

**KERNFORSCHUNGSZENTRUM
KARLSRUHE**

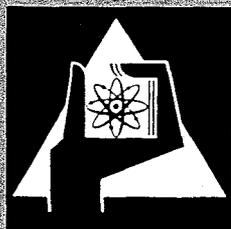
Juli 1970

KFK 1247

Institut für Angewandte Kernphysik

Ein Computerprogramm zum Auffinden von angeregten Kernzuständen
nach dem Ritz'schen Kombinationsprinzip

D. Heck



GESELLSCHAFT FÜR KERNFORSCHUNG M. B. H.
KARLSRUHE



KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Juli 1970

KFK 1247

Institut für Angewandte Kernphysik

Ein Computerprogramm
zum Auffinden von angeregten Kernzuständen
nach dem Ritz'schen Kombinationsprinzip

von

Dieter Heck

Gesellschaft für Kernforschung m.b.H., Karlsruhe

Abstract

Starting from a set of measured γ -ray energies and a few known level energies the Ritz combination principle may be used to construct a more complete level scheme. This problem is well suited for application of a computer, since certain operations - forming a sum or a difference of two γ -ray energies, forming a difference of two level energies and comparing these two quantities - must be performed many thousands of times in most cases. Therefore a program is developed, which is especially adapted to the data obtained from the (n,γ) reaction.

Inhalt

	Seite
1. Ritz'sches Kombinationsprinzip	1
2. Rückstoßkorrektur	2
3. Primäre Übergänge	2
4. Arbeitsweise des Programms "RITZ"	3
4.1. Aufbereiten der Daten	3
4.2. Neubestimmung der Niveauenergien	3
4.3. Suche nach neuen Niveaus	4
4.4. Ausgabe der Ergebnisse	6
4.5. Steuerung der Phasenfolge	6
Literatur	8
Anhang 1. Programmversionen	A1
Anhang 2. Eingabedaten	A1
Anhang 3. Bedeutung der Phasensteuermarke	A5
Anhang 4. Liste des Programms "RITZ"	A5

1. Ritz'sches Kombinationsprinzip

Beim Einfang thermischer Neutronen in Atomkernen können anhand der danach emittierten γ -Strahlung angeregte Zustände des neu gebildeten Produktkernes untersucht werden. Die Abregung des Einfangzustandes geht meist kaskadenartig über mehrere Zwischenzustände vor sich, wobei bei jedem Übergang ein Gammaquant einer bestimmten Energie emittiert wird. Bezeichnet man zwei solche Zwischenzustände mit i und j , dann stehen die diese Zustände charakterisierenden Energiewerte E_{Ni} und E_{Nj} und die beim Übergang von i nach j in Form von Gammastrahlung freiwerdende Energie E_{gij} in dem einfachen Zusammenhang

$$E_{Ni} = E_{Nj} + E_{gij} \quad (1a)$$

Betrachtet man noch einen dritten Zustand k mit dem Energiewert E_{Nk} und nimmt an, daß Übergänge von i und von j nach k erlaubt sind, dann gilt analog zu Gl. (1a):

$$E_{Ni} = E_{Nk} + E_{gik} \quad (1b)$$

$$E_{Nj} = E_{Nk} + E_{gjk} \cdot$$

Aus (1a) und (1b) resultiert

$$E_{gij} + E_{gjk} = E_{gik} \quad (2)$$

Die Beziehung (2) entspricht dem von Ritz 1908 aufgestellten Kombinationsprinzip für atomare Spektrallinien, das besagt, daß durch additive oder subtraktive Kombinationen der Frequenzen bekannter Spektrallinien die Frequenzen neuer Linien gefunden werden können. Dieses Prinzip kann auf die γ -Strahlung von angeregten Kernen zum Auffinden neuer Niveaus angewendet werden.

Sind z.B. die Energien der Niveaus j und k bekannt, so kann mit den beobachteten γ -Energien E_{gik} und E_{gij} auf ein Niveau mit der Energie E_{Ni} geschlossen werden. Die Treffsicherheit einer solchen Aussage hängt wesentlich von der Genauigkeit der gemessenen γ -Energien und der bekannten Niveauenergien ab.

Bei Verwendung von Ge(Li)-Detektoren zum Nachweis der γ -Strahlung ist es möglich, bei Kernreaktionen wie der (n, γ) -Reaktion meist mehrere hundert γ -Linien nachzuweisen. Beispielsweise wurden in der $^{151}\text{Eu}(n, \gamma)^{152}\text{Eu}$ Reaktion ¹⁾ über 270 Linien im Bereich zwischen 150 und 880 keV gefunden. Bei dieser Anzahl von Linien wird eine Durchmusterung von Hand nach Kombinationen der Gl. (2) eine sehr mühsame Arbeit, die ein Elektronenrechner schneller und sicherer ausführt. Für diesen Zweck wurde das in der vorliegenden Arbeit beschriebene Programm "RITZ" entworfen. Über die Anwendung ähnlicher Methoden zur Bestimmung von Niveaus wird in Ref. ²⁻⁶⁾ berichtet.

2. Rückstoßkorrektur

Ein wesentlicher Unterschied gegenüber den optischen Spektrallinien besteht bei der Kerngammastrahlung darin, daß der beim Emissionsakt dem Kern erteilte Rückstoß nicht zu vernachlässigen ist. Dieser Rückstoß beträgt $E_R = E_g^2 / 2Mc^2$, wo M die Masse des Kerns ist ($c =$ Lichtgeschwindigkeit). Zu der gemessenen Gammaenergie E_γ muß diese Rückstoßenergie addiert werden, um die zur Anwendung des Ritz'schen Kombinationsprinzips notwendige Übergangsenergie E_g zu erhalten. Wird die Energie in keV und die Kernmasse in atomaren Masseneinheiten ($^{12}\text{C} = 12.0000$) angegeben, so wird

$$E_g = E_\gamma (1 + E_\gamma / (1862300 M)). \quad (3)$$

3. Primäre Übergänge

Eine besondere Information stellen in der (n, γ) -Reaktion die vom Einfangzustand mit der Bindungsenergie E_B ausgehenden Primärübergänge dar. Nimmt man schwache Kopplung zwischen den Nukleonen an, so daß bei γ -Übergängen nur ein einzelnes Nukleon beteiligt ist, dann fällt nach Weisskopf ⁷⁾ die Übergangswahrscheinlichkeit für γ -Strahlung der Multipolordnung l mit kleiner werdender Übergangsenergie mit der Potenz $(2l+1)$ ab. Daher werden vom Einfangzustand die Niveaus mit der Energie $E_N > E_B/2$ kaum bevölkert, was die Vermutung rechtfertigt, daß Übergänge mit $E_\gamma > E_B/2$ fast immer Abregungen des Einfangzustandes zu tiefliegenden Niveaus sind. Mit der recht gut bekannten Bindungsenergie [z.B. Ref. ⁸⁾] lassen sich anhand der beobachteten Primärübergänge mit der Energie E_h sofort eine ganze Reihe von Niveauenergien E_N

aus

$$E_N = E_B - E_h \quad (4)$$

angeben.

4. Arbeitsweise des Programms "RITZ"

4.1. Aufbereiten der Daten (Phase 1)

In der ersten Phase wird der evtl. von einem vorhergehenden Problem noch belegte Speicher gelöscht, und die Daten des vorliegenden Falles werden eingelesen. Bei allen eingegebenen γ -Linien wird die Rückstoßkorrektur nach Gl. (3) vorgenommen. Mit der Bindungsenergie und den Primärübergängen werden nach Gl. (4) die Energien von direkt bevölkerten Niveaus berechnet.

