

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



9081

ЭКЗ. ЦИТ. ЗАП. - 9081

С.П.Иванова, Н.Ю.Ширикова

ВЫЧИСЛЕНИЕ ОДНОЧАСТИЧНЫХ СОСТОЯНИЙ
ДЕФОРМИРОВАННЫХ ЯДЕР
В ПОТЕНЦИАЛЕ САКСОНА-ВУДСА
(ПРОГРАММА НА ФОРТРАНЕ)

1975

P4 - 9081

С.П.Иванова, Н.Ю.Ширикова

ВЫЧИСЛЕНИЕ ОДНОЧАСТИЧНЫХ СОСТОЯНИЙ
ДЕФОРМИРОВАННЫХ ЯДЕР
В ПОТЕНЦИАЛЕ САКСОНА-ВУДСА
(ПРОГРАММА НА ФОРТРАНЕ)

ОИЯИ
ЗИБЛИОТЕКА

Введение.

В данной работе дается описание двух программ CALDNU и OUT, написанных на алгоритмическом языке Фортран-Церн, для вычисления одночастичных уровней и волновых функций деформированных ядер в потенциале Саксона-Вудса (CALDNU) и печати результатов в виде таблиц (OUT). Приводятся краткое описание метода вычислений, основные расчетные формулы, общие схемы работы программ и составление колоды перфокарт для практического использования.

Метод вычислений и основные формулы расчета.

В работе используется приближенный метод решения уравнения Шредингера, разработанный в [1,2,7]. Ниже приводится его краткое изложение.

Одночастичные энергии E и волновые функции $\Psi(\vec{r})$ являются решением уравнения Шредингера :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) - E \right) \Psi(\vec{r}) = 0, \quad (I)$$

где $V(\vec{r})$ - потенциал среднего поля.

Для деформированных ядер в [2] было сделано предположение, что средний радиус ядра зависит от параметров деформации β_{20} , β_{40} и угла θ относительно оси симметрии ядра:

$$R(\beta_{\nu 0}, \theta) = R_0 \left(1 + \beta_0 + \frac{\beta_{20} P_2(x)}{\sqrt{2\pi}} + \frac{\beta_{40} P_4(x)}{\sqrt{2\pi}} \right), \quad (2)$$

где $x = \cos \theta$,

R_0 - радиус равновеликого сферического ядра $R_0 = r_0 A^{1/3}$,

β_0 - постоянная, введенная для сохранения объема ядра [2],

β_{20} - параметр квадрупольной деформации,

β_{40} - параметр гексадекапольной деформации,

$P_n(x)$ - нормированный полином Лежандра.

В качестве потенциала среднего поля был выбран потенциал:

$$V(\beta_{\nu 0}, \vec{r}) = -V_0 (1 + \exp((r - R(\beta_{\nu 0}, \theta))\alpha))^{-1} + V_{\text{в.о.}}(\vec{r}), \quad (3)$$

а для протонной системы следует добавить кулоновское взаимодействие:

$$V_c(r) = \frac{2(z-1)e^2}{4\pi R_0^3} \int \frac{n(\vec{r}') d\vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, \quad (4)$$

где $n(\vec{r}') = (1 + \exp((r' - R(\beta_{\nu 0}, \theta'))\alpha))^{-1}$ - плотность распределения заряда в ядре.

Проведем в уравнении (I) тождественное преобразование для выделения сферически-симметричной части потенциала и в результате получим:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(0, r) + \tilde{V}(\beta_{\nu 0}, \vec{r}) - \epsilon \right) \Psi(\vec{r}) = 0, \quad (5)$$

где $\tilde{V}(\beta_{\nu 0}, \vec{r}) = V(\beta_{\nu 0}, \vec{r}) - V(0, r).$ (6)

Будем искать решение уравнения (5) в виде

$$\Psi(\beta_{\nu 0}, \vec{r}) = \sum_{nlj} a_{nlj}^{\Omega} \Psi_{nlj}^{\Omega}(\vec{r}), \quad (7)$$

где $\Psi_{nlj}^{\Omega}(\vec{r})$ являются решениями уравнения Шредингера (I) со сферически-симметричным потенциалом $V(0, r)$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(0, r) - \epsilon_{nlj} \right) \Psi_{nlj}^{\Omega}(\vec{r}) = 0. \quad (8)$$

В разложение (7) входят члены с 1, одинаковыми по четности. Метод решения (8) изложен в [1, 3]. Подставляя (7) в (5), умножая на $(\Psi_{nlj}^{\Omega})^*$ и интегрируя, получаем систему уравнений:

$$(\epsilon_{nlj} - \epsilon) a_{nlj}^{\Omega} + \sum_{n'l'j'} a_{n'l'j'}^{\Omega} \langle \Psi_{n'l'j'}^{\Omega} | \tilde{V}(\beta_{\nu 0}, \vec{r}) | \Psi_{nlj}^{\Omega} \rangle = 0. \quad (9)$$

Решая систему (9), находим одночастичные энергии ϵ и волновые функции (коэффициенты a_{nlj}^{Ω} разложения (7)). Ниже выпишем расчетную формулу для вычисления $\langle \Psi_{n'l'j'}^{\Omega} | \tilde{V} | \Psi_{nlj}^{\Omega} \rangle$ в (9). Разлагая $\tilde{n}(\vec{r}) = n(\vec{r}) - n_0(r)$, где $n_0(r) = (1 + \exp((r - R_0)\alpha))^{-1}$, по полиномам Лежандра, можно записать:

$$\tilde{n}(\vec{r}) = \sum_{\lambda=0}^m C_{2\lambda}(\beta_{\nu 0}, r) P_{2\lambda}(\cos \theta), \quad (10)$$

где $C_{2\lambda}(\beta_{\nu 0}, r) = 2\sqrt{2\pi} \int_0^1 \tilde{n}(\vec{r}') P_{2\lambda}(x) dx$.

