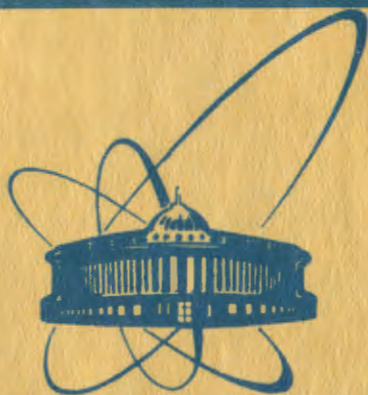


81-704



сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
Дубна

44/
12-82

4/1-82

P4-81-704

В.Ю.Пономарев, О.Стойнова, Ч.Стойнов

ВЫЧИСЛЕНИЕ НЕКОТОРЫХ ХАРАКТЕРИСТИК
ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ
ЧЕТНО-ЧЕТНЫХ СФЕРИЧЕСКИХ ЯДЕР
С ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИЕЙ, СОДЕРЖАЩЕЙ
ОДНО- И ДВУХФОНОННЫЕ КОМПОНЕНТЫ

1981

В рамках полумикроскопической квазичастично-фононной модели ядра (КФМ)^{/1/} в последние годы были выполнены расчеты различных характеристик высоколежащих возбуждений четно-четных сферических ядер, в которых учитывалось взаимодействие одно- и двухфононных состояний^{/2,3/}. Все эти расчеты были выполнены с помощью многоцелевой программы GIRES, являющейся одной из главных составных частей комплекса программ, созданного в отделе теории атомного ядра ЛТФ для расчетов широкого круга ядерных характеристик в рамках КФМ (см. также^{/4,5/}). Поскольку, как показал накопленный опыт, такие программы представляют интерес для широкого круга теоретиков и экспериментаторов, работающих в области структуры ядра, мы представляем в настоящей работе блок-схему, сжатое описание основных принципов организации и инструкцию программы GIRES.

Модель и формулы для расчета

В основе КФМ лежит эффективный гамильтониан ядра, содержащий одночастичные средние потенциалы для нейтронной и протонной систем, спаривательное нейтрон-нейтронное и протон-протонное взаимодействие с постоянными матричными элементами G_n или G_z , а также эффективные сепарабельные мультипольные и спин-мультипольные силы с изоскалярной и изовекторной компонентами. Основное состояние четно-четного ядра считается фононным вакуумом, а возбужденные состояния описываются как одно-, двух-, ..., многофононные состояния. Оператор рождения фонона при этом конструируется из операторов рождения α_{jm}^+ и уничтожения α_{jm} квазичастиц (здесь и в дальнейшем индексу jm соответствует набор одночастичных квантовых чисел $n_1 j m$):

$$Q_i^+(\lambda\mu) = \frac{1}{2} \sum_{jj'}^{n_i} \left\{ \Psi_{jj'}^{\lambda i} [\alpha_j^+ \alpha_{j'}^+]_{\lambda\mu} - (-)^{\lambda-\mu} \Psi_{jj'}^{\lambda i} [\alpha_{j'} \alpha_j]_{\lambda-\mu} \right\}. \quad (I)$$

Однофононные состояния натуральной четности генерируются остаточными мультипольными силами, а состояния аномальной четности - спин-мультипольными силами. Уравнения для энергий однофононных возбуждений ω_i^λ и амплитуд $\Psi_{jj'}^{\lambda i}$ и $\Psi_{jj'}^{\lambda i}$ приведены в^{/1,4/}. Остативаться подробно на характеристиках однофононных состояний мы здесь не будем, поскольку программа RRAS^{/4/}, рассчитывающая их, встроена в программу GIRES.

Постулируя бозонные коммутационные соотношения для фононных операторов, мы можем записать гамильтониан КФМ следующим образом:

$$H = \sum_{\lambda, \mu} \omega_i^\lambda Q_i^\dagger(\lambda, \mu) Q_i(\lambda, \mu) + H_{q,ph}. \quad (2)$$

Первый член формулы (2) соответствует приближению не взаимодействующих фононов (или приближению случайных фаз), член $H_{q,ph}$ описывает взаимодействие квазичастиц с фононами, его явный вид приведен в работе [2].

