

УДК 539.125.5

ОСОБЛИВОСТІ ОБРОБКИ РЕЗУЛЬТАТІВ ВИМІРІВ КУТОВИХ РОЗПОДІЛІВ РОЗСІЯННЯ НА ФІЛЬТРОВАНИХ НЕЙТРОННИХ ПУЧКАХ

В.А. Пшеничний (ДНІЦ СКАР, м. Київ)

В роботі узагальнені підходи в дослідженні та обробці результатів куткових вимірів розсіяних нейтронів з метою визначення вкладів різних орбітальних моментів в переріз розсіяння.

ВСТУП

На Київському дослідницькому атомному реакторі ВВР-М налаштовані нейтронні фільтри в діапазоні енергій від 2 кеВ до 144 кеВ. Останнім часом створено дві установки для вивчення куткових розподілів розсіяних нейтронів, на яких будуть використовуватися квазімонохроматичні нейтрони вказаного діапазону [1].

Виникла нагальна потреба осмислити та узагальнити підходи математичної моделі в обробці результатів вимірів куткових розподілів розсіяння нейтронів та трактування отриманих результатів. Такий напрямок роботи потрібен для відпрацювання раціональної методики вимірів на атомному реакторі з фільтрованими нейтронними пучками.

ЗАГАЛЬНІ ПОЛОЖЕННЯ

Пропозиція щодо використання інтерференційних мінімумів між потенційним та резонансним розсіяннями в повному перерізі взаємодії нейтронів з ядрами для формування квазімонохроматичних пучків нейтронів виникла на початку 60-х років минулого століття [2]. Незабаром вже були апробовані фільтри зі Sc, Fe, Si, які дали можливість сформувати нейтронні пучки з енергіями 2, 25, 53, 144 кеВ. Різноманітні за енергіями та достатньої інтенсивності пучки для вимірювання перерізів розсіяння почали інтенсивно використовуватись в середині 70-х років як в Україні [3, 4], так і в США [5]. Ці роботи дали початковий досвід в постановці експерименту та обробці результатів вимірів куткових розподілів розсіяння нейтронів на квазімонохроматичних пучках. В Києві, під керівництвом професора Вадима Павловича Вертебного, визначались перерізи розсіяння ядер в рідкоземельній області та для урана-233, урана-238 та торія-232 [6, 7, 8, 9]. Спочатку квазімонохроматичні пучки нейтронів використовувались в 2π -геометриях для визначення перерізів розсіяння, потім – для кутової анізотропії, коли виміри проводились для 2-3 кутів розсіяння [10], та для диференційних перерізів розсіяння нейтронів. В подальшому розвиток та вдосконалення установок розсіяння із залученням нейтронних лічильників за протонами віддачі призводить до можливості виділення впливу непружно розсіяних нейтронів [5, 8].

Робота [5] була присвячена диференційним перерізам пружно та непружно розсіяних нейтронів на урані-238 для 144 кеВ-нейтронів на

кремнієвому фільтрі довжиною 2108 мм. Виміри проводились відносно кутових розподілів розсіяних нейтронів для природного свинцю. В роботах [8, 9] приведені результати вимірів диференційних перерізів пружного та непружного розсіяння нейтронів з енергією 144 кеВ для урану-238 та торію-232 на кремнієвому фільтрі довжиною 2300 мм, що проводились відносно кутових розподілів розсіяних нейтронів для природного свинцю. Фізики обох лабораторій спостерігали анізотропію кутового розподілу розсіяних нейтронів, що відповідає помітним вкладом в розсіяння нейтронів з орбітальними моментами $l = 1$ та $l = 2$.

Важливо знати порядок величини вкладу нейтронів в діапазоні енергій до 144 кеВ із орбітальними моментами $l > 0$ в розсіяння відносно перерізу для s-хвилі нейтронів. Оцінки дають можливість стверджувати, що вклад хвиль з орбітальним моментом $l > 0$ в повний переріз розсіяння для нейтронів з енергіями не більше 144 кеВ може складати величину до 10 %.

Таким чином, для всіх ядер, на яких будуть досліджуватися кутові розподіли розсіяних нейтронів з енергіями не більше 144 кеВ, достатньо розгляду орбітальних моментів менше 4. Цей розгляд повинен бути присвячений зв'язку параметрів кутового розподілу розсіяних нейтронів із параметрами, що визначають поперечний переріз розсіяння для орбітальних моментів $l = 0, 1, 2, 3$. Піонерська робота з встановлення такого зв'язку з'явилась ще в 1952 році [11]. Диференційний переріз розсіяння нейтронів описується формулою, подібною (10), що наведена в тексті нижче, в якій коефіцієнти при поліномах Лежандра обчислюються за допомогою коефіцієнтів Клебша-Жордана та фаз для кожної нейтронної хвилі з орбітальним моментом l . Слід відмітити, що цей зв'язок досить складний. Більш послідовний підхід в математичному описі диференційних перерізів розсіяння нейтронів опублікований в [12]. В подальшому викладі статті цьому підходу відповідають формули (7, 7а–7г).

Нижче побіжно наведемо витоки цих формул та пов'яжемо коефіцієнти при поліномах Лежандра в кутовому розподілі з повними поперечними перерізами розсіяння нейтронів для конкретних орбітальних моментів l .

Введемо наступні позначення:

σ_s – повний поперечний переріз розсіяння;

σ_0 – поперечний переріз розсіяння для s-хвилі нейтронів;

σ_l – поперечний переріз розсіяння для l-нейтронів;

$\dot{\sigma}(\theta) = \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega}$ – диференційний переріз розсіяння для кута θ , барн/стер.

Із теорії розсіяння нейтронів в нерелятивіському випадку амплітуда розсіяної нейтронної хвилі $f(\theta)$ являє собою суму:

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{l_{\max}} \frac{1}{k} \cdot e^{i\delta_l} \cdot \sin \delta_l \cdot (2l+1) \cdot P_l, \quad (1)$$

де k – хвильове число;

δ_l – фаза хвилі розсіяння з моментом l ;

P_l – сферична функція – поліном Лежандра порядку l .

Зазначимо, що

$$\lambda = \frac{1}{k}, \quad (2)$$

де λ – дебройлівська довжина хвилі нейтронів, поділена на 2π .

$$\lambda = \frac{4.55}{\sqrt{E_n}}, \quad (3)$$

де E_n – енергія нейтронів в MeV;
 λ – в fm.

