

Л В Э

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

На правах рукописи
УДК 539.172

К-647

КОНОБЕЕВ
Александр Юрьевич

**РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ РАСЧЕТА И СОЗДАНИЕ БИБЛИОТЕК СЕЧЕНИЙ
ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ, ПРОТЕКАЮЩИХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЧАСТИЦ
ПРОМЕЖУТОЧНЫХ ЭНЕРГИЙ**

Специальность: 05.13.16 - применение вычислительной техники, математического моделирования и математических методов в научных исследованиях

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Дубна - 1997

Работа выполнена в Обнинском институте атомной энергетики.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор В.С.Барашенков
доктор физико-математических наук, профессор М.В.Казарновский
доктор физико-математических наук, профессор Н.С.Работнов

Ведущая организация:

Институт теоретической и экспериментальной физики

Защита диссертации состоится "28" марта 1997 г. в "10³⁰" часов на заседании диссертационного совета Д 047.01.04 при Лаборатории вычислительной техники и автоматизации Объединенного института ядерных исследований по адресу: 141980, г.Дубна Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Автореферат разослан "28" февраля 1997 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук

З.М.Иванченко

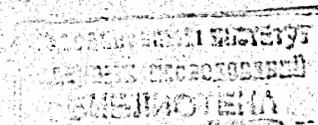
ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. В различных областях науки и техники возрастает потребность в ядерных данных при промежуточных энергиях. Такие данные (полные сечения, энергетические и угловые распределения образующихся частиц, выходы радионуклидов) необходимы при разработке и проектировании ядерно-энергетических установок будущего - термоядерных реакторов, подкритических реакторов на основе ускорителей, установок для трансмутации ядерных отходов в жестком нейтронном спектре и др. Данные по сечениям ядерных реакций при энергиях выше 10 МэВ находят применение в астрофизических и геофизических исследованиях, при разработке методов получения радионуклидов, используемых в современной промышленности и медицине.

Накопление экспериментальной информации о сечениях происходит медленно и не в состоянии удовлетворить растущих потребностей в ядерных данных при промежуточных энергиях. Получить данные по сечениям в объеме необходимом для детального исследования процесса трансмутации, активации материалов и нейтронного транспорта можно с помощью расчетов на основе теоретических моделей.

Несмотря на прогресс в развитии таких моделей в течение последних десятилетий до настоящего времени не существовало надежных и вместе с тем достаточно простых подходов, позволяющих определять сечения и спектры вторичных частиц для реакций, протекающих под действием частиц с энергией от ~ 10 МэВ до ~ 1 ГэВ. Это относится прежде всего к описанию эмиссии кластеров (d , t , ^3He , α и др.) с использованием методов, пригодных для проведения массовых расчетов. Методы теории прямых реакций (DWBA, CC) позволяют восстановить только относительно небольшую область спектра вторичных частиц, связанную с дискретными состояниями остаточных ядер, а предложенные ранее подходы на основе предравновесной экситонной модели противоречивы и представляют искаженное описание спектров составных частиц. Применение существующих методов расчета приводило к некорректному описанию нуклонных спектров, процесса деления, различных характеристик ядерных реакций, протекающих при промежуточных энергиях. Приближенные подходы для оценки сечений ядерных реакций содержали явные недостатки, основным из которых являлся их эмпирический характер, затрудняющий предсказание сечений в области ядер, где отсутствуют экспериментальные данные.

Как следствие в мире не существовало файлов и библиотек оцененных данных,



позволяющих проводить исследования трансмутации, активации, радиационных повреждений материалов и переноса нейтронов в материалах, облучаемых частицами промежуточных энергий.

Целью работы являлась разработка методов расчета, алгоритмов и компьютерных программ для получения функций возбуждения, дифференциальных сечений образования вторичных частиц в реакциях, протекающих при энергиях выше 10 МэВ, разработка приближенных подходов для оценки и предсказания сечений в широком диапазоне массовых чисел, создание библиотек сечений для изучения процесса активации, трансмутации, радиационных повреждений материалов и исследования переноса нейтронов в материалах, облучаемых частицами промежуточных энергий.

Научная новизна и практическая ценность полученных результатов. В диссертационной работе:

- предложена новая экситонная модель для расчета спектров неравновесной эмиссии α -частиц в ядерных реакциях, включающая описание процессов подхвата, выбивания кластеров и множественной эмиссии неравновесных частиц; впервые, с помощью предложенной модели достигнуто корректное описание α -спектров и согласие с экспериментальными данными для реакций под действием нуклонов с энергией от порога реакции до сотен МэВ;

- в рамках экситонной модели предложен новый подход к вычислению спектров эмиссии тяжелых фрагментов в реакциях под действием нуклонов с энергией до 100 МэВ; впервые, для средних и тяжелых ядер получены сечения реакции ($p, ^7\text{Be}$) количественно согласующиеся с экспериментальными данными;

- разработан новый феноменологический подход к описанию прямого канала образования дейтронов в реакциях под действием нуклонов промежуточных энергий;

- предложена новая модифицированная каскадно-испарительная модель, имеющая широкую область применимости и включающая описание взаимодействия нуклонов с "приготовленными" кластерами, процессы выбивания и подхвата; впервые в рамках каскадно-испарительной модели достигнуто корректное описание спектров эмиссии нуклонов в реакциях под действием частиц с энергией до 100 МэВ и описание спектров α -частиц в реакциях, протекающих при взаимодействии нуклонов с ядрами от Al до Bi;

- разработан новый феноменологический подход к расчету сечений реакций с множественным образованием вторичных частиц для делящихся ядер при энергиях до 100 МэВ;

- предложены новые полуэмпирические формулы для расчета сечений образования трития и изотопов гелия в реакциях под действием нуклонов с энергией от порога реакции (5-25 МэВ) до 10 ГэВ;

- разработаны новые принципы построения систематик сечений и функций возбуждения ядерных реакций, опирающиеся на использование предравновесно-испарительной модели;

- впервые получены полуэмпирические систематики сечений реакций (p, p), (p, d), (p, t), (p, α), ($p, ^3\text{He}$), (p, pr), ($p, 2p$) при энергии 14.5 МэВ, точность предсказания сечений которых выше, чем у всех ранее предложенных эмпирических систематик;

- разработаны алгоритмы и комплексы программ для вычисления и оценки функций возбуждения реакций, энергетических и угловых распределений вторичных частиц, выходов составных частиц, расчета сечений смещения атомов материала;

- на основе проведенных вычислений созданы библиотеки данных, не имеющие мировых аналогов;

библиотека сечений для исследования радиационной повреждаемости материалов (BISERM), содержащая сечения смещения, сечения образования водорода и гелия в реакциях, протекающих при облучении 259 стабильных ядер от Al до Bi нейтронами с энергией до 1 ГэВ,

библиотека сечений для изучения процесса трансмутации и активации материалов (MENDL), включающая более 110.000 функций возбуждения нейтронных и протонных реакций, протекающих на 505 стабильных и нестабильных ядрах от Al до Po при энергиях до 100 МэВ.

библиотека сечений для изучения трансмутации делящихся ядер (WIND), содержащая нейтронные сечения реакций деления, сечения пороговых реакций при энергиях до 100 МэВ для изотопов урана, нептуния, плутония, файлы данных для исследования переноса нейтронов в материалах, включающие информацию о функциях возбуждения, энергетических и угловых распределений частиц, образующихся при взаимодействии ядер с нейтронами энергии до 50 МэВ;

- впервые рассчитана активность и нуклидный состав мишеней из свинца, свинца-висмута и ртути, облучаемых протонами промежуточных энергий. Исследованы вклады реакций радиационного захвата, деления и глубокого расщепления ядер в полную активность мишеней. Определена роль различных компонентов нуклонных спектров в формировании суммарной активности.

Разработанные в диссертации расчетные методы и комплексы компьютерных

программ необходимы для решения важнейших научных и практических задач, связанных с определением характеристик материалов, облучаемых частицами промежуточных энергий, включая активационные исследования, изучение радиационной повреждаемости материалов, переноса нейтронов. Созданные на основе проведенных расчетов библиотеки сечений представляют основу для исследования свойств облученных материалов перспективных ядерно-энергетических установок (термоядерных реакторов, установок для трансмутации радиоактивных отходов, подкритических реакторов на основе ускорителей), для разработки эффективных методов получения радионуклидов, используемых в промышленности и медицине, постановке имитационных экспериментов по изучению радиационных эффектов и исследованию нейтронных потоков в различных средах.

Апробация работы. Основные результаты диссертации обсуждались на 29-ом Всесоюзном семинаре по моделированию на ЭВМ радиационных эффектов в г.Ташкенте в 1988 г., на Международном совещании по проблеме ядерной трансмутации долгоживущих радиоактивных отходов в г.Обнинске в 1991 г., на Международных конференциях по перспективным ядерно-энергетическим системам (ICENES) в г.Монтерей (США) в 1991 г., г. Макухари (Япония) в 1993 г., г.Обнинске в 1996 г., на Научно-технических конференциях Ядерного Общества в г.Санкт-Петербурге в 1992 г., и г.Нижнем Новгороде в 1993 г., на Международных конференциях по ядерно-энергетическим системам будущего (GLOBAL) в г.Сиэтл (США) в 1993 г., г.Версаль (Франция) в 1995 г., на Международном совещании по ядерным данным при промежуточных энергиях в г.Парнж (Франция) в 1994 г., на Международной конференции по технологии трансмутации с использованием ускорителей (ADTT) в г.Лас-Вегас (США) в 1994 г., на Международном симпозиуме по ядерно-энергетическим системам и их воздействию на окружающую среду (GENES) в г.Суоно (Япония) в 1994 г., на Международной конференции по использованию ядерных данных в науке и технике в г.Гатлинбург (США) в 1994 г., Международном симпозиуме по предравновесным ядерным реакциям в г.Словенице (Словакия) в 1995 г., на Международном совещании по методам трансмутации ядерных отходов в г.Дубне в 1996 г.

