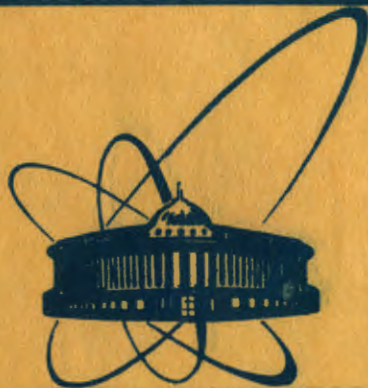


83-659

26/XII-83



**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

6748/83

10-83-659

Л.С.Нефедьева, В.Ф.Украинцев, Н.Янева

**РАСЧЕТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
НЕЙТРОННЫХ СЕЧЕНИЙ
ДЛЯ ТРАНСАКТИНИЕВЫХ ЯДЕР
В ОБЛАСТИ НЕРАЗРЕШЕННЫХ РЕЗОНАНСОВ**

1983

Введение

Важность знания характеристик нейтронных сечений тяжелых ядер в области неразрешенных резонансов определяется тем, что в этой области в энергетических реакторах (на быстрых нейтронах) происходит порядка 50% всех процессов, определяющих их динамику. В связи с этим проводятся широкие экспериментальные исследования характеристик сечений в этой области энергий, и для их интерпретации необходима строгая расчетная модель. В отличие от области разрешенных резонансов, где определяют параметры каждого уровня, в области неразрешенных резонансов известны лишь средние значения этих параметров и законы их статистических распределений.

Поэтому необходим метод, позволяющий определить характеристики сечений, усредненные по энергетическим интервалам, и затем сравнить их с наблюдаемыми величинами.

I. Описание алгоритма

Сечение в области неразрешенных резонансов, если исходить из средних резонансных параметров и статистических законов их распределения, может быть смоделировано методом "случайной матрицы" (как приложение метода Монте-Карло)^{/1/} следующим образом.

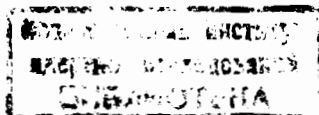
Генерируется последовательность псевдослучайных чисел X_1 , нормально распределенных с единичной дисперсией и нулевым средним. Вычисляются последовательности случайных чисел, подчиняющиеся законам Гаусса (β_λ) и Вигнера (Z_λ). Вычисляются параметры отдельных резонансов:

$$E_\lambda = E_0 + \sum_{\mu=1}^{\lambda} Z_\mu \bar{D}^J, \quad (Ia)$$

$$\Gamma_{n\lambda}^J = \bar{\Gamma}_n^J \beta_\lambda^2, \quad (Iб)$$

$$\Gamma_{f\lambda}^J = \bar{\Gamma}_f^J \beta_{\lambda'}^2, \quad (Iв)$$

где \bar{D}^J - среднее расстояние между уровнями в состоянии с полным моментом J .



$\bar{\Gamma}_n^J$ - средняя нейтронная ширина, а $\bar{\Gamma}_f^J$ - средняя делительная ширина в состоянии с полным моментом J .

Дальнейшая схема расчета зависит от природы исследуемого ядра. В четно-четных ядрах, где $\bar{\Gamma}_n^J/\bar{\Gamma}_f^J$ много меньше единицы, легко считать сечения по одноуровневой формуле Брейта-Вигнера^{2/}:

$$\sigma_t(E) = 4\pi\lambda^2 \sum_{J\pi} \sin^2 \varphi^{J\pi} + 4\pi\lambda^2 \sum_{J\pi} g(J) \cdot \frac{\Gamma_n^{J\pi}}{\Gamma^{J\pi}} * \quad (2a)$$

$$* [\Psi(x, \xi) \cos 2\varphi^{J\pi} + \chi(x, \xi) \sin 2\varphi^{J\pi}],$$

$$\sigma_\alpha(E) = 4\pi\lambda^2 \sum_{J\pi} g(J) \frac{\Gamma_n^{J\pi} \Gamma_\alpha^{J\pi}}{(\Gamma^{J\pi})^2} \Psi(x, \xi), \quad \text{где} \quad (2б)$$

- λ - длина волны нейтрона;
- J - полный момент составного ядра;
- π - его четность;
- $g(J)$ - статистический фактор;
- $\Gamma_n, \Gamma_\alpha, \Gamma$ - ширины: нейтронная, процесса "α" и полная;
- $\varphi^{J\pi}$ - фазы рассеяния, причем они зависят от орбитального момента системы нейтрон-ядро l и часто обозначаются как $\varphi^l \sim kR^l$, где R^l - радиус рассеяния.

