

## ВЛИЯНИЕ АТОМНЫХ, МОЛЕКУЛЯРНЫХ И ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ ЭФФЕКТОВ НА НЕЙТРОННОЕ РЕЗОНАНСНОЕ СЕЧЕНИЕ

*Б. Зайдель, Д. Зелигер, А. Майстер, З. Миттаг,  
В. Пильци*

Технический университет, Дрезден

Работа посвящена проведенным в последние годы исследованиям влияния атомных, молекулярных и твердотельных эффектов в мишени на сечение взаимодействия нейтронов с ядрами в области низкоэнергетических нейтронных резонансов. Даны обзор влияния этих эффектов на доплеровское уширение и сравнение расчетных результатов с экспериментальными. Изложены результаты исследования температурного и химического сдвигов нейтронных резонансов, которые представляют собой эффекты, аналогичные доплеровскому эффекту второго порядка и изомерному сдвигу, известным из мессбауэровской спектроскопии  $\gamma$ -линий.

In this paper investigations are reviewed, recently carried out about the influence of atomic, molecular, and solid state effects on neutron cross-section at low energy neutron resonances. It covers calculations of these effects on the Doppler broadening of neutron resonances as well as comparison to experimental data. Furtheron, investigations are presented on a temperature shift and a chemical shift of neutron resonances. These effects can be regarded as analogues to the second order Doppler effect and isomer shift respectively, well-known from the Mössbauer gamma-ray spectroscopy.

### ВВЕДЕНИЕ

Сечение ядерных реакций обычно рассматривается не зависящим от атомных, молекулярных или твердотельных свойств исследуемого образца. Это объясняется тем, что энергия ядерных процессов, как правило, превышает на много порядков энергии, типичные для химической связи или для теплового движения атомов в кристаллических решетках или в молекулах. Существует, однако, несколько исключений, при которых следует учесть влияние кристаллических и молекулярных эффектов. Одно из этих исключений представляет собой взаимодействие медленных нейтронов с ядрами.

Настоящий обзор посвящен проведенным в последние годы исследованиям влияния атомных, молекулярных и твердотельных эффектов на сечение взаимодействия нейтронов с ядрами в области низкоэнергетических нейтронных резонансов. Нейтронные резонансы — это ярко выраженные узкие максимумы в сечении ядерных реакций с нейтронами, приводящих к образованию изолированных возбужденных состояний составного ядра с энергией немного выше энергии связи нейтронов. Разрешенные нейтронные резонансы существуют

при энергиях нейтронов, зависящих от данных нуклидов, в диапазоне от электрон-вольта до килоэлектрон-вольта. Точное энергетическое положение и форма нейтронных резонансов зависят не только от ядерных свойств нуклидов, но и от окружающей среды. Исследования связанных с этим вопросов начались уже с момента развития ядерной физики. Так, доплеровское уширение резонансов обсуждалось уже в 1937 г. в работе Бете [1], и основная теоретическая работа о доплеровском уширении для кристаллических твердых тел была проведена Лэмбом [2] в 1939 г. Нейтронная спектроскопия ядер с резонансными нейтронами на мощных импульсных источниках в последние годы так сильно развилась, что в экспериментах были найдены новые, более тонкие эффекты. Эти эффекты относятся как к структуре ядер, так и к их окружению. Например, стало возможным проникновение в область сверхтонкого взаимодействия.

В разд. 1 дано краткое изложение экспериментальной методики, применяемой для исследования таких эффектов, как доплеровское уширение, температурный и химический сдвиг нейтронных резонансов [3—10].

Исследование этих тонких эффектов требует более точного понимания влияния атомных, молекулярных и особенно твердотельных свойств на ход нейтронного резонансного сечения. В первую очередь, это, конечно, относится к самому существенному эффекту — доплеровскому уширению. Сравнение положения и формы измеренных нейтронных резонансов ядер-мишеней, которые связаны в различных химических соединениях, ярко демонстрирует влияние разных спектров колебаний твердых тел и молекул на доплеровское уширение [3,5—8]. В разд. 2 изложены методы описания доплеровских уширений нейтронных резонансов. Сравнения результатов, полученных с помощью этих методов, с экспериментальными данными позволяют оценить точность теоретических методов.

Тепловое движение ядер-мишеней вызывает не только уширения нейтронных резонансов, но и зависящие от температуры смещения положений резонансов. Эти смещения имеют известный аналог — температурные сдвиги мессбауэровских  $\gamma$ -линий [11, 12]. Температурный сдвиг нейтронных резонансов впервые экспериментально зарегистрирован и теоретически обоснован в [10]. На этом эффекте остановимся в разд. 3.

В разд. 4 рассмотрено влияние сверхтонкого взаимодействия между ядром и атомной оболочкой на нейтронные резонансы. Первое экспериментальное исследование явления этого типа — сдвига положения нейтронных резонансов при измерениях с поляризованными нейтронами или ориентированными ядрами при изменении поляризации — описано в [13, 14]. Этот сдвиг вызван взаимодействием атомного ядра с внутриатомным магнитным полем. Измерение сдвига позволяет определить магнитные моменты атомного ядра в высоковозбужденных состояниях, образующихся при резонансном захвате нейтронов. При измерении пропускания нейтронов через мишени,

содержащие разные химические соединения исследуемого ядра [3], наблюдались химические сдвиги нейтронных резонансов вследствие электрического сверхтонкого взаимодействия заряда ядра с электронной оболочкой. На основе этого эффекта можно определить среднеквадратичные зарядовые радиусы ядер в высоковозбужденных компаунд-состояниях [3, 4, 9, 15]. Оба эффекта имеют свои аналоги в мессбауэровской спектроскопии — в сверхтонком расщеплении и в изомерном сдвиге [16, 17]. В данной работе ограничимся исследованиями с неполяризованными нейтронами и ядрами, в то время как [18] представляет собой подробный обзор исследования взаимодействия поляризованных нейтронов с ядрами.

### 1. ИЗМЕРЕНИЕ ТОНКИХ ЭФФЕКТОВ В ПОЛНОМ РЕЗОНАНСНОМ СЕЧЕНИИ

Рассматриваемые атомные, молекулярные и твердотельные эффекты в резонансном сечении, как правило, малы ( $\Delta\sigma/\sigma \approx 10^{-3} \div 10^{-1}$ ). Поэтому необходимы высокая статистическая точность измерений резонансных спектров и достаточно высокое разрешение нейтронных резонансов. Эти требования к разрешению и светосиле спектрометров могут быть реализованы в измерениях пропускания нейтронов через образцы по методу времени пролета на мощных импульсных источниках нейтронов.

Зависимость пропускания нейтронов от полного сечения взаимодействия  $\sigma(E_n)$  нейтронов энергии  $E_n$  с ядрами определяется выражением

$$T(E_n) = \exp[-N\sigma(E_n)], \quad (1)$$

где  $N$  — число ядер на единицу площади образца;  $E_n$  — энергия нейтронов, эВ, определяется по времени пролета  $t$ , мкс,

$$E_n = (72,3L/t)^2,$$

$L$  — длина пролетной базы, м.

Вследствие незначительности исследуемых эффектов главная цель экспериментов состоит в измерении разностей резонансных сечений различных образцов. Из этого следуют приведенные ниже требования к экспериментам:

а. Энергетический разброс  $\Delta E_n$  из-за ограниченной разрешающей способности спектрометра должен быть, как правило, меньше ширины  $\Gamma$  исследуемого резонанса:

$$\Delta E_n \lesssim \Gamma. \quad (2)$$

В экспериментах по времени пролета с длительностью нейтронного импульса  $\Delta t_r$ ,

$$\Delta E_n = \frac{\Delta t_r}{36,2L} E_n^{3/2}, \quad (3)$$

где  $\Delta E_n$  и  $E_n$  — в эВ,  $L$  — в м и  $\Delta t_r$  — в мкс. Выражения (2) и (3) определяют верхнюю границу энергии нейтронных резонансов, для которых возможны указанные исследования.

б. Статистическая точность измеряемых спектров для изучения эффектов в диапазоне  $\Delta\sigma/\sigma \approx 10^{-3} \div 10^{-2}$  требует больше  $10^6$  счетов в каждом временном канале. При этом ширина каналов должна быть меньше временного разрешения. Это накладывает дополнительные ограничения на возможность исследования эффектов с точки зрения интенсивности.

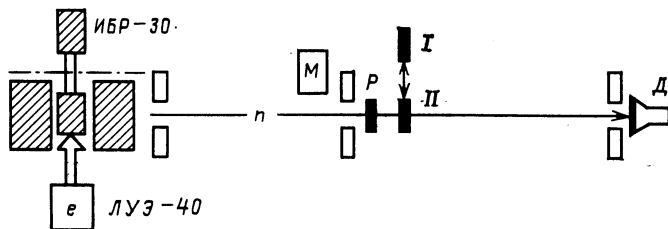


Рис. 1. Схема эксперимента в [3—10]:

ИБР-30 — импульсный реактор, работающий в бустерном режиме с ускорителем ЛУЭ-40; I, II — исследуемые образцы; Д — нейтронный детектор; Р — образец с реперными резонансами; М — монитор нейтронного пучка

в. Относительная разность числа ядер данного нуклида на единицу площади для двух сравниваемых образцов должна быть меньше  $10^{-3}$ . Остальные экспериментальные условия также должны быть как можно более одинаковыми. Все это предъявляет очень строгие требования к эксперименту.

г. Важным условием надежного измерения сечения в области резонанса является оптимальная толщина образца

$$N \approx (2-3) \frac{1}{\sigma(E_0)},$$

где  $\sigma(E_0)$  — сечение в максимуме резонанса. Если толщина образцов (вследствие большого резонансного сечения) очень маленькая (0,1—0,01 мм) и образцы используются в виде порошка, то необходимо учесть в выражении (1) неоднородность толщины, связанную с зернистостью порошка.

Из этих требований вытекает, что исследование названных тонких эффектов — чрезвычайно трудная экспериментальная задача.

Рассмотрим конкретную установку, используемую для таких экспериментов в ОИЯИ [3—10]. Схема эксперимента изображена на рис. 1. Спектры нейтронов, прошедших через исследуемые образцы, измеряются на пучке импульсного реактора ИБР-30, работающего в бустерном режиме с линейным ускорителем электронов ЛУЭ-40 [19]. Пролетная база  $L = 50 \div 60$  м и длительность нейтронного импульса  $\Delta t_r \approx 4,5$  мкс. Это значит, что условие  $\Delta E_n \ll$

$\ll \Gamma$  [см. (2)] выполняется в области энергии  $E_n \ll 13$  эВ при  $\Gamma \approx 0,1$  эВ. Для обеспечения одинаковых экспериментальных условий измерения разных образцов они проводятся с двумя (или тремя) образцами, которые вводятся в пучок поочередно на короткое время, например на 5 мин. Каждый пятиминутный спектр контролируется по показаниям монитора пучка и счетчика стартовых импульсов реактора. При выполнении условий постоянства спектров, заданных экспериментатором, спектр записывается в память ЭВМ.

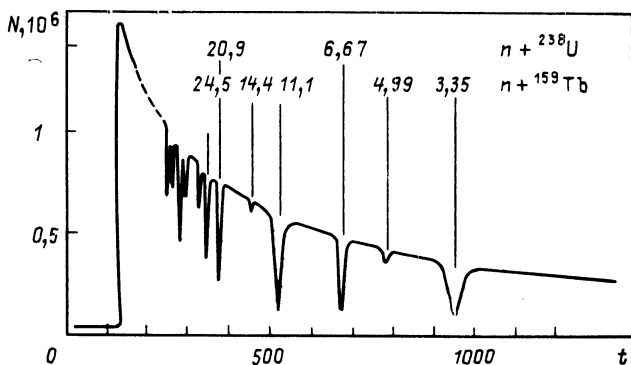


Рис. 2. Экспериментальный спектр по времени пролета для образца из естественного урана с присутствием в пучке контрольного образца Тб ( $t$  — номер времени-канала с шириной 2 мкс,  $N$  — число отсчетов)

После этого в пучок вводится следующий образец. Общая длительность измерений для двух образцов при мгновенных загрузках детекторного тракта до  $3 \cdot 10^5$  имп./с не меньше нескольких суток. Для регистрации нейтронов используется сцинтилляционный детектор с литиевым стеклом. Дополнительно к исследуемому образцу в пучке нейтронов постоянно находится реперный образец, резонансы которого обеспечивают объективный контроль временных спектров. На рис. 2 показан один из спектров уранового образца, полученный за 10 ч измерения, во время которого были сняты три спектра разных образцов. Некоторые экспериментальные примеры разностей пропусков нейтронов представлены на рис. 7.

Реактор ИБР-30, работающий в бустерном режиме с линейным ускорителем ЛУЭ-40, является в настоящее время одним из самых мощных импульсных источников нейтронов, пригодных для исследования эффектов рассматриваемого типа. На этой установке такие измерения ограничены указанными выше требованиями к низкоэнергетическим резонансам и могут охватывать область энергии  $E_0$  до 25 эВ. Это значит, что в настоящее время экспериментальному исследованию поддаются до 200 резонансов примерно для 100 нуклидов.

Развитие импульсных источников нейтронов на основе сильно-точных ускорителей протонов и импульсных бустеров [20] даст возможность исследовать тонкие эффекты в нейтронных резонансах с энергиями до килоэлектрон-вольта и соответственно уменьшить времена измерений и массу образцов.

## 2. ДОПЛЕРОВСКОЕ УШИРЕНИЕ НЕЙТРОННЫХ РЕЗОНАНСОВ

**Сечение в области изолированных резонансов для неподвижного ядра-мишени.** Энергетическую зависимость полного сечения взаимодействия нейтронов с ядрами для неподвижного ядра  $\sigma_0(E_x)$  можно представить следующей суммой:

$$\sigma_0(E_x) = \sigma_p + \sum_j [\sigma_{\text{ВВ}}(E_x) + \sigma_{\text{int}}^p(E_x) + \sigma_{\text{int}}^r(E_x)]_j. \quad (4)$$

Сечение потенциального рассеяния  $\sigma_p$  определяется выражением

$$\sigma_p = 4\pi R_p^2,$$

где  $R_p$  — радиус потенциального рассеяния.

Сумма в (4) проводится по всем резонансам  $j$ , вносящим вклад в полное сечение при рассматриваемой энергии.

