

83-811

12/III-84



**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

P4-83-811

1344/84

Л.А.Малов, В.О.Нестеренко, Н.Ю.Ширикова

**ВЫЧИСЛЕНИЕ
ОДНОЧАСТИЧНЫХ МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ
С ВОЛНОВЫМИ ФУНКЦИЯМИ
ДЕФОРМИРОВАННОГО ЯДРА
В ПОТЕНЦИАЛЕ САКСОНА-ВУДСА**

1983

ВВЕДЕНИЕ

В данной работе дается описание двух программ MATREL и MATRELNP, написанных на алгоритмическом языке фортран. Программы предназначены для вычисления матричных элементов различных операторов, включающих зависимость последних от орбитального момента, спина и изоспина и имеющих радиальную зависимость двух видов. Матричные элементы рассчитываются с использованием одночастичных волновых функций деформированного ядра в потенциале Саксона-Вудса. Приводятся основные расчетные формулы, краткое описание метода вычислений и входных данных к программам.

ОСНОВНЫЕ ФОРМУЛЫ РАСЧЕТОВ

В работе используются одночастичные волновые функции деформированного ядра, полученные при решении уравнения Шредингера с анизотропным потенциалом Саксона-Вудса методом, разработанным в /1-4/. Волновая функция деформированного ядра может быть представлена в виде

$$\langle i | = \Psi_{\Omega, \pi}^i = \sum_{n l j} a_{n l j}^{\Omega} \Psi_{n l j}^{\Omega} \quad /1/$$

Здесь $\Psi_{n l j}^{\Omega}$ - волновая функция уравнения Шредингера со сферически-симметричным потенциалом Саксона-Вудса, $a_{n l j}^{\Omega}$ - коэффициенты разложения. Функция имеет следующий вид:

$$\Psi_{n l j}^{\Omega} = R_{n l j}^{\Omega}(r) Y_{l j}^{\Omega} \quad /2/$$

где $Y_{l j}^{\Omega}$ - шаровой спинор:

$$Y_{l j}^{\Omega} = \sum_{\nu = \pm 1/2} (l \ 1/2 \ \Omega - \nu \ \nu | j \ \Omega) Y_{l \Omega - \nu} X_{1/2 \nu} \quad /3/$$

Вследствие аксиальной симметрии потенциала в /1/ входят члены с l , одинаковыми по четности. В соотношении /3/ и дальше использовано определение коэффициентов Клебша-Гордона, принятое в /5/. Радиальная часть волновой функции аппроксимируется выражением

$$R_{n l j}^{\Omega}(r) = \frac{N_n}{r} \left(\frac{a}{c}\right)^{1/2} H_n[S(r)] \exp(-S^2(r)/2) \quad /4/$$

$$S(r) = \begin{cases} b \ln(r/c), & r \leq a, \\ b_1 \ln(r/c), & r > a, \end{cases}$$

где $H_n(x)$ - полином Эрмита, N_n - константа нормировки, a, c, b, b_1 - параметры, характеризующие волновую функцию данного состояния.

Программы MATREL и MATRELNP позволяют вычислить матричные элементы с волновыми функциями /1/ от операторов следующего вида:

$$\hat{F}(\lambda\mu) = \hat{r}_j F_L(r) Y_{\lambda\mu}, \quad L = \lambda, \quad /5/$$

$$\hat{F}_s(L\lambda\mu) = \hat{r}_j \sqrt{\lambda(2\lambda+1)} F_L(r) (Y_L \hat{s})_{\lambda\mu} \quad /6/$$

$$\hat{F}_\ell(L\lambda\mu) = \hat{r}_j \sqrt{\lambda(2\lambda+1)} F_L(r) (Y_L \hat{\ell})_{\lambda\mu} \quad /7/$$

где $j = 1, 2, 3$,

$$(Y_L \hat{s})_{\lambda\mu} = \sum_m (L1m\mu-m|\lambda\mu) Y_{Lm} \hat{s}_{\mu-m}, \quad /8/$$

$$(Y_L \hat{\ell})_{\lambda\mu} = \sum_m (L1m\mu-m|\lambda\mu) Y_{Lm} \hat{\ell}_{\mu-m}. \quad /9/$$

Использованы два вида радиальной зависимости функции $F_L(r)$.

$$1. \text{ Мультипольные силы. } F_L(r) = r^{-L} \quad /10/$$

$$2. F_L(r) = \frac{dV(r)}{dr}, \quad /11/$$

где

$$V(r) = \frac{V_0^{n,p}}{1 + \exp(\alpha(r - R_0))} \quad /12/$$

центральная часть одночастичного сферически-симметричного потенциала Саксона-Вудса.

