

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ КОМИТЕТ
ПО ИСПОЛЬЗОВАНИЮ АТОМНОЙ ЭНЕРГИИ СССР

ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ

СЕРИЯ:

Ядерные константы

ВЫПУСК

2 (56)

1984

Сборник подготовлен Комиссией по ядерным данным
и Физико-энергетическим институтом

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Главный редактор **О.Д. КАЗАЧКОВСКИЙ**

НЕЙТРОННЫЕ КОНСТАНТЫ И ПАРАМЕТРЫ

Зам. главного редактора **Б.Д. КУЗЬМИНОВ**

Ф.Н. Беляев, П.П. Благоволин, В.П. Вертебный, В.Я. Головня, Ю.С. Замятнин,
Ю.А. Казанский, С.С. Коваленко, В.Е. Колесов, В.А. Коньшин, Б.Д. Кузьминов,
В.Н. Манохин, В.И. Мостовой, Г.В. Мурадян, В.Н. Нефедов, М.Н. Николаев,
Ю.П. Попов, Г.Я. Труханов, В.А. Толстиков, О.А. Сальников, С.И. Сухоручкин,
Г.Е. Шаталов, Г.Б. Яньков, В.П. Ярына, М.С. Юдкевич

КОНСТАНТЫ И ПАРАМЕТРЫ СТРУКТУРЫ ЯДРА И ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ

Зам. главного редактора **А.Г. ЗЕЛЕНКОВ**

Б.Я. Гужовский, П.П. Дмитриев, Н.Н. Жуковский, Б.С. Ишханов, Е.Г. Копанец,
В.М. Кулаков, И.П. Селинов, Ю.В. Сергеенков, Ю.В. Хольнов, Н.П. Чижова,
Ф.Е. Чукреев

ЯДЕРНО-РЕАКТОРНЫЕ ДАННЫЕ

Зам. главного редактора **М.Ф. ТРОЯНОВ**

И.А. Архангельский, П.П. Благоволин, А.И. Воропаев, А.Ю. Гагаринский,
Т.В. Голашвили, Л.В. Диев, В.П. Жарков, С.М. Зарицкий, Ю.А. Казанский,
А.А. Лукьянов, В.Г. Мадеев, В.И. Матвеев, В.А. Наумов, М.Н. Николаев,
Р.В. Никольский, Э.Е. Петров, Г.Б. Померанцев, Л.В. Точеный, В.В. Хромов,
О.В. Шведов

Ответственный секретарь выпуска **В.В. ВОЗЯКОВ**

© Центральный научно-исследовательский институт
информации и технико-экономических исследований
по атомной науке и технике (ЦНИИАтоминформ), 1984

ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ

Серия: ЯДЕРНЫЕ КОНСТАНТЫ

Научно-технический сборник

Выпуск 2(56)

КОНСТАНТЫ И ПАРАМЕТРЫ СТРУКТУРЫ ЯДРА И ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ

Москва

1984

СОДЕРЖАНИЕ

Журавлева Г.М., Чукреев Ф.Е. Решение задачи пополнения и использования международной базы экспериментальных ненейтронных ядерных данных в формате "Обобщенный ЭКСФОР"	3
Шорин В.С., Карабаш В.А., Соснин А.Н. Дифференциальное сечение реакции $^{14}\text{N}(d,p)^{15}\text{N}$ в области энергии дейтронов 0,3-2,0 МэВ для задач элементного анализа	26
Дмитриев П.П. Систематика выходов ядерных реакций для толстой мишени при энергии дейтронов 22 МэВ	32
Гречухин Д.П., Солдатов А.А. Исследование процесса конверсии мягких ядерных переходов ($\hbar\omega \leq 3$ кэВ) в связи с эффектами химического окружения атома	36
Абрамович С.Н., Гужовский Б.Я., Перешивкин В.А. Полные сечения образования радионуклида ^{11}C в реакциях $^9\text{Be}(^3\text{He},n)^{11}\text{C}$, $^{10}\text{B}(d,n)^{11}\text{C}$ и $^{11}\text{B}(d,2n)^{11}\text{C}$	55
Журавлева Г.М., Игнаточкин А.Е., Чукреев Ф.Е. Технология ввода данных для получения вторичного информационного документа в формате "Обобщенный ЭКСФОР" на малой ЭВМ	60
Правила подготовки авторской рукописи к изданию	71

УДК 681.3.06-142.2:539.170

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ПОПОЛНЕНИЯ И ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МЕЖДУНАРОДНОЙ БАЗЫ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ НЕЕНЕЙТРОННЫХ ЯДЕРНЫХ ДАННЫХ В ФОРМАТЕ
"ОБОБЩЕННЫЙ ЭКСФОР"

Г.М.Ж у р а в л е в а, Ф.Е.Ч у к р е е в

THE DECISION OF UPDATING AND USING PROBLEM OF INTERNATIONAL
NON - NEUTRON EXPERIMENTAL NUCLEAR DATA BASE "GENERALIZED
EXFOR". The software system for automatic produce of unfor-
malizationed text information for international exchange of
experimental nuclear data in "Generalized Exchange Format"
is described. The brief explanation of "Generalized Exchan-
ge Format" and the information about extent international
base of experimental non - neutron nuclear data are given.

Постоянное повышение стоимости экспериментов во всех областях науки, обусловленное необходимо-
стью исследования различных явлений, поставило задачу собрать и упорядочить имеющуюся информацию
и извлечь из нее надежные данные для использования их в разных областях науки и техники [1].

Процесс общения людей, занятых обработкой количественной информации, можно представить в ви-
де четырех последовательных стадий:

- получение и публикация данных самим исследователем;
- сбор, анализ и сопоставление полученной различными методами научной информации и выработка
необходимых табличных, оцененных и стандартных справочных данных;
- распространение этих данных в удобном для пользователя виде;
- пользование табличными, оцененными и стандартными справочными данными.

Было бы слишком непрактично и дорого каждому исследователю или даже лаборатории самим созда-
вать собственный набор данных. Поэтому необходимо осуществить связь между теми, кто впервые по-
лучил данные, и теми, кто ими пользуется, создав систему обзора, оценки и составления таблиц дан-
ных квалифицированными специалистами. Именно для осуществления этих целей в области ядерной физи-
ки по инициативе Секции ядерных данных Международного агентства по атомной энергии (МАГАТЭ) в
1964 г. была создана международная сеть центров [2]. Основные задачи центров - сбор эксперимен-
тальной информации, оценка данных, полученных в экспериментах, и распространение этих данных.
В настоящее время между центрами осуществляется обмен базами ядерных данных с помощью магнитных
лент. Данные на ленты записываются с соблюдением международных стандартов по разметке и структуре
магнитных лент. В стандартах определяются и правила построения блоков данных разных форматов.
Стандартизация данных по форматам записи способствует исчезновению языковых трудностей при обме-
не данными, а также тому, что центры, имеющие различное вычислительное оборудование, относитель-
но легко перерабатывают и интерпретируют полученную информацию, используя ее для решения различ-
ных задач. При передаче баз данных на магнитных лентах из одной страны в другую осуществляется
обмен научно-технической информацией в международном масштабе, что повышает научно-технический
потенциал стран, входящих в международную сеть центров. Кроме того, такой обмен позволяет прово-
дить многоаспектный поиск информации и пополнять базу данных центра в автоматическом режиме, что
намного сокращает трудозатраты, так как в этом случае используется полностью формализованная ин-
формация.

В настоящей статье рассматриваются вопросы, связанные с пополнением международной базы экспе-
риментальных неенейтронных ядерных данных в формате "Обобщенный ЭКСФОР" (база данных ЭКСФОР)
неформализованной первичной информацией и решением этой задачи в Центре по данным о строении атом-
ного ядра и ядерных реакциях Государственного комитета по использованию атомной энергии СССР

(ЦАЯД) [3]. Однако авторы считают целесообразным прежде всего дать основные сведения о международном формате "Обобщенный ЭКОФОР" (ОЭ). Этот формат является искусственным информационным языком, предназначенным для фактографического описания физических экспериментов с последующим поиском данных и их переработкой для синтеза новой информации (последнее характерно для информационно-логических систем). ОЭ можно определить как формат, представляющий собой компактную форму записи экспериментальных цифровых значений и физической информации (необходимой для понимания эксперимента и интерпретации данных), основанный на применении ЭВМ и предназначенный для международного обмена экспериментальными ядерными данными.

В настоящее время формат ОЭ широко используется, что объясняется его гибкостью и сравнительно легкой приспособляемостью к описанию результатов любого типа ядерно-физических экспериментов. Многолетний опыт использования показал, что этот формат путем модификации словарей можно применять для описания практически любых экспериментов с зависимостями непрерывного типа, например таких, как инфракрасные спектры, характеристики радиоактивных превращений, выходы продуктов химических взаимодействий в бинарных реакциях и т.п. Структура формата ОЭ разрабатывалась таким образом, чтобы сфера компиляции данных в нем могла быть расширена. Исторически развитие формата началось с компиляции сведений о реакциях под действием нейтронов [4]. Затем благодаря накоплению опыта и расширению международного сотрудничества получила развитие компиляция данных из экспериментов по ядерным реакциям под действием заряженных частиц, а затем и фотонов [5]. В последнее время разработан формат ОЭ применительно к атомно-молекулярным данным. В Физико-энергетическом институте (г.Обнинск) он адаптирован для теплофизических данных.

Распространение базы данных ЭКОФОР по реакциям с заряженными частицами осуществляется следующими ведущими центрами (которые являются ответственными за сбор, компиляцию и распространение информации по ядерным данным в определенной области обслуживания):

- ЦАЯД, обслуживающий СССР;
- Национальный центр ядерных данных США (Брукхейвенская национальная лаборатория), обслуживающий США и Канаду;
- Секция ядерных данных МАГАТЭ (Австрия), обслуживающая центры Восточной Европы, Азии, Южной и Центральной Америки, Австралии и Новой Зеландии;
- Центр атомно-энергетической документации (ФРГ), обслуживающий ФРГ*;
- Банк данных Агентства по атомной энергии в Сакле (Франция), занимающийся распространением данных среди всех стран Организации экономического сотрудничества и развития (кроме США и Канады).

Каждый центр может компилировать данные, измеренные вне его области обслуживания, но в других центрах передавать данные только из своей области обслуживания. Таким образом в каждом из центров создается международная библиотека экспериментальных ядерных данных на машинных носителях. При компиляции новых экспериментальных работ для включения в базу данных предпочтение отдается (с учетом потребностей каждого конкретного центра) работам, содержащим данные о важнейших элементах и реакциях. Деятельность центров ФРГ и ЦАЯД в основном направлена на компиляцию работ по интегральным ядерным данным о заряженных частицах, используемых для активационного анализа и производства изотопов. Центры США и МАГАТЭ занимаются компиляцией ядерных данных о заряженных частицах на основе реакций, которые представляют интерес как источники нейтронов.

Как уже отмечалось, для обмена данными между центрами необходимо стандартизировать содержание информации. В формате ОЭ это достигается посредством использования ключевых слов - системных и информационных идентификаторов и специально разработанных кодов (приложение I). Ключевые слова и коды делают информацию "понятной" для вычислительной машины и обеспечивают необходимую компактность записи при передаче информации. В то же время формат ОЭ предусматривает запись любого свободного текста, отражающего важные аспекты эксперимента, на которые следует обратить внимание, но которые нельзя записать с помощью принятых кодов. Очевидно, требование гибкости формата противоречит требованию его компактности. Вместе с тем строгие правила формата ОЭ обеспечивают относительно легкую трансформацию данных из ОЭ в жесткие, но компактные записи, которые могут потребоваться для ввода в специально подготовленные шаблоны для последующих вычислений [6].

* Группа KASPARAG в Карлсруэ, официально входившая в этот центр и занимавшаяся компиляцией данных о сечениях для заряженных частиц, прекратила существование 1 января 1982 г. Однако база данных, насчитывавшая 200 закомпиллированных ей работ, включена в международную базу данных по реакциям с заряженными частицами.

Требование компактности записи информации в формате ОЭ повлекло за собой разработку набора словарей для описания различных аспектов, отражающих результаты и условия проведения эксперимента, а также для дополнительной информации о нем (например, библиографической). Этот набор словарей используется для компиляции данных, контроля примененных кодов в программах синтаксической и семантической проверки, а также при восстановлении и расширении свободного текста с тем условием, чтобы закомпилированный текст мог быть легко прочитан человеком. Секция ядерных данных МАГАТЭ отвечает за координацию и возможность включения новых кодов в словари формата, за их соответствие ранее принятым кодам. Секция регулярно посылает дополненные и/или обновленные словари в другие центры.

Существующий общепринятый набор определений, соглашений, правил кодирования и международного обмена данными в формате ОЭ содержится в работе [7]. Это руководство состоит из двух частей. Первая часть - EXFOR SYSTEM - посвящена непосредственно описанию формата и его структуры, правилам кодирования ядерных данных и международным связям по обмену информацией в формате ОЭ. Эта часть является отправным материалом и для физиков, которые компилируют ядерные данные, и для программистов, которые создают математическое обеспечение для обработки информации, записанной в формате ОЭ (для системы ЭКОФОР). Вторая часть - LEEXFOR - содержит специфическую информацию, необходимую непосредственно физикам. Здесь уточняются правила кодирования и определения кодов, физический смысл кодов и область их применения. Формат ОЭ постоянно развивается таким образом, чтобы при наибольшей стандартизации, способствующей автоматизации обработки данных на ЭВМ, имелась возможность включения новых типов данных, широкой и разнообразной информации об эксперименте. Формат развивается главным образом в двух направлениях: 1) совершенствование правил кодирования в целях их однозначной интерпретации, что особенно важно при использовании формата для различных приложений (компиляции нейтронных, венеитронных, фотоядерных реакций); 2) расширение наборов словарей формата ОЭ и их кодов (как следствие первого).

Фактически любые данные об экспериментальной установке, методике измерений и их обработке не только могут, но и должны быть записаны в формате ОЭ, так как они используются или не сразу после публикации, или для выводов, о возможности которых автор мог и не подозревать. Объем обычной журнальной статьи ограничен, поэтому не все детали эксперимента могут быть описаны. В этом случае магнитная лента дополняет журнальную публикацию, сохранив для последующего анализа такие подробности, которые могут показаться излишними редактору или рецензенту. Но все эти "малозначительные" подробности известны только автору публикации. Они попадут на обменную ленту, если подготовку записи будет делать не физик-компилятор, работающий в центре, а сам автор. К тому же форматом предусмотрена компиляция данных не только по опубликованным, но и по предварительным экспериментальным работам.

Принципы кодирования результатов экспериментальных исследований состоят в следующем. Если экспериментальная работа (публикация) закодирована по правилам формата ОЭ, она записывается на международную обменную ленту, которая обычно содержит ряд закомпилированных публикаций. В публикации выделяются разделы таким образом, чтобы в каждом из них была записана информация, относящаяся, например, к одному типу реакции для определенного нуклида. Первый раздел закомпилированной публикации всегда содержит информацию, общую для всех последующих (см. приложение I). Каждый из разделов (кроме первого) может иметь до трех секций: библиографической информации, общих данных и таблицы данных. Структура обменной ленты представлена на рис. I.

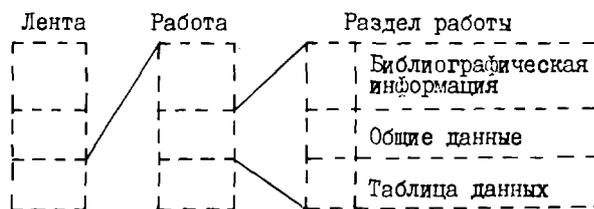


Рис. I. Общая структура обменной ленты

Для экспериментаторов, оценщиков, разработчиков и других потребителей наибольший интерес представляют (см. приложение I):

- результаты измерений и расчетов, представленные в форме таблиц с колонками независимых переменных, ошибок и т.д. (записываются в секции DATA);

- числовые данные, которые являются общими для всей таблицы данного раздела (записываются в секции COMMON);

- числовая информация, которая является общей для данной работы (записывается всегда в секции COMMON первого раздела).

Таблицы экспериментальных цифровых данных не могут быть осмыслены и разумно использованы без сопроводительной текстовой информации о данных, библиографических ссылках, анализе ошибок, нормализации и т.д. Эти сведения записываются в библиографической секции. Каждый пункт описательной информации определяется с помощью информационных идентификаторов, таких, как TITLE, MONITOR, REACTION. Любой информационный идентификатор описывается объектно-характеристической структурой /8,9/, где его название определяет наименование объекта, свойства которого проявляются в виде совокупности конечного числа характеристик (табл. I). По правилам формата характеристики записываются в определенной последовательности с соответствующими разделителями. Значения характеристик представлены кодами или числовыми значениями. Например, для информационного идентификатора DETECTOR это такие коды, как (GELL), (SCIN), для идентификатора METHOD - (TOP), (COINC), означающие, что при измерениях применялся германиево-литиевый или спинтиллиационный детектор, а сами измерения проводились методом времени пролета или совпадений. В то же время любая кодируемая информация может быть дополнена свободным текстом.

Структура информационного идентификатора

Таблица I

Информационный идентификатор	Значение информационного идентификатора	Номер поля	Включаемые поля и их коды
ADD-RES	Информация о дополнительных результатах, содержащихся в работе, но не включенных в таблицу данных	-	Код из словаря 20
ANALYSIS	Описание метода анализа, используемого для получения данных (параметров) из экспериментальных точек или аппаратных спектров	-	Код из словаря 23
ASSUMED	Информация об опорных значениях, используемых в процессе анализа данных	1	Код заголовка колонки в таблице данных
AUTHOR	Инициалы и фамилии всех авторов публикации	2	Описание ядерной реакции, для которой приводятся параметры
COMMENT	Комментарии к работе. Дополнительная информация, которая логически не может быть записана под каким-либо информационным идентификатором	-	Свободный текст
CORRECTION	Информация о введенных авторами поправках в экспериментальные данные	-	"
COVARIANCE	Информация, представленная экспериментатором о корреляциях внутри таблицы данных	-	"
CRITIQUE	Мнение компилятора или оценщика о качестве данных, представленных в таблице	-	"
DECAY-DATA	Данные о радиоактивном распаде нуклидов, на основе которых рассчитаны сечения реакции	1	Метка для таблицы данных, где указаны значения
		2	Распадающийся нуклид, кодируется в форме Z-S-A-X
		3	Период полураспада с указанием единиц измерений (код из словаря 25)
		4	Тип излучения (код из словаря I3)
		5	Энергия частиц (в киловольтах)
		6	Интенсивность в частицах на распад ядра (поля 4,5,6 могут повторяться столько раз, сколько необходимо)

Информационный идентификатор	Значение информационного идентификатора	Номер поля	Включаемые поля и их коды
DECAY-MON	Данные о радиоактивном распаде нуклидов, используемые в публикации о реакции-мониторе	-	Кодирование аналогично DECAY-DAT.
DETECTOR	Тип детектора, используемого в измерениях	-	Код из словаря 22
EN-SEC	Описание заголовков, под которыми представлены данные об энергиях частиц-продуктов	1 2	Код заголовка колонки в таблице данных Код частицы (из словаря I3) или нуклида (кодирование в форме Z-S-A-X)
ERR-ANALYS	Описание типов и источников неопределенностей, приведенных в таблице данных	1 2	Код заголовка колонки в таблице данных Свободный текст
EXP-YEAR	Год выполнения эксперимента указывается, если существенно отличается от года публикации	-	
FACILITY	Основное оборудование, использованное в эксперименте	1 2	Код из словаря I8 Может быть указан код института или лаборатории (код из словаря 3)
FLAG	Номер метки и расшифровка ее смысла. Используется для выделения тех экспериментальных данных, которые отличаются от остальных точек таблицы данных (например, способом получения, обработкой и т.д.)	1 2	Метка для таблицы данных Свободный текст
HALF-LIFE	Данные о величине периода полураспада указанного нуклида	1 2	Код заголовка колонки в таблице данных Код нуклида (кодирование в форме Z-S-A-X)
HISTORY	Используется для документирования набора данных (работы или раздела)	1 2	Дата Код проделанного над набором данных действия (из словаря I5)
INC-SPECT	Информация о некоторых характеристиках пучка частиц, важных для оценки качества данных (разрешение, форма спектра и т.д.)	-	Свободный текст
INSTITUTE	Лаборатория, институт, университет, где выполнен эксперимент	-	Код из словаря 3
METHOD	Описание метода эксперимента	-	Код из словаря 2I
MISC-COL	При обозначении любых приведенных в работе данных, для которых не предусмотрены специальные заголовки (из словаря 24) в таблице	1 2	Код заголовка колонки в таблице данных Свободный текст
MONITOR	Указание реакции-монитора, если она использована для абсолютизации экспериментальных данных	-	Кодирование аналогично информационному идентификатору REACTION
MONITOR-REF	Ссылка на публикацию, из которой были взяты данные о реакции-мониторе	1 2 3	Номер раздела закодированной в формате 09 работы Первый автор публикации по реакции-монитору Ссылка на публикацию (кодирование аналогично информационному идентификатору REFERENCE)
N-SOURCE	Источник частиц пучка	-	Код из словаря I9
PART-DET	Детектируемые мгновенные продукты реакции	-	Тип излучения (код из словаря I3) или код частицы в форме Z-S-A-X
RAD-DET	Данные о типе излучения радиоактивных продуктов	1 2	Метка для таблицы данных, где указаны значения Нестабильный нуклид (кодирование в форме Z-S-A-X)

Информационный идентификатор	Значение информационного идентификатора	Номер поля	Включаемые поля и их коды
REACTION	Описание исследованной ядерной реакции	3	Тип излучения (код из словаря I3)
		1	Ядро-мишень (кодирование в форме Z-S-A-X)
		2	Налетающая частица (код из словаря 33, или кодирование в форме Z-S-A-X)
		3	Процесс (код из словаря 30) или совокупность вылетающих частиц (код из словаря 33)
		4	Ядро-продукт (кодирование в форме Z-S-A-X)
		5	Информация о ветви реакции (код из словаря 31)
		6	Информация об измеренном параметре (код из словаря 32)
		7	Указание (когда это не очевидно) тех частиц - продуктов реакции, регистрация которых обеспечила измерение параметра поля 6 (код из словаря 31)
		8	Дополнительная информация о представлении данных, например, о коэффициентах разложения в ряд и т.п. (код из словаря 34)
REFERENCE	Ссылка на публикацию	9	Источник данных: эксперимент, расчет, оценка (код из словаря 35)
		1	Тип публикации (код из словаря 4)
		2	Код ссылки (коды из словарей 5, 6, 7)
		3	Том (выпуск)
		4	Страница
REL-REF	Ссылки, имеющие отношение к данной работе	5	Дата публикации
		1	Причина ссылки (код из словаря 17)
		2	Первый автор публикации
SAMPLE	Характеристика образца (материал, конструкция)	3	Ссылка на публикацию (кодирование аналогично информационному идентификатору REFERENCE)
		-	Свободный текст
STATUS	Информация о статусе приведенных данных	1	Код из словаря I6
		2	Ссылка на набор данных (работу или раздел), закодированный в формате 09
TITLE	Полное название публикации	-	-

Все цифровые данные определяются с помощью заголовков измерений Data-heading (например, DATA, EN) и единиц измерений Data-unit (например, EV, MB). Некоторые таблицы данных могут иметь более сложную структуру, их может быть несколько для разных реакций в одном разделе. В этом случае каждая реакция соединяется с соответствующей колонкой таблицы данных (секцией DATA) с помощью указателя (см. приложение I), который используется для связи информации из разных секций.

Логическое деление информации на обменной ленте на работы, разделы и секции осуществляется посредством системных идентификаторов (рис. 2). Каждый из них определяет информационную единицу на ленте обмена (табл. 2). В комбинациях с модификациями NO и END системные идентификаторы определяют:

- начало информационной единицы (посредством записи системного идентификатора);
- конец информационной единицы (модификацией END, предшествующей системному идентификатору);
- отмену информационной единицы (модификацией NO, предшествующей системному идентификатору).

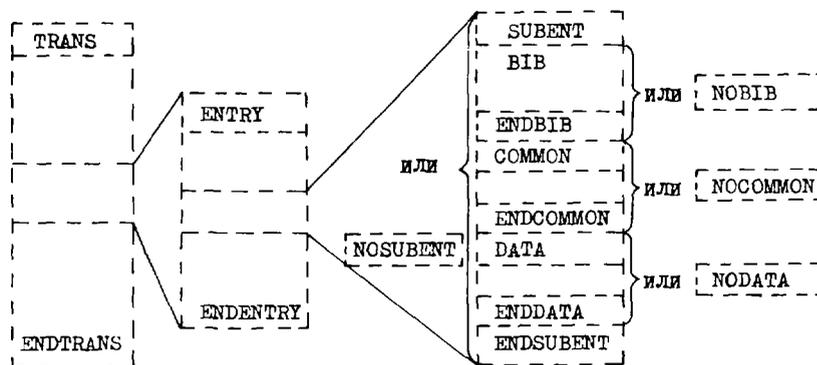


Рис.2. Структура ленты обмена с использованием системных идентификаторов

Размер одной записи на ленте имеет длину в 80 символов, причем каждая запись имеет свой индивидуальный номер - идентификатор записи (см. приложение I). Он записывается в колонках с 67 по 80 и состоит из пяти полей:

67 - идентификатор центра, определяющий индивидуальный код центра, передающего информацию в сеть центров;

68-71 - цифровой идентификатор работы, определяющий порядковый номер очередной закомпилированной публикации;

72-74 - цифровой идентификатор раздела, определяющий порядковый номер раздела в работе;

75-79 - цифровой идентификатор последовательной нумерации записей в разделе;

80 - сигнал изменений для указания тех записей, которые были изменены после предыдущей передачи ленты.

Использование идентификатора записи гарантирует, что каждая запись на ленте имеет единственную уникальную ссылку, которая может быть легко найдена. Структура записи информации позволяет удобно осуществлять любые операции по обработке информации: выборку, обновление, включение, удаление записей и т.д.

Постоянное пополнение новыми публикациями базы данных ЭКОФОР является одной из ее важнейших характеристик. Но, получив новые данные, необходимо убедиться в их достоверности; иначе может возникнуть недоверие пользователей к возможным противоречиям и неточностям. Только после оценки на достоверность возможно дальнейшее интегрированное использование базы данных. Эта задача решается в ЦАЯД на двух этапах. Первый этап состоит в привлечении авторов проведенного эксперимента к подготовке или проверке текста, записанного в формате ОЭ и отражающего не только основные характеристики, но и детали эксперимента. Эта мера не только желательна, но и необходима, так как при компиляции статьи возможны некоторые неточности, особенно при построении таблицы данных, когда данные снимаются с графиков физиком-компилятором. Кроме того, эксперимент следует описывать таким образом, чтобы его можно было воспроизвести. Для этого в публикации и, следовательно, в закодированном фактографическом описании должна присутствовать вся необходимая информация. Второй этап получения достоверных данных решается посредством передачи ЭВМ задач по обнаружению синтаксических и семантических ошибок, которые могли быть допущены при кодировании публикации и вводе фактографического описания в ЭВМ. Создание автоматизированных средств контроля данных важно прежде всего как дополнительная гарантия надежности, так как проверка вручную - довольно трудоемкая задача.

Таблица 2
Соответствие информационных единиц и системных идентификаторов формата ОЭ

Информационная единица	Системный идентификатор
Обменная лента	TRANS
Работа (закодированная публикация)	ENTRY
Раздел работы	SUBENT
Библиографическая секция	BIB
Секция общих данных	COMMON
Секция таблицы данных	DATA

Структура формата ОЭ позволяет автоматизировать многие процессы обработки информации. Задача автоматизации успешно решается в международных центрах. Такие системы разрабатываются, как правило, на больших ЭВМ с частичной передачей некоторых функций мощным мини-компьютерам [10]. В некоторых случаях целесообразно использовать не большие машинные комплексы, а малые ЭВМ, например в сравнительно небольших лабораториях или для обеспечения конфиденциальности работ.

Каждый региональный центр имеет определенные возможности своих вычислительных систем и пользовательские нужды, свою собственную систему передачи и хранения данных, оптимизированную для потребностей и возможностей данного центра [10-12]. Информационно-поисковая система ЦАЯД для работы с данными построена на базе малой ЭВМ IOIOB [13]. Принципы организации структуры программного обеспечения определяются не только характером решаемых задач и структурой аппаратных средств системы, но и в значительной мере конфигурацией самой ЭВМ. Особенности ЭВМ IOIOB - небольшой объем внутренней памяти (32Кб) и памяти прямого доступа (два мини-диска по 800Кб), стандартное математическое обеспечение - делают практически невозможным перенос программного обеспечения системы ЭКСФОР, разработанного в других международных центрах.

Разработка комплекса программ системы ЭКСФОР в ЦАЯД опиралась на принципы и организацию программного обеспечения информационно-поисковой системы, созданной в ЦАЯД для управления большими массивами данных, расположенными на магнитных лентах во внутреннем формате хранения. В то же время операционная система ЭВМ IOIOB по своей организации является диалоговой. Это позволило организовать подготовку и обработку базы данных ЭКСФОР в диалоговом режиме [14]. При этом на ЭВМ возлагаются функции формирования данных, обнаружения наиболее часто встречающихся ошибок, а также работа, связанная с реализацией хранения информации на всех этапах обработки.

Разработанный и созданный в ЦАЯД комплекс программ системы ЭКСФОР позволяет на базе малой ЭВМ, в пределах ее возможностей, создавать, поддерживать, хранить и обменивать большие массивы данных, записанные в международном формате ОЭ. При разработке и создании автоматизированного комплекса программ системы ЭКСФОР ставилась задача уменьшить долю ручного труда на всех этапах технологического цикла подготовки и обработки данных (рис.3). При этом программное обеспечение системы подготовки данных выполняет функции, связанные с вводом, контролем, редактированием и обновлением информации. Эти функции реализованы в виде самостоятельных программ, каждая из которых выполняет задачи определенного этапа обработки. Передача параметров, подготовленных или сохраненных программами предыдущего этапа обработки для программ следующего этапа, обеспечивает автоматическое управление последовательностью выполнения этапов, реализованных на ЭВМ. В случае необходимости эта последовательность может быть прервана. Оператор выполняет любой этап последовательности автономно, но при этом значительно возрастает доля ручных операций, что снижает скорость и качество обработки информации.

Установленная в ЦАЯД процедура пополнения базы данных ЭКСФОР начинается с этапа первичной аналитической обработки. Он включает просмотр советских и зарубежных изданий по данной тематике, выявление публикаций, интересных для пополнения базы данных и подготовку фактографического описания публикации в виде вторичного информационного документа (ВИД). Особенность данного этапа состоит в том, что требуется "интеллектуально" преобразовать первичную неформализованную информацию. Роль человека на этом этапе огромна, так как сводится к выявлению семантической (смысловой) информации, содержащейся в первичном информационном документе (ПИД). Эту работу может проделать только человек высокой квалификации, глубоко разбирающийся в той информации, которая должна храниться в базе экспериментальных данных. Этот этап, который называют также предмашинной обработкой данных (смысловой и технической), является наиболее трудоемким. Завершается этап первичной аналитической обработки созданием ВИД, который представляет собой рукописный вариант закодированной в формате ОЭ публикации. В некоторых центрах принята позиционная запись ВИД на специальных бланках, что предусматривает строгую стандартизацию при его составлении. Заполнение бланка осуществляется в полном соответствии с правилами формата. Рукописный же вариант, принятый в ЦАЯД, предполагает запись только семантической информации, но так, чтобы ее форма была понятна оператору при вводе в ЭВМ.

Любая технология ввода данных предусматривает их преобразование в форму, которая может быть воспринята ЭВМ. Этап ввода ВИД в ЭВМ является одним из основных технологических участков в общем цикле подготовки данных. Ввод осуществляется через дисплей по специальной программе. Жесткость формата позволяет автоматизировать процесс ввода данных и их частичное формирование в соответствии

с правилами формата ОЭ. Если же ввод данных осуществляется не оператором, а персоналом, занятым первичной аналитической обработкой, т.е. физиком-компилятором непосредственно с ПИД, то отпадает необходимость составления рукописного варианта ВИД.

