

МЕТОДИКА И ПРОГРАММА РАСЧЕТА ГРУППОВЫХ КОНСТАНТ ДЛЯ ВТОРИЧНЫХ ЧАСТИЦ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ В НЕЙТРОННО-ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЯХ НА ИЗОТОПАХ ВОДОРОДА И ГЕЛИЯ

Д. С. Барabanова, Н. В. Колобянина, С. В. Мжачих, А. В. Алексеев

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

Введение

Для численного решения задач термоядерного (ТЯ) синтеза, например, задач выхода нейтронов из DT-мишени, обжимаемой лазерным излучением, необходимо осуществлять численное решение согласованных между собой кинетических уравнений переноса быстрых заряженных частиц (БЗЧ, ядра основных изотопов водорода и гелия) и нейтронов.

Особенность расчета переноса быстрых заряженных частиц – учет конкурирующих процессов. С одной стороны, имеем вылет быстрых легких ядер из области ТЯ горения, что уменьшает число ТЯ актов и приводит к понижению энерговыделения рассчитываемой системы. С другой стороны, реакции между БЗЧ и тепловыми ядрами среды (реакции «на лету») энерговыделение поднимают.

БЗЧ образуются в тепловых ТЯ процессах, в реакциях «на лету» и в нейтронно-ядерных процессах. Для последующего расчета переноса БЗЧ необходимо предварительно как можно точнее рассчитать источник их образования с учетом закона сохранения энергии и импульса.

В настоящее время в ИТМФ для расчета многогрупповых нейтронных констант используется программный комплекс GROUND [1], созданный в 2011 г. с использованием собственных программных модулей и программных модулей пакета NJOY (США) [2].

Пакет программ NJOY является мощным и признанным программным продуктом, развивающимся с 70-х годов прошлого века, однако, он все же не покрывает полностью наши современные потребности в исследовании некоторых характеристик нейтронно-ядерных процессов. Например, в случае отсутствия в файлах оцененных данных информации об угловых или энерго-угловых распределениях продуктов нейтронно-ядерных реакций сейчас невозможно рассчитать групповые характеристики. Также отсутствует возможность расчета группового распределения кинетической энергии вторичных частиц, а введенные ограничения по квадратурам при численном интегрировании не позволяют проводить полноценные исследования индикатрисы выхода вторичных частиц.

В связи с этим, чтобы при расчете переноса БЗЧ мы смогли сохранять суммарный импульс частиц до и после нейтронно-ядерных взаимодействий, было

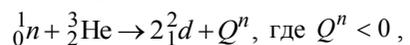
решено разработать в ИТМФ свою программу, которую мы назвали RМК2, для расчета многогрупповых данных, включающих энерго-угловое распределение всех вторичных частиц (нейтронов и легких ядер). Программа RМК2 разрабатывалась, прежде всего, для расчета групповых констант реакций, в результате которых рождаются БЗЧ. Среди рассматриваемых процессы упругого и неупругого рассеяния нейтронов, процессы ($n, 2n$) и реакции нейтронного поглощения (экзотермические и эндотермические) с последующей эмиссией легких ядер.

Программа позволяет рассчитывать как двухчастичные, так и многочастичные процессы. При этом учитывается температурное движение ядермишеней. При наличии данных процесс рассчитывается с учетом информации об анизотропии выхода частиц в системе центра масс (СЦМ) или в лабораторной системе координат (ЛСК).

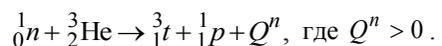
В качестве исходных данных мы используем международные библиотеки оцененных данных и отечественные базы данных в формате ENDF [3].

1. Расчет групповых потоков и групповых сечений

Рассмотрим процессы: упругое рассеяние нейтрона на протоне, реакцию эндотермического поглощения нейтронов на ядре ${}^3\text{He}$:



и реакцию экзотермического поглощения нейтронов на ядре ${}^3\text{He}$:



Здесь Q^n – калорийность процесса n (энергия дефекта масс):

$$Q^n = (m_1 + m_2)c^2 - (m_3 + m_4)c^2, \quad m_k = M_k / N_A,$$

где k – индекс частицы (ядра или нейтрона), M_k – масса, выраженная в атомных углеродных единицах (а.у.е.); константа N_A – число Авогадро.

