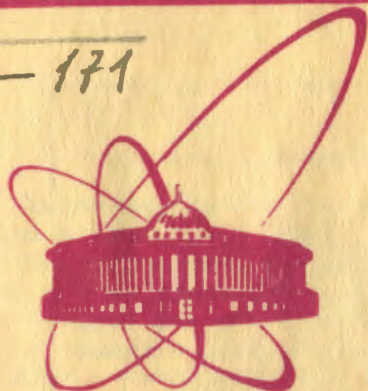


3-171



07  
объединенный  
институт  
ядерных  
исследований  
дубна

2381 / 2-81

18 / 5-81

P3-81-89

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

РЕЗОНАНСНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ НЕЙТРОНОВ  
С МОЛЕКУЛЯРНЫМ ГАЗОМ И КРИСТАЛЛАМИ

Направлено в ЯФ

1981

При взаимодействии нейтронов с ядрами форма сечения в резонансе существенно зависит от движения ядер мишени. В качестве приближения, учитывающего основные особенности явления, обычно используется газовая модель, в которой учитывается тепловое движение атомов. Основным параметром такой модели является доплеровская ширина, зависящая от температуры газа и энергии нейтрона. Однако, если требуется большая точность, то газовая модель становится слишком грубой.

Настоящая работа была поставлена в связи с экспериментальным исследованием химического сдвига нейтронных резонансов <sup>1-4/</sup>, обусловленного сверхтонким электростатическим взаимодействием заряда ядра и электронной оболочки в разных химических соединениях. По своей природе химический сдвиг нейтронного резонанса является аналогом изомерного сдвига, наблюдаемого методами мессбауэровской спектроскопии. Величина химического сдвига очень мала, порядка  $10^{-4}$  эВ. Эту величину следует сравнивать с собственной шириной резонанса, составляющей около 0,1 эВ. Отсюда видно, что необходим очень точный учет влияния формы резонанса на величину измеряемого сдвига.

В работе <sup>2/</sup> было показано, что модель твердого тела, учитывающая спектр колебаний решетки, с достаточной точностью описывает изменение формы нейтронного сечения при переходе от одного химического соединения к другому. В данной работе сделан следующий шаг: проведено сравнение нейтронного сечения для твердотельного образца и молекулярного газа. В этом случае применяются разные модели, и сравнение теоретических и экспериментальных результатов позволяет получить более строгую оценку качества каждой из них.

В настоящей работе описан эксперимент с поликристаллическим образцом  $UO_3$  и газообразным  $UF_6$ . Результаты сопоставляются с теоретическим расчетом.

## 2. ЭКСПЕРИМЕНТ

Исследование пропускания нейтронов мишенями из  $UO_3$  и  $UF_6$  проводилось по методу времени пролета на пучке нейтронов импульсного реактора ИБР-30, работавшего в бустерном режиме с линейным ускорителем электронов ЛУЭ-40, как описано в работе <sup>1/</sup>.

Для накопления спектров, управления сменой образцов и оперативного контроля хода эксперимента использовалась малая вычислительная машина ТРА-1. Чтобы обеспечить одинаковые экспериментальные условия, измерение велось с двумя мишенями, вводимыми в пучок поочередно на 5 мин. Каждый пятиминутный спектр контролировался по показаниям пучкового монитора и счетчика стартовых импульсов, и при выполнении заданных условий постоянства добавлялся к хранящемуся в памяти ЭВМ спектру данного образца. После этого в пучок автоматически вводился следующий образец.

Для регистрации нейтронов использовался сцинтилляционный детектор с литиевым стеклом и фотоумножителем ФЭУ-49. Весь тракт регистрации нейтронов обеспечивал возможность работы при мгновенных нагрузках до  $3 \cdot 10^5$  имп/с, что было необходимо для получения достаточно высокой статистической точности спектров. В пучке постоянно находился образец из тербия, резонансы которого служили для объективного контроля временных спектров.

Газообразный  $UF_6$  находился в медном цилиндре, стенки которого были покрыты внутри защитным слоем тефлона. К цилиндру был присоединен манометр для наблюдения за давлением. Порошок помещался в алюминиевую кассету с дополнительным медным экраном. Толщина стенок выбиралась такой, чтобы выровнять нерезонансное ослабление нейтронов в обоих образцах. Температура образцов поддерживалась равной 373 К с точностью 0,5 К при помощи специальной схемы. При такой температуре давление  $UF_6$  близко к атмосферному, и толщина образцов  $UO_3$  и  $UF_6$  одинакова и равна  $4 \cdot 10^{20}$  ядер  $^{238}U$  на  $см^2$ .