Функции Ψ и χ от аргументов $x = (E - E_\lambda)^2 / \Gamma_\lambda^{J\pi}$ и $\xi = \Gamma_\lambda^{J\pi} / 2\Delta$ (где Δ - доплеровская ширина) - известные доплеровские функции, учитывающие эффект теплового движения ядер в решетке.

Для ядер с нечетным атомным весом условие $\bar{\Gamma}_n^J/\bar{\Gamma}_f^J \ll 1$ не соблюдается практически никогда, т.к. плотность уровней у них существенно выше.

Для описания сечений тяжелых делящихся ядер существует несколько подходов. Мы выбрали приближение Райха-Мура^{3/}. Сначала вычисляется матрица $K_{cc'}$, характеризующая переход системы из входного канала "с" в выходной "с'":

$$K_{cc'}(E) = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \frac{\Gamma_{\lambda c}^{1/2} \Gamma_{\lambda c'}^{1/2}}{E_\lambda - E - i\Gamma_\lambda/2} = \frac{\bar{\Gamma}_c^{1/2} \bar{\Gamma}_{c'}^{1/2}}{2\bar{D}^2} \sum_{\lambda} \frac{\beta_{\lambda c} \beta_{\lambda c'}}{\left(\frac{E_\lambda - E}{\bar{D}}\right) - \left(\frac{i\Gamma_\lambda}{\bar{D}}\right)}. \quad (3)$$

Далее вычисляется матрица столкновений:

$$S_{cc'}(E) = \left[(1 + iK_{cc'}) / (1 - iK_{cc'}) \right] e^{-2i\varphi^{J\pi}}, \quad (4)$$

сечения реакций типа "с" и полное сечение

$$\sigma_t(E) = 2\pi\lambda^2 \sum_{J\pi} g(J) (1 - \text{Re } S_{nn}^{J\pi}), \quad (5a)$$

$$\sigma_\alpha(E) = \pi\lambda^2 \sum_{J\pi} g(J) |S_{n\alpha}^{J\pi}|^2. \quad (5б)$$

Однако, если в приближении Брейта-Вигнера эффект Доплера легко учитывается аналитическими Ψ - χ функциями, то здесь приходится прибегать к интегрированию сечения $\sigma(E)$ с весом доплеровской функции $f(E, E)$

$$\sigma(E) = \int_0^\infty f(E', E) \sigma(E') dE' / \int_0^\infty f(E', E) dE'. \quad (6)$$

Это интегрирование можно произвести численно (как и сделано в программе), а также методом Монте-Карло, пользуясь тем, что функция $f(E', E)$ является статистическим распределением с формой Гаусса^{4/} (этот путь требует выхода в специальную ветвь).

После того, как энергетическая зависимость сечений построена с помощью одного из описанных приближений, можно вычислить средние на интервале характеристики структуры сечений. Это моменты сечений вида:

$$\langle \sigma_\alpha \times (\sigma_t + \sigma_0)^k \rangle = \int_{\Delta E} \sigma_\alpha(E) \cdot [\sigma_t(E) + \sigma_0]^k dE, \quad (7)$$

зависящие от параметра σ_0 для $k = 0, -1, -2$ и наблюдаемые в эксперименте величины пропускания - самоиндикации:

$$T_\alpha(n) = \int_{\Delta E} \sigma_\alpha(E) \varphi(E) e^{-\sigma_\alpha(E) \cdot n} dE / \int_{\Delta E} \sigma_\alpha(E) \varphi(E) dE. \quad (8)$$

Здесь $\varphi(E)$ - спектр нейтронов $\sim 1/E$, n - толщина исследуемого образца (ядер /бн).