Приведем общий алгоритм расчета групповых потоков и групповых сечений для всех рассматриваемых процессов.

Зададим групповые разбиения: $g' = \overline{1, G}$, где g' – индекс группы нейтрона до столкновения,

$[E_{g'}, E_{g'-1}]$ – группы энергий нейтрона; $g_k = \overline{1, G_k}$, где g_k – индекс группы частицы k после столкновения, $[E_{g_k}, E_{g_{k-1}}]$ – группы энергий частицы k .

Расчеты в докладе приводятся для групповых разбиений: 14,19; 13,91; 8,18; 3,68; 1,35; 0,41; 0,15; 0,041; 0,0055 [МэВ] – границы групп g' ; 14,19; 13,1; 11,0; 7,3; 5,2; 1,35; 0,0055 [МэВ] – границы групп g_k .

Групповые сечения рассчитываются по формуле

$$\sigma_{g'}^n = \frac{\int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \psi(E') \sigma^n(E') dE'}{\Psi_{g'}}, \quad (1)$$

где $\sigma^n(E')$ – сечение в точке E' , $\psi(E')$ – весовая функция, имеющая физический смысл потока нейтронов, $\Psi_{g'}$ – групповой поток, который находится по формуле

$$\Psi_{g'} = \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \psi(E') dE'. \quad (2)$$

В общем случае величины $\sigma_{g'}^n$ и $\Psi_{g'}$ зависят от температур ядер среды.

Сечения и соответствующие им энергии налетающей частицы содержатся в файле MF=3 [3] ENDF.

Так как функции в формулах (1) и (2) кусочно-линейные, то интегралы в этих формулах рассчитываются аналитически.

Расчет групповых сечений $\sigma_{g'}^n$ показал, что результаты, полученные программой RMK2 и комплексом GROUND, совпадают для всех рассматриваемых нами реакций.

2. Расчет матриц групповых переходов и матриц коэффициентов Фурье индикатрисы выхода частиц в ЛСК

Элементы матрицы групповых переходов рассчитываются по формуле

$$\xi_{g' \rightarrow g_k}^{k,n} = \frac{\int_{E_{g' \rightarrow g_k, k, n}^{\min}}^{E_{g' \rightarrow g_k, k, n}^{\max}} \psi(E') \sigma^n(E') \left[\int_{E_{g' \rightarrow g_k, k}^{\min}}^{E_{g' \rightarrow g_k, k}^{\max}} f(E', \chi) d\chi \right] dE'}{\Psi_{g'} \sigma_{g'}^n}, \quad (3)$$

где χ – косинус угла рассеяния частицы k в СЦМ ($\chi = \chi_k$), $f = f^{k,n}(E', \chi)$ – функция плотности вероятности выхода частицы k в СЦМ,

$$\int_{-1}^1 f(E', \chi) d\chi = 1.$$

Для расчета матриц групповых переходов $\xi_{g' \rightarrow g_k}^{k,n}$ помимо данных о сечениях используются угловые распределения продуктов реакций (MF=4) [3]. Для определенного типа реакции угловые распределения могут задаваться двумя способами: либо таблицами нормированных распределений вероятностей $f(E', \chi)$ в точках E' налетающих нейтронов, либо коэффициентами разложения по полиномам Лежандра $f_l(E')$. В этом случае угловые распределения определяются по формуле

$$f(E', \chi) = \sum_{l=0}^{L^n} \frac{2l+1}{2} f_l(E') P_l(\chi),$$

где $P_l(\chi)$ – полином Лежандра степени l .

Для расчета пределов интегрирования по переменной χ используются следующие выражения:

$$\chi \in \left[X_{g' \rightarrow g_k, k}^{\min}(E'), X_{g' \rightarrow g_k, k}^{\max}(E') \right],$$