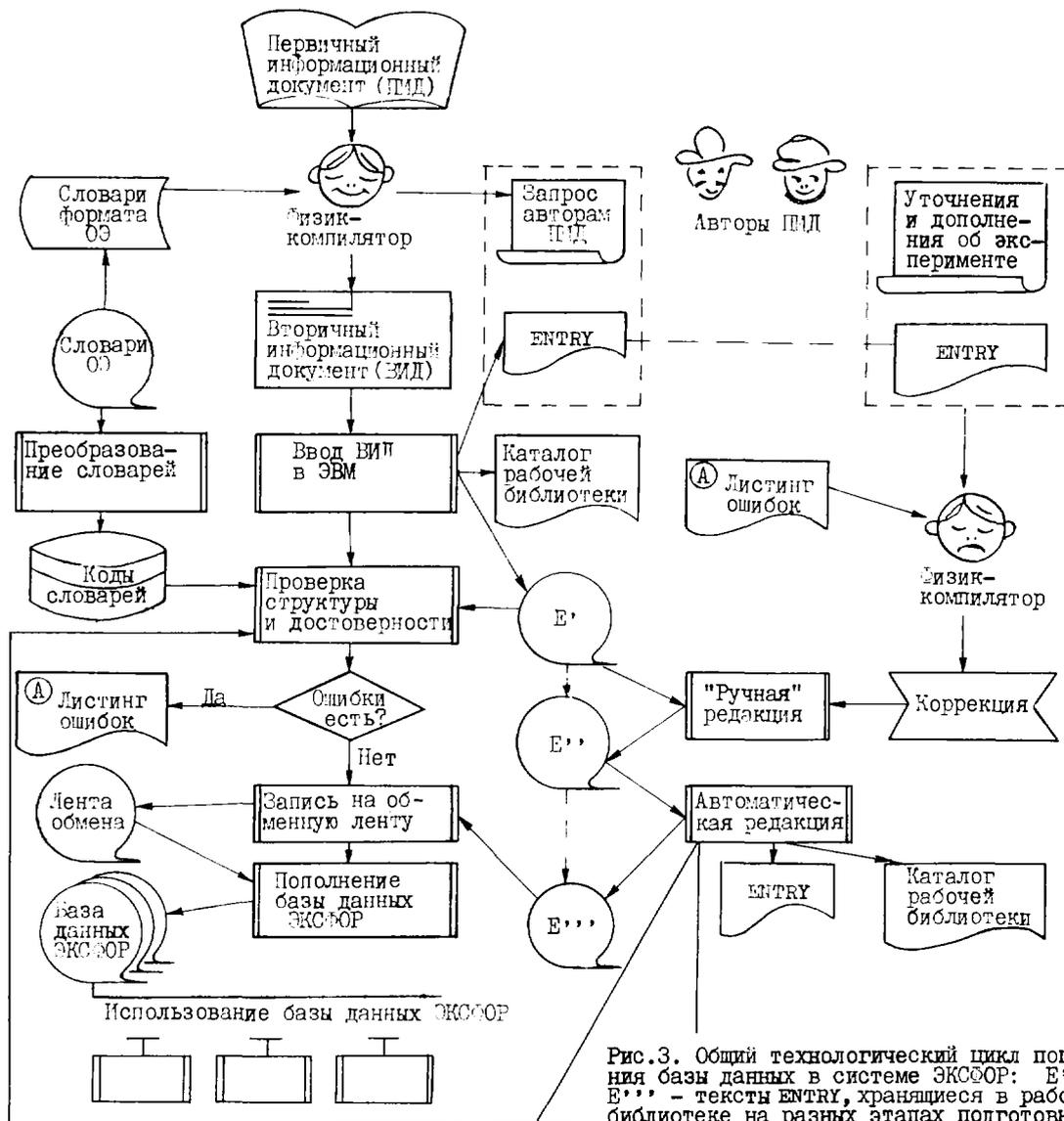


Рис.3. Общий технологический цикл пополнения базы данных в системе ЭКСФОР: Е', Е'', Е''' - тексты ENTRY, хранящиеся в рабочей библиотеке на разных этапах подготовки

Последовательность формирования системных и информационных идентификаторов находится под контролем программы ввода и реализуется на основе диалога между оператором и ЭВМ. При этом в различных формах используется задание последовательности выполнения работ ЭВМ с помощью обработки транзакций.* Такой подход позволяет начать работу по вводу ВИД практически без подробного изучения инструкций. Ответы оператора будут являться указаниями на то, что ЭВМ должна делать в данный момент. Это позволяет избежать ошибок, освобождая оператора от необходимости помнить порядок следования информации. При этом оператор вводит только ту содержательную часть ВИД, которая однозначно не определена правилами формата.

Процесс диалога оператора с ЭВМ происходит при одновременном моделировании каждой строки формализованного текста ENTRY на экране дисплея, что дает возможность оператору визуально обна-

* Передаваемое сообщение, инициирующее в вычислительной системе работу определенного вида [15].

ружить и в случае необходимости исправить ошибки, сделанные в пределах формируемой строки. Это является важным отличием от систем, использующих перфокарточные устройства ввода, когда при неправильно введенном символе приходится перебивать всю перфокарту.

Программа ввода ВИД в ЭВМ выполняет следующие функции:

- создает структуру данных;
- формирует информацию, которая служит для сохранения целостности при международном обмене;
- осуществляет проверку соответствия входного символа алфавиту формата;
- передает в соответствующую зону экрана дисплея сообщения о допущенных оператором ошибках;
- сохраняет формализованный текст ENTRY на магнитной ленте в рабочей библиотеке;
- присваивает тексту ENTRY соответствующее имя в каталоге закодированных работ;
- выдает на АЦПУ листинг в виде распечатки формализованного текста ENTRY.

Диалог оператора с ЭВМ на этапе ввода ВИД начинается с выбора режима ввода, который определяет дальнейшие действия ЭВМ.

Ввод ВИД может осуществляться в двух режимах:

- ввод новой закодированной публикации;
- дополнение информации из ВИД в ENTRY, начало которого хранилось в рабочей библиотеке под соответствующим именем.

При этом программа ввода предусматривает соблюдение правильной структуры для всего ENTRY при описывании новой информации и сохранение его в рабочей библиотеке.

При формировании библиографической секции ВІВ возможен автоматический ввод с любой позиции строки текста, находящегося в рабочей библиотеке. Оператор должен ввести в формируемую строку специальную транзакцию, по которой программа запросит имя этого текста. Получив правильное имя, программа "сотрет" диалог на экране дисплея и выполнит заданную транзакцию, последовательно перенося текст из рабочей библиотеки в формируемый текст ENTRY с соблюдением правил переноса и с формированием всей необходимой служебной информации. Перенос текста может также закончиться в любой позиции строки. Оператор должен или дополнить начатую строку, или перейти к формированию новой строки.

При формировании секций COMMON и DATA соблюдается строгая стандартизация записи цифровых данных. Для одного значения отводится 11 символов, т.е. в строке (80 символов) может быть не более шести колонок. Если количество колонок, определяемое множеством заголовков измерений, превышает это число, то специальными правилами формата предусматривается перенос значений в следующую строку. Поэтому задаваемые оператором значения должны быть расположены в определенных позициях строки таблицы. Это зависит не только от структуры таблицы данных, но и от формата, в котором они записаны. Применяются два формата: десятичный, когда наличие десятичной точки при записи значения переменной обязательно, и так называемый "формат E" (аналогичен применяемому в языке ФОРТРАН), когда значение переменной должно быть расположено в правых позициях колонки. Программа предусматривает соблюдение перечисленных выше правил формата ОЭ, т.е. осуществляет проверку введенных значений и их перезапись в нужные позиции с выводом на экран дисплея правильно формируемой строки таблицы цифровых данных.

Окончание процесса ввода закодированного текста может быть осуществлено или при полностью введенном ВИД (в этом случае кодом окончания процесса ввода служит строка с системным идентификатором ENENTRY), или после ввода очередного раздела (код окончания - системный идентификатор ENDSUBENT). И в том, и в другом случае введенный текст сохраняется в рабочей библиотеке и ему присваивается соответствующее имя.

Коды окончания процесса ввода определяют дальнейший режим работы автоматизированного комплекса. В процессе ввода возможно появление кодов исключительных ситуаций, препятствующих нормальному завершению процесса. В этом случае требуются некоторые ответные действия оператора. К процедурам обработки исключительных ситуаций обращаются только тогда, когда обнаружен соответствующий код и выдано сообщение о конкретной исключительной ситуации. Они могут быть обработаны как с возвратом, так и без возврата в программу. В последнем случае оператор переходит на автономный режим последовательной обработки.

При нормальном окончании процесса ввода и полностью введенном ВИД осуществляется автоматический переход к следующему этапу - проверке правильности структуры введенных данных и их досто-

верности. Однако невозможно провести строгую проверку закодированной информации без уверенности в правильности ее структуры. Кроме того, процесс проверки носит последовательный характер и требует достаточной оперативной памяти и времени для своей организации. Поэтому исчерпывающая проверка достоверности данных потребовала специальной организации программ [16] с некоторыми ограничениями на контроль соответствия формализованного текста правилам формата ОЭ и его кодам.

Основное внимание уделяется проверке информации, кодирование которой наиболее сложно, и выявление соответствия правилам формата ОЭ путем визуальной проверки трудоемко. Практика эксплуатации проверочных программ в разных центрах позволила выявить наиболее частые при кодировании ошибки (приложение 2). Проверка мест текста ENTRY, в которых возможны подобные ошибки, осуществляется программами особенно тщательно.

Проверка текста ENTRY на правильность структуры и достоверность предполагает выявление ошибок и неопределенных ситуаций по внешней и внутренней структуре формализованного текста. Проверка внешней структуры осуществляется контролем правильного его деления на разделы и секции путем выделения каждой такой части в соответствии с необходимым системным идентификатором, служебной информацией к нему, числовой идентификацией строк и т.д. Проверка внутренней структуры осуществляется нахождением определенного информационного идентификатора и соблюдением правил его кодирования (наличие обязательных компонентов, соответствующих разделителей, баланс скобок, проверку мнемонических кодов), а также выполнением требований записи числовых таблиц и величин, согласованием информации между секциями и т.п. Таким образом, контроль правильности структуры и достоверности информации в формализованном тексте ENTRY предусматривает его синтаксический и лексический анализ.

Для проверки достоверности данных достаточно убедиться, что использованный при кодировании код присутствует в соответствующем словаре. Поэтому использование массивов кодов словарей (без их расшифровки) является достаточным условием для работы программы проверки. Программа преобразования словарей, считывая с магнитной ленты весь набор словарей формата ОЭ, размещает по заданной структуре коды словарей и на известном секторе диска формирует каталог словарей с адресом начала размещения кодов каждого словаря на диске. Специальная организация размещения кодов словарей обеспечивает экономию памяти машины, а в программах проверки - некоторое ускорение времени поиска кода благодаря использованию прямого метода доступа к определенному словарю и метода сравнения ключей для поиска кода.

Результатом работы программ проверки является выданный на АЦПУ протокол с сообщениями о виде найденных ошибок и локализацией их места. Если ошибка обнаружена в семантической части, то для ее исправления нужен автор - физик, компилировавший данный текст. Такая ошибка исправляется сразу физиком-компилятором центра или требует консультации с автором публикации. В этом случае распечатка формализованного текста ENTRY с отметками для уточнения направляется авторам. Только после ответа авторов, приславших свои исправления и дополнения, формализованный текст ENTRY корректируется и редактируется. Если найдена ошибка, не требующая глубокого осмысления, оператор исправляет ее, редактируя текст ENTRY с помощью программы редакции. Эта программа позволяет удобно исправлять тексты с клавиатуры дисплея: отменить или ввести в текст новые символы и строки, объединить несколько разрозненных текстов в один или расчленить текст.

В процессе ручной редакции возможно нарушение структуры и правильности записи информации в тексте ENTRY в соответствии с правилами формата ОЭ. Это касается прежде всего несоответствий в идентификации строк, правильной служебной информации для системных идентификаторов, алфавита введенных при ручной редакции символов. Поэтому следующий этап работы реализуется программой автоматической редакции. Программой исправляются в соответствии с правилами формата все нарушения, допущенные в формализованном тексте при ручной редакции.

Программа автоматической редакции, выдавая на АЦПУ отредактированный текст ENTRY, выполняет следующие функции:

- заменяет символы, не соответствующие алфавиту формата ОЭ, на знак ? (строки, имеющие такие символы, отмечаются определенным сообщением);

- добавляет в текст строку с информационным идентификатором HISTORY, автоматически проставляя в этой строке дату редакции (смысл этой операции - проследить "историю" изготовления текста ENTRY);

- сохраняет формализованный текст в рабочей библиотеке, отменяя старое его имя и присваивая соответствующее новое в каталоге закодированных работ;
- выдает каталог рабочей библиотеки;
- по окончании процесса автоматической редакции происходит переход к этапу синтаксического и лексического анализа, т.е. вновь к программам проверки структуры и достоверности формализованного текста ENTRY.

При этом возможно повторение этапов коррекции, редакции (ручной и автоматической) и вновь проверки до тех пор, пока формализованный текст не будет содержать ошибок, противоречащих правилам формата ОЭ. Только тогда текст ENTRY записывается на международную обменную ленту и в базу данных ЭКСФОР. В настоящее время база экспериментальных нейтронных ядерных данных в формате ОЭ размещена в ЦАЯД на шести магнитных лентах — по числу центров, пополняющих ее (табл.3).

Таблица 3

Международная база экспериментальных нейтронных ядерных данных в формате ОЭ (на декабрь 1982 г.)

Центр-поставщик	Число закодированных публикаций	Число записей на магнитной ленте
ЦАЯД	130	32393
Национальный центр ядерных данных США (Бруксейвенская национальная лаборатория)	51	10561
Секция ядерных данных МАГАТЭ (Австрия)	23	8323
Центр атомно-энергетической документации, группа КАСНАРАГ (ФРГ)	200	55681
Центр данных фотоядерных экспериментов, ИГУ (СССР)	45	27993
Национальный центр ядерных данных США (Национальная лаборатория Лоуренса в Ливерморе)	35	24882

Эта база непрерывно пополняется. Структура записей текстовой и цифровой информации позволяет автоматизировать не только процессы поддержания базы данных, но и поиск информации. Использование базы данных ЭКСФОР многоаспектно. Она используется всеми центрами для ретроспективного поиска информации с последующей ее выдачей как в обобщенном виде, так и без обобщений. Используется она непосредственно и для печатных изданий. Так, в 1979 г. группа КАСНАРАГ начала выпуск многотомного издания внутри серии Physik Daten/Physics Data с данными по образованию радиоактивных изотопов в реакциях с заряженными частицами. Эти данные извлекались непосредственно из международной обменной ленты. В издании приведен как библиографический, так и фактографический материал, который обновляется по мере уточнения данных и появления новых результатов измерений. Национальный центр ядерных данных США использует международную базу данных ЭКСФОР при подготовке ежегодных сводок библиографических данных [17]. В настоящее время в Секции ядерных данных МАГАТЭ проходит пробную эксплуатацию программа, которая, используя форматные данные из базы ЭКСФОР, переводит их в так называемый "Формат вычислений экспериментальных данных" [6]. Выбирая данные по сечениям, угловым и энергетическим распределениям, программа переводит их в графическую форму для сравнения с соответствующими оцененными данными из базы данных ENDF/B [18]. Предполагается, что в будущем "Формат вычислений экспериментальных данных" может быть использован для доказательства достоверности данных, представленных авторами публикаций, а также для решения задач по оценке. В ЦАЯД база данных в формате ОЭ используется главным образом для ретроспективного поиска информации по разовым запросам потребителей. Организация поисковой программы позволяет получать ответы на запросы по данным о сечениях ядерных реакций. Поиск может быть проведен по реакциям с образованием определенного изотопа, по реакциям, проходящим на конкретной мишени, по реакциям под действием тех или иных частиц (тяжелых ионов). Ответы на запросы могут быть представлены или в виде распечаток на АЦПУ, или сформированы в виде массива на выходной магнитной ленте.

Таким образом, созданный автоматизированный комплекс программ, в основе которого лежит принцип однократной исчерпывающей обработки первичной информации, является основой для создания интегральной информационной системы.


```

SUBJECT      A0154002      R30005
REF ID       4              1A
REACTION    7(3)=SF=76(ME1,2A)30=KR=77,IND,STG,,,LYB)
             A(3)=SF=76(ME1,3)30=KR=76,IND,STG,,,LYB)
SAMPLE      FINISHED TARGETS, COMPOSITION (PER CENT)
            SF=74  0.14
            SF=76  96.88
            SF=77  0.85
            SF=78  0.22
            SF=80  0.95
            SF=82  0.18
PER-ANALYS (DATA=ERR), THE TOTAL UNCERTAINTY I  HOSS SECTIONS
VALY FROM CASE TO CASE, COMPILER GIV  THE MAXIMAL
UNCERTAINTY.
DECAV-DATA7(3A=KR=77,1,2)48,00,130,0,0,873,
            DE,147,0,0,0091
            A(3A=KR=76,10,4)48,00,270,0,272,0,267,
            DE,316,0,0,40)
FADDT      1A
COMMON     2              3
DATA=ERR   A:DATA=ERR  7
PER=CENT   PER=CENT?
            15.         12.
FADCOMMO   3
DATA       3              21
FA        DATA      7DATA      6
MEV        ER        4R
            13,15      26,56
            13,57      10,79
            16,15      179,4
            17,10      222,8
            18,68      327,1
            19,31      311,8
            21,10      416,0
            21,68      355,9
            23,63      360,1
            24,84      5,06
            25,74      29,60
            27,84      38,55
            28,89      296,7
            29,58      45,62
            30,05      202,3
            30,89      66,20
            31,21      148,0
            32,63      113,7
            34,68      99,60
            35,05      136,1
            35,05      105,8
            35,05      90,47
            35,05      167,
            35,05      123,6
            35,05      146,3
            35,05      159,4
            35,05      159,4
ENDDATA
ENDSHEET
            23
            4R

```

ВТОРОЙ РАЗДЕЛ РАБОТЫ A0154.002

Запись реакций под одним и тем же информационным идентификатором возможна, если измерения выполнены на одной мишени

Идентификатор записи

```

A015400200001
A015400200002
A015400200003
A015400200004
A015400200005
A015400200006
A015400200007
A015400200008
A015400200009
A015400200010
A015400200011
A015400200012
A015400200013
A015400200014
A015400200015
A015400200016
A015400200017
A015400200018
A015400200019
A015400200020
A015400200021
A015400200022
A015400200023
A015400200024
A015400200025
A015400200026
A015400200027
A015400200028
A015400200029
A015400200030
A015400200031
A015400200032
A015400200033
A015400200034
A015400200035
A015400200036
A015400200037
A015400200038
A015400200039
A015400200040
A015400200041
A015400200042
A015400200043
A015400200044
A015400200045
A015400200046
A015400200047
A015400200048
A015400200049
A015400200000

```

```

CURRENT      A0154003      A30405
PTR          4              1A
REACTION    7(34-SF=76(HF3,N+P)35=RR=77,IND/UND,SIG,,,EXP)
            4(34-SF=76(HF3,2N+P)35=RR=76,IND/UND,SIG,,,EXP)
            3(34-SF=76(HF3,3N+P)35=RR=75,IND/UND,SIG,,,EXP)
SAMPLE      ENRICHED TARGETS, COMPOSITION (PER CENT)
            SF=74 0,14
            SF=76 96,88
            SF=77 0,85
            SF=78 0,99
            SF=80 0,95
            SF=82 0,18
FRR-ANALYSIS (DATA=FRR), THE TOTAL UNCERTAINTY IN CROSS SECTIONS
            VARY FROM CASE TO CASE. COMPILER GIVES THE MAXIMAL
            UNCERTAINTY:
DECAY-DATA 7(35=RR=77,55,HR,DC,23A,,0,238,
            DC,521,,0,214)
            4(35=RR=76,16,HR,DC,550,,0,724,
            DC,1216,,0,887)
            3(35=RR=75,1,6HR,DC,287,,0,916)
ENDPRD
COMMON
DATA=FRR 7(DATA=FRR 4) DATA=FRR 3
PFR=CENT 20, PER=CENT 20, PER=CENT 20,
ENDCOMMON
DATA
ENR      DATA      7DATA      4DATA      3
MEV      HR          HR          HR
13,40    15,28
15,48    225,2
18,41    423,0
19,41    579,6
20,82    775,3
21,54    695,2      27,67
23,80    650,3      105,0
24,41    615,8      105,0
25,71    143,8
26,56
27,54    357,0
27,80    428,1
29,80    586,7
30,00    588,0
30,56    385,7      5,65
30,56    388,0      854,2      7,39
32,36    703,7
33,44    320,0      784,7      22,25
34,10    608,4
35,12    331,0      1000,
35,12    875,2      45,49
            54,55
ENDDATA
ENDSUBRPT
            22
            49

```

```

A015400300001
A015400300002
A015400300003
A015400300004
A015400300005
A015400300006
A015400300007
A015400300008
A015400300009
A015400300010
A015400300011
A015400300012
A015400300013
A015400300014
A015400300015
A015400300016
A015400300017
A015400300018
A015400300019
A015400300020
A015400300021
A015400300022
A015400300023
A015400300024
A015400300025
A015400300026
A015400300027
A015400300028
A015400300029
A015400300030
A015400300031
A015400300032
A015400300033
A015400300034
A015400300035
A015400300036
A015400300037
A015400300038
A015400300039
A015400300040
A015400300041
A015400300042
A015400300043
A015400300044
A015400300045
A015400300046
A015400300047
A015400300048
A015400300049
A015400300050
A015400399999

```

ТРЕТИЙ РАЗДЕЛ РАБОТЫ A01547003

Указатели связывают цифровую и текстовую информацию в пределах одного раздела. В этом примере осуществляется связь информации, описывающей ядерные реакции (REACTION) и данные о радиоактивном распаде продуктов (DECAY-DATA) реакций, с соответствующими числовыми данными результатов измерений

```

SURENT          A0154004      A30405          A015400400001
RJR              4              10          A015400400002
REACTION 9(34-SF=77(HF3,N)36-KR=79,IND,STG,,,EXP) A015400400003
          7(34-SF=77(HF3,3N)36-KR=77,IND,STG,,,EXP) A015400400004
          6(34-SF=77(HF3,4N)36-KR=76,IND,STG,,,EXP) A015400400005
SAMPLE  ENRICHED TARGETS, COMPOSITION(PER CENT) A015400400006
          SF=74      0.06 A015400400007
          SF=76      0.66 A015400400008
          SF=77     94.38 A015400400009
          SF=78      3.02 A015400400010
          SF=80      1.61 A015400400011
          SF=82      0.27 A015400400012
ERR-ANALYSIS (DATA=FRR). THE TOTAL UNCERTAINTY IN CROSS SECTIONS A015400400013
          VARY FROM CASE. COMPTON GIVES THE MAXIMAL UNCERTAINTY. A015400400014
DECAY-DATA 9(36-KR=79,35.HR,DC,261.,0.,127., A015400400015
          DC,397.,0.,095., A015400400016
          DC,606.,0.,081) A015400400017
          7(36-KR=77,1.2HR,DC,130.,0.,873., A015400400018
          DC,147.,0.,409) A015400400019
          6(36-KR=76,14.6HR,DC,270.,0.,267., A015400400020
          DC,316.,0.,400) A015400400021
ENDRJR          19 A015400400022
COMMON          3          3 A015400400023
DATA=FRR 0DATA=FRR 7DATA=FRR 6 A015400400024
PER-CENT  PER-CENT  PER-CENT A015400400025
          15.          12.          15. A015400400026
ENDCOMMON      3 A015400400027
DATA          4          12 A015400400028
FN           DATA 9DATA 7DATA 6 A015400400029
MFV          MR          MR          MR A015400400030
          14.86          8.74 A015400400031
          18.06          25.5          1.36 A015400400032
          20.05          40.15          12.97 A015400400033
          22.32          40.28          82.86 A015400400034
          23.80          179. A015400400035
          25.58          18.24          261. A015400400036
          27.38          10.1          273.          1.31 A015400400037
          29.33          8.73          313. A015400400038
          31.03          6.53          356.6          5.44 A015400400039
          32.57          9.60          304.9          11.8 A015400400040
          34.44          5.82          290.          18.7 A015400400041
          35.72          7.6          287.          36.6 A015400400042
ENDDATA          14 A015400400043
ENDSURENT          42 A015400499999

```

SURENT A0154005 830405
 RIP 4 1A
 REACTION A(34-SF=77(HF3,N+P)35-BR=78,IND/UND,SIG,,,EXP)
 7(34-SF=77(HF3,2N+P)35-BR=77,IND/UND,SIG,,,EXP)
 4(34-SF=77(HF3,3N+P)35-BR=76,IND/UND,SIG,,,EXP)
 SAMPLE ENRICHED TARGETS,COMPOSITION(PER CENT)
 SF=74 0,06
 SF=76 0,66
 SF=77 94,38
 SE=78 3,02
 SF=80 1,61
 SF=82 0,27
 FRR-ANALYSIS (DATA=ERR).THE TOTAL UNCERTAINTY IN CROSS SECTIONS
 VARY FROM CASE TO CASE.COMPIILER GIVES THE MAXIMAL
 UNCERTAINTY.
 DECAY-DATA A(35-BR=78,6.4MIN,DG,614,,0,136)
 7(35-BR=77,56.HR,DG,238,,0,238,
 DG,521,,0,214)
 4(35-BR=76,16.HR,DG,559,,0,724,
 DG,1216,,0,087)
 ENDBTR 18
 COMMON 3 3
 DATA=FRR A DATA=FRR 7 DATA=ERR 6
 PER-CENT PER-CENT PER-CENT
 20. 20. 20.
 FNDCOMMON 3
 DATA 4 17
 FN DATA 8 DATA 7 DATA 6
 MEV MR MR MR
 10,44 72,09
 13,61 349.
 14,70 3,63
 16,40 547.8
 17,64 22.02
 19,19 675.3
 20,06 101.3
 21,56 562.3
 22,48 430.8
 23,84 432,9
 25,48 493,4 743,7
 27,67 346,6 810,2 4,38
 29,17 348,1 949,
 31,07 328,9 961,5 9,49
 32,62 263,3 912,5 28,11
 34,24 296.2 1040. 76,97
 35,36 1201. 112.5
 FNDDATA 19
 FNSUBFACT 46

A015400500001
 A015400500002
 A015400500003
 A015400500004
 A015400500005
 A015400500006
 A015400500007
 A015400500008
 A015400500009
 A015400500010
 A015400500011
 A015400500012
 A015400500013
 A015400500014
 A015400500015
 A015400500016
 A015400500017
 A015400500018
 A015400500019
 A015400500020
 A015400500021
 A015400500022
 A015400500023
 A015400500024
 A015400500025
 A015400500026
 A015400500027
 A015400500028
 A015400500029
 A015400500030
 A015400500031
 A015400500032
 A015400500033
 A015400500034
 A015400500035
 A015400500036
 A015400500037
 A015400500038
 A015400500039
 A015400500040
 A015400500041
 A015400500042
 A015400500043
 A015400500044
 A015400500045
 A015400500046
 A015400500047
 A015400599999

Постоянные пара-
метры, действующие
только для раздела
AOI54.006

Таблица данных,
определенных под
информационным
идентификатором
"REACTION"

```

SERMENT          A0154006      A01220
PTR              1              14
REACTION        (34-SF=77,THE3,NAA)34-SF=75,IND/UND,SIG,,,EXP)
SAMPLE          ENRICHED TARGETS, COMPOSITION (PER CENT)
                SF-74          0.66
                SF-74          0.66
                SF-77          94.38
                SF-78          3.02
                SF-78          3.02
                SF-PP          0.27
FRF=ANALYSIS   (DATA=FRF), THE TOTAL UNCERTAINTY IN CROSS SECTIONS
                VARY FROM CASE TO CASE, COMPILER GIVES THE MAXIMAL
                UNCERTAINTY.
DECAY-DATA     (34-SF=75,120.0,CG,134.,0.54,
                CG,269.,0.58,
                CG,280.,0.249)

ENDRICH        14
COMMON        1              3
DATA=FRF
PER-CENT      15.
ENDCOMMON     3
DATA         2              11
EN          DATA
MEV         ME
              7,10
              26,45
              50,53
              98,90
              90,16
              63,05
              60,27
              49,03
              47,25
              35,84
              42,89
ENDDATA      13
ENDSURFAT    36

```

A015400600001
A015400600002
A015400600003
A015400600004
A015400600005
A015400600006
A015400600007
A015400600008
A015400600009
A015400600010
A015400600011
A015400600012
A015400600013
A015400600014
A015400600015
A015400600016
A015400600017
A015400600018
A015400600019
A015400600020
A015400600021
A015400600022
A015400600023
A015400600024
A015400600025
A015400600026
A015400600027
A015400600028
A015400600029
A015400600030
A015400600031
A015400600032
A015400600033
A015400600034
A015400600035
A015400600036
A015400600037
A015400699999

ШЕСТОЙ РАЗДЕЛ РАБОТЫ

A0154.006

SUBJECT	A0154008	R30405	A015400800001
RIR	4	14	A015400800002
REACTION	(34=SF=0(HE3,X)36=KR=79,IND,SIG,,,EXP)		A015400800003
SAMPLE	ISOTOPE COMPOSITION(PER CFNT)		A015400800004
	74=SF	0.87	A015400800005
	76=SF	9.02	A015400800006
	77=SF	7.58	A015400800007
	78=SF	23.52	A015400800008
	80=SF	49.82	A015400800009
	82=SF	9.19	A015400800010
ERR=ANALYS	(DATA=ERR).THE TOTAL UNCERTAINTY IN CROSS SECTIONS VARY FROM CASE TO CASE. COMPILER GIVES THE MAXIMAL UNCERTAINTY.		A015400800011
DECAY=DATA	(36=KR=79,35,HR,DC,261.0,127.0,397.0,095.0,606.0,081)		A015400800012
			A015400800013
			A015400800014
			A015400800015
			A015400800016
ENDRTR	14		A015400800017
COMMON	1	3	A015400800018
DATA=ERR			A015400800019
ERR=CFNT			A015400800020
15.			A015400800021
ENDCOMMON	3		A015400800022
DATA	2	17	A015400800023
FN	DATA		A015400800024
MFV	HR		A015400800025
	14.41	2.46	A015400800026
	15.98	49.94	A015400800027
	17.33	58.50	A015400800028
	18.90	115.9	A015400800029
	19.77	111.7	A015400800030
	20.92	183.9	A015400800031
	21.64	163.9	A015400800032
	23.33	136.8	A015400800033
	23.75	131.7	A015400800034
	25.66	68.37	A015400800035
	27.23	62.50	A015400800036
	28.59	53.10	A015400800037
	30.55	88.95	A015400800038
	31.77	149.7	A015400800039
	33.66	189.3	A015400800040
	34.54	219.3	A015400800041
	36.05	204.2	A015400800042
ENDDATA	19		A015400800043
ENDSUBJECT	42		A015400899999

24

SURENT	A0154010	830405		A015401000001
RIP	4	13		A015401000002
REACTION	(34=SE=0(HE3,X)36=KR=76,IND,STG,,,EXP)			A015401000003
SAMPLE	ISOTOPE COMPOSITION(PER CENT)			A015401000004
	74=SE	0.87		A015401000005
	76=SE	9.02		A015401000006
	77=SE	7.58		A015401000007
	78=SE	23.52		A015401000008
	80=SE	49.82		A015401000009
	82=SE	9.19		A015401000010
ERR=ANALYS	(DATA=ERR).THE TOTAL UNCERTAINTY IN CROSS SECTIONS VARY FROM CASE TO CASE. COMPILER GIVES THE MAXIMAL UNCERTAINTY.			A015401000011
DECAY=DATA	(36=KR=76,14.6HR,DG,270,272,0.267, DG,316,0.400)			A015401000012
ENDBIB	13			A015401000013
COMMON	1	3		A015401000014
DATA=ERR				A015401000015
PER=CENT				A015401000016
15.				A015401000017
ENDCOMMON	3			A015401000018
DATA	2	9		A015401000019
FN				A015401000020
MEV	DATA			A015401000021
	MB			A015401000022
23.29	0.88			A015401000023
23.47	1.66			A015401000024
25.23	4.76			A015401000025
26.84	7.03			A015401000026
28.85	8.61			A015401000027
30.61	8.86			A015401000028
31.98	13.19			A015401000029
33.45	13.93			A015401000030
35.07	13.29			A015401000031
ENDDATA	11			A015401000032
ENDSURENT	33			A015401000033
ENDENTRY	10			A015401099999
				A015499999999

Список ошибок,
наиболее часто допускаемых при кодировании данных
в формате ОЭ*

1. Кодирование ядер и продуктов реакции.
2. Использование новых кодов (лабораторий, конференций, публикаций и т.д.), еще не включенных в словарь формата.
3. Применение символов, запрещенных правилами формата (% , : , ;).
4. Наличие скобки в 12-й позиции строки в случаях, когда используется свободный текст (т.е. для таких информационных идентификаторов, как COMMON, TITLE, INC-SPECT).
5. Использование заголовка MISC в секции COMMON.
6. Отсутствие при кодировании информации для идентификатора DECAY-DATA десятичной точки в числовом значении, кода единиц измерений, кода типа данных.
7. Использование расширения -G для основного состояния, когда неизвестно метастабильное состояние, или расширения -M для тех состояний ядер, которые не принято считать метастабильными.
8. Использование пробелов вместо нулей в идентификаторах строк.
9. В таблицах данных: отсутствие десятичных точек в числовых значениях; запись заголовков и единиц измерений не в тех местах, где требует формат; отсутствие значений данных; ошибочные символы или пробелы в числовых значениях; применение неправильных заголовков (например, ELEM вместо ELEMENT).
10. Неправильные значения полей N1 и N2 для системных идентификаторов BIB и DATA.

* Материал подготовлен по документу "NDS checking of incoming TRANS tapes," представленному Секцией ядерных данных МАГАТЭ.

Список литературы

1. Horen D.J., Weinberg A.M. Criteria of choice for compilations of nuclear data. - In: Nuclear data in science and technology. V. 1. Vienna, 1973, p.3-11.
2. Summary report specialists' meeting on nuclear data for applications; Vienna, 1974. INDC(NDS)-060/W+Special.
3. Chukreev F.E. Centre for collection, evaluation and dissemination of non-neutron nuclear data.- In: /1/, v.2, p.319-323, IAEA-SM-170/24.
4. Бычков В.И., Манохин В.Н., Сургутанов В.В. Машинная библиотека экспериментальных нейтронных данных. - Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1975, вып.19, с.181-198.
5. Summary report on the consultants' meeting on charged particle and photonuclear reaction data. Vienna, 1974, INDC(NDS)-59/W+Special.
6. Report on the sixth IAEA consultants' meeting of Nuclear reaction data centers. Vienna, 1982. INDC(NDS)-141.
7. NDS EXFOR MANUAL. Documentation series of the IAEA Nuclear data section. Vienna: IAEA, IAEA-NDS-3 (Rev.79/6).
8. Крицкий Н.А., Миронов Г.А., Фролов Г.Д. Автоматизированные информационные системы. М.: Наука, 1982.
9. Соколов А.В. Информационно-поисковые системы: Учебное пособие для вузов. М.: Радио и связь, 1981.

10. Generalized data management systems and scientific information. - Report of a specialist study. Paris, OECD Nuclear Energy Agency, NEA Working Group on Nuclear Energy Information. 1978.
11. CINDU Catalogue of numerical nuclear data available from the IAEA Nuclear data section. Vienna, 1976, CINDU-11.
12. Report on the fifth IAEA consultants' meeting of Nuclear reaction data centers. Vienna, 1980, INDC(NDS)-125.
13. Вычислительная машина IOIOB: Справочник. Будапешт, "Видеотон", 1973.
14. Журавлева Г.М. Организация подготовки базы ядерных данных в интерактивной системе. - Тезисы доклада на Всесоюзной конференции "Проблемы информационного обеспечения фундаментальных и прикладных научных исследований в свете решений XXVI съезда КПСС" (г.Звенигород, 4-6 мая 1982 г.). Ч.П. М., 1982, с.190.
15. Мартин Дж. Организация баз данных в вычислительных системах. М.: Мир, 1978.
16. Журавлева Г.М. Некоторые вопросы обеспечения достоверности данных, записанных в формате ЭКСФОР, на малой ЭВМ: Препринт ИАЭ - 3649/15. М., 1982.
17. Burrows T.W., Dempsey P. The bibliography of integral charged particle nuclear data. Information analysis center report, March 1980, BNL-NCS-50640.
18. Garber D., Dunford C., Pearlstein S. Data formats and procedures for the evaluated nuclear data file, ENDF. USA, BNL, Oct. 1975. BNL-NCS-50496.