Тогда

$$\tilde{V}(\beta_{\nu 0}, \vec{r}) = -V_0 \sum_{\lambda=0}^m C_{2\lambda}(\beta_{\nu 0}, r) P_{2\lambda}(\cos \theta) + \sum_{\lambda=0}^m D_{2\lambda}(\beta_{\nu 0}, r) P_{2\lambda}(\cos \theta) + \tilde{V}_{\text{в.о.}}, \quad (11)$$

где

$$D_{\lambda}(\beta_{\nu 0}, r) = \frac{2(z-1)k}{R_0^3(2\lambda+1)} \left\{ \int_0^r C_{\lambda}(r') r' \left(\frac{r'}{R_0}\right)^{\lambda+1} dr' + \int_r^{2R_0} C_{\lambda}(r') r' \left(\frac{r'}{R_0}\right)^{\lambda} dr' \right\}.$$

Вторая сумма в (II) учитывает кулоновское взаимодействие для протонной системы.

Учитывая, что $\Psi_{nlj}^{\Omega}(\vec{r}) = R_{nlj}^{\Omega}(r) Y_{lj}^{\Omega}$, где $R_{nlj}^{\Omega}(r)$ - радиальная часть, а Y_{lj}^{Ω} - шаровой спинор /1,2/,

$$\langle \Psi_{nlj}^{\Omega} | \hat{V} | \Psi_{n'l'j'}^{\Omega} \rangle =$$

$$= \sum_{\lambda=0}^{\infty} \langle R_{nlj}(r) | -V_0 C_{2\lambda}(r) + D_{2\lambda}(r) + b_{lj} V_0 \frac{\partial}{\partial r} C_{2\lambda}(r) | R_{n'l'j'}(r) \rangle P(1, j, l', j', \Omega, 2\lambda)$$

$$- \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \langle R_{nlj}(r) | -V_0 \frac{\partial}{\partial r} C_2(r) | R_{n'l'j'}(r) \rangle W_2^0(1, j, l', j', \Omega) \quad (12)$$

$$+ \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \langle R_{nlj}(r) | -V_0 \frac{\partial}{\partial r} C_2(r) | R_{n'l'j'}(r) \rangle W_3^0(1, j, l', j', \Omega),$$

где

$$b_{lj} = \begin{cases} -(l+1), & \text{если } j=l-1/2 \\ 1, & \text{если } j=l+1/2. \end{cases}$$

Множители P , W_2^0 , W_3^0 в (12) выражаются через коэффициенты Клебша-Гордона /4/.

$$P(1, j, l, j', \Omega, \lambda) = \sqrt{\frac{(2\lambda+1)(2l+1)}{4\pi(2l+1)}} (1' \lambda 0 0 | 1 0).$$

$$\sum_{\nu=\pm 1/2} (1' \lambda \Omega - \nu 0 | 1 \Omega - \nu) (1 \frac{1}{2} \Omega - \nu \nu | j \Omega) (1' \frac{1}{2} \Omega - \nu \nu | j' \Omega)$$

$$W_2^0(1, j, l, j', \Omega) = Y_1 \cdot W_1 \sqrt{\frac{3}{8}} (-\sqrt{(1+\Omega+\frac{1}{2})(1-\Omega+\frac{1}{2})})_{ck1} - \sqrt{(1-\Omega+\frac{3}{2})(1+\Omega-\frac{1}{2})}_{ck3}$$

$$+ Y_1 \cdot W_2 \sqrt{\frac{3}{2}} (\Omega + \frac{1}{2})_{ck1} + Y_2 \cdot W_1 (\Omega - \frac{1}{2})_{ck2} \sqrt{\frac{3}{2}}$$

$$+ Y_2 \cdot W_2 \sqrt{\frac{3}{8}} (\sqrt{(1+\Omega+\frac{3}{2})(1-\Omega-\frac{1}{2})})_{ck4} + \sqrt{(1-\Omega+\frac{1}{2})(1+\Omega+\frac{1}{2})}_{ck2}$$

$$W_3^0(1, j, l, j', \Omega) = -\sqrt{\frac{3}{2}} Y_1 \cdot W_2 \cdot ck1 + \sqrt{\frac{3}{2}} Y_2 \cdot W_1 \cdot ck2,$$

где

$$Y_1 = (1 \frac{1}{2} \Omega - \frac{1}{2} \frac{1}{2} | j \Omega), \quad Y_2 = (1 \frac{1}{2} \Omega + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} | j \Omega)$$

$$W_1 = (1' \frac{1}{2} \Omega - \frac{1}{2} \frac{1}{2} | j' \Omega), \quad W_2 = (1' \frac{1}{2} \Omega + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} | j' \Omega)$$

$$ck1 = 2(2 \ 1' 0 0 | 1 0)(1 \ 2 \ \Omega - \frac{1}{2} \ 1 \ | 1' \ \Omega + \frac{1}{2})$$

$$ck2 = -2(2 \ 1' 0 0 | 1 0)(1 \ 2 \ \Omega + \frac{1}{2} - 1 \ | 1' \ \Omega - \frac{1}{2})$$

$$ck3 = -2(2 \ 1' 0 0 | 1 0)(1 \ 2 \ \Omega - \frac{1}{2} - 1 \ | 1' \ \Omega - \frac{3}{2})$$

$$ck4 = -2(2 \ 1' 0 0 | 1 0)(1 \ 2 \ \Omega + \frac{1}{2} - 1 \ | 1' \ \Omega + \frac{3}{2}).$$

Таким образом, для вычисления $\langle \Psi_{nlj}^{\Omega} | \hat{V} | \Psi_{n'l'j'}^{\Omega} \rangle$ по формуле (12) нужно сосчитать $(m+3)$ интеграла, а для получения коэффициентов системы (9) потребуется вычислить $N^2(m+3)$ интегралов, где N - порядок системы (число членов разложения в (7)).

