

КИЯИ-89-25

АКАДЕМИЯ НАУК УКРАИНСКОЙ ССР



ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

КиЯИ-89-25

Препринт КИЯИ-89-25

Г.М.Новоселов, Л.Л.Литвинский, А.В.Мурзин

МОДЕЛИРОВАНИЕ СЕЧЕНИЙ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ
СРЕДНИХ РЕЗОНАНСНЫХ ПАРАМЕТРОВ ЯДЕР
ИЗ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО ПРОПУСКАНИЮ
ФИЛЬТРОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ

КИЯИ

УДК 589.172.4

Г.М.Новоселов, Л.Л.Литвинский, А.В.Мурзин
МОДЕЛИРОВАНИЕ СЕЧЕНИЙ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ СРЕДНИХ РЕЗОНАНСНЫХ
ПАРАМЕТРОВ ЯДЕР ИЗ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО ПРОПУСКАНИЮ
ФИЛЬТРОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ

Описан один из способов численного моделирования нейтронных сечений в области неразрешенных резонансов и использование его для определения средних резонансных параметров ядер по экспериментальным данным с пропусками фильтрованных нейтронов.

A method of neutron cross section simulation in unresolved resonance region and its application for determination of nuclear average resonance parameters from transmission data on filtered neutrons are described.

Cross Section Simulation and Determination of the Average
Resonance Parameters from Transmission Experiments for
Filtered Neutrons

Novosjolov G.M., Litvinsky L.L., Mursin A.V.

АКАДЕМИЯ НАУК УССР

Г.М.Новоселов, И.И.Литвинский, А.В.Мурзин

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СЕЧЕНИЙ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ СРЕДНИХ
РЕЗОНАНСНЫХ ПАРАМЕТРОВ ЯДЕР ИЗ ЭКСПЕРИМЕНТОВ
ПО ПРОПУСКАНИЮ ФИЛЬТРОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ**

Киев, Институт ядерных исследований, 1989

Введение

Несмотря на значительный объем экспериментальной информации о нейтронных микроконстантах атомных ядер, накопленный к настоящему времени, задача определения резонансных параметров для большинства ядер по-прежнему остается актуальной /1/. Знание этих параметров необходимо как для теоретических рассмотрений, так и для различных реакторных и нейтронно-физических приложений. Наиболее обширную информацию о них дает область разрешенных резонансов. Анализ нейтронных сечений в этой области позволяет непосредственно определять параметры отдельных резонансов составного ядра. Однако из-за недостаточного энергетического разрешения экспериментальных установок даже в пределах области разрешенных резонансов надежность получаемой информации с ростом энергии заметно падает. Поэтому не все сведения о резонансах могут быть получены из разрешенной области. Например, для тяжелых ядер анализ имеющихся в настоящее время экспериментальных данных в этом диапазоне позволяет относительно надежно определять параметры только S - резонансов. Для изучения резонансов других зон необходимо привлечение нейтронных данных из более высокоэнергетической области (так называемой области неразрешенных резонансов).

Анализ нейтронных сечений и их различных функционалов в области неразрешенных резонансов позволяет определить средние значения резонансных параметров. В отличие от разрешенной области, здесь эти параметры определяются, как правило, косвенным путем, с прив-

лением к анализу некоторых модельных представлений о структуре сечений и свойствах самих параметров. Модельный подход применяется также для описания результатов различных экспериментов в неразрешенной области, данные которых чувствительны к детальной энергетической структуре сечений (например, экспериментов по исследованию резонансного самоэкранирования в сечениях $/2/$, угловых распределений рассеянных нейтронов $/3/$ и др.).

В последние годы на атомном реакторе ВВР-1 ИЯИ АН УССР широко используются нейтронные фильтры, позволяющие в диапазоне энергий $2 + 1000$ кэВ формировать высокопоточные лучи нейтронов сравнительно небольших энергетических ширин ($0,7 + 25$ кэВ). Для большинства средних и тяжелых ядер такой диапазон энергии соответствует области неразрешенных резонансов. Анализ экспериментальных данных о полных нейтронных сечениях, измеренных с помощью методики фильтрованных пучков, дает возможность определить как локальные значения средних резонансных параметров и средних сечений, соответствующие энергетическим ширинам формируемых пучков, так и значения, усредненные по всему (до 1 МэВ) диапазону энергий. В настоящей работе рассмотрен один из возможных способов такого анализа, использующий монте-карловское моделирование резонансной структуры наблюдаемых сечений с последующей оптимизацией средних резонансных параметров методом наименьших квадратов.

Следует отметить, что способ, в общих чертах аналогичный описываемому, рассматривался ранее $/4,5/$. Однако анализ самоэкранирования в $/4,5/$ ограничивался случаем низких энергий, где сечения представлялись в приближении изолированных резонансов с учетом одной лишь S -волны. В настоящей работе учитывается произвольное число волн, а также предусмотрена возможность учета каналов неупругого рассеяния.

1. Связь наблюдаемых нейтронных сечений с резонансными параметрами

Наблюдаемое в эксперименте пропускание нейтронов $\langle T \rangle$ определяется как отношение интенсивности прошедшего через образец пучка к интенсивности падающего пучка

$$\langle T \rangle = \frac{\int e^{-n\sigma_t(E)} \psi(E) dE}{\int \psi(E) dE} \quad (1)$$

где $\varphi(E)$ - энергетическое распределение нейтронов в падающем пучке, а n - произведение плотности ядер в образце на его линейные размеры вдоль пучка, которое условно будем называть толщиной образца. Если нейтронный пучок, выделяемый фильтром, имеет в максимуме распределения энергию E_0 , а ширину на половине высоты I , то при интегрировании в (1) можно ограничиться интервалом $(E_0 - I/2, E_0 + I/2)$. Так как в этом интервале