4.2. Neubestimmung der Niveauenergien (Phase 2)

Zunächst werden in das Ausgangstermschema, das sich aus den in der ersten Phase bestimmten Niveaus und zusätzlich eingelesenen, aus der Literatur bekannten Niveaus zusammensetzt, diejenigen Übergänge eingeordnet, die innerhalb der Fehlergrenzen mit den Niveauabständen übereinstimmen [vergl. Gl. (1a, 1b)]. Die Einordnung wird so vorgenommen, daß - beginnend beim ersten angeregten Zustand - die Differenzen zwischen einem Niveau k und allen darunter liegenden Niveaus j (mit $j = 1, \dots, k-1$) gebildet werden und mit den auf Rückstoß korrigierten γ -Energien verglichen werden. Im Falle der Übereinstimmung (innerhalb der Fehlergrenzen) wird der Energiewert des Gammaübergangs in eine Matrix an den Platz mit der Zeilennummer j und der Spaltennummer k gespeichert. Auf dem an der Diagonalen gespiegelten Platz (Zeile k , Spalte j) wird der Fehler des Übergangs abgespeichert. Sind zu dem Niveau k alle Abregungen gefunden, so wird die Niveauenergie E_{Nk} als Mittelwert über diese Abregungen neu bestimmt. Hierzu werden die einzelnen Übergangsenergien verschieden stark berücksichtigt. Je nachdem, wie genau die Energie E_{Nj} des Niveaus, auf das der betreffende Übergang mündet, und die Übergangsenergie E_{gj} selbst bekannt sind, erhält diese Summe $E_{Nj} + E_{gj}$ ein Gewicht g_j , das umgekehrt proportional dem (quadratisch überlagerten) Fehler von

E_{gj} und E_{Nj} ist:

$$g_j = 1/\sqrt{\Delta E_{gj}^2 + \Delta E_{Nj}^2}.$$

Der Fehler ΔE_{Nk} der Niveauenergie E_{Nk} wird zu

$$\Delta E_{Nk} = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^m g_j (\Delta E_{gj}^2 + \Delta E_{Nj}^2)}{(m-1) \sum_{j=1}^m g_j}} = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^m 1/g_j}{(m-1) \sum_{j=1}^m g_j}}$$

errechnet, wenn m die Anzahl der gefundenen Abregungen für dieses Niveau ist. Für den Sonderfall $m = 1$ wird

$$\Delta E_{Nk} = \sqrt{\Delta E_{gj}^2 + \Delta E_{Nj}^2}.$$

4.3. Suche nach neuen Niveaus (Phase 3)

In dieser Phase wird mit dem in Phase 2 bestimmten Satz von Niveaus und den verfügbaren Übergangsenergien versucht, neue Niveaus zu finden, indem Kombinationen der Art

$$E_{Ni} + E_{gk} + E_{gl} - E_{Nj} \stackrel{?}{=} 0 \quad (5)$$

gebildet werden (mit $E_{Nj} > E_{Ni}$). Für den Fall, daß ein solcher

Ausdruck innerhalb der Fehlergrenzen (quadratische Überlappung) zu Null wird, sind prinzipiell 2 energetische Lagen für ein neues Niveau E_L möglich (Fig. 1):

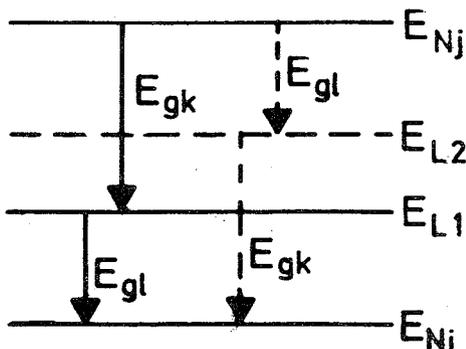


FIG. 1

$E_{L1} = E_{Ni} + E_{gl}$, wobei das neue Niveau durch den Übergang E_{gk} bevölkert wird und

$$E_{L2} = E_{Ni} + E_{gk}, \text{ wobei das}$$

neue Niveau durch E_{gl} bevölkert wird. Durch Suchen nach weiteren möglichen Übergängen, die diese Lösungen mit dem übrigen Termschema verknüpfen, muß eine der beiden Lösungen als neues Niveau bestätigt werden, wobei dann die komplementäre Lösung als nicht zutreffend ausgeschieden werden kann.

Da die Beziehung (5) neben echten Kombinationen meist sehr viel mehr zufällige Kombinationen liefert, muß gefordert werden, daß ein neues Niveau über mehr als 2 Übergänge mit dem bekannten Niveauschema verknüpft ist, da bei zunehmender Anzahl der Übergänge zu anderen Niveaus die Wahrscheinlichkeit für zufällige Kombinationen sehr schnell sinkt. Eine Abschätzung bei gegebenen Linienfehlern und bei gegebener Liniendichte findet sich in Ref. 5, 6).

Durch Gl. (5) ist die Lage neuer Niveaus auf den Bereich zwischen zwei bekannten Niveaus beschränkt. Daher müssen auch Kombinationen der Art

$$E_{Ni} + E_{gk} - E_{gl} - E_{Nj} \stackrel{?}{=} 0 \quad (6)$$

gebildet werden. Die beiden möglichen Lagen für ein neues Niveau

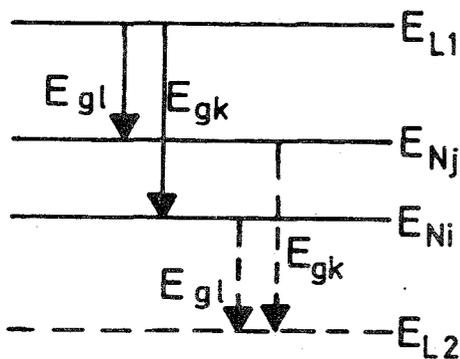


FIG. 2

E_L befinden sich dann außerhalb des Bereichs zwischen den alten Niveaus (Fig. 2). Die Lösungen haben die Form

$$E_{L1} = E_{Ni} + E_{gk} \quad \text{und}$$

$$E_{L2} = E_{Ni} - E_{gl} .$$

Hierbei können auch nicht sinnvolle Lösungen auftreten, z.B. $E_{L2} < 0$ oder $E_{L1} > E_B$.

Im Programm ist durch Vorgabe einer unteren Grenze die Möglichkeit vorgesehen, alle Lösungen unterhalb dieses Grenzwertes zu verwerfen. Ebenso werden durch Vorgabe einer oberen Grenze alle darüber liegenden Lösungen verworfen.

Um das Auffinden von solchen Niveaus zu verhindern, die z.B. auf Grund von fehlenden Koinzidenzbeziehungen eindeutig als zufällige Niveaus identifiziert werden, kann man durch Vorgabe des Energiewertes des zu sperrenden Niveaus solche Lösungen unterdrücken. Als Beispiel sei ein "Pseudoniveau" des ^{58}Fe [Ref. 9)] bei 2726 keV erwähnt, das durch Übergänge bei 2273 keV und 810 keV angeregt werden könnte und sich durch einen Grundzustandsübergang abregen könnte. Alle 3 Übergänge müssen jedoch aufgrund von Koinzidenzbeziehungen an anderen Stellen im Termschema eingeordnet werden.

Am Ende der Phase 3 werden wie in Phase 2 die passenden Linien in das erweiterte Niveauschema eingeordnet und die Niveauenergien neu berechnet.

4.4. Ausgabe der Ergebnisse (Phase 4 und 5)

In der 4. Phase wird mit allen Primärübergängen ein neuer Wert für die Bindungsenergie berechnet und ausgedruckt.

In der 5. Phase wird eine Tabelle aller Niveaus ausgedruckt. Die vorgenommenen Einordnungen werden mit dem Ausgangsniveau, dem Endniveau und der Übergangsenergie gelistet. In dieser Phase werden außerdem alle möglichen Summen von γ -Linien (sofern nicht beide Linien im Termschema eingeordnet sind) mit anderen Linien (möglichen Direktübergängen) verglichen. Im Falle der Übereinstimmung wird die Kombination ausgedruckt.

4.5. Steuerung der Phasenfolge (Phase 6)

Über eine Steuermarke kann der Ablauf der einzelnen Phasen gesteuert werden. Insbesondere ist es möglich, die Phasen 2 bis 6 mehrfach hintereinander zu durchlaufen, wobei in Phase 6 die eingeordneten γ -Linien wahlweise bei weiteren Durchläufen vom Auffinden neuer Niveaus ausgeschlossen werden können. Die möglichen Bedeutungen der Steuermarke werden im Anhang 3 erklärt.

Herrn Dipl.- Phys. H. Schmidt möchte ich für viele anregende Diskussionen danken. Ebenso gilt mein Dank Frl. G. Schüler für ihre Unterstützung beim Erstellen des Programms.

Literatur

- 1) W. Michaelis, eingereicht bei Nucl. Phys.
- 2) B. Hamermesh, J. E. Monahan und R. K. Smither, Annals of Physics
13 (1961) 284
- 3) O. I. Sumbaev, V. L. Alekseev, D. M. Kaminker, A. I. Smirnov
und V. A. Shaburov, Bull. Acad. Sci. USSR (Phys. Ser.)
29 (1966) 741
- 4) A. Bäcklin, Nucl. Instr. Meth. 53 (1967) 177
- 5) R. G. Helmer und A. Bäcklin, Nucl. Instr. Meth. 65 (1968) 31
- 6) H. Lycklama und T. J. Kennet, Nucl. Phys. A139 (1969) 625
- 7) J. M. Blatt und V. F. Weisskopf, Theoretical Nuclear Physics
(J. Wiley Sons, New York, 1952) p. 627
- 8) J. H. E. Mattauch, W. thiele und A. H. Wapstra, Nucl. Phys.
67 (1965) 32
- 9) U. Fanger, W. Michaelis, H. Schmidt und H. Ottmar, Nucl. Phys.
A128 (1969) 641

Anhang 1. Programmversionen

Das Programm "RITZ" ist in Fortran IV geschrieben. Versionen des Programms existieren für die beiden Rechenanlagen IBM 360/65 und IBM 7074 des Kernforschungszentrums Karlsruhe.

