

Г-90

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

На правах рукописи

УДК 539.172.4

ГРУДЗЕВИЧ Олег Теофильевич

**МЕТОДЫ СОГЛАСОВАННОЙ ОЦЕНКИ СЕЧЕНИЙ
ДЛЯ РАСЧЕТОВ АКТИВАЦИЙ И ТРАНСМУТАЦИЙ**

Специальность - 01.04.16 физика ядра и элементарных частиц

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук

Дубна - 1995

Работа выполнена в Обнинском институте атомной энергетики

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор Попов Ю.П.

доктор физико-математических наук, профессор Работнов Н.С.

доктор физико-математических наук, профессор Шаталов Г.Е.

Ведущая организация:

НИИ ядерной физики им. Д.В.Скобельцина
Московского государственного университета

Защита состоится "___" _____ 1995 г. в "___" часов
на заседании диссертационного совета Д 047.01.05 при
Лаборатории ядерных реакций им. Г.Н. Флерова и
Лаборатории нейтронной физики им И.М. Франка
Объединенного института ядерных исследований,
г. Дубна Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Автореферат разослан "___" _____ 1995 г.

Ученый секретарь специализированного совета,
кандидат физико-математических наук Попеко А.Г.

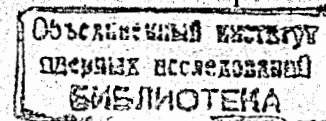
ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. Ядерно-физические данные - сечения реакций, энерго-угловые распределения вторичных частиц и другие характеристики - находят широкое применение в различных областях науки, техники и производства. Основным потребителем данных по-прежнему является ядерная энергетика. Ядерные данные для расчета реакторов и переработки отработанного горючего включены в национальные библиотеки нейтронных данных (ENDF/B - США, БРОНД - Россия, JENDL - Япония).

По мере того, как действующие реакторы вырабатывают свой проектный ресурс, возникает проблема вывода этих реакторов из эксплуатации, а значит, проблема утилизации большого количества активированных конструкционных материалов. Из-за наличия в конструкционных материалах некоторых элементов, например, никеля в нержавеющей сталях, облучение приводит к накоплению большого количества долгоживущих радиоизотопов, что значительно усложняет переработку отработавших свой срок конструкций. Поэтому ведется поиск новых малоактивируемых материалов для ядерных реакторов нового поколения и для перспективных термоядерных реакторов.

Существующие национальные библиотеки не могут удовлетворить современные потребности в данных для расчета активаций и трансмутаций в ядерно-физических установках с большим потоком высокоэнергетичных нейтронов. Этим обстоятельством вызвано рождение нового типа библиотек - библиотек активационных данных, которые должны содержать более десяти тысяч функций возбуждения реакций, вызванных нейтронами с энергией до 20 МэВ.

Опыт создания национальных библиотек свидетельствует, что экспериментальных данных недостаточно даже для создания этих, весьма ограниченных по объему, файлов. Поэтому работа по развитию методов оценки нейтронных сечений, основанных на расчетах по строгим теоретическим моделям, уточнение параметров и верификация самих моделей является актуальной; а



создание библиотек активационных данных практически важной задачей.

Целью работы является разработка методов оценки нейтронных сечений, основанных на расчетах по теоретическим моделям, и создание библиотеки активационных сечений с использованием разработанных методов оценки.

Главной особенностью разработанных в диссертации методов оценки сечений является использование расчетов по теоретическим моделям, согласованно учитывающим современные представления о механизмах ядерных реакций и структуре возбужденных ядер.

Новизна работы заключается в следующем:

- разработан метод согласованного учета равновесного, предравновесного и прямого механизмов реакций;

- для корректного использования статистической модели ядерных реакций создана систематика плотности уровней возбужденных ядер в рамках обобщенной сверхтекучей модели ядра;

- разработан и применен метод извлечения величины плотности уровней из новых типов экспериментальных данных;

- предложен метод расчета функций возбуждения изомерных уровней, позволяющий вычислять сечения, если отсутствуют данные о схемах γ -переходов между дискретными уровнями;

- показаны различия функций возбуждения реакций на ядрах мишенях, находящихся в основном и в изомерном состояниях;

- в едином подходе с использованием строгих теоретических моделей выполнена оценка активационных сечений для 30 тысяч функций возбуждения реакций, вызванных нейтронами с энергией $E_n \leq 20$ МэВ на ядрах с $Z \leq 83$.

Основные результаты диссертации можно сформулировать в виде следующих положений, выносимых на защиту:

1. Метод согласованного учета прямого, предравновесного и равновесного механизмов в реакциях неупругого рассеяния и зарядового обмена нуклонов

в широком диапазоне энергий налетающих частиц и массовых чисел ядер-мишеней.

2. Систематика параметров плотности уровней возбужденных ядер по обобщенной сверхтекучей модели ядра, метод и результаты тестирования систематики по спектрам эмиссии вторичных частиц и функциям возбуждения пороговых реакций.

3. Метод расчета функций возбуждения изомерных уровней в ядерных реакциях, позволяющий удовлетворительно предсказывать сечения при отсутствии одной из важнейших составляющих расчетов - отношений ветвления γ -переходов между дискретными уровнями.

4. Результаты исследования различий сечений реакций, вызванных нейтронами, на ядрах-мишенях, находящихся в основном и в изомерном состояниях.

5. Метод оценки парциальных сечений возбуждения основного и изомерных состояний и метод оценки сечений реакции (n, γ) в области неразрешенных резонансов.

6. Результаты использования и тестирования разработанных методов оценки активационных сечений по дифференциальным и интегральным экспериментальным данным и по сопоставлению с данными библиотек сечений.

Апробация работы. Материалы, представленные в Главе I, обсуждались на международном совещании специалистов-экспертов МАГАТЭ в г.Болонья (Италия) в 1986г.; на международном семинаре по взаимодействию нейтронов с ядрами в г.Дубна в 1990 г.; на международной конференции по ядерным данным для науки и техники в г.Юлих (ФРГ) в 1993 г.. Материалы Главы II были представлены на международных конференциях по ядерным данным в г.Киеве (1987г.) и в г.Мито (Япония) в 1988 г.; на совещании специалистов-экспертов МАГАТЭ в г.Вене (Австрия) в 1991 г. на совещании специалистов-экспертов МАГАТЭ в г.Дель-Мар (США) в 1993 г.. Материалы Глав III и IV обсуждались на совещании специалистов-экспертов МА-

ГАТЭ в г.Вене (Австрия) в 1991 г. и в г. Дель-Мар (США) в 1993 г., на международном семинаре по взаимодействию нейтронов с ядрами в г.Дубна в 1992 г., на международной конференции по ядерным данным в г.Гатлинбург (США) в 1994 г.. Материалы Главы V обсуждались на заседании Комиссии по Ядерным Данным Министерства атомной энергетики Российской Федерации (г.Обнинск, декабрь 1994 г.).