$\varphi(E)$ - плавная по сравнению с $\sigma_t(E)$ функция, то в большинстве случаев можно положить

$$\langle T \rangle \approx \frac{1}{I} \int_{E_0 - I/2}^{E_0 + I/2} e^{-n\sigma_t(E)} dE. \quad (2)$$

С величиной $\langle T \rangle$ может быть связано наблюдаемое полное нейтронное сечение

$$\langle \sigma_t^n \rangle = -\frac{1}{n} \ln \langle T \rangle. \quad (3)$$

Очевидно, в пределе бесконечно малых толщин n величина $\langle \sigma_t^n \rangle$ совпадает со средним по интервалу I полным сечением

$$\langle \sigma_t \rangle_I = \frac{1}{I} \int_{E_0 - I/2}^{E_0 + I/2} \sigma_t(E) dE. \quad (4)$$

Поскольку в рассматриваемом диапазоне энергий (< 1000 кэВ) для исследуемых ядер межрезонансная интерференция мала, то при моделировании величин (2)-(4) сечения представляются в рамках

R - матричного приближения изолированных резонансов [6,7].

$$\sigma_t(E) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell+1) \sin^2 \psi_{\ell} + \frac{\pi}{k^2} \sum_{J\pi} g_J \sum_{\lambda(\Gamma^{\pi}), s\ell} \frac{\Gamma_{\lambda}^{s\ell} [\Gamma_{\lambda} \cos 2\psi_{\ell} - 2(E_{\lambda}' - E) \sin 2\psi_{\ell}]}{(E_{\lambda}' - E)^2 + (\Gamma_{\lambda}/2)^2}, \quad (5)$$

где E_{λ}' - энергия λ -го резонанса, Γ_{λ} и $\Gamma_{\lambda}^{s\ell}$ - его полная и периферийная нейтронная ширина; ψ_{ℓ} - фаза рассеяния, $g_J = \frac{2J+1}{2(2I+1)}$ - статистический весовой фактор; I - спин ядра мишени,

$i = I/2$ - спин нейтрона, $S = |I + i|$ - спин канала,

$J = |I + S|$ - полный момент системы, π - ее четность.

$\sum_{s\ell}'$ означает суммирование лишь по тем значениям S и ℓ .

которые удовлетворяют законам сохранения полного момента J и четности π . Величины $E'_\lambda(J^*)$ включают в себя соответствующие сдвиги уровней $\Delta_\lambda(J^*)$, то есть $E'_\lambda = E_\lambda + \Delta_\lambda$.

Фаза φ_e предполагается не зависящей от s и J :

$$\varphi_e = \varphi_e - \arctg \frac{P_e R_e^{\infty}}{1 - S_e^{\circ} R_e^{\infty}}; \quad S_e^{\circ} \equiv S_e - B_e. \quad (6)$$

Здесь φ_e - сдвиг фазы рассеяния на непроницаемой сфере;

R_e^{∞} - остающаяся фоновая компонента R - матрицы;

B_e - параметр граничного условия, налагаемого на радиальную волновую функцию системы; P_e и S_e - факторы проницаемости и сдвига. В частности, при $\ell = 0$

$$\varphi_0 = \rho_0 = \rho, \quad S_0 = 0, \quad (7)$$

при $\ell = 1$

$$\varphi_1 = \rho - \arctg \rho, \quad P_1 = \frac{\rho^3}{1 - \rho^2}, \quad S_1 = -\frac{1}{1 - \rho^2}, \dots, \quad (7a)$$

где $\rho = ka$. Радиус канала a принимается равным $a \approx 1,85A^{1/3}$ ($\times 10^{-18}$ см), A - атомная масса.

Полная ширина Γ_λ в (5) является суммой парциальных ширин по всем открытым при данной энергии каналам реакции. Считая возможными лишь рассеяние и захват,

$$\Gamma_\lambda = \sum_{sl} \Gamma_{\lambda n}^{sl} + \sum_i \sum_{sl} \Gamma_{\lambda n_i}^{sl} + \Gamma_\gamma, \quad (8)$$

где $\Gamma_{\lambda n}^{sl}$ - парциальная нейтронная ширина λ -го резонанса, определяемая каналом упругого рассеяния:

$$\Gamma_{\lambda n}^{sl} = \frac{2P_e}{d_e} \gamma_{\lambda nsl}^2, \quad (9)$$

$$d_e \equiv (1 - S_e^{\circ} R_e^{\infty})^2 + (P_e R_e^{\infty})^2, \quad (10)$$

$\Gamma_{\lambda n_i}^{sl}$ - то же для i -го канала неупругого рассеяния;

$\gamma_{\lambda nsl}$ - амплитуды ширин; Γ_γ - радиационная ширина.

В предположении равноправности каналов с фиксированными ℓ, J и различными s ($\bar{\Gamma}_{nJ}^{sl} = \bar{\Gamma}_{nJ}^{s'l}$ при $s' \neq s$, где $\bar{\Gamma}_{nJ}^{sl}$ и $\bar{\Gamma}_{nJ}^{s'l}$ - средние значения парциальных ширин (9)) удобно ввести суммарную по s нейтронную ширину

$$\Gamma_{\lambda n}^e = \sum_j \Gamma_{\lambda n}^{se} = \sum_j \frac{2A}{d_j} \gamma_{\lambda n s j}^e. \quad (11)$$

Во среднем значении

$$\Gamma_{\lambda n}^e = n_j^{se} \cdot \Gamma_{\lambda n}^{se}, \quad (12)$$

где n_j^{se} принимает значение 1 или 2, если соответственно одно или оба значения спина канала S удовлетворяют неравенству

$$|J - \ell| \leq S \leq |J + \ell|.$$

Соответствующее (12) равенство для амплитуд имеет вид:

$$\overline{(\gamma_{\lambda n s j}^e)} = n_j^{se} \cdot \overline{(\gamma_{\lambda n s j}^{se})}. \quad (12a)$$

