

СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА



СЗУЗГ1

3-171

P3 - 11741

25/11-78

К.Зайдель, А.Майстер, Д.Пабст, Л.Б.Пикельнер

5632 / 2-78

ИЗОМЕРНЫЙ СДВИГ НЕЙТРОННЫХ РЕЗОНАНСОВ.

II. Учет колебаний в кристаллической решетке

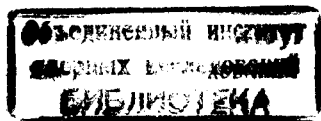
**1978**

РЗ - 11741

К.Зайдель, А.Майстер, Д.Пабст, Л.Б.Пикельнер

ИЗОМЕРНЫЙ СДВИГ НЕЙТРОННЫХ РЕЗОНАНСОВ.

II. Учет колебаний в кристаллической решетке



Зайдель К. и др.

P3 - 11741

Изомерный сдвиг нейтронных резонансов. 2. Учет колебаний в кристаллической решетке

Модель Эйнштейна, распространенная на два вида атомов, применена для описания формы нейтронного резонанса ядра, входящего в различные химические соединения. Результаты расчета для резонанса  $^{238}\text{U}$  6,67 эВ сравниваются с экспериментальными данными. Получено удовлетворительное согласие расчета с экспериментом.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Seidel K. et al.

P3 - 11741

The Isomer Shift of Neutron Resonances.

2. Correcting for Crystal Lattice Vibration Effects

The Einstein model, generalized to comprise two types of atoms, is employed to describe the shape of neutron resonance lines of nuclei in different chemical compounds. The results of calculations for the 6.67 eV resonance of  $^{238}\text{U}$  are compared with experimental data yielding a satisfactory agreement.

The investigation has been performed at the Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1978

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Как известно, колебания кристаллической решетки влияют на ход сечения вблизи нейтронного резонанса, что приводит к отклонению от формы, описываемой формулой Брейта-Вигнера. При анализе параметров нейтронных резонансов это учитывается путем введения доплеровского уширения. Однако при изучении малых эффектов, таких как изомерный сдвиг уровня <sup>1/1/</sup>, необходим более точный учет этого явления. Строгое описание формы резонанса можно провести, если известен частотный спектр колебаний решетки. В данной работе рассматривается захват нейтронов ядрами  $^{238}\text{U}$ , входящими в состав различных химических соединений вида  $\text{UX}_\rho$ , поэтому необходимо знать взвешенный /по квадратам вектора поляризации колебаний атомов урана/ частотный спектр, т.е. ту часть распределения нормальных мод колебаний, которые связаны с атомами урана <sup>1/2/</sup>. Такие макроскопические величины, как теплоемкость, коэффициент расширения и т.п., обусловлены полным спектром частот. До сих пор взвешенный частотный спектр был известен только для одного из исследованных нами соединений, а именно для  $\text{UO}_2$  <sup>2, 3/</sup>. Чтобы обеспечить достаточно аккуратное описание формы резонанса, необходимо было отразить основные черты спектра частот для всех соединений, ограничиваясь при этом минимальным числом свободных параметров. Нами был взят за основу подход Джэксона и Линна <sup>4/</sup>, которые достигли хорошего описания формы резонансов в  $\text{U}_3\text{O}_8$  и металлическом уране в широком

диапазоне температур  $/4 \div 297 \text{ K}/$ . Ими использовалась модель Нернста-Линденманна, которая представляет собой модель Эйнштейна, распространенную на два вида атомов.

Ниже обосновывается выбор параметров модели и проводится сравнение предсказанных на основании этой модели сдвигов уровней с экспериментально полученными при обработке по методу, изложенному в /1/.

## 2. ОПИСАНИЕ ФОРМЫ РЕЗОНАНСОВ

### 2.1. Взвешенный частотный спектр

Большая разница между массами обоих видов атомов соединений  $UX_2 (M_U \gg M_X)$  является определяющим условием для формы частотного спектра. Для линейной цепи гармонических, однородно связанных осцилляторов /5/, в которой частицы масс  $M$  и  $m$  следуют друг за другом, частоты оптических и акустических колебаний связаны соотношением

$$(\hbar\nu)_{opt} / (\hbar\nu)_{ac} = (M/m)^{1/2},$$

если  $M \gg m$ . Максимум частот акустической ветви частотного спектра связан с колебаниями только частиц массы  $M$ , амплитуда других частиц равняется нулю. Два максимума оптической ветви отвечают случаям  $u_M = 0$  /т.е. колеблются только частицы массы  $m$ / или  $u_m/u_M = M/m$ . Если колебания вызваны частицами массы  $M$ , то возбуждаются прежде всего низкие частоты  $(\hbar\nu)_{ac}$ , слабо связанные с частотами  $(\hbar\nu)_{opt}$ . Такое предположение подтверждается результатами Джэксона и Линна /4/ для  $U_3O_8$ . Подгонка выражения взвешенного частотного спектра вида

$$\rho_U(\hbar\nu) = a_1 \cdot \delta(\hbar\nu - \hbar\nu_1) + a_2 \cdot \delta(\hbar\nu - \hbar\nu_2)$$

к измеренным формам резонансов в диапазоне температуры от 4 до 297 K дает параметры  $a_1 = 0,90 \pm 0,05$ ;  $\hbar\nu_1 = /0,013 \pm 0,003/ \text{ эВ}$ ;  $\hbar\nu_2 = /0,052 \pm 0,008/ \text{ эВ}$ . Оказывается, что отношение  $\hbar\nu_1/\hbar\nu_2$  действитель-

но равняется  $(M_O/M_U)^{1/2}$ , а 90% колебаний возбуждается при низкой частоте  $\hbar\nu_1$ .

