СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

3 - 9742

А.Б.Попов, И.И.Шелонцев, Н.Ю.Ширикова

ВЫЧИСЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ НЕЙТРОННЫХ РЕЗОНАНСОВ

1976

3 - 9742

А.Б.Попов, И.И.Шелонцев, Н.Ю.Ширикова

ВЫЧИСЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ НЕЙТРОННЫХ РЕЗОНАНСОВ

Уже в течение 15 лет в Лаборатории нейтронной физики с переменной активностью, но постоянно ведутся нейтронно-спектрометрические исследования с использованием метода времени пролета, цель которых - определение таких параметров нейтронных резонансов, как энергия E_0, полная ширина Γ, нейтронная ширина Γ_n, радиационная ширина Γ_γ и спин J.

Полное сечение взаимодействия нейтронов с ядрами /в случае изолированного резонанса/ описывается известной формулой Брейта-Вигнера

$$\sigma_t(x) = \frac{\sigma_0}{1+x^2} + \frac{2a}{\lambda}\,\frac{\sigma_0 x}{1+x^2} + 4\pi a^2 , \qquad /1/$$

где a - амплитуда потенциального рассеяния;

$$\sigma_0 = 4\pi\lambda^2\frac{g\Gamma_n}{\Gamma} ;$$

$$g = \frac{1}{2}\,\frac{2J+1}{2I+1}$$ - статистический фактор, здесь I - спин ядра-мишени;

$$x = \frac{2(E-E_0)}{\Gamma} .$$

Резонансное сечение радиационного захвата

$$\sigma_\gamma(x) = \frac{\sigma_0}{1+x^2}\,\frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} .$$

Учет теплового движения ядер приводит к изменению сечения, и формула /1/ преобразуется к виду

$$\sigma_t(x) = \sigma_0\,\psi(\beta, x) + \sigma_0 \frac{2a}{\lambda}\phi(\beta, x) + 4\pi a^2 , \qquad /2/$$

где

$$\psi(\beta, x) = \frac{1}{\beta\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp\{-[\frac{(x-y)}{\beta}]^2\}}{1+y^2}\, dy ,$$

$$\phi(\beta, x) = \frac{1}{\beta\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp\{-[\frac{(x-y)}{\beta}]^2\}\, y}{1+y^2}\, dy ,$$

$$\beta = \frac{2\Delta}{\Gamma} ,$$

$$\Delta = 2(E_0 k T_{эфф}/A)^{1/2} .$$

Здесь $T_{эфф}$ - эффективная температура образца, k - постоянная Больцмана, A - атомный вес.

Наиболее простыми являются измерения пропускания нейтронов через исследуемый образец или радиационного захвата в нем нейтронов. Возможны также измерения рассеяния нейтронов. В результате таких измерений экспериментатор получает в свое распоряжение спектры /в зависимости от времени пролета нейтронов/ для величины ослабления проходящих через образец нейтронов, интенсивности γ -лучей от захвата нейтронов или рассеянных образцом нейтронов. Форма резонансов в наблюдаемых спектрах обычно искажена не только эффектом допплеровского уширения, но и недостаточной величиной временного /энергетического/ разрешения нейтронного спектрометра. В случае плохого разрешения форма резонанса во временной шкале является повторением формы нейтронного импульса.

Энергия резонансов достаточно точно определяется по их положению в наблюдаемом спектре /по времени пролета нейтронами известного расстояния от импульсного источника нейтронов до места расположения детектора/. Для определения остальных параметров резонансов необходима дальнейшая обработка спектров. В случае плохого разрешения вычисление параметров возможно с использованием метода площадей [1]. /В этом случае площадь зависит только от параметров резонансов и не зависит от функции разрешения спектрометра/. Если временная ширина резонансов больше ширины нейтронного импульса или сравнима с ней, то параметры резонансов можно извлечь с помощью анализа их формы /"метод формы" [2] /. Оба эти метода /"площадей" и "формы"/ были использованы в ЛНФ ОИЯИ много лет назад для вычислений на ЭВМ типа М-2О /или БЭСМ-4/ [3,4]. В настоящее время разработаны новые аналогичные программы вычисления параметров с использованием языка FORTRAN для ЭВМ CDC-6400. Ниже приводится их краткое описание.