Публикации. Основные результаты опубликованы в 26-ти статьях и докладах [1-26].

Структура и объем. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка цитируемой литературы. Работа изложена на 248 страницах и включает в себя 146 страниц основного машинописного текста, 87 рисунков, 11 таблиц и список литературы из 264 наименований на 22 страницах.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении сформулирована постановка задачи, обоснована ее актуальность, перечислены основные положения, выносимые на защиту, и указан личный вклад автора.

В первой главе анализируются механизмы ядерных реакций, вызванных нейтронами, и теоретические модели, используемые для расчетов сечений с учетом различных механизмов реакций. Особое внимание уделено статистической модели ядерных реакций, поскольку основной вклад в сечение реакций, вызванных нейтронами с энергией до 20 МэВ, вносит равновесный механизм реакции.

На основе анализа экспериментальных данных показана необходимость учета прямых процессов для описания спектров эмиссии вторичных частиц в реакциях неупругого рассеяния и зарядового обмена нуклонов в диапазоне энергий налетающих частиц от 14 до 26 МэВ. Расчеты выполнены по статистической модели ядерных реакций в формализме Хаузера-Фешбаха с подобранными оптическими потенциалами для нейтронов и протонов и с плотно-

стью уровней, вычисленной по обобщенной сверхтекучей модели ядра. В вычислениях учитывался вклад неравновесных процессов в сечение реакции по модели предравновесного распада и методу сильной связи каналов (МССК). Получено удовлетворительное описание экспериментальных данных с единым набором параметров моделей.

Расчеты вклада прямых процессов в сечение реакции по методу сильной связи каналов являются достаточно сложными и зачастую их невозможно выполнить из-за отсутствия экспериментальной информации, используемой в этом методе как исходные данные. Учитывая сложность проведения расчетов по МССК и тот факт, что вклад прямых процессов в сечение реакции, как правило, не превышает десяти процентов сечения, предложена параметризация интегрального вклада прямых процессов в виде:

$$\sigma_{dir}(E_n) = (d\sigma/dE')_{набл}(E_n - E_{гр}) \quad (1),$$

где $(d\sigma/dE')_{набл}$ - наблюдаемое дифференциальное сечение неупругого рассеяния в области "плато" и $E_{гр}$ - эффективная граничная энергия прямых переходов; $(d\sigma/dE')_{набл} = 20$ мб/МэВ и $E_{гр} = 5$ МэВ. Обоснованием этой оценки служат результаты анализа жесткой части спектров нейтронов и результаты теоретических расчетов вклада прямых процессов в сечения реакций.

Предлагаемая параметризация (1) позволяет использовать для согласованного анализа ядерных данных обычные ЭВМ-программы, в которых реализованы соотношения статистической и экситонной моделей. В то же время без заметной потери точности такой подход, оставаясь физически корректным, значительно упрощает анализ функций возбуждения различных реакций.

Сравнение результатов расчетов спектров вторичных частиц из реакций (n, xn) , (n, xp) и (p, xp) по статистической и экситонной моделям с учетом вкладов прямых процессов по формуле (1) с экспериментальными данными позволило сделать вывод о том, что развитый метод применим в широком диапазоне массовых чисел и энергий налетающих частиц.

Глава II посвящена развитию такого описания плотности уровней, которое в необходимой мере учитывало бы основные представления о структуре высоковозбужденных ядер и, в то же время, было достаточно простым и удобным для практических приложений. Основы такого подхода заложены в работах А.В.Игнатюка с соавторами.

При учете парных корреляций и коллективных эффектов выражение для плотности уровней ядра с энергией возбуждения U и спином J представляется в виде:

$$\rho(U, J) = \rho_{\text{кч}}(U, J) K_{\text{вibr}}(U) K_{\text{рот}}(U) \quad (2),$$

где $\rho_{\text{кч}}$ - плотность квазичастичных (неколлективизированных) состояний ядра; $K_{\text{вibr}}$ и $K_{\text{рот}}$ - коэффициенты увеличения плотности уровней за счет вибрационных и ротационных мод, соответственно.

Коэффициенты вибрационного увеличения плотности уровней ранее принимались согласно жидкокапельной оценке, что вполне оправдано для анализа плотности уровней деформированных ядер, где преобладают вращательные эффекты. Для ядер в диапазоне массовых чисел $A < 150$, где основными коллективными движениями являются колебания, в диссертации показано, что энергетическая зависимость коэффициента вибрационного усиления плотности уровней является немонотонной, поскольку зачастую $K(U_0) > K(B_n)$, и основной вклад в величину $K_{\text{вibr}}$ вносят квадрупольные вибрационные моды. Предложен метод учета затухания вибрационных эффектов.

Исходными экспериментальными данными для систематики параметров модели являются средние расстояния между нейтронными резонансами и данные об энергиях, спинах и четностях низколежащих уровней ядер. Использовалась также информация о протонных резонансах и флуктуационных измерениях плотности уровней. Полученные параметры (\bar{a} - асимптотический параметр и δ - эффективная поправка на четно-нечетные различия) приве-

дены на рис.1. Сравнение данных из рис.1 с аналогичными величинами, полученными в наиболее часто используемой модели ферми-газа с "обратным смещением" (ФГОС), показывает, что параметры гораздо лучше систематизированы и что их значения близки к теоретическим значениям, заложенным в модель.

Тестирование систематики параметров выполнено по экспериментальным данным, появившимся после выработки систематики, и по данным, извлеченным из сечений пороговых реакций. На рис.2 показаны примеры описания экспериментальных данных для ядер ^{65}Zn и ^{59}Co . Видно, что в целом и энергетическая зависимость, и величина плотности уровней в предлагаемом подходе описывается лучше, чем в ФГОС.

В Главе III разработаны основанные на каскадно-испарительной модели (КИМ) распада возбужденного ядра методы расчета сечений возбуждения изомерных уровней в реакциях, вызванных нейтронами. Показано, что основными характеристиками, определяющими сечение, являются отношения ветвления (ОВ) γ -переходов между дискретными уровнями остаточного ядра и спиновое распределение плотности уровней (СРПУ). Неопределенности параметров статистической модели удается в значительной мере компенсировать использованием согласованного описания сечений нескольких реакций, ведущих к одному и тому же остаточному ядру.