Тоді диференційний переріз розсіяння для кута θ визначається амплітудою розсіяної хвилі:

$$\dot{\sigma}(\theta) = |f(\theta)|^2, \quad (4)$$

а повний поперечний переріз розсіяння:

$$\sigma_s = 2\pi \cdot \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \cdot \sin\theta d\theta. \quad (5)$$

Позначимо добуток перед P_l в формулі (1) через α_l та через α_l^* для комплексно-спряженої величини, які треба використати при розрахунках в формулах (4, 5).

Тоді для $l_{max} = 3$ можна записати:

$$\dot{\sigma}(\theta) = (\alpha_0 + \alpha_1 \cdot P_1 + \alpha_2 \cdot P_2 + \alpha_3 \cdot P_3) \cdot (\alpha_0^* + \alpha_1^* \cdot P_1 + \alpha_2^* \cdot P_2 + \alpha_3^* \cdot P_3). \quad (6)$$

Якщо в формулі (6) винести за дужки добуток $\alpha_0 \cdot \alpha_0^*$, отримаємо вираз для $\dot{\sigma}(\theta)$:

$$\dot{\sigma}(\theta) = \alpha_0 \cdot \alpha_0^* \left(1 + \sum_{l=1}^3 A_l \cdot P_l + \sum_{l=1}^3 B_l \cdot P_l^2 + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 C_{ij} \cdot P_i \cdot P_j \right) \quad (7)$$

для подвійної суми $i \neq j$.

Згідно формули (1) запишемо позначення в формулі (7):

$$\alpha_0 \cdot \alpha_0^* = \frac{\sin^2 \delta_0}{k^2}; \quad (7a)$$

$$A_l = 2 \cdot (2l + 1) \cdot \frac{\sin \delta_l}{\sin \delta_0} \cdot \cos(\delta_0 - \delta_l); \quad (7b)$$

$$B_l = (2l + 1)^2 \cdot \frac{\sin^2 \delta_l}{\sin^2 \delta_0}; \quad (7b)$$

$$C_{ij} = 2 \cdot (2i + 1) \cdot (2j + 1) \cdot \frac{\sin \delta_i \cdot \sin \delta_j}{\sin \delta_0 \cdot \sin \delta_0} \cdot \cos(\delta_i - \delta_j), \quad (7g)$$

при умові, що $i \neq j$.

Якщо інтегрувати (7) по повному тілесному куту та врахувати ортогональність поліномів Лежандра, отримуємо наступне:

$$\sigma_s = 4\pi \cdot \alpha_0 \cdot \alpha_0^* \cdot \left(1 + \sum_{l=1}^3 \frac{B_l}{2l + 1} \right). \quad (8)$$

Повний переріз розсіяння нейтронів є сумою перерізів розсіяння з різними орбітальними моментами, тобто: $\sigma_s = \sigma_0 + \sum_{l=1}^3 \sigma_l$. Тоді в формулі (8) легко визначити фізичний зміст окремих виразів:

$$\frac{B_l}{2l + 1} = \frac{\sigma_l}{\sigma_0} \quad \text{та} \quad 4\pi \cdot \alpha_0 \cdot \alpha_0^* = \sigma_0.$$

Нагадаємо, що σ_0 є поперечний переріз розсіяння для s-нейтронної хвилі. Таким чином:

$$\alpha_0 \cdot \alpha_0^* = \frac{\sigma_0}{4\pi}. \quad (8a)$$

Для енергії нейтронів не більше 144 кеВ в розрахунках диференційного перерізу можна використати $\delta_0 \gg \delta_l$, тоді $\cos^2(\delta_0 - \delta_l) \approx \cos^2 \delta_0$, а $\cos(\delta_l - \delta_j) = 1$. При цьому інші коефіцієнти в (7) виглядають так:

$$A_l = a_l \sqrt{\frac{\sigma_l}{\sigma_0}}, \text{ де } a_l = \sqrt{4 \cdot \cos^2 \delta_0 \cdot (2l + 1)}, \quad (8б)$$

$$B_l = b_l \frac{\sigma_l}{\sigma_0}, \text{ де } b_l = (2l + 1), \quad (8в)$$

$$C_{ij} = c_{ij} \sqrt{\frac{\sigma_i \cdot \sigma_j}{\sigma_0 \cdot \sigma_0}}, \text{ де } c_{ij} = \sqrt{4 \cdot (2i + 1) \cdot (2j + 1)} \quad (8г)$$

при умові, що $i \neq j$.

Для розрахунків a_l в формулі (8б) $\cos^2 \delta_0 = 1 - \frac{R^2}{\lambda^2}$, де R – амплітуда потенційного розсіяння.

В формулу (7) зручно ввести повний поперечний переріз розсіяння σ_s , що зв'язаний із σ_0 наступним чином:

$$\sigma_0 = \frac{\sigma_s}{1 + \sum_{l=1}^3 \frac{\sigma_l}{\sigma_0}}. \quad (8д)$$

Якщо в формулі (7) знехтувати величинами сум, в яких присутній добуток двох поліномів Лежандра, тоді наближений вираз розрахунку диференційного перерізу розсіяння буде виглядати наступним чином:

$$\dot{\sigma}(\theta) \approx \frac{\sigma_0}{4\pi} (1 + A_1 \cdot P_1 + A_2 \cdot P_2 + A_3 \cdot P_3). \quad (9)$$

Недоліком цього наближення є невідповідність, яка виникає при інтегруванні по повному тілесному куту лівої частини та правої частини формули (9): $\sigma_s \approx \sigma_0$. Такий недолік ліквідується за допомогою заміни σ_0 на σ_s в формулі (9), тоді при інтегруванні по повному тілесному куту ліва та права частини рівні одна одній. Формула (9) буде мати такий вигляд:

$$\dot{\sigma}(\theta) = \frac{\sigma_s}{4\pi} (1 + A_1 \cdot P_1 + A_2 \cdot P_2 + A_3 \cdot P_3). \quad (10)$$

Виникає питання: на скільки відрізняються обчислення $\dot{\sigma}(\theta)$ за формулами (10) та (7) одне від одного. На Рис. 1 наведено відношення наближеного виразу (10) до точного (7), при 10 %, 5 % та 2,5 % вкладів суми перерізів розсіяння із $l = 1, 2, 3$ до величини σ_0 (переріз для $l = 0$). Співвідношення між перерізами із різними l постійне для трьох розрахунків:

$$\sigma_1 : \sigma_2 : \sigma_3 = 6 : 3 : 1.$$

Для кутів $45^\circ \div 150^\circ$ та $\sum_{l=1}^3 \frac{\sigma_l}{\sigma_0} = 0,1$ спостерігається майже постійна величина відношення розрахунків згідно формул (10) та (7), середнє значення та відхилення відношень для конкретного кута знаходиться в межах $1,06 \pm 0,03$. Для $\sum_{l=1}^3 \frac{\sigma_l}{\sigma_0} = 0,05$ в зазначеному діапазоні кутів відношення знаходиться в межах $1,03 \pm 0,02$, а для $\sum_{l=1}^3 \frac{\sigma_l}{\sigma_0} = 0,025$ – в межах $1,02 \pm 0,01$.