Общая схема работы программы CALDNU .

Для вычисления нейтронной или протонной схемы уровней задаются параметры ядра (A, z) и потенциала ($r_0, V_0, \alpha, \lambda$) и либо информация о волновых функциях сферического ядра, либо интервалы значений n, l, j , для которых волновые функции $\Psi_{nlj}^{\Omega}(\vec{r})$ должны быть рассчитаны. При заданных значениях β_{20}, β_{40} (параметры деформации) можно вычислить β_0 (для сохранения объема ядра) как корень уравнения /2/:

$$\int_0^{2R_0} C_0(\beta_0, r) r^2 dr = 0.$$

Это уравнение решается методом деления пополам отрезка $(0, 2\beta_0^0)$, где $\beta_0^0 = -\frac{1}{4\pi}(\beta_{20}^2 + \beta_{40}^2)$ - начальное приближение β_0 . По желанию пользователя можно положить $\beta_0 = 0$. Затем вычисляются таблицы коэффициентов $C_{\lambda}(\beta_0, r)$ на отрезке $(0, 2R_0)$ с шагом $\frac{2R_0}{99}$ и таблицы $D_{\lambda}(\beta_0, r)$ (для протонной системы) на отрезке $(.1, 2R_0)$ с шагом $\frac{2R_0}{99}$ для $\lambda=0, 2, \dots, 2m$. Вычисления $C_{\lambda}(\beta_0, r)$ и $D_{\lambda}(\beta_0, r)$ проводятся по формулам (10), (11) с использованием подпрограммы SIMPS /5/ с заданной относительной точностью. Эти таблицы использовались в дальнейшем для вычисления коэффициентов системы (9). По желанию пользователя программа может вычислить ква-

друпольный момент протонной системы :

$$Q_2 = \frac{2z}{B} \sqrt{\frac{4\pi}{5}} \int_0^{2R_0} r^4 C_2(r) dr$$

и гексадекапольный момент

$$Q_4 = \frac{2z}{B} \sqrt{\frac{4\pi}{5}} \int_0^{2R_0} r^6 C_4(r) dr ,$$

где $B = \frac{4\pi}{3} R_0^3 (1 + (\frac{\pi}{\alpha R_0})^2)$.

До вычисления коэффициентов системы в окончательном виде рассчитывались $N^2(m+1)$ интегралов $\langle R_{nlj}(r) | -V_0 C_{2\lambda}(r) + D_{2\lambda}(r) + b_{1j} V_0 \frac{dC_{2\lambda}}{dr} | R_{n'l'j'}(r) \rangle$ и записывались на ленту, а затем вычислялись $2N^2$ интегралов $-\sqrt{\frac{5}{4\pi}} \langle R_{nlj}(r) | -V_0 \frac{\alpha}{F^2} C_2(r) | R_{n'l'j'} \rangle, \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \langle R_{nlj}(r) | -V_0 \frac{\alpha}{F} C_2(r) | R_{n'l'j'}(r) \rangle$ и тоже записывались на ленту (N - количество членов разложения в (7)).

Вычисление интегралов производилось групповым образом по формуле Симпсона с заданным числом узлов интегрирования на отрезке $(.1, 2R_0)$. Требуемые значения функций $C_\lambda(r), D_\lambda(r)$ находились при помощи квадратичной интерполяции по сосчитанным таблицам. $C_{2\lambda}^0(r)$ находились численно.

Далее для каждого значения Ω , принимающего значения от $j_{\min}, j_{\min}+1, \dots, j_{\max}$, где

$$j_{\min} = \min_{1 \leq i \leq N} j_i, \quad j_{\max} = \max_{1 \leq i \leq N} j_i$$

вычисленные интегралы считывались с ленты и домножались на коэффициенты P, W_2^0, W_3^0 . Из полученной матрицы вычеркивались строки и столбцы, диагональный элемент которых был по модулю меньше заданной точности, и затем применялся метод /6/ нахождения собственных значений и векторов. Полученным состояниям приписывались асимптотические квантовые числа (одним из двух способов). По желанию пользователя результаты печатаются и записываются на магнитную ленту. Пользователю дается возможность записать энергии уровней для заданных β_{20} ,

β_{40} на отдельную магнитную ленту.

Для значения $\Omega = \frac{1}{2}$ вычисляется величина параметра развязывания

$$a = - \sum_{nlj} (-1)^{j+1/2} (j + \frac{1}{2}) (a_{nlj}^\Omega)^2.$$

Затем программа вводит следующий набор значений β_{20}, β_{40} и снова выполняет счет.

Запись результатов счета CALDNU на магнитные ленты.