В работе Боргонови и др. /2/ анализировался спектр колебаний решетки  $UO_2$  и было показано, что колебания, связанные с атомами урана, лежат в узком интервале низких частот  $/\hbar\nu \approx 10-20 \text{ мэВ}/$ , тогда как высокочастотная часть спектра  $/30-80 \text{ мэВ}/$  обусловлена колебаниями атомов кислорода. Качественно подобная картина получалась и для карбида урана UC. Все это позволяло ожидать, что взвешенный частотный спектр вида /1/ может быть использован для описания формы резонансной кривой урана в различных соединениях. Если принять отношение

$$\hbar\nu_1 / \hbar\nu_2 = (M_X / M_U)^{1/2} \quad /2/$$

и учесть, что  $a_1 + a_2 = 1$ , то взвешенный частотный спектр /1/ будет содержать два свободных параметра.

Рассмотрим теперь, как используется взвешенный спектр /1/ для расчета энергетического хода сечения вблизи резонанса, а позднее остановимся на вопросе определения параметров  $\hbar\nu_1$  и  $a_1$  для каждого исследованного нами соединения урана.

### 2.2. Вычисление хода сечения в области резонанса

Сечение с учетом колебаний решетки можно записать в виде

$$\sigma(E_n) = \int dE' \cdot S(E') \cdot B(E_n - E'), \quad /3/$$

где  $B(E)$  описывается формулой Брейта-Вигнера и зависит только от свойств ядра, а  $S(E)$  - функция передачи энергии колеблющимся атомам решетки. Пусть нормирование таково, что  $S(E) = \delta(E)$ , если ядро неподвижно. Допустим дальше, что кристалл изотропен, т.е. скорость распространения волны не зависит от ее направления. Предположения эти позволяют, как показано в

работе /4/, выразить  $S(E)$  с помощью взвешенного частотного спектра.

Используя уравнение /1/ для  $\rho_U(h\nu)$ , можно разложить интеграл выражения /3/:

$$\begin{aligned} \sigma(E_n) = & D(E_n) \sum_{\mu, \eta} \{ S_{1\mu} [ S_{3\eta} \cdot B(E_n - \mu h\nu_1 - \eta h\nu_2) + \\ & + S_{4\eta} \cdot B(E_n - \mu h\nu_1 + \eta h\nu_2) ] + \\ & + S_{2\mu} [ S_{3\eta} \cdot B(E_n + \mu h\nu_1 - \eta h\nu_2) + \\ & + S_{4\eta} \cdot B(E_n + \mu h\nu_1 + \eta h\nu_2) ] \}. \end{aligned} \quad /4/$$

Члены  $S_{i\mu}$  и  $S_{j\eta}$  являются весовыми статистическими множителями для возбуждения и поглощения  $\mu$  фононов  $h\nu_1$  и  $\eta$  фононов  $h\nu_2$ :

$$\begin{aligned} S_{1\rho} = \sum_{w=\rho}^{\infty} \frac{(b_1^+)^w \cdot (b_1^-)^{w-\rho}}{w!(w-\rho)!}; \quad S_{2\rho} = \sum_{w=\rho}^{\infty} \frac{(b_1^-)^w \cdot (b_1^+)^{w-\rho}}{w!(w-\rho)!}; \\ S_{3\rho} = \sum_{w=\rho}^{\infty} \frac{(b_2^+)^w \cdot (b_2^-)^{w-\rho}}{w!(w-\rho)!}; \quad S_{4\rho} = \sum_{w=\rho}^{\infty} \frac{(b_2^-)^w \cdot (b_2^+)^{w-\rho}}{w!(w-\rho)!}. \end{aligned} \quad /5/$$

Зная энергию отдачи  $E_n/(A+1)$ , которую ядро испытывает при захвате нейтрона, энергию фононов  $h\nu_1$  и  $h\nu_2$  и среднюю вероятность заселенности, по статистике Бозе-Эйнштейна, находим величины  $b_1^+$  и  $b_1^-$ :

$$b_1^+ = \frac{E_n}{(A+1)h\nu_1} \cdot \frac{a_1}{[1 - \exp(-h\nu_1/kT)]};$$

$$b_1^- = \frac{E_n}{(A+1)h\nu_1} \cdot \frac{a_1}{[\exp(h\nu_1/kT) - 1]}. \quad /6/$$