Первый член в сумме задан известной формулой Брейта — Вигнера [21]

$$\sigma_{\text{ВВ}}(E_x) = \frac{\pi}{k^2} g \frac{\kappa k \Gamma_n(E_0) \Gamma}{(E_x - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2}, \quad (5)$$

где

$$g = \frac{2J+1}{2(2I+1)} \quad \text{и} \quad \kappa = \frac{\hbar}{\sqrt{2m_n |E_0|}}.$$

Здесь  $E_0$  — энергия резонанса;  $\Gamma$  — полная ширина;  $\Gamma_n(E_0)$  — нейтронная ширина при  $E_0$ ;  $J$  — спин резонанса;  $I$  — спин ядра-мишени;  $k$  — волновое число нейтрона и  $m_n$  — масса нейтрона. Величина  $\sigma_{\text{int}}^p(E_x)$  учитывает интерференцию между потенциальным и резонансным рассеянием:

$$\sigma_{\text{int}}^p(E_x) = 4\pi \kappa g R_p \frac{\Gamma_n(E_0)(E_x - E_0)}{(E_x - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2}.$$

Последний член в сумме (4) описывает интерференцию резонанса  $j$  с соседними резонансами [22]:

$$\sigma_{\text{int}}^r(E_x) = \frac{\pi}{k^2} g \frac{\sqrt{E_x}(u\Gamma + v(E_x - E_0))}{(E_x - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2}. \quad (6)$$

Параметры  $u$  и  $v$ , как и другие резонансные параметры, можно определить экспериментально. Формула (6) дает только одно возможное простое описание интерференции (другие методы описания см. в [22—26]). Интерференция вносит вклад  $\sigma_{\text{int}}^r$  в сечение, если резонансы с одинаковым спином перекрывают друг друга и выполнено условие  $\Gamma_f + \Gamma_n \geq \Gamma_\nu$  между шириной деления  $\Gamma_f$ , шириной  $\gamma$ -распада  $\Gamma_\nu$  и нейтронной шириной  $\Gamma_n$  [27]. В противном случае вклад

пренебрежимо мал. Влияние ядерного состояния с энергией немного ниже энергии связи нейтрона на сечение можно учитывать резонансом с отрицательной энергией  $E_0$ .

**Влияние движения ядра-мишени на сечение.** Реальный атом не закреплен, он находится в каком-то окружении, позволяющем возбудить внешние степени свободы, т. е. привести в движение атом в газе, жидкости или кристалле. Поскольку в процессе поглощения нейтрона ядром сохраняется импульс, некоторая часть кинетической энергии нейтрона  $E_t$  переносится на эти внешние степени свободы. Поэтому энергия возбуждения  $E^*$  ядра после захвата нейтрона

$$E^* = B_n + (E_n - E_t) = B_n + E_x,$$

где  $B_n$  — энергия связи нейтрона в ядре.

Сечение  $\sigma_0(E_x)$ , зависящее от переданной ядру энергии  $E_x$ , определяется исключительно свойствами ядра. В эксперименте, однако, измеряется сечение  $\sigma(E_n)$  в зависимости от энергии нейтрона  $E_n$  в лабораторной системе координат. Связь между сечениями  $\sigma(E_n)$  и  $\sigma_0(E_x)$  можно задавать следующим образом:

$$\sigma(E_n) = \int_{-\infty}^{E_n} \sigma_0(E_n - E_t) S(E_n, E_t) dE_t, \quad (7)$$

где функция передачи  $S(E_n, E_t)$  определяет вероятность переноса энергии  $E_t$  на внешние степени свободы атома.

Движение атома, поглощающего нейтрон, до и после захвата нейтрона приводит к так называемому доплеровскому уширению нейтронных резонансов. Оно определяется свойствами функции передачи  $S(E_n, E_t)$ . Доплеровское уширение в значительной степени затрудняет точное измерение всех ядерных параметров нейтронных резонансов. Поэтому точное описание доплеровского уширения во многих случаях является предусловием для точного определения ядерных свойств нейтронных резонансов.

Для более тонких эффектов, как, например, температурного сдвига нейтронных резонансов (см. разд. 3), необходимо подробное рассмотрение. В резонансное сечение  $\sigma_{BW}(E_x)$  [см. (5)] входит волновое число  $k$  нейтрона, которое зависит от относительного движения нейтрона и ядра-мишени до захвата:

$$k = \frac{1}{\hbar} | \mathbf{p}_n - \mathbf{p}_A |,$$

где  $\mathbf{p}_n$  — импульс нейтрона;  $\mathbf{p}_A$  — импульс поглощающего ядра. В случае идеального газа выполняется закон сохранения импульса в системе «нейтрон плюс атом», поэтому получаем следующее соотношение для волнового числа:

$$k_G = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_n(E_n - E_t)}. \quad (8)$$

Однако если ядро-мишень связано в кристаллической решетке, следует применять закон сохранения импульса к системе «нейтрон плюс кристалл». Квантовомеханическое среднее импульса отдельного атома в кристаллической решетке равняется нулю, следовательно,

$$k_{\mathbf{n}} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_n E_n}. \quad (9)$$

В случае молекулярного газа, в котором в результате поглощения нейтрона возможны возбуждения внутримолекулярных степеней свободы, имеем

$$k_{\mathbf{n}} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_n (E_n - E_t - \Delta E_M)},$$

где  $\Delta E_M$  — изменение энергии возбуждения внутренних степеней свободы молекулы.

**Идеальный газ ядер-мишеней.** Доплеровское уширение для одноатомного идеального газа можно описать на основе классической механики. При захвате нейтрона энергии  $E_n$  (в лабораторной системе координат) атомом массы  $M$  при скорости  $w$  кинетическая энергия атома увеличивается на  $E_t$ :

$$E_t = \frac{m_n}{M+m_n} E_n + \frac{M}{M+m_n} \sqrt{2m_n E_n} w_{\parallel} - \frac{m_n M}{2(M+m_n)} (w_{\parallel}^2 + w_{\perp}^2), \quad (10)$$

где  $w_{\parallel}$  и  $w_{\perp}$  — составляющие скорости  $w$  параллельно и перпендикулярно направлению движения нейтрона.

Используя распределение Больцмана для составляющих скорости  $w_{\parallel}$  и  $w_{\perp}$  и учитывая кинематику движения нейтрона и атома, получаем функцию передачи

$$S_G(E_n, E_t) = \frac{1}{\pi^{1/2} \Delta_D} \left( \frac{M+m_n}{M} \right)^{3/2} \left( \frac{E_n - E_t}{E_n} \right)^{1/2} \times \\ \times \left\{ \exp \left[ - \left( \frac{2E_n \left( 1 - \sqrt{(1 - E_t/E_n) \frac{M+m_n}{M}} \right)}{\Delta_D} \right)^2 \right] - \right. \\ \left. - \exp \left[ - \left( \frac{2E_n \left( 1 + \sqrt{(1 - E_t/E_n) \frac{M+m_n}{M}} \right)}{\Delta_D} \right)^2 \right] \right\}, \quad (11)$$

где  $\Delta_D$  — доплеровская ширина. Она является мерой уширения нейтронных резонансов и определяется выражением

$$\Delta_D = 2 \sqrt{k_B T E_n \frac{m_n}{M}}, \quad (12)$$

где  $k_B$  — постоянная Больцмана;  $T$  — температура газа.

Кроме уширения происходит небольшое смещение резонанса в область более низкой энергии. Оно определяется в первом прибли-



жении энергией отдачи

$$R = \frac{m_n}{M + m_n} E_n.$$

Смещение резонанса обсуждается более подробно в разд. 3.

В дальнейшем рассмотрении нейтронных сечений мы несколько отойдем от традиционно используемого подхода [1, 28]. В этих работах в качестве  $\sigma_0$  берется сечение при температуре  $T = 0$ , и в связи с этим параметры нейтронных резонансов  $E_0$ ,  $\Gamma$ ,  $\Gamma_n \dots$  относятся к лабораторной системе. В нашем подходе используются резонансные параметры в системе центра масс (с.ц.м), т.е. те же самые параметры, как и в случаях кристаллических и молекулярно-газообразных образцов.

Учитывая приближения  $M \gg m_n$  и  $E_n \gg \frac{1}{2} M w^2$ , получаем из (14) для функции передачи известное еще из работы Бете [1] выражение:

$$S'_G(E_n, E_t) = \frac{1}{\pi^{1/2} \Delta_D} \exp \left[ -\frac{(E_t - E_n/A)^2}{\Delta_D^2} \right], \quad (13)$$

( $A = M/m_n$ ). Вводя еще несколько дополнительных приближений, интеграл (7) можно выразить с помощью известных из оптики функций  $\psi$  и  $\chi$  [29].

Следует отметить, что хотя модель идеального газа справедлива только для инертных газов, ее широко применяют и в других случаях (см. ниже).

**Кристаллическая твердотельная мишень.** Понятие «доплеровское уширение» нейтронных резонансов применяется обычно и для твердых тел, хотя физическая картина отличается значительно от классического доплеровского эффекта. При захвате нейтронов атомами, находящимися в кристаллической решетке, поглощаются и испускаются фононы. Эти процессы заметно влияют на энергетический ход резонансного сечения. Выбиванием атомов из узлов решетки при захвате нейтронов можно пренебречь, потому что энергия отдачи для рассматриваемых низкоэнергетических нейтронных резонансов значительно меньше энергии связи атомов в решетке.

Предположим, что кристаллическая решетка при захвате нейтрона переходит из состояния  $|\alpha\rangle$  в состояние  $|n\rangle$  и, следовательно,

$$E_t = E_n - E_\alpha.$$

Основным видом возбуждения кристаллической решетки при захвате резонансных нейтронов являются колебательные моды. Колебания атомов кристаллической решетки можно описать в системе нормальных координат. При низких энергиях возбуждения колебания решетки могут быть представлены  $3N$  независимыми гармоническими осцилляторами, где  $N$  — число атомов в кристалле. При этом функ-

ция передачи принимает следующую форму [2]:

$$S_K(E_n, E_t) = \sum_{\{\alpha_s\}} w_{\{\alpha_s\}}(T) \sum_{\{n_s\}} |\langle \{n_s\} | \exp(i\mathbf{p}_n(E_n) \mathbf{r}/\hbar^2) | \{\alpha_s\} \rangle|^2 \times \\ \times \delta(E_t - \sum_s (n_s - \alpha_s) \hbar \nu_s), \quad (14)$$

где  $\{\alpha_s\}$  и  $\{n_s\}$  — наборы квантовых чисел, характеризующих колебательное состояние решетки до и после захвата нейтрона;  $w_{\{\alpha_s\}}(T)$  — вероятность заселения состояния  $\{\alpha_s\}$  до захвата нейтрона при температуре  $T$ ;  $\hbar \nu_s$  — энергия фонона, относящаяся к нормальной координате  $s$ ;  $\mathbf{p}_n$  — импульс нейтрона и  $\mathbf{r}$  — смещение атома из равновесного положения. Матричный элемент представляет собой вероятность перехода из состояния  $\{\alpha_s\}$  в состояние  $\{n_s\}$  при захвате нейтрона. Если обсуждается только поглощение нейтрона, то матричный элемент применяется в том же виде и для любых ядерных реакций, протекающих через составное ядро. Дельта-функция в выражении (14) учитывает сохранение энергии. Следует отметить, что в формуле (14) пренебрегается увеличением массы атома вследствие захвата нейтрона, т. е. используется приближение  $M + m_n \approx M$ .

Авторы не ставят перед собой цель детально описать преобразования выражения (14) к виду, удобному для расчетов. Соответствующие подробности разложения функции  $S_K(E_n, E_t)$  содержатся в [2, 30—33].

Для одноатомного идеального изотропного кристалла функцию передачи  $S_K$  представим в виде [31]:

$$S_K(E_n, E_t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp[-iE_t t] \exp\{R[\gamma(t) - \gamma(0)]\}, \quad (15)$$

где

$$\gamma(t) = \int_0^{\infty} d(\hbar\nu) \frac{\rho(\hbar\nu)}{\hbar\nu} \left[ \operatorname{cth} \left( \frac{\hbar\nu}{2k_B T} \right) \cos(\hbar\nu t) + i \sin(\hbar\nu t) \right];$$

$$R = \frac{m_n}{M} E_n.$$

Предположение об изотропности кристалла дает возможность выразить функцию передачи лишь через спектр нормальных частот кристалла (спектр фононов)  $\rho(\hbar\nu)$ .

Соотношение, подобное (15), можно вывести и для многокомпонентных решеток, существующих, например, в случае химических соединений, если элементы переходной матрицы в (14) не зависят от направления падающего нейтрона. Такая изотропия имеет место для нескольких типов решеток кубической симметрии, например для решеток типа NaCl или CaF<sub>2</sub>. В случае поглощения нейтрона ядром X, связанным в химическом соединении XY<sub>l</sub>, функция передачи

$S_K(E_n, E_t)$  имеет следующий вид [34, 35]:

$$S_K(E_n, E_t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp[-iE_t t] \exp\{R[\gamma_X(t) - \gamma_X(0)]\}, \quad (16)$$

где

$$\gamma_X(t) = \int_0^{\infty} d(h, \nu) \frac{\rho_X(h\nu)}{h\nu} \left[ \operatorname{cth} \left( \frac{h\nu}{2k_B T} \right) \cos(h\nu t) + i \sin(h\nu t) \right];$$

$$R = \frac{m_n}{M_X} E_n.$$

Вместо спектра фононов  $\rho(h\nu)$  в (16) входит взвешенный спектр фононов  $\rho_X(h\nu)$ , содержащий только такие колебательные состояния решетки, которые доступны при поглощении нейтрона ядром X. Энергия отдачи  $R$  определяется массой  $M_X$  ядра X.

Вычисление переходной матрицы неизотропного кристалла должно быть выполнено отдельно для всех направлений колебаний атомов. После этого матричные элементы усредняются по ориентациям кристаллитов в исследуемом образце. Так как форма нейтронных резонансов не зависит от тонких структур в спектре фононов (см. ниже) и имеется мало данных о спектрах фононов поликристаллических образцов, метод расчета функции  $S_K(E_n, E_t)$ , изложенный в этом разделе, вполне соответствует настоящим требованиям.

**Спектр фононов решетки при захвате нейтронов.** Если мишень состоит только из атомов одного элемента, колебания ядра-мишени описываются полным спектром фононов  $\rho(h\nu)$ . Если, однако, ядро-мишень X связано в решетке, в состав которой входят и другие нуклиды Y, то не в каждом состоянии колебания решетки рассматриваемое ядро-мишень X смещается из равновесного положения. Иными словами, при поглощении нейтронов ядром X возбуждаются не все состояния спектра  $\rho(h\nu)$ . Поэтому для вычисления функции передачи используется взвешенный спектр, который определяется следующим образом [34]:

$$\rho_X(h\nu) = \lim_{\Delta h\nu \rightarrow 0} \frac{\left[ \sum_g \sum_j \left| u^j \left( \frac{q}{X} \right) \right|^2 \right]_{\Delta h\nu}}{\Delta h\nu},$$

где  $u^j \left( \frac{q}{X} \right)$  — нормированное смещение атома X из равновесного положения;  $j$  — номер ветви дисперсионного соотношения и  $q$  — волновой вектор фононов. Для настоящей работы особый интерес представляют низкоэнергетические нейтронные резонансы, существующие в основном в тяжелых нуклидах. Если в состав химических соединений этих элементов входят легкие элементы, как, например, H, O, C, N . . . , при  $M_X \gg M_Y$  взвешенный спектр фононов сильно отличается от полного спектра.