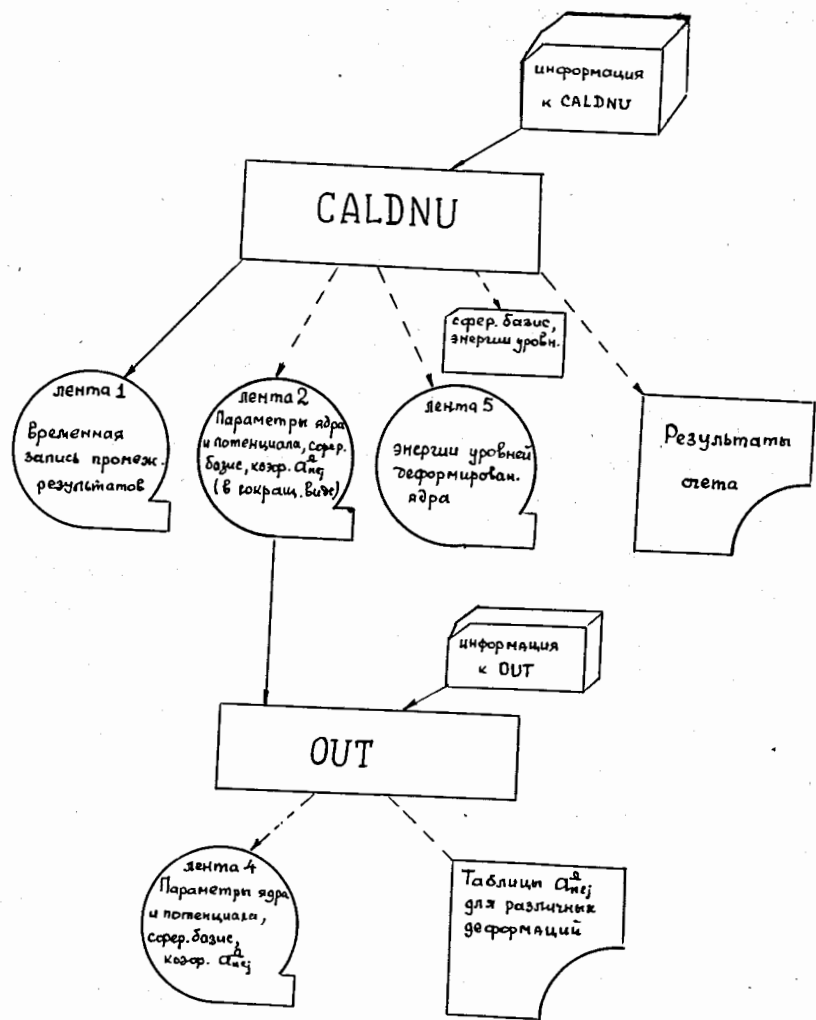
Программа CALDNU, предназначенная для вычисления одночастичных уровней и волновых функций деформированных ядер в потенциале Саксона-Вудса, может по желанию пользователя записать результаты счета на магнитные ленты (см. рис.1). Всего CALDNU может использовать три ленты (№ 1,2,5). Лента 1 используется для временной записи промежуточных результатов (на CDC - 6200 вместо ленты используется диск). Две другие ленты потребуются, если пользователь намерен сохранить результаты счета. На ленту 2 можно записать волновые функции сферического ядра (базис), коэффициенты a_{nlj}^Ω (7) волновых функций деформированного ядра. Зона ленты 2 содержит (все записано в вещественном виде):

$A, z, r_0, V_0, \alpha, \beta_{20}, \beta_{40}, M, N, \text{КОМ}, \text{КЕН}, \text{KWRT}, N.9$ параметров базиса, N параметров развязывания, КОМ массивов для каждого Ω : Ω, I (количество уровней), I энергий уровней, I асимптотических квантовых чисел, I соответствующих номеров функций базиса (по которым было разложение), $I+1$ коэффициентов a_{nlj}^Ω ,

где КОМ - количество Ω ,

КЕН - количество уровней,

M - количество всех записанных чисел в зоне.



Выдача по желанию пользователя.

Рис.1. Вводимая и выводимая информации программ CALDNU и OUT.

Информация с ленты 2 может быть использована в программе OUT. Последняя зона на ленте 2 содержит 16 чисел, первые два из которых нули. Эта зона служит признаком конца информации на ленте 2. (Если результаты ленты 2 не хранятся, то вместо ленты 2 запись следует производить на диск (на CDC-6200)) На ленту 5 с указанной первой свободной зоны можно записать энергии уровней деформированного ядра для различных вариантов. Зона на ленте 5 будет содержать:

$KEN, A, z, r_0, V_0, \alpha, \beta_1, \beta_2$, все энергии, где KEN - количество уровней для всех значений Ω .

Приписывание асимптотических квантовых чисел.

В программе CALDNU уровням энергий деформированного ядра приписываются асимптотические квантовые числа двумя способами.

1 способ.

Для каждого значения приписывание начинается с нижайшего по энергии состояния. Вычисляется

$$N_{\min} = \text{integer}(\Omega + \frac{1}{2}(-1)^i + \Omega + 1/2)$$

и N принимает значения $N_{\min}, N_{\min}+2, \dots$. Для каждого значения N nz принимает значение $0, 1, 2, \dots, N-\Omega+\frac{1}{2}$. Тогда приписываемое асимптотическое квантовое число вычисляется по формуле:

$$p = \begin{cases} \text{integer}(110 \cdot N - 10nz - 9(\Omega - \frac{1}{2})) & , \text{ если } N \leq 9 \\ \text{integer}(10100N - 100nz - 99(\Omega - \frac{1}{2})) & , \text{ если } N \geq 10 \end{cases}$$

2 способ.

Вычисленное выше число p является либо трехзначным десятичным числом, либо шестизначным десятичным числом. Для $N \leq 9$ $p = \sum_{i=1}^3 p_i \cdot 10^{i-1}$. В этом случае приписывается асимптотическое квантовое число, вычисляемое по формуле:

$$\rho' = \begin{cases} \rho, & |p_3 - p_2| \text{ и } p_1 \text{ одной четности.} \\ \rho+1, & |p_3 - p_2| \text{ и } p_1 \text{ разной четности.} \end{cases}$$

Для $n \geq 10$ $\rho = \sum_{i=1}^6 \rho_i 10^{i-1}$. В этом случае приписывается асимптотическое квантовое число, вычисляемое по формуле :

$$\rho' = \begin{cases} \rho, & \text{если } |p_6 p_5 - p_4 p_3| \text{ и } p_2 p_1 \text{ одной четности.} \\ \rho+1, & \text{если } |p_6 p_5 - p_4 p_3| \text{ и } p_2 p_1 \text{ разной четности.} \end{cases}$$

Список подпрограмм, используемых в CALDNU .