### 3. СЕЧЕНИЕ РЕЗОНАНСНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ НЕЙТРОНОВ В МОЛЕКУЛЯРНОМ ГАЗЕ

Для вычисления сечения резонансного поглощения нейтронов в молекулярном газе необходимо учитывать движение молекул в целом и внутреннее возбуждение.

В настоящей работе рассматриваются только симметричные молекулы типа  $XU_n/n = 2, 3, 4, 5, 6$ , у которых ядра  $X$  поглощают нейтроны и находятся в центре масс молекул. Для таких молекул оказывается возможным рассмотрение только колебательных переходов и пренебрежение вращательными <sup>/6/</sup>.

Основы общей теории испускания и поглощения  $\gamma$ -излучения ядрами в симметричных многоатомных молекулах были развиты в работах Летохова и Миногина <sup>/6,7/</sup>. На основе этого подхода Боуман и Шрак <sup>/8/</sup> впервые показали, что внутреннее возбуждение молекул заметно влияет на форму нейтронных резонансов.

Сечение резонансного поглощения нейтронов в зависимости от энергии  $E_n$  для молекулярного газа можно представить в виде

$$\sigma(E_n) = \sum_{\{n_i^a\}, \{n_i^b\}} W_{\{n_i^a\}} \sum_{\{n_i^b\}} P_{\{n_i^a\}, \{n_i^b\}} \sigma_G(E_n, \Delta E_M), \quad /1/$$

где  $\{n_i^a\}, \{n_i^b\}$  - совокупности квантовых чисел, определяющих состояния молекулы до и после взаимодействия,  $W_{\{n_i^a\}}$  - вероятность состояния  $\{n_i^a\}$  при определенной температуре газа, которую можно вычислить по формуле Гиббса,  $P_{\{n_i^a\}, \{n_i^b\}}$  - вероятность перехода молекулы из состояния  $\{n_i^a\}$  в состояние  $\{n_i^b\}$  при захвате нейтрона /черта означает усреднение по ориентациям молекулы/,  $\sigma_G(E_n, \Delta E_M)$  - сечение для молекул, которые поглощают и испускают энергию  $\Delta E_M = E_{\{n_i^b\}} - E_{\{n_i^a\}}$ .

Симметричные молекулы типа  $XY_n$  имеют несколько нормальных колебаний, которые в подавляющем большинстве случаев вырождены. Среди них есть и такие, при которых ядро остается в покое. Эти нормальные колебания не возбуждаются при захвате нейтрона ядром X и поэтому неинтересны при вычислении сечения резонансного поглощения нейтронов.

Интересующие нас колебания молекул описываются с помощью совокупности квантовых чисел  $\{n_{sa}\}$ . Индекс s описывает разные нормальные колебания, a - разные составляющие одного вырожденного нормального колебания. Вероятность перехода молекулы из состояния  $\{n_{sa}^a\}$  в состояние  $\{n_{sa}^b\}$  при захвате нейтрона ядром X можно вычислить согласно работе /6/ с помощью формулы

$$P_{\{n_{sa}^a\}, \{n_{sa}^b\}} = \prod_{s, \alpha} |\langle \Phi_{n_{sa}^b}(Q_{sa}) | \exp\{ik_{\alpha} b_{sa} Q_{sa} m_X^{-1/2}\} | \Phi_{n_{sa}^a}(Q_{sa}) \rangle|^2, \quad /2/$$

$Q_{sa}$  - нормальная координата a-составляющей s-го нормального колебания,  $\Phi_{n_{sa}^a}, \Phi_{n_{sa}^b}$  - волновые функции линейного гармонического осциллятора,  $b_{sa}$  - нормированное смещение ядра X из положения равновесия,  $k_{\alpha}$  - волновой вектор нейтрона,  $m_X$  - масса ядра X.

Величина  $b_{sa}$  может быть определена из элементов матрицы  $f$ , осуществляющей обратное преобразование матрицы масс - взвешенных декартовых координат q в матрицу нормальных координат Q /6, 10/ или из силовых постоянных молекул.