На рис.3 показано сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными о сечениях реакций $^{89}\text{Y}(n, \gamma)^{90m}\text{Y}$, $^{90}\text{Zr}(n, p)^{90m}\text{Y}$ и $^{93}\text{Nb}(n, \alpha)^{90m}\text{Y}$. В расчетах использованы экспериментальные ОВ. Корректировка параметра СРПУ приводит к согласованному описанию всех трех сечений.

Во многих случаях экспериментальные данные об отношениях ветвления отсутствуют и обычные расчеты по КИМ становятся невозможными. Для описания функций возбуждения изомерных уровней отношения ветвления γ -переходов между дискретными уровнями можно вычислять по статистиче-

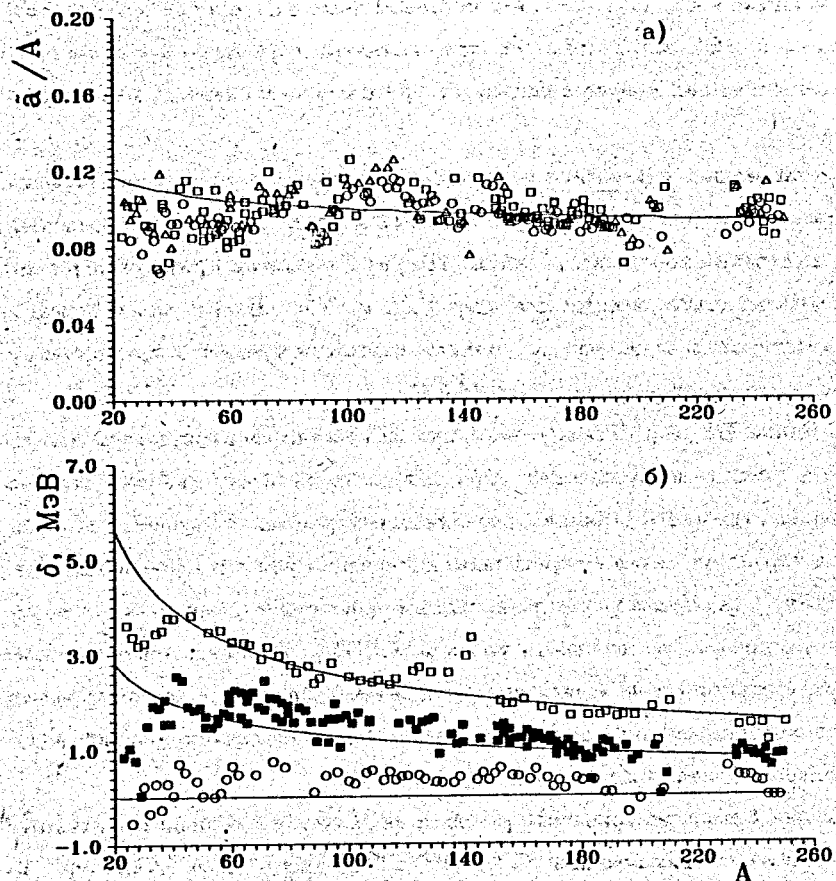


Рис. 1. а). Систематика отношения \bar{a}/A - асимптотического параметра плотности уровней к массовому числу.

б). Эффективные поправки на четно-нечетные различия плотности уровней. Линиями показаны результаты расчетов по формуле $\delta = n12/A^{1/2}$, где $n = 0, 1, 2$ для четно-четных, A -нечетных и нечетно-нечетных ядер, соответственно.

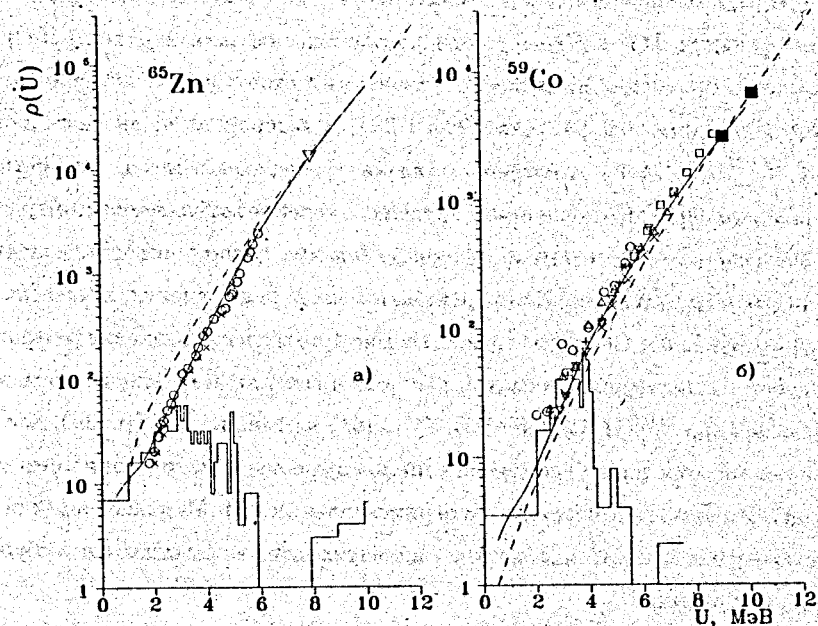


Рис. 2. а). Данные о плотности уровней (МэВ^{-1}) ядра ^{65}Zn . Гистограммой показаны данные о плотности дискретных уровней. Точками: x, o - данные извлеченные из спектров эмиссии нейтронов из реакции $^{65}\text{Cu}(p, n)$ при $E_p = 7$ и 9 МэВ, соответственно; ∇ - данные о плотности нейтронных резонансов.

б). Данные о плотности уровней (МэВ^{-1}) ядра ^{59}Co . Точками показаны данные из спектров: Δ - реакции $^{59}\text{Co}(\alpha, \alpha')$ при $E_\alpha = 16, 5$ МэВ; \square - реакции $^{56}\text{Fe}(\alpha, p)$ при $E_\alpha = 16, 5$ МэВ; o - реакции $^{62}\text{Ni}(p, \alpha)$ при $E_p = 14$ МэВ; $x, \nabla, +$ - реакции $^{59}\text{Co}(n, n')$ при $E_n = 8, 7$ и 6 МэВ, соответственно. Черными квадратиками показаны данные о плотности протонных резонансов. Кривые: сплошная - вычисления по ФОСМ, штриховая - по ФГОС.