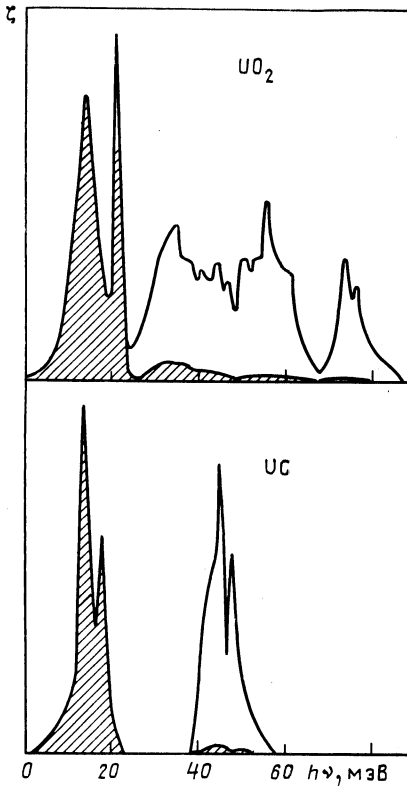


Рис. 3. Спектры нормальных частот  $\rho(h\nu)$  колебания решеток  $\text{UO}_2$  и  $\text{UC}$  и доли взвешенных для  $\text{U}$  спектров (заштрихованные) [3]

Рассмотрим, например,  $\text{UO}_2$  и  $\text{UC}$ , для которых в [34, 36] были рассчитаны полные и взвешенные спектры, представленные на рис. 3. Для количественного описания спектров фононов часто используют дебаевские спектры с верхними границами частот, соответствующими дебаевским температурам  $\Theta_D$ . Ясно, что дебаевская температура полного спектра  $\Theta_D$  в случае  $M_X \gg M_Y$  сильно отличается от соответствующей эффективной температуры Дебая  $\Theta_X$  для взвешенного спектра  $\rho_X(h\nu)$ . Для  $\text{UO}_2$   $\Theta_D = 520$  К, но для  $\text{U}$  в  $\text{UO}_2$  эффективная температура  $\Theta_U = 250$  К и для  $\text{O}$  в  $\text{UO}_2$  эффективная температура  $\Theta_O = 749$  К (при  $T = 293$  К) [37].

**Приближение спектра фононов дельта-функциями.** Вычисление функции передачи по (15) или (16) для сплошных спектров фононов

представляет собой довольно сложную задачу. Поэтому полезно вводить приближение для фононного спектра в виде суммы  $\delta$ -функций Дирака

$$\rho_X(h\nu) = \sum_{j=1}^m a_j \delta(h\nu - h\nu_j) \quad (17)$$

с нормировкой

$$\sum_{j=1}^m a_j = 1.$$

Выражением (17) можно приблизительно описать любой спектр фононов, выбирая подходящий набор величин  $\nu_j$  и  $a_j$ . Чем больше число  $m$ , тем лучше это приближение. Подставляя выражение (17) в функцию

$\gamma(t)$  (15) [или  $\gamma_X(t)$  (16)], получаем

$$\gamma(t) = \frac{1}{RE_n} \sum_{j=1}^m (b_j^+ e^{ih\nu_j t} + b_j^- e^{ih\nu_j t});$$

$$b_j^+ = \frac{Ra_j}{h\nu_j (1 - \exp(-h\nu_j/k_B T))};$$

$$b_j^- = b_j^+ \exp(-h\nu_j/k_B T).$$

С помощью разложения показательных функций

$$\exp(b_j^\pm e^{\pm ih\nu_j t}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{b_j^\pm e^{\pm kh\nu_j t}}{k!}$$

найдем из (15) для функции передачи

$$S_K(E_n, E_t) = D(E_n) \sum_{\rho_1=-\infty}^{\infty} \sum_{\rho_2=-\infty}^{\infty} \dots \sum_{\rho_m=-\infty}^{\infty} S_{\rho_1} S_{\rho_2} S_{\rho_m} \times$$

$$\times \delta\left(E_t + \sum_{j=1}^n \rho_j h\nu_j\right), \quad (18)$$

где  $D(E_n)$  — фактор Дебая — Валлера:

$$D(E_n) = \exp\left(-R \sum_{j=1}^m \frac{a_j}{h\nu_j} \operatorname{cth}\left(\frac{h\nu_j}{2k_B T}\right)\right)$$

и

$$S_{\rho_j} = \sum_{n=l}^{\infty} \frac{(b_j^+)^{\rho_j+n} (b_j^-)^n}{(\rho_j+n)! n!};$$

$$l = \begin{cases} -\rho_j, & \text{если } \rho_j \leq 0 \text{ (поглощение фотонов);} \\ 0, & \text{если } \rho_j > 0 \text{ (испускание фотонов).} \end{cases}$$

Величины  $S_{\rho_j}$  — вероятности поглощения или испускания  $\rho_j$  фононов с энергией  $h\nu_j$  при реакции нейтрона с ядром. Поскольку выражение (18) для  $S_K(E_n, E_t)$  содержит  $\delta$ -функции, то с его помощью можно легко вычислить сечение  $\sigma(E_n)$ . Оказалось, что суммы в (18) довольно быстро сходятся.

В [3—9, 32] использовалось приближение Нернста — Линдемана для взвешенного спектра фононов:

$$\rho_X(h\nu) = a_1 \delta(h\nu - h\nu_1) + a_2 \delta(h\nu - h\nu_2), \quad (19)$$

$$a_1 + a_2 = 1,$$

т. е. применялся спектр формы (17) для  $m = 2$ . В случае металлических образцов оказалась подходящей модель Эйнштейна, т. е.

$$\rho(h\nu) = \delta(h\nu - h\nu_1). \quad (20)$$

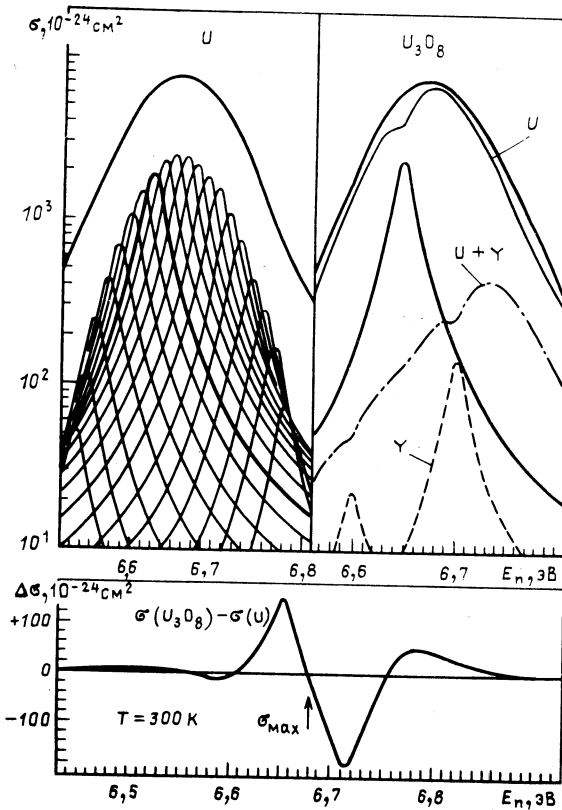


Рис. 4. Ход сечения резонанса энергии 6,67 эВ  $^{238}\text{U}$  при 300 К:

слева сверху —  $U$ ; справа сверху —  $U_3O_8$ ; внизу — разность обоих сечений

Для качественной дискуссии этого подхода рассмотрим коротко основные черты взвешенного спектра фононов для соединений, у которых  $M_X \gg M_Y$ . Существуют нормальные колебания низкой частоты ( $\approx \nu_1$ ), связанные с движениями тяжелых атомов  $X$ , дающие основной вклад во взвешенный спектр фононов  $\rho_X(h\nu)$ . Взаимодействие атомов  $X$  с атомами  $Y$  приводит к небольшому вкладу при более высоких частотах ( $\approx \nu_2$ ), описанному вторым членом в (19). Энергия  $h\nu_1$  может быть оценена и из данных по удельной теплоемкости

в области температур  $T \lesssim 100$  К, для которых мода  $h\nu_2$  практически не возбуждается. Для частот  $\nu_1$  и  $\nu_2$  получим в первом приближении

$$\nu_{1,2} \sim (M_{X,Y})^{1/2}.$$

Параметры взвешенных спектров фононов, полученные применением (19) при анализе хода нейтронного резонансного сечения, даны в табл. 1 для нескольких соединений урана.

На рис. 4 показаны рассчитанные с помощью (19) и (20) формы резонансов. Слева сверху изображен резонанс 6,67 эВ металлического  $^{238}\text{U}$  при комнатной температуре. Параметры для  $\rho_U(h\nu)$  соответствуют данным в табл. 1. Видно, как сечение складывается из составляющей без отдачи и из составляющих, связанных с возбуждением (направо) и поглощением (налево) фононов. Справа сверху на рис. 4 изображены рассчитанные сечения для соединения  $U_3O_8$ . Выделены вклад, соответствующий части без отдачи, сумма вкладов, для которых происходят возбуждения и поглощения фононов  $h\nu_1$  и фононов  $h\nu_2$ , а также совместное действие обоих видов колебаний

Таблица 1. Параметры взвешенных для U спектров фононов  $\rho_U(h\nu)$  для нескольких соединений урана, полученные из анализа нейтронных резонансов

Образец	$a_1$	$h\nu_1$ , мэВ	$h\nu_2$ , мэВ	Литература
U	1,0	$11 \pm 2$	—	[32]
UO <sub>2</sub>	$0,92 \pm 0,02$	$12 \pm 3$	$46 \pm 4$	[9]
U <sub>3</sub> O <sub>8</sub>	$0,90 \pm 0,05$	$13 \pm 3$	$52 \pm 8$	[32]
	$0,84 \pm 0,03$	$10 \pm 3$	$45 \pm 4$	[9]
$\alpha$ -UO <sub>3</sub>	$0,90 \pm 0,02$	$10 \pm 3$	$69 \pm 5$	[9]
$\gamma$ -UO <sub>3</sub>	$0,82 \pm 0,04$	$14 \pm 1$	$54 \pm 4$	[3]
UF <sub>4</sub> ·H <sub>2</sub> O	$0,53 \pm 0,06$	$8 \pm 1$	$28 \pm 3$	[3]
UO <sub>2</sub> (NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·6H <sub>2</sub> O	$0,82 \pm 0,04$	$14 \pm 1$	$54 \pm 4$	[3]

$h\nu_1$  и  $h\nu_2$ . В нижней части рис. 4 изображена разность сечений металлического урана и U<sub>3</sub>O<sub>8</sub>.

**Приближение идеального газа для твердотельных образцов.** Лэмб в [2] констатировал два простых предельных случая для опре-

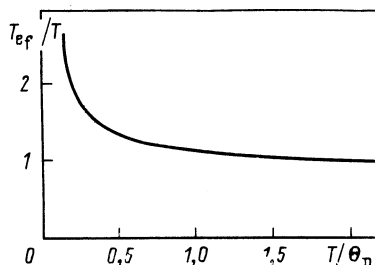


Рис. 5. Зависимость эффективной температуры  $T_{ef}$  от температуры кристалла  $T$ , измеренной в единицах дебаевской температуры  $\Theta_D$  кристалла [2]

деления функции передачи  $S_K(E_n, E_t)$ . Первый характеризуется слабой связью атомов в решетке. Здесь выполнено соотношение

$$\Gamma + \Delta_D \gg 2k_B\Theta_D, \quad (21)$$

где  $\Gamma$  — полная ширина резонанса;  $\Delta_D$  — доплеровская ширина (12) и  $\Theta_D$  — дебаевская температура образца. Форма и положение нейтронного резонанса совпадают с соответствующими величинами для идеального газа ядер-мишеней, обладающего, однако, эффективной температурой  $T_{эф}$  вместо температуры кристалла  $T$ . Эффективная температура определяется средней энергией атомов кристалла на вибрационную степень свободы:

$$T_{ef} = \langle \epsilon \rangle / k_B,$$

где

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{1}{2} \int h\nu \rho(h\nu) \operatorname{cth} \left( \frac{h\nu}{2k_B T} \right) d(h\nu).$$

На рис. 5 показано соотношение между  $T_{ef}$  и  $T$  для однокомпонентных кристаллов и различных температур Дебая. Формула для опре-

деления  $T_{ef}$  по данным о температуре Дебая и удельной теплоемкости дана в [38].

Соотношение (21) справедливо в первую очередь для однокомпонентных решеток. В случае многокомпонентных решеток оно модифицируется в соответствии с вышеупомянутыми рассуждениями в

$$T_{ef} = \langle \epsilon \rangle_X / k_B, \tag{22}$$

где

$$\langle \epsilon \rangle_X = \frac{1}{2} \int h\nu \rho_X(h\nu) \operatorname{cth} \left( \frac{h\nu}{2k_B T} \right) d(h\nu)$$

— средняя энергия на степень свободы атома X, поглощающего нейтрон, и  $\rho_X(h\nu)$  — соответственный взвешенный фононный спектр.

На рис. 6 изображены помимо хода сечения 6,67 эВ резонанса  $^{238}\text{U}$  по формуле Брейта — Вигнера (4) сечения для кристаллического образца  $\text{UO}_3$ , рассчитанные при температуре  $T = 300 \text{ K}$  с помощью  $\rho_X(h\nu)$  по (19), в газовом приближении с соответствующей температурой  $T_{ef} = 324 \text{ K}$  и для идеального газа при температуре  $T = 300 \text{ K}$ . Обе модели дают в общем сходные формы резонансов. Однако в газовой модели резонансная кривая более симметрична, чем в случае кристаллического образца. Разность кривых составляет до  $4 \cdot 10^{-22} \text{ см}^2$ , т. е. 5 % сечения в максимуме резонанса. Использование  $T_{ef}$  вместо  $T$  не улучшает воспроизведение резонансной кривой для твердотельной мишени, наоборот, остаются качественные различия. Условие (21) здесь выполнено на уровне  $(\Gamma + \Delta_D)/(2k_B\Theta_U) \approx 2$ .

Второй предельный случай, упомянутый в [2], — это сильная связь решетки, когда выполнены условия

$$\Gamma, \langle \epsilon \rangle, R \ll k_B\Theta_D.$$

При этом получается кривая  $\sigma_0(E_n)$  согласно соотношению (4) не уширенная и без отдачи (см. рис. 6). Этот случай можно считать аналогом эффекта Мессбауэра [39].