Для $\hat{r}_j = \hat{r}_3$ операторы /5/-/7/ не меняют изоспина, и, следовательно, вычисляются нейтрон-нейтронные или протон-протонные матричные элементы /между нейтронными или между протонными состояниями /1//. Для $\hat{r}_j = \hat{r}_1 = \hat{r}^+$ или $\hat{r}_j = \hat{r}_2 = \hat{r}^-$ вычисляются нейтрон-протонные или протон-нейтронные матричные элементы /между нейтронными и протонными состояниями /1//.

Приведем явный вид матричных элементов от операторов /5/-/7/ для $\hat{r}_j = \hat{r}_3$, предполагая для определенности, что $\Omega' \geq \Omega$ /в противном случае всегда можно сделать замену $i \leftrightarrow f$ /. Матричные элементы отличны от нуля при $\Omega' - \Omega = \mu$ или $\Omega' + \Omega = \mu$:

$$\langle f | \hat{\Gamma}(\lambda\mu) | i \rangle = \sum_{\substack{n\ell j \\ n'\ell' j'}} a_{n\ell j}^{\Omega} a_{n'\ell' j'}^{\Omega'} \langle R_{n'\ell' j'}(r) | F_\lambda(r) | R_{n\ell j}(r) \rangle \times \quad /13/$$

$$\times \langle Y_{\ell' j' \frac{1}{2}}^{\Omega'} | Y_{\lambda\mu} | Y_{\ell j \frac{1}{2}}^{\Omega} \rangle, \quad /14/$$

$$I_{n'\ell' j'}^{n\ell j}(\lambda) = \langle R_{n'\ell' j'}(r) | F_\lambda(r) | R_{n\ell j}(r) \rangle = \\ = N_n N_{n'} \left(\frac{a}{c}\right)_{n\ell j} \left(\frac{a}{c}\right)_{n'\ell' j'} \int_0^{R_m} H_n(S_{n\ell j}(r)) H_{n'}(S_{n'\ell' j'}(r)) \exp\left(-\frac{S_{n\ell j}^2(r) + S_{n'\ell' j'}^2(r)}{2}\right) \times \\ \times F_\lambda(r) dr.$$

При $\Omega' - \Omega = \mu$

$$\langle Y_{\ell' j' \frac{1}{2}}^{\Omega'} | Y_{\lambda\mu} | Y_{\ell j \frac{1}{2}}^{\Omega} \rangle = \quad /15/$$

$$= \sqrt{\frac{(2\lambda+1)(2\ell+1)(\ell\lambda 00 | \ell'0)}{4\pi(2\ell'+1)}} \sum_{\nu=\pm\frac{1}{2}} (\ell\lambda\Omega-\nu\mu | \ell'-\nu') (\ell' \frac{1}{2} \Omega' - \nu\nu | j' \Omega') \times \\ \times (\ell \frac{1}{2} \Omega - \nu\nu | j\Omega).$$

При $\Omega' + \Omega = \mu$ в выражении /15/ необходимо заменить Ω на $-\Omega$ и добавить фазовый множитель $(-1)^{j+\Omega-\ell}$.

$$\langle f | \hat{\Gamma}_s(L\lambda\mu) | i \rangle = \sqrt{\lambda(2\lambda+1)} \sum_{\substack{n\ell j \\ n'\ell' j'}} a_{n\ell j}^{\Omega} a_{n'\ell' j'}^{\Omega'} I_{n'\ell' j'}^{n\ell j}(L) \langle Y_{\ell' j' \frac{1}{2}}^{\Omega'} | (Y_L \hat{s}) | Y_{\ell j \frac{1}{2}}^{\Omega} \rangle. \quad /16/$$