Статья поступила в редакцию 19 декабря 1983 г.

УДК 539.172.1

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЕ СЕЧЕНИЕ РЕАКЦИИ $^{14}\text{N}(d,p_0)^{15}\text{N}$

В ОБЛАСТИ ЭНЕРГИИ ДЕЙТРОНОВ 0,3-2,0 МэВ ДЛЯ ЗАДАЧ ЭЛЕМЕНТНОГО АНАЛИЗА

В.С.Шорин, В.А.Карабаш, А.Н.Соснин

THE DIFFERENTIAL CROSS-SECTION OF THE REACTION $^{14}\text{N}(d,p_0)^{15}\text{N}$ IN THE 0,3-2,0 MeV DEUTRON ENERGY REGION FOR THE ELEMENTAL ANALYSIS. The excitation function of the reaction $^{14}\text{N}(d,p_0)^{15}\text{N}$ at $\theta_L=150^\circ$ has been measured in the 0,8-2,0 MeV deuteron energy region. Using the available data the reaction cross-section has been evaluated in the region $E_d \leq 0,8$ MeV. The differential reaction cross-section at $\theta_L=150^\circ$ in the region $E_d \leq 2,0$ MeV has been deduced. The recommended cross-section is found to be consistent with the other data and the measured values of the reactions yield for the thick target AlN in the 0,8-2,0 MeV energy region.

Реакция $^{14}\text{N}(d,p_0)^{15}\text{N}$ из-за высокой экзотермичности (энергия реакции $Q=8,61$ МэВ) и возможности легкого выделения основной группы протонов (p_0) на фоне других протонных групп, α -частиц и рассеянных дейтронов широко используется для микроанализа примесей азота в различных материалах [1-4]. Ядерно-физические методы анализа вещества, основанные на регистрации мгновенных заряженных продуктов ядерной реакции, требуют достаточно подробного знания функции возбуждения (или энергетического хода сечения реакции), как правило, в области тыльных углов. Интервал исследуемых глубин материала определяет выбор максимальной энергии налетающих заряженных частиц (в данном случае дейтронов). Профиль распределения анализируемого вещества может быть получен или по форме энергетической зависимости выхода ядерной реакции, или по форме спектра вылетающих заряженных частиц. Во втором случае достаточно знать энергетический ход сечения реакции в ограниченном диапазоне энергий зондирующих частиц, тогда как в первом случае необходимо знать энергетический ход функции возбуждения вплоть до нулевых энергий. Требования к точности абсолютных величин дифференциальных

сечений реакций в ядерно-физических методах не являются жесткими благодаря применению стандартов (обычно однородных толстых мишеней с постоянной и известной стехиометрией).

Известные литературные данные по сечению реакции $^{14}\text{N}(d,p_0)^{15}\text{N}$ [5-10] пока не соответствуют требованиям ядерного микроанализа. Цель настоящей работы - получение сечения реакции $^{14}\text{N}(d,p_0)^{15}\text{N}$ для угла $\theta_L = 150^\circ$, который является оптимальным для задач ядерного микроанализа азота [3], в области энергии дейтронов 0,3-2,0 МэВ, соответствующей возможностям электростатического ускорителя ЭГ-2,5. В области энергии 0,8-2,1 МэВ была измерена функция возбуждения реакции, ниже 0,8 МэВ проведена оценка сечения реакции на основе имеющейся информации.

Сечение реакции $^{14}\text{N}(d,p_0)^{15}\text{N}$ в области 0,8-2,1 МэВ. Данные о сечении реакции содержатся в работах [6-8] в виде коэффициентов разложения по полиномам Лежандра (в системе центра масс) угловых распределений протонов для отдельных значений энергии налетающих дейтронов. В работе [10] информация о сечении реакции для угла 150° приведена только в графической форме, извлечь цифровые данные из которой трудно, поэтому сравнения с данной работой не проводили. Во всех работах точность измеренных сечений составляет около 5%. Получены данные для трех значений энергии: 595, 805, 990 кэВ [6] и 600, 700, 800 кэВ [7]. В работе [8] приведены данные для области энергий 1,0-2,2 МэВ с шагом 0,2 МэВ (семь точек), которые являются практически последними по времени из известных авторов. Во всех работах имеются подробные данные о функции возбуждения, но для произвольно выбранного угла и в графическом виде, что затрудняет их сравнение. Данные работ [6-8] по сечению реакции $^{14}\text{N}(d,p_0)^{15}\text{N}$ для угла $\theta_L = 150^\circ$, преобразованные в лабораторную систему координат, приведены на рис.1. Там же представлены результаты настоящих измерений, выполненных на ускорителе ФЭИ ЭГ-2,5. Техника эксперимента и методика измерений подробно описаны в работе [3]. В эксперименте использовались твердые азотные мишени, приготовленные напылением в вакууме около 5 мкг/см² аденина (C₅N₅H₅) на никелевые подложки толщиной около 0,45 мг/см². На поверхность мишеней был также напылен слой золота толщиной около 30 мкг/см². Основным недостатком подобных мишеней - их нестойкость под пучком. Поэтому измерения проводили в несколько этапов, чередуя измерения с мелким шагом по энергии на отдельных интервалах с измерениями с большим энергетическим шагом по всему интервалу, которые затем использовали для сшивки данных. Для контрольных измерений применяли также тонкие угольные пленки (толщиной около 50 мкг/см²), насыщенные азотом. Несмотря на малый выход, эти мишени оказались более стабильными во времени. Вылетающие из мишени протоны регистрировались поверхностно-барьерным детектором типа ДКПс-50 с толщиной чувствительного слоя около 450 мкм. Детектор был расположен на расстоянии 50 мм от мишени в телесном угле Ω , равном приблизительно 0,01 ср. Поверхность детектора была защищена слоем алюминия толщиной 10 мкм и полиэтиленовой пленкой толщиной около 170 мкм. Ошибка измерения энергии падающего пучка составляла не более 1,7 кэВ. Абсолютизация данных осуществлялась привязкой к величине $d\sigma/d\Omega = 960$ мкб/ср при энергии дейтронов 1,4 МэВ [8]. Полученные результаты, а также величины ошибок измеренных сечений, составляющие 3-6,5% (без учета нормировки сечений), приведены в табл.1. Сравнение имеющихся данных показывает (см.рис.1), что в области энергии дейтронов менее 1,7 МэВ наблюдается достаточно хорошее согласие между данными. В области энергии более 1,8 МэВ результаты настоящей работы лежат несколько выше данных работы [8] (до 17%), что далеко выходит за пределы экспериментальных ошибок. Поэтому для проверки полученных результатов проведены дополнительные измерения функции выхода реакции в зависимости от энергии. Выход реакции $Y(E)$ (без учета малых эффектов страгглинга и многократного рассеяния) имеет вид

$$Y(E) = \text{const} \int_0^E \sigma(\varepsilon) S^{-1}(\varepsilon) d\varepsilon,$$

где $\sigma(\varepsilon)$ - сечение реакции под заданным углом для энергии дейтронов ε ; $S(\varepsilon)$ - тормозная способность вещества мишени, однородной по составу и глубине.

Сравнение измеренных выходов реакции с расчетными позволяет проверить энергетический ход сечения реакции. Результаты измерений выходов реакции в области энергии дейтронов 0,8-2,0 МэВ приведены на рис.1. В качестве стандарта использовали мишень из нитрида алюминия [3]. Точность измеренных величин менялась от 2,5% при энергии дейтронов 0,85 МэВ до 0,5% при энергии 2,03 МэВ. Полученные данные являются относительными, так как исследуется только энергетическое поведение функции $\sigma(\varepsilon)$. Для анализа данных необходимо знать энергетический ход как сечения в области энергии дейтронов 0-0,8 МэВ, так и тормозной способности $S(E)$.

Таблица I

Дифференциальное сечение $d\sigma/d\Omega$ реакции $^{14}\text{N}(d,p_0)^{15}\text{N}$
 для угла $\theta_L = 150^\circ$

E_d , кэВ	$d\sigma/d\Omega \pm \delta\sigma$, мкб/ср						
810	265±16	1125	519±25	1427	965±41	1732	1856±70
815	270±16	1138	539±26	1441	1117±45	1748	2047±76
837	295±18	1151	518±25	1449	1084±27	1756	2161±60
860	308±18	1164	529±25	1456	1051±44	1764	2184±80
871	351±21	1172	570±26	1471	1070±44	1780	2391±86
882	345±20	1191	601±28	1486	1140±45	1796	2295±83
894	327±19	1204	609±23	1500	1194±46	1804	2516±42
905	360±21	1218	618±28	1515	1063±44	1812	2443±91
917	345±20	1231	629±29	1523	1116±39	1829	2578±95
924	383±21	1238	633±29	1530	1089±44	1845	2560±95
940	388±21	1244	681±30	1545	1066±44	1854	2724±68
952	415±22	1258	713±31	1560	1111±45	1862	2740±100
983	420±22	1272	754±32	1576	1063±44	1878	2721±100
1000	480±24	1285	754±32	1591	1261±50	1895	2918±110
1013	428±23	1299	744±32	1599	1323±36	1903	2839±70
1025	510±25	1307	767±23	1606	1184±46	1912	2740±100
1037	490±25	1327	807±35	1622	1321±51	1919	2880±110
1044	522±26	1336	794±34	1637	1299±51	1920	2846±70
1049	545±26	1341	821±35	1653	1404±53	1937	2899±71
1062	528±25	1355	895±37	1668	1436±54	1954	2950±72
1074	521±25	1369	958±40	1677	1382±44	1971	2637±68
1087	533±25	1377	936±36	1684	1531±57	1988	2494±66
1100	545±26	1384	997±42	1700	1757±65	2005	2356±64
1107	514±25	1398	970±41	1716	1945±72	2022	2291±63
1113	531±25	1412	971±41	1724	1819±45		

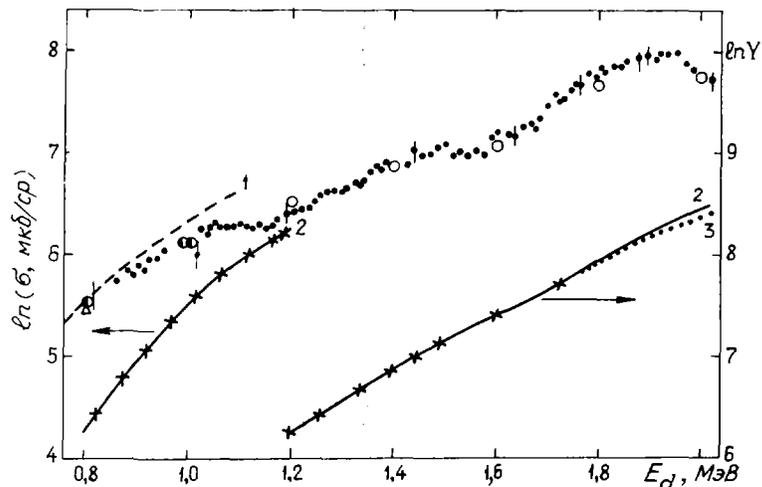


Рис. I. Дифференциальное сечение σ (кривая 1 и точки \bullet) и выход Y (кривые 2, 3) реакции $^{14}\text{N}(d,p_0)^{15}\text{N}$ для угла $\theta_L = 150^\circ$ в области энергии дейтронов 0,8-2,0 МэВ. Расчет: 1 — по формуле (3); 2 — с оцененным сечением; 3 — с сечением из работы [8]; \bullet , Δ , \circ — данные работ [6, 7, 8] соответственно; \bullet , \times — данные настоящей работы

Оценка сечения реакции в области энергии дейтронов менее 0,8 МэВ. На рис.2 собрана вся доступная информация о сечениях реакции $^{14}\text{N}(d,p_0)^{15}\text{N}$ ниже 0,8 МэВ. Кроме уже отмеченных данных [6,7] приведены данные работ [5,9]. В первой содержатся данные для трех значений энергии дейтронов: 400, 500 и 600 кэВ; точность измеренных сечений составляла 5-10%, причем возможны ошибки в определении энергии дейтронов до 20 кэВ. В работе [9] приведены угловые распределения для пяти значений энергии в области энергии дейтронов 0,324-0,626 МэВ, точность данных составляет 5-8%, для угла $\theta_L = 90^\circ$ содержатся подробные данные. (Все измерения представлены в графическом виде, поэтому при переводе их на рис.2 могли возникнуть ошибки.)

Ранее проведенные исследования [5-7,9] подтвердили преобладание статистического механизма реакции над прямыми процессами в области энергии дейтронов менее 800 кэВ. Этот факт позволяет описать усредненное сечение реакции в рамках статистического формализма, используя соотношение, часто встречающееся в астрофизических расчетах [11]:

$$\sigma(E) = S_{\text{аф}}(E) \exp(-2\pi\eta)/E,$$

где $S_{\text{аф}}(E)$ - астрофизический фактор; η - кулоновский параметр канала реакции. Величина $S_{\text{аф}}(E)$ зависит от параметров потенциала взаимодействия, вида частицы, ширины образования и распада составного ядра. В таком случае она будет иметь вид

$$\ln S_{\text{аф}}(E) = \xi - 0,6477E, \quad (1)$$

где величина ξ не зависит от энергии и может рассматриваться как свободный параметр [11]. Значение η определяется соотношением

$$2\pi\eta = 0,989Z_1Z_2(A/E)^{1/2} = 9,828E^{-1/2}, \quad (2)$$

где Z_1, Z_2 - заряды частиц во входном канале; A - приведенная масса ядра-мишени. Учитывая соотношения (1) и (2), сечение реакции в низкоэнергетической области можно аппроксимировать выражением

$$\ln \sigma(E) = \xi - 0,6477E - \ln E - 9,828E^{-1/2}, \quad (3)$$

где σ - сечение, мкб/ср; E - энергия, МэВ. Расчеты показали, что величина $\xi = 16,8$ является оптимальной для описания экспериментальных данных в области 0,3-0,8 МэВ (см.рис.2). Вычисленное значение сечения σ реакции в основном совпадает с последними данными [9] и хорошо согласуется с данными работ [6,7] при энергии 0,8 МэВ, выше которой оно согласуется также с экспериментальными данными настоящей работы (см.рис.1). Расхождение с наиболее старыми данными [5] может быть устроено или перенормировкой, или сдвигом данных по энергии на величину около 30 кэВ, что находится вблизи возможных экспериментальных ошибок [5]. Таким образом, проведенная оценка сечения реакции в области энергии дейтронов менее 0,8 МэВ и экспериментальные данные, полученные в настоящей работе, позволяют определить энергетический ход сечения реакции интересующей нас области энергии дейтронов менее 2,1 МэВ.

Тормозные способности $S(E)$. Существует множество таблиц оцененных данных по энергетическим потерям протонов (и других заряженных частиц) в различных веществах [12-15]. Как отмечено в работе [14], рассматриваемый энергетический интервал (соответствующий энергиям протонов $0,1 \leq E_p \leq 1,0$ МэВ) обладает той особенностью, что описание в нем данных на основе какой-либо физической модели затруднено. В то же время этот интервал является особенно интересным с точки зрения задач определения элементного состава вещества, поэтому в оценках [14,15] он выделен особо,

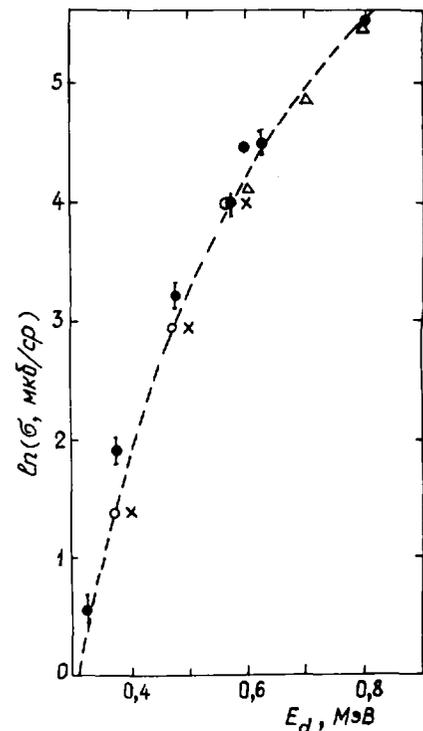


Рис.2. Дифференциальное сечение реакции $^{14}\text{N}(d,p_0)^{15}\text{N}$ для угла $\theta_L = 150^\circ$ в области энергии дейтронов менее 0,9 МэВ. Данные работ: [9] - [9]; [6] - [6]; [7] - [7]; x - [5]; o - [5] (смещены на $\Delta E = 30$ кэВ); --- - расчет по формуле (3) (оцененная кривая сечения)

и внутри него данные аппроксимируются некоторыми функциями. В области энергии протонов более 1,0 МэВ описание данных проводится на основе теоретического формализма типа Бете - Блоха [12]. В настоящей работе за основу были выбраны результаты последней компиляции [15], содержащей в отличие от других работ ошибки приводимых величин. Так, в рассмотренном диапазоне точность оцененных величин $S(E)$ составляет 1,5-2,4% для азота и 1% для алюминия. Однако в данной задаче более важными являются ошибки в энергетическом ходе тормозной способности $S(E)$, а не абсолютные ошибки. Для их оценки сравним между собой энергетическое поведение величин $S(E)$, приведенных к энергии протонов 1,0 МэВ [12-15] (табл.2). Данные о нитриде алюминия получены из табулированных значений для алюминия и азота с помощью правила Брегга [12]. Из табл.2 видно, что в интервале 0,5-0,2 МэВ расхождение между данными работ [12,15] составляет 2,3-7,0%. Данные работы [13, по сравнению с [15] в том же интервале испытывают флуктуации с амплитудой около 7%. В то же время различие между данными последних работ [14,15] невелико и составляет около 1,7% на верхней границе диапазона, что лежит в пределах возможных ошибок. Этот факт свидетельствует о точности энергетического хода оцененных в работе [15] величин $S(E)$, равной около 1%. В настоящей работе данные [15] были параметризованы в виде

$$S(E) = S_0 \left(1 + \sum_{i=1}^4 S_i E^i \right)^{-1},$$

где S_i - параметры ($i = 0,1,2,3,4$). Результаты такого представления, приведенные в табл.2, хорошо согласуются с исходными данными [15], подтверждая корректность подобной процедуры.

Таблица 2

Приведенная тормозная способность протонов $S(E)/S$ для нитрида алюминия

Энергия, МэВ	Данные работ				
	[12]	[13]	[14]	[15]	настоящей
1,0	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
0,9	1,068	1,080	1,068	1,070	1,070
0,8	1,147	1,179	1,148	1,153	1,157
0,7	1,241	1,301	1,243	1,256	1,255
0,6	1,354	1,448	1,359	1,377	1,377
0,5	1,493	1,628	1,505	1,528	1,529
0,4	1,668	1,820	1,696	1,724	1,725
0,3	1,898	-	1,960	1,994	1,994
0,2	2,214	2,209	2,342	2,381	2,379

Обсуждение результатов. По полученным сечению реакции и тормозным способностям были рассчитаны функции выхода реакции $Y(E)$ в области энергии дейтронов 0,8-2,0 МэВ. Результаты приведены на рис.1 и в табл.3 [величине $Y(J)$]. Они хорошо описывают экспериментальные данные, подтверждая правильность измеренного и оцененного сечений реакции. Если взять за основу сечение реакции $\sigma^*(E)$ из работы [8], где резонанс в сечении при энергии дейтронов около 1,9 МэВ выражен слабее, то вычисленные значения $Y^*(J)$ в области 1,8-2,0 МэВ меньше экспериментальных на 2-8% (см.табл.3), что значительно больше ошибок эксперимента (см.рис.1). Таким образом, независимый эксперимент подтверждает усиление резонанса в сечении реакции при энергии дейтронов около 1,9 МэВ. В табл.3 проведено также сравнение выходов реакции, рассчитанных на основе тормозных способностей из работ [14] - $Y(And)$ и работы [15] - $Y(J)$. По абсолютной величине результаты расчетов различаются примерно на 2%, а по величине отношения на границе диапазона примерно на 1,2%. С учетом точности измеряемых величин $\sigma(E)$ и $Y(E)$ подобные эффекты трудно обнаружить экспериментально.

Результаты изучения энергетического поведения сечения, полученные в настоящей работе, позволяют дать усредненное сечение реакции в области энергии дейтронов 2,0 МэВ, которое приведено в табл.4. Данные содержат в основном четыре значащие цифры, чтобы не терять точность при интер-

полями. Ошибки оцененной кривой составляют не более 4,5% по абсолютной величине в области энергии дейтронов более 1,0 МэВ и не более 2% по энергетическому ходу. Результаты настоящей работы использовались при анализе профиля распределения азота по глубине в нержавеющих сталях.

Таблица 3

Результаты расчетов и сравнение выхода Y реакции $^{14}\text{N}(d,p_0)^{15}\text{N}$

E_d , кэВ	$Y(J)$, мб·каВ/ср	$Y(\text{Анд})/Y(J)$	σ^*/σ	$Y^*(J)/Y(J)$
800	29,01	0,9847	1,0000	1,0000
900	57,52	0,9845	1,0000	1,0000
1000	101,4	0,9841	1,0000	1,0000
1100	156,0	0,9835	1,0000	1,0000
1200	215,1	0,9829	1,0000	1,0000
1300	292,2	0,9820	1,0000	1,0000
1400	395,7	0,9808	1,0000	1,0000
1500	529,5	0,9796	1,0000	1,0000
1600	676,9	0,9783	0,9542	0,9961
1700	867,3	0,9770	0,9988	0,9966
1800	1154	0,9753	0,8641	0,9790
1900	1541	0,9738	0,8252	0,9455
2000	1956	0,9726	0,9015	0,9227

Таблица 4

Оцененные сечения реакции $^{14}\text{N}(d,p_0)^{15}\text{N}$ для $\theta_L = 150^\circ$

E_d , кэВ	$d\sigma/d\Omega$, мкб/ср								
300	0,878	650	101,8	1000	528,5	1350	865,5	1700	1652
350	2,76	700	138,0	1050	528,5	1400	979,1	1750	2018
400	6,83	750	191,9	1100	528,5	1450	1108	1800	2465
450	14,30	800	249,6	1150	528,5	1500	1108	1850	2638
500	26,42	850	312,7	1200	597,9	1550	1108	1900	2824
550	44,39	900	372,5	1250	676,3	1600	1226	1950	2883
600	69,20	950	443,7	1300	765,1	1650	1226	1980	2609
								2030	2208

Список литературы

1. Gönczi L., Berggren H., Didriksson e.a. The use of the $^{14}\text{N}(d,p_0)^{15}\text{N}$ reaction for studies of nitrogen depth distributions in barley and in samples of steel. - Nucl. Instrum. and Methods, 1978, v.149, p.337.
2. Кривошеев В.Г., Любинский Н.Н., Меленевский А.Э. и др. Измерение распределения бейка ядерным методом. - Тезисы докладов XXX Соевещения по ядерной спектроскопии и структуре ядра. Л.: Наука, 1980, с.584.
3. Гурбич А.Ф., Истомин И.В., Карабаш В.А. и др. Ядерный микроанализ примесей азота и кислорода в углеродных образцах. - Препринт ФЭИ-1122. Обнинск, 1980.
4. Bird J.R., Campbell B.L., Price P.B. Prompt nuclear analysis. - Atomic Energy Rev., 1974, v.12, p.275-342.

5. Jongerius H.M., Valckx F.P.G., Endt P.M. Angular distributions and yield of the reaction $^{14}\text{N}(d,p)^{15}\text{N}$. - Physica, 1954, v.20, p.29-35.
6. Booth D.L., Price F.V., Roaf D. e.a. The differential cross-sections for the reactions $^{14}\text{N}(d,p)^{15}\text{N}$ and $^{14}\text{N}(d,\alpha)^{12}\text{C}$ between 600 and 1000 keV. - Proc. Phys. Soc., 1958, v.71, p.325-329.
7. Sjögren B., Sawa Z. Experimental investigation of three proton groups and one alpha particle groups obtained from deuteron bombardment of ^{14}N at low energies. - Ark. for fysik, 1961, v.19, p.417-428.
8. Beaumevielle H.M., Lambert M., Yaker M. e.a. Etude des reactions (d,p) sur ^{14}N a $E_d=2,2$ MeV. - Nuovo cimento, 1967, v.47B, p.139-143.
9. Valec A., Vertse T., Schlenk B. e.a. A study of the $^{14}\text{N}(d,p)^{15}\text{N}$ reactions at low bombardment energies. - Nucl. Phys., 1976, p.200-210.
10. Koenig W., Riccato A., Stock R. e.a. Search for quartet excited states in ^{16}O . - Nuovo cimento, 1977, v.39A, p.9-22.
11. Фаулер У., Хойл Ф. Нейтринные процессы и образование пар в массивных звездах и Сверхновых. М.: Мир, 1967. Приложение Б, с.176.
12. Немец О.Ф., Гофман Ю.В. Справочник по ядерной физике. Киев: Наукова думка, 1975, гл.3.
13. Northcliffe L.C., Schilling R.F. Range and stopping power and tables for heavy ions. - Nucl. Data Tables, 1970, v.A7, p.235-396.
14. Andersen H.H., Ziegler Z.F. Hydrogen stopping power and ranges in all elements. N.Y.: Pergamon Press, 1977, v.3.
15. Janni J.F. Proton range-energy tables. - Atomic Data and Nucl. Data Tables, 1982, v.27, p.150-529.

Статья поступила в редакцию 28 июля 1983 г.

УДК 539.172.13

СИСТЕМАТИКА ВЫХОДОВ ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ ДЛЯ ТОЛСТОЙ МИШЕНИ
ПРИ ЭНЕРГИИ ДЕЙТРОНОВ 22 МЭВ

П.П.Дмитриев

SYSTEMATICS OF NUCLEAR REACTIONS YIELDS FOR THICK TARGET AT 22 MEV DEUTERONS ENERGY. The paper presents the yields of nuclear reactions of various types for a thick target at irradiating chemical elements by 22 MeV energy deuterons. The reaction yield is determined by a number of reaction events per 1000 deuterons. On all there are 211 meanings of reaction yields of the types $d2n$, $d3n$, dp , dt , dn , $d(t+3n)$, $d\alpha$, $d\alpha n$, $d\alpha p$, ... These yields are systematized according to the reaction types. To obtain the reaction yields meanings the author has employed his previously published yields of radioactive nuclides for the thick target at $E_d=22$ MeV. The use of presented data for the evaluation of radionuclide yields is briefly considered.

В работе [1] приведено 208 значений экспериментальных выходов для ^{151}I радиоактивного нуклида при облучении дейтронами с энергией 22 МэВ толстых мишеней из различных химических элементов. Указаны также реакции получения радионуклидов типа dn , $d2n$, $d3n$, dp , dt , $d\alpha$, $d\alpha n$, $d2p$, $d(p+n)$, $d(t+3n)$ и др. Большое число приведенных в работе [1] данных по выходам радионуклидов позволяет систематизировать и сравнить выходы реакций различного типа в широкой области масс ядер.

В работе [2] представлены систематизированные данные о выходах различного типа реакций для толстой мишени под действием протонов с энергией 22 МэВ и описана методика получения значения выхода основной реакции в тех случаях, когда при облучении химического элемента радионуклид об-

разуется по нескольким реакциям. Изложенная в работе [2] методика полностью применима к реакциям под действием дейтронов, поэтому в настоящей статье ограничимся лишь краткими пояснениями.

Выход реакции можно определить числом ее актов на 1000 бомбардирующих дейтронов. Выход реакции, как и ее сечение, характеризует вероятность процесса. При получении радионуклидов в каждом акте реакции образуется атом определенного нуклида. Если при облучении химического элемента дейтронами радионуклид образуется только по одной реакции, то, зная выход радионуклида, можно найти ее выход по формуле

$$W = 0,554 T_{I/2} (B/P_c), \quad (1)$$

где W - выход реакции, атом/1000 дейтронов; $T_{I/2}$ - период полураспада нуклида, сут; B - выход радионуклида, МБк/(мкА·ч); P_c - содержание изотопа-мишени, %. По формуле (1), используя величину P_c , можно определить выход реакции, как и ее сечение, для 100%-ного содержания изотопа-мишени.

Следующая формула связывает выход реакции для толстой мишени со средним по пробегу бомбардирующей частицы эффективным сечением реакции; $\tilde{\sigma} = 1,66 \cdot 10^3 W(A/R)$, где $\tilde{\sigma}$ - эффективное сечение, мб; A - относительная атомная масса элемента; R - пробег частицы, мг/см².

В настоящей работе большинство значений выходов радионуклидов, приведенных в работе [1], пересчитаны в значения выходов ядерных реакций определенного типа и систематизированы по типам реакций. При энергии дейтронов 22 МэВ измерены выходы следующих 12 радионуклидов: $^{90}\text{Nb}(\text{Zr})$, $^{91}\text{Nb}(\text{Zr})$, $^{92}\text{Nb}(\text{Zr})$, $^{110}\text{In}(\text{Cd})$, $^{115}\text{In}(\text{Cd})$, $^{132}\text{Cs}(\text{Cs})$, $^{167}\text{Tm}(\text{Tm})$, $^{168}\text{Tm}(\text{Tm})$, $^{169}\text{Yb}(\text{Tm})$, $^{177}\text{Lu}(\text{Lu})$, $^{173}\text{Hf}(\text{Lu})$, $^{175}\text{Hf}(\text{Lu})$ (в скобках приведены облучаемые элементы). Эти выходы также пересчитаны в выходы реакций. Результаты расчетов представлены в таблице. Определены выходы для 211 реакций следующих типов (в скобках дано число реакций): $d2n$ (86), $d3n$ (24), dp (21), dt (16), dn (11), $d(t+3n)$ (9), $d\alpha$ (9), $d2p$ (8), $d\alpha n$ (7), $d\alpha p$ (6), $d4n$ (5), $d(p+n)$ (3), $d\alpha 2n$ (2), $d(\tau+t+3n)$ (1), $d(\tau+t)$ (1), dtn (1), $d(tn+4n)$ (1). Реакции перечислены в порядке уменьшения их числа.

Как видно из табл. I работы [1], радионуклиды образуются в результате одной или нескольких реакций. При получении радионуклида по одной реакции выход реакции находят по формуле (1). Если радионуклид образуется по нескольким реакциям на ядрах-мишенях различных стабильных изотопов облучаемого элемента и одна из реакций является преобладающей, то выход основной реакции рассчитывается по формуле

$$W_0 = (W_n 100 - \sum_i W_i P_i) / P_0, \quad (2)$$

где W_n - выход всех реакций (атом/1000 дейтронов), вычисленный по измеренному выходу радионуклида (1) при $P_c = 100\%$; W_i - выходы других реакций, дающих меньший по сравнению с основной реакцией вклад в выход радионуклида, атом/1000 дейтронов; P_i - содержание изотопов-мишеней других реакций, %; P_0 - содержание изотопа-мишени основной реакции, %.

При энергии дейтронов 22 МэВ $i \leq 3$. Методика определения значений W_i , границы применимости формулы (2), оценка погрешности значений W_0 , обусловленная погрешностью W_i , рассмотрены в работе [2]. Выходы реакций, рассчитанные по формуле (2), отмечены в таблице буквами "ор" (основная реакция). Способ определения выхода реакции по измеренной кривой выхода радионуклида, когда пороги реакций сильно различаются, также рассмотрен в работе [2]. Выходы реакций, найденные этим способом, отмечены в таблице буквами "кв" (кривая выхода). Приведены также выходы реакций, полученные при облучении обогащенных изотопов, которые отмечены буквами "об".

Выход реакции для толстой мишени определяется интегралом по пробегу функции возбуждения этой реакции. При рассмотрении таблицы можно обнаружить некоторые аномалии и закономерности в значениях выходов реакций, которые обусловлены факторами, влияющими на характер зависимости сечения реакции от энергии бомбардирующих частиц (например, величина порога реакции, механизм реакции и свойства участвующих в реакции ядер, величина кулоновского барьера).

Значения выходов реакций, приведенные в таблице, можно использовать для оценки выходов радионуклидов при облучении толстой мишени дейтронами с энергией 22 МэВ и при другой энергии дейтронов. В ссылке [4] работы [2] указаны публикации, в которых приведены значения кривых выхода для различного типа реакций с протонами. В этих же публикациях приведены значения кривых выхода радионуклидов для различного типа реакций с дейтронами. Относительный ход этих кривых можно использовать для получения выходов радионуклидов при энергии дейтронов 22 МэВ.