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в 44 статьях и докладах [1-44].

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, шести глав и заключения. Текст диссертации содержит 398 страниц, включая 126 рисунков на 95 страницах, 60 таблиц и библиографию из 283 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении сформулирована цель работы, обоснована ее актуальность. Подчернута новизна и практическая ценность работы, сформулированы основные положения, выносимые ее защиту.

В первой главе диссертации представлен краткий обзор современных методов расчета сечений ядерных реакций при промежуточных энергиях. Рассмотрены модели и подходы, применимость которых для получения функций возбуждения, спектров и угловых распределений продуктов реакций оправдана в широкой области энергий первичных частиц и массовых чисел ядер-мишеней.

В разделе 1.1 обсуждаются возможности предравновесных экситонных моделей описывать различные характеристики ядерных реакций, включая спектры составных частиц (d , t , ^3He , α). Проводится анализ моделей выбивания, подхвата и коалесценции, используемых для получения неравновесных спектров составных частиц. Показано, что ни одна из существующих моделей не способна воспроизводить экспериментальные спектры таких частиц, образующихся в реакциях под действием нуклонов с энергией до 100 МэВ. Неравновесные спектры, предсказываемые моделью выбивания, имеют характерный провал в "средней" части. Модель подхвата не описывает жесткого компонента неравновесных спектров при энергиях около 90 МэВ, что связано с характерным поведением плотности конечных состояний, рассчитанной в рамках этого подхода. Приближения, лежащие в основе коалесцентной модели, ограничивают ее применимость областью энергий выше нескольких сотен МэВ.

В разделе 1.2 рассмотрены проблемы, связанные с использованием каскадно-испарительной модели для расчета сечений ядерных реакций при промежуточных энергиях. Показано, что несмотря на успешное использование каскадно-испарительной модели для предсказания различных характеристик ядерных реакций, применение ее в области промежуточных энергий сталкивается с рядом проблем, связанных, как с описанием экспериментальных данных, так и реализацией расчетного алгоритма на ЭВМ. Подчеркивается, что модель дает искаженное описание спектров эмиссии нуклонов в реакциях под действием частиц с энергией ниже 100 МэВ. Наибольшее расхождение между экспериментальными и расчетными спектрами наблюдается при больших углах вылета нуклонов.

В существующих вариантах модели не рассматривается процесс взаимодействия нуклонов с "приготовленными" кластерами в ядре. Как следствие ни одна из совре-

менных компьютерных программ, основанных на каскадно-испарительной модели не содержит алгоритма для расчета спектров эмиссии составных частиц, образующихся на каскадной стадии реакции. В моделях, основанных на представлении ядра в виде сферических зон постоянной плотности, как правило, не рассматриваются эффекты преломления и отражения импульса частиц на границах зон, не учитывается ограничение на орбитальные моменты сталкивающихся частиц, определяемое конечным размером зон, игнорируется процесс проникновения заряженных частиц под кулоновским барьером. Для описания равновесной эмиссии используются грубые приближения, основанные на применении формул с "резким обрезанием" при вычислении сечений обратных реакций и расчете плотности ядерных уровней с использованием упрощенных подходов.

Подчеркивается необходимость создания модифицированной каскадно-испарительной модели, рассматривающей эмиссию неравновесных α -частиц, корректно описывающую угловые и энергетические распределения вторичных частиц и имеющую область применимости, заметно перекрывающуюся с экситонными моделями.

В разделе 1.3 рассмотрены проблемы, с которыми сталкивается оценка сечений ядерных реакций, протекающих на делящихся ядрах под действием частиц промежуточных энергий. Указано, что к основным факторам, затрудняющим проведение оценки, относятся: отсутствие наборов параметров расчетных моделей, позволяющих добиться надежных предсказаний сечений в тех случаях, когда экспериментальные данные не существуют, даже при использовании наиболее точных методов расчета; неопределенность расчетных значений сечений при энергии выше 20 МэВ, полученных с использованием различных методов расчета сечений, тестировка которых проводилась на основе экспериментальных данных в области низких энергий; недостатки подходов, основанных на применении традиционных вариантов каскадно-испарительной модели при проведении расчетов в области энергий ниже 100 МэВ; отсутствие надежных методов расчета сечений реакций (p,px) и $(p,\alpha xn)$, дающих заметный вклад в сумму сечений для делящихся ядер в области энергий выше 50 МэВ; вычислительные сложности, связанные с использованием модели Хаузера-Фешбаха для расчета сечений при энергиях больших 20 МэВ.

В разделе 1.4 выполнен анализ современных методов расчета сечений, используемых для изучения радиационной повреждаемости облучаемых материалов: сечений смещения атомов, сечений образования водорода и гелия. Показано, что попытки

определения нейтронных сечений смещения в области энергий 0-1000 МэВ, предпринятые рядом исследователей, столкнулись с проблемой согласованного описания сечений смещений на основе различных ядерных моделей. Так, рассчитанные сечения смещения на основе каскадно-испарительной модели при энергиях выше 20 МэВ оказались значительно ниже значений сечений, полученных с использованием экспериментальных и расчетных данных в области более низких энергий. Сечения образования гелия, рассчитанные ранее при энергиях до 1 ГэВ, находятся в резком противоречии с экспериментальными данными.

Указана необходимость разработки надежного и эффективного метода расчета сечений смещения, сечений выхода составных частиц при промежуточных энергиях.

В разделе 1.5 рассмотрены приближенные подходы к вычислению сечений ядерных реакций. Существующие приближенные методы расчета, основанные на использовании эмпирических выражений, не пригодны для описания выхода легких фрагментов (t , ^3He , α) в реакциях, образование которых играет важнейшую роль в процессах активации и радиационного повреждения материалов, облучаемых частицами промежуточных и высоких энергий. Для практических приложений знание выходов таких частиц необходимо в области энергий от порога реакции (5-25 МэВ) до десятков ГэВ.

Обсуждается вопрос об использовании систематик сечений нейтронных пороговых реакций для предсказания сечений при энергии 14.5 МэВ. Все предложенные ранее систематики основаны на использовании эмпирических выражений для параметризации сечений. Следствием применения на практике таких систематик является противоречивость предсказаний в области ядер, в которой отсутствуют экспериментальные данные, применявшиеся при подгонке параметров систематик.

Показана необходимость разработки нового метода построения систематик сечений нейтронных реакций, основанного на использовании теоретических моделей для описания неравновесных и статистических процессов, создания полупэмпирических систематик сечений важнейших нейтронных пороговых реакций, позволяющих проводить оценку сечений в области как стабильных, так и нестабильных ядер.

Вторая глава посвящена созданию методов расчета спектров составных частиц в рамках предравновесно-испарительной модели.

В разделе 2.1 развит новый подход к описанию неравновесных спектров α -частиц в ядерных реакциях. Недостатком предложенных ранее методов расчета α -спектров является то, что их авторы исходили из существования одного механизма испускания α -частиц (подхвата, выбивания) и пытались приписать его действию весь

неравновесный α -спектр. Вместе с тем, наблюдаемое отклонение расчетных данных от экспериментальных, а также анализ α -спектров на основе полумикроскопических методов, указывают на важность учета различных процессов, приводящих к неравновесной эмиссии α -частиц.

Модели подхвата и выбивания объединены для получения единого подхода к описанию α -эмиссии при промежуточных энергиях, позволяющего устранить наблюдаемое расхождение расчетных и экспериментальных данных. Для расчета спектров α -частиц предложено использовать гибридную экситонную модель, дающую, в отличие от других модификаций экситонной модели, более точное описание конкуренции испускания и поглощения возбужденной α -частицы в ядре.

Согласно развиваемому подходу спектр α -частиц представляется в виде суммы трех компонентов, отвечающих процессу подхвата, выбивания и испарительной эмиссии:

$$\frac{d\sigma}{d\epsilon_\alpha} = \frac{d\sigma^{\text{pick-up}}}{d\epsilon_\alpha} + \frac{d\sigma^{\text{knock-out}}}{d\epsilon_\alpha} + \frac{d\sigma^{\text{evap}}}{d\epsilon_\alpha}$$

Для вычисления $d\sigma^{\text{pick-up}}/d\epsilon_\alpha$ используется экситонная коалесцентная модель, учитывающая подхват частиц, соединенная с гибридной экситонной моделью. Для получения компонента спектра $d\sigma^{\text{knock-out}}/d\epsilon_\alpha$, отвечающего процессу выбивания α -частиц, рассматривается трехкомпонентная ядерная система, в состав которой входят нейтроны, протоны и α -частицы. Определяется плотность возбужденных состояний такой системы. В рамках гибридной экситонной модели записывается аналитическое выражение для расчета спектров α -частиц, включающее отношение плотностей конечного и начального состояний, скорость эмиссии и поглощения α -частицы.

Формулируется подход для описания многократной предравновесной эмиссии α -частиц - испускания неравновесных α -частиц из экситонных состояний, образованных после вылета неравновесных нейтронов, протонов и α -частиц.