Для $\Omega' - \Omega = \mu$

$$\langle Y_{\ell' j' \frac{1}{2}}^{\Omega'} | (Y_L \hat{s}) | Y_{\ell j \frac{1}{2}}^{\Omega} \rangle = -\sqrt{\frac{3}{16\pi}} \cdot \sqrt{\frac{(2\ell+1)(2L+1)}{2\ell'+1}} (\ell L 00 | \ell'0) \times$$

$$\times \sum_{\nu=\pm\frac{1}{2}} \sum_{\sigma=0, \pm 1} (\ell' \frac{1}{2} \Omega' - \nu - \sigma\nu + \sigma | j' \Omega') (\ell \frac{1}{2} \Omega - \nu\nu | j\Omega) (L1\mu - \sigma\sigma | \lambda\mu) \times \quad /17/$$

$$\times (1 \frac{1}{2} \sigma\nu | \frac{1}{2} \nu + \sigma) (\ell L \Omega - \nu\mu - \sigma | \ell' \Omega' - \nu - \sigma).$$

В случае $\Omega' + \Omega = \mu$ в /17/ необходимо заменить Ω на $-\Omega$ и добавить фазовый множитель $(-1)^{j+\Omega-\ell}$.

$$\langle f | \hat{\Gamma}_\ell(L\lambda\mu) | i \rangle = \sqrt{\lambda(2\lambda+1)} \sum_{\substack{n\ell j \\ n'\ell' j'}} a_{n\ell j}^{\Omega} a_{n'\ell' j'}^{\Omega'} I_{n'\ell' j'}^{n\ell j}(L) \langle Y_{\ell' j' \frac{1}{2}}^{\Omega'} | (Y_L \hat{\ell}) | Y_{\ell j \frac{1}{2}}^{\Omega} \rangle. \quad /18/$$

Для $\Omega' - \Omega = \mu$

$$\langle Y_{\ell' j' \mu'}^* | (Y_L \hat{r}) | Y_{\ell j \mu} \rangle = \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell'+1)\ell'(2L+1)}{4\pi(2\ell'+1)}} (\ell L 0 0 | \ell' 0) \times$$

$$\times \sum_{\nu=\pm\frac{1}{2}} \sum_{\sigma=0\pm 1} (\ell' \frac{1}{2} \Omega' - \nu \nu | j' \Omega') (\ell \frac{1}{2} \Omega - \nu \nu | j \Omega) (L 1 \mu - \sigma \sigma | \lambda \mu) \times$$

$$\times (\ell L \Omega - \nu \mu - \sigma | \ell' \Omega' - \nu - \sigma) (\ell' 1 \Omega' - \nu - \sigma \sigma | \ell' \Omega' - \nu).$$

В случае $\Omega' + \Omega = \mu$ в /19/ необходимо заменить Ω на $-\Omega$ и добавить фазовый множитель $(-1)^{j+\Omega-\ell}$. При вычислении матричных элементов, связанных с изменением изоспина, в выражениях /13/, /16/ и /18/ полагаем для определенности, что $\langle f |$ - одночастичные состояния нейтронной системы, а $| i \rangle$ - протонной системы, то есть вычисляем матричные элементы от операторов /5/-/7/ с $\hat{r}_j = \hat{r}_1$. Матричные элементы с $\hat{r}_j = \hat{r}_2$ получаются путем простой замены $i \rightarrow f$.

В случае $\lambda = 0$ в формулах /16/ и /18/ множитель $\sqrt{\lambda(2\lambda+1)}$ отсутствует.

МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЙ

Принимая во внимание, что волновая функция деформированного ядра представлена в виде суперпозиции по волновым функциям сферического ядра, количество которых ограничено, можно вместо /1/ волновую функцию представить в виде

$$\Psi_{\Omega, \pi} = \sum_i a_i^{\Omega} \Psi_{(n \ell j)_i}^{\Omega}$$

где $(n \ell j)_i$ - набор квантовых чисел n, ℓ, j , соответствующих i -той волновой функции сферического ядра. В этом случае в формулах /13/, /16/, /18/ производится только двукратное суммирование.

Введем матрицу $J(\lambda)$, элементы которой определяются по формуле

$$J_{ii'}(\lambda) = I_{(n' \ell' j')_i}^{(n \ell j)_i}(\lambda) (\ell_i \lambda 0 0 | \ell_i' 0)$$

и удовлетворяют следующим соотношениям:

$$J_{ii'}(\lambda) \neq 0, \quad |\ell_i - \lambda| \leq \ell_i' \leq \ell_i + \lambda, \quad (-1)^{\ell_i + \ell_i'} = (-1)^{\lambda}.$$

Таким образом, для вычисления матричных элементов сначала вычисляется матрица $J(\lambda) / \lambda = \lambda$ для /13/ и $\lambda = L$ для /16/, /18//.