где

$$X_{g' \rightarrow g_k, k}^{\min}(E') = \max \left\{ -1, \mathbb{X}_k \left(E', \varepsilon_{k, g', g_k}^{\min} \right) \right\}, \quad (4)$$

$$X_{g' \rightarrow g_k, k}^{\max}(E') = \min \left\{ +1, \mathbb{X}_k \left(E', \varepsilon_{k, g', g_k}^{\max} \right) \right\},$$

$$\mathbb{X}_k(E', E) = \frac{MM' E - (\mathbb{R}_k^2(E') + 1) E'}{A_k 2E' \mathbb{R}_k(E')}, \quad (5)$$

$$\mathbb{R}_k(E') = \sqrt{\frac{1}{U_k} \left(1 - \frac{\bar{E}^n}{E'} \right)},$$

$$R_k = \mathbb{R}_k(E'), \quad (6)$$

$$U_k = \frac{A_k}{(M - A_k) A_2},$$

$$\bar{E}^n = \frac{M'}{A_2} (-Q^n) -$$

энергия порога в пороговых реакциях, (7)

$$A_k = \frac{m_k}{m_1}, \quad A_1 = 1, \quad M' = A_1 + A_2, \quad M = A_3 + A_4. \quad (8)$$

Величины $\varepsilon_{k, g', g_k}^{\min}$ и $\varepsilon_{k, g', g_k}^{\max}$ определим позже.

Поскольку в СЦМ суммарный импульс равен нулю, то частицы 3 и 4 движутся в противоположных направлениях, и, следовательно, $\chi_4 = -\chi_3$. Если функция f задана для частицы $k = 4$, то пределы интегрирования по переменной χ для частицы $k = 3$ вычисляются с учетом следующих функций

$$X_{k, g' \rightarrow g_k}^{\min}(E') = \max \left\{ -1, \mathbb{X}_k \left(E', \varepsilon_{k, g', g_k}^{\max} \right) \right\}, \quad (9)$$

$$X_{k, g' \rightarrow g_k}^{\max}(E') = \min \left\{ +1, \mathbb{X}_k \left(E', \varepsilon_{k, g', g_k}^{\min} \right) \right\},$$

$$\text{где } \mathbb{X}_k(E', E) = \frac{MM' E - (\mathbb{R}_k^2(E') + 1) E'}{A_k} \cdot \frac{1}{-2E' \mathbb{R}_k(E')}.$$

Программа RMK2 имеет возможность рассчитать групповое распределение кинетической энергии быстрой частицы сорта k для инициирующего нейтрона группы g' :

$$[\xi E]_{g' \rightarrow g_k}^{k,n} = \frac{1}{\Psi_{g'} \sigma_{g'}^n} \int_{E_{g' \rightarrow g_k, k, n}^{\min}}^{E_{g' \rightarrow g_k, k, n}^{\max}} \Psi(E') \sigma^n(E') \times \left[\int_{X_{g' \rightarrow g_k, k}^{\min}(E')}^{X_{g' \rightarrow g_k, k}^{\max}(E')} E_k(E', \chi) f(E', \chi) d\chi \right] dE', \quad (10)$$

где $E_k = \frac{A_k E'}{M' M} (R_k^2 + 1 + 2\chi R_k)$ – кинетическая энергия частицы k в ЛСК, $\chi = \chi_k$.

Точные границы для величины E_k : $E_k \in [\mathcal{E}_k^{\min}(E'), \mathcal{E}_k^{\max}(E')]$,

где

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_k^{\min}(E') &= E' \frac{A_k}{MM'} [\mathbb{R}_k(E') - 1]^2, \\ \mathcal{E}_k^{\max}(E') &= E' \frac{A_k}{MM'} [\mathbb{R}_k(E') + 1]^2. \end{aligned} \quad (11)$$

Баланс энергии определяется равенством

$$E_{g'}^n + Q^n = \sum_{g_3=1}^{G_3} [\xi E]_{g' \rightarrow g_3}^{3,n} + \sum_{g_4=1}^{G_4} [\xi E]_{g' \rightarrow g_4}^{4,n},$$

где $E_{g'}^n = \frac{\int_{E_{g'}^{\min}}^{E_{g'}^{\max}} \Psi(E') \sigma^n(E') E' dE'}{\Psi_{g'} \sigma_{g'}^n}$ – энергия ини-

цирующих нейтронов группы g' .

Анализ показал, что баланс выполняется с высокой точностью.