Для учета влияния эффекта Доплера выражение (5) необходимо усреднить по распределению скоростей теплового движения ядер мишеней. Считая это распределение максвелловским, получаем \bar{B}_e :

$$\begin{aligned} \bar{B}_e(E) = & \frac{4\pi}{k^2} \sum_j (2\ell+1) \sin^2 \varphi_e + \\ & + \frac{2\pi \sqrt{A}}{k^2 \Delta} \sum_j q_j \sum_{\lambda(j^e)} \sum_{\ell} \Gamma_{\lambda n}^e \left[U\left(\frac{E-E}{A}, \frac{\Delta}{2A}\right) \cos 2\varphi_e - \mathcal{V}\left(\frac{E-E}{A}, \frac{\Delta}{2A}\right) \sin 2\varphi_e \right]. \quad (18) \end{aligned}$$

Здесь $\Delta = 2\sqrt{k_B T_{\text{эфф}} E / (A+1)}$ - "доплеровская ширина",

$k_B \approx 0,86 \cdot 10^{-4}$ эВ/град. - постоянная Больцмана, $T_{\text{эфф}}$ - эффективная температура образца в К, $U(x, y)$ и $\mathcal{V}(x, y)$ - действительная и мнимая части интеграла вероятности комплексного аргумента $z = x + iy$ ρ :

$$U(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{y e^{-t^2}}{(x-t)^2 + y^2} dt. \quad (14)$$

$$\mathcal{V}(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(x-t) e^{-t^2}}{(x-t)^2 + y^2} dt. \quad (14a)$$

При моделировании резонансной структуры в заданном энергетическом интервале методом Монте-Карло разыгрываются энергии резонансов E_{λ}^e , их парциальные упругие ширины Γ_{λ}^e , а если открыты каналы неупругого рассеяния, то и неупругие ширины $\Gamma_{\lambda n}^e$. Предполагается, что средние расстояния между уровнями с данным значением полного момента J удовлетворяют выражению 10% :

$$\frac{1}{\bar{D}_J} = \frac{2J+1}{24\sqrt{E} a^{1/2} U^{3/2} \sigma^3} \exp \left[2\sqrt{a}U - \frac{(J+1/2)^2}{2\sigma^2} \right], \quad (15)$$

где $U = W + E$ - энергия возбуждения ядра; W - энергия связи нейтрона в ядре, E - кинетическая энергия налетающего нейтрона. Значения параметров a и σ принимаются следующими /11/:

$$a \approx 0,125 A \text{ (МэВ}^{-2}\text{)}, \quad \sigma \approx 0,29 A^{7/12}. \quad (16)$$

Величины \bar{D}_J могут быть связаны со средним наблюдаемым при низких энергиях ($U \sim W$) расстоянием между S -резонансами \bar{D}_0 .

$$\bar{D}_J = \bar{D}_0 \frac{J e^{-\frac{J^2}{2\sigma^2}} + (J+1) e^{-\frac{(J+1)^2}{2\sigma^2}}}{J+1/2} e^{\frac{(J+1/2)^2}{2\sigma^2}} \left(1 + \frac{E}{W}\right)^{\frac{5}{2}} e^{-2\left[\sqrt{a(W+E)} - \sqrt{aW}\right]}. \quad (17)$$

Помимо \bar{D}_0 для разгруппирования резонансной структуры необходимо задать средние значения приведенных нейтронных шири $(\bar{\Gamma}_{nJ}^{s\ell})^0$ или силовых функций S^ℓ . В принятых обозначениях нейтронная силовая функция для ℓ -ой парциальной волны может быть определена любым из следующих эквивалентных способов:

$$S^\ell = \frac{(\bar{\Gamma}_{nJ}^{s\ell})^0 d_e}{\bar{D}_J} = \frac{\bar{\Gamma}_{nJ}^{s\ell} d_e}{\bar{D}_J \sqrt{E} \sigma_e} = \frac{\bar{\Gamma}_{nJ}^{s\ell} d_e}{\bar{D}_J \sqrt{E} \sigma_e n_J^{s\ell}}, \quad (18)$$

или через среднюю амплитуду нейтронных шири

$$S^\ell = \frac{2g}{\sqrt{E}} \frac{(\sqrt{n_J^{s\ell}})}{\bar{D}_J}, \quad (18a)$$

где $\sigma_e = P_e / g$ - коэффициент нейтронной проницаемости. Значения S^ℓ считаются не зависящими от J и S , и при данном ℓ одинаковыми для упругих и неупругих каналов.

Следует отметить, что в литературе часто встречается другое определение силовой функции S^ℓ , предполагающее $d_e = 1$. Определение (18) представляется более предпочтительным, поскольку в нем исключена явная зависимость силовой функции от энергии и параметра граничного условия B_e . Так как при низких энергиях

$P_e \approx 0$, $S_e \approx -t$, то для обычно используемого граничного условия $B_e = 0$ из (10) следует

$$d_e = (1 + tR_e^{\infty})^2 \quad \text{при } E \rightarrow 0. \quad (19)$$

Таким образом, в низкоэнергетическом пределе для S - всяки оба определения S^e практически совпадают, но для других волн отличаются на множитель (19).

2. Моделирование резонансной структуры сечений

Энергии резонансов и их нейтронные ширины в заданной энергетической области разыгрываются методом Монте-Карло. Расстояния $D_{\lambda}(j\pi)$ между соседними значениями $E_{\lambda}(j\pi)$ в каждой системе уровней с моментом J и четностью π предполагаются распределенными по закону Вигнера и в соответствии с общей схемой Монте-Карло находятся по формуле $A/$

$$D_{\lambda}(j\pi) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \bar{D}_j \sqrt{-\ln \xi_{\lambda}}, \quad \lambda = 1, 2, \dots \quad (20)$$

где \bar{D}_j определяется согласно (17), а ξ_{λ} - случайные числа, равномерно распределенные в интервале $(0, 1)$.