Подобным же образом получаются  $b_2^+$  и  $b_2^-$ , если использовать  $a_2$  и  $h\nu_2$  из /1/. Величина  $D(E_n)$  в /4/ является фактором Дебая-Валлера:

$$D(E_n) = \exp \left\{ - \frac{E_n}{A+1} \cdot \left[ \frac{a_1}{h\nu_1} \coth\left(\frac{h\nu_1}{2kT}\right) + \frac{a_2}{h\nu_2} \coth\left(\frac{h\nu_2}{2kT}\right) \right] \right\}. /7/$$

Формулу Брейта-Вигнера с учетом интерференции резонансного и потенциального рассеяния можно представить в виде:

$$B(E) = \frac{\frac{\pi\hbar}{2m_n} \Gamma_n E_0^{-1/2} [\Gamma_\gamma E^{-1/2} + \Gamma_n E_0^{-1/2} + 4\hbar^{-1}(2m_n)^{1/2} R(E-E_0)]}{(E-E_0)^2 + \Gamma^2/4} + 4\pi R^2, \quad /8/$$

где  $E_0$  - резонансная энергия,  $\Gamma_n$  - нейтронная ширина при энергии  $E_0$ ,  $\Gamma_\gamma$  - радиационная ширина ( $\Gamma_n + \Gamma_\gamma = \Gamma$ ),  $R$  - радиус потенциального рассеяния,  $m_n$  - масса нейтрона. Для резонанса  $^{238}\text{U}$   $E_0 = 6,67$  эВ,  $\Gamma_n = 1,48$  мэВ и  $\Gamma_\gamma = 23,0$  мэВ.

На рис. 1 показаны рассчитанные формы резонансов при комнатной температуре. Слева сверху изображен резонанс 6,67 эВ металлического  $^{238}\text{U}$ . Параметры для  $\rho_U(h\nu)$  соответствуют данным работы /4/  $/a_1 = 1$  и  $h\nu_1 = 11$  мэВ/. Видно, как общее сечение складывается из составляющей без отдачи /более толстая линия/ и из составляющих /более тонкие линии/, связанных с возбуждением /направо/ и поглощением /налево/ фононов.

Рисунок поясняет также, почему пригодна аппроксимация дельта-функцией колебаний, распределенных в широком диапазоне частот. Это связано с шириной функции Брейта-Вигнера, которая "размазывает" вклад отдельных степеней возбуждения решетки по области, значительно более широкой, чем диапазон спектра частот вокруг  $h\nu_1$ .

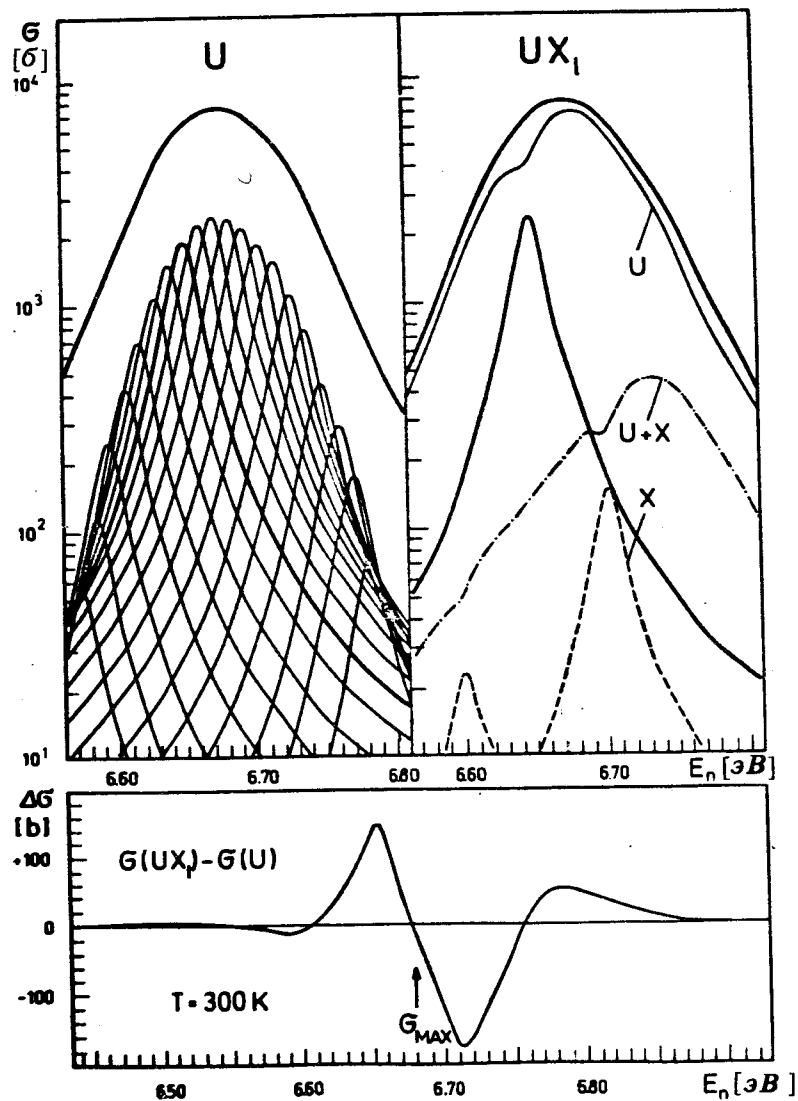


Рис. 1. Ход сечения резонанса 6,67 эВ  $^{238}\text{U}$  при 300 К. Слева сверху:  $U_{\text{Met}}$ ,  $\rho_U(h\nu) = 1,0 \cdot \delta(h\nu - 0,011 \text{ эВ})$ . Справа сверху:  $U_3O_8$ ,  $\rho_U(h\nu) = 0,9 \cdot \delta(h\nu - 0,013 \text{ эВ}) + 0,1 \cdot \delta(h\nu - 0,052 \text{ эВ})$ . Внизу: разность обоих сечений.