ским соотношениям, когда радиационные силовые функции $E1$ -переходов рассчитываются по модифицированным энергетическим зависимостям, а силовые функции $M1$ и $E2$ -переходов по лоренцовым зависимостям. На рис.4 показано сравнение вычисленных изомерных отношений с экспериментальными данными для реакции $^{59}\text{Co}(n, 2n)$, в которой из-за высокого порога ($Q = -10,46$ МэВ) отношения ветвления γ -переходов между дискретными уровнями ядра ^{58}Co полностью определяют сечение возбуждения изомера. Хорошее согласие расчетных и экспериментальных данных позволяет надеяться, что расчеты будут неплохо предсказывать изомерные сечения, даже если экспериментальные ОБ отсутствуют. На рис.4 приведено сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными о сечении возбуждения изомерного уровня ядра $^{178m2}\text{Hf}(2,446 \text{ МэВ}, J^\pi = 16^+)$ в реакции $^{179}\text{Hf}(n, 2n)$, для описания которых ранее требовалось индивидуальное моделирование ротационной полосы из-за отсутствия экспериментальных ОБ. Разработанный подход позволяет описывать накопление радионуклидов, находящихся в возбужденном состоянии.

В Главе III также представлены результаты исследований различий сечений реакций на ядрах-мишенях, находящихся в основном и в изомерном состояниях. В результате этих реакций накопленные радионуклиды будут трансмутироваться нейтронами. На рис.5 показано влияние характеристик ядра-мишени (энергии возбуждения и полного углового момента) на сечения реакций $(n, n'\gamma)$, $(n, 2n)$ и (n, γ) . В качестве ядра-мишени выбран ^{178}Hf , изомерное состояние которого имеет аномально высокие спин ($J^\pi = 16^+$) и энергию возбуждения (2,446 МэВ). Увеличение энергии возбуждения ядра-мишени приводит к смещению кривых сечений реакций $(n, n'\gamma)$, $(n, 2n)$ влево по шкале энергии, а увеличение спина - к обратному эффекту. Наибольшее влияние характеристик ядра мишени обнаружено для реакции (n, γ) , где различия могут достигать фактора 10. В диссертации анализируются и обосновыва-

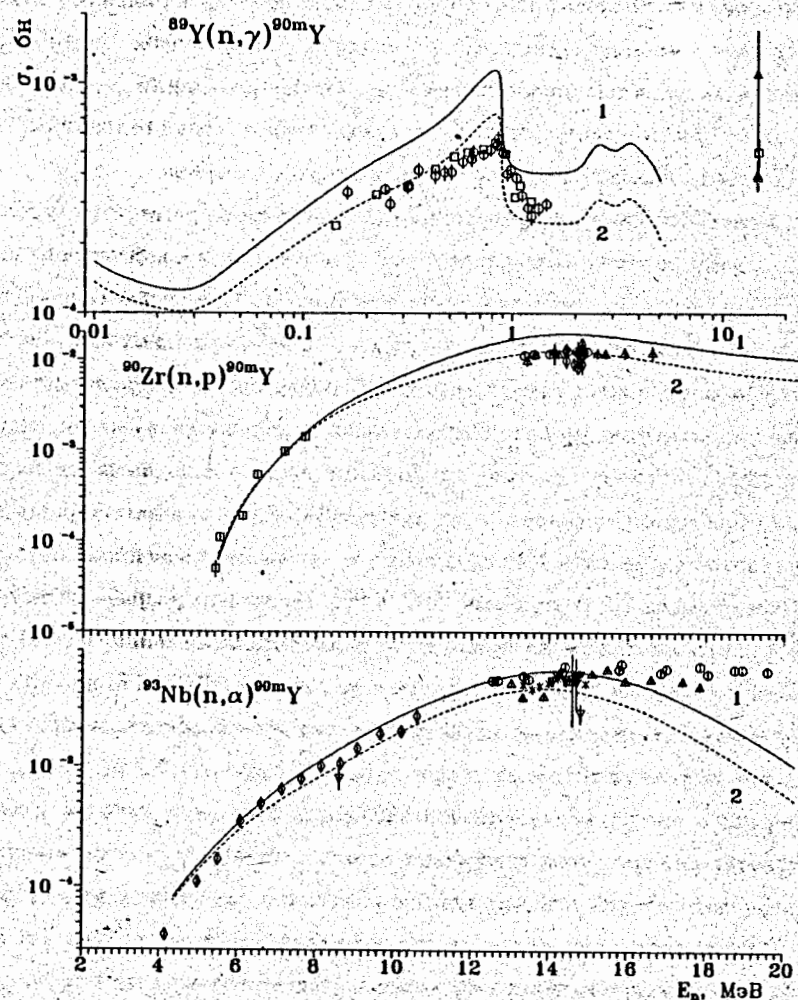


Рис. 3. Функции возбуждения реакций $^{89}\text{Y}(n, \gamma)^{90m}\text{Y}$, $^{90}\text{Zr}(n, p)^{90m}\text{Y}$ и $^{93}\text{Nb}(n, \alpha)^{90m}\text{Y}$, приводящих к заселению изомерного уровня $^{90m}\text{Y}(0,682 \text{ МэВ}, J^\pi = 7^-)$. Точками показаны экспериментальные данные. Кривые 1 рассчитаны с параметром спинового распределения соответствующим твердотельному моменту инерции, кривая 2 - полутвердотельному.

ются причины возникновения различий сечений реакций на ядрах-мишенях в основном и в изомерном состояниях. Показано, что увеличение спина ядра-мишени приводит к заметному увеличению сечения реакции $(n, n'\gamma)$ в околопороговой области и соответствующему уменьшению сечения реакции $(n, 2n)$ из-за влияния спиновых запретов на вылет второго нейтрона.

В главе IV изложены разработанные на основании теоретических моделей методы оценки сечений радиационного захвата нейтронов и возбуждения изомерных уровней в реакциях, вызванных нейтронами. При оценке сечений использованы современные экспериментальные данные абсолютных измерений и результаты более ранних относительных измерений после их перенормировки к существующим стандартам. Оценка сечений реакции (n, γ) на нуклидах, для которых отсутствуют экспериментальные данные, выполнена на основе систематики сечений реакции (n, γ) при $E_n=30$ кэВ и систематики радиационных силовых функций. На рис.6 показано сравнение оцененных данных о сечениях реакций (n, γ) на ядрах ^{93}Zr и ^{129}I . На момент разработки метода оценки, предложенного в диссертации, экспериментальные данные о сечениях реакций $^{93}\text{Zr}(n, \gamma)$ и $^{129}\text{I}(n, \gamma)$ отсутствовали (оценка БРОНД базируется на этих данных). Видно, что предложенный метод хорошо предсказывает сечения и что этот метод использован при создании библиотеки ЕАФ.

