Н.С. РАБОТНОВ

ИЗБРАННЫЕ ТРУДЫ. ВОСПОМИНАНИЯ

E Cor





Bront

ГОСУДАРСТВЕННАЯ КОРПОРАЦИЯ ПО АТОМНОЙ ЭНЕРГИИ «РОСАТОМ» АО «Государственный научный центр Российской Федерации — ФИЗИКО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ имени А. И. Лейпунского»

Н. С. РАБОТНОВ избранные труды воспоминания

Обнинск 2020

Н. С. Работнов. Избранные труды. Воспоминания / АО «ГНЦ РФ – ФЭИ»; отв. ред. А. В. Игнатюк. — Обнинск, 2020. — 586 с.

Книга посвящена выдающемуся ученому ГНЦ РФ – ФЭИ профессору Николаю Семёновичу Работнову.

В книге представлены основные труды Н. С. Работнова по коллективной модели ядра, по аналитической аппроксимации ядерных данных, по физике деления ядер и концепциям развития ядерной энергетики. Его работы внесли значительный вклад в систематику коллективных возбуждений четно-четных ядер и изучение особенностей аксиально-асимметричных деформаций переходных ядер. Разработанные алгоритмы построения рациональных аппроксимант и методы вычисления их погрешностей получили широкое распространение в практических анализах большой совокупности разнообразных ядерных данных. В результатах многолетних исследований фотоделения ядер накоплена уникальная информация о переходных каналовых состояниях делящихся ядер, отражающая современные представления о двугорбой структуре барьеров деления. Обсуждение ряда важных вопросов дальнейшего развития ядерной энергетики содержится в заключительном разделе сборника.

Для научных работников, аспирантов и студентов, специализирующихся в ядерной физике.

Составитель и отв. редактор А. В. Игнатюк

ISBN 978-5-907108-24-0

 \bigcirc AO «ГНЦ РФ – ФЭИ», 2020

Предисловие

Николай Семенович Работнов родился 9 марта 1936 г. в Ярославле. Его детские годы пришлись на военное время, и вместе с семьей ему пришлось испытать многие тяготы войны. Ярославль сильно бомбили, город был запасной целью при налетах немецких бомбардировщиков на Москву. Спокойнее стало только после Сталинграда, так что первые годы в школе были уже без бомб. К счастью, в семье никто не погиб. Отец, прошедший всю войну артиллеристом и закончивший ее в Кенигсберге, вернулся без единой царапины.

В 1949 г. отец получил назначение в город Челябинск-40, в котором велись «закрытые» работы по атомному проекту. Семья, естественно, поехала вместе с ним. Этот этап жизни прекрасно описан в воспоминаниях Николая Семеновича (повесть «Сороковка», журнал «Знамя» 2000 г., № 7). В этом городе в 1953 г. он окончил школу с серебряной медалью и поступил без экзаменов в Московский инженерный институт, позднее переименованный в Московский инженерно-физический институт. После завершения учебы в марте 1959 г. был направлен на работу в Лабораторию «В» (первоначальное название Физико-энергетического института). Двумя годами раньше в г. Обнинск переехали также родители Николая Семеновича, и этот город стал ему родным на всю оставшуюся жизнь.

Главным направлением работ ФЭИ была разработка ядерных реакторов на быстрых нейтронах. Наряду с огромным числом технических задач этого направления ядерной энергетики, для его успешного развития требовалось также глубокое физическое понимание многих особенностей процесса деления ядер. Совмещение фундаментальных аспектов изучения деления ядер с практическим применением полученных результатов является характерной чертой школы ядерных исследований ФЭИ, созданной работами А. И. Лейпунского, О. Д. Казачковского, И. И. Бондаренко, Л. Н. Усачева и Г. Н. Смиренкина.

Начав работать в теоретическом отделе, Николай Семенович, естественно, также был привлечен к задачам физики деления ядер. В середине 50-х годов О. Бором была предложена концепция каналов деления как переходных состояний над барьером деления, аналогичных низколежащим возбужденным состояниям ядер. Физики ФЭИ одними из первых осознали важность этой концепции для объяснения наблюдаемых вариаций множественности нейтронов деления, а также изменений кинетических энергий и угловых распределений продуктов деления. Был выполнен большой объем экспериментальных исследований этих вариаций, и многие сотрудники теоретического отдела активно привлекались к разработкам теоретического моделирования наблюдаемых эффектов.

В объяснении низколежащих коллективных возбуждений ядер очень плодотворной оказалась обобщенная коллективная модель ядра, предложенная О. Бором и Б. Моттельсоном. В последующее развитие этой модели значительный вклад внесли работы группы Московского университета, возглавляемой А. С. Давыдовым. Так как Александр Сергеевич в 1953—1956 гг. руководил теоретическим отделом ФЭИ, то тесные связи с его группой поддерживались сотрудниками ФЭИ многие годы. Уже в начальный период работы Н.С.Работнов осознал перспективность прямого сотрудничества с группой А.С. Давыдова и в 1960 г. поступил в заочную аспирантуру МГУ. Его первая научная работа о коллективных возбуждениях неаксиальных ядер была опубликована совместно с А.С. Давыдовым и А.А. Чабаном в престижном зарубежном журнале уже в первый год аспирантуры (н. сб., с. 9). Вопросы применения обобщенной модели для моделирования каналовых эффектов при делении ядер детально анализировались в работе (н. сб., с. 333). По результатам этих работ Н. С. Работновым в 1964 г. была успешно защищена кандидатская диссертация.

На последующие исследования Николая Семеновича значительное влияние оказала его полугодичная стажировка в Дании, в знаменитом институте Нильса Бора, состоявшаяся в 1966 г. В процессе стажировки он имел прекрасные возможности ознакомиться с новейшими результатами экспериментальных исследований коллективных возбуждений ядер, обсудить с ведущими мировыми специалистами ряд своих идей по улучшению моделирования таких возбуждений, а также освоиться с новейшими библиотеками вычислительных программ, используемых на зарубежных компьютерах. В те годы отечественная вычислительная техника заметно отставала от зарубежной, и информация о доступных стандартных программах представляла значительный интерес не только для ближайшего круга коллег Николая Семеновича, но и для широкого круга сотрудников других отделений ФЭИ.

Работы по коллективной модели ядра, выполненные Н. С. Работновым в последующие годы совместно с его учениками и коллегами, представленны в первом разделе настоящего сборника. На основе развитых методов решения обобщенных уравнений модели показано, что вся совокупность экспериментальных данных по спектрам коллективных возбуждений в подавляющем большинстве четно-четных ядер связана с изменениями их формы. По результатам полученных решений построены систематики, которые по двум параметрам, характеризующим нижайшие коллективные уровни ядер, позволяют построить полный спектр коллективных уровней и рассчитать с хорошей точностью квадрупольные моменты уровней и вероятности электромагнитных переходов между ними. Детально исследованы закономерности бета- и гамма-вибрационных возбуждений переходных ядер, обусловленные их динамической неаксиальностью. В рассмотренных работах значительный интерес представляют не только полученные теоретические предсказания свойств ядер, но и разработанные новые методы решения уравнений коллективной модели, которые могут быть успешно использованы для многих других задач теоретической физики.

Следует отметить, что в середине шестидесятых годов существенно изменились представления физики деления о форме барьеров деления ядер. Теоретический анализ накопленной экспериментальной информации о каналовой структуре барьеров деления, подтвердив некоторые качественные предсказания модели каналов О. Бора, в то же время показал существенные противоречия наблюдаемых вариаций анизотропии деления в околопороговой области с представлениями классической одногорбой модели барьера. Противоречия удалось устранить только на основе модели двугорбого барьера деления, предложенной В. М. Струтинским в 1967 г. На ранних этапах развития этой модели важно было понять, какие изменения в общие соотношения статистической теории ядерных реакций вносит такая модель. Основная часть ответов на этот вопрос была получена в рамках анализа проницаемости двугорбого барьера в квазиклассическом приближении (н. сб., с. 32). Аналитические формулы квазиклассического приближения хорошо воспроизводят результаты более сложных моделирований проницаемости барьеров деления ядер, и на их основе было получено успешное описание большой совокупности экспериментальных данных о каналовых структурах нейтронных сечений деления ядер (н. сб., с. 35) и аналогичных структурах сечений фотоделения (н. сб., с. 374). По результатам работ, представленных в первом разделе сборника, Н. С. Работновым в 1972 г. была защищена докторская диссертация.

В последующие годы круг интересов Николая Семеновича существенно сместился к математическим аспектам анализа ядерных данных. В значительной мере это было связано с практическими потребностями ядерной энергетики, перспективные проекты которой требуют переработки больших объемов данных. Работы по этому направлению представлены во втором разделе настоящего сборника. Основные результаты исследований связаны с развитием методов аналитической аппроксимации данных рациональными функциями. На конкретных задачах рассмотрены особенности построения алгоритмов рациональных аппроксимант и специфические особенности вычисления ковариационных матриц погрешностей полученного описания данных. Прекрасным обзором разработанных методов является включенная в сборник монография (н. сб., с. 176). Следует отметить, что эти методы активно использовались в ФЭИ для широкого круга задач, и ссылки на монографию содержатся во многих отечественных и зарубежных публикациях.

На протяжении всех лет работы Николай Семенович активно сотрудничал с экспериментальными лабораториями, и эти контакты были плодотворными для обеих сторон. Особенно плодотворным оказалось такое сотрудничество в изучении фотоделения ядер. Широкомасштабные экспериментальные исследования фотоделения были начаты в середине шестидесятых годов на базе сотрудничества лаборатории Смиренкина Г. Н. с Институтом физических проблем РАН (Москва), где незадолго до этого был сконструирован микротрон, обеспечивающий интенсивные потоки гамма-лучей. Для регистрации событий деления в условиях интенсивного фона гамма-квантов использовались трековые детекторы из стекла и слюды, и именно такая методика сыграла определяющую роль в успехах проведенных исследований. Н. С. Работнов активно участвовал в теоретическом анализе всей совокупности полученных данных, начиная с первых этапов работ. Естественно, что результаты первых экспериментов интерпретировались на основе стандартной модели одногорбого барьера деления (н. сб., с. 344). Наблюдаемые угловые распределения фотоделения четно-четных ядер ²³⁸U и ²⁴⁰Pu прекрасно подтвердили предсказания модели О. Бора о доминировании квадрупольных каналов при подбарьерном делении ядер и переходе к дипольному делению для надпороговых энергий. Однако в интерпретации разности порогов дипольного и квадрупольного деления возникли определенные противоречия с данными, полученными для порогов деления в нейтронных реакциях.

Переход к модели двугорбого барьера существенно изменил интерпретацию многих экспериментальных данных. В рамках этой модели пороги сечений деления определяются наиболее высоким из горбов, тогда как пороги каналов деления определяются главным образом внешним горбом. Пересмотр всей совокупности данных устранил большую часть имевшихся ранее противоречий анализа угловых распределений фотоделения, и уточненные результаты стали важным подтверждением справедливости новых представлений о сложной структуре барьеров деления ядер (н. сб., с. 374 и с. 397). Результаты исследования фотоделения были зарегистрированы в 1982 году как научное открытие СССР № 269 «Закономерности подбарьерного деления четно-четных ядер», совершенное коллективом авторов: Н. С. Работнов, Г. Н. Смиренкин, А. С. Солдатов, Л. Н. Усачев (ФЭИ) и С. П. Капица, Ю. М. Ципенюк (ИФП АН СССР).

Другим направлением физики деления ядер, долгие годы привлекавшим внимание Николая Семеновича, были исследования деления ориентированных ядер. Ориентация углового момента ядера-мишени изменяет соответствующим образом парциальные вклады различных каналов деления, и можно ожидать, что анализ этих изменений даст дополнительную информацию о структуре барьеров деления. Работы этого направления представлены в четвертом разделе сборника. К сожалению, выстраивание ядер в техническом отношении оказалось весьма сложной задачей, решение которой заняло много времени. По многим причинам удалось реализовать лишь малую часть планировавшихся экспериментов по делению ориентированных ядер ²³³U и ²³⁵U быстрыми нейтронами (н. сб., с. 440 и с. 458). Полученные результаты подтвердили перспективность работ с ориентированными ядрами, но для более полного анализа требовалось существенное уменьшение погрешностей измерений. Перспективность исследований значительно повысилась при переносе работ на импульсный реактор ОИЯИ (г. Дубна), где удалось провести измерения угловой анизотропии деления ориентированных ядер ²³⁵U резонансными нейтронами (н. сб., с. 478). Статистические погрешности этих измерений также оказались слишком высокими. Продолжению работ помешала многолетняя остановка реактора на модернизацию и последовавшие за ней болезни и уход из жизни основных исполнителей работ. При обсуждениях планов дальнейших работ на модернизированном реакторе Николай Семенович неоднократно отмечал целесообразность возвращения к исследованиям деления ориентированных ядер.

Девяностые годы внесли значительные изменения в жизнь Николая Семеновича. В 1990 г. ему было присвоено ученое звание профессора, в 1991 г. он был избран действительным членом Российской академии естественных наук и в 1994 г. ему присвоено почетное звание «Заслуженный деятель науки Российской Федерации». В 1992 г. он был назначен заместителем директора ФЭИ по фундаментальным исследованиям. В связи с новой должностью он начал все более вовлекаться в обсуждение острейших проблем развития ядерной энергетики: поиски оптимальных технологий замыкания ядерного топливного цикла и технологий переработки ядерных отходов. Научные публикации Николая Семеновича по этим вопросам представлены в пятом разделе сборника.

Наряду с актуальными научными задачами проблемы ядерной энергетики включает в себя множество социальных вопросов национального и международного уровня. Яркие публикации Работнова Н. С. по этим вопросам в журнале «Знамя» получили самое широкое признание общественности. В частности, статья «С дровами в XXI-й век» («Знамя», 1992, вып. 2) многократно упоминалась в процессе протестного движения строительству реактора БН-800 жителей Свердловской и Челябинской областей, и, по мнению многих, она сильно способствовала уменьшению общей радиофобии и изменению отношения населения к сооружению реактора. Не менее широкое обсуждение вызывала статья «На державу обидно?» («Знамя», 1999, вып. 8), которая удивительным образом отразилась на судьбе самого автора (н. сб., с. 550). В целом в «Знамени» опубликовано более 30 статей Николая Семеновича, большая часть которых совершенно не связана с его профессиональными интересами. Эти статьи демонстрируют поразительную разносторонность интересов автора, которая была отмечена в 2001 г. специальной премией редакции журнала «За творческий универсализм».

С 2000 по 2002 год Работнов Н. С. работал в должности главного ученого секретаря Минатома России, в 2002—2004 годах — представителем России в Международном проекте по инновационным ядерным реакторам и топливному циклу (ИНПРО МАГАТЭ). Работа по Международному проекту оказалась весьма специфической. Надо было анализировать многочисленные предложения государств — участников проекта и выделять в них «золотые зерна», удовлетворяющие интересы всех сторон. Программа ИНПРО разрабатывалась широким кругом экспертов, и значительный вклад Николая Семенович в формирование ее основополагающих документов был специально отмечен руководством проекта (н. сб., с. 554).

В начале 2005 г. тяжелое заболевание вынудило Николая Семеновича покинуть МАГАТЭ и после возвращения в Обнинск уйти на пенсию. Он про-

должал активно публиковаться в журнале «Знамя», по мере сил боролся с болезнью и ушел из жизни 27 октября 2006 г.

Николай Семенович Работнов является ученым мирового уровня, внесшим огромный вклад в широкий круг фундаментальных исследований по ядерной и нейтронной физике. Его пионерские работы по коллективной модели ядра и анализу деления атомных ядер в течение многих лет определяли направления поисковых работ многих теоретиков и экспериментаторов. Новым направлением развития теоретических методов явилась разработка аналитической аппроксимации данных, которая в дальнейшем успешно применялась для анализа и практической оценки большой совокупности разнообразных ядерных данных. Светлый образ Николая Семеновича неизменно сохраняется в памяти его друзей и коллег.

А. В. Игнатюк

РАБОТЫ ПО КОЛЛЕКТИВНОЙ МОДЕЛИ ЯДРА

Rotational Energies and Moments of Inertia of Non-Axial Nuclei

A. S. Davydov, N. S. Rabotnov and A. A. Chaban

Moscow State University, Moscow

Received 18 November 1959

It is shown that the ratios of rotational energies of a non-axial nucleus depending on the ratios of energies of two rotational states with spin 2 change but little with the deviation of nuclear moments of inertia from their hydrodynamic values.

1. Introduction

In the papers of Davydov and Filippov [1] and of Davydov and Rostovsky [2] a theory of the rotational states was developed for nuclei which do not possess axial symmetry. It was shown that the ratio of the energy of all the rotational levels to the energy of the first excited state with spin 2 is uniquely determined if the experimental value of the corresponding ratio for the second spin 2 state is available. It was further shown that the relative probabilities for quadrupole electric transitions between rotational levels are also determined uniquely through the same ratio of energies.

These simple results are obtained if one makes two simplifying assumption: a) the internal nuclear state does not change with its rotation (adiabatic approximation), b) the principal nuclear angular momenta are expressed only through two parameters A and γ with the help of the equalities

$$I_i = A\sin^2\left(\gamma - \frac{2}{3}\pi i\right), \ i = 1, 2, 3.$$
(1)

Such dependence of angular momenta on γ is, in particular, obtained in the hydrodynamic nuclear model and therefore we shall call this approximation a hydrodynamical one.

It seems natural to inquire to what extent the results of refs. [1, 2] are to be affected if one abandons both simplifying assumptions. MacDonald^{*} has used the expression for the moments of inertia in the form

^{*} The authors wish to thank N. MacDonald for kindly sending the preprint of his work.Nuclear Physics 17 (1960) 169 — 174.

$$I_i = I_i^H \left[\left(\frac{I_i^H}{I_i^R} \right)^{\frac{1}{2}} + \rho \right]^{-2}.$$
 (2)

Where I_i^R are the moments of inertia of a solid body, I_i^H are the moments of inertia coinciding with I_i , of formula (1) at $A = 4B\beta^2$, and ρ is a new parameter which was taken to be equal to 0.1 and 0.2. The peculiar feature of expression (2) is that $I_i \rightarrow I_i^R$ for $\rho \rightarrow 0$; for $\rho \neq 0$ and $\gamma \rightarrow 0$, the moment of inertia $I_3 \rightarrow 0$; for $\rho \neq 0$ and $\beta \rightarrow 0$, all the values $I_i \rightarrow 0$. Formula (2) can be considered as an empirical formula which takes into account the deviations of the nuclear moments of inertia from their hydrodynamical values. MacDonald has investigated only rotational levels of spin 2. We shall show below that in this case it is impossible to determine which of the corrections is more important: non-adiabatic conditions or deviation of the moments of inertia from their hydrodynamical values.

The present work attempts to investigate in adiabatic approximation the rotational states of non-axial nuclei with three arbitrary principal moments of inertia. We shall show that in the general case the ratio of the rotational energies is expressed in terms of the following two parameters: ξ , which is the energy ratio of two levels with spin 2, and η , which is a parameter depending on the character of collective motions responsible for the rotation of the nucleus: Comparison of the results with experiment allows us to establish that the hydrodynamical approximation is sufficient for calculating energy ratios of the rotational levels. The reason for deviations of the theoretical results from experiment is to be sought in the interaction of rotation with the internal nuclear states.

2. Calculation of the Rotational Energies

Let us unite down the operator of the rotational energy of a non-axial even nucleus in adiabatic approximation

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3} a_i J_i^2 ,$$

where $a_i = \hbar^2 / I_i$, and J_i are the projections of the angular momentum on the principal directions of the nucleus; I_i are the principal moments of inertia of the nucleus.

It has been pointed out in ref. [2] that the rotational states of even nuclei belong to the total symmetry representation of group D_2 . In the present article we shall consider only such states. It is easy to show that the energies of the rotational states of spin 2 is determined by the equation

$$E^{2} - 2(a_{1} + a_{2} + a_{3})E + 3(a_{1}a_{2} + a_{1}a_{3} + a_{2}a_{3}) = 0.$$

If we express the roots of this equation by $E_1(2)$ and $E_2(2)$, and use the properties of the coefficients of a quadratic equation, we shall be able to write

$$\frac{\sum a_i}{E_1(2)} = \frac{1}{2} (1+\xi), \ \frac{a_1 a_2 + a_1 a_3 + a_2 a_3}{E_1^2(2)} = \frac{1}{3} \xi,$$
(3)

where

$$\xi = \frac{E_2(2)}{E_1(2)} > 1.$$

The energies of all rotational states will be expressed in dimensionless units $\varepsilon = E / E_1(2)$. Then the energies of the rotational states with spins 3 and 5 will be directly expressed through the experimentally determinable ratio t with the help of the formulae

$$\varepsilon(3) = 1 + \xi, \ \varepsilon_1(5) = 4 + \xi, \ \varepsilon_2(5) = 1 + 4\xi.$$

The energy of the rotational levels of other spin values depends not only on the parameter ξ but also on the other parameter

$$\eta = \frac{a_1 a_2 a_3}{E_1^3(2)}.$$
(4)

Thus, for instance, the energy levels of spin 4 and 6 are defined by the respective equations

$$\begin{split} \epsilon^{3} - 5(1+\xi)\epsilon^{2} + 4\bigg[\xi^{2} + \frac{19}{3}\xi + 1\bigg]\epsilon - 40\bigg[\frac{1}{3}\xi(1+\xi) + 7\eta\bigg] &= 0,\\ \epsilon^{4} - 14(1+\xi)\epsilon + 49\big(1 + 4\xi + \xi^{2}\big)\epsilon^{2} - \bigg[36\big(\xi^{3} + 1\big) + 578\xi(1+\xi) + 3888\eta\bigg]\epsilon + \\ &+ \bigg[252\xi\big(1+\xi^{2}\big) + 889\xi^{2} + 13608(1+\xi)\eta\bigg] = 0. \end{split}$$

If the moments of inertia are determined by formula (1), then

$$\eta = \eta_H = \xi^2 \left[18 \left(1 + \xi \right) \right]^{-1}$$

and the energies of all the rotational states will be functions of only one parameter ξ , which in this case equals or exceeds 2, while in the general case η is a second parameter, whose possible values lie in a certain interval which can be determined through the value of ξ . In order to determine the limits of this parameter variation depending on ξ , we have to take into account that according to eqs. (3) and (4) the values $a_i/E_1(2)$ (i = 1, 2, 3) are the roots of the equation of the third degree

$$x^{3} - \frac{1}{2}(1+\xi)x^{2} + \frac{1}{3}\xi x - \eta = 0$$

In conformity with the requirement that the roots of this equation should be real and positive, we find that the value η can lie in the following intervals, determinable through the value of ξ :

$$\xi^{2}(3-\xi) \leq 54\eta \leq 3\xi - 1 \quad \text{if} \quad 1 < \xi \leq 3; \\ 0 \leq 54\eta \leq 3\xi - 1 \quad \text{if} \quad \xi \geq 3.$$
 (5)

The ratios $\varepsilon_1(4)$ and $\varepsilon_2(4)$, as functions of ξ for different values of η satisfying the inequalities (5), are represented in fig. 1. The shaded area lies between the curve corresponding to the hydrodvnamical approximation (designated by η_H) and the curve corresponding to the moments of inertia determined with the help of eq. (2) at $\beta = \rho = 0.2$ (designated by η_{HD}). Fig. 2 shows the possible values of $\varepsilon_1(6)$ ratios for different values of ξ and the values of η that satisfy the inequalities (5).

One should certainly keep in mind that the values of η satisfying the inequalities (5) correspond to all possible relations between the principal angular momenta



Fig. 1. The possible theoretical values of the ratios $\varepsilon_1(4)$ and $\varepsilon_2(4)$ for different values of ξ and η

and in particular to some which obviously cannot be realized in a nucleus/ Such is, for instance, the case of a solid-body rotation of a spherical body ($I_1 = I_2 = I_3$, $\xi = 1$) marked by a cross in figs. 1 and 2. Similar are the cases for which η is near to or equals zero.





3. Comparison with Experiment and Discussion

Recently it has become customary to consider that in nuclei the moments of inertia have values which are intermediate between those given by a hydrodynamical model and by a solid-body rotation model. Therefore, the real relation between the principal moments of inertia of a nucleus apparently corresponds to those values of η for which the energy ratios $\varepsilon_i(J)$ are shifted from the hydrodynamical values in the direction of the shaded area. This being taken into account, the energy ratios $\varepsilon_i(J)$ will only slightly change with the change of η values tolerated for atomic nuclei. This dependence becomes particularly slight for $\xi \ge 4$. Almost all the experimental ratios of $\varepsilon_1(4)$ and $\varepsilon_1(6)$ available at the present moment (see table 1) lie lower than the possible theoretical values calculated in adiabatic approximation (the shaded areas in figs. 1 and 2), while the experimental energy ratios $\varepsilon_2(4)$ lie lower than the theoretical ones at any η satisfying inequalities (5). This indicates that the agreement of the theory with experiment cannot be improved by passing from the hydrodynamical moments of inertia to values intermediate between these and the moments of inertia obtained in a solid-body model. Moreover, it follows from fig. 1 that if we formally choose those relations between the three principal moments of inertia which improve the agreement with the experimental $\varepsilon_1(4)$ ratios, we shall at the same time make this agreement worse for the $\varepsilon_2(4)$ ratios. Thus, it may be stated that the disagreement of the theory experiment is occasioned by the adiabatic approximation used in the calculations.

The results obtained in the present article permit to expect that a theory which will take into account the coupling between rotation and the internal excited states of a nucleus can be developed on the basis of the dependence of the angular momenta in the hydrodynamical model on the parameter γ responsible for the deviation of the shape of the nucleus from axial symmetry. The dependence of the relative energies $\epsilon_1(4)$, $\epsilon_2(4)$ and $\epsilon_1(6)$ on the deviation of the parameter η from its hydrodynamical value η_H is less than the corrections due to the violation of the adiabatic conditions.

E-manine antal nation

Table 1

Experimental fattos							
Nucleus	$E_1(2)$ (keV)	٤	ε(3)	$\epsilon_1(4)$	$\epsilon_{2}(6)$	$\epsilon_{1}(4)$	Ref.
Os ¹⁹⁰	186.7	2.99	4.04	2.94	5.12	5.61	3, 5
Mg^{24}	1368	3.09	3.82	3.01	4.61	_	3
Fe ⁵⁶	845	3.49	4.54	2.47	4.85	_	6
Os^{188}	155	4.09	5.10	3.08	6.17	_	4
Os ¹⁸⁶	137.2	5.60	6.63	3.16	7.73	0.33	4
Sm^{152}	122.3	8.92	10.14	3.01	11.68	_	4
Er^{166}	80.7	9.76	10.67	3.29	11.87	6.76	7
Er^{168}	79.9	10.29	11.22	3.31	12.47	6.86	7
Dy^{160}	87.0	11.16	12.11	3.27	13.35	6.70	8
Gd ¹⁵⁶	89.0	13.01	14.0	3.24	15.34	6.56	3,4
W^{182}	100.9	12.11	13.20	3.26	14.68		4

References

- 1. A.S. Davydov and G.F. Filippov, JETP 35 (1958) 440; Nuclear Physics 8 (1958) 237.
- 2. A.S. Davydov and V.S. Kostovsky, JETP 36 (1959) 1788; Nuclear Physics 12 (1959) 58.
- 3. B.S. Dželepov and L.K. Peker, Decay Schemes of Radioactive Nuclei (Moscow, 1958).
- 4. B.S. Dželepov and L.K. Peker, Excited States of Radioactive Nuclei, UINR, Dubna, p. 2158.
- 5. O. Nielson. N. Roy Poulson, R. Sheline and B.S. Jensen, Nuclear Physics 10 (1959) 475.
- 6. S. Cook, Nuclear Physics 7 (1958) 480.
- 7. K.P. Jacob. J.W. Mihelich, R. Hantz and T. Handey, Bull. Am. Phys. Soc. 3 (1958) 558.
- 8. B. Bitterlikh, E.P. Grigoriev, B.S. Dželepov, A.P. Zolotavin and B. Kratzik, Izv. Acad. Nauk SSSR, Ser. Fiz. 23 (1959) 868.

О коллективных возбуждениях слабодеформированных ядер

Н. С. Работнов, А. А. Серегин

(Поступила в редакцию 23 июля 1966 г.)

В пренебрежении ангармоническими эффектами и сдвигом частоты нулевых колебаний ядерной поверхности из-за взаимодействия с вращением получена простая универсальная связь между точным значением отношения $E_1(4^+) / E_1(2^+)$, энергиями остальных уровней ротационной полосы и β -колебательного уровня 0^+ для четно-четных аксиальных ядер. Наиболее интересно сравнение полученных кривых с. экспериментальными данными по уровням 0^+ и 6^+ для слабодеформированных ядер, где теоретические выражения позволяют проследить переход от эквидистантного спектра сферических ядер к ротационному спектру сильнодеформированных жестких ядер. Этот переход прослеживается на эксперименте в удовлетворительном согласии с расчетными кривыми, которые, кроме того, позволяют предсказать положение уровней 0^+ и 6^+ для тех ядер, у которых они не-известны.

В работе Даймонда и др. [1] было показано, что простые формулы, получающиеся в пренебрежении ангармоническими эффектами и сдвигом частоты пулевых β-колебаний из-за взаимодействия с вращением, с большой точностью описывают значения энергий ротационной полосы основного состояния аксиальных сильнодеформированных ядер вплоть до самых высоких наблюдаемых значений момента. В настоящей работе мы применим то же самое приближение для рассмотрения взаимодействия вращения с колебаниями в случае ядер с небольшой деформацией, уровни которых соответствуют переходной области от эквидистантного колебательного спектра сферических ядер к чисто ротационным состояниям деформированных жестких ядер.

В рассматриваемом приближении ротационная часть гамильтониана диагонализируется отдельно, и полученная вращательная энергия жесткого асимметричного полчка с моментами инерции, зависящими от параметров β и γ , и полным моментом *J* служит просто добавкой в «эффективную потенциальную энергию»:

$$V_{\ni\varphi\varphi} = V(\beta,\gamma) + E_{rot}^{0}(J,\beta,\gamma), \qquad (1)$$

где

$$V(\beta,\gamma) = \frac{c_{\beta}}{2} (\beta - \beta_0)^2 + \frac{c_{\gamma}}{18} \beta \beta_0 (1 - \cos 3\gamma)$$
(2)

(см., например, работу [2]). Здесь β_0 — равновесное значение параметра де-

Ядерная физика, 1967, т. 5, вып. 5, с. 996—1000.

формации ядра в основном состоянии, а c_{β} и c_{γ} — коэффициенты, характеризующие жесткость ядра по отношению к β - и γ -деформациям. Тогда энергия любого ротационного уровня E(J) находится минимизацией этого выражения по параметрам β и γ , т. е.

$$E(J) = V_{ij}\phi_{jk}(\beta_{min}, \gamma_{min}), \qquad (3)$$

где β_{min} и γ_{min} определяются системой уравнений

$$\frac{\partial V_{3\phi\phi}}{\partial \gamma}\Big|_{\gamma=\gamma_{\rm min}} = \frac{\partial V}{\partial \beta}\Big|_{\beta=\beta_{\rm min}} = 0.$$
(4)

Рассмотрим основную ротационную полосу. Как показано в работах Давыдова, Филиппова и Ростовского [3, 4], при заданном значении β величины E_{rot}^{0} являются монотонно возрастающими функциями γ при малых отклонениях от положения равновесия, поэтому второе из уравнений (4) для основной ротационной полосы удовлетворяется значением $\gamma_{\min} = \gamma_0 = 0$, при подстановке которого в первое уравнение получается условие для определения равновесного значения β_{\min} , не содержащее γ . Вводя обозначения $p_j = \beta_{\min}^J / \beta_0$ и $\mu^2 = \hbar/\beta_0^2 \sqrt{c_\beta B}$, для уровней основной ротационной полосы можно получить

$$E(J) = E_{\beta}(0) \left[\frac{(p_J - 1)^2}{2\mu^2} + \frac{\mu^2 J(J + 1)}{6p_J^2} \right],$$
(5)

где

$$p_J - 1 = \frac{J(J+1)\mu^4}{3p_J^3},$$
(6)

а $E_{\beta}(0) \equiv \hbar \omega_{\beta} = \hbar \sqrt{c_{\beta}/B}$ — энергия β -колебательного уровня 0^+ в гармоническом приближении. В работе [1] эти соотношения были использованы для расчета величин E(J) при высоких значениях момента для деформированных ядер. Информацию о положении уровней, содержащуюся в уравнениях (5), (6) для разных моментов, можно более компактно записать следующим образом. Введем обозначения

$$e(J) = \frac{E(J)}{E_{\beta}(0)} \left(\frac{12}{J(J+1)}\right)^{1/2}, \ v_J^2 \equiv \left(\frac{J(J+1)}{12}\right)^{1/2} \mu^2, \ x_J \equiv \left(\frac{p_J - 1}{p_J}\right)^{1/2}.$$
 (7)

Тогда из соотношений (5), (6) следует, что для любых моментов

$$e = x + x^3, \tag{8}$$

$$v^{2} = x/2\left(1-x^{2}\right)^{2}.$$
(9)

Последние два равенства параметрически определяют функцию $e(v^2)$, график которой приведен на рис. 1. При известной функции $e(v^2)$ значение энергии



любого уровня основной ротационной полосы по отношению к энергии β -колебательного уровня 0^+ определяется равенством

$$\frac{E(J)}{E_{\beta}(0)} = \left(\frac{J(J+1)}{12}\right)^{\frac{1}{2}} e\left(\left(\frac{J(J+1)}{12}\right)^{\frac{1}{2}} \mu^{2}\right).$$
 (10)

Будем измерять энергии всех коллективных состояний, приняв за единицу значение энергии E(2), и введем соответствующее обозначение $E(J)/E(2) \equiv \varepsilon(J)$. Тогда с помощью равенства (10) можно получить следующую систему уравнений:

Рис. 1. Кривая $e(v^2)$, определяемая уравнениями (8), (9)

$$\epsilon_{\beta}(0) = \sqrt{2}/e(\sqrt{2}\mu^{2})$$

$$\epsilon(4) = \sqrt{\frac{10}{3}e(\sqrt{\frac{5}{3}}\mu^{2})}/e(\sqrt{2}\mu^{2})}$$

$$\epsilon(6) = \sqrt{7}e(\sqrt{\frac{7}{2}}\mu^{2})/e(\sqrt{2}\mu^{2})$$
(11)

Эта система параметрически определяет две кривые (изображенные на рис. 2; $\varepsilon(0) = f_1(\varepsilon(4))$ и $\varepsilon(6) = f_2(\varepsilon(4))$, которые отражают универсальную (т. е. относящуюся к ядрам с произвольной деформацией и деформируемостью) и не содержащую никаких параметров связь между экспериментально наблюдаемыми величинами E(2), E(4), E(6) и $E_{B}(0)$. Эту связь удобно представить именно в том виде, который приведен на рис. 2, поскольку отношение є(4) известно с достаточной точностью у большого числа ядер, и кривые, определяемые системой уравнений (11), можно сравнить с экспериментом и предсказать положение уровней E(6) и E(0) для тех ядер, у которых известно отношение $\varepsilon(4)$. При изменении параметра μ^2 от ∞ до 0 эквидистантный вибрационный спектр сферических ядер должен непрерывно переходить в ротационный спектр, подчиняющийся закону J(J+1), т. е. $\varepsilon(6)$ должно изменяться от 3 до 6.7/2.3 = 7, $\varepsilon(4)$ — от 2 до 4.5 / 2.3 = 10/3, а отношение $\varepsilon_{\beta}(0)$ — возрастать от 2 до бесконечности. Оба предельных случая хорошо известны, и на рис. 2а, б теоретические кривые сравниваются с экспериментом в менее исследованной области ядер с $2,2 \le \epsilon$ (4) ≤ 3.2 , которую можно условно назвать областью «слабодеформированных ядер». В разных частях таблицы Менделеева известно около сорока ядер, попадающих в эту область, причем заполнена она довольно равномерно. Вблизи области сферических ядер (левый нижний край кривых на рис. 2 а, б) применимость нашего приближения нарушается, но и в этом предельном случае выражения (7) — (11) дают качественно правильные значения относительных энергий $\varepsilon_{\beta}(0) = 1,41$, $\epsilon(4) = 1,82, \epsilon(6) = 2,65$ вместо точных квантово-механических значений 2, 2, 3.



Рис. 2. Теоретические кривые $\varepsilon(0) = f_1(\varepsilon(4))$ (случай а) и $\varepsilon(6) = f_2(\varepsilon(4))$ (случай б), определяемые уравнениями (7) — (11), и сравнение их с экспериментальными данными. Кружочками обозначено положение уровней 0⁺ и 6⁺, известных экспериментально, вертикальными черточками — ожидаемое положение этих уровней для ядер, у которых известны лишь уровни 2⁺ и 4⁺. Заштрихованы слева области сферических ядер, справа — области сильнодеформированных жестких ядер. Экспериментальные величины взяты из книги Джелепова и др. [5] и теоретической работы Соловьева [6], где содержится сводка экспериментальных данных по уровням 0⁺, 6⁺, а также из работ [7, 8]

Таким образом, между энергиями уровней основной ротационной полосы и β -колебательным уровнем 0⁺ существуют простые и достаточно точно выполняющиеся соотношения, определяемые формулами (7) — (11) или непо-

средственно (5), (6). Эти соотношения являются более общим аналогом закона J(J+1) для случая ядер с произвольной деформацией и деформируемостью. Кривую рис. 2, а можно использовать для предсказания положения уровней 0⁺ и при $\varepsilon(4) > 3,2$, продолжив ее в эту область. В таблице сведен цифровой материал, соответствующий рис. 2: для всех слабодеформированных ядер с известными значениями E(2) и E(4) приведены теоретические значения энергий уровней 0⁺ и 6⁺, а также экспериментальные значения в тех случаях, где они имеются.

U ^T DO	<i>E</i> (2) _{ЭКСП} , кэВ	c(4)	<i>E</i> (6)	, кэВ	<i>E</i> (0	<i>E</i> (0), кэВ	
лдро		е(4)эксп	теория	эксперим.	теория	эксперим.	
Nd ¹⁴⁰ °	1025	2,27	3750		2140		
Nd ¹⁵⁰	132	2,97	742		660	690	
Sm^{150}	337	2,35	1290	1270	725	741	
Sm^{152}	122	3,009	691	705	667	683	
Gd ¹⁵⁴	123,1	3,015	710	718	684	680	
Dy ¹⁵⁶	138	2,93	748	766	632		
Dy ¹⁵⁸	99,3	3,198	632	633	993	991	
Os ¹⁸²	132	3,106	796	806	955		
Os ¹⁸⁴	119,8	3,205	772	784	1235		
Os ¹⁸⁶	137	3,166	860	868	1190		
Os ¹⁸⁸	155	3,09	906	950	1084	1086	
Os ¹⁹⁰	186,7	2,934	1012	1048	865		
Os ¹⁹²	205,7	2,82	1050		749		
Pt ¹⁸⁸	256	2,57	1130	1177			
Pt ¹⁹⁰	295	2,49	1240	1283	660		
Pt ¹⁹²	316,5	2,479	1320	1388	703		
Pt ¹⁹⁴	329	2,48	1370	1386	732		
Pt ¹⁹⁶	355,7	2,484	1480		793		
Hg ¹⁹⁶	426	2,47	1765		945		
Hg^{198}	412	2,53	1780		906		
Hg^{200}	368	2,57	1625		892		
Ra ²¹⁸	324,0	2,61	1460		870		
Ra ²²⁰	177	2,69	662		540		
Ra ²²²	111,1	2,77	552		362		
Ra ²²⁴	84,5	3,00	476	487	448		
Ra ²²⁶	67,8	3,097	415	416	476		
Ra ²²⁸	60	3,08	355		406		
Th ²²⁴	93	3,01	526		486		
Th ²²⁶	72,1	3,14	437		580		

Примечание. Экспериментальные данные взяты из работ [5—8]. Для проверки теории наибольший интерес представляло бы определение положения уровней 0⁺ у изотопов осмия, платины и радия.

Однозначную связь между величинами $\varepsilon(4)$ и $\varepsilon(6)$ можно получить, исключив параметр γ_0 , из формул теории неаксиальных ядер Давыдова — Филиппова — Ростовского. Соответствующая кривая проведена пунктиром на рис. 26. Видно, что она не охватывает всего интервала значений $\varepsilon(4)$ и $\varepsilon(6)$. Поэтому интерпретация этих состояний вместе с уровнем 0^+ на основе представлений об аксиально-симметричном деформируемом ядре кажется более естественной, и результаты, приведенные на рис. 2a, б, служат доводом в пользу того, что все ядра аксиальны в основном состоянии и в состояниях основной ротационной полосы. Более точные теоретические соотношения можно получить численным исключением параметра μ^2 из выражений квантовой теории Давыдова — Чабана [9], однако простые выражения (7) — (11) имеют, повидимому, точность, достаточную для наших целей.

Поскольку при получении результатов было использовано предположение о равенстве вращательного и β-колебательного массовых параметров, то хорошее согласие с экспериментом подтверждает справедливость указанного предположения, и это один из физических выводов настоящей работы.

Наконец, следует заметить, что, согласно нашим результатам, большой интерес представляют относительные значения энергий коллективных уровней, и если в спектроскопическом эксперименте есть возможность установить эти относительные величины с большей точностью, чем абсолютные, то их обязательно следует приводить при изложении экспериментальных данных.

Литература

- 1. R. Diamond, F. Stephens, W. Swiatecki. Phys. Lett., 11, 315, 1964.
- 2. A. S. Davydov. Nucl. Phys., 24, 682. 1901.
- 3. А. С. Давыдов, Г. Ф. Филиппов. ЖЭТФ, 35. 440. 1958.
- 4. А. С. Давыдов, В. С. Ростовский. ЖЭТФ, 36. 1788. 1959.
- 5. Б. С. Джелепов, Л. К. Пекер, В. О. Сергеев. Схемы распада радиоактивных ядер, АН СССР, 1963.
- 6. В. Г. Соловьев. Коллективные неротационные состояния деформированных четно-четных ядер. Препринт Р-1973, ОИЯИ, 1965.
- 7. H. Morinaga. Nucl. Phys., 75, 385, 1966.
- 8. B. Greetzer, G. B. Hagemann, K. A. Hagemann, B. Elbek. Nucl. Phys., 76, 1, 1966.
- 9. A. S. Davydov, A. A. Chaban. Nucl. Phys., 20, 499, 1960.

On Collective Excitations of Weakly Deformed Nuclei

N. S. Rabotnov, A. A. Seregin

A simple universal relation between the exact value of the ratio $E_1(4^+)/E_1(2^+)$. energies of the other levels of rotational baud and β -vibrational level 0⁺ for the evenoven axial nuclei is obtained neglecting the effects of unharmonicity and the frequency shift of the zero-vibrations of nuclear surface due to interaction with rotation. It is of greatest interest to compare the obtained curves with the experimental data for 0⁺ and 6⁺ levels of weakly deformed nuclei where it is possible to follow theoretically the transition from the equidistant spectrum of spherical nuclei to the rotational spectrum of strongly deformed rigid nuclei The calculated curves are in satisfactory agreement with the experimental data and allow to predict the positions of the levels 0⁺ and 6⁺ for the nuclei where these levels are unknown.

Геометрическая модель симметричного деления

В. С. Ставинский, Н. С. Работнов, А. А. Серегин

(Поступила в редакцию 2 октябри 1967 г.)

Предлагается однопараметрическое уравнение поверхности тел вращения постоянного объема для описания фигур равновесия равномерно заряженной жидкой капли с постоянным поверхностным натяжением и моделирования деформированных конфигураций, проходимых атомным ядром в процессе симметричного деления. Вычисляются поверхностная и кулоновская энергия, а также моменты инерции тел вращения, образующей которых служит линия Кассини. Результаты хорошо согласуются с характеристиками седловых форм капельной модели, которые получил Струтинский точным численным решением уравнения равновесия. Описываемая модель удобна для простого динамического описания процесса деления в задаче с одной степенью свободы.

При теоретическом рассмотрении процесса деления атомное ядро часто моделируется каплей равномерно заряженной несжимаемой жидкости, обладающей постоянным поверхностным натяжением. В первых теоретических [1, 2] и более поздних работах сначала рассматривались лишь малые отклонения формы капли от сферической. Поскольку ядра в процессе деления проходят через стадии, форма которых сильно отличается от сферической, то в последующих исследованиях были сделаны попытки распространить расчеты на области больших деформаций (см., например, [3, 4]). В работах Струтинского и др. [5, 6] с помощью численного решения точного интегродифференциального уравнения были рассчитаны равновесные конфигурации статической капельной модели при произвольных деформациях.

Тем не менее до последнего времени не оставлены попытки (см., например, [6, 7]) найти простое уравнение поверхности вращения с малым числом параметров, которое приближенно описывало бы форму поверхности ядра на поздних стадиях процесса деления, при больших деформациях. Этим достигается резкое математическое упрощение задачи, в том числе и динамического ее варианта. В настоящей работе предлагается геометрическая модель симметричного деления, которая очень удачно описывает равновесные формы капельной модели при помощи уравнения с единственным параметром.

Известно, что очень «гибким» классом геометрических фигур являются лемнискаты: геометрические места точек, произведение расстояний от которых до фиксированных точек — фокусов — постоянно. Варьируя число и расположение фокусов, можно, в принципе, уравнением лемнискаты с наперед заданной точностью описать любую замкнутую фигуру. Оказывается, для наших целей с хорошей точностью можно пользоваться телом вращения, обра-

Ядерная физика, 1968, т. 7, вып. 5, с. 1051—1055.



Рис. 1. Образующие тел вращения, поверхности которых описываются уравнением (1) при условии сохранения объема, для разных *s*

зующей которого служит уже простейшая, двухфокусная, лемниската (линия Кассини). Если обозначить расстояние между фокусами через 2c, а произведение расстояний до них через a^2 , то уравнение этой поверхности в цилиндрических координатах будет иметь вид

$$(z^{2} + \rho^{2})^{2} - 2c^{2}(z^{2} + \rho^{2}) = a^{4} - c^{4}.$$
(1)

Введем безразмерный параметр s = c / a, который после наложе-

ния условия сохранения объема будет полностью определять форму. При s = 0 рассматриваемое тело вращения есть сфера. С увеличением *s* она превращается в вытянутое тело овальной формы, на котором, начиная с $s = 1 / \sqrt{2}$, появляется шейка. Для s > 1 тело двусвязно, и при $s \to \infty$ превращается в две сферы половинного объема, удаляющиеся друг от друга. Условие сохранения объема выглядит при s < 1 следующим образом:

$$\frac{4}{3}\pi R_0^3 = V = \text{const} = \pi a^3 \left[\frac{\sqrt{1+s^2}}{3} (1-2s^2) + \frac{1}{2s} \operatorname{arsh} 2s\sqrt{1+s^2} \right].$$
 (2)

Здесь R_0 — радиус равновеликой сферы. Формы овалов Кассини для различных *s* изображены на рис. 1; на рис. 2 они сравниваются с седловыми формами жидкой капли, рассчитанными в работе [5]. Совпадение очень близкое, что и оправдывает выбор уравнения (1) для дальнейшего количественного сравнения.



Рис. 2. Сравнение седловых конфигураций капельной модели, рассчитанных в работе [5], с овалами Кассини при равном отношении длин полуосей для значении x = 0,65 и 0,9, которые являются крайними для реально делящихся ядер. Эти же конфигурации овалов практически совпадают с «седловыми» для этих значений x, определяемыми прямым расчетом по формулам (6) — (11)

Приведем другие геометрические характеристики описанных тел вращения, которые будут использованы в расчетах: расстояние между центрами тяжести половин тела — «будущих осколков» —

$$2b(s) = \frac{1}{4}a\left(\frac{a}{R_0}\right)^3 \left(3 - s^4\right),$$
(3)

площадь поверхности —

$$S = 4\pi a^2 \int_{0}^{\sqrt{1+s^2}} \left[\frac{\left(1+4s^2x^2\right)^{1/2}s^2}{1+4s^2x^2} \right]^{1/2} dx, \qquad (4)$$

отношение большой и малой полуосей —

$$\frac{r_{\max}}{r_{\min}} = \left(\frac{1+s^2}{1-s^2}\right)^{1/2}.$$
(5)

Значения различных характеристик равномерно заряженной жидкой капли, описываемой уравнением поверхности (1) при фиксированном объеме при разных значениях параметра деформации *s*

S	$a(s)/R_0$	B_S	B_C	b/R_0	S	$a(s)/R_0$	B_S	B_C	b/R_0
0	1	1	1	0,375	0,6	1,0805	1,02526	0,98632	0,4891
0,1	1,0017	1,00002	0,99998	0,3775	0,7	1,1234	1,04932	0,97223	0,5494
0,2	1,0069	1,00028	0,99984	0,3852	0,8	1,1875	1,09247	0,94597	0,6438
0,3	1,0161	1,00146	0,99924	0,3987	0,9	1,2903	1,16887	0,89570	0,8121
0,4	1,0303	1,00469	0,99756	0,4189	1,0	1,4816	1,28590	0,80174	1,2046
0,5	1,0509	1,01172	0,99380	0,4479					

Примечание. a(s) — параметр, учитывающий сохранение объема, $B_S = E_S / E_S^{(0)}$, $B_C = E_C / E_C^{(0)}$, b — расстояние от центра тяжести половины тела до общего центра тяжести, начала координат.

Рассчитаем с помощью рассматриваемой модели значения порогов симметричного деления. В статической капельной модели полная энергия капли есть сумма кулоновской и поверхностной энергий и целиком определяется формой капли. При постоянных коэффициенте поверхностного натяжения α и плотности заряда σ поверхностная E_S и кулоновская E_C энергии равны

$$E_S \equiv B_S E_S^{(0)} = \alpha S ; \ E_C \equiv B_C E_C^{(0)} = \int_V \sigma \Phi(\mathbf{r}) dV .$$
(6)

Здесь *S* определяется выражением (4), $\Phi(\mathbf{r})$ — кулоновский потенциал в точке. Для вычисления кулоновской энергии применим метод, предложенный в работе [3], где выражение для $\Phi(\mathbf{r})$ сведено к поверхностному интегралу:

$$E_C = \frac{\sigma}{5} \int_{S} R^3(\theta) d\Omega \Phi(R(\theta)).$$
⁽⁷⁾

Потенциал на поверхности в цилиндрических координатах равен

$$\Phi(\rho_j z_j) = \sigma \int \frac{dV_m}{r_{jm}},$$
(8)

где r_{jm} — длина вектора, направленного в точку на поверхности с координатами ρ_j , z_j ($\rho_j = \rho_j$ (z_j) из уравнения поверхности) из переменной точки интегрирования с координатами ρ_m , z_m . Этот вектор имеет компоненты

$$(r_{jm})_{x} = \rho_{m} \cos \varphi - \rho_{j}; (r_{jm})_{y} = \rho_{m} \sin \varphi; (r_{jm})_{z} = z_{m} - z_{j}.$$
(9)

За начало отсчета по φ выбрана плоскость z_j , ρ_j . Учитывая, что 1/r = 1/2 div (**r** / *r*), и используя формулу Остроградского — Гаусса, получаем

$$\Phi(\rho_{j}z_{j}) = 2\sigma \int_{z_{1}}^{z_{2}} dz_{m} \frac{1}{g_{jm}} \left\{ \left[\rho_{m}^{2} + \frac{g_{jm}^{2}}{4} \left(k_{jm}^{2} - 2 \right) + \left(z_{j} - z_{m} \right) \frac{1}{2} \frac{\partial \rho_{m}^{2}}{\partial z_{m}} \right] K\left(k_{jm}^{2} \right) + \frac{1}{2} g_{jm}^{2} E\left(k_{jm}^{2} \right) \right\},$$
(10)

где

$$g_{jm}^{2} = (\rho_{m} + \rho_{j})^{2} + (z_{m} - z_{j})^{2}, \qquad (11)$$

$$k_{jm}^{2} = 4\rho_{j}\rho_{m}/g_{jm}^{2}, \qquad (12)$$

а $K(k_{jm}^2)$ и $E(k_{jm}^2)$ — полные эллиптические интегралы первого и второго рода. $K(k_{jm}^2)$ обращается в бесконечность только при $\rho_m = \rho_j$, $z_j = z_m$, а $d\rho_m / dz_m$ при $\rho_m = 0$ (для гладких контуров), так что подынтегральная функция не имеет особенностей. Формулы (4) и (10) были использованы для расчета полной энергии капли при изменении *s* от нуля до единицы. Результаты для различных значений параметра делимости $x \equiv E_C^{(0)} / 2E_S^{(0)}$ приведены на рис. 3 и в таблице. На рис. 4 приводится кривая, изображающая зависимость высоты барьера от *x*, полученная в настоящих расчетах. Она сравнивается с результатами численных расчетов Струтинского [5] и приближенной формулой Святецкого для *x*, близких к единице [4].

Другой способ проверить, насколько близко тела вращения, задаваемые уравнением (1), совпадают с истинными равновесными конфигурациями, заключается в подстановке (1) в интегродифференциальное уравнение, описывающее равновесную форму и полученное Френкелем [3]. Оно отражает физическое условие гидростатического равновесия — постоянства давления па поверхности — и имеет вид

$$5x\Phi + H = \text{const} = 5xB_C + B_S. \tag{13}$$

Здесь Н — средняя кривизна поверхности, вычисляемая с помощью (1) в яв-

ном виде. В равенстве (13) использованы безразмерные переменные, в которых за единицы принимаются R_0 , E_0 и Φ_0 . Согласно расчетам, отклонение фактического давления от константы для «фигур равновесия», соответствующих делящимся ядрам ($x \approx 0.75 - 0.8$), не превышает нескольких процентов.

Наконец, на рис. 5 изображена зависимость от *s* комбинации главных моментов инерции $J_{9\phi\phi}^{-1} = J_{\parallel}^{-1} - J_{\perp}^{-1}$ которая играет важную роль в теории угловых распределений осколков. Для сравнения снова приведены результаты Струтинского [5].



Рис. 3. Сумма кулоновской и поверхностной энергий капли с поверхностью, описываемой уравнением (1) для различных значений параметра x в зависимости от s; E_0 — энергия сферической капли

Рис. 4. Зависимость высоты барьера симметричного деления от параметра делимости x согласно результатам точных численных расчетов Струтинского [5] (пунктирная кривая), расчетов по приближенной формуле для x, близких к единице, [4] (штрих-пунктир) и согласно результатам настоящей работы (сплошная кривая)

Рис. 5. Зависимость величины $J_{9\varphi\varphi}^{-1} = J_{\parallel}^{-1} - J_{\perp}^{-1}$ от *s* для тел, описываемых уравнением (1). Моменты инерции относительно оси симметрии J_{\parallel} и оси, перпендикулярной ей (J_⊥), вычислены по формулам для твердого тела. Для сравнения приведены те же величины для седловых форм при разных *x*, рассчитанные Струтинскпм [5]. Соответствие *s*(*x*) выбиралось так же, как для рис. 2. Момент инерции исходной сферы принят за единицу. Результаты работы [5] — пунктирная кривая



Сопоставление результатов, получаемых при помощи простых фигур (1), с результатами точного численного решения уравнений равновесия (12) показывает, что указанные тела вращения с удивительной для однопараметрического семейства точностью моделируют равновесные формы капельной модели деления на всех стадиях от исходной сферы до момента разрыва.

Поэтому их можно использовать в простой динамической модели с одной степенью свободы для оценки массового параметра на разных стадиях процесса, времени прохождения через седловую точку и т. д.

Литература

- 1. Я.И. Френкель. ЖЭТФ, 9, 641, 1939.
- 2. N. Bohr, J.A. Wheeler. Phys. Rev., 56, 456, 1939.
- 3. S. Frankel, N. Metropolis. Phys. Rev., 72, 914, 1947.
- 4. W.J. Swiatecki. Phys. Rev., 101, 651, 1956; 104, 993, 1956.
- 5. В.М. Струтинский. Н.Я. Лященко, Н.А. Попов. ЖЭТФ, 43, 584, 1962; Nucl. Phys., 46, 639, 1962.
- 6. T. Kelson. Phys. Rev., 136, B1667, 1964.
- 7. J.N.P. Lawrence. Phys. Rev., 139, B1227, 1965.

Geometric Model of Symmetric Fission

V. S. Stavinsky, N. S. Rabotnov, A. A. Seregin

One-parameter equation for the surface of rotation bodies with constant volume is proposed to describe equilibrium figures of a uniformly charged liquid drop with the constant surface tension and to model deformed configurations suffered by an atomic nucleus during the symmetric fission process. The surface and the Coulomb energies are calculated as well as the momenta of inertia of rotation bodies, the generatrix of which is the Cassini line. Results are in good agreement with the parameters of the saddle form of the drop model obtained using the exact numerical solution of the Strutinsky's equilibrium equation. The model described is convenient for a simple dynamical description of the fission process with one degree of freedom.

Вычисление эффективной массы в геометрической модели симметричного деления

В. С. Ставинский, Н. С. Работнов, А. А. Серегин

Физико-энергетический институт, г. Обнинск

(Поступила в редакцию 26 августа 1968 г.)

С использованием однопараметрической геометрической модели симметричного деления, предложенной в [1], в рамках капельной модели производятся расчет зависимости эффективной массы делящегося ядра от расстояния между центрами тяжести осколков. При прохождении всех стадий деления от исходной сферы до двух сферических осколков на бесконечности эффективная масса меняется от 0,533 до 0,25 полной массы делящегося ядра. Учет непостоянства эффективной массы при расчете проницаемости барьера деления дает увеличение примерно на 10 % логарифма времени жизни по отношению к спонтанному делению, но практически не сказывается на энергетической зависимости проницаемости.

В работе [1] было предложено однопараметрическое уравнение поверхности вращения, ограничивающей фиксированный объем, которое, как там было показано, удачно описывает последовательность форм, принимаемых каплей заряженной несжимаемой жидкости, на разных стадиях процесса ее разделения на два одинаковых осколка. Это уравнение в цилиндрических координатах имеет вид

$$\left(\rho^{2}+z^{2}\right)^{2}-2a^{2}s^{2}\left(\rho^{2}+z^{2}\right)=a^{4}\left(1+s^{4}\right),$$
(1)

где a(s) — функция, обеспечивающая сохранение объема и вычисленная в [1]. Это же уравнение оказывается удобным для решения простейшей динамической задачи — вычисления эффективной массы делящейся капли на разных стадиях процесса, которое и производится в настоящей работе. Для расчетов по физике деления важно знать зависимость эффективной массы от параметра деформации. У нас таким параметром является расстояние между центрами тяжести половин капли, которое после разделения переходит в расстояние между осколками и определяется выражением

$$b(s) = (a/R_0)^3 a(3-s^4)/4 \quad при \ s \le 1,$$

$$b(s) = (a/R_0)^3 a/2s \qquad при \ s > 1.$$
(2)

В последние годы появились работы [2—5], в которых аналогичные расчеты производятся для модельных поверхностей с несколькими параметрами. Вычисление кинетической энергии жидкости и последующее определение эф-

Ядерная физика, 1969, т. 9, вып. 4, с. 779-783.

фективной массы производится или при помощи приближенного метода Уилера [2], или путем точного решения соответствующего гидродинамического уравнения. Мы использовали оба способа, что, в частности, позволяет оценить точность метода Уилера. Кроме того, с учетом полученной зависимости эффективной массы от относительного расстояния между осколками b/R_0 в квазиклассическом приближении будет рассчитана проницаемость барьера деления.

Приближение Уилера позволяет представить кинетическую энергию жидкости, заключенной внутри поверхности, уравнение которой содержит *n* параметров $\rho = \rho(z, a_1, ..., a_n)$ в виде

$$T = \frac{1}{2} \sum_{j,i=1}^{n} \mu_{ij} \dot{a}_i \dot{a}_j , \qquad (3)$$

где \dot{a}_i — скорость изменения параметров со временем, а μ_{ij} — элементы «тензора эффективной массы». У нас параметр формы единственный, поэтому и массовый коэффициент только один. При бесконечно малом отклонении от начальной сферы форма, описываемая уравнением (1), есть эллипсоид вращения, обладающий с точностью до членов четвертого порядка лишь квадрупольной деформацией. В этом случае, как легко показать,

$$\mu = \frac{8}{15} (1 - \alpha_2) M_0, \qquad (4)$$

т. е. для начальной сферической формы $\mu_0 = 0,533M_0$. В другом предельном случае, соответствующем двум разделившимся осколкам, каждый из которых движется как целое, эффективная масса совпадает с обычной приведенной, т. е. равняется половине массы каждого из осколков или четверти массы исходной капли $\mu_0 = M_0/4$. Таким образом, в процессе деления эффективная масса меняется более чем в два раза. Уравнение (1) описывает и форму капли после разделения, а поэтому позволяет рассчитывать эффективную массу во всем интервале ее изменения от одного предельного случая до другого.

Применение приближения Уилера к нашему случаю дает следующее выражение для эффективной массы:

$$\mu_n = \frac{3M_0}{4R_0^3} \int_{-a\sqrt{1+s^2}}^{a\sqrt{1+s^2}} \rho^2(z) \left[A^2(z) + \frac{1}{2}B^2(z) \right] dz , \qquad (5)$$

где

$$A(z) = \frac{2}{\rho^{2}(z)} \int_{-a\sqrt{1+s^{2}}}^{a\sqrt{1+s^{2}}} \rho(z') \frac{\partial\rho}{\partial s} \partial z',$$

$$B(z) = A(z) \frac{\partial\rho}{\partial z} + \frac{\partial\rho}{\partial s}.$$
(6)

С помощью этих выражений был произведен расчет µ_п в интервале $0 \le s \le 1,1$ (0,35 $\le b / R_0 \le 1,5$), результаты приведены на рисунке. Там же для удобства ориентировки изображены формы капли на разных стадиях деления, соответствующих разным значениям параметра деформации.

Для сравнения при небольших деформациях мы произвели точное численное решение рассматриваемой гидродинамической задачи о безвихревом течении жидкости, заключенной в деформируемую поверхность (1). Течение в этом случае потенциально, $v = \nabla \phi$, где ϕ — потенциал, удовлетворяющий уравнению Лапласа с граничным условием, соответствующим обращению в нуль нормальной компоненты скорости жидкости относительно поверхности. Решение для потенциала мы искали в виде ряда по сферическим функциям

$$\varphi = \sum_{\lambda=1}^{\infty} A_{\lambda} r^{\lambda} P_{\lambda} \left(\cos \theta \right).$$
 (7)

Упомянутое граничное условие в нашем случае при использовании

r



Зависимость эффективной массы делящегося ядра от расстояния между центрами тяжести будущих осколков согласно результатам настоящей работы; µ — эффективная масса, M_0 — полная масса ядракапли, b — расстояние между центрами тяжести, R₀ — радиус исходной сферы. Кривая, помеченная µ_т, соответствует результатам точного численного решения гидродинамического уравнения, µ_п значения, полученные приближенным методом Уилера. До появления шейки кривые совпадают, а затем использованный численный метод теряет точность и решение µ_т расходится. Предельные значения µ равны 8/15М₀ для исходной сферы и 0,25 М₀ для разделившихся осколков на бесконечности

уравнения (1), переписанного в сферических координатах,

$$(\theta) = a \left[s^2 \cos 2\theta + \sqrt{s^4 \cos 2\theta - s^4 + 1} \right]^{1/2}, \tag{8}$$

имеет вид

$$\left[\left(as^{2}\frac{\partial a}{\partial s}+a^{2}s\right)r^{2}(\theta)\cos 2\theta+a^{3}\left(1-s^{4}\right)-a^{4}s^{3}\right]\frac{\partial s}{\partial t}=\\=\sum_{\lambda=1}^{\infty}A_{\lambda}r^{\lambda}\left(\theta\right)\left\{\left[r^{2}\left(\theta\right)-a^{2}s^{2}\cos 2\theta\right]P_{\lambda}\left(\cos\theta\right)-a^{2}s^{2}\cos\theta\sin\theta\frac{\partial P_{\lambda}\left(\cos\theta\right)}{\partial\left(\cos\theta\right)}\right\}.$$
(9)

Из уравнения (9), разлагая правую и левую части по полиномам Лежандра, приравнивая коэффициенты при одинаковых P_{λ} и решая полученную систему линейных уравнений

$$\alpha_i = \sum_{\lambda} A_{\lambda} \gamma_{\lambda i} , \qquad (10)$$

где

$$\alpha_{i} = \frac{2i+1}{2} \int_{-1}^{1} \left[\left(as^{2} \frac{da}{ds} + a^{2}s \right) r^{2}(\theta) \cos 2\theta + a^{3} \left(1 - s^{4} \right) - a^{4}s^{3} \right] \times P_{i}(\cos\theta) d(\cos\theta),$$

$$\gamma_{\lambda i} = \frac{2i+1}{2} \int_{-1}^{1} \left\{ \left[r^{2}(\theta) - a^{2}s^{2}\cos 2\theta \right] P_{\lambda}(\cos\theta) - a^{2}s^{2}\cos\theta \sin^{2}\theta \frac{\partial P_{\lambda}(\cos\theta)}{\partial(\cos\theta)} \right\} \times r^{\lambda} P_{i}(\cos\theta) d(\cos\theta), \quad (11)$$

получаем коэффициенты A_{λ} , а затем вычисляем массовый коэффициент по формуле

$$\mu_{\rm T} = \frac{3}{2} \left(\frac{M_0}{\left(\frac{db}{ds}\right)^2} \right) \sum_{\lambda,\lambda'=1}^{\infty} \frac{A_{\lambda}A_{\lambda'}}{\lambda + \lambda' + 1} \int_{-1}^{1} r^{\lambda + \lambda' + 1} (\theta) \times \left[P_{\lambda} (\cos\theta) P_{\lambda'} (\cos\theta) - (1 - \cos^2\theta) \frac{\partial P_{\lambda} (\cos\theta)}{\partial (\cos\theta)} \frac{\partial P_{\lambda'} (\cos\theta)}{\partial (\cos\theta)} \right] d(\cos\theta)$$
(12)

Это выражение получено из определения

$$T = \mu_{\rm T} \left(\frac{db}{dt}\right)^2 / 2$$

с использованием выражения (2) для b(s). Изложенный метод решения обеспечивает сходимость процедуры вплоть до появления «шейки» у капли и в этих пределах дает значения, совпадающие с теми, которые получаются методом Уилера. Это обстоятельство, а также стремление значения $\mu_{\rm n}/M_0$ к 0,25 за точкой разрыва указывают на то, что метод Уилера является, во всяком случае, достаточно точным приближением. Возможно также, что то физическое предположение, которое лежит в его основе, а именно, что жидкость можно разбить на плоские слои, перпендикулярные оси симметрии, из которых частицы жидкости при движении не выходят, точно выполняется для потенциального течения рассматриваемого типа.

При моделировании деления ядра одномерным процессом проницаемость барьера в квазиклассическом приближении определяется выражением

$$P = \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_{b_1}^{b_2} \sqrt{2\mu(b)\left[V(b) - E\right]db}\right\},\tag{13}$$

где V(b) — потенциальная функция, а E — энергия возбуждения. Если $\mu(b)$ постоянно, то для параболического барьера выражение (13) дает простой результат

$$P(E) = \exp\left[-2\pi \left(E_f - E\right)/\hbar\omega\right],\tag{14}$$

где *E_f* — высота барьера деления, а $\hbar \omega$ — параметр, характеризующий кривиз-

ну вершины барьера. Чтобы оценить влияние непостоянства эффективной массы, мы произвели численные расчеты по формуле (13), подставляя в нее V(b), полученную в работе [1], и $\mu(b)$ — по данным настоящей работы. Получились следующие результаты: отношение $\delta \equiv \ln P' / \ln P$, где P' – проницаемость барьера с учетом переменной массы, а P — проницаемость при $\mu = M_0/4 = \text{сonst}$, практически не зависит от энергии возбуждения, а лишь от параметра делимости x. Для значений x, равных 0,7; 0,75; 0,8, получаются значения δ , равные соответственно 1,06; 1,09; 1,14. Эти результаты показывают, что при оценках абсолютных величин проницаемостей зависимость эффективной массы приводит к эффектам того же порядка, что и отличия в Z^2/A для разных изотопов, влияние четности числа нуклонов и т. д., и, следовательно, ее желательно учитывать, например, при расчете периодов спонтанного деления. Однако на анализ энергетических зависимостей вероятности деления этот эффект не повлияет, поскольку он приводит лишь к небольшому изменению феноменологически определяемых констант.

Литература

- 1. В.С. Ставинский, Н.С. Работнов, А.А. Серегин. ЯФ, 7, 105, 1968.
- 2. I. Kelson. Phys. Rev., 136 B, 1667. 1964.
- 3. J.N.P. Lawrence. Phys. Rev., I39B. 1227. 1965.
- 4. J.R. Nix, W.J. Swiatecki. Nucl. Phys., 71, 1, 1965.
- 5. R.W. Hasse, R. Ebert, G. Süssmann. Nucl. Phys., A106, 117, 1967.

Calculation of the Effective Mass in the Geometric Model of Symmetrical Fission

V. S. Stavinsky, N. S. Rabotnov, A. A. Seregin

Dependence of the effective mass of fusible nucleus on the distance between centres of gravity of fragments is calculated in terms of the drop model using the one-parametric geometric model of symmetrical fission. In all the stages of fission from initial sphere up to two-spherical fragments at infinity the effective mass is changed from 0,533 up to 0,25 of the total mass of fissile nucleus. The account of the violation of the effective mass when calculating the barrier penetrability gives the increase .approximately by 10 % of a logarithm of the life time as compared to the spontaneous fission but really does not affect the energy dependence of the penetrability.

Two-Hump Fission Barrier in Quasiclassical Approximation

A. V. Ignatyuk, N. S. Rabotnov and G. N. Smirenkin

Institute of Physics and Energetics, Obninsk, USSR

Received 3 April 1969

The penetrability of the fission barrier with two maxima is calculated. Its energy dependence shows characteristic resonance structure. Some experimental data on slow-neutron induced fission are discussed in terms of the model.

Some recent experimental data [1] and theoretical considerations [2, 3] suggest that the fission barrier for heavy nuclei probably has two maxima. If the well between them is deep enough, nuclear fission will be a two-stage process. Some interesting new possibilities for the interpretation of fission phenomena arise in this "two-hump" model. According to Bjornholm and Strutinsky [3] some important general aspects of this new physical picture may be expressed and understood in terms of a simple quantum mechanical problem: the penetration through the onedimensional symmetrical double potential barrier [4]. In the present paper we consider a quasiclassical solution of a somewhat more general problem dealing with an arbitrary two- hump barrier. The results are discussed in connection with some experimental data on the neutron induced fission.

After some cumbersome calculations the penetrability of the barrier with twomaxima (A and B) may be expressed explicitly as:

$$P(E) = \frac{P_{\rm A} P_{\rm B}}{4} \left[\left(\frac{P_{\rm A} + P_{\rm B}}{4} \right)^2 \sin^2 \varphi(E) + \cos^2 \varphi(E) \right]^{-1}.$$
 (1)

Here P_A and P_B are the quasiclassical penetrabilities of the barriers A and B taken separately. The energy dependent phase $\varphi(E) = (I/\hbar) \int \sqrt{2\mu [E - V(x)]} dx$ is subject to the ordinary conditions at the energy points E_n^0 coinciding with the positons of the quasistable levels in the well; these conditions may be used to define the widths of the levels

$$\varphi\left(E_n^0\right) = \pi\left(n + \frac{1}{2}\right),\tag{2}$$

$$\Gamma = \frac{\hbar\omega}{4\pi} (P_{\rm A} + P_{\rm B}) \equiv \frac{1}{2} (\Gamma_{\rm A} + \Gamma_{\rm B}).$$
(3)

Here $(\hbar\omega)^{-1} = \pi^{-1}$ is the level density in the well.

Physics Letters, 1969, vol. 29B, no. 4, pp. 209-210.

The penetrability P(E) oscillates sharply with the variation of the energy *E* reaching the maximum values at $E = E_n^0$ with the minima between the levels. The expressions for these limit values are listed below. The result of averaging the penetrability over an energy interval containing many levels is included in

		$P_{\rm A} = P_{\rm B}$	$P_{\rm A} \ll P_{\rm B}$
P_{\max}	$4P_{\rm A}P_{\rm B}/\left(P_{\rm A}+P_{\rm B}\right)^2$	1	$4P_{\rm A}/P_{\rm B}$
P_{\min}	$\frac{1}{4}P_{\mathrm{A}}P_{\mathrm{B}}$	$\frac{1}{4}P_{\rm A}^2$	$\frac{1}{4}P_{\rm A}P_{\rm B}$
Р	$P_{\rm A}P_{\rm B}/\left(P_{\rm A}+P_{\rm B}\right)$	$\frac{1}{2}P_{\rm A}$	P_{A}

The maximum value of the penetrability is unity [3] only for symmetrical barrier ($P_A = P_B$) but not in the general case. The average penetrability is such as if there existed only one of two humps, the highest one. The penetrability of the lower hump serves as the "hindrance factor" of the minium and being placed in the denominator at $E = E_n^0$ as the "amplification coefficient". In the vicinity of the quasilevel the penetrability has a Lorentzian dependence on energy.

$$P\left(E_n^0 + \Delta E\right) = \frac{\Gamma_A \Gamma_B}{\frac{1}{4} \left(\Gamma_A + \Gamma_B\right)^2 + \left(\Delta E\right)^2}.$$
(4)

These results make it possible to express the fission width in the form $\Gamma_f = P(E)/2\pi\rho_I$, where ρ_I is the level density of fissioning nucleus. This result is identical to the expression for the fission width obtained by the methods of the R-matrix theory in ref. 5, if eq. (4) is taken into account.

The eqs. (1—4) are valid in the energy interval between the bottom of the well parting the humps and the top of the lower hump. If the excitation energy released after absorption of a neutron by the nucleus belongs to the interval, the following phenomena will occur in neutron induced fission:

1. The fission width of the neutron resonances are modulated by the penetrability oscillations. The energy spectrum in the well is superimposed on the usual nuclear levels and the resonances enveloped by the level in the well have abnormally large fission widths.

2. The relationship between the fission widths and level densities of "weak" and "strong" groups of resonances result in the following relation: the total average fission width is the geometric mean value of two values obtained by averaging over weak and strong groups separately.

3. When the fission barrier is higher than the neutron binding energy the fission width is often known only for the first epithermal neutron resonance. This

resonance will much more probably belong to a more numerous weak group (the weak resonances outnumber the strong ones by a factor of about $(\hbar\omega)/(\Gamma_A + \Gamma_B)$). So its fission widths must be in most cases considerably less than the average value estimated by the extrapolation of the fast neutron data to zero neutron energy.

The first of the features listed above is well established experimentally for the nuclei ²³⁴U, ²³⁷Np, ²⁴⁰Pu, ²⁴²Pu [1] and was discussed more than once as evidence of the complex structure of the fission barrier.

²⁴⁰P̂u is studied well enough to provide a direct check for the second statement. According to ref. 1 $\Gamma_{f \max} \approx 130 \text{ meV}$, $\Gamma_{f \min} \approx 0,007 \text{ meV}$ [6], i. e. $\sqrt{\Gamma_{f \max} \Gamma_{f \min}} \approx 1 \text{ meV}$; $\Gamma_f = 3.5 \text{ meV}$ [1]. The figures are in qualitative agreement with the theoretical relation.

The third statement explains a discrepancy mentioned by several authors [6] concerned with the analysis of the neutron induced fission.

These results suggest that the simple model under consideration is worth investigating to compare its predictions with other experimental data on fission.

Authors wish to acknowledge stimulating discussions with Prof. V. M. Strutinski.

References

- E. Migneco, G. Theobald. Nucl. Phys., A112 (1968) 603;
 A. Fibine, J. Blons, A. Michaudon, D. Paya. Phys. Rev. Lett., 20 (1968) 1373;
 G.D. James, E.R. Rae. Nucl. Phys., A118 (1968) 313.
- 2. V.M. Strutinski. Nucl. Phys., A95 (1968) 420.
- 3. V.M. Strutinski, S. Bjørnholm. Int. Symp. Nucl. Structure, Dubna (1968).
- I.I. Goldman, V.D. Krivchenkov. Problems in Quant. Mech., Pergamon Press (1960) 9; D. Bohm. Quantum Theory (New York, 1952) ch.14.
- J.E. Lynn. Int. Symp. Nucl. Structure, Dubna (1968);
 H. Weigmann. Z. f
 ür Physik, 214 (1968) 7.
- N.S. Rabotnov, G.N. Smirenkin. JINR-1845, p. 112 (1964);
 E.R. Rae. Phys. and Chem. Fission, (Vienna, 1968), p. 187;
 P.E. Vorotnikov. Jadern. Fiz., 5 (1967) 1021.
Двугорбый барьер и деление ядер нейтронами

Е. В. Гай, А. В. Игнатюк, Н. С. Работнов, Г. Н. Смиренкин

Физико-энергетический институт, Обнинск

В квазиклассическом приближении рассчитывается энергетическая зависимость проницаемости двугорбого потенциального барьера с ямой между максимумами. Показано, что проницаемость испытывает резкие колебания, достигая максимальных значений при энергиях, совпадающих с положениями квазиуровней в яме. Результаты применяются для анализа экспериментальных данных по делению ядер нейтронами.

В последнее время появились экспериментальные данные [1—3] и теоретические соображения [4, 5], которые указывают на то, что потенциальный барьер, препятствующий делению тяжелых ядер, может иметь два максимума и при достаточной глубине ямы между ними сам процесс деления может быть двухступенчатым. Модель двугорбого барьера открывает новые интересные возможности для интерпретации экспериментальных данных. В работе [5] указывалось, что некоторые важные черты новой физической картины можно понять на простейшей схематической модели одномерного симметричного двойного барьера [6]. В настоящей работе рассматривается более общая одномерная задача о двойном барьере произвольной формы, и полученные результаты используются при обсуждении некоторых экспериментальных данных по делению ядер.

Рассмотрим движение частицы с массой μ в потенциальном поле, имеющем вид барьера с двумя максимумами A и B, разделенными ямой C. Для определенности будем полагать, что левый максимум выше правого. Основные обозначения введены на схематическом рис. 1. В квазиклассическом приближении специального рассмотрения требует лишь случай, когда $E_C < E < E_B$, и, следовательно, имеются четыре точки поворота. Введем следующие обозначения:

$$p(x) = \sqrt{2\mu[E - V(x)]}, \quad \varphi(E) = \frac{1}{\hbar} \int p(x) dx,$$

$$P_A = \exp\left\{-\frac{2}{\hbar} \int_{a_1}^{a_2} |p| dx\right\},$$

$$P_B = \exp\left\{-\frac{2}{\hbar} \int_{a_3}^{a_4} |p| dx\right\}.$$
(1)

Ядерная физика, 1969, т. 10, вып. 3, с. 542-548.



Рис. 1. Схематическое изображение двугорбого барьера. V(x) — потенциальная энергия деформации, *x* — параметр деформации

 P_A и P_B есть вычисленные в квазиклассическом приближении проницаемости барьеров A и B, взятых по отдельности. Просто оценить проницаемость двойного барьера позволяет следующее рассуждение: вероятность пройти через первый барьер есть P_A ; после этого частица попадает в яму, где у нее имеется выбор — либо вернуться обратно, либо проникнуть через следующий барьер B. Относительная вероятность последнего события есть, очевидно, $P_B/(P_A + P_B)$ и полная проницаемость есть тогда $P_A P_B/(P_A + P_B)$. Покажем, что это выражение справедливо лишь для средней проницаемости: детальная энергетическая зависимость сложнее.

Простые, но довольно громоздкие вычисления проницаемости двугорбого барьера в квазиклассическом приближении дают

$$P(E) = \frac{P_A P_B}{4} \left\{ \left(\frac{P_A + P_B}{4} \right)^2 \sin^2 \varphi(E) + \cos^2 \varphi(E) \right\}^{-1}.$$
 (2)

Для определения квазистационарных уровней в яме между горбами имеем уравнение

$$\operatorname{ctg} \varphi(E) = \frac{i}{4} (P_A + P_B), \qquad (3)$$

решение которого позволяет определить энергию уровней и их ширину

$$\varphi\left(E_n^0\right) = \pi\left(n + \frac{1}{2}\right),\tag{4}$$

$$\Gamma = \frac{D}{4\pi} (P_A + P_B) \equiv (\Gamma_A + \Gamma_B) / 2.$$
⁽⁵⁾

Здесь $D = \pi (d\varphi / dE)^{-1}$ — расстояние между уровнями в яме *C* (частота колебаний).

Проницаемость P(E) испытывает резкие колебания при изменении энергии, достигая максимальных значений при $E = E_n^0$ и минимальных — между квазистационарными уровнями:

$$P_{\max} = P(E_n^0) = 4 P_A P_B / (P_A + P_B)^2,$$

$$P_{\min} = P_A P_B / 4.$$
(6)

Вблизи квазистационарных состояний проницаемость имеет лоренцевскую зависимость от энергии (рис. 2):

$$P\left(E_n^0 + \Delta E\right) = \frac{\Gamma_A \Gamma_B}{\left(\Gamma_A + \Gamma_B\right)^2 / 4 + \left(\Delta E\right)^2}.$$
(7)

Усредняя (2) по интервалу между уровнями, получаем

$$\overline{P} = D^{-1} \int_{E_n^0}^{E_{n+1}^0} P(E) dE \approx \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} P(\varphi) d\varphi = \frac{P_A P_B}{P_A + P_B}.$$
(8)

что подтверждает полученную выше оценку. Для симметричного двойного барьера $P_A = P_B$ получаем известный [4] результат $P_{\text{max}} = 1$, $P_{\text{min}} = P_A^{-2}/4$. Так как проницаемость экспоненциально зависит от высоты барьера, то при скольконибудь существенной разнице высот имеем для несимметричного барьера $P_A \ll P_B$. В этом важном частном случае

$$P_{\max} = 4P_A/P_B; \quad P_{\min} = P_A P_B/4; \quad \overline{P} = P_A.$$
(9)

Как видно, средняя проницаемость такая же, как если бы «работал» только один, более высокий, из горбов. Этот вывод совпадает с результатом, который получен в работе [5] на основании статистических соображений. Проницаемость меньшего барьера определяет «коэффициент усиления» этой средней проницаемости при $E = E^0$ и ее ослабление вдали от резонансов. Отметим тождественное соотношение, вытекающее из (7), (8): $\overline{P} = (P_{\text{max}}P_{\text{min}})^{1/2}$.

Полученные результаты можно использовать при анализе экспериментальных данных по делению. Примеры такого рода для случая деления ядер нейтронами приводятся ниже. При этом, однако, необходимо помнить об ограниченной применимости использованной простой модели. В частности, состояния во второй яме, если она существует у реальных ядер, несомненно, имеют более сложную природу, чем одномерные колебания, и рассмотренное приближение отражает лишь часть полной картины.

В рамках *R*-матричной теории этот вопрос был рассмотрен Линном [7] и Вайгманом [8], полученные ими выражения для делительных ширин совпадают с результатами квазиклассического приближения (6), (7).

Если предположить, что структуру барьера деления реальных ядер можно приближенно описывать одномерным двугорбым барьером, то полученные выражения позволяют записать делительную ширину ядерных уровней в виде

 $\Gamma_f = \frac{D_1}{2\pi} P(E)$, где D_1 — среднее расстояние между уровнями составного ядра.

Тогда колебания проницаемости будут отражаться на энергетической зависимости делительной ширины. Это означает, что если энергия возбуждения, соответствующая поглощению ядром нейтрона, попадает в интервал $E_C < E < E_B$, то при делении нейтронами должны наблюдаться некоторые особенности.



Рис. 2. Схематическое изображение энергетической зависимости в окрестности квазистационарного состояния

1. Делительные ширины нейтронных резонансов модулируются колебаниями проницаемости, т. е. группы уровней, энергии которых находятся в пределах ширины состояний во второй яме, имеют аномально большую делительную ширину. Этот факт хорошо известен экспериментально для ядер Np²³⁷ [1], Pu²⁴⁰ [2], U²³⁴, Pu²⁴² [3] и уже неоднократно отмечался как указание на сложную структуру барьера деления. Наиболее подробные данные имеются для Np²³⁷ и Pu²⁴⁰.

2. Делительные ширины и плотности уровней сильных и слабых делительных резонансов находятся между собой в таком соотношении, что делительная ширина, усредненная *по всем резонансам*, является средним геометрическим значением ширин, полученных усреднением по группам «сильных» и «слабых» уровней отдельно.

Ядро Ри²⁴⁰ достаточно подробно изучено для проверки этого утверждения. Согласно результатам работы [2] $\Gamma_{f \max} = 130$ мэВ, $\Gamma_{f \min} = 0,007$ мэВ [9], $\overline{\Gamma}_{f} = 3,5$ мэВ, $\sqrt{\Gamma_{f \max}}\Gamma_{f \min} = 1$ мэВ, что находится в качественном согласии с отмеченным соотношением (максимальная и минимальная ширины различаются в 20000 раз). Оценим P_A и P_B для этого ядра. С помощью (9), учитывая, что $\overline{D}_1 = 15$ эВ, получаем $P_A = \overline{P}_1 = 2\pi \overline{\Gamma}_f / \overline{D}_1 = 1,5 \cdot 10^{-3}$; $P_B = \sqrt{4 \overline{P} / P_{\max}} \sim 10^{-1}$. Параметр кривизны вершины барьера, который в рассматриваемой интерпретации относится к барьеру A, согласно измерениям сечения деления на быстрых нейтронах [10] равен $\hbar \omega_A = 650$ кэВ, а высота барьера $E_{fA} = 0,7$ МэВ. Предположив для простоты, что $\hbar \omega_A = \hbar \omega_B$, можно оценить высоту барьеров A и B. Авторы работы [2] оценивают по отношению плотностей уровней в первой и второй ямах высоту второй ямы над минимумом, соответствующим основному состоянию. Эта величина $E_C = 2,1$ МэВ. По совокупности этих результатов можно восстановить структуру двойного барьера составного ядра Pu²⁴¹. Она изображена на вставке к рис. 3.



Рис. 3. Сечение деления Pu²⁴⁰ как функция энергии нейтронов согласно [2]. На вставке — некоторые параметры барьера деления (см. текст) Pu²⁴¹

Сравнение делительных ширин, наблюдаемых в резонансной области $\Gamma_{\text{рез}}$ и полученных экстраполяцией $\overline{\Gamma}_{\text{быстр}}$

Ядро-мишень	Г _{рез} , мэВ	$\overline{\Gamma}_{\text{быстр}, M \ni B}^*$	ћω_/2π, кэВ	$\Gamma_{\rm pes}/\overline{\Gamma}_{\rm быстр}$
Th ²³²	$2 \cdot 10^{-4}$	10 ⁻⁷	60	2.10^{8}
Pa ²³¹	$6 \cdot 10^{-3}$	0,1	70	$6 \cdot 10^{-2}$
U ²³⁴	$2 \cdot 10^{-2}$	1	80	$2 \cdot 10^{-2}$
Np ²³⁷	$1,5 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-2}$	90	$3 \cdot 10^{-2}$
Pu ²³⁸	1	50	100	$2 \cdot 10^{-2}$
Pu ²⁴⁰	$6 \cdot 10^{-3}$	3	100	$2 \cdot 10^{-3}$
Pu ²⁴²	$2 \cdot 10^{-2}$	2	100	10^{-2}
Am ²⁴¹	0,2	0,2	100	1

* Оценка $\overline{\Gamma}_{6bicrp}$ путем экстраполяции из области экспоненциального спада Γ_f ($E_n \sim 0.5$ МэВ) к $E_n = 0$ производилась с использованием значений $\hbar \omega_A/2\pi$ [12], приведенных в четвертом столбце.

3. У пороговых элементов, плохо делящихся резонансными нейтронами, значение делительной ширины часто известно лишь для первого резонанса. Этот резонанс с большей вероятностью будет принадлежать к более многочисленной категории «слабых» (их в D_2/Γ больше, чем «сильных»). Поэтому его делительная ширина в подавляющем большинстве случаев будет иметь значение много меньшее, чем экстраполированные в эту область значения средних ширин, которые получены при измерениях на быстрых нейтронах усреднением по всем уровням, а в тех редких случаях, когда эпитепловой резонанс является «сильным», будет наблюдаться резкое обратное неравенство. Этим объясняется видимое противоречие, неоднократно отмечавшееся при анализе экспериментальных данных по делению нейтронами [11] и иллюстрируемое таблицей. Для Pu^{240} и Np^{237} известны такие значения $\overline{\Gamma}_{медл}$, усредненные по «сильным» и «слабым» резонансам и равные соответственно 3,5 мэВ [2] и 7·10⁻² мэВ [1]. Они хорошо согласуются с оценками $\overline{\Gamma}_{быстр}$. Таким образом, *в средних* ширинах никакого противоречия нет.

Можно получить и явный вид статистического распределения делительных ширин нейтронных резонансов в случае двугорбого барьера. Согласно сказанному выше, кривые проницаемости являются примерно огибающими делительных резонансов. Тогда формула (2) непосредственно преобразуется в распределение делительных ширин относительно среднего значения

$$\varphi(x)dx = \frac{dx}{\pi x} (x - x_{\min})^{-1/2} (x_{\max} - x)^{-1/2}, \qquad (10)$$
$$x = \frac{\Gamma_f}{\overline{\Gamma}_f}, \quad x_{\max} = \frac{\Gamma_f \max}{\overline{\Gamma}_f} = \sqrt{\frac{\Gamma_f \max}{\Gamma_f \min}}, \quad x_{\min} = \frac{\Gamma_f \min}{\overline{\Gamma}_f} = \sqrt{\frac{\Gamma_f \min}{\Gamma_f \max}}.$$

где

В действительности, конечно, кривая проницаемости является огибающей средних сечений делительных ширин по небольшим интервалам, содержащим несколько уровней, и на каждом таком участке ширины флуктуируют относительно этих локальных средних значений $\tilde{\Gamma}_f$. Для получения более реалистического полного распределения необходимо поэтому свернуть (10) с распределением, которое описывало бы локальные флуктуации.

Предположим, что локальные флуктуации описываются распределением Портера — Томаса (χ^2 -распределением) с числом степеней свободы v, которое имеет вид

$$f_{\rm v}(z) = \frac{z^{{\rm v}/2-1}e^{-z}}{\Gamma({\rm v}/2)},\tag{11}$$

где $z = (v / 2) (\Gamma_f / \overline{\Gamma}_f)$, а $\Gamma(v/2) - \Gamma$ -функция.

Пусть $\varphi(x)dx = \varphi(\tilde{\Gamma}_f/\overline{\Gamma}_f)d(\tilde{\Gamma}_f/\overline{\Gamma}_f)$, тогда получается следующее распределение для величины $(\nu/2)\Gamma_f/\overline{\Gamma}_f = y$:

$$\Psi_{\nu}(y)dy = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \varphi(x) f_{\nu}(y/x) d(y/x) dx = e^{-yx_{\min}} y^{\nu/2-1} \frac{(x_{\max} - x_{\min})^{\nu/2}}{\pi\Gamma(\nu/2)} \times \\ \times \int_{0}^{1} \frac{\left[z + x_{\min}/(x_{\max} - x_{\min})\right]^{\nu/2} \exp\left[-yz(x_{\max} - x_{\min})\right]}{z^{1/2}(1-z)^{1/2}} dz.$$
(12)

Для важного частного случая v = 2 (экспоненциальное распределение) интеграл берется и

$$\Psi_{2}(y)dy = \left\{ x_{\min} \exp\left[-\frac{y}{2} \left(x_{\max} - x_{\min}\right)\right] I_{0}\left(y \frac{x_{\max} - x_{\min}}{2}\right) + \frac{x_{\max} - x_{\min}}{2} \exp\left(-x_{\max}y\right) F\left(\frac{1}{2}, 2, y(x_{\max} - x_{\min})\right) \right\} dy,$$
(13)

где I_0 — функция Бесселя мнимого аргумента, а F — вырожденная гипергеометрическая функция.

Результаты удобнее представить в том виде, в котором они обычно сравниваются с экспериментом, а именно в форме интегральных распределений, показывающих, какая доля резонансов имеет ширину больше заданной. Для распределений (10) и (13) получаем соответственно

$$f\left(\Gamma_{f}' \ge \Gamma_{f}\right) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arcsin\left(\frac{\overline{\Gamma}_{f}}{\Gamma_{f}} \frac{2}{x_{\max} - x_{\min}} - \frac{x_{\max} + x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}}\right),\tag{14}$$

$$\psi_2\left(\Gamma_f' \ge \Gamma_f\right) = \exp\left\{-\frac{\Gamma_f}{\overline{\Gamma}_f} \frac{x_{\max} + x_{\min}}{2}\right\} I_0\left(\frac{\Gamma_f}{\overline{\Gamma}_f} \frac{x_{\max} - x_{\min}}{2}\right).$$
(15)

Экспериментальное распределение ширин для случая с группировкой построено в работе [1] для Np²³⁷. Результаты сравниваются с выражениями (14)—(15) на рис. 4. Согласие вполне удовлетворительное.



Одно свойство распределений типа (10) следует отметить особо. Они имеют очень большую дисперсию. Непосредственное вычисление дает

$$\sigma_{\Gamma_f}^2 = \left(\overline{\tilde{\Gamma}_f^2} / \overline{\tilde{\Gamma}_f^2}\right) - 1 = \frac{x_{\max} + x_{\min}}{2} - 1.$$
(16)

В случае Np²³⁷ и Pu²⁴⁰ эта величина равна, например, ~15. Напомним, что одноканальное распределение Портера — Томаса — максимально «широкое» из тех, которые используются для описания статистических распределений ширин ядерных уровней, имеет дисперсию, равную двум. Поэтому различные функции ширин, усредняемые по флуктуациям и используемые при расчете сечений, могут сильнее отличаться от средних значений, чем в случае распределений Портера — Томаса. Так, для часто используемой функции

$$S = \left\langle \frac{\Gamma_f}{\Gamma_f + \Gamma_c} \right\rangle / \frac{\overline{\Gamma}_f}{\overline{\Gamma}_f + \Gamma_c},$$

где Γ_c — полная ширина процессов распада, конкурирующих с делением, для распределения (10) получается

$$S = (1+\alpha) / \sqrt{(\alpha + x_{\max})(\alpha + x_{\min})}, \qquad (17)$$

где $\alpha = \Gamma_c / \overline{\Gamma}_f$. Для $x_{\text{max}} = x_{\text{min}}^{-1} \approx 30$, которые примерно соответствуют Pu²⁴⁰ и Np²³⁷. Вид этой функции сравнивается с аналогичной функцией для однока-



Рис. 5. Поведение функции *S* (см. формулу (17)).

одноканальное распределение Портера — Томаса,
 2 — распределение (10)

нального распределения Портера — Томаса на рис. 5. Разница весьма существенна и ее следует учитывать при расчете сечений пороговых элементов.

Приведенные результаты показывают, что рассмотренная простая модель заслуживает дальнейшего исследования с целью сопоставления ее результатов с другими экспериментальными данными по делению.

Авторы выражают благодарность В. М. Струтинскому за обсуждения, стимулировавшие данную работу, и В. С. Ставинскому за ценные замечания.

(Поступила в редакцию 3 февраля 1969 г.)

Литература

- 1. A. Fubini, J. Blons, A. Michaudon, D. Paya. Phys. Rev. Lett., 20, 1373, 1968.
- 2. F. Migneco, G. Theobald. Nucl. Phys., A112, 603, 1968.
- 3. C. D. James, E. R. Rae. Nucl. Phys., A118, 313, 1968.
- 4. V. M. Strutinsky. Nucl. Phys., A95, 420, 1968.

- 5. V. M. Strutinsky, S. Bjørnholm. Intern. Simp. Nucl. Structure, Dubna, 1968.
- 6. И. И. Гольдман, В. Д. Кривченков. Сб. задач по квантовой механике. Гостехиздат, 1957, с. 13;
 - Д. Бом. Квантовая теория. Наука, 1965, стр. 334.
- 7. J. E. Lynn. Intern. Simp. Nucl. Structure, Dubna, 1968.
- 8. H. Weigmann. Z. für Physik, 214, 7, 1968.
- 9. Neutron Cross Section, Suppl. 2, v. III, 1965.
- 10. De Vroey, A. T. G. Ferguson, W. Starfelt. Symp. Phys. and Chem. of Fission, Vienna, 1965, vol. 1, p. 281.
- Н. С. Работнов, Г. Н. Смиренкин. Препринт-1845, ОИЯИ, 1964, стр. 112;
 Е. R. Rae. Symp. Phys. and Chem. of Fission, Vienna, 1965, vol. 1, p. 187;
 П. Е. Воротников. ЯΦ, 5, 1021, 1967.
- 12. С. Б. Ермагамбетов, В. Ф. Кузнецов, Г. Н. Смиренкин. *ЯФ*, 5, 257, 1967.

Two-Bump Barrier and the Neutron-Induced Nuclear Fission

E. V. Gai, A. V. Ignatyuk, N. S. Rabotnov, G. N. Smirenkin

Energy dependence of the penetration for a two-bump potential barrier with a well between the maxima is calculated in the quasiclassical approximation. It is shown that the penetration oscillates sharply, increasing to the maxima for energies near the quasilevels of the well. The results are applied for analysis of the experimental data on the neutron-induced nuclear fission.

К феноменологической теории коллективных возбуждений в ядрах

Н. С. Работнов, А. А. Серегин

Физико-энергетический институт, Обнинск (Поступила в редакцию 6 января 1969 г.)

Обсуждается зависимость потенциальной анергии деформируемого ядра от параметров деформации. Показано, что практически удобен потенциал вида $V = A + B\beta + C^2\beta + D\beta \cos 3\gamma$. При таком выборе потенциала предлагается метод численного решения уравнения Шреднигера коллективной модели с пятью динамическими переменными без предположений о малости колебаний относительно равновесной деформации или их адиабатическом приближенном отделении от вращения. Рассчитываются положения уровней 0⁺, 2⁺, 4⁺, 6⁺ и проводится сравнение с экспериментальными данными для четно-четных ядер.

Введение

Начиная с основополагающих работ О. Бора и Моттельсона [1, 2], феноменологической теории коллективных возбуждений в ядрах было посвящено большое число работ. Их достаточно полный и всесторонний обзор произведен в недавно вышедшей монографии Давыдова [3]. В общем виде свойства коллективного гамильтониана и способы численного решения соответствующего уравнения Шредингера детально обсуждаются в последних работах Кумара и Барранджера [4]. В настоящей работе мы изложим иной подход к выбору оператора потенциальной энергии коллективных движений и численному решению задачи, который позволяет сравнительно просто описать основные свойства квадрупольных коллективных возбуждений, не прибегая к обычным предположениям о малости колебаний или их приближенном адиабатическом отделении от вращения.

Излагаемый метод позволяет с наибольшим удобством рассматривать ядра, переходные между сферическими и сильнодеформированными, для которых плохо работают известные приближения. С точки зрения численных расчетов он сводится к диагонализации стандартными способами двумерных матриц, когда точное решение ищется в виде ряда по произведениям функций, зависящих, с одной стороны, от β , а с другой — от γ и θ_i (β и γ — общеизвестные «внутренние» коллективные переменные, описывающие форму квадрупольно деформированного ядра в системе координат, связанной с главными осями инерции ядра, а θ_i — углы Эйлера, задающие ориентацию этой системы относительно л. с.). Мы будем называть первую систему функций «радиальной», а вторую — «угловой», поскольку β есть не что иное, как модуль радиус-

Ядерная физика, 1969, т. 10, вып. 2, с. 286-295.

вектора в пятимерном пространстве комплексных деформационных параметров α_{μ} , а γ и θ_i можно связать с углами сферической системы координат в этом пространстве [5].

Выбор потенциала

Из величин α_µ можно составить лишь две независимые комбинации, инвариантные относительно обычных трехмерных вращений [6]:

$$I^2 = \sum_{\mu} \alpha_{\mu} \alpha_{\mu}^* \equiv \beta^2 \,, \tag{1}$$

$$I^{(3)} = \sqrt{\frac{7}{2}} \sum_{\mu,\mu',\mu''} (2\mu 2\mu'/2\mu'') \alpha_{\mu} \alpha_{\mu'} \alpha_{\mu''}^* = \beta^3 \cos 3\gamma.$$
 (2)

Кумар и Барранджер [4] исходят из предположения, что потенциальная энергия коллективных движений должна быть аналитической функцией (т. е. практически полиномом) от этих двух основных комбинаций. Потенциальные функции, обладающие указанным свойством, мы вслед за авторами работы [4] будем называть функциями *V*-типа. Поскольку степеней β ниже второй в этих полиномах нет, то их общим свойством, в частности, является обращение в нуль производной $\partial V / \partial \beta$ при $\beta = 0$. Однако ограничение при записи коллективных потенциалов лишь функциями *V*-типа вызывает два возражения.

1. Физически естественное требование гладкости потенциала как функции переменных β и γ не эквивалентно требованию аналитичности его как функции $I^{(2)}$ и $I^{(3)}$, поскольку переменные в последней паре не являются абсолютно независимыми: если $I^{(2)} = 0$, то и $I^{(3)} = 0$. Поэтому нет общих оснований для запрещения членов типа $I^{(3)}/I^{(2)}$, которые оставляют функцию гладкой, но приводят к существованию отличной от нуля производной $\partial V/\partial\beta|_{\beta=0} \neq 0$. Это ничему, однако, не противоречит, поскольку физически ясно, что произвольный «черный эллипсоид», если начать его сжимать в продольном направлении, совсем не обязательно «прекратит сопротивление», будучи сжат до сферической формы. Некоторые конкретные физические системы, например ядро, могут, конечно, обладать такими свойствами, но априорных оснований для введения такого ограничения как общего нет.

2. Само требование гладкости и непрерывности вовсе не обязательно для модельных потенциалов, от которых требуется лишь, чтобы они приближенно правильно описывали моделируемую потенциальную функцию и чтобы решение соответствующего уравнения Шредингера удовлетворяло обычным требованиям ограниченности, непрерывности и периодичности по угловым переменным. Потенциалы типа ямы с резким краем и даже δ-образные, как известно, успешно используются наравне с гладкими потенциалами. Поэтому в феноменологический потенциал можно включить, например, член просто пропорциональный β (он приводит к излому в начале координат), если это окажется удобным с вычислительной точки зрения.

Конкретное неудобство потенциалов *V*-типа в рассматриваемой задаче состоит в том, что, ограничиваясь малым числом первых членов в разложении их по степеням $I^{(2)}$ и $I^{(3)}$, трудно получить функцию, соответствующую аксиальному деформированному ядру, т. е. имеющую абсолютный минимум при $\beta = \beta_0 \neq 0$ и $\gamma = 0$. Поскольку реально $\beta_0 \ll 1$, функция $V(\beta, \gamma = 0)$ должна иметь два очень близких экстремума — при $\beta = 0$ и $\beta = \beta_0$. Например, как легко убедиться, простейший двухпараметрический потенциал $V = A + B \beta^2 + C \beta^3 \cos 3\gamma$ ни при каком выборе постоянных *A*, *B*, *C* не будет иметь абсолютного минимума при $\beta = \beta_0 > 0$ и $\gamma = 0$. С другой стороны, желательно, чтобы потенциальная функция при минимальном числе параметров описывала деформированное ядро и непрерывно переходила в простейшем предельном случае в осцилляторный потенциал сферического ядра, оставаясь все время периодической функцией 3γ с периодом 360° (важность последнего обстоятельства была подчеркнута в работе Беляка и Зайкина [7]). Практически удобным оказался потенциал

$$V = A + B\beta + C\beta^2 + D\beta\cos 3\gamma, \qquad (3)$$

который мы и будем в дальнейшем использовать.

Метод расчета

Полный оператор кинетической энергии имеет вид

$$\hat{T} = \frac{\hbar^2}{2B} \left[\hat{T}_{\beta} + \hat{T}_{\gamma} + \hat{T}_{\text{rot}} \right] \equiv \frac{\hbar^2}{2B} \left[\hat{T}_{\beta} + \frac{1}{\beta^2} \hat{\Delta} \right] =$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2B} \left\{ \frac{1}{\beta^4} \frac{\partial}{\partial \beta} \beta^4 \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\beta^2} \left[\frac{1}{\sin 3\gamma} \frac{\partial}{\partial \gamma} \sin 3\gamma \frac{\partial}{\partial \gamma} + \frac{1}{4} \sum_k \frac{\hat{Q}_k^2}{\sin^2 \left(\gamma - \frac{2}{\sqrt{3}} \pi k\right)} \right] \right\}.$$
(4)

Здесь B — массовый параметр, а Δ — угловая часть пятимерного оператора Лапласа. Ниже мы изложим метод точного численного решения задачи на собственные значения:

$$\left(\hat{T}+V\right)\Psi\left(\beta,\gamma,\theta_{i}\right)=E\Psi\left(\beta,\gamma,\theta_{i}\right).$$
(5)

Обозначая величину β , при которой потенциал (3) имеет абсолютный минимум, через β_0 , мы введем безразмерную переменную γ и следующую систему обозначений:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial \beta^2} \bigg|_{\beta = \beta_0, \gamma = 0} \equiv C_{\beta}, \ \frac{\partial^2 V}{\partial \gamma^2} \bigg|_{\beta = \beta_0, \gamma = 0} \equiv C_{\gamma} \beta_0^2,$$
$$\langle \beta \rangle^2 \equiv \frac{\hbar}{\sqrt{BC_{\beta}}}, \ y = \frac{\beta}{\langle \beta \rangle}, \ y_0 = \frac{\beta_0}{\langle \beta \rangle},$$

$$\omega_{\beta} = \sqrt{\frac{C_{\beta}}{B}}, \ x = \cos 3\gamma, \ \alpha = \frac{C_{\gamma} \langle \beta \rangle^2}{9}.$$
 (6)

Наши параметры жесткости связаны, например, с обозначениями Давыдова — Чабана [8] μ^2 и Γ^2 следующим образом:

$$y_0^2 = 1/\mu^2$$
, $\alpha = \mu^4/36\Gamma^4$. (7)

Удобство выбранной параметризации потенциала и обозначений состоит в том, что с их помощью как кинетическая, так и потенциальная энергия (при одновременной замене волновой функции Ψ на Ψ / y^2) приводятся к простому виду:

$$\hat{T} = \hbar \omega_{\beta} \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2y^2} \left(-\hat{\Delta} + 2 \right) \right], \tag{8}$$

$$V = \hbar \omega_{\beta} \left[\frac{(y - y_0)^2}{2} + \alpha y y_0 (1 - x) \right].$$
(9)

вид потенциала (9) при различных значениях параметров y_0 и α изображен на рис. 1. Уравнение (5) решалось ранее в разнообразных приближениях. Наиболее известные из них:

адиабатическое приближение,
 соответствующее отделению вращения от колебаний путем фиксации
 деформационных переменных в ротационном члене;

б) решение уравнения с потенциалом, зависящим только от y(« γ -нестабильный потенциал» Жана — Уилетса [9]);

в) замена динамической переменной γ ее эффективным средним значением — приближение Давыдова — Чабана [8].

Мы будем решать уравнение (5) точно, записывая волновую функцию в виде двойного ряда, где каждый член является произведением двух функций, одна из которых зависит от γ и углов Эйлера θ_i , а другая от β :



Рис. 1. Форма потенциальной поверхности, описываемой уравнением (9) при различных значениях параметров y_0 и α :

a) $y_0 = 0, 0 < \alpha < 1;$ 6) $y_0 = 2,5, \alpha = 0;$ b) $y_0 = 2,5, \alpha = 0,5;$ r) $y_0 = 2,5, \alpha = 1$

6 y ²₀ √α



Рис. 2. Спектры коллективных возбуждений в потенциале (9) в различных предельных случаях: а) $y_0 = 0$ (сферическое ядро, эквидистантный вибрационный спектр); б) $y_0^2 \gg 1$, a = 0 (γ-нестабильное ядро, случай Жана — Уилетса); в) $y_0^2 \gg 1$, $a \neq 0$ (жесткое деформированное ядро, случай Давыдова — Чабана)

$$\Psi_{i}^{J,M} = \sum_{n_{\gamma}} \sum_{n_{\beta}} a_{i,n_{\gamma},n_{\beta}}^{(J)} \varphi_{\lambda^{J}(n_{\gamma})}^{J,M} (\gamma, \theta_{i}) f_{n_{\beta}}^{\lambda^{J}(n_{\gamma})} (\gamma).$$
(10)

В качестве универсального набора ортогональных функций $\phi_{\lambda J(n_{\gamma})}^{J,M}$ соответствующих определенному значению углового момента *J* и его проекции на фиксированную ось *M*, мы будем брать решения уравнения

$$\hat{\Delta}\varphi_{\lambda}^{J,M}\left(y,\theta_{i}\right) + \lambda\left(\lambda+3\right)\varphi_{\lambda}^{J,M}\left(y,\theta_{i}\right) = 0, \qquad (11)$$

которые описывают «угловую» зависимость волновых (функций коллективных возбуждений сферического ядра, т. е. зависимость от переменных γ и θ_i . Явный вид этих функций для спинов J = 0, 2, 3, 4, 5, 6 при первых нескольких допустимых значениях λ получен в работе Беса [10]:

$$\varphi_{\lambda}^{J,M} = \sum_{K=0}^{J} w_{\lambda K} \left(\sin \gamma, \cos \gamma, x \right) \left(D_{MK}^{J} + (-1)^{J} D_{M-K}^{J} \right).$$
(12)

Для коэффициентов полиномов $w_{\lambda K}$ там приведены явные, но в общем случае весьма громоздкие рекуррентные соотношения. Практически при выбранном потенциале нам нужны лишь матричные элементы x — единственного члена в гамильтониане, недиагонального по этим функциям. Значения λ , при которых существует решение, соответствующее определенному моменту J, приведены в таблице. Квантовое число λ называется обычно «синьорити» и, как видно из уравнения (11), играет в нашей пятимерной задаче ту же роль, что орбитальный момент l в трехмерной задаче. Простые явные выражения для элементов матрицы x в базисе (12) получаются лишь при J = 0, 2, 3. Отличные от нуля матричные элементы, как можно показать непосредственным вычислением, таковы:

$$x_{n,n-1} = x_{n-1,n} = n/\sqrt{4n^2 - 1} \qquad (J=0),$$

$$x_{n,n-1} = x_{n-1,n} = \left[\frac{(n+1)^2 - 1}{4(n+1)^2 - 1}\right]^{1/2} \qquad (J=3),$$

$$x_{n,m} = \begin{cases} \left[1 + (-1)^n / [2n(n+2)]\right] & \text{при } n - m = 1\\ -\sqrt{n(n+1)} / (2n+1) & \text{при } n - m = 2 \end{cases} \qquad (J=2).$$

В остальных случаях (для спинов $J \ge 4$) их приходится вычислять, интегрируя численно выражения, приведенные в работе [10]. Для примера ниже приводится получаемая таким образом матрица x для J = 4:

0	-0,4264	0	0,3892	0	0
-0,4264	0	-0,2644	0	0,4079	0
0	-0,2644	0	-0,07725	0	0,4188
0,3892	0	-0,07725	0	-0,1314	0
0	0,4079	0	-0,1314	0	-0,1000
0	0	0,4188	0	-0,1000	0

Полную систему радиальных волновых функций можно выбирать поразному. Для ядер переходной по деформациям области, которым уделяется основное внимание в настоящей работе, удобно использовать в этом качестве радиальные функции сферического ядра, т. е. решения уравнения

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{(\lambda+1)(\lambda+2)}{2y^2} + \frac{y^2}{2} - \left(2n+\lambda+\frac{5}{2}\right)\right]f_n^{\lambda}(y) = 0.$$
(14)

Будучи нормированы условием $\int f^2 dy = 1$, они имеют вид

$$f_n^{\lambda}(y) = \left\{ \frac{2\Gamma\left(n+\lambda+\frac{5}{2}\right)}{n!\Gamma^2\left(\lambda+\frac{5}{2}\right)} \right\}^{1/2} y^{\lambda+2} \Phi\left(-n,\lambda+\frac{5}{2},y^2\right),$$
(15)

где Ф — вырожденная гипергеометрическая функция. Используя выражение для Ф через полиномы Лагерра и явный вид последних, легко получить явный вид матричного элемента произвольной положительной степени *y* по этим функциям: $\langle n_{\beta}, \lambda^{J}(n_{\gamma}) | y^{s} | n'_{\beta'}, \lambda(n'_{\gamma}) \rangle$.

<u> </u>		
$\frac{\frac{8,18}{\approx 5,54^{\approx}}0^+}{2^+}$	$\frac{6,61}{6,38} \begin{array}{c} 0^+\\ 3^+ \end{array}$	$\frac{6,13}{5,47}$ 3 ⁺
$\frac{-4,89}{-3,88} 0^+$	$\frac{4,48}{4,04} \begin{array}{c} 2^+\\ 6^+ \end{array}$	$\frac{3, 91}{3, 83}$ $2^+_{6^+}$
2,68 4+	$\frac{3,00}{2,38}0^+$	$\frac{2,545}{2,345} \begin{array}{c} 0 \\ 4 \\ 4 \end{array}$
$ 2^+$	<u> </u>	<u> </u>
······· 0+		····· 0+
u	D	A

Рис. 3. Примеры спектров коллективных возбуждений, соответствующих решениям уравнения Шредингера с гамильтонианом (16): а) $\alpha = 1$, $y_0 = 2$; б) $\alpha = 0.5$, $y_0 = 2$; в) $\alpha = 1$, $y_0 = 1.5$

Таким образом, подлежащая диагонализации матрица полного гамильтониана представляет собой сумму прямых произведений матриц операторов, действующих лишь на радиальную или угловые переменные, и матричные элементы гамильтониана при фиксированном моменте имеют вид (за единицу энергии принято $\hbar\omega_{\beta}$)

$$H_{i,r}^{J} = \left(2n_{\beta} + \lambda^{J}(n_{\gamma}) + \frac{5}{2} + \frac{y_{0}^{2}}{2}\right) \delta_{n_{\gamma}n'_{\gamma}} \delta_{n_{\beta}n'_{\beta}} - \left\langle n_{\beta}, \lambda^{J}(n_{\gamma}) | y | n'_{\beta}, \lambda^{J}(n'_{\gamma}) \right\rangle \times y_{0} \left[(1 - \alpha) \delta_{n_{\gamma}n'_{\gamma}} + \alpha x_{n_{\gamma}n'_{\gamma}} \right].$$

$$(16)$$

Индексы *i*, *k* «двумерной» матрицы формируются следующим образом:

$$i = n_{\gamma} n_{\beta}^{\max} + n_{\beta} + 1, \ k = n_{\gamma}' n_{\beta}^{\max} + n_{\beta}' + 1.$$
 (17)

Численная процедура диагонализации дает собственные значения, измеренные в единицах $\hbar\omega_{\beta}$. Вычисление приведенных вероятностей электрических переходов и статических квадрупольных моментов будет следующим этапом работы.

Обсуждение результатов

В принципе разложение (10) позволяет полностью решить задачу, однако необходимость обрывать его и использовать при расчете матрицы конечного ранга ограничивает область значений параметров, при которых имеет смысл пользоваться этим разложением. В настоящих расчетах максимальный ранг матриц $N^{\text{max}} = (n_{\beta}^{\text{max}} + 1) (n_{\gamma}^{\text{max}} + 1)$ был равен 64. Этого оказалось достаточно,

чтобы перекрыть промежуточную область и дойти до таких значений параметров деформации и жесткости, при которых хорошо применимо приближение Давыдова — Чабана.

Основная цель настоящей работы проследить за превращением эквидистантного вибрационного спектра сферического ядра, который соответствует $y_0 = \alpha = 0$, в вибрационно-ротационный спектр сильнодеформированных жестких ядер, получающийся в пределе $y_0 \gg 1$, $ay_0^2 > 1$. Третьим предельным с точки зрения нашего расчета случаем является γ -нестабильный потенциал Жана — Уилетса ($\alpha = 0$) при $y_0 \gg 1$. Спектры коллективных возбуждений четно-четного ядра, соответствующие перечисленным пределам, приведены на рис. 2. На рис. 3 и 4 показано, что дает точное решение урав-



Рис. 4. «Теоретически доступные» области значений энергии уровней 3^+ и 0^+ , отвечающие гамильтониану (16). Пунктирные линии соответствуют предельным случаям приближенного разделения переменных: эквидистантные β -колебательные уровни 0^+_{β} и γ -колебательные уровни 0^+_{γ} для которых $E_x(0) \approx 2E(3)$

нения в промежуточных случаях и как происходит переход к пределам.

Опишем теперь способ сопоставления результатов расчета с экспериментальными данными, которое проводится на рис. 5. Теоретические значения отношений энергий любых двух уровней являются в нашей модели функциями двух параметров — y_0 и α . Для вычисления таких отношений в качестве «единицы» удобно употреблять значение энергии первого уровня 2⁺, который экспериментально лучше всего изучен у большинства четно-четных ядер.

Введем обозначение

$$\varepsilon_i(J) \equiv E_i(J) / E_1(2) \tag{18}$$

Тогда исключение параметров, начатое на рис. 4, можно продолжить и сжато представить результаты расчетов следующим образом: теоретические функции для любой пары отношений

$$\varepsilon_i(J) = f_1(y_0, \alpha), \ \varepsilon_k(J_2) = f_2(y_0, \alpha) \tag{19}$$

можно рассматривать как параметрическое уравнение функциональной связи между $\varepsilon_i(J_1)$ и $\varepsilon_k(J_2)$, содержащее лишь одни свободный параметр. Тогда на графике, где по оси абсцисс отложено $\varepsilon_i(J_1)$, а по оси ординат $\varepsilon_k(J_2)$, система уравнений (19) ограничивает некоторую «теоретически доступную» область значений. При таком построении по оси абсцисс мы откладываем $\varepsilon_1(4)$, которое известно у большого числа ядер с хорошей точностью. В рассматриваемой модели это отношение заключено в пределах $2 \le \varepsilon_1(4) \le 10/3$. У сильнодеформированных жестких ядер наблюдаются следующие основные типы кол-



Рис. 5. Сравнение результатов расчета энергий уровней 2^+ , 4^+ , 6^+ , 0^+ и 2^+_2 с экспериментом. Границы области, соответствующей $0 \le \alpha \le 1$, обозначены сплошными линиями; пунктир соответствует неаксиальным ядрам; штрих-пунктир — результаты Давыдова — Чабана. Экспериментальные точки взяты для всех четно-четных ядер, у которых соответствующая комбинация уровней известна ($E_1(2), E_1(4)$ и по крайней мере один из остальных). Точки: \bigcirc — ядра, у которых $E_1(2) >$

1 МэВ; ● – ядра с 0,5 МэВ < *E*₁(2) < 1 МэВ; ● — ядра с *E*₁(2) < 0,5 МэВ. Экспериментальные значения энергий взяты из таблиц, приведенных в работах [12—14], и экспериментальных работ [15—17]

лективных возбужденных состояний: 1) основная ротационная полоса с последовательностью спинов 2, 4, 6...; 2) β-вибрационное состояние 0^+ и основанная на нем ротационная полоса 2, 4, 6,...; 3) у-вибрационное состояние 2^+ , служащее основанием для серии уровней 3, 4, 5, 6,..., которая в теории неаксиальных ядер Давыдова — Филиппова называется аномальной ротационной полосой [11]. На рис. 5 изображены «теоретически доступные» области значений $\varepsilon_1(6)$, $\varepsilon_1(0)$ и $\varepsilon_2(2)$ в зависимости от $\varepsilon_1(4)$.

В рамках настоящей работы расчеты проводятся лишь для ядер, аксиальных в основном состоянии. Охарактеризуем кратко полученные теоретические результаты, графически представленные на рис. 5.

А. Для рассмотренного класса потенциалов отношения $\varepsilon_1(4)$, $\varepsilon_1(0)$ и $\varepsilon_2(2)$ всегда не меньше двух.

Б. Уровни сферического ядра, соответствующие самому высокому для заданного квантового числа N спину J = 2N, с появлением и ростом деформации переходят в уровни основной ротационной полосы с $E(J) \sim J(J + 1)$, причем теоретически доступная область значений в зависимости от $\varepsilon_1(4)$ довольно узка и с достаточной точностью выполняется линейное соотношение $\varepsilon_1(6) = = 3(\varepsilon_1(4) - 1)$.

В. Классификация уровней 0⁺ и 2⁺ в промежуточной области по квантовым числам сферического или сильнодеформированного ядра невозможна. В зависимости от способа изменения параметров деформации уровень 0⁺ вибрационного триплета может переходить либо в однофононный уровень $E_{\beta}(0)$, либо в 0⁺₇ с $E_{\gamma}(0) \approx 2E_1(3)$; уровень 0⁺ с N=3 переходит либо в один из этих двух уровней, либо в двухфононное β-колебание; уровень 2⁺ с N=2 переходит либо в нижнее состояние «аномальной ротационной полосы» (γ -колебаний), либо в первый возбужденный уровень β-вибрационной полосы. Кривые, построенные по результатам работы [8], показывают, что в приближении Давыдова — Чабана всегда 2⁺_{N=2} \rightarrow 2⁺₇ и 2⁺_{N=3} \rightarrow 2⁺_β за счет пересечения этих уровней, которое является следствием приближенного разделения переменных и не сохраняется при точном решении.

Г. Снятие вырождения в двухфононном вибрационном триплете происходит по-разному для γ -нестабильных ($\alpha = 0$) и γ -жестких ($\alpha = 1$) ядер. В первом случае резко уходит вверх уровень 0⁺ ($\epsilon_1(0) = 3,5$ при $\epsilon_1(2) = \epsilon_1(4) = 2,15$), а во втором — уровень 2⁺ ($\epsilon_1(2) = 3$ при $\epsilon_1(4) \approx \epsilon_1(0) \approx 2,1$).

J	$n_{\gamma} = 0$	$n_{\gamma} = 01$	$n_{\gamma} = ^{\circ}2$	$n_{\gamma} = 3$	$n_{\gamma} = 4$	$n_{\gamma} = 5$
0	0	3	6	9	12	15
2	1	2	4	5	7	8
3	3	6	9	12	15	18
4	2	3	4	5	6	7
5	4	5	7	8	10	11
3	3	4	5	6	6	7

Значения квантового числа λ в зависимости от n_{γ} для различных J

В силу упомянутого ограничения максимального ранга использованных матриц расчеты выполнялись лишь для области с $\varepsilon_1(4) < 3$, которую можно назвать областью слабодеформированных ядер. Для них же производится сравнение с экспериментом. Продолжать расчеты для более сильнодеформированных ядер рассматриваемым способом вряд ли имеет смысл, поскольку, как видно из рис. 5, уже при $\varepsilon_1(4) > 2,5$ хорошо работает приближение Давыдова — Чабана и наши результаты тут практически совпадают с результатами работы [8]. Следует подчеркнуть условность терминов «слабодеформированные» или «сильнодеформированные» ядра. Деформация основного состояния, продольная и поперечная жесткости входят в расчеты в виде безразмерных комбинаций y_0 и α (см. (6)), которые и определяют законы подобия для спектров. Ядро может по форме мало отличаться от сферического и иметь малый

квадрупольный момент, который определяется именно величиной устойчивой деформации, но обладать в то же время развитым ротационным спектром.

Изложенная простая модель заведомо неприменима к магическим, околомагическим и самым легким ядрам. Они исключались из рассмотрения тем, что сравнение с экспериментом производилось лишь для ядер, у которых $E_1(2) < 1$ МэВ.

Сопоставление с экспериментальными данными, произведенное на рис. 5, носит качественный характер. Подбор параметров для наилучшего воспроизведения экспериментальных данных для отдельных ядер не производился. Сказать заранее, к какой области атомных весов и деформаций рассматриваемая модель применима лучше всего, трудно. Ясно, однако, что к уровням магических и околомагических ядер она неприменима. Степень «коллективизации» спектра грубо можно оценивать по энергии первого возбужденного состояния (2^+). Чем ниже этот уровень, тем больше эффективная масса вовлеченных в возбуждение частиц, тем больше оснований надеяться, что свойства спектра будут описываться рассматриваемой, но существу капельной моделью. Поэтому на рис. 5 нанесены экспериментальные точки для всех четночетных ядер, у которых известны соответствующие комбинации уровней, за исключением дважды магических.

Однако точки «рассортированы» следующим образом: разными значками обозначены уровни ядер с $E_1(2) < 1$ МэВ, 0,5 МэВ $< E_1(2) < 1$ МэВ И $E_1(2) < 0.5$ МэВ. Видно, что высказанное выше качественное соображение оправдывается. Для ядер первой группы корреляция экспериментальных значений с расчетными практически отсутствует. Для ядер второй группы она уже заметна, а для третьей практически все экспериментальные точки лежат в пределах соответствующих «теоретически доступных» областей. Заметная часть экспериментальных точек $\varepsilon_1(2)$ лежит, однако, ниже области аксиальных ядер (рис. 5б). Для жестких неаксиальпых ядер, согласно результатам работы [11], при $y_0 = 30^\circ \epsilon_1(4) = 2,666, \epsilon_2(2) = 2$. И не производя расчетов, можно довольно уверенно сказать, глядя на рис. 56, что если при фиксированном $y_0 = 30^\circ$ уменьшать жесткость, то $\varepsilon_1(4)$ будет уменьшаться, стремясь к предельному значению 2 примерно при постоянном $\varepsilon_2(2) = 2$, т. е. нижней границей области ε₂(2) для неаксиальных ядер примерно будет горизонтальная прямая, соединяющая точки $\varepsilon_1(4) = 2$, $\varepsilon_2(2) = 2$ и $\varepsilon_1(4) = 2,66$, $\varepsilon_2(2) = 2$. Она показана на рис. 56 пунктиром. Результаты Давыдова — Чабана, точность которых ухудшается при уменьшении жесткости и деформации, качественно согласуются с таким предположением. Поэтому в рамках рассматриваемой модели, возможно, следует описывать ядра, лежащие между сплошной и пунктирной кривой (см. рис. 5б), как нежесткие неаксиальпые.

Для более определенных количественных заключений необходимо произвести расчеты уровней энергии для неаксиальных ядер и вычислить приведенные вероятности переходов B(E2) и статические квадрупольные моменты. Такие расчеты ведутся в настоящее время. Из-за скудности имеющихся экспериментальных данных мы не обсуждаем здесь некоторый интересные вопросы, например положение вторых возбужденных состояний 0^+ и уровней 3^+ . Для более определенных суждений о применимости феноменологического описания в области ядер, близких по форме к сферическим, желательно знать для каждого ядра положение по отношению к уровню 2^+_1 уровней 4^+ , 6^+ , еще двух уровней со спином 2^+ , двух уровней 0^+ уровня 3^+ , относительные величины B(E2) для переходов

$$2^+_1 \to 0^+_0, \ 2^+_2 \to 0^+_0, \ 2^+_3 \to 0^+_0, \ 0^+_1 \to 2^+_1, \ 0^+_2 \to 2^+_1, \ 2^+_2 \to 2^+_1$$

и статические квадрупольные моменты для уровней 2^+_1 и 2^+_2 . В настоящее время почти полные наборы такого рода имеются лишь для некоторых сильнодеформированных ядер. Наиболее интересным объектом для интенсивного экспериментального изучения с точки зрения результатов, настоящей работы являются ядра, близкие к краям области редких земель — от Nd до Gd и от Os до Pb.

Авторы выражают благодарность А. С. Давыдову за интерес к работе и обсуждения. Одному из авторов (Н.Р.) была предоставлена возможность работы в институте Нильса Бора, где было начато настоящее исследование. Он выражает признательность за эту возможность и благодарен профессорам О. Бору, Б. Моттельсону и Р. Даймонду за обсуждения и указания.

Литература

- A. Bohr. Mat.-Fys. Medd. Kong. Dan. Vid. Selsk., 26, 14, 1952 (перев. см. ПСФ, 9, 9. 1955).
- 2. A. Bohr, B. Mattelson. Mat.-Fys. Medd. Kong. Dan. Vid. Selsk., 27, 16, 1953 (перев. см. ПСФ, 9, 34, 1955).
- 3. А. С. Давыдов. Возбужденные состояния атомных ядер, Атомиздат, 1967.
- 4. K. Kumar, M. Barranger. Nucl. Phys., A92, 608, 653, 1967.
- 5. G. Rakavy. Nucl. Phys., 4, 289, 1957.
- 6. A. K. Kerman. Ann. of Phys., 12, 300, 1961.
- 7. В. И. Беляк, Д. И. Заикин. Изв. АН СССР, серия физ., 25, 1163, 1963.
- 8. A. S. Davydov, A. A. Chaban. Nucl. Phys., 20, 499, 1960.
- 9. L. Wilets, M. Jean. Phys. Rev., 102, 788, 1956.
- 10. D. R. Bes. Nucl. Phys., 10, 373, 1959.
- 11. А. С. Давыдов, Г. Ф. Филиппов. ЖЭТФ, 35, 440, 1958.
- 12. Б. С. Джелепов, Л. К. Пекер, В. О. Сергеев. Схемы распада радиоактивных ядер, Изд-во АН СССР. М.— Л., 1963; «Наука», 1966.
- 13. Nuclear Data. Sect. B, vol. I, II, 1966–1968.
- 14. E. Y. de Aisenberg, J. F. Suarez. Nucl. Phys., A97, 529, 1967.
- 15. J. Burde, R. M. Diamond, F. S. Stephens. Nucl. Phys. A92. 306, 1967.
- 16. J. E. Clarkson, R. M. Diamond, F. S. Stephens et al. Nucl. Phys., A93, 272, 1967.
- 17. J. O. Newton, F. S. Stephens, R. M. Diamond. Nucl. Phys., A95, 377, 1967.

To the Phenomenological Theory of Collective Excitations in Nuclei

N. S. Rabotnov, A. A. Seregin

Dependence of the potential energy of a deformed nucleus on the deformation parameters is discussed. It is shown that the potential of the form $V = A + B\beta + C\beta^2 +$ + D $\beta \cos 3\gamma$ is practically useful. A method is presented for numerical solution of the Schroedinger equation of the collective model with five dynamical variables for such a potential, without assuming a smallness of the vibrations about the equilibrium deformation or their adiabatic separation from the rotations. Positions of the levels 0⁺, 2⁺, 4⁺, 6⁺ are calculated and compared, with the experimental data on even-even nuclei.

Вероятности квадрупольных электрических переходов и средние значения квадрупольных моментов в феноменологической теории ядра

А. П. Будник, Н. С. Работнов, А. А. Серегин

Физико-энергетический институт (Поступила в редакцию 9 февраля 1970 г.)

В рамках феноменологической коллективной модели ядра с потенциалом, зависящим от обеих внутренних коллективных переменных β и γ , рассчитаны относительные значения приведенных вероятностей электрических квадрупольных переходов между состояниями 2⁺ и из состояний 2⁺ в состояния 0⁺, а также средние значения статических электрических квадрупольных моментов состояний 2⁺. Полученные результаты сравниваются с экспериментальными данными для ядер переходной по деформациям области, у которых $\varepsilon_2(2) = E_2(2^+) / E_1(2^+) \leq 8$.

Введение

В работе [1] был проведен выбор коллективного потенциала феноменологической теории и получено решение соответствующего пятимерного уравнения Шредингера, что позволило проследить за переходом эквидистантного колебательного спектра четно-четных сферических ядер в вибрационноротационный спектр деформированных ядер. В настоящей работе в рамках той же модели провозится расчет вероятностей электрических квадрупольных переходов между уровнями 2^+ и с уровней 2^+ на уровни 0^+ , а также средних значении квадрупольных моментов в состояниях 2^+ для ядер переходной по деформациям области

Функции базиса и вычисление матричных элементов

Уравнение Шредингера коллективной модели с потенциалом, выбранным в [1], имеет вид

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2y^2}(-\hat{\Delta}+2) + \frac{(y-y_0)^2}{2} + \alpha y y_0(1-x)\right]\Psi = \frac{E}{\hbar\omega}\Psi.$$
 (1)

Здесь Δ — угловая часть пятимерного оператора Лапласа, а безразмерная переменная *у* и другие обозначения следующим образом связаны с известными параметрами коллективной модели [2]:

$$y = \beta/\beta_{00}, \quad \beta_{00}^2 = \hbar\sqrt{BC_{\beta}}, \quad y_0 = \beta/\beta_{00},$$

$$x = \cos 3\gamma, \quad \omega = \sqrt{C_{\beta}/B}, \quad \alpha = C_{\gamma}/9C_{\beta},$$
 (2)

Ядерная физика, 1970, т. 12, вып. 3, с. 477-484.

где *В* — массовый параметр, $C_{\beta, \gamma}$ — жесткости по отношению к β - и γ -колебаниям, β_0 — равновесное значение параметра деформации.

Решение уравнения (1) ищется в виде двойного ряда по произведениям базисных функций, являющихся решениями «радиального» и «углового» уравнений, на которые разделяется уравнение (1) при $\alpha = y_0 = 0$:

$$\Psi_i^{JM}(y,\gamma,\theta) = \sum_{n_\beta} \sum_{n_\gamma} a^i_{n_\gamma n_\beta} \varphi_{\lambda(n_\gamma)}^{JM}(\gamma,\theta_i) f_{\lambda(n_\gamma)n_\beta}(y).$$
(3)

Здесь *J* и *M* — момент количества движения и его проекция на ось *z* в л. с., а λ — квантовое число «синьорити». В рассматриваемом случае оно является аналогом орбитального момента количества движения для пятиметрового пространства, и функции φ , зависящие от угловых переменных, являются решениями уравнения

$$\hat{\Delta}_{\varphi\lambda}^{JM} = \lambda(\lambda+3)\varphi_{\lambda}^{JM} .$$
⁽⁴⁾

При J = 0 решения существуют лишь для $\lambda = 3n$, где n = 0, 1, 2,..., a при J = 2 — лишь при $\lambda \neq 3n$, т. е. для $\lambda = 1, 2, 4, 5, 7, 8,...$ (см. [3, 4]). В первом случае волновые функции не зависят от углов Эйлера и совпадают с нормированными на единицу полиномами Лежандра от соs3 γ

$$\varphi_{\lambda(n_{\gamma})}^{00} = P_{n_{\gamma}}(\cos 3\gamma), \qquad (5)$$

а во втором имеют вид

$$\varphi_{\lambda}^{2M} = u_{\lambda}(x)\varphi_{1}^{2M} + v_{\lambda}(x)\varphi_{2}^{2M}, \qquad (6)$$

где u_{λ} , v_{λ} — полиномы от x, а $\varphi_{\lambda 1}^{2M}$ и $\varphi_{\lambda 2}^{2M}$ — два первых решения, имеющие вид

$$\varphi_1^{2M} = \cos \gamma D_{M0}^2 + \frac{\sin \gamma}{\sqrt{2}} \Big[D_{M2}^2(\theta_i) + D_{M-2}^2(\theta_i) \Big], \tag{7}$$

$$\varphi_2^{2M} = \cos 2\gamma D_{M0}^2 - \frac{\sin 2\gamma}{\sqrt{2}} \Big[D_{M2}^2(\theta_i) + D_{M-2}^2(\theta_i) \Big].$$
(8)

Особое значение для дальнейшего имеет функция ϕ^{2M} . Она с точностью до множителя, не зависящего от угловых переменных, совпадает с оператором электрического квадрупольного момента в феноменологической коллективной модели (см., например, [5]):

$$\hat{q}_{2M} = y \varphi_1^{2M} \tag{9}$$

и с точностью до другого множителя совпадает с α_{2M} — коэффициентом в разложении функции, описывающей форму ядра, по сферическим гармоникам —

$$\alpha_{2M} = \beta \varphi_1^{2M} \,. \tag{10}$$

Эти коэффициенты в рассматриваемой феноменологической теории являются динамическими переменными и в представлении вторичного квантования представляют собой линейную комбинацию операторов рождения и уничтожения, повышающих или понижающих на единицу значение квантового числа λ . И вообще λ подчиняется некоторому закону сложения, который аналогичен закону сложения моментов для трехмерного случая и имеет вид

$$\sum_{M_1M_2} (J_1M_1J_2M_2 | JM) \varphi_{\lambda_1}^{J_1M_1} \varphi_{\lambda_2}^{J_2M_2} = \sum_{i=|\lambda_1-\lambda_2|}^{\lambda_1+\lambda_2} C_i \varphi_i^{JM} .$$
(11)

В частности, с учетом того, что сказано выше о допустимых значениях λ для данного *J*, имеем:

$$\sum_{M_1M_2} (2M_1 2M_2 | 2M) \varphi_{3n+1}^{2M_1} \varphi_1^{2M_2} = C_1(n) \varphi_{3n+2}^{2M},$$
(12)

$$\sum_{M_1M_2} (2M_1 2M_2 | 2M) \varphi_{3n+2}^{2M_1} \varphi_2^{2M_2} = C_2(n) \varphi_{3n+2}^{2M} + C_3(n) \varphi_{3(n+1)+1}^{2M},$$
(13)

$$\sum_{M_1M_2} (2M_1 2M_2 | 00) \varphi_1^{2M_1} \varphi_{3n+1}^{2M_2} = C_4(n) \varphi_{3n}^{00}.$$
(14)

Приведенная вероятность электрического квадрупольного перехода из k-го состояния с моментом J в *i*-е состояние с моментом J' (k и *i* — номера сово-купностей остальных квантовых чисел) имеет в наших переменных вид

$$B(E2; J_r \to J_i') = \frac{5Q_0^2}{16\pi(2J+1)y_0^2} \sum_{M,M',\mu} \left| \langle J'M'i | q_{2\mu} | JMk \rangle \right|^2.$$
(15)

Зная волновые функции Ψ_k^{M} , заданные наборами коэффициентов $\alpha_{n_{\gamma}n_{\beta}}$, для вычисления приведенных вероятностей мы должны получить матричные элементы оператора (9) по функциям базиса. «Радиальные» волновые функции имеют вид (см. [5]):

$$f_{\lambda(n_{\gamma})n_{\beta}}(y) = \left\{ \frac{2\Gamma(n_{\beta} + \lambda + \frac{5}{2})}{n_{\beta}!\Gamma^{2}(\lambda + \frac{5}{2})} \right\}^{1/2} y^{\lambda+2} e^{-y^{2}/2} \Phi(-n,\lambda + \frac{5}{2},y^{2}).$$
(16)

Матричные элементы *у* по этим функциям легко вычислить, используя явный вид гипергеометрических функций $\Phi(-n, \lambda + \frac{5}{2}, y^2)$. Это было сделано в работе [1]. Явный вид «угловых» матричных элементов можно получить, используя соотношения (5), (6) и (12) — (14), а также дифференциальные уравнения, которым подчиняются полиномы u_k и v_k в выражении (6). Эти дифференциальные уравнения имеют вид (см. [4])

$$(\Lambda - 4)u_{\lambda} - 24x \frac{du_{\lambda}}{dx} + 9(1 - x^{2}) \frac{d^{2}u_{\lambda}}{dx^{2}} + 12 \frac{dv_{\lambda}}{dx} = 0,$$

$$6 \frac{du_{\lambda}}{dx} + (\Lambda - 10)v_{\lambda} - 30x \frac{dv_{\lambda}}{dx} + 9(1 - x^{2}) \frac{d^{2}v_{\lambda}}{dx^{2}} = 0,$$

$$(\Lambda = \lambda(\lambda + 3)).$$
(17)

Преобразуем сначала выражение (15), воспользовавшись теоремой Вигнера — Эккарта в применении к оператору квадрупольного момента

$$\left\langle J'M'n_{\gamma}' \Big| q_{2\mu} \Big| JMn_{\gamma} \right\rangle = \frac{(J2M\mu | J'M')}{\sqrt{2J'+1}} \left\langle J'n_{\gamma}' \| q \| Jn_{\gamma} \right\rangle.$$
(18)

Здесь $(J2M\mu|J'M')$ — коэффициент Клебша — Гордана, а $\langle J'n'_{\gamma} ||q||Jn_{\gamma} \rangle$ — приведенный матричный элемент, не зависящий от магнитных квантовых чисел,

$$\langle J'n'_{\gamma} \| q \| Jn_{\gamma} \rangle = \int_{-1}^{1} dx \sum_{KK'} g_{n'_{\gamma}K'}^{J'}(\gamma) g_{n_{\gamma}K}^{J}(\gamma) \langle J'K' \| q \| JK \rangle,$$

$$\langle J'K' \| q \| JK \rangle = \sqrt{2J+1} \left\{ (J2K0 \Big| J'K') \cos \gamma + \frac{\sin \gamma}{\sqrt{2}} \Big[\sqrt{\frac{1+\delta_{K0}}{1+\delta_{K'0}}} \times (19) \right] \\ \times (J2K2 \Big| J'K') + \sqrt{\frac{1+\delta_{K'0}}{1+\delta_{K0}}} (J2K2 \Big| J'K') \Big] .$$

Подставляя (18), (19) в (15) и выполняя суммирование по магнитным квантовым числам с использованием свойств коэффициентов Клебша — Гордана, получаем

ī

$$B(E2; J_k \to 2_i) = \frac{Q_0^2}{16\pi y_0^2} \left| \sum_{n_\gamma n'_\gamma n_\beta n'_\beta} a^i_{n_\gamma n_\beta} a^k_{n'_\gamma n'_\beta} \times \left\langle n_\beta, \lambda(n_\gamma) \middle| y \middle| n_\beta, \lambda(n'_\gamma) \right\rangle g^J_{n_\gamma n'_\lambda} \right|^2,$$
(20)

где

$$g_{n_{\gamma}n_{\lambda}'}^{J} \equiv \left\langle J'n_{\gamma}' \| q \| J n_{\gamma} \right\rangle.$$
⁽²¹⁾

Остается вычислить матричные элементы $g_{n_{7}n_{\lambda}}^{J}$. Выполняя в выражениях (12) — (14) суммирование с использованием свойств обобщенных сферических функций и коэффициентов Клебша — Гордана, действуя на левые н правые части этих выражений оператором

$$\hat{\Delta} = -\frac{1}{\sin 3\gamma} \frac{\partial}{\partial \gamma} \sin 3\gamma \frac{\partial}{\partial \gamma} + \frac{1}{4} \sum_{r=1}^{3} \frac{\hat{Q}_{r}^{2}}{\sin^{2} \left(\gamma - \frac{2\pi}{3}k\right)}$$
(22)

и учитывая (17), после несложных, но громоздких выкладок получаем

$$g_{n_{\gamma}n_{\lambda}}^{2} = -\sqrt{\frac{10}{7}},$$
 (23)

$$g_{nn_{\gamma}}^{0} = (-1)^{n_{\gamma} - n'} \sqrt{\frac{-n_{\gamma} + n_{\lambda}' + 1}{2n_{\gamma} + 1}}$$
(24)

при выполнении правил отбора

$$\left|\lambda^{J}(n_{\gamma}) - \lambda^{2}(n_{\gamma}')\right| = 1.$$
⁽²⁵⁾

Попутно получается явный вид полиномов u_{λ} и v_{λ} . Для дальнейших численных расчетов нужны только матричные элементы (23) — (25), но мы приведем здесь для полноты и выражения для u_{λ} и v_{λ} , определив тем самым явный вид функций φ_{λ}^{2M} для произвольных значений λ :

$$u = \frac{(-1)^n}{1 - x^2} \sqrt{\frac{3(n+1)}{2}} \left[P_n(x) - x P_{n+1}(x) \right], \tag{26}$$

$$v = \frac{(-1)^n}{1 - x^2} \sqrt{\frac{3(n+1)}{2}} \left[P_{n+1}(x) - x P_n(x) \right].$$
(27)

Среднее значение электрического квадрупольного момента в состоянии $\Psi_i^{JM}(y,\gamma,\theta_i)$ определяется диагональными матричными элементами $\langle JMi | Q_{20} | JMi \rangle$ при M = J, т. е.

$$Q_{Ji} = \left\langle JJi \left| Q_{20} \right| JJi \right\rangle.$$
⁽²⁸⁾

Учитывая все сказанное выше, это выражение можно привести к виду

$$Q_{2i} = \sqrt{\frac{2}{35}} \frac{Q_0}{y_0} \sum_{n_\gamma n'_\gamma n_\beta n'_\beta} a^i_{n_\gamma n_\beta} a^i_{n'_\gamma n'_\beta} \left\langle n_\beta n_\gamma | y | n'_\beta n'_\gamma \right\rangle g^J_{n_\gamma n'_\gamma}$$
(29)

В это выражение входит та же амплитудная матрица $g_{n_{\gamma}n_{\lambda}}^{J}$, что и в формулу (21) для вероятности перехода.

Обсуждение результатов и сравнение с экспериментом

Нахождение матричных элементов гамильтониана (1) было произведено в работе [1]. Там же была описана численная процедура диагонализации, позволяющая получить собственные значения и собственные функции. Последние получаются в форме наборов коэффициентов $a^i_{n_{\gamma}n_{\gamma}}$, соответствующих ортонормированным векторам. После этого для вычислений можно непосредственно пользоваться формулами (21) и (29).

В некоторых случаях, соответствующих предельным значениям параметров α и y_0 . вид гамильтониана упрощается. Для сферического ядра ($\alpha = y_0 = 0$) приведенные вероятности перехода вычисляются аналитически, а средние значения электрического квадрупольного момента во всех состояниях равны нулю. Предельный случай $\alpha = 0$ соответствует не зависящему от γ потенциалу Жана — Уилетса [6], т. е. так называемым гамма-нестабильным ядрам. В этом случае n_{γ} является точным квантовым числом, и в выражении (3) остается

только сумма по n_{β} . Аналогично можно рассмотреть противоположный предельный случай, когда точным квантовым числом является n_{β} . Он соответствует физически «бесконечно большой» бета-жесткости по сравнению с гаммажесткостью, т. е. фиксированному значению $y = y_0$. В этом случае матричные элементы гамильтониана в прежних единицах имеют вид

$$H_{n_{\gamma}n_{\gamma}'}^{J} = \frac{\left[\lambda(n_{\gamma})+1\right]\left[\lambda(n_{\gamma})+2\right]}{y_{0}^{2}}\delta_{n_{\gamma}n_{\gamma}'} + \alpha y_{0}^{2}(\delta_{n_{\gamma}n_{\gamma}'}-x_{n_{\gamma}n_{\gamma}'}).$$
(30)

Если вынести отсюда общий множитель y_0^{-2} , то в матрице гамильтониана кроме единицы измерения энергии, которая теперь будет равна $\hbar\omega/y_0^2$, останется единственный параметр $\delta = \alpha y_0^4$.

Приведенные вероятности перехода вычисляются в единицах $Q_0^2 / 16\pi y_0^2$. Этот общий множитель является таким же невычисляемым в данной модели масштабным фактором, как и $\hbar \omega$ при расчете положения уровней. Чтобы не вводить дополнительный параметр, затрудняющий сравнение результатов с экспериментом, мы поступим так же, как и при расчете спектров в работе [1] — будем сравнивать с экспериментом лишь относительные значения вероятностей, выбрав за «единицу» $B(E2, 2_1 \rightarrow 0_0)$ — вероятность перехода из первого возбужденного состояния с моментом 2 в основное состояние. Отношения приведенных вероятностей, так же как и отношения энергий, зависят только от двух параметров. Задание любого из относительных значении энергии фиксирует одни параметр. Поэтому если построить график, выбрав в качестве аргумента по оси абсцисс какое-нибудь из относительных значений энергии, а по оси ординат откладывать значение для отношения любого другого отношения энергий или приведенных вероятностей, то при вариации параметров во всем интервале их изменения эти относительные значения будут запол-



Рис. 1. Сравнение результатов расчета приведенных вероятностей электрических квадрупольных переходов $B(E2; 2_2 \rightarrow 0_0) / B(E2; 2_2 \rightarrow 2_1)$ с экспериментом. Пунктир соответствует $\alpha = 1$, штрих-пунктир — результатам работы [2]

нять на графике некоторую ограниченную «теоретически доступную» область. При расчете спектров для представления результатов в качестве такого аргумента использовалось отношение $\varepsilon_1(4)$, при расчете вероятностей удобное использовать отношение $\varepsilon_2(2) = E_2(2) / E_1(2)$.

Сходимость использованного метода расчета (см. [1]) обеспечивается примерно до $\varepsilon_2(2) \le 8$, что соответствует промежуточным по деформациям ядрам. Для них и проводилось сравнение с экспериментом, приведенное на рис. 1—3.

Лучше всего изучено отношение приведенных вероятностей переходов со второго уровня 2_2^+ в основное состояние и на уровень 2_1^+ , т. е. $B(E2, 2_1 \rightarrow 0_0)$ / $B(E2, 0_1 \rightarrow 2_1)$. Это отношение легко рассчитать по наблюдаемым интенсивностям в схеме распада, поскольку оно не зависит от заселенности исходного уровня 2_{2}^{+} . Теоретические значения для $\alpha = 0$ равны нулю и образуют нижнюю границу для $2 \le \epsilon_2(2) \le 2.5$. Кривая для $\alpha = 1$ резко поднимается от нуля при $\epsilon_2(2) \approx 2$, но имеет глубокий минимум при $\epsilon_2(2) \approx 4$ (эта кривая изображена на рис. 1 пунктиром везде, кроме тех участков, где она образует границу теоретически доступной области; эта граница нанесена сплошной линией). Штрихпунктир соответствует теории неаксиальных ядер Давыдова — Филиппова [7], которая предсказывает монотонное увеличение отношения $B(E2, 2_2 \rightarrow 0_0) / (E2, 2_2 \rightarrow 0_0)$ $B(E2, 2_2 \rightarrow 2_1)$ с ростом $\varepsilon_2(2)$. Минимум, наличие которого следует из наших расчетов, расположен вблизи «квазипересечения» второго и третьего уровней 2⁺. Это утверждение поясняется рис. 4. Вблизи этой точки структура волновой функции резко меняется. Вероятности перехода, как наиболее чувствительные к структуре состояния величины, в таких случаях могут сильно отличаться от результатов расчета адиабатическими приближенными методами. Это явленно должно существовать и у сильнодеформированных ядер в тех случаях, когда два коллективных уровня разной природы (например, бета-вибрационный и гамма-



Рис. 2. То же, что на рис. 1, для отношения $B(E2; 2_2 \rightarrow 2_1) / B(E2; 2_1 \rightarrow 0_0)$



Рис. 3. То же, что в рис. 1, для отношения $B(E2, 0_1 \rightarrow 2_1) / B(E2, 2_1 \rightarrow 0_0)$



Рис. 4. Зависимость абсолютных значении энергий первых трех уровней 2⁺ (измеренных в единицах $\hbar \omega$) и приведенной вероятности B(E2; 2₂ \rightarrow 0₀) (в единицах $Q_0^2 / 16\pi y_0^2 \epsilon_2$ (2)

вибрационный) имеют близкие значения энергий. В область минимума попадает ядро Cr^{50} . У него рассматриваемое отношение вероятностей примерно в 20 раз меньше, чем можно ожидать из монотонной зависимости; и действительно, рядом со вторым уровнем 2^+ ($\varepsilon_2(2) = 3,72$) у этого ядра находится третий ($\varepsilon_2(2) = 4,05$).

Отношение $B(E2, 2_2 \rightarrow 2_1) / B(E2, 2_2 \rightarrow 0_0)$ (см. рис. 2) зависит от $\varepsilon_2(2)$ монотонно при всех значениях α ; эта зависимость находится в качественном согласии с адиабатической теорией. Экспериментальные точки лежат на нижней границе теоретически доступной области, а при малых $\varepsilon_2(2)$ даже ниже нее.

Всего для нескольких ядер в рассматриваемой области имеются экспериментальные данные по отношению $B(E2, 0_1 \rightarrow 2_1) / B(E2, 2_1 \rightarrow 0_0)$, а теоретически доступная область значений в этом случае настолько широка, что попадание в нее нескольких экспериментальных точек практически не дает информации.

Результаты расчета средних значений квадрупольного момента первых двух уровней со спином 2^+ представлены на рис. 5, 6. Для уровня 2^+_1 это значение всегда меньше нуля и с увеличением параметров деформации и жесткости стремится к своему предельному значению $-2^2/7Q_0$ (см. [8]), в согласии с немногочисленными экспериментальными данными. Второе состояние 2^+ , которое у сферического ядра является одним из членов вибрационного триплета 0^+ , 2^+ , 4^+ , с появлением и ростом деформации согласно результатам, полученным в



Рис. 5. Сравнение результатов расчета средних значений электрических квадрупольных моментов состояния 2_1^+ с экспериментом. Эти значения измеряются в единицах Q_0 . Значения Q_0 взяты из работ [8, 13]

[1], может переходить либо в гамма-вибрационное состояние, служащее основанием «аномальной вращательной полосы», либо в первое возбужденное состояние бета-вибрационной полосы. Результаты расчета квадрупольных моментов подтверждают этот вывод. В пределе больших деформаций отношение Q / Q_0 для этого состояния может принимать любое значение от $-2^2/7$ до $+2^2/7$. Первый предельный случай соот-



Рис. 6. Результаты расчета средних значений квадрупольных моментов состояния 2⁺₁

ветствует первому вращательному уровню бета-вибрационной полосы, второй — гамма-вибрационному уровню. Однако в области слабодеформированных ядер для $2 \le \varepsilon_2(2) \le 2,8$ этот момент должен быть всегда положителен. Экспериментальных данных пока нет.

Выводы

Метод получения собственных значений и волновых функций коллективного гамильтониана, предложенный в работе [1], позволяет рассчитать вероятности квадрупольных электрических переходов между уровнями положительной четности для ядер переходной по деформациям области и средние значения статистических квадрупольных моментов. Получены теоретические закономерности, качественно согласующиеся с экспериментом. Между различными предельными случаями существуют, как правило, плавные переходы. Однако отношение $B(E2, 2_2 \rightarrow 0_0) / B(E2, 2_2 \rightarrow 2_1)$ резко уменьшается при сближении коллективных уровней 2⁺ разной природы. Значительный интерес представляло бы экспериментальное определение этого отношения для таких слабодеформированных ядер, как Ti⁴⁶, Cr⁵⁴, Sm¹⁴⁸, а также измерение средних значений квадрупольных моментов второго возбужденного состояния со спином 2.

Литература

- 1. Н. С. Работнов, А. А. Серегин. ЯФ, 10, 286, 1969.
- 2. А. С. Давыдов, А. А. Чабан. Nucl. Phys., 20, 499, I960.
- 3. G. Rakavy. Nucl. Phys., 4, 289, 1957.
- 4. D. R. Bes. Nucl. Phys., 10, 373, 1959.
- 5. А.С. Давыдов. Возбужденные состоянии атомных ядер. Атомиздат, 1967.
- 6. L. Wilets, M. Jean. Phys. Rev., 102, 788, 1956.
- 7. А. С. Давыдов, Г.Ф. Филиппов. ЖЭТФ, 35, 703, 1958.
- 8. А.С. Давыдов, В. И. Овчаренко. ЯФ, 7, 57, 1968.

- 9. G. Goldring, U. Simlansky. Phys Lett., 16, 151, 1965.
- 10. J. J. Simpson, D. Ecelshall. M. J. L. Yates, R. J. Freeman. Nucl. Phys., A94, 177, 1967.
- 11. A. Bamberger, P. G. Bizziti. B. Povh. Phys. Rev. Lett., 21, 1599, 1968.
- 12. O. Hausser, B. W. Hooton, D. Pelte, T. K. Alexander. Phys. Rev. Lett., 22, 359. 1969.
- 13. D. Schwalm, B. Povh. Phys. Lett., 29B, 103, 1969.

Probabilities of Quadrupole Transitions and the Mean Values of Quadrupole Moments in Phenomenological Nuclear Theory

A. P. Budnik, N. S. Rabotnov. A. A. Seregin

Relative values of reduced probabilities of electric quadrupole transitions between states 2⁺ and from states 2⁺ into states 0⁺ as well as the mean values of statistic electric quadrupole moments of 2⁺ stales are calculated in framework of phenomenological collective nuclear model with the potential depending on both internal collective variables α and γ . The results obtained are compared with the experimental data for nuclei with intermediate deformations in which $\varepsilon_2(2) = E_2(2^+) / E_1(2^+) \leq 8$.

Задача о жестком ротаторе и коллективные состояния четно-четных ядер

Е. В. Гай, Н. С. Работнов

Физико-энергетический институт

(Поступила в редакцию 25 января1971 г.)

Показано, что ряд теории возмущений в рекурсивной формулировке может быть использован для точного решения частичной проблемы собственных значений в применении к задаче об ассиметричном жестком квантово-механическом ротаторе. Ряд сходится для всех уровней основной ротационной полосы с произвольно высоким значением момента количества движения в общем случае трех произвольно выбранных моментов инерции. При сравнении результатов расчета с экспериментальными данными по уровням четно-четных ядер последовательно используется тот факт, что по существу решение зависит лишь от одного параметра, являющегося безразмерной комбинацией моментов инерции. Сравнение показывает, что при удовлетворительном описании уровней основной ротационной полосы модель в большинстве случаев предсказывает сильно завышенные по сравнению с наблюдаемыми значения энергий уровней «аномальной» ротационной полосы.

1. Введение

Представление о деформированном ядре как о жестком симметричном квантово-механическом ротаторе было впервые выдвинуто О. Бором и Моттельсоном [1, 2] для объяснения некоторых основных закономерностей, связанных с коллективной природой низколежащих возбуждений в ядрах. Следствия возможного нарушения аксиальной симметрии ядра в основном состоянии были исследованы Давыдовым и Филипповым [3]. Впоследствии появился ряд работ [4—7], в которых для исследования свойств низколежащих уровней четно-четных ядер использовалась задача о квантовом ротаторе в самой общей постановке, без априорных ограничении на моменты инерции. Задача эта допускает сравнительно простое точное численное решение, и возможности такого подхода были, казалось, быстро исчерпаны. Дальнейшее усовершенствование коллективной модели пошло по пути все более точного учета взаимодействия вращения с колебаниями и внутренними возбуждениями.

В настоящей работе мы возвращаемся к задаче о жестком ротаторе в применении к объяснению свойств спектров четно-четных ядер по двум причинам.

1. В предшествующих работах не был до конца использован тот хорошо известный факт, что даже в самом общем случае трех независимых моментов инерции задача о волчке в квантовой механике является по существу однопа-

Ядерная физика, 1971, т. 14, вып. 3, с. 519-525.

раметрической, т. е. сводится к нахождению собственных значений и векторов матрицы, элементы которой зависят только от одной безразмерной комбинации моментов инерции. Последовательное использование этого обстоятельства позволяет более полно и наглядно анализировать экспериментальные данные.

2. Как будет показано ниже для большинства уровней волчка, представляющих интерес с точки зрения теории ядра, а именно для всех уровней основной ротационной полосы с произвольно высоким значением момента количества движения и для нижайших состояний «аномальной» ротационной полосы нет необходимости прибегать к численной диагонализации матриц, а значения энергии и собственные функции с произвольной точностью получаются с помощью ряда теории возмущений (РТВ), который для перечисленных уровней всегда сходится.

2. Постановка задачи, выбор представления и параметров

Гамильтониан волчка имеет вид

$$H = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{J_A^2}{I_A} + \frac{J_B^2}{I_B} + \frac{J_C^2}{I_C} \right),$$
(1)

где J_i — операторы проекций момента количества движения на главные оси инерции волчка, а I_i — главные моменты инерции, упорядоченные соотношениями

$$I_C \ge I_B \ge I_A \,. \tag{2}$$

Обратим внимание на то, что порядок (2) отличается от выбранного, например, в работах [1—3], где направление оси z подвижной системы координат выбиралось вдоль оси приближенной аксиальной симметрии, момент инерции относительно которой минимален. Причины для этого будут указаны ниже. Тождественные преобразования позволяют привести выражение (1) к виду

$$H = aJ(J+1)[1+\beta v(\alpha)], \qquad (3)$$

где постоянные *a*, β, α зависят от главных моментов инерции следующим образом

$$a = \frac{\hbar^2}{2I_A}, \ \beta = \frac{I_A - I_C}{I_C}, \ \alpha = \frac{I_C (I_B - I_A)}{I_B (I_C - I_A)},$$
(4)

а оператор $v(\alpha)$ имеет вид

$$v(\alpha) = \left(J_C^2 - \alpha J_B^2\right) / J(J+1).$$
⁽⁵⁾

Из (2) следует, что

$$0 \le \alpha \le 1, \ -1 \le \beta \le 0. \tag{6}$$

Обозначая собственные значения матрицы v через $v_{J\tau}$ и вводя величины

 $\varepsilon_{J\tau} = E_{J\tau}/J(J+1)$, получаем из (3), что все дробно-рациональные комбинации типа

$$\frac{\varepsilon_{J\tau} - \varepsilon_{J_1\tau_1}}{\varepsilon_{J_2\tau_2} - \varepsilon_{J_3\tau_3}} = \frac{v_{J\tau} - v_{J_1\tau_1}}{v_{J_2\tau_2} - v_{J_3\tau_3}}$$
(7)

зависят только от α . Если мы выберем одну из таких комбинаций в качестве аргумента, то все остальные будут ее однозначными функциями. Эти функциональные зависимости в совокупности являются обобщением закона J(J + 1) на случай асимметрического волчка. Такое представление позволяет сосредоточить всю нетривиальную информацию о четырех ротационных уровнях в одной теоретической кривой, которую можно сравнивать непосредственно с наблюдаемыми величинами. Никакие подбираемые параметры при этом в анализе не участвуют.

3. Вычисление функций ν_{Jτ}(α) с использованием РТВ

Рассматривая в выражение (5) член $J_C^2 = K^2$ как «нулевое приближение», αJ_B^2 как «возмущение», мы можем получить $v_{J\tau}$, используя РТВ (впервые на возможность получения сходящегося РТВ для вычисления энергии некоторых ротационных уровней квантового волчка было указано в работе [8]). Удобнее всего в нашем случае использовать рекурсивную формулировку теории возмущении (см. [9, 10]). Приведем необходимые формулы.

Если уравнение для нахождения собственных функций и собственных значений имеет вид

$$(H_0 + \alpha W)\psi_n = E_n\psi_n, \qquad (8)$$

то решение с помощью РТВ записывают в виде

$$\Psi_n = \sum_{lk} c_{nk}^{(l)} \alpha^l \Psi_k^{(0)} , \qquad (9)$$

$$E_n = \sum_l E_n^{(l)} \alpha^l , \qquad (10)$$

где поправки очередного приближения выражаются через поправки предыдущих приближений следующим образом

$$E_n^{(l)} = \sum_{m \neq n} c_{nm}^{(l-1)} - \sum_{t=1}^{l-2} c_{nn}^{(t)} E_n^{(l-t)}, \ l > 1; \qquad E_n^{(1)} = W_{nn},$$
(11)

$$c_{nk}^{(l)} = \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \left(\sum_m c_{nm}^{(l-1)} W_{km} - \sum_{t=1}^{l-1} c_{nk}^{(t)} E_n^{(l-t)} \right), \quad k \neq n,$$
(12)

$$c_{nn}^{(l)} = -\frac{1}{2} \sum_{k} \sum_{t=1}^{l-1} c_{nk}^{(t)} c_{nk}^{(l-t)} .$$
(13)

Матричные элементы J_B^2 хорошо известны в представлении, где $J_C = K$ диагонально (см. например, [11]). Чтобы определить, будет ли РТВ сходиться, мы должны рассмотреть отношения $\alpha(J_B^2)_{KK_1}/(K_1^2 - K^2)$. Они отличны от нуля лишь для $K_1 = K + 2$ (будем рассматривать только полностью симметричные вращательные состояния — «уровни класса А» в обозначениях работы [11]):

$$\frac{\alpha(J_B^2)_{J,J-2}}{J^2 - (J-2)^2} = \alpha \sqrt{\frac{J(2J-1)}{8(J-1)}} .$$
(14)

Поскольку $\alpha \le 1$, эти отношения всегда меньше $\sqrt{6}/8$ для произвольных значений α и J (чем и объясняется выбранный порядок осей; при нем основной ротационной полосе симметричного волчка соответствуют именно состояния с максимальным значением K = J). Это позволяет надеяться, что РТВ будет всегда сходиться для этих уровней, что и было подтверждено прямым расчетом для четных значений $J \le 12$. Необходимо заметить, что РТВ сходится и для самого верхнего при заданном J уровня, если изменить порядок моментов инерции на обратный. Эти два вращательных уровня — верхний и нижний — с увеличением J переходят в состояния классического вращения относительно осей с минимальным и максимальным значением момента инерции. В классической механике эти два типа вращения, как известно, устойчивы.

Для J=2, когда существуют только два уровня класса A, их значения энергии получаются из решения квадратного характеристического уравнения. Получая эти значения также и с помощью РТВ и сравнивая результаты, легко следить за сходимостью ряда и точностью расчета.

4. Сравнение с экспериментом и обсуждение результатов

Следует сделать некоторые общие замечания относительно выбранного в настоящей работе способа графического представления результатов расчета. Этот способ основан на полном исключении параметров. В принципе в любой теоретической модели, в которой содержатся n параметров p_i и вычисляются N результирующих величин R_k , подлежащих сравнению с экспериментом, при N > n теоретические выражения

$$R_k = R_k (p_1, \dots, p_n), \ k = 1, \dots, N$$
(15)

всегда можно рассматривать как параметрические уравнения, определяющие N - n функциональных соотношений только между наблюдаемыми величинами или их комбинациями. Эти соотношения уже не зависят ни от каких подбираемых параметров и в концентрированной форме выражают существо теории — законы подобия, связь между безразмерными комбинациями наблюдаемых величин. Особенно удобен такой способ в применении к моделям, в которых окончательные результаты допускают представление в виде

$$q_l = q_l(q_1), \ l = 2, \dots, N - n,$$
 (16)
где все q_i , включая q_1 , есть функции только наблюдаемых величин. Модель асимметричного волчка, рассматриваемая в настоящей работе, относится, как было показано выше, к этой категории.

Для представления результатов расчета мы выбрали в качестве аргумента $x = (\varepsilon_{61} - \varepsilon_{21})/(\varepsilon_{41} - \varepsilon_{21}),$ а в качестве функций величины $y_{J\tau} = (\varepsilon_{J\tau} - \varepsilon_{21})/(\varepsilon_{41} - \varepsilon_{21})$. Это означает, что для определения инерционных параметров в качестве опорных используются первые три уровня основной ротационной полосы. Эти уровни в среднем менее чувствительны к значениям моментов инерции, чем уровни аномальной полосы. Так отношение энергий E_{61}/E_{21} меняется в эксперименте примерно от 3 до 11, а отношение E_{22}/E_{21} примерно от 2 до 25. В работе [3], например, значения единственного не исключенного параметра у подбираются фактически по положению E₂₂ как наиболее чувствительного уровня. Однако при полном исключении параметров из окончательных теоретических зависимостей все уровни равноправны. Выбор уровня E_{22} в качестве опорного вместо E_{61} , привел бы и нашем случае только к взаимной перемене местами абсциссы и ординаты на рис. 2.

Теоретические зависимости $y_{81}(x)$ и $y_{22}(x)$ представлены на рис. 1 и сравниваются там с экспериментальными данными. Сравнение производится для всех четно- четных ядер с A > 16, для которых имеются необходимые данные и у которых $E_{41}/E_{21} > 2$, $E_{61}/E_{21} > 3$.

Теоретическая кривая $y_{81}(x)$ удовлетворительно согласуется с экспериментом. Большинство точек систематически отклоняются несколько вверх, что, казалось бы, легко можно объяснить центробежным растяжением (чем выше y_{μ} , тем ниже E_{μ}). Однако рис. 1 лишь демонстрирует с максимальной ясностью существо дилеммы, стоящей перед всяким, кто пытается описывать коллективные возбуждения с высоким моментом на языке взаимодействия вращений с колебаниями: в чем именно заключается эффект растяжения — в отклонении от кривой, соответствующей асимметричному волчку, или в отклонении от крайней правой точки этой кривой (эта точка соответствует симметричному волчку и закону J(J + 1)? Как видно из рис. 1, эти два эффекта могут отличаться больше чем на порядок. Рис. 2, на котором изображена зависимость $y_{22}(x)$, может помочь «рассортировать» четно-четные ядра в этом отношении. На нем большое отклонение экспериментальной точки вверх означает, что второй уровень 2^+ лежит значительно, в некоторых случаях в несколько раз, выше, чем предсказывает модель асимметричного волчка. Переход от безразмерных величин у_л к значениям энергий ротационных уровней производится по формуле, вытекающей из соотношений (3) — (7):

$$E_{J\tau} = J \left(J + 1 \right) \left[\varepsilon_{21} + y_{J\tau} \left(\varepsilon_{41} - \varepsilon_{21} \right) \right], \tag{17}$$

где $y_{J_{\tau}}$ можно определить с помощью таблицы, вычислив по наблюдаемым значениям E_{21} , E_{41} и E_{61} величину x.



$y_{f_1}(x)$ $f_2(x)$ $f_3(x)$								
α	x	<i>Y</i> 21	${\mathcal Y}$ 10 1	<i>Y</i> 121	<i>Y</i> 22			
0	1,42857	1,66666	1,81818	1,92308	-5,0			
0,3	1,45877	1,71444	1,87779	1,99009	-5,72209			
0,5	1,54343	1,85170	2,04809	2,18534	-8,03214			
0,6	1,62970	1,99747	2,23309	2,39784	-10,9164			
0,65	1,692064	2,10717	2,37521	2,56176	-13,4248			
0,7	1,77261	2,25509	2,56955	2,78897	-17,3429			
0,75	1,87663	2,45834	2,84403	3,11446	-23,9371			
0,8	2,00938	2,74292	3,24541	3,60134	-36,2865			
0,85	2,17234	3,14576	3,85680	4,37285	-63,5212			
0,9	2,35303	3,70287	4,82380	5,69197	-143,215			
0,93	2,45365	4,09951	5,65117	6,96342	-295,332			
0,95	2,50866	4,35954	6,29898	8,10526	-585,209			
0,99	2,57108	1,70330	7,37645	10,5520	-1511,18			
1,0	2,83333	5,33333	7,75	12,3333				

Теоретические значения $v_{I}(x)$ для J = 8, 10, 12 и 2_2

Примечание. Неравномерный шаг выбран с учетом того, что зависимости y(x) становятся более резкими с увеличением x.



Рис. 2. То же, что на рис. 1, но для $y_{22} = (\varepsilon_{22} - \varepsilon_{21}) / (\varepsilon_{41} - \varepsilon_{21})$

Сильные отклонения точек на рис. 2 означают, что положения уровней в основной ротационной полосе не могут быть согласованы с положением второго уровня 2^+ за счет введения третьего независимого момента инерции. Это относится к большинству четно-четных ядер. С другой стороны, рис. 2 дает возможность выделить и те ядра, для которых модель ассиметричного волчка позволяет удовлетворительно описать положение уровней как основной, так и «аномальной» ротационных полос. Это относится, по-видимому, к Dy¹⁵⁴, Cd¹⁰⁸, Sm¹⁵⁰, Ce¹³⁴, Fe⁵⁶.

Авторы считают своим приятным долгом поблагодарить А. М. Дудкину и Е. И. Слесареву за помощь в оформлении работы.

Литература

- 1. A. Bohr. Math.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk., 26, 14,1952.
- 2. A. Bohr, B. R. Mottelson. Math.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk., 27, 16,1953.
- 3. A. S. Davydov, G. F. Filippov. Nucl. Phys., 8, 237, 1958.
- 4. A. S. Davydov, V. S.Rostovsky. Nucl. Phys., 12, 58, 1959.
- 5. A. S. Davydov, N. S. Rabotnov, A. A. Chaban. Nucl. Phys., 17, 169, 1960.
- 6. D. M. Van Patter. Nucl. Phys., 14, 42, 1959/60.
- 7. C. A. Mallman. Nucl. Phys., 24, 535, 1961.
- 8. R. M. Hainer, P. C. Cross, G. W. King. J. Chem. Phys., 35, 557, 1926.
- 9. M. Born, W. Heisenberg, P. Jordan. Z. für Physik, 17, 826, 1949
- 10. E. M. Corson. Perturbation Methods in the Quantum Mechanics of n-electron Systems, Blakie&Son LTD, London and Glasgow, 1951, p. 84.
- 11. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика, Физматгиз, 1953. С. 447-454.
- 12. Nuclear Data Sheets. 1959 1970.

Problem of the Rigid Rotator and Collective States of Even-Even Nuclei

E. V. Gay, N. S. Rabotnov

It is shown that the perturbation series in a recursive formulation may be used for exact solution of the partial eigen-value problem applying to the problem on the asymmetric rigid quantum-mechanical rotator. The series converges for all the levels of the ground rotation band with arbitrarily large angular momentum in general case of three arbitrary moments of inertia. When comparing the calculation results with the experimental data on the even-even nuclei, the fact is consecutively used that in the essence the solution depends on the only one parameter, being a dimensionless combination of the moment of inertia. The comparison shows that at reasonable description of levels of the ground rotation band the model in the most cases predicts rather overestimated energies of levels of the «anomalous» rotation band as compared to the observed ones.

Базисные волновые функции и матрицы операторов коллективной модели ядра

А. П. Будник, Е. В. Гай, Н. С. Работнов, А. В. Климов¹⁾, В. Ф. Турчин¹⁾, И. Б. Щенков¹⁾

Физико-энергетический институт, ¹⁾ Институт прикладной математики АН СССР

(Поступила в редакцию 25 января 1971 г.)

Волновые функции, соответствующие гармоническим квадрупольным колебаниям формы поверхности ядра, получены в физическом базисе, т. е. с выделением явной зависимости от переменных и квантовых чисел группы вращения O(3) физического пространства. Благодаря использованию языка РЕФАЛ для автоматизации громоздких аналитических выкладок удалось получить явный вид функций вплоть до высоких значений квантовых чисел момента J = 12 и синьорити $\lambda = 14$. Построенные функции использованы для вычисления матричных элементов основных операторов, используемых при расчетах в коллективной феноменологической модели ядра: монопольного электрического, дипольного магнитного и квадрупольного электрического моментов.

1. Введение

В последние годы наблюдается возрождение интереса к теоретическому исследованию свойств атомных ядер методом феноменологической теории коллективных возбуждений [1, 2] в связи с качественными достижениями в развитии экспериментальных методик, которые привели к быстрому накоплению новых данных, в частности данных, по состояниям с высокими моментами. Появился ряд работ, развивающих и углубляющих математический аппарат теории [3—8]. В работах [9, 10] было показано, что задачу на собственные значения, возникающую при рассмотрении квадрупольных возбуждений деформированных ядер, удобно решать в представлении, использующем в качестве базиса волновые функции сферического ядра. Это, по существу, волновые функции 5-гармонического осциллятора, и они образуют базис полностью симметричных представлений группы вращений 5-пространства O(5). Несмотря на то, что построению этого базиса посвящено значительное число работ (см., например. [11, 12, 7, 8]), решение этой задачи далеко от завершения.

В настоящей работе предпринято построение «физического базиса» группы O(5), т. е. получение базисных функции с явным выделением зависимости от параметров и квантовых чисел 3-группы вращений O(3) (в «естественном базисе», когда выделение подгрупп производится путем последовательного понижения числа измерений пространства, известен общий метод решения

Ядерная физика, 1971, т. 14, вып. 2, с. 304—313.

этой задачи [13]). Особенностью настоящей работы является интенсивное использование автоматического выполнения громоздких аналитических выкладок на ЭВМ с помощью языка РЕФАЛ [14—16].

2. Постановка задачи

ſ

Динамическими переменными в коллективной модели [1, 2] являются пять комплексных «деформационных координат» α_{μ} ($\mu = -2,..., 2$) коэффициенты в разложении функции, описывающей форму ядра в л. с., по сферическим гармоникам второго порядка

$$R(\theta, \varphi) = R_0 \left(1 + \sum_{\mu=-2}^{2} \alpha_{\mu} Y_{2\mu}(\theta, \varphi) \right).$$
(1)

Вещественность функции $R(\theta, \phi)$ накладывает на α_{μ} пять условий

$$\alpha_{\mu}^{*} = (-1)^{\mu} \alpha_{-\mu} , \qquad (2)$$

так что фактически задача содержит пять независимых действительных переменных. В 5-«пространстве деформаций» величины α_{μ} являются базисными функциями 5-представления группы O(5), т. е. сферическими компонентами радиус-вектора, а в физическом 3-мерном пространстве они же образуют сферический тензор второго ранга, чем и определяется своеобразная симметрия задачи.

Если ввести собственную систему координат в 3-пространстве так, чтобы ее плоскости совпадали с плоскостями симметрии поверхности, описываемой уравнением (1), то в этой системе для описания деформации обычно используются две внутренние деформационные переменные β и γ , которые связаны с α_{μ} и углами Эйлера, описывающими ориентацию собственной системы относительно лабораторной, соотношением

$$\alpha_{\mu} = \beta \left[\cos \gamma D_{\mu 0}^{2} \left(\theta_{i} \right) + \frac{\sin \gamma}{\sqrt{2}} \left(D_{\mu 2}^{2} \left(\theta_{i} \right) + D_{\mu - 2}^{2} \left(\theta_{i} \right) \right) \right], \tag{3}$$

где D_{MK}^{J} — обобщенные сферические функции. Если постоянную Планка \hbar , а также частоту и амплитуду нулевых колебаний положить равными единице, то в таких безразмерных переменных гамильтониан приобретает вид

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\mu=-2}^{2} (-1)^{\mu} \frac{\partial^{2}}{\partial \alpha_{\mu} \partial \alpha_{-\mu}} + \frac{1}{2} \sum_{\mu=-2}^{2} (-1)^{\mu} \alpha_{\mu} \alpha_{-\mu} =$$
(4)

$$=\frac{1}{2}\left\{-\frac{1}{\beta^4}\frac{\partial}{\partial\beta}\beta^4\frac{\partial}{\partial\beta}-\frac{1}{\beta^2}\frac{1}{\sin 3\gamma}\frac{\partial}{\partial\gamma}\sin 3\gamma\frac{\partial}{\partial\gamma}+\frac{1}{4\beta^2}\sum_{i}\frac{\hat{J}_i^2}{\sin^2\left(\gamma-\frac{2\pi}{2}i\right)}+\beta^2\right\}, \quad (4a)$$

где J_i — дифференциальные операторы проекций момента количества движе-

ния на оси собственной системы координат, они действуют лишь на углы Эйлера. Переменные в уравнении Шредингера с гамильтонианом (4) полностью разделяются, но из получающихся простых решений сложно строить функции с определенным моментом количества движения, поэтому в большинстве работ используется представление (4а). В этом случае в 5-операторе Лапласа от-

деляется лишь радиальная часть $f(\beta)$ ($\beta^2 = \sum_{\mu=-2}^{2} (-1)^{\mu} \alpha_{\mu} \alpha_{-\mu}$ является квадра-

том радиус-вектора в пространстве деформаций) и разделенные уравнения принимают вид

$$\left\{-\frac{1}{\beta^4}\frac{\partial}{\partial\beta}\beta^4\frac{\partial}{\partial\beta}+\beta^2+\frac{\Lambda}{\beta^2}-2E\right\}f(\beta)=0,$$
(5)

$$(\hat{\Delta}_{\theta,\gamma} - \Lambda) \Phi(\gamma, \theta_i) = 0,$$
 (6)

где $\hat{\Delta}_{\theta,\gamma}$ — угловая часть 5-лапласиана, а константа разделения является аналогом квадрата момента количества движения для 5-пространства, принимая значения

$$\Lambda_{\lambda} = \lambda(\lambda + 3); \quad \lambda = 0, 1, 2, \dots$$
(7)

Квантовое число λ получило название «синьорити». Общий вид решения уравнения (5) известен [1, 2]. Более сложной является задача отыскания всех решении уравнения (6), особенно для высоких значении квантовых чисел. В работе [12] путем непосредственного решения дифференциального уравнения (6) выведены рекуррентные соотношения, позволяющие получить функции Ф для $I \leq 6$. В настоящей работе получены функции Ф для высоких значении момента — до I = 12 включительно — и вычислены матрицы важнейших операторов, используемых в коллективной модели ядра, в построенном базисе.

3. Построение волновых функций

Квантовые числа «физического базиса» λ , *I*, *M* не всегда полностью характеризуют волновые функции, являющиеся решением уравнения (6). Для высоких значений квантовых чисел (начиная с $I = \lambda = 6$) появляется дополнительное вырождение.

Оператор, соответствующий дополнительному квантовому числу, неизвестен. В настоящей работе нам достаточно в каждом случае построить полный набор ортонормированных «функций с меткой», соответствующих определенным комбинациям λ , J, M, но не обязательно являющихся собственными функциями дополнительного оператора. Метку, как и авторы работ [7, 8], мы будем обозначать через v. Как показано в работе [12], искомые функции имеют вид

$$\Phi_{\nu,\lambda,J,M}\left(\gamma,\theta_{i}\right) = \sum_{K} g_{\nu,\lambda,J,M}\left(\gamma\right) D_{MK}^{J}\left(\theta_{i}\right),\tag{8}$$

где суммирование ведется по всем четным значениям K, а $g_K = (-1)^J g_{-K}$. Для построения функций Φ мы получим рекуррентные соотношения на основе ряда Клебша — Гордана для группы O(5)

$$\Phi_{\nu\lambda JM} \Phi_{\nu'\lambda' J'M'} = \sum_{\nu''\lambda'' J''M''} C^{\nu\lambda JM,\nu'\lambda'J'M'}_{\nu''\lambda'' J''M'} \Phi_{\nu''\lambda'' J''M''} .$$
⁽⁹⁾

Коэффициенты ряда для выбранного набора квантовых чисел неизвестны. Однако эту трудность можно обойти, поскольку известны пределы суммирования, и оказывается возможным порождать функции с более высокими значениями квантовых чисел путем умножения на некоторую функцию, выбранную в качестве «генератора», находя при этом неопределенные коэффициенты путем ортогонализации вновь получаемой функции к уже найденным, с последующей нормировкой. В качестве генерирующих удобно выбрать функции

$$\Phi_{12\mu} = \cos\gamma D_{\mu0}^2 + \frac{\sin\gamma}{\sqrt{2}} \left(D_{\mu2}^2 + D_{\mu-2}^2 \right) = \frac{\alpha_{\mu}}{\beta}$$
(10)

И

$$\sqrt{\frac{2}{3}}\Phi_{300} = \cos 3\gamma = \sqrt{\frac{7}{2}} \frac{1}{\beta^2} \sum_{\mu,\mu',\mu''} (-1)^{\mu''} (2\mu 2\mu' | 2 - \mu'') \alpha_{\mu} \alpha_{\mu'} \alpha_{\mu''}$$
(11)

(в тех случаях, когда дополнительное вырождение отсутствует, мы будем иногда этот индекс опускать). Умножение на $\Phi_{12\mu}$ меняет λ на ±1, а умножение на Φ_{300} — на ±1 и ±3. Квантовое число *J* при этом, естественно, подчиняется известным правилам сложения момента: умножение на скаляр не меняет *J*, а умножение на $\Phi_{12\mu}$ меняет на больше чем на два. Эти соображения позволяют конкретизировать для интересующих нас частных случаев выражение (9):

$$\Phi_{\nu,\lambda+1,J,M} = N\left(\sum_{\mu,m} \left(Im2\mu \middle| JM\right) \Phi_{12\mu} \Phi_{\nu\lambda Im} + q_{I\lambda-1\nu}^{I\lambda\nu} \Phi_{\nu\lambda-1,JM}\right),$$
(12)

$$\Phi_{\nu+1,\lambda+3,J,M} = N(\cos 3\gamma \Phi_{\nu\lambda \,\mathrm{Im}} + \sum_{\substack{\lambda'=\lambda\pm 1, \\ \lambda\pm 3}} \sum_{\nu'=\nu\pm 1} B_{\nu'\lambda'J'}^{\nu\lambda J} \Phi_{\nu'\lambda'JM}).$$
(13)

Специального пояснения требуют правила обращения с индексом *v* в выражениях (12), (13). Пока не найден оператор, соответствующий этому квантовому числу, и его спектр неизвестен, *v* остается лишь номером, с помощью которого делается различие между функциями с фиксированным набором λJM , если таких функций несколько. Выбор системы нумерации произволен и может определяться соображениями удобства. Кроме того, с помощью попеременного (и совместного) применения выражений (12), (13) можно получать функции в разной последовательности по λ и *J*, начиная с постоянной Φ_{0000} . На рис. 1 приведены допустимые комбинации λ и *J* до *J* = 12 и λ = 15 и показан выбранный нами вариант продвижения по этой схеме при последовательном построении базиса. Наиболее удобным оказался способ нумерации вырожденных

уровней, проиллюстрированный рис. 2. Этот же рисунок служит удобной мнемонической схемой, построенной с учетом того, что известно о кратностях вырождения (см. [11, 12]). Наименьшее возможное значение λ при заданном J



Рис. 1. Допустимые комбинации J, λ ≤ 12 и λ, J ≤ 15 изображены точками в незаштрихованных квадратах. Кратность вырождения при заданных λ, J в тех случаях, когда она отличается от единицы, приведена в соответствующих квадратах. Указана последовательность построения функций с помощью квадрупольного (сплошные стрелки) и скалярного (прерывистые стрелки) порождения. См. также рис. 2



Рис. 2. Схема, соответствующая определенному моменту *J* и иллюстрирующая способ нумерация вырожденных состояний с помощью метки *v*. Кратность вырождения при заданном λ*JM* равна числу незаштрихованных квадратов в соответствующем вертикальном столбце. Значение стрелок то же, что на рис. 1

Как показано в работе [12], подставляя функция в виде (8) в уравнение (6), можно получить для коэффициентов д систему связанных дифференциальных уравнений второго порядка, полное число которых равно числу n(J)возможных четных неотрицательных значений К, не превышающих Ј (для нечетных J запрещено также K = 0). Назовем «малым базисом» первые (по λ) n(J)функций, получаемых с помощью процедуры (12), которую мы будем называть в дальнейшем квадрупольным порождением. Первая функция для заданного J получается по формуле (12) из первой функции для J - 2, при этом коэффициент q равен нулю. Всем функциям малого базиса присваивается значение v = 0. С помощью скалярного порождения (выражение (13)) получается первая из следующих n(J) функций, которым присваивается v = 1, а движение вдоль этого ряда осуществляется с помощью квадрупольного порождения и т. д. Каждый последующий ряд получается из предыдущего с помощью скалярного порождения, сдвинут относительно него на три единицы по λ в сторону больших значений и имеет v на единицу большее, чем предыдущий. Схемы для различных J одинаковой четности отличаются только длиной ряда, которая равна

$$n(J) = \begin{cases} J/2 + 1 & \text{для четных } J, \\ (J-1)/2 & \text{для нечетных } J. \end{cases}$$
(15)

Подставляя в (12), (13) выражения (8), пользуясь известной формулой для произведения сферических функций

$$D_{M_1K_1}^{J_1} D_{M_2K_2}^{J_2} = \sum_{J_3M_3K_3} (2J+1) \binom{J_1 J_2 J_3}{M_1 M_2 M_3} \binom{J_1 J_2 J_3}{K_1 K_2 K_3} D_{M_3K_3}^{J_3^*}, \quad (16)$$

где $\begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ M_1 M_2 M_3 \end{pmatrix}$ — 3*j*-символы Вигнера; приравнивая коэффициенты при оди-

наковых D_{MK}^{J} в правых и левых частях равенств и выполняя интегрирование по углам Эйлера, получаем окончательно рекурсивные формулы для коэффициентов $g_{v\lambda,JK}$:

$$g_{\nu\lambda+1JK} = N\left(\sum_{K'} g_{012K'} g_{\nu\lambda IK-K'} \left(2K'IK - K' \middle| JK \right) + q_{\nu\lambda-1J}^{\nu\lambda I} g_{\nu\lambda-1JK}\right), \quad (17)$$

где

$$q_{\nu\lambda-1J}^{\nu\lambda I} = -\sum_{K,K'} \int_{-1}^{1} d(\cos 3\gamma) g_{012K'} g_{\nu\lambda IK-K'} g_{\nu,\lambda-1,J,K} \left(2K'IK - K' \big| JK \right)$$
(18)

приведенный матричный элемент квадрупольного оператора (10);

$$g_{\nu+1,\lambda+3,I,K} = N(\cos 3\gamma)g_{\nu\lambda IK} = \sum_{\nu'=\nu\pm 1}\sum_{\substack{\lambda'=\lambda\pm 1,\\\lambda\pm 3}} S_{\nu'\lambda' I}^{\nu\lambda I}g_{\nu'\lambda' IK} , \qquad (19)$$

где матричный элемент скалярного оператора (11)

$$S_{\nu'\lambda'I'}^{\nu\lambda I} = -\sum_{K} \int_{-1}^{1} d(\cos 3\gamma) g_{\nu\lambda IK} g_{\nu'\lambda' IK} \cos 3\gamma.$$
(20)

Нормировочный множитель N во всех случаях определяется условием

$$\sum_{K} \int_{-1}^{1} g_{\nu\lambda JK}^2 d(\cos 3\gamma) = 1.$$
⁽²¹⁾

Каждый из коэффициентов *g* является полиномом степени λ по sin γ и соs γ , подынтегральные выражения в формулах (18) — (21) — полиномы по соs 3γ . Программа, составленная на языке РЕФАЛ, получала в явном виде полиномы *g* (преобразованные так, чтобы соs γ входил в них только в первой или нулевой степени), производя преобразования (17) и (19) и аналитически выполняя интегрирование в (18), (20), (21) с последующей подстановкой пределов.