Выход реакций различного типа для толстой мишени под действием дейтронов с энергией 22 МэВ

Ядро-мишень	Ядро-продукт	Выход реакции, атом/1000 дейтронов	Ядро-мишень	Ядро-продукт	Выход реакции, атом/1000 дейтронов	Ядро-мишень	Ядро-продукт	Выход реакции, атом/1000 дейтронов
<u>Реакция d2n</u>			102 _{Ru}	102 _{Rh}	1,0 ор	168 _{Er}	168 _{Tm}	0,81 ор
7 _{Li}	7 _{Be}	1,6 ор [*]	103 _{Nh}	103 _{Pd}	2,4	170 _{Er}	170 _{Tm}	0,82
11 _B	11 _C	0,56 ор	107 _{Ag}	107 _{Cd}	1,8	169 _{Tm}	169 _{Yb}	0,45
18 _O	18 _F	1,8 ор	109 _{Ag}	109 _{Cd}	1,4	173 _{Yb}	173 _{Lu}	1,1 ор
44 _{Ca}	44 ^m _{Sc}	0,48 ор	110 _{Cd}	110 ^m _{In}	2,5 об	174 _{Yb}	174 _{Lu}	0,32 ор
48 _{Ca}	48 _{Sc}	3,0	111 _{Cd}	111 _{In}	2,5 об	175 _{Lu}	175 _{Hf}	0,63 ор
45 _{Sc}	45 _{Ti}	0,95	114 _{Cd}	114 ^m _{In}	1,0 ор	181 _{Ta}	181 _W	0,33
48 _{Ti}	48 _V	1,4 ор	113 _{In}	113 _{Sn}	1,5	182 _W	182 ^m _{Re}	0,32 ор
51 _V	51 _{Cr}	2,9	120 _{Sn}	120 ^m _{Sb}	0,32 ор	184 _W	184 ^m _{Re}	0,034 ор
52 _{Cr}	52 _{Mn}	0,48 ор	122 _{Sn}	122 _{Sb}	0,62	184 _W	184 _{Re}	0,51 ор
55 _{Mn}	55 _{Fe}	1,4	124 _{Sn}	124 _{Sb}	1,8	185 _{Re}	185 _{Os}	0,55
56 _{Fe}	56 _{Co}	0,79 ор	121 _{Sb}	121 ^m _{Te}	1,2	194 _{Pt}	194 _{Au}	0,48 ор
65 _{Cu}	65 _{Zn}	3,0	121 _{Sb}	121 _{Te}	1,5	195 _{Pt}	195 _{Au}	0,25 ор
66 _{Zn}	66 _{Ga}	1,3 об [*]	123 _{Sb}	123 ^m _{Te}	1,1	196 _{Pt}	196 _{Au}	0,69 ор
67 _{Zn}	67 _{Ga}	2,9 об	124 _{Te}	124 _I	2,0 ор	198 _{Pt}	198 _{Au}	0,46
69 _{Ga}	69 _{Ge}	1,7	125 _{Te}	125 _I	0,82 ор	197 _{Au}	197 _{Hg}	0,36
72 _{Ge}	72 _{As}	2,8 ор	126 _{Te}	126 _I	1,1 ор	200 _{Hg}	200 _{Tl}	0,41 ор
74 _{Ge}	74 _{As}	2,2 ор	130 _{Te}	130 _I	1,0	202 _{Hg}	202 _{Tl}	0,37 ор
76 _{Ge}	76 _{As}	2,7	127 _I	127 _{Xe}	1,1	203 _{Tl}	203 _{Pb}	0,68
75 _{As}	75 _{Se}	1,8	133 _{Cs}	133 ^m _{Ba}	0,78	<u>Реакция d3n</u>		
76 _{Se}	76 _{Br}	1,5 ор	133 _{Cs}	133 _{Ba}	1,7	48 _{Ca}	47 _{Sc}	0,75
82 _{Se}	82 _{Br}	0,79	139 _{La}	139 _{Ce}	1,2	45 _{Sc}	44 _{Ti}	0,66
85 _{Rb}	85 _{Sr}	2,3	144 _{Nd}	144 _{Pm}	1,5 ор	56 _{Fe}	55 _{Co}	0,011 кв [*]
86 _{Sr}	86 _Y	3,2 ор	148 _{Nd}	148 _{Pm}	0,52	63 _{Cu}	62 _{Zn}	0,0096
88 _{Sr}	88 _Y	2,5 ор	148 _{Sm}	148 _{Eu}	0,58 ор	67 _{Zn}	66 _{Ga}	0,091
89 _Y	89 _{Zr}	1,8	150 _{Sm}	150 ^m _{Eu}	0,85 ор	68 _{Zn}	67 _{Ga}	0,27 об
90 _{Zr}	90 _{Nb}	1,5 ор	152 _{Sm}	152 _{Eu}	0,58	69 _{Ga}	68 _{Ge}	0,18
92 _{Zr}	92 ^m _{Nb}	0,82 ор	154 _{Sm}	154 _{Eu}	0,54	88 _{Sr}	87 ^m _Y	0,011 ор
96 _{Zr}	96 _{Nb}	1,4	151 _{Eu}	151 _{Gd}	0,43	88 _{Sr}	87 _Y	0,19 ор
93 _{Nb}	93 ^m _{Mo}	0,27	153 _{Eu}	153 _{Gd}	0,48	89 _Y	88 _{Zr}	0,14
93 _{Nb}	93 _{Mo}	1,2	155 _{Gd}	155 _{Tb}	2,2 ор	111 _{Cd}	110 ^m _{In}	0,36 об
95 _{Mo}	95 ^m _{Tc}	0,56 ор	156 _{Gd}	156 _{Tb}	2,0 ор	112 _{Cd}	111 _{In}	0,67 об
96 _{Mo}	96 _{Tc}	2,0 ор	166 _{Er}	166 _{Tm}	1,0 ор	126 _{Te}	125 _I	0,20 ор
102 _{Ru}	102 ^m _{Rh}	0,62 ор	167 _{Er}	167 _{Tm}	1,6 ор			

* Пояснения обозначений "ор", "об", "кв" см. в тексте.

Ядро-мишень	Ядро-продукт	Выход реакции, атом/1000 дейтронов	Ядро-мишень	Ядро-продукт	Выход реакции, атом/1000 дейтронов	Ядро-мишень	Ядро-продукт	Выход реакции, атом/1000 дейтронов
141Pr	140Nd	0,53	45Sc	44mSc	0,07	110Cd	109Cd	0,20
166Er	165Tm	0,56 оп	55Mn	54Mn	0,18	176Hf	175Hf	0,79
177Hf	176Ta	0,97 оп	59Co	58Co	0,16	<u>Реакция dα</u>		
182W	181Re	0,45 оп	75As	74As	0,095	24Mg	22Na	0,81 оп
184W	183Re	0,96 оп	85Rb	84Rb	0,07	44Ca	42K	0,091 оп
194Pt	193Au	0,67 оп	89Y	88Y	0,034	48Ti	46Sc	0,19 оп
195Pt	194Au	0,66 оп	93Nb	92mNb	0,054	50Cr	48V	0,13 оп
202Hg	201Tl	0,88 оп	103Rh	102mRh	0,03	56Fe	54Mn	0,19 оп
206Pb	205Bi	0,65 оп	103Rh	102Rh	0,085	58Ni	56Co	0,15 об
207Pb	206Bi	1,3 оп	107Ag	106mAg	0,024	60Ni	58Co	0,16 об
208Pb	207Bi	1,4 оп	115In	114mIn	0,024 оп	90Zr	88Y	0,027
<u>Реакция dp</u>			133Cs	132Cs	0,051	205Tl	203Hg	0,0075
23Na	24Na	1,6	169Tm	168Tm	0,074	<u>Реакция d2p</u>		
45Sc	46Sc	0,78	197Au	196Au	0,0066	24Mg	24Na	0,03 оп
59Co	60Co	0,90	<u>Реакция dn</u>			59Co	59Fe	0,03
63Cu	64Cu	0,72 оп	12C	13N	0,64 оп	58Ni	58Co	0,91 об
81Br	82Br	0,70	48Tl	49V	0,68 оп	60Ni	50Co	0,082
85Rb	86Rb	0,49 оп	54Fe	55Co	0,37 кв	64Zn	64Cu	0,14 оп
94Zr	95Zr	0,50 оп	56Fe	57Co	0,57	103Rh	103Ru	0,022
109Ag	110mAg	0,064	57Fe	58Co	0,24 оп	133Cs	133Xe	0,053
114Cd	115Cd	0,43 оп	66Zn	67Ga	0,83 об	140Ce	140La	0,0043 оп
116Sn	117mSn	0,20 оп	70Ge	71As	0,33 оп	<u>Реакция dαn</u>		
123Sb	124Sb	0,87	94Zr	95Nb	0,41 оп	10Bo	7Be	1,4 кв
133Cs	134Cs	0,63	110Cd	111In	0,22 об	14N	11C	0,46
139La	140La	0,23	112Cd	113mIn	0,075 об	16O	13N	0,16
140Ce	141Ce	0,28 оп	164Er	165Tm	0,11 кв	52Cr	49V	0,096
142Ce	143Ce	0,40	<u>Реакция d(t+3n)</u>			58Ni	55Co	0,18
141Pr	142Pr	0,75	19F	18F	0,30	70Ge	67Ga	0,27
165Ho	166Ho	0,42	23Na	22Na	0,18	90Zr	87Y	0,035
180Hf	118Hf	0,37	52Cr	51Cr	0,076	<u>Реакция dαp</u>		
181Ta	182Ta	0,24	56Fe	55Fe	0,26	27Al	24Na	0,15
197Au	198Au	0,34	58Ni	57Ni	0,022	45Sc	42K	0,051
202Hg	203Hg	0,18 оп	76Se	75Se	0,12	51V	48Sc	0,02
<u>Реакция dt</u>			90Zr	89Zr	0,11			
12C	11C	0,028						
14N	13N	0,13						

Ядро-мишень	Ядро-продукт	Выход реакции, атом/1000 дейтронов	Ядро-мишень	Ядро-продукт	Выход реакции, атом/1000 дейтронов	Ядро-мишень	Ядро-продукт	Выход реакции, атом/1000 дейтронов
59Co	56Mn	0,012	<u>Реакция d(p+n)</u>			<u>Реакция d(τ+t)</u>		
58Ni	55Fe	0,062	64Zn	65Zn	2,2 ор	48Ca	47Ca	0,1
63Cu	60Co	0,026	130Te	131I	0,48	<u>Реакция dtn</u>		
<u>Реакция d4n</u>			198Pt	199Au	0,34	9Be	7Be	0,0074
175Lu	173Hf	0,0019	<u>Реакция dα2n</u>			<u>Реакция d(tn+4n)</u>		
186W	184mRe	0,018 кв	11B	7Be	0,16 кв	169Tm	167Tm	0,0018
186W	184Re	0,081 кв	55Mn	51Cr	0,0016			
204Hg	202Tl	0,22 кв	<u>Реакция d(τ+t+3n)</u>					
205Tl	203Pb	0,016 кв	58Ni	57Co	0,34			

Список литературы

1. Дмитриев П.П., Молин Г.А. Выходы радиоактивных нуклидов для толстой мишени при энергии α -частиц 44 МэВ. - Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1982, вып.4(48), с.26-30.
2. Дмитриев П.П. Систематика выходов ядерных реакций для толстой мишени при энергии протонов 22 МэВ. - Там же, 1983, вып.2(51), с.57-61.

Статья поступила в редакцию 24 ноября 1983 г.

УДК 539.1.01

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА КОНВЕРСИИ МЯГКИХ ЯДЕРНЫХ ПЕРЕХОДОВ
($\hbar\omega \leq 3$ кэВ) В СВЯЗИ С ЭФФЕКТАМИ ХИМИЧЕСКОГО ОКРУЖЕНИЯ АТОМА

Д.П.Гречухин, А.А.Солдатов

INVESTIGATION OF CONVERSION PROCESS OF SOFT NUCLEAR TRANSITIONS ($\hbar\omega \leq 3$ keV) IN CONNECTION WITH EFFECTS OF ATOM CHEMICAL SURROUNDINGS. The conversion of nuclear transitions ($\hbar\omega \leq 3$ keV) on external electron orbits is considered as a possible method for investigating the electronic structure of compounds. To this aim the conversion process analysis has been made. 1. Distinctness of the contribution of orbits with definite electron orbital (l) and angular momenta has been registered. The conversion process is compared with atom photoionization. 2. Estimation of the conversion process localization in the vicinity of an isomeric nucleus has been made. 3. A universal character of radial component behaviour of the functions of (lj)-orbits in the conversion zone has been shown. 4. Proportionality of the conversion probability to the wavefunction amplitude of the (lj)-orbit in the conversion zone has been detected. The calculations were made within the frame of the Hartree - Fock - Slater method (with the Latter's correction). Probabilities of a number of processes associated with the conversion process, such as conversion on a neighbouring atom shell and that over the electron bridge channel, were estimated.

Введение

При внедрении атома в конденсированную среду и в процессе образования химического соединения происходит перестройка электронной оболочки. В большей степени она затрагивает область валентной зоны спектра состояний, которую обычно ограничивает величиной энергии связи электрона,

равной примерно 10–15 эВ. Однако под воздействием полей атомов-соседей естественно возникновение значительной деформации и более глубоких электронных орбит. Далее будем использовать грубую качественную классификацию видимых типов деформации орбит электрона:

1. Изменение плотности электронной оболочки проявляется в эффекте экранирования, в результате которого орбиты испытывают деформацию радиально-симметричного "сжатия и растяжения", проявляющаяся в изменении вероятности нахождения электрона в окрестности ядра и сопровождающаяся химическим сдвигом терма. Такие деформации в чистом виде присущи наиболее глубоким орбитам атома.

2. Под воздействием электростатического поля среды (обычно квадрупольного) происходит смешивание состояний, принадлежащих группе тесно расположенных уровней в атоме, например компонентам спин-орбитального дублета. В результате воздействия поля среды возникает система состояний $\psi^{(k)}$, заданных суперпозицией по компонентам исходной группы орбит:

$$\psi^{(k)} = \sum_{(n\ell j\mu)} A_{n\ell j\mu}^{(k)} \psi_{n\ell j\mu}(x), \quad (1)$$

где

$$\sum_{(n\ell j\mu)} A_{n\ell j\mu}^{(k)*} A_{n\ell j\mu}^{(k')} = \delta_{kk'}; \quad (2)$$

n – главное квантовое число орбиты; ℓ и j – соответственно орбитальный и угловой моменты относительно ядра рассматриваемого атома; μ – магнитная проекция j -момента. В чистом виде деформация электростатического расщепления также характерна лишь для глубоких электронных орбит.

3. При соприкосновении атомов-соседей становится возможным "перетекание" электронов из одной потенциальной ямы в соседнюю; при этом в результате взаимодействия электронов возникают гибридные орбиты, в которых пространственное распределение электронной плотности существенно отличается от ситуации для изолированных атомов.

Подчеркнем, что в малой окрестности какого-либо выделенного ядра (например, ядра-изомера) $z/a_0 = x \leq x_0 \approx 0,1$ ($a_0 = 5,29 \cdot 10^{-9}$ см – радиус Бора) гибридная орбита электрона может быть представлена в форме (1) для случая электростатического расщепления:

$$\psi^{(x)} = \sum_{(\ell j\mu)} a_{\ell j\mu}^{(x)} \tilde{\psi}_{\ell j\mu}(x), \quad (3)$$

где $\tilde{\psi}_{\ell j\mu}(x)$ – система определенным образом выбранных функций с фиксированными угловыми и орбитальными моментами и стандартным для каждого (ℓj) -набора поведением радиальных компонент в зоне $x \leq x_0 \approx 0,1$, где локализован процесс конверсии. В отличие от коэффициентов суперпозиции (1) $A_{n\ell j\mu}^{(k)}$ здесь коэффициенты $a_{\ell j\mu}^{(x)}$, представляющие гибридную орбиту в окрестности фиксированного ядра, не обладают, вообще говоря, свойством ортогональности (2).

Представление о гибридизации электронных орбит в химических соединениях давно принято в квантовой химии. Понятие гибридизации широко и повсеместно используется преимущественно при описании состояний валентной зоны; однако закономерен вопрос, насколько сильно затрагиваются гибридизацией более глубокие орбиты и как быстро эффект гибридизации орбит затухает с ростом энергии связи. Достаточно определенный, хотя далеко не полный, ответ на эти вопросы может быть получен путем изучения энергетического спектра электронов внутренней конверсии мягких ядерных переходов ($\hbar\omega \leq 3-5$ кэВ) на внешних (не только валентных) оболочках при вариации химического окружения радиоактивного атома. Этому способствуют специфические характеристики процесса конверсии:

1. В случае ядерных переходов мультипольности E2, E3, E4, M1, M2, M3, M4... как показали первые исследования [1] (затем исследования в работе [2]) уникального по энергии E3-изомера ^{235}U ($\hbar\omega = 76,8$ эВ), область формирования конверсионного матричного элемента, как правило, ограничена окрестностью радиусом $R_0 \lesssim 0,2 a_0$ около ядра-изомера. Исключения имеются лишь для случая ядерных E1-переходов. Эта довольно четко выраженная локализация процесса конверсии в окрестности выделенного ядра-изомера весьма существенна для понимания структуры тех гибридных орбит, энергии которых близки к уровням энергии в изолированных атомах-соседах [3]. Обычно на ос-

ножливой такой близости термов при анализе спектров фотоэлектронов эти орбиты относят к орбитам атомов-соседей. Локальность процесса конверсии позволяет решающим образом пересмотреть такую интерпретацию.

2. Известные в литературе расчеты вероятностей конверсии демонстрируют специфическую для каждого мультиполя (E1 или M1) и достаточно резко выраженную избирательность процесса конверсии к состояниям с определенными величинами орбитального и полного углового моментов электрона от-носительно ядра-изомера*. С уменьшением энергии перехода выделенность (l_j)-состояний становится более резкой. Например, в случае E3-переходов урана, ниобия, технеция процесс конверсии наиболее эффективно идет на p -орбитах, слабее на d -орбитах, а вкладом s - и f -орбит можно пренебречь. Наоборот, в M1-переходах, как известно, основной вклад дают s -орбиты. Эта избирательность процес-са конверсии к величинам l - и j -моментов электрона позволяет по экспериментальным данным оце-нить в представлении гибридной орбиты в форме (3) компоненту с фиксированными l - и j -моментами. Для полноты анализа структуры гибридных орбит в окрестности ядра-изомера хотелось бы для каждого химического элемента среди его изотопов найти набор изомеров с различной мультипольностью пере-ходов ΔL (т.е. E1 и M1), что пока не реализовано ни для одного элемента. Это существенно обед-няет возможности конверсионного метода исследования электронной структуры соединений. Определен-ные перспективы имеются на пути расширения диапазона энергий перехода изомера до величины 10-20 кэВ. Действительно, фиксированное выше ограничение $\hbar\omega \leq 3$ кэВ обусловлено лишь достигну-тым в этом диапазоне высоким энергетическим разрешением спектра конверсионных электронов $\Delta\epsilon \leq 1$ эВ [5]. В известных нам других исследованиях конверсионных спектров [6-10], в которых предпринималась попытка выделить вклад определенных орбит электрона, разрешение $\Delta\epsilon$ было значи-тельно хуже: около 0,1% величины $\hbar\omega$, т.е. $\Delta\epsilon \approx 8$ эВ при $\hbar\omega = 8,4$ кэВ [6] и $\Delta\epsilon \approx 50-100$ эВ при $\hbar\omega = 35-109$ кэВ [9, 10]. При разрешении $\Delta\epsilon = 10-100$ эВ конверсионные спектры становятся маловырази-тельными. Однако, когда в процессе конверсии существенно превалирует вклад какой-либо (l_j)-ор-биты над другими (например, в M1-переходе ядра выделен вклад $s^{1/2}$ -орбит электронов), оказывается все же возможным получить данные об изменении заселенности ($n l_j$)-состояния валентной зоны, по-скольку следующий уровень ($n-1, l_j$)-состояния лежит, как правило, уже вне полосы шириной $\Delta\epsilon$ от валентной зоны. Эти данные существенно более информативны, чем результаты измерения интеграль-ного эффекта изменения скорости распада λ конверсионного изомера ($\Delta\lambda/\lambda$) в зависимости от ва-риации химического окружения радиоактивного атома, поскольку величина $\Delta\lambda$ определяется суммой вкладов всех электронных орбит, которые претерпевают различные возможные виды деформации с ва-риацией химического окружения**.

Подобного рода исследования вариаций заселенности выделенной зоны атома проведены на сле-дующих изомерах: ^{189m}Tm (M1) [6]; ^{119m}Sn (M1) [7]; ^{206m}Bi (M1+E2) [8]; ^{109m}Ag (E3) [9]; ^{125m}Te (M1; E3) [10].

Относительно ^{125m}Te сделан вывод, что исследования влияния химического окружения на внутрен-нюю конверсию в случае надлежащим образом подобранной пары переходов различных мультипольностей могут помочь разобраться в деталях участия в химической связи s - и p -валентных электронов ([10], с. 758). На наш взгляд, этот вывод имеет характер лишь качественного утверждения и ограни-чен отнесением только к орбитам валентной зоны, тогда как при наличии разрешения конверсионного спектра около 1 эВ и лучше реально уже теперь ставить задачу о количественном анализе эффектов гибридизации не только валентных, но и более глубоких орбит с энергиями связи вплоть до 100 эВ. Имея в виду эту цель, в работе [4] мы провели поиск и первичные расчеты вероятностей конверсии на внешних оболочках изолированных атомов для серии отобранных изомеров с энергиями $\hbar\omega \leq 3$ кэВ.

Отобранные в работе [4] ядра разделены на две группы:

I. Ядра, в которых изомерный переход происходит с первого возбужденного уровня на основное состояние. По-видимому, все эти изомеры реально могут быть использованы в изучении влияния хими-ческого окружения: ^{103m}Ru (M1+E2), ^{110m}Ag (E1), ^{142m}Pr (M3+E4), ^{193m}Pt (M1+E2), ^{201m}Hg (M1+E2), ^{205m}Pb (E2), ^{236m}Pa (M1), ^{235m}U (E3). В настоящее время экспериментально исследуется лишь уникаль-

* Для мягких изомеров ($\hbar\omega \leq 3$ кэВ) и внешних оболочек атома такие расчеты сделаны нами в работе [4] для серии отобранных ядер.

** Впервые влияние химического окружения на скорость распада изомера качественно обсужда-лось в работе [11] на примере E3-изомера ^{99m}Tc , а последние данные получены в работе [12].

ный изомер $^{235}\text{m}\text{U}$, существенно отличающийся энергией перехода $\hbar\omega = 7,8 \pm 0,5$ эВ [5] от других ядер этой группы, где обычно $\hbar\omega = 1-3$ кэВ.

2. Гораздо более многочисленна группа ядер, где изомерный переход совершается между возбужденными уровнями и, следовательно, конкурирует с переходом, сильно заторможенным структурными ядерными факторами и с существенно большей энергией (около 100-400 кэВ). В настоящее время из ядер этой группы в измерениях $\Delta\lambda/\lambda$ используются изомеры $^{99\text{m}}\text{Tc}$ и $^{90\text{m}}\text{Nb}$. Для других ядер этой группы необходимо прежде всего более надежно оценить конкурентное отношение изомерного перехода с более энергичным. При отборе этих ядер руководствовались модельными представлениями, свидетельствующими о возможном сильном торможении конкурирующего перехода.

В настоящей работе процесс конверсии рассматривается в упрощенной схеме, т.е. как происходящий на оболочках изолированных атомов или ионов, причем для описания электронных состояний используется релятивистский вариант метода Хартри - Фока - Слейтера (ХФС) с поправкой Латтера. Функции электронных состояний в непрерывном спектре также находились путем численного интегрирования уравнений Дирака с тем же средним атомным полем выделенной конфигурации. При этом преследовалась цель изучить некоторые аспекты акта конверсии мультиполя:

- сопоставить для выбранных атомов и изомеров характеристики процессов конверсии и фотоионизации, т.е. зависимости вероятностей и сечений от величин орбитального и полного углового моментов и энергии связи орбит ε_{nlj} ;

- количественно оценить чувствительность вероятности конверсии к допустимым (возможным) изменениям среднего атомного поля, обусловленным вариациями конфигурации электронной оболочки атома или иона, что в какой-то мере может имитировать существенно более сложный процесс перестройки оболочки в химических соединениях и дать оценку масштаба $\Delta\lambda/\lambda$;

- для ряда мультиполей E1, E2, E3, M1, M2, M3 установить границы пространственной области, где матричный элемент конверсии на внешней оболочке атома набирается с заданной точностью (лучше 1%);

- выявить количественно меру единообразия (универсальности) поведения радиальных компонент волновых функций состояний электронов с фиксированными ℓ - и j -моментами в зоне конверсии при вариации энергии связи (ℓj)-орбит и конфигурации электронной оболочки. Эти данные необходимы для формулировки последующей схемы интерпретации наблюдаемых конверсионных спектров в терминах амплитуд гибридной орбиты (3);

- получить оценку вероятности неизбежно сопутствующих процессу конверсии "паразитных" процессов выброса электрона из оболочки атома-соседа по каналу "электронного мостика" и по каналу прямой конверсии на оболочке отдаленного атома-соседа. Эти процессы имитируют акт конверсии на гибридной орбите в том случае, когда энергия связи гибридной орбиты близка к энергии связанного состояния электрона в оболочке изолированного атома-соседа. Подобная ситуация имеет место в случае конверсии E3-изомеров урана и технеция в различных химических соединениях [3,5,16]. Вклад паразитных каналов естественно ограничивает интерпретацию конверсионных спектров в терминах амплитуд гибридной орбиты.

В случае изомеров урана и ниобия [13,14] наблюдаются весьма большие изменения скорости распада при вариации химического окружения ($\Delta\lambda/\lambda \approx 5\%$), хотя конкретные механизмы такого изменения различны. Для E3-изомера $^{99\text{m}}\text{Tc}$ существует обычный масштаб $\Delta\lambda/\lambda \approx 0,3\%$ [15]. Кроме указанных фактов и весьма широкого использования изомеров урана, ниобия и технеция в экспериментах специфический интерес к этим атомам вызывает также положение внешних p-орбит, лежащих ниже валентной зоны: $\varepsilon_{4p}(\text{Nb}) \approx 40$ эВ, $\varepsilon_{4p}(\text{Tc}) \approx 50$ эВ, $\varepsilon_{6p}(\text{U}) \approx 20-40$ эВ, причем на этих орбитах весьма интенсивно протекает конверсия E3-мультиполя. Поскольку эти p-орбиты пространственно довольно протяженны, естественно ожидать значительного участия их в образовании гибридных орбит в химических соединениях, что становится доступным для наблюдения по спектру конверсионных электронов при разрешении $\Delta\varepsilon$ лучше 1 эВ. Это подтверждается первыми экспериментами по прямому наблюдению гибридизации глубоких 6p-орбит урана [3] и 4p-орбит технеция [16]. В настоящей работе при исследовании общих аспектов конверсионного процесса в связи с эффектами химического окружения большая часть конкретных расчетов проведена для указанных изомеров и лишь в порядке сопоставления взяты некоторые другие изомеры группы А.

Далее приведен довольно значительный объем полученных авторами результатов численного расчета для изомеров урана, технеция и ниобия, поскольку они весьма широко исследуются в современном эксперименте.

Вероятность конверсии ядерного мультиполя.
Одноэлектронные факторы конверсии

Расчет вероятности конверсии ядерного мультиполя ΛL (т.е. E_L или M_L) проводится в рамках известной в квантовой электродинамике [17] схемы "токов и зарядов перехода": возбужденное ядро в переходе из изомерного состояния $|E_1, \pi_1, I_1, M_1\rangle$ на нижележащее $|E_2, \pi_2, I_2, M_2\rangle$ (E, π, I, M - энергия, четность, спин и магнитная проекция спина ядра) создает запаздывающее электромагнитное поле с частотой $\hbar\omega = E_1 - E_2$, которое приводит к выбрасыванию электрона с орбиты $\varepsilon_1, n_1, \ell_1, j_1$ (имеющей заданную энергию ε_1 , главное квантовое число n_1 , орбитальный ℓ_1 и угловой j_1 моменты) в состояние непрерывного спектра с импульсом $\hbar c q$ и полной энергией:

$$\varepsilon = [m^2 c^4 + (\hbar c q)^2]^{1/2}.$$

Поскольку процесс конверсии фактически протекает на малых расстояниях от ядра, волновые функции электрона должны быть релятивистскими даже в рассматриваемом случае конверсии мягкого изомера ($\hbar\omega \leq 3$ кэВ) на слабосвязанных электронных орбитах. В этих случаях формально определяемый коэффициент внутренней конверсии (КВК) всегда весьма велик и практического смысла не имеет, поскольку реальное соотношение числа излучаемых системой фотонов $\hbar\omega$ и числа выбрасываемых электронов определяется вторичными эффектами (об излучении фотонов через "электронный мостик" см. в работе [17]). В связи с этим в рассматриваемой области $\hbar\omega \leq 3$ кэВ следует отказаться от привычного термина КВК и использовать непосредственно вероятность конверсии ядерных ΛL -мультиполей в единицу времени. Теория конверсии ядерных мультиполей давно стала классической главой в учебниках по квантовой электродинамике, поэтому мы не останавливаемся на рутинных выкладках и приводим конечную формулу вероятности конверсии с целью фиксации далее используемых определений. Удобно сразу отметить вероятность конверсии на один электрон в (n_1, ℓ_1, j_1) -оболочке атома, что отмечается символом $[n_1, \ell_1, j_1]^1$:

$$W(\Lambda L; I_1 \rightarrow I_2; \varepsilon_1 [n_1, \ell_1, j_1]^1 \rightarrow \varepsilon) = [\delta(\varepsilon - \varepsilon_1 - \hbar\omega) d\varepsilon] \left(\frac{2I_2 + 1}{2I_1 + 1} \right) |\langle I_2 \| \Lambda L \| I_1 \rangle|^2 \times \\ \times \frac{e^4 m}{\hbar^3} \left(\frac{R_0}{a_0} \right)^{2L} w_3(\Lambda L [n_1, \ell_1, j_1]^1 \hbar\omega), \quad (4)$$

где $e^4 m / \hbar^3 = 4,1341 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$; $a_0 = \hbar^2 / m e^2 = 5,2917 \cdot 10^{-9} \text{ см}$.

Здесь рассматривается лишь случай $L \neq 0$, поскольку мягкий Е0-переход не обнаружен пока ни в одном ядре. Соответственно выделен общий масштабный фактор $(R_0/a_0)^{2L}$, где R_0 - радиус ядра. Волновые функции электрона определялись с учетом конечных размеров ядра, кулоновское поле которого аппроксимировалось полем равномерно заряженного шара радиусом R_0 , причем в численных расчетах принято значение $R_0 = 1,24 \cdot 10^{-13} \text{ А}^{1/3} \text{ см}$. Безразмерные приведенные элементы ядерного ΛL -мультиполя связаны с приведенными вероятностями $B(\Lambda L; I_1 \rightarrow I_2)$, повсеместно принятыми в литературе [18, 19], соотношениями

$$e^2 R_0^{2L} \frac{2I_2 + 1}{2I_1 + 1} \left| \langle I_1 \| E L \| I_2 \rangle \right|^2 = B(EL; I_1 \rightarrow I_2); \quad (5)$$

$$e^2 R_0^{2L} \left(\frac{L}{L+1} \right) \frac{2I_2 + 1}{2I_1 + 1} \left| \langle I_1 \| M L \| I_2 \rangle \right|^2 = B(ML; I_1 \rightarrow I_2). \quad (6)$$

Видимая "неравноправность" формул (5) и (6) обусловлена несколько неудачным исходным определением одноэлектронного фактора конверсии $w_3(\Lambda L [n_1, \ell_1, j_1]^1 \hbar\omega)$, который затем был табулирован

для некоторых изомеров именно в форме соотношений (4)-(6) [4], и "убирать" множитель $(L/L+1)$ уже было невозможно.

При фиксированном заполнении $N(n_1, \ell_1, j_1)$ -орбит электронной оболочки для полной вероятности конверсии ядерного ΛL -мультиполя в изомерном $(I_1 \rightarrow I_2)$ -переходе ядра (в единицу времени) имеем

$$W_{\text{конв}}(\Lambda L; I_1 \rightarrow I_2) = (e^4 m / \hbar^3) \left(\frac{R_0}{a_0} \right)^{2L} \frac{2I_2 + 1}{2I_1 + 1} \left| \langle I_2 \| \Lambda L \| I_1 \rangle \right|^2 \xi(\Lambda L), \quad (7)$$

где введена сумма вкладов заполненных орбит:

$$\xi(\Lambda L) = \sum_{(n_1, \ell_1, j_1)} N(n_1, \ell_1, j_1) w_3(\Lambda L [n_1, \ell_1, j_1]^1 \hbar \omega). \quad (8)$$

Поскольку для рассматриваемых мягких изомерных переходов ядра процесс конверсии дает подавляющий вклад в распад изомера, то изменение скорости распада изомера $\Delta \lambda$ в случае чистого мультипольного ΛL -перехода определяется изменением суммы $\xi(\Lambda L)$:

$$\Delta \lambda / \lambda = \Delta \xi / \xi, \quad (9)$$

причем $\Delta \xi$ может быть обусловлено как непосредственным изменением чисел заполнения $N(n_1, \ell_1, j_1)$ (что обычно для состояний валентной зоны и возможно для более глубоких орбит при гибридизации), так и вариацией факторов конверсии $w_3(\Lambda L [n_1, \ell_1, j_1]^1 \hbar \omega)$ для всех орбит, на которых идет конверсия (что связано с изменением условий экранировки и химическим сдвигом орбит при вариациях конфигурации электронной оболочки).

Специфическая ситуация возникает в случае изомера ^{90m}Nb , где в интервал допустимых значений энергии перехода $\hbar \omega = 2,38 \pm 0,36$ кэВ [14] попадают пороги ионизации $2p^{1/2}$ - и $2p^{3/2}$ -орбит электрона. Как показывают наши расчеты, околороговое поведение факторов конверсии и химический сдвиг масштаба ± 5 эВ, обусловленный вариацией конфигурации валентной зоны, могут дать величины $\Delta \lambda / \lambda$, подобные наблюдаемым (около 5%) и даже более. Однако детальное описание многих возможных ситуаций в данном конкретном случае выходит за рамки этой работы.

Сравнение характеристик процесса конверсии при $\hbar \omega \leq 3$ кэВ и процесса фотоионизации атома

В методе рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, широко применяемой для исследования электронной структуры химических соединений [20], обычно используют монохроматические кванты в интервале энергий $\hbar \omega_\gamma = 1-3$ кэВ. Именно в этой области энергий переходов изомеров становится возможным прецизионное измерение конверсионных спектров. Естественно сопоставить характеристики этих двух процессов; далее для сравнения выбраны изомеры $^{99m}\text{Tc}(E3)$, $^{110m}\text{Ag}(E1)$ и уникальный изомер $^{235m}\text{U}(E3)$. Сечения фотоионизации вычислены в тех же рамках метода ХФС с единым средним атомным полем для дискретного и непрерывного спектров электрона. При этом использован комплекс программ RAINE [21]. Результаты приведены в табл. I-3. Хотя расчеты сделаны для нескольких значений энергии фотона $\hbar \omega_\gamma$, изменения с энергией $\hbar \omega_\gamma$ незначительные, поэтому приводятся величины лишь при одном значении. Как видно из таблиц, сечения фотоионизации демонстрируют весьма невыразительную зависимость от ℓ - и j -моментов орбит электрона, проявляющуюся на фоне тоже слабого изменения с уменьшением энергии связи орбиты, тогда как для факторов конверсии характерно весьма резкое выделение фиксированных (ℓj) -орбит: так, для E3-изомеров технеция и урана (а также других таких изомеров) явно превалирует вклад p -состояний над другими. Такая картина наблюдается и для E1-изомера серебра, хотя она выражена существенно слабее. Именно эта особенность процесса конверсии может быть использована для анализа структуры гибридных электронных орбит в химических соединениях, поскольку из конверсионного спектра могут быть извлечены амплитуды (ℓj) -состояний, на которых наиболее интенсивно идет процесс конверсии.