Для расчета индикатрисы выхода частиц в ЛСК используется функция $w_{g' \rightarrow g_k}^{k,n}(\mu)$, которая представляется конечным рядом Фурье по полиномам Лежандра

$$w_{g' \rightarrow g_k}^{k,n}(\mu) = \sum_{l=0}^{L^n} \frac{2l+1}{2} w_{g' \rightarrow g_k}^{k,n,l} P_l(\mu).$$

Элементы матрицы коэффициентов Фурье определяются по формуле

$$w_{g' \rightarrow g_k}^{k,n,l} = \frac{\int_{E_{g' \rightarrow g_k, k, n}^{\min}}^{E_{g' \rightarrow g_k, k, n}^{\max}} \Psi(E') \sigma^n(E') \left[\int_{X_{g' \rightarrow g_k, k}^{\min}(E')}^{X_{g' \rightarrow g_k, k}^{\max}(E')} f(E', \chi) P_l(\mu) d\chi \right] dE'}{\Psi_{g'} \sigma_{g'}^n \xi_{g' \rightarrow g_k}^{k,n}}, \quad (12)$$

где $\mu = \frac{1 + R_k \chi}{\sqrt{1 + R_k^2 + 2R_k \chi}}$ – косинус угла рассеяния

частицы k в ЛСК.

Далее рассмотрим основные двухчастичные нейтронно-ядерные процессы.

2.1. Реакция упругого рассеяния

Особенность связана с условием $Q_n = 0$. Полагаем $A_2 = A_3$, $A_4 = A_1 = 1$.

Область интегрирования по переменной E' для частицы $k = 3$ (ядра отдачи):

$$E' \in [E_{k, g' \rightarrow g_k}^{\min}, E_{k, g' \rightarrow g_k}^{\max}] \subseteq [E_{g'}, E_{g'-1}],$$

где

$$\begin{aligned} E_{k, g' \rightarrow g_k}^{\min} &= \max \left\{ E_{g'}, \frac{1}{C_k^{\max}} \varepsilon_{k, g', g_k}^{\min} \right\}, \quad E_{k, g' \rightarrow g_k}^{\max} = E_{g'-1}, \\ \left. \begin{aligned} \varepsilon_{k, g', g_k}^{\min} &= 0, \quad \text{если } g_k = G_k \\ \varepsilon_{k, g', g_k}^{\min} &= E_{k, g_k} \quad \text{в других случаях} \end{aligned} \right\}, \quad C_k^{\max} = \frac{A_k (R_k + 1)^2}{M^2}. \end{aligned}$$

В данном случае $R_3 = \sqrt{\frac{A_4}{A_3}} A_2 = 1$, следова-

тельно, $C_3^{\max} = \frac{4A_3}{M^2} = \frac{4A_2}{M^2}$.

Для нахождения пределов интегрирования по переменной E' для частицы $k = 4$ (нейтрона или легкого ядра) используем выражения

$$\begin{aligned} E_{k, g' \rightarrow g_k}^{\min} &= \max \left\{ E_{g'}, \frac{1}{C_k^{\max}} \varepsilon_{k, g', g_k}^{\min} \right\}, \\ E_{k, g' \rightarrow g_k}^{\max} &= \min \left\{ E_{g'-1}, \frac{1}{C_k^{\min}} \varepsilon_{k, g', g_k}^{\max} \right\}, \end{aligned}$$

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_{k, g', g_k}^{\min} &= E_{k, g'}^{\min}, \quad \varepsilon_{k, g', g_k}^{\max} = E_{k, g'}^{\max}, \quad G_k = 1; \\ \varepsilon_{k, g', g_k}^{\min} &= \max \left\{ E_{k, g'}^{\min}, E_{k, g_k} \right\}, \quad \varepsilon_{k, g', g_k}^{\max} = E_{k, g'}^{\max}, \\ &\text{если } g_k = 1, \quad g_k \neq G_k; \\ \varepsilon_{k, g', g_k}^{\min} &= E_{k, g'}^{\min}, \quad \varepsilon_{k, g', g_k}^{\max} = \min \left\{ E_{k, g'}^{\max}, E_{k, g_k - 1} \right\}, \\ &\text{если } g_k = G_k, \quad g_k \neq 1; \\ \varepsilon_{k, g', g_k}^{\min} &= \max \left\{ E_{k, g'}^{\min}, E_{k, g_k} \right\}, \\ \varepsilon_{k, g', g_k}^{\max} &= \min \left\{ E_{k, g'}^{\max}, E_{k, g_k - 1} \right\}, \quad g_k \neq 1, \quad g_k \neq G_k \end{aligned} \right\},$$

$$E_{k,g'}^{\min} = \mathcal{E}_k^{\min}(E_{g'}) = E_{g'} C_k^{\min},$$

$$E_{k,g'}^{\max} = \mathcal{E}_k^{\max}(E_{g'-1}) = E_{g'-1},$$

$$R_4 = A_2, \quad C_4^{\min} = \left(\frac{A_2 - 1}{A_2 + 1} \right)^2, \quad C_4^{\max} = A_4 = 1.$$

Величины \mathcal{E}_k^{\min} и \mathcal{E}_k^{\max} вычисляются с помощью формул (11).