4. Матрицы операторов коллективной модели ядра

Вычисленные с помощью предыдущего раздела волновые функции были использованы для получения приведенных матричных элементов операторов, используемых в коллективной модели ядра. Ниже приводятся важнейшие из этих операторов в определениях, используемых в книге Давыдова [17], но в обозначениях настоящей работы:

- оператор монопольного электрического перехода

$$\mathcal{M}(E0) = \frac{3Z}{4\pi} \left(\beta^2 + \frac{5\sqrt{10}}{21\sqrt{3\pi}} \Phi_{1300} \right)$$
(22)

(*Z* — заряд ядра);

- оператор электрического квадрупольного момента

$$\mathcal{M}_{\mu}(E2) = \frac{3eZR_0^2}{4\pi}\beta\Phi_{012\mu}, \quad \mu = -2,...,2;$$
(23)

- оператор магнитного дипольного момента

$$\mathcal{M}_{\mu}(M1) = \mu_0 g_R \frac{45\sqrt{6}}{56\pi} \sum_{\nu} (2\mu - \nu 1\nu | 1\mu) I_{\nu} \Phi_{012\mu}, \, \mu = -1, 0, 1, \quad (24)$$

где g_R — гиромагнитное отношение для ротационного движения, μ_0 — ядерный магнетон.

Кроме того, β^2 и $\beta^3 \cos 3\gamma$ исчерпывают все возможные независимые скалярные комбинации из переменных α_{μ} , поэтому потенциальная энергия деформации ядра в самом общем случае является функцией лишь этих двух комбинаций (см. [18]). Следовательно, знание приведенных матричных элементов операторов $\Phi_{012\mu}$ и Φ_{1300} позволяет с помощью диагонализации матриц находить значения энергий и волновые функции коллективных уровней в потен-

циале с произвольной полиномиальной зависимостью от β^2 и соз 3 γ , вычислять средние значения мультипольных моментов в этих состояниях и вероятности E0-, M1- и E2-переходов между ними. Из формул (18) и (20) видно, что «побочным продуктом» построения базисных функций являются все отличные от нуля приведенные матричные элементы $\langle v\lambda | \cos 3\gamma | v'\lambda' \rangle$ (эта матрица диагональна по J, поскольку $\cos 3\gamma$ — скаляр) и все диагональные по J и v матричные элементы $\langle \lambda | \Phi_{012} | \lambda' \rangle$. Поэтому специально вычислять с использованием явного вида полученных волновых функций нужно только недиагональные элементы $\langle v\lambda J | \Phi_{012} | v'\lambda' J' \rangle$. Поскольку первоочередным запланированным применением построенных матриц является изучение свойств уровней основной ротационной полосы при высоких моментах, то в настоящей работе мы ограничились получением матричных элементов для переходов между состояниями с четными значениями момента (матричные элементы $\cos 3\gamma$ для I = 4получены в недавней работе [18]) вплоть до $\lambda = 12$. Непосредственный результат расчета — матричные элементы в виде несократимых рациональных дробей, помноженных на корни квадратные из целых чисел. В тех случаях, когда отсутствует дополнительное вырождение и матричные элементы вычисляются по «правильным функциям», удается подобрать явные формулы, выражающие зависимость матричного элемента от квантовых чисел и проверенные на большом числе частных случаев. Эти формулы приведены в Приложении. Для J > 6 в расчетах фактически все время участвуют функции с меткой, и простых формул для матричных элементов не получается. Поэтому для больших моментов результаты расчетов приведены в численном виде в таблице.

Полученные результаты показывают, что язык РЕФАЛ, реализованный на ЭВМ БЭСМ-6, является удобным средством для автоматизации громоздких выкладок, особенно в тех случаях, когда они сводятся к многократному повторению вычислений по рекурсивным формулам. Ближайшие применения он может найти в расчетах по методу вторичного квантования, для получения результатов с помощью теории возмущений высоких порядков, в выполнении преобразований при замене переменных в сложных дифференциальных операторах, при решении дифференциальных уравнений с помощью рядов и т. п.

ПРИЛОЖЕНИЕ

В тех случаях, когда отсутствует вырождение, соответствующее дополнительному квантовому числу, выражения (12), (13) дают правильные волновые функции, соответствующие полному набору операторов. Матричные элементы, вычисляемые по этим функциям, подчиняются простым закономерностям, что позволяет записать их в явном виде как функции λ при заданном *J*. Это относится ко всем приведенным матричным элементам, вычисляемым нами для J = 2 и 4, и к некоторым матричным элементам для J = 6. Соответствующие формулы приведены ниже. В работе [19] ранее аналитически был получен вид матричных элементов $\langle \lambda 0 \parallel \Phi_{012} \parallel \lambda' 2 \rangle$ и $\langle \lambda 2 \parallel \Phi_{012} \parallel \lambda' 2 \rangle$, а в работе [20] — $\langle \lambda J | \cos 3\gamma | \lambda' J \rangle$ для J = 0, 2, 4. Эти формулы, использованные нами для контроля за правильностью машинных расчетов, для полноты также приведены ниже

$$\langle \lambda, 0 \| \cos 3\gamma \| \lambda + 3, 0 \rangle = (m+1) / \sqrt{(2m+1)(2m+3)}, \quad \lambda = 3m,$$
 (II.1)

$$\langle \lambda, 0 \| \Phi_{012} \| \lambda + 1, 2 \rangle = (-1)^{m+1} \sqrt{(m+1)/(2m+1)}, \ \lambda = 3m,$$
 (II.2)

$$\langle \lambda, 0 \| \Phi_{012} \| \lambda - 1, 2 \rangle = (-1)^m \sqrt{(m+1)/(2m+3)}, \quad \lambda = 3(m+1),$$
 (II.3)

$$\langle \lambda, 2 \| \Phi_{012} \| \lambda + 1, 2 \rangle = 1 / \sqrt{7}$$
, (II.4)

$$\langle \lambda, 2 \| \cos 3\gamma \| \lambda + 1, 2 \rangle = -\frac{1}{(2m+1)(2m+3)}, \quad \lambda = 3m+1, \ 3m+2,$$
 (II.5)

$$\langle \lambda, 2 \| \cos 3\gamma \| \lambda + 3, 2 \rangle = \frac{\left[(m+1)(m+2) \right]^{1/2}}{2m+3}, \quad \lambda = 3m+1, \quad 3m+2,$$
 (II.6)

$$\langle \lambda, 2 \| \Phi_{012} \| \lambda + 1, 4 \rangle = \begin{cases} \left[\frac{9(m+2)}{14(2\lambda+3)} \right]^{1/2}, & \lambda = 3m+1 \\ \left[\frac{3(m+2)(2\lambda+7)}{20(2m+3)(2\lambda+3)} \right]^{1/2}, & \lambda = 3m+2 \end{cases}$$
(II.7)

$$\langle \lambda, 2 \| \Phi_{012} \| \lambda - 1, 4 \rangle = \begin{cases} -\left[\frac{3(2\lambda + 1)m}{20(2\lambda + 3)(2m + 1)} \right]^{1/2}, & \lambda = 3m + 1 \\ -\left[\frac{3m}{14(2\lambda + 3)} \right]^{1/2}, & \lambda = 3m + 2 \end{cases}$$
(II.8)

$$\langle \lambda, 4 \| \Phi_{012} \| \lambda + 1, 4 \rangle = \begin{cases} \left[\frac{(2\lambda + 1)(2\lambda + 7)}{11(2\lambda + 3)(2\lambda + 5)} \right]^{1/2}, & \lambda \neq 3m + 1 \\ \left[\frac{288m(m+1)}{385(2\lambda + 3)(2\lambda + 5)} \right]^{1/2}, & \lambda = 3m + 1 \end{cases}$$
(II.9)

$$\langle \lambda, 4 \| \cos 3\gamma \| \lambda + 1, 4 \rangle = \begin{cases} -\left[\frac{630(2\lambda - 1)!!}{(2\lambda + 7)!!}\right]^{1/2}, & \lambda \neq 3m + 4\\ -\frac{8}{(2m + 3)(2m + 5)} \left[\frac{(m + 1)(m + 3)}{(2\lambda + 3)(2\lambda + 5)}\right]^{1/2}, & \lambda = 3m + 4 \end{cases}$$
(II.10)

$$\langle \lambda, 4 \| \cos 3\gamma \| \lambda + 3, 4 \rangle = \begin{cases} \left[\frac{(2\lambda + 1)(m+1)(m+3)}{(2\lambda + 7)(2m+3)^2} \right]^{1/2}, & \lambda = 3m+2 \\ \left[\frac{(2\lambda + 1)(2\lambda + 11)(m+1)(m+3)}{(2\lambda + 5)(2\lambda + 7)(2m+3)(2m+5)} \right]^{1/2}, & \lambda = 3m+3 \pmod{1.11} \\ \left[\frac{(2\lambda + 11)(m+1)(m+3)}{(2\lambda + 5)(2m+5)^2} \right]^{1/2}, & \lambda = 3m+4 \end{cases}$$

$$\left< \lambda, 4 \right\| \Phi_{012} \right\| \lambda + 1, 6 \right> = \begin{cases} \left[\frac{5}{33} \frac{(m+2)(2\lambda+7)}{20(2m+1)(2\lambda+5)} \right]^{1/2}, & \lambda = 3m \\ \left[\frac{7(m+2)(2\lambda+9)}{22(2\lambda+3)(2\lambda+5)} \right]^{1/2}, & \lambda = 3m+1 \end{cases}$$
(II.12)

$$\langle \lambda, 4 \| \Phi_{012} \| \lambda - 1, 6 \rangle = \begin{cases} -\left[\frac{7m(2\lambda - 3)}{22(2\lambda + 1)(2\lambda + 3)} \right]^{1/2}, & \lambda = 3m + 2\\ -\left[\frac{5m(2\lambda - 1)}{11(2\lambda + 1)(2\lambda + 3)} \right]^{1/2}, & \lambda = 3m + 3 \end{cases}$$
(II.13)

$$\langle \lambda, 6 \| \cos 3\gamma \| \lambda + 1, 6 \rangle = -\frac{6}{(2m+1)(2m+3)} \left[\frac{(2\lambda-1)(2\lambda+9)}{(2\lambda+3)(2\lambda+5)} \right]^{1/2}, \quad \lambda = 3m+1, \quad (\Pi.14)$$

$$\langle \lambda, 6 \| \cos 3\gamma \| \lambda + 3, 6 \rangle = \begin{cases} \frac{\left[2(m+1)(2\lambda-1)(2\lambda+1)(2\lambda+11)\right]^{1/2}}{(2\lambda+5)(2\lambda+7)}, \quad \lambda = 3m+1 \\ \frac{\left[2(m+1)(2\lambda-1)(2\lambda+1)(2\lambda+13)\right]^{1/2}}{(2\lambda+5)(2\lambda+7)}, \quad \lambda = 3m+2 \end{cases}$$

$$(\Pi.15)$$

При получении остальных элементов для J = 6 и всех элементов для $J \ge 8$ используются функции с меткой. В этих случаях явные формулы не получены, и соответствующие численные значения приведены в таблице. Соображения экономии места привели к следующим ограничениям:

1) не приведены громоздкие результаты для *J* = 12;

2) значения, оказавшиеся равными нулю, опущены даже в тех случаях, когда это не вытекает из известных правил отбора по J и λ ;

3) не приведены диагональные по *J* элементы квадрупольного оператора, поскольку вычисление средних значений квадрупольного момента для состоя-

ний с высоким *J* является задачей менее актуальной, чем вычисление вероятностей переходов:

4) использован не наглядный, но наиболее компактный способ линейного упорядочивания совокупности индексов выражения $\langle v\lambda ||A||v'\lambda' \rangle$, позволяющий избежать пробелов в таблице.

			· · · ·	- I - 012		- ,	- , -			
λ	ν	λ'	ν'		λ	ν	λ'	ν'		
$\langle \nu, \lambda, 4 \parallel \Phi_{012} \parallel \nu', \lambda + 1, 6 \rangle$					$\langle v, \lambda, 6 \parallel \cos 3\gamma \parallel v', \lambda + 1, 6 \rangle$					
2	0	3	0	0,49065	3	0	4	0	-0,46675	
3	0	4	0	0,42316	4	0	5	0	-0,36489	
4	0	5	0	0,33686	5	0	6	0	-0,24808	
5	1	6	0	0,20362	6	0	7	1	-0,13199	
5	1	6	1	0,41355	6	1	7	1	-0,13870	
6	1	7	1	0,36806	7	1	8	1	-0,16496	
7	1	8	1	0,30104	8	1	9	1	-0,12357	
8	2	9	1	0,19997	9	1	10	2	-0,75446	
8	2	9	2	0,37992	9	2	10	2	-0,069261	
9	2	10	2	0,33783	10	2	11	2	-0,093488	
	(ν, λ,	$4 \parallel \Phi_{012}$	ν',λ-	- 1,6>	$\langle v, \lambda, 6 \parallel \cos 3\gamma \parallel v', \lambda + 3, 6 \rangle$					
4	0	3	0	-0,044260	3	0	6	0	0,16154	
5	1	4	0	-0,12480	3	0	6	1	0,28622	
6	1	5	0	-0,16013	4	0	7	1	0,35485	
7	1	6	0	-0,17906	5	0	8	1	0,37426	
7	1	6	1	-0,066546	6	0	9	1	0,38988	
8	2	7	1	-0,16004	6	1	9	1	0,032179	
9	2	8	1	-0,19681	6	1	9	2	0,41146	
10	2	9	1	-0,21286	7	1	10	2	0,42867	
10	2	9	2	-0,036538	8	1	11	2	0,43611	
$\langle v, \lambda, 6 \parallel \Phi_{012} \parallel v', \lambda + 1, 8 \rangle$					$\langle v, \lambda, 8 \mid \cos 3\gamma \parallel v', \lambda + 1, 8 \rangle$					
3	0	4	0	0,48761	4	0	5	0	-0,48358	
4	0	5	0	0,43718	5	0	6	0	-0,42556	
5	0	6	0	0,38523	6	0	7	0	-0,33540	
6	0	7	0	0,32162	7	0	8	0	-0,24710	
6	0	7	1	0,069627	7	1	8	0	-0,052908	
6	1	7	0	0,038546	7	1	8	1	-0,19289	
6	1	7	1	0,39563	8	0	9	1	-0,17543	
7	1	8	0	0,26902	8	1	9	1	-0,13490	
7	1	8	1	0,27396	9	1	10	1	-0,18444	
8	1	9	1	0,34538	10	1	11	1	-0,14484	
9	Ι	10	1	0,29723	10	2	11	1	-0,030017	
9	1	10	2	0,058387	10	2	11	2	-0,099870	
9	2	10	1	0,038306	11	1	12	2	-0,11250	
9	2	10	2	0,36252	11	2	12	2	-0,072632	
10	2	11	1	0,26472						
10	2	11	2	0,23963						

Численные значения приведенных матричных элементов операторов Φ_{012} и соs3 γ для I = 6, 8, 10

.

Работы по коллективной модели ядра

	1				n	1	1			
λ	ν	λ'	ν'		λ	ν	λ'	ν'		
$\overline{\langle \mathbf{v}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{6} \parallel \Phi_{012} \parallel \mathbf{v}', \boldsymbol{\lambda} - 1, 8 \rangle}$					$\langle \mathbf{v}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{8} \parallel \cos 3\gamma \parallel \mathbf{v}', \boldsymbol{\lambda} + 3, \boldsymbol{8} \rangle$					
5	0	4	0	-0.044354	5	0	8	0	0,21835	
6	0	5	0	-0.068658	5	0	8	1	0.22237	
6	1	5	0	-0.072151	6	0	9	1	0.33555	
7	1	6	0	-0.12816	7	0	10	1	0 35486	
8	1	7	Õ	-0.14735	7	1	10	1	0.029438	
9	1	8	Ő	_0 15931	7	1	10	2	0 38178	
9	2	8	1	-0.12450	8	0	10	1	0.37/02	
10	2	0	1	0 16373	8	1	11	1	0,07472	
10	2	9	1	-0,10373	0	1	11	1	0,040048	
11	2	10	1	-0,18110	0	1	11	2	0,37494	
	l .				9	1	12	Z	0,40919	
	(ν , λ,)	$8 \ \Phi_{012} \ $	ν', λ+	1,10>	$\langle v, \lambda, 10 \parallel \cos 3\gamma \parallel v', \lambda + 1, 10 \rangle$					
4	0	5	0	0,48740	5	0	6	0	-0,48862	
5	0	6	0	0,44652	6	0	7	0	-0,46378	
6	0	7	0	0,40790	7	0	8	0	-0,39417	
7	0	8	0	0,36666	8	0	9	0	-0,32033	
7	0	8	1	0,027316	8	1	9	0	-0,030449	
7	1	8	0	0,023858	8	1	9	1	-0,22110	
7	1	8	1	0.41661	9	0	10	0	-0.25314	
8	0	9	0	0.32360	9	1	10	0	-0.071544	
8	0	9	1	0.085657	9	1	10	1	-0 19405	
8	1	9	0	0.041935	10	0	11	0	-0.20616	
8	1	9	1	0.33884	10	1	11	1	-0.11441	
0	1	10	0	0,30450	10	1	11	2	0,0000866	
9	1	10	1	0,30430	10	1	11	1	-0,0090800	
9	1	10	1	0,20002	11	2	12	1	-0,19934	
10	1	11	1	0,53725	11	2	12	1	-0,017333	
10	1	11	2	0,02/301	11	2	12	2	-0,128/8	
10	2	11	1	0,024210						
10	2	11	2	0,38488						
11	1	12	I	0,30689						
$\langle \nu, \lambda, 8 \parallel \Phi_{012} \parallel \nu', \lambda - 1, 10 \rangle$					$\langle v, \lambda, 10 \parallel \cos 3\gamma \parallel v', \lambda + 3, 10 \rangle$					
6	0	5	0	-0,041152	5	0	8	0	0,10951	
7	0	6	0	-0,062477	5	0	8	1	0,22263	
7	1	6	0	-0,056184	6	0	9	0	0,17913	
8	0	7	0	-0,086039	6	0	9	1	0,21063	
8	1	7	0	-0.066161	7	0	10	0	0.25048	
9	1	8	0	-0,12610	7	0	10	1	0,16947	
10	1	9	Ō	-0.13952	8	Ő	11	1	0.32434	
10	2	9	1	-0.098506	8	1	11	1	0.027437	
11	1	10	Ô	-0 14984	8	1	11	2	0 35462	
11	2	10	ő	-0.13277	9	0	12	1	0 34421	
12	2	11	1	_0 15904	á	1	12	1	0.043460	
14	<i>2</i>	11	1	0,15704	0	1	12	2	0 35222	
	l	l	I		7	1	12	-	0,55255	

Продолжение таблицы

Литература

- 1. A. Bohr. Math. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk., 26, 14. 1952.
- 2. A. Bohr B. Mottelson. Math. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk., 27, 16, 1953.
- 3. K. Kumar, M. Barranger. Nucl. Phys., A92, 608, 1967.
- 4. K. Kumar. Nucl. Phys., A92. 653, 1967.
- 5. M. Barranger, K. Kumar. Nucl. Phys., A110, 490, 529, 1968.
- 6. C.C. Noack. Nucl. Phys., A108, 493, 1968.
- 7. N. Kemmer, D. L. Pursey, S. A. Williams. J. Math. Phys., 9, 1224, 1968.
- 8. S. A. Williams, D. L. Pursey. J. Math. Phys., 9, 1230, 1968.
- 9. N. S. Rabotnov, A. A. Seregin. Phys. Lett., 29B, 162, 1909.
- 10. Н. С. Работнов, А. А. Серегин. ЯФ, 10, 286, 1969.
- 11. G. Rakavy. Nucl. Phys., 4, 289, 1957.
- 12. D. R. Bes. Nucl. Phys., 10, 373, 1959.
- 13. И. М. Гельфанд, М. Л. Цейтлин. ДАН СССР, 71, 1017, 1950.
- 14. В. Ф. Турчин. В сб. Цифровая вычислительная техника и программирование, «Сов. Радио», 1966.
- 15. В. Ф. Турчин. Алгоритмический язык рекурсивных функций (РЕФАЛ), ИПМ АП СССР, 1968.
- 16. В. Ф. Турчин. Кибернетика, 4, 45, 1968.
- 17. А. С. Давыдов. Возбужденные состояния атомных ядер, Атомиздат, 1967.
- 18. A.K. Kerman. Ann. of Phys., 12, 300, 1961.
- 19. А. П. Будник, Н. С. Работнов. А. А. Серегин. ЯФ, 12, 477, 1970.
- 20. G. G. Dussel, D. R. Bes. Nucl. Phys., A143, 623, 1970.

Basis Wave Functions and Operator Matrices of Collective Nuclear Model

A. P. Budnik, E. V. Gay, N. S. Rabotnov, A. V. Klimov, V. F. Turcuin, I. B. Shchenkov

Wave functions corresponding to harmonic quadrupole vibrations of the nuclear surface shape are obtained in a physical basis, i. e. with separation of an explicit dependence on variables and quantum numbers of the physical space rotation group, O(3). As a result of using the language REFAL to automatize the cumbersome analytic calculations the authors succeded in obtaining an explicit form of the functions up to high values of the quantum numbers: angular momentum J = 12 and seniority $\lambda = 14$. The constructed functions are applied to calculate the matrix elements of the fundamental operators used in calculations in the collective phenomenological nuclear model: electric monopole, magnetic dipole and electric quadrupole moments.

Вероятности Е2-переходов в модели жесткого асимметричного ротатора

Е. В. Гай, Н. С. Работнов

Физико-энергетический институт

(Поступила в редакцию 2 августа 1971 г.)

В рамках модели жесткого асимметричного ротатора рассчитано отношение приведенных вероятностей E2-переходов с уровня 2^+ аномальной ротационной полосы на первый уровень 2^+ и в основное состояние. Использовано предположение о связи сферических тензоров инерции и квадрупольного момента волчка, позволяющее не вводить дополнительных параметров. Результаты сравниваются с экспериментальными данными для чётно-четных ядер.

Введение

В работе [1] с использованием рядов рекурсивной теории возмущений были рассчитаны значения энергии и волновые функции уровней основной ротационной полосы жесткого асимметричного квантового волчка и проведено сравнение с наблюдаемыми спектрами четно-четных ядер. При этом в максимальной степени использовался тот факт, что нетривиальное слагаемое в выражениях для энергии уровней зависит лишь от одной безразмерной комбинации моментов инерции, что позволяет избежать явного подбора параметров при сравнении с экспериментом.

В настоящей работе с аналогичной точки зрения исследуются вероятности электрических квадрупольных переходов между уровнями 2^+ основной и аномальной ротационных полос асимметричного волчка с основным состоянием 0^+ . Использование соображений, связанных с тензорной размерностью, позволяет в принятой модели однозначно связать относительные значения компонент оператора квадрупольного момента волчка с моментами инерции и таким образом вычислить отношения приведенных вероятностей переходов без введения каких-либо дополнительных параметров. Полученные результаты сравниваются с экспериментальными данными для уровней четно-четных ядер.

1. Оператор квадрупольного момента волчка

Если в системе координат, жестко связанной с главными осями инерции, тело обладает постоянными компонентами тензора квадрупольного момента, то наиболее общий вид тензорного оператора квадрупольного момента в л.с. можно записать как

Ядерная физика, 1972, т. 15, вып. 3, с.705-709.

$$\hat{Q}_{\mu} = q_0 D_{\mu 0}^2 \left(\theta_i\right) + \frac{q_2}{\sqrt{2}} \left(D_{\mu 2}^2 \left(\theta_i\right) + D_{\mu - 2}^2 \left(\theta_i\right)\right), \tag{1}$$

где D_{MK}^{J} — обобщенные сферические функции, зависящие от углов Эйлера θ_i , а q_i — постоянные.

Таким образом, если известны волновые функции состояний волчка, то для расчета абсолютных величин приведенных вероятностей E2-переходов между этими состояниями необходимо задать две величины q_i , а для расчета относительных значений — одну. Мы ограничимся расчетом отношений вероятностей, поэтому потребуется один параметр, в качестве которого удобно выбрать

$$\mathbf{a} \equiv \operatorname{arctg}(q_2/q_0). \tag{2}$$

Сделав дополнительное физическое предположение о свойствах системы, рассматриваемой динамически как жесткий волчок, и использовав одинаковые трансформационные свойства тензоров инерции квадрупольного момента, можно однозначно связать q_i со значениями моментов инерции.

В модели неаксиального ротатора Давыдова — Филиппова [2] ядро рассматривается в рамках коллективной модели Бора — Моттельсона [3, 4] как деформированная капля несжимаемой равномерно заряженной жидкости, моменты инерции которой равны с точностью до постоянной

$$I_i \cong \beta^2 \sin^2 \left(\gamma - \frac{2\pi}{3} i \right), \tag{3}$$

где β и γ — параметры, задающие соответственно общую вытянутость и неаксиальность формы ядра. В выражении для квадрупольного момента в этом случае $\alpha = \gamma$. Если в общем случае перевести тензор инерции в собственной системе координат из декартовой формы в сферическую, он будет иметь две независимые компоненты (имеется еще скалярная комбинация моментов инерции)

$$i_0 = (I_2 + I_3 - 2I_1), \quad i_2 = i_{-2} = \sqrt{\frac{3}{2}} (I_2 - I_3), \quad i_1 = i_{-1} = 0.$$
 (4)

Легко убедиться, что в модели Давыдова — Филиппова между сферическими тензорами q и i осуществляется следующая связь:

$$i_{\mu} = \text{const} \cdot \sum_{\mu'} \left(2\mu' 2\mu - \mu' | 2\mu \right) q_{\mu} q_{\mu-\mu'}, \tag{5}$$

где (2µ2µ'|2µ["]) — коэффициенты Клебша — Гордана. Таким образом, для жидкого эллипсоида тензор инерции есть полином второго порядка по компонентам тензора квадрупольного момента. В случае твердого тела просто

$$i_{\mu} = \operatorname{const} \cdot q_{\mu} ,$$
 (6)

т. е. связь между тензорами линейна.

По динамическим свойствам ядерная материя ближе к жидкости, чем к твердому телу, поэтому естественно попытаться использовать соотношение (5) в более общем случае волчка с тремя независимыми моментами инерции, что и является предметом рассмотрения в настоящей работе.

Подстановка значений коэффициентов Клебша — Гордана в выражения (5) дает систему квадратных уравнений

$$i_0 = -\operatorname{const} \left(q_0^2 - 2q_2^2 \right), \ i_2 = \operatorname{const} 2q_0 q_2.$$
 (7)

Поделив первое уравнение на второе и учтя (2), получаем

$$i_0/i_2 = -\sqrt{2} \operatorname{ctg} 2\mathfrak{X}.$$
 (8)

2. Расчет вероятностен электрических квадрупольных переходов

Выражение (8) однозначно связывает относительную величину компонент квадрупольного момента с наблюдаемыми моментами инерции и тем самым позволяет в выбранном приближении рассчитать относительные значения приведенных вероятностен *E2*-переходов между любыми уровнями асимметрического волчка и средние значения квадрупольных моментов этих состояний. Для этого необходимо получить волновые функции ротационных состояний и вычислить по ним матричные элементы оператора (1) с учетом соотношений (8).

Гамильтониан волчка имеет вид

$$H = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{J_1^2}{I_1} + \frac{J_2^2}{I_2} + \frac{J_3^2}{I_3} \right) = aJ(J+1) \left[1 + \beta v(\alpha) \right], \tag{9}$$

где *J_i* — проекции момента количества движения на главные оси инерции

$$a = \frac{\hbar^2}{2I_1}, \quad \beta = \frac{I_1 - I_3}{I_3}, \quad \alpha = \frac{I_3 (I_2 - I_1)}{I_2 (I_3 - I_1)}, \tag{10}$$

а

$$v(\alpha) = \frac{J_3^2 + \alpha J_2^2}{J(J+1)}.$$
 (11)

Если упорядочить моменты инерции соотношением $I_1 \ge I_2 \ge I_3$, то $0 \le \alpha \le 1$, $0 \le \beta \le \infty$.

Общее аналитическое решение задачи не найдено. Однако при рассмотрении вероятностей переходов между уровнями основной и первой аномальной ротационных полос можно ограничиться отношением $B(E2, 2_2 \rightarrow 2_1) / B(E2, 2_2 \rightarrow 0)$ по следующим причинам. Во-первых, именно это отношение сильнее всего зависит от структуры волновых функций, поскольку переход связывает состояния разных полос, и меняется на эксперименте от ядра к ядру в несколько тысяч раз. Во-вторых, оно известно экспериментально для большого числа ядер, поскольку не зависит от заселенности и способа образования распадающегося состояния 2^+ . В этом случае задача решается полностью ана-

литически (см., например, [5]). В наших обозначениях для J = 2 собственные значения оператора v, через которые выражаются энергии уровней, имеют вид

$$\mathbf{v}_{1,2}\left(\alpha\right) = 2\left(1 + \alpha \mp \sqrt{1 - \alpha + \alpha^2}\right),\tag{12}$$

а волновые функции

$$\Psi_1^{2M}\left(\theta_i\right) = N\left(\cos\delta D_{M0}\left(\theta_i\right) + \frac{\sin\delta}{\sqrt{2}}\left(D_{M2}\left(\theta_i\right) + D_{M-2}^2\right)\right),\tag{13}$$

$$\Psi_2^{2M}\left(\theta_i\right) = N\left(-\sin\delta D_{M0}^2\left(\theta_i\right) + \frac{\cos\delta}{\sqrt{2}}\left(D_{M2}^2\left(\theta_i\right) + D_{M-2}^2\left(\theta_i\right)\right)\right),\tag{14}$$

где N — нормировочный множитель, а

$$\delta(\alpha) = \operatorname{arctg}\left(\frac{\alpha - 2 + 2\sqrt{1 - \alpha + \alpha^2}}{\sqrt{3}\alpha}\right).$$
(15)

Общее выражение для приведенной вероятности E2-переходов между уровнями волчка J_i и J'_K имеет вид

$$B(E2; J_i \to J'_K) = \frac{5}{16\pi(2J+1)} \sum_{MM'\mu} \left| \left\langle J'_K M' | Q_{2\mu} | J_i M \right\rangle \right|^2.$$
(16)

Из выражений (1), (2) и (13) — (16) получаем

$$b = \frac{B(E2, 2_2 \to 2_1)}{B(E2, 2_2 \to 0)} = \frac{10}{7} \frac{\sin^2(\alpha + 2\delta)}{\sin^2(\alpha - \delta)},$$
(17)

а из (7) — (10) имеем

$$\mathfrak{a}(\alpha,\beta) = \frac{1}{2}\operatorname{arcctg} \frac{2+\beta\alpha-\alpha}{\sqrt{3}\alpha(\beta+1)}.$$
(18)

3. Сравнение с экспериментальными данными и обсуждение результатов

Из входящих в полученные выражения четырех параметров α, β, δ и æ только два являются независимыми. Для сравнения с экспериментом желательно связать их с непосредственно наблюдаемыми величинами — относительными значениями энергии уровней волчка. В качестве одного отношения естественно выбрать

$$\varepsilon = \frac{E_2(2)}{E_1(2)} = \frac{1 + \beta v_2(\alpha)}{1 + \beta v_1(\alpha)}.$$
(19)

Если откладывать є по оси абсцисс, а отношение (17) по оси ординат, то соотношения (15) - (19) задают однопараметрическое семейство кривых, определяющих на этом графике некоторую область, границы которой можно уже



Отношение приведенных вероятностей $B(E2, 2_2 \rightarrow 2_1) / B(E2, 2_2 \rightarrow 0)$ в зависимости от $\varepsilon = E_2(2) / E_1(2)$. Теоретически доступная область значений ограничена сплошными линиями. Пунктирная кривая соответствует результатам работы [2]. Экспериментальные данные взяты из [6]

просто получить. Как легко показать, Допустимые значения æ и б в выражении (17) определяются неравенствами

$$\pi/6 \ge \mathfrak{a} \ge \delta \ge 0. \tag{20}$$

Следовательно, минимальное значение рассматриваемого отношения равно 10/7 = 1,428 и достигается при $\delta = \alpha = 0$. Как следует из (19) и (12), это возможно при любом значении $\varepsilon \ge 1$, поэтому горизонтальная прямая b = 10/7 служит нижней границей искомой области. Верхней ее границей оказывается геометрическое место точек, соответствующих максимальному при заданном α значению ε , что отвечает пределу $\beta \to \infty$, $\alpha = \pi/6$. Эта граничная линия уходит в бесконечность при $\varepsilon = 3$. При $\varepsilon = 1$ (шаровой волчок) допустимы любые значения $b \ge 10/7$ и левой границей области служит вертикальная прямая $\varepsilon = 1$.

Полученная область допустимых значений $b(\varepsilon)$ изображена на рисунке. Там же точками нанесены все известные экспериментально значения отношения b для четно-четных ядер, а также кривая, соответствующая результатам теории Давыдова — Филиппова. Она проходит примерно посередине теоретически доступной области. Практически все измеренные значения попадают внутрь этой области, и можно сказать, что рассмотренная простая модель качественно передает основные особенности поведения отношения b. Представляется целесообразным рассчитать в тех же предположениях приведенные вероятности других переходов между коллективными уровнями и провести более детальное сравнение с экспериментом для отдельных ядер. Для этого потребуются расчеты значений энергии и волновых функций вращательных состояний для более высоких значений момента количества движения.

Литература

- 1. E. V. Gay, N. S. Rabotnov. Phys. Lett., 34B, 567, 1971.
- 2. A. S. Davydov, G. F. Filippov. Nucl. Phys., 8, 237, 1958.
- 3. A. Bohr. Mat.-Fys. Medd. Dan Vid. Selsk., 26, 16, 1952.
- 4. A. Bohr, B. R. Mottelson. Mal.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk., 27, 16, 1953.
- 5. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика. М.: Физматгиз, 1963, с. 447—454.
- 6. Nuclear Data Sheets, 1961-70.

E2-Transition Probabilities in a Rigid Asymmetric Rotator Model

E. V. Gay, N. S. Rabotnov

A ratio of reduced probabilities of E2-transitions from anomalous rotator band 2^+ level to a first 2^+ level and the ground state is calculated in a rigid asymmetric rotator model. An assumption of a connection of the spherical inertia tensors with the quadrupole top moments is used which permits not to introduce additional parameters. Results obtained are compared with experimental data on even-even nuclei.

Уровни четно-четных ядер с высокими моментами в феноменологической коллективной модели ядра

А. П. Будник, Н. С. Работнов, А. А. Серегин

Физико-энергетический институт

(Поступила в редакцию 16 июля 1971 г.)

В рамках феноменологической коллективной модели атомного ядра с потенциальной энергией, зависящей от деформационных переменных β и γ , рассчитаны значения энергии уровней четно-четных ядер для значений момента количества движения вплоть до J = 12. Полученные результаты сравниваются с экспериментальными данными для ядер переходной по деформациям области.

Введение

В работах [1, 2] был предложен способ решения уравнения Шредингера феноменологической коллективной модели ядра, в которой в качестве пяти динамических переменных используются параметры β и γ , описывающие квадрупольную деформацию в системе координат, связанной с главными осями инерции, и углы Эйлера θ_i , задающие положение этой системы координат относительно лабораторной. Выбранный в этих работах двупараметрический потенциал позволяет единым образом описывать как сферические, так и аксиальные деформированные ядра, что позволяет проследить за превращением эквидистантного вибрационного спектра ядра в колебательно-вращательный спектр деформированных жестких ядер.

В работах [1, 2] рассматривались состояния с моментом количества движения $J \leq 6$, поскольку построение базисных функций для больших моментов сопряжено с весьма громоздкими выкладками, хотя принципиально способ их построения известен. Так как использованная модель успешнее всего описывала состояния «основной ротационной полосы», т. е. уровни 2⁺, 4⁺, 6⁺, и свойства уровней этой полосы в последнее время интенсивно исследуются вплоть до высоких значений момента, представляет интерес распространение метода расчета на уровни с большим спином. Техническая возможность для этого возникла в связи с созданием языка РЕФАЛ [3, 4], позволяющего выполнять громоздкие аналитические выкладки на ЭВМ. В работе [5] с помощью интенсивного применения РЕФАЛа были получены базисные функции коллективной модели в переменных β , γ , θ_i вплоть до $J \leq 2$ и матрицы основных операторов по этим функциям, что позволяет рассчитывать значения энергий уровней и вероятности электромагнитных переходов между ними. В настоящей работе излагаются результаты расчета энергии уровней основной ротационной полосы до J = 12 и сравниваются полученные результаты с экспериментом.

Ядерная физика, 1972, т. 15, вып. 3, с. 470-473.

1. Метод расчета

Уравнение Шредингера с потенциалом, выбранным в работе [1], в безразмерных переменных, введенных там же, имеет вид

$$\left\{-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2y^2}\left(\hat{\Delta} + 2\right) + \frac{\left(y - y_0\right)^2}{2} + \alpha y_0 y \left(1 - \cos 3\gamma\right)\right\} \Psi^{JM} = \frac{E}{\hbar\omega} \Psi^{JM}.$$
 (1)

Здесь $\hat{\Delta}$ — угловая часть пятимерного лапласиана, а переменная *у* и другие обозначения следующим образом связаны с известными параметрами коллективной модели [6]:

$$y = \beta/\beta_{00}, \ y_0 = \beta_0/\beta_{00}, \ \beta_{00}^2 = \hbar\sqrt{BC}, \ \omega = \sqrt{C_\beta/B}, \ \alpha = C_\gamma/9C_\beta.$$
 (2)

Здесь *В* — массовый параметр, C_{β} и C_{γ} — жесткости но отношению к β - и γ -колебаниям соответственно, β_0 — равновесное значение параметра деформации. Таким образом, если измерять энергию в единицах $\hbar\omega$, то решение уравнения (1) будет зависеть от двух параметров: y_0 и α .

Для сферического ядра ($y_0 = \alpha = 0$) переменные в уравнении (1) разделяются, и решение можно представить в виде произведения двух функций:

$$\Psi_{n\lambda\nu}^{JM}(y,\gamma,\theta_i) = f_{n\lambda}(y)\varphi_{\lambda\nu}^{JM}(\gamma,\theta_i), \qquad (3)$$

где $f_{n\lambda}$ — радиальная функция, для которой имеется общее решение (см. [6]), а $\varphi_{\lambda\nu}^{JM}$ — угловые функции, зависящие наряду с моментом количества движения и его проекцией M еще от двух квантовых чисел: синьорити λ и дополнительного числа ν , которое необходимо ввести для $J \ge 6$. Решение уравнения (1) в общем случае ищется в виде ряда

$$\Psi^{JM}(y,\gamma,\theta_i) = \sum_{n,\lambda,\nu} \alpha^J_{n,\lambda,\nu} f_{n\lambda}(y) \varphi^{JM}_{\lambda\nu}(\gamma,\theta_i).$$
(4)

Единственный недиагональный по функциям φ член в уравнении (1) содержит соз 3 γ , матрицы этого оператора были получены в [5] и использованы нами. После этого решение задачи сводится к нахождению собственных значений матрицы, являющейся прямым произведением матриц операторов, действующих на радиальную и угловую части функции. Эти перемножаемые матрицы имели в нашем случае максимальный ранг 8, а полная матрица гамильтониана, следовательно, ранг 64, что и ограничивало интервал значений параметров, при которых такое решение обеспечивало требуемую количественную точность.

Результаты расчетов представлены на рисунке.

2. Обсуждение результатов и сравнение с экспериментом

Выбор относительных единиц $\varepsilon_1(J) = E_i(J) / E_1(2)$ позволяет исключить масштабный множитель $\hbar\omega$. После того как одно из отношений (в нашем случае $\varepsilon_1(4)$) выбирается в качестве аргумента, откладываемого по оси абсцисс, решение получается в виде однопараметрического семейства кривых, запол-



Теоретически доступные области относительных значений энергии уровней $\varepsilon_1(J)$ для J = 6, 8, 10, 12 в зависимости от $\varepsilon_1(4)$. Пунктирная линия соответствует результатам Давыдова—Чабана [7], штрих-пунктирная — ядрам с $y = y_0$ и конечной γ -жесткостью. Точки соответствуют экспериментальным данным, взятым из работ [6, 8—10]

няющих некоторую область. Эти теоретически доступные области для значений отношений $\varepsilon_1(6)$, $\varepsilon_1(8)$, $\varepsilon_1(10)$ и $\varepsilon_1(12)$ изображены на рисунке.

Границами их служат линии, соответствующие предельным значениям параметра $\alpha = 0$ и $\alpha = 1$, или огибающие, а также концевые линии, соответствующие определенным отличным от нуля значениям α и пределу $y = y_0$. По-

следний случай отвечает бесконечно большой β -жесткости, т. е. фиксированной продольной деформации, при конечной γ -жесткости. Эти концевые линии (их также называют «дискриминантными») во всех случаях образуют верхние границы теоретически доступных областей. Каждая из таких дискриминантных линий, изображенных на рисунке штрих-пунктиром, имеет своей левой границей точку с абсциссой $\frac{5}{2}$ и ординатой $\varepsilon_1(J) = J(J+6) / 16$, что соответствует γ -нестабильным ядрам Жана — Уилетса [11] с $y_0 \gg 1$.

Кривые, соответствующие заданному моменту и разным фиксированным α , при изменении y_0 могут пересекаться, на рисунке это видно для случая кривых с $\alpha = 0$ и $\alpha = 1$. Это является лишь следствием определенного выбора системы параметров. Выбрав новые параметры, являющиеся функциями старых, всегда можно заполнить ту же плоскую область двупараметрическим семейством непересекающихся кривых.

Отметим основные черты полученных результатов:

1) для рассматриваемого класса потенциалов относительные значения энергии уровней основной ротационной полосы всегда больше, чем для сферического ядра, т. е. $\varepsilon_1(J) \ge J/2$;

2) уровни сферического ядра, соответствующие самому высокому для заданного главного квантового числа $N = 2n + \lambda$ моменту J = 2N, с появлением и ростом деформации переходят в уровни основной ротационной полосы с $E(J) \sim J(J + 1)$;

3) теоретически доступная область значений $\varepsilon_1(J)$ при заданном $\varepsilon_1(4)$ довольно узка для $\varepsilon_1(4) \le 2,5$, и зависимость $\varepsilon_1(J)$ от $\varepsilon_1(4)$ является с хорошей точностью линейной, а затем происходит резкое расширение области, тем более значительное, чем выше момент;

4) при $2,5 \le \varepsilon_1(4) \le 3,0$ возможно сопоставление с теоретическими результатами Давыдова — Чабана [7]. Их приближенный метод решения, основанный на разделении переменных, тем точнее, чем больше y_0 (чем меньше μ в параметризации работы [7]). У обоих методов имеется, правда довольно узкая, область перекрытия, в которой они одновременно применимы. Проверка, произведенная при $\alpha = 1$, показывает, что результаты к этой области количественно совпадают, расчеты по формулам работы [7] использованы нами для замыкания теоретически доступных областей при $\varepsilon_1(4) \ge 3$. Соответствующие участки кривых обозначены на рисунке пунктиром.

Сравнение с экспериментальными данными, нанесенными на том же рисунке, показывает, что качественно согласие вполне удовлетворительно, практически все точки попадают в теоретические области.

Представляет интерес проведение расчетов для еще более высоких значений момента, где в самое последнее время обнаружены указания на аномальную зависимость феноменологических инерционных параметров от J [12], что интерпретируется как фазовый переход в ядерной жидкости, а также расчет вероятностей каскадных E2-переходов в основной ротационной полосе и средних значений квадрупольных моментов. Такие расчеты в настоящее время ведутся. В заключение авторы выражают благодарность В. В. Булычеву и Т. И. Ставинской за содействие в проведении расчетов на ЭВМ.

Литература

- 1. N. S. Rabotnov, A. A. Seregin. Phys. Lett., 29B, 162, 1969.
- 2. Н. С. Работнов. А. А. Серегин. ЯФ, 10, 286, 1969.
- 3. В. Ф. Турчин. Алгоритмический язык рекурсивных функций (РЕФАЛ), ИПМ АН СССР, 1968.
- 4. В. Ф. Турчин. Кибернетика, 4, 45, 1968.
- А. П. Будник, Е. В. Гай, Н. С. Работнов, А. В. Климов, В. Ф. Турчин, И. Б. Щенков. ЯФ, 14, 304, 71.
- 6. А. С. Давыдов. Возбужденные состояния атомных ядер. Атомиздат, 1967.
- 7. A. S. Davidov, A. A. Chaban. Nucl. Phys., 20, 499, 1960.
- 8. Nuclear Data Sheets, 1961—1971.
- 9. Z. Wilhelmin. Instytut Badan Jadrowich, Report «p», No 960 (I/PL).
- 10. O. Lonsjö, G. B. Hagemann. Nucl. Phys., 88, 624, 1966.
- 11. L. Wilets, M. Jean. Phys. Rev., 102, 788, 1956.
- 12. A. Johnson, H. Ryde, J. Szlarkier. Phys. Lett., 34B, 605, 1971.

Levels of Even-Even Nuclei with High Angular Momenta in a Phenomenology Collective Nuclei Model

A. P. Budnik, N. S. Rabotnov, A. A. Seregin

The energy levels of even-even nuclei with angular momenta up to J = 12 were calculated in the frame of a phenomenologic collective model of atomic nucleus with a potential energy having been dependent on the deformation variables β and γ . The results obtained are compared wills experimental data on the nuclei lying in the intermediate region of the deformation variables.

E2-переходы и квадрупольные моменты состояний с высоким спином в коллективной модели

А. П. Будник, Н. С. Работнов, А. А. Серегин

Физико-энергетический институт

(Поступила в редакцию 31 января 1973 г.)

В рамках феноменологической коллективной модели ядра с потенциальной энергией, зависящей от деформационных координат β и γ , рассчитаны значения приведенных вероятностей каскадных *E*2-переходов и средние значения квадрупольных моментов в возбужденных состояниях четно-четных ядер с высоким спином в основной ротационной полосе.

В работах [1, 2] был изложен способ решения пятимерного уравнения Шредингера феноменологической коллективной модели ядра с потенциалом, зависящим от переменных β и γ . Предложенный двухпараметрический потенциал описывает сферические и аксиальные вытянутые ядра. В настоящей работе в рамках той же модели рассчитаны приведенные вероятности каскадных *E2*-переходов и средние значения электрических квадрупольных моментов состояний основной ротационной полосы с высоким спином для четно-четных ядер переходной по деформациям области.

Уравнение Шредингера с потенциалом, выбранным в [1], имеет в безразмерных переменных вид

$$\left\{-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\hat{\Delta}+2}{2y^2} + \frac{\left(y-y_0\right)^2}{2} + ay_0y(1-\cos 3\gamma) - \frac{E}{\hbar\omega}\right\}\Psi_i^{JM}\left(y,\gamma,\theta_i\right) = 0, \quad (1)$$

где $\hat{\Delta}$ — угловая часть пятимерного лапласиана, а переменная *у* и другие обозначения следующим образом связаны с известными параметрами коллективной модели [3]:

$$y = \beta/\beta_{00}$$
, $y_0 = \beta_0/\beta_{00}$, $\beta_{00}^2 = \hbar/\sqrt{BC_\beta}$, $\omega = \sqrt{C_\beta/B}$, $\alpha = C_\gamma/(9C_\beta)$. (2)

Здесь *В* — массовый параметр, C_{β} и C_{γ} — жесткости по отношению соответственно к β - и γ -колебаниям, β_0 — равновесное значение параметра деформации. Таким образом, если измерять энергию в единицах $\hbar \omega$, то решения уравнения (1) зависят от двух параметров: y_0 и α . Решение ищется в виде двойного ряда по произведениям базисных функций, являющихся решениями «радиального» и «углового» уравнений, на которые разделяется (1) при $y_0 = \alpha = 0$:

$$\Psi_{i}^{JM}\left(y,\gamma,\theta_{i}\right) = \sum_{n\lambda} a_{n\lambda}^{i} f_{n\lambda}\left(y\right) \varphi_{\lambda}^{JM}\left(\gamma,\theta_{i}\right).$$
(3)

Ядерная физика, 1972, том 16, вып. 1, с. 34—37.

При y_0 и α , отличных от нуля, единственным недиагональным членом, содержащим угловые переменные, является слагаемое, содержащее соs3 γ . Получение соответствующих матричных элементов при высоких моментах представляет значительные трудности. Для значений $J \le 12$ эти матрицы были получены в работе [4], и приведенные там значения использовались в работе [5] и в настоящей работе. В расчетах для всех значений J диагонализовались матрицы 64-го порядка, контроль за сходимостью осуществлялся так же, как в работе [1].

Знание волновых функций позволяет рассчитывать различные характеристики возбужденных состояний. В данной работе рассмотрены приведенные вероятности каскадных *E2*-переходов

$$B(E2; J, i \to J-2, i) = \frac{5}{16\pi(2J+1)} \left| \sum_{\mu M, M'} \langle J-2, M' | Q_{2\mu} | JM \rangle \right|^2$$
(4)

и средние значения электрических квадрупольных моментов

$$Q(J) = \left\langle JJ_i \left| Q_{20} \right| JJ_i \right\rangle \tag{5}$$

.2

для состояний основной полосы, т. е. для уровней с минимальными при заданном спине значениями энергии. Оператор электрического квадрупольного момента ядра

$$Q_{2\mu} = \frac{Q_0}{y_0} y \left\{ \cos \gamma D_{\mu 0}^2 + \frac{\sin \gamma}{\sqrt{2}} \left[D_{\mu 2}^2 \left(\theta_i \right) + D_{\mu - 2}^2 \left(\theta_i \right) \right] \right\}.$$
 (6)

где Q_0 — квадрупольный момент ядра в системе координат, связанной с его главными осями.

Используя явный вид волновых функций (3) и учитывая то, что

$$\varphi_{\lambda}^{JM}\left(\gamma,\theta_{i}\right) = \sum_{K\geq0}^{J} g_{\lambda K}\left(\gamma\right) \left[D_{MK}^{J}\left(\theta_{i}\right) + \left(-1\right)^{J} D_{M-K}^{J}\left(\theta_{i}\right) \right],\tag{7}$$

можно преобразовать (4), (5) к следующему виду:

$$B(E2; J, 1 \to J-2, 1) = \frac{5Q_0^2}{16\pi y_0^2 (2J+1)} \left| \sum_{n_\gamma n_\beta n'_\gamma n'_\beta} a_{n_\gamma n_\beta}^J a_{n'_\gamma n'_\beta}^{J-2} \left\langle n_\beta n_\gamma \left| y \right| n'_\beta n'_\gamma \right\rangle g_{n_\gamma n'_\gamma}^{J,J-2} \right|^2, \quad (8)$$

$$Q(J) = \frac{Q_0}{y_0} \sum_{n_\gamma n_\beta n'_\gamma n'_\beta} a^J_{n_\gamma n_\beta} a^J_{n'_\gamma n'_\beta} \left\langle n_\beta n_\gamma | y | n'_\beta n'_\gamma \right\rangle g^{J,J'}_{n_\gamma n'_\gamma}, \qquad (9)$$

где

$$g_{n\gamma n\gamma'}^{J,J'} = \int_{-1}^{1} d(\cos 3\gamma) \sum_{KK'} g_{n\gamma K}^{J}(\gamma) g_{n\gamma K'}^{J'}(\gamma) \langle J'K' \| q \| JK \rangle, \qquad (10)$$

$$\langle J'K' \| q \| JK \rangle = \sqrt{2J+1} \left\{ \left(J2K0 | J'K' \right) \cos \gamma + \frac{\sin \gamma}{\sqrt{2}} \times \left[\sqrt{\frac{1+\delta_{K_0}}{1+\delta_{K_0}}} \left(J2K2 | J'K' \right) + \sqrt{\frac{1+\delta_{K_0}}{1+\delta_{K_0}}} \left(J2K-2 | J'K' \right) \right] \right\}.$$
(10a)

Матричные элементы $g_{n_{\gamma}n_{\gamma}'}^{J,J'}$ взяты из работы [4] ($g_{n_{\gamma}n_{\gamma}'}^{20}$ и $g_{n_{\gamma}n_{\gamma}'}^{22}$ были ранее получены в работе [6]).

Относительные значения B(E2; J, $i \rightarrow J-2$, i) / B(E2; 21 \rightarrow 00) и $Q(J)/Q_0$ зависят только от двух параметров. Задание любого из относительных значений энергии накладывает еще одну связь. Поэтому если построить график, выбрав в качестве аргумента, например, $\varepsilon_1(4) = E_1(4) / E_1(2)$, то расчетные значения отношений B(E2; J, $i \rightarrow J-2$, i) / B(E2; 21 \rightarrow 00) и $Q(J) / Q_0$ будут заполнять на нем некоторые области.

Результаты численных расчетов представлены графически на рис. 1, 2 именно в таком виде. В некоторых предельных случаях теоретические отношения просто получаются в явном виде.

1. Сферические ядра ($y_0 = \alpha = 0$):

$$\varepsilon_1(4) = 2, \ B(E2; J, 1 \to J - 2, 1) / B(E2; 21 \to 00) = \frac{J}{2}, \ Q(J) = 0$$

2. γ-нестабильные ядра ($y_0 \gg 1$, $\alpha = 0$ [7]):

$$\varepsilon_1(4) = 2,5, B(E2;J,1 \rightarrow J-2,1)/B(E2;21 \rightarrow 00) = \frac{5J}{2(J+3)}, Q(J) = 0.$$

3. Сильнодеформированные аксиальные ядра ($y_0 \gg 1$, $\alpha y_0 > 1$ [8]):

$$\epsilon_1(4) = \frac{10}{3}, \ B(E2; J, 1 \to J - 2, 1) / B(E2; 21 \to 00) = \frac{15J(J-1)}{2(2J-1)(2J-3)},$$

 $Q(J) = Q_0 \frac{J}{2J+3}.$

4. Ядра, у которых β -жесткость «бесконечно велика» по сравнению с γ жесткостью [6]. В этом случае переменные разделяются, и, хотя явного аналитического выражения не получается, численное решение задачи заметно упрощается. Соответствующие кривые служат в каждом случае одной из границ теоретически доступных областей при $y_0 \rightarrow \infty$.

На рис. 1, 2 приведены результаты для J = 4, 8 и 12. Зависимости для J = 6 и 10 имеют тот же характер и опущены, чтобы не загромождать рисунков.

Экспериментальные данные о вероятностях *E*2-переходов и средних значениях квадрупольных моментов для состояний с достаточно высоким спином имеются лишь для нескольких сильнодеформированных ядер, по своим ротационным свойствам близким к жесткому волчку. Результаты расчётов на

рис. 1 показывают, что практически значения B(E2) в рассматриваемой модели достигают максимальных значений в случае сферической равновесной формы, а минимальных — в пределе жесткого ротатора. Наиболее сильная зависимость от равновесной деформации и жесткости наблюдается при малых деформациях; там же теоретически доступные области сужаются, и предсказания модели делаются определеннее. Однако экспериментальные данные в этой области отсутствуют.

Рис. 2 показывает, что с хорошей точностью $Q(J) = k(J) Q(2^+)$, где k(J) - функция J, слабо зависящая от параметров модели. При малых отклонениях от равновесной сферической формы отношение $Q(J) / Q_0$ может увеличиваться весьма резко, что соответствует сильной динамической деформации ядер с малой жесткостью.



Рис. 1. Теоретически доступные области значений относительных вероятностей E2-переходов для случаев $12^+ \rightarrow 10^+$, $8^+ \rightarrow 6^+$ и $4^+ \rightarrow 2^+$ в зависимости от ϵ_1 (4)

Рис. 2. То же, что на рис. 1, для отношений $Q(J) / Q_0$. Кривые: сплошная — $Q(4_1^+) / Q_0$; штрих-пунктирная — $Q(8_1^+) / Q_0$, пунктирная — $Q(12_1^+) / Q_0$

В заключение авторы выражают благодарность В. В. Булычеву за содействие в проведении расчетов на ЭВМ.

Литература

- 1. N. S. Rabotnov, A. A. Seregin. Phys. Lett., 29B, 162, 1969.
- 2. Н. С. Работнов, А. А. Серегин. ЯФ, 10, 286, 1969.
- 3. А. С. Давыдов. Возбужденные состояния атомных ядер, Атомиздат, 1967.
- А. П. Будник, Е. В. Гай, Н. С. Работнов, А. В. Климов, В. Ф. Турчин, И. Б. Щенков. ЯФ, 14, 304, 1971
- 5. А. П. Будник, Н. С. Работнов, А. А. Серегин. ЯФ, 15, 470, 1972.

- 6. А. П. Будник, Н. С. Работнов, А.А. Серегин. ЯФ, 12, 477, 1970.
- 7. L. Wilets, M. Jean. Phys. Rev., 102, 788, 1956.
- 8. G. Alaga, K. Alder, A. Bohr, B. Mottelson. Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk., 29, 9, 1955 (перев. см. ПСФ, 1, 80, 1956).

E2-Transitions and Quadrupole Moments of High Spin States in Collective Nucleus Model

A. P. Budnik, N. S. Rabotnov, A. A. Seregin

In the framework of phenomenological collective nucleus model with a potential energy, dependent on deformation coordinates β and γ , the values of the reduced probabilities of cascade *E*2-transitions and mean values of quadrupole moments in excited states of even-even nuclei with high spin in the basic rotation band have been calculated.

Вероятности E2-переходов и средние значения квадрупольных моментов состояний с высоким спином в модели асимметричного волчка

Е. В. Гай, Н. С. Работнов

В модели асимметричного волчка с тремя независимыми моментами инерции рассчитываются вероятности *E*2-переходов между состояниями с высоким моментом вплоть до J = 12 и средние значения электрических квадрупольных моментов в этих состояниях. Предположение о связи сферических тензорных операторов инерции и квадрупольного момента, введенное ранее в [1], позволяет сделать это без введения дополнительных параметров. Теоретические значения отношении $B(E2, J \rightarrow J - 2) / B(E2, 2 \rightarrow 0)$ сравниваются с экспериментальными данными для сильнодеформированных ядер.

Введение

В работе [1] было использовано предположение о связи тензоров инерции и квадрупольного момента ядра, которое позволило в рамках модели жесткого асимметричного ротатора с тремя произвольными моментами инерции рассчитать относительные вероятности *E*2-переходов с уровня 2^+ «аномальной» ротационной полосы в основное состояние и на первый уровень 2^+ . В этом простейшем случае окончательный результат можно представить в простом аналитическом виде.

Представляет интерес изучение приведенных вероятностей электрических квадрупольных переходов между уровнями основной ротационной полосы с высокими моментами и средних значений квадрупольных моментов в этих состояниях. Сопоставление этих данных со свойствами спектра энергии может дать информацию о природе состояний с высоким моментом для ядер в различных областях периодической таблицы.

В настоящей работе модель, предложенная в [1], применена для расчета относительных вероятностей E2-переходов и статических квадрупольных моментов четно-четных ядер в основной ротационной полосе до спина J = 12. Явные выражения здесь удается получить только в простейших предельных случаях, в общей постановке задачу приходится решать с помощью численной диагонализации гамильтониана асимметричного волчка.

1. Гамильтониан и тензор квадрупольного момента волчка

Гамильтониан асимметричного волчка в параметризации, использованной в работе [1], имеет вид

$$H = aJ(J+1)[1+\beta\nu(\alpha)], \qquad (1)$$

Ядерная физика, 1972, т. 16, вып. 2, с. 284-288.

где параметры *a*, α и β следующим образом выражаются через моменты инерции $I_1 \ge I_2 \ge I_3$:

$$a = \frac{\hbar^2}{2I_1}, \ \beta = \frac{I_1 - I_3}{I_3}, \ \alpha = \frac{I_3 (I_2 - I_1)}{I_2 (I_3 - I_1)},$$
(2)

а оператор $v(\alpha)$ связан с компонентами J_i момента количества движения соотношением

$$v(\alpha) = \frac{J_3^2 + \alpha J_2^2}{J(J+1)}.$$
 (3)

Тензорный оператор квадрупольного момента имеет вид

$$Q_{\mu} = Q_0 \left\{ D_{\mu 0}^2 \cos \alpha + \frac{\sin \alpha}{\sqrt{2}} \left(D_{\mu 2}^2 + D_{\mu - 2}^2 \right) \right\} \equiv Q_0 q_{\mu} , \qquad (4)$$

где D_{MK}^{J} — сферические функции Вигнера, а æ, вообще говоря, независимый параметр. Однако использованное в работе [1] предположение о том, что момент инерции квадратичен по квадрупольному моменту (это обобщение зависимости, имеющей место и гидродинамической модели), позволяет выразить æчерез α и β :

$$\mathfrak{a}(\alpha,\beta) = \frac{1}{2}\operatorname{arcctg}\frac{2+\beta\alpha-\alpha}{\sqrt{3}\alpha(\beta+1)}$$
(5)

и избежать введения дополнительных параметров.

Волновая функция состояния с моментом Ј ищется в виде

$$\Psi_{M}^{J\tau} = \sum_{K\geq 0}^{J} A_{JK}^{\tau} \frac{1}{\sqrt{2-\delta_{K0}}} \Big(D_{MK}^{J} + (-1)^{J} D_{M-K}^{J} \Big), \tag{6}$$

где сумма берется только по четным значениям K, а τ — квантовое число, различающее уровни с данным J. Если нумеровать их в порядке возрастания энергии, то уровням основной ротационной полосы, которые рассматриваются в настоящей работе, соответствует $\tau = 1$, поэтому в дальнейшем мы будем опускать этот индекс. Коэффициенты A_{JK} находились путем численной диагонализации однопараметрической матрицы $v(\alpha)$.

2. Расчет вероятностей *E2*-переходов и средних значений квадрупольных моментов

Выражение для вероятности *E*2-переходов между состояниями основной ротационной полосы имеет вид (см., например, [2])

$$B(E2, J \to J') = \frac{5Q_0^2}{16\pi(2J+1)} \left| \sum_{KK'} A_{J'K'} A_{JK} \left\langle J'K' \| q \| JK \right\rangle \right|^2, \tag{7}$$

где приведенный матричный элемент безразмерного оператора квадрупольного момента

$$J'K' \|q\| JK = \sqrt{2J+1} \left\{ \left(JK20 | J'K' \right) \cos \alpha + \frac{\sin \alpha}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\frac{1+\delta_{K0}}{1+\delta_{K'0}}} \left(JK22 | J'K' \right) + \sqrt{\frac{1+\delta_{K'0}}{1+\delta_{K0}}} \left(JK2-2 | J'K' \right) \right] \right\},$$
(8)

Аналогично для среднего значения квадрупольного момента

$$\langle Q \rangle = Q_0 \left[\frac{J(2J+1)}{(J+1)(2J+1)(2J+3)} \right]^{1/2} \sum_{K,K'} \langle JK' \| q \| JK \rangle \equiv Q_0 \langle q \rangle_J.$$
(9)

Предельный случай $\alpha \to 0$ соответствует симметричному волчку с совпадающими большими моментами инерции. В этом пределе $A_{JK} = \delta_{K0}$ и независимо от значения β , как можно показать, подставляя (5) в (7) и (9),

$$\frac{B(E2, J \to J - 2)}{B(E2, 2 \to 0)} = \frac{15(J+1)J}{2(2J+1)(2J-1)},$$
(10)

$$\langle q \rangle_J = -J/(2J+3)$$
 при $\alpha = 0$. (11)

Несколько сложнее расчет в пределе $\alpha \rightarrow 1$. В этом случае волчок также симметричен, совпадают два меньших момента инерции, однако в *z*-представлении, которое используется при проведении расчетов, гамильтониан недиагонален, и необходимо перейти, например, к *x*-представлению в выражении как для волновой функции, так и для оператора квадрупольного момента. При этом следует воспользоваться известным выражением для *D*-функций в повернутой системе координат

$$D_{MK}^{J}\left(\boldsymbol{\varphi}',\boldsymbol{\theta}',\boldsymbol{\psi}'\right) = \sum_{K'} D_{MK'}^{J}\left(\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\psi}\right) D_{K'K}^{J}\left(\boldsymbol{0},\frac{\pi}{2},\boldsymbol{0}\right). \tag{12}$$

Произведя необходимые преобразования, получаем

$$\frac{B(E2, J \to J-2)}{B(E2, 2 \to 0)} = \frac{5}{2} \frac{2J-3}{2J+1}, \quad \alpha = 1 \quad (J \neq 2).$$
(13)

Предельные значения $\langle q \rangle_J$ зависят от β :

$$\frac{\langle q \rangle_J}{\langle q \rangle_2} = \frac{7}{6} \frac{J^2 (2J - J)}{(J^2 - 1)(2J + 3)}, \quad \alpha = 1, \quad \beta = 0,$$
(14)

$$\frac{\langle q \rangle_J}{\langle q \rangle_2} = \frac{7}{4} \frac{J(2J-1)}{(J-1)(J+1)(2J+3)}, \quad (J \neq 2), \quad \beta \to \infty.$$
(15)




Рис. 1. Теоретически доступная область значений $\langle Q \rangle_2$ в единицах Q_0 как функции параметра *x* (а); для отношений *B* (*E*2, *J* \rightarrow *J* - 2) / *B* (*E*2, 2 \rightarrow 0) (б); для отношений $\langle Q \rangle_J / \langle Q \rangle_2$ (в)

3. Обсуждение результатов

Как показано в работе [1], параметр α взаимно однозначно связан с некоторыми дробно-линейными комбинациями наблюдаемых величин — значений энергии ротационных уровней, и при анализе результатов естественно этим воспользоваться. На рис. 1a - b теоретические значения B(E2) и $\langle Q \rangle$ отложены как функции одной из упомянутых дробно-линейных комбинаций

$$x = \frac{10}{7} \frac{E_1(6) - 7E_1(2)}{3E_1(4) - 10E_1(2)}.$$
(16)

С изменением β при заданном α результаты меняются, поэтому теоретические значения в каждом случае заполняют некоторую область.

Величина $B(E2, 2 \rightarrow 0)$ в единицах $Q_0^2/16\pi$ весьма слабо зависит от инерционных параметров, меняясь от 1 до 0,75, поэтому отдельного графика для нее не приведено.

Значение $\langle Q \rangle_2$, напротив, резко убывает по абсолютной величине при возрастании α и, оставаясь все время отрицательным, обращается в нуль при $\alpha = 1$ независимо от β (см. рис. 1*a*).

Зависимость относительных величин $B(E2, 2 \rightarrow 0)$ от x для разных моментов приведена на рис. 16.

При $\alpha = 1, \beta \rightarrow \infty$ основная ротационная полоса имеет эквидистантный спектр состояний, внешне совпадающий со спектром колебаний сферического

ядра. Как указывалось в работе [1], может оказаться, что состояния некоторых ядер с примерно эквидистантным спектром уровней 2^+ , 4^+ , 6^+ ,... ближе по своей природе к чисто ротационным с $\alpha = 1$, чем к колебательным. Однако, согласно формуле (13), отношения приведенных вероятностей *E*2-переходов у волчка с эквидистантным спектром резко отличаются от случая гармонических колебаний: для волчка отношения $B(E2, J \rightarrow J - 2) / B(E2, 2 \rightarrow 0)$ у уровней 4^+ , 6^+ , 8^+ равны ${}^{25}/_{18}$, ${}^{45}/_{26}$, ${}^{65}/_{34}$, и стремятся с увеличением момента к постоянному пределу ${}^{5}/_{2}$, а для вибрационного спектра эти отношения равны 2, 3, 4 и неограниченно растут с ростом момента. Отношение энергий мерных двух уровней 2^+ в первом случае равняется трем, а во втором — двум. Поэтому представляет интерес измерение *E*2 в основной полосе у тех «вибрационных» ядер, у которых $E_2(2) / E_1(2) \approx 3$, с целью возможного обнаружения ротационных состояний с таким необычным спектром.

В настоящее время экспериментальные значения B(E2) для состояний с достаточно высоким спином известны лишь для нескольких сильнодеформированных ядер, поэтому возможности сравнения их с результатами расчетов ограничены. Сравнение производится на рис. 2, где в зависимости от границы теоретически возможных значений отношения $B(E2, J \rightarrow J-2) / B(E2, 2 \rightarrow 0)$. Все экспериментальные значения находятся в «теоретически доступной» для волчка области только при J = 4, 6, а затем отклоняются в основном вниз.

Результаты расчета отношений $\langle Q \rangle_J / \langle Q \rangle_2$ представлены на рис. 1*в*. Рис. 1*а* и 1*в* показывают, что как абсолютные, так и относительные значения $\langle Q \rangle_J$ заметно чувствительнее к изменению инерционных параметров, чем B(E2), и могут меняться в более широких пределах. Однако экспериментальное определение этих величин для достаточно высоких значений момента все еще пока не рассматривалось.



Рис. 2. Границы теоретически доступных областей значений отношения $B(E2, J \rightarrow J - 2) / B(E2, 2 \rightarrow 0)$ в зависимости от момента *J*. Экспериментальные данные взяты из работ [3—5]

Литература

- 1. Е. В. Гай, Н. С. Работнов. ЯФ, 15, 713, 1972.
- 2. А.С. Давыдов. Возбужденные состояния атомных ядер. Атомиздат, 1967, с. 90—92.
- 3. R. M. Diamond, P. S. Stephens, W.H. Kelly, D. Ward. Phys. Rev. Lett., 22, 546, 1969.
- 4. R. O. Sayer, R. H. Stelson, F. K. McGowan, W. T. Milner, R. L. Robinson. Phys. Rev., C1, 1525. 1970.
- 5. H. M. Diamond, P. S. Stephens, K. Nakai, R. Nordhagen. Phys. Rev., C3, 344, 1971.

Probabilities of *E2*-Transitions and Mean Values of Quadrupole Moments of High Spin States in Asymmetric Top Model

E. V. Gay, N. S. Rabotnov

Probabilities of *E*2-transition between states with a high moment up to J = 16 and mean values of electric quadrupole moments in these states are calculated in the framework of the asymmetric top model with three independent moments of inertia. In assumption on connection between spherical tensor operators of inertia and the quadrupole moment, introduced in [1], one can do it without introducing any additional parameters. Theoretical values of ratios $B(E2, J \rightarrow J - 2) / B(E2, 2 \rightarrow 0)$ are compared with the experimental data on strongly deformed nuclei.

Поступила в редакцию 3 февраля 1972 г.

On a Correlation Between the Properties of Low Lying Collective Levels and Fission Process Observables in Even Nuclei

A. P. Budnik and N. S. Rabotnov

Institute of Physics and Energetics, Obninsk, USSR

Received 1 March 1972

Effective polynomial potentials for one-dimensional nuclear collective motion leading to fission make it possible to obtain a relation between the spontaneous fission rate, the height of the barrier and the energies of low-lying collective levels. The results are compared with experiment.

Many essential features of the fission process may be interpreted in terms of the simple phenomenological theory using a one-dimensional deformation potential. Some experimental discoveries (fission isomers [1], irregular energy dependence of the barrier penetrability [2—5]) and theoretical developments [6] of the last decade suggest strongly that the potential curve has more than one maximum. The effective mass involved in this collective motion depends also on the deformation. Recently Hoffman and Dietrich [7] investigated the one-dimensional quantum motion with the variable inertial parameter and have found this variation to lead to some strong effects. Nevertheless the very possibility of a one-dimensional description working all the way from the ground-state equilibrium deformation to the scission point may result in correlations between the properties of the low-lying collective levels and fission process observables for heavy nuclei. Possible connections between various forms and stages of nuclear collective motion including fission were investigated recently in ref. [8, 9]. A correlation of this kind is discussed below.

The Schrodinger equation with the variable mass m(q) has the form [10]

$$\frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{m(q)}} \frac{d}{dq} \frac{1}{\sqrt{m(q)}} \frac{d\psi}{dq} + \left(V(q) - E\right)\psi = 0.$$
(1)

The authors of ref. [7] introduce a new independent variable in eq. (1) making the mass constant. Instead we can introduce a new wave function getting also an equation without first derivative which is easy to solve in the JWKB-approximation

$$\Psi = \sqrt[4]{m(q)x}; \qquad x'' + Q^2 x = 0 \tag{2}$$

$$Q^2 = 2m(V_{\rm eff} - E); \quad V_{\rm eff} = V + \frac{5(m')^2 - 4mm'}{32m^3}.$$
 (3)

The collective variable is q and for our purpose may be left unspecified provided that the nuclear moment of inertia is proportional to q^2 near the ground-state

Physics Letters, 1972, vol. 39B, no. 3, pp. 311-312.

deformation. The penetrability W of the barrier formed by V_{eff} may be written in WKB-approximation [11]:

$$W = \exp\left(-2\int |Q| dq\right),\tag{4}$$

where the integral is taken between the zeros of Q. Let us approximate $\{m(q)/m(0)\}$ $V_{\text{eff}}(q)$ by a polynomial. Then we can transform it by shifting the origin and choosing abscissa and ordinate units without losing generality into

$$\frac{m(q(y))V_{eff}(q(y))}{m(0)} = \hbar\omega \left(\frac{1}{2}y^2 + \sum_{h=3}^N a_n y^n\right) \equiv \hbar\omega P(y),$$
(5)

where $\hbar\omega$ is the ground-state oscillation energy and P'(0) = 0, P''(0) = 1. Eqs. (4) and (5) make it possible to express the spontaneous fission halflife T_{sf} in the following form

$$T_{sf} = \frac{\hbar\omega}{2\pi} \exp\left(-E_f / \hbar\omega\right) \varphi_N , \qquad (6)$$

where E_f is the height of the barrier and φ_N is a function determined by the parameters of the "dimensionless potential" P(y). For the simplest cubic potential there is no parameter left and it is easy to show that $\varphi_3 = 36/5 = 7.2$ for E = 0. For a two humptwo minima barrier the lowest N = 5. The detailed structure of the potential curve near the barrier's top is not essential in our calculations of T_{sf} . All the experiments indicate that the heights of the two humps are almost equal and the humps are rather close. So we take the simplest potential of fifth order to estimate T_{sf} ; namely we consider the case where the humps and the second well have just merged forming a flat top. There are no extra parameters in this case also and $\varphi_5 = 16.1$.

 $\hbar\omega$ is a ground state parameter and the simplest way to find it is to use a method proposed by Diamond et al. [12]. They found that for well-deformed, relatively rigid nuclei with a quadratic dependence of the moment of inertia on the deformation parameter

$$\hbar\omega = E_1(2) \cdot f(E_1(4)/E_1(2)), \tag{7}$$

where $E_1(J)$ are the energies of the levels of the ground-state rotational band. In ref. [13] a formula was derived making it possible to get the explicit form of *f* for small $\mu^2 = E_1(2) / \hbar \omega$.

 $\mu \sim \frac{1}{20}$ for fissioning nuclei so the approximation is good. The result is

$$\hbar\omega = E_1(2) \left[\frac{3}{14} \left(1 - \frac{3}{10} E_1(4) / E_1(2) \right) \right]^{-1/2}.$$
(8)

 $\hbar\omega$ as given by eq. (8) varies by about 100 % from Th to Cf and E_f within 10 % so in the crude model we can assume E_f to be constant and equal to 6 MeV for even nuclei. Eq. (7) provides also a good description of the energies of beta-vibrational 0⁺ levels for lighter nuclei ($E_1(0) \approx \hbar\omega$) but in transthorium region $\hbar\omega > E_1(0^+)$ systematically. The resulting theoretical curves connecting T_{sf} , $E_1(4)$ and $E_1(2)$ by eqs. (6)—(8) are shown in fig. 1. For relatively light nuclei $E_1(4)$ and $E_1(2)$ are well



Fig. 1. Experimental values of ln ($\hbar\omega T_{sf} / 2\pi\hbar$) versus $\hbar\omega$ defined by eq. (8). The curves correspond to eq. (6) for N = 5 (curve 1, "degenerate" two-hump barrier) and for N = 3 (curve 2, one-hump barrier) of T_{sf} and $E_1(J)$ were taken from ref. [14]. Horizontal error bars are indicated for ²³⁸Pu only. They are typical for most cases; ²⁵⁴Fm is an exception. The value $E_1(4) / E_1(2) = 3/10$ corresponding to $\hbar\omega = \infty$ is within experimental error for this nucleus

known in many cases but the values of T_{sf} are scarce. For the heaviest nuclei the situation is the opposite so there are only a few "complete" experimental points. Both absolute values of and observable correlation between In T_{sf} and $\hbar\omega$ seem to be reproduced qualitatively by the simple model outlined above for the "degenerate" two-hump barrier, i. e. for N = 5.

It would be interesting to check the systematics by comparison with experimental data for other even nuclei. For that purpose precise measurements of the ratio $E_1(4) / E_1(2)$ are needed.

It may be worth trying to extend the model to look for a correlation between the observables determined by the barrier's top structure neglected here.

References

- S. M. Polykanov, V. A. Druin, V. A. Karnauhov, V. L. Mikheev, A. A. Pleve, M. K. Skobelev, V. G. Subbotin, G. M. Ter-Akopyan and V. A. Fomitchev. Zh. Eksp. i Teor. Fiz., 42 (1962) 1464.
- P. E. Vorotnikov, S. M. Dubravina, G. N. Otroshchenko, V. A. Shigin. Yad. Fiz., 7 (1968) 1228.
- 3. A. Fubini, J. Blons, A. Michandon and D. Raya. Phys. Rev. Lett., 20 (1968) 1373.
- 4. E. Migneco and G. Theobald. Nucl. Phys., A112 (1968) 603.
- 5. C. D. James and E. R. Rae. Nucl. Phys., A118 (1968) 313.
- 6. V. M. Strutinsky. Nucl. Phys., A95 (1968) 420.
- 7. H. Hoffman and K. Dietrich. Nucl. Phys., A165 (1971) 1.
- 8. V. Metag, R. Pernow and P. von Brentano. Nucl. Phys., A165 (1971) 289.
- 9. K. Ohta. Prog. Theor. Phys., 45 (1971) 70.
- 10. W. Pauli. Handbuch der Physik, Bd 24/1 (Springer, Berlin) p. 120.
- N. Fröman and P. O. Fröman. JWKB approximation (North-Holland P.Co., Amsterdam, 1965).
- 12. P. Diamond, F. Stephens and W. Swiatecki. Phys. Lett., 11 (1964) 315.
- 13. N. S. Rabotnov and A. A.Seregin. Yad. Fiz., 5 (1967) 996.
- 14. V. M. Gorhachev, Yu. S. Zamyatin and A. A. Lbov. Osnovniye charakteristiky isotopov tyazhelyh elementov (Atomizdat, Moskva, 1970).

On the Possibility to Detect the Spatial Parity Violation in Nuclear Fission through the Two-Hump Barrier

A. P. Budnik and N. S. Rabotnov

Institute of Physics and Power Engineering, Obninsk, USSR

Received 31 July 1973

The dependence of the height of the fission barrier on the parity combined with the resonance effect due to the existence of quasilevels in the second well may make it possible to detect the spatial parity violation in the fission process.

Andreev and Vladimirsky [1] have suggested to use the fission process as a "nuclear amplifier" to investigate the spatial parity violation in the nucleon-nucleon interaction exploiting the strong dependence of the height of the barrier on the quantum numbers of fissioning nucleus, parity in particular. The penetrability factor may enhance the admixture of "anomalous" parity component in the final state by a few orders of magnitude.

The authors of ref. [1] have proposed to look for possible pseudoscalar components in the angular distributions of the spontaneous fission products of polarized nuclei to detect the effect. One of the possibilities indicated was the correlation between the direction of the light or heavy fragment emission on one hand and the polarisation of the fissioning nucleus on the other.

In this paper we discuss an additional possibility emerging from the existence of the second minimum on the fission potential curve [2] and resulting sharp maxima in the energy dependence of the probability of fission [3]. If the excitation energy of the fissioning nucleus coincides with a quasistationary level in the second well the barrier's penetrability will increase in a resonance way. A simple explicit expression making it possible to evaluate the enhancement in the case of arbitrary one-dimensional two-hump barrier was derived in ref. [4]. The possibility in question arrives in the case when the state in the second well and compound-state have opposite panties.

Let's consider an admittedly oversimplified quasiclassical model of the process to estimate the effect, namely the decay of a mixed parity level in a spherically symmetric potential with the radial dependence forming a two-hump barrier. The Schrodinger equation has the form

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} + u_l(r)\right)\Psi,$$
(1)

where

$$\Psi = \Psi_1 + \beta \Psi_2 = \varphi_1(r) Y_m^{l_1}(\theta, \phi) + \varphi_2(r) Y_m^{l_2}(\theta, \phi).$$
(2)

Physics Letters, 1973, vol. 46B, no. 2, pp. 155-156.

But the potential $u_l(r)$ is supposed to be different for different angular momenta and we shall consider the case when one of the numbers l_1 and l_2 is even and the other is not. The wave functions, ψ_1 and ψ_2 are normalized

$$\int |\Psi_1|^2 \, dr = \int |\Psi_2|^2 \, dr \,. \tag{3}$$

Here the first well is the integration domain. Eq. (1) is reduced to the two independent equations for the radial motion

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi_k(r,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+u_k(r)+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l_k(l_k+1)}{r^2}\right]\varphi_k.$$
 (4)

The particle flux in the θ , ϕ direction is

$$j_r(\theta, \phi) = j_1 + \beta^2 j_2 + \beta j_{12}$$
(5)

where

$$j_{k} = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi_{k} \frac{\partial}{\partial r} \Psi_{k}^{*} - \Psi_{k}^{*} \frac{\partial}{\partial r} \Psi_{k} \right), \quad k = 1, 2$$
(6)

and

$$j_{12} = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m} \left(\Psi_1 \frac{\partial}{\partial r} \Psi_2^* + \Psi_2 \frac{\partial}{\partial r} \Psi_1^* - \Psi_1^* \frac{\partial}{\partial r} \Psi_2 - \Psi_2^* \frac{\partial}{\partial r} \Psi_1 \right).$$
(7)

Let's estimate quasiclassically the value of the component j_{12} , which is inversion-asymmetric, for the most interesting case when a quasistationary level exists at the given energy in the second well and its parity coincides with "anomalous" admixture parity in the first well.

 ψ_1 has the following asymptotic form for large

$$\Psi_1 = \frac{1}{r\sqrt{p_1}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{b_2}^r p_1 dr\right) Y_m^{l_1}(\theta, \varphi) \,. \tag{8}$$

Using eq. (3) we obtain asymptotic expression for ψ_2

$$\Psi_2 = \frac{M}{r\sqrt{p_2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{b_1}^r p_2 dr\right) Y_m^{l_2}(\theta, \varphi)$$
(9)

where the factor *M* is expressed in the terms of the single hump penetrabilities P_{A_l} and P_{B_l} in the following way

$$M = \sqrt{\frac{P_{A_2} P_{B_2}}{P_{A_1} P_{B_1}}} \cdot \frac{4}{\sqrt{P_{A_2}^2 + P_{B_2}^2}}.$$
 (10)

Thus, the effect under discussion is determined by several factors $\sqrt{P_{A_2}} / P_{A_1}$ corresponds to the difference in barrier's heights, it is this factor that was considered in

ref. [1], but estimated there presumably erroneously as P_{A_2} / P_{A_1} ; the existence of the second hump similarly gives rise to $\sqrt{P_{B_2} / P_{B_1}}$ factor and the last but not least is the resonance factor $1/\sqrt{P_{A_2}^2 + P_{B_2}^2}$ due to the existence of the quasistationary level. It's necessary to note that eq. (10), naturally, may not be applied to the limiting case when the barriers for different parities are identical. This equation corresponds to the situation, when the levels of different parities form two separated systems in the second well.

There is in principle the following experimental possibility to detect the effect, one has to investigate the (n, f)-reaction with polarized *s*-neutrons on an even threshold nucleus, say ²⁴⁰Pu, at the resonance energies trying to observe a correlation between preferential direction of emission of light or heavy fragments and polarisation direction. In other words, parity violation may lead to a larger or smaller total mass emitted along the polarized in the plane perpendicular to the beam to separate the effect, arising from the possible *p*-wave admixture. Factors P_{A_1} and

 P_{B_l} are a priori unknown in real situation and may differ for different cases both quantitatively and qualitatively (i. e. to reduce the effect instead of enhancing it for some resonances), so an attempt to observe the effect should include the investigation of as many resonances as possible.

The authors wish to thank Dr. V.N. Andreev for helpful discussions.

References

- 1. V. N. Andreev and V. V. Vladimirsky. JETP, 41 (1961) 663.
- 2. V. M. Strutinsky. Nucl. Phys., A95 (1967) 420.
- P. E. Vorotnikov, S. M. Dubrovina, G. A. Otroshchenko and V. A. Shigin. Yad. Fiz., 3 (1966) 479;
 - A. Fubini, J. Blons, A. Michaudou and P. Paya. Phys. Rev. Lett., 20(1968) 1373;
 - E. Migneco and G. Theobald. Nucl. Phys, A122 (1968) 603;
 - C. D. James and E. R. Rae, Nucl. Phys. A118 (1968) 313.
- 4. A. V. Ignatyuk, N. S. Rabotnov and G. N. Smirenkin. Phys. Lett., 29B (1969) 209.

АНАЛИТИЧЕСКАЯ АППРОКСИМАЦИЯ В ЯДЕРНОЙ ФИЗИКЕ

Построение физических базисов групп O(5) и SU(3) с автоматическим выполнением символьных преобразований

В. Н. Виноградов, Е. В. Гай, С. И. Попов, Н. С. Работнов, И. Б. Щенков

Физико-энергетический институт, Обнинск

(Поступила в редакцию 1 июня 1972 г.)

Автоматическое выполнение громоздких аналитических выкладок на основе языка РЕФАЛ использовано для построения физических базисов представлений групп O(5) и SU(3). Эти базисы используются для описания квадрупольных колебаний ядерной поверхности и в квантово-механической задаче трех тел. Для группы O(5) найдено явное выражение для оператора, соответствующего дополнительному и квантовому числу, записанного в виде полинома четвертого порядка по генераторам группы. Для базиса группы SU(3) вычислены также некоторые матричные элементы и интегралы перекрытия с использованием полученных функций.

1. Введение

В работе [1] были построены в явном виде функции физического базиса неприводимых представлений группы O(5) для высоких значений квантовых чисел, а затем вычислены матрицы некоторых основных операторов коллективной модели ядра по этим функциям с использованием языка РЕФАЛ [2, 3] для автоматизации громоздких аналитических выкладок. Полученный опыт привел участников работы к заключению о перспективности этого нового направления применения ЭВМ для решения задач математической и теоретической физики, и исследования были продолжены. В настоящей работе излагаются результаты, полученные с использованием того же подхода в двух других задачах, на этот раз с довольно большим числом переменных — с пятью (в работе [1] трудность заключалась по существу в нахождении сложных функций одной переменной). Эти задачи близки методически, но по объему работы и полученным результатам первая из них — построение оператора дополни-

Ядерная физика, 1972, т. 16, вып. 6, 1178—1187.

тельного квантового числа для физического базиса группы O(5) — значительно проще и носит фактически вводный характер; на ней проверялись возможности РЕФАЛа применительно к действиям с операторными полиномами от нескольких переменных. Вторая задача заключается в построении базисных функций метода *К*-гармоник в задаче трех тел и вычислении некоторых матричных элементов по этим функциям. Полученные результаты могут быть использованы при расчетах свойств системы трех частиц с парным взаимодействием и представляют больший физический интерес.

2. Построение оператора дополнительного квантового числа физического базиса неприводимых представлений группы *O* (5)

Волновые функции, описывающие квадрупольные гармонические колебания ядра относительно сферической равновесной формы, образуют физический базис неприводимых представлений группы O(5). Гамильтониан задачи в представлении вторичного квантования имеет вид

$$H = \sum_{\mu} \left(b_{\mu}^{+} b_{\mu} + \frac{1}{2} \right), \tag{1}$$

где операторы рождения и уничтожения b_{μ}^{+}, b_{μ} подчиняются обычным коммутационным соотношениям

$$\left[b_{\mu}^{+},b_{\mu'}^{+}\right] = 0, \quad \left[b_{\mu},b_{\mu'}^{+}\right] = 0, \quad \left[b_{\mu},b_{\mu'}^{+}\right] = \delta_{\mu\mu'}.$$
(2)

Задачу отыскания собственных функций оператора (1) можно сформулировать как задачу построения тензоров с определенными свойствами в пространстве операторов b_{μ}^{+} , действующих на вакуумную функцию. Генераторы $\Lambda_{\mu\mu'}$ группы O (5) (всего их десять) имеют следующий вид [4]:

$$\Lambda_{\mu\mu'} = \frac{1}{2} \Big((-1)^{\mu'} b_{\mu} b^{+}_{-\mu'} - (-1)^{\mu} b^{+}_{\mu'} b_{-\mu} \Big).$$
(3)

Они и служат исходным материалом для построения операторов, соответствующих квантовым числам. Удобно воспользоваться линейными комбинациями генераторов в форме Рака [5]. В этом случае они разбиваются на две группы, образующие в физическом трехмерном пространстве тензоры первого и третьего рангов соответственно:

$$U_{k,q} = \sum_{\mu\mu'} (2\mu 2\mu' | kq) \Lambda_{\mu\mu'}, \quad k = 1, 3.$$
(4)

Кроме главного квантового числа *N*, соответствующего собственным значениям гамильтониана (1), известны еще три квантовых числа: – квадрат момента количества движения

$$J^{2} = 10\sum_{q} (-1)^{q} U_{1q} U_{1,-q} = J(J+1),$$
(5)

- проекция момента на ось z в л.с.

$$J_0 = \sqrt{10} U_{10} = M, \tag{6}$$

– оператор Казимира группы O(5)

$$C_2 = \sum_{k,q} (-1)^q U_{kq} U_{k,-q} = \lambda (\lambda + 3)/2,$$
(7)

где число λ — синьорити. В правых частях выражений (5) — (7) указана зависимость собственных значений операторов от квантовых чисел в общепринятых обозначениях. Для полной идентификации состояний четырех указанных чисел, вообще говоря, недостаточно. При $J, \lambda \ge 6$ имеется дополнительное вырождение и для полноты набора квантовых чисел нужен еще один оператор (см. [6]). Проекция J_0 есть полином первого порядка по генераторам; выражения (5), (7) — полиномы второго порядка. Естественно искать оператор недостающего квантового числа также в виде полинома по генераторам, скалярного по отношению к преобразованиям группы O (3). Легко показать, используя свойства генераторов группы O (5), что он должен иметь по крайней мере четвертый порядок, а такие операторы, в свою очередь, можно представить в виде линейной комбинации выражений типа

$$Y_{k_{1}k_{2}k_{3}}^{(L)} = \sum_{q_{1},q_{2},q_{3},q_{1}',M} \left(-1\right)^{M} \binom{K_{1}K_{1}L}{q_{1}q_{1}'M} \binom{K_{2}K_{3}L}{q_{2}q_{3}-M} U_{k_{1}q_{1}}U_{k_{1}q_{1}'}U_{k_{2}q_{2}}U_{k_{3}q_{3}}, \quad (8)$$

из которых необходимо исследовать лишь четыре оператора, соответствующих следующим комбинациям чисел k_1 , k_2 и k_3 : 3,3,3, 3,3,1, 1,3,3 и 1,1,3.

Один из операторов четвертой степени удовлетворяет всем необходимым условиям и соответствует, следовательно, искомому квантовому числу. Показать это можно следующим образом. Нужно рассмотреть случаи, когда совокупность всех остальных квантовых чисел не определяет полностью состояние и имеется дополнительное вырождение, кратность которого мы обозначим n. Если все n ортогональных функций известны, то следует вычислить n^2 матричных элементов по этим функциям «подозреваемого» оператора и найти все собственные значения полученной матрицы. Если собственные значения окажутся различными, это будет означать, что оператор найден, и собственные функции его будут «правильными». Если же собственные значения совпадут, это будет означать, что они являются однозначными функциями остальных квантовых чисел и не могут служить значениями дополнительного квантового числа.

Для функций вырожденных состояний в принципе указан рекурсивный способ построения [7], однако он до сих пор не применялся в силу своей громоздкости. Мы воспользуемся этим методом, опираясь на возможности, предоставляемые алгоритмическим языком рекурсивных функций РЕФАЛ [2, 3], реализованным на ЭВМ БЭСМ-6. Метод основан на использовании ряда Клебша — Гордана для группы O(5): Построение физических базисов групп O(5) и SU(3) с автоматическим выполнением...

$$\psi_{\alpha}\psi_{\alpha'} = \sum_{\alpha''} C_{\alpha''}^{\alpha\alpha'}\psi_{\alpha''},\tag{9}$$

причем α — совокупность индексов v, λ , J, M, где метка v служит для различения функций, у которых все квантовые числа, кроме дополнительного искомого, совпадают. Используя (9), можно порождать функции с более высокими значениями квантовых чисел путем умножения на некоторую функцию, выбранную в качестве «генератора», находя при этом коэффициенты путем ортогонализации вновь получаемых функций к уже найденным с последующей нормировкой. В качестве генераторов были выбраны квадрупольный и скалярный операторы

$$\hat{G}_{2\mu} = b_{\mu}^{+}, \quad \hat{G}_{0} = \sum_{\mu_{1},\mu_{2},\mu_{3}} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \\ \mu_{1} & \mu_{2} & \mu_{3} \end{pmatrix} b_{\mu_{1}}^{+} b_{\mu_{2}}^{+} b_{\mu_{3}}^{+}. \tag{10}$$

Умножение на \hat{G}_2 меняет λ на ±1, а умножение на \hat{G}_0 — на ±1 и ±3. Квантовое число J при этом, естественно, подчиняется известным правилам сложения момента. Эти соображения позволяют конкретизировать для интересующих нас частных случаев выражения (9):

$$\Psi_{\nu,\lambda+1,JM} = N \left\{ \sum_{m,\mu} (Im 2\mu | JM) b^{+}_{\mu} \Psi_{\nu\lambda Im} + q^{J\lambda\nu}_{J,\lambda-1,\nu} \left(\sum_{\mu} (-1)^{\mu} b^{+}_{\mu} b^{+}_{-\mu} \right) \Psi_{\nu,\lambda-1,JM} \right\}; \quad (11)$$

$$\Psi_{\nu',\lambda+3,JM} = N \left(\hat{G}_{0} \Psi_{\nu\lambda JM} + \sum_{\lambda_{1}=\lambda-3,\lambda\pm 1} \sum_{\nu} S^{\nu\lambda J}_{\nu_{1}\lambda_{1}J_{1}} \left(\sum_{\mu} (-1)^{\mu} b^{+}_{\mu} b^{+}_{-\mu} \right)^{\lambda+3-\lambda_{1}} \Psi_{\nu_{1}\lambda_{1}J_{1}M} \right). \quad (12)$$

Из всех случаев вырождения простейшим является двукратно вырожденное состояние, соответствующее $N = \lambda = J = 6$. На языке РЕФАЛ была написана программа, получившая в явном виде обе необходимые функции путем последовательного применения выражений (11), (12). Использовалось основное правило умножения выражений, содержащих b_{μ} , b_{μ}^+ :

$$\left\langle 0 \left| \prod_{\mu=-2}^{2} \left(b_{\mu} \right)^{n_{\mu}} \prod_{\mu=-2}^{2} \left(b_{\mu}^{+} \right)^{n'_{\mu}} \right| 0 \right\rangle = \prod_{\mu=-2}^{2} \delta_{n_{\mu}n'_{\mu}} \left(n_{\mu} ! \right).$$
(13)

Для иллюстрации возможностей языка РЕФАЛ обе функции приведены ниже в явном виде

$$\begin{split} \Psi_{0666} &= \frac{1}{\sqrt{A}} \bigg[-\frac{143}{4} \sqrt{2} b_{l}^{6} + 143 \sqrt{3} b_{0}^{+} b_{l}^{+4} b_{2}^{+} + 52 \sqrt{2} b_{-1}^{+2} b_{2}^{+4} + \\ &+ 72 \sqrt{2} b_{-2}^{+} b_{1}^{+2} b_{2}^{+3} - 96 \sqrt{3} b_{-2}^{+} b_{0}^{+} b_{2}^{+4} - 20 \sqrt{2} b_{-1}^{+} b_{1}^{+3} b_{2}^{+2} - \\ &- 8 \sqrt{3} b_{-1}^{+} b_{0}^{+} b_{1}^{+} b_{2}^{+3} + 276 \sqrt{2} b_{0}^{+2} b_{1}^{+2} b_{2}^{+2} + \frac{376}{3} \sqrt{3} b_{0}^{+3} b_{2}^{+3} \bigg] \big| 0 \big\rangle, \end{split}$$

$$A = 2 \cdot 3 \cdot 5 \cdot 7 \cdot 13 \cdot 17 \cdot 157 = 7286370;$$

$$\Psi_{1666} = \frac{1}{\sqrt{B}} \bigg[-\sqrt{2}b_1^{+6} + 4\sqrt{3}b_0^+ b_1^{+4}b_2^+ - \frac{37}{4}\sqrt{2}b_{-1}^{+2}b_2^{+4} - \frac{15}{4}\sqrt{2}b_{-2}^+ b_1^{+2}b_2^{+3} + 5\sqrt{3}b_{-2}^+ b_0^+ b_2^{+4} - \frac{11}{2}\sqrt{2}b_{-1}^+ b_1^{+3}b_2^{+2} + \frac{27}{2}\sqrt{3}b_{-1}^+ b_0^+ b_1^+ b_2^{+3} - \frac{21}{4}\sqrt{2}b_0^{+2}b_1^{+2}b_2^{+2} - \frac{13}{6}\sqrt{3}b_0^{+3}b_2^{+3}\bigg] |0\rangle,$$

$$B = 2 \cdot 3 \cdot 19 \cdot 157 = 17898. \tag{14}$$

Воспользовавшись теоремой Вигнера — Эккарта и известными свойствами приведенных матричных элементов тензорных операторов (см., например, [8]), можно выразить приведенные матричные элементы оператора $Y_{k_1k_2k_3}^{(L)}$ через амплитудные матрицы U_{kq} . При $k_1 = k_2 = 1$, $k_3 = 3$, когда из четырех перемножаемых операторов три пропорциональны оператору момента, соответствующее выражение сильно упрощается и приобретает вид

$$\left\langle \mathbf{v}''J \| Y_{113}^{(2)} \| \mathbf{v}'J \right\rangle = \frac{1}{2J+1} \left\{ \begin{matrix} JJ2\\ 1&1J \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} JJ2\\ 1&3J \end{matrix} \right\} \left[(2J+1)(J+1)J \right]^{3/2} \left\langle \mathbf{v}''J \| U_3 \| \mathbf{v}'J \right\rangle.$$
(15)

Дальнейшие исследования показали, что этот простейший оператор четвертого порядка удовлетворяет всем требованиям. Матричные элементы, вычисленные программой на РЕФАЛе, оказались равными (все индексы, кроме *v*, *v*', опущены):

$$\left\langle Y \right\rangle_{00} = \frac{144 \cdot 163}{7 \cdot 157} \sqrt{\frac{11}{5 \cdot 13}}, \quad \left\langle Y \right\rangle_{11} = -\frac{27 \cdot 211}{2 \cdot 157} \sqrt{\frac{11}{5 \cdot 13}}, \quad \left\langle Y \right\rangle_{01} = \frac{36}{157} \sqrt{\frac{2 \cdot 5 \cdot 11 \cdot 17 \cdot 19}{7}}$$

Собственные значения этой матрицы различны и равны

$$Y_{1,2} = \frac{3 \cdot 157}{28} \sqrt{\frac{2 \cdot 11}{13}} \left(5 \pm \sqrt{41 \cdot 241}\right).$$

Следовательно, $Y_{113}^{(2)}$ может играть роль последнего оператора полного набора.

3. Построение базисных функций метода К-гармоник в задаче трех тел

Проблема построения полной ортонормированной системы функций, удобной в задаче трех тел, рассматривается во многих работах последних лет [9—19]. В методе *К*-гармоник в этом качестве используются функция свободного движения системы трех независимых частиц. Ниже рассматривается задача получения в явном виде функций полного набора вплоть до высоких значений квантовых чисел и простейших коэффициентов Клебша — Гордана физического базиса группы SU(3), т. е. матричных элементов от угловых частей *К*-гармоник. При этом выкладки также выполняются с помощью РЕФАЛа.

Гамильтониан относительного движения системы трех свободных частиц имеет вид

$$H = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \right) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{z} \partial \mathbf{z}^*} = -\frac{1}{2} \Delta .$$
(16)

Здесь $\xi = \sqrt{\frac{2}{3}} \left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} - \mathbf{r}_3 \right), \ \eta = \frac{1}{2} (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ — координаты Якоби (массы частиц

и постоянная Планка положены равными единице), $z = \xi + i\eta$, $z^* = \xi - i\eta$. Гамильтониан (16) (а также гамильтониан системы трех частиц с осцилляторным парным взаимодействием) инвариантен относительно поворотов в 6-мерном пространстве, в котором ξ и η рассматриваются как взаимно ортогональные трехмерные компоненты 6-мерного вектора. Переход от ξ , η к z, z^* позволяет вместо O (6) рассматривать SU (3) и оказывается полезным при построении функций, принадлежащих к определенным представлениям группы перестановок системы трех частиц, поскольку

$$s_{12}\mathbf{z} = \mathbf{z}^*, \ s_{13}\mathbf{z} = \mathbf{z}^* \exp(2\pi i/3), \ s_{23}\mathbf{z} = \mathbf{z}^* \exp(-2\pi i/3).$$
 (17)

Потребуем также, чтобы искомые функции преобразовывались по неприводимым представлениям группы вращений физического пространства O(3). Полный набор квантовых чисел физического базиса группы SU(3) определяется в этом случае операторами [13, 14]:

$$K^{2} = \left(\mathbf{z}\frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} + \mathbf{z}*\frac{\partial}{\partial \mathbf{z}*}\right) \left(\mathbf{z}\frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} + \mathbf{z}*\frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} + 4\right) - 4\left(\mathbf{z}\mathbf{z}*\right)\Delta,$$
(18)

$$L^{2} = \sum_{\mu} (-1)^{\mu} L_{\mu} L_{-\mu}, \quad L_{\mu} = \sum_{\mu',\mu''} (-1)^{\mu''} \sqrt{6} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -\mu'''\mu'\mu \end{pmatrix} \left(z_{\mu''} \frac{\partial}{\partial z_{\mu'}} + z_{\mu''}^{*} \frac{\partial}{\partial z_{\mu'}^{*}} \right), \quad (19)$$

$$L_0 = \sum_{\mu} \mu \left(z_{\mu} \frac{\partial}{\partial z_{\mu}} + z_{\mu}^* \frac{\partial}{\partial z_{\mu}^*} \right), \tag{20}$$

$$\mathbf{v} = \frac{1}{2} \sum_{\mu} \left(z_{\mu} \frac{\partial}{\partial z_{\mu}} - z_{\mu}^{*} \frac{\partial}{\partial z_{\mu}^{*}} \right), \tag{21}$$

$$\hat{\Omega} = 10 \sum_{q_i} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ q_1 q_2 q_3 \end{pmatrix} L_{q_1} S_{q_2} L_{q_3} + \frac{1}{3} L(L+1) \nu , \qquad (22)$$

$$S_{q} = \sum_{\mu_{1},\mu_{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ -\mu_{1} & \mu_{2} & q \end{pmatrix} (-1)^{\mu_{1}} \left(z_{\mu_{1}} \frac{\partial}{\partial z_{-\mu_{2}}} - z_{\mu_{1}}^{*} \frac{\partial}{\partial z_{-\mu_{2}}^{*}} \right)$$
(23)

Собственные функции этих операторов есть гармонические полиномы в пространстве z, z^* ; при $L_0 = L = M$ их можно представить в виде

$$U_{KLL}^{\nu\Omega} = \sum_{\substack{p:q\\\alpha,\beta,\gamma}} a_{\alpha\beta\gamma}^{pq} \left(z_1 z_0^* - z_0 z_1^* \right)^{\delta} z_1^p z_1^{*q} \left(z^2 \right)^{\alpha} \left(z^{*2} \right)^{\beta} \left(z z^* \right)^{\gamma}, \tag{24}$$

где

$$\delta + p + q = L, \ \alpha + \beta + \gamma = \frac{K - L - \delta}{2}, \ \frac{p - q}{2} + \alpha - \beta = \nu, \ \delta = 0, 1.$$
 (25)

Заметим, что в каждом таком полиноме хотя бы одно слагаемое с $\gamma = 0$. Выберем в качестве функций с метками (см. [14])

$$U_{KLL}^{\mathbf{v}\omega} = \left(z_{1}z_{0}^{*} - z_{0}z_{1}^{*}\right)^{\delta} \left[z_{1}^{\frac{L-\delta}{2}+\omega} z_{1}^{\frac{k-\delta}{2}-\omega} (z^{2})^{\frac{K-L-\delta}{4}+\frac{\nu-\omega}{2}} (z^{*2})^{\frac{K-L-\delta}{4}-\frac{\nu-\omega}{2}} + (\mathbf{z}\mathbf{z}^{*}) \sum_{p,q;\alpha,\beta,\gamma} a_{\alpha\beta\gamma}^{pq} z_{1}^{p} z_{1}^{p} (z^{2})^{\alpha} (z^{*2})^{\beta} (\mathbf{z}\mathbf{z}^{*})^{\gamma-1} \right],$$
(26)

где *p*, *q*, *a*, *β*, *γ* удовлетворяют условиям (25). Кроме того, $a_{\alpha\beta\gamma}^{pq}$ таковы, что $\Delta U_{KLL}^{v\omega} = 0$.

Полиномы (26) от пяти переменных: $z_1, z_1^*, (z^2), (zz^2), (zz^*)$ — являются собственными функциями операторов K^2, L^2, L_0, v ; при различных ω они линейно независимы, но не ортогональны по ω . Их число при заданных K, L, v (шаг по ω равен 2) есть

$$\left|K - 2L\right| \le \left|2\nu\right|,\tag{27a}$$

$$n_{\omega} = \begin{cases} \frac{K - L - \delta}{2} + 1, & 2L \ge K, \\ \frac{L + 1 - \delta}{2} + \frac{1}{4} \left(\left(-1 \right)^{K/2 - \delta - \nu} + \left(-1 \right)^{K/2 - \delta + \nu} \right), & K \ge 2L, \\ |K - 2L| \le |2\nu|, & n_{\omega} = \frac{K - 2\delta}{4} - \frac{|\nu|}{2} + \frac{3 + \left(-1 \right)^{K/2 - |\nu| - \delta}}{4}. \end{cases}$$
(276)

Для построения собственных функций оператора Ω из функций с метками (26) в работе [14] получена цепочка зацепляющих уравнений, решение которой легко получить диагонализацией соответствующей матрицы. Поскольку для физических приложений достаточно иметь полный набор независимых функций, их интегралы перекрывания и матричные элементы по ним, мы ограничимся построением функций с метками (26). Имея в виду одновременное получение функций, интегралов перекрывания и основных матричных элементов, в рекурсивной процедуре построения мы использовали соотношения, основанные на известных свойствах гармонических полиномов [20]:

$$\left[\sum_{\mu} z_{\mu}^{*} \frac{\partial}{\partial z_{\mu}} - \frac{(\mathbf{z}\mathbf{z}^{*})}{K+1} \Delta_{z}\right] U_{KLL}^{\vee\omega} = \sum_{\omega'} b_{\omega'}^{\omega} U_{KLL}^{\nu-1,\omega'}, \qquad (28)$$

$$\left[\left(z^{*2}\right) - \frac{2(\mathbf{z}\mathbf{z}^{*})}{K+1}\sum_{\mu}z_{\mu}^{*}\frac{\partial}{\partial z_{\mu}} + \frac{(\mathbf{z}\mathbf{z}^{*})^{2}}{K(K+1)}\Delta_{z}\right]\Delta_{z}U_{KLL}^{\mathsf{v}\omega} = \sum_{\omega'}C_{\omega'}^{\omega}U_{KLL}^{\mathsf{v}-2,\omega'},\qquad(29)$$

где $C_{\omega'}^{\omega} \neq 0$ при $\omega' = \omega$, $\omega' = \omega \pm 2$; $b_{\omega'}^{\omega} \neq 0$ при $\omega' = \omega \pm 1$. Можно показать, что двукратное применение процедуры (28) и однократное применение (29) приводят к различным линейным комбинациям функций $U_{KLL}^{v-2,\omega}$. Это позволяет получить все $U_{KLL}^{v-2,\omega'}$ в виде линейных комбинаций правых частей (28) и (29). Построение функций и вычисление интегралов производилось в представлении вторичного квантования с помощью программы, написанной на РЕФАЛе. В качестве исходной выбиралась функция

$$U_{KLL}^{\frac{K}{2}-\delta,\frac{L-\delta}{2}} = \left(z_1 z_0^* - z_0 z_1^*\right)^{\delta} z_1^{L-\delta} \left(z^2\right)^{\frac{K-L-\delta}{2}}.$$

Операторы рождения и уничтожения x_{μ} , x_{μ}^* и $\partial/\partial x_{\mu}$, $\partial/\partial x_{\mu}^*$ обычным образом выражаются через z_{μ} , z_{μ}^* , $q/\partial z_{\mu}^*$, $\partial/\partial z_{\mu}$. Все групповые соотношения пространствах (**x**, **x***) и (**z**, **z***) совпадают; отличие в том, что роль единицы в (**x**, **x***)-пространстве играет вакуумное состояние $|0\rangle = 2\sqrt{2}e^{-(zz^*)}$ и в скалярном произведении двух функций вместо интегрирования по $dzdz^*$ фигурирует дифференцирование. Используя явные выражения для операторов рождения и уничтожения через zz^* , получаем для гармонических полиномов U_k :

$$\left(x_{\mu}^{*} - \frac{(-1)^{\mu}(\mathbf{x}\mathbf{x}^{*})}{K+2}\frac{\partial}{\partial x_{-\mu}}\right)U_{k}(\mathbf{x},\mathbf{x}^{*}) = \\
= 2\sqrt{2}e^{-\rho^{2}}\left(z_{\mu}^{*} - \frac{(-1)^{\mu}(\mathbf{z}\mathbf{z}^{*})}{K+2}\frac{\partial}{\partial z_{-\mu}}\right)U_{k}(\mathbf{z},\mathbf{z}^{*}). \quad (30)$$

Поэтому

$$U_{KLM}^{\nu\omega}\left(\mathbf{x},\mathbf{x}^{*}\right) = 2\sqrt{2}Ne^{-(\mathbf{z}\mathbf{z}^{*})}U_{KLM}^{\nu\omega}\left(\mathbf{z},\mathbf{z}^{*}\right) = \sqrt{\frac{2^{K+4}}{(K+2)!}}\rho^{K}e^{-\rho^{2}}\Phi_{KLM}^{\nu\omega}\left(\theta_{i}\right).$$
 (31)

Здесь N — нормировочный коэффициент, θ_i и ρ — углы и радиус в 6-мерном пространстве, $\Phi_{KLM}^{v\omega}(\theta_i)$ — нормированная угловая часть *K*-гармоник. Используя (31) и выражения, аналогичные (30), для интегралов перекрывания и матричных элементов получаем

$$\int \left(\Phi_{K'L'M'}^{\nu'\omega'}(\theta_i) \right)^* \Phi_{KLM}^{\nu\omega}(\theta_i) d\theta = \delta_{K'K} \delta_{L'L} \delta_{M'M} \delta_{\nu'\nu} N_{KLM}^{\nu\omega} N_{KLM}^{\nu\omega'} J_{KLM\nu}^{\omega\omega'}, \quad (32)$$

$$\begin{split} & \int \left(\Phi_{K'L'M'}^{v'\omega'}(\theta_{i}) \right)^{*} \frac{\left(z^{*2}\right)}{\rho^{2}} \Phi_{KLM}^{v\omega}(\theta_{i}) d\theta = \delta_{L'L} \delta_{M'M} \delta_{v'v-1} N_{KLM}^{v\omega} \times \\ & \times \left(\delta_{K',K+2} \frac{2N_{K+2,LM}^{v'\omega} J_{K+2,LM,v-1}^{\omega\omega'}}{\sqrt{(K+3)(K+4)}} + \frac{2\delta_{K'K}}{K+3} \sum_{\omega'} b_{\omega''}^{\omega} N_{KLM}^{v-1,\omega'} J_{KLM,v-1}^{\omega'\omega'} + \right. \\ & \left. + \delta_{K',K-2} \frac{N_{K-2,LM}^{v-1,\omega'} J_{KLM}^{\omega'\omega}}{2\sqrt{(K+1)(K+2)}} \right), \quad (33) \end{split}$$

$$\int \left(\Phi_{K'L'M'}^{v'\omega'}(\theta_{i}) \right)^{*} \frac{z_{1}^{*}}{\rho^{2}} \Phi_{KLM}^{v\omega}(\theta_{i}) d\theta = \delta_{L'L+1} \delta_{M'M+1} \delta_{v'v-1/2} N_{KLM}^{v\omega} \times \\ & \times \left\{ \delta_{K',K+1} \sqrt{\frac{2}{K+3}} N_{K+1,L+1,M+1}^{v-1/2} J_{K+1,L+1,M+1,v-1/2}^{\omega',\omega-1/2} + \frac{\delta_{K',K-1}}{\sqrt{2(K+2)}} N_{K-1,L+1,M+1}^{v-1/2,\omega'} \times \\ & B_{\omega-1}^{\omega} - \frac{L-\delta}{2} - \omega \right) J_{K-1,L+1,M+1,v-1/2}^{\omega',\omega-3/2} + \left(\frac{K-L-\delta}{2} + v - \omega + b_{\omega+1}^{\omega} \right) J_{K-1,L+1,M+1,v+1/2}^{\omega',\omega+1/2} \right] \bigg\}, \end{split}$$

где
$$J_{KLM\nu}^{\omega\omega'} = \langle KLM\nu\omega | KLM\nu\omega' \rangle$$
; в частности, $J_{KLM\nu}^{\omega\omega} = (N_{KLM}^{\nu\omega})^{-2}$. Заметим еще,
что $N_{KLM}^{\nu\omega} = N_{KLM}^{-\nu,-\omega}$ и $J_{KLM\nu}^{\omega\omega'} = J_{KLM,-\nu}^{-\omega,-\omega'}$, поэтому при построении функций и
вычислении матричных элементов достаточно рассмотреть случай $\nu > 0$

(34)

вычислении матричных элементов достаточно рассмотреть случай $v \ge 0$. Полученные значения $N_{KLM}^{v\omega}$ и $b_{\omega}^{\omega'}$ до K = 6 приведены в табл. 1. Громоздкие результаты для высоких значений K вплоть до K = 12 включительно будут опубликованы. Интегралы перекрывания приведены в табл. 2.

4. Выводы

Результаты, полученные в [1] и в настоящей работе, позволяют сделать некоторые заключения о возможностях использования ЭВМ для выполнения аналитических выкладок на основе языка РЕФАЛ.

Его весьма существенным достоинством является исключительная простота синтаксиса — формальное описание РЕФАЛа занимает две страницы, оставляющая в то же время программисту большую свободу в выборе средств. Язык универсален, доказана его алгоритмическая полнота.

Второе важное преимущество — естественность описания рекурсивных процессов. На этой особенности следует обновиться подробнее. Автоматическое выполнение выкладок не получило до сих пор широкого распространения в значительной мере из-за трудностей субъективного характера. Они связаны с тем, что в осуществлении обычного стремления теоретиков «пробиться» к конечному общему аналитическому выражению путем удачного подбора искусственных приемов и приближений ЭВМ, конечно, мало чем может помочь.

T (
Ταίοπιμα	1
<i>I uOnuuu</i>	1.

	Нормировочные интегралы и коэффициенты										
L	2ν	2ω	$N_{KLM}^{\mathrm{V}\mathrm{G}\mathrm{G}}$	$b^{\omega}_{\omega-1}$	$-b_{\omega+1}^{\omega}$	L	2ν	2ω	$N_{KLM}^{\rm vo}$	$b^{\omega}_{\omega-1}$	$-b_{\omega+1}^{\omega}$
	<i>K</i> =1			3	3	1	24	2	1/3		
1	1	1	1	1	1	3	1	-1	44/3	1	2/3
	<i>K</i> =2			3	1	3	24	2			
2	2	2	2	2		2	3	1	42	1	
2	0	0	1	1		2	1	-1	28		1/3
1	0	0	2			1	5	1	280	1	
0	2	0	6			1	3	-1	280/3		2/3
			K=3			1	1	1	140/3	2/3	
3	3	3	6	3					<i>K</i> =6		
3	1	1	2	2		6	6	6	720	6	
2	1	1	3	1		6	4	4	120	5	
1	3	1	10	1		6	2	2	48	4	
1	1	-1	5		1/2	6	0	0	36	3	
			<i>K</i> =4			5	4	4	144	4	
4	4	4	24	4		5	2	2	36	3	
4	2	2	6	3		5	0	0	24	2	
4	0	0	4	2		4	6	4	528	4	
3	2	2	8	2		4	4	2	660/7	3	2/7
3	0	0	4	1		4	2	0	296/7	2	4/7
2	4	2	28	2		4	2	4	624/7	20/7	
2	2	0	42/5	1	2/5	4	0	-2	276/7	1	6/7
2	0	-2	44/5		4/5	4	0	2	276/7	15/7	
2	0	2	44/5	6/5		3	4	2	144	2	
1	2	0	20			3	2	0	360/7	1	2/7
0	4	0	120			3	0	-2	496/7		4/7
0	0	0	30			3	0	2	496/7	10/7	
			K=5			2	6	2	1008	2	
5	5	5	120	5		2	4	0	216	1	4/7
5	3	3	24	4		2	2	-2	464/3		8/7
5	1	1	12	3		2	2	2	368/3	10/7	
4	3	3	30	3		2	0	0	72	5/7	2/7
4	1	1	10	2		1	4	0	560		
3	5	3	108	3		1	0	0	560/3		
						0	6	0	5040		
						0	2	0	560		

Однако для многих задач имеются или могут быть просто получены достаточно общие методы их аналитического решения, сводящиеся к использованию рекуррентных соотношений. Рекуррентные формулы практически всегда проще явных выражений, а их получение часто качественно проще. Записать рекуррентное соотношение так же просто, как записать дифференциальное уравнение. Получить явное выражение так же сложно, как решить уравнение. Но последовательное многократное применение рекуррентных соотношений быстро вы-

Таблица 2

Интегралы перекрывания								
L	2v	$2\omega_1$	$2\omega_2$	$-J^{\omega_1\omega_2}_{KLLV}$				
		<i>K</i> =4						
2	0	-2	2	16/5				
		<i>K</i> =5						
3	1	-1	3	8				
<i>K</i> =6								
4	2	0	4	192/7				
4	0	-2	2	144/7				
3	0	-2	2	64/7				
2	2	-2	2	160/3				

водит объем соответствующих, идейно простых преобразований за пределы возможностей человека. С учетом этого можно сказать, что в автоматизации аналитических выкладок рекурсивные методы могут сыграть примерно такую же роль, как двоичная система счисления в численных расчетах — она так же громоздка и неудобна для человека, но принципиально проще и потому удобна для машины.

Одна из наиболее употребительных операций при проведении аналитических преобразований — действия над рациональными числами и радикалами с точным вычислением результатов. Эта особенность может показаться маловажной с точки зрения специалиста, владеющего численными методами, у которого возникнет вопрос: почему бы проще и быстрее на той же ЭВМ не выполнить те же операции над округленными десятичными числами? Ответ заключается в следующем. Во-первых, получение точного ответа часто дает возможность найти для него явную формулу, как это было продемонстрировано в работе [1]. Ее, в принципе, можно доказать затем по индукции. Во-вторых, при точных вычислениях полностью снимаются проблемы, связанные с потерей знаков и ошибками округления, которые при работе со специальными функциями высоких порядков часто создают большие трудности. Поясним это простым примером. Во многих задачах используются разложения по полиномам Лежандра вплоть до высоких порядков. Коэффициенты двадцатого полинома достигают величины 10⁶, сорокового 10¹², а значения аргумента и самих полиномов не превышают единицы. Значит, в соответствующих расчетах можно «с порога» потерять десять знаков и более. При вычислениях в рациональных числах этой трудности не существует.

Вторым распространенным типом операций являются всевозможные полиномиальные. При этом особенности действия над элементами, скажем некоммутативность или неассоциативность умножения, никаких дополнительных трудностей не создают. С этой точки зрения такой широко распространенный и достаточно универсальный метод, как вторичное квантование, где все можно свести к действиям над полиномами, сконструированными из операторов рождения и уничтожения, является одной из очевидных потенциальных областей применимости РЕФАЛа.

Другие перспективные области — теория групп, теория возмущений высоких порядков, которая известна в простой и универсальной рекурсивной формулировке [21], разложение решений в ряды (включая подстановку ряда в ряд) и т. п.

Литература

- А. П. Будник, Е. В. Гай, Н. С. Работнов, А. В. Климов, В. Ф. Турчин, И. Б. Щенков. ЯФ, 14, 304, 1971.
- 2. В. Ф. Турчин. Алгоритмический язык рекурсивных функций (РЕФАЛ), ИПМ АН СССР, 1968.
- 3. В. Ф. Турчин. Программирование на языке РЕФАЛ, ИПМ АН СССР, 1971.
- 4. M. Mochinsky. In Fundamentals in Nucl. Theory, Vienna, 1967.
- 5. G. Racah. Group Theory and Spectroscopy. R-1864, Dubna, 1964.
- 6. G. Racavy. Nucl. Phys., 4, 289, 1957.
- 7. D.R. Bes. Nucl. Phys., 10, 573, 1959.
- 8. А. Эдмондс. В сб. Деформация атомных ядер, ИИЛ, 1958.
- 9. A.J. Dragt. J. Math. Phys., 6, 533, 1965.
- 10. J. M. Levy-Blond, F. Lurcat. J. Math. Phys., 6, 1571, 1965.
- 11. W. Zickendraht. Ann. Phys., 35, 157, 1965.
- 12. Ю. А. Симонов. ЯФ, 3, 630, 1966.
- 13. В. В. Пустовалов, Ю. А. Симонов. ЖЭТФ, 51, 345, 1966.
- 14. В. В. Пустовалов, Я. А. Смородинский. ЯФ, 10, 1287, 1969.
- 15. Ю. Нири, Я. А. Смородинский. ЯФ, 9, 882, 1969; 12, 202, 1970.
- 16. Р. М. Ашерова, Ю. Ф. Смирнов. Nucl. Phys., A114, 116, 1970.
- 17. А. И. Базь, М. В. Жуков. ЯФ, 11, 779, 1970.
- 18. А. А. Садовой, Ю. А. Симонов. ЯФ, 13, 990, 1971.
- 19. В. Д. Эфрос. ЯФ, 13, 1318, 1971.
- 20. Н. Я. Виленкин. Специальные функции и теория представлений групп, «Наука», 1965.
- 21. M. Born, W. Heizenberg, P. Jordan. Z. für Physik, 35, 557, 1926.

Construction of Physical Basis for O(5) and SU(3) Groups with Automatic Performance of Symbolic Transformations

V. N. Vinogradov, E. V. Gay, S. I. Popov, N. S. Rabotnov, I. B. Shchenkov

Automatic fulfillment of complicated analytical operations based of REFAL language is used to construct physical basic of O(5) and SU(3) group representations. These basises were used in describing quadrupole oscillations of nuclear surface and in the quantum mechanical three-body problem. For O(5) group there has been found an explicit form of the operator corresponding to the extra quantum number, represented as the a fourth order polynomial in group generators. For SU(3) group basis there are also derived some matrix elements and overlapping integrals, using the obtained formulae.

Резонансный анализ сечений ядерных реакций с использованием приближения Паде

В. Н. Виноградов, Е. В. Гай, Н. С. Работнов

Физико-энергетический институт, Обнинск

Излагается метод анализа энергетических зависимостей сечений ядерных реакций в резонансной области с помощью аппроксимации дробно-рациональными выражениями. Значения энергии и полные ширины уровней получаются без каких-либо априорных предположений о структуре матрицы рассеяния. Особенности метода рассматриваются на примере модельной задачи и резонансного анализа нейтронных сечений.

1. Введение

В последнее время в различных физических задачах все чаще используется приближенное представление аналитических функций комплексного переменного дробно-рациональными выражениями — так называемое приближение Паде [1, 2]. Общее изложение метода с многочисленными примерами его использования в приложениях можно найти в обзорах [3, 4] и в сборнике работ [5]. Приближение Паде представляет собой весьма мощный метод аналитического продолжения функций, заданных либо ограниченным числом членов степенного рада (приближение первого рода), либо своими значениями в отдельных точках комплексной плоскости; чаще всего на действительной оси (приближение второго рода). В важном частном случае «диагонального» или «почти диагонального» приближения, когда степени полиномов в числителе и знаменателе отличаются не больше, чем на единицу, приближение Паде сводится к разложению в цепную дробь.

Если элементы S-матрицы являются аналитическими функциями энергии частиц, вызывающих ядерную реакцию, то весьма привлекательным представляется использование приближения Паде для описания энергетической зависимости сечений [6]. Уровни компаунд-системы соответствуют полюсам S-матрицы, а полюсные особенности не являются точками существенной расходимости приближения Паде — они описываются корнями полинома, стоящего в знаменателе дробно-рационального выражения. Кроме того, результаты анализа с помощью приближения Паде сравнительно хорошо устойчивы к шумам [3],

Осложнением является то обстоятельство, что на опыте измеряется сечение, т. е. квадрат модуля матрицы рассеяния — не аналитическая функция, и при аналитическом продолжении его энергетической зависимости за пределы действительной оси искажаются фазовые соотношения. Однако положение

ВАНТ, серия: Ядерные константы, 1975, вып. 20 (1), с. 13-28.

полюсов при таком продолжении должно воспроизводиться точно, а уже определение их положения несет интересную физическую информацию, позволяя определить энергию квазистационарного состояния и полную его ширину, которые отвечают действительной и мнимой частям комплексного значения энергии, при котором *S*-матрица имеет полюс.

В настоящей работе исследуются возможности использования приближения Паде второго рода для анализа нейтронных сечений в резонансной области.

2. Приближение Паде второго рода. Основные соотношения

По определению, приближением Паде второго рода $f^{[N,M]}(z)$ для функции f(z) называется отношение двух полиномов от z

$$f^{[N,M]}(z) = P^{N}(z) / Q^{M}(z), \qquad (1)$$

которое в точках z_i ($1 \le i \le N+M+1$) принимает значения $f(z_i)$. В частности, $f^{[N,0]}$ соответствует приближению функций полиномами. В общем случае при произвольном соотношении между M и N, построение $f^{[N,M]}(z)$ является сложной задачей, однако, как будет ясно из дальнейшего, для нас особый интерес представляет случай, когда M = N, $N \pm 1$, сводящийся к цепным дробям.

Для этого случая, следуя [3], определим последовательность функций $f_n(z)$, удовлетворяющих следующему условию:

$$f_n(z) = C_n / (1 + (z - z_n) f_{n+1}(z)).$$
⁽²⁾

Пусть, кроме того $f_1(z_i) \equiv f(z_i)$. Тогда для $f_1(z)$ получим следующую конечную цепкую дробь

$$f_1(z) = \frac{C_1}{1} + \frac{(z - z_1)C_2}{1} + \frac{(z - z_2)C_3}{1} + \dots + \frac{(z - z_n)C_{n+1}}{1 + (z - z_{n+1})f_{n+2}}.$$
 (3)

Введем также функции $U_n(z)$:

$$f_n(z) = U_{n+1}(z) / U_n(z); \ U_1(z) \equiv 1.$$
(4)

Тогда вместо определения (2) получим:

$$C_n U_n(z) = U_{n+1}(z) - (z - z_n) U_{n+2}(z).$$
(5)

Из последнего соотношения легко получить следующее выражение для рекуррентного вычисления *C_n*:

$$U_{n+2} = \frac{C_n U_n(z) - U_{n+1}(z)}{z - z_n},$$
(6)

$$C_n = U_{n+1}(z_n)/U_n(z_n).$$
 (7)

Поясним подробнее процедуру вычисления коэффициентов C_n . Пусть по значениям функции $f(z_i)$ при $i \le k$ вычислены $C_n c n \le k$. Тогда, используя эти C_n , z_n и $U_1(z_{k+1}) = 1$, $U_2(z_{k+1}) = f(z_{k+1})$, по формуле (7) получим все $U_n(z_{k+1})$ до $U_{k+2}(z_{k+1})$ включительно, что позволит по формуле (8) при n = k+1 получить C_{k+1} .

Конечную цепкую дробь вида (3) можно преобразовать таким образом, чтобы превратить ее в обыкновенную дробь

$$\frac{a_1}{b_1} + \frac{a_2}{b_2} + \dots + \frac{a_n}{b_n} = \frac{P_n}{Q_n} \,. \tag{8}$$

Для числителя и знаменателя этой так называемой присоединенной дроби нетрудно получить следующие рекуррентные соотношения (см. [7])

$$P_n = b_n P_{n-1} + a_n P_{n-2}; \ Q_n = b_n Q_{n-1} + a_n Q_{n-2}.$$
(9)

В случае цепной дроби (3) получим соответственно

$$b_n = 1, \ a_n = C_n \left(z - z_{n-1} \right).$$
 (10)

Построенные таким образом P_n и Q_n являются полиномами по *z* степеней $\left[\frac{n-1}{2}\right]$ и $\left[\frac{n}{2}\right]$ соответственно, где [x] — целая часть числа *X*. Введем сле-

дующие обозначения:

$$P_n = \sum_{m=0}^{\left[(n-1)/2 \right]} P_n^m z^m \; ; \; Q_n = \sum_{m=0}^{\left[n/2 \right]} q_n^m z^m \; . \tag{11}$$

Используя (11), получим для P_n^m и Q_n^m следующие рекуррентные соотношения

$$P_n^m = P_{n-1}^m - C_n \left(z_{n-1} P_{n-2}^m - P_{n-2}^{m-1} \right),$$

$$q_n^m = q_{n-1}^m - C_n \left(z_{n-1} q_{n-2}^m - q_{n-2}^{m-1} \right)$$
(12)

с начальными условиями:

$$P_0^0 = 0; P_1^0 = C_1; q_0^0 = q_1^0 = 1$$
 (13)

и граничными условиями

$$P_n^m = 0 \text{ при } m > \left[\frac{n-1}{2}\right],$$

$$q_n^m = 0 \text{ при } m > \left[\frac{n}{2}\right].$$
(14)

Таким образом, зная значения функций в *n* точках, с помощью цепных дробей можно построить два полинома степеней $\left[\frac{n-1}{2}\right]$ и $\left[\frac{n}{2}\right]$, отношение которых будет в исходных точках принимать заданные значения, а это ж есть приближение Паде-II $f\left[\left[\frac{n-1}{2}\right], \left[\frac{n}{2}\right]\right]$.

3. Анализ данных с ошибками. Способ выбора опорных точек

Дробно-рациональная аппроксимация функциональных зависимостей, заданных значениями в отдельных точках с ошибками, является частным методом извлечения аналитической информации в присутствии случайного шума. Эффективность таких методов всегда зависит от информации о «степени гладкости» искомых истинных зависимостей и об их конкретной аналитической природе. Так, в нашем случае можно утверждать, что искомая функция не имеет ни нулей, ни особенностей на положительной части действительной оси, а за ее пределами — лишь пары комплексно-сопряженных простых полюсов

вида $E_0^0 \pm i \frac{\Gamma}{2}$, где E_0^0 — энергия квазистационарного состояния, а Γ — его полная ширина. Поскольку любой полином нечетного порядка имеет по крайней мере один действительный корень, то, исходя из сказанного, в рассматриваемой задаче такими полиномами лучше не пользоваться, то есть ограничиться четно-четными приближениями Паде (M и N в (1) — оба четные). Это означает, что число опорных точек L удобно выбирать равным L = 4K + 1, где K — целое, то есть L = 5, 9, 13... При этом полином в знаменателе может иметь K пар комплексно сопряженных корней и такое описание можно назвать обобщенной K-резонансной формулой — обобщенной, поскольку не делается априорных предположений об интерференционной структуре.

Необходимо остановиться на вопросе о влиянии шума, т. е. случайного разброса экспериментальных точек, на получаемые результаты. Известно, что наложение шумов на анализируемую функцию приводит к появлению у полиномов P^N и Q^M взаимно близких корней, так называемых шумовых дублетов [3]. При представлении P^N и Q^M в виде разложения на простейшие множители соответствующие биномы сокращаются и не отражаются на восстановлении функции. Вторым, кроме совпадения с хорошей точностью, отличием шумовых корней от «физических» является их нерегулярное поведение при изменении числа опорных точек — они бессистемно и, как правило, довольно резко сдвигаются при переходе к более высоким приближениям, в то время как значения физических корней при этом стабилизируются. В рассматриваемой нами задаче, кроме того, шумовые корни чаще всего оказываются действительными, в то время как физические обязательно имеют заметную мнимую часть.

Поскольку аналитические свойства искомых функций в рассматриваемом нами случае сравнительно просты, а анализируемые данные достаточно подробны, число экспериментальных точек на рассматриваемом интервале всегда много больше практически требуемого ранга приближения, т. е. необходимого числа опорных точек. В связи с этим возникает задача: так организовать выбор опорных точек, чтобы по возможности полнее использовать информацию, содержащуюся в полной совокупности экспериментальных точек. Для этой цели в настоящей работе был применен следующий итерационный процесс. Обозначим полное число экспериментальных точек N_{ex} . Соответствующий участок оси абсцисс разбивается на L интервалов, каждый из которых, кроме последнего, содержит по $[N_{ex}/L]$ экспериментальных точек, а последний — все не вошедшие в первые L-1 интервалов, т. е. $N_{ex} - \left[\frac{N_{ex}}{L}\right](L-1)$. В качестве первого

шага одна случайно (с помощью программного датчика случайных чисел) выбранная в каждом из первых L-1 интервалов точка объявляется опорной, а за L-ю опорную выбирается крайняя правая точка L-го интервала, т. е. самая последняя и производится первое восстановление функции по этому набору опорных точек. Результат восстановления сравнивается во всех $N_{\rm ex}$ точках с исходными данными и при этом вычисляется значение параметра, выбранного для количественной характеристики качества восстановления, который и подлежит минимизации в результате описываемого итерационного процесса. В качестве такого параметра было выбрано среднеквадратичное относительное отклонение восстановленной функции от экспериментальных значений, т. е.

$$\Delta_{\mathsf{ЭКСП}} = \sqrt{\sum_{i=1}^{N_{ex}} \frac{\left(f_{\mathsf{ЭКСП}}\left(z_{i}\right) - f_{\mathsf{BOCCT}}\left(z_{i}\right)\right)^{2} / f_{ex}^{2}\left(z_{i}\right)}{N_{ex}}} \,. \tag{15}$$

На втором шаге процесса сохраняются в качестве опорных первые L-1 точек, а последняя сдвигается на один номер влево, восстановление и сравнение повторяется и т. д., пока не переберутся все точки последнего интервала. Затем та из них, которая соответствует минимальному $\Delta_{3\kappa cn}$ делается первой опорной, фиксируется и весь процесс перебора повторяется для интервала, бывшего последним и т. д. После перебора всех интервалов первая итерация считается законченной, и результатом ее является некоторый, вообще говоря, не совпадающий с исходным набор опорных точек и восстановленная кривая, лучшая из всех $N_{\rm ex} - L + 1$ рассмотренных кривых, т. е. соответствующая наименьшему из получавшихся значению $\Delta_{3\kappa cn}$. Этот набор служит исходным для второй итерации в том же смысле, в каком случайный набор — для первой, и процесс повторяется до тех пор, пока в результате очередной итерации набор «лучших» точек изменяется. Соответствующая ему кривая и выбирается в качестве окончательного результата восстановления при заданных L и начальном выборе опорных точек.

Принципиальная сходимость такого процесса очевидна, поскольку ни на одном его шаге $\Delta_{3\kappa cn}$ по определению не может ухудшиться, и число возможных вариантов ограничено, хотя и весьма велико. Практическая сходимость оказалась вполне удовлетворительной (см. ниже).

4. Получение резонансных параметров

Если анализируемая функция представляет собой энергетическую зависимость сечения ядерной реакции, то в случае N = M = 2m выражение (1), полученное в результате описанной выше процедуры, после выделения постоянной части и нахождения корней знаменателя можно представить в следующей форме:

$$\sigma(E) = \frac{P^{2m}(E)}{Q^{2m}(E)} = C + \sum_{k=1}^{m} \left(\frac{\alpha_k}{E - E_k^0} + \frac{\alpha_k^*}{E - E_k^{0*}} \right), \tag{16}$$

где

$$E_k = E_k^0 - i\frac{\Gamma_k}{2}; \ \alpha_k = \gamma_k + i\delta_k.$$
⁽¹⁷⁾

Разложение (16) однозначно, чего нельзя сказать о физической интерпретации всех входящих в него величин. Действительно, в теории ядерных реакций [8] общее выражение для энергетической зависимости сечения в резонансной области имеет вид

$$\sigma(E) = \sum_{k=1}^{m} \left| C_k e^{i\varphi_k} + \sum_{j=1}^{n_k} \frac{\rho_{kj} e^{i\varphi_{kj}}}{E - E_{kj}^0 + i\frac{\Gamma_{kj}}{2}} \right|^2.$$
(18)

В нем учитывается как интерференция резонансов с потенциальным рассеянием, так и между собой. Не нарушая общности, можно положить $\varphi_k = 0$. Энергии E_{kj}^0 и ширины Γ_{kj} непосредственно и однозначно определяются по положению полюсов приближения Паде. Трудность заключается в интерпретации интерференционных параметров. Сопоставляя (18) с одной стороны и (16)—(17) с другой, получим:

$$C = \sum_{k=1}^{m} C_{k}^{\delta}; \ \alpha_{kj} = \rho_{kj} e^{i\varphi_{kj}} \left(C_{k} + \sum_{i} \frac{\rho_{ki} e^{-i\varphi_{ki}}}{\left(E_{kj}^{0} - E_{ki}^{0} \right) + i \frac{\Gamma_{kj} + \Gamma_{ki}}{2}} \right).$$
(19)

Если в описании участвуют N резонансов, то для определения 2N+m величин (ρ_{kj} и ϕ_{kj} для каждого уровня и m констант C_k) имеются 2N + 1 уравнений (19), считая сопряженные, и задача не имеет однозначного решения. Поэтому мы ограничимся качественными выводами и рассмотрением частных случаев. Простейший случай — один резонанс, интерферирующий с потенциальным рассеянием, когда

$$\sigma(E) = \left| C + \frac{\rho e^{i\varphi}}{E - E^0 + \frac{i\Gamma}{2}} \right|^2 = C^2 + \frac{\gamma + i\delta}{E - E^0 + \frac{i\Gamma}{2}} + \frac{\gamma - i\delta}{E - E^0 - \frac{i\Gamma}{2}}, \quad (20)$$

где $\gamma + i\delta = \alpha$. Используя (19), получим

$$\rho^4 - \rho^2 \Gamma^2 \left(C^2 + \frac{2\delta}{\Gamma} \right) + \Gamma^2 \left(\delta^2 + \gamma^2 \right) = 0 ; \cos \varphi = \gamma / C \rho .$$
 (21)

Однако на практике не всегда известно, какая доля «гладкого сечения» интерферирует с данным резонансом, поэтому представляет интерес следующее ограничение снизу на соответствующую величину, которое получается из очевидного условия $\rho^2 \ge 0$.

$$C^{2} \ge \frac{2\delta}{\Gamma} \left(\sqrt{1 + \frac{\gamma^{2}}{\delta^{2}}} - 1 \right).$$
(22)

В случае, когда $C = C_k = 0$, т. е. нет интерференции с потенциальным рассеянием, уравнения (19) в принципе разрешимы относительно ρ_{kj} и ($\varphi_{kj} - \varphi_{k1}$). Так, для двух интерферирующих резонансов получим

$$\rho_{1}^{4} + \rho_{1}^{2} \left(-2\delta_{1}\Gamma_{1} - \frac{\Gamma_{1}^{2}\Gamma_{2}(\delta_{1} - \delta_{2})}{\epsilon^{2} - \Gamma_{1}\Gamma_{2}} \right) + \frac{\left(\gamma_{1}^{2} + \delta_{1}^{2}\right)\Gamma_{1}^{2}\epsilon^{2}}{\epsilon^{2} - \Gamma_{1}\Gamma_{2}} = 0,$$

$$\rho_{2} = -\Gamma_{2} \left(\delta_{1} - \delta_{2} - \frac{\rho_{1}^{2}}{\Gamma_{1}}\right), \ tg(\varphi + \beta) = \frac{\delta_{1}}{\gamma_{1}} + \frac{\rho_{1}^{2}}{\gamma_{1}\Gamma_{1}},$$

$$\epsilon^{2} = \left(E_{1}^{0} - E_{2}^{0}\right) + \frac{\left(\Gamma_{1} + \Gamma_{2}\right)^{2}}{4},$$

$$tg\beta = -\frac{\Gamma_{1} + \Gamma_{2}}{2\left(E_{1}^{0} - E_{2}^{0}\right)}, \ \varphi = \varphi_{2} - \varphi_{1}.$$
(23)

Решение этой системы дает два набора резонансных параметров. Если $C = C_k = 0$, то суммируя по *j* правые части уравнения (19), можно получить:

$$\sum_{j} \left(\alpha_{kj} + \alpha_{kj}^* \right) = \sum_{j} \gamma_{kj} = 0.$$
⁽²⁴⁾

Выражение (24) дает способ разбиения резонансов, в случае отсутствия интерференции с потенциальным рассеянием, на взаимно не интерферирующие группы, внутри каждой из которых выполняется равенство (24), а величины γ_{kj} определяются с помощью приближения Паде.

Следует отметить также, что результаты анализа с помощью выражений (23) оказываются чувствительными к сравнительно малым изменениям наблюдаемых величин.

5. Рассмотрение модельной задачи

В качестве модельной функции была выбрана сумма двух резонансных слагаемых с интерференцией

$$\sigma(E) = \left| \frac{\rho_1}{E - E_1^0 + i\frac{\Gamma_1}{2}} + \frac{\rho_2 e^{-i\varphi}}{E - E_2^0 + i\frac{\Gamma_2}{2}} \right|^2$$
(25)

при следующих значениях параметров: $E_1^0 = 5$, $\Gamma_1 = 1$, $E_2^0 = 10$, $\Gamma_2 = 2$, $\rho_1 = \rho_2 = 1$, $\varphi = 0$. Интервал изменения переменной $0 \le E \le 15$ с шагом 0,1 — всего 151 точка. Экспериментальный разброс ординат моделировался следующим образом: в каждой точке задавалась величина дисперсии «сечения», связанная с его абсолютной величиной, эта дисперсия умножалась на случайное число из последовательности, генерируемой датчиком случайных чисел с нормальным распределением при единичной дисперсии в среднем значении, равном нулю. Подученная величина добавлялась к значению, определяемому формулой (25).

Связь относительной дисперсии с величиной сечения В точке была выбрана в следующем виде

$$\Delta(E) = \Delta_{\text{лучин}} \sqrt[4]{\sigma_{\text{max}} / \sigma(E)} , \qquad (26)$$

который описывает ситуацию, промежуточную между случаем, когда экспериментальная ошибка полностью определяется набранной статисткой (тогда в выражении (26) фигурировал бы квадратный корень) и постоянной относительной ошибкой.

Результаты восстановления для значений $\Delta_{nyum} = (2 - 10)\%$, что соответствует среда ему фактическому разбросу точек $\Delta = (4 - 20)\%$, приведены в таблице 1.

Выбор описанного выше итерационного процесса основан фактически на предположении о том, что такая процедура приведет к отбору в качестве опорных «наиболее информативных» экспериментальных точек. Естественно ожидать, что таковыми окажутся точки, «наименее уклонившиеся» от истинной кривой в пределах разброса. На примере модальной кривой справедливость такого предположения может быть непосредственно проверена, кроме того, восстановленную кривую можно равнять не только с исходными точками, но и с истинной функцией (25). Для такого сравнения вычислялась величина $\overline{\Delta}_{ист}$, выражение для которой совпадает с (15) с заменой $\sigma_{эксп}(z_i)$ на $\sigma(z_i)$. Рассчитывался также фактический разброс точек, т. е.

$$\overline{\Delta}_{\text{OII}} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{h} \left(\sigma_{\text{BOCCT}}^{*}\left(z_{i}^{\text{OII}}\right) - \sigma\left(z_{i}^{\text{OII}}\right)\right)^{2} / \sigma^{2}\left(z_{i}^{\text{OII}}\right)}{L}} \qquad (27)$$

Оказалось, что $\overline{\Delta}_{on}$ очень близко к $\overline{\Delta}_{ucr}$ т. е. восстановленная кривая отклоняется от истинной в среднем так же, как выбранные опорные точки, а отношение $\overline{\Delta}_{ucr}/\overline{\Delta}_{3\kappa cn}$ — значительно, в 3-4 раза меньше единицы (см. таблицу 1). Это согласуется качественно с простейшей оценкой $\sqrt{N_{ex}/L}$, получаемой в предположении, что процесс проходит без потери информации и что дисперсию параметров результирующей кривой можно вычислять как дисперсию среднего по $[N_{ex}/L]$ точкам. Таким образом, с помощью описанного процесса удается получить значительное повышение точности описания истинной кривой по сравнению со средним разбросом «экспериментальных точек». Это, конечно, является следствием аналитичности, гладкости исходной функции.

Из таблицы 1 следует, что точность вычисления резонансных параметров достаточно высока.

T	аблииа	1.
•	00000000000000	••

		-		· · · ·	•••	
$\Delta_{ m лучш}$ %	0	2	3	4	5	10
$\overline{\Delta}$ %	0	4,11	6,17	8,23	10,3	20,6
L	_	13	9	13	9	9
$\overline{\Delta}_{_{\mathcal{HC}n.}}$	0	3,92	5,76	7,85	9,52	19,25
$\overline{\Delta}_{ucm.}$	0	1,38	1,45	2,42	2,28	6,58
E_{1}^{0}	5	4,944	4,987	4,992	4,983	4,963
$\Gamma_1/2$	0,5	0,496	0,514	0,491	0,508	0,476
E_{2}^{0}	10	9,996	9,991	10,009959	9,996	9,989
$\Gamma_2/2$	1	0,987	1,017	0,995	1,030	1,006
γ_1	-0,1835	-0,1770	-0,1857	-0,1757	-0,182	-0,1786
δ_1	1,055	1,0406	1,0510	1,0510	1,0466	1,02227
γ_2	0,1835	0,1825	0,1881	0,1767	0,1862	0,1795
δ_2	0,555	0,5506	0,5558	0,5363	0,5603	0,5506
С	0	0,00138	0,00155	0,0005	0,00476	0,00225
ρ_1	1	0,99	1,01	0,99	1,01	0,96
ρ_2	1	0,99	1,00	0,98	1,02	1
φ	0	-0,01	0	-0,01	0	-0,01
${\rho_1^1}^*$	1,11	1,10	1,11	1,10	1,11	1,07
$\rho_2^{l}^*$	1,22	1,20	1,24	1,19	1,25	1,20
ϕ^{1*}	1,08	1,07	1,09	1,08	1,10	1,04

Результаты обработки модельной задачи (см. формулу (25))

^{*}Второй эквивалентный набор параметров, получаемый вследствие неоднозначности восстановления интерференционных параметров.

6. Примеры обработки экспериментальные данных

При выборе примеров экспериментальных данных для пробной обработки, чтобы сделать их совокупность при сохранении обозримости достаточно представительной, учитывались следующие обстоятельства:

 а) разнообразие по энергиям нейтронов, вызывающих реакцию, что соответствует также и различным условиям с точки зрения энергетического разрешения и роли Доплер-эффекта;

- б) разнообразие возможных интерференционных эффектов;
- в) наличие подробной числовой информации о результатах эксперимента.

По этим соображениям было выбрано три примера: сечение деления ²³⁵U в интервале 6 эВ $\leq E \leq$ 7 эВ, полное сечение ⁵¹V при 20 кэВ $\leq E_n \leq$ 24 кэВ, полное сечение Cr при 575 кэВ $\leq E_n \leq$ 587 кэВ.

Числовая информация об измеренных сечениях во всех случаях была получена с магнитных лент библиотеки EXFOR Центра по ядерным данный ГК ИАЭ СССР [19—11]. Результаты обработки представлены на рис. 1—3, полученные данные о резонансных параметрах приводятся в подписях к рисункам. Для получения среднего отклонения, соответствующего примерно экспериментальному разбросу, понадобилось во всех случаях использовать L = 4k + 1при k, на единицу превышающем наблюдаемое «на глаз» число резонансов в рассматриваемом интервале, причем соответствующие «лишние» корни всегда сказывались шумовыми.

В заключение авторы выражают благодарность сотрудникам ЦЯД ГК ИАЭ СССР В. Н. Манохину и В. В. Возякову за большую организационную помощь при получении данных с магнитных лент и проведении расчетов на ЭВМ ЦЯД.



Рис. 1. Результаты анализа энергетической зависимости сечения деления ²³⁵U при 6 эВ ≤ E_n ≤ 6,7 эВ [9]. Близкие сплошные кривые соответствуют L=9 и 13, пунктир — L=17, соответствующие значения $\overline{\Delta}_{3\text{ксп}}$ = 6,7, 6,9, 6,4 %. $\overline{\Delta}_{a\text{BT}}$ = 5,8%. Полученные значения резонансных параметров: E_1^0 = 6,199 эВ, Γ_1 = 180 МэВ, E_2^0 = 6,40 эВ, Γ_2 = 108МэВ. При L=17 левый резонанса «расщепился» на два с параметрами E_1^0 = 6,087 эВ, Γ_1 = 322 МэВ, E_1^{0*} = 6,279 эВ, Γ_1^{**} = 80 МэВ



Рис. 2. Результаты анализа полного сечения ⁵¹V в интервале 20 кэВ $\leq E_n \leq$ 24 кэВ [10]. Налицо заметная интерференция с упругим рассеянием. Анализ проводился лишь для L = 9. Пунктир — первая итерация ($\overline{\Delta}_{3\kappa c \Pi} = 11$ %), сплошная кривая — последняя, седьмая, итерация ($\overline{\Delta}_{3\kappa c \Pi} = 7,5$ %). Ошибки авторами не приводятся. Получены резонансные параметры $E_1^0 = 21,56$ кэВ, $\Gamma_1/2 = 0,326$ кэВ



Рис. 3. Результаты анализа полного сечения Сг в интервале 575 кэВ $\leq E_n \leq 587$ кэВ [11]. Пунктир соответствует L = 9, тонкая линия — L = 13, жирная — L = 17. В первых двух случаях наблюдаются ложные действительные полюса. При L = 17 (аналог четырехуровневой формулы) получено удовлетворительное описание ($\overline{\Delta}_{3\text{ксп}} = 5,33$ %) и разрешены три уровня с параметрами $E_1^0 = 577,13$ кэВ, $\Gamma_1/2 = 0,900$ кэВ, $E_2^0 = 579,85$ кэВ, $\Gamma_2/2 = 0,817$ кэВ, $E_3^0 = 584,3$ кэВ, $\Gamma_3/2 = 1,83$ кэВ

Резонансный анализ сечений ядерных реакций с использованием приближения Паде

Литература

- 1. H. Pade. Ann. Ecole Normale Superiere. Paris, vol. 9, (1892).
- 2. H. Pade. Ibid, vol. 16 (1899).
- 3. J. Zinn-Justin. Phys. Rep., vol. lc, No.3 (1971).
- 4. J.L. Basdevant. Port der Physik, 20, 283 (1971).
- 5. G.A. Baker, J.L. Gammel. The Pade-Approximant in Theoretical Physics. Acad. Preas. N.-Y. (1970).
- 6. J.L. Gammel, P.A. McDonald. Phys. Rev., 142, 1245 (1966).
- 7. Хованский А.Н. Приложение цепных дробей и их обобщений к вопросам прикладного анализа. Москва, ГИТТЛ, 1956.
- 8. Лейн А., Томас Р. Теория ядерных реакций при низких энергиях. Москва, ИИЛ 1960.
- 9. M.G. Cao, F. Migneco, J.P. Theobald, J.A. Wartena, J. Winter. EXFOR Library, AN-20129.
- 10. C. Rohr, E. Friedland. EXFOR Library, AN-20152.
- 11. S. Cierjacks, P. Porti, D. Kopsch, L. Kropp, J. Nebe, H. Unseld. EXFOR Library, AN-20012.

Resonance Analysis of the Nuclear Reactions Cross-Sections by Pade-Approximations

V. N. Vinogradov, E. V. Gay, N. S. Rabotnov

A method is outlined for the analysis of the nuclear reaction cross-sections by rational approximations (Pade-approximations). Resonance energies and total widths may be evaluated without any apriory assumptions on the S-matrix structure. The examples considered are a model problem and a few neutron cross sections in resonance region.

Построение дробно-рациональных аппроксимаций резонансной кривой методом псевдообращения

В. Н. Виноградов, Е. В. Гай, В. М. Дмитриев, Н. С. Работнов

Физико-энергетический институт, Обнинск

Наиболее употребительным методом обработки экспериментальных данных в целях их параметризации и анализа является метод наименьших квадратов (МНК) на различных классах аппроксимирующих функций. В настоящей работе рассмотрены некоторые аспекты этого метода (при обработке резонансных кривых с помощью дробно-рациональной аппроксимации), связанные с нелинейностью соответствующей математической задачи. Предлагается простой метод ее линеаризации, исследуется вопрос о сходимости итерационного процесса, при этом линеаризованная задача решается методом псевдообратной матрицы.

Постановка задачи в общем случае

При обработке необходимо найти значения параметров $\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_n$, при которых принимает минимальной значение выражение

$$\Delta = \sum_{k=1}^{N} \left[\left(f\left(x_{k}, \alpha\right) - f_{\mathfrak{s}}\left(x_{k}\right) \right) F\left(x_{k}, \alpha\right) \right]^{2}$$
(1)

в предложении, что вид функции $f(x, \alpha)$ и весового множителя $F(x, \alpha)$ известны (суммирование ведется по экспериментальным точкам x_k ; $f_3(x_k)$ — экспериментальные значения). Для определения α_i следует решить относительно α_i систему n уравнений с n неизвестными

$$\frac{\partial \Delta}{\partial \alpha_i} = 0, \, i = 1, 2, \dots, n.$$
⁽²⁾

Система (2) может быть решена, если она линейна относительно α_i . Линейному случаю соответствует, например, выбор в качестве *f* полинома $\sum_{i=1}^{n} \alpha_i x^{i-1}$ и ми-

нимизация абсолютного отклонения при $F(x, \alpha) = 1$. В случае же системы нелинейных уравнений появляются принципиальные трудности двух типов. Во-первых, в общем случае нет прямого способа решения системы нелинейных уравнений, поэтому приходится использовать приближенные методы, в частности итерационные. Их разработке посвящено много работ, но сходимость метода при большом числе параметров фактически оценивается эмпирически, по конечному результату. Во-вторых, даже если итерационная процедура сходится, неизвестно, получен абсолютный или относительный минимум, поскольку, в отличие от линейной задачи, система (2) может иметь много решений.

ВАНТ, серия: Ядерные константы, 1977, вып. 25, с. 76-80.

Поясним последнее утверждение примером. Для этого опишем набор «экспериментальных данных» $f_3(1) = f_3(-1) = \alpha$; $f_3(0) = 0$ с помощью функции $f(x, \alpha) = \alpha_0 + \alpha_1 x$, но минимизировать будем относительное отклонение

$$\Delta = \sum_{k} \left(1 - \frac{f_{\mathfrak{z}}(x_k)}{\alpha_0 + \alpha_1 x_k} \right)^2 \,. \tag{3}$$

В этом случае система уравнений (2) принимает вид

$$\left(\frac{a}{\alpha_{0}-\alpha_{1}}-1\right)\frac{1}{\left(\alpha_{0}-\alpha_{1}\right)^{2}}-\frac{1}{\alpha_{0}^{2}}+\left(\frac{a}{\alpha_{0}+\alpha_{1}}-1\right)\frac{1}{\left(\alpha_{0}+\alpha_{1}\right)^{2}}=0 \\ -\left(\frac{a}{\alpha_{0}-\alpha_{1}}-1\right)\frac{1}{\left(\alpha_{0}-\alpha_{1}\right)^{2}}-\left(\frac{a}{\alpha_{0}+\alpha_{1}}-1\right)\frac{1}{\left(\alpha_{0}+\alpha_{1}\right)^{2}}=0 \right] .$$
(4)

(Задача будет линейной, если относить невязку, как это обычно делается, к экспериментальному значению). Решениями этой системы будут $\alpha_0 = -a/6$; $\alpha_1 = \pm i \sqrt{5}/a$; (у исходной задачи есть еще решение $\alpha_0 = \alpha_1 = 0$). Таким образом, уже при полиномиальной аппроксимации, но при минимизации относительного отклонения, получается несколько формальных решений, включая комплексные. При использовании дробно-рациональной аппроксимации даже минимизация абсолютного отклонения $F(x, \alpha) = 1$ приводит к системе (2), допускающей множество решений.

Псевдообратная матрица

Прежде чем перейти к задаче описания экспериментальных данных с помощью дробно-рациональных функций, рассмотрим линейный случай МНК, когда для определения α_i получается система линейных уравнений вида

$$\sum_{i} a_{mi} \alpha_i = y_m, \tag{5}$$

которая решается обращением матрицы A (здесь не рассматриваются проблемы, связанные с возможной плохой обусловленностью этой матрицы). В последние годы интенсивно развивается теория обобщенных обратных матриц, которая еще редко применяется в практических вычислениях. Определение и сведения о свойствах псевдообратной матрицы приведены в работе [1], библиография — в работах [2, 3]. В частности, псевдообратная матрица A^+ (прямоугольная $n \times m$) дает наилучшее приближенное решение системы Ax = y, где x — столбец длины n; A — матрица $m \times n$, y — столбец длины m. При этом минимизируется квадратичное отклонение

$$|y - \mathbf{A}x|^2 = \sum_{k=1}^{m} \left| y_k - \sum_{i=1}^{n} a_{ki} x_i \right|^2$$
 (6)

Число неизвестных при этом может отличаться от числа уравнений в любую сторону. Когда задача не доопределена, среди всех столбцов *x* выбирается в качестве x^0 столбец с наименьшим значением $\sum_{k=1}^{n} |x_k|^2$. Если в качестве y_m подставить в выражение (6) значения $f \ni (x_m)$, а вместо $\sum_{i} a_{mi} \alpha_i$ подставить $\sum_{i} x_m^{i-1} \alpha_i$,

то получим систему уравнений типа (5) для полиномиальной аппроксимации, решение которой методом псевдообратной матрицы и будет решением соответствующей задачи МНК. Простой рекуррентный метод построения псевдообратной матрицы \mathbf{A}^+ по матрице \mathbf{A} (метод Гревилля) приведен в работе [1].

Таким образом, использование метода псевдообратной матрицы позволяет оперировать сразу с исходными данными, не переходя к системе уравнений (2). В дальнейшем при решении линейной задачи МНК будем пользоваться именно этим методом. Отметим еще, что умножение какого-либо из уравнений метода псевдообратной матрицы на число соответствует введению дополнительного весового множителя для соответствующей экспериментальной точки.

Линеаризация задачи в случае дробно-рациональных функций

Для целей анализа резонансных сечений представляет интерес МНК с ϕ ункцией f(x) в виде отношения двух полиномов, где

$$f(x) = \frac{P(x)}{1 + Q(x)}; \ P(x) = \sum_{i=0}^{N} P_i x^i ; \ Q(x) = \sum_{i=1}^{M} q_i x^i .$$
(7)

При любом задании веса F в этом случае система уравнений (2) будет нелинейной. Одним из методов линеализации является разложение функции в ряд Тейлора, но для этого надо «находиться» достаточно близко к минимуму, другой путь состоит в построении схемы итераций: в системе уравнений (2) часть множителей (например, знаменатели) предполагаются известными из предыдущей итерации, так чтобы каждое из получающихся уравнений было линейным относительно неизвестных параметров. Систему уравнений метода псевдообратной матрицы можно схематически записать в виде

$$f(x_k, p, q)F(x_k, p, q) = f_{\mathfrak{z}}(x_k)F(x_k, p, q).$$

При таком подходе очевидно, что надо линеализовать левую часть уравнения. Для этого воспользуемся соотношением

$$f = \frac{P}{1+Q} = P - Qf \tag{8}$$

и запишем систему уравнений методом псевдообратной матрицы в виде

$$F_{i-1}(P_i - Q_i f_{i-1}) = f_{\mathfrak{Z}} F_{i-1}.$$
(9)
Здесь f_{i-1} и F_{i-1} предполагаются известными из предыдущей матрицы, а коэффициенты $p_k^{(i)}$ и $q_k^{(i)}$ можно вычислить методом псевдообратной матрицы, получить $P_i(x_k), Q_i(x_k), f_i(x_k), F_i(x_k)$, подставить в следующую итерацию и т. д.

Оценка сходимости итераций

Введем следующие обозначения:

$$\varepsilon_i(x) = f_i(x) - f(x); \tag{10}$$

$$\delta(x_k) = (f(x_k) - f_{\mathfrak{z}}(x_k))F(x_k); \qquad (11)$$

$$\delta_i(x_k) = (f_i(x_k) - f_{\mathfrak{z}}(x_k))F_i(x_i); \qquad (12)$$

$$\delta_{i}'(x_{k}) = (P_{i}(x_{k}) - Q_{i}(x_{k}) f_{i-1}(x_{k}) - f_{\mathfrak{z}}(x_{k}))F_{k-1}(x_{k}), \qquad (13)$$

здесь f(x) и F(x) — неизвестные истинные значения аппроксимирующей функции и весового множителя.

Предположим еще, что $\varepsilon_i(x) \ll f(x)$, тогда из выражений (11) — (13) в первом порядке по ε_i получим:

$$\delta_i(x_k) = \delta(x_k) + \varepsilon_i(x_k) F(x_k).$$
(14)

В случае F = 1 соотношение (14) верно при любых $\varepsilon_i(x_k)$ и смысл его очевиден: отклонение восстановленной кривой от эксперимента есть сумма отклонения от истинной и отклонения истинной кривой от эксперимента.

Метод псевдообратной матрицы дает для системы (10) наилучшее приближение к МНК, поэтому

$$\sum_{k} \left(\delta_i'(x_k) \right)^2 \leq \sum_{k} \left(\delta_{i-1}(x_k) \right)^2.$$
(15)

Знак равенства получится, если $P_i - Q_i f_{i-1} = f_{i-1}$, т. е. если в результате итерации восстановились исходные данные. P_i и Q_i связаны соотношением $\frac{P_i}{1+Q_i} = f_{i-1}$ и итерации сошлись. Подставляя в выражение (13) $f_i = f + \varepsilon_i = P_i - \frac{1+Q_i}{1+Q_i}$

 $-Q_i f_i$, получают из уравнений (12) и (13) в первом порядке по ε_i , ε_{i-1} :

$$\delta_i'(x_i) = \delta_{i-1}(x_k) + F(x_k)(1 + Q(x_k))(\varepsilon_i - \varepsilon_{i-1}).$$
(16)

Используя уравнение (14), получим, что для сходимости итерации необходимо, чтобы

$$\sum_{k} \left(\delta(x_k) + F(x_k) \varepsilon_i(x_k) \right)^2 \leq \sum \left(\delta(x_k) + F(x_k) \varepsilon_{i-1}(x_k) \right)^2, \quad (17)$$

а из уравнений (15) и (16) следует, что

$$\sum \left(\delta(x_k) + F(x_k) \varepsilon_i(x_k) + Q_i(x_k) F(x_k) \varepsilon(x_k) - \varepsilon_{i-1}(x_k) \right)^2 \leq \\ \leq \sum \left(\delta(x_k) + F(x_k) \varepsilon_{i-1}(x_k) \right)^2.$$
(18)

Отклонения $\delta(x_k)$ распределены случайным образом, а остальные величины в неравенстве (18) меняются от точки к точке плавно. Кроме того, по смыслу весовой множитель всегда положителен, предположим еще, что искомая функция *f* положительна и не имеет полюсов на исследуемом отрезке действительной оси, т. е. 1 + Q > 0 и что $f_i(x)$ достаточно близко к f(x), т. е. $|\varepsilon_i(x_k)| \ll |\delta(x_k)|$. Тогда суммируя по *k* в неравенстве (18) и приравнивая нулю слагаемые вида $\sum_k \delta(x_k) \varphi(x_k)$, где $\varphi(x)$ — гладкая функция, получим из неравенства (18)

$$\sum_{k} (1+Q) \left[\varepsilon_{i}^{2} - \varepsilon_{i-1}^{2} + Q \left(\varepsilon_{i} - \varepsilon_{i-1} \right)^{2} \right] \leq 0.$$
(19)

Исследуя выражение (19), получим, что из этого неравенства следует либо неравенство (17), либо преобладающий вклад в неравенство (19) дают слагаемые с $-1 < Q(x_k) \le -\frac{1}{2}$, $\varepsilon_i(x_k)$ и $\varepsilon_{i-1}(x_k)$ противоположных знаков и $|\varepsilon_i(x_k)| > |\varepsilon_{i-1}(x_k)|$.

Приведенные выше исследования не являются строгим доказательством сходимости предложенного итерационного процесса, а лишь помогают понять результаты расчетов модельной задачи.

Модельная задача

Для исследования свойств предлагаемого метода было обработано несколько математических экспериментов: обрабатывались одно-, двух- и трехрезонансные кривые с ошибкой, внесенной датчиком случайных чисел со среднеквадратичным относительным отклонением 1, 2, 3, 5 и 10 %.

Для ускорения сходимости итераций оказалось полезным вставлять в итерацию не просто результат предыдущей итерации, а функцию, зависящую еще от $f_3(x_k)$. При этом учитывалось, что решаемая в каждой итерации задача дает наилучшее описание эксперимента суперпозицией двух полиномов P_i и Q_i ; коэффициент смешивания зависит от x_k как $f_{i-1}(x_k)$. Опишем эксперимент дробно-рациональной функцией $P_i/(1+Q_i) = P_i - Q_i f_i$ путем использования выражения (13) получим, что такая функция будет описывать с невязкой $\delta'_i(x_k)$ другие экспериментальные точки $f_3'(x_k)$, которые можно найти из уравнения (13) и

$$\delta'(x_k) = (P_i - Q_i f_i - f_{\mathfrak{I}}') F_i.$$
⁽²⁰⁾

Заметим, что это уже не есть описание по методу наименьших квадратов. Представляется разумным предположить, что истинная функция сдвинута по

отношению к f_i на величину, пропорциональную $f_3 - f_3'$. Поэтому в качестве исходных данных для следующей итерации взяли

$$f'_{i} = f_{i} + \Delta_{i} z^{2} / (a + |z|)^{2}$$
, (21)

где $z = \left| \frac{\Delta_i}{\Delta'_i} - 1 \right|;$ $\Delta_i = f_{\mathfrak{Z}} - f_i;$ $\Delta'_i = f'_{\mathfrak{Z}} - f_i;$

а — параметр, который подбирается эмпирически.

Кроме такого подхода использовался и другой, основанный на том, что в случае минимизации относительного отклонения весовой множитель F(x) равен просто $f(x)^{-1}$, что позволяет получить систему уравнений

$$\frac{Q_i'(x_k)f_{\mathfrak{z}}(x_k)}{P_i(x_k)} = 1 - \frac{f_{\mathfrak{z}}(x_k)}{P_i(x_k)}, \qquad (22)$$

линейных относительно $Q_i'(x_k)$, если задано $P_i(x_k)$. Эта система уравнений использовалась для коррекции Q(x): после каждого этапа итераций (9) вычисляли Q_i' и в следующую итерацию подставляли $f_i' = P_i / (1 + Q_i')$.

Применение описанного метода дало вполне удовлетворительные результаты. Итерации сходились, и полученные кривые согласовались с «экспериментальными данными» в пределах известных «ошибок». Ниже приведены результаты обработки трехрезонансной кривой со среднеквадратичным относительным отклонением 5 %, первый вариант соответствует итерациям с Q = 2, а второй — итерациям с коррекцией Q(x).

№ итерации	1-й вариант		2-й вариант	
	Среднеквадратич- р1		Среднеквадратич-	\mathbf{p}_1
	ное относительное		ное относительное	
	отклонение, %		отклонение, %	
1	48	22,5	48	22,5
3	11,8	56,9	9,6	107,5
5	7,5	57,1	7,43	122,4
7	6,22	55,6	6,39	124,4
9	5,25	41,7	5,78	118,7
11	4,88	27,7	5,42	107,7
13	4,59	24	5,18	94,18
15	4,46	17	5,027	79,76
24	4,27	_	_	_

Из поведения коэффициентов p₁ видно, что в двух разных вариантах процесс сходится к разным локальным минимумам.

Выводы

Предложенный метод линеаризованного построения дробно-рационального приближения обладает преимуществами перед способом, опирающимся на использование цепных дробей [4]. Во-первых, он применим в единой форме для разных соотношений между M и N (для цепных дробей M = N + 1). Во-вторых, новый алгоритм проще и «работает» быстрее. В-третьих, линеаризованная задача теоретически проще, что облегчает обоснование метода и рассмотрение вопросов сходимости. Однако вопрос о его применимости к сложным задачам с большим числом параметров еще требует рассмотрения.

Список литературы

- 1. Гантмахер Ф. Р. Теория матриц. М., «Наука», 1966.
- 2. Фадеев Д. К., Фадеева В. Н. Записки научных семинаров Ленинградского отделения математического института АН СССР. Т. 54, 1975, с. 3.
- 3. Rao C., Mitra S. Generalized inverse of matrices and its application. N.-Y., 1971.
- 4. Виноградов В. Н., Гай Е. В., Работнов Н. С. Препринт ФЭИ-484, Обнинск, 1974.

Construction of the Rational Fraction Approximations of a Resonance Curve by the Preudoiversion Method

V. N. Vinogradov, E. V. Gay, V. M. Dmitriev, N. S. Rabotnov

A linear recurrent method is proposed for the construction of the rational fraction approximations of experimental data. The linearized problem is solved by the pseudoinversion of a rectangular matrix. The proposed algorithm allows to get the approximants with an arbitrary orders of polynomials in the numerator and in the denominator. The convergence and effectiveness of the method are investigated for model problems.

Измерение полных нейтронных сечений изотопов ⁵⁴Fe и ⁵⁶Fe методом времени пролета в интервале энергий 1—70 кэВ

В. И. Виноградов, Е. В. Гай, А. Н. Глуховец, Н. С. Работнов, А. И. Ступак, М. З. Тараско, О. А. Щербаков

Физико-энергетический институт, Обнинск

(Поступила в редакцию 4 октября 1976 г.)

Приводятся результаты измерений полных нейтронных сечений для изотопов ⁵⁴Fe и ⁵⁶Fe в области от 1 до 70 *кэB* с разрешением 8 *нсек/м*. Используются возможности приближения Паде второго рода для анализа сечений в резонансной области. Приводятся значения полученных резонансных параметров.

1. Введение

Измерению полных нейтронных сечений разделенных изотопов железа посвящено всего несколько работ [1—5], хотя число публикаций по измерениям для естественной смеси изотопов, являющейся важнейшим конструкционным материалом в реакторостроении, весьма велико.

В полных сечениях изотопов Fe наблюдаются глубокие провалы вблизи резонансов, обусловленные интерференцией резонансного и потенциального рассеяния. В этих областях данные разных авторов заметно отличаются друг от друга, как в результатах измерений, так и в их интерпретации на основе теории ядерных реакций. Дополнительным осложняющим обстоятельством является наличие у основного изотопа ⁵⁶Fe близкого отрицательного уровня. В связи с этим представляется актуальным дальнейшее изучение взаимодействия нейтронов с разделенными изотопам железа вблизи первых резонансов при энергиях $E_n \leq 100 \ \kappa \Rightarrow B$.

В настоящей работе излагаются результаты измерений полных нейтронных сечений изотопов 54 Fe и 56 Fe, при анализе которых используется приближение Паде второго рода.

2. Методика эксперимента

Измерения проводились методом времени пролета с использованием линейного ускорителя электронов с энергией 25 *МэВ*. Длительность импульсов ускоренных электронов равнялась 1,5 *мксек* при частоте посылок 50 Гц и средней величине тока 5 *мкА*. Пролетная база спектрометра составляет 121,6 *м*. Нейтроноводом служит труба диаметром 500 *мм*, заполненная гелием до давления 760 *мм рт. ст.*, закрытая алюминиевыми заглушками общей толщиной

Ядерная физика, 1977, т. 26, вып. 5 (11), с. 936—941.

5,5 *мм.* За коллиматором располагается устройство, обеспечивающее установку на пучок и удаление с пучка измеряемого образца. Устройство связано с временным анализатором АИ-4096, полное число каналов которого разбито на два равных сектора. В первый сектор набирается спектр без образца, во второй — с образцом. Мониторами нейтронного потока служат два пропорциональных счетчика, расположенные в разных местах, но в непосредственной близости от нейтронного пучка. На конце пролетной базы расположен детектор, описанный в работе [6]. Принцип его работы основан на регистрации каскадных γ -квантов, возникающих в результате реакции (n, γ) на редкоземельных элементах.

Наличие сильного тормозного излучения, возникающего на мишени в начальный момент, перегружает электронику, препятствуя проведению измерений в высокоэнергетической области. В связи с этим применена схема запирания фотоумножителей на время действия тормозного излучения. Измерения проводились при ширине канала анализатора 0,25 *мксек*.

Измерения фона нейтронного спектрометра проводились по пропусканию через два набора толщин элементов, имеющих сильные резонансы: алюминия, натрия и марганца. Толщины выбирались таким образом, чтобы обеспечить условие $n \sigma > 5$ в области сильных резонансов. По точкам, соответствующим этим резонансам, проводилась плавная кривая фона. Постоянная составляющая фона, не зависящая от работы ускорителя, измерялась фоновым каналом шириной 400 *мксек*. Величина фона составляла 25 % при энергии 1 *кэВ*, уменьшаясь до 10 % в области 20—100 *кэВ*.

В измерениях использовалось несколько образцов, в большинстве случаев из прессованного порошка в алюминиевых контейнерах. Один образец ⁵⁴Fe представлял собой металлический слиток в форме диска. Обогащение изотопа ⁵⁴Fe составляло 99,2 %, толщины использованных образцов 0,053 и 0,0137 *атом/бн*. При измерениях с ⁵⁶Fe использовались три образца с обогащением 99,7 % при толщинах 0,0129; 0,0515 и 0,0985 *атом/бн*.

После учета фона и введения поправки на просчеты во временном анализаторе в измеряемые спектры вводилась поправка на функцию разрешения спектрометра, которая определялась экспериментально по измерению пропускания слоя (500 *мм*) железа «армко» в области интерференционного провала для резонанса 83,7 *кэВ* методом, предложенным в работах [7, 8]. Полуширина измеренной функции разрешения равнялась 1 *мксек*, что соответствует разрешению спектрометра 8 *нсек/м*. Функция нормирована условием

$$\int_{0}^{\infty} R(t,t')dt' \simeq \sum_{k=-\inf}^{\sup} r_k = 1.$$
(1)

Здесь r_k — экспериментальное значение функции разрешения в k-м канале, *inf* и *sup* — нижняя и верхняя границы функции разрешения, за пределами которых она полагалась равной нулю. Связь истинного и экспериментального распределений выражается системой уравнений

$$\sum_{k=-\inf}^{\sup} x_{i+k} r_k = y_i, \ i=0, 1, 2, \dots, n,$$
(2)

где x_i — значение истинного распределения в *i*-м канале, y_i — значение измеренного распределения. Система (2) решалась с помощью метода наименьшего направленного расхождения [9] следующим итерационным процессом:

$$x_{j}^{(w+1)} = x_{j}^{(w)} \sum_{i=0}^{n} r_{j-1} \frac{y_{i}}{\sum_{k=-\inf}^{\sup} x_{i+k}^{(w)} r_{k}} / \sum_{i=0}^{n} r_{j-1}, \qquad (3)$$

где w — номер итерации. Индекс j восстанавливаемого распределения пробегает значения от —*inf* до n+sup. Этот метод, позволяя разрешать близкие уровни, дает несколько сглаженные кривые, т. е. сохраняет некоторое «остаточное уширение» узких резонансов.

Ошибки, обусловленные статистическим характером измеряемых величин, не превышали 3 % в значениях пропускания. Систематические ошибки порядка 2—3 % в определении сечения могут быть связаны с неравномерностью плотности исследуемых порошкообразных образцов по сечению пучка. Полная ошибка в определении величины составляет 7 % в большей части рассматриваемой области. Однако в области 35 $\kappa \beta B$, где в спектрах проявляется резонанс алюминия, находящегося в заглушках, ошибка в величине полного сечения может достигать 15 %, так как именно эта область особенно чувствительна к неточностям в измерении фона.

3. Результаты измерений и их анализ

На рисунке *а* и б приведены результаты измерений. Вместе с экспериментальными точками нанесены кривые, полученные на основе дробно-рациональной аппроксимации данных (приближение Паде). Этот метод применительно к анализу нейтронных сечений развивался в работах [10—12], где он подробно описан, и здесь будут приведены лишь краткие сведения, необходимые для понимания полученных результатов.

Приближением Паде второго рода (Паде-II) для функции комплексного переменного f(z) называется дробно-рациональное выражение

[]]]

$$f^{[N,M]}(z) = P_N(z)/Q_M(z),$$

где P_N и Q_M — полиномы степеней N и M, причем равенство $f^{[N, M]}(z_i) = f(z_i)$ выполняется при L = N + M + 1 значениях переменной $z = z_i$ (см. обзоры [13, 14]). Из определения, в частности, следует, что полюса аппроксимируемой функции не являются точками «существенной расходимости» приближения Паде — они моделируются корнями $Q_M(z)$. Найдя эти корни и выполнив известными методами разложение дробно-рационального выражения на элементарные слагаемые, можно всегда представить его в виде



Результаты измерения полного сечения изотопов ⁵⁴Fe (*a*) и ⁵⁶Fe (*б*) (точки) и аппроксимации полученных данных дробно-рациональным выражением (4) (сплошная кривая). Значения параметров приведены в таблице

$$\frac{P_N(z)}{Q_M(z)} \equiv C + \sum_{i=1}^m \frac{a_i}{z - p_i} + \sum_{k=1}^l \frac{\alpha_k z + \beta_k}{\left(z - \varepsilon_k\right)^2 + \gamma_k^2},\tag{4}$$

где все постоянные вещественны. Эта естественность разложения в сумму полюсных слагаемых весьма привлекательна с точки зрения резонансного анализа.

Второй удобной особенностью приближения Паде является его устойчивость к шумам, т. е. в нашем случае к разбросу экспериментальных точек из-за ограниченной статистики. Действительно, резонансный анализ есть частный случай задачи аналитического продолжения функции, которая, как известно (см. [15]), некорректна, т. е. решение неустойчиво к малым вариациям исходных данных. Оказывается, однако, что в случае приближения Паде-II эта неустойчивость носит специфический характер, позволяющий надежно извлекать аналитическую информацию при уровнях погрешностей, характерных для рассматриваемой задачи. Именно с возрастанием ранга приближения L при некотором его значении в результирующем выражении (4) появляются слагаемые вида $a_i/(z-p_i)$, где действительные значения p_i лежат в пределах исследуемого интервала, между экспериментальными точками. Соответствующие коэффициенты *a_i* при этом обычно малы. Поскольку анализируемая функция нейтронное сечение — при действительных положительных значениях энергии не может ни принимать отрицательных значений, ни обращаться в бесконечность, то ясно, что эти слагаемые, так называемые шумовые полюса, не имеют физического смысла и должны быть отброшены.

Вообще физический смысл параметров, входящих в выражение (4), которое является фактически «*l*-уровневой формулой», определен в разной степени. Приближение Паде — один из наиболее мощных методов аналитического продолжения функций, и его можно рассматривать как самый последовательный и объективный метод определения координат полюса *S*-матрицы: ε_k — резонансной

энергии и γ_k — полной полуширины. В случае отсутствия межрезонансной интерференции комбинация ($\alpha \epsilon + \beta$) / γ^2 должна равняться $4\pi \lambda_0 g (\Gamma_n / \Gamma) \equiv \sigma_0$, а $\alpha / \gamma^2 = 2R\sigma_0 / \lambda_0$, где λ_0 — длина волны нейтрона при резонансной энергии, а R длина рассеяния. В общем же случае связь этих коэффициентов с физическими величинами сложнее. Следует заметить, что хотя интерференцию между резонансами описывают обычно большим числом параметров, наиболее употребительные многоуровневые формулы тождественным преобразованием сводятся к выражению (4). Более подробный интерференционный анализ одного только полного сечения, таким образом, (см. [11]) фактически есть решение недоопределенной системы уравнений с результирующими большими неоднозначностями. Поэтому мы ограничились получением параметров формулы (4).

Константа С и сумма, соответствующая действительным полюсам, описывают суммарный вклад потенциального рассеяния и «хвосты» резонансов, лежащих за пределами рассматриваемого интервала, информация о которых недостаточна для определения полного набора параметров α , β , γ , ε . Наибольший интерес представляют слагаемые такого типа, соответствующие «отрицательным резонансам» при энергиях нейтронов, близких к нулю. Обычно эти уровни описывают так же, как и «положительные». Следует, однако, отметить, что и без того некорректная задача аналитического продолжения осложняется в этом случае наличием у аппроксимируемой функции $\sigma(E)$ точки ветвления (вклад 1/ υ), ЧТО В большинстве случаев лишает полученные параметры физического смысла; отсюда известные различия при определении их разными авторами (см. подробнее [12]). Несомненно, наличие отрицательного уровня у ⁵⁶Fe и его вклад в виде слагаемого *a* / (*E* – *p*) определяется в нашем анализе, однако интерпретировать *p* как энергию резонанса в этом случае нужно уже с осторожностью.