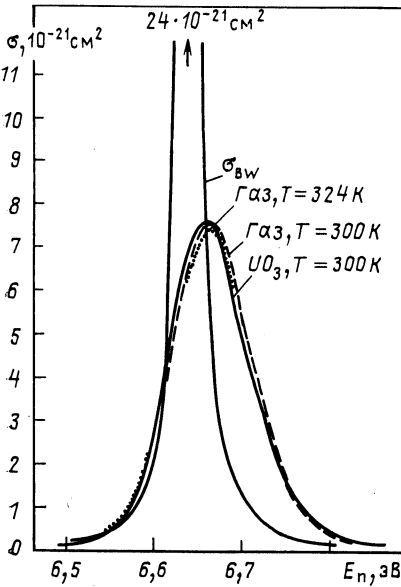


Рис. 6. Сечение в области резонанса энергии 6,67 эВ  $^{238}\text{U}$ , вычисленное по формуле Брейта — Вигнера ( $\sigma_{BW}$ ), для образца  $\text{UO}_3$  при температуре  $T=300 \text{ K}$  и в модели идеального газа с  $T=300 \text{ K}$  и  $T_{ef} = 324 \text{ K}$ .



**Сравнение модельных и экспериментальных результатов для твердотельных мишеней.** Влияние кристаллической связи на доплеровское уширение можно четко показать, исследуя разность доплеровских уширений одного и того же резонанса в различных образцах, как это проиллюстрировано на рис. 4. В [3—9] измерены спектры пропускания различных химических соединений урана для низкоэнергетических резонансов. Некоторые примеры показаны на рис. 7. Разности экспериментально полученных кривых описаны с помощью простого выражения (19) для фононных спектров с точностью экспериментально достигнутого уровня.

Исследования проводились в [3—10] на ядрах-мишенях с массовыми числами  $A = 109, 161, 234, 235, 238$  в диапазоне энергии от 1 до 15 эВ. Полные ширины  $\Gamma$  изученных резонансов составляли от 25 до 120 мэВ. Кроме измерений при комнатной температуре, в ряде экспериментов образцы нагревались до температуры 373 и 670 К, сравнивались также резонансные кривые твердотельного образца  $\text{UO}_2$  и газообразного  $\text{UF}_6$ . Во всех случаях выражение (19) для спектров фононов оказалось применимым. Во-первых, естественная ширина  $\Gamma$  нейтронных резонансов сглаживает влияние тонких структур фононных спектров. Структуры с шириной меньше  $\Gamma$  принципиально не разрешимы. Во-вторых, в предельном случае слабой связи кристалла единственным параметром, который определяет энергетический ход резонансного сечения, является средняя энергия атомов на вибративную степень свободы  $\langle \epsilon \rangle_X$  [см. соотношение (22)]. Этот параметр практически не зависит от деталей спектров фононов.

Кроме того, оказалось невозможным удовлетворительно описать измеренные разности сечений различных образцов на основе газовой модели. На рис. 8 в качестве примера сравнивается разность сечений  $\Delta\sigma$  образцов  $\text{UO}_2$  и U в области резонанса 6,67 эВ  $^{238}\text{U}$ , рассчитанная по модели с фононным спектром, с разностью, полученной при расчетах по газовой модели. Несимметричное поведение относительно максимума резонанса связано с квантовым характером колебаний в кристаллической решетке. Результат газовой модели отличается по значению и по форме от результата решеточной модели. Для сравнения на том же рисунке приведены результаты расчета по газовой модели с другим значением  $\Gamma_\gamma$ , отличающимся на 1 мэВ. Такая точность требуется для инженерных расчетов в ядерной энергетике [40]. Видно, что расчет по разным моделям дает вполне заметную разницу в сечениях.

Обычно доплеровское уширение описывается в рамках газовой модели. В связи с этим поднимается вопрос, при каких условиях и в какой мере влияют твердотельные эффекты на резонансное сечение. Рассмотрим сначала зависимость твердотельных эффектов от температуры образцов. На рис. 9 показаны разность и отношение сечения резонанса 6,67 эВ  $^{238}\text{U}$  при  $T = 300$  и 600 К, полученные либо с учетом колебаний кристаллической решетки, либо в рамках газовой модели (при одних и тех же резонансных параметрах). Как

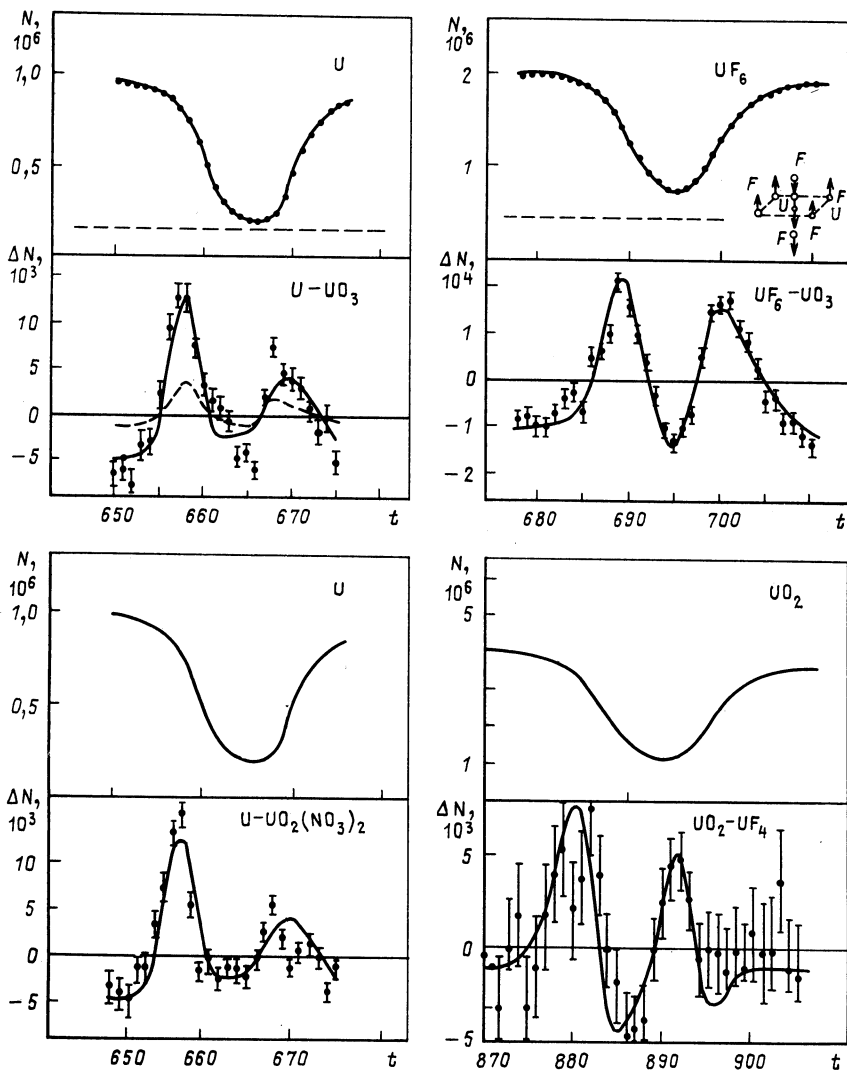


Рис. 7. Спектры пропускания (вверху) и разности спектров (внизу) в диапазоне резонанса 6,67 эВ  $^{238}\text{U}$ . Температуры образцов слева направо: комнатная, 373 К, комнатная, 370 К, толщины образцов:  $12 \cdot 10^{20}$ ,  $4 \cdot 10^{20}$ ,  $12 \cdot 10^{20}$ ,  $5,5 \cdot 10^{20}$  ядер/см<sup>2</sup> [8]

видно, при удваивании температуры различия уменьшаются примерно наполовину. (Применение  $T_{\text{ef}}$  вместо  $T$  в газовой модели картину принципиально не изменяет.) Далее на рис. 10 представлены результаты для разных резонансов: 6,67, 20,9 и 36,7 эВ  $^{238}\text{U}$  и 1,06 эВ

Рис. 8. Разности сечений резонанса энергии 6,67 эВ  $^{238}\text{U}$  в  $\text{UO}_2$  и  $\text{U}$  для колебаний атомов в решетке (сплошная) по газовой модели с соответствующими  $T_{\text{эф}}$  (пунктирная) и газовой модели с  $T_{\text{эф}}$  и  $\Gamma_\gamma$ , измененной на  $\sigma_\gamma = 1$  мэВ (точечная)

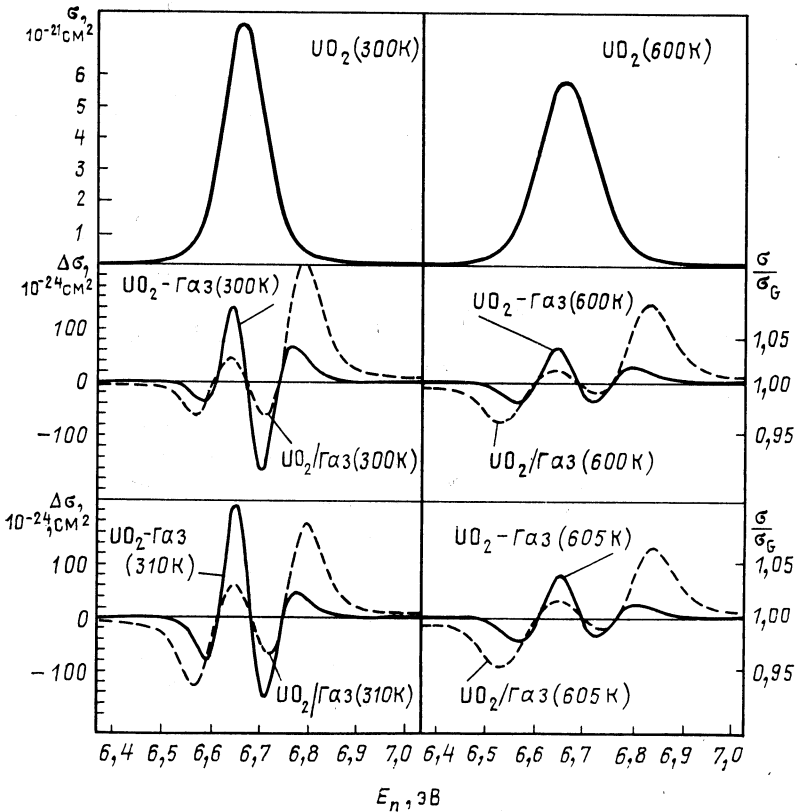
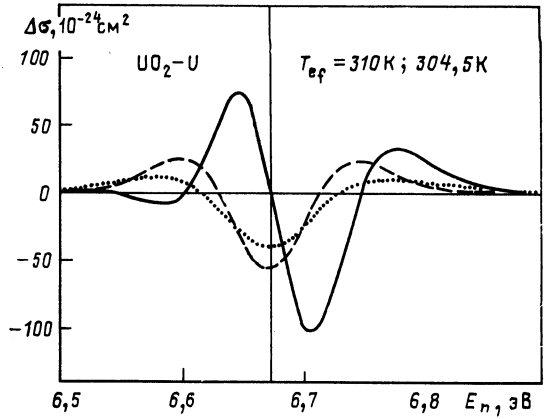


Рис. 9. Разность  $\Delta\sigma$  и отношения  $\sigma/\sigma_G$  сечений резонанса 6,67 эВ  $^{238}\text{U}$ , рассчитанные для колебаний в решетке и по газовой модели при  $T = 300$  и  $600$  К [8]

$^{240}\text{Pu}$  в образце  $\text{UO}_2$  при  $T = 300$  К. В качестве меры различия сечения воспользуемся величиной

$$P = \frac{\left\{ \int dE_n [\sigma(E_n) - \sigma_{\text{газ}}(E_n)]^2 \right\}^{1/2}}{\int dE_n \sigma(E_n)}$$

На рис. 10 приведена  $P$  в зависимости от значения  $\frac{1}{2}(\Gamma + \Delta_D) = \frac{1}{2}\Gamma + (E_0 \langle \varepsilon \rangle_{\text{U}} M/m_n)^{1/2}$ , которое в соответствии с (21) в случае справедливости газовой модели должно быть много больше  $k_B \Theta_D$ .

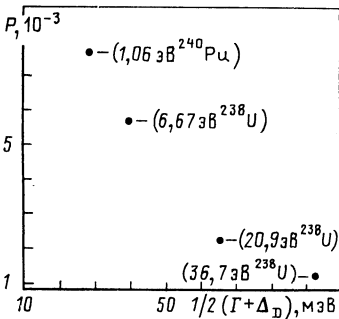


Рис. 10. Сходимость различия сечений в  $\text{UO}_2$  [8]

Для рассмотренного здесь образца  $\text{UO}_2$  имеем  $k_B \Theta_D \approx 22$  мэВ. Видно, что с ростом энергии  $E_0$  и ширины  $\Gamma$  резонансов  $P$  довольно быстро падает. Значит, твердотельные эффекты в резонансном сечении сильно проявляются для самых низкоэнергетических нейтронных резонансов тяжелых нуклидов. Они тем сильнее, чем выше дебаевская температура и чем ниже температура образца. Из данных табл. 2 для 6,67 эВ резонанса  $^{238}\text{U}$  видна погрешность определения параметров резонанса из экспериментально полученных спектров в приближении газовой модели вместо точного описания доплеровского уширения [41].

Для ширины  $\Gamma_n$  было бы найдено значение, повышенное на один процент, и для  $\Gamma_\gamma$  на несколько процентов. В заключение можно добавить, что последовательный учет решеточных колебаний для низкоэнергетических резонансов урана может представлять интерес для экспериментаторов.

Таблица 2. Изменение ширин  $\Delta\Gamma_n$  и  $\Delta\Gamma_\gamma$  вследствие использования газовой модели доплеровских уширений резонанса 6,67 эВ  $^{238}\text{U}$  для указанных образцов и температур [41]

Образец	$T, \text{K}$	$\Delta\Gamma_n/\Gamma_n$	$\Delta\Gamma_\gamma/\Gamma_\gamma$
$\text{UO}_2$	300	-0,009	-0,08
$\text{UO}_2$	600	-0,006	-0,07
U	300	-0,005	-0,04

**Молекулярный газ.** Нейтронное резонансное сечение для молекулярного газа определяется не только тепловым движением молекул в целом, но существенным образом и внутренними возбуждениями.