Справа сверху на рис. 1 изображены рассчитанные сечения для соединения  $UX_\ell$ . Выделены вклад, соответствующий части без отдачи, сумма вкладов, для которых происходят возбуждения и поглощения фононов  $h\nu_1$ , возбуждения и поглощения фононов  $h\nu_2$ , а также совместное действие обоих видов колебаний  $h\nu_1$  и  $h\nu_2$ .

Разность между сечениями металлического урана и  $UX_\ell$ , являющаяся особенно интересной для целей настоящей работы, изображена в нижней части рис. 1. Такой же ход наблюдается и для разностей между сечениями различных соединений  $UX_\ell$ , так как положение пиков и провалов определяется шириной  $\Gamma$  в формуле Брейта-Вигнера. Значения указанных разностей при комнатной температуре достигают нескольких процентов от максимального сечения и различны для разных соединений. Поскольку разности несимметричны относительно максимума сечения, они интерпретируются как сдвиг при сравнении положения резонансов двух различных соединений. На рис. 2 показано, как этот эффект проявляется в условиях использованного нами метода измерения и обработки. Теоретические спектры пропускания для двух образцов рассчитывались на основании сечений /4/ при учете экспериментальных условий: функции разрешения, отношения эффекта к фону, толщины образцов. Один из спектров показан на рисунке. Разность между двумя кривыми показана в увеличенном масштабе в нижней части рисунка. Затем один спектр подгонялся к другому по такой же программе, которая употребляется при обработке экспериментальных спектров пропускания /1/. После подгонки получается измененная кривая разности /пунктир/, у которой значение  $\chi^2$  минимально вследствие перемещения одного спектра пропускания относительно другого. Этот сдвиг в данном случае составляет 0,026 канала, т.е. около 400 мкэВ. Измеренные спектры пропускания дают подобную картину, которую можно сопоставлять с рассчитанной.

Выше отмечалось, что для проведения расчета кривых пропускания разных образцов необходимо знание параметров  $h\nu_1$  и  $a_1$  взвешенного частотного спектра

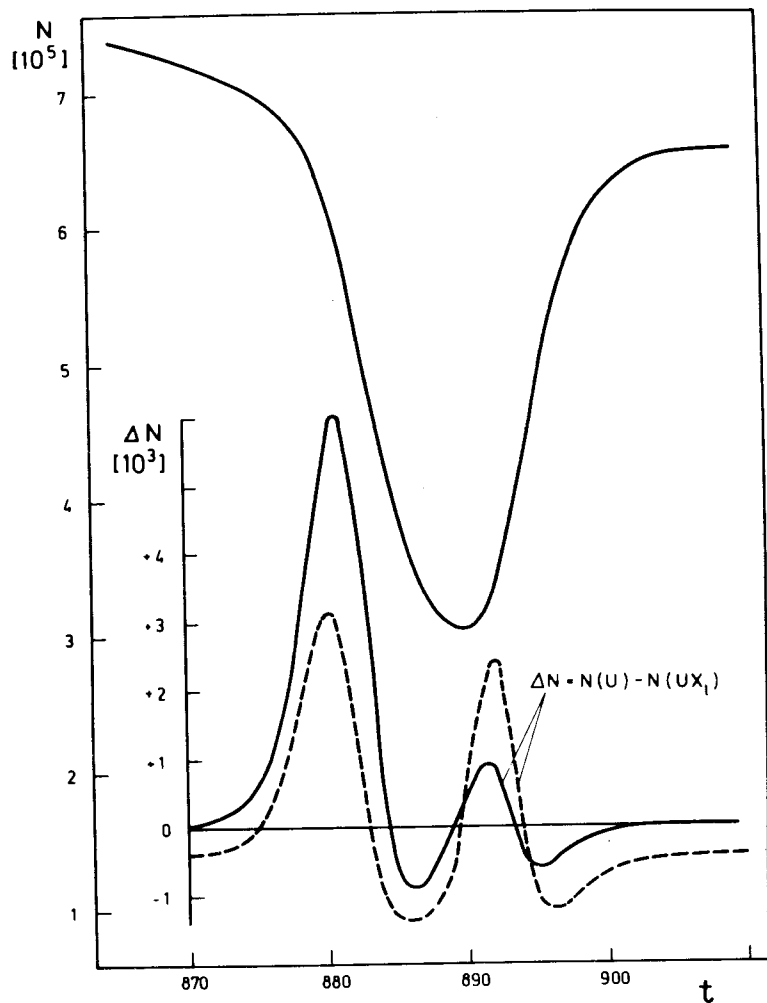


Рис. 2. Вверху: спектр пропускания по времени пролета. Экспериментальные условия: пролетная база - 63,6 м; ширина временного канала - 2,0 мкс; толщина образцов -  $0,552 \cdot 10^{21}$  ядер/см<sup>2</sup>;  $T = 300$  К; фон -  $2,8 \cdot 10^5$  отсчетов. Внизу: разность спектров  $U_{Met}$  и  $U_3O_8$  по данным рис. 1.