Изотоп	Параметры					
	α, бн кэВ	β, бн·кэВ ²	$\Gamma = \Gamma/2$, кэВ	ε, кэВ		
⁵⁴ Fe	$47,\!28 \pm 0,\!67$	$-259,2 \pm 3,5$	$0,582 \pm 0,020$	$7,71 \pm 0,02$		
	$29,7 \pm 1,4$	-1487 ± 71	$1,\!43 \pm 0,\!09$	$52,53 \pm 0,07$		
	23,1*	5,691·10 ^{4*}	60,65*	45,5*		
<i>C</i> =17,18±0,23						
⁵⁶ Fe	$29,10 \pm 0,25$	$-751,7 \pm 6,4$	$0,791 \pm 0,014$	$27,\!60 \pm 0,\!01$		
	$-15,15^{*}$	2333*	24,7*	42,5*		
<i>C</i> =0						
		$a = 65, 7 \pm 1, 2$	$P = -6,40 \pm 0,21$			

Резонансные параметры ³⁴ Fe и	^ю Fe, полученные при анализе	результатов по формулам (4)
--	---	-----------------------------

- -

^{*}Параметры, описывающиеся вместе со значением C «нерезонансное» слагаемое, имеют большую неопределенность. Их можно использовать наряду с резонансными лишь для построения теоретической кривой полного сечения, но не для описания вклада потенциального рассеяния.

Особый вопрос — описание вклада потенциального рассеяния. Для обоих изотопов анализ дает в полном сечении слагаемое, имеющее формально резонансный характер, однако ширина этого резонанса примерно равна или больше всего рассматриваемого интервала, и его вклад слабо зависит от энергии, поэтому мы относим его к потенциальному рассеянию.

Результаты анализа в виде значений резонансных параметров с ошибками приводятся в таблице. Простота аналитического выражения (4) позволила получить для этих параметров не только ошибки, но и коэффициенты корреляции в обычном определении [16]. Этого нельзя сделать только для плохо определенных параметров упомянутых «резонансов», описывающих потенциальное рассеяние. Ввиду громоздкости все эти результаты не приводятся, однако следует отметить некоторые случаи, когда коэффициенты корреляции q_{mn} близки по модулю к единице, что при заданных дисперсиях повышает точность определения некоторых комбинаций этих параметров, имеющих простой физический смысл. Так, только в третьем или четвертом знаке отличаются от -1 все q_{ab} , поскольку лучше определяется из эксперимента линейная комбинация $\beta \equiv \alpha \varepsilon + \beta$, пропорциональная σ_0 . Для параметров *а* и *p* «отрицательного уровня» ⁵⁶Fe $q_{av} = -0.907$. По этому ошибка отношения a/p составляет 1.9 % — вдвое меньше, чем было бы при коэффициенте корреляции, равном нулю. Это отношение — вклад отрицательного уровня в тепловое сечение, который желательно знать с повышенной точностью.

В положении резонансов имеется в принципе неопределенность, возникающая из-за неточности определения начала отсчета времени при регистрации, составляющая в середине рассматриваемого интервала около 100 эВ. Ошибки в определении соответствующего параметра, если считать шкалу энергий фиксированной, значительно меньше. Поскольку полученные значения резонансных энергий совпали в пределах этих небольших ошибок с результатами работ [4, 5], выполненных с лучшим разрешением, в таблице приводятся именно ошибки анализа.

4. Заключение

Полученные выражения типа (4) для зависимостей $\sigma_t(E)$ могут служить хорошим исходным материалом для дальнейшего физического анализа с целью получения параметров, описывающих межрезонансную интерференцию и сечение потенциального рассеяния. Для этого, однако, необходимо продолжить измерения полных сечений в область низких энергий вплоть до тепловой точки и привлечь данные по сечениям захвата. Соответствующие измерения проводятся в настоящее время.

Литература

1. H. Newson, E. G. Bilpuch, E. P. Karriker, L. W. Weston, J. K. Ratterson, C. D. Bowman. Ann. Phys., 14, 365, 1961.

Измерение полных нейтронных сечений 54Fe и 56Fe методом времени пролета...

- 2. H. Newson, E. Bilpuch. Ann. Phys., 17, 319, 1962.
- 3. J. Rainwater, J. Garg. W. Havens. Bull. Amer. Phys. Soc., 8, 334, 1963.
- 4. J. Havens. Phys. Rev., 3, 2447, 1971.
- 5. H. Beer, R.R. Spencer, F.H. Fröhner, M. Cho. KFK-1516S, 1972.
- 6. Е.Я. Доильницын, А.И. Ступак. Нейтронная физика, Матер. Всесоюз. совещ., Киев, 1971, ч. 2, с. 84.
- 7. Ю.В. Адамчук, С.С. Москалев, Г.В. Мурадян. Препринт ИАЭ-468, 1963.
- 8. Г.В. Мурадян, Ю.В. Адамчук, С.С. Москалев. ПТЭ, 1, 28, 1969.
- 9. М.З. Тараско. Препринт ФЭИ-156, Обнинск, 1969.
- 10. В.Н. Виноградов, Е.В. Гай, Н.С. Работнов. Препринт ФЭИ-484, Обнинск, 1974.
- 11. В.Н. Виноградов, Е.В. Гай, Н.С. Работнов. Ядерные константы, 20, Атомиздат, 1975, ч. 1, с. 13.
- 12. В.Н. Виноградов, Е.В. Гай, Н.С. Работнов. Ядерные константы, 21, Атомиздат, 1975, стр. 21.
- 13. J. Zinn-Justin. Phys. Rev., 10, no. 3, 1971.
- 14. I.L. Basdevant. Fortschr. Phys., 20, 283, 1972.
- 15. А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин. Методы решения некорректных задач. «Наука», 1974, с. 18.
- 16. Д. Худсон. Статистика для физиков. «Мир», 1970, с. 195.

Measurement of the Neutron Total Cross Sections for the Isotopes ⁵⁴Fe and ⁵⁶Fe by Means of the Time-of-Flight Method in the Energy Range 1 — 70 keV

V. N. Vinogradov, E. V. Gay, A. N. Glukhovets, N. S. Rabotnov, A. I. Stupak, M. Z. Tarasko, O. A. Shcherbakov

Results of measurements are presented for the neutron total cross sections of the isotopes ⁵⁴Fe and ⁵⁶Fe in the energy range from 1 up to 70 *keV* with the resolution of 8 *nsec/m*. The Pade approximations of type II was used to analyse the cross sections in the resonance region. Values of the obtained resonance parameters are presented.

Аналитическая аппроксимация данных в нейтронной физике

С. А. Бадиков, В. А. Виноградов, Е. В. Гай, Н. С. Работнов

Изложен метод аналитической аппроксимации данных рациональными функциями, основанный на использовании приближения Паде. Наличие полюсных особенностей у аппроксимирующих функций делает его особенно удобным для обработки и анализа резонансных кривых, составляющих основную часть данных в нейтронной и ядерной физике. Описан способ оценки погрешностей построенной аппроксиманты. Материал иллюстрируется результатами обработки модельных и практических задач.

Потребность в аналитическом представлении одномерных функциональных зависимостей постоянно возникает на разных этапах физических исследований и технических разработок, в которых используются их результаты. Физический расчет ядерно-энергетических установок требует весьма большого объема вычислений и входных данных. Существенную часть последних составляют функции одного переменного, описывающие энергетическую зависимость сечений разнообразных ядерных реакций под действием нейтронов. Сбор, хранение, оценка этих данных и представление их в виде, наиболее удобном для использования, стали предметом самостоятельной и немаловажной научной дисциплины. Ее цель — получение оцененных данных, для которых помимо значения сечения при произвольной энергии важно знать точность этого значения, т. е. уметь определять погрешность оцененной кривой.

Исходная экспериментальная информация всегда представляет собой дискретный набор значений, измеренных с конечной погрешностью в конечном числе точек. В результате аналитической аппроксимации этих данных должны быть определены:

аппроксиманта $f^{[L]}(E, p_1, p_2, ..., p_L)$, где E — независимая переменная; p_i — параметры; L — их полное число. Значение аппроксимируемого сечения при заданном E и найденном $f^{[L]}$ остается, разумеется, точно не известной, случайной величиной, так что $f^{[L]}(E)$ — среднее значение статистического распределения этой случайной величины;

 $\Delta(E)$ — погрешность случайной величины. Если ее распределение можно считать нормальным, то обычно $\Delta(E)$ — стандартное отклонение, являющееся квадратичной формой погрешностей параметров Δp_i ;

коэффициент корреляции $\rho(E_1, E_2)$ значений аппроксиманты в двух произвольных точках рассматриваемого энергетического интервала.

Все эти характеристики аппроксимации рациональными функциями (Паде-приближение) рассмотрены ниже.

Атомная энергия, 1984, т. 56, вып. 1, с. 20-25.

Паде-аппроксиманта, ее физический смысл и различные параметризации. Паде-приближение предложено в конце прошлого века [1], но лишь в последнее десятилетие оно находит все более широкое применение в самых различных задачах математической физики [2—7]. При обработке экспериментальных данных его использование до сих пор ограничивалось нелинейностью соответствующей задачи метода наименьших квадратов (МНК) и своеобразной формой неустойчивости, связанной с появлением у аппроксиманты действительных особых точек. В работах [8—10] предложены способы преодоления этих трудностей, создан приемлемый метод Паде-аппроксимации экспериментальных зависимостей и накоплен практический опыт его использования. Приближением Паде второго рода для функции f(E) называется рациональная функция

$$f_{N,M}^{[L]}(E) = P_N(E)/Q_M(E)$$
⁽¹⁾

[здесь $P_N(E)$ и $Q_M(E)$ — полиномы степеней N и M], совпадающая с f(E) в L точках, т. е. удовлетворяющая системе уравнений

r - 1

$$f_{N,M}^{[L]}(E_{\nu}) = P_N(E_{\nu})/Q_M(E_{\nu}) = f(E_{\nu}); \ \nu=1, 2, ..., L.$$
(2)

Умножением каждого уравнения на $Q_M(E_v)$ эта система превращается в линейную по коэффициентам полиномов. Ее решение удобно находить с помощью простых двучленных рекуррентных соотношений, не прибегая к обращению матриц (см., например, работу [11]).

Отличительным свойством Паде-аппроксиманты является наличие у нее полюсов, совпадающих с корнями полинома Q_M . В нейтронной физике чаще всего аппроксимируемые функции — резонансные кривые нейтронных сечений. Резонансы соответствуют комплексным полюсам *S*-матрицы, что и служит физической основой Паде-аппроксимации в этом случае. Рациональные функции удобны для использования в расчетах. Поскольку результат любых арифметических действий над ними есть снова рациональная функция, единственным способом разлагаемая в сумму элементарных выражений [см. выражение (3)], то многие важные в реакторных расчетах функционалы (интеграл столкновений, коэффициенты резонансной самоэкранировки и т. п.) можно быстро вычислять аналитически.

Параметры, определяющие Паде-аппроксиманту, можно выбрать многими способами, например, взять коэффициенты или корни полиномов $P_N(E)$ и $Q_M(E)$. Один из способов, наиболее подходящий для наших целей, — представление в виде полюсного разложения

$$f_{N,M}^{[L]}(E) = C + \sum_{k=1}^{l_1} \frac{ak}{E - p_k} + \sum_{i=1}^{l_2} \frac{\alpha_i (E - \varepsilon_i) + \beta_i}{(E - \varepsilon_i)^2 + \gamma_i^2}.$$
 (3)

Такое разложение можно получить, найдя корни $Q_M(E)$ (действительные полюса должны, естественно, лежать за пределами рассматриваемого интер-

вала). Выражение (3) является по существу обобщенной многоуровневой формулой резонансного анализа, и входящим в него параметрам можно во многих случаях придать ясный физический смысл. Однако для исследования статистических характеристик полученной аппроксиманты более удобной оказывается предложенная в работах [12, 13] параметризация опорными ординатами. Если выбрать L произвольных значений аргумента E_v и записать систему уравнений

$$f(E_{v}, p_{1}, ..., p_{L}) = f_{v}; v = 1, 2, ..., L,$$
(4)

определяющую совокупность (p_v) как функцию совокупности (f_v), то значения f_v можно рассматривать как новые назависимые параметры. Назовем их опорными ординатами.

Погрешности опорных ординат непосредственно задают «коридор ошибок» вдоль кривой. Кроме того, все эти параметры имеют одинаковую размерность, и аппроксиманта является в достаточно общем случае их однородной симметричной функцией первого порядка (последнее весьма важно). По теореме Эйлера об однородных функциях первого порядка справедливо следующее их представление:

$$f(E, f_1, ..., f_L) = \sum_{\nu=1}^{L} f \frac{\partial f}{\partial f_{\nu}}.$$
(5)

Хотя оно и не линейно по f_v (производные также зависят от f_v), но в некоторых отношениях, как будет показано ниже, может сыграть роль линейного разложения по ортогональным функциям. Выбор значений абсцисс E_v произволен, что делает параметризацию опорными ординатами исключительно гибкой. Выбор можно подчинить некоторым требованиям оптимальности и сделать однозначным. Два варианта такого выбора рассмотрены ниже.

Построение Паде-аппроксиманты. Система уравнений (2) приводится к линейной относительно коэффициентов полиномов P_N и Q_M , однако с ее помощью можно решить лишь задачу интерполяции. Задача МНК, когда число экспериментальных точек N_{ex} больше числа параметров L, при Паде-аппроксимации нелинейна. Сложность численного решения этой задачи с увеличением L возрастает. Поэтому в работах [8, 9] предложен приближенный метод ее решения путем минимизации статистической суммы на дискретном подмножестве значений параметров f_v . При этом в качестве опорных выбираются в различных комбинациях L экспериментальных значений. Сходимость метода оказалась вполне приемлемой. Детали соответствующего итерационного процесса описаны в публикации [8]. Теоретические оценки показывают, что среднее квадратичное отклонение аппроксиманты, полученной методом перебора, от решения задачи МНК в $\sqrt{N_{ex}/L} \cdot a$ раз меньше, чем отклонение последней от точной кривой. Здесь значение a порядка единицы. Если отношение N_{ex}/L достаточно велико, то аппроксиманта, полученная дискретной

оптимизацией, статистически эквивалентна решению задачи МНК. Если же N_{ex}/L порядка немногих единиц, то решение можно уточнять, минимизируя статистическую сумму градиентными методами, поскольку для производных по опорным ординатам, входящим в равенство (5), легко получается явное выражение [см. ниже равенство (9)].

Паде-аппроксимацию на протяжении нескольких лет авторы использовали для представления в аналитической форме разного рода экспериментальных и оцененных данных в нейтронной и ядерной физике [10, 12—17]. На рис. 1 показаны аппроксиманты, относящиеся к различным этапам обработки нейтронных данных и построенные для временного спектра на выходе анализатора (см. рис. 1*a*) и для оцененной кривой сечения пороговой реакции в поточечном задании (см. рис. 1*б*). На рис. 2*a* и 3*a* приведены примеры обработки модельной задачи и построения оцененной кривой по совокупности экспериментальных данных разных авторов. Примеры различаются по степени сложности (число используемых параметров приблизительно равно четырем на один «пик»). Метод использовали для аппроксимации резонансных кривых с полным числом параметров $L \leq 40$.



Рис. 1. Результаты Паде-аппроксимации: *а* — временного спектра при измерении сечения реакции 52 Cr(*p*, *n*) [19] для числа параметров *L* = 28; *б* — оцененных данных по сечению реакции 16 O(*n*, *p*) 16 N в поточечном задании (библиотека БОСПОР, полные результаты ее аналитической аппроксимации собраны в работе [143]); • — эксперимент; — — аппроксиманта



Рис. 2. Результаты обработки модельной задачи [функция, определяемая выражением (18), значения которой рандомизированы с разбросом ($\Delta f/f$) = 5 %]:

а — Паде-аппроксиманта, построенная дискретной оптимизацией;
 б — оценка погрешности аппроксимации по формулам (7) и (9) (двойная штриховка);
 одинарная штриховка — экспериментальная погрешность; — аппроксиманта, отсчитанная от истинной кривой; • — эксперимент



Рис. 3. Результаты построения оцененной кривой $\sigma(E)$ для реакции ²³⁸U(*n*, 2*n*) по совокупности экспериментальных данных [14ж]: *а* — Паде-аппроксиманта; *б* — оценка погрешности аппроксимации (сплошная плавная кривая); значения экспериментальных погрешностей показаны ломаной линией

Варьирование выбора опорных абсцисс. Статистически оптимальная Паде-аппроксимация. Рассмотрим следующую задачу. Пусть известно, что измеряемая зависимость описывается рациональной функцией ранга L, и пусть измерения проводятся при значениях аргумента E_{μ} , которые можно выбирать произвольно в пределах заданного интервала, а абсолютная точность измерения фиксирована и не зависит от E. Это означает, что измеренные значения

$$F_{\mu} = f(E_{\mu}) + \Delta_{\mu}, \ \mu = 1, 2, ..., L.$$
(6)

где $f(E_{\mu})$ — значения истинной рациональной функции, а Δ_{μ} — случайные, одинаково нормально распределенные величины. Интерполирующая функция $f^{[L]}(E)$ строится подстановкой F_{μ} в выражение (1) с последующим решением этой системы. Тогда значения $f^{[L]}(E)$ в произвольных точках рассматриваемого интервала являются случайными величинами, распределение которых зависит от выбора узлов интерполяции E_{μ} .

В качестве критерия оптимальности выбора E_{μ} возьмем минимизацию тах $\Delta^2(E)$ — максимума математического ожидания квадрата отклонения значений интерполирующей функции от истинной в рассматриваемом интервале. Средняя квадратичная погрешность описания равна при малых Δ_{μ}

$$\Delta^{2}(E) = \sum_{\mu=1}^{L} \left(\frac{\partial f^{[L]}(E)}{\partial f_{\mu}} \right)^{2} \overline{\Delta}_{\mu}^{2} = \Delta^{2} \sum_{\mu=1}^{L} \left(\frac{\partial f^{[L]}(E)}{\partial f_{\mu}} \right)^{2}.$$
 (7)

Правая часть получается при $\overline{\Delta}_{\mu}^2 = \Delta^2$.

Входящие в уравнение (8) производные аппроксимант по независимым параметрам (опорным ординатам f_v) обладают очевидным свойством:

$$\frac{\partial f^{[L]}(E)}{\partial f_{\nu}}\bigg|_{E=E_{\mu}} = \delta_{\mu\nu} .$$
(8)

Из определения (2) также следует, что все функции $\partial f^{[L]}(E)/\partial f_{v}$ должны быть отношением двух полиномов, причем полином в знаменателе равен $Q_{M}^{2}(E)$, а полином в числителе имеет степень M + N и должен удовлетворять равенствам (8). Это однозначно определяет

$$\frac{\partial f^{[L]}(E)}{\partial f_{\mu}} = \frac{\prod_{\nu \neq \mu} (E - E_{\nu}) Q_{M}^{2}(E_{\mu})}{Q_{M}^{2}(E) \prod_{\nu \neq \mu} (E_{\mu} - E_{\nu})}.$$
(9)

Итак, потребуем, чтобы $\Delta^2(E) \leq \Delta^2(E_\mu) = \Delta^2$ при $E \neq E_\mu$. Тогда необходимым условием оптимальности выбора опорных точек будет

r • 1

$$\frac{\partial}{\partial E} \frac{\partial f^{[L]}(E)}{\partial f_{\mu}} \bigg|_{E=E_{\mu}} = 0; \ \mu=1, 2, \dots, L.$$
(10)

В работах [12, 13] показано, что у задачи нахождения совокупности E_{μ} , удовлетворяющих системе (10), существует простая электростатическая аналогия. Значения E_{μ} соответствуют равновесным координатам системы L зарядов единичной величины и одинакового знака, которые могут свободно двигаться по оси E, взаимодействуя по логарифмическому закону между собой, а также с M зарядами противоположного знака и удвоенной величины, закрепленными в точках плоскости с координатами x_k^0 и y_k^0 , если комплексные числа $E_k^0 = x_k^0 \pm iy_k^0$



Рис. 4. Максимально информативные точки и погрешность статистически оптимальной интерполяции для изолированного резонанса. В средней части изображена зависимость $f(E) = (1 + 0.2E) / (1 + E^2)$, в нижней — расположение максимально информативных точек (\circ) и полюсов аппроксиманты в комплексной плоскости (\bullet) для иллюстрации электростатической аналогии, в верхней — зависимость по-

грешности интерполяции $\Delta(E)$

являются корнями знаменателя аппроксиманты *f*. Это утверждение иллюстрируется рис. 4 для простейшего случая изолированного резонанса единичной полуширины при $Q_M = 1 + E^2$. В общем случае вычисление четырех статистически оптимальных абсцисс дает $\pm (1 \pm 2/\sqrt{5})^{1/2}$. Оптимальные точки «отталкиваются» друг от друга и «притягиваются» к полюсам аппроксиманты, т. е. к резонансным энергиям.

В частном случае полиномиальной интерполяции $[Q_M(E) \equiv 1]$ «внешние» заряды отсутствуют, и оптимальные абсциссы совпадают с решением задачи о так называемом максимальном расположении точек на отрезке [18]. Если линейным преобразованием свести рассматриваемый интервал значений E к [-1, 1], то E_{μ} будут нулями производной полинома Лежандра порядка L - 1 с добавлением концов интервала $E_{1,L} = \pm 1$, а для $\Delta^2(E)$ получим следующее явное выражение:

$$\Delta^{2}(E) = 1 - (1 - E^{2}) \left[P_{L-1}'(E) \right]^{2} / L(L+1), \qquad (11a)$$

где $P_{L-1}(E)$ — полином Лежандра.

Интересен точный результат для «диагональной» Паде-интерполяции (при M = N). В этом случае $\Delta^2(E) = \Delta^2 = \text{const}$, т. е. погрешность аппроксиманты постоянна и равна погрешности измерения (или вычисления, если интерполируются расчетные значения). В другом важном частном случае «околодиагональной» Паде-аппроксиманты (N = M - 1)

$$\Delta^{2}(E) = \left[1 - \prod_{\mu=1}^{L} \left(E - E_{\mu}\right)^{2} / \mathcal{Q}_{M}^{4}(E)\right] \Delta^{2} \leq \Delta^{2}.$$
(116)

Следует отметить, что при неоптимальном (например, эквидистантном) выборе узлов погрешность интерполяции быстро растет с увеличением порядка; при $L \gtrsim 10$ она приобретает характер «раскачки», когда значения функции между углами неограниченно и неконтролируемо возрастают по модулю. Значения E_{μ} , выбранные описанным способом, назовем статистически оптимальными абсциссами первого рода или максимально информативными точками.

Другой вариант выбора оптимальных абсцисс связан с задачей МНК. Он позволяет получить диагональную ковариационную матрицу для опорных ординат при статистически независимых экспериментальных значениях.

Пусть F_i ($i = 1, 2, ..., N_{ex}$) — экспериментальные значения аппроксимируемой функции, измеренные при значениях аргумента E_i с независимыми нормально распределенными погрешностями, дисперсии которых заданы и равны σ_i^2 . Тогда

$$S = \sum_{i=1}^{N_{ex}} \frac{\left[f^{[L]}(E_i) - F_i \right]^2}{\sigma_i^2} -$$
(12)

статистическая сумма, минимизируемая в МНК. Подчиним выбор опорных абсцисс E_{μ} ($\mu = 1, 2, ..., L$) требованию, чтобы информационная $A_{\mu\nu}$ и обратная ей ковариационная $V_{\mu\nu}$ матрицы были диагональными. По определению

$$\mathbf{A}_{\mu\nu} = \frac{\partial S}{\partial f_{\mu}} \frac{\partial S}{\partial f_{\nu}} \equiv \left(\mathbf{V}^{-1} \right)_{\mu\nu} = \lambda_{\mu} \delta_{\mu\nu} \,. \tag{13}$$

Здесь усреднение ведется по распределению отклонений экспериментальных значений от истинных. Подставив сумму (12) в уравнение (13), получим

$$\mathbf{A}_{\mu\nu} = \sum_{i=1}^{N_{ex}} \frac{1}{\sigma_i^2} \left[\frac{\partial f(E_i)}{\partial f_{\mu}} \right] \left[\frac{\partial f(E_i)}{\partial f_{\nu}} \right] = \lambda_{\mu} \delta_{\mu\nu}.$$
(14)

Для диагональности этой матрицы необходимо и достаточно, чтобы производные $\partial f(E)/\partial f_{\mu}$ были ортогональны на дискретном множестве значений аргумента E_i с весом $1/\sigma_i^2$. В этом случае

$$\left(\Delta f_{\rm v}\right)^2 = 1/\lambda_{\rm v} \tag{15}$$

дисперсии опорных ординат как параметров аппроксиманты.

Используя известные свойства ортогональных полиномов [18] и учитывая уравнение (9), нетрудно убедиться, что для выполнения равенств (14) достаточно выбрать в качестве E_{μ} корни полинома $p_L(E)$ из системы полиномов $p_0(E)$, $p_1(E)$, ..., $p_L(E)$ ортогональных на множестве E_i с весом $1/[\sigma_i^2 Q_M^4(E_i)]$, т. е. удовлетворяющих соотношениям

$$\sum_{i=1}^{N_{ex}} p_k\left(E_i\right) p_l\left(E_i\right) / \sigma_i^2 Q_M^4\left(E_i\right) = N_k \delta_{kl} .$$
(16)

Способы рекурсивного построения таких систем полиномов хорошо известны [18]. После выбора опорных абсцисс указанным способом (их можно назвать статистически оптимальными абсциссами второго рода) оценка среднего квадрата погрешности значения аппроксиманты в произвольной точке определяется выражением (7), а коэффициент корреляции значений $f^{[L]}(E_1)$ и $f^{[L]}(E_2)$ в двух произвольных точках равен

$$\rho(E_1, E_2) = \sum_{\mu=1}^{L} \frac{\partial f^{[L]}}{\partial f_{\mu}} (E_1) \frac{\partial f^{[L]}}{\partial f_{\mu}} (E_2) (\Delta f_{\mu})^2 / \sqrt{\Delta^2(E_1) \Delta^2(E_2)} .$$
(17)

Проиллюстрируем описанный метод вычисления погрешностей аппроксиманты. Начнем с модельного примера, для которого была выбрана аппроксимация функции

$$f(E) = \frac{1}{\left(E+0,5\right)^2+0,5^2} + \frac{1+0,2E}{\left(E-0,5\right)^2+0,3^2},$$
(18)

«измеренной» в 41 эквидистантной точке в интервале [-1, 1] с погрешностью, которая задавалась датчиком случайных чисел, выбирающим их из нормального распределения со средним значением 0 и дисперсией, соответствующей стандартному отклонению 5 %. На рис. 2a приведены эти смоделированные «экспериментальные» точки и построенная аппроксиманта, а на рис. 2b — отклонение аппроксимирующей функции от истинной. Заштрихованные области соответствуют коридорам ошибок — «экспериментальному» и определяемому формулой (7). Как и следовало ожидать, точки аппроксиманты укладываются во второй, примерно вдвое более узкий коридор с вероятностью, соответствующей стандартному отклонению. Значения статистически оптимальных абсцисс второго рода E_{μ} , опорных ординат f_{μ} и погрешностей опорных ординат Δf_{μ} для этого примера приведены в таблице.

Модельная задача (рис. 2)		Оценка сечения реакции ²³⁸ U(<i>n</i> , 2 <i>n</i>) (рис. 3)				
μ	E_{μ}	f_{μ}	Δf_{μ}	<i>Е</i> _μ , МэВ	f_{μ} , мб*	Δf_{μ} , мб*
1	-0,936	2,650	0,0665	5,55	86,5	4,2
2	-0,669	4,184	0,0870	7,09	508	13,2
3	-0,368	4,838	0,0995	8,24	1209	22,5
4	-0,080	4,652	0,0965	9,75	1405	24,5
5	0,193	7,006	0,1503	11,62	1447	54,1
6	0,432	12,375	0,2935	13,61	1052	19,4
7	0,656	10,254	0,2268	14,60	720	11,8
8	0,927	4,790	0,1101	17,29	335	16,7

Опорные абсциссы E_{μ} , ординаты f_{μ} , обеспечивающие диагональность ковариационной матрицы, и погрешности опорных ординат Δf_{μ}

*1 б =10⁻²⁸ м²

На рис. 4 подобная обработка данных проведена для оценки сечения реакции 238 U(*n*, 2*n*) в интервале энергии от пороговой до 19 МэВ (пример взят из работы [14ж]). Отсчет на рис. 4 ведется от значений аппроксиманты. Хотя число параметров в этом случае такое же, как в первом (восемь), резкие скачки в зависимости экспериментальной погрешности от энергии (обрабатывались совместно данные многих работ с разной точностью) ухудшают условия численного построения нужной системы ортогональных полиномов, однако это осложнение не вызывает затруднений. Численные данные, как и для модельной задачи, приведены в таблице. Как видно, погрешность оценки везде заметно меньше огибающей экспериментальной погрешности.

Заключение. Изложенный метод построения рациональных аппроксимант и получения их статистических характеристик является достаточно удобным и универсальным. Если учесть, что экспоненциально-гармонический анализ также сводится к рациональной аппроксимации, только не самой функции, а результатов применения к ней преобразований Фурье и Лапласа [15a, δ], то область применения этого метода охватывает практически все важнейшие системы аппроксимирующих функций. Наличие у Паде-аппроксиманты полюсных особенностей является весьма ценным аналитическим свойством, существенно расширяющим область сходимости и увеличивающим ее скорость по сравнению с полиномиальной аппроксимацией. Особенно естественным инструментом является Паде-аппроксимация при обработке резонансных кривых, так как резонансы соответствуют комплексным полюсам аппроксиманты. Но и в общем случае аналитическое представление данных в этой форме является удобным и компактным. Так, представление в виде рациональных функций данных о сечениях пороговых реакций под действием нейтронов (библиотека БОСПОР [143]) привело примерно к двадцатикратному сокращению подлежащей хранению числовой информации по сравнению с поточечным заданием при той же точности описания. Все это позволяет рассматривать Паде-аппроксимацию как перспективный метод представления нейтронных и ядерных данных.

Список литературы

- 1. Pade H. // Ann. l'Ecole Norm., 1892, vol. 9, no. 3, p. 3.
- 2. Baker G. Essentials of Pade approximants. N.Y., Acad. Press, 1975.
- 3. Baker G., Gammel J. The Pade approximants in theoretical Physics. N.Y., Acad. Press, 1970.
- 4. Graves-Morris P. Pade approximants and applications. N.Y., Acad. Press, 1973.
- 5. Zinn-Justin J. // Phys. Rep., 1971, vol. 1C, no. 3, p. 56.
- 6. Basdevant J. // Fortschr. der Physik, 1972, vol. 20, p. 283.
- 7. Апресян А.А. // Изв. вузов. Сер. Радиофизика, 1979, т. XXII, № 6, с. 653.
- 8. Виноградов В.Н., Гай Е.В., Работнов Н.С. Препринт ФЭИ-484. Обнинск, 1974.
- 9. Виноградов В.Н., Гай Е.В., Работнов Н.С. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1975, вып. 20 (1), с. 13.

- 10. Виноградов В.Н. и др. // Ядерная физика, 1977, т. 26, вып. 5, с. 936.
- 11. Данилов О.Л. и др. Цепные дроби. Математический анализ, М., Физматгиз, 1961, с. 226.
- 12. Виноградов В.Н., Гай Е.В., Работнов Н.С. // Журн. вычисл. матем. и матем. физики, 1981, т. 21, № 8, с. 1557.
- 13. Виноградов В.Н., Гай Е.В., Работнов Н.С. Препринт ФЭИ-1328. Обнинск, 1982.
- Виноградов В.Н. и др. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы; а) 1976, вып 21, с. 21; б) 1977, вып. 25, с. 76; в) 1977, вып. 25, с. 81; г) 1979, вып. 33, с. 31; д) 1979, вып. 34, с. 70; е) 1981, вып. 42, с. 9; ж) 1982, вып. 45, с. 33; з) 1982, вып. 47, с. 66.
- Виноградов В.Н., Гай Е.В., Работнов Н.С. а) Препринт ФЭИ-513. Обнинск, 1974; б) Препринт ФЭИ-554. Обнинск, 1975; в) Препринт ФЭИ-951. Обнинск, 1979; г) Обзор ФЭИ ОБ-125. Обнинск, 1981; д) Препринт ФЭИ-1279. Обнинск, 1982.
- Виноградов В.Н. и др. // В кн.: Нейтронная физика. М., изд. ЦНИИАтоминформ, 1976, ч. 1, с. 165; ч. 4, с. 104.
- 17. Виноградов В.Н. и др. // Там же, 1980, с. 58.
- 18. Сегё Г. Ортогональные многочлены. М., Физматгиз, 1962, с. 127.
- 19. Бирюков Н.С. и др. // Ядерная физика, 1982, т. 35, вып. 4, с. 814.

Поступила в Редакцию 22.04.83

Использование Паде-аппроксимации для расчета подгрупповых констант и учета эффекта Доплера в резонансном анализе нейтронных сечений

С. А. Бадиков, Е. В. Гай, Н. С. Работнов, В. В. Синица

Описаны методы использования приближений Паде первого и второго родов для расчета подгрупповых констант путем аппроксимации рациональными функциями зависимостей реакторных функционалов от сечения разбавления. Показано, что наиболее эффективен алгоритм, использующий приближение второго рода. Предложен новый способ учета эффекта Доплера в резонансном анализе нейтронных сечений, основанный на приближение гауссова ядра соответствующего интегрального уравнения функцией $K_{\exp}(E)=A/ch(\delta E)$ и аппроксимации сечения, измеренного при конечной температуре, рациональной функцией, представленной в виде полюсного разложения. Приводятся примеры использования описанных алгоритмов.

В работе [1] описан метод аналитической аппроксимации данных в нейтронной физике, основанный на использовании рациональных функций (приближения Паде). В настоящей статье результаты развития этого метода применяют к двум конкретным задачам нейтронно-физических расчетов: получение групповых констант в резонансной области энергии и учет эффекта Доплера при резонансном анализе нейтронных сечений. Как известно, групповые константы, используемые в многогрупповых методах расчета реакторов и защиты [2], выражаются через функционалы сечений вида

$$F(\sigma_0, N) = \int_{\Delta E} \frac{\varphi(E) dE}{\left[\sigma(E) + \sigma_0\right]^N} \bigg/ \int_{\Delta E} \varphi(E) dE;$$
(1)

$$F_{x}(\sigma_{0},N) = \int_{\Delta E} \frac{\sigma_{x}(E)\varphi(E)dE}{\left[\sigma(E) + \sigma_{0}\right]^{N}} / \int_{\Delta E} \varphi(E)dE, \qquad (2)$$

где $\sigma_x(E)$, $\sigma(E)$ — сечение реакции типа *x* и полное сечение в зависимости от энергии *E* соответственно; σ_0 — параметр, называемый сечением разбавления; $\varphi(E)$ — стандартный спектр нейтронов; ΔE — групповой энергетический интервал. Информация о резонансной структуре сечений представлена в интегральном виде в зависимости функционалов (1) и (2) от сечения разбавления. Обычно эта зависимость задана либо в поточечном представлении, например в виде факторов самоэкранировки [3], либо при помощи формул аппроксимации

$$F_n(\sigma_0, 1) \equiv F_n(\sigma_0) = \sum_{i=1}^n \frac{a_i}{\sigma_i + \sigma_0};$$
(3)

Атомная энергия, 1986, т. 60, вып. 1, с. 29 — 34.

$$F_{x,n}(\sigma_0, 1) \equiv F_{x,n}(\sigma_0) = \sum_{i=1}^n \frac{a_i \sigma_{x,i}}{\sigma_i + \sigma_0}$$
(4)

с параметрами a_i , σ_i , $\sigma_{x,i}$ [3].

При определенных связях и физических ограничениях, накладываемых на значения параметров, а именно

$$\sum_{i} a_i = 1; \quad \sum_{x} \sigma_{x,i} = \sigma_i; \quad a_i, \quad \sigma_i, \quad \sigma_{x,i} > 0,$$

последние можно непосредственно использовать в качестве подгрупповых констант в специально развитых подгрупповых методах расчета полей нейтронов [4].

На первом этапе расчета подгрупповых констант [2] зависимость от σ_0 функционала $F(\sigma_0) \equiv F(\sigma_0, 1)$, определяемого лишь полным сечением, аппроксимируют рациональной функцией.

Учитывая, что $\sigma(E) > 0$, а $\int_{0}^{E} \phi(E') dE'$ — неубывающая функция, и разбив

 ΔE на интервалы, в которых $\sigma(E)$ меняется монотонно, перейдем к интегрированию по σ [2]. В результате получим интеграл Стилтьеса

$$\int_{\sigma_{\min}}^{\sigma_{\max}} p(\sigma) d\sigma / (\sigma + \sigma_0),$$

в котором $p(\sigma)$ — кусочно-гладкая положительная функция на интервале [σ_{\min} , σ_{\max}], поэтому $P(\sigma) = \int_{0}^{\sigma} p(\sigma') d\sigma'$ — кусочно-гладкая неубывающая функция.

Расчет подгрупповых констант основан на аппроксимации этой функции кусочно-постоянной функцией скачков $P(\sigma) \approx \sum_{\sigma_i < \sigma} a_i$, i = 1, ..., n, где $a_i > 0$. При

этом $p(\sigma)$ аппроксимируем суммой δ -функций

$$p_n(\sigma) = \sum_{i=1}^n a_i \delta(\sigma - \sigma_i),$$

а $F(\sigma_0)$ — рациональной функцией $F_n(\sigma_0)$.

Заменяя в подынтегральном выражении

$$F(\sigma_0) = \int \frac{p(\sigma) d\sigma}{\sigma + \sigma_0}$$

дробь $1/(\sigma+\sigma_0)$ сходящимися в соответствующих областях рядами по степеням σ_0/σ и σ/σ_0 , задачу аппроксимации $F(\sigma_0)$ сформулируем как усеченную проблему моментов [5]. Известно, что получаемые при этом a_i и σ_i положительные [6]. В настоящей работе для построения $F_n(\sigma_0)$ используют метод Паде-аппроксимации. Паде-аппроксимантой степенного ряда $\sum_{l=0}^{\infty} \alpha_l z^l$ (приближением Паде

первого рода) называют рациональную функцию $P_N(z)/Q_M(z)$, где $P_N(z)$ и $Q_M(z)$ — полиномы степеней N и M соответственно, разложение которой по степеням z совпадает с исходным рядом до слагаемого $\alpha_{N+M} z^{N+M}$ включительно. Рекуррентный алгоритм построения такой аппроксиманты, позволяющий обойтись без явного решения системы линейных уравнений, приведен в работах [6, 7]. Представляя подынтегральное выражение функционала $F(\sigma_0)$ в виде рядов по степеням ($\sigma_0 - \sigma'$) и ($\sigma_0 - \sigma'$)⁻¹, получим два разложения

$$F(\sigma_0) = \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^l (\sigma_0 - \sigma')^l F(\sigma', l+1);$$
(5)

$$F(\sigma_0) = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} F(\sigma', -k+1) / (\sigma_0 - \sigma')^k.$$
(5)

Полагая $z = \sigma_0 - \sigma'$ и $\alpha_i = (-1)^i F(\sigma', l+1)$, можно, постепенно наращивая число используемых α_i построить приближение $F_n(\sigma_0) = P_n(\sigma_0 - \sigma')/Q_n(\sigma_0 - \sigma')$. Переходя затем к полюсному представлению этой аппроксиманты, получим искомые параметры a_i и σ_i в выражении (3). Аналогичным образом, рассматривая ряд (5') как ряд по степеням $t = (\sigma_0 - \sigma')^{-1}$, можно использовать тот же алгоритм и построить приближение Паде $P'_{n-1}(t) / Q'_n(t)$ для функций F(1 / t) / t. Возвращаясь затем к переменной $\sigma_0 - \sigma_1$ и переходя к полюсному представлению, получим параметры a'_i и σ'_i , которые будут совпадать с a_i и σ_i лишь в том случае, если $F(\sigma_0)$ действительно есть рациональная функция (3). Заметим, что построение Паде-аппроксиманты по ряду (5') автоматически обеспечивает строгое выполнение важного для подгрупповых констант нормировочного ус-

ловия $\sum_{i=1}^{n} a_i = 1$.

Итак, вычислив для некоторого σ' значения функционалов (1) с положительными и отрицательными *N*, т. е. фактически коэффициенты разложений (5) и (5'), можно построить рациональную функцию, аппроксимирующую *F*(σ_0) во всей области изменения σ_0 . Более того, учитывая, что при этом $p_n(\sigma) = \sum_{i=1}^n a_i \delta(\sigma - \sigma')$, для функционалов типа (1) с другими *N* получим про-

стые аппроксиманты

$$F(\sigma_0, N) = \sum_{i=1}^{n} \frac{a_i}{\left(\sigma_0 + \sigma_i\right)^N}.$$
(6)

Однако поскольку сложность достаточно точного вычисления $F(\sigma', N)$ резко увеличивается с ростом |N|, рассмотрим еще один способ аппроксимации,

позволяющий обойтись случаем малых |N| за счет совместного использования первых членов обоих рядов (5) и (6). Рассмотрим рациональное приближение (3), где n_i первых коэффициентов разложения по положительным степеням ($\sigma_0 - \sigma'$) суть $\alpha_i = (-1)^i F(\sigma', l+1)$, а $n_2 = 2n - n_1$ первых коэффициентов разложения по отрицательным степеням суть $\beta_k = (-1)^{k-1} F(\sigma', -k+1), k \ge 1$, т. е. совпадают с соответствующими коэффициентами разложений (4) и (5). Связь этих коэффициентов с параметрами полюсного представления аппроксиманты очевидна:

$$\alpha_{l} = (-1)^{l} \sum_{i=1}^{n} \frac{a_{i}}{\left(\sigma' + \sigma_{i}\right)^{l+1}};$$

$$\beta_{k} = (-1)^{k-1} \sum_{i=1}^{n} a_{i} \left(\sigma' + \sigma_{i}\right)^{k-1}.$$
(7)

Рассмотрим выражение

$$\Phi(x) = \alpha_{n_1 - 1} + \alpha_{n_1 - 2}x + \dots + \alpha_0 x^{n_1 - 1} - \beta_1 x^{n_1} - \beta_2 x^{n_1 + 1} - \dots \beta_{n_2} x^{n_1 + n_2 - 1}$$
(8)

и построим при помощи алгоритма приближения Паде его аппроксиманту

$$R_{n-1}(x)/S_n(x) = \sum_{i=1}^n c_i/(x+x_i).$$

Сравнивая формулу (7) с выражениями для этой аппроксиманты

$$\alpha_{l} = (-1)^{l-n_{1}-1} \sum_{i=1}^{n} \frac{c_{i}}{x_{i}^{n_{1}-l}};$$

$$\beta_{k} = (-1)^{n_{1}+k} \sum_{i=1}^{n} \frac{c_{i}}{x_{i}^{n_{1}+k}}$$
(9)

и используя единственность Паде-приближения, получим следующие выражения, связывающие параметры полюсного представления аппроксиманты (3), построенной с учетом положительных и отрицательных моментов α_l , β_k , с параметрами Паде-аппроксиманты ряда (8):

$$\sigma' + \sigma_i = 1/x_i; \ a_i = (-1)^{n_1+1} c_i / x_i^{n_1+1}$$

Существует альтернативный способ построения рациональной аппроксиманты, при котором используют не разложения в ряды, а значения $F(\sigma_0^{(m)})$ в 2*n* различных точках $\sigma_0^{(m)}$. Применение рекуррентного алгоритма построения такой функции $P_{n-1}(\sigma_0)/Q_n(\sigma_0)$ (приближение Паде второго рода) позволяет и в этом случае обойтись без решения системы уравнений [7]. Хотя условие $\sum_i a_i = 1$ выполняется приближенно, у этого способа есть преимущества: вы-

числяя значения $F(\sigma_0)$ в большем числе точек, чем это требуется для построения приближения (3), можно воспользоваться методом дискретной оптимизации (перебора) [7]. Этот метод позволяет отобрать из множества возможных рациональных решений, описывающих различные наборы точек, одно, оптимальное относительно некоторого критерия, например обеспечивающее наименьшую максимальную ошибку при вычислении других функционалов. Выполнение нормировочных условий обеспечивают потом несложной корректирующей процедурой.

Наконец, наиболее общим является подход, в котором используют разложение по положительным и отрицательным моментам в различных точках. Алгоритм построения такого приближения с учетом возможности дискретной оптимизации приведен в работе [8], однако в отличие от четырех предыдущих алгоритмов он не был численно реализован.

Из опыта использования Паде-аппроксимации для расчета подгрупповых констант следует: применение приближения Паде первого рода для аппроксимации зависимостей $F(\sigma_0)$ и $F_x(\sigma_0, 1)$ эквивалентно методу моментов, используемому в настоящее время в практике подготовки констант, однако алгоритмы для определения аппроксимационных параметров в Паде-приближении бывают более эффективными; оптимальным является алгоритм, использующий приближение Паде второго рода и имеющий очевидное преимущество: для определения параметров аппроксиманты не требуется вычисления дополнительных функционалов $F(\sigma', N)$, $N \neq 1$, что значительно сокращает объем расчетов (табл. 1). Охарактеризуем кратко данные табл. 1. Объектом сравнения выбран групповой функционал

$$\overline{\sigma(\sigma_0)} = \int_{\Delta E} \frac{\sigma(E)\phi(E)dE}{\left[\sigma(E) + \sigma_0\right]^2} \bigg/ \int_{\Delta E} \frac{\phi(E)dE}{\left[\sigma(E) + \sigma_0\right]^2}.$$
(10)

Таблица 1.

$\sigma_0 \qquad \qquad F(\sigma_0)$	$\overline{\mathbf{\sigma}}\left(\mathbf{\sigma}_{0} ight)$	$ ilde{\sigma}\left(\sigma_{0} ight)$
0 0,02211	33,04	33,12
10 0,01713	35,86	35,91
30 0,01207	39,83	39,92
10 ² 0,026177	47,90	47,95
3.10^2 0,022674	59,30	59,42
10 ³ 0,039184	76,45	76,52
3·10 ³ 0,033227	91,86	92,06
10 ⁴ 0,049896	102,03	102,18

Зависимость момента $F(\sigma_0) = \langle 1 / (\sigma + \sigma_0) \rangle$ от сечения разбавления и сравнение подгрупповой аппроксимации с точным блокированным сечением

В качестве спектра принимали стандартный спектр Ферми $\Phi(E) = 1 / E$; ΔE — групповой интервал. Расчеты проводили для полного сечения ²³⁵U в двадцатой группе разбиения БНАБ [3] ($\Delta E = 10,0 \div 21,5$ эВ), где имеется достаточно сложная резонансная структура. Значения сечения восстанавливали по резонансным параметрам библиотеки ENDF/B V [10] при T = 300 К. Сначала были получены точные значения функционала $F(\sigma_0)$ непосредственным вычислением интеграла (1). Затем построением Паде-аппроксиманты второго рода (3) определяли подгрупповые параметры a_i и σ_i . Полученные значения следующие: $a_i = 0,0548$; 0,1719; 0,4840; 0,2893; $\sigma_i = 823,2$; 176,3; 52,91; 24,35 соответственно. Достаточная точность ~1 % была получена при 2n = 8. Затем при помощи подгрупповых параметров восстановили зависимость от σ_0 по формуле

$$\widetilde{\sigma(\sigma_0)} = \frac{\sum a_i \sigma_i / (\sigma_i + \sigma_0)^2}{\sum a_i / (\sigma_i + \sigma_0^2)}.$$
(11)

Устойчивость программы, реализующей алгоритм, качество аппроксимации и восстановления на всех этапах удовлетворительны. В настоящее время программу включают в существующий комплекс по расчету групповых констант [9].

Эффект Доплера играет важную роль в нейтронной и реакторной физике. Остановимся на одном аспекте этого вопроса — приведении к нулевой температуре энергетической зависимости сечения в резонансной области, измеренного при $T \neq 0$. Интегральное уравнение, связывающее две функции энергии $\sqrt{E}\sigma(E,0)$ и $\sqrt{E}\sigma(E,T)$, в точной форме имеет довольно сложный вид вследствие неразностного ядра, однако при не слишком близкой нулю энергии нейтронов удовлетворительную точность обеспечивает общепринятая газовая модель в приближении доплеровской ширины, согласно которой

$$\int_{-\infty}^{\infty} K_G(E - E', T) \sqrt{E'} \sigma(E', 0) dE' = \sqrt{E} \sigma(E, T),$$
(12)

где гауссово ядро

$$K_G(E,T) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\Delta(T)} \exp\left[-E^2/\Delta^2(T)\right];$$
(13)

 $\Delta = \sqrt{KTE/(A+1)}$ — доплеровская ширина; *K* — постоянная Больцмана; *A* — атомная масса ядра-мишени. Задача решения уравнения (12) с приближенно известной правой частью относится к классу некорректных, в которых малость вариации исходных данных [в данном случае $\sigma(E, T)$] не гарантирует малости изменения решения. Кроме того, для ядра (13) даже формально не применим метод точного решения уравнения (12) с использованием преобразования Фурье, поскольку Фурье-образ ядра, имеющий также гауссову зависимость от аргумента, слишком быстро убывает, и интегральное решение расходится [см. формулу (16)]. Обычный подход к таким задачам — использование метода регуляризации Тихонова [11]. Однако аппроксимация правой части уравнения (12) рациональной функцией и учет того, что искомое решение $\sigma(E, 0)$ в ней-

тронном резонансном анализе также хорошо аппроксимируется полюсным разложением, позволяет испытать более узкий проблемно-ориентированный метод приближенного решения уравнения (12). Он основан на замене ядра (13) другой функцией, Фурье-образ которой позволяет аналитически решить уравнение (12), если для правой части построена рациональная аппроксиманта

$$f(E) \equiv \sqrt{E}\sigma(E,T) \equiv \frac{P_N(E)}{Q_M(E)} = \sum_{k=1}^{l} \frac{\alpha_k (E - \varepsilon_k) + \beta_k}{(E - \varepsilon_k)^2 + \gamma_k^2} + \text{const},$$
(14)

где α_k , β_k , ε_k и γ_k — постоянные; $N \le M$ (при N < M const = 0). Фурье-образ разложения (14) имеет вид

$$\Sigma(s) = \pi \sum_{k=1}^{l} \exp\left(-i\varepsilon_k s - \gamma_k \left|s\right|\right) \left[\frac{\beta_k}{\gamma_k} - i\alpha_k \operatorname{sign}(s)\right].$$
(15)

Для реализации этого способа необходимо, чтобы интеграл Фурье

$$\varphi(E) \equiv \sqrt{E}\sigma(E,0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Sigma(s)\exp(isE)}{K(s)} ds , \qquad (16)$$

где K(s) — Фурье-образ модельного ядра, сходился и вычислялся аналитически. Один вариант приближенной замены ядра (13) хорошо известен по работе [12]. В этом случае функция Гаусса заменяется на функцию Лоренца: $K_L = A(\alpha E + 1)$ / $(E2 + \Gamma_L^2)$. Тогда приближенное уравнение решается просто: каждому резонансному слагаемому в уравнении (14) соответствует слагаемое с полушириной γ_k — Γ_L в решении. Однако это приближение является слишком грубым асимптотика гауссова ядра ~exp ($-\beta E^2$) заменяется на степенную E^{-2} . Ниже рассмотрим замену ядра (13) функцией с экспоненциальной асимптотикой

$$K_{\exp}(E) = A/\operatorname{ch}(\delta E). \tag{17}$$

Одно из условий для выбора постоянных *А* и δ очевидно: ядро должно быть нормировано

$$\int_{-\infty}^{\infty} K_{\exp}(E) dE = 1.$$
(18)

В качестве другого условия выбрано равенство вторых моментов функций (13) и (17):

$$\int_{-\infty}^{\infty} E^2 K_G(E) dE = \int_{-\infty}^{\infty} E^2 K_{\exp}(E) dE.$$
(19)

Этот выбор оказался удачнее часто используемого условия совпадения в избранных точках — в максимуме или на половине высоты. Из условий (18) и (19) следует

$$A = \operatorname{arch} 2/(\pi\Gamma); \ \delta = \operatorname{arch} 2/\Gamma; \ \Gamma = 0,593\Delta,$$
(20)

где Г — полуширина распределения (17). Фурье-образ ядра (17) имеет вид

$$\overline{K}_{\exp}(s) = 1 / \operatorname{ch}\left(\frac{s\pi\Gamma}{2\operatorname{arch}2}\right).$$
(21)

Подставив (15), (17) и (20) в (16) и взяв интеграл, получим для каждого резонансного слагаемого в формуле (14) соответствующее слагаемое вида

$$\varphi_{k}(E) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\alpha(E-\varepsilon) + \beta \left[1 - \pi \Gamma / (2\gamma \operatorname{arch} 2) \right]}{(E-\varepsilon)^{2} + \left[\gamma - \pi \Gamma / (2\operatorname{arch} 2) \right]^{2}} + \frac{\alpha(E-\varepsilon) + \beta \left[1 + \pi \Gamma / (2\gamma \operatorname{arch} 2) \right]}{(E-\varepsilon)^{2} + \left[\gamma + \pi \Gamma / (2\operatorname{arch} 2) \right]^{2}} \right\}. (22)$$

Здесь опущен индекс в обозначениях резонансных параметров.

В итоге возникает следующая схема резонансного анализа нейтронных сечений: для сечения, измеренного при $T \neq 0$, строим Паде-аппроксиманту типа (14); по формуле (22) получаем приближенное аналитическое решение, в котором каждому резонансному параметру соответствует, как правило, несколько (обычно два-четыре) полюсных слагаемых; для этой сложной функции строим более простую Паде-апроксиманту, параметры которой имеют физический смысл обычных резонансных параметров в представлении Адлера — Адлера [12]; сверткой полученного решения с гауссовым ядром и сравнением результата с исходной правой частью контролируем приемлемость полученных результатов.

Чтобы интеграл (16) сходился, необходимо выполнение неравенств $\gamma_k > \pi \Gamma / (2 \text{ arch } 2)$.

Прежде чем привести примеры, иллюстрирующие описанный алгоритм, сделаем некоторые замечания о математическом смысле этой процедуры. Уравнение (12) запишем в операторной форме

$$\hat{A}\varphi = f . \tag{23}$$

Если $[E_1, E_2]$ — интервал, на котором параметризуется сечение, и φ можно записать в виде рациональной функции с комплексными полюсами, т. е. она принадлежит пространству $L_2[E_1, E_2]$ суммируемых с квадратом на интервале функций, то уравнение (23) определяет в пространстве L_2 вполне непрерывный оператор. Обратный ему оператор неограничен, чем и объясняется некорректность задачи. Методы решения некорректных задач [11] заключаются в получении приближенного решения, непрерывно зависящего от правой части. При этом используют априорную информацию: о гладкости, выпуклости искомых кривых, о возможности выделить в классе предполагаемых решений компактное множество. Именно последнее обстоятельство используют при параметризации нейтронных сечений в области разрешенных резонансов, когда в конечномерном пространстве параметров функции вида (14) выделяют некоторое замкнутое множество, тем самым определяя компакт в пространстве $L_2[E_1, E_2]$.

В табл. 2 и на рис. 1 приведены результаты использования описанного выше метода на модели. В качестве истинной энергетической зависимости се-

чения выбрана функция (энергия дана в электрон-вольтах)

$$\sigma(E) = \frac{0.5(E - 41,5) + 1.35}{(E - 41,5)^2 + 0.25^2} + \frac{0.8(E - 40,0) + 1.5}{(E - 40,0)^2 + 0.5^2},$$
(24)

соответствующая двум интерферирующим резонансам, отстоящим друг от друга на расстоянии, равном сумме их ширин. Функция (24) свертывалась с гауссовым ядром (13) при T = 1473, 773, 273, 100 К и A = 239. К результату свертки, вычисленному в 65 эквидистантных точках на интервале $38,6 \le E \le 45$, добавляли случайную погрешность, выбранную из нормального распределения, соответствующего постоянной относительной погрешности 3 %. Полученную совокупность экспериментальных точек обрабатывали при помощи описанного алгоритма. Данные табл. 2 и рис. 1 показывают, что найденное решение вполне удовлетворительно согласовалось с истинным. На рис. 1 результаты приведены лишь для T = 1473 и 773 К, поскольку при меньшей температуре приближенное расчетное решение на графике неотличимо от истинного.

Таблица 2.

p_i	Температура образца, К				
	0	100	273	773	1473
α_1	0,5000	0,4673	0,5121	0,4079	0,4619
β_1	1,3500	1,3864	1,3420	1,3596	1,334
ϵ_1	41,500	41,502	41,493	41,520	41,494
γ_1	0,2500	0,2566	0,2477	0,2550	0,2524
α_2	0,800	0,8410	0,8232	0,8718	0,8757
β_2	1,5000	1,5136	1,5525	1,4949	1,5615
ϵ_2	40,000	39,993	39,997	39,972	39,993
γ2	0,5000	0,5092	0,5160	0,5120	0,5244
L		8	8	12	12
Δ_{f}		3,38	3,27	3,26	4,17
Δ	—	3,12	2,71	3,31	3,53
Δ_{ϕ}	—	0,97	1,68	2,80	1,95

Результаты обработки модельной задачи по учету эффекта Доплера

Примечание: p_i — восстановленные параметры резонансов (T = 0 — истинные значения); L — число параметров аппроксиманты экспериментальных точек. Последние три строки-функционалы, характеризующие точность обработки (средние квадратичные относительные отклонения, %): Δ_f — аппроксиманты от экспериментальных точек; Δ — результирующей кривой φ , свернутой с гауссовым ядром, от экспериментальных точек; Δ_{φ} — результирующей кривой от истинной.



Затем этим же способом обработали участок резонансной области ²³⁹Ри при $E = 10 \div 13$ эВ и результаты сравнивали с полученными итерационным методом в $\psi \sim \chi$ приближении [13] (рис. 2). Параметры резонансов в представлении (14), полученные в работе [13]: $\alpha_1 = 34,90$; $\beta_1 = 50,87$; $\varepsilon_1 = 10,92$; $\gamma_1 = 0,0889$; $\alpha_2 = -22,13$; $\beta_2 = 9,54$; $\varepsilon_2 = 11,88$; $\gamma_2 = 0,331$; в настоящей работе: $\alpha_1 = 36,03$; $\beta_1 = 50,62$; $\varepsilon_1 = 10,92$; $\gamma_1 = 0,0947$; $\alpha_2 = -18,84$; $\beta_2 = 8,408$; $\varepsilon_2 = 11,88$; $\gamma_2 = 0,0318$. Размерность параметров опущена. Отклонение кривых от точек на краях интервала обусловлено вкладом соседних резонансов.

Результаты настоящей работы подтверждают на новом материале общий вывод, сделанный в работе [1]: Паде-аппроксимация является естественным и удобным методом описания нейтронных данных, прежде всего в резонансной области, причем такое представление можно применять на всех этапах — от обработки первичной экспериментальной информации до использования в расчетах реакторов.

Список литературы

1. Бадиков С.А., Виноградов В.А., Гай Е.В. и др. Аналитическая аппроксимация данных в нейтронной физике. — Атомная энергия, 1984, т. 56, вып. 1, с. 20.

Использование Паде-аппроксимации для расчета подгрупповых констант...

- Николаев М.Н., Рязанов Б.Г., Савоськин М.М. и др. Многогрупповое приближение в теории переноса нейтронов. М.: Энергоатомиздат, 1984; Синица В.В., Николаев М.Н. Аналитический метод получения подгрупповых параметров. — Атомная энергия, 1973, т. 35, вып. 6, с. 429.
- 3. Абагян Л.П., Базазянц Н.О., Николаев М.Н. и др. Групповые константы для расчета реакторов и защиты. М.: Энергоатомиздат, 1984.
- 4. Николаев М.Н., Игнатов А.А., Исаев Н.В. и др. Метод подгрупп для учета резонансной структуры сечений в нейтронных расчетах (часть 1). — Атомная энергия, 1970, т. 29, вып. 1, с. 11.
- 5. Ахиезер Н.И. Классическая проблема моментов. М.: ГИФМЛ, 1961, с. 42.
- 6. Baker G.A. Essentials of Pade Approximants. N.-Y.: Academic Press, 1975.
- Виноградов В.Н., Гай Е.В., Работнов Н.С. Аналитическая аппроксимация экспериментальных зависимостей в ядерной и нейтронной физике: Обзор ФЭИ ОБ-125. Обнинск, 1981.
- 8. Гай Е.В. Построение многоточечной рациональной аппроксиманты с учетом разложения по отрицательным степеням: Препринт ФЭИ-1582. Обнинск, 1984.
- 9. Синица В.В. Пакет ГРУКОН: Препринт ФЭИ-1188. Обнинск, 1981.
- 10. INDC/NEANDC Nuclear Standards File, 1978 Version. INDG-30/L+Sp. IAEA Nuclear Data Section, Vienna, 1980.
- 11. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979.
- 12. Лукьянов А.А. Структура нейтронных сечений. М.: Атомиздат, 1978, с. 60-62.
- Колесов В.В., Лукьянов А.А. Параметры многоуровневого анализа сечений ²³⁹Ри в резонансной области: Препринт ФЭИ-1404. Обнинск, 1983.
- 14. Derrien H., Blons J., Eggerman C. e.a. In: Proc. IAEA Conf. on Nuclear Data for Reactors. Paris, 1966, vol. 2, p. 195.

Поступила в Редакцию 01.02.85

Аналитическая аппроксимация данных в ядерной и нейтронной физике

В. Н. Виноградов, Е. В. Гай, Н. С. Работнов

Описан метод аналитической аппроксимации данных рациональными функциями одного переменного, ориентированной на теоретические и расчетные задачи нейтронной и ядерной физики. Детально представлены алгоритмы построения рациональных аппроксимант и вычисления погрешностей их параметров, проиллюстрированные многочисленными примерами их использования.

Для научных работников и инженеров, специализирующихся в областях ядерной, нейтронной, реакторной физики и прикладной математики, а также аспирантов и студентов старших курсов.

ПРЕДИСЛОВИЕ

Ядерная энергетика связана с фундаментальными научными исследованиями, пожалуй, сильнее и глубже, чем любая другая отрасль техники. Весьма важной областью этих исследований являются ядерная и нейтронная физика. Теория, эксперимент и технические приложения объединены здесь высоким уровнем использования математики — как ее общих результатов, так и прикладных, вычислительных методов. При этом в развитии последних, в приспособлении мощных математических инструментов к конкретным ядерно-физическим задачам сами физики традиционно активны.

Одним из заметных направлений такой деятельности в последнее время стало использование аппроксимации рациональными функциями (приближение Паде) в самых разнообразных задачах математической физики. В частности, использование этой аппроксимации оказалось весьма плодотворным и перспективным при обработке экспериментальных данных, однако в литературе оно отражено лишь журнальными публикациями с рассмотрением конкретных задач или краткими отступлениями в монографиях на другие темы. В то же время подробное освещение этого вопроса с целью более широкого внедрения аппроксимации рациональными функциями в практику обработки экспериментальных данных представляется нам необходимым и своевременным. Потребность в издании такого рода в какой-то мере должна удовлетворить настоящая книга.

Книги, в которых рассматриваются математические методы обработки экспериментальных данных, можно отнести к двум основным типам. Один из них — это монографии и учебники по теоретической статистике, в которых конкретные задачи или вообще не излагаются, или привлекаются лишь для

Виноградов В. Н., Гай Е. В., Работнов Н. С. Аналитическая аппроксимация данных в ядерной и нейтронной физике. М.: Энергоатомиздат, 1987. 128 с.

иллюстрации. Книги второго типа — это практические руководства, в которых рассматривается в основном вычислительная сторона метода наименьших квадратов. Аналитические свойства функций, аппроксимирующие экспериментальные данные, в обоих случаях остаются в стороне от основного круга проблем.

В отличие от книг этих двух типов, в предлагаемом издании основное внимание уделяется вопросам, связанным с использованием именно аналитических свойств функций при обработке экспериментальных данных. Сведения из математической статистики привлекаются лишь в пределах необходимого минимума. Особое место занимает построение алгоритмов, позволяющих эффективно использовать для обработки экспериментальных данных следующий по сложности после полиномов класс аналитических функций — рациональные функции. Приводятся примеры использования этих алгоритмов, реализованных на ЭВМ, в задачах ядерной и нейтронной физики. Основные методические результаты представляют собой дальнейшее развитие математического аппарата приближения Паде. Мы надеемся, что эта книга окажется полезной для специалистов в области обработки данных, а также для всех, кто использует приближение Паде высоких порядков в теоретической и расчетной работе. Ее можно использовать и для первого знакомства с этим вопросом.

Настоящая монография является итогом коллективной работы, начатой в 1973 г. по инициативе одного из авторов (Е. В. Гая), которым получены основные методические результаты, изложенные в гл. 3, 4. Остальные главы написаны совместно.

Авторы выражают искреннюю признательность С. А. Бадикову, в соавторстве с которым написаны работы, положенные в основу изложения материала двух последних глав, а также своим многочисленным коллегам, сотрудникам Физико-энергетического института, за полезные обсуждения. С особой благодарностью мы вспоминаем ныне покойного Л. Н. Усачева, чье внимание и поддержка много значили для нас.

введение

Для физического расчета ядерно-энергетических установок требуются весьма большой объем вычислений и множество входных данных. Существенную часть последних составляют функции одного переменного, описывающие энергетическую зависимость сечений разнообразных ядерных реакций под действием нейтронов. Их измерение — одна из важнейших задач экспериментальной ядерной физики, а сбор, хранение, оценка этих данных и представление их в виде, наиболее удобном для использования, стали самостоятельной и немаловажной научной дисциплиной.

Потребность в удобном аналитическом представлении одномерных функциональных зависимостей постоянно возникает на всех этапах исследований — от построения теоретических моделей до обработки результатов эксперимента. При этом следует различать две основные задачи.

1. Аппроксимация известных функций, когда необходимо сложную функцию, значения которой могут быть вычислены сколь угодно точно, но с большими затратами труда, заменить простой, легко вычисляемой и близкой к исходной по некоторым критериям. В этой задаче сведения об исходной функции могут быть заданы в различных формах: в виде ее значений в некоторой области изменения аргумента, коэффициентов ряда Тейлора (не обязательно в области сходимости этого ряда), обобщенных моментов с некоторыми весами, результатов применения разного рода интегральных преобразований, характеристик особых точек и экстремумов и т. д. Функция «наилучшего приближения» (внутри класса аппроксимирующих функций, выбранного из соображений удобства дальнейшего использования) может определяться самыми разнообразными требованиями: минимизацией максимального или среднего квадратического отклонения от исходной функции, заданием асимптотик, моделированием особенностей функций и т. д.

2. Аппроксимация дискретной одномерной зависимости, полученной в результате эксперимента. В этом случае значения аппроксимируемой функции известны лишь при некоторых значениях аргумента и с некоторой погрешностью, т. е. содержат в качестве аддитивной добавки случайную величину, о статистическом распределении которой имеется ограниченная или полная информация. В качестве критерия выбора аппроксиманты обычно принимают требование статистической оптимальности типа критерия χ^2 .

В обоих случаях результирующая аппроксиманта становится впоследствии объектом различных математических операций, законность использования которых часто решающим образом зависит от близости ее аналитических свойств к аналитическим свойствам истинной функции, прежде всего от сходства их особенностей в комплексной плоскости. С этой точки зрения весьма популярная в силу своей простоты и разработанности методов полиномиальная аппроксимация обладает серьезным недостатком — полным отсутствием у аппроксиманты особых точек, кроме бесконечно удаленной.

В настоящем издании основное внимание уделяется приближению Паде аппроксимации рациональными функциями, у которых имеются полюсы, моделирующие особенности приближаемой функции. В последнее время этот метод находит все более широкое применение в самых разных задачах математической физики (см., например, [1—7]), При обработке данных его использование сдерживалось нелинейностью соответствующей задачи метода наименьших квадратов и своеобразной формой неустойчивости — появлением, так называемых шумовых дублетов (см. § 5.3). В работах авторов этой книги [8—10] были предложены способы обхода указанных трудностей и создан приемлемый метод паде-аппроксимации экспериментальных зависимостей. Вместе с тем в необходимых случаях рассматриваются и другие способы аппроксимации.
ГЛАВА 1. ОБЩИЕ ВОПРОСЫ АНАЛИТИЧЕСКОЙ АППРОКСИМАЦИИ ДАННЫХ

1.1. Способы представления данных в нейтронно-физических расчетах

Первичной исходной информацией для большинства нейтронно-физических расчетов являются данные о зависимости сечений различных ядерных реакций, вызываемых нейтронами, от энергии нейтронов *E*. Если речь идет об интегральных сечениях, то соответствующие данные описываются функциями, иногда весьма сложными, от этой единственной переменной. Дифференциальные сечения зависят еще от углов вылета и энергий продуктов реакции. В настоящей книге речь пойдет почти исключительно об аппроксимации функциональных зависимостей, хотя излагаемые в ней результаты можно, разумеется, использовать и при работе с дифференциальными сечениями, фиксируя в них все переменные, кроме одной.

Результатом ядерно-физического эксперимента по измерению сечения $\sigma(E)$ всегда служит набор дискретных значений $\sigma(E_i)$, соответствующих некоторому набору значений энергии. Эта информация может быть весьма детальной, т. е. насчитывать многие тысячи пар значений энергия — сечение (так называемое поточечное задание нейтронных сечений). Однако для расчетов обычно требуется знать сечение при произвольном значении энергии, отсюда возникает необходимость использования разного рода интерполяционных формул, которые позволяют вычислять $\sigma(E)$ между первичными точками. Сами экспериментальные значения содержат неконтролируемую случайную погрешность и поэтому не всегда удобны в качестве узлов интерполяционных формул. Вместо них при поточечном задании все чаще используются оцененные данные, представляющие собой результат применения некоторых процедур сглаживания первичной информации.

Такая информация близка к полной в области низких энергий нейтронов, соответствующих разрешенным резонансам. В этой области можно описать зависимость $\sigma(E)$ функцией многих параметров. Вид этой функции определяется физическими соображениями, а значения параметров — подгонкой под экспериментальные данные. С повышением энергии экспериментальные, а значит, и оцененные значения $\sigma(E)$ становятся результатом усреднения по все более широким энергетическим интервалам с некоторым, не всегда хорошо известным весом, и детальные сведения о резонансной структуре сечений теряются. Для этих областей приводятся вместе с поточечным заданием или вместо него средние значения резонансных параметров и характеристики их статистических распределений, т. е. их флюктуации относительно средних значений. Подробная информация об этих способах задания ядерных данных содержится в описаниях многочисленных библиотек на магнитных носителях информации, из которых наиболее употребительны американская ENDF/B (версии IV и V [11, 12]), английская UKNDL [13], японская JENDL [14]. Идеальным было бы непосредственное использование в реакторно-физических расчетах всей имеющейся поточечной информации о нейтронных сечениях вместе с интерполяционными формулами, однако ресурсы современных ЭВМ такой возможности пока не дают. Даже там, где имеется детальная поточечная информация, ее, приходится заменять менее детальной, но зато существенно меньшей по объему. Самый распространенный метод такого сокращения входной информации – получение групповых констант, которые и используются непосредственно в реакторно-физических расчетах. Методы их получения и применения изложены в [15, 16]. Простейший из этих методов — усреднение известных сечений по энергетическим интервалам с фиксированными для данной системы констант границами. Число таких интервалов колеблется от немногих десятков до многих сотен.

В практических расчетах требуются, кроме того, функционалы сечений, более сложные, чем их средние значения в каких-то интервалах, например пропускание (см. § 7.3), факторы резонансной самоэкранировки (см. § 7.1) и т. д. Они, в свою очередь, являются функциями некоторых параметров: пропускание зависит от толщины образца, факторы самоэкранировки — от так называемого сечения разбавления и т. д.

На всех этапах перевода информации о нейтронных сечениях из одной формы в другую аппроксимация экспериментальных, оцененных или усредненных данных играет важную роль.

Обработка результатов современного эксперимента, как правило, многоступенчатый и сложный процесс. Он обычно включает: внесение поправок на геометрию опыта и эффективность детектирующих устройств; вычитание фона и эффектов, связанных с наличием примесей в образцах; учет конечного энергетического разрешения аппаратуры и эффекта Доплера; окончательный расчет значений измеряемых величин с учетом их возможных корреляций. Только после этого можно приступать к анализу с целью получения физической информации. Этот анализ, вообще говоря, однозначен лишь в предположении, что физические закономерности описываются аналитическими функциями.

1.2. Роль аналитичности в задаче аппроксимации

Термин «аналитический» в зависимости от контекста может иметь различный смысл. Так, первое употребление этого слова, с которым мы встречаемся еще в школе, это «аналитическое задание функции» в отличие от графического или табличного. Речь идет о том, что, определив простейшие функции, более сложные функциональные зависимости сводят к некоторым комбинациям простейших, при этом свойства полученной функции (гладкость, дифференцируемость и др.) требуют дополнительного рассмотрения.

Аналитическое в этом смысле описание экспериментальной зависимости осуществляется, в частности, с помощью полиномов, рациональных функций, сплайнов (т.е. сшиванием различных полиномов в различных областях изме-

нения аргумента), но наличие аналитической формулы при одних значениях аргумента в такой постановке еще не ограничивает выбор формулы при других его значениях, для этого требуется дополнительная информация или дополнительные критерии.

Гораздо уже понятие аналитической функции [17, 18] комплексного аргумента f(z) = u(x, y)+iv(x, y), где x и y — действительная и мнимая части аргумента; u и v — действительная и мнимая части функции. Есть два эквивалентных определения такой функции: по Вейерштрассу — это функция, задаваемая своим разложением в ряд Тейлора в области его сходимости и продолжениями этого ряда в других областях; по Коши — Риману (Д'Аламберу — Эйлеру) — в точках аналитичности должны выполняться условия $\partial u/\partial x = \partial v/\partial y$ и $\partial u/\partial y = -\partial v/\partial x$, соответствующие существованию в этих точках производной по комплексной переменной z = x + iy, которая не зависит от направления дифференцирования в комплексной плоскости. Первое из этих определений удобно для изучения свойств конкретных аналитических функций, второе для проверки аналитичности функции.

Хотя в определении речь идет об аналитичности в точке, одно из самых существенных для физических применений свойств аналитических функций заключается в следующем: задание аналитической функции на некотором отрезке полностью и однозначно определяет эту функцию или ее ветвь во всей комплексной плоскости. Представление о единстве и детерминированности физических законов лучше всего согласуется именно с требованием аналитичности используемых функций. Один из аргументов в пользу такого требования состоит в том, что дифференциальные уравнения, описывающие физические явления, это уравнения с аналитическими коэффициентами, а решениями таких уравнений являются аналитические функции. Известно, что квантовая механика совсем не требует такого сужения класса используемых функций (см. [19]), так что это, скорее, эмпирический закон, чем математическая теорема.

При обработке экспериментальных данных с ростом числа и точности измерений ситуация приближается к следующей: известны значения функции на участке действительной оси; требуется параметризовать эту зависимость и, что самое главное, выявить физические закономерности, найти параметры физических моделей, которые, как только что упоминалось, описываются аналитическими функциями. Подробнее об этом см. в § 5.5.

1.3. Выбор системы аппроксимирующих функций при обработке экспериментальных результатов

Аппроксимация аналитическими функциями позволяет определить параметры физических моделей. В свою очередь, во многих случаях знание физической природы изучаемого явления непосредственно определяет выбор достаточно простого класса аппроксимирующих функций. Приведем примеры такого рода, не останавливаясь пока на смысле входящих в формулы параметров. 1. Угловые распределения продуктов ядерной реакции, проходящей через уровень составного ядра с определенным спином J, описываются полиномами от соs θ (θ — угол между направлениями пучка налетающих частиц и вылета продуктов реакции), причем максимальная степень полинома $N_{\text{max}} = 2J$.

2. Энергетическая зависимость сечений ядерных реакций под действием нейтронов в резонансной области энергий определяется положением полюсов соответствующей S-матрицы, а потому хорошо аппроксимируется полюсным разложением, т. е. рациональной функцией от энергии E, умноженной на $E^{-1/2}$:

$$\sigma(E) = \frac{1}{\sqrt{E}} \frac{P_N(E)}{Q_M(E)} = \frac{1}{\sqrt{E}} \sum_{i=1}^{l} \frac{a_i (E - E_i)}{\gamma_i^2 + (E - \epsilon_i)^2},$$
(1.1)

где $P_N(E)$ и $Q_M(E)$ — полиномы степеней N и M соответственно.

3. Радиоактивный распад ядер происходит по экспоненциальному закону, и зависимость от времени активности образцов, содержащих различные нуклиды, представляется суммой экспонент:

$$A(t) = \sum_{i=1}^{l} a_i e^{-p_i t} .$$
 (1.2)

4. Функции, описывающие периодические процессы в электрических цепях, разлагаются в ряды Фурье:

$$f(t) = \sum_{i=1}^{l} a_i \sin(\omega_i t + \delta_i). \qquad (1.3)$$

5. Обобщением случаев 3 и 4 является представление в виде суммы экспонент с комплексными параметрами, когда в (1.2) параметры a_i и p_i могут принимать комплексные значения, что позволяет наряду с периодическими описывать и апериодические процессы, включая затухающие колебания.

6. Функции времени, которые обладают спектром Фурье, сосредоточенным в ограниченном интервале частот, т. е. такие, что

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-2\pi W}^{2\pi W} e^{i\omega t} F(\omega) d\omega, \qquad (1.4)$$

в соответствии с теоремой Котельникова [20] разлагаются по так называемым функциям отсчетов:

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f\left(\frac{n}{2W}\right) \frac{\sin\left(2\pi W t - n\pi\right)}{2\pi W t - n\pi},$$
(1.5)

т. е. полностью определяются своими значениями в эквидистантной последовательности точек. Это разложение широко используется в теории информации и теории линий связи.

7. Если статистическое распределение некоторой физической величины представляет собой суперпозицию нормальных распределений с различными

средними значениями и дисперсиями, то такое распределение разлагается в сумму гауссианов

$$f(z) = \sum_{i=1}^{l} a_i e^{-(z-\mu_i)^2/2\sigma_i^2} .$$
(1.6)

В пп. 1—7 перечислены, пожалуй, все важнейшие используемые на практике классы аппроксимирующих функций. Теория и методы этих аппроксимаций детальнее всего разработаны для полиномов и разложений Фурье (тригонометрических полиномов), которым посвящена весьма обширная литература.

Аналитическая аппроксимация одномерной зависимости, заданной дискретной последовательностью пар значений аргумента и функции, может преследовать различные цели. Об одной мы уже упоминали: параметры аппроксиманты могут иметь непосредственный физический смысл. Так, ϵ_i и $2\gamma_i$ в (1.1) — энергии ядерных уровней и их полные ширины; p_i в (1.2) связаны с периодом полураспада отдельных нуклидов T_i соотношением $T_i = \ln 2/p_i$.

В других случаях аналитическое выражение нужно просто для того, чтобы иметь возможность вычислить значение измеряемой функции при произвольном значении аргумента. Немаловажной представляется возможность уточнения результатов эксперимента с помощью аналитической аппроксимации. Поясним это общеизвестным простым примером. Если значение некоторой физической величины измеряется N_{ex} раз и погрешность каждого измерения является нормально распределенной случайной величиной со стандартным отклонением Δf , то погрешность среднего значения \overline{f} по N_{ex} измерениям равна $\Delta f / \sqrt{N_{ex} - 1}$, т. е. служит более надежной оценкой величины f, чем любое из измеренных значений. Такой результат обработки эксперимента можно рассматривать как результат аппроксимации f(i) простейшей аналитической функцией — горизонтальной прямой $f(i) = \overline{f} = const$. В более сложных случаях расчет погрешности аппроксиманты не так прост, но в общем возможность уточнения сохраняется, если число параметров аппроксиманты меньше числа точек, в которых осуществляются измерения.

Аналитическая аппроксимация позволяет также сжать инфорцию, т. е. сократить объем числовых массивов, подлежащих хранению, что весьма существенно в случае нейтронных данных, поскольку объем соответствующих машинных библиотек уже сейчас составляет многие сотни мегабайт.

1.4. Параметризация аппроксиманты опорными ординатами

Даже ограничившись определенным классом аппроксимирующих функций, параметры аппроксиманты в большинстве случаев все еще можно выбирать разными способами. Рассмотрим возможные варианты такого выбора на примере полиномиальной аппроксиманты. Полином $P_N(z)$ степени N можно задать: 1) значениями коэффициентов *a_n* при степенях аргумента:

$$P_N(z) = \sum_{n=0}^{N} a_n z^n ; \qquad (1.7)$$

2) значениями корней полинома *z_n* и коэффициентом *a_N* при старшей степени:

$$P_N(z) = a_N \prod_{n=1}^{N} (z - z_n); \qquad (1.8)$$

3) значениями самого полинома как функции z при N+1 значении аргумента z_v :

$$P_N(z) = \sum_{\nu=0}^{N} P_{\nu} \prod_{\mu \neq \nu} \frac{(z - z_{\mu})}{(z_{\nu} - z_{\mu})}, \qquad (1.9)$$

где $P_v \equiv P_N(z_v)$. (Выражение (1.9) известно как интерполяционная формула Лагранжа [21]).

Эти варианты эквивалентны в том смысле, что полное число параметров во всех случаях одинаково и равно N+1, и разные их наборы взаимно однозначно выражаются друг через друга. Однако в различных задачах можно по разным соображениям предпочесть тот или иной конкретный вариант. Так, разложения (1.7) и (1.9) являются линейными функциями параметров a_n и P_v соответственно, а (1.8) нелинейно по z_n . В то же время, имея значения z_n , можно весьма просто вычислять a_n и P_v , а обратная процедура не имеет, в общем случае, алгебраического решения и должна выполняться численными методами, которые быстро усложняются с ростом N.

Представления (1.7) и (1.8) единственны, в то время как, варьируя абсциссы z_v , заданный полином можно представить в виде (1.9) бесконечным числом способов. Эта гибкость интерполяционной формулы Лагранжа широко используется в теории полиномиальной аппроксимации. Выбор z_v (назовем их опорными абсциссами, а P_v — опорными ординатами) можно подчинять самым различным требованиям оптимальности. Таким способом получаются многие широко употребляющиеся аппроксимационные, квадратурные и прочие формулы [21].

Параметризация опорными ординатами возможна и, как будет показано ниже, полезна и для других классов аппроксимирующих функций. Так, при разложении (1.5) по функциям отсчетов также используются в качестве параметров опорные ординаты. Заметим, что выбор абсцисс в этом случае подчинен общему требованию — они должны образовывать эквидистантные последовательности, шаг которых определяется границей фурье-спектра.

В общем случае, если задано L-параметрическое семейство функций одной переменной $f(z; p_1, p_2, ..., p_L)$, то, выбирая L, вообще говоря, произвольных значений аргумента z, можно записать систему уравнений

$$f(z_{v}; p_{1}, p_{2},..., p_{L}) = f_{v}, v = 1, 2, ..., L.$$
 (1.10)

Если система (1.10) имеет в некоторой области значений f_v , решение, однозначно определяющее вектор $\{p_v\}$ как функцию вектора $\{f_v\}$, то f_v можно рассматривать как новые параметры. Если удается получить для f(z) как функции этих аргументов явное выражение или достаточно простой' алгоритм вычисления, то величинами f_v можно пользоваться, как любыми другими параметрами аппроксиманты — находить для них оптимальные значения, брать по ним производные, вычислять ковариационные матрицы этих параметров и т. д. При этом отмеченная выше для полиномов гибкость этой параметризации сохраняется в общем случае и оказывается очень полезной.

Опорные ординаты обладают следующими очевидными достоинствами: имеют все одинаковую размерность (когда речь идет об аппроксимации функциональной зависимости между физическими величинами), значение функции при фиксированном аргументе является их однородной функцией первого порядка, если

$$f\left(z;\lambda f_1,\lambda f_2,...,\lambda f_L\right) = \lambda f\left(z;f_1,f_2,...,f_L\right),\tag{1.11}$$

т. е. умножение всех опорных ординат на одно и то же число эквивалентно умножению всей функции на то же число (обратное свойство, разумеется, тривиально и выполняется всегда).

Для всех рассматриваемых классов аппроксимирующих функций свойство (1.11) выполняется. Легко, однако, привести примеры, когда оно нарушается. Это, в частности, относится ко всем функциям с «неподвижной точкой», которые при любом выборе параметров имеют постоянное значение при некотором значении аргумента, например $\exp(a_1z + a_2z^2 + ... + a_nz^n)$ при z = 0.

Зависимость функции от опорных ординат также и симметрична (разумеется, если переставлять вместе с ординатами и значения опорных абсцисс).

Однородность функциональной зависимости от опорных ординат (1.11) представляет собой весьма важное свойство аппроксиманты. По теореме Эйлера об однородных функциях первого порядка справедливо следующее их представление:

$$f(z_{v}; f_{1}, f_{2}, ..., f_{L}) = \sum_{\nu=1}^{L} f_{\nu} \frac{\partial f(z)}{\partial f_{\nu}}.$$
 (1.12)

Это соотношение, вообще говоря, не линейно по f_{ν} , поскольку производные также могут зависеть от f_{ν} .

Производные $\partial f(z)/\partial f_v$ естественно называть коэффициентами чувствительности функции к значениям опорных ординат. Эти коэффициенты сами являются функциями переменного z, но при фиксированных абсциссах z_v не обязательно зависят от f_v . Так, в случае полиномиальной аппроксимации дифференцирование выражения (1.9) по P_v дает полиномы, зависящие при заданном N только от выбора z_v :

$$\frac{\partial P_N(z)}{\partial P_v} = \prod_{\mu \neq v} \frac{\left(z - z_{\mu}\right)}{\left(z_v - z_{\mu}\right)}.$$
(1.13)

Следует отметить также общее свойство коэффициентов чувствительности, вытекающее непосредственно из определения опорных ординат как независимых параметров:

$$\partial f(z) / \partial f_{\nu} \Big|_{z=z_{\mu}} = \delta_{\mu\nu} \,.$$
 (1.14)

ГЛАВА 2. ПАДЕ-АППРОКСИМАЦИЯ, ОПРЕДЕЛЕНИЕ И ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА

2.1. Терминология и обозначения

Функцию, являющуюся отношением двух полиномов, одни авторы (см., например, [18, 22]) называют дробно-рациональной функцией, другие (см., например, [23, 24]) — просто рациональной функцией. В свою очередь, функции, не имеющие в конечной области других особенностей, кроме полюсов, в одних книгах называются рациональными [17, 22], а в других — мероморфными [23, 24], что в переводе означает «дробные». Везде в дальнейшем под рациональной функцией будем понимать отношение полиномов.

Некоторые сложности представляет также употребление терминов «интерполяция», «аппроксимация» и их производных. Под интерполяцией всегда подразумеваем проведение кривой по точкам, т. е. построение функции, принимающей при некоторых значениях аргумента заданные значения, а под аппроксимацией — любые способы построения приближения к функции, в том числе и интерполяцию. Такой же смысл имеет термин «аппроксиманта» приближающая функция любого типа.

В дальнейшем будем использовать следующие обозначения:

$$f^{[N,M]}(z) = \frac{P_N(z)}{Q_M(z)} = \sum_{n=0}^N p_N^n z^n \bigg/ \sum_{m=0}^M q_M^m z^m$$
(2.1)

рациональная функция, в числителе которой полином $P_N(z)$ степени N, а в знаменателе — полином $Q_M(z)$ степени M; L = N + M + 1 — ранг приближения. Иногда под рангом приближения будем подразумевать не только полное число его параметров L, но и его структуру [N, M], т. е. степени числителя и знаменателя. Поскольку при одной и той же степени числителя могут быть приближения с различными степенями знаменателей и, наоборот, там, где это необходимо, будем использовать обозначение $f^{[N,M]}(z) = P_{N,M}(z)/Q_{N,M}(z)$, сохраняя прежний смысл индексов N и M. В некоторых случаях нет необходимости указывать степени числителя и знаменателя, поскольку они однозначно определяются начальным приближением, цепочкой рекуррентного построения и рангом приближения *L*: тогда используется обозначение $f^{L}(z) = P_{(L)}(z)/Q_{(L)}(z)$. Все рекуррентные соотношения одинаковы для числителей и знаменателей рациональных приближений; поэтому в них вместо $P_{N,M}(z)$ и $Q_{N,M}(z)$ употребляется единое обозначение $R_{N,M}(z)$ — коэффициенты полиномов $P_N(z)$ и $Q_M(z)$ определены равенством (2.1). Там, где это необходимо, будут использоваться также обозначения $p_{N,M}^n$, $q_{N,M}^m$, $p_{(L)}^n$ и $q_{(L)}^m$. Коэффициенты рекуррентных соотношений зависят от цепочки построения и степеней числителя и знаменателя входящих в них приближений; ниже употребляются одни и те же буквы α и β для обозначения разных коэффициентов в различных соотношениях. Из контекста всегда ясно, к какому соотношению и к какому набору индексов относятся приводимые формулы для α и β .

Основы теории аппроксимации рациональными функциями заложены еще в работах Коши, Якоби, Фробениуса (см. [1]), а многие важные результаты получены в теории цепных дробей и методе обратных разностей. Французский математик Паде, по-видимому, их не знал и дал в своей диссертации первое систематическое изложение теории, которая в последние десятилетия интенсивно используется в различных физических и вычислительных задачах. Исторический обзор развития теории дан в статье [3, с.1].

Существуют различные обобщения паде-аппроксимации, определяемые, в частности, для операторных и матричных переменных, а также для функций многих переменных. Однако в этой книге мы не будем на них останавливаться.

2.2. Приближение Паде первого рода

Приближением Паде первого рода (Паде-1) к аналитической функции f(z) называется рациональная функция^{*} (2.1), для которой первые L = N + M + 1 членов разложения в ряд Тейлора по степеням *z* совпадают с соответствующими членами ряда Тейлора функции f(z), или, что то же самое, функция, имеющая сf(z) L - 1 одинаковую низшую производную при z = 0, т. е. такая, что

$$\frac{d^{k} f^{L}(z)}{dz^{k}}\bigg|_{z=0} = \frac{d^{k} f(z)}{dz^{k}}\bigg|_{z=0}, \ k=0, 1, 2, \dots, L-1.$$
(2.2)

Введем обозначение a_k для коэффициентов формального разложения функции f(z) в степенной ряд:

$$f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{d^k f(z)}{dz^k} \bigg|_{z=0} \frac{z^k}{k!} = \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k .$$
(2.3)

В пределах круга сходимости ряда Тейлора функции $Q^{-1}(z)$ условия (2.2) эквивалентны следующей системе линейных уравнений для определения коэффи-

^{*}Такое приближение называют также аппроксимацией рациональными функциями со свободными (плавающими) полюсами в отличие от аппроксимации рациональными функциями с заданными полюсами [23].

циентов полиномов в числителе и знаменателе правой части (2.1):

$$\sum_{m=0}^{M} q_{M}^{m} a_{n-m} = p_{N}^{n}, 0 \le n \le N$$

$$\sum_{m=0}^{n} q_{M}^{n} a_{n-m} = 0, N < n < L - 1$$
(2.4)

Решение этой системы можно найти с помощью простых рекуррентных соотношений, не прибегая к численному обращению матриц.

В отличие от задачи приближенного описания известных функций в любой из решаемых нами (см. гл. 7) задач известны лишь числовые значения конечного числа коэффициентов a_k , поэтому вопрос о сходимости полученных приближений решается так, как это обычно делается при решении физических задач с помощью теории возмущений — просто сравнением последовательных приближений. При этом использование паде-аппроксимации часто приводит к результатам, которые могут показаться парадоксальными: ряд теории возмущений расходится, и его частичные суммы смысла не имеют, т. е. разложение (2.3) носит формальный характер, а построенные по нему приближения Паде сходятся.

Перечислим и проиллюстрируем примерами основные преимущества приближения Паде-1 перед частичными суммами ряда Тейлора, на основании которых это приближение строится.

1. Область сходимости приближения Паде-1 гораздо шире, чем у степенного ряда. Рассмотрим функцию $f(z) = \ln (1 + z)$, для которой точка z = -1 является особой, а именно точкой ветвления. Ряд Тейлора любой функции сходится лишь в круге, радиус которого равен расстоянию от начала координат до ближайшей особой точки, поэтому ряд

$$\ln(1+z) = z - z^2 / 2 + z^3 / 3 - z^4 / 4 + z^5 / 5 + \dots$$
(2.5)

можно использовать для приближенного вычисления функции лишь при |z| < 1. Выпишем несколько первых приближений Паде-1 для этой функции

$$f^{[1,0]}(z) = z; f^{[1,1]}(z) = \frac{2z}{z+2}; f^{[2,1]}(z) = \frac{z(z+6)}{2(2z+3)};$$

$$f^{[2,2]}(z) = \frac{3z(z+2)}{z^2+6z+6}; f^{[3,2]}(z) = \frac{z(z^2+21z+30)}{3(3z^2+12z+10)}.$$
(2.6)

Обозначим сумму первых λ членов ряда (2.5) S_{λ} , а значение построенного по ним приближения f^{λ} где $\lambda = N + M$ ($a_0 \neq 0$). Сравнение этих величин друг с другом и с точными значениями приводится ниже:

z
$$\ln(1+z)$$
 S_1 f^1 S^2 f^2 0,50,40550,50,50,3750,4002,01,09862,02,001

S_3	f^3	S_4	f^4	S_5	f^5
0,4166	0,4062	0,401	0,4050	0,40629	0,40550
2,6667	1,1429	-1,333	1,0909	5,0667	1,1014

Видно, что приближения (2.6) позволяют вычислять $\ln(1 + z)$ и при z = 2, когда ряд (2.5) расходится.

2. В общей части областей сходимости ряда Тейлора и приближения Паде-1 последнее сходится быстрее. Данные п. 1 подтверждают это. Рассмотрим другой пример. Приближение Паде-1, построенное по трем первым членам ряда Тейлора, для функции $f(z) = \sin z = z - z^3/6 + z^5/120 + ...$ имеет вид

$$f^{[3,2]}(z) = (60z - 7z^3) / (60z - 3z^2).$$
(2.7)

При постановке в (2.7) $z = \pi/4 \approx 0,7854$ получается $\sin(\pi/4) \approx 0,7071$ со всеми четырьмя верными знаками, в то время как первые три члена разложения в ряд дают $\sin(\pi/4) \approx 0,691$. Таким образом, используя периодичность синуса и соотношение $\sin(\pi/2 - z) = \sqrt{1 - \sin^2 z}$, с помощью приближения (2.7) можно построить полную таблицу четырехзначных значений этой функции. Благодаря быстрой сходимости приближение Паде стало в последнее время основным средством для расчета значений элементарных и специальных функций в вычислительной математике [25].

3. Паде-аппроксиманта моделирует полюсы приближаемых функций^{*}. Рассмотрим последовательные паде-аппроксиманты для мероморфной функции f(z) = tgz, имеющей полюсы при $z_n = \pi (2n + 1) / 2$:

$$f^{[1,0]}(z) = z; f^{[1,2]}(z) = \frac{3z}{3-z^2}; f^{[3,2]}(z) = \frac{z(15-z^2)}{15-6z^2}.$$

Уже $f^{[3=2]}(z)$ дает для положения первого полюса $z = \sqrt{5/2} \approx 1,581$, что совпадает с $\pi/2$ в пределах погрешности 1 %. С увеличением ранга приближения появляются новые полюсы, а предыдущие воспроизводятся все более точно.

2.3. Задача аналитического продолжения функции и сходимость рациональной аппроксиманты

Приведенные выше примеры показывают, что использование приближения Паде позволяет выйти за пределы области сходимости ряда Тейлора. Остановимся на этом несколько подробнее.

Принципиальную возможность выхода за пределы области сходимости ряда Тейлора дает его аналитическое продолжение. Для этого надо вычислить с

^{*}Рациональные приближения, моделирующие более сложные особенности функций, рассмотрены в [26].

помощью ряда значения функции и ее производных в точке z_0 , лежащей внутри области сходимости, и перейти к ряду Тейлора относительно точки z_0 по степеням $t = z - z_0$, т. е. фактически сделать замену переменной $z = t + z_0$ в исходном ряду. Поясним это на примере функции 1/(1 + z). Особой точкой этой функции

является полюс при z = -1, поэтому ряд Тейлора для нее $\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n z^n$ (геомет-

рический ряд) сходится лишь при |z| < 1. Переходя к разложению относительно $z_0 = 3/4$, получаем

$$\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n z^n = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n (t+3/4)^n = \frac{4}{7} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n (4t/7)^n.$$

Последний ряд сходится при |t| < 7/4, следовательно, с его помощью можно, например, вычислять 1/(1 + z) и при z = 2, поскольку тогда t = 5/4. Таким образом, коэффициенты ряда Тейлора в совокупности несут гораздо большую информацию о значениях функции, чем его частичные суммы. Надо только уметь ее извлекать, и один из способов сделать это заключается в построении паде-аппроксимант.

Приближение Паде-1 к сумме геометрической прогрессии уже по первым двум членам дает $P_0(z) / Q_1(z) = (1 + z)^{-1}$, т. е. точно восстанавливает исходную функцию. В общем случае приближение Паде, конечно, функцию точно не восстанавливает, однако оно позволяет аппроксимировать суммы рядов не только в пределах их кругов сходимости, но и вне их, причем полученные значения отнюдь не стремятся во внешней области к частичным суммам исходных рядов.

Такой подход к суммированию расходящихся рядов был развит еще Эйлером, который не рассматривал сумму ряда как предел последовательности его частичных сумм, а считал, что «сумма некоторого бесконечного ряда есть конечное выражение, из разложения которого возникает этот ряд» (цит. по книге Фихтенгольц Г.Н. Основы математического анализа М.: Физматгиз, 1960. Т. 2. С. 106).

В течение длительного времени этот подход отвергался, и примеры рядов, которые таким образом суммировал Эйлер, во многих учебниках еще недавно приводились в качестве иллюстрации того, как неправильно обращались с бесконечными рядами великие математики XVIII в. Развитая в XX в. теория суммирования расходящихся рядов фактически основана на идеях Эйлера. Рациональные функции — это как раз пример таких «конечных выражений», разложения которых в ряд Тейлора вне круга сходимости дают расходящиеся ряды.

Как уже упоминалось, при решении практических задач сходимость последовательных приближений Паде определяется просто их вычислением, однако даже если они сходятся, то еще не известно, сходятся ли они именно к той функции, по коэффициентам ряда Тейлора которой они построены. В последние два десятилетия теории сходимости таких приближений посвящено множество работ. Обзор состояния теории можно найти, например, в [1]. Суммируем вкратце основные результаты, полученные в этом направлении.

Прежде всего, при достаточно большом ранге приближение Паде точно восстанавливает рациональные функции, в том числе и полиномы. Многочисленные примеры показывают, что с ростом ранга приближения улучшается описание функций в точках их аналитичности, а расположение полюсов аппроксиманты несет информацию об особых точках функции. Например, разрез на участке действительной оси является той областью, в которой скапливаются полюсы аппроксиманты. Пояснить это можно следующим образом: приближение Паде ряда с действительными Коэффициентами по построению может иметь на действительной оси только действительные значения и поэтому может моделировать различные значения аппроксимирующей функции при подходе к одной и той же точке разреза с разных сторон только полюсами. Ясно, что такие рассуждения отнюдь не служат строгим доказательством.

В строгой теории сходимости приближений Паде можно выделить три основных направления.

Первое из них дает доказательства сходимости частных последовательностей приближений при некоторых ограничениях на функцию. Простейшая из теорем этого типа утверждает, что если в круге радиусом ρ находится M полюсов (с учетом их кратности) функции f(z) и нет других особенностей, то последовательность приближений $f^{[N,M]}(z)$ при $N \to \infty$ сходится к f(z) в этом круге. В более сложных теоремах при некоторых ограничениях на коэффициенты ряда Тейлора функции f(z) доказывается сходимость во всей плоскости.

Следующая совокупность теорем получена в том случае, когда рассматриваются подпоследовательности приближений, распределение полюсов которых удовлетворяет некоторым условиям, и доказывается сходимость таких подпоследовательностей.

Наконец, третий подход к проблеме сходимости состоит в доказательстве того, что если полюсы аппроксиманты нарушают сходимость, то область нарушения в некотором смысле мала.

Наиболее полезно, по-видимому, так называемое утверждение Бейкера (Baker), у которого нет строгого доказательства, но нет и опровергающих контрпримеров: если функция регулярна при $|z| \le 1$, кроме полюсов и точки z = 1, тогда по крайней мере последовательность $P_N(z) / Q_N(z)$ при $N \to \infty$ сходится к этой функции внутри круга $|z| \le 1$.

2.4. Приближение Паде второго рода

Приближением Паде второго рода (Паде-2) для функции f(z) называется рациональная функция $f^{[N,M]}(z)$ вида (2.1) такая, что ее значения при L значениях аргумента совпадают со значениями f(z) в тех же точках:

$$f^{[N,M]}(z_i) = f(z_i), \ i = 1, 2, \dots, L, L = N + M + 1.$$
(2.8)

Равенства (2.8) приводят к следующей системе линейных уравнений для определения коэффициентов полиномов в числителе и знаменателе аппроксиманты:

$$\sum_{n=0}^{N} p_{N}^{n} z_{i}^{n} - f(z_{i}) \sum_{m=0}^{M} q_{M}^{m} z_{i}^{n} = 0.$$
(2.9)

Методы решения этой системы с помощью рекуррентных соотношений будут описаны в гл. 3. Построение приближения Паде-2 будем также называть рациональной интерполяцией. Из определения приближения Паде-2 следует, что для него весьма естественна параметризация опорными ординатами, описанная в § 1.4.

Для построения приближения Паде-1 необходимо уметь вычислять в одной точке производные аппроксимирующей функции высокого порядка. При табличном задании функции этот метод практически не применим, особенно если опорные значения имеют заметную погрешность. Именно поточечно таблично заданные функции являются объектом аппроксимации приближением Паде-2. Как будет показано в гл. 5, рациональную интерполяцию можно эффективно использовать для аппроксимации функций в тех случаях, когда ранг аппроксиманты меньше числа точек, в которых задана исходная функция, и выбор наилучшего приближения производится с помощью метода наименьших квадратов или другими методами оптимизации.

Приближение Паде-2 во многих случаях не только обеспечивает получение интерполяционных формул, гораздо более эффективных, чем, скажем, формулы полиномиальной интерполяции Лагранжа, но и позволяет экстраполировать значения функции, заданной на ограниченном интервале, за его пределы, чего практически никогда не позволяет сделать полиномиальное приближение. Что особенно нетривиально, приближение Паде-2 дает возможность, например, довольно точно устанавливать положение действительных полюсов интерполируемой функции, лежащих за пределами интервала интерполяции.

Примеры такого рода будут приведены в гл. 5.

Одна из областей применимости приближения Паде-2 — изучение в различных задачах математической физики аналитических свойств функций, которые в силу физической природы рассматриваемого явления известны лишь при целочисленных значениях аргумента. Таковы, например, зависимости амплитуд от орбитального момента в квантовой теории (см. [5]).

Оригинальный способ использования приближения Паде-2 для ускорения сходимости числовых рядов изложен в [5, 6]. Суть его ясна из следующего примера. Рассмотрим ряд

$$S = \sum_{n=1}^{\infty} 1/n^2$$

и обозначим S_N его частичные суммы до n = N включительно. Рассмотрим S_N как функцию переменной $z = N^{-1}$, т. е. $S_N = f(z)$. Тогда точная полная сумма $S = S_{\infty} = = f(0)$. Если взять всего три первые частичные суммы $S_1 = 1$, $S_2 = 1,25$, $S_3 = 1,361$, построить по ним приближение Паде-2 для f(z) и вычислить его значение при z=0, то получится $f^{[1,1]}(0) = 1,65$ при точном числовом значении 1,645. Для обеспечения такой точности непосредственным суммированием пришлось бы взять около 20 членов исходного ряда — весьма значительное ускорение сходимости.

В том же обзоре [5] описан итерационный метод решения трансцендентных и алгебраических уравнений вида f(z) = 0 с помощью построения рациональной интерполяции $f^{1,1}(z) = (Az + B)/(Cz + D)$ проходящей через точки $f(z_l)$, $f(z_{l+1}), f(z_{l+2})$. Следующая итерация состоит в построении такого же приближения с заменой $z_l \rightarrow z_{l+3} = -A/B$ и т. д. Этот метод обеспечивает кубическую сходимость — если точки z_l, z_{l+1}, z_{l+2} отличаются от истинного корня на Δz_l , $\Delta z_{l+1}, \Delta z_{l+2}$, то для следующего приближения $\Delta z_{l+3} \sim \Delta z_l \Delta z_{l+1} \Delta z_{l+2}$. Таким образом, уменьшение погрешности от 0,1 до 10⁻⁹ достигается за два шага, при этом с одинаковым успехом ищутся как действительные, так и комплексные корни уравнений.

Очень важно для наших целей использование приближения Паде-2 для аппроксимации сложных экспериментальных зависимостей — резонансных кривых с числом параметров до нескольких десятков.

2.5. Инвариантность приближений Паде. Преобразования Эйлера

Рассмотрим теперь свойства инвариантности приближений Паде. Вопрос ставится так: какие преобразования можно делать с функцией f(z) и переменной z, чтобы соответственно преобразованное приближение Паде было приближением того же ранга [N, M] для преобразованной функции относительно преобразованной переменной?

Прежде всего, заметим, что в отличие от полиномиальных приближений рациональные нельзя складывать — если сумма полиномов $P_N(z)$ и $P'_N(z)$ степени N есть полином $P''_N(z)$ той же степени, то сумма $P''_N(z) / Q_M(z)$ рациональных функций $P_N(z) / Q_M(z)$ и $P'_N(z) / Q'_M(z)$ уже не есть рациональная функция того же ранга, если $Q_M(z) \neq Q'_M(z)$. Следовательно, рациональное приближение заданного ранга к сумме функций не есть сумма приближений того же ранга к каждому из слагаемых. Такая неаддитивность, конечно, к числу достоинств рациональной аппроксимации не относится, однако она не представляет принципиальной трудности, поскольку вся необходимая информация об аппроксиманте суммы содержится в аппроксимантах слагаемых.

В случае приближения Паде-1 можно, например, разложить слагаемые в ряды, сложить ряды и по суммарному ряду построить рациональное приближение требуемого ранга [N, M]. Для приближения Паде-2, даже не рассматривая алгебраического решения этой проблемы, по сумме рациональных функций, используя машинные алгоритмы, строят рациональное приближение заданного ранга везде, где это необходимо (см. § 7.2).

При рациональной интерполяции очевидна инвариантность приближений относительно линейного преобразования (сдвига и растяжения) независимой переменной — если приближение $P_N(z) / Q_M(z)$ проходит через L точек $f(z_i)$, то $T_N(t) / S_M(t) = P_N(\alpha t + \beta) / Q_M(\alpha t + \beta)$ проходит через L точек $\varphi(t_i)$, где $\varphi(t) = f(z(t))$. Такая инвариантность используется при поиске корней полиномов числителя и знаменателя приближения Паде-2. Обычно это удобнее делать, отображая сначала исходный интервал изменения аргумента на [-1, 1] или [0, 1] с помощью линейного преобразования.

При более общем дробно-линейном преобразовании $z = (\alpha t + \beta) / (\gamma t + \delta)$ получим

$$P_{N}(z)/Q_{M}(z) = (\gamma t - \delta)^{M} T_{N}(t)/(\gamma t - \delta)^{N} S_{M}(t).$$

Построенная таким образом рациональная функция аргумента *t* проходит через все *L* точек $\varphi(t_i)$, где $\varphi(t) = f[(\alpha t + \beta)/(\gamma t + \delta)]$, но будет функцией того же ранга, что и $f^{[N,M]}(z)$, лишь в том случае, когда N = M, т. е. только диагональные приближения инвариантны относительно дробно-линейных преобразований независимой переменной. Очевидно, что такой же вывод получится при дробно-линейном преобразовании функции $\varphi(z) = f[(\alpha f(z) + \beta) / (\gamma f(z) + \delta)]$, т. е. если подвергнуть такому же преобразованию диагональное рациональное приближение $P_N(z) / Q_M(z)$ получим диагональное приближение $T_N(t) / S_M(t)$ которое проходит через *L* точек $\varphi(z_i)$. Отметим, что при интерполяции любые преобразования, которые делаются с исходной и интерполирующей функциями, дают решение задачи интерполяции с тем же числом узлов, но рациональное приближение считается инвариантным относительно преобразования лишь в том случае, если при этом не меняется его ранг [*N*, *M*].

Задача аппроксимации функции по конечному числу членов ее ряда Тейлора в этом отношении принципиально отличается от задачи интерполяции. Как и в § 2.2, рассмотрим аналитическое продолжение ряда Тейлора функции f(z), т. е. перейдем от разложения функции вблизи z = 0 к разложению вблизи $z = z_0$. Обозначив $t = z - z_0$, получим:

$$f(z) = \sum_{i} a_{i} z^{i} = \sum_{k} b_{k} t^{k}, \ b_{k} = \sum_{i=k}^{\infty} z_{0}^{i-k} a_{i} \frac{i!}{k!(i-k)!}.$$

Следовательно, при таком преобразовании любое b_k зависит от всех a_i , $i \ge k$, тогда как при построении аппроксиманты используется лишь конечное число a_i . Отсюда следует, что построить аппроксиманту аналитического продолжения ряда Тейлора функции, имея лишь аппроксиманту исходного ряда, принципиально невозможно — необходимо привлекать информацию об отброшенных членах ряда Тейлора. Поэтому и приближение Паде-1, в частности, не может быть инвариантным относительно преобразования сдвига независимой переменной $z = t + z_0$.

Однако существует важный класс преобразований, а именно преобразования Эйлера, при которых конечное число членов разложения по t выражается через такое же число членов разложения по z:

$$z = \alpha t / (1 + \beta t); \ f(z) = \sum_{i} a_{i} z^{i};$$

$$\phi(t) = f(z(t)) = \sum_{k} c_{k} t^{k};$$

$$c_{0} = a_{0},$$

$$c_{k} = \sum_{n=1}^{k} (-1)^{k-n} \beta^{k-n} a_{n} \alpha^{n} \frac{(k-1)!}{(n-1)!(k-n)!}.$$
(2.10)

По определению приближения Паде-1 $P_N(z) / Q_M(z) = f(z) + O(z^L)$, где $O(z^L)$ при $z \to 0$ убывает, как z^L . Поскольку $O(z^L)$ при подстановке $z = \alpha t / (1 + \beta t)$ переходит в $O(t^L)$, рациональная функция аргумента t

$$(1+\beta t)^{M} T_{N}(t) / (1+\beta t)^{N} S_{M}(t) = P_{N}[z(t)] / Q_{M}[z(t)]$$

будет аппроксимировать ряд Тейлора функции $\varphi(t)$ с точностью до $O(z^{L})$. Отсюда следует, что диагональные приближения инвариантны относительно преобразований Эйлера. Эти преобразования, как и аналитическое продолжение ряда Тейлора, позволяют выйти за пределы круга сходимости последнего. Для пояснения снова рассмотрим функцию $f(z) = \ln (1 + z)$ и преобразование переменной z = t / (1 - t), которое приводит к новой функции $\varphi(t) = -\ln (1 - t)$. Исходная функция аналогична во всей плоскости комплексной переменной z, кроме разреза на действительной оси $[-\infty, 1]$, а функция $\varphi(t)$ аналогична во всей плоскости, кроме разреза $[1, \infty]$. Ряды Тейлора каждой из функций f(z) и $\varphi(t)$:

$$f(z) = z - z^{2}/2 + z^{3}/3 - z^{4}/4 + \dots;$$

$$\varphi(t) = -(t + t^{2}/2 + t^{3}/3 + t^{4}/4 + \dots)$$

сходятся в круге единичного радиуса, но кругу |t| < 1 в плоскости *z* соответствует область Re $z > -\frac{1}{2}$, и преобразованный ряд позволяет вычислять ln (1+*z*), в частности, при любом действительном $z > -\frac{1}{2}$. Переходить от суммы конечного числа членов ряда по *z* к такому же числу членов ряда по *t* можно, не зная всего ряда, а лишь используя формулу (2.10) для связи коэффициентов c_k и a_k .

Итак, даже в случае полиномиальной аппроксимации преобразование Эйлера с соответствующими параметрами позволяет вычислять аппроксиманту

функции вне круга сходимости ряда Тейлора, переходя от $P_L(z) = \sum_{n=0}^{L} a_n z^n$ к

аппроксиманте $F_L(t) = \sum_{n=0}^{n=0} c_n [t(z)]^n = H_L(z) / (\alpha - \beta z)^L$. Эта аппроксиманта —

уже не полиномиальная функция z, а рациональная с равными степенями по-

линомов числителя и знаменателя. Диагональное приближение Паде, которое описывает то же число членов ряда Тейлора функции f(z), будет при L - 1 = 2N иметь вид: $P_N(z) / Q_M(z)$ со степенями полиномов числителя и знаменателя, вдвое меньшими, чем у $H_L(z) / (\alpha - \beta z)^L$. Как уже говорилось, преобразование Эйлера такого приближения приводит к аппроксиманте $T_N(t) / S_N(t)$, которая равна в точке t = t(z) просто $P_N(z) / Q_M(z)$. Поэтому, если при некотором t последовательные приближения $T_N(t) / S_N(t)$ при $N \to \infty$ сходятся к функции $\varphi(t) = f[z(t)]$ то приближения $P_N(z) / Q_M(z)$ сходятся к f(z) при любом выборе параметров преобразований Эйлера.

Эти рассуждения помогают понять, почему с помощью приближения Паде можно суммировать расходящиеся ряды — преобразованиями Эйлера их можно свести к сходящимся, а приближение Паде инвариантно относительно преобразований Эйлера. Кроме того, становится понятнее, почему область сходимости приближения Паде гораздо шире области сходимости степенного ряда.

Рассмотрим теперь дробно-линейное преобразование не аргумента, а функции $\varphi(z)$ и применим его к диагональному приближению Паде-1 $f^{[N,N]}(z)$ для функции f(z):

$$\varphi^{[N,N]}(z) = \left[\alpha P_{N}(z) + \beta Q_{N}(z)\right] / \left[\gamma P_{N}(z) + \delta Q_{N}(z)\right]$$

Инвариантность приближения Паде-2 относительно такого преобразования очевидна. В случае приближения Паде-1, используя равенство $f(z) = f^{[N, N]}(z) + O(z^L)$, нетрудно показать, что $\varphi(z) = \varphi^{[N, N]}(z) + O(z^L)$, т. е. диагональное приближение преобразованной функции есть преобразование диагонального приближения к исходной функции. Это преобразование, в частности, позволяет связать аппроксиманты функций f(z) и $[f(z)]^{-1}$: выбирая $\alpha = \delta = 0$, $\beta = \gamma = 1$, получаем, что функции $[f(z)]^{-1}$ соответствует аппроксиманта $[f^{[N, N]}(z)]^{-1} = Q_M(z)/P_N(z)$.

ГЛАВА 3. АЛГОРИТМЫ РАЦИОНАЛЬНОЙ ИНТЕРПОЛЯЦИИ

3.1. Детерминантное решение задачи интерполяции

Первым этапом обработки и анализа экспериментальных данных является построение гладкой кривой, которая служит оценкой истинной физической зависимости. Широкое использование на этом этапе рациональных приближений становится возможным благодаря методу перебора, который позволяет получать оценки параметров аппроксиманты, не прибегая к решению системы нелинейных уравнений или использованию более сложных методов оптимизации. Идея метода перебора состоит в том, что среди множества интерполирующих кривых ранга L, построенных по различным наборам L экспериментальных точек из общего числа $N_{ex} \gg L$ будут и такие кривые, которые

достаточно близки к статистически оптимальной. Подробнее этот метод изложен в гл. 5.

Метод перебора становится технически возможным лишь благодаря использованию соответствующих алгоритмов рекуррентного построения рациональной интерполяции. Эти алгоритмы аналогично формуле Ньютона [21] в задаче полиномиальной интерполяции позволяют увеличивать на единицу число узлов интерполяции, т. е. ранг приближения, при использовании лишь двух предыдущих приближений. При этом от добавляемой точки зависят лишь коэффициенты рекуррентного соотношения. Получение алгоритмов такого рода, несимметричных относительно последовательности выбора узлов, но удобных для машинного построения большого числа вариантов интерполяции и вычисления производных, является основной целью настоящей главы.

Задача интерполяции рациональными функциями, т. е. приближение Паде-2, имеет при заданных степенях полиномов числителя и знаменателя аппроксиманты N и M и заданном числе узлов интерполяции L = N + M + 1 не больше одного решения. Действительно, если отношения полиномов $P_N(z)/Q_M(z)$ и $P'_N(z)/Q'_M(z)$ принимают значения $f(z_i)$ в L точках z_i , то полином $P_N(z)/Q'_M(z) - P'_N(z)/Q_M(z)$ степени N + M будет равен нулю в этих N + M + 1точках и поэтому равен нулю тождественно. Следовательно, полиномы $P_N(z)$, $Q_M(z)$, $P'_N(z)$, $Q'_M(z)$ могут различаться лишь общим множителем α , т. е. $P_N(z) = \alpha P'_N(z)$, $Q_M(z) = \alpha Q'_M(z)$, который будем называть нормировочным. При обработке резонансных кривых этот множитель удобно выбирать так, чтобы коэффициент при старшей степени знаменателя был равен единице. Случаи, когда построение рациональной интерполяции с заданными N и M невозможно, будут рассмотрены в § 3.6.

Детерминантное решение этой задачи было получено Якоби. Проще всего к нему прийти, присоединяя к системе (2.9) еще одно уравнение, которое следует из определения интерполирующей функции:

$$\sum_{n=0}^{N} p_N^n z^n - f^{[N,M]}(z) \sum_{m=0}^{M} q_M^m z^m = 0.$$

Получающаяся при этом система L + 1 линейных уравнений относительно L + 1 неизвестных. p_N^n и q_M^m имеет нетривиальное решение, если ее детерминант равен нулю. Используя простейшие свойства детерминантов, последнюю строку этого детерминанта можно представить в виде суммы двух строк:

$$\begin{pmatrix} z^{N}, z^{N-1}, ..., 1; -f^{[N,M]}(z), -zf^{[N,M]}z, ..., -z^{M}f^{[N,M]}(z) \end{pmatrix} = \\ = (z^{N}, z^{N-1}, ..., 1; 0, 0, ..., 0) - (0, 0, ..., 0; f^{[N,M]}(z), zf^{[N,M]}z, ..., z^{M}f^{[N,M]}(z)),$$

затем перейти к сумме детерминантов и вынести в одном из них общий множитель $f^{[N, M]}(z)$. В результате получится следующее выражение для $f^{[N, M]}(z)$:

Здесь $f_i \equiv f(z_i)$; $C_{N,M}^L$ — прямоугольная матрица, структура которой ясна из (3.1). В дальнейшем мы будем использовать следующее обозначение: $C_{N(k),M(l)}^{L(i)}$ — матрица, которая получается из $C_{N,M}^L$ отбрасыванием *i*-й строки и столбцов с z_n^k и $f_n z_n^l$. Если отбрасываются последние строки или крайние столбцы, будем писать просто $C_{N_1,M_1}^{L_1}$, при этом L_1 совсем не обязательно равно $N_1 + M_1 + 1$. Строки, у которых только первый или последний элемент равен единице, а остальные — нулю, обозначим соответственно (*e*, 0) и (0, *e*). Последние строки в числителе и знаменателе (3.1) обозначены (\tilde{z} , 0) (0, \tilde{z}). В дальнейшем такие строки всегда будут присоединяться к матрицам $C_{N(k),M(l)}^{L(i)}$ поэтому число нулей в строке ($0, \tilde{z}$) всегда равно числу столбцов без множителя f_n , число нулей в строке (\tilde{z} , 0) всегда равно числу столбцов с этим множителем, а степени *z* в ненулевых элементах этих строк всегда совпадают со степенями z_n соответствующих столбцов тех матриц, к которым они присоединяются. В этих обозначениях нормировка на $q_M^M = 1$ получится, если числи-

тель и знаменатель выражения (3.1) разделить на $|C_{N,M-1}^L|$.

Детерминатное решение позволяет получить не слишком сложные формулы для $P_N(z)$ и $Q_M(z)$ лишь при малых N и M, поскольку ранг соответствующих детерминантов равен N + M + 2. Формулы можно несколько упростить, если использовать разложение детерминантов по минорам (теорема Лапласа) и свойства определителей Вандермонда [27]. Используя принятые выше обозначения, выпишем известное соотношение для определителя Вандермонда W_{N+1} :

$$W_{n+1} = \left| C_{N,0}^{N+1} \right| = \prod_{1 \le i < k \le N+1} \left(z_i + z_k \right)$$
(3.2)

и определителя, получающегося из него отбрасыванием одного столбца и последней строки [27]:

$$W_N^{(l)} = \left| C_{N(l),0}^N \right| = S_{N(l)} \prod_{1 \le i < k \le N+1} (z_i + z_k).$$
(3.3)

Здесь $S_{N(l)} = \sum_{\gamma} \prod_{i=1}^{N-1} z_{\gamma_i}$, т. е. $S_{N(l)}$ есть сумма всех возможных различных про-

изведений N-1 абсцисс z_{γ_i} из общего числа N абсцисс $z_1, z_2, ..., z_N$. В частности,

$$S_{N(N)} = 1; \ S_{N(N-1)} = \sum_{i=1}^{N} z_i; \ S_{N(N-2)} = \sum_{1 \le i < k \le N} z_i z_k; \ S_{N(0)} = \prod_{i=1}^{N} z_i$$

Используя теорему Лапласа, разложим определители, входящие в (3.1), по первым N+1 столбцам. Миноры, составленные из элементов этих столбцов, являются определителями Вандермонда, дополнительные к ним миноры отличаются от определителей Вандермонда лишь домножением каждой строки на соответствующее f_{i} , поэтому, используя (3.2), получаем:

$$P_{N}(z) = \sum_{\alpha} \prod_{1 \le i < k \le N} (z_{\alpha_{i}} - z) (z_{\alpha_{i}} - z_{\alpha_{k}}) \prod_{l=1}^{M+1} f_{\tilde{\alpha}_{l}} \times \times \prod_{1 \le n < m \le M+1} (z_{\tilde{\alpha}_{n}} - z_{\tilde{\alpha}_{m}}) (-1)^{L + \sum_{i=1}^{N} \alpha_{i} + B} Q_{M}(z) = \sum_{\alpha} \prod_{1 \le i < k \le N+1} (z_{\alpha_{i}} - z_{\alpha_{k}}) \prod_{l=1}^{M} f_{\tilde{\alpha}_{l}} (z_{\tilde{\alpha}_{l}} - z) \times \times \prod_{1 \le n < m \le M} (z_{\tilde{\alpha}_{n}} - z_{\tilde{\alpha}_{m}}) (-1)^{\sum_{i=1}^{N+1} \alpha_{i} + B}$$

$$(3.4)$$

Здесь *B* от α_i не зависит; α_i и $\tilde{\alpha}_n$ — номера строк, которые входят в миноры, составленные из первых N+1 столбцов и из остальных M+1 столбцов соответственно. Суммирование по α ведется по различным разбиениям индексов 1, 2... на две группы α и $\tilde{\alpha}$ из N и M+1 индексов в случае $P_N(z)$ и из N+1 и M индексов в случае $Q_M(z)$. Для иллюстрации выпишем $P_N(z)$ и $Q_M(z)$ в случае N=M=1:

$$P_{1}(z) = -(z_{1} - z) f_{2} f_{3}(z_{2} - z_{3}) + (z_{2} - z) f_{1} f_{3}(z_{1} - z_{3}) - (z_{3} - z) f_{1} f_{2}(z_{1} - z_{2})$$

$$Q_{1}(z) = (z_{1} - z) f_{1}(z_{2} - z_{3}) - (z_{2} - z) f_{2}(z_{1} + z_{3}) + (z_{3} - z) f_{3}(z_{1} - z_{2})$$

$$(3.5)$$

Коэффициенты полиномов числителя и знаменателя (p_N^n и q_M^m) аппроксиманты $f^{[N,M]}(z)$ получаются при разложении соответствующих детерминантов выражения (3.1) по элементам последних строк. Используя при этом теорему Лапласа и формулы (3.2) и (3.3), получаем для p_N^n :

$$p_{N}^{n} = \sum_{\alpha,\beta} \prod_{i=1}^{N-n} z_{\beta_{i}} \prod_{1 \leq l < k \leq N} (z_{\alpha_{l}} - z_{\alpha_{k}}) \prod_{m=1}^{M+1} f_{\tilde{\alpha}_{m}} \times \sum_{1 \leq l < s \leq M+1} (z_{\tilde{\alpha}_{l}} - z_{\tilde{\alpha}_{s}}) (-1)^{L-n+\sum_{k=1}^{N} \alpha_{k}+B},$$

$$(3.6)$$

где α — набор *N* различных индексов из *L*, соответствующий выбору строк минора из первых *N* столбцов; β — набор *N* – *n* индексов из *N* индексов набора α ; $\tilde{\alpha}$ — набор *M* + 1 индексов из *L*, дополнительный к α . Суммирование по α — это разложение детерминанта по теореме Лапласа, суммирование по β появляется из-за использования формулы (3.3).

Аналогично для q_{M}^{m} получим:

$$q_{M}^{m} = \sum_{\alpha,\beta} \prod_{1 \le i < k \le N+1} \left(z_{\alpha_{i}} - z_{\alpha_{k}} \right) \prod_{l=1}^{M-m} z_{\beta_{l}} \prod_{n=1}^{M} f_{\tilde{\alpha}_{n}} \times \sum_{1 \le s < l \le M} \left(z_{\tilde{\alpha}_{s}} - z_{\tilde{\alpha}_{l}} \right) (-1)^{N+1} \sum_{k=1}^{N+1} \alpha_{k} + B}.$$

$$(3.7)$$

. .

. .

Здесь α — набор N + 1 индексов из L; $\tilde{\alpha}$ — набор M индексов из L, дополнительный к α ; β — набор M - m индексов из M индексов набора $\tilde{\alpha}$.

Выражения (3.3), (3.6), (3.7) довольно компактны, симметричны и удобнее для пользования, чем хорошо известная формула (3.1). Их можно рассматривать как аналог интерполяционной формулы Лагранжа, используемой в полиномиальной интерполяции. Однако с ростом N и M число слагаемых быстро увеличивается, и для получения приближений высоких порядков они все равно неудобны.

3.2. Производные по опорным ординатам

Используя свойства детерминантов, можно получить соотношения для элементов рациональной интерполяции, которые понадобятся нам в дальнейшем. Прежде всего, выразим $Q_M(z_i)$ через детерминант ранга L - 1. Для этого в знаменатель формулы (3.1) подставим $z = z_i$, вычтем из *i*-й строки последнюю, домноженную на f_i , затем из каждого столбца, кроме N + 1-го и N + 2-го, вычтем соседний, домноженный на z_i и из каждой строки, кроме *i*-й, вынесем $Z_k - z_i$, где k — номер строки. Разложим полученный детерминант по *i*-й и последней строкам. В результате получим:

$$Q_M(z_i) = \prod_{k \neq 1} (-1)^{L+i} (z_k - z_i) \left| C_{N-1,M-1}^{L(i)} \right|.$$
(3.8)

Исключительно полезно при работе с детерминантами рациональной интерполяции следующее тождество:

$$\begin{vmatrix} \mathbf{A} & | \mathbf{A} \\ \mathbf{a} & | \mathbf{c} \\ \mathbf{b} & | \mathbf{d} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \mathbf{A} & | \mathbf{A} \\ \mathbf{a} & | \mathbf{c} \\ \mathbf{b} & | \mathbf{d} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \mathbf{A} & | \mathbf{A} \\ \mathbf{c} & | \mathbf{a} \\ \mathbf{b} & | \mathbf{c} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \mathbf{A} & | \mathbf{A} \\ \mathbf{b} & | \mathbf{c} \\ \mathbf{c} & | \mathbf{d} \end{vmatrix}.$$
(3.9)

Здесь А — прямоугольная матрица с L-1 строкой и L+1 столбцом; **a**, **b**, **c** и **d** обозначают строки ($a_1, a_2, ..., a_L, a_{L+1}$) и т. д. Для доказательства этого соотношения надо применить тождество Сильвестра [27] к каждому из входящих в него детерминантов и привести подобные члены.

Простейшим примером использования этого соотношения может служить вывод формулы для производной рациональной интерполяции по значению функции f(z) в узле интерполяции z_i :

$$\frac{\partial f^{[N,M]}(z)}{\partial f_i} = \left[\frac{\partial P_N(z)}{\partial f_i}Q_M(z) - \frac{\partial Q_M(z)}{\partial f_i}P_N(z)\right] \left[Q_M(z)\right]^{-2}.$$
 (3.10)

Поскольку от f_i зависят только *i*-е строки детерминантов $P_N(z)$ и $Q_M(z)$, дифференцируя их по f_i и применяя затем тождество (3.9), которое, естественно, справедливо и в том случае, когда детерминанты различаются любыми двумя строками, а не обязательно последними, получаем:

$$\frac{\partial f^{[N,M]}(z)}{\partial f_i} = \begin{vmatrix} C_{N,M}^L \\ 0, \tilde{z} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} C_{N,M}^{L(i)} \\ (i) \tilde{z}, 0 \\ 0, \tilde{z} \frac{\delta y}{\delta x} \end{vmatrix} / Q_M^2(z).$$
(3.11)

Здесь $\begin{vmatrix} C_{N,M}^{L(i)} \\ (i)z,0 \end{vmatrix}$ — матрица, которая получается из $C_{N,M}^L$ заменой *i*-й строки

строкой (\tilde{z} , 0). Первый из входящих в (3.11) детерминантов есть $Q_M(z_i)$, а второй получается из него заменой в *i*-й и последней строках $z_i \rightarrow z$, поэтому, используя (3.8), имеем

$$\frac{\partial f^{[N,M]}(z)}{\partial f_i} = \frac{\mathcal{Q}_M^2(z_i)}{\mathcal{Q}_M^2(z)} \frac{\prod_{k \neq i} (z - z_k)}{\prod_{k \neq i} (z_i - z_k)}.$$
(3.12)

Последнее выражение можно получить и из общих соображений, вообще не рассматривая детерминанты. Именно, поскольку от опорных ординат f_i за-

висят лишь коэффициенты полиномов $P_N(z)$ и $Q_M(z)$, в знаменателе производной стоит $Q_M^2(z)$, а в числителе — полином степени N + M. Этот полином должен обращаться в нуль во всех остальных узлах интерполяции, поскольку изменение одной опорной ординаты не меняет других и $\partial f(z_k)/\partial f_i = \delta_{ik}$. Следовательно, данный полином имеет вид const $\prod_{k \neq i} (z - z_k)$. Определяя константу из

условия $\partial f(z_i)/\partial f_i = 1$, получаем окончательно (3.12).

В некоторых случаях, например при использовании для оптимизации аппроксиманты метода Ньютона — Рафсона или других методов второго порядка, необходимо уметь вычислять вторые производные аппроксиманты по параметрам. Дифференцируя (3.12) по f_k , находим:

$$\frac{\partial f^{[N,M]}(z)}{\partial f_k \partial f_i} = 2 \frac{\prod_{n \neq i} (z - z_n)}{\prod_{n \neq i} (z_i - z_n)} \frac{Q_M(z_i)}{Q_M^3(z)} \left[\frac{\partial Q_M(z_i)}{\partial f_k} Q_M(z) - \frac{\partial Q_M(z)}{\partial f_k} Q_M(z_i) \right]. \quad (3.13a)$$

Применив к выражению в квадратных скобках соотношение (3.9), получим произведение $Q_M(z_k)$ и детерминанта, который отличается от $Q_M(z_i)$ тем, что вместо *k*-й строки (\tilde{z}_k , $f_k \tilde{z}_k$) в нем стоит (0, \tilde{z}). Действуя так же, как при выводе формулы (3.8), получим при i > k следующее выражение для второй производной:

$$\frac{\partial f^{2[N,M]}(z)}{\partial f_k \partial f_i} = (-1)^{i+k+N} \cdot 2 \frac{\prod_{n=1}^{L} (z_n - z)}{(z_i - z_k)} \frac{Q_M(z_i) Q_M(z_k)}{Q^3(z)} \left| \frac{C_{N-1,M-1}^{L(i,k)}}{0,\tilde{z}} \right|. (3.136)$$

Последний детерминант — это знаменатель выражения для рациональной интерполяции по L-2 точкам без узлов z_i и z_k . Таким образом, получено довольно компактное выражение для второй производной, однако оно не всегда пригодно при совместном использовании с рекуррентной процедурой построения рациональной интерполяции, так как при рекуррентном построении воспользоваться уже полученными приближениями ранга L-2 для вычисления (3.136) можно лишь в том случае, когда z_i и z_k — это два последних узла, т. е. z_L и z_{L-1} . Во всех остальных случаях, а их порядка L^2 , необходимы другие цепочки рекуррентного построения, и объем вычислений при больших L резко возрастает.

Поэтому вместо использования сравнительно простой формулы (3.13б) приходится переходить в (3.13а) к величинам, которые уже были получены при рекуррентном построении. Это сложная задача, требующая многократного применения тождества (3.9), соотношений типа (3.8) и некоторой изобретательности. Приведем здесь лишь окончательные формулы:

$$\frac{\partial^{2} f^{[N,M]}(z)}{\partial f_{i} \partial f_{k}} = 2 \frac{\mathcal{Q}_{(L)}(z_{i})\mathcal{Q}_{(L)}(z_{k})}{\mathcal{Q}_{(L)}^{3}(z)} \prod_{\substack{n \neq i \\ n \neq i}}^{m \neq i} (z_{i} - z_{n}) \prod_{\substack{n \neq L \\ n \neq L}}^{m \neq L} (z_{n} - z_{L})} \times \frac{\beta_{ik}}{\mathcal{Q}_{(L)}(z_{L}) \left[-P_{L-1}(z_{L}) + f_{L}\mathcal{Q}_{(L-1)}(z_{L}) \right]}}{\mathcal{Q}_{(L)}(z_{L}) \left[-P_{L-1}(z_{L}) + f_{L}\mathcal{Q}_{(L-1)}(z_{L}) \right]}$$

$$\beta_{ik} = \frac{z - z_{L}}{z - z_{k}} \mathcal{Q}_{(L)}(z_{i}) \left[\mathcal{Q}_{(L)}(z) \mathcal{Q}_{L-1}(z_{k}) - \mathcal{Q}_{L-1}(z) \mathcal{Q}_{L}(z_{k}) \right] - \frac{z_{i} - z_{L}}{z_{i} - z_{k}} \mathcal{Q}_{(L)}(z) \left[\mathcal{Q}_{(L)}(z_{i}) \mathcal{Q}_{(L-1)}(z_{k}) - \mathcal{Q}_{(L-1)}(z_{i}) \mathcal{Q}_{(L)}(z_{k}) \right], \ i \neq k$$

$$\beta_{kk} = \mathcal{Q}_{(L)}(z_{k}) \frac{z - z_{L}}{z - z_{k}} \left[\mathcal{Q}_{(L)}(z) \mathcal{Q}_{(L-1)}(z_{k}) - \mathcal{Q}_{(L-1)}(z) \mathcal{Q}_{(L)}(z_{k}) \right] - (z_{k} - z_{L}) \mathcal{Q}_{(L)}(z) \left[\mathcal{Q}_{(L-1)}(z_{k}) \frac{\partial}{\partial y} \mathcal{Q}_{(L)}(y) \right|_{y = z_{k}} - \mathcal{Q}_{(L)}(z_{k}) \frac{\partial}{\partial y} \mathcal{Q}_{(L-1)}(y) \right|_{y = z_{k}} \right]$$

$$(3.14)$$

Поскольку коэффициенты полиномов $Q_L(z)$ и $Q_{(L-1)}(z)$ известны, вычисление производных в выражении для β_{kk} не представляет труда. Для проверки этих формул в частном случае k = L - 1, i = L можно использовать (3.13б) и аналогичное выражение для i = k = L. Отметим, что первая производная по опорным ординатам зависит лишь от знаменателя рационального интерполяционного выражения и положения узлов интерполяции, но не зависит от числителя.

3.3. Рекуррентные соотношения для рациональной интерполяции

Лучше всего исследованы частные случаи рациональной интерполяции и аппроксимации, в которых используются лишь приближения с одинаковыми или различающимися не более чем на единицу степенями числителя и знаменателя. Дело в том, что эти приближения являются так называемыми подходящими дробями непрерывных (цепных) дробей, теория и практика применения которых имеет многовековую историю^{*}. В [2, с. 375] приведена аннотированная библиография алгоритмов построения приближений Паде. В большинстве этих алгоритмов коэффициенты рекуррентных соотношений выражаются через элементы цепных дробей, которые сами по себе для построения рациональных приближений не нужны. Не останавливаясь на них, приведем более простые алгоритмы для непосредственного построения приближений Паде.

^{*}Современное состояние теории и приложений непрерывных дробей см. в книге Джоунс У., Трон В. Непрерывные дроби: Пер. с англ. М.: Мир, 1985.

Основные тождества, связывающие между собой смежные приближения Паде-1 с произвольными разностями степеней числителя и знаменателя, были получены Фробениусом еще в 1881 г. (см. [1], там же приведены рекуррентные алгоритмы построения приближения Паде-1, в основе которых лежат эти тождества).

В настоящем параграфе для элементов приближения Паде-2 будут получены соотношения, аналогичные тождествам Фробениуса для Паде-1. Это четыре трехчленных соотношения, связывающие смежные интерполяции [N-1, M-1], [N-1, M], [N, M-1] и [N, M], а также соотношения, связывающие между собой приближения внутри каждой из следующих троек: [N, M], [N-1, M], [N-2, M]; [N, M], [N, M-1], [N, M-2]; [N, M], [N-1, M-1], [N-2, M-2]; [N, M], [N-1, M+1], [N+1, M-1]. В рекуррентных соотношениях этого параграфа учтены особенности машинного построения приближений высоких рангов.

Рассмотрим, прежде всего, вывод таких соотношений в детерминантном подходе. Используя тождество (3.9) и конкретную структуру матриц $C_{N,M}^L$, можно получить следующее соотношение между детерминантами:

$$\begin{vmatrix} C_{N,M}^{L} \\ 0,\tilde{z} \\ 0,\tilde{z} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} C_{N,M}^{L-1} \\ 0,\tilde{z}_{L-1} \\ e,0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} C_{N,M}^{L} \\ 0,\tilde{z}_{L-1} \\ 0,\tilde{z} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} C_{N,M}^{L} \\ 0,\tilde{z}_{L-1} \\ 0,\tilde{z}_{L-1} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} C_{N,M}^{L} \\ 0,\tilde{z} \\ e,0 \end{vmatrix}.$$
(3.15)

Перейдя от матричных обозначений к элементам рациональной интерполяции, получим:

$$Q_{N,M}(z)Q_{N-1,M}(z_{L-1}) = (z - z_{L-1})\prod_{i=1}^{L-2} (z_i - z_{L-1}) \Big[f_L Q_{N-1,M-1}(z) - P_{N-1,M}(z_L) \Big] \times \\ \times Q_{N-1,M-1}(z) - \prod_{i \neq L-1} (z_i - z_{L-1}) \Big[f_L Q_{N-1,M-1}(z_L) - P_{N-1,M-1}(z_L) \Big] Q_{N-1,M}(z),$$

т. е. рекуррентное соотношение для знаменателей приближений Паде-2. Замена строки $(0, \tilde{z})$ строкой $(\tilde{z}, 0)$ в левой части (3.15) приведет к такой же замене лишь в тех детерминантах правой части, которые зависят от z, и для числителей получится рекуррентное соотношение с теми же коэффициентами.

Применяя (3.9) к произведениям детерминантов

$$\begin{vmatrix} C_{N,M}^L \\ 0, \tilde{z} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} C_{N,M}^{L-1} \\ 0, \tilde{z}_{L-1} \\ 0, e \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} C_{N,M}^L \\ 0, e \end{vmatrix} \begin{vmatrix} C_{N,M}^L \\ 0, \tilde{z} \\ e, 0 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} C_{N,M}^{L-1} \\ 0, \tilde{z} \\ 0, \tilde{z} \\ 0, e \end{vmatrix} \begin{vmatrix} C_{N,M}^{L-1} \\ 0, \tilde{z} \\ 0, \tilde{z}_{L-1} \\ e, 0 \end{vmatrix},$$

аналогичным образом можно получить оставшиеся три соотношения, связывающие смежные интерполяции. Каждое из этих соотношений станет рекуррентным, если все входящие в него коэффициенты выразить через величины, полученные на предыдущих этапах построения. Хотя формально нормировка числителя и знаменателя интерполяционного выражения роли не играет, так как их всегда можно домножить на одно и то же число, при машинном построении приближений высоких порядков отнюдь не безразлично, каковы значения числителя и знаменателя в отдельности. Исходя из этих соображений, а также для удобства сравнения приближений разных рангов перейдем к полиномам $\tilde{P}_N(z)$ и $\tilde{Q}_M(z)$, нормированным условием $q_M^M = 1$. Основываясь на единственности нормированного рационального интерполяционного выражения и предполагая существование соответствующего рекуррентного соотношения, можно определить его коэффициенты из условий на коэффициенты нормированных числителей и знаменателей и из условия прохождения построенного приближения через узлы интерполяции. Сравнение этого подхода с детерминантным позволяет получать соотношения между детерминантами, доказательство которых иным путем весьма затруднительно.

В наших расчетах основными являются рекуррентные соотношения, которые позволяют при увеличении ранга (числа узлов интерполяции) на единицу увеличивать на единицу степень числителя или знаменателя приближения. Первое из них запишем в виде

$$\frac{\tilde{P}_{N,M}(z)}{\tilde{Q}_{N,M}(z)} = \frac{\alpha \tilde{P}_{N-1,M}(z) + \beta(z - z_{L-1})\tilde{P}_{N-1,M-1}(z)}{\alpha \tilde{Q}_{N-1,M}(z) + \beta(z - z_{L-1})\tilde{Q}_{N-1,M-1}(z)}.$$
(3.16)

Условие равенства единице старших коэффициентов всех $\tilde{Q}_M(z)$ дает сразу $\alpha = 1 - \beta$. Функция (3.16) при любых α и β проходит через все узлы интерполяции, кроме z_L . Полагая $f^{[N, M]}(z_L) = f(z_L)$, получаем

$$\beta = \tilde{c}_{N-1,M} \left(z_L \right) / \left(\tilde{c}_{N-1,M} \left(z_L \right) - \left(z_L - z_{L-1} \right) \tilde{c}_{N-1,M} \left(z_L \right) \right), \tag{3.17}$$

где

$$\tilde{c}_{N,M}(z) = f(z)\tilde{Q}_{N,M}(z) - \tilde{P}_{N,M}(z); \tilde{c}_{N-1,M}(z_L) = |C_{N-1,M}^L|/|C_{N-1,M-1}^{L-1}|; \tilde{c}_{N-1,M-1}(z_L) = |C_{N-1,M-1}^L|/|C_{N-1,M-2}^{L-2}|.$$

Если предыдущее приближение было не $f^{[N-1,M]}(z)$, а $f^{[N,M-1]}(z)$, получим $\beta = 1$ и

$$\tilde{R}_{N,M} = \left(z_{L-1} - z_L\right) \frac{\tilde{c}_{N-1,M-1}(z_L)}{\tilde{c}_{N,M-1}(z_L)} \tilde{R}_{N,M-1} + \left(z - z_{L-1}\right) \tilde{R}_{N-1,M-1}.$$
(3.18)

Для того чтобы пользоваться этими рекуррентными соотношениями, необходимо выбрать два начальных приближения [28, с. 267]. Формальные начальные условия $f^{[-1, 0]}(z) = 0/1$, $f^{[0, 0]}(z) = f_1/1$ позволяют строить диагональные и околодиагональные приближения, у которых N = M - 1 чередуется с N = M; условия $f^{[0, -1]}(z) = 1/0$ и $f^{[0, 0]}(z) = f_1/1$ приводят к чередованию N = M + 1 с N = M. Приближения такой структуры, но с другими нормировками получаются в теории цепных Дробей. Соответствующие разным вариантам определения этих дробей рекуррентные соотношения для подходящих дробей получаются, если вместо $q_M^M = 1$ положить в (3.16) $\alpha = 1$ или $\beta = 1$. В каждом из этих вариантов вместо (3.16), (3.18) получается одно рекуррентное соотношение для наращивания степени и числителя, и знаменателя. Сравнивая эти соотношения с приведенными выше, можно найти связь получающихся полиномов с полиномами, нормированными условием $q_M^M = 1$.

Для построения приближений, у которых модуль разности степеней числителя и знаменателя больше единицы, в качестве начальных приближений выбирают последовательные полиномиальные приближения $f^{[l, 0]}(z)$ и $f^{[l+1, 0]}(z)$ в случае, когда $N - M \ge l$, и приближения $f^{[0, l]}(z)$ и $f^{[0, l+1]}(z)$ если $M - N \ge l$. Последние легко получить, строя полиномиальные интерполяции $Q_{0,M}(z)$ функции l/f(z), поскольку вследствие единственности рационального интерполяционного выражения $f^{[0,M]}(z) = l/Q_{0,M}(z) = l/\lceil q_M^M \tilde{Q}_{0,M}(z) \rceil$.

Получим теперь два соотношения, совместное использование которых позволяет, не наращивая числа узлов интерполяции, переходить от приближений $f^{[L, 0]}(z)$ или $f^{[0, L]}(z)$ к приближениям $f^{[N, L-M]}(z)$ с ненулевыми степенями полиномов и в числителе, и в знаменателе. Использование этих соотношений может оказаться удобнее последовательного наращивания степеней в том случае, когда известен ранг [N, M] конечного приближения и есть простая процедура построения полиномиальной интерполяции, так как оно позволяет почти вдвое уменьшить число обращений к рекуррентным формулам.

Первое из соотношений запишем в виде

$$\tilde{R}_{N-1,M} = \alpha \tilde{R}_{N,M} + \beta \tilde{R}_{N,M-1}.$$

Условие нормировки знаменателей дает $\alpha = 1$, условие равенства нулю коэффициента при z^N в числителе дает $\beta = -\tilde{p}_{N,M}^N / \tilde{p}_{N,M-1}^N$. В результате получим

$$\tilde{R}_{N-1,M} = \tilde{R}_{N,M} - \tilde{p}_{N,M}^N \tilde{R}_{N,M-1} / \tilde{p}_{N,M-1}^N .$$
(3.19)

Аналогичные рассуждения приводят к следующему выражению для второго соотношения:

$$\tilde{R}_{N-1,M} = (z - z_{L-1})\tilde{R}_{N-1,M-1} - (\tilde{p}_{N-1,M-1}^{N-1} / \tilde{p}_{N,M-1}^{N})\tilde{R}_{N,M-1}.$$
(3.20)

Ясно, что таким методом легко получить коэффициенты соотношений, связывающих те же приближения, но понижающих степень знаменателя и повышающих степень числителя.

Четыре приведенных выше рекуррентных соотношения (3.16)—(3.20) являются исчерпывающими в том соотношении, что с их помощью, взяв в качестве начальных любые два смежных приближения, можно построить любое приближение с тем же или большим числом узлов. Для рекуррентного построения приближений с постоянной степенью полинома в числителе можно использовать соотношение

$$\tilde{R}_{N,M} = \left[(z - z_L) + (z_L - z_{L-1}) \frac{\tilde{p}_{N,M-1}^N \tilde{c}_{N,M-2}(z_L)}{\tilde{p}_{N,M-2}^N \tilde{c}_{N,M-1}(z_L)} \right] \tilde{R}_{N,M-1} - (z - z_{L-1}) \frac{\tilde{p}_{N,M-1}^N}{\tilde{p}_{N,M-2}^N} \tilde{R}_{N,M-2}.$$
(3.21)

В том случае, когда постоянна степень знаменателя, рекуррентное соотношение имеет вид

$$\tilde{R}_{N,M} = \alpha \left\{ \left[\left(z - z_L \right) + \left(z_L - z_{L-1} \right) \frac{\tilde{c}_{N-2,M} \left(z_L \right)}{\tilde{c}_{N-1,M} \left(z_L \right)} \right] \tilde{R}_{N-1,M} - \left(z - z_{L-1} \right) \tilde{R}_{N-2,M} \right\} \right\}. (3.22)$$

$$\alpha = \left\{ \tilde{q}_{N-1,M}^{M-1} - \tilde{q}_{N-2,M}^{M-1} + \left[\left(z_L - z_{L-1} \right) \frac{\tilde{c}_{N-2,M} \left(z_L \right)}{\tilde{c}_{N-1,M} \left(z_L \right)} + z_{L-1} \right] \right\}^{-1} \right\}.$$

Разные приближения, проходящие через одни и те же узлы интерполяции, связаны соотношением

$$\tilde{R}_{N-2,M+2} = \left(z - \frac{\tilde{p}_{N-1,M+1}^{N-2}}{\tilde{p}_{N-1,M+1}^{N-1}} + \frac{\tilde{p}_{N,M}^{N-1}}{\tilde{p}_{N,M}^{N}}\right) \tilde{R}_{N-1,M+1} - \frac{\tilde{p}_{N-1,M+1}^{N-1}}{\tilde{p}_{N,M}^{N}} \tilde{R}_{N,M} .$$
(3.23)

Наконец, приведем рекуррентное соотношение, связывающее интерполяционные выражения с одинаковой четностью числа узлов. Это соотношение может оказаться полезным в том случае, когда известна разность степеней числителя и знаменателя искомого приближения, хотя и не известно оптимальное число параметров:

$$\tilde{R}_{N,M} = \left[\alpha(z-z_{L-1})+\beta\right]\tilde{R}_{N-1,M-1} + (1-\alpha)(z-z_{L-2})(z-z_{L-3})\tilde{R}_{N-2,M-2}.$$
 (3.24)

Коэффициенты α и β нетрудно выразить через элементы предыдущих приближений, подставляя (3.24) в систему линейных уравнений:

$$f(z_{L-1})\tilde{Q}_{N,M}(z_{L-1}) - \tilde{P}_{N,M}(z_{L-1}) = 0;$$

$$f(z_L)\tilde{Q}_{N,M}(z_L) - \tilde{P}_{N,M}(z_L) = 0.$$

3.4. Алгоритм построения двух аппроксимант с одинаковыми знаменателями

Сечения различных ядерных реакций, проходящих через одно и то же составное ядро, имеют одинаковую резонансную структуру — один и тот же резонанс в различных реакциях может проявляться с разной силой, интерферировать с другими, но его положение и полная ширина неизменны и характеризуют состояние составного ядра при данной энергии. Обычно обработка данных по сечениям различных реакций ведется раздельно, и согласовывать полученные результаты непросто — при попытке использовать результаты статистической обработки одного сечения для описания другого иногда даже появляются физически бессмысленные отрицательные слагаемые. Совместная обработка всей информации с учетом статистического веса каждого измерения была бы наиболее корректной, но она пока технически неосуществима из-за вычислительных трудностей при традиционных методах обработки экспериментальных данных. Нам представляется, что использование метода перебора и рекуррентной процедуры, которая будет изложена в этом параграфе, может существенно облегчить выполнение такой программы.

Простейшая задача этого класса — совместная обработка данных по сечениям двух реакций — применением метода перебора сводится к следующей интерполяционной задаче: функции f(x) и g(y) известны в L_1 точках x_i и L_2 точках y_k соответственно; надо построить три полинома — $P_N(z)$, $T_K(z)$ и $Q_M(z)$ таких, что

$$f^{[N,M]}(x_i) = P_N(x_i)/Q_M(x_i) = f(x_i), \quad i = 1, 2, ..., L_1$$

$$g^{[K,M]}(y_k) = T_K(y_k)/Q_M(y_k) = g(y_k), \quad k = 1, 2, ..., L_2$$
(3.25)

т. е. построить два рациональных интерполяционных выражения с одинаковыми знаменателями, что соответствует одинаковой резонансной структуре двух сечений. Заметим, что в отличие от условия L = N + M + 1, связывающего число узлов и степени полиномов обычной рациональной интерполяции, в этом случае $L_1 \le N + M + 1$, $L_2 \le N + M + 1$, $L = L_1 + L_2 = K + M + N + 2$. Поскольку рекуррентные соотношения для всех трех полиномов одинаковы, введем для них общее обозначение $R_{N,K,M}^{L_1,L_2}$.

Прежде всего, схематически изобразим один из множества возможных вариантов наращивания ранга интерполяции:

$$R_{N,K,M}^{L_{1},L_{2}} \to R_{N,K+1,M}^{L_{1},L_{2}+1} \to R_{N+1,K+1,M}^{L_{1}+1,L_{2}+1} \to R_{N+1,K+1,M+1}^{L_{1}+1,L_{2}+2} \to R_{N+1,K+2,M+1}^{L_{1}+2,L_{2}+2} \to R_{N+2,K+2,M+1}^{L_{1}+2,L_{2}+3}$$

$$(3.26)$$

В качестве нормировки можно использовать условие $q_M^M = 1$.

Все рекуррентные соотношения в этой задаче можно записать в виде

$$R_{(L+1)} = \alpha R_{(L)} + \beta R_{(L-1)} + \gamma (z - z_{L-1}) R_{(L-2)}.$$
(3.27)

Коэффициенты α , β , γ определяются из условия нормировки знаменателя и двух линейных уравнений, которые следуют из условий $\varphi^{L+1}(z_L) = \varphi(z_L)$, $\varphi^{L+1}(z_{L+1}) = \varphi(z_{L+1})$, где $\varphi(z)$ обозначает f(x) или g(y) в зависимости от того, к какой функции относятся узлы z_L , z_{L+1} .

Рассмотрим, например, наращивание степени знаменателя в цепочке приближений (3.26):

$$R_{N+1,K+1,M+1}^{L_1+1,L_2+2} = \alpha R_{N+1,K+1,M}^{L_1+1,L_2+1} + \beta R_{N,K+1,M}^{L_1,L_2+2} + (z - y_{L_2+1}) R_{N,K,M}^{L_1,L_2}.$$
 (3.28)

Система линейных уравнений для α и β в этом случае имеет вид:

$$R_{N+1,K+1,M+1}^{L_{1}+1,L_{2}+2}(x_{L_{1}+1}) - f(x_{L_{1}+1})Q_{N+1,K+1,M+1}^{L_{1}+1,L_{2}+2} = 0$$

$$T_{N+1,K+1,M+1}^{L_{1}+1,L_{2}+2}(y_{L_{2}+2}) - g(y_{L_{2}+2})Q_{N+1,K+1,M+1}^{L_{1}+1,L_{2}+2}(y_{L_{2}+2}) = 0$$
(3.29)

Ее решение дает

$$\alpha = \delta^{-1} \Big[(y_{L_{2}+2} - y_{L_{2}-1}) a^{(L+1)} (x_{L_{1}+1}) b^{(L)} (y_{L_{2}+2}) - (x_{L_{1}+1} - y_{L_{2}+2}) a^{(L)} (x_{L_{1}+1}) b^{(L+2)} (y_{L_{2}+2}) \Big];$$

$$\beta = \delta^{-1} \Big[(x_{L_{1}+1} - y_{L_{2}+2}) a^{(L)} (x_{L_{1}+1}) b^{(L+2)} (y_{L_{2}+2}) - (y_{L_{2}+2} - y_{L_{2}+1}) a^{(L+2)} (x_{L_{1}+1}) b^{(L)} (y_{L_{2}+2}) \Big].$$
(3.30)

Здесь

$$a^{(L)}(x) = f(x)Q_{(L)}(x) - P_{(L)}(x);$$

$$b^{(L)}(y) = g(y)Q_{(L)}(y) - T_{(L)}(y);$$

$$\delta = a^{(L+2)}(x_{L_{1}+1})b^{(L+1)}(y_{L_{2}+2}) - a^{(L+1)}(x_{L_{1}+1})b^{(L+2)}(y_{L_{2}+1}).$$
(3.31)

Аналогично определяются коэффициенты рекуррентных соотношений для наращивания степени одного из числителей в цепочке (3.25), а также для других цепочек изменения верхних индексов, т. е. для других последовательностей наращивания числа узлов интерполяции.

Приведем один из вариантов построения интерполяции низших рангов:

$$L = 1, \quad \frac{P_{-1}}{Q_0} = \frac{0}{1}, \quad \frac{T_0}{Q_0} = \frac{g_1}{1};$$

$$L = 2, \quad \frac{P_{0,0,0}^{1,1}}{Q_{0,0,0}^{1,1}} = \frac{f_1}{1}, \quad \frac{T_{0,0,0}^{1,1}}{Q_{0,0,0}^{1,1}} = \frac{g_1}{1};$$

$$L = 3, \quad \frac{P_{0,0,1}^{1,2}}{Q_{0,0,1}^{1,2}} = \frac{f_1}{1+\alpha+\beta(x-y_1)}, \quad \frac{T_{0,0,1}^{1,2}}{Q_{0,0,1}^{1,2}} = \frac{(1+\alpha)g_1}{1+\alpha+\beta(y-y_1)};$$

$$\alpha = (y_1 - x_1)\beta; \quad \beta = \left(\frac{g_2}{g_1} - 1\right) \left[y_1 - x_1 - \frac{g_2}{g_1}(y_2 - x_1) \right]^{-1}.$$
(3.32)

При обобщении на большое число обрабатываемых по такой методике (с общим знаменателем) кривых глубина рекурсии по *L* на единицу больше числа обрабатываемых функций, и, возможно, для вычисления коэффициентов

удобнее численное решение соответствующей линейной системы. Все слагаемые, кроме последнего, в правой части такого рекуррентного соотношения соответствуют приближениям, отличающимся от искомого (левая часть) тем, что каждое из них не проходит через один из узлов интерполяции какой-либо кривой. Они входят в соотношение с постоянными коэффициентами. Последнее слагаемое соответствует приближению, которое описывает на две точки одной из кривых меньше, чем искомое. Это слагаемое умножается на $z - z_n$, где z_n — та из двух точек, которая всеми остальными слагаемыми описывается.

Использование разных цепочек построения делает возможным перебор не только узлов интерполяции каждой из функций, но и узлов, соответствующих разным функциям. Если у какой-нибудь функции исчерпаны все узлы интерполяции, то через несколько шагов в рекуррентных соотношениях не будет слагаемых, которые не обеспечивали бы прохождение через все эти узлы, и глубина рекурсии уменьшится на единицу. Можно, наоборот, увеличивать число обрабатываемых функций. Все эти алгоритмы идейно просты, но слишком громоздки в записи, чтобы их здесь приводить.

3.5. Тригонометрическая мероморфная интерполяция

Тригонометрическим полиномом степени N называется выражение

$$A_0 + \sum_{n=1}^N (A_n \cos n\varphi + B_n \sin n\varphi),$$

где хотя бы один из коэффициентов A_N или B_N отличен от нуля. Тригонометрическая интерполяция применяется для периодических функций. Если функция к тому же четна, то переходят к переменной $z = \cos\varphi$ и далее все проводят, как для обычных полиномов или рациональных функций, если же она нечетна — можно положить $z = \sin\varphi$. В общем случае для функции без определенной симметрии задача тригонометрической интерполяции полиномом минимальной степени имеет единственное решение лишь тогда, когда число узлов нечетно. В случае же четного числа узлов один из коэффициентов тригонометрического полинома можно выбрать произвольно (например, положить $A_N = 0$ или $B_N = 0$). Точно такая же ситуация будет, если в качестве интерполирующей функции взять отношение тригонометрических полиномов.

Если перейти к переменным $z_i = e^{i\varphi_k}$, где φ_k — узлы тригонометрической интерполяции с нечетным числом узлов $L = N_1 + N_2 + M_1 + M_2 + 1$ вида

$$f^{L}(\varphi) = f^{[N_{1},N_{2},M_{1},M_{2}]}(\varphi) = \frac{P_{(L)}(\varphi)}{Q_{(L)}(\varphi)} = \frac{A_{0} + \sum_{n=1}^{N_{1}} A_{n} \cos n\varphi + \sum_{n=1}^{N_{2}} B_{n} \sin n\varphi}{1 + \sum_{m=1}^{M_{1}} C_{m} \cos m\varphi + \sum_{m=1}^{M_{2}} D_{m} \sin m\varphi}$$
(3.33)

при $N_1 = N_2$, $M_1 = M_2$, можно дать детерминантов решение, аналогичное реше-

нию задачи о полиномиальной интерполяции (см. § 3.1). Несколько сложнее случай четных L, на котором останавливаться не будем, а дадим рекуррентную процедуру интерполяции отношением тригонометрических полиномов.

Наметим сначала построение такой цепочки, в которой нечетному числу узлов соответствует отношение полных тригонометрических полиномов, т. е. $N_1 = N_2 = N$, $M_1 = M_2 = M$. Для четного числа узлов строятся две интерполяции: $f'^{L+1}(\varphi) = f^{[N+1,N,M,M]}(\varphi)$ и $f''^{L+1}(z) = f''^{[N,N+1,M,M]}(\varphi)$, затем строится $f^{L+2}(\varphi) = f^{[N+1,N+1,M,M]}(\varphi)$ и опять две интерполяции: $f'^{(L+3)} = f'^{[N+1,N+1,M+1,M]}(\varphi)$ и $f''^{L+3} = f''^{[N+1,N+1,M+1,M]}(\varphi)$ и т. д.

Интерполяции с нечетным числом узлов строят так:

$$R_{(L+2)} = \alpha R'_{(L+1)} + (1 - \alpha) R''_{(L+1)}.$$
(3.34)

Условие прохождения аппроксиманты через $f(\varphi_{L+2})$ дает для α :

$$\alpha^{-1} = 1 - \frac{P_{(L+1)}''(\varphi_{L+2}) - f_{L+2}Q_{(L+1)}''(\varphi_{L+2})}{P_{(L+1)}'(\varphi_{L+2}) - f_{L+2}Q_{(L+2)}'(\varphi_{L+2})}.$$
(3.35)

Для построения интерполяции с четным числом узлов используем соотношения типа

$$R_{(L+1)} = (1 + \alpha_1 \cos \varphi_L + \alpha_2 \sin \varphi_L + \beta_1 \cos \varphi_L + \beta_2 \sin \varphi_L) R_{(L)} + + [\alpha_1 (\cos \varphi - \cos \varphi_L) + \alpha_2 (\sin \varphi - \sin \varphi_L)] R'_{(L-1)} + + [\beta_1 (\cos \varphi - \cos \varphi_L) + \beta_2 (\sin \varphi - \sin \varphi_L)] R''_{(L-1)}.$$
(3.36)

Рассмотрим подробнее случай $f^{L+1}(\varphi) = f^{[N+1,N,M,M]}(\varphi)$, $f'^{L-1}(\varphi) = f^{[N,N,M,M-1]}(\varphi)$, $f''^{L-1}(\varphi) = f^{[N,N,M-1,M]}(\varphi)$. Коэффициенты $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2$ определяются из системы четырех линейных уравнений, два из которых получаются, если приравнять нулю коэффициенты при соз $(M+1) \varphi$ и при sin $(M+1)\varphi$ в соотношении (3.36) для знаменателя $Q_{(L+1)}(\varphi)$, третье уравнение следует из условия $f_{(L+1)}(\varphi_{L+1}) = f(\varphi_{L+1})$, а четвертое — из условия равенства нулю коэффициента при sin $(N+1)\varphi$ в числителе аппроксиманты. Аналогично получаются системы уравнений для определения коэффициентов рекуррентных соотношений при построении остальных приближений с четным числом узлов. Во всех этих случаях можно найти явный вид решения и выразить коэффициенты $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2$ через коэффициенты тригонометрических полиномов предыдущих приближений, однако эти формулы слишком громоздки, чтобы их здесь приводить, хотя и вполне пригодны для программирования.

Для построения аппроксиманты с помощью приведенных выше соотношений можно выбрать, например, следующие начальные приближения:

$$f^{[0,0,0,0]}(\varphi) = \frac{f_1}{1}; \quad f^{[0,0,1,0]}(\varphi) = \frac{a}{1+b\cos\varphi}; \quad f^{[0,0,0,1]}(\varphi) = \frac{c}{1+d\sin\varphi};$$

$$a = \frac{f_1 f_2 (\cos \varphi_2 - \cos \varphi_1)}{f_2 \cos \varphi_2 - f_1 \cos \varphi_1}; \quad b = \frac{f_2 - f_1}{f_1 \cos \varphi_1 - f_2 \cos \varphi_2};$$
$$c = \frac{f_1 f_2 (\sin \varphi_2 - \sin \varphi_1)}{f_2 \sin \varphi_2 - f_1 \sin \varphi_1}; \quad d = \frac{f_2 - f_1}{f_1 \sin \varphi_1 - f_2 \sin \varphi_2}.$$

Приведем также алгоритм построения тригонометрической интерполяции, при котором используются лишь приближения с нечетным числом узлов и не соблюдается условие нормировки:

$$R_{N,N,M,M} = R_{(2l-1)} + \alpha \sin \frac{\phi - \phi_{2l-1}}{2} \sin \frac{\phi - \phi_{2l-2}}{2} R_{(2l-3)} + \beta \frac{\sin \phi - \sin \phi_{2l-1}}{2} \sin \frac{\phi - \phi_{2l-3}}{2} R'_{(2l-3)}.$$
(3.37)

Здесь l = N + M. Для того чтобы с помощью этого алгоритма построить приближение ранга 2l + 1, необходимо на предыдущих этапах получить два приближения ранга 2l - 3, различающихся одним из узлов интерполяции, а именно приближение $f^{2l-3}(\varphi)$, которое проходит через точки $\varphi_1, \varphi_2, ..., \varphi_{2l-4}, \varphi_{2l-3}$, и приближение $f'^{2l-3}(\varphi)$, описывающее узлы $\varphi_1, \varphi_2, ..., \varphi_{2l-4}, \varphi_{2l-2}$, т. е. отличающеся от предыдущего последним узлом. Коэффициенты α и β определяются системой двух линейных уравнений, следующих из условий $f^{2l+1}(\varphi_{2l}) = f(\varphi_{2l})$; $f^{2l+1}(\varphi_{2l+1}) = f(\varphi_{2l+1})$. Начальные приближения можно выбрать следующим образом:

$$f^{1}(\varphi) = \frac{f_{1}}{1}, \quad f'^{1}(\varphi) = \frac{f_{2}}{1};$$
$$f^{3}(\varphi) = \frac{a}{1 + b\cos\varphi + c\sin\varphi}; \quad f'^{3}(\varphi) = \frac{a'}{1 + b'\cos\varphi + c'\sin\varphi}$$

Здесь a, b и c определяются из системы

$$f^{3}(\varphi_{1}) = f_{1}; f^{3}(\varphi_{2}) = f_{2}; f^{3}(\varphi_{3}) = f_{3},$$

а *a*', *b*' и *c*' — из системы

$$f'^{3}(\varphi_{1}) = f_{1}; f'^{3}(\varphi_{2}) = f_{2}; f'^{3}(\varphi_{4}) = f_{4}.$$

Построенные с помощью этих начальных условий аппроксиманты будут иметь структуру [N - 1, N - 1, N, N] и [N, N, N, N]. Выбирая другие начальные условия, можно получить другие соотношения степеней тригонометрических полиномов в числителе и знаменателе аппроксиманты.

3.6. Особые случаи рациональной интерполяции

При любых значениях z_i и $f(z_i)$ можно получить детерминантное решение задачи интерполяции в виде (3.1), однако это отнюдь не означает, что всегда можно построить приближение Паде-2 $f^{[N, M]}(z)$ с L = N + M + 1. Может оказаться, что старшие коэффициенты полиномов $Q_M(z)$ или $P_N(z)$ равны нулю,

тогда получим приближение с меньшим числом параметров, которое в дальнейшем будем называть приближением неполного ранга. Кроме того, у числителя и знаменателя могут оказаться совпадающие корни. Особого внимания все эти случаи требуют при рекуррентном построении приближений, поскольку приводят к необходимости модификации алгоритмов.

Из единственности рациональной интерполяции следует, что если L точек кривой f(z) лежат на кривой $f^{[N_0,M_0]}(z)$ где $N_0 + M_0 + 1 = L_0 < L$, то вместо всех рациональных приближений $f^{[N_1,M_1]}(z)$ ранга L_1 , где $L_0 \le L_1 \le L$, получим при $N_1 > N_0$ и $M_1 \ge M_0$ приближение $f^{[N_0,M_0]}(z)$. Однако могут быть построены и приближения, у которых или $N_1 < N_0$, или $M_1 < M_0$. Так, если L точек кривой f(z) описываются полиномом $P_{N_0}(z)$ степени N_0 , то все рациональные приближения $P_{N_1>N_0}(z)/Q_{M_1}(z)$ будут просто совпадать с $P_{N_0}(z)$, но приближения вида $P_{N_0-1}(z)/Q_M(z)$ существуют.

При детерминантном подходе случаи равенства нулю старших коэффициентов полиномов $P_N(z)$ и $Q_M(z)$ ничем не выделены. Гораздо интереснее следующий вопрос: могут ли быть числитель и знаменатель не взаимно простыми полиномами? Предположим, что у них есть совпадающий корень z_{α} , который не совпадает ни с одним из узлов интерполяции z_i . Сократив числитель и знаменатель на общий множитель $z - z_{\alpha}$, получим приближение, описывающее все L = N + M + 1 узлов, ранг которого на два меньше. Поскольку при этом $f^{[N-1, M]}(z_L) = f^{[N-1, M-1]}(z_L) = f(z_L)$, детерминант $\left| C_{N-1, M}^L \right|$, равный $P_{N-1, M}(z_L) - -f_L Q_{N-1, M}(z_L)$, будет равен нулю, а он является старшим коэффициентом полинома в числителе приближения $f^{[N, M]}(z)$ при детерминантном подходе, т. е. степень числителя равна M - 1. Таким образом, предложение о том, что у числителя и знаменателя есть общий корень z_{α} , должно быть отвергнуто, поскольку приводит к противоречию.

Допустим, что такой корень совпадает с одним из узлов интерполяции $z_{\alpha} = z_i$. Использовав (3.8), т. е. $Q_M(z_i) = \prod_{k \neq i} (z_k - z_i) |C_{N-1,M-1}^{L(i)}|(-1)^{L+i}$, получим, что в этом случае $P_{N,M-1}^N = q_{N-1,M}^M = |C_{N-1,M-1}^{L(i)}| = 0$. Следовательно, $f^{[N-1,M]}(z)$ и $f^{[N,M-1]}(z)$, не описывающие $f(z_i)$, были приближениями неполного ранга и равнялись $f^{[N-1,M-1]}(z)$. И наоборот, если предыдущие приближения были неполного ранга и $f^L(z_i) \neq f^{L-1}(z_i)$, то $f^L(z)$ — приближение полного ранга и у $P_N(z)$ и $Q_M(z)$ есть общий множитель $z - z_i$.

Рассмотрим теперь, как проявляются эти особые случаи при рекуррентном построении

$$R_{(L)} = \alpha R_{(L-1)} + \beta (z - z_{L-1}) R_{(L-2)}, \qquad (3.38)$$

коэффициенты которого определяются формулами (3.17) или (3.18) в зависимости от того, применяется оно для повышения степени числителя или знаменателя. В обоих случаях, если $f(z_L) = f^{L-2}(z_L)$, т. е. если точка $f(z_L)$ лежит на $f^{L-2}(z),$ $\alpha = 0$ и $\beta = 1$, кривой получим использование И $(z - z_{L-1})P_{(L-2)}(z)/(z - z_{L-1})Q_{(L-2)}(z)$ в качестве $f^{L}(z)$ (без сокращения общего множителя) позволяет строить дальнейшие приближения без изменения алгоритма. Смысл такого приближения мы рассмотрим ниже, а сейчас отметим, что в любом случае, когда $\overline{L} - 1$ точка из L точек кривой f(z) лежит на кривой $f^{L-2}(z)$, а одна точка $f(z_i)$ на этой кривой не лежит, приближение ранга L имеет вид $(z-z_i)P_{(N-1)}(z)/(z-z_i)Q_{(M-1)}(z)$. Если не искать корни числителя и знаменателя, то такую особенность интерполирующей функции можно и не заметить.

Когда $f(z_L) = f^{L-1}(z_L)$, т. е. добавляемая точка описывается только что построенным приближением, получим $\alpha = 1$ и $\beta = 0$, если надо повысить степень числителя, и $\alpha = \infty$, если надо повысить степень знаменателя. В обоих случаях это означает, что получается приближение неполного ранга $f^L(z) = f^{L-1}(z)$. Дальнейшее построение с помощью (3.38) невозможно. Если следующая точка $f(z_{L+1})$ не описывается этим же приближением, то построение удобно проводить, поменяв ее местами с одной из точек z_i , например рассмотрев последовательность узлов $z_1, z_2, ..., z_{L-1}, z_{L+1}, z_L$. В результате получим

$$R'_{(L)} = \alpha R_{(L-1)} + \beta (z - z_{L-1}) R_{(L-2)}; \quad f'^{L+1}(z) = \frac{(z - z_{L+1}) P_{(L-1)}(z)}{(z - z_{L+1}) Q_{(L-1)}(z)};$$

и дальнейшее построение идет обычным образом с использованием $R_{(L)}(z)$ и $R'_{(L+1)}(z)$. Если $f^{L-2}(z_L) \neq f(z_L)$, но

$$f^{L-1}(z_L) - f(z_L) = \frac{(z_{L-1} - z_L)Q_{(L-2)}(z_L)}{Q_{(L-1)}(z_L)} \Big[f^{L-2}(z_L) - f(z_L) \Big],$$

то получим $\alpha = \infty$ в случае, когда наращивается степень числителя. Это означает, что следующее приближение невозможно нормировать условием $q_M^M = 1$. Отказавшись от этого условия, получим в качестве следующего приближения:

$$f^{[N,M]}(z) = f^{[N,M-1]}(z) = \frac{\alpha' [P_{N-1,M}(z) - (z - z_{L-1})P_{N-1,M-1}(z)]}{\alpha' [Q_{N-1,M}(z) - (z - z_{L-1})Q_{N-1,M-1}(z)]}$$

Здесь α' — нормировочный коэффициент. Вместо $f^{[N,M]}(z)$ имеем функцию неполного ранга $f^{[N,M-1]}(z)$ — возросла степень числителя, но уменьшилась степень знаменателя. Аналогично, если $\alpha = -p_{N,M-1}^N/p_{N-1,M-1}^{N-1}$, то при наращивании степени знаменателя можно получить приближение неполного ранга, у которого уменьшилась степень числителя. В обоих этих случаях дальнейшее построение можно вести обычным образом.
Комбинируя рассмотренные особые случаи, можно несколько усложнить картину, но ничего принципиально нового при этом не возникнет. Надо пользоваться симметрией приближения относительно перестановок узлов и при дальнейшем построении не забывать о том, что требование нормировки $q_M^M = 1$ имеет смысл только тогда, когда степень полинома в знаменателе действительно равна M.

При обработке экспериментальных данных, значение которых в точке определяется суммой гладкой функции и случайной погрешности, рассмотренные выше особые случаи маловероятны. Гораздо чаще оказывается, что значение обрабатываемой физической величины в некоторой точке близко к значению в этой точке одного из последних построенных приближений, хотя с ним и не совпадает. Исследуем поведение особенностей следующих приближений в этом случае.

Обозначим $\Delta_L(z) = f(z) - f^L(z)$ погрешность описания в точке z и будем наращивать ранг приближения с помощью рекуррентного соотношения (3.38), положив в нем для простоты $\alpha = 1$, т. е. отказавшись от условия нормировки $q_M^M = 1$. Определив β из условия описания точки $f(z_L)$, получим:

$$R_{(L)} = R_{(L-1)} - \frac{z - z_{L-1}}{z_L - z_{L-1}} \frac{\Delta_{L-1}(z)}{\Delta_{L-2}(z)} \frac{Q_{(L-1)}(z_L)}{Q_{(L-2)}(z_L)} R_{(L-2)}.$$
(3.39)

Если $|\Delta_{L-1}(z)| \ll |\Delta_{L-2}(z)|$, т. е. приближение $f^{L-1}(z)$ в отличие от $f^{L-2}(z)$ «почти» описывает значение f(z) в точке z_L , то $\beta \ll 1$ и приближение $f^L(z)$, построенное согласно (3.39), фактически совпадает с $f^{L-1}(z)$ в широкой области $|z| \ll |\beta^{-1}|$. В зависимости от того, наращивается на данном этапе степень числителя или степень знаменателя, приближение $f^L(z)$ в пределе $\beta \to 0$ отличается от $f^{L-1}(z)$ смещением особенностей и множителем $1 - c_1\beta z$ в числителе или знаменателе, т. е. имеет нуль или полюс при больших по модулю $z \approx (c_1\beta)^{-1}$ (здесь c_1 — константа).

С точностью до членов первого порядка малости по В находим

$$R_{(L+1)} = R_{(L-1)} \left[\frac{z_{L+1} - z}{z_{L+1} - z_L} - \frac{z - z_L}{z_{L+1} - z_L} c_2 \frac{\beta}{\Delta_{L-1}(z_{L+1})} \right] - (z - z_{L+1}) \beta R_{(L-2)}, \quad (3.40)$$

где c_2 — константа. При $\beta = 0$ получим рассмотренный ранее особый случай $f^L + {}^1(z) = (z - z_{L+1})P_{(L-1)}(z)/(z - z_{L+1})Q_{(L-1)}(z)$. Учет последнего слагаемого в (3.40) приводит к малым смещениям особенностей аппроксиманты, различным для числителя и знаменателя. В частности, вместо совпадающих корней числителя и знаменателя в точке $z = z_{L+1}$ получим при $|\Delta_{L-1}(z_L)| \ll |\Delta_{L-1}(z_{L+1})|$ близкие к этой точке корни, расстояние между которыми пропорционально β . Если еще и $\Delta_{L-1}(z_{L+1})$ мало, т. е. погрешности описания функции f(z) аппроксимантой

 $f^{L-1}(z)$ малы как при $z = z_L$, так и при $z = z_{L+1}$, то эта пара особенностей удаляется от точки z_{L+1} . Если же $|\Delta_{L-1}(z_L)| \gg |\Delta_{L-1}(z_{L+1})|$, то эти особенности будут вблизи точки z_L , в которой погрешность описания больше.

Ясно, что если все узлы интерполяции, кроме z_i , достаточно хорошо описываются приближением неполного ранга, то при любом выборе цепочки рекуррентного построения вблизи этого узла будут сосредоточены корни числителя и знаменателя аппроксиманты. Такие особенности получили название шумовых^{*}, поскольку они позволяют выявить узел интерполяции z_i , в котором значение $f(z_i)$ таково, что не может быть описано с помощью гладкой вблизи этого узла интерполирующей рациональной кривой ранга L (или тем более неполного ранга) с заданной разностью степеней числителя и знаменателя.

Это свойство приближения Паде-2 полезно при анализе экспериментальных данных, так как дает возможность выявлять точки, имеющие экстремально большую погрешность, при некоторых предположениях о числе параметров и соотношении степеней рациональной аппроксиманты (см. § 5.3). Дальнейшее увеличение ранга приближения, естественно, может привести к построению рациональных приближений с большим числом параметров, гладких вблизи узлов интерполяции.

ГЛАВА 4. ПРИБЛИЖЕНИЕ ПАДЕ ПЕРВОГО РОДА И ЕГО ОБОБЩЕНИЯ. ОСНОВНЫЕ АЛГОРИТМЫ

4.1. Алгоритмы построения приближения Паде первого рода

Приближение Паде-1, основной областью применения которого является суммирование степенных рядов, оказывается полезным при обработке экспериментальных данных, соответствующих экспоненциальным зависимостям, а также при построении погрупповых констант. В этой главе изложены основные алгебраические свойства приближения Паде-1, дан простой вывод алгоритмов его рекуррентного построения, а также рассмотрены особые случаи и некоторые обобщения.

Присоединяя к системе (2.4) уравнение

$$\sum_{n=0}^{M} p_{N}^{n} z^{n} - \left(\sum_{m=0}^{M} q_{M}^{m} z^{m}\right) f^{[N,M]}(z) = 0$$

и приравнивая нулю детерминант получающейся системы L+2 линейных уравнений, после несложных операций с детерминантами можно получить известное решение задачи рациональной аппроксимации

^{*}Эти особенности называют также дефектами, см. книгу Бейкер Дж., Грейвс-Моррис П. Аппроксимации Паде: Пер. с англ. М.: Мир, 1986.

Здесь и везде далее в этом параграфе $a_k = 0$, если k < 0. Матрицы

известны как матрицы Ганкеля, их детерминанты $h_{N,M} = |H_{N,M}|$ называются циркулянтами, частично их свойства описаны в [27]. В отличие от детерминантов, которые возникали при рациональной интерполяции, ранг этих матриц от N не зависит и равен M + 1. Выпишем некоторые довольно очевидные выражения, связывающие эти детерминанты с элементами рациональной аппроксимации:

$$q_{N,M+1}^{M+1} = \sum_{m} a_{L-m} q_{N,M}^{m} = h_{N,M} ;$$

$$p_{N,M}^{N} = (-1)^{M+1} h_{N-1,M} ; Q_{N,M} (0) = (-1)^{M} h_{N-1,M-1} .$$
(4.2)

Исходя из общих соотношений между детерминантами и частного вида матриц, используемых в задаче, можно получить рекуррентные соотношения между приближениями с различными N и M. Примененный ниже метод полу-

чения таких соотношений фактически позволяет их доказать методом математической индукции. Аналогично случаю рациональной интерполяции будем нормировать знаменатель условием $\tilde{q}_M^M = 1$, т. е. будем использовать полиномы $\tilde{R}_{N,M} = R_{N,M} / h_{N,M-1}$. Пусть $f^{L-2}(z)$ и $f^{L-1}(z)$ описывают соответственно L - 2 и

L-1 первых членов ряда $\sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n$. Для построения $f^L(z)$ рассмотрим рекур-

рентное соотношение

$$\tilde{R}_{N,M} = \alpha \tilde{R}_{N,M-1} + \beta z \tilde{R}_{N-1,M} \,. \tag{4.3}$$

При любом α и β такое построение обеспечивает равенство нулю коэффициентов при z^k с k < L < 1 в выражении

$$\left(\sum_{n=0}^{\infty}a_{n}z^{n}\right)\tilde{Q}_{N,M}\left(z\right)-\tilde{P}_{N,M}\left(z\right)=O\left(z^{L}\right),$$

которое почти всегда эквивалентно определению приближения Паде-1 ранга L (исключения будут рассмотрены в § 4.4)^{*}. Приравнивая нулю коэффициент при z^{L-1} в этом выражении и учитывая, что условие нормировки знаменателя дает $\beta = 1$, получаем

$$\alpha = \frac{\sum_{m=0}^{M-1} a_{L-2-m} \tilde{q}_{N-1,M-1}^{m}}{\sum_{m=0}^{M-1} a_{L-1-m} \tilde{q}_{N,M-1}^{m}} = -\frac{\tilde{h}_{N-1,M-1}}{\tilde{h}_{N,M-1}}.$$
(4.4)

Для последовательного наращивания ранга приближения необходимо еще соотношение

$$\tilde{R}_{N,M} = \alpha \tilde{R}_{N-1,M} + (1-\alpha) z \tilde{R}_{N-1,M-1}, \qquad (4.5)$$

где $\alpha = \tilde{h}_{N-1,M-1} / (\tilde{h}_{N-1,M-1} - \tilde{h}_{N-1,M}).$

Аналогично для приближений, нормированных условием $\overline{Q}_{M}(0) = 1$, т. е. $R_{NM} = (-1)^{M} h_{N-1,M-1} \overline{R}_{N,M}$ получаем рекуррентное соотношение:

$$\overline{R}_{(L)} = \overline{R}_{(L-1)} + \alpha z \overline{R}_{(L-2)}, \ \alpha = -\overline{h}_{(L-1)} / \overline{h}_{N-1,M-1},$$
(4.6)

известное в теории цепных дробей и единое для приближений рангов [N, M-1], [N-1, M] на предыдущем шаге. Это соотношение обеспечивает нормировку

^{*}Заметим, что при построении приближений, в которых требуется совпадение не коэффициентов разложения в ряд Тейлора, а разложений по ортогональным полиномам, такой подход некорректен и приводит к неверному результату [28, с. 230]. Корректное решение этой задачи, которую называют нелинейным приближением Паде, дано в [29].

 $q_M^0 = q_0^0 = 1$. Рекуррентные соотношения для коэффициентов полиномов p_N^n и q_M^n , которые следуют из (4.3), (4.5) и (4.6), имеют вид

$$r_{(L)}^{n} = \alpha r_{(L-1)}^{n} + \beta r_{(L-2)}^{n-1}.$$
(4.7)

Приведенные выше рекуррентные соотношения вида (4.3) являются основными в задачах типа суммирования рядов, например рядов теории возмущений, когда последовательное наращивание ранга необходимо для практической оценки сходимости приближений.

Известный из теории цепных дробей выбор начального приближения $f^{[-1, 0]} = 0/1$, $f^{[0, 0]} = a_0/1$ позволяет строить аппроксиманты, у которых одинаковые степени полиномов в числителе и знаменателе чередуются с N = M - 1; начальные условия $f^{[-1, 0]} = 1/0$, $f^{[0, 0]} = a_0/1$ приводят к чередованию приближений с N = M и N = M + 1.

Приближения, у которых $N - M = N_0$ чередуется с $N - M = N_0 + 1$, где $N_0 \ge 1$, получаются, если в качестве начальных выбрать полиномы

$$f^{[N_0,0]}(z) = \sum_{n=0}^{N_0} a_n z^n \; ; \; f^{[N_0+1,0]}(z) = \sum_{n=0}^{N_0+1} a_n z^n \; , \tag{4.8}$$

т. е. просто соответствующее число членов исходного ряда. Для построения приближений, у которых $M - N = M_0$ чередуется с $M - N = M_0 + 1$, где $M_0 \ge 1$, начальными служат аппроксиманты $f^{0,M_0}(z) = 1/S_{M_0}(z)$ и $c^{0,M_0+1}(z) = 1/S_{M_0}(z)$ и

 $f^{0,M_0+1}(z) = 1/S_{M_0+1}(z)$. Их знаменатели должны удовлетворять уравнениям

$$S_K(z)\sum_{n=0}^{\infty}a_nz^n = O(z^K).$$
(4.9)

Здесь $K = M_0$ или $K = M_0 + 1$.