Непосредственное вычисление интегралов (7-8) от многозначных функций при большом числе параметров σ_0 и "n" требует большого расхода времени ЭВМ, поэтому применен переход к интегралу Лебега:

$$\langle \sigma_\alpha (\sigma_t + \sigma_0)^k \rangle = \int_0^\infty P(\sigma_t(E)) \sigma_\alpha(\sigma_t(E)) [\sigma_t + \sigma_0]^k \frac{dE}{d\sigma_t} d\sigma_t. \quad (9)$$

Вычислив функции плотности вероятности полного сечения $P(\sigma_t)$ и корреляции с ним парциальных $\sigma_\alpha(\sigma_t)$, можно экономно получить

требуемые средние и сравнить их с соответствующими экспериментальными значениями.

II. Описание программ

Набор программ, реализующий данный алгоритм, состоит из головной MNCARL и ряда подпрограмм, реализующих определенные части алгоритма.

1. MNCARL - осуществляет ввод и подготовку исходных данных; моделирование "решетки" резонансов; обращение к модулям, реализующим одно из альтернативных приближений Брейта-Вигнера или Райха-Мура; сравнение вычисленных функционалов с экспериментальными величинами. Все вводимые данные выдаются на печать в виде таблиц с комментариями.
2. MATRX1, MATRX2 - производят расчет сечений в энергетической точке с помощью приближения Райха-Мура в предположении наличия одного нейтронного и одного-двух каналов деления соответственно.
3. BREIT - рассчитывает сечения в энергетической точке с использованием формул (2).
4. DUB - производит процедуру интегрирования сечений по формуле (6).
5. PSIXI - вычисляет значения доплеровских функций Ψ и χ .
6. RND1 - генерирует псевдослучайные числа на интервале $(0,1)$.
7. BETA, BET - производят перевод случайных чисел X_1 , равномерно распределенных на интервале $(0,1)$, в случайные числа β_λ , распределенные по закону Гаусса.
8. ZETA, ZET - переводят случайные числа X_1 в случайные числа Z_λ , подчиняющиеся распределению Вигнера.
9. SHKALA - производит разметку шкалы полного сечения σ_t на интервалы, в которых будет производиться преобразование $\sigma_t \rightarrow P(\sigma_t)$.
10. SORT - производит преобразования $\sigma_t \rightarrow P(\sigma_t)$, $\sigma_\alpha(E) \rightarrow \sigma_\alpha(\sigma_t)$.
11. PSIGMA - производит нормировку функции плотности вероятности $f(\sigma)$ и корреляции $\sigma_\alpha(\sigma_t)$.
12. MOMENT - вычисляет значения интегралов по формулам (7-8).

Описанный набор программ включен в библиотеку программных модулей системы СОС^{5/} на ЭМ БЭСМ-6.

III. Обращение и подготовка исходных данных

Обращение из задания, написанного на языке системы СОС^{6/}:

CALL MNCARL(FIL), где

FIL - имя файла, куда будут занесены результаты расчета функций плотности вероятности $P(\sigma_t)$ и корреляции $\sigma_f(\sigma_t)$, $\sigma_c(\sigma_t)$, $\sigma_{cl}(\sigma_t)$. Исходные данные вводятся с перфокарт.

I-я карта - LEVEL, IPRI, IPUN (формат 3I10), где

LEVEL $\begin{cases} 0 - \text{используется формула (2),} \\ 1 - \text{используются формулы (3-5);} \end{cases}$

IPRI $\begin{cases} \neq 0, \text{ то будет выдана печать распределений} \\ P(\sigma), \sigma_\alpha(\sigma), \\ = 0, \text{ то печать блокируется;} \end{cases}$

IPUN $\begin{cases} \neq 0, \text{ то будет выдана перфорация распределений,} \\ = 0, \text{ то перфорация блокируется.} \end{cases}$

2-я карта - JS, JP, NST, NZN (формат 4I4), где

JS - число состояний с орбитальным моментом $\ell=0$ (s-состояний);

JP - число состояний с орбитальным моментом $\ell=1$ (p-состояний);

NST - общее число состояний;

NZN - размерность массива разбиения шкалы сечений, а также массивов $P(\sigma)$, $\sigma_\alpha(\sigma)$.