Die 7074-Version (10 k Kernspeicher) ist als Mehrphasenprogramm aufgebaut und besteht aus den Programmen

	16985,
	16986,
	07704,
	07703,
	16987,
	16988,
	16989
und den Unterprogrammen	EINO 16990
	und SORTIE 16991.

Die 360/65-Version besteht aus

dem Hauptprogramm	MAIN	07730,
dem Unterprogramm	BNBD	07731,
dem Unterprogramm	PRUEF	07732,
dem Unterprogramm	SUBIL	07733
und dem Unterprogramm	SORTIE	07734.

Eine Programmliste der 360/65-Version ist im Anhang 4 abgedruckt.

Anhang 2. Eingabedaten

Die Eingabedaten müssen in der folgenden Weise angeordnet sein. Das Zeichen / bedeutet den Beginn einer neuen Karte. Zu jeder Karte ist in Klammern das Format, in dem sie gelesen wird (360/65-Version mit formatierter Eingabe), aufgeführt.

Kartenfolge:

	MANF /	(I6)
	TEXT NN NAN NGH NG /	(15A4, 4I4)
	EB FEB UNTGR OBGR AMASS NPRES /	(5F15.8, I5)
NN mal	$\left\{ \begin{array}{l} EN_1 \quad FEN_1 / \\ EN_2 \quad FEN_2 / \\ \dots \quad \dots / \\ EN_{NN} \quad FEN_{NN} / \end{array} \right.$	(2F15.8)
NAN mal	$\left\{ \begin{array}{l} EAN_1 / \\ EAN_2 / \\ \dots / \\ EAN_{NAN} / \end{array} \right.$	(F15.8)
NGH mal	$\left\{ \begin{array}{l} EGH_1 \quad FEGH_1 / \\ EGH_2 \quad FEGH_2 / \\ \dots \quad \dots / \\ EGH_{NGH} \quad FEGH_{NGH} / \end{array} \right.$	(2F15.8)
NG mal	$\left\{ \begin{array}{l} EG_1 \quad FEG_1 / \\ EG_2 \quad FEG_2 / \\ \dots \quad \dots / \\ EG_{NG} \quad FEG_{NG} / \end{array} \right.$	(2F15.8)
	MANF /	(I6)

Bedeutung der Größen:

- MANF = Steuermarke, steuert den Programmablauf; Bedeutung siehe Anhang 3
- TEXT = 60 Zeichen α -Text, der als Überschrift ausgedruckt wird
- NN = Anzahl der Niveaus, die eingegeben werden
- NAN = Anzahl der Stellen, an denen kein Niveau gefunden werden soll
- NGH = Anzahl der Übergänge, mit denen als Primärübergängen ein Niveau, das sonst nicht eingegeben wird, definiert wird
- NG = Anzahl der Gammaübergänge
- EB = Bindungsenergie des letzten Neutrons

- FEB = Fehler der Bindungsenergie
UNTGR = Untere Grenze, unterhalb der kein neues Niveau eingeführt wird
OBGR = Obere Grenze, oberhalb der kein neues Niveau eingeführt wird
AMASS = Masse des Kerns für Rückstoßkorrektur (bezogen auf $^{12}\text{C} = 12,0000$)
NPRES = Vorgabezahl für die Mindestanzahl von Übergängen, mit denen ein neues Niveau mit dem übrigen Termschema verknüpft sein soll
EN = Niveauenergie von bekanntem Niveau
FEN = Fehler der Niveauenergie
EAN = Energie der Stelle, an der kein Niveau gefunden werden soll
EGH = Energie eines Primärübergangs. Primärübergänge, die auf ein durch Eingabe von EN definiertes Niveau münden, sind als normale Übergänge einzugeben, sonst erscheint das betreffende Niveau doppelt
FEGH = Fehler des Primärübergangs
EG = Energie eines Gammaübergangs
FEG = Fehler des Gammaübergangs

Alle Energieangaben sind in keV-Einheiten einzugeben. Alle Fehlerangaben sind unbedingt größer 10^{-20} keV einzugeben, da sonst Divisionsüberlauf eintreten kann.

Beschränkungen:

Aus Speicherplatzgründen gelten folgende Höchstgrenzen:

	IBM 360/65	IBM 7074
NN + NGH	100	79
NN	100	79
NAN	30	20
NGH	30	20
NG	400	275

Rechenzeiten:

Die Rechenzeit hängt sehr stark von der Anzahl der Niveaus und der Linien ab, so daß kein genauer Wert angegeben werden kann. Als Beispiel [^{149}Pm aus Ref. 5)] sei genannt, daß für 8 Niveaus und 155 γ -Linien die Go-Step Zeit für einen Lauf mit MANF = 2 auf der Rechenanlage IBM 360/65 etwa 1 min beträgt. Mit MANF = 201 steigt sie auf 4 min, mit MANF = 203 auf über 8 min. Dazu kommt noch die Zeit des Compile-Steps mit 35 sec. Auf der Rechenanlage IBM 7074 sind die Rechenzeiten etwa 8 mal so lange.

Fehlermeldungen:

Die meisten Fehlermeldungen sind selbsterläuternd. Treten Überläufe in dimensionierten Listen auf, so kann dem meist durch Weglassen der schwächsten (und mit dem größten Fehler behafteten) Gammalinien begegnet werden. Beim Auftreten eines solchen Falles wird im Allgemeinen die vom Programm erarbeitete Information ausgedruckt und erst dann der Lauf beendet.

Anhang 3. Bedeutung der Phasensteuermarke

Durch verschiedene Werte der Steuermarke MANF kann der Ablauf der Programmphasen gesteuert werden. Es bewirken:

MANF < 0 Beendigung des Laufs, muß daher am Ende der Eingabedaten stehen

MANF = 0 Phasen 1, 2, 3, 4, 5, 6, Rückkehr zu Phase 1

MANF = 1 Phasen 1, 5 (nur Summenbildung von Linien), 6, Rückkehr zu Phase 1

MANF = 2 Phasen 1, 2, 4, 5, 6, Rückkehr zu Phase 1

MANF = 100 wie MANF = 0

MANF = 10i Phase 1, 2, 3, 4, 5, 6, Rückkehr zu Phase 1
i + 1 mal, i < 100

Eingeordnete Linien werden nicht vom weiteren Suchprozess ausgeschlossen

MANF = 200 wie MANF = 0

MANF = 20i Phasen 1, 2, 4, 5, 6, 2, 3, 4, 5, 6, Rückkehr zu Phase 1
i mal, i < 100

Bei jedem Durchlauf durch Phase 6 werden alle eingeordneten Linien vom weiteren Suchprozess ausgeschlossen

Anhang 4. Liste des Programms "RITZ" (Version für IBM 360/65)

MAIN

```
C
C PROGRAMM RITZ
C
C RITZ IST EIN PROGRAMM ZUM EINORDNEN VON GAMMALINIEN IN EIN
C VORHANDENES NIVEAUSCHEMA UND ZUM AUFFINDEN NEUER NIVEAUS NACH DEM
C RITZSCHEN KOMBINATIONSPRINZIP
C
C DAS PROGRAMM BESTEHT AUS DEM HAUPTPROGRAMM      07730
C                                     DER SUBROUTINE BNBD  07731
C                                     DER SUBROUTINE PRUEF 07732
C                                     DER SUBROUTINE SUBIL 07733
C                                     DER SUBROUTINE SORTIE07734
C
C
C   DIMENSION ITEXT(15)
C   DIMENSION FEGEN(100,100),NEN(100,100)
C   COMMON NN,NAN,NGH,NG,EB,FEB,UNTGR,DBGR,NPRES
C   COMMON EN(100),FEN(100),EAN(30),EGH(30),FEGH(30)
C   COMMON EG(400),FEG(400),NEG(400)
C   COMMON EGEIN(100,100)
C   COMMON ENL(250),FENL(250),NNL(250)
C   COMMON JDUBL,DUBL1(50),DUBL2(50),KDUBL3(50),KDUBL4(50)
C   COMMON JNIV,JANF,MARK1,MANF,L,M,I,JE,ME
C   COMMON ENLO(2),FENLO(2)
C   EQUIVALENCE(EGEIN(1,1),FEGEN(1,1))
C   EQUIVALENCE (EGEIN(1,1),NEN(1,1))
C   EQUIVALENCE(FENLO(1),FEN1L),(FENLO(2),FEN2L),(ENLO(1),EN1L)
C   EQUIVALENCE(ENLO(2),EN2L)
C
C EINGABE DER DATEN, ANFANGSZUSTAND HERSTELLEN
C
C ANFANGS UND ENDMARKE LESEN
C
C 1000 READ(8,1001) MANF
C 1001 FORMAT(I6)
C     IF(MANF)1199,1102,1102
C 1199 STOP
C 1102 READ(8,1103)ITEXT,NN,NAN,NGH,NG
C 1103 FORMAT(15A4,4I4)
C     WRITE(9,1365)ITEXT
C 1365 FORMAT(1H1,30X,15A4)
C
C SPEICHER LÖSCHEN
C
C   DO 1104 L1=1,400
C     EG(L1)=0.
C     FEG(L1)=0.
C 1104 NEG(L1)=0
C     DO 1105 L2=1,30
C       EAN(L2)=0.
C       EGH(L2)=0.
C 1105 FEGH(L2)=0.
C     DO 1106 L4=1,100
C       FEN(L4) =0.
C       EN(L4)=0.
C     DO 1106 L5=1,100
C 1106 FEGEN(L5,L4)=0.
C     DO 1107 L6=1,50
```

