2, p.25.
4. Чан Зуй Кхыонг, Воронов В.В. ОИЯИ, Р4-80-692, Дубна, 1980.
5. Стоянов Ч., Юдин И.П. ОИЯИ, Р4-11076, Дубна, 1977.

Рукопись поступила в издательский отдел
3 апреля 1981 года.