Таблица 1

Сравнение одноэлектронных факторов конверсии EI-перехода $^{110m}\text{Ag}_{47}$ и сечений фотоионизации атома серебра, отнесенных на один электрон (nlj) -оболочки $\sigma(\hbar\omega_p[nlj])'$

Орбита (nlj)	$N(nlj)$	$\varepsilon_{nlj}, \text{эВ}$	$w_3(EI[nlj])'$	σ, σ
3s1/2	2	704,0	$1,456 \cdot 10^0$	$3,196 \cdot 10^4$
3p1/2	2	600,4	$4,339 \cdot 10^0$	$4,499 \cdot 10^4$
3p3/2	4	568,5	$4,811 \cdot 10^0$	$4,682 \cdot 10^4$
3d3/2	4	383,0	$1,158 \cdot 10^{-1}$	$6,173 \cdot 10^4$
3d5/2	6	376,4	$1,131 \cdot 10^{-1}$	$5,988 \cdot 10^4$
4s1/2	2	101,7	$3,772 \cdot 10^{-1}$	$0,763 \cdot 10^4$
4p1/2	2	68,5	$8,030 \cdot 10^{-1}$	$0,845 \cdot 10^4$
4p3/2	4	63,2	$8,465 \cdot 10^{-1}$	$0,840 \cdot 10^4$
4d3/2	4	12,5	$8,898 \cdot 10^{-1}$	$0,502 \cdot 10^4$
4d5/2	6	11,8	$8,601 \cdot 10^{-1}$	$0,481 \cdot 10^4$
5s1/2	1	5,9	$2,576 \cdot 10^{-2}$	$5,14 \cdot 10^2$

Примечание. Нормальная конфигурация атома серебра. Энергия фотонов и изомерного перехода равна 1,08 кэВ. Метод ХФС.

Таблица 2

Сравнение спектров конверсии $N(nlj)w_3(E3[nlj])'\hbar\omega$ и фотоионизации $N(nlj)\sigma(\hbar\omega_p[nlj])'$

Орбита (nlj)	$N(nlj)$	$\varepsilon_{nlj}, \text{эВ}$	$Nw_3(E3)$	$N\sigma, \sigma$
3s1/2	2	537,4	$1,36 \cdot 10^2$	$3,30 \cdot 10^4$
3p1/2	2	499,3	$2,40 \cdot 10^5$	$4,34 \cdot 10^4$
3p3/2	4	428,8	$4,28 \cdot 10^5$	$8,52 \cdot 10^4$
3d3/2	4	270,9	$0,84 \cdot 10^5$	$5,93 \cdot 10^4$
3d5/2	6	266,9	$1,28 \cdot 10^5$	$8,59 \cdot 10^4$
4s1/2	2	79,4	$3,63 \cdot 10^1$	$0,65 \cdot 10^4$
4p1/2	2	53,0	$4,06 \cdot 10^4$	$0,67 \cdot 10^4$
4p3/2	4	49,9	$7,08 \cdot 10^4$	$1,30 \cdot 10^4$
4d3/2	4	10,7	$8,18 \cdot 10^3$	$0,47 \cdot 10^4$
4d5/2	1	10,4	$2,05 \cdot 10^3$	$1,12 \cdot 10^3$
5s1/2	2	7,07	$3,52 \cdot 10^0$	$5,98 \cdot 10^2$

Примечание. Нормальная конфигурация атома технеция. Энергия перехода изомера равна 2,122 кэВ, энергия фотонов равна 1,50 кэВ. Метод ХФС.

Таблица 3

Сравнение сечения фотоионизации, отнесенного на один электрон (nlj) -оболочки $\sigma(\hbar\omega_p[nlj])'$, для уникального изомера ^{235}U и одноэлектронных факторов конверсии $w_3(E3[nlj])'\hbar\omega$

Орбита (nlj)	$N(nlj)$	$\varepsilon_{nlj}, \text{эВ}$	$w_3(E3)$	$\sigma \cdot 10^3, \sigma$
6s1/2	2	52,00	$6,50 \cdot 10^2$	1,11
6p1/2	2	33,90	$4,27 \cdot 10^5$	0,88
6p3/2	4	24,36	$1,985 \cdot 10^5$	1,26
6d3/2	1	4,62	$4,050 \cdot 10^4$	0,60
6d5/2	0	4,07	$4,472 \cdot 10^4$	0,53
5f5/2	3	7,53	$6,270 \cdot 10^2$	3,59
7s1/2	2	5,72	$7,071 \cdot 10^1$	0,12

Примечание. Нормальная конфигурация оболочки. Принято $\hbar\omega = 75 \text{ эВ}$ и $\hbar\omega_p = 1,50 \text{ кэВ}$. Метод ХФС.

Отклик факторов конверсии на вариации конфигурации электронной оболочки

Анализ экспериментальных конверсионных спектров, несущих информацию об электронных орбитах в химических соединениях, каждый раз ставит задачу расчета этого спектра для используемого изомера в данном конкретном соединении. Первые попытки расчета соединений технеция проведены в работах [22-24] для изомера ^{99m}Tc . Реализация такой программы для соединений урана, ниобия, технеция, серебра, ртути, платины, свинца и т.д., в которых есть подходящий мягкий изомер ($\hbar\omega \leq 3-5$ кэВ) - дело отдаленного будущего. В настоящей работе ставилась другая задача - оценить масштаб возможных изменений конверсионного спектра и величину $\Delta\lambda/\lambda$ путем имитации перестройки электронной оболочки при вариациях заселенностей внешних (не только валентных) орбит в атоме. Представляется, что подобного рода "конфигурационные игры" необходимы в качестве предварительной исходной количественной оценки функционального отклика процесса конверсии на изменения состояния электронной оболочки. К сожалению, и эта упрощенная задача решается лишь путем проведения серии конкретных расчетов. Для этой цели выбраны изомеры урана и ниобия, для которых наблюдаются изменения $\Delta\lambda/\lambda = 5\%$.

Изомер ^{235}U . В связи с поиском путей эффективного заселения изомерного уровня $|1/2 + \rangle$ ядра ^{235}U ранее [25-27] были сделаны расчеты факторов конверсии E3-перехода в последовательности ионов урана: U, U³⁺, U⁶⁺. В настоящей работе приводятся результаты расчета для некоторых конфигураций оболочки атома урана, стимулированного наблюдением фотоэлектронных спектров в последовательности оксидов урана. Согласно данным [28,29], с ростом степени окисления урана от UO₂ до UO₃ происходит заметное уменьшение характерного выделенного пика в спектре фотоэлектронов, относимого к 5f-оболочке. Сечение фотоионизации 5f-оболочки действительно превышает сечение для других орбит валентной зоны (см. табл.3). Объяснить наблюдаемую картину могут две крайние гипотезы:

1. С ростом степени окисления происходит переход электронов с пространственно компактной 5f-орбиты на более протяженную, например 6d-орбиту.
2. Общее число 5f-электронов в сфере атома урана не изменяется, но с ростом степени окисления 5f-орбита все в большей мере участвует в формировании более глубоких гибридных орбит, размешиваясь среди них.

Сами 5f-электроны (а также 7s) вносят пренебрежимо малый вклад в спектр конверсии и величину $\Delta\lambda/\lambda$, однако переселение их на более протяженную d-орбиту существенно изменяет эффект экранировки для 6p-орбит, дающих основной вклад в конверсию изомера. Чтобы оценить отклик конверсии на изменение заселенности 5f-орбиты, мы провели расчет факторов конверсии, энергий связи и средних квадратов радиусов для атома урана в последовательности конфигураций с изменением числа 5f-электронов. Результаты приведены в табл.4. Большие вариации числа 5f-электронов дают изменения $\Delta\lambda/\lambda$, существенно превышающие наблюдаемые (5%). В реальных ситуациях изменение спектра конверсии и $\Delta\lambda/\lambda$ определяются также непосредственным участием 6p-состояний в формировании гибридных орбит.

Таблица 4

Изменение факторов конверсии $w_3(E3[n\ell j]')$, средних квадратов радиуса $\langle n\ell j | (r/a_0)^2 | n\ell j \rangle \equiv \langle x^2 \rangle$ и энергий связи (в электронвольтах) некоторых орбит ϵ в последовательности конфигураций валентной зоны атома урана с изменением заселения 5f-орбиты (метод ХФС с поправкой Латтера)

Орбита (nℓj)	Конфигурация					
	(5f5/2) ⁰ , (7s1/2) ⁰ , (6d5/2) ⁶	(5f5/2) ² , (7s1/2) ⁰ , (6d3/2) ⁴	(5f5/2) ⁴ , (7s1/2) ⁰ , (6d3/2) ²	(5f5/2) ² , (7s1/2) ² , (6d3/2) ² [21]	(5f5/2) ³ , (7s1/2) ² , (6d3/2) ¹	
6p1/2	w_3	4,871 · 10 ⁵	4,436 · 10 ⁵	4,073 · 10 ⁵	-	4,271 · 10 ⁵
	$\langle x^2 \rangle$	-	-	-	2,8155	2,9103
	ϵ	38,34	33,90	29,59	36,45	33,89

Орбита ($n\ell j$)	Конфигурация					
	(5f5/2) ⁰ , (7s1/2) ⁰ , (6d5/2) ⁶	(5f5/2) ² , (7s1/2) ⁰ , (6d3/2) ⁴	(5f5/2) ⁴ , (7s1/2) ⁰ , (6d3/2) ²	(5f5/2) ² , (7s1/2) ² , (6d3/2) ²	(5f5/2) ³ , (7s1/2) ² , (6d3/2) ¹	
				217		
6p3/2	w_3	2,267·10 ⁵	2,040·10 ⁵	1,833·10 ⁵	-	1,985·10 ⁵
	$\langle x^2 \rangle$	3,4553	3,7336	4,0438	3,6510	3,8055
	ε	27,55	24,08	20,65	26,43	24,36
6d3/2	w_3	5,460·10 ⁴	4,024·10 ⁴	2,478·10 ⁴	-	4,050·10 ⁴
	$\langle x^2 \rangle$	8,2355	11,1695	19,4767	8,7474	18,638
	ε	5,435	4,027	2,762	5,595	4,619
6d5/2	w_3	6,075·10 ⁴	4,295·10 ⁴	2,375·10 ⁴	-	4,472·10 ⁴
	$\langle x^2 \rangle$	9,6701	13,8428	26,5476	-	-
	ε	4,616	3,434	2,455	-	-
5f5/2	w_3	7,676·10 ²	6,680·10 ²	5,625·10 ²	-	6,270·10 ²
	$\langle x^2 \rangle$	1,7364	2,0633	2,7910	1,9952	2,2223
	ε	16,04	9,355	3,532	12,001	8,520
5f7/2	w_3	3,796·10 ²	3,277·10 ²	2,695·10 ²	-	3,062·10 ²
	$\langle x^2 \rangle$	1,8083	2,1798	3,2024	-	-
	ε	14,83	8,301	2,652	-	7,533
$\Delta\lambda/\lambda, \%$		33,0	13,8	-5,40	-	0

Изотоп ^{90}Nb . В случае ^{90m}Nb энергия смешанного (M2+E3)-перехода $|4-\rangle \rightarrow |6+\rangle$ известна с большой ошибкой: $\hbar\omega = 2,38 \pm 0,36$ кэВ [14]. Таким образом, в допустимый интервал энергии перехода (2000–2800 эВ) попадают пороги ионизации $2p_{1/2}$ - и $2p_{3/2}$ -орбит, разнесенных на интервал 97,76 эВ, не зависящий в пределах $\pm 0,02$ эВ от конфигурации внешних электронов (как показали наши расчеты на основе метода ХФС, для II конфигураций с широкой вариацией заселенности $4p$ -, $4d$ -, $5s$ -, $5p$ -состояний). В этой неопределенной ситуации допустимо громадное число различных взаимоположений порогов $2p$ -орбит и энергии перехода изомера. Пытаясь проанализировать всю картину, мы провели расчеты факторов конверсии для интервала $\hbar\omega = 2000$ –2800 эВ при девяти различных конфигурациях оболочки атома ниобия. Полное описание всех мыслимых ситуаций выходит за рамки настоящей работы. Ограничимся суммирующими утверждениями для ситуаций, представляющихся вероятными:

1. В случае наложения энергии перехода на порог $\varepsilon(2p_{1/2})$ в какой-либо конфигурации атома, близкой к нормальной, вызванный изменением химического окружения сдвиг терма $\Delta\varepsilon(2p_{1/2})$ "включает" или "выключает" процесс конверсии на $2p_{1/2}$ -орбите. В этом варианте для чистого E3-перехода возможны значения $\Delta\lambda/\lambda \approx 27\%$, тогда как для M2-перехода $\Delta\lambda/\lambda \approx 1,5\%$.

2. Большие вариации заселенности орбит валентной зоны приводят к весьма малым (около 0,1%) изменениям суммарного вклада в конверсию более глубоких орбит (3s, 3p, 3d, 4s, 4p) как для E3-, так и для M2-переходов.

3. Вклад валентных орбит в величину $\Delta\lambda/\lambda$ при самых грубых вариациях заселенностей не превышает примерно 0,1% для M2- и E3-мультиполей.

4. "Приход-уход" из сферы атома ниобия одного $4p$ -электрона, что можно было бы связать с участием $4p$ -оболочки в формировании гибридных орбит, дает для M2- и E3-мультиполей величину $\Delta\lambda/\lambda \approx (0,7-0,3)\%$.

5. Более вероятной причиной объяснения наблюдаемых значений $\Delta\lambda/\lambda$, равных примерно 5%, представляется специфическое поведение факторов конверсии в интервале до 20 эВ над порогами $2p_{1/2}$ - или $2p_{3/2}$ -орбит в ряде конфигураций. Это обнаружено путем численного расчета факторов конверсии с шагом $\Delta\hbar\omega = 1$ эВ для серии конфигураций оболочки ниобия. Для иллюстрации в табл.5

и 6 приведен фрагмент результатов расчета для $2p_{1/2}$ -орбиты, откуда видно, что в случае, когда энергия перехода изомера лежит в области порога $2p_{1/2}$ -орбиты нормальной конфигурации атома $\{(4d_{3/2})^4(5s_{1/2})^1\}$, то вариации конфигураций валентной зоны дают изменение фактора конверсии $2p_{1/2}$ -орбиты около 10–20%. Однако практическая стабильность (с точностью примерно 0,1%) вкладов $2p_{3/2}$ и других орбит ($3s, 3p, 3d, 4s, 4p$) снижает величину $\Delta\lambda/\lambda$ до уровня приблизительно 5% в случае E3-перехода и еще меньшего уровня для M2-перехода. Таким образом, в этом случае непринужденно получаем масштаб экспериментальной величины. Замечание о возможном эффекте порога $2p$ -орбит в величине $\Delta\lambda/\lambda$ содержится в работе [14], но оно не сопровождается какими-либо оценками и носит общий характер.

Не будем перебирать многочисленные варианты, допускаемые неопределенностями доли E3- и M2-мультиполей и энергии перехода ниобия. Измерение этих величин с точностью около 1% (и лучше) - необходимое условие для последующего использования изомера ^{90m}Nb в анализе электронной структуры соединений ниобия. С другой стороны, пороговый характер эффекта требует и более точного, чем применяемый метод ХФС, описания состояний электрона в непрерывном спектре.

Таблица 5а

Поведение фактора конверсии E3-перехода $w_3(E_3[2p_{3/2}]^1\hbar\omega) \cdot 10^{-6}$ у порога ионизации $2p_{3/2}$ -орбиты ниобия в последовательности конфигураций валентной зоны (метод ХФС)

$\hbar\omega, \text{эВ}$	$\epsilon(2p_{3/2}), \text{эВ}$				
	2368,82	2369,98	2372,29	2374,80	2366,42
	Конфигурация				
	$(4d_{3/2})^4, (5s_{1/2})^1$	$(4d_{3/2})^4, (5p_{1/2})^1$	$(4d_{3/2})^3, (5s_{1/2})^2$	$(4d_{3/2})^3, (5p_{1/2})^2$	$(4d_{5/2})^4, (4d_{3/2})^1$
2367	0	0	0	0	0,3240
2368	0	0	0	0	0,3170
2369	0,2423	0	0	0	0,3116
2370	0,2443	0,2131	0	0	0,3077
2371	0,2630	0,2332	0	0	0,3051
2372	0,2700	0,2486	0	0	0,3034
2373	0,2759	0,2611	0,2123	0	0,3027
2374	0,2811	0,2715	0,2318	0	0,3025
2375	0,2858	0,2802	0,2475	-	0,3028
2376	0,2901	0,2877	0,2605	0,2476	0,3034
2377	0,2940	0,2941	0,2714	0,2686	0,3043
2378	0,2976	0,2995	0,2805	0,2839	0,3054
2379	0,3008	0,3040	0,2881	0,2950	0,3066
2380	0,3037	0,3078	0,2944	0,3026	0,3079
2382	0,3086	0,3133	0,3038	0,3108	0,3104
2384	0,3123	0,3166	0,3097	0,3135	0,3128
2386	0,3149	0,3183	0,3131	0,3136	0,3149
2388	0,3166	0,3188	0,3146	0,3128	0,3165
2390	0,3175	0,3185	0,3148	0,3120	0,3178
2392	0,3178	0,3178	0,3143	0,3114	0,3187
2394	0,3176	0,3170	0,3134	0,3114	0,3192

Таблица 5б

Поведение фактора конверсии E3-перехода $\omega_3(E3[2p^{1/2}]^1 \hbar\omega) \cdot 10^{-6}$
у порога ионизации 2p^{1/2}-орбиты нибоя в последовательности
конфигураций валентной зоны (метод ХФС с поправкой Латтера)

$\hbar\omega, \text{эВ}$	$\epsilon(2p^{1/2}), \text{эВ}$				
	2466,59	2467,75	2470,06	2472,57	2464,20
	Конфигурация				
	$(4d3/2)_4^4$ $(5s1/2)_1^1$	$(4d3/2)_4^4$ $(5p1/2)_1^1$	$(4d3/2)_3^3$ $(5s1/2)_2^2$	$(4d3/2)_3^3$ $(5p1/2)_2^2$	$(4d3/2)_4^4$ $(4d5/2)_1^1$
2465	0	0	0	0	0,3692
2466	0	0	0	0	0,3600
2467	0,2797	0	0	0	0,353I
2468	0,29I4	-	0	0	0,348I
2469	0,2999	0,26II	0	0	0,3448
2470	0,3069	0,2786	0	0	0,3427
247I	0,3I29	0,2926	0,2455	0	0,34I5
2472	0,3I82	0,3043	0,2660	0	0,34II
2473	0,323I	0,3I4I	0,2826	0	0,34I2
2474	0,3276	0,3225	0,2963	0,2835	0,34I8
2475	0,33I7	0,3296	0,3079	0,3053	0,3428
2476	0,3355	0,3357	0,3I75	0,32I2	0,3438
2477	0,3389	0,3408	0,3256	0,3326	0,3450
2478	0,3420	0,345I	0,3323	0,3404	0,3463
2480	0,3472	0,35I4	0,3422	0,3487	0,3490
2482	0,35II	0,3553	0,3484	0,35I3	0,35I5
2484	0,3538	0,3573	0,35I9	0,35II	0,3537
2486	0,3554	0,3579	0,3534	0,350I	0,3559

Таблица 6а

Поведение фактора конверсии M2-перехода $\omega_3(M2[2p^{3/2}]^1 \hbar\omega) \cdot 10^{-4}$
у порога ионизации 2p^{3/2}-орбиты нибоя в последовательности
конфигураций валентной зоны (метод ХФС)

$\hbar\omega, \text{эВ}$	$\epsilon(2p^{3/2}), \text{эВ}$				
	2368,82	2369,98	2372,29	2374,80	2366,42
	Конфигурация				
	$(4d3/2)_4^4$ $(5s1/2)_1^1$	$(4d3/2)_4^4$ $(5p1/2)_1^1$	$(4d3/2)_3^3$ $(5s1/2)_2^2$	$(4d3/2)_3^3$ $(5p1/2)_2^2$	$(4d3/2)_4^4$ $(4d5/2)_1^1$
2367	0	0	0	0	0,9736
2368	0	0	0	0	0,963I
2369	0,9529	0	0	0	0,9495
2370	0,9365	0,9064	0	0	0,9375
237I	0,9225	0,8942	0	0	0,9269
2372	0,9I06	0,8843	0	0	0,9I75
2373	0,9005	0,8763	0,88I2	0	0,9092
2374	0,8920	0,8699	0,8730	0	0,90I8
2375	0,8848	0,8649	0,8666	-	0,8953

$\hbar\omega, \text{эВ}$	$\varepsilon(2p3/2), \text{эВ}$				
	2368,82	2369,98	2372,29	2374,80	2366,42
	Конфигурация				
	$(4d3/2)^4, (5s1/2)^1$	$(4d3/2)^4, (5p1/2)^1$	$(4d3/2)^3, (5s1/2)^2$	$(4d3/2)^3, (5p1/2)^2$	$(4d3/2)^4, (4d5/2)^1$
2376	0,8788	0,8611	0,8616	0,8541	0,8896
2377	0,8738	0,8583	0,8579	0,8609	0,8845
2378	0,8696	0,8563	0,8553	0,8675	0,8800
2379	0,8662	0,8550	0,8536	0,8731	0,8761
2380	0,8635	0,8543	0,8527	0,8783	0,8726
2382	0,8596	0,8541	0,8525	0,8871	0,8671
2384	0,8575	0,8553	0,8540	0,8934	0,8630
2386	0,8567	0,8572	0,8565	0,8976	0,8600
2388	0,8568	0,8595	0,8595	0,8998	0,8582
2390	0,8577	0,8619	0,8627	0,9001	0,8571
2392	0,8590	0,8642	0,8658	0,8993	0,8567
2394	0,8605	0,8664	0,8686	0,8987	0,8568

Таблица 6б

Поведение фактора конверсии M2-перехода $w_3(M2[2p1/2]^1 \hbar\omega \cdot 10^{-3})$ у порога ионизации $2p1/2$ -орбиты ниобия в последовательности конфигураций валентной зоны (метод ХФС с поправкой Латтера)

$\hbar\omega, \text{эВ}$	$\varepsilon(2p1/2), \text{эВ}$				
	2466,59	2467,75	2470,06	2472,57	2464,20
	Конфигурация				
	$(4d3/2)^4, (5s1/2)^1$	$(4d3/2)^4, (5p1/2)^1$	$(4d3/2)^3, (5s1/2)^2$	$(4d3/2)^3, (5p1/2)^2$	$(4d3/2)^4, (4d5/2)^1$
2465	0	0	0	0	0,5064
2466	0	0	0	0	0,4976
2467	0,3868	0	0	0	0,4905
2468	0,4053	-	0	0	0,4856
2469	0,4189	0,3652	0	0	0,4825
2470	0,4300	0,3910	0	0	0,4807
2471	0,4395	0,4118	0,3442	0	0,4801
2472	0,4479	0,4290	0,3739	0	0,4803
2473	0,4555	0,4435	0,3981	0	0,4812
2474	0,4625	0,4559	0,4182	0,4028	0,4825
2475	0,4687	0,4665	0,4350	0,4340	0,4842
2476	0,4745	0,4754	0,4490	0,4568	0,4862
2477	0,4797	0,4829	0,4608	0,4729	0,4882
2478	0,4843	0,4891	0,4705	0,4840	0,4903
2480	0,4920	0,4983	0,4848	0,4957	0,4945
2482	0,4977	0,5039	0,4938	0,4994	0,4884
2484	0,5017	0,5067	0,4987	0,4993	0,5017
2486	0,5043	0,5076	0,5009	0,4980	0,5051

Пространственная область формирования фактора конверсии мягких переходов окрестности ядра-изомера

Для интерпретации наблюдаемых спектров конверсии необходимо количественно оценить радиус сферы $R(\delta)$ около ядра-изомера, в которой фактор конверсии набирается с некоторой заданной точностью (например, $\delta=1\%$) относительно асимптотического значения при $R \rightarrow \infty$ и с ростом радиуса R не выходит за пределы погрешности δ . Впервые пространственная картина формирования КВК в общих целях изучалась в работе [1], а для уникального изомера ^{235m}U в работе [2]. В настоящей работе процесс конверсии мягких изомеров на внешних электронных орбитах рассматривается как возможный метод исследования структуры химических соединений, где внешние оболочки атомов сильно возмущены. В данном случае важно знать, в какой области пространства около ядра-изомера протекает процесс конверсии. Приближение фактора конверсии $w_3(R)$ (как функции верхнего предела радиуса R входящих радиальных интегралов конверсионного элемента) к асимптотическому значению $w_3 |_{R \rightarrow \infty}$ носит самый различный характер в зависимости от (nlj) -оболочки и ΔL -мультипола ядра, что видно, например, из рисунков работы [1], хотя они не исчерпывают всего множества форм. Ограничимся в качестве меры оценки радиуса сферы $R(\delta)$ при $\delta=1\%$. Соответствующие расчеты сделаны для изомеров $^{110m}\text{Ag}(E_1; \hbar\omega = 1,11 \text{ кэВ})$; $^{193m}\text{Pt}(M1; \hbar\omega = 1,63 \text{ кэВ})$; $^{193m}\text{Pt}(E2; \hbar\omega = 1,63 \text{ кэВ})$; $^{235m}\text{U}(E3; \hbar\omega = 76,8 \text{ кэВ})$; $^{90m}\text{Nb}(M2; \hbar\omega = 2,40 \text{ кэВ})$.

Для платины и ниобия часть результатов представлена в табл.7. Видна вполне определенная связь: для орбит, где наиболее интенсивно идет процесс конверсии, мы имеем наименьшие радиусы $R(1\%)$; для таких орбит этот радиус не более $0,2\alpha_0$ ($\alpha_0 = 5,29 \cdot 10^{-9} \text{ см}$).

Что касается E1-перехода в серебре, то для орбит $3s1/2$, $3p1/2$, $3p3/2$, $3d3/2$, $3d5/2$, $4s1/2$, $4p1/2$, $4p3/2$, которые были нами изучены, зона формирования фактора конверсии с отклонением от асимптотики на величину не более 1% простирается за радиус $R = 1\alpha_0$, т.е. по существу охватывает весь объем атома. Наоборот, в случае E3-изомера урана для серии орбит $np1/2$, $np3/2$, $nd3/2$, $nd5/2$ ($n = 6-9$) наблюдается практически единая картина накопления фактора конверсии: точность 1% всюду достигается при $R(1\%) = 0,1\alpha_0$, а точность 0,1% - при $R = 0,13\alpha_0$. Таким образом, в E3-переходе процесс конверсии жестко локализован в самой ближней окрестности ядра-изомера, что весьма существенно при исследовании гибридных электронных орбит и эффектов делокализации электронов в химических соединениях.

Таблица 7

Радиусы $R(1\%)$ сфер, где факторы конверсии выходят на величину, отличающуюся далее от асимптотического значения w_3^∞ не более чем на 1% (метод ХФС с поправкой Латтера)

Ниобий, $\hbar\omega=2400$ эВ, M2-переход			Платина, $\hbar\omega=1630$ эВ					
			M1-переход			E2-переход		
nlj	$w_3^\infty(M2)$	$R(1\%)$	nlj	$w_3^\infty(M1)$	$R(1\%)$	nlj	$w_3^\infty(E2)$	$R(1\%)$
$3s1/2$	$4,362 \cdot 10^3$	0,10	$4s1/2$	$1,212 \cdot 10^3$	0,06	$4s1/2$	$4,519 \cdot 10^2$	0,34
$3p1/2$	$1,385 \cdot 10^2$	0,30	$4p1/2$	$1,294 \cdot 10^2$	0,10	$4p1/2$	$7,695 \cdot 10^4$	0,18
$3p3/2$	$1,651 \cdot 10^3$	0,10	$4p3/2$	$7,506 \cdot 10^0$	0,38	$4p3/2$	$5,453 \cdot 10^4$	0,16
$3d3/2$	$1,802 \cdot 10^1$	0,30	$4d3/2$	$1,620 \cdot 10^0$	0,46	$4d3/2$	$8,855 \cdot 10^2$	0,28
$3d5/2$	$1,596 \cdot 10^0$	0,40	$4d5/2$	$5,837 \cdot 10^{-1}$	0,38	$4d5/2$	$5,696 \cdot 10^2$	0,46

Примечание. В случае ниобия радиусы $R(1\%)$ для состояний оболочки $n=4$ практически совпадают с $R(1\%)$ для соответствующих состояний оболочки $n=3$. Подобное совпадение наблюдается для E3-изомера урана при np - и nd -состояниях и $n=6-9$.

Для (ℓj) -состояний с хорошо выраженной областью конверсии $[R(I\%) \approx 0,1 a_0 \leq 0,2 a_0]$ возможна интерпретация спектров конверсии в терминах амплитуд состояний в зоне конверсии. Действительно, на расстояниях $x = r/a_0 < 0,2$ среднее поле атома в основном формируется кулоновым полем ядра и электронами, находящимися на самых глубоких орбитах, которые практически не меняются при "погружении" атома в среду или при связывании в химическое соединение. Поскольку доля наиболее лабильных внешних электронов в зоне конверсии мала в связи со значительной протяженностью их орбит, в окрестности ядра для радиальных компонент волновых функций состояний с определенными моментами (ℓj) следует ожидать стандартную зависимость от радиуса x , весьма устойчивую к вариациям химического окружения:

$$R_{\varepsilon \ell j}(x) = A(\varepsilon \ell j) \mathcal{F}_{\ell j}(x), \quad (10)$$

где $\mathcal{F}_{\ell j}(x)$ - практически "универсальная" функция при заданных (ℓj) ; $A(\varepsilon \ell j)$ - амплитуда, определяющая зависимость фактора конверсии от внешней среды. Строго говоря, в фактор конверсии входят амплитуды дискретного и непрерывного состояний электрона. Обе они несут информацию об изменении среднего поля при образовании химического соединения. В случае состояний непрерывного спектра изменение $A(\varepsilon \ell j)$ может быть связано с наблюдаемым явлением протяженной тонкой структуры в сечении фотоионизации глубоких орбит вблизи порога [28] (XAFS). Для дискретного спектра получим оценку чувствительности факторов конверсии к вариации конфигурации валентной зоны атома; в этой оценке проявится также изменение состояний непрерывного спектра.

Найденные путем численного интегрирования уравнения Дирака с атомным полем фиксированной конфигурации большая $g_{n\ell j}$ и малая $f_{n\ell j}$ компоненты волновой функции в зоне $0 \leq x \leq 0,1$ аппроксимировались полиномами вида

$$g_{n\ell j}(x) = A_{n\ell j}(g) \sum_{k=0}^N C_k(g) x^{\nu(g)+k}; \quad (11)$$

$$f_{n\ell j}(x) = A_{n\ell j}(f) \sum_{k=0}^N C_k(f) x^{\nu(f)+k}, \quad (12)$$

где $C_0(g) = C_0(f) = 1$ и функции нормированы обычным условием

$$\int_0^1 dx (|g_{n\ell j}|^2 + |f_{n\ell j}|^2) = 1. \quad (13)$$

Здесь коэффициенты $C_k(g)$, $C_k(f)$, $A_{n\ell j}(g)$, $A_{n\ell j}(f)$ при выбранных показателях $\nu(g)$ и $\nu(f)$ подбирались методом наименьших квадратов по значениям функций в ряде точек x_i интервала $0 \leq x \leq 0,1$. Разумная точность (лучше 1%) достигалась при $N=6$. Коэффициенты f -компоненты жестко связаны уравнением Дирака с коэффициентами g -компоненты, поэтому далее изменения величин $C_k(g)$ и $A_{n\ell j}(g)$ изучались в различных ситуациях.

Влияние электронных факторов конверсии на вариации конфигурации оболочки атома и изменения энергии связи (ℓj) -орбит можно проследить на основе отношения

$$Q_{n\ell j} = \frac{\omega_3 (\Lambda L [n\ell j]^1 \hbar \omega)}{|A_{n\ell j}(g)|^2}. \quad (14)$$

Абсолютная величина $Q_{n\ell j}$, естественно, зависит от выбора степени $\nu(g)$ в аппроксимации (II), однако интерес представляют относительные вариации $Q_{n\ell j}$ при фиксированном выборе аппроксимации (II). Поскольку в фактор $\omega_3 (\Lambda L [n\ell j]^1 \hbar \omega)$ входят амплитуды состояний дискретного и непрерывного спектров электрона, то $Q_{n\ell j}$ -отношение не должно быть постоянным при изменениях

энергии связи (чисел n) или конфигурации оболочки атома. Именно масштаб вариаций $Q_{n\ell j}$ дает меру чувствительности факторов конверсии w_3 к этим изменениям и позволяет оценить воздействие изменения в оболочке на состояния непрерывного спектра, тогда как для состояний дискретного спектра такой мерой является изменение амплитуды $|A_{n\ell j}(g)|^2$.

Для урана и технеция рассмотрены в поле одной (нормальной) конфигурации последовательности состояний $np1/2$, $np3/2$, $nd3/2$ и $nd5/2$, где $n=6-9$ для урана и $n=3-9$ для технеция, тогда как для ниобия изучены эти же группы состояний ($n=3-5$), но для конфигураций валентной зоны оболочки с широким варьированием заселенностей валентных орбит $4d$, $5s$ и $5p$ (табл.8). Во всех случаях (уран, технеций, ниобий) масштабы изменений коэффициентов $C_k(g)$ ($k=1-6$) не превышают 10^{-2} , что дает количественную меру универсальности поведения радиальных компонент (ℓj)-состояний в зоне конверсии (независимость от числа n).