Колебательные и вращательные спектры и другие необходимые параметры, главным образом силовые константы многих молекул, известны довольно точно. Поэтому расчет резонансного сечения для молекулярных газов является более однозначным, чем для твердых тел. Функцию передачи при поглощении нейтронов в молекулярном газе можно представить в виде

$$S_M(E_n, E_t) = \sum_{\{n_i^a\}} W_{\{n_i^a\}} \sum_{\{n_i^b\}} \overline{P_{\{n_i^a\}}^{\{n_i^b\}}} S_G(E_n, E_t - (E_b - E_a)), \quad (23)$$

где  $\{n_i^a\}$ ,  $\{n_i^b\}$  — совокупности квантовых чисел, определяющих состояния молекулы до и после захвата нейтрона с соответственными энергиями  $E_a$  и  $E_b$ . Здесь необходимо учесть только те возбуждения, которые могут изменяться вследствие резонансного захвата нейтрона ядром X. (Это аналогично введению взвешенного спектра фононов в случае твердых тел);  $W_{\{n_i^a\}}$  — вероятность заселения состояния молекулы  $\{n_i^a\}$  до захвата нейтрона при определенной температуре газа;  $P_{\{n_i^a\}}^{\{n_i^b\}}$  — вероятность перехода молекулы из состояния  $\{n_i^a\}$  в состояние  $\{n_i^b\}$  при захвате нейтрона. Черта означает усреднение по ориентациям молекулы относительно направления движения нейтрона;  $S_G$  — функция передачи одноатомного идеального газа (11), но вместо  $E_t$  надо подставлять энергию  $E_t - (E_b - E_a)$  и вместо  $M$  массу полной молекулы. Расчет резонансного сечения на основе формулы (23) требует учета многих состояний  $\{n_i^a\}$ , и в случае несимметричных молекул необходимо усреднение сечений по ориентациям молекул.

При низкоэнергетических нейтронных резонансах энергия нейтронов недостаточна для разрушения молекулы. Следовательно, в общем случае нужно рассмотреть колебательные состояния молекул и вращения, а также связь между ними. Эта проблема была рассмотрена в [42] для захвата  $\gamma$ -квантов двухатомными молекулами. Более простой случай имеем для симметричных молекул типа  $XU_l$  ( $l = 2, 3, 4, 5, 6$ ), у которых ядра X поглощают нейтроны и находятся в центре масс молекул. Для таких молекул следует рассматривать только колебательные переходы и пренебречь вращательными [43].

В [43, 44] была развита общая теория испускания и поглощения  $\gamma$ -квантов ядрами X в симметричных молекулах типа  $XU_l$ . На основе этой теории в [5, 45] были рассчитаны нейтронные резонансные сечения для газообразного  $UF_6$ . Симметричные молекулы типа  $XU_l$  имеют несколько нормальных колебаний, которые в подавляющем большинстве случаев вырождены. Среди них есть и такие, при которых ядро остается в покое. Эти нормальные колебания не возбуждаются при захвате нейтрона ядром X, и поэтому они неинтересны при вычислении сечения резонансного поглощения нейтронов.

Интересующие нас колебания молекул описываются с помощью совокупности квантовых чисел  $\{n_{s\alpha}\}$ . Индекс  $s$  описывает разные нормальные колебания,  $\alpha$  — разные составляющие одного вырожденного нормального колебания. Вероятность перехода молекулы из состояния  $\{n_{s\alpha}^a\}$  в состояние  $\{n_{s\alpha}^b\}$  при захвате нейтрона ядром X можно вычислить согласно [43] с помощью формулы

$$P_{\{n_{s\alpha}^a\}}^{\{n_{s\alpha}^b\}} = \prod_{s, \alpha} |\langle \Phi_{n_{s\alpha}^b}(Q_{s\alpha}) | \exp\{ik_{\alpha}b_{s\alpha}Q_{s\alpha}M_X^{-1/2}\} | \Phi_{n_{s\alpha}^a}(Q_{s\alpha}) \rangle|^2, \quad (24)$$

где  $Q_{s\alpha}$  — нормальная координата  $\alpha$ -составляющей  $s$ -го нормального колебания;  $\Phi_{n_{s\alpha}^a}$ ,  $\Phi_{n_{s\alpha}^b}$  — волновые функции линейного гармонического осциллятора;  $b_{s\alpha}$  — нормированное смещение ядра X из положения равновесия;  $k_{\alpha}$  — волновой вектор нейтрона;  $M_X$  — масса ядра X. Величина  $b_{s\alpha}$  может быть определена из элементов матрицы  $\hat{l}$ , осуществляющей обратное преобразование матрицы масс-взвешенных декартовых координат  $\hat{q}$  в матрицу нормальных координат  $\hat{Q}$  [43, 46] или из силовых постоянных молекул. Матричные элементы в (24) были вычислены в [43]. Для случая поглощения энергии молекулой ( $n_{s\alpha}^b \geq n_{s\alpha}^a$ ) получаем

$$\begin{aligned} & |\langle \Phi_{n_{s\alpha}^b}(Q_{s\alpha}) | \exp\{ik_{\alpha}b_{s\alpha}Q_{s\alpha}M_X^{-1/2}\} | \Phi_{n_{s\alpha}^a}(Q_{s\alpha}) \rangle|^2 = \\ & = \left( \frac{n_{s\alpha}^a!}{n_{s\alpha}^b!} \right) Z_{s\alpha}^{n_{s\alpha}^b - n_{s\alpha}^a} \exp\{-Z_{s\alpha} \cos^2(\beta_{s\alpha})\} \times \\ & \times \cos^2(n_{s\alpha}^b - n_{s\alpha}^a)(\beta_{s\alpha}) \left[ L_{n_{s\alpha}^a}^{(n_{s\alpha}^b - n_{s\alpha}^a)}(Z_{s\alpha} \cos^2(\beta_{s\alpha})) \right]^2, \end{aligned} \quad (25)$$

где  $L$  — присоединенные полиномы Лагерра;  $\beta_{s\alpha}$  — угол между направлением падающего нейтрона и направлением смещения ядра X за счет  $\alpha$ -составляющей  $s$ -го нормального колебания. Для случая ( $n_{s\alpha}^b < n_{s\alpha}^a$ ) получаем аналогичную формулу, потому что матричный элемент не изменяется, если мы меняем местами начальное и конечное состояния. Параметры  $Z_{s\alpha}$  существенно определяют вероятность перехода

$$Z_{s\alpha} = \frac{R}{h\nu_s} \frac{M + m_n}{M_X + m_n} b_{s\alpha}^2, \quad (26)$$

где  $R$  — энергия отдачи молекулы и  $h\nu_s$  — энергия кванта  $s$ -го нормального колебания.

**Сравнение модельных и экспериментальных результатов для  $UF_6$ .** Резонансные сечения для энергии 6,67 эВ в газообразном  $^{238}UF_6$  были рассчитаны при разных температурах по формулам (23) — (26) в [5 и 45].

Молекулы газообразного  $UF_6$  относятся к точечной группе  $O_h$ , у них октаэдрическая структура. Атом урана находится в центре

масс молекулы. Расстояния от атома урана до атомов фтора одинаковы. Углы между линиями связи U — F только 90 или 180°.  $UF_6$  имеет шесть нормальных колебаний. Однако в смещение ядра урана дают вклад только трижды вырожденные нормальные колебания  $\nu_3$  и  $\nu_4$  типа симметрии  $F_{1\mu}$ . Необходимые частоты  $\nu_3$  и  $\nu_4$  приведены

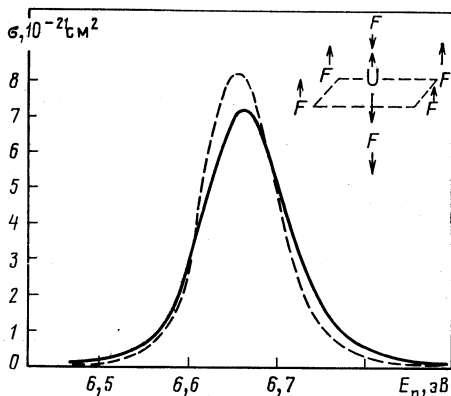


Рис. 11. Сечение резонанса энергии 6,67 эВ в  $UF_6$  при  $T=373$  К с учетом (сплошная кривая) и без учета (пунктирная кривая) внутренних возбуждений молекул [5]

в [47]:  $h\nu_3 = 0,0776$  эВ,  $h\nu_4 = 0,0231$  эВ. Параметры  $b_{s\alpha}$  были вычислены из силовых постоянных [47, 48].

На рис. 11 представлены сечения резонансного поглощения нейтронов для 6,67 эВ резонанса с учетом и без учета внутреннего возбуждения молекул, полученные в [5]. В [45] было измерено отно-

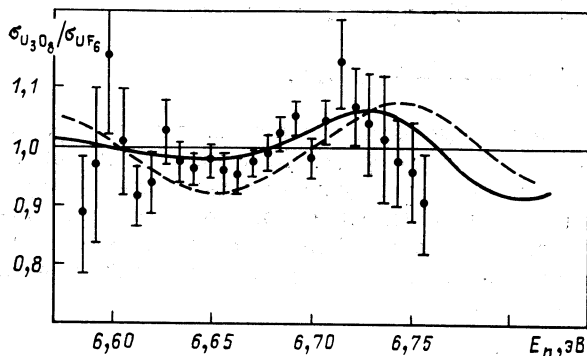


Рис. 12. Отношение сечений резонанса энергии 6,67 эВ для  $^{238}U_3O_8$  и  $^{238}UF_6$  при комнатной температуре:

точки — экспериментальный результат работы [45]; пунктирная кривая — результат расчета [45]; сплошная — результат расчета [5]

шение сечений резонансного поглощения нейтронов для поликристаллического  $U_3O_8$  и газообразного  $UF_6$  при комнатной температуре. Экспериментальный результат представлен на рис. 12 вместе с результатами теоретических расчетов из [5 и 45]. Резонансное сечение для поликристаллического  $U_3O_8$  было описано в обеих работах на основе описанных выше методов с помощью спектра фононов из [32]. При расчете сечения для  $UF_6$  в [45] сделано несколько приближений,

главным образом существенно ограничили число состояний  $n_{s\alpha}$ , пренебрегли переходами, связанными с передачей больше одного фона на одинаковой энергии, и зависимостью параметра  $Z_{s\alpha}$  от энергии. В [5] этих приближений нет, и результат расчета довольно хорошо совпадает с экспериментальными данными. Измеренные в [5] разности спектров пропусканий  $UF_6$  и  $UO_3$  в диапазоне 6,67 эВ резонанса  $^{238}U$  и соответствующий результат расчета показаны на рис. 7.

### 3. ТЕМПЕРАТУРНЫЙ СДВИГ НЕЙТРОННЫХ РЕЗОНАНСОВ

Температурный сдвиг мессбауэровских линий и нейтронных резонансов. Температурный сдвиг мессбауэровских резонансных  $\gamma$ -линий был открыт в 1960 г. [11, 12, 49]. Изменение температуры источника или поглотителя приводит к энергетическому сдвигу резонансной  $\gamma$ -линии без существенного изменения ее формы. Этот сдвиг равен

$$\delta E_\gamma = -\frac{E_\gamma}{Mc^2} \Delta \langle \epsilon_k \rangle, \quad (27)$$

где  $\Delta \langle \epsilon_k \rangle$  — разность средних кинетических энергий атомов, соответствующая разности температур  $\Delta T = T_2 - T_1$  и

$$\langle \epsilon_k \rangle = \frac{3}{4} \int_0^\infty h\nu \rho(h\nu) \operatorname{cth} \left( \frac{h\nu}{2k_B T} \right) d(h\nu);$$

$M$  — масса атомов;  $\rho(h\nu)$  — фоновый спектр кристалла. При высоких температурах выражение (27) приводится к виду

$$\delta E_\gamma \approx -\frac{3}{2} \frac{E_\gamma}{Mc^2} k_B \Delta T.$$

Подобный эффект должен существовать и при захвате нейтронов [15]. В отличие от мессбауэровских  $\gamma$ -линий, форма нейтронного резонанса в кристаллических образцах существенным образом определяется испусканием и поглощением фононов. Повышение температуры приводит к уширению резонанса. Определим понятие «сдвиг» резонанса. В данной работе за положение резонанса принимается положение его центра тяжести:

$$\bar{E}_n = \frac{\int_{E_1}^{E_2} \sigma_R(E_n) E_n dE_n}{\int_{E_1}^{E_2} \sigma_R(E_n) dE_n}, \quad (28)$$

где  $\sigma_R(E_n)$  — резонансная часть полного сечения, и пределы интегрирования  $E_1, E_2$  берутся в тех точках, где сечение  $\sigma_R(E_n)$  с достигнутой экспериментальной точностью можно положить равным



нулю:

$$\sigma_R(E_1) \approx \sigma_R(E_2) \approx 0. \quad (29)$$

Разумеется, при этом необходимо иметь дело только с изолированными резонансами. Температурным сдвигом называется величина

$$\Delta \bar{E}_n = \bar{E}_n(T_2) - \bar{E}_n(T_1). \quad (30)$$

**Описание в модели одноатомного идеального газа.** Рассмотрим самый простой случай идеального газа. Если подставим функцию передачи (11) в выражение (7), а в качестве сечения  $\sigma_0$  неподвижного ядра используем  $\delta$ -функцию (бесконечно узкий резонанс):

$$\sigma_0(E_x) \sim \delta(E_x - E_0),$$

формула (28) приведет к интегралам

$$\int_0^{\infty} dx x^n \exp(-ax^2) \operatorname{sh}(bx);$$

$$a = \frac{A}{k_B T}, \quad b = \frac{2}{k_B T} \sqrt{A(A+1)E_0},$$

где  $A$  — массовое число ядра-мишени и  $n = 2$  или  $n = 0$  [числитель или знаменатель выражения (28)]. В результате интегрирования [50] получаем центр тяжести

$$\bar{E}_{nG} = E_0 + \frac{1}{A} \left[ E_0 + \frac{1}{3} \langle \varepsilon_k \rangle_G \right] + \frac{\tilde{x} \exp(-\tilde{x}^2)}{A \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\tilde{x})} \frac{2}{3} \langle \varepsilon_k \rangle_G,$$

где

$$\operatorname{erf}(\tilde{x}) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\tilde{x}} dt \exp(-t^2);$$

$$\tilde{x} = \left\{ (A+1) \frac{3E_0}{2 \langle \varepsilon_k \rangle_G} \right\}^{1/2};$$

$\langle \varepsilon_k \rangle_G$  средняя кинетическая энергия атома в идеальном газе при температуре  $T$ :

$$\langle \varepsilon_k \rangle_G = \frac{3}{2} k_B T.$$

Любое сечение  $\sigma_0(E_x)$ , которое зависит от волнового числа  $k$  нейтрона, можно представить в виде

$$\sigma_0(E_x) = \sum_i c_i \delta(E_x - E_{0i}).$$

Отсюда нетрудно найти результат

$$\bar{E}_{nG} = \bar{E}_0 + \frac{1}{A} \left[ \bar{E}_0 + \frac{1}{3} \langle \varepsilon_k \rangle_G \right], \quad (31)$$

где  $\bar{E}_0$  — центр тяжести сечения  $\sigma_0(E_x)$  любой формы.