MAIN

```
DUBL1(L6)=0.
DUBL2(L6)=0.
KDUBL3(L6)=0
1107 KDUBL4(L6)=0
JDUBL=0
C
C BINDUNGSENERGIE, UNTERE GRENZE, OBERE GRENZE FUER NEUE NIVEAUS UND
C MASSE FUER RUECKSTOSSKORREKTUR EINLESEN, VORGABEZAHL FUER
C VERKNUEPFUNGEN EINLESEN
C
      READ (8,1108)EB,FEB,UNTGR,OBGR,AMASS,NPRES
1108 FORMAT(5F15.8,I5)
      IF(NN)1111,1111,1109
C
C BEKANNTE NIVEAUS EINLESEN
C
1109 DO1110 N=1,NN
1110 READ(8,1108) EN(N+1),FEN(N+1)
1111 IF(NAN)1011,1011,1012
C
C GESPERRTE NIVEAUS EINLESEN
C
1012 WRITE(9,1014)
1014 FORMAT(1H0,11HANTINIVEAUS)
      DO 1013 N=1,NAN
      READ(8,1108)EAN(N)
      WRITE(9,1108)EAN(N)
1013 CONTINUE
C
C HOCHENERGETISCHE GAMMAENERGIEN EINLESEN
C
1011 IF(NGH)1113,1113,1112
1112 DO 1114 N=1,NGH
1114 READ(8,1108)EGH(N),FEGH(N)
1113 IF(NG)1117,1117,1116
1117 WRITE(9,1118)
1118 FORMAT(1H0,30HKEINE GAMMAENERGIEN EINGEGEBEN)
      GO TO 1199
C
C ANDERE GAMMAENERGIEN EINLESEN
C
1116 DO1119NNG=1,NG
1119 READ(8,1108)EG(NNG),FEG(NNG)
      DO1122K=1,NG
      IF(FEG(K))1122,1123,1122
1122 CONTINUE
      GO TO 1124
1123 WRITE(9,1145)EG(K)
1145 FORMAT(1H0,27HFEHLERANGABE DER GAMMALINIE,F10.3,2H=0)
      GO TO 1000
1026 WRITE(9,1145)EGH(K)
      GO TO 1000
1124 IF(NGH) 1025,1025,1024
1024 DO1125K=1,NGH
      IF(FEGH(K)) 1125,1026,1125
1125 CONTINUE
C
C RUECKSTOSSKORREKTUR
```

MAIN

```
C
1025 RUECK=1./(AMASS*1862300.)
      WRITE(9,1030)
1030 FORMAT(1H0,20X,37HRUECKSTCSSKORREKTUR DER GAMMAENERGIEN/
      110X,25HEINGEGEBENE ENERGIE (KEV), 1X,12HFEHLER (KEV),1X,
      225HKORRIGIERTE ENERGIE (KEV))
      DO 1040 K=1,NG
      ENEU=(RUECK*EG(K)+1.)*EG(K)
      WRITE(9,1031) EG(K),FEG(K),ENEU
1031 FORMAT (1H ,23X,F11.3,2X,F11.3,14X,F11.3)
      EG(K) =ENEU
1040 CONTINUE
      IF(NGH)1051,1051,1041
1041 WRITE (9,1042)
1042 FORMAT(1H0)
      DO 1050 K=1,NGH
      ENEU=(RUECK*EGH(K)+1.)*EGH(K)
      WRITE(9,1031) EGH(K),FEGH(K),ENEU
      EGH(K)=ENEU
1050 CONTINUE
C
1051 WRITE(9,1052)
1052 FORMAT(1H0,10X,15HBINDUNGSENERGIE)
      WRITE(9,1031)EB,FEB
C
C
C MIT DER BINDUNGSENERGIE UND HOCHENERGETISCHEN UEBERGAENGEN NIVEAUS
C FESTLEGEN
C
      JNIV=NN+NGH+1
      IF(JNIV-100) 1126,1127,1127
1127 WRITE(9,1128)
1128 FORMAT(1H0,81HZAHL DER NIVEAUS UND ZAHL DER HOCHENERGETISCHEN UEBE
      IRGAENGE SIND GROESSER ALS 100)
      GO TO 1000
1126 IF(NGH)1130,1130,1129
1129 DO1131I=1,NGH
      J=NN+I+1
      EN(J)=EB-EGH(I)
1131 FEN(J)=FEB+FEGH(I)
C
C NIVEAUS WERDEN NACH DER ENERGIE SORTIERT
C
1130 IF(JNIV-2)1132,1133,1133
1133 JNIVE=JNIV-1
      DO 1134 N3=2,JNIVE
      NA = N3 +1
      DO1135N4 = NA,JNIV
      IF(EN(N3)-EN(N4))1135,1135,1136
1136 A=EN(N3)
      EN(N3)=EN(N4)
      EN(N4)=A
      A=FEN(N3)
      FEN(N3)=FEN(N4)
      FEN(N4)=A
1135 CONTINUE
1134 CONTINUE
1132 GO TO 6986
```

MAIN

```
C
C
6986 IF(MANF-1)4001,4103,4001
4103 GO TO 6989
4001 GO TO 2
C
C ZWISCHEN DIE VORHANDENEN NIVEAUS MIT DER ENERGIE EN WERDEN PASSENDE
C UEBERGAENGE EINGEORDNET, LINEARE FEHLERUEBERLAPPUNG
C
  2 IF(JNIV -2) 4,3,3
  3 JEND=JNIV+1
  DO 10 J=2,JEND
  JMEND=J-1
  DO 20 M=1,JMEND
  MARKK=0
  DO 30 K=1,NG
  IF(EN(J)-EN(M)+FEN(J)+FEN(M)+FEG(K)-EG(K))30,30,11
11 IF(EN(J)-EN(M)-FEN(J)-FEN(M)-FEG(K)-EG(K))12,30,30
12 IF(MARKK)13,13,14
14 IF(JDUBL)16,16,15
15 DO 25 LD=1,JDUBL
  IF(MARKK-KDUBL3(LD))25,17,25
17 IF(K-KDUBL4(LD))25,18,25
18 IF(EN(J)-DUBL1(LD)+FEN(J)+DUBL2(LD))25,25,19
19 IF(EN(J)-DUBL1(LD)-FEN(J)-DUBL2(LD))20,25,25
25 CONTINUE
16 JDUBL=JDUBL+1
  IF(JDUBL-50)35,35,21
21 WRITE(9,22)
22 FORMAT(1H0,20HMEHR ALS 50 DUBLETTS)
  GO TO 6988
35 DUBL1(JDUBL)=EN(M)
  DUBL2(JDUBL)=EN(J)
  KDUBL3(JDUBL)=MARKK
  KDUBL4(JDUBL)=K
  GO TO 20
13 MARKK=K
30 CONTINUE
  IF(MARKK)26,20,26
26 FEGEN(M,J)=FEG(MARKK)
  EGEIN(J,M)=EG(MARKK)
20 CONTINUE
C
C NEUBERECHNUNG DER NIVEAUENERGIE MIT DEN EINGEORDNETEN UEBERGAENGEN
C GEWICHT = 1/FEHLER
C
  SGEW=0.
  NEIN=0
  ZAEHL=0.
  GEW=0.
  SZAE=0.
  SFEHL = 0.
  JEND2=J-1
  DO 40 MEIN=1,JEND2
  IF(EGEIN(J,MEIN))31,40,31
31 ZAEHL=EGEIN(J,MEIN)+EN(MEIN)
  FEHL = SQRT(FEN(MEIN)*FEN(MEIN)+FEGEN(MEIN,J)*FEGEN(MEIN,J))
  GEW =1./FEHL
```