Метод площадей

В отсутствие заметной интерференции между резонансным и потенциальным рассеянием $(2a/\lambda \ll 1)$ площадь резонанса на кривой пропускания будет равна

$$A = \frac{\Gamma}{2} \int_{-\infty}^{\infty} [1 - \exp(-n\sigma_0\,\psi(\beta, x))]\, dx . \qquad /3/$$

Резонансные площади для других типов измерений просто выражаются через площадь A /которую часто называют площадью Юза/. Так, площадь резонанса в спектре радиационного захвата /после необходимой нормировки/ равна

$$C = A\,\frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} . \qquad /4/$$

В настоящей программе используются только два типа площадей: /3/ и /4/. Имея набор площадей резонансов из разных типов измерений и для разных толщин образцов, мы можем определить значения параметров, решая систему нелинейных уравнений

$$S_i \pm \sigma_{S_i} = f_i(n_i, \Gamma, g\Gamma_n), \qquad /5/$$

где S_i и σ_{S_i} - экспериментальная площадь и ее ошибка, n_i - толщина образца.

Для решения системы уравнений использовалась стандартная программа вычислений по методу наименьших квадратов /5/. Производные по искомым параметрам находились численно. Свободными параметрами считались $g\Gamma_n$ и Γ_γ. Поэтому в расчетах принималось, что полная ширина $\Gamma = \Gamma_\gamma + g\Gamma_n / g$. При этом g задавались равными истинным значениям /для резонансов с известными спинами/ или 1/2 /если спины были неизвестны/. Такая параметризация позволяет вычислять основной параметр резонансов $g\Gamma_n$, когда имеются площади только для образца одной толщины. В этом случае задается фиксированное значение Γ_γ, одинаковое для всех резонансов. Такое допущение базируется на хорошо известном факте, что Γ_γ мало флюктуируют от резонанса к резонансу. Возможность задавать определенное значение Γ_γ оказывается полезной и при обработке площадей для образцов нескольких толщин, когда соотношение толщин не позволяет определить оба искомых параметра, $g\Gamma_n$ и Γ_γ.

При вычислении допплеровской функции $\psi(\beta, x)$ использовалась стандартная программа комплексного интеграла ошибок, с которым $\psi(\beta, x)$ имеет простую связь:

$$\psi(\beta, x) = \frac{\sqrt{\pi}}{\beta} \operatorname{Re}\left[W(z) = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{z-t}\,dt\right].$$

Вычисления интеграла в программе выполняются по формуле /3/ в конечных пределах, в которых были определены экспериментальные площади. Если эти пределы были слишком велики

$$\left(|x_{+,-}| > x_0 = \frac{(n\sigma_0)^{1/2}}{0{,}177}\right),$$

то площадь A вычислялась в пределах от $-x_0$ до x_0 и к результату прибавлялись поправки на крылья резонанса

$$\Delta A \simeq \frac{n\sigma_0\,\Gamma}{x_0}.$$

Программой составляется таблица параметров резонансов, в которой, помимо $g\Gamma_n$, Γ_γ, имеются приведенные нейтронные ширины $\Gamma_n^\circ = g\Gamma_n / g\sqrt{E_0}_{1/}$ и ошибки величины Γ_n° с учетом фактора $(\chi^2/(N-r))^{1/2}$, где N - число площадей, r - число вычисляемых параметров /1 или 2/.

Метод формы

Метод формы разработан для анализа спектров пропускания. В предположении, что сечение описывается формулой /2/ и нет интерференции между резонансами, пропускание при энергии нейтронов E выражается в виде

$$T(E) = Ce^{-4\pi a^2 n}\int_{E-d}^{E+b} R(E,E')\,e^{-\sum_i n_i \sigma_{0i} F_i}\,dE', \qquad /6/$$

где C - некоторая нормировочная константа, зависящая от примесей в образце или метода вычисления пропускания, $R(E,E')$ - функция разрешения, нормированная условием

$$\int_{E-d}^{E+b} R(E,E')\,dE' = 1,$$

n - полное число ядер /по элементу/ образца, n_i - число ядер изотопа, которому принадлежит резонанс i.