Решение этих уравнений, т. е. фактически построение ряда Тейлора функции l/f(z), дает для коэффициентов этих полиномов:

$$s_K^0 = 1/a_0$$
; $s_K^m = -\sum_{l=0}^{m-1} a_{m-l} s_K^l / a_0$. (4.10)

Как и в случае рациональной интерполяции, рекуррентные соотношения для полиномов с различной нормировкой можно получать друг из друга, используя свойства детерминантов. В частности, чтобы перейти от (4.5) к (4.6), достаточно доказать, что

$$h_{N-1,M-1}^2 - h_{N-1,M-2} h_{N-1,M} = h_{N,M-1} h_{N-2,M-1}, \qquad (4.11)$$

а это есть просто тождество Сильвестра для $h_{N-1,M-2}h_{N-1,M}$, если $h_{N-1,M}$ представить в виде

$$h_{N-1,M} = \begin{vmatrix} a_N & a_{N-1} & \dots & a_{N-M} \\ a_{N+1} & H_{N-1,M-2} & a_{N-M+1} \\ \vdots & & \vdots \\ \vdots & & & \vdots \\ a_{N+M} & \dots & & a_N \end{vmatrix} .$$
(4.12)

Остальные рекуррентные соотношения здесь приводить не будем. Отметим лишь, что они совпадают с аналогичными соотношениями для рациональной интерполяции, если в последних произвести замену $z - z_i \rightarrow z$, $z_i - z_k \rightarrow 1$, $\tilde{c}_{N,M}(z_i) \rightarrow \tilde{h}_{N,M}$.

Исключением из этого правила служат лишь выражения для коэффициентов соотношения, аналогичного (3.24), в которых кроме $\tilde{h}_{N,M}$ появляются еще величины $\tilde{h}'_{N,M} = \sum_{m} a_{N+M+2-m} q_{N,M}^{m}$.

4.2. Интерполяция с кратными узлами

В § 3.3 были приведены алгоритмы построения рациональных функций, проходящих через заданные точки кривой f(z), а в § 4.1 — алгоритмы пострения рациональных функций, описывающих заданное число производных функции f(z) в точке z=0. Теперь рассмотрим задачу интерполяции с кратными узлами, т. е. построение рациональных приближений, которые проходят через несколько точек кривой f(z) и в этих точках имеют несколько первых производных оризводных функции f(z). Такое приближение иногда называют многоточечной паде-аппроксимацией, приближение Паде-1 — одноточечной.

Рациональную функцию, разложение которой в каждой из Λ точек z_i , $i = 1, 2, ..., \Lambda$ в ряд по степеням $z - z_i$ совпадает с n_i первыми членами ряда Тейлора функции f(z) относительно точки z_i , обозначим

$$f^{L}(z) = f^{(n_{1}, n_{2}, \dots, n_{\Lambda})}(z) = P_{(\Lambda)}(z) / Q_{(\Lambda)}(z).$$
(4.13)
Здесь $L = N + M + 1 = \sum_{i=1}^{\Lambda} n_{i}.$

Поскольку $n_i = 0$ означает, что приближение через точку вообще не проходит, для упрощения будем нумеровать узлы в порядке их первого появления при рекуррентном построении, при этом Λ — число использованных узлов и все индексы $n_1, n_2, ..., n_{\Lambda}$ не меньше единицы. Тогда следующее приближение может быть либо $f^{(n_1, n_2, ..., n_{\Lambda}, 1)}$ либо $f^{(n_1, ..., n_{\Lambda+1}, ..., n_{\Lambda}, 1)}$. Если предыдущее приближение было $f^{(...,n_{k-1},...)}$, то при $k < \Lambda$ должно быть $n_k > 1$ и лишь для последнего узла, т. е. при $k = \Lambda$, может быть $n_k = 1$.

Прежде всего, научимся прибавлять еще один узел интерполяции. Для этого используем обычное рекуррентное соотношение рациональной интерполяции

$$R_{(L+1)}^{(n_1,\dots,n_\Lambda,1)} = \alpha R_{(L)}^{(n_1,\dots,n_\Lambda)} + \beta (z - z_k) R_{(L-1)}^{(n_1,\dots,n_{-1},\dots,n_\Lambda)}$$
(4.14)

Учитывая условие нормировки и подставляя в $f^{L+1}(z)$ значение функции в добавляемом узле $z_{\Lambda+1}$, легко получить коэффициенты этого рекуррентного соотношения. Очевидно, что такое построение не нарушает равенства

$$P_{(L+1)}(z) - Q_{(L+1)}(z) \sum_{n=0}^{\infty} a_n^{(i)} (z - z_i)^n = O\left[(z - z_i)^{n_i} \right]$$

во всех остальных точках, в том числе и в точке z_k , т. е. сохраняет описание производных во всех остальных узлах интерполяции.

Если же следующее приближение соответствует добавлению не еще одного узла, а производной в одном из уже учтенных узлов z_i , то перейдем к переменным $y = z - z_i$. Тогда

$$Q_{N,M}(z) = S_{N,M}(y); s_{N,M}^{m} = \sum_{l=0}^{M-m} q_{N,M}^{l+m} \frac{(l+m)!}{l!m!} z_{i}^{l}$$

$$P_{N,M}(z) = T_{N,M}(y); t_{N,M}^{n} = \sum_{l=0}^{N-n} p_{N,M}^{l+n} \frac{(l+n)!}{l!n!} z_{i}^{l}$$

$$(4.15)$$

Рассмотрим рекуррентное соотношение

$$R_{N,M}^{(\dots,n_i+1,\dots)}(y) = \alpha R_{N,M-1}^{(\dots,n_i,\dots,n_k,\dots)}(y) + (y+z_i-z_k) R_{N-1,M-1}^{(\dots,n_i,\dots,n_{k-1},\dots)}(y). \quad (4.16)$$

Построенное с его помощью приближение $f^{[N,M]}$ при любом α описывает столько же производных в каждом узле, сколько и предыдущее приближение ранга [N, M-1]. Потребовав выполнения соотношения

$$T_{N,M}(y) - S_{N,M}(y) \sum_{n=0}^{\infty} a_n^{(i)} y^n = O(y^{n_i+1}),$$

найдем при $i \neq k$

$$\alpha = \left(z_i - z_k\right) \sum_{l=0}^{\min(n_i, M-1)} \left(s_{N, M-1}^l a_{n_i-l}^{(i)} - t_{N, M-1}^{n_i}\right) / \sum_{l=0}^{\min(n_i, M)} \left(s_{N, M}^l a_{n_i-l}^{(i)} - t_{N, M}^{n_i}\right).$$
(4.17)

Если k = i, т. е. если надо учесть еще один член ряда Тейлора в той же точке, что и на предыдущем этапе, получим

$$\alpha = -\sum_{l=0}^{n_i-1} \left(s_{N,M-1}^l a_{n_i-l-l}^{(i)} - t_{N,M-1}^{n_i-1} \right) / \sum_{l=0}^{n_i} \left(s_{N,M}^l a_{n_i-l}^{(i)} - t_{N,M}^{n_i} \right).$$
(4.18)

Последнее выражение отличается от (4.4), полученного при построении приближения Паде-1, тем, что в него входят коэффициенты числителя. Дело в том, что степень полинома в числителе многоточечной паде-аппроксиманты может быть даже больше, чем число членов ряда Тейлора, которые мы в этом узле используем. Такова же причина появления $t_{N,M}^{n_i}$ (4.17). Заметим еще, что в этих формулах $s_{N,M}^l = 0$ при l > M и $t_{N,M}^n = 0$ при n > N.

Аналогично можно получить коэффициенты рекуррентных соотношений в том случае, когда предыдущим этапом было приближение ранга [N-1, M], т. е. для повышения степени полинома в числителе. Построение нормированных приближений не меняет структуры рекуррентных соотношений и полностью совпадает с построением при рациональной интерполяции.

Полученные рекуррентные формулы позволяют, используя лишь два предыдущих приближения, добавлять новые узлы интерполяции, а также увеличивать на единицу число учтенных производных в любом из уже описанных узлов, поэтому они могут быть использованы в методе перебора.

4.3. Построение многоточечной аппроксиманты с учетом разложения по отрицательным степеням

В задаче определения подгрупповых констант теории переноса нейтронов, которая рассматривается в гл. 7, возникает необходимость построения рационального приближения, которое не только принимает определенные значения и имеет заданные производные по *z* в некоторых точках z_i , но и описывает в точке z_1 первые n^- членов разложения в ряд по степеням $t = (z - z_1)^{-1}$. Это разложение имеет вид $\sum_{n=1}^{\infty} c_{-n} t^n$, т. е. в отличие от разложений по положительным степеням z

начинается не с нулевой степени z, а с t^1 . Если же $n^-=0$, то получается рассмотренная в предыдущем параграфе задача интерполяции с кратными узлами.

Обозначим искомое приближение

$$f_{N,M}^{\left(n^{-};n_{1},\dots,n_{\Lambda}\right)}(z) = \frac{P_{N}^{\left(n^{-};n_{1},\dots,n_{\Lambda}\right)}(z)}{Q_{M}^{\left(n^{-};n_{1},\dots,n_{\Lambda}\right)}(z)}.$$
(4.19)

Отличие от предыдущего параграфа состоит лишь в том, что появился индекс n^- , описывающий разложение в ряд по отрицательным степеням $z - z_1$. В дальнейшем положим $z_1 = 0$, что упростит изложение, не уменьшая его общности. Сделав в (4.19) замену переменной t = 1/z, получим

$$P_{N}(z)/Q_{M}(z) = t^{M}W_{N}(t)/t^{N}V_{N}(t).$$
(4.20)

Поскольку разложение по степеням t начинается с первой степени, только рациональные приближения с N = M - 1 могут быть решением поставленной задачи.

Рассмотрим теперь разложение по отрицательным степеням вблизи точки $z = z_k$, т. е. разложение по положительным степеням $u = (z - z_k)^{-1}$. Эта переменная связана с t преобразованием Эйлера, поскольку $u = t / (1 - z_k t)$, а диагональное приближение $tW_{M-1}(t) / V_M(t)$, как показано в § 2.4, инвариантно относительно преобразования Эйлера. Следовательно, разложение в ряд по отрицательным степеням в одной точке однозначно определяет такое же разложение в любой другой точке. Учет этого факта позволяет упростить алгоритм по сравнению с изложенным в [30].

Приближения с N = M - 1 при построении по обычным правилам можно получить лишь при $L = n^- + \sum_i n_i = 2M$, т. е. при четном числе описываемых

величин. Для того чтобы и при L = 2M - 1 обеспечить описание отрицательных степеней, будем для нечетных L строить приближение избыточного ранга, т. е. вместо $f^{L-2} = f^{[M-1,M-1]}(z)$ будем строить $f'^{L-2} = f'^{[M-1,M]}(z)$. Это можно осуществить не единственным образом, поскольку еще один из коэффициентов полиномов $P'_{M-1}(z)$ и $Q'_M(z)$, кроме нормировочного, можно выбрать произвольно. Например, приближение минимального ранга $f^1 = f^{[0,0]}(z)$ с L = 1, N = 0, M = 0, описывающее прохождение аппроксиманты через $f(z_i)$, есть $f(z_i)/1$, а приближение избыточного ранга $f'^1 = f^{[0,1]}(z)$ с L = 1, N = 0, M = 1, описывающее прохождение аппроксиманты через $f(z_i)$, есть $f(z_i)/(a + bz)$, где $a = 1 - bz_i$. При рекуррентном построении выбор начальных приближений и цепочки построения позволяет на каждом из следующих этапов получать одно приближение, даже если оно избыточного ранга. Выберем в качестве таких начальных условий $f^0 = 0/1$ и f'' = f(0)/(1+z) и в дальнейшем получим приближения $f^L(z) = P_{E\left(\frac{L-1}{2}\right)}(z) / Q_{E\left(\frac{L+1}{2}\right)}(z)$, где E(A)— целая часть числа A.

Несколько сложнее построить алгоритм, который позволял бы в этой задаче использовать метод перебора, т. е. при увеличении L на единицу давал бы возможность, исходя из тех же предыдущих приближений, получать приближения с увеличенным на единицу любым n_i , а также n^- . Поскольку разложение по отрицательным степеням достаточно учесть в одной точке, удобнее использовать более простой алгоритм — строить функции с определенными n^- , а затем осуществлять перебор сравнением вариантов с различными $n_i + 1$.

Для построения приближений, описывающих ряд $\sum_{n=1}^{n} c_{-n} t^{n}$, воспользуемся

обычным рекуррентным соотношением приближения Паде-1, применяя его к $f^{n-}(t) = W_{(n-)}(t) / V_{(n-)}(t)$:

$$\frac{W_{\left(n^{-}+1\right)}(t)}{V_{\left(n^{-}+1\right)}(t)} = \frac{W_{n^{-}}(t) + \alpha t W_{\left(n^{-}-1\right)}(t)}{V_{\left(n^{-}\right)}(t) + \alpha t V_{\left(n^{-}-1\right)}(t)},$$
(4.21)

где

$$\alpha = -\sum_{k=0}^{n} c_{k-n^{-}-1} w_{n^{-}}^{k} / \sum_{k=0}^{n^{-}} c_{k-n^{-}} w_{n^{-}-1}^{k} .$$
(4.22)

В качестве начальных приближений возьмем 0/1 и с₋₁/(1 + t). Подставляя в (4.21) t = 1/z, перейдем к привычным полиномам $P_L(z)$ и $Q_{(L)}(z)$. При таком построении получаются приближения, нормированные условием $q_m^M = 1$. Приближения $n^- \le 4$, которых, как правило, достаточно в задаче определения подгрупповых констант, при этом имеют вид:

$$f'^{1-}(z) = \frac{c_{-1}}{1+z}; \quad f'^{2-}(z) = \frac{c_{-1}}{z - c_{-2}/c_{-1}};$$

$$f'^{3-}(z) = \frac{c_{-1} \left[z + (c_{-2}^2 - c_{-3}c_{-1}) / c_{-1}(c_{-2} + c_{-1}) \right]}{z^2 - z(c_{-3} + c_{-2}) / (c_{-2} + c_{-1}) + (c_{-2}^2 - c_{-3}c_{-1}) / c_{-1}(c_{-2} + c_{-1})};$$

$$f'^{4-}(z) = \frac{c_{-1}z + c_{-2} - c_{-1}(c_{-4}c_{-1} - c_{-3}c_{-2}) / (c_{-3}c_{-1} - c_{-2}^2)}{z^2 - z(c_{-3}c_{-2} - c_{-4}c_{-1}) / (c_{-3}c_{-1} - c_{-2}^2) + (c_{-4}c_{-2} - c_{-3}^2) / (c_{-3}c_{-1} - c_{-2}^2)}.$$

Следующий шаг — это учет значения функции в точке z_k . Если n^- — нечетное, т. е. последнее приближение было избыточного ранга, то построение осуществляется следующим образом:

$$R_{(n^{-},n_{k}=1)} = R_{(n^{-})}' + \alpha R_{(n^{-}-1)}.$$
(4.23)

Переходя к t = 1/z, нетрудно убедиться, что при любом α такое приближение описывает n^- членов разложения в ряд по отрицательным степеням. Требование описания $f(z_k)$ определяет α :

$$\alpha = -\frac{P_{(n^{-})}(z_{k}) - f(z_{k})Q_{(n^{-})}(z_{k})}{P_{(n^{-}-1)}(z_{k}) - f(z_{k})Q_{(n^{-}-1)}(z_{k})}.$$
(4.24)

Если же n^- — четное и надо построить приближение избыточного ранга, то воспользуемся соотношением

$$R'_{n^{-},n_{k}=1} = (z - \alpha_{k})R_{(n^{-})} + \beta_{k}R'_{(n^{-}-1)}.$$
(4.25)

В этом соотношении два коэффициента, это значит, что приближение избыточного ранга можно выбрать не единственным образом. Нам удобно при $z_k = z_1 = 0$ положить $\beta_1 = 1$, тогда

$$\alpha_{1} = -\frac{P_{(n^{-}-1)}(0) - f(0)Q_{(n^{-}-1)}(0)}{P_{(n^{-})}(0) - f(0)Q_{(n^{-})}(0)}.$$
(4.26)

При $z_k \neq 0$ положим $\alpha = 0$ и получим

$$\beta_{k} = -\frac{z_{k} \left[P_{(n^{-})}(z_{k}) - f(z_{k}) Q_{(n^{-})}(z_{k}) \right]}{P_{(n^{-}-1)}(z_{k}) - f(z_{k}) Q_{(n^{-}-1)}(z_{k})}.$$
(4.27)

Рекуррентные соотношения, связывающие приближения с одним и тем же значением n^- , несмотря на использование приближений избыточного ранга, полностью совпадают с соотношениями § 4.2.

Отметим еще, что в этом случае использование метода перебора может оказаться не столь эффективным, как при рациональной интерполяции, поскольку младшие производные, описанные на предыдущих этапах построения аппроксиманты, варьировать уже нельзя.

4.4. Особые случаи приближения Паде первого года

При построении приближения Паде-1 всегда можно записать решение (3.1) в виде отношения детерминантов. Как и при рациональной интерполяции, это решение может оказаться приближением неполного ранга, если старшие ко-эффициенты числителя или знаменателя равны нулю. Особую опасность представляет обращение в нуль младшего коэффициента знаменателя $q_M^0 = 0$ — формальное решение системы уравнений при этом существует, но радиус сходимости ряда Тейлора аппроксиманты ранга [N, M] равен нулю! Дело в том, что эта система уравнений и ее детерминантное решение получаются в результате перехода от первоначальной постановки задачи о совпадении L членов рядов Тейлора аппроксиманты и функции f(z) к требованию $P_N(z) = Q_M(z) f(z) + O {L \choose z}$. Согласно теореме Абеля об умножении рядов, такой переход допустим лишь в той области, в которой сходится ряд Тейлора функции $1/Q_M(z)$.

В детерминантном подходе, используя тождество Сильвестра, можно показать, что если приближение ранга $[N_0, M_0]$ описывает $L_0 + n$ коэффициентов ряда Тейлора функции f(z), то все приближения рангов $[N_1, M_1]$ с $N_1 \ge N_0, M_1 \ge$ $M_0, L_0 \le L_1 \le L_0 + n$ будут приближениями неполного ранга и совпадут с приближениями ранга $[N_0, M_0]$, а (1/2)n(n-1) следующих приближений рангов $[N_2, M_2]$ с $N_0 + n \ge N_2 \ge N_0, M_0 + n \ge M_2 \ge M_0$ вообще будут отсутствовать, так как при формальном их построении $q_{M_2}^0 = 0$. Не останавливаясь на этом, рассмотрим рекуррентное построение приближений в особых случаях.

При рекуррентном построении приближения Паде-1 возможны те же особенности коэффициентов, что и при рациональной интерполяции. Чаще всего используется построение с помощью рекуррентных соотношений (4.3)—(4.5), т. е. с чередующимся увеличением степеней числителя и знаменателя. Эти соотношения можно записать в виде $R_{(L+1)} = \alpha R_{(L)} + \beta z R_{(L-1)}$. Если $\sum_{n=1}^{M} a_m q_{(L)}^{L-m} = 0$, т. е. приближение ранга [N, M] описывает еще и коэффициент

при z^{L} в разложении функции f(z) в ряд Тейлора, а не только a_i с $i \leq L - 1$, то приближение $f^{L+1}(z)$ совпадает с $f^{L}(z)$. При этом для приближений, нормированных условием $q_{M}^{M} = 1$, в случае увеличения степени знаменателя $a = \infty$, а в случае увеличения степени числителя $\alpha = 1$, $\beta = 0$. Попытка построить с помощью этих же соотношений следующее приближение дает $\alpha = 0$, т. е. формально приближение имеет вид $f^{L+2}(z) = zP_{(L)}(z)/zQ_{(L)}(z)$. Если коэффициент при z^{L+1} действительно описывается приближением $f^{L}(z)$, то можно сократить общий множитель z, т. е. $f^{L+2}(z) = P_{(L)}(z)/Q_{(L)}(z)$. В противном случае не существует не только приближения $f^{L+2}(z)$, но и эквивалентных ему приближений неполного ранга.

Есть еще возможность (как и при рациональной интерполяции) уменьшения степеней числителя или знаменателя на некотором этапе построения. Например, если строить рациональные аппроксимации полинома $P_N(z)$ степени N, то после обычного построения приближений рангов [N-1, M-1], [N-1, M]получим $f^{[N, M]}(z) = f^{[N, 0]}(z) = P_N(z)$.

Рассмотрим подробнее следующий случай: пусть до ранга $[N-1, M+\lambda]$ построение шло по обычным формулам (4.3)—(4.5). Следующий шаг дал вместо $f^{[N,M+\lambda]}(z)$ приближение ранга [N, M]. Пусть n— число коэффициентов ряда Тейлора функции f(z), которые, сверх L = N + M + 1, описываются приближением ранга [N, M]. Очевидно, что $n \ge \lambda$. Для построения приближения ранга

$$\left[N+E\left(\frac{n+\kappa+\lambda}{2}\right), \ M+\lambda+E\left(\frac{n+\kappa-\lambda+1}{2}\right)\right],$$

где E(A) — целая часть числа A, рассмотрим рекуррентное соотношение

• `

$$f^{L+n+\kappa}(z) = \frac{\begin{pmatrix} E\left(\frac{n+\kappa-\lambda}{2}\right)\\\sum_{m=0}^{m=0}\alpha_{m}z^{m} \end{pmatrix} P_{N}(z) + \beta z^{E\left(\frac{n+\kappa-\lambda+1}{2}\right)} P_{N-1}(z)}{\begin{pmatrix} E\left(\frac{n+\kappa-\lambda}{2}\right)\\\sum_{m=0}^{2}\alpha_{m}z^{m} \end{pmatrix} Q_{M}(z) + \beta z^{E\left(\frac{n+\kappa-\lambda+1}{2}\right)} Q_{M+\lambda}(z)}.$$
 (4.28)

Учитывая, что $P_N(z) = f(z)Q_M(z) + O(z^{L+n})$ и $P_{N-1}(z) = f(z)Q_{M+\lambda}(z) + O(z^{L+\lambda-1})$, и рассматривая аналогичное уравнение для

$$P_{L+n+\kappa}(z) = f(z)Q_{L+n+\kappa}(z) + O(z^{L+n+\kappa})$$

из условия равенства между собой коэффициентов при z^k с $k \le L + n + \kappa$ в правой и левой его частях получим систему зацепляющихся линейных уравнений для определения коэффициентов рекуррентного соотношения (4.28).

Решив эту систему уравнений, получим, что при $\kappa \le n - \lambda$ всегда $\beta = 0$ и все α_m , кроме α_m с $m \ge \kappa$, также равны нулю. Следовательно, таким образом можно

получить формальное решение вида $z^{\kappa}P_N(z) / z^{\kappa}Q_M(z)$, о котором уже говорилось, но построить аппроксиманту, удовлетворяющую определению приближения Паде-1, невозможно. При $\kappa = n - \lambda + 1$ все коэффициенты α_m и β отличны от нуля и получается приближение полного ранга $f^{L+2n+1-\lambda}(z) = P_{N+n-\lambda}(z) / Q_{M+n+1}(z)$. Если оно вдобавок описывает еще k лишних коэффициентов ряда Тейлора, то для дальнейшего построения надо использовать рекуррентное соотношение

$$R_{(L+2n+2k+1-\lambda)} = \left(\sum_{m=0}^{k} \alpha_m z^m\right) R_{(L+2n+1-\lambda)} + \beta z^{n+k+1} R_{(L+\lambda-1)}.$$
(4.29)

После этого при k = 0 можно возвращаться к использованию обычных рекуррентных соотношений (4.3)—(4.5). Аналогичным образом можно рассмотреть случай, когда приближение ранга [N, M] получается при добавлении еще одного узла к приближению ранга $[N + \lambda, M - 1]$.

На основании проведенных выше рассуждений можно более подробно рассмотреть вопрос о том, при каких N и M получаются приближения неполного ранга, а при каких построение рационального приближения вообще невозможно. Оказывается, что в таблице, клетки которой занумерованы числами N и M, этим особым случаям соответствуют квадраты со стороной и, где n — число лишних коэффициентов, описываемых приближением ранга [N, M]. Если в такой таблице N и M увеличиваются слева направо и сверху вниз соответственно, то клетка (N, M) находится в левом верхнем углу квадрата. Этот результат был получен еще Паде, а таблица называется таблицей Паде.

Поскольку есть рекуррентные соотношения, которые позволяют менять степень только числителя или только знаменателя, т. е. двигаться по вертикалям или горизонталям таблицы Паде, может оказаться удобнее использовать их для обхода опасных областей таблицы, а не применять сравнительно сложное рекуррентное построение, изложенное выше в этом параграфе.

Рассмотрим теперь более реалистический случай, когда последнее построенное приближение $f^{L}(z)$ «почти» описывает коэффициент a_{L} ряда Тейлора функции f(z), но не описывает коэффициент a_{L+1} . Введем обозначение $\sum_{m=0}^{L} a_m q_{(L-1)}^{L-1-m} = c_{L-1}$ и для простоты положим $\alpha = 1$, т. е. откажемся от норми-

ровки $q_M^M = 1$. При этом $\beta = -c_L/c_{L-1}$ и $R_{L+1} = R_{(L)} - z (c_L/c_{L-1})R_{(L-1)}$. Учитывая, что $q_{(L+1)}^m = q_{(L)}^m - (c_L/c_{L-1})q_{(L-1)}^{m-1}$, для приближений следующего ранга получаем

$$R_{(L+2)} = \left(1 + \frac{c_L}{c_{L-1}}z - \frac{c_{L+1}}{c_L}\right)R_{(L)} - \frac{c_L}{c_{L-1}}zR_{(L-1)}.$$

Таким образом, при $|c_L| \ll |c_{L-1}|$ везде, кроме очень больших z, приближение $f^{L+1}(z)$ фактически совпадает с $f^L(z)$, а при $z \approx c_{L-1}/c_L$ получаем корень числителя, если наращивалась его степень, и корень знаменателя при переходе

от ранга [N, M] к рангу [N+1, M+1]. Если, кроме того, $|c_L| \ll |c_{L+1}|$, то приближение $f^{L+2}(z)$ при $c_L \rightarrow 0$ переходит в $zP_{(L)}(z)/zQ_{(L)}(z)$, т. е. происходит слияние близких к нулю корней числителя и знаменателя. Если же c_{L+1} тоже мало и одного порядка с c_L , то получим, что приближение $f^{L+2}(z)$ фактически совпадает с $f^L(z)$, но имеет близкие корни числителя и знаменателя при $z = c_L/c_{L+1}$.

Такие предельные случаи можно рассмотреть и тогда, когда приближение f^L «почти» описывает большее число лишних коэффициентов исходного ряда Тейлора. Общий вывод таков: если с помощью $f^{L}(z)$ «почти» описано *n* лишних коэффициентов, то при построении следующих приближений будем получать фактически то же приближение во всей плоскости комплексного переменного z, кроме точек $z = \infty$, z = 0 и точек, определяемых отношениями отклонений полученного описания от точного описания этих коэффициентов ряда Тейлора. В этих точках будут скапливаться нули числителей и знаменателей таких приближений. Только после того, как число коэффициентов $a_L, a_{L+1}, ..., a_{L+k+1}$, не описанных приближением $f^{L+k}(z)$, превысит число «почти» описанных ими коэффициентов, получим существенно новое приближение. Таким образом, получается некая инертность — если по коэффициентам ряда Тейлора удалось предсказать еще *n* коэффициентов, то отклонения в описании следующих *n* коэффициентов при движении вдоль диагонали таблицы Паде воспринимаются как шум и приводят к появлению шумовых особенностей. Отметим, что такая же инерционность есть и при рациональной интерполяции — если приближение $f^{L}(z)$ описывает *n* лишних узлов, то следующими приближениями полного ранга без шумовых полюсов будут $f^{L+2n+1}(z)$ и приближения, соответствующие обходу опасной области таблицы Паде.

ГЛАВА 5. РАЦИОНАЛЬНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ

5.1. Метод наименьших квадратов

В гл. 3 были описаны способы построения рациональной интерполяции с помощью различных рекуррентных соотношений. Однако непосредственно интерполяция как способ приближенного описания применяется по большей части лишь к аналитическим функциям (достаточно широко распространенным исключением является, пожалуй, лишь метод сплайнов, см. [31]). Если же значения аппроксимируемой функции включают заметную погрешность, то, как правило, используются аппроксимирующие функции с числом параметров, гораздо меньшим числа аппроксимируемых точек, и аппроксимация осуществляет, таким образом, сглаживание поточечной зависимости с учетом информации о статистических свойствах погрешностей исходных значений. Эксперимент, поставленный с целью определения гладкой «истинной» функции, называют регрессионным, функцию, параметры которой надо определить, — регрессионной моделью или функцией регрессии, а задачу обработки экспериментальных данных в такой постановке — регрессионным анализом [32]. Эта задача и рассматривается в настоящей главе.

Пусть числа F_1 , F_2 ,..., F_{Nex} — результаты эксперимента («исходные значения»), полученные при значениях аргумента z_1 , z_2 , ..., z_{Nex} . Задача аналитической аппроксимации экспериментальных данных обычно сводится к нахождению функции perpeccuu, принадлежащей к определенному L — параметрическому семейству и минимизирующей некоторый функционал S, зависящий от исходных значений F_i , значений аппроксиманты при тех же значениях аргумента $f^L(z, \{p\})$, а также от матрицы (или вектора), определяемой свойствами статистического распределения погрешности исходных значений. На практике в подавляющем большинстве случаев S выбирают в виде квадратичной формы по элементам вектора отклонений аппроксиманты от исходных значений:

$$S = (1/2) \left[\mathbf{f}^{L} - \mathbf{F} \right]^{T} \mathbf{V}^{-1} \left[\mathbf{f}^{L} - \mathbf{F} \right],$$
(5.1)

где $\mathbf{f}^{L} - \mathbf{F}$ — вектор-столбец с компонентами $f^{L}(z_{i}) - \mathbf{F}_{i}$; V — корреляционная матрица исходных значений; *T* обозначает транспонирование. Функционал *S*, определенный выражением (5.1), называется статистической суммой. Если экспериментальные значения можно считать статистически независимыми и нормально распределенными, то $V_{ik} = \sigma_{i}^{2} \delta_{ik}$, где σ_{i}^{2} — дисперсии соответствующих нормальных распределений, и выражение для *S* упрощается:

$$S = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_{ex}} \left[f^{L}(z_{i}) - F_{i} \right]^{2} / \sigma_{i}^{2} .$$
 (5.2)

Аппроксимация на основе минимизации статистической суммы называется *методом наименьших квадратов* (МНК). Исследованию МНК посвящено множество работ, а его описание содержится практически во всех руководствах по статистическим методам обработки данных (см., например, [33]), поэтому здесь мы приводим лишь необходимые краткие сведения.

Согласно сказанному, МНК — нахождение минимума S как функции многих переменных, а именно параметров аппроксиманты $\{p\}$. Необходимые условия этого минимума — обращение в нуль производных по параметрам, т. е. выполнение равенств

$$\frac{\partial S}{\partial p_k} = \sum_{i=1}^{N_{ex}} \frac{1}{\sigma_i^2} \Big[f^L \big(z_i, \{p\} \big) - F_i \Big] \frac{\partial f^L \big(z_i, \{p\} \big)}{\partial p_k} = 0$$
(5.3)

для всех *k*.

Если f — линейная функция параметров p_l (задача линейной регрессии)

$$f^{L}(z, \{p\}) = \sum_{k=1}^{L} p_{l} \varphi_{l}(z), \qquad (5.4)$$

то (5.3) сводится к системе линейных уравнений относительно *p_l*:

$$\sum_{l=1}^{L} p_l \sum_{i=1}^{N_{ex}} \varphi_l(z_i) \varphi_k(z_i) / \sigma_i^2 = \sum_{i=1}^{N_{ex}} F_i \varphi_k(z_i) / \sigma_i^2 .$$
(5.5)

Если функции $\varphi_l(z)$ ортогональны на дискретной совокупности точек z_i с весом $1/\sigma_i^2$, т. е.

$$\sum_{i=1}^{N_{ex}} \varphi_l(z_i) \varphi_k(z_i) / \sigma_i^2 = \delta_{lk} , \qquad (5.6)$$

то система (5.5) сводится к выражениям для

$$p_k = \sum_{i=1}^{N_{ex}} F_i \varphi_k(z_i) / \sigma_i^2 . \qquad (5.7)$$

Линейный МНК с разложением по ортогональным функциям (чаще всего полиномам) широко используется, поскольку он чрезвычайно удобен.

Однако в задаче нелинейной регрессии условия минимума S приводят к системам уравнений, нелинейных относительно p_k . Положение резко осложняется, сколько-нибудь универсальных методов решения этой задачи не существует, и даже использование проблемно-ориентированных численных методов сильно затруднено, если число параметров велико.

Метод наименьших квадратов тесно связан с *методом максимального* правдоподобия (ММП) — в нем в качестве оценок истинных значений параметров выбираются те, которые максимизируют функцию правдоподобия $\mathcal{L} = \prod_{i} \psi [f(z_i), F_i]$. Здесь $\psi [f(z_i), F_i]$ — значение плотности вероятности

распределения погрешности эксперимента для выборочного (т. е. измеренного) значения F_i . Если $\psi(f, F)$ — нормальное распределение и если дисперсия его в каждой точке от оцениваемых параметров не зависит, то ММП сводится к МНК. В общем случае оценки МНК в асимптотике (при $N_{\rm ex} \rightarrow \infty$) совпадают с оценками ММП, и математические теоремы, полученные для одного из этих методов, можно использовать для другого, чем мы будем неоднократно пользоваться в дальнейшем.

Итак, при заданном числе параметров и соотношении степеней числителя и знаменателя рациональной аппроксиманты для выбора оптимального приближения мы используем МНК. Простейший метод определения оптимального числа параметров основан на свойствах остаточной суммы квадратов, т. е. значения статистической суммы, которое получается при подстановке в нее значений аппроксиманты. Если погрешности эксперимента в разных точках независимы и подчиняются нормальному распределению, то сумма их квад-

ратов, т. е. квадратов отклонений экспериментальных данных от истинных значений $S_{\text{ост}} = \sum_{i=1}^{N_{ex}} \left[f(z_i) - F_i \right]^2$, подчиняется χ^2 -распределению с N_{ex} степенями свободы. В случае линейной регрессии сумма квадратов отклонений экспериментальных данных от *L*-параметрической оценки по МНК $S_{\text{ост}}^{L} = \sum_{i=1}^{N_{ex}} \left[f^{L}(z_{i}) - F_{i} \right]^{2}$ должна подчиняться χ^{2} -распределению с числом степеней свободы N_{ex} – L. При нелинейной регрессии это утверждение справедливо для $N_{ex} \rightarrow \infty$. Вычисляя остаточную сумму квадратов, можно, задавшись некоторым доверительным интервалом, определить, согласуется ли описание при данном числе параметров с предположением о независимом нормальном распределении погрешностей, т. е. значимо ли отличие остаточной суммы квадратов от значения, предсказываемого χ^2 -распределением с соответствующим числом степеней свободы. Оптимальное число параметров L₀ можно найти, сравнивая с критерием χ^2 и между собой значения $S_{oct}^i/(N_{ex} - L_i)$, т. е. вычисленные при разном числе параметров значения остаточной суммы квадратов, деленной на число степеней свободы, и используя статистические критерии Можно привлекать более сложные критерии, например значимости. *t*-статистику Стьюдента или *F*-статистику Фишера [32, 33].

Все эти статистические методы, реализованные в виде стандартных программ во многих прикладных пакетах, несложно включить в программу обработки экспериментальных данных для ЭВМ. Практически число резонансов при анализе сечений почти всегда известно; если его превысить, появятся шумовые полюсы, и дальнейшее наращивание числа параметров смысла не имеет. Если же экспериментальные данные столь неточны, что возможно их описание аппроксимантами с различным числом параметров, и используемый нами критерий $S_{oct}^i(N_{ex} - L_i)$ принимает близкие значения для нескольких L_i , то предпочтение отдается описанию с меньшим числом параметров. Описание с большим числом параметров рассматривается как допустимое. Такая ситуация указывает на необходимость дальнейшего уточнения экспериментальных данных в рассматриваемой области. Можно даже, следуя теории планирования эксперимента, определить точку или область, в которой максимально различие описаний и уточнение экспериментальных данных наиболее информативно для выбора оптимального числа параметров.

5.2. Дискретная оптимизация Паде-аппроксиманты (метод перебора)

В любом варианте выбора параметров рациональной аппроксиманты (2.1) попытка найти их обычным методом наименьших квадратов, т. е. использованием условий (5.3), приводит к весьма сложным системам нелинейных уравнений.

В то же время, как детально показано в гл. 3, построение рациональной аппроксиманты при $L = N_{ex}$ осуществляется с помощью простых рекуррентных соотношений без численного обращения матриц высокого порядка. С учетом этого обстоятельства в [8—10, 34, 35] был предложен и реализован в виде программ для ЭВМ способ рациональной аппроксимации одномерных зависимостей, основанный на дискретной оптимизации методом перебора, который и будет описан в этом параграфе.

Суть метода сводится к следующему: из экспериментальных точек некоторым образом выбирают начальный набор из L опорных точек z_k , F_k , $1 \le k \le N_{ex}$, где в k различны, и для них с помощью рекуррентных алгоритмов, описанных в § 3.3 решают задачу рациональной интерполяции, т. е. строят рациональную аппроксиманту, проходящую через все L опорных точек. После этого вычисляются значения $f^L(z_i)$ для всех $i = 1, 2, ..., N_{ex}$ и значение минимизируемого функционала, которыми определяется начальное приближение. Затем начинают итерационный процесс, на *i*-м шаге которого одна из опорных точек заменяется другой из экспериментальных, строят новую аппроксиманту, для нее вычисляют значение функционала S^i , и если $S^i > S_{min}^{i-1} = min \{S^1, S^2, ..., S^{i-1}\}$, то

і-й набор опорных точек запоминается в качестве текущего оптимального.

Способы получения начального отбора опорных точек, выбора заменяемой и заменяющей опорных точек и определения момента окончания итерационного процесса можно варьировать в широких пределах. Описанные ниже варианты выбраны на основе многолетнего опыта эксплуатации различных алгоритмов паде-аппроксимации.

Характеристики итерационного процесса, как оказалось, слабо зависят от начального выбора опорных точек, и в качестве таковых обычно берут эквидистантную последовательность: $k_i = (i - 1)E(N_{ex}/L) + 1$, i = 1, 2, ..., L.

Перебор опорных точек организуется следующим образом. Точки с номерами $k_1, k_2, ..., k_{L-1}$ фиксируются, а k_L поочередно принимает все значения N_{ex} , $N_{ex} - 1, ..., 1$, пропуская только уже «занятые» опорные точки, т. е. $k_L \neq k_1, k_2, ..., k_{L-1}$. Для каждого набора k_i строят паде-аппроксиманту, вычисляют и сравнивают с минимальным из предыдущих минимизируемый функционал. После выполнения этих вычислений $N_{ex} - L$ раз заканчивают малую итерацию. Затем последней опорной точке присваивают номер, соответствующий минимальному из полученных значений функционала, и эта точка делается первой из опорных, а все остальные опорные сдвигаются на одно место вправо, малая итерация повторяется с очередной крайней правой точкой. Цикл из L малых итераций называют большой итерацией. Набор, полученный в результате очередной большой итерации, становится исходным для следующей большой итерации в том же смысле, в каком исходным для первой итерации был начальный набор.

Описанная процедура существенным образом основана на том благоприятном обстоятельстве, что для «перестройки» паде-аппроксиманты при изменении только одной последней опорной точки требуется сравнительно небольшое число операций: получение коэффициента рекуррентного соотношения и вычисление значений аппроксиманты по формулам (3.16), (3.18) с использованием оставшихся неизменными значений полиномов L - 2-го и L - 1-го приближений.

Безусловным признаком окончания итерационного процесса служит получение в результате очередной большой итерации в точности того же набора $\{k_i\}$, что и после предыдущей большой итерации. Принципиальная сходимость описанной итерационной процедуры очевидна, поскольку полное число доступных для перебора вариантов $N_{ex}!/[L!(N_{ex} - L)!]$ конечно, хотя и очень велико. Практическая сходимость оказалась вполне приемлемой, число больших итераций в редких случаях превышает 10. Поэтому наряду с указанным безусловным признаком используются два условных: итерации заканчиваются, если на очередном «большом» шаге относительное изменение S_{oct} не превышает некоторого малого значения (обычно 10^{-3}) или если число больших итераций достигло заданного максимума (обычно 10).

В необходимых случаях можно добавлять *дополнительные точки* к совокупности, из которой выбираются опорные, за счет, например, равномерной линейной интерполяции между исходными точками (на всем рассматриваемом интервале или его части). Следует подчеркнуть, что такое добавление не означает расширения совокупности аппроксимируемых точек. Последняя всегда совпадает с исходной, и минимизируемый функционал вычисляется только по отклонению аппроксиманты от исходных точек.

К достоинствам метода дискретной оптимизации по сравнению с непрерывным МНК можно отнести возможность использования без каких-либо затруднений сравнительно *разнообразных минимизирующих функционалов*. Например, вес σ_i^2 в статистической сумме (5.2) можно сделать функцией значения аппроксиманты, а не только номера *i* или исходных значений F_i . Эта возможность введения «гладкого веса» существенна в случае больших экспериментальных погрешностей аппроксимируемых значений. Принципиально ничего не меняется в итерационном процессе и при вычислении статистической суммы с учетом корреляций экспериментальных значений (5.1), хотя объем вычислений при этом возрастет примерно пропорционально числу «ненулевых» диагоналей корреляционной матрицы экспериментальных значений. Совсем прост и не вызывает увеличения объема вычислений переход от минимизации статистической суммы к чебышевскому критерию — минимизации максимума взвешенного уклонения.

Если в итерационном процессе сохранять не только статистически оптимальный, но еще и несколько близких к нему по качеству минимизации S наборов опорных точек $\{k_i\}$, то в результате можно получать не единственную аппроксиманту, а «*пучок» статистически эквивалентных кривых*, для которых значения S лежат в пределах поддающейся оценке погрешности этой величины. Из набора этих равноценных результатов можно выбрать один оптимальный уже не по статистическим, а физическим или аналитическим критериям. Эта возможность может оказаться особенно полезной, если абсолютно лучшее в смысле минимизации *S* приближение получилось «раскачанным», т. е. принимающим бессмысленно большие по модулю значения между аппроксимируемыми точками. В случае рациональной аппроксимации раскачка обычно имеет особенно резкую форму — появляются так называемые *шумовые дублеты* (см. § 5.3), а такая неединственность оптимизации методом перебора позволяет найти статистически удовлетворительную гладкую аппроксиманту.

Недостатком метода является отсутствие его полного теоретического обоснования. Однако теоретические оценки, учитывающие свойства рациональных аппроксимант, свойства порядковых статистик, т. е. упорядоченных выборок случайно распределенных величин, и алгоритм перебора, показывают, что среднее квадратическое отклонение аппроксиманты, найденной методом перебора, от точного решения задачи МНК при $N_{ex} \gg L$ в $a\sqrt{N_{ex}/L}$ раз меньше, чем отклонение последнего от истинной кривой. Здесь *а* порядка единицы. Если отношение N_{ex}/L достаточно велико, то аппроксиманта, полученная дискретной оптимизацией, статистически эквивалентна решению задачи МНК, поэтому мы везде используем для нее результаты статистической теории, полученные для оценок МНК.

Если же N_{ex}/L не превышает нескольких единиц, то решение задачи можно уточнить, минимизируя статистическую сумму нелинейной задачи известными численными методами^{*}. Поскольку для производных по опорным ординатам известен явный вид (3.12), (3.14), удобно использовать градиентные методы. Однако в практике авторов этой книги многочисленные попытки такого улучшения аппроксиманты после дискретной оптимизации никогда не приводили к статистически значимому улучшению статистической суммы. Подробнее особенности метода перебора для минимизации статистической суммы при небольших N_{ex}/L рассмотрены в [35] для простейшего случая — одномерного нормального распределения.

Еще одним недостатком описанного выше алгоритма перебора, как и других алгоритмов случайного поиска, в которых не используется полученная на предыдущих этапах информация о предпочтительном направлении поиска, является быстрый рост объема вычислений с увеличением числа параметров L и экспериментальных точек N_{ex} . Общее число операций на одну большую итерацию растет примерно пропорционально $L^2(N_{ex} - L)^2$, поэтому практически при обработке резонансных кривых максимальные значения числа параметров и числа экспериментальных точек были $L \approx 40$ и $N_{ex} \approx 500$. Примеры использо-

^{*} Заметим, что аппроксимацию экспериментальной зависимости с помощью рациональной функции, при которой на первом этапе строится приближение Паде-2, а затем опорные ординаты или коэффициенты полиномов рассматриваются в качестве свободных параметров и численными методами оптимизируется статистический критерий, в [4, 36] называют приближением Паде третьего рода (Паде-3).

вания этого алгоритма в модельных и практических задачах аппроксимации экспериментальных данных приведены и проанализированы в § 5.4.

5.3. Построение и анализ рациональной аппроксиманты. Шумовые полюсы

В том случае, когда оптимальное число параметров аппроксиманты заранее неизвестно, удобно пользоваться рекуррентным построением с последовательным наращиванием ранга приближения. Рекуррентные соотношения (3.16)—(3.18) дают такую возможность. Для каждого из вариантов интерполяции, сравниваемых в методе перебора, при вычислении статистической суммы необходимо иметь значения аппроксиманты не только в опорных точках, но и при всех z_i , для которых известны экспериментальные данные.

Коэффициенты рекуррентных соотношений, с помощью которых наращивается ранг приближения, выражаются через уже вычисленные на предыдущих этапах значения элементов аппроксимант рангов L - 1 и L - 2 и через экспериментальное значение в точке z_L . Поэтому для вычисления значения аппроксиманты $f^L(z)$ в каждой из N_{ex} точек z_i достаточно один раз (для всех z) найти коэффициенты рекуррентного соотношения и подставить в него полученные на предыдущих этапах значения $P_{(L-1)}(z_i)$, $Q_{(L-1)}(z_i)$, $P_{(L-2)}(z_i)$, $Q_{(L-2)}(z_i)$. Таким образом, можно, используя критерий минимизации статистической суммы и значения аппроксиманты в точках z_i , определить число параметров и выбрать опорные точки оптимального приближения, не зная явного вида $P_N(z)$ и $Q_M(z)$.

Для анализа полученного приближения необходимо знать коэффициенты полиномов p_N^n и q_M^m , а не только их значения в отдельных точках. Если построение ведется с помощью рекуррентного соотношения типа $R_{(L)} = \alpha R_{(L-1)} + \beta (z - z_{L-1}) R_{L-2}$, то коэффициенты полиномов p_N^n , q_M^m связаны с коэффициентами полиномов предыдущих приближений рекуррентным соотношением $r_{(L)}^n = \alpha r_{(L-1)}^n + \beta r_{(L-2)}^{n-1} - \beta z_{L-1} r_{(L-2)}^n$. Таким образом, определив методом перебора

оптимальный набор узлов и использовав уже полученные для него коэффициенты рекуррентных соотношений, можно найти явный вид аппроксиманты именно для этого случая, не затрачивая времени на нахождение коэффициентов полиномов при других наборах узлов интерполяции. Можно поступить еще проще: поскольку значения полиномов оптимального приближения $P_N(z)$ и $Q_M(z)$ известны в N_{ex} точках, где $N_{ex} \gg N+M+1$, взяв любые N из них для $P_N(z)$ и любые M для $Q_M(z)$, воспользоваться простыми алгоритмами полиномиальной интерполяции, например интерполяционной формулой Лагранжа (1.9), и построить эти полиномы.

Следующий этап — поиск корней числителя и знаменателя аппроксиманты — осуществляется с помощью стандартных численных процедур. Наиболее эффективным оказалось использование в качестве начального алгоритма Мюллера с последующим уточнением методом Ньютона. При больших степенях полиномов эта задача может оказаться неустойчивой, что накладывает ограничения на максимальный ранг аппроксиманты, примерно совпадающие с условием $L \approx 40$, которое возникает из-за ограниченного быстродействия алгоритма перебора.

Зная корни числителя и знаменателя, можно перейти к эквивалентному представлению аппроксиманты

$$f^{L}(z) = p_{(L)}^{N} \sum_{\alpha=1}^{N} (z - z_{\alpha}) / \sum_{\beta=1}^{M} (z - z_{\beta}),$$

которое позволяет анализировать ее поведение не только в точках *z_i*, но и между ними. Еще удобнее для этого полюсное разложение аппроксиманты

$$f^{L} = A_{N-M}(z) + \sum_{\beta} a_{\beta} / (z - z_{\beta}) \equiv A_{N-M}(z) + \sum_{i=1}^{l_{1}} \frac{a_{i}}{z - p_{i}} + \sum_{k=1}^{l_{2}} \frac{\alpha_{k}(z - \epsilon_{k}) + \beta_{k}}{(z - \epsilon_{k})^{2} + \gamma_{k}^{2}}, \quad (5.8)$$

которое получается, если из $f^{L}(z)$ выделить целую часть (она имеется при $N \ge M$), при этом коэффициенты определяются соотношением

$$a_{\beta} = \left[P_{N}(z) - AQ_{M}(z) \right] / \partial \left[Q_{M}(z) \right] / \partial z \Big|_{z_{\beta}}$$

При кратных корнях знаменателя полюсное разложение сложнее.

Даже в случае использования линейного МНК или других методов аналитической аппроксимации, для которых теоретически гарантирована единственность решения, при численной реализации этих методов вследствие ограниченной точности вычислений или по иным причинам полученное решение иногда «раскачивается». При рациональной аппроксимации эта раскачка носит совершенно специфический характер, обусловленный наличием у аппроксиманты полюсных особенностей, которых нет у аппроксимирующих функций других классов. Рассмотрим это явление подробнее.

Пусть, постепенно наращивая ранг *L*, мы строим паде-аппроксиманту для поточечно заданной функции, которая сама является рациональной, т. е. отношением полиномов $P_{N_0}(z)/Q_{M_0}(z)$. Дойдя до $L_0 = N_0 + M_0 + 1$, мы восстановим исходную функцию по любым опорным точкам. При дальнейшем увеличении ранга приближения *L* мы все равно должны получить $f^L(z) = P_{N_0}(z)/Q_{M_0}(z)$, т. е. приближение неполного ранга. Именно к такому результату приводили бы описанные выше алгоритмы паде-аппроксимации при неограниченной точности вычислений. Если же вычисления ведутся с ограниченной, например машинной, точностью, то приближение $f^{L_0}(z)$ будет с этой же точностью проходить только через точки, по которым оно построено, в остальных будут малые отклонения восстановленных значений от истинных.

Как показано в § 3.6, в этом случае увеличение ранга приближения на единицу вызывает появление шумовых особенностей аппроксиманты на бес-

конечности, а увеличение ранга на две единицы приводит к построению аппроксиманты $(Az + B)P_{N_0}(z)/(A'z + B')Q_{M_0}(z)$, где A и A', B и B' мало отличаются друг от друга. Но эта небольшая количественная разница обусловливает качественно иной результат — биномы не сокращаются и у аппроксиманты появляется «шумовой дублет», близкие нуль и полюс, — она обращается в нуль при z = -B/A и в бесконечность при z = -B'/A'.

Найдя корни знаменателя аппроксиманты, ее можно представить в виде полюсного разложения (1.1). В этом разложении шумовой полюс будет присутствовать в виде слагаемого a/(z-b), где a — малая величина, а b = -B'/A'. Сокращение почти одинаковых биномов Az + B и A'z + B' в числителе и знаменателе соответствует отбрасыванию этого слагаемого в полюсном разложении. Таким образом, несмотря на бесконечную раскачку, ее локальный характер [слагаемое a/(z-b) при малых a заметно отлично от нуля только при z, близких к b] позволяет весьма просто с ней бороться.

Это рассуждение, в общем, справедливо и тогда, когда шумовой полюс появляется вследствие наличия случайных погрешностей у исходных данных. Если при этом погрешность в одной точке заметно превышает погрешности в других точках, то, как показано в § 3.6, шумовой дублет возникает вблизи точки, выпадающей из общей закономерности. Шумовые полюсы в большинстве случаев появляются, как это и показывают рассуждения, приведенные в начале параграфа, когда ранг аппроксиманты уже превысил оптимальное значение. Наряду со статистическими критериями это обстоятельство служит независимым указанием на то, что аналитическая информация, содержащаяся в аппроксимируемой совокупности точек, исчерпана. Довольно часто отсутствует надежная информация о статистической погрешности аппроксимируемых значений и выполнение критериев типа χ^2 непосредственно проконтролировать нельзя, тогда возникновение шумовых полюсов может быть единственным объективным указанием на то, что оптимальное значение L уже достигнуто и превзойдено. Это, например, относится к случаю, когда аппроксимируются не экспериментальные, а расчетные данные, для которых априорная оценка погрешности затруднительна или невозможна.

5.4. Примеры использования дискретной оптимизации для аппроксимации экспериментальных данных

Алгоритмы рациональной аппроксимации, описанные выше, применялись и совершенствовались в течение примерно десяти лет. Ниже для иллюстрации их возможностей и ограничений приведены примеры получаемых результатов, относящихся к тем случаям, когда не требовалось оценивать погрешности параметров аппроксиманты. Аппарат для вычисления таких погрешностей изложен в главе 6, там же даны и соответствующие примеры.

А. Начнем с простого модельного примера, на котором наглядно иллюстрируются особенности работы алгоритма и получаемых результатов. Величину $\sigma(E)$ брали в виде суммы двух резонансных слагаемых брейт-вигнеровского типа:

$$\sigma(E) = \frac{\beta_1}{\left(E - \epsilon_1\right)^2 + \Gamma_1^2/4} + \frac{\beta_2}{\left(E - \epsilon_2\right)^2 + \Gamma_2^2/4}$$
(5.9)

со значениями параметров $\epsilon_1 = 5$, $\Gamma_1 = \beta_1 = 1$, $\epsilon_2 = 10$, $\beta_2 = \Gamma_2 = 4,542$. Последнее число было задано датчиком случайных чисел. Интервал изменения аргумента $0 \le E \le 15$ с шагом $\Delta E = 0,1$ (всего 151 точка). «Экспериментальный» разброс моделировался с помощью датчика случайных чисел из нормального распределения с равным нулю средним. Связь относительной погрешности с сечением в точке была выбрана в виде

$$\Delta(E) = \Delta_0 \sqrt[4]{\sigma_{\max}}/\sigma(E)$$

Это выражение описывает погрешность, промежуточную между пуассоновской (тогда в этом выражении стоял бы квадратный корень) и постоянной относительной погрешностью. Амплитуда $\Delta_0 = 2$ %, что соответствует $2 \le \Delta(E) \le 5$ % и средней относительной погрешности $\overline{\Delta} = 3,44$ % (рис. 5.1). Критерием оптимизации аппроксиманты была выбрана минимизация среднего квадратического относительного отклонения, т.е. в программе использовалась искаженная информация относительно статистических свойств экспериментальной погрешности. Аппроксиманта представлялась в виде

$$\sigma(E) = C + \sum_{i} \frac{a_i}{E - p_i} + \sum_{k} \frac{\alpha_k (E - \epsilon_k) + \beta_k}{(E - \epsilon_k)^2 + \gamma_k^0}$$

где все постоянные действительные результаты обработки при L = 8, 9, 10 приведены в табл. 5.1.



Рис. 5.1. Результат обработки модельной кривой [функция (5.7)]: точки разбросаны датчиком случайных чисел с $\overline{\Delta} = 3,44$ %; сплошная линия — аппроксиманта, соответствующая оптимальному числу параметров L = 9. Значения ее параметров приведены в табл. 5.2

Аналитическая аппроксимация данных в ядерной и нейтронной физике

Результаты обработки модельной кривой								
Характеристика аппроксиманты	Точные значе- ния параметров	L=8	L=9	L=10				
С	0	0	0,0019	0				
α_1	0	-0,0081	-0,0009	0,0022				
β_1	1	0,9828	0,9858	0,9733				
γ_1	0,5	0,4957	0,4975	0,4939				
ϵ_1	5	5,001	4,998	4,991				
α_2	0	0,0060	0,0075	-0,015				
β_2	4,542	4,591	4,549	4,630				
γ_2	2,271	2,278	2,276	2,292				
ϵ_2	10	9,988	9,977	10,008				
a_1	—	_	-	0,263 · 10 ⁻⁴				
p_1	—	_	-	1,598				
$\overline{\Delta}_{ m эксп}$, %	_	3,328	3,352	3,344				
$\overline{\Delta}_{ ext{mct}}$, %	_	0,589	0,552	0,775				
$\overline{\Delta}_{ m onop}$, %	—	0,466	0,580	3,560				

Таблица 5.1.

Таблица 5.2.

Характеристика аппроксиманты	6 Li(n, α)	$^{10}\mathrm{B}(n, \alpha_0)$	$^{10}{ m B}(n,\alpha_1)$	$^{10}\mathrm{B}(n,\alpha)$
С	8,4361	1,1931	2,3696	5,8468
a_1	$-2,4420 \cdot 10^4$	-286,25	40,314	26,020
p_1	$-5,0045 \cdot 10^3$	$1,3381 \cdot 10^3$	-18,296	-14,492
α_1	$-1,3978 \cdot 10^{3}$	183,62	$-2,5382 \cdot 10^{3}$	$3,5630 \cdot 10^3$
β_1	$5,4164 \cdot 10^{6}$	$2,3854 \cdot 10^4$	$1,8669 \cdot 10^{6}$	$1,3885 \cdot 10^{6}$
γ_1	$1,1053 \cdot 10^3$	130,11	345,76	319,58
ϵ_1	$2,4509 \cdot 10^3$	467,90	230,49	287,93
α_2	414,54	49,034	465,45	893,84
β_2	$9,0840 \cdot 10^4$	$1,7806 \cdot 10^4$	$4,7728 \cdot 10^4$	$7,2963 \cdot 10^4$
γ2	44,533	152,92	124,88	138,18
ϵ_2	238,01	245,03	449,79	447,16
$\overline{\Delta}_{ m oth}$, %	0,69	0,42	0,24	0,21
N_{ex}	170	69	72	68
E_{\min} , эВ	10^{-7}	10^{-4}	10^{-7}	10^{-4}

		10
Значения параметров аппроксимации величин	н $\sqrt{E}\sigma_{nlpha}(E)$,	10 ⁻²⁸ м ²

Идея метода дискретной оптимизации подсказана свойствами порядковых статистик. Если $L \ll N_{ex}$, то среди N_{ex} точек, случайно разбросанных относительно истинной кривой, есть «наилучшие», наименее уклонившиеся, распределение отклонений которых гораздо уже полного. Естественно ожидать, что опорные точки, полученные в результате описанного выше итерационного процесса, при прочих равных условиях должны отбираться именно из них. На примере модельной кривой справедливость такого предположения может быть проверена. Кроме того, восстанавливаемую кривую можно сравнить не только с исходными точками, но и с истинной функцией. Функционалы, характеризующие перечисленные средние квадратические относительные отклонения, также приведены в таблице наряду с подученными параметрами аппроксиманты: $\overline{\Delta}_{3ксп}$ и $\overline{\Delta}_{ист}$ — отклонения аппроксиманты от «экспериментальных» и истинных точек, $\overline{\Delta}_{опор}$ — отклонение опорных точек от истинных.

Данные, приведенные в табл. 5.1, показывают следующее:

1) $\overline{\Delta}_{\text{ист}}$ заметно (в оптимальном варианте примерно в 6 раз) меньше $\overline{\Delta}_{3\text{ксп}}$. Это уменьшение погрешностей качественно согласуется с простейшей оценкой, полученной в предположении, что дисперсию параметров (опорных ординат) результирующей кривой можно вычислять как дисперсию среднего по N_{ex}/L значениям;

2) $\overline{\Delta}_{\text{опор}}$ близко к оптимальному $\overline{\Delta}_{\text{ист}}$, т. е. вся восстановленная кривая отклоняется от истинной в среднем так же, как выбранные опорные точки, а эти последние действительно лежат гораздо ближе к истинной кривой, чем каждая из N_{ex} точек в среднем;

3) аппроксиманта при L = 10 после отбрасывания шумовых полюсов сильнее отклоняется от истинной кривой, чем оптимальная аппроксиманта при L = 8, и полученные параметры сильнее отличаются от истинных;

4) точность восстановления ϵ_i и $\gamma_i = \Gamma_i/2$ координат полюсов в комплексной плоскости заметно выше, чем для α_i и β_i [в модели (5.9) $\alpha_i = 0$];

5) шумовой полюс появляется, когда L на две единицы превышает «истинное» значение L = 8, при этом в качестве одной из опорных была выбрана точка при E = 1,6, для которой в «экспериментальное» значение датчиком случайных чисел была внесена наибольшая относительная погрешность — 9,6 %.

Результаты обработки многих других модельных задач, в том числе и более сложных, чем приведенная, неизменно качественно подтверждали выводы 1—5.

Б. Сечения реакций ⁶Li(n, α), ¹⁰B(n, α_0) ¹⁰B(n, α_1) и ¹⁰B(n, α) широко используются в качестве стандартов при экспериментальных исследованиях взаимодействия нейтронов с ядрами. Наиболее полной и теоретически обоснованной современной оценкой этих сечений является библиотека ENDF/B-V [12]. Результаты этой оценки приводятся в табличном виде, что не всегда удобно для использования. Поэтому в [37] зависимости $\sqrt{E}\sigma(E)$ для этих ре-

акций были аппроксимированы рациональными функциями с помощью описанных выше алгоритмов; результаты приведены в табл. 5.2. Поскольку случайный разброс точек отсутствует и критерий χ^2 непосредственно использован быть не может, число параметров аппроксимации *L* выбиралось из условия достижения заранее намеченной относительной точности описания в интервале до *E* = 900 кэВ, а именно погрешности 0,5 %, что заведомо меньше средней погрешности оцененного стандартного сечения, но по порядку близко к ней в рассмотренных случаях. Оптимальное число параметров *L*_{отп} оказалось равным 11 во всех рассмотренных случаях при *N* = *M* = 5. Поскольку при поточечном задании оцененного сечения необходимо задавать абсциссы и ординаты, полное число подлежащих хранению значений в этих случаях в 10—20 раз превышает число параметров аналитической аппроксимации.

Следует отметить, что при обработке результатов по сечению реакции ${}^{6}\text{Li}(n, \alpha)$ в табличных данных с помощью программы была обнаружена одна выпадающая точка — значение, соответствующее E = 750 кэВ и равное $0,2462 \cdot 10^{-28}$ м². Она смещена больше чем на 5 % вниз от любой гладкой интерполяции по соседним точкам, и программа паде-аппроксимации неизменно использовала для ее описания шумовой полюс. Предположительно, в библиотеке ENDF/B-V [12] допущена опечатка, и правильное значение равно 0,2642.

В. Аналогичные расчеты были выполнены при переводе в аналитическую форму данных по оцененным сечениям пороговых реакций под действием нейтронов (библиотека БОСПОР [38]). Были обработаны в общей сложности 144 кривые с результирующим пример-20-кратным сокращением но подлежащей хранению числовой информации. На рис. 5.2. приведен один из типичных случаев такой аппроксимации.



Рис 5.2. Пример аппроксимации оцененных данных из библиотеки БОСПОР — сечение реакции ${}^{16}O(n, p){}^{16}N$ (см. [38])

Г. На рис. 5.3 представлен сравнительно сложный по числу параметров случай (L = 28).

Д. На рис. 5.4 приведены результаты обработки полных нейтронных сечений изотопов железа ⁵⁴Fe и ⁵⁶Fe, измеренных методом времени пролета в интервале энергий $E = 1 \div 70$ кэВ [40]. Результаты анализа в виде значений резонансных параметров даны в табл. 5.3.

Константа *C* и слагаемое a / (E - p), соответствующее действительному полюсу, описывают суммарный вклад потенциального рассеяния и «хвосты» резонансов, лежащих за пределами рассматриваемого интервала, информация о которых недостаточна для определения полного набора параметров ϵ_k , γ_k , α_k , β_k .



Рис 5.3. Результат аппроксимации временного спектра при измерении сечения реакции 52 Cr(p, n) [39] для числа параметров L = 28



Рис 5.4. Результаты измерения полного нейтронного сечения для ⁵⁴Fe (*a*) и ⁵⁶Fe (*б*) (точки) и аппроксимации полученных данных рациональной функцией (сплошная кривая)

Аналитическая аппроксимация данных в ядерной и нейтронной физике

					Таблица 5.3.				
Параметры аппроксимации полных нейтронных сечений ⁵⁴ Fe и ⁵⁶ Fe									
Нуклид	α, 10 ⁻²⁸ м ² ·кэВ	β, 10 ⁻²⁸ м ² ·кэВ ²	ү, кэВ	є, кэВ	Другие параметры				
⁵⁴ Fe	47,28	105,33	0,582	7,71	<i>C</i> = 17,18				
	29,7	73,141	1,43	52,53					
	23,1	$5,796 \cdot 10^4$	60,65	45,5					
⁵⁶ Fe	29,1	51,46	0,791	27,6	C = 0				
	-15,15	1689	24,7	42,5	<i>a</i> = 65,7				
					<i>p</i> = –6,40				

Константа *С* и слагаемое a / (E - p), соответствующее действительному полюсу, описывают суммарный вклад потенциального рассеяния и «хвосты» резонансов, лежащих за пределами рассматриваемого интервала, информация о которых недостаточна для определения полного набора параметров ϵ_k , γ_k , α_k , β_k . Наибольший интерес представляют слагаемые такого типа, соответствующие резонансам при отрицательных энергиях нейтронов, близких к нулю. Обычно их описывают так же, как и резонансы при положительных энергиях. Следует, однако, отметить, что и без того некорректная задача аналитического продолжения функции осложняется наличием в этом случае у аппроксимируемой функции точки ветвления (вклад $1/\sqrt{E}$), что чаще всего лишает полученные параметры физического смысла. Отсюда — известные различия при определении их разными авторами. Несомненно, наличие отрицательного уровня энергии у ⁵⁶Fe и его вклад в виде слагаемого a / (E - p) определяются в нашем анализе, однако интерпретировать р как энергию резонанса при этом нужно уже с осторожностью. Особый вопрос — описание вклада потенциального рассеяния. Для обоих изотопов железа анализ дает в выражении для полного сечения слагаемое, имеющее формально резонансный характер, однако ширина этого резонанса примерно равна или больше всего рассматриваемого интервала, и его вклад слабо зависит от энергии, поэтому мы относим его к потенциальному рассеянию.

5.5. Резонансный анализ на основе рациональной аппроксимации

Как уже упоминалось в гл. 1, рациональная аппроксимация как метод аналитического продолжения позволяет при обработке энергетической зависимости сечений ядерных реакций определять параметры полюсов *S*-матрицы, имеющие физический смысл резонансных параметров. В настоящем параграфе математические аспекты этого вопроса рассматриваются несколько подробнее.

Одна из принципиальных трудностей описания экспериментальных данных аналитическими функциями состоит в том, что физически наблюдаемыми являются не сами аналитические функции f(z), которые могут принимать комплексные значения, а действительные величины |f(z)|, Re f(z), Im f(z). В том случае, когда эти величины известны при всех комплексных значениях аргумента, можно однозначно определить аналитическую функцию во всей комплексной плоскости [18], но экспериментальные данные известны лишь при некоторых действительных значениях аргумента.

Так, сечение упругого рассеяния $\sigma_e^{(l)}$ сечение реакции $\sigma_r^{(l)}$ и полное сечение $\sigma_t^{(l)}$ для частиц с заданным орбитальным моментом *l* следующим образом выражаются через S_l аналитическую функцию энергии или волнового вектора *k* [41]:

$$\sigma_{e}^{(l)} = (\pi/k^{2})(2l+1)|1-S_{l}|^{2}$$

$$\sigma_{r}^{(l)} = (\pi/k^{2})(2l+1)(1-|S_{l}|^{2})$$

$$\sigma_{l}^{(l)} = (\pi/k^{2})(2l+1)(1-\operatorname{Re} S_{l})$$
(5.10)

Если известны два из трех сечений, то известно ReS_l и, с точностью до знака ImS_l на действительной оси, т. е. при действительных z = k. Знак ImS_l определяется из физических соображений (см., например, [4]). Используя условие Коши-Римана, нетрудно убедиться, что если f(z) — аналитическая функция, то $f^*(z)$ — неаналитическая в любой точке комплексной плоскости, кроме тех (если они существуют), где $\partial u/\partial x = \partial v/\partial y = \partial u/\partial y = \partial v/\partial x = 0$. Поэтому функции $|f(z)|^2 = f(z)f^*(z)$, $\text{Re } f(z) = (1/2)[f(z) + f^*(z)]$ и $\text{Im } f(z) = (1/2)[f(z) - f^*(z)]$ также неаналитические. Аналитической функцией будет $f^*(z^*)$, и можно построить аналитические функции $f^+(z) = (1/2)[f^*(z) + f^*(z^*)]$ и $f^-(z) = (1/2)[f(z) - f^*(z^*)]$, которые на действительной оси совпадают с неаналитическими Ref(z) и Im f(z).

Как уже отмечалось, задание аналитической функции на некотором отрезке полностью определяет ее во всей комплексной плоскости, поэтому, использовав $f^+(z) + if^-(z)$, получим аналитическую функцию, совпадающую с f(z)на действительной оси и, следовательно, во всей комплексной плоскости. При этом аналитическая функция $f^+(z) - if^-(z)$ совпадает на действительной оси с неаналитической функцией $f^*(z)$. Если потребовать, чтобы аналитической функцией была $f^*(z)$, то f(z) будет неаналитической — выбор одной из этих функций в качестве S_l определяется теми же соображениями, что и знак Im S_l .

Гораздо чаще при обработке экспериментальных данных известен только модуль или только действительная или мнимая часть аналитической функции на действительной оси. В любом из этих случаев можно построить единственную аналитическую функцию $\varphi(z)$, принимающую заданные действительные значения на действительной оси. Как следует из теории аналитических функций, $\varphi(z)$ будет принимать комплексно-сопряженные значения в комплексно-сопряженные значения в комплексно-сопряженных точках, поэтому ее можно представить в любом из следующих видов: $\varphi(z) = f(z)f^*(z^*)$, $\varphi(z) = (1/2)[f(z) + f^*(z^*)]$, $\varphi(z) = (1/2)[f(z) - f^*(z^*)]$. Однако в каждом случае такое разбиение можно сделать не единственным обра-

зом — функция $\varphi(z)$ определена с точностью до множителя $c_1(z) = 1/c_1^*(z^*)$ в первом случае, с точностью до слагаемого $c_2(z) = -c_2^*(z^*)$ во втором и с точностью до слагаемого $c_3(z) = c_3^*(z^*)$ в третьем. Рассматривая значения этих слагаемых и множителя на действительной оси и требуя их аналитичности во всей плоскости, нетрудно убедиться, что в первом случае $c_1 = e^{i\delta}$, во втором $c_2 = ia$, в третьем $c_3 = b$, где δ , a, b — действительные постоянные. Однако основное затруднение при переходе от $\varphi(z) \kappa f(z)$ заключается не в этих несущественных постоянных, а в том, что любую из пары комплексно-сопряженных особых точек, которые имеются у $\varphi(z)$, можно отнести $\kappa f(z)$, а сопряженную ей — κ $f^*(z^*)$. Для проведения такого разбиения необходимо пользоваться дополнительной информацией, например привлекать известные из теории аналитические свойства S_l . При анализе резонансных сечений, таким образом, можно однозначно определить положения и ширины резонансов, которым соответствуют полюсы аналитической функции S_l .

В теории ядерных реакций общее выражение для энергетической зависимости сечения в резонансной области имеет вид

$$\sigma(E) = \sum_{k=1}^{m} \left| c_k + \sum_{j=1}^{n_k} \frac{\rho_{kj} e^{i\varphi_{kj}}}{E - E_{kj} + i\Gamma_{kj}/2} \right|^2.$$
(5.11)

В нем учитывается как интерференция резонансного рассеяния с потенциальным, так и межрезонансная интерференция. При паде-аппроксимации сечение восстанавливается в виде

$$\sigma(E) = \frac{P_{2n}(E)}{Q_{2n}(E)} = c + \sum_{k=1}^{m} \sum_{j=1}^{n_k} \left(\frac{\alpha_{kj}}{E - E_{kj} + i\Gamma_{kj}/2} + \frac{\alpha_{kj}^*}{E - E_{kj} + i\Gamma_{kj}/2} \right), \quad (5.12)$$

где $n = \sum_{k=1}^{m} n_k$; α_k — комплексные постоянные.

Сравнивая (5.11) и (5.12), получаем

$$C = \sum_{k=1}^{m} c_k^2$$

$$\alpha_{kj} = \rho_{kj} e^{i\varphi_{kj}} \left(c_k + \sum_l \frac{\rho_{kl} e^{-i\varphi_{kl}}}{E_{kj} - E_{kl} + i(\Gamma_{kj} + \Gamma_{kl})/2} \right)^{-1}$$
(5.13)

Если в описании участвует N резонансов, то для определения 2N + m величин (ρ_{kj} и ϕ_{kj} для каждого уровня и m постоянных c_k) есть 2N + 1 уравнение (5.13), считая сопряженные, и задача не имеет однозначного решения. Поэтому ограничимся качественными выводами и рассмотрением частных случаев. Простейший случай — резонансное рассеяние на одном уровне, интерферирующее с потенциальным рассеянием, когда

$$\sigma(E) = \left| c + \frac{\rho e^{i\varphi}}{E - E^0 + i\Gamma/2} \right|^2 = c^2 + \frac{\gamma + i\delta}{E - E^0 + i\Gamma/2} + \frac{\gamma - i\delta}{E - E^0 + i\Gamma/2}, \quad (5.14)$$

где $\gamma + i\delta = \alpha$. Используя (5.13), находим:

$$\rho^{4} - \rho^{2}\Gamma^{2}\left(c^{2} + 2\delta/\Gamma\right) + \Gamma^{2}\left(\delta^{2} + \gamma^{2}\right) = 0 \left\{ \cos\varphi = \gamma/c\rho \right\}.$$
(5.15)

Однако на практике не всегда известно, какая доля потенциального рассеяния интерферирует с рассеянием на данном уровне, поэтому представляет интерес следующее ограничение снизу на соответствующую величину, которое получается из очевидного условия $\rho^2 \ge 0$:

$$c^{2} \ge \left(2\delta/\Gamma\right) \left(\sqrt{1+\gamma^{2}/\delta^{2}-1}\right).$$
(5.16)

Когда $C = c_k = 0$, т. е. нет интерференции резонансного рассеяния с потенциальным, уравнения (5.13) в принципе разрешимы относительно ρ_{kj} и $\varphi_{kj} - \varphi_{kl}$. Так, для двух интерферирующих резонансов получим

$$\rho_{1}^{4} + \rho_{1}^{2} \left[-2\delta_{1}\Gamma_{1} - \frac{\Gamma_{1}^{2}\Gamma_{2}(\delta_{1} + \delta_{2})}{\epsilon^{2} - \Gamma_{1}\Gamma_{2}} \right] + \frac{(\gamma_{1}^{2} + \delta_{1}^{2})\Gamma_{1}^{2}\epsilon^{2}}{\epsilon^{2} - \Gamma_{1}\Gamma_{2}} = 0$$

$$\rho_{2} = -\Gamma_{2} \left(\delta_{1} - \delta_{2} - \rho_{1}^{2}/\Gamma_{1} \right)$$

$$tg \left(\varphi + \beta \right) = \delta_{1}/\gamma_{1} + \rho_{1}^{2}/\gamma_{1}\Gamma_{1}$$

$$\epsilon^{2} = (E_{1} - E_{2})^{2} + (\Gamma_{1} - \Gamma_{2})^{2}/4$$

$$tg\beta = -(\Gamma_{1} - \Gamma_{2})/2(E_{1} - E_{2})$$

$$\varphi = \varphi_{2} - \varphi_{1}$$
(5.17)

Решение этой системы дает два набора резонансных параметров. Следует отметить, что результаты анализа с помощью выражений (5.17) чувствительны к сравнительно малым изменениям наблюдаемых величин.

Если $C = c_k = 0$, то, суммируя по *j* в правой части (5.13), можно найти

$$\sum_{j} \left(\alpha_{kj} + \alpha_{kj}^* \right) = \sum_{j} \gamma_{kj} = 0.$$
(5.18)

Выражение (5.18) дает способ разбиения резонансов при отсутствии интерференции резонансного рассеяния с потенциальным на группы с межрезонансной интерференцией, внутри каждой из которых выполняется равенство (5.18), а γ_{ki} определяются с помощью приближения Паде.

Ситуация упрощается, если потенциальное рассеяние отсутствует, т. е. речь идет о сечении реакции, идущей через составное ядро, например о сечении

деления, и построена паде-аппроксиманта, у которой N = M - 2 = 2(m - 1). После нахождения корней числителя и знаменателя ее можно разложить на два комплексно-сопряженных множителя:

$$\sigma(E) = \frac{P_{2(m-1)}(E)}{Q_{2m}(E)} = A \frac{\prod_{k=1}^{m-1} (E - \epsilon'_k + i\gamma'_k) (E - \epsilon'_k - i\gamma'_k)}{\prod_{j=1}^m (E - \epsilon_j + i\gamma_j) (E - \epsilon_j - i\gamma_j)}.$$
(5.19)

Один из множителей, например тот, полюсы и нули которого лежат в верхней полуплоскости, и приравнивается к полюсному разложению амплитуды, не содержащему постоянных слагаемых c_k .

Заметим, что при практическом использовании данных по нейтронным сечениям и оценке этих данных все чаще под резонансным анализом понимают представление зависимости $\sigma(E)$ в формализме Адлер — Адлера [42]. Это представление есть не что иное, как рациональная аппроксимация функций $\sqrt{E}\sigma(E)$ с параметризацией (5.8) полюсного разложения полученной аппроксиманты.

Методы анализа экспериментальных данных по рассеянию, основанные на использовании теоретических и феноменологических результатов физики ядерных взаимодействий, подробно изложены в [4].

ГЛАВА 6. ОЦЕНКА ПОГРЕШНОСТЕЙ ПАДЕ-АППРОКСИМАНТЫ

6.1. Информационная и ковариационная матрицы при параметризации резонансными параметрами и опорными ординатами

В предыдущей главе был рассмотрен этап обработки экспериментальных данных, целью которого было получение рациональной функции, аппроксимирующей истинную зависимость. Любой критерий выбора такой аппроксиманты, в частности используемый здесь МНК, и любой метод ее получения, будь то решение системы уравнений, численные методы поиска экстремумов или метод перебора, приводят к построению функции, параметры которой определяются случайными величинами — экспериментальными данными и в этом смысле являются случайными. Например, если распределение погрешностей эксперимента в точке считать нормальным, то значение найденной с помощью МНК аппроксимирующей функции в этой точке является оценкой среднего этого нормального распределения, т. е. оценкой значения истинной функции. Эта оценка сама подчиняется некоторому статистическому распределению, и ее дисперсия определяет погрешность описания в данной точке. В этой главе рассмотрено определение погрешностей параметров аппроксиманты и их корреляций. Для задачи линейной регрессии, т. е. при линейной зависимости истинной функции от оцениваемых параметров, имеется хорошо развитая теория, которая позволяет по распределениям погрешностей эксперимента получать распределения оценок параметров и их характеристики. В этом случае оценки подчиняются нормальному распределению, а ковариационная матрица погрешностей параметров аппроксиманты V получается обращением информационной матрицы A — матрицы Фишера (см., например, [32—33]). Матрица Фишера при многомерном нормальном распределении погрешностей эксперимента следующим образом выражается через математическое ожидание производных статистической суммы (5.1) по параметрам аппроксиманты

$$A_{\mu\nu} = \left(\mathbf{V}^{-1}\right)_{\mu\nu} = \frac{\partial S}{\partial p_{\mu}} \frac{\partial S}{\partial p_{\nu}}.$$
(6.1)

В случае нескоррелированных погрешностей исходных данных, когда выражение для статистической суммы упрощается и сводится к (5.2), подстановка (5.2) в (6.1) дает

$$A_{\mu\nu} = \sum_{i=1}^{N_{ex}} \frac{1}{\sigma_i^2} \frac{\partial f(z_i)}{\partial p_{\mu}} \frac{\partial f(z_i)}{\partial p_{\nu}}.$$
(6.2)

В дальнейшем будем рассматривать именно этот случай.

Наряду с ковариационной используется корреляционная матрица с элементами

$$\rho_{\mu\nu} = V_{\mu\nu} / \sqrt{V_{\mu\mu}V_{\nu\nu}} . \tag{6.3}$$

Ее диагональные элементы равны единице, а недиагональные — коэффициентам корреляции соответствующих параметров.

В задачах нелинейной регрессии, к числу которых относится аппроксимация экспериментальных зависимостей с помощью рациональных функций, гораздо сложнее не только сам процесс получения оценки, но и определение погрешностей аппроксиманты при небольшом числе экспериментальных точек N_{ex} . Оценка МНК в этой задаче лишь асимптотически нормальна, т. е. распределение параметров аппроксиманты стремится к нормальному при $N_{ex} \rightarrow \infty$. Асимптотическое разложение ковариационной матрицы параметров имеет вид

$$\mathbf{A}^{-1} + O(N_{ex}^{-1}),$$

где **A** определено формулой (6.2). В дальнейшем будем предполагать, что N_{ex} достаточно велико, для того чтобы в качестве ковариационной матрицы и в этой задаче использовать просто **A**⁻¹.

Как упоминалось выше, параметры паде-аппроксиманты можно выбирать различными способами. Удобными для резонансного анализа, например, представляются параметры полюсного разложения (5.8). Производные аппроксиманты по этим параметрам, входящие в (6.1), (6.2), элементарно вычисляются прямым дифференцированием:

$$\frac{\partial f}{\partial \alpha_{k}} = \frac{z - \epsilon_{k}}{Q_{k}}$$

$$\frac{\partial f}{\partial \beta_{k}} = \frac{1}{Q_{k}}$$

$$\frac{\partial f}{\partial \gamma_{k}} = -2\frac{P_{k}\gamma_{k}}{Q_{k}^{2}}$$

$$\frac{\partial f}{\partial \epsilon_{k}} = -\frac{\alpha_{k}}{Q_{k}} + 2\frac{P_{k}(z - \epsilon_{k})}{Q_{k}^{2}}$$
(6.4)

где $Q_k = \gamma_k^2 + (z - \epsilon_k)^2$; $P_k = \alpha_k (z - \epsilon_k) + \beta_k$.

Рассмотрим пример, иллюстрирующий свойства ковариационной матрицы этих параметров. В качестве модельной была выбрана функция

$$F(z) = 1 + \frac{1}{(z+0,5)^2 + 0,5^2} + \frac{1+0,2z}{(z-0,5)^2 + 0,3^2},$$
(6.5)

заданная на отрезке [-1, 1] с шагом 0,05 (всего 41 точка). С помощью датчика случайных чисел, выбранных из нормального распределения, к значениям функции (6.5) добавлялись случайные отклонения с дисперсией, соответствующей постоянной относительной погрешности. Обрабатывались два набора: с $\overline{\Delta} = 1 \%$ и $\overline{\Delta} = 5 \%$. Исходная кривая является рациональным выражением с L = 9. Оптимальные аппроксиманты для описания значений функции с учетом этих случайных отклонений также получились при L = 9 в обоих случаях со средними квадратическими относительными отклонениями 1,03 и 4,11 %.

Результаты аппроксимации и вычисления ковариационных матриц приведены в табл. 6.1 для $\overline{\Delta} = 1$ %. Для $\overline{\Delta} = 5$ % матрица Фишера оказалась плохо обусловленной, что привело к бессмысленным значениям элементов корреляционной матрицы. Из результатов для $\overline{\Delta} = 1$ % обращают на себя внимание близкие по модулю к единице значения коэффициентов корреляции многих пар параметров, в первую очередь β и α для одного резонанса, а также большие погрешности в определении значений α_i .

Выше было получено общее выражение для производных аппроксиманты по опорным ординатам (3.12), позволяющее при подстановке его в (6.2) вычислять для этих параметров матрицу Фишера и корреляционную матрицу. В табл. 6.2 приведены результаты таких вычислений для той же модельной кривой (6.5), что и в табл. 6.1, но для параметризации опорными ординатами. При этом в качестве опорных точек взяты те, которые выбрала в оптимальном варианте программа паде-аппроксимации методом перебора, описанным в § 5.2. Видно, во-первых, что информационная матрица хорошо обусловлена и при $\overline{\Delta} = 5$ % в отличие от случая параметризации резонансными параметрами.

Таблица 6.1.

и коэффициентов корреляции									
Параметр	С	α_1	β_1	γ_1	ϵ_1	α_2	β_2	γ_2	ϵ_2
Точное значение	1	0,2	1	0,3	0,5	0	1	0,5	-0,5
Оценка	1,03	0,193	1,01	0,302	0,501	-0,03	0,974	0,497	-0,494
Абсолютная погрешность	0,14	0,051	0,08	0,008	0,004	0,22	0,062	0,011	0,033
ρ_{ik}	1	-0,54	-0,88	-0,86	0,35	0,74	-0,58	-0,17	-0,69
		1	0,46	0,44	-0,92	-0,54	0,57	0,26	0,57
			1	0,99	-0,33	-0,93	0,18	-0,23	0,88
				1	-0,32	-0,90	0,16	-0,24	0,85
					1	0,44	-0,37	-0,11	-0,47
						1	-0,87	0,30	-0,99
							1	0,87	0,84
								1	-0,28
									1

Оцененные значения резонансных параметров, их погрешностей и коэффициентов корреляции

Таблица 6.2.

Оцененные значения опорных ординат, их погрешностей и коэффициентов корреляции

	Zi	-1	-0,6	-0,45	-0,25	0,05	0,15	0,35	0,5	0,8
$\overline{\Delta} = 1\%$	f_i	3,35	5,506	5,871	5,656	6,261	7,327	11,48	13,93	7,98
	$\Delta f_i/f_i$, %	0,80	0,45	0,47	0,48	0,61	0,59	0,51	0,52	0,57
	Z _i	-1	-0,9	-0,25	0,1	0,15	0,5	0,65	0,85	1,0
$\overline{\Delta} = 5\%$	f_i	3,05	3,766	5,687	6,638	7,292	14,15	11,73	7,086	4,868
	$\Delta f_i/f_i$, %	0,12	0,027	0,021	0,011	0,008	0,019	0,01	0,01	0,023
	ρ _{ik} , %	1	-0,08	0,5	-0,4	0,5	0,4	-0,3	0,3	-0,7
	кроме диа-	10,2	1	1,5	-0,7	0,6	0,5	-0,4	0,3	-0,6
	гональной	13,7	0,4	1	0,6	0,06	0,15	-0,05	-0,06	-0,3
		-23,0	0,35	-3,9	1	-0,6	-0,8	0,4	-0,2	0,7
		17	0,00	1,5	-0,6	1	3,3	-0,4	-0,03	-0,9
		-23,5	0,00	-3,5	3,7	-2,9	1	1,0	-0,7	-0,09
		-4,4	1,3	2,0	-1,0	0,8	4,3	-2,4	1	-2,6
		-9,4	-1,0	-3,1	2,7	-2,1	11,9	2,9	-0,4	1
Примечание. Справа от лиагонали приведены o_{ik} для $\overline{\Delta} = 1$ %, слева — o_{ik} для $\overline{\Delta} = 5$ %.										

Во-вторых, результирующая корреляционная матрица близка к диагональной — наибольший по модулю коэффициент корреляции параметров равен 0,033 для $\overline{\Delta} = 1$ % и 0,235 для $\overline{\Delta} = 5$ %. Если учесть, что для уже построенной аппроксиманты положение задающих ее *L* опорных точек можно выбирать в принципе произвольно, то близость полученной ковариационной матрицы к диагональной приводит к естественному вопросу: а нельзя ли, варьируя абс-
циссы опорных точек, получить диагональную информационную (и, следовательно, корреляционную) матрицу для опорных ординат? Оказывается, если погрешности аппроксимирующих значений статистически независимы, то такая возможность имеется. Она обсуждается в следующем параграфе.

6.2. Диагонализация информационной матрицы опорных ординат

Согласно (6.2) для диагональности ковариационной матрицы опорных ординат как параметров аппроксиманты необходимо и достаточно, чтобы выполнялись равенства

$$A_{\mu\nu} = \sum_{i=1}^{N_{ex}} \frac{\partial f(z_i)}{\partial f_{\mu}} \frac{\partial f(z_i)}{\partial f_{\nu}} = \lambda_{\mu} \delta_{\mu\nu} , \qquad (6.6)$$

т. е. чтобы производные аппроксиманты по опорным ординатам как функции *z* были диагональны на дискретном множестве значений аргумента z_i с весом σ_i^{-2} . Тогда дисперсии опорных ординат аппроксиманты статистически независимы и равны

$$\overline{\left(\Delta f_{\nu}\right)^{2}} = 1/\lambda_{\nu} . \tag{6.7}$$

Согласно (3.12)

$$\frac{\partial f}{\partial f_{\mu}} = \frac{Q_M^2\left(z_{\mu}\right)}{Q_M^2\left(z\right)} \prod_{\nu \neq \mu} \frac{\left(z - z_{\nu}\right)}{\left(z_{\mu} - z_{\nu}\right)},\tag{6.8}$$

где $Q_M(z)$ — знаменатель паде-аппроксиманты, поэтому (6.6) эквивалентно требованию ортогональности полиномов, стоящих в числителе (6.8) с весом, который легко определяется из (6.6)—(6.8) и равен $1/\sigma_i^2 Q_M^4(z)$, на той же совокупности значений аргумента $z_1, z_2, ..., z_{Nex}$.

Из теории ортогональных полиномов (см., например, [21]) известно следующее их свойство. Пусть $P_0(z)$, $P_1(z)$, ..., $P_L(z)$ — система полиномов степеней до L, ортогональных на множестве точек $\{z_i\}$ с весом w(z), а $z_1, z_2, ..., z_L$ — корни полинома $P_L(z)$. Тогда L различных полиномов одной и той же степени L - 1, определяемых выражением

$$l_{\nu}(z) = \prod_{\mu \neq \nu} (z - z_{\mu}) / \prod_{\mu \neq \nu} (z_{\nu} - z_{\mu}), \ \nu = 1, 2, ..., L ,$$
(6.9)

попарно ортогональны на том же множестве с тем же весом. Таким образом, если выбрать в качестве веса $w(z) = 1/Q_M^4(z) \sigma^2(z)$, построить систему полиномов степеней до *L*, ортогональных с этим весом на множестве N_{ex} абсцисс исходных точек, и взять в (6.8) в качестве опорных абсцисс корни полинома $P_L(z)$, то соотношения (6.6) будут выполняться.

Приведем формулы, позволяющие построить нужную систему ортогональных полиномов [21]. Введем по определению для произвольной функции $\varphi(z)$ взвешенную сумму значений на множестве $\{z\}_{Nex}$:

$$\left\langle \varphi \right\rangle = \sum_{i=1}^{N_{ex}} \varphi(z_i) / \mathcal{Q}_M^4(z_i) \sigma_i^2 . \qquad (6.10)$$

Полином будем нормировать на единичный коэффициент при старшей степени. Тогда, опуская для краткости аргумент полиномов, можно записать следующее рекуррентное соотношение:

$$P_{n} = \left(z - \frac{\left\langle zP_{n-1}^{2}\right\rangle}{\left\langle P_{n-1}^{2}\right\rangle}\right) P_{n-1} - \frac{\left\langle zP_{n-1}^{2}P_{n-2}^{2}\right\rangle}{\left\langle P_{n-2}^{2}\right\rangle} P_{n-2} .$$
(6.11)

С учетом начальных условий $P_{-1} = 0$, $P_0 = 1$ рекуррентное соотношение (6.11) позволяет решить поставленную задачу.

6.3. Погрешности аппроксиманты

Если ковариационная матрица опорных ординат диагональна, т. е. $\overline{\Delta f_{\mu} \Delta f_{\nu}} = (\Delta f_{\nu})^2 \delta_{\mu\nu}$, то в предположении малости дисперсий с средний квадрат погрешности аппроксиманты в произвольной точке *z* будет равен

$$\overline{\Delta^{2}(z)} = \sum_{v} \left[\frac{\partial f^{L}(z)}{\partial f_{v}} \right]^{2} \overline{\left(\Delta f_{v}\right)^{2}}, \qquad (6.12)$$

а коэффициент корреляции значений $f^L(z_1)$ и $f^L(z_2)$ в двух произвольных точках z_1, z_2

$$\rho(z_1, z_2) = \frac{\sum_{\mu=1}^{L} \frac{\partial f^L(z_1)}{\partial f_{\mu}} \frac{\partial f^L(z_2)}{\partial f_{\mu}}}{\sqrt{\Delta^2(z_1)\Delta^2(z_2)}}, \qquad (6.13)$$

где $\overline{\Delta^2(z)}$ определяется выражением (6.12).

Итак, вычисление погрешностей построенной аппроксиманты как функции *z* (построение «коридора ошибок») производится следующим образом:

1) По формуле (6.11) строят систему полиномов, ортогональных на множестве $\{z\}N_{ex}$ с весом $1/\sigma^2(z)Q_M^4(z)$.

2) Численными методами находят корни полинома $P_L(z)$. В силу ортогональности полинома все корни действительны и лежат внутри интервала аппроксимации. Значения этих корней z_v выбирают в качестве опорных абсцисс.

3) По формуле (6.7) с использованием (6.6) вычисляют $\overline{\Delta f_{\nu}}$ — дисперсию погрешностей опорных ординат. Подчеркнем, что $\overline{\Delta f_{\nu}}$ — это не дисперсия экспериментальной погрешности в точке z_{ν} , а дисперсия параметра аппроксиманты f_{ν} .

4) В выражение (6.12) подставляют полученные значения $\overline{\Delta f_{\nu}}$ и $\partial f/\partial f_{\nu}$.

Приведем примеры использования этого метода.

В качестве модельной задачи рассмотрим кривую (6.5) без постоянного слагаемого, т. е. сумму двух интерферирующих резонансов при $\overline{\Delta} = 5 \%$ (рис. 6.1*a*, δ). Как и следовало ожидать, точки аппроксиманты укладываются во второй, примерно вдвое более узкий, коридор ошибок

с вероятностью, близкой к 70 %.

На рис. 6.2*а* представлены результаты подобной же обработки для оценки сечения реакции 238 U(*n*, 2*n*) в интервале энергий от пороговой до 19 МэВ



Рис. 6.1. Результаты обработки модельной задачи с 5 %-м разбросом точек относительно кривой (6.5): а — паде-аппроксиманта; б — оценка погрешности аппроксиманты по (6.13) (двойная штриховка); одинарная штриховка — экспериментальная погрешность; жирная кривая — отклонение аппроксиманты от истинной кривой; точки — эксперимент

(пример взят из [43], где указаны источники экспериментальной информации). Отсчет на рис. 6.26 ведется от значений аппроксиманты. Хотя число параметров в этом случае такое же, как в модельном примере (восемь), резкие скачки в зависимости экспериментальной погрешности от энергии (обрабатывались совместно данные многих работ с разной точностью) ухудшают условия численного построения нужной системы ортогональных полиномов (однако это осложнение не вызывает в данном случае затруднений). Числовые данные, как и для модельной задачи, приведены в табл. 6.3. Как видно, погрешность оценки везде заметно меньше погрешностей экспериментальных значений.



Рис. 6.2. Результаты построения оцененной кривой $\sigma(E)$ для реакции ²³⁸U(*n*, 2*n*) по совокупности экспериментальных данных, приведенных в [43]: *a* — паде-аппроксиманта; δ — оценка погрешности аппроксимации (плавная кривая); значения экспериментальных погрешностей показаны ломаной линией

Таблица 6.3.

	Модельная задача (рис. 6.1)			Сечение реакции ²³⁸ U(<i>n</i> , 2 <i>n</i>) (рис. 6.2)			
μ	E_{μ}	f_{μ}	$\overline{\Delta f_{\mu}}$	<i>Е</i> _µ , МэВ	f_{μ} , 10^{-31} m^2	$\overline{\Delta f_{\mu}}$, 10^{-31} m ²	
1	-0,936	2,650	0,0665	5,55	86,5	4,2	
2	-0,669	4,184	0,0870	7,09	508	13,2	
3	-0,368	4,838	0,0995	8,24	1209	22,5	
4	-0,080	4,652	0,0965	9,75	1405	34,5	
5	0,193	7,006	0,1503	11,62	1447	54,1	
6	0,432	12,375	0,2935	13,61	1052	19,4	
7	0,656	10,254	0,2268	14,60	720	11,8	
8	0,927	4,720	0,1101	17,29	335	16,7	

Опорные абсциссы E_{μ} , ординаты f_{μ} , обеспечивающие диагональность ковариационной матрицы, и погрешности опорных ординат Δf_{μ}

Еще один практический пример. В [44—46] методом активации были измерены сечения радиационного захвата нейтронов ядром ²³⁶U для $E=0,15\div1,15$ МэВ. Полная погрешность, полученная в экспериментах с использованием сечения захвата ядром ¹⁹⁷Au быстрых нейтронов в качестве стандарта, находится в пределах 10,7—5%, а погрешность, найденная с использованием сечения (*n*, *p*)-рассеяния, составляет 4,1—3,2%. По сравнению с этими результатами оценка ENDF/B-V представляется заметно завышенной, поэтому полученные данные оценены методом паде-аппроксимации, и результаты приведены на рис. 6.3, 6.4. Оптимальная кривая вида (5.12) соответствовала L = 10 при C = 0. Подстановка в (5.12) числовых значений полученных параметров дает следующую формулу для энергетической зависимости $\sigma_{n\gamma}$ (сечение — в 10^{-28} м², энергия — в кэВ):

$$\sigma_{n\gamma}(E) = \frac{62,01}{E+316,2} + \frac{12,45}{E+14,87} + \frac{1,749}{E-0,25} + \frac{15,99(E-767,1)+18854}{(420,5)^2 + (E-767,1)^2}.$$
 (6.14)

Из рис. 6.4 видно, что оцененная погрешность на большей части интервала измерений примерно вдвое ниже экспериментальной. Рисунок иллюстрирует также влияние добавления информации на оцененную погрешность, добавление данных уменьшает погрешность оценки. Ниже приведены значения E_{ν} и $\Delta \sigma_{\nu}$, позволяющие по формулам (6.8), (6.12) вычислять значение оцененной погрешности сечения реакции ²³⁶U(*n*, γ):

<i>Е</i> _v , кэВ	1,139	2,270	6,837	23,48	73,72
$\Delta \sigma_{v}, 10^{-31} \text{ m}^{2}$	26,3	16,1	8,25	6,87	10,0
<i>Е</i> _v , кэВ	280,3	515,3	717,8	924,5	1125,0
$\Delta \sigma_{v}, 10^{-31} \text{ m}^{2}$	5,92	4,65	7,38	5,04	4,17



Рис 6.3. Сравнение экспериментальных данных [44—46] с оцененной кривой: данные [45] обозначены треугольниками; экспериментальные погрешности в левой части рисунка не указаны, так как они там примерно соответствуют размеру точек графика



Рис. 6.4. Сравнение погрешностей оцененной кривой (коридор с двойной штриховкой) с экспериментальными погрешностями (коридор с одинарной штриховкой): пунктирная граница в правой части рисунка соответствует оценке погрешности без учета данных [45], полученных позже других результатов. Ось абсцисс, от которой отсчитано значение погрешности, соответствует оцененной кривой на рис. 6.3

6.4. Статистически оптимальная рациональная интерполяция

Рассмотрим следующую задачу. Пусть известно, что измеряемая зависимость описывается *L*-параметрической рациональной функцией, и пусть измерения проводятся при значениях аргумента z_{μ} , $\mu = 1, 2, ..., L$, которые можно выбирать произвольно в пределах заданного интервала, а абсолютная точность измерений фиксирована и не зависит от *z*. Это означает, что измеренные значения

$$F_{\mu} = f(z_{\mu}) + \Delta_{\mu}, \ \mu = 1, 2, \dots, N_{ex} = L,$$
(6.15)

где $f(z_{\mu})$ — истинные значения рациональной функции; Δ_{μ} — случайные независимые одинаково нормально распределенные величины. Интерполирующая функция $f^{L}(z)$ строится по L узлам (z_{μ}, F_{μ}) с помощью рекуррентных соотношений (3.26), (3.18) (без перебора, $L = N_{ex}$). Тогда значения $f^{L}(z)$ в произвольных точках рассматриваемого интервала представляют собой случайные величины, распределение которых зависит от выбора абсцисс узлов интерполяции z_u. В качестве критерия оптимизации выбора узлов возьмем минимизацию $\max \overline{\Delta^2(z)}$ — максимума математического ожидания квадрата отклонений значений проходящей через эти узлы интерполирующей функции от истинной на всем рассматриваемом интервале, не задаваясь целью минимизации статистической суммы. Если измерения проводятся только в узлах, то такая аппроксиманта дает оценку решения задачи МНК, и приведенный выше критерий является критерием G-оптимальности в теории планирования эксперимента [32]. В задаче линейной регрессии с равноточными измерениями этот критерий эквивалентен критерию *D*-оптимальности, т. е. требованию минимизации объема эллипсоида рассеяния параметров. Спектр *D*-оптимального плана, т. е. набор оптимальных опорных точек, для полиномиальной аппроксимации известен в явном виде — это корни присоединенного полинома Лежандра. Рассмотрим случай рациональной аппроксимации, т. е. нелинейной регрессии. Для того чтобы проиллюстрировать, к чему на практике приводит такой выбор узлов интерполяции, при интерполяции полиномами проводится сравнение с другими вариантами выбора опорных точек.

Итак, используя предложения о независимости экспериментальных погрешностей в разных точках и о малости этих погрешностей, для математического ожидания среднего квадратического отклонения интерполирующей функции в точке z от истинного значения получаем

$$\overline{\Delta^{2}(z)} = \Delta^{2} \sum_{\mu=1}^{L} \left[\partial f^{L}(z) / \partial f_{\mu} \right]^{2}, \qquad (6.16)$$

где $\Delta^2 = \overline{\Delta_{\mu}^2}$.

Потребуем, чтобы $\overline{\Delta^2(z)} \le \Delta^2$ при $z \ne z_{\mu}$. Необходимым условием оптимальности выбора опорных точек, при котором это требование может быть удов-

летворено, будет справедливость системы уравнений

$$\frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial f^L(z)}{\partial f_{\mu}} \bigg|_{z=z_{\mu}} = 0, \ \mu = 1, 2, \dots, L,$$
(6.17)

где $\partial f^L(z)/\partial f_{\mu}$ определяются выражениями (6.8). Из (1.14) и (6.16) следует, что при нарушении этого условия в μ -й опорной точке всегда найдется такая ее окрестность, где $\Delta^2(z) > \Delta^2$.

Введем обозначение для «фундаментального полинома»

$$\mathscr{P}(z, z_1, z_2, ..., z_L) = \prod_{\mu=1}^{L} (z_{\nu} - z_{\mu}).$$
(6.18)

В дальнейшем все аргументы, кроме z, будем для краткости опускать. Полином $\mathcal{P}(z)$ обладает следующими свойствами (см. [21]):

$$\frac{\partial \mathscr{P}(z)}{\partial z} \bigg|_{z=z_{v}} = \prod_{\mu \neq v} (z_{v} - z_{\mu})
\frac{\partial^{2} \mathscr{P}(z)}{\partial z^{2}} \bigg|_{z=z_{v}} = 2 \frac{\partial}{\partial z_{\mu}} \prod_{\mu \neq v} (z - z_{\mu}) \bigg|_{z=z_{v}} \right\}.$$
(6.19)

Подставляя (6.8) в (6.17) и используя (6.19), получаем

$$\mathscr{P}''(z_{\mu})Q_{M}(z_{\mu}) - 4Q'_{M}(z_{\mu})\mathscr{P}'(z) = 0, \ \mu = 1, 2, ..., L,$$
(6.20)

что эквивалентно дифференциальному уравнению

$$\mathscr{P}''(z)Q_M(z) - 4Q'_M(z)\mathscr{P}'(z) - R(z)\mathscr{P}(z) = 0, \qquad (6.21)$$

где R — полином степени M – 2. Очевидно, что если N > M, то $\left| \partial f^L(z) / \partial f_i \right| \rightarrow \infty$

при $z \to \infty$ и крайние точки следует выбирать на границах интервала аппроксимации, а система (6.18) или уравнение (6.21) определяет лишь внутренние статистически оптимальные точки. Отметим, что положение этих точек полностью определяется их числом и параметрами полинома $Q_M(z)$, но не зависит от $P_N(z)$. При $Q_M(z) \equiv 1$ получается полиномиальная интерполяция, и система имеет решение, определяемое только степенью полинома и не зависящее от значений аппроксимируемой функции (см. также ниже).

Рассмотрим электростатическую модель нашей задачи. Пусть на плоскости *xy* расположена система зарядов, взаимодействующих по логарифмическому закону: каждому корню z_{α} полинома $Q_M(z)$ соответствует заряд +2, неподвижно закрепленный в точке (x_{α}, y_{α}) , где $z_{\alpha} = x_{\alpha} + iy_{\alpha}$, а каждому корню $\mathcal{P}(x)$, т. е. каждой опорной точке x_{μ} — подвижный заряд –1, расположенный в этой точке оси *x*. Потенциал взаимодействия имеет вид

$$U_{ik} = e_i e_k \ln |z_i - z_k|, \qquad (6.22)$$

где e_i — заряд *i*-й точки; z_i — ее радиус-вектор. Следует отметить, что взаимодействие, описываемое этим потенциалом, не соответствует в точности двумерному закону Кулона: такие заряды создают двумерный кулоновскии потенциал, но взаимодействуют с ним, как точечные заряды трехмерного пространства. Однако сохраним за этой моделью традиционное название «электростатическая». Потенциал, действующий на заряд –1 в точке x_i со стороны всех остальных зарядов системы, равен

$$U_{i}(x_{i}) = -\ln \left| \prod_{k \neq i} (x_{i} - x_{k}) / Q^{2}(x_{i}) \right|, \qquad (6.23)$$

а потенциальная энергия всей системы (без учета взаимного отталкивания неподвижных положительных зарядов) есть

$$U(x) = -\frac{1}{2} \ln \prod_{i < k} \frac{(x_i - x_k)^2}{Q^4(x_i)}.$$
 (6.24)

Равновесное положение такой системы зарядов, соответствующее минимуму потенциальной энергии, должно удовлетворять системе уравнений $\partial U/\partial x_i = 0$, которая, как легко убедиться, совпадает с (6.20).

Корни знаменателя рациональной аппроксиманты обычно соответствуют резонансам аппроксимируемой кривой, поэтому в соответствии с описанной электростатической аналогией оптимальные опорные точки «притягиваются» к резонансам в отличие от случая полиномиальной аппроксимации [Q(x) = 1], когда расположение этих точек соответствует равновесной конфигурации свободной системы одноименных зарядов на оси x (с закрепленными крайними зарядами).

В общем случае систему (6.20) необходимо решать численно. Результаты для простейших случаев, когда ее решение находится в явной форме, приве-

Рис. 6.5. Статистические погрешности $\Delta(x) = \sqrt{\Delta^2(x)}$ полиномиальной интерполяции для различных вариантов выбора узлов: 1 — узлы чебышевской квадратурной формулы, $\overline{\Delta} = 3,11; 2$ — эквидистантные узлы, $\overline{\Delta} = 1,12;$ 3 — узлы гауссовой квадратурной формулы, $\overline{\Delta} = 1,03;$

4 — узлы чауссовой квадратурной формулы, $\Delta = 1,0$

 $-\frac{1}{2}$

5 — оптимальный выбор узлов [$\overline{\Delta^2(x)}$ определяется

выражением (6.25)], $\overline{\Delta} = 0,95$ ($\overline{\Delta}$ — средние значения по интервалу [0, 1])



дены в табл. 6.4. Статистически оптимальная интерполяция полиномами подробно рассмотрена в [35, 47]; для статистически оптимальных узлов интерполяции полиномом степени *n*

$$\overline{\Delta^2(z)} = \Delta^2 \left\{ 1 - \left(1 - z^2\right) \left[\frac{\partial P_{n-1}(z)}{\partial z} \right] / \left[n(n+1) \right] \right\}, \qquad (6.25)$$

где $P_n(z)$ — полином Лежандра. Сравнение с другими вариантами выбора узлов интерполяции при n = 6 приведено на рис. 6.5.

Статистически оптимальные узлы лля простейших случаев

Таблица 6.4.

рациональной интерполяции								
$f^{L}(z)$	Число параметров («зарядов»)	Интерпретация	$(z_i - \epsilon)/\gamma$					
$1/[\gamma^2 + (z - \epsilon)^2]$	2	Симметричный резонанс с фиксированной ампли- тудой	$\pm 7^{-1/2}$					
$\beta/[\gamma^2 + (z - \epsilon)^2]$	3	Симметричный резонанс с произвольной амплитудой	0; $\pm (3/5)^{1/2}$					
$\frac{\alpha(z-\epsilon)+\beta}{\gamma^2+(z-\epsilon)^2}$	4	Асимметричный резонанс	$\pm (1 \pm 2/\sqrt{5})^{1/2}$					
$C + \frac{\alpha(z-\epsilon) + \beta}{\gamma^2 + (z-\epsilon)^2}$	5	Асимметричный резонанс с фоном	0; ± $(5 \pm 2/\sqrt{5})^{1/2}$					

Вернемся к рациональной интерполяции. Выражение (6.17) представляет собой необходимое условие для статистической оптимальности ее узлов. Нетрудно убедиться, что при $N \ge M - 1$ оно является и достаточным. Прежде всего, используя (6.16), получаем

$$\Delta^{2}(x) = R(z) / Q_{M}^{4}(z), \qquad (6.26)$$

где R(z) — полином степени 2 (N + M). В то же время $\overline{\Delta^2(z_{\mu})} = \Delta^2$ и $\partial \overline{\Delta^2(z)} / \partial z \Big|_{z=z_V} = 0$ (последнее при N > M верно лишь для внутренних узлов).

Следовательно, при N > M

$$\overline{\Delta^{2}(z)} = \Delta^{2} \left[1 - \alpha (z - z_{1}) (z - z_{L}) \prod_{\nu = 1, L} (z - z_{\nu})^{2} / Q_{M}^{4}(z) \right], \quad (6.27)$$

так как степень полинома в числителе правой части (после приведения к общему знаменателю) равна степени R(z), т. е. 2 (N + M).

Вычисляя
$$\partial \overline{\Delta^2(z)} / \partial z \Big|_{z=z_1}$$
 из (6.27), находим
 $\alpha = 2 \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial f}{\partial f_1} \Big|_{z=z_1} Q_M^4(z_1) / (z_L - z_1) \prod_{\nu \neq 1, L} (z_1 - z_\nu).$ (6.28)

При N > M имеем

$$\left. \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial f}{\partial f_1} \right|_{z=z_1} < 0$$

поэтому $\alpha < 0$ и при $z_1 < z < z_L$ будет $\overline{\Delta^2(z)} \le \Delta^2$. Аналогичные рассуждения при $N \le M$ приводят к выражению

$$\overline{\Delta^2(z)} = \Delta^2 \left[1 - \psi(z) \prod_{\nu=1} (z - z_{\nu}) / Q_M^4(z) \right], \qquad (6.29)$$

где $\psi(z)$ не имеет полюсов в точках z_{ν} . При N = M выражение $Q^4(z) - \psi(z) \prod_{\nu} (z - z_{\nu})^2$ будет полиномом степени 4*M* лишь для $\psi(z) \equiv 0$, поскольку степень $\sum_{\nu=1}^{L} (z - z_{\nu})^2$ равна в этом случае 4*M* + 2. Поэтому в диаго-

скольку степень $\sum_{v=1}^{\infty} (z - z_v)^2$ равна в этом случае 4M + 2. Поэтому в диагональном приближении при статистически оптимальном выборе узлов $\overline{\Delta^2(z)} \equiv \Delta^2$, т. е. погрешность интерполяции постоянна и равна погрешности опорных значений.

При N = M - 1 функция $\psi(z)$ в (6.29) должна быть такой, чтобы выражение $Q_M^4(z) - \psi(z) \prod_{\nu=1}^L (z - z_{\nu})^2$ было полиномом степени 4M - 2. Это возможно лишь при $\psi(z) = 1$ (вспомним, что $q_M^M = 1$) и тогда

$$\Delta^{2}(z)/\Delta^{2} = 1 - \prod_{i=1}^{L} (z - z_{i})^{2}/Q_{M}^{4}(z) \leq 1.$$

В заключение обратим внимание на то, что упоминавшиеся в гл. 1 «функции отсчета» (1.5) удовлетворяют равенствам

$$\frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial f(z)}{\partial f_{\nu}} \bigg|_{z=z_{\nu}} = 0, \ \frac{\partial f(z)}{\partial f_{\mu}} \bigg|_{z=z_{\nu}} = \delta_{\mu\nu}$$
(6.30)

и, кроме того,

$$\sum_{i=-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \left[\pi(z-i) \right]}{\left[\pi(z-i) \right]^2} \equiv 1.$$
(6.31)

Следовательно, бесконечная последовательность эквидистантных опорных точек представляет собой статистически оптимальную для интерполяции функций с ограниченной шириной фурье-спектра с помощью разложения (1.5), при этом статистическая погрешность интерполяции постоянна, если постоянна погрешность в опорных точках, и равна последней.

6.5. Оценка количества информации, полученной при обработке и анализе экспериментальных данных

В основе любой количественной оценки передаваемой информации лежит сравнение с ранее накопленными знаниями и требование ее аддитивности. Классическим является определение количества информации, полученной при приеме сообщения о событии

$$I_i = \ln \left[P_{\text{out}}\left(a_i\right) / P_{\text{in}}\left(a_i\right) \right], \tag{6.32}$$

где $P_{out}(a_i)$ и $P_{in}(a_i)$ — вероятности события a_i после и до приема сообщения соответственно. В теории передачи сообщений, основанной на этом определении Шеннона, известно событие a_i и вероятности P_{out} и P_{in} . Основной вели-

чиной служит энтропия $H = \sum_{i=1}^{N} I_i / N$ (среднее количество информации в одном

сообщении), зависящая от набора возможных событий и характеристик передающей системы. Непосредственно использовать эту схему в задаче обработки данных невозможно, поскольку если в качестве «события» рассматривать F_i результат измерения величины $f(z, \{p\})$ в точке z_i , то $P_{in}(F_i)$ и $P_{out}(F_i)$ неизвестны и можно лишь делать некоторые предположения о них. Кроме того, конечная цель обработки эксперимента заключается, как правило, в определении вектора параметров физических величин $\{p\}$, а не характеристик передающего (измерительного) устройства.

Поэтому рассмотрим следующую постановку задачи: известны результаты измерений на выходе измерительного устройства и сравниваются две гипотезы (α и β) о вероятностях этих результатов. В определении Кульбака [48, с. 15] количество «различающей» информации определяется как логарифм отношения соответствующих плотностей вероятности $\psi_{\alpha}(F_i)$ и $\psi_{\beta}(F_i)$:

$$I(\alpha;\beta) = \sum_{i} I_{i}(\alpha;\beta) = \sum_{i} \ln \frac{\Psi_{\alpha}(F_{i})}{\Psi_{\beta}(F_{i})}.$$
(6.33)

Одним из достоинств такого определения «различающей» информации является возможность сравнения гипотез α и β , которые могут различаться не только значениями параметров функции $f(z, \{p\})$, но и их числом, а также структурой функций. Это дает возможность не только выбрать оптимальный набор параметров для $f(z, \{p_{\alpha}\})$ и $f(z, \{p_{\beta}\})$, но и определить оптимальную из двух функций $f^{(\alpha)}(z, \{p_{\alpha}\})$ и $f^{\beta}(z, \{p_{\beta}\})$. Очевидно, для тех z_i , при которых

 $\psi_{\alpha}(F_i) > \psi_{\beta}(F_i)$, количество информации I_i будет положительным, и это определение действительно позволяет выбрать из двух гипотез наиболее правдоподобную по всей совокупности экспериментальных результатов. В такой постановке задачи погрешности эксперимента пока никак не использовались.

В качестве гипотезы α естественно принять обычное предположение о том, что погрешности эксперимента независимы и в каждой точке подчиняются нормальному распределению с известной дисперсией:

$$\psi_{\alpha}(F_{i}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{i}^{\alpha}} \exp\left\{-\frac{\left[f^{(\alpha)}(z_{i}, \{p_{\alpha}\}) - F_{i}\right]^{2}}{2(\sigma_{i}^{\alpha})^{2}}\right\}.$$
(6.34)

Неизвестны лишь параметры $\{p_{\alpha}\}$ функции $f^{\alpha}(z, \{p_{\alpha}\})$. Очевидно, что при любом выборе структуры и числа параметров этой функции количество «различающей» информации будет максимально, если эти параметры положить равными параметрам $\{\hat{p}_{\alpha}\}$ оценки максимального правдоподобия:

$$\left. \frac{\partial}{\partial p} \prod_{i} \Psi_{\alpha} \left(F_{i} \right) \right|_{\hat{p}_{\alpha}} = 0 \; .$$

Для распределения (6.34) эта оценка совпадает с оценкой МНК.

Если в качестве гипотезы β принять априорные знания, например, определить ψ_{β} как распределение с параметрами, оцененными по результатам предыдущих экспериментов, то значение $I(\alpha : \beta)$ естественно рассматривать как прирост информации в результате последнего эксперимента, которому соответствует гипотеза α . Отметим, что если нет основания подвергать сомнению результаты предыдущих экспериментов, т. е. гипотезу β , то имеет смысл вместо гипотезы α рассматривать гипотезу $\alpha' = \alpha + \beta$, получающуюся при совместной обработке накопленных ранее и полученных в результате последнего эксперимента (гипотеза α) сведений. Ясно, что чем точнее эксперимент и чем больше число измерений, тем больше прирост информации; это согласуется с обычным представлением об информации, извлекаемой из эксперимента.

Кроме количества информации, полученной в результате конкретного эксперимента, обычно, как и в дискретном случае, когда набор возможных событий образует счетное множество, рассматривают еще энтропию

$$H = \int \prod_{i} \Psi_{\alpha}(F_{i}) \ln \frac{\Psi_{\alpha}(F_{i})}{\Psi_{\beta}(F_{i})} dF_{i}.$$
(6.35)

Эта величина связана с *I* следующим образом: $H = \lim_{n \to \infty} (I/n)$, где $n = n_i$ — число измерений, проводимых в каждой точке z_i . Энтропия представляет собой среднее количество «различающей» информации, которое получается при проведении измерений в точках z_i . В качестве параметров { p_{α} }, { p_{β} } при этом

обычно берут их оценки, полученные в конкретном эксперименте, т. е. неусредненные.

Как правило, число параметров, которые извлекаются из эксперимента, гораздо меньше числа измерений. Так, если в точке z_i проводится n_i измерений и оцениваемым параметром по обыкновению служит среднее нормального распределения $\psi(F_{i,k})$, где $F_{i,k}$ — результат k-го измерения, то оценкой величины

$$F_{i,k}^{0} = \mu$$
 является значение $\frac{1}{n_i} \sum_{k=1}^{-1} F_{i,k}$.

Из этого примера видно, что для оценки параметров совсем не обязательно знать результаты всех измерений. Необходимая для получения оценки информация содержится в некоторых их комбинациях, которые называются доста-

точными статистиками. В рассмотренном примере это $\hat{\mu} = \frac{1}{n_i} \sum_{k=1}^{n_i} F_{i,k}$. Для

функции правдоподобия получим:

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2\alpha\sigma_i}}\right)^{n_i} \exp\left[-\frac{\sum_{k=1}^{n_i} (\mu - F_{i,k})^2}{2\sigma_i^2}\right] = \left[\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_i}}\right)^{n_i} \exp\left[-\frac{n_i (\mu - \hat{\mu})}{2\sigma_i^2}\right] \exp\left[-\frac{\sum_{k=1}^{n} (\hat{\mu} - F_{i,k})^2}{2\sigma_i^2}\right]\right]$$

т. е. функция правдоподобия факторизуется и для оценки значения μ необходимо знать лишь достаточную статистику μ̂. Такая факторизация лежит в основе определения достаточных статистик.

В общем случае будем обозначать достаточную статистику, необходимую для оценки векторного параметра $\{p\}$ функции $f(z, \{p\})$, как $\{\hat{p}\}$. Дисперсии и корреляции этих компонент вектора $\{p\}$, а также прочие статистики (комбинации результатов измерений), которые информации о значениях параметров $\{p\}$ не несут, обозначим $\{s\}$. Параметры $\{s\}$ и их достаточные статистики $\{\hat{s}\}$ характеризуют надежность полученных оценок параметров $\{p\}$, свойства измерительного устройства и статистику эксперимента. Общее число введенных таким образом параметров p_i и s_k равняется числу экспериментальных измерений N_{ex} .

Перейдем теперь от распределения $\Pi \psi[f(z_i, \{p\}), F_i]dF_i$ к распределению $\psi'(\{p\}, \{s^i\}, \{\hat{p}\}, \{\hat{s}\})$. В случае линейной регрессии последнее распределение

факторизуется, $\psi' = \varphi(\{p\}, \{\hat{p}\}) \rho(\{s\}, \{\hat{s}\})$; в случае нелинейной регрессии это утверждение носит асимптотический характер, т. е. верно при $N_{\text{ex}} \rightarrow \infty$. Используя свойство факторизации, энтропию (6.35) можно представить в виде суммы двух слагаемых:

$$H = \int \varphi_{\alpha} \ln \frac{\varphi_{\alpha}}{\varphi_{\beta}} d\{\hat{p}\} + \int \rho_{\alpha} \ln \frac{\rho_{\alpha}}{\rho_{\beta}} d\{\hat{s}\} = H_{p}(\alpha;\beta) + H_{s}(\alpha;\beta), \quad (6.36)$$

первое из которых будем рассматривать как определение полезной (аналитической) информации, извлекаемой из эксперимента. Второе слагаемое дает информацию о «шумах» в широком смысле слова. Если эти шумы одинаковы в обеих гипотезах, т. е. $f^{(\alpha)}(z, \{p_{\alpha}\})$ и $f^{\beta}(z, \{p_{\beta}\})$ различаются только значениями параметров $\{p_{\alpha}\}$ и $\{p_{\beta}\}$, то второе слагаемое равно нулю. Если шумы разные, то может получиться, что $H_{p} > H$, а это означает, что отброшенное слагаемое было отрицательным, т. е. уровень шумов выше в эксперименте, которому соответствует гипотеза α , и необходимо дополнительное исследование.

Как уже указывалось, при нелинейной регрессии распределение оценок параметров аппроксиманты $\{p\}$ асимптотически нормально с ковариационной матрицей \mathbf{A}^{-1} , где \mathbf{A} — матрица Фишера (6.2).

Предположим теперь, что эксперимент проводится впервые. В этом случае удобно выбрать гипотезу β так, чтобы выражение для энтропии принимало наиболее простой вид. Возьмем в качестве такой гипотезы предположение о равновероятных значениях параметров $\{p\}$ на интервале [-T, T], достаточно широком для того, чтобы вне его можно было считать $\psi^{\beta}(\{p\})$ равным нулю. Если $\psi_{\alpha}(\{p\},\{\hat{p}\})$ — многомерное нормальное распределение с ковариационной матрицей **A**, т. е.

$$\Psi_{\alpha}(\{p\},\{\hat{p}\}) = \frac{(\det A)^{1/2}}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\{p-\hat{p}\}A\{p-\hat{p}\}^{T}},$$

то для количества полезной информации получим

$$H_{p}(\alpha:\beta) = \frac{1}{2} \ln(\det A) 2\pi e + \nu \ln 2T = H_{p,\alpha} - H_{p,\beta}, \qquad (6.37)$$

где v — размерность вектора {p}.

При переходе от параметров $\{p\}$ к параметрам $\{t\}$ плотность вероятностного распределения преобразуется очевидным образом:

$$\Psi_{\alpha}(\lbrace p \rbrace)d\lbrace p \rbrace = \Psi_{\alpha}(\lbrace p(t) \rbrace) \left| \frac{dp}{dt} \right| d\lbrace t \rbrace = \kappa_{\alpha}(\lbrace t \rbrace)d\lbrace t \rbrace.$$

Здесь |dp/dt| = J — якобиан преобразования параметров. Энтропия при этом не меняется: $H_p(\alpha : \beta) = H_t(\alpha : \beta)$, но меняются слагаемые $H_{p,\alpha}$ и $H_{p,\beta}$:

$$H_{t,\alpha} = \int \kappa_{\alpha} \left(\{t\} \right) \ln \kappa_{\alpha} \left(\{t\} \right) d\left\{t\right\} = H_{p,\alpha} + \ln \left| \frac{dp}{dt} \right|.$$
(6.38)

ī

Если в качестве параметров выбраны опорные ординаты, то в случае линейной регрессии якобиан *J* будет равен

$$\left|\prod_{i< k} (z_{p_i} - z_{p_k}) \right| / \prod_{l < n} (z_{t_l} - z_{t_n}) \right|.$$

При любом выборе опорных точек $z\{t\}$ этот якобиан принимает максимальное значение, если $z\{p\}$ — статистически оптимальные точки. И наоборот, при любом выборе $z\{p\}$, этот якобиан минимален, если $z\{t\}$ — статистически оптимальные точки. Можно показать, что такая связь экстремумов якобиана со статистически оптимальным выбором опорных точек сохраняется и для рациональной функции регрессии $f^L(z) = P_N(z)/Q_M(z)$.

Предположим теперь, что априорная информация отсутствует и в качестве гипотезы β о распределении параметров аппроксиманты — опорных ординат при любом выборе опорных абсцисс принимается гипотеза об их равномерном распределении на интервале [-*T*, *T*]. Тогда, как следует из (6.37) и (6.38), количество «различающей» информации для двух различных наборов опорных абсцисс подчиняется следующему соотношению: $H_t(\alpha:\beta) = H_p(\alpha:\beta) + \ln J$. Если измерения проводятся в точках z_{p_i} и распределение погрешностей экс-

перимента от z_p не зависит, то количество различающей информации $H_p(\alpha: \beta)$ будет одним и тем же при любом выборе абсцисс $z\{p\}$. В этом случае количество «различающей» информации $H_t(\alpha: \beta)$ для параметров $\{t\}$ будет максимальным при таком выборе $z\{p\}$, которому соответствует максимальное значение якобина, т. е. когда z_{p_i} — статистически оптимальные точки. В то же время при одном и том же наборе $z\{p\}$ количество «различающей» информации для параметров $\{t\}$ будет минимальным для тех $z\{t\}$, при которых якобиан минимален, т. е. когда z_{t_i} — статистически оптимальные точки.

Суммируя сказанное, можно сделать следующие выводы: максимум информации о значениях опорных ординат получается тогда, когда измерения проводятся в статистически оптимальных точках. При проведении измерений с произвольным набором точек распределение опорных ординат, соответствующих статистически оптимальным точкам, труднее всего отличать от равномерного, и их можно задавать менее точно. В этом смысле статистически оптимальные точки наиболее информативны.

ГЛАВА 7. НЕКОТОРЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ ПАДЕ-АППРОКСИМАЦИИ

7.1. Расчет подгрупповых констант теории переноса нейтронов

Для физического расчета ядерных реакторов желательно в принципе иметь как можно более детальную информацию о нейтронных сечениях. Однако существующие методы расчета с учетом производительности современных ЭВМ не позволяют использовать всю эту информацию непосредственно, т. е. в виде функций $\sigma(E)$ во всем энергетическом диапазоне. Поэтому разработаны и с успехом применяются расчетные методы, основанные на преобразовании исходных «микроскопических» ядерных данных в интегральную форму. Общей основой этих методов служит использование многогруппового приближения в теории переноса нейтронов. Его современное описание можно найти в монографии [15], существенную часть содержания которой составляет изложение именно методов расчета групповых констант из микроскопических данных. Там же содержится необходимая библиография.

Одна из ветвей этого направления — расчет так называемых погрупповых констант (см. [15]), при котором широко используется аппроксимация рациональными функциями. Настоящий параграф посвящен рассмотрению возможностей описанных выше алгоритмов Паде-аппроксимации применительно к этой задаче.

Основной формой интегрального представления информации о резонансной структуре сечений в многогрупповом приближении являются функционалы вида

$$F(\sigma_0, N) = \int_{\Delta E} \frac{\varphi(E) dE}{\left[\sigma(E) + \sigma_0\right]^N} \bigg/ \int_{\Delta E} \varphi(E) dE \equiv \left\langle \frac{1}{\left(\sigma + \sigma_0\right)^N} \right\rangle,$$
(7.1)

$$F_{x}(\sigma_{0},N) = \int_{\Delta E} \frac{\sigma_{x}(E)\phi(E)dE}{\left[\sigma(E) + \sigma_{0}\right]^{N}} \bigg/ \int_{\Delta E} \phi(E)dE \equiv \left\langle \frac{\sigma_{x}}{\left(\sigma + \sigma_{0}\right)^{N}} \right\rangle.$$
(7.2)

Здесь σ_0 — параметр, называемый сечением разбавления; $\phi(E)$ — стандартный спектр нейтронов; $\sigma_x(E)$, $\sigma(E)$ — сечение реакции типа x и полное сечение в зависимости от энергии E; ΔE — групповой энергетический интервал.

Зависимость этих функционалов от σ_0 можно задавать в поточечном представлении в виде таблиц факторов резонансной самоэкранировки [16]. При использовании подгрупповых констант эти зависимости представляются аналитически с помощью аппроксимации рациональными функциями:

$$F_n(\sigma_0, N) = \sum_{i=1}^n a_i / (\sigma_i - \sigma_0)^N , \qquad (7.3)$$

$$F_{x,n}(\boldsymbol{\sigma}_0, N) = \sum_{i=1}^{n} a_i \boldsymbol{\sigma}_{x_i} / (\boldsymbol{\sigma}_i - \boldsymbol{\sigma}_0)^N .$$
(7.4)

Здесь *n* — число подгрупп; a_i , σ_i и σ_{x_i} — подгрупповые параметры, на значения которых накладываются следующие нормировочные ограничения:

$$\sum_{i} a_{i} = 1; \sum_{i} \sigma_{x_{i}} = \sigma_{i}; a_{i}, \sigma_{i}, \sigma_{x_{i}} > 0.$$

$$(7.5)$$

Обычно эти параметры получаются так: располагая информацией о детальной энергетической зависимости нейтронных сечений, можно вычислять значения функций (7.1), (7.2) при различных комбинациях σ_0 и N и затем подставлять полученные значения в соотношения (7.3), (7.4), рассматривая последние как уравнения для определения подгрупповых констант. Однако этот путь сложен. Во-первых, получение моментов сечений высоких порядков связано с заметными вычислительными трудностями. Достаточно заметить, что порядок моментов N в практических расчетах меняется от -5 до 4, в то же время диапазон изменения сечений — от 10⁻²⁹ до 10⁻²³ м². Во-вторых, решение возникающей системы нелинейных уравнений со многими неизвестными при соблюдении условий (7.5) также представляет собой непростую задачу. Эти трудности и методы их преодоления обсуждаются в [15, гл. 2]. Там, в частности, отмечается, что при достаточно точном аналитическом описании зависимости функционала $\langle 1/(\sigma + \sigma_0) \rangle$ от сечения разбавления можно избежать численного расчета моментов высоких порядков, получая их дифференцированием соответствующих аналитических зависимостей

$$\left\langle \frac{1}{\left(\sigma + \sigma_{0}\right)^{N+1}} \right\rangle = \frac{\left(-1\right)^{N}}{N!} \frac{d^{N}}{d\sigma_{0}^{N}} \left\langle \frac{1}{\sigma + \sigma_{0}} \right\rangle.$$
(7.6)

σ

Понятно, что для получения надежных значений дифференцируемую функцию необходимо знать с весьма высокой точностью.

Первым этапом в расчете подгрупповых констант и является задача рациональной аппроксимации зависимости функционала *F*, определяемого лишь полным сечением, от σ_0 : $F(\sigma_0) \equiv F(\sigma_0, 1) = \langle 1/(\sigma + \sigma_0) \rangle$. Учитывая, что сечение $\sigma(E)$ положительно, а $\int_{0}^{E} \phi(E') dE'$ — функция неубывающая, и разбивая ΔE на

интервалы, в которых $\sigma(E)$ меняется монотонно, можно перейти к интегрированию по σ (см. [15, с. 62]). В результате получим интеграл Стильтьеса σ_{max}

 $\int_{\sigma_{\min}} p(\sigma) d\sigma / (\sigma + \sigma_0)$, в котором $p(\sigma)$ — кусочно-гладкая, положительная на

интервале
$$[\sigma_{\min}, \sigma_{\max}]$$
 функция, поэтому $P(\sigma) = \int_{0}^{\sigma} p(\sigma) d\sigma$ — кусочно-гладкая

неубывающая функция. Введение подгрупповых констант основано на аппроксимации этой функции кусочно-постоянной «функцией скачков» $P(\sigma) \approx \sum_{\sigma_i < \sigma} a_i$, i = 1, 2, ..., n, где a_i положительны. При этом $p(\sigma)$ аппроксими-

руется суммой б-функций $p_n(\sigma) = \sum_{i=1}^n a_i \delta(\sigma - \sigma_i)$, а $F(\sigma_0)$ — рациональной

функцией $F_n(\sigma_0)$. Отсюда ясен смысл подгрупповых констант: функция распределения значений полного сечения в энергетической группе аппроксимируется гистограммой из *n* ступенек высотой σ_i , причем доля нейтронов в групповом интервале, которым приписывается постоянное значение сечения σ_i , равна a_i .

В предыдущих главах были описаны два основных способа построения рациональной аппроксиманты — приближения Паде-1 и Паде-2, которые основаны на использовании разложения аппроксимируемой функции в степенной ряд и ее значений в дискретном наборе точек соответственно. Ниже оба эти способа последовательно применены для аппроксимации функции $F(\sigma_0)$ и проведено сравнительное обсуждение результатов.

Заменяя в подынтегральном выражении $F(\sigma_0) = \int p(\sigma) d\sigma / (\sigma + \sigma_0)$ дробь $1/(\sigma + \sigma_0)$ сходящимися в соответствующих областях рядами по степеням σ_0/σ и σ/σ_0 , можно сформулировать задачу рациональной аппроксимации как усеченную проблему моментов [49, с. 42] и показать, что получаемые при этом a_i и σ_i положительны [1]. Разложения в ряды и будут использованы для построения приближений Паде-1 с помощью рекуррентных соотношений, описанных в гл. 4. При этом переменные удобно выбирать в несколько более общем виде, а именно $\sigma - \sigma'$ и $(\sigma_0 - \sigma')^{-1}$, где σ' — постоянная. Получим, таким образом, два разложения:

$$F(\boldsymbol{\sigma}_0) = \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^l (\boldsymbol{\sigma}_0 - \boldsymbol{\sigma}')^l F(\boldsymbol{\sigma}', l+1), \qquad (7.7)$$

$$F(\sigma_0) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^{k-1} F(\sigma', -k+1) / (\sigma_0 - \sigma')^k .$$
(7.8)

Полагая $z = \sigma_0 - \sigma'$ и $\alpha_l = (-1)^l F(\sigma', l+1)$, можно, наращивая число используемых a_l , построить приближение $F_n(\sigma_0) = P_{n-1}(z)/Q_n(z)$. Перейдя затем к полюсному представлению этой аппроксиманты, получим искомые параметры a_i и σ_i . Аналогичным образом, рассматривая (7.8) как ряд по степеням $t = z^{-1}$, можно, используя тот же алгоритм, построить приближение Паде $P_{n-1}(t)/Q_{n-1}(t)$ для фукнции $t^{-1} F(t^{-1})$. Возвратясь затем к переменной $\sigma_0 - \sigma'$ и перейдя к полюсному представлению, получим параметры a'_i и σ'_i . Они будут совпадать с a_i и σ_i лишь в том случае, если $F(\sigma_0)$ действительно есть рациональная функция. Заметим,

что построение паде-аппроксиманты по ряду (7.7) автоматически обеспечивает точное выполнение важного нормировочного условия $\sum_{i=1}^{n} a_i = 1$.

Итак, вычислив в некоторой точке σ' значения функционалов (7.1) с положительными и отрицательными N, т. е. фактически коэффициенты разложений (7.7), (7.8), можно построить рациональную функцию, аппроксимирующую $F(\sigma_0)$ во всей области изменения σ_0 . Поскольку при этом $p_n(\sigma) = \sum_{i=1}^n a_i \delta(\sigma - \sigma_i)$, получаются аппроксиманты типа (7.3) и для функцио-

налов с другими *N*. Однако, как уже упоминалось, сложность достаточно точного вычисления $F(\sigma', N)$ резко увеличивается с ростом |N|, поэтому мы рассмотрим еще один способ аппроксимации, позволяющий обойтись сравнительно малым |N| за счет совместного использования первых членов обоих рядов (7.7), (7.8).

Рассмотрим рациональное приближение $F_n(\sigma_0, 1)$, первых n_1 коэффициентов разложения которого по положительным степеням $\sigma_0 - \sigma'$ суть $\alpha_l = (-1)^l F(\sigma', l+1)$, а первых $n_2 = 2n - n_1$ коэффициентов разложения по отрицательным степеням суть $\beta_k = (-1)^{k-1} F(\sigma', -k+1)$, $k \ge 1$, т. е. совпадают с соответствующими коэффициентами разложений (7.7) и (7.8). Связь этих коэффициентов с параметрами полюсного представления аппроксиманты (7.3), (7.4) очевидна:

$$\alpha_{l} = (-1)^{l} \sum_{i=1}^{n} a_{i} / (\sigma' + \sigma_{i})^{l+1}, \ \beta_{k} = (-1)^{k-1} \sum_{i=1}^{n} a_{i} (\sigma' + \sigma_{i})^{k-1}.$$
(7.9)

Рассмотрим теперь выражение

$$\Phi(x) = \alpha_{n_1-1} + \alpha_{n_1-2}x + \dots + \alpha_0 x^{n_1-1} - \beta_1 x^{n_1} - \beta_2 x^{n_1+1} - \dots - \beta_{n_2} x^{n_1+n_2-1}$$
(7.10)

и построим с помощью алгоритма приближения Паде-1 его аппроксиманту $T_{n-1}(x)/S_n(x) = \sum_{i=1}^n c_i/(x+x_i)$. Сравнивая (7.9) с выражением для параметров

этой аппроксиманты

$$\alpha_{l} = (-1)^{l-m_{1}-1} \sum_{i=1}^{n} c_{i} / x_{i}^{m_{1}-l} , \ \beta_{k} = (-1)^{m_{1}+k} \sum_{i=1}^{n} c_{i} / x_{i}^{m_{1}+k}$$
(7.11)

и используя единственность приближения Паде, получаем следующие выражения, которые связывают параметры полюсного представления аппроксиманты $F_n(\sigma_0)$, построенной с учетом положительных и отрицательных моментов α_l , β_k , с параметрами паде-аппроксиманты ряда (7.10)

$$\sigma' + \sigma = 1/x_i$$
, $a_i = (-1)^{n_1 + 1} c_i / x_i^{n_1 + 1}$. (7.12)

Таблица	7.1.

Значения параметров анпрокеймации для – Ай при различном числе трупп						
Характеристи-	Паде-2			Паде-1		
ка аппрокси- манты	3	4	5	3	4	
a_1	1,66.10-1	$1,09 \cdot 10^{-1}$	7,86.10 ⁻²	$2,26 \cdot 10^{-2}$	$1,17 \cdot 10^{-2}$	
σ_1	5903,22	13579	18910	3271,6	4444,5	
a_2	$3,20 \cdot 10^{-1}$	$1,60 \cdot 10^{-1}$	$1,05 \cdot 10^{-1}$	$3,98 \cdot 10^{-1}$	$6,52 \cdot 10^{-2}$	
σ_2	199,96	935,56	2707,6	38,186	407,75	
a_3	$5,05 \cdot 10^{-1}$	$3,40 \cdot 10^{-1}$	$1,78 \cdot 10^{-1}$	$6,79 \cdot 10^{-1}$	$6,73 \cdot 10^{-2}$	
σ_3	29,178	91,836	310,413	17,322	34,968	
a_4	-	$3,87 \cdot 10^{-1}$	$3,17 \cdot 10^{-1}$	_	$2,50 \cdot 10^{-1}$	
σ_4	-	25,768	61,698	_	14,910	
a_5	-	_	$3,20 \cdot 10^{-1}$	_	_	
σ_5	_	_	24,304	—	_	
<i>S</i> , %	0,235	$3,82 \cdot 10^{-1}$	$4,16 \cdot 10^{-3}$	2,55	1,26	
[*] Значения σ_i даны в 10 ⁻²⁸ м ² , a_i — безразмерные.						

Значения^{*} параметров аппроксимации для ¹⁹⁷Ац при различном числе групп

Описанным способом (с использованием разложения как по положительным, так и по отрицательным степеням) были рассчитаны параметры a_i и σ_i для полного нейтронного сечения ¹⁹⁷Au в одной из энергетических групп $4,65 \le E \le 10$ эВ в трех- и четырехподгрупповом представлениях. Результаты приведены в левой части табл. 7.1. Кроме значений подгрупповых констант, даны значения *S* — средней квадратической относительной погрешности описания полученными параметрами кривой $F(\sigma_0)$, рассчитанной при $N_{ex} = 20$ значениях сечения разбавления. Значения *S* вычислялись по формуле

$$S = \sqrt{\sum_{i=1}^{N_{\text{ex}}} \left[\left(f_{\text{p}i} - f_{\text{a}i} \right)^2 / f_{\text{p}i} \right] / (N_{\text{ex}} - 1)},$$

где f_{pi} и f_{ai} — исходные расчетные значения и значения аппроксиманты в *i*-й точке. При построении паде-аппроксиманты за исходные данные принимались величины

$$\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \varphi(E) dE / \left[\sigma(E) + \sigma_0 \right]^N, N = -4, -3, ..., 2, 3,$$

рассчитанные при $\sigma_0 = 10$. При четырех подгруппах была достигнута удовлетворительная точность описания (погрешность порядка 1 %). Однако для этого потребовалось вычисление 2n = 8 моментов, и на том же примере был испытан альтернативный метод построения рациональной аппроксиманты — приближения Паде-2 с помощью алгоритма, описанного в гл. 3. Аппроксимировались при этом те же 20 точек, которые использовались для контроля точности расчетов в первом случае. Полученная точность описания при одинаковом числе подгрупп оказалась гораздо выше, устойчивые результаты были получены и при n = 5, в этом случае $S = 4,17 \cdot 10^{-5}$. Нормировочное условие $\sum_{i} a_i = 1$, хотя

теоретически оно и не должно точно выполняться при использовании этого алгоритма, также выполнялось вполне удовлетворительно.

Алгоритм приближения Паде-2 был проверен еще на одном примере с более сложной резонансной структурой, а именно для случая полного нейтронного сечения ²³⁵U в двадцатой группе разбиения БНАБ [16] $10,0 \le E \le 21,5$ эВ. Значения сечения восстанавливались по резонансным параметрам машинной библиотеки ENDF/B-V [12] при T = 300 К. Объектом сравнения служил групповой функционал

$$\overline{\sigma}(\sigma_0) = \int_{\Delta E} \frac{\sigma(E)\phi(E)dE}{\left[\sigma(E) + \sigma_0\right]^2} \bigg/ \int_{\Delta E} \frac{\phi(E)dE}{\left[\sigma(E) + \sigma_0\right]^2} \,.$$
(7.13)

В качестве спектра выбирался стандартный спектр Ферми $\varphi(E) = 1/E$. Сначала были получены «точные» значения функционала $F(\sigma_0)$ непосредственным вычислением интеграла (7.1) при N = 1. Затем построением аппроксиманты Паде-2 определены подгрупповые параметры a_i , σ_i . Достаточная низкая погрешность (около 1 %) была получена при 2n = 8. Далее с помощью подгрупповых параметров восстановлена зависимость от σ_0 по формуле

$$\tilde{\sigma}(\sigma_0) = \left[\sum_i a_i \sigma_i / (\sigma_i + \sigma_0)^2\right] / \left[\sum_i a_i / (\sigma_i + \sigma_0)^2\right].$$
(7.14)

Результаты приведены ниже и в табл. 7.2:

a_i	0,0548	0,1719	0,4840	0,2893
$\sigma_i, 10^{-28} \text{ m}^2$	823,2	176,3	52,91	24,35

Устойчивость работы программы, реализующей алгоритм, качество аппроксимации и восстановления на всех этапах оказались удовлетворительными. В настоящее время эта программа включается в существующий программный комплекс по расчету групповых констант [50]. В сложных случаях нормировочные условия выполняются лишь приближенно, но для их уточнения достаточно линейных корректирующих процедур.

Существует более общий по сравнению с изложенным способ построения рациональной аппроксиманты, в котором используются разложения по положительным и отрицательным моментам в различных точках. Он описан в § 4.3, однако в отличие от обсуждавшихся в настоящем параграфе численно реализован не был.

Таблица 7.2.

Зависимость момента $F(\sigma_0) = \langle 1/(\sigma + \sigma_0) \rangle$ от сечения разбавления σ_0 (исходная для определения подгрупповых параметров) и сравнение $\tilde{\sigma}$ — значения, полученного

подгрупповой аппроксимацией, с точным блокированным сечением

$$\overline{\sigma}(\sigma_0) = \int_{\Delta E} \frac{\sigma(E)\varphi(E)dE}{\left[\sigma(E) + \sigma_0\right]^2} \bigg/ \int_{\Delta E} \frac{\varphi(E)dE}{\left[\sigma(E) + \sigma_0\right]^2}$$

для ²³⁵U по данным библиотеки ENDF/B-V[12]; *E* = 10,0÷21,5 эB; *T* = 300 К

σ_0	$F(\sigma_0)$	$\overline{\sigma}(\sigma_0)$	õ				
0	0,02211	33,04	33,12				
10	0,01713	35,86	35,91				
30	0,01207	39,83	39,92				
10^{2}	$0,6177 \cdot 10^{-2}$	47,90	47,95				
$3 \cdot 10^2$	$0,2674 \cdot 10^{-2}$	59,30	59,42				
10^{3}	$0,9184 \cdot 10^{-3}$	76,45	76,52				
$3 \cdot 10^{3}$	$0,3227 \cdot 10^{-3}$	91,86	92,06				
10^{4}	0,9896 • 10 ⁻⁴	102,03	102,18				
Примечание. Здесь σ_0 и $\tilde{\sigma}$ — в 10^{-28} м ² .							

7.2. Обратная задача теоретической спектроскопии

Выше везде предполагалось, что экспериментальные данные отличаются от истинной гладкой кривой лишь вследствие погрешностей эксперимента, которые являются величинами случайными и могут быть учтены только статистической обработкой. Однако на практике чаще всего наблюдаемые зависимости еще и систематически отличаются от тех, которые соответствуют лежащим в их основе физическим закономерностям. Именно такая ситуация имеет место при изучении ядерных реакций. Есть две причины, по которым наблюдаемые сечения отличаются от истинных, и обе связаны не с погрешностью измерения сечения, а с определением значения энергии *E*.

Энергия E, которая входит в теоретические и аппроксимационные выражения для $\sigma(E)$, — это энергия относительного движения участвующих в реакции частиц. Переход от системы центра масс к лабораторной системе не искажает кривую $\sigma(E)$, а лишь сдвигает начало координат. Однако даже в предположении абсолютной моноэнергетичности пучка налетающих частиц наблюдаемое сечение есть результат физического усреднения по относительной энергии, обусловленного тепловым движением ядер. При отличной от нуля (в абсолютной шкале) температуре такое усреднение не может быть устранено усовершенствованием техники эксперимента.

Другая причина искажения гладкой истинной зависимости связана в основном с немоноэнергетичностью пучка налетающих частиц и обусловливает

усреднение по некоторому спектральному распределению. Отсюда при обработке данных эксперимента возникает необходимость учета функции разрешения.

Обе эти причины приводят к тому, что наблюдаемое сечение связано с истинным интегральным преобразованием, и для восстановления истинного сечения надо решать так называемую обратную задачу.

Согласно принятой в математической физике терминологии термин «обратная задача» в широком смысле слова применим ко всем случаям, включающим обращение причинно-следственной связи. Самым распространенным типом таких задач является восстановление сигналов, принятых измерительным прибором, по «отклику» этого прибора, т. е. по сигналу, искаженному регистрирующей, усилительной и анализирующей аппаратурой. Эти задачи в большинстве своем относятся к классу «некорректных» задач («некорректно поставленных»), в которых малость изменения исходных данных не гарантирует малости изменения решения. В наиболее распространенном случае такие задачи сводятся к решению уравнения

$$A\varphi = f , \qquad (7.15)$$

где \hat{A} — вполне непрерывный линейный оператор; φ и f — функции, принадлежащие к некоторому линейному пространству, причем f — известная функция, а φ — искомое решение. Сжатое изложение современных методов решения таких задач можно найти в монографиях [51, 52], содержащих подробную библиографию.

В настоящем параграфе речь пойдет о частном, но важном случае обратной задачи, когда f и φ в (7.15) зависят от одной переменной, \hat{A} — оператор свертки и (7.15) сводится к интегральному уравнению Фредгольма первого рода с разностным ядром

$$\int_{-\infty}^{\infty} k(x-y)\varphi(y)dy = f(x).$$
(7.16)

Если энергетическая зависимость сечений ядерных реакций, идущих через определенные уровни составного ядра, измерена с конечным разрешением, решение уравнения (7.16) является составной частью резонансного анализа. К нему же относится учет эффекта Доплера — уширения резонансов в результате теплового движения ядер-мишеней.

Рассматриваемый метод относится к аппроксимативным способам решения обратной задачи [52, с. 32], когда f(x) и k(x) аппроксимируются функциями, позволяющими аналитически решить (7.16) с помощью преобразования Фурье. Как известно, уравнению (7.16) соответствует следующая связь между фурье-образами входящих в него функций:

$$K(\omega)\Phi(\omega) = F(\omega). \tag{7.17}$$

Фурье-образы обозначены прописными буквами и определяются как

$$K(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega x} k(x) dx$$
(7.18)

и т. п. Тогда формальное решение (7.16) записывается в виде

$$\varphi(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F(\omega)}{K(\omega)} e^{i\omega x} d\omega.$$
(7.19)

При использовании аппроксимативного метода функции $K(\omega)$ и $F(\omega)$ должны быть такими, чтобы интеграл (7.19) сходился и брался аналитически. Будем использовать паде-аппроксимацию функции f(x) в виде последней суммы полюсного разложения (5.8). Фурье-образ этого выражения есть

$$F(\omega) = \sum_{k=1}^{l} e^{-i\epsilon_k \omega - \gamma_k |\omega|} \left[\frac{\beta_k}{\gamma_k} - i\alpha_k \operatorname{sign}(\omega) \right].$$
(7.20)

Давно известен пример ядра уравнения (7.16) (см., например, [53]), для которого решение (7.19) имеет очень простой явный вид. Это лоренцево ядро, которое само есть рациональная функция и содержит единственное резонансное слагаемое, т. е.

$$k(x) = \frac{\Gamma}{\pi} \frac{\alpha x + 1}{x^2 + \Gamma^2}, \quad K(\omega) = e^{-\Gamma|\omega|} \Big[1 - i\alpha \operatorname{sign}(\omega) \Big].$$
(7.21)

Тогда после подстановки (7.20), (7.21) в (7.19) получим

$$\varphi(x) = \sum_{k=1}^{l} \frac{(\alpha_k \gamma_k - \alpha \beta_k \Gamma)(x - \epsilon_k) + (\gamma_k - \Gamma)(\beta_k + \alpha_k \alpha \gamma_k \Gamma)}{\gamma_k (1 + \alpha^2 \Gamma^2) \left[(x - \epsilon_k)^2 + (\gamma_k - \Gamma)^2 \right]}.$$
 (7.22)

Видно, что сохраняется число слагаемых в разложении f(x) и $\varphi(x)$, т. е. при решении обратной задачи с лоренцевым ядром происходит переход «резонанса в резонанс» с уменьшением его ширины при некотором искажении формы.

Однако лоренцево ядро (в статистике оно называется распределением Коши) имеет медленно убывающую асимптотику, которая дает, в частности, бесконечную дисперсию, что ограничивает его использование. Приведем примеры ядер уравнения (7.16), допускающих аналитическое решение (7.19) и обладающих более реалистической экспоненциальной или близкой к экспоненциальной асимптотикой:

$$k(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2}} e^{-\sqrt{2}|x|/\sigma},$$
 (7.23)

$$k(x) = \frac{1}{2\sigma \operatorname{ch} \frac{\pi x}{2\sigma}},\tag{7.24}$$

$$k(x) = \frac{4^{n-1}2nx}{(2n-1)!\sigma^2 \operatorname{sh}\left(\frac{\pi x}{2}\sqrt{\frac{n}{2}}\right)} \prod_{r=1}^n \left(\frac{x^2n}{2\sigma^2} + r^2\right),$$
(7.25)

$$k(x) = \frac{2^{2n}\sqrt{2n+1}}{2n!\sigma \operatorname{ch}\left(\frac{\pi x}{2}\sqrt{2n+1}\right)} \prod_{r=1}^{n} \left(\frac{x^2(2n+1)}{4\sigma^2} + \left(\frac{2r-1}{2}\right)^2\right), \quad (7.26)$$

$$k(x) = \frac{\pi(1 + \cos\beta)\operatorname{ch}(\beta x/\alpha)}{\alpha \sin\beta \operatorname{sh}(\pi x/\alpha)},$$
(7.27)

$$\alpha^2 = \sigma^2 \left(1 + \cos \beta \right).$$

Все функции k(x), приведенные выше, нормированы условием $\int_{-\infty} k(x) dx = 1$, а

параметр σ выражается через второй момент:

$$\sigma^2 \equiv \int_{-\infty}^{\infty} x^2 k(x) dx. \qquad (7.28)$$

Во всех этих примерах, в отличие от лоренцева ядра, не совпадает число членов разложения f(x) и $\varphi(x)$, т. е. каждый «резонанс» в итоге превращается в сумму резонансных слагаемых. Для представления результата в виде стандартного резонансного разложения на последнем этапе решения задачи функцию $\varphi(x)$ можно снова аппроксимировать рациональной функцией с нужным числом полюсов. Ниже будет приведен пример такого рода.

В [54] описанный аппроксимативный метод с лоренцевым ядром использовался для корректировки энергетической зависимости полного нейтронного сечения с целью выяснить влияние учета разрешения на расчетные значения пропускания при прохождении нейтронов через образцы вещества. В качестве примера для обработки было взято полное нейтронное сечение хрома в интервале энергий нейтронов 0,76 — 1,07 МэВ, измеренное в [55] на электростатическом генераторе. Обработка включала следующие этапы:

1. Экспериментально измеренная энергетическая зависимость полного сечения $\sigma_t(E)$ аппроксимировалась рациональной функцией.

2. Для установления вида функции разрешения в [55] были построены приближения Паде для двух эталонных кривых пропускания на резонансе углерода при E = 2,08 МэВ: по результатам измерений в условиях [55] и для кривой, рассчитанной по рекомендованным значениям резонансных параметров [56] (рис. 7.1). После этого решалось уравнение (7.16), где в качестве f бралась первая из указанных кривых, а в качестве φ — вторая. Решением была функция разрешения в виде (7.21). Ее полуширина оказалась равной примерно 3,5 кэВ.

3. Полученная функция разрешения использовалась в качестве ядра уравнения (7.16) для получения скорректированной энергетической зависимости $\sigma_t(E)$. В качестве правой части уравнения использовалась аппроксиманта, найденная на первом этапе. На рис. 7.2 изображены исходные экспериментальные точки и скорректированная кривая. Приведены также данные по полному нейтронному сечению хрома, взятые из библиотеки оцененных данных [57]. При их получении использовалось на порядок более высокое разрешение, и они дают более детальную картину зависимости $\sigma(E)$.



Рис. 7.2. Энергетическая зависимость полного нейтронного сечения хрома в интервале 0,76 < *E* < 1,07 МэВ с разной степенью детализации резонансной структуры: пунктир — постоянное среднее сечение; кружки — экспериментальные данные [56]; жирная кривая — скорректированное сечение; тонкая кривая — детальная структура из файла оцененных данных



Рис. 7.3. Расчетные кривые и экспериментальные значения (точки) среднего пропускания T в зависимости от толщины образца x. Кривые соответствуют разной степени учета резонансной структуры, т. е. зависимостям $\sigma_t(E)$, приведенным на рис 7.2:

- 1 постоянное среднее сечение;
- 2 экспериментальные значения [56];
- 3 скорректированные значения сечения;
- 4 файл оцененных данных

4. Все четыре зависимости $\sigma_t(E)$, представленные на рис. 7.2 и в разной степени учитывающие резонансную структуру сечения в указанном интервале, были использованы для расчета среднего по интервалу энергий пропускания нейтронного пучка в зависимости от толщины образца хрома. Результаты расчетов представлены на рис. 7.3, где они сравниваются с результатами прямых измерений пропускания на различных толщинах, полученными в [58].

Как и следовало ожидать, каждый шаг в детализации резонансной структуры сечения приводит к увеличению расчетных значений пропускания, которые последовательно приближаются к результатам прямых измерений. В частности, заметное повышение пропускания дает и описанная корректировка, учитывающая разрешение, хотя она, разумеется, не приводит к восстановлению деталей структуры, характерный период которых гораздо меньше ширины линии разрешения.

Эффект Доплера — зависимость наблюдаемого сечения взаимодействия нейтронов с ядрами вещества от температуры последнего — играет важную роль в нейтронной физике и физике реакторов по нескольким причинам. Остановимся на одном аспекте этого вопроса – приведении к нулевой температуре энергетической зависимости сечения в резонансной области, измеренного при не равной нулю температуре *T*. Интегральное уравнение, связывающее функции энергии $\sqrt{E}\sigma(E,0)$ и $\sqrt{E}\sigma(E,T)$, в точной форме имеет довольно сложный вид: оно обладает неразностным ядром, однако при не слишком близких к нулю энергиях нейтронов удовлетворительную точность обеспечивает общепринятая газовая модель в приближении «доплеровской ширины», в которой

$$\int_{-\infty}^{\infty} k_G \left(E - E', T \right) \sqrt{E'} \sigma(E', 0) dE' = \sqrt{E} \sigma(E, T) , \qquad (7.29)$$

где гауссово ядро

$$k_G(E,T) = \left[1/\sqrt{\pi}\Delta(T)\right] e^{-E^2/\Delta^2(T)}, \qquad (7.30)$$

а $\Delta T = \sqrt{2k_E TE/(A+1)}$ — доплеровская ширина; $k_{\rm b}$ — постоянная Больцмана; A — атомная масса ядра-мишени. Для ядра (7.30) даже формально неприменимо точное решение уравнения (7.29) в форме (7.19), поскольку фурье-образ ядра, имеющий также гауссову зависимость от аргумента, слишком быстро убывает и интеграл (7.19) расходится. Однако аппроксимация правой части (7.29) рациональной функцией и учет того обстоятельства, что искомое решение $\sqrt{E\sigma}(E,0)$ в нейтронном резонансном анализе по физическим соображениям также хорошо аппроксимируется полюсным разложением, позволяют применять проблемно-ориентированный аппроксимативный метод приближенного решения уравнения (7.29). Он основан на замене ядра (7.30) модельной функцией вида (7.24). Решение (7.19) в этом случае имеет вид

$$\varphi(x) = \frac{1}{2} \left[\frac{\alpha(x-\epsilon) + \beta(1-\sigma/\gamma)}{(x-\epsilon)^2 + (\gamma-\sigma)^2} + \frac{\alpha(x-\epsilon) + \beta(1+\sigma/\gamma)}{(x-\epsilon)^2 + (\gamma+\sigma)^2} \right]$$
(7.31)
при $f(x) = \left[\alpha(x-\epsilon) + \beta \right] / \left[(x-\epsilon)^2 + \gamma^2 \right].$

Возникает следующая расчетная схема:

1. Для сечения, измеренного при температуре $T \neq 0$, строится паде-аппроксиманта типа (5.8), число резонансных слагаемых которой может превышать число резонансов истинного решения.

2. По формуле (7.31) каждому из резонансов аппроксиманты сечения при $T \neq 0$ ставится в соответствие два резонанса аппроксиманты при T = 0. В результате каждому резонансному слагаемому истинного сечения соответствует несколько (обычно два-четыре) резонансных слагаемых приближенного решения обратной задачи.

3. Для этой сложной функции строится более простая паде-аппроксиманта, параметры которой уже имеют смысл обычных резонансных параметров в представлении Адлера — Адлера [42].

4. Сверткой полученного решения с гауссовым ядром и сравнением результата с исходной правой частью контролируется приемлемость полученных результатов.

Чтобы интеграл (7.19) сходился, необходимо выполнение неравенств $\gamma_k > \sigma$ для всех резонансных слагаемых в аппроксиманте, построенной для правой части.

В табл. 7.3 и на рис. 7.4 приведены результаты использования описанного выше метода на модельном примере. В качестве истинной энергетической зависимости сечения была выбрана функция

$$\sigma(E) = \frac{0.5(E - 41.5) + 1.35}{(E - 41.5)^2 + 0.25^2} + \frac{0.8(E - 40.0) + 1.5}{(E - 400)^2 + 0.5^2}$$
(7.32)

(энергия — в эВ), соответствующая двум интерферирующим резонансам, ко-

торые отстоят друг от друга на расстояние, равное сумме их ширин. Функция (7.35) свертывалась с гауссовым ядром (7.34) при значениях температуры 1473, 773, 273 и 100 К для A = 239. К результату свертки, вычисленному в 65 эквидистантных точках на интервале $38,6 \le E \le 45$ эВ, добавлялась случайная погрешность, выбранная из нормального распределения и соответствующая постоянной относительной погрешности 3 %. Полученная совокупность экспериментальных точек обрабатывалась описанным алгоритмом. Данные табл. 7.3, проиллюстрированные рис. 7.4, показывают, что найденное решение вполне удовлетворительно согласуется с истинным. На рис. 7.4 результаты приведены лишь для T = 1473 К и T = 773 К; поскольку при меньших температурах приближение на графике не отличимо от $\sigma(E)$.

Таблица 7.3.

		1	1 51 1	•	
Характерис- тика аппроксимант	0 К	100 K	273 К	773 K	1473 K
α_1	0,5000	0,4673	0,5121	0,4079	0,4619
β_1	1,3500	1,3864	1,3420	1,3596	1,334
ϵ_1	41,500	41,502	41,493	41,520	41,494
γ_1	0,2500	0,2566	0,2477	0,2550	0,2524
α_2	0,8000	0,8410	0,8232	0,8718	0,8757
β_2	1,5000	1,5136	1,5525	1,4949	1,5615
ϵ_2	40,0000	39,993	39,997	39,972	39,993
γ_2	0,5000	0,5092	0,5160	0,5120	0,5244
L	_	8	8	12	12
$\Delta_L, \%$	_	3,38	3,27	3,26	4,17
Δ_{f} , %	_	3,12	2,71	3,31	3,53
$\Delta_{\varphi}, \%$		0,97	1,68	2,80	1,95

Результаты обработки модельной задачи по учету эффекта Доплера для различных температур образца

Примечание. Здесь L — число параметров аппроксиманты — «экспериментальных» точек; в боковике перечислены восстановленные параметры резонансов (первый столбец, при T = 0 — истинные значения). Последние три строки — функционалы, характеризующие точность обработки — средние квадратические относительные отклонения: Δ_L — аппроксиманты от «экспериментальных» точек; Δ_f — результирующей кривой, свернутой с гауссовым ядром, от «экспериментальных» точек; Δ_{ϕ} — результирующей кривой от истинной.



Рис. 7.4. Результаты обработки модельной задачи по учету эффекта Доплера: точки — «экспериментальные» значения доплеровски уширенного сечения; жирная линия «истинное» сечение; тонкая линия — результат восстановления

7.3. Экспоненциальный анализ

Необходимость представить измеренную на опыте функциональную зависимость (чаще всего временную) в виде суммы экспонент и гармоник часто возникает в самых различных областях науки и техники. При решении задачи в наиболее общей постановке определению подлежат и периоды каждой из экспонент, и коэффициенты разложения по ним.

Подход к решению и сложность задачи существенно зависят от характеристик анализируемой кривой — числа экспериментальных точек, их распределения по оси абсцисс, перепада значений (для экспоненциальных кривых), разницы в периодах экспоненциальных слагаемых, уровня шума и т. д. Практически удобных универсальных методов пока не существует, да и в частных случаях решение затруднено. Часто в той или иной форме используется преобразование Лапласа или его дискретный аналог, так называемое Z-преобразование (см. [59, с. 200]), последнее особенно удобно при эквидистантных абсциссах опорных точек, в том и в другом случае сумма экспонент и гармоник является рациональной функцией. Естественно поэтому попытаться использовать при таком анализе приближение Паде. Z-преобразование по определению применяется к функциям, значения которых f_n известны для бесконечной дискретной последовательности значений аргумента с постоянным шагом, занумерованных индексом п. Z-изображение такой последовательности определяется образом Лапласа $F(s) = L\{f(t)\}$ вспомогательной ступенчатой (кусочно-постоянной) функции f(t), определенной ниже:

$$f(t) \equiv f_n (n \le t \le n+1, \ n = 0, 1, 2, ...).$$
(7.33)

Тогда

$$L\{f(t)\} \equiv \int_{0}^{\infty} f(t)e^{-st}dt = \frac{1-e^{-s}}{s}\sum_{n=0}^{\infty} f_{n}e^{-ns}.$$
 (7.34)

В определении Z-преобразования несущественный общий множитель отбрасывается, и окончательное выражение приобретает вид:

$$D\{f_n\} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-ns} f_n .$$
 (7.35)

Удобно сделать подстановку $e^{-s} = z$. Тогда этот ряд превращается в степенной:

$$\sum_{n} f_n z^n \equiv F(z) \,. \tag{7.36}$$

Заметим, что обычно используют замену $e^s = z$ и получают ряд по отрицательным степеням *z*, однако выражение (7.36) здесь удобнее.

Пусть $f_n = e^{\alpha n}$. Тогда (7.36) представляет собой сумму геометрической прогрессии:

$$F(z) = \sum_{n=0}^{\infty} (e^{\alpha} z)^n = 1/(1 - ze^{\alpha}).$$
(7.37)

Таким образом, Z-изображение экспоненты является простейшей рациональной функцией, а суммы экспонент — суммой элементарных выражений типа (7.37), т. е. рациональной функцией, у которой M = N + 1. Так как формула суммирования справедлива и в комплексной плоскости, не возникает принципиальных осложнений и в случае применения Z-преобразования к суммам (и произведениям) гармоник и экспонент, когда α может принимать комплексные значения. Тогда

$$f_n = \sum_{j=1}^{N} a_j e^{-r_j t_n} \sin(\tau_j t_n + \delta_i),$$
 (7.38)

где $t_n = n\Delta + t_0$ (Δ и t_0 — интервал между измерениями и начало отсчета соответственно), и

$$F(z) = \sum_{n} f_{n} z^{n} = \sum_{j=1}^{N} \frac{a_{j} e^{r_{j}(\Delta - t_{0})}}{2} \left\{ \frac{e^{i\left[\tau_{j}(\Delta - t_{0}) - \delta_{j} - \pi/2\right]}}{z - e^{\Delta\left(r_{j} - i\tau_{j}\right)}} + \frac{e^{-i\left[\tau_{j}(\Delta - t_{0}) - \delta_{j} - \pi/2\right]}}{z - e^{\left[\Delta\left(r_{j} - i\tau_{j}\right)\right]}} \right\}.$$
 (7.39)

Итак, если Z-изображение анализируемой функции есть отношение полиномов, то, разлагая известным образом это отношение на элементарные дробно-линейные слагаемые, можно сопоставить каждому слагаемому с действительным корнем знаменателя экспоненциальный член функции-оригинала, а каждой паре комплексно-сопряженных корней — экспоненциальный член, умноженный на гармонику с определенными частотой и фазой (в частных случаях показатели экспоненты или частоты гармоник могут оказаться равными нулю, что соответствует чисто гармоническим или постоянным слагаемым оригинала).

Несмотря на то, что Z-преобразование применимо к бесконечным последовательностям, рациональная функция, как упоминалось выше, однозначно восстанавливается по первым M = N + 1 членам своего разложения в ряд Тейлора (этот факт является основой излагаемого метода), причем приведенные в § 4.1 рекуррентные формулы приближения Паде-1 позволяют сделать это достаточно просто. Схема вычислений тогда сводится к следующему.

1. Значения f_n подлежащей анализу функции, соответствующие эквидистантным значениям аргумента, рассматриваются как коэффициенты степенного ряда (7.36), и по ним с помощью формул (4.3), (4.5) строится приближение Паде-1.

2. Из полюсного разложения этого приближения определяются параметры выражения (7.39).

3. Отбрасываются те слагаемые разложения, у которых значения коэффициентов |*a_i*| меньше некоторого критического уровня, выбранного в качестве границы уровня шумов.

Прежде чем перейти к примеру анализа экспериментальных данных, рассмотрим близкую ему по характеру модельную задачу.

Пусть

$$f(t) = 50e^{-0.075t} + 5e^{-0.5t} + 0.5\sin(0.4t + 4) - 0.5\sin(0.5t + 0.5\sin(0$$

функция, заданная в 20 точках на действительной оси со случайной погрешностью, распределенной по нормальному закону, причем амплитуда распределения $\Delta(t) = \Delta [f_{max}(t) / f(t)]^{1/4}$, что соответствует случаю, промежуточному между чисто статистической погрешностью (тогда в этом выражении стоял бы квадратный корень) и постоянной амплитудой разброса. Погрешности в точках задаются датчиком случайных чисел. Результаты анализа таких последова-

Таблица 7.4.

	5	1	, ,		
$\Delta_{\rm лучш}$, %	$\overline{\Delta}$, %	$\overline{\Delta}_{_{ m 3KCII}}$, %	$\Delta_{\mu ct}$, %	a_1	r_1
0	0	0	0	50	-0,075
0,5	0,756	0,69	0,66	49,90	-0,07496
1,0	1,532	1,93	2,07	49,79	-0,07489
<i>a</i> ₂	r_2	<i>a</i> ₃	<i>r</i> ₃	τ^3	δ^3
5	-0,5	0,5	0	0,4	4
5,42	-0,523	0,5765	-0,003	0,3955	4,055
7,93	-0,687	0,687	-0,007	0,3727	4,71
		1,196	-0,102	-0,551	4,42
	•		•	•	•

Результаты обработки модельной задачи*

*В последнем варианте синусоидальный член расщеплен на два.

тельностей для нескольких значений Δ приведены в табл. 7.4. Качество восстановления оценивается двумя способами — по абсолютному $\overline{\Delta}_{a\delta c}$ и относительному $\overline{\Delta}_{oth}$ средним квадратическим отклонениям. При рассмотрении задачи имеется возможность сравнить результат восстановления с истинной функцией. С ростом погрешности, как видно из табл. 7.4, надежность выделения компонент, кроме главной, т. е. медленно затухающей экспоненты с большим коэффициентом, быстро падает, и синусоидальный член начинает расщепляться на шумовые гармоники.

Практический анализ экспериментальных данных производился на примере набора кривых, изображающих временную зависимость тока электронного охлаждения катода термоэмиссионного реактора после переключения нагрузки, по материалам [60]. Всего было обработано 34 кривых, каждая из которых имела от 8 до 20 временных точек, снятых с постоянной абсолютной погрешностью 0,5 единицы. Результаты, характеризующие точность описания экспериментальных данных, приведены ниже:

Число опорных точек	20	18	16	14	12	10	8
Число кривых	11	6	6	7	2	1	1
$\overline{\Delta}_{ m эксп. aбc}$	0,43	0,658	0,687	0,537	0,773	0,230	0,577
$\overline{\Delta}_{\mathfrak{skcn.oth}}, \mathfrak{H}$	2,62	7,9	6,6	3,1	10,2	2,9	6,1

Для наиболее подробных данных наряду с основным вариантом просчитывались два вспомогательных, по 10 точкам каждый — по четным и по нечетным.

Во всех 34 случаях выделен один главный экспоненциальный член с константой затухания 0,06, а также один или два гармонических члена с максимальной амплитудой на уровне 0,5 — 1,5. В нескольких случаях (примерно третья часть) появлялось второе, чисто экспоненциальное слагаемое с константой затухания, примерно на порядок большей. Вклад всех слагаемых, кроме главного, можно оценить по кривым, изображенным на рис. 7.5. Проведенный анализ позволяет с уверенностью говорить о наличии синусоидальных слагаемых, но данные недостаточно детальны для того, чтобы заключить, соответствует ли этот вклад автоколебаниям с примерно постоянной частотой или шумовым гармоникам.

Образ Лапласа суммы экспонент является рациональной функцией своего аргумента. Если

$$f(t) = \sum_{k=1}^{M} a_k e^{-pk^t} ,$$

то

$$F(s) = \int_{0}^{\infty} e^{-st} f(t) dt = \sum_{k=1}^{M} \frac{a_k}{s+p_k} = \frac{P_{M-1}(s)}{Q_M(s)}.$$
 (7.40)

Рис. 7.5. Результаты обработки двух экспериментальных кривых по 20 опорным точкам:

1 — лучшая из всех исследованных в смысле среднего квадратического отклонения кривая (0,192, или 2,46 %);

2 — худшая кривая (0,511, или 3,47 %).

Для наглядности кривая 1 сдвинута вверх на 10 единиц; пунктирные кривые — вклад главного экспоненциального члена



Отсюда вытекает следующий способ разложения функции в сумму экспонент, более общий, чем только что изложенный.

1. Численным интегрированием образ Лапласа F(s) разлагаемой функции f(t) вычисляется в выбранных точках $0 \le s_n \le s_{\max}$ действительной оси $(n = 1, 2, ..., N_s)$, полное число их должно быть $N_s \ge 2M + 1$, где M — число искомых экспонент в разложении.

2. Методом дискретной оптимизации этот образ аппроксимируется рациональной функцией, которая разлагается в сумму элементарных слагаемых (7.40). Каждому такому слагаемому сопоставляется экспоненциальная компонента функции-оригинала и по совокупности полученных параметров строится оригинал.

Реально функция f(t) задана в конечном интервале, поэтому перепад экспериментальных значений должен быть достаточным, чтобы можно было пренебречь вкладом неучтенного «хвоста» функции f(t). Пусть $f(t) = e^{-pt}$. Тогда при s = 0

$$F(0) = \int_{0}^{\infty} e^{-pt} dt = 1/p ,$$

$$F^{*}(0) = \int_{0}^{t_{0}} e^{-pt} dt = \frac{1}{p} \Big[1 - e^{-pt_{0}} \Big] = F(0) \Big[1 - e^{-pt_{0}} \Big] .$$

Очевидно, разница между F(s) и $F^*(s^*)$ тем меньше, чем больше произведение pt_0 и чем больше s. Проблема «хвоста» f(t), связанная с возможностью выделения долгоживущих (с малыми p_k) компонент функции, присутствует в любом методе экспоненциального анализа. На практике эта добавка воспринимается

как составляющая шума. Например, при s = 0 и $pt_0 \approx 16$ добавка e^{-pt_0} имеет значение порядка 10^{-6} .

Значения параметров, так же как и в других методах анализа, влияют на эффективность их восстановления. Короткоживущие экспоненты с малыми вкладами всегда трудно выделять на фоне долгоживущих с большими коэффициентами. Обычно это свойство задачи учитывается на этапе получения (экспериментального или расчетного) значений исходной функции f(t).

При преобразовании Лапласа поведение функции-оригинала f(t) при малых t определяется поведением F(s) при больших s и наоборот. Отсюда вытекает следующее. Во-первых, величина s_{max} является параметром метода, и ее оптимальное значение связано с перепадом значений F от F(0) до $F(s_{max})$ и с эффективностью выделения короткоживущих экспонент. Во-вторых, важную роль играет распределение точек s_n на интервале $[0, s_{max}]$. Практика показала, что значение s_{max} должно быть не меньше ожидаемого p_{max} и его следует выбирать таким образом, чтобы при числе экспонент M = 2 перепад от F(0) до $F(s_{max})$ был не менее десяти, при $M = 5 \div 7$ — не менее $10^3 - 10^4$. Что же касается второго обстоятельства, то точки должны сгущаться к s = 0, чтобы точнее восстанавливались долгоживущие экспоненты. На практике желательно варьировать и s_{max} , и распределение точек на оси s, пользуясь результатом пробного разложения.

Уровень погрешностей исходной функции отражается, конечно, на эффективности восстановления параметров разложения. Он влияет и на результат вычисления образа Лапласа, но F(s), как величина интегральная, является более гладкой функцией своего аргумента, чем исходная функция f(t). В результате точность аппроксимации F(s) выше, чем точность аппроксимации f(t). Если $\overline{\Delta}_f$ и $\overline{\Delta}_F$ — характеристики качества описания f(t) и F(s), то $\overline{\Delta}_F < \overline{\Delta}_f$ и минимальные значения $\overline{\Delta}_f$ обязательно соответствуют минимальным $\overline{\Delta}_F$. Однако на практике критерием выбора опорных точек при аппроксимации может служить как $\overline{\Delta}_f$, так и $\overline{\Delta}_F$, только для расчета $\overline{\Delta}_f$ требуется существенно большее машинное время.

Проиллюстрируем устойчивость и качество описания на примере анализа экспериментальных кривых пропускания для серы [58] при двух значениях энергии. В обоих случаях оптимальное разложение было получено для двух экспонент. На рис. 7.6 представлены отдельно вклады каждого экспоненциального члена. Для каждого случая были учтены результаты около десятка вариантов обработки, соответствующих различным *s*_{max} и разным распределениям точек по оси *s*. Это дало возможность приблизительно оценить неопределенность вклада каждой экспоненты (заштрихованные области на рисунках). Исходные значения функций пропускания описывались в пределах экспериментальной погрешности. Видно, что выделение в каждом случае двух главных компонент разложения происходит с достаточной степенью устойчивости. Попытки выделения трех экспонент привели в каждом случае к резкому уве-


Рис. 7.6. Примеры обработки двух экспериментальных кривых пропускания для серы: по оси абсцисс — толщина образца в условных единицах; заштрихованные области — вклады каждого экспоненциального члена с учетом его неопределенности

личению неопределенности каждой компоненты, и это означает, что оптимальны разложения на суммы двух экспонент.

Одно из возможных применений описываемого метода — анализ интегральных кривых пропускания, которые используются в физике реакторов для расчета различных интегральных функционалов в рамках подгруппового подхода, так что последующее изложение тесно связано с материалом начала данной главы. Кривой пропускания называют зависимость

$$T_i(x) = \int_{E_1}^{E_2} \varphi(E) \sigma_i(E) e^{-\sigma_i(E)x} dE$$

где интеграл берется по энергетической группе. Здесь $\varphi(E)$ — функция, описывающая нейтронный спектр; *х* — толщина образца; σ_i и σ_t — полное и парциальное сечения.

Если приближенно заменить $\sigma_t(E)$ ступенчатой функцией и перейти в интеграле к переменной σ_t , то, поскольку производная от ступенчатой функции есть сумма δ-функций, получим:

$$T_i(x) = \int_{\sigma_{\min}}^{\sigma_{\max}} \varphi \sigma_i e^{-\sigma_t x} \frac{dE}{d\sigma_t} d\sigma_t = \sum_{k=1}^M a_k^i e^{-\sigma_{ik} x} .$$
(7.41)

При этом сумму

$$p(\mathbf{\sigma}_i) = \sum_{k=1}^{M} a_k^i \delta(\mathbf{\sigma}_i - \mathbf{\sigma}_{ik})$$
(7.42)

можно трактовать как приближенное распределение вероятностей для различных значений сечения в данной энергетической группе [15]. Тогда, разложив $T_i(x)$ на сумму экспонент (7.41), можно с помощью (7.42) просто вычислять различные интегральные величины, зависящие от поведения сечения в пределах группы, например средние сечения

$$\langle \sigma_i \rangle = \sum_{k=1}^M a_k^i \sigma_{ik}$$

и другие функционалы (см. § 7.1). Здесь подгрупповые константы a_k^t и σ_k^t — параметры разложения (7.41) для полного сечения $T_t(x)$.

В табл. 7.5 приведены результаты анализа кривых пропускания для марганца в пределах энергетической группы $2 \le E \le 4$ кэВ, полученных в [61]. Три кривые соответствуют сечениям захвата, рассеяния и полному сечению. Анализируемые кривые пропускания не являются точными суммами конечного числа экспоненциальных слагаемых и в принципе могут быть разложены в бесконечную их сумму с последовательно убывающими вкладами, но практически их число ограничивается точностью расчетов.

Таблица 7.5.

		5		1 1	2	., ., .,		
М	$\overline{\Delta}_F$	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7
	$\Delta_{f}, \%$	$-r_1$	$-r_2$	<i>-r</i> ₃	<i>-r</i> ₄	- <i>r</i> ₅	$-r_6$	- <i>r</i> ₇
6	$2,6.10^{-6}$	0,00317	0,0105	0,0255	0,06321	0,2369	0,6587	_
	0,67	9,302	14,45	30,04	77,46	244,07	567,0	_
7	$6,2 \cdot 10^{-8}$	0,00406	0,0128	0,0302	0,0698	0,02623	0,6195	0
	1,28	9,577	16,06	35,53	91,94	271,5	581,1	2,266
8	$1,2 \cdot 10^{-8}$	0,00098	0,0068	0,0176	0,0379	0,0816	0,2963	0,5591
	0,96	8,412	11,391	21,03	47,97	121,1	313,6	601,9
9	$2,9 \cdot 10^{-8}$	0,00117	0,0074	0,0165	0,0359	0,07721	0,287	0,5733
	0,66	9,043	12,71	22,58	48,50	117,4	304,8	597,1
7	$7,8 \cdot 10^{-8}$	0,00561	0,0189	0,0416	0,0851	0,2572	0,5904	0
	0,94	9,532	15,65	33,86	87,42	261,45	590,46	_
8	$1,2 \cdot 10^{-8}$	0,04582	0,01523	0,0336	0,0728	0,2148	0,6552	_
	0,66	9,329	14,28	28,12	68,83	213,99	550,68	_
9	$1,1.10^{-8}$	0,04252	0,0135	0,0276	0,0526	0,0990	0,2994	0,5034
	0,59	9,265	13,77	25,26	54,35	131,12	325,54	610,7
6	$1,9.10^{-5}$	0,08852	0,2011	0,2295	0,1986	0,2771	0	_
	0,74	9,394	15,056	33,88	107,78	446,78	0	_
7	3,8.10-6	0,1118	0,2121	0,2227	0,1911	0,2593	$2,19 \cdot 10^{-4}$	0
	0,37	9,7508	16,64	39,018	126,73	477,9	5,5929	_
8	$4,0.10^{-7}$	0,0611	0,1346	0,1653	0,0302	0,0698	0,2623	0,1753
	0,31	9,0706	12,541	20,628	40,399	92,985	257,99	576,06

Результаты анализа кривых пропускания *T_t*, *T_c*, *T_s* для Mn

Примечание. Здесь M — число экспоненциальных членов в разложении. Три части таблицы по вертикали соответствуют T, T_c и T_s .

Данные табл. 7.5 показывают, что восстановление образа Лапласа с точностью до шестого-седьмого знака обеспечивает восстановление кривых пропускания на интервале восемь-девять декад с относительной погрешностью 0,3-0,5% при выделении шести-семи экспоненциальных слагаемых. Поскольку значение полного сечения на энергетическом интервале группы заключено в пределах от 10^{-27} до $6 \cdot 10^{-26}$ м², то примерно в тех же пределах должны располагаться полученные значения, что, как видно, выполняется. Проверить «качество» полученного набора подгрупповых констант можно, рассчитав с их помощью средние сечения и коэффициенты самоэкранировки и сравнив их со значениями, полученными численным интегрированием с использованием фактической энергетической зависимости $\sigma(E)$. Результаты такого сравнения приведены в табл. 7.6.

Таблица 7.6.

	сечения разбавления σ_0						
Meton pacheta	$(\sigma_{\rm v}) 10^{-28} {\rm m}^2$	F_{c}					
метод расчета	$\langle 0_t \rangle$, io m	$\sigma_0 = 0$	$\sigma_0 = 10^{-27} \text{ m}^2$	$\sigma_0 = 10^{-26} \text{ m}^2$			
Численный	167,7	0,1514	0,1995	0,4087			
По параметрам							
экспонент	166,8	0,1504	0,1981	0,4075			

Средние сечения (σ_t) и факторы самоэкранировки F_c при разных значениях
-------------------	------------	--

Величины обоих типов хорошо согласуются между собой, что и оправдывает введение констант, полученных из экспоненциального разложения.

В силу ограниченности объема данной книги представляется целесообразным в заключение сослаться дополнительно на некоторые работы авторов, в которых либо можно найти более детальное освещение вопросов, затронутых выше, либо рассматриваются вопросы, смежные с затронутыми: [62—64] — построение паде-аппроксиманты, оценка ее погрешностей и практические примеры; [65] — многоуровневый резонансный анализ; [66] — суммирование рядов квантовомеханической теории возмущений в рекурсивной формулиров-ке; [67] — информационная емкость экспериментальных кривых с погрешностями; [68] — получение подгрупповых констант; [69—71] — обратная задача; [72,73] — экспоненциальный анализ.

