

ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ

СЕРИЯ:
Ядерные константы

ВЫПУСК

1

1987

Сборник подготовлен Физико-энергетическим институтом
и Комиссией по ядерным данным

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Главный редактор О.Д. КАЗАЧКОВСКИЙ

НЕЙТРОННЫЕ КОНСТАНТЫ И ПАРАМЕТРЫ

Зам. главного редактора Б.Д. КУЗЬМИНОВ

Ф.Н. Беляев, В.П. Вертебный, В.В. Возяков, В.Я. Головня, С.С. Коваленко,
В.Е. Колесов, В.А. Коньшин, В.Н. Манохин, В.И. Мостовой, Г.В. Мурадян,
В.Н. Нефедов, Ю.П. Попов, О.А. Сальников, Г.Н. Смиренкин, В.А. Толстикова,
Г.Я. Труханов, Г.Е. Шаталов, М.С. Юдкевич, Г.Б. Яньков, В.П. Ярына

КОНСТАНТЫ И ПАРАМЕТРЫ СТРУКТУРЫ ЯДРА И ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ

Зам. главного редактора Ф.Е. ЧУКРЕЕВ

В.В. Варламов, Б.Я. Гужовский, П.П. Дмитриев, В.В. Ежела, Б.В. Журавлев,
Р.Б. Иванов, Б.С. Ишханов, В.М. Кулаков, Ю.В. Сергеенков, В.Е. Сторишко,
Н.П. Чижова

ЯДЕРНО-РЕАКТОРНЫЕ ДАННЫЕ

Зам. главного редактора М.Ф. ТРОЯНОВ

П.П. Благоволин, А.И. Воропаев, А.Ю. Гагаринский, Л.В. Диев, С.М. Зарицкий,
М.Н. Зизин, А.А. Лукьянов, В.Г. Мадеев, В.И. Матвеев, И.П. Матвеев,
М.Н. Николаев, Э.Е. Петров, Л.В. Точеный, В.В. Хромов

Ответственный секретарь В.В. Возяков

© Центральный научно-исследовательский институт
информации и технико-экономических исследований
по атомной науке и технике (ЦНИИАтоминформ), 1987

ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ

Серия: ЯДЕРНЫЕ КОНСТАНТЫ

Научно-технический сборник

Выпуск 1

НЕЙТРОННЫЕ КОНСТАНТЫ И ПАРАМЕТРЫ ЯДЕРНО-РЕАКТОРНЫЕ ДАННЫЕ КОНСТАНТЫ И ПАРАМЕТРЫ СТРУКТУРЫ ЯДРА И ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ

Москва

Издается с 1971 г.

1987

СОДЕРЖАНИЕ

НЕЙТРОННЫЕ КОНСТАНТЫ И ПАРАМЕТРЫ

- Игнатюк А.В., Кравченко И.В., Мантуров Г.Н.
Библиотека рекомендованных оцененных нейтронных сечений для
важнейших продуктов деления ядер 3
- Хеп Я., Валента В.
О библиотеках ядерных данных, используемых на заводе энергетического
машиностроения "Шкода" 10
- Корж И.А.
Измерение и анализ сечений рассеяния нейтронов ядрами
конструкционных материалов в области энергий 0,5-9,0 МэВ 18
- Кривцов А.С.
НЛОУЭС - комплекс программ переработки оцененных нейтронных данных
в формате ENDF/B в групповые константы на ЕС ЭВМ 30
- Група О.В., Иванова С.П., Шубин Ю.Н.
Комплекс программ для исследования ядерных реакций на основе
статистической теории 36

ЯДЕРНО-РЕАКТОРНЫЕ ДАННЫЕ

- Мазанов В.Л., Николаев А.Н., Овчинников А.В., Полевой В.Б., Рябов А.В.,
Синицын Б.И., Хохлов В.Ф.
Применимость трехмерных расчетных программ ЗАМОК и ММК22G к описа-
нию прохождения γ -излучения через защиты с прямыми полыми
цилиндрическими каналами 45

Возяков В.В., Мантуров Г.Н.	
Константная составляющая погрешности расчета спектра нейтронов в активной зоне быстрого реактора	48
КОНСТАНТЫ И ПАРАМЕТРЫ СТРУКТУРЫ ЯДРА И ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ	
Гречухин Д.П., Солдатов А.А.	
Вероятности конверсии ядерных переходов малой энергии ($\hbar\omega \leq 3$ кэВ) на электронных оболочках свободных атомов	55
Гречухин Д.П., Солдатов А.А.	
Возбуждение изомерного уровня ^{235}U квантами и электронами	66
Библиографический индекс работ, помещенных в настоящем выпуске, в Международной системе СИИДА	87
Правила подготовки авторской рукописи к изданию (Памятка автору).....	88

НЕЙТРОННЫЕ КОНСТАНТЫ И ПАРАМЕТРЫ

Первые три статьи настоящего выпуска - доклады, представленные на IV Координационное совещание стран - членов СЭВ по оценке ядерных данных, которое состоялось 11-15 марта 1986 г. в г. Обнинске. Остальные доклады опубликованы в выпуске 4 данной серии за 1986 г.

УДК 539.172.4

БИБЛИОТЕКА РЕКОМЕНДОВАННЫХ ОЦЕНЕННЫХ НЕЙТРОННЫХ СЕЧЕНИЙ
ДЛЯ ВАЖНЕЙШИХ ПРОДУКТОВ ДЕЛЕНИЯ ЯДЕР

А. В. И г н а т ю к, И. В. К р а в ч е н к о, Г. Н. М а н т у р о в

THE LIBRARY OF RECOMMENDED NEUTRON CROSS-SECTIONS FOR THE MOST IMPORTANT FISSION PRODUCT NUCLIDES. The neutron cross-sections of 27 fission product nuclides included in the Library of Recommended Data are shortly described. The adopted cross-sections are obtained from the analysis of the neutron resonance parameters, the new measurements of the capture cross-sections and the other evaluations such as ENDF/B-V and JENDL-I (or II). Accuracies of evaluated data and the possibility of their improvement are discussed.

В настоящее время весьма актуальна проблема разработки надежных оцененных нейтронных сечений для продуктов деления ядер, определяющих отравление активной зоны быстрого реактора и активность перерабатываемого ядерного топлива. Существует большое число таких оценок, наиболее полными из которых являются компиляции SNEB [1], RCN-II [2], JENDL-I [3] и ENDF/B-V [4].

При решении практических задач наибольший интерес представляют оценки сечений радиационного захвата нейтронов. Для многих продуктов деления оценки сечений захвата в указанных выше компиляциях имеют значительные расхождения, проявляющиеся особенно отчетливо в новых экспериментальных данных, полученных после выработки оценок. Чтобы устанвить такие расхождения, в Центре по ядерным данным Госкомитета по использованию атомной энергии СССР проведен анализ всей совокупности экспериментальных данных о сечениях радиационного захвата резонансных и быстрых нейтронов. На основе этого анализа для изотопов ^{99}Tc , $^{101,102,104}\text{Ru}$, ^{103}Rh , $^{105,107}\text{Pd}$, ^{109}Ag , ^{129}I , ^{131}Xe , $^{143,145}\text{Nd}$, ^{147}Pm , $^{147,149,151}\text{Sm}$ были выполнены новые оценки сечений захвата. Показано, что для изотопов $^{95,97,98,100}\text{Mo}$, ^{133}Cs , ^{141}Pr , $^{151,153}\text{Eu}$ нет необходимости в новых оценках, так как для них оптимальными остаются рекомендации библиотек JENDL-I или ENDF/B-V. В результате проведенного пересмотра оценок сечений захвата нейтронов сформирована библиотека рекомендуемых оцененных нейтронных данных для 27 важнейших продуктов деления. В статье дано краткое описание оценок, включенных в библиотеку, и приведен анализ погрешностей этих оценок.

Список важнейших продуктов деления ядер, вносящих доминирующий вклад в поглощение нейтронов в активной зоне быстрого реактора, представлен в табл. I. В последних трех колонках таблицы приведены имеющиеся экспериментальные данные о сечениях захвата тепловых нейтронов [5], о резонансных интегралах захвата и средних сечениях захвата нейтронов на сборке CFRMP [6], нейтронный спектр которой подобен спектру быстрого реактора.

За годы, прошедшие после завершения оценок [1-4], появилось много экспериментальных данных о сечениях захвата быстрых нейтронов, характеризующихся возросшим уровнем методики измерений сечений, более корректными методами учета сопутствующих захвату нейтрона фонов и надежностью абсолютизации сечений. Анализ таких данных проводился в работах [7-10]. В процессе этого анализа были перенормированы на основе современных стандартов также результаты более ранних измерений, выполненных с помощью относительной методики [8, 10]. В результате перенормировки удается устранить многие разногласия в экспериментальных данных, а также отличия результатов ранних измерений от экспериментов последних лет. Отобранные таким образом данные и были положены в основу настоящей оценки сечений захвата нейтронов.

Таблица I

Характеристики важнейших продуктов деления, накапливаемых в активной зоне быстрого реактора

Изотоп	Номер продукта деления (по важности вклада)	Вклад в поглощение, %	Сечение захвата тепловых нейтронов, б	Резонансный интеграл захвата, б	Средние сечения захвата для сборки CFRMF, б
^{105}Pd	1	9,9	$20 \pm 3^*$	98*	-
^{99}Tc	2	8,6	20 ± 1	340 ± 20	$0,267 \pm 40$
^{101}Ru	3	7,7	$3,4 \pm 0,9$	100 ± 20	-
^{107}Pd	4	6,2	$1,8 \pm 0,2^*$	86,6*	-
^{103}Rh	5	5,5	145 ± 2	1100 ± 50	$0,376 \pm 0,090$
^{133}Cs	6	4,9	$29,0 \pm 1,5$	437 ± 26	$0,276 \pm 0,018$
^{147}Pm	7	3,5	$168,4 \pm 3,5$	2064 ± 100	$0,641 \pm 0,085$
^{149}Sm	8	3,4	3390*	40140 ± 600	-
^{145}Nd	9	3,4	42 ± 2	240 ± 35	-
^{102}Ru	10	3,3	$1,21 \pm 0,07$	$4,2 \pm 0,1$	$0,089 \pm 0,006$
^{135}Cs	11	3,0	$8,7 \pm 0,5$	62 ± 2	-
^{97}Mo	12	2,9	$2,1 \pm 0,5$	14 ± 3	-
^{109}Ag	13	2,7	91 ± 1	1400 ± 48	$0,507 \pm 0,50$
^{106}Ru	14	2,3	$0,146 \pm 0,045$	-	-
^{143}Nd	15	2,3	325 ± 10	528 ± 30	-
^{131}Xe	16	1,9	85 ± 10	900 ± 100	-
^{151}Sm	17	1,9	15200 ± 300	$3520 \pm 180^*$	-
^{95}Mo	18	1,5	$14,0 \pm 0,5$	109 ± 5	-
^{104}Ru	19	1,3	$0,32 \pm 0,02$	$4,3 \pm 0,1$	$0,083 \pm 0,005$
^{153}Eu	20	1,3	312 ± 7	1420 ± 100	$1,45 \pm 0,10$
^{98}Mo	21	1,2	$0,130 \pm 0,006$	$6,9 \pm 0,3$	$0,056 \pm 0,004$
^{144}Ce	22	1,1	$1,0 \pm 0,1$	$2,6 \pm 0,3$	-
^{129}I	23	1,0	27 ± 3	36 ± 4	$0,184 \pm 0,012$
^{100}Mo	24	0,9	$0,199 \pm 0,003$	$3,75 \pm 0,15$	$0,055 \pm 0,010$
^{141}Pr	25	0,9	$11,5 \pm 0,3$	$17,4 \pm 2,0$	$0,073 \pm 0,011$

* Тепловое сечение и резонансный интеграл вычислены на основе резонансных параметров.

Основные критерии формирования рекомендуемых файлов оцененных нейтронных сечений можно сформулировать следующим образом:

1. Для области разрешенных резонансов были использованы новые значения параметров нейтронных резонансов [5]. При этом для описания сечений захвата тепловых нейтронов, как правило, вводился отрицательный резонанс. Верхняя граница разрешенных резонансов определялась условием отсутствия существенного пропуска резонансов.

2. Для большинства изотопов была введена область неразрешенных резонансов с верхней границей 30-100 кэВ. Для этой области использовались зависящие от энергии средние нейтронные и радиационные ширины, найденные с помощью программы EVPAR [7] из условия оптимального описания имеющейся совокупности экспериментальных данных о средних параметрах разрешенных резонансов и сечениях радиационного захвата быстрых нейтронов в диапазоне энергий 1-100 кэВ.

3. В области энергий выше 100 кэВ оценки сечений захвата основывались на статистическом описании отобранных экспериментальных данных [8,9]. При этом для энергий нейтронов 1-8 МэВ, где экспериментальные данные практически отсутствуют, широко использовались предыдущие оценки сечений [3,4]. Однако для области энергий выше 8 МэВ для всех изотопов была использована новая оценка, основанная на эмпирической систематике экспериментальных данных в модели прямого коллективного захвата нейтронов [10].

4. Для сечений упругого и неупругого рассеяний, а также полных нейтронных сечений выше области неразрешенных резонансов использовались оценки библиотек JENDL или ENDF/B-V. При этом критерием выбора соответствующей оценки служило согласие вошедших в нее сечений неупругого рассеяния нейтронов с расчетами по программе EURAC. Так как какой-либо новой экспериментальной информации по функциям возбуждения низколежащих уровней за прошедшие годы не появилось, целесообразно уточнить уже имеющиеся оценки сечений неупругого рассеяния нейтронов. Без изменений из файлов ENDF/B-V были взяты оценки сечений пороговых реакций, возможные погрешности которых малосущественны для реакторных приложений.

В табл.2 приведены данные включенных в файлы нейтронных резонансов, границы областей разрешенных и неразрешенных резонансов, рекомендуемые оценки сечений захвата и рассеяния, а также рассчитанные по данным файлам средние сечения захвата нейтронов для спектра сборки STPMF и погрешности рекомендуемых сечений захвата, определенные из дисперсии экспериментальных данных и имеющихся расхождений оценок средних сечений в области энергий нейтронов 10-300 кэВ. В табл.3 приведены параметры используемого статистического описания сечений захвата: среднее расстояние между s -резонансами D_S , нейтронные силовые функции S -, P - и D -волн, радиационная силовая функция $S_p = \Gamma_p/D_S$ и радиус потенциального рассеяния R' . Из сопоставления сечений, рассчитанных для спектра сборки STPMF, с данными табл.1 можно сделать вывод, что в пределах погрешностей приведенные оценки согласуются с интегральными экспериментами для большей части ядер. Исключение составляют изотопы ^{99}Tc и ^{109}Ag , для которых расхождения заметно превышают указанные погрешности. К обсуждению этих расхождений целесообразно вернуться после краткого рассмотрения оценок погрешностей принятых сечений захвата.

Таблица 2

Характеристики оценок продуктов деления, включенных в библиотеку рекомендуемых оцененных нейтронных данных

Изотоп	Номер продукта деления (по важности вклада)	Число резонансов	E_{max}^* рез, кэВ	E_{max}^{*2} нерез, кэВ	$\langle \sigma_c \rangle^{*3}$, σ	Принятая оценка		Погрешность сечений захвата, %
						захвата	рассеяния	
^{95}Mo	18	55	2,0	100	-	JENDL-II	JENDL-II	15
^{97}Mo	12	64	1,8	100	-	JENDL-II	JENDL-II	15
^{96}Mo	21	161	32	100	-	JENDL-II	JENDL-II	20
^{100}Mo	24	158	26	100	-	JENDL-II	JENDL-II	20
^{99}Tc	2	107	1,4	141	0,348	ФЭИ	ENDF/B-V	10
^{101}Ru	3	40	1,0	120	-	ФЭИ	ENDF/B-V	10
^{102}Ru	10	8	1,3	100	0,102	ФЭИ	JENDL-I	10
^{104}Ru	19	8	1,2	100	0,100	ФЭИ	JENDL-I	10
^{106}Ru	14	-	0,5	-	-	JENDL-I ^{*3}	JENDL-I	30
^{103}Rh	5	164	2,0	92	0,405	ФЭИ	JENDL-I	15
^{105}Pd	1	199	2,0	283	-	ФЭИ	ENDF/B-V	10
^{107}Pd	4	60	0,7	300	-	ФЭИ	ENDF/B-V	15
^{109}Ag	13	64	1,0	132	0,408	ФЭИ	ENDF/B-V	10
^{129}I	23	5	2,0	500	-	ФЭИ	JENDL-I	20
^{131}Xe	16	39	1,0	164	-	ФЭИ	JENDL-I	25
^{133}Cs	6	160	3,5	-	0,292	JENDL-I	JENDL-I	10
^{135}Cs	11	-	0,03	-	-	JENDL-I ^{*3}	JENDL-I	30
^{141}Pr	25	15	0,99	-	0,080	ENDF/B-V	ENDF/B-V	10
^{144}Ce	22	-	0,5	-	-	JENDL-I ^{*3}	JENDL-I	30
^{143}Nd	15	65	2,5	30	-	ФЭИ	JENDL-I	20
^{145}Nd	9	114	2,0	30	-	ФЭИ	JENDL-I	20
^{147}Pm	7	43	0,30	100	0,743	ФЭИ	JENDL-I	25
^{147}Sm	46	120	0,75	120	-	ФЭИ	JENDL-I	20

Окончание табл.2

Изотоп	Номер про- дукта де- ления (по важности вклада)	Число резо- нансов	$E_{\text{рез}}^{\text{max}}$, кэВ	$E_{\text{нерез}}^{\text{max}*2}$, кэВ	$\langle \sigma_c \rangle^{\text{*3}}$, б	Принятая оценка		Погрешность сечений захвата, %
						захвата	рассеяния	
^{149}Sm	8	70	0,12	520	-	ФЭИ	JENDL-1	20
^{151}Sm	17	76	0,10	10	-	ФЭИ	JENDL-I	30
^{151}Eu	-	92	0,01	10	2,31	ENDF/B-V	ENDF/B-V	15
^{153}Eu	20	72	0,01	10	1,44	ENDF/B-V	ENDF/B-V	15

- * Верхняя граница области разрешенных резонансов.
 *2 Верхняя граница области неразрешенных резонансов.
 *3 Сечение перенормировано.

Для изотопов молибдена оценки сечений захвата $[I1]$ опираются в основном на результаты измерений $[I2]$, которые достаточно хорошо согласуются с более ранними измерениями на свинцовом кубе $[I3]$. Для изотопов ^{98}Mo и ^{100}Mo имеются не противоречащие этим данным результаты большого числа активационных измерений $[I0]$. Вся совокупность данных позволяет приписать оценкам сечений захвата быстрых нейтронов погрешность 20%, примерно совпадающую с погрешностью экспериментальных данных $[I2]$.

Таблица 3

Средние параметры нейтронных резонансов,
принятые при статистическом описании рекомендуемых сечений захвата нейтронов

Изотоп	D_s , эВ	$S_0 \cdot 10^{-4}$	$S_1 \cdot 10^{-4}$	$S_2 \cdot 10^{-4}$	$S_\gamma \cdot 10^{-4}$	R' , дм
^{95}Mo	80,0	0,37	5,48	3,65	29	6,70
^{97}Mo	60,0	0,37	5,48	3,65	30	6,67
^{98}Mo	950	0,37	5,48	3,65	1,40	6,66
^{100}Mo	620	0,37	5,48	3,65	13,7	6,64
^{99}Tc	26,0	0,48	6,60	0,20	80	6,0
^{101}Ru	15,0	0,59	6,10	0,25	100	6,4
^{102}Ru	280	0,55	5,00	0,55	3,2	6,6
^{104}Ru	300	0,33	6,04	0,33	2,8	6,7
^{106}Ru	1000	0,33	5,80	-	1,5	6,4
^{103}Rh	16,0	0,53	5,50	0,53	60	6,2
^{105}Pd	10,0	0,54	5,60	0,54	140	6,1
^{107}Pd	11,4	0,60	5,80	0,60	170	6,6
^{109}Ag	18,7	0,68	3,80	0,68	50	6,6
^{129}I	25,0	0,80	2,00	0,80	40	5,6
^{131}Xe	50,0	1,20	1,80	1,20	24	5,95
^{133}Cs	23,2	1,42	1,39	-	51	5,2
^{135}Cs	60,0	1,61	1,26	-	-	5,2
^{141}Pr	88,0	1,50	-	-	-	6,28
^{144}Ce	1000	2,97	0,78	-	-	4,6
^{143}Nd	36,0	3,20	0,80	1,60	25	5,8
^{145}Nd	17,0	4,40	0,70	2,20	45	6,5
^{147}Pm	3,7	3,00	0,60	3,00	190	7,1
^{147}Sm	5,1	4,70	1,00	2,00	150	8,3
^{149}Sm	1,9	4,80	0,50	4,80	337	7,5
^{151}Sm	1,0	3,40	0,50	2,00	950	8,0
^{151}Eu	0,59	4,07	0,80	-	1650	8,8
^{153}Eu	1,37	2,50	0,60	-	700	8,8

Экспериментальные данные по оценкам сечений захвата для изотопов ^{103}Rh , ^{105}Pd , ^{133}Cs и ^{141}Pr сравнительно хорошо согласуются, а расхождение между оценками не превышает 10%. Это расхождение, по-видимому, и является оптимальным определением погрешности рекомендуемой оценки сечений захвата быстрых нейтронов. Несколько сложнее ситуация с ^{109}Ag , разброс его экспериментальных данных и расхождения оценок более значительны (рис. I, а). Однако хорошее согласие результатов последних экспериментов на линейных ускорителях [14], на которые опирается настоящая оценка, позволяет приписать оценке погрешность 10%, примерно соответствующую погрешности измерений. Для изотопов ^{99}Tc , $^{101},^{102},^{104}\text{Ru}$ оценка (рис. I, б) также опирается на более новые по отношению к предыдущим оценкам экспериментальные данные [15, 16]. Так как для двух первых изотопов эти данные достаточно хорошо согласуются со статистическим описанием, опирающимся на средние параметры разрешенных резонансов, оценке сечений захвата этих изотопов можно приписать погрешность экспериментальных данных [15, 16]. Для $^{102},^{104}\text{Ru}$ можно сохранить такую же погрешность, хотя обосновывать ее труднее, так как информация о параметрах нейтронных резонансов является здесь менее полной, чем для нечетного изотопа рутения.

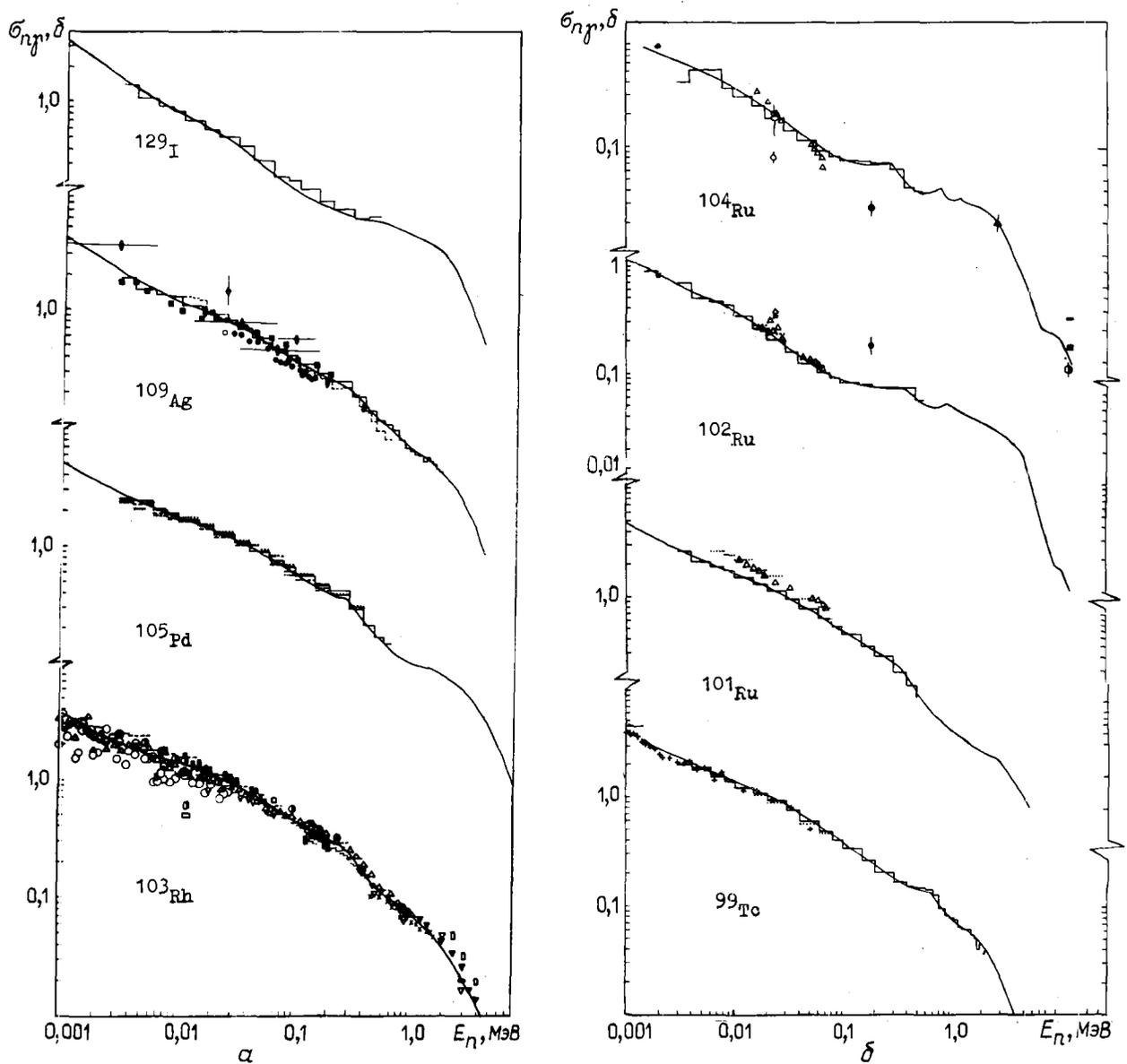


Рис. I. Экспериментальные данные о сечениях радиационного захвата быстрых нейтронов (гистограммы и точки [10]) и их описание рекомендуемыми оценками (сплошные кривые) для разных изотопов (а, б)

Для изотопов ^{107}Pd и ^{129}I оценки сечений захвата опираются на полученные недавно экспериментальные данные [17,18]. Трудности приготовления мишеней нестабильных изотопов порождают множество вопросов о возможных систематических погрешностях этих однократных измерений. Поэтому оценкам сечений, как и экспериментальным данным для этих изотопов, вряд ли следует приписывать погрешность менее 20%, но окончательный ответ можно получить лишь при повторном измерении сечений.

Для ^{131}Xe , ^{147}Pm и ^{151}Sm отсутствуют экспериментальные данные по захвату быстрых нейтронов и все оценки сечений основаны на оптико-статистических расчетах сечений с силовыми функциями, полученными из анализа разрешенных резонансов. Разногласия в оценках в среднем достигают 30%. Это, по-видимому, следует принять в качестве погрешности рекомендуемых оценок. Для изотопов ^{106}Ru , ^{135}Cs и ^{144}Ce отсутствуют экспериментальные данные как о сечениях захвата быстрых нейтронов, так и о средних параметрах нейтронных резонансов. Расхождения различных оценок для этих изотопов оказываются более чем двукратными (рис.2). Рекомендуемые авторами оценки основаны на систематике изотопических зависимостей сечений захвата быстрых нейтронов [8], а погрешности такой систематики сравнимы с погрешностями оценки сечений по средним резонансным параметрам, т.е. они не менее 30%, но в среднем не превышают существенно эту цифру.

Определение погрешности оценок сечений захвата становится сложным в изотопах $^{143,145}\text{Nd}$ и $^{147,149}\text{Sm}$, где имеются существенные и труднообъяснимые расхождения экспериментальных данных (рис.3) [9,19]. Кроме того, для этих изотопов проявляются значительные расхождения радиационных силовых функций, полученных из описания наблюдаемых сечений захвата и анализа средних параметров разрешенных резонансов. Такая ситуация требует критического отношения к указываемым авторами погрешностям экспериментальных данных. Поэтому в настоящее время следует признать реалистичной погрешность в 20%, которая примерно вдвое превышает приводимые в оригинальных работах погрешности измерений. Несомненно, что для нечетных изотопов неодима и самария необходима дальнейшая работа по измерению и анализу сечений захвата быстрых нейтронов, которая должна быть нацелена на устранение имеющихся разногласий экспериментальных данных.

Проведенное обсуждение погрешностей показывает, что для первой десятки важнейших продуктов деления, определяющих более чем на 50% отравление активной зоны быстрого реактора, точность рекомендуемых оценок захвата составляет 10-15%. Так как при пересчете на эффективный псевдоосколок независимые погрешности сечений отдельных продуктов статистически погашаются, то можно ожидать, что погрешность предсказания сечений захвата псевдоосколка на основе рекомендуемых файлов не превысит 10%, т.е. удовлетворит современным требованиям к точности оценки продуктов деления [20].

Следует отметить, что в вопросе о расхождениях расчетных средних сечений с данными для сборки CFRMF проявляются противоречия между данными дифференциальных и интегральных измерений. По-видимому, решение может быть получено только при проведении дополнительных измерений, в первую очередь интегральных. Большой интерес представляют также поиски возможностей проверки оценок сечений захвата изотопов, для которых отсутствуют экспериментальные данные.

Список литературы

1. Fort E., Krebs J., Ribon P. e.a. В кн.: Нейтронная физика: Материалы 4-й Всесоюзной конференции по нейтронной физике, Киев, 18-22 апреля 1977 г. Ч.4. М.: ЦНИИАтоминформ, 1977, с.3.
2. Gruppelaar H. Rep. ECN-13, 1977; ECN-33, 1977; ECN-65, 1979.
3. Kikuchi Y., Nakagawa T., Matsunobu H. e.a. Rep. JAERI-1268, 1981.
4. Schenter R.E., England T.R. In: Proc. specialists meeting on neutron cross-sections of fission product nuclei. Bologna, 1979, p.273.
5. Mughabghab S.F., Divadeenam H., Holden N.E. Neutron cross-sections. V.1, part A. N.Y.: Academic Press, 1981; Mughabghab S.F. Ibid, part B, 1984.
6. Harker Y.D., Rogers J.W., Millsap D.A. Rep. TREE-1259, 1978.
7. Юрлов Б.Д., Беланова Т.С., Игнатюк А.В. и др. Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1983, вып.50 (I), с.25.
8. Беланова Т.С., Горбачева Л.В., Грудзевич О.Т. и др. Атомная энергия, 1984, т.57, с.243.

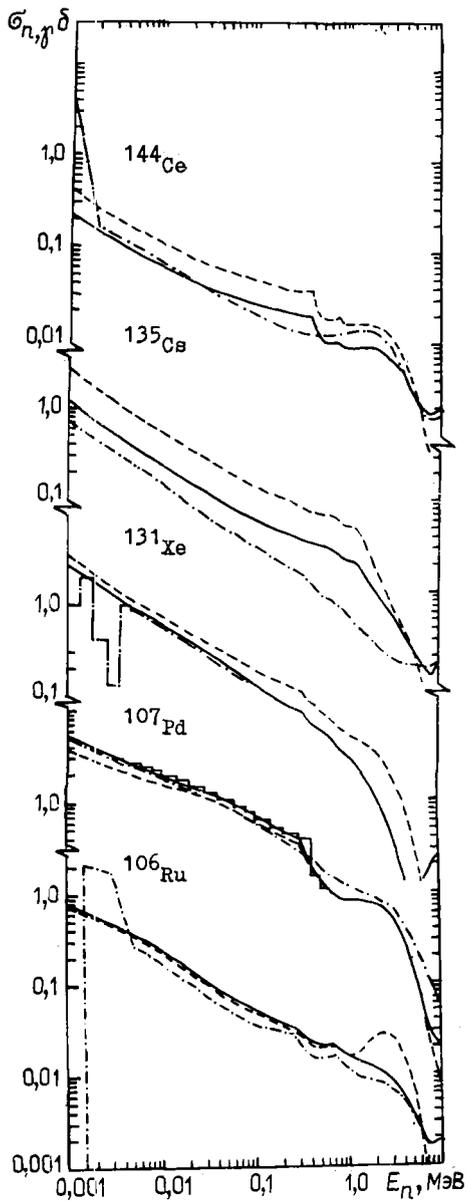


Рис.2

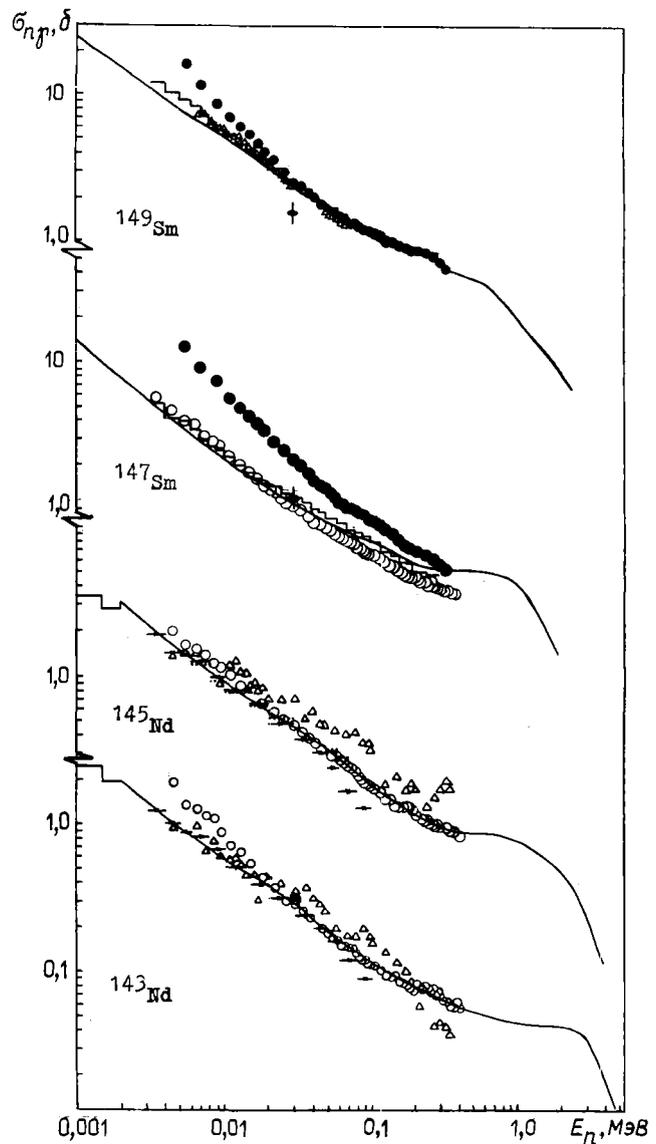


Рис.3

Рис.2. Сравнение рекомендуемых оценок (сплошная кривая) с оценками БНДФ/В-В (пунктир) и JENDL-1 (штрих-пунктир) изотопов, для которых отсутствуют экспериментальные данные. Для ^{107}Pd гистограммой показаны результаты недавних измерений [17]

Рис.3. Сравнение рекомендуемых оценок (сплошная кривая) с экспериментальными данными (точки и гистограммы) для нечетных изотопов неодима и самария

9. Захарова С.М., Абагян Л.П., Капустина В.Ф. Изотопы $^{147}, ^{149}\text{Sm}$. Обнинск, 1984.
10. Беланова Т.С., Игнатюк А.В., Пашенко А.Б., Пляскин В.И. Радиационный захват нейтронов. М.: Энергоатомиздат, 1986.
11. Kikuchi Y., Togawa O., Watanabe T. e.a. Rep. JAERI-M84-103, 1984.
12. Musgrove A.R., Allen B.J., Boldeman J.W., Macklin R.L. Nucl. Phys., 1976, v.A270, p.108.
13. Капцигашев С.П., Попов Ю.П. Атомная энергия, 1963, т.15, с.120.
14. Macklin R. Nucl. Sci. and Engng, 1982, v.82, p.400; Mizumoto M., Asami A., Nakajama Y. e.a. In: Nucl. data for sci. and technol.: Proc. on the Intern. conf. (Antwerp, 1982). Holland, 1983, p.226.

15. Macklin R. Nucl. Sci. and Engng, 1982, v.81, p.520.
16. Macklin R., Winters R., Halperin J. Ibid., 1980, v.73, p.174.
17. Macklin R. Ibid., 1985, v.89, p.79.
18. Macklin R. Ibid., 1983, v.85, p.350.
19. Божовко М.В., Казаков Л.Е., Кононов В.Е. и др. Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1985, вып.3, с.12.
20. Манохин В.Н., Усачев Л.Н. Атомная энергия, 1984, т.57, с.234.

Статья поступила в редакцию 14 марта 1986 г.

УДК 539.172.4

О БИБЛИОТЕКАХ ЯДЕРНЫХ ДАННЫХ,
ИСПОЛЬЗУЕМЫХ НА ЗАВОДЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО МАШИНОСТРОЕНИЯ "ШКОДА"

Я. Х е п, В. В а л е н т а

ABOUT ZEM SHKODA NUCLEAR DATA LIBRARIES. The nuclear data libraries for reactors BBEP calculations were described. The library BIBA contain the data of 828 nuclides for calculation of materials activation. The library BIBGREP contain the data of 584 fission products. The library BIPAL contain the data for 113 actinides and their radioactive decay chains. These libraries were used by group on radiation shielding and safety.

После 1970 г. на ЗЭМ "Шкода" была поставлена задача составить набор программ, необходимых для оценки радиационной ситуации на АЭС с реакторами типа ВВЭР при нормальной эксплуатации, а также в случае аварии. Эта задача предполагала большой объем работ:

1. Определение источников радиоактивного излучения:
 - в выгоревшем топливе вследствие распада продуктов деления и актинидов, а также вследствие спонтанного деления, деления и реакции (α, n) на кислороде;
 - в теплоносителе - продуктов активации теплоносителя и его примесей, а также продуктов деления и коррозии;
 - активированных частей (например, конструкционных материалов, воздуха шахты и т.д.).
2. Изучение радиоактивностей на АЭС с применением разных методов их устранения.
3. Определение эквивалентной дозы облучения персонала и населения.

Решение этих задач потребовало организации и анализа необходимых литературных данных, так как каких-либо библиотек на магнитных носителях не имелось. Данные были сформированы в три библиотеки:

1. Библиотека BIBA [1] радиоактивных продуктов применяется при расчете балансов активностей и источников излучения вследствие распада продуктов коррозии в первичном контуре, продуктов активации теплоносителя и его примесей, продуктов активации в конструкционных материалах и т.д. Библиотека содержит данные для 828 нуклидов с порядковыми номерами I-84, которые находятся в природной смеси изотопов определенного элемента или возникают при активации и радиоактивном распаде. Для каждого нуклида в библиотеке приведены: обозначение нуклида - номер в библиотеке, порядковый и массовый номера и характеристика состояния; доля нуклида в натуральной смеси - число ядер в 1 г элемента; характеристики радиоактивного распада - постоянная распада, описание формы цепочки распада (номера конечных нуклидов и соответствующие вероятности переходов); характеристики перехода вследствие активационных реакций - вид реакции [учитывается пять видов реакций (n, γ) , (n, p) , (n, n') , (n, α) , $(n, 2n)$], соответствующие сечения (в двух группах нейтронов), номера конечных нуклидов и вероятности переходов; характеристики радиоактивных нуклидов - число β -линий, β^- или β^+ -спектров, энергии отдельных линий (или средние энергии β -спектров) на один распад и соответствующие выходы на один распад.

2. Библиотека BIBGREP для продуктов деления используется при расчетах баланса радиоактивностей и источников излучения продуктов деления в твэлах, первичном контуре, пространстве АЭС

и т.д. Библиотека содержит данные для 584 продуктов деления (элементы с порядковыми номерами 29-67). Для каждого нуклида в библиотеке приведены: обозначение нуклида - номер в библиотеке, порядковый и массовый номера и характеристика состояния; независимые выходы деления ^{235}U , ^{239}Pu , ^{241}Pu и ^{238}U (тепловыми и 1-МэВ нейтронами); характеристики радиоактивного распада - постоянная распада и описание формы цепочки распада (номер конечного нуклида и соответствующая вероятность перехода); характеристики перехода вследствие реакции (n, γ) - сечение реакции (для тепловых нейтронов и резонансный интеграл) и описание формы перехода (номера конечных нуклидов и соответствующие вероятности переходов). Источники энергии вследствие радиоактивного распада - это источники α - и β -излучений на один распад, а также источники γ -излучения в двух системах групп:

- I3-групповой системе - распределение границ групп соответствует набору программ SOPRGA [2] для расчетов эквивалентных доз облучения от источников различных (элементарных) геометрических форм;

- I2-групповой системе, соответствующей по распределению группам данных Снайдера для расчетов эквивалентных доз облучения человека при распаде в органах или в окружающем воздухе.

3. Библиотека VIVAL [3] для актинидов используется при решении уравнения баланса актинидов и членов цепочек их распада. Библиотека содержит данные для 113 нуклидов из области тяжелых элементов. Для каждого нуклида в библиотеке приведено: обозначение нуклида - номер в библиотеке, порядковый и массовый номера и характеристика состояния; доля нуклида в натуральной смеси соответствующего элемента; характеристики радиоактивного распада - постоянная распада и описание формы цепочки распада (номера конечных нуклидов и соответствующие вероятности); характеристики перехода вследствие реакции (n, γ) - сечение реакции (две группы нейтронов) и описание формы перехода (номера конечных нуклидов и соответствующие вероятности переходов); характеристики радиоактивных нуклидов - число α -, γ -линий и β -спектров, энергии отдельных линий (средние энергии β -спектров) на один распад и соответствующие выходы на один распад; характеристики делящихся нуклидов - сечение деления (две группы), пороговая энергия деления, среднее число нейтронов на одно деление тепловыми нейтронами, постоянная распада для спонтанного деления и среднее число нейтронов на одно деление.

Все данные, входящие в состав этих библиотек, взяты из литературных источников или пересчитаны на основе этих источников (например, сечения деления, независимые выходы при делении, групповые источники энергии и др.).

Литература, использованная при составлении библиотеки VIVA: при расчете постоянных распада и определении состава нуклида в природной смеси элементов использовались данные работ [4-9], при расчете формы цепочек распада - работа [8], при определении энергий γ -линий и их выходов - главным образом работы [9-14] [ограничение по числу γ -линий (31) вытекает из основных принципов библиотеки, для большинства γ -излучателей число γ -линий меньше 31; если возникла необходимость из-за этого ограничения опустить некоторые линии, то игнорировались линии низких энергий и малых выходов], при определении энергии β -спектров - главным образом работы [10, 15] или [12-14], для определения характеристик α -линий - работы [4, 10], а сечений - работы [14, 16-18].

Библиотека VIBGRFP возникла на основе данных, собранных в библиотеке VIBFP [19] и данных о независимых выходах при делении, обработанных в работе [20]. В основе создания библиотеки VIBFP лежали данные работ [21-23]. Для дополнения данных о сечениях использованы работы [24, 25]. Некоторые поправки постоянных распада сделаны на основе сравнения с данными работ [4, 26]. Основания для определения независимых выходов будут приведены дальше в части, описывающей их расчеты.

Литература, использованная при составлении библиотеки VIVAL: для выбора набора нуклидов - данные работ [27, 28], для определения основных характеристик нуклидов - данные [4] (время полураспада), [29] (время полураспада для спонтанного деления), [4, 28] (сечения), [30-32] (резонансные интегралы) [10, 11, 33, 34] (источники энергии при радиоактивных α -, β -, γ -распадах).

Остановимся подробнее на проблематике определения независимых выходов при делении. Эти выходы, приведенные в библиотеке VIBGRFP, взяты из расчетов [20, 35]. Ввиду того, что в этой библиотеке приведены независимые выходы при делении тепловыми нейтронами ^{235}U , ^{239}Pu , ^{241}Pu и нейтронами около 1 МэВ ^{235}U , ^{239}Pu , ^{241}Pu и ^{238}U , использовались данные изобарических выходов из работ [23, 36]. Следует отметить, что в работах [20, 35] приведен алгоритм для пересчета изобарических выходов для других энергий и других делящихся материалов на основе сдвига

выходов, пропорционального изменению средних масс легкого и тяжелого осколков (в соответствии с данными работы [37]).

Независимые выходы при делении определяются соотношением

$$Y(Z, A) = Y(A) \frac{1}{\sigma(A)\sqrt{2\pi}} \int_{z-\frac{1}{2}}^{z+\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{[Z' - Z_p(A)]^2}{2\sigma^2(A)} \right\} dZ' =$$

$$= Y(A) \left\{ P \left[\frac{Z + \frac{1}{2} - Z_p(A)}{\sigma(A)} \right] - P \left[\frac{Z - \frac{1}{2} - Z_p(A)}{\sigma(A)} \right] \right\} = Y(A) f(Z, A), \quad (I)$$

где Z, A - порядковый и массовый номера изотопа, для которого рассчитывается независимый выход $Y(Z, A)$; $Y(A)$ - изобарический выход для массового номера A ; $\sigma(A)$ - дисперсия распределения Гаусса; $Z_p(A)$ - наиболее вероятная величина Z для массовой цепочки A ; $f(Z, A)$ - относительный независимый выход.

Для вычисления функции $P(x)$ использовалось выражение [38]. По формуле (I) определяются независимые выходы для

$$Z = Z_{min}^{(A)} + 1, Z_{min}^{(A)} + 2, \dots, Z_{max}^{(A)}; \quad Y(Z_{min}, A) = Y(A) - \sum_{Z=Z_{min}+1}^{Z_{max}} Y(Z, A),$$

где Z_{min}, Z_{max} - минимальное и максимальное значения порядковых номеров, находящихся в цепочке с массовым номером A .

Когда для изотопа с числами Z, A существует больше нуклидов (разные изомерные состояния), независимый выход $Y(Z, A)$ предполагаем разделенным на одинаковые доли. Обоснованием является то, что нет данных для спинов всех нуклидов - изомеров из библиотеки WIBGRFP и, следовательно, нельзя использовать для пересчета выходов полуэмпирическую формулу [39]. Для определения применено соотношение

$$Z_p(A) = \frac{Z_f}{A_{fc}} A'(A) + \Delta_Z(A') + \delta_Z(A).$$

Здесь Z_f - порядковый номер делящегося материала; A_{fc} - массовый номер составного ядра; $A_Z(A)$ - отклонение от равномерного распределения заряда; $\delta_Z(A)$ - поправка для аномальных значений Z_p [в расчетах используется $\delta_Z(A) = 0$]; $A'(A) = A + \nu_p(A)$, где A - масса фрагмента после испускания мгновенных нейтронов; $\nu_p(A)$ - среднее число нейтронов, испущенных фрагментом. Данные $\nu_p(A)$ при делении ^{235}U тепловыми нейтронами приняты по работе [40]. Графики из работы [41] позволяют сделать вывод, что форма зависимости $\nu_p(A)$ похожа для разных делящихся материалов и сдвиг кривых $\nu_p(A)$ пропорционален смещению средних масс тяжелого и легкого фрагментов* (таким образом можно учесть влияние энергии).

Зависимость $\Delta_Z(A')$ была аппроксимирована на основе результатов работы [43] (рис. I) по частям линейной функции (табл. I).

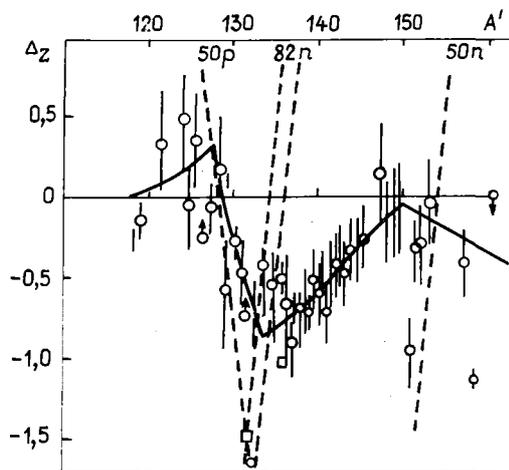


Рис. I. Аппроксимация отклонения Δ_Z от равномерного распределения $[\Delta_Z(A') = Z_p(A) - (Z_f/A_{fc})A'(A)]$, где $A' \geq A_c/2$

* Для определения средних масс легкого и тяжелого фрагментов используются формулы работы [42].