В дальнейшем при вычислении матричных элементов по формулам /13/, /16/, /18/ при суммировании учитываются только те индексы i, i' , для которых a_i^{Ω} , $a_{i'}^{\Omega'}$, $J_{ii'}(\lambda)$ отличны от нуля. Для этих индексов и заданных значений Ω и Ω' в матрице запоминаются величины, вычисленные по формулам /15/, /17/, /19/ без коэффициента $(\ell \lambda 0 0 | \ell' 0)$ для /15/ и $(\ell L 0 0 | \ell' 0)$ для /17/ и /19/, где $\ell = \ell_i$, $j = j_i$, $\ell' = \ell_i'$, $j' = j_i'$. Если последующие вычисляемые матричные элементы имеют те же значения Ω и Ω' , то при их счете используются уже сосчитанные по формулам /15/, /17/, /19/ величины. И только при смене значений Ω, Ω' производится пересчет этих величин.

ВХОДНАЯ ИНФОРМАЦИЯ К ПРОГРАММАМ

Для программ MATREL и MATRELNP предполагается, что одночастичные волновые функции деформированного ядра в потенциале Саксона-Вудса были рассчитаны по программе CALDNU/4/ и записаны либо на ленте, либо на диске зонами так, что в двух соседних зонах находятся волновые функции обеих четностей.

Вводимая информация одного варианта состоит из

ZONE,
CWS, β_0 , E_{\min} , E_{\max} , ρ_{\min} , ρ_{\max} ,
ZONEWR,
 $(L\lambda\mu)_1, (L\lambda\mu)_2, \dots,$
1000,

цифра 1000 является признаком конца наборов $(L\lambda\mu)$. Вариантов может быть несколько. Признаком конца вариантов является ZONE=1000.

ZONE

- Целое число, задающее номер зоны /для программы MATREL/ на ленте с волновыми функциями. Начиная с этого номера будут прочитаны две зоны, в которых должны находиться волновые функции двух четностей.

Для программы MATRELNP

ZONE = ZONE1 * 1000 + ZONE2.

ZONE1 - номер зоны, начиная с которого будут прочитаны две зоны, в которых должны находиться волновые функции двух четностей. ZONE2 - номер другой зоны, начиная с которой будут прочитаны еще две зоны, где должны находиться волновые функции двух четностей. Программа MATRELNP по информации, поступающей из ZONE1 и ZONE2, определяет типы волновых функций /нейтронная или протонная/ и вычисляет матричные элементы между состояниями этих зон.

- CWS - Вещественное число, задающее константу нормировки матричных элементов и определяющее режим счета. Матричные элементы будут нормированы на $|CWS|^{\lambda}$. Если $CWS > 0$, то вычисляются матричные элементы с радиальной зависимостью $/10/$, в противном случае используется зависимость $/11/$.
- β_0 - Вещественная константа, которая в счете не используется, но записывается в информацию счета.
- E_{min}, E_{max} - Вещественные числа, задающие энергетический диапазон отбираемых для счета волновых функций.
- ρ_{min}, ρ_{max} - Целые числа, задающие диапазон отбора волновых функций по асимптотическим квантовым числам.
- ZONEWR - Целое число, задающее номер зоны, начиная с которой будут записываться посчитанные матричные элементы. Этот начальный номер программой берется только из информации первого варианта.
- L_{μ} - Целое число, задающее значение мультипольностей и определяющее режим счета. Если $L_{\mu} > 0$, то будут вычислены мультиполь-мультипольные матричные элементы. Если $L_{\mu} < 0$, то будут вычислены спин-мультипольные матричные элементы.

Краткая характеристика программ

Язык: фортран IV.

ЭВМ: CDC 6500, операционная система NOS/VE.

Потребности памяти: 66375 /MATREL/, 73121 /MATRELNP/.

Количество используемых магнитных лент: 2.

Используемые периферийные устройства: читающее и печатающее устройство.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kalinkin B.N., Grabovski Ya., Gareev F.A. Acta Phys.Pol., 1966, 30, p. 999.
2. Гареев Ф.А. и др. ЭЧАЯ, 1973, 4, вып.2, с. 357; Gareev F.A. et al. Nucl.Phys., 1971, A171, p. 194.
3. Гареев Ф.А., Иванова С.П., Калинин Б.Н. Изв. АН СССР, сер.физ., 1968, 32, с. 1690.
4. Иванова С.П., Ширикова Н.Ю. ОИЯИ, Р4-9081, Дубна, 1975.
5. Давыдов А.С. Теория атомного ядра. Физматгиз, М., 1958.

