

МНОГОУРОВНЕВАЯ ПАРАМЕТРИЗАЦИЯ НЕЙТРОННЫХ РЕЗОНАНСНЫХ СЕЧЕНИЙ

А.А.Лукьянов

Софийский университет, София, Болгария

Н.Б.Янева

Институт ядерных исследований и ядерной энергетики БАН,
София, Болгария

Исходя из классических выводов R -матричной теории Вигнера формулируются методологические принципы построения различных практически реализуемых методов многоуровневой параметризации нейтронных резонансных сечений. Рассмотрена общая структура схемы SAMMY, эффективно используемой в последние годы для анализа и представления детальной энергетической структуры сечений в широких интервалах области разрешенных уровней. Показано, что, кроме этой схемы, подобные результаты могут быть получены в комбинированном методе и методе строгого полюсного разложения U -матрицы. Представлены алгоритмы преобразования параметров разных методов и рассмотрены их преимущества при практическом использовании данных библиотеки ENDF/B-VI.

The methodological principles for construction of different practically realizable methods for neutron resonance cross sections multilevel parametrization are formulated by derivation from the classic results of Wigner R -matrix theory. The general structure of the scheme of well known code SAMMY, which is effectively used during the last years for the analysis and presentation of the cross sections detailed structure in wide intervals of the resolved levels region, is considered. It is shown, that similar results can be achieved also with the combined method and the method of the rigorous pole expansion of U -matrix. The algorithms for transformation of different methods parameters are presented and the advantages of these in practical use of ENDF/B-VI parameters are discussed.

ВВЕДЕНИЕ

На фоне современных впечатляющих достижений физики ядра, таких как открытие новых сверхтяжелых элементов в реакциях с ионами или обнаружение уровней ядер с аномально большими моментами (гипердеформация ядер), как-то незаметно прошли также неординарные события в такой, казавшейся «спокойной», области, как спектрометрия резонансных

нейтронов. Объем и точность экспериментальных данных за последние 10 лет здесь настолько увеличились, что для многих ядер практически исчезла так называемая «область неразрешенных резонансов». К уровням s -волны в нейтронных каналах добавилось множество резонансов с $l = 1, 2, \dots$, довольно ясно проявляются интерференционные минимумы в сечениях, появилось множество данных по измерению спектров γ -квантов в отдельных резонансах, по взаимодействию поляризованных нейтронов с ориентированными ядрами и т.п. Для многих ядер число экспериментально разрешенных резонансов исчисляется сотнями, и для большинства из них определены такие параметры уровней, как энергия, полная и парциальные ширины, а также значения спина и четности. В этой ситуации согласованный анализ и оценка рекомендованных данных по резонансным сечениям различных реакций в широких энергетических интервалах требуют привлечения весьма общих многоуровневых методов параметризации, основанных на выводах формальной теории ядерных реакций [1—5].

Иллюстрацией прогресса в нейтронной спектроскопии могут служить, в частности, современные оцененные данные для резонансных сечений наиболее важных для практики ядер ^{235}U и ^{239}Pu , где область разрешенных уровней за последние годы расширилась почти в 10 раз (см. рисунок) [5,6]. Для воспроизведения детальной энергетической структуры этих сечений в библиотеке ядерных данных ENDF/B-IV используется непосредственно R -матричный метод параметризации (схема SAMMY) [5,6]. Здесь в общих кинематических соотношениях для полного сечения

$$\sigma(E) = 2\pi k^{-2} \sum_J g(J) \sum_n \text{Re} [1 - U_{nn}^J(E)],$$

суммарного сечения поглощения нейтронов (деление и радиационный захват)