Если воспользоваться вместо (11) функцией передачи Бете (13), получим центр тяжести

$$\bar{E}'_{nG} = \bar{E}_0 + \frac{1}{A} \left[ \bar{E}_0 + \frac{4}{3} \langle \varepsilon_k \rangle_G \right]. \quad (32)$$

Различие между (31) и (32) можно понять, если рассмотреть энергию  $E_t$  по (10). Усредняя (10) по распределению Максвелла, получаем

$$\bar{E}_t = \frac{1}{A+1} E_n - \frac{1}{A+1} \langle \varepsilon_k \rangle_G.$$

В приближении Бете пренебрегается последним членом выражения (10), поэтому

$$\bar{E}'_t = \frac{1}{A+1} E_n \approx \frac{1}{A} E_n.$$

Видно, что приближение Бете переоценивает  $\bar{E}_t$  на величину  $\sim \frac{1}{A} \langle \varepsilon_k \rangle_G$ , и это как раз разность между (31) и (32), т. е. приближение Бете, в котором пренебрегается увеличением массы атома в результате захвата нейтрона, недостаточно для правильного описания температурного сдвига нейтронного резонанса.

**Описание в случае твердотельной мишени.** Для вычисления центра тяжести резонанса в качестве функции передачи воспользуемся выражением Лэмба (14). Но, как показано выше, нельзя пренебречь увеличением массы атома на массу нейтрона при его поглощении. Выражение (14) содержит то же самое приближение, как и формула Бете:  $M + m_n \approx M$  или  $A + 1 \approx A$ . Учитываем увеличение массы изменением энергии, относящейся к движению ядра в кристалле после захвата нейтрона

$$\sum_s h\tilde{\nu}_s \left( n_s + \frac{1}{2} \right) = \tilde{E}_f \quad (|\{n_s\}\rangle = |f\rangle)$$

и до захвата нейтрона

$$\sum_s h\nu_s \left( \alpha_s + \frac{1}{2} \right) = E_j \quad (|\{\alpha_s\}\rangle = |j\rangle).$$

Энергии  $E_j$  и  $\tilde{E}_f$  относятся к разным гамильтонианам  $H$  и  $\tilde{H}$ :

$$H|j\rangle = E_j|j\rangle;$$

$$H(\hat{\mathbf{p}}_A) = \frac{\hat{\mathbf{p}}_A^2}{2m_n A} + V(\mathbf{r});$$

$$\tilde{H}|f\rangle = \tilde{E}_f|f\rangle;$$

$$\tilde{H}(\hat{\mathbf{p}}_A) = \frac{\hat{\mathbf{p}}_A^2}{2m_n(A+1)} + V(\mathbf{r}).$$

Первое слагаемое в гамильтонианах отвечает кинетической энергии, а второе — потенциальной. Отметим, что к гамильтонианам  $H$  и  $\tilde{H}$  относятся разные наборы собственных функций. Что касается описания сечения  $\sigma_0(E_x)$  неподвижного ядра, то воспользуемся формулой Брейта и Вигнера (5) с условием  $\Gamma_n \ll \Gamma$ . Воспользовавшись дальше преобразованием

$$\delta(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp\left(\frac{i}{\hbar} Et\right),$$

соотношением

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_n \mathbf{r}\right) \hat{H}(\hat{\mathbf{p}}_A) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_n \mathbf{r}\right) = \tilde{H}(\hat{\mathbf{p}}_A + \mathbf{p}_n) = \frac{(\hat{\mathbf{p}}_A + \mathbf{p}_n)^2}{2m_n(A+1)} + V(\mathbf{r})$$

и выражениями (5), (9) и (14), сечение (7) можно представить в виде

$$\sigma(E_n) \sim \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_t \Gamma_n(E_0) \Gamma/p_n}{(E_t - E_0)^2 + \Gamma^2/4} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} S(t) \exp\left[\frac{i}{\hbar} (E_n - E_t) t\right], \quad (33)$$

где

$$S(t) = \sum_j W_j \langle j | \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(\hat{\mathbf{p}}_A + \mathbf{p}_n)\right] | j \rangle \exp\left(\frac{i}{\hbar} E_j t\right). \quad (34)$$

Поскольку в интеграл (7) вносят вклад только малые значения  $E_t$  ( $|E_t| \ll E_n$ ), то вместо верхнего предела  $E_n$  в интеграле поставили значение бесконечности. В гармоническом приближении, пользуясь методом вторичного квантования, имеем операторы

$$\hat{\mathbf{p}}_A = \sum_s i \sqrt{\hbar v_s m_n (A+1)/2N} (\hat{a}_s^+ - \hat{a}_s) \mathbf{e}_s,$$

где  $N$  — число атомов кристалла;

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{p}}_A + \mathbf{p}_n) = \sum_s \hbar \tilde{\nu}_s \left[ (\hat{a}_s^+ - i\alpha_s) (\hat{a}_s^+ + i\alpha_s) + \frac{1}{2} \right];$$

$$\alpha_s = (\mathbf{p}_n \mathbf{e}_s) / \sqrt{2m_n(A+1)N\hbar v_s}.$$

Так как колебания различных мод  $s$  независимы между собой, выражение (34) можно представить в виде произведения

$$S(t) = \prod_s S_s(t) = \prod_s \sum_l \langle l | \hat{Q}_s | l \rangle (X_s^l / Z_s) \exp[2\pi i \delta \nu_s t].$$

Здесь введены обозначения

$$|l\rangle_{(s)} = \frac{(\hat{a}_s^+)^l}{\sqrt{l!}} |0\rangle_{(s)}, \quad \hat{Q}_s = \exp[-2\pi i \tilde{\nu}_s t] (\hat{a}_s^+ - i\alpha_s) (\hat{a}_s^+ + i\alpha_s);$$

$$X_s = \exp\left(-\frac{\hbar \nu_s}{k_B T} + 2\pi i \nu_s t\right); \quad Z_s = \sum_l \exp\left(-l \frac{\hbar \nu_s}{k_B T}\right) =$$

$$= \frac{1}{1 - \exp\left(-\frac{\hbar \nu_s}{k_B T}\right)};$$

$$\delta \nu_s = \nu_s - \tilde{\nu}_s.$$

Для вычисления функции  $S(t)$  воспользуемся методом Березина [51]. Величину  $\delta \nu_s$  в первом приближении можно представить выражением

$$\delta \nu_s = \frac{\nu_s}{2AN}.$$

После интегрирования (33) по  $E_t$  и  $t$  сечение  $\sigma(E_n)$  принимает вид

$$\sigma(E_n) \sim \frac{1}{\sqrt{E_n}} \left[ 1 + 3 \frac{\langle \epsilon_{k1} \rangle}{A} \frac{d}{dE_n} + \right.$$

$$\left. + 2 \frac{\langle \epsilon_{k1||} \rangle}{A} \frac{d^2}{dE_n^2} \right] \frac{\Gamma_n(E_0) \Gamma}{(E_n - \tilde{E}_0)^2 + \Gamma^2/4};$$

$$\tilde{E}_0 = E_0 A / (A + 1),$$

где  $\langle \epsilon_{k1} \rangle$  — средняя кинетическая энергия на степень свободы:

$$\langle \epsilon_{k1} \rangle = \frac{1}{3} \langle \epsilon_k \rangle,$$

а  $\langle \epsilon_{k1||} \rangle$  — кинетическая энергия, которая соответствует только координате  $x_1$ , относящейся к направлению движения нейтрона  $\mathbf{p}_n = p_n \cdot \mathbf{e}_{x_1}$ . Отсюда нетрудно найти положение центра тяжести резонанса по формуле (28):

$$\bar{E}_n = \sqrt{\tilde{E}_0^2 + (\Gamma/2)^2} - \frac{3}{2A} (\langle \epsilon_{k1} \rangle - \langle \epsilon_{k1||} \rangle) -$$

$$- \frac{1}{2A} (3 \langle \epsilon_{k1} \rangle - \langle \epsilon_{k1||} \rangle) \cos\left(\frac{3\phi}{2}\right) \cos\left(\frac{\phi}{2}\right);$$

$$\phi = \arctg(\Gamma/\tilde{E}_0).$$

Для кубического кристалла можно положить  $\langle \epsilon_{k1||} \rangle = \langle \epsilon_k \rangle$ , тогда при  $\phi \ll 1$  имеем

$$\bar{E}_n = \sqrt{\tilde{E}_0^2 + (\Gamma/2)^2} - \langle \epsilon_k \rangle / 3A,$$

и, следовательно, температурный сдвиг в кристаллах

$$\Delta \bar{E}_{nK} = -\frac{1}{3A} \Delta \langle \epsilon_R \rangle_K. \quad (35)$$

При высоких температурах имеем  $\langle \epsilon_R \rangle_K \approx \langle \epsilon_R \rangle_G = \frac{3}{2} k_B T$ . Результат (35) можно использовать и как приближение для любого поликристаллического твердого тела.

Если пренебречь увеличением массы атома при поглощении нейтрона, т. е. имеем  $\tilde{H} = H$ , получим результат, который отличается на слагаемое  $(1/A) \Delta \langle \epsilon_R \rangle_K$  от выражения (35), в полной аналогии с результатами для газа. Если в качестве волнового числа нейтрона вместо  $k_K$  (9) использовать  $k_G$  (8), то для температурного сдвига получится выражение  $\Delta \bar{E}'_n = \frac{1}{3A} \Delta \langle \epsilon_R \rangle_K$ , т. е. знак изменится. Отсюда видно, что эти тонкости, практически незаметные при доплеровских уширениях резонансов, играют важную роль при температурном сдвиге.

**Экспериментальное наблюдение сдвига центра тяжести нейтронных резонансов.** Впервые температурные сдвиги центра тяжести нейтронных резонансов наблюдались в [10]. В этой работе измерены пропускания образцов  $Du$ ,  $Rh$  и  $Ag$  при различных температурах в области низкоэнергетических резонансов. Экспериментальная установка описана в разд. 1. При измерении пропускания нейтронов два одинаковых образца при различных температурах  $T_1$  и  $T_2$  вводились поочередно в пучок на 10 мин. Через каждые 12 ч температура образцов менялась на  $T_2$  и  $T_1$  соответственно. Энергетический ход спектра падающего пучка и фона измерялся в дополнительных экспериментах.

Температурные сдвиги  $\Delta \bar{E}_n$  определялись двумя методами. В первом методе определяется разность измеренных резонансных сечений  $\Delta \sigma_R(E_n) = \sigma_R(T_2, E_n) - \sigma_R(T_1, E_n)$ . При правильном определении этой разности должно выполняться условие

$$\int_{E_1}^{E_2} \Delta \sigma_R(E_n) dE_n = 0,$$

если  $E_1$  и  $E_2$  выбраны в соответствии с условием (29). Практически, однако, условие (29) строго не выполняется, и приходится вводить в связи с этим небольшие поправки. Погрешность полученного сдвига определяется погрешностями при определении фона, функции разрешения и спектра падающего пучка. Суть второго метода состоит в сравнении экспериментальных спектров с теоретическими расчетами. Сечения  $\sigma_R(T_2, E_n)$  и  $\sigma_R(T_1, E_n)$  были рассчитаны на основе методов, описанных в разд. 2. В качестве фоновый спектра принималась модель Эйнштейна (20), причем  $h\nu$  выбиралась таким образом, чтобы правильно описывался температурный ход теплоемкости. Кро-

ме того, при одной из температур вводится дополнительный энергетический сдвиг  $\Delta$ , который служит подгоночным параметром:

$$\sigma'_R(T_2, E_n) = \sigma_R(T_2, E_n - \Delta).$$

Далее рассчитываются теоретические спектры пропускания  $N_{th}(T, t)$  и подгонкой разностного теоретического спектра  $\Delta N_{th}(t) = N_{th}(T_2, t) - N_{th}(T_1, t)$  к разностному экспериментальному спектру  $\Delta N_{exp}(t)$  находят параметр  $\Delta$ , после чего по формулам

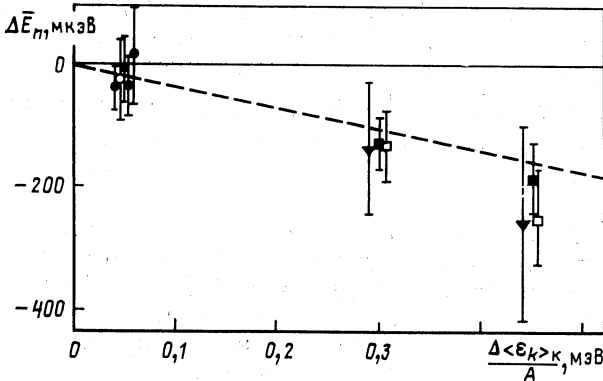


Рис. 13. Зависимость температурных сдвигов резонансов от  $\Delta \langle \epsilon_R \rangle \kappa / A$  [10]:  $\square, \blacksquare$  — для  $^{108}\text{Rh}$  (1,26 эВ);  $\blacktriangledown$  — для  $^{109}\text{Ag}$  (5,19 эВ);  $\circ, \bullet$  — для  $\text{Dy}$  ( $^{161}\text{Dy}$  1,71 эВ,  $^{162}\text{Dy}$  2,72, 3,68, 4,34 эВ); темные символы соответствуют сдвигам, полученным первым методом, а светлые — вторым методом; штрихованная кривая — формула (35)

(28) и (30) получают температурный сдвиг. Второй метод хорош тем, что при его использовании погрешности, связанные с измерением спектра падающего пучка и фона, сказываются на результатах меньше, чем в первом методе. Основные погрешности здесь связаны с выбором резонансных параметров и фоновый спектр. В этом смысле оба метода независимы.

Результаты эксперимента представлены на рис. 13. В случае  $^{108}\text{Ag}$  и  $^{161}\text{Dy}$  первый метод не дал результатов из-за трудностей определения сечения вдали от максимума резонанса или из-за перекрытия резонансов. В остальных случаях результаты, полученные разными методами, хорошо согласуются между собой. Измеренные для поликристаллических образцов сдвиги отрицательны, т. е. при повышении температуры центр тяжести смещается в сторону более низких энергий. Результаты эксперимента удовлетворительно согласуются с теоретической оценкой (35). В пределах погрешностей эксперимента никаких дополнительных зависимостей от параметров резонанса, энергии отдачи или фоновый спектр, которые могли бы имитировать температурный сдвиг, не имеется.