Проводится сравнение рассчитанных и экспериментальных спектров α -частиц, испущенных в реакциях под действием нуклонов с энергией 15 + 90 МэВ. Показано, что при относительно низких энергиях нуклонов, вызывающих реакцию, неравновесная эмиссия α -частиц определяется механизмом подхвата. Вклад процессов выбивания α -частиц в спектр неравновесной эмиссии увеличивается при повышении энергии первичных частиц, причем механизм выбивания определяет наиболее жесткую часть α -

спектра (рис.1). Указано также, что корректное описание экспериментальных данных может быть достигнуто только с учетом многократной предравновесной эмиссии α -частиц.

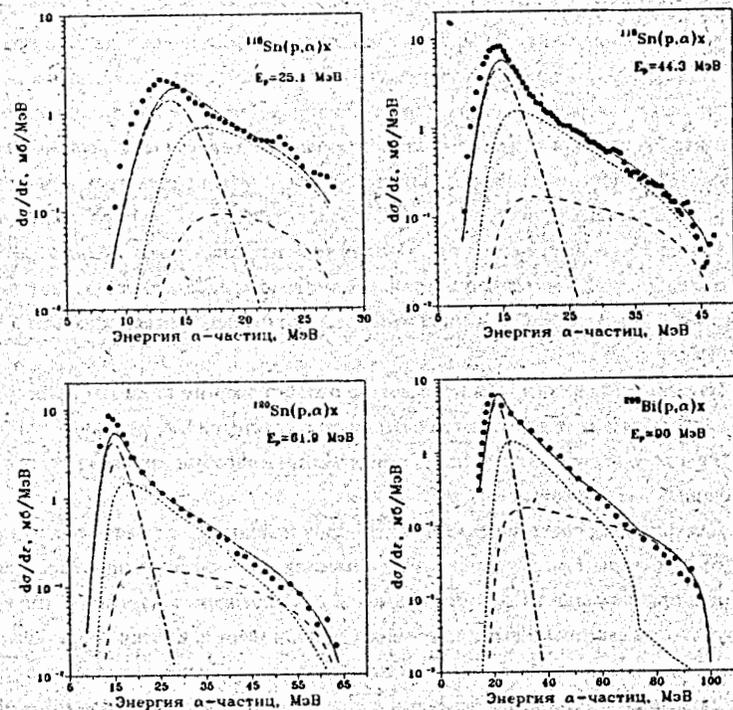


Рис.1 Рассчитанные спектры α -частиц для реакций, протекающих при облучении различных ядер протонами с энергией 25 - 90 МэВ: полный спектр (сплошная линия), вклады процессов подхвата (короткая штриховая линия), выбивания (длинная штриховая линия) и испарительной эмиссии (штрих-пунктирная линия).

В разделе 2.2 изложен разработанный метод расчета дейтронных спектров в реакциях под действием нуклонов промежуточных энергий. Использование для расчета спектров дейтронов экситонной модели, рассматривающей эмиссию частиц из состояний с числом экситонов $p \geq 3$, приводит к заниженным значениям расчетных спектров относительно экспериментальных в жесткой части. Предложен феноменологический подход для описания прямого канала образования дейтронов. Спектры эмиссии дейтронов, рассчитанные с помощью предложенного подхода, согласуются с экспериментальными данными в широкой области энергий первичных частиц, при этом наибольший вклад в жесткую часть спектра дает прямой канал образования дейтронов, при малых энергиях спектра определяющим является вклад предравновесного компонента $F_{1,1}$ и испарительной эмиссии. Показано, что описание экспериментальных спектров дейтронов может быть достигнуто лишь с учетом всех трех компонентов спектра: прямого канала, предравновесной и испарительной эмиссии (рис.2).

Раздел 2.3 посвящен описанию эмиссии тяжелых кластеров в ядерных реакциях на основе гибридной экситонной модели. С помощью предложенного метода расчета получены спектры испускания ${}^7\text{Be}$ и сечения реакции $(p, {}^7\text{Be})$, протекающей на ядрах от ${}^{27}\text{Al}$ до ${}^{238}\text{U}$.

Изучение реакции $(p, {}^7\text{Be})$ проведено в области энергий ниже 100 МэВ, в которой реакция протекает в основном за счет эмиссии кластеров ${}^7\text{Be}$, в отличие от образования ${}^7\text{Be}$ в результате вылета менее тяжелых частиц из возбужденного ядра, происходящего при более высоких энергиях.

Для описания спектров тяжелых кластеров используется модель подхвата частиц. Форм-факторы $F_{1,m}$, характеризующие вероятность формирования кластера, вычисляются приближенно на основе выражений для плотности состояний в яме конечной глубины с 1 частицами выше и m - ниже энергии Ферми. Сечения обратных реакций рассчитываются с помощью оптической модели с параболическим барьером.

Данные вычислений, проведенных с единым набором параметров моделей, согласуются с экспериментальными данными для различных ядер (рис.3).

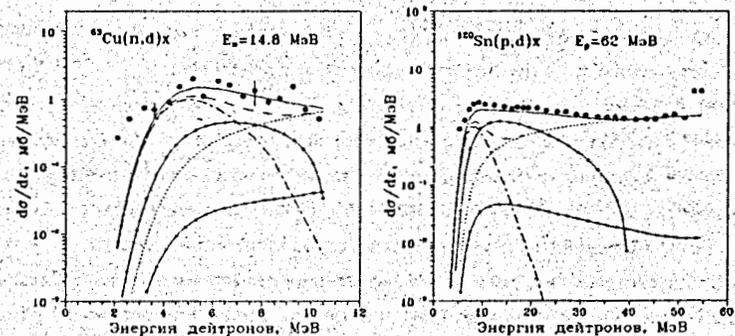


Рис.2 Рассчитанный спектр эмиссии дейтронов для реакций, протекающих при облучении ядер ${}^{63}\text{Cu}$ нейтронами с энергией 14.8 МэВ и ${}^{120}\text{Sn}$ протонами с энергией 62 МэВ. Показан полный спектр (—), компоненты спектра, соответствующие прямому каналу (- - -), предравновесной эмиссии, определяемой вероятностью коалесценции $F_{1,1}$, отвечающей объединению нуклонов с энергией выше и ниже энергии Ферми (+—+), $F_{2,0}$, соответствующей объединению двух нуклонов с энергией выше энергий Ферми (x—x—x) и равновесной эмиссии (· · · · ·). Приведена также сумма спектра, соответствующего прямому процессу и испарительной эмиссии (— — —).

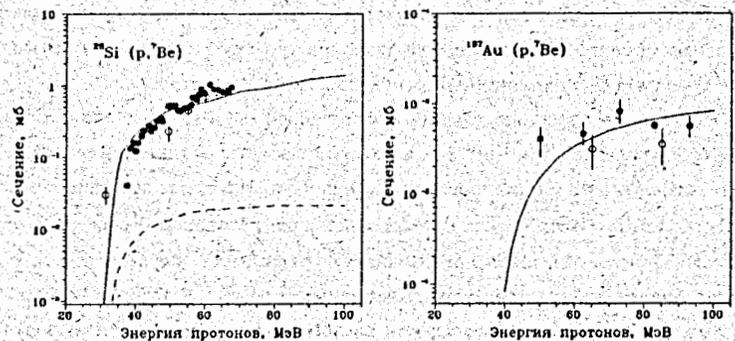


Рис.3 Рассчитанные полное сечение реакции $(p, {}^7\text{Be})$ для ${}^{28}\text{Si}$ и ${}^{197}\text{Au}$ реакции (сплошная линия) и предравновесный компонент сечения (штриховая линия).

В третьей главе представлен предложенный вариант каскадно-испарительной модели, включающий описание неравновесной эмиссии α -частиц.

Раздел 3.1 посвящен описанию эмиссии нуклонов на основе модели внутриядерных каскадов в области промежуточных энергий. Рассмотрены основные факторы, учет которых в алгоритме модели позволяет значительно повысить точность вычисляемых величин и при энергиях ниже 100 МэВ получать расчетные данные близкие к результатам вычислений на основе предравновесных экситонных моделей.

Исследуется влияние, оказываемое конечными размерами ядра на орбитальные моменты взаимодействующих нуклонов. Для модели ядра с многоступенчатой плотностью сформулировано ограничение на орбитальные моменты нуклонов, сталкивающихся в i -ой зоне:

$$l \leq r_{i+1} R_i,$$

где l - угловой момент нуклона с импульсом p_i в i -ой зоне, p_{i+1} - импульс, который данный нуклон имел бы в $i+1$ -ой зоне, R_i - радиус зоны, в которой сталкиваются два нуклона.

Указанное выше условие проверяется вместе с принципом Паули при моделировании внутриядерных взаимодействий.

Рассмотрены эффекты, связанные с преломлением и отражением импульса нуклонов на границах внутриядерных зон. На примере реакции $Nb(p,n)$, протекающей при энергии $E_n = 26$ МэВ, показано, что учет этих эффектов вместе с ограничениями на орбитальные моменты сталкивающихся нуклонов приводит к заметному повышению точности предсказания дважды дифференциальных спектров нуклонов.

Обсуждаются проблемы, связанные с введением энергии "обрезания", представляющей собой минимальную энергию, с которой быстрая частица может вылететь из ядра. Показано, что при моделировании каскадного процесса для протонов с энергией $e < V_p$ необходимо учесть эффект прохождения через кулоновский барьер. Учет подбарьерного эффекта позволяет описать плавную зависимость неравновесного компонента протонного спектра от энергий вылетающего протона. В предравновесной экситонной модели аналогичная зависимость расчетного спектра от энергии получается при вычислении сечения обратной реакции для протонов по оптической модели, описывающей поглощение и рассеяние протонов в реалистической потенциальной яме.