/1/ для каждого образца. Для их определения можно использовать разности между экспериментальными кривыми различных соединений /рис. 3 и 4/. Как показали расчеты, выполненные для широкого набора искомых параметров, разности между кривыми для разных соединений практически не меняются с изменением  $h\nu_1$  и  $a_1$ , если сохраняется средняя энергия на одну степень свободы колебаний атома урана  $\langle \epsilon \rangle_U$ . При изменении  $\langle \epsilon \rangle_U$  заметно меняется амплитуда разностей, но не период этой структуры, как это видно из рис. 3 и 4.

В приближении гармонических осцилляторов, подчиняющихся статистике Бозе-Эйнштейна, среднюю энергию  $\langle \epsilon \rangle_U$  можно выразить через взвешенный спектр колебаний урана  $\rho_U(h\nu)$  в виде

$$\langle \epsilon \rangle_U = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} h\nu \rho_U(h\nu) \coth(h\nu/2kT) d(h\nu). \quad /9/$$

Из выражения /9/ может быть найден один из параметров  $h\nu_1$  или  $a_1$ , если задан другой параметр и  $\langle \epsilon \rangle_U$ . Так как выбор первого параметра не является строгим, для всех соединений находились значения  $h\nu_1$  из известных значений удельной теплоемкости  $c_v$ . Для соединений вида  $UX_\ell$

$$c_v = \frac{d}{dT} [3(\ell + 1)L \langle \epsilon \rangle_{UX_\ell}], \quad /10/$$

где  $L$  - число Авогадро,  $\langle \epsilon \rangle_{UX_\ell}$  - средняя энергия на одну степень свободы атома, усредненная по всей решетке  $UX_\ell$ . Она описывается тем же выражением /9/, но вместо взвешенного спектра  $\rho_U(h\nu)$  для урана необходимо подставить полный спектр нормальных колебаний всей решетки  $\rho(h\nu)$ . При  $M_U \gg M_X$  кристалл можно представить как две квазинезависимые решетки, колебания которых имеют частоты  $h\nu_1$  и  $h\nu_2$ , при малом влиянии связи между ними на удельную теплоемкость.

Тогда в первом приближении

$$\rho(h\nu) = \frac{1}{\ell + 1} \cdot \delta(h\nu - h\nu_1) + \frac{\ell}{\ell + 1} \cdot \delta(h\nu - h\nu_2),$$

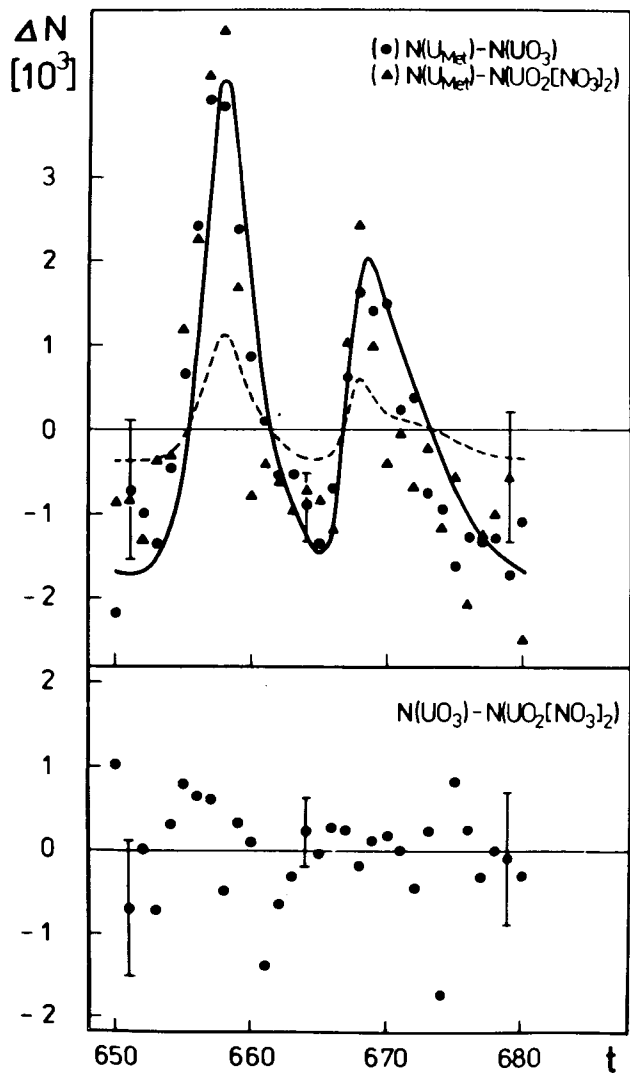


Рис. 3. Вверху: разности экспериментальных спектров /точки/ пар образцов  $U_{Met} \div UO_3$ ,  $U_{Met} \div UO_2(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ . Сплошная кривая - расчет при  $\langle \epsilon \rangle_U / kT = 1,080$ , пунктирная - при  $\langle \epsilon \rangle_U / kT = 1,038$ . Внизу: экспериментальная разность спектров  $UO_3$  и  $UO_2(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ . Ширина временного канала - 2,5 мкс /около 20 мэВ/. Толщина образцов  $n = 1,19 \cdot 10^{21}$  ядер/см<sup>2</sup>, температура - комнатная.