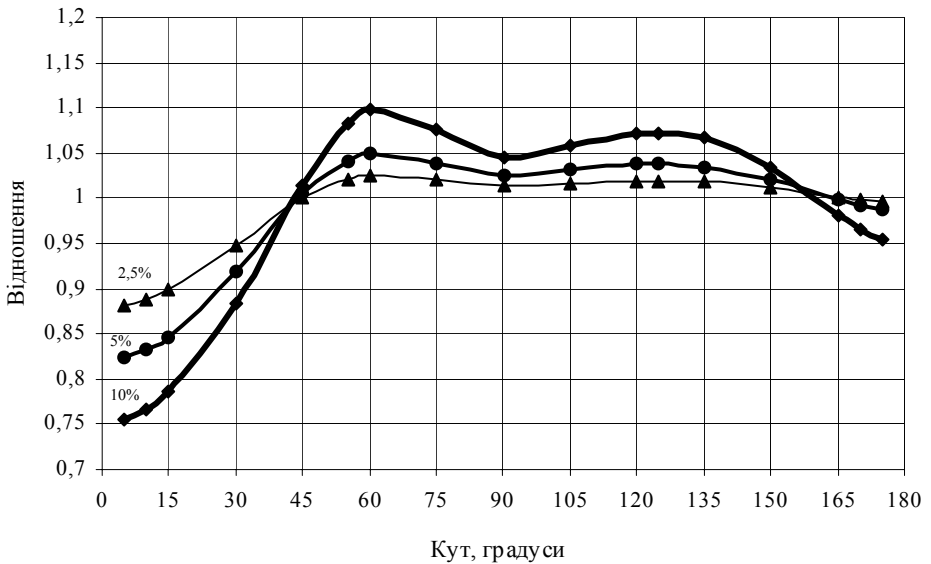


Рис.1. Кутова залежність відношення розрахунків за формулою (10) до формули (7) при $(s_1+s_2+s_3)/s_0 = 2,5\%, 5\%, 10\%$

Якщо врахувати, що експериментальні кутові розподіли визначаються з похибкою 2–3 %, що відповідає відхиленню відношень розрахунків згідно формул (10) та (7) від постійної величини в межах кутів $45^\circ \div 150^\circ$, можна використовувати формулу (10) для оцінки перших наближень σ_l/σ_0 . Формула (10) за рахунок особливостей в поведінці функцій Лежандра P_1, P_2, P_3 від кута θ має певні переваги при обробці кутових розподілів та особливостей нормування експериментальних вимірів, про що буде йти мова далі.

СХЕМА ПОСТАНОВКИ ЕКСПЕРИМЕНТІВ ІЗ КУТОВИХ РОЗПОДІЛІВ ТА ОБРОБКА РЕЗУЛЬТАТІВ

Відмітимо основні особливості схеми вимірів кутових розподілів нейтронів: зразок товщиною $n \cdot \sigma_s < 0,1$ циліндричної форми розміщується своєю площиною перпендикулярно нейтронному пучку, діаметр якого менше ніж

розмір зразка. В центр зразка направлена вісь детектора та його захисної системи. Таким чином визначається кут розсіяння в лабораторній системі координат (ЛСК) – це кут між осями нейтронного пучка та детектора; відстань до детектора відраховується по його осі від центра зразка.

Така постановка досліду призводить до використання двох зразків: стандарту – еталона та дослідного зразка. Із порівняння відгуків детектора на розсіяні нейтрони для цих двох зразків визначається диференційний переріз розсіяння в ЛСК для данного кута розсіяння.

Вимоги для еталона: по-перше, переріз розсіяння ядер еталона домінує над перерізами реакцій з вильотом заряджених частинок, радіаційного захоплення нейтронів та непружного розсіяння, а саме $\sigma_{tot} \approx \sigma_s$; по-друге, еталон повинен

мати роздільну структуру нейтронних резонансів в області енергій квазімонохроматичних нейтронів; по-третє, атомний номер ядер еталона повинен бути більше 50. Остання вимога пов'язана з тим, що для таких ядер кути розсіяння в ЛСК практично однакові з кутами в системі центра мас (СЦМ) (Додаток 3). Цим вимогам відповідають ядра, що знаходяться в двічімагічній області, наприклад, ^{208}Pb .

Задля конкретності будемо вважати, що нейтронний фільтр виділяє квазімонохроматичну лінію з середньою енергією E , щільністю потоку нейтронів Φ та ефективною площею нейтронного пучка S . Дослідний зразок має кількість ядер n_z на 1 см^2 , а еталон ^{208}Pb – n_e . Ефективність реєстрації нейтронів, розсіяних під кутом θ , у випадку зразка визначається ε_z , а еталона – ε_e ; відповідно диференційні перерізи розсіяння для зразка та еталона – $\dot{\sigma}_z$, $\dot{\sigma}_e$; а σ_z та σ_e – повні перерізи розсіяння для зразка та еталона.

У випадку зразка швидкість лічби N_z для кута θ визначається:

$$N_z = \Phi \cdot S \cdot n_z \cdot \dot{\sigma}_z \cdot \varepsilon_z. \quad (11)$$

У випадку еталона ^{208}Pb швидкість лічби N_e для кута θ визначається подібно формулі (11).

$$N_e = \Phi \cdot S \cdot n_e \cdot \dot{\sigma}_e \cdot \varepsilon_e. \quad (12)$$

Якщо геометрії вимірів зі зразком та еталонам ідентичні одна одній, тоді спільними для обох вимірів є $\Phi \cdot S$. Відношення швидкості лічби детектора для зразка та для еталона дорівнює:

$$\frac{N_z}{N_e} = \frac{n_z \cdot \dot{\sigma}_z \cdot \varepsilon_z}{n_e \cdot \dot{\sigma}_e \cdot \varepsilon_e}. \quad (13)$$

Якщо величина $\dot{\sigma}_e$ відома, то у виразі (13) всі величини, окрім $\dot{\sigma}_z$, відомі або їх можна розрахувати. Цим співвідношенням визначається диференційний переріз розсіяння зразка для кута θ в ЛСК у відносних вимірах.