Рассмотрены особенности моделирования равновесной стадии реакции. Приведены рекомендации по использованию приближенных подходов для расчета сечений обратных реакций и плотности ядерных уровней. Подчеркивается необходимость уче-

та затухания оболочечных эффектов в плотности ядерных уровней при проведении вычислений в области промежуточных энергий первичных частиц. Отмечается возможность построения аналитических выражений для расчета вероятности испарения частиц на основе формул, аппроксимирующих сечения обратных реакций (σ_{inv}), полученных с помощью оптической модели, и передающих экспоненциальный рост σ_{inv} в области малых энергий, и выражения для плотности уровней модели ферми-газа.

Приведены примеры расчета дифференциальных сечений, спектров и функций возбуждения, полученных с помощью модифицированной каскадно-испарительной модели при энергиях ниже 100 МэВ. Результаты расчета сопоставляются с вычислениями на основе гибридной экситонной и испарительной модели.

Сравнение экспериментальных данных и результатов расчетов показывает, что каскадно-испарительная модель может использоваться для расчета полных и дифференциальных сечений ядерных реакций во всей области энергий, в которой для этих целей применяются предравновесные экситонные модели, т.е. при энергиях выше нескольких МэВ. Несмотря на различие физических приближений, положенных в основу указанных моделей, грубость сделанных допущений при их формулировке оказывается вполне сопоставимой.

Формальным основанием для использования модели внутриядерного каскада при относительно низких энергиях первичных частиц является малость длины волны падающего нуклона по сравнению с его длиной пробега внутри ядра.

В разделе 3.2 кратко описан предложенный метод расчета спектров испускания α -частиц на основе модели внутриядерного каскада.

Рассмотрена модель ядра, состоящего из 10 сферических зон постоянной плотности. Предполагается, что в состав ядра входят "приготовленные" кластеры: тритоны, ядра 3He и α -частицы. Максимальная кинетическая энергия α -частиц в i -ой зоне определяется как $T_{\alpha}^F = 4 T_n^F$, где T_n^F - энергия Ферми для нуклонов. Считается, что распределение α -частиц в ядре по импульсам имеет вид: $N_{\alpha}(p_{\alpha}) dp_{\alpha} \sim p_{\alpha}^2 dp_{\alpha} d\Omega$.

Определение точки взаимодействия и характеристик партнера во внутриядерных взаимодействиях осуществляется с помощью предложенного метода, основанного на использовании специфических свойств эффективных сечений взаимодействия частиц с нуклонами и "приготовленными" кластерами, входящими в состав ядра, и зависимости таких сечений от импульса сталкивающихся частиц.

При вычислении пробега частицы внутри ядра рассматривается взаимодействие

с нуклонами и сформированными кластерами. Для протона, движущегося в поле ядра с кинетической энергией T , вероятность взаимодействия Q записывается в виде:

$$Q_i = \rho_i \{ \varphi_n \sigma^{nn} (T) + \varphi_p \sigma^{pp} (T) + \varphi_\alpha \sigma^{\alpha\alpha} (T) + \sigma_{p-n}^{\alpha} (T) \},$$

где ρ_i - плотность нуклонов в i -ой зоне, σ^{nn} и σ^{pp} - сечение взаимодействия с внутриядерным нейтроном и протоном, $\sigma^{\alpha\alpha}$ - сечение взаимодействия с α -кластером, σ_{p-n}^{α} - сечение "подхвата" - процесса, приводящего к объединению протона и тритона, входящего в состав ядра, и образованию α -частицы, φ_n , φ_p , φ_α - относительное число нейтронов, протонов и α -кластеров в ядре.

Для возбужденной α -частицы рассматривается процесс упругого рассеяния и развала при взаимодействии с внутриядерными нуклонами. Сечения взаимодействия нуклона с α -частицей рассчитываются с помощью приближенных формул, полученных на основе экспериментальных и оцененных данных при энергиях выше 14 МэВ и данных библиотеки БРОНД-2 в области более низких энергий.

При описании внутриядерных взаимодействий учитывается принцип Паули и ограничение на орбитальные моменты частиц, как в нуклон-нуклонных, так и нуклон- α столкновениях. Характеристики частиц, образующихся при развале α -частицы при столкновении с нуклоном, определяются приближенно, в предположении, что нуклон взаимодействует с одним из нуклонов, входящих в состав α -частицы.

Относительное число α -кластеров φ_α и абсолютное значение сечения подхвата σ_{p-n}^{α} выбираются таким образом, чтобы обеспечить согласие расчетных спектров α -частиц, спектров испускания нуклонов под большими углами и экспериментальных данных. Энергетическая зависимость сечения σ_{p-n}^{α} определяется в соответствии с расчетами форм-фактора $F_{1,2}$ в экситонной коалесцентной модели подхвата.

Приводятся результаты вычисления энергетических спектров и дважды дифференциальных сечений образования α -частиц в ядерных реакциях. В качестве иллюстрации на рис.4 приведены полученные α -спектры для некоторых ядер.

Отмечается, что

- абсолютные величины рассчитанных неравновесных α -спектров слабо зависят от формы распределения кластеров, входящих в состав ядра, по импульсам;

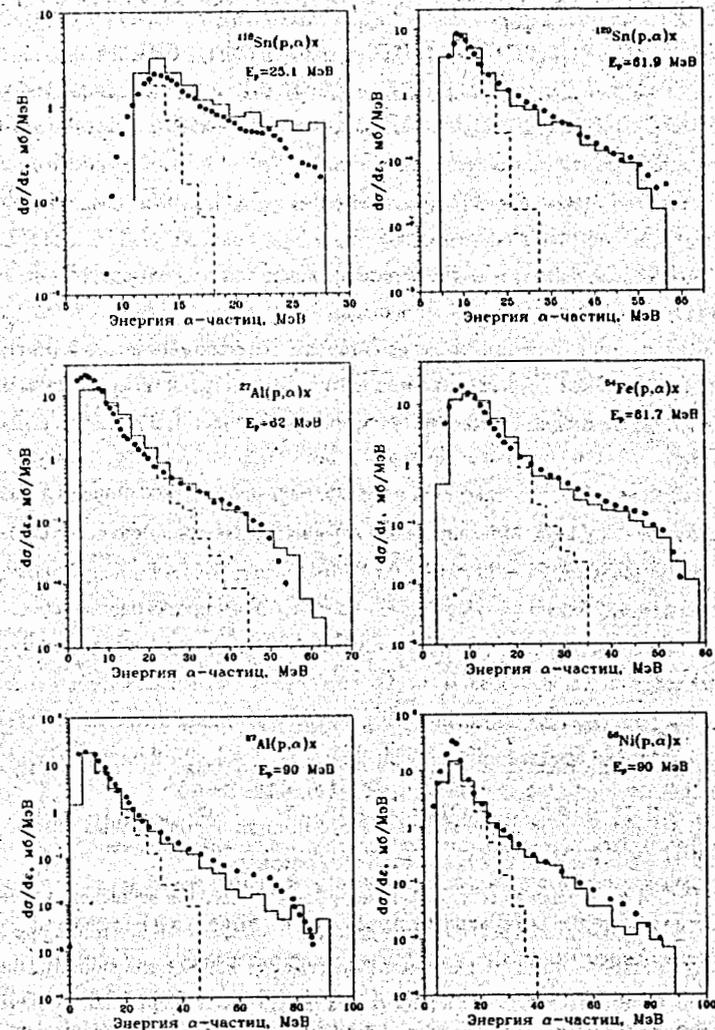


Рис.4 Спектры α -частиц для реакций, протекающих под действием протонов с энергией 25 - 90 МэВ, рассчитанные на основе каскадно-испарительной модели. Сплошная гистограмма - полный спектр, пунктирная гистограмма - испарительный спектр.

- выбивание α -частиц в результате упругого нуклон- α взаимодействия играет второстепенную роль в формировании неравновесного α -спектра при энергии первичных частиц ниже 100 МэВ. Спектры, вычисленные в рамках модели выбивания, имеют "провал" в средней части, характерный также для подходов, основанных на использовании предравновесно-экситонной модели. Наиболее заметный вклад механизм выбивания дает в жесткую часть спектра α -частиц;

- упругие взаимодействия нуклонов с "приготовленными" α -частницами оказывают заметное влияние на эмиссию нуклонов при больших углах вылета. Согласие расчетных и экспериментальных спектров нуклонов заметно улучшается при рассмотрении таких процессов;

- корректное описание экспериментальных спектров α -частиц в реакциях под действием нуклонов с энергией до сотен МэВ может быть достигнуто только при рассмотрении двух основных механизмов образования α -частиц в процессе выбивания и подхвата.

Рассмотрена роль областей ядра с малыми плотностями в формировании неравновесного α -спектра. Моделирование внутриядерных процессов на различных расстояниях от центра ядра показывает, что образование α -частиц, испускаемых в реакциях под действием нуклонов с энергией до сотен МэВ, происходит в основном в результате взаимодействий в области с плотностью $\rho < 0.1\rho_0$ (ρ_0 - плотность нуклонов в центре ядра).

Для практических вычислений неравновесного компонента сечения выхода α -частиц предложен простой приближенный подход, основанный на использовании аналитических соотношений модели "нарушения ядерных связей".

В четвертой главе представлены разработанные приближенные методы расчета сечений ядерных реакций при промежуточных энергиях.