В формулах (3), (10), (12) интегралы по углу рассчитываются аналитически, интегралы по энергии – методом численного интегрирования с помощью квадратур Гаусса [4, 5]. Отметим, что программа RMK2 имеет возможность использования большого числа узлов и весов, при этом используются данные работы [0].

В табл. 1 представлены результаты расчета матрицы $\xi_{g' \rightarrow g_k}^{k,n}$ для протона (ядра отдачи), образовав-

шегося в результате упругого рассеяния нейтронов на неподвижном ядре ^1H . Из табл. 1 видно, что нормировка матрицы $\xi_{g' \rightarrow g_k}^{k,n}$ на единицу выполняется с достаточной для практики точностью (см. строку «Сумма»).

В табл. 2 представлены результаты расчета матрицы группового распределения кинетической энергии $[\xi E]_{g' \rightarrow g_k}^{k,n}$ для протона, образовавшегося в результате реакции упругого рассеяния нейтронов на ядре ^1H .

В табл. 3 приводятся полученные для упругого рассеяния значения матрицы коэффициентов Фурье для рассеянного протона. Данные приводятся для первой гармоники ($l = 1$), имеющей физический смысл среднего косинуса угла рассеяния.

Таблица 1

Результаты расчета $\xi_{g' \rightarrow g_k}^{k,n}$ для протона: $MT = 2, \psi \equiv 1$

$\xi_{g' \rightarrow g_k}^{k,n}$	Номер g'							
	1	2	3	4	5	6	7	8
Номер g_k	1	2	3	4	5	6	7	8
1	0,0708	0,0036	0	0	0	0	0	0
2	0,1537	0,0472	0	0	0	0	0	0
3	0,2648	0,2650	0,0087	0	0	0	0	0
4	0,1481	0,1993	0,1113	0	0	0	0	0
5	0,2689	0,3601	0,6342	0,3919	0	0	0	0
6	0,0937	0,1248	0,2458	0,6081	1	1	1	1
Сумма	1	1	1	1	1	1	1	1

Таблица 2

Результаты расчета $[\xi E]_{g' \rightarrow g_k}^{k,n}$ для протона: $MT = 2, \psi \equiv 1$

$[\xi E]_{g' \rightarrow g_k}^{k,n}, \text{ МэВ}$	Номер g'							
	1	2	3	4	5	6	7	8
Номер g_k	1	2	3	4	5	6	7	8
1	0,9613	0,0477	0	0	0	0	0	0
2	1,8521	0,5579	0	0	0	0	0	0
3	2,4248	2,3474	0,0659	0	0	0	0	0
4	0,9258	1,2461	0,6690	0	0	0	0	0
5	0,8817	1,1814	1,9726	0,7939	0	0	0	0
6	0,0633	0,0843	0,1662	0,4112	0,4166	0,1349	0,0460	0,0113

Таблица 3

Результаты расчета $w_{g' \rightarrow g_k}^{k,n,l}$ для протона: $l = 1, MT = 2, \psi \equiv 1$

$w_{g' \rightarrow g_k}^{k,n,l}$	Номер g'							
	1	2	3	4	5	6	7	8
Номер g_k	1	2	3	4	5	6	7	8
1	0,9828	0,9902	0	0	0	0	0	0
2	0,9260	0,9615	0	0	0	0	0	0
3	0,8059	0,8973	0,9816	0	0	0	0	0
4	0,6663	0,7752	0,9295	0	0	0	0	0
5	0,4756	0,5534	0,7468	0,8697	0	0	0	0
6	0,2067	0,2405	0,3398	0,5378	0,6671	0,6668	0,6667	0,6667

2.2. Реакция эндотермического поглощения

Зафиксируем группу g' . Для расчета групповых констант учитываются только «быстрые» группы g' , для которых истинно неравенство $\bar{E}^n < E_{g'-1}$.