В області енергій нейтронів до 200 кеВ кутовий розподіл нейтронів для ^{208}Pb далекий від ізотропного. Це пов'язано із впливом на розсіяння нейтронів із орбітальними моментами $l > 0$.

Будемо вважати, що диференційний переріз розсіяння нейтронів для ^{208}Pb описується моментами $l = 0, 1, 2, 3$ згідно формули (10).

Нагадаємо вирази поліномів Лежандра та кути, при яких вони дорівнюють нулю:

$$P_1 = \cos\theta. \text{ При } \theta = 90^\circ, P_1 = 0$$

$$P_2 = 1/2(3\cos^2\theta - 1). \text{ При } \theta = 54,74^\circ, \theta = 125,26^\circ, P_2 = 0$$

$$P_3 = 1/2(5\cos^3\theta - 3\cos\theta). \text{ При } \theta = 90^\circ, \theta = 39,23^\circ, \theta = 140,77^\circ, P_3 = 0.$$

Коли $A_1, A_2, A_3 = 0$, розподіл розсіяних нейтронів є ізотропним.

Функції P_1 та P_3 антисиметричні відносно кута 90° , тобто значення цих функцій для кутів $\theta_1 = (90^\circ - \alpha)$ та $\theta_2 = (90^\circ + \alpha)$, де $\alpha < 90^\circ$, однакові за величиною та протилежні за знаками. Використовуючи формулу (10), при $A_2 = 0$, а $A_1 \neq 0, A_3 \neq 0$ напівсума перерізів розсіяння для кутів θ_1 та θ_2 визначається через експериментальне значення σ_s для еталона:

$$\frac{\dot{\sigma}(\theta_1) + \dot{\sigma}(\theta_2)}{2} = \frac{\sigma_s}{4\pi} \cdot W. \quad (14)$$

При використанні формули (10) коефіцієнт $W = 1$, а для формули (7) він близький до 1 і залежить від відношень $\sigma_1/\sigma_0, \sigma_2/\sigma_0$ та σ_3/σ_0 (детально про це – в Додатку 1).

При $A_2 \neq 0$ співвідношення (14) буде істинним для кутів $\theta_1 = 55^\circ$ та $\theta_2 = 125^\circ$, коли $P_2 = 0$.

Якщо $W = 1$ при довільних значеннях A_1, A_2, A_3 та кутах $\theta_1 = 55^\circ$ і $\theta_2 = 125^\circ$, сума ефектів розсіяння нейтронів від ^{208}Pb , використовуючи співвідношення (12) та (14), дорівнює:

$$\frac{N_e(55^\circ)}{\varepsilon_e} + \frac{N_e(125^\circ)}{\varepsilon_e} = 2 \cdot \Phi \cdot S \cdot n_e \cdot \frac{\sigma_e}{4\pi}, \quad (15)$$

де ε_e – ефективність детектора для відповідного кута;

σ_e – повний переріз розсіяння нейтронів ^{208}Pb .

Співвідношення (15) дозволяє визначити найбільш важкодосяжну величину $\Phi \cdot S$. Тоді для довільного θ диференційний переріз розсіяння ^{208}Pb визначається співвідношенням (виміри проводяться одним і тим же детектором):

$$\dot{\sigma}_e(\theta) = \frac{2 \cdot \frac{N_e(\theta)}{\varepsilon_e}}{\frac{N_e(55^\circ)}{\varepsilon_e} + \frac{N_e(125^\circ)}{\varepsilon_e}} \cdot \frac{\sigma_e}{4\pi}. \quad (16)$$

Для дослідного зразка, який вимірюється в одному циклі з еталонам, диференційний переріз розсіяння зразка в ЛСК виглядає (виміри проводяться одним і тим же детектором):

$$\dot{\sigma}_3(\theta) = \frac{2 \cdot \frac{N_3(\theta)}{\varepsilon_3}}{\frac{N_e(55^\circ)}{\varepsilon_e} + \frac{N_e(125^\circ)}{\varepsilon_e}} \cdot \frac{\sigma_e}{4\pi} \cdot \frac{n_e}{n_3}. \quad (17)$$

Формулою (17) визначається диференційний переріз розсіяння зразка, коли не визначається величина диференційного перерізу еталона. Якщо відома величина диференційного перерізу еталона, тоді використовується формула (13). У випадку відносних вимірювань еталона та зразка багатодетекторною системою, коли кожний детектор розміщується під певним кутом, диференційний переріз зразка для кута θ визначається також формулою (13).

Відмітимо, що багатодетекторним вимірам повинні передувати копінки виміри $\dot{\sigma}_e$ для еталона з допомогою одного детектора.

Вищенаведені викладки вказують на особливу важливість розрахунку величин ε_s та ε_e – ефективностей реєстрації детектором розсіяних нейтронів для зразка та еталона. В модель розрахунку цих величин потрібно включити: геометричні розміри зразка, розмір пучка нейтронів, величини поглинання розсіяних нейтронів, значення поперечних перерізів та залежність ефективності від зміни енергії нейтронів при розсіянні на кут θ . Математична модель таких розрахунків описана в [13].

ЗАКЛЮЧЕННЯ

Основний висновок роботи полягає в тому, що розглянуті особливості обробки результатів вимірів кутових розподілів на квазімонохроматичних фільтрованих нейтронних пучках з енергією не більше 144 кеВ дають можливість визначення параметрів розсіяння у випадку, коли кутовий розподіл розсіяних нейтронів зразком-еталоном є анізотропним із вкладками в розсіяння орбітальних моментів менше 4.

Формули (14) та (15) дають можливість пронормувати за допомогою зразка-еталона основний параметр фільтрованого нейтронного пучка, на якому проходять виміри: це – величина потоку нейтронів на зразок розсіяння. З цієї причини в методику вимірів кутових розподілів необхідно ввести виміри при кутах 55° та 125° .

Із кутових розподілів розсіяння нейтронів кінцеві значення параметрів розсіяння повинні визначатися з допомогою формули (7) методом МНК (Додаток 1).