Для $A' < A_c/2$ используется антисимметрия функции $\Delta_Z(A')$ относительно $A_c/2$ [для $A' < A_c/2$ обозначим $B = (A_c/2) - A'$ и $\Delta_Z(A') = -\Delta_Z(A_c/2 + B)$].

Для определения $\sigma_f(A)$ использовалось выражение

$$\sigma_f(A, E_n) = 0,56 + \left\{ \sqrt{\frac{A_c T_f}{16\beta}} - \sqrt{\frac{236 T_{236}}{16\beta}} \right\} + \delta_\sigma(A), \quad (2)$$

где E_n - энергия нейтрона, вызывающего деление; A_c - масса составного ядра; f - индекс вида делящегося материала: $\beta = 19,307$ МэВ / коэффициент выражения $(A - 2Z/A)^2$ в формуле Вейцекера для энергии связи; $\delta_\sigma(A)$ - поправка на оболочечные эффекты (этот член можно определить на основе сравнения с экспериментальными данными; полагаем, что $\delta_\sigma(A) = 0^*$; T_f, T_{236} - температура составного ядра f и ^{236}U , определяемая [44, 45] соотношением $1/T = \sqrt{\alpha/\mu} - 5/4\mu$, в котором $\alpha = 0,16 A_c$; $\mu = E_f^n + E_k^n - E_f^{pzh} > 0$, где E_f^n - энергия связи нейтрона в составном ядре; E_k^n - кинетическая энергия нейтрона; E_f^{pzh} - барьер деления составного ядра.

Для определения $\sigma(A)$ использовалась формула (2), чтобы описать зависимость σ от вида делящегося материала и от энергии нейтрона согласно статистической теории [46] и чтобы для деления ^{235}U тепловыми нейтронами получить величину $\sigma = 0,56$, приведенную в работе [40]. Зависимость определенных значений дисперсии от энергии при делении ^{235}U и от температуры составного ядра приведена в табл. 2.

Дисперсия при делении тепловыми нейтронами разных делящихся материалов такова: изотопа ^{235}U - 0,56; ^{239}Pu - 0,564; ^{241}Pu - 0,566.

Особое внимание уделяется сравнению данных по выходам, рассчитанных нами, с экспериментальными результатами (рис. 1-3). Проведено сравнение всех доступных литературных источников [43, 47-52].

В соответствии с работой [52] в изобарических цепочках видна необходимость введения поправки $\delta_\sigma(A, Z)$, которую, например, можно записать в виде

$$\delta_\sigma(A, Z) = 1/2 [1 + (-1)^A] (-1)^Z \delta_\sigma,$$

где $\delta_\sigma = 0,11$.

Четно-четные эффекты предлагается описать соотношением $\delta_\sigma = \delta A^{3/4}$, где $\delta = 0,00376$ определено из сравнения экспериментальных данных (рис. 4).

Результаты независимых выходов, приведенные в библиотеке BIBGRFP, можно уточнить при:

- использовании поправки $\delta_\sigma(Z, A)$ для четных чисел A (как было указано выше);
- замене непрерывного по числу Z распределения Гаусса дискретным. Распределение Гаусса имеется в интервале $(Z - Z_p) \in (-\infty, +\infty)$. На самом деле число Z ограничено, с одной стороны, устойчивыми нуклидами, с другой - кривой нейтронной неустойчивости. Помимо этого, для четных чисел A по предыдущему пункту необходимо использовать два типа распределений с разными значениями $\sigma(Z, A)$. Это ведет к тому, что распределение изобарического выхода проводится среди небольшого числа нуклидов с разными числами Z ;

- включения правильного распределения независимого выхода среди нуклидов - изомерных состояний того же изотопа, т.е. использовании полуэмпирической формулы Гусева [39].

* По соотношению (2) при $\delta_\sigma(A) = 0$ значение σ не зависит от A .

Таблица 1

Величина $\Delta_Z(A')$ в граничных точках интервала

Интервал	Граница интервала	
	нижняя	верхняя
$A' \in \langle A_c/2, 128 \rangle$	0	0,3
$A' \in \langle 128, 134 \rangle$	0,3	-0,8
$A' \in \langle 134, 150 \rangle$	-0,8	-0,05
$A' \in \langle 150, 165 \rangle$	-0,05	-0,5

Примечание. A_c - масса составного ядра.

Таблица 2

Дисперсия составного ядра

E , МэВ	T_f , МэВ	σ
0,025 E-6	0,417	0,56
I	0,446	0,58
10	0,645	0,695
14	0,719	0,738

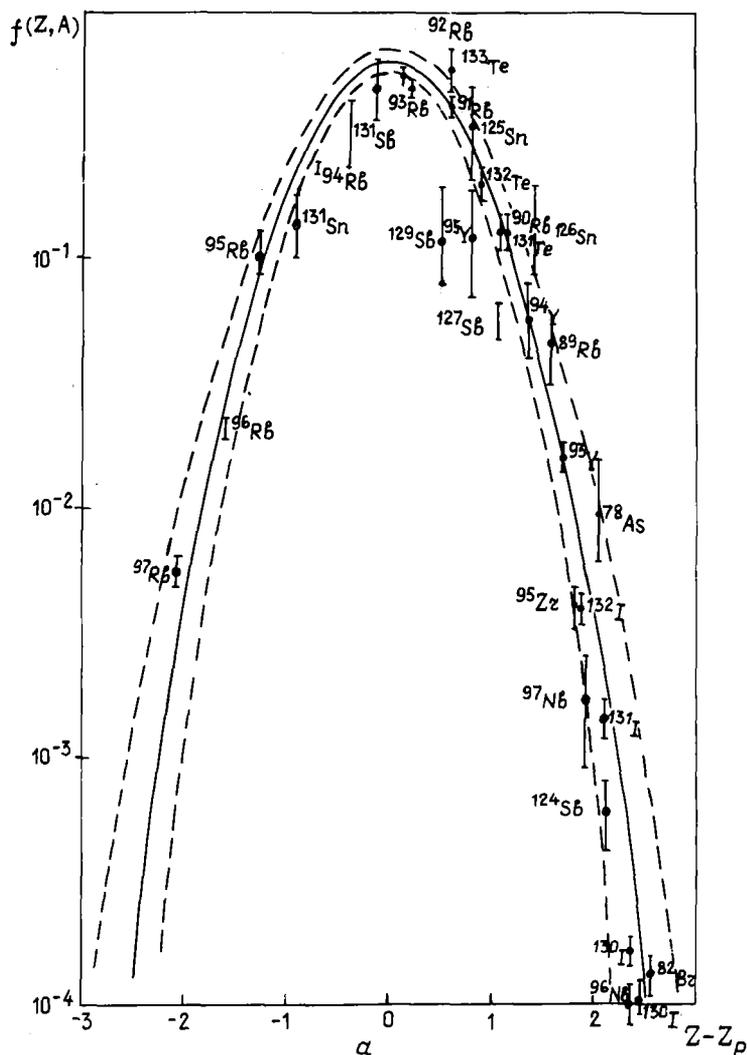


Рис.2. Сравнение экспериментальных и рассчитанных данных по относительному независимому выходу (а), кумулятивному выходу (б) и относительным кумулятивным выходам (в) для некоторых массовых чисел (--- - /89/; □, Δ, ○, ⊕ - /40/) при делении ^{235}U тепловыми нейтронами

Для расчетов баланса нуклидов и пропорциональных значений в настоящее время используются три библиотеки, которые возникли постепенно в течение 14 лет. Планируется объединением данных отдельных библиотек создать библиотеку NITRITION с единой формой данных для всех нуклидов. Данные, описывающие источники энергии (α -, β -линии и β -спектры), будут заменены групповыми источниками γ -излучения и средней энергией заряженных частиц на один распад, как этого требуют программы; будут сделаны дополнения для оценки влияния радиоактивностей на население (дозовые факторы для внешнего облучения от полубесконечного пространства, плоскости и т.д.).

Пока библиотека NITRITION содержит 1180 нуклидов с $Z = 1-100$. Сделан первый выбор нуклидов, находящихся одновременно в двух библиотеках (главный критерий - качество литературных источников) Для более широкого использования библиотеки необходимо уточнение некоторых данных по сечениям. Кроме того, описание активационных реакций в двугрупповой системе является грубым. Так как библиотека предназначена для инженерных расчетов, было бы полезно использовать 26-групповое разбиение (БНАВ). В эту систему уже переведены 128-групповые данные австралийской библиотеки продуктов деления [53] для 192 нуклидов (в BIBGRFP еще не включены). Целесообразно данные австралийской библиотеки проверить. Возможно, информация для других нуклидов также нуждается в дополнении.

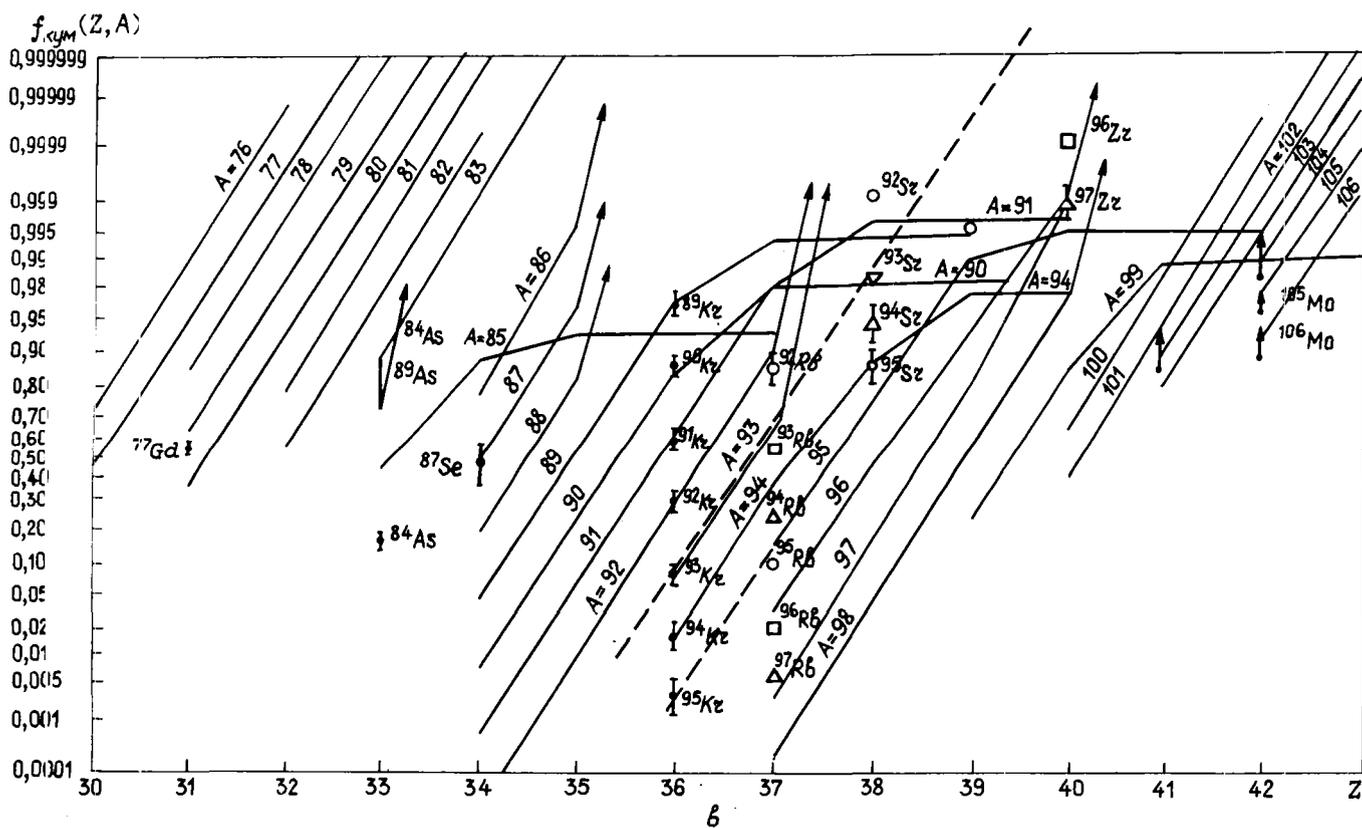
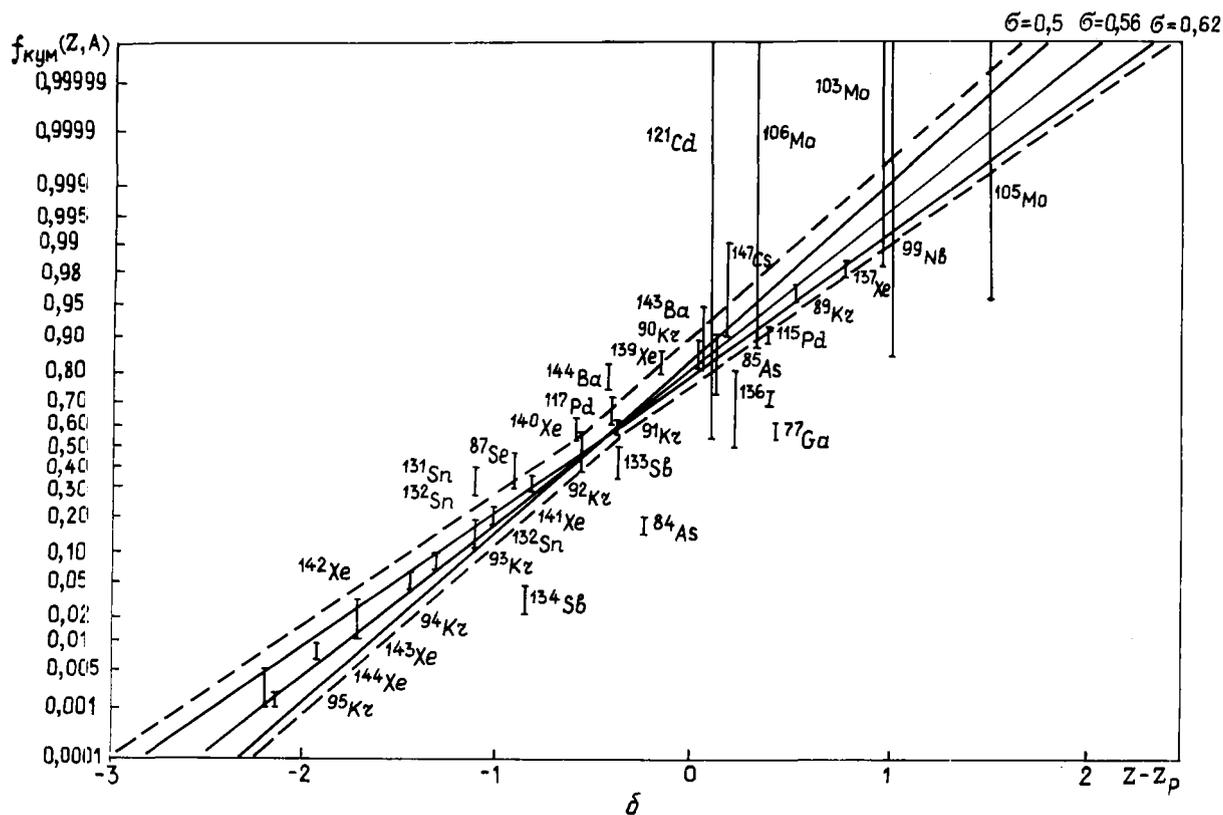


Рис.2. Окончание

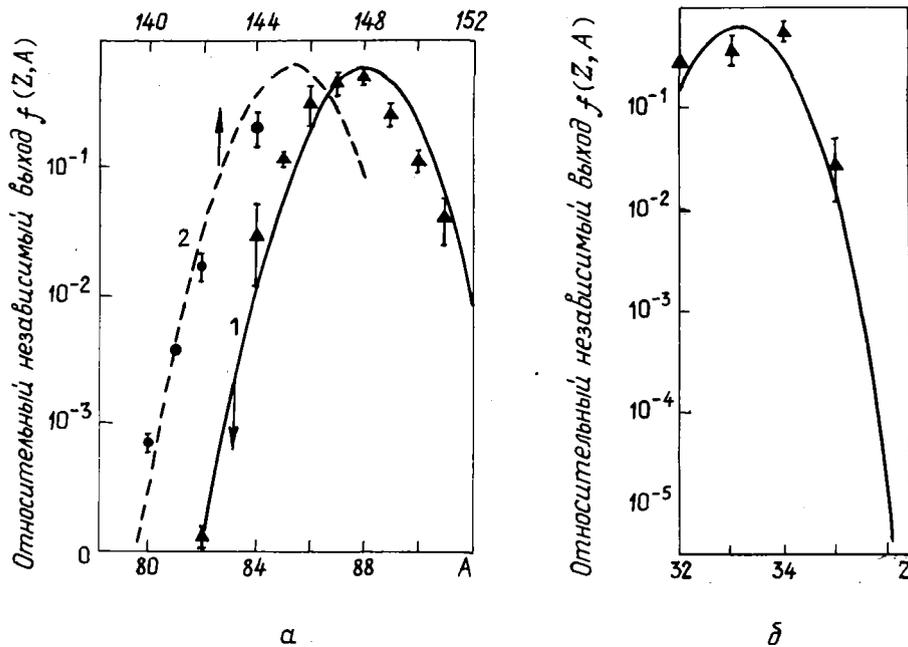


Рис.3. Сравнение экспериментальных и рассчитанных относительных независимых выходов в зависимости от массового числа, A (а) для ^{35}Br (кривая 1), ^{57}La (кривая 2) и от порядкового номера Z (б) для $A=84$

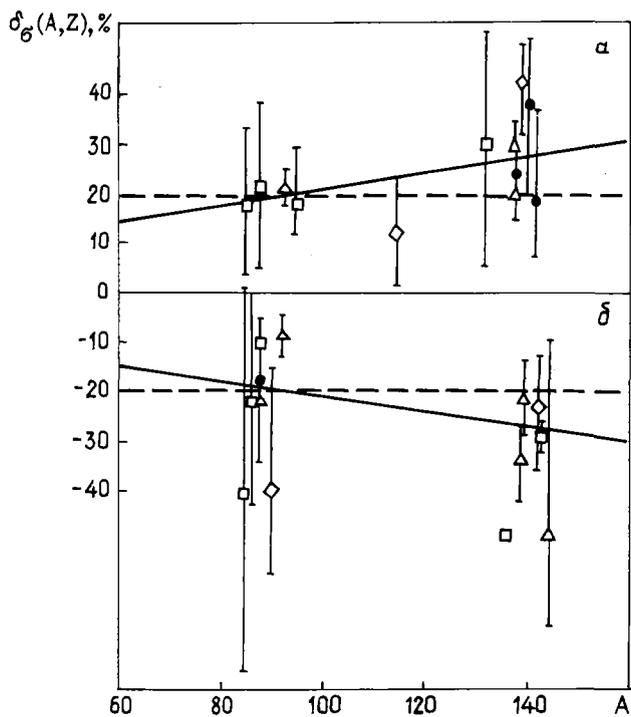


Рис.4. Поправка к дисперсии для нечетных (а) и четных (б) чисел Z на основе экспериментальных данных

Список литературы

1. Královcová E., Hep J., Valenta V. BIBA3 - Knihovna pro výpočet aktivací: Ae 5576/Dok., 1984.
2. Hep J., Valenta V., Smutný V., Královcová E. Anotace souboru programů TRABAК a SOPRGA: Ae 5208/Dok., 1984.

3. Královcová E., Hep J. Valenta V. BIPAL3 - Nová verze knihovny pro výpočty vyhořívání štěpných materiálů a produktů jejich rozpadu: Ae 4702/Dok., 1981.
4. Seemann-Eggebert W. e.a. Nuklidkarte, Kernforschungszentrum Karlsruhe, 4. Auflage, 1974; 5. Auflage, 1981.
5. Zijp W.L. Nuclear data guide for reactor neutron metrology: ECN-37, 1978.
6. Zijp W.L., Baard J.H. Nuclear data guide for reactor neutron metrology, part 1-ECN-70, 1979; part 2-ECN-71, 1979.
7. Minoru Okada. Chart of nuclides relating to neutron activation: JAERI-M 9649, 1981.
8. Гусев М.Г., Дмитриев П.П. Радиоактивные цепочки. М., 1978.
9. Гусев Н.Г., Дмитриев П.П. Квантовое излучение радиоактивных нуклидов. М., 1977.
10. Немец О.Ф., Гофман Ё.В. Справочник по ядерной физике. Киев, 1975.
11. Meixner Ch. Gamma-energien, 2. Auflage, teil 1. Jülich: Jül-1087-RX, 1974.
12. Martin M.J. (edit). Nuclear decay data for selected radionuclides ORNL-5114, 1976.
13. Kocher D.C. Nuclear decay data for radionuclides in routine releases from nuclear fuel cycle facilities: ORNL (NUREG) TM-102, 1977.
14. Nichols A.L. Radioactive - nuclide decay data for reactor calculations. Activation products and related isotopes: AERE-R 8903. Harwell, Oxfordshire, 1977.
15. Колобашкин В.М. и др. Бета-излучение продуктов деления. М., 1978.
16. Handbook of nuclear activation cross-sections. Vienna: IAEA, 1974.
17. Jimenez. Section eficaces (n, γ), (n, α)у(n,2n) de los componentes de los aceros y otros materiales nucleaires. Madrid, 1972.
18. Pearlstein. J. Nucl. Energy, 1973, v.27, p.81.
19. Valenta V., Hep J. Fission product data library BIBFP: ZJE-158, 1975.
20. Valenta V., Hep J. Fission product yields: ZJE-211, 1978.
21. Blachot J., De Turreil R. Bibliothèque de donnés nucléaires relatives aux produits de fission (3 éme edition): Note CEA-N-1526, 1972.
22. Barre B., De Turreil R. Bibliothèque de donnés nucléaires relatives aux produits de fission (2 éme version): Note CEA-N-1423, 1971.
23. Barre B., De Turreil R. Concentration des produits de fission après une fission thermique de ^{235}U et ^{239}Pu at après une fission rapid ($E \sim 1 \text{ MeV}$) de ^{235}U , ^{238}U et ^{239}Pu : Note CEA-N-1309, 1970.
24. Rychelynk J. Capture des produits de fission: Rap. SPM 936, 1969.
25. Sakata, Nagayama, Otake. Study for decay chain of fission products: JAERI-1194, 1970.
26. Blachot J., Devillers Ch. Bibliothèque de données nucléaires relatives aux produits de fission (4 éme édition): CEA-N-1822, 1975.
27. Mishra U.C. e.a. Fission and activation product data relevant to the studies on radioactive fallout from atmospheric nuclear explosions. India, Bombay, 1975.
28. Sola A. ISOTEX Code de calcul de concentrations isotopique et reports de concentrations. Euratom 1974.
29. Harte G.A. HYACINTH. A heavy isotope point burnup and decay code: RD/B/N 3564. Berkeley nucl. lab., 1976.
30. ANL 5800. Reactor physics constants. Sec. edition, 1963.
31. Гордеев И.В., Кардашев Д.А., Малышев В.А. Ядерно-физические константы. М., 1963.
32. Елагин Й.П. Резонансные интегралы элементов с $Z=90$. - Ядерные константы. Вып.7. М.: Атомиздат, 1971.
33. Kunz W., Schintlmeister J. Tabellen der Atomkerne. Akademie Verlag Berlin, 1959.
34. Dillman L.T. Radionuclide decay schemes and nuclear parameters for use in radiation - dose estimation, nm/mird: Pamptlet ORNL, N 10.
35. Valenta V. New possibilities of calculating independent fission product yields: ZJE-207, 1977.
36. Lammer, Eder. Discussion of fission products yields evaluation. Methods and a new evaluation: IAEA-SM-170/13, 1973.
37. Sidebotham. Fission product yields - data extrapolated for some actinides: TRG Rep. 2143 (R), 1972.

38. Abramowitz, Stegun. Handbook of mathematical functions National bureau of standards: AMS-55. Washington, 1966.
39. Гусев Н.Г. Радиоактивные характеристики продуктов деления. М.: Атомиздат, 1974.
40. Wahl e.a. Products from thermal neutron induced fission of ^{235}U a correlation of radiochemical charge and mass distribution data: IAEA-SM-127/116, 813.
41. Apalin e.a. Nucl. Phys., 1965, v.71, p.553.
42. Terrel. Neutron yields from fission fragments. - Phys. Rev., 1962, v.127, p.880-904.
43. Denschlag. Charge distribution in low energy fission reactors: IAEA-SM-122/126, 945.
44. Facchini. Energia Nucl., 1968, v.15, p.54.
45. Schwartzmann, Sieger, Yiftah. Conf. Geneva, 1964, P/511.
46. Пик Пи́чак, Струтинский. Статистическая теория деления. Физика деления атомных ядер. М.: Атомиздат, 1962.
47. Wahl. Physics and chemistry of fission: Proc. symposium (Salzburg, 1965). V.I. IAEA, 1965, p.317.
48. Cuminghame, Goodall, Willis. Absolute yields in fission of ^{235}U , ^{238}U and ^{239}Pu irradiated in DFR: AERE-R6862 (rev.), 1972.
49. Wahl, Ferguson. Nuclear charge distribution in low-energy fission. - Phys. Rev., 1962, v.126, p.1112-1127.
50. Strom, Love. Phys. Rev., 1966, v.144, p.984.
51. Rhin e.a. IAEA-SM-122/150.
52. Amiel, Feldstein. Phys. Rev., 1975, v.0 3.
53. Bertram W.K. e.a. Group cross-section library: AABC/E-214, 1971.

Статья поступила в редакцию 17 марта 1986 г.

УДК 539.171:539.172

ИЗМЕРЕНИЕ И АНАЛИЗ СЕЧЕНИЙ РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ ЯДРАМИ
 КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ В ОБЛАСТИ ЭНЕРГИЙ 0,5-9,0 МэВ

И. А. К о р ж

MEASUREMENT AND ANALYSIS OF NEUTRON SCATTERING CROSS-SECTIONS FOR THE NUCLEI OF STRUCTURAL MATERIALS IN THE ENERGY RANGE 0,5-9,0 MeV. Experimental data on differential and integrated neutron elastic and inelastic scattering cross-sections for the nuclei ^{16}O , ^{24}Mg , ^{28}Si , ^{32}S , ^{48}Ti , $^{50,52,54}\text{Cr}$, $^{54,56}\text{Fe}$, $^{58,60,62,64}\text{Ni}$, $^{64,66,68}\text{Zn}$, $^{76,78,80,82}\text{Se}$, $^{92,94}\text{Mo}$, $^{126,130}\text{Te}$ and ^{209}Bi , obtained by the authors and other investigators, as well as the total neutron cross-sections for these nuclei, are analysed using the spherical optical, statistical and coupled-channels models. The data on the titanium, chromium, iron and nickel isotopes are compared with the present evaluations.

В связи с интенсивным развитием ядерной энергетики и перспективой использования термоядерной энергии все большее значение приобретает проблема обеспечения расчетов энергетических ядерных установок нейтронными константами, особенно дифференциальных и интегральных сечений упругого и неупругого рассеяния быстрых нейтронов ядрами железа, никеля и хрома (основные компоненты конструкционных сталей), а также молибдена, циркония, титана и других элементов, применяемых в тугоплавких сплавах и легирующих добавках. Кроме того, перспективно использование хрома, никеля и молибдена в относительно больших количествах (до 40%) в твэлах реактора на быстрых нейтронах с диссоциирующим газовым теплоносителем.

Обширная информация о сечениях рассеяния быстрых нейтронов ядрами реакторных и нереакторных материалов в широких областях массовых чисел и энергий нейтронов имеет и теоретическое значение, связанное с проверкой применимости различных ядерных моделей и с исследованием энергетической зависимости механизма рассеяния.

Практические потребности современной ядерной технологии обуславливают повышенные требования к точности и надежности экспериментальных сечений рассеяния атомными ядрами конструкционных материалов. Необходимы также экспериментальные нейтронные данные о сечениях всех реакций. Однако во многих случаях такие данные отсутствуют, а парциальные сечения, полученные в разных лабораториях, не согласуются между собой. Экспериментальные исследования пока не в состоянии полностью удовлетворить указанные потребности. Для решения проблемы обеспечения ядерной технологии и расчетов энергетических установок нейтронными данными необходимы не только новые измерения сечений. Особое значение приобретают новые оценки сечений и совершенствование теоретических моделей, которые широко используются при расчетах. На решение этих задач и были направлены работы авторов [1-27].

Получены дифференциальные и интегральные сечения упругого и неупругого (с возбуждением первых одного - семи уровней или групп уровней) рассеяний нейтронов ядрами ^{24}Mg , ^{48}Ti , ^{52}Cr , ^{54}Fe , $^{58,60,64}\text{Ni}$ и $^{92,94}\text{Mo}$ при энергиях 1,5; 2; 2,5; 3; 5; 6 и 7 МэВ, ядрами ^{62}Ni , $^{76,78,80,82}\text{Se}$ и $^{126,130}\text{Te}$ при энергиях 1,5; 2; 2,5; 3 и 5 МэВ, ядрами $^{50,54}\text{Cr}$, ^{56}Fe , $^{64,66,68}\text{Zn}$ и ^{209}Bi при энергиях 1,5; 2; 2,5 и 3 МэВ, ядрами ^{16}O , ^{28}Si , ^{32}S и никеля при энергии 5 МэВ. Эти экспериментальные данные совместно с данными других авторов при сопоставимых энергиях проанализированы в рамках сферической оптической модели (ОМ), статистической модели и модели связанных каналов (СК); для полноты анализа использованы также энергетические зависимости полных сечений и интегральных сечений упругого и неупругого рассеяний в диапазоне энергий 0,5-9 МэВ. Данные о нейтронных сечениях упругого и неупругого рассеяний титана, хрома, железа и никеля сопоставлены с результатами современных оценок.

Методика эксперимента. Измерения дифференциальных сечений упругого и неупругого рассеяний нейтронов с возбуждением одного - семи нижайших уровней (или групп уровней) исследуемых ядер проведены с помощью спектрометра по времени пролета [1, II] в цилиндрической геометрии в диапазоне углов $20-150^\circ$. Параметры спектрометра быстрых нейтронов по времени пролета и условия измерений приведены ниже:

Источники нейтронов	Реакции $T(p,n)^3\text{He}$ и $D(d,n)^3\text{He}$
Энергия нейтронов	1-7 МэВ
Мишени (толщиной 100-300 кэВ)	Титан-тритиевая, скандий-тритиевая, титан-дейтериевая на молибденовой подложке толщиной 0,1 мм
Расстояния:	
мишень - образец	10 см
образец - детектор	1,5-2,8 м
Детектор нейтронов	Стильбеновый кристалл размером 5x5 см и ФЭУ-30
Разделение ($n-\gamma$) с коэффициентом подавления γ -квантов	10^3-10^4
Порог регистрации нейтронов	Не менее 300 кэВ
Мониторы	Спектрометр по времени пролета с кристаллом стильбена размером 3x4 см и ФЭУ-30, "длинный" счетчик, интегратор тока
Параметры спектрометра:	
Нелинейность:	
интегральная	0,3%
дифференциальная	4,0%
Собственное временное разрешение	1,8 нс
Углы измерений	10-20 углов в диапазоне $20-150^\circ$

Измерения спектров рассеянных нейтронов с начальными энергиями 1,5; 2; 2,5 и 3 МэВ проведены с использованием нейтронов из реакции $T(p,n)^3\text{He}$. Суммарный энергетический разброс нейтронов, обусловленный конечной толщиной мишени, разбросом энергий протонов и конечной геометрией эксперимента, составлял 100-80 кэВ. В измерениях спектров рассеянных нейтронов с начальными энергиями 5, 6 и 7 МэВ использовались нейтроны из реакции $D(d,n)^3\text{He}$ с полным энергетическим разбросом 340-100 кэВ. Из рис. 1 видно, что спектрометр быстрых нейтронов по времени пролета обладает пара-

метрами, которые достигнуты на лучших спектрометрах мира. В этих измерениях использовались образцы высокого изотопного обогащения в виде помещенных в тонкостенные цилиндрические контейнеры прессованных порошков изотопов (или в виде их окислов) $^{58,60,62,64}\text{Ni}$, $^{64,66,68}\text{Zn}$, $^{50,52,54}\text{Cr}$, ^{54}Fe , $^{76,78,80,82}\text{Se}$, $^{92,94}\text{Mo}$, $^{126,130}\text{Te}$. Часть образцов была природного изотопного состава, но с доминированием исследуемого изотопа: ^{24}Mg , ^{28}Si , ^{32}S , ^{48}Ti , ^{56}Fe , ^{209}Bi . В качестве стандарта для нормировки сечений неупругого рассеяния использовался водородсодержащий материал - полиэтилен.

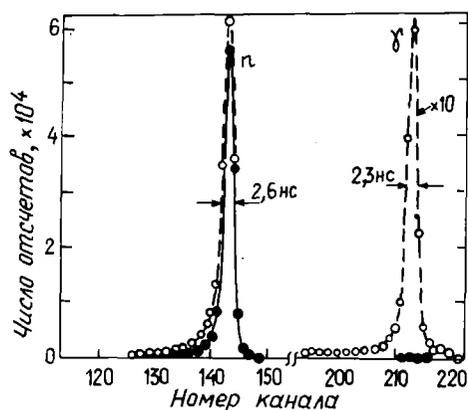


Рис. I. Спектр нейтронов прямого пучка из реакции $\text{T}(p,n)^3\text{He}$ с дискриминацией β -квантов (сплошная кривая) и без нее (пунктирная кривая): $E_n = 3$ МэВ; $\theta = 0^\circ$; ширина канала 1,15 нс; пролетная база 2,1 м

Результаты измерений. По измеренным спектрам рассеянных нейтронов нормировкой к потоку нейтронов под нулевым углом определены дифференциальные сечения упругого рассеяния, а нормировкой к хорошо известному сечению рассеяния нейтронов водородом определены дифференциальные сечения неупругого рассеяния с возбуждением одного - семи уровней исследуемых изотопов. Для этого кроме измерений спектров нейтронов, рассеянных исследуемыми образцами, измеряли также спектры прямого пучка нейтронов и спектры нейтронов, рассеянных полиэтиленовым образцом. В измерениях на окислах для определения сечений упругого рассеяния исследуемых изотопов из экспериментальных сечений упругого рассеяния соответствующих окислов вычитались сечения упругого рассеяния кислорода.

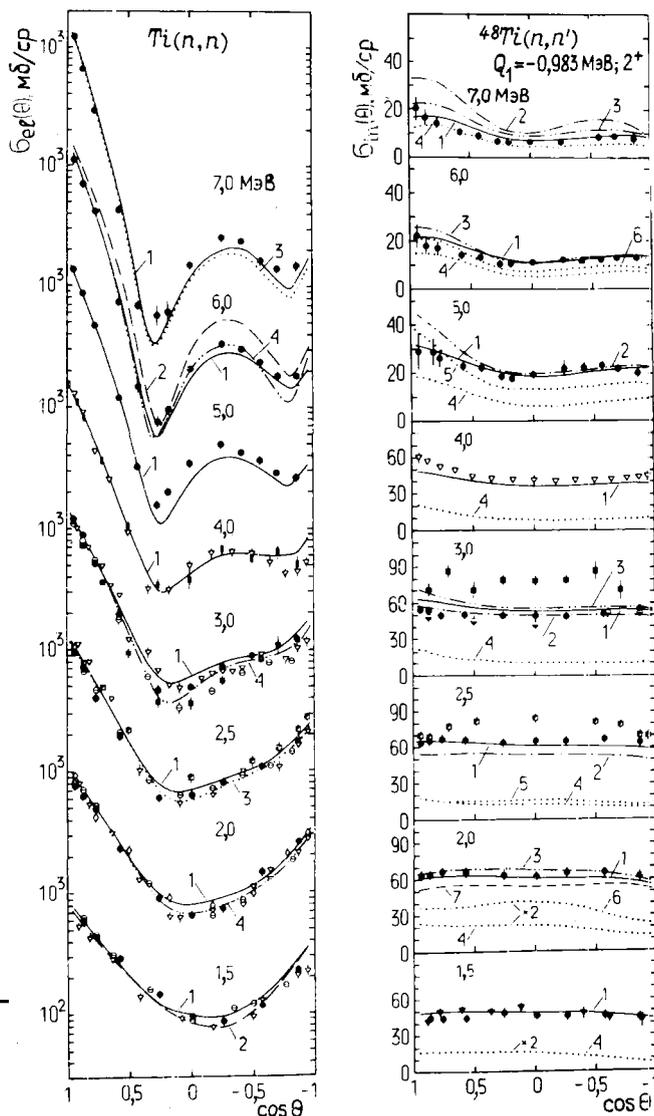
Аналитическим методом в дифференциальные сечения упругого и неупругого рассеяний введены поправки на ослабление потока нейтронов в образце и на анизотропию выхода нейтронов из источника, а в дифференциальные сечения упругого рассеяния введены также поправки на угловое разрешение эксперимента и на многократное рассеяние нейтронов в образце [28].

Полные погрешности измеренных сечений включают статистические погрешности измерений (для упругого рассеяния до 7%, а в минимумах до 12%, для неупругого рассеяния до 10%, а при высоких энергиях под передними углами до 25%), погрешности в сечениях рассеяния нейтронов на кислороде и водороде (1,5% для каждого) и погрешности, связанные с процедурой вычисления сечений. Наличие ^{16}O в окисных образцах может привести к (5-12)%-ной погрешности, многократное рассеяние нейтронов учитывается с (2-3)%-ной точностью, анизотропия выхода нейтронов из мишеней дает 1,5%-ную погрешность, ослабление потока нейтронов в образцах и полиэтилене приводит к 2%-ной погрешности в обоих случаях, угловое разрешение эксперимента дает вклад до 3%, статистика отсчета мониторов - до 1%. Полные погрешности измерений дифференциальных сечений упругого рассеяния нейтронов в среднем составляют (3-10)% для металлических образцов и (6-15)% для окислов, неупругого рассеяния нейтронов - (5-12)% для всех исследуемых изотопов под всеми углами, кроме трех передних углов при высоких энергиях нейтронов, где погрешности достигают (16-25)%. Эти погрешности находятся на уровне современных требований, предъявляемых к точности измерений дифференциальных сечений упругого и неупругого рассеяний.

Путем интегрирования дифференциальных сечений определены полные сечения упругого и неупругого рассеяний нейтронов. В качестве примера в работе приведены экспериментальные дифференциальные сечения упругого и неупругого рассеяний нейтронов с энергиями 1,5-7 МэВ ядрами ^{48}Ti (рис. 2), ^{52}Cr и ^{94}Mo (рис. 3)*, а также имеющиеся в литературе [29-42] данные при сопоставимых энергиях.

* Для ^{60}Ni подобный рисунок опубликован в работе автора [26], с. 62.

Рис. 2. Дифференциальные сечения упругого и неупругого рассеяний нейтронов с энергиями 1,5–7,0 МэВ ядром ^{48}Ti . Экспериментальные данные работ: ● - авторов [4, 27]; ▼ - [29]; ▽ - [30]; ■ - [31]; ⊙ - [32]; ◇ - [33]; ▣ - [34]; □ - [35]; ⊙ - [36]. Расчеты сечений упругого рассеяния: кривые 1, 2 - по модели OM и статистической модели Хаузера - Рещбаха - Мольдауэра (ХФМ) с параметрами (1) и [37]; кривые 3, 4 - по методу СК и ХФМ с параметрами (1) и (2). Расчеты сечений неупругого рассеяния и его компонентов: кривые 1–3 - по модели СК и ХФМ с параметрами (1), [37] и (2); кривые 4–6 - по модели СК с аналогичными параметрами; кривая 7 - по модели ХФМ с параметрами (1)



Характерной особенностью измеренных угловых распределений упругорассеянных нейтронов в исследуемой области энергий является наличие сильной анизотропии, проявляющейся в виде резко выраженного максимума вперед, к которому с увеличением энергии нейтронов добавляется еще один – два максимума в сечении в области углов $70\text{--}130^\circ$. При исследовании дифференциальных сечений упругого рассеяния четными изотопами никеля, селена и молибдена обнаружена изотопная зависимость формы угловых распределений сечений, указывающая на существенно оптический характер процесса. В области энергий нейтронов 1–3 МэВ для всех исследуемых ядер угловые распределения сечений неупругого рассеяния с возбуждением отдельных уровней или групп уровней изотропны или симметричны относительно 90° , что указывает на преимущественное протекание процессов неупругого рассеяния через составное ядро. При энергиях нейтронов выше 5 МэВ в дифференциальных сечениях неупругого рассеяния с возбуждением первых 2^+ -уровней исследуемых ядер проявляется анизотропия в виде подъема сечений в области малых углов рассеяния: с ростом энергии нейтронов все более существенную роль в неупругом рассеянии начинают играть прямые процессы.

В качестве примера измеренных энергетических зависимостей в работе приведены интегральные сечения упругого и неупругого рассеяний нейтронов ядрами титана, ^{48}Ti (рис. 4, 5), ^{52}Cr (рис. 6) и ^{94}Mo (рис. 7)* в области энергий 1–7 МэВ; для сопоставления на этих рисунках приведены данные других авторов, результаты современных оценок этих сечений, а также полные сечения взаимодействия в энергетическом интервале 0,5–9 МэВ [29–36, 39–62]. Результаты работ по упругому и неупругому рассеяниям и данные о полных сечениях, полученные с высоким энергетическим разрешением, представлены усредненными по интервалам 200 кэВ.

* Для ^{60}Ni подобный рисунок опубликован в работе автора [26], с. 65.

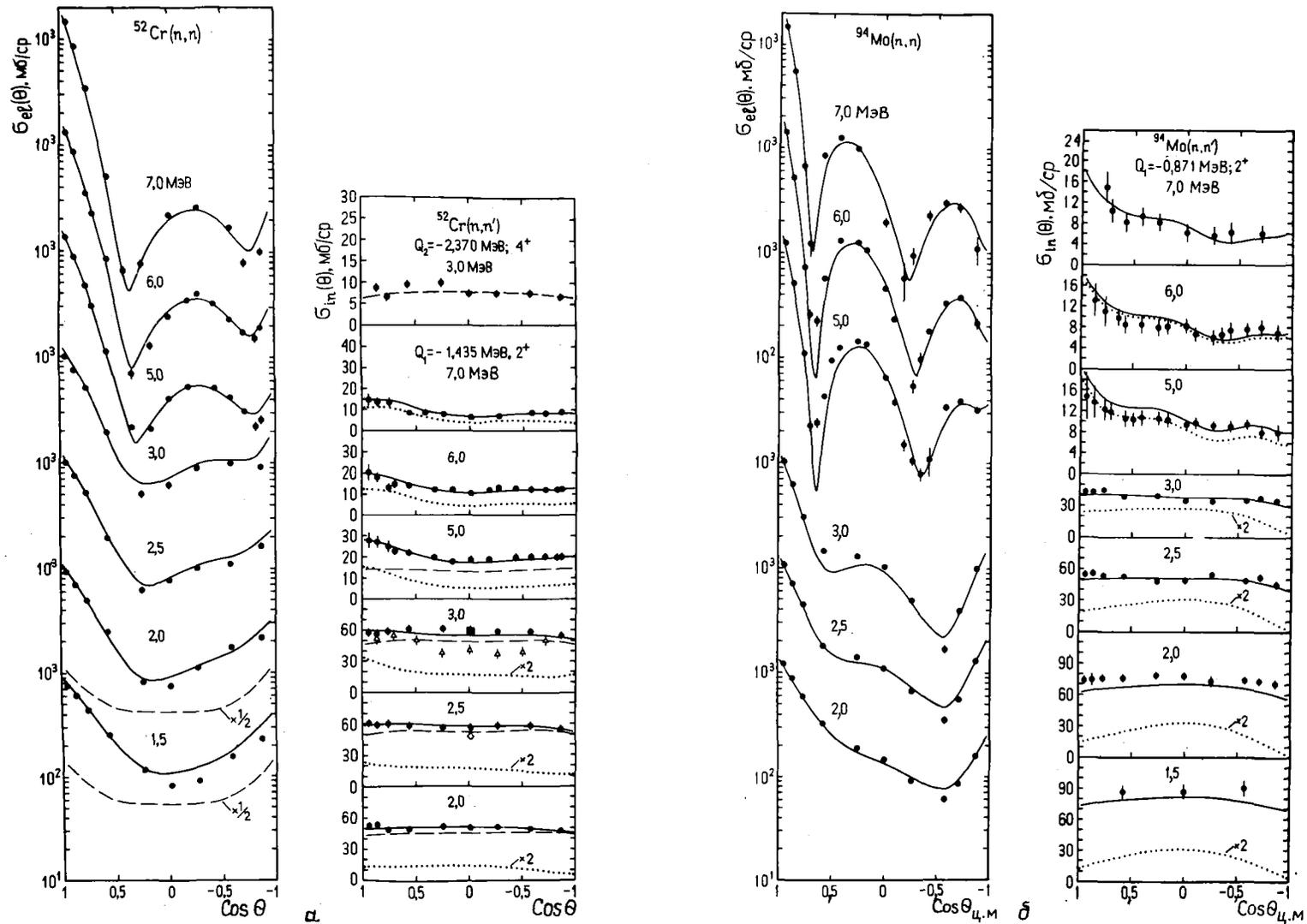


Рис. 3. Дифференциальные сечения упругого и неупругого рассеяний нейтронов с энергиями 1,5–7,0 МэВ ядрами ^{52}Cr (а) и ^{94}Mo (б). Расчеты сечения с параметрами (1): сплошные кривые для упругого рассеяния – по моделям ОМ и ХФМ, для неупругого – по моделям СК и ХФМ; штриховые кривые – по модели ХФМ; пунктирные кривые – по модели СК. Экспериментальные данные для ядра ^{52}Cr : \bullet – авторов [3, 5, 13, 16, 18, 20]; Δ – [34]; \diamond – [35]; \square – [38]. Для ядра ^{94}Mo экспериментальные данные авторов из работ [17, 19].