Функция F легко выражается через функции U и V, действительную и мнимую часть комплексного интеграла ошибок

$$U(x,y) = \operatorname{Re}[W(z)], \quad V(x,y,) = \operatorname{Im}[W(z)],$$

$$F_i(x_i, y_i, a_i) = \sqrt{\pi}\, y_i\,[U(x_i, y_i) + a_i V(x_i, y_i)],$$

где

$$x_i = \frac{E - E_{0i}}{\Delta_i}, \quad y_i = \frac{\Gamma_i}{2\Delta_i}, \quad a_i = \frac{2a}{\lambda_i}.$$

При вычислении пропускания по формуле /6/ в точке E, естественно, не все резонансы следует принимать во внимание. Вкладом далекого уровня можно пренебречь, если для соответствующей экспоненты в /6/ выполнено условие

$$\exp(-n_i \sigma_{0i} F_i) < 1-\epsilon_1 ,$$

где ϵ_1 - некая малая величина /10^{-2} - 10^{-3} /. Практически уровень не учитывался в точке E, если для него выполнялось условие

$$|E-E_{0i}| \geq mW + \frac{\Gamma_i}{2} x_{0i} , \qquad /7/$$

где

$$x_{0i} = \frac{\alpha_i n_i \sigma_{0i}}{\epsilon_1} + \sqrt{\left(\frac{\alpha_i n_i \sigma_{0i}}{2\epsilon_1}\right)^2 + \frac{n_i \sigma_{0i}}{\epsilon_1}} ,$$

W - полуширина функции разрешения в точке E, m - некоторое заданное число /5 - 10/. Величины $\exp(-n_i \sigma_{0i} F_i)$ для далеких уровней, кроме того, выносились за знак интеграла /т.е. функция разрешения не принималась во внимание/, если было выполнено условие

$$\frac{\exp\left[-n_i \sigma_{0i} F_i\left(\frac{E+mW-E_{0i}}{\Delta_i}, y_i, \alpha_i\right)\right]}{\exp\left[-n_i \sigma_{0i} F_i\left(\frac{E-mW-E_{0i}}{\Delta_i}, y_i, \alpha_i\right)\right]} \approx 1+\epsilon_2 ,$$

что равносильно

$$\frac{\partial F_i}{\partial E} \leq \frac{\epsilon_2}{2mW n_i \sigma_{0i}} .$$

Используя асимптотические выражения для U и V и рассматривая вклад каждого слагаемого в F_i, получим, что при выполнении условия

$$|E-E_{0i}| \geq \max\{b_1, b_2\} , \qquad /8/$$

$$b_1 = \Gamma_i\left(\frac{n_i \sigma_{0i} mW}{\epsilon_2 \Gamma_i}\right) , \qquad b_2 = \Gamma_i\left(\frac{\alpha_i n_i \sigma_{0i} mW}{\epsilon_2 \Gamma_i}\right)^{1/2},$$

уровень E_{0i} можно вынести из-под интеграла по функции разрешения. В случае, когда mW /величина интервала, на котором функция разрешения существенно отличается от нуля/ сравнима с величинами в фигурных скобках /8/, необходимо учитывать условие

$$|E-E_{0i}| \geq \max\{b_1, b_2, mW\}. \qquad /9/$$

Для реализации стандартного метода наименьших квадратов необходимо знать производные по всем параметрам, входящим в /6/. Использовалась такая параметризация: C, a, E_{0i}, $\Gamma_{\gamma i}$, $g\Gamma_{ni}$ /полная ширина, как и в методе площадей, принималась равной $\Gamma = \Gamma_\gamma + g\Gamma_n / g$ /. При вычислении производных предполагалось, что величины Δ_i и α_i не зависят от E_{0i}. Для производных функции F можно получить следующие выражения:

$$\frac{\partial F_i}{\partial a} = 2\sqrt{\pi}\,\frac{y_i}{\lambda_i} V(x_i, y_i) ,$$

$$\frac{\partial F_i}{\partial E_{0i}} = \frac{2\sqrt{\pi}\, y_i}{\Delta_i}\left[(x_i + \alpha_i y_i)U - (y_i - \alpha_i x_i)V - \frac{\alpha_i}{\sqrt{\pi}}\right] ,$$

$$\frac{\partial F_i}{\partial \Gamma_{\gamma i}} = \frac{\partial F_i}{\partial \Gamma_i} = \frac{\sqrt{\pi}}{2\Delta_i}\left[(1-2\alpha_i x_i y_i + 2y_i^2)U + (\alpha_i + 2x_i y_i + 2\alpha_i y_i^2)V - \frac{2y_i}{\sqrt{\pi}}\right] ,$$

$$\frac{\partial F_i}{\partial (g\Gamma_{ni})} = \frac{1}{g_i}\,\frac{\partial F_i}{\partial \Gamma_i} . \qquad /10/$$