Матричные элементы в /2/ уже вычислены авторами работы /6/. Для случая поглощения энергии ( $n_{sa}^b \geq n_{sa}^a$ ) получается:

$$\begin{aligned} & |\langle \Phi_{n_{sa}^b}(Q_{sa}) | \exp\{ik_{\alpha} b_{sa} Q_{sa} m_X^{-1/2}\} | \Phi_{n_{sa}^a}(Q_{sa}) \rangle|^2 = \\ & = \frac{(n_{sa}^a)!}{(n_{sa}^b)!} \cdot Z_{sa}^{(n_{sa}^b - n_{sa}^a)} \exp\{-Z_{sa} \cos^2 \beta_{sa}\} \times \\ & \times \cos^{2(n_{sa}^b - n_{sa}^a)} \beta_{sa} (L_{n_{sa}^b - n_{sa}^a} (Z_{sa} \cos^2 \beta_{sa}))^2. \end{aligned} \quad /3/$$

Для случая ( $n_{sa}^b < n_{sa}^a$ ) получается аналогичная формула, потому что матричный элемент не изменяется, если мы переворачиваем начальное и конечное состояния. В формуле /3/:  $L_m^n(x)$  - присоединенные полиномы Лагерра,  $\beta_{sa}$  - угол между направлением падающего нейтрона и направлением смещения ядра X за счет  $\alpha$ -составляющей s-го нормального колебания.

Параметры  $Z_{sa}$  существенно определяют вероятность перехода

$$Z_{sa} = \frac{R}{h\nu_s} \cdot \frac{M + m_n}{m_x + m_n} \cdot b_{sa}^2 \quad /4/$$

Энергия отдачи молекулы

$$R = \frac{m_n}{M + m_n} \cdot E_n, \quad /5/$$

$h\nu_s$  - энергия кванта s-го нормального колебания, M - масса молекулы,  $m_n$  - масса нейтрона.

Чтобы усреднить  $P_{\{n_{sa}^b\}}^{\{n_{sa}^a\}}$  по ориентациям молекулы, выгодно представить углы  $\beta_{sa}$  как функции от углов сферических координат  $\theta, \phi$  ( $x = r \sin\theta \cdot \cos\phi, y = r \sin\theta \sin\phi, z = r \cos\theta$ ). Потом можно вычислить  $P_{\{n_{sa}^b\}}^{\{n_{sa}^a\}}$  по формуле

$$P_{\{n_{sa}^b\}}^{\{n_{sa}^a\}} = \frac{1}{4\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=-\pi}^{\pi} \sin\theta P_{\{n_{sa}^b\}}^{\{n_{sa}^a\}}(\theta, \phi) d\theta d\phi. \quad /6/$$

#### 4. ВЫЧИСЛЕНИЕ СЕЧЕНИЯ РЕЗОНАНСНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ДЛЯ $UF_6$

Молекулы газообразного  $UF_6$  относятся к точечной группе  $O_h$ , у них октаэдрическая структура. Атом урана находится в центре масс молекулы. Расстояния от атома урана до атомов фтора все одинаковы. Углы между линиями связи U-F только  $90^\circ$  или  $180^\circ$  /рис. 1/.  $UF_6$  имеет шесть нормальных колебаний. Однако в смещение ядра урана дают вклад только трижды вырожденные нормальные колебания  $\nu_3$  и  $\nu_4$  типа симметрии  $F_{1u}$ . Колебания  $\nu_3$  и  $\nu_4$  представлены на рис. 1. Видно, что  $\beta_{3a} = \beta_{4a} / \alpha = 1, 2, 3/$ . Необходимые частоты  $\nu_3$  и  $\nu_4$  приведены в обзоре /11/:

$$c^{-1} \nu_3 = 625 \text{ см}^{-1}, \text{ т.е. } h\nu_3 = 0,0776 \text{ эВ}$$

$$c^{-1} \nu_4 = 186 \text{ см}^{-1}, \text{ т.е. } h\nu_4 = 0,0231 \text{ эВ.}$$

Для соответствующих критических температур  $T_C = h\nu_s/k$  получаются  $T_{C3} = 900,5 \text{ К}$ ;  $T_{C4} = 268,1 \text{ К}$ . Это значит, что уже при относительно низких температурах четвертое нормальное колебание сильно возбуждено. Параметры  $b_{sa}$  были вычислены из силовых