Частичные нейтронные ширины $\Gamma_{\lambda n}^{se}$ (или квадраты амплитуд $\delta_{\lambda n l j}^2$) считаются распределенными по закону Портера-Томаса. Для квадратов амплитуд суммарных по S ширины $\delta_{\lambda n l j}^2$ (II) это соответствует χ^2 - распределению с числом степеней свободы

n_j^{se} .
При $n_j^{se} = 1$ два независимых значения $\delta_{\lambda n l j}^2$ могут быть получены по двум независимым случайным числам ξ_{μ} и ξ_{ν} $A/$

$$\delta_{\mu n l j}^2 = (\overline{\delta_{n s l j}^2}) (-2 \ln \xi_{\mu}) \cos^2\left(\frac{\pi}{2} \xi_{\nu}\right), \quad (21)$$

$$\delta_{\nu n l j}^2 = (\overline{\delta_{n s l j}^2}) (-2 \ln \xi_{\mu}) \sin^2\left(\frac{\pi}{2} \xi_{\nu}\right),$$

а при $n_j^{se} = 2$ $A/2/$

$$\delta_{\mu n l j}^2 = 2 (\overline{\delta_{n s l j}^2}) (-2 \ln \xi_{\mu}). \quad (21a)$$

Средние значения квадратов амплитуд нейтронных $A/$, согласно (18), могут быть выражены через силовую функцию:

$$(\overline{\delta_{n s l j}^2}) = \frac{\sqrt{E}}{2q} S^e \bar{D}_j. \quad (22)$$

Так как силовая функция (18) предполагается не зависящей от J и E , то это означает, что $(\bar{Y}_{nl\ell}^2)$ имеет ту же зависимость от J , E , что и \bar{D}_r . То есть, считая $\bar{D}_r = \bar{D}_r f(J, E)$, можно показать:

$$(\bar{Y}_{nl\ell}^2) = G_{\ell} \cdot f(J, E), \quad \text{где } G_{\ell} = \frac{\sqrt{E}}{2q} S^{\ell} \bar{D}_r. \quad (28)$$

Следует отметить, что при размытывании резонансной структуры исследуемых ядер в заданный энергетический интервал попадает ограниченное число резонансов, и реализуемая при этом выборка резонансных параметров зачастую оказывается недостаточно репрезентативной. В результате средние по i -ой выборке значения параметров \bar{D}_r и $(\bar{Y}_{nl\ell}^2)$ отличаются от начальных \bar{D}_r , $(\bar{Y}_{nl\ell}^2)$. Поэтому после размытывания каждой J^{π} -системы параметры ее резонансов корректируются: все межузловые расстояния $D_{\lambda}^i(J^{\pi})$ домножаются на один и тот же для данной системы множитель $\rho_{\lambda}^i = \bar{D}_r / \bar{D}_r^i$, а квадраты амплитуд нейтронных ширины $Y_{nl\ell}^2$ - на $\rho_{\ell}^i = (\bar{Y}_{nl\ell}^2) / (Y_{nl\ell}^i)^2$. Такая процедура не меняет законы распределения соответствующих величин, но корректирует их средние значения.

Радмационные ширины Γ_r считаются не флуктуирующими и для всех значений J и ℓ берутся одинаковыми. Энергетическая зависимость Γ_r задается следующим образом /13/:

$$\Gamma_r = \bar{\Gamma}_r \left(1 + \frac{E}{W}\right)^{\delta}, \quad (24)$$

где $\bar{\Gamma}_r$ - среднее наблюдаемое в макронергетической области значение Γ_r , а параметр δ , согласно /13/, равен 2,5.

Для вычисления факторов проницаемости P_{ℓ} и сдвига S_{ℓ} , а также фаз рассеяния на непроницаемой сфере Φ_{ℓ} (7) используются рекуррентные формулы /6/:

$$P_{\ell} = \frac{q^{\ell} P_{\ell-1}}{(\ell - S_{\ell-1})^2 + P_{\ell-1}^2}, \quad (25)$$

$$S_{\ell} = -\ell + \frac{q^2 (\ell - S_{\ell-1})}{(\ell - S_{\ell-1})^2 + P_{\ell-1}^2}, \quad (25a)$$

$$\Phi_{\ell} = \Phi_{\ell-1} - \arctg \left(\frac{P_{\ell}}{\ell - S_{\ell-1}} \right) \quad (25b)$$

с начальными значениями (7).

Случайные числа ξ_i , равномерно распределенные в интервале (0,1), генерируются с помощью подпрограммы URAND /14/. Период последовательности псевдослучайных чисел, вырабатываемых ею, равен 2^{31} . Тестирование подпрограммы URAND предложеными в /15/.

методами дано удовлетворительные результаты.

В. Расчет наблюдаемых сечений

Сечения (18) и их различные функционалы (\bar{S}, \bar{D}) могут быть непосредственно рассчитаны по параметрам разбитых резонансов. При вычислении $\bar{S}_i(E)$ (18) в сумме по λ для каждой J^{π} -состояния учитывается фиксированное число резонансов, расположенных слева и справа от точки E . Поэтому для корректного расчета $\bar{S}_i(E)$ на краях рассматриваемого энергетического интервала I резонансная структура разгруппируется в усредненном диапазоне $J^{\pi} > I$. Но описанная в разд. 2 корректировка резонансных параметров осуществляется только для резонансов, попадающих в интервал I .