Эти выражения использовались для вычислений производных T по искомым параметрам. При этом, естественно, принималось во внимание, надо ли учитывать данный резонанс /если нет, то производные по его параметрам полагались равными нулю/, можно ли вынести его крылья за знак интеграла по функции разрешения. Так как в наших измерениях определялось только резонансное пропускание, то мы исключали прямую зависимость T от параметра a /опускали множитель $e^{-4\pi a^2 n}$ /.

Созданная программа "Метод формы" предусматривает предварительную запись числовых данных о пропускании и его ошибках на магнитную ленту на ЭВМ БЭСМ-4, на которой проводится вычисление T. Возможна одновременная обработка спектров пропусканий для пяти образцов, на обрабатываемых участках спектров /длиной до 1000 каналов/ может находиться до 30 резонансов.

В программе используется функция разрешения, обусловленная теоретической формой нейтронного импульса в бустерном режиме работы реактора, которую можно описать так:

$$a(t) = \begin{cases} 0, & t < 0; \\ 1 - e^{-t/\tau}, & 0 < t < t_0; \\ (1 - e^{-t_0/\tau})\, e^{-\frac{t - t_0}{\tau}}, & t > t_0; \end{cases} \qquad /11/$$

где t_0 - длительность электронного импульса инжектора, τ - время " затухания" реактора. Если принять, что ширина канала временного анализатора существенно меньше ширины нейтронного импульса, то легко получить, что в этом случае функция разрешения имеет вид

$$R(E,E') = \begin{cases} 0, & E' < E - \epsilon_0; \\ \frac{1}{\epsilon_0}(1 - e^{-t_0/\tau} e^{-\frac{E'-E}{\tau W}}), & E - \epsilon_0 \le E' \le E; \\ \frac{1}{\epsilon_0}(1 - e^{-t_0/\tau})\, e^{-\frac{E'-E}{\tau W}}, & E' > E, \end{cases} \qquad /12/$$

где

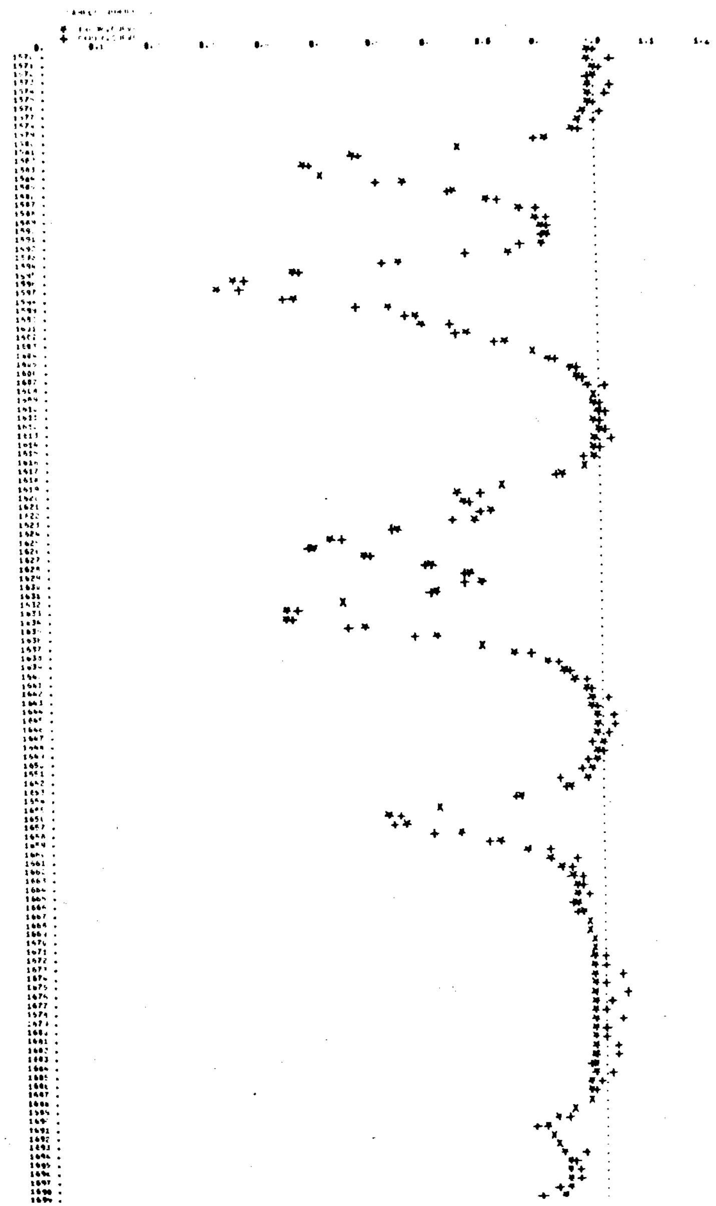
$$\epsilon_0 = \frac{2 t_0 E^{3/2}}{72{,}3 L}, \quad W = \frac{2 E^{3/2}}{72{,}3 L},$$