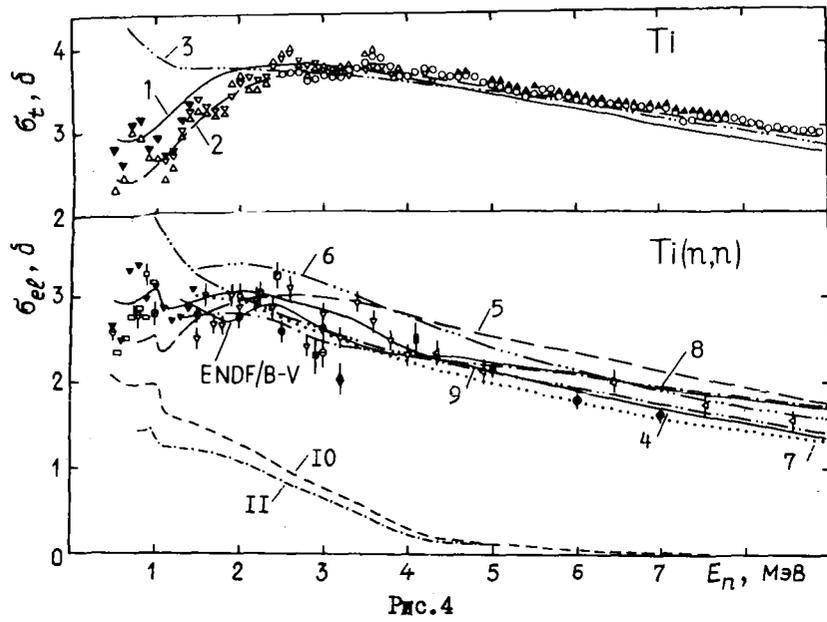


Рис. 4

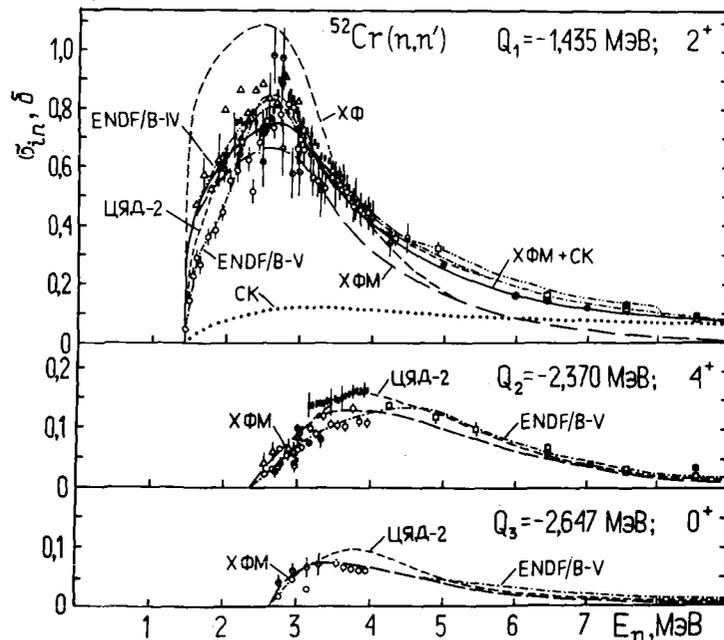


Рис. 6

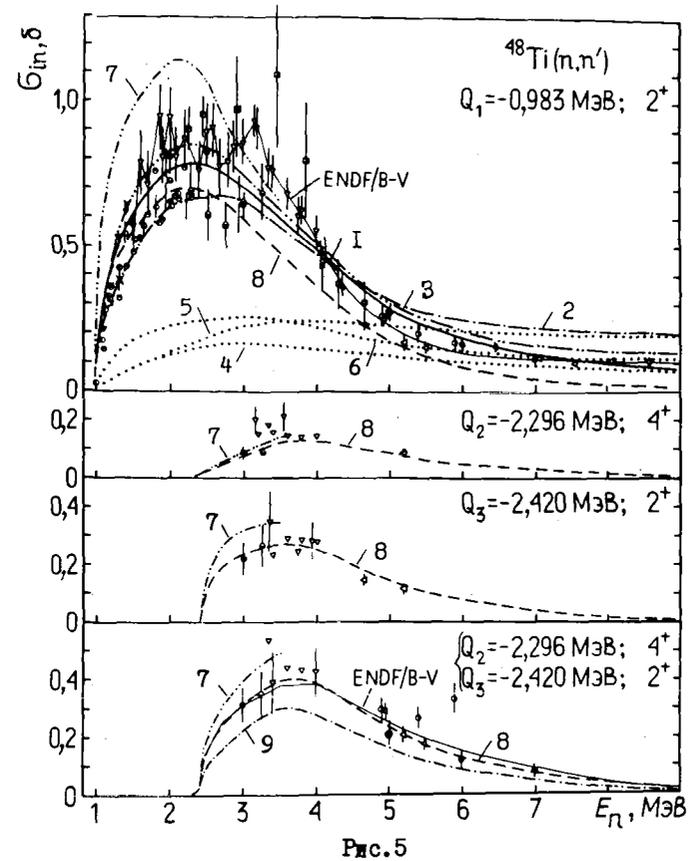


Рис. 5

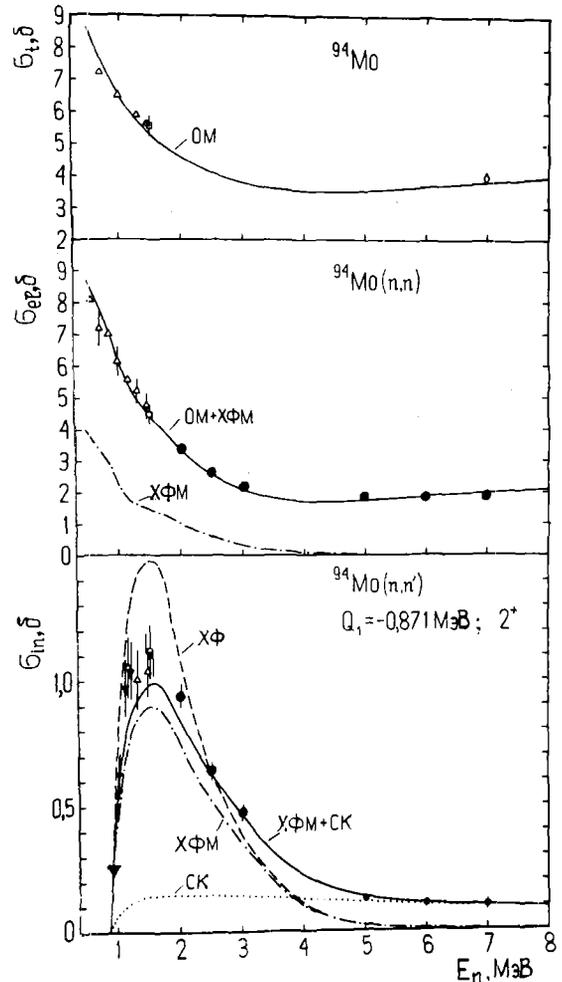
Рис. 4. Энергетические зависимости полных сечений и интегральных сечений упругого рассеяния нейтронов ядром титана. Экспериментальные данные работ: ● - авторов [4, 27]; ▼ - [29]; ▽ - [30]; ■ - [31]; ⊖ - [32]; ⊕ - [33]; ■ - [34]; □ - [35]; ⊞ - [43]; □ - [44]; ⊞ - [45]; ◆ - [46]; ◁ - [47]; △ - [48]; ○ - [49]; ▲ - [50]. ENDF/B-V - оцененные сечения работы [51], усредненные по энергетическому интервалу 200 кэВ. Расчеты: кривые I-3 - полные сечения по модели OM с параметрами (1) и [37] и по модели СК с параметрами (2); кривые 4-6 - сечения упругого рассеяния по моделям OM и ХФМ с параметрами (1), [37] и (2); кривые 7-9 - сечения упругого рассеяния по моделям СК и ХФМ с параметрами (1), [37] и (2); кривые 10, II - сечения упругого рассеяния по модели ХФМ с параметрами (1) и [37]

Рис. 5. Энергетические зависимости интегральных сечений неупругого рассеяния нейтронов с энергиями от порога до 9,0 МэВ с возбуждением трех нижайших уровней ядра

^{48}Ti . Экспериментальные данные работ: ● - [2, 9, 27]; ▼ - [29]; ▽ - [30]; ■ - [34]; □ - [35]; ⊖ - [36]; ◁ - [47]; ⊞ - [52]; ⊕ - [53]; ○ - [54]; ⊖ - [55]; × - [56]. ENDF/B-V - оцененные сечения работы [51], усредненные по энергетическому интервалу 200 кэВ. Расчеты: кривые I-3 - по моделям СК и ХФМ с параметрами (1), [37] и (2); кривые 4-6 - по модели СК с параметрами (1), [37] и (2); кривые 7, 8 - по модели Хаузера - Фешбаха (ХФ) и ХФМ с параметрами (1); кривая 9 - по модели ХФМ с параметрами [37]

Рис. 6. Энергетические зависимости сечений неупругого рассеяния нейтронов с энергиями от порога до 9,0 МэВ с возбуждением трех нижайших уровней ядра ^{52}Cr . Экспериментальные данные работ: ● - авторов [2, 3, 5, 13, 16, 18, 20]; ■ - [57]; ○ - [58]; □, ■ - [59]; ⊖ - [60]; △ - [61]; ○ - [62]; ⊖ - [63]. Кривые - расчеты по разным моделям с параметрами (1), а также данные современных оценок ЦЯД-2 [64], ENDF/B-V [65] ENDF/B-V [66]

Рис.7. Энергетические зависимости полных сечений упругого и неупругого рассеяний нейтронов с возбуждением трех нижайших уровней ядра ^{94}Mo . Экспериментальные данные работ: \bullet - авторов [17,19]; \blacktriangledown - [56]; \diamond - [67]; \triangle - [68]; \square - [69]. Кривые - расчет по разным моделям с параметрами (1) (ОМ, ХФ, ХФМ, СК) и с параметрами [37] (ОМ-1, ХФ-1, ХФМ-1, СК-1), а также данные современных оценок ИЯД-1 [70] и ENDF/B-IV [71].



Из рис.2,3 видно, что дифференциальные сечения упругого и неупругого рассеяний, полученные в разных лабораториях, за некоторыми исключениями удовлетворительно согласуются между собой. Однако приведенные на рис.4-7 интегральные сечения, представляющие результаты существенно большего числа работ, не отраженных в дифференциальных сечениях на рис.2,3, обнаруживают существенные разбросы, часто превышающие экспериментальные погрешности. В первую очередь это относится к данным по неупругому рассеянию, полученным в результате измерений выхода сопутствующих β -квантов и измерений на образцах природного изотопного состава.

Анализ литературных данных о сечениях рассеяния быстрых нейтронов исследуемыми ядрами показал, что большинство измеренных дифференциальных сечений упругого и неупругого рассеяний получены впервые. Часть полученных автором экспериментальных данных существенно пополняет и уточняет имеющиеся.

Теоретический анализ. Новые экспериментальные данные о сечениях рассеяния совместно с данными других авторов и данными о полных сечениях проанализированы по сферической оптической модели с использованием полученных авторами усредненных и имеющихся в литературе оптимальных параметров потенциала по несферической оптической модели (метод связанных каналов) и по статистическим моделям Хаузера - Фешбаха, Хаузера - Фешбаха - Мольдаузера и Тепеля - Хоффмана - Вайденмюллера (ТХВ).

В основу теоретического анализа в рамках оптико-статистического подхода положен набор усредненных параметров сферического потенциала, полученный автором из теоретического анализа данных о полных сечениях и сечениях упругого рассеяния поляризованных и неполяризованных нейтронов ядрами со средней относительной атомной массой в области энергий нейтронов 1,5-6,1 МэВ [83]:

$$\begin{aligned}
 V_c &= (48,7-0,33E) \text{ МэВ}; & a_v &= a_{s0} = 0,65 \text{ фм}; \\
 W_c &= (7,2+0,66E) \text{ МэВ}; & & a_w &= 0,98 \text{ фм}; \\
 V_{s0} &= 7,5 \text{ МэВ}; & & z_v = z_{s0} = z_w &= 1,25 \text{ фм}.
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

Кроме того, при анализе данных для ядер титана, хрома, железа и никеля были использованы наборы оптимальных параметров сферического оптического потенциала, полученные из анализа полных сечений в широкой области энергий [37].

Использовался в анализе и набор усредненных параметров несферического оптического потенциала, полученный для широкой области энергий и массовых чисел [84]:

$$\begin{aligned} V_C &= [51,85 - 0,33E - 24(N-Z)/A] \text{ МэВ}; & z_0 &= 1,25 \text{ фм}; \\ W_C &= 2,55 \sqrt{E} \text{ МэВ}; & a_w &= 0,48 \text{ фм}; \\ V_{S0} &= 7,0 \text{ МэВ}; & a_v &= a_{S0} = 0,65 \text{ фм}. \end{aligned} \quad (2)$$

В расчетах полных сечений и сечений прямого упругого и неупругого рассеяний по методу СК [85] потенциал взаимодействия представляется в виде $V(r, \theta, \varphi) = V_{diag} + V_{coupl}$, где V_{diag} - сферический оптический потенциал; V_{coupl} - его недиагональная часть, приводящая к связи каналов реакции. В методе СК задача сводится к выбору потенциала связи и вычислению матричных элементов по определенной модели для описания структуры нижайших уровней ядра-мишени. Для сферических ядер обычно используется вибраторная модель с динамической деформацией. В этом варианте модели СК радиус деформируемых компонентов потенциала V_C и W_C взят в виде $R = R_0 [1 + \sum_{\mu} \alpha_{\mu} Y_{2\mu}(\theta, \varphi)]$, где $R_0 = z_0 A^{1/3}$ и $\langle 0 | \sum_{\mu} |\alpha_{\mu}|^2 | 0 \rangle = \beta_2^2$ (параметр β_2 определяет силу связи). В предположении вибраторной природы нижайших возбужденных уровней ядер в явном виде авторы учли только связь основного состояния с первым возбуждением ($0^+ - 2^+$). Расчеты методом СК проведены с использованием комплексного потенциала связи по программе, описанной в работе [86]. Значения коэффициентов квадратной деформации β_2 взяты из работ [42, 87] и приведены ниже:

^{28}Si	0,40	^{58}Ni	0,20	^{78}Se	0,27
^{32}S	0,37	^{60}Ni	0,22	^{80}Se	0,25
^{48}Ti	0,26	^{62}Ni	0,22	^{82}Se	0,22
^{50}Cr	0,30	^{64}Ni	0,20	^{92}Mo	0,116
^{52}Cr	0,23	^{64}Zn	0,25	^{94}Mo	0,169
^{54}Cr	0,27	^{66}Zn	0,22	^{126}Te	0,163
^{54}Fe	0,18	^{68}Zn	0,20	^{130}Te	0,127
^{56}Fe	0,23	^{76}Se	0,28		

В проведенных расчетах по моделям ОМ и СК при использовании одного и того же набора параметров величина потенциала поглощения изменялась по соотношению $W_C^{СК} = 0,8 W_C^{ОМ}$, а остальные параметры сохранялись такими же. В этом случае расхождения между сечениями σ_t и σ_{el} , вычисленными методами СК и ОМ, для всех исследуемых ядер, кроме изотопов селена [23], малы.

Расчеты компаундных сечений упругого и неупругого рассеяний до энергии нейтронов 3,5 МэВ проводились по статистической модели без учета флуктуаций ширин уровней - по модели ХФ [88] и с учетом их - по модели ХФМ [89]. При более высоких энергиях компаундные сечения рассчитывались как по модели ХФМ, так и по модели ТХВ [90]. В расчетах по этим вариантам статистической модели до энергий 3,0-4,8 МэВ учтены дискретные уровни с известными характеристиками [91], а вклады более высоких возбужденных уровней в сечения рассеяний через составное ядро учитывались, как вклады континуума с распределением плотности уровней, определяемым моделью ферми-газа с "обратным смещением" с параметрами α и Δ из работы [92].

Формулы ХФМ и ТХВ получены в предположении независимых каналов реакции, т.е. для случая, когда сечение прямой реакции равно нулю. При наличии связи каналов флуктуационное сечение можно вычислить по методу Хофмана - Рихерта - Тепеля - Вайденмюллера (ХРТВ) [93]. Проведенные сравнения компаундных сечений, вычисленных по этому методу, с компаундными сечениями, вычисленными по методу ТХВ, с использованием проницаемостей, вычисленных методом СК, показали, что сечения рассеяния через составное ядро при наличии связи каналов, приводящей к корреляции ширин резонансов, незначительно отличается от сечений рассеяния через составное ядро в приближении независимых каналов (сечения неупругого рассеяния нейтронов ядрами ^{60}Ni в области энергий до 2,5 МэВ, вычисленные методом ХРТВ, на 5-7% больше сечений, вычисленных методом ТХВ).

В расчетах по статистической модели учитывались только нейтронные выходные каналы, а конкурирующие каналы с вылетом протонов и α -частиц учитывались множителем $(\sigma_C^{ОМ} - \sigma_{пр} - \sigma_{\alpha}) / \sigma_C$,

где σ_c^{OM} - сечение образования составного ядра, вычисленное методом OM. Так как в расчетах по статистической модели использовались проникаемости, вычисленные по сферической модели OM, то при сложении прямых сечений с компаундными сечениями последние нормировались множителем $(\sigma_c^{OM} - \sigma_{2+}^D) / \sigma_c^{OM}$, где σ_{2+}^D - сечение прямого возбуждения 2^+ -уровня, вычисленное методом СК. Поэтому полное сечение неупругого рассеяния нейтронов с возбуждением первых 2^+ -уровней исследуемых ядер определяется формулой $\sigma_{nn'}^T = [(\sigma_c^{OM} - \sigma_{nn'}^D) / \sigma_c^{OM}] \sigma_{nn'}^{CN} + \sigma_{nn'}^D$, где $\sigma_{nn'}^{CN}$ - сечение неупругого рассеяния через составное ядро. Справедливость этой формулы подтверждена проведенными расчетами полных сечений неупругого рассеяния нейтронов с использованием проникаемостей, вычисленных методом СК.

На рис. 2-7 для сравнения с экспериментальными данными приведены результаты расчетов по указанным выше моделям. Дифференциальные и интегральные сечения упругого рассеяния нейтронов представлены суммами сечений, рассчитанных по сферической модели OM или СК и по статистической модели ХФМ.

В области энергий нейтронов 2-9 МэВ расчетные полные сечения с приведенными выше наборами параметров удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными для всех ядер. В начале исследуемого энергетического диапазона, как и следовало ожидать, с экспериментальными данными лучше согласуются результаты расчетов с набором оптимальных параметров [37] и совсем не согласуются результаты расчетов с набором параметров несферического оптического потенциала (2). Полные сечения, вычисленные по оптической модели с параметрами (1) и [37], незначительно различаются между собой (см. рис. 7). Однако расчеты с набором параметров [37] дают заниженные вклады компаундных сечений в суммарные сечения возбуждения уровней исследуемых ядер.

Сравнение вычисленных методами OM и СК дифференциальных и интегральных сечений упругого рассеяния с экспериментальными показало, что в области энергий до 3 МэВ все наборы параметров [37, 83, 84] удовлетворительно описывают экспериментальные данные, но с повышением энергии согласие с экспериментальными данными результатов расчетов с набором параметров [37] заметно ухудшается. Минимальные расхождения между сечениями, вычисленными методами OM и СК, наблюдаются при использовании усредненных параметров (1); их использование во всем энергетическом диапазоне приводит к достаточно хорошему согласию с экспериментальными данными по упругому рассеянию, полностью воспроизводя усложнение дифракционной картины рассеяния с ростом энергии.

В исследуемом энергетическом диапазоне расчеты с наборами параметров (1) и (2) дают разные вклады как прямого, так и компаундного рассеяний в суммарные сечения возбуждения первого 2^+ -уровня исследуемых ядер. Суммарные сечения также различаются между собой. Лучше других с экспериментальными данными как по форме угловых распределений, так и по величине сечений согласуются результаты расчетов с набором параметров (1). В диапазоне энергий от порога возбуждения до 3 МэВ в суммарных дифференциальных сечениях, вычисленных с использованием набора параметров (2), у ядер с большим параметром деформации β_2 появляется анизотропия в угловых распределениях, которая не наблюдалась в экспериментах. С увеличением энергии расчеты с наборами параметров (2) и [37] дают анизотропию в угловых распределениях сечений, которая все больше отличается от наблюдаемой экспериментально. Имеется также существенное превышение интегральных сечений, рассчитанных с набором параметров [37], над экспериментальными сечениями в области энергий выше 5 МэВ. Эксперименты показывают, что уже начиная с порога возбуждения сечения прямого возбуждения первого 2^+ -уровня имеют заметные величины вклада в суммарные сечения и поэтому должны учитываться.

В исследуемом энергетическом диапазоне сечения возбуждения вторых и последующих уровней практически изотропны и достаточно хорошо описываются статистической моделью, что свидетельствует о доминирующей роли механизма составного ядра в возбуждении этих уровней. Проведенные расчеты сечений прямого возбуждения уровней двухфононного триплета четных изотопов титана, железа и никеля по пятиканальному варианту метода СК показали, что они примерно на порядок величины меньше сечений возбуждения первого 2^+ -уровня.

В рамках принятого подхода достигнуто также удовлетворительное описание полных сечений неупругого рассеяния, полученных как сумма сечений неупругого рассеяния с возбуждением дискретных уровней или как разность между σ_t и $(\sigma_{el} + \sigma_r)$; в качестве примера на рис. 8 приведено сравнение результатов расчета и эксперимента для ядер ^{50}Cr и ^{94}Mo в области энергий до 10 МэВ.

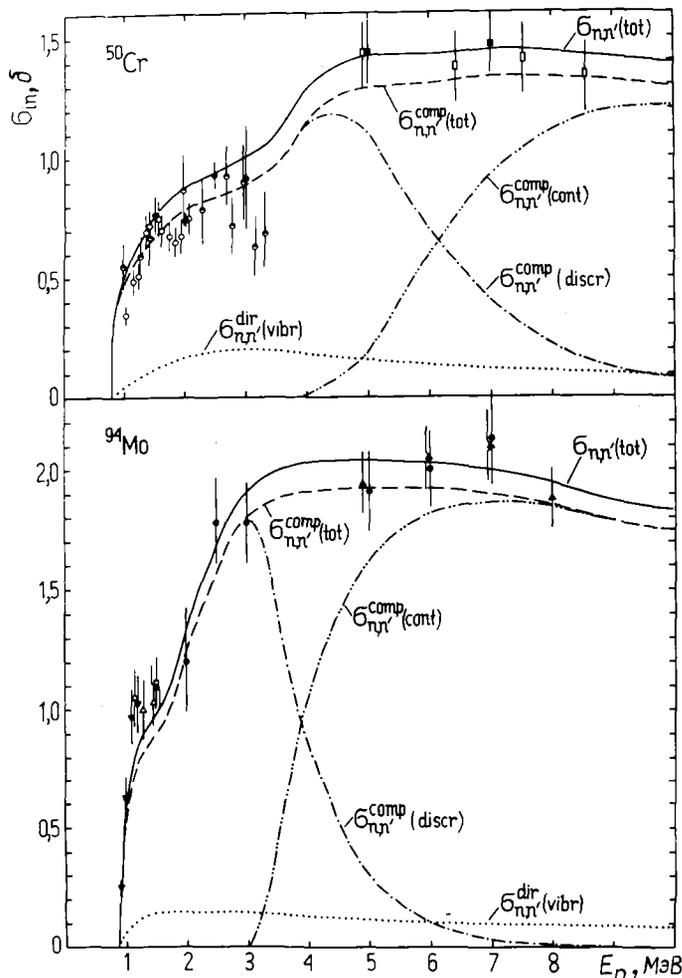


Рис.8. Энергетические зависимости полных сечений неупругого рассеяния нейтронов ядрами ^{50}Cr и ^{94}Mo . Экспериментальные данные для ядра ^{50}Cr : \bullet, \blacksquare - авторов [3,16] (\blacksquare - для природного хрома); \square - [53]; \circ - [60]; \circ - [62]. Экспериментальные данные для ядра ^{94}Mo : \bullet - авторов [17,19]; \blacktriangledown - [56]; Δ - [68]; \square - [69]; \blacktriangle - [94] (для природного молибдена). Кривые - результаты расчетов по статистической модели и методу связанных каналов

Из рисунка видно, что с экспериментальными результатами удовлетворительно согласуются рассчитанные сечения, представленные суммой сечений прямого неупругого рассеяния $\sigma_{nn'}^{dir}(vibr)$ и сечений рассеяния через составное ядро $\sigma_{nn'}^{comp}(tot) = \sigma_{nn'}^{comp}(discr) + \sigma_{nn'}^{comp}(cont)$, где $\sigma_{nn'}^{comp}(discr)$ - суммарное сечение неупругого рассеяния с возбуждением дискретных уровней с известными характеристиками; $\sigma_{nn'}^{comp}(cont)$ - сечение неупругого рассеяния с возбуждением более высоких уровней с неизвестными характеристиками.

Таким образом, удовлетворительное согласие вычисленных полных сечений, дифференциальных и интегральных сечений упругого и неупругого рассеяний нейтронов ядрами со средней относительной атомной массой в области энергий 0,5–9,0 МэВ со всей совокупностью экспериментальных данных автора и данных других авторов получено при расчетах сечений рассеяний через составное ядро по статистической модели, учитывающей флуктуации ширин уровней, и при учете прямого возбуждения первых 2^+ -уровней (начиная с порога).

Адекватное теоретическое описание экспериментальных данных по рассеяниям нейтронов в рамках описанного подхода позволило сделать надежные оценки относительных вкладов механизмов рассеяния (прямого и компаундного) и их изменения с изменением энергии налетающих нейтронов. Так, сечение прямого упругого рассеяния нейтронов в начале исследуемого энергетического диапазона в данных расчетах составляет около 50% суммарного, а в конце его становится преобладающим, при энергиях налетающих нейтронов около 1 МэВ над порогом возбуждения первого 2^+ -уровня исследуемых ядер не превышает 15% суммарного, а в конце исследуемого энергетического диапазона становится преобладающим. Большой вклад прямого механизма в сечения возбуждения этого уровня даже при малых эне-

ргиях налетающих нейтронов объясняется коллективной природой первых возбужденных состояний исследуемых ядер, благодаря которой вероятность их прямого возбуждения усилена примерно на порядок величины по сравнению с возбуждением одночастичных уровней.

Удовлетворительное теоретическое описание большого числа экспериментальных данных для ядер со средней относительной атомной массой в широком энергетическом диапазоне (0,5–9,0 МэВ) позволило значительно снизить неопределенность теоретических сечений, обусловленную неоднозначностью параметров теоретических моделей. В итоге надежность теоретических сечений достигла такого уровня, что описанная выше методика теоретического анализа экспериментальных данных может быть использована для оценки нейтронных сечений в тех областях энергий, где существуют противоречивые экспериментальные данные, или для предсказания их в тех областях энергий, где экспериментальные данные отсутствуют.

Сравнение с оценками. Для изотопов титана, хрома, железа и никеля проведено сопоставление экспериментальных сечений и результатов расчетов с оцененными данными, полученными в разных центрах (БНАБ-78, ЦЯД, ENDF/B-IV, ENDF/B-V, КЕДАК-III, JENDL-I). На примере энергетических зависимостей интегральных сечений упругого и неупругого рассеяний нейтронов ядрами титана, ^{48}Ti , ^{52}Cr и ^{94}Mo такое сравнение представлено на рис. 4–7.

Результаты оценки ENDF/B-V [51] сечений упругого рассеяния нейтронов ядрами титана не противоречат всей совокупности экспериментальных данных. Для ядер хрома лучше всего с совокупностью экспериментальных сечений согласуются оценки ENDF/B-V [66] и БНАБ-78 [95], а оцененные сечения системы JENDL-I [96] и КЕДАК-III [97] заметно отличаются от экспериментальных. Существенные расхождения наблюдаются и между оценками средних косинусов угла упругого рассеяния, особенно в области энергий менее 2 МэВ. Это объясняется тем, что в основу некоторых оценок положена та или иная экспериментальная работа. Естественно, что более надежная оценка может быть получена при учете всей совокупности экспериментальных данных. Именно по такому принципу для хрома проведена оценка среднего косинуса угла упругого рассеяния (КИЯИ-83/ [20]. Проведенное в работе [26] сравнение экспериментальных данных по интегральным сечениям упругого рассеяния быстрых нейтронов ядрами никеля с результатами оценки ENDF/B-V [98], усредненными по интервалу энергий 200 кэВ, и с данными групповой системы констант БНАБ-78 [95] показало, что в области энергий до 4 МэВ результаты оценки ENDF/B-V хорошо согласуются с экспериментальными данными, а при энергиях выше 4 МэВ оценки систематически превышают экспериментальные данные примерно на 10%. Наблюдается отличное согласие данных групповой системы констант БНАБ-78 с экспериментальными данными, полученными как до ее создания, так и после.

Для всех исследуемых ядер результаты разных оценок сечений неупругого рассеяния заметно различаются между собой, а иногда существуют заметные расхождения между оцененными данными и совокупностью экспериментальных данных. Как видно из рис. 6, для сечений неупругого рассеяния нейтронов ядрами ^{52}Cr в области энергий 2 МэВ существуют большие различия между оцененными данными IV и V версий оценок ENDF/B. Для первого уровня ядра ^{60}Ni при энергии нейтронов 2,0 МэВ оценки ENDF/B-IV [71] и ЦЯД-I [70] различаются в 1,5 раза [26]. Не улучшила согласие с экспериментальными данными по сечениям неупругого рассеяния и оценка ENDF/B-V [98], потому что в основу этой оценки положена одна экспериментальная работа. Еще большие расхождения существуют между оценками КЕДАК-III [97] и JENDL-I [99] и экспериментальными данными по сечениям неупругого рассеяния для ядер $^{58,60}\text{Ni}$. Значительные различия между результатами оценок отражают различия в подходах и сложности самой процедуры оценки. Большое доверие вызывают результаты оценок, основывающихся на совокупности имеющихся данных о сечениях.

Измеренные автором сечения и результаты теоретического анализа дали возможность для проведения более надежной оценки нейтронных сечений ядер конструкционных материалов, поэтому они были положены в основу оценки сечений упругого и неупругого рассеяний на хроме природного изотопного состава и на изотопах хрома, которая проведена в 1983 г. в Центре по ядерным данным Госкомитета по использованию атомной энергии СССР (ЦЯД) [100] и рекомендована в качестве стандартного файла в отечественную библиотеку оцененных нейтронных сечений. В 1985 г. в ЦЯД сделана новая оценка данных для никеля и его изотопов, в основу которой также положены наши результаты по сечениям упругого и неупругого рассеяний. В настоящее время оценки ЦЯД, проведенные в последние годы, лучше всего отражают современное состояние данных.

Список литературы

1. Жук В.В., Козарь А.А., Корж И.А. и др. В кн.: *Нейтронная физика: Материалы 2-й Всесоюзной конференции по нейтронной физике*, Киев, 28 мая - 1 июня 1973 г. Ч. 4. Обнинск, 1974, с.203.
2. Корж И.А., Кашуба И.Е., Голубова А.А. В кн.: *Нейтронная физика: Материалы 3-й Всесоюзной конференции по нейтронной физике*, Киев, 9-13 июня 1975 г. Ч. 4. М.: ЦНИИАтоминформ, 1976, с.203.
3. Корж И.А., Мищенко В.А., Можжухин Э.Н. и др. Там же, с.220.
4. Корж И.А., Мищенко В.А., Можжухин Э.Н. и др. *Укр. физ. ж.*, 1977, т.22, с.87.
5. Корж И.А., Мищенко В.А., Можжухин Э.Н. и др. *Ядерная физика*, 1977, т.26, с.1151.
6. Корж И.А., Мищенко В.А., Можжухин Э.Н. и др. *Укр. физ. ж.*, 1977, т.22, с.112.
7. Корж И.А., Мищенко В.А., Можжухин Э.Н. и др. Там же, с.866.
8. Корж И.А., Мищенко В.А., Можжухин Э.Н. и др. *Ядерная физика*, 1977, т.26, с.234.
9. Правдивый Н.М., Корж И.А., Мищенко В.А. и др. В кн.: *Нейтронная физика: Материалы 4-й Всесоюзной конференции по нейтронной физике*, Киев, 18-22 апреля 1977 г. Ч.1. М.: ЦНИИАтоминформ, 1977, с.273.
10. Корж И.А., Мищенко В.А., Правдивый Н.М. *Изв. АН КазССР. Сер. физ.-мат.*, 1978, № 6, с.61.
11. Корж И.А., Мищенко В.А., Санжур И.Е. *Укр. физ. ж.*, 1980, т.25, с.109.
12. Корж И.А., Мищенко В.А., Можжухин Э.Н. и др. *Ядерная физика*, 1980, т.31, с.13.
13. Pascechnik M.V., Korzh I.A., Mozzhukhin E.N. In: *Nucl. cross-sect. for technol.: Proc. of Intern. conf. (Knoxville, 1979)*. Washington, 1980, p.893.
14. Korzh I.A., Mishchenko V.A., Mozzhukhin E.N. e.a. *Ibid.*, p.898.
15. Корж И.А., Лунев В.П., Мищенко В.А. и др. В кн.: *Нейтронная физика: Материалы 5-й Всесоюзной конференции по нейтронной физике*, Киев, 15-19 сентября 1980 г. Ч.1. М.: ЦНИИАтоминформ, 1980, с.314; *Атомная энергия*, 1981, т.50, с.398.
16. Корж И.А., Мищенко В.А., Можжухин Э.Н., Правдивый Н.М. *Ядерная физика*, 1982, т.35, с.1097.
17. Корж И.А., Мищенко В.А., Правдивый Н.М. В кн.: *Физика элементарных частиц и атомного ядра: Материалы конференции по ядерно-физическим исследованиям (Харьков, 1982)*. Ч.2. М.: ЦНИИАтоминформ, 1983, с.144.
18. Korzh I.A., Mishchenko V.A., Pascechnik M.V., Pravdivy N.M. In: *Nucl. data for sci. and technol.: Proc. of Intern. conf. (Antwerp, 1982)*. Holland, 1983, p.159.
19. Корж И.А., Лунев В.П., Мищенко В.А. и др. *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы*, 1983, вып.1(50), с.40.
20. Корж И.А., Мищенко В.А., Пасечник М.В., Правдивый Н.М. В кн.: *Нейтронная физика: Материалы 6-й Всесоюзной конференции по нейтронной физике*, Киев, 2-6 октября 1983 г. Т.3. М.: ЦНИИАтоминформ, 1984, с.60.
21. Правдивый Н.М., Корж И.А., Лунев В.П., Мищенко В.А. Там же, с.78.
22. Корж И.А. Там же, с.99.
23. Корж И.А., Мищенко В.А., Правдивый Н.М. Там же, с.167.
24. Корж И.А., Лунев В.П., Мищенко В.А., Правдивый Н.М. Там же, с.173.
25. Корж И.А., Мищенко В.А., Пасечник М.В., Правдивый Н.М. *Атомная энергия*, 1985, т.58, с.143.
26. Корж И.А. *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы*, 1985, вып.4, с.61-71.
27. Корж И.А., Мищенко В.А., Правдивый Н.М. *Ядерная физика*, 1986, т.43, вып.5, с.1083-1091.
28. Engelbrecht C.A. *Nucl. Instrum. and Methods*, 1970, v.80, p.187; 1971, v.93, p.103; Block J., Jonker C. *Physica*, 1952, v.18, p.809.
29. Barnard E., de Villiers J., Reitmann D. e.a. *Nucl. Phys.*, 1974, v.A229, p.189.
30. Smith A., Guenther P., Moldauer P., Whalen J. *Ibid.*, 1978, v.A307, p.224.
31. Walt M., Beyster J. *Phys. Rev.*, 1955, v.98, p.677.
32. Корж И.А., Мищенко В.А., Правдивый Н.М. и др. *Укр. физ. ж.*, 1966, т.11, с.563; Корж И.А., Мищенко В.А., Пасечник М.В. и др. Там же, 1967, т.12, с.1571; Пасечник М.В., Корж И.А., Кашуба И.Е. и др. *Ядерная физика*, 1970, т.11, с.958.
33. Kazakova L. Ya, Kolesov V.E., Popov V.I. e.a. In: *Nucl. struct. study with neutrons: Proc. Intern. conf. Antwerpen, 1966*, p.576.
34. Пасечник М.В., Федоров М.Б., Яковенко Т.И. *Ядерно-физические исследования в СССР*. М.: Атомиздат, 1968, вып.6, с.106.

35. Cranberg L., Levin J.S. Phys. Rev., 1956, v.103, p.343.
36. Etemad M.A. Aktiebolaget Atomenergi Rep. AE-481. Sweden: Studsvik, 1973.
37. Kawai M. Determination of spherical optical model parameters for structural materials. Contrib. to the topical discussion on "Progress in neutron cross-section measurements and evaluations concerning structural materials for fast reactors": NEANDC-Meeting. Belgium: Geel, 1979.
38. Гофман Ю.В., Немец О.Ф., Токаревский В.В. Атомная энергия, 1959, т.7, с.477.
39. Boschung P., Lindow J.T., Shrader E.F. Nucl. Phys., 1971, v.A161, p.593.
40. Пасечник М.В., Федоров М.Б., Яковенко Т.И. В кн.: Нейтронная физика, ч.1. Киев: Наукова думка, 1972, с.277.
41. Smith A.B., Guenther P., Smith D., Whalen J. Nucl. Sci. and Engng, 1979, v.72, p.293.
42. Lachkar J., McEllistrem M.T., Haouat G. e.a. Phys. Rev., 1976, v.C14, p.933.
43. Langsdorf A., Jr., Lane R.O., Monahan J.E. Ibid., 1957, v.107, p.1077.
44. Ловчикова Г.Н. Атомная энергия, 1962, т.12, с.48.
45. Walt M., Barschall H. Phys.Rev., 1954, v.93, p.1062.
46. Becker R.L., Guindon W.G., Smith G.J. Nucl. Phys., 1966, v.89, p.154.
47. Kinney W.E., Perey F.G. Rep. ORNL-4810. Oak Ridge, 1973.
48. Cabe J., Cance M. Rap. CEA-R-4524. France, 1973.
49. Foster D.G., Jr., Glasgow D.M. Phys. Rev., 1971, v.C3, p.576.
50. Carlson A.D., Rothenberg L.M., Grimes S.M. Ibid., 1967, v.158, p.1142.
51. Phillis C., Howerton R., Smith A. Titanium-II: An evaluated nuclear data file: ANL/NDM-28. Argonne, 1977.
52. Tsukada K., Tanaka S., Maruyama M. J.Phys.Soc. Japan, 1961, v.16, p.166.
53. Бродер Д.Л. и др. Ядерно-физические исследования в СССР. Обнинск, 1966, вып.2, с.9.
54. Лашук А.И., Садохин И.П. Ядерные константы. М.: Атомиздат, 1972, вып.10, с.13.
55. Dickens J.K. Nucl. Sci. and Engng, 1974, v.54, p.191.
56. Конобеевский Е.С., Мусаелин Р.М., Попов В.И. и др. Физика элементарных частиц и атомного ядра, 1982, т.13, с.300.
57. Smith A.B., Guenther P.T., Whalen J.F. In: Nucl. cross-section for technol.: Proc. Intern. conf. (Knoxville, 1979). Washington, 1980, N 594, p.168; Guenther P.T., Smith A.B., Whalen J.F. Nucl. Sci. and Engng, 1982, v.82, p.408.
58. Федоров М.Б., Яковенко Т.И. См. [1], с.56.
59. Kinney W.E., Perey F.G. Rep. ORNL-4806. Oak Ridge, 1974.
60. Van Patter D.M., Nath N., Shafrath S.M. e.a. Phys.Rev., 1962, v.128, p.1246.
61. Бродер Д.Л., Колесов В.Е., Лашук И.П. и др. Атомная энергия, 1964, т.16, с.103.
62. Karatzas P.T., Couchel G.P., Barnes B.K. e.a. Nucl. Sci. and Engng, 1978, v.67, p.37.
63. Almen-Ramstrom E. Aktiebolaget Atomenergi Rep. AE-503. Sweden: Studsvik, 1975.
64. Возяков В.В., Бычков В.М., Лунев В.П., Попов В.И. Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1982, вып.4(48), с.44.
65. Prince A. Evaluation of chromium neutron and gamma-production cross-sections for ENDF/B-IV. N.Y.: Upton, 1976.
66. Prince A., Burrows T.W. Evaluation of nature chromium neutron cross-sections for ENDF/B-V. N.Y.: Upton, 1979.
67. Garber D.I., Kinsey R.R. (Eds.). Neutron cross-sections: BNL-325. 3rd ed. 1976, v.II.
68. Lambropoulos P., Guenther P., Smith A., Whalen J. Nucl. Phys., 1973, v.A201, p.1.
69. McDaniel F.D., Brandenberger J.D., Glasgow G.P., Leighton H.G. Phys. Rev., 1974, v.C10, p.1087.
70. Бычков В.М., Попов В.И. Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1977, вып.25, с.55.
71. ENDF/B-IV, ²⁸Ni (MAT 1190). Evaluated by M.R.Bhat: BNL-17541, N.Y.: Upton, 1975.
72. Tsukada K., Tanaka S., Tomita Y., Maruyama M. Nucl. Phys., 1969, v.A125, p.641.
73. Perey F.G., Le Rigoleur C.O., Kinney W.E. ORNL-4523, UC-34-Physics, 1970; Kinney W.E., Perey F.G. ORNL-4807, 1974.
74. Towle J.H., Batchelor R., Gilboy W.B. In: Nucl. data for reactors: Proc. Intern. conf. (Paris, 1966). V.1. Vienna, 1967, p.367.

75. Rogers V.C., Beghian W.E., Clikeman F.M. Nucl. Sci. and Engng, 1971, v.45, p.297.
76. Towle J.H., Owens R.O. Nucl. Phys., 1967, v.A100, p.257.
77. Traiforos S., Mittler A., Schier W.A. e.a. Nucl. Sci. and Engng, 1979, v.72, p.191.
78. Федоров М.Б., Овдленко В.Д., Сметанкин Г.А., Яковенко Т.И. См. [15], с.309.
79. Конобеевский Е.С., Куденко Ю.Г., Попов В.И., Скоркин В.М. Ядерная физика, 1983, т.37, с. 1083.
80. Foster D.G., Jr., Glasgow D.W. Phys. Rev., 1971, v.C3, p.576.
81. Walt M., Becker R.L., Okazaki A., Fields R.E. Ibid., 1953, v.89, p.1271.
82. Мусаелян Р.М., Скоркин В.М. Краткие сообщения по физике, 1982, № 12, с.28.
83. Пасечник М.В., Корж И.А., Кашуба И.Е. В кн.: Нейтронная физика, Ч.1. Киев: Наукова думка, 1972, с.253.
84. Tanaka S. JAERI-M 5984. Japan, 1975, p.212.
85. Tamura T. Rev. Mod. Phys., 1965, v.37, p.679.
86. Игнатюк А.В., Лунев В.П., Шорин В.С. Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1974, вып.13, с.59.
87. Stelson P.H., Grodzins L. Nucl.Data, 1965, v.A1, p.21.
88. Hauser W., Feshbach H. Phys.Rev., 1952, v.87, p.366.
89. Moldauer P. Ibid., 1964, v.B135, p.642; Revs. Mod. Phys., 1964, v.36, p.1079.
90. Terpel J.W., Hofmann H.M., Weidenmuller H.A. Phys. Letters, 1974, v.B49, p.1.
91. Lederer C.M., Shirley V.S. (Eds.) Table of isotopes. 7th ed. N.Y., 1978.
92. Dilg W., Schantl W., Vonach H., Uhl M. Nucl. Phys., 1973, v.A217, p.269.
93. Hofmann H.M., Richert J., Terpel J.W., Weidenmuller H.A. Ann. of Phys., 1975, v.90, p.403.
94. Ловчинова Г.Н., Лунев В.П., Сальников О.А. и др. Ядерная физика, 1983, т.37, с.533.
95. Абагян Л.П., Базаянц Н.О., Николаев М.Н., Цыбуля А.М. Групповые константы для расчета реакторов и защиты. М.: Энергоиздат, 1981.
96. Igarasi S., Nakagawa T., Kikuchi Y. e.a. Rep. JAERI-1261, 1979.
97. Goel B. Graphical representation of the german nuclear data library KEDAK. Part I: Nonfissile Materials: KFK-2233. Karlsruhe, 1975.
98. Divadeenam M. Ni Elemental neutron induced reaction cross-section evaluation:BNL-NCS-51346 N.Y.: Upton, 1979.
99. Asami T., Tanaka S. Graphs of neutron cross-section data for fusion reactor development: JAERI-M-8136, 1979.
100. Беланова Т.С., Блохин А.И., Булеева Н.Н. и др. См. [20], с.54.

Статья поступила в редакцию 18 марта 1986 г.

УДК 621.039.51.134

**NJOYEC - КОМПЛЕКС ПРОГРАММ ПЕРЕРАБОТКИ ОЦЕНЕННЫХ НЕЙТРОННЫХ ДАННЫХ
В ФОРМАТЕ ENDF/B В ГРУППОВЫЕ КОНСТАНТЫ НА ЕС ЭВМ**

А. С. К р и в ц о в

NJOYEC - processing system for the group constant production from the ENDF/B evaluated neutron data on the EC computer. The possibility of the NJOY-processing system adapted for the EC computer is described. This system produces pointwise, multi-group neutron and photon cross-section, group-to-group neutron and photon matrices, photon production matrices, heat neutron and photon production from the ENDF/B format evaluated data. The multigroup constants are produced in the DTFR format for transport codes like DTF-IV and the multigroup format МУЛЬТИГ.

В настоящее время при оценке ядерных данных широко используется формат ENDF/B [1], в котором представлены многие зарубежные библиотеки оцененных данных, также, как JENDL [2], ENDF [3] и др. В СССР ENDF/B принят в качестве основного обменного формата. В связи с этим особую актуальность

приобретают комплексы программ, привязанных к формату ENDF/B и осуществляющих автоматическую переработку микроскопических данных в мультигрупповые с произвольным групповым разбиением. Это позволяет оперативно создавать специальные библиотеки констант, исследовать влияние группового разбиения и весовых спектров на различные функционалы. Такие комплексы программ могут служить надежным инструментом для оценщика при проверке качества оценок и сравнении их с другими данными.

За рубежом и в СССР существуют программы, позволяющие выполнять указанные функции. К ним относятся комплексы SUPERLOG [4], MC² [5], MINX [6], NJOY [7], ГРУКОН [8], СПРУТ [9], отличающиеся друг от друга по функциональным возможностям и способам реализации разных алгоритмов.

В настоящей работе приводится краткое описание возможностей адаптированного применительно к ЭВМ серии ЕС комплекса NJOY (в дальнейшем адаптированный вариант будем называть NJOYES). Этот комплекс расширил и улучшил возможности своего предшественника MINX, а также объединил существовавшие ранее независимо программы RESEND [10], SIGMA1 [11], ВТОХ [12], GAMLEG [13], MASK [14]. Исходный вариант NJOY был ориентирован на ЭВМ типа CDC. Текст программ комплекса NJOY и сопровождающая документация получены в результате международного обмена, организованного Центром по ядерным данным (г.Обнинск).

Структура комплекса NJOY

Этот комплекс предназначен для получения детального хода сечений, а также мультигрупповых нейтронных и фотонных сечений из библиотек оцененных данных в формате ENDF/B и включает в себя следующие модули: RECONR, BROADR, UNRESR, HEATR, TERMR, GROUPE, GAMINR, ERRORR, DTFR, CCCCR, MATXSU, MODER. Эти модули в комплексе связаны структурой over-line и вызываются в оперативную память головным блоком в последовательности, которая определяется входными данными. Передача данных между отдельными блоками осуществляется посредством интерфейсных файлов на внешних носителях в специальном внутреннем формате. Каждый из этих модулей может быть использован как отдельная программа.

В адаптированный комплекс NJOYES на данном этапе входят с соответствующими модификациями следующие модули NJOY: головной управляющий блок, RECONR, BROADR, UNRESR, HEATR, GROUPE, GAMINR, ERRORR, DTFR, MODER. Кроме того, в комплекс дополнительно включены модули NJBXOD, NJSUM и NJPRIN, функции которых будут описаны далее.

Описание модулей комплекса NJOY

Прежде чем перейти к описанию отдельных модулей комплекса, сделаем общие замечания по поводу адаптации его к ЭВМ серии ЕС. Существенное различие между ЭВМ серий CDC и ЕС - малая разрядная сетка в серии ЕС, которая позволяет с обычной точностью сохранять не более семи десятичных знаков. В связи с этим во многих подпрограммах комплекса необходимо вводить двойную точность для используемых переменных. В исходной программе также места в большинстве случаев отмечены комментариями. В комплексе NJOY имеются машинно-ориентированные программы TIMER, ERROR и PACK, которые содержат ссылки на подпрограммы, отсутствующие в исходном комплексе. В программе TIMER такой подпрограммой является SECOND; в программе ERROR есть обращение к подпрограмме EXITA, а в программе PACK - к подпрограмме SHIFR. В комплексе NJOYES подпрограмма SECOND заменена подпрограммой ICLOCK, взятой из системного пакета прикладных программ. Программа ERROR проводит "трассировку" используемых подпрограмм в аварийных ситуациях, а программа PACK - обработку вводимой текстовой информации. Обе подпрограммы являются сервисными, поэтому отказ от них не вызывает существенных ограничений в работе комплекса. Наиболее важное из ограничений - запрет ввода символьной информации, которую ранее можно было использовать для наглядности вводимой информации. Символьные имена блоков NJOY, которые использовались во входных данных, заменены на десятичные номера блоков.

В исходном варианте комплекса NJOY структура over-line задается в виде операторов внутри программы. В варианте NJOYES эта структура формируется на уровне управляющих карт, для чего в комплексе NJOY сделаны соответствующие изменения. При совместном редактировании комплекса транс-

лятором ФОРТРАН уровня G оказалось, что в различных блоках over-line имелись одинаковые имена подпрограмм. Например, в блоке BROADR есть функция HNAB, а в блоке GROUPR - подпрограмма HNAB и т.д. Это привело к появлению запрещенных перекрестных ссылок, избавиться от которых можно изменением имен дублирующих подпрограмм. Кроме того, в процессе постановки комплекса на ЭВМ серии ЕС приходилось делать мелкие изменения в программе, связанные с изменением разрядности; некоторые программы проходили трансляцию только после доработки. Адаптированные модули тестировались и дополнительно дорабатывались на основе результатов тестировки.