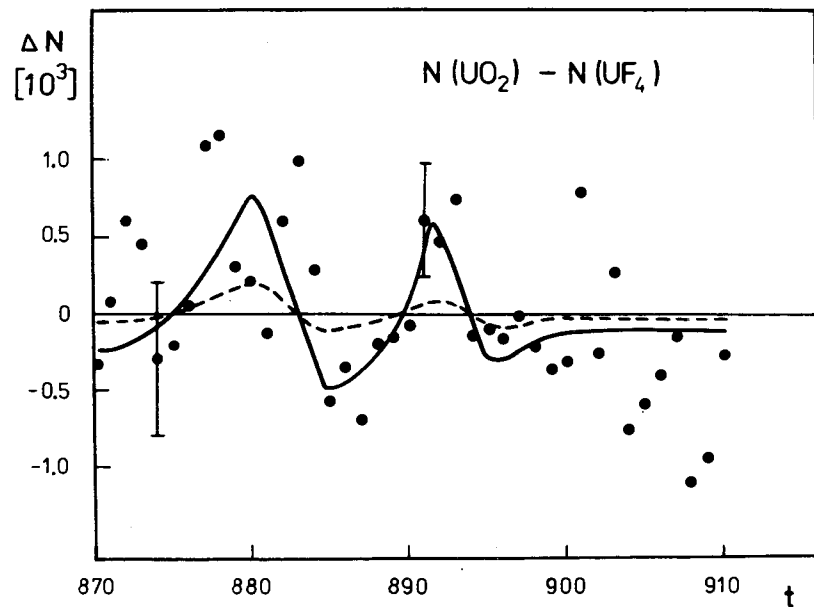


Рис. 4. Разность спектров пропускания пары образцов  $UO_2 \div UF_4$ . Точки - эксперимент. Сплошная кривая - расчет при  $\langle \epsilon \rangle_U / kT = 1,034$ ; пунктирная -  $\langle \epsilon \rangle_U / kT = 1,007$  для  $UF_4$ . Для  $UO_2$  в обоих случаях  $\langle \epsilon \rangle_U / kT = 1,023$ . Толщина образцов -  $5,52 \cdot 10^{20}$  ядер/см<sup>2</sup>,  $T = 370$  К.

а следовательно, можно определить  $h\nu_1$ , имея в виду соотношения /2/, /9/ и /10/.

Так как разность двух кривых пропускания определяется параметрами двух соответствующих решеток, необходимо знание средней энергии одной из них, чтобы получить значение  $\langle \epsilon \rangle_U$  для другой. В связи с этим в эксперименте проводилось совместное измерение таких пар, в которых одно соединение имело известные параметры. В качестве известных образцов применялся металлический уран и  $UO_2$ . Для последнего искомое значение  $\langle \epsilon \rangle_U$  получено из данных работ /2,3/ и равно  $\langle \epsilon \rangle_U / kT = 1,035$  при  $T = 300$  К и  $1,023$  - при  $T = 370$  К. Остальные примененные нами образцы - это  $UO_3$ ,  $UF_4$  и уранилнитрат  $UO_2(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ .



Металлический уран, для которого  $h\nu_1 = 11 \text{ мэВ}^{4/}$ , что соответствует  $\langle \epsilon \rangle_U / kT = 1,015$  при 300 К, измерялся совместно с  $\text{UO}_3$  и уранилнитратом. На рис. 3 показаны результаты измерений - разности между указанными спектрами, а также теоретические разности, рассчитанные при значениях  $\langle \epsilon \rangle_U / kT$  для  $\text{UO}_3$ , равных 1,0138 и 1,080. Известно, что кристаллическая решетка уранилнитрата близка к структуре  $\text{UO}_3^{6/}$ . У обеих основу составляют цепочки чередующихся атомов урана и кислорода, а в плоскости, перпендикулярной цепочке, вокруг урана лежат шесть атомов кислорода в случае  $\text{UO}_3$ , из которых четыре заменены азотнокислым радикалом в уранилнитрате. Поведение экспериментальных точек на рис. 3 указывает на то, что влияние кристаллической структуры на форму резонансной кривой практически одинаково для  $\text{UO}_3$  и  $\text{UO}_2(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ , а расчетная кривая хорошо согласуется с экспериментальными точками.

На рис. 4 сопоставлены разности экспериментальных и расчетных кривых для пары  $\text{UO}_2 \div \text{UF}_4$ . Для расчета приняты значения  $\langle \epsilon \rangle_U / kT = 1,023$  для  $\text{UO}_2$  и 1,034 - для  $\text{UF}_4$  при 370 К. Видно, что в пределах точности эксперимента согласие вполне удовлетворительно. Вторая кривая /пунктир/ дает заметно меньшую величину разности.