Помимо среднего сечения $\langle \bar{S}_i \rangle$, производный $\langle \bar{T} \rangle$, и наблюдаемых полных сечений $\langle \bar{S}_i^2 \rangle$, соответствующих набору экспериментальных толщин Π_i , рассчитываются значения производных этих величин по средним резонансным параметрам:

$$\frac{\partial \langle \bar{S}_i^2 \rangle}{\partial G_i}, \quad \frac{\partial \langle \bar{S}_i^2 \rangle}{\partial R_i^2}, \quad \frac{\partial \langle \bar{S}_i^2 \rangle}{\partial E_i}, \quad \frac{\partial \langle \bar{S}_i^2 \rangle}{\partial \Pi_i}. \quad (26)$$

Если интервал усреднения I не очень широкий, то, как уже отмечалось, получаемая при разгруппировании в нем выборка резонансных параметров может быть недостаточно репрезентативной. В этом случае для увеличения объема выборки разгруппирование резонансной структуры может проводиться многократно, а значения $\langle \bar{S}_i \rangle$, $\langle \bar{T} \rangle$, $\langle \bar{S}_i^2 \rangle$ и их производных определяться путем усреднения:

$$f = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K f_k, \quad (27)$$

где f_k - значение усредняемой величины в k -ой выборке. При этом вероятные ошибки могут быть оценены по общей формуле [12/

$$\Delta f = 0,675 \sqrt{\frac{\sigma_f^2}{K}}, \quad (28)$$

где σ_f^2 - дисперсия величин f :

$$\sigma_f^2 = \frac{1}{K-1} \sum_{k=1}^K f_k^2 - \frac{1}{K(K-1)} \left(\sum_{k=1}^K f_k \right)^2. \quad (29)$$

4. Определение средних параметров резонансов

В экспериментах, проводимых на фильтрованных нейтронных пучках, пропускания измеряются для набора образцов различных толщин l_i . На рисунке представлен характерный вид получаемой зависимости наблюдаемых полных нейтронных сечений $\langle \sigma_i^n \rangle$ от l_i . Из анализа таких данных могут быть определены средние резонансные параметры, соответствующие энергетическому интервалу усреднения.

Для этого по начальному набору средних параметров

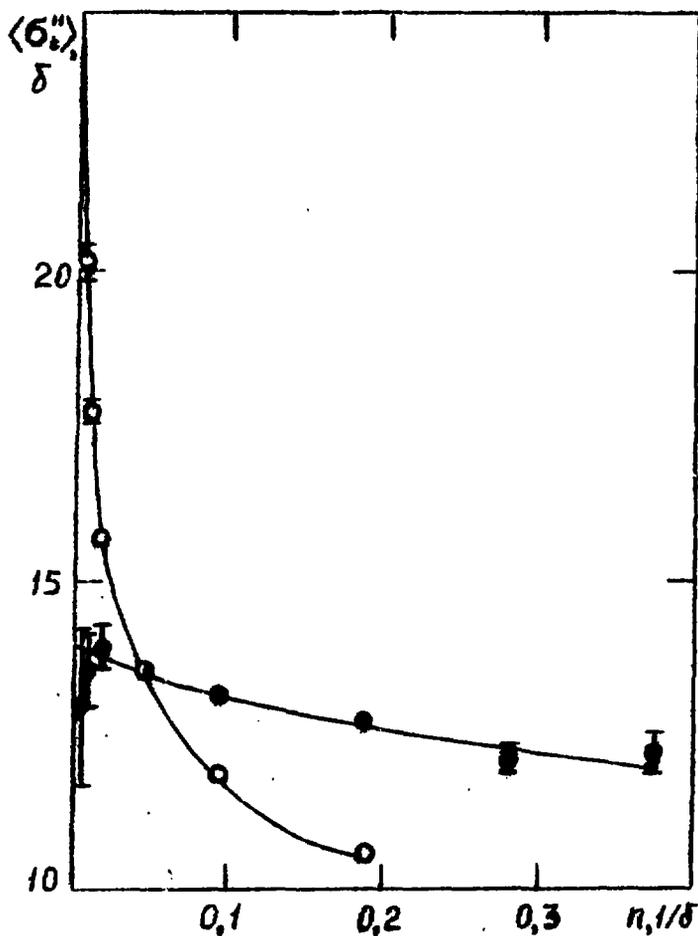
$$S^l, R_l^n, D, \text{ и } \Gamma_l \quad (l=0, 1, \dots) \quad (30)$$

в заданном интервале разгружаются параметры нейтронных резонансов, по которым вычисляются модельные сечения $\langle \sigma_i^n \rangle$ и их производные. Затем параметры (30) варьируются методом наименьших квадратов для получения наилучшего согласия расчетных сечений с экспериментальными.

Обычный метод наименьших квадратов использует процедуру линеаризации аппроксимирующей функции. Поэтому для лучшей его сходимости необходимо, чтобы сечения, соответствующие начальному набору параметров, не сильно отличались от экспериментальных. Как правило, в качестве начальных значений S^l, R_l^n, D и Γ_l берутся данные на области разрозненных резонансов. Если эти значения выбраны удачно, то для определения коковых параметров достаточно однократного применения описанной выше процедуры. Однако, если конечный набор средних резонансных параметров сильно отличается от начального, то для уточнения вся процедура может быть повторена.

На каждом фильтре измерения наблюдаемых полных сечений $\langle \sigma_i^n \rangle$ для образцов разных толщин l_i проводятся независимо. Поэтому при определении локальных значений средних резонансных параметров (30), соответствующих выделяемому фильтром интервалу энергий, исходная ковариационная матрица ошибок экспериментальных сечений C_e считается диагональной. Элементы ее - суммарные квадратичные ошибки экспериментальных $\Delta \sigma_i^n$ и расчетных $\Delta \sigma_i^p$ сечений:

$$(\Delta \sigma_i^n)^2 = (\Delta \sigma_i^a)^2 + (\Delta \sigma_i^p)^2. \quad (31)$$



Зависимость наблюдаемых полных нейтронных сечений урана-238 от толщины образца (данные работы [2]):

○ — при энергии нейтронов $E_0 = 2$ кэВ (скандиевый фильтр, интервал усреднения $\bar{I} = 0,6$ кэВ);

● — при $E_0 = 24,4$ кэВ (железный фильтр, $\bar{I} = 2,1$ кэВ);
сплошные кривые — расчет методом Монте-Карло.