#### 4. ВЛИЯНИЕ СВЕРХТОНКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА НЕЙТРОННЫЕ РЕЗОНАНСЫ

**Химический сдвиг нейтронных резонансов.** Взаимодействие атомного ядра с электронами приводит к зависимости наблюдаемых энергетических уровней ядра и электронной оболочки как от электрических и магнитных моментов ядра, так и от конфигурации электронной оболочки. Это сверхтонкое взаимодействие проявляется при любых квантовых переходах в ядре и в оболочке в виде известных явлений, например изотопического и изомерного сдвигов, мультипольных расщеплений и т. д. Эти явления наблюдаются при спектроскопии оболочки в оптическом и рентгеновском диапазонах, при мессбауэровской спектроскопии и при спектроскопии мюонных атомов. В принципе, они возникают также при возбуждении компаунд-состояний ядра нейтронами и вызывают смещения и уширения нейтронных резонансов.

Впервые на возможность измерений таких эффектов (для определения электромагнитных моментов компаунд-ядер) указал Ф. Л. Шаширо [52] в 1967 г. В работе В. К. Игнатовича и др. [15] было указано на существование химического сдвига нейтронных резонансов как аналога мессбауэровского изомерного сдвига и на возможность использования его для определения среднеквадратичных радиусов ядра в изолированных компаунд-состояниях.

Для вычисления эффектов сверхтонкого взаимодействия в нейтронных резонансах рассмотрим отдельно его электрическую и магнитную компоненты:

$$E_{nt} = E_{ef} + E_{mg}.$$

Обсудим сначала электрический вклад. Будем исходить из кулоновского взаимодействия

$$E_C = \sum_{r_e, r_p} \left\langle \psi_k \varphi_e \left| \frac{-e^2/4\pi\epsilon_0}{|r_e - r_p|} \right| \psi_k \varphi_e \right\rangle, \quad (36)$$

где  $\psi_k$  и  $\varphi_e$  — волновые функции ядра и электронов, суммирование проводится по всем координатам электронов  $r_e$  и протонов  $r_p$ . Разложив  $\frac{1}{|r_e - r_p|}$  из (36) по сферическим гармоникам, получаем  $E_C$  в виде суммы с возрастающими порядками мультиполей. Далее мы выпишем только монополярный член:

$$E_C = \sum_{r_e, r_p} \left\langle \psi_k \varphi_e \left| \frac{-e^2/4\pi\epsilon_0}{r_e} \right| \psi_k \varphi_e \right\rangle + \sum_{r_e, r_p} \psi_k \left| -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{r_e \leq r_p} \left( \frac{1}{r_p} - \frac{1}{r_e} \right) \varphi_e \varphi_e^* d\tau_e \right| \psi_k \right\rangle + \dots \quad (37)$$

Первая сумма в выражении (37) представляет собой кулоновскую энергию между точечным ядром и электронами оболочки (не вносящую вклад в сверхтонкое взаимодействие), а вторая сумма представляет собой отклонение от этой энергии, вызванное конечным размером атомного ядра. Следующий исчезающий член разложения (37)

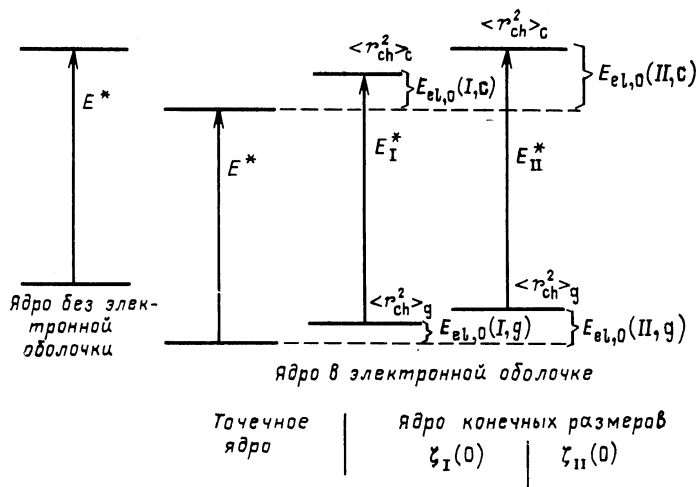


Рис. 14. Влияние электрического взаимодействия ядра с электронной оболочкой на энергии основного и возбужденного состояний

описывает квадрупольное взаимодействие, о чем говорится ниже. Остальные члены с большим порядком мультиполей пренебрежимо малы или равны нулю.

Для дальнейшего упрощения выражения (37) рассмотрим плотность электронов в пределах ядра. В нерелятивистском случае, т. е. для более легких атомов, она складывается только из  $s$ -электронов. Для тяжелых атомов, где движение электронов имеет релятивистский характер,  $p_{1/2}$ -электроны тоже дают маленький вклад. Их плотность в первом приближении постоянна в пределах ядра. Тогда вторую сумму в (37) можно привести к виду

$$E_{el, 0} = \frac{e^2 Z}{6\epsilon_0} \rho_e(0) \langle r_{ch}^2 \rangle, \quad (38)$$

где  $\rho_e(0)$  — плотность электронов на месте ядра;  $Z$  — зарядовое число ядра и  $\langle r_{ch}^2 \rangle$  — среднеквадратичный зарядовый радиус атомного ядра. На рис. 14 схематически проиллюстрированы сдвиги  $E_{el,0}$ , вызванные конечными размерами ядра, для основного и возбужденного уровней. Эти сдвиги составляют примерно 350 эВ для тяжелого ядра, например урана. Для двух образцов, состоящих из различных химических соединений (I и II) с разными плотностями электронов  $\rho_I(0)$  и  $\rho_{II}(0)$ , положения  $E_0$  нейтронного резонанса раз-



личаются на

$$\Delta E_0 = [E_{el,0}(I, c) - E_{el,0}(I, g) - E_{el,0}(II, c) - E_{el,0}(II, g)].$$

Подставляя в эту формулу  $E_{el,0}$  по (38), получаем

$$\Delta E_0 = \frac{e^2 Z}{6\epsilon_0} (\rho_I(0) - \rho_{II}(0)) (\langle r_{ch}^2 \rangle_c - \langle r_{ch}^2 \rangle_g). \quad (39)$$

Для вывода (39) было предположено, что изменения  $\rho_I(0)$  и  $\rho_{II}(0)$ , вызванные возбуждением ядра, взаимно компенсируются. Проведенными оценками это предположение подтверждается.

**О порядке величин химических сдвигов.** Рассмотрим теперь величину химических сдвигов. На рис. 15 представлены оценки раз-

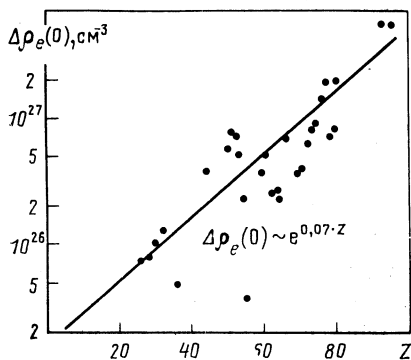


Рис. 15. Максимальные разности плотностей электронов  $\Delta\rho_e(0)$  между различными химическими соединениями в зависимости от порядкового номера  $Z$  по данным [53]

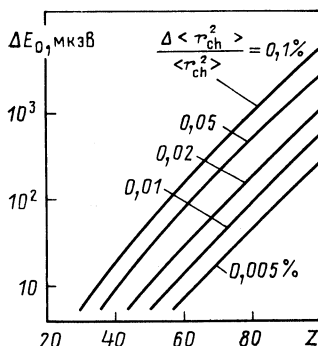


Рис. 16. Зависимость химического сдвига  $\Delta E_0$  от порядкового номера  $Z$  при изменении  $\Delta \langle r_{ch}^2 \rangle$

ностей плотностей электронов  $\Delta\rho_e(0)$  для различных пар химических соединений в зависимости от  $Z$ . Данные рассчитаны по методу Хартри — Фока — Слейтера в [53] для свободных ионов. Разность  $\Delta\rho_e(0)$  вызывается делокализацией  $s$ - и  $p_{1/2}$ -электронов, если они участвуют в химической связи и, косвенным образом, остальными  $p$ -,  $d$ -электронами и т. д. вследствие экранирования внешних  $s$ - и  $p_{1/2}$ -электронов. Видно сильное увеличение  $\Delta\rho_e(0)$  с порядковым номером  $Z$  элемента. Исходя из указанных расчетов [53], получаем

$$\Delta\rho_e(0) \approx 6,7 \cdot 10^{24} \cdot e^{0,07Z} \text{ см}^{-3}. \quad (40)$$

Изменение среднеквадратичного радиуса ядра обусловлено, во-первых, изотопным эффектом между ядром-мишенью и основным состоянием составного ядра и, во-вторых, изменением  $\langle r_{ch}^2 \rangle$  за счет возбуждения ядра. Принимая изменение  $r_{ch}^2$  в диапазоне от доли процента до нескольких процентов [54, 55] и используя (40), получаем оценку химических сдвигов, данных на рис. 16. Для тяжелых ядер

сдвиги могут быть больше  $10^2$  мкэВ, в то время как для более легких ядер они сильно уменьшаются.

**Определение химических сдвигов.** Несмотря на малый химический сдвиг по сравнению с шириной нейтронных резонансов ( $\Gamma \approx 100$  мэВ) и дополнительные трудности, связанные с влиянием доплеровского уширения нейтронных резонансов, в последние годы были выполнены измерения для нескольких резонансов изотопов урана [3, 4, 9]. Эксперименты проводились на импульсном реакторе ИБР-30 по принципу, описанному в первом разделе. Измерялось пропускание нейтронов через мишени из различных химических соединений урана при одинаковой температуре образцов. В противоположность этому температурные сдвиги были изучены с образцами одного и того же вещества, но при разных температурах. Как в первом, так и во втором случае разность кинетических энергий атомов

$$\Delta\langle\varepsilon\rangle = \langle\varepsilon(T)\rangle_I - \langle\varepsilon(T)\rangle_{II}$$

обоих сравниваемых образцов (I и II) вызывает сдвиг резонансов [см. (35)]

$$\Delta\bar{E}_n = -\frac{1}{3A} [\langle\varepsilon(T)\rangle_I - \langle\varepsilon(T)\rangle_{II}].$$

Этот сдвиг, возникающий дополнительно к химическому сдвигу, в первом случае пренебрежимо мал. Для всех исследованных образцов он меньше 4 мкэВ. Химические сдвиги были определены прямо из экспериментальных спектров пропускания  $N_I(t)$  и  $N_{II}(t)$  по методу, описанному в разд. 3; спектры сравнивались в диапазоне резонанса методом наименьших квадратов при варьировании  $N_{II}(t)$  относительно  $N_I(t)$  параметром  $\Delta t(N_{II}(t) \rightarrow N'_{II}(t + \Delta t))$ . Доплеровское уширение и некоторые другие факторы, воздействующие на пропускание, определялись расчетами спектров, имеющих такие же формы, как  $N_I(t)$  и  $N_{II}(t)$ , но без химического сдвига.

На рис. 17 приведены химические сдвиги для 6,67 эВ резонанса  $^{238}\text{U}$  в зависимости от  $\Delta\rho_e(0)$ . В табл. 3 даны значения  $\Delta\langle r_{ch}^2 \rangle$  всех исследованных резонансов, найденные при измерениях химических

Т а б л и ц а 3. Изменения среднеквадратичных радиусов ядер, определенные по измеренным химическим сдвигам резонансов в [3, 9]

Ядро-мишень	Резонанс $E_0$ , эВ	$\Delta\langle r_{ch}^2 \rangle$ , фм <sup>2</sup>	Ядро-мишень	Резонанс $E_0$ , эВ	$\Delta\langle r_{ch}^2 \rangle$ , фм <sup>2</sup>
$^{234}\text{U}$	5,16	$-0,41 \pm 0,25$	$^{235}\text{U}$	4,85	$-0,52 \pm 0,25$
$^{235}\text{U}$	1,14	$+0,01 \pm 0,22$	$^{235}\text{U}$	8,77	$+0,09 \pm 0,26$
$^{235}\text{U}$	2,03	$-0,13 \pm 0,21$	$^{235}\text{U}$	11,67	$-0,24 \pm 0,29$
$^{235}\text{U}$	3,15	$+0,20 \pm 0,48$	$^{235}\text{U}$	12,39	$+0,25 \pm 0,31$
$^{235}\text{U}$	3,61	$+0,02 \pm 0,25$	$^{238}\text{U}$	6,67	$-1,7 \pm 0,5$

сдвигов нейтронных резонансов. Значения  $\Delta\rho_e(0)$  были получены в рамках модели эффективных конфигураций валентных электронов

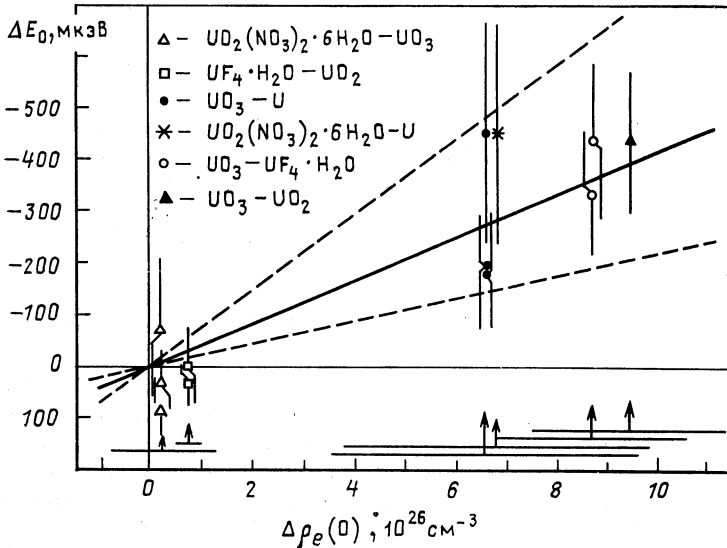


Рис. 17. Зависимость химического сдвига  $\Delta E_0$  от разности плотностей электронов  $\Delta\rho_e(0)$  указанных пар химических соединений, измеренная для резонанса 6,67 эВ  $^{238}\text{U}$  [3]

с использованием экспериментальных данных по химическим сдвигам рентгеновских линий урана и изомерному сдвигу мессбауэровской линии соседнего нуклида  $^{237}\text{Np}$ .

**О влиянии дипольного и квадрупольного взаимодействий.** Если атомное ядро имеет спин  $I > 0$ , то кроме электрического монополярного взаимодействия появляются вклады сверхтонкого взаимодействия более высшего порядка до  $l = 2I$ . Конечно, другие вклады, кроме магнитного дипольного и электрического квадрупольного взаимодействий, не играют роли вследствие их малости. Дипольное и квадрупольное взаимодействия вызывают расщепления ядерных уровней. Влияние этих расщеплений на нейтронное резонансное сечение обсуждается в этом разделе отдельно для чистого дипольного и чистого квадрупольного взаимодействий.