Модуль RECONR

Этот модуль, предназначенный для восстановления детального хода сечений по резонансным параметрам в области разрешенных резонансов, использует метод RESEND с некоторыми модификациями. Энергетическая сетка, на которой рассчитываются сечения, включает в себя энергии резонансов, энергетическую сетку для сечения из $MF = 3$ и $MF = 13$ и энергии, задаваемые пользователем на входе. Кроме того, чтобы гарантировать представление сечения с линейной интерполяцией в пределах допустимой погрешности, в энергетическое разбиение могут включаться дополнительные точки. Входной параметр программы TEMP позволяет рассчитывать резонансные сечения с учетом доплеровского уширения в приближении функции ψ и χ . Однако авторы рекомендуют восстанавливать сечения при $TEMP = 0$ и затем (при необходимости) использовать блок BROADR для учета температурной зависимости. Этот метод является более строгим. Нередко пользователю нет необходимости восстанавливать детальный ход во всей энергетической области, ему требуется только исследовать определенный интервал энергий. В исходной программе такая возможность не предусмотрена. В варианте NJOUES на входе можно задавать область энергий (E_1, E_2) , в которой надо производить расчет. Во многих случаях это приводит к значительной экономии машинного времени и позволяет проводить оперативные исследовательские расчеты.

Модуль BROADR

Этот модуль, проводящий доплеровское уширение резонансов и нерезонансных сечений, является модифицированной версией метода, предложенного в программе SIGMA1. Энергетическая сетка для всех реакций в выходном файле выбирается из файла полного сечения. Так как при доплеровском уширении сечения становятся более плавными, их можно представить меньшим числом точек. Поэтому в программе происходит отбрасывание лишних точек с сохранением заданной точности. Пороговые реакции с высокими энергиями не уширяются. Относительно высоких температур и низких энергий, для которых метод SIGMA1 не применялся, используется новое прямое выражение для доплеровского интеграла.

Выходные результаты записываются на ленту PENDF, причем данные для каждой температуры представлены в отдельном файле. Входной параметр ISTRAP позволяет ускорить работу программы путем использования результатов расчета для предыдущей температуры в качестве входа для расчета следующей температуры. В этом случае следующий расчет осуществляется гораздо быстрее, так как сечение будет более плавным и число точек для его задания уменьшится. Однако при расчете большого числа температур на этом пути возможно накопление ошибок. В комплексе NJOUES для модуля BROADR вводится возможность уширения сечений не во всей энергетической области, а только в заданном интервале, который определяется пользователем на входе.

Модуль UNRESR

Этот модуль использует метод ETOX, чтобы получить эффективные самоэкранированные сечения в области неразрешенных резонансов для заданного набора температур и сечений разбавления. По аналогии с предыдущими блоками в комплексе NJOUES для модуля UNRESR вводится возможность расчета сечений только в заданной энергетической области, которая определяется входными данными.

Модуль HEATR

Этот модуль рассчитывает сечения энерговыделения (керма-факторы) с учетом энергетического баланса. Сначала рассчитывается вклад в энерговыделение от всех нейтронных реакций на энергетической сетке полного сечения. Если в обрабатываемом файле есть данные о выходе β -квантов (MT равно 12,13,15), то на этой же энергетической сетке рассчитывается энергия, уносимая β -квантами, которая вычитается затем из нейтронного энерговыделения. Остаток будет составлять кинетическую энергию ядра и заряженных частиц, которая ведет к локальному энерговыделению. Результаты расчета записываются на выходную ленту, которую затем можно обработать модулем GROUPR для получения групповых керма-факторов. Практика работы с файлами библиотеки ENDF показала, что часто нейтронные данные плохо согласуются с данными о выходе β -квантов, поэтому полезно делать проверку такой согласованности. В варианте NJOUES для модуля HEATR введена процедура расчета энергии возбуждения ядра при неупругом рассеянии в области непрерывного спектра (MT = 91). Эта энергия затем выделяется в виде β -квантов, т.е. появляется возможность проверить балансные энергетические соотношения.

Модуль GROUPR

Этот модуль рассчитывает самоэкранированные мультигрупповые сечения, матрицы межгрупповых переходов для нейтронов и матрицы выхода β -квантов. В общем случае рассчитываются интегралы типа

$$\int_{\Delta g} \sigma^x(E) \vec{S}_\ell^{g'}(E) \phi(E) dE / \int_{\Delta g} \phi(E) dE,$$

где $\sigma^x(E)$ - поперечное сечение при реакции типа x ; $\vec{S}_\ell^{g'}(E)$ - ℓ -й угловой момент функции рассеяния, описывающей рассеяние с начальной энергией E в группу g' ; $\phi(E) = \varphi(E) / [\sigma^t(E) + \sigma_0]$ - весовая функция, в которой $\varphi(E)$ - спектр усреднения, задаваемый на входе пользователем; $\sigma^t(E)$ - полное сечение; σ_0 - сечение разбавления (параметр).

В варианте NJOUES модуль GROUPR модифицирован для возможности проведения расчетов по файлам советских оценок, представленных в формате ENDF/B. Так появилась возможность расчета матриц межгрупповых переходов при упругом рассеянии для MT=2, когда угловая зависимость задана коэффициентами полиномов Лежандра не только в системе центра инерции, но и в лабораторной системе координат. Рассчитываются матрицы переходов и для случая, когда энергетическое распределение вторичных нейтронов задано суперпозицией нескольких распределений, каждое из которых задается табулированной функцией. В исходном варианте NJOY в случае суперпозиции распределений ставилось ограничивающее условие, что табулированное распределение должно быть последним.

Модуль GAMTR

Этот модуль рассчитывает мультигрупповые сечения взаимодействия фотонов, матрицы межгрупповых переходов фотонов и энерговыделение (керма-факторы) от фотонов. Входной параметр MFD (тип взаимодействия) определяет список обрабатываемых реакций. При параметре MFD = -1 для всех элементов формируется стандартный список реакций (MT равно 501,502,504,516,602 и 621). Все номера реакций соответствуют классификации MT в формате ENDF/B. MT=621 определяет энерговыделение от фотонов.

Модуль ERRORR

Этот модуль рассчитывает мультигрупповые ковариационные матрицы погрешностей из файлов ENDF/B. В модуле могут рассчитываться собственные мультигрупповые константы (на основе метода GROUPR) или использоваться ранее посчитанные константы. Результаты выводятся на печать и могут быть записаны на ленту для дальнейшего использования.

Модуль DTFR

Этот модуль преобразует мультигрупповые константы из внутреннего формата NJOY в формат DTFR для транспортных программ типа DTF-IV [15]. При переработке пользователь может указать режим редактирования, который позволяет получить линейные комбинации ранее рассчитанных сечений. Модуль DTFR содержит также машинно-ориентированный блок вывода сечений и матриц переходов на графопостроитель. В варианте NJOYES эта возможность пока не реализована.

Модуль MODER

Этот модуль преобразует файлы ENDF/V из формата BCD в специальный блокированный двоичный формат, используемый комплексом NJOY. В дальнейшем это приводит к сокращению времени счета программы и к экономии памяти.

Модуль NJBXOD

Этот модуль является дополнительным, включен в комплекс NJOYES и осуществляет предварительную обработку входных файлов, а также формирование входных данных комплекса NJOY. Он выполняет следующие функции:

Выбор реакций для расчета мультигрупповых констант. При расчете групповых сечений и матриц межгрупповых переходов (модуль GROUPR) для каждой реакции из файла надо указать ее номер, причем это надо делать отдельно для сечений и для переходных матриц. Если необходимо учитывать температурную зависимость, то номера MT повторяются для каждой температуры. При проведении серийных расчетов это является очень утомительным занятием и ведет к появлению ошибок во входных данных. Поэтому в модуле NJBXOD предусмотрено несколько вариантов расчетов, при которых реакции для расчета формируются автоматически в соответствии со словарем обрабатываемого файла (MF-I, MT-45I).

Удаление резонансной секции. Исходный вариант NJOY при расчете сечений и матриц переходов всегда предполагал предварительную работу блоков RECONR и UNRESR. На практике часто возникает необходимость рассчитать, например, пороговые реакции типа $(n, 2n)$, $(n, 3n)$ или матрицу неупругих переходов, т.е. те реакции, для которых нет необходимости восстанавливать детальный ход по резонансным параметрам. В этом случае в модуле NJBXOD предусмотрена возможность искусственного удаления резонансной структуры путем занесения в соответствующие места файла признаков отсутствия резонансов.

Формирование секций угловых распределений. Файлы библиотеки ENDF сформированы так, что секции с данными по угловым распределениям для реакций $(n, 2n)$, $(n, 3n)$ и др. отсутствуют в том случае, если угловое распределение для них изотропно в лабораторной системе координат. В этом случае блок GROUPR при расчете неупругих матриц завершается аварийно с диагностикой, что отсутствует секция с угловыми распределениями. Поэтому модуль NJBXOD производит анализ подобных ситуаций и формирует недостающие секции в соответствии с форматом ENDF/V в предположении изотропности рассеяния.

Модификация секций энергетических распределений. Как указывалось, блок GROUPR не допускает наличия в файле секций с суперпозицией нескольких табулированных законов энергетического распределения вторичных нейтронов. В таких случаях модуль NJBXOD разбивает данную секцию на несколько секций, в каждой из которых присутствует уже только один закон с соответствующей вероятностью. Тогда в выходном файле тоже присутствует несколько "фиктивных" реакций, которые затем суммируются в общую матрицу неупругого рассеяния.

Режим продолжения счета. Для многих изотопов при расчете мультигрупповых сечений и матриц перехода приходится считать несколько десятков парциальных реакций, что требует более 1-2 ч процессорного времени. В связи с возможными сбоями машины в программу ввели режим продолжения счета. После расчета очередной реакции результаты дописываются в выходной файл с признаком конца

файла. В режиме продолжения модуль NJBXOD анализирует входное задание и выходной файл, затем передает на счет те реакции, которые еще не просчитаны.

Модуль NJPRIN

Этот модуль производит расчет и вывод на печать коэффициентов блокировки и их доплеровских приращений, используя выходной файл модуля GROUFR, который, как указано выше, готовит только блокированные сечения при заданном наборе сечений разбавления и температур.

Модуль NJSUM

Этот модуль был создан в процессе привязки комплекса NJOUES к ЗОI-групповой системе констант [16] для заполнения ее данными по мультигрупповым сечениям и матрицам межгрупповых переходов. Модуль определяет линейные комбинации сечений и матриц переходов для различных парциальных сечений. Номера МГ для линейных комбинаций задаются пользователем. Входные параметры модуля NJSUM позволяют осуществлять все комбинации автоматически на основе выходного файла модуля GROUFR и требований формата МУЛЬТИК [16].

В настоящее время система МУЛЬТИК имеет ЗОI-групповое разбиение. При таком числе групп матрица неупругих переходов становится очень громоздкой, поэтому в модуле NJSUM предусматривается возможность "обрезания" строк матриц снизу там, где абсолютные значения ее элементов очень малы, а также перенормировку оставшейся матрицы в целях сохранения баланса. На выходе модуль имеет файл мультигрупповых констант в промежуточном формате МУЛЬТИКА, который удобен для визуального просмотра и внесения различных корректировок.

Список литературы

1. Data formats and procedures for the evaluated nuclear data file (ENDF). - Rep. of BNL-NCS, 50496 (ENDF-102), 1976.
2. Igarasi S. e.a. Japanese evaluated nuclear data library, version-1 (JENDL-1). - Rep. JAERI-1261 [INDC (JAP)-45/L], 1979.
3. Hoverton R.J. e.a. The LLL Evaluated nuclear data library (ENDL): Descriptions of individual evaluations. - Rep. UCRL-50400, 1978, v.15, parts A-F.
4. Wright R.O., Greene N.M., Lucius J.L., Craven C.W. SUPERTOG: A Program to generate fine group constant and P scattering matrices from ENDF/B. - Rep. ORNL-TM-2679, 1969.
5. Toppel B.J., Rago A.L., O'Shea D.M. MC, A Code to calculate multigroup cross-sections. - Rep. ANL-7318, 1967.
6. Weisbin C.R., Soran P.D., MacFarlane R.E. e.a. MINX, A Multigroup interpretation of nuclear X-sections from ENDF/B. - Rep. LA-6486-MS (ENDF-237), 1976.
7. MacFarlane R.E., Barrett R.J., Muir D.W. e.a. The NJOY nuclear data processing system: user's manual. - Rep. LA-7584-M(ENDF-272), 1978.
8. Свиница В.В. Пакет ГРУКОН. Ч.1. Программа преобразований. - Препринт ФЭИ-1188. Обнинск, 1981; То же. Ч.2. Управляющие данные. - Препринт ФЭИ-1189. Обнинск, 1981.
9. Колесов В.Е., Кривцов А.С. Алгоритм и программа подготовки групповых констант расчета реакторов на основе библиотеки нейтронных данных системы СОКРАТОР. - В кн.: Нейтронная физика: Материалы 3-й Всесоюзной конференции по нейтронной физике, Киев, 9-13 июня 1975 г. Ч.1. М.: ЦНИИатоминформ, 1976, с.140-145.
10. Schenter R.E., Baker J.L., Kidman R.B. ETCX, A Code to calculate group constants for nuclear reactor calculations. - Rep. BNWL-1002, 1962.
11. Ozer O. RESEND: A Program to preprocess ENDF/B materials with resonance files into a point-wise form. - Rep. BNL-17134, 1972.
12. Cullen D.E., Weisbin C.R. Exact doppler broadening of tabulated cross-sections. - Nucl. Sci. and Engng, 1976, v.60, p.199.

13. Lathrop K.D. GAMLEG - A FORTRAN Code to produce multigroup cross-sections for photon transport calculations. - Rep. LA-3267, 1965.
14. Abdou M.A., Maynard C.W., Wright R.Q. MACK: A computer program to calculate neutron energy release parameters (fluence-to-kerma factors) and multigroup neutron reaction cross-sections from nuclear data in ENDF format. - Rep. ORNL-TM-3994, 1973.
15. Lathrop K.D. DTF-IV, A FORTRAN program for solving the multigroup transport equation with anisotropic scattering. - Rep. LA-3373, 1965.
16. Долгов Е.В., Савоськин М.М., Цибуля А.М. К вопросу о разработке мультигрупповой системы констант. - Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1984, вып.5(59), с.49-52.

Статья поступила в редакцию 18 июля 1986 г.

УДК 539.172

КОМПЛЕКС ПРОГРАММ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ
НА ОСНОВЕ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ

О. В. Груша, С. П. Иванова, Д. Н. Шубин

THE CODE FOR NUCLEAR REACTION INVESTIGATIONS ON THE BASE OF THE STATISTICAL THEORY. GROGIG - a nuclear reaction computer code on the base of statistical theory is described. The basic relations used in the calculations are given. The complements and modifications which enlarge initial code GROGI-2 possibilities are also presented. The code described enables to look for the excited system desintegration with neutron, proton, α -particle and γ -emission taking into account nuclear fission on the every decay step.

Ядерные реакции с нуклонами и тяжелыми ионами проходят с участием сильновозбужденных ядер, плотность состояний которых настолько велика, что описание отдельных состояний теряет смысл и необходимо привлечение статистической теории. Статистический подход успешно применяется для описания широкого круга ядерных явлений [1].

Цель настоящей работы - описание комплекса программ GROGIG, который позволяет исследовать и анализировать многие характеристики ядерных реакций. В работе изложена общая организация программы и основные соотношения, используемые в расчетах, а также описано задание входной информации.

Комплекс программ GROGIG является модифицированной версией программного комплекса GROGI-2 [2]. Существует несколько модификаций этого комплекса [3]. Авторы в дополнение к возможностям исходной программы GROGI-2 включили в нее возможность учета конкуренции дельтального канала, распада на дискретные уровни дочернего ядра в нейтронном канале, а также расчет времен жизни ядер на каждом этапе распада. Таким образом, программа позволяет детально проследить за распадом возбужденной составной системы с эмиссией нейтронов, протонов, α -частиц и γ -квантов с учетом возможности деления на каждом этапе распада.

Программа позволяет рассчитать распределение по энергии и моменту остаточного ядра (μ -I), определяемого заданием входной информации. Для каждой точки (\bar{E}, \bar{J}) начального распределения с населенностью $R_{\mu}(\bar{E}, \bar{J})$ и для всех возможных видов распада и значений (E, J) рассчитываются относительные вероятности распада:

$$R_{\mu i}(\bar{E}, \bar{J}; E, J) = \rho_i(E, J) \sum_{S=|J-\delta|}^{J+\delta} \sum_{\ell=|\bar{J}-S|}^{\bar{J}+S} \pi_{i\ell}(\varepsilon), \quad (1)$$

где i - вылетающая частица (нейтрон, протон или α -частица); $\rho_i(E, J)$ - плотность уровней остаточного ядра с энергией возбуждения E и угловым моментом J ; δ - спин вылетающей частицы;

$T_{i\ell}(\varepsilon)$ - коэффициенты проницаемости соответствующей частицы с орбитальным угловым моментом ℓ и энергией ε . Для эмиссии γ -квантов соответствующая относительная вероятность определяется соотношением

$$R_{\mu\gamma} = \sum_L \xi_L \varepsilon^{2L+1} \rho_{\mu}(E, J), \quad (2)$$

где L - мультипольность перехода; ξ_L - константа, обеспечивающая нормировку на экспериментальное значение радиационной ширины; ε - энергия фотона. В расчетах учитываются дипольные и квадрупольные γ -кванты.

Одним из наиболее важных каналов распада сильновозбужденных состояний тяжелых ядер является деление. Вероятность деления ядра μ при наличии одnogорбого барьера высотой B_f и с кривизной $\hbar\omega$ определяется соотношением

$$R_{\mu f}(\bar{E}, \bar{J}) = \int_0^{\bar{E}} \frac{\rho_{\mu f}(\varepsilon, \bar{J}) d\varepsilon}{1 + \exp[2\pi/\hbar\omega (B_f + \varepsilon - \bar{E})]}, \quad (3)$$

где $\rho_{\mu f}(\varepsilon, \bar{J})$ - плотность уровней ядра μ в седловой точке. Для двугорбого барьера с параметрами $B_f^I, \hbar\omega^I, B_f^{II}, \hbar\omega^{II}$ вероятность деления [4]

$$R_{\mu f}(\bar{E}, \bar{J}) = \left[\frac{1}{R_{\mu f}^I(\bar{E}, \bar{J})} + \frac{1}{R_{\mu f}^{II}(\bar{E}, \bar{J})} \right]^{-1}, \quad (4)$$

где величины $R_{\mu f}^I$ и $R_{\mu f}^{II}$ определяются согласно выражению (3).

Нормированная вероятность распада рассчитывается следующим образом:

$$G_{\mu f}(\bar{E}, \bar{J}; E, J) = R_{\mu i}(\bar{E}, \bar{J}; E, J) / G_{\mu}, \quad (5)$$

где G_{μ} - суммарная относительная вероятность распада

$$G_{\mu} = \sum_i \sum_J \int R_{\mu i}(\bar{E}, \bar{J}; E, J) dE. \quad (6)$$

Суммирование в выражении (6) проводится по всем возможным каналам распада и включает дипольные и квадрупольные γ -кванты, три типа частиц (нейтроны, протоны, α -частицы) и деление. Аналогичным образом рассчитывается спектр частицы i , вылетающей из ядра μ :

$$S_{\mu i}(\varepsilon) = \sum_{\bar{E}} \sum_{\bar{J}} P_{\mu}(\bar{E}, \bar{J}) \sum_J R_{\mu i} / G. \quad (7)$$

После того, как все распределения нормированы, рассчитываются вероятности переходов для других точек начального распределения. Вновь созданное распределение дочернего ядра ($\mu-1$) становится родительским для следующего шага испарительного каскада. Распределение дочернего ядра $P_{\mu-1}(E, J)$ дается соотношением

$$P_{\mu-1}(E, J) = \sum_{\bar{E}} \sum_{\bar{J}} P_{\mu}(\bar{E}, \bar{J}) R_{\mu k}(\bar{E}, \bar{J}; E, J). \quad (8)$$

В модифицированном комплексе программ GROGIG предусмотрена возможность учета зависимости высоты барьера деления от величины углового момента в соответствии с результатами работ [5]:

$$B_f(J) = B_f(J=0) - \Delta E_f. \quad (9)$$

Здесь

$$\Delta E_f = [(1,27 + 5,6 z^2) - (4,6 + 11 z) y] E_{\text{tot}}, \quad (10)$$

где

$$y = 2,3 J^2 / A^{7/3}; \quad E_{\text{tot}} = 34,54 J^2 / A^{5/3}; \quad (11)$$

$$z = 1 - \frac{z^2 A}{(z^2/A)_{кр}} \quad (12)$$

В соотношениях (I-8) определяющей величиной является плотность уровней $\rho(\varepsilon, J)$ возбужденных ядер при деформациях, соответствующих как основному состоянию $[\rho_{\mu i}(\varepsilon, J)]$, так и седловой точке $[\rho_{\mu f}(\varepsilon, J)]$. В данном комплексе программ используются аналитические соотношения модели ферми-газа [1] с эффективной энергией возбуждения

$$\rho(\varepsilon, J) = \omega(\varepsilon, M=J) - \omega(\varepsilon, M=J+1). \quad (13)$$

В этом выражении $\omega(\varepsilon, M)$ - плотность возбужденных состояний ядра с энергией возбуждения ε и проекцией M углового момента на ось симметрии ядра

$$\omega(\varepsilon, M) = \omega\left(\varepsilon - \frac{M^2}{aR}, 0\right); \quad (14)$$

$$\omega(\varepsilon, 0) = \frac{k}{R^{1/2} a^2 t^3} \exp(2\sqrt{aU}). \quad (15)$$

Здесь a - параметр плотности уровней, пропорциональный средней плотности одночастичных состояний вблизи поверхности Ферми; U - эффективная энергия возбуждения

$$U = \varepsilon - \delta; \quad (16)$$

t - температура ядра, связанная с эффективной энергией возбуждения соотношением

$$U = at^2 - 3/2t; \quad (17)$$

$$R = 12/\pi^2 \langle m^2 \rangle, \quad (18)$$

где $\langle m^2 \rangle$ - средний квадрат проекции одночастичного углового момента на ось симметрии ядра, $\langle m^2 \rangle = \xi A^{2/3}$.

При низких энергиях возбуждения необходимо учитывать отдельные дискретные уровни и переходы на эти уровни, когда энергия возбуждения ядра близка к энергии связи нейтрона. Вероятность таких переходов определяется выражением

$$R_{\mu\nu}(\bar{E}, \bar{J}) = \sum_{k=1}^N \sum_{\ell} \frac{2J_k+1}{2} T_{\nu\ell}(\varepsilon). \quad (19)$$

Здесь N - число экспериментально известных уровней; J_k - угловой момент k -го уровня дочернего ядра; ε - энергия нейтрона,

$$\varepsilon = \bar{E} - E_k - B_{\mu\nu}, \quad (20)$$

где E_k - энергия k -го уровня дочернего ядра. Величина $R_{\mu\nu}(\bar{E}, \bar{J})$ учитывается при расчете величины G_{μ} (6).

Таким образом, в рамках указанного комплекса программ можно получить распределения по энергии и моментам ядер испарительного каскада, энергетические спектры испускаемых частиц и J -квантов, сечения деления и делимости ядер каскада. Кроме того, в комплекс включена возможность оценки среднего времени жизни каждого ядра каскада.

Время жизни ядра μ при энергии возбуждения \bar{E} и угловом моменте \bar{J} связано с полной шириной распада $\Gamma_{\mu}(\bar{E}, \bar{J})$ соотношением

$$\tau_{\mu}(\bar{E}, \bar{J}) = \hbar / \Gamma_{\mu}(\bar{E}, \bar{J}). \quad (21)$$

Полная ширина распада связана с полной вероятностью распада ядра μ следующим образом:

$$\Gamma_{\mu}(\bar{E}, \bar{J}) = \left[1/2\pi \rho_{\mu}(\bar{E}, \bar{J}) \right] G_{\mu}. \quad (22)$$

Среднее по угловым моментам время жизни ядра μ

$$\langle \tau_{\mu}(\bar{E}, \bar{J}) \rangle_{\bar{J}} = \sum_{\bar{J}} \tau_{\mu}(\bar{E}, \bar{J}) P_{\mu}(\bar{E}, \bar{J}) / \sum_{\bar{J}} P_{\mu}(\bar{E}, \bar{J}) . \quad (23)$$

Экспериментальные результаты по временам жизни делящихся ядер получены к настоящему моменту с помощью метода теней [6,7], которым исследуются ядерные реакции на монокристалле. При этом регистрируются изменения параметров тени от кристаллографических осей и плоскостей в зависимости от смещения из узла кристаллической решетки составного ядра под действием импульса налетающей частицы. Среднее смещение ядра μ , перпендикулярное оси кристалла, $S_{\mu\perp}$ сопоставляется с изменением параметров тени (например, с изменением выхода осколков деления в минимуме осевой тени $\Delta\chi_{\mu}$) с помощью соотношений перехода:

$$\Delta\chi_{\mu} = f(S_{\mu\perp}) . \quad (24)$$

Функциональная зависимость $\Delta\chi_{\mu}$ от $S_{\mu\perp}$ рассчитывается отдельно для каждого типа кристалла. Для исследования реакций с заряженными частицами на ядрах урана используется кристалл UO_2 , соотношения перехода для которого получены в работе [7].

Для наиболее полного анализа экспериментов по измерению времен жизни методом теней в комплексе GROGIG предусмотрена возможность расчета среднего смещения ядра μ :

$$S_{\mu\perp}(\bar{E}, \bar{J}) = v_{\perp} \left[\sum_{\nu=1}^{\mu-1} \langle \tau_{\nu} \rangle + \tau_{\mu}(\bar{E}, \bar{J}) \right] , \quad (25)$$

где v_{\perp} - скорость отдачи составной ядерной системы, перпендикулярная оси кристалла; $\langle \tau_{\nu} \rangle$ - среднее время жизни ядра ν на предыдущих ступенях каскада:

$$\langle \tau_{\nu} \rangle = \sum_{\bar{E}, \bar{J}} \tau_{\nu}(\bar{E}, \bar{J}) P_{\nu}(\bar{E}, \bar{J}) G_{\nu i}(\bar{E}, \bar{J}) / \sum_{\bar{E}, \bar{J}} P_{\nu}(\bar{E}, \bar{J}) G_{\nu i}(\bar{E}, \bar{J}) . \quad (26)$$

Каждому значению $S_{\mu\perp}$ сопоставляется изменение параметров профиля тени $\Delta\chi_{\mu}(\bar{E}, \bar{J})$. Тогда полный вклад в экспериментально наблюдаемую величину $\Delta\chi_{\text{набл}}$ дается выражением

$$\langle \Delta\chi_{\mu} \rangle = \sum_{\bar{E}, \bar{J}} \Delta\chi_{\mu}(\bar{E}, \bar{J}) P_{\mu}(\bar{E}, \bar{J}) G_{\mu f}(\bar{E}, \bar{J}) / \sum_{\nu=1}^{\nu_{\text{max}}} \sum_{\bar{E}, \bar{J}} P_{\nu}(\bar{E}, \bar{J}) G_{\nu f}(\bar{E}, \bar{J}) , \quad (27)$$

где ν_{max} - полное число делящихся ядер, возможное в данном каскаде. Наблюдаемый в эксперименте эффект конечного времени жизни представляет собой суммарный вклад всех делящихся ядер каскада:

$$\Delta\chi_{\text{набл}} = \sum_{\nu=1}^{\nu_{\text{max}}} \langle \Delta\chi_{\nu} \rangle . \quad (28)$$

Последовательность вычислений в программном комплексе GROGIG и задание входных данных описаны в приложении.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Последовательность вычислений в комплексе GROGIG аналогична последовательности в исходном комплексе GROGI-2.

Начальное распределение $P_{\mu}(\bar{E}, \bar{J})$ по энергии и угловому моменту может быть рассчитано по какому-либо варианту оптической модели внутри программы или задано на основе уже имеющейся информации (\bar{E} и \bar{J} принимают целочисленные значения). Коэффициенты проницаемости $\pi_{i\ell}(\epsilon)$ для частицы i в ядре μ и начальное распределение хранятся в памяти ЭВМ. Таблицы плотности уровней $\rho_i(\bar{E}, \bar{J})$ вычисляются для каждого шага испарительного каскада. Затем для каждого значения энергии \bar{E} и момента \bar{J} родительского ядра μ рассчитываются вероятности распада в каждом канале (нейтроны, протоны, α -частицы, дипольные и квадрупольные γ -кванты и деление). Для заданного дочернего ядра ($\mu-1$) запоминаются вероятности $R_{\mu i}$ и $R_{\mu f}$. Для остальных частиц сохраняются только спектры,

т.е. $\sum_{\mu} R_{\mu i}(\bar{E}, \bar{J}; E, J)$. Полученные таким образом таблицы интегрируются для вычисления нормировочной константы $G_{\mu}(6)$. На следующем этапе распада дочернее ядро становится родительским и вся процедура повторяется.

В выражениях (1) - (8) суммирование по моменту J проводится с учетом следующих ограничений: $J \leq 99$; $\ell \leq 11$ для нейтронов и протонов; $\ell \leq 19$ для α -частиц. Интегрирование по энергии проводится с учетом следующих ограничений: $E \geq 0$; $0,01 \leq \epsilon \leq 24$ МэВ для нейтронов; $1 \leq \epsilon \leq 25$ МэВ для протонов; $1 \leq \epsilon \leq 50$ МэВ для α -частиц; $1 \leq \epsilon \leq 26$ МэВ для γ -квантов. Ввод исходных данных к программе GROGIG приведен в таблице.

Описание ввода исходных данных к программе GROGIG

№ перфокарты	Формат	Вводимая величина	Описание вводимых величин	
1			Чистая перфокарта	
2	I4A4		Любая буквенно-цифровая информация	
3	5I6	MTGT	Масса ядра-мишени.	
		IZT	Заряд мишени.	
	FIO.4	MPROJ	Масса падающей частицы.	
		IZP	Заряд падающей частицы.	
		IP	Контроль за предэмиссионным испусканием частиц. Если IP = 0, то предэмиссионное испускание частиц не предполагается. Если IP = 1, то на перфокарте 3a должна быть задана последовательность предэмиссионных частиц (эта возможность используется, когда входное распределение является промежуточным распределением, образованным предыдущим, более высокоэнергетическим каскадом).	
		QC	Q-реакции	
3a	6I5	IPRSEQ	Эта карта считывается, если IP ≠ 0. Последовательность предэмиссионных частиц; индекс частиц те же, что и для ISEQ, но число возможных частиц не более 6	
4	I2I5	ISEQ	Последовательность испаряемых частиц, 1 - нейтрон, 2 - протон, 3 - α -частица. Если ISEQ=0, то вычисления прекращаются (до I2 частиц)	
5	2F6.2 2E15.4 2FIO.4 I10	EGAM	Энергия, при которой производится нормировка γ -ширины к экспериментальному значению. Момент составного ядра, при котором производится нормировка. $\Gamma_{\gamma 1}$ - ширина (в электронвольтах) для дипольного испускания γ -квантов. $\Gamma_{\gamma 2}$ - ширина для квадрупольного испускания. t_0 - параметр температуры ядра. Параметр обрезания таблиц заселенностей, обычно равный 10^{-3} и 10^{-6} . Когда заселенность при данных энергии и моменте становится меньше, чем CUT * на полную заселенность при данном шаге, то данная точка не рассматривается. Если LPRINT = 1, то промежуточные таблицы на печать не выводятся; если LPRINT=2, то заселенности родительского и дочернего ядер, а также спектра частиц выводятся на каждом шаге; если LPRINT=3, то осуществляется вывод промежуточных таблиц делимости и времен жизни на каждом этапе испарительного каскада	
		AJGAM		
		GAMMA		
		GAMQ		
		TZERO		
		CUT		
6	5I1	KTABLE	Программа генерирует таблицы относительной вероятности эмиссии какой-либо частицы из каждой точки родительского ядра и выводит их на печать (только, если LPRINT=1). Если KTABLE=1, то генерируется вероятность нейтронной эмиссии; KTABLE=2 - γ -эмиссии, KTABLE=3 - α -эмиссии; KTABLE=4 - вероятность эмиссии протонов, KTABLE=5 - таблица делимости ядра, KTABLE=6 - вывод таблиц времен жизни родительского ядра, KTABLE=7 - таблицы на печать не выводятся	
		5FIO.0	JJKPAC	Если > 0, то печатаются таблицы коэффициентов проницаемости для легких частиц.
		I5	JJKPLD	Если > 0, то печатаются таблицы плотностей уровней.

№ перфокарты	Формат	Вводимая величина	Описание вводимых величин
	F10.0	JJKVMI	Если =0, то момент инерции ядра не изменяется. Если > 0, то используется переменный момент инерции ядра, причем вариация момента инерции происходит в зависимости от величин AIZERO и DPARAM.
		JJKGDR	Если > 0, то при расчете β -распада учитывается гигантский дипольный резонанс, положение и ширина которого задаются на перфокарте IO' (см. далее).
		AIZERO	Величина момента инерции при угловом моменте, равном нулю (часть от твердотельного момента). Используется, когда JJKVMI > 0.
		DPARAM	Скорость, с которой момент инерции ядра приближается к твердотельному. Задается в мегаэлектронвольтах. Используется, если JJKVMI > 0; $I = I_0 \exp(-\frac{0,693U}{DPARAM})$.
		QEF	Квадрупольная часть гигантского резонанса. Используется, когда JJKGDR.
		FRACI	Если R (I) > 49 на перфокарте 9, то I = FRACI x I (твердотельное).
		ALIT	Если AL (I) > 49 на перфокарте 9, то $\alpha_i = A/ALIT$.
		IROMPT	=0, параметры оптической модели задаются набором I из внутренней таблицы для расчета нейтронов, протонов, α -частиц, коэффициентов проницаемости. Коэффициенты проницаемости пересчитываются на каждом испарительном шаге. =I, параметры оптической модели задаются набором 2; коэффициенты проницаемости пересчитываются на каждом шаге. =IO, то же, что и при равенстве нулю, но коэффициенты проницаемости, рассчитанные на первом шаге, используются и на остальных шагах. =II, то же, что и при равенстве единице, но коэффициенты проницаемости, вычисленные на первом шаге, используются на всех последующих шагах.
		RJDEL	Член центробежного усиления момента инерции $I = I_0 [1 + (RJDEL) \cdot J^2]$, где I_0 - определяется далее (см. перфокарту 9)
7	I2	LSADE	=0, тогда расчет величины $\Delta\chi_\mu$ не проводится. >0, тогда на следующей перфокарте задается массив данных по соотношениям перехода от $S_{\mu 1}$ к величине $\Delta\chi_\mu$ (24)
7a	14F5.2	DELXI	Массив соотношений перехода размерностью LSAD + 1. В двух последних элементах этого массива задаются углы между налетающим пучком частиц и осью кристалла, относительно которого которого смотрится тень. Эта перфокарта необходима только в случае LSAD > 0
8	3F10.5	Q(1) Q(2) Q(3)	Q_n - реакции отделения нейтрона. Q_p - реакции отделения протона. Q_α - реакции отделения α -частицы
9	I2F6.2	AL(1) AL(2) AL(3) AL(4) R(1) R(2) R(3) R(4)	Параметр a плотности уровней для родительского ядра. Параметр a для дочернего ядра после испускания нейтрона. Параметр a для дочернего ядра после испускания протона. Параметр a для дочернего ядра после испускания α -частицы. Спиновый параметр R для родительского ядра. R для дочернего ядра после испускания нейтрона. R для дочернего ядра после испускания протона. R для дочернего ядра после испускания α -частицы. Если величины $0 < R < 1,0$, то считается, что это параметр ξ в формуле (17), а величины R рассчитываются соответственно для каждого ядра по формулам (18)

№ перфокарты	Формат	Вводимая величина	Описание вводимых величин
		DELTA (1) DELTA (2) DELTA (3) DELTA (4)	<p>Параметр δ (I6) для родительского ядра.</p> <p>Параметр δ для дочернего ядра после испускания нейтронов.</p> <p>δ - для дочернего ядра после испускания протонов.</p> <p>δ - для дочернего ядра после испускания α-частицы.</p> <p>В случае, если $AL(i) = 0$, то $AL(i) = A/7,5$.</p> <p>Если $AL(i) > 49$, то $AL(i) = A/ALIT$. $ALIT$ - задается на перфокарте 6.</p> <p>Если $R(i) = 0$ и если момент инерции ядра выбирается неизменным, то $R(i) = R$ - твердотельное, т.е. имеем значение, соответствующее твердотельному моменту инерции.</p> <p>Если $R(i) > 49$, то $R(i) = FRAC1 \times R$ (твердотельное). Величина $FRAC1$ задается на перфокарте 6.</p> <p>Если $DELTA(i) = 0$, то $DELTA(i) = 0$ для нечетно-нечетных ядер; равно 1,2 для нечетных A; равно 2,4 для четно-четных ядер</p>
IO	4I1	IRAST(i)	<p>Параметр задания ираст-полосы.</p> <p>=0, предполагается численное задание ираст-полосы.</p> <p>=1, программа вычисляет свои собственную ираст-полосу.</p> <p>В случае равенства нулю далее необходимо задание набора данных по ираст-полосе для каждого ядра, для которого $IRAST(i) = 0$ в следующей последовательности</p>
IOa	AIO	DUMMY	Карта заголовка (может быть пустой)
IOб	I5	NJ	Число вводимых ираст-значений
IOв	IOF7.3	EJAY	Ираст-энергии в порядке возрастания момента J по десять значений на каждой перфокарте
IO'	2F10.3	GDRE GDRW	<p>Если $JJKGDR > 0$, то на этой перфокарте задаются положение и ширина гигантского дипольного резонанса.</p> <p>Положение гигантского резонанса (в мегаэлектронвольтах).</p> <p>Ширина гигантского резонанса (в мегаэлектронвольтах). Если $GDRE = 0$ или $GDRW = 0$, то программа выбирает свои внутренние величины</p>
			Набор карт, определяющих составную систему
IIa	2F10.3 2I5	EB EXMAX2 M2 N2	<p>Если $IP = I$ (см. перфокарту 3), то:</p> <p>Энергия налетающей частицы в лабораторной системе.</p> <p>Максимальная энергия возбуждения в распределении.</p> <p>Число точек в распределении по энергиям.</p> <p>Число точек в распределении по моментам</p>
IIб	6E12.4	POP(EJ)	Заселенность составного ядра. Вводится для каждого значения J распределение по энергии (по J - в порядке возрастания, по энергии - в порядке убывания энергий)
IIa'	I10 2F10.3 2I10 2F10.0	NJP EB LCUT	<p>Если $IP = 0$ (см. перфокарту 3), то:</p> <p>> 999 спиновое распределение составного ядра рассчитывается в соответствии с заданием $IBOMP$ (см. далее).</p> <p>< 999 - спиновое распределение читается с последующих перфокарт. Величины σ_ℓ располагаются в порядке возрастания ℓ от нуля до $\ell = NJP-1$.</p> <p>Энергия падающих частиц в мегаэлектронвольтах в лабораторной системе координат.</p> <p>=0 - максимальный угловой момент составной системы выбирается по Вазз-модели, как описано в работе [2].</p> <p>=1 - нет ограничений на спиновое распределение по угловым моментам.</p> <p>>1 - максимальный угловой момент составной системы равен $LCUT$.</p>

№ перфокарты	Формат	Вводимая величина	Описание вводимых величин
I3a'	2F5.2	DELF EPSF	Если $E_{EP} > 0$, то: параметр δ_f ; параметр U_{xf} (см. перфокарту I3a).
I3b	2FI0.3	PL BC	Величина плотности уровней, при которой производится привязка ρ_f . Энергия, при которой производится привязка.
I4	2FI0.3 I10	REPS1 AEPS1 LPRI	Относительная точность интегрирования при расчете величины Γ_f . Абсолютная точность интегрирования при расчете Γ_f . Контроль промежуточной распечатки делимости ядра. =0 не производится промежуточная распечатка.
I5	4FI0.2 I5	BF1 BF2 $\hbar\omega$ I $\hbar\omega$ 2 LJWF	Считываются характеристики барьера деления: высота первого горба барьера в мегаэлектронвольтах; высота второго горба в мегаэлектронвольтах; кривизна первого горба; кривизна второго горба. Если $\text{MAX}(BF1, BF2)$ равен 0, то учет конкуренции делительного канала не производится. Если $BF2 = 0$, то барьер деления считается одnogорбьм. =0, тогда высота барьера деления не зависит от момента ядра. >0, тогда зависимость барьера деления от момента ядра учитывается по формулам (9)-(12)

Примечание. Следующие шаги каскада определяются заданием перфокарт 8-10, 12-15.

Список литературы

1. Игнатюк А.В. Статистические свойства возбужденных атомных ядер. М.: Энергоатомиздат, 1983.
2. Gilat J. GROG-1,-2 - A nuclear evaporation computer code. - Description and user's manual: Rep. BNL-50246 (T-580).
3. Fleury A. Phys. Rev., 1977, v.C16, p.1396. Takahashi H. Proc. of EANDC topical discussion on critique of nucl. models and their validity in the evaluation on nucl. data: JAERI, M-5984. Tokio, 1975, p.257.
4. Strutinsky V.M., Bernholm S. Nucl. Phys., 1969, v.A136, p.1.
5. Пик-Пичак Г.А. Ж. Эксперим. и теор. физ., 1958, т.34, вып.2, с.341; Cohen S., Flasil F., Swiatecky W.J. Ann. Phys., 1974, v.82, p.557.
6. Grusha O.V., Kordjuevich, Melikov Yu.V. e.a. Nucl. Phys., 1984, v.A429, p.313.
7. Воротников П.Е., Груша О.В., Еремин Н.В. и др. Ядерная физика, 1982, т.36, с.1073.

Статья поступила в редакцию 30 апреля 1986 г.

ЯДЕРНО-РЕАКТОРНЫЕ ДАННЫЕ

УДК 621.039.5

ПРИМЕНИМОСТЬ ТРЕХМЕРНЫХ РАСЧЕТНЫХ ПРОГРАММ ЗАМОК И ММК22G
К ОПИСАНИЮ ПРОХОЖДЕНИЯ γ -ИЗЛУЧЕНИЯ
ЧЕРЕЗ ЗАЩИТЫ С ПРЯМЫМИ ПОЛЫМИ ЦИЛИНДРИЧЕСКИМИ КАНАЛАМИ

В. Л. Мазанов, А. Н. Николаев, А. В. Овчинников, В. Б. Полевой,
А. В. Рябов, Б. И. Синицын, В. Ф. Хохлов

THE APPLICATION OF THE THREE-DIMENSIONAL CODES ZAMOK AND MMK22G IN THE DESCRIPTION OF THE PENETRATION OF THE γ -RADIATION THROUGH SHIELDINGS WITH STRAIGHT HOLLOW CYLINDER DUCTS. The paper presents the comparison of the calculations carried out according to two Monte-Carlo codes ZAMOK and MMK22G with the results of the experiments on the penetration of the γ -radiation through shieldings with straight hollow cylinder ducts.

В работе исследуется применимость трехмерных расчетных программ ЗАМОК [1] и ММК22G, использующих метод Монте-Карло, к описанию прохождения γ -излучения от точечных и плоских источников γ -излучения через защиты с прямыми полыми цилиндрическими каналами. Такие каналы - наиболее распространенные виды элементарных неоднородностей, встречающихся в защитах ядерно-технических установок [2], экспериментально исследованы наиболее полно.

До последнего времени основными методами расчета прохождения γ -излучения через защиты с неоднородностями оставались различного рода полуэмпирические и эмпирические методы [3,4], однако они обеспечивают высокую точность расчетов лишь для наиболее простых случаев. Большинство защитных композиций с неоднородностями - это трехмерные объекты, поэтому применение для расчета прохождения γ -излучения через такие защиты трехмерных расчетных программ, использующих метод Монте-Карло, будет иметь большое практическое значение и может привести к существенному ускорению и улучшению качества расчетных исследований.

Эксперименты. Для сравнения с расчетами были проведены две серии экспериментов. В первой серии [4] изучалось распределение рассеянного компонента γ -излучения точечных изотропных радионуклидных источников ^{60}Co ($E_\gamma = 1,25$ МэВ) и ^{137}Cs ($E_\gamma = 0,661$ МэВ) вдоль оси прямых полых цилиндрических каналов в защите из парафина, графита, свинца (каналы диаметром по 5 см), а также железа (канал диаметром 10 см). Точечный источник во всех экспериментах располагали на оси канала в плоскости переднего среза макета. Подбор защитных сред позволял выяснить влияние материала среды на характер и форму распределения рассеянного компонента γ -излучения по каналу. Геометрия эксперимента представлена на рис. 1,а.

Во второй серии экспериментов (рис. 1,б,в) изучалось распределение γ -излучения плоских изотропных радионуклидных источников ^{60}Co и ^{137}Cs , которые моделировались перемещением точечных изотропных источников вдоль оси прямых полых цилиндрических каналов в защите из железа (канал диаметром 10 см, источник ^{60}Co) и в многослойной железо-графитовой защите, составленной из чередующихся слоев железа и графита с толщиной каждого слоя 12 и 20 см соответственно (канал диаметром 10 см, источники ^{60}Co и ^{137}Cs). Источники γ -излучения располагали в плоскости переднего торца макета. Методика проведения эксперимента позволяла разделять распределение полной интенсивности γ -излучения в канале на два компонента: от видимой из точки детектирования части источника $[I_{\text{пр}}(Z) + I_{\text{ал.пр}}(Z)]$ и от невидимой части источника $[I_{\text{нат}}(Z) + I_{\text{ал.нат}}(Z)]$, где $I_{\text{пр}}$ и $I_{\text{ал.пр}}$ - интенсивности соответственно нерассеянного и рассеянного γ -излучения от видимой части источника; $I_{\text{нат}}$ и $I_{\text{ал.нат}}$ - интенсивности соответственно нерассеянного и рассеянного γ -излучения от невидимой части источника.

Во всех экспериментах детектирование γ -излучения проводилось счетчиком типа СБМ-10 с системой фильтров [2]. Погрешности экспериментов в первой серии не превышали 7%, а во второй серии

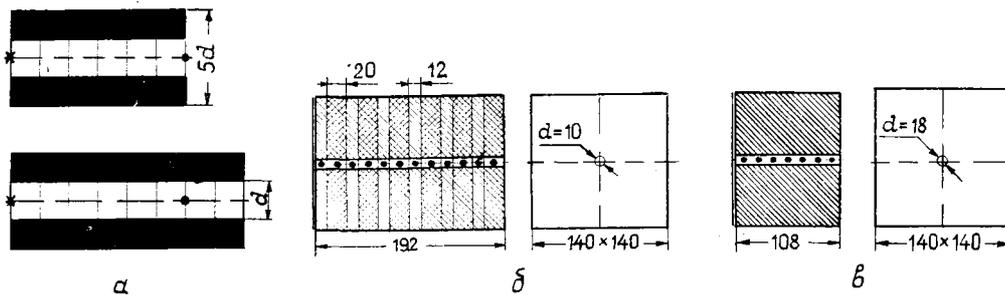


Рис.1. Схемы экспериментов: * - источник; • - детектор; ■ - материал защиты; ▨ - железо; ▩ - графит

погрешность в распределении компонента полной интенсивности γ -излучения по каналу от видимой из точки детектирования части источника составляла 10% вблизи источника и 15% в конце канала, а для компонента от невидимой части источника - около 10% вблизи источника, до 30-40% в конце канала.

Расчеты. Расчетные исследования были выполнены по трехмерным программам ЗАМОК и ММК22G. Программа ЗАМОК [1] использует метод Монте-Карло в сочетании с конечно-разностными методами для решения уравнения переноса излучения в трехмерной геометрии. Групповые константы для расчета (15 групп по γ -квантам) подготавливаются с помощью автоматизированного комплекса программы ОБРАЗ [5].

Программа ММК22G, использующая метод Монте-Карло (авторы А.В.Овчинников и В.Б.Полевой), разработана на основе библиотеки программ ММК22 [6]. В ней реализована следующая модель взаимодействия γ -квантов с веществом:

- розыгрыш пробега и типа реакции (комpton-рассеяние, образование пар, фотоэффект) осуществляется с использованием 15-групповых констант;

- ведется детальное слежение за энергией γ -кванта;

- комpton-рассеяние моделируется точно в соответствии с законом Клейна - Нишины - Тамма по алгоритму [7];

- реакция образования электрон-позитронных пар моделируется при $E_\gamma \geq 1,022$ МэВ. При этом в точке взаимодействия образуются два γ -кванта с $E_\gamma = 0,511$ МэВ.

При расчетах потока энергии в каналах использовалась систематическая выборка начального направления γ -кванта преимущественно вдоль канала. Смещение компенсировалось соответствующими начальными весами. Программа рассчитывает для заданных на оси канала точек значение среднего потока энергии излучения, который и приводится в качестве расчетных значений.