При совместной обработке данных, полученных на разных фильтрах, следует учитывать еще флуктуационные ошибки наблюдаемых сечений $\Delta \sigma_i^p$, обусловленные ограниченностью энергетических интервалов, используемых фильтрами. Численно такие ошибки могут быть оценены с помощью метода Монте-Карло. (Для этого при разыгрывании резонансных параметров не следует проводить их корректировку, о которой шла речь в п.2). Однако такой способ слишком громоздкий; при расчетах целесообразно ограничиться простым приближенным выражением для $\Delta \sigma_i^p$. Как показано в Приложении, флуктуационная ошибка полного сечения, уряденного в конечном энергетическом интервале I, может быть представлена в виде:

$$\Delta \sigma_i^p = \frac{1}{N} \sqrt{\frac{1}{N}} \left[\sum_{l=1}^N (Nl+1) \left(S' \frac{dE}{d\epsilon} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (82)$$

Флуктуационные ошибки наблюдаемых полных сечений $\Delta \sigma_i^p$ в случае не очень толстых образцов можно приближенно выразить через $\Delta \sigma_i^p$:

$$\Delta \sigma_i^p \approx \left(\frac{\langle \sigma_i^p \rangle}{\langle \sigma_i \rangle} \right) \cdot \Delta \sigma_i^p, \quad (88)$$

где в круглых скобках стоят расчетные величины.

Для исследуемого ядра совокупность наблюдаемых сечений $\langle \sigma_i^p \rangle$, измеренная на конкретном фильтре, реально определяется одной и той же резонансной структурой. Поэтому при совместной обработке всех данных, полученных на разных фильтрах, следует учитывать корреляции сечений внутри каждой из таких совокупностей. Ковариационная матрица ошибок в этом случае задается в виде клеточной матрицы, у которой ненулевыми являются только диагональные квадратные подматрицы, соответствующие сечениям, измеренным на отдельных фильтрах:

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} C^{(1)} & 0 & \dots \\ 0 & C^{(2)} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}. \quad (84)$$

Недиагональные элементы подматриц $C^{(k)}$ (здесь k - индекс фильтра) имеют вид

$$C_{ij}^{(k)} = (\Delta \sigma_i^p) (\Delta \sigma_j^p), \quad i \neq j, \quad (35)$$

а диагональные

$$C_{ii}^{(k)} = (\Delta \sigma_i^o)^2 + (\Delta \sigma_i^p)^2. \quad (35a)$$

Следует отметить, что из анализа данных об одних лишь полых нейтронных сечениях реально могут быть определены не все средние резонансные параметры (30). Например, для ядра ^{238}U обработка таких данных, полученных с помощью разных фильтров в широком (\sim до 800 кэВ) энергетическом диапазоне, позволяет относительно надежно определять S^o , R_o^m , S^i , R_i^m и \bar{D}_o . Поэтому для нахождения значений других параметров необходимо привлекать дополнительную экспериментальную информацию, например, данные о сечениях рассеяния, захвата и др.

Приложение.

Флуктуационная погрешность среднего полного сечения

В статистическом подходе параметры резонансов рассматриваются как случайные величины, имеющие определенные законы распределения. Соответственно, сечения являются случайными функциями, отдельные реализации которых наблюдаются в эксперименте. Поэтому всякое среднее по конечному энергетическому интервалу I сечения $\langle \sigma_t \rangle_I$ по сути является выборочным и может отличаться от "истинного", то есть усредненного по сколь угодно большому интервалу, значения $\langle \sigma_t \rangle$.

Характерной величиной, определяющей возможные отклонения $\langle \sigma_t \rangle_I$ от этого значения, будет:

$$(\Delta \sigma_t^p)^2 = \overline{(\langle \sigma_t \rangle_I - \langle \sigma_t \rangle)^2}. \quad (36)$$

Поскольку математическое ожидание $\langle \sigma_t \rangle_I$ есть $\langle \sigma_t \rangle$:

$$\overline{\langle \sigma_t \rangle_I} = \langle \sigma_t \rangle, \quad (37)$$

то (36) представляет собой дисперсию случайной функции $\langle \sigma_t \rangle_I$. Учитывая (37),

$$(\Delta \sigma_t^p)^2 = \overline{\langle \sigma_t \rangle_I^2} - \langle \sigma_t \rangle^2. \quad (38)$$

Как известно, в приближении изолированных резонансов (5), (15) среднее сечение $\langle \sigma_c \rangle$ не зависит от эффекта Доплера и может быть представлено в виде $\langle \sigma_c \rangle / \Delta$

$$\langle \sigma_c \rangle = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \psi_l + \frac{2\pi^2}{k^2} \sum_{j \neq l} g_j \sum_{\lambda \neq l} \frac{\Gamma_{\lambda j}^{2\lambda}}{\Delta_j} \cos 2\psi_l. \quad (39)$$

Таким образом, задача сводится к оценке одного лишь первого члена в (38). Ограничиваясь в (38) только резонансными составляющими, в приближении (15) имеем:

$$(\Delta \sigma_c^R)^2 = \left(\frac{2\pi}{k^2} \right)^2 \frac{\pi}{\Delta^2} \left\{ \left\langle \sum_{j \neq l} g_j \sum_{\lambda(j^*)} \sum_{\lambda l} \Gamma_{\lambda l}^{2\lambda} [U(\lambda) \cos 2\psi_l - \sigma(\lambda) \sin 2\psi_l] \right\rangle^2 - \left\langle \sum_{j \neq l} g_j \sum_{\mu(j^*)} \sum_{\mu l} \Gamma_{\mu l}^{2\mu} [U(\mu) \cos 2\psi_l - \sigma(\mu) \sin 2\psi_l] \right\rangle^2 \right\}, \quad (40)$$