Теоретические расчеты сечений возбуждения изомерных уровней и заселения основного состояния остаточных ядер (парциальные сечения реакции) и суммарных сечений в целом неплохо описывают экспериментальные данные. Однако, возникают ситуации, когда требуется перенормировка расчетных кривых к экспериментальным данным. Задача осложняется тем, что перенормировка не может быть выполнена независимо для каждого из сечений, поскольку накладывается условие: $\sigma = \sigma_g + \sigma_m$.

При достаточно близком совпадении расчетных и экспериментальных сечений для получения оцененных значений расчетные данные могут быть пе-

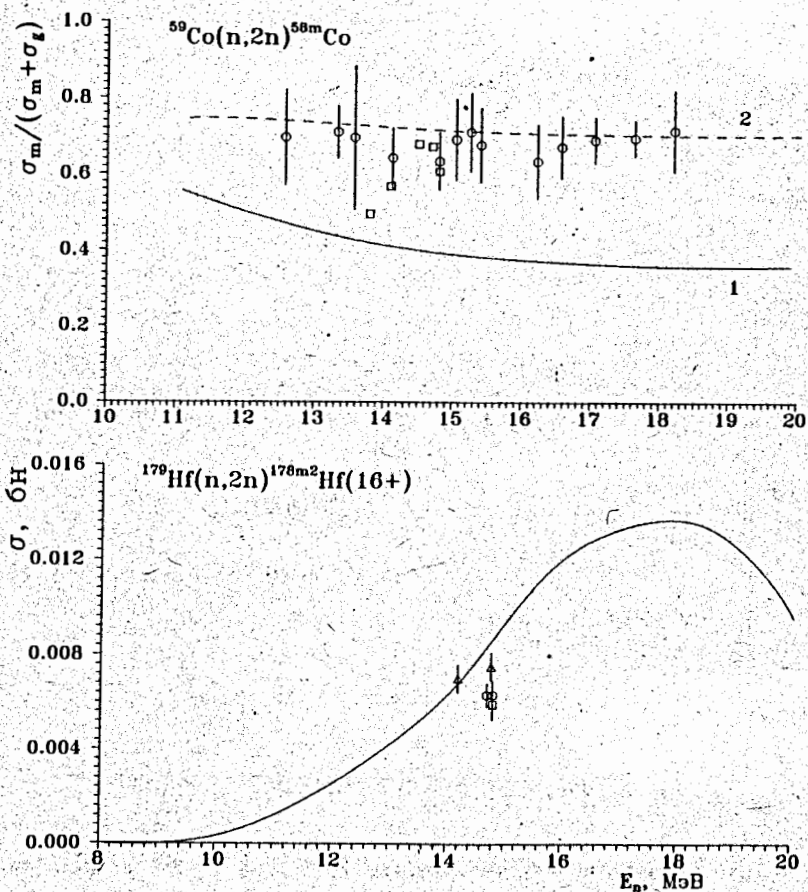


Рис. 4.а). Сравнение модельных расчетов изомерного отношения реакции $^{59}\text{Co}(n, 2n)$. Кривая 1 - изомерные отношения, вычисленные с использованием экспериментальных отношений ветвления, 2 - с расчетными ОВ.
б). Сечение реакции $^{179}\text{Hf}(n, 2n)^{178m2}\text{Hf}$. Точки - экспериментальные данные, кривая - результаты расчетов с расчетными ОВ.

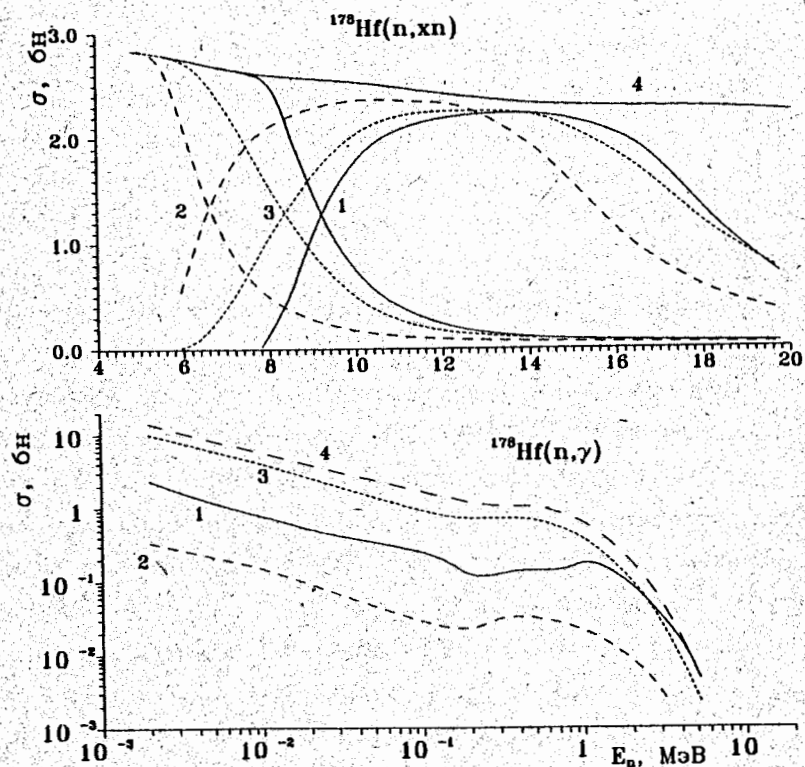


Рис. 5.а). Функции возбуждения реакций $(n, n'\gamma)$ и $(n, 2n)$ на различных состояниях ядра-мишени ^{178}Hf . Кривые: 1 - сечения реакций для $E = 0$, $I_0 = 0^+$, 2 - $E = 2,446$ МэВ, $I_0 = 0^+$, 3 - $E = 2,446$ МэВ, $I_0 = 16^+$, 4 - сечение поглощения нейтронов.

б). Функция возбуждения реакции $^{178}\text{Hf}(n, \gamma)$. Кривые: 1 - $E = 0$, $I_0 = 0^+$, $D_0 = 54$ эВ и $\Gamma_\gamma = 79$ мэВ; 2 - $E = 2,446$ МэВ, $I_0 = 0^+$, 3 - $E = 2,446$ МэВ, $I_0 = 16^+$, 4 - изменены величины $D_0 = 0,81$ эВ и $\Gamma_\gamma = 186$ мэВ.