В настоящей работе волновая функция возбужденного состояния четно-четного ядра с квантовыми числами J^π задается в виде

$$\Psi_\nu(JM) = \left\{ \sum_i R_i(J\nu) Q_i^\dagger(JM) + \sum_{\substack{\lambda_1, \lambda_2 \\ i_1, i_2}} P_{\lambda_1, i_1}^{\lambda_2, i_2}(J\nu) [Q_{i_1}^\dagger(\lambda_1, \mu_1) Q_{i_2}^\dagger(\lambda_2, \mu_2)]_{JM} \right\} \Psi_0. \quad (3)$$

Уравнение для энергии состояния $\Psi_\nu(JM)$ и выражение для коэффициентов $R_i(J\nu)$ и $P_{\lambda_1, i_1}^{\lambda_2, i_2}(J\nu)$ имеют вид

$$\mathcal{F}(\eta) \equiv \det \left| \left(\omega_i^J - \eta_{J\nu} \right) \delta_{ii'} - \frac{1}{2} \sum_{\substack{\lambda_1, \lambda_2 \\ i_1, i_2}} \frac{U_{\lambda_1, i_1}^{\lambda_2, i_2}(Ji) U_{\lambda_1, i_1}^{\lambda_2, i_2}(Ji')}{\omega_{i_1}^{\lambda_1} + \omega_{i_2}^{\lambda_2} - \eta_{J\nu}} \right| = 0, \quad (4)$$

$$[R_i(J\nu)]^{-2} = - \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\mathcal{F}(\eta)}{M_{ii}} \right) \Big|_{\eta = \eta_{J\nu}},$$

$$P_{\lambda_1, i_1}^{\lambda_2, i_2}(J\nu) = \frac{1}{2} \sum_i R_\nu(Ji) \frac{U_{\lambda_1, i_1}^{\lambda_2, i_2}(Ji)}{\omega_{i_1}^{\lambda_1} + \omega_{i_2}^{\lambda_2} - \eta_{J\nu}}.$$

Ранг матрицы (4) совпадает с числом однофоновных компонент волновой функции (3), M_{ii} - минор матрицы (4). Коэффициенты $U_{\lambda_1, i_1}^{\lambda_2, i_2}(Ji)$ определены как среднее значение от $H_{q,ph}$:

$$U_{\lambda_1, i_1}^{\lambda_2, i_2}(Ji) = \langle \Psi_0 | Q_i(JM) H_{q,ph} [Q_{i_1}^\dagger(\lambda_1, \mu_1) Q_{i_2}^\dagger(\lambda_2, \mu_2)]_{JM} | \Psi_0 \rangle,$$

$$U_{\lambda_1, i_1}^{\lambda_2, i_2}(Ji) = (-)^{\lambda_1 + \lambda_2 + J} \frac{1}{\sqrt{2}} [(2\lambda_1 + 1)(2\lambda_2 + 1)]^{1/2} \times$$

$$\times \sum_{j_1, j_2}^{n, \pi} \left[\frac{f_{j_1, j_2}^J V_{j_1, j_2}^{(\mp)}}{\sqrt{4n(n-1)}} \left\{ \lambda_1, \lambda_2, J \right\} \left(\psi_{j_2, j_1}^{\lambda_1, i_1} \varphi_{j_2, j_1}^{\lambda_2, i_2} + (-)^{\Sigma} \psi_{j_2, j_1}^{\lambda_2, i_2} \varphi_{j_2, j_1}^{\lambda_1, i_1} \right) + \right. \quad (5)$$

$$\left. + \frac{f_{j_1, j_2}^{\lambda_1} V_{j_1, j_2}^{(\mp)}}{\sqrt{4n(n-1)}(\lambda_1, i_1)} \left\{ \lambda_1, \lambda_2, J \right\} \left(\varphi_{j_2, j_1}^{j_1} \varphi_{j_2, j_1}^{\lambda_2, i_2} + (-)^{\Sigma_1} \varphi_{j_2, j_1}^{j_1} \psi_{j_2, j_1}^{\lambda_2, i_2} \right) + \right.$$

$$\left. + \frac{f_{j_1, j_2}^{\lambda_2} V_{j_1, j_2}^{(\mp)}}{\sqrt{4n(n-1)}(\lambda_2, i_2)} \left\{ \lambda_1, \lambda_2, J \right\} \left(\psi_{j_2, j_1}^{j_2} \psi_{j_2, j_1}^{\lambda_1, i_1} + (-)^{\Sigma_2} \psi_{j_2, j_1}^{j_2} \varphi_{j_2, j_1}^{\lambda_1, i_1} \right) \right],$$

где f_{j_1, j_2}^λ - приведенные матричные элементы от мультипольного или спин-мультипольного операторов; $V_{j_1, j_2}^{(\mp)} = U_{j_1, j_2} \mp V_{j_1, j_2}$ - комбинация

коэффициентов преобразования Боголюбова U_j и V_j ; $V_{j_1 j_2}^{(-)}$ появляется в сочетании с мультипольным м.э. $f_{j_1 j_2}^{\lambda}, V_{j_1 j_2}^{(\lambda)}$ - со спин-мультипольным; число ℓ_j принимает значение 0 в случае мультипольного м.э. $f_{j_1 j_2}^{\lambda, \kappa}$ и 1 в случае спин-мультипольного м.э.; $y_{\mu}(\lambda)$ и $y_{\pi}(\lambda)$ - нормировочные коэффициенты^{1/4/}.