3-я карта - g(J) - массив статистических факторов составного ядра (формат 6E10.4);

4-я карта - n - массив толщин исследуемых в экспериментах образцов (формат 8E10.4);

5-я карта - R^e, T^o - значение радиуса рассеяния и температуры образца (формат 2E10.2);

6-я карта - UTA, UIN - границы энергетического интервала ΔE (формат 2E20.10);

7-я карта - IMAX, N1 (формат I10, E10.3), где

IMAX - число реализаций метода Монте-Карло;

N1 - шаг интегрирования по формуле (6) и превращения $\sigma \rightarrow P(\sigma)$ в шкале логарифма нейтронов "U" ($U = \ln E/E_0$);

8-я группа NST карт со значениями средних резонансных параметров: $\bar{D}^J, \bar{r}_\gamma^J, \bar{S}_n^J, \bar{r}_f^J, f_1, f_2, \gamma_n, \gamma_f$ (формат 7E10.4, I1), где

- \bar{D}^J - среднее расстояние между уровнями;
 $\bar{\Gamma}_f^J, \bar{\Gamma}_f^J$ - средние ширины захвата и деления;
 \bar{S}_n^J - значение нейтронной силовой функции ($\bar{S}_n^J = \bar{\Gamma}_n^J / \bar{D}^J$);
 f_1, f_2 - взвешенные вклады первого и второго каналов деления в среднюю делительную ширину;
 ν_n, ν_f - число степеней свободы в нейтронном и делительном каналах;

9-я группа карт - четыре карты со значениями среднего полного и среднего делительного сечений $\langle \sigma_t \rangle, \langle \sigma_f \rangle$, пропусканий T_t на семи толщинах и самоиндикации деления на пяти толщинах, их ошибки в соответствующем порядке (формат 7E10.3);

последняя карта - со значениями средних величин $\bar{S}_n^1, \bar{S}_n^2, \bar{\Gamma}_f^2$, флуктуирующих от интервала к интервалу (формат 3E10.3).

IV. Вид печати

Все исходные данные выводятся на печать с комментариями. Затем печатается строка, содержащая рабочие скорректированные величины:

IMAX, N1, KIN, NSH, DD, UTA, UIN, где

- KIN - число точек, в которых вычисляются сечения;
 NSH - число точек-узлов интегрирования функции $f(E, E)$;
 DD - доплеровская ширина Δ .

На каждой реализации метода Монте-Карло происходит выдача на печать значений средних сечений $\sigma_t, \sigma_f, \sigma_c, \sigma_{el}$ и функционалов от средней функции $P(\sigma)$. На последней реализации выдается на печать заголовок:

AVERAGE CHARACTERS

Далее следует печать средних характеристик и их дисперсий. Печатаются средние сечения с дисперсиями, таблица пропусканий и самоиндикаций с комментариями, таблица так называемых факторов резонансной самоэкранировки с дисперсиями и комментариями.

В конце выдаются по строкам сравнительные данные для величин: средних сечений (полного и деления), пропусканий на 7 толщинах образцов, самоиндикаций на 5 толщинах. В строке, характеризующей величину, располагаются: аргумент, ее расчетное значение с ошибкой, экспериментальное значение с ошибкой, величина χ^2_1 отклонения.

Замечания

Для повторного расчета функционалов на основе распределений $P(\sigma)$, $\sigma_c(\sigma)$, записанных в файле FIL, можно использовать подпрограмму MOMENS:

CALL MOMENS(FIL), где

FIL - имя файла распределений $P(\sigma)$, $\sigma_c(\sigma)$, рассчитанных в программе MNCARL.