где введены обозначения

$$U(\lambda) = U\left(\frac{E_c - E_c}{\Delta}, \frac{\Gamma_\lambda}{2\Delta}\right), \quad \sigma(\lambda) = \sigma\left(\frac{E_c - E_c}{\Delta}, \frac{\Gamma_\lambda}{2\Delta}\right). \quad (41)$$

Усреднение по энергетическому интервалу I может быть выполнено с помощью весовой функции; в частности, в (I) такая функция соответствует $\varphi(E)$. Так как конкретный вид этой функции не существен $\langle \sigma_c \rangle$, удобно выбрать ее в виде функции Лоренца

$$\langle \sigma_c \rangle_I = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \sigma_c(E') \frac{1}{(E' - E_c)^2 + I^2} dE'. \quad (42)$$

В этом случае, вынося из-под интеграла (42) плавно зависящие от энергии параметры при их среднем значении, усреднение в (42) приводит лишь к появлению во вторых аргументах функций U и σ (41) дополнительного слагаемого I/Δ . Поскольку обычно $I \gg \Gamma_\lambda$, то можно принять

$$U\left(\frac{E_c - E_c}{\Delta}, \frac{\Gamma_\lambda}{2\Delta} + \frac{I}{\Delta}\right) \approx U\left(\frac{E_c - E_c}{\Delta}, \frac{I}{\Delta}\right), \quad \sigma\left(\frac{E_c - E_c}{\Delta}, \frac{\Gamma_\lambda}{2\Delta} + \frac{I}{\Delta}\right) \approx \sigma\left(\frac{E_c - E_c}{\Delta}, \frac{I}{\Delta}\right). \quad (43)$$

Такое предположение позволяет в (40) провести усреднение по резонансным нейтронным ширин $\Gamma_{\lambda n}^{2\lambda}$. Считая эти ширин распределенными по закону Лоренца-Томаса, получаем:

$$\overline{(\Gamma_{\lambda n}^{sl})} = \Gamma_{nJ}^{sl}, \quad \overline{(\Gamma_{\lambda n}^{sl})^2} = 3\Gamma_{nJ}^{sl}. \quad (44)$$

Для суммирования по λ и μ резонансные уровни каждой $J\pi$ -системы будем считать эквидистантными с межуровневым расстоянием \overline{D}_J / Π :

$$E_{\lambda(J\pi)} = E_{J\pi}^{(0)} + \lambda \overline{D}_J, \quad (45)$$

где $\lambda = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, а $E_{J\pi}^{(0)}$ - ближайший к точке E_0 резонанс системы $J\pi$. Суммы по λ и μ в (14) берутся в пределах $(-\infty, \infty)$. Ввиду произвольности выбора "нулевого" резонанса $E_{J\pi}^{(0)}$ (он имеет смысл лишь в данной модели эквидистантных резонансов), результат суммирования должен быть усреднен по возможным значениям $\lambda_{J\pi} \equiv \Pi(E_0 - E_{J\pi}^{(0)}) / \overline{D}_J$ из диапазона $(-\pi/2, \pi/2)$.

Для примера рассмотрим выполнение такого суммирования с усреднением (обозначим это символом $\tilde{\Sigma}$) в одном из членов (40):

$$S = \tilde{\Sigma}_{\lambda, \mu} U(\lambda) U(\mu),$$

где уровни λ и μ считаются принадлежащими одной системе $J\pi$. Используя конкретный вид функции U (14) и меняя последовательность суммирования по λ, μ и интегрирования по t , имеем:

$$S = \frac{\Delta^2}{\overline{D}_J^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 e^{-t_1^2 - t_2^2} \sum_{\lambda=-\infty}^{\infty} \frac{y}{[\pi\lambda - (\lambda + \delta t_1)]^2 + y^2} \sum_{\mu=-\infty}^{\infty} \frac{y}{[\pi\mu - (\mu + \delta t_2)]^2 + y^2},$$

где введены обозначения $\delta \equiv \Pi \Delta / \overline{D}_J$, $y \equiv \Pi I / \overline{D}_J$.

Вычисления сумм по λ или μ дают выражения вида

$$\text{Re} [ictg(x + iy + \delta t)].$$

Используя разложение

$$ictg(x + iy + \delta t) = 1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \exp(-2\psi_k + i2\chi_k + i2\delta t k) \quad (46)$$

и интегрируя по t_1, t_2 , а затем усредняя по x , находим:

$$\tilde{\Sigma}_{\lambda, \mu} U(\lambda) U(\mu) = \frac{\Pi \Delta^2}{\overline{D}_J^2} \left[1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{2\Pi \Delta^2}{\overline{D}_J^2} k^2 - \frac{4\Pi I}{\overline{D}_J^2} k\right) \right]. \quad (47)$$

Аналогично можно показать

$$\tilde{\Sigma}_{\lambda} U(\lambda) = \sqrt{\pi} \frac{\Delta}{\overline{D}_J}, \quad \tilde{\Sigma}_{\lambda} \nu(\lambda) = 0, \quad (48)$$

$$\sum_{\lambda} u^2(\lambda) = \tilde{\sum}_{\lambda} v^2(\lambda) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\Delta}{D_r} u\left(0, \frac{\sqrt{2}I}{D_r}\right), \quad \sum_{\lambda} u(\lambda) v(\lambda) = 0, \quad (49)$$

$$\tilde{\sum}_{\lambda, \mu} v(\lambda) v(\mu) = \frac{\pi \Delta^2}{D_r^2} 2 \sum_{k=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{2\pi^2 \Delta^2}{D_r^2} k^2 - \frac{4\pi I}{D_r} k\right), \quad (50)$$

$$\sum_{\lambda, \mu} u(\lambda) v(\mu) = 0, \quad (51)$$

где в двойных суммах уровни λ и μ тоже считаются принадлежащими одной системе.