$$\sigma_a(E) = \pi k^{-2} \sum_J g(J) \sum_n \text{Re} [1 - |U_{nn}^J(E)|^2]$$

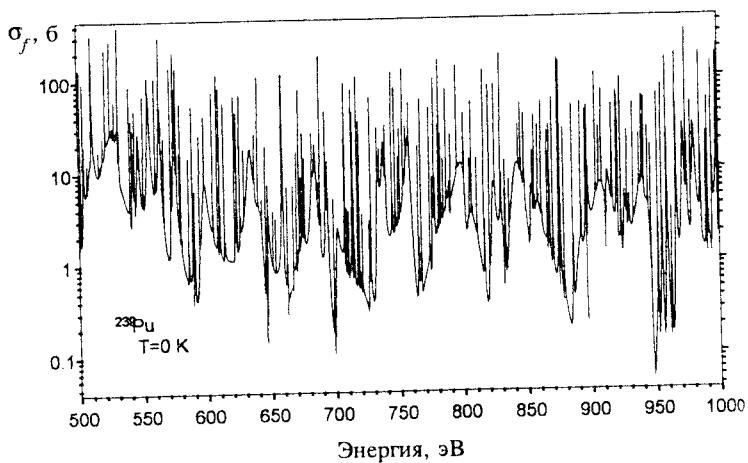
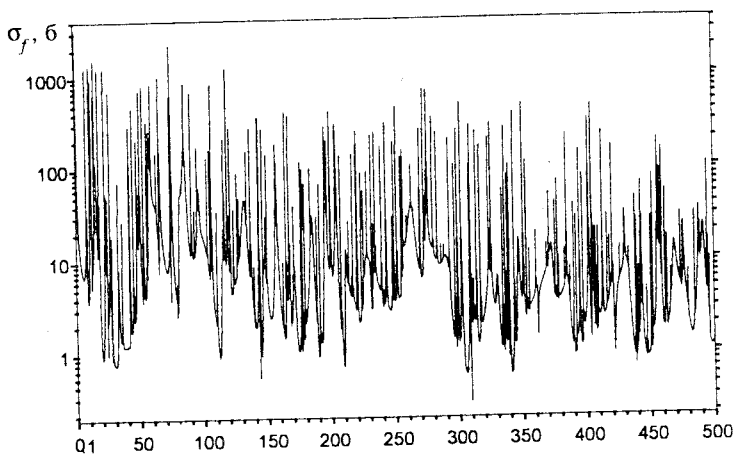
и сечения канала реакции c (в данном случае канала деления $c(f)$)

$$\sigma_c(E) = \pi k^{-2} \sum_J g(J) \sum_n \text{Re} |U_{cn}^J(E)|^2 \quad (1)$$

элементы матрицы столкновений U_{cn}^J для нескольких делительных (c) и нейтронных (n) каналов для каждого из возможных значений полного момента J и четности выбираются в виде

$$U_{cn}^J(E) = e^{-i\varphi_c} \left[\frac{2}{1 - iK^J(E)} - 1 \right]_{cn} e^{-i\varphi_n}, \quad (2)$$

где φ_n — фаза рассеяния, а


 Сечение деления ^{239}Pu (ENDF/B-VI [1])

$$K_{c'c}^J(E) = \frac{1}{2} \sum_{\lambda(J)} \Gamma_{\lambda c'}^{1/2} \Gamma_{\lambda c}^{-1/2} / (E_{\lambda} - E - i\Gamma_{\lambda\gamma}/2) \quad (3)$$

— аналог R -матрицы Вигнера с исключенными каналами радиационного захвата [1—4]. Параметры E_{λ} , $\Gamma_{\lambda\gamma}$, $\Gamma_{\lambda c(f)}$ предполагаются не зависящими от энергии, а $\Gamma_{\lambda l}(E) = \Gamma_{\lambda l}^0 \sqrt{E}$ (табл.1), где $\Gamma_{\lambda l}^0$ — приведенная нейтронная ширина (определяемая для $l = 0$ как $\Gamma_{\lambda l}^0 = \Gamma_{\lambda l}^{\text{рез}} / \sqrt{E_{\lambda}^{\text{рез}}}$).