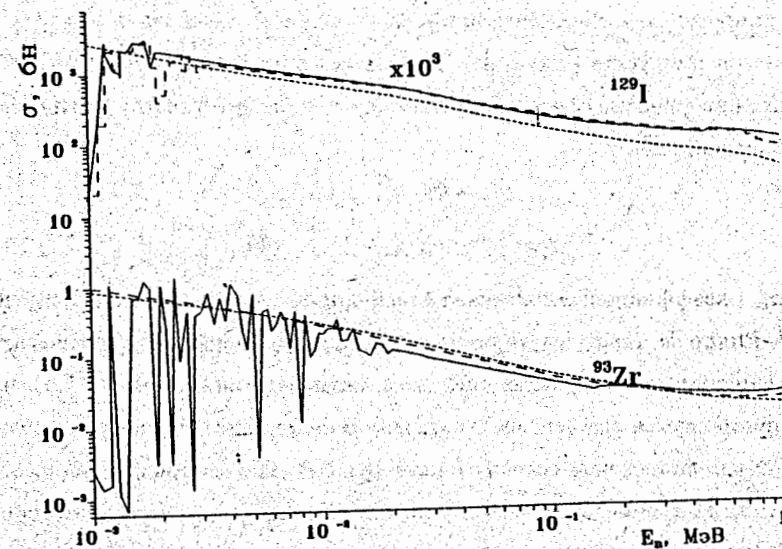


Рис. 6. Сравнение оцененных сечений реакции (n, γ) для нуклидов ^{93}Zr и ^{129}I . Сплошными кривыми показаны данные БРОНД, базируются на экспериментальных данных, штриховыми - данные ЕАФ, а точечными - результаты применения предложенного метода.

ренормированы ($\sigma^o = \sigma^p \alpha$) с использованием коэффициента α , величина которого определяется по методу наименьших квадратов:

$$\alpha = (\sum \sigma^o \sigma^p / \Delta^2) / (\sum \sigma^p \sigma^p / \Delta^2) \quad (3),$$

где Δ - погрешности экспериментальных данных, индексами "э" и "р" обозначены экспериментальные и расчетные сечения, соответственно. Пример применения предложенного способа оценки для случая, когда требуется перенормировка всех трех сечений приведен на рис.7. Суть способа в том, что сначала нормируется суммарное сечение реакции с коэффициентом, вычисленным по формуле (3), и полученное сечение распределяется по парциальным сечениям как

$$\sigma_m^o = \sigma_m^p \alpha_m \quad (4a),$$

$$\sigma_g^o = \sigma_g^p - \sigma_g^p (\alpha_m - 1) \quad (4б),$$

где α_m - коэффициент вычисленный по формуле (3) для изомерного сечения.

В Главе V приведен краткий обзор методов оценки, использовавшихся при создании существующих библиотек активационных сечений. Показано, что применяются два основных подхода: использование упрощенных соотношений для вычисления сечений с последующей их нормировкой на экспериментальные данные либо на систематики сечений; и использование строгих теоретических моделей с корректно выбранными и отгестированными параметрами. Описано применение разработанных в диссертации методов оценки для создания библиотеки активационных сечений ADL-3. Содержание библиотеки: 15455 функций возбуждения реакций на ядрах в основном состоянии, 4134 функций возбуждения на ядрах в первом изомерном состоянии, 379 функций возбуждения на ядрах во втором изомерном состоянии.

В главе показано на конкретных примерах, что использование разработанных в диссертации методов оценки является предпочтительным. Приведены результаты сравнительного анализа оцененных сечений реакций ($n, 2n$), наи-

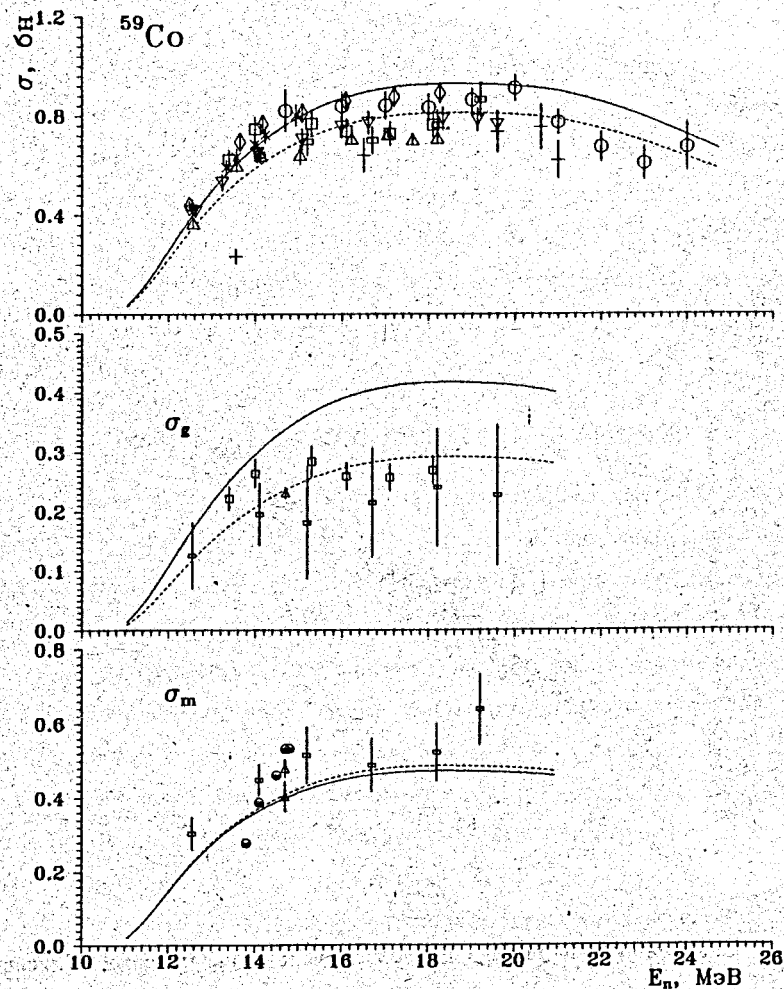


Рис. 7. Суммарное (вверху) и парциальные сечения реакции $^{59}\text{Co}(n, 2n)$. Значками показаны экспериментальные данные, сплошные кривые - результаты расчетов, штриховые - результаты оценки.