Для расчета конкретных физических характеристик использован метод силовых функций^{2,6/}, в котором рассчитываются их усредненные по интервалу Δ значения, что значительно упрощает численные расчеты. Суть метода в следующем.

Пусть $\Phi_{J\nu}$ - амплитуда возбуждения состояния $\Psi_{\nu}(JM)$ в ядерной реакции. Тогда расчет величин $|\Phi_{J\nu}|^2$ для каждого состояния заменится вычислением усредненной величины $b(\Phi, \eta)$ (силовой функции):

$$b(\Phi, \eta) = \sum_{\nu} \rho(\eta - \eta_{J\nu}) |\Phi_{J\nu}|^2, \quad \rho(\eta - \eta_{J\nu}) = \frac{1}{2\pi} \frac{\Delta}{(\eta - \eta_{J\nu})^2 + \frac{\Delta^2}{4}} \quad (6)$$

Суммирование в формуле (6) проводится по всем состояниям (3), параметр размазки Δ определяет степень детальности, с которой рассчитывается искомое распределение величины $|\Phi|^2$. Подробно вопросы выбора величины Δ , а также вида весовой функции $\rho(\eta - \eta_{J\nu})$ (у нас она взята в лорентцевской форме) обсуждаются в работе^{6/}.

В тех случаях, когда процесс возбуждения состояния $\Psi_{\nu}(JM)$ идет главным образом через однофононные компоненты, т.е. вероятность прямого возбуждения уровней $Q_i^{\lambda_1 \mu_1} Q_i^{\lambda_2 \mu_2} |\Psi_0\rangle$ заметно подавлена по сравнению с $Q_i^{\lambda \mu} |\Psi_0\rangle$, а также когда нас интересует изменение распределения характеристик однофононных состояний за счет их взаимодействия с двухфононными, можно записать

$$\Phi_{J\nu} = \sum_i R_i(J\nu) \Phi_{Ji} \quad (7)$$

В таких случаях для силовой функции, используя аналитические свойства уравнения (4), можно получить замкнутое выражение, для вычисления которого достаточно знать коэффициенты $U_{\lambda_1 \lambda_2}^{\lambda_1 \lambda_2}(Ji)$ и амплитуды Φ_{Ji} , а именно:

$$b(\Phi, \eta) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \frac{\sum_i M_{ii}(\eta + i\frac{\Delta}{2}) \Phi_{Ji} \Phi_{Ji}}{\mathcal{F}(\eta + i\frac{\Delta}{2})} \right\} \quad (8)$$

Программа GIBES позволяет рассчитывать следующие силовые функции:

I. Силовая функция электромагнитных переходов

Для $b(E\lambda, \eta)$: $\Phi_{Ji} = \frac{1}{2} \sum_{j_1 j_2}^{J \mp} (\Psi_{j_1 j_2}^{Ji} + \Psi_{j_2 j_1}^{Ji}) u_{j_1 j_2}^{(\lambda)} \langle j \| \Pi(E\lambda) \| j' \rangle$,

$$\text{для } b(M\lambda, \eta): \quad \Phi_{J_i} = \frac{1}{2} \sum_{J_j'}^{n_z} (\Psi_{J_j'}^{J_i} - \Psi_{J_j'}^{J_i'}) U^{(-)} \langle J \| \Gamma(MJ) \| J' \rangle, \quad (9)$$

где $U_{J_j'}^{(\pm)} = U_j V_j \pm U_j' V_j'$; операторы электрического $\Gamma(E\lambda)$ и магнитного $\Gamma(M\lambda)$ мультипольного момента имеют стандартный вид /1,6/.

2. Нейтронная силовая функция

Для ℓ -силовой функции с заданной величиной спина компаунд-ядра $\bar{J} = \bar{I}_0 + j$ в канале j

$$\Phi_{J_i} = \sum_n U_{nlj} \Psi_{nlj, n_0 l_0 j_0}^{J_i}, \quad (10)$$

где \bar{I}_0 - момент ядра-мишени; $|n_0 l_0 j_0\rangle$ - основное состояние нечетного ядра с волновой функцией $\alpha_{n_0 l_0 j_0}^+ \Psi_0^{A-1}$ (Ψ_0^{A-1} - основное состояние соседнего четно-четного ядра).

3. Силовая функция реакции однонуклонной передачи

Для расчета спектроскопических факторов однонуклонной передачи используется силовая функция, которая обозначается $S_{jj_0}(J\eta)$ и определяется по формуле (8). В реакции срыва типа (d, p) индекс j соответствует одночастичному уровню ядра-мишени, на который передается нуклон, а амплитуда Φ_{J_i} рассчитывается по формуле (10).