Для кутів неменше 45° кутовий розподіл розсіяних нейтронів наближено описується формулою (10), яка дає можливість для оцінок параметрів $\sigma_s, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$, що можна використовувати як початкові параметри для методу МНК (Додаток 2).

В Додатку 3 наводяться співвідношення диференційних перерізів в системах ЛКС та СЦМ та відповідність кутів в цих системах для вуглецю-12 та свинцю-208.

В додатках більш детально наведені підходи для визначення параметрів розсіяння, а також порівнюються результати двох підходів згідно формул (7) та (10). Порівняння визначених параметрів розсіяння нейтронів вказує на життєспроможність запропонованих підходів для обробки результатів вимірів кутових розподілів розсіяних нейтронів на фільтрованих нейтронних пучках з енергіями не більше 144 кеВ.

Автор висловлює щирю подяку Л.Л.Литвинському та В.В.Колотому за ознайомлення з роботою та конструктивні зауваження.

Додаток 1

**Основні формули для обробки результатів з допомогою
метода найменших квадратів**

Зазвичай кутовий розподіл розсіяних нейтронів вимірюється для 4–10 кутів. В загальному випадку формула (7) потребує чотирьох параметрів, а саме: $\sigma_0, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$, де індекс означає величину орбітального момента. Якщо використовувати додаткові виміри повного перерізу розсіяння σ_s , то можна σ_0 перевизначити через σ_s та $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$. Тоді формула (7) в позначеннях (8а)–(8д) виглядає:

$$\frac{\dot{\sigma}(\theta)}{\sigma_s/4\pi} = \frac{l}{1+x_1+x_2+x_3} \cdot \left(1 + \sum_{l=1}^3 a_l \cdot P_l \cdot \sqrt{x_l} + \sum_{l=1}^3 b_l \cdot P_l^2 \cdot x_l + c_{12} \cdot P_1 \cdot P_2 \cdot \sqrt{x_1 \cdot x_2} + c_{13} \cdot P_1 \cdot P_3 \cdot \sqrt{x_1 \cdot x_3} + c_{23} \cdot P_2 \cdot P_3 \cdot \sqrt{x_2 \cdot x_3} \right) \quad (1.1)$$

де $x_l = \frac{\sigma_l}{\sigma_0}$.

При такому підході можна використовувати метод найменших квадратів навіть для чотирьох точок.

Формула (1.1) не є лінійною відносно x_l , тому використовується лініалізація її з допомогою диференціювання по x_l , і ведеться пошук прирощувань Δx_l до початкових параметрів x_l^{st} : $x_l = x_l^{st} + \Delta x_l$ (див., наприклад, [14]).

Якщо записати формулу (1.1) в вигляді:

$$\frac{\dot{\sigma}(\theta)}{\sigma_s/4\pi} = \frac{l}{1+x_1+x_2+x_3} \cdot f(\sqrt{x_l}, x_l), \quad (1.2)$$

де

$$f(\sqrt{x_l}, x_l) = \left(1 + \sum_{l=1}^3 a_l \cdot P_l \cdot \sqrt{x_l} + \sum_{l=1}^3 b_l \cdot P_l^2 \cdot x_l + c_{12} \cdot P_1 \cdot P_2 \cdot \sqrt{x_1 \cdot x_2} + c_{13} \cdot P_1 \cdot P_3 \cdot \sqrt{x_1 \cdot x_3} + c_{23} \cdot P_2 \cdot P_3 \cdot \sqrt{x_2 \cdot x_3} \right),$$

то похідні по x_l виглядають:

$$\frac{d}{dx_l} \left(\frac{\dot{\sigma}(\theta)}{\sigma_s/4\pi} \right) = \frac{-\frac{l}{2}}{(1+x_1+x_2+x_3)^{\frac{3}{2}}} \cdot f(\sqrt{x_l}, x_l) + \frac{l}{1+x_1+x_2+x_3} \cdot \left(\frac{a_l \cdot P_l}{2\sqrt{x_l}} + b_l \cdot P_l^2 + \frac{c_{12} \cdot P_1 \cdot P_2 \cdot \sqrt{x_2}}{2\sqrt{x_1}} + \frac{c_{13} \cdot P_1 \cdot P_3 \cdot \sqrt{x_3}}{2\sqrt{x_1}} \right), \quad (1.3)$$

$$\frac{d}{dx_2} \left(\frac{\dot{\sigma}(\theta)}{\sigma_s/4\pi} \right) = \frac{-1/2}{(1+x_1+x_2+x_3)^{3/2}} \cdot f(\sqrt{x_1}, x_1) +$$

$$+ \frac{1}{1+x_1+x_2+x_3} \cdot \left(\frac{a_2 \cdot P_2}{2\sqrt{x_2}} + b_2 \cdot P_2^2 + \frac{c_{12} \cdot P_1 \cdot P_2 \cdot \sqrt{x_1}}{2\sqrt{x_2}} + \frac{c_{23} \cdot P_2 \cdot P_3 \cdot \sqrt{x_3}}{2\sqrt{x_2}} \right) \quad (1.4)$$

$$\frac{d}{dx_3} \left(\frac{\dot{\sigma}(\theta)}{\sigma_s/4\pi} \right) = \frac{-1/2}{(1+x_1+x_2+x_3)^{3/2}} \cdot f(\sqrt{x_1}, x_1) +$$

$$+ \frac{1}{1+x_1+x_2+x_3} \cdot \left(\frac{a_3 \cdot P_3}{2\sqrt{x_3}} + b_3 \cdot P_3^2 + \frac{c_{13} \cdot P_1 \cdot P_3 \cdot \sqrt{x_1}}{2\sqrt{x_3}} + \frac{c_{23} \cdot P_2 \cdot P_3 \cdot \sqrt{x_2}}{2\sqrt{x_3}} \right) \quad (1.5)$$

Сходимість пошукованих параметрів x_i до деякого граничного значення, який визначається як кінцевий результат обчислень, залежить від початкових значень x_i^{st} ; тому в розроблену обчислювальну програму варто вводити реалістичні початкові оцінки цих параметрів, які ми пропонуємо визначати за допомогою формули (10) (Додаток 2).