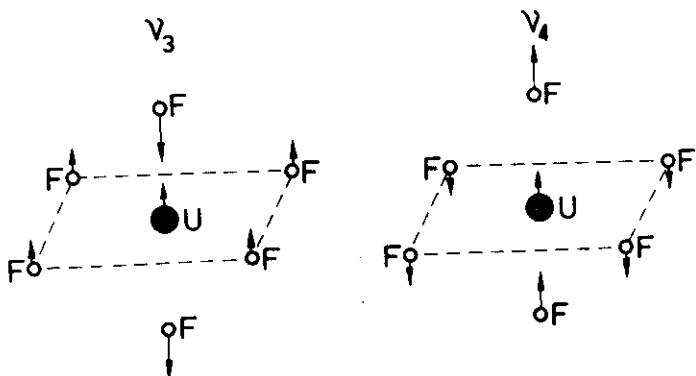


Рис. 1. Колебания  $\nu_3$  и  $\nu_4$  молекулы  $XY_6$ .

постоянных /10,12/. Из-за вырождения параметры  $b_{sa}$  не зависят от  $a$ :

$$b_{31} = b_{32} = b_{33} = 0,368.$$

$$b_{41} = b_{42} = b_{43} = 0,434.$$

Усреднение по углам вследствие сферической симметрии тривиально.

Сечения для 6,67 эВ-резонанса в  $^{238}UF_6$  были вычислены при температурах 293 К и 373 К с помощью формулы /1/ в виде

$$\sigma(E_n) = \sum_{\Delta n_3, \Delta n_4} R_{\Delta E_M} \sigma_G(E_n, \Delta E_M). \quad //$$

Для расчета сечения необходимы некоторые ограничения. Сначала надо ограничить число фононов в начальном состоянии. Мы использовали  $n_{3 \text{ макс.}}^a = 2$  и  $n_{4 \text{ макс.}}^a = 9$ , т.е. включили около 97% всех молекул при температуре 373 К. Кроме того, мы добавили вероятности неучтенных степеней возбуждения к вероятностям

$W_{n_3^a, n_4^a \text{ макс.}}$ ,  $W_{n_3^a \text{ макс.}, n_4^a}$  или  $W_{n_3^a \text{ макс.}, n_4^a \text{ макс.}}$ . Процессы вида  $\{n_{41}^a, n_{42}^a, n_{43}^a\} = \{1, 0, 0\} \Rightarrow \{0, 1, 0\}$  представляют собой процессы высших порядков и были учтены только для нормального колебания  $\nu_4$ .

Кроме того, необходимо ограничить число слагаемых в ///. Мы учитывали все коэффициенты  $R_{\Delta E_M}$ , вклад которых выше 0,0001. Расчеты показали, что процессы, при которых молекула одновременно поглощает или испускает несколько фононов, дают заметный вклад.

Как видно из /4/ и /5/, параметры  $Z_{sa}$ , а поэтому и параметры  $R_{\Delta E_M}$ , зависят от энергии нейтрона  $E_n$ . Мы учитывали этот эффект с помощью линейной интерполяции между энергиями  $E_{n1} = 6,52$  эВ и  $E_{n2} = 6,82$  эВ.

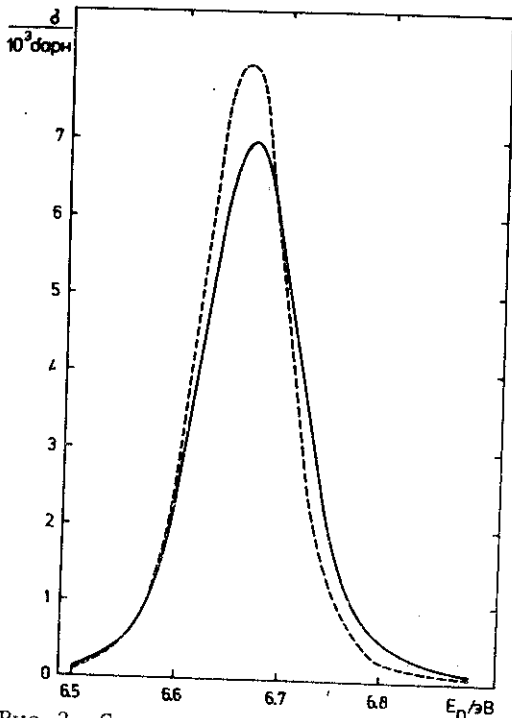


Рис. 2. Сечение резонансного поглощения для 6,67 эВ резонанса в  $^{238}\text{U}$  при температуре  $T=373\text{ К}$  с учетом /сплошная кривая/ и без учета /пунктирная кривая/ возбуждения молекул.