Раздел 4.1 посвящен созданию приближенных методов вычисления сечений выхода легких фрагментов в реакциях под действием нейтронов и протонов при энергиях от порога реакций до 10 ГэВ. Основное внимание уделено образованию трития в реакциях. Опорными данными для построения аналитических выражений, описывающих сечение выхода трития, послужили экспериментальные значения сечений и результаты расчетов, выполненных для более чем 200 стабильных ядер от С до Вi. Расчеты были проведены на основе каскадно-испарительной модели с учетом неравновесной эмиссии тритонов.

В основу параметризации неравновесного компонента сечения выхода трития (σ_{TRT}) положены аналитические выражения для расчета σ_{TRT} на основе модели "нарушения ядерных связей". Дополнительные множители введены в формулу для σ_{TRT} , чтобы достичь согласия с экспериментальными данными по выходу трития на тяжелых ядрах и передать пороговый характер сечения σ_{TRT} . Формула для расчета испарительного компонента сечения выхода трития получена с помощью статистической модели Вайскопфа.

Приводятся полученные формулы и рекомендации по их использованию для оценки сечений выхода трития при облучении ядер от С до Вi нейтронами и протонами промежуточных энергий.

Аналогичный принцип построения приближенных формул использован для параметризации сечений образования ядер ${}^3\text{He}$ и α -частиц в ядерных реакциях.

В разделе 4.2 описан предложенный приближенный подход для расчета сечений смещения атомов в упругих взаимодействиях с заряженными частицами. Исследуется влияние, которое оказывает способ расчета функции рассеяния $f(t^{1/2})$, определяющей дифференциальное сечение взаимодействия заряженной частицы с атомами вещества, на величину сечения смещения $\sigma_{\text{см}}$. Показано, что использование функции Линдхарда-Нильсена-Шарффа и эмпирических зависимостей для расчета $f(t^{1/2})$ дает близкие значения величины $\sigma_{\text{см}}$. Каскадная функция в виде TRN-стандарта и подход Линдхарда-Нильсена-Шарффа применены для получения приближенных формул, описывающих упругий компонент сечений смещения атомов под действием заряженных частиц с $A \leq 4$.

Раздел 4.3 посвящен созданию систематик сечений нейтронных пороговых реакций.

Разработаны новые принципы создания систематик сечений, опирающиеся на использование предравновесно-испарительной модели. С помощью аналитических выражений для расчета спектров частиц на основе экситонной модели в "замкнутой форме" получены приближенные формулы, описывающие предравновесный компонент сечений нейтронных пороговых реакций. Для реакций с образованием составных частиц (d , t , ${}^3\text{He}$, α) при выводе формул использовалась экситонная модель подхвата, рассматривался прямой канал образования вторичных частиц. Применение для вывода приближенных формул гибридной модели и экситонной модели в "замкнутой" форме приводит к одинаковой зависимости неравновесного компонента сечений от

характеристик протекающих процессов.

С помощью модели Вайскопфа получены аналитические выражения для вычисления равновесных спектров испускаемых в реакциях частиц.

Представлены формулы, используемые для создания систематик сечений нейтронных пороговых реакций при энергии около 14.5 МэВ.

Реакция (п,р). На основе полученных аналитических выражений, описывающих сечение реакции (п,р) и формулы масс для построения систематики предложена 7-ми параметрическая полуэмпирическая формула, компоненты которой описывают вклад предравновесной и равновесной эмиссии в сечение реакции (п,р).

Для определения значений параметров представленной формулы использовалась библиотека сечений реакции (п,р) при 14.5 МэВ для 159 ядер с $A = 40 - 209$, полученных из анализа различных экспериментов. За основу библиотеки таких сечений были взяты существующие компиляции, для 24 ядер данные были пересмотрены или добавлены в библиотеку, исходя из результатов экспериментов, выполненных в течении последних лет.

В результате подгонки параметров предложенной формулы к экспериментальным сечениям была получена полуэмпирическая систематика сечений реакции (п,р) при 14.5 МэВ:

$$\sigma_{(n,p)} = \pi_0^2 (A^{1/3} + 1)^2 \left\{ A^{1.1128} (1.1242 S^2 - 0.73212 S + 0.11707)^3 + 0.4936 \exp(-194.69 S^2 - 5.3778 S) \right\},$$

где $\pi_0 = 1.3$ фм, $S = (N-Z+1)/A$, N , Z , A -, соответственно, число нейтронов, протонов и нуклонов в ядре-мишени.

Первое слагаемое в указанной формуле описывает вклад предравновесной, а второе - равновесной эмиссии протонов в сечение реакции (п,р).

Проведенное сравнение различных систематик показывает, что полученная полуэмпирическая формула точнее передает экспериментальные значения сечений (имеет меньшее значение χ^2), чем предложенные ранее другими авторами эмпирические систематики. Отмечается, что использование полуэмпирической систематики позволяет описывать не только значения сечений реакции (п,р), но также и экспериментальные вклады неравновесных процессов в сечение реакции.

Реакция (п,α). При построении систематики сечений реакции (п,α) при 14.5 МэВ рассматривалась предравновесная и испарительная эмиссия α-частиц из ядер, а также образование α-частиц в результате прямого процесса. На основе полуэмпирической

формулы масс установлена зависимость эффективного порога реакции (п,α) от числа нейтронов и протонов в ядрах. С использованием полученных выражений для вычисления сечения реакции (п,α) на основе предравновесно-испарительной модели записана 12-ти параметрическая формула, описывающая сечение данной реакции, различные компоненты которой отвечают вкладам неравновесной и равновесной эмиссии в сечение реакции.

Для построения систематики предложена также более простая 7-ми параметрическая составная формула, согласно которой область исследуемых ядер разбивается на два интервала с атомным номером меньшим и большим 50. Для ядер с $Z \leq 50$ используется выражение, описывающее равновесный компонент сечения, а для ядер с $Z > 50$ неравновесный компонент. При подгонке к экспериментальным данным оказалось, что 7-ми параметрическая составная формула имеет меньшее значение χ^2 , чем 12-ти параметрическая.

При подгонки параметров систематик использовалась библиотека сечений реакции (п,α) для 120 ядер с $A = 40 - 209$, полученных из анализа экспериментальных данных: 55 значений сечений, включенных в библиотеку, были заимствованы из существующих компиляций таких сечений, оценка сечений для 65 ядер была выполнена на основе экспериментальных данных, полученных в течении последних лет и содержащихся в EXFOR.

Полученная 7-ми параметрическая формула точнее описывает экспериментальные значения сечений, чем предложенные ранее эмпирические систематики, имеющие большее число свободных параметров.

Реакция (п,t). Для построения систематики сечения реакции (п,t), протекающей на ядрах с $A > 40$ при 14.5 МэВ, достаточно рассмотреть только неравновесный компонент сечения реакции. Из-за существования значительных различий в величине сечений у ядер разной четности для получения приближенных выражений, описывающих сечение реакции, необходимо учесть эффекты спаривания при вычислении плотности экситонных состояний. Рассмотрение таких эффектов, а также различий в величине эффективного порога реакции у ядер разной четности позволило установить общую формулу для построения систематики сечения реакции (п,t).

Сравнение представленной полуэмпирической систематики с предложенными ранее эмпирическими выражениями, указывает на преимущества полученной систематики. Полуэмпирическая систематика обеспечивает лучшее описание эксперименталь-

ных данных и позволяет получать более реалистичные значения сечений для нестабильных ядер, чем предсказываемые эмпирическими систематиками (рис.5).

Реакция (n,d). Построение систематики на основе экспериментальных сечений приводит к противоречиям. Для предсказания сечений реакции (n,d) в области средних и тяжелых ядер необходимо в дополнение к экспериментальным данным использовать результаты теоретических расчетов.

С использованием предложенного метода расчета спектров эмиссии дейтронов в ядерных реакциях получены сечения реакции (n,d) для 245 стабильных ядер при энергии 15 МэВ. Доказывается, что для практических вычислений необходимо использовать не сами результаты теоретических расчетов, а предсказания систематической кривой, полученной из подгонки к значениям сечений, рассчитанным с помощью теоретических моделей. В качестве иллюстрации приводятся результаты таких расчетов и предсказания полученных на основе расчетных данных систематик сечений реакций (n,p) и (n,α). Приводится формула, рекомендуемая для оценки сечения реакции (n,d) при энергии 15 МэВ.

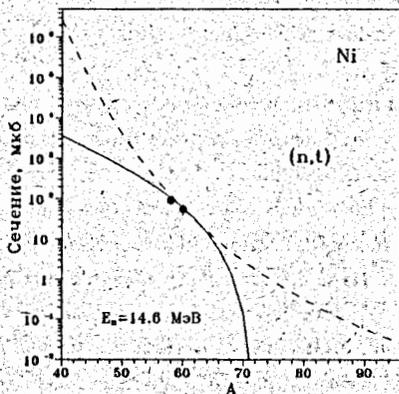


Рис.5 Сечения реакции (n,t) при энергии 14.6 МэВ для изотопов никеля, имеющих четное число нейтронов, рассчитанные с помощью полученной полумпирической формулы (сплошная линия) и наиболее точной эмпирической формулы (систематика Форреста) (пунктирная линия). Рисунок иллюстрирует преимущества полумпирической систематики: сечения, предсказываемые эмпирической формулой для относительно легких изотопов, превышают полное сечение реакций, — для тяжелых изотопов сечения, рассчитанные по эмпирической формуле, отличны от нуля, в то время как энергия первичных нейтронов 14.6 выше порога реакции.