Список литературы

- 1. Baker G. Essentials of Pade approximants. N.Y.: Academic Press, 1975.
- Lecture Notes on Mathematics 765. Pade appromixation and its applications / Ed. L. Wuytack. Berlin — Heidelberg — N.Y.: Springer-Verlag, 1979.
- Lecture Notes on Mathematics 888. Pade approximation and its applications / Ed. M.E. de Bruin, H. van Kossum. Berlin — Heidelberg — N.Y.: Springer-Verlag. 1981.

- Никитиу Ф. Фазовый анализ в физике ядерных взаимодействий: Пер. с рум.: М.: Мир, 1983.
- 5. Zinn-Justin J. // Phys. Repts. 1971. Vol. 1C. No. 3. P. 55-102.
- 6. Basdevant J. // Fortschr. Phis. 1972. Bd 20. S. 283-331.
- 7. Апресян А.А. // Изв. вузов. Сер. Радиофизика. 1979. Т. XXII. №6. С. 653—674.
- 8. Виноградов В.Н., Гай Е.В., Работнов Н.С. Препринт ФЭИ-484. Обнинск, 1974.
- Виноградов В.Н., Гай Е.В., Работнов Н.С. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы. М.: ЦНИИатоминформ, 1975. Вып. 20 (1). С. 13—28.
- Виноградов В.Н., Гай Е.В., Работнов Н.С. Обзорная информация ОБ-125 ФЭИ. Обнинск, 1981.
- 11. ENDF/B, Summary documentation / Compiled by D. Garber. BNL-17541 (TNDF-201). Brookhaven, 1975.
- Nuclear Standard Reference Data: Proc. of Advisory Meeting. Gell, Belgium, 12—16 Nov., 1984. Vienna: IAEA. 1985.
- 13. UKNDL—80, Contents and documentation / Compiled by O. Schverer. IAEA-NDC-30 Vienna: IAEA, 1980.
- 14. JENDL—1, Japanese Evaluated Nuclear Data Library, Version-1. IAEA-NDS-18. Vienna: IAEA, 1979.
- 15. Многогрупповое приближение в теории переноса нейтронов / М.Н. Николаев, Б.Г. Рязанов, М.М. Савоськин, А.М. Цибуля. М.: Энергоатомиздат, 1984.
- 16. Групповые константы для расчета реакторов и защиты / Л.П. Абагян, Н.О. Базазянц, М.Н. Николаев, А.М. Цибуля. М.: Энергоиздат, 1981.
- 17. Уиттекер Э.Т., Ватсон Дж.Н. Курс современного анализа: Пер. с англ. М.: Физматгиз, 1963. Т. 1.
- 18. Лаврентьев М.А., Шабат Б.В. Методы теории функций комплексного переменного. М.: Физматгиз, 1958.
- 19. Чью Дж. Аналитическая теория S-матрицы: Пер. с англ. М.: Мир, 1968.
- 20. Голдман С. Теория информации: Пер. с англ. М.: Изд-во иностр. лит., 1957.
- 21. Сеге Г. Ортогональные многочлены: Пер. с англ. М.: Физматгиз, 1962.
- 22. Курош А.Г. Курс высшей алгебры. М.: Физматгиз, 1963.
- 23. Уолш Дж. Л. Интерполяция и аппроксимация рациональными функциями в комплексной области: Пер. с англ. М.: Изд-во иностр. лит., 1961.
- 24. Маркушевич А.И. Теория аналитических функций. М.: Наука, 1967. Т. 1.
- Люк Ю. Специальные математические функции и их аппроксимации: Пер. с англ. М.: Мир, 1980.
- 26. Common A.K. // J. Phys. 1982. Vol. 15. P. 3665-3667.
- 27. Мишина А.П., Проскуряков И.В. СМБ. Высшая алгебра. М.: Физматгиз, 1962.
- Данилов В.Л., Иванова А.Н., Исакова Е.К. и др. СМБ. Математический анализ. М.: Физматгиз, 1962.
- 29. Fleischer J. // J. Math.Phys. 1973. Vol. 14. No. 2. P. 246-248.
- 30. Гай Е.В. Препринт ФЭИ-1582. Обнинск, 1984.
- 31. Алберг Дж., Нильсон Э., Уолш Дж.Л. Теория сплайнов и ее приложения: Пер. англ. М.: Мир, 1972.
- 32. СМБ. Математическая теория планирования эксперимента / С. М. Ермаков, В.З. Бродский, А.А. Жиглявский и др. М.: Наука, 1983.

- 33. Худсон Д. Статистика для физиков: Пер. с англ. М.: Мир, 1970.
- 34. Виноградов В.Н., Гай Е.В., Работнов Н.С. Препринт ФЭИ-1328. Обнинск, 1982.
- 35. Бадиков С.А., Гай Е.В., Работнов Н.С. Препринт ФЭИ-1565. Обнинск, 1984.
- Краснопольский В.М., Каганов Б.Г., Хлебников С.Ю. // Тезисы докладов XXXIV совещания по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра. Л.: Наука, 1984. С. 399.
- Виноградов В.Н., Гай Е.В., Кононов В.Н., Работнов Н.С. // Нейтронная физика (материалы 5-й Всесоюз. конф. по нейтронной физике. Киев, 15—19 сент. 1980). М.: ЦНИИатоминформ, 1980. Ч. 4. С. 58—61.
- Бадиков С.А., Виноградов В.Н., Гай Е.В. и др. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы. М.: ЦНИИатоминформ, 1982. Вып. 3 (47). С. 66—79.
- 39. Бирюков Н.С, Журавлев Б.В., Рученко А.П. и др. // Ядерная физика. 1982. Т. 3, вып. 4. С. 814—819.
- 40. Виноградов В.Н., Гай Е.В., Глуховец А.Н. и др. // Там же. 1977. Т. 26, вып. 5. С. 936—941.
- 41. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
- 42. Adler D.B., Adler F.T. // Nuclear Data for Reactors. Vienna: IAEA, 1970. Vol. 2. P. 77-792.
- 43. Kornilov N.V., Vinogradov V.N., Gay E.V. e. a. // Nuclear Data Science and Technology. Brussels: Inst. Exper. Phys. 1983. P. 679–680.
- 44. Грудзевич О.Т., Давлетшин А.Н., Типунков А.О. и др. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы. М.: ЦНИИатоминформ, 1983. Вып. 2(51). С. 3—15.
- Давлетшин А. Н., Типунков А. О., Тихонов С. В. и др. // Нейтронная физика (материалы 6-й Всесоюз. конф. по нейтронной физике. Киев, 2—6 окт. 1983).
 М.: ЦНИИатоминформ, 1983. Ч. 2. С. 164—167.
- 46. Грудзевич О. Т., Давлетшин А. Н., Типунков А. О. и др. // Там же. С. 181-184.
- 47. Виноградов В.Н., Гай Е.В., Работнов Н.С. // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. 1981. Т. 21, № 8. С. 1557—1559.
- 48. Кульбак С. Теория информации и статистика: Пер. с англ. М.: Наука, 1967.
- 49. Ахиезер Н.И. Классическая проблема моментов. М.: Физматгиз, 1961.
- 50. Синица В.В., Абагян Л.П., Базазянц Н.О. и др. // Ядерно-физические исследования в СССР. М.: ЦНИИатоминформ, 1979. Вып. 27. С. 31—38.
- 51. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979.
- 52. Василенко Г.И. Теория восстановления сигналов. О редукции к идеальному прибору в физике и технике. М.: Сов. радио, 1979.
- 53. Лукьянов А.А. Структура нейтронных сечений. М.: Атомиздат, 1978.
- 54. Виноградов В.Н., Гай Е.В., Работнов Н.С., Филиппов В.В. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы. 1979. Вып. 3(34). С. 70—72.
- 55. Филиппов В.В., Николаев М.Н. Бюллетень информационного центра по ядерным данным. М.: Атомиздат, 1966. Вып. 111. С. 102—107.
- 56. Mughabhab S., Garber D. Neutron Cross-Sections. BNL-325. Third Ed. Brookhaven, 1973. Vol. 1.

- 57. Бычков В.М., Возяков В.В., Манохин В.Н. и др. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы. М.: ЦНИИатомининформ, 1976. Вып. 23.
- Филиппов В.В., Николаев М.Н. Доклад АСС-68-23 на англо-советском семинаре «Ядерные константы для расчета реакторов» (Дубна, 1968). INDC-ССР 16/1. Vienna: IAEA, 1971. Р. 68—73.
- Деч Г. Руководство к практическому использованию преобразования Лапласа и Z-преобразования. М.: Наука, 1971.
- Кузнецов В.А., Грязнов Г.М., Артюхов Г.Я. и др. // Атомная энергия. 1974. Т. 36, № 6. С. 450—457.
- Абагян Л.П., Николаев М.Н., Синица В.В. // ВАНТ, серия: Ядерные константы. М.: Атомиздат, 1972. Вып. 9. С. 146—175.
- 62. Бадиков С.А., Виноградов В.Н., Гай Е.В., Работнов Н.С. // Атомная энергия. 1984. Т. 56, вып. 1. С. 20—25.
- 63. Виноградов В.Н., Гай Е.В., Работнов Н.С. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы. М.: ЦНИИатоминформ, 1977. Вып. 25. С. 81—84.
- 64. Бадиков С.А., Блохин А.И., Гай Е.В., и др. // Там же. 1984. Вып. 3(57). C 28-41.
- 65. Виноградов В.Н., Гай Е.В., Работнов Н.С. // Там же. 1976. Вып. 21. С. 21-31.
- 66. Будник А.П., Гай Е.В., Работнов Н.С. Препринт ФЭИ-583. Обнинск, 1975.
- 67. Виноградов В.Н., Гай Е.В., Работнов Н.С. // Прикладная ядерная спектроскопия. М.: Энергоатомиздат. 1982. Вып. 11. С. 128—135.
- 68. Бадиков С.А., Гай Е.В., Работнов Н.С., Синица В.В. Препринт ФЭИ-1580. Обнинск, 1984.
- Бадиков С.А., Виноградов В.Н., Гай Е.В., Работнов Н.С. Препринт ФЭИ-1279. Обнинск, 1982.
- Виноградов В.Н., Гай Е.В., Работнов Н.С. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы. М.: ЦНИИатоминформ, 1978. Вып. 29. С. 37—40.
- 71. Виноградов В.Н., Гай Е.В., Работнов Н.С. // Там же. 1981. Вып. 42. С. 9-12.
- 72. Виноградов В.Н., Гай Е.В., Работнов Н.С. Препринт ФЭИ-513. Обнинск, 1974.
- 73. Виноградов В.Н., Гай Е.В., Работнов Н.С. Препринт ФЭИ-554. Обнинск, 1975.

О влиянии энергетической зависимости $\overline{v}(E)$ при *E* менее 1 эВ на групповые константы ²³⁹Pu в нижних группах

А. Г. Гусейнов, М. А. Гусейнов, Н. С. Работнов

ON THE EFFECT OF $\overline{v}(E)$ ENERGY DEPENDENCE AT E < 1 eV ON THE GROUP CONSTANTS OF Pu-239 IN THE LOWEST GROUPS. The effect is estimated of the energy dependence of the average number of fission prompt neutrons on energy for Pu-239 on the group cross-sections functionals in BNAB-26 system. This effect is shown to result in a significant dependence of $\overline{v}(E)$ averaged over maxwellian neutron spectrum on the neutron gas temperature T. $\overline{v}(E)$ decreases by approximately 1 % when T increases from 300 K to 2000 K. Taking this dependence into account may improve the predictability of the characteristics of the plutonium-fueled systems.

Результаты измерений среднего числа мгновенных нейтронов деления $\overline{v}(E_n)$ в реакции ²³⁹ Pu(*n*, *f*) при энергиях $E_n \leq 1$ эВ указывают на существование заметной энергетической зависимости $\overline{v}(E_n)$ в этой области [1—4]. В работе [5] были выполнены прецизионные измерения средней кинетической энергии осколков деления в той же реакции для той же области энергий. Сопоставление этих результатов и систематизированных данных [1-4] с использованием энергетического баланса приводит авторов [5] к выводу, что физической причиной вариаций $\overline{v}(E_n)$ и $\overline{E}_k(E_n)$ является различие порядка 2 % в величинах \overline{v} для состояний компаунд-ядра 0^+ и 1^+ , соответствующих ближайшему к энергии связи «отрицательному» уровню ²⁴⁰Pu (0^+) и первому резонансу с энергией $E_n^0 = 0,299$ эВ (1⁺). На рисунке воспроизведена систематика из работы [5], причем для точек, взятых из разных работ, использованы одинаковые обозначения. Детальные ссылки можно найти в работе [5]. В настоящем сообщении оценивается для нижних энергетических групп влияние указанного эффекта на усредненные значения \overline{v} , используемые в 26-групповой системе констант [6], в частности на зависимость их от температуры нейтронного спектра и сечения разбавления при учете резонансной само экранировки. (В дальнейшем для краткости вместо E_n будем использовать обозначение E.)

Экспериментальные точки на рисунке соответствуют средним значениям числа мгновенных нейтронов на акт деления при фиксированной энергии падающих нейтронов. В предположении, что значения $\overline{v}(E_n)$ различаются для двух спиновых подсистем, но сами от энергии не зависят, зависимость $\overline{v}(E)$ дается выражением

ВАНТ, сер. Ядерные константы, 1988, № 4, с. 17-21.



Зависимость среднего числа мгновенных нейтронов деления для ²³⁹Pu при энергии нейтронов, вызывающих деление энергии менее 1 эВ: • — экспериментальные данные, систематизированные в работе [1]; • — результаты усреднения по максвелловскому спектру (4); • — пересчет в \overline{v} (E_n) зависимости от E_n средней кинетической энергии осколков, измеренной в работе [1]. Сплошные кривые — расчет зависимости \overline{v} (E_n) в предположении, что эти значения различаются для резонансов 0⁺ и 1⁺ на 0,059; жирная кривая взята из работы [1], тонкая рассчитана нами в двухрезонансном приближении, параметры которого приведены в табл. 1

$$\overline{\mathbf{v}}(E) = \left[\sigma_f^1(E)\overline{\mathbf{v}}^1 + \sigma_f^0(E)\overline{\mathbf{v}}^0\right] / \left[\sigma_f^1(E) + \sigma_f^0(E)\right],\tag{1}$$

где \overline{v}^0 и \overline{v}^1 — постоянные значения \overline{v} для резонансов 0^+ и 1^+ , а σ_f^i — вклады соответствующих резонансов в сечение деления.

Сплошной жирной кривой на рисунке изображена расчетная зависимость (1) из работы [5]. Такая кривая рассчитана нами в двухрезонансном приближении, т. е. в предположении, что вклад в полное сечение и сечение деления дают только два упомянутых резонанса (фактически этот вклад составляет в рассматриваемой области около 90 %). Эти две кривые весьма близки. При расчете использовались резонансные параметры для ²³⁹Pu из работы [7]. Сече-

ния, измеренные в барнах, при этом имеют вид (в пренебрежении эффектом Доплера)

$$\sigma_t(E) = 0.6537 / \sqrt{E} \sum_{J=0,1} \frac{G_J^t + H_J^t \left[\left(E - E_J^0 \right) / \gamma_J \right]}{\gamma_J \left\{ 1 + \left[\left(E - E_J^0 \right) / \gamma_J \right]^2 \right\}} + \sigma_{pot};$$
(2)

$$\sigma_{f}(E) = 0,6537/\sqrt{E} \sum_{J=0,1} \frac{G_{J}^{f} + H_{J}^{f} \left[\left(E - E_{J}^{0} \right) / \gamma_{J} \right]}{\gamma_{J} \left\{ 1 + \left[\left(E - E_{J}^{0} \right) / \gamma_{J} \right]^{2} \right\}}.$$
(3)

Численные значения параметров приведены в табл. 1, при этом $\sigma_{pot} = 10,2$ б.

Таблица 1.

Значения параметров резонансной структуры сечений ²³⁹Ри при *E* менее 1 эВ [7] для получения сечения (2)—(3), б

E_J^0 , $\mathbf{\mathfrak{sB}}$	J	G_J^f	H_J^f	G_J^t	H_J^t	γ_J
-0,260	0	0	31,92	0	45,21	0,100
0,299	1	129,08	3,32	220,78	6,07	0,0471

Для коэффициентов \overline{v}^J в выражении (1) были использованы значения $\overline{v}^0 = 2,886$ и $\overline{v}^1 = 2,827$, полученные при нормировке на величину $\overline{v} = 2,862$ для тепловых нейтронов (соответствующую кривой из работы [5]) и при использовании $\Delta v = \overline{v}^0 - \overline{v}^1 = 0,059$ из той же работы [5].

Сначала оценим простейший эффект — зависимость значения \overline{v} , усредненного по максвелловскому спектру нейтронов, от температуры этого спектра, т. е.

$$\langle \overline{\mathbf{v}} \rangle (T) = \frac{\int_{0}^{\infty} dE \varphi(E,T) \Big[\overline{\mathbf{v}}^{0} \sigma_{f}^{0}(E) + \overline{\mathbf{v}}^{1} \sigma_{f}^{1}(E) \Big]}{\int_{0}^{\infty} dE \varphi(E,T) \Big[\sigma_{f}^{0}(E) + \sigma_{f}^{1}(E) \Big]}, \qquad (4)$$

$$\overline{E} \exp(-E/kT) \Big/ \sqrt{\pi(kT)^{3}}.$$

где $\varphi(E,T) = 2\sqrt{E} \exp(-E/kT)/\sqrt{\pi(kT)^3}$

Полученные значения для T = 300 - 10000 также нанесены на рисунке (крупные точки), причем температура T выражена в электронвольтах. Зависимость $\langle \overline{v} \rangle(T)$ не повторяет $\overline{v}(E)$, но максимальная величина эффекта (уменьшения $\langle \overline{v} \rangle$) также достигает около 1 %.

Были также рассчитаны различные функционалы сечении для 25-й и 24-й групп 26-групповой системы констант, чтобы проиллюстрировать влияние

энергетической зависимости $\overline{v}(E)$ на средние величины $\langle \overline{v} \rangle(T)$, получаемые с учетом резонансной самоэкранировки сечений. Вычислялись следующие групповые средние: $\langle 1/(\sigma_t + \sigma_0) \rangle_{\Delta E}$; $\langle \sigma_f / (\sigma_t + \sigma_0) \rangle_{\Delta E}$; $\langle v\sigma_f / (\sigma_t + \sigma_0) \rangle$, где ΔE — энергетический интервал усреднения; σ_0 — сечение разбавления, для $\Delta E_{25} = 0.215 \div 0.465$ эВ и $\Delta E_{24} = 0.465 \div 1$ эВ соответственно $\sigma_0 = 0$ и $\sigma_0 = 100$ б. Скобки $\langle \rangle$ по-прежнему означают усреднение по максвелловскому спектру, а сокращенное обозначение $v\sigma_f$ заменяет $\overline{v}^0 \sigma_f^0(E) + \overline{v}^1 \sigma_f^1(E)$. Символом $\langle 1 \rangle$ обозначается нормировка — интеграл от спектра по интервалу ΔE . Результаты сведены в табл. 2, там же приведены и некоторые отношения этих функционалов, в том числе итоговая величина — «блокированное» значение \overline{v}

$$\langle \overline{\mathbf{v}} \rangle (T, \sigma_0) = \langle \mathbf{v} \sigma_f / (\sigma_t + \sigma_0) \rangle / \langle \sigma_f / (\sigma_t + \sigma_0) \rangle.$$
 (5)

Видно, что $\langle \overline{v} \rangle$ — блок для 25-й группы практически не зависит от температуры нейтронного спектра, а для 24-й группы зависит слабо и в отличие от неблокированного значения, усредненного по полному спектру, увеличивается с ростом *T*. Однако оба эти значения, например при kT = 0,0253 эВ, существенно меньше, чем «тепловое» \overline{v} для моноэнергетических нейтронов с E = 0,0253 эВ.

Таблица 2.

	Функционалы							
<i>Т</i> , К (эВ)	$\left\langle \frac{1}{\sigma_t + \sigma_0} \right\rangle$	$\left\langle \frac{\sigma_f}{\sigma_t + \sigma_0} \right\rangle$	$\left\langle \frac{\mathbf{v}\sigma_f}{\sigma_t + \sigma_0} \right\rangle$	$\left\langle \frac{\mathbf{v}\sigma_f}{\sigma_t + \sigma_0} \right\rangle / \left\langle \frac{1}{\sigma_t + \sigma_0} \right\rangle$	$\left\langle \frac{\mathbf{v}\sigma_f}{\sigma_t + \sigma_0} \right\rangle / \left\langle \frac{\sigma_f}{\sigma_t + \sigma_0} \right\rangle$			
1	2	3	4	5	6			
		Для 24-й гр	уппы ΔE =	$= (0,466 \div 1,0) \Im B, \sigma_0 = 0$	б			
300	2,951(-3)	5,832(-1)	1,656	561,3	2,840			
(0,0253)								
500	3,448(-3)	5,825(-1)	1,654	479,2	2,840			
(0,04217)								
1000	4,790(-3)	5,790(-1)	1,646	343,7	2,844			
(0,08433)	<		4 680		• • • •			
2000	6,902(-3)	5,720(-1)	1,628	235,9	2,846			
(0,16867)	0.050(2)	5 (70(1)	1 (17	200 7	2 0 4 0			
3000	8,059(-3)	5,679(-1)	1,617	200,7	2,848			
(0,2550)	0.142(2)	5 620(1)	1 607	175 9	2 850			
(0.4217)	9,142(-5)	5,059(-1)	1,007	173,0	2,830			
10000	1 001(-2)	5 606(-1)	1 598	159.6	2 851			
(0.8433)	1,001(-2)	5,000(-1)	1,570	100,0	2,001			
(0,0100)								

Зависимость от температуры максвелловского спектра *Т* функционалов сечений, усредненных по групповым интервалам 24-й и 25-й групп

О влиянии энергетической зависимос	ги ν(<i>E</i>) при <i>E</i> менее :	 эВ на групповые конста 	анты ²³⁹ Pu
------------------------------------	---------------------------------------	--	------------------------

1		,			
1	2	3	4	5	6
		Д	(ля 24-й гр <u>у</u>	уппы $\sigma_0 = 100$ б	
300	2,258(-3)	4,515(-1)	1,282	567,9	2,840
(0,0253)					
500	2,509(-3)	4,365(-1)	1,239	493,9	2,840
(0,04217)					
1000(0,08	3,068(-3)	4,011(-1)	1,143	372,3	2,843
433)					
2000	3,783(-3)	3,573(-1)	1,017	268,7	2,845
(0,16867)					
3000	4,133(-3)	3,353(-1)	9,543(-1)	230,9	2,847
(0,2530)					
5000	4,445(-3)	3,156(-1)	8,989(-1)	202,3	2,848
(0,4217)					
10000	4,684(-3)	3,004(-1)	8,559(-1)	182,7	2,849
(0,8433)					
300	4,307(-4)	5,895(-1)	1,669	3874	2,831
(0,0253)					
500	3,978(-4)	5,685(-1)	1,665	4186	2,830
(0,04217)					
1000	6,788(-3)	5,873(-1)	1,662	244,8	2,830
(0,08433)					
2000	2,446(-3)	5,866(-1)	1,660	678,9	2,831
(0,16867)					
3000	1,353(-3)	5,863(-1)	1,660	8940	2,831
(0,2530)					
5000	1,549(-3)	5,861(-1)	1,659	1071	2,831
(0,4217)					
10000	1,389(-3)	5,860(-1)	1,660	1194	2,831
(0,8433)					
	Дл	ія 25-й гру	ппы $\Delta E = ($	$0,215 \div 0,465)$ $3B$, $\sigma_0 = 10$	00 б
300	4,114(-4)	5,652(-1)	1,600	3889	2,831
(0,0253)					
500	3,795(-4)	5,661(-1)	1,602	4222	2,830
(0,04217)	, , , ,	, , , ,	-		
1000	4,272(-4)	5,621(-1)	1,590	3724	2,830
(0,08433)			-		
2000	5,230(-4)	5,559(-1)	1,573	3008	2,830
(0,16867)			-		
3000	5,691(-4)	5,530(-1)	1,565	2750	2,830
(0,2530)		/	-		
5000	6,07(-4)	5,504(-1)	1,558	2551	2,831
(0,4217)	/				
10000	6,442(-4)	5,483(-1)	1,552	2409	2,831
(0.8433)		, í			

Продолжение таблицы 2

С учетом использованных приближений оценки, проведенные в настоящей работе, являются достаточно грубыми, однако они дают основания полагать, что учет эффекта зависимости $\overline{v}(E)$ более точными методами позволит повысить надежность предсказания характеристик тепловых систем с плутониевым топливом.

Список литературы

- 1. Baldeman J.W. Proc. Intern. Specialists Symp. on Neutron Standarts and Applications. Gaitersburg: NBS 6P 493, 1977. P. 182.
- 2. Weinstein, Reed R. Block R.C. Proc. 2nd IAEA Symp. on Physics and Chem. of Fission. Vienna, 1969. P. 447.
- 3. Hockenbury R.W., Reed R.L., Block R.C. Proc. 3rd IAEA Symp. on Phys. and Chem. of Fission. Rochester, 1973. Vol. 2, p. 502.
- 4. Gwin R.L., Spencer R.R., Ingle R.W. Nucl. Phys. Sci. and Engng, 1984, vol. 87, p. 381.
- 5. Walsh R.L., Baldeman J.W. Nucl. Phys, 1986, vol. A451, p. 113.
- 6. Абагян Л.П. и др. Групповые константы для расчета реакторов и защиты. М.: Энергоиздат, 1981.
- 7. Колесов В.В., Лукьянов А.А. Препринт ФЭИ-1404-2. Обнинск, 1983.

Статья поступила в редакцию 25 января 1988 г.

Вероятность и средняя кинетическая энергия осколков деления в простейшей двумерной модели

Н. С. Работнов, А. А. Серёгин

Физико-энергетический институт, Обнинск

(Поступила в редакцию 9 марта 1987 г.)

Зависимость средней кинетической энергии осколков деления от энергии возбуждения анализируется в одномерной модели деления и двух вариантах простой двумерной модели: с дискретным и непрерывным спектром «поперечной» координаты. Наблюдаемые вариации средней кинетической энергии качественно можно объяснить только в двумерной модели с дискретным спектром. В той же модели проницаемость двугорбого барьера медленнее выходит на асимптотическое значение и обнаруживает немонотонную зависимость выше барьера, что также согласуется с наблюдаемыми фактами.

Средняя кинетическая энергия осколков \overline{E}_k , являющаяся одной из важнейших величин, характеризующих продукты деления ядер, может зависеть от квантовых характеристик делящегося ядра, что должно приводить к вариациям в зависимости \overline{E}_k от энергии возбуждения в околобарьерной области. Впервые на такую возможность указал О. Бор [1]. При делении резонансными нейтронами \overline{E}_k меняется от резонанса к резонансу, впервые об этом сообщалось в [2], краткий обзор работ на эту тему содержится в недавней статье [3]. При делении быстрыми нейтронами указанные вариации имеют вид отклонений от линейной энергетической зависимости, в среднем наблюдающейся на больших энергетических интервалах (см. [4-6]). Отклонения эти невелики (составляют несколько сот кэВ), и наблюдать их можно только потому, что \overline{E}_k является, по-видимому, наиболее точно измеряемой характеристикой процесса деления — достигнута точность порядка 0,1 % (см. [4]). В настоящее время интерес к этому вопросу возродился с появлением работы [7], в которой при делении нейтронами²³⁴U наблюдалось уменьшение \overline{E}_k примерно на 0,6 МэВ в области вибрационного резонанса в сечении деления при $E_n \approx 0.8$ МэВ. Этот эффект коррелирует с нерегулярностями в угловых распределениях осколков и усиливается, если регистрировать осколки, вылетающие под определенными углами.

В настоящей работе оценивается возможное влияние на \overline{E}_k сложной формы барьера деления в рамках простейшей двумерной модели, когда учитывается распределение полной энергии возбуждения по двум степеням свободы: делительной с безразмерной координатой x и еще одной, которую мы

Ядерная физика, 1988, т. 47, вып. 3, с. 643-647.

будем условно называть «поперечной», с безразмерной координатой y. Ее физическая природа на данной первоначальной стадии обсуждения вопроса не существенна, важно лишь предположение, что энергия, сосредоточенная в движении по x, переходит в кинетическую энергию осколков, а энергия по y — в другие составляющие энерговыделения, прежде всего испускание вторичных нейтронов и гамма-лучей. Рассматриваются два варианта модели — с дискретным и непрерывным спектрами поперечной координаты.

Прежде чем переходить к расчетам вероятности и средней кинетической энергии осколков деления в двумерном случае, рассмотрим новую, удобную для наших целей параметризацию барьеров деления. Как известно, деление ядра обычно моделируется процессом прохождения частицей одномерного потенциального барьера V(x). Для большинства задач двугорбый барьер достаточно аппроксимировать тремя сопряженными параболами. Для рассмотрения кинетической энергии нужно аппроксимировать асимптотику барьера. Это можно сделать с помощью рациональных функций следующим образом:

$$V(x) = \begin{cases} V_1 = E_A / \left(1 + \frac{\hbar \omega_A}{2E_A} x^2 \right) & \text{при } x \le a, \end{cases}$$

$$V(x) = \begin{cases} V_{II} = E_c + \frac{\hbar \omega_c}{2} \frac{\omega_c}{(x - x_c)^2} & \text{при } a \le x \le b, \end{cases} (1)$$

$$\begin{bmatrix} I & 2 & \omega_A \\ V_{III} &= -Q_f + (E_B + Q_f) / \left[1 + \frac{\hbar \omega_B}{2E_B} \frac{\omega_B}{\omega_A} (x - x_B)^2 \right] \quad \text{при } x \ge b,$$

где x — безразмерная координата, E_A и E_B — высоты максимумов, E_c — значение в минимуме между горбами, $\hbar\omega_i$ — параметры, характеризующие кривизну потенциальной кривой в трех экстремумах, Q_f — асимптотическое значение потенциала на бесконечности справа. Для того чтобы кривая V(x) была гладкой, необходимо, чтобы в точках сшивания a и b выполнялись соотношения

$$V_{\rm I}(a) = V_{\rm II}(a), \ V_{\rm II}(b) = V_{\rm III}(b), \ V'_{\rm I}(a) = V'_{\rm II}(a), \ V'_{\rm II}(b) = V'_{\rm III}(b).$$

Решая эту систему для заданных параметров барьера E_A , $\hbar\omega_A$, E_C , $\hbar\omega_C$, E_B , $\hbar\omega_B$ и Q_f , найдем a, x_C , b, x_B , определив тем самым V(x). Таким образом, предлагаемая параметризация оперирует с тем же набором параметров, что и общеупотребительное описание тремя сопряженными параболами, что весьма удобно, так как для многих ядер этот набор уже определен [8].

Для нахождения проницаемости двугорбого барьера в зависимости от энергии и положения квазистационарных состояний во второй яме удобно воспользоваться квазиклассическим приближением в формулировке Цваана, которое применимо не только под барьером, но и выше барьера, поскольку учитывает наряду с действительными и комплексные точки поворота. Необходимые формулы для вычисления проницаемости двугорбого барьера получены в [9]. Ввиду громоздкости здесь они не воспроизводятся, но численные результаты, приводимые ниже, были получены с их использованием. Для барьера деления ядра ²³⁵U, согласно [8], рекомендуется следующий набор параметров: $E_A = 6,15$, $\hbar\omega_A = 0,8$, $E_C = 2,5$, $\hbar\omega_C = 1,0$, $E_B = 5,9$, $\hbar\omega_B = 0,52$ (все в МэВ). Для новой параметризации необходимо ввести также $Q_f = 166$ МэВ. Рассчитанный потенциальный барьер изображен на рис. 1, где показаны также семь квазистационарных состояний, существующих во второй яме. Для одномерного случая \overline{E}_k просто совпадает с $E + Q_f$.

Рассмотрим простейшую двумерную модель деления, в которой можно отделить делительную степень свободы *x* от поперечной *y*, сперва для случая, когда движение, соответствующее поперечной координате, имеет дискретный, а именно осцилляторный спектр. Тогда потенциальная энергия

$$V(x,y) = V_1(x) + V_2(y),$$

где $V_1(x)$ — двугорбая потенциальная кривая, а $V_2(y) = \hbar \omega_y y^2/2$. Переменные в уравнении Шредингера при этом разделяются, и энергия возбуждения

$$E = E_x + E_y = E_x + \hbar \omega_y \left(n + \frac{1}{2} \right).$$
(2)

Проницаемость такого барьера будет суммой проницаемостей

$$\overline{P}(E) = \sum_{i=0}^{N} a_i P(E - i\hbar\omega_y) / \sum_{i=0}^{N} a_i , \qquad (3)$$

где $P(E - i\hbar\omega_y)$ — проницаемости одномерного двугорбого барьера. Весовые коэффициенты a_i , определяют долю каждого из поперечных возбуждений в падающей волне, т. е. в рассматриваемой модели задают граничные условия на $-\infty$ по x и являются феноменологически варьируемыми параметрами. Аналогично для средней кинетической энергии осколков получаем

$$\overline{E}_{\kappa} = \sum_{i=0}^{N} a_i \left(E + Q_f - i\hbar\omega_y \right) P\left(E - i\hbar\omega_y \right) / \sum_{i=0}^{N} a_i P\left(E - i\hbar\omega_y \right).$$
(4)

Так как проницаемость P(E) очень быстро убывает в подбарьерной области с уменьшением аргумента, то в суммах выражений (3), (4) практически играют роль только два первых слагаемых. Оставляя их, получаем (полагая $a \equiv a_1/a_0$)

$$\overline{P}(E) = \left[P(E) + aP(E - \hbar\omega_y) \right] / (1+a),$$
(5)

$$\overline{E}_{\kappa} = \frac{\left(E + Q_f\right)P(E) + a\left(E + Q_f - \hbar\omega_y\right)P\left(E - \hbar\omega_y\right)}{P(E) + aP\left(E - \hbar\omega_y\right)}.$$
(6)

Обозначение а в смысле (1) в дальнейшем не употребляется.

На рис. 2 показана зависимость $\overline{P}(E)$ от энергии возбуждения для трех значений $\hbar \omega_y$ и *а*. Обращает на себя внимание немонотонная зависимость $\overline{P}(E)$ от энергии возбуждения выше барьера деления, где наблюдаются наиболее сильные изменения по сравнению с одномерным случаем.



Рис. 1. Потенциальный барьер деления для ядра ²³⁵U. Горизонтальные уровни во второй яме соответствуют положениям квазистационарных состояний в ней

Рис. 2. Зависимость проницаемости двугорбого барьера от энергии возбуждения для ядра ²³⁵U в рамках двумерной модели. Штриховая кривая — проницаемость одномерного барьера (*a* = 0), тонкие линии — $\hbar \omega_y = 0,5$ МэВ и толстые — $\hbar \omega_y = 1$ МэВ. Кривые 1 соответствуют *a* = 1, кривые 2 — *a* = 10

На рис. 3 представлены результаты расчетов вариации средней кинетической энергии

$$\Delta \overline{E}_{\kappa}(E) = \overline{E}_{\kappa} - E - Q_f$$

в зависимости от энергии для трех значений $\hbar \omega_y$ и *а*. Видно, что в зависимости $\Delta \overline{E}_{\kappa}(E)$ наблюдаются структуры, связанные с резонансами в проницаемости. Структуры имеют вид минимумов, располагающихся при энергиях резонансов. Их глубина составляет несколько сот кэВ, и с ростом $\hbar \omega_y$ они смещаются в надбарьерную область, так же как и соответствующие им нерегулярности в вероятности деления.

Фактически, делящееся ядро представляет собой систему с большим числом степеней свободы, и мы приближенно заменяем их все, кроме делительной, одной единственной. Поэтому необходимо рассмотреть и случай, когда эта поперечная степень свободы имеет непрерывный энергетический спектр, и соответственно проницаемость барьера и кинетическая энергия усредняются по некоторому распределению. Сохраняя для полной энергии возбуждения символ E, обозначим энергию, сосредоточенную в поперечной степени свободы ε , а ее распределение $w(\varepsilon)$. Тогда средняя проницаемость барьера $\overline{P}(E)$ и средняя кинетическая энергия $\overline{E}_{\kappa}(E)$ определяются выражениями

$$\overline{P}(E) = \int_{0}^{E} P(\varepsilon) w(E - \varepsilon) d\varepsilon, \qquad (7)$$



Рис. 3. Вариации средней кинетической энергии осколков деления в зависимости от энергии возбуждения в рамках двумерной модели с $\hbar\omega_y = 0.25$ (I), 0,5 (II) и 1 МэВ (III) при значениях параметра a = 0.1 (a), 1 (б) и 10 (в)

$$\overline{E}_{\kappa}(E) = Q_f + \int_{0}^{E} \varepsilon P(\varepsilon) w(E - \varepsilon) d\varepsilon / \overline{P}(E) .$$
(8)

О форме распределения $w(\varepsilon)$ из общих соображений трудно высказать сколько-нибудь конкретные предположения, да его точный вид и не является особенно существенным ввиду общей схематичности исследуемой модели. Для качественного рассмотрения отличия этого случая от дискретного спектра возьмем простейшую — ступенчатую форму распределения

$$w(E-\varepsilon) = \begin{cases} 1/\Delta, & E-\Delta \le \varepsilon \le E, \\ 0, & \varepsilon \le E-\Delta, \ \varepsilon > E. \end{cases}$$
(9)

Подбарьерные резонансы проницаемости имеют приближенно лоренцову форму, поэтому мы получим зависимости $\overline{P}(E)$ и $\overline{E}_{\kappa}(E)$, определяемые выражениями (7), (8) для распределения (9) в случае лоренцевского резонанса единичной амплитуды, приняв его полуширину за единицу измерения энергии, т. е. для $P(\varepsilon) = [1 + (\varepsilon - \varepsilon_0)^2]^{-1}$, где ε_0 — резонансная энергия. Выполняя интегрирование, получим

$$\overline{P}(E,\varepsilon_0,\Delta) \equiv \frac{I_0}{\Delta} = \frac{1}{\Delta} \Big[\operatorname{arctg}(E-\varepsilon_0) - \operatorname{arctg}(E-\varepsilon_0-\Delta) \Big], \quad (10)$$

$$\overline{E}_{\kappa}(E,\varepsilon_{0},\Delta) = \frac{1}{I_{0}} \left(\frac{1}{2} \ln \left(\frac{1 + (E - \varepsilon_{0})^{2}}{1 + (E - \varepsilon_{0} - \Delta)^{2}} \right) + \varepsilon_{0} I_{0} \right).$$
(11)

В качестве количественного примера на рис. 4 представлены расчеты по формулам (10), (11) для $\varepsilon_0 = 100$, $\Delta = 10$. Видно, что при непрерывном спектре по *у* нерегулярность в $\overline{E}_{\kappa}(E)$, соответствующая резонансу проницаемости, имеет вид ступеньки, а не минимума, и сам резонанс размывается.



Рис. 4. Влияние брейт-вигнеровского резонанса проницаемости (кривая 1) на энергетическую зависимость проницаемости и средней кинетической энергии осколков в двумерной модели со ступенчатым спектром энергии поперечной степени свободы (распределение (8)) при $\varepsilon_0 = 100, \Delta = 10$. Кривая 2 — размытый резонанс проницаемости, 3 — зависимость $\overline{E}_k(E)$

Подытоживая, можно сказать, что в двумерной модели с дискретным спектром поперечной степени свободы качественно объясняются три наблюдаемых факта: резонансам проницаемости соответствует локальное уменьшение кинетической энергии осколков; с увеличением $\hbar\omega_y$ структурные особенности смещаются в надбарьерную область; резко затягивается выход проницаемости на асимптотическое надбарьерное значение, равное единице. При непрерывном спектре поперечной степени свободы нерегулярности в $\overline{E}_{\kappa}(E)$ имеют вид ступенек, а не минимумов, резонансы проницаемости сильно снижаются и уширяются. Поэтому предпочтительным представляется вариант с дискретным спектром.

Литература

- Бор О. Матер. Междунар. конф. по мирному использованию атомной энергии. Женева, 1955 г. М.: Физматгиз, 1958. Т. 2, с. 175.
- Бочаров С., Дерменджиев Е., Кашукеев Н. Препринт ОИЯИ РЗ-4110. Дубна, 1968.
- 3. Walsh R.L., Boldeman J.W. // Nucl. Phys., 1986, vol. A451, p. 113.
- 4. Дьяченко П. П., Кузьминов Б. Д. // Physics and Chemistry Fission. IAEA, Vienna, 1965. Vol. 1, p. 601.
- 5. Сергачев А.И., Воробьева В.Г., Кузьминов Б.Д. и др. // ЯФ, 1968, т. 7, с. 778.

- Дьяченко П.П., Кузьминов Б.Д., Малиновский В.В. и др. // ЯФ, 1979, т. 30, с. 904.
- 7. Говердовский А.А., Кузьминов Б.Д., Митрофанов В.Ф., Сергачев А.И. // ЯФ, 1986, т. 44, с. 287.
- 8. Bjørnholm S., Lynn J. // Rev. Mod. Phys., 1980, vol. 52, p. 725.
- 9. Мастеров В.С., Серегин А.А. // ЯФ, 1978, т. 27, с. 1464.

Fission Probability and Mean Kinetic Energy of Fragments in a Simple Two-Dimensional Model

Rabotnov N. S., Seregin A. A.

The excitation energy dependence of the kinetic energy of fission fragments is analyzed making use of the one-dimensional model and of simple two-dimensional model, i. e. with discrete and continuous spectrum of the "transversal" coordinate. The observed variations of the mean kinetic energy can be qualitatively explained only in the two-dimensional model with discrete spectrum. In the same model, the penetrability of the two-hump barrier more slowly approaches its asymptotic value and shows non-monotonic dependence avobe the barrier that is in agreement with observations.

Nuclear Data Processing, Analysis, Transformation and Storage with Pade-Approximants

S. A. Badikov, E. V. Gay, M. A. Guseynov, N. S. Rabotnov

Institute of Physics and Power Engineering, Obninsk, USSR

A method is described to generate rational approximants of high order with applications to neutron data handling. The problems considered are: the approximations of neutron cross-sections in resonance region producing the parameters for Adler — Adler type formulae; calculations of resulting rational approximants' errors given in analytical form allowing to compute the error at any energy point inside the interval of approximation; calculations of the correlation coefficient of error values in two arbitrary points provided that experimental errors are independent and normally distributed; a method of simultaneous generation of a few rational approximants with identical set of poles; functionals other than LSM; two-dimensional approximation.

(Nuclear data, Pade-approximation, resonance analyses, covariational matrix, simultaneous fitting of several cross-sections, two-dimensional rational fitting)

Introduction

The main way to extract and compress useful information from experimental curves is the analytical approximation. The polynomial approximation is the simplest, best developed and most popular one.

But the physics of a problem often dictates the necessity to use more complicated functions with special analytical features. Rational functions (Pade-approximants) are extensively used in mathematical physics (see [1] for references) and offer wide opportunities especially in the case of resonance processes particularly nuclear reactions. But their application was hindered so far by two obstacles. First: rational approximants unlike polynomial ones lead to nonlinear systems of equations in the least squares method (LSM). Second is a special form of approximant's instability — real pole-zero couples. We have proposed a method to circumvent both difficulties, outlined below briefly. The method is based on the recursive calculation of many approximant s differing by the choice of interpolation knots with their subsequent statistical optimization by discrete sorting. The best fitting approximants are analyzed and noise poles removed.

A rational function f(z) = P(z)/Q(z) may be parameterized:

1. By the coefficients pn and qm of the polynomials in the numerator and denominator

$$f(z) = \sum_{n=0}^{N} p_N^n z^n / \sum_{m=0}^{M} q_M^m z^m.$$
 (1)

Proc. Conf. Nuclear Data for Science and Technology, May 13–17, 1991, Jülich, Germany, Springer-Verlag, 1991, pp. 182–187.

2. By the values of the polinomials' zeros

$$F(z) = P_N^N \prod_{n=1}^N (z - z_n) / Q_M^M \prod_{m=1}^M (z - z_m).$$
(2)

3. By the parameters of polar expansion

$$f(z) = A_{N-M}(z) + \sum_{\beta} a_{\beta} / (z - z_{\beta}) = A_{N-M}(z) + \sum_{i=1}^{l_1} \frac{a_i}{z - p_1} + \sum_{k=1}^{l_2} \frac{\alpha_k (z - \varepsilon_k) + \beta_k}{(z - \varepsilon)^2 + \gamma^2}, \quad (3)$$

4. By the very values of the function for N+M+1 argument values

$$f(z) = f(z; f(z_1), f(z_2), ..., f(z_{N+M+1}))$$
(4)

Unlike polynomial case there is no simple Lagrange-type formula for this "supporting ordinates" parameterization.

Pade-2 approximant for a function f(z) is defined as a rational function $f^{[N,M]}(z)$ coinciding with f(z) in L = N + M + 1 poins:

$$f^{[N,M]}(z_i) = f(z_i), \ i=1, 2, ..., L$$
(5)

Eqs (5) result in the linear system for coefficients which may be solved either with determinants or with the recurrent formulae. The simplest of the latter is

$$f^{L}(\gamma;z) = \frac{P_{(L-1)}(z) + \gamma(z - z_{L-1})P_{L-2}(z)}{Q_{(L-1)}(z) + \gamma(z - z_{L-1})Q_{L-2}(z)}.$$
(6)

Annotated references for corresponding algorithms may be found in [2].

Discrete optimization

An attempt to optimize a rational approximant by standard least squares methods results in very complicated set of equations within any parameterization. At the same time a rational interpolant with L supporting points may be calculated by recursive relations (6) without inversing high order matrices. We have prorosed and realised in computer codes a method of rational approximation of single variable functions based on discrete optimisation (sorting) and described in [3]. Its essential stages are: for $N_{\text{ex}} \gg L$ (N_{ex} is the number of experimental points) we choose an initial set of L supporting points z_k , F_k ; $1 \le k \le N_{\text{ex}}$ and using recursive algorithms interpolate them with a rational function. Then the values $fL(z_i)$ for $i = 1, 2, ..., N_{\text{ex}}$ and the functional to be minimized, usually

$$S = \sum_{i=1}^{N_{ex}} \left[f^{L}(z_{i}) - F_{i} \right]^{2} / 2\sigma_{1}^{2} , \qquad (7)$$

are computed defining a starting interpolant. Then iteration process begins. On its *l*-th stage one of the supporting points is replaced by another experimental point, new approximant and its functional's value S^{l} are calculated.

If $S^1 < S_{\min}^{l-1} = \min \{S^1, S^2, ..., S^{l-1}\}$, then *l*-th set of supporting points is stored as current optimum and so on.

One of the advantages of discrete optimization as compared with continuous LSM is the possibility to use a variety of functionals. Theoretical estimates show that mean quadratic deviation of the approximant found by sorting from LSM solution for $N_{ex} \gg L$ is $\approx \sqrt{N_{ex}/L}$ times less than deviation of the last from exact curve, and the approximant is statistically equivalent to LSM solution. Note that fitting of experimental data with Pade-2 approximant (without sorting!) followed by statistical optimization with supporting ordinates for variables is known as Pade-3 [4, 5].

Noise doublets

Let's increase the rank *L* in approximating a rational function $P_{N_0}(z)/Q_{M_0}(z)$. Coming to $N = N_0$, $M = M_0$, we can reproduce the function exactly with any L_0 interpolation knots. Increasing *L* we must nevertheless get $f^L(z) = P_{N_0}(z)/Q_{M_0}(z)$, i. e. an approximant of incomplete rank. With finite accuracy overranking *L* by one leads to a noise singularity in remote point, by two — results in the approximant $(Az + B)P_{N_0}(z)/(A'z + B')Q_{M_0}(z)$, where *A* and *A'*, *B* and *B'* are close pairs. That's called "noise doublet": zero at z = -B/A and a pole at z = -B'/A'. In polar expansion (3) the pole appears as a term a/(z - b) where *a* is small and b = -B'/A'. Cancellation of these almost identical binoms in the numerator and denominator corresponds to omitting the term in polar expansion. So in spite of singular instability its local character (the term a/(z - b) differs from zero considerably for *z* close to *b* only) allows to liquidate it relatively simply. These arguments are valid also when a noise poles result from random errors of input data. The poles appear mostly after overranking and indicate together with the statistical criteria that analytical information in the approximated set is exhausted.

The method was tested and applied in many practical problems. The most significant examples are:

1. Convertion to analytical form the evaluated neutron cross-section data (BOSPOR library). 144 curves were approximated with resulting 20-fold reduction of the numerical information to store. Fig 1. shows relatively complex case of approximation. The statistical properties are discussed in the next section.

2. Complete neutron data files of the isotopes ^{14, 15}N and ¹⁹F were prepared for BROND-1 ibrary with the extensive use of Pade-approximation.

Information matrix of approximant

Supporting ordinates as parameters allow simplify and clarify the statistical analysis of resulting approximant. For the covariational matrix of supporting ordinates to be diagonal the following equations are necessary and sufficient

$$A_{\mu\nu} = \sum_{i=1}^{N_{ex}} \frac{\partial f(z_i)}{\partial f_{\mu}} \frac{\partial f(z_i)}{\partial f_{\nu}} \bigg/ \sigma_i^2 = \lambda_{\mu} \delta_{\mu\nu} \,. \tag{8}$$

Then supporting ordinates are statistically independent and their dispersions are $\Delta f_v^2 = 1/\lambda_v$. The derivatives in (8) are

$$\frac{\partial f(z)}{\partial f_{\mu}} = \frac{Q_M^2(z_{\mu})}{Q_M^2(z)} \prod_{\nu \neq \mu} \frac{(z - z_{\nu})}{(z_{\mu} - z_{\nu})}, \qquad (9)$$

(10)

and (8) is equivalent to orthogonality of the polynomials in the numerator of (9) with the weight $\left[\sigma_i^2 Q_M^4(z_i)\right]^{-1}$ on the same set of arguments $z_1, z_2, ..., z_{Nex}$. The method to construct the needed set of orthogonal polynomials is well known. If the covariational matrix is diagonal i. e. $\overline{\Delta f_{\mu} \Delta f_{\nu}} = \overline{\Delta f_{\nu}^2 \delta_{\mu\nu}}$ assuming the dispersion $\overline{\Delta^2(z)}$ small we get the mean quadratic error of the approximant's value in an arbitrary point



Fig. 1. The results of Pade-approximation of a set of experimental data on the energy dependence of $^{24}Mg(n, p)$ -reaction cross-section. The data were taken from some 20 papers. The points are unspecified and unreferenced here because the figure is purely illustrative. Error-bars are indicated for a few points only but all of them were taken into account both in computing the approximant (central solid line) and in estimating "resulting error corridor" (two side lines) using Eqs. (9), (10). All experimental errors were assumed independent and normally distributed. The number of points $N_{ex} = 269$, the number of parameters L = 37

and for a correlation coefficient of two values $f^{L}(z_1) \bowtie f^{L}(z_2)$ in two arbitrary points z_1, z_2

$$\rho(z_1, z_2) = \left[\overline{\Delta^2(z_1)}\overline{\Delta^2(z_2)}\right]^{-1/2} \sum_{\mu=1}^{L} \overline{\Delta f_{\mu}^2} \frac{\partial f^L(z_1)}{\partial f_{\mu}} \frac{\partial f^L(z_2)}{\partial f_{\mu}}, \qquad (11)$$

where $\overline{\Delta^2(z)}$ is defined by (10).

Pade-approximation with nondiagonal covariational matrix

There exists a well known anomaly in the behavior of reduced neutron widths of ²³⁵U resonances — first levels are about ten times weaker than the rest. We tried to determine short range energy dependence of $\overline{\Gamma}_n^0$ if any by Pade-approximating the cumulative reduced width as a function of resonance' number N

$$G(N) = \sum_{i=1}^{N} 2g_i \Gamma_{n_i}^0 = \overline{2g\Gamma_n^0} \sum_{i=1}^{N} x_i \equiv \overline{2g\Gamma_n^0} X(N)$$
(12)

 x_i are supposed to be χ^2 -distributed with one degree of freedom. Then covariational matrix is easily calculated

$$R_{mn} - \overline{\left(X(m) - m\right)\left(X(n) - n\right)} = \min(m, n), \qquad (13)$$

and it's inverse, the informational matrix with following non-zero elements

$$A_{nn} = 2 - \delta_{nN}; \ A_{nn\pm 1} = -I.$$
 (14)

Then the functional to be minimized is

$$S = \Delta_1^2 + \sum_{i=2}^{N} (\Delta_i - \Delta_{i-1})^2 .$$
(15)

Where Δ_i are the differences between values to be approximated and the approximant. By calculating the finite differences of the approximant we get "smoothed" dependence $2g\Gamma_n^0(N)$. The results for ²³⁵U resonances with spin J=3 are shown in Fig. 2. We are not discussing now possible physical meaning of the results but they seem to be a good demonstration of the analytical potential of Pade-approximation.

Simultaneous fitting of a few curves

We consider a problem of cross-sections fitting for different nuclear reactions going through the same compound nucleus. For the minimization we choose the standard LSM functional

$$S = \sum_{i} S_{i} = \sum_{i} \sum_{l} \left(\sigma_{i}, \exp^{(E_{1}) - \sigma_{i}^{(L)}(E_{l}, \bar{p})} \right) w_{i}^{l} , \qquad (16)$$

where w_i^l — is the statistical weight of $\sigma_i(E)$ at the energy $E = E_l$ determined by the experimental error. We use the algorithm of interpolatig a few rational curves with the same denominator optimizing the set of supporting points by sorting.



Fig.2. Left: reduced neutron widths $\Gamma_n^0(N)$ of the resonances of ²³⁵U with spin J = 3 averaged over first N levels as a function of N (squares) and the Pade-approximant (line). Right: the same for differential curve $\Gamma_n^0(N)$

The analysis of the numerators and denominators allows to select the solutions satisfying physical conditions. If the total cross-section is fitted together with all the partial ones, the approximants numerators are taken as

$$p^{(k)}(E) = p^{(t)}(E) - \sum_{i \neq k} p^{(i)}(E) \text{ or } p^{(t)}(E) = \sum_{i} p^{(i)}(E).$$

Let's consider multiband (subgroup) parameters generation. Our way to calculate them is simultaneous approximation of some cross-sections' functionals $f(\sigma_0)$, x = el, f, c as functions of "background cross-section" or by rational functions with identical denominators

$$f(\sigma_0) \equiv \left\langle \frac{1}{\sigma + \sigma_0} \right\rangle \cong \sum_{k=1}^M \frac{a_k}{\sigma_{tot,k} + \sigma_0} ,$$

$$f_x(\sigma_0) \equiv \left\langle \frac{\sigma_x}{\sigma + \sigma_0} \right\rangle \cong \sum_{k=1}^M \frac{a\sigma_{x,k}}{\sigma_{tot,k} + \sigma_0} , x = el, f, c.$$
(17)

Here σ_{el} , σ_f , σ_c are elastic, fission and capture cross-sections respectively, σ — total cross-section, background cross-section, a_k , σ_{xk} , σ_{tk} multiband parameters, M — the number of subgroups, brackets $\langle ... \rangle$ mean averaging over the group interval with standart neutron spectrum.

Table 1 contains the calculated multiband parameters compared with the results of the same calculations by momentum method for ²³⁹Pu ($\Delta E = 40.84 \div 43.54$ eV), ²³⁸U ($\Delta E = 202.1 \div 215.5$ eV), natural iron ($\Delta E = 1136.5 \div 1211.5$ eV). The functions $f(\sigma_0)$, $f_x(\sigma_0)$, x = el, f, c calculated for 23 values of σ_0 in [0,106 b] interval with

BROND resonance parameters were used as input information. In the Table Δ_x is maximum relative deviation (%) of the approximant of $\Sigma_{tot}(\sigma_0)$ and $\Sigma_x(\sigma_0)$ — self-shielded total and partial cross-sections

$$\sum_{tot}(\sigma_0) \equiv \left\langle \frac{\sigma}{\left(\sigma + \sigma_0\right)^2} \right\rangle / \left\langle \frac{1}{\left(\sigma + \sigma_0\right)^2} \right\rangle, \ \sum_x(\sigma_0) \equiv f_x(\sigma_0) / f(\sigma_0), \ x = el, \ f, \ c.$$

The needed accuracy of approximation is about 1.5%. The results in Table 1 show that the method of simultaneous approximation ensures either new quality — less subgroup number (2 instead of 3) or substantial quantitative improvement as compared to momentum method. Moreover the momentum method failed completely in case of 238 U while simultaneous approximation produced satisfactory accuracy (1.2%).

It must be stressed that multyband parameters corresponding to the results in Tables satisfy physical restrictions $\sum_{k} a_k = 1$, $\sum_{k} a_k \sigma_{tot,k} = \langle \sigma_{tot} \rangle$, $\sum_{x} \sigma_{x,k} = \sigma_{tot,k}$.

1	able	1.

N	Method	Δ_{el}	Δ_f	Δ_c	Δ_{tot}	Nuclide
2	Ι	9.5	33	31	28	²³⁹ Pu
	II	3.1	14	7.3	13	
3	Ι	1.9	0.7	4.1	3.9	
	II	1.3	3.3	2.4	5.8	
4	Ι	0.32	1.2	0.76	1.1	
	II	0.04	0.4	0.48	0.78	
2	Ι	38	-	74	53	²³⁸ U
	II	14	-	18	31	
3	Ι	12	-	10	34	
	II	3.2	-	6.4	7.3	
4	Ι	6.2	-	9.1	19	
	II	0.33	-	1.2	1.1	
2	Ι	0.41	-	23	3.1	^{nat} Fe
	II	0.26	-	1.6	0.69	
3	Ι	0.02	-	1.1	0.28	
	II	0.008	-	0.13	0.14	

The accuracies (%) of multyband calculations

Two-dimensional approximation

A straightforward generalisation of discrete optimisat ion method for the case of two variables is relatively simple. We used the approximants

$$R_{[N,M]} = P_N(x, y; \vec{p}) / Q_M(x, y; \vec{q})$$
(18)

where
$$\vec{p} = (p^{(0)}, ..., p^{(N)}), \quad \vec{q} = (q^{(0)}, ..., q^{(m)}),$$

$$p_N = \sum_{k=0}^N p^{(k)} \varphi_k , \quad q_M = \sum_{k=0}^M q^{(k)} \varphi_k$$
(19)

with the ordered products of variables' degrees for basic functions φ_k

$$\varphi_k(x, y) = x^{i_k} y^{i_k}, \ i_k \ge 0, j_k \ge 0, \ k = 0, 1, 2, \dots$$

The intermediate problem of two dimensional rational interpolation of increasing order may be solved either by using recursive relations or by matrix bordering. The latter method was used to make a computer code and solve a few test problems.

A function of the type

$$F(x, y) = \sum_{k=1}^{2} \frac{h_k}{1 + \left(\frac{x - E_{1,k}}{r_{1,k}}\right)^2 + \left(\frac{y - E_{2,k}}{r_{2,k}}\right)^2}$$
(20)

was calculated on a grid 13×10 in $[0, 1]^2$, randomized with 5 % relative error and approximated. The results are illustrated by Fig. 3.

Fig. 3. Top: the initial two-dimensional function F(x, y) (Eq(20)); $h_1 = 800$; $E_{1,1} = E_{2,1} = 0.125$; $r_{1,1} = r_{1,2} = 0.125$; $h_2 = 1000$; $E_{1,2} = 0.375$; $E_{2,2} = 0.75$; $r_{1,2} = 0.25$; $r_{2,2} = 0.125$.

Bottom: the relative error of the approximation $\Delta F/F = (F - F_{appr}) / F.$ The number of parameters L = 28, $\chi^2 = 0.981$

Further possibilities

1. Trigonometric (Pade-Fourrier) approximants may be generated by the methods almost Identical to those described above. The simplest case was successfully tested: the description of complicated angular distributions with strong forward peaks by change of the variable $x = \cos\theta$.

2. Laplace- and Z-transforms of a sum of exponents are rational functions which opens prospects of using Fade-approximations in general exponential analysis including complex periods. Some examples may be found in [3].



3. Fredholm integral equations of the second type with a rational function in the right-hand side may be solved analytically for some special forms of equation's nucleus. For examples of using this property to correct resolution and Doppler broadening in resonance analysis see again [3].

4. In the sorting method described above a single supporting point is optimized in a small iteration so that $nL(N_{ex}-L)$ sets of supporting points are considred instead of $N_{ex}!/[L!(N_{ex}-L)!]$ possible in principle (*n* is the number of big iterations, a few are usualy enough). For every set considered the functional *S* is calculated and the computer time is roughly proportional to $L(N_{ex}-L)2$. This sets practical restrictions $L \le 40$, $N_{ex} \le 500$. A method of directed instead of random search was proposed which allows to reduce the number of the functional's computations to no more than $2\log_2N_{ex} + 1$ in every small iteration with conciderable gain of speed. Some details are in [5].

Conclusions

Pade-approximants, unlike polynomial ones, provide an instrument of analytical continuation of a function under investigation which makes drastic difference. The main mathematical advantage of rational functions is of cource the existence of the poles which reproduce the poles of approximated function. If energy is the argument the real part of the pole's value more often than not may be interpreted as resonance energy and the imaginary part as a total half-width.

The supporting ordinates as a parameters to be evaluated by optimization are very convenient to visualize the statistical properties of the final approximant (error corridor, covariational matrix).

The method of discrete sorting does not require any starting set of parameters and the approximation process may be made highly automatic. If the information on experimental errors is incomplete the appearance of noise doublets is — together with and instead of χ^2 -criteria — a raliable signal to stop increasing the number of parameters.

So the rational functions (Pade-approximants) seem to provide most natural language in dealing with various problems in nuclear data domain as well as in some areas of neutron and nuclear physics in general.

References

- 1. G. Baker, P. Graves-Morris. Pade-approximants. Addison-Wesley, 1981.
- L. Wuytack, ed. Lecture Notes on Mathematics 765. Pade Approximation and its Applications. Berlin — Heidelberg — N.Y., Springer-Verlag, 1979.
- 3. V.N. Vinogradov, E.V. Gai, N.S. Rabotnov. Analytical approximation of the data in nuclear and neutron physics. Energoatomizdat, Moscow, 1987 (in Russian).
- 4. F. Nichitiu. Phase analysis in the nuclear interaction physics. Moscow, Mir, 1988 (in Russian).
- 5. S.A. Badikov, E.V. Gai, M.A. Guseinov, N.S. Rabotnov. Proc. of the Third IMSL User Group Conference, Bologna, B11, 1990.

Влияние корреляции экспериментальных данных на погрешности оцененных нейтронных сечений

С. А. Бадиков, Е. В. Гай, Н. С. Работнов

Работа посвящена недооценке погрешностей рекомендованных нейтронных сечений, полученных на основе анализа результатов измерений в рамках строгих статистических методов. Показано, что одной из причин этого является неадекватное представление исходной экспериментальной информации, в частности, пренебрежение корреляциями экспериментальных данных. На реалистических моделях и практических примерах изучено влияние корреляции экспериментальных данных. На реалистических моделях и практических примерах изучено влияние корреляции экспериментальных данных. На реалистических моделях и практических примерах изучено влияние корреляции экспериментальных данных сечений. Особое внимание уделяется корреляциям измерений, выполненных разными авторами. Рассмотрение такого вида корреляций приводит к существенному увеличению погрешностей оцененных сечений. Как следует из анализа модельных примеров, поправка может быть значительной (~70 %) даже для случаев с относительно слабой корреляцией измерений разных авторов. При оценке сечений реакций 103 Rh(*n*, *n*)^{103m}Rh и 237 Np(*n*, *f*) поправки достигают 41 % и 25 % для некоторых энергетических интервалов.

В последние годы значительная часть оценок сечений нейтронных реакций была выполнена на основе анализа экспериментальных данных в рамках строгих статистических методов: метода наименьших квадратов, байесовского формализма и метода максимального правдоподобия. Существует, однако, обстоятельство, сдерживающее широкое использование этих методов в процедурах оценки нейтронных данных. Речь идет о существенной недооценке погрешностей рекомендованных нейтронных сечений, полученных после использования строгих статистических методов для анализа результатов измерений. Показательным примером является оценка стандарта — сечения деления нейтронами ядра ²³⁵U, когда погрешности оцененного сечения, извлеченные в результате анализа экспериментальных данных в рамках метода наименьших квадратов, были увеличены в 2-3 раза экспертами Американской рабочей группы по оценке сечений (US Cross Section Evaluation Working Group) [1]. Аргументированной критике подвергались результирующие погрешности оцененных сечений для некоторых других реакций, например, погрешности оцененного сечения реакции 93 Nb(n, 2n) 92m Nb [2]. Есть несколько причин, приводящих к недооценке погрешностей оцененных сечений. Одна из них неадекватное представление исходной экспериментальной информации, в частности, пренебрежение корреляцией результатов измерений. Физической основой корреляции экспериментальных данных является использование одних и тех же источников нейтронов, образцов, мониторных реакций, констант распада в различных измерениях.

Атомная энергия, 1999, т. 86, вып. 1, с. 40 — 46.

Цель настоящей работы — изучение влияния корреляции экспериментальных данных на погрешности оцененных нейтронных сечений. Особое внимание при этом будет уделено корреляции результатов измерений, выполненных разными авторами (в современных исследованиях [3, 4] такие корреляции рассматриваются как пренебрежимо малые).

Схема расчетов. Вычисления проведены в рамках метода наименьших квадратов. В качестве аппроксимирующих использовали рациональные функции, представляющие собой естественный инструмент для описания нейтронных сечений [5]. Расчетная схема, подробно изложенная в работе [6], справедлива для некоррелирующих измерений, выполненных разными авторами. В случае их корреляции подлежит изменению лишь расчет корреляционной матрицы Р неопределенностей измерений. Элементы матрицы вычис-

ляли как $P_{ij} = \left(\sum_{k=1}^{K} \rho_{ij}^{k} e_{i}^{k} e_{j}^{k}\right) / (e_{i}e_{j})$, где e_{i}^{k} — k-я систематическая составляющая

погрешности сечения e_i ; ρ_{ij}^{k} — коэффициент корреляции между k-ми систематическими составляющими e_i^{k} и e_j^{k} . Матрица Р может быть представлена в виде блоков из матриц меньшей размерности P=(P_{lm}), l, m=1, ..., M, где M — число экспериментов. Блок P_{lm} аппроксимирован матрицей с постоянным элементом

$$\overline{p_{lm}} = \left(\sum_{i=1}^{n_l} \sum_{j=1}^{n_m} p_{ij}\right) / (n_l n_m); n_l$$
 — число измерений в *l*-м эксперименте. Для $l = m$

усреднение выполняется по элементам, расположенным вне диагонали.

Отметим, что метод наименьших квадратов обеспечивает асимптотически несмещенные оценки. Поэтому отличие оценок будет определяться индивидуальными особенностями статистических выборок независимо от того, учитываются ли корреляции измерений или нет. Кроме того, рассмотрение корреляций экспериментальных данных эквивалентно уменьшению исходной информации. В соответствии с общим принципом теории информации (чем меньше объем исходной информации, тем выше неопределенность результирующей) нам следует ожидать увеличения неопределенности оценок при рассмотрении корреляций измерений в статистическом анализе экспериментальных данных. Таким образом, основной объект исследования — масштаб этого эффекта.

Анализ корреляций измерений одного автора. В этом и следующем разделе рассмотрению реальных примеров будет предшествовать анализ точно решаемых простейших моделей. Результаты и оценки, полученные при рассмотрении точно решаемых моделей, представляют интерес, как для понимания общих закономерностей, так и для анализа экспериментальных данных в реальных ситуациях в качестве «эталонов». В рамках первого модельного примера рассмотрим *n* одинаково коррелированных измерений σ_i неизвестного среднего θ . Известны погрешность измерений *e* и коэффициент корреляции ρ . Вычисления дисперсии $V(\tilde{\theta})$ оценки метода наименьших квадратов для θ

приводят к следующему выражению:

$$V(\tilde{\theta}) = \frac{e^2}{n} + \frac{e^2(n-1)}{n}\rho.$$

Отношение $V(\tilde{\theta})$ к дисперсии $V_{stat}(\tilde{\theta})$ оценки метода наименьших квадратов, вычисленной в предположении независимых измерений ($\rho = 0$), составляет $V(\tilde{\theta}) / V_{stat}(\tilde{\theta}) = 1 + (n-1) \rho$. Второй член в последней формуле представляет именно то увеличение неопределенности оценки, которое обусловлено их корреляцией — снижением качества экспериментальных данных. Из рассмотрения данной модели следуют два важных общих вывода: 1) невозможно неограниченно уменьшать погрешность оценки, основанной на коррелированных измерениях, есть предел, равный $e\sqrt{\rho}$, другими словами, начиная с некоторого n = N, новые измерения становятся бессмысленными; 2) с ростом числа измерений недооценка погрешности величин, предсказанных на основе строгих статистических методов без надлежащего учета корреляции измерений, также увеличивается.

В качестве первого практического примера рассмотрим вычисление погрешности для полученной в работе [7] зависимости (систематики) сечения реакции (*n*, *p*) от массового числа *A* и параметра асимметрии $\alpha = (A - 2Z)/A$ при энергии нейтронов 14,9 МэВ с учетом и без учета корреляции экспериментальных данных. Систематика имеет вид $\sigma_{np}(A,\alpha) = 31,42(A^{1/3}+1)^2 \times \exp[-29,07\alpha]$. Она построена на основе выполненных одной и той же группой общирных измерений сечения реакции (*n*, *p*) в интервале энергии нейтронов 13—15 МэВ для ядер с ⁵⁸Ni и до ¹⁸⁸Os [7]. Результаты измерений коррелируют незначительно (средний коэффициент корреляции равен 0,22). Основной источник корреляции — использование во всех измерениях одной и той же реакции-монитора ⁹³Nb(*n*, 2*n*)^{92m}Nb. Погрешность сечения реакции-монитора в

Рис. 1. Влияние корреляции измерений на погрешности оцененной зависимости сечения реакции (n, p) при энергии нейтронов 14,9 МэВ: 1 — погрешности измерений сечения; 2, 3 — погрешности оцененной зависимости сечения, рассчитанные с учетом и без учета корреляции измерений соответственно; 4 — погрешность сечения реакции-монитора



интервале 13—15 МэВ принята авторами равной 4,2 %. Заметим, что полная погрешность измерений изменяется от 5 до 13 %. Результаты расчетов погрешности оцененной зависимости $\sigma_{np}(A, \alpha)$ с учетом и без учета корреляции измерений приведены на рис. 1. Отметим, что исключение из рассмотрения даже относительно слабых корреляций измерений приводит к физически неверным результатам. Оцененная погрешность систематики (кривая 3) в широком интервале изменения параметра асимметрии (A-2Z)/A меньше 4,2 % погрешности сечения реакции-монитора ⁹³Nb(n, 2n)^{92m}Nb (соответствующая этой погрешности случайная величина — систематическая составляющая полной неопределенности измерений на 100 % скоррелирована по всем измерениям). Напротив, учет корреляций измерений в статистическом анализе экспериментальных данных приводит к реалистическим значениям оцененной погрешности систематики (кривая 2).

Анализ корреляций измерений разных авторов. В современных исследованиях [3, 4] корреляции измерений разных авторов исключаются со ссылкой на их малость по сравнению с корреляциями измерений одного и того же автора. В большинстве случаев такая аргументация справедлива. Однако есть достаточно широкая совокупность сечений нейтронных реакций, при анализе измерений которых она несостоятельна. Характерной чертой таких измерений является значительное преобладание одного из систематических компонентов полной погрешности над другими компонентами.

Рассмотрим, прежде всего, модельный пример, допускающий точное решение. Пусть параметр θ , требующий оценки (например, сечение нейтронной реакции при энергии нейтронов 14 МэВ), был изучен M авторами в M сериях несмещенных измерений σ_i^k , выполненных с одной и той же погрешностью e $(i=1, ..., n_k, n_k = n/M, k = 1, ..., M)$.

Измерения коррелируют с коэффициентами p_1 и p_2 в пределах и вне серии соответственно. Для практически важных случаев $p_1 > 0$ и $p_2 > 0$, причем p_2



Рис. 2. Модельный пример резонансной кривой: ●, ○ — измерения двух авторов; — — аппроксиманта

существенно меньше p_1 . Предположим, $p_2 = p_1/J = p/J$. После вычислений, выполненных для двух вариантов (корреляции измерений разных серий исключены из анализа m = 1 и рассмотрены в анализе m = 2), получим одну и ту же оценку метода наименьших квадратов ($\Sigma \sigma_i/n$) для параметров и отношение дисперсий оценок: $V_2/V_1 = 1 + p (M-1)n / / [J_{pn} + MJ(1-p)]$. Для «больших» n и типичных значений J = 2 и M = 5 отношение дисперсий оценок равно $V_2/V_1 = 3$. Таким образом, исключение из статистического анализа корреляции измерений пяти серий приводит к существенной недооценке (~70 %) погрешности оценки метода наименьших квадратов. Приближение — «большие» n — соответствует отношению $n/M \approx 10$ с хорошей точностью.

Следующий более сложный объект исследования — резонансная кривая в «энергетическом» интервале [-1, 1]

$$f(E) = \frac{1}{(E+0,5)^2 + 0,5^2} + \frac{1+0,2E}{(E-0,5)^2 + 0,3^2}.$$

Результаты двух экспериментов σ_i^1 и σ_i^2 были смоделированы разбросом $+0,06\xi^5+0,06\eta$), i=2n-1 для k=1 и i=2n для k=2, n=1, ..., 21 (рис. 2). Здесь $\varepsilon_{i}^{k} \xi^{k}, \eta$ — случайные числа из нормального (0, 1) распределения. Относительная погрешность измерений 10 %, измерения, выполненные в одном и том же эксперименте, коррелируют с коэффициентом 0,72, в то время как в разных экспериментах — 0,36. Как показано на рис. 3, рассмотрение корреляции измерений, принадлежащих разным экспериментам, ведет к увеличению погрешности (кривая 2) оцененной кривой в среднем в 1,2 раза по сравнению со случаем, когда такая корреляция исключена из анализа (кривая 3). Анализ экспериментальных данных с учетом всех корреляций измерений приводит лишь к незначительному уменьшению (в данном случае в 1,2 раза) погрешности оценки (кривая 2) по сравнению с погрешностью измерений (кривая 1). В случае, когда все корреляции исключены из анализа, уменьшение погрешности оценки (кривая 4) гораздо более значимо (в 2,5 раза). Таким образом, в последнем случае погрешность оценки сильно искажена.

Из множества практических примеров мы остановились на оценке сечения реакции 103 Rh(*n*, *n'*) 103m Rh, представляющей собой наглядный материал для демонстрации влияния корреляций измерений разных авторов на погрешность оцененных сечений. Сечение реакции 103 Rh(*n*, *n'*) 103m Rh измерено в интервале энергии от порога до 17 МэВ в 10 экспериментах (см. таблицу).

Рис. 3. Влияние корреляции измерений на погрешности оцененной модельной кривой: 1 — погрешности измерений; 2, 3, 4 — погрешности оцененной кривой, рассчитанные с учетом, без учета корреляций измерений разных экспериментов и в предположении статистической независимости измерений соответственно; ●, ○ — отклонения измерений двух авторов от оцененной кривой



2 tupu	ki epherinki i	skenepilmentob no ee leilink	peakaini Ini(<i>n</i> , <i>n</i>)	Tui
Интервал энергии, МэВ	Число измере- ний	Метод	Монитор	Источник
2,2—14	4	Активационный, реги- страция ү-квантов NaI-детектором	115 In(<i>n</i> , <i>n'</i>) ^{115m} In	[8]
14,2	2	То же	${}^{65}Cu(n, 2n), {}^{36}Fe(n, p)$	[9]
0,18—4,6	18	То же	Расчет выхода нейтронов	[10]
14,7	1	Активационный, реги- страция ү-квантов Si (Li)-детектором	27 Al(<i>n</i> , α), (<i>n</i> , <i>n</i>) ^{115m} In	[11]
4,8—14,74	33	Активационный, реги- страция ү-квантов NaI-детектором	32 S(<i>n</i> , <i>p</i>)	[12]
0,12—6	46	То же	Длинный счетчик	[12]
2,7—14,8	2	Активационный, реги- страция ү-квантов Si (Li)-детектором	¹¹⁵ In(<i>n</i> , <i>n'</i>)	[13]
0,55—1,5	10	Времяпролетный, ре- гистрация неупруго- рассеянных нейтронов	Упругое рассеяние на углероде	[14]
1,1—1,93	8	Регистрация γ-квантов, сопровождающих не- упругое рассеяние ней- тронов, Се (Li)	${}^{92}Zr(n, n'\gamma),$ ${}^{94}Zr(n, n'\gamma)$	[14]
0,2—6,1	62	Активационный, реги- страция ү-квантов NaI-детектором	Относительная функция возбуждения	[15]
3—16,7	5	То же	То же	[15]
3,74—5,18	9	Активационный, реги- страция ү-квантов Si (Li)-детектором	Протоны отдачи	[16]
5,69—12	14	То же	238 U(<i>n</i> , <i>f</i>)	[17]

Аналитическая аппроксимация в ядерной физике

Измерения сечения реакции 103 Rh(*n*, *n*) 103m Rh сопряжены с двумя основными трудностями: необходимостью прецизионной калибровки детектора, который регистрирует рентгеновское излучение, сопровождающее испускание электронов внутренней конверсии атомом родия, и значительным поглощением рентгеновского излучения в активированных образцах. С точки зрения решения этих проблем можно выделить измерения [12], принятые за эталон при анализе

Характеристики экспериментов по сечению реакции 103 Rh(*n n*) 103m Rh

других измерений. Выполненная в измерениях [12] калибровка детектора не зависит от значения коэффициента конверсии. Кроме того, в этих измерениях самым тщательным образом изучено поглощение рентгеновского излучения в образцах. После критического анализа всех экспериментальных данных некоторые измерения, например, [8—10, 14, 16] были исключены из базы данных вследствие низкой точности, косвенного характера и предварительного статуса экспериментальных данных. Погрешность вероятности эмиссии рентгенов-

ского излучения на одно распавшееся ядро-изомер, равная 3,56 % [18], значительно преобладает над другими систематическими компонентами полной погрешности измерений. Обусловленная этим компонентом корреляция измерений разных авторов изменяется от 0,14 до 0,37. Корреляция измерений, выполненных одним и тем же автором, колеблется между 0,43 и 0,8. Оцененное сечение вместе с экспериментальными данными показано на рис. 4. На рис. 5 приведены погрешности измерений и оцененного сечения, вычисленные с учетом и без учета корреляции измерений разных авторов. В последнем случае расчет привел к физически неверным результатам: в интервале энергии нейтронов 1-7 МэВ погрешность оцененного сечения меньше погрешности вероятности эмиссии рентгеновского излучения — одного из систематических компонентов полной погрешности из-Соответствующая мерений. этому систематическому компоненту случайная величина на 100 % скоррелирована по всем измерениям.

Другим важным примером, иллюстрирующим необходимость учета корреляций экспериментальных данных разных авторов, является оценка нейтронных сечений деления. Большая часть измерений сечений делений последних лет выполнена относительно сечения деления ²³⁵U нейтронами. При



Рис. 4. Оцененное сечение реакции ¹⁰³Rh(*n*, *n'*)^{103m}Rh (——) в сравнении с экспериментальными данными: ▲ — [11], * — [12], \circ — [15], \Box — [17]



Рис. 5. Влияние корреляции измерений разных авторов на погрешность оцененного сечения реакции 103 Rh(*n*, *n*') 103m Rh: 1 — погрешности измерений сечения; 2, 3 — погрешности оцененного сечения, рассчитанные с учетом и без учета корреляции измерений разных авторов

таких измерениях погрешность сечения реакции 235 U(*n*, *f*), как правило, доминирует над другими систематическими составляющими полной погрешности измерений, что и приводит к значимым корреляциям измерений разных авторов. В силу ограниченного объема данной статьи приведем лишь основные результаты оценки сечения реакции 237 Np(*n*, *f*), выполненной для упрощения анализа на основе только трех измерений [19—21]. Корреляция измерений этих авторов, обусловленная использованием оцененного сечения реакции 235 U(*n*, *f*) из библиотеки ENDF/B-6 [22], изменяется от 0,16 до 0,17, в то время как корреляция «внутри» экспериментальных наборов от 0,19 до 0,59. Рассмотрение корреляции экспериментальных наборов привело к увеличению по сравнению с вариантом, когда она была исключена из анализа, погрешности оцененного сечения реакции 237 Np(*n*, *f*) максимум в 1,25 раза.

В заключение отметим основные результаты работы.

1. Исключение из статистического анализа экспериментальных данных корреляций измерений приводит в некоторых случаях к физически неверным результатам, когда погрешность оцененного сечения меньше одной из систематических составляющих полной погрешности измерений. Соответствующая этой систематической составляющей случайная величина на 100 % скоррелирована по всем измерениям.

2. При исключении из статистического анализа экспериментальных данных корреляций измерений того или иного типа погрешности оцененных сечений занижены тем больше, чем больше число коррелированных измерений этого типа.

3. Впервые изучены корреляции измерений разных авторов (рассматриваемые ранее как пренебрежимо малые). Роль этих корреляций существенна в случаях, когда одна или несколько составляющих полной погрешности измерений доминируют над другими составляющими. В число таких случаев входят, например, измерения сечений нейтронного деления. В рассмотренных примерах включение в статистический анализ экспериментальных данных корреляций измерений разных авторов привело к увеличению погрешности оцененного сечения в 1,2—1,5 раза по сравнению с вариантом, когда такие корреляции были проигнорированы.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 98-02-16719).

Список литературы

- 1. Nuclear Data Standards for Nuclear Measurements. Ed. H. Conde. OECD, Paris, 1992.
- 2. Santry D., Werner R. Cross sections for the ${}^{93}Nb(n, 2n)^{92m}Nb$ reaction // Canad. J. Phys., 1990, v. 68, p. 582—586.
- Tagesen S., Vonach H., Badikov S.A., Pronyaev V.G. Evaluation of fast neutron cross sections and covariance matrices of ⁵²Cr // In: Proc. Intern. Conf. on Nucl. Data for Science and Technology, May 9—13 1994, Gatlinburg, USA, pp. 620—623.
Влияние корреляции экспериментальных данных на погрешности оцененных нейтронных...

- 4. Oh S., Shibata K. Evaluation of covariance data for chromium, iron and nickel contained in JENDL-3.2 // J. Nucl. Sci. Technol., 1998, vol. 35, no. 1, pp. 66—75.
- 5. Бадиков С.А., Виноградов В.Н., Гай Е.В., Работнов Н.С. Аналитическая аппроксимация данных в нейтронной физике // Атомная энергия, 1984, т. 56, вып. 1, с. 20—25.
- 6. Бадиков С.А. Статистический анализ коррелированных экспериментальных данных и оценка нейтронных сечений // Там же, 1998, т. 84, вып. 5, с. 426—434.
- Konno Ch., Ikeda Yu., Oishi K. e. a. Activation Cross Section Measurements at Neutron Energy from 13,3 to 14,9 MeV using the FNS Fasility. Rep. JAER1-1329, 1993.
- 8. Cross W., Pai H. Cross Section for the Reaction 103 Rh(n, n') 103m Rh. Rep. EANDC(CAN)-17, 1963, p. 1.
- 9. Nagel W., Aten A.H.W. Jr // J. Nucl. Energy A/B, 1966, vol. 20, p. 475.
- 10. Kimura I., Kobayashi K., Shibata T. Measurement of cross section for the 103 Rh(n, n') 103m Rh reaction and its application to fast neutron flux measurements // J. Nucl. Sci. Technol., 1969, vol. 6, p. 1.
- 11. Pazsit A., Csikai J. ¹¹³In $(n, n'\gamma)^{113m}$ In and ¹⁰³Rh $(n, n'\gamma)^{103m}$ Rh cross sections for fast neutrons // Sov. J. Nucl. Phys., 1972, vol. 15, p. 232.
- 12. Santry D., Butler J. Cross section measurements for the ¹⁰³Rh(*n*, *n'*)^{103m}Rh reaction from 0,122 to 14,74 MeV // Canad. J. Phys., 1974, vol. 52, p. 1421.
- 13. Pazsit A // Inter. J. Appl. Radiat. Isot., 1975, vol. 26, p. 621.
- 14. Barnard E., Reitmann D. Scattering of fast neutrons from ¹⁰³Rh // Nucl. Phys., 1978, A303, pp. 27–50.
- 15. Paulsen A., Widera A., Vaninbroukx R., Liskien H. Cross section measurements for the reaction ¹⁰³Rh(*n*, *n*)^{103m}Rh // Nucl. Sci. Eng., 1980, vol. 76, p. 331.
- Zhihua Wu, Jianwei Li, Songmao Wu e.a. Neutron activation cross sections measurements in Fudan University // In: Proc. Conf. on Nuclear Data for Science and Technology, Mito, Japan, 30 May—3 June 1988, p. 315.
- Miah M., Vonach H., Mannhart W., Schmidt D. Measurement of the cross section for ¹⁰³Rh(*n*, *n*')^{103m}Rh in the energy range 6—12 MeV // In: Proc. Conf. on Nuclear Data for Science and Technology, Gatlinburg, USA, 9—13 May 1994, p. 278.
- 18. Browne E., Firestone R. Table of Radioactive Isotopes. Univ. of California, 1986.
- Stein W., Smith R., Smith H. Relative fission cross section of ²³⁶U, ²³⁸U, ²³⁷Np and ²³⁵U // In: Proc. Conf. Neutron Cross Sections and Technology, Washington, 1968 March 4—7, NBS Special Publication 299, p. 627.
- Behrens J., Browne J., Walden J. Measurement of the neutron induced fission cross section of Np-237 relative to U-235 from 0,02 to 30 MeV // Nucl. Sci. Eng., 1982, vol. 80, p. 239.
- Lisowski P., Ullman J., Balestrini S. e.a. Neutron induced fission cross section ratios for ²³²Th, ²³⁵U, ²³⁸U, ²³⁷Np and ²³⁹Pu from 1 to 400 MeV // In: Proc. Conf. on Nuclear Data for Science and Technology, Mito, Japan, 30 May—3 June 1988, p. 97.
- 22. ENDF/B-VI Summary Documentation. Report BNL-NCS-17541 (ENDF-201), 1991.

Поступила в Редакцию 22.01.99

Одновременный статистический анализ больших массивов коррелированных нейтронных измерений

С. А. Бадиков, Е. В. Гай, Н. С. Работнов

Обсуждаются проблемы, обусловленные, в основном, ограничениями на физические характеристики современных компьютеров, препятствующие внедрению современных методов оценки нейтронных данных в повседневную практику и затрудняющие использование оцененных данных прикладными программами. Представлены возможные решения этих проблем. В частности, найдено тождественное преобразование минимизируемого статистического функционала, позволяющее избежать формирования, хранения и численного обращения ковариационных матриц неопределенностей измерений сверхвысокой размерности.

Преобразование дает возможность выполнить статистический анализ произвольно большого числа измерений. Предложен эффективный способ параметризации сечений нейтронных реакций в области высокой энергии нейтронов. Способ основан на применении резонансной формулы Адлера — Адлера для аппроксимации сечений. Параметры формулы в данном случае не имеют явной физической интерпретации. Способ позволяет значительно сократить объем информации, подлежащей хранению в файлах оцененных данных в формате ENDF-6. Для трех сечений (полного, деления и радиационного захвата) предлагаемая параметризация является универсальной, дает возможность представить сечение единым образом от тепловой точки до произвольно высокой энергии нейтронов. Результаты работы иллюстрируются на примере оценки сечения реакции 241 Am(*n*, *f*).

Стимулом для выполнения настоящей работы послужила необходимость модернизации традиционной расчетной схемы обобщенного метода наименьших квадратов. Такая необходимость возникла в процессе подготовки к созданию нового поколения оценок нейтронных стандартных сечений для очередной версии библиотеки ENDF/В (последняя шестая версия описана в работе [1]). Результат модернизации виделся в таком изменении традиционной расчетной схемы, которое бы обеспечивало возможность одновременного статистического анализа сверхбольших массивов коррелированных нейтронных измерений.

К настоящему времени удалось получить детальную и, что особенно важно, разнообразную экспериментальную информацию о сечениях ядерных реакций, энергетических и угловых распределениях вторичных частиц, выходах продуктов реакций некоторых нуклидов. Строгие статистические методы оценки нейтронных данных требуют согласованного (одновременного) анализа всей экспериментальной информации с учетом корреляции измерений [2—4]. Например, при оценке нейтронных стандартных сечений для библиотеки оцененных данных ENDF/B-6 одновременно анализировали более 10000 различных

Атомная энергия, 2000, т. 88, вып. 3, с. 197-203.

измерений [5]. В типичных задачах оценки нейтронных данных требуется одновременно анализировать $10^3 - 10^5$ измерений. Это приводит к необходимости оперировать с ковариационными и корреляционными матрицами, число подлежащих хранению элементов которых составляет $5 \cdot 10^5 - 5 \cdot 10^9$. Данные параметры находятся за пределами характеристик современных компьютеров по памяти и быстродействию. В итоге статистический анализ больших выборок измерений проводится или с использованием различных приближений (как в уже упомянутой работе [5]), или на ограниченных множествах измерений с последующим согласованием результатов [6]. В обоих случаях результаты анализа искажены по сравнению с одновременной обработкой всех измерений. Высокая размерность матриц, подлежащих анализу и обработке (причем ковариационных матриц неопределенностей, как измерений, так и оцененных данных), является одним из основных факторов [2], сдерживающих широкое применение строгих статистических методов оценки нейтронных данных и использование оценок в комплексах переработки микроскопических данных [7].

Нельзя не упомянуть еще об одной стороне проблемы. Математические задачи, решаемые в процессе статистического анализа (например, обращение матриц и минимизация функционала), относятся к классу неустойчивых [8]. Характерной особенностью задач оценки нейтронных данных является тот факт, что ковариационные матрицы неопределенностей экспериментальных и оцененных данных, как правило, плохо обусловлены. Причем с ростом размерности матрицы число обусловленности увеличивается. Соответственно повышается неустойчивость расчетных значений при численном обращении матрицы.

Структура работы следующая. В первой части описано тождественное преобразование минимизируемого функционала, которое позволяет радикально снизить размерность матриц, обращаемых численно, что дает возможность одновременно анализировать произвольное число коррелированных измерений. Во второй части предложен эффективный способ параметризации полного сечения, сечений радиационного захвата и деления при нейтронной энергии выше области разрешенных резонансов. Способ допускает представление параметров в формате ENDF-6 и обработку параметризованных сечений сервисными программами библиотеки ENDF/B-6, а также дает возможность значительно снизить объем информации, подлежащей хранению в библиотеках оцененных данных.

Уравнения расчетной схемы. Все изложенные рассмотрения выполнены в рамках обобщенного метода наименьших квадратов в целях получения более простых структур (по сравнению с полностью заполненными ковариационными матрицами большой размерности) в уравнениях.

Предполагается, что измеренные сечения являются значениями гипотетической «истинной» кривой, искаженными аддитивными случайными несмещенными отклонениями. Минимизируемый функционал имеет вид

$$S(\theta) = \sum_{k=1}^{M} \sum_{l=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_k} \sum_{j=1}^{n_l} \frac{\sigma_i^k - f(E_i^k, \theta)}{e_i^k} (P^{-1})_{ij}^{kl} \frac{\sigma_j^l - f(E_j^l, \theta)}{e_j^l}.$$
 (1)

Здесь M — число экспериментов; n_k — число измерений в k-м эксперименте; $n=\sum n_k$ — полное число измерений в экспериментальной базе данных; $\sigma_1^1,...,\sigma_{n_l}^1,...,\sigma_1^M,...,\sigma_{n_M}^M$ — значения измерений из экспериментальной базы данных; e_i^k — погрешность измерения $\sigma_{i_k}^k$; $\theta = (\theta_1,...,\theta_L)^T$ — вектор оцениваемых параметров; f(E) — резонансная формула Адлера — Адлера [9]

$$f(E) = \frac{\pi}{\sqrt{E}} \sum_{r=1}^{K} \frac{\nu_r G_r + (\mu_r - E) H_r}{(\mu_r - E)^2 + \nu_r^2}.$$
 (2)

Параметры { μ_r , v_r , G_r , H_r } образуют вектор **0**. Ковариационная матрица **V** случайных отклонений известна с точностью до постоянного множителя Δ : $V_{ij}^{kl} = \Delta p_{ij}^{kl} e_i^k e_j^l$; **P** = p_{ij}^{kl} — корреляционная матрица случайных отклонений, верхние индексы указывают номер эксперимента. Корреляции p_{ij}^{kl} были вычислены согласно работе [10]. Матрица **P** может быть представлена в виде блоков **P** = (P_{kl}), k, l = 1, ..., M. Блок P_{kl} аппроксимируем матрицей с постоянным элементом

$$\overline{p_{kl}} = \left(\sum_{i=1}^{n_k} \sum_{j=1}^{n_l} p_{ij}^{kl}\right) / (n_k n_l).$$

Для l = k усреднение проводится по элементам, лежащим вне диагонали.

В типичных задачах оценки нейтронных данных симметричная матрица **Р** состоит из сотен и тысяч строк. В результате некоторые операции (обращение, вычисление детерминанта и собственных значений) затруднены или даже невозможны из-за особенностей матриц (в значительном числе случаев они плохо обусловлены) и ограничений на память компьютеров. Поэтому поиск эквивалентных более простых структур был бы полезен.

Квадратичная форма (1) инвариантна относительно ортогональных преобразований, в том числе относительно перехода к переменным Якоби. Переменные Якоби, широко использующиеся в теоретической физике, имеют уникальные свойства. Воспользуемся этими свойствами для преобразования квадратичной формы (1).

Определим новые переменные следующим образом:

$$\begin{split} q_m^k = \sqrt{\frac{m}{m+1}} \bigg(\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m z_i^k - z_{m+1}^k \bigg) & \text{для } m \le n_k - 1; \qquad q_{n_k}^k = \frac{1}{\sqrt{n_k}} \sum_{i=1}^{n_k} z_i^k = \sqrt{n_k} \overline{z}^k, \\ z_i^k = \frac{\sigma_i^k - f\left(E_i^k, \theta\right)}{e_i^k}. \end{split}$$

где

Ковариации между новыми переменными

$$\operatorname{cov}\left(q_{i}^{k},q_{j}^{l}\right) = \left(1-\overline{p_{kk}}\right)\delta_{ij}\delta_{kl} + \overline{p_{kl}}\sqrt{n_{k}}\sqrt{n_{l}}\delta_{ink}\delta_{jnl}.$$

Соответственно статистический функционал приобретает вид

$$S = \sum_{k=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_k - 1} \frac{\left(q_i^k\right)^2}{1 - \overline{p_{kk}}} + \sum_{k=1}^{M} \sum_{l=1}^{M} q_{n_k}^k q_{n_l}^l \left(T^{-1}\right)_{kl} / \sqrt{n_k n_l}.$$

Здесь $T_{kl} = \overline{p_{kl}} + (1 - \overline{p_{kk}}) \delta_{kl} / n_k$. Учитывая одно из свойств ортогонального преобразования (сохранение длины вектора)

$$\sum_{i=1}^{n_k} (q_i^k)^2 = \sum_{i=1}^{n_k} (z_i^k)^2,$$

получим окончательное выражение для статистического функционала

$$S = \sum_{k=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_k} \frac{\left(z_i^k\right)^2}{1 - p_{kk}} - \sum_{k=1}^{M} \frac{n_k \left(\overline{z}^k\right)^2}{1 - p_{kk}} + zT^{-1}z.$$
 (3)

В случае, когда измерения, выполненные в разных экспериментах, не коррелируют между собой ($\overline{p_{kl}} = 0$ для $k \neq l$), получаем уже известную из работы [11] формулу

$$S = \sum_{k=1}^{M} \sum_{i=1}^{n_k} \frac{\left(z_i^k\right)^2}{1 - \overline{p_{kk}}} - \sum_{k=1}^{M} \frac{\overline{p_{kk}} n_k \left(\overline{z}^k\right)^2}{\left(1 - \overline{p_{kk}} - n_k \overline{p_{kk}}\right)}.$$

Описанные преобразования позволяют выполнить статистический анализ для неограниченного числа измерений. Действительно, квадратичная форма (1) («двумерное» выражение) была тождественно преобразована в «одномерное» выражение, близкое к алгебраической сумме квадратов отклонений, плюс квадратичная форма с рангом, не превышающим число экспериментов M (см. формулу (3)). Еще одним преимуществом данных преобразований является появившаяся возможность избежать формирования и обращения $n \times n$ матрицы **Р**. Вместо нее необходимо сформировать и обратить $M \times M$ матрицу **Т** значительно меньшей размерности. Формулы для вычисления ковариационной матрицы неопределенностей «резонансных» параметров не приведены, так как они имеют общепринятую форму.

Представление оцененных ковариационных данных в формате ENDF-6. Основные трудности, возникающие в процессе обработки оцененных ковариационных данных прикладными программами, обусловлены громоздкой и неадекватной формой представления этих данных в формате ENDF-6 [9]. Например, структура формата раздела LB = 5 произвольной подсекции в файле 33

[9] является причиной появления многочисленных ошибочных (отрицательно определенных) ковариационных матриц, полученных после перехода от исходной энергетической сетки, заявленной в файле 33, к более мелкой. Первая попытка решить проблему путем включения в подсекцию дополнительного раздела LB = 8 со своим форматом не увенчалась успехом. Согласно описанию формата раздела LB = 8 в нем должна храниться нефизическая (не связанная с объектом исследования) информация. Цель данной операции — сделать результирующую матрицу (сумма матриц по всем разделам) положительно определенной. Цена решения проблемы — искажение физических свойств объекта, описываемого матрицей. Причем искажение тем больше, чем мельче энергетическая сетка. Вторая попытка представляла собой разработку принципиально нового формата хранения ковариационных данных, предназначенного для файла 30. Этот формат обеспечил естественную, универсальную и гибкую форму представления ковариационных данных. Однако использование формата файла 30 приводит к трудностям другого рода — ковариационные данные, подготовленные в этом формате, являются чрезвычайно громоздкими. Кроме того, в настоящее время нет программ, обрабатывающих данный формат (данное утверждение справедливо и для сервисных программ ENDF-6).

Между тем формат ENDF-6 имеет неочевидные возможности для эффективного и адекватного представления оцененных сечений деления, радиационного захвата, полного сечения, а также их ковариаций в интервале от тепловой точки до произвольно высокой энергии нейтронов. Резонансные формулы (одно- и многоуровневая Брейта — Вигнера, формула Адлера — Адлера [9]) хорошо известны и применяются для параметризации нейтронных сечений в области разрешенных резонансов. В этой энергетической области параметры резонансных формул имеют прямой физический смысл.

Формально (без физической интерпретации параметров) все резонансные формулы могут быть также использованы для аппроксимации сечений выше области разрешенных резонансов. Однако только одна из них — формула Адлера — Адлера — является особенно удобной для аппроксимации сечений в области промежуточной и высокой энергии. Одно- и многоуровневая формулы Брейта — Вигнера содержат параметры (нейтронную ширину), зависимые от энергии. Структура формата ENDF-6 также благоприятствует параметризации сечений с помощью резонансных формул. Формат имеет разнообразные возможности для представления оцененных резонансных параметров и их ковариаций. В частности, секция MT = 151 файлов 2 и 32 зарезервирована для хранения соответствующей информации.

Аппроксимация сечений выше области разрешенных резонансов формулой Адлера — Адлера и представление оцененных «резонансных» параметров и их ковариаций в формате ENDF-6 имеют очевидные преимущества:

 – естественная форма представления ковариационных данных (в виде ковариаций первично оцениваемых величин), такая форма облегчает вычисление групповых сечений для произвольной энергетической сетки и позволяет избежать неоднозначного представления ковариаций групповых сечений на основе информации, хранящейся в разделах LB = 5 и LB = 8 подсекции файла 33;

– радикальное сокращение информации, подлежащей хранению в файлах оцененных данных;

– широкие возможности для преобразования в другие типы ядерных данных обрабатывающими системами (NJOY [7]).

Отметим также следующий важный факт. Формализм Адлера — Адлера предполагает использование одной и той же резонансной ширины и энергии в выражениях для парциальных и полных сечений, тогда как формат ENDF-6 допускает хранение различной резонансной ширины и энергии. Архаизм значительно упрощает процедуру параметризации сечений.

Примеры. В качестве иллюстративного примера выбраны оценки сечения нейтронного деления ²⁴¹Am в интервале энергии 100 кэВ — 20 МэВ. Точные данные о сечениях деления Np, Am, Cm особенно важны для трансмутации ядерных отходов.

Процедура оценки включала три этапа. На первом этапе была сформирована база экспериментальных данных на основе информации, извлеченной из библиотеки EXFOR [12] и последних публикаций. База данных включает результаты 13 экспериментов, которые могут быть разделены на две группы: обширные относительные измерения [13—20], охватывающие широкий интервал энергии нейтронов, и одиночные измерения в окрестности 14,5 МэВ [21—26].

На втором этапе все эксперименты были подвергнуты критическому анализу. Данные некоторых авторов были удалены из базы данных вследствие больших отличий (более чем 3) от основной массы экспериментальных данных [13, 22, 26], низкой точности измерений [19, 25]. Включение этих данных в статистический анализ не оказало бы сколько-нибудь существенного влияния на результаты оценки. Все экспериментальные данные были перенормированы на новые значения стандартных сечений и констант распада. Специальной коррекции были подвергнуты экспериментальные данные [17]. Как отмечено в работе [27], результаты измерений сечений деления [17], выполненные методом изотопных примесей, систематически сдвинуты относительно других измерений. Кроме того, для ²³⁷Np и ²⁴³Am существует значительное расхождение между усредненными по спектру нейтронов деления ²⁵²Сf дифференциальными сечениями деления [17] и результатами интегральных измерений. Вероятный источник расхождения — ошибка в определении отношения числа ядер в образцах. По этой причине экспериментальные данные [17] были скорректированы в соответствии с процедурой, описанной в работе [27].

На третьем этапе был выполнен статистический анализ измерений из базы экспериментальных данных. Результаты оценки приведены на рисунке и в таблице. В целом обе оценки согласуются между собой и с экспериментальными данными. Выше 8 МэВ оценка авторов настоящей статьи систематически ниже оценки ENDF/B-6. Это расхождение объясняется различием в методах

определения (оценка ENDF/B-6 основана на расчетах в рамках теоретических моделей ядерных реакций).

r	$\mu_{ m r}$	\mathcal{V}_r	G_r	H_r	
1	$1,33711 \cdot 10^7$	$2,49968 \cdot 10^7$	6,83180·10 ¹⁰	$-9,94233 \cdot 10^{10}$	
2	$8,20920 \cdot 10^5$	$1,21767 \cdot 10^{6}$	$-2,35967 \cdot 10^{8}$	$-4,88687 \cdot 10^{8}$	
3	$7,14540 \cdot 10^{6}$	$1,14693 \cdot 10^{6}$	$2,40444 \cdot 10^{8}$	$-4,22780 \cdot 10^{8}$	
4	$8,00862 \cdot 10^5$	$3,54717 \cdot 10^5$	$-5,16893 \cdot 10^{7}$	$-7,13229 \cdot 10^{7}$	

Параметры резонансной формулы Адлера—Адлера (2) для представления оцененного сечения деления ²⁴¹ Am в энергетическом интервале 100 кэВ — 20 МэВ





В заключение изложим основные результаты работы.

1. Предложена модернизация традиционной расчетной схемы обобщенного метода наименьших квадратов. В частности, найдено тождественное преобразование минимизируемого функционала, которое дает возможность избежать формирования, хранения и численного обращения матриц высокой размерности, позволяет выполнить статистический анализ одномерного массива результатов измерений, размер которого ограничен лишь памятью компьютера.

2. Продемонстрирована возможность применения резонансной формулы Адлера — Адлера для аппроксимации сечений нейтронных реакций выше области разрешенных резонансов и представления «резонансных» параметров и их ковариаций в формате ENDF-6 (секции MT = 151 файлов 2 и 32). Для трех сечений (полного, деления и радиационного захвата) резонансная формула Адлера — Адлера является универсальным способом параметризации от тепловой точки до произвольно высокой энергии нейтро-Представление «резонансных» HOB. параметров и их ковариаций в формате ENDF-6 обеспечивает радикальное сокращение (по сравнению с обычным способом хранения в файлах 3 и 33) объема информации, подлежащей хранению в библиотеках оцененных данных. Сокращение было бы более впечатляющим после устранения недостатков, которые присущи формату файла 32 в части, соответствующей формуле Адлера — Адлера.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 98-02-16719).

Список литературы

- 1. ENDF/BVI Summary Documentation. Ed. P. Rose. Rep. BNL-NCS-17541 (ENDF-201), 1991.
- 2. Proceedings of BNL Covariance Workshop, 22-23 April 1999. OLNL, 1999.
- 3. Poenitz W. Data interpretation, objective evaluation procedures and mathematical techniques for the evaluation of energy dependent ratio, shape and cross section data // In: Proc. Conf. on Nuclear Data Evaluation Methods and Procedures. Rep. BNL-NCS-51363, 1981, vol. 1, p. 249.
- Tagesen S., Vonach H., Badikov S.A., Pronyaev V.G. Evaluation of fast neutron cross sections and covariance matrices of ⁵²Cr // In: Proc. Conf. on Nuclear Data for Science and Technology. USA, Gatlinburg, May 9–13 1994. USA, 1994, pp. 620–623.
- Poenitz W., Aumeier S. The Simultaneous Evaluation of the Standards and Other Cross Sections of Importance for Technology. Rep. ANL/NDM-139 (ENDF-358), ANL, 1997.
- 6. Копач Ю.Н., Попов А.Б., Фурман В.И. и др. Исследование угловой анизотропии осколков деления выстроенных ядер ²³⁵U резонансными нейтронами и роль *JK*-каналов // Ядерная физика, 1999, т. 62, № 5, с. 900—914.
- MacFarlane R., Muir D., Boicourt R. The NJOY Nuclear Data Processing System. V. 1—4. LA-9303-M, ENDF-324, 1982—1985.
- 8. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1986.
- 9. Rose P., Dunford C. Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File, ENDF-6. Rep. BNL-NCS 44945, ENDF-102, Rev. 10/91, 1991.
- Бадиков С.А., Гай Е.В., Работнов Н.С. Влияние корреляции экспериментальных данных на погрешности оцененных нейтронных сечений // Атомная энергия, 1999, т. 86, вып. 1, с. 40.
- 11. Бадиков С.А. Статистический анализ коррелированных экспериментальных данных и оценка нейтронных сечений // Там же, 1998, т. 84, вып. 5, с. 426—434.
- 12. Lemmel H. Short Guide to EXFOR. Rep. IAEA-NDS-l, Rev. 5, Vienna: IAEA, 1986.
- Nobles R., Henkel R., Smith R. Neutron-induced fission curve for ²⁴¹Am // Phys. Rev., 1955, vol. 99, p. 616.
- 14. Куприянов В.М., Фурсов Б.И., Иванов В.И., Смиренкин Г.Н. Измерение отношений сечений деления ²³⁷Np/²³⁹Pu и ²⁴¹Am/²³⁹Pu в диапазоне энергии нейтронов 0,13—7 МэВ // Атомная энергия, 1978, т. 45, вып. 6, с. 440—442.
- 15. Knitter H., Budts-Jorgensen C. Measurement of the neutron induced fission cross

section of Am-241 from 100 eV to 5.3 MeV. — Atomkernenergie, 1979, vol. 33, p. 205.

- Hage W., Wisshak K., Kappeler K. Neutron fission cross-section measurements of Americium-241 in the energy range from 10 to 1030 keV // Nucl. Sci. Engng, 1981, vol. 78, p. 248—258.
- Behrens J., Browne J. Measurement of the neutron-induced fission cross sections of Am-241 and Am-243 relative U-235 from 0.2 MeV to 30 MeV // Ibid., 1981, vol. 77, pp. 444—453.
- Dabbs J., Johnson C., Bemis C., Jr. Measurement of the 241-Am neutron fission cross section // Ibid., 1983, vol. 83, p. 22—36.
- Воротников П.Е., Дмитриев С.В., Молчанов Ю.Д., Отрощенко Г.А. Промежуточная структура сечения деления ²⁴¹Ат нейтронами с энергией 0,08—1,3 МэВ // Ядерная физика, 1986, т. 44, с. 1403—1408.
- Фомушкин Э.Ф., Гутникова Е.К. Сечения и угловые распределения осколков при делении ²³⁸Pu, ²⁴²Pu, ²⁴¹Am нейтронами с энергией 0,45—3,6 МэВ // Там же, 1969, т. 10, вып. 5, с. 917—922.
- 21. Протопопов А.Н., Селицкий Ю.А., Соловьев С.М. Сечение деления ²⁴¹Ат нейтронами с энергией 14,6 МэВ // Атомная энергия, 1959, т. 6, вып. 1, с. 67—68.
- 22. Казаринова М.И., Замятнин Ю.С., Горбачев В.Н. Сечения деления ²³⁰Th, ²⁴⁰Pu, ²⁴¹Pu и ²⁴¹Am нейтронами с энергией 2,5 и 14,6 МэВ // Там же, 1960, т. 8, с. 139—141.
- Фомушкин Э.Ф., Гутникова Е.К., Замятнин Ю.С. и др. Сечения и угловая анизотропия осколков при делении некоторых изотопов плутония, америция и кюрия быстрыми нейтронами // Ядерная физика, 1967, т. 5, с. 966.
- 24. Iyer R., Sampathkumar R. Total Fission Cross Section Measurements Using Solid State Track Detectors. Rep. BARC/I-79, 1970, p. 55.
- 25. Cance M., Grenier G. Absolute fission cross section U-235 at 2.5 and 4.45 MeV and Am-241 at 14.6 MeV neutron energies. Rep. CEA-N-2194, 1981.
- Khan N.A., Khan H.A., Anwar M. e.a. 14.8 MeV neutron induced fission studies of ²³⁹Pu, ²⁴²Pu, ²⁴⁴Pu and ²⁴¹Am // Nucl. Instrum. Meth., 1980, vol. 173, pp. 163—168.
 Badikov S.A., Zolotarev K.I. Evaluation of the ²³⁷Np fission cross section in the en-
- Badikov S.A., Zolotarev K.I. Evaluation of the ²⁵ Np fission cross section in the energy range 100 keV— 20 MeV // In: Proc. 9-th Intern. Symp. on Reactor Dosimetry, Sept. 2—6 1996, Prague, Czech Republic, Paper E145. World Sci., 1998.

Поступила в Редакцию 14.01.2000

ИССЛЕДОВАНИЯ ФОТОДЕЛЕНИЯ ЯДЕР

Каналовые эффекты при делении четно-четных составных ядер

Л. Н. Усачев, В. А. Павлинчук, Н. С. Работнов

Анализируются экспериментальные данные о делении четно-четных составных ядер в реакциях (*d*, *pf*), (γ , *f*) и (*n*, *f*) вблизи порога. Оценки делительной ширины проводятся на основе формулы Бора — Уилера. Все приведенные экспериментальные данные согласуются со структурой каналов деления, предложенной О. Бором. При этом оказывается, что каналы деления, имеющие отрицательную четность, лежат на 0,6—0,8 МэВ выше, чем первые каналы положительной четности. При таком расположении каналов деления формула Бора — Уилера дает количественное описание средних делительных ширин резонансов реакции (*n*, *f*) на ядрах U²³³, U²³⁵ и Pu²⁴¹. Для объяснения резкого расхождения в случае Pu²³⁹ нужно предположить, что основное состояние этого ядра имеет отрицательную четность.

Экспериментальные данные анализируются с целью изучения влияния спина и четности делящегося ядра на барьер деления. Если барьер приближенно считать параболическим, то его форма полностью определяется двумя величинами: высотой E_f и параметром E_{curv} , который характеризует кривизну барьера в седловой точке [1]. Основные теоретические представления о связи процесса деления с квантовыми характеристиками делящегося ядра были развиты в работах Н. Бора, О. Бора, Хилла и Уилера [1—3], в которых высказан ряд положений, использованных в настоящей работе. Эти положения можно обобщить следующим образом:

1. В седловой точке значительная часть энергии возбуждения переходит в потенциальную энергию деформации, ядро «охлаждается» и число способов возбуждения степеней свободы, не связанных с делением, сильно ограничивается. Поэтому невелико и число способов — «каналов деления», — которыми ядро может проходить через седловую точку.

2. Для четно-четных ядер в седловой точке должны проявляться эффекты спаривания и спектр каналов деления должен быть похож на спектр низколежащих возбужденных уровней. Поэтому согласно гипотезе О. Бора каналы

Атомная энергия, 1964, т. 17, вып. 6, с. 479-485.



Рис. 1. Схематическое изображение структуры каналов деления, соответствующей гипотезе О. Бора

деления в порядке возрастания соответствующих им порогов деления располагаются следующим образом (рис. 1): 1) ротационная полоса положительной четности, основанная на уровне 0^+ (уровень 1^+ в ней отсутствует); 2) ротационная полоса отрицательной четности, начинающаяся с уровня 1-, расстояние которого от уровня 0^+ обозначим через Δ_1 (уровень 0⁻ в этой полосе отсутствует); 3) на расстоянии $\Delta_2 \approx 1$ МэВ выше нижнего из каналов деления (канала 0⁺) начинаются каналы, соответствую-

щие одночастичным возбуждениям, которые, вообще говоря, могут иметь любые характеристики, в том числе 0^- и 1^+ .

3. Для средней делительной ширины состояний со спином J и четностью П справедлива формула Бора — Уилера

$$\overline{\Gamma}_{f}^{J,\Pi} = \frac{\overline{D}^{J,\Pi}}{2\pi} \sum_{i=1}^{\nu} P\Big(E_{f}^{(i)}, E_{\text{curv}}^{(i)}, E\Big),\tag{1}$$

где $\overline{D}^{J,\Pi}$ — среднее расстояние между уровнями составного ядра; *i* — номер канала деления; *P* — проницаемость барьера для *i*-го канала, которая дается выражением [1]

$$P\left(E_{f}^{(i)}, E_{\text{curv}}^{(i)}, E\right) = 1 / \left[1 + \exp \frac{2\pi \left(E_{f}^{(i)} - E\right)}{E_{\text{curv}}^{(i)}}\right].$$
 (2)

Формула (1) используется для получения характеристик каналов деления.

Реакция (*d*, *pf*)

В работе [4] с помощью реакции (*d*, *pf*) были экспериментально получены кривые делимости составных ядер U^{234} , U^{236} и Pu^{240} ниже энергии связи нейтрона в соответствующем ядре. Кривые имеют характерный вид, показанный на рис. 2. Ниже порога эмиссии нейтронов единственным процессом, конкурирующим с делением, является испускание γ -квантов, поэтому измеряемая в работе [4] делимость выражается формулой

$$F = \frac{\sigma_{d,pf}}{\sigma_{d,p}} = \sum_{J,\Pi} \left\langle \frac{\Gamma_f^{J,\Pi}}{\Gamma_f^{J,\Pi} + \Gamma_\gamma^{J,\Pi}} \right\rangle \sigma_{d,p}^{J,\Pi} \frac{1}{\sum_{J,\Pi} \sigma_{d,p}^{J,\Pi}},$$
(3)



Рис. 2. Схематическое изображение кривых делимости в реакции (*d*, *pf*), полученных в работе [4]

где $\sigma_{d,p}^{J,\Pi}$ — среднее сечение образования составного ядра со спином J и четностью П в реакции d, p, а парциальные средние делимости получаются усреднением по распределению делительных ширин и равны

$$\left\langle \frac{\Gamma_f^{J,\Pi}}{\Gamma_f^{J,\Pi} + \Gamma_\gamma^{J,\Pi}} \right\rangle = \frac{1}{1+\alpha} S(\alpha).$$
(4)

Здесь $\alpha = \frac{\overline{\Gamma}_{\gamma}^{J,\Pi}}{\Gamma_{f}^{J,\Pi}}$, а $S(\alpha)$ — «функция флуктуаций» (см. ниже). Из формул (1)—

(3) следует, что кривая делимости будет иметь характерный ступенчатый вид, наблюдающийся в эксперименте, при одном из двух следующих случаев:

А. Если $\overline{\Gamma}_f \ll \overline{\Gamma}_{\gamma}$ даже при P = 1 (т. е. на плато), то в знаменателе можно пренебречь величиной $\overline{\Gamma}_f$ но сравнению с $\overline{\Gamma}_{\gamma}$. Поскольку $\overline{\Gamma}_{\gamma}$ очень слабо зависит от энергии, делимость будет просто пропорциональна делительной ширине и, следовательно, проницаемости. На плато делимость примет значение

$$F^{\Pi\Pi} = \sigma_{d,p}^{J,\Pi} \frac{\overline{\Gamma}_{f}^{\Pi\Pi,\Pi}}{\overline{\Gamma}_{\gamma}} \frac{1}{\sigma_{d,p}}.$$
(5)

если $\overline{\Gamma}_{f}^{J,\Pi} = \overline{\Gamma}_{f}^{\Pi J,\Pi} P.$

Б. Если при некоторой энергии средняя делительная ширина сравнивается с радиационной и продолжает расти быстрее, то при $\overline{\Gamma}_f \gg \overline{\Gamma}_{\gamma}$ делимость на плато дается отношением

$$F^{\Pi\Pi} = \frac{\sigma_{d,p}^{J,\Pi}}{\sigma_{d,p}}.$$
 (6)

Если при одной и той же энергии расположены барьеры для нескольких комбинаций момента и четности, то выражения (5) и (6) надо просуммировать по всем таким комбинациям.

В работе [4] принимается предположение *A*, из которого следует, что пороговое значение энергии совпадает с *T* (см. рис. 2) — той точкой энергетической оси, где $F = \frac{1}{2}F^{\Pi\Pi}$. Параметр $E_{curv} = \frac{\pi}{2}\delta E = \frac{\pi}{2S}$ (здесь *S* — наклон кривой $F'(E) = \frac{F(E)}{F^{\Pi\Pi}}$ в точке, где $F' = \frac{1}{2}$).

Для справедливости такой интерпретации необходимо, чтобы величина $\overline{\Gamma}_f$ при проницаемости, равной единице, была в несколько раз меньше $\overline{\Gamma}_{\gamma}$ при энергии, соответствующей выходу на первое плато. Ширина $\overline{\Gamma}_{\gamma}$ при $E = B_n$ для всех делящихся элементов составляет 30—40 МэВ. Если даже предположить, что это значение не уменьшается при уменьшении энергии возбуждения на 1 МэВ, то для Pu²⁴⁰ при E = 4,9 МэВ должно быть $\overline{\Gamma}_f \approx 5$ МэВ. При использовании выражения для плотности уровней на основе модели Ферми-газа

$$\varrho(E,J) = \varrho(E) \frac{2J+1}{2\sqrt{2\pi\sigma^3}} \exp\left[-\frac{\left(J+\frac{1}{2}\right)^{1/2}}{2\sigma^2}\right],\tag{7}$$

где

$$\varrho(E) = \frac{\sqrt{\pi}}{12(a)^{\frac{1}{4}}(E')^{\frac{5}{4}}} \exp\left[2(aE')^{\frac{1}{2}}\right]$$
(7)

[здесь $E' = E - \Delta$ (параметры σ , a, Δ были получены А. В. Малышевым из сравнения с экспериментальными данными при $E = B_n$)], оценка по формуле (1) дает в сотни раз большие значения. Поэтому мы попытаемся проанализировать экспериментальные данные, исходя из предположения E и используя формулы (1)—(7).

Согласно предположению *Б* делимость достигает половины своего значения на плато при $T < E_f$. Выясним, как связаны в этом случае экспериментальные значения величин *T* и δE с E_f и E_{curv} . Сделав естественное предположение, что при подбарьерном делении играет роль лишь один нижний (для заданных *J* и П) канал и распределение делительных ширин описывается, следовательно, χ^2 -распределением с одной степенью свободы [5], получим, что в нашем случае *F* ' равно средней парциальной делимости:

$$F' = \frac{1}{1+\alpha} S(\alpha), \qquad (8)$$

а

$$S_{1}(\alpha) = (1+\alpha) \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{0}^{\infty} \frac{x^{1/2}}{1+x} e^{-dx/2} dx$$
(9)

является «функцией флуктуаций» для одноканального распределения, полученной в работе [6]. Дифференцируя (8) по энергии, используя (1), (2) и (9) и считая, что плотность уровней и радиационная ширина с увеличением энергии меняются медленно по сравнению с быстрым ростом делительной ширины, получим

$$\frac{\partial F'}{\partial E} = -\frac{\pi}{E_{\text{curv}}} \Big[S(\alpha) - 1 \Big].$$
(10)

При $F' = \frac{1}{2}$ решение трансцендентного уравнения (8) относительно α дает значения $\alpha^* = 0.37$; $S(\alpha^*) = 0.675$. Подстановка экспериментального значения $\frac{\partial F'}{\partial E}\Big|_{F'=\frac{1}{2}} = \frac{1}{\delta E}$ в левую часть (10) и $\alpha = \alpha^*$ — в правую дает такую связь между $\delta E = \frac{1}{2}$

 δE и E_{curv} :

$$E_{\rm curv} = \pi \delta E \cdot 0,325 \approx \delta E. \tag{11}$$

Это показывает, что по нашему анализу значения E_{curv} в 1,5 раза меньше определенных авторами работы [4] при использовании предположения A. Следует заметить, что при расчетах по формуле (11) можно пользоваться величинами δE , приведенными в работе [4], поскольку кривые делимости в предположениях A и B, но с разными E_{curv} очень близки друг к другу и конечное энергетическое разрешение меняет их одинаково.

Для вычисления *E*_f воспользуемся условием

$$\alpha^* = \alpha(T) = \frac{\overline{\Gamma}_{\gamma}}{\Gamma_f(T)}.$$
(12)

Применяя формулы (1) и (7), получим

$$E_f = T + \frac{E_{\text{curv}}}{2\pi} \ln \left[\frac{\alpha_0}{2\pi \varrho(T)} - 1 \right].$$
(13)

Результаты расчетов по формулам (11) и (13) приводятся в таблице. Полученные значения «сдвига порогов» $E_f - T$ примерно в 1,5 раза меньше найденных по предварительным оценкам, которые были проведены в работе [7] без учета флуктуаций делительных ширин.

Поскольку в реакции (d, pf) при энергии дейтонов 14 МэВ нейтроны, захватываемые ядром-мишенью, могут иметь значительный орбитальный момент, составное ядро образуется в состояниях со всевозможными комбинациями спина и четности. Согласно нашим предположениям, плато у кривой

Составное ядро	$E_f^{(1)}$	$E_{ m curv}^{(1)}$	$E_f^{(2)}$	$E_{ m curv}^{(2)}$	B_n
Th ²³²	5,7 (γ, <i>f</i>)	0,41 (γ, <i>f</i>)	6,4 (γ, <i>f</i>)	0,68 (γ, <i>f</i>)	6,4
U^{234}	5,5 (<i>d</i> , <i>pf</i>)	0,45 (<i>d</i> , <i>pf</i>)	6,2 (<i>d</i> , <i>pf</i>)	0,45 (<i>d</i> , <i>pf</i>)	6,8
			6,4 (γ, <i>f</i>)		
U^{236}	6,0 (<i>d</i> , <i>pf</i>)	0,58 (<i>d</i> , <i>pf</i>)	6,6 (<i>n</i> , <i>f</i>)		6,4
U^{238}	6,0 (γ, <i>f</i>)	0,68 (γ, <i>f</i>)	6,6 (γ, <i>f</i>)	0,9 (γ, <i>f</i>)	6,0
Pu ²⁴⁰	5,0 (<i>d</i> , <i>pf</i>)	0,31 (<i>d</i> , <i>pf</i>)	5,8 (<i>d</i> , <i>pf</i>)	0,38 (<i>d</i> , <i>pf</i>)	6,4
Pu ²⁴²	~6,0 (<i>n</i> , <i>f</i>)		—	—	6,4

Значения параметров $E_f^{(1)}$, $E_f^{(2)}$, $E_{curv}^{(1)}$ и $E_{curv}^{(2)}$, определенные из данных, полученных в различных реакциях, МэВ

делимости первый раз появляется при $\Gamma_f \gg \Gamma_\gamma$. Поэтому последующий подъем делимости нельзя объяснить дальнейшим увеличением делительной ширины, т. е. открытием новых делительных каналов для тех составных ядер, вероятность деления которых и так уже была очень велика. Второй подъем, следовательно, означает, что при энергии возбуждения, соответствующей началу первого плато, для значительной, возможно, даже преобладающей части составных ядер деление еще сильно запрещено [существуют по крайней мере две группы комбинаций спина и четности составного ядра, для которых пороги равны соответственно $E_f^{(1)}$ и $E_f^{(2)}$ (см. таблицу)], т. е. различаются примерно на 0,6 — 0,8 МэВ. На это указывает и тот факт, что значение делимости F на первом плато существенно меньше единицы. Однако прямо отождествлять значение делимости на первом плато с долей составных ядер, делящихся через нижний барьер, нельзя, поскольку высота плато может зависеть от спина ядрамишени, а также из-за возможного влияния на эту величину анизотропии в угловых распределениях протонов и осколков. Последнее обстоятельство отмечается и авторами работы [4].

Если предположить, что Δ_1 (см. выше) составляет несколько сотен килоэлектронвольт, то второй подъем на кривой делимости соответствует делению составных ядер отрицательной четности. Следствия из такого предположения можно сравнить с экспериментальными данными по фотоделению и делению резонансными нейтронами.

Фотоделение

Энергетическая зависимость сечений фотоделения и угловые распределения осколков исследовались многими авторами как с помощью монохроматических γ-линий [8—10], так и на тормозном спектре [11, 12]. Лучше всего изучены ядра Th²³² и U²³⁸. Гамма-кванты с энергией 5—7 МэВ испытывают на тяжелых ядрах лишь электрическое дипольное и квадрупольное поглощение, что приводит для четно-четных ядер-мишеней к образованию составных ядер в состояниях 1⁻ и 2⁺. Сечение фотоделения равно

$$\sigma_{\gamma,f} = \sigma_{\gamma}^{(2+)} \left\langle \frac{\Gamma_f^{2+}}{\Gamma_f^{2+} + \Gamma_c} \right\rangle + \sigma_{\gamma}^{(1-)} \left\langle \frac{\Gamma_f^{1-}}{\Gamma_f^{1-} + \Gamma_c} \right\rangle, \tag{14}$$

где $\sigma_{\gamma}^{(2+)}$ и $\sigma_{\gamma}^{(1-)}$ — сечения квадрупольного и дипольного фотопоглощения соответственно, а Г_с — суммарная ширина процессов распада, конкурирующих с делением. Ниже порога реакции (γ , n) значение $\Gamma_{\gamma} = \Gamma_{c}$. Из общих соображений сечение дипольного поглощения должно быть значительно больше квадрупольного. Если это справедливо, то при значительной разнице порогов в пользу квадрупольного фотоделения качественно кривая энергетической зависимости сечения фотоделения в логарифмическом масштабе по оси ординат при $E < E_f^{(1)}$ должна представлять собой прямую с наклоном $2\pi / E_{curv}^{(1)}$, а при $E_{f}^{(1)} < E_{\gamma} < E_{f}^{(2)}$ — прямую с наклоном $2\pi / E_{curv}^{(2)}$. Изменение наклона происходит там, где сечение квадрупольного фотоделения достигает насыщения, т. е. при $\overline{\Gamma}_{f}^{(2+)} = \overline{\Gamma}_{\gamma}$. Поскольку качественно кривизна вершины, а, следовательно, и соответствующее значение E_{curv} должны быть больше для более высокого барьера, то указанное изменение наклона должно происходить в сторону его уменьшения. Экспериментальные кривые для Th²³² и U²³⁸, взятые из работы [12], приведены на рис. 3. Их ход, как видно, качественно вполне согласуется с нашими предположениями, особенно для Th²³², у которого отчетливо видны оба прямолинейных участка. Величины $E_{curv}^{(1)}$ для обоих ядер определяются непосредственно по наклону и равны 0,41 для Th²³² и 0,68 для U²³⁸. Если считать, что в точке излома $\overline{\Gamma}_{\nu} \approx \overline{\Gamma}_{\nu}$, то с помощью формулы (13) можно получить значения порогов квадрупольного фотоделения. Они равны 5,7 и 6,0 МэВ соответственно. Для Th²³² можно найти и $E_{curv}^{(2)}$ =0,68 МэВ. Чтобы определить положение второго порога, необходимо знать полное сечение дипольного поглощения у-квантов в данной области энергий. Нижнюю границу этой величины можно получить, если считать, что сечения фотоделения достигают насыщения вблизи $E_{\gamma} = B_n$. Тогда

$$\sigma_{\gamma}^{(1-)} + \sigma_{\gamma}^{(2+)} = \sigma_{\gamma f} \left(B_n \right). \tag{15}$$

Из опытов работы [8] по изучению углового распределения осколков фотоделения известно, что при $E_{\gamma} = 6,14$ МэВ для U²³⁸ деление через канал 2⁺ составляет примерно 20 % полного сечения фотоделения. Вклад квадрупольного деления у Th²³², если судить по кривым на рис. 3, еще меньше. Тогда, пользу-



Рис. 3. Энергетическая зависимость сечений фотоделения $U^{238}(a)$ и Th²³² (б)

ясь равенством (15) и считая, что сечение фотопоглощения слабо меняется при изменении E_{γ} на несколько сотен килоэлектронвольт, можно восстановить ход делимости через канал 1⁻ в области $E_{\gamma} = 5,5 \div 6$ МэВ и с помощью формулы (13) определить $E_{f}^{(2)}$. Результаты приведены в таблице.

Следует отметить, что вклад квадрупольной компоненты в угловое распределение осколков фотоделения впервые был обнаружен в работе [11] при измерениях на тормозном спектре с граничной энергией $E_{\gamma} = 9,3$ МэВ и равнялся 10%. При усреднении полученных нами парциальных сечений фотоделения по такому тормозному спектру как раз получается отношение $\frac{\overline{\sigma}_{\gamma f}^{2+}}{\overline{\sigma}_{\gamma f}^{1-}} \approx 10\%$. Для ядер U²³⁴ и U²³⁶ сечение фотоделения измерено в работе [10] с помощью монохроматического γ -излучения только в двух точках: $E_{\gamma} = 6,14$ МэВ и $E_{\gamma} = 7,0$ МэВ. Для U²³⁴ $\sigma_{\gamma f} (6,14) = 5^{+10}_{-2}$ мбарн и

 $\sigma_{\gamma f}(7,0) = 52 \pm 16$ мбарн. Вторая точка лежит уже выше энергии связи нейтро-

на, и определенного заключения о положении порога канала 1⁻ сделать нельзя.

Наши предположения о взаимном расположении порогов 1⁻ и 2⁺ приводят к некоторым следствиям, для проверки которых имеющихся экспериментальных данных недостаточно. Так, например, при $E_{\gamma} < E_{f}^{(1)}$ в угловом распределении осколков деления по мере углубления в подбарьерную область должна все большую роль играть квадрупольная компонента, для обнаружения которой нужно измерять выходы осколков не только под углами 0 и 90°, но и под углом 45° к пучку γ -квантов. Это обстоятельство отмечалось в работе [18].

Деление резонансными нейтронами

Известны экспериментальные данные, которые можно использовать для непосредственной проверки формулы Бора — Уилера. Это результаты опытов по изучению резонансной структуры нейтронных сечений. Такие данные имеются для четырех делящихся ядер U²³³, U²³⁵, Pu²³⁹, Pu²⁴¹.

Несколько первых резонансов у каждого из указанных изотопов с помощью многоуровневого анализа разбиты на две группы с различными спинами, и для каждой группы найдены средние значения расстояний между уровнями \overline{D}^J и делительных ширин. Если формула Бора — Уилера (1) справедлива, то «эффективное число каналов»

$$\mathbf{v}_{\mathbf{y}\phi\phi}^{J,\pi} = \sum_{i=1}^{\nu} P_i(E_i, E) = \frac{2\pi \overline{\Gamma}_f^{J,\Pi}}{\overline{D}^{J,\Pi}}$$
(16)

выражается через экспериментально наблюдаемые величины. Проверим, как полученные таким образом значения v_{эфф} для различных ядер согласуются с нашими предположениями о структуре каналов деления.

1. $U^{233} + n$. Основное состояние $\frac{5^+}{2}$. Следовательно, резонансы соответ-

ствуют уровням 2⁺ и 3⁺ U²³⁴. Если ядро в седловой точке аксиальносимметрично, то в ротационной полосе положительной четности, которая по нашим предположениям соответствует нижнему делительному каналу, есть лишь уровень 2⁺, а уровень 3⁺ одночастичный. Нижний порог деления U²³⁴ (см. таблицу) лежит ниже энергии связи нейтрона более чем на 1 МэВ. Одночастичные каналы при $E = B_n$ уже должны вносить вклад и, следовательно, $v_{3\phi\phi}^{2+} > v_{3\phi\phi}^{3+} \approx 1$. Экспериментальные значения, оцененные по данным работ [13, 14], $v_{3\phi\phi}^{2+} \approx 2$; $v_{3\phi\phi}^{3+} \approx 0,7$.

2. U²³⁵ + *n*. Основное состояние U²³⁵ $\frac{7^{-}}{2}$: составное ядро делится из со-

стояний 3⁻ и 4⁻. У U²³⁶ известно лишь положение первого порога, который лежит примерно на 0,4 МэВ ниже энергии связи нейтрона (см. таблицу). Ротационная полоса отрицательной четности, в которой есть уровень 3⁻, должна лежать на 0,6—0,8 МэВ выше нижнего порога, т. е. около $E = B_n$. Также вблизи B_n , на несколько сотен килоэлектронвольт выше, будут располагаться первые каналы, соответствующие одночастичным возбуждениям. Поэтому примерно должно выполняться соотношение $v_{3\phi\phi}^{4-} < v_{3\phi\phi}^{3-} \leq 1$. Согласно результатам работы [15] для двух систем резонансов значения $v_{3\phi\phi}$ равны 0,6 и 0,15. Значения спинов этих групп экспериментально не определялись. Наши предположения, как видно, лучше будут согласовываться с экспериментальными данными, если считать, что уровни с большей делительной шириной имеют спин 3. 3. $\mathbf{Pu^{241}} + \mathbf{n}$. Основное состояние $\mathbf{Pu^{241}} \frac{5^+}{2}$. Делительные ширины измерены только у девяти резонансов [16]; положение порогов деления неизвестно. Значения $v_{3\phi\phi}$ равны примерно 1,5 и 0,2. Если все наши предположения справедливы, то это должно означать, что широкие резонансы соответствуют J = 2, а узкие J = 3 и порог нижнего канала расположен примерно на 0,5 МэВ ниже энергии связи нейтрона. В связи с этим изучение реакции (d, pf) на ядре $\mathbf{Pu^{241}}$ представляет особый интерес.

4. $\mathbf{Pu}^{239} + \mathbf{n}$. Основное состояние $\frac{1^+}{2}$. Среднее расстояние между резонансами $\overline{D} = 2,9$ эВ, что соответствует $\overline{D}^{0+} = 11,6$ эВ, $\overline{D}^{1+} = 3,9$ эВ. Согласно последним измерениям [15] $\overline{\Gamma}_{f}^{0+} \approx 40$ МэВ, $\overline{\Gamma}_{f}^{1+} \approx 160$ МэВ и, следовательно, $v_{9\varphi\varphi}^{1+} = 0,26, v_{9\varphi\varphi}^{0+} = 0,02$. Таким образом, те представления о структуре каналов деления, которые в остальных случаях вполне удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными, здесь приводят к ошибке на два порядка. Это противоречие можно устранить, если предположить, что основное состояние ядра Pu^{239} имеет отрицательную четность. Уровня 0⁻ в ротационных полосах отрицательной четности нет; соответствующий ему канал — обязательно одночастичный. Если он лежит примерно на 2,0 МэВ выше нижнего порога, это и дает наблюдаемую малую проницаемость. Флуктуации делительных ширин резонансов Pu^{239} хорошо описываются одноканальным распределением Портера — Томаса [5]. Это также свидетельствует о том, что порог деления Pu^{239} *S*-нейтронами расположен высоко.

В работе [17] предложена систематика четностей основных состояний αактивных ядер. Положительная четность Pu²³⁹ — одно из очень немногих расхождений этой систематики с данными эксперимента.

Заключение

В работе предполагалось, что по порядку величины средняя делительная ширина описывается формулой Бора — Уилера (1). При анализе данных реакции (*d*, *pf*) из этого предположения однозначно следует, что, во-первых, существует по крайней мере два набора комбинаций спина и четности делящегося ядра, для которых пороги деления различаются на 0,6—0,8 МэВ, и, вовторых, эти пороги расположены выше, чем считалось раньше. Данные реакции (γ , *f*) анализировались при дополнительном предположении, что сечение фотопоглощения слабо зависит от энергии в интервалах порядка 1 МэВ по сравнению с экспоненциальным ростом делительной ширины в области $E_{\gamma} = 5 \div 7$ МэВ. Наше рассмотрение также приводит к заметно более высоким значениям порогов фотоделения по сравнению с принимавшимися до сих пор, причем барьер деления при квадрупольном фотопоглощении расположен ниже барьера дипольного фотоделения на 0,6—1,0 МэВ. Сопоставляя результаты анализа реакций (d, pf) и (γ , f), естественно предположить, что первый подъем делимости в реакции (d, pf) соответствует каналам положительной четности, а второй — каналам отрицательной четности. Все эти выводы согласуются с гипотезой О. Бора о структуре каналов деления четно-четных ядер, если расстояние между ротационными полосами положительной и отрицательной четности $\Delta_1 \approx 0,6 - 1,0$ МэВ.

В соответствии с результатами рассмотрения реакций (d, pf) и (γ, f) и в рамках гипотезы О. Бора можно задать такое расположение каналов деления, при котором формула Бора — Уилера количественно описывает экспериментальные данные о средних делительных ширинах резонансов реакции (n, f), кроме данных для ядра Pu²³⁹. Для устранения резкого расхождения, отмеченного в последнем случае, нужно предположить, что основное состояние ядра Pu²³⁹ имеет отрицательную четность.

Литература

- 1. D. Hill, J. Wheeler. Phys. Rev., 89, 1102 (1953).
- 2. N. Bohr, J. Wheeler. Phys. Rev., 56, 426 (1939).
- 3. О. Бор. В кн. «Материалы Международной конференции по мирному использованию атомной энергии (Женева, 1955)». Т. 2. М., Физматгиз, 1958, с. 176.
- 4. J. Northrop, R. Stokes, K. Bayer. Phys. Rev., 115, 1227 (1959).
- 5. G. Porter, R. Thomas. Phys. Rev., 104, 483 (1956).
- 6. A. Lane, J. Lynn. Proc. Phys. Soc., 70, 557 (1957).
- 7. Л.Н. Усачев, В.А. Павлинчук, Н.С. Работнов. ЖЭТФ, 44, 1950 (1963).
- 8. B. Forkman, S. Tohansson. Nucl. Phys., 20, 136 (1960).
- 9. H. De Carwalho, A. Manfredini, M. Muchnik. Nuovo Cimento, 25, 136 (1960).
- 10. J. Huizenqa et al. Nucl. Phys., 34, 439 (1962).
- А.И. Базь и др. В кн.: «Труды Второй международной конференции по мирному использованию атомной энергии». Докл. сов. ученых. Т. 1. М., Атомиздат, 1959, с. 362.
- L. Catz, A. Baerg, F. Brown. P/200. Proc. of II d UN Conference on PUAE (Geneva 1958), vol. 15 (1958), p. 183.
- 13. G. Reich, M. Moore. Phys. Rev., 118, 718 (1960).
- 14. E. Vogt. Phys. Rev., 118, 724 (1960).
- 15. И.В. Кирпичников и др. Атомная энергия, 16, 110 (1964).
- 16. O. Simpson, M. Moore. Phys. Rev., 123. 559 (1961).
- 17. В.Н. Андреев. ЖЭТФ, 42, 913 (1962).
- 18. J. Griffin. Phys. Rev., 116, 107 (1959).

Поступила в Редакцию 12/ XII 1963 г.

Фотоделение четно-четных ядер вблизи порога

Н. С. Работнов, Г. Н. Смиренкин, А. С. Солдатов, Л. Н. Усачев Физико-энергетический институт, Обнинск

С. П. Капица, Ю. М. Ципенюк

Институт физических проблем, Москва, СССР

Сообщаются результаты измерений угловых распределений осколков при фотоделении U²³⁸, Th²³², Pu²⁴⁰ и Pu²³⁹, выполненных на пучке гамма-квантов тормозного излучения. Источником гамма-излучения служил микротрон Института физиических проблем АН СССР с мощностью пучка 12 МэВ. Использование микротрона в качестве мощного источника гамма-лучей позволило произвести измерения угловых распределений в наиболее интересной и до сих пор не изученной области энергий гамма-квантов с $E_{\text{макс}} < 6$ МэВ.

Для U²³⁸ исследования были произведены в диапазоне энергий от 5,2 до 9,2 МэВ, для Th²³² — от 5,4 до 6,9 МэВ, для Pu²⁴⁰ — от 5,4 до 7,9 МэВ и для Pu²³⁹ — от 5,4 до 7,9 МэВ. Приводятся также результаты измерений угловых распределений при фотоделении U²³⁸ и Th²³² гамма-лучами реакции F¹⁹(p, $\alpha \gamma$)O¹⁶. Источником гамма-излучения являлась толстая мишень из CaF₂, облучавшаяся протонами с энергией 1,45 МэВ.

В результате этих измерений удалось установить, в соответствии с большинством выполненных ранее экспериментов, но в противоположность данным Лазаревой и др. и Форкмана и Юхансона, что вклад делений, связанных с квадрупольным поглощением фотонов в полное сечение деления мал в области энергий $E \leq 6$ МэВ. Впервые показано, что в согласии с теоретическими предпосылками, основанными на модели каналов деления О. Бора, относительный вес квадрупольной компоненты становится существенным только при энергиях возбуждения ниже порога «дипольного» деления, соответствующего каналу 1^{-} (K = 0). Так, например, в угловых распределениях осколков фотоделения U^{238} при максимальных энергиях тормозного спектра $E_{\text{макс}} = 5,4$ и 5,2 МэВ вклад квадрупольной компоненты в полное сечение фотоделения составляет соответственно 10 % и 43 %, в то время как в области $E_{\text{макс}} < 6 \text{ МэВ}$ этот вклад не превышает 3-3,5 %. Из исследованных четно-четных делящихся ядер эффект «квадрупольного» деления более отчетливо проявляется у Pu²⁴⁰ и менее — у Th²³². По результатам измерений можно оценить отношение парциальных сечений фотопоглощения на тяжелых ядрах.

В связи с результатами измерений угловых распределений осколков фотоделения Pu^{239} , обнаруживающих изменение знака анизотропии в соответствии с предсказаниями теории для каналов с $K = \frac{1}{2}$ и $\frac{3}{2}$, обсуждается вопрос о четности основного состояния Pu^{239} .

1. Введение

Весьма привлекательной с точки зрения изучения физики деления является реакция (γ , f) при энергиях гамма-квантов, близких к порогу деления. Это

Physics and Chemistry of Fission, vol. 1. IAEA, Vienna, Austria, 1965, pp. 135-156.

объясняется двумя обстоятельствами. Во-первых, гамма-кванты с энергией 5—7 МэВ испытывают на тяжелых ядрах лишь электрическое дипольное и электрическое квадрупольное поглощение. Для четно-четных ядер-мишеней это приводит к образованию составных ядер лишь в двух возможных состояниях 2^+ и 1^- , причем из-за того, что длина волны гамма-квантов в рассматриваемой области энергий значительно превышает размеры ядра, сечение дипольного поглощения. Во-вторых, моменты составных ядер после поглощения гамма-кванта оказываются выстроенными вдоль направления пучка фотонов. В случае дипольного поглощения выстраивание является полным (для четночетных мишеней), поскольку проекция полного момента фотона, равного единице, на направление пучка может принимать лишь значения ±1 (но не 0).

О. Бор высказал предположение [1], что барьер деления сильно зависит от квантового числа K — проекции полного момента ядра на ось деления, и ядро проходит через седловую точку по одному из достаточно далеко отстоящих друг от друга по энергии «каналов». Ниже всего лежат барьеры для K = 0, поэтому при фотоделении имеется направление преимущественного вылета осколков и угловое распределение имеет вид $b\sin^2 v + c\sin^2 v$, где коэффициенты b и c связаны с сечениями «дипольного» и «квадрупольного» фотоделения. Если вклад дают каналы с K = 0, то в угловом распределении появляется изотропная компонента, обозначение ее a.

В экспериментальных исследованиях к гамма-лучам в качестве средства возбуждения деления прибегают гораздо реже, чем к нейтронам, поскольку сечение реакции (γ , f) в интересующей нас области энергий мало и измеряется обычно миллибарнами. Впервые экспериментальные указания на существование компоненты, пропорциональной sin²2v в угловом распределении осколков были получены при фотоделении U²³⁸ гамма-квантами тормозного излучения с максимальной энергией Емакс = 9,4 МэВ группой Лазаревой [2]. Большая величина наблюденного на опыте отношения *c/b* ~ 0,6 истолковывалась авторами как результат подавления дипольной компоненты в сечении нейтронной конкуренцией. Однако аналогичные измерения группы Каца [3, 4] для большого числа четно-четных мишеней, в том числе и для U²³⁸, не показали скольконибудь существенного вклада квадрупольного фотопоглощения в процесс. Форкман и Юханссон [5] использовали γ -лучи реакции F¹⁹(p, $\alpha\gamma$)O¹⁶ и обнаружили на U²³⁸ при E = 6,1 МэВ значительную вероятность квадрупольного деления (c/b = 0,37). При исследовании углового распределения осколков при делении другого ядра U²³⁶ γ-квантами реакции F¹⁹(p, αγ)O¹⁶, выполненном Коннером, Хенкелем и Симмонсом [6], не обнаружено заметной примеси компоненты

$$\sigma_{\gamma f}^{(2^+,0)} \sim \sin^2 2\upsilon \,.$$

Угловые распределения осколков при делении U²³⁸ и Th²⁸² γ -лучами, сопровождающими радиационный захват медленных нейтронов титаном, $E = 6,61^{+0,14}_{-0.20}$ были измерены группой итальянских и немецких физиков [7].

Эти измерения также показали, что вклад квадрупольной компоненты в угловое распределение незначителен. В работе Солдатова и др. [8] были повторены те измерения Лазаревой и др. [2] и Форкмана и Юханссона [5], которые обнаружили существенный вклад $\sigma_{\gamma f}^{(2^+,0)}$. Повторные опыты не подтвердили результатов работ [5, 9]. Таким образом, большинство выполненных исследований фотоделения при квадрупольном поглощении γ -квантов показывает, что эффект, связанный с присутствием квадрупольной компоненты в угловом распределении осколков, в диапазоне энергий γ -квантов от 6 до 20 МэВ если и имеет место, то не выходит за пределы экспериментальных ошибок порядка нескольких процентов.

В работе Гриффина [9] было отмечено, что если порог деления для состояний 2⁺ существенно ниже, чем для состояний 1⁻, то при подпороговом делении большая проницаемость барьера для квадрупольного деления может существенно увеличить отношение $\sigma_{\gamma f}^{(2^+)}/\sigma_{\gamma f}^{(1^-)}$ по сравнению с отношением сечений фотопоглощения $\sigma_{\gamma}^{(2^+)}/\sigma_{\gamma}^{(1^-)}$.

В работе [10] было показано, что в пользу предположения о большой — порядка 0,5 МэВ — разнице в порогах между состояниями 1⁻ и 2⁺ указывают некоторые экспериментальные данные по реакциям (α , *p f*), (*n*, *f*) и (γ , *f*). Если это справедливо, то заметный вклад квадрупольной компоненты следовало искать, углубляясь под порог «дипольного» деления — в область энергий возбуждения ниже 6 МэВ. Анализ угловых распределений в этом случае мог бы дать прямую информацию об относительном расположении порогов деления для различных каналов и позволил бы оценить отношение парциальных сечений дипольного и квадрупольного фотопоглощения, которое представляет самостоятельный физический интерес. Поэтому мы предприняли подробное измерение угловых распределений осколков фотоделения при энергиях возбуждения порядка и меньше 6 МэВ на Th²³², U²³⁸ и Pu²⁴⁰. Краткое сообщение о результатах для U²³⁸ было опубликовано в работе [25].

2. Экспериментальная часть

2.1 Методика эксперимента

В настоящей работе использовалась простая, но весьма надежная методика регистрации осколков по следам, которые они оставляют при прохождении через стекло.

Путем травления поверхности стекла в 2,5 %-м растворе плавиковой кислоты при соответствующих условиях следы осколков доводятся до размеров,



Источник	a	b	R	L	d
ү-лучей			СМ		
F ¹⁹ (<i>p</i> , αγ)	1,0	3,6	5,0	7,0	1,5
Тормозное излучение	0,8	2,0	4,0	6,5	1,0

Рис. 1. Экспериментальное устройство и схема опыта: 1 — источник γ-лучей; 2 — слой; 3 — стекло

удобных для просмотра в обычный биологический микроскоп с увеличением в 150 раз.

Устройство, применявшееся для измерений угловых распределений осколков (рис. 1), представляло собой кассету, в центре которой закреплялись слои из исследовавшихся делящихся веществ, а по окружности вокруг них через 15° между направлениями 0° (180°) и 90° по отношению к пучку γ -квантов располагались два набора пластинок из фотостекла. Некоторые количественные характеристики геометрии опыта в измерениях с γ -квантами реакции $F^{19}(p, \alpha \gamma)O^{16}$ и тормозного излучения показаны на рис. 1.

Использовавшиеся слои естественного урана и Th^{232} были толщиной 1,0-1,5 мг/см², а изотопов плутония 0,0-0,2 мг/см².

При измерении угловых распределений осколков фотоделения [U²³⁸] и [Th²³²] в обе половины экспериментального устройства помещались практически одинаковые слои одного и того же вещества. При измерении угловых распределений осколков фотоделения Pu²⁴⁰ и Pu²³⁹ использовался двойной слой, на одну сторону которого наносился плутоний с содержанием 92 % (Pu²⁴⁰) и 8 % (Pu²³⁹), а на другую плутоний с содержанием 97 % (Pu²³⁹) и 3 % (Pu²⁴⁰). Из измерений числа делений в одинаковом потоке γ -квантов исключался вклад делений, который был связан с примесью изотопа Pu²³⁹ в Pu²⁴⁰ и определялся по отношению чисел делений в потоке нейтронов из тепловой колонны реактора, а также Pu²⁴⁰ в Pu²³⁹, определяемый по скорости спонтанных делений. Результаты, полученные для фотоделения Pu²³⁹, приводятся и обсуждаются в работе [12].

Экспериментальные данные описывались выражением

$$W(\upsilon) = a + b\sin^2 \upsilon + c\sin^2 2\upsilon, \qquad (1)$$

в самом общем виде представляющим угловое распределение осколков фотоделения четно-четных ядер дипольными и квадрупольными γ-квантами. Коэффициенты в выражении (1) определялись по способу наименьших квадратов с учетом конечного углового разрешения опыта и небольших вариаций эффективности регистрации осколков от пластинки к пластинке в пределах 2 %. Ошибки измерений вычислялись как алгебраическая сумма статистической ошибки и неопределенности, связанной с расхождением результатов просмотра пластинок двумя наблюдателями (0,5—2 %).

Все представленные в работе угловые распределения осколков нормировались из условия $W(90^\circ) = a + b = 1$.

2.2 Измерения на γ-лучах реакции F¹⁹(p, αγ)O¹⁶

В данном разделе сообщаются результаты измерения угловых распределений осколков при фотоделении U^{238} и Th²³² γ-квантами реакции F¹⁹(*p*, *α*γ)O¹⁶. Спектр γ-квантов, реализующихся в этой реакции, состоит из трех моноэнергетических линий 6,1; 6,9; 7,1 МэВ. При выполнении эксперимента были предприняты все меры для выполнений условий опыта поставленного Форкманом и Юханссоном [5]. Источником γ-квантов служила толстая мишень из кристалла CaF₂, облучавшаяся протонами с энергией 1,45 МэВ. При токе протонов ~30 мкА мишень выгорала достаточно медленно, обеспечивая постоянный выход γ-квантов в течение 10 часов. Суммарная экспозиция при облучении U и Th составила 320 и 260 часов, соответственно. Кассета с пластинками в данном эксперименте помещалась внутрь герметической тонкостенной камеры, вакуумировавшейся на время облучения. Более подробно эти измерения описаны в работе [8].

На рис. 2 и 3 приведены результаты измерений угловых распределений осколков для U^{238} и Th^{232} . Предварительные результаты этого опыта были представлены в работе [13]. Сплошные кривые представляют результаты обработки экспериментальных данных по методу наименьших квадратов:

для
$$U^{238} - W(\upsilon) = 0,22 \pm 0,02 + (0,78 \pm 0,03) \sin^2 \upsilon + (0,04 \pm 0,04) \sin^2 2\upsilon;$$

для $Th^{232} - W(\upsilon) = 0,07 \pm 0,01 + (0,93 \pm 0,03) \sin^2 \upsilon + (0,12 \pm 0,04) \sin^2 2\upsilon.$

Полученные в настоящем эксперименте данные относятся к совокупности трех линий у-квантов, отдельные интенсивности которых для толстой мишени из

$$1 (6,1) : 1 (6,9) : 1 (7,1) = 1,00 : 0,15 : 0,17$$

измерены в работе [5]. Пунктиром на рис. 2 показано угловое распределение осколков при фотоделении U²³⁸:

$$W(v) = 0,24 + 0,76 \sin^2 v + 0,24 \sin^2 2v$$
,

соответствующее результатам опыта Форкмана и Юханссона для всего спектра γ -лучей при облучении толстой мишени из CaF₂ протонами E = 1,45 МэВ.





Рис. 2. Угловое распределение осколков при делении U^{238} ү-квантами реакции $F^{19}(p, \alpha \gamma)O^{16}$. Сплошная кривая получена обработкой с помощью наименьших квадратов, пунктирная кривая описывает данные из работы [5]

Рис. 3. Угловое распределение осколков при делении Th²³² γ -квантами реакции F¹⁹(p, $\alpha \gamma$)O¹⁶. Сплошная и пунктирная кривые описывают результаты обработки экспериментальных данных в предположении $c \neq 0$ и c = 0 соответственно

Непосредственно это выражение в работе [5] не приводится. Численные значения коэффициентов в нем были рассчитаны на основе представленной в работе [5] экспериментальной информации для отдельных γ-линий.

На рис. 2 отчетливо видно значительное расхождение результатов наших измерений и данных Форкмана и Юханссона. Тем не менее значения угловой анизотропии $W(90^\circ)/W(0^\circ)$, как следует из соотношений (1) и (3), в обоих экспериментах оказались совпадающими в пределах ошибок опыта.

Полученные экспериментальные данные для углового распределения осколков при фотоделении U²³⁸, как следует из результатов обработки по методу наименьших квадратов, могут быть удовлетворительно описаны соотношением, не содержащим квадрупольной компоненты. Для Th²³² угловое распределение осколков, представленное зависимостью без квадрупольной компоненты

$$W(v) = 0.11 \pm 0.02 + (0.96 \pm 0.05) \sin^2 v$$

(пунктирная кривая на рис. 3) по критерию χ^2 , не может быть отвергнуто с достаточно большой вероятностью P = 0,1 ($\chi^2_5 = 9,5$).

2.3 Измерения на пучке тормозного излучения микротрона

Опыты с пучком у-квантов тормозного излучения были выполнены на микротроне Института Физических проблем АН СССР (мощностью пучка 12 МэВ) [14, 15]. Большое расстояние между электронными орбитами в микротроне (около 35 мм) позволило производить облучение непосредственно в вакуумной камере ускорителя. Мишенью служил вольфрамовый диск толщиной 1 мм, за которым помещалась кассета со слоем и стеклами. Заданное значение энергии Е_{макс} устанавливалось как переходом на разные орбиты, так и вариацией магнитного поля. Точность определения энергии с учетом нестабильности не хуже 0,1 МэВ. Средний ток электронов достигал 50 мкА. В данном эксперименте был получен значительный выигрыш в интенсивности делений в сравнении с условиями опыта в аналогичных выполнениях ранее измеренных. Это преимущество дало возможность осуществить измерения в наиболее интересной и до сих пор неизученной области энергий у-квантов с *E*_{макс} < 6 МэВ, где процесс дипольного деления становится существенно подбарьерным. В этой области Емакс несмотря на то, что в спектре тормозного излучения присутствуют у-кванты с энергией от 0 до Емакс вследствие резкого уменьшения вероятности вблизи порога (см. рис. 4), реальный спектр у-квантов, производящих деление, имеет форму достаточно узкой линии с шириной ~0,4 МэВ. Измерения угловых распределений осколков были выполнены в интервале $E_{\text{макс}}$ от 5,2 до 9,25 МэВ.



Рис. 4. Энергетические распределения γ -квантов при $E_{\text{макс}} = 5,6$ МэВ: 1 — интегральный спектр тормозного излучения, рассчитанный Шиффом [16] $\varphi(E_{\text{макс}}, E)$ для тонкой мишени; 2 — распределение $f(E_{\text{макс}}, E) = \int_{E}^{E_{\text{макс}}} \varphi(E', E) dE')$ для толстой мишени, вычисленное в предположении равномерной потери энергии электроном по толщине мишени; 3 — кривая $k(E_{\text{макс}}, E)^2$, которой спектр $f(E_{\text{макс}}, E)$ аппроксимировался при анализе экспериментальных данных (см. ниже); 4 — величина $\sigma_f(E) \cdot f(E_{\text{макс}}, E)$ — «эффективный спектр» гамма-лучей, вызывающих деление; 5 — сечение фотоделения $\sigma_f(E)$

Чтобы предотвратить нежелательный нагрев стеклянных пластинок под действием прямого пучка электронов, прошедших через мишень, за мишенью помещался алюминиевый поглотитель толщиной 1 см, достаточной для полного торможения электронов с энергией 10 МэВ. Контрольные опыты показали, что введение поглотителя не приводит к существенному изменению той части спектра γ-лучей, которая производит деление. Также было установлено, что фон делений, связанных с фотонейтронами и рассеянными γ-квантами, составляет менее 0,1 % эффекта, наблюдаемого в прямом пучке.

Результаты, полученные путем обработки экспериментальных данных с помощью метода наименьших квадратов, представлены на рис. 5—9. На рис. 5—7 изображены энергетические зависимости коэффициентов *a*, *b*, *c* для Th^{232} , U^{238} и Pu^{240} .

Значения анизотропии фотоделения

$$W(90^\circ)/W(0^\circ) - 1 = b/a ,$$

полученные в настоящей работе, на рис. 8 сравниваются с данными Берга и др. [4]. Экспериментальные точки микротронных измерений лежат систематически выше. Контрольный опыт при $E_{\text{макс}} = 9,25$ МэВ с мишенями толщиной 1 и 0,05 мм убедил нас в том, что этот эффект обусловлен разницей в толщине мишени, а следовательно, и в спектрах тормозного излучения (рис. 8). На рис. 8 полностью зачерченным кружком показана величина анизотропии фотоделения U^{238} при $E_{\text{макс}} = 9,25$ МэВ, наблюдаемая в опыте с мишенью толщиной 0,05 мм.







Рис. 6. Зависимость от от $E_{\text{макс}}$ коэффициентов *a*, *b*, *c* для фотоделения U²³⁸







Рис. 8. Зависимость угловой анизотропии фотоделения b/a от $E_{\text{макс}}$. Кружки — результаты измерений с 1 мм мишенью; Δ — данные [4]



Рис. 9. Угловые распределения осколков фотоделения Th^{232} , U^{238} , Pu^{240} при $E_{\text{макс}} = 5,4$ МэВ. Кривые рассчитаны методом наименьших квадратов. Пунктиром показаны отдельно дипольная квадрупольная и изотропная компоненты

На рис. 9 приводятся результаты опыта и последующей математической обработки, полученные для трех исследовавшийся ядер при при $E_{\text{макс}} = 5,4$ МэВ. Из представленных данных видно, что относительный вклад различных компонент зависит не только от энергии γ-квантов, но и заметно изменяется от ядра к ядру. Более детальный анализ результатов эксперимента проводится в следующем разделе.

3. Анализ и обсуждение результатов

Характерными чертами полученных угловых распределений осколков фотоделения являются почти полное исчезновение изотропного члена и резкое возрастание квадрупольной компоненты при уменьшении энергии гамма-квантов, вызывающих деление. Для изложения современных взглядов на природу этой анизотропии приведем цитату из основополагающей по этому вопросу работы О. Бора [1]: «При энергиях возбуждения, не сильно превышающих порог деления, ядро, проходящее через седловую точку, является по существу «холодным», так как большая часть его энергии представляет потенциальную энергию деформации. Квантовые состояния, в которых ядро может находиться в критической точке «каналов деления», сильно разделены и представляют относительно простой тип движения ядра, Можно ожидать, что спектр этих каналов будет похож на спектр, наблюдаемых при малых возбуждениях основного состояния ядра... Таким образом, можно ожидать, что вблизи седловой точки четно-четные ядра имеют самое низкое состояние $I = 0^+$ и близко расположенные уровни коллективного возбуждения типа $2^+, 4^+, ...,$ так же как и состояние типа 1⁻, 3⁻, ..., хотя и с несколько более высокими энергиями».

В обеих указанных ротационных полосах проекция полного момента на ось симметрии ядра, которая совпадает с направлением разлета осколков, K=0, что и дает наблюдаемые угловые распределения

 $W(\upsilon) \sim \sin^2 \upsilon$ при $I^{\pi} = 1^-$ и $W(\upsilon) \sim \sin^2 2\upsilon$ при $I^{\pi} = 2^+$.

Основная трудность, связанная с такой интерпретацией, неоднократно отмечалась. В работе Гриффина [9], например, говорится: «Предполагаемый спектр в седловой точке в лучшем случае является квазистационарным, и фактически понятие о таком спектре корректно только в том случае, если ядро находится в седловой точке значительно более продолжительное время, чем период возбуждения». Период, связанный, например, с вращением имеет порядок 10⁻¹⁹ сек. Оценки времени прохождения через барьер дают обычно заметно меньшие значения (см., напр., [17]). Причин, по которым это соотношение характерных времен изменилось бы до сих пор не указано. Поэтому мы предлагаем несколько другую точку зрения. Составное ядро живет 10⁻¹⁴ сек. Если в процессе эволюции составного ядра К сохраняется в течение отрезков времени больших времени деления, то в течение таких периодов сохраняется соответствующее этому значению распределение вероятности для ориентации оси ядра в пространстве и за время деления направление оси ядра не успеет измениться. Изложенные выше качественные соображения мы и использовали при анализе результатов эксперимента. Для получения количественных соотношений необходимо ввести некоторые дополнительные предположения.

Составное ядро образуется в рассматриваемой области энергий гаммаквантов лишь за счет электрического дипольного и квадрупольного поглощения. Анизотропные члены в угловом распределении соответствуют низшим каналам с K = 0. Изотропная компонента создается каналами с более высокими порогами, у которых все значения K равновероятны. Дифференциальное сечение фотоделения монохроматическими γ -квантами (с учетом нормировки угловых распределений) можно записать в виде:

$$\sigma(\theta, E) = \sigma_{\gamma}^{(1^{-})} \left(\frac{\Gamma_{f}^{(1^{-},0)}}{\Gamma_{f} + \Gamma_{\gamma}} \frac{3}{4} \sin^{2} \upsilon + \frac{1}{2} \frac{\Gamma_{f}^{(1^{-},k)}}{\Gamma_{f} + \Gamma_{\gamma}} \right) + \sigma_{\gamma}^{(2^{+})} \left(\frac{\Gamma_{f}^{(2^{+},0)}}{\Gamma_{f} + \Gamma_{\gamma}} \frac{15}{16} \sin^{2} \upsilon + \frac{1}{2} \frac{\Gamma_{f}^{(2^{+},k)}}{\Gamma_{f} + \Gamma_{\gamma}} \right),$$

$$(2)$$

где $\sigma_{\gamma}^{(1^{-})}$ и $\sigma_{\gamma}^{(2^{+})}$ — парциальные сечения дипольного и квадрупольного фотопоглощения соответственно; $\Gamma_{f}^{(I^{\pi},0)}$ — делительная ширина низшего канала с K = 0 для состояния со спином *I* и четностью π , а $\Gamma_{f}^{(I^{\pi},k)} = \Gamma_{f} + \Gamma_{f}^{(I^{\pi},0)}$ — полная делительная, а Γ_{γ} — радиационная ширина.

Энергетическая зависимость средней делительной ширины уровней с заданным спином *I* и четностью *π* определяется формулой Бора-Уилера [18]:

$$\overline{\Gamma}^{I,\pi} = \frac{\overline{D}^{I,\pi}}{2\pi} \sum_{i=1}^{\upsilon} P\Big(E, E_f^{(i)}, E_{\text{крив}}^{(i)}\Big), \tag{3}$$

где $\overline{D}^{I,\pi}$ — среднее расстояние между уровнями, индекс *i* нумерует каналы деления, υ — полное число каналов, а *P* — проницаемость барьера для *i*-го канала.

Для проницаемости параболического барьера Хилл и Уилер [19] нашли

$$P(E, E_f^{(i)}, E_{\rm kpub}^{(i)}) = \left[1 + \exp\frac{2\pi \left(E_f^{(i)} - E\right)}{E_{\rm kpub}^{(i)}}\right]^{-1}.$$
(4)

В этом выражении E_f — высота барьера деления, а $E_{\text{крив}}$ — параметр, характеризующий кривизну вершины параболы, которая аппроксимирует форму барьера вблизи порога.

В формуле (3) множитель $\overline{D}^{I,\pi}$ слабо зависит от энергии, убывая как $E^2 e^{-\sqrt{aE}}$, и в наших расчетах на протяжении энергетических интервалов порядка 0,5 — 1 МэВ его можно с той же, примерно, точностью, что и $\sigma_{\gamma}^{(2^+)} / \sigma_{\gamma}^{(1^-)}$ считать постоянным.

Однако наблюдаемые характеристики процесса — угловые распределения, сечения и т. д., определяются не только энергетической зависимостью предэкспоненциального множителя в выражении (3), но и его абсолютной величиной. Как показано в работе [10], при заданных E_f и $E_{\text{крив}}$ положение «наблюдаемого» порога T, то есть точки энергетической оси, где сечение деления достигает половины своего значения на плато, а также наклон кривой сечения в этой точке сильно зависят от относительной величины множителя $D/2\pi$ и радиационной ширины Γ_{γ} .

В работе [10] показано, что формула (3) вполне удовлетворительно описывает обширную совокупность экспериментальных данных за единственным, но очень резким исключением — делительная ширина резонансов 0^+ в реакции Pu^{239} (*n*, *f*) примерно в 70 раз меньше величины, предсказываемой выражением (3). Как относительно общего согласия, так и относительно указанного резкого исключения, одинаково трудно предположить, что они являются случайными. В книге Уилтеса [20] это положение объясняется следующим образом: «Возможным объяснением является то, что примесь самого нижнего адиабатического уровня (0^+) в компаунд-состоянии невелика. Этот уровень изолирован от плотного спектра энергетической щелью в 1 или 2 МэВ... и переходы на него и с него сильно запрещены».

Все эти соображения относятся, конечно, и ко всей нижней полосе каналов с K = 0, построенной на состоянии 0⁺. Если они справедливы, то при расчете делительной ширины для этих каналов правую часть в (3) надо поделить на величину А больше единицы. Как указывалось выше, сравнение с экспериментом для резонансов реакции $Pu^{239}+n$ дает A~70. Помимо аномально малой делительной ширины состояний 0⁺ у Pu^{240} такое предположение качественно объясняет обнаруженное в работе [21] преимущественное испускание осколков под углом 90° к пучку в реакции $U^{235} + n$ при энергии $E_n \sim 100$ кэВ, и некоторые особенности энергетической зависимости угловых распределений осколков фотоделения (как будет показано ниже).

Измерения производились на сплошном спектре тормозного излучения. Поэтому анализ энергетических зависимостей угловых распределений осложняется, и получаемые оценки физических характеристик — таких, как высота и форма барьера деления, отношение парциальных сечений — становятся менее определенными. С учетом «размазывания» в толстой мишени близкий к верхней границе участок тормозного спектра может быть удовлетворительно представлен (рис. 4) функцией

$$f(E_{\text{MAKC}}, E)dE = k(E_{\text{MAKC}} - E)^2 dE, \qquad (5)$$

где k практически не зависит от $E_{\text{макс}}$.

Радиационная ширина $\Gamma_{\gamma} \sim 30$ мВ в рассматриваемой области энергий $E \sim 5,5 - 6$ МэВ. Оценка величины $D/2\pi$ по формулам для плотности уровней [22] дает значение порядка нескольких сот мВ. Это означает, что для оценок

можно считать, что $\overline{D}/2\pi \gg \Gamma_{\gamma}$ а $\overline{D}/2\pi A \ll \Gamma_{\gamma}$. Поэтому для K = 0 мы в знаменателе дроби $\Gamma_f / (\Gamma_f + \Gamma_{\gamma})$ можем пренебрегать величиной Γ_f по сравнению с Γ_{γ} .

Для каналов с $K \neq 0$ при подбарьерном делении это тоже, очевидно, возможно до тех пор, пока $\Gamma_{\gamma} > \Gamma_{f}^{(I^{\pi},0)} > \Gamma_{f}^{(I^{\pi},k)}$, то есть при $b \gtrsim a$, но уже по другой причине — из-за большой величины $\exp \frac{2\pi(E_{f}-E)}{E_{\text{крив}}}$ по сравнению с еди-

ницей.

Интегрируя выражение (2) по спектру (5) учитывая все выше сказанное и выполняя несложные преобразования, легко показать, что

$$\frac{a}{b} (E_{\text{make}}) = \frac{2A}{3} \frac{\Phi \left(E_{\text{make}}, E_{f}^{(1^{-},k)}, E_{\text{крив}}^{(1^{-},k)} \right)}{\Phi \left(E_{\text{make}}, E_{f}^{(1^{-},0)}, E_{\text{крив}}^{(1^{-},0)} \right)};$$
(6)

$$\frac{c}{b} \left(E_{\text{макс}} \right) = \frac{3}{4} \frac{\sigma_{\gamma}^{(2^+)}}{\sigma_{\gamma}^{(1^-)}} \frac{\Phi \left(E_{\text{макс}}, E_f^{(2^+,0)}, E_{\text{крив}}^{(2^+,0)} \right)}{\Phi \left(E_{\text{макс}}, E_f^{(1^-,0)}, E_{\text{крив}}^{(1^-,0)} \right)},$$
(7)

где

$$\Phi(E_{\text{макс}}, E_f, E_{\text{крив}}) = \int_{0}^{\infty} \frac{\epsilon^2 d\epsilon}{1 + \exp\frac{2\pi}{E_{\text{крив}}} \left(\epsilon - E_{\text{макс}} + E_f\right)}.$$
(8)

Интеграл (8) вычисляется точно лишь при $E_{\text{макс}} = E_{f}$, когда его значение равно

$$\Phi\left(E_{\text{макс}}, E_f, E_{\text{крив}}\right) = 1,8\left(E_{\text{крив}}/2\pi\right)^3,\tag{9}$$

но как только $E_{\text{макс}}$ отличается от E_f в ту или другую сторону на величину, большую, чем $E_{\text{крив}}/2\pi$, можно, сохраняя вполне достаточную точность, использовать асимптотические выражения:

$$\Phi(E_{\text{макс}}, E_f, E_{\text{крив}}) = \begin{cases} 1, 8\left(\frac{E_{\text{крив}}}{2\pi}\right)^3 + \frac{\left(E_{\text{макс}} - E_f\right)^3}{3}, & \text{при } E_{\text{макс}} - E_f > \frac{E_{\text{крив}}}{2\pi} (10) \\ (E_{\text{макс}})^3 - \frac{2\pi}{3} (E_{\text{макс}} - E_f) & E_{\text{макс}} - E_f \end{cases}$$

$$\left(2\left(\frac{E_{\text{крив}}}{2\pi}\right)^{3} \cdot e^{-\frac{2\pi}{E_{\text{крив}}}\left(E_{\text{макс}}-E_{f}\right)}, \quad \text{при } E_{f}-E_{\text{макс}} > \frac{E_{\text{крив}}}{2\pi}$$
(11)

С помощью выражений (6) — (11) можно сделать следующие оценки:

1. Отношение a/b согласно (6) при $E_{\text{крив}}^{(1^-,0)} < E_{\text{крив}}^{(1^-,k)}$ должно с уменьшением $E_{\text{макс}}$ достигать минимума при $E_{\text{макс}} = E_f^{(1^-,0)}$. (После этого минимума начнется

плавный подъем. Он соответствует тому факту, что отношение проницаемостей двух барьеров, отличающихся лишь вблизи вершины, с углублением в подбарьерную область должно стремиться к единице. Однако для четночетных ядер это соответствует таким низким энергиям, возбуждения, где наблюдать деление уже трудно). Значение порога канала (1⁻, k = 0) тогда, согласно табл. 1 и рис. 10, равны для U²³⁸ и Th²³² 5,7 и 5,9 МэВ соответственно. Эти значения совпадают с величинами, которые можно получить по кривым энергетической зависимости сечения фотоделения для этих ядер, приведенным в работе [10]. На Pu²⁴⁰ до энергии $E_{\text{макс}} = 5,4$ МэВ a/b монотонно падает и, таким образом, для этого ядра получается $E_f^{(1^-,0)} \le 5,4$ МэВ (см. рис. 11).

TC		
Tannua	_ /	
<i>I uOnuuu</i>	1	
,		

Параметры углового распределения осколков						
$E_{\text{макс}}, M$ эВ	а	b	С			
Th ²³²						
5,4	$0,009 \pm 0,009$	$0,991 \pm 0,027$	$0,030 \pm 0,025$			
5,65	$0,010 \pm 0,005$	$0,\!990 \pm 0,\!016$	0*			
5,9	$0,010 \pm 0,005$	$0,\!990 \pm 0,\!016$	$0,084 \pm 0,014$			
6,4	$0,022 \pm 0,005$	$0,978 \pm 0,015$	$0,022 \pm 0,014$			
6,9	$0,032 \pm 0,007$	$0,968 \pm 0,024$	$0,020 \pm 0,022$			
		U^{238}				
5,2	$0,042 \pm 0,035$	$0,\!958 \pm 0,\!050$	$1,018 \pm 0,068$			
5,4	$0,038 \pm 0,009$	$0,962 \pm 0,017$	$0,155 \pm 0,021$			
5,65	$0,034 \pm 0,005$	$0,966 \pm 0,011$	$0,\!040 \pm 0,\!010$			
5,9	$0,078 \pm 0,005$	$0,922 \pm 0,014$	$0,039 \pm 0,014$			
6,4	$0,127 \pm 0,004$	$0,873 \pm 0,009$	$0,034 \pm 0,008$			
6,9	$0,213 \pm 0,004$	$0,787 \pm 0,008$	$0,047 \pm 0,008$			
9,25	$0,570 \pm 0,006$	$0,\!430 \pm 0,\!007$	$0,013 \pm 0,007$			
Pu ²⁴⁰						
5,4	$0,171 \pm 0,044$	$0,829 \pm 0,061$	$1,072 \pm 0,077$			
5,65	$0,301 \pm 0,038$	$0,\!699 \pm 0,\!050$	$0,\!628 \pm 0,\!064$			
5,9	$0,561 \pm 0,013$	$0,\!439 \pm 0,\!017$	$0,302 \pm 0,021$			
6,4	$0,660 \pm 0,008$	$0,340 \pm 0,011$	$0,106 \pm 0,012$			
6,9	$0,\!689 \pm 0,\!016$	$0,311 \pm 0,021$	$0,067 \pm 0,024$			
7,9	$0,725 \pm 0,012$	$0,275 \pm 0,016$	$0,074 \pm 0,018$			

*Обработка данных при $E_{\text{макс}} = 5,4$ МэВ для Th²³² выполнена в предположении c = 0, поскольку в противном случае для c получается небольшое отрицательное значение.



Рис. 10. Сравнение экспериментальных и расчетных значений *a/b* и *c/b* в случае фотоделения U²³⁸: Δ, ○ — данные настоящей работы; □ — данные, полученные на моноэнергетических γ-квантах [5, 7]. Сплошные кривые рассчитаны по формулам (6) и (7), пунктирная кривая проведена по экспериментальным точкам

Рис. 11. Сравнение экспериментальных и расчетных значений a/b и c/b в случае фотоделения Pu^{240} (обозначения те же, что и на рис. 10)

2. Аналогично отношение c/b с уменьшением энергии достигает максимума в точке $E_f^{(2^+,0)}$. На эксперименте это отношение для U^{238} и Pu^{240} монотонно возрастает вплоть до самых низких исследованных значений $E_{\text{макс}} - 5,2$ и 5,4 МэВ соответственно. Эти величины и являются верхними границами для $E_f^{(2^+,0)}$ соответствующих ядер. Для Pu^{240} нижний порог известен из реакции (*d*, *pf*) и равен 4,8 МэВ [23], поэтому полученный нами результат лишь увеличивает вероятность того, что порог 4,8 МэВ соответствует полосе каналов с k = 0 и положительной четностью. Случай с U^{238} убедительно показывает, что разница по энергии между полосами 0^+ , 2^+ ... и 1^- , 3^- составляет для этого ядра не менее 0,5 МэВ.
3. Точка, в которой достигается минимальное отношение a/b (или, что то же самое, максимальное значение анизотропии) для каналов 1⁻, k = 1 является глубоко подбарьерной, а делительная ширина и сечение деления через канал (1⁻, k = 1) в ней как раз выходят на насыщение. Измерения на монохроматических γ -лучах и тормозном спектре при этой энергии должны давать примерно одинаковую анизотропию. С повышением энергии изотропная компонента a/b на монохроматических γ -квантах должна возрастать экспоненциально

$$\frac{a}{b} \sim \exp \frac{2\pi \left(E_f^{(1^-,k)} - E_{\text{макс}}\right)}{E_{\text{крив}}^{(1^-,k)}},\tag{12}$$

а на тормозном спектре медленнее, по закону

$$\frac{a}{b} \sim \frac{\exp \frac{2\pi \left(E_f^{(1^-,k)} - E_{\text{макс}}\right)}{E_{\text{крив}}^{(1^-,k)}}}{\left(E_{\text{макс}} - E_f^{(1^-,0)}\right)^3}.$$
(13)

На эксперименте все это наблюдается (см. рис. 10), и можно оценить значения параметров $E_f^{(1^-,k)}$ и $E_{\text{крив}}^{(1^-,k)}$, выбирая их так, чтобы кривая (6) проходила через экспериментальные точки. Это было проделано как для зависимостей $a/b(E_{\text{макс}})$, так и для $c/b(E_{\text{макс}})$. Для некоторых порогов значения параметров E_f и $E_{\text{крив}}$ получены в работах [3] и [23], в расчетах мы на них опирались. Расчетные кривые приведены на рис. 10 и 11, а результирующие значения параметров E_f и $E_{\text{крив}}$ собраны в табл. 2.

4. При значениях $E_{\text{макс}}$, заметно превышающих пороги $E_f^{(2^+,0)}$ и $E_f^{(1^-,0)}$ формула (10) дает асимптотическое значение:

$$\frac{c}{b}(E_{\text{make}}) \simeq \frac{3}{4} \frac{\sigma_{\gamma}^{(2^+)}}{\sigma_{\gamma}^{(1^-)}} \frac{\left(E_{\text{make}} - E_f^{(2^+,0)}\right)^3}{\left(E_{\text{make}} - E_f^{(1^-,0)}\right)^3}.$$
(14)

Это соотношение позволяет оценить значения $\sigma_{\gamma}^{(2^+)} / \sigma_{\gamma}^{(1^-)}$ для Th²³², U²³⁸, Pu²⁴⁰ в рассматриваемой области энергий. Они также приводятся в табл. 2.

Результаты, приведенные в табл. 2, показывают, что для всех исследованных четно-четных ядер каналовая структура является достаточно четкой, т. е. пороги для разных каналов, как правило, отделены друг от друга значительными энергетическими интервалами.

Таблица 2.

	Th ²³²	U^{238}	Pu ²⁴⁰			
$E_f^{(2^+,0)}$	-	≦5,2	<5,4(4,8) ^a			
$E_{ m \kappa pub}^{(2^+,0)}$	-	$0,7^{6}$	-			
$E_{f}^{(1^{-},0)}$	5,9	5,7	5,2			
$E_{ m \kappa pub}^{(1^-,0)}$	$0,7^{6}$	$0,7^{6}$	0,4 ^a			
$E_f^{(1^-,k)}$	7,2	7,0	5,7			
$E_{ ext{крив}}^{(1^-,k)}$	1,0	1,1	0,5			
$\sigma_{\gamma}^{(2^+)} \Big/ \sigma_{\gamma}^{(l^-)}$	0,01<	0,015	0,14			

Значение параметров E_f и $E_{\text{крив}}$, а также отношения $\sigma_{\gamma}^{(2^+)}/\sigma_{\gamma}^{(1^-)}$, полученные из анализа экспериментальных результатов

^а Значение взято из работы [23].

⁶Значение получено по результатам работы [3].

Расстояние между порогами $\Delta_1 E_f = E_f^{(2^+,0)} - E_f^{(1^-,0)}$ для Pu^{240} и U²³⁸ составляет 0,4—0,5 МэВ. Для Th²³² эту величину определить не удается, поскольку для этого ядра примесь квадрупольной компоненты в исследованном интервале энергий всюду находится на уровне экспериментальных ошибок. Расстояния между $E_f^{(1^-,0)}$ и $E_f^{(2^+,0)}$ находятся в качественном согласии с результатами работы [4] — возрастают от Pu²⁴⁰ к Th²³² от 0,5 до 1,3 МэВ.

Однако у нас во всех случаях получаются существенно (примерно вдвое) большие значения. Во-первых, пороги $E_f^{(1^-,0)}$ и $E_f^{(1^-,k)}$ несколько «раздвинулись» из-за введения множителя $1_A' \sim 1_{70}$ в правую часть формулы (3) для каналов с k = 0. Во-вторых, при обработке экспериментальных данных мы учитывали форму тормозного спектра (в работе [4] при вычислении величин $\Delta_2 E_f = E_f^{(1^-,k)} - E_f^{(1^-,0)}$ спектр γ -квантов приближенно заменялся монохроматической линией с $E = E_{\text{макс}}$. Это также приводит к увеличению $\Delta_2 E_f$. Величина $\Delta_1 E_f - \Delta_2 E_f = E_f^{(1^-,k)} - E_f^{(2^+,0)}$, связанная с «шириной энергетической щели в седловой точке» в предположении одночастичной природы каналов (1⁻, k = 1), близка к 1 МэВ у Рu²⁴⁰ и к 2 МэВ у U²³⁸.

Кривизна вершины более высокого порога должна быть больше [13]. Из таблицы 2 видно, что значения $E_{\rm крив}$ действительно увеличиваются с повышением порога.

Приведенные в таблице отношения сечений поглощения квадрупольных γ -квантов меняются от ядра к ядру, но по порядку величины согласуются с электродинамической оценкой $(R / \lambda)^2 \sim 5 \cdot 10^{-2}$ [24].

Изменение отношений сечений от ядра к ядру, по-видимому, указывает на существование зависимости этих сечений и от энергии для каждого из ядер. Отсюда следует необходимость более детального изучения этого вопроса.

Заключение

В работе показано, что прежние публикации об обнаружении квадрупольной компоненты в угловом распределении осколков фотоделения U^{238} при энергиях 6—10 МэВ не подтверждаются. Квадрупольная компонента обнаружена в не изученной до сих пор области энергий γ -квантов 5—6 МэВ ниже порога дипольного деления в согласии с теоретическими представлениями, следующими из модели каналов деления. Анализ относительного вклада квадрупольной, дипольной и изотропной компонент углового распределения осколков показывает структуру каналов деления, находящуюся почти в буквальном соответствии с предсказаниями О. Бора.

Авторы выражают глубокую признательность академику П. Л. Капице за поддержку исследований, В. М. Струтинскому за полезное обсуждение, И. Е. Бочаровой и В. Г. Золотухину за проведение математической обработки экспериментальных результатов на электронно-вычислительной машине, М. К. Голубевой, Н. Е. Федоровой, Л. Д. Гордеевой и З. А. Александровой за участие в эксперименте.

Литература

- 1. Bohr A. Proc. UN Int. Conf. PUAE, 1956, vol. 2, p. 99.
- 2. Баз А.И., Куликова Н.М., Лазарева Л.Е., Никитина Н.В., Семенов В.А. Труды Второй Международной конференции по мирному использованию атомной энергии. Доклады советских ученых. Т. 1. М., Атомиздат, 1959, с. 362.
- Katz L., Baerg A.P., Brown F. Sec. UN Int. Conf. on the Peaceful Uses of Atomic Energy (U.N., Geneva, 1958) vol. 15, p. 188, 1958.
- Baerg A. P., Bartholmev R.M., Brown F., Katz L., Kowalski S. B. Can. J. Phys. 37 (1959) 148.
- 5. Foreman B., Johansson S.A.E. Nucl. Phys. 20 (1960) 136.
- 6. Conner J.P., Henkel R.L., Simmons J.E. Bull. Amer. Phys. Soc. II 4 (1959) 234.
- Carvalho H.G. Manfredini A., Muchnik M., Severi M., Bosch H., Wölfle W. Nuovo Cimento 29 (1963) 464.
- 8. Солдатов А.С., Александрова З.А., Гордеева Л.Д., Смиренкин Г.Н. Ядерная физика (в печати, 1965).
- 9. Griffin J.J. Phys. Rev. 116 (1959) 107.
- 10. Усачев Л.Н., Павлинчук В.А., Работнов Н.С. Атомная энергия 17 (1964) 479.
- 11. Перелыгин В.П., Третьякова С.П., Звара И. ПТЭ №4 (1964) 78.