Таблица 8

Изменение факторов конверсии w_3 для E3 и M2-переходов ^{90}Nb ($\hbar\omega=2400$ эВ), $|A_{n\ell j}(g)|^2$ [в аппроксимации (II) $\nu(g)=\ell$] и факторов $Q_{n\ell j}$ для четырех орбит при вариациях конфигурации валентной зоны атома (метод ХФС)

Определяемая величина	Конфигурация									
	$(4d3/2)^4(5s1/2)^1$	$(4d3/2)^4(5p1/2)^1$	$(4d3/2)^3(5s1/2)^2$	$(4d3/2)^3(5p1/2)^2$	$(4d3/2)^4(4d5/2)^1$	$(4d3/2)^2(5p1/2)^2(5p3/2)^1$	$(4d3/2)^1(5p1/2)^2(5p3/2)^2$	$(5p1/2)^2(5p3/2)^3$	$(5s1/2)^2(5p1/2)^2$	$(5p3/2)^1$
Орбита $4p1/2$										
$\epsilon(4p1/2)$, эВ	40,49	41,75	43,40	45,94	38,34	50,29	54,70	59,17	57,10	
$ A ^2 \cdot 10^2$	0,4609	0,4600	0,4686	0,4691	0,4561	0,4807	0,4942	0,5092	0,5063	
$w_3(E3) \cdot 10^{-5}$	0,1475	0,1475	0,1500	0,1502	0,1460	0,1540	0,1583	0,1632	0,1622	
$w_3(M2) \cdot 10^{-2}$	0,2081	0,2085	0,2123	0,2127	0,2066	0,2180	0,2241	0,2310	0,2297	
$Q(E3) \cdot 10^{-7}$	0,3200	0,3202	0,3201	0,3202	0,3201	0,3204	0,3203	0,3205	0,3203	
$Q(M2) \cdot 10^{-4}$	0,4515	0,4532	0,4531	0,4534	0,4530	0,4535	0,4535	0,4534	0,4537	
Орбита $4p3/2$										
$\epsilon(4p3/2)$, эВ	38,24	39,50	41,11	43,65	36,12	47,93	52,28	56,67	54,62	
$ A ^2 \cdot 10^4$	0,1149	0,1141	0,1170	0,1166	0,1134	0,1197	0,1232	0,1273	0,1266	
$w_3(E3) \cdot 10^{-5}$	0,1298	0,1297	0,1322	0,1325	0,1283	0,1361	0,1402	0,1448	0,1439	
$w_3(M2) \cdot 10^{-3}$	0,2358	0,2355	0,2400	0,2406	0,2330	0,2471	0,2546	0,2628	0,2612	
$Q(E3) \cdot 10^{-9}$	1,1301	1,1366	1,1304	1,1364	1,1311	1,1367	1,1380	1,1371	1,1371	
$Q(M2) \cdot 10^{-7}$	0,2053	0,2064	0,2052	0,2064	0,2054	0,2064	0,2067	0,2064	0,2062	
Орбита $4d3/2$										
$\epsilon(4d3/2)$, эВ	5,861	6,994	7,997	10,257	4,344	13,638	17,086	20,590	18,787	
$ A ^2 \cdot 10^4$	0,4896	0,5078	0,5511	0,5782	0,4295	0,6467	0,7155	-	-	
$w_3(E3) \cdot 10^{-4}$	0,1007	0,1045	0,1133	0,1187	0,08827	0,1330	0,1472	-	-	
$w_3(M2) \cdot 10^{-1}$	0,1290	0,1341	0,1455	0,1527	0,1135	0,1707	0,1889	-	-	
$Q(E3) \cdot 10^{-8}$	0,2057	0,2059	0,2056	0,2053	0,2055	0,2057	0,2057	-	-	
$Q(M2) \cdot 10^{-5}$	0,2635	0,2641	0,2640	0,2641	0,2643	0,2639	0,2640	-	-	
Орбита $5p1/2$										
$\epsilon(5p1/2)$, эВ	3,097	3,281	3,377	4,000	2,955	4,931	5,894	6,860	6,073	
$ A ^2 \cdot 10^4$	-	1,8333	-	3,0534	-	4,2440	5,3514	6,4227	5,8724	
$w_3(E3) \cdot 10^{-3}$	-	0,5902	-	0,9836	-	1,3680	1,7261	2,0730	1,9350	
$w_3(M2) \cdot 10^{-1}$	-	0,08356	-	0,1392	-	0,1937	0,2444	0,2935	0,2683	
$Q(E3) \cdot 10^{-7}$	-	0,3219	-	0,3221	-	0,3223	0,3226	0,3228	0,3295	
$Q(M2) \cdot 10^{-4}$	-	0,4558	-	0,4559	-	0,4564	0,4567	0,4570	0,4569	

В случае E3-изомеров ниобия, урана и технеция отношения Q_{nlj} для np - и nd -орбит изменяются на 1-2% при росте числа n , но для $np3/2$ -орбиты технеция обнаружены изменения около 7% с ростом величины n от 3 до 5. При этом энергия связи изменяется с 429 до 3,4 эВ, а фактор конверсии на три порядка. Таким образом, эти 1-7% обусловлены изменением эффекта атомного поля в состояниях непрерывного спектра в связи с ростом импульса электрона. Более интересными представляются результаты расчета для атома ниобия с вариацией конфигурации валентной зоны, что в какой-то мере имитирует эффект химического окружения атома.

Кратко суммируем результаты расчета:

1. Для глубоких орбит ($3p1/2$, $3p3/2$, $3d3/2$, $3d5/2$), где энергии связи 200-400 эВ, вариации факторов конверсии $w_3 \approx 0,1\%$. При этом изменения $|A_{nlj}|^2$ и Q_{nlj} - одного порядка, что свидетельствует о равной величине эффекта вариации атомного поля на состояниях дискретного и непрерывного спектра электрона.

2. Для $4p1/2$ - и $4p3/2$ -орбит ($\epsilon_{4p} \approx 40-50$ эВ) факторы конверсии и амплитуды $|A_{4pj}|^2$ варьируют в пределах 10% (см. табл.8). Таким образом, параметры $4p$ -орбиты довольно чувствительны к изменениям в валентной зоне и можно надеяться наблюдать заметный эффект химического окружения в спектрах конверсии. Здесь отношения Q_{nlj} постоянны с точностью лучше 1%, т.е. изменения факторов конверсии могут быть отнесены к изменениям амплитуд $|A_{nlj}|^2$ в зоне конверсии.

3. В случае орбит ($4d3/2$, $5p1/2$, $5p3/2$) валентной зоны атома ниобия величины $|A_{nlj}|^2$ и $w_3(L)$ изменяются весьма сильно (см. табл.8): для $5p1/2$ -состояния в несколько раз, тогда как отношения $Q_{5p1/2}$ варьируют в пределах 1-2%; таким образом, и здесь вариации факторов конверсии (с указанной точностью) связаны с изменением $|A_{5p1/2}|^2$.

4. Изменения отношений Q_{nlj} с ростом квантового числа n достигают примерно 5% для $p1/2$ -орбиты и существенно меньше для других (табл.9). В данном случае наблюдается ситуация, подобная для E3-перехода технеция.

Таблица 9

Изменения факторов конверсии w_3 и отношения Q_{nlj} с ростом главного квантового числа n для орбит ниобия конфигурации $\{ (4d3/2)^2 (5p1/2)^2 (5p3/2)^1 \}$ [аппроксимация (II) при $\nu(q)=l$, метод ХФС]

Орбита	ϵ_{nlj} , эВ	$w_3(E3)$	$w_3(M2)$	$Q_{nlj}(E3)$	$Q_{nlj}(M2)$
$3p1/2$	386,32	$0,9783 \cdot 10^5$	$0,1386 \cdot 10^3$	$0,3045 \cdot 10^7$	$0,4315 \cdot 10^4$
$4p1/2$	50,29	$0,1540 \cdot 10^5$	$0,2180 \cdot 10^2$	$0,3204 \cdot 10^7$	$0,4535 \cdot 10^4$
$5p1/2$	4,93	$1,368 \cdot 10^3$	$0,1937 \cdot 10^1$	$0,3223 \cdot 10^7$	$0,4564 \cdot 10^4$
$3p3/2$	370,25	$0,8706 \cdot 10^5$	$0,1652 \cdot 10^4$	$1,0818 \cdot 10^9$	$0,2053 \cdot 10^8$
$4p3/2$	47,93	$0,1361 \cdot 10^5$	$0,2471 \cdot 10^3$	$1,1367 \cdot 10^9$	$0,2064 \cdot 10^8$
$5p3/2$	4,73	$0,1182 \cdot 10^4$	$0,2134 \cdot 10^2$	$1,1437 \cdot 10^9$	$0,2065 \cdot 10^8$
$3d3/2$	225,82	$0,1406 \cdot 10^5$	$0,1804 \cdot 10^2$	$0,2080 \cdot 10^8$	$0,2669 \cdot 10^5$
$4d3/2$	13,54	$0,1330 \cdot 10^4$	$0,1707 \cdot 10^1$	$0,2057 \cdot 10^8$	$0,2639 \cdot 10^5$

Возможное представление информации, извлекаемой из спектров конверсии на гибридных орбитах

В отличие от фотоионизации в процессе конверсии резко выделен вклад определенных (lj) -состояний. Зона конверсии с этих орбит локализована в окрестности ядра в сфере радиусом $\sim 0,1 a_0$. Радиальные функции (lj) -состояний в зоне конверсии демонстрируют с высокой точностью универсальный характер поведения (при $\hbar\omega \leq 3$ кэВ). С другой стороны, для этих интенсивных переходов имеется практически постоянное отношение Q_{nlj} . Все это позволяет предложить схему интерпретации конверсионных спектров для гибридных орбит в терминах амплитуд волновых функций в зоне конверсии.

Для этого введем систему "стандартных" функций (ℓ_j) -состояний электрона в дискретном спектре $\tilde{\psi}_{\ell_j \mu}(x)$, нормировка которых может быть выбрана по соглашению из соображений удобства. Для этих состояний возможно найти "стандартные" факторы конверсии $\tilde{w}_3(\Lambda L |\ell_j|^1 \hbar \omega)$, в качестве которых вполне могут быть взяты факторы для изолированного атома [4]. Далее значения w_3 используем для интерпретации наблюдаемых конверсионных спектров.

Пусть, например, в монокристалле (или молекуле), зафиксированном относительно лабораторной системы координат векторами осей симметрии $\xi_S(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$, имеется строго определенная конфигурация атомов около ядра-изомера. Состояние $\psi^{(\alpha)}(x)$ электрона в такой системе описывается гибридной орбитой, которая в зоне конверсии может быть представлена суперпозицией по выбранным стандартным функциям $\tilde{\psi}_{\ell_j \mu}$:

$$\psi^{(\alpha)}(x|\xi_S) = \sum_{(\ell_j, \mu_j)} \alpha_{\ell_j, \mu_j}^{(\alpha)}(\xi_S) \tilde{\psi}_{\ell_j, \mu_j}(x). \quad (15)$$

Функции $\tilde{\psi}_{\ell_j \mu}$ ортогональны лишь по угловым переменным, их радиальные компоненты не составляют полного базиса. Таким образом, в разложении (15) коэффициенты $\alpha_{\ell_j, \mu_j}^{(\alpha)}(\xi_S)$ могут быть найдены лишь путем подгонки $\psi^{(\alpha)}(x|\xi_S)$, например методом наименьших квадратов, и само разложение (15) имеет смысл лишь в зоне конверсии.

Далее введем меру наполнения "стандартных" $\tilde{\psi}_{\ell_j \mu}$ -состояний в зоне конверсии, не зависящую от векторов ξ_S :

$$B_{\ell_j, \mu_j}^{(\alpha)} = \sum_{\mu_j} \left| \alpha_{\ell_j, \mu_j}^{(\alpha)}(\xi_S) \right|^2. \quad (16)$$

В реальном эксперименте детектором фиксируется вектор импульса $\hbar q$ конверсионного электрона относительно лабораторной системы координат. Если источник, содержащий ядро-изомер, есть конгломерат хаотически ориентированных монокристаллов, то усреднение по ориентациям векторов ξ_S эквивалентно интегрированию по всем направлениям импульса $\hbar q$. В этом варианте эксперимента формула конверсии с гибридной орбиты $\psi^{(\alpha)}(x|\xi_S)$ приводится к виду (расчет на один электрон на орбите)

$$W(\Lambda L [\psi^{(\alpha)}]^1 \hbar \omega) = [2I_2 + 1/(2I_1 + 1)] \left| \langle I_2 \| \Lambda L \| I_1 \rangle \right|^2 (R_q/a_0)^{2L} (e^4 m/\hbar^3) \times \\ \times \sum_{(\ell_j, \mu_j)} \tilde{w}_3(\Lambda L [\ell_j, \mu_j]^1 \hbar \omega) B_{\ell_j, \mu_j}^{(\alpha)}. \quad (17)$$

Формула (17) фиксирует характер получаемой на основе конверсионного спектра информации о структуре гибридных орбит в зоне конверсии в случае идеального разрешения спектра на отдельные линии. Эта информация - интегральная, но не столь усредненная, как в случае измерения величины $\Delta\lambda/\lambda$. Подчеркнутая ранее резкая выделенность вкладов орбит с фиксированными моментами ℓ_j, μ_j существенно улучшает ситуацию, поскольку на определенном уровне точности по спектру конверсии можно оценить распределение $B_{\ell_j, \mu_j}^{(\alpha)}$ для этих выделенных (ℓ_j, μ_j) -состояний (например, p-состояний в E3-конверсии). Затем эти величины могут быть сопоставлены с рассчитанными в рамках известных методов квантовой химии. Отметим, что в перспективе имеется возможность получить более детальную информацию о структуре гибридных орбит путем измерения угловых распределений конверсионных электронов при использовании ориентированных монокристаллов в качестве источника.

Формула (17) может быть распространена на случай конверсии на электрорасщепленных глубоких орбитах (I). Для глубоких орбит разности термов при изменении главного квантового числа n_1 (ℓ_j, μ_j -фиксированы) значительно превышают энергию взаимодействия с внешним электрическим полем среды или молекулы. С другой стороны, для факторов конверсии существует слабая зависимость от числа n_1 (см. например, табл. I и 2). Поэтому при расчете вероятности конверсии $W(\Lambda L [\psi^{(k)}]^1 \hbar \omega)$ для электрорасщепленной орбиты в состоянии $\psi^{(k)}$ в сумме по числам n в формуле (I) следует оставить лишь член $n = n_1$, соответствующий расщепляемому терму. В результате в формуле (17) надо

заменить индекс $[\psi^{(\infty)}]'$ на $[\psi^{(k)}]'$, фактор $\bar{w}_3(\Lambda L [l_1 j_1] \hbar \omega)$ на фактор $w_3(\Lambda L [l_1 l_1 j_1] \hbar \omega)$ и вместо величины $B_{l_1 j_1}^{(\infty)}$ поставить заселенность $(n_1 l_1 j_1)$ -компоненты в суперпозиции (I), т.е. величину

$$B_{l_1 j_1}^{(k)} = \sum_{\mu_1} |A_{n_1 l_1 j_1 \mu_1}^{(k)}|^2$$

Поскольку в выражении (I7) используются факторы конверсии для изолированного атома, точность формулы для $\psi^{(\infty)}$ и $\psi^{(k)}$ -орбит определяется изменением амплитуд состояний непрерывного спектра в зоне конверсии под воздействием поля среды. Грубо эту точность можно оценить по вариации отношения $Q_{n_1 l_1 j_1}$ при изменении конфигурации валентной зоны. По данным нашего расчета для ниобия (см. выше) в случае глубоких орбит вариации отношения $Q_{n_1 l_1 j_1}$ составляют не более 0,2%.

Сопутствующие процессы, имитирующие конверсию на гибридной орбите

В конверсионных спектрах изомеров урана и технеция, полученных для различных соединений этих элементов (γ UO_3 , U_4 и т.п.), наряду с линиями, относимыми по формальному признаку близости энергии связи к энергиям состояний в изолированных атомах урана и технеция, как это принято в интерпретации спектров фотоэлектронов, наблюдаются также линии, энергии которых соответствуют орбитам в изолированных атомах кислорода, фтора и т.п. [3,5,16,29,30]. Этот эффект интерпретируется [3] как факт проявления сильной гибридизации глубоких (энергии связи 20-50 эВ) орбит в указанных соединениях урана и технеция [3,5]. Таким образом, формально относимая к 2s-состоянию кислорода орбита реально в зоне конверсии около ядра-изомера имеет значительную компоненту p-орбиты атома урана (или технеция), которая проявляется в акте конверсии. Такое заключение нельзя делать на основе только спектров фотоэлектронов (при $\hbar\omega_p \leq 3-5$ кэВ), поскольку процесс фотоионизации (в отличие от конверсии) не имеет определенной пространственной локализации около какого-либо ядра в данной молекуле. С другой стороны, относительно простые расчеты, проведенные авторами в рамках одномерной модели трех соприкасающихся потенциальных ям, показывают, что энергетические уровни в такой системе близки к уровням в изолированных ямах, однако и при малом (примерно 3-5%) различии значений энергии волновые функции частицы в системе трех ям радикально отличаются от функций для изолированных ям - имеются весьма заметные эффекты делокализации частицы при сближении ям. Этот эффект делокализации электронов глубоких (20-50 эВ) орбит при образовании химических соединений проявляется непосредственно в акте конверсии. Однако наряду с этим явлением имеются процессы, также ведущие к появлению в конверсионном спектре линий, соответствующих уровням орбит в оболочке атома-соседа:

- конверсия мягкого ядерного мультиполя непосредственно на орбите, локализованной в объеме атома-соседа (конверсия "на соседе" в отличие от конверсии "на себе");
- эффект ионизации атома-соседа по каналу электронного мостика, когда электрон, вырванный полем перехода ядра-изомера из собственной оболочки атома, "садится" в дырку и своим полем перебега выбрасывает электрон из оболочки атома-соседа. В этом же процессе заполнения дырки возможно также излучение фотона, который затем порождает фотоэлектрон, поглощаясь атомом-соседом.

Для рассматриваемых мягких переходов ядер ($\hbar\omega \leq 3$ кэВ) длина волны $\lambda \approx 0,7 \text{ \AA}^*$, а для изомера урана $\lambda \approx 27 \text{ \AA}$, т.е. поле перехода ядра не выходит на асимптотику волновой зоны в окрестности ближайшего окружения, а для урана поле зоны статического октуполя (около z^{-4}) охватывает весьма удаленные атомы среды, поэтому для урана эффект конверсии "на соседе" необходимо оценить прежде всего. Такой расчет, проведенный авторами, показал, что факторы конверсии "на соседе" меньше факторов конверсии "на себе" на множитель масштаба около 10^6-10^{10} для разных орбит, который не может быть скомпенсирован большим числом окружающих атомов-соседей, поскольку вклад конверсии "на соседе" весьма быстро падает с расстоянием между ядром-изомером и ядром атома-соседа R_0 [по крайней мере как $(a_0/R_0)^6$ или быстрее], так что в конверсии участвует лишь ближайшее окружение изомера. В случае конверсии на собственных оболочках оператор взаимодействия электрона

* $\text{\AA} = 10^{-8} \text{ см.}$

с полем EL -перехода изомера при $\lambda/a_0 > 1$ пропорционален $(x)^{-(l-1)}$ (здесь и далее $x = z/a_0$, где $a_0 = 5,29 \cdot 10^{-9}$ см; z - координата электрона относительно собственного ядра в рассматриваемом атоме), тогда как для атома-соседа этот оператор пропорционален $(a_0/R_0)^{L+2} x^1$. В случае $E2$ - и $E2$ -мультиполей матричные элементы конверсионного перехода "на себе" на два-три порядка больше элементов оператора x . Кроме того, $a_0/R_0 \approx 1/3-1/4$ даже для ближайших соседей изомера. В основном именно эти факторы и обуславливают малость эффекта конверсии "на соседе" для мягких $E2$ -, $E3$ - и $M1$ -изомеров. Возможно, этот канал конверсии "на соседе" даст сколько-нибудь заметный эффект в случае $E1$ -изомеров, что потребует отдельного исследования.

Что касается вклада электронного мостика с переизлучением кванта $\hbar\omega$ и последующей фото-ионизацией какого-либо атома среды, то вероятность этого канала весьма мала (примерно $10^{-5}-10^{-6}$) [17]. В реальном варианте изомера урана ($\hbar\omega = 76,8$ эВ) это можно видеть из следующей картины процесса: созданный в конверсионном переходе электронный пакет пересекает границу атома за время $\tau \approx a_0/v_{ат} \approx 10^{-17}$ с, тогда как время излучения фотона с этой энергией $\hbar\omega$ для дискретных состояний электрона, локализованных в объеме атома, имеет величину $\tau_f \approx 10^{-11}$ с. Отсюда для вероятности переизлучения фотона имеем $\tau/\tau_f \approx 10^{-6}$. Несколько больший вклад может дать конверсия по каналу электронного мостика с диполь-дипольным взаимодействием электронов соседних атомов (a и b), разнесенных на расстояние R_0 :

$$V_{ee}(z_a z_b) = (e^2/R_0^5) [3(z_a R_0)(z_b R_0) - R_0^2(z_a z_b)].$$

Величина эффекта определяется здесь прежде всего фактором $(a_0/R_0)^6$ (не более 10^{-3}) и малыми (в атомном масштабе) величинами дипольных матричных элементов для переходов электронов в непрерывный спектр при импульсах $\hbar q$, превышающих атомную величину ($q a_0 \gg 1$), что обычно наблюдается при $\hbar\omega = 1-3$ кэВ. Наибольший эффект этого канала следует ожидать в специфическом случае изомера урана, где $q a_0 \approx 2$ для конверсии с $6p$ -орбит. Проведенная авторами прямая оценка суммарного вклада этого канала на $2s$ -оболочках шести окружающих уран атомов фтора дала величину не более 10^{-3} . Таким образом, при интерпретации конверсионных спектров соединений эффект электронного мостика следует учитывать лишь для очень слабых конверсионных линий.

Выводы

1. Резкая выделенность вклада в спектр конверсии электронных состояний с определенными моментами (lj) относительно ядра-изомера и установленный для этих интенсивных переходов факт жесткой локализации процесса конверсии (в случае $E2$ -, $E3$ -, $M1$ -, $M2$ -, $M3$ -мультиполей) в ближайшей окрестности ядра-изомера является основой количественной оценки характера гибридизации орбит [распределения выделенных (lj)-компонент по гибридным орбитам] и степени делокализации электронов при образовании химических соединений.

2. Универсальность поведения волновых функций (lj)-состояний электрона в зоне конверсии и практическое ($\pm 5\%$) постоянство отношения одноэлектронного фактора конверсии к амплитуде функции дискретного состояния электрона в зоне конверсии позволяют сформулировать схему интерпретации конверсионных спектров в терминах этих амплитуд, подобно тому, как сдвиги Найта в спектрах ядерно-магнитного резонанса интерпретируются в терминах плотности неспаренных s -электронов на ядре. Однако в случае конверсии проявляются амплитуды различных (lj)-орбит, причем (lj)-оболочки могут быть полностью заняты. На данном этапе задача сводится к развитию экспериментальной методики количественной оценки наблюдаемых конверсионных линий в существующих фоновых условиях.

3. Сопутствующие процессу конверсии паразитные процессы - конверсия ядерного перехода на оболочке атома-соседа и конверсия "на соседе" по каналу электронного мостика - дают малый вклад (меньше 10^{-3} на акт перехода ядра) даже в случае изомера урана. Эти процессы следует учитывать при анализе весьма слабых конверсионных линий, что является задачей отдаленного будущего. Таким образом, наблюдаемые в спектрах конверсии соединений урана и технеция линии, энергии которых соответствуют энергиям связи электронов в изолированных атомах фтора, кислорода и т.д., возникают в результате эффекта делокализации и гибридизации электронных орбит.

Список литературы

1. Band I.M., Sliv L.A., Trzhaskovskaya M.B. Nucl. Phys., 1970, v. A156, p.170,
2. Гречухин Д.П., Солдатов А.А. Ядерная физика, 1976, т.23, с.273.

3. Гречухин Д.П., Жудов В.И., Зеленков А.Г. и др. Письма в ЖЭТФ, 1980, т.31, с.627.
4. Гречухин Д.П., Солдатов А.А. Препринт ИАЭ-3174. М., 1979.
5. Жудов В.И., Зеленков А.Г., Кулаков В.М. и др. Письма в ЖЭТФ, 1979, т.30, с.549.
6. Carlson T.A., Ertman P., Fransson K. Nucl. Phys., 1968, v. A111, p.371.
7. Vocquet J.P., Chu Y.Y., Kistner O.C. e.a. Phys. Rev.Letters, 1966, v.17, p.809.
8. Fujioka M., Takashima M., Knabe M. e.a. Z.Phys., 1981, Bd A229, S.283.
9. Давидонис Р.И., Киргулявичюс Р.К., Калинаускас Р.А. и др. Изв. АН СССР, Сер. физ., 1980, т.44, с.1060.
10. Давидонис Р.И., Киргулявичюс Р.К., Калинаускас Р.А. Литовский физический сборник, 1976, т.ХVI, с.757.
11. Slater J.C. Phys. Rev., 1951, v.84, p.1261.
12. Dostal K.P., Nagel M., Pabat D. Z. Naturforschung, 1977, Bd 32a, S.345.
13. Neve de Mevergnies M. Phys. Rev. Letters, 1969, v.23, p.422.
14. Meykens A., Fettweis P., Neve de Mevergnies M. Z. Phys., 1978, Bd A284, S.417.
15. Mazaki H., Kakiuchi S., Mukoyama T., Matsui M. Phys. Rev. C, 1980, v.21, p.344.
16. Герасимов В.Н., Гречухин Д.П., Зеленков А.Г. и др. Тезисы докладов XXXI совещания по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра. Л.: Наука, 1981, с.306.
17. Ахнерер А.И., Берестецкий В.Б. Квантовая электродинамика. М.: Гостехиздат, 1959.
18. Бор О., Моттelson Б. Структура атомного ядра. М.: Мир, 1971, т.1,2.
19. Альзер К., Бор О., Хус Т. и др. Изучение структуры ядра при кулоновском возбуждении ионами. Деформация атомных ядер/Под редакцией Л.А.Слива. М.: Изд-во иностр.лит., 1968.
20. Зигбан К., Нордлинг К., Фальман Л. и др. Электронная спектроскопия. М.: Мир, 1971.
21. Банд И.М., Тржасковская М.Б. Препринты ЛИЯФ № 90,91,92. Л., 1974.
22. Hartmann E., Der E., Nagel M. Z.Phys., 1979, Bd A290, S.349.
23. Hartmann E., Seifert G., Phys. status solidi. (b), 1980, v.100, p.589.
24. Hinneburg D., Nagel M., Brunner G. Z.Phys., 1981, Bd A299, S.201.
25. Гречухин Д.П., Солдатов А.А. Препринт ИАЭ-2706. М., 1976.
26. Гречухин Д.П., Солдатов А.А. Препринт ИАЭ-2976. М., 1978.
27. Гречухин Д.П., Солдатов А.А. Ядерная физика, 1978, т.28, с.1206.
28. Lee P.A., Citrin P.H., Eisenberger P., Kincaid B.M. Rev. Mod. Phys., 1981, v.53, p.769.
29. Герасимов В.Н., Зеленков А.Г., Кулаков В.М. и др. Ядерная физика, 1981, т.34, с.3.
30. Герасимов В.Н., Зеленков А.Г., Кулаков В.М. и др. Ж. эксперим. и теор. физ., 1982, т.82, с.362.

Статья поступила в редакцию 17 октября 1982 г.

УДК 539.172.13+539.172.15

ПОЛНЫЕ СЕЧЕНИЯ ОБРАЗОВАНИЯ РАДИОНУКЛИДА ^{11}C В РЕАКЦИЯХ
 $^9\text{Be}(^3\text{He}, n)^{11}\text{C}$, $^{10}\text{B}(d, n)^{11}\text{C}$ и $^{11}\text{B}(d, 2n)^{11}\text{C}$

С.Н.Абрамович, Б.Я.Гужовский, В.А.Перешивкин

INTEGRAL CROSS-SECTIONS MEASUREMENTS FOR THE $^9\text{Be}(^3\text{He}, n)^{11}\text{C}$, $^{10}\text{B}(d, n)^{11}\text{C}$ and $^{11}\text{B}(d, 2n)^{11}\text{C}$ REACTIONS. The integral cross-sections of the reactions $^9\text{Be}(^3\text{He}, n)^{11}\text{C}$, $^{10}\text{B}(d, n)^{11}\text{C}$ and $^{11}\text{B}(d, 2n)^{11}\text{C}$ were measured for ions of ^3He and of deuteron. The beam of ions of ^3He was obtained from the Van-de-Graaf accelerator. The beam of ions of deuteron was obtained from the tandem. Thin targets of ^9Be and B were produced by evaporation onto tantalum backings. The ^{11}C activity in the targets was measured by $\text{Ge}(\text{Li})$ -detector.

Настоящая работа является продолжением исследований, посвященных измерениям сечений образования радиоактивных ядер в реакциях, вызываемых быстрыми частицами на возможных компонентах зоны горения и blankets управляемых термоядерных реакторов [1]. Описываются методика и результаты измере-

ний полных сечений образования радионуклида ^{11}C при взаимодействии изотопов бора с дейтронами и бериллия с ^3He .

В табл. I приведены энергии исследованных реакций Q_0 , энергия порога $E_{\text{пор}}$, максимальные углы θ_{max} вылета ядер ^{11}C в лабораторной системе координат для исследованного диапазона энергий налетающих частиц ΔE , а также доля α ядер-отдачи, вылетающих из мишени ($\theta > 90^\circ$) при энергии частиц 3 МэВ (с учетом торможения в мишени).

Основные характеристики исследуемых реакций Таблица I

Реакция	ΔE , МэВ	Q_0 , МэВ	$E_{\text{пор}}$, МэВ	θ_{max} , град	α , %
$^9\text{Be}(^3\text{He}, n)^{11}\text{C}$	2-6,24	7,56	-	180	I, I
$^{10}\text{B}(d, n)^{11}\text{C}$	3-II	6,47	-	180	3,6
$^{11}\text{B}(d, 2n)^{11}\text{C}$	5,9-II	-4,99	5,90	43	0

Измерения полных сечений исследуемых реакций выполняли активационным методом, состоящим в накоплении радиоактивных продуктов реакции в мишени и подложке при облучении ионным пучком и последующей спектрометрии аннигиляционных γ -квантов, сопровождающих распад ^{11}C , полупроводниковым германиевым спектрометром. Радиоактивное ядро ^{11}C распадается на основное состояние ядра ^{11}B с периодом полураспада $T_{1/2} = 20,38$ мин в 99,76% случаев в результате β^+ -перехода с граничной энергией $E_{\beta^+}^{\text{max}} = 0,961$ МэВ, а в 0,24% случаев в результате e^- -захвата [2]. Эффективность детектора к регистрации актов β^+ -распада определяли с помощью эталонного источника ^{22}Na с точностью не хуже 3% по площади пика с $E_{\gamma} = 511$ кэВ в спектре γ -квантов.

Мишени в виде тонких слоев бериллия, а также естественного и изотопно-обогащенного бора изготовляли методом напыления в вакууме на танталовые подложки толщиной 0,5 мм. Толщину мишеней определяли относительным взвешиванием по выходам ядерных реакций и последующей абсолютизацией по эталонным мишеням, толщину которых определяли взвешиванием на аналитических весах с точностью не хуже 5%. Неоднородность толщины мишеней не превышала 2%. Энергетическую толщину мишеней ΔE_M вычисляли по тормозным способностям заряженных частиц [3]. В качестве эффективной энергии налетающих частиц принимали величину $E_{\text{эф}} = E - 1/2 \Delta E_M$, где E - энергия дейтрона или ^3He перед мишенью.

Активацию мишеней проводили на пучках ионов ^3He и дейтронов электростатического ускорителя ЭГ-5 и тандема ЭП-10. Мишенное устройство, представляющее собой цилиндр Фарадея, обеспечивало достаточное охлаждение мишени благодаря контакту с тонкой стенкой, обдуваемой сжатым воздухом. Время облучения $t_{\text{обл}} \approx 0,3 T_{1/2} \approx 6$ мин выбирали таким, чтобы поправка на распад во время облучения, вычисляемая в предположении постоянства тока пучка, не оказывала существенного влияния на погрешность измерения. Поток бомбардирующих частиц измерялся по заряду, внесенному ионным пучком в цилиндр Фарадея, с помощью интегратора тока. Электрические импульсы с гамма-детектора после предусилителя и усилителя поступали на смещенный усилитель, к выходу которого были подсоединены два одноканальных амплитудных анализатора. Ширины окон анализаторов устанавливались равными. Нижний порог одного из них выбирали таким, чтобы анализатор регистрировал аннигиляционный γ -пик. Нижний порог второго анализатора был равен верхнему порогу первого. Таким образом определяли фон, обусловленный комптоновскими распределениями высокоэнергетических γ -квантов, возникающих в результате фоновых процессов. После облучения мишень извлекали из мишенной камеры и помещали на гамма-детектор, защищенный от внешнего фона экраном из свинца.

Измерение активности облученных мишеней осуществлялось четырехминутными циклами. В каждом цикле за $t_p = 200$ с измерялась наведенная активность и за следующее время $t_n = 40$ с происходила запись полученных результатов. Первый цикл начинался в заданный момент после облучения.

Использованный режим измерения активности облученных мишеней позволял получить кривые распада образующихся в результате ядерных реакций радиоактивных продуктов. Анализ этих кривых показал, что при облучении дейтронами бора образуется лишь один радиоактивный продукт с периодом полураспада около 20 мин, а при облучении ионами ^3He бериллия образуются два радионуклида с пе-

периодами полураспада около 20 и 110 мин. Первый период полураспада соответствовал таковому для изотопа ^{11}C , образующегося в результате реакции $^9\text{Be}(^3\text{He}, n)^{11}\text{C}$, а второй - для изотопа ^{18}F , образующегося в результате реакции $^{16}\text{O}(^3\text{He}, p)^{18}\text{F}$ на примеси кислорода в мишени. При облучении бора дейтронами с энергией выше порога реакции $^{11}\text{B}(d, 2n)^{11}\text{C}$ ($E_{\text{порог}} = 5,9$ МэВ) ядра ^{11}C образуются за счет взаимодействия с обоими изотопами бора: ^{10}B и ^{11}B . Для определения сечений реакций $^{10}\text{B}(d, n)^{11}\text{C}$ и $^{11}\text{B}(d, 2n)^{11}\text{C}$ измерения проводили на мишенях с разными изотопными составами: с естественной смесью изотопов ($^{11}\text{B} - 80,2\%$, $^{10}\text{B} - 19,8\%$ [27]) и обогащенным легким изотопом ($^{10}\text{B} - 84\%$, $^{11}\text{B} - 16\%$).