В реакции подхвата типа (p, d) нуклон "подхватывается" с одночастичного уровня j ядра-мишени. Для этого типа реакций в программе GIREС предусмотрена возможность учета примеси "квантичестица-фонон" в основном состоянии нечетного ядра-мишени, т.е. волновая функция основного состояния имеет вид

$$\Psi_{v_0}(j_0 m_0) = C_{j_0 v_0} \left\{ \alpha_{j_0 m_0}^+ + \sum_{\lambda \mu i j} D_j^{\lambda i}(j_0) [\alpha_{jm}^+ Q_i^+(\lambda \mu)]_{j_0 m_0} \right\} \Psi_0^{A-1}. \quad (11)$$

Амплитуда Φ_{J_i} при этом имеет вид

$$\Phi_{J_i} = \sum_n \left(V_{nlj} \Psi_{nlj, n_0 l_0 j_0}^{J_i} + \sum_{n' l' j'} D_{n' l' j'}^{\lambda i}(j_0) U_{n' l' j'} \delta_{n, n'} \delta_{l, l'} \delta_{j, j'} \right). \quad (12)$$

Коэффициенты $C_{j_0 v_0}$ и $D_{n' l' j'}^{\lambda i}$ рассчитываются программой рНОСUS /5/.

4. Силовая функция сечения возбуждения состояний в (e, e')-реакции

Если процесс неупругого рассеяния электронов описывать методом искаженных волн, то выражение для сечения возбуждения i -го однофононного состояния записывается в виде:

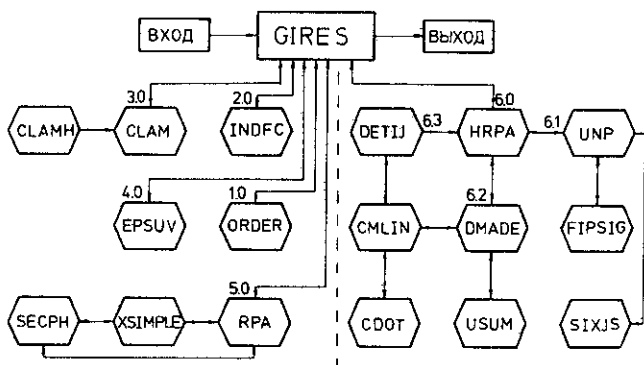
$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_i^\lambda = \sum_{k=1}^{2(2\lambda+1)} |\tilde{\Phi}_{ik}(\lambda)|^2. \quad (13)$$

Программа GIRES рассчитывает силовую функцию для каждой из комплексных амплитуд Φ_{ik} и затем суммированием по k получает $\delta(\frac{d\sigma}{d\Omega}, \eta)$.

Ранее мы отмечали, что в заложенной в GIRES формулировке КФМ для оператора фона имеют место бозонные коммутационные соотношения. Тем самым мы "забываем" о его фермионной структуре, что приводит к нарушению принципа Паули для ряда двухфононных компонент в волновой функции (3). Программа GIRES позволяет исключить те состояния, для которых нарушение принципа Паули может привести к существенным ошибкам. С этой целью на двухфононные компоненты функции $\Psi_V(JM)$ может быть наложено ограничение, требующее, чтобы хотя бы один из двух фононов был коллективным. Критерием коллективности при этом служит величина амплитуды $\Psi_{jm}^{\lambda_i \lambda_j}$ той двухквaziчастичной компоненты, которая дает наибольший вклад в нормировку однофононной волновой функции: фонон считается коллективным, если $|\Psi_{jm}^{\lambda_i \lambda_j}|^2 \cdot 100\%$ меньше условно задаваемой величины. При таком приближенном учете принципа Паули происходит обрезание двухфононного базиса, но отбрасываемые компоненты отвечают, как правило, малым значениям матричного элемента $U_{\lambda_i \lambda_j}^{\lambda_i \lambda_j}(J_i)$.

Краткое описание программы

Программа GIRES написана на языке фортран-IV применительно к ЭВМ CDC-6500 (операционная система NOS(BE1)). Программа состоит из основной программы GIRES и 17 подпрограмм и занимает ~137000В ячеек памяти - ее структурная блок-схема представлена на рисунке.



Структурная блок-схема программы.

1. Программа GIRES осуществляет ввод информации и организует работу подпрограмм: последовательность их вызова отмечена цифрами.

2. Подпрограммы, расположенные слева от пунктирной линии, перенесены из программы RPAS, их описание см. в /4/.

3. Подпрограмма NRPA формирует двухфононные поляса $(\omega_{i_1}^{\lambda_1} + \omega_{i_2}^{\lambda_2})$ и вычисляет силовые функции.

4. Подпрограмма UNP вычисляет коэффициенты $U_{\lambda_1 i_1 \lambda_2 i_2}^{\lambda_1 i_2}(J_i)$.

5. Подпрограмма FIPSIG вычисляет амплитуды $\Psi_{j_1 j_2}^{\lambda_1 i}$ и $\varphi_{j_1 j_2}^{\lambda_1 i}$ для формулы (5).

