87-203

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р6-87-203

И.Адам*, В.Вагнер*, М.Гонусек*,
М.И.Кривопустов, В.А.Морозов

ОПИСАНИЕ ПРОГРАММЫ ZORKA ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ НА ЭВМ ФИЗИЧЕСКИХ КОНСТАНТ ОСНОВНОГО И КВАДРУПОЛЬНЫХ ВИБРАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ И ПЕРЕХОДОВ В ЧЕТНО-ЧЕТНЫХ ДЕФОРМИРОВАННЫХ ЯДРАХ

* Институт ядерной физики Чехословацкой академии наук, Ржеж

1987

ВВЕДЕНИЕ

В наших работах [1,2] проведено систематическое рассмотрение вопросов, относящихся к определению физических констант ядерной структуры основного и квадрупольных вибрационных состояний и переходов в четно-четных деформированных ядрах. Впервые получены общие формулы для определения приведенных вероятностей магнитных (M1)- [1] и электрических (E2) [2] внутриполосных и междуполосных переходов в предположении смешивания волновых функций в рамках теории возмущений.

В настоящей публикации, которая вместе с работами [1,2] составляет единый цикл, описана программа ZORKA, позволяющая на основе экспериментальных данных о значениях приведенных вероятностей B(E2), B(M1) или их отношений определять физические константы основного и квадрупольных вибрационных состояний и γ-переходов в четно-четных деформированных ядрах.

О ПРОГРАММЕ ZORKA

Сравнение экспериментальных и вычисленных данных по приведенным вероятностям E2- и M1-переходов производится с помощью составленной нами для ЭВМ программы. В первую очередь рассматриваются E2-переходы, и на основе полученных результатов можно перейти к анализу M1-переходов.

Переходы, разряжающие ротационные уровни β–и γ-вибрационных полос, обычно являются почти чистыми E2-переходами с возможной примесью M1-мультипольности, достигающей нескольких процентов. Когда эта примесь определена экспериментально, то есть установлен параметр смешивания δ, вычисляем долю E2-мультипольности по формуле

$$I_\gamma (E2) = I_\gamma \frac{\delta^2}{1+\delta^2} . \qquad (1)$$

Важность учета M1-мультипольности будет показана в настоящей работе на примере ^{160}Dy . Формулы для приведенных вероятностей E2-переходов можно записать в следующем виде:

$$Y^2 = B(E2;\, I_i\, K_{q_i} \to I_f\, K_{q_f}) = \langle I_i K_i 2,\, K_f - K_i \,|\, I_f K_f \rangle^2\, Q^2_{q_i q_f} \times$$
$$\times (1 + (\delta_{k_i,o} - \delta_{k_f,o}|)\{1 + \mathcal{F}(p_1, \dots p_n,\, I_i,\, I_f)\}^2, \qquad (2)$$

где p_i -параметры теории возмущений $(Z_\beta, Z_\gamma, \dots)$. Если нам не известно абсолютное значение B(E2), но мы знаем I_γ(E2), тогда получим уравнение, аналогичное формуле (2), то есть

$$Y^2 = \frac{I_\gamma(E2;\, I_i K_{q_i} \to I_f K_{q_f})}{E_\gamma^5} = \alpha_i^2 B(E2;\, I_i K_{q_i} \to I_f\, K_{q_f}), \qquad (2')$$

где α_i — нормировочный коэффициент i-того уровня.

Вычисления параметров $Q_{q_i q_f}$ (или их отношений), α_i и p_i, которые обозначим через θ, производятся методом наименьших квадратов для нелинейной функции, разлагаемой в ряд Тейлора в окрестности точки θ_o.