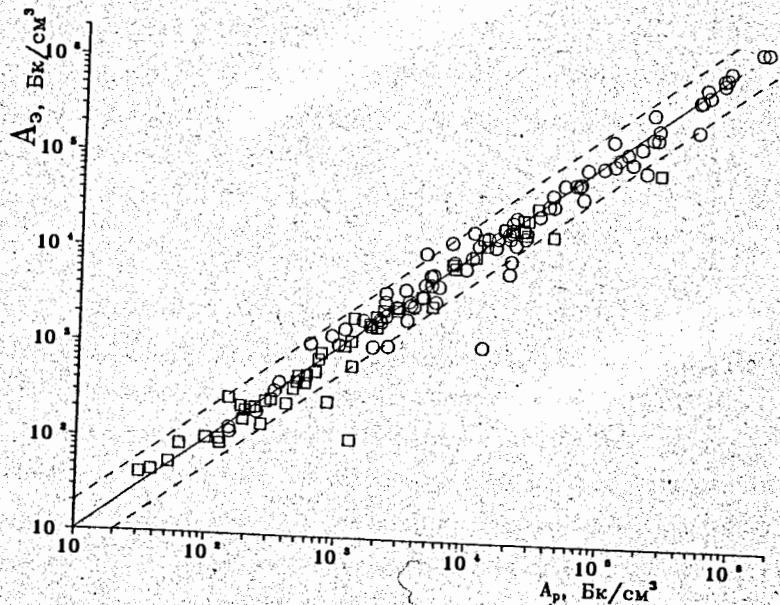


Рис. 8. Сравнение экспериментальных и расчетных активностей. Сплошная прямая соответствует равенству активностей, пунктирные - обозначают диапазон, в пределах которого активности отличаются менее чем в два раза.

более важных в термоядерном реакторе. Представлены результаты тестирования библиотек по интегральным экспериментальным данным. На рис.8 показано сравнение активностей нуклидов, полученных при облучении различных конструкционных материалов нейтронами, имеющими спектр, подобный спектру термоядерного реактора, с расчетными величинами. Видно, что в большинстве случаев имеется хорошее согласие экспериментальных и расчетных активностей, независимо от величин активностей. В диссертации анализируются немногочисленные случаи значительного расхождения вычисленных и экспериментальных активностей и указаны возможные причины этих расхождений.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Показано, что для согласованного расчета вкладов различных механизмов реакции в спектры неупругорассеянных нейтронов необходимо учитывать вклад прямого некогерентного возбуждения коллективных низколежащих состояний ядра-мишени. На основе метода сильной связи каналов выполнены расчеты вкладов таких процессов в жесткую часть нейтронных спектров. Предложен метод учета интегрального вклада прямых процессов в сечение неупругого рассеяния нейтронов на основе параметризации результатов расчетов и на основе анализа экспериментальных данных, позволяющий достаточно надежно предсказывать требуемые сечения в случае отсутствия или недостаточной полноты экспериментальных данных.

2. Показано, что для согласованного описания всей совокупности экспериментальной информации о плотности уровней необходимо использовать обобщенную сверхтекучую модель ядра (ОСМ). Модель ферми-газа не может описать такую информацию с единым набором параметров, т.к. не учитывает основных эффектов в структуре возбужденных ядер. Предложен метод учета затухания вибрационного усиления плотности ядерных уровней.

3. Разработана систематика плотности уровней ядер с $20 \leq A \leq 250$ в широком диапазоне энергий возбуждения на основе обобщенной сверхтекучей модели ядра. Показано, что ОСМ хорошо описывает энергетическую зависимость, а использование параметров разработанной систематики позволяет правильно предсказывать величину и спиновое распределение плотности уровней возбужденных ядер.

4. Показано, что основную трудность при вычислении изомерных сечений - отсутствие экспериментальных отношений ветвления γ -переходов для дискретных уровней - можно преодолеть, если использовать статистические соотношения с корректно выбранными энергетическими зависимостями радиационных силовых функций. Для описания экспериментальных данных не потребовалось моделировать или модифицировать схемы дискретных уровней. Согласно с экспериментальными данными удалось добиться после уточнения соотношений между радиационными силовыми функциями различных мультипольностей и их энергетических зависимостей.

5. Исследованы возможные различия сечений реакций (n, γ) , $(n, n'\gamma)$ и $(n, 2n)$ на ядрах-мишенях, находящихся в основном и в изомерном состояниях. Показано, что энергия изомерного уровня приводит к сдвигу кривой сечения влево по шкале энергии, а больший спин изомера приводит к обратному эффекту. Выяснены причины и характер различий. Показано, что различие сечений пороговых реакций по сравнению с основным состоянием мишеней не будет значительным даже для изомерных мишеней, имеющих аномально высокий спин и энергию возбуждения. В то же время, указанные различия для реакции (n, γ) могут достигать фактора 10.

6. Проведен анализ имеющейся экспериментальной информации о сечениях радиационного захвата нейтронов наиболее важными продуктами деления ядерного топлива и на основе этого анализа показаны причины расхождения оценок различных библиотек. Выполнена оценка сечений реакции

(n, γ) на основе современных экспериментальных данных и с учетом более равных данных после их перенормировки к существующим стандартам. На основе систематики сечений реакции (n, γ) при энергии нейтронов $E_n = 30$ кэВ и радиационных силовых функций для нуклидов в диапазоне массовых чисел $90 < A < 150$ и с применением статистической модели выполнена оценка сечений радиационного захвата нейтронов нестабильными продуктами деления, наиболее сильно отравляющими ядерный реактор.

7. Разработанные в диссертации методы применены для создания библиотеки активационных сечений ADL-3. В библиотеке содержатся более 30-ти тысяч функций возбуждения реакций, вызванных нейтронами с энергией до 20 МэВ. Показано, что использование упрощенных методов расчета при создании современных версий библиотек сечений является неприемлемым. На основании сравнительного анализа оцененных сечений, результатов теоретических расчетов и экспериментальных данных показаны преимущества разработанных методов оценки.

8. Выполнено тестирование развитых методов оценки по интегральным экспериментальным данным об активациях различных материалов в потоках высокоэнергетичных нейтронов. Показано, что в целом наблюдается достаточно хорошее согласие активностей, независимо от их величин и периодов полураспада радиоактивных ядер. Обнаружено десять (из 150-ти исследованных) случаев значительных расхождений, анализ которых требует дополнительной информации, например, знания неопределенностей спектра нейтронов, особенно для низкоэнергетической его части.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах:

1. Грудзевич О.Т., Игнатюк А.В., Пляскин В.И. Роль нестатистических эффектов в оценке сечений радиационного захвата нейтронов изотопами циркония и молибдена // Proc. XII Intern. Symposium on Neutron Physics., ZFK-491, Dresden, 1982, p.191.