Рукопись поступила в издательский отдел
2 декабря 1983 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

- | | | |
|---------------|---|-------------|
| | Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/ | 7 р. 40 к. |
| | Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/ | 8 р. 00 к. |
| D11-80-13 | Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979 | 3 р. 50 к. |
| D4-80-271 | Труды Международной конференции по проблемам нескольких тел в ядерной физике. Дубна, 1979. | 3 р. 00 к. |
| D4-80-385 | Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1980. | 5 р. 00 к. |
| D2-81-543 | Труды VI Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1981 | 2 р. 50 к. |
| D10,11-81-622 | Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980 | 2 р. 50 к. |
| D1,2-81-728 | Труды VI Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1981. | 3 р. 60 к. |
| D17-81-758 | Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981. | 5 р. 40 к. |
| D1,2-82-27 | Труды Международного симпозиума по поляризационным явлениям в физике высоких энергий. Дубна, 1981. | 3 р. 20 к. |
| P18-82-117 | Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981. | 3 р. 80 к. |
| D2-82-568 | Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982. | 1 р. 75 к. |
| D9-82-664 | Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982. | 3 р. 30 к. |
| D3,4-82-704 | Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982. | 5 р. 00 к. |
| D2,4-83-179 | Труды XV Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Дубна, 1982. | 4 р. 80 к. |
| | Труды УШ Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Протвино, 1982 /2 тома/ | 11 р. 40 к. |
| D11-83-511 | Труды совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1982. | 2 р. 50 к. |
| D7-83-644 | Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983. | 6 р. 55 к. |
| D2,13-83-689 | Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983. | 2 р. 00 к. |

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

**ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ
ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ**

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты
17.	Теория конденсированного состояния
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники
19.	Биофизика

P4-83-811

Малов Л.А., Нестеренко В.О., Ширикова Н.Ю.
 Вычисление одночастичных матричных элементов с волновыми функциями деформированного ядра в потенциале Саксона-Вудса

Дается описание программы MATREL и MATRELNP, предназначенных для вычисления одночастичных матричных элементов с волновыми функциями деформированного ядра в потенциале Саксона-Вудса. Используются три вида одночастичных операторов: $\hat{F}(L\mu) = \hat{r}_j F_L(r) Y_{L\mu}$, $\hat{F}_s(L\mu) = \hat{r}_j \sqrt{\lambda(2\lambda+1)} F_L(r) (Y_L \hat{s})_{\lambda\mu}$ и $\hat{F}_l(L\mu) = -\hat{r}_j \sqrt{\lambda(2\lambda+1)} F_L(r) (Y_L \hat{l})_{\lambda\mu}$, зависящих от операторов спина \hat{s} , орбитального момента \hat{l} и изоспина \hat{r} . Радиальная зависимость $F_L(r)$ задается в виде r^L или в виде производной от центральной части сферически-симметричного потенциала Саксона-Вудса.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

P4-83-811

Malov L.A., Nesterenko V.O., Shirikova N.Yu.
 Calculation of Single Particle Matrix Elements with Wave Functions of a Deformed Nucleus in the Saxon-Woods Potential

MATREL and MATRELNP programs are described intended for the calculation of single particle matrix elements with the wave functions of a deformed nucleus in the Saxon-Woods potential. Three types of single particle operators with the dependence on spin operators \hat{s} , orbital moment operator \hat{l} and isospin operators \hat{r} are used $\hat{F}(L\mu) = \hat{r}_j F_L(r) Y_{L\mu}$, $\hat{F}_s(L\mu) = \hat{r}_j \sqrt{\lambda(2\lambda+1)} \times F_L(r) (Y_L \hat{s})_{\lambda\mu}$ and $\hat{F}_l(L\mu) = -\hat{r}_j \sqrt{\lambda(2\lambda+1)} F_L(r) (Y_L \hat{l})_{\lambda\mu}$. Radial dependence $F_L(r)$ is in the form of r^L or of a derivative of the central part of the spherically-symmetric Saxon-Woods potential.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1983

Перевод О.С.Виноградовой