Результаты экспериментально-расчетных исследований представлены на рис. 2-4.

Анализ сравнения экспериментальных и расчетных результатов:

1. Расчеты, выполненные по программам ЗАМОК и ММК22G, в целом хорошо согласуются с экспериментами.

2. При сравнении расчетных результатов с экспериментами первой серии наблюдается хорошее согласие расчета с экспериментом в распределении рассеянного компонента γ -излучения вдоль оси прямого полого цилиндрического канала для таких сред, как парафин и графит (см. рис.2, а, б). Наблюдается, однако, систематическое занижение расчетом по программе ММК22G (по программе ЗАМОК в несколько меньшей степени) потока рассеянного излучения в свинце и завышение в железе (см. рис.2, в, г). По-видимому, это объясняется отличием реального спектра в области значительного фотоэффекта от спектра, принятого при подготовке групповых констант. Для более корректного сравнения расчетов и экспериментов необходимо учесть энергетическую зависимость реального счетчика γ -квантов в низкоэнергетической области, а также учитывать то обстоятельство, что эксперимент дает информацию практически в точке на оси канала (реальный счетчик СБМ-10 с фильтрами имеет диаметр 10 мм и длину 20 мм), а расчет по программе ММК22G ведется для зоны, равной сечению канала. Расчет по программе ЗАМОК дается для точки на оси канала (локальная оценка), поэтому результаты расчетов, возможно, лучше согласуются с экспериментом.

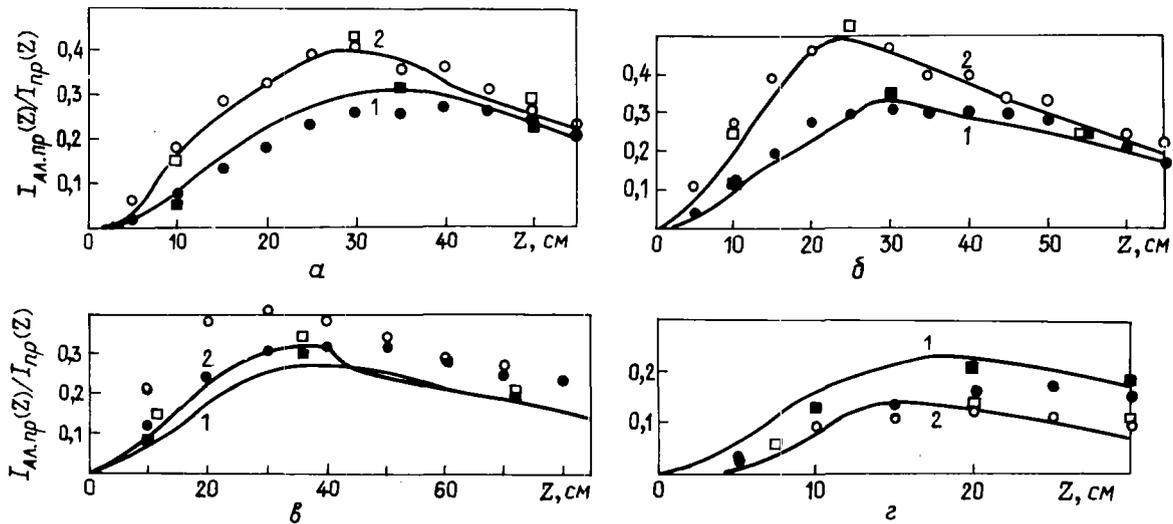


Рис.2. Распределения $I_{\alpha,pr}(Z)/I_{pr}(Z)$ вдоль оси прямого полого цилиндрического канала диаметром 5 см в парафине (а), графите (б), свинце (в) и диаметром 10 см в железе (г) для радионуклидных источников ^{137}Cs ($E_{\gamma}=0,661 \text{ МэВ}$ (кривая 1) и ^{60}Co ($E_{\gamma}=1,25 \text{ МэВ}$) (кривая 2). Геометрия эксперимента рис.1,а: — эксперимент; ■, □ — расчет по программе ZAMOK; ●, ○ — по программе MMR22G. Темные точки относятся к кривой 1, светлые — к кривой 2

Рис.3. Распределения полной интенсивности γ -излучения (кривая 1) и ее составляющих от видимой (кривая 2) и невидимой (кривая 3) из точки детектирования частей плоского изотропного источника ^{60}Co ($E_{\gamma}=1,25 \text{ МэВ}$) вдоль оси прямого полого цилиндрического канала диаметром 10 см в железе. Геометрия эксперимента рис.1,в: — эксперимент; ● — расчет по программе MMR22G

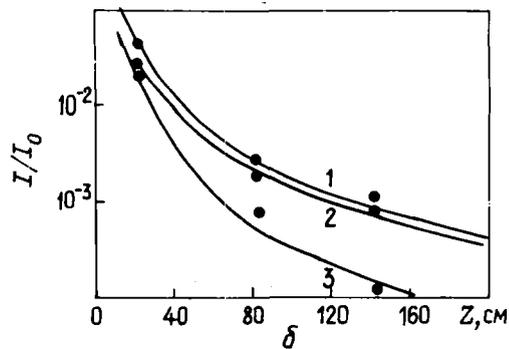
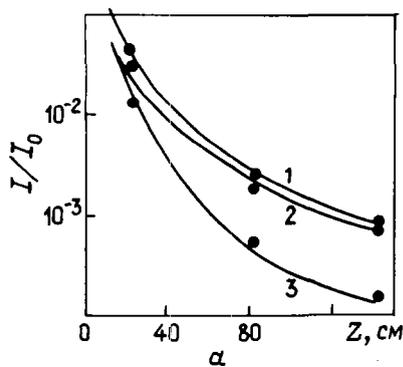
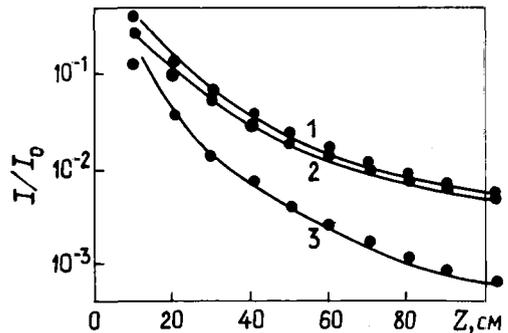


Рис.4. Распределения полной интенсивности γ -излучения (кривая 1) и ее составляющих от видимой (кривая 2) и невидимой (кривая 3) из точки детектирования частей источников ^{60}Co ($E_{\gamma}=1,25 \text{ МэВ}$) (а) и ^{137}Cs ($E_{\gamma}=0,661 \text{ МэВ}$) (б) вдоль оси прямого полого цилиндрического канала диаметром 10 см в многослойной железо-графитовой защите. Геометрия эксперимента рис.1,б: — эксперимент; ● — расчет по программе ZAMOK

3. Для случая плоских источников (см. рис.3,4,а,б) наблюдается хорошее согласие расчетов по программам ЗАМОК и ММК22G с результатами экспериментов как в распределении по оси канала полной интенсивности γ -излучения, так и в распределении отдельных ее компонентов. Практически везде расчеты согласуются с экспериментами в пределах погрешностей измерений.

Основные выводы:

1. Необходимо продолжить сравнение результатов расчетов по программам ЗАМОК и ММК22G с экспериментами по прохождению γ -излучения через прямые неоднородности других геометрических форм (кольцевые каналы и плоские щели), а также через многосекционные неоднородности, как полые, так и заполненные, в целях более широкого исследования применимости этих расчетных программ к описанию прохождения γ -излучения через защиты с неоднородностями.

2. Трехмерные расчетные программы ЗАМОК и ММК22G, использующие метод Монте-Карло, можно рекомендовать к практическому использованию при исследовании защитных композиций с полыми цилиндрическими неоднородностями.

Список литературы

1. Илюшкин А.И., Линге И.И., Мазанов В.Л. и др. ЗАМОК - программа расчета полей нейтронов и гамма-квантов в трехмерной геометрии методом Монте-Карло. - Тезисы докладов на IV Всесоюзной научной конференции по защите от ионизирующих излучений ядерно-технических установок. Томск: ТПИ, 1985, с.31.
2. Николаев А.Н. Новый подход и классификация неоднородностей и систематизации экспериментов по прохождению ионизирующих излучений через неоднородности в защите: Препринт ФЭИ-1726. Обнинск, 1985.
3. Золотухин В.Г., Климанов В.А., Лейпунский О.И. и др. В кн.: Прохождение излучений через неоднородности в защите. М.: Атомиздат, 1968.
4. Ганьшин А.И., Левитин А.С., Николаев А.Н. и др. Пространственные распределения гамма-излучения в цилиндрических каналах. - В кн.: Вопросы физики защиты реакторов. М.: Атомиздат, 1970, вып.4.
5. Хохлов В.Ф., Шейно И.Н. Атомная энергия, 1978, т.15, № 2, с.112.
6. Франк-Каменецкий А.Д. Библиотека программ на ФОРТРАНЕ для расчета реакторов методом Монте-Карло. - В кн.: Доклады по программам и методам физического расчета быстрых реакторов. Дмитровград: НИИАР, 1975, с.250-254.
7. Андросенко П.А., Попова Г.В. О моделировании распределения Клейна - Нишины - Тамма: Препринт ФЭИ-1002. Обнинск, 1980.

Статья поступила в редакцию 28 апреля 1986 г.

УДК 621.039.547

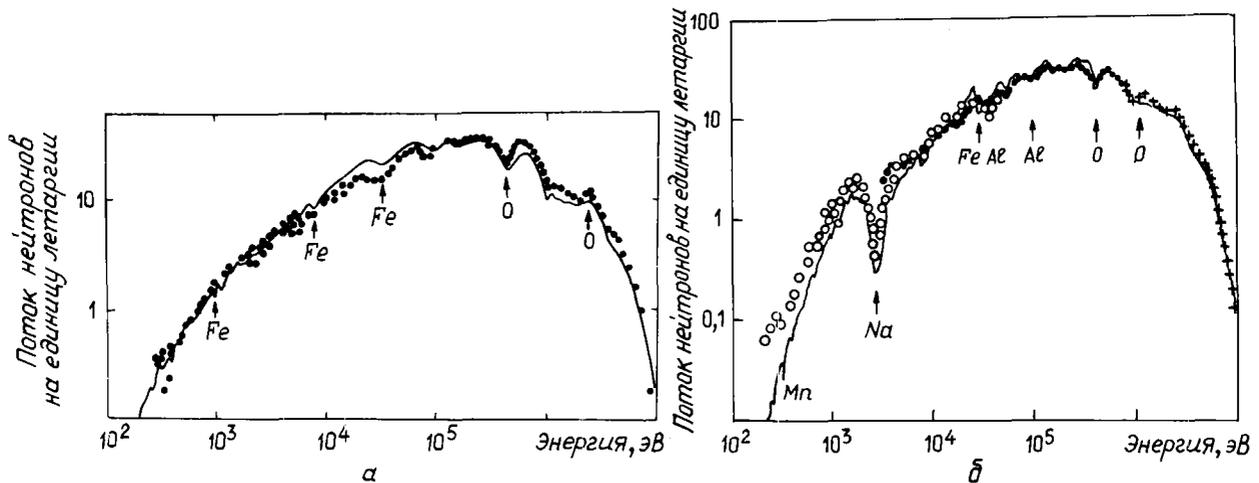
КОНСТАНТНАЯ СОСТАВЛЯЮЩАЯ ПОГРЕШНОСТИ РАСЧЕТА
СПЕКТРА НЕЙТРОНОВ В АКТИВНОЙ ЗОНЕ БЫСТРОГО РЕАКТОРА

В. В. Возяков, Г. Н. Мантуров

THE CONSTANT COMPONENT OF ERROR OF FAST REACTOR NEUTRON SPECTRUM CALCULATION. The analysis of constant component of 26-group fluxes is made with using statistical program complex CORE. The flux sensibility coefficients relatively variations of main cross-sections for reactor nuclides were determined in direct calculations at 3 p.c. cross-section changes.

При расчете характеристик быстрого реактора основную неопределенность вносят погрешности используемых в расчетах групповых констант [1]. Величины этих погрешностей для основных характеристик - коэффициентов размножения и воспроизводства - оценены в работе [2]. В реакторно-физичес-

ком эксперименте наряду с данными о критичности, отношениях средних сечений и коэффициентах реактивности нередко измеряют энергетический спектр нейтронов в различных пространственных областях. При сравнении этих данных с расчетными возникает задача оценки погрешностей последних. Существенны два основных источника погрешностей: приближенность группового подхода, обусловленная неточностью учета поведения потока внутри группы; неточность используемых групповых микросечений, обусловленная ошибками эксперимента и оценки. Остановимся кратко на первой погрешности. Сравнение групповых потоков, вычисленных с константами, которые подготовлены либо по методике БНАБ, либо с учетом детального энергетического спектра в сборке, выявляет различие $\delta\bar{\varphi} = \bar{\varphi}_{\text{БНАБ}} - \bar{\varphi}_{\text{точн}}$, имеющее смысл погрешности расчета вследствие приближенности группового метода подготовки констант. Эта составляющая погрешности для большинства групп равна 1-2% и увеличивается до 3-6% в группах, перекрывающих широкие рассеивающие резонансы натрия, кислорода и железа. Приведенные численные результаты получены в работе [3]. Изучалось [4,5] расхождение экспериментальных и расчетных энергетических спектров $\Delta\bar{\varphi}_{\text{э-р}}$ сборок БЭС (на рисунке приведены спектры двух сборок, используемых в данной работе). Показано, что имеющиеся различия в значимой части спектра для сборок, моделирующих активные зоны реакторов-размножителей с окисным урановым топливом, составляют 5-40%, т.е. указанная погрешность расчета $\delta\bar{\varphi}$ (назовем ее систематической) не объясняет расхождений. Поэтому становится актуальным выяснение погрешности расчета из-за неточности собственно микросечений, т.е. статистической константной составляющей. Эта составляющая оценивалась в работе [6], но использованная там матрица ошибок групповых констант едва ли отражает современный уровень знаний. Кроме того, применялось грубое энергетическое разбиение на 4 группы. В данной работе статистическая константная составляющая оценивается при 26-групповом разбиении и с современной матрицей погрешностей сечений.



Энергетический спектр нейтронов критических сборок БЭС № 33(а) и № 45(б). Сплошная кривая - расчет; точки - эксперимент

Как известно, матрица дисперсий и ковариаций погрешностей расчета групповых потоков записывается в виде

$$D_{\varphi} = \left\| \frac{\delta\varphi_k \delta\varphi_{k'}}{\varphi_k \varphi_{k'}} \right\| = HWH^T,$$

где H - матрица коэффициентов чувствительности групповых потоков φ_k к групповым сечениям σ_{xi}

$$H = \left\| \frac{\partial\varphi_k / \varphi_k}{\partial\sigma_{xi} / \sigma_{xi}} \right\|;$$

W - ковариационная матрица погрешностей сечений нуклидов, входящих в состав среды

$$W = \left\| \frac{\delta\sigma_{xi} \delta\sigma_{yj}}{\sigma_{xi} \sigma_{yj}} \right\|.$$

В качестве модели быстрого реактора принят стандартный реактор Бейкера [7], имитирующий реактор-размножитель с окисным урановым топливом и натриевым теплоносителем. Коэффициенты чувствительности групповых потоков к основным сечениям нуклидов активной зоны (σ_f , σ_c , σ_{in} для ^{238}U , ^{239}Pu ; σ_{el} , σ_{in} для натрия, ^{16}O ; σ_{el} , σ_c , σ_{in} для железа, хрома, никеля) были определены в прямом расчете при вариации констант на 3%. Расчеты выполнены в 26-групповом приближении по программе ФУНКЦИОНАЛ комплекса программы СПЕКТР [8] с константным обеспечением в виде детальных файлов, групповые сечения которых близки к БНАБ-78.

В табл.1 приведены чувствительности групповых потоков φ_k к групповым сечениям σ_c^8 , σ_f^9 и σ_{el}^{16} . Как видно, величины чувствительностей распределены по группам довольно сложно: примерно до II-й группы они достаточно малы, а суммарные чувствительности $\frac{\partial\varphi_k/\varphi_k}{\partial\sigma_x/\sigma_x} = \sum_{i=1}^{26} \frac{\partial\varphi_k/\varphi_k}{\partial\sigma_{xi}/\sigma_{xi}}$ растут с ростом номера группы k .

В табл.2 приведены интегральные чувствительности потоков φ_k к вариациям сечений $\delta\sigma_x$ для наиболее значимых реакций. Данные представлены как без учета компенсации критичности при внесении возмущения $\delta\sigma_x$, так и с учетом компенсации изменением обогащения. Для наиболее важных реакций - σ_f^9 , σ_c^8 и σ_{in}^8 - учет компенсации критичности оказывает заметное влияние на величины чувствительностей, для остальных же реакций это влияние несущественно.

Оценка погрешностей расчета спектра нейтронов из-за неопределенностей групповых микроскопических сечений и анализ источников этих погрешностей проводились в рамках статистического программного комплекса CORE системы программ и архивов ИНДЭКС [9]. В качестве оценки матрицы W использовали 12-групповые ковариационные матрицы погрешностей констант БНАБ-МИКРО из работы [1],

В табл.3 приведены оцененные источники статистической константной составляющей погрешности расчета спектра нейтронов и суммарные погрешности. Представленные данные получены без учета и с учетом компенсации критичности обогащением. Как видно из табл.3, учет компенсации критичности не оказывает существенного влияния на оценку суммарной погрешности расчета групповых потоков φ_k . Довольно неожиданным является относительно малая константная составляющая погрешности расчетных спектров φ_k , которая колеблется от 3 до 7%, причем наименьшая величина приходится на максимум спектра нейтронов. Что касается области ниже 465 эВ (15-20 группы), то оцененная константная составляющая увеличивается с ростом номера группы (от 10 до 60%), что и следовало ожидать. Таким образом получили количественную оценку двух основных компонентов погрешности расчета спектра нейтронов. Привлекая погрешность эксперимента, можно корректно сопоставить расчет с экспериментом. Расчетно-экспериментальное расхождение $\Delta\bar{\varphi}_{э-р}$, имеющее особенности для каждой сборки, обнаруживает общую черту: как правило, оно в 2-5 раз превышает ошибку эксперимента в большинстве энергетических групп и для большинства рассмотренных в работах [4,5] 12 сборок БФС. В табл.4 даны результаты сопоставления двух типичныхборок № 33, 42 и сборки № 45, для которой расхождение $\Delta\varphi_{э-р}$ удовлетворительно объясняется экспериментальной погрешностью или совокупностью всех составляющих погрешности. Результаты измерений на сборке № 45 можно объяснить, по-видимому, большей достоверностью эксперимента. Например, поправки, вводимые для достижения адекватности условий расчета и эксперимента, для этой сборки установлены более тщательно. Как видно из табл.4, расчетно-экспериментальное расхождение дляборок № 33, 42 и им подобных по качеству эксперимента невозможно объяснить и с учетом всех составляющих погрешности. Использованная авторами матрица погрешностей групповых констант проверена, например, в работе [2] (при расчете совокупности данных интегральных экспериментов). Можно считать, что погрешности констант скорее завышены, чем занижены. Проведенный анализ составляющих погрешности расчета спектра нейтронов и интерпретация расхождений $\Delta\varphi_{э-р}$ позволяют выработать определенные требования к спектральным измерениям на критических сборках. Очевидно, эксперимент малоинформативен, и его нельзя использовать для корректировки констант, если погрешность эксперимента сравнима или превышает константную составляющую погрешности расчета.

Таблица 2

Интегральные коэффициенты чувствительности групповых потоков φ_k к вариации групповых сечений

Тип материала	Сечение реакции	Тип КЧ	Чувствительности групповых потоков φ_k																											
			I	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19									
Топливо	β_f^g	А	0,19	0,19	0,18	0,17	0,16	0,14	0,09	0,02	-0,02	-0,09	-0,17	-0,24	-0,27	-0,38	-0,63	-0,95	-1,5	-2,3	-5									
		Б	0,36	0,34	0,33	0,30	0,30	0,27	0,20	0,09	-0,01	-0,03	-0,32	-0,49	-0,50	-0,80	-1,49	-2,40	-3,7	-5,6	-13,5									
	β_c^g	А	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,02	0	-0,04	-0,1	-0,12	-0,25	-0,42	-0,70	-1,1	-1,5	-3									
		Б	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,03	0,03	0,02	0,01	-0,03	-0,08	-0,09	-0,20	-0,34	-0,57	-0,90	-1,2	-2,25								
	β_c^g	А	0,18	0,18	0,18	0,17	0,16	0,15	0,13	0,1	0,04	-0,07	-0,24	-0,45	-0,53	-0,69	-0,9	-1,14	-1,5	-1,9	-3									
		Б	0,09	0,09	0,10	0,09	0,08	0,07	0,07	0,06	0,04	-0,03	-0,16	-0,3	-0,35	-0,39	-0,4	-0,32	-0,24	-0,04	2									
	β_f^g	А	0,04	В остальных группах КЧ $\leq 0,01$																										
		Б	0,07	0,02	0,03	0,02	0,03	0,02	0,02	0,02	0,01	-0,01	-0,02	-0,04	-0,06	-0,08	-0,09	-0,25	-0,4	-0,57	-1,5									
	β_{in}^g	А	-0,15	-0,24	-0,30	-0,37	-0,29	-0,09	-0,02	0,02	0,08	0,14	0,15	В остальных группах = 0,16																
		Б	-0,17	-0,26	-0,32	-0,39	-0,31	-0,11	-0,03	-0,01	0,08	0,15	0,17	0,19	0,2	0,23	0,28	0,35	0,45	0,60	1,2									
	β_{in}^g	А	-0,02	В остальных группах КЧ $\leq 0,01$																										
		Б	-0,02	В остальных группах КЧ $\leq 0,01$																										
	Сталь	β_c	А	В остальных группах КЧ = 0,03																										
			Б	В остальных группах КЧ = 0,03																										
β_{in}		А	-0,20	-0,22	-0,19	-0,14	-0,08	+0,02	0,03	0,3	В остальных группах КЧ = 0,03																			
		Б	-0,20	-0,22	-0,19	-0,14	-0,08	0,02	0,03	0,3	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,09	0,12	0,18	0,24	0,58								
Замедлители	β_{el}^{Na}	А	0,03	0,03	0,01	0,01	-0,01	-0,10	-0,10	-0,05	-0,07	0,04	0,1	0,16	0,13	0,48	0,84	1,1	1,4	1,8	3,2									
		Б	0,02	0,02	0	0	-0,02	-0,10	-0,10	-0,05	-0,07	0,04	0,11	0,17	0,14	0,5	0,88	1,16	1,5	1,9	3,6									
	β_{el}^o	А	-0,01	-0,04	-0,04	-0,07	-0,09	-0,2	-0,18	-0,14	-0,05	0,07	0,20	0,60	0,90	0,80	1	1,4	2	2,8	5,4									
		Б	-0,04	-0,06	-0,06	-0,09	-0,11	-0,22	-0,20	-0,15	-0,05	0,06	0,17	0,56	0,85	0,70	0,9	1,25	1,6	2,4	-3,9									
	β_{in}^{Na}	А	-0,14	-0,11	-0,09	-0,06	-0,15	-0,04	+0,01	В остальных группах КЧ = 0,02																				
		Б	-0,14	-0,11	-0,09	-0,06	-0,15	-0,04	0,01	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,04	0,05	0,07	0,09	0,2									

Примечание. А - коэффициенты чувствительности, вычисленные без компенсации критичности, Б - с учетом компенсации критичности изменением обогащения.

Таблица 3

Составляющие погрешности групповых потоков φ_k ,
обусловленные неопределенностями групповых сечений, %

Тип материала	Сечение реакции	Тип КЧ	Погрешности групповых потоков $\delta\varphi_k$																			
			I	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	
Топливо	σ_f^g	А	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,1	0,1	0,4	0,5	0,6	0,8	1,5	3	5	8	12	25	
		Б	1	1	1	1	1	1	0,8	0,3	0,1	0,4	1	1,2	1,8	3	7	9	16	25	50	
	σ_c^g	А	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,3	0,5	2	3	5	8	11	22
		Б	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,3	0,4	1,5	2,5	4	7	9	17
	σ_c^8	А	0,7	0,7	0,7	0,6	0,6	0,6	0,5	0,4	0,3	0,5	1	1,1	1,5	2,5	3,4	4,7	7	10	19	
		Б	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,3	0,2	0,2	0,2	0,6	0,7	1	1,2	1,5	1,2	1,2	0	4	
	σ_f^8	А	Во всех группах КЧ $\leq 0,01$																			
		Б	В остальных группах КЧ $\leq 0,01$											0,1	0,1	0,2	0,3	0,3	0,7	1	2	5
	σ_{in}^8	А	2	2,5	4	6	4	1,4	1,2	1,2	1,2	В остальных группах КЧ = 2										
		Б	2	2,5	4	6	4	1,5	1,5	1,5	1,5	2	2	2	2,5	3	4	5	7	9	14	
	σ_{in}^g	А	0,5	1	1,3	1,5	В остальных группах КЧ = 0,5															
		Б	0,5	1	1,3	1,5	В остальных группах КС = 0,5										1	2				
Сталь	σ_c	А	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,3	0,4	0,5	0,6	0,6	1	1	
		Б	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,2	0,2	0,2	0,1	0,1	0,1	0,1	
	σ_{in}	А	2	2	1,8	1	0,8	В остальных группах КЧ = 0,3														
		Б	2	2	1,8	1	0,8	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,6	1	1,5	2	5	
Замедлители	σ_{el}^{Na}	А	0,5	0,5	0,8	1	1,5	2	2	2	1,3	1	1	1	1	3	6	8	10	13	22	
		Б	0,5	0,5	0,5	1	1,5	2	2	2	1,3	1	1	1	1	3	6	8	10	15	25	
	σ_{el}^o	А	0,5	0,5	0,9	0,6	1,2	1,7	1	0,8	0,8	0,8	0,8	0,8	0,8	1,3	1,3	1,4	2	3	4	8
		Б	0,5	0,5	0,9	0,6	1,2	1,7	1	0,8	0,8	0,8	0,8	0,8	0,8	1,3	1,3	1,4	2	3	5	10
	σ_{el}^{Na}	А	3	2	2	1	3	1	0,5	0,5	В остальных группах КЧ = 0,5											
		Б	3	2	2	1	3	1	0,5	0,5	В остальных группах КЧ = 0,5										1	1,5
Суммарный вклад, %	А	4	4	5	6,5	5,5	3,5	3	3	2	2,5	3	3	3,5	5	8	12	17	24	45		
	Б	4	4	5	6,5	5,5	3,5	3	3	2	2,5	3	3	4	6	10	10	22	32	60		

Примечание. А - составляющая погрешности, вычисленная по КЧ типа А (см.табл.2), Б - то же, но с КЧ типа Б.

Таблица 4

Сравнение групповых потоков некоторых сборок БЭС

Номер группы	Интервал энергий	Различие групповых потоков $\Delta\varphi_{э-р}$, полученных из усредненных результатов эксперимента и расчета, и методическая составляющая погрешности $\delta\varphi$ при расчете, %						Погрешность эксперимента, %	Константная составляющая погрешности при расчете, %
		БЭС-33		БЭС-42		БЭС-45			
		$\Delta\varphi$	$\delta\varphi$	$\Delta\varphi$	$\delta\varphi$	$\Delta\varphi$	$\delta\varphi$		
1	10-6,5 МэВ	-5	5	-40	2	-12	4	15	10
2	6,5-4 "	42	-2	-50	-1	13	-1	10	7
3	4-2,5 "	35	1	-40	2	11	-1	10	7
4	2,5-1,4 "	24	-1	-34	-2	8	-1	10	7
5	1,4-0,8 "	27	3	-1	2	5	1	10	6
6	0,8-0,4 "	35	-1	3	-2	4	-3	7	4
7	0,4-0,2 "	2	1	3	1	-10	1	5	3
8	0,2-0,1 "	3	1	20	1	-5	1	7	3
9	100-46,5 кэВ	-10	-2	7	1	-8	-1	7	3
10	46,5-21,5 "	-26	-1	-6	1	-8	-1	10	3
11	21,5-10 "	-21	1	-10	1	-9	1	10	5
12	10-4,65 "	-14	1	1	1	19	-2	10	7
13	4,65-2,15 "	3	-5	5	-5	70	-5	10	10
14	2,15-1 "	5	2	-13	2	44	4	10	6
Доля нейтронов в спектре ниже 10 кэВ, %		9		14		4		-	-

Примечание. $\Delta\varphi_{э-р} = (\varphi_{\text{эксп}} - \varphi_{\text{расч}}) / \varphi_{\text{расч}}$.

Основные выводы работы:

1. В случае корректного эксперимента имеющиеся расхождения $\Delta\varphi_{э-р}$ полностью объясняются оцененными составляющими погрешности.
2. Желательна такая точность спектральных измерений на сборках, при которой погрешность групповых потоков не более 3-5%. Если такие данные будут получены, их можно использовать для проверки надежности используемых констант, а возможно, и для их корректировки.
3. Выполненные измерения спектров критических сборок желательно переоценить в целях более тщательного введения различных поправок, нормировок и т.д.

Список литературы

1. Абагян Л.П., Базазянц Н.О., Николаев М.Н., Цибуля А.М. Групповые константы для расчета реакторов и защиты. М.: Энергоиздат, 1981.
2. Алексеев Г.Н., Мантуров Г.Н., Николаев М.Н. Оценка погрешностей расчета коэффициентов критичности и воспроизводства энергетических быстрых реакторов из-за неточности нейтронных данных. - Атомная энергия, 1980, т.49, вып.4, с.221.
3. Воротынецев М.Ф., Воропаев А.И., Пивоваров В.А. и др. Анализ погрешностей алгоритмов подготовки групповых констант в инженерных расчетах быстрых реакторов. - Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1983, вып.4 (53), с.26-37.
4. Возяков В.В., Кузин Е.Н., Литяев В.М., Шапарь А.В. Энергетические спектры нейтронов критических сборок БЭС. - Там же, с.49-55.

5. Казанский Д.А., Ваньков А.А., Возяков В.В. и др. Изучение энергетических спектров нейтронов на сборках БЭС. - Там же, 1981, вып.4(43), с.4-12.
6. Ваньков А.А., Воропаев А.И., Дрова Л.Н. Анализ реакторно-физического эксперимента. М.: Атомиздат, 1977.
7. Basker A.R., Hammond A.D. Calculations for a large fast reactor. - TRG-report 2133(A), 1971.
8. Возяков В.В., Пивоваров В.А. Реализация алгоритма расчета спектра нейтронов на основе библиотек оцененных ядерных данных. - Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1976, вып.21, с.185-195.
9. Мантуров Г.Н. Система программ и архивов ИНДЭКС. - Там же, 1984, вып.5(59), с.20-23.

Статья поступила в редакцию 8 августа 1986 г.

КОНСТАНТЫ И ПАРАМЕТРЫ СТРУКТУРЫ ЯДРА И ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ

УДК 539.14

ВЕРОЯТНОСТИ КОНВЕРСИИ ЯДЕРНЫХ ПЕРЕХОДОВ МАЛОЙ ЭНЕРГИИ ($\hbar\omega \leq 3$ кэВ)
НА ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧКАХ СВОБОДНЫХ АТОМОВ*

Д. П. Г р е ч у х и н, А. А. С о л д а т о в

CONVERSION OF LOW ENERGY NUCLEAR TRANSITIONS ($\hbar\omega \leq 3$ keV) ON EXTERNAL ELECTRONIC SHELLS OF AN ISOLATED ATOM. Conversion of some low-energy transitions ($\hbar\omega \leq 3$ keV) in the nuclei ^{90}Nb , ^{99}Tc , ^{103}Ru , ^{110}Ag , ^{140}Pr , ^{142}Pr , ^{153}Gd , ^{159}Gd , ^{160}Tb , ^{165}Tm , ^{171}Lu , ^{173}W , ^{188}Re , ^{193}Pt , ^{2d}Hg , ^{205}Pb , ^{236}Pa , ^{250}Bk are investigated for the case of an isolated atom. The probabilities of the conversion transitions are calculated with the electron wave functions, obtained integrating numerically the Dirac equations in the atomic field in framework of the Hartree - Fock - Slater method. The calculation are carried out for the normal configuration of the valence band of the above enumerated atoms. The results of the calculation are tabulated in this paper.

Введение

I. В случае ядерных переходов малой энергии $E_1 I_1 \rightarrow E_2 I_2$ ($\hbar\omega = E_1 - E_2 \approx 3$ кэВ; $I_1 I_2$ - спин ядра в начальном и конечном состояниях) электроны атомной оболочки находятся фактически в статической зоне ядерного ΛL -мультиполя (ML или EL); случай $E0$ -конверсии не рассматривается. Вероятность внутренней конверсии в таких переходах существенно превышает вероятность излучения γ -кванта ядром. В этой ситуации более естественно оперировать непосредственно с вероятностью конверсии, чем с коэффициентами внутренней конверсии (КВК), которые здесь имеют огромные значения и становятся фактически ненаблюдаемыми величинами. Экспериментальные КВК по существу определяются переизлучением кванта по каналу "электронного мостика": сначала ядерный переход выбрасы-

* В полном объеме таблицы электронных факторов вероятностей конверсии могут быть получены в ЦАЯД ГКАЭ СССР (Центр по данным о строении атомного ядра и ядерных реакциях Госкомитета по использованию атомной энергии СССР) по адресу: 123182, Москва, Д-182, ИАЭ им.И.В.Курчатова, ЦАЯД. Здесь авторы ограничились инструкцией по их использованию на примере ядра $^{90}\text{Nb}_{41}$.

вает электрон из оболочки атома, затем этот электрон "садится" в образовавшуюся дырку путем излучения γ -кванта. В процессе конверсии при рассматриваемых энергиях активное участие принимают электроны валентной зоны [энергия связи орбит $\varepsilon \leq \frac{1}{2}(e^2/a_0) = 13,6$ эВ] и электроны внешних заполненных оболочек [$\varepsilon \leq (2-3)e^2/a_0$]. Строение внешних электронных орбит определяется характером окружения изучаемого атома в молекуле или конденсированной среде, в которую внедрен этот меченый изомерным ядром атом. Обусловленные изменением химического окружения вариации константы скорости распада λ (или времени жизни изомера τ) исходного ядерного состояния оказываются достаточно большими и доступными для экспериментального исследования. Сводка накопленных к 1972 г. данных по вариациям констант λ для некоторых изотопов, в том числе для конверсионных переходов в ядрах ^{90}Nb , ^{99}Tc , ^{193}Pt , ^{235}U , приведена в обзоре [1]. По конверсионным изомерам современное состояние эксперимента дано в обзоре [2].

Особенно детально изменение константы скорости распада λ изучено для E3-переходов изомеров ^{235}mU ($\hbar\omega = 76,8 \pm 0,5$ эВ) [3-5], $^{99\text{m}}\text{Tc}$ [6] и $^{90\text{m}}\text{Nb}$ (смешанный переход E3+M2) [7]. В случае внедрения изомеров урана и ниобия в металлы [4,5,7] обнаружены изменения $\delta\lambda/\lambda \approx 3-5\%$. Эти изменения константы скорости конверсионного перехода ядра при внедрении в среду или образовании химического соединения обусловлены различными механизмами, проявление которых отражает специфику процесса конверсии. Эффекты особенно ярко выражены при переходах малой энергии ($\hbar\omega$ равно нескольким килоэлектронвольтам). Общее исследование конверсионного процесса в связи с эффектами химического окружения атома проведено в работе [8].

В области малых энергий ядерных переходов, когда длина волны кванта $\lambda = c/\omega$ больше размера атомной оболочки, электромагнитные потенциалы перехода ΛL -мультипольности имеют зависимость вида $(1/z)^{L+1}$ на расстоянии z от ядра изомера, т.е. конверсия протекает в зоне поля статического мультиполя. В результате радиальные интегралы взаимодействия электрона с полем перехода ядра, определяющие вероятности конверсии, накапливаются на малых расстояниях в области радиуса $R \approx 0,1 a_0$ ($a_0 = \hbar^2/me^2 = 5,2917 \cdot 10^{-9}$ см - радиус Бора) для мультиполей M1, E2, M2, E3 и более высоких (исключение для E1). Впервые этот факт подчеркнут Дж.Слейтером [9], общее качественное исследование характера пространственного формирования КВК проведено группой Л.А.Слива [10], более конкретные качественные характеристики для некоторых изучаемых конверсионных изомеров получены авторами [8,11].

В зоне конверсии вид волновых функций электрона определяется в основном сильным кулоновским полем ядра, поэтому функции с одними и теми же орбитальным (l) и угловым (j) моментами слабо зависят от энергии. Эта зависимость проявляется в амплитуде волновой функции электрона в окрестности ядра [8]. При внедрении атома в среду или образовании молекулы орбиты конвергирующих электронов искажаются. Здесь возможно как изменение числовых значений амплитуд радиальных компонентов волновой функции в окрестности ядра-изомера (сжатие - растяжение орбиты), так и обусловленная пространственной структурой возмущающего поля атомов-соседей гибридизация орбит. Последние эффекты выражаются в перераспределении амплитуд разложения волновых функций по состояниям с моментами (l, j). Оба эффекта (сжатие - растяжение и гибридизация) наблюдаются как для связанных орбит, так и для состояний непрерывного спектра электрона. Эффекты должны экспоненциально затухать с ростом энергии связи орбиты. Для самых внешних связанных орбит масштабы вносимых изменений при сильной деформации орбит могут быть оценены, если имитировать эти эффекты изменением заселенностей атомных орбит, т.е. вариацией структуры конфигурации валентной зоны оболочки атома. Именно такого рода упрощенная оценка возможного масштаба $\delta\lambda$ была проведена для E3-изомера ^{235}mU путем перебора возможных конфигураций шести внешних электронов оболочки атома [12]. Нами установлено наличие сильного воздействия изменения числа 5f-электронов на вероятность конверсии с заполненных 6p-орбит [$\delta\lambda/\lambda \approx 8\%$ при $\Delta N(5f) = 1$], хотя сами 5f-электроны вносят ничтожный непосредственный вклад в вероятность конверсии E3-изомера.

При взаимодействии атомов кроме изменения состояний электронов, принадлежащих фиксированному атому, происходит просачивание (делокализация) в окрестность ядра-изомера электронов, ранее принадлежавших изолированным атомам-соседям. Этот эффект делокализации открывает новый канал конверсии, отсутствующий в ситуации изолированного атома, он также дает изменение $\delta\lambda$. Наряду с эффектами гибридизации орбит этот канал конверсии представляет особый интерес в исследовании электронной структуры оболочки.

2. Введенная классификация эффектов, конечно, условна, но она отражает качественно структуру возможных типов деформации электронных орбит, приводящих к изменению константы $\delta\lambda$ в конверсионном переходе ядра. Ясно, что наблюдаемые на опыте величины $\delta\lambda$ являются суммарными как по вкладам различных электронных орбит, включенных в процесс конверсии, так и по вышестоящим типам деформации, которым подвергаются эти орбиты при взаимодействии атомов. Сами по себе значения $\delta\lambda/\lambda$, как правило, не информативны: конечно, большие величины свидетельствуют о существенной перестройке электронной оболочки, но малая величина еще не означает, что оболочка изменилась слабо, поскольку вклад разных орбит в $\delta\lambda$ может иметь различные знаки. Неизмеримо более детальную информацию о структуре электронной оболочки содержит дифференциальный спектр электронов конверсии, разрешенный на отдельные линии (или группы близких линий), соответствующие конверсии с отдельных электронных орбит. Для изомеров ^{235m}U и ^{99m}Tc такие спектры с разрешением по энергии около 1 эВ были уже изучены в работах [13,14]. Именно вариации парциальных вероятностей конверсии ядерного ΛL -перехода на отдельных электронных орбитах и следует рассматривать в качестве основного объекта экспериментального и теоретического исследований. Чтобы иметь возможность оценивать характер и глубину перестройки электронной оболочки при взаимодействии атомов по спектрам электронов конверсии, необходимо иметь в качестве опорных данные о парциальных вероятностях конверсии в том случае, когда атом поставлен в фиксированные "стандартные" условия. Это, конечно, не устраняет необходимости последующего расчета конверсионного спектра для каждого конкретного химического соединения или кластера. Подобного рода весьма трудоемкие расчеты могут быть проведены с волновыми функциями электронных орбит, найденными, например, в рамках метода $X\alpha$ -рассеянных волн путем численного интегрирования уравнения Дирака в самосогласованном многоцентровом поле молекулы или кластера. Этот путь анализа с успехом уже применяется к соединениям технеция [14]; для изомера ^{235m}U необходимо построить функции непрерывного спектра электрона в поле кластера.

Единой для всех атомов формой реперных условий существования является ситуация изолированного свободного атома. Здесь расчет конверсионного спектра может быть сделан в рамках различных вариантов, исходящих из метода Хартри - Фока. К сожалению, эта идеализированная ситуация в эксперименте практически не реализуется: атомы в мишенях всегда имеют соседей, существенно влияющих на состояния электронов с энергиями связи вплоть до величины примерно $2e^2/a_0$ (около 60 эВ) [13,14]. Тем не менее детальные расчеты парциальных вероятностей конверсии ΛL -мультиполей на электронной оболочке изолированного атома необходимы прежде всего для первичного анализа экспериментальных спектров в целях выделения области спектра с наибольшими отклонениями от этого реперного спектра, поскольку для глубоких орбит возможна привязка к реперному спектру. Эти данные необходимы также для грубой начальной оценки возможной амплитуды вариаций $\delta\lambda/\lambda$ при изменении конфигурации валентной зоны. Кроме того, полученные реперные вероятности конверсии позволяют по известным периодам полураспада конверсионного изомера найти величины ядерных матричных элементов, несущих информацию о структуре ядерных состояний. Отметим два изомера: ^{235m}U и ^{90m}Nb . В случае изомера ^{235m}U найден [11] матричный элемент E3-перехода, который оказался близким по величине к протонному одночастичному элементу, хотя в случае ядра $^{235}\text{U}_{92}$ происходит изменение состояния нечетного нейтрона. Такое большое усиление E3-перехода, как оказалось, обусловлено возбуждением окупольных колебаний остова (ядра ^{234}U). Для изомера ^{90m}Nb проведенный нами подобного рода расчет вероятностей конверсии зафиксировал весьма сильное торможение M2-перехода, что обусловлено взаимным погашением вкладов M2-переходов протонной и нейтронной дырок $(1f\ 5/2)^{-1} \rightarrow (1g\ 9/2)^{-1}$ в оболочке ядра $^{90}\text{Nb}_{41}$.

Имея в виду указанные выше области применения парциальных вероятностей конверсии, авторы приводят в данной работе результаты расчета факторов конверсии ядерных ΛL -переходов с энергиями $\hbar\omega \lesssim 5$ кэВ для группы отобранных изотопов. В отличие от стандартных таблиц КВК для каждого ядра рассматривался процесс конверсии фиксированного по мультиполюсности перехода в интервале энергии, ограниченном экспериментальной ошибкой измерения. В расчете использовался релятивистский вариант метода Хартри - Фока - Слейтера (с поправкой Латтера) [XFC(L)] для расчета среднего поля атома и электронных волновых функций [15,16].

Вероятности конверсии ядерного ΛL -перехода на (nlj) -орбите изолированного атома

I. Рассмотрим ΛL -мультипольный переход ядра с энергией $\hbar\omega = E_1 - E_2$ из состояния $|E_1 I_1 M_1\rangle$ в конечное состояние $|E_2 I_2 M_2\rangle$, где $E_i I_i M_i$ - соответственно энергия, спин и проекция спина ядра в i -м состоянии. В этом процессе электрон оболочки атома из состояния $|\varepsilon_1 n_1 \ell_1 j_1 \mu_1\rangle$ с энергией ε_1 (главным квантовым числом n_1 , орбитальным моментом ℓ_1 и угловым моментом j_1 (μ_1 - магнитная проекция вектора j_1)) переходит в состояние непрерывного спектра с энергией $\varepsilon = \hbar\omega + \varepsilon_1$. Далее всюду используется значение полной (релятивистской) энергии электрона $\varepsilon = [(mc^2)^2 + \hbar^2 c^2 p^2]^{1/2}$, поскольку процесс конверсии идет на малых расстояниях от ядра и, следовательно, волновые функции электрона в исходном $|\varepsilon_1 n_1 \ell_1 j_1\rangle$ и конечном $|\varepsilon p\rangle$ состояниях по необходимости должны быть релятивистскими, несмотря на то что при энергиях переходов ядра $\hbar\omega \leq 3$ кэВ (которые здесь рассматриваются) процессом конверсии затрагиваются лишь слабосвязанные орбиты электрона в оболочке атома.

Теория конверсии ядерных ΛL -мультиполей на электронных орбитах давно стала "классической" главой квантовой электродинамики, весьма подробно изложенной в доступной литературе (см., например, работы [17, 18]). Поэтому, не останавливаясь на деталях выкладок, мы приводим результирующую формулу вероятности конверсии в единицу времени для ядерного ΛL -мультиполя в случае $E L$ - и $M L$ -переходов ($L \neq 0$), отнесенную на один электрон заселения $(n_1 \ell_1 j_1)$ -орбиты атомной оболочки. Это отмечается ниже индексом $[n_1 \ell_1 j_1]^1$. По ненаблюдаемым квантовым числам начальных и конечных состояний производится соответственно усреднение и суммирование:

$$W(\Lambda L; I_1 \rightarrow I_2; \varepsilon_1 [n_1 \ell_1 j_1]^1 \rightarrow \varepsilon) = e^4 m / \hbar^3 (R_0 / a_0)^{2L} \omega_3(\Lambda L [n_1 \ell_1 j_1]^1 \hbar\omega) \left(\frac{2I_2 + 1}{2I_1 + 1} \right) | \langle I_2 \| \Lambda L \| I_1 \rangle |^2, \quad (1)$$

где $\varepsilon = \varepsilon_1 + \hbar\omega$; $e^4 m \hbar^{-3} = 4,1341 \cdot 10^{16} \text{ c}^{-1}$; $\varepsilon_1 \leq mc^2$; $\alpha_0 = \hbar^2 / me^2 = 5,2917 \cdot 10^{-9}$; R_0 - радиус ядра.

Если на электронной орбите $(n_1 \ell_1 j_1)$ находится $N(n_1 \ell_1 j_1)$ электронов, то полная вероятность конверсии с этой орбиты равна произведению

$$N(n_1 \ell_1 j_1) W(\Lambda L; I_1 \rightarrow I_2; \varepsilon_1 [n_1 \ell_1 j_1]^1 \rightarrow \varepsilon). \quad (2)$$

Здесь удобно ввести частичный фактор конверсии $(n_1 \ell_1 j_1)$ -орбиты согласно определению

$$\xi(n_1 \ell_1 j_1; \Lambda L) = N(n_1 \ell_1 j_1) \omega_3(\Lambda L [n_1 \ell_1 j_1]^1 \hbar\omega). \quad (3)$$

Этот фактор фиксирует структуру наблюдаемого конверсионного спектра электронов. Ниже рассматривается лишь случай $L \neq 0$, поэтому в формуле вероятности выделен общий масштабный фактор $(R_0 / a_0)^{2L}$; для радиуса ядра в расчетах принято значение $R_0 = 1,24 \cdot 10^{-13} \text{ A}^{1/3} \text{ см}$.

Волновые функции исходного и конечного состояний электрона находились с учетом конечных размеров ядра, кулоновское поле которого аппроксимировалось полем равномерно заряженного по объему шара с радиусом, равным R_0 . Безразмерные приведенные ядерные элементы $\langle I_2 \| \Lambda L \| I_1 \rangle$ определены равенствами

$$e R_0^L \langle I_2 \| E L \| I_1 \rangle C_{LM I_1 M_1}^{I_2 M_2} = \langle E_2 I_2 M_2 | \int (\vec{d}\vec{z}) z^L Y_{LM}(\vec{z}) \hat{\rho}_N(\vec{z}) | E_1 I_1 M_1 \rangle \quad (4)$$

(где $\hat{\rho}_N(\vec{z})$ - оператор плотности заряда ядра);

$$eR_0^L \langle I_2 \| ML \| I_1 \rangle C_{LM I_1 M_1}^{I_2 M_2} = \\ = \langle E_2 I_2 M_2 | \frac{1}{c} \int (\vec{d}\vec{z}) z^L \left[\vec{Y}_{LLM}(\vec{z}) \hat{j}_N(\vec{z}) \right] | E_1 I_1 M_1 \rangle \quad (5)$$

(где оператор плотности тока заряда $\hat{j}_N(\vec{z})$ связан с оператором плотности заряда соотношением сохранения

$$\text{div } \hat{j}_N + \frac{\partial \hat{\rho}_N}{\partial t} = 0). \quad (6)$$

Здесь используются шаровые векторные гармоники $\vec{Y}_{LLM}(\vec{z})$, определенные в работе [7] и коэффициенты Клебша - Гордана $C_{LM I_1 M_1}^{I_2 M_2}$.