На рис. 2 представлены сечения резонансного поглощения нейтронов для 6,67 эВ-резонанса в  $^{238}\text{U}$  с учетом и без учета внутреннего возбуждения молекул. Видно, что внутреннее возбуждение молекул сильно влияет на форму резонанса, а также обуславливает сдвиг максимума на 6 мэВ.

Самое важное преимущество в случае  $\text{UF}_6$  состоит в том, что расчет сечения резонансного поглощения нейтронов не содержит свободных параметров и что частоты колебаний хорошо известны.

Боуман и Шрак в работе /8/ тоже вычислили сечение резонансного поглощения нейтронов для  $\text{UF}_6$  при температуре 293 К, интересуясь в первую очередь ядерными данными. Для этой цели были достаточны относительно грубые приближения. В началь-

ном состоянии они учитывали только  $\{n_3^a, n_4^a\} = \{0, 0\}, \{0, 1\}, \{0, 2\}$  и  $\{1, 0\}$ , т.е. около 60% всех молекул. Кроме того, они учитывали только переходы  $\{\Delta n_3, \Delta n_4\} = \{0, 0\}, \{0, 1\}, \{0, -1\}, \{1, 0\}, \{1, -1\}$ , это около 93,7% всех переходов. Такой расчет недостаточен для исследования химического сдвига нейтронных резонансов.

## 5. ХИМИЧЕСКИЙ СДВИГ НЕЙТРОННЫХ РЕЗОНАНСОВ

Химический сдвиг нейтронного резонанса  $\Delta E_0$  можно записать в виде /4/:

$$\Delta E_0 = \frac{2\pi}{3} Z e^2 k \Delta \rho_e(0) \cdot \Delta \langle r_p^2 \rangle, \quad /8/$$

где  $\Delta \rho_e$  /0/ - разность плотности электронов на месте ядра для двух рассматриваемых химических соединений;  $\Delta \langle r_p^2 \rangle$  - изменение среднеквадратичного радиуса заряда ядра при захвате нейт-

рона;  $k$  - коэффициент, учитывающий изменение  $\Delta p_e$  по объему ядра. В работах<sup>/1-4/</sup> впервые были проведены измерения этого эффекта, обусловленного сверхтонким электрическим взаимодействием, для резонанса  $6,67 \text{ эВ } ^{288}\text{U}$ . В эксперименте использовались поликристаллические образцы.

Для сравнения положения резонанса в спектрах разных химических соединений проводилась подгонка методом наименьших квадратов, при которой резонансные провалы совпадали наилучшим образом /подробнее см.<sup>/1/</sup>/. Экспериментальный сдвиг можно представить в виде

$$\Delta E_{\text{эксп.}} = \Delta E_0 + \Delta E_{\text{попр.}} \quad /9/$$

где  $\Delta E_{\text{попр.}}$  - фиктивный сдвиг, обусловленный в первую очередь различием формы резонансов из-за разницы в спектре колебаний кристаллических решеток рассматриваемых веществ.

Для определения химического сдвига  $\Delta E_0$  необходим надежный расчет поправки  $\Delta E_{\text{попр.}}$ . Такой расчет был выполнен в работе<sup>/2/</sup> на основе подхода Джексона и Линна<sup>/5/</sup>. Ими была использована модель Нернста-Линденманна, которая представляет собой модель Эйнштейна, распространенную на два вида атомов  $U$  и  $X$ . Взвешенный частотный спектр, т.е. колебания, связанные с атомами урана, можно представить в виде

$$\rho(h\nu) = a_1 \delta(h\nu - h\nu_1) + a_2 \delta(h\nu - h\nu_2), \quad /10/$$

$$a_1 + a_2 = 1; \quad h\nu_1/h\nu_2 = \sqrt{m_X/m_U}, \quad /11/$$

где  $m_X$  и  $m_U$  - массы атомов  $X$  и  $U$ .