После усреднения члены в (40), содержащие двойные суммы, соответствующие разным J^{π} -системам, сокращаются. Поэтому окончательно получаем

$$(\Delta \sigma_t^{\nu})^2 \approx \left(\frac{2\pi^2}{k^2}\right)^2 \sum_{J^{\pi}} q_J^2 \sum_{\ell} \left(\frac{\Gamma_{n\ell}^{J^{\pi}}}{D_r}\right)^2 \left[\frac{D_r}{\sqrt{2\pi} \Delta} 2 u\left(0, \frac{\sqrt{2}I}{\Delta}\right) + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{2\pi^2 \Delta^2}{D_r^2} k^2 - \frac{4\pi I}{D_r} k\right) \right]. \quad (52)$$

Для рассматриваемого круга задач $I \gg \Delta, D_r$. В этом случае вторым членом в (52) можно пренебречь, а для первого воспользоваться приближением

$$u(0, y) \approx \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{y}, \quad (y \gg 1). \quad (53)$$

Тогда

$$(\Delta \sigma_t^{\nu})^2 \approx \left(\frac{2\pi^2}{k^2}\right)^2 \sum_{J^{\pi}} q_J^2 \sum_{\ell} \left(\frac{\Gamma_{n\ell}^{J^{\pi}}}{D_r}\right)^2 \frac{D_r}{\pi I}. \quad (54)$$

Пологая $D_r = D_0/q_r$, суммируя по ℓ и используя (16), находим:

$$\Delta \sigma_t^{\nu} \approx \frac{2\pi^2}{k^2} \sqrt{\frac{D_0}{\pi I}} \left[\sum_{\ell} (2\ell+1) \left(S_{\ell}^{\nu} \frac{\sqrt{E} R_{\ell}}{q d_{\ell}} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (55)$$

Список литературы

1. Mughabghab S.F. Neutron Cross-Sections, v.1, Neutron Resonance Parameters and Thermal Cross-Sections, BNL, N4, Upton, 1964.
2. Вертеби́й Е.П. и др. Полные нейтронные сечения и средние резонансные параметры урана-238. В кн.: Нейтронная физика (материалы I Международной конференции по нейтронной физике. Киев, 14-19

- сентября 1987г.) М., 1988, т.2, с.175-178.
3. Мурзин А.Б. и др. Средние параметры взаимодействия промежуточных нейтронов с ядром урана-238. - В сб.: Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, М.: ЦНИИатоминформ, 1986, в. 4, с.80-86.
4. Новоселов Г.М., Вертсбный В.П. Применение метода Монте-Карло для расчета нейтронных сечений в неразрешенной области. Препринт КИАИ-77-9, Киев, 1977, - 20с.
5. Вертсбный В.П. и др. Определение оптических длин рассеяния и силовых функций S^0 изотопов $^{151,153}Eu$, ^{165}Ho , $^{166-168}Er$, ^{197}Au , ^{238}U . - В сб.: Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы. М.: ЦНИИатоминформ, 1980, в. I(36), с.82-81.
6. Лейн А., Томас Ф. Теория ядерных реакций при низких энергиях. Пер. с англ. М., ИЛ, 1960. - 474с.
7. Lynn J.E. The Theory of Neutron Resonance Reactions. Oxford, Clarendon Press, 1968, - 504 p.
8. Atta S.E., Harvey J.A. Numerical Analysis of Neutron Resonances. ORNL-3205, 1962. - 17 p.
9. Фадеева В.М., Терентьев К.М. Таблицы интеграла вероятности от комплексного аргумента. М.: Гостехиздат, 1954, - 268с.
10. Gilbert A., Cameron A.G.W. A Composite Nuclear Density Formula with Shell Corrections. - Can. Journ. of Phys., 1965, v.43, p.1446-1496.
11. Лукьянов А.А. Замедление и поглощение резонансных нейтронов. М.: Атомиздат, 1974, - 360с.
12. Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1978, - 812с.
13. Беланова Т.С., Игнатюк А.В., Пашенко А.Б., Пляскин В.И. Радиационный захват нейтронов. М.: Энергоиздат, 1986. - 247с.
14. Форсайт Дж., Малькольм М., Моултер К. Машинные методы математических вычислений. /Пер. с англ./ М.: Мир, 1960. - 280с.
15. Кочкин В.И. Некоторые программы для проверки псевдослучайных чисел, используемых в методе Монте-Карло. РИИ-80-92, ОИЯИ, Дубна, 1980, - 4с.

Рукопись поступила в редакционную группу
7.06.89 г.

Геннадий Максимович Новоселов,
Людвиг Леонидович Литвинский,
Артур Владимирович Мурзин
МОДЕЛИРОВАНИЕ СЕЧЕНИЙ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ СРЕДНИХ
РЕЗОНАНСНЫХ ПАРАМЕТРОВ ЯДЕР ИЗ ЭКСПЕРИМЕНТОВ
ПО ПРОПУСКАНИЮ ФИЛЬТРОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ
(Препринт КИЯИ-89-25)

Редакторы: Н.А.Солдатенко
Л.П.Малашкина

Подписано к печати 7.07.89 г.

ВФ 21483	Бумага офсетная	Усл.-печ.л. - 1,1
Изд. КИЯИ-89-25	Печать офсетная	Уч.-изд.л. - 0,6
Тип.заказ № 220	Формат бумаги 60x90/16	
Тираж 200 экз.	Цена 5 коп.	

ОКТЕ с ЭИ Института ядерных исследований АН УССР
252028, Киев-28, проспект Науки, 47

5 коп.

)

1
1
1

1
1