Безразмерные приведенные ядерные матричные элементы $\langle I_2 \| \Lambda L \| I_1 \rangle$ ($L \neq 0$) связаны с принятыми в литературе [19, 20] приведенными вероятностями $B(\Lambda L; I_1 \rightarrow I_2)$ ядерного ΛL -мультиплетного перехода $I_1 \rightarrow I_2$ соотношениями

$$e^2 R_0^{2L} \frac{2I_2 + 1}{2I_1 + 1} |\langle I_2 \| EL \| I_1 \rangle|^2 = B(EL; I_1 \rightarrow I_2); \quad (7)$$

$$e^2 R_0^{2L} \frac{L}{L+1} \frac{2I_2 + 1}{2I_1 + 1} |\langle I_2 \| ML \| I_1 \rangle|^2 = B(ML; I_1 \rightarrow I_2). \quad (8)$$

Видимая неравноправность записи в формулах (1) и (2) для EL - и ML -мультиполей обусловлена исходным выбором определения электронного фактора $w_3(\Lambda L [n\ell j]^1 \hbar \omega)$, который затем был численно табулирован именно в таком определении. Переопределять этот фактор путем включения множителя $L/L+1$ авторы посчитали излишним.

2. Одноэлектронные факторы конверсии ядерных ΛL -мультиполей ($L \neq 0$) можно представить в виде

$$w_3(\Lambda L [n_1 \ell_1 j_1]^1 \hbar \omega) = 32\pi^2 \frac{(ka_0)^{2L+2}}{[(2L+1)!!]^2} \frac{1}{(\rho a_0)} \frac{\varepsilon + mc^2}{mc^2} \times \\ \times 1/(2L+1)(2j_1+1) \sum_{(j\ell)} (2j+1) |A(j\ell; \Lambda L; j_1 \ell_1)|^2 |\langle j\ell [\Lambda L \varepsilon \Lambda] | j_1 \ell_1 \rangle|^2, \quad (9)$$

где ρ - волновое число улетающего электрона; $k = \omega/c$; $\varepsilon = [m^2 c^4 + \hbar^2 c^2 \rho^2]^{1/2}$. Здесь введена система радиальных интегралов $\langle j\ell | [\Lambda L \varepsilon \Lambda] | j_1 \ell_1 \rangle$, при вычислении которых использованы релятивистские волновые функции начального и конечного состояний электрона с фиксированными угловыми моментами $(j_1 \ell_1)$ и $(j\ell)$ соответственно. Функции получены путем численного интегрирования уравнений Дирака со средним атомным полем модели Хартри - Фока - Слейтера [16]:

$$\langle j\ell | [EL \varepsilon \Lambda] | j_1 \ell_1 \rangle = \int_0^\infty dx h_L^{(1)}(ka_0 x) (G_{\ell j} g_{\ell_1 j_1} + F_{\ell j} f_{\ell_1 j_1}) - \\ - \int_0^\infty dx h_{L-1}^{(1)}(ka_0 x) (F_{\ell j} g_{\ell_1 j_1} - G_{\ell j} f_{\ell_1 j_1}) + \frac{1}{L} [(j+1)j - \\ - (j_1+1)j_1 + (\ell_1+1)\ell_1 - (\ell+1)\ell] \int_0^\infty dx h_{L-1}^{(1)}(ka_0 x) (F_{\ell j} g_{\ell_1 j_1} + G_{\ell j} f_{\ell_1 j_1}). \quad (10)$$

Для ML -мультиполя имеем

$$\langle j\ell | [ML \varepsilon \Lambda] | j_1 \ell_1 \rangle = \int_0^\infty dx h_L^{(1)}(ka_0 x) (G_{\ell j} f_{\ell_1 j_1} + F_{\ell j} g_{\ell_1 j_1}). \quad (11)$$

В выражениях (3) и (4) $h_N^{(1)}(z)$ - сферическая функция Ганкеля первого рода. Радиальные компоненты (большая $G_{\ell j}$ и малая $F_{\ell j}$) состояний непрерывного спектра электрона нормированы так, что в асимптотике большие компоненты имеют вид

$$G_{\ell j}(z) \Big|_{z \rightarrow \infty} \rightarrow \sin\left(pz - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_{\ell j}\right). \quad (12)$$

Для связанных состояний имеем норму

$$\int_0^{\infty} dx (g_{\ell_1 j_1}^2 + f_{\ell_1 j_1}^2) = 1. \quad (13)$$

Угловые интегралы от электронных шаровых спиноров $\Omega_{j\ell m}$ [17] введены согласно определению: для электрического мультиполя EL

$$A(j\ell; EL; j_1 \ell_1) C_{LM j_1 m_1}^{jm} = \oint d\Omega \Omega_{j\ell m}^+ Y_{LM}^{(\vec{n})} \Omega_{j_1 \ell_1 m_1}^{(\vec{n})}, \quad (14)$$

т.е.

$$A(j\ell; EL; j_1 \ell_1) = \left[\frac{(2L+1)(2\ell_1+1)(2j_1+1)}{4\pi} \right]^{1/2} C_{L0\ell_1 0}^{\ell 0} W(L\ell_1 j \frac{1}{2}; \ell j_1), \quad (15)$$

и для магнитного мультиполя ML

$$\begin{aligned} A(j\ell; ML; j_1 \ell_1) C_{LM j_1 m_1}^{jm} &= \\ &= - \oint d\Omega \Omega_n \Omega_{j\ell m}^+(\vec{n}) (\vec{\sigma} \vec{Y}_{LM}^+(\vec{n})) (\vec{\sigma} n) \Omega_{j_1 \ell_1 m_1}^{(\vec{n})}, \end{aligned} \quad (16)$$

т.е.

$$A(j\ell; ML; j_1 \ell_1) = [L(L+1)]^{-1/2} [j(j+1) - j_1(j_1+1) + \ell_1(\ell_1+1) - \ell(\ell+1)] A(j\ell; EL; j_1 \ell_1). \quad (17)$$

Здесь $\ell_1' = 2j_1 - \ell_1$; $W(abcd; ef)$ - функция Рака; $\vec{\sigma}$ - матрицы Паули.

3. В работе табулированы одноэлектронные факторы конверсии $w_3(\Lambda L [nlj]^{-1} \hbar\omega)$ для ряда отобранных ΛL -переходов атомных ядер с энергиями $\hbar\omega \lesssim 3$ кэВ. Обычно в качестве характеристики процесса конверсии используются парциальные КВК, табулируемые в широкой области изменения параметров Z (заряд ядра), ΛL и $\hbar\omega$ (см., например, таблицы такого рода [21]). Однако здесь изучаются индивидуальные ΛL -переходы ядер в области малых энергий $\hbar\omega \approx 3$ кэВ. Как отмечалось, реально физический смысл для них имеет непосредственно вероятность конверсии, представленная факторами $w_3(\Lambda L [nlj]^{-1} \hbar\omega)$. Использование этих факторов удобно в том случае, когда заполнение внешних орбит оболочки атома при погружении в среду сильно варьирует в зависимости от химического окружения атома. Как показано в работе [8], изменения интенсивностей сильных конверсионных линий масштаба примерно на 1% и более допускает прямую интерпретацию в терминах изменения амплитуд волновых функций электронных орбит в зоне конверсии. Для проведения такой интерпретации данных также необходимы реперные факторы конверсии.

Сводка отобранных ядерных переходов

I. В области энергии возбуждения ядер $E^* \leq 1$ МэВ пары близких уровней $E_1 I_1$ и $E_2 I_2$ с разностью $E_1 - E_2 \lesssim 3$ кэВ встречаются в спектрах ядер довольно часто. Однако наблюдение достаточно интенсивных конверсионных переходов с такой энергией оказалось событием весьма редким. Если ставить основной целью последующее использование процесса конверсии ядерного ΛL -мультиполя малой энергии для изучения структуры электронных оболочек атома в зависимости от химического окружения (конверсионный метод), то необходимо иметь по возможности широкий ассортимент ядер с наблюдаемыми мягкими переходами различной мультипольности. С этой целью проведен первичный поиск

таких возможных переходов в доступном диапазоне ядер и отобраны случаи, в которых такие переходы наблюдаются или, на первый взгляд, есть основания ожидать, что они могут быть наблюдаемы и конкурентно способными с другими каналами распада изомерного ядерного уровня. Пока детальный (модельный) анализ конкурентности выбранных переходов не проводится (это задача будущего), авторы ограничились областью энергии $\hbar\omega \lesssim 3$ кэВ, хотя уже сейчас видна необходимость расширения диапазона энергии изомеров $\hbar\omega$ примерно до 5-10 кэВ, чтобы существенно увеличить реализуемый в эксперименте ассортимент изомеров, условия формирования которых (выход, чистота образца, определенность химической структуры соединения и т.д.) удовлетворяют требованиям метода конверсионной спектроскопии. В настоящее время в конверсионном методе широко используются пока два изомера ^{235}Pu и $^{99\text{m}}\text{Tc}$. Включение каждого нового изомера в исследования является весьма актуальным моментом в развитии нового метода исследования вещества.

2. Все отобранные ядра в соответствии с положением изомерного перехода в спектре ядерных состояний разделены на две группы - А и Б: группа А - изомерный уровень находится непосредственно вблизи основного состояния ядра, переход идет на основное состояние ядра; группа Б - изомерный переход происходит между возбужденными состояниями ядра, возможна конкуренция с более жесткими переходами, в частности на основное состояние.

В ситуации А необходимо искать процессы с наиболее эффективным заселением изомерного уровня, тогда как в ситуации Б еще требуется провести оценку конкурентности полезного изомерного перехода $E_1 I_1 \rightarrow E_2 I_2$ с другими сопутствующими каналами распада уровня $E_1 I_1$ на основное состояние ядра или на все другие уровни, лежащие между основным и уровнем $E_2 I_2$. Поскольку в этих сопутствующих переходах реализуется существенно большая энергия, чем в изомерном, то изомерный переход с $\hbar\omega = E_1 - E_2$ ($\lesssim 3$ кэВ) может быть конкурентоспособен только при выполнении специфических условий, когда более энергичные переходы существенно заторможены, например вследствие большей мультипольности, чем в изомерном переходе, или из-за структурных особенностей ядерных состояний, например запрета по ΔK -изменению проекции момента на ось симметрии сильнодеформированного ядра, конфигурационных запретов и т.п.

3. Сводка отобранных переходов группы А дана в табл.1, группы Б - в табл.2. Для всех этих переходов проведена табуляция одноэлектронных факторов конверсии $w_3(\Lambda L [nlj]^1 \hbar\omega)$ соответствующего мультиполя на оболочках изолированного свободного атома. При заданном заселении $N(nlj)$ электронных (nlj) -орбит эти таблицы позволяют найти полную вероятность конверсии в $(E_1 I_1 \rightarrow E_2 I_2)$ -переходе ядра:

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

Здесь введен полный фактор конверсии ΛL -мультиполя:

$$\xi(\Lambda L) = \sum_{(nlj)} N(nlj) w_3(\Lambda L [nlj]^1 \hbar\omega),$$

где сумма берется по связанным орбитам, на которых процесс конверсии энергетически разрешен, т.е.

$$\hbar\omega > [mc^2 - \varepsilon(nlj)] = E(nlj),$$

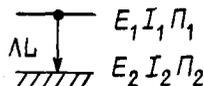
где $\varepsilon(nlj)$ - полная (релятивистская) энергия связанного электрона; $E(nlj)$ - энергия связи.

Поскольку энергии ядерных уровней и переходов ядра $\hbar\omega$ известны с ошибками, весьма различными по величине для разных возможных случаев, собранных в рассматриваемых группах А и Б, то для всех отобранных переходов вычисления сделаны в последовательности значений энергии $\hbar\omega_i$, заполняющей фиксируемый экспериментальной ошибкой ($\pm \Delta \hbar\omega$) интервал около среднего. Авторы не стремились к унификации процедуры расчета во всей серии отобранных ядер, каждый случай рассматривался индивидуально, причем число точек $\hbar\omega_i$ на интервал $\pm \Delta \hbar\omega$ варьировалось от 10 до 20 и каждый интервал $2\Delta \hbar\omega$ проходил со своим шагом $\delta \hbar\omega$. По группе ядер в соответствии с величиной $\Delta \hbar\omega$ шаг $\delta \hbar\omega$ варьируется довольно широко. Величина шага указана в табл.1 и 2, где приведены также и пределы интервала энергии $\hbar\omega$ -перехода, в рамках которого осуществлен расчет одноэлектронных факторов конверсии.

4. Случай уникально мягкого ЕЗ-перехода ^{235}mU ($\hbar\omega = 76,8 \pm 0,5$ эВ [4]) весьма детально изучен, результаты приведены в работах [8,11,12], поэтому ниже изомер ^{235}mU не представлен. Особый случай порогового поведения факторов конверсии для изомера $^{90\text{m}}\text{Nb}$ детально рассмотрен в работе [8]. Здесь эти результаты не приводятся.

Таблица 1

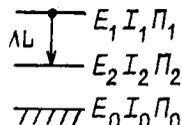
Ядра группы А; изомерный уровень вблизи основного состояния ядра



Ядро	Переход $I_1 \Pi_1 \rightarrow I_2 \Pi_2$	ΛL	Интервал энергии $\leq \hbar\omega \leq$, кэВ	Шаг $\delta \hbar\omega$, эВ	Литература
$^{103}\text{Ru}_{44}$	$5/2^+ \rightarrow 3/2^+$	M1+E2	2,500-2,900	40	[22]
$^{110}\text{Ag}_{47}$	$2^- \rightarrow 1^+$	E1	1,080-1,140	4	[23]
$^{142}\text{Pr}_{59}$	$5^- \rightarrow 2^-$	M3+E4	3,650-3,710	4	[24]
$^{193}\text{Pt}_{78}$	$3/2^- \rightarrow 1/2$	M1+E2	1,630-1,660	3	[25]
$^{201}\text{Hg}_{80}$	$1/2^- \rightarrow 3/2^-$	M1+E2	1,500-1,650	15	[26]
$^{205}\text{Pb}_{82}$	$1/2^- \rightarrow 5/2^-$	E2	2,200-2,600	40	[27]
$^{236}\text{Pa}_{91}$	$(0^-) \rightarrow (1^-)$	M1	1,900-2,100	13	[28]
$^{235}\text{U}_{92}$	$1/2^+ \rightarrow 7/2^-$	E3	$76,8 \pm 0,5$ эВ	-	[4]

Таблица 2

Ядра группы В; изомерный уровень не вблизи основного состояния ядра



Ядро	E_1 , кэВ	Переход $I_1 \Pi_1 \rightarrow I_2 \Pi_2$	ΛL	Интервал энергии $\leq \hbar\omega \leq$, кэВ	Шаг $\delta \hbar\omega$, эВ	Литература
$^{90\text{m}}\text{Nb}_{41}$	124,8	$4^- \rightarrow 6^+$	M2+E3	2,00-2,800	40	[29]
$^{99\text{m}}\text{Te}_{43}$	142	$1/2^- \rightarrow 7/2^+$	E3	2,082-2,182	10	[30]
$^{110\text{m}}\text{Ag}_{47}$	118,65	$3^+ \rightarrow 6^+$	M3	1,200-1,350	10	[31]
$^{140\text{m}}\text{Pr}_{59}$	29,5	$3^+ \rightarrow 2^+$	M1+E2	2,050-2,350	20	[32]
$^{153\text{m}}\text{Gd}_{64}$	95,2	$9/2^+ \rightarrow 7/2^-$	E1	1,650-1,950	20	[33]
$^{159\text{m}}\text{Gd}_{64}$	122,0	$7/2^- \rightarrow 7/2^+$	E1	2,850-3,150	20	[34]
$^{160\text{m}}\text{Tb}_{65}$	139,473	$2^- \rightarrow 1^+$	E1	0,715-0,760	3	[35]
$^{165\text{m}}\text{Tm}_{69}$	161,2	$7/2^- \rightarrow 7/2^+$	E1	1,800-2,400	25	[36]
$^{171\text{m}}\text{Lu}_{71}$	72,9	$5/2^- \rightarrow 1/2^-$	E2	1,300-2,200	50	[37]
$^{171\text{m}}\text{Lu}_{71}$	208,1	$1/2^+ \rightarrow 3/2^-$	E1	1,300-2,200	50	[37]
$^{183\text{m}}\text{W}_{74}$	309,491	$(11/2^+) \rightarrow 9/2^-$	E1	0,515-0,575	4	[38]
$^{183\text{m}}\text{W}_{74}$	208,804	$3/2^- \rightarrow 7/2^-$	E2	1,785-1,800	1	[38]
$^{188\text{m}}\text{Re}_{75}$	172,07	$6^- \rightarrow 3^-$	M3+E4	2,607-2,647	4	[39]
$^{250\text{m}}\text{Rf}_{97}$	35,4	$(4^+) \rightarrow (3^-)$	E1	0,950-1,250	20	[40]

Таблица 3

Электронные факторы конверсии изомера ниобия

NB Z=41 (KR) (4D3/2) (5S1/2) (4 1)
ПЕРЕХОД M2

N	L	J	I	2p1/2	2p3/2	3s1/2	3p1/2	3p3/2	3d3/2	3d5/2	4s1/2	4p1/2	4p3/2	4d3/2
E1 (eV)	I	2467.	2369.	455.9	375.1	359.1	214.6	211.6	63.36	40.49	38.24	5.861		
N	I	2	3	3	2	3	1	0	2	1	2	0		
$\hbar\omega$ (keV)	I	$\kappa E(NLJ, \hbar\omega) / 10^{10} \text{ s}^{-1}$												
2.000	I	0.000	0.000	4.265	1.232	1.650	1.817	1.591	7.231	1.872	2.355	1.303		
2.040	I	0.000	0.000	4.274	1.247	1.650	1.816	1.591	7.267	1.894	2.355	1.302		
2.080	I	0.000	0.000	4.284	1.263	1.650	1.814	1.592	7.283	1.915	2.356	1.301		
2.120	I	0.000	0.000	4.294	1.278	1.650	1.813	1.592	7.299	1.937	2.356	1.300		
2.160	I	0.000	0.000	4.303	1.293	1.650	1.811	1.593	7.315	1.959	2.356	1.299		
2.200	I	0.000	0.000	4.313	1.308	1.651	1.810	1.593	7.331	1.980	2.356	1.298		
2.240	I	0.000	0.000	4.323	1.324	1.651	1.808	1.594	7.348	2.002	2.356	1.296		
2.280	I	0.000	0.000	4.332	1.339	1.651	1.807	1.594	7.364	2.023	2.357	1.295		
2.320	I	0.000	0.000	4.342	1.354	1.651	1.805	1.595	7.380	2.045	2.357	1.294		
2.360	I	0.000	0.000	4.352	1.370	1.651	1.804	1.595	7.396	2.066	2.357	1.293		
2.400	I	0.000	0.656	4.362	1.385	1.651	1.802	1.596	7.412	2.088	2.357	1.292		
2.440	I	0.000	0.699	4.371	1.400	1.652	1.801	1.596	7.428	2.109	2.357	1.291		
2.480	I	4.920	0.716	4.381	1.415	1.652	1.800	1.597	7.444	2.131	2.358	1.290		
2.520	I	4.992	0.729	4.390	1.431	1.652	1.798	1.597	7.460	2.152	2.358	1.289		
2.560	I	5.122	0.723	4.400	1.446	1.652	1.797	1.597	7.476	2.174	2.358	1.288		
2.600	I	5.210	0.736	4.410	1.461	1.652	1.795	1.598	7.492	2.195	2.358	1.287		
2.640	I	5.336	0.734	4.420	1.477	1.652	1.794	1.598	7.508	2.217	2.358	1.286		
2.680	I	5.433	0.731	4.429	1.492	1.653	1.793	1.599	7.524	2.238	2.359	1.285		
2.720	I	5.538	0.735	4.439	1.507	1.653	1.791	1.599	7.540	2.260	2.359	1.284		
2.760	I	5.635	0.735	4.449	1.522	1.653	1.790	1.600	7.557	2.281	2.359	1.283		
2.800	I	5.727	0.732	4.458	1.538	1.653	1.788	1.600	7.573	2.303	2.359	1.282		

Таблицы одноэлектронных факторов конверсии

1. Одноэлектронные факторы конверсии $w_3(\Lambda L [nlj]^1 \hbar\omega)$ рассчитывались по формулам (I) - (I7), т.е. в рамках так называемой модели "непроникиновения" [18]. Волновые функции атомной оболочки вычислялись по методу ХФС(Л) [16,41]. Все волновые функции как дискретного, так и непрерывного спектров электрона находились путем численного интегрирования уравнения Дирака с единым средним атомным потенциалом. Этот потенциал получался при самосогласовании для одной указанной в таблицах факторов конверсии (см., например, табл.3) числами заселения (nlj) -орбит конфигурации электронной оболочки. Таким образом, все используемые функции электронов автоматически удовлетворяют условию ортогональности; энергия улетающего электрона определялась с использованием теоретической энергии связи орбиты в среднем поле E_i , т.е. $\varepsilon = \hbar\omega + mc^2 - E_i$.

В этом же среднем поле выделенной конфигурации были найдены также и функциям незаселенных орбит, с ними затем были вычислены одноэлектронные факторы конверсии для этих пустых орбит. Эти факторы позволяют грубо оценить масштаб эффекта химического окружения $\delta\lambda/\lambda$ путем вариации конфигурации валентной зоны атома. Следует иметь в виду, что такая упрощенная оценка эффекта $\delta\lambda/\lambda$, строго говоря, непоследовательна и может рассматриваться лишь в качестве первичной, ориентировочной в поисках эффекта; именно с этой целью и были проведены расчеты факторов для пустых орбит, поскольку перебор возможных конфигураций (что сделано для урана и ниобия) весьма трудоемко.

2. Для проверки программы расчета одноэлектронных факторов конверсии были выполнены расчеты КВК, результаты которых в пределах заданной точности совпали с известными таблицами Хагера и Зельцера [21], а также с результатами программы комплекса RAINE [16] в серии выбранных точек.

3. Таблицы факторов $w_3(\Lambda L [nlj]^1 \hbar\omega)$ конверсии вычислены с математической точностью 0,01%. Подчеркнем, что эта точность расчета не имеет ничего общего с физической точностью, так как точность физических предположений относительно вида атомных волновых функций существенно ниже.

4. Описание таблиц факторов конверсии на примере табл.3:

Первая строка заголовка каждой таблицы содержит идентификацию атомных волновых функций: заряд ядра Z и электронную конфигурацию, в которой проводилось самосогласование; конфигурация задана числами заселения (nlj) -орбит. Использовалась обычная атомная номенклатура электронных (nlj) -орбиталей (состояния s, p, d, f). Далее следует указание мультипольности перехода ядра (E_L или M_L).

Первая строка таблицы идентифицирует электронные орбитали, для которых были вычислены одноэлектронные факторы конверсии. Вторая строка таблицы содержит расчетные энергии ионизации орбиталей в электронвольтах. Для более компактной записи показатели степени десяти у факторов конверсии вынесли в третью строку (они обозначены как M). Таким образом, в таблицах представлены не сами факторы конверсии, а величины, нормированные домножением фактора на 10^{-M} . Крайняя левая колонка таблицы содержит энергии перехода ядра $\hbar\omega$ (в килоэлектронвольтах), при которых вычислялись факторы конверсии.

Фактор конверсии $M2$ -перехода ^{90}Nb ($Z=41$) был вычислен с атомными функциями, полученными путем самосогласования при заданной электронной конфигурации: $\{K\tau\} (4d^{3/2})^4 (5s^{1/2})^1$, что указано в заголовке, при этом одноэлектронный фактор $M2$ -мультиполя в точке $\hbar\omega = 2,44$ кэВ равен $w_3(M2 [4s^{1/2}]^1 \hbar\omega = 2,44 \text{ кэВ}) = 7,428 \cdot 10^2$.

Энергия связи $(4s^{1/2})$ -орбитали в приближении ХФС(Л) равна 63,36 эВ. В этих расчетах для параметра обменного члена потенциальной энергии электрона в поле атома принято значение $C=1$; энергии связи орбит $E(nlj)$ можно сравнить с результатами расчета [42], выполненными в рамках этой же схемы.

Список литературы

1. Emery G.T. Ann. Rev. Nucl. Sci., 1972, v.22, p.165.
2. Dragoun O. Advances in Electronics and Electron Physics, 1983, v.60, p.1.
3. Neve de Mevergnies M. Phys. Rev. Letters, 1972, v.29, p.1188; 1969, v.23, p.442; Phys. Letters B, 1974, v.49, p.428.

4. Жудов В.И., Зеленков А.Г., Кулаков В.М. и др. Письма в ЖЭТФ, 1979, т.30, с.549.
5. Жудов В.И., Кулаков В.М., Одинов Б.В., Панов А.Д. Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1984, вып.4(56), с.3.
6. Mazaki H., Kakiuchi S., Mukoyama T., Matsui M. Phys.Rev. C, 1980, v.21, p.344.
7. Meukens A., Fettweis P., Neve de Mevergnies M. Z.Phys. A, 1978, Bd 284, S.417.
8. Гречухин Д.П., Солдатов А.А. Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1984, вып.2(56), с.36.
9. Slater J.C. Phys.Rev., 1951, v.84, p.1261.
10. Band I.M., Sliv L.A., Trzhaskovskaya M.B. Nucl. Phys. A, 1970, v.156, p.170.
11. Гречухин Д.П., Солдатов А.А. Ядерная физика, 1976, т.23, с.273.
12. Гречухин Д.П., Солдатов А.А. Там же, 1983, т.38, № 6(12), с.1397.
13. Гречухин Д.П., Жудов В.И., Зеленков А.Г. и др. Письма в ЖЭТФ, 1980, т.31, с.627.
14. Герасимов В.Н., Зеленков А.Г., Кулаков В.М. и др. Ж. эксперим. и теор. физ., 1982, т.82, с.362; 1984, т.86, с.1169; Ядерная физика, 1981, т.34, с.3.
15. Солдатов А.А. Препринт ИАЭ-3916/1. М., 1984; Вопросы атомной науки и техники. Сер. Общая и ядерная физика, 1984, вып.4(29), с.86.
16. Банд И.М., Листенгартен М.А., Тржасковская М.Б., Фомичев В.И. Препринт ЛИЯФ-289. Л., 1977.
17. Ахизер А.И., Берестецкий В.Б. Квантовая электродинамика. М.: Наука, 1969.
18. Банд И.М., Листенгартен М.А., Фересин А.П. Аномалии в коэффициентах внутренней конверсии гамма-лучей. Л.: Наука, 1976.
19. Бор О., Мотгельсон Б. Структура атомного ядра. Т.1,2. М.: Мир, 1971.
20. Альдер К., Бор О., Хус Т. и др. Изучение структуры ядра при кулоновском возбуждении ионами.- В кн.: Деформация атомных ядер/ Под ред. Л.А.Слива. М.: Изд-во иностр.лит., 1958.
21. Hager R.S., Seltzer E.C. Nucl. Data, 1968, v.A4, p.1.
22. Bartsch H., Huber K. e.a. Nucl.Phys. A, 1975, v.252, p.1.
23. Clark D.D., Kostroun V.O., Silms N.B. Phys. Rev. C, 1975, v.12, p.595.
24. Bercks C., Hummel E., Schedl K.H. Z.Phys. A, 1975, Bd 273, S.385.
25. Ali I. Saleh, Braga R.A., Fink R.W. Ibid., 1976, Bd 279, S.27.
26. Hofmann S., Walcker D. Ibid., 1975, Bd 272, S.351.
27. Hamilton J.H., Ananthakrishnan V. e.a. Phys.Rev. C, 1972, v.6, p.1265; Jardine L.J., Shihab-Eldin A.A. Ibid., 1976, v.13, p.348.
28. Orth C.J., Daniels W.R., Dropesky B.J. Ibid., 1973, v.8, p.2364.
29. Serduke F.J.D., Lawson R.D., Gloeckner D.H. Nucl.Phys. A, 1976, v.256, p.45.
30. Chopra R.C., Tandon P.H., Devare S.H., Devare H.G. Ibid., 1973, v.209, p.461; Nucl. Data Sheets, 1974, v.12, N 4.
31. Bertschat H., Leithäuser U., Leitz W. e.a. Nucl.Phys. A, 1974, v.229, p.72.
32. Schedl K.H., Bercks C., Hummel E. Z.Phys. A, 1975, Bd 272, S.417.
33. Nucl. Data Sheets, 1973, v.10, N 5.
34. Ibid., v.9, N 5.
35. Kern J., Mauron G., Michaud B. e.a. Nucl.Phys. A, 1974, v.221, p.333.
36. Tamura T., Rezanka I., Iwata S. e.a. Phys.Rev. C, 1973, v.8, p.2425; Nucl. Data Sheets, 1974, v.11, N 2.
37. Nucl. Data Sheets, 1974, v.11, N 4; Schilling K.D., Käubler L. e.a. Nucl. Phys. A, 1976, v.265, p.58.
38. Nucl. Data Sheets, 1975, v.16, N 2.
39. Ibid., 1973, v.10, N 6; Shere E.B., Gruber U., Maier B.P.K. e.a. Phys.Rev. C, 1972, v.6, p. 537.
40. Nucl. Data Sheets, 1976, v.17, N 3.
41. Letter R. Phys.Rev., 1955, v.99, p.510.
42. Банд И.М., Тржасковская М.Б. Препринт ЛИЯФ-90.91.92. Л., 1974.

Статья поступила в редакцию 26 апреля 1985 г.

ISOMER LEVEL ^{235}U EXCITATION INDUCED BY QUANTS AND ELECTRONS. A number of possible mechanisms for population of the isomer level $(73\pm 5)\text{eV}$; $1/2^+$ in nucleus ^{235}U resulting from E3 transition from the ground state $7/2^-$, induced by the Coulomb electron-nucleus interaction, is considered. Effectivity of population of the ^{235}U isomer level is estimated for the hypothetical resonance of the nuclear $7/2^- \rightarrow 1/2^+$ E3 transition with some electron transitions in the shell of U atom. The probabilities of conversion are calculated with the electron wave functions, obtained integrating numerically the Dirac equation in the atomic field.

Данные о спектре ядра ^{235}U . Постановка задачи

1. Первый возбужденный уровень ядра ^{235}U имеет необычно малую энергию возбуждения, причем экспериментально определенные значения этой величины весьма различны: по данным работы [1], $\Delta E = (30\pm 3)\text{эВ}$, ранние измерения [2] приводили к $\Delta E \leq 23\text{эВ}$. Однако более поздние исследования [3] дают величину $\Delta E \approx 80\text{эВ}$, в работах последних лет [4] фиксирована величина $\Delta E = (73\pm 5)\text{эВ}^*$.

Полный спектр состояний ядра ^{235}U до энергии возбуждения около 1,5 МэВ и классификация состояний в модели Нильссона приведены в работе [5] по всей известной совокупности экспериментальных данных о ядре ^{235}U . Необходимый для последующих расчетов фрагмент спектра возбуждений ^{235}U приведен также по результатам этой работы.

Согласно данным работы [5], основное состояние ядра ^{235}U (далее обозначим его индексом α) является головным в ротационной серии состояний, принадлежащих нейтронной орбите $|743\rangle 7/2^- >$, т.е. $I_\alpha = 7/2^-$. Первое (изомерное) возбужденное состояние ядра ^{235}U есть головное состояние ротационной серии нейтронной орбиты $|631\rangle 1/2^+ >$. Это изомерное состояние отметим индексом β , т.е. $I_\beta = 1/2^+$. Согласно данным работы [4], изомерное состояние $|I_\beta >$ распадается путем конверсии E3-мультиполя на электронной оболочке атома урана с константой скорости распада λ : $\lambda = 0,026\text{ мин}^{-1}$, или $\tau = 2308\text{ с}$, $\lambda = 0,433 \cdot 10^{-3}\text{ с}^{-1}$. Итак, для рассматриваемых состояний ^{235}U имеем сводку данных, представленных на рис.1.

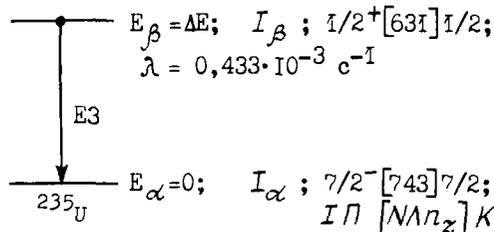


Рис.1. Сводка данных для рассматриваемых состояний ^{235}U

В расчетах будут иметь значение энергии возбуждения изомерного уровня $E_\beta = (73\pm 5)\text{эВ}$ в качестве наиболее правдоподобного, однако будут обсуждаться возможные величины эффектов и при энергии возбуждения $\Delta E = (30\pm 3)\text{эВ}$ [по данным 1979 г. [6], $\hbar\omega = (76,8\pm 0,5)\text{эВ}$].

2. Процесс конверсии мягкого ($\hbar\omega \approx 73\text{эВ}$) E3-перехода на внешних оболочках атома урана может (в принципе) быть использован для разделения изотопов ^{235}U и ^{238}U из их природной смеси: если возбудим ядро ^{235}U на изомерный уровень, то последующая конверсия на внешних оболочках приведет к ионизации атома урана с ядром ^{235}U и этот атом может быть выведен из смеси путем воздействия электрическим полем или вследствие сильной активации подходящей химической реакции, связывающей атом урана. Эта идея высказана в работе [7], где приведены довольно грубые оценки эффективности такого процесса разделения изотопов, причем М.Морита опирался на величину энергии

* Энергия изомера ^{235}U теперь фиксирована величиной $\hbar\omega = 76,8\pm 0,5\text{эВ}$ [6], однако резонанс электронного и ядерного переходов (в принципе) может быть достигнут путем использования химического сдвига уровней электронных орбит. Поэтому задача по-прежнему представляет интерес.

возбуждения изомера ^{235m}U $\Delta E = (30 \pm 3) \text{ эВ}$. В качестве механизмов возбуждения изомера ^{235m}U в работе [7] рассмотрены процессы резонанса переходов электронной оболочки и ядерного ЕЗ-перехода; близкими по частотам переходов оказались следующие:

$$\begin{aligned} \hbar\omega &= 13,1 \text{ кэВ}, 7/2^- \leftrightarrow 3/2^+, \text{ ЕЗ-переход ядра } ^{235}\text{U}; \\ \hbar\omega &= 13,440 \text{ кэВ}, 3d3/2 \leftrightarrow 2p3/2, \text{ ЕЗ-переход оболочки атома}; \\ \hbar\omega &= 30 \pm 3 \text{ эВ}, 7/2^- \leftrightarrow 1/2^+, \text{ ЕЗ-переход ядра } ^{235}\text{U}; \\ \hbar\omega &\approx 30 \text{ эВ}, 6d 3/2 \leftrightarrow 6p 3/2, \text{ ЕЗ-переход оболочки атома}. \end{aligned}$$

В первом процессе для возбуждения изомерного уровня $|I_\beta\rangle$ необходимо создать дырку в оболочке $2p3/2$ атома урана, на что потребуется энергия в 17,168 кэВ, причем, по оценке работы [7] [формула (16)], на одну такую дырку возможен выход $P \approx 2,4 \cdot 10^{-9}$ изомерных ядер ^{235m}U . Таким образом, на выделение одного атома ^{235m}U необходимо предварительно затратить около $7,1 \cdot 10^6$ МэВ энергии. Так как в акте деления ^{235}U высвобождается до 200 МэВ энергии, необходима рекуперация затраченной энергии с эффективностью, не меньшей $[\bar{1} - (2 \cdot 10^2) / (7,1 \cdot 10^6)] = [\bar{1} - (0,28 \cdot 10^{-4})]$. Численной оценки для второго процесса в работе [7] не приводится, автор лишь отмечает, что второй процесс по выходу еще менее эффективен. Следует заметить, что эти оценки содержат весьма грубые ошибки, приводящие к завышению эффективности первого процесса примерно на 6 порядков (см. раздел на с.84). Однако сама идея использования изомера ^{235m}U для разделения изотопов ^{235}U и ^{238}U из природной смеси заслуживает внимания и требует более тщательного анализа. Кроме того, необходимо рассмотреть процессы резонансного возбуждения изомера ^{235m}U путем возбуждения переходов электронной оболочки для определения более правдоподобного значения энергии возбуждения $\Delta E = (73 \pm 5) \text{ эВ}$, поскольку при этом открываются другие возможности, не рассмотренные в работе [7].

3. Кратко наметим программу необходимых для такой оценки расчетов:

1) прежде всего следует получить числовое значение величины ядерного матричного элемента ЕЗ-перехода $(I_\alpha \rightarrow I_\beta)$ ядра ^{235}U , для чего необходимы расчеты вероятности конверсии ЕЗ-мультиполя на внешних электронных оболочках атома урана;

2) с полученным ядерным элементом $\langle I_\alpha \| E3 \| I_\beta \rangle$ можно провести расчет прямого возбуждения изомера ^{235m}U в актах захвата резонансного кванта $\hbar\omega = E_\beta - E_\alpha$ и в процессе неупругого рассеяния электронов (ee') с возбуждением ЕЗ-перехода ядра;

3) эффективность процесса резонансного возбуждения перехода ядра в переходах электронной оболочки наряду с другими факторами определяется конкурирующими процессами излучения квантов оболочкой атома. Поэтому необходимо иметь оценки радиационных ширин одноэлектронных состояний внешних оболочек атома урана.

Определение ядерного матричного элемента $(I_\alpha \rightarrow I_\beta)$ ЕЗ-перехода по времени жизни изомерного уровня ^{235m}U

Данные о термах одночастичных электронных состояний (nlj) не совпадают [7,8]* (табл. I). Как видно, положение термов оценивается с очень большой ошибкой и для некоторых из них нет каких-либо определенных оценочных данных. Основной конфигурацией нейтрального атома урана считается $(6s 1/2)^2 (6p 1/2)^2 (6p 3/2)^4 (5f 5/2)^3 (6d)^1 (7s 1/2)^2$. При энергии перехода $\hbar\omega = 73 \text{ эВ}$ конверсия возможна практически на всех (nlj) -орбитах основной конфигурации, однако подавляющий вклад вносят заполненные конфигурации $(6p 1/2)^2$ и $(6p 3/2)^4$. Для одноэлектронной вероятности конверсии ЕЗ-мультиполя ядра в переходе $I_\beta \rightarrow I_\alpha$ на (nlj) -орбите атома имеем

$$\begin{aligned} W(E3, I_\beta \rightarrow I_\alpha; nlj \rightarrow \varepsilon_2) = \\ = \left(\frac{2I_\alpha + 1}{2I_\beta + 1} \right) |\langle I_\alpha \| E3 \| I_\beta \rangle|^2 \left(\frac{R_0}{a_0} \right)^6 \frac{e^4 m}{\hbar^3} w_3(E3 [nlj]^1 \hbar\omega), \end{aligned}$$

* Положение уровней $\varepsilon(nlj)$ для урана, полученных в рамках релятивистского метода Хартри - Фока - Слейтера (с поправкой Латтера) [ХФС(Л)], при $\alpha = 0,7$ для ряда конфигураций оболочки атома урана см. в приложении I.

где m - масса электрона; $e^4 m \hbar^{-3} = 4,134 \cdot 10^{16} \text{ e}^{-1}$; $R_0 = 1,24 \cdot 10^{-13} A^{1/3} \text{ см}$; $a_0 = 5,29 \cdot 10^{-9} \text{ см}$, а безразмерный приведенный ядерный элемент определен равенством

$$\langle I_\alpha M_\alpha | \sum_{i=1}^A q_i (z_i/R_0)^3 Y_{3M}(\theta_i, \Phi_i) | I_\beta M_\beta \rangle = C_{I_\beta M_\beta 3M}^{I_\alpha M_\alpha} \langle I_\alpha || E3 || I_\beta \rangle$$

при $q_i = \begin{cases} 0 & \text{для нейтронов,} \\ 1 & \text{для протонов.} \end{cases}$

Электронный фактор $w_3(E3[nlj]^1 \hbar\omega)$ вычислен как функция частоты перехода ядра $\hbar\omega$ в достаточно широком интервале с релятивистскими волновыми функциями дискретного и непрерывного спектра электрона, полученными численным интегрированием уравнения Дирака для электрона, движущегося в среднем поле атома*.

Таблица 1

Термы электронных орбит атома урана

(nlj)	$\varepsilon(nlj)/I$, эксперимент, эВ	$\varepsilon(nlj)/I$, эксперимент, эВ	$\varepsilon(nlj)/I$, (теоретические оценки), эВ
6s 1/2	70,7±1,2	74	57,6
6p 1/2	42,3±9,0	46	36,8
6p 3/2	32,3±9,0	36	25,9
6d 3/2	5±2	7	5,3
6d 5/2	-	-	-
7s 1/2	-	-	5,5
5f 5/2	-	-	8,8
5f 7/2	-	-	7,0

Для проверки устойчивости результата к возможным вариациям этого среднего поля атома были использованы потенциал ТФД, аппроксимированный по Латтеру [9], и атомный потенциал, табулированный в работе [10], полученный путем численного решения релятивистских уравнений ХФС [10]. Значения электронного фактора различных (nlj) -орбит приведены в табл.2 для значения энергии перехода $\hbar\omega \approx 80$ эВ. Ход величины факторов $w_3(E3[nlj]^1 \hbar\omega)$ с энергией перехода иллюстрируется рис.2-5. Как видно из этих рисунков, величины факторов $w_3(E3[nlj]^1 \hbar\omega)$ весьма слабо зависят от энергии перехода $\hbar\omega$ и подавляющий вклад в процесс конверсии вносят заполненные подоболочки (6p 1/2² и 6p 3/2⁴).

Таблица 2

Значения электронного фактора $w_3(E3[nlj]^1 \hbar\omega)$ парциальных вероятностей конверсии E3-мультиполя ядра ²³⁵U на (nlj) -орбите электрона

(nlj)	ТФД [9]		ХФС [10]		
	$\varepsilon(nlj)/I$	$w_3(E3[nlj]^1)$	$\varepsilon(nlj)/I$	$w_3(E3[nlj]^1)$	$\frac{w_3(\text{ТФД})}{w_3(\text{ХФС})}$
6s 1/2	2,0158	8,49·10 ²	1,9119	6,50·10 ²	1,30
6p 1/2	1,3235	5,29·10 ⁵	1,2458	4,32·10 ⁵	1,22
6p 3/2	0,93461	2,33·10 ⁵	0,89554	1,99·10 ⁵	1,17
6d 3/2	0,15973	4,76·10 ⁴	0,17001	4,05·10 ⁴	1,16
6d 5/2	0,134996	5,23·10 ⁴	0,14753	4,50·10 ⁴	1,15
7s 1/2	0,19872	7,34·10 ¹	0,21082	7,09·10 ¹	1,16
5f 5/2	0,44588	8,99·10 ²	0,31362	6,30·10 ²	1,41
5f 7/2	0,39912	4,16·10 ²	0,27652	3,07·10 ²	1,35

П р и м е ч а н и е. Энергии перехода и связи (nlj) -электронов, полученные при решении уравнения Дирака, даны в единицах потенциала ионизации $I = 27,21$ эВ.

* Авторы провели расчет факторов конверсии E3-перехода последовательно в рамках релятивистского метода ХФС(Л) при числовом значении параметра самосогласования $\alpha = 0,7$. Для некоторых конфигураций атома урана результаты приведены в приложении 2. Они мало отличаются от результатов упрощенного расчета с одноэлектронными функциями в среднем атомном поле Томаса - Ферми - Дирака (ТФД) [9] или Хартри - Фока - Слейтера (ХФС) [10].

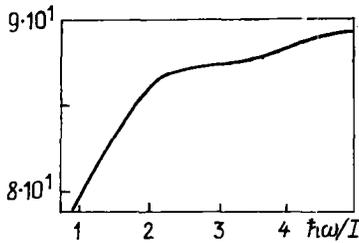


Рис.2

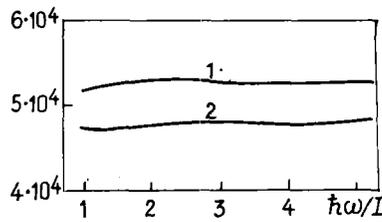


Рис.3

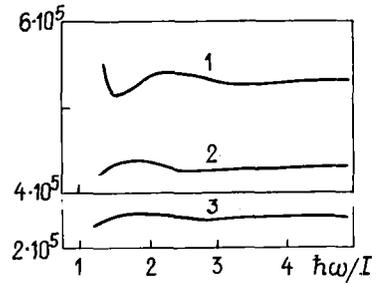


Рис.4

Рис.2. Фактор конверсии E3-перехода $w_3(E3[nlj]^1 \hbar\omega)$ для орбит урана $7s\ 1/2$. Потенциал ТФД (по Латтеру) [9]

Рис.3. Факторы конверсии E3-перехода $w_3(E3[nlj]^1 \hbar\omega)$ для орбит урана $6d\ 5/2$ (кривая 1) и $6d\ 3/2$ (кривая 2). Потенциал ТФД (по Латтеру) [9]

Рис.4. Факторы конверсии E3-перехода $w_3(E3[nlj]^1 \hbar\omega)$ для орбит урана $6p\ 1/2$ (кривая 1), $6p\ 1/2$ с потенциалом $Lu/10$ (кривая 2) и $6p\ 3/2$ с потенциалом ТФД (по Латтеру) [9] (кривая 3)

Рис.5. Факторы конверсии E3-перехода $w_3(E3[nlj]^1 \hbar\omega)$ для орбит урана $5f\ 5/2$ (кривая 1), $6s\ 1/2$ (кривая 2), $6s\ 1/2$ с потенциалом $Lu/10$ (кривая 3) и $5f\ 7/2$ (кривая 4). Кривые 1, 2 и 4 - орбиты с потенциалом ТФД по Латтеру [9]

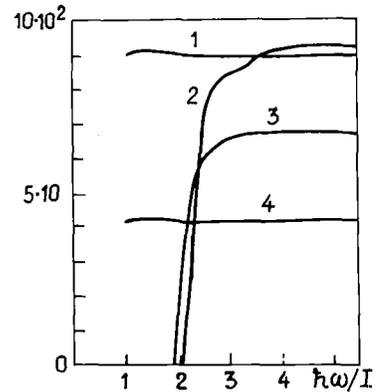


Рис.5

Принимая для атома $N(nlj)$ -числа заполнения орбит (nlj) , согласно основной конфигурации $(6s\ 1/2)^2, (6p\ 1/2)^2, (6p\ 3/2)^4, (6d\ 3/2)^1, (5f\ 5/2)^3, (7s\ 1/2)^2$, получаем для константы распада изомерного уровня ядра ^{235}U

$$\lambda = \left(\frac{2I_\alpha + 1}{2I_\beta + 1} \right) | \langle I_\alpha \| E3 \| I_\beta \rangle |^2 (R_0/a_0)^6 \frac{me^4}{\hbar^3} \xi_0,$$

где $\xi_0 = \sum_{(nlj)} N(nlj) w_3(E3[nlj]^1 \hbar\omega)$, или $\xi_0 = 1,716 \cdot 10^6$ (ХФС); $\xi_0 = 2,043 \cdot 10^6$ (ТФД).