Реакция (n,³He). Для рассматриваемой реакции существует относительно небольшое число измерений сечений при энергии около 14.5 МэВ, поэтому для построения систематики предложена простая двух-параметрическая полумпирическая формула. Предсказания полученной формулы оказываются точнее, чем эмпирических систематик.

Реакция (n,2n). Представлены полученные приближенные формулы для оценки сечения реакции (n,2n), протекающей на ядрах различной четности при 14.5 МэВ. Для построения систематики используются экспериментальные данные для 122 четно-четных и нечетно-четных ядер, а также результаты проведенных вычислений с помощью теоретических моделей для четно-нечетных и нечетно-нечетных ядер.

Предложенная систематика имеет меньшее значение χ^2 при описании экспериментальных сечений по сравнению с другими систематиками и в отличие от них правильно воспроизводит изотопическую зависимость сечений и различия в величинах сечений у ядер разной четности.

Реакция (n,pr). Вывод приближенных формул, положенных в основу систематики, проведен для двух групп ядер, соответствующих различным соотношениям между энергиями отделения нейтронов и протонов в ядрах. Выполненный анализ указывает на то, что для одной группы ядер предравновесный компонент сечения реакции (n,pr) при 14.5 МэВ заметно превышает равновесный, а у второй — преобладает вклад равновесной эмиссии в сечение реакции. С учетом этих обстоятельств и с использованием полумпирической формулы масс получена 6-ти параметрическая формула для оценки сечения реакции (n,pr).

Сравнение с другими систематиками и результатами расчетов на основе предравновесной экситонной модели и модели Хаузера-Фешбаха показывает, что предложенная формула наиболее точно описывает экспериментальные данные.

Далее в четвертой главе обсуждается альтернативный изложению выше метод построения систематик, основанный на использовании экспериментальных масс нуклидов и учете оболочечных эффектов и эффектов спаривания в плотности уровней возбужденной ядерной системы. Описана предложенная систематика функций возбуждения реакции (n,p) при энергиях до 50 МэВ.

Пятая глава посвящена созданию библиотек сечений ядерных реакций для исследования процессов, протекающих в материалах под действием частиц промежуточных энергий.

В разделе 5.1 проводится исследование возможностей использования различных

теоретических моделей для получения сечений ядерных реакций при промежуточных энергиях.

Для 100 стабильных ядер проведены сравнительные расчеты сечений реакций $(n,2n)$, (n,p) и (n,α) с помощью модели, учитывающей (модель Хаузера-Фешбаха) и не учитывающей (модель Вайскофа) сохранение углового момента и четности при распаде возбужденных ядер. Показано, что при условии неопределенности параметров моделей и выборе их значений на основе аппроксимационных зависимостей, систематик и т.п., точность предсказаний сечений с использованием различных подходов для описания статистических процессов, оказывается сопоставимой.

Исследовано влияние, которое оказывает способ вычисления плотности ядерных уровней на рассчитываемые величины сечений ядерных реакций, протекающих при промежуточных энергиях. Расчет плотности уровней проведен на основе модели ферми-газа без учета оболочечных эффектов с параметром плотности $a=A/9$ и с помощью обобщенной сверхтекучей модели. Неравновесная эмиссия частиц описывалась с помощью гибридной экситонной модели. Вычисления сечений проведены для 60 протонных реакций, протекающих при энергии до 200 МэВ, с числом вторичных частиц $n \geq 3$. Установлено, что использование сверхтекучей модели для расчета плотности уровней приводит к лучшему описанию сечений, чем применение модели ферми-газа, однако различие в результатах расчета сечений на основе модели ферми-газа с параметром $a=A/9$ и сверхтекучей модели не столь значительно, чтобы пренебречь использованием модели ферми-газа в качестве простого и удобного инструмента для получения плотности ядерных уровней при проведении вычислений сечений ядерных реакций, протекающих под действием частиц промежуточных энергий.

Проведено сравнение различных компьютерных программ и методов расчета сечений в области энергий от 1 МэВ до 25 ГэВ. Расчеты выполнены для изотопов циркония, ядер долгоживущих продуктов деления - стронция, цезия, технеция, йода и др., а также для изотопов свинца и висмута. Исследованы различные методы описания неравновесной эмиссии, сечений обратных реакций, плотности ядерных уровней.

В разделе 5.2 описана разработанная библиотека и методы получения сечений, используемых для исследования радиационной повреждаемости материалов, находящихся под облучением нуклонами промежуточных энергий.

Расчеты нейтронных сечений смещения для упругого рассеяния (σ_{sd}) проведены с помощью оптической модели. Выполнено сравнение различных оптических потенциалов при вычислении σ_{sd} , представлены рекомендуемые типы потенциалов. Для вы-

числения сечений смещения в неупругих взаимодействиях нейтронов с ядрами (σ_{ndn}) использована модифицированная каскадно-испарительная модель, реализованная в разработанной компьютерной программе DISCA.

Проводится сравнение полученных сечений смещения с результатами вычислений, проведенных ранее другими авторами. Отмечается, что выполненные расчеты сечений смещения представляют собой наиболее реалистическую оценку таких сечений в области промежуточных энергий.

Расчет сечений выхода водорода и гелия при энергиях ниже 50 МэВ проведен на основе гибридной экситонной и испарительной модели с учетом неравновесной эмиссии α -частиц. При более высоких энергиях для получения сечений использовалась каскадно-испарительная модель.

Исследована роль оболочечных эффектов, неравновесной эмиссии α -частиц, различных способов описания сечений обратных реакций и плотности ядерных уровней при вычислении сечений выхода α -частиц в ядерных реакциях.

Полученные данные по сечениям образования гелия, водорода и сечениям смещения представлены в виде библиотеки БИСЕРМ, включающей информацию о 259 стабильных нуклидах от Al до Bi при энергиях от порога реакций до 1 ГэВ. Данные БИСЕРМ записаны в формате ENDF/B-VI.

В разделе 5.3 представлено описание разработанной библиотеки сечений для исследования процесса активации и трансмутации материалов под действием нуклонов промежуточных энергий.

Нейтронные и протонные данные, содержащиеся в созданной библиотеке (MENDL), были получены с помощью теоретических расчетов на основе зависящей от геометрии гибридной экситонной модели и испарительной модели Вайскофа. Спектры нуклонов вычислялись с учетом многократной предравновесной эмиссии. Описание неравновесных спектров дейтронов и α -частиц осуществлялось с помощью разработанных подходов. На равновесной стадии реакции рассматривалось испускание нейтронов, протонов, дейтронов, α -частиц и γ -квантов. Сечения неупругих взаимодействий и обратных реакций рассчитывались по оптической модели. В ряде случаев для стабильных ядер проводилась корректировка рассчитанных сечений с использованием имеющихся экспериментальных данных и предсказаний систематик.

Библиотека MENDL содержит полученные сечения для более чем 110.000 пороговых реакций, протекающих при взаимодействии нейтронов и протонов с ядрами

элементов от Al до Po в области энергий 0-100 МэВ. Библиотека включает информацию о сечениях для 505 стабильных ядер и нестабильных ядер с периодом полураспада $T_{1/2} \geq 1$ сут. Данные MENDL представлены в формате ENDF/B-VI.

Приводятся примеры функций возбуждения, содержащихся в MENDL для реакций, протекающих под действием нейтронов и протонов.

В разделе 5.4 обсуждается предложенный метод получения сечений пороговых реакций для трансактинидов и созданная библиотека сечений, включающая данные при энергиях до 100 МэВ.

Разработанная библиотека (WIND) содержит оцененные нейтронные сечения для 576 реакций, включая реакции деления и сечения пороговых реакций (п,хп), (п,рхп) и (п,αхп), протекающих на изотопах урана, нептуния и плутония: ^{231}U , ^{233}U , ^{234}U , ^{235}U , ^{236}U , ^{237}U , ^{238}U , ^{237}Np , ^{239}Np , ^{236}Pu , ^{237}Pu , ^{238}Pu , ^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{241}Pu , ^{242}Pu , ^{243}Pu , ^{244}Pu .

Предложенный метод получения сечений основан на использовании гибридной экситонной модели для вычисления предравновесных нуклонных спектров, применении модели выбивания и подхвата в расчетах эмиссии α-частиц. Описание конкуренции испарения частиц и деления осуществляется с помощью независимых от энергии отношений нейтронной и делительной ширины.

Обоснование метода получения сечений осуществляется с помощью предравновесно-испарительной модели с использованием сверхтекучей модели для определения плотности ядерных уровней. На примере ^{238}U показано, что согласие рассчитанных сечений и экспериментальных данных может быть достигнуто при использовании в расчетах только таких значений параметров сверхтекучей модели, которые обеспечивают наличие широкого "плато" в зависимости отношения нейтронной и делительной ширины Γ_n/Γ_f от энергии возбуждения.

Проводится сравнение рассчитанных сечений, нейтронных данных библиотек БРОНД-2, JENDL-3, ENDF/B-VI, экспериментальных сечений для реакций, протекающих под действием заряженных частиц в широкой области энергий.

В разделе 5.5 кратко описаны файлы оцененных данных для исследования переноса нейтронов в материалах, облучаемых нейтронами с энергией до 50 МэВ.

Файлы включают информацию о полных сечениях, сечениях упругого и неупругого рассеяния, сечениях пороговых реакций, угловых и энергетических распределениях вторичных нейтронов для реакций, протекающих на ядрах ^{56}Fe , ^{23}Na , ^{39}K , ^{238}U .