Для случая эндотермического поглощения МТ = 104 на ${}^3\text{He}$ истинно условие

$$A_k < A_2 \text{ для } k=3,4. \quad (13)$$

Ниже приведен расчет пределов интегрирования $E_{k,g' \rightarrow g_k}^{\min}$ и $E_{k,g' \rightarrow g_k}^{\max}$ из формулы (3).

Значениям E' из рассматриваемой группы g' ($E' \in [E_{g'}^*, E_{g'-1}]$, $E_{g'}^* = \max(E_{g'}, \bar{E}^n)$) отвечают значения E_k из множества $[E_{k,g'}^{\min}, E_{k,g'}^{\max}]$, где

$$E_{k,g'}^{\min} = \begin{cases} \mathcal{E}_k^{\min}(E_{g'-1}), & \text{если } E_{g'-1} < \tilde{E}'_k \\ \mathcal{E}_k^{\min}(E_{g'}^*), & \text{если } E_{g'}^* > \tilde{E}'_k \\ 0 & \text{в других случаях} \end{cases},$$

где
$$\tilde{E}'_k = \frac{\bar{E}^n}{1-U_k}, \quad (14)$$

$$E_{k,g'}^{\max} = \mathcal{E}_k^{\max}(E_{g'-1}). \quad (15)$$

Зафиксируем группу g_k . Пусть $g_k \neq 1$ и $g_k \neq G_k$. Интерес представляют только те группы g_k , для которых истинны неравенства

$$E_{k,g_k} < E_{k,g'}^{\max}, \quad (16)$$

$$E_{k,g'}^{\min} < E_{k,g_k-1}. \quad (17)$$

Для области пересечения

$$E_k \in [\mathcal{E}_{k,g',g_k}^{\min}, \mathcal{E}_{k,g',g_k}^{\max}],$$

где $[\mathcal{E}_{k,g',g_k}^{\min}, \mathcal{E}_{k,g',g_k}^{\max}] \subseteq [E_{k,g_k}, E_{k,g_k-1}]$ имеем

$$\mathcal{E}_{k,g',g_k}^{\min} = \max\{E_{k,g'}^{\min}, E_{k,g_k}\},$$

$$\mathcal{E}_{k,g',g_k}^{\max} = \min\{E_{k,g'}^{\max}, E_{k,g_k-1}\}.$$

Для $g_k = 1$ и $g_k \neq G_k$, если истинно неравенство (16), переход $g' \rightarrow g_k$ возможен, причем

$$\mathcal{E}_{k,g',g_k}^{\min} = \max\{E_{k,g'}^{\min}, E_{k,g_k}\}, \quad \mathcal{E}_{k,g',g_k}^{\max} = E_{k,g'}^{\max}.$$

Для $g_k = G_k$ и $g_k \neq 1$, если истинно неравенство (17), переход $g' \rightarrow g_k$ возможен, причем

$$\mathcal{E}_{k,g',g_k}^{\min} = E_{k,g'}^{\min}, \quad \mathcal{E}_{k,g',g_k}^{\max} = \min\{E_{k,g'}^{\max}, E_{k,g_k-1}\}.$$

Далее рассчитываются

$$E_{k,g',g_k}^{\min} = \begin{cases} \mathcal{E}_k^{\min}(\mathcal{E}_{k,g',g_k}^{\max}), & \text{если } \mathcal{E}_{k,g',g_k}^{\max} < \tilde{E}'_k \\ \mathcal{E}_k^{\min}(\mathcal{E}_{k,g',g_k}^{\min}), & \text{если } \mathcal{E}_{k,g',g_k}^{\min} > \tilde{E}'_k \\ \bar{E}^n & \text{в других случаях} \end{cases}, \quad (18)$$

$$E_{k,g',g_k}^{\max} = \mathcal{E}_k^{\max}(\mathcal{E}_{k,g',g_k}^{\max}), \quad (19)$$