В каждой итерации решается уравнение

$$(\theta - \theta_o) = (A' W A)^{-1} A' W (Y - Y_o), \qquad (3)$$

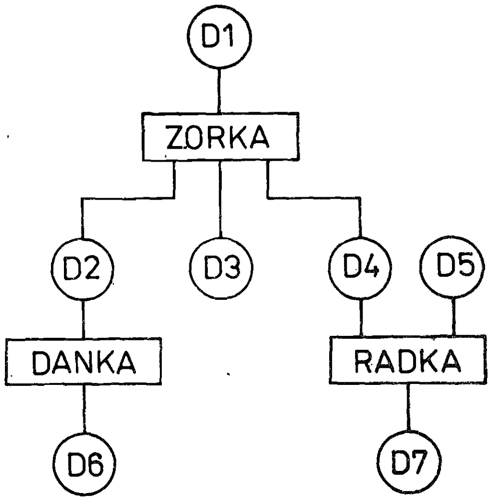
где элементы матрицы A равны $\{A\}_{ik} = \left(\frac{\partial Y_i}{\partial \theta_k}\right)_{\theta_o}$, $W_{ii} = 1/(\Delta Y_i)^2$, $W_{ij} = 0$ (если $i \neq j$) для ошибок ΔY_i величины Y_i; Y_o — значение Y в точке θ_o. Следующая итерация начинается с точки $\theta_o = \theta$. Начальные значения величины θ_o для итерационного процесса выбираем на основе адиабатического приближения.

После вычисления параметров θ_i и матрицы ошибок $D(\theta) = (A'WA)^{-1}$ (в случае $\chi^2 > 1$ матрица $D(\theta)$ заменяется матрицей $D(\theta) \cdot \chi^2$) определяем значения Y_i и их ошибок $(\Delta Y_i)^2 = A(Y_i) D(\theta) A'(Y_i)$. Далее производим сравнение экспериментальных и вычисленных абсолютных и относительных значений приведенных вероятностей.

Для определения величин Q_{gg}, Q_β и Q_γ обычно используем экспериментальные значения: $B_{exp}(E2;\, 2^+0_g \to 0^+0_g)$, $B_{exp}(E2;\, 2^+2_\gamma \to 0^+0_g)$ и $B_{exp}(E2;\, 2^+0_\beta \to 0^+0_g)$.

Когда установлены значения параметров Z_q и матричных элементов $Q_{qq'}$, определяем по программе DANKA коэффициенты смешивания $\epsilon_{qq'}$ из соотношений (13) ÷ (15), приведенных в нашей работе [2], и таким образом конкретизируем волновую функцию $|K_q I\rangle$ (см. формулу (32) в работе [1]). Знание параметров Z_q и $Q_{qq'}$ позволяет предсказать значения интенсивностей ненаблюдаемых переходов, установить абсолютные значения вероятностей $B(XL;\, I_i \to I_f)$ для всех переходов и вычислить времена жизни P, P_γ и $T_{1/2}$ рассматриваемых уровней при помощи программы RADKA. Описание величин $B(XL;\, I_i \to I_f)$,

P_γ(XL), P(уровня) и $T_{1/2}$ (уровня) дано в [1], см. формулы (1), (2), (5) и (6).



На рис. 1 показана структура программы ZORKA, которая написана на языке Фортран и реализована на ЭВМ Хьюллет-Паккард модели 1000. Входные данные для этой программы записываются в следующем виде.

Рис. 1. Структура программы ZORKA для вычисления приведенных вероятностей, интенсивностей ненаблюдаемых переходов и времени жизни возбужденных состояний ядер.

D1 — входные данные программы. Первая строка содержит наборы параметров NV(1) ÷ NV(4), которые определяют выбранный вариант расчета. Вариант NV(1) означает, что рассматриваются приведенные вероятности E2-переходов между γ-полосой и полосой основного состояния; NV(2) — переходы между β-полосой и полосой основного состояния; NV(3) — внутриполосные переходы; NV(4) — переходы между β-полосой и γ-полосой. В табл. 1 приведены значения параметров NV(1) ÷ ÷ NV(4), которые определяют вид формул для расчетов приведенных вероятностей. Вторая и третья строки содержат характеристики γ-переходов, полученные из экспериментальных данных: $2I_i$, $2I_f$, $2K_i$, v_i, $2K_f$, v_f, X, E_γ, $s(E_\gamma)$, I_γ, $s(I_\gamma)$, B(XL), s(B(XL)), α_{tot}, где величины v_i, v_f определяют принадлежность перехода к данной ротационной полосе и к конкретной (анализируемой) работе; B(XL) — измеренные абсолютные значения приведенных вероятностей переходов; E_γ и I_γ — энергия и относительная интенсивность γ-переходов, а $s(E_\gamma)$, $s(I_\gamma)$ и s(B(XL)) — ошибки в определении величин E_γ, I_γ и B(XL). В случае, когда не известны значения I_γ или B(XL), этим величинам присваивается значение (-1). Набор данных для всех известных переходов согласно второй и третьей строкам заканчиваются числом (-2). Далее следуют характеристики возможных γ-переходов: $2I_i$, $2I_f$, $2K_i$, v_i, $2K_f$, v_f, L, E_γ, $s(E_\gamma)$ и α_{tot}; этот набор заканчивается числом (-1);

D2 — результаты расчета по программе ZORKA, необходимые для программы DANKA, содержащие значения параметров α_i, $Q_{qq'}$, P_i, матрицу ошибок $D(\theta)$ и характеристики переходов;

нужно задавать (2X)!