2. Лычагин А.А., Виноградов В.А., Грудзевич О.Т. и др. Спектр вторых нейтронов и сечение реакции ($n, 2n$) на ниобии//Атомная энергия, 1984, т.54, с.266.
3. Беланова Т.С., Горбачева Л.В., Грудзевич О.Т., Игнатюк А.В., и др. Сравнительный анализ оценок сечений радиационного захвата нейтронов для важнейших продуктов деления//Атомная энергия, 1984, т.54, вып.4, с.243.
4. Лычагин А.А., Симаков С.П., Девкин Б.В., Сальников О.А., Андросенко А.А., Андросенко П.А., Пашенко А.Б., Грудзевич О.Т. и др. Исследование реакции $^{56}\text{Fe}(n, n'\gamma)$ при начальной энергии нейтронов 14,1 МэВ//Ядерная физика, 1987, т.45, в.5, с.1226.
5. Бычкова В.В., Грудзевич О.Т., Зеленецкий А.В., Пляскин В.И. Оценка нейтронных сечений Zr в диапазоне энергий от 10^{-5} эВ до 20 МэВ//Материалы международной конференции по нейтронной физике, Киев, 1987, М.: ЦНИИ-Атоминформ, 1988, т.1, с.428.
6. Бычков В.М., Грудзевич О.Т., Пляскин В.И. Систематика радиационных ширин и плотности уровней в диапазоне массовых чисел $20 \leq A \leq 150$ //Вопросы атомной науки и техники, Сер.: Ядерные константы, 1987, в.3, с.14.
7. Bychkova V.V., Grudzevich O.T., Zelenetsky A.V. Development of Neutron Data Evaluation Methods and Creating Complete Files of Zirconium Isotopes//Intern.Conf. on Nuclear Data for Science and Technology, Mito, Japan, 1988, p.807-810.
8. Grudzevich O.T., Ignatyuk A.V., Manokhin V.N. and Pashchenko A.B. Role of Direct and Pre-Equilibrium Process in the Description of Threshold Reaction Excitation Functions// Proc. of the IAEA Research Coordination Meeting on METHODS FOR THE CALCULATIONS OF NEUTRON NUCLEAR DATA FOR STRUCTURAL MATERIALS. Bologna, Italy, 1986, IAEA, 1988, p.81.

9. Грудзевич О.Т., Игнатюк А.В., Пляскин В.И. Согласованная систематика плотности уровней средних и тяжелых ядер//Материалы Международной конференции по нейтронной физике. Киев, 1987 г., М.: ЦНИИ-Атоминформ, 1988, т.2, с.96.

10. Grudzevich O.T., Ignatyuk A.V., Plyaskin V.I. Consistent Systematics of Level Densities//Proc. Intern. Conf. on Nuclear Data for Science and Technology, Mito, Japan, 1988, p. 1221.

11. Грудзевич О.Т., Кагаленко А.И., Корнилов Н.В., Пашенко А.Б. Выход изомера ^{199m}Hg в реакциях $^{199}\text{Hg}(n, n')$ и $^{200}\text{Hg}(n, 2n)$ // Материалы Международной конференции по нейтронной физике. Киев, 1987 г., М.: ЦНИИ-Атоминформ, 1988, т.3, с.349.

12. Грудзевич О.Т., Зеленецкий А.В., Игнатюк А.В., Пляскин В.И. Извлечение плотности уровней из испарительных спектров и функций возбуждения пороговых реакций//Ядерная Физика, 1991, т.53, в.1., с. 143.

13. Шмелев А.Н., Куликов Г.Г., Грудзевич О.Т. и др. Оценка сечения реакции $^{85}\text{Kr}(n, n')^{85m}\text{Kr}$, усредненного по спектру нейтронов быстрого реактора//Атомная Энергия, 1991, т.71, в.4, с.354.

14. Grudzevich O.T., Ignatyuk A.V., Pashchenko A.B., Zelenetsky A.V. Neutron Reactions with Nuclei in Isomeric States//Proc. of IAEA Co-ordinated Meeting, Del Mar, USA, 1993, INDC(NDS)-286, p.113.

15. Грудзевич О.Т., Зеленецкий А.В., Пашенко А.Б. Библиотека исходных данных для теоретических расчетов сечений ядерных реакций//Препринт ФЭИ-2306, Обнинск, 1993.

16. Grudzevich O.T., Ignatyuk A.V., Pashchenko A.B., Zelenetsky A.V. Self-Consistent Description of Isomer Yields in Neutron Reactions//Proc. of IAEA Co-ordinated Meeting, Del Mar, USA, 1993, INDC(NDS)-286, p.95.

17. Chadwick M.B., Gardner M.A., Gardner D.G., Grudzevich O.T. e.a. Intercomparison of Theoretical Calculations of Important Activation Cross

Sections for Fusion Reactor Technology//Proc. of IAEA Co-ordinated Meeting, Del Mar, USA, 1993, INDC(NDS)-286, p.123.

18. Грудзевич О.Т., Зеленецкий А.В., Игнатюк А.В., Пашенко А.Б. Метод согласованного описания выходов изомеров в нейтронных реакциях//Ядерная Физика, 1994, т. 57, в.8, с. 1428.

19. Grudzevich O.T., Ignatyuk A.V., Pashchekko A.B., Zelenetsky A.V. Calculations of Isomer Yields and Reaction Cross Sections for Nuclei in Isomeric States//Proc. of International Conference on Nuclear Data for Science and Technology, Gatlinburg, Tennessee, USA, May 9-13, 1994, p.433.

20. Грудзевич О.Т., Зеленецкий А.В., Игнатюк А.В., Пашенко А.Б. Различие сечений нейтронных реакций на ядрах в основном и в изомерном состояниях//Ядерная Физика, 1994, т.57, в.8, с.1423.

21. Грудзевич О.Т., Зеленецкий А.В., Игнатюк А.В., Пашенко А.Б. Библиотека ядерно-физических данных для расчета активаций и трансмутаций//Атомная энергия, 1994, т.76, в.2, с.127.

22. Грудзевич О.Т. Зеленецкий А.В., Игнатюк А.В., Пашенко А.Б. Каталог библиотеки ADL-3// Вопросы Атомной Науки и Техники, Серия: Ядерные Константы, 1993, в.3-4, с.1.

23. Грудзевич О.Т., Зеленецкий А.В., Игнатюк А.В., Пашенко А.Б. Метод оценки сечений возбуждения изомерных уровней для библиотеки ADL-3//Атомная энергия, 1994, т. 77, в.6, с.427.

24. Грудзевич О.Т., Зеленецкий А.В., Игнатюк А.В., Пашенко А.Б. Анализ оцененных сечений реакций ($n, 2n$), наиболее важных в термоядерном реакторе//Атомная энергия, 1994, т.77, в.1, с.39.

25. Грудзевич О.Т., Зеленецкий А.В., Пашенко А.Б. Тестирование библиотеки активационных сечений по интегральным данным//Атомная энергия, 1994, т.77, в.3, с. 203.

26. Грудзевич О.Т. Систематика параметров спиновой зависимости плотности уровней//Ядерная Физика, 1995, т.58, в.10, с.1437.