Реальный спектр фононов непрерывен, но выражение /10/ является хорошим приближением, что связано еще и с тем, что собственная ширина резонанса обеспечивает дополнительное усреднение. В работе<sup>/2/</sup> на основе этого подхода удалось хорошо описать разности нейтронных спектров для разных химических соединений, а также зависимости от толщины образцов, температуры, диапазона подгонки. Тем не менее, для строгой оценки качества описания формы резонанса с помощью этой модели желательна дополнительная проверка. Дело в том, что не исключена компенсация систематической ошибки, когда берутся разности спектров, рассчитанных по одной и той же модели. В этом отношении сравнение пропусканий через поликристаллический  $UO_3$  и молекулярный газ  $UF_6$  дает хорошую проверку, так как модели при этом существенно отличаются. Для твердого тела атомы зафиксированы в узлах решетки, и ход сечения обусловлен только поглощением и испусканием фононов решеткой. В случае молекулярного газа учитывается распределение молекул по скоростям, энергия отдачи, внутренние возбуждения молекул.



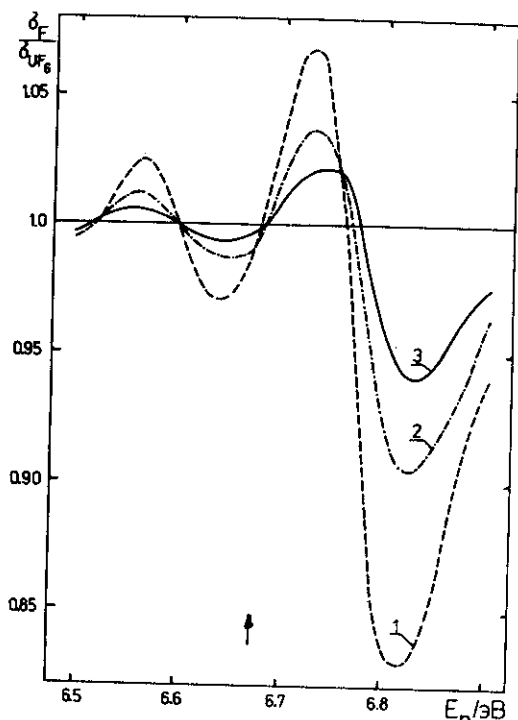


Рис. 3. Рассчитанные отношения сечений для различных поликристаллических образцов  $\sigma_F$  к сечению  $\sigma_{UF_6}$  при температуре  $T=373$  К. Для описания сечения поликристаллических образцов были использованы следующие параметры:  $U_{мет}$ :  $a_1=1,0$ ;  $h\nu_1=0,011$  эВ /1/;  $U_3O_8$ :  $a_1=0,9$ ,  $a_2=0,1$ ,  $h\nu_1=0,013$  эВ,  $h\nu_2=0,052$  эВ /2/;  $UO_2$ :  $a_1=0,85$ ,  $a_2=0,15$ ,  $h\nu_1=0,014$  эВ,  $h\nu_2=0,054$  эВ /3/.  
Стрелкой указана энергия резонанса.

на рис. 3 представлено рассчитанные отношения сечений для различных поликристаллических образцов  $\sigma_F$  к сечению для  $UF_6$  при температуре  $T=373$  К. Видно, что различие в сечениях очень значительно.

### 6. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТА И ОБСУЖДЕНИЕ

Обработка экспериментальных спектров для резонанса  $^{238}U$  6,67 эВ в  $UO_2$  и  $UF_6$  дала значение  $\Delta E_{эксп.} = 118 \pm 66$  мкэВ. Для определения поправки  $\Delta E_{попр.}$  были рассчитаны теоретические спектры. В расчете использованы, кроме рассмотренных выше сечений в резонансе, также значения потока нейтронов, фона, функции разрешения и т.д. На рис. 4 вверху показаны экспериментальные точки и теоретическая кривая. Видно, что согласие достаточно хорошее. Для расчета обоих спектров все параметры одинаковы, кроме характеристик кристалла и газа. Для теоретических спектров далее проводилась такая же обработка, как для экспериментальных, откуда было получено значение  $\Delta E_{попр.} = 139$  мкэВ. Параметры спектра колебаний решетки /10/ были получены в ходе подгонки и найдены равными  $a_1 = 0,85 \pm 0,06$  и  $h\nu_1 = 14 \pm 1$  мэВ. На рис. 4 внизу показаны экспериментальные точки разности спектров в области нейтронного резонанса, а кривая показывает аналогичную разность теоретических спектров.