MAIN

```

SZAE=SZAE+ZAEHL*GEW
SGEW=SGEW+GEW
SFEHL = SFEHL+FEHL
NEIN=NEIN+1
40 CONTINUE
   IF(NEIN-1) 10,33,32
32 EN(J) = SZAE/SGEW
   FEN(J)=SQRT(SFEHL/((FLOAT(NEIN)-1.)*SGEW))
   GO TO 10
33 EN(J) =ZAEHL
   FEN(J) =FEHL
10 CONTINUE
   4 GO TO 4002
C
C
4002 IF(MANF-2)4003,4008,4003
4003 IF(MANF-200)4132,4132,4008
4008 GO TO 6988
4132 WRITE(9,4137)
4137 FORMAT(1H1,50HIN DIESER REIHENFOLGE WURDEN NEUE NIVEAUS GEFUNDEN)
C
C SUMMEN VCN LINIEN BILDEN UND MIT NIVEAUABSTAENDEN VERGLEICHEN
C
   CALL SUBIL
C
C DIFFERENZ ZWISCHEN LINIEN BILDEN UND MIT NIVEAUABSTAENDEN
C VERGLEICHEN
C
7704 NG1 = NG-1
   DO 510 L=1,NG1
   LPL1=L+1
   DO 520 M=LPL1,NG
   DEG =ABS(EG(L)-EG(M))
   FDEGQ=FEG(L)*FEG(L)+FEG(M)*FEG(M)
   DO 530 JE=2,JNIV
   JEND =JE-1
   DO 540 ME=1,JEND
   HIGR=EN(JE)-EN(ME)-DEG
   FEBAL=SQRT(FEN(ME)*FEN(ME)+FEN(JE)*FEN(JE)+FDEGQ)
   IF(HIGR+FEBAL)540,540,511
511 IF(HIGR-FEBAL)513,540,540
540 CONTINUE
530 CONTINUE
   GO TO 520
513 IF(EG(L)-EG(M))514,514,515
515 EG1=EG(L)
   EG2=EG(M)
   FEG1=FEG(L)
   FEG2=FEG(M)
   GO TO 516
514 EG1=EG(M)
   EG2=EG(L)
   FEG1=FEG(M)
   FEG2=FEG(L)
516 EN1L=EN(ME)+EG1
   FEN1L=FEN(ME)+FEG1
   EN2L=EN(ME)-EG2
   FEN2L=FEN(ME)+FEG2
```

MAIN

```
DO 101 LOE=1,2
DO 100 K=1,JNIV
IF(ENLO(LOE)+FENLO(LOE)+FEN(K)-EN(K))100,100,139
139 IF(ENLO(LOE)-FENLO(LOE)-FEN(K)-EN(K))520, 100,100
100 CONTINUE
DO 200 K=1,I
IF(ENLO(LOE)+FENLO(LOE)+FENL(K)-ENL(K))200,200,201
201 IF(ENLO(LOE)-FENLO(LOE)-FENL(K)-ENL(K))202,200,200
202 WRITE(9,508)ENLO(LOE), EG(L), EG(M),EN(ME),EN(JE)
508 FORMAT(1H0,6HNIVEAU,F11.3,18H*DURCH UEBERGAENGE,2F11.3,7H ZU DEN,
18H NIVEAUS,F11.3,4H UND,F11.3,2H *)
GO TO 520
200 CONTINUE
101 CONTINUE
MARK1=1
DO 115 LOE=1,2
IF(NAN)116,116,111
111 DO 113 K=1,NAN
IF(ENLO(LOE)-EAN(K)+FENLO(LOE))113,113,112
112 IF(ENLO(LOE)-EAN(K)-FENLO(LOE))114,113,113
113 CONTINUE
116 IF(ENLO(LOE)-UNTGR) 114,114, 415
415 IF(ENLO(LOE)-OBGR) 115,114,114
114 GO TO (161,121),LOE
121 IF(MARK1) 520,520,123
161 MARK1=-1
115 CONTINUE
122 IF(-MARK1) 528,124,124
124 EN1L=EN2L
FEN1L=FEN2L
123 MARK1=0
528 CALL SORTIE
520 CONTINUE
510 CONTINUE
```

```
C
C
C LOESUNGEN FUER NEUE NIVEAUS NACH ENERGIE SORTIEREN
C
```

```
7703 IF(I-1) 2200,2131,2100
2100 IEND = I-1
DO 2120 I2=1,IEND
IANF = I2+1
DO 2110 I3=IANF,I
IF(ENL(I2)-ENL(I3)) 2110,2110,2102
2102 A=ENL(I2)
ENL(I2) = ENL(I3)
ENL(I3) = A
A = FENL(I2)
FENL(I2) = FENL(I3)
FENL(I3) = A
2110 CONTINUE
2120 CONTINUE
```

```
C
C VORHANDENE DOPPELTE LOESUNGEN AUF EINE LOESUNG REDUZIEREN
C
```

```
2121 DO 2130 K=1,I
IF(ENL(K) -ENL(K+1) +FENL(K) +FENL(K+1)) 2130,2130,2122
2122 IF(ENL(K) -ENL(K+1) -FENL(K) -FENL(K+1)) 2123,2130,2130
```

MAIN

```
2123 DO 2125 KS = K,I
      ENL(KS) = ENL(KS+1)
      FENL(KS) = FENL(KS+1)
2125 CONTINUE
      I = I-1
      GO TO 2121
2130 CONTINUE
C
C ZAHL DER UEBERGAENGE BESTIMMEN UND PRUEFEN, OB GROESSER ALS
C DER VORGABEWERT
C
      DO 2500 IL=1,I
      NNL(IL) = 0
      DO 2530 J=1,JNIV
      IF(ENL(IL)-EN(J))2519,2509,2509
2509 DO 2510 K=1,NG
      IF(ENL(IL)-EN(J)+FENL(IL)+FEN(J)+FEG(K)-EG(K))2510,2511,2511
2511 IF(ENL(IL)-EN(J)-FENL(IL)-FEN(J)-FEG(K)-EG(K))2529,2529,2510
2510 CONTINUE
      GO TO 2530
2519 DO 2520 K=1,NG
      IF(EN(J)-ENL(IL)+FENL(IL)+FEN(J)+FEG(K)-EG(K))2520,2521,2521
2521 IF(EN(J)-ENL(IL)-FENL(IL)-FEN(J)-FEG(K)-EG(K))2529,2529,2520
2520 CONTINUE
      GO TO 2530
2529 NNL(IL) =NNL(IL) +1
2530 CONTINUE
2500 CONTINUE
C
C LOESUNGEN IN NIVEAUSCHEMA EINORDNEN
C
2131 DO 2540 J=1,I
      IF(NNL(J)-NPRES)2540,2542,2542
2542 J2 = JNIV+1
      IF(J2-100)2139 ,2702,2702
2702 WRITE(9,2703)
2703 FORMAT(1H0,43HANZAHL DER NIVEAUS GROESSER ODER GLEICH 100)
      MANF = 0
      JNIV = 79
      GO TO 2142
2139 EN(J2)=ENL(J)
      FEN(J2) = FENL(J)
      WRITE(9,2704)EN(J2),NNL(J)
2704 FORMAT(1H0,12HNEUES NIVEAU,F11.3,5H MIT ,I5,24H UEBERGAENGEN EINGE
      IREIHT)
      JNIV=JNIV+1
2540 CONTINUE
C
C MATRIX NEU ORDNEN
C
2142 JNIVE = JNIV-1
      DO 2160 N3=1,JNIVE
      NA = N3+1
      DO 2150 N4=NA,JNIV
      IF(EN(N3)-EN(N4))2150,2150,2159
2159 A=EN(N3)
      EN(N3) = EN(N4)
      EN(N4) = A
```

MAIN

```
A=FEN(N3)
FEN(N3) = FEN(N4)
FEN(N4)=A
DO 2170 K=1,JNIV
A=EGEIN(N3,K)
EGEIN(N3,K)=EGEIN(N4,K)
EGEIN(N4,K) =A
2170 CONTINUE
DO 2171 K=1,JNIV
A=EGEIN(K,N3)
EGEIN(K,N3)=EGEIN(K,N4)
EGEIN(K,N4)=A
2171 CONTINUE
N5=N4-1
DO 2180 K=N3,N5
A=EGEIN(N3,K)
EGEIN(N3,K)=EGEIN(K,N3)
EGEIN(K,N3)=A
A=EGEIN(N4,K)
EGEIN(N4,K)=EGEIN(K,N4)
EGEIN(K,N4)=A
2180 CONTINUE
2150 CONTINUE
2160 CONTINUE
```