Из экспериментального значения $\lambda = 0,433 \cdot 10^{-3} \text{ с}^{-1}$ получаем необходимую величину ядерного матричного элемента E3-перехода ^{235}U :

$$| \langle I_\alpha \| E3 \| I_\beta \rangle | = \begin{cases} 1,15 \cdot 10^{-2} & \text{(ТФД);} \\ 1,26 \cdot 10^{-2} & \text{(ХФС);} \end{cases} \quad | \langle I_\alpha \| E3 \| I_\beta \rangle |^2 = \begin{cases} 1,322 \cdot 10^{-4} & \text{(ТФД);} \\ 1,588 \cdot 10^{-4} & \text{(ХФС).} \end{cases}$$

Фотовозбуждение изомера ^{235}mU

При облучении ядра ^{235}U потоком квантов с энергией $\hbar\omega$, близкой к энергии возбуждения изомера $(E_\beta - E_\alpha) = \Delta E$, возможен процесс захвата фотона с образованием изомера ^{235}mU , который затем путем конверсии на оболочке атома переходит в ^{235}U . Однако при этом образуется ионизованный атом урана, который может быть выведен из смеси. Для сечения такого резонансного процесса имеем

$$\sigma_{\text{фото}} = \pi \lambda^2 \frac{\Gamma_{\text{конв}} \Gamma_{\text{рад}}}{(E_\beta - E_\alpha - \hbar\omega)^2 + (\Gamma_{\text{tot}}/2)^2},$$

где $\Gamma_{\text{конв}}, \Gamma_{\text{рад}}$ - конверсионная и радиационная ширины уровня изомера. При $\Delta E = 73 \text{ эВ}$ (в условиях резонанса $\hbar\omega = 73 \text{ эВ}$) для полной ширины имеем

$$\Gamma_{\text{tot}} = \hbar \frac{1}{\tau} = \frac{10^{-27} \cdot 4,33 \cdot 10^{-4}}{1,6 \cdot 16^{-12}} = 2,7 \cdot 10^{-19} \text{ эВ.}$$

Найдем радиационную ширину уровня 73 эВ:

$$\Gamma_{\text{раг}} = \hbar W_{\gamma}(E3, I_{\beta} \rightarrow I_{\alpha});$$

$$W_{\gamma}(E3, I_{\beta} \rightarrow I_{\alpha}) = \frac{e^2}{\hbar} \left(\frac{\omega}{c}\right)^7 \frac{R_0^6}{[7!!]^2} \frac{4}{3} 8\pi \left(\frac{2I_{\beta}+1}{2I_{\alpha}+1}\right) |\langle I_{\alpha} || E3 || I_{\beta} \rangle|^2,$$

что дает величину $W_{\gamma}(E3, I_{\beta} \rightarrow I_{\alpha}) = 0,96 \cdot 10^{-12} \text{ с}^{-1}$. Отсюда отношение ширин равно

$$\Gamma_{\text{раг}} / \Gamma_{\text{tot}} = \frac{0,96 \cdot 10^{-24}}{4,333 \cdot 10^{-4}} = 0,22 \cdot 10^{-20}$$

и соответственно сечение процесса фотовозбуждения изомера в точке резонанса ($\lambda = 2,57 \cdot 10^{-7} \text{ см}$)

$$\sigma_{\gamma} = 4\pi \lambda^2 (\Gamma_{\text{раг}} / \Gamma_{\text{tot}}) = 1,82 \cdot 10^{-33} \text{ см}^2.$$

Таким образом, если даже удастся построить источник фотонов с энергией $\hbar\omega = 73 \text{ эВ}$, то использовать процесс фотовозбуждения ^{235}U с целью выделения изотопа ^{235}U нерационально, так как с этим процессом будет конкурировать процесс прямой фотоионизации атома урана, имеющий сечение (не меньше $10^{-19} - 10^{-20} \text{ см}^2$), которое не оценивалось, поскольку в этом нет особой необходимости.

Электровозбуждение изомера в процессе неупругого рассеяния электронов

1. Рассмотрим процесс возбуждения перехода ядра $I_1 \rightarrow I_2$ при рассеянии электронов с энергией несколько мегаэлектронвольт. Для оценки масштаба сечения воспользуемся борновским приближением, причем учтем вклад только кулоновского члена, поскольку члены, определяющие вклад векторного потенциала перехода (при калибровке $\text{div} \vec{A} = 0$), вносят в полное сечение поправки порядка нескольких процентов кулоновского. Соответственно в борновском приближении для процесса возбуждения ЕL-перехода ядра имеем

$$\frac{d\sigma_{ee'}(I_1 \rightarrow I_2)}{d\Omega} = 8\pi \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \left(\frac{1}{\hbar c}\right)^2 \frac{p_2}{p_1} \frac{\xi_1 \xi_2 + c^2 \vec{p}_1 \vec{p}_2 + m^2 c^4}{q^4} \left| \frac{q^L R_{\gamma}^L}{(2L+1)!!} \right|^2 |\langle I_2 || \left(\frac{r}{R_{\gamma}}\right)^L Y_{LM}^* || I_1 \rangle|^2, \quad (1)$$

где $\xi_1 p_1, \xi_2 p_2$ - энергия и импульс электрона в начальном и конечном состояниях; $\hbar \vec{q} = \vec{p}_1 - \vec{p}_2$ - переданный импульс; $d\Omega$ - интервал телесного угла рассеянного электрона.

2. Оценим сечение возбуждения ЕЗ-перехода ядра $I_{\alpha} \rightarrow I_{\beta}$ с образованием изомера ^{235}U . Интегрируя по углам рассеянного электрона в частном случае $L=3$ формулу (1), получим полное сечение прямого возбуждения изомера ^{235}U :

$$\sigma_{\text{tot}}(I_{\alpha} \rightarrow I_{\beta}) = (8\pi)^2 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2 \left(\frac{R_0}{\lambda_e}\right)^6 \frac{1}{[7!!]^2} \left[\beta^2 (\xi^2 + 1 + \beta^2) - \frac{4}{3} \beta^4 \right] |\langle I_{\alpha} || E3 || I_{\beta} \rangle|^2,$$

где $\beta = p/mc$; $\xi = \xi/mc^2$; $\lambda_e = \hbar/mc = 3,67 \cdot 10^{-11} \text{ см}$. Разницей импульсов и энергий электрона в начальном и конечном состояниях пренебрегаем, поскольку энергия перехода $\Delta E = 73 \text{ эВ}$ ничтожно мала по сравнению с ξ_1, ξ_2 (около нескольких мегаэлектронвольт). Для ^{235}U $R_0 = 1,24 \cdot 10^{-13} \text{ А}^{1/3} \text{ см} = 7,67 \cdot 10^{-13} \text{ см}$, что дает фактор

$$(8\pi)^2 (e^2/\hbar c)^2 (\hbar/mc)^2 (R_0/\lambda_e)^6 1/[7!!]^2 = 3,4 \cdot 10^{-37} \text{ см}^2.$$

Для величины $|\langle I_\alpha \| E3 \| I_\beta \rangle|^2$ имеем значения $(1,322-1,588) \cdot 10^{-4}$. Таким образом, общий фактор, входящий в сечение, имеет значение около $(4,5-5,4) \cdot 10^{-41} \text{ см}^2$ и при энергии электронов $\mathcal{E} \approx 10 \text{ мэВ}$ сечение прямого возбуждения изомера равно примерно 10^{-37} см^2 .

3. Рассмотрим не прямое возбуждение изомера ^{235}U в неупругом рассеянии электронов. По данным работы [5], в спектре нижних состояний ^{235}U наблюдается серия E1- и E2-переходов. Измерение интенсивностей соответствующих линий в реакции захвата (n, γ) на ^{234}U дает следующие значения интенсивностей (выход на 100 захватов):

Номер линии	$\hbar\omega_n$, кэВ	I_n , число квантов / 100 захватов
1	125,25	0,005
2	171,41	0,03
3	129,26	3,3
4	42,15	0,03
5	47,63	0,03
6	77,53	0,16
7	116,25	0,26

На рис.6 эти линии отмечены наверху соответствующими номерами. Согласно схеме состояний ^{235}U , возбуждение изомерного состояния I_β в рассеянии электронов возможно косвенным путем: сначала возбуждаются E1-переходы на уровни 129,26 кэВ, $I = 5/2^+$ и 171,41 кэВ, $I = 7/2^+$ полосы $|\{622\} 5/2^+\rangle$, затем с них изомерный уровень $|I_\beta\rangle$ заселяется путем радиационных E2-переходов на состояния полосы $|\{631\} 1/2^+\rangle$. Как видно из таблицы интенсивностей, наиболее эффективен процесс возбуждения изомера через состояние 129,26 кэВ $|I' = 5/2^+\rangle$. В этом случае конкурентное отношение перехода на изомер к переходу на основное состояние равно

$$\frac{J(5/2^+ \rightarrow \beta)}{J(5/2^+ \rightarrow \alpha)} = \frac{0,03+0,16+0,26}{3,3} = \frac{0,45}{3,3} = 0,137$$

и доля переходов на изомер равна $\frac{0,45}{3,75} = 0,12$. Для оценки эффективности возбуждения изомера необходимо найти полное сечение возбуждения E1-перехода на уровень 129,26 кэВ в процессе неупругого рассеяния электронов. Используя общую формулу (1), получаем

$$\sigma_{\text{tot}}(E1, I_\alpha \rightarrow 5/2^+) = \frac{16}{9} \pi^2 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 R_0^2 |\langle I_\alpha \| E1 \| I' \rangle|^2 \left[2 \frac{\xi^2}{\beta^2} \ln\left(\frac{2\beta^2}{\xi \Delta}\right) - 2 \right],$$

$$I' = 5/2^+;$$

где $\Delta = 129,26 \text{ кэВ} / \text{мэВ}$; $\xi = \mathcal{E} / \text{мэВ}$; $\beta = p / \text{мэВ}$; $R_0 = 1,24 \cdot 10^{-13} \text{ А}^{1/3} \text{ см}$,

что при энергии электрона $\mathcal{E} = 10 \text{ мэВ}$ дает величину сечения

$$\sigma_{\text{tot}}(E1, I_\alpha \rightarrow I' = 5/2^+, 129 \text{ кэВ}) = 3,8 \cdot 10^{-27} |\langle I_\alpha \| E1 \| I' \rangle|^2 \text{ ем}^2. \quad (2)$$

Следует отметить, что приведенный элемент $|\langle I_\alpha \| E1 \| I' \rangle|^2$ для деформированных ядер имеет обычно порядок величины $10^{-3}-10^{-4}$, поэтому сечение E1-возбуждения при $\mathcal{E} \approx 5 \text{ МэВ}$ оказывается равным 10^{-30} см^2 . Матричный элемент $\langle I_\alpha \| E1 \| I' \rangle$ может быть оценен более точно, поскольку для ^{235}U имеется достаточно обоснованная классификация состояний в терминах орбит Нильссона, однако мы не видим необходимости в этой оценке. Малое конкурентное отношение (0,12) выхода изомера $|I_\beta\rangle$ примерно на порядок уменьшает эффективную величину сечения (2).

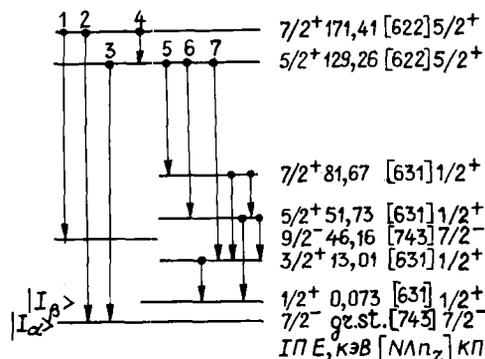


Рис.6. Идентификация состояний ядра ^{235}U в модели Бора - Моттельсона согласно данным работы [5]

Рассмотренный процесс электровозбуждения изомера в (ee') -рассеянии конкурирует с обычным процессом электроионизации атома, имеющим сечение около 10^{-20} см^2 , поэтому использование (ee') -рассеяния для выделения изотопов ^{235}U из природной смеси путем возбуждения изомера лишено смысла.

Резонансное возбуждение изомерного состояния $^{235}\text{m}_1\text{U}$ в переходах электронной оболочки (постановка задачи)

1. Энергия ядерного изомера $^{235}\text{m}_1\text{U}$ определена с довольно большой ошибкой $\Delta E = (73 \pm 5) \text{ эВ}$, таким образом, вероятны значения $68 \leq \Delta E \leq 78 \text{ эВ}$. Кроме того, энергия связи электрона $6s \ 1/2$ определена также грубо: $\epsilon(6s \ 1/2) = 74 \text{ эВ}$ [8], или $\epsilon(6s \ 1/2) = (70,7 \pm 1,2) \text{ эВ}$ [7], тогда как об энергии связи электронов $5fj$ можно лишь предположить по факту заполнения подоболочки $5f$ вместе с заполнением оболочки $6d$, т.е. $\epsilon(5f \ 5/2) \approx (5 \pm 2) \text{ эВ}$. Следовательно, разность энергий связи электронов $6s \ 1/2$ и $5f$ (частота атомного E3-перехода) попадает в интервал вероятных значений $67 \text{ эВ} \leq \epsilon \leq (6s \ 1/2) - \epsilon(5f \ 5/2) \leq 71 \text{ эВ}$.

Таким образом, возможные интервалы частоты ядерного E3-перехода и частоты атомного перехода перекрываются: $68 \text{ эВ} \leq \hbar\omega_\gamma \leq 78 \text{ эВ}$; $67 \text{ эВ} \leq \hbar\omega \leq 71 \text{ эВ}$. Поэтому в настоящее время данные эксперимента не исключают случайного совпадения этих частот, т.е. резонанс между ядерным E3-переходом и атомным K3-переходом. Далее ставится цель проанализировать эффективность возможного процесса резонансного возбуждения ядра.

2. В качестве основы для анализа резонансного процесса возбуждения изомера $^{235}\text{m}_1\text{U}$ возьмем спектр одночастичных состояний атома урана $\epsilon(nlj)$, полученный путем численного интегрирования уравнения Дирака для электрона в среднем центрально-симметричном поле атома (см. табл. 2). Как видно из рис. 7, где представлен этот спектр, хотя значения термов $\epsilon(nlj)$ варьируют с вариацией среднего поля (ТФД и ХФС), общая структура остается неизменной и качественно согласуется с наблюдаемой в эксперименте.

ТФД	0	ХФС
$-7s \ 1/2$	$\begin{matrix} = 6d \ 5/2 \\ = 6d \ 3/2 \\ = 5f \ 7/2 \\ = 5f \ 5/2 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -7s \ 1/2 \\ = 6d \ 5/2 \\ = 6d \ 3/2 \\ = 5f \ 7/2 \\ = 5f \ 5/2 \end{matrix}$
$-6p \ 3/2$	1	$-6p \ 3/2$
$-6p \ 1/2$		$-6p \ 1/2$
$-6s \ 1/2$	2	$-6s \ 1/2$

Рис. 7. Спектр уровней энергии одночастичных состояний атома урана с различными средними потенциальными атомными полями (потенциалы ТФД [9] и ХФС [10]), полученный интегрированием уравнения Дирака

Для принятой энергии изомерного уровня $\Delta E \approx 73 \text{ эВ}$ процесс резонансного возбуждения изомера в рамках схемы одночастичных состояний атомной оболочки протекает через следующие стадии:

1) в начальный момент ядро находится в основном состоянии $|I_\alpha\rangle$, а в электронной оболочке заполнены состояния терма $6s \ 1/2$: $|I_\alpha\rangle$, $[6s \ 1/2]^2 [6p \ 1/2]^{n_1} [6p \ 3/2]^{n_2} [6d]^{n_3} [5f \ 5/2]^{n_4}$;

2) пусть в заполнении подоболочки $6s \ 1/2$ создана дырка, состояния $5f$ также частично заполнены, ядро находится в основном состоянии, т.е. система описывается конфигурацией

$|I_\alpha\rangle$, $[6s \ 1/2]^1 [6p \ 1/2]^{n_1} [6p \ 3/2]^{n_2} [6d]^{n_3} [5f]^{n_4}$, причем $n_4 \neq 0$;

3) последующее заполнение дырки $6s \ 1/2$ возможно различными конкурирующими путями:

- если числа заполнения состояний $6p \ 1/2$ и $6p \ 3/2$ отличны от нуля, то возможен радиационный переход $6p \ j \rightarrow 6s \ 1/2$, при этом ядро остается в основном состоянии;

- если состояния $6p \ 1/2$ и $6p \ 3/2$ пустые, то возможен радиационный E2-переход электрона из состояния $5f$ в $6p \ j$ с последующим радиационным переходом $6p \ j \rightarrow 6s \ 1/2$ ($n_4 \neq 0$), ядро остается в основном состоянии;

- оба эти процесса заполнения дырки 6s 1/2 конкурируют с резонансным E3-переходом электрона 5f в состояние 6s 1/2, причем ядро переходит в изомерное состояние $|I_{\beta}\rangle$.

Эффективность резонансного возбуждения изомера ^{235}U существенно зависит от интенсивности конкурирующих процессов захлопывания дырки 6s 1/2 и величины матричного элемента $\langle 6s\ 1/2\ I_{\beta} | H_{\beta\gamma} | 5f\ j\ I_{\alpha} \rangle$ кулоновского взаимодействия ядра и электрона оболочки:

$$H_{\beta\gamma} = \frac{4\pi}{7} \sum_M \sum_j \sum_{i=1}^A \frac{z_i^3 q_i}{r_i^4} Y_{3M}^*(\vec{z}_i) Y_{3M}(\vec{r}_j),$$

который определяет скорость резонансного возбуждения ядра.

Вероятности радиационных одноэлектронных переходов в оболочке атома урана

Для перехода E L электрона из состояния $(n_1\ \ell_1\ j_1)$ в состояние $(n_2\ \ell_2\ j_2)$ (n - главное квантовое число; ℓ, j - орбитальный и полный угловой моменты электрона) имеем

$$W(E_L; n_1\ \ell_1\ j_1 \rightarrow n_2\ \ell_2\ j_2) = e^4 m / \hbar (k a_0)^{2L+1} / [(2L+1)!]^2 [2(L+1)(2L+1) / L] \times \\ \times |C_{\ell_1\ 0\ L\ 0}^{\ell_2\ 0} u(L\ \ell_2\ j_1\ \frac{1}{2}; \ell_1\ j_2)|^2 |\langle n_2\ \ell_2\ j_2 | x^L | n_1\ \ell_1\ j_1 \rangle|^2,$$

где $k a_0 = 1/137 (a_0/e^2) [\varepsilon(n_1\ \ell_1\ j_1) - \varepsilon(n_2\ \ell_2\ j_2)]$;

$$e^4 m / \hbar = 4,134 \cdot 10^{16} \text{с}^{-1}; \quad x = r/a_0; \quad a_0 = \hbar^2/m e^2;$$

$\langle n_2\ \ell_2\ j_2 | x^L | n_1\ \ell_1\ j_1 \rangle$ - радиальный матричный элемент E L -мультиполя (в атомных единицах); $u(L\ \ell_2\ j_1\ \frac{1}{2}; \ell_1\ j_2)$ - функция Рака, табулированная в работе [11]. Радиальные матричные элементы возможных переходов E1, E2 и E3 были вычислены с релятивистскими функциями электрона в потенциале ТФД, аппроксимированном по Латтеру (табл.3). Эти элементы могут потребоваться при расчете радиационных переходов между состояниями сложных конфигураций электронной оболочки атома урана. Величины радиальных элементов $\langle n_2\ \ell_2\ j_2 | x^L | n_1\ \ell_1\ j_1 \rangle$ слабо варьируют при выборе различных форм среднего атомного потенциала и близки к величинам, получаемым с нерелятивистскими функциями электрона. Чтобы иметь представление о масштабе величин вероятностей переходов E1, E2 в атомной оболочке, был проведен расчет с термами, полученными с потенциалом ТФД (табл.4). Разумеется в случае переходов E L между состояниями сложных электронных конфигураций величины вероятностей будут отличаться от приведенных в табл.4, однако эти изменения, так же, как и вариации, обусловленные изменением величин термов, находятся в рамках одного порядка.

Таблица 3

Система матричных элементов $\langle n_2\ \ell_2\ j_2 | x^L | n_1\ \ell_1\ j_1 \rangle$ атома урана

Элемент	Значение	Элемент	Значение
$\langle 6s\ 1/2 x 6p\ 1/2 \rangle$	-1,44617	$\langle 6p\ 1/2 x^2 5f\ 5/2 \rangle$	-1,99751
$\langle 6s\ 1/2 x 6p\ 3/2 \rangle$	-1,42966	$\langle 6p\ 3/2 x^2 5f\ 5/2 \rangle$	-2,15195
$\langle 6p\ 1/2 x 6d\ 3/2 \rangle$	-1,36174	$\langle 6p\ 3/2 x^2 5f\ 7/2 \rangle$	-2,24293
$\langle 6p\ 3/2 x 6d\ 3/2 \rangle$	-1,72861	$\langle 6d\ 5/2 x^2 6s\ 1/2 \rangle$	2,07199
$\langle 6p\ 3/2 x 6d\ 5/2 \rangle$	-1,65222	$\langle 6d\ 3/2 x^2 6s\ 1/2 \rangle$	2,20605
$\langle 6d\ 3/2 x 5f\ 5/2 \rangle$	0,954207	$\langle 7s\ 1/2 x^2 6d\ 3/2 \rangle$	1,27195 · 10 ¹
$\langle 6d\ 5/2 x 5f\ 5/2 \rangle$	0,894466	$\langle 7s\ 1/2 x^2 6d\ 5/2 \rangle$	-1,46772 · 10 ¹
$\langle 6d\ 5/2 x 5f\ 7/2 \rangle$	0,953301	$\langle 5f\ 5/2 x^3 6s\ 1/2 \rangle$	3,17126
$\langle 6p\ 1/2 x 7s\ 1/2 \rangle$	0,498256	$\langle 5f\ 7/2 x^3 6s\ 1/2 \rangle$	3,27972
$\langle 6p\ 3/2 x 7s\ 1/2 \rangle$	0,908754		

Таблица 4

Вероятности радиационных переходов E1 и E2 в оболочке атома урана, полученные в одноэлектронном приближении с термами ТФД ($I = e^2/a_0$)

Переход	EL	ε_2/I	ε_1/I	$W(EL; n_1 l_1 j_1 \rightarrow n_2 l_2 j_2) \text{ с}^{-1}$
6p1/2 → 6s1/2	E1	2,016	1,323	$0,475 \cdot 10^{10}$
6p3/2 → 6s1/2	E1	2,016	0,935	$1,83 \cdot 10^{10}$
6a3/2 → 6p1/2	E1	1,323	0,160	$2,07 \cdot 10^{10}$
6a3/2 → 6p3/2	E1	0,935	0,160	$1,99 \cdot 10^9$
6a5/2 → 6p3/2	E1	0,935	0,135	$1,19 \cdot 10^{10}$
6a3/2 → 5f5/2	E1	0,446	0,160	$0,273 \cdot 10^9$
6a5/2 → 5f5/2	E1	0,446	0,135	$0,146 \cdot 10^8$
6a5/2 → 5f7/2	E1	0,399	0,135	$2,04 \cdot 10^8$
5f5/2 → 6p1/2	E2	1,323	0,446	$2,44 \cdot 10^4$
5f5/2 → 6p3/2	E2	0,935	0,446	$0,72 \cdot 10^3$
5f7/2 → 6p3/2	E2	0,935	0,399	$0,354 \cdot 10^4$

Матричный элемент "резонансного" кулоновского (E3E3)-взаимодействия ядра и электронов оболочки атома урана

Из оператора кулоновского взаимодействия нуклонов ядра и электронов оболочки

$$-e^2 \sum_k \sum_{i=1}^A \frac{q_i}{|\vec{z}_k - \vec{r}_i|}, \quad \text{где } q_i = \begin{cases} 1 & \text{для протонов,} \\ 0 & \text{для нейтронов} \end{cases}$$

выделим член, соответствующий "резонансному" (E3E3)-взаимодействию. Эффектом объема ядра в данном случае можно пренебречь, т.е. $z_k > r_i$:

$$H_{E3}^A(E3 E3) = -e^2 \frac{4\pi}{7} \sum_{M=-3}^3 \left[\sum_k \frac{Y_{3M}(\vec{z}_k)}{z_k^4} \right] \left[\sum_{i=1}^A q_i r_i^3 Y_{3M}^*(\vec{r}_i) \right].$$

Величина элемента взаимодействия зависит от структуры состояний электронной оболочки. Для одночастичного элемента, соответствующего переходу системы $|I_\alpha\rangle |n_1 l_1 j_1\rangle \rightarrow |I_\beta\rangle |n_2 l_2 j_2\rangle$, имеем

$$\begin{aligned} & \langle \Psi_{n_2 l_2 j_2 \mu_2}^+ u_{I_\beta M_\beta}^* | H_{E3}^A(E3 E3) | \Psi_{n_1 l_1 j_1 \mu_1} u_{I_\alpha M_\alpha} \rangle = \\ & = (-) \left(\frac{e^2 R_0^3}{\alpha_0^4 \hbar} \right) \sqrt{\frac{4\pi}{7}} \sqrt{\frac{2j_1+1}{2j_2+1}} C_{l_1 0 3 0}^{l_2 0} u(3l_2 j_1 \frac{1}{2}; l_1 j_2) \langle n_2 l_2 j_2 | \left(\frac{1}{x}\right)^4 | n_1 l_1 j_1 \rangle \times \\ & \times \langle I_\alpha \| E3 \| I_\beta \rangle^* C_{I_\beta M_\beta 3 M}^{I_\alpha M_\alpha} C_{j_1 \mu_1 3 M}^{j_2 \mu_2}. \end{aligned}$$

Здесь для ядра урана $e^2 R_0^3 / \hbar \alpha_0^4 = 1,26 \cdot 10^5 \text{ с}^{-1}$

$$|\langle I_\alpha \| E3 \| I_\beta \rangle| = (1,15 - 1,26) \cdot 10^2.$$

Радиальный матричный элемент $\langle n_2 l_2 j_2 | (1/x)^4 | n_1 l_1 j_1 \rangle$ требует для аккуратной оценки применения релятивистских волновых функций. Расчет был проведен с функциями электрона в потенциале ТФД и ХФС (табл.5).

$\langle n_2 l_2 j_2 (1/x)^4 n_1 l_1 j_1 \rangle$	ТФД [9]	ХФС [10]	$\langle n_2 l_2 j_2 (1/x)^4 n_1 l_1 j_1 \rangle$	ТФД [9]	ХФС [10]
$\langle 6s 1/2 x^{-4} 5f 5/2 \rangle$	-67,20	-52,62	$\langle 6d 3/2 x^{-4} 5f 7/2 \rangle$	+32,44	+26,60
$\langle 6s 1/2 x^{-4} 5f 7/2 \rangle$	+1,08	+0,778	$\langle 6d 5/2 x^{-4} 5f 5/2 \rangle$	+31,20	+26,02
$\langle 6p 1/2 x^{-4} 6d 5/2 \rangle$	+704,19	+620,82	$\langle 6d 5/2 x^{-4} 5f 7/2 \rangle$	+30,01	+24,98
$\langle 6p 3/2 x^{-4} 6d 3/2 \rangle$	+524,74	+461,83	$\langle 7s 1/2 x^{-4} 5f 5/2 \rangle$	-20,60	-17,18
$\langle 6p 3/2 x^{-4} 6d 5/2 \rangle$	+460,29	+410,73	$\langle 7s 1/2 x^{-4} 5f 7/2 \rangle$	+0,325	+0,246
$\langle 6d 3/2 x^{-4} 5f 5/2 \rangle$	+43,89	+35,80			

Как видно из табл.5, радиальный элемент варьирует в интервале трех порядков, поэтому необходимо детально анализировать структуру конфигурационных состояний атомной оболочки, которые включены в "резонансный" процесс возбуждения изомера ядра. Оператор H_{E3} (ЕЗЕЗ) сохраняет полный угловой момент системы ядро плюс электронная оболочка $\vec{F} = \vec{I} + \vec{J}$, и матричный элемент H_{E3} (ЕЗЕЗ) не зависит от проекции момента \vec{F} (вектора на ось квантования). Для некоторых простых конфигураций имеем

$$\begin{aligned} & \langle [6s 1/2]^1 I_{\beta} F=1 | \hat{H}_{E3} | [nf 5/2]^1 I_{\alpha} F=1 \rangle = \\ & = \sqrt{4/7} e^2 R_0^3 / \alpha_0^4 \sqrt{16\pi/49} \langle 6s 1/2 | x^{-4} | nf 5/2 \rangle \langle I_{\alpha} \| E3 \| I_{\beta} \rangle^* ; \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} & \langle [6s 1/2]^1 I_{\beta} F=0 | \hat{H}_{E3} | [nf 7/2]^1 I_{\alpha} F=0 \rangle = \\ & = e^2 R_0^3 / \alpha_0^4 \sqrt{16\pi/49} \langle 6s 1/2 | x^{-4} | nf 7/2 \rangle \langle I_{\alpha} \| E3 \| I_{\beta} \rangle^* ; \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} & \langle [6s 1/2]^1 I_{\beta} F=1 | \hat{H}_{E3} | [nf 7/2]^1 I_{\alpha} F=1 \rangle = \\ & = \sqrt{3/7} e^2 R_0^3 / \alpha_0^4 \sqrt{16\pi/49} \langle 6s 1/2 | x^{-4} | nf 7/2 \rangle \langle I_{\alpha} \| E3 \| I_{\beta} \rangle^* ; \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} & \langle [6s 1/2]^2 I_{\beta} F=1/2 | H_{E3} | [(6s 1/2)^1 (nf 5/2)^1] I_{\alpha} F=1/2 \rangle = \\ & = \sqrt{6/7} e^2 R_0^3 / \alpha_0^4 \sqrt{16\pi/49} \langle 6s 1/2 | x^{-4} | nf 5/2 \rangle \langle I_{\alpha} \| E3 \| I_{\beta} \rangle^* . \end{aligned} \quad (6)$$

Учитывая данные табл.5 и результаты выражений (3)-(6) в качестве оценочной примеси, величину "резонансного" матричного элемента оценим как

$$\gamma = | \langle J_2 I_{\beta} F | H_{E3} (E3E3) / \hbar | J_1 I_{\alpha} F \rangle | = 5(10^4 - 10^5) c^{-1}.$$

Выход изомера ^{235m}U в различных возможных вариантах резонансного возбуждения ядра электронным переходом ЕЗ

I. Пусть в момент $t=0$ создана (фотоионизацией, неупругим рассеянием электронов или ионов) дырка в подоболочке $6s 1/2$, т.е. конфигурация электронной оболочки

$$[6s1/2]^1 [6p1/2]^{n1} [6p3/2]^{n2} [6d]^{n3} [5f5/2]^{n4}, \quad (7)$$

причем $n_4 \neq 0$, т.е. заселен уровень $5f\ 5/2$. Ядро при этом находится в основном состоянии $|I_\alpha\rangle$. Это состояние оболочки с моментом J_1 будем обозначать как ψ_{J_1, μ_1} ; полное состояние системы ядро плюс оболочка с фиксированным полным угловым моментом определено волновой функцией

$$\psi_{\alpha 1} = \sum_{M_\alpha, \mu_1} C_{I_\alpha M_\alpha J_1 \mu_1}^{Ff} \psi_{J_1, \mu_1} u_{I_\alpha M_\alpha} = |J_1 I_\alpha; Ff\rangle.$$

Дырка в подоболочке $[6s\ 1/2]$ может быть заселена в радиационных переходах электрона, и скорость затухания дырки обозначим $2\lambda_1$ (в s^{-1}). Энергия системы в состоянии $|J_1 I_\alpha Ff\rangle$ равна $[E_1(J_1 F) + E_\alpha]$, где $E_1(J_1 F)$ включает и сверхтонкое взаимодействие ядра в состоянии с электронной оболочкой; E_α - энергия основного состояния ядра.

2. Допустим, что конфигурация оболочки

$$[6s1/2]^2 [6p1/2]^{n1} [6p3/2]^{n2} [6d]^{n3} [5f5/2]^{n4-1}$$

обладает таким состоянием ψ_{J_2, μ_2} , что образуется состояние системы

$$\psi_{\beta 2} = |J_2 I_\beta Ff\rangle = \sum_{M_\beta, \mu_2} C_{I_\beta M_\beta J_2 \mu_2}^{Ff} \psi_{J_2, \mu_2} u_{I_\beta M_\beta}$$

с возбужденным ядром, причем энергия этого состояния $E_2(J_2 F) + E_\beta$ близка к энергии первого состояния $E_1(J_1 F) + E_\alpha$.

Вторая рассматриваемая конфигурация оболочки атома (или иона) урана может быть неустойчивой и затухать со скоростью $2\lambda_2$.

3. Проследим развитие системы во времени

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = [\hat{H}_\alpha + \hat{H}_{\beta\delta} + \hat{H}_{\beta\gamma}(E_3 E_3) + \hat{H}(hfs)] \psi,$$

где $\hat{H}(hfs)$ - взаимодействие электронов оболочки и ядра, обуславливающее сверхтонкую структуру спектра. Разложим функцию ψ системы по состояниям $\psi_{\alpha 1}, \psi_{\beta 2}, \psi_{k\alpha}, \psi_{n\beta}$, где $\psi_{k\alpha}, \psi_{n\beta}$ - все остальные состояния системы, кроме уже выделенных $\psi_{\alpha 1}, \psi_{\beta 2}$:

$$\begin{aligned} \psi = & C_{\alpha 1}(Ff, t) \psi_{\alpha 1} \exp\left(-i \frac{\epsilon_1 + E_\alpha}{\hbar} t\right) + C_{\beta 2}(Ff, t) \psi_{\beta 2} \exp\left(-i \frac{\epsilon_2 + E_\beta}{\hbar} t\right) + \\ & + \sum_k C_{\alpha k} \psi_{\alpha k} \exp\left(-i \frac{\epsilon_k + E_\alpha}{\hbar} t\right) + \sum_n C_{\beta n} \psi_{\beta n} \exp\left(-i \frac{\epsilon_n + E_\beta}{\hbar} t\right). \end{aligned}$$

Для амплитуд $C_{\alpha 1}(t), C_{\beta 2}(t)$ получим обычную систему уравнений, которую упростим, вводя феноменологические константы затухания соответствующих электронных конфигураций λ_1, λ_2 . Удобнее ввести амплитуды

$$\begin{aligned} b_{\alpha 1}(Ff; t) &= C_{\alpha 1}(Ff; t) \exp\left(-i \frac{\epsilon_1 + E_\alpha}{\hbar} t\right); \\ b_{\beta 2}(Ff; t) &= C_{\beta 2}(Ff; t) \exp\left(-i \frac{\epsilon_2 + E_\beta}{\hbar} t\right). \end{aligned}$$

Тогда имеем систему уравнений

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} b_{\alpha 1} + \left(i \frac{\varepsilon_1 + E_\alpha}{\hbar} + \lambda_1 \right) b_{\alpha 1} + i \langle J_1 I_{\alpha}^F \left| \frac{H_{\beta 3}(E3E3)}{\hbar} \right| J_2 I_{\beta}^F \rangle b_{\beta 2} &= 0; \\ \frac{d}{dt} b_{\beta 2} + \left(i \frac{\varepsilon_2 + E_\beta}{\hbar} + \lambda_2 \right) b_{\beta 2} + i \langle J_2 I_{\beta}^F \left| \frac{H_{\beta 3}(E3E3)}{\hbar} \right| J_1 I_{\alpha}^F \rangle b_{\alpha 1} &= 0 \end{aligned}$$

с начальными условиями $b_{\alpha 1}(t)|_0 = B_{\alpha 1}(Ff)$; $b_{\beta 2}(t)|_0 = 0$.

Решение системы проще получить методом Лапласа

$$Z(p) = \int_0^{\infty} b(t) \exp(-pt) dt .$$

Тогда для лаплас-изображений получим

$$\begin{aligned} Z_{\alpha 1}(p) &= \left(p + \lambda_2 + i \frac{E_\beta + \varepsilon_2}{\hbar} \right) \frac{B_{\alpha 1}}{\Delta(p)} ; \\ Z_{\beta 2}(p) &= -i \langle J_2 I_{\beta}^F \left| \frac{H_{\beta 3}(E3E3)}{\hbar} \right| J_1 I_{\alpha}^F \rangle \frac{B_{\alpha 1}}{\Delta(p)} , \end{aligned} \quad (8)$$

где

$$\Delta(p) = \left(p + \lambda_1 + i \frac{E_\alpha + \varepsilon_1}{\hbar} \right) \left(p + \lambda_2 + i \frac{E_\beta + \varepsilon_2}{\hbar} \right) + \gamma^2 .$$

Здесь введено обозначение

$$\gamma^2 = \left| \langle J_2 I_{\beta}^F \left| \frac{H_{\beta 3}(E3E3)}{\hbar} \right| J_1 I_{\alpha}^F \rangle \right|^2 .$$

Для корней детерминанта имеем $\Delta(p) = (p - x_1)(p - x_2)$;

$$x_{1,2} = - \left(i\omega + i \frac{\delta}{2} + \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} \right) \pm \sqrt{\left(\frac{i\delta + \lambda_2 - \lambda_1}{2} \right)^2 - \gamma^2} , \quad (9)$$

где введены обозначения (δ - расстройка резонанса)

$$\frac{(\varepsilon_1 + E_\alpha)}{\hbar} = \omega ; \quad \frac{(\varepsilon_2 + E_\beta)}{\hbar} = \omega + \delta ; \quad \delta = \left(\frac{E_\beta - E_\alpha}{\hbar} \right) - \left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\hbar} \right) .$$

Согласно выражению (8) для определяющей выход изомера амплитуды $b_{\beta 2}(Ff; t)$

$$b_{\beta 2}(Ff; t) = -i B_{\alpha 1}(Ff) \frac{\langle J_2 I_{\beta}^F \left| \frac{H_{\beta 3}(E3E3)}{\hbar} \right| J_1 I_{\alpha}^F \rangle}{(x_1 - x_2)} [\exp(x_1 t) - \exp(x_2 t)] ;$$

$$\begin{aligned} |b_{\beta 2}(Ff; t)|^2 &= |B_{\alpha 1}(Ff)|^2 \gamma^2 |x_1 - x_2|^{-2} \times \\ &\times [\exp(x_1 + x_1^*) t + \exp(x_2 + x_2^*) t - \exp(x_1 + x_2^*) t - \exp(x_1^* + x_2) t] . \end{aligned}$$

4. Определим выход изомера на одну дырку в оболочке $6s\ 1/2$. Здесь возможны две ситуации:

А. Если электронная конфигурация состояния ψ_{J_2, μ_2} затухает быстро, т.е. $\lambda_2 \gg \gamma$ [$\gamma = 5(10^4 - 10^5) \text{с}^{-1}$], то выход изомера на одну дырку $6s\ 1/2$ равен

$$Y_{\beta}(\infty) = 2\lambda_2 \int_0^{\infty} \frac{|\beta_{\beta 2}(F_f, t)|^2}{|B_{\alpha 1}(F_f)|^2} dt =$$

$$= \frac{\gamma^2 2\lambda_2}{|x_1 - x_2|^2} \left[\frac{-1}{(x_1 + x_1^*)} + \frac{-1}{(x_2 + x_2^*)} + \frac{1}{(x_1 + x_2^*)} + \frac{1}{(x_1^* + x_2)} \right] =$$

$$= \frac{1}{2} \gamma^2 \lambda_2 \left(\frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} \right) \left\{ \left[\left(\frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} \right)^2 - a^2 \right] \left[\left(\frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} \right)^2 + \beta^2 \right] \right\}^{-1},$$

где введено обозначение

$$\sqrt{\left(\frac{i\delta + \lambda_2 - \lambda_1}{2} \right)^2 - \gamma^2} = a + ib.$$

В частном случае $(\lambda_1 - \lambda_2) \gg \gamma$ для выхода изомера получим

$$Y_{\beta}(\infty) = \frac{1}{4} \frac{\gamma^2 (\lambda_1 + \lambda_2)}{\lambda_1 \left[\left(\frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} \right)^2 + \left(\frac{\delta}{2} \right)^2 \right]}. \quad (10)$$

Б. Если электронная конфигурация состояния ψ_{J_2, μ_2} оболочки не затухает, т.е. $\lambda_2 = 0$, то в этом случае имеет смысл выход изомера на одну дырку к фиксированному моменту времени t :

$$Y_{\beta}(t) = \frac{\gamma^2}{|x_1 - x_2|^2} \left[\exp(x_1 + x_1^*)t + \exp(x_2 + x_2^*)t - \exp(x_1 + x_2^*)t - \exp(x_1^* + x_2)t \right]. \quad (11)$$

5. Рассмотрим вариант, когда ($6s\ 1/2$)-дырка находится в заполненной оболочке атома урана (случай точного резонанса, $\delta = 0$). Здесь λ_1 определяется радиационным переходом электронов $6p\ 1/2$ и $6p\ 3/2$ в состояние $6s\ 1/2$, т.е., согласно данным табл.4, $\lambda_1 = 2 \cdot 10^{10} \text{с}^{-1}$. Затухание λ_2 можно считать равным нулю, а $\gamma = 5(10^4 - 10^5) \text{с}^{-1}$. Таким образом, $\lambda_1 \gg \gamma$ и для корней x_1, x_2 получаем

$$x_1 = -i\omega - \gamma^2/\lambda_1; \quad x_2 = -i\omega + \gamma^2/\lambda_1.$$

Согласно выражению (11) выход изомера ^{235}U

$$Y_{\beta}(t) = \frac{\gamma^2}{\lambda_1^2} \left[\exp\left(-\frac{\gamma^2}{\lambda_1} t\right) - \exp\left(-\lambda_1 t + \frac{\gamma^2}{\lambda_1} t\right) \right], \quad \text{где } \gamma^2/\lambda_1 \approx 1 \text{ с}^{-1}.$$

Выход определяется величиной $\gamma^2/\lambda_1^2 = (0,6 - 2,5) \cdot 10^{-11}$. Поскольку на создание дырки $6s\ 1/2$ требуется энергия до 100 эВ, то на выделение одного ядра ^{235}U из смеси изотопов необходима энергия примерно в 10^7 МэВ. При делении ядра ^{235}U выход энергии составляет около 200 МэВ, следовательно, такой процесс разделения изотопов требует высокой степени рекуперации затрачиваемой энергии: $\eta > [1 - (200/10^7)] = [1 - (2 \cdot 10^{-5})]$, что практически недостижимо.

Итак, использование процесса резонансного возбуждения изомерного состояния ядра ^{235}U в целях разделения изотопов в случае заполненной оболочки атома практически лишено смысла. Чтобы процесс был эффективен, необходимо глубоко ионизовать атом урана, т.е. "ободрать" электроны $6p\ 1/2$, $6p\ 5/2$, $6d$ и $5f$. Однако при этом существенно изменится структура спектра атома.

6. На рис.8 представлен вариант использования резонансного E3-перехода $3d\ 3/2 \rightarrow 2p\ 3/2$ для возбуждения изомера ^{235}U через уровень $I' = 3/2^+ (I3,01\ \text{кэВ})$.

Схема расчета процесса возбуждения остается такой же, что и для дырки оболочки $6s\ 1/2$. Однако затухание λ_2 состояния с возбужденным ядром определяется как переходами электронной оболочки (заполнение дырки $3d\ 3/2$), так и временем жизни $|I'\rangle$ -уровня ядра ^{235}U , обусловленным переходом E2 на изомерный уровень $|I_\beta\rangle$. Время жизни $\tau(I')$ для ^{235}U может быть оценено по величине деформации ядра $\beta_{20} \approx 0,25$:

$$W(E2, I' \rightarrow I_\beta) = 1,23 \cdot 10^{-2} (\Delta E)^5 B(E2, I_\beta \rightarrow I') \left(\frac{2I_\beta + 1}{2I' + 1} \right) c^{-1},$$

где $\Delta E = 13\ \text{кэВ}$; $B(E2) e^2 \delta^2 = \frac{5}{16\pi} e^2 Q_0^2 (C_{I_\beta}^{I' 1/2})$; для ^{235}U $Q_0 = 10\ \text{б}$. Таким образом получаем

$$W(E2, I' \rightarrow I_\beta) = 0,91 \cdot 10^4 c^{-1}.$$

Коэффициент конверсии I3 кэВ E2-перехода на подоболочках MI, MII, MIII, MIV атома урана имеет величину $\alpha_2(\text{tot}) = 6,32 \cdot 10^4$. Отсюда $\lambda' = \alpha_2(\text{tot}) W(E2, I' \rightarrow I_\beta) = 5,75 \cdot 10^8 c^{-1}$. Однако эта величина существенно меньше скорости затухания дырки $3d\ 3/2$ в оболочке атома. Используя данные о вероятности радиационных переходов атома водорода и зависимость Z^4 от заряда ядра, находим оценки скоростей затухания дырок оболочки:

$$\lambda_1 = \lambda(2p\ 3/2) \approx 2,3 \cdot 10^{15} c^{-1} \quad [\Gamma(2p\ 3/2) \approx 2,9\ \text{эВ}];$$

$$\lambda_2 = \lambda(3d\ 3/2) \approx 0,49 \cdot 10^{15} c^{-1} \quad [\Gamma(3d\ 3/2) \approx 0,62\ \text{эВ}].$$

Для резонансного матричного элемента $H_{\beta_3}(E3E3)$ в одноэлектронном приближении имеем $\langle 2p\ 3/2\ \mu_2\ I' M' | 1/\hbar H_{\beta_3}(E3E3) | 3d\ 3/2\ \mu_1\ I_\alpha M_\alpha \rangle = (-1)^{\mu_2} \sqrt{4\pi/7} e^2 R_0^3 / \hbar \alpha_0^4 C_{2030}^{10} \mu(3\ 3/2\ 1/2; 2\ 3/2) \langle 2p\ 3/2 | (1/x)^4 | 3d\ 3/2 \rangle \langle I_\alpha \| E3 \| I' \rangle C_{I' M' 3 m}^{I_\alpha M_\alpha} C_{3/2 \mu_1 3 m}^{3/2 \mu_2}$.

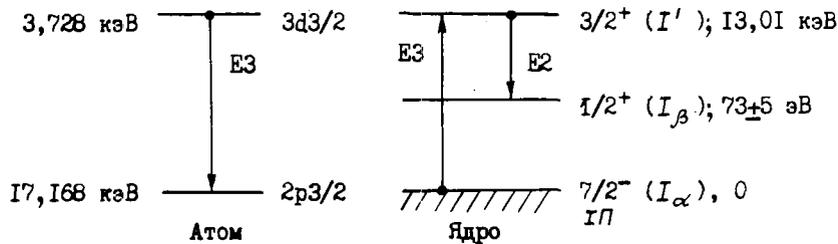


Рис.8. Вариант резонансного E3-перехода для возбуждения изомера ^{235}U

Радиальный матричный элемент был вычислен с функциями ТФД $\langle 2p\ 3/2 | (1/x)^4 | 3d\ 3/2 \rangle = 1,679 \cdot 10^5$ и ХФС $\langle 2p\ 3/2 | (1/x)^4 | 3d\ 3/2 \rangle = 1,596 \cdot 10^5$. Поскольку ядерное состояние $|I'\rangle$ принадлежит той же ротационной полосе, что и состояние $|I_\beta\rangle$, то ядерный матричный элемент $|\langle I_\alpha \| E3 \| I' \rangle|$ с точностью до фактора порядка единицы равен элементу $|\langle I_\alpha \| E3 \| I_\beta \rangle| = 1,17 \cdot 10^{-2}$. Отсюда для величины γ -скорости резонансного возбуждения ядра в переходе $3d\ 3/2 \rightarrow 2p\ 3/2$ электрона получаем с точностью до фактора порядка единицы оценку $\gamma(3d\ 3/2 \rightarrow 2p\ 3/2, I_\alpha - I') \approx 2 \cdot 10^8 c^{-1}$.

Таким образом, в рассмотрении реализуются условия $\lambda_1 \lambda_2 \gg \gamma$; для случая точного резонанса, согласно выражению (10), находим выход изомера на одну дырку $2p\ 3/2$:

$$Y_{\beta}(\infty) = \gamma^2 / \lambda_1 (\lambda_1 + \lambda_2) = \frac{(2 \cdot 10^8)^2}{(2,3 \cdot 10^{15}) (2,8 \cdot 10)^{15}} = 0,6 \cdot 10^{-14}.$$

Эта величина примерно на пять порядков меньше приводимой в работе [7], поскольку М. Морита оценил величину $\langle H_{\beta_3} \rangle \approx 0,04$ эВ, тогда как правильная оценка дает $\langle H_{\beta_3} \rangle \approx 10^{-7}$ эВ. Причины такого расхождения будут рассмотрены далее. Малый выход изомера не позволяет даже в случае точного резонанса использовать этот механизм для разделения изотопов урана.

7. Вариант резонансного возбуждения изомера в переходе $6d\ 3/2 \rightarrow 6p\ 3/2$ при $E_{\beta} - E_{\alpha} = (30 \pm 3)$ эВ. Допустим, что энергия изомерного уровня ядра ^{235}U равна (30 ± 3) эВ, как было определено в ранних работах [1]. В этом случае возможен процесс возбуждения состояния $|I_{\beta}\rangle$ при переходе электрона $6d\ 3/2$ на дырку в оболочке $6p\ 3/2$. Схема расчета остается такой же, как и ранее рассмотренная для перехода $5f\ 5/2 \rightarrow 6s\ 1/2$.