6. Комплексная подпрограмма-функция USUM вычисляет суммы вида $\sum_{\lambda_1 i_1 \lambda_2 i_2} U_{\lambda_1 i_1 \lambda_2 i_2}^{\lambda_1 i_2}(J_i) U_{\lambda_1 i_1 \lambda_2 i_2}^{\lambda_1 i_2}(J_i) [\omega_{i_1}^{\lambda_1} + \omega_{i_2}^{\lambda_2} + \eta]^{-1}$ в точках $\eta = x + i \frac{\Delta}{2}$.

7. Подпрограмма DMADE заполняет матрицу (4) и вычисляет ее детерминант.

8. Подпрограмма DETIJ вычисляет миноры M_{ij} .

9. Подпрограмма SYMLIN и комплексная подпрограмма-функция SDOT необходимы для вычисления определителей.

10. Подпрограмма-функция SIXJS вычисляет 6j-символы.

Для вычисления силовых функций необходимо иметь приведенные матричные элементы остаточного взаимодействия $f_{j_1 j_2}^{\lambda}$, коэффициенты преобразования Боголюбова U_j и V_j , энергии однофононных состояний ω_i^{λ} , а также амплитуды $\Psi_{j_1 j_2}^{\lambda i}$ и $\varphi_{j_1 j_2}^{\lambda i}$. Величины $f_{j_1 j_2}^{\lambda}$, а также одночастичный спектр E_{nj} можно вычислить с помощью программ REBMEL /8/ и SAIMEL /9/, которые имеются в библиотеке программ отдела теории атомного ядра ЛТФ ОИЯИ. Коэффициенты U_j и V_j , а также одноквазичастичные энергии ϵ_{nj} рассчитываются самой программой на основе вводимой информации о сверхтекучих характеристиках $C_{n(z)}$ (корреляционная функция) и $\lambda_{n(z)}$ (химпотенциал) и спектра E_{n1j} . Сверхтекучие характеристики могут быть также вычислены, если задать значение матричного элемента спаривательного взаимодействия $G_{n(z)}$. Для расчета ω_i^{λ} , $\Psi_{j_1 j_2}^{\lambda i}$ и $\varphi_{j_1 j_2}^{\lambda i}$ помимо спектра E_{n1j} и матричных элементов $f_{j_1 j_2}^{\lambda}$ необходимо определить константы остаточного взаимодействия χ_0 и $\chi_i^{(\lambda)}$, которые либо вводятся в программу, либо вычисляются внутри нее по заданным энергиям фононов. Амплитуды Φ_{ji} в формуле (8) вычисляются самой программой, только при расчете $b(\frac{d\sigma}{d\Omega}, \eta)$ они вводятся с перфокарт.

В программе GIRES все величины, имеющие размерность энергии, определены в единицах МэВ.

Инструкция по использованию программы

Ввод исходных данных осуществляется в следующем порядке (ес-

ли информация вводится с перфокарт, то в конце пункта в скобках указан формат ввода):

п. 1. Число IREG (см. п. 4), управляющее вводом одночастичного спектра и приведенных матричных элементов $f_{j_1 j_2}^{\lambda}$ (I3).

п. 2. Количество мультипольностей (≤ 15), включаемых в расчет (I3).

п. 3. Величины мультипольностей в виде чисел $L \cdot 10 + \lambda$ (для мультипольных сил $L = \lambda$, для спин-мультипольных $L = \lambda + 1$, $\lambda \leq 9$) в порядке их возрастания (15I3).

п. 4. А. Если IREG $\neq 99$, то вводится:

п. 4.1. Количество нейтронных одночастичных уровней (I3).

п. 4.2. Параметры нейтронного потенциала Вудса-Саксона: a , Z , z_0 , V_0 , x , α . В расчетах эти параметры не участвуют (2I3, 4F10.0).

п. 4.3. Энергии одночастичных уровней $E_{n l j}$ и их одночастичные квантовые числа в виде числа $\rho = n \cdot 100 + l \cdot 10 + j - \frac{1}{2} (5(F7.0, 1X, I3, 1X))$.

п. 4.4. Для протонов пп. 4.1-4.3 повторяются по тем же форматам.

п. 4.5. Количество нейтронных м.э. (≤ 200) для первой мультипольности (I3).

п. 4.6. Нейтронные м.э. $f_{j_1 j_2}^{L \lambda}$ и соответствующие им индексы в виде числа $\rho_{12} = \rho_1 \cdot 10^5 + \rho_2 \cdot 10^2 + L \cdot 10 + \lambda$ (3(E12.0, 1X, I10, 1X)).

п. 4.7. Для протонов пп. 4.5-4.6 повторяются по тем же форматам.

п. 4.8. Для каждой мультипольности повторяются пп. 4.5-4.7.

Б. Если IREG = 99, то информация пп. 4.1-4.8 вводится с ленты TARE4. В этом случае до начала счета на TARE4 должна быть занесена информация пп. 2, 3, 4.1-4.8 в бесформатной записи.