В таблице 1 для всех исследованных нами соединений приведены параметры взвешенных частотных спектров, хорошо описывающие экспериментальные разности.

### 3. ПРОВЕРКА ОПИСАНИЯ СДВИГА РЕЗОНАНСОВ

Точность описания сдвига резонанса, связанного с кристаллической структурой образцов, можно проверить, сравнивая некоторые зависимости, предсказанные моделью, с экспериментальными данными. С целью такой проверки были рассчитаны спектры в области резонанса для нескольких пар соединений, а затем для них вычислялся сдвиг по той же программе подгонки, как и для соответствующих экспериментальных спектров.

Таблица 1

Параметры взвешенного частотного спектра

$$\rho_U(h\nu) = a_1 \cdot \delta(h\nu - h\nu_1) + a_2 \cdot \delta(h\nu - h\nu_2)$$

Соединение	$a_1$	$h\nu_1$ (эВ)	$a_2$	$h\nu_2$ (эВ)
$\text{U}_{\text{мет}} / 4/$	1,0	0,011	-	-
$\text{UO}_2 / 2/$	0,93	0,012	0,07	0,046
$\text{UF}_4$	$0,53 \pm 0,06$	$0,008 \pm 0,001$	$0,47 \pm 0,06$	$0,028 \pm 0,003$
$\text{UO}_3$	$0,82 \pm 0,04$	$0,014 \pm 0,001$	$0,18 \pm 0,04$	$0,054 \pm 0,004$
$\text{UO}_2(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	$0,82 \pm 0,04$	$0,014 \pm 0,001$	$0,18 \pm 0,04$	$0,054 \pm 0,004$

ров. Исследовалась зависимость сдвига от ширины диапазона подгонки, толщины образцов и разности температур образцов.

#### 3.1. Зависимость сдвига от диапазона подгонки и толщины образцов

Как видно из рис. 2, разность резонансных кривых имеет сложный характер и несимметрична относительно центра. Отсюда можно ожидать, что включение в обработку большей или меньшей части резонансной кривой приведет к различным значениям сдвига. То же самое можно сказать о влиянии толщины образца. Для тонкого образца сильно влияет на величину сдвига участок спектра вблизи минимума. Для толстого образца существенны участки, более далекие от центра резонанса.

Зависимость сдвига резонанса  $\Delta E_0$  от диапазона подгонки  $t_2 - t_1$ , т.е. числа каналов спектра, включенных в обработку, иллюстрируется рис. 5. Видно, что уменьшение диапазона подгонки уменьшает величину сдвига

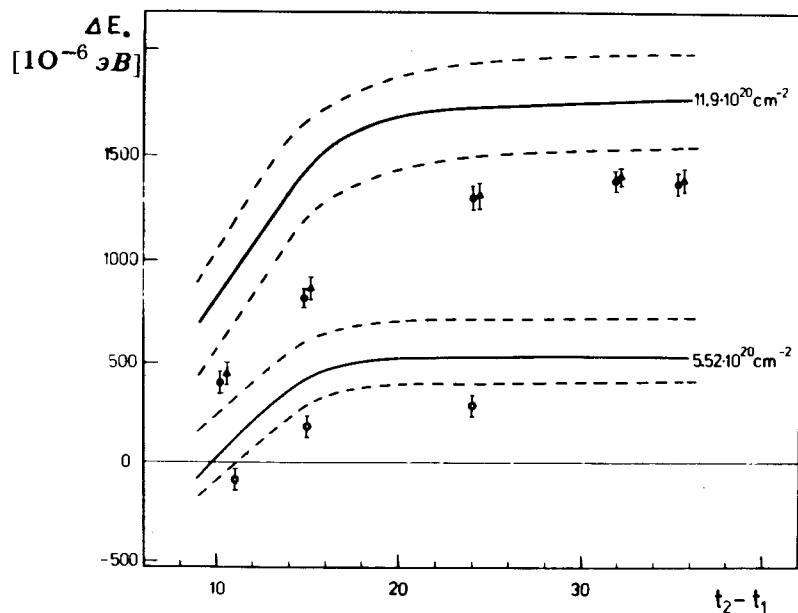


Рис. 5. Зависимость регистрируемого сдвига от числа каналов  $t_2-t_1$ , включенных в обработку. Точки - эксперимент, сплошные кривые - расчет, учитывающий только влияние колебаний решетки. Пунктиром указаны оцененные пределы погрешности расчета. ● - пара  $U_{Met} \div UO_2(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ , толщина образцов -  $1,19 \cdot 10^{21}$  ядер/см<sup>2</sup>; Δ - пара  $U_{Met} \div UO_2$ , толщина -  $1,19 \cdot 10^{21}$  ядер/см<sup>2</sup>, ○ - пара  $U_{Met} \div UO_3$ , толщина -  $0,552 \cdot 10^{21}$  ядер/см<sup>2</sup>. Ширина временного канала - 2 мкс.