C
C ZWISCHEN VORHANDENE NIVEAUS WERDEN PASSENDE UEBERGAENGE EINGEORDNET
C LINEARE FEHLERUEBERLAPPUNG

C
802 IF(JNIV-2) 804,803,803
803 JEND=JNIV+1
DO 810 J=2,JEND
JMEND=J-1
DO 820 M=1,JMEND
MARKK=0
DO 830 K=1,NG
IF(EN(J)-EN(M)+FEN(J)+FEN(M)+FEG(K)-EG(K))830,830,811
811 IF(EN(J)-EN(M)-FEN(J)-FEN(M)-FEG(K)-EG(K))812,830,830
812 IF (MARKK)813,813,814
814 IF(JDUBL)816,816,815
815 DO 825 LD=1,JDUBL
IF(MARKK-KDUBL3(LD)) 825,817,825
817 IF(K-KDUBL4(LD)) 825,818,825
818 IF(EN(J)-DUBL1(LD)+FEN(J)+DUBL2(LD))825,825,819
819 IF(EN(J)-DUBL1(LD)-FEN(J)-DUBL2(LD))820,825,825
825 CONTINUE
816 JDUBL=JDUBL+1
IF(JDUBL-10) 835,835,821
821 WRITE(9,822)
822 FORMAT(1H0,20HMEHR ALS 10 DUBLETTS)
GO TO 6988
835 DUBL1(JDUBL)=EN(M)
DUBL2(JDUBL)=EN(J)
KDUBL3(JDUBL)=MARKK
KDUBL4(JDUBL)=K
GO TO 820
813 MARKK =K
830 CONTINUE
IF(MARKK) 826,820,826

MAIN

```
826 FEGEN(M,J)=FEG(MARKK)
    EGEIN(J,M)=EG(MARKK)
820 CONTINUE
C
C NEUBERECHNUNG DER NIVEAUENERGIE MIT DEN EINGEORDNETEN UEBERGAENGEN
C GEWICHT = 1/FEHLER
C
    SGEW=0.
    NEIN=0
    ZAEHL=0.
    GEW=C.
    SZAE=0.
    SFEHL=0.
    JEND2 = J-1
    DO 840 MEIN=1,JEND2
    IF(EGEIN(J,MEIN))831,840,831
831 ZAEHL=EGEIN(J,MEIN)+EN(MEIN)
    FEHL=SQRT(FEN(MEIN)*FEN(MEIN)+FEGEN(MEIN,J)*FEGEN(MEIN,J))
    GEW=1./FEHL
    SZAE=SZAE+ZAEHL*GEW
    SGEW=SGEW+GEW
    SFEHL=SFEHL+FEHL
    NEIN=NEIN+1
840 CONTINUE
    IF(NEIN-1)810,833,832
832 EN(J)=SZAE/SGEW
    FEN(J)=SQRT(SFEHL/((FLOAT(NEIN)-1.)*SGEW))
    GO TO 810
833 EN(J) =ZAEHL
    FEN(J)= FEHL
810 CONTINUE
804 GO TO 2200
C
C
2200 GO TO 6987
6987 WRITE(9,3001)
3001 FORMAT(1H1)
C
C
    CALL PRUEF
C
C
6988 CALL BNBD
C
C
C BESTIMMEN DER ANZAHL VON FEEDINGS UND ABREGUNGEN
C
6989 IF(MANF-1)5509,5521,5509
5509 DO 5510 K=1,NG
5510 NEG(K)=0
    WRITE(9,5511)
5511 FORMAT(1H1,30X,72HERRECHNETE NIVEAUS (KEV) MIT FEHLER (KEV) ANZA
    1HL DER AN-UND ABREGUNGEN)
    DO5580J=1,JNIV
    WRITE(9,5512)EN(J),FEN(J),NEN(J,J)
5512 FORMAT(1H0,38X,F16.4,3X,F14.4,19X,I5)
5580 CONTINUE
C
```

MAIN

C ZERFALLSSCHEMA DRUCKEN

```
C
  WRITE(9,5513)
5513 FORMAT(1H1,55X,21HEINORDNUNG DER LINIEN)
  WRITE(9,5514)
5514 FORMAT(1H0,5X,11HLINIE (KEV),1X,3HMIT,1X,12HFEHLER (KEV),2X,3HIST,
119H UEBERGANG ZWISCHEN,2X,12HNIVEAU (KEV),2X,3HUND,2X,
212HNIVEAU (KEV),9X,21HNIVEAUDIFFERENZ (KEV))
  DO5520J=2,JNIV
  JLAST=J-1
  DO5530M=1,JLAST
  IF(EGEIN(J,M))5515,5530,5515
5515 DEN=EN(J)-EN(M)
  WRITE(9,5516)EGEIN(J,M),FEGEN(M,J),EN(J),EN(M),DEN
5516 FORMAT(1H0,F16.3, 2X,F15.3,22X,F16.3,3X,F16.3,14X,F16.3)
  DO 5540 K=1,NG
  IF(EGEIN(J,M)-EG(K))5540,5517,5540
5517 NEG(K)=NEG(K)+1
  GO TO 5530
5540 CONTINUE
5530 CONTINUE
5520 CONTINUE
  IF(JDUBL)5522,5521,5522
5522 WRITE(9,5222)
5222 FORMAT(1H0,70HZWISCHEN DEN BEIDEN NIVEAUS KANN          DUBLETT
1EINGEORDNET WERDEN)
  DO 5550 J=1,JDUBL
  JDUBL3=KDUBL3(J)
  JDUBL4=KDUBL4(J)
  WRITE(9,5523)
  1          DUBL2(J),DUBL1(J),EG(JDUBL3),FEG(JDUBL3)
5523 FORMAT(1H0,6X,F11.3,F10.3,8X,F11.3,2X,F10.3)
  WRITE (9,5524)EG(JDUBL4),FEG(JDUBL4)
5524 FORMAT(1H ,35X,F11.3,2X,F10.3/)
5550 CONTINUE
  JDUBL=0
```

C

C GAMMAENERGIEN SORTIEREN

C

```
5521 KEND=NG-1
  DO5300K=1,KEND
  DO5310 N= K,NG
  IF(EG(K)-EG(N))5310,5310,5311
5311 A=EG(K)
  EG(K)=EG(N)
  EG(N)=A
  A=FEG(K)
  FEG(K)=FEG(N)
  FEG(N)=A
  NEGA=NEG(K)
  NEG(K)=NEG(N)
  NEG(N)=NEGA
5310 CONTINUE
5300 CONTINUE
```

C

C SUMMEN VON GAMMAENERGIEN MIT NICHT EINGEORDNETEN GAMMALINIEN

C VERGLEICHEN

C

MAIN

```
WRITE(9,5518)
5518 FORMAT(1H1,23X,7HLINIE 1,5X,7HLINIE 2,5X,9HSUMME 1+2,2X,12HAEQUIVA
1LENTE/62X,5HLINIE/)
NGEND = NG-1
DO5560L =1,NGEND
MBE=L+1
DO5570M=MBE,NG
IF(NEG(L))5531,5532,5531
5531 IF(NEG(M))5570,5532,5570
5532 SEG=EG(L)+EG(M)
IF(SEG-EB)5533,5533,5570
5533 FSEG=FEG(L)+FEG(M)
DO5100 JE=1,NG
5534 IF(SEG+FSEG+FEG(JE)-EG(JE))5100,5100,5535
5535 IF(SEG-FSEG-FEG(JE)-EG(JE))5536,5100,5100
5536 WRITE(9,5537)EG(L),EG(M),SEG,EG(JE)
5537 FORMAT(1H0,20X,F11.3,1X,F11.3,2X,F11.3,1X,F11.3)
5100 CONTINUE
5570 CONTINUE
5560 CONTINUE
```

C
C DRUCKEN DER ENERGIETABELLE

```
C
WRITE(9,5561)
5561 FORMAT(1H1,49X,23HTABELLE DER GAMMALINIEN)
WRITE(9,5562)
5562 FORMAT(3CX,13HENERGIE (KEV),11X,12HFEHLER (KEV), 5X,21HZAHL DER EI
1NORDNUNGEN)
5577 DO5554K=1,NG
5554 WRITE(9,5556)EG(K),FEG(K),NEG(K)
5556 FORMAT(1H ,30X,F11.3,12X,F11.3,12X,I5)
WRITE(9,5551)
5551 FORMAT(1H0)
5544 IF(NGH)5546,5546,5547
5547 WRITE(9,5549)
5549 FORMAT(1H0)
DO5200 K=1,NGH
5200 WRITE(9,5556)EGH(K),FEGH(K)
```

C
C ANFANGSMARKE ABFRAGEN UND MODIFIZIEREN

```
C
5546 IF(MANF-200)5151,5150,5150
5150 MANF=200-MANF
I=1
5151 IF(MANF-2)5146,5146,5148
5148 IF(MANF-100)5147,5147,5152
5152 MANF=MANF-1
GO TO 5071
5146 IF(MANF)5049,5147,5147
5147 GO TO 1000
5049 MANF=MANF+1
```

C
C EINGEORDNETE LINIEN AUS DER ENERGIETABELLE STREICHEN

```
C
DO 5050 K=1,NG
IF(NEG(K))5050,5050,5051
5051 EG(K)=0.
5050 CONTINUE
```