Программа CALDNU содержит 37 подпрограмм :

- ✓ SUBROUTINE SPHERE Вычисляет волновую функцию сферического ядра для заданных n, l, j .
- ✓ FUNCTION INE Используется для отыскания ϵ_{nlj} .
- FUNCTION FINDA Используется для отыскания параметра a радиальной части волновой функции сферического ядра.
- FUNCTION POSS Используется для отыскания $S_3 = S(r_2 + k_2)$.
- FUNCTION NEGS Используется для отыскания $S_1 = S(r_1 + k_1)$ и $S_2 = S(a+1)$.
- ✓ FUNCTION NORM Используется для вычисления N_{nlj} .
- ✓ SUBROUTINE BISECE Используется для отыскания ϵ_{nlj} .
- ✓ SUBROUTINE BISEC Используется для отыскания r_1, r_2, a, S_1, S_3 .
- ✓ FUNCTION V Вычисляет потенциал $V(0, r)$.
- FUNCTION DV Вычисляет производную $V'(0, r)$.
- FUNCTION P Используется для отыскания r_1, r_2 .
- ✓ FUNCTION FUNCT Используется для вычисления ϵ_{nlj}, S_1, S_3 .
- ✓ SUBROUTINE SIMPS Используется для вычисления интеграла.
- ✓ SUBROUTINE INTER Подпрограмма параболического интерполирования

- ✓ SUBROUTINE GROUP1 Используется для группового вычисления интегралов (I2).
- ✓ FUNCTION CLEBSH Вычисляет коэффициент Клебша-Гордона.
- ✓ SUBROUTINE RXD Используется для вычисления rR_{nlj} и R'_{nlj} .
- FUNCTION CLO Вычисляет $C_1(r)$.
- FUNCTION YLO Используется для вычисления $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} P_1^0(x)$.
- FUNCTION R1 Вычисляет $R(\beta_{vo}, \theta)$.
- FUNCTION TIN Используется для вычисления $\tilde{n}(r, x)$.
- FUNCTION UNCL0 Используется для вычисления $C_1(r)$.
- ✓ FUNCTION PNO Вычисляет $P_1^0(x)$ для $l=0, 2, 4, 6$.
- ✓ FUNCTION UNDL01 Используется для вычисления $D_1(r)$.
- ✓ FUNCTION UNDL02 Используется для вычисления $D_1(r)$.
- ✓ FUNCTION HN Вычисляет $H_N(S)$.
- ✓ FUNCTION DLO Вычисляет $D_1(r)$.
- ✓ FUNCTION XINLJ Вычисляет $rR_{nlj}(r)$.
- SUBROUTINE EBERLN Используется для нахождения собственных значений и собственных векторов матрицы.
- ✓ SUBROUTINE CLEBNA Используется для вычисления коэффициентов Клебша-Гордона вида $(1 \frac{1}{2} \Omega \pm \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} | j \Omega)$.
- ✓ SUBROUTINE SIMP2 Это дубль подпрограммы SIMPS. Используется для вычисления двойных интегралов.
- ✓ SUBROUTINE UNGRO Используется для вычисления (I2).
- ✓ SUBROUTINE UNGRS Используется для вычисления (I2).
- ✓ FUNCTION UNBE Используется для нахождения β_0 .
- FUNCTION CALBO Используется для нахождения β_0 .
- ✓ FUNCTION UNQ4 Используется для вычисления Q_4 .

функций, заданных таблично. Используется для нахождения $C_\lambda(r), D_\lambda(r)$.

Используется для группового вычисления интегралов (I2).

Вычисляет коэффициент Клебша-Гордона.

Используется для вычисления rR_{nlj} и R'_{nlj} .

Вычисляет $C_1(r)$.

Используется для вычисления $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} P_1^0(x)$.

Вычисляет $R(\beta_{vo}, \theta)$.

Используется для вычисления $\tilde{n}(r, x)$.

Используется для вычисления $C_1(r)$.

Вычисляет $P_1^0(x)$ для $l=0, 2, 4, 6$.

Используется для вычисления $D_1(r)$.

Используется для вычисления $D_1(r)$.

Вычисляет $H_N(S)$.

Вычисляет $D_1(r)$.

Вычисляет $rR_{nlj}(r)$.

Используется для нахождения собственных значений и собственных векторов матрицы.

Используется для вычисления коэффициентов Клебша-Гордона вида $(1 \frac{1}{2} \Omega \pm \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} | j \Omega)$.

Это дубль подпрограммы SIMPS. Используется для вычисления двойных интегралов.

Используется для вычисления (I2).

Используется для вычисления (I2).

Используется для нахождения β_0 .

Используется для нахождения β_0 .

Используется для вычисления Q_4 .

✓ FUNCTION UNQ2 Используется для вычисления q_2 .

Общая схема работы программы OUT .

Программа OUT просматривает ленту 2, на которой записаны коэффициенты разложения a_{nlj}^{α} различных ядер с различными параметрами потенциала и деформаций, и по заданному формату листа печати печатает таблицы коэффициентов для различных наборов β_{20}, β_{40} , но с одинаковыми параметрами ядра и потенциала. Она также может записать коэффициенты разложения на другую ленту (сделать перепись с ленты 2 в определенном ниже виде на новую ленту, начиная с заданной зоны). Зона на этой новой ленте (для CDC -6200 номер ленты - 4) будет содержать :

$M1, A, z, r_0, V_0, \alpha, \beta_{20}, \beta_{40}, KEN, KOM, N, N+9$ параметров базиса, N параметров развязывания, далее для каждого состояния: асимптотическое квантовое число, энергия уровня, N компонент волновой функции и т.д. ,

где $M1$ - целое число, задающее количество всех записанных в зоне в вещественном виде чисел,

KEN - количество уровней,

KOM - количество различных значений Ω .

Если $N(KWRITE)$ превышало число состояний базиса, используемых в CALDNU , то параметры дополнительных состояний базиса (и соответственно коэффициенты a_{nlj}^{α} по ним) полагаются равными нулю.