Якщо використати розрахунки за формулою (7) з вкладами $\frac{\sigma_1}{\sigma_0} = 0,06$,

$\frac{\sigma_2}{\sigma_0} = 0,03$ та $\frac{\sigma_3}{\sigma_0} = 0,01$ для 11-ти кутів в межах $30^\circ \div 150^\circ$, вважаючи їх рівноточними, метод МНК дає значення σ_i/σ_0 , які наведені в Таблиці 1.1. В останньому стовпчику таблиці наведені результати розрахунків σ_i/σ_0 , коли розрахункові точки розкидано почергово в бік зменшення або збільшення на величину до 2,6 %. Таким чином, при похибці експериментальних значень до ~ 3 %, визначені величини σ_i/σ_0 не відрізняються від точних значень на ± 10 %. Причому, точність визначених похибок методом МНК приблизно відповідає цьому відхиленню (до ~ 15 %).

Таблиця 1.1. Результати визначення σ_i/σ_0 методом МНК для 11-ти точок ($30^\circ \div 150^\circ$) для $\sum_I \sigma_i/\sigma_0 = 0,1$

σ_i/σ_0	Рівноточні значення	Значення з відхиленням до 2,6%
σ_1/σ_0	$0,0605 \pm 0,0016$	$0,0597 \pm 0,0029$
σ_2/σ_0	$0,0305 \pm 0,0015$	$0,0294 \pm 0,0026$
σ_3/σ_0	$0,0099 \pm 0,0008$	$0,0091 \pm 0,0014$
$\sum_I \sigma_i/\sigma_0$	0,1009	0,0982

Для спрощення викладок в основному тексті статті у формулах (16) та (17) використано коефіцієнт $W = 1$. Саме в коефіцієнті W присутнє нормування

диференційного перерізу розсіяння нейтронів еталоном при використанні формули (7). Формула (16) виглядає в цьому випадку наступним чином:

$$\dot{\sigma}_e(\theta) = \frac{2 \cdot \frac{N_e(\theta)}{\varepsilon_e}}{\frac{N_e(55^\circ)}{\varepsilon_e} + \frac{N_e(125^\circ)}{\varepsilon_e}} \cdot \frac{\sigma_e}{4\pi} \cdot W, \quad (1.6)$$

де

$$W = \frac{1 + 0,9871 \cdot x_1 + 1,0571 \cdot x_3 - 2,0429 \cdot \sqrt{x_1 \cdot x_3}}{1 + x_1 + x_2 + x_3}, \quad (1.7)$$

а $x_1 = \sigma_1/\sigma_0$, $x_2 = \sigma_2/\sigma_0$, $x_3 = \sigma_3/\sigma_0$.

W вираховується з допомогою формули (15), в яку підставляються теоретичні вирази згідно формули (1.1) для кутів 55° та 125° .

Таким чином процедура нормування диференційного перерізу розсіяння нейтронів еталоном полягає на першому етапі у визначенні методом МНК величин x_i при $W = 1$. Другий етап – визначається W за формулою (1.7) та проводиться перенормування вхідних експериментальних даних за формулою (1.6) і визначаються нові значення x_i . При потребі така процедура повторюється.

Додаток 2

Методика оцінки вкладів $l = 1, 2, 3$ із кутових розподілів розсіяних нейтронів

Для використання методу МНК в пошуці вкладів σ_l/σ_0 необхідно вводити в програму реалістичні початкові значення цих величин. Ми пропонуємо використовувати формулу (10), яка дає змогу оцінити параметри σ_l/σ_0 із кутових розподілів розсіяних нейтронів в межах кутів $45^\circ \div 150^\circ$. Підкреслимо, що нижче наведені викладки стосуються зразків важких елементів (наприклад, еталона ^{208}Pb) згідно зауважень, наведених в основному тексті статті.

Для зручності наведення формул оцінки параметрів σ_l/σ_0 пропонуємо ввести позначення $S(\theta)$ – відносного диференційного перерізу розсіяних нейтронів:

$$S(\theta) = \frac{\dot{\sigma}(\theta)}{\sigma_s/4\pi}.$$

Використовуючи формули (10) та (14), легко показати, з допомогою яких співвідношень можна оцінити параметри σ_l/σ_0 .

Оцінка σ_2/σ_0 із експериментальних даних для пари кутів α та $(\pi - \alpha)$ можна визначити за допомогою співвідношення:

$$\frac{S(\alpha) + S(\pi - \alpha)}{2} - \frac{S(55^\circ) + S(125^\circ)}{2} = a_2 \cdot P_2(\alpha) \cdot \sqrt{\frac{\sigma_2}{\sigma_0}}. \quad (2.1)$$

Якщо існують результати вимірювань для кута 90° , для оцінки σ_2/σ_0 можна використовувати інше співвідношення:

$$S(90^\circ) - \frac{S(55^\circ) + S(125^\circ)}{2} = a_2 \cdot P_2(90^\circ) \cdot \sqrt{\frac{\sigma_2}{\sigma_0}}. \quad (2.2)$$

В залежності від величин вкладів σ_i в повний переріз розсіяння σ_s , оцінки σ_2/σ_0 згідно формул (2.1) та (2.2) через наближеність формули (10) можуть значно розрізнятися, тому рекомендуємо за оцінку σ_2/σ_0 приймати їх середнє значення.

Оцінки σ_1/σ_0 та σ_3/σ_0 із експериментальних даних для двох пар кутів α_i і $(\pi - \alpha_i)$ та α_i і $(\pi - \alpha_2)$ визначаються за допомогою співвідношення:

$$\frac{S(\alpha) - S(\pi - \alpha)}{2} = a_1 \cdot P_1(\alpha) \cdot \sqrt{\frac{\sigma_1}{\sigma_0}} + a_3 \cdot P_3(\alpha) \cdot \sqrt{\frac{\sigma_3}{\sigma_0}}. \quad (2.3)$$

В результаті отримуємо систему рівнянь з двома невідомими $\sqrt{\sigma_1/\sigma_0}$ та $\sqrt{\sigma_3/\sigma_0}$.