где

$$\mathcal{E}_k^{\max}(E) = \frac{\bar{E}^n}{1-U_k \left(\frac{1 + \sqrt{Y_k(E) \left(\frac{1+Y_k(E)}{U_k} - 1 \right)}}{1+Y_k(E)} \right)^2}, \quad (20)$$

$$\mathcal{E}_k^{\min}(E) = \frac{\bar{E}^n}{1-U_k \left(\frac{-1 + \sqrt{Y_k(E) \left(\frac{1+Y_k(E)}{U_k} - 1 \right)}}{1+Y_k(E)} \right)^2}, \quad (21)$$

$$Y_k(E) = \frac{M}{M-A_k} \frac{E}{(-Q^n)}, \quad (22)$$

$$\tilde{E}'_k = \bar{E}^n \frac{A_k}{MM'} = \frac{(-Q^n)A_k}{A_2M}. \quad (23)$$

В случае истинности неравенств $E_{g'}^* < E_{k,g',g_k}^{\max}$, $E_{k,g',g_k}^{\min} < E_{g'-1}$ пределы интегрирования по энергии: $E' \in [E_{k,g' \rightarrow g_k}^{\min}, E_{k,g' \rightarrow g_k}^{\max}]$, где

$$E_{k,g' \rightarrow g_k}^{\min} = \max\{E_{k,g',g_k}^{\min}, E_{g'}^*\}, \quad (24)$$

$$E_{k,g' \rightarrow g_k}^{\max} = \min\{E_{k,g',g_k}^{\max}, E_{g'-1}\}.$$

Величина $f(E', \chi)$ для МТ = 104 на ${}^3\text{He}$ для одного и второго дейтрона равновероятна, следовательно, $f(E', \chi) = \frac{1}{2}$.

Пределы интегрирования по углу рассчитываются с помощью формул (4)–(9).

Для расчета элементов матрицы $\xi_{g' \rightarrow g_k}^{k,n}$ используются те же методы, что и в разделе 2.1.

Расчет интеграла по углу в формуле (12) проводился двумя способами. Первый, методом численного интегрирования с помощью квадратур Гаусса [4, 5]. Второй способ – аналитический расчет. Приведем результаты аналитического расчета, его описание опустим, отметим лишь, что данный расчет подразумевает разложение полинома в классический вид и использование рекуррентных соотношений.

2.3. Реакция экзотермического поглощения

Расчет проводится в полной аналогии с расчетами из разделов 2.1 и 2.2. Далее приводятся только те положения методики расчета, которые являются специфичными для экзотермического процесса.

Также как и в разделе 2.2 рассмотрим случай, когда действительно условие (13). Данное условие подходит для протона, образовавшегося в результате реакции экзотермического поглощения $MT = 103$ на ${}^3\text{He}$.

Рассчитываются величины:

$$\begin{aligned}\tilde{E}'_k &= \frac{(-\bar{E}^n)}{1/U_k - 1}, \\ E_k^{\min} &= \mathcal{E}_k^{\min}(\tilde{E}'_k) \approx Q^n \frac{A_2 - A_k}{A_2}, \\ \tilde{E}_k &= Q^n \frac{M - A_k}{M}.\end{aligned}\quad (25)$$

Интерес представляют только «быстрые» группы g_k , для которых истинно неравенство $E_k^{\min} < E_{k,g_{k-1}}$. В формуле (18) значение \bar{E}^n заменяется на ноль. Также есть изменения в расчете величин $\mathbb{E}_k^{\max}(E)$ и $\mathbb{E}_k^{\min}(E)$:

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_k^{\max}(E) &= \frac{\bar{E}^n}{1 - U_k \left(\frac{1 - \frac{Y_k(E)}{U_k}}{1 + \sqrt{Y_k(E) \left(\frac{1 + Y_k(E)}{U_k} - 1 \right)}} \right)^2}, \\ \mathbb{E}_k^{\min}(E) &= \frac{(1 + Y_k(E))^2 \bar{E}^n}{(1 + Y_k(E))^2 - U_k \left(1 + \sqrt{Y_k(E) \left(\frac{1 + Y_k(E)}{U_k} - 1 \right)} \right)^2},\end{aligned}\quad (26)$$

где $Y_k(E)$ рассчитывается по формуле (22). В случае истинности неравенств $E_{g'} < E'_{k,g',g_k}{}^{\max}$, $E'_{k,g',g_k}{}^{\min} < E_{g'-1}$ определяем пределы интегрирования по переменной E' :

$$E' \in \left[E_{k,g' \rightarrow g_k}^{\min}, E_{k,g' \rightarrow g_k}^{\max} \right],$$