В дальнейшем все величины, относящиеся к радиоактивным продуктам реакции ^{11}C и ^{18}F , будем снабжать индексами С и F сверху, а величины, относящиеся к изотопам ^9Be , ^{10}B или ^{11}B мишени - индексами 9, 10 или 11 снизу.

Количество N_{10}^C накопленных к концу облучения ядер ^{11}C связано с сечением σ_{10}^C реакции $^{10}\text{B}(d, n)^{11}\text{C}$ и поверхностной плотностью n_{10} данного изотопа ^{10}B в мишени зависимостью

$$N_{10}^C = \sigma_{10}^C n_{10} q f(t_{\text{обл}}), \quad (1)$$

где q - количество упавших на мишень ускоренных ионов; $f(t_{\text{обл}}) = \lambda^C t_{\text{обл}} [1 - \exp(-\lambda^C t_{\text{обл}})]^{-1}$ - фактор, учитывающий распад образующихся во время облучения ядер ^{11}C в предположении постоянства тока пучка ускоренных ионов; $\lambda^C = 0,03401$ мин $^{-1}$ - постоянная распада ^{11}C . Для реакций на изотопах ^9Be и ^{11}B в формуле (1) индекс 10 заменяется соответственно индексами 9 или 11. В случае образования одного радиоактивного продукта ^{11}C число накопленных к концу облучения ядер ^{11}C (N_i^C) связано со скоростью счета N_i в i -м цикле измерения кривой распада следующей зависимостью:

$$N_i^C = N_i \exp \left\{ \lambda^C [t_p i + t_n (i-1)] \right\} / \varepsilon P [\exp(\lambda^C t_p) - 1], \quad (2)$$

где $P = 0,9976$ - вероятность β^+ -распада ядра ^{11}C ; ε - абсолютная эффективность гамма-детектора к акту β^+ -распада в облученной мишени за счет регистрации γ -квантов с $E_\gamma = 511$ кэВ.

Наилучшей оценкой числа накопленных ядер является средневзвешенное значение N^C из всех N_i^C :

$$N^C = \frac{\sum_i^n N_i^C \mathcal{D}_i^{-1}}{\sum_i^n \mathcal{D}_i^{-1}}; \quad \Delta N^C = \sqrt{\frac{\sum_i^n (N_i^C - N^C)^2 \mathcal{D}_i^{-1}}{(n-1) \sum_i^n \mathcal{D}_i^{-1}}}$$

Здесь n - число циклов; $\mathcal{D}_i = \Delta N_i \exp \left\{ \lambda^C [t_p i + t_n (i-1)] \right\}^2$ - относительная дисперсия N_i^C , определяемая погрешностью числа отсчетов в i -м цикле $\Delta N_i = \sqrt{N_{1i} + N_{2i}}$, где N_{1i} и N_{2i} - числа отсчетов первого и второго одноканальных анализаторов.

При облучении бериллиевой мишени ионами ^3He , когда образуются два радионуклида ^{11}C и ^{18}F , число образующихся к концу облучения ядер ^{11}C и ^{18}F (N_9^C и N^F) связано с ожидаемым числом регистраций в i -м цикле N_{0i} соотношением

$$N_{0i} = \varepsilon \left\langle N_9^C [\exp(\lambda^C t_p) - 1] \exp \left\{ -\lambda^C [t_p i + t_n (i-1)] \right\} + N^F [\exp(\lambda^F t_p) - 1] \exp \left\{ -\lambda^F [t_p i + t_n (i-1)] \right\} \right\rangle,$$

где $\lambda^F = 0,00631$ мин $^{-1}$ - постоянная распада ^{18}F . В результате подгонки N_{0i} к экспериментальным значениям числа регистраций в каждом цикле N_i с помощью метода наименьших квадратов были найдены оценки N_9^C и N^F с их случайными погрешностями. По найденному значению N_9^C из выражения (1) можно найти сечение реакции $^9\text{Be}(^3\text{He}, n)^{11}\text{C}$.

Когда оба изотопа бора дают в качестве конечного продукта ^{11}C , общее число ядер ^{11}C (N^C), накопленных к концу облучения, состоит из суммы ядер ^{11}C , образовавшихся при взаимодействии дейтронов с ^{10}B (N_{10}^C) и ^{11}B (N_{11}^C): $N^C = N_{10}^C + N_{11}^C$.

Взяв два значения N^C из измерений с мишенями разных изотопных составов и подставив вместо N^{10C} и N^{11C} их выражения из формулы (I), получили систему двух уравнений с двумя неизвестными, из которой находят сечения σ_{10} и σ_{11} реакций $^{10}\text{B}(d, n)^{11}\text{C}$ и $^{11}\text{B}(d, 2n)^{11}\text{C}$. В качестве случайной ошибки измерения рассматривалась погрешность средневзвешенного значения N^C (ΔN^C) в случае одного радионуклида с или погрешность, полученная при подгонке методом наименьших квадратов, в случае двух радионуклидов ^{11}C и ^{18}F . Систематическая погрешность при определении величины сечения каждой реакции складывалась в основном из погрешности измерения эффективности детектора (3%) и из погрешности в определении толщины эталонных мишеней (5%) и составила 5,8%. Полная погрешность измерения вычислялась как квадратичная сумма случайной и систематической погрешностей. Полученные сечения образования ^{11}C в исследуемых реакциях и их полные погрешности представлены в табл.2 и на рис.1 и 2.

Таблица 2

Полные сечения образования ^{11}C

E , МэВ	$E_{эф}$, МэВ	σ , мб	$\Delta\sigma$, мб	E , МэВ	$E_{эф}$, МэВ	σ , мб	$\Delta\sigma$, мб	E , МэВ	$E_{эф}$, МэВ	σ , мб	$\Delta\sigma$, мб
Реакция $^9\text{Be}(^3\text{He}, n)^{11}\text{C}$				Реакция $^{11}\text{B}(d, 2n)^{11}\text{C}$							
2	1,95	82,4	6,3	5	4,99	101	7,3	6,5	6,48	1,1	0,95
2,5	2,41	110	8,4	5,5	5,49	94,9	5,7	7	6,92	2,7	1,5
3	2,96	131	10	6	5,97	88,8	7	7,5	7,48	8,8	2,2
3,5	3,46	123	9	6,5	6,49	80,1	6,4	8	7,93	1,67	0,54
4	3,95	111	26	7	6,98	69,8	6,5	8,5	8,49	8,0	1,6
4,7	4,64	115	8,8	7,5	7,49	64,6	6,6	9	8,98	5,7	2,4
6,24	6,22	110	8,6	8	7,99	69,0	5,2	9,5	9,48	9,3	1,8
Реакция $^{10}\text{B}(d, n)^{11}\text{C}$				8,5	8,5	65,7	5,2	10	9,99	16,2	1,6
3	2,93	139	9,3	9	8,99	73,2	5,7	10,5	10,48	11,8	8,4
3,5	3,48	128	10	9,5	9,49	56,7	7,2	11	10,98	21,3	2,9
4	3,94	114	8,2	10	9,99	63,4	5,1				
4,5	4,49	108	6,3	10,5	10,49	57,5	10,5				
				11	10,99	60,0	6,7				

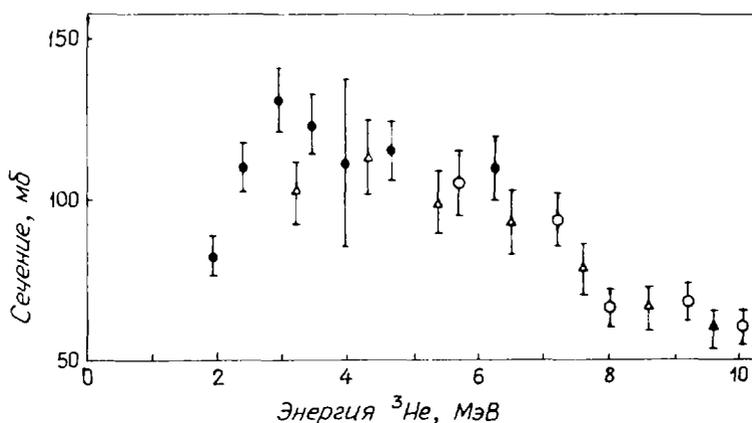


Рис.1. Сечение образования ^{11}C в реакции $^9\text{Be}+^3\text{He}$. Данные работ: ● - настоящей; Δ - [4]; ○ - [5]

На рис.1 изображены данные настоящей работы и работ [4,5] по сечениям образования ^{11}C в реакции $^9\text{Be}+^3\text{He}$. В этих работах абсолютизация выполнена независимо, результаты находятся в хорошем согласии как по абсолютной величине, так и по относительному ходу. По данным работы [6], интегрированием угловых распределений нейтронных групп, соответствующих нуклонно-стабиль-

ным состояниям ^{11}C , были получены сечения реакции $^9\text{Be}(^3\text{He}, n)^{11}\text{C}$ при энергиях ^3He , равных 4,25 и 5,15 МэВ. Полученные значения сечения, равные соответственно 186 ± 47 и 160 ± 40 мб, в пределах приведенных ошибок совпадают с данными настоящей работы, но в обоих случаях больше по абсолютным величинам. Данные работы [7] по абсолютной величине меньше результатов остальных работ в 10-15 раз и на рис.1 не приведены.

Сечения образования ^{11}C в реакции $^{10}\text{B}(d, n)^{11}\text{C}$, а также данные работ [5,7-9] приведены на рис.2,б. Величина сечения, полученная в работе [9] интегрированием приведенных угловых распределений нейтронных групп, соответствующих нуклонно-стабильным состояниям ^{11}C , находится в хорошем согласии с данными авторов настоящей работы. Абсолютизация сечений в работе [5] была проведена по данным работы [8]. Результаты работ [5,8] согласуются с нашими по относительному ходу, но вдвое превышают их по абсолютным значениям. Причины расхождения выяснить не удалось. Приведенные на рис.2 данные работ [5,8] умножены на 1/2. Результаты работы [7] не согласуются с настоящими ни по относительному ходу, ни по абсолютной величине.

На рис.2,а изображены сечения реакции $^{11}\text{B}(d, 2n)^{11}\text{C}$, определенные по экспериментальным данным авторов настоящей работы и источников [5,7]. Наши данные систематически ниже, чем в работе [5], в два раза. Абсолютизация толщи мишеней из изотопов ^{11}B в работе [5] проводилась по реакции $^{11}\text{B}(p, n)^{11}\text{C}$ с использованием данных работы [10] о сечении этой реакции, которые завышены примерно в два раза по сравнению с результатами более поздних работ [11,12]. Это привело к завышению сечения в работе [5]. На рис.2 данные работы [5] умножены на 1/2.

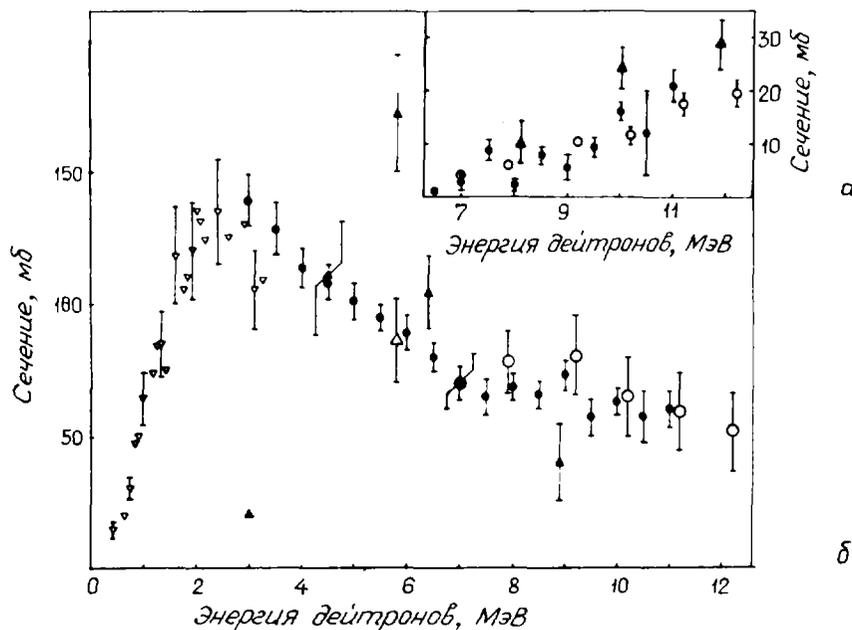


Рис.2. Сечение образования ^{11}C в реакциях $^{11}\text{B}+d$ (а) и $^{10}\text{B}+d$ (б). Данные работ: ● - настоящей; ▽ - [8], умноженные на 1/2; ▲ - [7]; △ - [9]; ○ - [5], умноженные на 1/2

Результаты работы [7] для трех исследованных реакций не совпадают с настоящими как по относительному ходу, так и по абсолютным величинам. Расходятся они также с другими работами. Это дает основание считать данные работы [7] сомнительными.

Список литературы

1. Абрамович С.Н., Гужовский Б.Я., Перешивкин В.А. Измерение полных сечений образования радиоактивного нуклида ^7Be при взаимодействии ^6Li , ^7Li , ^9Be и ^{10}B с ^3He . - Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1982, вып.5(49), с.21-25.

2. Tables of Isotopes. Editors C.M.Lederer, V.S.Shirley. 7th ed. New York: Wiley, 1978.
3. Немец О.Ф., Гофман Д.В. Справочник по ядерной физике. Киев: Наукова думка, 1975.
4. Hahn R.H., Ricci E. Interactions of ^3He particles with B, N, Na and Be. - Nucl. Phys., 1967, v.A101, N 2, p.353.
5. Anders N., Herges P., Scobel W. Excitation functions of nuclear reactions producing ^{11}C . - Z. Phys., 1981, Bd A301, N 4, S. 353.
6. Towle J.H., Macefield B.E. A study of the $^9\text{Be}(^3\text{He}, n)^{11}\text{C}$ reaction. - Nucl. Phys., 1965, v.66, N 1, p.65.
7. Бриэль О.Д. Сечение реакций ^3He с легкими ядрами. - Ядерная физика, 1965, т.1, вып.1, с.55.
8. Wohlleben K., Schuster E. Aktivierungsanalyse mit Deuteron. - Radiochim.Acta, 1969, v.12, N 1, p.75.
9. Bohne W., Bommer I., Fuchs H. e.a. Transfer reactions leading to states of ^{11}C . - Nucl. Phys., 1970, v.A157, N 2, p.593.
10. Hegge G., Bubb I.F. ^{12}C level structure in the excitation region 2,5-26,5 MeV. - Ibid., 1961, v.26, N 4, p.616.
11. Van der Zwan H., Geiger K.W. The $^{11}\text{B}(p,n)^{11}\text{C}$ cross-section from threshold to 4,5 MeV. - Ibid., 1970, v.A157, N 2, p.59.
12. Hohn J., Kayser J., Pilz W. e.a. Experimental investigation of the $^{11}\text{B}-p$ reaction and analysis in the frame of continuum sheel model. - Ibid., 1981, v.7, N 6, p.803.

Статья поступила в редакцию 23 апреля 1984 г.

УДК 681.327.12:539.1

ТЕХНОЛОГИЯ ВВОДА ДАННЫХ
 ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ВТОРИЧНОГО ИНФОРМАЦИОННОГО ДОКУМЕНТА
 В ФОРМАТЕ "ОБОБЩЕННЫЙ ЭКSFOR" НА МАЛОЙ ЭВМ

Г.М.Журавлева, А.Е.Игнаточкин, Ф.Е.Чукреев

THE TECHNOLOGY OF DATA INPUT FOR PRODUCTION OF THE SECONDARY INFORMATION DOCUMENTATION IN THE FORMAT "GENERALIZED EXFOR" BY MINICOMPUTER. The technology for automatization the abstract data input from scientific and technology information source in the international format "Generalized EXFOR" by minicomputer is described. Opportunities of this technology are considered. Comparative characteristic with known data input designs is cited.

Одним из основных режимов работы любой автоматизированной информационной системы является режим ввода информации. Технология ввода данных может быть различной и зависит от особенностей конкретной системы обработки данных. Наиболее характерные особенности:

- степень готовности первичной информации к вводу в систему;
- состав и характеристики основных технических средств системы;
- объемы вводимой информации;
- степень участия человека в подготовке данных;
- использование различных устройств подготовки данных (в частности, устройств ручного ввода);
- регламент подготовки данных, используемых в процессе функционирования систем обработки.

В настоящее время получила распространение подготовка данных с записью информации непосредственно с клавиатуры устройств подготовки данных на магнитные носители [1-3]. В работе [4] приведены четыре основные технологические схемы ввода данных в ЭВМ, преобразующих неформализованную первичную информацию в данные, которые могут быть восприняты ЭВМ для дальнейшей обработки.

Процесс преобразования неформализованной информации и приведения ее к виду, удобному для дальнейшей обработки, является наиболее трудоемким. К неформализованной первичной информации

относятся прежде всего книги, периодические издания, справочники и им подобные материалы. Особенность этой информации состоит в том, что она, во-первых, имеет большие объемы, во-вторых, многие информационные издания дублируют друг друга. А это определяет большую трудоемкость работ, связанных с выборкой, необходимой для ввода в ЭВМ данных из первичной информации. Поэтому первичная аналитическая обработка и индексирование информации, в результате которых создается вторичный информационный документ (ВИД), проводятся высококвалифицированными специалистами. Помимо этого нужны операторы, которые ввели бы весь подготовленный материал в ЭВМ. Важно также правильно использовать специалистов различной квалификации в процессе преобразования первичной информации в данные, вводимые затем в базы и банки данных для дальнейшей обработки и использования. От этого зависят производительность и качество всей системы обработки данных.

Приведенные в работе [1] схемы в качестве первой предполагают стадию первичной аналитической обработки. Суть ее заключается в выявлении семантической (смысловой) информации, содержащейся в первичном информационном документе (ИИД), и создании ВИД с форматированными данными на каком-либо носителе, который затем вводится в ЭВМ через устройства ввода.

По первой технологической схеме ВИД составляется на бумажном носителе, информация с которого затем переносится на перфоносители. Характерная особенность этой схемы - двойной ввод с посимвольным сравнением информации для контроля (верификация). Для ввода информации по этой схеме необходим персонал на четырех технологических участках: первичная аналитическая обработка, перфорация 1, перфорация-контроль 2, ввод данных в ЭВМ, а также учет, контроль и передача ВИД и перфокарт между этими технологическими участками.

ВИД для второй технологической схемы готовится также на бумажном носителе и передается оператору дисплея, который по определенным правилам набирает изображение ВИД на экране дисплея, контролирует правильность набора и нажатием кнопки "Ввод" вводит ВИД в ЭВМ. По третьей технологической схеме персонал, ведущий первичную аналитическую обработку, все свои "записи" ведет непосредственно на дисплее. По четвертой технологической схеме при составлении ВИД на бумажном носителе предусматривается строгая стандартизация. Это обеспечивается специальными бланками или специальными печатающими устройствами. Обычно такая схема ввода данных в ЭВМ применяется в тех случаях, когда первичная аналитическая обработка и составление ВИД ведутся в разных местах, территориально удаленных от мест ввода данных.

Проведенный в работе [1] анализ показывает преимущества схем, использующих ввод данных с дисплеев, т.е. бесперфорационный ввод. Отмечается, что третья схема обладает производительностью в 2-3 раза большей по сравнению со второй и в 3-4 раза большей по сравнению с первой. Основные преимущества третьей схемы:

- ВИД, составленный на экране дисплея в результате первичной аналитической обработки, контролируется персоналом, занятым этой операцией, и в дальнейшем человек никаких искажений в него не вносит;
- отпадает необходимость составления ВИД на бумажном носителе, что исключает такие операции, как учет, передача, хранение и т.д.

В работе [3] описана такая технология ввода реферативной информации в интегральную систему информационного обеспечения и обосновывается возможность и целесообразность совмещения функций индекатора, референта и оператора. Если совмещение функций индекатора и референта действительно целесообразно, то целесообразность совмещения функций референта и оператора доказана только для случая, когда весь поток вводимой в систему информации обрабатывается штатными референтами - держателями системы. В случае использования внештатных референтов эта технология предусматривает передачу информационной продукции, разработанной ими, в подразделение бесперфорационного ввода для записи ее на машиночитаемые носители силами операторов. Кроме того, организация работы референтов по технологии прямого ввода должна предусматривать:

- небольшие объемы вводимой информации (нормативное время на составление поискового образа документа и его запись на МД составляет примерно 12 мин);
- выделение достаточного машинного времени (не менее чем 2 ч по строго определенному графику);
- установку терминалов бесперфорационного ввода на рабочем месте или в помещении референтов;
- наличие средств оперативной связи с машинным залом;

- надежность режимов работы ЭВМ;
- правильно налаженную систему материального стимулирования.

Кроме того, приведенные в работе [3] результаты оценки технологии "прямого ввода" не учитывают этапов по корректировке и редактированию введенных документов. По предложенной технологии эти операции, вероятно, выполняет референт. Таким образом, референт должен овладеть не только процессом ввода информации, но и обучиться проведению процедур формально-логического контроля с последующим редактированием документов на ЭВМ. Хотя практика показывает, что референты могут с успехом выполнять очерченный круг задач, используя дисплеи как основные технические средства обработки и регистрации на соответствующем носителе (МЛ) составленных ими документов, однако приведенные выше обстоятельства делают нецелесообразной передачу референтам указанных функций, особенно при больших объемах вводимых данных.

Большие объемы информации, необходимость выбора из нее достоверных и наиболее ценных данных, слежение за правильностью расстановки этих данных в ВИД способствуют стремлению к созданию систем с максимально возможной заменой интеллектуальных процессов автоматическими в целях сокращения затрат ручного труда, в том числе к необходимости автоматизации процесса ввода ВИД [4,5].

При подготовке центрами узкотематических массивов с помощью комплексов средств системного применения предлагается технология, по которой функции референта и оператора разграничены. Референт, выполняющий задачи аналитико-синтетической обработки и индексирования информации, ответствен за качество и достоверность информации, выбранной из первоисточника и перенесенной в формируемый ВИД. На оператора возлагается задача по обработке этих ВИД на ЭВМ (ввод, редактирование, анализ формально-логического контроля и т.д.). Прямое взаимодействие референта и оператора в процессе полного цикла обработки массивов ВИД способствует качественному формированию данных для окончательного помещения их в базу данных.

В то же время человек-оператор в отличие от технических источников помех является специфически "активным" источником ошибок, так как может не только совершать ошибки, но и обнаруживать и исправлять их. Хотя полный учет влияния ошибок оператора на достоверность обработки данных в автоматизированных системах обработки информации провести, по-видимому, невозможно (более того, литературные данные отчасти противоречивы [6-8]), все-таки считается, что из-за ошибок оператора устройств ручного ввода информация искажается в значительно большей степени, чем из-за действия других источников помех и ошибок.

Однако существуют пути, позволяющие повысить эффективность работы операторов по вводу данных. Один из них - сократить объемы перфорируемых данных. В условиях информационного центра, занятого переработкой научно-технической информации, которая является содержательно связанной и структурно зависимой, оператор вводит не весь формируемый ВИД, структура которого должна соответствовать требованиям дальнейшей обработки, а только его семантическую часть, подготовленную референтами на бумажном носителе, в частности написанную в произвольном виде от руки. Это позволяет повысить производительность труда операторов и достоверность данных. Второй путь, дополняющий первый, - создание программ ввода с возложенными на них функциями по формированию ВИД форматированной структуры на основе заложенных в программу правил по его составлению.

Программная реализация процедур ввода данных может быть различной. Во-первых, эти процедуры в каждом конкретном случае могут программироваться заново на каком-либо процедурно-ориентированном языке. Во-вторых, они могут быть реализованы в виде универсальных программ интерпретирующего типа. В-третьих, эти программы могут быть реализованы в виде генератора программ.

В отличие от первого способа второй и третий требуют не задания технологии обработки данных, а лишь описания входных и выходных параметров. Однако настройка на конкретный носитель в универсальных программах настолько сложна, что, как правило, требует разработки различных программ ввода с различных носителей [9]. В генераторах программ такой проблемы нет, так как в процессе генерации создается блок ввода информации с конкретного носителя [10]. Однако генераторы программ создаются, как правило, для обработки и формирования массивов из разнотипных структур, включающих большое число реквизитов. Формируемые массивы, состоящие из одних и тех же реквизитов, могут иметь различные структуры для выходных файлов. Именно генератор программ посредством задаваемых пользователем на основе бланков-заказов входных и выходных данных по установленным между реквизитами связям формирует конкретную программу, которая соответствует структуре требуемого выходного массива. Но если структура формируемого массива конкретна, то нет необходимости проектиро-

вать логически сложные программы, способные реализовать все необходимые структуры выходных массивов, при этом с учетом особенностей работы с пользователями.

Поэтому для формирования массивов данных с постоянной формализованной структурой выходных массивов более рационально создавать программы ввода, ориентированные на конкретную обработку, что позволяет получать более эффективную программу как по быстродействию, так и по объему оперативной памяти. Применение малых ЭВМ дает однозначный ответ на рассматриваемый вопрос: использование специализированных программ более рационально (оптимально) для решения поставленной задачи. Дело в том, что для обработки данных в однопользовательском режиме практически не требуется большого быстродействия выполнения операций, а также сверхбольшой оперативной памяти при наличии развитых внешних устройств. Кроме того, пользуясь услугами центрального процессора малой ЭВМ, можно обеспечить дополнительные удобства, расширив возможности диалога между оператором и ЭВМ, и таким образом упростить процесс ввода информации, а язык общения между ЭВМ и оператором в максимальной степени приблизить к естественному. В то же время однопользовательский режим малых ЭВМ позволяет легко преодолеть одну из существенных "психологических проблем": свести до минимума интервал времени между моментами задания "вопроса" и получения "ответа" при запланированном диалоге.

Инициатива в запланированном диалоге, как правило, принадлежит программе. Однако, получив "приглашение" от программы ввести управляющую информацию, оператор выбирает ту или иную ее ветвь. Но анализ символьной информации на языках высокого уровня - довольно трудоемкая операция, требующая достаточного времени даже на такую операцию, как распознавание стандартного ответа "Да" или "Нет". Свести к минимуму время реакции программы на ответы оператора позволяет использование языков ассемблерного типа (АССЕМБЛЕР, МАКРОЯЗЫК) [11,12]. С другой стороны, использование в качестве выходной форматированной, содержательно связанной информации создает условия для автоматического формирования некоторой обязательной информации и, таким образом, исключения возможностей ее искажения или потери при формировании. При форматированной структуре каждая запись состоит из нескольких участков (полей, элементов) и возможно однозначное, фиксированное определение "адреса" любого поля массива. Это открывает реальные пути для ввода в массивы любых данных, в том числе тех, которые могут быть введены автоматически с различных носителей или путем преобразований, например непосредственно с печатных изданий.

Изложенным выше принципам отвечает специализированная программа полуавтоматического ввода данных, записанных в международном формате "Обобщенный ЭКСПОР" (ОЭ) [13]. Программа написана на языке, использующем макрорасширение АССЕМБЛЕРА для малой ЭВМ IOIOB [14].

Международный формат ОЭ предназначен для фактографического описания физических экспериментов. Жесткость формата позволяет автоматизировать процесс ввода данных и их частичное формирование. Процесс ввода реализуется на основе запланированного диалога между оператором и ЭВМ. При этом используется задание последовательности выполнения работ ЭВМ с помощью обработки транзакций. Такой подход позволяет начать работу по вводу ВИД практически без каких-либо подробных инструкций и изучения специального языка. Ручной ввод сочетается с автоматическим формированием данных и записью их в представлении, которое диктуется правилами формата. Ответы оператора на предложения программы являются указаниями дальнейших действий ЭВМ. Это позволяет избежать ошибок, освобождая оператора от необходимости помнить порядок следования и формат информации. Процесс диалога происходит при одновременном моделировании каждой формируемой строки ВИД на экране дисплея. Это дает возможность оператору визуально обнаружить и в случае необходимости исправить ошибки, допущенные в пределах формируемой строки.

Проверка достоверности входных данных при их первоначальном вводе в систему является одной из самых важных проблем. В работе [7] показано, что в наибольшей степени на искажение результатов влияют такие этапы, как подготовка данных и их вывод. Именно на этих этапах должен быть произведен необходимый и наиболее тщательный контроль достоверности данных.

Программные проверки достоверности данных распадаются на несколько категорий: проверка литер, поля, строки, части файла, всего файла. Так как эти проверки составляют большую часть программирования, целесообразно отделить программу ввода от программы контроля и редактирования. Поэтому за программой ввода оставлен контроль только необходимых данных и таких, которые не увеличивают время реакции при запланированном диалоге.

Программа ввода и формирования ВИД выполняет следующие функции:

- следит за правильностью и создает структуру данных в соответствии с правилами международного формата ОЗ;
- осуществляет проверку вводимых символов;
- передает на экран дисплея сообщения о допущенных ошибках;
- ведет запланированный диалог с оператором по правильности ввода информации;
- записывает сформированный форматированный ВИД (ENTRY) на промежуточную МЛ для дальнейшей обработки;
- выдает на АЦПУ распечатку сформированного ENTRY;
- сообщает оператору о готовности внешних устройств к работе.

Процесс ввода, после задания имени программы, начинается с выбора режима ввода. Ввод ВИД может осуществляться в двух режимах: ввод нового ВИД и дополнение информацией из ВИД, начало которого в форматированном виде - ENTRY - хранилось в рабочей библиотеке. Библиотека расположена на МЛ, имеющей файловую структуру хранения. Обращение к какому-либо ENTRY в библиотеке происходит путем задания двух имен: имени библиотеки и имени ENTRY. Элементы последней строки дополняемого ENTRY служат необходимыми параметрами для построения правильной структуры всей вводимой в последующем информации из ВИД. Программа обеспечивает соблюдение правильной структуры ENTRY, которая будет сформирована при дописывании новой информации и в дальнейшем сохранена в рабочей библиотеке. Если осуществляется ввод нового ВИД, то входные данные задаются в виде начальных условий программы.

Иерархическая структура формата позволяет расчленить программу ввода на процедурно-связанные модули. Это обеспечивает легкость развития программы как в плане совершенствования режимов ввода, так и для расширения сервисных возможностей и процедур обработки.

Можно выделить четыре основных уровня программы в соответствии с иерархической структурой формата:

- формирование общей структуры, которая задается фиксированной последовательностью системных идентификаторов (СИ);
- формирование секции библиографических данных (секция BIB);
- формирование таблиц цифровых данных (секции COMMON и DATA);
- формирование идентификаторов строк.

Введенный ВИД ENTRY формируется в определенной зоне диска. Адрес начала размещения ENTRY фиксирован. После окончания процесса ввода путем сообщения об этом оператором программе ввода ENTRY переписывается с диска на МЛ. Запись ENTRY сначала на диск, а затем на МЛ объясняется следующими причинами: автоматическим формированием информации, необходимостью обработки аварийных ситуаций при сбоях и обеспечением некоторой мобильности программы по дальнейшей обработке введенной информации.

При аварийных ситуациях оператор задает имя программы, которая переписывает введенную информацию с диска на МЛ, и, таким образом, вся введенная до сбоя информация не теряется.

Ввод данных осуществляется построчно. Программой обеспечивается формирование данных в перфокарточном формате, как того требуют правила международного формата ОЗ. Каждая строка разбита на три зоны. Первые 11 позиций отводятся для системных и информационных идентификаторов. Эта зона формируется полуавтоматически. Зона с позициями 12-66 является информационной. Данные для формирования этой зоны полностью вводятся оператором. Программа только размещает введенную информацию в соответствии со структурой. Третья зона (позиции 67-80) заполняется идентификаторами строк и формируется программой автоматически.

Формирование общей структуры

Формирование общей структуры форматированного ВИД происходит путем задания соответствующей последовательности системных идентификаторов: ENTRY, SUBENT, NOSUBENT, BIB, NOBIB, COMMON, NOCOMMON, DATA, NODATA, ENDDATA, ENDCOMMON, ENDBIB, ENDSUBENT, ENDBENT. Вызов СИ на экран дисплея происходит в соответствии с функциями, заложенными в программе. Для этого выделена область, занятая списком СИ в виде следующего массива V1:

ENTRY	BIB	DATA
SUBENT	COMMON	ENDSUBENT

В каждый момент времени указатель массива V1 определяет тот СИ, который отвечает последовательности формирования ENTRY в соответствии с правилами формата ОЭ.

СИ SUBENT, BIB, COMMON и DATA определяют по правилам формата начало соответствующей информационной единицы (ИЕ) - раздела или секции. Это означает, что если данная ИЕ будет заполняться данными, то оператор должен подтвердить ее дальнейшее присутствие в ENTRY - ввести знак подтверждения (любой, кроме N). Если данных для заполнения этой ИЕ нет, то оператор сообщает об этом, вводя знак N на предлагаемую строку с СИ; причем строка с СИ, определяющим ИЕ, заменяется на экране дисплея на строку с СИ, определяющим ее отсутствие, т.е. на строки NOSUBENT, NOBIB, NOCOMMON, NODATA.

Для окончательного формирования строк BIB, COMMON и DATA требуется информация, которая может быть получена только после полного заполнения этих секций. Поэтому, получив от оператора директиву о дальнейшем заполнении секции данными, программа запоминает адрес размещения на диске строки с этим СИ. Процесс окончания заполнения ИЕ определяется оператором заданием признака окончания, что влечет вызов на экран строк с СИ, определяющими конец данной ИЕ (ENDBIB, ENDCOMMON или ENDDATA), и перезапись строк с СИ, определяющими ее начало по запомненному адресу.

Окончание формирования очередного раздела - ИЕ SUBENT - происходит полностью автоматически вслед за окончанием формирования ИЕ COMMON или DATA путем формирования строки ENDSUBENT. Вслед за этой строкой на экране автоматически появляется строка с СИ SUBENT. Таким образом, в зависимости от ответа оператора, осуществляется автоматический переход либо к заполнению следующего раздела, либо к окончанию процесса ввода.

Окончание процесса ввода и формирования ENTRY определяется ответами оператора на сообщения-рекомендации программы. В зависимости от ответов может быть сформирован полный ENTRY или ENTRY, который затем дополняется информацией из БИД.