Примечание. При необходимости, задав IREG = 55, можно распечатать м.э. и их индексы.

п. 5. А. При расчете $b(M, \lambda, \eta)$ вводится:

п. 5.1. Количество наборов (≤ 5) $\{g_s^n, g_s^z, g_1^n, g_1^z\}_{эфф}$ (I3).

п. 5.2. Величины $\{g_s^n, g_s^z, g_1^n, g_1^z\}_{эфф}$ (4F10.0).

п. 5.3. Количество нейтронных магнитных м.э. (≤ 200) $F_{j_1 j_2}^{L \lambda}$ (I3).

п. 5.4. Нейтронные магнитные м.э. $F_{j_1 j_2}^{qz}$ и $F_{j_1 j_2}^{qt}$ и их индексы в виде числа ρ_{12} (здесь $L = \lambda$) (2(2(E12.0, 1X), I9, 1X)).

п. 5.5. Для протонов пп. 5.3-5.4 повторяются по тем же форматам.

Б. При расчете других силовых функций информация пп. 5.1-5.5 не нужна и вместо нее вводится одна пустая карта.

п. 6. Данные о конкретном четно-четном ядре: заряд Z , атомный вес A , число обрезанных снизу нейтронных NSCORE и протонных

ЗСОРЕ одночастичных уровней, индексы основного состояния нейтронной ρ_0^n и протонной ρ_0^p систем, константы G_n и $G_z(614,2F10.0)$.

п. 7. Карта с режимами (1615) :

- I. $\left\{ \begin{array}{l} 0 - \text{ задается количество однофононных состояний в п. II.} \\ 99 - \text{ задается максимальная энергия однофононных состояний.} \end{array} \right.$
2. $\left\{ \begin{array}{l} 0 - \text{ константы } \chi^{(\lambda)} \text{ вычисляются по заданным энергиям фононов} \\ \text{ в п. 8.} \\ 99 - \text{ константы } \chi^{(\lambda)} \text{ вводятся с перфокарт в п. I2.} \end{array} \right.$
3. $\left\{ \begin{array}{l} 0 - \text{ при расчете } b(E(M)\lambda, \eta), b(d\sigma/d\Omega, \eta), \text{ нейтронных силовых} \\ \text{ функций и } S_{jj_0}(J, \eta) \text{ (в реакциях типа (d, p)).} \\ 99 - \text{ при расчете } S_{jj_0}(J, \eta) \text{ (в реакциях типа (p, d)).} \end{array} \right.$
4. $\left\{ \begin{array}{l} 0 - \text{ при расчете } b(E(M)\lambda, \eta) \text{ и } b(d\sigma/d\Omega, \eta). \\ 99 - \text{ при расчете нейтронных силовых функций и } S_{jj_0}(J, \eta). \end{array} \right.$
5. $\left\{ \begin{array}{l} 0 - \text{ в волновой функции } \Psi_j(JM) \text{ будут использованы однофонон-} \\ \text{ ные компоненты с максимальными значениями } b(E\lambda) \text{ или } b(M\lambda). \\ 99 - \text{ будут задаваться номера однофононных компонент в п. I7.} \end{array} \right.$
6. $\left\{ \begin{array}{l} 0 - \text{ значения } c_{n,z}, \lambda_{n,z} \text{ вычисляются программой.} \\ 99 - \text{ значения } c_{n,z}, \lambda_{n,z} \text{ читаются с перфокарт в п. I0.} \end{array} \right.$
7. $\left\{ \begin{array}{l} 0 - \text{ не печатает таблицу с } b(E\lambda). \\ 99 - \text{ печатает таблицу с } b(E\lambda). \end{array} \right.$
8. $\left\{ \begin{array}{l} 0 - \text{ не печатает коэффициенты } U_{\lambda_1 \lambda_2}^{\lambda_1 \lambda_2} (J_i). \\ 99 - \text{ печатает коэффициенты } U_{\lambda_1 \lambda_2}^{\lambda_1 \lambda_2} (J_i). \end{array} \right.$
9. $\left\{ \begin{array}{l} 0 - \text{ программа считается полностью.} \\ 99 - \text{ учитываются только диагональные элементы детерминанта} \\ \text{ (4).} \end{array} \right.$
10. $\left\{ \begin{array}{l} 0 - \text{ не печатает двухквасичастичные полюса.} \\ 99 - \text{ печатает двухквасичастичные полюса.} \end{array} \right.$
- II. $\left\{ \begin{array}{l} 0 - \text{ не считает } b(M\lambda, \eta). \\ 99 - \text{ считает } b(M\lambda, \eta). \end{array} \right.$
15. $\left\{ \begin{array}{l} 0 - \text{ не считает } b(d\sigma/d\Omega, \eta). \\ 99 - \text{ считает } b(d\sigma/d\Omega, \eta). \end{array} \right.$

16. $\left\{ \begin{array}{l} 0 - \text{коэффициенты } U_{\lambda_i, l_i}^{\lambda_i, l_i}(J_i) \text{ вычисляются программой.} \\ 99 - \text{коэффициенты } U_{\lambda_i, l_i}^{\lambda_i, l_i}(J_i) \text{ читаются с ленты ТАРЭЗ.} \end{array} \right.$

Режимы I2-I4 свободны.