Таблица 1. R-матричные параметры ^{239}Pu

#	E_{λ} , эВ	$\Gamma_{\lambda l}^0$, эВ ^{1/2}	$\Gamma_{\lambda \gamma}$, эВ ^{1/2}	$\Gamma_{\lambda \gamma_1}$, эВ ^{1/2}	$\Gamma_{\lambda \gamma_2}$, эВ ^{1/2}	J
1	-1.5002E+2	3.5017E-2	4.5720E-2	1.9050E-1	0.0000E-1	1
2	-1.5467E+1	3.4454E-5	2.6850E-2	-2.5530E-6	0.0000E-1	1
3	-6.9087E+0	4.7024E-3	2.6000E-1	-9.4170E-1	2.9620E-1	0
4	-2.1944E-1	6.5045E-5	2.5910E-3	-1.6140E-3	-5.8250E-1	0
5	2.9562E-1	1.4701E-4	3.9300E-2	5.7380E-2	0.0000E-1	1
6	7.8158E+0	2.8329E-4	3.7750E-2	-4.4750E-2	0.0000E-1	1
7	1.0928E+1	5.4299E-4	3.6120E-2	-1.5400E-1	0.0000E-1	1
8	1.1898E+1	2.8269E-4	3.7960E-2	2.0710E-2	0.0000E-1	1
9	1.4329E+1	1.5975E-4	2.9210E-2	5.9040E-2	0.0000E-1	1
10	1.4678E+1	4.9854E-4	3.9160E-2	3.0450E-2	0.0000E-1	1
11	1.5417E+1	5.2567E-4	4.2000E-2	-7.5480E-6	7.5500E-1	0
12	1.7657E+1	4.2908E-4	3.8240E-2	-3.6400E-2	0.0000E-1	1
13	2.2266E+1	5.4846E-4	4.1580E-2	-6.2990E-2	0.0000E-1	1
14	2.3933E+1	1.7522E-5	3.5340E-2	2.5880E-2	0.0000E-1	1
15	2.6269E+1	3.0105E-4	3.9040E-2	4.1120E-2	0.0000E-1	1
16	2.7288E+1	2.8581E-5	3.8710E-2	2.7880E-3	0.0000E-1	1
17	3.2327E+1	1.5310E-4	4.2520E-2	8.1710E-3	-1.2790E-1	0
18	3.5486E+1	4.5291E-5	4.0920E-2	3.5470E-3	0.0000E-1	1
19	4.1457E+1	5.1315E-4	4.8939E-2	-6.4090E-3	0.0000E-1	1
20	4.1736E+1	1.4473E-4	3.7700E-2	6.1030E-2	0.0000E-1	1
21	4.4531E+1	9.1891E-4	4.0030E-2	-4.3730E-3	0.0000E-1	1
22	4.7534E+1	7.0186E-4	3.1460E-2	4.8150E-1	-1.2740E-1	0
23	4.9576E+1	6.0730E-4	4.2000E-2	-1.0490E+0	4.9830E-3	0
24	5.0144E+1	4.5952E-4	2.2500E-2	-4.9960E-3	0.0000E-1	1
25	5.2648E+1	1.3038E-3	4.3940E-2	-9.0450E-3	0.0000E-1	1
26	5.5704E+1	2.0205E-4	3.7560E-2	2.4270E-2	0.0000E-1	1
27	5.6924E+1	1.5666E-3	4.2000E-2	-2.2040E+0	2.5300E-2	0
28	5.9291E+1	5.7727E-4	3.3900E-2	9.8690E-2	0.0000E-1	1
29	6.1621E+1	3.5835E-3	4.2000E-2	7.0980E+0	6.6790E-3	0
30	6.3170E+1	7.9190E-5	3.5279E-2	7.2420E-2	0.0000E-1	1
31	6.5454E+1	4.6537E-4	2.4110E-2	4.5020E-1	-2.1170E-9	0
32	6.5793E+1	1.1948E-3	6.1610E-2	1.0910E-1	0.0000E-1	1
33	7.4167E+1	3.7285E-4	3.1210E-2	-2.9710E-2	0.0000E-1	1
34	7.4885E+1	3.0346E-4	4.2000E-2	1.2530E-3	-3.4030E-1	0
35	7.5034E+1	2.4116E-3	4.0160E-2	-8.9020E-2	0.0000E-1	1
36	7.9085E+1	4.8263E-6	4.1820E-2	6.1800E-3	0.0000E-1	1

#	E_{λ} , эВ	$\Gamma_{\lambda l}^0$, эВ ^{1/2}	$\Gamma_{\lambda \gamma}$, эВ ^{1/2}	$\Gamma_{\lambda f_i}$, эВ ^{1/2}	$\Gamma_{\lambda f_2}$, эВ ^{1/2}	J
37	8.0872E + 1	5.0095E - 4	4.2000E - 2	1.8600E + 0	- 1.7600E - 3	0
38	8.2774E + 1	3.6404E - 5	4.6850E - 2	5.1500E - 3	0.0000E - 1	1
39	8.5507E + 1	5.3974E - 3	5.1000E - 2	- 1.8440E + 0	3.0440E - 3	0
40	8.5618E + 1	8.8555E - 4	2.6180E - 2	5.8660E - 3	0.0000E - 1	1
41	9.0850E + 1	1.2810E - 3	3.3990E - 2	7.3610E - 3	0.0000E - 1	1
42	9.3079E + 1	6.9965E - 5	3.7640E - 2	- 2.8980E - 3	0.0000E - 1	1