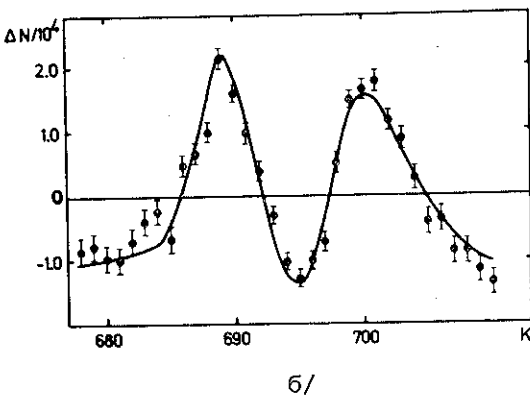
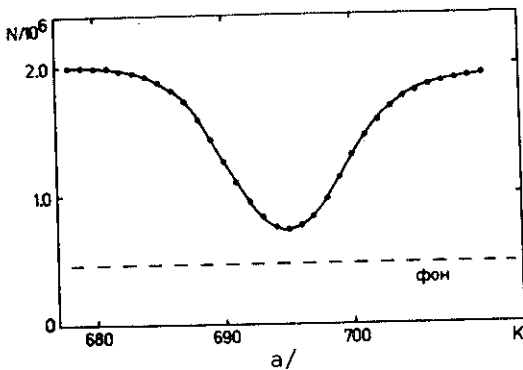


Рис.4. а/ - экспериментальный спектр пропускания по времени пролета для 6,67 эВ резонанса  $^{238}\text{UF}_6$  /точки/ и результат расчета этого спектра /сплошная кривая/. б/ - разность экспериментальных спектров для  $^{238}\text{UO}_3$  и  $^{238}\text{UF}_6$  после подгонки /точки/ и результат расчета этой разности /сплошная кривая/.  $k$  - номер канала анализатора.

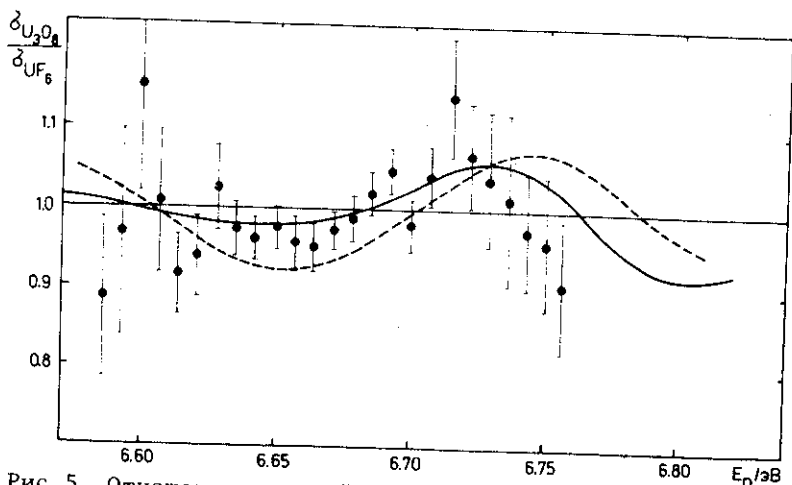
ров. Важно отметить, что полученные параметры кристаллической решетки  $a_1$  и  $h\nu_1$  хорошо совпадают с полученными ранее в работе /2/.

Окончательный результат для химического сдвига  $\Delta E_0 = \Delta E_{\text{экср.}} - \Delta E_{\text{попр.}}$   
 $= -21 \pm 211$  / мкэВ.

В ошибку входят статистическая ошибка эксперимента и ошибка поправки. Последняя определяется в основном ошибками параметров  $a_1$  и  $h\nu_1$  для  $\text{UO}_3$ , а для  $\text{UF}_6$  - неопределенностью силовых постоянных и частот молекулы  $\text{UF}_6$ .