В данном случае затухание дырки $6p\ 3/2$ обусловлено радиационными переходами $7s\ 1/2 \rightarrow 6p\ 3/2$, $6d\ 3/2 \rightarrow 6p\ 3/2$, $6d\ 5/2 \rightarrow 6p\ 3/2$. Как видно из табл. 4, оно имеет величину около $10^{10} \text{с}^{-1} = \lambda_1$. Затухание дырки $6d\ 3/2$ в принятой схеме состояний $\lambda_2 = 0$.

Для резонансного матричного элемента взаимодействия электрона с ядром имеем

$$\begin{aligned} & \langle 6p\ 3/2\ \mu_2\ I_{\beta}\ M_{\beta} | 1/\hbar \hat{H}_{\beta_3} (E_3 E_3) | 6d\ 3/2\ \mu_1\ I_{\alpha}\ M_{\alpha} \rangle = \\ & = (-) \sqrt{4\pi/7} (e^2 R_0^3 / \hbar \alpha_0^4) C_{2030}^{10} u(31\ 3/2\ 1/2; 2\ 3/2) \langle 6p\ 3/2 | (1/x)^4 | 6d\ 3/2 \rangle \times \\ & \times \langle I_{\alpha} || E_3 || I_{\beta} \rangle^* C_{I_{\beta} M_{\beta} 3m}^{I_{\alpha} M_{\alpha}} C_{3/2\ \mu_1\ 3m}^{3/2\ \mu_2}. \end{aligned}$$

Здесь определяем $\langle 6p\ 3/2 | (1/x)^4 | 6d\ 3/2 \rangle = 524,74 - 461,83$ (см. табл. 5). Таким образом, величина γ для перехода $6d\ 3/2 \rightarrow 6p\ 3/2$ (с точностью до фактора порядка единицы, зависящего от конфигурации оболочки)

$$\gamma = (0,53 - 0,46) \cdot 10^6 \text{с}^{-1}.$$

В этом случае имеется неравенство $\lambda_1 \gg \gamma$, поэтому для корней x_1 и x_2 находим

$$\begin{aligned} x_1 &= -i\omega + i \frac{\gamma^2 \delta}{\lambda_1^2 + \delta^2} - \lambda_1 \left(1 - \frac{\gamma^2}{\lambda_1^2 + \delta^2} \right); \\ x_2 &= -i\omega - i \frac{\gamma^2 \delta}{\lambda_1^2 + \delta^2} - i\delta - \frac{\lambda_1 \gamma^2}{\lambda_1^2 + \delta^2}; \\ |x_1 - x_2|^2 &= \delta^2 \left(1 + 2 \frac{\gamma^2}{\lambda_1^2 + \delta^2} \right)^2 + \lambda_1^2 \left(1 - 2 \frac{\gamma^2}{\lambda_1^2 + \delta^2} \right)^2. \end{aligned}$$

По истечении времени $t > 1/\lambda_1$ выход изомера как функция времени имеет вид

$$Y_{\beta}(t) = \gamma^2 / \left[\delta^2 \left(1 + 2 \frac{\gamma^2}{\lambda_1^2 + \delta^2} \right)^2 + \lambda_1^2 \left(1 - 2 \frac{\gamma^2}{\lambda_1^2 + \delta^2} \right)^2 \right] \exp \left(-2 \frac{\lambda_1 \gamma^2}{\lambda_1^2 + \delta^2} t \right).$$

Для заданных чисел $\gamma = 5 \cdot 10^5 \text{с}^{-1}$; $\lambda_1 = 10^{10} \text{с}^{-1}$ в случае точного резонанса получаем $Y_{\beta}(t) = 2,5 \cdot 10^{-9} \exp(-50t)$, где t в секундах. Однако, если расстройка резонанса $\hbar\delta \approx 1$ эВ, что соответствует $\delta = 1,6 \cdot 10^{15} \text{с}^{-1}$, выход изомера по порядку величины равен 10^{-19} на одну дырку в оболочке $6p\ 3/2$ атома. Впрочем и в случае точного резонанса на выделение одного атома ^{235}U требуется энергия $1,6 \cdot 10^4$ МэВ. Реализация такого механизма выделения изотопа из природной смеси требует

высокой степени рекуперации рассеянной энергии, поскольку при делении ядра ^{235}U выделяется энергия в 200 МэВ. В данном случае существенно изменить величину λ_1 (путем ионизации атома) нельзя, так как E1-переход $6d\ 3/2 \rightarrow 6p\ 3/2$, который в этой схеме всегда существует (при любом заполнении состояний оболочки), дает затухание $\lambda_1 = 1,99 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$, конкурирующее с процессом резонансного возбуждения ядра ^{235}U .

Итоги по проверенным оценкам выхода изомера ^{235m}U в различных процессах

При делении ядра ^{235}U высвобождается энергия $2 \cdot 10^8$ эВ. Однако процесс возбуждения изомера ^{235m}U идет на фоне мощных конкурирующих процессов, так что выход изомера ^{235m}U в элементарном акте Y_β обычно очень мал. Поэтому на выделение одного ядра затрачивается энергия в первоначальной "организованной" форме, равная $\langle \Delta \mathcal{E} \rangle / Y_\beta$, где $\langle \Delta \mathcal{E} \rangle$ - средняя величина энергии, рассеиваемой конкурирующим процессом в одном акте. Естественно требование возврата этой рассеиваемой энергии в первоначальную форму, чтобы процесс разделения изотопов урана был энергетически выгоден. Для оценки эффективности процесса разделения введем коэффициент возврата η_{min} (степень рекуперации), который определим как $\eta_{min} = 1 - (2 \cdot 10^8 \text{ эВ}) / (\langle \Delta \mathcal{E} \rangle / Y_\beta)$. При достижении η_{min} цикл разделения изотопов урана имеет нулевой энергетический выход.

1. Рассмотрим резонансное фотовозбуждение ^{235m}U квантами с $\hbar\omega = 73$ эВ, $\sigma(\hbar\omega, I_\alpha \rightarrow I_\beta, E3) = 1,8 \cdot 10^{-33} \text{ см}^2$. Конкурирующий процесс - фотоионизация атома $\langle \Delta \mathcal{E} \rangle = 73$ эВ, $\sigma_i \approx 10^{-20} \text{ см}^2$. Выход изомера $Y_\beta = 1,8 \cdot 10^{-13}$. Отсюда $\eta_{min} = [1 - (0,5 \cdot 10^{-6})]$.

2. Прямое возбуждение E3-перехода $I_\alpha \rightarrow I_\beta$ в неупругом рассеянии электронов с энергией $\mathcal{E} = 5$ МэВ $\sigma(ee', I_\alpha \rightarrow I_\beta, E3) = 5 \cdot 10^{-37} \text{ см}^2$. Конкурирующий процесс - ионизация атома, сечение ионизации прием равным примерно 10^{-21} см^2 при средней потере энергии $\langle \Delta \mathcal{E} \rangle \approx 30$ эВ. Выход изомера $Y_\beta = 5 \cdot 10^{-16}$. Отсюда $\eta_{min} = [1 - (0,33 \cdot 10^{-8})]$.

3. Возбуждение перехода E1 в неупругом рассеянии электрона с энергией $\mathcal{E} \approx 5$ МэВ $\sigma(ee', I_\alpha \rightarrow I', E1) = 10^{-30} \text{ см}^2$. Конкурирующий процесс - ионизация атома, сечение ионизации прием равным примерно 10^{-21} см^2 при средней потере энергии $\langle \Delta \mathcal{E} \rangle \approx 30$ эВ. Выход изомера $Y_\beta \approx 10^{-9}$. Отсюда $\eta_{min} = [1 - (0,66 \cdot 10^{-2})]$.

4. Рассмотрим резонансное возбуждение в переходе $5f\ 5/2 \rightarrow 6s\ 1/2$ электрона оболочки атома. Выход изомера на одну ($6s\ 1/2$)-дырку $Y_\beta = (0,6 - 2,5) \cdot 10^{-11}$. Потери энергии в одном акте $\langle \Delta \mathcal{E} \rangle \approx 73$ эВ. Отсюда

$$\eta_{min} \geq \left[1 - \left\{ \begin{array}{l} 0,16 \cdot 10^{-4} \\ 0,64 \cdot 10^{-4} \end{array} \right\} \right].$$

Здесь оценка величины $\langle \Delta \mathcal{E} \rangle$ существенно занижена.

5. Рассмотрим резонансное возбуждение уровня $13,01$ кэВ ядра ^{235}U в E3-переходе $3d\ 3/2 \rightarrow 2p\ 3/2$ электрона оболочки атома (случай точного резонанса). Выход изомера $Y_\beta = 0,6 \cdot 10^{-14}$, минимальные потери энергии в одном акте $\langle \Delta \mathcal{E} \rangle \approx 17$ кэВ. Отсюда $\eta_{min} = [1 - (0,7 \cdot 10^{-10})]$.

6. Рассмотрим резонансное возбуждение изомера ^{235m}U в переходе электрона $6d\ 3/2 \rightarrow 6p\ 3/2$. Допускаем, что энергия изомерного уровня равна 30 эВ.

А. Случай точного резонанса: выход изомера $Y_\beta \approx 2,5 \cdot 10^{-9}$, минимальные потери энергии в одном акте образования дырки $\langle \Delta \mathcal{E} \rangle \approx 40$ эВ. Отсюда $\eta_{min} = [1 - (0,125 \cdot 10^{-11})]$.

Б. Случай расстройки резонанса ($\hbar\delta \approx 1$ эВ): $Y_\beta = 2,5 \cdot 10^{-19}$ и $\eta_{min} = [1 - (0,125 \cdot 10^{-11})]$. Поскольку оценки потерь энергии $\langle \Delta \mathcal{E} \rangle$ в одном акте, как правило, существенно занижены, величины η_{min} (степени рекуперации рассеянной энергии) должны быть больше (ближе к единице).

Как видно из приведенной сводки, все процессы разделения изотопов урана, основанные на возбуждении изомерного состояния для реализации, требуют весьма высокой степени рекуперации рассеянной энергии в ионизирующем процессе. Практически эти степени рекуперации вряд ли достижимы, поэтому рассмотренные выше механизмы разрешения изотопов нецелесообразны.

Поставим задачу несколько иначе: выясним условия оптимального процесса возбуждения изомера урана, чтобы знать, какие условия следует искать.

1. Малый выход изомера ^{235}mU на одну дырку в оболочке атома обусловлен быстрым затуханием дырки в результате радиационного перехода электронов из верхних заполненных подоболочек. Рассмотрим вариант глубокоионизированного иона урана. В этом случае величину λ_1 (скорость затухания дырки) будет определять радиационный переход E2, т.е. $\lambda_1 \approx 10^4 \text{c}^{-1}$, тогда как среднее значение γ для резонансного возбуждения ядра имеет величину около 10^5c^{-1} (см. табл. 5) для элементов $\langle (1/x)^4 \rangle$. Посмотрим выход изомера $Y_\beta(t)$ в этой ситуации.

А. Вариант точного резонанса ($\delta=0, \gamma \gg \lambda_1$). Для корней x_1 и x_2 имеем [см. (9)]

$$x_1 = -i\omega - (\lambda_1/2) + i\sqrt{\gamma^2 - (\lambda_1/2)^2}; \quad x_2 = -i\omega - (\lambda_1/2) - i\sqrt{\gamma^2 - (\lambda_1/2)^2}.$$

В результате для выхода изомера получаем

$$Y_\beta(t) = \frac{\gamma^2}{4[\gamma^2 - (\lambda_1/2)^2]} \left[\sin \sqrt{\gamma^2 - (\lambda_1/2)^2} t \right]^2 \exp(-\lambda_1 t).$$

Хотя выход изомера относительно велик, со временем он быстро затухает ($\tau \approx 10^{-4} \text{c}$), что не позволит реализовать процесс для разделения изотопов.

Б. Вариант сильной расстройки резонанса. Пусть $\delta \gg \gamma$ ($\delta \approx 10-100 \gamma$). Разлагая корни x_1, x_2 (9) по малому параметру $(4\gamma^2 - \lambda_1^2)/\delta^2$, получим

$$x_1 = -i\omega + i\frac{\gamma^2}{\delta} - i\frac{\delta}{16} \left(\frac{4\gamma^2 - \lambda_1^2}{\delta^2} \right)^2 - \lambda_1 \left[1 - \frac{1}{8} \left(\frac{4\gamma^2 - \lambda_1^2}{\delta^2} \right) \right] + \dots;$$

$$x_2 = -i\omega + i\delta - i\frac{\gamma^2}{\delta} + i\frac{\delta}{16} \left(\frac{4\gamma^2 - \lambda_1^2}{\delta^2} \right)^2 - \frac{\lambda_1}{8} \left(\frac{4\gamma^2 - \lambda_1^2}{\delta^2} \right) + \dots;$$

$$(x_1 - x_2) = -i\delta + 2i\frac{\gamma^2}{\delta} - i\frac{\delta}{8} \left(\frac{4\gamma^2 - \lambda_1^2}{\delta^2} \right)^2 - \lambda_1 \left[1 - \frac{1}{4} \left(\frac{4\gamma^2 - \lambda_1^2}{\delta^2} \right) \right] + \dots;$$

$$Y_\beta(t) = \gamma^2 / \left[\left(\delta - 2\frac{\gamma^2}{\delta} \right)^2 + \lambda_1^2 \right] \left\langle \exp \left[-\frac{\lambda_1}{4} \left(\frac{4\gamma^2 - \lambda_1^2}{\delta^2} \right) t \right] + \right. \\ \left. + \exp(-2\lambda_1 t) \exp \left[\frac{\lambda_1}{4} \left(\frac{4\gamma^2 - \lambda_1^2}{\delta^2} \right) t \right] - 2\exp(-\lambda_1 t) \cos \left\{ \left[\delta - 2\frac{\gamma^2}{\delta} + \frac{\delta}{8} \left(\frac{4\gamma^2 - \lambda_1^2}{\delta^2} \right) \right] t \right\} \right\rangle.$$

После истечения времени $t > 1/\lambda_1$ выход изомера слабо затухает по закону

$$Y_\beta(t) = \gamma^2 / \left[\left(\delta - 2\frac{\gamma^2}{\delta} \right)^2 + \lambda_1^2 \right] \exp \left[-\frac{\lambda_1}{4} \left(\frac{4\gamma^2 - \lambda_1^2}{\delta^2} \right) t \right].$$

Так, при $\gamma = 10^5 \text{c}^{-1}$, $\lambda_1 = 10^4 \text{c}^{-1}$, $\delta = 10 \gamma$ получим $Y_\beta(t) = 10^{-2} \exp(-t/\tau)$, где время затухания изомера $\tau = 10^{-2} \text{c}$. Это время достаточно велико, чтобы успеть нейтрализовать ион урана и вывести атом урана с изомерным ядром ^{235}mU для последующего разделения изотопов. Таким образом, вариант с расстройкой резонанса $\delta \approx 10 \gamma$ представляется наиболее оптимальным.

2. Величина расстройки резонанса δ ограничена сверху коэффициентом рекуперации η_{\min} . Допустим, что резонансная ситуация реализуется в спектре (10-12)-кратно ионизированного атома

урана. На такую ионизацию требуется энергия в несколько килоэлектронвольт (около 2 кэВ). Грубо это можно оценить по изменению термов электронов $\varepsilon(nlj)$ с ростом степени ионизации. В природной смеси изотопов на каждое ядро ^{235}U приходится 140 ядер ^{238}U . Таким образом, энергия, затрачиваемая на ионизацию и отнесенная к одному ядру ^{235}U , равна 300 кэВ. При выходе Y_β вкладываемая энергия равна $300/Y_\beta$. Отсюда при коэффициенте $\eta = 0$ получаем ограничение

$$Y_\beta = \frac{300 \cdot 10^3}{2 \cdot 10^8} = 1,5 \cdot 10^{-3}, \text{ что соответствует расстройке резонанса } \delta = 30 \gamma \text{ или } E_\beta - E_\alpha = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \pm \pm 10^{-5} \text{ эВ.}$$

3. Теоретическая (не вычислительная) точность расчета положения одноэлектронных орбит $\varepsilon(nlj)$ методом Хартри - Фока для области внешних орбит (на уровне $6s\ 1/2$ урана) составляет около 5%. Поэтому не может быть речи о теоретическом анализе возможности достаточно строгого резонанса с расстройкой порядка 10^{-9} эВ. Методом Хартри - Фока достаточно надежно можно вычислить динамические элементы: матричные элементы H_{ij} (ЕЗЕЗ) и элементы радиационных переходов электрона. В этой ситуации проблема установления существования резонансных условий в состояниях какого-либо иона урана является проблемой эксперимента. Расчеты методом Хартри - Фока (или в рамках упрощенных вариантов, например ХФС) позволяют лишь оценить характер качественного изменения спектра одночастичных состояний атома урана с изменением конфигурации или с ионизацией. В порядке иллюстрации приведем результаты расчета методом Хартри - Фока, полученные в работах [12, 13] (табл. 6).

Таблица 6

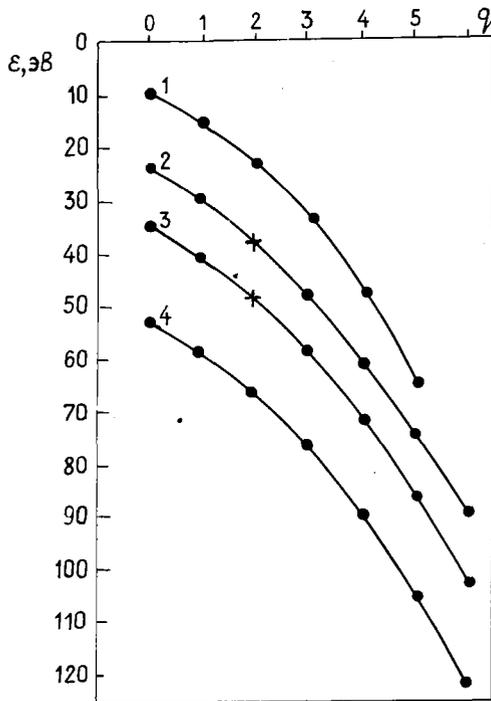
Изменение термов оболочки атома урана в зависимости от конфигурации "внешней" части оболочки [12, 13]

Заряд иона	Числа заполнения электронных орбит					Энергия термов $\varepsilon(nlj)$, эВ							
	5f5/2	5f7/2	6d3/2	6d5/2	7s1/2	5f5/2	5f7/2	6s1/2	6p1/2	6p3/2	6d3/2	6d5/2	7s1/2
0	3	0	1	0	2	8,520	-	52,014	33,892	24,364	5,724(?)	-	4,620(?)
0	2	0	2	0	2	12,001	-	54,964	36,446	26,432	5,595	-	6,120
1	3	0	1	0	1	15,063	-	58,579	40,434	30,854	11,337	-	10,704
1	3	0	0	0	2	16,765	-	60,303	42,073	32,362	-	-	11,914
1	2	0	1	0	2	20,520	-	63,481	44,851	34,652	13,005	-	12,501
1	1	0	2	0	2	24,397	-	66,626	47,589	36,888	14,243	-	13,032
3	3	0	0	0	0	32,653	-	76,181	57,834	47,934	-	-	-
4	2	0	0	0	0	47,799	-	90,620	71,673	60,972	-	-	-
5	1	0	0	0	0	64,153	-	105,956	86,374	74,820	-	-	-
6	0	0	0	0	0	-	-	122,063	101,833	89,396	-	-	-
0*	3	0	1	0	2	7,900	-	51,388	33,277	23,772	4,047	-	5,116
1*	3	0	1	0	1	14,539	-	58,058	39,929	30,375	10,553	-	10,459
1*	3	0	0	0	2	16,298	-	59,835	41,618	31,928	-	-	11,307
0**	3	0	1	0	2	7,949	7,348	55,784	34,964	25,981	5,203	4,962	5,410

* Данные, полученные методом ХФС(Л) (не отмеченные звездочкой - методом ХФС, см. рис. 9).
 ** Данные работы [13]. Остальные данные взяты из работы [12].

Характерной чертой является устойчивость энергии перехода $5f\ 5/2 \rightarrow 6s\ 1/2$ с ионизацией атома урана, что иллюстрируется табл. 7, составленной по данным работы [12].

Весьма интересно было бы проследить изменение термов $6s\ 1/2$, $6p\ 1/2$, $6d\ 3/2$, $6p\ 3/2$, $6d\ 5/2$, $5f\ 5/2$, $5f\ 7/2$ до больших зарядов иона урана, т.е. до $q = 10-12$. Если $\hbar\omega$ - частота перехода $5f\ 5/2 \rightarrow 6s\ 1/2$ устойчива и до таких степеней ионизации атома урана, то вероятность найти ситуацию, подходящую к гипотетическому оптимальному варианту, существенно возрастет.



Энергия одноэлектронного перехода 5f - 6s в ионах урана

Таблица 7

Заряд иона	Числа заполнения состояний					$\hbar\omega$ перехода 5f 5/2 → 6s 1/2, эВ
	5f 5/2	5f 7/2	6d 3/2	6d 5/2	7s 1/2	
0	3	0	1	0	2	43,494
0	2	0	2	0	2	42,963
I	3	0	1	0	1	43,516
I	3	0	0	0	2	43,538
I	2	0	1	0	2	42,961
I	1	0	2	0	2	42,229
3	3	0	0	0	0	43,528
4	2	0	0	0	0	42,821
5	1	0	0	0	0	41,803

Рис.9. Поведение одноэлектронных термов $\epsilon(nlj)$ для орбит 5f 5/2 (кривая 1), 6p 3/2 (кривая 2), 6p 1/2 (кривая 3), 6s 1/2 (кривая 4) как функций заряда иона урана по данным работы [12] (+ - получено путем интегриации)

Замечания к оценкам, полученным М.Морита [7]

Резонансное возбуждение изомерного уровня $^{235}\text{U} |1/2^+\rangle$ [в предположении $E_\beta - E_\alpha = (30 \pm 3) \text{ эВ}$] было рассмотрено в работе [7]. Однако в оценках выхода изомера в этой работе допущены грубые ошибки, которые следует отметить:

1. М.Морита не рассматривает последовательно изменение состояния системы во времени, поэтому в его оценках в формулы выхода изомера входит лишь расстройка резонанса, например для возбуждения уровня 13,1 кэВ ядра ^{235}U в переходе электрона $3d\ 3/2 \rightarrow 2p\ 3/2$.

2. Формула (II) работы [7] для кулоновского взаимодействия грубо ошибочна. М.Морита принимает

$$H' = -e^2 Z \sum_{\ell m} 4\pi / (2\ell + 1) (r_N^\ell / r_e^{\ell+1}) Y_{\ell m}^* (\theta_e, \phi_e) Y_{\ell m} (\theta_N, \phi_N),$$

тогда как правильное выражение имеет вид

$$H_{\beta\beta} = -e^2 \sum_{\ell m} 4\pi / (2\ell + 1) \sum_k (1/r_k)^{\ell+1} Y_{\ell m}^* (\vec{r}_k) \sum_{i=1}^A q_i r_i^\ell Y_{\ell m} (\vec{r}_i),$$

где q_i равно нулю для нейтронов и единице для протонов; r_k эквивалентно r_e ; r_i эквивалентно r_N . В результате H' оказывается в Z раз завышено ($Z=92$).

Далее, в оценке ядерного элемента оператора $r_N^3 Y_{3m}(\vec{r}_N)$ М.Морита принимает величину R_0^3 ($R_0 = 1,24 \text{ А}^{1/3} \cdot 10^{-13} \text{ см}$), тогда как для переходов ЕЗ ядер даже одночастичная модель в случае протонного перехода дает величину около $2 \cdot 10^{-2} R_0^3$. Наш расчет вероятности конверсии ЕЗ-перехода ^{235}U с изомерного уровня дает величину $(1,17 \cdot 10^{-2}) R_0^3$. Эта величина оказалась близкой к протонной одночастичной единице, что обусловлено коллективным характером перехода ЕЗ [14, 15].

Таким образом, суммарно величина резонансного H' (ЕЗЕЗ)-матричного элемента в работе [7] оказалась завышенной в $Z \cdot 10^2 \approx 10^4$ раз для урана, а выход изомера, пропорциональный квадрату матричного элемента H' -взаимодействия, завышен в $10^7 - 10^8$ раз. Следовательно, для выхода изомера в переходе $3d\ 3/2 \rightarrow 2p\ 3/2$ электрона вместо величины $P \approx 2,4 \cdot 10^{-9}$ [см. формулу (I6) работы [7]] должны иметь $P \approx 10^{-17} - 10^{-16}$.

3. Использование для оценки величины электронного радиального элемента $\langle 3d\ 3/2 | x^{-4} | 2p\ 3/2 \rangle$ нерелятивистских водородных функций также некорректно.

ПРИЛОЖЕНИЕ I

Энергии связи (в эВ) электронных орбит атома урана $\epsilon(n\ell j)$ в последовательности конфигураций валентной зоны атома (расчет сделан в рамках релятивистского метода ХФС(Л) при значении параметра самосогласования $\alpha = 0,7$)

Конфигурация	Электронная орбита						
	6s1/2	6p1/2	6p3/2	6d3/2	6d5/2	5f5/2	7s1/2
$(7s1/2)^2(6d3/2)^1(5f5/2)^3$	52,01	33,89	24,36	4,62	-	8,52	5,72
$(7s1/2)^1(6d3/2)^2(5f5/2)^3$	50,73	32,67	23,24	3,89	-	7,27	5,30
$(6d3/2)^3(5f5/2)^3$	49,73	31,71	22,35	3,37	-	6,30	-
$(7s1/2)^2(5f5/2)^4$	49,03	31,28	22,21	-	-	5,19	5,26
$(7s1/2)^2(6d3/2)^2(5f5/2)^2$	54,97	36,45	26,43	5,59	-	12,00	6,12
$(7s1/2)^2(6d3/2)^3(5f5/2)^1$	57,89	38,96	28,44	6,56	-	15,62	6,46
$(7s1/2)^2(6d3/2)^4$	60,77	41,44	30,41	7,51	-	-	6,76
$(6d5/2)^6$	58,84	39,57	28,66	-	5,30	-	-
$(6d3/2)^1(6d5/2)^5$	58,63	39,37	28,48	6,06	5,19	-	-
$(6d3/2)^2(6d5/2)^4$	58,42	39,18	28,30	5,94	5,08	-	-
$(6d3/2)^3(6d5/2)^3$	58,21	38,97	28,12	5,82	4,97	-	-
$(6d3/2)^4(6d5/2)^2$	57,99	38,77	27,93	5,69	4,85	-	-
$(5f5/2)^2(6d3/2)^4$	52,30	33,90	24,08	4,26	-	-	-
$(5f5/2)^4(6d3/2)^2$	47,27	29,59	20,65	2,76	-	-	-

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Одноэлектронные факторы конверсии $w_z(E3[n\ell j]^1 \hbar \omega)$ для изомера ^{235m}U при $\hbar \omega = 77$ эВ в серии I4 конфигураций валентной зоны атома урана (расчет сделан в рамках релятивистского метода ХФС, $\alpha = 0,7$)

Конфигурация	Электронная орбита						
	6s1/2, $\times 10^3$	6p1/2, $\times 10^6$	6p3/2, $\times 10^6$	6d3/2, $\times 10^5$	6d5/2, $\times 10^5$	5f5/2, $\times 10^3$	7s1/2, $\times 10^2$
$(7s1/2)^2(6d3/2)^1(5f5/2)^3$	0,6323	0,4277	0,1988	0,4052	-	0,6270	0,7070
$(7s1/2)^1(6d3/2)^2(5f5/2)^3$	0,6338	0,4248	0,1957	0,3650	-	0,6217	0,6353
$(6d3/2)^3(5f5/2)^3$	0,6358	0,4237	0,1933	0,3272	-	0,6167	-
$(7s1/2)^2(5f5/2)^4$	0,6357	0,4093	0,1876	-	-	0,5737	0,6143
$(7s1/2)^2(6d3/2)^2(5f5/2)^2$	0,6300	0,4471	0,2102	0,4804	-	0,6789	0,7873
$(7s1/2)^2(6d3/2)^3(5f5/2)^1$	0,6320	0,4673	0,2217	0,5527	-	0,7298	0,8599
$(7s1/2)^2(6d3/2)^4$	0,6394	0,4883	0,2331	0,6237	-	-	0,9271
$(6d5/2)^6$	0,6414	0,4883	0,2295	-	0,6571	-	-
$(6d3/2)^1(6d5/2)^5$	0,6410	0,4878	0,2290	0,5759	0,6495	-	-
$(6d3/2)^2(6d5/2)^4$	0,6406	0,4873	0,2285	0,5703	0,6417	-	-
$(6d3/2)^3(6d5/2)^3$	0,6402	0,4868	0,2280	0,5645	0,6336	-	-
$(6d3/2)^4(6d5/2)^2$	0,6398	0,4864	0,2275	0,5584	0,6252	-	-
$(5f5/2)^2(6d3/2)^4$	0,6360	0,4436	0,2040	0,4024	-	0,6680	-
$(5f5/2)^4(6d3/2)^2$	0,6350	0,4073	0,1833	0,2478	-	0,5625	-

Список литературы

1. Mazaki H., Shimizu S. *Phys. Letters*, 1966, v.23, p.137.
2. Freedman M.S., Porter F.T. *Phys.Rev.*, 1957, v.108, p.836.
3. Lederer C.M., Hollander J.M., Perlman I. *Tables of Isotopes*. N.-Y.: J.Wiley and Sons, 1968.
4. Néve de Mevergnies M. *Phys.Rev. Letters*, 1972, v.29, p.1188; 1962, v.23, p.422; *Phys. Letters B*, 1970, v.32, p.482.
5. Rickey F.A., Journey E.T., Britt H.C. *Phys.Rev. C*, 1972, v.5, p.2072.
6. Жудов В.И., Зеленков А.Г., Кулаков В.М. и др. *Письма в ЖЭТФ*, 1979, т.30, № 8, с.549.
7. Morita M. *Progr. Theor.Phys.*, 1973, v.49, p.1574.
8. Зигбан К., Нордлинг К. и др. *Электронная спектроскопия*. М.: Мир, 1971.
9. Latter R. *Phys.Rev.*, 1955, v.99, p.510.
10. Lu C.C., Carlsson T.A., Malik F.B., Tucker T.C. *Atomic Data*, 1971, v.3, p.1.
11. Jahn H.A. *Proc. Roy. Soc. A*, 1951, v.205, p.192.
12. Банд И.М., Тржасковская М.Б. *Препринт ЛИЯФ-92. Л.*, 1974.
13. Desclaux J.P. *Atomic and Nuclear Data Tables*, 1973, v.12, N 4, p.311.
14. Гречухин Д.П., Солдатов А.А. *Ядерная физика*, 1976, т.23, № 2, с.273.
15. Гречухин Д.П., Солдатов А.А. Там же, 1983, т.38, № 6(12), с.1397; *Препринт ИАЭ-3824/2. М.*, 1983.

Статья поступила в редакцию 26 апреля 1986 г.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ ИНДЕКС РАБОТ, ПОМЕЩЕННЫХ В НАСТОЯЩЕМ ВЫПУСКЕ,
В МЕЖДУНАРОДНОЙ СИСТЕМЕ СИЛДА

Element		Quantity	Laboratory	Work-type	Energy (eV)		Page	COMMENTS
S	A				min	max		
TI		DEL	IJI	REVW	1.5+6	7.0+6	I8	KØRZH. ANGDIST AT 8ES, GRPH, CFD
TI		DIN	IJI	REVW	1.5+6	7.0+6	I8	KØRZH. 1LVL, ANGDIST AT 8ES, GRPH, CFD
TI		TØT	IJI	REVW	5.0+5	9.0+6	I8	KØRZH. SIG(E), EXPT, CALC, EVAL, GRPH, CFD
TI		SEL	IJI	REVW	5.0+5	9.0+6	I8	KØRZH. SIG(E), EXPT, CALC, EVAL, GRPH, CFD
TI	48	DIN	IJI	REVW	1.0+6	9.0+6	I8	KØRZH. 3LVLS EXIT FN, GRPH, CFD
CR	50	SIN	IJI	REVW	8.0+5	1.0+7	I8	KØRZH. SIG(E), EXPT, CALC, GRPH, CFD
CR	52	DEL	IJI	REVW	1.5+6	7.0+6	I8	KØRZH. ANGDIST AT 7ES, GRPH, CFD
CR	52	DIN	IJI	REVW	2.0+6	7.0+6	I8	KØRZH. 2LVLS, ANGDIST AT 6ES, GRPH, CFD
CR	52	DIN	IJI	REVW	1.4+6	9.0+6	I8	KØRZH. 3LVLS EXIT FN, GRPH, CFD
NI	60	DEL	IJI	REVW	1.5+6	7.0+6	I8	KØRZH. ANGDIST AT 7ES, GRPH, CFD
NI	60	DIN	IJI	REVW	2.0+6	7.0+6	I8	KØRZH. 2LVLS, ANGDIST AT 3ES, GRPH, CFD
NI	60	TØT	IJI	REVW	5.0+5	9.0+6	I8	KØRZH. SIG(E), EXPT, CALC, EVAL, GRPH, CFD
NI	60	SEL	IJI	REVW	5.0+5	9.0+6	I8	KØRZH. SIG(E), EXPT, CALC, EVAL, GRPH, CFD
NI	64	SIN	IJI	REVW	8.0+5	1.0+7	I8	KØRZH. SIG(E), EXPT, CALC, GRPH, CFD
SE	78	DEL	IJI	REVW	1.5+6	8.0+6	I8	KØRZH. ANGDIST AT 6ES, GRPH, CFD
SE	78	DIN	IJI	REVW	1.5+6	5.0+6	I8	KØRZH. 4LVLS, ANGDIST AT 5ES, GRPH, CFD
SE	78	SEL	IJI	REVW	6.0+5	8.0+6	I8	KØRZH. SIG(E), EXPT, CALC, GRPH, CFD
SE	78	DIN	IJI	REVW	6.0+5	8.0+6	I8	KØRZH. 4LVLS EXIT FN, GRPH, CFD
MØ	92	SIN	IJI	REVW	8.0+5	1.0+7	I8	KØRZH. SIG(E), EXPT, CALC, GRPH, CFD
MØ	94	SIN	IJI	REVW	8.0+5	1.0+7	I8	KØRZH. SIG(E), EXPT, CALC, GRPH, CFD
MØ	94	DEL	IJI	REVW	2.0+6	7.0+6	I8	KØRZH. ANGDIST AT 6ES, GRPH, CFD
MØ	94	DIN	IJI	REVW	1.5+6	7.0+6	I8	KØRZH. 1LVL, ANGDIST AT 7ES, GRPH, CFD
MØ	94	TØT	IJI	REVW	5.0+5	8.0+6	I8	KØRZH. EXPT, CALC, GRPH, CFD
MØ	94	SEL	IJI	REVW	5.0+5	8.0+6	I8	KØRZH. EXPT, CALC, GRPH, CFD
MØ	94	DIN	IJI	REVW	8.0+5	8.0+6	I8	KØRZH. 1LVL EXIT FN, GRPH, CFD
TC	99	NG	FBI	EVAL	1.0+3	1.0+6	3	IGNATJUK+ SIG(E), EXPTS, EVAL, GRPH, CFD
RU	101	NG	FBI	EVAL	1.0+3	1.0+6	3	IGNATJUK+ SIG(E), EXPTS, EVAL, GRPH, CFD
RU	102	NG	FBI	EVAL	1.0+3	1.0+6	3	IGNATJUK+ SIG(E), EXPTS, EVAL, GRPH, CFD
RU	104	NG	FBI	EVAL	1.0+3	1.0+6	3	IGNATJUK+ SIG(E), EXPTS, EVAL, GRPH, CFD
RU	106	NG	FBI	EVAL	1.0+3	1.0+6	3	IGNATJUK+ SIG(E), EVALS, GRPH, CFD
RH	103	NG	FBI	EVAL	1.0+3	1.0+6	3	IGNATJUK+ SIG(E), EXPTS, EVAL, GRPH, CFD
PD	105	NG	FBI	EVAL	1.0+3	1.0+6	3	IGNATJUK+ SIG(E), EXPTS, EVAL, GRPH, CFD
PD	107	NG	FBI	EVAL	1.0+3	1.0+6	3	IGNATJUK+ SIG(E), EXPTS, EVAL, GRPH, CFD
AG	109	NG	FBI	EVAL	1.0+3	1.0+6	3	IGNATJUK+ SIG(E), EXPTS, EVAL, GRPH, CFD
I	129	NG	FBI	EVAL	1.0+3	1.0+6	3	IGNATJUK+ SIG(E), EVALS, GRPH, CFD
XE	131	NG	FBI	EVAL	1.0+3	1.0+6	3	IGNATJUK+ SIG(E), EVALS, GRPH, CFD
CS	135	NG	FBI	EVAL	1.0+3	1.0+6	3	IGNATJUK+ SIG(E), EVALS, GRPH, CFD
CE	144	NG	FBI	EVAL	1.0+3	1.0+6	3	IGNATJUK+ SIG(E), EVALS, GRPH, CFD

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.

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.

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 повторений 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.

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 (например, 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 — щиток 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**.

Полутонные фотоиллюстрации 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 горизонтали (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 машиннописного 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} , $K^{\text{эф}}$) 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 fuele 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 Brennstoffwiederaufarbeitung, — 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.

Редактор Г.В.Зубова
Технический редактор С.И.Халиллулина
Корректор Е.М.Спиридонова

Подписано в печать 26.02.87. Т-08751. Формат 60x84 1/8.
Печать офсетная. Печ.л. 12,0+вкл. Уч.-изд.л. 9,5. Тираж 355 экз.
Индекс 3645. 9 статей. Заказ № 293

Отпечатано в ЦНИИАтоминформе
127434, Москва, ас/ящ 971

УДК 539.172.4

БИБЛИОТЕКА РЕКОМЕНДОВАННЫХ ОЦЕНЕННЫХ НЕЙТРОННЫХ СЕЧЕНИЙ ДЛЯ ВАЖНЕЙШИХ ПРОДУКТОВ ДЕЛЕНИЯ ЯДЕР/А.В.Игнатюк, И.В.Кравченко, Г.Н.Мантуров. - Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1987, вып.1, с.3-10.

Представлено краткое описание библиотеки рекомендуемых оцененных нейтронных данных для 27 важнейших продуктов деления, сформированной в Центре по ядерным данным (г.Обнинск). Рекомендуемые сечения получены из анализа экспериментальных данных о параметрах нейтронных резонансов, усредненных сечений радиационного захвата быстрых нейтронов и предыдущих оценок сечений. Обсуждены возможные погрешности оцененных сечений. Для изотопов ^{107}Pd , ^{109}Ag , ^{129}I , $^{143,145}\text{Nd}$ и $^{147,149}\text{Sm}$ отмечена целесообразность дальнейших измерений сечений захвата быстрых нейтронов, направленных на устранение имеющихся разногласий экспериментальных данных (рис.3, табл.3, список лит. - 20 назв.).

УДК 539.172.4

О БИБЛИОТЕКАХ ЯДЕРНЫХ ДАННЫХ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ НА ЗАВОДЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО МАШИНОСТРОЕНИЯ "ШКОДА"/Я.Хеп, В.Валента. - Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1987, вып.1, с.10-18.

Описываются библиотеки ядерных данных, используемые для расчетов на АЭС с реакторами ВВЭР. Библиотека ВІВА содержит данные для 828 нуклидов, необходимых для расчетов активации материалов. Библиотека ВІВГВЕР содержит данные для 584 продуктов деления. Библиотека ВІРАЛ содержит данные для 113 актинидов и цепочек их распада. Группа по защите и радиационной безопасности использует эти библиотеки для оценки радиационной ситуации на АЭС, т.е. определяет источники излучения, их распространение с учетом дезактивации, дозовые эквиваленты персонала АЭС и населения (рис.4, табл.2, список лит. - 53 назв.).

УДК 539.171:539.172

ИЗМЕРЕНИЕ И АНАЛИЗ СЕЧЕНИЙ РАССЕЙЯНИЯ НЕЙТРОНОВ ЯДРАМИ КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ В ОБЛАСТИ ЭНЕРГИЙ 0,5-9,0 МэВ/И.А.Корж. - Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1987, вып.1, с.18-30.

Методом времени пролета на электростатическом ускорителе измерены дифференциальные и интегральные сечения упругого и неупругого рассеяния нейтронов с возбуждением одного-семи уровней ядер ^{48}Ti , ^{52}Cr , ^{54}Fe , $^{58,60,64}\text{Ni}$ и $^{92,94}\text{Mo}$ при энергиях 1,5; 2; 2,5; 3; 5; 6 и 7 МэВ; ядер ^{62}Ni , $^{76,78,80,82}\text{Se}$ и $^{126,130}\text{Te}$ при энергиях 1,5; 2; 2,5; 3 и 5 МэВ; ядер $^{50,54}\text{Cr}$, ^{56}Fe , $^{64,66,68}\text{Zn}$ и ^{209}Bi при энергиях 1,5; 2; 2,5 и 3 МэВ; ядер ^{16}O , ^{28}Si , ^{32}S и никеля при энергии 5 МэВ. Полученные экспериментальные данные вместе с данными других авторов в области энергий 0,5-9 МэВ проанализированы по сферической оптической модели с использованием усредненных и оптимальных параметров потенциала, по несферической оптической модели и по статистической модели. Адекватное теоретическое описание экспериментальных данных о сечениях рассеяния нейтронов позволило сделать оценки относительных вкладов механизмов рассеяния (прямого и компаундного) и их энергетической зависимости. Для изотопов титана, хрома, железа и никеля проведено сравнение экспериментальных и теоретических результатов с оцененными данными (рис.8, список лит. - 100 назв.).

УДК 621.039.51.134

НЮУЕС - КОМПЛЕКС ПРОГРАММ ПЕРЕРАБОТКИ ОЦЕНЕННЫХ НЕЙТРОННЫХ ДАННЫХ В ФОРМАТЕ ENDF/V В ГРУППОВЫЕ КОНСТАНТЫ НА ЕС ЭВМ/А.С.Кривцов. - Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1987, вып. I, с.30-36.

Описываются возможности адаптированного применительно к ЭВМ серии ЕС комплекса программ НЮУ, предназначенного для получения детального хода, мультигрупповых нейтронных и фотонных сечений, матриц межгрупповых переходов нейтронов и фотонов, матриц выхода γ -квантов, тепловыделения от нейтронов и фотонов из библиотек оцененных данных в формате ENDF/V. На выходе мультигрупповые константы могут иметь формат DTFR для транспортных программ типа DTF-IV и формат констант системы МУЛЬТИК (список лит. - 16 назв.).

УДК 539.172

КОМПЛЕКС ПРОГРАММ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ НА ОСНОВЕ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ/О.В.Груша, С.П.Иванова, Ю.Н.Шубин. - Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1987, вып. I, с.36-44.

Описан комплекс программ GROGIG для анализа ядерных реакций на основе статистической теории. Приводятся основные соотношения, используемые в расчетах, а также дополнения и изменения в исходном комплексе GROGI-2, расширяющие его возможности и позволяющие детально проследить за распадом сильновозбужденной системы с эмиссией нейтронов, протонов, α -частиц и γ -квантов с учетом деления на каждом этапе распада (прил. I, список лит. - 7 назв.).

УДК 621.039.5

ПРИМЕНИМОСТЬ ТРЕХМЕРНЫХ РАСЧЕТНЫХ ПРОГРАММ ЗАМОК И ММК22G К ОПИСАНИЮ ПРОХОЖДЕНИЯ γ -ИЗЛУЧЕНИЯ ЧЕРЕЗ ЗАЩИТЫ С ПРЯМЫМИ ПОЛЫМИ ЦИЛИНДРИЧЕСКИМИ КАНАЛАМИ/В.Л.Мазанов, А.Н.Николаев, А.В.Овчинников и др. - Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1987, вып. I, с.45-48.

Исследуется применимость трехмерных программ ЗАМОК и ММК22G, использующих метод Монте-Карло, к описанию прохождения γ -излучения от точечных и плоских источников через защиты с прямыми полыми цилиндрическими каналами. Для сравнения с расчетами были использованы две серии экспериментов. В первой серии изучалось распределение рассеянного компонента γ -излучения точечных изотропных источников вдоль прямых полых цилиндрических каналов в защитах из железа, парафина, графита и свинца. Во второй серии исследовалось распределение γ -излучения плоских изотропных источников вдоль прямых полых цилиндрических каналов в защите из железа и в многослойной железо-графитовой композиции. При сравнении расчета и эксперимента наблюдается согласие в пределах погрешностей измерений, а также отклонение результатов расчетов от эксперимента первой серии для каналов в защитах из железа и свинца (рис. 4, список лит. - 7 назв.).

УДК 621.039.547

КОНСТАНТНАЯ СОСТАВЛЯЮЩАЯ ПОГРЕШНОСТИ РАСЧЕТА СПЕКТРА НЕЙТРОНОВ В АКТИВНОЙ ЗОНЕ БЫСТРОГО РЕАКТОРА/В.В.Возяков, Г.Н.Мантуров. - Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1987, вып.1, с.48-55.

Проведен анализ константной составляющей погрешности расчета 26-групповых спектров нейтронов в активной зоне критических сборок, моделирующих активную зону быстрого реактора. Коэффициенты чувствительности групповых спектров к вариации основных сечений нуклидов активной зоны определены прямым расчетом при изменении сечений на 5%. Оценка константной составляющей погрешности выполнена с помощью комплекса программ CORE на основе статистического подхода. Использовались 12-групповые ковариационные матрицы погрешностей. В значимой части спектра константная составляющая 26-групповых потоков находится в пределах 3-10% (рис.1, табл.4, список лит. - 9 назв.).

УДК 539.14

ВЕРоятности конверсии ядерных переходов малой энергии ($\hbar\omega \ll 3$ кэВ) на электронных оболочках свободных атомов/Д.П.Гречухин, А.А.Солдатов. - Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1987, вып.1, с.55-65.

Ядерные переходы с энергией $\hbar\omega \ll 3$ кэВ практически полностью конвертированы. Заметная доля вероятности конверсии приходится на электроны внешних орбиталей с энергиями связи $E \ll 60$ эВ. Эти орбитали подвержены сильному воздействию химического окружения изучаемого атома. Наблюдаемые в эксперименте изменения скорости распада конверсионного изомера λ в некоторых случаях достигают нескольких процентов ($\rho_{0\text{м}}^{\text{н}} \text{ } ^{235}\text{U}$). Эти данные могут быть использованы в анализе электронной структуры молекул и конденсированных сред методом конверсионной спектроскопии. Чтобы провести первичный анализ спектров конверсии, необходимо иметь оценки парциальных вероятностей конверсии на отдельных орбитах атома. Факторы конверсии рассчитаны с волновыми функциями электронов оболочки свободного атома, полученными в рамках релятивистского метода Хартри - Фока - Слейтера с учетом поправки Латтера (табл.3, список лит. - 42 назв.).

УДК 539.14

ВОЗБУЖДЕНИЕ ИЗОМЕРНОГО УРОВНЯ ^{235}U КВАНТАМИ И ЭЛЕКТРОНАМИ/ Д.П.Гречухин, А.А.Солдатов. - Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1987, вып.1, с.66-86.

М.Морита предложено использовать изомерный уровень ядра ^{235}U с аномально малой энергией возбуждения в процессе разделения изотопов урана. Хотя им допущены ошибки, завывшающие эффект, проблема разделения изотопов урана остается актуальной. Авторы предприняли анализ возможности использования изомерного состояния ^{235}U в процессе разделения изотопов. Идея процесса проста: если имеется смесь изотопов урана, в которой ядра ^{235}U возбуждены на изомерный уровень, то по истечении времени жизни атомы ^{235}U будут ионизированы в процессе конверсии ЕЗ-мультиполя и могут быть выведены из смеси внешним электрическим полем или иным путем. Проблема сводится к поиску эффективного процесса возбуждения изомерного уровня ^{235}U . Авторы изучили как процессы прямого возбуждения изомера монохроматическими квантами и в неупругом рассеянии релятивистских электронов, так и процесс резонансного возбуждения изомера в переходе возбужденной электронной оболочки атома (рис.9, табл.7, прил.2, список лит. -15 назв.).

1 р. 50 к.

Индекс 3645

Вопросы атомной науки и техники. Серия: Ядерные константы, 1987, вып. I, I-90.