400	9.9424E + 2	5.9972E - 4	4.3060E - 2	3.2550E - 2	0.0000E - 1	1
401	9.9797E + 2	1.1256E - 3	3.1420E - 2	- 2.7140E - 1	0.0000E - 1	1
402	9.9867E + 2	1.1167E - 3	3.9660E - 2	- 4.0760E - 2	0.0000E - 1	1
403	1.0050E + 3	2.4361E - 3	4.6000E - 2	1.1950E - 3	0.0000E - 1	1
404	1.0100E + 3	5.8243E - 3	4.6000E - 2	- 4.9200E + 0	2.0850E - 2	0
405	1.1000E + 3	3.6784E - 2	4.6000E - 2	4.2000E - 2	0.0000E - 1	1

Знаки ± при $\Gamma_{\lambda f}$ соответствуют знаку произведения $(\Gamma_{\lambda l}^0)^{1/2} \Gamma_{\lambda f_i}^{1/2}$.

Создание и реализация в многоуровневом анализе резонансных сечений программного комплекса SAMMY, несомненно, является существенным достижением группы ORNL [6,7], позволяющим в полной мере использовать современные данные о детальной энергетической структуре сечений в прикладных задачах. Однако воспроизведение здесь резонансных сечений по параметрам *K*-матрицы (3) приводит в общем случае к существенным вычислительным трудностям при учете доплеровского уширения резонансов, например, или нахождении резонансных интегралов в отдельных интервалах энергии, что связано как с необходимостью учета на каждом шаге интегрирования всего набора параметров уровней, так и со сложной матричной формой энергетической зависимости сечений (необходимость обращения матрицы $[1 - iK^J(E)]$ (2)). Вместе с тем весьма общие аналитические свойства элементов *U*-матрицы приводят к выводу о принципиальной возможности их представления в виде суммы полюсных членов по переменной *E* или $k = \sqrt{2\mu E} / \hbar$ [3,8]. В этом случае резонансные сечения воспроизводятся как сумма простых брейт-вигнеровских членов, что, несомненно, удобнее для практических приложений и не требует принципиального пересмотра существующих расчетных методов при использовании современной информации о резонансной структуре нейтронных сечений во всем интервале разрешенных уровней.

Полюсные формы матрицы столкновений характерны для формализмов Капура — Пайерлса [1] и Юмбле — Розенфельда [8]. И хотя общие схемы

преобразования параметров \mathbf{R} -матрицы к параметрам полюсных разложений в принципе известны, их практическая реализация стала актуальной лишь сейчас с появлением новых данных о резонансных сечениях в широких энергетических интервалах и результатов их многоуровневого анализа по схеме SAMMY [5,6]. В данной работе представлен обзор схем и методов, используемых при многоуровневой параметризации нейтронных резонансных сечений и алгоритмов для установления взаимосвязи между параметрами разных схем. В практическом плане нашей целью является построение удобных в приложениях многоуровневых выражений для сечений, математически тождественных SAMMY, т.е. воспроизводящих при соответствующем переопределении параметров реальную энергетическую структуру сечений во всей области разрешенных уровней.

1. R-МАТРИЧНЫЕ МЕТОДЫ ПАРАМЕТРИЗАЦИИ

Приведем здесь известные соотношения R -матричной теории Вигнера для матрицы столкновений $U(E)$ с элементами $U_{c'c}(E)$ и рангом, равным полному числу эффективных (при рассматриваемых энергиях) каналов. Как основное, выберем унитарное представление [1]:

$$U(E) = e^{-i\Phi} \mathbf{P}^{1/2} [1 - \mathbf{R}(E)\bar{\mathbf{L}}]^{-1} [1 - \mathbf{R}(E)\bar{\mathbf{L}}^*] \mathbf{P}^{-1/2} e^{-i\Phi}, \quad (4)$$