Наведемо значення коефіцієнтів a_i для ^{208}Pb :

$$a_1 = 2,4167; \quad a_2 = 3,1199; \quad a_3 = 3,6916.$$

Інші коефіцієнти b_i та c_{ij} не залежать від маси ядра розсіяння:

$$\begin{array}{lll} b_1 = 3; & b_2 = 5; & b_3 = 7; \\ c_{12} = 7,746; & c_{13} = 9,1652; & c_{23} = 11,8322. \end{array}$$

Наведемо величини P_i для деяких кутів, які часто використовуються для оцінок:

$$\begin{array}{lll} P_1(45^\circ) = 0,7071; & P_1(55^\circ) = 0,5736; & P_1(60^\circ) = 0,5; \\ P_2(45^\circ) = 0,25; & P_2(55^\circ) = -0,0065; & P_2(90^\circ) = -0,5; \\ P_3(45^\circ) = -0,1768; & P_3(55^\circ) = -0,3886; & P_3(60^\circ) = -0,4375. \end{array}$$

Для перевірки формул (2.1) та (2.2) були використані розрахунки за формулою (7) з вкладами $\frac{\sigma_1}{\sigma_0} = 0,06$, $\frac{\sigma_2}{\sigma_0} = 0,03$ та $\frac{\sigma_3}{\sigma_0} = 0,01$. Формула (2.1) для кутів 45° та 135° дає оцінку $\sigma_2/\sigma_0 = 0,049$, а для кута 90° – $\sigma_2/\sigma_0 = 0,021$; середнє значення складає $\sigma_2/\sigma_0 = 0,035$.

За допомогою формули (2.3) оцінки σ_1/σ_0 та σ_3/σ_0 для пар кутів 45° і 135° та 60° і 120° наступні: $\sigma_1/\sigma_0 = 0,068$ та $\sigma_3/\sigma_0 = 0,015$.

Таким чином, за допомогою формул (2.1), (2.2) та (2.3) ми отримуємо оцінки, які в межах $\sim 60\%$ відповідають точним значенням.

Проведемо оцінку вкладів σ_i/σ_0 з експериментальних результатів кутових розподілів розсіяних нейтронів для природного свинцю [8] та порівняємо їх з визначенням за допомогою метода МНК – Таблиця 2.1.

Таблиця 2.1. Порівняння значень σ_i/σ_0 , визначених за методом МНК для 9-ти точок ($30^\circ \pm 150^\circ$), з оцінками за формулами (2.1), (2.2) та (2.3)

σ_i/σ_0	Формули (2.1), (2.2), (2.3)	МНК
σ_1/σ_0	0,028	$0,0215 \pm 0,0018$
σ_2/σ_0	0,001	$0,0016 \pm 0,0006$
σ_3/σ_0	0,0006	$(2 \pm 80) \cdot 10^{-6} < 0,0001$
$\sum_i \sigma_i/\sigma_0$	0,030	0,0232

На закінчення наведемо оцінку повного перерізу розсіяння нейтронів для природного свинцю із даних [8], використовуючи формулу (14) для кутів 55° і 125° , для яких $P_2 = 0$, отримуємо:

$$\frac{\dot{\sigma}(55^\circ) + \dot{\sigma}(125^\circ)}{2} = \frac{\sigma_s}{4\pi}. \quad (2.4)$$

Експериментальні дані [8] вказують, що

$$\frac{\dot{\sigma}(55^\circ) + \dot{\sigma}(125^\circ)}{2} = 0,750 \text{ б/степ.}$$

Використовуючи (2.4), отримуємо $\sigma_s = 9,42 \text{ б}$, що не суперечить експериментальним визначенням повного перерізу розсіяння нейтронів з енергією 144 кеВ для природного свинцю $\sigma_s = (9,344 \pm 0,027) \text{ б}$ [8]. Якщо визначити коефіцієнт W , то узгодження буде кращим.

Таким чином, оцінки параметрів σ_s , σ_n , σ_2 та σ_3 за допомогою формул (2.1), (2.2), (2.3) та (2.4) не суперечать експериментальній величині σ_s , а також визначенням σ_i/σ_0 методом МНК.

Додаток 3

Співвідношення диференційних перерізів в системах ЛКС та СЦМ

В нерелятивістському випадку σ_s – повний поперечний переріз розсіяння в ЛКС та СЦМ – є інваріантом. При $M_2 > M_1$ можна записати:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \dot{\sigma}_\psi d(-\cos \psi) d\varphi_\psi = \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \dot{\sigma}_\theta d(-\cos \theta) d\varphi_\theta, \quad (3.1)$$

де θ – кут розсіяння в цій системі, а ψ – кут розсіяння в системі СЦМ.

Диференціюючи (3.1) та враховуючи відсутність поляризації при пружному розсіянні нейтронів, а саме: $d\varphi_\psi = d\varphi_\theta$, отримуємо зв'язок між $\dot{\sigma}_\psi$ в СЦМ та $\dot{\sigma}_\theta$ в ЛСК:

$$\dot{\sigma}_\psi = \dot{\sigma}_\theta \cdot F, \quad (3.2)$$

де

$$F = \frac{\sin\theta}{\sin\psi} \cdot \frac{d\theta}{d\psi}. \quad (3.3)$$

Для обрахування F скористаємось зв'язком між кутами θ та ψ , який впливає з кінематики пружного розсіяння частинок з масами M_1 та M_2 (для цього зручно ввести $\gamma = \frac{M_1}{M_2}$):

$$\cos\theta = \frac{\gamma + \cos\psi}{(1 + \gamma^2 + 2\gamma \cos\psi)^{1/2}}, \quad (3.3)$$

$$\sin\theta = \frac{\sin\psi}{(1 + \gamma^2 + 2\gamma \cos\psi)^{1/2}}, \quad (3.3a)$$

$$\operatorname{tg}\theta = \frac{\sin\psi}{\gamma + \cos\psi}. \quad (3.3b)$$

Задля повноти наведемо визначення ψ через θ .

$$\cos\psi = -\gamma \sin^2\theta + \cos\theta \cdot (1 - \gamma^2 \sin^2\theta)^{1/2}, \quad (3.4)$$

$$\sin\psi = \sin\theta \cdot \left\{ 1 - \gamma^2 + 2 \cdot \gamma^2 \cdot \cos^2\theta + 2 \cdot \gamma \cdot \cos\theta \cdot [1 - \gamma^2 \cdot \sin^2\theta]^{1/2} \right\}^{1/2}. \quad (3.4a)$$

Величину $\frac{d\theta}{d\psi}$ легко обчислити, використовуючи (3.3):

$$\theta = \arccos\left(\frac{\gamma + \cos\psi}{(1 + \gamma^2 + 2\gamma \cos\psi)^{1/2}}\right), \quad (3.5)$$

отримуємо

$$\frac{d\theta}{d\psi} = \frac{1 + \gamma \cos\psi}{1 + \gamma^2 + 2\gamma \cos\psi}. \quad (3.6)$$

Таким чином:

$$F = \frac{1 + \gamma \cdot \cos\psi}{[1 + \gamma^2 + 2 \cdot \gamma \cdot \cos\psi]^{3/2}}. \quad (3.8)$$