Для сопоставления найденного значения  $\Delta E_0$  с результатами, полученными в /4/, где было определено  $\Delta \langle r_p^2 \rangle = \begin{pmatrix} -1,7 & +1,2 \\ -0,8 & 2 \end{pmatrix}$  Фм<sup>2</sup>,

необходимо знать  $\Delta r_e / 0$  для  $\text{UO}_3$  и  $\text{UF}_6$ . Пока таких экспериментальных данных нет, но из одинаковой валентности этих соединений можно ожидать, что  $\Delta r_e / 0$  мало. Это согласуется с найденным экспериментальным значением  $\Delta E_0$ . Оценку для  $\Delta r_e / 0$  можно получить на основании данных для аналогичных соединений нептуния /13/, если предположить, что нептуний имеет такие же, как уран, эффективные заселенности валентных электронов плюс один дополнительный  $5f$ -электрон. Тогда верхняя граница  $\Delta r_e / 0$  для  $\text{UO}_3$  и  $\text{UF}_6$  составит около  $5 \cdot 10^{-26}$  см<sup>-3</sup>. Согласно /8/ и найденному ранее значению  $\Delta \langle r_p^2 \rangle$ , в этом случае  $\Delta E_0 = \begin{pmatrix} -210 & +150 \\ -100 & \end{pmatrix}$ . Эта величина также не противоречит приведенному выше значению.



**Рис. 5.** Отношение сечений резонансного поглощения нейтронов для  $^{238}\text{U}_3\text{O}_8$  и  $^{238}\text{UF}_6$  при комнатной температуре, точки - экспериментальный результат работы /8/, пунктирная кривая - результат расчета работы /8/, сплошная кривая - результат расчета в рамках настоящей работы.

Для дополнительной проверки наших расчетов нами были проведены сравнения с данными Боумана и Шрака /8/. Они измеряли спектры пропускания по времени пролета для резонанса 6,67 эВ в соединениях  $\text{U}_3\text{O}_8$  и  $\text{UF}_6$  при комнатной температуре. Экспериментальные результаты, полученные ими, приведены на рис. 5 вместе с теоретической кривой /пунктир/. Здесь же приведены результаты наших расчетов для этих соединений /сплошная линия/. Видно, что согласие с экспериментом хорошее.

Проведенное в данной работе сопоставление экспериментальных и теоретических спектров через разности для двух химических соединений является чувствительным методом проверки модели твердого тела или газа в приложении к описанию нейтронного сечения. Для данного резонанса сдвиг за счет колебаний кристаллической решетки  $\text{UO}_3$  составляет около 25 мэВ по сравнению с резонансом для закрепленного ядра. В  $\text{UF}_6$  такой сдвиг за счет отдачи равняется  $E_n \cdot m_n / (m_n + M) = 19$  мэВ и дополнительный сдвиг за счет внутреннего возбуждения молекулы около 6 мэВ. Все эти величины много больше измеренных химических сдвигов, что указывает на отсутствие заметных систематических погрешностей в примененных моделях. Одновременно проведенный эксперимент и расчеты служат дополнительным обоснованием метода наблюдения химических сдвигов нейтронных резонансов.

В заключение считаем своим приятным долгом выразить благодарность И.М.Франку и Д.Зеелигеру за поддержку работы и полезные дискуссии, а также З.Экштейн за помощь в обработке данных.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Акопян Г.Г. и др. ОИЯИ, РЗ-11740, Дубна, 1978.
2. Зайдель К.- и др. ОИЯИ, РЗ-11741, Дубна, 1978.
3. Зайдель К. и др. ОИЯИ, РЗ-11742, Дубна, 1978.
4. Зайдель К. и др. ОИЯИ, РЗ-80-135, Дубна, 1980.
5. Jackson H.E., Lynn J.E. Phys.Rev., 1962, 127, p. 461.
6. Летохов В.С., Миногин В.Г. ЖЭТФ, 1976, 70/3, с. 794.
7. Letokhov V.S. Phys.Rev., 1975, A1215, p. 1954.
8. Bowmann C.D., Schrack R.A. Phys.Rev., 1980, C21/1, p. 58.
9. Bethe H. Rev.Mod.Phys., 1937, 9, p. 140.
10. Сивин С. Колебания молекул и среднеквадратичные амплитуды. "Мир", М., 1971.
11. Белянин В.С. Теплофизические свойства гексафторидов урана и вольфрама, АН СССР, М., 1976.
12. Meisingseth E., Brunvoll J., Cyvin S.J. Det KGL Norske Videnskabers Selskabs Skrifter, 1964, 7, p. 96.
13. Dunlap B.D. Isomer Shifts in the Actinides. In: Mössbauer Isomer Shifts. Shenoy G.K., Wagner F.E. (Eds.), North-Holland Publ.Comp., Amsterdam, 1978.

Рукопись поступила в издательский отдел  
6 февраля 1981 года.