где $\exp[-i\Phi]$ и $\bar{\mathbf{L}}$ — диагональные матрицы внешних решений: Φ_c — фаза потенциального рассеяния, $\bar{L}_c = L_c + b_c$, b_c — вещественная константа граничного условия, $L_c = S_c + iP_c$ — логарифмическая производная на радиусе канала a_c , мнимая часть которой P_c — есть фактор проницаемости канала c (приложение 1). Элементы матрицы $\mathbf{R}(E)$ определяются в общем случае как суммы по полному набору собственных состояний во внутренней области ($0 < r_c < a_c$) с энергиями E_λ для фиксированного значения полного момента J и четности (соответствующие индексы в \mathbf{U} и \mathbf{R} мы здесь временно опускаем):

$$R_{c'c} = \sum_{\lambda} \gamma_{\lambda c'} \frac{1}{E_{\lambda} - E} \gamma_{\lambda c}, \quad (5)$$

где параметры E_λ и $\gamma_{\lambda c}$ — вещественные константы [1].

Можно также представить $R_{c'c}$ (5) как элементы матрицы каналов

$$\mathbf{R}(E) = \boldsymbol{\gamma}^T \frac{1}{\boldsymbol{\mathcal{E}} - E} \boldsymbol{\gamma}, \quad (6)$$

где \mathcal{E} — диагональная матрица уровней с элементами E_λ , γ — прямоугольная матрица ($\lambda \times c$) с элементами $\gamma_{\lambda c}$ (γ^T — транспонированная матрица). Введем также матрицу

$$\mathbf{G} = (\mathbf{1} - \overline{\mathbf{R}}\mathbf{L})^{-1}\mathbf{R}, \quad (\mathbf{G} = \mathbf{R} + \overline{\mathbf{R}}\mathbf{L}\mathbf{G}), \quad (7)$$

и если определить

$$\mathbf{G} = \gamma^T \mathbf{A}^{-1} \gamma, \quad (8)$$

то из соотношения (7) найдем матрицу уровней \mathbf{A} :

$$\mathbf{A} = \mathcal{E} - \mathbf{E} - \gamma \overline{\mathbf{L}} \gamma^T, \quad A_{\lambda\mu} = (E_\lambda - E) \delta_{\lambda\mu} - \xi_{\lambda\mu}, \quad (9)$$

где

$$\xi_{\lambda\mu} = (\gamma \overline{\mathbf{L}} \gamma^T)_{\lambda\mu} = \Delta_{\lambda\mu} + i\Gamma_{\lambda\mu}/2 = \sum_c \gamma_{\lambda c} (S_c - b_c) \gamma_{\mu c} + i \sum_c \gamma_{\lambda c} P_c \gamma_{\mu c}.$$

В результате получим так называемое альтернативное представление для $\mathbf{U}(E)$ (4) через матрицу уровней \mathbf{A} [1]:

$$\begin{aligned} \mathbf{U}(E) &= e^{-i\Phi} [1 + 2i\mathbf{P}^{1/2} \mathbf{G} \mathbf{P}^{1/2}] e^{-i\Phi} = \\ &= e^{-i\Phi} [1 + 2i\mathbf{P}^{1/2} \gamma^T \mathbf{A}^{-1} \gamma \mathbf{P}^{1/2}] e^{-i\Phi} \end{aligned} \quad (10)$$

или

$$U_{cn}(E) = e^{-i\Phi_c} [\delta_{cn} + 2iP_c^{1/2} \sum_{\lambda\mu} \gamma_{\lambda c} \gamma_{\mu n} (A^{-1})_{\lambda\mu} P_n^{1/2}] e^{-i\Phi_n} \quad (11)$$

(в обзоре [1] для \mathbf{A} используется обратное обозначение \mathbf{A}^{-1}).

Эти две тождественные формы $\mathbf{U}(E)$ -матрицы (4) и (11), определяемые в R -матричной теории Вигнера, уже более 40 лет служат методической основой для построения различных практических схем параметризации резонансных сечений и физического анализа параметров. Наиболее популярно, конечно, одноуровневое приближение (формулы Брейта — Вигнера), используемое для описания энергетической зависимости сечений в изолированных резонансах. Определяемые здесь параметры E_λ (энергии уровней) и резонансные ширины в отдельных каналах $\Gamma_{\lambda c}$ находят качественную интерпретацию в микроскопических моделях взаимодействия [1—3,9]. Известны статистические распределения величин этих параметров, стандартизованы процедуры учета доплеровского уширения резонансов, усреднения сечений по энергии, анализа данных по пропусканию резонансных нейтронов. Одноуровневое приближение используется также в теории и методах нейтронно-физического расчета ядерных реакторов [10].