У випадку відносних вимірів, коли вимірюються експериментальні значення $\dot{\sigma}_\theta^e$ для еталона та $\dot{\sigma}_\theta^3$ для зразка, можна записати:

$$\dot{\sigma}_\psi^e = \dot{\sigma}_\theta^e \cdot F_e, \quad \dot{\sigma}_\psi^3 = \dot{\sigma}_\theta^3 \cdot F_3.$$

Зважаючи, що $\psi_3 \neq \psi_e$, а $\theta_3 = \theta_e$, виходить:

$$\dot{\sigma}_\psi^3 = \dot{\sigma}_\psi^e \cdot \frac{\dot{\sigma}_\theta^3}{\dot{\sigma}_\theta^e} \cdot \frac{F_3}{F_e}. \quad (3.9)$$

Величини F_3/F_e наведені в Таблиці 3.1, там також наведена відповідність кутів θ та ψ^3 для вуглецю-12 і ψ^e – для свинцю-208, а також самі величини F_3 і F_e .

Таблиця 3.1. Відповідність кутів ЛСК до СЦМ для ^{12}C , ^{208}Pb та величини F_a та F_e

θ , град	ψ^a , град	F_a	ψ^e , град	F_e	F_a/F_e
5	5,42	0,8526	5,02	0,9905	0,8608
10	10,83	0,8541	10,05	0,9906	0,8622
15	16,24	0,8567	15,07	0,9908	0,8648
30	32,39	0,8706	30,14	0,9917	0,8779
45	48,38	0,8932	45,20	0,9932	0,8993
55	58,91	0,9128	55,23	0,9945	0,9178
60	64,14	0,9238	60,24	0,9952	0,9283
75	79,62	0,9612	75,27	0,9975	0,9636
90	94,78	1,0035	90,28	1,0000	1,0035
105	109,62	1,0481	105,27	1,0025	1,0455
120	124,14	1,0919	120,24	1,0048	1,0867
125	128,91	1,1058	125,23	1,0055	1,0998
135	138,38	1,1314	135,19	1,0068	1,1238
150	152,39	1,1628	150,14	1,0084	1,1531
165	166,24	1,1831	165,07	1,0094	1,1721
170	170,83	1,1869	170,05	1,0095	1,1757
175	175,42	1,1893	175,02	1,0096	1,1780

ЛІТЕРАТУРА

1. Грицай О.О., Архипов В.М., Венедиктов В.М., Кислицький А.І., Клімова Н.А., Колотий В.В., Лібман В.А., Пшеничний В.А. Експериментальні установки для дослідження кутових розподілів квазімоноенергетичних нейтронів. Актуальні проблеми ядерної фізики та ядерної енергетики // Міжнародна конференція 29 травня–3 червня 2006 р. Абстракти доповідей. – Київ, Україна. – С. 125–126.
2. Simpson O.D., Miller L.G. Nucl. Instr. and Meth. – V. 61. – 1963. – 245 p.
3. Вертебный В.П., Кирилюк А.Л., Гнидак Н.Л., Трофимова Н.А., Гребнев А.В. Полные и парциальные нейтронные сечения некоторых лантанидов и делящихся ядер, измеренные с помощью скандиевого фильтра // Нейтронная физика (Материалы 3-й Всесоюзной конференции по нейтронной физике, Киев, 9–13 июня 1975 г.). – Часть 3. – М. – 1976. – С. 151–155.
4. Трофимова Н.А., Кирилюк А.Л., Вертебный В.П., Новоселов Г.М., Гнидак Н.Л., Павленко Е.А., Гребнев А.В. Определение S_0 -силовых функций и оптических длин рассеяния R' из усредненных нейтронных сечений с помощью скандиевого фильтра // Нейтронная физика (Материалы 4-й Всесоюзной конференции по нейтронной физике, Киев, 18–22 апреля 1977 г.). – Часть 2. – М. – 1977. – С. 227–231.
5. Tsang F.Y., Brugger R.M. The differential neutron scattering cross sections of uranium-238 at 144 keV // NSE. – V. 65. – 1978. – P. 70–75.
6. Вертебный В.П., Гнидак Н.Л., Гребнев А.В., Кирилюк А.Л., Новоселов Г.М., Павленко Е.А., Трофимова Н.А. Определение нейтронных силовых

- функций и оптических длин рассеяния тяжелых ядер с помощью изучения самоэкранирования резонансных нейтронов // Нейтронная физика (Материалы 5-й Всесоюзной конференции по нейтронной физике, Киев, 15–19 сентября 1980 г.). – Часть 2. – М. – 1980. – С. 249–253.
7. Вертебный В.П., Гнидак Н.Л., Гребнев А.В., Кирилюк А.Л., Павленко Е.А., Трофимова Н.А. Определение полного сечения и сечения рассеяния урана-235 для нейтронов с энергией 2 и 24,4 кэВ // Нейтронная физика (Материалы 5-й Всесоюзной конференции по нейтронной физике, Киев, 15–19 сентября 1980 г.). – Часть 2. – М. – 1980. – С. 254–256.
 8. Литвинский Л.Л., Лиман В.А., Мурзин А.В. Установка для определения угловых распределений упруго и неупруго рассеянных нейтронов с помощью нейтронных фильтров / Препринт КИЯИ-85-35. – Киев. – 1985.
 9. Литвинский Л.Л., Вертебный В.П., Лиман В.А., Мурзин А.В. Неупругое рассеяние нейтронов с энергией 144 кеВ торием-232 / Препринт КИЯИ-87-9. – Киев. – 1987.
 10. Гребнев А.В., Кирилюк А.Л., Николенко В.Г., Попов А.Б., Самосват Г.С. Изучение анизотропии килоэлектронвольтных нейтронов, упруго рассеиваемых ядрами / Препринт ОИЯИ Р3-82-514. – Дубна. – 1982.
 11. Blatt J.M., Biedenharn L.C. The angular distribution scattering and reaction cross sections // Rev. Mod. Phys. – V. 24. – 1952. – P. 258–271.
 12. Маляров В.В. Основы теории атомного ядра. – Москва. – 1959. – 110 с.
 13. Пшеничний В.А. Математична модель вимірів кутових розподілів розсіяння нейтронів // Ядерні та радіаційні технології. – т.5 (№3–4). – Київ. – 2006. – С. 5–11.
 14. Пшеничний В.А. Программы обработки нейтронных резонансов “методом формы” / Препринт КИЯИ-74-16. – Киев. – 1974.