- Работнов Н.С., Смиренкин Г.Н., Солдатов А.С., Усачев Л.Н., Капица С.П., Ципенюк Ю.М. Угловая анизотропия фотоделения и четность основного состояния Ри. Ядерная физика (в печати).
- Работнов Н.С., Смиренкин Г.Н., Солдатов А.С., Усачев Л.Н. Структура каналов деления четно-четных компаунд-ядер. Доклад на конгрессе по физике ядра №4е/с337, Париж, 1964.
- 14. Капица С.П., Быков В.П., Мелехин В.Н. ЖЭТФ, 41 (1961) 368.
- 15. Зыкин Л.М., Капица С.П., Мелехин В.Н., Неделяев А.Г. Труды Международной конференции по ускорителям (Дубна, 1963). Атомиздат, М., 1964, с.1049.
- 16. Schiff L.I. Phys. Rev., 83 (1951) 252.
- Гейликман Б.Т. Материалы Первой Международной конференции по мирному использованию атомной энергии. (Объединенные нации, Женева, 1955); т. 2, Физматгиз, М., 1956, с. 230.
- 18. Bohr N., Wheeler J.A. Phys. Rev., 56 (1939) 426.
- 19. Hill D.L., Wheeler J.A. Phys. Rev. 89 (1953) 1102.
- 20. Wilets L. Theories of Fission. Oxford Press, 1964.
- Нестеров В.Г., Блюмкина Ю.А., Камаева Л.А., Смиренкин Г.Н. Атомная энергия 16 (1964) 519.
- 22. Малышев А.В. ЖЭТФ, 45 (1963) 316.
- 23. Northrop J. A., Stokes R.H., Boyer K. Phys. Rev., 115 (1959) 1227.
- 24. Давыдов А.С. Теория атомного ядра. М.: Физматгиз, 1958, с.422.
- Soldatov A.S., Smirenkin G.N., Kapitza S.P., Tsipeniuk Yu.M. Phys. Let., 14 (1965) 217.

Photofission of Even-Even Nuclei Near the Threshold

N. S. Rabotnov, G. N. Smirenkin, A. S. Soldatov, L. N. Usachev, S. P. Kapitza, Yu. M. Tsipenyuk

The results of measurements of the angular distributions of the fragments from photofission of U²³⁸, Th²³², Pu²⁴⁰, Pu²³⁹ in a beam of bremsstrahlung gamma-quanta are given. The gamma radiation source used was the 12-MeV microtron of the USSR Academy of Sciences, Institute of Physical Problems. The use of a microtron as a powerful source of gamma rays made it possible to measure angular distributions in the very interesting and hitherto uninvestigated gamma-quanta energy range $E_m < 6 \text{ MeV}$.

For U²³⁸ the investigations were carried out in the energy range 5.2 MeV to 9.2 MeV, for Th²³², 5.4 MeV to 6.9 MeV, for Pu²⁴⁰, 5.4 MeV to 7.9 MeV, and for Pu²³⁹, 5.4 MeV to 7.9 MeV. Results of the measurements of angular distributions for photofission of U²³⁸ and Th²³² by gamma-rays or the F¹⁹(p, $\alpha \gamma$)O¹⁶ reaction are also given. The gamma-radiation source used was a thick CaF₂ target irradiated with 1.45-MeV protons.

These measurements made it possible to establish, in agreement with most of the earlier experiments but in contradiction to the data of Lazareva et al. and Forkman and Johansson, that the contribution of fissions connected with the quadrupole absorption of photons to the total fission cross-section is low in the energy range $E \leq 6$ MeV. It is shown for the first time that, in agreement with the theoretical predictions based on A. Bohr's fission channel model, the relative weight of the quadrupole component becomes considerable only at excitation energies lower than the "dipole" fission threshold corresponding to the channel 1^{-} (K = 0). For example, in the angular distributions of the photofission fragments of U^{238} at energies of the bremsstrahlung spectrum $E_m = 5.4$ MeV and 5.2 MeV the contributions of the quadrupole component to the total photofission cross-section is 10 % and 43 % respectively, while in the range $E_m < 6$ MeV this contribution does not exceed 3 to 3.5 %. Of the even-even fissionable nuclei investigated, Pu²⁴⁰ shows the effect of "quadrupole" fission most clearly and Th²³² least. The results of the measurements may be used to assess the relationship of the partial cross-sections of photoabsorption in heavy nuclei.

The question of the parity of the ground state of Pu^{239} is discussed in the context of the results of measurements of the angular distributions of Pu^{239} photofission fragments exhibiting a change in the anisotropy sign in accordance with the predictions of the theory for channels with $K = \frac{1}{2}$ and $\frac{3}{2}$.

Photofission Angular Anisotropy and the Parity of the Ground State of ²³⁹Pu

N. S. Rabotnov, G. N. Smirenkin, A. S. Soldatov, L. N. Usachev, S. P. Kapitza and Yu. M. Tsipenyuk

> Physics and Power Engineering Institute, Obninsk and Institute for Physical Problems, Moscow

> > Received 12 August 1965

The angular distributions of ²³⁹Pu photofission fragments produced by 5.4—7.9 MeV endpoint energy bremsstrahlung γ quanta from a microtron are measured. Anisotropic angular distributions of the form

$$W(\vartheta) = a + b \sin^2 \vartheta$$

were observed for $E_{max} = 5.4$, 5.65 and 5.9 MeV. The greatest anisotropy which corresponded to b/a = -0.192 was recorded for $E_{max} = 5.65$ MeV. Comparison of the results with those on neutron-induced fission of ²³⁸Pu yields the parity of the ground state of ²³⁹Pu with respect to that of the ground state of the even nucleus. The fission data are in agreement with the positive parity of ²³⁹Pu derived from spectroscopic data.

Keywords: nuclear reaction ²³⁹Pu(γ , *f*), $E \le 7.9$ MeV; measured $\sigma(E; \theta_{fragment})$; ²³⁹Pu deduced π . Enriched target.

1. Introduction

The angular distribution anisotropy of fission fragments is determined by two factors. The first of these is the degree of alignment of the compound nuclei in a given reaction of which the last stage is fission. For example, on absorption of dipole gamma quanta by an even nucleus, the compound nuclei are found to be completely oriented along the direction of the gamma quantum beam since this is precisely the direction in which the moments of the photons themselves are oriented. The second determining factor is the dependence of the fission probability for a given value of the total angular momentum J on the magnitude of the projection K of this momentum on the nuclear axis at the saddle point. The greater the fission thresholds for states with different K differ from each other, the more pronounced will be some preferred directions of divergence of the fragments relative to the direction of the oriented momentum.

Because of these two reasons, in general, it should be expected that the angular distributions for fission of odd-mass nuclei targets will be more isotropic than those for even targets. Indeed the randomly oriented target spin (which is zero in even nuclei) appreciably decreases the resultant alignment of the compound nuclear moments created by the moment of the fission-inducing photon itself. Secondly, it

Nuclear Physics, 1966, vol. 77, pp. 92-98.

follows from Bohr's hypothesis [1] which establishes a relationship between the nuclear levels at the saddle point and the low-lying levels near the ground state, that channels with different values of *K* are much more "densely" distributed in odd-mass nuclei than in even nuclei and their contributions to the anisotropy cancel out. These considerations are in complete agreement with the experimental data. Whereas very large values of the anisotropy $\alpha = W(90^\circ) / W(0^\circ)$ (up to $\alpha \approx 100$, [2]) are found at low energy photofission of even targets, numerous investigations of the angular distributions for odd-mass nuclei [3–5] have not revealed any effects which exceed the experimental errors.

As noted by Griffin [6], the best chance to detect an anisotropy in odd-mass targets should be with ²³⁹Pu since this nucleus possesses the lowest possible spin $I=\frac{1}{2}$. This case is interesting in one other respect due to the fact that the ²³⁹Pu nucleus has a low neutron binding energy $B_n = 5.62 + 0.10$ MeV (see ref. [7]) which is close to the fission threshold. Experimental data on the energy dependence of the cross section and angular distribution [8] of the ²³⁸Pu(*n*, *f*) reaction have recently appeared which should be interesting to compare with similar results on photofission of ²³⁹Pu since the same compound nucleus undergoes fission in each case. Simultaneously it should be possible to obtain information on the parity of the ground state of ²³⁹Pu. In accordance with the foregoing, we measured the angular distributions of ²³⁹Pu photofission fragments produced by the bremsstrahlung radiation from a microtron with limiting energies $E_{max} = 5.4$ —7.9 MeV.

2. Results of the Measurements

The experimental method has been described in detail by the authors in a previous paper [2].

The angular distribution of the fragments was measured at seven angles between 0 and 90° for two fissioning plutonium isotopes 239 Pu and 240 Pu (see ref. [2]).

Fission fragments from two Pu layers of different isotopic composition subjected to identical gamma irradiation were recorded simultaneously. The predominant component in one of the layers was ²³⁹Pu (\approx 97 %) and that in the other was ²⁴⁰Pu (\approx 92 %). In this way a correction to take into account a small admixture of fissioning ²⁴⁰Pu contained in the ²³⁹Pu layer could easily be introduced. It can be shown that the angular distribution of ²³⁹Pu photofission fragments produced by dipole γ quanta may be described by the relationship

$$W(\vartheta) = a + b\sin^2 \vartheta. \tag{1}$$

The values of W(90°) / W(0°) – l = b/a obtained by treating the experimental data by the method of least-squares are presented in table 1 as well as the values of the mean excitation energy E^* of ²³⁹Pu fission for various values of E_{max} (see formula (10) below).

The anisotropy values obtained in the present experiment and in refs. [4, 5] are compared in fig. 1. According to our data the anisotropy changes sign on changing from $E_{max} = 5.4$ MeV to $E_{max} = 5.65$ MeV and then slowly decreases. After

 E_{max} = 6.4 MeV the angular distribution becomes practically isotropic. It seems natural to explain this type of energy dependence of b/a by assuming that the band of fission channels with $K = \frac{1}{2} [W(90^\circ) / W(0^\circ) > 1]$ lies below the band of fission channels with $K = \frac{3}{2} [W(90^\circ) / W(0^\circ) < 1]$. The possible existence of channels yielding a ²³⁹Pu photofission angular anisotropy of both signs was pointed out by Griffin [6].



Fig. 1. Dependence of the angular anisotropy of ²³⁹Pu photofission on the bremsstrahlung spectrum boundary energy E_{max} . Δ — results of ref. [5], \circ — results of the present measurements

Table 1

E_{max} , (MeV)	b/a	<i>E</i> *, (MeV)
5.4	0.103 ± 0.028	5.15
5.65	-0.192 ± 0.010	5.38
5.9	-0.161 ± 0.012	5.52
6.4	-0.016 ± 0.025	5.70
6.9	-0.011 ± 0.015	a)
7.9	0.016 ± 0.008	a)

	Angu	lar anisotro	py of 239	'Pu pho	tofission	<i>b/a</i> as a	function	of E_{max}	and E
--	------	--------------	----------------	---------	-----------	-----------------	----------	--------------	-------

^{a)} For $E_{max} = 6.9$ and 7.9 MeV the values of the mean excitation energies which are not required for the subsequent analysis were not calculated.

3. Discussion of the Results

The large discrepancy of the theoretical and experimental values of the mean fission widths of the 0⁺ resonances in the (n, f) reaction of ²³⁹Pu was noted in ref. [9]. As a possible explanation it was suggested that the parity of the ground state of ²³⁹Pu is negative. It was also mentioned in ref. [9] that it would be desirable to perform an experiment in which the parity of ²³⁹Pu would be directly related to the parity of the ground state of the even nucleus. It will be shown below that such a relation can be established by comparing the experimental data on the ²³⁸Pu (n, f) reaction and the ²³⁹Pu (γ, f) reaction.

Consider the ²³⁸Pu (n, f) reaction for the same neutron energies for which the contribution to the anisotropy is due almost exclusively to *P* neutrons, i. e. at energies of 100—200 keV. In this case the compound ²³⁹Pu nuclei in the $3/2^{-}$ states are produced so that they are predominantly oriented in a plane perpendicular to the beam and create an anisotropic angular distribution. The spin $1/2^{+}$ states produced by *S* neutrons and the $1/2^{-}$ states produced by *P* neutrons yield strictly isotropic angular distributions.

If the parity of the ²³⁹Pu nucleus is positive then only $\frac{1}{2}$ and $\frac{3}{2}$ compound states should be produced on absorption of $\frac{1}{2}$ dipole gamma quanta by the nucleus. Thus during photofission of a ²³⁹Pu target nucleus, the anisotropic component in the angular distribution is produced by those $\frac{3}{2}$ states and only those states which are involved in the fission of ²³⁹Pu induced by *P* neutrons. However during photofission, the nuclei in these states are aligned mainly along the direction of the beam since the moments of the dipole γ quanta are oriented in precisely this way. Therefore, irrespective of the structure of the fission channels of the ²³⁹Pu compound nucleus the following rule must be obeyed in the case of positive parity of the ground state of ²³⁹Pu by 100—200 keV neutrons and photofission of ²³⁹Pu by γ quanta of corresponding energy should be mutually perpendicular. This is a necessary (but not a sufficient) characteristic of positive parity of the ground state of ²³⁹Pu and if this rule is not found to hold experimentally the parity of ²³⁹Pu is negative.

Data on fission of ²³⁸Pu induced by resonance neutrons show that S neutron fission of this nucleus is very small (fission has been recorded in only one thermal resonance [10]). An analysis of the cross section and angular distributions of the ²³⁸Pu (n, f) reaction on fast neutrons [8] also shows that S neutrons do not contribute appreciably to fission, at least up to $E_n \approx 0.5$ MeV. According to the results in ref. [8] at $E_n = 100$ keV, the fission cross section comprises already ½ of the total cross section. These results indicate that although the probability for compound nucleus production by S and P neutrons at $E_n \approx 100$ keV are approximately the same, fission, nevertheless, is caused only by P neutrons. Thus the angular distributions of the fission fragments produced by neutrons in ²³⁸Pu and by dipole γ quanta in ²³⁹Pu are uniquely related kinematically. In other words it is possible to determine not only the relative sign but also the relative magnitude of the anisotropy in these two reactions.

Let us consider the quantitative relationships. On fission of a nucleus with a spin J and spin projection on the direction of the beam M through a channel corresponding to a projection of the moment J on the nuclear axis equal to K, the fragment angular distribution will have the form

$$W_{MK}^J = \left| D_{MK}^J \right|^2 + \left| D_{M-K}^J \right|^2$$

By taking into account that the angular distributions are normalized by the condition

$$\int_{0}^{n} W_{MK}^{J} \sin \vartheta d\vartheta = 1$$

and employing the explicit form of the functions (see, e. g. 11)), we obtain

$$W_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}, \qquad W_{\frac{3}{2}\frac{3}{2}}^{\frac{3}{2}} = W_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} = 1 - \frac{3}{4}\sin^2\vartheta, \qquad W_{\frac{1}{2}\frac{3}{2}}^{\frac{3}{2}} = W_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}^{\frac{3}{2}} = \frac{3}{4}\sin^2\vartheta.$$

For $J = \frac{3}{2}$ only two values of K are possible viz. $\frac{1}{2}$ and $\frac{3}{2}$. If the probability for fission with a given value of K is denoted by A_k , then evidently

$$4_{\frac{1}{2}} = 1 - A_{\frac{3}{2}} \equiv A$$

As mentioned by Griffin [6], absorption of a dipole y quantum by a spin $\frac{1}{2}$ nucleus results in the formation of compound states $(I, M) = \binom{3}{2}; \pm \frac{1}{2}, \binom{1}{2}; \pm \frac{1}{2}$ with probabilities of $\frac{1}{2}, \frac{1}{6}$, and $\frac{1}{3}$. Therefore by employing eqs. (4) and (5) the angular distribution of the ²³⁹Pu photofission fragments may be written in the following form:

$$W_{\gamma}(\vartheta) = \frac{1}{6} + \frac{1}{2} \left[AW_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}^{\frac{3}{2}} + (1-A)W_{\frac{3}{2}\frac{3}{2}}^{\frac{3}{2}} \right] + \frac{1}{6} \left[AW_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{\frac{3}{2}} + (1-A)W_{\frac{1}{2}\frac{3}{2}}^{\frac{3}{2}} \right] = \frac{1}{3}(2-A) + \frac{1}{4}(2A-1)\sin^{2}\vartheta.$$

When *P* neutrons are absorbed by the even ²³⁸Pu nucleus, the ²³⁹Pu compound nucleus is produced in the states $J^{\pi} = \frac{1}{2^{-}}$ and $\frac{3}{2^{-}}$ with probabilities of $\frac{1}{3}$ and $\frac{2}{3}$ (assuming that the spin-orbit interaction is neglected). In both cases $M = \frac{1}{2}$ and hence the corresponding angular distribution is

$$W_{\gamma}(\vartheta) = \frac{1}{6} + \frac{2}{3} \left[AW_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{\frac{3}{2}} + (1-A)W_{\frac{1}{2}\frac{3}{2}}^{\frac{3}{2}} \right] = \frac{1}{6}(1+4A) + \frac{1}{2}(1-2A)\sin^2\vartheta.$$

As usual the angular distributions are expressed in the form $W(\vartheta) = a + b \sin^2 \vartheta$. The coefficient ratios b/a are given in table 1. From eqs. (6) and (7) it follows that between the ratios $b/a = \beta$ for the ²³⁸Pu (n, f) and ²³⁹Pu (γ, f) reactions at the same excitation energy the relations

$$\beta_n = -\frac{2\beta_{\gamma}}{1+2\beta_{\gamma}}$$
 or $\beta_{\gamma} = -\frac{\beta_n}{2(1+\beta_n)}$

should hold where β_n and β_{γ} are small compared with unity. Moreover in reality the *S* wave contribution somewhat lowers the anisotropy in neutron-induced fission and hence in the experiments the following relation may be expected to hold:

$$\beta_{\gamma} \geq -\frac{1}{2}\beta_n.$$

The angular distributions of the photofission fragments were performed by using the bremsstrahlung radiation from a thick target. As shown in ref. [2], near the limiting energy the bremsstrahlung spectrum can be satisfactorily approximated by the function

$$f(E_{\max}, E_{\gamma})dE_{\gamma} = K(E_{\max} - E_{\gamma})^2 dE_{\gamma}.$$

For comparison of the photofission anisotropy values with those obtained in the experiments with monochromatic neutrons, it is natural to plot the values not as a function of the bremsstrahlung spectrum boundary energy but as a function of the mean excitation energy of the fissioning nuclei which is given by the expression

$$E^{*}(E_{\max}) = \frac{\int_{0}^{E_{\max}} E_{\gamma} \sigma_{y,f}(E_{\gamma}) f(E_{\max}, E_{\gamma}) dE_{\gamma}}{\int_{0}^{E_{\max}} \sigma_{y,f}(E_{\gamma}) f(E_{\max}, E_{\gamma}) dE_{\gamma}}$$

The energy dependence of the ²³⁹Pu photofission cross section which is required for the calculations has been measured in ref. [4] and the corresponding results are employed here. The values of $E^*(E_{max})$ deduced in this way are presented in table 1. Comparison with the results of the neutron measurements [8] is illustrated in fig. 2. The range of the values of E_n for which a direct comparison is meaningful is quite narrow whereas the width of the "effective" gamma quantum spectrum is large. Nevertheless, qualitative agreement with expressions (8) and (8a) is apparent.

Thus the consequence of the positive parity of the ²³⁹Pu ground state mentioned above is indeed observed. According to the results in ref. [4] the ²³⁹Pu photofission threshold for γ rays is approximately 5.4 MeV, and our measurements indicate that the lower channel band corresponds to $K = \frac{1}{2}$. If the parity of ²³⁹Pu were negative this would mean that the threshold is lowest in the $\frac{1}{2}^+$ state. However the data on ²³⁸Pu fission induced by resonance [10, 7] and fast [8] neutrons show that the fission

Fig. 2. Comparison of the angular anisotropy of the fragments from the ²³⁹Pu (γ , *f*) [$W_{\gamma}(90^{\circ}) / W_{\gamma}(0^{\circ}) - 1$] (\circ) and ²³⁸Pu (*n*, *f*) [$W_n(0^{\circ}) / W_n(90^{\circ}) - 1$] (\bullet) reactions. The data are represented as a function of the excitation energy of the ²³⁹Pu compound nucleus *E** (see text). The energy dependence of the ²³⁹Pu photofission cross section [4] is

presented in the upper part of the figure



threshold for the $\frac{1}{2}^{+}$ state is approximately 0.5 MeV higher than the neutron binding energy, which is 5.6 MeV in the ²³⁹Pu nucleus. Consequently the lower threshold with $K = \frac{1}{2}$, which is observed in photofission, cannot correspond to a positive parity state. This set of results is sufficient to assert that the parity of the ²³⁹Pu ground state is positive. An explanation of the anomalously small mean fission width of the ²³⁹Pu 0⁺ resonances is presented by Wilets [12].

References

- 1. A. Bohr. First UN Int. Conf. on the Peaceful Uses of Atomic Energy, vol. 2 (UN, Geneva, 1955), 1956, p. 99.
- N.S. Rabotnov et al. Symposium on the Physics and Chemistry of Fission, Salzburg, Austria (1965) SM-60/81.
- 3. E.J. Winhold and J. Halpern. Phys. Rev., 103 (1956) 990.
- 4. L. Katz, A.P. Bearg and F. Brown, Second UN Int. Conf. on the Peaceful Uses of Atomic Energy, vol 15 (UN 1958, Geneva) p. 188.
- 5. A.P. Bearg et al. Can. J. Phys., 37 (1959) 148.
- 6. J.J. Griffin. Phys. Rev., 116 (1959) 107.
- I.V. Gordeyev, D.A. Kardashev and A.V. Malyshev. Yaderno fizicheskie konstanty. Moskva, Atomizd, 1963.
- 8. P.E. Vorotnikov, S.M. Dubrovski, G.A. Otroshchenko and V.A. Shigin. Symposium on the Physics and Chemistry of Fission, Salzburg, Austria (1965) SM-60/88.
- 9. L.N. Usachev, V.A. Pavlinchuk and N.S. Rabotnov. Atomn. Energ., 17 (1964) 479.
- G.D. James. Symposium on the Physics and Chemistry of Fission, Salzburg, Austria (1965) SM-60/15.
- 11. A.S. Davydov. Teoriya atomnogo yadra. Moskva, Fizmatgiz, 1958.
- 12. L. Wilets. Theories of fission. Oxford University Press, 1964.

Angular Distribution of Photofission Fragments Near Threshold

N. S. Rabotnov, G. N. Smirenkin, A. S. Soldatov and L. N. Usachev Institute of Physics and Energetics, Obninsk, USSR

> S. P. Kapitza and Yu. M. Tsipeniuk Vavilov Institute for Physical Problems, Moscow, USSR

> > Received 20 December 1967

The results of measurements of angular distributions of the photofission fragments for 232 Th, 238 U, 240 Pu, 242 Pu and 239 Pu nuclei in the bremsstrahlung energy interval $E_{max} = 5 - 8$ MeV are reported and discussed. These results support the hypothesis about approximate conservation of the quantum number *K* at moderate excitation energies.

Investigations of the angular distributions of the fragments of nuclear fission induced by γ quanta at excitation energies near the fission threshold provide valuable information about the channel structure of the fission barrier.

The fission of heavy nuclei by dipole radiation near the threshold was studied in detail by Katz et al. [1]. In this paper we report and discuss new data on the angular distributions of the photofission fragments for ²³²Th, ²³⁸U ²³⁹Pu, ²⁴⁰Pu and ²⁴²Pu in the underbarrier energy region, for which no experimental results were published up to now. The 12 MeV microtron was used to produce the bremsstrahlung beam in the energy interval $E_{max} = 5 - 8$ MeV. The traces left by the fission fragments in glass were used to detect the fission events [2]. The average current of the electron beam was about 50 µA and a 1mm tungsten bremsstrahlung target was used [3].

Dipole photoabsorption dominates in the process of compound-nucleus formation at the energies in question. The differential fission cross section is then proportional to $a + b \sin^2 \theta$. The ratio b/a is determined by the competition of the channels with K = 0 and K = 1 (K is the projection of the nuclear spin on the fission axis). The energy dependence of the average fission width is determined by the height and form of the fission barrier for a given channel

$$\Gamma_{f} \sim \left[1 + \exp\left(2\pi \frac{E_{f}^{k} - E}{E_{curv}^{k}}\right) \right]$$

where *E* is the excitation energy, E_f^k the fission threshold for given *K*, and E_{curv}^k the parameter describing the curvature of the barrier's top.

Fig. 1 shows the results of experiments for even-even nuclei. The anisotropy of dipole photofission (i. e. the coefficient b) will become zero when the probabilities of the fission through the channels with different K become equal. This occurs when

Physics Letters, 1968, vol. 26B, no. 4, pp. 218-219.

the excitation energy is either 1) higher than the thresholds for both *K*-values or 2) considerably lower than the lowest barrier. Hence b/a as a function of *E* must have a maximum in between these limits. Calculating the penetrabilities of the barriers one can show that the position of the maximum is determined by the value of the lowest threshold. That *b* vanishes for low energy is hard to observe. This conclusion agrees qualitatively with the experimental data which indicate the presence of the maximum for the nuclei ²⁴⁰Pu and ²⁴²Pu; only "the right-hand side" of the maximum, the anisotropy plateau at low energies, is observable for ²³²Th and ²³⁸U.

The value of K may be determined in two alternative ways: (a) K may be a good quantum number in the compound-nucleus states at excitation energies near the fission threshold and (b) K may be fixed when a nucleus passes over the saddle point. These two possibilities result in two different relations between the energy dependence b/a(E) and $\sigma_f(E)$. Let T_f be the energy at which the fission and radiation widths become equal. Below the neutron emission threshold T_f may be called an "observable fission threshold". The difference $\Delta E_f = E_f - T_f$ varies usually between a few hundred keV and nearly 1 MeV. It is easy to show from the energy dependence of the differential and total fission cross sections that in the case (a) the energy value E_{crit} , where the fission anisotropy begins to decrease from the maximum value, is approximately equal to T_f , but in the case (b) E_{crit} would be ΔE_f higher than T_f . Experimental data (see fig. 1) are in fair agreement with (a), since the relation $E_{crit} = T_f$ approximately holds, while for (b) the estimated difference between these two values would have been about 500—600 keV.

The kinematics of the ²³⁹Pu photofission is somewhat more complicated. The anisotropy must also begin to vanish at E_f or at the observable threshold T_f . Furthermore, if the difference between the thresholds for two channels with different



Fig. 1. The measured value of b/a as a function of energy. Photofission cross sections taken from ref. 1 are also shown for ²³²Th and ²³⁸U. *E* is the average excitation energy of the fissioning nuclei and T_f the observable fission threshold



Fig. 2. Energy dependence of the anisotropy for the ²³⁹Pu photofission and the ²³⁸Pu (*n*, *f*) reaction. The neutron data are taken from ref. 4. In the upper part of the figure the energy dependence of the cross sections as measured in refs. 1 and 4 is shown. The shaded regions indicate approximately the positions of the observable and the real fission thresholds for the compound nucleus ²³⁹Pu; E_n is the neutron binding energy in ²³⁹Pu

K is large, there will be no possibility for the anisotropy to change its sign under the barrier if (b) holds, but this can happen in case (a) if the threshold difference is favorable for one *K*-value and the ratio of the compound-nucleus formation cross sections for another *K*-value. The real threshold E_f may be determined experimentally from the energy dependence of the cross section of the ²³⁸Pu (*n*, *f*) reaction. The threshold observed from photofission experiments is about 5.6 MeV. Analysis of neutron data yields $E_f \approx 6.5$ MeV [4].

In fig. 2 it is shown that both the data, which can decide between (a) and (b), support the first one: the anisotropy begins to drop at about T_{f_2} and this point is nearly 1 MeV lower than E_{f_2} furthermore the anisotropy changes its sign far below the barrier.

Thus our results demonstrate that the expected consequences of the large threshold difference between the channels with different K can be observed experimentally. Furthermore, these results support the hypothesis about the existence of the approximate conservation law of the quantum number K at moderate excitation energies.

References

- 1. L. Katz, A.P. Bearg and F. Brown. Proc. Second Int. Conf. on the Peaceful Uses of Atomic Energy, vol. 15. UN, Geneva, 1958, p. 198.
- V.P. Perelygyn, S.P. Tretiakova, I. Zvara. Pribory Tekhn. Eksp., no. 4 (1964) p. 78; Instr. and Exp. Techn. (1965) 796.
- N.S. Rabotnov, G.N. Smirenkin, A.S. Soldatov, L.N. Usachev, S.P. Kapitza, Yu.M. Tsipeniuk, in: Physics and Chemistry of Fission, vol. 1, IAEA, Vienna, 1965, p. 135.
- P.E. Vorotnikov, S.N. Dubrovina, G.A. Otroshchenko, V.A. Shigin. Yadernaja Fiz., 3 (1966) 479.

Фотоделение Th²³², U²³⁸, Pu²³⁸, Pu²⁴⁰, Pu²⁴² и структура барьера деления

Н. С. Работнов, Г. Н. Смиренкин, А. С. Солдатов, Л. Н. Усачев, С. П. Капица¹, Ю. М. Ципенюк¹

> Физико-энергетический институт, Обнинск ¹ Институт физических проблем АН СССР, Москва

> > (Поступила в редакцию 14 июля 1963 г.)

Сообщаются результаты измерений угловых распределений и выходов осколков при фотоделении четно-четных ядер Th²³², U²³⁸, Pu²³⁸, Pu²⁴⁰ и Pu²⁴² вблизи порога. Измерения выполнены на пучке тормозных γ -квантов микротрона с энергией 12 МэВ ИФП АН СССР в диапазоне максимальных энергий от 5 до 10 МэВ. Описывается расчет тормозного спектра из вольфрамовой мишени толщиной 1 мм, который использовался для восстановления зависимости полного сечения фотоделения и его угловых компонент от энергии γ -квантов. Результаты эксперимента, не укладывающиеся в рамки традиционных представлений, свидетельствуют в пользу двугорбого барьера деления [7].

Введение

Весьма привлекательной с точки зрения изучения физики деления является реакция (γ , f) при энергиях γ -квантов, близких к порогу деления. Это объясняется двумя обстоятельствами. Во-первых, фотоны с энергией 5—7 МэВ, повидимому, испытывают на тяжелых ядрах поглощение лишь с мультипольностями E1 и E2. Для четно-четных мишеней, исследованию которых посвящена настоящая работа, это приводит к образованию составных ядер лишь с двумя комбинациями спина и четности — 1⁻ и 2⁺ причем квадрупольное поглощение должно быть на порядок или на два менее вероятным. Во-вторых, моменты составных ядер после поглощения γ -квантов оказываются выстроенными вдоль направления пучка фотонов. В случае дипольного поглощения выстраивание является полным.

Характерные черты процесса деления можно описать, рассматривая одномерную задачу о прохождении частицы через потенциальный барьер определенной высоты. Эта высота называется порогом деления, хотя в точном смысле деление не является пороговой реакцией. Первой задачей при анализе экспериментальных данных по делению обычно и является определение параметров, характеризующих высоту и форму барьера деления. При фиксированном нуклонном составе делящегося ядра барьер, вообще говоря, зависит от квантовых чисел состояния, из которого происходит деление, и этот факт определяющим образом влияет на энергетическую зависимость дифференциаль-

Ядерная физика, 1970, т. 11, вып. 3, с. 508-527.

ных и полных сечений деления. Кроме спина и четности составного ядра барьер может существенно зависеть от величины K — проекции момента на направление оси симметрии ядра, вдоль которой разлетаются осколки. Если деление с определенным значением K энергетически выгодно, а моменты делящихся составных ядер ориентированы, это и приводит к появлению анизотропии в угловых распределениях. Впервые эта анизотропия была обнаружена в работе [1]. Физическая интерпретация этого явления была предложена О. Бором [2], который описал конкретный механизм выделения «избранных» значений K в процессе деления. Он сводится к тому, что при прохождении через седловую точку большая часть энергии сконцентрирована в потенциале деформации, а остальные степени свободы могут возбуждаться ограниченным числом способов, и ядро делится через переходные состояния — «каналы деления» с определенными значениями K.

Настоящая работа подытоживает экспериментальное изучение угловых распределений осколков деления четно-четных ядер тормозными γ -квантами. Приводятся результаты измерений угловых распределений осколков W(9) в области граничных энергий тормозного спектра $E_{\text{max}} = 5 \div 10$ МэВ для пяти ядер: Th²³², U²³⁸, Pu²³⁸, Pu²⁴⁰, Pu²⁴². Некоторые данные для Th²³², U²³⁸, Pu²⁴⁰ сообщались ранее [3, 4]. Краткая информация о совокупности результатов, полученных в настоящей работе, содержится в предварительной публикации [5, 6].

В настоящее время происходит интенсивная проверка изложенных основных представлений о протекании процесса деления, связанная с появлением гипотезы о существовании второго минимума на потенциальной кривой [7]. Ее возможности обсуждаются при интерпретации экспериментальных данных вместе с традиционными предположениями о зависимости вероятности деления от квантовых характеристик делящегося ядра.

Экспериментальная часть

Эксперимент был выполнен на внутренней мишени микротрона ИФП АН СССР с максимальной энергией электронов 12 МэВ. Как и в работах [3, 4], тормозной мишенью служила вольфрамовая пластина толщиной 1 мм. Средний рабочий ток составлял 50 мка. Для фильтрации пучка γ-квантов от электронов непосредственно за мишенью помещался алюминиевый поглотитель толщиной 10 мм. Для измерений угловых распределений осколков применялись стеклянные детекторы [8]. Детекторы и подложки делящихся слоев монтировались в кассете, которая размещалась внутри ускорительной камеры микротрона так, чтобы не задевать пучка электронов на предыдущей орбите. Плоскость подложки слоев была наклонена к оси пучка тормозных γ-квантов под углом 45° (рис. 1). Детектирующее устройство позволяло либо одновременно изучать два разных делящихся веществ,. либо использовать двойные слои одного изотопа. Тормозная мишень и кассета были жестко укреплены на зонде, с помощью которого производилось дистанционное перемещение всего экспериментального устройства относительно пучка электронов. Точность ус-



Рис. 1. Схема экспериментального устройства и геометрия опыта: 1 — слои делящегося вещества; 2 — детекторы осколков деления; 3 — кассета; 4 — алюминиевый фильтр; 5 — вольфрамовая мишень; 6 — зонд

тановки детектирующего устройства относительно пучка электронов определялась с помощью телевизионной установки и составляла ~1 мм.

На отдельных этапах работы использовались детекторы различной конфигурации и делящиеся образцы разной толщины. Эксперименты производились с наборами прямоугольных стекол и с цилиндрическими стеклами, которые охватывали область углов от 7,5° до 97,5°. В табл. 1 указаны характеристики исследовавшихся изотопов. При изучении фотоделения Th²³² и U²³⁸ применялись также фольги, толщина которых значительно превышала длину пробега осколков. Использование последних позволило при прочих равных условиях увеличить статистику отсчетов в пять-семь раз по сравнению с экспериментами со слоем толщиной 1 мг/см² [8]. Изучаемый диапазон углов разбивался на семь угловых интервалов. Просмотр каждого углового интервала детектора под микроскопом давал число попавших в него осколков N_j с точностью 0,5—2% в зависимости от плотности следов осколков [4].

Неточность определения энергии электронного пучка (неопределенность ΔE_{max}) в наших ранних работах [3, 4] принималась равной ±50 кэВ; в более поздних экспериментах, когда установка н контроль энергии электронов производились путем измерения поля микротрона с помощью ядерного магнитного резонанса, ΔE_{max} удалось уменьшить до ±25 кэВ.

Во время облучения непрерывно велась запись среднего тока электронов, полностью поглощавшихся в мишени и алюминиевом фильтре, что позволило попутно с основными измерениями $W(\vartheta)$ определить выход $Y(E_{max})$ реакции (γ , f) на единицу тока электронов и единицу массы исследуемого изотопа. Ошибка этих измерений с учетом ряда неопределенностей оценена равной 10 %.

Более подробно параметры ускорителя, схема и методические особенности эксперимента описаны в работе [4].

	Таблица 1.
Параметры слоев использовавшихс	я делящихся элементов

Изотоп	Полное количество вещества, мг	Толщина слоев, мг/см ²	Примеси
Th ²³² , двойной	2,12	1,35	Нет
U ²³⁸ , двойной	1,72	1,1	Естественный
U^{238}		200	1 U^{235} : 200 U^{238}
Pu ²³⁸ , двойной	0,057	0,036	<0,3%
Pu ²⁴⁰	0,144	0,182	7,3% Pu ²³⁹
Ри ²⁴² , двойной	0,700	0,445	1,5% Pu ²⁴⁰ 2,0% Pu ²⁴¹

Результаты измерений

Угловые распределения осколков. Определяемое непосредственно в опыте распределение числа отсчетов N_j из-за конечного углового разрешения не может быть просто отождествлено с искомой функцией W(9):

$$N_j \sim \iint_{\Omega\Omega_j} W(\vartheta) \eta(\psi) d\Omega d\Omega_j, \tag{1}$$

где $d\Omega$, и $d\Omega_j$ — элементы телесного угла, построенные соответственно на векторах, идущих из точки вылета фотона до точки слоя, в которой произошло деление, и из этой точки до точки детектора, в которой произошла регистрация осколка; $\eta(\psi)$ — эффективность регистрации осколков, зависящая от угла вылета из слоя $\psi \approx |90^\circ - \vartheta|$.

При работе со слоями исследовавшихся изотопов, толщины которых указаны в табл. 1, эффективность регистрации осколков в доступном для использовавшейся геометрии диапазоне изменения углов $0^{\circ} \le \psi \le 45^{\circ}$ ($0^{\circ} \le \vartheta \le 90^{\circ}$) с точностью до 1—2 % не зависела от угла. Угловая зависимость эффективности регистрации осколков в опытах с фольгами Th и U, толстыми по сравнению с пробегом, хорошо описывается косинусоидальным законом $\eta(\psi) = \cos \psi$, вытекающим из простых геометрических соображений [8].

Математическая обработка результатов измерений N_j , цель которой состоит в определении методом наименьших квадратов коэффициентов *a*, *b*, *c* в угловом распределении

$$W(\vartheta) = a + b\sin^2 \vartheta + c\sin^2 2\vartheta, \qquad (2)$$

в самом общем виде описывающем пространственное распределение вероятности разлета осколков при дипольном и квадрупольном фотоделении, детально обсуждается в работах [4, 8]. Отметим только, что в этих расчетах, производившихся на электронно-вычислительной машине, точно (методом Монте-Карло) учитывались конечные размеры слоя делящегося вещества и угловых интервалов детектора. При этом, однако, не принимались во внимание конечные размеры пучка электронов (2×4 мм) и угловая зависимость интенсивности γ -излучения в пределах телесного угла, выделяемого слоем (от центра к краю слоя интенсивность падает на 10—15 %). Грубый учет размеров пучка электронов показал, что приводимые ниже значения коэффициентов *а* несколько завышены. Максимально возможная погрешность зависит от значения коэффициентов следующим образом:

<i>a</i> :	0,015	0,1	0,6	0,8
Погрешность, %:	30	9	0,7	0,2

Коэффициент *c*, наоборот, занижен в среднем на 2—3 % практически независимо от его значения. Погрешности, обусловленные неравномерностью «освещения» поверхности делящегося образца, малы (~1—2 %) при всех значениях коэффициентов W(9). Ошибки измерения N_j при математической обработке складывались из статистической ошибки отсчетов и средней погрешности просмотра.

Коэффициенты углового распределения осколков в нормировке a + b = 1 представлены в табл. 2. На рис. 2 приведены отношения коэффициентов b / a и c / b. Отношение $b / a = W(0^\circ) / W(90^\circ) - 1$ характеризует угловую анизотропию фотоделения, c / b — относительный вклад квадрупольной компоненты. Здесь мы приводим только данные, полученные с «тонкими» образцами. Информация, полученная с помощью металлических фольг, из-за искажений W(9), которые происходят вследствие рассеяния осколков в толстых образцах, привлекалась только для определения относительной энергетической зависимости полного выхода делений (см. ниже).

Полный выход реакции (γ , f). В прежних работах по фотоделению [9], большинство которых выполнено на бетатронах и синхротронах, выход реакции обычно относился на 1 рентген интенсивности тормозного γ -излучения и единицу количества делящегося вещества. При измерениях на внутренней мишени микротрона не возникает принципиальных проблем измерения тока электронов, присущих индукционным ускорителям. Это дает возможность представить данные о выходе $Y(E_{\text{max}})$ реакции (γ , f) в более простой нормировке — в виде полного числа делений в 1 секунду на 1 мка тока электронов на 1 мг делящегося вещества:

$$Y = F \int_{0}^{\pi} W(\vartheta) \sin \vartheta d\vartheta = 2F \left(a + \frac{2}{3}b + \frac{8}{15}c \right) = 2Fv.$$
(3)

Множители *F* и *v* зависят от E_{max} . Экспериментальные данные о полном выходе $Y(E_{\text{max}})$, полученные из измерений с делящимися образцами в виде слоев, приведены в последнем столбце табл. 2. Полная совокупность данных о $Y(E_{\text{max}})$, включая результаты, полученные с металлическими фольгами Th и U, изображена на рис. 3.

Таблица 2.

	Параметр	ы упловых распреде.	лении осколков				
E _{max} , MaB	а	b	с	Ү, деление			
				мг мка с			
1	2	3	4	5			
		Th ²³²					
5,2	-	-	-	$4,5 \cdot 10^{-5}$			
5,4	$0,009 \pm 9,009$	$0,991 \pm 0,927$	$0,030 \pm 0,025$	0,0024			
5,65	$0,011 \pm 0,005$	$9,989 \pm 0,007$	$-0,005 \pm 0,006$	0,059			
5,75	$0,015 \pm 0,010$	$0,985 \pm 0,034$	$0,033 \pm 0,033$	0,062			
5,9	$0,010 \pm 0,005$	$0,990 \pm 0,016$	$0,084 \pm 0,014$	0,20			
5,95	$0,014 \pm 9,004$	$0,986 \pm 0,009$	$0,074 \pm 0,010$	0,32			
6,2	$0,012 \pm 0,003$	$0,988 \pm 0,010$	$0,079 \pm 0,010$	0,79			
6,5	$0,022 \pm 0,005$	$0,978 \pm 0,015$	$0,022 \pm 0,014$	5,4			
6,7	$9,023 \pm 0,002$	$0,977 \pm 0,009$	$0,009 \pm 0,008$	9,8			
6,9	$0,032 \pm 0,007$	$0,968 \pm 0,024$	$0,020 \pm 0,022$	7,7			
7,0	0,036+0,004	$0,964 \pm 0,013$	$0,038 \pm 0,012$	13,5			
7,3	$0,056 \pm 0,006$	$0,944 \pm 0,020$	$0,031 \pm 0,017$	19,5			
7,7	$0,038 \pm 0,005$	$0,912 \pm 0,015$	$0,028 \pm 0,013$	40,5			
8,0	$0,109 \pm 0,006$	$0,891 \pm 0,013$	$0,026 \pm 0,012$	35			
8,5	$0,164 \pm 0,004$	$0,836 \pm 0,008$	$0,017 \pm 0,008$	71			
10,0	$0,301 \pm 0,009$	$0,\!696 \pm 0,\!014$	$-0,031 \pm 0,014$	_			
U^{238}							
5,0	$0,052 \pm 0,100$	$0,948 \pm 0,164$	$1,296 \pm 0,205$	0,00071			
5,2	$0,100 \pm 0,035$	$0,900 \pm 0,061$	$0,910 \pm 0,080$	0,0042			
5,3	$0,020 \pm 0,035$	$9,980 \pm 0,061$	$0,566 \pm 0,076$	0,0120			
5,4	$0,007 \pm 0,024$	$0,993 \pm 0,059$	$0,412 \pm 0,066$	0,030			
5,45	$0,038 \pm 0,009$	$0,962 \pm 0,017$	$0,155 \pm 0,021$	0,044			
5,65	$0,034 \pm 0,005$	$0,966 \pm 0,011$	$0,040 \pm 0,010$	0,27			
5,95	$0,078 \pm 0,005$	$0,922 \pm 0,014$	$0,039 \pm 0,014$	1,7			
6,4	$0,127 \pm 0,004$	$0,873 \pm 0,009$	$0,034 \pm 0,008$	6,0			
6,95	$0,213 \pm 0,001$	$0,787 \pm 0,008$	$0,047 \pm 0,008$	24,0			
7,5	$0,364 \pm 0,006$	$0,636 \pm 0,010$	$0,024 \pm 0,011$	47,0			
8,0	$0,401 \pm 0,005$	$0,599 \pm 0,006$	$9,014 \pm 0,007$	74,0			
9,25	$0,570 \pm 0,006$	$0,\!430 \pm 0,\!007$	$0,013 \pm 0,007$	0,00071			
		Pu ²³⁸					
5,25	$0,408 \pm 0,103$	$0,592 \pm 0,130$	$1,412 \pm 0,139$	0,011			
5,5	$0,330 \pm 0,063$	$0,\!670 \pm 0,\!084$	$1,513 \pm 0,112$	0,14			

Параметры угловых распределений осколков

			Тиолици 2	(продолжение)
1	2	3	4	5
5,75	$0,414 \pm 0,037$	$0,586 \pm 0,046$	$0,654 \pm 0,055$	0,47
6,0	$0,526 \pm 0,011$	$0,\!474 \pm 0,\!016$	$0,370 \pm 0,018$	1,7
6,25	$0,666 \pm 0,008$	$0,334 \pm 0,011$	$0,180 \pm 0,013$	5,9
6,5	$0,733 \pm 0,012$	$0,267 \pm 0,016$	$0,080 \pm 0,018$	11
7,0	$0,772 \pm 0,011$	$0,228 \pm 0,016$	$0,068 \pm 0,017$	56
7,5	$0,785 \pm 0,012$	$0,215 \pm 0,017$	$0,032 \pm 0,019$	80
8,0	$0,813 \pm 0,013$	$0,187 \pm 0,017$	$0,029 \pm 0,018$	160
8,5	$0,828 \pm 0,015$	$0,172 \pm 0,020$	$0,023 \pm 0,022$	270
		Pu ²⁴⁰		
5,0*	$0,000 \pm 0,200$	0,000+0,200	$1 \pm 0,200$	0,0031
5,2	$0,115 \pm 0,097$	0,885+0,111	$2,58 \pm 0,15$	0,047
5,45	$0,102 \pm 0,014$	$0,898 \pm 0,056$	$1,147 \pm 0,070$	0,15
5,7	$0,222 \pm 0,034$	$0,773 \pm 0,042$	$0,710 \pm 0,052$	0,49
5,95	$0,533 \pm 0,010$	$0,467 \pm 0,011$	$0,331 \pm 0,013$	2,3
6,4	$0,\!670 \pm 0,\!012$	$0,330 \pm 0,012$	$0,096 \pm 0,013$	11,5
6,95	$0,\!689 \pm 0,\!025$	$0,311 \pm 0,027$	$0,067 \pm 0,029$	40
7,7	$0,716 \pm 0,012$	$0,284 \pm 0,016$	$6,055 \pm 0,017$	115
7,9	$0,725 \pm 0,012$	$0,275 \pm 0,016$	$0,074 \pm 0,018$	145
8,2	$0,762 \pm 0,010$	$0,238 \pm 0,014$	$0,046 \pm 0,015$	180
8,5	$0,779 \pm 0,020$	$0,221 \pm 0,027$	$0,057 \pm 0,029$	240
8,7	$0,791 \pm 0,009$	$0,209 \pm 0,012$	$0,032 \pm 0,014$	230
9,5	$0,822 \pm 0,011$	$0,178 \pm 0,014$	$0,019 \pm 0,016$	680
		Pu ²⁴²		
5,0	$0,532 \pm 0,308$	$0,468 \pm 0,372$	$3,702 \pm 0,424$	0,0055
5,25	$0,448 \pm 0,053$	$0,552 \pm 0,068$	$0,965 \pm 0,032$	0,056
5,35	$0,418 \pm 0,046$	$0,582 \pm 0,059$	$1,018 \pm 0,069$	-
5,5	$0,310 \pm 0,022$	$0,690 \pm 0,029$	$0,734 \pm 0,034$	0,26
5,75	$0,\!488 \pm 0,\!008$	$0,512 \pm 0,010$	$0,422 \pm 0,012$	1,0
6,0	$0,598 \pm 0,011$	$0,402 \pm 0,016$	$0,207 \pm 0,018$	2,7
6,25	$0,669 \pm 0,012$	$0,331 \pm 0,017$	$0,138 \pm 0,019$	8,8
6,5	$0,700 \pm 0,009$	$0,300 \pm 0,013$	$0,122 \pm 0,014$	17
7.0	$0,740 \pm 0,005$	$0,260 \pm 0,007$	$0,075 \pm 0,008$	50
7,5	$0,754 \pm 0,005$	$0,246 \pm 0,007$	$0,0,6 \pm 0,003$	105
8,0	$0,766 \pm 0,006$	$0,234 \pm 0,008$	$0,047 \pm 0,009$	175
8,5	$0,814 \pm 0,005$	$0,\!186 \pm 0,\!007$	$0,042 \pm 0,008$	225

* В этом случае W(9) описывается чисто квадрупольным распределением ~ $\sin^2 29$, поэтому коэффициент *с* в применявшейся нормировке не имеет смысла и принят равным единице.



Угловые компоненты выхода. Знание коэффициентов a, b и c позволяет определить вклад отдельных компонент выхода Y_a , Y_b и Y_c , угловая зависимость которых соответствует трем составляющим в выражении (2): изотропной, дипольной и квадрупольной. Смысл их понятен из следующих определений:

$$Y = Y_a + Y_b + Y_c; \qquad \frac{dY}{d\Omega} = \frac{1}{4\pi\nu} YW(\vartheta);$$

$$Y_a = \frac{a}{\nu}Y; \qquad Y_b = \frac{2}{3}\frac{b}{\nu}Y; \qquad Y_c = \frac{8}{15}\frac{c}{\nu}Y.$$
(4)

Зависимости Y_i от E_{max} приведены на рис. 3 вместе с данными о полном выходе. Экспериментальные точки $Y_i(E_{\text{max}})$ находились по формулам (4) из значений коэффициентов W(9), которые даны в табл. 2, и полного выхода. В указанную на рис. 3 ошибку Y_i не включена ошибка измерений $Y(E_{\text{max}})$ (~10 %).

Рис. 3. Энергетическая зависимость полного выхода $Y(E_{\text{max}})$ (\bigcirc) и его угловых компонент $Y_a(E_{\text{max}})$ (\bullet), $Y_b(E_{\text{max}})$ (\blacktriangle), $Y_c(E_{\text{max}})$ (\times).

Внизу — полученные путем решения уравнения (5) зависимости полного сечения $\sigma_{vf}(E)$ (сплошная кривая) и его угловых компонент $\sigma_a(E)$ (длинный пунктир), $\sigma_b(E)$ (короткий пунктир), $\sigma_c(E)$ (штрихпунктир) от энергии γ -квантов. Точки для спина U²³⁸ взяты из [10]. Вертикальной пунктирной линией отмечены энергии связи нейтрона в соответствующем ядре



Восстановление сечений как функций энергии фотонов

Проведенные эксперименты позволяют непосредственно определить только интегральные характеристики — выход и угловые компоненты выхода в зависимости от максимальной энергии спектра тормозного излучения. Для теоретического анализа значительно большую ценность представляют данные о сечении деления $\sigma(E)$ и его угловых компонентах, которые можно рассчитать путем решения интегрального уравнения Вольтерра первого рода

$$Y(E_{\max}) = C \int_{0}^{E_{\max}} \sigma(E) f(E, E_{\max}) dE$$
(5)

с экспериментально определенными левыми частями. Ядро интегрального уравнения (5) $f(E, E_{\text{max}})$ представляет собой число γ -квантов в интервале энергии E, E + dE на один электрон, а коэффициент C перед интегралом не зависит от E_{max} .



Для решения уравнения (5) прежде всего необходимо достаточно надежно знать спектр γ -квантов тормозного излучения $f(E, E_{\text{max}})$ из толстой мишени, применявшейся в опыте.

Спектр γ -квантов. Спектры тормозного излучения из толстых мишеней не настолько подробно изучены, чтобы для установления функции $f(E, E_{max})$ можно было воспользоваться интерполяцией экспериментальных данных. Единственно возможный путь — это расчет. В прежних наших работах [3, 4] для анализа результатов измерений мы использовали приближенное соотношение

$$f(E, E_{\max}) \sim (E_{\max} - E)^2, \qquad (6)$$

полученное в грубом предположении равномерного распределения интенсивности $I \gamma$ -излучения вперед по толщине мишени t. Это предположение не учитывает важного эффекта — многократного рассеяния электронов, которое приводит к значительному уменьшению $dI(0^\circ, t) / dt$ с ростом t. Лоусон [11] показал, что $I(0^\circ, t) \sim \ln 950t$, где толщина t выражена в единицах радиационной длины. Эта формула, хорошо согласующаяся с экспериментом [12], и была положена в основу более корректных расчетов тормозного спектра γ -квантов.

Искомый спектр находился суммированием спектров из отдельных слоев мишени, взятых в виде интегральных распределений Шиффа с весами, учитывающими логарифмическую зависимость интенсивности. Расчет производился в двух предположениях: при наличии только ионизационных потерь энергии электронов и с учетом средних потерь на излучение. На рис. 4 результаты расчетов сравниваются с экспериментом в диапазоне энергии γ -квантов E от 2 МэВ до E_{max} для двух значений граничной энергии спектра $E_{\text{max}} = 4,55$ и 9,65 МэВ и трех толщин мишени из вольфрама t = 0,12; 0,25 и 3,0 мм. Из приведенных данных следует:

 а) учет средних радиационных потерь, в согласии с Лоусоном [11], не приводит к существенному изменению спектра γ-квантов;

б) результаты расчета хорошо согласуются с экспериментом в широком диапазоне значений E_{max} и t, полностью удовлетворяющем интересам пашей работы;

в) в области энергий γ-квантов (≥ 5 МэВ), существенных для процесса деления, форма спектра близка к линейной в отличие от принимавшейся ранее параболической зависимости (6).

Рассчитанное таким образом распределение $f_1(E, E_{\text{max}})$ нормировалось к экспериментально изученному ходу интенсивности $I(0^\circ, E_{\text{max}})$ суммарного у-излучения вперед:

$$I(0^\circ, E_{\max}) = A(E_{\max}) \int_{0}^{E_{\max}} E_{\gamma}(E) f_1(E, E_{\max}) dE,$$

где $I(0^\circ, E_{\text{max}})$ — изображенная на рис. 4 зависимость для аналогичной «толстой» мишени [13], $\gamma(E)$ учитывает самопоглощение γ -квантов в мишени и соотношение между потоком γ -излучения и мощностью дозы, выраженной в рентгенах в единицу времени. Мы рассчитываем, что в результате этой нормировки получена функциональная зависимость энергетического распределения выхода фотонов $f(E, E_{\text{max}}) = A(E_{\text{max}}) f_1(E, E_{\text{max}})$, однако абсолютная величина выхода едва ли имеет точность лучше 30%. Поэтому мы ограничились отысканием относительного хода $\sigma(E)$.



Рис. 4. Сравнение расчетных спектров γ-квантов тормозного излучения вперед из вольфрамовых мишеней толщиной 3 мм (а), 0,25 мм (б) и 0,12 мм (в) с экспериментальными [12]. Сплошная линия — расчет без учета средних потерь на излучение, пунктирная — с учетом средних потерь на излучение. Наверху справа — энергетическая зависимость интенсивности γ-излучения вперед (расстояние 1 м) [13]

Следует отметить, что поглощение γ-квантов в алюминиевом фильтре, а также и тормозное излучение из последнего, возникающее вследствие неполной потери энергии электронов в мишени, проявляется лишь в несущественной глубоко подбарьерной области энергий γ-квантов.

Расчет сечений. Сечение фотоделения $\sigma(E)$ и его угловые компоненты σ_a (E), $\sigma_b(E)$ и $\sigma_c(E)$ являются искомыми функциями интегральных уравнений (5), в которых ядром служит определенный выше спектр γ -квантов $f(E, E_{max})$. Для нахождения сечений как функций энергии фотона мы воспользовались методикой матричной обработки, предложенной Нозиком и Турчиным [14]. Она позволяет решать уравнение (5) с экспериментально определенными левыми частями, используя метод максимального правдоподобия. Имевшаяся в нашем распоряжении программа вычислений на ЭВМ была рассчитана на эквидистантные по энергии измерения $Y(E_{max})$. Наш эксперимент не удовлетворяет этому условию. Чтобы можно было использовать указанную программу, мы производили интерполяцию данных опыта путем проведения плавных лекальных кривых через экспериментальные точки с последующим разбиением интересующей нас области $E_{max} = 5,0 \div 8,5$ МэВ на равные интервалы 0,1 МэВ.

Прежде чем перейти к результатам расчетов, сделаем несколько общих замечаний относительно точности такой обработки применительно к свойствам исследуемой зависимости $\sigma(E)$.

1. Нахождение неизвестных функций интегрального уравнения (5) принадлежит к классу некорректно поставленных задач. Задачам этого типа присущи неопределенности обусловленные «раскачкой» решений. Это свойство применявшейся обработки экспериментальных данных требовало осторожности в истолковании получаемого нерегулярного поведения искомых функций $\sigma(E)$.

2. Матричный способ решения уравнения (5) является более совершенной в математическом отношении модификацией дифференцирования кривой $Y(E_{\text{max}})$ — так называемого метода разности фотонов. Относительная ошибка дифференцирования, грубо говоря, обратно пропорциональна $d \ln Y / dE_{\text{max}}$ ($E_{\text{max}} = E$), из чего можно заключить, что, несмотря па общее увеличение статистики отсчетов с ростом E_{max} , точность определения сечения в области «плато» будет хуже, чем на большей части подбарьерного участка.

3. Точность вычисления отдельных компонент сечения существенным образом зависит от ошибок коэффициентов углового распределения осколков $W(\vartheta)$. Особенно она низка для квадрупольной компоненты при высоких энергиях фотонов, где резкое возрастание относительной ошибки $Y_c(E_{\rm max})$ из-за уменьшения коэффициента с усугубляется падением точности дифференцирования.

4. Наконец, одним из главных источников ошибок восстановления сечений является применявшаяся интерполяция данных о $Y(E_{\rm max})$, которая неизбежно содержала элемент произвола, тем более существенный, чем больше расстояние между экспериментальными точками. Этот недостаток свойствен в той или иной мере всем известным исследованиям фотоделення на пучках тормозного излучения. Чтобы установить масштаб возникающих неопреде-

ленностей, также как и в работе [9], мы производили обработку нескольких вариантов интерполяции $Y(E_{\text{max}})$.

На рис. 5 справа изображены результаты обработки нескольких плавных пробных функций $Y_c(E_{max})$ для Pu^{238} , по-разному проведенных в пределах экспериментальных ошибок. Их сопоставление служит наглядной демонстрацией отмеченных неопределенностей обработки. Поучительно в этом отношении испытание кривой *1*, которая представляет собой сглаженную зависимость $\sigma_c(E)$, игнорирующую нерегулярности вариантов *2* и *3*; на верхней части рис. 5 показана соответствующая ей кривая $Y_c(E_{max})$, полученная интегрированием по известному γ -спектру. Она, очевидно, не может быть отвергнута как не согласующаяся с опытом. Иначе говоря, достигнутая точность экспериментальных данных не гарантирует достоверность «резонансной» структуры сечения.



Рис. 5. Примеры вариантов обработки выходов $Y_i(E_{\text{max}})$

Этим эффектам уделяли особое внимание в связи с ролью квазистационарных состояний в процессе деления, интенсивно обсуждаемой в последнее время [7, 15, 16].

На рис. 3 приведены зависимости $Y(E_{\text{max}})$ и $Y_i(E_{\text{max}})$, а также полученные в результате их обработки кривые $\sigma(E)$. Для квадрупольных компонент приведены лишь сглаженные кривые $\sigma_c(E)$ и $Y_c(E_{\text{max}})$, полученные путем интегрирования их по тормозному спектру.

Исследование решений показало:

1) подавляющее большинство наблюдаемых зависимостей $Y(E_{\text{max}})$ и $Y_i(E_{\text{max}})$ в пределах ошибок опыта может быть удовлетворительно согласовано с плавными кривыми для $\sigma(E)$ на рис. 3 (в том числе и $\sigma_a(E)$ для Th²³²);

2) достоверное исключение составляют только полное $\sigma_{tf}(E)$ и дипольное $\sigma_b(E)$ сечения деления Th²³² (максимум в районе 5,6 МэВ) и, возможно, изотропная компонента $\sigma_a(E)$ у Pu²⁴² (см. рис. 5 слева; на рис. 3 принят сглаженный вариант);

3) наибольшего доверия заслуживает низкоэнергетический участок ниже и около порога деления (< 6,5 ÷ 7 МэВ).

Изображенные на рис. 3 сечения нормированы по точкам, полученным в опытах с монохроматическими γ -квантами для U²³⁸ [10]. Кривые для Th²³² и U²³⁸ в целом удовлетворительно согласуются с результатами Каца с соавторами [9]. На рис. 6 приведены кривые $b/a = 3\sigma_b/2\sigma_a$ и $c/b = 5\sigma_c/4\sigma_b$ для исследованных ядер. Для Th²³² и U²³⁸ они сравниваются срезультатами измерений на монохроматических γ -квантах реакций (n, γ) [10, 17] и F¹⁹ (p, $\alpha\gamma$) O¹⁶ [3, 18]. При сравнении данных о фотоделении квантами с энергией 6,14 МэВ из реакции F¹⁹ (p, $\alpha\gamma$) O¹⁶ с другими результатами следует соблюдать осторожность, так как ширина этой линии составляет всего 10 эВ [19] и при ее фотопоглощении может возбуждаться только одно состояние составного ядра.

Обсуждение результатов

Главными качественными чертами полученных угловых распределений осколков фотоделения являются:

1) значительное уменьшение изотропной составляющей с углублением в подбарьерную область;

2) резкое возрастание при этом квадрупольной компоненты;

3) немонотонное доведение с уменьшением энергии отношения b/a;

4) сильная зависимость энергетического хода парциальных сечений и их отношений — коэффициентов анизотропии — от нуклонного состава делящегося ядра.

Независимо от мультипольности γ -кванты имеют проекцию полного момента на направление своего движения, равную по абсолютной величине единице; поэтому при поглощении их четно-четными ядрами, имеющими спин 0, образуются состояния составного ядра с теми же выделенными значениями $M_z = \pm 1$.



Рис. 6. Зависимости от энергии γ-квантов (*E*, МэВ) отношений *b* / *a* и *c* / *b*, полученных из кривых σ_i(*E*) на рис. 3 (сплошные линии), и ln σ_{yf} (штрих-пунктир), выраженные в произвольных единицах. Точками обозначены результаты работ: ○ — [3], □ — [10, 17],
• — [18]. Пунктиром показано отношение *b* / *a* для варианта обработки, приводящего к нерегулярности в σ_a для Pu²⁴² (см. рис. 5)

Если К сохраняется в процессе деления, то угловое распределение осколков, нормированное условием

$$\int_{0}^{\pi} W(\vartheta) \sin \vartheta d\vartheta = 1,$$

имеет вид

$$W_{K}^{J}(\vartheta) = \frac{2J+1}{4} \left\{ \left| D_{1K}^{J} \right|^{2} + \left| D_{-1K}^{J} \right|^{2} \right\},$$
(7)

где $D_{MK}^{J}(9)$ — сферические функции Вигнера. Мы будем предполагать, что поглощение квантов происходит лишь с мультипольностями *E*1 и *E*2, и для уровней составных ядер, следовательно, возможны лишь две комбинации спина и четности: 1⁻ и 2⁺. Таким образом, при расчетах могут понадобиться лишь следующие элементарные угловые распределения типа (7):

$$W_0^1(\vartheta) = \frac{3}{4}\sin^2 \vartheta,$$

$$W_1^1(\vartheta) = \frac{3}{4} \left(1 - \frac{1}{2}\sin^2 \vartheta \right),$$

$$W_0^2(\vartheta) = \frac{15}{16}\sin^2 2\vartheta,$$

$$W_2^2(\vartheta) = \frac{5}{8} \left(\sin^2 \vartheta + \frac{1}{4}\sin^2 2\vartheta \right),$$

$$W_1^2(\vartheta) = \frac{5}{4} \left(1 - \frac{1}{2}\sin^2 \vartheta - \frac{1}{2}\sin^2 2\vartheta \right).$$

(8)

Дифференциальное сечение фотоделения имеет вид

$$2\pi \frac{d\sigma_{\gamma}}{d\Omega} = \sigma_{\gamma}^{1^{-}} \sum_{K=0,1} P_{K}^{-} W_{K}^{1}\left(\vartheta\right) + \sigma_{\gamma}^{2^{+}} \sum_{K=0,1,2} P_{K}^{2^{+}} W_{K}^{2}\left(\vartheta\right).$$
(9)

Здесь $\sigma_{\gamma}^{l^-}$ и $\sigma_{\gamma}^{2^+}$ — соответственно сечения фотопоглощения дипольных и квадрупольных γ -квантов, $P_K^{J^{\pi}}$ — вероятность деления через канал с заданным K (при этом надо учитывать, что значения $K \neq 0$ имеют вдвое больший статистический вес, чем K = 0). Изотропное угловое распределению получается, когда все K равновероятны, что в выбранной нормировке соответствует равенству

$$\sum_{K=0}^{J} W_{K}^{J} \left(2 - \delta_{K0} \right) = \text{const} = \frac{2J+1}{2}.$$
 (10)

Если из состояния с фиксированными J и π возможно деление с различными значениями K, то

$$P_K^{J^{\pi}} = \frac{\Gamma_{fK}^{J^{\pi}}}{\Gamma_c + \sum_{K'} \Gamma_{fK'}^{J^{\pi}}} \equiv \frac{\Gamma_{fK}^{J^{\pi}}}{\Gamma^{J^{\pi}}},\tag{11}$$

где $\Gamma_{fK}^{J^{\pi}}$ — средняя делительная ширина для канала с фиксированным K, Γ_c – полная ширина процессов распада составного ядра, конкурирующих с делением. Перегруппировывая члены в угловом распределении (9), получаем

$$2\pi \frac{d\sigma_{\gamma f}}{d\Omega} = \left(\frac{3}{4}\sigma_{\gamma}^{I^{-}} \frac{\Gamma_{f1}^{I^{-}}}{\Gamma^{I^{-}}} + \frac{5}{4}\sigma_{\gamma}^{2^{+}} \frac{\Gamma_{f1}^{2^{+}}}{\Gamma^{2^{+}}}\right) + \sin^{2}\vartheta \left(\frac{3}{4}\sigma_{\gamma}^{I^{-}} \frac{\Gamma_{f0}^{I^{-}} - 0.5\Gamma_{f1}^{I^{-}}}{\Gamma^{I^{-}}} + \frac{5}{8}\sigma_{\gamma}^{2^{+}} \frac{\Gamma_{f2}^{2^{+}} - \Gamma_{f1}^{2^{+}}}{\Gamma^{2^{+}}}\right) + \sin^{2}2\vartheta\sigma_{\gamma}^{2^{+}} \left(\frac{15}{16}\frac{\Gamma_{f0}^{2^{+}}}{\Gamma^{2^{+}}} - \frac{5}{8}\frac{\Gamma_{f1}^{2^{+}}}{\Gamma^{2^{+}}} + \frac{5}{32}\frac{\Gamma_{f2}^{2^{+}}}{\Gamma^{2^{+}}}\right). \quad (12)$$

Главный анизотропный член, пропорциональный $\sin^2 \vartheta$, обеспечивается разницей в порогах $E_f^{J\pi K}$ состояний 1⁻, K = 0 и 1⁻, K = 1 (в пользу состояния 1⁻, K = 0), вследствие чего $\Gamma_{f1}^{1^-} < \Gamma_{f0}^{1^-}$, причем ниже порога с K = 1 неравенство может быть сильным.

Специфической трудностью при анализе данных по фотоделению является отсутствие надежных прямых данных об абсолютной величине и энергетической зависимости в рассматриваемой области энергий полного сечения фотопоглощения и его парциальных составляющих, соответствующих разным мультипольностям. Поэтому последовательный каналовый анализ, т. е. прямое извлечение энергетических зависимостей $\Gamma_{fK}^{J\pi}$ из экспериментальных данных, осуществить нельзя, и возможности интерпретации ограничиваются необходимостью использовать относительные величины, на которые возможное непостоянство сечении $\sigma_{\gamma}^{1^-}$ и $\sigma_{\gamma}^{2^+}$ в рассматриваемом интервале влияет меньше.

Согласно электродинамическим оценкам $\sigma_{\gamma}^{2^+} / \sigma_{\gamma}^{1^-} \approx R^2 / \lambda^2$, где R — радиус ядра, а λ — длина волны γ-кванта. Для делящихся ядер в рассматриваемой области энергий это отношение равно примерно 1/20, так что вклад квадрупольной компоненты (~sin² 2 9) в угловое распределение, сравнимый с вкладом дипольной компоненты, может получиться лишь при $P_0^{2^+} \gg P_0^{1^-}$. Это неравенство будет иметь место в том случае, когда барьер деления для состояний $2^+, K = 0$ заметно ниже, чем для состояний $1^-, K = 0$, что вполне соответствует модели каналов деления О. Бора, согласно которой спектр каналов подобен спектру низколежащих состояний четно-четного ядра, а там всегда $E^{1-} > E^{2+}$. Этим объясняется рост обеих анизотропных компонент с уменьшением энергии возбуждения. Наличие же максимума на кривой b / a тоже соответствует, по-видимому, простому факту: отношение проницаемостей *р* двух барьеров, которые отличаются лишь вблизи вершины, обращается в единицу в двух случаях — выше обоих барьеров, когда обе проницаемости равны единице, и в глубоко подбарьерной области. Следовательно, при какой-то промежуточной энергии это отношение должно иметь экстремум. Положение его приближенно совпадает с вершиной нижнего барьера. Это утверждение иллюстрируется схематически на рис. 7. Для параболических барьеров, изображенных на ри-



Рис. 7. Схема энергетической зависимости отношения проницаемостей двух барьеров, отличающихся лишь вблизи вершины

сунке, отношение p_1/p_2 с убыванием энергии сначала экспоненциально растет, затем, после прохождения максимума, при $E < E_1$ экспоненциально падает, но с меньшим наклоном. После прохождения точки слияния обоих барьеров падение замедляется, но продолжается в пределе до $p_1/p_2 = 1$.

Таково естественное качественное объяснение энергети-

ческих зависимостей обеих анизотропных компонент в сечении в рамках традиционного каналового анализа. При более подробном рассмотрении возникает серьезная трудность. В подбарьерной области должно быть $\Gamma_{f0}^{J^{\pi}} \gg \Gamma_{fK\neq 0}^{J^{\pi}}$; учитывая также, что $\sigma_{\gamma}^{l^{-}} \gg \sigma_{\gamma}^{2^{+}}$, из сравнения (2) и (12) получаем, что при таких энергиях примерно выполняются следующие соотношения:

$$\frac{b}{a} \sim \frac{p(1^-,0)}{p(1^-,1)}, \quad \frac{c}{b} \sim r \frac{p(2^+,0)}{p(1^-,0)} \frac{\Gamma^1}{\Gamma^{2^+}}, \tag{13}$$

где $p(J^{\pi},K)$ — проницаемости барьера для данной комбинации квантовых чисел. Согласно сказанному выше, b/a с уменьшением энергии должно достигать максимального значения примерно при $E = E_f^{1^-,0}$, а сечение фотоделения при увеличении энергии будет выходить на плато примерно в той же точке, точнее, даже несколько раньше, при $E = T_f^{1^-} \equiv E_f^{1^-,0} - \Delta E_f$. Точка T_f — «наблюдаемый порог деления» — лежит ниже истинного порога за счет того, что делительная ширина становится больше конкурирующей радиационной ширины раньше, чем сама выходит на насыщение при $E \sim E_f^{1^-,0}$. Как показано в работе [20], ΔE_f составляет несколько сот кэВ. Эта ситуация, предсказываемая теорией каналов деления, схематически изображена на рис. 8*a*. Как следует из структуры формулы (13) отношение c/b достигает максимума при наблюдаемом пороге $T_f^{2^+,0}$, а не $E_f^{2^+,0}$, как было ошибочно указано в [6].

На рис. 6 слева экспериментальные результаты представлены в виде, удобном для сравнения с этим предсказанием теории. Видно, что у изотопов плутония точка, в которой анизотропия (отношение b/a) достигает максимального значения, лежит почти на 1 МэВ ниже наблюдаемого порога T_f , а должна лежать выше. Количественное расхождение очень резкое: сечение в этой точке должно примерно совпадать со своим значением на плато, а факти-



Рис. 8. Схематическое изображение зависимостей анизотропии и сечения фотоделения для случаев одногорбого (а) и двугорбого (б) барьеров. Пунктирные линии указывают значения: $T_f^{2^+,0}$ для кривой c/b, $T_f^{1^-,0}$ для кривой $\ln \sigma_f$, $E_f^{1^-,0}$ для кривой b/a на рис. a; $T_{fB}^{2^+,0}$ для кривой c/b, $E_{fB}^{1^-,0}$ для кривой b/a и $T_f^{1^-,0}$, $E_{fA}^{1^-,0}$ для кривой $\ln \sigma_f$ на рис. δ

чески оно примерно в 100 раз меньше. Это противоречие намечалось уже у Th^{232} и U^{238} , и при обсуждении результатов измерения выходов при делении этих элементов на спектре мы отмечали его ранее как трудно объяснимое в рамках традиционных представлении [3, 5, 6]. Пока отсутствовали данные по сечениям изотопов Pu, тот факт, что для Th^{232} и U^{238} $T^{1^-,0}$ примерно равно $E_f^{1^-,0}$, а не меньше, мог быть объяснен предположением о приближенном со-хранении квантового числа K в состояниях компаунд-ядра [5] или идеей Уилетса о подавлении деления через каналы, соответствующие K = 0 [3]. После получения результатов для изотопов Pu, которые приводятся в настоящей работе, стало ясно, что такие объяснения несостоятельны, поскольку определенно $T_f^{1^-,0} > E_f^{1^-,0}$ и разница значительна. Именно этого, как сейчас будет показано, следует ожидать в модели двугорбого барьера при $E_{fA} > E_{fB}$ (см. рис. 86).

Решение одномерной квазиклассической задачи о проницаемости двугорбого барьера показывает [21], что средняя проницаемость его такая, как если бы существовал только барьер A, т. е. положение наблюдаемого порога в сечении определяется более высоким из барьеров — A. Механизм возникновения анизотропии в этом случае, согласно Струтинскому и Бьёрнхольму [7], состоит в следующем: преодолев первый барьер, ядро проводит во второй яме время, достаточное для того, чтобы «забыть» то значение *K*, с которым оно проходило первый барьер. Поэтому при $E_{fB}^{1^-,0} < E < E_{fA}^{1^-,0} < E_{fA}^{1^-,1}$ ядра попадают во вторую яму через канал 1⁻, 0 на барьере *A*, поскольку это энергетически выгодно, а затем делятся, и угловое распределение определяется положением энергии возбуждения по отношению к каналам барьера *B*. В этом случае $T_f^{1^-,0}$ примерно совпадает с $E_{fA}^{1^-,0}$ для барьера *A* (или несколько ниже этого порога), а максимумы отношений *b* / *a* и *c* / *b* примерно находятся при энергиях, равных $E_{fB}^{1^-,0}$ и $T_{fB}^{2^+,0}$ (см. рис. 8*б*). Экспериментальная картина вполне удовлетворительно соответствует такому описанию, и из ее анализа получаются значения порогов, приведенные в табл. 3. Величина $\Delta_{AB} = T_f^{1^-,0} - E_{fB}^{1^-,0}$ увеличивается от Th к Pu в согласии с предсказаниями работы [7]. Поскольку в большинстве случаев *c* / *b* монотонно растет с уменьшением энергии, для $T_{fB}^{2^+,0}$, определяемого по положению максимума этого отношения, в табл. 3 приводятся верхние граничные значения.

Таблица 3.

n nback providence de concerne de la constante					
Изотоп	$T_{fB}^{2^+,0}$, MəB	$E_{fB}^{1^-,0}$, МэВ	$T_f^{1^-,0} \lesssim E_{f\!A}^{1^-,0}$, МэВ	Δ_{AB} , МэВ	r
Th ^{232:}	5,7	6,0	6,0	0	1/60
U^{238}	< 5,0	5,4	5,8	0,4	1/30
Pu ²³⁸	< 5,2	5,4	6,1	0,7	1/10
Pu ²⁴⁰	< 5,0	5,1	6,0	0,9	1/15
Pu ²⁴²	< 5,0	5,2	6,1	0,9	1/10

Параметры барьера деления* и отношение сечений дипольного и квадрупольного фотопоглощения

* Значения характеристик, приведенных в таблице, следует рассматривать как оценки, имеющие точность ~0,2 МэВ

Обсуждавшиеся выше эффекты, которые мы связываем с возможностью существования второго минимума на потенциальной поверхности делящегося ядра, могут быть лишь при заметной разнице порогов A и B и значительной глубине ямы между ними. Они, говоря коротко, сводятся к тому, что надбарьерные эффекты в угловых распределениях проявляются в подбарьерной по сечению области. Это явление отчетливо наблюдается также и при делении четно-четных ядер U²³⁴, U²³⁶, Pu²⁴⁰ в (*d*, *pf*)- и (*t*, *pf*)-реакциях [22]. Максимум угловой анизотропии, связываемой с делением через состояния $K^{\pi} = 0^+$, расположен ниже энергии связи нейтрона и соответствует вероятности деления $p \approx \Gamma_f/\Gamma_c \ll 1$, т. е. очень малой проницаемости $p \ll P$, поскольку Γ_c равно ра-
диационной ширине. Аналогичные особенности отмечались и при делении ядер нейтронами [7, 23].

Изученные ядра сильно разнятся по величине смещения Δ_{AB} , угловой анизотропии b/a и соотношению угловых компонент вблизи наблюдаемого порога. Отсутствие значительной разницы между $T_f^{1^-,0}$ и $E_{fB}^{1^-,0}$ и соотношение $\sigma_a/\sigma_b \ll 1$ у Th²³² отвечают общепринятым представлениям о каналовых эффектах. Этот случай, видимо, соответствует барьеру, у которого $E_{fB} \gtrsim E_{fA}$. Существование ямы между максимумами подтверждает наличие резонанса σ_b при $E \approx 5,6$ МэВ [7]. У изотопов плутония Δ_{AB} велико и вследствие этого уже вблизи наблюдаемого порога $\sigma_a/\sigma_b \gg 1$. Здесь для описания энергетических зависимостей средних делительных ширин необходимо привлекать статистический подход, что согласуется с результатами исследования угловых распределений осколков при делении нейтронами [23]. Поведение указанных величин в случае U²³⁸ имеет промежуточный характер. Конкуренция со стороны испускания фотонейтронов у Th²³² велика, у изотопов Ри еле заметна, что также естественно связать с разницей в Δ_{AB} и, следовательно, в числе состояний, участвующих в делении вблизи $T_f^{1^-,0}$.

Определенный интерес представляет оценка отношения сечений фотопоглощения разной мультипольности $r = \sigma_{\gamma}^{2^+} / \sigma_{\gamma}^{1^-}$. В более ранней работе [3] это отношение было оценено в детальных традиционных представлениях о каналовой структуре барьера деления. Полученные значения менялись в пределах от 0,015 у Th²³² до 0,15 у Pu²⁴⁰. В табл. 3 приведены значения $r \approx \sigma_a / \sigma_b$.

В заключение заметим, что учет возможности существования во второй яме квазистационарных состояний может дать альтернативную интерпретацию некоторых особенностей, наблюдающихся на опыте (максимум b / a, подъем c / b).

Кратко перечислим основные физические выводы настоящей работы.

1. Энергетическая зависимость обеих анизотропных компонент в угловых распределениях согласуется с предсказаниями коллективной модели в отношении зависимости высоты барьера деления от квантовых характеристик делящегося ядра.

2. Большие значения анизотропии в глубоко подбарьерной области служат сильным аргументом в пользу гипотезы о наличии второго максимума на потенциальной кривой, описывающей барьер деления.

3. Отношения сечений квадрупольного и дипольного фотопоглощения для тяжелых четно-четных ядер в области энергий 5—6 МэВ близки к ¹/₂₀ в качественном согласии с электродинамическими оценками.

Авторы глубоко признательны П. Л. Капице за поддержку исследований, В. М. Струтинскому — за ценные обсуждения, М. К. Голубевой и Н. Е. Федоровой — за участие в работе.

Литература

- 1. E. J. Winhold, P. T. Demos, I. Halpern. Phys. Rev., 87, 1139, 1952.
- 2. О. Бор. Тр. I Женевск. конф. по мирн. использ. атомн. энергии в 1955 г., т. 2. Физматгиз, 1958, с. 175.
- H. C. Работнов, Г. Н. Смиренкин, А. С. Солдатов и др. Phys. and Chem. of Fission, vol. 1, IAEA, Vienna. 135, 1965.
- 4. И. Е. Бочарова, В. Г. Золотухин, С. П. Капица и др. ЖЭТФ, 49, 476, 1965.
- 5. N. S. Rabotnov, G. N. Smirenkin, A. S. Soldatov et al. Phys. Lett., 26B, 218, 1968.
- С. П. Капица, Н. С. Работнов, Г. Н. Смиренкин и др. Письма ЖЭТФ, 9, 128. 1969; Phys. and Chem. of Fission, SM-122/134, p. 419, Vienna, 1969.
- В. М. Струтинский. С. Бьёрнхольм. Матер. Междунар. симп. по структуре ядра, Дубна. 1968.
- 8. А. С. Солдатов, И. Е. Бочарова, Г. Н. Смиренкин. ПТЭ, 5, 226, 1968.
- 9. L. Katz, A.P. Baerg, F. Brown. II UN Int. Conf. on the PUAE (UN, Geneva. 1958), vol. 15, 1958, p. 188.
- 10. A. Manfredini, E. Fiore, C. Ramorino et al. Nucl. Phys., A123, 664, 1969.
- 11. J. Lowson. Nucleonics, 10, 61, 1952.
- 12. N. Starfelt, H. W. Koch. Phys. Rev., 102, 1598, 1956.
- 13. M. H. MacGregor. Nucleonics, 11, 176, 1957.
- 14. В. Ф. Турчин. ЖВМ и МФ. 8, 230, 1968; В. 3. Нозик, В. Ф. Турчин. Препринт ФЭИ-138, 1968.
- 15. J. E. Lynn. Nucl. Date for Reactors, IAEA, Vienna, 1967, vol. 2, p. 89.
- 16. П. Е. Воротников. ЯФ, 7, 1228, 1968; ЯФ, 5, 295, 1967.
- 17. H.G. de Carvalho, A. Manfredini, M. Muchnik et al. Nuovo Cim., 29, 464, 1963.
- 18. B. Foreman, S. A. E. Johansson. Nucl. Phys., 20, 136, 1960.
- 19. J. R. Huizenga, K. M. Clarke, J. E. Gindler, R. Vandenbosch. Nucl. Phys., 34, 439, 1962.
- 20. Л. Н. Усачев, Н. С. Работнов, В. А. Павлинчук. Атомная энергия, 17, 479, 1964.
- 21. Е. В. Гай, А. В. Игнатюк, Н. С. Работнов, Г. Н. Смиренкин. ЯФ, 10, 542, 1969.
- 22. H. C. Britt, F. A. Rickey, A. W. Hall. Preprint LA-DC-9562, 1968.
- Х. Д. Андросенко, Г. Н. Смиренкин. Письма ЖЭТФ, 8. 181, 1968.
 Д. Л. Шпак, Г. Н. Смиренкин. Письма ЖЭТФ, 9, 196, 1969.

Photofission of Th²³², U²³⁸, Pu²³⁸, Pu²⁴⁰, Pu²⁴² and Structure of the Fission Barrier

N. S. Rabotnov, G. N. Smikenkin, A. S. Soldatov, L. N. Usachev, S. P. Kapitza, Yu. M. Tsipenyuk

Results of measurements of angular distributions and of fragment yields in photofission of even-even nuclei of Th²³², U²³⁸, Pa²³⁸, Pu²⁴⁰ and Pu²⁴² near the threshold are given. The measurements are performed on the γ -quanta beam from the 12 MeV microtron of the Institute of Physical Problems of the USSR Academy of Sciences with the maximal energies from 5 up to 10 MeV. The calculation of the bremsstrahlung spectrum of 1 mm tungsten target which was used to reconstruct the dependence of the photofission total cross section and its angular components on the γ -quanta energy is discribed. Experimental results which are beyond the framework of conventional leas are in the favour of the two-peak fission barrier.

Подбарьерное фотоделение четно-четных ядер

А. В. Игнатюк, Н. С. Работнов, Г. Н. Смиренкин, А. С. Солдатов, Ю. М. Ципенюк

На тормозном пучке микротрона ИФП АН СССР проведены измерения угловых распределений осколков и сечения фотоделения U^{238} и Th²³². В качестве делящихся мишеней использовались металлические фольги урана и тория. При обработке учитывался процесс рассеяния осколков на ядрах делящегося вещества. В подбарьерной области энергий обнаружены нерегулярности, которые, по-видимому, соответствуют квазистационарным состояниям вибрационного типа во второй яме. Результаты настоящего эксперимента и прежних измерений [1] анализируются в рамках модели двугорбого барьера с потенциалом, составленным из трех сопряженных парабол. Показано, что описание резонансной структуры требует учета затухания вибрационного движения, которое в настоящей работе моделируется добавлением в потенциал мнимой части.

Введение

Реакция (γ , f) на четно-четных ядрах создает весьма благоприятные возможности для изучения процесса деления ядер вблизи порога. Благодаря сильной зависимости сечения фотопоглощения $\sigma_{\gamma l}$ от мультипольности γ -квантов заметный вклад в процесс деления вносят лишь состояния с двумя комбинациями спина и четности: $I^{\pi} = 1^{-}$ и 2^{+} , причем в исследуемой области энергий выполняется условие $\sigma_{\gamma l} \gg \sigma_{\gamma l}$. Это обстоятельство сильно упрощает анализ спектра реализующихся каналов деления и является значительным преимуществом реакции (γ , f) перед другими способами возбуждения деления.

Основные трудности экспериментального исследования фотоядерных реакций связаны с отсутствием интенсивных источников монохроматических γ -квантов. При использовании тормозного излучения электронного пучка оптимальные условия с точки зрения интенсивности и энергетического разрешения реализуются на микротроне. Исследования фотоделения тяжелых ядер проводились нами в течение последних лет на сильноточном микротроне ИФП АН СССР с 17 орбитами [1, 2]. Эти исследования показали, что в энергетической зависимости сечения деления и компонент углового распределения осколков имеют место аномалии, которые противоречат традиционным представлениям о структуре барьера деления, но находят естественное объяснение в модели двугорбого барьера, предложенной Струтинским [3].

В настоящей работе излагаются результаты дальнейшего изучения этого вопроса. Приводятся новые экспериментальные данные для U^{238} и Th²³². Они анализируются совместно с опубликованными ранее [1] данными для изотопов Pu.

Журнал экспериментальной и теоретической физики, 1971, т. 61, вып. 10, с. 1284—1302.

Влияние структуры барьера деления на наблюдаемые характеристики процесса

Приведем основные понятия и обозначения, используемые ниже. Выражение для дифференциального сечения фотоделения имеет вид [1]

$$2\pi \frac{d\sigma_{f}(\theta)}{d\Omega} = \frac{3}{2}\sigma_{\gamma 1}\frac{\Gamma_{f}^{11}}{\Gamma_{1}} + \frac{5}{2}\sigma_{\gamma 2}\frac{\Gamma_{f}^{21}}{\Gamma_{2}} + \left(\frac{3}{4}\sigma_{\gamma 1}\frac{\Gamma_{f}^{10} - \Gamma_{f}^{11}}{\Gamma_{1}} + \frac{5}{4}\sigma_{\gamma 2}\frac{\Gamma_{f}^{22} - \Gamma_{f}^{21}}{\Gamma_{2}}\right)\sin^{2}\theta + \sigma_{\gamma 2}\left(\frac{15}{16}\frac{\Gamma_{f}^{20}}{\Gamma_{2}} - \frac{5}{4}\frac{\Gamma_{f}^{21}}{\Gamma_{2}} + \frac{5}{16}\frac{\Gamma_{f}^{22}}{\Gamma_{2}}\right)\sin^{2}2\theta.$$
(1)

Здесь $\sigma_{\gamma l}$ — сечения образования составного ядра с моментом *I*, Γ_{f}^{IK} — парциальные делительные ширины,

$$\Gamma_I = \sum_{K=-I}^{I} \Gamma_f^{IK} + \Gamma_c^I - -$$

полная ширина ($\Gamma_f^{IK} = \Gamma_f^{I,-K}$), Γ_c^{I} — ширина процессов, конкурирующих с делением, K — проекция момента количества движения на ось деления. Угловое распределение без учета нормировки записывается обычно в виде

$$W(\theta) = a + b\sin^2 \theta + c\sin^2 2\theta.$$
 (2)

Если потенциальная кривая, описывающая барьер деления, имеет единственный максимум, то вблизи этого максимума барьер можно считать параболическим. Для проницаемости параболического барьера имеем

$$\frac{2\pi}{\overline{D}_{I}}\Gamma_{f}^{IK} \equiv P_{IK} = \left\{1 + \exp\left[\frac{2\pi\left(E_{f}^{IK} - E\right)}{\hbar\omega_{IK}}\right]\right\}^{-1},\qquad(3)$$

где E_f^{IK} и $\hbar \omega_{IK}$ — высота и параметр кривизны барьера, \overline{D}_I — расстояние между уровнями составного ядра. Проницаемости P_{IK} достигает значения 0,5 при $E = E_f^{IK}$ («истинный порог деления»).

Параметры барьера могут зависеть от квантовых чисел I и K, что и приводит к анизотропии разлета осколков. Для спина I = 1 минимальное значение высоты барьера соответствует K = 0, так что при достаточной разнице E_f^{11} и E_f^{10} в подбарьерной области $\Gamma_f^{10} \gg \Gamma_f^{11}$ и в угловом распределении $b \gg a$

$$\frac{b}{a} = \frac{1}{2} \left(\frac{\Gamma_f^{10}}{\Gamma_f^{11}} - 1 \right) \sim \frac{P_{10}}{P_{11}}.$$
(4)

В этом выражении мы пренебрегаем вкладом квадрупольной компоненты в первых двух слагаемых (1). Сам по себе факт наблюдения квадрупольного фотопоглощения интересен. Однако из-за сложности анализа энергетической зависимости коэффициента c, определяемого вкладом трех состояний K = 0, 1, 2; I = 2, разделить которые очень трудно, в данной работе квадрупольное деление не рассматривается.

При наличии конкурирующих процессов распада составного ядра энергетическая зависимость сечения деления определяется не проницаемостью, а так называемой делимостью:

$$\frac{\sigma_{f1}}{\sigma_{\gamma l}} = \frac{\Gamma_f^{10} + 2\Gamma_f^{11}}{\Gamma_f^{10} + 2\Gamma_f^{11} + \Gamma_\gamma^{l}} \approx \frac{\Gamma_f^{10}}{\Gamma_f^{10} + \Gamma_\gamma^{l}}.$$
(5)

Делимость принимает значение 0,5 не на истинном пороге, а несколько раньше при энергии

$$T_{1} = E_{f}^{10} - \frac{\hbar\omega_{10}}{2\pi} \ln \frac{\bar{D}_{1}}{2\pi\Gamma_{\gamma}^{1}}, \qquad (6)$$

которую называют наблюдаемым порогом (см. [4]).

В рамках традиционного описания каналовых эффектов максимум b/a, т. е. P_{10}/P_{11} , возникает при $E \approx E_f^{10}$, точнее, несколько ниже, если реализуется естественное геометрическое соотношение — более высокому барьеру соответствует большая кривизна ($\hbar\omega_{11} > \hbar\omega_{10}$). Этот максимум всегда должен быть справа по энергии от наблюдаемого порога, что иллюстрируется рис. 1а. На рис. 1б представлены результаты измерения энергетических зависимостей анизотропии и сечения деления в реакции $Pu^{240}(\gamma, f)$ [1]. Они показывают противоположное положение этих характерных точек. Наблюдаемое расхождение выходит за рамки любых мыслимых неопределенностей экспериментальных данных и не может быть устранено ни при каком выборе параметров, используемых в расчетах кривых на рис. 1а. Сечение деления Pu^{240} в той точке, где анизотропия достигает максимума, примерно на два порядка меньше, чем оно должно быть согласно расчетам. Аналогичные результаты были получены и при исследовании фотоделения других ядер [1].

Если потенциальная кривая имеет два максимума, то проницаемость такого двугорбого барьера в достаточно простой аналитической форме может быть определена в рамках квазиклассического приближения [5]:

$$P = \frac{P_A P_B}{4} \left[\left(\frac{P_A + P_B}{4} \right)^2 \sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi \right]^{-1}.$$
 (7)

Здесь $P_A(E)$ и $P_B(E)$ — проницаемости составляющих барьеров A и B, а фазовый множитель $\varphi(E)$ определяет условия возникновения квазистационарных уровней в яме между горбами. Их энергия определяется уравнением



Рис. 1. Пример расчетной (а) и экспериментальной (б) делимости и анизотропии фотоделения. Расчеты проведены в рамках традиционной модели одногорбого барьера со следующим набором параметров:

 $E_f^{10} = 5,5$ M₃B, $\hbar\omega_{10}/2\pi = 0,1$; 0,125; 0,150 M₃B; $E_f^{11} = 6,0$ M₃B; $\hbar\omega_{11}/2\pi = 0,125$ M₃B

$$\varphi\left(E_n^0\right) = \pi\left(n + \frac{1}{2}\right),\tag{8}$$

а ширина

$$\Gamma = D_0 \left(P_A + P_B \right) / 2\pi \,, \tag{9}$$

где *n* — номер уровня, отсчитываемый от дна ямы, а $D_0 = \pi (d\varphi / dE)^{-1}$ — расстояние между этими уровнями. Проницаемость двугорбого барьера испытывает резкие колебания от

$$P_{\min} = P_A P_B / 4$$
 до $P_{\max} = 4 P_A P_B / (P_A + P_B)^2$, (10)

которые проявляются в виде резонансов в энергетической зависимости делимости. Такие резонансы, действительно, были наблюдены в разных реакциях, заключительным этапом которых является деление.

Вопрос о расщеплении двугорбого барьера в зависимости от квантового числа K и о влиянии этого расщепления на наблюдаемые характеристики процесса деления значительно сложнее, чем в случае одногорбого барьера. Характерными являются две крайние возможности: а) время жизни во второй яме велико по сравнению с периодом миграции K, и ядро «забывает», с каким значением K был пройден барьер — модель «с забыванием»; б) величина K сохраняется на всех этапах прохождения двугорбого барьера — модель «без забывания». Первый случай моделируется барьерами с нерасщепленными по Kвнутренними горбами, во втором — каждой комбинации IK^{π} соответствует своя потенциальная кривая. При достаточно большой разности высот горбов наблюдаемый порог деления в обоих случаях определяется положением более высокого горба, тогда как угловая анизотропия вблизи порога определяется расщеплением только внешнего горба B в модели «с забыванием» и расщеплением обоих горбов в модели «без забывания».

Если второй горб ниже первого, то в модели «с забыванием» максимум угловой анизотропии сместится ниже наблюдаемого в сечении порога, и это позволяет качественно объяснить отмеченные выше аномалии в поведении *b/a* (рис. 16) [1]. При учете резонансной структуры энергетической зависимости делимости картина значительно усложняется. Ее однозначная интерпретация требует количественного анализа.

Метод и результаты измерений

Как и в прежних наших работах [1, 2], измерения проводились на тормозном пучке от внутренней мишени микротрона с использованием цилиндрических стекол в качестве детекторов осколков деления. Подробнее постановка эксперимента и обработка данных описаны в [1]. Для исследования глубоко подбарьерной области фотоделения U²³⁸ делящееся вещество использовалось в виде металлической фольги урана двухсоткратного обеднения по изотопу U²³⁵. Толщина фольги (~0,2 г/см²) значительно превосходила пробег осколков ($R \approx 10 \text{ мг/см}^2$). По сравнению со слоем 1 мг/см² фольга дает выигрыш в статистике отсчетов для стеклянных детекторов в 5–7 раз в зависимости от угла вылета осколков [6].

Несмотря на то, что дифференциальное сечение рассеяния осколков имеет вид очень узкого пика вперед [7], процесс рассеяния осколков в толстой мишени может исказить $W(\theta)$, особенно при большой величине анизотропии. На рис. 2 сравниваются коэффициенты углового распределения a_{ϕ} и c_{ϕ} , полученные методом наименьших квадратов из результатов измерений с урановыми и ториевыми металлическими фольгами с аналогичными коэффициентами $a_{c\pi}$ и $c_{c_{\text{сл}}}$ для тонких слоев толщиной $\approx 1,2$ мг/см² (коэффициент \hat{b} определяется согласно условию нормировки: a + b = 1). Эффект рассеяния осколков, проявляющийся в отклонении от пунктирных кривых $a_{\Phi} = a_{c\pi}$ и $c_{\Phi} = c_{c\pi}$, заметен лишь при $a_{c_{II}} < 0,2$, т. е. b/a > 5, и в пределах ошибок не сказывается на коэффициенте с. Искажающее влияние рассеяния осколков на коэффициент а тем больше, чем больше величина квадрупольной компоненты, что хорошо видно из рис. 2, на котором значения а для с < 0,1 показаны зачерненными кружками, для $c = 0,3 \div 1,2$ — светлыми. Этот результат объясняется тем, что в области малых углов из-за рассеяния осколков влияние квадрупольной компоненты на коэффициент а при равных b и c вчетверо больше, чем от дипольной.



Рис. 2. Сравнение коэффициентов углового распределения осколков *a* (○, ●) и *c* (◊) для фольги и слоя толщиной 1,2 мг/см². Светлые кружки — *a* для *W*(θ) со значением *c* = 0,3 ÷ 1,2

Для введения поправок на рассмотренный эффект необходимо знать вид углового распределения рассеянных осколков для рассеивателя, эквивалентного рабочему слою фольги, эффективная толщина которого $\approx (R - R_b)/2$, $R_b \approx 3$ мг/см² — пробег осколка, соответствующий порогу регистрации в стекле. С этой целью были поставлены опыты по рассеянию коллимированного пучка осколков Cf²⁵² с полушириной 1,5°. В качестве рассеивателей использовались золотые фольги толщиной 1,6 и 3,3 мг/см². Результаты измерений, представленные на рис. 3, нормированы так, чтобы площади под кривыми были одинаковы. На вставке к рис. 3 в произвольных единицах показаны результаты работы [7] для рассеивателей из золота толщиной 0,315 и 0,63 мг/см².

Результаты наших измерений можно хорошо аппроксимировать выражением

$$N(\theta_p) = m_1 \exp\{-\theta_p/\tau_1\} + m_2 \exp\{-\theta_p/\tau_2\}, \qquad (11)$$

параметры которого для разных толщин t_{Au} приведены на рис. 3. Наблюдаемое угловое распределение осколков $W(\theta)$ как

$$W(\boldsymbol{\theta})_{\Phi} = \int_{\Omega} W(\boldsymbol{\theta}') N(\boldsymbol{\theta}_p) d\Omega' / \int_{\Omega} N(\boldsymbol{\theta}_p) d\Omega'.$$
(12)

Опуская выкладки, приведем лишь конечный результат:

$$a_{\Phi} = a_{cn} + (1 - a_{cn})K_1 + 4c_{cn}K_2, \quad c_{\Phi} \approx c_{cn}.$$
(13)



Рис. 3. Угловые распределения осколков, рассеянных на золотой фольге толщиной 1,6 ($\tau_1 = 3,75^\circ$; $\tau_2 = 7,4^\circ$; $m_2/m_1 = 0,025$) и 3,3 ($\tau_1 = 2,17^\circ$; $\tau_2 = 6,5^\circ$; $m_2/m_1 = 0,065$) мг/см². Треугольными значками изображена характеристика коллиматора. На вставке приведены $N(\theta_p)$ для более тонких слоев золота [7]: 0,63 ($\tau_1 = 1,0^\circ$) и 0,315 ($\tau_1 = 0,5^\circ$) мг/см²

Значения коэффициентов K_1 и K_2 , найденные методом наименьших квадратов из данных, приведенных на рис. 2, составили соответственно $0,022 \pm 0,002$ и $0,019 \pm 0,008$. Сплошная кривая на рис. 2 описывается выражением (13) при c=0,025. Используя (13) с приведенными выше константами K_1 и K_2 , можно произвести пересчет параметров углового распределения $W(\theta)_{\Phi}$, полученных в измерениях с фольгой, к значениям этих параметров для слоя толщиной 1,2 мг/см², применявшегося в прежних измерениях [1]. С помощью такой обработки результатов непосредственных измерений с фольгой получены исправленные значения a, которые сравниваются в табл. 1 с результатами измерений со слоями.

Закономерно поставить вопрос о величине аналогичной поправки в экспериментах со слоями. К сожалению, нам не удалось произвести надежных измерений с более тонкими рассеивателями из Аu. Полученная грубая экспериментальная оценка параметров для толщины $t_{Au} \approx 0.5 \text{ мг/сm}^2$, которая примерно эквивалентна толщине уранового слоя 1 мг/см² приводит к значению $K \approx 0,008$. Если эта оценка верна, то, как следует из (13), угловую анизотропию U²³⁸ в максимуме

надо увеличить на 25 %, а у Th²³² ниже порога, где $a \approx 0,01-0,015$, — в 2–5 раз. Иными словами, не исключено, что в последнем случае значительная часть наблюдаемой изотропной составляющей связана с «фоном», обусловленным рассеянием осколков. Однако отсутствие достоверной информации побудило нас оставить данные в табл. 1 в неизменном виде.

Таблица 1.

Параметры угловых распределений a_{Φ} и c_{Φ} и выход реакции фотоделения, полученные в измерениях с металлическими фольгами. Изотропная составляющая $W(\theta)$, полученная со слоями ($a_{c_{\Pi}}$), сравнивается со значением a, полученным из соотношения (13)

E_{\max} ,	<i>(</i>].	a	a	C.	Υ,			
МэВ		и	сисл	¢ψ	дел/мг·мка·с			
Th ²³²								
5,55	0,042±0,019	0,019±0,019	-	0,022±0,046	$1,45 \cdot 10^{-2}$			
5,65	0,041±0,014	0,017±0,014	0,010±0,005	0,038±0,025	$5,1.10^{-2}$			
5,75	0,031±0,002	0,010±0,003	0,015±0,010	$0,002\pm0,007$	$6,2 \cdot 10^{-2}$			
5,80	0,028±0,008	0,006±0,008	0,015±0,010	0,013±0,025	$9,3.10^{-2}$			
6,00	0,024±0,004	-0,004±0,005	0,014±0,003	0,089±0,011	0,31			
6,20	0,034±0,004	0,008±0,005	0,012±0,003	0,066±0,011	0,79			
6,40	0,044±0,002	0,021±0,003	0,022±0,005	0,028±0,006	4,0			
6,70	0,049±0,003	0,028±0,004	0,023±0,002	-0,006±0,010	9,8			
7,00	0,059±0,004	0,036±0,005	0,036±0,004	0,027±0,012	14,5			
7,20	0,075±0,003	0,054±0,004	-	-0,005±0,011	17,8			
7,30	0,070±0,003	0,047±0,004	0,056±0,006	0,031±0,004	19,5			
7,70	0,111±0,005	$0,089\pm0,006$	$0,088\pm0,005$	0,027±0,013	40,5			
8,00	0,135±0,004	$0,115\pm0,005$	0,109±0,006	0,007±0,011	50			
8,50	0,181±0,005	0,161±0,006	0,164±0,004	0,015±0,012	68			
U^{238}								
4,63	0,355±0,195	0,215±0,220	-	1,657±0,334	$1,2.10^{-5}$			
4,8	0,841±0,077	$0,760\pm0,078$	-	0,971±0,110	$2 \cdot 10^{-4}$			
4,85	0,351±0,078	0,231±0,079	-	$1,380\pm0,134$	$3 \cdot 10^{-4}$			
4,93	0,290±0,052	0,171±0,053	-	$1,350\pm0,088$	$4,7.10^{-4}$			
5,0	0,241±0,017	0,135±0,020	$0,052\pm0,098$	1,139±0,031	$8,4.10^{-4}$			
5,13	0,256±0,031	0,162±0,033	-	$1,026\pm0,054$	$2,7 \cdot 10^{-3}$			
5,2	0,179±0,023	0,090±0,024	0,100±0,035	0,907±0,045	$4,3.10^{-3}$			
5,4	0,094±0,011	0,050±0,012	0,038±0,009	0,306±0,026	$2,4.10^{-2}$			
5,5	0,073±0,003	$0,040\pm0,004$	-	0,161±0,007	$7,4.10^{-2}$			
5,6	0,080±0,005	0,054±0,005	-	0,074±0,012	0,16			
5,65	0,062±0,005	0,034±0,006	0,034±0,005	0,085±0,011	0,27			
5,7	0,077±0,003	0,054±0,004	-	0,041±0,009	0,34			
5,8	0,092±0,006	0,068±0,007	-	0,052±0,014	0,69			
5,9	0,079±0,003	0,054±0,004	0,078±0,005	0,058±0,007	0,91			
6,0	0,122±0,005	0,099±0,006	-	0,048±0,012	1,8			
6,2	0,149±0,018	0,128±0,019	-	0,034±0,038	5,0			
7,3	0,341±0,004	0,326±0,005	-	0,013±0,007	34			
7,4	0,351±0,006	0,336±0,007	-	0,009±0,010	40			
7,5	$0,354{\pm}0,008$	0,338±0,010	$0,364{\pm}0,006$	0,027±0,013	47			

404

В табл. 1 приведено также регистрируемое в нашем опыте число делений в секундах на 1 мг вещества для тока в 1 мка:

$$Y(E_{\max}) = C \int_{0}^{E_{\max}} \sigma_f(E) f(E, E_{\max}) dE.$$
(14)

Здесь $f(E, E_{\text{max}})$ — спектр тормозного излучения, а выход $Y(E_{\text{max}})$ нормирован так же, как в [1]. Данные о выходе и его угловых компонентах $Y_{1K}(E_{\text{max}})$ и $Y_c(E_{\text{max}})$ изображены в верхней части рис. 4. В [1] нами использовалось иное разбиение выхода на угловые компоненты, соответствующие вкладу каждой из составляющих углового распределения (2) в полный выход. Например, выход квадрупольной компоненты определяется как

$$Y_{c} = \frac{\frac{8}{15}c}{a + \frac{2}{3}b + \frac{8}{15}c}Y.$$
 (15)

Более полезным для анализа является разбиение выхода и сечения на компоненты Y_{1K} и σ_{IK} , соответствующие делению через каналы с фиксированными *I* и *K* (см. (1)):

$$\sigma_{10} = \sigma_{\gamma l} \Gamma_f^{10} / \Gamma_l , \quad \sigma_{11} = \sigma_{\gamma l} 2 \Gamma_f^{11} / \Gamma_l .$$
⁽¹⁶⁾

Аналогичное разбиение по признаку *К* в случае квадруполыюго сечения невозможно, и для него по-прежнему будет использоваться менее физическое представление (15), которому в подынтегральном выражении (14) соответствует сечение

$$\sigma_{c} = \sigma_{\gamma 2} \left(\Gamma_{f}^{20} - \frac{4}{3} \Gamma_{f}^{21} + \frac{1}{3} \Gamma_{f}^{22} \right) / \left(\Gamma_{f}^{20} + 2\Gamma_{f}^{21} + 2\Gamma_{f}^{22} + \Gamma_{\gamma}^{2} \right), \tag{17}$$

составляющее некоторую часть σ_{/2}.

Результаты новой серии измерений подтверждают наличие у Th²³² излома в полном выходе и Y_{10} при $E_{\text{max}} \approx 5,7$ МэВ, обнаруженного ранее в [8]. Аналогичный эффект проявляется у U²³⁸ в компонентах Y_{10} и Y_{11} при E_{max} , равной 4,8 и 5,0 МэВ и Y_c при E_{max} , равной 4,7—5,0 и 5,4—5,7 МэВ. Нерегулярности Y_{11} у Th²³² при $E_{\text{max}} \approx 5,7$ МэВ, по-видимому, не следует придавать большого значения. Во всей области E_{max} ниже 6 МэВ, где значения $a = 0,015 \div 0,010$ сравнимы с предполагаемым эффектом рассеяния осколков в слое толщиной 1,2 мг/см², Y_{11} в значительной степени может повторять ход $Y \approx Y_{10}$, в том числе и нерегулярности при $E_{\text{max}} \approx 5,7$ МэВ.

В нижней части рис. 4 приведены кривые сечений деления σ_f и его угловых компонент σ_{10} , σ_{11} , σ_c , полученные путем решения интегральных уравнений (14) для *Y*, *Y*₁₀, *Y*₁₁ и *Y_c* методом, описанным в [9]. Как и прежде [1], в данной работе мы ограничились экспериментальным определением относительного хода сечения, привязав его в случае U²³⁸ к данным для моноэнергетических фотонов [10]. Там же приведены кривые Каца с соавторами [8], примерно



Рис. 4. Вверху — энергетические зависимости полного выхода $Y(E_{\max})$ — \circ , • и его компонент $Y_{10}(E_{\max})$ — Δ , ▲, $Y_{11}(E_{\max})$ — \Box , ■ и $Y_c(E_{\max})$ — \diamond , •. Светлыми точками показаны результаты измерений с тонкими слоями Th²³² и U²³⁸, темными — с металлическими фольгами. Внизу — зависимости полного сечения фотоделения $\sigma_f(E)$ и его компонент $\sigma_{10}(E)$, $\sigma_{11}(E)$ и $\sigma_c(E)$. Точками × и Ф показаны соответственно результаты работ [10] и [12]. Тонкой сплошной линией показаны зависимости полного сечения $\sigma_f(E)$ в сечения $\sigma_f(E)$, полученные в работе [8]

одинаково отклоняющиеся от результатов наших измерений как для Th²³², так и для U²³⁸. Аналогичный сдвиг наблюдается и в случае фотоделения Pu²³⁹ [11], что говорит о систематическом расхождении результатов работ, которое связано, вероятно, с неточностью определения энергии. Последние данные Ноулеса с соавторами [12] для моноэнергетических фотонов поддерживают результаты настоящей работы.

Несколько общих замечаний о данных на рис. 4. Методам решения некорректно поставленных задач, к которым принадлежит и применявшаяся нами математическая обработка выходов, свойственны неопределенности, связанные с раскачкой решений и неоднозначным выбором параметров их регуляризации. Поэтому к достоверным мы относим лишь те нерегулярности решений, которые отчетливо проявляются в интегральных величинах. На рис. 4 для примера изображены результаты обработки нескольких плавных пробных функций $Y_c(E_{\rm max})$ для U²³⁸ (кривые 1, 2, 3). Видно, что никакой разумной вариацией хода $Y_c(E_{\text{max}})$ в пределах ошибок опыта нельзя устранить нерегулярную структуру $\sigma_c(E)$. В частности, кривая 3, которой в работе [1] были аппроксимированы данные, полученные со слоями U₃O₈, игнорирует единственную «провалившуюся» точку прежних измерений. В данной серии измерений этот провал У_с был подтвержден, что привело к возникновению сложной структуры σ_c (*E*). Осторожности в интерпретации требуют данные выше наблюдаемого порога ≈6 МэВ, где мы не производили подробных измерений. Здесь мы можем претендовать лишь на описание среднего хода приведенных величин.

Анализ экспериментальных данных

1. Зависимость потенциальной энергии ядра от деформации даже в одномерном представлении V(x) имеет вид достаточно сложной кривой. Поэтому при анализе экспериментов обычно идут на упрощения, связанные с выбором формы барьера в удобно параметризуемом виде. Чаще всего используется двугорбый барьер в виде трех сопряженных парабол. Результаты расчета проницаемости такого барьера в квазиклассическом приближении (7)—(10) достаточно хорошо согласуются с точным решением в области энергий ниже E_{tB} (рис. 5). Важной особенностью точного решения задачи является нали-



Рис. 5. Сравнение точного решения задачи о проницаемости двугорбого барьера (сплошная линия) с результатами квазиклассического приближения (точки) [13]. Пунктир — зависимость $P_{\min}(E)$.

Параметры барьера, МэВ: $E_A = 6$, $\hbar \omega_A = 1,3$, $E_B = 5$, $\hbar \omega_B = 0,48$, $E_{II} = 2$, $\hbar \omega_{II} = 2$ чие широких резонансов в проницаемости барьера при энергиях выше E_{fB} . Их природа аналогична хорошо известным оптическим резонансам в сечениях рассеяния частиц на потенциальной яме.

На рис. 6 данные о подбарьерном сечении

$$\sigma_{10} = \sigma_{\gamma 1} \frac{D_1}{2\pi\Gamma_{\gamma}^1} P_{10}(E)$$

для ядра U²³⁸ сравниваются с результатами расчета P(E). Параметры барьера были подобраны таким образом, чтобы воспроизвести положение наблюдаемого резонанса и ход экспериментальной кривой за его пределами. Можно видеть, что теоретическая «высота» резонанса — отношение $P_{\text{max}}/P_{\text{min}} = [4/(P_A + P_B)]^2$ —



Рис. 6. Сравнение резонанса в сечении фотоделения U^{238} (жирная кривая) с результатами расчета проницаемости двугорбого барьера. *а* — Расчеты с действительным потенциалом V(x)без учета экспериментального энергетического разрешения показаны тонкой сплошной линией, с учетом разрешения (50 кэВ) — пунктирной; штрих-пунктирными кривыми *1* и *2* показаны расчеты с комплексным потенциалом при w_0 , равном соответственно –0,05 и –0,1 МэВ. Кроме того, дано сравнение тех же кривых, проинтегрированных по тормозному спектру (*б*)

на несколько порядков превышает довольно слабый наблюдаемый эффект. Поскольку резонанс находится в глубоко подбарьерной области, где заведомо $P_A + P_B \ll 1$, то ясно, что никаким подбором параметров этого противоречия ликвидировать не удастся. Очевидным физическим эффектом, сглаживающим и уширяющим подбарьерные резонансы, является взаимодействие продольных колебаний ядра, ведущих к делению, с другими коллективными и одночастичными степенями свободы. Диссипация колебаний должна приводить к «затуханию» резонансов — к уменьшению их высоты, уширению и расщеплению. Эффекты такого рода наиболее отчетливо проявились в реакции Pu²³⁹ (d, pf) [14]. Можно ожидать, что они сравнительно невелики при мелкой яме, когда малы энергия возбуждения и определяемая ею плотность нуклонных состояний. Соответствующие этому случаю «чистые» вибрационные состояния следует ожидать у легких актинидов типа Th [3]. Для более тяжелых ядер, у которых, по-видимому, яма глубже, уширение резонансов необходимо принимать во внимание при анализе экспериментальных данных.

Достаточно просто затухание можно учесть путем добавления в потенциал V(x) мнимой части, в полной аналогии с комплексным потенциалом оптической модели ядра. Если мнимая добавка в потенциал отлична от нуля только в пределах классически разрешенной области движений в яме между горбами, то в квазиклассическом приближении проницаемость двугорбого барьера будет иметь вид

$$P(E) = \frac{P_A P_B}{4} \left\{ \cos^2 x \left[\operatorname{ch} y + \operatorname{sh} y \frac{P_A + P_B}{4} \right]^2 + \sin^2 x \left[\operatorname{sh} y + \operatorname{ch} y \frac{P_A + P_B}{4} \right]^2 \right\}^{-1}, \quad (18)$$

где $x = \text{Re } \varphi(E)$, а $y = \text{Im } \varphi(E)$. Если мнимая часть потенциала $w_0 < 0$ постоянна и мала, то $y = -\pi w_0/D_0$. Пределы изменения проницаемости в этом случае

$$P_{\min} = \frac{P_A + P_B}{4}, \quad P_{\max} = \frac{P_A P_B}{4 \left[y + \left(P_A + P_B \right) / 4 \right]^2},$$
 (19)

а ширину резонансов легко получить из разложения (18) вблизи E_n^0 (8):

$$P(E_n^0 + \Delta E) = \frac{(D_0/2\pi)^2 P_A P_B}{\left[-2w_0 + D_0 (P_A + P_B)/2\pi\right]^2 / 4 + (\Delta E)^2} \equiv \frac{\Gamma_A \Gamma_B}{\Gamma^2 / 4 + (\Delta E)^2}, \quad (20)$$

где

$$\Gamma = -2w_0 + D_0 \left(P_A + P_B \right) / 2\pi \equiv -2w_0 + \Gamma_A + \Gamma_B \,.$$

Таким образом, в подбарьерной области введение мнимого потенциала не меняет P_{\min} , но экспоненциально уменьшает высоту резонанса проницаемости P_{\max} и увеличивает его ширину.

В данной работе расчеты проницаемости двугорбого барьера в виде трех сопряженных парабол производились с мнимой частью потенциала, заданной между горбами соотношением

$$\operatorname{Im} V(x) = \begin{cases} w_0 + \frac{1}{2} \mu \hbar \omega_w^2 (x - x_{\mathrm{II}})^2, & \text{если Im} V(x) < 0; \\ 0, & \text{в остальной области.} \end{cases}$$
(21)

Здесь w_0 — максимальная глубина мнимой части потенциала, $\hbar \omega_w$ — его кривизна и μ — массовый параметр. Влияние затухания на ширину резонансов в проницаемости можно проследить на рис. 6. При $w_0 = -(0.05 \div 0.1)$ МэВ имеет место достаточно хорошее согласие рассчитанных кривых с экспериментальными данными для U²³⁸. Для описания более острых резонансов Th²³² нужна меньшая величина w_0 , что соответствует изложенным выше качественным соображениям.

2. На угловую анизотропию b/a, величину относительную, не влияют возможные нерегулярности сечения фотопоглощения [15]. Однако поскольку

немонотонную энергетическую зависимость имеют в этом случае делительные ширины, стоящие как в числителе, так и в знаменателе (4), интерпретация резонансной структуры b/a сильно затрудняется. Поэтому в настоящей работе к анализу привлекается информация о проницаемости каждого из каналов K = 0и K = 1, которую можно извлечь из σ_{10} и σ_{11} .

Данные, которые позволяют судить об абсолютной величине и энергетической зависимости сечения фотопоглощения тяжелых ядер в интересующей нас области энергий [16], приведены на рис. 7. Они довольно скудны и позволяют лишь оценить сечение по порядку величины и сделать качественное заключение о его зависимости от энергии. Поэтому основой для физических выводов в настоящей работе служит поведение парциальных сечений фотоделения в подбарьерной области, где можно быть уверенным, что резкая экспоненциальная зависимость делимости делает несущественным возможные неопределенности в сечении образования составного ядра.

Для восстановления проницаемостей

$$P_{10} = \frac{\sigma_{10}P_{\gamma 1}}{\sigma_{\gamma 1} - \sigma_{10} - \sigma_{11}} \quad \text{M} \quad P_{11} = \frac{\sigma_{11}P_{\gamma 1}}{2(\sigma_{\gamma 1} - \sigma_{10} - \sigma_{11})}$$
(22)

использовались следующие предположения:



Рис. 7. Принятая в расчетах форма зависимости сечения дипольного фотопоглощения $\sigma_{\gamma 1}$ (сплошная линия). Точками показаны средние значения $\sigma_{\gamma 1} = \sigma_f + \sigma_{\gamma,n}$, полученные из [6, 16]: Δ — для U²³⁸, \circ — для Th²³². Штрих-пунктиром показаны участки зависимостей $\sigma_f(E)$ [1, 8] в районе наблюдаемого порога. Пунктиром показана экстраполяция гигантского резонанса сечения фотопоглощения

а) зависимость $\sigma_{\gamma l}(E)$ в рассматриваемом узком энергетическом интервале 4,5—6 МэВ принималась экспоненциальной в соответствии со сплошной прямой на рис. 7, а абсолютная величина выбиралась для каждого ядра так, чтобы на наблюдаемом пороге выполнялось условие $\sigma_{fl} / \sigma_{\gamma l} = 0.5$;

б) расчет «радиационной проницаемости» $P_{\gamma 1}$ при $E < B_n$ проводился в рамках статистической теории ядерных реакций [17]:

$$P_{\gamma}(E) = \frac{2\pi\Gamma_{\gamma}(U_0)}{\overline{D}(U_0)} \frac{X(U)}{X(U_0)}$$
(23)
$$X = e^x \left(x^4 - 10x^3 + 45x^2 - 105x + 105\right), \ x = 2\sqrt{aU}, \ U = E - \delta.$$

Здесь $\overline{D}(U_0)$ — среднее расстояние между уровнями ядра при энергии: связи нейтрона $E = B_n$, *a* и δ — параметр плотности уровней и поправка на спаривание модели Ферми-газа. Значения $\Gamma_{\gamma}(U_0)$ и $\overline{D}(U_0)$ были взяты из данных для нейтронных резонансов ядра Pu^{240} со спином 1 [18]. На рис. 8 изображены полученные описанным способом проницаемости P_{10} , P_{11} и их отношения P_{10}/P_{11} для пяти исследованных ядер Th²³², U²³³, Pu²⁴⁰, Pu²⁴², Pu²³⁸ [1].



Рис. 8. Сравнение проницаемостей P_{10} и P_{11} и их отношений, полученных из эксперимента (толстые сплошные линии) и расчета (штрих-пунктир). Пунктиром проведены кривые $(P_{10})_{\min}/(P_{11})_{\min}$

3. Проницаемость двугорбого барьера, основываясь на квазиклассическом решении, можно представить в виде двух составляющих: гладкой, $P_{\min} = P_A P_B/4$, и резонансной. Гладкая часть проницаемости зависит от значений E_{fi} и $\hbar \omega_i$ только для горбов, но не для ямы. Зависимость $P_{\min}(E)$ обладает важной особенностью, которая может служить исходным пунктом для выбора этих параметров: в точке $E = E_{fB}$, точнее, в ее окрестности, заметно меняется наклон кривой $\ln P_{\min}$:

$$2\pi \left(\frac{d\ln P_{\min}}{dE}\right)^{-1} = \begin{cases} \hbar\omega_A & (E_{fB} < E < E_{fA}) \\ \hbar\omega_{9\varphi} = \frac{\hbar\omega_A \hbar\omega_B}{\hbar\omega_A + \hbar\omega_B} & (E < E_{fB}) \end{cases}$$
(24)

Резонансы P(E) усложняют картину. Если имеется оптический резонанс, близкий к E_{fB} , то его легко принять за подбарьерный, пропустить излом в $\ln P_{min}$ и завысить высоту второго горба. Эту альтернативу необходимо учитывать при анализе.

Экспериментальные данные обнаруживают наличие излома проницаемости P_{10} у всех изотопов Ри в районе 5,0—5,5 МэВ, выше и ниже которого параметры кривизны принимают значения $\hbar\omega_A/2\pi = 110-120$ кэВ и $\hbar\omega_{ab}/2\pi =$ = 60 - 70 кэВ. У Th²³² и U²³⁸ в подбарьерной области такого четко выраженного излома нет. Это заставляет предположить, что горбы А и В у этих ядер близки $(\ln P_{\min}/dE)^{-1} =$ наблюдаемое значение параметра по высоте И = 60—75 кэВ есть $\hbar \omega_{\rm sol}/2\pi$, поскольку мы видим в этом случае эффективную проницаемость обоих горбов. Этим соображениям не противоречат данные об $\hbar\omega$, полученные из анализа сечений деления нечетных ядер нейтронами вблизи порога. Для тяжелых ядер (Np — Bk), где следует ожидать большую разность высот барьеров A и B, параметр кривизны (наблюдается $\hbar\omega_A$) примерно в 1,5—2 раза больше, чем у легких ядер с $E_{fA} \approx E_{fB}$ (наблюдается $\hbar \omega_{ab}$). Соотношению $\hbar\omega_{ab} = \hbar\omega_A/2$ соответствует равенство $\hbar\omega_A = \hbar\omega_B$. Совокупность имеющихся данных о параметре $(\ln P_{\min}/dE)^{-1}$ приведена на рис. 9.

Информация о параметрах второй ямы содержится только в резонансной составляющей проницаемости. Глубиной и формой ямы определяется положение резонансов. Однако по резонансам, наблюдаемым в сечении фотоделения, восстановить эти характеристики невозможно. Дело в том, что видны только резонансы, близкие к краю ямы, и неизвестно, которые они по счету от ее дна. Высота резонанса определяется характеристиками горбов и затуханием.

Таким образом, по каждой кривой проницаемости можно, в принципе, восстановить значения пяти величин E_{fA} , E_{fB} , $\hbar\omega_A$, $\hbar\omega_B$, w_0 . Однако в силу ограниченности экспериментальной информации необходимо ввести упрощающие предположения, которые сократили бы число параметров, тем более, что сама модель барьера является, конечно, достаточно грубой, что делает неоправданной излишнюю детализацию в описании потенциальной кривой. Прежде всего мы ограничились рассмотрением двух нижайших каналов K = 0 и K = 1. В качестве второго упрощения, не противоречащего эксперименту, было принято равенство кривизн горбов $\hbar\omega_A = \hbar\omega_B$. Кроме того, мы предположили равенство E_{Π} и w_0 для обоих каналов. Результаты расчета $P_{1K}(E)$ приведены на рис. 8, подобранные значения параметров — в табл. 2. Даже оставшиеся три параметра — E_{fA} , E_{fB} , $\hbar\omega$ — не всегда удается однозначно определить. В этих случаях даются два варианта, характеризующие величину неопределенности. В табл. 2 курсивом приведены также параметры ямы, позволяющие описать наблюдаемые резонансы, но, в соответствии со сказанным, эти цифры имеют чисто иллюстративное значение.



Рис. 9. Величина $(\ln P_{\min}/dE)^{-1}$ для различных ядер. Черными точками показаны данные реакции (*n*, *f*) [19]; светлыми — (γ , *f*) [1]

Таблица 2.

Параметры, использованные при описании экспериментальных зависимостей *P*_{1K}(*E*) в модели двугорбого барьера (рис. 8)

Иготоп	Реак- ция	w ₀	$I, K^{\pi} = 1, 0^{-}$				$I, K^{\pi} = 1, 1^{-}$							
11501011			EfA	$\hbar\omega_A$	EfB	$\hbar\omega_B$	E_{II}	$\hbar\omega_{II}$	EfA	$\hbar\omega_A$	EfB	$\hbar\omega_B$	$E_{\rm II}$	$\hbar\omega_{II}$
Th ²³²	(γ, <i>f</i>)	-0,05	6,2	0,75	6,1	0,75	4,8	3,0	6,6	0,8	6,5	0,8	4,8	3,0
$U^{238}(1)$	(γ, <i>f</i>)	-0,1	6,2	0,92	5,5	0,92	3,6	3,0	6,5	0,95	5,9	0,95	3,6	4,0
$U^{238}(2)$	(γ, <i>f</i>)	-0,1	6,0	1,0	6,0	1,0	3,6	2,0	6,25	0,95	6,25	0,95	3,6	3,0
Pu ²³⁸	(γ, <i>f</i>)	-0,1	6,45	0,74	5,3	0,74	2,3	3,0	6,45	0,63	5,37	0,63	2,3	3,5
$Pu^{240}(1)$	(γ, <i>f</i>)	-0,1	6,25	0,7	5,05	0,7	2,3	3,0	6,25	0,57	5,15	0,57	2,3	4,0
$Pu^{240}(2)$	(γ, <i>f</i>)	-0,15	6,25	1,3	6,05	1,3	2,55	2,0	6,25	1,15	6,05	1,15	2,55	2,0
Pu ²⁴⁰ [20]	(<i>d</i> , <i>pf</i>)	-	6,35	1,3	6,15	1,3	2,65	2,0	-	-	-	-	-	-
Pu ²⁴⁰ [21]	(<i>d</i> , <i>pf</i>) (<i>p</i> , <i>p</i> ' <i>f</i>)	-	6,4	1,3	5,7	0,48	2,55	2,0	6,7	1,3	6,0	0,48	2,85	2,0
Pu ²⁴²	(γ, <i>f</i>)	-0,1	6,3	0,76	5,2	0,76	2,1	3,0	6,3	0,65	5,28	0,65	2,1	4,0

Примечание. Величины энергии и кривизны приведены в МэВ. Индексом II обозначены параметры второй ямы. В модели «с забыванием» (см. выше) параметры горбов *A* одинаковы для обоих каналов. Если она и выполняется, то прежде всего для тяжелых ядер с глубокой ямой. У Ри $E_{fA}^{10} = E_{fA}^{11}$, а параметры $\hbar\omega_{10}$ и $\hbar\omega_{11}$ отличаются не более чем на 20 %. Комбинированный вариант для U²³⁸ — параметры P_{10} из варианта (1) и P_{11} из варианта (2) — также не противоречит требованию данной модели. При современном состоянии данных по фотоделению ответить на вопрос, какая из моделей — «с забыванием» или «без забывания» — лучше согласуется с опытом, нельзя.

В нижней части рис. 8 изображены отношения проницаемостей $P_{10}/P_{11} = 2b/a + 1$. Пунктиром для всех ядер показан ход отношения $(P_{10})_{\min}/(P_{11})_{\min}$, играющего роль осевой линии, относительно которой происходят осцилляции P_{10}/P_{11} , обусловленные резонансами числителя и знаменателя. Отступления экспериментальных данных от осевой линии позволяют оценить роль резонансов в формировании наблюдаемых максимумов b/a.

К результатам анализа, приведенным в табл. 2 и на рис. 8, необходимо сделать замечания, касающиеся отдельных ядер.

Th²³². Подбарьерный участок проницаемостей Th²³² удовлетворительно описывается при одинаковых параметрах горбов. Поскольку в проницаемости $P_{10}(E)$ кроме резонанса при E = 5,4 МэВ нет других особенностей, а надежно измеренный участок $P_{11}(E)$ узок, то неопределенность такого выбора параметров значительна. Проницаемость

$$P_{\min} = \frac{1}{4} P_A P_B \sim \exp\left[\frac{E}{\hbar\omega_{_{3}\phi}} - \left(\frac{E_{_{fA}}}{\hbar\omega_A} + \frac{E_{_{fB}}}{\hbar\omega_B}\right)\right], \quad E < E_{_{fB}}$$

при $\hbar\omega_A = \hbar\omega_B$ определяется суммой $E_{fA} + E_{fB}$, что позволяет в пределах нескольких сотен кэВ варьировать E_{fA} и E_{fB} , не приходя к существенному расхождению с экспериментом. Однако приведенный в табл. 2 вариант $E_{fA} \approx E_{fB}$ нам кажется разумным, так как для близкого ядра Th²³¹ в реакции Th²³⁰(*n*, *f*) наблюдается подбарьерный резонанс с P_{max} , не сильно отличающимся от единицы [22]. При $\hbar\omega_A \approx \hbar\omega_B$ это возможно только тогда, когда $P_A \approx P_B$ и $E_{fA} \approx E_{fB}$.

Отметим расхождение результатов расчета с опытом в области E > 6,3 МэВ (нейтронная ширина рассчитывалась по оптической модели), где в P_{10} наблюдается широкий резонанс. Никакой комбинацией параметров барьера воспроизвести его форму не удается: для оптического максимума он слишком высок, для состояния в яме — слишком широк. Природа данного эффекта (см. также P_{1K} у Pu²³⁸), вероятно, связана с резонансами сечения дипольного фотопоглощения [15]. Широкие резонансы квадрупольной компоненты, повидимому, обязаны своим происхождениям аналогичным эффектам в сечении квадрупольного фотопоглощения.

U²³⁸. Два приведенных в табл. 2 набора параметров дают примерно одинаковое согласие расчета с экспериментом. В варианте (1) параметры барьера подобраны так, чтобы вблизи основного максимума угловой анизотропии (или P_{10}/P_{11}) располагался оптический резонанс, в варианте (2) высота внешнего горба E_{fB} поднята так, чтобы на его место пришлось верхнее состояние в яме. Разница в значениях E_{fB} служит оценкой точности определения этих параметров.

Изотопы плутония. Параметры барьера деления изотопов плутония были выбраны в соответствии с данным выше истолкованием излома проницаемости. В случае Pu^{240} , который анализировался более подробно, было показано, что, не отказываясь от предположения о равенстве параметров E_{Π} и w_0 для каналов K = 0и K = 1, ни при каких разумных вариациях затухания и других параметров не удается интерпретировать нерегулярность P_{10} при E = 5,2 МэВ как состояние, достаточно далекое от края ямы (см. рис. 8, кривая 2). Поэтому в отличие от авторов работы [20] (см. табл. 2) мы считаем ее резонансом, примерно совпадающим с вершиной барьера *B* (кривая 1). Отсюда резкое отличие в E_{fB} . Для варианта (1) этот резонанс является оптическим. Без существенного расхождения с опытом E_{fB} можно поднять так, что он станет подбарьерным, но не более чем на 0,2–0,3 МэВ. Для уточнения параметров барьера ядер плутония, обнаруживающих, согласно результатам данного анализа, разницу в E_{fA} и E_{fB} около 1 МэВ, желательно иметь более подробную экспериментальную информацию.

Параметры барьеров, полученные в настоящем анализе, удовлетворительно согласуются с оценками E_{fA}^{10} и E_{fB}^{10} , сделанными из качественных соображений в нашей предыдущей работе [1]. Этот результат обусловлен тем, что в обеих работах для определения положений служили одни и те же характерные точки, получившие, однако, в отдельных случаях разную интерпретацию.

В табл. 2 приведены также параметры барьера деления Pu²⁴⁰, полученные из анализа реакций $Pu^{239}(d, pf)$ и $Pu^{240}(p, p'f)$ [21]. Наиболее сильное расхождение с нашими данными имеет место для кривизны горбов. Это явилось прямым следствием того, что в работе [21] в анализ была включена информация о периоде спонтанного деления из основного и изомерного состояний. Для описания последних потребовалось значительное утолщение барьера B: $\hbar\omega_A / \hbar\omega_B$ в [21] было выбрано равным 2,7 вместо единицы в данном анализе. Скорость изменения вероятности вынужденного деления определяется формой потенциальной кривой V(x) вблизи вершин горбов, в то время как вероятность спонтанного деления определяется площадью всего барьера. Мы полагаем, что при тех сильных упрощениях, которые использованы при моделировании двугорбого барьера тремя параболами, нельзя одновременно претендовать на удовлетворительное описание вероятностей как вынужденного, так и спонтанного деления. Расчеты формы барьеров V(x) и массового параметра $\mu(x)$, проводимые различными авторами [23], показывают сильное отличие формы второй ямы от ее вида в модели трех парабол.

Выводы

На основе проведенного анализа мы можем сделать следующие выводы.

1. Совместное рассмотрение сечения фотоделения и углового распределения осколков дает возможность определить делимость ядра через каналы с заданными квантовыми характеристиками. В энергетической зависимости проницаемостей отчетливо наблюдаются резонансные структуры, которые в настоящее время мы можем описать только на основе представлений о двугорбом барьере деления.

2. Для описания ширины наблюдаемых резонансов необходим учет связи делительной степени свободы с другими типами движения. Такая связь была моделирована мнимой частью потенциала, описывающего двугорбый барьер, что позволяет достаточно хорошо воспроизвести форму наблюдаемых резонансов.

3. Аппроксимация барьера одномерным потенциалом в виде трех сопряженных парабол дает удовлетворительное описание наблюдаемого хода проницаемостей. Результаты анализа экспериментальных данных показывают увеличение разницы внешнего и внутреннего максимумов потенциальной кривой и уменьшение квантового расщепления $E_f^{11} - E_f^{10}$ с ростом Z и A делящегося ядра.

4. Для определения параметров барьера была использована лишь часть экспериментальных данных, относящихся к подбарьерной области. Такое ограничение обусловлено отсутствием надежных данных о сечении фотопоглощения. Последнее обстоятельство в настоящее время наиболее существенно тормозит использование уникальных возможностей фотоделения для изучения процесса деления ядер в широкой области энергий.

В заключение авторы выражают признательность П. Л. Капице и С. П. Капице за постоянную поддержку исследований, В. М. Струтинскому за плодотворное обсуждение результатов, В. А. Пчелину и В. М. Шубко за изготовление мишени из калифорния, М. К. Голубевой и Н. Е. Федоровой за техническую помощь.

Литература

- 1. Н.С. Работнов, Г.Н. Смиренкин, А.С. Солдатов, Л.Н. Усачев, С.П. Капица, Ю.М. Ципенюк. ЯФ, 11, 508, 1970.
- 2. Н.С. Работнов, Г.Н. Смиренкин, А.С. Солдатов, Л.Н. Усачев, С.П. Капица, Ю.М. Ципенюк. Phys. and Chem. of Fission, vol. 1, IAEA, Vienna, 1965, p. 135.
- V.M. Strutinsky. Nucl. Phys., A95, 420, 1967; A122, 1, 1968.
 V.M. Strutinsky, C.B. Bjørnholm. Nucl. Phys., A136, 1, 1969.
- 4. Л.Н. Усачёв, В.А. Павлинчук, Н.С. Работнов. АЭ, 17, 479, 1964.
- 5. Е.В. Гай, А.В. Игнатюк, Н.С. Работнов, Г.Н. Смиренкин. ЯФ, 10, 542, 1969.
- 6. А.С. Солдатов, И.Е. Бочарова, Г.Н. Смиренкин. ПТЭ, 5, 226, 1968.
- 7. D. Kerr, G. Siegert, K. Kürzinger, E. Konecny, H. Ewald. Zs. Naturf., 22a, 1799, 1967.

- 8. L. Katz, A.P. Baerg, F. Brown. Sec. UN Int. Conf. on the PUAE, U. N. Geneva, 1958, 15, 188, 1958.
- 9. В.Ф. Турчин, В.З. Нозик. Изв. АН СССР, серия Физика атмосферы и океана, 5, 29, 1969; препринт ФЭИ-138, 1969.
- 10. A. Manfredini, L. Fiore, C. Ramorino, H.G. de Carvalho, W. Wölfli. Nucl. Phys., A123, 664, 1969.
- 11. А.С. Солдатов, Ю.М. Ципенюк, Г.Н. Смиренкин. ЯФ, 11, 992, 1970.
- 12. Дж.В. Ноулес, А.М. Хан, В.Дж. Кросс. Известия АН СССР, серия физ., 34, 1627, 1970.
- 13. J.D. Cramer, J.R. Nix. Report LA-DC-11314, 1970.
- J. Pedersen, B.D. Kuzminov. Phys. Lett., 29B, 176, 1969;
 H.G. Specht, J.S. Fraser, J.C.D. Milton, W.G. Davies. Phys. and Chem. of Fission, IAEA, Vienna, 1969, p. 363.
- Б.С. Ишханов, И.М. Капитонов, М.И. Пекарь, И.М. Пискарев, В.Г. Шевченко. Доклад на XX ежегодном совещании по ядерной спектроскопии и структуре ядра, Ленинград, 1970.
 Б.С. Ишханов, И.М. Капитонов, Е.В. Лазутин, И.М. Пискарев, О.П. Шевченко. ЯФ, 12, 682, 1970.
- 16. Л.Е. Лазарева, Б.И. Гаврилов, Б.Н. Валуев, Г.Н. Зацепина, В.С. Ставинский. Сессия АН СССР по мирному использованию атомной энергии. Издательство АН СССР, 1955, с. 306.
 - J.E. Gindler, J.R. Huizenga, R.A. Schmidt. Phys. Rev., 104, 425, 1956.
 - R.B. Duffield, J.R. Huizenga. Phys. Rev., 89, 1042, 1953.

L. Katz, K.G. McNeill, M. LeBlanc, F. Brown. Canad. J. Phys., 35, 470, 1957.

- 17. A.N. Behkami, J.H. Roberts, W. Loveland, J.R. Huizenga. Phys. Rev., 171, 1267, 1968.
- 18. A. Michaudon. EANDS-E76, 1969.
- Neutron Cross Section, BNL-325, Suppl. no. 01, no. 02.
 P.E. Vorotnikov, S.M. Dubrovina, V.N. Kosyakov, L.V. Chistyakov, V.A. Shigin, V.M. Shubko. Nucl. Phys., A150, 56, 1970.
- 20. B.B. Back, J.R. Bondorf, G.A. Otroshenko, J. Pedersen, B. Rasmussen. Phys. and Chem. of Fission, IAEA, Vienna, 1969, p. 351.
- 21. H.C. Britt, S. Burnett, J.D. Cramer. Phys. and Chem. of Fission, IAEA, Vienna, 1969, p. 375.
- 22. L. Earwaker, G.D. James. Phys. and Chem. of Fission, IAEA, Vienna, 1969. p. 911.
- S.G. Nilsson, C.F. Tsang, A. Sobiczewski, Z. Szymanski, S. Wycech, C. Gustafson, I.-L. Lamm, P. Möller, B. Nilsson. Nucl. Phys., A131, 1, 1969;
 V.M. Strutinsky, N.C. Pauli. Phys. and Chem. of Fission, IAEA, Vienna, 1969, p. 155.

Поступила в редакцию 5 мая 1971 г.

Sub-Barrier Photo-Fission of Even-Even Nuclei

A. V. Ignatyuk, N. S. Rabotnov, G. N. Smirenkin, A. S. Soldatov, Yu. M. Tsipenyuk

The angular distributions of the fragments and the photofission cross sections for U²³⁸ and Th²³² are measured by using the bremsstrahlung beam from the microtron of the Institute for Physical Problems. Metallic uranium and thorium foils were employed as the fissioning targets. Scattering of fragments by nuclei of the fissioning material was taken into account in treatment of the results. Nonregularities in the sub-barrier energy region are observed which apparently correspond to quasistationary states of the vibrational type in the second well. The results of the present experiment and of previous measurements [1] are analyzed within the framework of the two-hump barrier model with a potential consisting of three conjugate parabolas. It is shown that a description of resonance structures requires that allowance be made of damping of vibrational motion which in the present paper is modeled by adding an imaginary part to the potential.

ДЕЛЕНИЕ ОРИЕНТИРОВАННЫХ ЯДЕР

О выстраивании составных ядер орбитальным моментом налетающей частицы

Л. К. Козловский, Н. С. Работнов

Физико-энергетический институт

(Поступила в редакцию 23 августа 1974 г.)

Показано, что распространенное утверждение о выстраивании составных ядер в плоскости, перпендикулярной пучку, справедливо не всегда и в некоторых случаях, в зависимости от соотношения между спином ядра-мишени и орбитальным моментом налетающей частицы, может получаться довольно сильный обратный эффект, т. е. преимущественное выстраивание вдоль направления пучка. Рассчитаны значения выстроенности составных ядер в зависимости от спина ядрамишени и момента нейтрона. Полученные результаты обсуждаются применительно к угловым распределениям осколков деления ядер нейтронами.

Анизотропные угловые распределения продуктов ядерных реакций, идущих через составное ядро, наблюдаются благодаря тому факту, что ядра, образующиеся в результате поглощения хаотически ориентированными ядрами мишени налетающих частиц, орбитальный момент которых имеет нулевую проекцию на направление своего движения, оказываются выстроенными преимущественно в плоскости, перпендикулярной пучку. Если направление вылета частиц-продуктов коррелирует с направлением момента составного ядра, то это и приводит к анизотропии углового распределения. Это соображение, качественная справедливость которого очевидна, было примерно в такой форме высказано в 1955 г. Бором [1] для объяснения резкой анизотропии угловых распределений осколков фотоделения.

В настоящей работе мы покажем, что утверждение о выстраивании составных ядер в плоскости, перпендикулярной пучку, верно не всегда и в некоторых случаях, в зависимости от соотношения между спином ядра-мишени и орбитальным моментом налетающей частицы, может получаться довольно сильный

Ядерная физика, 1975, т. 22, вып. 2, с. 308—311.

обратный эффект, т. е. преимущественное выстраивание вдоль направления пучка. Обсуждаются также некоторые возможные следствия этого факта применительно к угловым распределениям осколков деления ядер нейтронами.

Известно, что спиновое состояние составных ядер можно описать матрицей плотности. Ее удобно разложить в ряд по спин-тензорам, среднее значение каждого из которых соответствует некоторому моменту функции распределения составных ядер с заданным спином по значениям проекции m_J на выделенное направление в пространстве, в качестве которого мы выберем направление пучка падающих частиц (см., например, [2]). Первый момент, пропорциональный \overline{m}_J , называется поляризацией и в случае рассматриваемых нами неполяризованных пучков и мишеней равен нулю. Со вторым моментом связана другая мера ориентации, называемая выстроенностью, она определяется как

$$f = \frac{1}{J(2J-1)} \left[3\overline{m_J^2} - J(J+1) \right],$$
 (1)

где J — полный момент ядра. Нормировочный множитель выбран так, чтобы в чистом состоянии с максимально возможным значением проекции, т. е. при $m_J = J$, выстроенность f = +1. Возможен и другой выбор постоянной. Если составные ядра с моментом J и проекциями m_J , образуются при поглощении ядром-мишенью с неориентированным спином I частицы с полным моментом j, то, очевидно,

$$\overline{m_J^2} = \frac{2j+1}{2(2I+1)} \sum_{m_j m_I m_J} \left(j m_j I m_I \left| J m_J \right. \right)^2 m_J^2 , \qquad (2)$$

где $(jm_j Im_l | Jm_j)$ — коэффициент Клебша — Гордана. Если налетающая частица бесспиновая, то $m_J = 0$, а j = l (l — орбитальный момент налетающей частицы). Для нуклонов $m_j = \pm^{1/2}$. В обоих этих случаях момент налетающей частицы полностью выстроен в плоскости, перпендикулярной пучку, т. е. выстроенность принимает отрицательное, максимально возможное по модулю для данного момента значение. При поглощении такой частицы бесспиновым ядром составное ядро получит те же значения момента и выстроенности, которые были у налетающей частицы. По-иному обстоит дело, если ядро-мишень имеет отличный от нуля спин.

Сущность обсуждаемого эффекта проще всего пояснить на конкретном примере. Пусть ядра с $I=^{7}/_{2}$ поглощают нейтроны, обладающие полным моментом $j = {}^{3}/_{2}$. Используя простой в этом случае явный вид коэффициентов Клебша — Гордана, получаем, что для составных ядер с моментами J = 2, 3, 4, 5, образование которых разрешается законами сохранения момента, выстроенность *f*, рассчитанная с помощью выражений (1), (2), будет равна соответственно -0,2; +0,4; +0,157 и -0,347. Если усреднить эти значения с весом (2J + 1), которому пропорциональна вероятность образования ядер с моментом *J*, то получится величина $\overline{f} = -0,021$. Таким образом, в соответствии с высказанным выше наглядным представлением средняя выстроенность, действительно, отрицательная, что соответствует преимущественной ориентации в плоскости, перпендикулярной пучку. Однако она мала по абсолютной величине и складывается из существенно больших по модулю величин разного знака. Это означает, что если вероятность реакции зависит от J, то может случиться, что главный вклад в угловое распределение, определяющий знак анизотропии, дадут как раз ядра, выстроенные вдоль направления пучка.

В таблице приводятся значения выстроенности составных ядер в зависимости от полного момента для I = 5/2 и 7/2 и различных значений *j*. Из этих результатов видно, что значения *f* становятся отрицательными для всех *J* лишь при $j \ge 9/2$, начиная с этого же значения быстрее растет абсолютная величина средней выстроенности \overline{f} .

Появление положительной выстроенности для некоторых значений J в результате сложения момента налетающей частицы, обладающего предельной

возможной отрицательной выстроенностью, и спина ядра-мишени, выстроенность которого равна нулю, имеет чисто геометрическую природу и не является специфическим свойством квантовых векторов. Чтобы показать это, рассмотрим следующий классический аналог данной задачи: сложение двух случайно ориентированных векторов длиной I и j, у одного из которых фиксирована проекция m_j на выделенную ось, в суммарный вектор длины J. Выбор системы координат и



обозначения ясны из рисунка. Фиксация длины суммарного вектора задает θ_1 , и усреднение надо проводить только по φ , поскольку от азимутального угла φ_j , ничто не зависит, и его можно положить равным нулю. По известной формуле сложения

$$\cos\theta = \cos\theta_1 \cos\theta_0 + \sin\theta_1 \sin\theta_0 \cos\phi \,. \tag{3}$$

Поскольку

$$\cos\theta_1 = \frac{J^2 - I^2 - j^2}{2Ij}, \quad \cos\theta_0 = \frac{m_j}{j}, \quad M = j\cos\theta_0 + I\cos\theta, \quad (4)$$

$$\overline{M^2} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} M^2 d\phi = A^2 + B^2,$$
 (5)

$$A^{2} = \frac{m_{j}}{2j^{2}} \left(J^{2} + j^{2} - I^{2} \right),$$

$$B^{2} = \frac{1}{8j^{2}} \left(j^{2} - m_{j}^{2} \right) \left(2I^{2}j^{2} + 2I^{2}J^{2} - 2J^{2}j^{2} - I^{4} - J^{4} - j^{4} \right).$$
(6)

то

где

Деление	ориентированных	ядер
---------	-----------------	------

Спин ядра- мишени	Момент нейтро- на	Спин состав- ного ядра	Выстроен- ность	Спин ядра- мишени	Момент нейтро- на	Спин состав- ного ядра	Выстроен- ность
⁵ / ₂	¹ / ₂	2	0		⁵ / ₂	1	-0,2857
		3	0			2	+0,4857
	³ / ₂	1	-0,2			3	+0,3428
		2	+0,5			4	+0,1183
		3	+0,12			5	-0,1485
		4	-0,3928			6	-0,4545
	⁵ / ₂	0	0	7/2	⁷ / ₂	0	0
		1	+0,9142			1	+0,9523
		2	+0,2857			2	+0,0381
		3	+0,0228			3	+0,1904
		4	-0,2244			4	+0,0340
		5	-0,4952			5	-0,1269
	⁷ / ₂	1	-0,7142			6	-0,3030
		2	-0,1190			7	-0,4981
		3	-0,1428.		⁹ / ₂	1	-0,6666
		4	-0,2397			2	-0,0303
		5	-0,3714			3	-0,0242
		6	-0,5303			4	-0,0822
⁷ / ₂	¹ / ₂	3	0			5	-0,1656
	¹ / ₂	4	0			6	-0,2672
	³ / ₂	2	-0,2			7	-0,3849
		3	+0,4			8	-0,5181
		4	+0,1571				
		5	-0,3466				

Зависимость выстроенности составного ядра с моментом J от спина ядра-мишени и полного момента поглощаемого нейтрона

Классическую выстроенность по аналогии с (1) можно определить как

$$f_{\rm KJI} = \left(3\overline{M^2} - J^2\right) / 2J^2. \tag{7}$$

Для примера, рассмотренного выше, т. е. при $I = {7/2}$, $j = {3/2}$, $m_j = {1/2}$, выражения (5) — (7) дают f_{κ_7} , равную соответственно -0.333; +0.160; +0.042 и -0.333. Более детальное сравнение результатов, получаемых по формулам (1), (2), с одной стороны, и (5) — (7), с другой, показывает, что все качественные особенности воспроизводятся классическими формулами, а получаемые с их помо-

щью количественные значения становятся близкими к точным при достаточно больших моментах составного ядра $J \ge 4$ как и следовало ожидать.

Из общей теории угловых распределений ядерных реакций известно [3], что сложность угловой зависимости дифференциального сечения определяется величиной максимального орбитального момента налетающей частицы *l*. Максимальный ранг полинома Лежандра в разложении

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_{0}^{k_{\text{max}}} A_k P_k (\cos \theta) \quad \text{есть} \quad k_{\text{max}} = 2l_{\text{max}} \; .$$

С точки зрения изложенного выше наибольший интерес представляет случай $l_{\text{max}} = 1$, когда выстроенность является единственным спин-тензором с отличным от нуля средним значением и полностью определяет форму угловых распределений. Известным примером реакции, которая идет через составное ядро и при которой направление разлета продуктов сильно коррелирует с направлением момента количества движения составного ядра, является деление тяжелых ядер нейтронами при энергиях возбуждения, близких к порогу. В этом случае, как было указано О. Бором [1], наиболее энергетически выгодно значение проекции момента ядра на ось деления K = 0. Это означает, что осколки преимущественно разлетаются в плоскости, перпендикулярной моменту, что с наибольшей ясностью было продемонстрировано результатами изучения угловых распределений осколков фотоделения [4]. При образовании составного делящегося ядра за счет поглощения нейтрона с отличным от нуля орбитальным моментом следует ожидать преимущественного испускания осколков в направлении «вперед — назад», если исходить из упомянутых общих соображений о преимущественном выстраивании составных ядер в плоскости, перпендикулярной направлению пучка. Это предсказание согласовалось с многочисленными экспериментальными фактами. Тем более трудно объяснимым было обнаружение анизотропии обратного знака при делении²³⁵U нейтронами с энергией в несколько десятков кэв, когда анизотропный вклад в дифференциальное сечение деления дают практически только р-нейтроны [5]. Соображения, изложенные выше, указывают на возможное объяснение этой аномалии: как следует из результатов, приведенных в таблице, примерно половина составных ядер, образующихся при взаимодействии р-нейтронов с моментом ³/₂ с ядрами ²³⁵U, выстроена преимущественно вдоль направления пучка. Результаты экспериментов [5] означают, что эти ядра (с моментами 3 и 4) имеют в среднем несколько более высокую делимость, чем ядра с моментами 2 и 5.

Литература

- A. Bohr. Proc. Intern. Conf. Peaceful Uses Atomic Energy, vol. 2, Geneva, 1955, UN, N. Y., 1955, p. 151.
- 2. А. М. Балдин и др. Кинематика ядерных реакций, Атомиздат, 1968, с. 264.
- Г. Я. Любарский. Теория групп и ее применение в физике, Физматгиз, 1968, с. 313.

- 4. W. J. Winhold, P. T. Demos, I. Halpern. Phys. Rev., 87, 1139, 1952.
- 5. I. I. Bondarenko et al. Comp. Rend. Congr. Int. Phys. Nucl., vol. 2, Paris, 1964, p. 1132;
 - В. Г. Нестеров, Г. Н. Смиренкин. ЯФ, 4, 399, 1966;
 - Г. Н. Смиренкин, Д. Л. Шпак и др. Письма в ЖЭТФ, 11, 489, 1970.

On Aligning of Compound Nuclei by the Orbital Momentum of the Incident Particle

L. K. Kozlovsky, N. S. Rabotnov

It is shown that the widely used statement on the aligning of compound nuclei in the plane orthogonal to the beam is not always valid. In some cases (depending on the relation of the target spin to the orbital momentum of the incident particles) there may appear a strong inverse effect i. e. a dominant aligning along the beam direction. The alignment of compound nuclei is calculated as a function of the nuclear target spin and of the neutron momentum. The obtained results are discussed in connection with the angular distributions of fragments of nuclear fission induced by neutrons.

Угловая анизотропия осколков при делении ориентированных ядер ²³⁵U нейтронами с энергией 10—150 кэВ

Н. Н. Гонин, В. К. Горюнов, Л. К. Козловский, Н. С. Работнов, Ю. Я. Стависский, Д. И. Тамбовцев

Физико-энергетический институт, Обнинск

(Поступила в редакцию 24 октября 1974 г.)

Приведены результаты измерений угловой анизотропии осколков при делении ориентированных ядер ²³⁵U нейтронами тепловой энергии и $E_n = 10, 50, 80, 124$ и 155 кэВ. Для энергий нейтронов 50, 80, 124 и 155 кэВ измерена также анизотропия на неориентированных ядрах. Результаты экспериментов сравниваются с данными других авторов. Дана интерпретация наблюдаемых анизотропий в рамках существующих модельных представлений деления ядер.

Введение

Интересным методом изучения каналовой структуры барьера деления являются исследования с ориентированными ядрами мишени. Изменение кинематики реакции и прежде всего изменение выстроенности составных ядер приводит к заметным эффектам в угловых распределениях. Кроме степени ориентации меняются и вероятности образования составного ядра в состояниях с различными значениями полного момента количества движения, что должно отражаться на полном сечении реакции.

Впервые эксперименты по делению ориентированных ядер были выполнены Даббсом и др. [1]; они заключались в исследовании реакции (n, f) под действием тепловых нейтронов на ядрах ²³⁵U и ²³³U, выстроенных в монокристалле уранил-рубидиевого нитрата (УРН) [2]. В дальнейшем эксперименты продолжены с использованием нейтронов резонансных энергий и проведен многоуровневый анализ полученных данных [3]. В улучшенных условиях опыты такого рода были выполнены также Паттенденом и Постмой [4].

Все перечисленные способы относятся к делению *s*-нейтронами, т. е. в состояниях с комбинациями спина и четности $J^n = 3^-$, 4^- в интервале энергии нейтронов от 0 до 2 кэВ. Представляет интерес изучить деление нейтронами ориентированных ядер более высоких энергий, когда сравнимый вклад в сечение образования составного ядра дают *s* и *p*-нейтроны. Этот интерес определяется следующими обстоятельствами.

1. Данные о каналовой структуре барьера деления составного ядра ²³⁶U с учетом существования второго максимума не являются достаточно определен-

Ядерная физика, 1975, т. 22, вып. 4, с. 692-700.

ными. Имеется практически две работы [5, 6], где параметры барьера определяются из анализа делимости в реакциях (d, pf) и (t, pf) без привлечения данных по угловым распределениям и без сопоставления с результатами исследования реакции (n, f).

2. Исследования угловой анизотропии реакции (n, f) в интервале энергии нейтронов до 100 кэВ указывают на отрицательную анизотропию разлета осколков, которая возникает, по-видимому, благодаря вкладу *p*-нейтронов и должна быть следствием особенностей зависимости вероятности деления от *J* и *K* [7, 8].

3. Данные о делении ²³⁵U под действием нейтронов с энергией до 100 кэВ имеют большое практическое значение, и дополнительную информацию о сравнительной роли *s*- и *p*-нейтронов в этом процессе, которую можно получить в исследованиях с ориентированными ядрами, следует использовать при изучении механизма реакции.

В настоящей работе излагаются и анализируются результаты экспериментального исследования анизотропии разлета осколков при делении ядер ²³⁵U, ориентированных в кристалле УРН, нейтронами при нескольких значениях энергии E_n в интервале 10 — 150 кэВ. Некоторые предварительные данные об этих исследованиях были приведены в работе [9].

Угловые распределения осколков деления ориентированных ядер

Полагая, что при прохождении ядра от седловой точки до точки разрыва проекция *K* его углового момента на направление разлета осколков деления сохраняется, угловое распределение осколков с учетом возможной выстроенности ядер мишени можно записать следующим образом:

$$\frac{d\sigma_f}{d\Omega}(E_n, T, \theta) = \frac{\hbar^2}{4} \sum_{N=0,2,4,\dots,I,J,\pi} \sum_{(2J+1)} (2J+1) T_l^{J^{\pi}}(E_n) G_N^{J^{\pi}}(T) \times \sum_{K=-J}^{J} (-1)^{J-K} (JJK - K | N0) \gamma_f^{J^{\pi}K}(E_n) P_N(\cos \theta).$$
(1)

Здесь T — температура образца, θ — угол в л. с. между осью квантования и направлением вылета осколков; λ — длина волны падающего нейтрона, $T_l^{J^{\pi}}$ — оптические коэффициенты нейтронной проницаемости, (JJK - K|N0) — коэффициенты Клебша — Гордана, $\gamma_f^{J^{\pi}K}$ — делимость составного ядра с квантовыми числами $J^{\pi}K$, $P_N(\cos \theta)$ — полином Лежандра, $G_N^{J^{\pi}}(T)$ — коэффициенты выстроенности составного ядра [10]

$$G_N^{J^{\pi}}(T) = \sum_{M=-J}^{J} (-1)^{J-M} \left(JJM - M \left| N0 \right) \rho_{JM}(T) \right),$$
(2)

где $\rho_{JM}(T)$ — элементы матрицы плотности спиновых состояний составного

ядра с моментом *J*. В случае отсутствия поляризации падающего пучка $\rho_{JM}(T)$ связаны с элементами матрицы плотности спиновых состояний ядра-мишени $\rho_{LM-m}(T)$ соотношением

$$\rho_{JM}(T) = \frac{2l+1}{2} \sum_{S=I-1/2,m} \left(SlM0 | JM \right)^2 \left(s \operatorname{Im} M - m | SM \right)^2 \rho_{I,M-m}(T), \quad (3)$$

где s, I, S, l — спины нейтрона, ядра-мишени, канала и орбитальный момент нейтрона, а m, M-m, M, 0 — их проекции на ось квантования, совпадающую в нашем случае с направлением нейтронного пучка и C-осью ориентирующего кристалла. При используемом в данной работе методе ориентации ядер мишени

$$\rho_{I,M-m}(T) = \exp\left[-\frac{P}{T}(M-m)^2\right] / \sum_{M-m} \exp\left[-\frac{P}{T}(M-m)^2\right],$$
 (4)

где константа сверхтонкого взаимодействия $P = (0,0154 \pm 0,0030)$ К [1, 4]. В отсутствие выстроенности ядер мишени ($T \rightarrow \infty$) имеем $\rho_{I,M-m} = 1/(2I+1)$. Если при этом l = 0, то все коэффициенты $G_N^{J^{\pi}}$ для $N \ge 2$ равны нулю и угловое распределение будет изотропным. Выражение для полного сечения деления получается из (1) умножением члена, соответствующего N = 0 на 4π :

$$\sigma_f(E_n, T) = \pi \lambda^2 \sum_{l, J, \pi} \sqrt{2J + 1} T_l^{J^{\pi}}(E_n) G_0^{J^{\pi}}(T) \sum_K \gamma_f^{J^{\pi}K}(E_n) .$$
(5)

Введя обозначения

$$F_N^{J^{\pi_K}}(T) = (-1)^{J-K} \left(2J+1 \right) G_N^{J^{\pi}}(T) \left(JJK - K \left| N0 \right),$$
(6)

перепишем (1) в более удобном для анализа виде:

$$\frac{d\sigma_f}{d\Omega}(E_n, T, \theta) = \frac{\lambda^2}{4} \sum_{N=0,2,4} \sum_{l,J,\pi,K} T_l^{J^{\pi}}(E_n) F_N^{J^{\pi}K}(T) \gamma_f^{J^{\pi}K}(E_n) P_N(\cos\theta).$$
(7)

В этом выражении знак вклада каждого парциального состояния $J^{\pi}K$ определяется знаком кинематического коэффициента $F_N^{J^{\pi}K}$. Значения этих коэффициентов в отсутствие ($T = \infty$) и при наличии (T = 0,2 K) выстроенности ядер мишени для состояний отрицательной и положительной четности, образованных при захвате ядрами ²³⁵U ($I^{\pi} = 7/2^{-}$) соответственно *s*- и *p*-нейтронов, которые вычислены по формулам (2) — (4), (6), приведены в табл. 1.

Описание эксперимента

Установка для измерения угловой анизотропии разлета осколков деления выстроенных ядер ²³⁵U нейтронами представляла собой гелиевый криостат, в котором температура ниже 1 К достигалась путем адиабатического размагничивания блока парамагнитной соли в поле сверхпроводящего соленоида.

Таблица 1.

- F	· · · · · · ·	- r	···· / ···	- (2)-	r - r -			
Iπ	K	Ядра мишени	и не выстроены	Ядра мишени выстроены (<i>T</i> = 0,2 K)				
5	Π	$F_0^{J^{\pi}}$	$F_2^{J^{\pi_K}}$	$F_0^{J^{\pi}}$	$F_2^{J^{\pi_K}}$			
3-	0		0,		+0,149			
	1	0.4275	0,	0 4275	+0,223			
	2	0,4373	0,	0,4375	0,			
	3		0,		-0,372			
4^{-}	0		Запрет по	четности				
	1		0,		+0,329			
	2	0,5625	0,	0,5625	+0,155			
	3		0,		-0,136			
	4		0,		-0,542			
2^{+}	0		+0,09		+0,166			
	1	0,312	+0,09	0,3762	+0,166			
	2		-0,18		-0,332			
3+	0	Запрет по четности						
	1		-0,44		+0,031			
	2	0,876	0,	0,844	0,			
	3	%	+0,733		-0,052			
4^{+}	0		-0,161		+0,233			
	1		-0,273		+0,395			
	2	1,125	-0,129	1,023	+0,186			
	3		+0,113		-0,163			
	4		+0,450		-0,651			
5^{+}	0		Запрет по	четности				
	1		+0,824		+1,114			
	2	0,690	+0,550	0,753	+0,744			
	3		+0,090		+0,123			
	4		-0,550		-0,744			
	5		-1,374		-1,859			

Значения кинематических коэффициентов $F_0^{J^{\pi}}$ и $F_2^{J^{\pi}K}$ в отсутствие и при наличии выстроенности ядер мишени при захвате ядрами ²³⁵U ($I^{\pi} = 7/2^{-}$) *s*- и *p*-нейтронов

Конструктивные особенности установки описаны в работе [11].

Выстраивание ядер достигалось за счет взаимодействия их электрического квадрупольного момента с градиентом неоднородного электрического поля монокристалла УРН (UO₂Rb(NO₃)₃) при его глубоком охлаждении [1, 2].

Образец представлял собой пластинку (или мозаику из пластинок) толщиной 1,5 — 2 мм, вырезанную из монокристалла УРН на основе естественного урана параллельно грани 1012, составляющей угол ~41° с осью монокристалла. Общая площадь образца составляла 4 — 6 см². На поверхность пластинок наращивался монокристаллический слой УРН с обогащенным (до 90 %) ²³⁵U толщиной 1,5 — 2 мг/см². Раствор соли УРН с обогащенным ураном со-

держал $0.5 - 1.0 \%^{237}$ Np по отношению к урану, добавление которого необходимо для улучшения связи спиновой системы ядер ²³⁵U с кристаллической решеткой УРН [12]. Изоморфность нарощенного слоя по отношению к кристаллу-матрице проверялась на рентгеновском пучке методом отраженных лауэграмм [13].

Более подробно методика выращивания монокристаллов УРН объемом до 15 см³, резки и покрытия пластинок описана в работе [14]. Образец приклеивается вакуумной замазкой к медной подложке, которая твердым припоем припаяна к пучку медных проволок, служащих хладопроводом и пронизывающих блок парамагнитной соли (120 г хромокалиевых квасцов). Блок имел плотность 0,98 плотности монокристалла квасцов и был запаян в контейнер из нержавеющей стали. Система блок парамагнитной соли — образец подвешивалась на держателе из чистого графита ко дну гелиевого бака. Схема внутренней части криостата представлена на рис. 1.

Начальная температура процедуры адиабатического размагничивания, полученная откачкой паров гелия над жидкой фазой, составляла 1,22 К, начальная индукция была 1,1 Тесла. В качестве теплового ключа использовался обменный газ. Температура образцов в процессе проведения экспериментов контролировалась угольным термометром сопротивления, приклеенным вакуумной замазкой на обратной стороне медной подложки. Расчетное значение

Рис. 1. Схема низкотемпературной части криостата: 1 — гелиевый бак $T \sim 1$ К, 2 — гелиевый бак $T \simeq 4$ К, 3 — пластинка монокристалла УРН на медной подложке, 4 — угольный термометр, 5 — стеклянный детектор, 6 — сверхпроводящий магнит, 7 — блок парамагнитной соли, 8 — графитовый держатель







минимальной температуры при адиабатическом размагничивании в указанных условиях составляло 0,08 К. За время экспозиции (~8 ч) температура нарастала до 0,25—0,3 К. Среднее по времени экспозиции значение температуры медной подложки составляло 0,15 К. Температура рабочего слоя ²³⁵U была несколько выше из-за тепловыделения от осколков деления. Оценка величины подогрева на основе материалов работы [15] составляла 0,05 К, что приводит к средней температуре образца за время измерений $\approx 0,2$ К.

В процессе эксперимента регистрировалось количество осколков деления, вылетающих под углами 0° и 90° к *С*-оси монокристаллического образца и направлению пучка. Детектирующая система представляла собой набор из четырех кассет со стеклами, снабженных проволочными тягами, выведенными из криостата. Каждая кассета содержала два стекла размером $2,8 \times 3,6$ см, расположенных на расстоянии 3,4 - 4,0 см от центра образца под углом 45° к его поверхности. Взаимное расположение образца и детекторов представлено на рис. 2. Экспонированные стекла травились в 2,5%-м растворе HF, и следы осколков подсчитывались под микроскопом со 150-кратным увеличением.

Источником нейтронов служила реакция ${}^{7}\text{Li}(p, n){}^{7}\text{Be}$ на мишени металлического лития, который наносился на медную подложку испарением непосредственно в вакуумном объеме ионопровода. На время напыления ампула с металлическим литием и электронагревателем с помощью сильфонного узла вводилась на ось ионопровода и затем убиралась.

При токе протонов 200 мка в течение примерно 30 ч работы снижение выхода нейтронов практически не наблюдалось.

Спектры нейтронов рассчитывались по заданному превышению над порогом реакции Li (p, n) с учетом толщины мишени и конечных размеров мишени и образца по кинематическим соотношениям [16]. Тепловые нейтроны генерировались в парафиновом поясе, окружавшем криостат.

Обработка данных и результаты эксперимента

Выражение для углового распределения осколков деления (7) с учетом достигнутой в наших экспериментах степени выстроенности ядер можно привести к виду

$$\frac{d\sigma_f}{d\Omega}(E_n, T, \theta) = \frac{\sigma_f(E_n, T)}{4\pi} \Big[1 + A_2(E_n, T) P_2(\cos\theta) \Big].$$
(8)

Можно также показать, что получаемое в эксперименте отношение выходов осколков под 0 и 90° с учетом конечных размеров образца, детектора и расстояния между ними имеет вид

$$R_{_{3\mathrm{KC\Pi}}} = \frac{1 + A_2(E_n, T)P_2(\cos\theta)}{1 + A_2(E_n, T)P_2[\cos(90^\circ - \overline{\theta})]}$$
(9)

где $\overline{\theta}$ — некоторый эффективный угол.
Связь между $R_{_{3KCII}}$ и $R_{_{HCT}} = [d\sigma_f / d\Omega(0^\circ)] / [d\sigma_f / d\Omega(90^\circ)]$ дается соотношением

$$R_{\mu c \tau} (E_n, T) = \frac{R_{\Im c \pi} (E_n, T) (\eta + 0, 5) - 1 + \eta}{\eta + 0, 5 - R_{\Im c \pi} (E_n, T) (1 - \eta)},$$
(10)

где $\eta = P_2(\cos\overline{\theta})$. При расчете геометрических поправок η -образец и детектор представлялись в виде дисков с площадью, равной соответственно площади образца и детектора, с последующей заменой диска-образца кольцом с эффективным радиусом $\rho = r/\sqrt{2}$ [17]. Окончательное соотношение имеет вид

$$\eta = \frac{1}{2} \cos \alpha (1 + \cos \alpha) P_2(\cos \beta) , \qquad (11)$$

где смысл углов α и β ясен из рис. 3.

Измерения проводились последовательно для выстроенных и невыстроенных ядер образца, и для ряда серий снималась также тепловая точка. Это позволяло получить как «эффект выстраивания», т.е. обусловленный выстроенностью вклад. ядер ²³⁵U, так и значения анизотропий осколков на выстроенных и невыстроенных ядрах. Полученные результаты представлены на рис. 4. В величины указанных ошибок включены статистические ошибки набора событий и систематические ошибки, связанные с введением геометрических поправок и просмотром стекол под микроскопом. Значения энергий, к которым отнесены измеренные анизотропии осколков, определены как средние величины по расчетным спектрам нейтронов. Данные, по-



Рис. 3. К расчету геометрической поправки (см. (11))

лученные в отсутствие выстраивания ядер мишени, согласуются с результатами работ [7, 8], подтверждая наличие небольшой отрицательной анизотропии в области $E_n = 50 \div 150$ кэВ. Для выстроенных же ядер анизотропия положительна во всей исследованной области и имеет значительно большую абсолютную величину. Анизотропия осколков для $E_n = 10$ кэВ хорошо согласуется с результатами Паттендена и Постмы [4] для области $E_n = 1 \div 2$ кэВ, приведенными к условиям нашего эксперимента, хотя полученные нами результаты для тепловых нейтронов по абсолютной величине несколько меньше результатов Даббса [1], также приведенных к нашим условиям.



Рис. 4. Угловая анизотропия разлета осколков при делении ²³⁵U нейтронами: •, ▲, ◆ — результаты настоящей работы (● — ядра мишени выстроены, ▲ — ядра мишени не выстроены, ◆ — эффект выстроенности ядер мишени); △, ▽ — результаты работ [7] и [8] на неориентированных ядрах, ○ — результаты работы [4] на ориентированных ядрах, приведенные к условиям нашего эксперимента

Анализ и обсуждение результатов

Полученные данные по угловым анизотропиям следует анализировать совместно с уже известными результатами по средним значениям делительных ширин нейтронных резонансов, энергетической зависимостью сечения деления в реакции (n, f) и сопоставить их с результатами каналового анализа деления ²³⁶U в реакциях (d, pf) и (t, pf) [5, 6].

Данные табл. 1 показывают, что оба факта — наблюдение положительной анизотропии разлета осколков при наличии выстраивания ядер мишени и отрицательной на невыстроенных ядрах — можно объяснить, предположив, что деление состояний положительной четности при рассматриваемых энергиях проходит главным образом через коллективные состояния $K^{\pi} = 0^+$. Поскольку при этом состояния с моментами $J^{\pi} = 3^+$ и 5^+ для данной полосы запрещены по четности, то анизотропия осколков будет определяться конкуренцией вкладов состояний $J^{\pi} = 2^+$ и 4^+ . При наличии выстроенности ядер мишени оба эти состояния, как видно из табл. 1, дают положительную анизотропию, а в отсутствие выстроенности состояние $J^{\pi} = 4^+$ — отрицательную, причем заметно большую по абсолютной величине, чем вклад состояния $J^{\pi} = 2^+$.

Поэтому задачей анализа являлся расчет делимостей $\gamma_f^{J^{\pi_K}}(E_n)$ (подбор высот барьеров, их кривизн и спектра переходных состояний на барьерах), которые описывали бы известные экспериментальные результаты средних делительных ширин ²³⁵U *s*-нейтронных резонансов, полное сечение деления, а так-

же удовлетворяли бы требованиям кинематического анализа анизотропий угловых распределений осколков.

При расчете делимостей по формуле

$$\gamma_f^{J^{\pi_K}} = \left\langle \frac{\Gamma_f^{J^{\pi_K}}}{\Gamma_n^{J^{\pi}} + \sum_K \Gamma_f^{J^{\pi_K}} + \Gamma_\gamma} \right\rangle$$

было использовано выражение Хилла — Уиллера для средних значений делительных ширин

$$\bar{\Gamma}_{f}^{J^{\pi}} = \frac{\bar{D}^{J} \sum_{K} P_{f}^{J^{\pi}K}}{4\pi}$$
(12)

и приняты следующие приближения, слабо влияющие на результаты вычислений: не учитывались флуктуации ширин относительно средних значений и вклад неупругого рассеяния нейтронов в полную ширину состояний; значения среднего расстояния между уровнями составного ядра \overline{D}^J с моментом J считались не зависящими от энергии возбуждения в рассматриваемом интервале и одинаковыми для состояний положительной и отрицательной четности; радиационная ширина принималась равной $\overline{\Gamma}_{\gamma} = 0,04$ эВ и не зависящей от энергии; не учитывалось ротационное расщепление переходных состояний с различными J при заданном K.

Средние расстояния \overline{D}^{J} вычислялись на основе экспериментально известного для ²³⁵U $\overline{D}_{\text{набл}} = (1,3 \pm 0,1)$ эВ [18] с учетом экспоненциального спинового множителя.

Проницаемость барьера $P_f^{J^{\pi}K}(E)$ в модели двугорбого барьера деления для околопороговой области и в отсутствие резонансных явлений на барьерах имеет вид [19]

$$P_{f}^{J^{\pi_{K}}} = \frac{P_{A}^{J^{\pi_{K}}} P_{B}^{J^{\pi_{K}}}}{\left[1 + \sqrt{\left(1 - P_{A}^{J^{\pi_{K}}}\right)\left(1 - P_{B}^{J^{\pi_{K}}}\right)}\right]^{2}},$$
(13)

где P_A и P_B описываются известным выражением

$$P_{A(B)}^{J^{\pi}K} = \left[1 + \exp\frac{2\pi}{\hbar\omega_{A(B)}} \left(E_{A(B)}^{J^{\pi}K} - B_n - E_n\right)\right]^{-1},$$
(14)

в котором $E_{A(B)}^{J^{\pi}K}$ — положение переходного состояния с набором квантовых чисел $J^{\pi}K$ на барьерах соответственно A и B, $\hbar\omega$ — кривизна барьеров, а B_n — энергия связи нейтрона в составном ядре (B_n принималось равным 6,545 МэВ).

Результаты расчетов представлены в табл. 2 и 3. Расчетные значения $\overline{\Gamma}_{f}^{J^{-}}$ сравнивались с экспериментальными [20]:

$$\overline{\Gamma}_{f}^{3^{-}} = 103 \pm 32 \text{ мэB}, \quad \overline{\Gamma}_{f}^{4^{-}} = 58 \pm 15 \text{ мэB}.$$

Таблица 2.

Параметры барьеров, спектры переходных состояний и расчетные значения средних
делительных ширин <i>s</i> -нейтронных резонансов при делении ²³⁸ U нейтронами

Источник	Барьер, МэВ	$A^{J^{\pi_K}}$	Барьер, МэВ	$B^{J^{\pi_K}}$	$\Delta E^{K^{\pi}}$, МэВ						$\overline{\Gamma}_{f}^{J^{-}}$, мэВ	
	E^{2+0}	ħω	E^{2+0}	ħω	0^+	0-	1-	2-	2^{+}	1^+	3-	4-
[5]	6,1	1,0	5,8	0,7	0,00	0,4	0,45	-	0,32	-	216	103
[6]	5,7	0,9	5,7	0,5	0,00	0,15	0,45	—	0,18	-	644	342
Настоящая	6,0	1,0	5,9	0,7	0,00	0,5	0,6	0,8			117	41
работа	5,9	1,0	6,0	0,7	0,00	0,5	0,6	0,8			103	40
	6,0	1,0	6,0	1,0	0,00	0,5	0,55	0,7	0,9	1,0	96	50

Таблица 3.

Расчетные значения полного сечения деления и угловой анизотропии разлета осколков при делении ядер ²³⁵U нейтронами с энергией 100 кэB

T_l^s	T_l^p	Условия эксперимента	б <i>_f</i> , бн	$\varepsilon = \left[\frac{d\sigma_f}{d\Omega} (0^\circ) / \frac{d\sigma_f}{d\Omega} (90^\circ) \right]$
0,288	0,083	Ядра мишени не ориентированы Ядра мишени ориен-	1,62	-0,02
		тированы	1,60	+0,46

Попытки непосредственно использовать схемы расстановки каналов, полученные при анализе делимостей в (*d*, *pf*)- и (*t*, *pf*)-реакциях [5, 6], как видно из табл. 2, приводят к завышенным значениям делительных ширин, к завышенным величинам полного сечения деления и не позволяют даже качественно объяснить наблюдаемую отрицательную анизотропию на неориентированных ядрах мишени в районе энергий нейтронов 80—100 кэВ. Поэтому были выполнены расчеты с измененными значениями параметров, представленные в нижней строке табл. 2, которые в общем неплохо описывают наблюдаемые значения средних делительных ширин. Результаты расчета [21] сечения деления со схемой делительных каналов, приведенной в нижней строке табл. 2, достаточно хорошо согласуются с экспериментом (при $E_n = 100$ кэВ σ_f (²³⁵U) = = 1,69 ± 0,11 бн [22]). Следует отметить, что в указанной области энергий нейтронов выстраивание ядер мишени должно приводить к изменению (в данном случае — к небольшому уменьшению величины полного сечения деления (см. табл. 3)). В то же время для чистых *s*-нейтронов, как свидетельствует набор коэффициентов $F_0^{J^{\pi}}$ из табл. 1, полное сечение деления должно сохраняться. Аналогичный эффект получен Ефимовым для реакции (*n*, γ) [23]. Анализ выражения (5) показывает, что указанный эффект является следствием изменения сечения образования составного ядра, обусловленного изменением кинематики реакции. Поэтому изменение полного сечения любой нейтронной реакции в зависимости от выстроенности ядер мишени может служить индикатором присутствия *p*-нейтронов.

Расчеты анизотропий разлета осколков с той же схемой каналов дают как для неориентированных, так и для ориентированных ядер ²³⁵U правильные знаки и порядок величин. Однако абсолютные значения получаемых анизотропий в случае ориентированных ядер мишени примерно втрое больше, а в отсутствие ориентации — примерно во столько же раз меньше соответствующих экспериментальных результатов. Данные табл. 1 свидетельствуют о том, что для улучшения количественного описания наблюдаемых анизотропий необходимо увеличить вклад состояний $J^{\pi} = 3^+$ и 4^+ из «*p*-нейтронной волны» с малыми значениями проекции *K*.

В заключение авторы выражают признательность А. В. Игнатюку и Г. Н. Смиренкину за полезные обсуждения и ценные замечания.

Литература

- 1. L. D. Roberts, J. W. T. Dabbs et al. Proc. Inetrn. Conf. on Nucl. Structur, Kingston, 1960.
- 2. R. V. Pound. Phys. Rev., 76, 1410, 1949.
- 3. J. W. T. Dabbs et al. Proc. Symp. on the Phys. and Chem. of Fission, SM 122/123, IAEA, Vienna, 1969.
- 4. N. J. Pattenden, H. Postma. Nucl. Phys., A167, 225, 1971.
- 5. B. B. Back et al. Nucl. Phys., A165, 449, 1971.
- 6. B. B. Back, Ole Hansen et al. Report LA-UR-73-1762.
- 7. В. Г. Нестеров, Г. Н. Смиренкин. *ЯФ*, 4, 399, 1966.
- 8. Г. Н. Смиренкин, Д. Л. Шпак и др. Письма в ЖЭТФ, 11, 489, 1970.
- 9. Н. Н. Гонин, В. К. Горюнов и др. Письма в ЖЭТФ, 20, 503, 1974.
- 10. M. E. Rose. Elementary Theory of Angular Momentum, New York, 1957.
- 11. Н. Н. Гонин, Л. К. Козловский, Ю. Я. Стависский, Д. И. Тамбовцев. ПТЭ, 1, 47. 1974.
- 12. J. C. Waldron. Report AERE-R-6141, 1969.
- 13. В. И. Матвиенко, К. А. Петржак, Т. М. Трегубова. Радиохимия, 10, № 2, 1968.
- 14. Н. Н. Гонин, Л. К. Козловский, Д. И. Тамбовцев. ПТЭ, 1, 232, 1975.
- 15. R. C. Kuiken et al. Nucl. Phys., A190, 2, 401, 1972.
- 16. Физика быстрых нейтронов, т. 1, Атомиздат, 1963.
- 17. Актиниды. Сб. под ред. Г. Сиборга и Дж. Каца, ИИЛ, 1955, с. 521.

- 18. И. В. Гордеев, Д. А. Кардашев, А. В. Малышев. Справочник: Ядернофизические константы, Атомиздат, 1963.
- 19. А. С. Тяпин, В. Е. Маршалкин. ЯФ, 18, 2, 277, 1973.
- 20. Neutron cross sections BNL-325, vol. 1, Third Edition, 1973.
- 21. Г. В. Аникин, А. Г. Довбенко и др. Атомная энергия, 28, 420, 1970.
- 22. M. G. Sowerby et al. AERE-R7273, 1973.
- 23. Н. Ефимов. Препринт R-1369, ОИЯИ, 1963.

Angular Anisotropy of Fragments From Fission of ²³⁵U Oriented Nuclei Induced by 10—150 keV Neutrons

N. N. Gonin, V. K. Goryunov, L. K. Kozlovsky, N. S. Rabotnov, Yu. Ya. Stavissky, D. I. Tambovtsev

The results of measuring the angular anisotropy of fragments from fission of the ²³⁵U oriented nuclei by thermal neutrons and by neutrons with the energy $E_n = 10, 50, 80, 124$ and 155 keV are presented. For the energies 50, 80, 124 and 155 keV we have as well measured the anysotropy on disoriented nuclei. The experimental results are compared with the data of other authors. The observed values of anisotropy are interpreted in the .framework of present model approach to nuclear fission.

Эффекты ориентации спина ядра мишени в делении ²³⁵U нейтронами

Н. Н. Гонин, Л. К. Козловский, В. С. Мастеров, Н. С. Работнов, Ю. Я. Стависский, Д. И. Тамбовцев

Приводятся результаты исследования реакции (n, f) на выстроенных ядрах ²³⁵U в области энергий нейтронов 10 — 200 кэВ. Измерялись эффекты выстроенности в полном сечении деления и в угловом распределении осколков. Полученные результаты интерпретируются исходя из предположения о частичном сохранении кваркового числа K в реакции образования составного ядра и в образующихся состояниях.