Список подпрограмм, используемых в OUT .

✓ SUBROUTINE MALOV Записывает на ленту NTAPE базис и компоненты a_{nlj}^{α} .

✓ SUBROUTINE CARRY Используется для подготовки страницы на печать.

Задание информации к CALDNU и OUT .

Программы CALDNU и OUT можно объединить в одну программу MAIN , тогда они должны быть оформлены как оверлеи(сегменты) первого уровня. Ниже приводится описание данных для программы MAIN .
1 карта пакета - I, J по формату (2I3) - режимы работы CALDNU и OUT.

Если задано 000000, то счет по CALDNU и OUT.

Если задано 001000, то счет по OUT.

Если задано 000001, то счет по CALDNU.

Следующая информация зависит от режимов работы. Если будет работать программа CALDNU , то подкладывается её информация, которая делится на общую информацию и информацию вариантов. Общая информация состоит из 15 карт (точности CALDNU и номер начальной зоны записи на ленте 5).

2 - 15 карты - Точности CALDNU . Каждая величина пробивается на отдельной карте по формату (E20.I0).

Задаются :

ALAM - $\frac{2m}{\hbar^2}$
EPS1 - ϵ_1 - абсолютная точность нахождения r_1, r_2 (в SPHERE) .
EPS2 - ϵ_2 - абсолютная точность нахождения ϵ_{nlj} (в SPHERE) .
EPS3 - ϵ_3 - относительная точность вычисления интегралов (в SPHERE) .
EPS4 - ϵ_4 - абсолютная точность вычисления $a, S1, S2, S3$ (в SPHERE) , β_0 (в CALDNU) .
EPS6 - ϵ_6 - нижний предел в интеграле вычисления нормы волновой функции сферического ядра (в SPHERE)

- EPS7 - ϵ_7 - величина порядка $1.E-08$ (абсолютная точность вычисления интегралов в SPHERE, точность нуля в BISEC).
- AK1 - k_1 }
 AK2 - k_2 } - узлы для определения S (в SPHERE),
 AK - e^2 - константа в потенциале (кулоновский член),
 ANOD - число узлов при групповом интегрировании в CALDNU,
 EPSRD - ϵ_{RD} - относительная точность вычисления $D_\lambda(r)$ (величина порядка $10 \cdot \epsilon_{RC}$),
 EPSRC - ϵ_{RC} - относительная точность вычисления $C_\lambda(r)$,
 EPSEB - ϵ_{EB} - точность для решения системы.

Пример точностей:

$$\epsilon_1 = 10^{-3}, \epsilon_2 = 10^{-2}, \epsilon_3 = 10^{-3}, \epsilon_4 = 10^{-3},$$

$$\epsilon_6 = 10^{-3}, \epsilon_7 = 10^{-8}, k_1 = 0,7, k_2 = 3,3, k = 1,44,$$

$$ANOD = 100,0, \epsilon_{RD} = 10^{-1}, \epsilon_{RC} = 10^{-2}, \epsilon_{EB} = 10^{-3}$$

16 карта - INRECOR - номер первой свободной зоны на ленте 5 по формату (I3). Если записи на ленту 5 нет, то можно пробить 000.

Далее идет информация вариантов.

Информация варианта начинается с карты данных о ядре и потенциале:

$A, z, r_0, V_0, \alpha, \alpha$, которые пробиваются по формату (2F3.0,4F10.3),

где

- A - атомный вес,
 z - заряд (для нейтронов задавать $z = 0$),
 r_0 - константа для вычисления радиуса ядра $R = r_0 A^{1/3}$,
 V_0 - глубина ямы в МэВ,

α - константа спинорбитального взаимодействия,

α - параметр диффузности.

Если задано $A = 0$, то это является признаком окончания задания данных вариантов для программы CALDNU.

Далее задаются на одной карте по формату (8I3) данные для вычисления базиса (одночастичных состояний сферического ядра):

$m, N, l_1, l_2, n_1, n_2, j_r, KWRITE$,

где

m - число членов разложения в (10) ($1 \leq m \leq 4$),

N - число состояний сферического ядра ($N \leq 40$).

Если задано $N = 0$, то программа будет рассчитывать состояния для каждого l , принимающего значения l_1, l_1+2, \dots, l_2 , для $j = l \pm 1/2$ и n , принимающего значения n_1, n_1+1, \dots, n_2 .

Если задано $N \neq 0$, то параметры состояний будут вводиться с карт, и l_1, l_2, n_1, n_2 можно задать нулями.

$j_r = \begin{cases} 0, & \text{если требуется упорядочивание базиса по энергиям,} \\ 1, & \text{если упорядочивание не требуется.} \end{cases}$

$KWRITE$ - число состояний базиса для записи на магнитную ленту 4 ($KWRITE \leq 40$).

Затем задается режим работы программы и её выдачи для данного варианта $KWOUT$ - число из 19 цифр по формату (I19). Значение каждой цифры 0 или 1.

1 в 1^{ой} цифре - не печатать сферический базис,

1 во 2^{ой} цифре - не печатать параметры развязывания,

1 в 3^{ей} цифре - не печатать мультипольные моменты (для протонной схемы),

- I в 4^{ой} цифре - не печатать все энергии уровней для различных Ω ,
- I в 5^{ой} цифре - не выдавать на перфоратор все энергии уровней для различных Ω ,
- I в 6^{ой} цифре - не печатать результаты счета для различных Ω ,
- I в 7^{ой} цифре - счет только для $\Omega = j_{\min}$,
- I в 8^{ой} цифре - не вычислять β_0 и положить β_0 равным 0,
- I в 9^{ой} цифре - выдавать на перфоратор сферический базис,
- I в 10^{ой} цифре - предписать асимптотические квантовые числа первым способом,
- I в 11^{ой} цифре - не писать на ленту 2,
- I в 12^{ой} цифре - не писать на ленту 5.