Обсуждается метод оценки сечений, способ вычисления угловых и энергетических распределений испускаемых в реакциях частиц, формат представления данных.

Приведено краткое описание содержимого файлов, представлено сравнение полученных сечений с экспериментальными данными, предсказаниями систематик, сечениями из библиотек БРОНД-2, JENDL-3, ENDF/B-VI.

Данные файлов записаны в формате ENDF/B-VI.

Шестая глава посвящена исследованию активности жидкометаллических мишеней, облучаемых протонами промежуточных и высоких энергий.

Приведено краткое описание разработанной программы SNT для определения концентрации нуклидов в облучаемых мишенях. Представлены результаты тестовых расчетов активности свинца, находящегося под облучением нейтронами спектра термоядерного реактора.

С использованием предложенных методов расчета сечений и созданных библиотек проведены вычисления нуклидного состава и активности мишеней из свинца, свинца-висмута и ртути, облучаемых протонами с энергией 0.4, 0.8 и 1.6 ГэВ.

Проанализирована роль первичных и вторичных реакций в формировании полной активности мишеней. Исследованы вклады различных диапазонов нейтронного и протонного спектра в активность мишеней.

Наибольший вклад в полную активность вносит область энергий нейтронов выше 20 МэВ и протонов выше 100 МэВ, несмотря на то, что доля нуклонов такой энергии в полном потоке частиц внутри мишеней относительно мала (4-5%).

Определена роль продуктов деления в формировании активности свинцовых и свинцово-висмутовых мишеней. Отмечается, что активность продуктов деления ($Z < 50$) составляет от 5 до 25% полной активности для мишеней при разных временах выдержки.

Наибольший вклад в активность облученной мишени из свинца и свинца-висмута дают радионуклиды висмута, свинца, ртути, золота и платины, для ртутной мишени - изотопы ртути, золота, платины, технеция, ниобия и циркония. Для всех типов мишеней заметный вклад в активность при временах выдержки от полугода до 20 лет дает тритий.

Рассмотрена зависимость активности облученных мишеней от энергии первичных частиц. Проведено сравнение активности мишеней различного состава. Активности облученных свинцовой и свинцово-висмутовой мишеней близки при временах выдержки до 10 лет. Активность ртутной мишени оказывается выше, чем у мишеней из свинца и свинца-висмута при выдержке в течение 1 года и существенно ниже для времени, превышающем ~ 3000 лет.

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

1. Разработаны новые методы расчета неравновесных спектров составных частиц в ядерных реакциях, протекающих при промежуточных энергиях. В рамках гибридной экситонной модели предложен подход к описанию неравновесных спектров α -частиц, объединяющий модели подхвата и выбивания кластеров. Разработан метод расчета дейтронных спектров на основе предравновесной модели с учетом прямого канала. Предложена экситонная модель для описания эмиссии тяжелых фрагментов (^6Be) в реакциях под действием нуклонов.

2. Предложена модель внутриядерного каскада, описывающая эмиссию неравновесных α -частиц, включающая ряд принципов, позволяющих заметно расширить область применимости модели.

3. Разработан приближенный метод расчета сечений образования трития, ^3He , и α -частиц в реакциях под действием нуклонов с энергией от порога реакции до 10 ГэВ.

4. Разработаны новые принципы построения систематик сечений нейтронных пороговых реакций, основанные на использовании предравновесной экситонной и испарительной модели. Созданы полуэмпирические систематики сечений реакций (n,p) , (n,d) , (n,t) , (n,α) , $(n,^3\text{He})$, (n,np) , (n,pn) при энергии 14.5 МэВ, позволяющие проводить более точную оценку сечений, чем предложенные ранее эмпирические систематики. Построена систематика функций возбуждения реакции (n,p) .

5. Предложен метод расчета сечений смещения атомов материала в упругих и неупругих взаимодействиях с частицами промежуточных энергий. Получены аналитические выражения для вычисления упругих сечений смещения под действием заряженных частиц.

6. Разработан новый феноменологический подход к описанию сечений ядерных реакций, протекающих на делящихся ядрах, основанный на использовании гибридной экситонной модели для расчета неравновесных спектров частиц и независящих от энергии возбуждения отношений нейтронной и делительной ширин. Обоснование метода проведено с использованием обобщенной сверхтекучей модели для расчета плотности ядерных уровней. На основе проведенных вычислений с использованием предложенного метода создана библиотека WIND для трансактинидов, включающая сечения реакций (p,xn) , (n,rxn) , $(n,\alpha\text{xn})$, протекающих на изотопах урана, нептуния, плуто-

ния при энергиях до 100 МэВ.

7. Разработаны расчетные алгоритмы, комплексы компьютерных программ, в которых реализованы предложенные методы расчета функций возбуждения, энергетических и угловых распределений вторичных частиц, выходов составных частиц, сечений смещения атомов.

8. Выполнен анализ различных расчетных приближений, их влияния на величины рассчитываемых сечений. Установлена роль плотности ядерных уровней при описании сечений с множественным образованием вторичных частиц. Проведены сравнительные расчеты сечений с использованием модели Хаузера-Фешбаха, Вайскопфа, различных способов описания неравновесной эмиссии частиц, форм оптических потенциалов, моделей для расчета плотности уровней.

9. Выполнена оценка нейтронных сечений смещения, сечений образования водорода и гелия для 259 стабильных ядер от Al до Bi при энергиях до 1 ГэВ. Результаты оформлены в виде библиотеки БИСЕРМ.

10. С использованием разработанных методов расчета выполнена оценка более чем 110.000 функций возбуждения нейтронных и протонных реакций, протекающих на стабильных и нестабильных ядрах с периодом полураспада $T_{1/2} \geq 1$ сут при энергиях до 100 МэВ. Полученные данные для 505 ядер с атомным номером $Z = 13 + 84$ представлены в виде библиотеки MENDL.

11. Созданы файлы для исследования процесса трансмутации и переноса нейтронов в материалах, облучаемых нейтронами с энергией до 50 МэВ. Файлы включают информацию о полных сечениях, сечениях упругого и неупругого рассеяния, сечениях пороговых реакций, угловых и энергетических распределениях вторичных нейтронов для реакций, протекающих на ядрах ^{56}Fe , ^{23}Na , ^{39}K , ^{238}U .

12. С использованием предложенных методов расчета сечений и созданных библиотек проведены вычисления нуклидного состава и активности мишеней из свинца, свинца-висмута и ртути, облучаемых протонами промежуточных энергий. Определена роль различных компонентов нуклонных спектров внутри мишеней и различных групп ядер, включая продукты деления, в формировании суммарной активности мишеней. Проанализированы вклады долгоживущих радионуклидов в активность мишеней.

Основные результаты диссертации изложены в следующих работах:

1. Конобеев А.Ю., Коровин Ю.А., Соснин В.Н. Некоторые особенности и приближения, связанные с расчетом нейтронной повреждающей дозы и сечений смещения при энергиях нейтронов выше 10 МэВ // Известия АН БССР. Серия физико-энергетических наук, 1989, N1, с.3-8.
2. Конобеев А.Ю., Коровин Ю.А., Соснин В.Н. Расчет нейтронных сечений смещения для ядер железа в области энергий от 10 до 40 МэВ // Известия АН БССР. Серия физико-энергетических наук, 1989, N2, с.9-12.
3. Konobeyev A.Yu., Korovin Yu.A., Sosnin V.N., Chereuta I.I. Transformation of Chemical Composition of Irradiated First Wall Construction Material of the Muon-Catalyzed Fusion Hybrid Reactor // Muon Catalyzed Fusion, 1989, v.4, p.125-128.
4. Konobeyev A.Yu., Korovin Yu.A., Sosnin V.N. Calculation of Displacement Cross Section for Structural Materials of the Muon-Catalyzed Fusion Hybrid Reactor // Muon Catalyzed Fusion, 1989, v.4, p.231-234.
5. Конобеев А.Ю., Коровин Ю.А., Соснин В.Н. Простые формулы для расчета сечений смещения при облучении конструкционных материалов частицами с атомной массой $A < 4$ в области энергий до 150 МэВ // В кн.: Расчетные исследования экспериментальных и энергетических установок. Сборник научных трудов кафедры Общей и Специальной физики, ИАТЭ, Обнинск, 1989, N2, с.56-69.
6. Konobeyev A.Yu., Korovin Yu.A., Sosnin V.N. Radiation Damage in Muon-Catalyzed Hybrid Reactors // Kerntechnik, 1990, v.55, N6, p.358-361.
7. Конобеев А.Ю., Коровин Ю.А., Соснин В.Н. Комплекс программ DIDACS/88 для расчета сечений смещения и образования водорода, гелия и долгоживущих радионуклидов конструкционных материалов, облучаемых нуклонами энергией до 200 МэВ // Атомная энергия, 1991, т.71, вып.2, с.168-169.
8. Конобеев А.Ю., Коровин Ю.А., Соснин В.Н. Нуклонные сечения смещения для расчета повреждающей дозы при энергиях от 50 до 500 МэВ // Известия АН БССР. Серия физико-энергетических наук, 1991, N1, с.29-34.
9. Артисюк В.В., Конобеев А.Ю., Коровин Ю.А., Соснин В.Н. Выжигание долгоживущих радиоактивных продуктов деления Sr и Cs в потоке быстрых нейтронов // Атомная энергия, 1991, т.71, вып.2, с.184-186.
10. Korovin Yu.A., Konobeyev A.Yu., Sosnin V.N. BISERM, Neutron and Proton Data Library for Evaluation of Irradiation Effects in Structural Materials in the Energy Range up to 800 MeV // Fusion Technology, 1991, v.20, p.883-887.
11. Artisyuk V.V., Korovin Yu.A., Konobeyev A.Yu., Sosnin V.N. Radioactive Waste Transmutation in the Muon Catalyzed Fusion Reactor // Fusion Technology, 1991, v.20, p.689-690.
12. Konobeyev A.Yu., Korovin Yu.A., Sosnin V.N. Neutron Displacement Cross-Sections for Structural Materials below 800 MeV // Journal of Nuclear Materials, 1992, v.186, p.117-130.
13. Konobeyev A.Yu., Korovin Yu.A., Sosnin V.N. A Nuclear Data Library for Structural Material Radiation Damage Calculation at High Energies // Kerntechnik, 1992, v.57, N3, p.188-191.
14. Грудзевич О.Т., Конобеев А.Ю., Коровин Ю.А. Расчет сечений образования долгоживущих радиоактивных изотопов при облучении конструкционных материалов нейтронами с энергией выше 20 МэВ // Вопросы атомной науки и техники. Серия: ядерные константы, 1992, вып.1, с.57-64.
15. Конобеев А.Ю., Коровин Ю.А., Лунев В.П., Мастеров В.С., Шубин Ю.Н. Библиотека сечений для изучения процесса трансмутации и активации материалов, облучаемых нейтронами и протонами с энергией до 100 МэВ // Вопросы атомной науки и техники. Серия: ядерные константы, 1992, вып.3-4, с.55-58.
16. Коровин Ю.А., Конобеев А.Ю., Переславцев П.Э. Программа для расчета изотопного состава и наведенной активности облученных материалов // Вопросы атомной науки и техники. Серия: ядерные константы, 1992, вып.3-4, с.117-121.
17. Коровин Ю.А., Артисюк В.В., Конобеев А.Ю. Библиотеки сечений для исследования радиационной повреждаемости, активации и трансмутации материалов, облучаемых частицами высокой энергии // Атомная энергия, 1992, т.73, вып.1, с.24-26.
18. Конобеев А.Ю., Коровин Ю.А., Эрвю К. Сечения реакций, приводящих к трансмутации долгоживущих радионуклидов отработавшего ядерного топлива под действием быстрых нейтронов // Атомная энергия, 1992, т.73, вып.4, с.300-305.
19. Konobeyev A.Yu., Korovin Yu.A. Helium Production Cross Sections in Structural Materials Irradiated by Protons and Neutrons at Energies up to 800 MeV // Journal of Nuclear Materials, 1992, v.195, p.286-300.
20. Artisyuk V.V., Konobeyev A.Yu., Korovin Yu.A. Nucleon Induced Reaction Cross-Sections for Strontium and Cesium at Energies 1 MeV to 10 GeV // Kerntechnik, 1993, v.58, N3, p.174-181.
21. Грудзевич О.Т., Зеленецкий А.В., Конобеев А.Ю., Коровин Ю.А. Расчет актив-

- ности материалов, облучаемых в нейтронном спектре термоядерного реактора // В кн.: Расчетные исследования экспериментальных и энергетических установок. Сборник научных трудов кафедры Общей и Специальной физики, ИАТЭ, Обнинск, 1993, N5, с.43-50.
22. Конобеев А.Ю., Коровин Ю.А., Кулаченко А.В. Аналитические выражения для расчета вероятности равновесной эмиссии частиц на основе каскадно-испарительной модели // В кн.: Расчетные исследования экспериментальных и энергетических установок. Сборник научных трудов кафедры Общей и Специальной физики, ИАТЭ, Обнинск, 1993, N5, с.75-80.
 23. Konobeyev A.Yu., Korovin Yu.A. Tritium Production in Materials from C to Bi Irradiated with Nucleons of Intermediate and High Energies // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, 1993, v.B82, p.103-115.
 24. Korovin Yu.A., Konobeyev A.Yu., Pereslavitsev P.E. Comparison of Different Approaches for Nucleon Induced Reaction Cross-Section Calculation for Nonstable Long-Lived Fission Products at the Intermediate and High Energies // In: Proc. Int. Conf. on Emerging Nuclear Energy Systems. Makuhari, Japan, September 1993, p.444-448.
 25. Konobeyev A.Yu., Korovin Yu.A. Calculation of Pre-Compound Alpha-Particle Spectra for Nucleon-Induced Reactions on the Basis of the Hybrid Exciton Model // Kerntechnik, 1994, v.59, N1-2, p.72-75.
 26. Конобеев А.Ю., Коровин Ю.А., Переславцев П.Э. Расчет сечений ядерных реакций, протекающих при облучении изотопов циркония протонами промежуточных и высоких энергий // Вопросы атомной науки и техники. Серия: ядерные константы, 1994, вып.1, с.81-91.
 27. Shubin Yu.N., Lunev V.P., Konobeyev A.Yu., Korovin Yu.A. Comparison between Preequilibrium and Intranuclear Cascade Models at Intermediate Energies // In: Intermediate Energy Nuclear Data: Models and Codes, Proc. Specialists Meeting. Issy-les-Moulineaux, France, June 1994, OECD, p.35-47.
 28. Konobeyev A.Yu., Korovin Yu.A., Plyaskin V.I. Evaluation of Neutron-Induced Reaction Cross-Sections for Uranium Isotopes at Energies up to 100 MeV // Kerntechnik, 1994, v.59, N3, p.87-97.
 29. Konobeyev A.Yu., Korovin Yu.A., Pereslavitsev P.E. Systematics of (n,t) Reaction Cross Sections at 14.6 MeV // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, 1994, v.B93, p.409-414.

30. Konobeyev A.Yu., Korovin Yu.A., Semi-Empirical Systematics of (n,p) Reaction Excitation Functions // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, 1994, v.B94, p.119-129.
31. Korovin Yu.A., Konobeyev A.Yu., Pereslavitsev P.E., Plyaskin V.I. Evaluation of Neutron Induced Reaction Cross-Sections for Neptunium Isotopes at Energies up to 100 MeV // In: Proc. Int. Conf. Nuclear Data for Science and Technology. Gatlinburg, USA, May 1994, p.655-657.
32. Shubin Yu.N., Lunev V.P., Konobeyev A.Yu., Dityuk A.I. Cross-Section Library MENDL-2 to Study Activation and Transmutation of Materials Irradiated by Nucleons of Intermediate Energies // Report IAEA, INDC(CCP)-385, 1995.
33. Konobeyev A.Yu., Lunev V.P., Shubin Yu.N. Pre-Equilibrium Emission of Clusters // Acta Physica Slovaca, 1995, v.45, p.705-710.
34. Konobeyev A.Yu., Korovin Yu.A. Emission of ${}^7\text{Be}$ from Nuclei with Atomic Numbers $Z \geq 13$ Induced by Intermediate Energy Protons // Kerntechnik, 1995, v.60, N4, p.147-151.
35. Konobeyev A.Yu., Korovin Yu.A., Semi-Empirical Systematics of (n,p) Reaction Cross-Sections at the Energy of 14.5 MeV // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, 1995, v.B103, p.15-22.
36. Шубин Ю.Н., Лунев В.П., Конобеев А.Ю. Роль плотности ядерных уровней при описании сечений ядерных реакций с множественной эмиссией частиц // Препринт ФЭИ, N 2461, 1995.
37. Артслюк В.В., Конобеев А.Ю., Коровин Ю.А., Переславцев П.Э. К вопросу об активности свинцовых и свинцово-висмутовых мишеней ЭЯУ // Известия вузов. Ядерная энергетика, 1995, вып.4, с.12-18.
38. Korovin Yu.A., Konobeyev A.Yu., Pereslavitsev P.E., Plyaskin V.I., Stankovsky A.Yu. Evaluation of Nuclear Data for Transuranium Elements in the Intermediate Energy Region // Progress in Nuclear Energy, 1995, v.29 (Supplement), p.297-302.
39. Конобеев А.Ю., Коровин Ю.А., Переславцев П.Э., Пляскин В.И. Расчет сечений ядерных реакций, протекающих при взаимодействии заряженных частиц промежуточных энергий с ядрами урана // Известия вузов. Ядерная энергетика, 1995, вып.5, с.4-11.
40. Konobeyev A.Yu., Korovin Yu.A., Pereslavitsev P.E., Plyaskin V.I., Stankovsky A.Yu. WIND. Nuclear Data Library for Transactinides at Energies up to 100 MeV // Report IAEA, INDC(CCP)-384, 1995.

41. Konobeyev A.Yu., Lunev V.P., Shubin Yu.N. Semi-Empirical Systematics for (n,α) Reaction Cross Sections at the Energy of 14.5 MeV // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, 1996, v.B108, p.233-242.
42. Konobeyev A.Yu., Korovin Yu.A. Calculation of Deuteron Spectra for Nucleon Induced Reactions on the Basis of the Hybrid Exciton Model Taking into Account Direct Processes // Kerntechnik, 1996, v.61, N1, p.45-49.
43. Дитюк А.И., Конобеев А.Ю., Лунев В.П., Шубин Ю.Н. Создание систематик пороговых реакций // Вопросы атомной науки и техники. Серия: ядерные константы, 1996, вып.1, с.129-163.
44. Конобеев А.Ю., Коровин Ю.А. Исследование систематической зависимости сечения реакций $(n,2n)$ при энергии 14.5 МэВ // Известия вузов. Ядерная энергетика, 1996, вып.2, с.14-23.