и даже может привести к изменению знака эффекта. Такое поведение проявляется как для экспериментальных спектров /точки/, так и для расчетных /сплошные кривые/. На том же рисунке видно влияние толщины образца. Сдвиг значительно больше у толстого образца, причем опять наблюдается аналогичный результат для экспериментальных и расчетных спектров. Данные рис. 5 относятся к паре металлический уран -  $UO_3$ , однако и для других пар имеет место такое же поведение.

### 3.2. Зависимость сдвига от разности температур образцов

Изменение температуры образца приводит к изменению средней энергии колебаний. Поэтому представляло интерес сравнение экспериментального сдвига, полученного при разных температурах образцов, с рассчитанным на основе описанной выше модели. Измерения проводились с парой образцов  $UO_2 \div UF_4$  толщиной  $0,552 \cdot 10^{21}$  ядер/см<sup>2</sup>. Температура  $UO_2$  была постоянной и равнялась 370 К, а температура  $UF_4$  устанавливалась равной 366, 370, 373 и 376 К. Такое изменение температуры /на 3-4 К/ соответствует изменению средней энергии  $\langle \epsilon \rangle_U$  примерно на один процент. Различие в  $\langle \epsilon \rangle_U$  для разных решеток примерно такое же. На рис. 6 приведены сдвиги  $\Delta E_0$  для теоретически рассчитанных

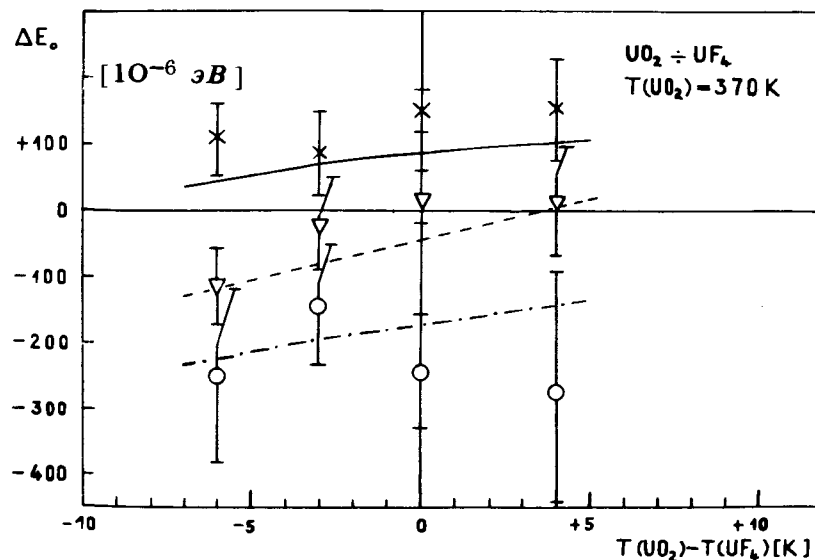


Рис. 6. Зависимость сдвига резонанса от разности температур образцов  $UF_4$  и  $UO_2$  при разных диапазонах подгонки. Точки - эксперимент, линии - расчет. × - 41 канал, Δ - 12 каналов, ○ - 8 каналов.

спектров /линии/ и экспериментальных спектров /точки/, обработанных одинаковым способом, в зависимости от разности температур образцов и при различных диапазонах подгонки. Видно, что теоретические и экспериментальные значения находятся в удовлетворительном согласии, хотя сдвиг едва ли можно считать обнаруженным.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сопоставление экспериментальных и расчетных данных, проведенное выше, показывает, что использованная модель кристаллической решетки позволяет удовлетворительно описать форму нейтронного резонанса ядер, входящих в кристаллическое соединение. Пригодность такой простой модели в значительной степени обусловлена тем, что собственная ширина резонанса  $\Gamma$  значительно больше энергии фонона  $h\nu_1$ , поэтому происходит сглаживание вкладов в сечение, связанных с поглощением или возбуждением фононов. Это приводит к подавлению влияния структуры частотного спектра на ход сечения. Аналогичную роль играет превышение энергии отдачи ядра над энергией фонона, что делает процесс многофононным.

Сдвиг резонанса, обусловленный кристаллической структурой образца, зависит от диапазона подгонки и толщины мишени и описывается теоретической моделью довольно хорошо. Это позволяет отделить искомый изомерный сдвиг, который не зависит от указанных параметров, от маскирующего эффекта кристаллической решетки.

В заключение считаем своим приятным долгом поблагодарить В.К.Игнатовича, Ю.М.Останевича, Л.Чера за полезные дискуссии и З.Экштейна - за помощь в проведении расчетов.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Акопян Г.Г. и др. ОИЯИ, РЗ-11740, Дубна, 1978.
2. Borgonovi G.M. e.a. *Phys. Rev.*, 1970, C1, p.2054.
3. Butland A.T.D. *Ann.Nucl.Sci. Eng.*, 1974, 1, p.575.
4. Jackson H.E., Lynn J.E. *Phys.Rev.*, 1972, 127, p.461.
5. Займан Дж. *Принципы теории твердого тела.* "Мир", М., 1974.
6. Ruby S.L. e.a. *Phys. Rev.*, 1969, 184, p.374.

Рукопись поступила в издательский отдел  
10 июля 1978 года.