Неоднократно отмечались (см., например, [1]) противоречия, возникающие при попытках описать одинаковой структурой каналов деления сечения и угловые распределения осколков одних и тех же составных ядер, образованных в реакциях двух типов: на бесспиновых ядрах-мишенях в реакциях (γ , f) и (t, pf), а на ядрах с отличными от нуля спинами в реакциях (n, f) и (d, pf). Одной из физических причин такого различия может быть приближенное сохранение квантового числа K (проекции полного углового момента J на ось симметрии ядра) в реакции образования составного ядра и в его возбужденных состояниях вблизи энергии связи нейтрона. При поглощении ядром ²³⁵U s-нейтронов сложение моментов в собственной системе приводит к тому, что состояния 3⁻ образуются лишь с K = J = 3, а 4⁻ — лишь с K = 4 и 3. Простой кинематический расчет показывает, что К близкие к Ј продолжают доминировать и при поглощении *p*- и *d*-нейтронов. Таким образом, процессом образования составного ядра подчеркиваются $K \sim J$ и запрещаются $K \sim 0$, а структурой каналов деления — наоборот. Произведение этих двух по-разному асимметричных распределений должно иметь максимум при $K = 1 \div 2$. По результатам измерений угловой анизотропии реакции (n, f) на выстроенной мишени ²³⁵U в отдельных резонансах [2] нами построены графики (рис. 1), согласующиеся с высказанными качественными соображениями.

В данной работе исследовалась реакция (n, f) на выстроенных ядрах ²³⁵U в более высокой области энергий нейтронов, где основной вклад в процесс вносят *s*- и *p*-нейтроны. В отличие от резонансной области, здесь наблюдаемые величины усредняются по уровням составного ядра с различными свойствами. Участие в реакции *p*-нейтронов открывает возможность наблюдать также влияние выстроенности ядер-мишеней на полное сечение деления. Источником нейтронов служила реакция ⁷Li(*p*, *n*)⁷Be на пучке каскадного генератора КГ-2,5, падающем на металлическую литиевую мишень, напыленную на медную подложку. Выстраивание ядер ²³⁵U производилось методом, аналогичным

Письма в ЖЭТФ, т. 35, вып. 4, стр. 176—178.



Рис. 1. Распределение величин $(2g\Gamma_n\Gamma_f)/\Gamma$ в зависимости от коэффициента A_2 в угловом распределении осколков при делении ориентированных ядер ²³⁵U резонансными нейтронами (по результатам [2]). Стрелками указаны значения A_2 , соответствующие определенным *K*

использованному в работах [2, 3]. Образец, изготовленный из изотопно чистого 235 U (99,99 %), толщиной 0,5 мг/см², охлаждался в криостате на адиабатическом размагничивании до температуры 0,2 К. Ось *С* монокристаллического образца ориентировалась по пучку нейтронов. Осколки регистрировались поверхностно-барьерными кремниевыми детекторами, находящимися при температуре 4,2 К [4].

Два детектора использовались для измерения угловой анизотропии 0—90°, третий служил для мониторирования потока нейтронов через образец, для чего на обратной стороне медной подложки образца был помещен слой из неориентируемого ²³⁵U. Таким образом, в одном эксперименте измерялись оба эффекта от выстраивания ядер — в полном сечении деления и в угловом распределении.

На рис. 2 приведены полученные экспериментальные результаты с указанием статистических ошибок измерений. Систематические ошибки, связанные с введением поправок на геометрию опыта составили: $\pm 0,005$ для эффекта в сечении и $\pm 0,014$ для угловой анизотропии. Среднеквадратичный разброс нейтронов по энергии не превышал 20 кэВ.

Эффект выстраивания в сечении просто выражается через средние ширины и кинематические коэффициенты для *p*-нейтронов, вклад которых максимален при $E_n \sim 100$ кэВ. Эффект в сечении указывает на сильно неравномерное по *J* распределение вероятности деления в составном ядре. Рассмотрение кинематики заставляет предположить, что значительно преобладающий вклад в сечение деления на *p*-нейтронах дают состояния 3⁺ и 4⁺, а состояния 2⁺ и 5⁺, имеющие в сумме вдвое меньший статистический вес против суммы первых двух, дополнительно подавляются фактором $\Gamma_n \Gamma_f / \Gamma$. Для качественного со-



Рис. 2. Эффект выстраивания спинов ядер мишени U в угловом распределении осколков (вверху) и в сечении деления (внизу) нейтронами: ◆ — результаты работы [2], приведенные к условиям данного эксперимента; ● — настоящая работа. Точки, лежащие на оси ординат, относятся к измерениям на тепловых нейтронах

поставления экспериментальных результатов с теоретическими оценками можно пренебречь их вкладом. Если к этому добавить предположение об ограничении возможных значений *К* величинами 1 и 2, вытекающее из высказанных выше соображений, то удается совместно объяснить наблюдаемые величины как для резонансных нейтронов, так и для энергий, при которых нейтронные *s*- и *p*-волны дают сравнимый вклад.

В заключение следует еще раз подчеркнуть, что расчеты в традиционных предположениях о кинематике реакции с использованием известной структуры каналов деления неизбежно приводят к резкому расхождению с экспериментом (см. также [5]).

Литература

- 1. Остапенко Ю. Б., Смиренкин Г. Н. Материалы V Всесоюзной конференции по нейтронной физике. Киев 1980, ч. 3, с. 73.
- 2. Pottenden N. J., Postma H. Nucl. Phys., 1971, A167, 225.
- Dabbs J. W. T. et al. Proceed. Symp. on Phys and Chem. of Fiss., Salzburg, 1965, 1, 39.
- 4. Gonin N. N. et al. Cryogenics, 1978, 18, 57.
- 5. Гонин Н. Н. и др. ЯФ, 1975, 22, 692.

Поступила в редакцию 10 января 1982 г.

Деление ориентированных ядер ²³³U и ²³⁵U нейтронами с энергией 10—200 кэВ

Н. Н. Гонин, Л. К. Козловский, В. С. Мастеров, Н. С. Работнов, Д. И. Тамбовцев, Ю. Я. Стависский¹

> Физико-энергетический институт, Обнинск ¹ Институт ядерных исследований АН СССР, Москва

(Поступила в редакцию 35 октября 1983 г.)

Приводятся результаты экспериментального исследования эффектов выстраивания ядер-мишеней в реакции деления ²³³U и ²³⁵U нейтронами. Кратко описана экспериментальная установка. Обсуждаются трудности теоретической интерпретации экспериментальных данных. Показано, что выделение промежуточных значений квантового числа K = 1 и 2 может быть обусловлено его частичным сохранением на стадии образования составного ядра и в образующихся состояниях.

Введение

К настоящему времени можно выделить три основные группы экспериментов по изучению деления ориентированных ядер-мишеней: измерение анизотропии разлета осколков при делении выстроенных ядер тепловыми [1] и резонансными [2—4] нейтронами, измерение сечения деления поляризованных ядер поляризованными резонансными нейтронами [5], измерение эффектов выстроенности ядра мишени в сечении и угловой анизотропии деления под действием быстрых нейтронов [6—8]. Эксперименты второй группы были выполнены главным образом с целью определения спинов резонансов ²³⁵U. Основной результат работ [2—4] заключался в том, что наблюдаемые угловые распределения соответствовали главным образом делению через каналы с K=1, 2, в то время как, например, исследования фотоделения тех же составных ядер при тех же энергиях возбуждения убедительно показывали, что нижние делительные каналы, в соответствии с моделью О. Бора [9], отвечают K=0как для состояний положительной, так и отрицательной четности.

Авторы работы [10] обратили внимание на достаточно общий характер противоречий, возникающих при попытках описать одинаковой структурой каналов деления сечения и угловые распределения осколков деления одних и тех же составных ядер, образованных в реакциях (γ , f) и (d, pf) на бесспиновых мишенях и в реакциях (n, f) и (d, pf) на ядрах с отличными от нуля спинами. Эти трудности обострились при получении данных по делению ориентированных ядер ²³⁵U быстрыми нейтронами [6]. Поэтому соответствующие эксперименты были продолжены в направлении детализации и уточнения результатов для ^{23S}U и ²³³U. Результаты этих исследований излагаются в настоящей работе. Предварительные сообщения приведены в работах [7, 8].

Ядерная физика, 1983, т. 38, вып. 3 (9), с. 557.

Экспериментальная часть

Схема экспериментальной установки подобна описанной нами в работе [6]. Источником нейтронов служит металлическая литиевая мишень, напыленная на медную подложку, на которую падает коллимированный пучок протонов. Использовались подложки двух типов: в одном случае — медный диск, охлаждаемый водой (для улучшения охлаждения омываемая водой поверхность диска имеет ребра), в другом — медная пластинка толщиной 1,8 мм, параллельно рабочей поверхности которой были насверлены капилляры диаметром 1 мм с шагом 1,5 мм, так что толщина передней стенки мишени составила 0,4 мм. Долговечность мишени второго типа в 3-4 раза больше, чем первого.

Исследуемый образец площадью ~5 см², расположенный в нижней части криостата, находится на расстоянии ~7 см от нейтронной мишени. При токе протонов 250 мкА и толщине мишени ~20 кэВ (в единицах ионизационных потерь протонов) поток нейтронов через образец составляет ~10⁷ нейтрон/с. Действующий спектр нейтронов, который определяется диапазоном углов вылета нейтронов из мишени и ее толщиной, имеет форму неправильной трапеции с полушириной ~35 кэВ.

Выстраивание ядер делящихся изотопов урана (²³³U и ²³⁵U) осуществляется во внутрикристаллическом поле монокристалла уранилрубидиевого нитрата (УРН) при охлаждении до температуры 0,2 К в криостате с адиабатическим размагничиванием, конструкция которого подробно описана в работе [11]. Слой исследуемого изотопа толщиной 0,5 мг/см² наращивался на пластинку УРН из естественного урана толщиной 1,5 мм, отрезанную от монокристалла параллельно грани 10Т2, составляющей угол 41° с осью выстраивания ядер. Степень выстроенности спинов ядер мишени (среднее значение нулевой компоненты статистического тензора Фано второго ранга) в большинстве измерений составляла величину -0,11 для ²³⁵U и -0,13 для ²³³U (максимально возможная величина выстроенности, достижимая при $T \rightarrow 0$ K, для этих изотопов равняется соответственно -0,37 и -0,43).

Образец приклеивается вакуумной замазкой к медной подложке и ориентируется так, чтобы ось выстраивания была направлена по пучку нейтронов. На рис. 1 изображена находящаяся внутри криостата камера образца, в которой помимо исследуемого образца расположены: слой 235 UO₂, который мониторирует поток нейтронов, проходящий через образец, и три полупроводниковых кремниевых детектора, регистрирующих осколки, вылетающие из образца под углами 0 и 90° к оси выстраивания, и осколки из мониторирующего слоя. Слои образца и монитора выбраны достаточно тонкими, поэтому осколки и αчастицы надежно отделяются друг от друга.

Кремниевые поверхностно-барьерные детекторы достаточно стабильно работают и надежны в эксплуатации в условиях глубокого охлаждения, если крепление кремниевой шайбы к корпусу и электрические контакты достаточно устойчивы к температурным деформациям [3, 12].



Рис. 1. Нижняя часть криостата: 1 — тефлоновая «звездочка», 2 — радиационный экран при T = 80 K, 3 — теплообменник, 4 — нержавеющая трубка, 5 — корпус криостата, 6 — полупроводниковые детекторы, 7 — камера образца, 8 — ванна с жидким гелием при T = 1,17 K, 9 — ванна с жидким гелием при T = 4,2 K, 10 — сверхпроводящий соленоид, 11 — блок хромокалиевых квасцов, 12 — монокристаллический образец, 13 — тефлоновый подвес, 14 — трубка напуска и откачки теплообменного газа, 15 — мониторный слой, 16 — фиксатор

С помощью медных жгутов сечением около 1 см² обеспечивается тепловой контакт корпусов детекторов с гелиевой ванной при температуре 4,2 К. Так как детекторы находятся внутри теплового экрана с температурой 1,2 К, их опорные патрубки изготовлены из тонкостенной нержавеющей трубки (0,1 мм). Необходима тщательная термостабилизация полупроводниковых детекторов ввиду сильной зависимости амплитуды сигнала и разрешающей способности по энергии от температуры при охлаждении ниже 77 К [11].



Рис. 2. Горизонтальный разрез криостата: 1 — камера образца, 2 — радиационный экран при температуре жидкого азота, 3 — мониторный слой с неориентирующимися ядрами ²³⁵U, 4 — детектор-монитор нейтронов, 5 — сегментный срез на корпусе криостата, 6 — детектор «90°», 7 — монокристаллический слой УРН-образца на медной подложке, 8 — детектор «0°»

Не все детекторы, обладающие хорошими параметрами при умеренном охлаждении, способны удовлетворительно работать при температурах ниже 40 К. С тем чтобы исключить возможность нарушения температурного режима детекторов, применена специальная конструкция газового теплового ключа, необходимого для передачи тепла от парамагнитной соли к одноградусному гелию в процессе ее намагничивания. Для изоляции газового ключа от камеры образца и детекторов используется теплообменник и специальная система подвеса парамагнитной соли. Блок хромокалиевых квасцов в стакане из нержавеющей стали подвешивается к наружной стенке теплообменника с помощью герметизированной тефлоновой трубки длиной 50 мм и диаметром 8 мм со стенкой толщиной 0.25 мм. Центровка блока в одноградусном экране обеспечивается тефлоновыми звездочками. Теплопередача от парамагнитной соли к внутренней пластине теплообменника осуществляется с помощью жгута медных проволок, пронизывающих соль, медной пластины, служащей в качестве подложки образца, и системы холодопроводов. Герметизация объема теплообменника в месте входа холодопровода осуществляется путем зажима концов тефлоновой трубки между притертыми конусными поверхностями [12].

Такая конструкция выдержала многократные отогревы до комнатной температуры без потери герметичности.

Относительное расположение образца, мониторного слоя и детекторов показано на рис. 2. В такой геометрии измерялась угловая анизотропия осколков деления неориентированных и выстроенных ядер и эффект выстроенности в полном сечении деления.

Значительную трудность представляет определение эффективной Температуры образца, знание которой с достаточной точностью необходимо для определения степени выстроенности ядер-мишеней. В ходе измерений с помощью угольных сопротивлений, прокалиброванных по упругости паров гелия, контролируется температура подложки. Известно [2, 3], однако, что температура поверхности образца может быть выше температуры подложки. Для определения температуры образца в отдельном эксперименте измерялась угловая анизотропия вылета α -частиц из ²³⁷Np, введенного в УPH аналогично изотопам



Рис. 3. Энергетическая зависимость угловой анизотропии разлета осколков при делении нейтронами неориентированных ядер ²³³U, ²³⁵U (вверху) и эффектов ориентации спинов ядер мишени ²³³U, ²³⁵U в угловом распределении осколков (в центре) и сечении деления (внизу): ◆ — данные работы [18], ▼ — [15], △, ▲ — [16], ■ — [17], □ — [19], ◇ — [2], приведенные к условиям эксперимента в работе [8], ● — [7], ○ — [6, 8]. Точки, расположенные на оси ординат, соответствуют тепловым нейтронам

урана, и, кроме того, угловая анизотропия осколков при делении изотопов урана тепловыми нейтронами. Результаты сопоставлялись с данными работ [1, 3]. Было подтверждено существование систематического температурного перепада ~0,05 К между поверхностью образца и медной подложкой во всем исследованном диапазоне температур. Несоответствие выстроенности ядер температуре подложки может быть вызвано, однако, и несовершенством кристаллической структуры наращиваемого слоя.

На рис. 3 приведены полученные экспериментальные результаты, где указаны только статистические ошибки измерений. Систематические ошибки, связанные с неопределенностью поправок на геометрию опыта, составили $\pm 0,005$ для эффекта в сечении и $\pm 0,014$ для угловой анизотропии. Способ определения этих поправок описан в работе [6].

При близкой степени выстроенности ядер-мишеней для обоих изотопов измеренные эффекты в сечении у них имеют противоположные знаки, а эффект в угловой анизотропии для 233 U вдвое меньше, чем для 235 U. Теоретические расчеты эффектов выстроенности в угловых анизотропиях вылета осколков и в полных сечениях деления в традиционных предположениях о кинематике реакции и структуре каналов деления не удается согласовать с экспериментом [2, 3, 6—8]. Возможной причиной является то, что в теории подробно анализируется выходной, делительный, канал реакции деления и гораздо меньше внимания уделяется стадии образования составного ядра.

Обсуждение результатов

Одной из особенностей модельного описания свойств ядер является представление о собственной системе координат, связанной с главными осями инерции ядра. В результате при описании волновой функции ядра наряду с квантовым вектором момента количества движения используется классический вектор — направление оси симметрии ядра относительно л. с. При этом появляется особое квантовое число *K* — проекция момента на ось симметрии.

Интересен и сложен вопрос о том, насколько хорошим квантовым числом является K. В применении к процессу деления четно-четного возбужденного ядра этот вопрос распадается по крайней мере на четыре: сохранение K в основном состоянии нечетного ядра, сохранение в реакции, приводящей к образованию возбужденного состояния, сохранение в образовавшемся состоянии компаунд-ядра, т. е. вклад членов с различными K в волновую функцию этого состояния, сохранение, в процессе деформации, ведущей к делению.

Лишь на первый из перечисленных вопросов существует к настоящему времени совершенно определенный ответ: в основном состоянии K = I. Необходимо подчеркнуть, что если лабораторная система одна, то собственные системы — разные на разных этапах процесса: на первом этапе это система осей инерции нечетного ядра-мишени, потом — четно-четного составного ядра в определенном состоянии и, наконец, система с осью *z* вдоль направления разлета осколков.

Обычно предполагается, что в состояниях, соответствующих нейтронным резонансам, осуществляется полное смешивание по K, т. е. все значения K равновероятны. Главным основанием для такого предположения (см., например, [14]) является форма статистического распределения приведенных нейтронных ширин резонансов. Если это так, то для дифференциального сечения деления ориентированных ядер нейтронами получаются общеизвестные выражения (см. [7]), в которых от K зависит только вероятность деления, при этом $\Gamma_f^J = \sum \Gamma^{JK}$.

Так, в частности, выражения для величин эффектов выстроенности в сечении деления и в угловой анизотропии, а также для самой угловой анизотропии неориентированных ядер имеют вид

$$A_0(E_n,T) \equiv \frac{\Delta \sigma_f}{\sigma_f^{\text{heop}}} = \frac{1}{B} \sum_{l,J,\pi} T_l^{J^{\pi}} \Delta F_0^{J^{\pi}}(T) \gamma_f^{lJ^{\pi}}(E_n) , \qquad (1)$$

$$\Delta A_2(E_n, T) = \frac{1}{B} \sum_{l, J, \pi, K} T_l^{J^{\pi}} \Delta F_2^{J^{\pi} K}(T) \gamma_f^{J^{\pi} K}(E_n), \qquad (2)$$

$$A_{2}(E_{n},T) = \frac{1}{B} \sum_{l,J,\pi,K} T_{l}^{J^{\pi}} F_{2}^{\text{heop} l J^{\pi} K} \gamma_{f}^{l J^{\pi} K}(E_{n}), \qquad (3)$$

где В — безразмерное сечение деления неориентированных ядер:

$$B \equiv \frac{\sigma_f^{\text{Heop}}}{\pi \lambda^2} = \sum_{l,J,\pi} T_l^{J^{\pi}} F_0^{\text{Heop} l J^{\pi}} \gamma_f^{l J^{\pi}}, \qquad (4)$$

Экспериментальные результаты, сводка которых представлена на рис. 3, в совокупности не удается интерпретировать на основе выражений (1)—(3) ни при каких разумных предположениях о величине силовых функций первых парциальных нейтронных волн и зависимости делительных ширин от K. Проще всего проиллюстрировать эти трудности на примере величины A_0 . При энергиях $E_n \leq 100$ кэВ, когда основной вклад в образование составного ядра дают *s*- и *p*-волны, выражение (1) упрощается

$$A_0 = \frac{T_1}{B} \sum_J \Delta F_0^{1J^{\pi}} \gamma_f^{1J^{\pi}} , \qquad (5)$$

суммирование ведется по состояниям одинаковой четности, образующимся при поглощении ядром-мишенью *p*-нейтрона: 2⁺, 3⁺, 4⁺, 5⁺ в случае ²³⁵U и 1⁻, 2⁻, 3⁻,

4⁻ на ²³³U. Соответствующие значения кинематических коэффициентов $\Delta F_0^{1J^{\pi}}$ равны +0,064, -0,031, -0,102, +0,065 для ²³⁵U и +0,060, -0,014, -0,108, +0,062 для ²³³U. При $E_n = 100$ кэВ наблюдаемые значения A_0 (для ²³⁵U) = -0,05 и A_0 (для ²³³U) = 0,02. Величина *B* равна соответственно 0,234 и 0,345. Нейтронный коэффициент проницаемости для *p*-волны по разным оценкам составляет примерно 0,12. Величина $\gamma^{1J} < 1$. Отсюда непосредственно следует, что для получения согласия выражения (5) с наблюдаемыми величинами необходимо предположить, что в случае ²³⁵U делимости состояний 2⁺ и 5⁺, дающих положительный вклад в A_0 , по непонятным причинам подавлены, а в случае ²³³U то же самое нужно предполагать о делимостях состояний 2⁻, 3⁻. При этом и абсолютные величины эффектов, хотя сами по себе и небольшие, находятся на пределе объяснимого даже при экстремальных предположениях о зависимости делимости от *J* [7, 8].

Столь же заметные осложнения возникают при сравнении наблюдаемого поведения в зависимости от энергии величин A_2 и ΔA_2 с выражениями (2) и (3). Для получения даже качественного описания в этих случаях необходимо вводить зависимость делимости от J и K, противоречащую существующим представлениям о структуре каналов деления четно-четных ядер.

Пожалуй, единственное физическое различие, которое может лежать в основе наблюдаемой разницы в реакциях на бесспиновых ядрах и ядрах с $I \neq 0$, конечным этапом которых является деление одних и тех же составных ядер, связано с ролью в этих реакциях собственной системы координат и квантового числа K.

В работе [20] было получено выражение для $\rho_{K_j}^{Im_I j}$ -спиновой матрицы плотности налетающей частицы с полным моментом *j* в собственной системе (с. с.) ядра, имеющего момент *I* и проекцию *m_I* в л. с. Пусть волновая функция уровня составного ядра, образующегося при поглощении нейтрона ядроммишенью, имеет вид

$$\Psi_M^J(\theta, x) = \sum_{K=0}^J a_K^J \varphi_K^J(x) \Big\{ D_{MK}^J(\theta) \pm D_{M-K}^J(\theta) \Big\},$$
(6)

где *х* — координаты нуклонов в с. с. Набор величин $|a_K^J|^2$ можно назвать спиновой матрицей плотности полного момента ядра в с. с. Тогда в предположении сохранения проекции полного момента в с. с. в реакции образования составного ядра сечение этой реакции с выделением лишь существенных для нашего рассмотрения факторов запишется в виде

$$\sigma^{Ij} = \text{const} \cdot \sum_{m_{I}=-I}^{I} \sum_{K_{j}=-j}^{j} \rho_{m_{I}}^{I} \rho_{K_{j}}^{Im_{I}j} \left(IjIK_{j} \left| JK \right)^{2} \left| a_{K}^{J} \right|^{2} T^{JK} , \qquad (7)$$

где T^{K} — парциальные нейтронные ширины, зависящие от K. Таким образом, если учитывать сохранение проекции полного момента в с. с., то в выражениях

						ŀ	K			
Ι	j	J	و	J	J -	- 1	J-	- 2	J -	- 3
			неор.	op.	неор.	op.	неор.	op.	неор.	op.
⁵ / ₂	$^{1}/_{2}$	2	0,417	0,417						
		3	0,5	0,5	0,083					
	$^{3}/_{2}$	1	0,125	0,144						
		2	0,119	0,102	0,0895	0,1025				
		3	0,156	0,133	0,104	0,088	0,0315	0,036		
		4	0,25	0,287	0,094	0,080	0,027	0,023		
$^{7}/_{2}$	$^{1}/_{2}$	3	0,438	0,438						
		4	0,5	0,5	0,062	0,062				
	$^{3}/_{2}$	2	0,156	0,182						
		3	0,146	0,121	0,073	0,085				
		4	0,175	0,146	0,0875	0,073	0,019	0,022		
		5	0,25	0,291	0,075	0,0625	0,0165	0,014	0,0002	0,0003

Вероятности образования составных ядер при поглощении *s*- и *p*-нейтронов неориентированными и ориентированными ядрами ²³³U ($I = \frac{5}{2}$) и ²³⁵U ($I = \frac{7}{2}$)

типа (7) нельзя выносить величины, характеризующие входной канал, за знак суммирования по К. Кинематический расчет по формулам, приведенным в [20], для относительных вероятностей образования составного ядра с различными комбинациями J, K при поглощении s- и p-нейтронов дает значения, приведенные в таблице. Эти результаты показывают, что значения К, близкие к J, доминируют. Это остается справедливым и для d-нейтронов. Таким образом, процессом образования составного ядра подчеркиваются K = J и запрещаются K = 0, а структурой каналов деления, как известно, — наоборот. Произведение этих двух по-разному асимметричных распределений должно иметь максимум при $K = 1 \div 2$. По результатам измерения угловой анизотропии реакции (n, f) на выстроенных мишенях ²³⁵U и ²³³U [2, 3] с привлечением данных работы [5] нами были построены зависимости, представленные на рис. 4. Здесь приведены величины $2g(\Gamma_n^0\Gamma_f)/\Gamma$ для соответствующих резонансов в зависимости от A_2 — коэффициента угловой анизотропии разлета осколков. Именно эта величина «приведенной площади под резонансом» определяет его вклад в сечение деления, а не просто делительная ширина. На тех же рисунках приведены кривые, построенные авторами работ [2, 3] и определяющие долю резонансов с данной анизотропией. Сравнение кривых с гистограммами показывает, что преобладание в наблюдаемых угловых распределениях значений K = 1÷ 2 определяется скорее всего свойствами входного канала в качественном согласии с высказанными выше соображениями.

Открытым остается вопрос о форме распределения приведенных нейтронных ширин, соответствующего выражению (7). Если величины $|a_K^J|^2$ и T^{JK} подчиняются одноканальному распределению χ^2 (что соответствует гауссову распределению соответствующих амплитуд), то их произведение флуктуирует еще сильнее с относительной дисперсией $(\overline{x^2} - \overline{x}^2) / \overline{x}^2 = 8$ (у χ^2 -распределения эта величина равна двум). Взвешенная сумма (7) таких произведений флуктуирует слабее, снова приближаясь к χ^2 -распределению. Этот вопрос заслуживает самостоятельного рассмотрения.

Рис. 4. Сопоставление относительной вероятности наблюдения коэффициента A_2 , в угловом распределении осколков деления ориентированных ядер ²³³U, ²³⁵U в резонансной области до 100 эВ (пунктирные линии по данным работ [2, 3]) с распределением величин $2g\Gamma_n^0\Gamma_f/\Gamma$ (сплошные линии) для резонансов, измеренных в работах [2, 3]. Стрелками указаны значения коэффициента $A_2(J^{\pi}K)$, соот-

ветствующие определенным $J^{\pi}K$



Заключение

Экспериментальные работы по исследованию деления ориентированных ядер немногочисленны. Однако, на наш взгляд, их результаты содержат достаточно определенные указания на то, что существующие представления о роли квантового числа *K* в реакциях с деформированными ядрами под действием нейтронов нуждаются в подробном изучении и, возможно, пересмотре. Сами эксперименты желательно продолжить в следующих направлениях:

Детализация и уточнение данных по эффектам выстраивания в полном сечении и анизотропии при энергиях $E \leq 100$ кэВ с возможным расширением круга исследуемых ядер.

Повторение измерений в резонансной области в улучшенных условиях в первую очередь для оценки анизотропии в резонансах с малыми Γ_n^0 и больши-

ми Γ_f для более уверенного разделения эффектов, связанных с входным каналом и со структурой каналов деления.

Литература

- 1. Roberts L. D., Dabbs J. W. T. Ann. Rev. Nucl. Sci., 1961, 11, 175.
- 2. Pattenden N. J., Postma H. Nucl. Phys., 1971, A167, 225.
- 3. Kuiken R., Pattenden N. Postma H. Nucl. Phys., 1972, A190, 401.
- 4. Kuiken R., Pattenden N. J., Postma H. Nucl. Phys., 1972, A196, 389.
- 5. Moore et al. Phys. Rev., 1978, C18, 3, 1328.
- 6. Гонин Н. Н. и др. ЯФ, 1975, 22, 692.
- 7. Гонин Н. Н. и др. Матер. V Всесоюзн. конф. по нейтронной физике. Киев, 1980, ч. 3, с. 85.
- 8. Гонин Н. Н. и др. Письма в ЖЭТФ, 1982, 35, 176.
- Bohr A. Proc. Intern. Conf. on Peacefull Uses Atom. Energy. Vol. 2. Geneva, 1955, p. 151.
- Остапенко Ю. Б., Смиренкин Г. Н. Матер. V Всесоюзн. конф. по нейтронной физике. Киев, 1980, ч. 3, с. 73.
- 11. Гонин Н. Н. и др. Препринт ФЭИ-1301, Обнинск, 1982.
- 12. Gonin N. N. et al. Criogenics, 1978, 18, 57.
- 13. Hanauer S. H. et al. Phys. Rev., 1961, 124, 1512.
- 14. Бор О., Моттельсон Б. Структура атомного ядра. Т. 2. М.: Мир, 1977.
- 15. Мастеров В. С., Работнов Н. С. ЯФ, 1980, 32, 1263.
- 16. Шпак Д. Л. и др. ЯФ, 1975, 21, 704.
- 17. Смиренкин Г. Н. и др. Письма в ЖЭТФ, 1970, 11, 489.
- 18. Нестеров В. Г. и др. ЯФ, 1966, 4, 399.
- 19. Шигин В. А. Докл. АН СССР, 1961, 140, 351.
- Демерджиев Е. и др. Матер. V симпозиума по вопросам взаимодействия быстрых нейтронов с атомными ядрами. Гауссиг, ГДР, 1975.

Fission of Oriented Nuclei ²³³U and ²³⁵U Induced by Neutrons with Energies 10 — 200 keV

N. N. Gonin, L. K. Kozlovsky, V. S. Masterov, N. S. Rabotnov, D. I. Tambovtsev, Yu. Ya. Stavissky

Results are presented of an experimental investigation of effects due to alignment «of target nuclei ²³³U and ²³⁵U in the neutron-induced fission reactions. The experimental set-up is described briefly. Difficulties in a theoretical interpretation of the experimental data are discussed. It is shown that an enhancement for the intermediate values of the quantum number K = 1 and 2 may be due to its partial conservation at the stage of formation of the compound nucleus and in the produced states.

Азимутально-асимметричная ориентация в экспериментах по делению ориентированных ядер

В. С. Мастеров, Н. С. Работнов

Физико-энергетический институт, Обнинск

(Поступила в редакцию 6 февраля 1985 г.)

Обосновывается целесообразность проведения экспериментов в азимутальноасимметричной геометрии при высокой степени ориентации ядер-мишеней и поляризации нейтронов. Рассчитаны необходимые кинематические коэффициенты. Показано, что для выстроенного ядра ²³⁵U в уранил-рубидиевом нитрате предлагаемая, постановка эксперимента имеет смысл при температурах образца порядка 0,1 К. Эксперимент может быть использован для идентификации *p*-резонансов и определения их спинов.

Сравнительно новым направлением экспериментальных исследований в физике деления является использование предварительной ориентации ядермишеней, имеющих спин I > 1/2, электромагнитным полем. Ориентация меняет кинематику реакции, приводя к перераспределению образующихся состояний ядра по квантовым числам. Поскольку от последних могут сильно зависеть свойства компаунд-состояний, а также высота и форма барьера деления, то это заметно отражается на наблюдаемых характеристиках процесса.

Этим методом исследовалось деление нечетных изотопов урана тепловыми, резонансными и быстрыми нейтронами, причем использовались как выстроенные [1—6], так и поляризованные мишени. В работе [7] поляризовались и нейтроны, вызывающие реакцию. Во всех этих работах ось пучка и направление ориентации мишени совпадали. В настоящей работе показывается, что эксперименты, проведенные в геометрии с несовпадающими направлениями ориентации мишени и оси пучка, могут давать дополнительную информацию при условии достаточной степени ориентации. Цель работы — обоснование целесообразности проведения таких экспериментов и расчет необходимых кинематических коэффициентов для случая, когда направления пучка и оси ориентации перпендикулярны.

Выражение для сечения деления ядер под действием нейтронов теперь удобнее записать в системе координат, ось *z* которой направлена вдоль оси ориентации спина ядра-мишени. Целесообразность введения такой системы координат обусловлена двумя причинами: в этой системе проще записывается сравнительно сложная спиновая матрица плотности ядра и в этой системе также обычно задается положение детекторов относительно образца.

Ядерная физика, 1986, т. 43, вып. 1, с. 28.

Выражение для сечения имеет вид

$$\frac{d\sigma_f}{d\Omega} = \frac{\lambda^2}{4} \sum_{l,J} \sum_{k,\kappa} G_{k\kappa}^{Jl}(T) T_l^J(E_n) \tau_k^{J\pi} \sqrt{\frac{4\pi}{2k+1}} Y_{k-\kappa}(\theta, \varphi) .$$
(1)

Здесь $T_l^J(E_n)$ — коэффициент прилипания нейтрона с заданным $l, Y_{k-\kappa}(\theta, \phi)$ — сферическая функция. Сиин-тензоры в определении [8]

$$G_{k\kappa}^{Jl}(T) = \sum_{M,M'} (-1)^{J-M'} (JMJ - M' | k\kappa) \rho_{MM'}^{Jl}(T),$$
(2)

$$\tau_k^{J\pi} = \sum_K (-1)^{J-K} \left(JKJ - K \left| k0 \right) \gamma_f^{J\pi K} \right)$$
(3)

выражаются через $\rho_{MM'}^{J}(T)$ — зависящую от температуры спиновую матрицу плотности компаунд-ядра (температурой кристалла определяется: степень ориентации мишени) — и через $\gamma_{J}^{J\pi K}$ — делимости ядра в состоянии с заданными J, π, K .

$$\gamma_f^{J\pi K} = \frac{\Gamma_f^{J\pi K}}{\sum_K \Gamma_f^{J\pi K} + \Gamma_n^{J\pi} + \Gamma_\gamma^{J\pi}},\tag{4}$$

 $\Gamma_{f}^{J\pi K}$, $\Gamma_{n}^{J\pi}$, $\Gamma_{\gamma}^{J\pi}$ — соответственно делительная, нейтронная и радиационная парциальные ширины, а

$$\rho_{MM'}^{Jl}(T) = \sum_{\substack{m_S, m'_S \\ m_l, m'_l}} \rho_{m_S, m'_S}^S(T) \rho_{m_l, m'_l}^l \left(Sm_S lm_l \left| JM \right) \left(Sm'_S lm'_l \left| JM' \right) \right)$$
(5)

В свою очередь

$$\rho_{m_S,m'_S}^S = \sum_{\substack{m_I,m'_I\\m_S,m'_S}} \rho_{m_I,m'_I}^I (T) \rho_{m_S,m'_S}^S \left(Im_I^{1/2} m_S \left| Sm_S \right) \left(Im'_I^{1/2} m_S \left| Sm'_S \right) \right).$$
(6)

Здесь спиновые матрицы плотности: $\hat{\rho}^{l}$ — орбитального момента, $\hat{\rho}^{S}$ — спина нейтрона, $\hat{\rho}^{I}$ — спина ядра-мишени.

Из трех факторов, входящих в правую часть выражения (1), точному расчету поддаются только кинематические коэффициенты $\Gamma_{k\kappa}^{Jl}(T)$, поэтому (1) является по существу уравнением, содержащим информацию о величинах T_l^J и $\tau_k^{J\pi}$. Неизвестных значительно больше, чем уравнений для их определения, поэтому желательно увеличить число последних. Ориентация мишеней и поляризация нейтронов позволяют существенным образом менять наборы коэффициентов и получать независимые уравнения. Чем сильнее различаются вклады различных J и M в разных кинематических ситуациях, тем более информативными являются соответствующие эксперименты.

Ясно, что при низких энергиях нейтронов, когда можно считать, что с ядром-мишенью взаимодействует только нейтронная *s*-волна, направление

ориентации спина ядра-мишени относительно пучка значения не имеет. Максимальный интерес с точки зрения использования азимутально-асимметричной ориентации представляет поэтому область, где заметный вклад дает *p*-волна, а вкладом более высоких орбитальных моментов можно пренебречь.

p-Нейтроны обладают следующей кинематической особенностью: проекция их орбитального момента *l*, равного единице, на направление пучка равна нулю, и угловая часть их волновой функции есть $Y_{10}(\theta, \varphi)$. Однако если перейти в систему координат, ось *z* которой перпендикулярна направлению пучка, то в ней соответствующим образом преобразованная волновая функция имеет вид

$$\Psi(\theta', \phi') = \sum_{m} D'_{0m} \left(0, \frac{\pi}{2}, 0 \right) Y_{1m}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(Y_{11}(\theta', \phi') + Y_{1-1}(\theta', \phi') \right).$$
(7)

Таким образом, в системе, связанной с пучком, орбитальный момент *р*нейтрона обладает максимальной плоскостной выстроенностью (проекция принимает лишь минимальное по модулю значение), а в системе, повернутой на 90°,— максимальной осевой выстроенностью (максимальные по модулю значения проекции). Соответствующая матрица плотности орбитального момента имеет вид

$$\hat{\rho}^{l} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$
(8)

Ввиду этого факта при дальнейших расчетах мы будем сравнивать именно эти две ситуации для трех вариантов взаимодействия *p*-нейтрона с ориентированным ядром-мишенью, располагая их в порядке возрастания кинематической сложности: поляризованное ядро + поляризованный нейтрон, поляризованное ядро + неполяризованный нейтрон, выстроенное ядро + неполяризованный нейтрон.

Основной величиной, подлежащей расчету, является матрица плотности образующихся состояний ядра и прежде всего ее диагональные элементы в зависимости от полного момента *J* и его проекции *M*. Для того чтобы охарактеризовать отклонение распределения заселенности по проекциям полного момента от однородного, удобно пользоваться линейными комбинациями элементов матрицы плотности — спин-тензорами (2) или пропорциональными им величинами — мультиполяризациями, которые вводятся следующими соотношениями [9]:

$$f_N^J = G_{N0}^J / \left[\left(JJJ - J | N0 \right) Sp\hat{\rho}^2 \right]$$
(9)

Важнейшими из этих величин являются $G_{10}^{J}(f_1^{J})$ (поляризация), $G_{20}^{J}(f_2^{J})$ (выстраивание), а также $G_{30}^{J}(f_3^{J})$ и $G_{40}^{J}(f_4^{J})$. Для поляризованных мишеней рассмотрим только простейший случай полной поляризации ²³⁵U, а для выстроен-

ных мишеней ²³⁵U приведем результаты расчетов, соответствующих реальным условиям в кристалле уранил-рубидиевого нитрата, поскольку достигнутая в экспериментах поляризация значительно ближе к единице, чем выстроенность.

Поляризованное ядро + поляризованный нейтрон. В этом случае при полной поляризации нейтронов пучка и ядер-мишени их матрицы плотности соответственно равны

$$\rho^I_{m_I,m_I'} = \delta_{m_I I} \delta_{m_I' I}, \quad \rho^s_{m_s,m_s'} = \delta_{m_s \pm s} \delta_{m_s' \pm s},$$

причем знак плюс соответствует параллельной поляризации мишени и нейтрона, а минус — антипараллельной. Результирующая матрица плотности составного ядра

$$\rho_{MM'}^{J} = \sum \rho_{m_{S}}^{S} \rho_{m_{l}m_{l}'}^{l} \left(Sm_{S}lm_{l} \left| JM \right) \left(Sm_{S}lm_{l}' \left| JM' \right) \right), \tag{10}$$

где при совпадении оси поляризации с направлением пучка ($\beta = 0$) $\rho_{m_l m_l'}^l = \delta_{m_l 0} \delta_{m_l' 0}$, а при $\beta = 90^\circ$ эта матрица имеет вид (8). Матрица спина канала

$$\rho_{m_{S}}^{S} = \sum_{m_{I},m_{s}} \rho_{m_{I}}^{I} \rho_{m_{s}}^{s} \left(Im_{I} sm_{s} \left| Sm_{s} \right)^{2} \right).$$
(11)

Результирующие значения для заселенностей состояний с данным $J G_{10}^J$ и G_{20}^J приведены в табл. 1, 2. Эти данные показывают, что азимутально-асимметричная поляризация приводит к сильному изменению вероятности образования составного ядра как функции J и M при поглощении p-нейтрона по сравнению с азимутально-симметричным случаем, что должно приводить к заметным эффектам в наблюдаемых сечениях деления и угловых распределениях осколков.

Поляризованное ядро + неполяризованный нейтрон. Этот случай отличается от предыдущего только видом спиновой матрицы плотности нейтрона, которая теперь равна

$$\rho_{m_s,m'_s}^s = \frac{1}{2s+1} \delta_{m_s,m'_s} \,. \tag{12}$$

Результаты расчетов приведены в табл. 3. Данные табл. 1—3 в совокупности показывают, что поворот направления поляризации по отношению к пучку является возможностью, дополнительной, например, к выключению поляризации или к изменению относительного направления поляризаций нейтронов и ядер-мишеней. Его можно использовать не только в экспериментах с делящимися, но и с более легкими поляризованными ядрами, например для идентификации *p*-резонансов и определения их спина.

Таблица 1.

поляризации ядра-мишени и неитрона												
		$\beta = 90^{\circ}$		$\beta = 0^{\circ}$								
	J = 3	4	5	4	5							
$G_{0\ 0}$	0,1470	0,03333	0,1541	0,2667	0,0603							
G_{10}	0.2205	0,03873	0,2415	0,4131	0,0763							
G_{20}	0.2121	0,01339	0,2557	0,4254	0,0409							
G_{22}	0	0	-0,0139	0	0							
G_{30}	0,1588	-0,02225	0,2253	0,3559	-0,0183							
G_{32}	0	0	-0,0279	0	0							
G_{40}	0,0940	-0,04693	0,1734	0,2503	-0,0709							
G_{42}	0	0	-0,0374	0	0							

Значения спин-тензоров *G*^{*J*}_{*k*^{*k*}} в зависимости от угла β между осью поляризации и направлением пучка нейтронов для случая параллельных стопроцентных поляризаций ядра-мишени и нейтрона

Таблица 2.

Значения спин-тензоров G^J_k в зависимости от угла β между осью поляризации и направлением пучка нейтронов для случая антипараллельных поляризаций нейтрона и ядра-мишени

		β=	90°		$\beta = 0^{\circ}$				
	J = 2	3	4	5	3	4	5		
$G_{0 0}$	0,1397	0,05512	0,1625	0,01633	0,2572	0,0917	0,0134		
G_{10}	0,1976	0,06512	0,2420	0,01986	0,3858	0,1065	0,0127		
G_{20}	0,1670	0	0,2336	0,00939	0,3712	0,0366	0,0015		
G_{22}	0	0	-0,0163	-0,00418	0	0	0		
G_{30}	0,0197	0,00744	0,1847	0,00604	0,2778	0,06118	0,0149		
G_{32}	0	0	-0,0304	-0,00627	0	0	0		
G_{40}	0,2241	0,08226	0,1316	0,05396	0,1645	0,1291	0,0157		
G_{42}	0	0	-0,0371	-0,00467	0	0	0		

Таблица 3.

Значения спин-тензоров в зависимости от полного момента составного ядра *J* и угла между осью поляризации и направлением нейтронного пучка для системы: полностью поляризованное ядро + неполяризованный нейтрон

		-			0				
		$\beta =$	90°			$\beta = 0^{\circ}$			
	J = 2	3	4	5	3	4	5		
G_{00}	0,06987	0,10105	0,09791	0,08521	0,12861	0,17916	0,03685		
G_{10}	0,09882	0,13779	0,14039	0,13070	0,04449	0,25981	0,19291		
G_{20}	0,08351	0,10607	0,12345	0,13252	0,0197	0,23100	0,18563		
G_{22}	0	0	-0,08141	-0,00905	0	0	0		
G_{30}	0,04941	0,04961	0,08124	0,10961	-0,01662	0,14738	0,13891		
G_{32}	0	0	-0,15231	-0,01707	0	0	0		
G_{40}	0,01867	0,00587	0,04232	0,07773	-0,04336	0,0606	0,0822		
G_{42}	0	0	-0,01855	-0,02103	0	0	0		

Таблица 4.

			и пап	равление	m ny na i	nempono	Б		
			<i>T</i> =	= ∞			$\mathbf{T}=0$,2 К	
		<i>J</i> = 2	3	4	5	J = 2	3	4	5
$\beta = 90^{\circ}$	$G_{0 0}$	0,0456	0,1102	0,125	0,0691	0,0418	0,1121	0,1306	0,0658
	G_{20}	0,0056	-0,0159	-0,0078	-0,0085	-0,0068	-0,0399	-0,0379	-0,0177
	G_{22}	-0,0068	0,0195	0,0096	-0,0249	-0,0090	0,0233	0,0139	-0,0284
	G_{40}	0	0	0	0	-0,0003	0,0049	0,00077	-0,0051
	G_{42}	0	0	0	0	0,0003	-0,0026	0,00014	0,0043
	G_{60}	0	0	0	0	0	-0,00017	0,00059	0,00101
	G_{62}	0	0	0	0	0	0,00019	-0,00035	-0,00074
$\beta = 0^{\circ}$	$G_{0 \ 0}$	0,0456	0,1102	0,125	0,0691	0,0562	0,1065	0,1138	0,0757
	G_{20}	-0,0111	0,0318	0,0157	-0,0407	-0,0208	-0,0022	-0,0228	-0,0550
	G_{40}	0	0	0	0	0,0013	-0,0050	0,0058	0,0159
	G_{60}	0	0	0	0	0	0,00041	-0,0012	-0,0022
			<i>T</i> = 0,1 K				T=0,	05 K	
		J=2	3	4	5	J = 2	3	4	5
$\beta = 90^{\circ}$	$G_{0 0}$	0,0383	0,1135	0:1346	0,0634	0,0344	0,1150	0,1391	0,0607
	G_{20}	-0,0146	-0,0569	-0,0607	-0,0256	-0,0211	-0,0751	-0,0877	-0,0362
	G_{22}	-0,0108	0,0259	0,0172	-0,0310	-0,0132	0,0287	0,0212	-0,0339
	G_{40}	0,00151	0,0100	0,00464	-0,0054	0,0040	0,0181	0,0153	0,00075
	G_{42}	0,00069	-0,0053	-0,00065	0,0079	0,0016	-0,0095	-0,0032	0,0125
	G_{60}	0	-0,00041	0,0020	0,0032	0	-0,000088	0,0058	0,0071
	G_{62}	0	0,00079	-0,0010	-0,0026	0	0,0029	-0,0017	-0,0071
$\beta = 0^{\circ}$	G_{00}	0,0632	0,1037	0,1057	0,0806	0,0709	0,1007	0,0967	0,0859
	G_{20}	-0,0302	-0,0277	-0,0488	-0,0661	-0,0450	-0,0573	-0,0740	-0,0794
	G_{40}	0,0034	-0,0040	0,0155	0,0299	0,0090	0,0067	0,0357	0,0497
	G_{60}	0	0,0013	-0,0045	-0,0076	0	0,0027	-0,0139	-0,0212

Значения спин-тензоров G^J_k в зависимости от температуры кристалла уранилрубидиевого нитрата и угла β между осью выстроенности ядер ²³³U

Выстроенное ядро + неполяризованный нейтрон. При ориентации ядер за счет взаимодействия их квадрупольных моментов с градиентом электрического поля кристалла матрица плотности является четной функцией М, и от нуля отличны только четные мультиполяризации, из которых важнейшими являются f_2^J и f_4^J . Именно эти величины наряду с заселенностью уровней по *J* были рассчитаны нами, чтобы оценить эффект азимутально-асимметричного выстраивания ядра ²³⁵U. При этом было использовано выражение для зависимости матрицы плотности от температуры кристалла из работы [10], и результирующие значения Sp ρ^J , G_{20}^J , G_{10}^J рассчитаны для значений температуры $T=\infty$; 0,2; 0,1; 0,05; 0 K. Результаты приведены в табл. 4. Они показывают, что переход к азимутально-асимметричному выстраиванию сравнительно слабо отражается на значениях выстроенности G_{20}^{J} и гораздо сильнее на G_{40}^{J} . Эта последняя величина, входящая в коэффициент при $Y_{40}(\theta, \phi)$ в выражении для углового распределения, начинает играть заметную роль, как видно из табл. 4, при T = 0,1 К и ниже. Именно при этих температурах и рекомендуется использовать азимутально-асимметричное выстраивание при ориентации ядер ²³⁵U в кристалле уранил-рубидиевого нитрата.

При совпадении оси пучка и направления ориентации измерения проводятся с двумя детекторами, расположенными под углами 0° и 90° к пучку, что позволяет получить анизотропию углового распределения осколков. При азимутально-асимметричной ориентации целесообразно использовать и третий детектор, регистрирующий вылет осколков в направлении, перпендикулярном двум указанным, поскольку угловые распределения также становятся азимутально-асимметричными.

Литература

- Roberts L. D., Walter F. J., Dabbs J. W. T. et al. Proc. Intern. Conf. on Nucl. Struct., Kingston, 1960, p. 884–890.
- 2. Dabbs J. W. T., Eggerman C., Cauvin B. et al. Proc. 2 IAEA Symp. on Phys. and Chem. of Fission. Vienna, 1969, p. 321—336.
- 3. Pattenden N. J., Postma H. Nucl. Phys., 1971, A167, 225.
- 4. Kuiken R., Pattenden N. J., Postma H. Nucl. Phys., 1972, A190, 401.
- 5. Гонин Н. Н., Горюнов В. К., Козловский Л. К. и др. ЯФ, 1975, 22, 692.
- 6. Гонин Н. Н., Козловский Л. К., Мастеров В. С. и др. ЯФ, 1983, 38, 557.
- 7. Moore M. S., Moses J. D., Keyworth G. A. et al. Phys. Rev., 1978, C18, 1328.
- Гольдфарб Л. Угловая корреляция и поляризация. В кн.: Ядерные реакции. Т. 1. М.: Госатомиздат, 1962, с. 154—207.
- 9. Хуцишвили Г. Р. УФН, 1954, 53, 381.
- Roberts L. D., Dabbs J. W. T. Nuclear Orientation. In: Ann. Rev. of Nucl. V. 11, Sci. Palo Alto, California, USA, Ann. Rev. INC, 1961, p. 175–212.

Azimuth-Asymmetrical Orientation in Experiments on Fission of Oriented Nuclei

V. S. Masterov, N. S. Rabotnov

The authors advocate expediency of experiments in an azimuth-asymmetrical geometry at high orientation of target nuclei and high neutron polarization. The necessary kinematical coefficients are calculated. It is shown that for an aligned ²³⁵U nucleus in uranyl-rubidium nitrate the proposed experiment performance is meaningful if the sample temperature is about 0.1 K. The experiment can be used to identify *p* resonances and determine their spins.

Исследование спиновой зависимости делимости в экспериментах по делению ориентированных ядер ²³⁵U быстрыми нейтронами

Н. Н. Гонин, М. А. Гусейнов, Л. К. Козловский, Н. С. Работнов, Д. И. Тамбовцев

Физико-энергетический институт, Обнинск

(Поступила в редакцию 1 февраля 1988 г.)

С помощью усовершенствованной методики изморены аффекты ориентации ядер мишени при делении ²³⁵U нейтронами с анергией 50—900 кэВ в полном сечении деления, квадрупольной и гексадекапольной составляющих угловых распределений осколков. Анализ этих данных совместно с результатами предыдущих работ позволил определить зависимость делимости от квантовых чисел *J*, *K*. Показано, что преимущественный вклад в деление на *p*-нейтронах вносят состояния с моментом $J = I \pm \frac{1}{2} (I = \frac{7}{2}$ — спин ядра-мишени), а при заданном *J* максимум делимости соответствует ~ $K \approx J/2$.

Экспериментальному и теоретическому исследованиям зависимости делимости составного ядра ²³⁶U вблизи порога от квантовых чисел $J^{\pi}K$ посвящено значительное число работ [1 — 16]. В настоящее время нами усовершенствована методика исследования реакции ²³⁵U(*n*, *f*) на ориентированных ядрах за счет использования криостата с растворением ³Не в ⁴Не и установки дополнительного детектора осколков, повышающего детальность измерения угловых распределений. Результаты экспериментов на этой установке и их анализ приводятся в настоящей работе. К анализу привлекаются данные [3 — 5, 7 — 9, 16] (детальнее см. в разд. 2).

1. Методика измерений

Методика измерений ориентационных эффектов в угловых распределениях осколков деления ²³⁵U в основном подобна описанной нами в [16]. Для измерения гексадекапольной составляющей углового распределения необходимо установить дополнительный детектор под углом 45° относительно оси ориентации. Геометрия эксперимента показана на рис. 1.

Ориентирование ядер достигалось за счет сверхтонкого электрического квадрупольного взаимодействия. Образец представлял собой мозаику из двух монокристаллических пластинок уранил-рубидиевого нитрата с естественным ураном толщиной 2,5 мм, на которые был нанесен слой изоморфного состава с высокообогащенным ²³⁵U толщиной 1 мг/см². Размер образца 2,5 × 2 см. Оцененный ноток нейтронов через образец составлял ~10⁷ нейтронов/см² с. Это

Ядерная физика, 1988, т. 48, вып. 6 (12), с. 1626—1634.

обеспечивало скорость набора событий в каждом из детекторов от 2 до 5 отсчетов/с.

Измерения проводились на каскадном генераторе КГ-2,5 ФЭИ. Источником нейтронов служила реакция (*p*, *n*). Использовались мишени двух типов: металлическая литиевая для получения нейтронов с энергиями от 50 до 200 кэВ и титан-тритиевая — для получения нейтронов с энергиями от 300 до 900 кэВ. Ток протонов составлял 300—400 мкА. Толщина литиевой мишени 25—27 кэВ, титан-тритиевой — 100 и 30 кэВ в единицах потерь энергии протонов.

Достигаемая в эксперименте степень ядерного выстраивания зависит в основном от двух факторов — температуры образца и совершенства монокристалла. Температура контролировалась угольными термометрами, прокалиброванными по анизотропии углового распределения α -частиц ²³³U, и оценивалась в 0,15 К. Ядерное выстраивание находилось по формулам

$$\tau_{2}^{I}(T) = \frac{1}{2I+1} \left[\frac{(2I+3)!}{(2I+2)!} \right]^{\frac{1}{2}} \left[-\frac{P}{kT} + \frac{4I(I+1)-15}{42} \left(\frac{P}{kT} \right)^{2} \right],$$
(1)

$$\tau_4^I(T) = \frac{1}{420} \frac{1}{2I+1} \left[\frac{(2I+5)!}{(2I-4)!} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{P}{kT} \right)^2, \tag{2}$$

P/k = 0,0154 K; $\tau_2^{7/2}$ (0,15 K) = -0,146, $\tau_2^{7/2}$ (1,1 K) = -0,025, $\tau_4^{7/2}$ (0,15 K) = 0,027, $\tau_4^{7/2}$ (1,1 K) = ,006. Для охлаждения образца до температуры 0,15 К использовался гелиевый рефрижератор растворения ³Не в ⁴Не [17]. На рис. 2 схематически изображен вертикальный разрез внутренней нижней части криостата. Медная подложка *6* с образцом и мониторирующим слоем находилась в центре вакуумной полости, ограниченной тепловым экраном, находящимся при температуре 1,1 К. Осколки деления регистрировались поверхностно-барьерными

Рис. 1. Горизонтальный разрез криостата в плоскости нейтронного пучка: 1 — корпус криостата, 2 — кристаллический образец на медной подложке, 3 — экран при T = 80 К; 4 — мониторный слой, 5 — нижний фланец корпуса криостата, 6 — угольный термометр, 7 — экран при T = 15 К, 8 — камера образца. C — ось ориентации ядер в образце





Рис. 2. Вертикальный разрез низкотемпературной части криостата: 1 — камера растворения, 2 — тефлоновая распорка, 3 — тефлоновая трубка, 4 — холодопровод, 5 — угольный термометр, 6 — медная подложка с образцом, 7 — кремниевый детектор, 8 — камера образца

кремниевыми детекторами специальной конструкции [18, 19]. Проблемы, возникающие при использовании полупроводниковых детекторов при гелиевых температурах, обсуждаются в [20]. Детекторы располагались на внутренней поверхности экрана под углами 0, 50, 100 и 135° к направлению пучка нейтронов, совпадающему в нашем эксперименте с *С*-осью ориентации ядер в образце. Из-за ухудшающегося с понижением температуры теплового контакта образца и медной подложки, к которой он приклеивался вакуумной замазкой, не удалось добиться более низкой температуры на образце, чем 0,15 К, хотя минимальная температура на медной подложке оценивается нами в 0,05 К.

Перепад температур между образцом и медной подложкой был вызван тепловыделением в образце главным образом из-за радиационного нагрева и, возможно, из-за вибраций, которых в условиях работы на ускорителе трудно избежать. Аналогичная проблема из-за неэффективного теплового контакта существует и для детекторов осколков, характеристики которых (амплитуда сигнала и разрешающая способность по энергии) сильно зависят от температуры. Поэтому были приняты меры против дрейфа их температуры во время измерений. По этой причине измерение эффектов ориентации проводилось относительно 1,1 К, а остаточная выстроенность ядер при этой температуре учитывалась путем введения поправок. Нагревание подложки («выключение» ориентации) проводилось с помощью электрического нагревателя. Чтобы нагреть подложку с образцом до температуры 1,1 К (при сохранении циркуляции ³He), достаточно мощности нагревателя 2—3 мВт. В дальнейшем эта мощ
 Иолином Лежандра
 Углы установки детекторов

 0°
 50°
 100°

 (Р₂(cos θ))
 0,86 (1,0)
 0,09 (0,12)
 -0,42 (-0,45)

 (Р₄(cos θ))
 0,62 (1,0)
 -0,28 (-0,43)
 0,21 (0,25)

Геометрические факторы эксперимента

Примечание. В скобках указаны значения полиномов для идеальной геометрии.

ность в течение 1—2 ч постепенно снижалась до 0,2—0,3 мВт. На последующее восстановление ориентации требовалось время около 6 ч.

Экспериментальная информация регистрировалась как в виде цифровых наборов по четырем каналам, так и в форме спектров осколков с прилегающей α -частичной частью спектра при двух температурах образца: 0,15 и 1,1 К. Затем составлялась система трех уравнений относительно подлежащих определению коэффициентов ΔA_0 , ΔA_2 и ΔA_4 , (см. ниже выражение (3)). Телесные углы, занимаемые детекторами и образцом относительно друг друга, достаточно велики, поэтому в эти уравнения должны быть внесены соответствующие геометрические факторы. Они были определены для реального варианта взаимного расположения образца и детекторов методом Монте-Карло и приведены в табл. 1 в виде полиномов Лежандра $P_2(\cos \theta)$ и $P_4(\cos \theta)$, усредненных по углам в пределах их допустимых значений. Геометрическая поправка оказывается не очень существенной для A_2 (15 % ее величины для идеальной геометрии), она значительно выше для A_4 (25 %) и особенно для A_0 (30 %). Поскольку эти величины сравнимы со статистической ошибкой измерений, не требуется слишком высокой точности вычисления геометрических поправок.

Хотя наблюдалась достаточно хорошая стабильность результатов от измерения к измерению, нельзя было исключить возможность существования систематической ошибки, связанной с отмеченной выше опасностью температурного дрейфа полупроводниковых детекторов, что приводило бы к смещению уровня дискриминации низкоэнергетической части спектра. Чтобы исключить или по крайней мере понизить вероятность связанной с этим ошибки, записанные спектры были обработать следующим образом. Осколочная часть спектра аппроксимировалась лоренцианом с пятью варьируемыми параметрами. На рис. 3 приведен пример такой аппроксимации для двух наборов в одном детекторе при двух температурах образца. Левая ветвь аппроксимирующей кривой экстраполировалась до пересечения с правым склоном α-частичного спектра. Точка пересечения принималась за границу раздела спектров. Осколочные части спектра выше границы раздела интегрировались. В подавляющем большинстве случаев положения этих точек для «холодного» и «теплого» замеров совпадали между собой с точностью ±1 канал, что указывало на малость (по сравнению со статистической) связанной с этим систематической ошибки.

Таблица 1.





Рис. 3. Энергетические спектры осколков деления ²³⁵U при разных температурах образца: ○ — *T* = 0,15 К, ● — *T* = 1,1 К. Сплошной линией изображены аппроксимирующие кривые

Рис. 4. Результаты измерений эффектов ориентации ядер мишени в угловом распределении осколков деления ²³⁸U нейтронами: ● — «тонкая» мишень (30 кэВ), ○ — «толстая» мишень (60 кэВ)

Полученные экспериментальные результаты приведены на рис. 4. Значок Δ у всех коэффициентов означает, что приведенные величины связаны с выстраиванием ядер мишени и обращаются в нуль для неориентированных ядер. Сравнение этих данных с ранее опубликованными нами в [16] указывает на достаточно хорошее совпадение значений ΔA_2 в соответствующем диапазоне энергий нейтронов и заметное уменьшение ΔA_0 . Это, очевидно, объясняется тем, что при обработке экспериментальных данных в [16] не было учтено $\Delta A_4 \neq 0$.

2. Обсуждение результатов

Анализ экспериментальных данных состоит в сопоставлении коэффициентов ΔA_0 , A_2^{Heop} , ΔA_2 и ΔA_4 , полученных в экспериментах, с соответствующими коэффициентами, входящими в выражения для дифференциального сечения деления ²³⁵U, представленного в форме разложения по полиномам Лежандра:

$$W(\theta) = \frac{d\sigma_f}{d\Omega} \left/ \sigma_f^{\text{Heop}} = \frac{1}{4\pi} \left[1 + \Delta A_0 + \sum_{N=2,4,\dots} A_N P_N(\cos\theta) \right].$$
(3)

Здесь $\Delta A_0 \equiv \Delta \sigma_f / \sigma_f^{\text{Reop}}$ — эффект ориентации спинов ядер мишени в сечении деления,

$$\Delta A_0 = \sum_{J,\pi} P_J^{J^{\pi}} \Delta A_0^{J^{\pi}}, \qquad (4)$$

где

$$P_f^{J^{\pi}} = \frac{T_l}{\sum_{l'} (2l'+1)T_{l'}} \frac{\gamma_f^{J^{\pi}}}{\left\langle \gamma_f \right\rangle},\tag{5}$$

 T_{l} — коэффициенты нейтронной проницаемости, $\gamma_{f}^{J^{\pi}}$ — парциальная делимость J^{π} -состояния, $\langle \gamma_{f} \rangle$ — средняя делимость,

$$\gamma_f^{J^{\pi}} = \sigma_f^{J^{\pi}} / \sigma_R^{J^{\pi}}, \quad \langle \gamma_f \rangle = \sigma_f / \sigma_R , \qquad (6)$$

 $\sigma_f^{J^{\pi}}$, σ_R — парциальное и полное сечения реакций.

Коэффициенты $\Delta A_0^{J^{\pi}}$ выражаются через спин-тензоры ориентации ядер мишени τ_2^{J} и коэффициенты U_{nN0} , протабулированные в [10]:

$$\Delta A_0^{J^{\pi}} = \frac{1}{\pi} \tau_2^I \sum_j U_{200} (I l j J).$$
⁽⁷⁾

Эффекты в угловом распределении осколков, связанные с ориентацией ядер мишени, описываются коэффициентами ΔA_N :

$$\Delta A_N = \sum_{J,\pi,K} P_f^{J^\pi} \Delta A_N^{J^\pi K} \beta_K^{J^\pi}, \qquad (8)$$

$$\Delta A_N^{J^{\pi}K} = (2N+1)\Delta G_N^{J^{\pi}} C_{JKN0}^{JK}, \qquad (9)$$

 $\Delta G_N^{J^{\pi}}$ — ненормированные спин-тензоры изменения ориентации J^{π} -состояний,

$$\Delta G_N^{J^{\pi}} = \frac{1}{\pi} \sum_{n=2,4,\dots,j} \tau_n^I U_{nN0} (IljJ),$$
(10)

 C_{JKN0}^{JK} — коэффициенты Клебша — Гордана, $\beta_{K}^{J^{\pi}}$ — функция распределения делимостей $\gamma_{f}^{J^{\pi}}$ по *K* (проекции *J* на ось симметрии ядра). Условие нормировки $\sum_{K} \beta_{K}^{J^{\pi}} = 1$.

Наконец, угловые распределения осколков деления неориентированных ядер определяются с помощью коэффициентов $A_N^{\text{неор}}$, выражения для которых имеют вид, подобный (8), но без значка Δ , причем

$$G_N^{J^{\pi},\text{Heop}} = \frac{1}{\pi} \sum_j U_{0N0} (IljJ).$$
(11)

Полученные данные несут информацию двух основных типов: о вкладе в процесс образования составного ядра различных парциальных нейтронных волн и о делимостях уровней составного ядра с разными комбинациями $J^{\pi}K$. Эту информацию нужно анализировать с учетом уже имеющихся данных по делению составного ядра²³⁶U при энергиях возбуждения, близких к порогу. Важнейшие из них: измерение угловых распределений осколков деления неориентированных ядер в реакции 235 U(n, f) [3, 8, 9]: деление ориентированных ядер ²³⁵Ú нейтронами резонансных и надрезонансных энергий [4, 6]; фотоделение ²³⁶U (см. обзор [7]). Основные физические выводы из этих результатов: барьер деления ²³⁶U для нижних каналов на несколько сот кэВ ниже энергии связи нейтрона B = 6,545 МэВ; преобладающий вклад в деление на *s*-нейтронах через состояния $J^{\pi} = 3^{-}, 4^{-}$ дают каналы с K = 1 и 2; при делении неориентированных ядер²³⁵U быстрыми нейтронами с энергией до ~150 кэВ наблюдается отрицательная анизотропия. Это рассматривалось как указание на преобладающий вклад каналов с К, отличным от нуля, также и при делении через состояния 2^+ , 3^+ , 4^+ , 5^+ , образующиеся при поглощении *p*-нейтронов.

Наиболее интересен для анализа данных настоящей работы интервал $E_n = 50 \div 300$ кэВ, где можно ограничиться учетом вклада только *s*- и *p*-нейтронов. Характеристики деления на *s*-нейтронах будем считать известными из работ [4, 6]: $\langle \gamma_f \rangle = 0.6$; $\langle K^2 \rangle = 2.5$ для обоих спинов. Кинематические коэффициенты, определяющие вклад каждого из состояний $J^{\pi}K$ в наблюдаемые величины ΔA_N , собраны в табл. 2.

Отправной для анализа примем точку $E_n = 100$ кэВ. По совокупности результатов измерений в диапазоне энергий нейтронов 50—100 кэВ [3, 8, 9, 15, 16], включая и настоящую работу, с учетом энергетического разброса нейтронов в измерениях примем для анализа следующие экспериментальные значения коэффициентов: $\Delta A_0 = -0.02$, $A_2^{\text{neop}} = -0.04$, $\Delta A_2 = 0.2$, $\Delta A_4 = -0.07$, a $\langle \gamma_f \rangle = 0.66$ (см. [11]).

Данные табл. 2 показывают, что даже вклады чистых состояний $J^{\pi}K$ в эти коэффициенты имеют небольшую абсолютную величину и разные комбинации знаков, что значительно сужает возможности их сочетания. Кроме того, для объяснения порядка наблюдаемых абсолютных величин ΔA_0 и $A_2^{\text{неор}}$, которые равны нулю для *s*-нейтронов, требуется большая доля *p*-нейтронов. Различные теоретические оценки их вклада с использованием оптической модели колеблются при $E_n = 100$ кэВ от 60 [21] до 90 % [22]. Максимальная из этих оценок является необходимой для объяснения наблюдаемых эффектов, поэтому для расчетов были выбраны T_{lj} из [22].

Эффект выстраивания в полном сечении деления ΔA_0 не зависит от распределения делимостей по *K*. а только по *J*. В этом заключается главный смысл измерения ΔA_0 . Так как *s*-нейтроны вклада в ΔA_0 не дают, то знак и величина ΔA_0 целиком определяются состояниями положительной четности. Отрицательное ΔA_0 означает (см. табл. 2), что вклад состояний 3⁺, 4⁺ в сечение деления должен превышать вклад состояний 2⁺, 5⁺. Данные табл. 2 позволяют качественно классифицировать состояния с различными $J^{\pi}K$ по числу совпадений знаков $\Delta A_N^{J^{\pi}K}$ — вклада этих состояний в коэффициенты $\Delta A_0, A_2^{\text{неор}}, \Delta A_2, \Delta A_4$ — со знаками коэффициентов. Видно, что корреляции этих знаков заметно сильнее для «средних» состояний 3⁺ и 4⁺, чем для «крайних» 2⁺ и 5⁺. Уровни 3⁺ и 4⁺ образуются и при j = 1/2 и при j = 3/2, их вклад в образование составного ядра выше.

Таблица	2
таблица	4.

J^{π}	V	Ядра мишени н	не ориентированы	Ядра мишени ориентированы			
J^{κ}	K	$A_0^{J^{\pi}}$	$A_2^{J^{\pi_K}}$	$\Delta A_0^{J^{\pi}}$	$\Delta A_2^{J^{\pi_K}}$	$\Delta A_4^{J^{\pi_K}}$	
3-	0				+0,192	0,031	
	1	0,4375	0	0	0,144	0,005	
	2	,			0	-0,036	
	3				-0,240	0,015	
4^{-}	0				0,247	0,040	
	1				0,210	0,020	
	2	0,5625	0	0	0,100	-0,024	
	3				-0,087	-0,046	
	4				-0,346	0,030	
2^+	0		0,090		0,104	0,019	
	1	0,3125	0,045	0,082	0,052	-0,012	
	2		-0,090		-0,104	0,003	
3+	0		-0,293		0,400	-0,054	
	1	0.975	-0,220	0.029	0,300	-0,009	
	2	0,875	0	-0,038	0	0,063	
	3		0,367		-0,500	-0,027	
4^+	0		-0,161		0,500	0,097	
	1		-0,137		0,424	0,049	
	2	1,125	-0,065	-0,128	0,200	-0,060	
	3		0,057		-0,176	-0,114	
	4		0,225		-0,698	0,076	
5^{+}	0		0,460		0,209	0,245	
	1		0,412		0,186	0,163	
	2	0.60	0,275	0.094	0,125	-0,041	
	3	0,09	0,045	0,084	0,021	-0,245	
	4		-0,275		-0,125	-0,245	
	5		-0,687		-0,312	0,245	

Значения кинематических коэффициентов, входящих в выражения (4)—(10)

Таблица 3.

Чувствительность	ориентационных	эффектов	к вариации	делимостей
	компаунд-со	стояний J^3	π	

Вариант расчета		$\gamma_f^{J^{\pi}} / \langle \gamma_f \rangle$						A_2^{heop}	ΔA_2	ΔA_4	
	3-	4-	2^{+}	3+	4+	5+					
1	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	0	-0,059	0,196	-0,100	
2	1,0	1,0	1,5	1,0	1,5	0	-0,033	-0,077	0,228	-0,037	
3	1,0	1,0	1,5	0,8	1,5	0,2	-0,024	-0,060	0,210	-0,051	
4	1.0	1,0	1,5	0,8	1,5	0,3	-0,021	-0,053	0,203	-0,059	
5	1,0	1,0	1,4	0,8	1,4	0,4	-0,018	-0,056	0,205	-0,064	

Примечание. Расчет проведен для набора коэффициентов проницаемости T_{lj} [22], δ -образного распределения, причем K = 1 для состояний 2^+ , 3^+ , K = 2 для состояния 4^+ , K = 3 для состояния 5^+ .

Таблица 4.

Чувствительность расчетных значений $A_2^{\text{неор}}$, ΔA_2 и ΔA_4 к уширению δ -образных распределений относительно K^J

α	A_2^{heop}	ΔA_2	ΔA_4
0	-0,056	0,205	-0,064
0,1	-0,056	0,184	-0,060
0,15	-0,055	0,175	-0,057
0,20	-0,055	0,165	-0,054
0,30	-0,055	0,149	-0,045
Экспериментальные значения			
	$-0,040 \pm 0,015$	$0,200 \pm 0,015$	-0,070 + 0,022

Примечание. Расчет проведен для набора коэффициентов T_{lj} из [22] и варианта (5) распределении делимостей из табл. 3.

В серии работ [10—14] были детально проанализированы результаты экспериментов [4, 6, 10]. При этом для описания распределения делимостей по Kиспользовались их моменты $\langle K^2 \rangle$ и $\langle K^4 \rangle$. Число неизвестных при этом сокращается, но все еще заметно превышает число уравнений, и для их решения необходимо накладывать связи на коэффициенты. Работы [10—14] выполнены до получения информации но ΔA_4 , кроме того, их авторы были вынуждены использовать, как мы теперь понимаем, несколько завышенные по абсолютной величине значения ΔA_0 . Это сказалось на результатах анализа, и возникающие трудности в объяснении прежде всего эффекта в сечении отмечались в [11, 13].

Анализ дополненной и уточненной совокупности данных проводится нами примерно по тон же схеме, что и в [11]. Используются тс же наборы T_{ij} . Основное изменение в предположениях сводится к следующему. Данные указывают на больший вклад состояний 3⁺, 4⁺, однако предполагать, что $\gamma_f^{2+} = \gamma_f^{5+} \ll 1$, как
в [11], мы считаем неправомерным, поскольку согласно данным по фотоделению [7] барьер состояний 2⁺ лежит гораздо ниже энергии связи нейтрона и $\gamma_f^{2^+}$ должна быть близка к единице.

Простейший, но сильно идеализированный способ попытаться объяснить значение эффектов при 100 кэВ состоят в том, чтобы для каждого из состояний 2^+ , 3^+ , 4^+ , 5^+ выбрать одно значение *K*, наиболее предпочтительное по результатам предварительного качественного анализа набора экспериментальных данных ΔA_0 , A_2^{Heop} , ΔA_2 , ΔA_4 , и рассчитать их значения. Результаты таких расчетов приведены в табл. 3. В расчетах принято, что $\beta_K^{J^+} = 0$ для всех значений *K*, кроме K = 1 для состояний 2⁺ и 3⁺, K = 2 для состояния 4⁺ и K = 3 для состояния 5⁺. Для состояний отрицательной четности принято распределение по K, дающее $\langle K^2 \rangle = 2,5$ для обоих спинов. Как видно из табл. 3, при условии, что делимости в состояниях 2⁺ и 4⁺ приняты равными или близкими к максимально возможным значениям, последовательно увеличивая вклад состояния 5⁺, можно получить такой набор $\gamma_f^{J^+}$, который дает удовлетворительное согласие всех расчетных коэффициентов с их экспериментальными значениями (вариант 5). Следует отметить, что для равномерного распределения делимостей по J^{π} (вариант 1) эффект в сечении $\Delta A_0 = 0$, а для A_2^{heop} , ΔA_2 и ΔA_4 , получаются значения, не сильно отличающиеся от экспериментальных. Таким образом, эффект в сечении возникает только за счет неравномерности распределения делимостей по J, а остальные коэффициенты определяются видом функции β_K^J и слабо зависят от распределения делимостей по Ј.

Однако δ -образные распределения по K нереалистичны. Следующий шаг — уширение этих распределений. В табл. 4 приведены результаты для распределений β_{K}^{J} , расширенных симметрично однопараметрически таким образом, чтобы $\beta_{K\pm 1}^{J} = \alpha \beta_{K}^{J}$, остальные $\beta_{K}^{J} = 0$. Чувствительными к такому уширению оказываются ΔA_2 и ΔA_4 , при изменении α от 0 до 1 они уменьшаются по величине почти вдвое, в то время как $A_2^{\text{неор}}$ практически не изменяется. Именно вариации ΔA_2 и ΔA_4 кладут предел допустимому уширению распределений β_{K}^{J} , т. е. ограничивают величину α . Максимальная величина, при которой расхождение между экспериментальными и расчетными значениями ΔA_2 и ΔA_4 не превышает двух стандартных отклонений, составляет $\alpha_{\text{max}} = 0,15$. Таким образом, распределения β_{K}^{J} имеют максимумы при $K \approx J/2$, и суммарная примесь двух соседних K, вероятно, не превышает 30 %.

Заключение

Вышеизложенное позволяет сделать следующие основные выводы:

1. Измерение угловых распределений осколков деления ориентированных ядер под тремя углами позволяет выделить гексадекапольную составляющую и существенно уточнить эффект ориентации в полном сечении деления.

2. Совместный анализ этих данных показывает, что при энергии $E_n = 100 \div 200$ кэВ вклад *s*-нейтронов в сечение образования составного ядра должен составлять ~10÷15%.

3. Знак эффекта в сечении говорит, что состояния 3^+ , 4^+ дают больший суммарный вклад в сечение деления на *p*-нейтронах, чем 2^+ , 5^+ , на то же самое указывает отрицательная анизотропия на неориентированных ядрах.

4. Знак и сравнительно большая абсолютная величина ΔA_4 облегчают получение распределения делимостей по *K*. Распределения, по-видимому, имеют резкие максимумы при $K \approx J/2$.

5. В силу независимости от K величина ориентационного эффекта в сечении ΔA_0 очень информативна с точки зрении построения распределения делимостей по J. Поэтому весьма желательны более детальные и точные измерения этого эффекта.

Литература

- Bohr A. // Proc. Intern. Conf. on Peaceful Uses of Atomic Energy. Geneva, 1955. Vol. 2, p. 151.
- 2. Струтинский В. М. // Атом. энергия, 1957, т. 2, с. 508.
- 3. *Нестеров В. Г. и др. //* ЯФ, 1966, т. 4, с. 399.
- Dabbs J. W. T. et al. // Proc. Symp. on Phys. and Chem. of Fission. IAEA. Vienna, 1969, SM-122/123.
- 5. Back B. B. et al. // Phys. Rev., 1974, C10, p. 1948.
- 6. Pattenden N. J., Postma H. // Nucl. Phys., 1971, A167, p. 225.
- 7. Остапенко Ю.Б., Смиренкин Г.Н., Солдатов А.С. // ЭЧАЯ, 1981, т. 12, с. 130.
- 8. Шпак Д.Л. и др. // ЯФ, 1975, т. 21, с. 704.
- 9. *Андросенко Х. Д., Королев Г. Г., Шпак Д. Л.* // ВАНТ. Сер.: Ядерные константы, 1985, № 2, с. 24.
- 10. Барабанов А. Л., Гречухин Д. П. Препринт ИАЭ-4099, М., 1985.
- 11. Барабанов А. Л., Гречухин Д. П. Препринт ИАЭ-4163, М., 1985.
- 12. *Барабанов А. Л., Гречухин Д. П.* // ВАНТ. Сер.: Общая и ядерная физика, 1985, № 2, с. 101.
- 13. Барабанов А. Л., Гречухин Д. П. // ЯФ, 1986, т. 43, с. 1386.
- 14. Барабанов А. Л., Гречухин Д. П. // ЯФ, 1986, т. 43, с. 798.
- 15. Гонин Н. Н. и др. // ЯФ, 1975, т. 22, с. 692.
- 16. Гонин Н. Н. и др. // ЯФ, 1983, т. 38, с. 557.
- 17. Гонин Н. Н. и др. Препринт ФЭИ-1542 Обнинск, 1984.
- 18. Gonin N. N. et al. // Cryogenics, 1978, vol. 18, p. 57.
- 19. Дьяченко П. П., Серегина Е.А. А. с. 591084 СССР // Б. И. 1980, № 44, с. 299.
- 20. Гонин Н. Н. и др. Препринт ФЭИ-1301, Обнинск, 1982.
- 21. Lagrange Ch. NEANDC(E)228, "L". INDC(FR), 56/L. Ed. CEA, 1982.
- 22. Auerbach E. H., Perey F. G. J. BNL 765 (T-286), 1962.

Experimental Study of Spin Dependence of Fissionability in Fast-Neutron-Induced Fission of ²³⁵U Oriented Nuclei

N. N. Gonin, M. A. Guseinov, L. K. Kozlovsky, N. S. Rabotnov, D. I. Tambovtsev

Making use of an improved technique, we have studied ²³⁵U fission induced by 50—900 keV neutrons aiming to measure the nuclear target orientation effects in the total fission cross section and in quadrupole and hexadecapole components of angular distribution of fragments. Analyzing these data and making use of the previous results we have found the fissionability dependence upon the quantum numbers *J*, *K*. We have shown that the slates with momentum $J = I \pm \frac{1}{2}$ ($I = \frac{7}{2}$ is tire spin of the target nucleus) dominate fission on p neutrons, and at given *J* the fissionability maximum corresponds to $K \approx J/2$.

Об угловых распределениях осколков деления ориентированных ядер ²³⁵U резонансными нейтронами

Н. Н. Гонин, Л. К. Козловский, Н. С. Работнов, Д. И. Тамбовцев

Физико-энергетический институт, Обнинск, Россия

Угловые распределения осколков деления ориентированных ядер резонансными нейтронами обнаруживают особенности, резко отличающиеся от характеристик угловых распределений осколков при делении того же составного ядра в реакциях на бесспиновых мишенях. Прежде всего это проявляется в подавлении состояний с K = 0. В работе исследуется влияние на эти угловые распределения обрезания снизу статистических распределений делительных ширин резонансов из-за ограниченности экспериментальной выборки или из-за слабо флуктуирующей составляющей в делительной ширине. Показано, что этот эффект деформирует угловые распределения качественно нужным образом.

Введение

Деление ориентированных ядер резонансными нейтронами является единственным способом получения и исследования анизотропных угловых распределений осколков в состояниях, соответствующих поглощению *s*-нейтрона. При использовании неориентированных мишеней эти угловые распределения изотропны. Их изучение на выстроенных ядрах ²³⁵U [1, 2] обнаруживает особенности в распределении по квантовому числу К, резко отличающиеся от характеристик угловых распределений осколков при делении того же составного ядра, полученного в реакциях на бесспиновых мишенях — ²³⁶U(*γ*, *f*) и 234 U (*t*, *pf*), что прежде всего проявляется в подавлении состояний с K = 0. В работах [3-5] было высказано предположение, что это может быть следствием частичного сохранения числа К в резонансных состояниях, т. е. отличия этого распределения от однородного. Тогда большие значения К во входном — нейтронном — канале будут модулировать распределение по К в выходном — делительном — канале, сдвигая его в сторону больших значений. Ниже исследуется влияние на частотное распределение A_2 обрезания снизу статистических распределений делительных ширин резонансов, которое является следствием их пропуска при измерении угловых распределений или же суммарного вклада в делительную ширину многих слабо открытых каналов, которые суммируются в почти нефлуктуирующее слагаемое. Эти эффекты оказывают заметное влияние в нужном направлении.

1. Угловые распределения в резонансной области

Угловые распределения осколков деления ориентированных ядер обычно представляются в виде разложения по полиномам Лежандра

Ядерная физика, 1994, т. 57, вып. 7, с. 1235—1239.

$$W(\theta) = 1 + \sum_{\text{четн.}\,n} A_n(I, J, K) f_n(I) P_n(\cos \theta).$$
(1)

Коэффициенты этого разложения распадаются на два сомножителя: параметры f_n описывают ориентацию спина ядра мишени I, а значения A_n зависят от спина составного ядра J и его проекции K на ось деформации ядра, вдоль которой разлетаются осколки.

Если считать, как это имело место в выполненных до сих пор экспериментах [1, 2], что для описания ориентации ядер-мишеней достаточно низшего спин-тензора четного порядка — выстроенности f_2 , то в разложении углового распределения по полиномам Лежандра будет присутствовать единственное анизотропное слагаемое, пропорциональное $P_2(\cos \theta)$. В этом случае

$$f_2 = -\frac{(I+1)(2I+3)(2I-1)}{45I}\frac{P}{kT},$$
(2)

где T — температура кристалла, в котором осуществляется выстраивание, а P — константа спинового гамильтониана, который расщепляет основное состояние ядра в неоднородном электрическом поле кристалла

$$H = P \Big[I_z^2 - I (I+1)/3 \Big].$$
(3)

Для кристалла уранил-рубидиевого нитрата, в котором ориентируются ядра урана, по оценке работы [1] P/k = 0,0154 К. Коэффициент A_2 в выражении (1) для «чистых» состояний с определенным *К* имеет следующий вид:

$$A_2(I,J,K) = \frac{15I}{4(I+1)} \left[\frac{3K^2}{J(J+1)} - 1 \right].$$
 (4)

При поглощении *s*-нейтрона ядром ²³⁵U, имеющим в основном состоянии спин $I = 7/_2$ и отрицательную четность, образуются компаунд-состояния с комбинациями спина и четности $J^{\pi} = 3^-$ и 4⁻. Если бы деление из каждого состояния происходило только через канал с определенным значением *K*, то каждой комбинации *J* и *K* отвечало бы вполне определенное значение коэффициента A_2 . Эти значения сведены в таблицу.

Наблюдаемые значения коэффициентов A_2 для резонансов ²³⁵U отрицательны и по модулю в большинстве случаев заключены между единицей и двойкой у обеих спиновых подсистем. Это означает, что в усредненное значение для каждого резонанса основной вклад дают K = 1, 2.

Значения коэффициентов A₂ для различных J и K

J, K	A_2	<i>J, K</i>	A_2
3,0	-2,92	4,0	-2,97
3,1	-2,19	4,1	-2,48
3,2	0	4,2	-1,17
3,3	+3,65	4,3	+1,02
		4,4	+4,08

2. Частотное распределение коэффициента A₂ в разложении по полиномам Лежандра как характеристика угловых распределений

Многолетнее изучение структуры каналов деления четно-четных ядер позволяет уверенно утверждать, что их спектр подобен спектру низколежащих возбужденных состояний тех же ядер: сперва идет основная ротационная полоса положительной четности $(J^{\pi}, K) = (0^+, 0), (2^+, 0), (4^+, 0)...,$ затем полоса отрицательной четности $(J^{\pi}, K) = (1^-, 0), (3^-, 0), (5^-, 0)...$ и уровни положительной четности с K = 2, соответствующие гамма-колебаниям. При энергиях возбуждения, близких к энергии связи нейтрона, вкладом каналов с K > 2 можно пренебречь. Коллективные возбуждения (4⁻, 0) запрещены по четности. Таким образом, можно считать, что вклад в делительную ширину и в формирование угловых распределений из всех состояний, представленных в таблице, вносят лишь состояния (3⁻, 0), (3⁻, 1), (3⁻, 2), (4⁻, 1), (4⁻, 2). Они и будут учитываться ниже.

Согласно общепринятым представлениям, восходящим к известной работе Портера и Томаса [6], амплитуду ядерной реакции, проходящей через уровни составного ядра с одинаковым спином и четностью, можно считать суммой m нормально распределенных случайных величин (m — число каналов реакции), и, следовательно, приведенная ширина соответствующей реакции, пропорциональная квадрату модуля этой амплитуды, описывается χ^2 -распределением с m степенями свободы. Это распределение имеет вид

$$\Phi_m(Y) = \frac{1}{\Gamma(m/2)2^{m/2}} Y^{(m-2)/2} e^{-Y/2}, \quad Y > 0, \tag{5}$$

где Г — гамма-функция, а *Y* — отношение случайной величины к ее среднему значению.

При экспериментальном изучении деление ориентированных ядер нейтронами появилась возможность измерять угловые распределение осколков деления в отдельных резонансах. Лучше всего изучен ²³⁵U [1, 2], который был также объектом исследования на быстрых нейтронах [3–5].

Одним из вопросов, которые возникают при интерпретации этих опытов, является следующий: не влияет ли входной канал (поглощение нейтронов с образованием составного ядра) на угловое распределение осколков за счет частичного сохранения квантового числа *К* в состояниях составного ядра вблизи энергии связи нейтрона. Данные [3–5] указывают на такую возможность.

Основная трудность при интерпретации данных по резонансным угловым распределениям — объяснение частотных распределений коэффициентов A_2 . Наблюдаемое значение A_2 в резонансе — результат усреднения по проницаемостям каналов с различными *K*. Эти проницаемости мы будем обозначать β_K , а безразмерную парциальную ширину $x_K = \Gamma_{fK} / \beta_K \langle \Gamma_f \rangle$. Таким образом,

$$\Gamma_f = \left\langle \Gamma_f \right\rangle \sum_K \beta_K x_K;$$

$$A_{2} = \left(\sum_{K} \beta_{K} x_{K} A_{K} \left(J, K\right)\right) / \left(\sum_{K} \beta_{K} x_{K}\right).$$
(6)

Тогда на основании выражения (5) при m = 2 в случае двух конкурирующих каналов *J*, *K* путем соответствующего интегрирования получается следующее распределение для A_2 :

$$P(A_2) = \pi^{-1} \Big[\Big(A_2(J, K_1) - A_2 \Big) \Big(A_2 - A(J, K_2) \Big) \Big]^{-1/2}.$$
(7)

Оно имеет острые (формально расходящиеся) пики при $A_2 = A(J, K_i)$. Их происхождение вполне понятно. Выражение (7) для A_2 имеет структуру $A_2 = (Ax + By) / (x + y)$, где x и y флуктуируют сильно и независимо в соответствии с распределением (5). В большинстве случаев либо $x \gg y$, либо $y \gg x$, одним из членов и в числителе, и в знаменателе можно пренебречь, и в результате получим $A_2 = A$ или $A_2 = B$. Но в эксперименте ничего похожего не наблюдается. Это иллюстрируют рис. 1 и 2, где распределения $P(A_2)$, смоделированные с помощью датчика случайных чисел на хорошей статистике (5000 «резонансов»), сравниваются с экспериментальными данными [2] для двух спиновых подсистем с двумя наборами значений Вк в каждом случае. Экспериментальная статистика весьма скудна — двадцать — тридцать случаев. Эти рисунки иллюстрируют упомянутую выше трудность: при любом выборе β_k pacчетные распределения имеют резкие максимумы при одном из «чистых» значений А₂ из таблицы, чего в эксперименте не наблюдается. Никакие попытки варьирования β_{κ} положения не изменяют, они меняют только удельный вес максимумов.

Спины уровней, соответствующих резонансным состояниям ²³⁵U, определены для 91 резонанса 3⁻ и 105 резонансов 4⁻ [7], (см. также [8]). В силу значительных экспериментальных трудностей угловые распределения осколков деления на ориентированных мишенях измерены лишь для 21 и 37 резонансов соответственно. Естественно, что это сильные резонансы с относительно большими делительными и приведенными нейтронными ширинами. Этот процесс экспериментального отбора сильных резонансов фактически приводит к тому, что распределения их ширин заметно отличаются от (5), они обрезаны снизу. Мы смоделировали это обрезание простейшим способом — «выбраковкой» при вычислениях A_2 по формуле (6) значений x_K , задаваемых датчиком случайных чисел, если они ниже некоторого порогового значения, которое варьируется в расчетах. Влияние этого обрезания на примерах тех же двух наборов β_{κ} , которые соответствуют рис. 1 и 2, показано на рис. 3 и 4. Видно, что резкие разнесенные пики случая (0; 0,5; 0,5) с усилением обрезания заменяются широким центральным максимумом, а единичный краевой максимум случая (0,8; 0,15; 0,05) лишь незначительно сдвигается влево.

Детальный анализ данных [2] по делению выстроенных ядер резонансными нейтронами, выполненный в [9], показал, что относительные вклады каналов с K = 0, 1, 2 для J = 3 примерно равны 0,11; 0,56; 0,33, а каналов с K = 1, 2



Рис. 1. Сравнение теоретических распределений (7) с экспериментальным частотным распределением коэффициента анизотропии A_2 осколков деления ориентированных ядер для 3⁻-резонансов ²³⁵U. Относительное открытие каналов с K = 0, 1 и 2: $\circ - 0, 0, 5, 0, 5; \Delta - 0, 8, 0, 15, 0, 05; * — эксперимент [2]$

Рис. 2. То же, что на рис. 1, для 4⁻-резонансов ²³⁵U. Относительное открытие каналов с K = 0, 1 и 2: $\circ - 0, 0, 5, 0, 5; \Delta - 0, 0, 8, 0, 2; * — эксперимент [2]$

для $J = 4^{-1}$ соответственно 0,63; 0,37. В экспериментах по фотоделению ²³⁶U исследование дипольной компоненты в угловых распределениях позволяет надежно оценить отношение вкладов каналов с K = 0 и K = 1 для состояний 1⁻. порог которых практически совпадает с порогом для состояний 3⁻. Согласно результатам, изложенным в работе [10], это отношение при энергии возбуждения, равной энергии связи нейтрона, составляет примерно 1:1. Нейтронные эксперименты дают, как мы видим, 1:5. В предположении частичного сохранения К в резонансных состояниях это подавление можно интерпретировать как результат влияния входного канала, в котором присутствуют только максимальные значения K, равные J и J-1. Однако в данной работе мы просто считали упомянутые распределения по K эмпирическим фактом и, используя их, вычислили частотные распределения A₂ для различных уровней обрезания. Эта результаты приведены на рис. 3, 4. Они показывают, что введение обрезания сдвигает форму распределений качественно в правильном направлении, заменяя острые локальные максимумы широким центральным пиком. Очень скудная экспериментальная статистика — не больше десяти случаев на столбец гистограммы — не позволяет детализировать сравнение и подбирать параметры. Интегрируя распределение (5) (результат выражается через неполную Г-функцию), легко убедиться, что обрезание на уровне 0,1 соответствует пропуску 25 % резонансов, на уровне 0,5 — пропуску 52 %, на уровне 1,0 —



Рис. 3. Сравнение теоретических распределений коэффициента A_2 для относительного открытия делительных каналов с K = 0, 1, 2, равного 0, 0, 5, 0, 5 соответственно, полученных путем «обрезания» снизу парциальных распределений Портера — Томаса с экспериментальным распределением A_2 для 3⁻-резонансов ²³⁵U. □ — 0,1; Δ — 0,5; \circ — 1,0. Линия без значков — без «обрезания»; * — эксперимент [2]

Рис. 4. То же, что на рис. 3, но для 4⁻-резонансов ²³⁵U

пропуску 68 %. Экспериментальная ситуация работы [2] близка, таким образом, к обрезанию на уровне 1,0.

Помимо пропуска резонансов с малыми делительными ширинами существуют и физические эффекты, приводящие к аналогичному результату: вклад в делительную ширину большого числа либо слабо открытых делительных каналов, либо (*n*, γf)-каналов. Это слагаемое должно быть малым и почти не флуктуирующим, что приблизительно эквивалентно обрезанию распределения ширин снизу. Рассмотрим этот вопрос количественно. Пусть безразмерная ширина *z* (со средним значением 1) является суммой двух слагаемых $z = \alpha x + \beta y$, где $\alpha + \beta = 1$, $\alpha \gg \beta$, *x* и *y* подчиняются распределению (5) с числами каналов μ и v соответственно, где μ мало, а v велико. Тогда для *z* получается распределение

$$P_{\nu\mu}(z)dz = \frac{dz}{\beta} \int_{0}^{z/\alpha} P_{\mu}(x) P_{\nu}\left(\frac{z-\alpha x}{\beta}\right) dx,$$
(8)

где парциальные распределения P_{μ} даются выражением (5).

Для иллюстрации рассмотрим аналитически простейший случай, когда интеграл (8) берется в явном виде: v = 2 (экспоненциальное распределение) и

четные значения $\mu = 2n$, позволяющие избежать полуцелых степеней в подынтегральном выражении. В результате получаем

$$P_{\mu 2}(z)dz = d\left(\frac{z}{\beta}\right)e^{-z/\beta}\left(1 - e^{-p}\sum_{k=0}^{n-1}\frac{p^k}{k!}\right) / \left(1 - \frac{\alpha}{n\beta}\right)n,$$

$$p = \frac{z}{\alpha}\left(n - \frac{\alpha}{\beta}\right).$$
(9)

где

Распределения (9) были рассчитаны для $\beta = 0,1$ в наиболее интересной области малых значений аргумента 0 < z < 0,5 для n = 2, 3, ..., 10 ($\nu = 4, 6, ..., 20$).



Рис. 5. Распределения (9) для $\beta = 0,1$, $\nu = 4, 6,..., 20$ и n = 2, 3,..., 10 (сплошные линии) в сравнении с «невозмущенным» экспоненциальным распределением (точки)

Результаты представлены на рис. 5, где они сравниваются с «неискаженным» экспоненциальным распределением. Рисунок 5 показывает, как и ожидалось, что добавление многоканального слагаемого в ширины действительно очень близко к обрезанию распределения снизу на уровне α.

Представляется, что изложенные выше соображения объясняют главный парадокс в угловых распределениях при делении резонансными нейтронами, но, разумеется, лишь качественно, и неясно также, является ли причина деформации распределений физической (вклад высоколежащих каналов, процесс $(n, \gamma f)$) или это артефакт, возникающий из-за пропуска

резонансов. Необходимо количественное рассмотрение обеих этих возможностей. Максимальная анизотропия должна наблюдаться в сравнительно слабых резонансах сечения деления с относительно небольшой делительной шириной. Поэтому расширение круга резонансов, в которых измерена анизотропия, представляет существенный интерес. Только при улучшении этой статистики можно будет обоснованно судить о степени различия во вкладах делительных каналов, например между фотоделением и делением нейтронами.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (93-02-16773).

Список литературы

 Roberts L.D., Dabbs J.W.T. // Proc. Int. Conf. Nucl. Structure. Kingston, 1960. Univ. of Toronto Press, 1960, p. 882.

- 2. Pattenden N.J., Postma H. // Nucl. Phys., 1971, A167, p. 225.
- 3. Гонин Н.Н. и др. // ЯФ, 1975, т. 22, с. 652.
- 4. Гонин Н.Н. и др. // ЯФ, 1983, т. 38, с. 557.
- 5. Гонин Н.Н. и др. // ЯФ, 1988, т. 48, с. 1626.
- 6. Porter C.E., Thomas R.G. // Phys. Rev, 1956, vol. 104, p. 483.
- 7. Moore M.S. et al. // Phys. Rev., 1978, C18, p. 1328.
- 8. Mughabhab S.F. et al. Neutron Cross Sections. V. 1B. N.Y.: Acad. Press, 1984.
- 9. *Moore M.S.* // Proc. of 4th Conf. on Nuclear Cross-Section and Technology. Washington, 1975, p. 129.
- 10. Остапенко Ю.Б. и др. // ЭЧАЯ, 1981, т. 12, с. 1364.

On the Angular Distributions of Fragments in the Fission of the Oriented Nuclei of ²³⁵U by Resonance Neutrons

N. N. Gonin, L. K. Kozlovskiy, N. S. Rabotnov, D. I. Tambovtsev

Possible origin of a well known discrepancy between observed statistics of the angular distributions of fragments in the fission of the oriented nuclei of ²³⁵U by resonance neutrons and the accepted structure of fission channels of compound nucleus ²³⁶U is discussed. A deformation of Porter — Thomas distributions due to a contribution of many slightly open fission or $(n, \gamma f)$ channels is shown to be the most likely cause.

Экспериментальные исследования энергетической зависимости угловой анизотропии осколков при делении ориентированных ядер²³⁵U резонансными нейтронами

Д. И. Тамбовцев¹, Л. К. Козловский, Н. Н. Гонин¹, Н. С. Работнов¹, Ю. Н. Копач, А. Б. Попов, В. И. Фурман, Я. Климан², Г. Постма³, А. А. Богдзель, М. А. Гусейнов¹

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия ¹ ГНЦ РФ — Физико-энергетический институт, Обнинск, Россия ² Институт физики САН, Братислава, Словакия ³ Технологический университет, Дельфт, Нидерланды

Поступила в редакцию 11 июля 1996 г.

Представлены результаты эксперимента по измерению энергетической зависимости угловой анизотропии осколков при делении выстроенных ядер 235 U резонансными нейтронами с энергией до 42 эВ. Для измеренных резонансов полученные результаты согласуются с данными предшествующего эксперимента Паттендена и Постмы. В то же время расчет, проведенный в рамках *R*-матричный теории в многоуровневом двухканальном приближении, не отражает ряда особенностей энергетического хода угловой анизотропии осколков деления. Обсуждаются соображения необходимости учета в теории интерференции резонансов с разными спинами.

Введение

Известно, что реакция деления принадлежит к числу наиболее сложных: в ходе ее происходит не частичное изменение нуклонного состава, а коренная перестройка всего ядра. Трудности построения теории такого сложного превращения многонуклонной системы очень велики. В существующем виде она продолжает представлять собой набор разрозненных модельных представлений, сильно идеализирующих поведение ядра в процессе деления. Совершенствование экспериментальной техники и расширение возможностей теории непрерывно открывают новые пласты информации, которые требуют уточнения, а в ряде случаев пересмотра существующих представлений и моделей процесса деления, считавшихся до недавнего времени устоявшимися. К разряду таких явлений можно отнести открытие *P*-четных и *P*-нечетных угловых корреляций осколков деления, вызванных резонансными нейтронами [1-3], а также недавно предсказанную теорией возможность интерференции (в дифференциальном сечении деления) резонансов с разными спинами при наличии ориентации спинов взаимодействующих частиц во входном канале реакции [4]. В экспериментах [5-8], проведенных с использованием выстроенности

Ядерная физика, 1997, т. 60, ывп. 6, с. 981—987.

спинов ядер мишени, была измерена угловая анизотропия осколков деления ядер $^{233, 235}$ U и 237 Np, индуцированного резонансными нейтронами. В них получена важная информация о *К*-зависимости делимости указанных ядер вблизи барьера деления, которая указывает на отклонения от предсказаний модели каналов деления О. Бора. Отметим, что эти данные до сих пор не получили удовлетворительного объяснения.

Важнейшими величинами, позволяющими количественно описать процесс деления, вызываемого резонансными нейтронами, являются амплитуды деления $\gamma_{\lambda f}^{J^{\pi}K}$ для данного нейтронного резонанса λ . Здесь $J^{\pi}K$ — спин, четность и проекция спина на ось симметрии компаунд-состояния λ делящегося ядра. Чтобы извлечь эти величины из экспериментальных данных, необходимо проведение измерений энергетической зависимости полного и дифференциального сечения (*n*, *f*)-реакции под действием поляризованных (и неполяризованных) резонансных нейтронов на поляризованной (выстроенной) мишени. Наличие в этой зависимости межрезонансных интерференционных эффектов (одинаковых спинов и четностей в интегральном сечении деления и разных спинов — в дифференциальном сечении) дает дополнительную информацию для определения значения делительных амплитуд.

Для ядер мишени с выстроенностью f_2 , зависящей от температуры T [9], дифференциальное сечение деления, индуцированного *s*-нейтронами с энергией E_n , может быть записано следующим образом:

$$\frac{d\sigma_{nf}}{d\Omega} = \frac{\sigma_{nf}(E_n)}{4\pi} \left[1 + f_2(T)A_2(E_n)P_2(\cos\theta) \right],\tag{1}$$

где коэффициент угловой анизотропии разлета осколков A₂ имеет вид

$$A_2 = \frac{15I^2}{\sqrt{(2I-1)I(I+1)(2I+3)}} \frac{\sigma_{nf2}}{\sigma_{nf0}}.$$
 (2)

Полное сечение деления σ_{nf0} можно представить в виде [4]

$$\sigma_{nf0}(E_n) = \pi \lambda^2 \sum_J g_J \sum_K \left| S_J \left(0 \frac{1}{2} \to K f \right) \right|^2.$$
(3)

где $S_J(lj \to K_f)$ — зависящий от энергии элемент S-матрицы — описывает переход от входного канала $\{ljI\}$ к эксклюзивному делительному каналу f с определенным значением квантовых чисел JK. Он выражается через стандартный набор резонансных параметров, включая делительные амплитуды $\gamma_{\lambda f}^{J^{\pi}K}$. Часть дифференциального сечения деления, описывающая угловую анизотропию осколков, выражается формулой [4]

$$\sigma_{nf2}(E_n) = \pi \lambda^2 \sum_{JJ'} \sqrt{g_J g_{J'}} U\left(\frac{1}{2} IJ'^2; JI\right) \sum_K C_{JK20}^{J'K} S_{J'}^* \left(0\frac{1}{2} \to Kf\right) S_J\left(0\frac{1}{2} \to Kf\right).$$
(4)

Здесь $g_J = (2J+1) / 2(2I+1)$ — статистический вес состояния, I — спин ядра мишени; $U(\frac{1}{2}IJ^2; JI)$ и $C_{JK20}^{J'K}$ — коэффициенты Рака и Клебша — Гордана соответственно. Новым в этих формулах является присутствие в (4) интерференции между резонансами с различными спинами, что делает важным как можно более детальное измерение энергетической зависимости угловой анизотропии осколков не только в резонансах, но и в межрезонансных областях, а также в пределах хорошо разрешенных резонансов. Ниже приводятся результаты эксперимента, выполненного с целью детального измерения указанной зависимости при делении ориентированных ядер ²³⁵U резонансными неполяризованными нейтронами с энергией до 42 эВ.

Эксперимент

Эксперимент проводился на пучке импульсного реактора ИБР-30 в Дубне с длительностью нейтронной вспышки 4 мкс и частотой повторения 100 Гц. Длина пролетной базы составляла 29,45 ± 0,05 м и была определена по положению хорошо известных резонансов ²³⁵U. Серия коллиматоров, расположенных в вакуумном нейтроноводе, ограничивала пучок нейтронов до диаметра 8 см на входе в криостат. Поток нейтронов на образце и энергетическое разрешение составляли $3 \times 10^4 E^{-1}$ нейтрон/см²эВ с и $3.8 \times 10^{-3} E^{3/2}$ эВ соответственно. Метод ориентации спинов ядер²³⁵U основан на использовании сверхтонкого взаимодействия электрического квадрупольного момента ядра ²³⁵Ú с градиентом электрического поля ураниловой группы (UO₂) монокристалла уранил-рубидиевого нитрата (UO₂Rb(NO₃)₃ (в дальнейшем УРН) при его глубоком охлаждении [5]. Метод дает плоскостное выстраивание, при котором спины ядер урана ориентируются в плоскости, перпендикулярной С-оси монокристалла УРН. Было выращено три партии монокристаллов УРН методом изотермического испарения горячего раствора соли УРН в концентрированной азотной кислоте [10]. В этих монокристаллах использовался уран природного изотопного состава. Затем от монокристаллов параллельно естественной грани 1012, составляющей угол 49° с С-осью монокристалла, отрезались пластинкиматрицы толщиной 3 мм, на которые в специальной ячейке наращивался тонкий (~ 1 мг/см²) монокристаллический слой УРН с обогащенным ²³⁵U следующего изотопного состава: 234 U — $(4,2\pm0,1)\times10^{-3}$, 235 U — $(0,994\pm0,002)$, 236 U — $(1,5\pm0,1)\times10^{-3}$, 238 U — $(\le1,5)\times10^{-4}$. Раствор соли УРН с обогащенным ураном содержал также (0,5-1,0)% 237 Np по отношению к 235 U, добавление которого необходимо для улучшения связи спиновой системы ядер ²³⁵U с кристаллической решеткой УРН [11]. Качество монокристаллов и изоморфизм наращенных слоев проверялись на рентгеновском пучке методом отраженных лауэграмм [12]. С целью увеличения светосилы эксперимента образец приготавливался в виде двух мозаик площадью 20 и 24 см² из монокристаллических пластинок УРН с ²³⁵U-содержащими слоями, укрепленных на противоположных сторонах медной пластины-подложки, соединенной с камерой растворения рефрижератора. С-оси пластинок в мозаике тщательно ориентировались в одном направлении.

Для охлаждения образца до сверхнизкой температуры использовался рефрижератор растворения ³Не в ⁴Не, подробно описанный в [13] и модернизированный в соответствии с особенностями проведения эксперимента на пучке реактора ИБР-30. Продолжительность непрерывного поддержания низкой температуры ограничивалась емкостью откачиваемого гелиевого бака и составляла ~50 ч. Минимальная температура 0,07 К без пучка и 0,1 К под пучком нейтронов была достигнута на подложке образца при скорости циркуляции смеси ³Не—⁴Не 70 мкмоль/с.

Температура образцов в районе 1 К (для «теплых» замеров) определялась по давлению насыщенных паров ⁴Не в откачиваемой гелиевой ванне. В то же время определение реальной температуры ²³⁵U-содержащих слоев при низких температурах (порядка 0,1 К в «холодных» замерах) представляет трудную задачу. Низкая неизвестная теплопроводность монокристаллов УРН, большое теплосопротивление клеевых контактов приводят к заметному градиенту температур между подложкой образца и ²³⁵U-содержащим слоем. Решение проблемы найдено с помощью ядерного термометра — измерения угловой анизотропии α-излучения образца. С этой целью в раствор УРН, из которого нарацивались ²³⁵U-содержащие слои, дополнительно была введена небольшая (<0,1%) примесь изотопа ²³³U. Температура поверхности ²³⁵U-содержащих слоев, измеренная по анизотропии α -частиц ²³³U, под пучком нейтронов оказалась равной (0.15 ± 0.02) К. Важно подчеркнуть, что «альфа-термометр», во-первых, является непосредственным и прямым методом измерения температуры ²³⁵U-содержащего слоя и, во-вторых, сразу дает усредненное по времени замера значение температуры. Далее, используя оцененное значение константы сверхтонкой связи $P = (0,0154 \pm 0,0027)$ К [5], был вычислен параметр выстроенности спинов ядер 235 U: $f_2 = -0.15 \pm 0.02$ с помощью выражений [9]

$$f_2(T) = \frac{1}{I^2} \left[\left\langle M^2 \right\rangle - \frac{1}{3} I \left(I + 1 \right) \right], \tag{5}$$

$$\langle M^2 \rangle = \sum_{i=-I}^{I} \frac{M_i^2 e^{-M_i^2 P/kT}}{\sum e^{-M_i^2 P/kT}},$$
 (6)

где I — спин ядра-мишени, а M — его проекция на выделенное направление (C-ось).

Альфа-частицы и осколки деления с каждой стороны образца регистрировались тремя кремниевыми поверхностно-барьерными детекторами прямоугольной формы (площадью 2×5 см каждый) специальной, разработанной для низкотемпературных условий, конструкции. Детекторы располагались в направлениях 0°, 45° и 90° по отношению к *С*-оси монокристаллов УРН. Заме-



Рис. 1. Схематическое расположение образцов и детекторов

Таблица 1. Значения геометрических поправок $\beta_2 cos \theta$

Размещение де- тектора, град	Образец А	Образец Б
0	$0,\!79\pm0,\!05$	$0,81 \pm 0,05$
45	$0,\!24 \pm 0,\!03$	$0,\!20 \pm 0,\!03$
90	$-0,41 \pm 0,02$	$-0,44 \pm 0,02$

тим, что для уточнения вида распределения углового ocколков деления нами. по сравнению с [5-8], добавлен 45°-й детектор. Кроме этого, для монейтронного ниторирования потока использовался неориентируемый отдельный слой ²³⁵U толщиной 0,5 мг/см² и отдельный кремниевый детектор. Эта мониторная система, расположенная сзади реакционной камеры, помимо прямого назначения оказалась очень полезной для контроля стабильности работы остальных детекторов.

Схема расположения образцов и детекторов в криостате представлена на рис. 1. В процессе измерений детекторы поддерживались при температуре 1 К. Использовались только те детекторы, которые

выдержали многократное термоциклирование между комнатной и гелиевой температурой с контролем параметров. Тем не менее в процессе эксперимента несколько детекторов из-за ухудшения их характеристик были заменены.

Система сбора информации (ССИ) состояла из набора аналоговых, логических и цифровых блоков, выполненных в стандарте САМАС с выходом на РС в режиме on-line. ССИ позволяла регистрировать семь отдельных (по числу детекторов) амплитудных спектров (по 1024 каналов каждый) α-частиц и осколков деления и семь времяпролетных спектров (по 4096 каналов каждый) только осколков. Программно осуществлялся контроль отбора входной информации и периодическое «спасение» накопленной информации на винчестер РС в виде файла данных. Всего проведено 10 двухнедельных циклов измерений. В каждом цикле измерялись фоновые условия традиционным методом «черных резонансов» с набором фильтров: Со, W, Ag, Rh и Cd. Фон аппроксимировался выражением a + bx + c/x, где x — номер временного канала, а коэффициенты a, b и c находились методом наименьших квадратов. Для привязки фоновой кривой рабочие замеры проводились с Со- и Сd-фильтрами. Процесс заключался в чередовании «теплых» (1 К) и «холодных» (0,15 К) режимов. Файлы однотипных замеров суммировались, если их контрольные параметры находились в пределах экспериментальных погрешностей. В противном случае их обработка проводилась раздельно. Она велась по специально разработанным программам: расчет фоновых спектров по фоновым файлам, вычитание фона из рабочих спектров, расчет геометрических поправок реальной геометрии эксперимента методом Монте-Карло, извлечение коэффициентов A_2 (см. ниже) и их погрешностей в разложении (1) дифференциального сечения деления по четным полиномам Лежандра методом минимизации χ^2 -функционала для пары («теплый» и «холодный») файлов данных.

Рассмотрим процедуру обработки подробнее. Количество событий, зарегистрированных детектором, стоящим под углом θ при температуре *T*, можно представить в виде

$$N_T(\theta) = I(t)\Omega(\theta) \left[1 + A_2 f_2(T)\beta_2(\theta) \right], \tag{7}$$

где I(t) — нормировочный множитель, связанный со временем измерения t и интенсивностью пучка; $\Omega(\theta)$ — телесный угол, под которым «виден» детектор; $A_2 \sim \sigma_{nf2}/\sigma_{nf0}$ (см. формулу (2)); $\beta_2(\theta) = \langle P_2(\cos \theta) \rangle$ — среднее значение второго полинома Лежандра для детектора, расположенного в направлении угла θ в пределах телесного угла $\Omega(\theta)$. Эти геометрические поправки, как уже указывалось, вычислялись методом Монте-Карло [14]. Результаты расчетов приведены в табл. 1.

Если у нас имеются два измерения при разных температурах T_1 и T_2 , то, разделив каждое из уравнений (7) на отсчет монитора, получим

$$\frac{N_{T_1}(\theta)}{N_{T_2}(\theta)} \left/ \frac{M_{T_1}}{M_{T_2}} = \frac{1 + A_2 f_2(T_1) \beta_2(\theta)}{1 + A_2 f_2(T_2) \beta_2(\theta)}.$$
(8)

Имея три детектора под углами 0°, 45°, 90°, мы получаем переопределенную систему из трех уравнений с одним неизвестным A_2 . Эта система решалась методом минимизации χ^2 -функционала вида

$$\chi^{2} = \sum_{\boldsymbol{\theta}=0^{\circ}, \, 45^{\circ}, 90^{\circ}} \frac{F^{2}\left(\boldsymbol{\theta}, A_{2}, \boldsymbol{\beta}_{2}\right)}{\boldsymbol{\sigma}_{f}^{2}\left(\boldsymbol{\theta}\right)},\tag{9}$$

где

$$F^{2}(\theta, A_{2}, \beta_{2}) = \frac{N_{T_{1}}(\theta)}{N_{T_{2}}(\theta)} \left/ \frac{M_{T_{1}}}{M_{T_{2}}} - \frac{1 + A_{2}f_{2}(T_{1})\beta_{2}(\theta)}{1 + A_{2}f_{2}(T_{2})\beta_{2}(\theta)}, \right.$$
(10)

с помощью программы FUMILI. Решение проходило в два этапа. Сначала в качестве σ_f принималась только статистическая ошибка левой части уравнения (8) и находилось значение A_2 . После этого проводилась повторная минимизация функционала (10) с ошибками, увеличенными на вклад неопределенностей

геометрических поправок $\beta_2(\theta): \sigma^2 \to \sigma^2 + \left(\frac{\partial F(\theta, A_2, \beta_2)}{\partial \beta_2}\right)^2 (\Delta \beta_2)^2$. Повторное

обращение к FUMILI не приводило к смещениям оцениваемых значений A2, а

несколько увеличивало их ошибки. Значения отсчетов M мониторного детектора всегда брались по полному спектру (0—4095 каналов), а число отсчетов N рабочих детекторов суммировалось по задаваемому интервалу.

При анализе экспериментальных данных выявилось, что образец Б постоянно имел выстроенность почти в 2 раза более низкую, чем образец А. Причина этого отличия не была установлена, и данные для стороны Б не были включены в окончательные результаты.

Результаты измерений и их обсуждение

Основной целью нашего эксперимента было исследование энергетической зависимости коэффициента А₂ в разложении дифференциального сечения деления по полиномам Лежандра. В качестве первого шага важно было обработать экспериментальную информацию по площадям разрешенных в нашем эксперименте резонансов и сопоставить полученные результаты с даными Паттендена и Постмы [6]. Оба набора данных для области энергий нейтронов до 42 эВ представлены в табл. 2. Данные [6] увеличены нами на 10 % ввиду неправильной ориентации части кристаллов в соответствии с замечанием авторов в конце их статьи. Ошибки наших значений А2 содержат в себе статистические флуктуации счета с вычитанием фона, а также ошибки определения геометрических поправок. Как видно из табл. 2, для 18 из 34 измеренных в настоящей работе резонансов полученные нами значения A₂ согласуются в пределах ошибок (Δ) с исправленными результатами Паттендена и Постмы, для 26 резонансов — в пределах 2Д, для 30 — в пределах 3Д. Расхождение более 3Δ наблюдается для 4 резонансов. Можно заключить, что оба набора данных в целом согласуются между собой, если принять во внимание различия использованных способов определения температуры поверхностного слоя образца и вычисления геометрических поправок, а также возможные отличия в выборе интервалов суммирования при определении площади резонансов.

Результаты измерения энергетической зависимости коэффициента A_2 в области энергий 0,4—20 эВ по интервалам, равным функции разрешения спектрометра, представлены на рис. 2. Здесь также приведены статистические ошибки A_2 с вычитанием фона и ошибки геометрических поправок. Систематические ошибки, связанные с неопределенностью константы сверхтонкого взаимодействия P и температуры, оценены нами в пределах 20%. Они могут единообразно перенормировать все значения $A_2(E_n)$, но не могут изменить характер энергетической зависимости $A_2(E_n)$.

Данные рис. 2 указывают на сильную флуктуацию коэффициента A_2 угловой анизотропии осколков деления при изменении энергии, причем вид этой зависимости отличен от энергетической зависимости сечения деления и имеет сложный характер. Видно, что теоретическая кривая [16], полученная в результате совместного анализа экспериментальных данных полного нейтронного сечения, сечения деления, радиационного захвата, угловых и массовых распределений осколков деления ²³⁵U в резонансах ниже 100 эВ по программе SAMMY,

Durannug managuaga aD	Настоящая работа		Работа [6]	
энергия резонанса, эВ	A2	ΔA_2	A_2	ΔA_2
0,29			1,49	0,20
1,14	1,83	0,12	1,79	0,08
2,05	1,28	0,24	2,06	0,32
3,15	1,49	0,22	1,76	0,15
3,61	2,08	0,24	2,16	0,12
4,85	1,71	0,39	1,91	0,38
5,46 + 5,84	0,97	0,29	1,12	0,24
6,17	1,26	0,27	1,06	0,20
6.39	1.30	0.22	1.87	0.14
7.09	2.53	0.28	2.52	0.17
8.78	1.52	0.11	1.96	0.05
9.28	1.92	0.19	1,99	0.13
10.16	1.39	0.23	2.08	0.21
11.67	0.71	0.23	2.02	0.19
12 39	0.93	0.14	1 29	0.08
12,99	1 57	0.26	2 10	0.30
13 34	0.68	0.26	1 33	0.32
14 02	1.05	0.18	1 32	0.12
14 53	1,00	0.24	1,52	0.22
15 45	1 72	0.33	2 32	0,22
16,10	1,72	0,33	2,02	0,20
16,67	2 28	0,32	2,00	0.18
18.05	1.48	0,32	1.80	0,10
10,00	1,40	0,20	2.00	0,10
20.15	1,05	0,13	1 10	0,00
20,15	1,07	0,25	2.62	0.22
20,05	2.02	0.23	2,02	0,28
22,10	2,02	0,25	2,12	0,15
22,95 22 40 + 23 65	1.55	0.20	2,37	0,20
22,40 + 25,05	1,55	0,20	2,50	0,15
27,32 25 20 + 25 55	0.84	0.18	1,05	0,17
25,20 + 25,55	0,04	0,10	1,07	0,15
20,48	1 2 1	0.21	1,71	0,19
27,64	1,51	0,21	1,07	0,21
20,55	1.52	0.26	1,30	0,31
29,05	1,55	0,20	1,00	0,40
30,0 + 30,83	2,10	0,28	2,24	0,24
52,05	1,45	0,22	2,07	0,14
33,51			2,32	0,10
34,35	0.95	0.11	1,50	0,13
34,81 +35,16	0,85	0,11	1,09	0,07
30,30			1,02	0,23
58,50	1.50	0.00	1,11	0,25
39,41	1,58	0,22	1,88	0,13
41,90 + 42,20	0,92	0,24	1,28	0,15

Таблица 2. Результаты настоящего эксперимента для разрешенных резонансов в области энергий нейтронов до 42 эВ в сравнении с данными Паттендена и Постмы [6], в которые введена 10 %-я поправка на неправильную ориентацию части кристаллов



Рис. 2. Энергетическая зависимость коэффициента A₂ углового распределения осколков при делении ориентированных ядер ²³⁵U резонансными нейтронами с энергией ниже 20 эВ. Точки: □ — [6], исправленные в соответствии с указанием авторов (см. текст); Δ — [15]; • — настоящая работа. Верхние кривые [16] — расчет по *R*-матричной теории в многоуровневом двухканальном приближении. Кривые внизу рисунка сечение деления в отн. ед. с указанием спинов и энергии резонансов

с использованием *R*-матричной теории в многоуровневом двухканальном приближении, на отдельных интервалах энергий не отражает ряда особенностей энергетической зависимости A_2 . По нашему мнению, это указывает на необходимость учета интерференции между уровнями с разными спинами. Привлечение для анализа данных [15] и настоящей работы в новом подходе [4], основанном на формальной теории (*n*, *f*)-реакции и, естественно, включающем указанную интерференцию, с учетом и развитием соображений [17] о роли квантового числа *K* на всех стадиях реакции деления позволит уточнить набор параметров теории и добиться количественного описания результатов экспериментов по изучению энергетической зависимости анизотропии вылета осколков при делении выстроенных ядер ²³⁵U резонансными нейтронами.

Заключение

Ввиду больших экспериментальных трудностей измеренные в данной работе значения коэффициентов A_2 обладают значительными статистическими погрешностями. Учитывая важность этой информации для углубления представлений о процессе деления, дальнейшие исследования будут проведены на новом гелиевом рефрижераторе, обладающим длительным ресурсом поддержания ориентации ядер, что позволит более эффективно использовать пучковое время, с новым образцом (с более тонким слоем ~0,3 мг²³⁵U/см²) и новым комплектом кремниевых планарных детекторов. Качество амплитудного спектра осколков нового образца открывает дополнительную возможность для исследования зависимости угловой анизотропии осколков деления от их кинетической энергии, что актуально для исследования взаимосвязи каналов деления теории О. Бора и мод деления Брозы — Мюллера [18].

Работа выполнена по Российской государственной программе «Фундаментальная ядерная физика» при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 93-02-16773, 96-02-19162а).

Список литературы

- 1. Данилян Г. В., Воденников Б. Д. и др. // Письма в ЖЭТФ, 1977, т. 26, с. 191; Данилян Г. В., Дроняев В. П. и др. // Письма в ЖЭТФ, 1978, т. 27, с. 68.
- 2. Весна В. А., Князьков В. А. и др. // Письма в ЖЭТФ, 1980, т. 31, с. 704.
- 3. Гагарский А. М. и др. // Письма в ЖЭТФ, 1991, т. 54, с. 9.
- Barabanov A. L., Furman W. I. // Proc. Int. Conf. on Nucl. data for Science and Technology. Gatlingburg, Tennessee, USA, 9–13 May 1994, p. 448; Барабанов А.Л., Фурман В.И. Труды XIII междунар. совещ. по физике деления памяти проф. Г. Н. Смиренкина, Обнинск, 3—6 окт., 1995 (в печати).
- 5. *Dabbs J.W.T. et al.* // Proc. Second IEAE Symp. on Phys. And Chem. of Fission. Vienna, 1969, SM-122/123.
- 6. Pattenden N. J., Postma H. // Nucl. Phys., 1971, A167, p. 225.
- 7. Kuiken R., Pattenden N. J., Postma H. // Nucl. Phys. 1972, A190, p. 401.
- 8. Kuiken R., Pattenden N. J., Postma H. // Nucl. Phys. 1972, A196, p. 389.
- 9. Tolhoek H. A., Cox J. A. M. // Physica, 1953, vol. 19, p. 101.
- 10. Гонин Н. Н., Козловский Л. К., Тамбовцев Д. И. // ПТЭ, 1975, № 1, с. 232.
- 11. Waldron J. C. Report AERE. 1969, № 6141.
- 12. Матвиенко В. И., Петржак К. А., Трегубова Т. М. // Радиохимия, 1968, т. 10, с. 138.
- 13. Тамбовцев Д. И. и др. Препринт ФЭИ, 1984, № 1542.
- 14. Гусейнов М. А., Козловский Л. К. Препринт ФЭИ, 1994, № 2356.
- 15. *Postma H.* // Proc. Int. Symp. on Neutron Capture. Gamma-ray Spectroscopy and Related Topics. Petten, 1974, p. 619.
- 16. *Moore M. S.* // Proc. III^d Int. Seminar on Neutron-Nuclei Unteractions. Dubna, 26–28 Apr., 1995, p. 290.
- 17. Гонин Н. Н. и др. // ЯФ, 1994, т. 57, с. 1235.
- Postma H. // Proc lid Int. Seminar on Neutron-Nuclei Interaction, Dubna, 26—28 Apr. 1994. Dubna: JINR, 1995, p. 347.

Experimental Study of Energy Dependence of Fission-Fragment Angular Anysotropy in Resonance-Neutron-Induced Fission of ²³⁵U Aligned Target

D. I. Tambovtsev, L. K. Kozlovsky, N. N. Gonin, N. S. Rabotnov, Yu. N. Kopach, A. B. Popov, W. I. Furman, J. Kliman, H. Postma, A. A. Bogdzel, M. A. Guseinov

The results of the experiment are presented on measuring the energy dependence of the fission-fragment angular anisotropy in resonance-neutron-induced fission of ²³⁵U aligned target in energy region up to 42 eV. The agreement with the data of Pattenden and Postma in resonances is good enough, while the theoretical curve, calculated using the R-matrix multilevel two-fission-channel approach, does not seem to describe properly the energy dependence of fission-fragment angular anisotropy. The necessity of taking into account the interference between levels with different spins is discussed.

ВОПРОСЫ РАЗВИТИЯ ЯДЕРНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

Концепция использования плутония в атомной энергетике

В. М. Мурогов, В. И. Субботин, М. Ф. Троянов, В. Г. Илюнин, В. С. Каграманян, Н. С. Работнов, В. Я. Руднева

Физико-энергетический институт, Обнинск

Сокращение атомных вооружений выдвинуло в ряд первоочередных задачу безопасной утилизации оружейных делящихся материалов: высокообогащенного урана и плутония. Эта задача рассматривается в работе в связи с общей стратегией развития атомной энергетики, с перспективой усовершенствования и развития традиционных типов реакторов: легководных (типа ВВЭР) и быстрых (типа БН) и их топливного цикла. Исследованы вопросы сохранения энергетического потенциала плутония, возможности снижения радиотоксичности в топливном цикле и возможности уменьшения периода утилизации плутония. Показано, что наиболее экологически приемлемый путь утилизации Ри — это использование его в качестве топлива для быстрых реакторов.

Планируемое высвобождение значительного количества делящихся материалов в результате сокращения атомного оружия привлекло внимание широкой общественности всех стран к судьбе расщепляющихся материалов — высокообогащенного урана и плутония, а также, как следствие, и плутония, получаемого в результате переработки использованного топлива энергетических реакторов.

Нет практически расхождения мнений по оружейному урану — это традиционный продукт атомной энергетики, и он может быть эффективно использован в производстве топлива для АЭС. Необходимое хранение на требуемый срок в этом случае не создает принципиально новых проблем.

Иное положение в оценке ситуации с плутонием. Современный этап развития атомной энергетики мира характеризуется замораживанием темпов ее развития в первую очередь в результате снижения доверия населения к возможности ее безопасного функционирования, перепроизводством и относительно низкой стоимостью уранового топлива, нерешенностью полностью

Теплоэнергетика, 1993, вып. 8, с. 9-11.

экономических и экологических проблем замкнутого топливного цикла, отсутствием ясного решения проблемы обращения с отходами атомной промышленности и энергетики.

Дополнительную остроту проблеме плутония придают вопросы и желания общественности сделать процесс разоружения необратимым. Можно утверждать, что в мировом общественном мнении в настоящее время сформировались две крайние точки зрения по отношению к плутонию.

Одна из них рассматривает плутоний как «отходы» атомной энергетики, с другой точки зрения плутоний является «национальным достоянием». Как правило, первую из них поддерживают защитники окружающей среды, «зеленые» и общественные деятели. Основная масса сторонников второго подхода — в среде специалистов, т. е. людей, причастных к атомной энергетике и промышленности. Они понимают, что обращение с плутонием — его производство, выделение, хранение, использование — связано с решением большого комплекса серьезнейших проблем, преодолением многочисленных опасностей. В целом — это одна из важнейших ветвей технической культуры в нескольких крупнейших странах мира. Суммарные затраты на ее развитие с трудом поддаются даже приблизительной оценке, и вопрос об их чисто экономической эффективности смысла не имеет. Эту цену человечество заплатило за предотвращение третьей мировой войны. Но с переключением все большей и большей части усилий в атомной промышленности на мирные задачи отношение к затратам будет определяться экономическими мерками при отсутствии какихлибо скидок в отношении безопасности и экологии.

Но два первых вывода из этого общего рассмотрения можно сделать.

С одной стороны, общей чертой всех подходов к плутониевой проблеме является понимание того, что в настоящее время масштабы развития атомной энергетики (АЭ) и уровень ее технологии в мире не позволяют в короткий срок решить задачу утилизации плутония. Поэтому надежное и безопасное хранение плутония, как оружейного, так и энергетического, является неизбежным и необходимым этапом в решении данной задачи.

С другой стороны, специалистам ясно, что такие «упрощенные» подходы, как, например, навечное захоронение в космосе или смешивание с продуктами деления и навечное захоронение на миллионы лет, в настоящее время не могут быть научно обоснованы.

Выбор варианта утилизации оружейного плутония должен производиться с учетом принятой национальной стратегии утилизации энергетического плутония, которая может быть различной для разных стран, поскольку зависит от многих условий, и в первую очередь следующих:

 выбранной концепции долгосрочного развития АЭ, включая стратегию перехода от современной структуры АЭ к перспективной;

 – научно-технического задела и степени готовности технологической базы по утилизации плутония;

- особенностей развития атомного комплекса.

С авторской точки зрения задача эффективного и безопасного использования оружейного плутония является частью проблемы повторного использования топлива в атомной энергетике, проблемы реализации безопасного и экологически приемлемого замкнутого топливного цикла. Поэтому эта задача рассматривается авторами статьи в связи с общей стратегией развития атомной энергетики в нашей стране, с перспективой усовершенствования и развития традиционных типов реакторов (легководных типа ВВЭР и быстрых типа БН) и их топливного цикла.

Строительство быстрых реакторов в нашей стране проводилось в соответствии с концепцией развития в будущем внутри АЭ быстрых реакторов типа БН с замкнутым уран-плутониевым топливным циклом. Такое развитие АЭ обосновывалось необходимостью существенного повышения коэффициента полезного использования природного урана.

Работающие в нашей стране реакторы типа БН в настоящее время наиболее подготовлены к решению задачи использования уран-плутониевого топлива, в том числе на основе оружейного плутония.

В Физико-энергетическом институте накоплен опыт реакторного использования плутония оружейного состава: в экспериментальном реакторе БР-10 (БР-5) с суммарной загрузкой 150 кг и на физическом стенде БФС с массой загрузки 750 кг таблеток из металлического плутония.

В опытно-промышленном реакторе БН-350 прошли реакторные испытания и затем были проведены исследования (с химической переработкой) десяти опытных ТВС со смешанным оксидным топливом (350 кг) с плутонием оружейного качества.

Работающий в настоящее время на обогащенном урановом топливе реактор БН-600 способен потреблять до 1 т плутония в год при сохранении отработанной и промышленно освоенной конструкции твэлов и ТВС и соответствия современным требованиям безопасности.

В качестве следующего шага развития программы по быстрый реакторам в стране планировалось строительство трех-четырех блоков БН-800 на уранплутониевом топливе и цеха-300 для дистанционного изготовления ТВС со смешанным уран-плутониевым топливом. К настоящему времени начато строительство двух блоков БН-800 на Белоярской и Челябинской площадках и выполнено более 50% объема строительства цеха-300. Однако в связи с протестами общественности в послечернобыльский период, а также из-за нынешних экономических трудностей эти работы были практически приостановлены. При условии выполнения программ строительства БН-800 и цеха-300 в начале следующего века быстрые реакторы готовы будут к широкомасштабному использованию плутония для целей энергопроизводства.

Реактор БН-800 Южно-Уральской АЭС рассчитан на использование 2,3 т плутония для начальной загрузки и 1,6 т для ежегодной подпитки.

Одновременно с развитием быстрых реакторов в отрасли ведутся работы по реализации на промышленном уровне технологии повторного использова-

ния уран-плутониевого топлива в быстрых реакторах: работает завод по переработке облученного топлива реакторов ВВЭР, выполнено 50% объема строительства топливного комплекса по производству ТВС для реакторов типа БН-800, работает опытная установка «Пакет» производства ТВС со смешанным топливом для реакторов БН-600 и БН-350.

К настоящему времени в реакторах БН-600 и БН-350 испытано более 2000 твэлов на основе смешанного топлива. Ни один из испытанных в настоящее время твэлов не потерял герметичности при выгорании до 10% тяжелых атомов, теплонапряженности 490 Вт/см и температуре оболочки 690 °C.

В то же время повторное использование оружейного плутония в легководных реакторах (ЛВР), кроме освоения технологии, требует разработки концепции легководных реакторных установок с использованием топлива на основе практически чистого плутония-239 и решения задачи их безопасной эксплуатации. Особого внимания при этом требует проблема нераспространения и защиты ядерного материала оружейной чистоты, в том числе при его транспортировке.

Для стран с развитой индустрией по изготовлению MOX (смешанное уран-плутониевое топливо) топлива для тепловых реакторов, например во Франции, утилизация плутония через ЛВР (при необходимости поддержания баланса плутония в системе) может быть предпочтительнее с точки зрения задач сегодняшнего дня, чем через БН.

В нашей же стране ситуация совсем иная. Как уже говорилось выше, у нас получил значительно большее развитие уран-плутониевый цикл для быстрых реакторов, чем для тепловых.

Более того, прохождение оружейного плутония через ЛВР приводит не только к нежелательному росту общей радиотоксичности плутония, но и к уничтожению более 60 % его первоначального энергетического потенциала. Совсем иная картина складывается при утилизации оружейного плутония в быстрых реакторах. В этом случае при прохождении плутония через реакторы типа БН-800 сохраняется энергетический потенциал плутония для будущей АЭ при стабилизации уровня радиотоксичности плутония в случае его многократного использования (см. таблицу).

Работы, выполненные в последние годы в ФЭИ, показывают, что в замкнутом топливном цикле одних тепловых реакторов суммарная радиотоксичность трансурановых элементов будет расти быстрее, чем в разомкнутом, из-за увеличения накопления младших актинидов. Таким образом, долгосрочное развитие АЭ на базе одних тепловых реакторов в замкнутом топливном цикле не позволяет кардинально изменить ситуацию в сравнении с разомкнутым циклом ни с точки зрения повышения эффективности потребления природного урана, ни с точки зрения ограничения роста суммарной радиотоксичности топлива.

Только достаточно широкое внедрение быстрых реакторов позволяет в принципе остановить рост не только расхода природного урана, но и рост суммарной массы плутония, младших актинидов и интегральной величины их радиологической опасности. Показатели эффективности утилизации оружейного плутония в расчете на 100 т при заданном изотопном составе (Pu-239/Pu-240/Pu-241 /Pu-242 — 0,934/0,06/0,006/0)

	Тип реактора		
параметры	ЛВР	БН	
Минимальный период утилизации при заданной мощности АЭС-3 ГВт(эл.), лет	40	15	
Изменение энергетического потенциала плутония, %	-60	0	
Изменение радиотоксичности плутония, %	+230	+30	
	Постоянный рост	Стабилизация при	
	при рецикле	рецикле	

Необходимо отметить, что утилизация оружейного плутония в быстрых реакторах может быть организована без накопления вторичного плутония вследствие инертных зон воспроизводства. Вместо урана-238 они могут быть загружены сырьевыми материалами без наработки плутония (например, торием) или инертными разбавителями.

При этом создание специализированных быстрых реакторов с достаточно «жестким» спектром нейтронов (например, с металлическим или керметным топливом) позволит эффективно сжигать плутоний с практически любым содержанием высших актинидов и нарабатывать «чистый» уран-233, т. е. позволит решить проблему реализации экологически приемлемого топливного цикла с надежным решением проблемы топливных отходов.

Исходя из вышеизложенного, предлагается следующая концепция утилизации оружейного плутония, высвобождающегося в результате разоружения:

 – решение задачи надежного и безопасного хранения оружейного и энергетического плутония как неизбежный этап процесса утилизации;

– ориентация на первоочередную утилизацию оружейного плутония в действующих быстрых реакторах типа БН (БН-600, БН-350);

 ориентация в дальнейшем на реализацию оружейного плутония в рамках концепции ядерно-энергетического центра на базе ПО «Маяк» — с решением проблемы защиты и нераспространения;

 – разработка специализированного энергетического быстрого реактора эффективного «выжигателя» оружейного и энергетического плутония;

 – разработка новой концепции активной зоны легководного реактора повышенной безопасности с использованием плутония на базе «холодных» тепловыделяющих элементов с керметным топливом;

 – решение проблемы долговременного захоронения высокотоксичных актиноидов на базе развития технологии трансмутации и экологически приемлемого и безопасного ториевого топливного цикла.

Исследования по трансмутации и технологии топливного цикла на основе тория являются более отдаленной, перспективной проблемой, но уже в на-

стоящее время должны предусматриваться фундаментальные и поисковые исследования в этом направлении.

Что касается задачи утилизации плутония в легководных реакторах, то здесь, по мнению авторов настоящей статьи, усилия должны быть сконцентрированы на научно-исследовательских работах по обоснованию целесообразности и возможности решения этой задачи с точки зрения безопасности, надежности и экономичности АЭС при соблюдении требований «нераспространения». Возможно, такое решение может быть найдено в рамках упомянутой «холодной» керметной активной зоны ЛВР.

В результате реализации предполагаемой концепции не только достигается существенное усовершенствование технико-экономических показателей и безопасности АЭС с реакторами на тепловых и на быстрых нейтронах, но и закладываются основы атомной энергетики более отдаленного будущего, свободной от накопления значительных запасов плутония и других трансурановых элементов, определяющих в значительной мере одну из основных проблем, стоящих перед энергетикой будущего, — проблему высокотоксичных отходов.

Концепции обращения с долгоживущими ядерными отходами

Е. В. Гай, А. В. Игнатюк, Н. С. Работнов, Ю. Н. Шубин

Проблема обращения с долгоживущими ядерными отходами обсуждается с учетом возможности выжигания их наиболее опасной компоненты — актинидов в интенсивных нейтронных потоках.

Связь проблемы отходов с проблемой ядерного сырья

В открытом ЯТЦ отходами считается облученное ядерное топливо целиком. В замкнутом же ЯТЦ оно рассматривается как вторичное сырье, а отходы возникают при его радиохимической переработке. В последнее время активные сторонники открытого ЯТЦ предлагают считать отходами также и оружейный плутоний. Главный аргумент, помимо очевидной необходимости всячески препятствовать распространению ядерного оружия, чисто экономический: дешевого урана на сегодняшний день в избытке.

Понять парадоксальность ситуации поможет аналогия с самым ценным видом органического топлива — нефтью. Полное энергосодержание тонны нефти 40 ГДж, цена 160 долларов, удельная цена энергии 4 доллара/ГДж. Полное энергосодержание тонны урана $7,5 \times 10^7$ ГДж, цена 30 000 долларов, удельная цена энергии 4×10^{-4} доллара/ГДж. Разумеется, сжигание урана гораздо сложнее, чем сжигание нефти, и относительная дешевизна самой сырьевой составляющей является необходимым компонентом эффективности ядерной энергетики. Но при существующем положении вклад цены урана в цену готового свежего реакторного топлива на уровне немногих процентов, и этому нет сколько-нибудь близкого аналога среди остальных энергоносителей. Поэтому в открытом топливном цикле и используется порядка одного процента полного энергосодержания.

Ясно, что эта ситуация, основанная на неадекватной цене природного урана, противоестественна. Даже многократное повышение цены природного урана удорожит вырабатываемую на АЭС электроэнергию незначительно. Но оно поневоле качественно изменит отношение и ко вторичному ядерному топливному сырью, и к тем реакторам, которые такое сырье могут использовать проще и эффективнее всего. Координация усилий стран-производителей и экспортеров урана в этом направлении представляется поэтому насущной необходимостью.

Кроме плутония вторичным сырьем можно считать и младшие актиниды (MA), чем, в принципе, решается и задача борьбы с наиболее опасными долгоживущими альфа-излучателями (см. ниже).

Известия вузов. Ядерная энергетика, 1994, № 1, с. 17-21.

Проблема долговременного риска

Риск, связанный с РАО ядерной энергетики, и ответственность за этот риск должны быть разделены между нынешним и несколькими ближайшими поколениями. За устранение (не полностью достоверное) небольшого риска для людей далекого будущего нельзя платить реальной опасностью в настоящем. Основным футурологическим предположением является сохранение отныне человечеством постоянной, достаточно высокой радиационной культуры, поскольку это связано прежде всего с естественной радиоактивностью окружающей среды. Поведение геологических захоронений РАО в течение времен, измеряемых миллионами лет, трудно предсказать с полной убедительностью, поэтому предпочтительными являются методы обращения с РАО, предельно минимизирующие тот их объем и суммарную долгоживущую активность, которые направляются в такие хранилища. Прежде всего это трансмутация МА в быстрых реакторах (БР).

Фракционирование и трансмутация

В проблеме окончательного удаления РАО в геологические хранилища наибольшую опасность представляют долгоживущие актиниды, в большинстве своем альфа-излучатели. Если принять за меру радиотоксичности эффективную эквивалентную дозу на единицу активности, то эта величина от нуклида к нуклиду и в зависимости от способа поступления в организм (через пищеварительный тракт или через легкие) меняется примерно на шесть порядков, и для актинидов она в сотни и тысячи раз больше, чем для продуктов деления. Если удалить из отходов актиниды, их суммарная радиотоксичность сравняется с исходной токсичностью урановой руды через несколько сот лет, в противном случае для этого потребуются миллионы лет. Поэтому в последние годы все более заметное внимание уделяется возможности переработки долгоживущих радионуклидов в высоких нейтронных потоках.

Первым конкретным проявлением этого интереса была программа МАГАТЭ, начатая в 1976 г. и завершившаяся в 1982 г. выпуском отчета [1]. Для обозначения процесса переработки используются два термина: трансмутация и выжигание. Первый — более общий, им называется любое превращение долгоживущего нуклида в другой. Термином выжигание сейчас обозначается деление. Именно эта разница является ключевой для понимания количественного, переходящего в качественное, различия между результатами рециклирования актинидов в реакторах на быстрых и тепловых нейтронах.

Для трансмутации необходимо возможно более полное радиохимическое разделение важнейших групп нуклидов, дальнейшие операции с которыми сильно индивидуальны и определяются всем комплексом физических и химических свойств элементов каждой группы. Конкретные значения коэффициентов извлечения подлежат оптимизации и уточнениям, но ясно, что прежде всего необходимо минимизировать безвозвратные потери радионуклидов, а требования на коэффициенты их взаимной очистки могут быть не слишком жесткими. Самыми вероятными кандидатами в список радионуклидов, подлежащих трансмутации, являются младшие актиниды и технеций.

Роль плутония

Плутоний накапливается в активной зоне при работе любого современного реактора с урановым топливом, причем интенсивнее всего в тяжеловодных реакторах — примерно 500 кг/ГВт(э) год, у легководных реакторов (ЛВР) эта цифра в два с лишним раза меньше. До 20 % всей вырабатываемой тепловыми реакторами энергии получается за счет нарабатываемого и тут же сжигаемого плутония. Изотопный состав плутония, нарабатываемого в реакторах разных типов, различается очень сильно, и если на химическую токсичность это не влияет, то на радиологическую токсичность влияет весьма существенно. Из пяти основных изотопов плутония, с 238 по 242, четыре являются альфаизлучателями и только Pu-241 — бета-излучателем с периодом 14;4 года. Энергия альфа-распада всех изотопов примерно одинакова, поэтому радиотоксичность каждого из них в хорошем приближении можно считать обратно пропорциональной периоду полураспада. Тогда, если принять токсичность Ри-239 за единицу, то для остальных альфа-излучателей получаем: Ри-238 — 275; Pu-240 — 3,7; Pu-242 — 0,06. Радиотоксичность Pu-241 как такового (средняя энергия бета-излучения всего 5 кэВ) меньше единицы, но он превращается в Am-241, у которого относительная радиотоксичность (OPT) равна примерно 50. С учетом приведенных цифр, ОРТ оружейного плутония равна 1,42. Если использовать его в качестве горючего ЛВР, то ОРТ выгружаемого плутония за счет изменения изотопного состава повысится до 4,67, а в быстром реакторе типа БН-800 — всего до 1,82. Таким образом, высказываемые иногда утверждения об особой опасности использования плутония именно в БР ошибочны. Положение в действительности обратное.

Младшие актиниды

Возможность выжигания плутония и актинидов является одним из современных стимулов разработки и внедрения быстрых реакторов (см. подробнее [2]). Сборник трудов [3] содержит достаточно полную информацию о современном состоянии вопроса.

Использование МА в качестве добавок в топливо быстрых реакторов приводит к скоростям их выжигания до 10% в год, увеличивает ресурсы топлива на 0,03—0,06. В БР пороговое деление МА делает ненужным большой запас начальной реактивности.

В БР нарабатывается примерно на порядок менее радиотоксичный состав MA, чем в TP. Если рециклировать в БР только один плутоний, отправляя MA в отходы, это уже приводит к снижению радиотоксичности актинидов в десятки раз по сравнению с разомкнутым циклом тепловых реакторов. Отсчет снижения радиотоксичности за счет выжигания MA ведется от этого, достаточно низкого уровня. Но дальнейшее снижение при рециклировании не очень зна-

чительно — максимум несколько раз при нынешних коэффициентах извлечения, их улучшение может этот показатель существенно повысить.

При рециклировании MA окончательное количество отправляемых на захоронение отходов уменьшается также с ростом глубины выжигания MA за цикл. В этом отношении представляют интерес проекты специализированных реакторов-выжигателей с ужестченным спектром быстрых нейтронов [4, 5]. Имеется проект БР-выжигателя со сверхдолгой кампанией, совпадающей со сроком службы реактора (SLLC, Япония) [6]. Реакторы-выжигатели становятся одновременно в каком-то смысле и промежуточными хранилищами MA, причем довольно емкими, компактными и хорошо защищенными.

Реализация трансмутации в быстрых реакторах связана, разумеется, и с весьма серьезными проблемами. Управление реакторами с топливом, содержащим МА в больших концентрациях, осложняется. В этом случае компенсирующая способность поглощающих стержней как при гомогенной, так и при гетерогенной загрузке МА уменьшается. Уменьшается и доля запаздывающих нейтронов $\beta_{эф\phi}$. С ростом концентрации МА может возрастать НПЭР (натриевый пустотный эффект реактивности), который является весьма важной величиной, характеризующей безопасность быстрого реактора.

Радиоактивность топлива, содержащего МА, увеличивается на многие порядки по сравнению со свежим топливом урановых тепловых реакторов. Это существенно затрудняет все операции со свежим топливом, содержащим МА. Общей трудностью реакторной трансмутации является резкое увеличение разнообразия топливных композиций с вытекающими отсюда осложнениями в формировании АЗ, обеспечении устойчивости их работы и равномерности энерговыделения.

Но в целом трансмутацию в БР можно назвать прагматическим вариантом, поскольку он в большой степени опирается на уже разработанные и опробованные в промышленном масштабе технологии. Уже первые образцы энергетических быстрых реакторов могут быть использованы для трансмутации МА в значительных опытно-промышленных масштабах.

Трансмутация МА в БР тесно связана с другими стратегическими проблемами ядерной энергетики, использующей замкнутый топливный цикл, утилизацией реакторного и оружейного плутония и переходом к уранториевому циклу, где накопление трансурановых элементов (ТУЭ) примерно на три порядка меньше. Все эти проблемы естественно решать в комплексе.

Тепловые реакторы с нейтронным потоком до нескольких единиц на 10^{14} см⁻²с⁻¹ нельзя использовать для выжигания МА, поскольку они при этом в основном не делятся, а превращаются в высокорадиотоксичные и долгоживущие изотопы кюрия и плутония.

Важнейшие осколки деления

Стратегия обращения со среднеживущими (тепловыделяющими) нуклидами, основную часть которых составляют стронций-90 и цезий-137, и долгоживущими (йод-129, технеций) должна быть различной. Недавние измерения дают весьма малое тепловое сечение захвата нейтронов стронцием-90 порядка 10 мб [7] вместо 900 мб по ранним измерениям [8]. Если это так, то трансмутация стронция представляется нереальной, а без него трансмутация остальных среднеживущих продуктов деления нерациональна. С другой стороны, тепловыделение и газовыделение делают неприемлемым их быстрое окончательное удаление в геологические формации, и ему должен предшествовать период помещения на несколько сот лет (порядка трехсот) в контролируемые хранилища. При планировании последующего окончательного захоронения решающим будет учет наличия в этих РАО изотопных примесей долгоживущих нуклидов.

Среди долгоживущих продуктов деления особое место занимает йод-129 благодаря большому периоду полураспада (16 млн лет), высокой подвижности соединений в природных средах и летучести газообразного йода при переработке ОЯТ. Выбор твердого соединения йода, удовлетворяющего требованиям к реакторным мишеням, является проблемой. Летучесть йода при многократной переработке приводит к недопустимо высокому загрязнению окрестностей перерабатывающих предприятий. Поэтому йод-129 является важнейшим лимитирующим фактором при циклическом выжигании (делении) ТУЭ и его высокоэффективное улавливание на стадии переработки является одной из первоочередных задач.

Двухэтапное гомогенное разбавление йода-129 стабильным изотопом сперва искусственное, а затем естественное в водах Мирового океана — приведет к кратностям разбавления, на многие порядки более высоким, чем в случае природного калия-40, не замечаемого земной жизнью, хотя естественная активность, например, морской воды по калию-40 близка к 300 Ки/куб. км, и порядка 10000 Ки ежегодно вносилось в бывшем СССР в почву с минеральными удобрениями. Разбавление в океане представляется поэтому самым безопасным способом обращения с йодом-129. Разумеется, необходимо разработать технологию подлинно гомогенного разбавления, исключающего сохранение горячих частиц.

Вопрос об изотопном разбавлении как приеме обращения с долгоживущими радионуклидами заслуживает изучения и в более широкой постановке. Необходимо провести аналогичные исследования для долгоживущих изотопов с другими химическими свойствами.

Среди продуктов деления наиболее желательна и возможна трансмутация Tc-99. По выходу он уступает только Cs-137, и его полное содержание в ОЯТ российских реакторов составляет несколько тонн. У него самый «неудобный» период полураспада, 213 тыс. лет, при котором и уровень удельной активности достаточно высок, и выдержка в контролируемых хранилищах ничего не дает. В то же время его тепловое сечение захвата составляет 20 б, что достаточно для нейтронной трансмутации, поскольку такое сечение соответствует выгоранию 22% в год в потоке 5×10^{14} см⁻²с⁻¹, и последовательный захват трех ней-

тронов приводит к образованию только стабильных изотопов рутения — благородного металла. Сам технеций — химически стойкий металл, вполне пригодный для изготовления мишеней для реакторного облучения. Других кандидатур для трансмутации среди продуктов деления не просматривается.

Электроядерная трансмутация

Предлагаемые проекты электроядерных бланкетов столь же разнообразны, как и соответствующие реакторные проекты. Первоначально предполагалось, что использование ускорителей позволит получать большие потоки тепловых нейтронов (порядка 10¹⁶ см⁻²с⁻¹), что привело бы к качественному улучшению выжигания МА при одновременном резком уменьшении загрузок. Однако с углублением проработки проектов потоки падают, а загрузки растут, и роль ускорителя сводится в основном к обеспечению работы в подкритическом режиме. Но проблемы безопасности возможностью аварий с неконтролируемым разгоном не исчерпываются, а масштаб и сложность других трудностей, связанных с высокопоточными ЭЯЭУ, существенно выше, чем в реакторном случае. Перевод на подкритичность одного реактора из многих практически не повышает безопасности отрасли в целом, а экономические показатели ЭЯЭУ будут хуже, чем у реакторов, поскольку значительную часть вырабатываемой электроэнергии они будут тратить на собственные нужды. Кроме того, и меру риска нужно относить к единице конечной продукции, и пока не очевидно, что такой удельный показатель с учетом облучения персонала, обслуживающего ЭЯЭУ, будет ниже, чем у реакторов.

В заключение следует отметить, что весьма привлекательной выглядит концепция «ядерных островов», т. е. компактных, хорошо огражденных и охраняемых территорий, на каждой из которых сосредотачивается весь комплекс наиболее радиационно опасных объектов ЯТЦ. Первыми из таких островов могли бы стать уже в ближайшее время площадки старейших предприятий оборонного ядерно-промышленного комплекса.

Литература

- 1. Evaluation of Actinide Partitioning and Transmutation. Technical Report Series No. 124. IAEA, Vienna, 1982.
- Мурогов В.М., Субботин В.И., Каграманян В.С. и др. Современные стимулы развития быстрых реакторов с натриевым теплоносителем // Атомная энергия. — 1993. — Т. 74. — Вып. 4. — С. 285.
- Use of Fast Reactors for Actinide Transmutation. Proceedings of a Specialists Meeting held in Obninsk, Russian Federation, 22—24 September 1992. IAEA-TECDOC-693. IAEA, 1993.
- 4. *Mukayama T., Yoshida H., Ogava T.* Minor Actinides Transmutation in Fast Reactors and Fuel Cycle Considerations. In [3], p.86.
- 5. *Matveev V.I., Ivanov A.P., Efimenko E.M.* A Concept of Specialized Fast Reactor for Minor Actinide Burning. In [3], p. 114.

- 6. *Wakabayashi T., Yamaoka M.* Characteristics of TRU Transmutation in LMFBR. In [3], p. 99.
- Lone M.A., Edwards W.J., Collins R. Cross Section of the Sr(n,) Sr Reaction. In: Global'93 International Conference and Technology Exhibition. Future Nuclear Systems: Emerging Fuel Cycles & Waste Disposal Options. Proceedings. September 12–17, 1993, Seattle, Washington, p.445.
- 8. Zeisel G. Acta Phys. Austr. 23(1966)223.

Поступила в редакцию 1.02.94.

Использование плутония в ядерной энергетике России

В. Н. Михайлов¹, В. М. Мурогов², Н. С. Работнов², М. Ф. Троянов², В. Г. Илюнин², В. С. Каграманян², В. Я. Руднева², М. И. Солонин³, Б. С. Захаркин³, С. А. Антипов³, Т. С. Меньшикова³, А. И. Кирюшин⁴

> ¹Минатом РФ, Москва ² ГНЦ РФ – ФЭИ им. А. И. Лейпунского, Обнинск ³ ВИИИНМ им. А.А. Бочвара, Москва ⁴ ОКБМ им. И. И. Африкантова, Нижний Новгород

В последние 2—3 года особое внимание мирового сообщества привлечено к плутонию. Плутоний является вторичным продуктом, сопутствующим ядерной энергетике. Последняя стала реальным фактором прогресса в энергообеспечении: сегодня на атомных электростанциях мира вырабатывается около 17 % всей электроэнергии, и эта доля растет. Все больше осознается, что ядерная энергетика — единственный производитель электрической энергии, способный на длительный период обеспечить человечество энергией, решая положительно экологические проблемы глобального характера (парниковый эффект, кислотные дожди и др.). Вместе с тем нельзя не считаться с потенциальной опасностью, сопутствующей ядерной энергетике (образование в отработавшем топливе плутония и других высокотоксичных продуктов).

Дополнительную остроту проблеме придает желание мирового сообщества сделать процесс ядерного разоружения необратимым. Можно утверждать, что в настоящее время сформировались две крайние точки зрения по отношению к плутонию. Одна из них рассматривает его как отходы ядерной энергетики, другая — как национальное достояние. В основе такого подхода лежит объективное различие уровней технологического развития ЯТЦ в конкретных странах, а не только субъективное разделение на специалистов-ядерщиков и поборников защиты окружающей среды. Если страна обладает достаточно развитой технологией утилизации плутония с точки зрения решения задач нераспространения, безопасности и экологической приемлемости топливного цикла с его использованием, экономической конкурентоспособности, то в этом случае плутоний — национальное богатство. В противном случае он является источником опасности глобального масштаба.

Работы по использованию плутония в ядерной энергетике, освоению уранплутониевого топливного цикла и его технологии, анализу роли быстрых и тепловых реакторов и другим проблемам ведутся на предприятиях Минатома РФ давно и интенсивно. Здесь следует отметить, что человечество находится только в начале пути освоения реакции деления ядер, и многие аспекты этого прогресса, в том числе и не раскрытые полностью возможности, еще впереди.

Атомная энергия, 1994, т. 76, вып. 4, с. 326 — 332.
Утилизация плутония в быстрых реакторах. К настоящему времени отработана технология изготовления смешанного уран-плутониевого таблеточного топлива для быстрых реакторов и на ПО «Маяк» созданы опытно-промышленные установки «Гранат» и «Пакет» по производству топлива и твэлов.

В экспериментальном быстром реакторе БР-10 испытаны две активные зоны с загрузкой оксида плутония оружейного состава. В БОР-60 в НИИАРе испытаны и исследованы большие партии твэлов из смешанного уран-плутониевого оксидного топлива, изготовленных по разной технологии с плутонием различного изотопного состава. Уже много лет этот реактор работает на смешанном оксидном топливе, основу которого составляет энергетический плутоний различного изотопного состава. В БН-350 прошли реакторные испытания с последующим исследованием и химической переработкой опытные TBC со смешанным оксидным таблеточным топливом (350 кг плутония) на основе плутония оружейного состава. К настоящему времени изготовлено и испытано в БН-350 и -600 более 2 тыс. твэлов на основе смешанного таблеточного плутониевого топлива. Ни один из испытанных на сегодня твэлов не потерял герметичности при проектных параметрах работы реакторов: выгорании до 10 % тяж. ат., теплонапряженности 490 Вт/см и температуре оболочки 690 °C [1, 2].

БН-800, сооружаемый на Южно-Уральской АЭС, рассчитан на начальную загрузку 2,3 т плутония и 1,6 т для ежегодной подпитки. Одновременно с реализацией программы развития быстрых реакторов проводятся работы по реализации на промышленном уровне технологии повторного использования смешанного уран-плутониевого топлива в быстрых реакторах: выполнено около 50 % объема строительства топливного комплекса по производству ТВС для БН-800 (Комплекс 300 ПО «Маяк»), работают опытно-промышленные установки «Гранат» и «Пакет» по производству топливных материалов и твэлов со смешанным уран-плутониевым топливом для быстрых реакторов. В НИИ-АРе работает опытная установка по производству ТВС с плутониевым топливом на основе вибротехнологии.

В качестве следующего шага развития программы по быстрым реакторам в стране планируется строительство трех-четырех БН-800 на уран-плутониевом топливе. К настоящему времени начато строительство двух БН-800 на Белоярской и Южно-Уральской АЭС. При условии выполнения программы строительства БН-800 и Комплекса 300 в начале следующего века быстрые реакторы будут готовы к широкомасштабному использованию плутония для энергопроизводства [1, 2].

Выбор варианта утилизации оружейного плутония должен проводиться с учетом принятой национальной стратегии утилизации энергетического плутония, которая может быть различной для разных стран, поскольку зависит от многих условий, и в первую очередь:

 выбранной концепции долгосрочного развития ядерной энергетики, включая стратегию перехода от современной ее структуры к перспективной; – научно-технического задела и степени готовности технологической базы по утилизации плутония;

- конкретных национальных особенностей развития ядерного комплекса.

Утилизация оружейного плутония в свою очередь может способствовать решению нескольких проблем:

- нераспространению ядерного оружия;

- повышению энергетического потенциала ядерной энергетики;

- снижению опасности актиноидосодержащих радиоактивных отходов;

 – упрощению начального этапа освоения уран-плутониевого топливного цикла быстрых и тепловых реакторов.

Уменьшение или просто прекращение наращивания запасов плутония в мире, в первую очередь оружейного, является, несомненно, позитивным процессом. Однако на изготовление примитивного ядерного заряда идет и энергетический плутоний [3]. Поэтому утилизация излишков оружейного плутония нами рассматривается с учетом накопленных объемов энергетического в ядерной энергетике, большая часть которого находится в форме отработавшего топлива. Извлечение плутония из отработавшего топлива представляет сложную техническую задачу, что является надежным барьером на пути его неконтролируемого отвлечения на немирные цели.

Энергетического плутония, выделяемого из отработавшего уранового топлива, в нашей стране накоплено около 30 т. Его извлечение проводится на PT-1 ПО «Маяк» в результате химической переработки отработавших ТВС BBЭP-440, БН-600 и -350, работающих на урановом топливе. Переработка осуществляется, прежде всего, для извлечения невыгоревшего урана и последующего его использования для изготовления топлива РБМК, а также утилизации и локализации высокотоксичных отходов. Выделяемый при переработке плутоний складируется для последующего использования в энергетике.

Оценки показывают, что проблему выделенного и выделяемого на РТ-1 энергетического плутония, а также высвобождаемых излишков оружейного плутония до 100 т можно решить в рамках создаваемого ядерного центра в ПО «Маяк» на базе Комплекса 300 и трех-четырех БН-800.

Для минимизации времени обезвреживания или утилизации выделенного плутония, т. е. перевода в форму отработавшего топлива [3] целесообразна работа быстрых реакторов в разомкнутом цикле. Ожидаемое время утилизации выделенного энергетического и оружейного плутония в зависимости от числа БН-800 показано на рис. 1 (для одной из возможных производительности завода РТ-1 по плутонию). В этом варианте, как следует из рис. 1, период утилизации энергетического, а затем и оружейного плутония в количестве до 100 т может простираться до 2030 и 2040 гг. при вводе соответственно четырех и трех БН-800. Химическая переработка собственного плутония БН-800 целесообразна только после полного обезвреживания выделенного плутония.

В принципе утилизация плутония в рамках Комплекса 300 могла бы решаться и на базе легководных реакторов, как это предлагают американские

специалисты [3] и уже делается во Франции [4]. Однако для России такое решение неприемлемо по нескольким причинам.

Работы по расчетно-экспериментальному обоснованию возможности использования смешанного уранплутониевого топлива в ВВЭР в нашей стране только разворачиваются. Ни один из тепловых реакторов в России не проектировался с учетом возможности использования такого топлива. Показатели безопасности действующих ВВЭР даже на урановом топливе не удовлетворяют перспективным требованиям, предъявляемым к показателям реакторов повышенной безопасности нового поко-



Рис. 1. Баланс плутония на складе РТ-1 производительностью 2,6 т/год в зависимости от времени при вводе одного (2), двух (3), трех (4), четырех БН-800 (5), без ввода БН-800 (1)

ления. В силу этого вопрос о лицензировании возможности замены части урановых ТВС в действующих ВВЭР на ТВС со смешанным уран-плутониевым топливом, приводящим к некоторому ухудшению показателей безопасности, вызывает определенные сомнения. Кроме того, при ориентировании на ВВЭР, например, с полной загрузкой такого топлива для утилизации оружейного плутония потребовалось бы в 2 раза больше реакторов, чем быстрых такой же мощности. Это обусловлено различиями в годовом расходе плутония на изготовление топлива для ВВЭР и быстрых. При ограничении доли смешанного топлива 1/3 загрузки активной зоны (как, например, во французских АЭС) требуемое число ВВЭР возрастает в 6 раз по сравнению с быстрыми.

Нетривиальным является также вопрос о радиотоксичности отработавшего топлива. Известно, что присутствие в отработавшем топливе долгоживущих плутония, америция, нептуния и кюрия существенным образом усложняет, вопервых, технологию рецикла смешанного топлива, во-вторых, решение проблемы долгосрочного захоронения отходов. Во многом эти проблемы связываются с накоплением в отработавшем топливе ²⁴¹Pu, удельная радиотоксичность которого в 40 раз выше радиотоксичности основного изотопа ²³⁹Pu. При хранении ²⁴¹Pu превращается в еще более токсичный ²⁴¹Am с периодом полураспада 433 года, вносящий основной вклад в радиотоксичность трансурановых элементов отработавшего топлива после распада короткоживущих продуктов деления.

При работе легководных реакторов на урановом топливе из общей массы нарабатываемого энергетического плутония ~250 кг/(ГВт(эл)·год) около 30 кг составляет ²⁴¹Pu. Утилизация оружейного плутония в тепловых реакторах увеличивает его годовую наработку более чем в 3 раза по сравнению с наработкой

в ВВЭР на урановом топливе. В условиях вынужденного длительного хранения отработавшего топлива значительная часть ²⁴¹Ри превращается в ²⁴¹Аm, что существенным образом затрудняет дальнейшее использование плутония и захоронение отходов.

Помимо нежелательного накопления ²⁴¹Pu, утилизация оружейного плутония в ВВЭР приведет также к увеличению в несколько раз массы Am, Np и Cm по сравнению с ВВЭР на уране. В результате выжигания основного изотопа ²³⁹Pu при утилизации оружейного плутония в ВВЭР на ПО «Маяк» накопилось бы нуклидов общей радиотоксичностью, превышающей более чем в 3 раза радиотоксичность трансурановых элементов, накапливаемых при работе ВВЭР такой же мощности, но на уране.

Совсем иная картина складывается при утилизации оружейного плутония в быстрых реакторах. Радиотоксичность утилизированного плутония здесь почти совпадает с радиотоксичностью первоначального плутония. Характер изменения индекса радиотоксичности показан на рис. 2. Для сравнения приведен индекс радиотоксичности годовой выгрузки трансурановых элементов для ВВЭР на урановом топливе. Из анализа рис. 2 следует, что наилучший радиоэкологический эффект достигается при утилизации энергетического плутония в быстром реакторе. В этом цикле такой реактор является выжигателем наиболее радиотоксичного изотопа плутония — ²⁴¹Pu. Поэтому при прочих равных условиях в первую очередь необходимо утилизировать выделенный энергетический плутоний, а затем оружейный.

Характер изменения радиотоксичности ядерных материалов имеет существенное значение для условий ПО «Маяк», находящегося на территории с



Рис. 2. Изменение радиотоксичности трансурановых элементов за первый цикл утилизации оружейного и энергетического плутония в ВВЭР на урановом топливе (1), оружейном плутонии (2), 1/3 загрузки энергетического плутония (4), энергетическом плутонии (5) и в быстром реакторе на оружейном (3) и энергетическом плутонии (6)

экологически сложной обстановкой.

Вопрос о целесообразности использования плутония в тепловых реакторах во многих странах связывается с относительной дороговизной быстрых реакторов. И в нашей стране первый промышленный БН-600 производит электроэнергию на 40% дороже, чем ВВЭР-1000. Однако опыт БН-600 был учтен при разработке БН-800. Удельная металлоемкость этого реактора составляет около 80 % аналогичного показателя БН-600. Улучшение экономики топливного цикла БН-800 определяется также переходом с неэффективного для быстрых реакторов уранового топлива на смешанное уранплутониевое и увеличением в последующем его выгорания.

Повышение требований безопасности в нашей стране после аварий на АЭС «Три-Майл-Айленд» (США) и Чернобыльской АЭС также способствовало сближению экономических показателей быстрых и тепловых реакторов.

Присущие быстрым реакторам свойства, а также введение дополнительных технических решений позволили вывести проект БН-800 на уровень, соответствующий требованиям к АЭС нового поколения повышенной безопасности. В настоящее время это единственный проект, который прошел все необходимые стадии экспертизы, в том числе экологической. Имеется положительное решение региональных властей.

Работа над созданием новых проектов легководных урановых реакторов повышенной безопасности ВВЭР (ВВЭР-500 и ВПБЭР-600) еще не закончена. Предварительные оценки показывают, что удельные капиталовложения в эти реакторы примерно соответствуют средней оценке удельных капиталовложений для Южно-Уральской АЭС с тремя БН-800.

Необходимо отметить, что в России нет еще отработанной технологии изготовления смешанного уран-плутониевого топлива для ВВЭР. Такая цепочка предусматривается на заводе РТ-2, ввод которого предполагается после 2005 г. Что касается быстрых реакторов, то Комплекс 300 наполовину уже построен и при соответствующем инвестировании может быть введен в строй к концу столетия перед окончанием строительства первого блока БН-800. При выполнении программы ввода трех-четырех БН-800 обеспечивается экономически рентабельное производство смешанного топлива на Комплексе 300.

БН-800 — реальная база утилизации плутония и трансмутации Am, Np, Cm. Приведем конкретный пример эффективности работы БН-800 по утилизации плутония, снижению радиотоксичности плутония и других актиноидов, накопленных в результате переработки топлива BBЭР-440 на PT-1. По оценкам в этом топливе до 2000 г. будут накоплены актиноиды следующего состава, кг: ²³⁸Pu 165, ²³⁹Pu 11564, ²⁴⁰Pu 4173, ²⁴¹Pu 2350, ²⁴²Pu 779, ²⁴¹Am 420, ²⁴³Am146, ²³⁷Np 550, ²⁴⁴Cm 41, ²⁴⁵Cm 2.

При добавлении в топливо одного БН-800 3,5 % Am, Np, Cm в виде примеси обеспечивается их выжигание в количестве примерно 100 кг в год. Такое количество нарабатывают ежегодно три ВВЭР-1000.

Включение актиноидов в топливо быстрых реакторов может быть реализовано разными путями. Наиболее прямолинейный — добавление ранее выделенных нептуния и америция. Однако привлекают внимание и такие схемы, в которых проводится неполная очистка от урана и нептуния либо вообще снимаются требования по разделению плутония и нептуния. Могут рассматриваться и менее строгие ограничения на очистку от осколков деления. Реализация таких подходов может снизить неизбежное удорожание технологии химической переработки при выжигании актиноидов. Рассмотрим три характерных варианта возможного развития событий (см. таблицу):

- БН-800 не вводится в строй, актиноиды хранятся на складе до 2060 г.;

– в 2000 г. вводится БН-800 в традиционной концепции уран-плутониевого топливного цикла без выжигания Am, Np, Cm;

– в 2000 г. вводится БН-800 с использованием уран-плутониевого топлива в смеси с Am, Np, Cm. Безвозвратные потери актиноидов приняты постоянными и равными k = 0,2 % для плутония и америция.

для трех сценариев развития соовтии								
Нуклид	Macca	Масса к 2060 г., кг, в том числе отправлено						
	к 2000 г.,	на з	ахоронение (в ско	обках)				
	КГ	1	2*	3**				
²³⁷ Np	550	720	785 (785)	55 (40)				
²⁴¹ Am	420	2450	2040 (2040)	290 (20)				
²⁴³ Am	150	150	630 (630)	190 (4)				
²⁴⁴ Cm	40	5	25 (25)	110 (11)				
²³⁸ Pu	165	110	40 (2)	261 (8)				
²³⁹ Pu	17600	17600	17230 (175)	17480 (173)				
²⁴⁰ Pu	4370	4400	3810 (84)	3500 (86)				
²⁴¹ Pu	2350	165	420 (9)	430 (9)				

Количество радионуклидов и их суммарная радиотоксичность к 2000 г. для трех сценариев развития событий

* При *k* =100 % для Np, Am и Cm и *k* =0,2% для Pu.

** При *k* =2 % для Np и Cm и *k* =0,2% для Pu и Am.

Из анализа рис. 3 следует, что работа быстрого реактора в режиме рецикла плутония и Am, Np, Cm существенно (в 100 раз и более) сокращает объем и радиотоксичность актиноидов, уходящих в безвозвратные потери.

Долгосрочный экологический эффект трансмутации тем самым убедителен для того, чтобы считать оправданными исследования и развитие технологии в этом направлении. При этом открывается также перспектива к постепенному переходу ядерной энергетики к уран-ториевому топливному циклу [1] (рис. 4). Это позволит не только повысить безопасность АЭС и избавиться в топливном цикле от радиотоксичных Am, Np, Cm, но и существенно снизить количество плутония. Экологическая целесообразность такого перехода требует обоснования.

Выводы. Таким образом, возникает следующая концепция утилизации плутония, основанная на эволюционном развитии традиционно освоенной в нашей стране технологии:

 обязательное решение основной задачи любой краткосрочной программы обращения с плутонием — надежное и безопасное хранение выделенного энергетического плутония и высвободившегося оружейного плутония до использования в реакторах;



Рис. 3. Изменение радиотоксичности отходов во времени в зависимости от типа топливного цикла (кг²³⁹Ри в расчете на 1 ГВт(эл) год): 1 — ВВЭР, замкнутый ЯТЦ с ¹/₃ смешанного уран-плутониевого топлива; 2 — ВВЭР, открытый ЯТЦ; 3 — ВВЭР, замкнутый ЯТЦ со смешанным уран-плутониевым топливом; 4 — БН с плутонием; 5 — БН с плутонием и Np, Am, Cm

Рис. 4. Количество плутония в ядерной энергетике в зависимости от типа топливного цикла: 1 — открытый ЯТЦ, тепловые реакторы; 2 — замкнутый уран-плутониевый ЯТЦ, тепловые и быстрые реакторы; 3 — замкнутый уран-плутоний-ториевый ЯТЦ, тепловые и быстрые реакторы

 первоочередная утилизация плутония (прежде всего энергетического) в быстрых реакторах типа БН-800 с началом отработки технологии с использованием плутония оружейного качества в БН-600;

– ориентация в дальнейшем на ядерно-энергетические центры на базе ПО «Маяк» (завод РТ-1, Комплекс 300, БН-800) с надежным нераспространением оружейного плутония.

Исключительно важным при этом является форсирование работ по завершению строительства Комплекса 300: они должны опережать готовность БН-800.

В дальнейшем усилия должны быть сосредоточены:

 – на разработке и реализации в БН-800 активной зоны с повышенной экономичностью и эффективным использованием плутония;

 – обосновании возможности создания легководных реакторов требуемого уровня безопасности для эффективной утилизации плутония (в том числе «холодная» активная зона на основе керметного топлива);

– разработке и реализации технологии безопасного и экологически приемлемого замкнутого ЯТЦ на основе плутония и 233 U с выжиганием Am, Np, Cm.

Литература

- 1. Михайлов В.Н. Возвращение оружейного плутония в ядерную энергетику: Доклад, представленный на Межд. конф. «Ядерные системы будущего: ядерный топливный цикл и способы обращения с отходами». 12—17 сентября 1993, Сиэтл, США // Известия вузов, сер. «Ядерная энергетика», 1993, № 2.
- Мурогов В. М. и др. Использование оружейного плутония в ядерной энергетике (Концепция развития уран-плутониевого топливного цикла): Препринт ФЭИ-2303, 1993.
- Garwin R. Management and Disposition of Excess Weapons Plutonium. Executive Summary. Committee on Intern. Security and Arms Control. National Academy of Siences, National Academy Press, Washington, D.S. 1994.
- 4. Bouchard J. The effect of fuel cycle strategies on the choice of next-generation reactors. ENS TOPNUX'93 The Hague, April 25–28, 1993.

Nuclear Energy: in Search of a Paradigm Shift

A. A. Harms¹, B. W. Augenstein² and N. S. Rabotnov³

¹McMaster University, Hamilton, ON, Canada L8S 4L7 ²RAND Corporation, Santa Monica, CA 90407, U.S.A. ³Institute of Physics and Power Engineering, Obninsk, Russia 249020

Received 12 July 1994

The leveling-off trend in global installed nuclear power capacity together with the absence of an assured prospect of fission energy renewal, is here taken as a potential precursor to a paradigm shift in fission reactor technology. Underlying this perspective is the recognition that existing reactors are based on a rigid-fuel core configuration which has been shown to possess an intractable sensitivity to fuel melting under conceivable operational disruptions. Our analysis suggests that a fuel-in-suspension developmental initiative could — with considerable efficiency — clarify a critical component substitution as a potential factor in nuclear energy renewal.

Background

Perhaps it is useful to highlight why we believe that a new paradigm in the reactor industry and in nuclear energy utilization is both purposeful and timely. Issues of risk perception, social acceptance, and an increased realization that indirect costs — rather than direct prices — should be the focus of considerations for any energy systems, are now prevalent. Indeed, much of the current social consensus suggests that the nuclear industry has not fared well insofar as these issues are concerned. An early industry emphasis on the prospective low price of electricity from nuclear plants was not successfully borne out, attributable in part to an imperfect realization of the complexity and direct cost of nuclear plants as prompted by increasing safety concerns, for example. The vision of safe commercial nuclear power was further perturbed by highly publicized accidents and by some operational deficiencies which need not have happened.

Today, nuclear power has an opportunity for a revival if certain circumstances prevail. The viability of nuclear power can be reconsidered if suitable and well documented arguments are made as to the standing of nuclear energy in the array of future energy options — standing in the context of indirect costs of total energy systems. Such costs need to consider environmental impacts, use of resources, role of site approval and construction, waste disposal, the technologies used therein, and other factors such as the risks posed by the ancillary technologies involved.

In a future era of concerns about climatic perturbations, the relative position of nuclear energy certainly deserves explicit attention — and in this era nuclear energy continues to have many supportable attractions which warrant reasoned public confrontation. The nuclear industry has presumably now learned that addressing public

Ann. Nucl. Energy, 1995, vol. 22, no. 5, pp. 291-296.

opinion and the arguments of ecological champions, is best done by carefully buttressed comparisons with alternatives and not by simply effectively dismissing such concerns out of hand. Nuclear power can, we judge, make better arguments about environmental compatibility and a true containment of direct costs compared with alternatives — than it appears to have been made in the eyes of public opinion.

However, any carefully structured arguments of the degree of environmental compatibility and control of indirect costs possible for the nuclear industry will, nevertheless, be largely irrelevant if recurring public concerns about safety issues are not concurrently faced up to. That nuclear energy can be very safe, again compared with alternatives, needs to be made believable to the public in a transparent form — whether causal or detailed — and openly embedded in both the philosophy and implementation of future nuclear plant construction and operation. The effects on plant economics of such a direct focus on new engineering approaches in safety should be clearly evident to the non-specialist and to public opinion. In our view, engineering approaches which greatly enhance self-evident safety are possible without substantial impact on direct costs.

The triad of concerns on future nuclear power — environmental compatibility, indirect costs, and transparent safety — is intertwined in much of the public vision of nuclear energy. Herein we focus on a particular and most critical safety issue: fuel melting for which we believe new paradigms are indeed possible. Additionally, we feel strongly that this focus also impacts on other concerns, including direct costs of nuclear energy, which can be moderated if safety is truly transparent, and so affects beneficially the long processes of licensing, construction, inspection, and entry into operation.

Current Status

The historical trend of global installed nuclear power capacity, Fig. 1, shows a pronounced leveling-off; this trend, together with existing reactor construction activity, present disinterest in nuclear power by utilities, and the anticipated shutdown of aging reactors, suggest that zero net-growth will likely continue for the next decade. For this first-generation family of nuclear reactors, the indicated asymptomatic trend corresponds to about 6 % of present global total commercial energy and approx. 17% of global electrical energy with the remaining fraction supplied primarily by coal, oil, and natural gas. This nuclear energy supply portion is evidently quite incommensurate with known nuclear fuel supply, reactor manufacturing capacity, and human resources.

Current power reactors share the design feature in which the fuel rods are rigidly attached to the core pressure vessel — a design concept traceable to the developmental influence of the nuclear submarine program. Civilian nuclear power plants evidently operate under different constraints implying therefore that other core design concepts might be more appropriate. Indeed, throughout the entire history of fission reactor development, there have existed various small-scale research programs on alternative core concepts dwarfed, however, by the dominant influence of the several

programs leading to the present main-line designs.

The present lull in reactor construction provides a human-resource opportunity for a reexamination of alternative core configurations. Our interpretation of nuclear technology suggests that there exist promising developmental/design directions consisting of the replacement of rigid-fuel cores while leaving the remaining nuclear industry in its existing functional public-service form fully intact. We add that component substitution is a feature of the evolution of technology (Basalla, 1988;



Fig. 1. Global market penetration of nuclear fission energy [based on L. R. Brown et al. (1993)]

Gruebler and Nakicenovic, 1991), examples of which are suggested by the following: at the turn of the century, the railway industry began the replacement of steam locomotives by diesel-electric with a consequent resurgence in its network and service; similarly, in the middle of this century, the aircraft industry substituted jet engines for piston engines — with some consequent aerodynamic redesign — leading to a dramatic expansion in its public utility. The point to note is that a second generation innovation may lead to an added and expanded market penetration which follows the decline of the first generation entry; we envisage that a similar transformation might apply to the nuclear electric industry.

Fission reactors are commonly based on the use of encased uranium rods rigidly attached to the core pressure vessel. Liquid or gas coolant flows past these fuel elements thereby removing the heat generated in the fuel for subsequent conversion into electricity. The dominant fraction of generated heat is due to nuclear fission reactions the rate of which is under operator control via in-core control rod positioning. Failure to remove the generated heat from the rods will raise the fuel temperature which, when it reaches the fuel melting point, causes cladding rupture and radionuclide release from the fuel.

Two severe accident conditions may be identified: the local nuclear power exceeds the heat removal capacity of the coolant and equipment failure prevents the

Oct. 1966:	Partial core melt (Enrico Fermi), Michigan, U.S.A.
Oct. 1969:	Partial core melt, Saint-Laurent, France
March 1975:	Loss of control (Browns Ferry), Alabama, USA
March 1978:	Loss of control (Rancho Seco), California, U.S.A.
March 1979:	Partial core melt (TMI-2), Pennsylvania, U.S.A.
April 1986:	Loss of control and building rupture (Chemobyl-4), Kiev, Ukraine

Table 1. Listing of major power reactor accidents

removal of the nuclear power. Thus, certain operator errors or equipment failures are the primary initiators of severe nuclear reactor accidents some of which are listed in Table 1.

Towards a Fail-Safe Ideal

The preceding suggests that a dominant and fundamental feature of current fission reactor safety may be summarized by the following: since operator error and equipment failure cannot be totally avoided, prompt back-up action must be provided; then, since these safety back-up provisions are also based on mechanical/electrical devices, the ultimate reactor safety measures reduce to a multiplicative probability estimate which, by experience with existing reactors, is evidently unacceptably large.

Our perspective on this aspect of reactor safety is radically different: the proposition is that a design be considered such that these primary initiators directly trigger a "transparently assured" process of placing the nuclear fuel into a subcritical and perpetually cooled state. Evidently, the force of gravity may be considered sufficiently "assured" but "transparency" requires design considerations.

It follows therefore that, rather than deploying a core in which the fuel is rigidly fixed to the pressure vessel — a common feature of current power reactors the design concept of fuel held in suspension by a vertically upward moving coolant should be the guiding design principle; evidently, a suitably configured catchment situated directly below the core such that a gravity-driven descend of the fuel leads to a subcritical and perpetually cooled state is required. Figure 2 provides a schematic depiction of such a pellet fuel-in-suspension reactor concept.



Fig. 2. Schematic depiction of a fuel-in-suspension reactor concept. Under normal operation, the upward moving gas coolant suspends the fuel pellet in each of several fuel channels in a core domain; in the event of a coolant pump failure, the fuel pellets descend by gravity into a divergent conical annulus with perpetual cooling provided by packed-bed heat conduction into a surrounding pool of ordinary water. For reasons of graphical clarity, only one fuel channel is here shown

We point to an important corollary resulting from the above: the role of operator and equipment reliability is to relate to operational efficiency and not to critical safety such as loss of control and fuel melting, Table 1. The term "fail-safe", as commonly used, seems to describe the paradigm-shift safety concept we introduce here.

Evolution of Fuel-in-Suspension Concepts

The notion of non-rigid fuels as a reactor core design concept dates to the earliest period of nuclear reactor development. One extensively tested concept was the molten-salt system based on the use of nuclear fuel homogeneously mixed in a slurry with the entire mixture circulating in a closed core and heat exchanger loop. A subsequent version of this concept involves small (~ 5 pm) fuel microspheres suspended in ordinary water (Went and Hermans, 1971). In recent years, this concept has developed into macro fuel spheres (~ 1–5 cm), suspended in vertically moving cooling fluid and (optionally) constrained by an upper and lower sieve which would transmit the coolant but not the fuel. Criticality corresponded to a narrow range of coolant flow rates with deviations causing fuel sphere bunching at either the upper or lower sieve with consequent subcritical conditions (Sefidrash, 1985; Seifritz, 1992).