Таблица 1

Параметр для выбора варианта вычисления при использовании программы ZORKA

Значение параметра / параметр NV(i)	–1	0	1	2	3	4	5	6
NV(1)	а	$Z_\gamma(2_\gamma) = Z_\gamma(O_g) = Z_{\beta\gamma} = 0$	$Z_\gamma(2_\gamma) = Z_\gamma(O_g)$ $Z_{\beta\gamma} = 0$	$Z_{\beta\gamma} = 0$	$Z_\gamma(2_\gamma) = Z_\gamma(O_g)$	$Z_\gamma(2_\gamma) = Z_\gamma(O_g)$ б		б
NV(2)	а	$Z_\beta(O_\beta) = Z_\beta(O_g) = \xi_{\beta\gamma} = 0$	$Z_\beta(O_\beta) = Z_\beta(O_g)$ $\xi_{\beta\gamma} = 0$	$\xi_{\beta\gamma} = 0$	$Z_\beta(O_\beta) = Z_\beta(O_g)$	$Z_\beta(O_\beta) = Z_\beta(O_g)$ б		б
NV(3)	а	$a_\beta = a_\gamma = a_{\beta\gamma} = 0$	$a_{\beta\gamma} = 0$	$a_{\beta\gamma} \neq 0$	–	–	–	–
NV(4)	а	$Z'_\beta = Z'_\gamma = Z_{\beta\gamma}(2_\gamma) = Z_{\beta\gamma}(O_\beta) = 0$	$Z'_{\beta\gamma}(2_\gamma) = Z'_{\beta\gamma}(O_\beta) = 0$	$Z'_{\beta\gamma}(2_\gamma) = Z'_{\beta\gamma}(O_\beta) = 0$	$Z'_{\beta\gamma}(2_\gamma) = Z'_{\beta\gamma}(O_\beta)$		$Q_{\beta\gamma} = 0$	при помощи $Z_\beta, Z_\gamma, Z_{\beta,\gamma}$ ...

а) Вычисление параметров для данной полосы не производится.

б) С учетом поправки, рассмотренной в работе [3].

D3 — результаты расчета по программе ZORKA, содержащие параметры a_i, Q_{qq}, и P_i; сравнение вычисленных и экспериментальных значений B(XL) и вычисленные интенсивности переходов, не обнаруженных экспериментально;

D4 — результаты расчета по программе ZORKA для программы RADKA;

D5 — дополнительные данные для программы RADKA: характеристики уровней I, K, θ и E; этот набор заканчивается числом (-1);

D6 — результаты расчета по программе DANKA, которые содержат значения матричных элементов, параметров смешивания, параметров теории возмущения и интенсивности переходов, не обнаруженных экспериментально;

D7 — результаты расчета по программе RADKA: времена жизни возбужденных состояний.

Использование программы ZORKA проиллюстрировано на примере изотопа диспрозий-160 при анализе интенсивностей γ-переходов [4], связанных с γ-вибрационной полосой. Применяя правила Алаги, получаем $\chi^2 = 99$; при расчете B(E2) с одним параметром Z_γ величина χ^2 равна 2,3. Используя данные о параметрах δ^2, которые приведены в работе [5], для интенсивностей всех переходов получим поправку меньше 3% (за исключением перехода с энергией 872,09 кэВ, у которого доля E2-мультипольности составляет около 30%), тогда при вычислении параметра Z_β величина χ^2 равна 8,7. Переход с энергией 872,09 кэВ имеет малую интенсивность (0,79 ед.) и находится в γ-спектре вблизи самого интенсивного (100 ед.) перехода с энергией 879,370 кэВ; поэтому можно предположить, что при вычислении параметра δ^2 (872,09 кэВ) имеет место систематическая ошибка, которая не учитывалась авторами работы [5]. С учетом этого принимаем δ^2(872,09 кэВ) $= \infty$, тогда при вычислении параметра Z_γ имеем $\chi^2 = 1,5$.