MAIN

```
5052 NGEND=NG
      DO 5060 K=1,NGEND
      IF(EG(K))5060,5061,5060
5061 KANF=K
      NG=NG-1
      IF(NG-1) 5147,5147,5062
5062 DO 5070K1=KANF,NG
      EG(K1)=EG(K1+1)
      FEG(K1)=FEG(K1+1)
5070 CONTINUE
      GO TO 5052
5060 CONTINUE
      IF(I)5147,5147,5071
5071 GO TO 6986
      END
```

BNBD

SUBROUTINE BNBD

```
C
DIMENSION FEGEN(100,100),NEN(100,100)
COMMON NN,NAN,NGH,NG,EB,FEB,UNTGR,OBGR,NPRES
COMMON EN(100),FEN(100),EAN(30),EGH(30),FEGH(30)
COMMON EG(400),FEG(400),NEG(400)
COMMON EGEIN(100,100)
COMMON ENL(250),FENL(250),NNL(250)
COMMON JDUBL,DUBL1(50),DUBL2(50),KDUBL3(50),KDUBL4(50)
COMMON JNIV,JANF,MARK1,MANF,L,M,I,JE,ME
COMMON ENLO(2),FENLO(2)
EQUIVALENCE(EGEIN(1,1),FEGEN(1,1))
EQUIVALENCE(EGEIN(1,1),NEN(1,1))
EQUIVALENCE(FENLO(1),FENL),(FENLO(2),FEN2L),(ENLO(1),ENL)
EQUIVALENCE(ENLO(2),EN2L)
```

```
C
C BINDUNGSENERGIE NEU BERECHNEN UND DRUCKEN
C
```

```
IF(NGH)6010,6040,6010
6010 IF(EN(JNIV)-EB+FEN(JNIV)+FEB)6112,6112,6110
6110 IF(EN(JNIV)-EB-FEN(JNIV)-FEB)6111,6112,6112
6112 JNIV=JNIV+1
6111 J = JNIV
EN(J)=EB
FEN(J)=FEB
JM1 = J-1
DO 6001 M =1, JM1
DO 6002 K=1,NGH
IF(EN(J)-EN(M)+FEN(J)+FEN(M)+FEGH(K)-EGH(K))6002,6002,6011
6011 IF(EN(J)-EN(M)-FEN(J)-FEN(M)-FEGH(K)-EGH(K))6012,6002,6002
6002 CONTINUE
GO TO 6001
6012 FEGEN(M,J)=FEGH(K)
EGEIN(J,M)=EGH(K)
6001 CONTINUE
```

```
C
NEIN=0
ZAEHL=0.
GEW=0.
SZAE=0.
SGEW=0.
SFEHL = 0.
WRITE(9,6014)
6014 FORMAT(1H1,51HZUR BERECHNUNG DER BINDUNGSENERGIE WURDEN VERWENDET,
14X,6HNIVEAU,1X,3HMIT,1X,6HFEHLER,4X,3HUND,4X,9HUEBERGANG,1X,3HMIT,
21X,6HFEHLER,4X,16HNIVEAU+UEBERGANG)
```

```
C
DO 6003 MEIN=1, JM1
IF(EGEIN(J,MEIN))6013,6003,6013
6013 ZAEHL=EGEIN(J,MEIN)+EN(MEIN)
FEHL = SQRT(FEN(MEIN)*FEN(MEIN)+FEGEN(MEIN,J)*FEGEN(MEIN,J))
GEW =1./FEHL
SZAE=SZAE+ZAEHL*GEW
SGEW=SGEW+GEW
SFEHL = SFEHL+FEHL
NEIN=NEIN+1
WRITE(9,6015)
1 EN(MEIN),FEN(MEIN),EGEIN(J,MEIN),FEGEN(MEIN,J),ZAEHL
```

BNBD

```
6015 FORMAT(1H0,50X,F11.3,1X,F10.3,9X,F11.3,1X,F10.3,9X,F11.3)
6003 CONTINUE
      IF(NEIN-1) 6022,6033,6032
6022 WRITE(9,6023)
6023 FORMAT(1H0,97HKEIN HOCHENERGETISCHER UEBERGANG PASST IN DAS TERMSC
      1HEMA MIT DEM AUSGANGSWERT DER BINDUNGSENERGIE)
      GO TO 6028
6032 EN(J) = SZAE/SGEW
      FEN(J)=SQRT(SFEHL/(((FLOAT(NEIN)-1.)*SGEW)))
      GO TO 6028
6033 EN(J) =ZAEHL
      FEN(J) =FEHL
6028 WRITE(9,6029)EN(J),FEN(J)
6029 FORMAT(1H0,35HDARAUS ERRECHNETE BINDUNGSENERGIE =,F12.4,4H KEV,
      115H MIT FEHLER =,F 8.4,1X,3HKEV)
6040 DO 6004 J=1,JNIV
      NEN(J,J)=0
      DO 6060 M=1,JNIV
      IF(M-J)6034,6060,6034
6034 IF(EGEIN(J,M))6035,6060,6035
6035 NEN(J,J)=NEN(J,J)+1
6060 CONTINUE
6004 CONTINUE
      RETURN
      END
```

PRUEF

SUBROUTINE PRUEF

C

```
DIMENSION FEGEN(100,100),NEN(100,100)
COMMON NN,NAN,NGH,NG,EB,FEB,UNTGR,OBGR,NPRES
COMMON EN(100),FEN(100),EAN(30),EGH(30),FEGH(30)
COMMON EG(400),FEG(400),NEG(400)
COMMON EGEIN(100,100)
COMMON ENL(250),FENL(250),NNL(250)
COMMON JDUBL,DUBL1(50),DUBL2(50),KDUBL3(50),KDUBL4(50)
COMMON JNIV,JANF,MARK1,MANF,L,M,I,JE,ME
COMMON ENLO(2),FENLO(2)
EQUIVALENCE(EGEIN(1,1),FEGEN(1,1))
EQUIVALENCE(EGEIN(1,1),NEN(1,1))
EQUIVALENCE(FENLO(1),FEN1L),(FENLO(2),FEN2L),(ENLO(1),EN1L)
EQUIVALENCE(ENLO(2),EN2L)
```

C

C NIVEAUS UEBERPRUEFEN , GEGEBENENFALLS ELIMINIEREN

C

C

```
3009 DO 3101 J=1,JNIV
      NEN(J,J)=0
      DO3010M=1,JNIV
      IF(M-J)3003,3010,3003
3003 IF(EGEIN(J,M))3004,3010,3004
3004 NEN(J,J)=NEN(J,J)+1
3010 CONTINUE
3101 CONTINUE
      DO 3002 JPR=2,JNIV
3011 IF(NEN(JPR,JPR)-2)3002,3005,3002
3005 M=1
3012 IF(EGEIN(JPR,M))3006,3007,3006
3007 M=M+1
      IF(M-JPR)3008,3007,3008
3008 IF(M-JNIV)3012,3012,3002
3006 M1=M
      IF(JPR-M1)3013,3013,3014
3013 M=M+1
      IF(M-JNIV)3015,3015,3002
3015 IF(EGEIN(JPR,M))3016,3013,3016
3016 M2=M
      GO TO 3042
3014 M=M+1
      IF(M-JPR)3017,3014,3017
3017 IF(M-JNIV)3018,3018,3002
3018 IF(EGEIN(JPR,M))3019,3014,3019
3019 M2=M
      IF(JPR-M2)3021,3021,3022
3022 DO3030K=1,M1
      IF(EN(JPR)-EGEIN(JPR,M1)-EGEIN(JPR,M2)+FEN(JPR)+FEGEN(M1,JPR)+
      1FEGEN(M2,JPR)+FEN(K)-EN(K))3030,3030,3023
3023 IF(EN(JPR)-EGEIN(JPR,M1)-EGEIN(JPR,M2)-FEN(JPR)-FEGEN(M1,JPR)-
      1FEGEN(M2,JPR)-FEN(K)-EN(K))3035,3030,3030
3030 CONTINUE
      GO TO 3002
3021 DO3040K=M1,M2
      IF(EN(JPR)-EGEIN(JPR,M1)+EGEIN(M2,JPR)+FEN(JPR)+FEGEN(M1,JPR)+
      1FEGEN(JPR,M2)+FEN(K)-EN(K))3040,3040,3041
3041 IF(EN(JPR)-EGEIN(JPR,M1)+EGEIN(M2,JPR)-FEN(JPR)-FEGEN(M1,JPR)-
```