Остальные 7 цифр оставлены в резерве.

Далее следуют N карт с параметрами состояний сферического ядра, если было задано $N \neq 0$. Каждое состояние характеризуется 9 параметрами, которые пробиваются на одной карте по формату

(F7.2,2F2.0,F4.1,5F8.4).

Затем задаются значения деформаций β_{20}, β_{40} ($|\beta_{20}| \leq 1, |\beta_{40}| \leq 1$), которые пробиваются на одной карте по формату (2F5.3). Количество перфокарт с β_{20}, β_{40} - любое. Карта с $\beta_{20} = 0$ и $\beta_{40} = 0$ является признаком конца наборов β_{20}, β_{40} .

Таким образом, информация одного варианта состоит из $4+N+k$ карт, где N - число сферических состояний, k - число различных пар β_{20}, β_{40} .

Информации с вариантами может быть сколько угодно. Признаком конца вариантов и счета CALDNU является карта с $A=000$.

Далее подкладывается информация к программе OUT, если будет счет по OUT. Информация к OUT задается на одной карте величинами: NTARE, NREC, KCOL, KROW, EN, EK по формату (4I3,2F10.3),

где:

- NTARE - номер ленты, на которую записываются результаты (для CDC - 6200, NTARE = 4).
- NREC - номер первой свободной зоны. Если NTARE = 0, то записи не будет.
- KCOL - формат листа для выдачи таблиц (количество символов на строке).
- KROW - количество строк на листе.
- EN, EK - пределы энергий уровней, выводимых на печать.

Таких карт может быть сколько угодно. Признаком конца информации к OUT является карта с $NTARE = 0$ и $KCOL = 0$.

Формирование пакета данных смотри на рис. 2.

Замечания по работе программы CALDNU.

1. В случае, если было задано более 40 сферических состояний или программа рассчитала больше чем 40 состояний базиса, то счет такого варианта прекращается и на печать будет выдано
 TOO MANY LEVELS (слишком много уровней).
2. Если программа работала в режиме вычисления базиса и для какого-то набора n_0, l_0, j_0 состояние не определяется, то программа печатает:
 NO LEVEL L = l_0 J = j_0 N = n_0 N2 = n_2
3. Если для какого-то набора данных матрица системы имеет комплексные собственные значения, то программа печатает:
 THE TRANSFORMED MATRIX HAS THE COMPLEX EIGENVALUES
 и выдает величину $TAUSQ = \sum_{i \neq j} a_{ij}^2$, печатает матрицу (по столбцам) и собственные вектора. Счет продолжается.

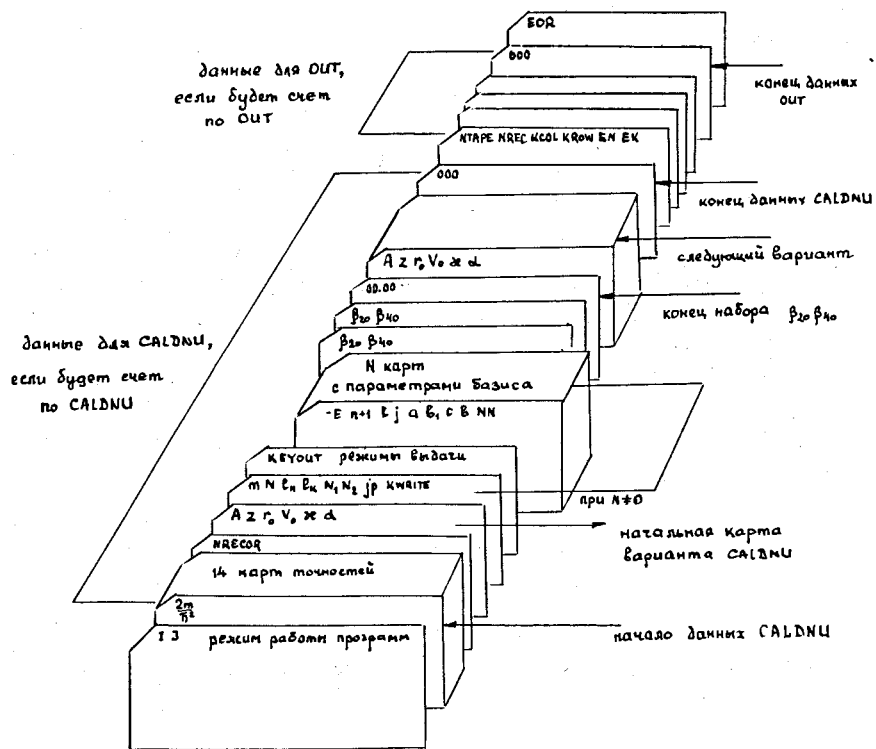


Рис.2. Задание данных для счета по программам CALDNU и OUT .

Краткая характеристика программ CALDNU и OUT ,
 объединенных в одну программу MAIN .

Язык : Фортран-Церн.

ЭВМ : CDC -6200. Операционная система SCORE 3.4

Потребности памяти : 70000.

Количество используемых магнитных лент : 3.

Какие периферийные устройства используются : читающее устройство,
 печать, перфоратор.

Количество карт в пакете (вместе с контрольным вариантом) : 3347.

Код пробивки : CDC .

Выдача CALDNU и OUT на печать.

Работа программы CALDNU начинается с печати сообщения

BEGIN CALDNU .

Печатается вся введенная с карт информация. Остальная выдача на печать зависит от режимов работы CALDNU . Если CALDNU записывала на ленту 2, то печатается $KREC = N$, где N - количество записанных зон на ленте 2. Если CALDNU записывала на ленту 5 , то печатается $THE\ LAST\ RECORD = N$ ($N = NRECOP + K$, где K - количество записанных зон на ленте 5)

Работа программы OUT начинается с печати сообщения

BEGIN OUT .