где

$$\begin{aligned}E_{k,g' \rightarrow g_k}^{\min} &= \max \left\{ E'_{k,g',g_k}{}^{\min}, E_{g'} \right\}, \\ E_{k,g' \rightarrow g_k}^{\max} &= \min \left\{ E'_{k,g',g_k}{}^{\max}, E_{g'-1} \right\}.\end{aligned}\quad (28)$$

Далее отметим, что для тритона, образовавшегося в результате экзотермического поглощения $MT = 103$ на ${}^3\text{He}$, следует использовать другой спо-

соб расчета, а именно, если истинно условие $A_k \approx A_2$, а в рассматриваемом нами случае масса атома ${}^3\text{H}$ ($m_3 = 3,016\,049$) примерно равна массе атома-мишени ${}^3\text{He}$ ($m_2 = 3,016\,029$). Для рассматриваемой модели расчета задаются

$$A_3 = A_2 \text{ и } A_4 = 1, \quad (29)$$

что автоматически приводит к значению

$$U_k = 1. \quad (30)$$

Расчет констант для частицы 4, в нашем случае для протона, можно также проводить с учетом равенств (29).

Отметим некоторые особенности кинематики, которые порождаются равенством (30). В данном случае определяется только функция $\mathbb{E}_k^{\min}(E)$. Также требуется небольшая корректировка алгоритма, рассчитывающего пределы интегрирования по переменной E' . Полагаем $E_{k,g'}^{\min} = \mathcal{E}_k^{\min}(E_{g'-1})$. В случае истинности $E'_{k,g',g_k}{}^{\min} < E_{g'-1}$ определяем пределы интегрирования:

$$E' \in \left[E_{k,g' \rightarrow g_k}^{\min}, E_{k,g' \rightarrow g_k}^{\max} \right],$$

где $E_{k,g' \rightarrow g_k}^{\min} = \max \left\{ E'_{k,g',g_k}{}^{\min}, E_{g'} \right\}$, $E_{k,g' \rightarrow g_k}^{\max} = E_{g'-1}$.

Заметим, что данный расчет также подходит и для эндотермического поглощения при условии $A_k \approx A_2$.

Заключение

В докладе приводится краткое описание методов и алгоритмов расчета групповых констант: групповых сечений, матриц групповых переходов, матриц коэффициентов Фурье для упругого рассеяния нейтронов, реакций эндотермического и экзотермического нейтронного поглощения.

Примером упругого рассеяния нейтронов послужила реакция на ${}^1\text{H}$. Для эндотермического поглощения рассмотрена реакция $MT = 104$ на ядре ${}^3\text{He}$. Для экзотермического – $MT = 103$ на ядре ${}^3\text{He}$. Продемонстрированы полученные программой RMK2 результаты расчета для вторичных частиц.

Предполагаем, что в ближайшем будущем возможности программы позволят рассчитывать характеристики не только нейтронно-ядерных взаимодействий для легких мишеней, а также получать групповые данные для реакций «на лету».

Литература

1. Алексеев А. В., Крутько Н. А., Бнятов А. В., Касаткин С. С. Программный комплекс GROUND константного обеспечения ядерно-физическими данными // Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», Доклад на

66-й международной конференции «Ядро-2016» по проблемам ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра. 11–14 октября 2016 г.

2. MacFarlane R. E., Muir D. W. The NJOY Nuclear Data Processing System. Version 91, LA-12740-M, October 1994.

3. Herman M. and members of the cross section evaluation working group ENDF-6 Formats Manual. Report BNL-NCS-44945-05-Rev. July 1990 // N.Y.: BNL, Revised June 2005.

4. Крылов В. И., Шульгина Л. Т. Справочная книга по численному интегрированию. М., Наука, 1966.

5. Davis P., Rabinowitz P. Abscissas and weights for Gaussian quadratures of high order // J. Research NBS. 1956. Vol. 56, N 1. P. 35–37.

6. Davis P., Rabinowitz P. Additional abscissas and weights for Gaussian quadratures of high order: Values for $n = 64, 80, \text{ and } 96$ // J. Research NBS. 1958. Vol. 60, N 6. P. 613–614.