- FIL(1) - в первой записи $P(\sigma)$,
 FIL(2) - во второй записи $\sigma_c(\sigma)$,
 FIL(3) - в третьей записи $\sigma_c(\sigma)$,
 FIL(4) - в четвертой записи $\sigma_{el}(\sigma)$.

Исходная информация для этой программы задается на перфокартах в биоформатном виде, т.е. через запятую:

- RAB - массив сечений разбавлений σ_0 из 8 величин,
 V11 - массив толщин исследуемых образцов "n" из 7 величин.

Если необходимо в одном задании обратиться к программе MNCARL и MOMENS с одним и тем же файлом FIL, то он должен быть описан как рабочий файл. Если эти программы используются в разных заданиях, то файл должен быть описан как постоянный, в этом случае он будет храниться на магнитных лентах.

Литература

1. Наумов В.А., Розин С.Г. Решение задач физики реакторов методом Монте-Карло. "Наука и техника", Минск, 1978.
2. Breit G., Wigner E. Capture of Slow Neutrons. Phys. Rev., 1936, v43, p 519.
3. Reich C.W., Moore M.S. Multilevel Formula for the Fission Process. Phys. Rev., 1958, v111, p 929.
4. Соболев П.М. Численные методы Монте-Карло. "Наука", М., 1973.
5. Нефедьева Л.С. и др. Автоматизированная система обработки спектров (СОС) на машине БЭСМ-6. "Знание", Рига, 1975, с.4.
6. Нефедьева Л.С., Салтыков А.М. ОИЯИ, Р10-80-861, Дубна, 1980.

Рукопись поступила в издательский отдел
19 сентября 1983 года

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

ДЗ-11787	Труды III Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1978.	3 р. 00 к.
Д13-11807	Труды III Международного совещания по пропорциональным и дрейфовым камерам. Дубна, 1978.	6 р. 00 к.
	Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/	7 р. 40 к.
Д1,2-12036	Труды V Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1978	5 р. 00 к.
Д1,2-12450	Труды XII Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Приморско, НРБ, 1978.	3 р. 00 к.
	Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/	8 р. 00 к.
Д11-80-13	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979	3 р. 50 к.
Д4-80-271	Труды Международной конференции по проблемам нескольких тел в ядерной физике. Дубна, 1979.	3 р. 00 к.
Д4-80-385	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1980.	5 р. 00 к.
Д2-81-543	Труды VI Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1981	2 р. 50 к.
Д10,11-81-622	Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980	2 р. 50 к.
Д1,2-81-728	Труды VI Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 60 к.
Д17-81-758	Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981.	5 р. 40 к.
Д1,2-82-27	Труды Международного симпозиума по поляризационным явлениям в физике высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 20 к.
Р18-82-117	Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981.	3 р. 80 к.
Д2-82-568	Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982.	1 р. 75 к.
Д9-82-664	Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.	3 р. 30 к.
ДЗ,4-82-704	Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.	5 р. 00 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

Нефедьева Л.С., Украинцев В.Ф., Янева Н. 10-83-659
Расчетное моделирование нейтронных сечений для трансактиниевых ядер в области неразрешенных резонансов

Дается описание методики алгоритма и программ для моделирования нейтронных сечений и их функционалов в области неразрешенных резонансов. Рассматривается алгоритм, основанный на методике Монте-Карло, на использовании функции распределения плотности вероятности сечений, сравнения расчетных величин сечений и пропускания с экспериментальными данными. Программы включены в библиотеку системы обработки спектров /СОС/ и использованы для расчетов характеристик сечений ряда трансактиниевых изотопов.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Nefedieva L.S., Ukraintsev V.F., Yaneva N. 10-83-659
Simulation of Neutron Cross Sections for Transactinium Nuclei in the Region of Forbidden Resonances

Technique of algorithm and programs for simulating neutron cross sections and their functionals in the region of forbidden resonances are described. The algorithm based on the Monte Carlo method, on using the function of density distribution of cross section probability and on the comparison the calculated values of cross sections and transmissions with experimental data is considered. The programs are included into the library of spectrum processing system /SPS/ and are used for calculating cross section characteristics of a number of transactinium elements.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1983

Перевод О.С.Виноградовой