An innovative approach was reported by Taube et al. (1986) again based on macro fuel sphere (~5 cm) held in vertical channels by the upward motion of liquid lead coolant. Below the core is situated a set of collector trays the size and spacing of which is chosen so that, in the event of coolant pump failure, the fuel spheres will descend and settle on these trays forming a subcritical assembly with sufficient radiative cooling until — and if necessary — spray dousing is supplied. A variation of the above (Mizuno et al., 1990) involves ~1 cm spheres suspended in a water coolant such that in the event of coolant pump failure, the fuel sphere would descend through a so-called "density lock" into a liquid holding tank.

In a more recent work, we have explored the possibility of micro fuel pellets (<1 mm) held in suspension in separate vertical channels by a helium gas coolant (Harms and Kingdon, 1993; Harms and Fundamenski, 1993). Situated below the core is a conically divergent dry annulus surrounded by ordinary water; pump failure would cause the fuel pellets to descend into the annulus providing both nuclear subcritically and perpetual cooling by packed- bed heat transfer. Further, the dry fuel pellets could be remotely extracted and robotically subjected to various tests, thereby separating those for recycle from those for on-site processing. Figure 3 provides a schematic of this pellet suspension reactor concept and Table 2 lists a set of consistent core parameters determined for a thermal reactor configuration generating 600 MW. Other design features — such as variations in enrichment, type of moderator, neutron spectrum, power densities, and other reactor core properties — can be readily conceived.

A reactor concept possessing similar features had also been suggested by Hovingh (1985).



Fig. 3. Depiction of a fuel-in-suspension fission reactor system concept with on-site fuel management suggested by the block-diagram components

Evolution of Fuel-in-Suspension Concepts

The fuel-in-suspension reactor concept described here, Fig. 2 and Table 2, possesses material compositions, geometrical configurations, and nuclear properties, generally similar to existing reactor designs. The one feature which is unique and will require specialized further development involves the kinetics of fuel pellets suspended in a flowing coolant gas; we note that this gas-particle-kinetic technology is not a traditional part of nuclear engineering and more at home with mechanical and aeronautical engineering practice. Experimental investigations in this area, recognizing that the fission core places restrictions on local reactivity variations which translates into particular demands on pellet homogeneity and dynamic stability, are evidently required; an inverse analogy with void dynamics associated with boiling light water reactors is suggested. The alternative would be for the upward flowing coolant to push the pellets against a suitable upper sieve which allows the coolant to pass through but not the fuel pellets; additionally or alternatively, at the lower end of the fuel channel, one may conceive of a trap-door arrangement held in place by the upward moving gas coolant.

F ¹ ¹	(00) (1)		
[Whitlock (1993)]			
Table 2. Example of	scoping calculational	result for the pellet fuel-in-suspension co	oncept

Fission power:	600 MW,
Cylindrical core:	$H = 5.0 \text{ m}, D = 5.0 \text{ m} (1 \text{ m} \text{ D}_2\text{O} \text{ reflector})$
Coolant:	He, 5 MPa, 6.6 m/s
Temperature:	$T_{\rm fuel} < 1700 \ ^{\circ}{\rm C}, \ T_{\rm cool} < 900 \ ^{\circ}{\rm C}$
Fuel pellets:	$D = 0.5 \text{ mm}, \text{UO}_2, \text{UC}, \text{Nat. U}$
Fuel tube:	D = 20 cm, Zr — 2.5 % Nb, Pitch: 39 cm
Volume ratios:	$V_{\text{fuel}}/V_{\text{channel}} = 0.10, V_{\text{channel}}/V_{\text{core}} = 0.25$
Pellet catchment:	6 cm thick annulus, 7 m long, $q_{\text{max}} = 600 \text{ kW/m}^2$
Reactivity coefficient:	$\alpha_{\text{fuel}} = -1 \times 10^{-6} \text{ C}^{-1}, \ \alpha_{\text{cool}} = -1 \times 10^{-5} \text{ C}^{-1}$

Operational Features

Primary cooling pump failure in a conventional rigid-fuel fission reactor is evidently a serious event; in a fuel-in-suspension reactor, this event will simply lead to an unscheduled scram with reactor start-up possible soon after. Fuel melting hazards are thus eliminated and with it the need for back-up emergency core cooling. Thus, the ghost of Three-Mile-Island and Chernobyl might indeed be put to rest.

A surprising and exceptional feature of the fuel-insuspension reactor concept is an apparent intrinsic resistance to malicious intent by an operator. While a deliberate coolant pump shutdown leads simply to a scram, a deliberate attempt towards an excessive power excursion will evidently increase the fuel temperature followed by a coolant temperature increase; the consequences of this is a tendency toward downward and upward ejection of fuel thereby leading to subcriticality and autonomous reactor shutdown.

New fuel cycle options may also be introduced. For example, rather than mixing different fissile isotopes within a fuel element, the use of micro fuel pellets provides for a new approach: while each pellet may be homogeneous with respect to its fissile composition, one may use mixtures of fuel pellets of various fissile or fertile compositions in a given core loading. Thus, the prospects of burning weapons plutonium and introduction of the thorium cycle may be viewed in a different context. Additionally, the form of fuel in pellets also render them in a convenient form for possible on-site quality control for high burn-up, reprocessing, and recycling of all materials with the exception of highly neutron absorbing isotopes; the inventory of radioisotope outside the core may thus be considerably reduced.

Finally, if the gas coolant is kept sufficiently pure, one might bypass the thermal cycle and supply a gas turbine directly with a significant station energy conversion efficiency enhancement.

Concluding Comment

Technological advances, technological change and public policy are currently interrelated to a remarkable degree in the eyes of both the public and the officials who must formulate policy. Many concerned citizens fear that existing economic and societal structures cannot adjust to the kind of technological change which has many potential consequences for the individual and society as a whole. Probably nowhere are such fears as evident as in the field of nuclear energy for peaceful purposes of sustaining growth and productivity. The erstwhile promise of nuclear energy here has been, in the eyes of many, greatly clouded by issues of safety, health, environment, and cost. The net benefits available to society by the technological changes inherent in nuclear energy depend critically on overt confrontations of the risk of inadequate accommodation to these issues. The past few decades have seen some dramatic evidence of such inadequate adjustments to the publicly voiced concerns of many.

We believe that means are now available to meet the concerns of citizens and are convinced that benefits may occur to nuclear energy in a proper technological embodiment. Our perspectives are reflected in this paper via some brief discussion of the evolutionary history of nuclear fission reactors, and a reexamination of how the current status — and prospects — of the nuclear industry can be very beneficially improved in a timely and opportune way. Principally, implementation of new fission core concept suggests an avenue which promises new levels of — and new paradigms for — efficiency, safety, and alleviation of public concerns about the viability of nuclear energy. Our analysis suggests that at least one promising technological innovation, as described herein, can be introduced with quite substantial impacts on reactor safety, operational enhancements, and consequent cost containment — all factors which address directly major public concerns about nuclear energy.

References

Basalla G. *The Evolution of Technology*. Cambridge Univ. Press, Cambridge, U.K. (1988).

Brown L.R., Kane H. and Ayres E. Vital Signs 1993. W.W. Norton, New York, U.S.A.

- Gruebler A. and Nakicenovic N. Long Waves, Technology Diffusion and Substitution, RR-91-17. Int. Applied System Analysis, Laxenburg, Austria (1991).
- Harms A.A. and Fundamenski W.R. Fail-Safe Decay- Heat Removal in a Pellet Suspension Fission Reactor. Proc. Seventh Int. Conf. Emerging Nuclear Energy Systems, Chiba, Japan (20—24 Sept. 1993).

- Harms A.A. and Kingdon D.R. Passively Fail-Safe Fission Reactor Based on Pellet Suspension Technology. *Proc. Int. Joint Power Generation Conf.*, Kansas City, U.S.A. (17–21 Oct. 1993).
- Mizuno T. et al. The Inherently-Safe Fluidized-Bed Boiling Water Reactor Concept. Ann. Nucl. Energy 17, 987 (1990).
- Sefidvash F. A Fluidized-Bed Nuclear Reactor Concept. Nucl. Technol. 71, 527 (1985).
- Seifritz W. A Passively Safe 10 MW(th) Fluidized-Bed Heating Reactor Module. *Proc. Jahrestagung Kerntechnik 1992*, Karlsruhe, Germany (5-7 May 1992).
- Taube M. et al., The Inherently-Safe Power Reactor DYONISOS. *Ann. Nucl. Energy* 13, 641 (1986).
- Went J.J. and Hermans M.E.A. The KEMA Suspension Test Reactor. Fourth Int. Conf. Peaceful Use of Atomic Energy, Geneva (1971).
- Whitlock J. Reactor Neutronics Analysis of a Pellet Suspension Reactor. Dept of Engineering Physics, Mc- Master University, Hamilton, Canada (March 1993).
- Following a seminar presentation by A. A. Harms at the Lawrence Livermore National Laboratory on 22 Jan. on the pellet-in-suspension concept suggested in Fig. 3, J. Hovingh of the LLNL staff provided sketches of a somewhat similar concept which had been discussed in an in-house workshop at LLNL in 1985.

Исследования деления ядер

А. В. Игнатюк, Б. Д. Кузьминов, Н. С. Работнов, Б. И. Фурсов

Кратко излагается более чем 40-летняя история исследований по физике деления в ФЭИ, инициированных потребностями в ядерных данных для реакторов на быстрых нейтронах и превратившихся в один из важнейших разделов физики ядра. Список лит. 50 назв.

Начало работ. В 50-е годы понятия «ядерная физика» и «ядерные данные» были неразделимы, и главным стимулом исследований деления было количественное определение важнейших величин как функций энергии падающих нейтронов: сечений деления, среднего числа мгновенных и запаздывающих нейтронов, нейтронных спектров, выходов осколков деления ядер. Была осознана роль глубокого физического понимания этого сложного ядерного превращения, для чего требовалось не только уточнить важнейшие характеристики, но и качественно детализировать измерения (угловое распределение осколков, кинетическую энергию), изучить деление, вызываемое заряженными частицами и γ-квантами, и интенсивно развивать теорию процесса деления.

Именно сочетание практической и научной значимости стимулировало развитие в ФЭИ исследований всех стадий процесса деления, а наличие школы, созданной А. И. Лейпунским, И. И. Бондаренко, Л. Н. Усачевым и Г. Н. Смиренкиным, способствовало успешному решению этих задач. Работы, инициированные потребностями разработки быстрых реакторов, были секретными, результаты стали публиковаться лишь в конце 50-х годов. Основной экспериментальной базой стал комплекс электростатических ускорителей, созданный под руководством В. Н. Глазанова и А. Н. Сербинова.

Для определения коэффициента воспроизводства ядерного топлива были необходимы достоверные данные о взаимодействии быстрых нейтронов с ядрами ²³⁵U, ²³⁸U и ²³⁹Pu. В 1951 г. И. И. Бондаренко впервые измерил сечения деления ²³⁸U и ²³²Th на спектре нейтронов деления. Позже Л. Н. Усачевым и Г. Н. Смиренкиным было определено значение $\alpha = (\sigma_{\gamma})/(\sigma_{f})$ для ²³⁹Pu на «смягченном» спектре деления по накоплению ²⁴⁰Pu, В. Н. Андреевым — при энергии нейтронов 20, 200 и 800 кэВ по размножению в плутониевой сфере. В эти же годы были начаты измерения спектров нейтронов деления с использованием камеры Вильсона и пороговых детекторов.

В 1953 г. Л. Н. Усачев и П. В. Трубицин предсказали линейный рост числа нейтронов на акт деления v в зависимости от энергии возбуждения ядра ²³⁹Pu. Позже зависимость v(E) была измерена двумя методами для ^{233, 235, 238}U, ²³⁹Pu и ²³²Th [1]. Рост v со скоростью около 0,15 MэB⁻¹ был подтвержден. Далее были измерены v для ²³⁷Np и ²⁴⁰Pu и начата разработка систематики v(A, Z) для спонтанного деления. Несмотря на упрощенный подход, эта систематика ока-

Атомная энергия, 1996, т. 80, вып. 5, с. 322 — 329.

залась плодотворной и нашла свое подтверждение в более поздних экспериментальных данных по v для спонтанного деления.

Измерения сечений и угловых распределений осколков деления актиноидов быстрыми нейтронами. Измерения сечений деления ядер быстрыми нейтронами всегда занимали важное место вначале для основных компонентов уран-плутониевого топлива, а затем для всей совокупности нуклидов от радия до калифорния. Уже в 1957 г. была определена форма сечения деления ²⁴⁰Ри вблизи порога, что дало ответ на вопрос: будет ли он в быстром реакторе топливом или поглотителем [2]. Потом были измерены сечения деления ²³³U, ²³⁵U и ²³⁹Pu до 2,5 МэВ [3].

В 50-х гг. О. Бор предложил концепцию каналов деления как дискретных переходных состояний над барьером, в случае четно-четных ядер аналогичных низколежащим состояниям. Физики ФЭИ одними из первых осознали важность изучения каналовой структуры барьеров. Первые измерения угловой анизотропии деления ²³⁹Pu и ²⁴⁰Pu нейтронами энергией до 4 МэВ были выполнены с простой ионизационной камерой [4]. В дальнейшем для измерений угловых распределений была создана многосекционная камера с 2π -геометрией и позднее камера с трековыми детекторами.

Накопленная экспериментальная информация и ее теоретический анализ, подтвердив некоторые качественные предсказания модели каналов О. Бора, в то же время показали существенные противоречия наблюдаемых вариаций анизотропии деления в околопороговой области с представлениями классической одногорбой модели барьера. Их удалось устранить только на основе модели двугорбого барьера деления, предложенной В. М. Струтинским [5]. Работы физиков ФЭИ внесли значительный вклад в ее становление и развитие: были получены в квазиклассическом приближении формулы для проницаемости двугорбого барьера, определены статистические закономерности флюктуаций делительных ширин, объяснены наблюдаемые четно-нечетные различия порогов деления и главные особенности вариаций угловой анизотропии для подбарьерной и околобарьерной энергии [6, 7].

Позднее были выполнены систематические измерения угловых распределений осколков деления нейтронами энергией до 7 МэВ для множества ядер актиноидов [8]. Из этих данных были определены эффективные моменты инерции переходных состояний делящихся ядер, зависимость которых от массового числа и параметра делимости подтверждает гипотезу о формировании угловых распределений на внешнем горбе [9].

Необходимость существенного уточнения ядерных данных для быстрых реакторов стимулировала систематические исследования сечений деления с высокой точностью в области энергии нейтронов до 14 МэВ. Были разработаны новые экспериментальные методики (быстрые ионизационные камеры, полупроводниковые и трековые детекторы), методы калибровок, определены стандарты для относительных измерений (²³⁵U как международный стандарт и ²³⁹Pu как удобный «подстандарт») [10—12]. Создание сильноточного режима

ускорителей позволило проводить измерения с хорошей статистической точностью даже для мишеней массой 1—2 мкг [13]. Было исследовано более двух десятков нуклидов, получены данные с высокой точностью, которые легли в основу современных оценок сечений деления. Подробно исследованы все основные изотопы U—Pu- и U—Th-топливных циклов, а также другие нуклиды, интересные для изучения зависимости вероятности деления от нуклонного состава ядер: ²³⁷Np, ^{241,242m,243}Am, ^{245,247}Cm, ²⁴⁹Cf. Полученные данные легли в основу национальных оценок сечений деления и библиотек рекомендованных ядерных данных.

В последние годы приоритет исследований сместился к Np, Am, Cm в связи с их возможной трансмутацией в быстрых реакторах-сжигателях и электроядерных установках, измеряются сечения деления ²³⁸Pu, ^{243,244,246,248}Cm.

Большой объем данных о сечениях деления помог создать «физическую» систематику параметров двугорбого барьера и делимости актиноидов [14], более надежную, чем эмпирические систематики. Она позволяет предсказывать сечения деления для всех трансурановых ядер, включая нейтронодефицитные и нейтроноизбыточные, экспериментальное изучение которых затруднено.

Ориентация ядер-мишеней меняет кинематику реакций и заселенности состояний с разными значениями углового момента и его проекций. Это открывает ценные возможности для изучения зависимости структуры барьера от квантовых чисел. Такие эксперименты проводятся в ФЭИ на протяжении более чем 20 лет. Эта методика сложна, для ориентации ядер урана необходимо поддерживать температуру монокристаллических мишеней не выше 0,1 К, при сверхнизкой температуре работают и детекторы. Первоначально основным направлением исследований было деление ядер урана быстрыми нейтронами энергией в несколько сот кэВ. Это позволило изучить особенности деления состояний разной четности и получить новые данные о взаимодействии *p*-нейтронов с деформированными ядрами [15]. Сейчас эти работы идут на импульсном реакторе ОИЯИ на резонансных нейтронах, где имеется уникальная возможность измерять угловые распределения осколков при делении через отдельные уровни составного ядра.

Выход и спектр нейтронов. Для реакторного приложения требуется достаточно высокая точность данных о выходе нейтронов, поэтому измерению v долгие годы уделялось большое внимание. Двумя независимыми методиками [16, 17] были выполнены систематические измерения энергетической зависимости v для ²³²Th, ^{233,235,236,238}U, ²³⁷Np, ²³⁹Pu нейтронами энергией до 7 МэВ.

Интенсивно изучались немонотонные измерения $\langle v \rangle$ при околопороговой энергии. Совместный анализ $\langle v \rangle$, средней кинетической энергии осколков E_{κ} , выхода симметричного деления и дисперсий угловых распределений осколков показал сильную скоррелированность наблюдаемых вариаций указанных величин со спектром переходных состояний на барьере деления [18] в согласии с идеей В. М. Струтинского и В. А. Павлинчука [19] о распределении полной энергии деления по наблюдаемым компонентам. Баланс энергии и накоплен-

ные экспериментальные данные о v и E_{κ} позволили развить систематики энергетической зависимости v, широко применяемые при оценке выхода нейтронов для всех трансурановых элементов [20].

По мере разработки новых методов спектрометрии нейтронов проводились все более тщательные измерения спектров мгновенных нейтронов деления. В сотрудничестве с ЦИФИ Будапешта методикой литиевых стекол была изучена форма низкоэнергетической части спектров нейтронов деления ^{233,235}U и ²³⁹Pu тепловыми нейтронами и при спонтанном делении ²⁵²Cf [21]. На спектрометре со стильбеновым детектором была изучена зависимость средней энергии нейтронов деления от энергии возбуждения ядра [22].

Созданные спектрометры быстрых нейтронов по времени пролета позволили проводить более полное изучение спектров. Впервые экспериментально было подтверждено теоретическое предположение о «смягчении» суммарного спектра нейтронов, сопровождающих деление ядра ²³⁸U, при достижении порога реакции (*n*, *n'f*) [23]. Были также измерены спектры нейтронов при делении моноэнергетическими нейтронами ядер ²³²Th (1,5 MэB), ²³⁵U (0,5; 1,5; 5,0 MэB), ²³⁷Np (4,9 MэB), ²³⁹Pu (1,5 MэB) [24]. В совместных работах с физиками Технического университета Дрездена измерены спектры нейтронов деления ²³²Th (1,88 MэB), ²³⁷Np (7,8 MэB), ²³⁹Pu (7,5; 10 MэB) [25]. Это имело большое значение как для выработки оцененных данных о спектрах нейтронов, так и для тестирования теоретических моделей, описывающих испускание нейтронов осколками деления ядер.

Для исследования механизмов испускания нейтронов спонтанного деления ²⁵²Cf были измерены число и спектр мгновенных нейтронов осколков деления с фиксированной массой и кинетической энергией под углом 0 и 90° к направлению разлета парных осколков деления, а также энергетическое и угловое распределение нейтронов (10 углов) без фиксации параметров осколков [26]. Результаты подтвердили, что доминирующим является испарение нейтронов из полностью ускоренных осколков деления. Из наблюдаемых спектров нейтронов были извлечены параметры плотности уровней, подтверждающие глубокий оболочечный провал вблизи массы 132. Более полный анализ спектров нейтронов из разделенных осколков был выполнен в сотрудничестве с Центром ядерных исследований в Геле (Бельгия) [27]. Было показано хорошее согласие извлекаемых параметров плотности уровней с предсказаниями обобщенной сверхтекучей модели.

В сотрудничестве с Радиевым институтом выполнены прецизионные измерения спектров мгновенных нейтронов эмиссионного деления ²³²Th, ²³⁸U и ²³⁷Np нейтронами начальной энергией 14,7 МэВ [28]. Анализ спектров позволил идентифицировать высокоэнергетические предделительные нейтроны, образующиеся в результате предравновесного испарения. При этом в низкоэнергетической части спектра обнаружен компонент, который не удается объяснить стандартными расчетами по статистической модели. Для выяснения физической природы «лишних» нейтронов низкоэнергетического спектра в настоящее время проводятся измерения эмиссионных спектров при начальной энергии нейтронов ниже 14 МэВ и начаты исследования угловых распределений испускаемых нейтронов.

В большом цикле работ Б. П. Максютенко, охватившем 70—80-е годы, для важнейших актиноидов были детально исследованы выход и спектр запаздывающих нейтронов деления [29]. На основе систематик выхода предшественников и вероятностей испускания нейтронов в излучателях разработаны модели полного описания энергетических и временных спектров и выхода запаздывающих нейтронов.

Фотоделение ядер. Физики ФЭИ одними из первых осознали важность фотоделения для исследования каналовой структуры барьера благодаря простой кинематике угловых моментов в этой реакции. Исследования фотоделения стали возможными на базе сотрудничества с ИФП АН СССР, где был создан микротрон, обеспечивший нужную интенсивность и энергию γ-излучения. Эксперименты можно разделить на несколько этапов.

1. Исследование углового распределения осколков фотоделения четночетных ядер. При этой энергии возможно только дипольное и квадрупольное поглощение квантов с образованием состояний 1⁻ и 2⁺ с проекцией |M| = 1. При делении через K = 0 только две гармоники присутствуют в угловых распределениях. Был надежно измерен и исследован квадрупольный компонент в угловых распределениях для трех ядер ²³²Th, ²³⁸U, ²⁴⁰Pu в интервале энергии 5—7 МэВ [30]. Было измерено также отношение выхода симметричного и асимметричного фотоделения. Одновременное исследование сечения фотоделения и угловых распределений [31] показало, что относительное положение максимумов анизотропии и барьеров является сильным доводом в пользу теории двугорбого барьера.

2. Примерно 5 лет были посвящены исследованиям во все более глубокой подбарьерной области для определения резонансной структуры проницаемости двугорбого барьера и изучения изомерного шельфа [32]. В 80-е годы энергия возбуждения была снижена до 3,5 МэВ и расширено число исследуемых ядер с включением нечетных (девять изотопов от ²³²Th до ²⁴¹Am) [33].

3. Во второй половине 80-х годов начались эксперименты при более высокой энергии («деление второго шанса») уже для 19 ядер от ²³¹Ра до ²⁴⁹Cf [34]. Анализ результатов продолжается до настоящего времени.

4. 90-е годы были посвящены детальному изучению подбарьерного фотоделения 232 Th, где была подтверждена тонкая структура, обнаруженная в реакции (*p*, *p*'*f*).

Массово-энергетическое распределение осколков. Проблема асимметрии деления постоянно была одной из центральных. В связи с этим в ФЭИ были начаты многопараметрические исследования осколков деления, первая задача которых состояла в выявлении роли седловой точки в формировании массы и кинетической энергии. Поскольку было установлено, что угловое распределение осколков определяется квантовыми характеристиками переходных

состояний, были измерены спектры массы и кинетической энергии осколков под 0 и 90° к направлению движения нейтронов, вызывающих деление ядер ²³²Th, ^{235, 238}U, ²²⁶Ra [35] заметного различия в характеристиках распределения не обнаружено.

Были выполнены статистические расчеты распределения массы, кинетической энергии и энергии возбуждения осколков в точке разрыва [36]. Предложенная модель описывает наблюдаемую асимметрию выхода массы, уменьшение кинетической энергии для области симметричного деления, пилообразную зависимость числа испускаемых осколками нейтронов, а также основные закономерности изменения массово-энергетического распределения с ростом энергии возбуждения ядра. Модель недооценивает примерно в 2 раза наблюдаемые дисперсии распределений осколков, что указывает на существенную роль этапов, предшествующих точке разрыва.

Для описания, как статики, так и динамики деления оказались полезны теоретические работы [37], где было предложено описывать форму ядра с помощью обобщенных лемнискат (овалов Кассини).

Развитый в ФЭИ метод двумерного измерения энергии парных осколков полупроводниковыми детекторами в потоке быстрых нейтронов позволил выполнить систематические исследования выхода и кинетической энергии осколков при делении основных изотопов тория, урана, нептуния, плутония и америция моноэнергетическими нейтронами в диапазоне энергии до 6 МэВ [38]. Большинство измерений было выполнено впервые. Благодаря высокой точности и широте охвата полученные результаты до сих пор составляют основной источник информации в этой специфической области исследований. По результатам можно сделать следующие выводы:

– кинетическая энергия осколков заметно флюктуирует при энергии возбуждения, близкой к барьеру. Это особенно ярко проявилось при делении ядер ²³²Th нейтронами. Антикорреляция v и E_{κ} говорит о наличии обмена энергией между внутренними и коллективными степенями свободы;

– впервые обнаружено систематическое уменьшение E_{κ} при делении четных изотопов урана через вибрационные резонансы во второй яме [39], что указывает на достаточно сильную связь состояний второй ямы с точкой разрыва ядра;

– изменение кинетической энергии обусловлено вариациями выхода осколков, что в дальнейшем было объяснено в рамках представлений о многодолинной структуре потенциальной поверхности делящегося ядра. В частности, учет изменения вклада событий деления, протекающих по различным долинам, позволил объяснить изменения E_{κ} при делении ²³⁷Np вблизи барьера деления и ²³²Th при $E_n > 2$ MэB, а также большую часть изменений E_{κ} при переходе от спонтанного к вынужденному делению ²⁴²Pu;

– для всех изученных ядер, кроме ²³²Th, по мере приближения энергии возбуждения к порогу реакции (*n*, *n'f*) кинетическая энергия уменьшается тем раньше, чем выше Z делящегося ядра. Для ²³²Th наблюдается рост E_{κ} по мере

роста E_n . Такое поведение было объяснено специфической зависимостью оболочечной поправки от температуры [40]. Поскольку из всех изученных ядер ²³²Th имеет минимальную энергию возбуждения в момент разрыва, то оболочечная поправка растет с энергией возбуждения, и образуются менее деформированные осколки с увеличенной кинетической энергией.

В 80-е годы были созданы высокоэффективная ионизационная камера, соответствующее электронное обеспечение и компьютерные программы, позволяющие проводить измерения одновременно энергии, массы и угла разлета каждого из пары образующихся осколков. Впервые были выполнены исследования холодной фрагментации при делении ядер ²³⁵U, ²³⁶U и ²⁴³Am быстрыми нейтронами [41]. Проникновение в область холодной фрагментации, где масса осколков не искажена испусканием нейтронов, позволило обнаружить аномально асимметричное деление с образованием осколков в окрестности никеля и железа, а также различие углового распределения осколков с разной массой и кинетической энергией [42].

В настоящее время многопараметрические исследования структуры деления ядер стали одним из перспективных направлений в изучении физики деления ядер и их развитию придается большое значение в ФЭИ.

Исследования сечений деления в реакциях с легкими заряженными частицами. В начале 70-х годов ФЭИ в сотрудничестве с ИЯФ АН Казахстана были начаты широкомасштабные исследования сечений деления доактиноидных ядер. Их целью было уточнение барьеров деления, определение моментов инерции предельно деформированных переходных конфигураций ядер, изучение оболочечных и сверхтекучих эффектов в возбужденных ядрах. Измерения проводили на изохронном циклотроне ИЯФ, как правило, с помощью диэлектрических трековых детекторов, почти нечувствительных к фону [43]. Только так удалось провести измерения вблизи порога, где сечения уменьшаются до 10^{-33} — 10^{-34} см².

При анализе сечений деления в окрестности свинца впервые была показана существенная роль оболочечных эффектов в описании энергетической зависимости делимости, в частности, исчезновение оболочечных «провалов» параметров плотности уровней при большой энергии возбуждения. Было разработано феноменологическое описание параметра плотности уровней, связывающее его энергетические изменения с оболочечной поправкой к энергии связи ядер [44].

Наряду с оболочечными эффектами важную роль при энергии возбуждения ниже 10—12 МэВ играют сверхтекучие эффекты. На основе детальных измерений углового распределения осколков при энергии возбуждения, близкой к барьеру деления, было показано, что в температурной зависимости эффективных моментов инерции отчетливо проявляется фазовый переход, предсказываемый моделью сверхтекучего ядра [45]. Найденная при этом энергетическая щель для переходных состояний ядер лишь незначительно превышает аналогичные значения для равномерных состояний. Анализ делимости ядер убедительно демонстрирует также важную роль эффектов, связанных с ротационным увеличением плотности уровней. Оно существенно зависит от деформации ядер, и его следствием является более высокая и быстрорастущая делимость сферических ядер по сравнению с деформированными. Эти различия были подтверждены результатами анализа экспериментальных данных и учтены в феноменологической обобщенной сверхтекучей модели [46]. Она широко использовалась в последующие годы для анализа всей совокупности данных о делимости доактиноидных и актиноидных ядер [47].

В результате более чем 10-летних исследований были измерены сечения деления и угловое распределение осколков деления для более чем 30 изотопов в реакциях под действием протонов, дейтронов, α -частиц и ионов ³He [48]. Накоплена обширная экспериментальная информация о делимости ядер легкими заряженными частицами и определены барьеры деления для ядер в области $28 \le Z^2/A \le 35$. Полученные результаты существенно дополнили и уточнили данные об оболочечном и капельном компонентах барьеров деления и создали надежную основу для тестирования параметров современных модификаций модели жидкой капли.

В 80-е годы интерес в изучении доактиноидных ядер сместился к исследованиям массово-энергетического распределения осколков при низкоэнергетическом делении. Продвижение в область низкой энергии стало возможным в результате усовершенствования полупроводниковых спектрометров энергии парных осколков и создания быстродействующей электронной аппаратуры, позволяющей измерять массово-энергетическое распределение с разрешением не хуже 2—3 атомных единиц при сечении деления ниже 10^{-28} см². Было обнаружено, что «холодное» деление ядер в окрестности свинца не является чисто симметричным [49], а имеется асимметричный компонент, быстро убывающий с уменьшением Z и A делящегося ядра и исчезающий для A=200. Была детально изучена энергетическая зависимость основных характеристик асимметричного деления ядер вблизи свинца и показано, что данный способ деления является прямым следствием долинной структуры барьеров деления, ответственной за бимодальное деление актиноидных ядер [50]. Исследования температурной зависимости дисперсии массового и энергетического распределения осколков деления позволили установить общие закономерности перехода от низкоэнергетической оболочечной к высокоэнергетической жидкокапельной картине формирования массово-энергетического распределения, важные для большой совокупности доактиноидных, актиноидных и наиболее тяжелых трансфермиевых ядер. Эти результаты получили широкий отклик, их полный анализ остается актуальным и по сей день.

Настоящая статья отражает лишь важнейшие результаты, полученные за прошедшие годы. Далеко не все обнаруженные явления нашли свое объяснение. Дальнейшее изучение деления ядер представляет несомненный научный интерес и остается важным для многих практических приложений.

Литература

- 1. Бондаренко И.И., Кузьминов Б.Д., Кудаева Л.С. и др. // Труды Второй конференции по мирному использованию атомной энергии, Женева, 1958, т. 15, с. 2187.
- 2. Нестеров В.Г., Смиренкин Г.Н. // ЖЭТФ, 1958, т. 35, с. 503.
- Нестеров В.Г., Смиренкин Г.Н., Бондаренко И.И. // Атомная энергия, 1962, т. 13, вып. 4, с. 366.
- Нестеров В.Г., Смиренкин Г.Н., Бондаренко И.И. // Там же, 1961, т. 10, вып. 6, с. 620.
- 5. Strutinsky V.M. // Nucl. Phys., 1967, v. A95, p. 420; 1968, v. A122, p. 1.
- Gai E.V., Ignatyuk A.V., Rabotnov N.S., Smirenkin G.N. // In: Proc. Intern. Conf. Phys. Chem. Fission. Vienna: IAEA, 1969, p. 337.
- 7. Androsenko Ch.D., Ermagambetov S.B., Ignatyuk A.V. e.a. // Ibid, p. 419.
- Шпак Д.Л., Степанов Д.Н., Смиренкин Г.Н. // Ядерная физика, 1969, т. 9, с. 940; Шпак Д.Л., Фурсов Б.И., Смиренкин Г.Н. // Там же, 1970, т. 12, с. 35; Шпак Д.Л. // Там же, 1989, т. 50, с. 922.
- 9. Ермагамбетов С.Б., Истеков К.К., Нурпеисов Б.Д. и др. // ВАНТ. Сер. Ядерные константы, 1976, вып. 23, с. 122.
- Фурсов Б.И., Куприянов В.М., Масленников Б.К., Смиренкин Г.Н. // Атомная энергия, 1977, т. 43, вып. 3, с. 181; Фурсов Б.И., Баранов Е.Ю., Клемышев М.П. и др. — 1986, т. 61, вып. 5, с. 383; 1991, т. 71, вып. 4, с. 320.
- 11. Фурсов Б.И., Смиренкин Г.Н. // ВАНТ. Сер. Ядерные константы, 1985, вып. 2, с. 31.
- 12. Говердовский А.А., Гордюшин А.К., Кузьминов Б.Д. и др. // Атомная энергия, 1985, т. 59, вып. 6, с. 429; 1986, т. 61, вып. 5, с. 380; 1987, т. 62, вып. 3, с. 190.
- Fursov B.I., Samylin B.F., Smirenkin G.N., Polynov V.N. // In: Proc. Intern. Conf. Nuclear Data for Science and Technology (Gatlinburg, 1994). ORNL, 1994, v. 1, p. 269.
- 14. Куприянов В.М., Смиренкин Г.Н., Фурсов Б.И. // Ядерная физика, 1984, т. 39, с. 281.
- Гонин Н.Н., Козловский Л.К., Работнов Н.С. и др. // ЖЭТФ, 1974, т. 20, с. 503; Гонин Н.Н., Козловский Л.К., Мастеров В.С., Работнов Н.С. // Ядерная физика, 1983, т. 38, с. 557.
- 16. Прохорова Л.И., Смиренкин Г.Н. // Ядерная физика, 1971, т. 13, с. 1170.
- 17. Малиновский В.В., Кузьминов Б.Д., Семенова Н.Н. и др. // ВАНТ. Сер. Ядерные константы, 1980, вып. 3(38), с. 44; Атомная энергия, 1982, т. 53, вып. 2, с. 83.
- 18. Blyumkina Yu.A., Bondarenko I.I., Kuznetsov V.F. e.a. // Nucl. Phys., 1964, v. 52, p. 648.
- 19. Strutinsky V.M., Pavlinchuk V.A. // In: Proc. Intern. Conf. Phys. Chem. Fission. Vienna: IAEA, 1965, v. 1, p. 127.
- Малиновский В.В., Тараско М.З., Кузьминов Б.Д. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1985, вып. 1, с. 24.
- Jeki L., Kluge G., Kozma G. e.a. // In: Proc. Intern. Conf. Nuclear Data for Reactors. Vienna: IAEA, 1970, v. 2, p. 87; Лайтаи А., Кейчкемети Й., Шафар Й. и др. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы, 1983, вып. 2(51), с. 22.
- 22. Большов В.И., Смиренкин Г.Н. // Атомная энергия, 1985, т. 59, вып. 5, с. 343.
- 23. Корнилов Н.В., Барыба В.Я., Сальников О.А. // В кн.: Нейтронная физика, т. 3. М., ЦНИИатоминформ, 1980, с. 104.
- Поляков А.В., Ловчикова Г.Н., Журавлев Б.В. и др. // В кн.: Деление ядер 50 лет. Л., 1989, т. 2, с. 150.
- Труфанов А.М., Ловчикова Г.Н., Сухих С.Э. и др. // Ядерная физика, 1992, т. 55, с. 289.

- Пиксайкин В.М., Дьяченко П.П., Кудаева Л.С. // Там же, 1977, т. 25, с. 723; Серегина Е.А., Дьяченко П.П. — 1985, т. 42, с. 1337.
- 27. Свирин М.И., Смиренкин Г.Н., Хамбш Ф. // Там же, 1996, т. 59, вып. 6, с. 1.
- Бойков Г.С., Дмитриев В.Д., Кудяев Г.А. и др. // Там же, 1991, т. 53, с. 628; Z. Physik, 1991, v. A340, p. 79.
- Максютенко Б.П. // ЖЭТФ, 1958, т. 35, с. 815; Ядерная физика, 1972, т. 15, с. 448; In: Proc. Intern. Conf. Phys. Chem. Fission. Vienna: IAEA, 1965, v. 2, p. 215; In: Proc. IAEA Meeting on Fission Product Nuclear Data, 1978, INDC(NDS)-87, p. 283.
- Rabotnov N.S., Smirenkin G.N., Soldatov A.S. e.a. // In: Proc. Intern. Conf. Phys. Chem. Fission. Vienna: IAEA, 1965, v. 1, p. 135.
- 31. Игнатюк А.В., Работнов Н.С., Смиренкин Г.Н. и др. // ЖЭТФ, 1971, т. 61. с. 1284.
- Жучко В.Е., Игнатюк А.В., Остапенко Ю.Б. и др. // Письма в ЖЭТФ, 1976, т. 24, с. 309.
- Остапенко Ю.Б., Смиренкин Г.Н., Солдатов А.С., Ципенюк Ю.М. // ЭЧАЯ, 1981, т. 12, с. 1364; УФН, 1984, т. 144, с. 3.
- 34. Солдатов А.С., Смиренкин Г.Н. // Ядерная физика, 1992, т. 55, с. 3153.
- Кузьминов Б.Д., Гентош А.И., Сергачев А.И. // Там же, 1969, т. 10, с. 491;
 Кузьминов Б.Д., Сергачев А.И. // In: Proc. Intern. Conf. Phys. Chem. Fission. Vienna: IAEA, 1965, v. 1, p. 611.
- 36. Игнатюк А.В. // Ядерная физика, 1969, т. 9, с. 357.
- 37. Ставинский В.С., Работнов Н.С., Серегин А.А. // Там же, 1968, т. 7, с. 105; 1969, т. 9, с. 779.
- Сергачев А.И., Воробьева В.Г., Кузьминов Б.Д. и др. // Там же, 1968, т. 7, с. 778; Дьяченко П.П., Кузьминов Б.Д., Тараско М.З. // 1968, т. 8, с. 286; Воробьева В.Г., Кузьминов Б.Д., Сергачев А.И., Тараско М.З. // 1969, т. 9, с. 296; Кузьминов Б.Д., Сергачев А.И., Смиренкина Л.Д. // 1970, т. 11, с. 297.
- Goverdovsky A.A., Kuzminov B.D., Mitrofanov V.F., Sergachev A.I. // In: Proc. Intern. Conf. Nucl. Data, JAERI, 1988, p. 695.
- 40. Малиновский В.В., Кузьминов Б.Д. // Ядерная физика, 1985, т. 42, с. 814.
- Khryachkov V.A., Goverdovsky A.A., Kuzminov B.D. e.a. // In: Proc. Intern. Conf. Nuclear Data Science Technology, Julich, 1991, p. 139.
- 42. Говердовский А.А., Хрячков В.А., Кузьминов Б.Д. и др. // Ядерная физика, 1993, т. 56, с. 40.
- 43. Игнатюк А.В., Иткис М.Г., Околович В.Н. и др. // Там же, 1975, т. 25, с. 1185.
- 44. Игнатюк А.В., Смиренкин Г.Н., Тишин А.С. // Там же, с. 485.
- 45. Игнатюк А.В., Истеков К.К., Смиренкин Г.Н. // Там же, 1982, т. 36, с. 54.
- 46. Игнатюк А.В., Истеков К.К., Смиренкин Г.Н. // Там же, 1979, т. 29, с. 875.
- Кудяев Г.А., Остапенко Ю.Б., Растопчин Е.М., Смиренкин Г.Н. // Там же, 1988, т. 47, с. 1540; Остапенко Ю.Б., Растопчин Е.М., Пашкевич В.В., Смиренкин Г.Н. — 1989, т. 49, с. 24.
- 48. Игнатюк А.В., Смиренкин Г.Н., Иткис М.Г. и др. // ЭЧАЯ, 1985, т. 16, с. 709.
- 49. Иткис М.Г., Околович В.Н., Русанов А.Я., Смиренкин Г.Н. // Ядерная физика, 1984, т. 39, с. 1349; 1985, т. 41, с. 849; 1985, т. 41, с. 1109.
- 50. Иткис М.Г., Околович В.Н., Русанов А.Я., Смиренкин Г.Н. // ЭЧАЯ, 1988, т. 19, с. 701.

Замыкание ядерного топливного цикла: баланс актиноидов и безопасность

В. М. Поплавский, В. И. Матвеев, Н. С. Работнов

ГНЦ РФ — ФЭИ им. А. И. Лейпунского

Обсуждается накопление радиотоксичности в отработавшем топливе и формулируется приоритетная задача ее уменьшения путем выжигания наиболее долгоживущей части — актиноидов. Рассматриваются параметры равновесной топливной смеси в системе тепловых и быстрых реакторов, работающих в замкнутом топливном цикле по актиноидам. Обсуждаются некоторые концептуальные вопросы инженерной и экологической безопасности упомянутой системы реакторов и предлагаются пути их решения. Рис. 3, табл. 5, список лит. 5 назв.

К 2010 г. в мире ядерные реакторы на урановом топливе суммарной электрической мощностью около 400 ГВт наработают более 300 тыс. т отработавшего топлива. В случае отсутствия переработки (рециклирования) оно будет содержать около 3 тыс. т плутония, примерно 140 т ²³⁷Np и около 120 т ^{241,243}Am (количество ²³⁷Np со временем увеличится до 500 т из-за распада ²⁴¹Pu и ²⁴¹Am, количество последних соответственно уменьшится). В отработавшем топливе будут находиться также продукты деления долгоживущей радиотоксичности (около 250 т ⁹⁹Tc, примерно 90 т ¹³⁵Cs и около 60 т ¹²⁹I) [1].

Экологические проблемы, связанные с минимизацией радиационного воздействия ядерного топливного цикла, предполагается решать в двух диаметрально противоположных направлениях: на пути создания замкнутого топливного цикла и отказа от него. Целью замыкания ядерного топливного цикла является минимизация потребления природного урана и возможно более полное уничтожение долгоживущих отходов путем трансмутации. Первая задача не утратила стратегической актуальности, но путь решения ее известен включение в ядерную энергетику быстрых реакторов с расширенным воспроизводством вторичного топлива. Снижение темпов развития ядерной энергетики повысило роль второй задачи, поэтому ей и уделяется основное внимание в настоящей статье. Она должна быть решена при обеспечении ядерной безопасности и предотвращении распространения ядерного оружия.

Если в первые 10—50 лет после извлечения отработавшего топлива из реактора радиотоксичность продуктов деления и актиноидов примерно одинакова, то далее радиотоксичность продуктов деления уменьшается быстрее и через 300 лет почти не отличается от радиотоксичности природного урана. За это время радиотоксичность актиноидов почти не изменяется, и именно она определяет опасность отходов в интервале не менее миллиона лет. Следовательно, актуально создание в рамках замкнутого топливного цикла структуры ядерной

Атомная энергия, 1996, т. 81, вып. 2, с. 123 — 127.

энергетики, способной локализовать наиболее долгоживущие нуклиды — актиноиды (Pu, Np, Am, Cm).

Система тепловых и быстрых реакторов в ядерном топливном цикле, замкнутом по актиноидам. Радиотоксичность отработавшего топлива реакторов разного типа (ВВЭР, РБМК, быстрых) различается, но на фоне больших абсолютных величин это различие несущественно (рис. 1) [2].

Заметно снизить радиотоксичность можно в замкнутом топливном цикле тогда, когда только небольшие потери радиоактивных материалов будут попадать в окружающую среду. Однако если в быстром реакторе рециклирование, например, плутония снижает радиотоксичность отработавшего топлива во много раз, то в тепловом реакторе толь-



Рис. 1. Зависимость индекса радиотоксичности отработавшего ядерного топлива от времени хранения для различных реакторов в открытом топливном цикле: 1 — БН-800 (реакторный плутоний); 2 — ГТ-МГР; 3 — ВВЭР-1000 (100 % смешанное топливо); 4 — БН-800 (оружейный плутоний); 5 — ВВЭР-1000 (UO₂); 6 — РБМК-1000

ко в несколько раз. Кроме того, многократный рецикл в последних затруднен тем, что изменение изотопного состава плутония приводит к появлению изотопов, не делящихся в тепловом спектре, а это требует повышения начального обогащения топлива по плутонию. К тому же возникают проблемы, связанные с безопасностью. И уж совсем «непосильной ношей» являются образующиеся Np, Am, Cm, обладающие большим тепловым сечением захвата нейтронов.

Указанных недостатков лишены быстрые реакторы, где быстрые нейтроны обеспечивают эффективное выжигание актиноидов в многократном рецикле. Поэтому целесообразно вернуться к старой идее создания гибридной системы, состоящей из тепловых и быстрых реакторов и замкнутой по переработке актиноидов.

Фундаментальное свойство быстрых реакторов воспроизводить ядерное топливо будет востребовано в недалеком будущем. Однако можно ли в связи с новыми задачами расширить сферу их применения и преобразовать реакторразмножитель в выжигатель актиноидов? Пути такого преобразования достаточно хорошо изучены на концептуальном уровне и состоят в замене воспроизводящих экранов на невоспроизводящие и модернизации традиционной активной зоны путем, например, повышения обогащения топлива или использо-



Рис. 2. Принципиальная схема ядерной энергетической системы с тепловыми и быстрыми реакторами

вания топлива без ²³⁸U, замененного инертной матрицей [3]. Коэффициент воспроизводства таких реакторов меньше 1.

Np, Am, Cm можно выжигать, подмешивая их к основному топливу или заключая в инертную матрицу в специальных TBC. Возможно и более интенсивное выжигание в специальном быстром реакторе (или специализированной активной зоне), топливо которого содержит 30—40 % Np, Am, Cm.

Итак, возможно ли создать структуру из тепловых и быстрых реакторов, способную «замкнуть на себя» все образующиеся в ней актиноиды — Np, Am, Cm и плутоний, и каковы будут ее характеристики? Ниже в качестве примера рассмотрены системы, включающие тепловой реактор (ВВЭР-1000) с урановой загрузкой или с 30 % смешанного топлива и быстрый (БН-800) с разной активной зоной (рис. 2) [4]. Основные характеристики рассматриваемых моделей активной зоны приведены в табл. 1, количество актиноидов — в табл. 2. Рассматривались варианты с максимальным выгоранием 10 и 20 % для быстрого реактора по модели 1 и 50 % по модели 2. Время выдержки отработавшего топлива T до следующей постановки в активную зону изменялось в интервале 1—3 года.

Расчеты показывают, что наблюдается медленное нарастание содержания актиноидов в топливе, идущем на загрузку быстрого реактора. Для модели 1 быстрого реактора, работающего с ВВЭР на урановом топливе, равновесный изотопный состав устанавливается примерно после 17 циклов, для модели 2 — через 25 циклов. Равновесный состав топлива характеризуется увеличением доли Np, Am, Cm до 10—13 % количества плутония для ВВЭР с урановой загрузкой. Равновесный состав топлива для ВВЭР с плутониевой загрузкой (30 % — смешанное топливо) содержит уже 15—18 % Np, Am, Cm. В качестве

примера в табл. 3 приведен равновесный состав топлива, поступающего в быстрый реактор, который работает в системе с тепловым на урановом топливе.

Соотношение ВВЭР-1000 и БН-800, способных работать в варианте замкнутого топливного цикла, приведено в табл. 4.

		Объемная	Среднее	Выжигание	
Модель	Параметр	доля	обогащение	актиноидов,	
_		топлива	по Pu, %	кг∕(ГВт•год)	
1	Топливо с повышенным				
	обогащением по плутонию	0,29	37	57	
2	Топливо на основе инертной				
	матрицы без ²³⁸ U	0,10	100	110	

Таблица 1. Характеристики активной зоны быстрого реактора в размерах БН-800

Таблица 2. Количество	нарабатываемых актиноидов,	кг/(ГВт·год)
-----------------------	----------------------------	--------------

Топливо	Плутоний					Неп- туний	Америций		Кюрий		
	238	239	240	241	242	237	241	243	242	244	245
Урановое	2,8	121,7	53,2	27,5	12,8	7,1	6,4	2,6	-	1,0	-
Смешанное	6,8	160,1	96,7	56,9	31,8	11,2	8,0	9,1	0,05	4,0	0,2

Изотоп		Мод	Модель 2				
	Выгора	ние 10%	Выгора	ние 20%	Выгорание 50%		
	1 год	3 года	1 год	3 года	1 год	3 года	
²³⁵ U	2,4	2,3	2,1	2,1	_	_	
²³⁸ U	564,1	575,9	521,4	516,4	_	_	
²³⁸ Pu	12,3	14,7	13,5	15,0	46,6	53,5	
²³⁹ Pu	151,4	153,8	170,1	171,6	249,0	250,1	
²⁴⁰ Pu	137,6	140,3	153,6	155,5	358,7	358,3	
²⁴¹ Pu	30,0	26,6	38,1	35,6	80,2	67,9	
²⁴² Pu	38,6	38,4	47,3	47,4	118,6	119,0	
²³⁷ Np	6,0	6,3	8,0	8,2	17,1	17,8	
²⁴¹ Am	12,4	17,9	13,8	17,6	47,2	62,1	
²⁴² Am	0,7	0,9	0,7	0,8	3,0	3,5	
²⁴³ Am	14,3	14,3	18,0	18,2	46,6	43,7	
²⁴² Cm	0,2	0,02	0,2	0,02	0,6	0,06	
²⁴⁴ Cm	7,8	6,8	10,4	9,1	26,3	20,1	
²⁴⁵ Cm	2,1	1,8	2,7	2,5	5,3	4,0	
²⁴⁰ Pu	137,6	140,3	153,6	155,5	358,7	358,3	

Таблица 3. Установившийся состав топлива в системе ВВЭР — быстрый реактор, кг/т

Таблица 4. Число ВВ	ЭР-1000, актиноиды которых может утилизировать один
быстрый реактор	
	Выгорание в быстром реакторе. %

Молени	Выгорание в быстром реакторе, %							
модель	10	20	50					
1	1,5 (1)*	1,7 (~ 1,05)						
2			2,6 (2,6)					

* В скобках — ВВЭР с 30%-й загрузкой плутония.

Некоторые вопросы инженерной и экологической безопасности системы реакторов в топливном цикле, замкнутом по актиноидам. Представляется актуальным рассмотрение безопасного функционирования анализируемой системы реакторов в замкнутом топливном цикле с инженерной точки зрения (безопасность реактора, обращение с топливом) и с точки зрения общей экологической эффективности.

Переход на смешанное топливо в ВВЭР сопряжен с понижением эффективности органов СУЗ (ужестчение спектра нейтронов и уменьшение сечения поглощения в поглощающих материалах), возникновением неравномерности тепловыделения на границах уранового и плутониевого топлива (требуется профилирование обогащения твэлов), уменьшением $\beta_{эф}$ и т. д. Перечисленные факторы ограничивают допустимую в настоящее время загрузку смешанного топлива в активную зону (до 30 %), но, тем не менее, нет сомнения, что вопросы безопасности ВВЭР будут решены, и опыт использования плутония в зарубежных тепловых реакторах это подтверждает.

Переход с реактора-размножителя на реактор-выжигатель актиноидов сопровождается появлением некоторых дополнительных проблем, касающихся безопасности и эксплуатационных характеристик, однако на концептуальном уровне уже найдены пути их решения. Так, в варианте с повышенным обогащением топлива, который можно осуществить либо за счет введения дополнительных поглотителей, либо уменьшением объемной доли топлива, снижается и доплер-эффект, и натриевый пустотный эффект реактивности. Доплерэффект снижается, однако, в допустимых пределах и, кроме того, улучшается самозащищенность реактора в некоторых запроектных авариях. В любом варианте в конструкционных размерах БН-800 есть пути достижения безопасности при нужных эксплуатационных характеристиках.

Использование в реакторе-выжигателе активной зоны на основе топлива без ²³⁸U связано с такими проблемами, как уменьшение доплер-эффекта, увеличение неравномерности поля энерговыделения. Первая задача может быть решена добавкой в топливо резонансных поглотителей, вторая — использованием специальной схемы перегрузок.

Одним из наиболее важных критериев при рассмотрении обращения с равновесным составом топлива, циркулирующим в системе тепловой — быстрый реактор, является тепловыделение топливной смеси (вопросы радиационной безопасности решаются путем оптимизации защиты). В табл. 5 приведены

		Выгорание, %								
Топли-	Mo-	10				20		50		
во ВВЭР дель		Све-	Установа сост	ившегося Све-		Установившегося состава		Све-	Установившегося состава	
		жее	1 год	3 года	жее	1 год	3 года	жее	1 год	3 года
Уран	1	24,1	81,3	74,5	24,1	88,3	80,5			
	2							23,7	171,7	96,9
30%	1	45,1	114,6	103,2	45,1	125,2	109,7			
плуто- ния	2							44,2	290,6	165,4

Таблица 5. Энерговыделение топлива быстрого реактора свежего и установившегося состава, Вт/кг Ри

результаты расчетного анализа рассмотренных вариантов (моделей) системы реакторов с точки зрения энерговыделения свежего и равновесного состава топлива по отношению к быстрым реакторам.

Для уранового варианта BBЭP, работающего в системе с быстрым реактором, энерговыделение равновесного состава топлива в 3—3,5 раза превышает энерговыделение свежего. Оно также превышает допустимое значение, причем 70 % энерговыделения определяется изотопами кюрия. Эффект выдержки отработавшего топлива наиболее значителен для варианта быстрого реактора с топливом без ²³⁸U (модель 2). Таким образом, при организации замкнутого топливного цикла с BBЭP на урановом топливе и быстрыми целесообразно выделение изотопов кюрия из отработавшего топлива последних. При использовании в BBЭP 30 % смешанного топлива тепловыделение превышает допустимое значение уже в свежем топливе (из-за ²⁴¹Am и ²⁴⁴Cm). Поэтому в общей постановке задачи при организации замкнутого топливного цикла быстрых реакторов-выжигателей с тепловыми необходимо решать проблему выделения изотопов кюрия в целях снижения энерговыделения и активности TBC с равновесным составом

Для повышения безопасности системы целесообразно размещать завод по изготовлению смешанного топлива, радиохимический завод и быстрый реактор на одной замкнутой территории. В этом случае на площадку будет поступать только отработавшее топливо ВВЭР, а переработка топлива с выжиганием плутония и Np, Am, Cm будет осуществляться с равновесным или приближающимся к равновесному составом топлива. Это топливо будет храниться либо в составе ТВС на АЭС (в стандарте отработавшего топлива с наличием соответствующих барьеров безопасности), либо находиться в условиях переработки и рефабрикации (опять же в пределах ограниченной территории). Следует заметить, что уже есть опыт обращения с отработавшим топливом, высокоактивными отходами и плутонием на заключительном этапе ядерного топливного цикла с высокой степенью безопасности и защиты окружающей среды. Например, на французском перерабатывающем заводе на мысе Ar средняя индивидуальная доза облучения составляет 0,26 мЗв в год (1994), или 10 % естественного фона [5].

Результаты анализа общей экологической эффективности рассмотренной системы реакторов представлены на рис. 3. Зависимости 1, 2 показывают нарастание во времени радиоактивности актиноидов (Pu + Np, Am, Cm) для ВВЭР-1000 на урановом и смешанном топливе при их работе в замкнутом цикле. Радиоактивные отходы должны поступать на временное хранение или захоронение. Кривые 3, 4 иллюстрируют постепенный выход системы реакторов на равновесное состояние по радиотоксичности актиноидов, при этом начиная с некоторого времени количество актиноидов остается постоянным независимо от длительности функционирования реакторов.

Таким образом, на концептуальном уровне показана возможность создания и экологическая эффективность системы ядерной энергетики, включающей тепловые и быстрые реакторы и работающей в замкнутом топливном цикле по актиноидам (плутоний, нептуний, америций). Определено соотношение числа реакторов, при котором тепловой реактор (типа ВВЭР) является поставщиком актиноидов, быстрый — их выжигателем в условиях установившегося содержания Np, Am, Cm в ядерном топливе.

Для рассматриваемой реакторной системы имеются научно-технические основы безопасности реактора-выжигателя актиноидов, а также безопасности при обращении с отработавшим топливом, причем последнее возможно в условиях выделения из топлива только кюрия, обращение с которым требует отдельного рассмотрения. Общая экологическая безопасность системы наиболее эффективна при расположении реакторов-выжигателей и заводов по изготовлению свежего топлива и переработке отработавшего топлива на одной площадке.



Рис. 3. Изменение интегральной активности отходов, нарабатываемых тепловыми реакторами в открытом топливном цикле и системой тепловых и быстрых реакторов в замкнутом: 1 — BBЭР (U + 30%Pu); 2 — BBЭР (U + 30%Pu) + быстрый реактор; 3 — BBЭР (U); 4 — BBЭР (U) + быстрый реактор

Дальнейший анализ реакторной системы с точки зрения технических проблем радиохимии и технико-экономических параметров покажет целесообразность ее практической реализации в условиях замкнутого топливного цикла.

Список литературы

- 1. Kusters H., Kienzler B., Kolarik Z e.a. The nuclear fuel cycle for transmutation: critical review. In: Intern. Conf. on Evaluation of Emerging Nuclear Fuel Cycle System Global-95. Versailles, France, v. 1, p. 1076—1083.
- Мурогов В.М., Троянов М.Ф., Каграманян В.С. Экологически приемлемый и безопасный топливный цикл ядерной энергетики будущего с утилизацией плутония. — Труды конф. «Проблемы радиоэкологии и прогресс ядерной энергетики». Обнинск, ФЭИ, 1996, т. 1, с. 31—41.
- Кривицкий И.Ю., Матвеев В.И., Поплавский В.М. Исследование и выбор основных характеристик быстрого энергетического реактора эффективного выжигателя актиноидов. Докл. на Техн. комитете МАГАТЭ «Концептуальные проблемы перспективных быстрых энергетических реакторов». Индия, Калпакхам, октябрь 1995 г.
- 4. Matveev V.I., Krivitski I.Yu., Tsikunov A.G. Conceptof fast reactors-plutonium burners and their fuel cycle. In: Intern. Conf. Phys. Reactors Physor-96, Mito, Japan, Sept. 1996.
- Laurent I., Girand I. Plutonium recycling, a mature civilian industry and a key contribution to the weapons- plutonium inventory disposition issue. — In: Intern. Conf. on Evaluation of Emerging Nuclear Fuel Cycle System Global-95, Versailles, France, v. I, p. 417—421.

Изотопный состав и остаточное тепловыделение оксидного топлива с высоким содержанием америция после его облучения в БОР-60

Е. В. Гай, А. Е. Иванов, Л. А. Кочетков, Н. С. Работнов

ГНЦ РФ — ФЭИ им. А. И. Лейпунского

Для быстрого реактора БОР-60 в рамках подготовки экспериментальной программы РЕЦИКЛ проведены расчеты изотопного состава, остаточного тепловыделения и содержания гелия в смешанном оксидном топливе с высоким содержанием америция в течение кампании и при длительном периоде охлаждения. Состав топлива — уран 75 %-го обогащения и 20 или 50 % по массе америциевокюриевой фракции и редкоземельных элементов отработавшего топлива ВВЭР-1000 (выгорание 40 ГВт·сут/т, 10 лет выдержки). Скорость трансмутации америция составляет около 16,5 % за кампанию, масса накопившегося кюрия — около 13 % массы трансмутированного америция, плутония — 35—45 % последней (почти весь плутоний — неделящиеся изотопы). Полное накопление гелия может достигать 1 кг/т тяж. мет. Остаточное тепловыделение за счет α-распада ²⁴²Ст около месяца составляет ~1 МВт/т, что приводит к важным последствиям в случае запланированного или аварийного останова реактора.

В последние годы большое внимание как в теоретических, так и в экспериментальных исследованиях уделяется нейтронной трансмутации Np, Am, Cm, в первую очередь америция [1, 2].

В рамках подготовки экспериментальной программы РЕЦИКЛ для быстрого реактора БОР-60 был рассчитан изотопный состав, остаточное тепловыделение и содержание гелия в смешанном оксидном топливе с высоким содержанием америция в течение кампании и для времени выдержки до 180 лет (10 периодов полураспада²⁴⁴Cm). Отличительной чертой планируемого эксперимента является использование высокообогащенного уранового топлива, что в некотором отношении подобно топливу с инертной матрицей, поскольку низкое содержание ²³⁸U ограничивает накопление вторичных Np, Am, Cm. Предполагается, что подлежащий трансмутации америций полечен из отработавшего топлива ВВЭР-1000 в качестве компонента смеси америций — кюрий — редкоземельные элементы. Состав смеси рассчитан с учетом структуры активной зоны ВВЭР-1000, длительности и режима облучения, достигнутого выгорания, времени выдержки перед переработкой отработавшего топлива и приготовлением свежего оксидного с америцием, времени между переработкой и началом облучения (в настоящих расчетах принято равным нулю), коэффициента взаимного разделения америциево-кюриевой фракции и отдельных редкоземельных элементов.

Атомная энергия, 1999, т. 87, вып. 5, с. 360—365.
Отработавшее топливо ВВЭР содержит много ²⁴¹Pu, который сравнительно быстро распадается в ²⁴¹Am ($T_{1/2}$ = 14 лет), что приводит к накоплению америция во время выдержки, когда кюрий, наоборот, распадается. Поэтому концентрация америциево-кюриевой фракции отработавшего топлива растет со временем, тогда как кюрия уменьшается. Это необходимо учитывать при оптимизации экспериментов по трансмутации. В расчетах выгорание отработавшего топлива принималось равным 4 %, в эксперименте его точное значение станет известным после переработки заданной партии.

Строго говоря, коэффициенты очистки в процессе разделения индивидуальны для каждого редкоземельного элемента, но приближенно эти элементы можно отнести к двум группам — типа церия или иттрия. Концентрация редкоземельных элементов в америциево-кюриевой фракции была взята в соответствии с результатами, полученными в Радиевом институте им. В. Г. Хлопина в конце 1998 г. Изотопный состав каждого элемента соответствует расчетному для отработавшего топлива ВВЭР. Концентрация иттрия была рассчитана, но он не был включен в состав топливной загрузки, поскольку его коэффициент очистки в то время еще не был определен. Период полураспада наиболее долгоживущего ⁹¹Y составляет 58 сут, поэтому он не влияет на радиоактивность исходного отработавшего топлива. Короткоживущий ⁹⁰Y сопровождает свой материнский нуклид ⁹⁰Sr. Полная концентрация иттрия в свежем смешанном топливе с

высоким содержанием америция не превышает десятков г/т, тогда как его накопление при выгорании 150 ГВт·сут/т составляет несколько кг/т. Поэтому сделанное приближение не влияет на результаты расчетов. В качестве редкоземельного элемента иногда рассматривается скандий, однако его нет среди осколков деления, поэтому его также не учитывали.

На первом этапе был рассчитан состав отработавшего топлива ВВЭР. Полученные результаты сравнили с данными [3] для идентичной геометрии ячейки с помощью альтернативных программ с использованием других значений констант (табл. 1). Высота ячейки 5 см при условии зеркального отражения на всех границах. Временные интервалы аналогичны [1]: $8\times(3 \text{ ч}), 2\times(2 \text{ сут}), 2\times(3 \text{ сут}) 2\times(19,5 \text{ сут}),$ $2\times(25 \text{ сут}), 18\times(50 \text{ сут})$ до достижения 4 %-го выгорания через 1000 сут. Состав актиноидов приведен в табл. 2. Изменение концентрации америциево-кюриевой фракции в зависимости от времени выдержки и доля кюрия приведено на рисунке.



Содержание (а) и доля кюрия в америциево-кюриевой фракции (б) отработавшего топлива ВВЭР-1000 в зависимости от времени выдержки

Состав редкоземельной фракции принят следующим (%): легкие редкоземельные элементы La, Ce, Pr, Nd, Pm — 1, Gd — 67,5, Eu — 25,5, Sm — 5, тяжелые редкоземельные элементы Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu — 1. Полная примесь составляла 10 % по массе америциево-кюриевой фракции, которая, в свою очередь, равна 20 или 50 % массы топлива, остальное — высокообогащенный уран (235 U — 75 %, 238 U — 25 %, малую примесь природного 234 U, возросшую в процессе обогащения, не учитывали).

Расчетная зона ячейки (от центра наружу)	Начальная концентрация, 10^{24} ядер/см ³	<i>Т</i> , К
1, 3 — газовый зазор	He $4,9.10^{-5}$	580
2 — топливо	²³⁵ U 9,89·10 ⁻⁴	1400
	238 U 2,15·10 ⁻²	1400
	O $4,49 \cdot 10^{-2}$	1400
4 — циркониевая оболочка	$Zr = 4,25 \cdot 10^{-4}$	580
	Nb $4,22 \cdot 10^{-4}$	580
	B $1,74 \cdot 10^{-7}$	580
5 — вода	H 4,86·10 ⁻²	580
	O $2,43\cdot10^{-2}$	580

Таблица 1. Композиция расчетной топливной ячейки ВВЭР-1000

Таблица 2. С	остав актинс	оидов в отраб	отавшем топ	іливе ВВЭР-1	000 выгоранием
40 ГВт·сут/т	, г/т				

Изотоп	Время выдержки, год		Изотоп	Время выдержки, год	
11301011	0	10	11501011	0	10
²³² U	4,46.10-4	$3,01 \cdot 10^{-3}$	²⁴² Pu	$5,40.10^2$	$5,40.10^2$
²³⁵ U	$1,27 \cdot 10^4$	$1,27 \cdot 10^4$	²⁴³ Pu	$1,78 \cdot 10^{-1}$	0
²³⁶ U	$5,17 \cdot 10^3$	$5,17 \cdot 10^3$	²⁴⁴ Pu	$1,34 \cdot 10^{-2}$	$1,34 \cdot 10^{-2}$
²³⁷ U	$1,27 \cdot 10^{1}$	0	²⁴¹ Am	$4,33 \cdot 10^{1}$	$6,82 \cdot 10^2$
²³⁸ U	9,28·10 ⁵	9,28·10 ⁵	^{242m} Am	$5,25 \cdot 10^{-1}$	$5,01 \cdot 10^{-1}$
²³⁹ U	$7,86 \cdot 10^{-1}$	0	²⁴² Am	$1,28 \cdot 10^{-1}$	$6,00 \cdot 10^{-6}$
^{236m} Np	$3,81 \cdot 10^{-5}$	0	²⁴³ Am	$1,08 \cdot 10^2$	$1,08 \cdot 10^2$
²³⁷ Np	$5,05 \cdot 10^2$	$5,17 \cdot 10^2$	^{244m} Am	$4,75 \cdot 10^{-3}$	0
²³⁸ Np	1,67	0	²⁴⁴ Am	$7,04 \cdot 10^{-3}$	0
²³⁹ Np	$1,13 \cdot 10^2$	0	²⁴² Cm	$1,54 \cdot 10^{1}$	$1,22 \cdot 10^{-3}$
²³⁶ Pu	$3,08 \cdot 10^{-3}$	$2,72 \cdot 10^{-4}$	²⁴³ Cm	$3,29 \cdot 10^{-1}$	$2,58 \cdot 10^{-1}$
²³⁷ Pu	8,53·10 ⁻⁵	$7,09 \cdot 10^{-29}$	²⁴⁴ Cm	$3,30.10^{1}$	$2,25 \cdot 10^{1}$
²³⁸ Pu	$1,60.10^2$	$1,62 \cdot 10^2$	²⁴⁵ Cm	1,88	1,87
²³⁹ Pu	$6,75 \cdot 10^3$	$6,87 \cdot 10^3$	²⁴⁶ Cm	$3,0.10^{-2}$	$3,0.10^{-2}$
²⁴⁰ Pu	$2,37 \cdot 10^3$	$2,36 \cdot 10^3$	²⁴⁷ Cm	$3,59 \cdot 10^{-4}$	3,59.10-4
²⁴¹ Pu	$1,70.10^{3}$	$1,06 \cdot 10^3$	²⁴⁸ Cm	$1,50 \cdot 10^{-5}$	$1,50 \cdot 10^{-5}$

	Облучение, сут					кка, год		
	0	300	750	874	3	10		
Ussman		φ, c ⁻¹ ·cm ⁻²						
ИЗОТОП	0	$2,23 \cdot 10^{15}$	$2,52 \cdot 10^{15}$	$2,64 \cdot 10^{15}$				
Выгорание, ГВт сут/т								
	0	51,56	128,78	150	150	150		
²³⁵ U	6·10 ⁵	5,45·10 ⁵	4,65·10 ⁵	4,43·10 ⁵	4,43·10 ⁵	4,43·10 ⁵		
²³⁶ U	0	$8,85 \cdot 10^3$	$2,13 \cdot 10^4$	$2,46 \cdot 10^4$	$2,46 \cdot 10^4$	$2,46 \cdot 10^4$		
²³⁷ U	0	4,7	$1,13 \cdot 10^{1}$	$1,34 \cdot 10^{1}$	0	0		
²³⁸ U	$2 \cdot 10^5$	$1,97 \cdot 10^5$	$1,92 \cdot 10^5$	$1,91 \cdot 10^5$	1,91·10 ⁵	$1,91 \cdot 10^5$		
²³⁹ U	0	$1,43 \cdot 10^{-1}$	$1,58 \cdot 10^{-1}$	$1,64 \cdot 10^{-1}$	0	0		
Всего	8.10^{5}	$7,51 \cdot 10^5$	$6,78 \cdot 10^5$	$6,59 \cdot 10^5$	6,59·10 ⁵	6,59·10 ⁵		
²³⁷ Np	0	$8,35 \cdot 10^{1}$	$4,25 \cdot 10^2$	$5,65 \cdot 10^2$	$5,79 \cdot 10^2$	$5,79 \cdot 10^2$		
²³⁸ Np	0	$3,38 \cdot 10^{-2}$	$1,97 \cdot 10^{-1}$	$2,74 \cdot 10^{-1}$	0	0		
²³⁹ Np	0	$2,06 \cdot 10^{1}$	$2,28 \cdot 10^{1}$	$2,37 \cdot 10^{1}$	0	0		
Всего	0	$1,04 \cdot 10^2$	$4,48 \cdot 10^2$	$5,89 \cdot 10^2$	$5,79 \cdot 10^2$	$5,79 \cdot 10^2$		
²³⁸ Pu	0	$2,27 \cdot 10^3$	$8,32 \cdot 10^3$	$9,94 \cdot 10^3$	$1,35 \cdot 10^4$	$1,29 \cdot 10^4$		
²³⁹ Pu	0	$1,69 \cdot 10^3$	$4,11\cdot10^{3}$	$4,75 \cdot 10^3$	$4,77 \cdot 10^3$	$4,77 \cdot 10^3$		
²⁴⁰ Pu	0	$1 \cdot 10^{1}$	$6,56 \cdot 10^{1}$	9.10^{1}	9.10^{1}	9.10^{1}		
²⁴¹ Pu	0	$4,88 \cdot 10^{-2}$	$8,23 \cdot 10^{-1}$	1,33	1,15	$8,23 \cdot 10^{-1}$		
²⁴² Pu	0	$1,12 \cdot 10^3$	$2,70 \cdot 10^3$	$3,11\cdot10^{3}$	$3,11.10^{3}$	$3,12 \cdot 10^3$		
Всего	0	$5,10.10^3$	$1,52 \cdot 10^4$	$1,79 \cdot 10^4$	$2,15 \cdot 10^4$	$2,09 \cdot 10^4$		
²⁴¹ Am	$1,51 \cdot 10^5$	$1,38 \cdot 10^5$	$1,20.10^{5}$	$1,15 \cdot 10^5$	$1,14.10^{5}$	$1,13 \cdot 10^5$		
^{242m} Am	$1,11\cdot10^{2}$	$7,62 \cdot 10^2$	$1,51 \cdot 10^3$	$1,68 \cdot 10^3$	$1,65 \cdot 10^3$	$1,60.10^3$		
²⁴² Am	0	$2,12 \cdot 10^{1}$	$2,08 \cdot 10^{1}$	$2,09 \cdot 10^{1}$	$1,98 \cdot 10^{-2}$	$1,92 \cdot 10^{-2}$		
²⁴³ Am	$2,39 \cdot 10^4$	$2,27 \cdot 10^4$	$2,09 \cdot 10^4$	$2,05 \cdot 10^4$	$2,04 \cdot 10^4$	$2,04 \cdot 10^4$		
Всего	$1,75 \cdot 10^5$	$1,62 \cdot 10^5$	$1,42 \cdot 10^5$	$1,37 \cdot 10^5$	$1,36 \cdot 10^5$	$1,35 \cdot 10^5$		
²⁴² Cm	$2,705 \cdot 10^{-1}$	$3,07 \cdot 10^3$	$3,94 \cdot 10^3$	$3,98 \cdot 10^3$	$4,20.10^{1}$	3,90		
²⁴³ Cm	$5,69 \cdot 10^{1}$	$7,01 \cdot 10^{1}$	$1,19.10^{2}$	$1,33 \cdot 10^2$	$1,24 \cdot 10^2$	$1,04 \cdot 10^2$		
²⁴⁴ Cm	$4,962 \cdot 10^3$	$5,06 \cdot 10^3$	$5,18 \cdot 10^3$	$5,21 \cdot 10^3$	$4,64 \cdot 10^3$	$3,55 \cdot 10^3$		
²⁴⁵ Cm	$4,14 \cdot 10^2$	$4,41 \cdot 10^2$	$4,83 \cdot 10^2$	$4,94 \cdot 10^2$	$4,94 \cdot 10^2$	$4,94 \cdot 10^2$		
²⁴⁶ Cm	6,62	$1,05 \cdot 10^{1}$	$1,71 \cdot 10^{1}$	$1,91 \cdot 10^{1}$	$1,91 \cdot 10^{1}$	$1,90.10^{1}$		
²⁴⁷ Cm	$8,18 \cdot 10^{-2}$	$1,56 \cdot 10^{-1}$	$3,42 \cdot 10^{-1}$	$4,11 \cdot 10^{-1}$	$4,11 \cdot 10^{-1}$	$4,11 \cdot 10^{-1}$		
²⁴⁸ Cm	0	$1,19 \cdot 10^{-3}$	$5,20 \cdot 10^{-3}$	$7,03 \cdot 10^{-3}$	$7,03 \cdot 10^{-3}$	$7,03 \cdot 10^{-3}$		
Всего	$5,44 \cdot 10^3$	$8,65 \cdot 10^3$	$9,74 \cdot 10^3$	$9,84 \cdot 10^3$	$5,32 \cdot 10^3$	$4,17 \cdot 10^3$		
Итого	9,80·10 ⁵	9,27·10 ⁵	8,73·10 ⁵	8,46·10 ⁵	$8,24 \cdot 10^5$	8,23·10 ⁵		

Таблица 3. Эволюция композиции актиноидов в процессе облучения смешанного оксидного топлива с 20 % америциево-кюриевой фракции в быстром реакторе БОР-60 и последующей выдержки, г/т

На следующем этапе была рассчитана эволюция изотопного состава смешанного топлива в процессе облучения в нейтронном потоке реактора БОР-60 до выгорания 150 ГВт сут/т и последующей длительной выдержки. Были также рассчитаны остаточное энерговыделение и наработка гелия в результате α распада (табл. 3). Выгорание америция сопровождается накоплением кюрия, а также высокоактивного плутония с необычной изотопной композицией, в которой основным является ²³⁸Ри, концентрация нечетных хорошо делящихся изотопов мала. Поэтому эффективность трансмутации америция нельзя оценивать только по уменьшению его массы.

Первоначально было рассчитано остаточное тепловыделение только для большого времени выдержки в интервале 3—180 лет актиноидов и продуктов деления как компонентов отработавшего топлива. Однако тот факт, что во всем этом интервале вклад актиноидов был намного больше вклада продуктов деления, указал на необходимость распространения расчетов на малое время выдержки, от часа до года. Результаты приведены в табл. 4 для двух временных интервалов — от останова до шести месяцев и от 1 года до 180 лет. Остаточное тепловыделение актиноидов становится равным остаточному тепловыделению продуктов деления через трое суток после останова для топлива с 20 % америциево-кюриевой фракции и через 3 часа для топлива с 50 % (в случае уранового топлива это происходит через десятки лет). Полное остаточное тепловыделение превышает 1 МВт/т на протяжении примерно месяца, что приводит к важным последствиям в случае как планового, так и аварийного останова реактора.

В урановом и уран-плутониевом топливе наработка гелия в процессе облучения в процессах тройного деления, (n, α) -реакций и α -распада не играет существенной роли, так как парциальный объем гелия пренебрежимо мал по сравнению с объемом газообразных продуктов деления криптона и ксенона, приводящим к распуханию топлива. В смешанном топливе ситуация совершенно иная — выход гелия увеличивается во много раз (табл. 5). Параметры стандартного твэла реактора БОР-60 таковы: длина 1100 мм, внешний диаметр 6 мм, толщина стенки 0,3 мм, длина топливной части 400 мм, длина газосборника 400 мм, верхняя и нижняя части экрана по 100 мм, длина разделяющих слоев 100 мм, усредненная плотность топлива 8,8 г/см³. Если те же параметры принять для смешанного топлива, то масса тяжелого металла в твэле составит около 70 г. Это означает, что при наработке гелия 1 кг/т и его выходе в газосборник парциальное давление составит 4 МПа в нормальных условиях и 18 МПа при 1000 °С. Согласно этим результатам молярный объем гелия, накопившегося в отработавшем смешанном топливе, сравним с объемом благородных газов — продуктов деления и в процессе охлаждения может его превысить, если начальная концентрация Np, Am, Cm высока. Поведение гелия, его выход в газосборник и роль в распухании следует оценить на основании материаловедческих данных.

Время	Доля Am—Cm 20%		Доля Am—Cm 50%			
после	Продукты	Актиноиды	Всего	Продукты	Актиноиды	Всего
останова	деления			деления		
0 сут	9908	563	10470	9432	1498	10930
1 сут	696	529	1225	685	1440	2125
10 сут	349	499	848	344	1370	1714
30 сут	216	460	676	215	1265	1480
90 сут	118	364	482	120	1000	1120
180 сут	71	260	331	75	711	786
1 год	37	137	174	42	372	414
3 года	11	39	50	15	100	115
5 лет	7,0	33	40	9	85	94
10 лет	4,7	30	35	6	78	84
20 лет	3,3	26	30	3	68	71
60 лет	1,1	18	19	1	47	48
120 лет	0,26	14	14	0,24	36	36
180 лет	0,065	12	12	0,058	30	30

Таблица 4. Остаточное тепловыделение смешанного оксидного топлива

Таблица 5. Накопление гелия при облучении и выдержке отработавшего топлива, г/т

Характеристика	Состав топлива				
	20% Am—Cm	50% Am—Cm	20% Ат—Ст, л/т		
Облучение, сут:					
300	42	121	237		
600	117	333	658		
874	193	541	1081		
Выдержка, сут:					
1	193	542	1082		
30	201	563	1125		
180	229	641	1285		
Выдержка, год:					
1	249	694	1394		
20	396	1071	2220		
180	1024	2642	5738		

На основании численных результатов можно сделать несколько выводов. Интенсивность трансмутации америция в смешанном топливе, т. е. выжигания в результате всех ядерных реакций, примерно пропорциональна концентрации в свежем топливе. При выгорании 150 ГВт сут/т достигается трансмутация 22—24 % америция. Наработка кюрия составляет около 12 % массы трансмутированного америция, плутония — до 47 % массы трансмутированного америция для 20 % смешанного топлива и 37 % для 50 % смешанного топлива.

Поскольку наработанный плутоний состоит в основном из неделящихся четных изотопов, его следует рассматривать как балластный актиноид. Вклад актиноидов в остаточное тепловыделение отработавшего смешанного топлива возрастает в тысячи раз по сравнению со случаем стандартного уранового топлива и сравнивается с вкладом продуктов деления через часы или сутки вместо десятков лет в случае уранового топлива. Накопление гелия вследствие αраспада изотопов кюрия становится сравнимым с наработкой благородных газов — осколков деления и может повлиять на свойства топлива в процессе облучения и длительного хранения.

Список литературы

- Kloosterman J., Kiefhaber E., Rome M., Tommasi J. Strategies for transmutation of americium. — In: Proc. Intern. Conf. on Future Nuclear Sysems GLOBAL'97. October 5—10, 1997, Yokohama, Japan, vol. 1, p. 338.
- 2. Tommasi J., Delpech M., Huang S.L. e. a. Heterogeneous recycling of americium in thermal and fast reactors. Ibid., p. 224.
- Lopatkin A.V., Muratov V.G. The numerical tests for VVER-1000 reactor fuel burn up calculation. Paper Presented to ISTC Seminar «Methods of Calculation, Nuclear Data and Experiments for Problem of U—Pu use in PWR (VVER) — ISTC Projects». RDIPE, Moscow, March 22, 1999.

Поступила в Редакцию 10.08.99

Ядерная инициатива Президента России (попытка анализа и детализации)

Н. С. Работнов (Минатом), И. Х. Ганев, А. В. Лопаткин (НИКИЭТ)

Проведен анализ и детализация материала, содержащегося в выступлении Президента РФ В.В. Путина на саммите тысячелетия, в котором предложены инициативы по совершенствованию ядерной энергетики с проведением работ в рамках международного проекта. Рассмотренная концепция вводит в ядерную энергетику более высокий уровень безопасности с исключением аварий, требующих эвакуации населения, новую технологию обращения с ядерными радиоактивными материалами для решения проблем экологии, общее решение нераспространения за счет исключения выделения в чистом виде плутония, ^{233,235}U и др.

В выступлении Президента России на саммите тысячелетия предложены инициативы по совершенствованию ядерной энергетики [1, 2] с проведением работ в рамках международной программы [3, 4]. В частности, предлагается «...исключение из использования в мирной ядерной энергетике обогащенного урана и плутония» в «...интересах кардинального повышения эффективности нераспространения ядерного оружия» [1, 2]. В этом контексте для ближайшего времени подразумевается не вообще обогащенный уран и плутоний, а высокообогащенный уран с содержанием ²³⁵U 20—90 % и материал, например природный или обедненный уран, с высоким (выше 20 %) содержанием плутония, т. е. материалы, пригодные для использования в качестве ядерных боеприпасов.

Конечно, не предлагается сразу же исключить использование в ядерной энергетике низкообогащенного урана с содержанием 3—5 % ²³⁵U. Однако в будущем после исчерпания запасов дешевого природного урана двухкомпонентная ядерная энергетика, включающая, например, разрабатываемый естественно-безопасный быстрый реактор БРЕСТ-1200 [3] и ВВЭР-1000, сможет после окончания этапа развития работать только на плутонии без обогащенного урана и операции обогащения урана как таковой.

Исключить использование плутония в перспективной крупномасштабной и длительнодействующей ядерной энергетике нельзя, так как он является топливом быстрых реакторов, составляющих основу такой энергетики. Быстрые реакторы питаются обедненным ураном, превращая его в продукты деления, плутоний и некоторые другие актиноиды. Масса наработанного плутония превышает массу сгоревшего плутония, что позволяет быстрым реакторам с KB>1 снабжать топливом тепловые реакторы, выполняющие иные функции, например, атомное теплоснабжение, высокотемпературная энергетика.

Атомная энергия, 2001, т. 90, вып. 4, с. 320-323.

Таким образом, слова Президента об обогащенном уране и плутонии следует понимать как высокообогащенный уран в настоящее время и чистый или с высоким содержанием в обедненном уране плутоний.

Место высокообогащенного урана и чистого плутония в ядерной энергетике. Высокообогащенный уран применяется или применялся в исследовательских и транспортных реакторах. По инициативе МАГАТЭ в исследовательских реакторах в 70-х годах обогащение урана было снижено до 20 %, т. е. до уровня, безопасного с точки зрения использования такого топлива для оружия. При этом нейтронно-физические показатели реакторов ухудшаются, и, возможно, для некоторых уникальных исследовательских реакторов вопрос об использовании 90 %-го урана еще будет подниматься. В транспортных реакторах нельзя обойтись без среднеобогащенного урана. Однако исследовательские и транспортные реакторы не входят непосредственно в ядерную энергетику, о которой говорил Президент, и их можно считать особой точкой в данном рассмотрении, требующей собственного анализа.

Непосредственно в ядерной энергетике высокообогащенный уран не используется. Что касается чистого плутония, то он появляется на работающих в настоящее время заводах по переработке отработавшего ядерного топлива во Франции, Великобритании, России и некоторых других стран. Плутоний выделяется на технологических линиях завода по переработке, перевозится на склад переработанного топлива, хранится и далее может использоваться для изготовления свежего топлива тепловых реакторов. Такое применение плутония не является оптимальным. Лучшим вариантом является его длительное хранение и использование в будущем при развитии перспективной крупномасштабной ядерной энергетики для начальных загрузок быстрых реакторов.

Другим видом является плутоний, выделяемый из оружия и хранящийся на складах России и США. Этот материал наименее активен и наиболее опасен с точки зрения хищения.

Пути исключения чистого плутония или материалов с высоким сооержанием плутония. Выделение, перевозки и длительное хранение плутония опасны с точки зрения хищения в целях изготовления оружия. Имеет смысл изменить технологию переработки облученного топлива. Перед переработкой необходимо знать подробности дальнейшего использования основных материалов переработки — урана и плутония. Имеются три основные возможности их использования — в качестве топлива начальной загрузки, подпитки тепловых реакторов или топлива начальной загрузки быстрых. Все эти варианты представляют собой смесь ²³⁸U в виде обедненного или природного урана с плутонием, причем содержание плутония близко к 3—5 % в тепловых и 10 % в быстрых реакторах.

Как можно получить эти продукты из облученного топлива в настоящее время? Выделенные при переработке чистые уран и плутоний хранятся до появления потребности в топливе, затем смешиваются в нужной пропорции. Что может следовать из слов Президента? Отработавшее топливо следует хранить без переработки до появления конкретной потребности в свежем топливе. Затем в процессе переработки изготавливать нужную смесь урана и плутония. Для этого из очищенной от продуктов деления смеси урана с небольшим количеством плутония, характерным для отработавшего топлива тепловых легководных реакторов (регенерата), следует химическими методами постепенно отводить уран до получения нужного состава смеси. Ограничение технологического процесса можно связать с участком, где приближение к заданному уровню подкритичности будет вызывать оповещение и остановку процесса.

Если владелец отработавшего топлива не знает, где будут применяться продукты переработки, то он должен либо хранить отработавшее топливо без переработки, либо ему может быть выдан ядерно безопасный полуфабрикат, состоящий в основном из ²³⁸U и ~10 % делящегося плутония. Из этого полуфабриката при появлении потребности можно изготовить нужный вид топлива путем разбавления ²³⁸U и снижения содержания делящегося ^{239,241}Pu до < 10 %. Если чистый плутоний уже есть и хранится на складе, его можно денатурировать путем смешения с ²³⁸U и доведения содержания плутония до 10-15 %, т.е. переводом в материал, который нельзя использовать для создания оружия без дополнительных технологических операций. Чистый ²³⁹Ри и ²⁴⁰Pu) или плутоний может быть оружейным (95 % 5 % энергетическим, содержащим помимо ²³⁹Ри (60—70 %) другие изотопы плутония. Оружейный плутоний также следует денатурировать смешением с ²³⁸U и хранить до использования, например, в качестве начальных загрузок будущих быстрых реакторов. Заметим, что критическая масса, необходимая для взрыва, по мере уменьшения содержания плутония в ²³⁸U устремляется к бесконечности, что делает невозможным военное использование хранящегося в разбавленном виде оружейного плутония.

Исключение операций по получению чистого плутония при работе крупномасштабной ядерной энергетики с быстрыми и питаемыми ими тепловыми реакторами. Если коэффициент воспроизводства делящегося плутония в активной зоне быстрого реактора меньше единицы, то необходимо смешать регенерат урана и плутония активной зоны и боковой зоны воспроизводства, затем химическими методами отвести уран (²³⁸U) до повышения обогащения по плутонию до нужного в активной зоне уровня. Отведенный уран станет свежим топливом боковой зоны воспроизводства, полученный регенерат — свежим топливом активной зоны.

Если необходимо перевести в топливо теплового реактора, работающего, например, в ториевом цикле, ²³³U из ториевой торцевой зоны воспроизводства быстрого реактора, то можно смешать эти регенераты и химическим путем отвести нужное количество тория. Торий станет свежим топливом торцевой зоны воспроизводства, полученный регенерат — свежим топливом теплового реактора.

«Окончательное решение проблемы радиоактивных отходов» [1]. Поясним слова Президента следующими рассуждениями. В перспективной крупномасштабной ядерной энергетике необходимо модифицировать добычу урана, ввести трансмутационный замкнутый топливный цикл и улучшить упаковку (матрицу и оболочку) наиболее опасных нуклидов из числа отходов перед их окончательным захоронением.

Добычу урана следовало бы в будущем проводить без разрушения подстилающих пород, на которых размещено месторождение, без его обводнения и с рекультивацией, необходимой для размещения отходов ядерного топливного цикла. Таким образом, отходы будут размещаться в естественном радиоактивном месте, созданном природой.

Радиоактивность отходов следует приблизить к такой же по вредному воздействию на человека активности извлеченного природного урана за счет введения замкнутого трансмутационного топливного цикла. При этом ядерная энергетика в определенном смысле становится безотходной.

Замкнутый цикл необходим для длительного действия крупномасштабной ядерной энергетики. Если считать, что в недрах России есть 300 тыс. т доступного по стоимости природного урана, то для энергетики в 300 ГВт при расходе 200 т урана на 1 ГВт·год этого урана хватит на 5 лет. При этом в открытом цикле сжигается 0,5 % природного урана. В замкнутом цикле в первом приближении можно считать, что сжигается 100 % природного урана, т. е. в 200 раз больше, и время действия энергетики повышается до 1000 лет.

Простой замкнутый цикл, где из отработавшего топлива выделяется только уран и плутоний, необходимо развить до трансмутационного [5], в котором вместе с природным ураном извлекают и разрушают (трансмутируют) ²²⁶Ra и ²³⁰Th, трансмутируют путем рециклирования Pu, Am и Cm (последний после выдержки 100 лет), извлекают для полезного использования или хранения Sr, Cs и Np и для трансмутации I и Tc, проводят длительную (200 лет) контролируемую выдержку отходов и их упаковку перед окончательным захоронением. В трансмутационном цикле можно добиться выполнения радиационного баланса эквивалентной активности отходов (или их потенциальной биологической опасности) и сырья — природного урана, тогда как в открытом цикле при приемлемом времени выдержки нельзя.

Итак, окончательное решение проблемы долгоживущих компонентов высокоактивных отходов состоит в снижении их активности за счет применения операций трансмутационного ядерного топливного цикла и окончательного размещения в сохраненных при добыче урана структурах рекультивированных урановых рудников, т. е. в естественном радиоактивном природном месте с соблюдением баланса активности отходов и сырья.

Концепция вводит в ядерную энергетику:

– более высокий уровень безопасности (исключение аварий, требующих эвакуации населения);

 – новую технологию обращения с ядерными и радиоактивными материалами для решения проблем экологии (достижение радиационной эквивалентности отходов и сырьевых материалов); – техническое решение нераспространения делящихся материалов (исключение выделения в чистом виде плутония, ^{233,235}U);

– приемлемый уровень экономичности (стоимость реакторов нового поколения не должна превышать стоимость современных LWR).

Не исключается и окончательное захоронение отходов после их длительной контролируемой выдержки в глубинных геологических хранилищах.

Перечисленные решения и мероприятия, включая разработку естественно-безопасного быстрого реактора, могут быть дополнительно и более основательно проработаны в международной программе МАГАТЭ, в качестве основы которой предлагается принять проект [3].

В целом реализация этих задач решит проблему длительного и безопасного энергообеспечения за счет атомной энергии.

Список литературы

- 1. Выступление Президента РФ В.В. Путина на саммите тысячелетия. Нью-Йорк, ООН, сентябрь 2000.
- Пресс-релиз «Инициатива Президента РФ по энергетическому обеспечению устойчивого развития человечества, кардинальному решению проблем нераспространения ядерного оружия и экологическому оздоровлению планеты Земля». Нью-Йорк, ООН, сентябрь 2000.
- 3. Terms of Reference for the International Project on Innovative Nuclear Reactors and Fuel Cycles. Vienna, IAEA, Oct. 2000.
- 4. Baradei M. El. Statement to the Forty-Fourth Regular Session of the IAEA General Conference. Vienna, IAEA, 18 Sept. 2000.
- 5. Адамов Е.О., Ганев И.Х., Лопаткин А.В. и др. Трансмутационный топливный цикл в крупномасштабной ядерной энергетике России. М., НИКИЭТ, 1999.

Поступила в Редакцию 20.02.2001

воспоминания

Н. С. Работнов

О себе

Мысль попробовать свои силы в литературе в годы советской власти меня не посещала, но с середины семидесятых я начал записывать в дневниковой форме разного рода «непричесанные мысли» и наброски, которых за десять лет накопилось пятнадцать толстых общих тетрадей большого формата, которые иногда служат мне подспорьем до сих пор. А тогда нечего было и думать слепить на этом материале что-то «проходное».

Но вот «оковы рухнули». Главным редактором «Знамени» стал Г. Я. Бакланов, пригласивший первым заместителем В. Я. Лакшина, который посоветовал мне попробовать написать что-нибудь для журнала. Повод и тема представились неожиданно. Сатирический пятистраничный текстик под названием «...И остро современно, и певуче...» (об альманахе «День поэзии» восемьдесят седьмого года) у меня в журнале приняли и напечатали в июньском номере восемьдесят восьмого года.

То, что вступление в круг авторов «Знамени» окажется для меня в полном смысле слова судьбоносным, стало ясно только через десять с лишним лет, а я пока стал — очень неторопливо — сочинять две полновесные, листа по полтора каждая, публицистические статьи. Их темы были очень далекие как друг от друга, так и от первой публикации: одна про родную мне и оказавшуюся после Чернобыля в тяжелейшем положении атомную энергетику («С дровами в XXI век?»), вторая — об исторических перспективах разделяемого мной атеистического мировоззрения («Есть ли будущее у двадцать второй цивилизации?»). Заготовки были рассеяны по упоминавшимся выше пятнадцати тетрадкам. Ушло на это полных два года, и продвижение готовых работ на страницы журнала происходило по-разному. Юрий Сергеевич Апенченко с энтузиазмом принял и напечатал в последнем номере за девяностый год статью про атеизм. А работа по энергетике попала к кому-то другому, кто статью с плохо скрываемым негодованием отверг, считая ее попыткой защитить честь безнадежно опороченного мундира. Вышла она, если не ошибаюсь, уже при Александре Агееве в ноябре девяносто второго года.

Эти публикации вполне можно было считать многообещающим заделом, но все помнят, что тут началось... А еще меня, пробывшего добрых двадцать лет в подозрительных личностях за «опасные связи», вдруг ввели в руководство нашего института одним из заместителей директора.

Что представляла собой в девяностые годы служба в крупном закрытом НИИ, лишенном возможности работать «на сторону» и сдавать территории и помещения в аренду, знают только те, кто через это прошел. Разумеется, я был начальником, мне хоть не приходилось недоедать и ходить в обносках, но очень многим моим коллегам приходилось. Так что изящная словесность была, разумеется, забыта.

Этот мораторий продолжался семь лет, а в августе девяносто девятого года журнал напечатал мою статью «На державу обидно?» (вопросительные знаки в заголовках — моя слабость, категоричности я не люблю), о судьбах высоких технологий в советской и постсоветской России. Она повлекла за собой неожиданную и энергичную читательскую реакцию.

Через пару недель после выхода журнала со статьей сижу я утром в своем служебном кабинете, когда раздается междугородный телефонный звонок и смутно знакомый женский голос произносит:

— Николай Семенович, с вами будет говорить Министр (прописная буква в голосе секретаря ощущалась отчетливо).

Евгений Олегович Адамов был краток:

— Николай Семенович, я прочитал вашу статью в «Знамени». Она меня очень заинтересовала, и я согласен с девяноста процентами ваших утверждений, но есть отдельные вопросы и замечания, которые мне хотелось бы обсудить. На следующей неделе я провожу ученый совет в НИКИЭТе, не могли бы вы подъехать за полчаса до начала заседания? — и он назвал дату и время.

С профессором Адамовым я был знаком давно, с момента создания Ядерного общества СССР мы были членами правления этой организации и регулярно там встречались, но с назначением его на должность главы Минатома около двух лет назад побывал у него в кабинете лишь дважды и как проситель встретил прохладный, но закончившийся умеренно положительными решениями прием.

Статья моя, прочтенная Адамовым, была густо испещрена его пометками, и он быстро перебрал их все, как отмечая показавшиеся ему важными места, так и внося уточнения, главным образом в некоторые количественные утверждения и цифры. Когда до окончания начавшейся секунда в секунду получасовой аудиенции оставалось пять минут, министр неожиданно сказал:

— В. М. Михайлов уходит, председателем НТС буду я. Мне на этом посту нужен первый заместитель, он же главный ученый секретарь. Предлагаю вам занять эту должность. Материально не проиграете. Жилье в Москве будет предоставлено. На размышления неделя.

На этом мы расстались. Сейчас многие утверждают, что толстые журналы никто не читает. Более выразительного контрпримера я не знаю.

И я перебрался в Москву, где проработал почти три года, а после смещения Адамова еще два года в Вене экспертом МАГАТЭ, будучи направлен туда новым главой Минатома академиком А. Ю. Румянцевым. Обе службы были не слишком ответственными, но очень интересными, новыми и значительно изменили многие из моих, казалось бы, устоявшихся жизненных представлений. И все эти пять лет я писал для «Знамени» критику и публицистику, которые воспринимались благосклонно. Добавлю только, что файл с этим текстом я посылаю в «Знамя» в день своего семидесятилетия и, пригласив участвовать в юбилейном номере, редакция сделала мне очень лестный подарок.

«Знамя» 2006, № 6

М. Ф. Троянов

Светлый разумом

Да, таким я считаю Николай Семеновича. Мы ведь часто с большим опозданием сознаем, что рядом много лет были люди мощного интеллекта, нестандартного мышления, невыпячиваемых дарований.

Годы сотрудничества Николая Семеновича с журналом «Знамя» принесли читателям замечательные, на мой взгляд, публицистические статьи о науке и экономике, об атомной энергетике и демократии, о литературе.

Физик-теоретик, внесший существенный вклад в развитие физики деления, Николай Семенович от задач ядерной физики с возрастом все чаще обращался к обобщенному и глубокому смыслу происходящего вокруг. Ему было 50 лет, когда грянул Чернобыль. Это страшное событие не только всколыхнуло всю энергетику, но и подняло ядовитую пену абсурда, невежества, лжи, подтасовок и даже отрицания атомной энергетики вообще. Увы, авария дала пищу для этого.

Николай Семенович был истинным просветителем в то тяжелое время. Он обладал особым даром найти форму дискуссии, использовать убедительное сравнение, привести неоспоримую цифру. Конечно, не всегда уши и глаза разгоряченного и несведущего обывателя были открыты для восприятия. Успокоение приходило медленно, и, конечно, в первую очередь с доказательствами повышения безопасности АЭС. Но работа с общественным мнением стала неотъемлимым и постоянным делом, а Николай Семенович стал добровольным блистательным адвокатом атомной энергетики. Совершенно уверен, что именно этим он обратил на себя внимание Е. О. Адамова, вслед за которым последовало его приглашение на работу в Министерство.

В последний период работы в ФЭИ Николай Семенович и в своей научной деятельности сделал акцент на важнейшую проблему будущей атомной энергетики — обращение и уничтожение радиоактивных отходов. Выдвинутая им программа работ в этой области была с пониманием воспринята в Министерстве, поддержана деньгами, и ее начальные этапы выполнены на высоком уровне в теоротделе ФЭИ под его непосредственным руководством.

Уже работая в Министерстве, Николай Семенович оставался непримиримым борцом с невежеством и экспансией лже-науки. На него сыпались предложения о «новой атомной энергетике», о «новых» топливных циклах, различные домыслы по экономике отрасли и будущих экологических проблемах. Многое из этого послужило темами его публицистических статей, а кое-что побудило и к более крупному литературно-художественному творчеству.

Как много можно было бы еще сказать об этом человек — замечательном муже, отце и деде, любителе сыроежек и молодой картошки, «лесорубе» и автомобилисте, замечательном коллеге по командировкам, а также о многом и трудном, и прекрасном в его жизни.

Очень рад, что был в моей жизни Николай Семенович Работнов.

В. М. Мурогов

Воспоминания о Н.С. Работнове

В полной мере талант и глубина познаний мира Николая Семеновича открылась для меня только после моего назначения на должности общеинститутского уровня: сначала Ученым секретаря ФЭИ, а позднее и директором.

Научный авторитет НС высоко оценивался предыдущим директором ФЭИ Трояновым М. Ф., и предложение о выдвижении НС на должность заместителя директора по фундаментальным исследованиям было также поддержано научным руководителем института В. И. Субботиным. Соответствующий приказ я подписал в марте 1993 г. Этот шаг был для меня особенно важен в ряду других изменений руководства ФЭИ в 1992—1995 годах, так как было необходимо подчеркнуть роль и значение персонально НС как ученого в институте, несмотря на прошлые партийные взыскания и обусловленное ими принижение роли ученых в работе ФЭИ. Был и личный интерес продемонстрировать отношение директора к направлениям развития института, к привлечению на руководящие должности наиболее компетентных специалистов, знающих конкретное направление намного лучше директора. Правильный выбор научной и кадровой политики очень важен для института в целом, но в конкретном случае не обошлось без упреков со стороны части прежнего руководства.

Уникальной и незаменимой роль НС проявилась для меня с переходом его в МАГАТЭ после 2000 г., когда возникла необходимость значительных изменений в направлениях работы Департамента ядерной энергетики МАГАТЭ (ДЯЭ). Стагнация развития ядерной энергетики в мире после аварий на Три-Майленде (США, 1979) и Чернобыле (СССР, 1986), с одной стороны, и инцидент нарушения Соглашения о нераспространении ядерного вооружения Ираком в 1991 г., с другой стороны, существенно изменили роль МАГАТЭ в развитии ядерных технологий. Роль международного Агентства стала сводиться к контролю радиационной, ядерной безопасности и ядерного нераспространения, т.е. к функциям контролера — международного жандарма развития ядерных технологий. Была утеряна роль МАГАТЭ как координатора и лидера анализа проблем и перспектив развития ядерной энергетики, координатора оптимальных сценариев мирового развития ядерных технологий. Специалисты ведущих ядерных стран, со своей стороны, искали возможность привлечения МАГАТЭ для оптимального решения аналогичных задач в своих странах, поскольку взаимодействие на международном уровне во многих вопросах развития ядерной науки и технологии было утрачено.

Во второй половине девяностых годов ДЯЭ проводил значительное число технических совещаний экспертов по проблемам трансмутации ядерных отходов и рециклирования отработанного ядерного топлива. НС отвечал за эти направления работ в ФЭИ и, соответственно, принимал участие во многих из этих совещаний. Это позволяло нам довольно часто встречаться и обсуждать как вопросы перспектив ядерной энергетики, так и вопросы необходимых модификаций работы МАГАТЭ. Во многих таких обсуждениях участвовали также представители руководства Минатома и ведущие сотрудники российских научных центров, сотрудничавших с МАГАТЭ. Для меня эти обсуждения были очень важны, так как они существенно помогали выбору оптимальных решений многих вопросов, не всегда выносимых на плановые совещания экспертов МАГАТЭ. Глубокая эрудиция НС в большинстве обсуждаемых вопросов, а также его большой опыт дискуссий с противниками ядерных технологий, накопленный на основе его литературных публикаций, всегда становились дополнительной приятной частью наших встреч.

На Саммите тысячелетия в 2000 г. состоялось обсуждение вопросов дальнейшего развития человечества. Позиция российской стороны в вопросах стабильного энергетического развития человечества и нераспространения ядерного оружия была представлена в специальном выступлении Президента РФ. Президент предложил исключить использование в мирной ядерной энергетике высоко обогащенный уран и чистый (изотопно) плутоний. При этом Президент РФ сделал важный политический ход, призвав МАГАТЭ разработать и реализовать соответствующий международный проект.

Руководство МАГАТЭ поддержало российскую инициативу, и уже в конце 2000 г. были начаты работы по организации проекта ИНПРО на базе Департамента ЯЭ. Как директор департамента, я был назначен руководителем проекта, а руководитель соответствующей Секции моего департамента Ю. Купитц назначен координатором проекта. Представители 18 стран — членов МАГАТЭ поддержали проект и направили своих экспертов для участия в нем (впоследствии по мере реализации ИНПРО число стран-участниц превысило 40).

Необходимо отметить, что, если в вопросе создания проекта ИНПРО между странами-участниками практически не возникало разногласий, то в определении целей, задач и планов работ проекта позиции ведущих стран оказались сильно различающимися. Поэтому на первом этапе проекта (2000— 2003 гг.) огромные усилия международных экспертов и сотрудников ДЯЭ были потрачены на поиски компромисса в определении требований к ядерной энергетике будущего и выработке методологии сравнительного анализа инновационных ядерных систем.

Объем поступающих в МАГАТЭ документов по проекту от странучастниц был очень большим. При этом предложения стран с развитой ядерной энергетикой и стран, только планирующих строительство ядерных станций, отличались кардинальным образом. Основной задачей руководства ИНПРО на первом этапе было выделение «золотых зерен» из поступающей информации и формирование из экспертов стран-участниц единого научного коллектива, согласованно работающего над намеченными задачами. Обобщенная программа задач ИНПРО формулировалась в процесс подготовки технического отчета по проекту, который должен быть закончен к концу первого этапа. Для практической работы над отчетом была выделена редакционная группа экспертов в составе К. Аллен (Канада), Ф. Депиш (Германия) и Н. Работнов (Россия), которая собиралась с руководством проекта почти ежедневно в начале рабочего дня на 15—20 минут для уточнения подготовленных частей отчета. На такие встречи обычно приглашались также эксперты задач, которые в данный момент обсуждались. Следует отметить, что как руководство, так и большинство экспертов весьма быстро оценили высокую компетентность и значительный опыт Н. С. Работнова в выборе оптимальных формулировок обсуждаемых вопросов. Это являлось непосредственным отражением его литературных дарований, которые, несомненно, способствовали эффективной подготовке отчета IAEA-TECDOC-1362 (июнь 2003), являющегося одним из важнейших документов проекта ИНПРО. Отчет имеет более 150 соавторов (включая национальные группы экспертов, работающих «дома» над домашним заданием, определенным национальным руководством, но важная — определяющая — роль редакционной группы была специально отмечена руководством на первых страницах отчета.

На втором этапе ИНПРО (2003—2004 гг.) основной задачей было создание методологии сравнительного анализа инновационных ядерных реакторов и их топливных циклов. Коллектив экспертов, разрабатывающих методические предложения, оставался примерно тем же, но ответственность руководства и редакционной группы в оценке рекомендуемых методик значительно возросли. Заключительный отчет по методологии IAEA-TECDOC-1434 был выпущен в декабре 2004 г. В процессе работы НС неоднократно шутливо отмечал, что эффективности утренних дискуссий с руководством в значительной мере способствовало потребление Швабс-тоника, который регулярно сервировался в моем офисе.

В полной мере важность первых двух отчетов, создавших методологию определения и сравнительного анализа инновационных концепций АЭС и их ЯТЦ, потребовала времени для осознания, и оценка была дана позднее — на Юбилейной конференции ИНПРО в МАГАТЭ в 2010 г. Подводя итоги дискуссии на совещании глав делегаций стран — участниц ИНПРО во время проходившей сессии Генеральной конференции МАГАТЭ было высказано общее мнение, что разработанная и изложенная в первых двух отчетах методология ИНПРО явится настольной книгой — «азбукой» для разработчиков инновационных ядерных технологий.

К глубокому сожалению всего нашего коллектива, осенью 2004 г. у Николая Семеновича было обнаружено тяжелое заболевание, которое вынудило его покинуть МАГАТЭ и после возвращения в Обнинск выйти на пенсию.

Тесное сотрудничество с Н. С. Работновым на протяжении более пятнадцати лет оставило у меня множество светлых воспоминаний, и его вклад проект ИНПРО заслуживает самых высоких оценок.

Г. И. Тошинский

Яркая личность

Таким в моей памяти остался Николай Семенович Работнов. Мои встречи с ним были эпизодическими, и поэтому носят фрагментарный характер, поскольку работали мы по различным направлениям в разных коллективах. Он — физик-теоретик, получивший блестяще образование в МИФИ в области теоретической ядерной физики, я — инженер-физик, получивший хорошую подготовку по реакторной тематике в МЭИ, но несопоставимо меньшую — в области ядерной физики. Поэтому, когда я приходил к нему проконсультироваться по каким-то вопросам, он легко понимал меня. Я же понимал его разъяснения с трудом, не хватало ядерного образования. Возможно, моя «тугодумость» его раздражала, все теоретики очень быстро думают и быстро схватывают, но он никогда этого не показывал.

Безусловно, он был очень талантливым человеком, и не только в физике. Широко известно его соавторство в книгах «Физики шутят» и «Физики продолжают шутить», наделавших много шума. Но в полной мере я оценил его литературный талант после выхода его книги «Министерство». Это захватывающий детектив на тему кражи ядерных материалов. Он написан с подкупающим знанием деталей, что неудивительно для профессионала, но и в чуждой ему бандитской области. Значительно позднее я узнал о его очень интересных публицистических статьях в журнале «Знамя», тематика которых далеко выходила за область теоретической ядерной физики. Им написан прекрасный очерк «Сороковка» о Челябинске-40 (сейчас город Озерск), кузнице плутония, городе, где работали его родители и где он вырос.

Неожиданно для меня он выступил в мою защиту перед калужским обкомом КПСС, когда надо мной нависла угроза исключения из партии со всеми вытекающими последствиями за участие в похоронах сотрудника теоретического отдела ФЭИ Валерия Павлинчука и связь с диссидентами. Это было чистое «донкихотство». Он ничем не мог помочь, но сделал свой выбор и получил за это партийное внушение от обкома партии.

В 90-е годы он был назначен на должность заместителя генерального директора института по фундаментальным исследованиям. Захожу как-то в его кабинет и вижу на стене над его креслом большой плакат со следующим текстом: «Помни, что сегодня пошел первый день остатка твоей жизни». Меня он поразил, поскольку я почти на десять лет старше его, и это в ещё большей степени относится ко мне, нужно успеть больше сделать.

В 2000 году Е. О. Адамов пригласил его на должность Ученого секретаря Минатома России. Этот выбор оказался очень верным для организации работы научного блока. Помню его помощь и поддержку в организации большого совещания в конце 2001 года по реактору СВБР уже у нового Министра А. Ю. Румянцева. Позднее встречался с ним в Вене, после его перехода в МАГАТЭ. Очень обидно, что он ушел от нас так рано. В Австрии у него была обнаружена запущенная онкология, но, как выяснилось позднее, это были уже метастазы, обусловленные не обнаруженным вовремя раком простаты, одного из немногих видов рака, диагностируемого по анализу крови и сравнительно легко излечимого на ранней стадии с помощью брахитерапии. После его возвращения из МАГАТЭ мы случайно встретились в Сбербанке. Он выглядел очень грустным, видимо, предчувствуя близкий конец. Я всегда буду помнить этого прекрасного человека.

Ю. В. Конобеев

Большой и талантливый физик-теоретик

В феврале 1958 года я был принят на работу в теоретический отдел Лаборатории «В». Теоротдел в это время возглавлял Лев Николаевич Усачёв, доктор физико-математических наук, профессор, лауреат Ленинской премии за исследования по физике реакторов на быстрых нейтронах (совместно с И.И. Бондаренко, О.Д. Казачковским и А.И. Лейпунским). На самом деле, официальное название лаборатории «В» в то время было п/я № 276. Этот номер вскоре был изменен. В конце 50-х годов прошлого столетия руководство отрасли решило, что п/я должен иметь еще и открытое название. В лабораторию «В» вскоре пришли бланки с названием ФИГА — Физический Институт ГлавАтома. Поговаривали, что научный руководитель лаборатории «В» А. И. Лейпунский (между собой сотрудники его звали АИЛ) возмутился идиотизмом чиновников, потребовал изменить название и учесть в нём научноисследовательскую деятельность института. Вскоре были присланы новые бланки с названием НИФИГА — Научно-Исследовательский Физический Институт ГлавАтома. После этого АИЛ решил, что такое название — чистое издевательство. Он поехал в ГлавАтом и уговорил присвоить институту название, которое он сам придумал: ФЭИ — Физико-энергетический институт. Это название институт носит с 25 августа 1960 г.

В марте 1959 г. в теоротделе появился новый молодой сотрудник — Николай Семенович Работнов (НС). Это был 24-летний верзила баскетбольного роста (1 м 95 см), в меру упитанный, с добрым и умным лицом. Своим ростом он почти всегда превосходил тех, с кем ему доводилось общаться. Как-то раз он рассказал, что однажды, зайдя вечером в буфет обнинской гостиницы «Юбилейная» и встав в очередь, вдруг почувствовал себя как-то неуютно. Оглянувшись, увидел, что стоит среди молодых парней, ростом гораздо выше его. Оказалось, это были игроки сборной СССР по баскетболу, которая приехала в Обнинск на тренировки.

В отделе и в институте все скоро поняли, что HC — весьма доброжелательный и уважительный человек. Я, например, не могу припомнить ни одного случая, чтобы он о ком-нибудь высказался резко и негативно. В этом он был похож на своего отца, Семёна Николаевича, многие годы работавшего в парткоме ФЭИ. В отделе HC стал заниматься ядерной физикой, в том числе теорией деления ядер. HC живо откликался на инициативы начальства и сотрудников. Был активным участником коллективного изучения сотрудниками отдела: книг по теории информации, теории групп и релятивистской квантовой электродинамике. Никогда не отказывался выступать за отдел в спортивных соревнованиях. Когда в отделе начали выпускать стенгазету «Теоретик», он стал её редактором, а я — оформителем. И тут через какое-то время мы впервые оказались втянутыми в политику. Дело в том, что на зависть многим сотрудникам, Л. Н. Усачёв включил В. Ф. Турчина в состав делегации в научную поездку в Венгрию. После его возвращения мы с Колей попросили Валентина поделиться впечатлениями о командировке. В написанной им для нашей стенгазеты заметке ничего особенного не было, кроме, как оказалось, его впечатления от обеда делегации в советском посольстве. Турчин написал, что вопреки его ожиданиям, сотрудники посольства не набросились на членов делегации с расспросами о Москве, о новостях на родине и т. д. Они, мол, мрачно уткнулись в свои тарелки и не проявили никакого интереса. Неожиданно для нас это в заметке Турчина необыкновенно возмутило ведущих физиков-теоретиков института: беспартийного В. М. Аграновича и члена КПСС В. В. Орлова. Они усмотрели в заметке желание выставить советских людей в мрачном свете. В следующем выпуске стенгазеты они дали исключительно резкий отпор Турчину. Затем состоялся целый ряд собраний, на которых бедолаге изрядно потрепали нервы. Из сотрудников института, разделявших позицию нападающих, наиболее авторитетным был И. Г. Морозов, избранный в 1956 году первым секретарем горкома КПСС. Мы же с Николаем были на стороне В. Ф. Турчина, причем мы были не одни такие в теоротделе. Кто знает, возможно, что та шумиха, которая была поднята вокруг его заметки, явилась первым толчком Турчина в ряды диссидентов.

Какое-то время спустя я присутствовал при разговоре, в котором В. Ф. Турчин рекомендовал сочувствующим ему сотрудникам вступать в КПСС, чтобы изнутри активно изменить партию в лучшую сторону. Но сам он и не думал вступать в ряды КПСС. Тем не менее молодые физики-теоретики Н. С. Работнов и В. А. Павлинчук последовали его совету. Для Николая это вступление оказалось важным и своевременным, потому что Л. Н. Усачёву вскоре удалось добиться его направления на стажировку в Институт Нильса Бора (Копенгаген, Дания) на длительный срок (6 месяцев). Институт Нильса Бора в то время возглавлял его сын — Оге Бор. Из Дании время от времени Николай присылал мне письма. К сожалению, они не сохранились. Письма были очень интересными. НС обладал несомненным литературным талантом. Он писал о быте, о научных контактах, беседах и консультациях с Оге Бором. Многое из написанного им в Дании можно найти на страницах обнинской городской газеты «Вперед» за 60-е годы. По просьбе редакции этой газеты Николай регулярно делился своими впечатлениями о жизни датчан, которые редакция с удовольствием публиковала. Проживал он в апартаментах, предоставленных датским институтом. Как и другие советские люди в загранкомандировках, он вынужден был экономить. Пищу готовил сам. Вкусно поесть он любил, особенно любил жареное мясо различного сорта. Вспоминаются его зажигательные описания мясных магазинов в Копенгагене. Его там поразило, что в магазинах мясо разных животных было красиво расфасовано. Для нас в те годы это было удивительно. В каждой упаковке была информация о возрасте животного, его весе, кормах, указание, из какой части животного вырезана навеска, и др. Все бытовые подробности Коля описывал очень увлекательно. В 1968 г. в статье Свиридова Н. В., опубликованной в журнале «Коммунист» (№ 18, 1968), эти, якобы аполитичные и безыдейные, публикации в газете «Вперед» были подвергнуты жесткой партийной критике. По мнению автора статьи, Н. С. Работнов неоправданно увлёкся восхвалением западного образа жизни.

Поездка в Данию для НС была очень важной. За полгода он значительно усовершенствовал свой английский язык, что ему очень помогло в дальнейшем. Правда, и до поездки он знал английский лучше любого физика ФЭИ. Кроме того, знакомство с работами Огэ Бора по теории атомного ядра серьёзно помогло ему в дальнейшей работе, в том числе над докторской диссертацией.

В 60-х годах я, НС и В. А. Павлинчук работали в одной комнате. С самого начала работы в ФЭИ Валерий нацелился на написание кандидатской диссертации. Для этого он сам выбрал себе научного руководителя — Я. А. Смородинского, одного из авторитетных сотрудников Курчатовского института. В те времена Яков Абрамович хорошо был известен среди физиков своими лекциями о последних достижениях в ядерной физике и физике элементарных частиц. Его несколько раз приглашал в ФЭИ А. И. Лейпунский. В 1954 году Смородинский читал годовой курс лекций по нерелятивистской квантовой механике моему потоку на факультете ТЭФ МИФИ. К моему сожалению, качество его лекций несколько уступало лекциям других лекторов МИФИ, выдающихся учёных-физиков, таких как И. Я. Померанчук, А. И. Алиханян, И. К. Кикоин, И. В. Обреимов и др.

Валерию скоро стало известно, что в течение многих лет Я. А. Смородинский тесно взаимодействует с редакцией физики издательства «Мир», советуя, какие книги покупать за рубежом и переводить на русский язык, кого выбрать переводчиком. Желая подзаработать на подобных переводах, Валерий обратился с просьбой к Смородинскому, и тот свёл Валерия и его команду (меня, Николая Работнова, Владимира Филиппова) с издательством «Мир». Нам поручили сделать перевод нескольких книг зарубежных авторов по физике. Особенно большая работа была проведена по переводу и изданию в виде отдельной книги решений всех задач, сформулированных выдающимся физикомтеоретиком Фейнманом в его изданном издательством «Мир» курсе лекций. В процессе этой работы мы познакомились, а затем и подружились с очень умным и интересным собеседником А. А. Гусевым, работавшим заместителем заведующего физической редакцией издательства «Мир». Мы стали приглашать его в Обнинск на вечера Дома учёных или колесить на лыжах по красивейшим окрестностям нашего города. В один из его приездов в Обнинск Павлинчук и я позвали Гусева в ресторан «Обнинск» поужинать и поболтать. За столом неожиданно Валерий предложил Гусеву издать сборник шуток зарубежных физиков. Тот дал согласие, не раздумывая. Валерий вскоре сформировал команду составителей-переводчиков сборника: Ю. Конобеев, В. Павлинчук, Н. Работнов и В. Турчин. Роли были распределены так: Конобеев и Павлинчук — добытчики материала, Работнов — переводчик, Турчин — редактор. НС досталась самая трудная, творческая работа. Переводить юмор и технический текст — это, как говорят одесситы, две большие разницы. Однако Николай с этой работой отлично справился.

В 1966 году вышла небольшая книжка «Физики шутят» (название придумал А. А. Гусев). Она была переведена затем в Польще и Венгрии. А в 1968 году 300-тысячным тиражом вышел расширенный почти вдвое вариант этого сборника с названием «Физики продолжают шутить». Реакция властей на это событие подробно описана Ю. И. Кривоносовым в журнале «Вопросы истории естествознания и техники» (1995, № 4). В январе 1969 г. секретарь Калужского обкома КПСС А. Кандрёнков послал письмо с грифом «секретно» в ЦК КПСС. В нём Калужский обком КПСС считает политической ошибкой привлечение составителей-переводчиков сборника к литературной работе. За распространение антисоветской литературы («самиздата») В. Павлинчук в марте 1968 г. был исключен из партии и сразу же уволен из ФЭИ. Самым активным защитником Павлинчука и его действий Калужский обком посчитал Н. Работнова. За проявленную им якобы партийную беспринципность и нарушение устава КПСС ему был объявлен строгий выговор с занесением в личное дело. Беспартийный В. Турчин являлся, по мнению А. Кандренкова, автором «грязной антисоветской стряпни». В распространении антисоветских материалов обвинялся и беспартийный Ю. Конобеев. Письмо А. Кандрёнкова сработало. Секретным приказом председателя Комитета по печати при Совете Министров СССР директору издательства «Мир» Сосновскому С. Г., главному редактору издательства Божко Н. Т. и заместителю заведующего редакцией физики издательства Гусеву А. А. был объявлен выговор. Нескольким сотрудникам пришлось покинуть издательство.

В 1968 г. теоротдел был существенно переформирован. Лаборатория теории твердого тела, которой руководил В. М. Агранович, была ликвидирована. Агранович с семьей уехал из Обнинска в г. Троицк Московской области, где стал работать заведующим теоретическим отделом Института спектроскопии АН СССР. Оставшийся без руководителя коллектив его лаборатории в статусе исследовательской группы был переведен в здание материаловедческого отделения, которым руководил лауреат Ленинской премии за создание Первой в мире АЭС В. А. Малых. После непростых дискуссий руководство института назначило руководителем этой группы меня, а не Льва Овандера, защитившего только что докторскую диссертацию по теории комбинационного рассеяния света молекулярными кристаллами. Лаборатория И. П. Стаханова, работавшая над проблемами прямого преобразования ядерной энергии в электрическую, тоже была ликвидирована, и оставшиеся специалисты переведены в какое-то отделение ФЭИ, располагавшееся в здании «Атомиздата». И. П. Стаханов переехал тоже в г. Троицк, где устроился на работу в Институт земного магнетизма АН СССР. Николай Работнов остался работать в ФЭИ в лаборатории теоретической ядерной физики. Его понизили в должности. Чтобы достойно содержать жену и двух дочерей ему пришлось подрабатывать в качестве переводчика с английского. Мне говорили, что как-то раз за один день он сделал перевод на 4 печатных листа текста (64 страницы!). Доставать заказы на перевод ему помогали со всех сторон, но кто помогал, я уже не помню.

С Николаем мы стали работать снова в одном отделе в 1984 г., когда после смерти Л. Н. Усачёва директор ФЭИ О. Д. Казачковский предложил мне возглавить и, может быть, даже возродить теоротдел. В начале 70-х годов Николай и я защитили докторские диссертации. В 1983 г. НС уже работал старшим научным сотрудником, успешно руководя группой теоретиков-ядерщиков. Однако возродить прежний отдел так и не удалось. Теоретики-плазменщики из бывшей лаборатории И. П. Стаханова наотрез и дружно отказались возвращаться к прежней структуре.

Жизнь окончательно развела нас с Николаем по разным путям-дорогам в 1988 году, когда директор материаловедческого отделения ФЭИ А. Н. Рыжков предложил мне возглавить отдел радиационного материаловедения после смерти его руководителя, профессора В. Н. Быкова. Я охотно согласился и прошел все сложные этапы утверждения в этой должности. Впрочем, как любит говорить телеведущий канала НТВ Леонид Каневский, «это уже совсем другая история...».

НС несколько лет потом проработал Учёным секретарем министерства по атомной энергии по личному приглашению министра Е. О. Адамова, а затем два года в МАГАТЭ (Вена, Австрия) в рамках так называемой инициативы Президента. На этом посту он много и очень результативно помог ФЭИ в приобретении современного ускорительного оборудования. Последняя моя встреча с ним произошла, к сожалению, у его гроба в Доме культуры ФЭИ в октябре 2006 г.

Мысленно оглядываясь назад, я благодарю судьбу за то, что жил, трудился и отдыхал рядом с этим высоченным по росту и таланту человеком, каким был Николай Семенович Работнов.

Сентябрь 2020 г.

А. А. Серёгин

Я помню его всегда

Николай Семёнович Работнов был первым сотрудником, с которым я познакомился в ФЭИ. Он пришёл за мной в бюро пропусков, когда в январе 1965 года я получил пропуск для прохода в институт. Я не помню, как он представился, но я все время называл его Колей, как, впрочем, и все в теоретическом отделе. После знакомства, мы пошли к начальнику отдела Л. Н. Усачёву. Разговор с руководством был недолгим. Лев Николаевич расспросил меня о дипломной работе, сказал, что я буду работать в группе Николая Семёновича, и пожелал нам успехов в совместной работе.

Затем мы пошли в рабочую комнату Николая Семёновича, которую он делил с Ю. В. Конобеевым и В. А. Павлинчуком. Над его столом висел ватман с этикетками грузинских вин, начиная с Цинандали (№ 1) и кончая Кварели (№ 29). Как оказалось, весь этот набор собирали сотрудники отдела, привозя их из разных мест Союза. В комнате никого не было, и мы обсудили направление наших будущих работ. Предполагалось, что работа будет связана с изучением коллективных движений в ядрах. Это было быстро развивающееся направление в ядерной физике, за которое О. Бору, Б. Моттельсону и Дж. Рейноутеру позже была присуждена Нобелевская премия (1975 г.). Для начала мне предстояло освоить обобщенную модель ядра, в рамках которой предполагалось работать и анализировать экспериментальные данные, а также программирование на языке АЛГОЛ. Как раз в это время в ФЭИ появилась первая ЭВМ М-20 с транслятором на этом языке. Единственное, что меня огорчило в тот день, так это отсутствие рабочего места. Николай Семёнович отвел меня в библиотеку института, где мне предстояло какое-то время работать. Тогда в «теоретическом тупике», где располагался теоретический отдел, с производственными площадями было очень трудно, и аспиранты отдела почти по три года работали в библиотеке. Как оказалось впоследствии, это было даже неплохо, т. к. библиотека открывалась в 9 часов, а закрывалась в 16 часов. Поэтому, чтобы не болтаться по институту, на работу можно было приходить на час позже и уходить на час раньше. Правда, по записи можно было брать с собой журналы и книги, чтобы продолжать работу дома.

Здесь следует сказать несколько слов о теоретическом отделе. В шестидесятых годах его возглавлял Л. Н. Усачёв, лауреат Ленинской премии, крупный специалист по физике реакторов. Отдел состоял из четырех лабораторий: теоретической ядерной физики, руководимой начальником отдела, теории твердого тела, руководимой В. М. Аграновичем, реакторной физики, возглавляемой В. В. Орловым, и теории низкотемпературной плазмы, руководимой И. П. Стахановым. Всего в отделе было около 50 сотрудников. Только начальники сидели по одному в небольших комнатках, а все остальные по три — четыре человека в комнате. Причём в одной комнате могли сидеть сотрудники разных лабораторий. И, несмотря на такие условия, трудовая и спортивная жизнь в отделе била ключом. Регулярно проходили семинары в лабораториях. Тогда нельзя было выпустить работу в печать, если она не докладывалась на семинаре лаборатории. На семинар приходили сотрудники других лабораторий, что расширяло рамки рассматриваемого вопроса и повышало образование сотрудников. Семинары проходили шумно, или даже задиристо. Были споры, крики и даже обиды. Но все это переносилось сравнительно легко, может быть, потому, что мы все были молоды или всех нас объединяла общая кипучая жизнь. Кто-то увлекался подводным плаванием, кто-то горными лыжами, кто-то теннисом. Многих увлекал альпинизм. Секцию альпинизма города возглавлял сотрудник отдела Виктор Копров. Под его руководством сотрудники занимались круглый год в секции, а летом уезжали в альплагеря на Кавказе. Он же организовывал городские вечера бардовских песен, на которые приезжали в разное время Визбор, Клячкин и другие известные мастера авторской песни.

Одно время возникло большое увлечение шахматами. Все играли друг с другом, разбирали партии Ботвинника, Таля, Корчного и других. И во всем этом деятельное участие принимал Николай Семёнович. Но он всегда мог как-то останавливаться. Он забросил увлечение шахматами со словами: «Теоретику играть в шахматы — все равно, что почтальону после работы ходить на прогулку».

Многие сотрудники отдела занимались художественной самодеятельностью, участвовали в спектаклях на сцене Дома культуры ФЭИ. В. Ф. Турчин даже написал два сценария для таких спектаклей. Успех спектакля о защите диссертации на тему «Качение бревна по наклонной плоскости с учётом сучковатости» был общегородским. Также В. Ф. Турчин, Н. С. Работнов, В. А. Павлинчук, В. М. Веселов и В. М. Копров принимали активное участие в подготовке и проведении передачи КВН «Обнинск против Дубны», транслируемой по центральному телевидению. Я в то время был дипломником в Дубне и помню, как переживали дубнинцы проигрыш своей команды.

Отдел был известен своей стенгазетой, главным редактором которой долгие годы был Николай Семёнович. Каждый выпуск создавался всем отделом и становился, как правило, событием для института. Аналогично создавались сборники «Физики шутят» и «Физики продолжают шутить», авторами которых были Ю. В. Конобеев, В. А. Павлинчук, Н. С. Работнов и В. Ф. Турчин. Успех книг был огромным, они разошлась мгновенно. Авторов завалили просьбами прислать экземпляр. Другие просили выпустить подобный сборник с шутками советских физиков и присылали соответствующие материалы.

В отделе был некий культ устного творчества. Многие писали стихи и были мастера на едкие и шутливые остроты. К сожалению, их здесь не приведёшь из-за их двусмысленности или нецензурности. В стихотворной форме поздравляли с защитой диссертаций, круглой датой рождения или получением квартиры. Я помню, в стихотворении Ю. Соколову на новоселье к подаркам приложили стихи, строчка из которых звучала так: «...в заключение вместо вазы дарим крышку к унитазу». Эти литературные таланты теоретиков часто использовала дирекция института, заказывая различные поздравления известным физикам страны или даже институтам. Я помню, как писалось поздравление дважды Герою социалистического труда академику И. К. Кикоину, широко известному работами по созданию в СССР промышленной системы разделения изотопов урана. Николай Семёнович набросал каркас поздравления, а потом заходил в комнаты читал его сотрудникам и слушал их предложения по улучшению рифмы или содержания. В поздравлении прозвучали такие строчки: «...на задворках у Европы разделил он изотопы...». Это поздравление представлял в Курчатовском институте научный руководитель нашего института А. И. Лейпунский.

И у меня хранится стихотворный адрес, написанный Николай Семёновичем, в день моего пятидесятилетия.

Несмотря на кажущееся «веселье» в отделе, отдел был настоящей кузницей научных кадров. Докторами наук стали В. М. Агранович, Л. Н. Усачев, В. В. Орлов, В. Ф. Турчин, И. П. Стаханов, Л. Н. Овандер, Ю. В. Конобеев, В. С. Ставинский, Н. С. Работнов, А. А. Лукьянов, А. В. Игнатюк, С. П. Камерджиев, В. Н. Манохин, А. А. Серёгин, Е. В. Гай, Ю. Н. Шубин, И. Н. Борзов, а большинство остальных сотрудников отдела стали кандидатами наук.

Следует заметить, что наш институт для многих служил трамплином для перехода в другие институты на престижные должности. Директор института и первый начальник теоретического отдела Д. И. Блохинцев стал директором международного Объединенного института ядерных исследований в Дубне, заведующим кафедры Московского А.С. Давыдов стал университета, Г.И. Марчук возглавил Математический институт в Новосибирске, В. Ф. Турчин ушел в Институт прикладной математики в Москве, А. А. Рухадзе перешел в ФИАН, Б. Б. Кадомцев и Д. Ф. Зарецкий перешли в Курчатовский институт и так далее. Всех не перечесть. Уход специалистов столь высокого уровня, несомненно, ослаблял институт. Так, Д. И. Блохинцев унес в ОИЯИ проект импульсного быстрого реактора (ИБР), который разрабатывался в ФЭИ, и его сооружение планировалось первоначально на нашей территории. Г. И. Марчук увез в Новосибирск талантливую молодежь. В этом отношении Николай Семёнович был патриотом ФЭИ и Обнинска. Я помню, как в начале 1965 года он, подводя итог прошедшего года, назвал 1964 год — ужасным годом для ФЭИ. В том году в возрасте 38 лет умер Игорь Ильич Бондаренко доктор физ.-мат. наук, лауреат Ленинской премии. В том же году Академия наук СССР не избрала в академики А. И. Лейпунского. И, наконец, ФЭИ не смог стать международным Институтом реакторных исследований типа ОИЯИ в Дубне. Предпочтение было отдано Мелекессу (ныне Димитровград). Никто из иностранных специалистов не поехал в такую даль, и идея создания международного реакторного центра тихо умерла.

Наша работа по коллективной модели медленно продвигалась. За два года мы выпустили три статьи в журнале «Ядерная физика». Одна по спектрам четно-четных ядер и две по физике деления (совместно с В. С. Ставинским). У нас

с Николаем Семёновичем сложился рабочий тандем. Николай Семёнович осуществлял общее руководство работы, я во вторую руку проверял формулы и считал на ЭВМ. Из полученных результатов Николай Семёнович любил строить вручную графики и наносить экспериментальные данные. Затем я писал вариант статьи, в которую помещал всё, что я знал по этому вопросу, и отдавал её Николаю Семёновичу. Он редактировал текст и отдавал в печать, а часто и сам печатал.

Кроме работы со мной, Николай Семёнович активно сотрудничал с экспериментальной группой Г. Н. Смиренкина по фотоделению ядер. Результаты этих работ позднее были признаны открытием СССР.

Где-то в конце 1966 года Николай Семенович на полгода уехал на стажировку в Данию в известный институт Нильса Бора. За время его отъезда он посоветовал мне сдать кандидатские экзамены по языку и философии. Время пролетело быстро, и вот в «теоретическом тупике» появился помолодевший и похудевший Николай Семёнович. Его окружили сотрудники отдела и засыпали вопросами. Пришлось организовывать семинар отдела, на котором он рассказал о Копенгагене, об институте и его работе в нем. Рассказывал он обстоятельно и интересно, с запоминающимися деталями. Так мы узнали, что в институте работает около 200 сотрудников, но постоянно работающих только 50, а остальные — приезжие из разных стран мира. Всеми техническими вопросами занимается секретарь директора. Она рассаживает приезжих по рабочим комнатам, дает адреса сдаваемых поблизости квартир, в её распоряжении находится ксерокс, бумага, почта, и у неё можно было получить любую консультацию по любому вопросу. Каждый приезжий для знакомства в обязательном порядке устраивал семинар. Семинары, как правило, проходят спокойно. И если возникали какието споры или непонимания, то О. Бор, руководитель семинара, успокаивал всех такой фразой: «Я буду очень удивлен, если Вы окажитесь правы».

Жизнь в Дании оказалась дорогой, поэтому Николаю Семёновичу приходилось готовить дома из полуфабрикатов, которых в продаже было в избытке. На работу ходил пешком, чтобы не тратиться на транспорт.

Прошел подобный семинар на институтском уровне. На нем, наряду с другими вопросами, большое внимание Николай Семёнович уделил развитию вычислительной техники в институте и в Дании. Оказалось, что фирма IBM регулярно дарит институту и университету свои ЭВМ, что гарантировало ей продажу своей техники будущим специалистам Дании, да и специалистам многих других стран. Интересно, что в качестве операторов и обслуживающего персонала на этих ЭВМ работало большое количество американцев, больших специалистов своего дела. В справочном отделе вычислительного центра можно было найти множество программ, написанных на языке АЛГОЛ, часть из которых он привез в институт. Помню, что после семинара многие сотрудники института пришли посмотреть эти программы и сделали их копии.

После этого семинара Николая Семёновича стали приглашать с выступлениями в разные институты и на вечера Дома ученых. Он никому не отказывал, пока не появилась статья в газете «Вперёд», в которой его ругали за восхваление жизни в капиталистической стране. Его вызвали в партком, отругали и объявили выговор. Помню, когда он пришел на работу после заседания парткома, то удивлялся, что никто из членов партком не мог поверить, что он не видел ни одной забастовки рабочих в Копенгагене.

С приездом Николая Семёновича и его датскими наработками стало видно основное направление работ. Предстояла значительная работа по адаптации привезенных программ для советских ЭВМ. Дело в том, что в теории коллективной модели ядра были известны энергетические спектры для двух предельных форм четно-четных атомных ядер: сферических и сильно деформированных. В реальности форма многих ядер является промежуточной. Поэтому предстояло описать спектры ядер с промежуточной формой. Для этого нужно было создать модель, которая позволяла бы описывать спектры ядер, начиная от сферической и кончая сильно деформированной, и показать, как меняются свойства возбуждённых состояний при таком переходе. Все расчёты можно было сделать численно. Для расчётов пригодились программы диагонализации матриц, привезенные из Дании. В течение пары лет такие исследования были выполнены.

В конце 1967 года в теоретическом отделе начались большие неприятности. В горкоме узнали о чтении «антисоветской» литературы в отделе. Под этим подразумевалось чтение «Открытого письма Ф. Раскольникова Сталину», труды академика Е. Варги и ряд других. Была создана комиссия парткома, которая проводила расследование. На комиссию вызывали коммунистов отдела и устанавливали, кто и что читал, от кого получал литературу. В результате было установлено, что литературу из Москвы привозил В. А. Павлинчук. Он наотрез отказался называть лиц, от которых её получал. Решение комиссии было суровым: строгий выговор с занесением в карточку был объявлен И. П. Стаханову, выговора — Л. Н. Усачёву, В. М. Аграновичу и С. А. Маеву. Судьбу В. А. Павлинчука решал горком партии, который постановил — исключить его из членов коммунистической партии. Это означало и увольнение из режимного института. Павлинчуку сначала было предложено перейти работать инженером в гараж, но он отказался и был уволен по статье утрата доверия. Для В. А. Павлинчука это был удар. Непонятно было, как жить: на работу никто не брал, сбережений нет. У него обострилась хроническая болезнь почек. Он оказался в больнице, где вскоре умер. У него не было семьи, кроме пожилой матери, поэтому подготовку к похоронам и похороны пришлось проводить друзьям, в том числе и Николаю Семёновичу. На похороны пришло очень много народу.

Похороны вызвали просто бурю в горкоме. На ковер были вызваны все коммунисты, принимавшие участие в похоронах. Некоторых коммунистов из филиала МИФИ исключили из партии и выгнали с работы. Судьба Николая Семёновича решалась несколько дней. Он объяснял комиссии горкома, что 6 лет проработал в одной комнате с Павлинчуком, обсуждал множество вопросов по работе, выпускал книги в соавторстве и поэтому он, по-человечески, не

мог не прийти на похороны. Его не исключили из партии, а вынесли строгий выговор с занесением в личное дело и рекомендовали директору института перевести его с должности старшего научного сотрудника на должность младшего научного сотрудника с большой потерей в зарплате. Такой конец в той ситуации, как мне казалось, устроил Николая Семёновича, так как он готовился к худшему.

Теоретический отдел, в соответствии с рекомендацией парткома, переформировали, в нем осталась лишь две лаборатории. Парторганизацию отдела слили с парторганизацией математического отдела, который был раз в пять больше теоретического. Жизнь в отделе сильно затихла. Вскоре из института уволились В. М. Агранович и И. П. Стаханов с рядом молодых сотрудников из их лабораторий. Для Николая Семёновича партком придумал особую общественную работу. Ему дали партийное поручение — создать кинолекторий в конференц-зале Главного корпуса института. Он взялся за эту работу с жаром. Нашел в институте бывшего киномеханика. С ним распечатали и наладили киноаппарат. Выбил доплату киномеханику за работу в нерабочее время. Договорился, где-то в городе, о получении кинопленки. И очень скоро лекторий заработал. Два раза в месяц Николай Семёнович писал и вешал объявления, привозил киноленты, показывал кино и отвозил киноленты обратно. В основном это были документальные научно-познавательные фильмы. Я запомнил два красочных фильма. Это восхождение на Мак-Кинли и фильм про природу Аляски. Фильмы, как правило, показывали после работы, поэтому зал заполнялся на треть, но были случаи, когда зал заполнялся полностью. Этой общественной работой он занимался в течение нескольких лет. Его освободили от неё только после защиты докторской диссертации в 1973 г. Вскоре потух и кинолекторий.

Наша научная работа, однако, не прерывалась. В течение пары лет после переформирования отдела мы выпустили несколько хороших публикаций. Однажды Николай Семёнович попросил меня собрать оттиски выпущенных работ. Посмотрев их все вместе, он сказал, что у меня достаточно материала для кандидатской диссертацию и я должен начать её писать. Он считал, что наука движется диссертациями, поэтому обязательно следует вовремя остановиться и законченным куском изложить проделанную работу. Я скоро оценил этот совет, так как после написания диссертации у меня освободилась голова для новых работ. Диссертацию я писал сам, кроме одного параграфа, прочитав который, Николай Семёнович сказал, что перепишет этот параграф, потому что обдумывал его ещё в Дании.

После успешной защиты диссертации мы с Николаем Семёновичем ещё проработали пару лет по данной тематике до тех пор, как он начал писать докторскую диссертацию. Его стиль написания диссертации был оригинален. Он собирал оттиски своих работ, группировал их по главам и приступал к печати на пишущей машинке. Печатал он десятью пальцами, и очень аккуратно. Так что через три недели трехсотстраничный труд был закончен. Защита диссертации успешно произошла в Киеве в 1972 году. Банкет по поводу защиты проходил у него дома. На банкете были в основном сотрудники лаборатории и Л. Н. Усачёв. К банкету Николай Семёнович сам сделал ремонт своей квартиры и очень расстраивался, что не очень гладкими получились потолки.

Спустя какое-то время он пригласил меня и сказал, что хочет поменять направление своей работы. Для этого он предложил разделить свою группу, которая состояла из четырех сотрудников, пополам. Одну половинку он предложил возглавить мне, а сам возглавил другую. Мне он предлагал не бросать данную тему и довести её до докторской диссертации. Сам же он по следам В.Ф. Турчина, который перешел от физики к математике, решил заниматься математической обработкой экспериментальных данных. Здесь следует пояснить, что развитие ядерной физики требовало повышения точности экспериментов, и это требовало модернизации или даже полного обновления экспериментальной базы института. Были нужны большие денежные затраты, которые трудно было получить. Но был и другой способ. Можно было для работы на старых установках улучшить качество мишеней и улучшить обработку экспериментального материала, используя поступающую в институт вычислительную технику. Николай Семёнович выбрал этот путь. Кроме того, в теоретическом отделе Л. Н. Усачёвым создавался Центр ядерных данных, и разработанные новые методы обработки экспериментальных данных могли пригодиться для создания библиотек файлов рекомендуемых ядерных данных, необходимых для многих технических приложений. Так официально наши научные пути разошлись, но мы ещё долго объединялись для совместной работы по отдельным вопросам. Совместно подготовили по заказу Министерства большой отчет по переработке и захоронению ядерных отходов. Отчет был отмечен на конкурсе научных работ института первой премией. Последнюю совместную работу мы выпустил в 1989 году. Это была статья в журнале «Ядерная физика».

Мои контакты с Николаем Семёновичем не ограничивались только институтом. Мы ездили с ним поздней осенью на пару недель в колхоз, где выполняли разные работы. Убирали ток, разгружали удобрения, работали на пилораме. Одну из зим посвятили заготовлению пиломатериалов. Дело в том, что он и я в одно и то же время купили земельные участки, на которых не было домиков. Купить же пиломатериал в то время практически было невозможно. Вот мы с ним съездили в один их леспромхозов, где договорились о санитарной вырубке леса. Нам выделили делянку соснового леса, на которой мы должны были убрать засохшие, сломанные или сильно наклоненные деревья. Дерево нужно было спилить, обрубить ветки и распилить на куски, для того чтобы вытащить их к дороге. Толстые деревья мы пилили длиной три метра, а тонкие — по шесть. И вот таким делом мы занимались каждую субботу и воскресенье в течение пары месяцев. Но на этом работа не кончалась. Нужно было найти пилораму, чтобы распилить этот круглый лес. Такая пилорама нашлась в ремонтном цехе, но рабочих на пилораме не было. Вместе с Николаем Семёновичем мы оформили отпуск на пару недель и распилили весь лес на брус и доски, а из части досок сделали «вагонку». Таким образом мы наработали пиломатериала почти на два дома размером 6×4 метра. Помню, какие счастливые мы сидели в последний день работы среди кучи напиленных и обструганных досок, пили чай из термоса, вдыхали аромат свежей древесины и мысленно видели построенные дома. Последующие два года мы свои отпуска проводили за строительством домов.

Во время перестройки судьба Николая Семёновича резко изменилась. Его ум, талант и умение организатора, наконец, оценили. Он был избран в 1992 г. на должность главного научного сотрудника, а через год назначен заместителем директора ФЭИ по научной работе. Теперь мы встречались с ним редко, в основном когда я подписывал у него документы. По старой памяти немножко вспоминали прошлое или обсуждали наболевшее. В один из таких дней, я услышал от него рассказ о его поездке с директором института М. Ф. Трояновым в Челябинск-40. То, что он увидел там, его сильно потрясло. Из его сверстников, с которыми он учился в школе, когда жил там, никого не осталось в живых. В доме, в котором они проживали, с тех пор сменилось семь хозяев. Мне кажется, что под впечатлением этой поездки он и написал очень хороший очерк «Сороковка», напечатанный в журнале «Знамя» и позднее отмеченный специальной премией журнала.

Другая его публикация в «Знамени» о судьбах высоких технологий под названием «На державу обидно?» привлекла внимание Е. О. Адамова, в то время министра атомной энергетики России. Министр предложил Николаю Семёновичу должность главного Ученого секретаря Министерства. Это был декабрь 1999 г. С тех пор я его почти не видел, но слышал, что в понедельник он с огромным портфелем первой электричкой уезжал в Москву, а вечером в пятницу возвращался в Обнинск. Работа в Министерстве не была пределом его возможностей. Вскоре его послали на работу в МАГАТЭ, где он успешно представлял интересы России в международном проекте ИНПРО.

Встретились мы с ним уже тогда, когда он, больной, вернулся в Обнинск. Встретились в булочной, которая находилась в доме, где он жил. Мы разговорились. Он сказал, что уже не работает, лечится в ИМРе, плохо переносит химиотерапию, а дома приводит в порядок свои бумаги. Расспросил он и меня о моих делах и успехах.

Последняя наша встреча состоялась у него дома. Николай Семёнович пригласил своих соавторов отметить своё 70-летие. Он чувствовал себя плоховато. Но, несмотря на это, много вспоминал, рассказывал разные истории из своей жизни, о своих поездках в Карпаты, на Алтай, в Вену... Но всё же было очень грустно, так как все понимали, что болезнь неумолимо поедает его.

С тех пор прошло много времени. Я часто вспоминаю Николая Семёновича, а иногда даже вижу его во сне. Мы с ним что-то делаем или куда-то едем. Но чаще всего я думаю, как мне повезло, что именно он встретил меня в бюро пропусков института в тот январский день 1965 года.

С. А. Бадиков

Безмерная признательность

Николай Семёнович Работнов стал руководителем моей диссертационной работы в аспирантуре ФЭИ после неожиданной кончины Л. Н. Усачева в 1983 году. С годами я все в большей степени осознаю, как ласково мне улыбнулась судьба, подарив годы общения с неординарным человеком.

Я остановлюсь на тех моментах жизни HC, которые, возможно, были скрыты от стороннего наблюдателя. Научные сотрудники ФЭИ из поколения 30-х годов прошлого столетия отличались высоким уровнем общего и профессионального образования и, соответственно, широкой эрудицией. Но даже на этом фоне HC выделялся из общего ряда уникальными способностями и тщательно выверенным стилем общения. Доброжелательность, демократизм, тактичность, толерантность, чувство юмора, быющий фонтаном оптимизм, тонко регулируемый баланс критики и поощрения, ироничность превратили его в приятного собеседника, сильного критика и консультанта в одном лице.

Я едва ли смогу назвать еще одного человека, который обладал таким искусством общения и своим обаянием невольно обезоруживал собеседника. Страждущие обращались к нему за утешением и поддержкой, коллеги — за конструктивной критикой, руководители подразделений интересовались его мнением по различным вопросам.

Избранный НС стиль общения был особенно ценен для молодых сотрудников, которым излишняя критика чрезвычайно болезнена и губительна для смелых идей. НС исключительно мягко, намеками обращал внимание молодых коллег на «слабые места» логических построений. Как известно, успех в решении задачи — не частый гость научного сотрудника, особенно молодого. Тем ценнее была поддержка НС, оказанная в такие моменты, и тот заряд оптимизма, который мы поглощали при общении с ним. Это был научный руководитель, близкий к идеальному. Не случайно он воспитал целый отряд молодых ученых.

Не могу не упомянуть такую важную черту HC, как сострадание, желание оказать помощь и поддержку людям, оказавшимся в трудной жизненной ситуации. Всем хорошо известно его участие в судьбе соавторов и коллег по сборникам «Физики шутят» и «Физики продолжают шутить». Но и многие сотрудники ФЭИ шли к нему за поддержкой, когда идти больше было некуда. И ни от кого он не отвернулся... Даже совместные работы публиковали. Да и в моей истории был нетривиальный случай. К концу аспирантуры мне нужно было представить диссертационную работу на НТС отделения. Диссертация была в основном готова. Шла «доводка», одна редакция сменялась другой, другая — третьей... Машинистки отказались работать в таком режиме. На помощь пришел HC, печатавший на уровне профессиональной машинистки. Уже через два дня я передал переплетенную диссертацию рецензентам. Думаю, и по сей день я остаюсь единственным аспирантом, диссертацию которого напечатал научный руководитель.

Несомненно, НС был талантлив. Талантливые люди выделяются в первую очередь тем, что практически все, за что берутся, выполняют быстро и качественно. НС было свойственно не только это, но и особый блеск. Первое, что удивляло в нем, была скорость мышления. НС быстро воспринимал и анализировал новую информацию, запечатлевая в памяти «сухой остаток». Особенно показательны в этом плане были результаты обсуждения докладов, представленных на научных семинарах. Обычно слушателям непросто разобраться в представленной информации, коэффициент полезного восприятия, как правило, низок. НС же удавалось за несколько минут «ухватить» главное. Не раз был свидетелем того, как после семинара он объяснял коллегам основные результаты прозвучавшего доклада.

Необходимым этапом научного труда является написание статей, отчетов, диссертаций. Не каждый научный сотрудник (даже талантливый) в состоянии ясно и сравнительно кратко изложить свои мысли и результаты. Среди научного сообщества лишь единичные лица обладают выраженным литературным даром. НС был одним из них. Он любил писать, досконально освоил писательское ремесло и оставил нам богатое научное и публицистическое наследие. Как и в общении, он выработал свой собственный неповторимый стиль. Тексты НС отличали безупречная логика, ритм и удивительная гармония (в них «слышна музыка» — образное выражение Э. Ремарка здесь как нельзя кстати). Включение в публикации слов, редко используемых в обиходе, придавало тексту дополнительную изысканность.

НС прекрасно разбирался в литературе, был знатоком поэзии, да и сам сочинял стихи. Думаю, именно отсюда берет начало наблюдаемая в его прозе ритмичность. Писал он легко и быстро как на русском языке, так и на английском (английским владел в совершенстве, переводил в обе стороны с листа).

Наконец, то, как его звали лаборанты, машинистки, начальники лабораторий и подавляющее большинство коллег — «Коля», показывало, что ему не просто симпатизировали. Его любили как близкого человека.

Просматривая публикации HC и обращая взгляд в прошлое, я хочу выразить безмерную признательность моему учителю. И все же меня не покидает ощущение, что Николай Семенович не в полной мере реализовал свой огромный потенциал, отмеренный ему талантом и мощью интеллекта. Он ушел неоправданно рано.

В. З. Нозик

Мы жили в одном созвездии

Лес приходит в себя после злого, с грозою, дождя, Он и нынче начнётся, часа через три по приметам — Тем грешнее дремать по восходам ненастного лета. Каково это всё оставлять, уходя, уходя...

Н. Работнов

Конечно, я никогда бы не взялся писать что-либо о Николае Семеновиче Работнове, хотя мы были близки в 60-х годах, когда я работал в ФЭИ), если бы не цепочка не объяснимых ни логикой причинно-связанных событий, ни влиянием скрытых от прямой видимости точек ветвления. Я нисколько не мистик, но судите сами.

С 1969 года, после известного погрома в ФЭИ, произведенного тогдашним хозяином Обнинска И. В. Новиковым, я работал в Москве в Институте теоретической и экспериментальной физики. А уже в 2013, т. е. семь лет назад, уволился «по собственному», когда стало абсолютно ясно, что ИТЭФ обречен на вымирание. Но оказалось, что еще помнящие меня в ИТЭФе люди остались. Правда, всего-то трое-четверо, так что вероятность их случайной встречи на территории 45 га исчезающе мала. А на то и чудо, чтобы являться. Этим летом по дороге в отдел кадров (туда обращаются в период отпусков) один мой друг встретил еще одного друга, выходившего из отдела кадров. Первый спросил второго, не знает ли он, что-нибудь «про Нозика», которого «ищет» через отдел кадров кто-то из Обнинска. Этим «кем-то» оказался Анатолий Игнатюк.

В ФЭИ мы были едва-едва знакомы с Анатолием Владимировичем, а свела нас спустя почти полвека Татьяна Ивановна Турчина, вдова моего учителя Валентина Федоровича Турчина. Уже два года, как она умерла; теперь Валя и Таня лежат рядом на русском кладбище штата Нью Джерси.

По телефону Анатолий Владимирович рассказал, что физики ФЭИ готовят сборник памяти Николая Работнова, и что редакция сборника готова поместить туда и мои воспоминания о нем. Вряд ли его кто-то подтолкнул к этой идее. Скорее всего, он сам догадался о том, что у Работнова и меня должен быть общий аттрактор.

Мы не были с Колей друзьями, я не работал в теоротделе ФЭИ, мы не ходили на одном плоту по рекам Кольского полуострова и не путешествовали на машине по Крыму. И даже не играли в одной баскетбольной команде. Но в жизни нашей было нечто большее. У нас было два общих мощных цента притяжения с 60-х годов: В. Ф. Турчин и В. Я. Лакшин. Я уверен, что для Николая Семеновича, как и для меня, эти люди играли огромную роль в формировании мировоззрения, системы оценок и, в конечном итоге, понимания высшей цели.
И именно это позволяет мне занять страничку в мемориальном сборнике о Николае Работнове.

Я скажу не о профессиональной работе теоретика-ядерщика, потому что мало что понимаю в этой науке. Но надо непременно напомнить о книжке, которую написал для подростков, с одной стороны, высокий профессионал, а с другой — замечательный популяризатор науки Н. С. Работнов: «Ларчик можно не открывать. Квантовый туннельный эффект». Мне приходилось заниматься физикой с юными любознательными школьниками в «субботней школе», затеянной в ИТЭФ член-корр. РАН Алексеем Морозовым. Пафос такой попытки заключался в том, чтобы преодолеть обычную трудность восприятия мира при переходе от классической механики к квантовой, совершив кульбит: стартовать с квантовой картинки поведения микроскопических тел. И оказалось, что ребята с легкостью воспринимают, казалось бы, такое необычное описание. А лучшим руководством в этом эксперименте мне служила книжка Николая Семеновича. У меня большая библиотека таких книг, и Колин «Ларчик» в строю шедевров, начиная с «Солнечного вещества» М. Бронштейна.

Я не эксперт в проблемах ядерной физики (хотя профессионально занимался физикой конденсированного состояния в ФЭИ и физикой частиц в ИТЭФ), и о замечательных достижениях Николая Семеновича на этом поприще скажут профессионалы, но почему-то мне кажется, что истинным (и тайным) призванием Николая Семеновича была литература. И не случайна его многолетняя дружба с литературоведом В. Я. Лакшиным. Я знаю, что этой близостью равно дорожили они оба вплоть до ранней кончины Владимира Яковлевича: и в новомировские времена, и во время работы Лакшина в «Знамени» и в «Иностранной литературе». Именно в «Знамени» Николай Семенович публиковал свои «нефизические» опусы. Да и зачем мои догадки? О своем поклонении «слову и литературе» Николай Семенович сказал сам при вручении ему ежегодной премии журнала «Знамя» за 2000 г.: «Я не знаю антонима к причастию «выстраданный», а если бы знал, то именно его употребил бы применительно к своим статьям для «Знамени». Я работал над ними с большим удовольствием».

И еще стихи. Я знал, что стихами он был занят не просто как читатель — любитель словесности. Я знал, что Николай Семенович был суровым оппонентом самому Маршаку, пеняя последнему на слишком «руссковатую» мягкость в переводах сонетов Шекспира. Но относил это к англоманству НС. А на самом деле он писал **лирику**!

Прочтите.

На камне рядом с давленым инжиром Ореховая жухнет кожура. Паучьим ядом и гадючьим жиром Сочится жёлто-рыжая жара. Неторопливей солнечных часов Застенчивые ослики с поклажей, Столбы ворот седельной кожи глаже И темно-зелен бронзовый засов. Вспугнули птиц, и каждая уронит По медленному чёрному перу, Тихонько жжёт, как взгляд через чадру, Иголка солнца в жестколистной кроне, И музыка — как будто бы хоронят Убитого на свадебном пиру.

> Из цикла стихотворений «Концерт для глухих» http://gtrubnikov.ru/rabotnov/rabotnov.htm

Последний раз мы виделись и говорили летом 2006 г., когда Николай Семенович был непоправимо болен. Он попросил меня рассказать о Турчиных; в тот год я был у них в Окленде (Нью Джерси). Валя уже несколько лет страдал от болезни Паркинсона, но, благодаря медицине, был еще на ногах.

И последнее. Н. С. Работнов вступил в коммунистическую партию в период «оттепели» после XX съезда. В среде интеллигентов тогда утвердилась мысль, что перемены назрели и требуется только движущая сила, чтобы они состоялись. А поскольку никакой другой организованной силы, кроме КПСС у нас не было, то вся надежда ложилась на молодой, не омертвевший ее слой. Тогда в партию вступили многие достойные: И. П. Стаханов, В. А. Павлинчук и ряд других. К этому же был близок и человек действия — В. Турчин. Мы много раз обсуждали с ним моральные последствия такого решения. В год разгрома теоротдела Николай Семенович не убоялся неминуемых репрессий, когда отчаянно вступился за преследуемых партией сотрудников. И был со строгим партийным выговором понижен в должности из старшего научного сотрудника в младшие.

Для Николая Семеновича коммунизм был красивой Утопией в духе великого канцлера Англии Томаса Мора.

В. М. Бычков

Впервые я познакомился с Николаем Семёновичем будучи студентом четвёртого курса Обнинского филиала МИФИ. Это был 1968 год. Я учился по специальности «теоретическая и экспериментальная ядерная физика». Нам, студентам ОФ МИФИ, повезло в том, что среди наших преподавателей было много ведущих сотрудников ФЭИ. Очень хорошее впечатление на нас произвели также А. Г. Карабаш, Ю. В. Конобеев и Б. П. Максютенко, имена которых в настоящее время хорошо известны в ядерной энергетике.

Нас, слушателей курса теории атомного ядра, было не более 30 человек. Поэтому лекции проходили не в большой аудитории, а в среднего размера классной комнате. До сих пор помню первое впечатление от встречи с Николай Семёновичем. В класс зашёл молодой двухметровый детина и, представившись, стал читать лекцию, выписывая формулы на доске. После окончания лекции, дежурный по группе не смог очистить доску, поскольку не дотягивался до верхних строк, оставленных лектором.

Конечно, лектор выделялся не только ростом и относительно юным возрастом, но и высоким интеллектом, эрудированностью и остроумием. Читая лекцию, он не упускал возможности пошутить. Так, говоря о статистике Ферми — Эйнштейна и о статистике Гамова — Теллера, он пошутил, что первая названа в честь таких хороших людей, как Ферми и Эйнштейн, а вторая — в честь не таких уж хороших людей, поскольку Гамов — это физик, который уехал из России, а Теллер — отец американской водородной бомбы. Сейчас эту шутку можно считать не очень корректной, но тогда она была вполне в духе своего времени. В дальнейшем мы познакомились с книгами, в написании которых участвовал лектор: «Физики шутят», «Физики продолжают шутить», а также высказыванием о возможной следующей книга «Физики дошутились».

После окончания института я стал работать в Центре по ядерным данным, который административно входил в теоретический отдел ФЭИ. В отделе помимо Центра была также лаборатория теории ядра и ядерных реакций, сотрудником которой был Николай Семёнович. И хотя тематики этих лабораторий существенно различались, было много вещей, которые нас объединяли. Это в первую очередь физические семинары, партийная и профсоюзная организации, но также и поездки в колхоз на сельскохозяйственные шефские работы, совместные спортивные мероприятия и многое другое. Профсоюзная организация занималась такими вопросами, как распределение очереди на жизненные блага: на жильё, на автомашины, на путёвки в дома отдыха и т. д. Особенно чувствительным был «квартирный вопрос». Обычно рассматривалось много факторов: состав семьи, состояние здоровья членов семьи, текущие жилищные условия, и т. п. Николай Семёновичем сформулировал общий подход в отношении молодых сотрудников в шутливой форме: «Каждому необходимо набрать свой интеграл страданий». Он уделял много внимания молодым физикам, в частности моему сокурснику А.П. Буднику, который сам теперь является крупным учёным-теоретиком. В соавторстве с молодыми физиками С. А. Бадиковым, В. Н. Виноградовым и со своим коллегой Е. В. Гаем они выполнили большой объём исследований по применению аналитической аппроксимации Паде для задач оценки ядерных данных, входивших в планы обеих лабораторий.

Таким образом, я имел возможность наблюдать Николая Семёновича в различных жизненных ситуациях. Я бы отметил широту его интересов, глубокую порядочность и любовь к России. Человек талантливый в какой-либо области обычно талантлив во многом. Это в полной мере относится к Николаю Семёновичу. Он был не только талантливый физик, но и талантливый литератор. Эта, литературная, сторона его творчества полностью открылась мне, когда я познакомился с его публикациями в журнале «Знамя».

В 1981 году я был направлен на работу в МАГАТЭ и работал там, в Департаменте гарантий, с небольшим перерывом, до 2007 года. В те годы я встречал Николая Семёновича не часто. Девяностые годы принесли большие перемены в нашу страну: они коснулись как политической организации общества, так и положения науки в общей системе ценностей. Положительным элементом произошедших изменений было то, что значительно упростилась процедура, связанная с поездками за границу, и научные сотрудники получили возможность чаще выезжать заграницу, в том числе чаще принимать участие в семинарах и конференциях МАГАТЭ. Николай Семёнович, начиная с 2000 года, работал в Министерстве по атомной энергии в Москве и приезжал время от времени в МАГАТЭ. В то время у нас в Вене было довольно тесное сообщество обнинцев, работавших в МАГАТЭ, и мы не упускали возможности встречаться в неформальной обстановке с земляками, приезжавшими в командировки в Вену. С Николаем Семёновичем мы обсуждали и вопросы осуществления гарантий МАГАТЭ — тема близкая мне, но довольно далёкая от научных интересов Николая Семёновича. Но он знал сотрудников Комитета, работавших в этой сфере, и меня поразило, насколько точными были его суждения в этой области. Человек такого калибра не мог остаться незамеченным в международных организациях. Его пригласили работать в МАГАТЭ, где он работал экспертом в проекте INPRO.

Как я уже упоминал, НС обладал литературным талантом. По моему мнению, он был наиболее силён в публицистике и литературной критике. К последнему я отношу эссе об американском поэте Фросте и статью о русских писателях Викторе Ерофееве и Эдуарде Лимонове («Колдун Ерофей и переросток Савенко»). Его произведение «Сороковка» (Челябинск-40) имеет черты и мемуарной, и исторической литературы. Полностью согласен с высказыванием Георгия Трубникова, создавшего сайт «Николай Работнов. Публицистика»: «Поражает разносторонность творческих интересов Николая Работнова. О чем бы он ни писал — об экономике, истории или поэзии — его работы абсолютно профессиональны, но при этом лишены «академической» узости. Универсализм, характерный для классиков эпохи Возрождения».

Июнь 2020

Г. А. Кудяев

Удивительный человек

Судьба свела меня с Николаем Семеновичем раньше, чем я начал работать в Физико-энергетическом институте. Это случилось в начале восьмидесятых, когда на кафедре иностранного языка Обнинского филиала МИФИ появился новый преподаватель, выпускница Московского института иностранных языков Юлия Николаевна Работнова. Мы были уже студентами старших курсов, государственный экзамен по английскому языку был позади, разницы в возрасте с молодым преподавателем почти не было. Зато обнаружилось огромное количество общих интересов. Возникла дружба, которой было суждено продлиться долгие годы. Вскоре мы, а мы — это команда тогдашних студентов выпускного курса ОФ МИФИ, оказались представлены родителям Юли и стали частыми гостями в этом невероятно гостеприимном доме.

О Николае Семеновиче, отце Юли, вспоминать и рассказывать можно бесконечно. Никогда, ни до, ни после, мне не доводилось встречать такого колоритного, такого разносторонне одаренного и бесконечно обаятельного человека. Тогда я еще не знал, что вскоре судьба сведет меня с ним в новом качестве: мне посчастливилось стать сотрудником одной из лабораторий ФЭИ, тесно связанной деятельностью с областью научных интересов профессора Н. С. Работнова.

Блестящий теоретик, один из самых молодых докторов наук города Обнинска, известный большим количеством ярких работ в самых разных областях ядерной физики, автор зарегистрированного открытия по фотоделению ядер, Николай Семенович неожиданно предстал передо мной как талантливейший публицист, писатель и переводчик. Интеллект этого человека был невероятным. Публикации в литературных журналах, эссе, переводы и даже детективные романы, вышедшие из-под его пера, оставляли потрясающее впечатление.

Я помню много ярких впечатлений от общения с Николаем Семеновичем в разных жизненных ситуациях. Как-то на международном семинаре в Дубне один очень известный профессор из ОИЯИ заявил, что модная в то время математическая модель требует ведения в рассмотрение отрицательной поляризуемости нейтрона. Аудитория сконфуженно молчала. И тут раздался весёлый голос Николая Семеновича: «Саша, ты понимаешь, что только что сказал? Ты сказал, что одноименные заряды притягиваются, а разноименные — отталкиваются». Зал вздохнул с облегчением. Тема отрицательной поляризуемости была закрыта.

Ещё случай. В середине 80-х ФЭИ получил непростое задание «партии и правительства». Ведущим научным организациям страны нужно было подготовить предложения по убедительному (самое главное — в меру скромных возможностей тогдашней советской экономики) асимметричному ответу на Рейгановскую программу стратегической оборонной инициативы (СОИ). СОИ, или стратегическая оборонная инициатива, декларировала возможность создания США в одностороннем порядке совершенной противоракетной обороны. Было

очевидно, что реализация США этой программы без адекватного ответа со стороны СССР – недопустима. Термины «ядерная накачка», «реакторы для космоса» были не новы для ФЭИ. Но такие важнейшие составляющие СОИ, как создание мощного лазера на околоземной орбите и доставка пучка к поверхности подлежащего уничтожению объекта, движущегося через плотные слои атмосферы, в стенах нашего института никогда не рассматривались и не обсуждались. Руководством ФЭИ было принято беспрецедентное решение. Был созван так называемый директорский семинар. Семинар должен был трудиться в непривычном режиме. Туда приглашены были все без исключения научные сотрудники и инженеры института, имеющие свою точку зрения и желающие высказаться по данному вопросу. Без оглядки на чины и звания. То есть мозговой штурм. Вот здесь фундаментальные знания Николая Семеновича оказались бесценны. Он стал ведущим этого «круглого стола». По итогам работы коллективного разума вскоре стало понятно, что, исходя из общих физических принципов, американская СОИ — это не более, чем политическая афера, не имеющая шансов быть практически реализованной в обозримые времена. Руководству института было доложено о полной бесперспективности этой затеи.

Очень значимым является вклад Николая Семеновича в развития атомной энергетики в послечернобыльские времена. ФЭИ, как научный руководитель строительства энергоблока БН-800, столкнулся со стойкой оппозицией этому Проекту со стороны населения окружающих областей. Напуганные ужасами Чернобыля люди приняли «в штыки» эту, в сущности, очень нужную для страны затею. Демократия в стране была в апогее, и Проект мог оказаться закрытым на долгие годы. По какому-то наитию тогдашний директор ФЭИ М. Ф. Троянов пригласил с собой Николая Семеновича на одну из встреч с оппонентами из числа местных жителей — непримиримых борцов с «мирным атомом». Пригласил человека, в общем-то, очень далекого от всякой публичности. В итоге аргументы профессора Работнова в защиту ядерной энергетики оказались восприняты многими слушателями намного убедительнее, чем те, которые звучали в ходе предыдущих обсуждений. В дальнейшем было проведено много встреч с жителями Свердловской и Челябинской областей. Отношение населения к сооружению БН-800 поменялось. Проект был спасен, и в последствие, выступая перед разными аудиториями, М. Ф. Троянов неоднократно отмечал неоценимый вклад Николая Семеновича в это спасение.

Наивысшим результатом удивительного сочетания таланта физика, организатора и гуманитария, на мой взгляд, является его работа на посту Главного ученого секретаря Минатома и затем представителя России в МАГАТЭ. Эта работа высоко оценивалась, в том числе и руководством Минатома, а её результаты, несомненно, будут значимы в будущем.

И ещё, Николай Семенович был любителем природы, страстным грибником, знатоком леса, знатоком и любителем высокой кухни, прекрасным собеседником и очень хорошим человеком.

Время летит быстро, люди уходят, а жизнь продолжается...

К 60-летию Н.С. Работнова

К большой науке полон рвенья, ФЭИ переступив порог, Обрел наш Коля уваженье Опроверженьем многих догм. Он рано истину усвоил, Что все проблемы и дела Решать приятнее и проще, Глядя на физику шутя. Барьер двугорбый, для примера, Не надо в лоб одолевать. Для прохождения вернее Эффект туннельный применять. Аналогично для деленья Дипольный giant-резонанс Намного меньше интересен, Чем квадрупольный мезальянс. Попытки шуток приложенья К решениям партийных дел На долгие запомнил годы Наш молодой теоротдел. Ему заботливые дяди Решили воспитанья ради, Согласовав между собой, Дать выговор, затем другой... Но время нашу жизнь меняет, И КГБ уж больше нет, И шуткам Колиным внимает Нью-Йоркский университет. Разнообразьем интересов Он продолжает удивлять, Стремясь различные явленья Аппроксимантой заменять. Обильный урожай успехов Собрал за годы юбиляр, И был журналами отмечен Его литературный дар. Ему теперь мы пожелаем Успехов новых множить ряд И трансмутировать быстрее Всемирный ядерный заряд.

1996

Об авторах воспоминаний

Бадиков Сергей Александрович, главный специалист Атомстандарта (Москва), кандидат физ.-мат. наук

Бычков Валерий Михайлович, эксперт департамента гарантий МАГАТЭ (Вена), кандидат физ.-мат. наук, сотрудник ФЭИ в 1970—1987 гг.

Игнатюк Анатолий Владимирович, советник генерального директора ФЭИ, доктор физ.-мат. наук, профессор

Конобеев Юрий Васильевич, советник генерального директора ФЭИ, доктор физ.-мат. наук, профессор, заслуженный деятель науки и техники РФ

Кудяев Геннадий Анатольевич, генеральный директор ЗАО «Уралмаркет» (Москва), кандидат физ.-мат. наук

Мурогов Виктор Михайлович, директор Международного центра ядерного образования НИЯУ МИФИ (Москва), доктор техн. наук, профессор, директор ФЭИ в 1992—1995 гг.

Нозик Валентин Зиновьевич, старший научный сотрудник ИТЭФ (Москва) в 1968—2014 гг., кандидат физ.-мат. наук

Серёгин Артур Александрович, ведущий научный сотрудник ФЭИ, доктор физ.-мат. наук

Тошинский Георгий Ильич, советник генерального директора ФЭИ, доктор техн. наук, профессор, заслуженный деятель науки и техники РФ

Троянов Михаил Федотович, директор ФЭИ в 1987—1992 гг., доктор техн. наук, профессор, заслуженный деятель науки и техники РФ



Выпусники школы — друзья на всю жизнь, 1953 г. Слева направо: В. Николаев, Н. Работнов, В. Лысенко



Шефская помощь сельскому хозяйству — заготовка кормов,1982 г.: Кравченко И. В., Лунев В. П., Работнов Н. С., Соколов Ю. В.



Обсуждение сотрудничества с США по трансмутации минорных актинидов, март 1991 г. Слева направо: Кочетков Л. А., Шубин Ю. Н., Кузьминов Б. Д., Raman S. (ORNL, Oak Ridge), Работнов Н. С., Игнатюк А. В., Блохин А. И.



Российская делегация на Международной конференции по ядерным данным, Германия, Юлих, 1991 г. Слева направо: Игнатюк А. В., Кузьминов Б. Д., Шубин Ю. Н., Пащенко А. Б., Васильев А. П., Работнов Н. С.



Встреча на Пятой авеню в Нью-Йорке, октябрь 1992 г. Шубин Ю. Н., Работнов Н. С., Игнатюк А. В., Турчин В. Ф.



Круглый стол в МАГАТЭ, 1998 г.



70-летие Н. С.Работнова. Слева направо 1-й ряд: Игнатюк А. В., Работнов Н. С., Виноградов В. Н., Манохин В. Н.; 2-й ряд: Шубина В. А., Рудников В. Е., Фурсов Б. И., Работнова Ф. А., Будник А. П., Филиппов В. В.; З-й ряд: Маев С. А., Серегин А. А., Гай Е. В., Кузьминов Б. Д.

Предисловие
ИЗБРАННЫЕ СТАТЬИ
Работы по коллективной модели ядра
Davydov A. S., Rabotnov N. S., Chaban A. A.
Rotational Energies and Moments of Inertia of Non-Axial Nuclei
Работнов Н. С., Серегин А. А.
О коллективных возбуждениях слабодеформированных ядер15
Ставинский В. С., Работнов Н. С., Серегин А. А.
Геометрическая модель симметричного деления
Ставинский В. С., Работнов Н. С., Серегин А. А.
Вычисление эффективной массы в геометрической модели
симметричного деления
Ignatyuk A. V., Rabotnov N. S., Smirenkin G. N. Two Hymn Figsion Derrier in Operiological Amprovimation
Two-Hump Fission Barrier in Quasiciassical Approximation
I ай Е. Б., Игнатюк А. Б., Гаоотнов П. С., Смиренкин I. П. Пругорбни барьер и деление ядер цейтронами 35
Двугорови барьер и деление ядер неитронами
К феноменологической теории коллективных возбужлений в ялрах 44
Гудник А П Работнов H С Серегин А А
Вероятности квадрупольных электрических переходов и средние значения
квадрупольных моментов в феноменологической теории ядра
Гай Е. В., Работнов Н. С.
Задача о жестком ротаторе и коллективные состояния четно-четных ядер
Будник А. П., Гай Е. В., Работнов Н. С., Климов А. В., Турчин В. Ф., Щенков И. Б.
Базисные волновые функции и матрицы операторов в коллективной модели ядра 75
Гай Е. В., Работнов Н. С.
Вероятности Е2-переходов в модели жесткого асимметричного ротатора
Будник А. П., Работнов Н. С., Серегин А. А.
Уровни четно-четных ядер с высокими моментами в феноменологической
коллективной модели ядра
Буоник А. П., Раоотнов Н. С., Серегин А. А. F2-переходи и крадрупоции в моменти состоящий с рисским спином
в коллективной молели 99
Гай Е. В. Работнов Н. С.
Вероятности Е2-переходов и средние значения квадрупольных моментов
состояний с высоким спином в модели асимметричного волчка 104
Budnik A. P., Rabotnov N. S.
On a Correlation between the Properties of Low Lying Collective Levels and Fission
Process Observables in Even Nuclei
Budnik A. P., Rabotnov N. S.
On the Possibility to Detect the Spatial Parity Violation in Nuclear Fission
through the Two-Hump Barrier

Содержание

Аналитическая аппроксимация в ядерной физике

Виноградов В. Н., Гай Е. В., Попов С. В., Работнов Н. С., Щенков И. Б. Построение физических базисов групп O(5) и SU(3) с автоматическим выполнением символьных преобразований	116
$R_{\mu\nu}$	
Резонансный анализ сечений ядерных реакций с использованием приближения Пале	128
$P_{\mu\nu}$	120
Построение дробно-рациональных аппроксимаций резонансной кривой методом псевдообращения.	140
Виноградов В. Н., Гай Е. В., Глуховец А. Н., Работнов Н. С., Ступак А. И., Тараско М. З., Щербаков О. А.	
Измерение полных нейтронных сечений изотопов ⁵⁴ Fe и ⁵⁶ Fe методом времени пролета в интервале энергий 1—70 кэВ	147
Бадиков С. А., Виноградов В. А., Гай Е. В., Работнов Н. С.	
Аналитическая аппроксимация данных в нейтронной физике	154
Бадиков С. А., Гай Е. В., Работнов Н. С., Синица В. В.	
Использование Паде-аппроксимации для расчета подгрупповых констант	
и учета эффекта Доплера в резонансном анализе нейтронных сечений	165
Виноградов В. Н. Гай Е. В. Работнов Н. С.	
Аналитическая аппроксимация данных в ядерной и нейтронной физике	176
Глава 1. Общие вопросы аналитической аппроксимации ланных	
Глава 2. Пале-аппроксимания, определение и основные свойства	
Глава 3. Алгоритмы рациональной интерполяции.	196
Глава 4. Приближение Паде первого рода и его обобщения.	
Основные алгоритмы	216
Глава 5. Рациональная аппроксимация экспериментальных зависимостей	228
Глава 6. Оценка погрешностей Паде-аппроксиманты	247
Глава 7. Некоторые приложения Паде-аппроксимации	267
Список литературы	289
Гусейнов А. Г., Гусейнов М. А., Работнов Н. С. Влияние энергетической зависимости v (E) ниже 1 эВ	
на групповые константы ²³⁹ Ри	293
Работнов Н. С., Серегин А. А.	
Вероятность и средняя кинетическая энергия осколков деления в простейшей двумерной модели	299
Badikov S. A., Gai E. V., Gusevnov M. A., Rabotnov N. S.	
Nuclear Data Processing, Analysis, Transformation and Storage with Pade-approximants	306
Бадиков С. А., Гай Е. В., Работнов Н. С.	
Влияние корреляции экспериментальных данных на погрешности оцененных нейтронных сечений	315
Бадиков С. А., Гай Е. В., Работнов Н. С.	
Совместный статистический анализ больших массивов коррелированных	
нейтронных данных	324

Исследования фотоделения ядер

Усачев Л. Н., Павлинчук В. А., Работнов Н. С.	
Каналовые эффекты при делении четно-четных составных ядер	333
Работнов Н. С., Смиренкин Г. Н., Солдатов А. С., Усачев Л. Н.,	
Капица С. П., Ципенюк Ю. М.	
Фотоделение четно-четных ядер вблизи порога	344
Rabotnov N. S., Smirenkin G. N., Soldatov A. S., Usachev L. N.,	
Kapitza S. P., Tsipenyuk Y. M.	
Photofission Angular Anisotropy and the Parity of the Ground State of ²³⁹ Pu	364
Rabotnov N. S., Smirenkin G. N., Soldatov A. S., Usachev L. N.,	
Kapitza S. P., Tsipenyuk Y. M.	271
Angular Distribution of Photofission Fragments Near Threshold	3/1
Работнов Н. С., Смиренкин Г. Н., Солдатов А. С., Усачев Л. Н.,	
Капица С. П., Ципенюк Ю. М Фотоленение $Th^{232} L^{238} Du^{238} Du^{240} Du^{242} и отруктура боргора неления$	271
Фотоделение III, О, Fu, Fu, Fu, и структура оарьера деления	5/4
Иснатюк А. В., Гаоотнов П. С., Смиренкин Г. П., Солоатов А. С., Ципенюк Ю. М. Полбарьерное фотолеление цетно-цетных ядер	397
подоарьерное фотоделение четно-четных ядер	591
Деление ориентированных ядер	
Козловский Л. К., Работнов Н. С.	
О выстраивании составных ядер орбитальным моментом налетающей частицы	419
Гонин Н. Н., Горюнов В. К., Козловский Л. К., Работнов Н. С.,	
Стависский Ю. Я., Тамбовцев Д. И.	
у гловая анизотропия осколков при делении ориентированных ядер ~ 0	125
неитронами с энергией 10—130 кэв	423
ГОНИН П. П., КОЗЛОВСКИИ Л. К., МАСТЕРОВ В. С., РАООТНОВ П. С., Стависский Ю. Я. Тамбовиав Л. И	
Эффекты ориентации спина ядра мищени в делении ²³⁵ Ц нейтронами	437
Гонии Н. Н. Козловский Л. К. Мастеров В. С. Работнов Н. С.	137
Тамбовиев Л. И., Стависский Ю. Я	
Деление ориентированных ядер ²³³ U и ²³⁵ U нейтронами с энергией 10—200 кэВ	440
Мастеров В. С., Работнов Н. С.	
Азимутально-асимметричная ориентация в экспериментах по делению	
ориентированных ядер	451
Гонин Н. Н., Гусейнов М. А., Козловский Л. К., Работнов Н. С., Тамбовцев Д. И.	
Исследование спиновой зависимости делимости в экспериментах по делению	
ориентированных ядер ²³⁵ U быстрыми нейтронами	458
Гонин Н. Н., Козловский Л. К., Работнов Н. С., Тамбовцев Д. И.	
Об угловых распределениях осколков деления ориентированных ядер ²³⁵ U	
резонансными нейтронами	470
Тамбовцев Д. И., Козловский Л. К., Гонин Н. Н., Работнов Н. С., Копач Ю. Н.,	
Попов А. Б., Фурман В. И., Климан Я., Постма Г., Богдзель А. А., Гусейнов М. А.	
Экспериментальные исследования энергетической зависимости угловой	
анизотропии осколков при делении ориентированных ядер U	478
резопанеными пентропами	4/0

Вопросы развития ядерной энергетики

Мурогов В. М., Субботин В. И., Троянов М. Ф., Илюнин В. Г.,	
Каграманян В. С., Работнов Н. С., Руднева В. Я.	
Концепция использования плутония в атомной энергетике	489
Гай Е. В., Игнатюк А. В., Работнов Н. С., Шубин Ю. Н.	
Концепция обращения с долгоживущими ядерными отходами	495
Михайлов В. Н., Мурогов В. М., Работнов Н. С., Троянов М. Ф., Илюнин В. Г.,	
Каграманян В. С., Руднева В. Я., Солонин М. И., Захаркин Б. С.,	
Антипов С. А., Меньшикова Т. С., Кирюшин А. И.	
Использование плутония в ядерной энергетике России	502
Harms A. A., Augenstein B. W., Rabotnov N. S.	
Nuclear Energy: in Search of a Paradigm Shift	511
Игнатюк А. В., Кузьминов Б. Д., Работнов Н. С., Фурсов Б. И.	
Исследования деления ядер	520
Поплавский В. М., Матвеев В. И., Работнов Н. С.	
Замыкание ядерного топливного цикла: баланс актиноидов и безопасность	530
Гай Е. В., Иванов А. Е., Кочетков А. Л., Работнов Н. С.	
Изотопный состав и остаточное тепловыделение оксидного топлива с высоким	
содержанием америция после его облучения в БОР-60	538
Работнов Н. С., Ганев И. Х. , Лопаткин А. В.	
Ядерная инициатива Президента России (попытка анализа и детализации)	545
ВОСПОМИНАНИЯ	
Н. С. Работнов О себе	550
М. Ф. Троянов. Светлый разумом	553
В. М. Мурогов. Воспоминания о Н. С. Работнове	554
Г. И. Тошинский. Яркая личность	557
Ю. В. Конобеев. Большой и талантливый физик-теоретик	559
А. А. Серёгин. Я помню его всегда	566
С. А. Бадиков. Безмерная признательность	572
В. З. Нозик. Мы жили в одном созвездии	574
В. М. Бычков	577
Г. А. Кудяев. Удивительный человек	579
А. В. Игнатюк. К 60-летию Н. С. Работнова	581
Об авторах воспоминаний	582

Н. С. Работнов. Избранные труды. Воспоминания. К 85-летию со дня рождения АО «ГНЦ РФ – ФЭИ», Обнинск, 2020

Отв. редактор: А. В. Игнатюк Оцифровка материалов: И. И. Коба, Т. Т. Гарбузова, Т. В. Ластова Верстка: В. Н. Долженко Обложка и обработка фотографий: Л. Н. Чикинёва