Добавляя к данным об интенсивностях I_γ, полученным в работе [4], и о параметрах δ^2 [5] (δ^2 (872,09 кэВ) $= \infty$) сведения о средневзвешенных значениях квадрупольного момента $Q_{gg} = 7,21(10)$ eб, приведенных вероятностях $B(E2; 0^+0_g \to 2^+2_\gamma) = 0,114(8)$ $e^2б^2$ и $B(E2; 0^+0_g \to 2^+0_\beta) = 0,00184(15)$ $e^2б^2$, установленных в работе [6], проводим вычисления некоторых физических констант (см. табл. 2). Расчеты выполнены для случая, когда переходы β- и γ-полос анализируются независимо (вариант I); если они рассматриваются совместно, то вычисления проводятся по формулам (5) и (7) (вариант II) или по формулам (5') и (7') (вариант III), которые получены в нашей работе [2]. Из табл. 2 видно, что значения для трех вариантов расчетов мало отличаются друг от друга; введение поправки в соответствии с работой [3] (вариант III) проявляется незначительно, так как рассматриваются переходы, разряжающие уровни с малым значением спина ($I_i \leq 5$ для γ-полосы, $I_i = 2$ для β-полосы).

Таблица 2

Значения параметров для различных вариантов расчета

Параметры	Номер варианта		
	I	II	III
χ^2	a	0,291	0,285
$10^3 Z_\beta$	-14 (6)	-14 (6)	-14 (6)
$10^3 Z_\gamma$	43,8 (20)	43,8 (20)	43,3 (20)
$10^3 Z_{\beta\gamma}$	-3,5 (14)	-3,5 (14)	-3,5 (17)
Q_{gg}	2,27 (3)	2,27 (3)	2,27 (3)
Q_β	0,125 (6)	0,125 (6)	0,125 (6)
Q_γ	0,251 (9)	0,252 (9)	0,252 (9)
$10^3 \epsilon_\beta$	0,79 (29)	0,79 (29)	0,79 (29)
$10^3 \epsilon_\gamma$	-0,99 (6)	-0,99 (6)	-0,98 (6)
$10^3 \epsilon_{\beta\gamma}$	2,9 (12)	2,9 (12)	3,6 (14)
$10^3 \epsilon_{\alpha\beta}$		-0,043 (15)	-0,043 (15)
$10^3 \alpha_\gamma$		0,0182 (17)	0,0181 (16)
$10^3 \alpha_{\beta\gamma}$			0,0031 (13)

Примечание: а) параметр $\chi^2 = 1{,}05$ для переходов β-полосы и $\chi^2 = 0{,}038$ для переходов γ-полосы.

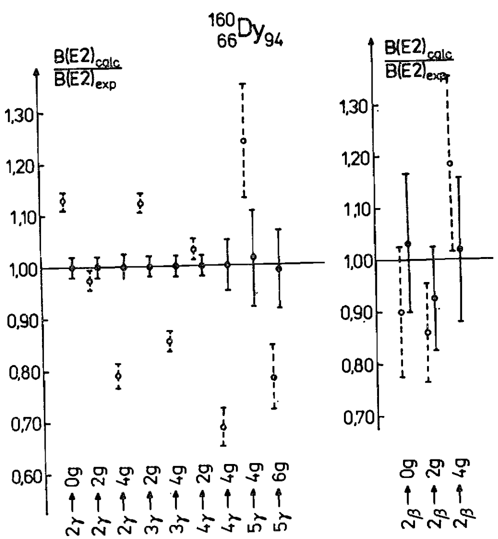


Рис. 2. Отношение вычисленных и экспериментальных значений приведенных вероятностей B(E2) для переходов из β– и γ-полос. ● – параметры смешивания при вычислении B(E2) принимали значения, указанные в табл. 2 (вариант III *), о – вычисления с учетом правила Алаги.*

В предположении, что смешивание волновых функций между β– и γ-полосами отсутствует (то есть $\epsilon_{\beta\gamma} = 0$), можно установить разницу между Q_{gg} и $Q_{\gamma\gamma}$; она равна $[Q_{\gamma\gamma} - Q_{gg}]/Q_{\gamma\gamma} =$ -0,16 (5), что согласуется с данными работы /7/, где получено $Q_{\gamma\gamma} = 6{,}6\,(5)$ e·б.

Отношение вычисленных величин к экспериментальным значениям приведенных вероятностей B (E2) для переходов из β– и γ-полос (вариант III , табл. 2) показано на рис. 2 (черные кружки). Отношения, полученные с применением правила Алаги для вычислений приведенных вероятностей, обозначены светлыми кружками.