Затем определяется количество записанных на ленте 2 зон и печатается $KREC = N$, где N - количество записанных зон на ленте 2. Печатается вводная информация . Если OUT работает в режиме записи на ленту 4, то после записи выдается $NREC = N$, где N - номер первой

свободной зоны на ленте 4. Затем печатаются таблицы, если OUT работает в режиме выдачи таблиц.

Описание контрольного варианта.

В качестве контрольного варианта к программам CALDNU и OUT выбран расчет нейтронных уровней и волновых функций деформированного ядра A=239 с параметрами потенциала $r_0 = 1,260$, $v_0 = 46,700$, $\kappa = 0,375$ и $\alpha = 1,60$ и параметрами деформации $\beta_{20} = 0,9$ и $\beta_{40} = 0,1$. Базис был рассчитан ранее (использовались только 3 состояния). При расчете были заданы следующие точности:

$$\frac{2m}{\hbar^2} = 0,04824 \quad \epsilon_1 = 10^{-3} \quad \epsilon_2 = 10^{-2} \quad \epsilon_3 = 10^{-3} \quad \epsilon_4 = 10^{-3}$$

$$\epsilon_5 = 10^{-3} \quad \epsilon_7 = 10^{-8} \quad k_1 = 0,7 \quad k_2 = 3,3 \quad k = 1,44$$

$$ANOD = 100.0 \quad \epsilon_{RD} = 0.1 \quad \epsilon_{RC} = 0.01 \quad \epsilon_{EB} = 0.001$$

Для разложения (10) взять три члена. CALDNU должна не выдавать на перфоратор энергии уровней для различных Ω (KEYOUT(5)=1) и приписать асимптотические квантовые числа первым способом (KEYOUT(10)=1). Отпечатать таблицу результатов на листе 110x60 (символов) для энергий уровней из интервала (-40,50) МэВ.

```
BEGIN MAIN -0 -0
BEGIN CALDNU
4.8240000000E-02
1.0000000000E-03
1.0000000000E-02
1.0000000000E-03
1.0000000000E-03
1.0000000000E-03
1.0000000000E-03
1.0000000000E-08
7.0000000000E-01
3.3000000000E+00
1.4400000000E+00
```

```
1.0000000000E+02
1.0000000000E-01
1.0000000000E-02
1.0000000000E-03
NRECORD= -0
```

A=239 Z= -0 RO=1.260 VO=46.700 KAPPA= .375 ALFA=1.600

M= 3 N= 3 LN= -0 LK= -0 N1= -0 N2= -0 JP= -0 KWRITE= 5

KEYOUT *****

ORDERING OF THE ENERGIES OF THE WAVE FUNCTION ACCORDING TO THE SIZE

THE WAVE FUNCTION OF SPHERICAL NUCLEUS

-E	N+1	L	J	A	B1	C	B	NN
-23.3100	1	11	11.5	7.4976	5.8636	5.8322	3.9507	.5106
-19.0400	1	9	8.5	6.6939	4.9920	5.0161	3.5349	.4958
-8.0800	1	9	9.5	7.1491	5.3674	5.5741	4.8033	.5523

JMIN=17/2 JMAX=23/2

BETA0=-.0695 BETA20= .900 BETA40= .100

OMEGA=17/2

ENERGY	25.829	38.134	42.671
	918	908	110308
1 11 23/2	.421	.891	-.170
1 9 17/2	-.143	.250	.958
1 9 19/2	.896	-.379	.233

OMEGA=19/2

ENERGY	32.392	40.366
	909	110209
1 11 23/2	.400	.917
1 9 19/2	.917	-.400

OMEGA=21/2

ENERGY	42.236
	110110
1 11 23/2	1.000

OMEGA=23/2

ENERGY	45.455
	110011
1 11 23/2	1.000

ALL ENERGIES FOR DIFFERENT OMEGA
25.829 38.134 42.671 32.392 40.366 42.236 45.455

KREC= 1
 THE LAST RECORD= 1
 BEGIN OUT
 KREC= 1
 -0 -0110 60 -40.000 50.000

A=239 N

	.900	.900	.900	.900	.900	.900	.900
BETA20	.900	.900	.900	.900	.900	.900	.900
BETA40	.100	.100	.100	.100	.100	.100	.100
OMEGA=17/2				OMEGA=19/2		OMEGA=21/2	OMEGA=23/2
ENERGY	25.829	38.134	42.671	32.392	40.366	42.236	45.455
AQN	918	908	110308	909	110209	110110	110011
1 11 23/2	.421	.891	-.170	.400	.917	1.000	1.000
1 9 17/2	-.143	.250	.958	0.000	0.000	0.000	0.000
1 9 19/2	.896	-.379	.233	.917	-.400	0.000	0.000

Литература

1. Kalinkin B.N., Grabovskii Ya., Gareev F.A. Acta Phys.Pol. XXX, 999, 1966.
2. Ф.А.Гареев, С.П.Иванова, В.Г.Соловьев, С.И.Федотов. ЭЧАЯ, т.4 вып.2, стр.357, 1973.
 F.A.Gareev, S.P.Ivanova, L.A.Malov, V.G.Soloviev. Nucl. Phys.A, 1971, 171, 194.
3. Н.Ю.Ширикова. Препринт ОИЯИ, Р5-3712, Дубна, 1968.
4. А.С.Давыдов. Теория атомного ядра, Физматгиз 1958, стр.558.
5. Р.Н.Федорова и др. Препринт ОИЯИ, БИ-II-5190, 1970, стр.59.
6. Eberlein P. J.Soc.Industr. and Appl.Math. 10 N 1, 1962.
7. Ф.А.Гареев, С.П.Иванова, Б.Н.Калинкин. Изв. АН СССР, сер. физ., 32, 1968, 1690.

Рукопись поступила в издательский отдел
 21 июля 1975 г.