п. 8. Энергии фононов, по которым в случае режима 2=0 вычисляются константы $\chi_{0,1}^{(n)}$. Энергии вводятся парами, число и порядков пар должны соответствовать числу и порядку мультипольностей (8F10.0).

п. 9. Режимы, указывающие, как решать гармоническое уравнение для соответствующей мультипольности (15I5):

- I.-I5. $\left\{ \begin{array}{l} 0 - \text{учитывается либо только изоскалярная, либо только изо-} \\ \text{векторная компонента остаточного взаимодействия.} \\ 10 - \text{учитываются обе компоненты остаточного взаимодейст-} \\ \text{вия.} \end{array} \right.$

п. 10. Если режим 6 \neq 0, то вводятся $c_n, c_z, \lambda_n, \lambda_z$ (4F10.0).

п. II. А. Если режим I=0, то вводится количество однофононных состояний, рассчитываемых в PRA, одинаковое для всех мультипольностей (I5).

Б. Если режим I=99, то вводится максимальная энергия однофононных состояний (F10.0).

п. 12. Если режим 2=99, то для каждой мультипольности последовательно вводятся пары констант ($\chi_0^{(n)}, \chi_1^{(n)}$) (5E15.6).

Примечание. Если в соответствии с п. 9 либо $\chi_0^{(n)}=0$, либо $\chi_1^{(n)}=0$, то соответствующая пара имеет вид ($\chi^{(n)}, 0$).

п. 13. Точность ϵ вычисления амплитуд Ψ и φ в % (амплитуды, для которых $|\Psi^2 - \varphi^2| \cdot 100\% < \epsilon$, в расчет не включаются); параметр размазки Δ ; шаг табуляции силовой функции n ; критерий коллективности фонона в %; нижняя граница δU (компоненты Q^+Q^+ , для которых $\sum_{i=1}^N |U_{\lambda_i, l_i}^{\lambda_i, l_i}(J_i)| < \delta U \cdot N$, отбрасываются); нижняя граница $\delta V(\epsilon, \lambda)$ (все однофононные состояния с $V(\epsilon, \lambda) < \delta V(\epsilon, \lambda)$ не учитываются в однофононной части $\Psi_y(JM)$) (6F10.0).

п. 14. Энергетический интервал, в котором выбираются однофононные компоненты (2F10.0).

п. 15. Количество (≤ 5) и значение мультипольностей, для которых необходимо рассчитывать силовую функцию (6I3).

Примечание. Одновременный расчет нескольких мультипольностей сразу возможен только для $V(\epsilon, \lambda, \eta)$.

п. 16. Ранг детерминанта (4) ≤ 14 (I3).

п. 17. Если режим 5=99, для каждой мультипольности, в которой рассчитывается силовая функция, на отдельной карте вводятся

номера однофононных состояний, которые войдут в однофононную часть $\Psi_\nu(JM)$. Их количество должно совпадать с рангом детерминанта в п. 16 (1415).

п. 18. На каждую рассчитываемую мультипольность вводится одна карта с номерами тех фононов, которые рассматриваются как коллективные (1615).

Примечание к пп. 17-18. При расчете Γ^- -возбуждений для исключения духового состояния с нулевой энергией номера всех фононов должны быть уменьшены на 1 по сравнению с нумерацией Γ^- -фононов программы RPAS /4/.

п. 19. Если режим 4=99, вводится карта с индексом основного состояния нечетного ядра в виде числа $\rho_0 \cdot 10 + \zeta$ ($\zeta = 0$ для нечетного по нейтронам ядра, $\zeta = 1$ - нечетного по протонам) и индексом нейтронной силовой функции в виде числа $1 \cdot 10 + j - 1/2$ (215).

п. 20. Если режим 3=99, вводится:

п. 20.1. Количество коэффициентов $D_j^{\lambda_i}$ в формуле (II) (15).

п. 20.2. Индексы коэффициентов $D_j^{\lambda_i}$ в виде числа ρ и значения коэффициентов $D_j^{\lambda_i}$ (4(15, E15.6)).

Примечание. Если в $S_{jj_0}(J, \eta)$ типа (p, a) примесь "квасичастица + фонон" не учитывается, то в п. 20.1 вводится единица, а в п. 20.2 - пустая карта.

п. 21. Интервал $[E_{\min}, E_{\max}]$, в котором выбираются двухфононные компоненты $\Psi_\nu(JM)$, и интервал $[E_{\min}^{\text{tab}}, E_{\max}^{\text{tab}}]$, в котором табулируется силовая функция (4F10.0).