PRUEF

```
1FEGEN(JPR,M2)-FEN(K)-EN(K))3035,3040,3040
3040 CONTINUE
      GO TO 3002
3042 DO3060K=M2,JNIV
      IF(EN(JPR)+EGEIN(M1,JPR)+EGEIN(M2,JPR)+FEN(JPR)+FEGEN(JPR,M1)+
1FEGEN(JPR,M2)+FEN(K)-EN(K))3060,3060,3043
3043 IF(EN(JPR)+EGEIN(M1,JPR)+EGEIN(M2,JPR)-FEN(JPR)-FEGEN(JPR,M1)-
1FEGEN(JPR,M2)-FEN(K)-EN(K))3035,3060,3060
3060 CONTINUE
      GO TO 3002
3035 IF(NEN(K,K)-2)3044,3002,3044
3044 WRITE(9,3045)
      $           EN(JPR),FEN(JPR),EGEIN(JPR,M1),FEGEN(M1,JPR),
1EGEIN(M2,JPR),FEGEN(JPR,M2)
3045 FORMAT(1H0,23HELIMINIERT WURDE NIVEAU,2F 9.3,18H MIT UEBERGAENGEN
1,2F 9.3,5H UND,2F 9.3)
      JNIVM=JNIV-1
      DO3050J=JPR,JNIVM
      EN(J)=EN(J+1)
      FEN(J)=FEN(J+1)
      DO3080M=1,JNIV
      IF(M-J-1)3081,3080,3081
3081 EGEIN(J,M)=EGEIN(J+1,M)
      FEGEN(M,J)=FEGEN(M,J+1)
3080 CONTINUE
3050 CONTINUE
      EN(JNIV) =0.
      FEN(JNIV) =0.
      DO3090J=1,JNIV
      EGEIN(JNIV,J)=0.
      EGEIN(J,JNIV) =0.
3090 CONTINUE
      JNIV=JNIV-1
      DO3070J=JPR,JNIV
      ZAEHL=0.
      GEW=0.
      SZAE=0.
      SGEW=0.
      SFEHL = 0.
      NEIN=0
      JEND=J-1
      DO3100 MEIN=1,JEND
      IF(EGEIN(J,MEIN))3047,3100,3047
3047 ZAEHL=EGEIN(J,MEIN)+EN(MEIN)
      FEHL = SQRT(FEN(MEIN)*FEN(MEIN)+FEGEN(MEIN,J)*FEGEN(MEIN,J))
      GEW =1./FEHL
      SZAE=SZAE+ZAEHL*GEW
      SGEW=SGEW+GEW
      SFEHL = SFEHL+FEHL
      NEIN=NEIN+1
3100 CONTINUE
      IF(NEIN-1) 3070,3033,3032
3032 EN(J) = SZAE/SGEW
      FEN(J)=SQRT(SFEHL/((FLOAT(NEIN)-1.)*SGEW))
      GO TO 3070
3033 EN(J) =ZAEHL
      FEN(J) =FEHL
3070 CONTINUE
```

- A22 -

PRUEF

GO TO 3009
3002 CONTINUE
RETURN
END

SUBIL

SUBROUTINE SUBIL

```
C
DIMENSION FEGEN(100,100),NEN(100,100)
COMMON NN,NAN,NGH,NG,EB,FEB,UNTGR,OBGR,NPRES
COMMON EN(100),FEN(100),EAN(30),EGH(30),FEGH(30)
COMMON EG(400),FEG(400),NEG(400)
COMMON EGEIN(100,100)
COMMON ENL(250),FENL(250),NNL(250)
COMMON JDUBL,DUBL1(50),DUBL2(50),KDUBL3(50),KDUBL4(50)
COMMON JNIV,JANF,MARK1,MANF,L,M,I,JE,ME
COMMON ENLO(2),FENLO(2)
EQUIVALENCE(EGEIN(1,1),FEGEN(1,1))
EQUIVALENCE(EGEIN(1,1),NEN(1,1))
EQUIVALENCE(FENLO(1),FEN1L),(FENLO(2),FEN2L),(ENLO(1),EN1L)
EQUIVALENCE(ENLO(2),EN2L)

C
C SUMMEN BILDEN UND MIT NIVEAUABSTAENDEN VERGLEICHEN
C
C
      JANF =0
      I =0
4009 NG1 =NG-1
      DO 4060 L=1,NG1
      MA1=L+1
      DO4070M=MA1,NG
      SEG=EG(L)+EG(M)
      IF(EB-SEG)4070,4036,4036

C
C UEBERLAPPUNG MIT FEHLERQUADRATEN
C
4036 FSEQ=FEG(L)*FEG(L)+FEG(M)*FEG(M)
      DO4080JE=2,JNIV
      JEND=JE-1
      DO4090ME=1,JEND
      HIGR=EN(JE)-EN(ME)-SEG
      FEBAL=SQRT(FEN(ME)*FEN(ME)+FEN(JE)*FEN(JE)+FSEQ)
      IF(HIGR+FEBAL)4090,4090,4037
4037 IF(HIGR-FEBAL)4038,4090,4090
4090 CONTINUE
4080 CONTINUE
      GO TO 4070
4038 EN1L=EN(ME)+EG(L)
      FEN1L=FEN(ME)+FEG(L)
      EN2L=EN(ME)+EG(M)
      FEN2L=FEN(ME)+FEG(M)
      DO4101 LGE=1,2
      DO4100 K=1,JNIV
      IF(ENLO(LGE)+FENLO(LGE)+FEN(K)-EN(K))4100,4100,4039
4039 IF(ENLO(LGE)-FENLO(LGE)-FEN(K)-EN(K))4070,4100,4100
4100 CONTINUE
      DO4200 K=1,I
      IF(ENLO(LGE)+FENLO(LGE)+FENL(K)-ENL(K))4200,4200,4201
4201 IF(ENLO(LGE)-FENLO(LGE)-FENL(K)-ENL(K))4202,4200,4200
4202 WRITE(9,4108)
      1 ENLO(LGE), EG(L), EG(M),EN(ME),EN(JE)
4108 FORMAT(1H0,6HNIVEAU,F11.3,18H*DURCH UEBERGAENGE,2F11.3,7H ZU DEN,
      18H NIVEAUS,F11.3,4H UND,F11.3,2H *)
      GO TO 4070
```

SUBIL

```
4200 CONTINUE
4101 CONTINUE
      MARK1=1
      DO4115 LCE=1,2
      IF(NAN)4116,4116,4111
4111 DO4113 K=1,NAN
      IF(ENLO(LCE)-EAN(K)+FENLO(LOE))4113,4113,4112
4112 IF(ENLO(LCE)-EAN(K)-FENLO(LOE))4114,4113,4113
4113 CONTINUE
4116 IF(ENLO(LCE)-UNTGR) 4114,4114,4215
4215 IF(ENLO(LCE)-OBGR) 4115,4114,4114
4114 GO TO (4161,4121),LOE
4121 IF(MARK1)4070,4070,4123
4161 MARK1=-1
4115 CONTINUE
4122 IF(-MARK1) 4028,4124,4124
4124 EN1L=EN2L
      FEN1L=FEN2L
4123 MARK1=0
4028 CALL SORTIE
4070 CONTINUE
4060 CONTINUE
      RETURN
      END
```

SORTIE

SUBROUTINE SORTIE

C

```
DIMENSION FEGEN(100,100),NEN(100,100)
COMMON NN,NAN,NGH,NG,EB,FEB,UNTGR,OBGR,NPRES
COMMON EN(100),FEN(100),EAN(30),EGH(30),FEGH(30)
COMMON EG(400),FEG(400),NEG(400)
COMMON EGEIN(100,100)
COMMON ENL(250),FENL(250),NNL(250)
COMMON JDUBL,DUBL1(50),DUBL2(50),KDUBL3(50),KDUBL4(50)
COMMON JNIV,JANF,MARK1,MANF,L,M,I,JE,ME
COMMON ENLO(2),FENLO(2)
EQUIVALENCE(EGEIN(1,1),FEGEN(1,1))
EQUIVALENCE(EGEIN(1,1),NEN(1,1))
EQUIVALENCE(FENLO(1),FEN1L),(FENLO(2),FEN2L),(ENLO(1),EN1L)
EQUIVALENCE(ENLO(2),EN2L)
```

C

```
C NEUGEFUNDENE LOESUNGEN WERDEN IN DIE LISTE "ENL" DER LOESUNGEN
C EINGEREIHT
```

C

C

```
IF(I-249) 2001,2002,2002
2002 IF(JANF)2009,2010,2009
2010 WRITE(9,2007)
2007 FORMAT(1H1,22HUEBER 250 NEUE NIVEAUS)
JANF =1
2009 I=148
2001 I=I+1
IF(MARK1) 2006,2004,2003
2003 ENL(I) = EN2L
FENL(I)= FEN2L
GO TO 2005
2004 ENL(I)=EN1L
FENL(I) = FEN1L
2005 WRITE(9,2018)
1 ENL(I),EG(L),EG(M),EN(ME),EN(JE)
2018 FORMAT(1H0,6HNIVEAU,F11.3,18H DURCH UEBERGAENGE,2F11.3,7H ZU DEN,
18H NIVEAUS,F11.3,4H UND,F11.3)
MARK1 = MARK1 -1
GO TO 2001
2006 I=I-1
2008 RETURN
END
```