а L - база /в метрах/.

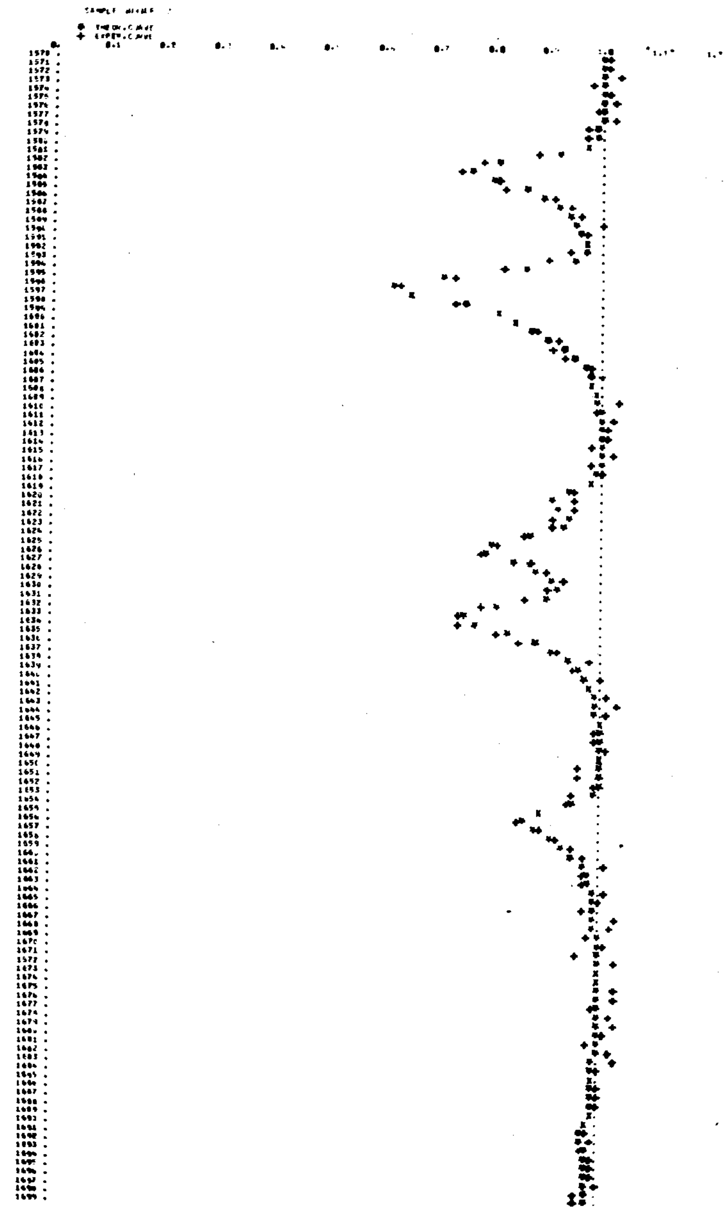
Если Δt - ширина канала анализатора - сравнима с шириной нейтронного импульса, то следует использовать такую функцию разрешения:

$$R(E,E') = \begin{cases} 0, \quad E' < E - \epsilon_0 - \frac{\Delta t W}{2}; \\ \frac{1}{\epsilon_0}\left(\frac{t_0 + \frac{\Delta t}{2} - \tau}{\Delta t} + \frac{E'-E}{\Delta t W} + \frac{\tau}{\Delta t} e^{-\frac{E'-E}{\tau W}} e^{-\frac{t_0 + \Delta t/2}{\tau}}\right), \\ E - \epsilon_0 - \frac{\Delta t W}{2} < E' < E - \epsilon_0 + \frac{\Delta t W}{2}; \\ \frac{1}{\epsilon_0}\left[1 + \frac{\tau}{\Delta t} e^{-\frac{t_0}{\tau}} e^{-\frac{E'-E}{\tau W}} \left(e^{-\frac{\Delta t}{2\tau}} - e^{\frac{\Delta t}{2\tau}}\right)\right], \\ E - \epsilon_0 + \frac{\Delta t W}{2} < E' < E - \frac{\Delta t W}{2}; \\ \frac{1}{\epsilon_0}\left[\frac{\tau + \Delta t/2}{\Delta t} - \frac{E'-E}{\Delta t W} + \frac{\tau}{\Delta t} e^{-\frac{E'-E}{\tau W}} \left(e^{-\frac{t_0}{\tau}} \left(e^{-\frac{\Delta t}{2\tau}} - e^{\frac{\Delta t}{2\tau}}\right) - e^{-\frac{\Delta t}{2\tau}}\right)\right], \quad E - \frac{\Delta t W}{2} < E' < E + \frac{\Delta t W}{2}; \\ \frac{1}{\epsilon_0}\left[\frac{\tau}{\Delta t}(1 - e^{-\frac{t_0}{\tau}})\, e^{-\frac{E'-E}{\tau W}} \left(e^{\frac{\Delta t}{2\tau}} - e^{-\frac{\Delta t}{2\tau}}\right)\right], \\ E' > E + \frac{\Delta t W}{2}. \end{cases} \qquad /13/$$

На *рисунке* приведен пример обработки участков пропускания для двух толщин образцов ^{159}Tb. Вычисления, выполненные с функциями разрешения в виде /12/ или



а/



б/

*Участок спектра пропускания ^{159}Tb от 46О до 42О эВ, обработанный методом формы /+ - экспериментальные точки, * - расчетные точки, × - точки, в которых экспериментальные и расчетные значения совпадают/; а/ - для образца толщиной 1,8О.1О^{22} яд/см^{2}, б/ - для образца толщиной 5,17.1О^{21} яд/см^{2}.*

/13/, показали, что в наших условиях, когда ширина канала временного анализатора /1 *мкс*/ в 2÷3 раза меньше полуширины нейтронного импульса, данные расчетов с уточненной функцией разрешения /13/ практически не отличаются от результатов расчетов с функцией разрешения /12/.

Использование программы метода формы для нескольких толщин образцов дает возможность определять параметры нейтронных резонансов и в условиях не очень хорошего разрешения. В этом случае нельзя ожидать существенного повышения точности в оценке параметров резонансов в сравнении с методом площадей, зато устраняются неопределенности в вычислении параметров близко расположенных резонансов, присущие последнему методу. Метод формы позволяет свести к минимуму участие экспериментатора в непосредственной процедуре вычисления параметров резонансов.

Литература

1. *J.Hughes. J.Nucl. Energy, 1, 237 /1955/.*
2. *S.Atta, J.Harvey. ORNL-3205, 1961.*
3. *И.И.Шелонцев. ОИЯИ, Б2-10-4090, Дубна, 1968.*
4. *В.Н.Ефимов, Н.Ю.Ширикова. ОИЯИ, Б2-10-4089, Дубна, 1968.*
5. *Р.Н.Федорова и др. ОИЯИ, Б1-11-5190, стр. 88, Дубна, 1970.*

Рукопись поступила в издательский отдел 27 апреля 1976 года.