п. 22. Если режим 15=99, вводится:

п. 22.1. Энергия налетающих электронов E_0 и угол рассеяния θ (2F10.0).

п. 22.2. Для каждой однофононной компоненты $\Psi_\nu(JM)$ вводятся $2(2\lambda+1)$ комплексных амплитуд $\Phi_{\lambda k}(\lambda)$ (см. (13)), рассчитываемых программой MICROB(4E16.0).

п. 22.3. Можно вводить несколько наборов пп. 22.1-22.2; карта с $E_0 = 5555$ указывает на конец п. 22.

п. 23. Можно вводить несколько наборов пп. 21-22, карта с $E_{\min} = 7777$ указывает на конец этих пунктов.

п. 24. В соответствии с п. 15 необходимо повторить пп. 21-23 для других мультипольностей.

п. 25. Можно повторить расчет для другого ядра (не изменяя одночастичной схемы). Для этого повторяется ввод пп. 6-24. Если в п. 6 $z = 7777$, это означает, что расчет с уже введенной одночастичной схемой окончен.

п. 26. Можно повторить расчет с новой одночастичной схемой, повторив информацию пп. 2-25. Если в п. 2 количество мультипольностей равно 777, то программа завершает работу.

Примечания: 1) для расчета $\delta(E, \lambda, \eta)$ необходимо задать режимы 3, 4, II=0; 2) для расчета $\delta(M\lambda, \eta)$ необходимо ввести магнитные м.э. и задать режимы 3, 4 = 0 и режим II=99; 3) для расчета нейтронных силовых функций необходимо задать режим 3=0 и режимы 4, 5 = 99; 4) для расчета $S_{jj_0}(I, \eta)$ необходимо задать режимы 4, 5 = 99 и режим 3 = 99 (в реакции типа (p, a)) и 3 = 0 (в реакции типа (a, p)); 5) для расчета $\delta(d\sigma/d\Omega, \eta)$ необходимо ввести компоненты Q_{ik} и задать режимы 3, 4, II = 0 и режим I5 = 99.

Ограничения программы

Кроме ограничений, указанных в тексте инструкции, возможны ограничения, возникающие в случаях, когда промежуточная информация не вмещается в зарезервированные массивы. К таким случаям относятся: а) число однофоновых состояний > 1500; б) полное число двухфоновых компонент > 1800; в) число двухфоновых компонент, удовлетворяющих условию $\sum |U| > \delta U \cdot N, > 1000$; г) число точек (в которых табулируется силовая функция) > 990. Во всех этих случаях программа автоматически произведет ограничения до необходимого уровня и продолжит работу.

Если выбрать малую величину ϵ в п. 13 или слишком большой интервал $[E_{\min}, E_{\max}]$ п. 22, то программа может прекратить свою работу из-за слишком большого количества амплитуд Ψ и Ψ' . Рекомендуется использовать значение $\epsilon = 0,01$.

В случае неправильного ввода информации или переполнения массивов печатается диагностика, позволяющая понять суть ошибки.

Текст программы, контрольный вариант для счета и печать контрольного варианта находится в библиотеке программ отдела теории атомного ядра ЛТФ ОИЯИ.

Авторы выражают свою благодарность проф. В.Г.Соловьеву за постоянное внимание, а также А.И.Идовину и В.В.Воронову за полезные обсуждения и замечания, стимулировавшие модификацию и усовершенствование программы.

Литература

1. Соловьев В.Г. Теория сложных ядер. "Наука", М., 1971;
Соловьев В.Г. ЭЧАЯ, 1978, 9, стр. 580.
2. Soloviev V.G. et al. Nucl.Phys., 1977, A288, p. 376.
3. Pomomarev V.Yu. et al. Nucl.Phys., 1979, A323, p. 446;
Воронов В.В. и др. ЯФ, 1980, 31, стр. 327;
Воронов В.В. и др. ОИЯИ, P4-81-227, Дубна, 1981;
Е4-81-290, Дубна, 1981;
Soloviev V.G. et al. Nucl.Phys., 1978, A304, p. 503.
4. Стоянов Ч., Юдин И.П. ОИЯИ, P4-11076, Дубна, 1977.
5. Стоянов Ч., Чан Зуй Кхонг. ОИЯИ, P4-81-234, Дубна, 1981.
6. Бор О., Мотгельсон Б. Структура атомного ядра, т. I. "Мир", М., 1971.
7. Малов Л.А. ОИЯИ, P4-81-228, Дубна, 1981.
8. Гиззаткулов М.Х. и др. ОИЯИ, P11-10029, Дубна, 1976.
9. Ширикова Н.Ю. ОИЯИ, P5-3712, Дубна, 1968.

Рукопись поступила в издательский отдел
10 ноября 1981 года.