Формирование секции библиографических данных

Секция BIB может быть представлена как объектно-характеристическая таблица. Названия объектов таблицы определены конечным набором информационных идентификаторов (ИИ). Свойства каждого из объектов определяются либо совокупностью конечного числа характеристик, коды которых находятся в словарях, либо свободным текстом, либо тем и другим. В программе выделена область, занятая списком ИИ в виде массива V2 (табл.1).

Таблица 1

Структура списка информационных идентификаторов (массив V2)

Информационный идентификатор	Флаг встречаемости	Флаг присутствия	Информационный идентификатор	Флаг встречаемости	Флаг присутствия
ADD-RES	02	20	HISTORY	02	20
ANALYSIS	00	20	INC-SPECT	00	20
ASSUMED	00	20	INSTITUTE	01	20
AUTHOR	01	20	METHOD	00	20
COMMENT	02	20	MISC-COL	02	20
CORRECTION	02	20	MONITOR	00	20
COVARIANCE	02	20	MONIT-REF	00	20
CRITIQUE	02	20	N-SOURCE	00	20
DECAY-DATA	02	20	PART-DET	00	20
DECAY-MON	00	20	RAD-DET	00	20
DETECTOR	00	20	REACTION	03	20
EN-SEC	02	20	REFERENCE	01	20
ERR-ANALYS	02	20	REL-REF	02	20
EXP-YEAR	01	20	SAMPLE	02	20
FACILITY	01	20	STATUS	02	20
FLAG	02	20	TITLE	01	20
HALF-LIFE	02	20	ENDBIB	02	20

Флаг присутствия ИИ. Каждый ИИ может присутствовать в секции ВІВ только один раз. Поэтому, как только происходит вызов оператором ИИ и заполнение его информацией, это отмечается программой изменением значения флага присутствия. Перед вызовом функционального модуля заполнения секции ВІВ флаг присутствия каждого ИИ получает пустое значение.

Флаг встречаемости ИИ. По правилам формата одни ИИ могут присутствовать в любом из разделов ENTRY, другие - только в первом, третьи - если присутствуют в первом разделе, то не должны встречаться во всех остальных, а если в первом отсутствуют, то должны присутствовать во всех остальных. Поэтому флаг встречаемости определяет возможность присутствия данного ИИ в любом из разделов ENTRY. Он задается как параметр, который не изменяется в процессе работы программы.

Последовательность ИИ в ENTRY произвольна, поэтому вызов очередного ИИ происходит по заданию оператором начальной буквы этого ИИ. Так как может существовать несколько ИИ, начинающихся с заданной буквы, то оператор должен дать знак подтверждения на выданный на экран ИИ. Только после этого оператор переходит к заполнению информационного поля.

В процессе заполнения информационного поля в пределах формируемой строки оператор осуществляет визуальный контроль вводимого текста. В случае необходимости он может исправить допущенные ошибки вплоть до уничтожения всей строки и начать формирование строки вновь с вызова ИИ (возможно, уже другого). По признаку окончания заполнения строки происходит автоматическое доформирование строки и ее принятие в буфер на диске. Признак окончания заполнения строки может быть задан оператором (RT), либо может быть сформирован автоматически, если оператор набивает текст, не глядя на экран и не замечая того, что область информационного поля заполнена полностью. Принятая в буфер диска очередная строка информации становится недоступной для исправления.

Возможен автоматический режим заполнения информационного поля секции ВІВ. В этом случае оператор должен задать транзакцию и в результате диалога-имя массива, который необходимо перенести в информационное поле. Переносимый массив до вызова должен присутствовать в рабочей библиотеке. Используя специальный знак в переносимом массиве, можно создавать желаемую структуру выходного массива. Закрытие секции ВІВ осуществляется по вызову на экран СИ ENDBІВ, задаваемому оператором по схеме вызова ИИ.

Формирование таблиц цифровых данных

Формирование секций COMMON и DATA требует соблюдения некоторых специфических особенностей, предписанных правилами формата ОЭ. Первая особенность состоит в том, что эти секции представляют собой таблицы с колонками переменных. На каждую колонку отводится II позиций. Таким образом, в каждой строке может быть записано не более шести колонок таблицы данных. Но таблицы экспериментальных данных могут содержать и большее число колонок. Правила формата предусматривают организацию специальной структуры для таких таблиц. Вторая особенность состоит в том, что цифровые значения могут быть записаны в таблице данных в двух форматах: в формате десятичного числа и в формате "Е". В первом случае цифровое значение может размещаться, начиная с любой позиции колонки. Однако для эстетического восприятия таблиц программа размещает значения так, что десятичная точка всегда ставится в середину колонки. Во втором случае число должно размещаться таким образом, чтобы его последняя цифра находилась в последней позиции колонки (т.е. быть правоприжатым). Третья особенность состоит в том, что наименования колонок и единиц измерений должны размещаться с начальной позиции колонки.

Перечисленные особенности учитываются автоматически функциональным модулем формирования секций цифровых данных. Задав число колонок таблицы по запросу модуля, оператор вводит цифровые значения переменных. Если колонка пуста, то оператор вводит признак перехода к следующей колонке (RT). По этому признаку после контроля цифрового поля происходит автоматическая перезапись введенного значения в нужные позиции колонки. Этот процесс визуально наблюдается, однако скорость переноса такова, что не мешает работе оператора, даже если ввод осуществляется оператором "вслепую". В случае необходимости оператор может исправить ошибки, допущенные в пределах формируемой строки, или отменить строку полностью.

Введенное цифровое значение контролируется по следующим признакам:

- наличие цифр и специальных знаков (. , Е , + , -);

- соответствию заданному формату;
- размеру введенного значения, который не должен превышать 11 символов вместе со специальными знаками.

Тип допущенной ошибки определяет либо программную корректировку цифрового значения в колонке, либо его повторный запрос. Закрытие секций COMMON и DATA осуществляется по признаку окончания формирования таблиц вводом символа # в первую позицию первой колонки. Модулем при этом проверяется равенство заданного и введенного числа колонок. В случае их несоответствия выдается сообщение о необходимости продолжить формирование таблицы.

Формирование идентификаторов строк

На основе правил формата и по значениям, которые вырабатываются программой на основе конкретных данных при вводе, осуществляется автоматическое формирование значения идентификатора для каждой строки ENTRY. Программой ввода осуществляется также проверка готовности устройств к приему информации. Если устройство при обращении программы к приему не готово, оператору выдается сообщение о необходимости провести конкретные действия для продолжения нормальной работы. Так как программа ввода входит в общий технологический цикл обработки данных в системе ЭКСФОР [15], ею формируются необходимые межпрограммные параметры для работы системы:

- имя сформированного ENTRY;
- дата его формирования;
- имя старого ENTRY, если ввод осуществлялся в режиме дополнения в ENTRY из ВИД;
- признак полного или неполного введенного ENTRY;
- число строк сформированного ENTRY.

Для оценки работы программы приведем сравнительные (с некоторой идеализацией) характеристики систем ввода, которые существуют в других международных центрах. Для сравнения рассмотрим системы ввода, существующие в СЯД - Секции ядерных данных МАГАТЭ (Австрия, Вена), в БНД - Брукхейвенской национальной лаборатории (США, Брукхейвен), в ЦЯД - Центре по ядерным данным (СССР, Обнинск) - и в ЦАЯД - Центре по данным о строении атомного ядра и ядерных реакциях (СССР, Москва). Приведенные далее сведения относятся к периоду 1982-1983 гг.

В МАГАТЭ ввод данных производится с дисплея, что позволяет оператору осуществлять самоконтроль вводимой информации, однако оператор должен сам заботиться о позиционной структуре информации. Это означает, что на скорость ввода влияет время установки маркера в нужную позицию строки. Число структурных полей в строке от 1 (при вводе только СИ, например ПОСCOMMON) до 7 (при формировании таблицы данных). Оператор вводит всю строку длиной в 80 символов. Следует отметить, что ввод осуществляется, как правило, автономно от ЭВМ на гибкие диски.

В БНД для подготовки больших массивов данных используются перфокарточные устройства ввода. Поэтому скорость ввода снижается в результате того, что ошибка исправляется путем повторного набора перфокарты. Для ввода данных небольшого объема применяется система для подготовки данных в формате CSISRS, близкого по своей структуре к формату ОЭ. В последующем данные из формата CSISRS переводятся в формат ОЭ с помощью специальной программы перевода.

В ЦЯД (Обнинск) ввод данных осуществляется следующим образом: текстовая информация до последнего информационного знака вводится оператором, который сам заботится о позиционной структуре строки. При формировании таблиц данных установка маркера в первую позицию колонки осуществляется автоматически, а необходимое позиционное размещение значений внутри колонки - забота оператора.

Для сравнения были использованы расчетные значения, приведенные в работе [16] (табл.2). В качестве примера рассмотрим структуру по формированию ENTRY (АО118). ENTRY содержит 341 строку, в том числе:

С системными идентификаторами.....	63
Из них имеющие:	
поля N1	27
поля N1 и N2	27
только СИ.....	9
С информационными идентификаторами.....	203
С колонками переменных.....	75

Так как по программе ввода, действующей в ЦАЯД, часть информации формируется автоматически, характеристика строк ENTRY будет следующей:

С системными идентификаторами.....	12
С информационными идентификаторами.....	196
С колонками переменных.....	75
Формируемые автоматически.....	58

При расчетах были приняты следующие ограничения:

Число колонок в таблицах данных.....	6
Максимальное число знаков в цифровых значениях при формировании таблиц данных.....	7
Среднее число знаков при формировании:	
информационного поля секции	
библиографических данных.....	50
строк с СИ.....	4

Таблица 2

Расчетные значения скоростных характеристик выполнения оператором технологических операций для различных дисплеев

Технологическая операция и ее характеристики	Тип дисплея	
	с клавишей МАРКЕР ВЛЕВО	без клавиши МАРКЕР ВЛЕВО
Время установки маркера в нужную позицию $T_{у.м}^c$, с:		
минимальное	0,55	0,55
максимальное	3,1	4,3
Время набора на клавиатуре одного знака $T_{зн}^c$, с:		
с самоконтролем	0,62	1,1
без самоконтроля	0,5	0,5

Расчет производится по формулам $T_{наб}^c = n T_{зн}^c$; $T_{у.м}^c = m T_{у.м}^c$; $T_{наб} = T_{наб}^c + T_{у.м}^c$;
 $T_{наб}^E = \sum_{i=1}^k T_{наб}^c(i)$, где n - длина набираемого сообщения; m - число структурных полей в строке; k - число строк формируемого ENTRY; $T_{наб}^c$ - время набора сообщения в строке;
 $T_{у.м}^c$ - время для установок маркера в структурные поля строки; $T_{наб}$ - время формирования строки;
 $T_{наб}^E$ - время формирования ENTRY. Результаты расчета сведены в табл.3.

В работе [1] приводится расчет трудовых затрат на ввод данных для автоматизированного банка данных с входным потоком ВИД, равным 617280 перфокарт в год. Это означает, что скорость ввода составляет 28,2 перфокарты в 1 ч в пересчете на одного оператора. Для системы ЭКОФОР по программе ввода, действующей в ЦАЯД, скорость ввода, исходя из приведенного в табл.3 расчета, составляет 155 перфокарт в 1 ч. Таким образом, использование специальной программы для ввода содержательно связанной и структурно зависимой информации увеличивает производительность труда более чем в 5 раз.

Показателем деятельности оператора кроме скоростного является надежный показатель - безошибочность его работы. Под безошибочностью в работе [16] понимается вероятность β набора безошибочного сообщения, определяемая по формуле $\beta = (\beta_{зн})^n$, где n - длина набираемого сообщения; $\beta_{зн}$ - безошибочность занесения одного знака с клавиатуры на экран (для дисплеев с клавишей МАРКЕР ВЛЕВО в режиме с самоконтролем $\beta_{зн} = 0,9994$, для дисплеев без клавиши МАРКЕР ВЛЕВО в режиме без самоконтроля $\beta_{зн} = 0,9950$).

Таблица 3

Сравнение времени ввода данных для формирования ВИД ENTRY A0118 в международных центрах

Центр	T _{зн}	T _{у.м}	Число			Время ввода
			вводимых в строку знаков	строк ВИД	структурных полей	
БНД*	0,5	0,55	80	27	3	14231,25 с = 3,95 ч
СЯД	0,62	0,55		27	2	17504,85 с = 4,86 ч
				9	1	
				203	2	
ЦЯД	0,62	0,55	75	7	10500,28 с = 2,92 ч	
			33	27		2
			22	27		1
			11	9		-
			50	203		1
ЦАЯД	0,62	-	66	75	-	8058,76 с = 2,24 ч
			4	12	-	
			50	196	-	
			42	75	-	

* Расчетные характеристики для перфокарточных устройств условно приравнены к характеристикам для дисплеев без клавиши MARKER ВЛЕВО в режиме без самоконтроля.

Результаты расчета, приведенные в табл.4, наглядно показывают преимущества автоматизированного ввода.

В общей информационной системе по обработке данных в международном формате ОЗ программа ввода рассматривается как процедурный модуль, реализующий определенную процедуру преобразования информации: ввод данных с клавиатуры дисплея в ЭВМ с автоматическим формированием этих данных в заданном формате.

Таблица 4

Сравнение безошибочности ввода данных для формирования ВИД ENTRY A0118 в международных центрах

Центр	$\beta_{зн}$	Число вводимых знаков	$\beta_{над}$	Ожидаемое число ошибок в тексте
БНД	0,9950	27280	$0,41 \cdot 10^{-59}$	136,4
СЯД	0,9994	27280	$0,76 \cdot 10^{-7}$	16,4
ЦЯД	0,9994	16684	$0,44 \cdot 10^{-4}$	10,0
ЦАЯД	0,9994	12998	$0,40 \cdot 10^{-3}$	7,8

Опыт, накопленный в процессе эксплуатации программы в течение нескольких лет, позволяет сделать следующие выводы:

1. Программа обеспечивает выполнение одного из основных принципов функционирования и эксплуатации автоматизированных информационных систем – однократный ввод информации.
2. Программа полностью соответствует своему назначению и имеет высокие параметры по скорости и безошибочности ввода данных.
3. Возможность ввода данных частями позволяет осуществить организацию ввода за небольшие интервалы выделяемого машинного времени.

4. Время обучения операторов низкой квалификации работе по вводу данных с помощью этой программы составляет менее одной рабочей недели.

5. Использование методов структурирования при построении и организации программы делает ее легко читаемой и открытой для совершенствования в направлениях, диктуемых практикой.

Список литературы

1. Овчаров Л.А., Селетков С.Н. Автоматизированные банки данных. М.: Финансы и статистика, 1982.
2. Кузнецов М.В., Немцов Л.Ф., Рубанов В.О. Система бесперфорационной подготовки данных для информационного центра. - Управляющие системы и машины, 1978, № 3, с.30-35.
3. Воройский Ф.С., Титов В.А. О технологии прямого ввода документов в условиях интегрированной системы информационного обеспечения. - Проблемы автоматизированной обработки научно-технической информации (Материалы межотраслевых научно-технических конференций, совещаний, семинаров и выставок). М.: ВИМИ, 1982, с.123-130.
4. Павлов А.Н. Опыт использования системы подготовки данных для ввода текстовой информации. - Там же, 1983, с. 26-28.
5. Будько Н.С., Григорьева К.А. О возможных улучшениях функционирования АСНТИ при решении проблемы автоматизации формирования предметного формата. - Там же, с.54-58.
6. Грайфер Р.С. Математические модели показателей деятельности операторов клавишных устройств. - Управляющие системы и машины, 1983, № 2, с.44-48.
7. Лицаев В.В., Калиниченко И.М. Достоверность обработки данных в АСОУ.- Там же, 1979, № 1, с.3-6.
8. Цыбулевский И.Е. Ошибочные реакции человека-оператора в системе управления (Обзор зарубежных исследований). - Автоматика и телемеханика, 1977, № 6, с.112-143.
9. Белоногов Г.Г., Кузнецов Б.А. Языковые средства автоматизированных информационных систем. М.: Наука, 1983.
10. Генератор программ ввода данных для ЕС ЭВМ. М.: Статистика, 1976.
11. Кетков Ю.Л. Программные средства для организации диалога с прикладной программой под управлением ДЭС ЕС. - В кн.: Оптимизация и МО САПР. М., 1980, с.126-140.
12. Люлинецкий В.П. Некоторые вопросы повышения эффективности разработки МО информационных систем. - В кн.: Программное обеспечение управляющих комплексов систем малых ЭВМ (Труды ИЗУМ). М., 1980, вып.80.
13. NDS EXFOR MANUAL, Documentation series of the IAEA Nuclear data section, A-1010. Vienna: IAEA, IAEA-NDS-3, 1984.
14. Вычислительная машина IOIOB: справочник. Будапешт, "Видеотон", 1973.
15. Дуравлева Г.М., Чукреев Ф.Е. Решение задачи пополнения и использования международной базы экспериментальных нейтронных ядерных данных в формате "Обобщенный ЭКСФОР". - См. настоящий выпуск, с.3-26.
16. Ротштейн А.П. Некоторые модели оценки надежности действий оператора в системе "оператор - дисплей". - Управляющие системы и машины, 1978, № 6, с.19-25.

Статья поступила в редакцию 30 апреля 1984 г.

ПРАВИЛА ПОДГОТОВКИ АВТОРСКОЙ РУКОПИСИ К ИЗДАНИЮ

Памятка автору

Составлена в соответствии с ГОСТ 7.3—77, предназначенным для авторов (в том числе переводчиков, составителей, ответственных за издание, и др.), работников издательств (издающих организаций) вне зависимости от ведомственного подчинения.

При подготовке рукописи к изданию автор (составитель) должен руководствоваться следующими правилами):

1. Авторская рукопись включает следующие элементы:
 - титульный лист издания по ГОСТ 7.4—77;
 - основной текст с заголовками, таблицами, формулами, включая авторское предисловие, введение, аннотацию (и реферат для статей в научно-технический сборник) по ГОСТ 7.9—77;
 - список литературы по ГОСТ 7.1—76;
 - подрисовочные подписи;
 - содержание.

Примечание. Наличие или отсутствие перечисленных видов текстовых элементов определяется содержанием авторского текстового оригинала.

2. Перечисленные в п. 1 элементы должны быть скомплектованы и представлены в издательский отдел в двух экземплярах. К рукописи должны быть приложены сведения хотя бы на одного из авторов (телефон, адрес).

Все текстовые элементы сдаются в первом и втором машинописных оттисках.

Примечание. Все текстовые элементы следует печатать в 3 экземплярах для прохождения через экспертную комиссию или в 4 экземплярах для прохождения через Госкомитет по использованию атомной энергии СССР. (Второй экземпляр, представляемый в издательский отдел, в этом случае должен иметь на титульном листе разрешающую печать).

3. Текстовые элементы (кроме многострочных названий в головках и боковиках таблиц и тематического заголовка таблиц — см. п. 9) должны быть отпечатаны через 2 интервала на пишущей машинке с крупным очком на стандартных листах белой бумаги, пригодной для правки чернилами. Формат печатного поля — 170×240 мм; с левой стороны поле — 4 см.

Вставки и вклейки из книг не допускаются.

4. Рукопись должна быть пронумерована простым карандашом в правом верхнем углу страницы. В сплошную нумерацию должны быть включены все элементы авторского оригинала, перечисленные в п. 1.

5. На титульном листе в соответствии с ГОСТ 7.4—77 должны быть указаны: индекс УДК, гриф, заглавие, подзаголовочные данные, фамилия, имя, отчество автора (составителя), общее число страниц, а также количество иллюстраций.

На титульном листе должны быть подписи автора (составителя) и начальника издающего отдела с указанием даты подписи. Статьи научно-технического сборника должны иметь подписи всех авторов.

6. Рукопись должна быть снабжена аннотацией — сжатой характеристикой излагаемого материала с указанием читательского назначения (ГОСТ 7.9—77).

Аннотации должны быть помещены:

- в обзорных информациях, трудах конференций и совещаний — на отдельном листе;
- в статьях к сборнику ВАНТ — на первой странице после названия статьи и фамилии автора перед текстом: для серии «Информация и системы управления» — на русском языке; для серии «Ядерные константы» — на английском языке.

7. Статьи в сборник ВАНТ должны быть, кроме того, снабжены отпечатанным на отдельном листе рефератом — сокращенным изложением содержания статьи с основными выводами и фактическими сведениями (ГОСТ 7.9—77).

8. Текст должен излагаться четко, без повторов и в соответствии с логикой изложения состоять из разделов и подразделов с заголовками и подзаголовками. При этом следует избегать большого количества заголовков, подзаголовков, сносок, примечаний, придерживаясь не более чем трехступенчатой нумерационной индексации.

1. (Заголовок) } — над текстом (посередине) без точки

1.1. (Подзаголовок) }

1.1.1. (Подподзаголовок) — в подбор к тексту с точкой или без точки в зависимости от контекста.

Нумерация разделов и подразделов не обязательна, можно использовать шрифтовые способы выделения.

9. Таблицы необходимо печатать через 1,5 интервала, кроме многострочных названий в головке и боковике и тематического заголовка таблицы (их следует печатать через 1 интервал).

Многозначные числа в таблицах (и в тексте) делятся на классы с отбивкой в один удар машинки (на пример, 25 584); четырехзначные числа разбиваются на классы (4 184), если они стоят в графе с числами из пяти и более цифр.

Примечания и сноски к таблицам даются непосредственно под ними. Сноски к цифрам в таблице обозначаются только звездочками. Если их больше трех, то они обозначаются одной звездочкой с последующей порядковой цифрой, например: 127*⁵.

Нумерационный заголовок без знака № (Таблица 5) выключается в правый край над тематическим заголовком, определяющим содержание таблицы. Тематический заголовок должны иметь все таблицы.

В тексте должны быть ссылки на все таблицы (форма ссылки — табл. 4); номер таблицы следует также вынести на левое поле напротив ссылки.

10. Выводы не нумеруются, так как их всегда располагают в том месте текста, где на них ссылаются: они продолжают текст, к ним относящийся. Как правило, у вывода нет тематического заголовка, поскольку он определен в тексте.

11. К рукописи в конверте должен быть приложен полный комплект пронумерованных рисунков (по одному комплекту к каждому экземпляру рукописи).

На один авторский лист (24 стр. машинописного текста) допускается не более 6 рисунков.

В тексте должны быть ссылки на все рисунки (форма ссылки: рис. 4); номер рисунка следует также вынести на левое поле напротив ссылки.

На обороте каждого рисунка и на конверте должно быть написано название рукописи.

Не допускается вклеивать рисунки в текст, оставлять для них место в тексте, а также впечатывать в текст или под рисунком подрисовочные подписи.

Подрисовочные подписи должны быть отпечатаны отдельным списком по порядку номеров рисунков.

В состав подрисовочной подписи входят: сокращенное название иллюстрации для ссылок (рис.) и ее порядковый номер (без знака №), если иллюстраций больше одной; собственно подпись (определение темы изображения); пояснения частей, деталей и условных обозначений иллюстраций. Пример правильного оформления подрисовочной подписи: Рис. 5. Центрифуга БЦ-1: а — с закрытыми, б — с открытыми дверцами; 1 — корпус; 2 — шиток управления; 3 — вольтметр.

Штриховые рисунки — схемы, графики, чертежи, диаграммы и т. д. — должны быть выполнены чертежными инструментами на белой плотной бумаге или кальке **обязательно черной тушью**.

Полутоновые фотониллюстрации принимаются в случае крайней необходимости при условии хорошего качества. Они должны быть выполнены на плотной фотобумаге и представлены в двух экземплярах.

Следует придерживаться следующих размеров рисунков:

— простой и средней сложности — 150×200 мм;

— высокой сложности — 200×300 мм.

Текстовые подписи на рисунках не рекомендуются, их заменяют цифровыми обозначениями, которые объясняются в тексте или подрисовочной подписи.

Цифры на рисунках ставят не на обозначаемой детали, а на поле рисунка — у конца линии-выноски. Нумерация может следовать по часовой стрелке, по горизонталу (слева направо) или вертикально (сверху вниз). Линии-выноски не должны пересекаться или сливаться с линиями штриховки.

Наименование величины на графиках располагают вдоль осей координат отдельной строкой; буквенное обозначение (символ) величины располагают в ряду числовых значений (не выходя за рамку графика); оси ординат — над числовыми значениями, оси абсцисс — справа от числовых значений.

12. Текст на иностранном языке и математические формулы должны быть вписаны предельно четко черными чернилами или тушью (пользоваться фломастером или шариковой ручкой **нельзя**).

Сходные по начертанию русские, латинские и греческие буквы необходимо тщательно вписывать, пользуясь таблицами соответствующих алфавитов. Вписываемые знаки, буквы и т. п. должны иметь размер не меньше машинописного шрифта; надстрочные и подстрочные индексы, показатели степени и т. п. могут быть меньших размеров, однако не меньше 2 мм по высоте.

Подстрочные и надстрочные обозначения (например, E_{\max} , $K^2\Phi$) следует располагать четко над и под строкой.

Размечать написанные формулы следует простым карандашом, в необходимом случае разъяснения о написании следует делать на левом поле также простым карандашом.

13. Ссылки на использованную литературу нумеруются в возрастающем порядке и заключаются в квадратные скобки. Список использованной литературы помещается в конце рукописи.

Ссылки на иностранные источники должны быть напечатаны на машинке с латинским шрифтом.

Ссылки на иностранную и отечественную литературу должны соответствовать ГОСТ 7.1—76. При этом следует учитывать, что ГОСТ допускает указывать фамилии четырех авторов. Если их число больше четырех, приводят фамилии первых трех, затем «и др.».

Примеры библиографического описания:

I. При описании книг:

1. Круглов А. К., Рудик А. П. Искусственные изотопы и методика расчета их образования в ядерных реакторах. М., Атомиздат, 1977.

2. Avery D., Davis E. Uranium enrichment by gas centrifuge. London, Mills and Boon Limited, 1973.

II. При описании статьи из журнала и из продолжающихся изданий:

1. Гордина В. М., Иванов В. Н., Теплицкий В. А., Ширяева Т. А. Состояние и перспективы развития ядерной энергетики США. — Атомная техника за рубежом, 1977, № 8, с. 13—17.

2. Махова В. А., Соколова И. Д., Смирнов Ю. В. и др. Водные методы приготовления микросфер топлива для высокотемпературных реакторов. — Атомная техника за рубежом, 1977, № 4, с. 20—27.

3. Harde R., Breyer W., Holling E. The Integrated PWR for small and medium sized nuclear power plants. — Nucl. Engng Intern., 1975, v. 20, N 225, p. 48—50.

4. Михан В. И. Канальные водо-графитовые реакторы с перегревом пара. — Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Физика и техника ядерных реакторов, 1978, вып. 1(21), с. 68—74.

5. Banergie S., Hatcher S., Lane A. e. a. Some aspects of the thorium fuel cycle. — Nucl. Technol., 1977, v. 34, N 1, p. 66.

III. Статьи из сборников:

1. Готлиб Л. И. Влияние подслоя на прочность керамических покрытий. — В кн.: Жаростойкие и теплостойкие покрытия. Л., Наука, 1969, с. 286.

2. Eschrich H. Abfall aus der Brennstoffveredlung, — In: Entsorgung der Kerntechnik. Bonn, Thene Druck KG, 1976, S. 227.

14. Единицы физических величин необходимо приводить в соответствие со СТ СЭВ 1052—78, принятым в качестве государственного стандарта СССР от 01.01.80.

УДК 681.3.06-142.2:539.170

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ПОПОЛНЕНИЯ И ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МЕЖДУНАРОДНОЙ БАЗЫ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ НЕНЕЙТРОННЫХ ЯДЕРНЫХ ДАННЫХ В ФОРМАТЕ "ОБЩЕНЫЙ ЭКФОР"/Г.М.Журавлева, Ф.Е.Чукреев. - Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1984, вып.2(56), с.3-26.

Описывается система программного обеспечения, предназначенная для автоматизации подготовки неформализованной текстовой информации для международного обмена экспериментальными ядерными данными в формате "Обобщенный ЭКФОР". Дается краткое описание формата "Обобщенный ЭКФОР", приводятся данные об объемах международной базы экспериментальных ненейтронных данных, представленной этим форматом (рис.3, табл.3, список лит. - 18 назв.).

УДК 539.172.1

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЕ СЕЧЕНИЕ РЕАКЦИИ $^{14}\text{N}(d, p_0)^{15}\text{N}$ В ОБЛАСТИ ЭНЕРГИИ ДЕЙТРОНОВ 0,3-2,0 МэВ ДЛЯ ЗАДАЧ ЭЛЕМЕНТНОГО АНАЛИЗА /В.С.Шорин, В.А.Карабаш, А.Н.Соснин. - Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1984, вып.2(56), с.26-32.

Измерена функция возбуждения реакции $^{14}\text{N}(d, p)^{15}\text{N}$ для угла $\theta_L = 150^\circ$ в области энергии дейтронов 0,8-2,0 МэВ. На основе имеющихся данных проведена оценка сечения реакции в области энергии дейтронов не более 0,8 МэВ. Получено дифференциальное сечение реакции для угла $\theta_L = 150^\circ$ в области энергии дейтронов не более 2,0 МэВ, которое согласуется с данными других работ и позволяет описать измеренные величины выхода реакции для толстой мишени из нитрида алюминия в области энергии дейтронов 0,8-2,0 МэВ (рис.2, табл.4, список лит. - 15 назв.).

УДК 539.172.13

СИСТЕМАТИКА ВЫХОДОВ ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ ДЛЯ ТОЛСТОЙ МИШЕНИ ПРИ ЭНЕРГИИ ДЕЙТРОНОВ 22 МэВ/П.П.Дмитриев. - Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1984, вып.2(56), с.32-36.

Приведены данные о выходах ядерных реакций различного типа при облучении толстых мишеней из химических элементов дейтронами с энергией 22 МэВ. Значение выхода реакции определяется числом актов реакции на 1000 падающих дейтронов. В таблице представлено 211 значений выхода реакций типа dn , d^2n , d^3n , dp , dt , $d\alpha$, d^2p , d^2n , $d(t+^3n)$, $d\alpha p$, d^4n , $d(p+n)$ и др. Выходы систематизированы по типам реакций. Выходы реакций получены из опубликованных автором экспериментальных выходов радиоактивных нуклидов при облучении толстых мишеней дейтронами с энергией 22 МэВ. Кратко обсуждается использование приведенных данных для оценок выхода радионуклидов (табл.1, список лит. - 2 назв.).

УДК 539.1.01

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА КОНВЕРСИИ МЯГКИХ ЯДЕРНЫХ ПЕРЕХОДОВ ($\hbar\omega \leq 3$ кэВ) В СВЯЗИ С ЭФФЕКТАМИ ХИМИЧЕСКОГО ОКРУЖЕНИЯ АТОМА / Д.П.Гречухин, А.А.Солдатов. - Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1984, вып.2(56), с.36-55.

Конверсия ядерных переходов ($\hbar\omega \leq 3$ кэВ) на внешних электронных орбитах рассматривается в качестве метода исследования электронной структуры соединений. С этой целью проведен качественный анализ характеристик конверсионного процесса, в результате которого отмечена выделенность вклада орбит с определенными орбитальными (ℓ) и угловыми (j) моментами, проведено сравнение с фотоэффектом; дана оценка области локализации процесса конверсии в окрестности ядра-изомера; подчеркнуты универсальность поведения радиальных компонент функций (ℓj)-орбит в зоне конверсии и пропорциональность вероятности конверсии амплитуде волновых функций в зоне конверсии. Расчеты выполнены в рамках релятивистского метода Лартри - Фока - Слейтера (с поправкой Латтера). Оценены также вероятности процессов, сопутствующих конверсии. Показано, что роль этих процессов в формировании электронного спектра мала (табл.9, список лит. - 30 назв.).

УДК 539.172.13+539.172.15

ПОЛНЫЕ СЕЧЕНИЯ ОБРАЗОВАНИЯ РАДИОНУКЛИДА ^{11}C В РЕАКЦИЯХ $^9\text{Be}(^3\text{He}, n)^{11}\text{C}$, $^{10}\text{B}(d, n)^{11}\text{C}$ и $^{11}\text{B}(d, 2n)^{11}\text{C}$ /С.Н.Абрамочкин, Б.Я.Гужовский, В.А.Перешивкин. - Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1984, вып.2(56), с.55-60.

Описаны результаты измерения сечений образования радионуклида ^{11}C в реакциях $^9\text{Be}(^3\text{He}, n)^{11}\text{C}$, $^{10}\text{B}(d, n)^{11}\text{C}$ и $^{11}\text{B}(d, 2n)^{11}\text{C}$ активационным методом. В качестве мишеней использовались тонкие слои бериллия и бора на толстых танталовых подложках. Активация мишеней проводилась на пучках ионов ^3He электростатического ускорителя и ионов дейтерия тандемного ускорителя. Измерение наведенной активности осуществлялось с помощью регистрации аннигиляционных γ -квантов полупроводниковым германиевым детектором (рис.2, табл.2, список лит.-12 назв.).

УДК 681.327.12:539.1

ТЕХНОЛОГИЯ ВВОДА ДАННЫХ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ВТОРИЧНОГО ИНФОРМАЦИОННОГО ДОКУМЕНТА В ФОРМАТЕ "ОБЩЕПОНЕННЫЙ ЭКСПОР" НА МАЛОЙ ЭВМ / Г.М.Журавлева, А.Е.Игнаточкин, Ф.Е.Чукреев. - Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1984, вып.2(56), с.60-70.

Описана технология автоматизированного ввода реферативной информации по научно-техническим источникам в международном формате "Обобщенный ЭКСПОР" применительно к малой ЭВМ. Рассмотрены возможности технологии, приводится сравнительная характеристика с известными технологическими схемами ввода данных (табл. - 4, список лит. - 16 назв.).

Редактор Г.В.Зубова
Технический редактор С.И.Халиллулина
Корректоры Г.Н.Балашова, М.А.Макеева

Подписано в печать 30.07.84 Т-13496 Формат 60x84 1/8.
Печать офсетная. Печ.л. 9,5. Уч.-изд.л. 8,8. Тираж 370 экз.
Индекс 3645. 6 статей. Зак.тип. № 304

Отпечатано в ЦНИИатоминформе
127434, Москва, ас/яш 971

1 р. 50 к.

Индекс 3645

Вопросы атомной науки и техники. Серия: Ядерные константы, 1984, вып.2(56), с. 1-72.