Магнитное дипольное взаимодействие атомного ядра, имеющего спин  $I$  и дипольный момент  $\mu$  с магнитным полем напряженности  $H$ , существующим на месте ядра, вызывает зеемановское расщепление каждого энергетического уровня на  $2I + 1$  равноотстоящих подуровней. Для расщепления имеем

$$E_{mg} = -\frac{\mu}{I} mH,$$

где  $m$  — проекция спина на направление магнитного поля,  $m = I, I - 1, \dots, -I$ . Внутриатомное магнитное поле возникает вследствие некомпенсированных электронов атомной оболочки и от их взаимодействий. Оно достигает в переходных элементах (железная группа, лантаноиды и актиноиды) напряженности от  $10^5$  до  $10^7$  Э [56]. Для  $H = 10^6$  Э и  $\mu = 1$  расстояние между наивысшим и наинизшим подуровнями составляет около 5 мкэВ.

Так как и основное состояние ядра-мишени и компаунд-состояние подлежат зеемановскому расщеплению, резонансное сечение соответственно складывается из сечений для переходов между отдельными подуровнями  $m_I$  и  $m_J$  основного и компаундного состояний с энергиями, отличающимися на  $\Delta E_{mg}(m_I, m_J)$ . Для полного сечения получаем

$$\sigma_0(E_x) = \sum_{m_I, m_J} \sigma_0(E_x, E_0 + \Delta E_{mg}(m_I, m_J)) W(m_I, m_J), \quad (41)$$

где  $W(m_I, m_J)$  — вероятность перехода между состояниями  $m_I$  и  $m_J$ . Если температура образца не очень низка (выше милликельвина), то заселенности отдельных зеемановских состояний равновероятны и, следовательно,  $\langle m_I \rangle = 0$ . Кроме того, в случае неполяризованных нейтронов имеем  $\langle m_J \rangle = 0$ . Поэтому для неполяризованных ядер и нейтронов принципиально не может возникать смещение центра нейтронного резонанса. Возникает, однако, уширение нейтронного резонанса. Порядок его можно оценить выражением  $\mu H/I$ , изменяющимся от нескольких микроэлектрон-вольт до нескольких десятков микроэлектрон-вольт. Экспериментальное исследование уширения нейтронного резонанса с величинами такого порядка на нынешнем уровне экспериментальных возможностей вряд ли будет успешным. Измеримым оказался тем не менее малый энергетический сдвиг нейтронных резонансов, вызванный дипольным взаимодействием в случае поляризованных ядер или нейтронов [18].

Энергию взаимодействия спектроскопического квадрупольного момента  $Q_I$  атомного ядра с градиентом электрического поля в самом простом случае аксиально-симметричного градиента  $V_z$  можно записать в виде

$$E_{e1,2} = \frac{3eV_z Q_I}{4I(2I-1)} \left( m_I^2 - \frac{I(I+1)}{3} \right), \quad (42)$$

где  $I$  — спин ядра и  $m_I$  — его проекция на направление градиента,  $m_I = I, I - 1, \dots, -I$ . В общем случае выражение (42), конечно, сложнее, однако его достаточно для обсуждения главных эффектов.

Резонансное сечение  $\sigma_0(E_x)$  складывается из сечений для отдельных переходов, как в случае дипольного взаимодействия. Надо лишь заменить в (41)  $\Delta E_{mg}(m_I, m_J)$  разностями энергий  $\Delta E_{e1,2}(m_I, m_J)$ , соответствующими квадрупольным подуровням. Из (42) видно, что расщепление уровней дает неравноотстоящие подуровни. Из этого следует, что даже для неориентированных ядер и неполяризованных

нейтронов может появляться маленький сдвиг центра тяжести резонанса порядка 1 мкэВ или меньше. Кроме того, возникает уширение резонанса, порядок которого можно оценить выражением  $eV_2 Q_1 / I$ . Уширение составляет максимально несколько десятков микроэлектрон-вольт. Если бы удалось измерить столь маленькие сдвиги нейтронных резонансов со значениями около 1 мкэВ, как было упомянуто в [52], то стало бы возможным определить также и квадрупольные моменты ядер в возбужденных компаунд-состояниях. Несомненно, это было бы интересно, особенно для делящихся ядер.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследование нейтронных резонансов проводится уже с первых лет развития ядерной физики, поэтому оно причисляется к традиционным, классическим областям ядерной физики. Тем не менее вследствие непрерывного совершенствования методов нейтронной спектроскопии и сегодня открывают новые явления в этой области. На основе исследований с помощью нейтронов удалось в последние годы глубже проникнуть в область физики, занимающейся свойствами самих атомных ядер, а также их взаимодействием с окружающей средой.

В результате наблюдения эффектов сверхтонких взаимодействий в нейтронных резонансах возникло новое направление изучения компаунд-состояний ядер, образующихся при захвате резонансных нейтронов. Дополнительно к уже хорошо изученным характеристикам этих состояний ядер, таким как энергия, спин, четность и ширина, около десяти лет тому назад стало возможным изучить магнитные моменты ядер. В последние годы впервые удалось измерить среднеквадратичные радиусы ядер в компаунд-состояниях. На основе этих данных заметно расширились сведения о структуре высоковозбужденных состояний ядер. В случае самых тяжелых ядер эти состояния являются делительными, с довольно большими флуктуациями вероятности деления от резонанса к резонансу. Естественно, что поиск корреляций между среднеквадратичными радиусами резонансных состояний и их вероятностями деления представляется интересным объектом исследований.

Детальное изучение структуры нейтронного резонанса выявило связи между ядрами-мишенями и окружающей их средой. Экспериментально наблюдалось, например, влияние колебаний различных решеток на доплеровское уширение нейтронных резонансов и температурный сдвиг нейтронных резонансов. Оказалось, что эффекты такого типа имеют значение также и для прикладных целей. Так, например, учет влияния связей в твердом теле необходим для точного определения ядерных констант для расчета ядерных реакторов.

Исследования указывают на то, что в пограничной области ядерно-физических и твердотельных явлений содержится еще много новых эффектов. Повышение мощности источников нейтронов будет способствовать дальнейшим исследованиям в этой области.

Авторы выражают глубокую благодарность Л. Б. Пикельнеру за чтение и полезные обсуждения рукописи, а также В. К. Игнатовичу за плодотворные дискуссии.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bethe H. A., Bacher R. F. // *Rev. Mod. Phys.* 1936. Vol. 8. P. 82—230; Bethe H. A., Placzek G. // *Phys. Rev.* 1937. Vol. 51. P. 450—484; Bethe H. A. // *Rev. Mod. Phys.* 1937. Vol. 9. P. 69—244.
2. Lamb W. E. // *Phys. Rev.* 1939. Vol. 55. P. 190—197.
3. Аюпян Г. Г., Вагов В. А., Зайдель К. и др. Сообщение ОИЯИ РЗ-11740, Дубна, 1978; Зайдель К., Майстер А., Пабст Д., Пикельнер Л. Б. Сообщения ОИЯИ РЗ-11741, Дубна, 1978; РЗ-11742, Дубна, 1978; РЗ-80-135, Дубна, 1980; Meister A., Pabst D., Pikelner L. B., Seidel K. // *Nucl. Phys.* 1981. Vol. A362. P. 18—44.
4. Зайдель К., Майстер А., Пабст Д., Пикельнер Л. Б. // *Докл. АН СССР* 1981. Т. 256. С. 360—363.
5. Зайдель К., Майстер А., Пабст Д. и др. // *ЯФ.* 1981. Т. 34. С. 1173—1180; Препринт ОИЯИ РЗ-81-89, Дубна, 1981.
6. Meister A., Pabst D., Pikelner L. B. e.a. // *Proc. IAEA Consultants Meeting on Uranium and Plutonium Isotope Resonance Parameters, Vienna, 1981.* INDC(NDS)-129/GS. P. 265; Preprint TU Dresden 05-17-81, 1981.
7. Meister A., Mittag S., Pabst D. e.a. // *Proc. Intern. Conf. Nuclear Data for Science and Technology, Antwerp, 1982.* P. 968—970; Preprint TU Dresden 05-27-82, 1982.
8. Зайдель К., Зайферт А., Зелигер Д. и др. // *Материалы 6-й Конф. по нейтронной физике.* Киев, 1983. Т. 2. С. 379—383.
9. Mittag S., Pabst D., Pikelner L. B. e.a. // *Nucl. Phys.* 1985. Vol. A435. P. 97—109; Препринт ОИЯИ РЗ-83-820, Дубна, 1983.
10. Зайдель К., Зелигер Д., Игнатович В. К. и др. // *ЯФ.* 1985. Т. 42. С. 1041—1049; Препринт ОИЯИ РЗ-85-17, Дубна, 1985.
11. Pound R. V., Rebka G. A. // *Phys. Rev. Lett.* 1960. Vol. 4. P. 337—341.
12. Josephson B. D. // *Phys. Rev. Lett.* 1960. Vol. 4. P. 341—344.
13. Alfimenkov V. P., Lason L., Mareev Yu. D. e.a. // *Nucl. Phys.* 1976. Vol. A267. P. 172—180.
14. Beckurts K. H., Brunhart G. // *Phys. Rev.* 1970. Vol. C1. P. 726—734.
15. Игнатович В. К., Останевич Ю. М., Чер Л. Сообщение ОИЯИ Р4-7296, Дубна, 1973.
16. Wertheim G. K. *Mössbauer Effekt: Principles and Applications.* N.Y.: Acad. Press, 1964.
17. Shenoy G. K., Wagner F. E. eds. *Mössbauer Isomer Shifts,* Amsterdam, North-Holland, 1978.
18. Алфименков В. П., Пикельнер Л. Б., Шарапов Э. И. // *ЭЧАЯ.* 1980. Т. 11. С. 411—453.
19. Франк И. М. // *ЭЧАЯ,* 1972. Т. 2. С. 805—860; Голиков В. В., Козлов Ж. А., Кулькин Л. К. и др. Сообщение ОИЯИ 3-5736, 1971.
20. Шабалин Е. П. // *АЭ.* 1982. Т. 52. С. 92—100.
21. Breit G., Wigner E. // *Phys. Rev.* 1936. Vol. 49. P. 519—531; Harvey J. A., Hughes D. J. e.a. // *Phys. Rev.* 1955. Vol. 99. P. 10—33.
22. Takano H., Ishiguro Y. // *J. Nucl. Sci. and Technology,* 1977. Vol. 14. P. 627.
23. Shore F. J., Sailor V. L. // *Phys. Rev.* 1958. Vol. 112. P. 191—202.
24. Reich C. W., Moore M. S. // *Phys. Rev.* 1958. Vol. 111. P. 929—933.
25. Vogt E. // *Phys. Rev.* 1958. Vol. 112. P. 203—214.
26. Adler D. B., Adler F. T. // *Trans. Amer. Nucl. Soc.* 1962. Vol. 5. P. 53.
27. Harvey J. A. *Experimental Neutron Resonance Spectroscopy,* Oak Ridge, Tennessee, N.Y., London, 1970. P. 379.

28. Solbrig Jr. A. W. // Amer. J. Phys. 1961. Vol. 29. P. 257—264; Nucl. Sci. Eng. 1961. Vol. 10. P. 167—168.
29. Born M. Optik, Berlin, 1933.
30. Visscher W. M. // Ann. Phys (N.Y.). 1960. Vol. 9. P. 194—210.
31. Nelkin M. S., Parks D. E. // Phys. Rev. 1960. Vol. 119. P. 1060—1068.
32. Jackson H. E., Lynn J. E. // Phys. Rev. 1962. Vol. 127. P. 461—486.
33. Egelstaff P. A., Schofield P. // Nucl. Sci. Eng. 1962. Vol. 12. P. 260—270.
34. Young J. A. // Nukleonik. 1969. Vol. 12. P. 205—208.
35. Borgonovi G. M., Houston D. H. e.a. // Phys. Rev. 1970. Vol. C1. P. 2054—2059.
36. Lajeunesse C., Moore W. E., Yeater M. L. // Nucl. Sci. Eng. 1972. Vol. 47. P. 349—364.
37. Butland A. T. D. // Ann. Nucl. Sci. Eng. 1974. Vol. 1. P. 575.
38. Lynn J. R., Rae E. R. // J. Nucl. Energy. 1957. Vol. 4. P. 418—444.
39. Mössbauer R. L. // Z. Physik. 1958. Vol. 151. P. 124—143.
40. Rowlands J. L. // Proc. IAEA Consultants Meeting on Uranium and Plutonium Isotope Resonance Parameters, Vienna, 1981, INDC(NDS)-129/GS. P. 8.
41. Seeliger D., Seidel K., Hermsdorf D. e.a. // Forschungsbericht, TU Dresden, 1984.
42. Летохов В. С., Миногин В. Г. // ЖЭТФ, 1975. Т. 69. С. 1569—1581.
43. Летохов В. С., Миногин В. Г. // ЖЭТФ, 1976. Т. 70. С. 794—804.
44. Letokhov V. S. // Phys. Rev. 1975. Vol. A12. P. 1954—1965.
45. Bowman C. D., Schrack R. A. // Phys. Rev. 1980. Vol. C21. P. 58—64.
46. Сибин С. Колебания молекул и среднеквадратичные амплитуды: Пер. с англ. М.: Мир, 1971.
47. Белянин В. С. Теплофизические константы гексафторидов урана и вольфрама. М.: Изд-во АН СССР, 1976.
48. Meisingseth E., Brunvoll J., Cyvin S. J. Det. KGL Norske Videnskabers Selskabs Skrifter. 1964. Vol. 7. P. 96.
49. Boyle A. J. F., Bunbury D. S. P. e.a. // Proc. Phys. Soc. (Lond.). 1960. Vol. 76. P. 165—167.
50. Прудников А. П., Брычков Ю. А., Маричев О. И. Интегралы и ряды. М.: Наука, 1981.
51. Березин Ф. А. Метод вторичного квантования. М.: Наука, 1965.
52. Shapiro F. L. Research Applications of Nuclear Pulsed Systems. Vienna, 1967. P. 176.
53. Band I. M., Fomichev V. I. // Atom. Data Nucl. Data Tables. 1979. Vol. 23. P. 295—314.
54. Heilig K., Steudel A. // Atom. Data Nucl. Data Tables. 1974. Vol. 14. P. 613—638.
55. Бунатян Г. Г. // ЯФ. 1979. Т. 29. С. 10—21; ЯФ. 1982. Т. 35. С. 16—26.
56. Таблицы физических величин. Справочник/Под ред. И. К. Кикоина. М.: Атомиздат, 1976.