В настоящее время продолжается использование описанной программы ZORKA для систематики B (E2) -переходов, связанных с β– и γ-полосами и полосой основного состояния изотопов эрбия ($Z = 68$) и изотонов с $N = 94$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ экспериментальных значений приведенных вероятностей B(E2)- и B(M1)-переходов, разряжающих ротационные уровни β– и γ-вибрационных полос в рамках теории, которая учитывает смешивание волновых функций этих состояний, позволяет определить физические константы переходов и состояний. Знание физических констант имеет важное значение при исследовании структуры четно-четных деформированных ядер.

Измерение параметров смешивания с хорошей точностью для большого числа γ-переходов, идущих из β–, γ– и g-ротационных полос, необходимо для корректного сравнения вычисленных и экспериментальных значений B (E2) , а также для нахождения B (M1) .

С помощью недавно созданной многодетекторной установки угловых корреляций МУК /8/ в ряде других задач можно эффективно проводить определение параметров смешивания для большого числа γ-переходов одновременно. Поэтому рассмотренные в публикациях /1, 2/ и в настоящей работе вопросы, включая программу ZORKA для ЭВМ, помогут планированию и обоснованию экспериментов, предлагаемых для выполнения на установке МУК по программе ЯСНАПП-2 на фазотроне Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ. Оценки времени жизни отдельных γ-переходов, полученные с помощью программы ZORKA, будут использованы с целью выбора некоторых из них для измерения методом доплеровского смещения энергий γ-квантов на пучке ионов циклотрона У-120М Института ядерной физики ЧСАН (Ржеж).

В заключение один из авторов (М.И.К.) выражает признательность Мосинцевой Л.П. за помощь в оформлении работ /1,2/ и настоящей публикации. Авторы благодарят К.Я.Громова, Ц.Вылова, В.Г.Калинникова за внимание и поддержку.

ЛИТЕРАТУРА

1. Адам И. и др. Сообщение ОИЯИ Р6-87-201, Дубна, 1987.
2. Адам И. и др. Сообщение ОИЯИ Р6-87-202, Дубна, 1987.
3. Rud N. et al. – Nucl. Phys., 1971, A167, p.401.

4. Адам И. и др. – В сб.: Тезисы докладов XXXVI Совещания по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра (Харьков). Л.: Наука, 1986, с.119.
5. Громова И.И. и др. – Известия АН СССР, сер. физ., 1979, 43, с.26.
6. Бегжанов Р.Б., Беленький Б.М. Гамма-спектроскопия атомных ядер. Ташкент: ФАН, 1980.
7. Forker M. et al. – Nucl. Phys., 1969, A138, p.97.
8. Абросимов В.Н. и др. Сообщение ОИЯИ Р6-86-320, Дубна, 1986;

Абросимов В.Н. и др. В сб.: Ядерная спектроскопия и структура атомного ядра (тезисы докладов XXXVII совещания, Юрмала, апрель 1987 г.). Л.: Наука, 1987, с.539.

Рукопись поступила в издательский отдел
31 марта 1987 года.

Адам И. и др. Р6-87-203
Описание программы ZORKA для вычисления на ЭВМ физических констант основного и квадрупольных вибрационных состояний и переходов в четно-четных деформированных ядрах

Разработана программа ZORKA, позволяющая на основе экспериментальных данных о значениях приведенных вероятностей B(E2), B(M1) или их отношений определять физические константы основного и квадрупольных вибрационных состояний и γ-переходов в четно-четных деформированных ядрах. Предполагается смешивание волновых функций ротационных уровней основного, β- и γ-вибрационных состояний. Расчеты по программе ZORKA проводятся с использованием метода наименьших квадратов.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод авторов

Adam J. et al. P6-87-203
The Description of the ZORKA Program for the Computer Calculation of the Physical Constants of the Ground State and Quadrupole Vibrational States and Transitions in Even-Even Deformed Nuclei

The program is described for calculation (from experimental values of reduced probabilities B(E2), B(M1) or their ratios) of the "physical constants" of the ground and quadrupole vibrational states and of gamma-transitions in even-even deformed nuclei. There was assumed the mixing of the ware function of ground, β- and γ-vibrational states. Calculations in the program ZORKA are based on the least-square method.

The investigation has beem performed at the Laboratory of Nuclear Problems, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987