Но уже двухуровневое приближение для случая двух близких резонансов ($\lambda = 1, 2$ в \mathbf{R} -матрице (5)) иллюстрирует эффект их интерференции, приводящий к увеличению или уменьшению сечений по сравнению с простой суммой одноуровневых формул, а иногда при наличии нерезонансного фона возможно и появление фиктивных резонансов [3—5]. Практически учет интерференции уровней наиболее существен для резонансных сечений делящихся ядер. Поэтому и задачи многоуровневой параметризации концентрируются в основном в приложениях к делящимся изотопам, хотя в последние годы R -матричный анализ эффективно используется и для анализа резонансных сечений неделяющихся ядер [7,11].

Очевидно, что при большом числе каналов реакций прямое использование в многоуровневом анализе R -матричных соотношений (4), (11) весьма проблематично из-за отсутствия полного набора данных по каждому из каналов и обилия свободных параметров. Необходимы определенные физические предположения, упрощающие анализ. Наиболее эффективным здесь оказалось приближение Райха — Мура (RM), предполагающее число каналов для радиационного захвата нейтронов большим со случайным (гауссовским) распределением величин соответствующих амплитуд $\gamma_{\lambda c}$, так что

$$2 \sum_{c(\gamma)} \gamma_{\lambda c} P_c \gamma_{\mu c} \approx \Gamma_{\lambda\gamma} \delta_{\lambda\mu}. \quad (12)$$

Погрешность RM -приближения оценивается малостью величины отношения

$$\sum_{c(\gamma)} \gamma_{\lambda c} P_c \gamma_{\mu c} / (E_\lambda - E_\mu) \ll 1 \quad (\lambda \neq \mu),$$

что практически, по-видимому, всегда выполняется. По крайней мере, до последнего времени при многоуровневой параметризации сечений не отмечались эффекты, связанные с ограниченностью RM -приближения. В то же время с его использованием резко уменьшается число явно учитываемых в анализе каналов, и в соотношениях для сечений (1) можно перейти к так называемой редуцированной матрице столкновений $U'(E)$, имеющей ранг, равный числу оставшихся после исключения радиационного захвата каналов (нейтронные и делительные в наших приложениях), и отличающейся от $U(E)$ (11) выбором матрицы уровней \mathbf{A} (9) в виде

$$A_{\lambda\mu} = (E_\lambda - E - i\Gamma_{\lambda\gamma}/2) \delta_{\lambda\mu} - \xi'_{\lambda\mu}, \quad (13)$$

где

$$\xi'_{\lambda\mu} = \sum_c \gamma_{\lambda c} \bar{L}_c \gamma_{\mu c} = \Delta'_{\lambda\mu} + i \sum_c \gamma_{\lambda c} P_c \gamma_{\mu c}$$

есть сумма по оставшимся каналам. В соответствующем основном представлении матрицы $U'(E)$ (4) элементы редуцированной R -матрицы определяются как

$$R'_{c'c} = \sum_{\lambda} \gamma_{\lambda c'} \frac{1}{E_{\lambda} - E - i\Gamma_{\lambda\gamma}/2} \gamma_{\lambda c}. \quad (14)$$

Заметим, что в отличие от $U(E)$ (4) редуцированная $U'(E)$ -матрица не унитарна, и если сечения (полное, поглощения и деления) определяются, как и в общем случае, элементами $U'_{nn}(E)$ и $U'_{cn}(E)$ (1), то сечение радиационного захвата находится здесь из условия унитарности по всем каналам матрицы $U(E)$ (4):

$$\sigma_{\gamma} \sim \sum_{c(\gamma)} |U_{cn}|^2 = 1 - \sum_c |U'_{cn}|^2.$$

Менее очевидно другое предположение схемы SAMMY — о несущественной зависимости от энергии факторов проницаемости для каналов деления и, соответственно, делительных ширин. Основным аргументом здесь может служить лишь ограниченность области разрешенных резонансов интервалом ~ 1 кэВ, в то время как факторы проницаемости для деления есть функции разности $E - E_{th}$, где энергии барьеров E_{th} имеют масштаб ~ 1 МэВ [2].

Наконец, пренебрежение фактором сдвига уровня $\Delta'_{\lambda\mu}$ (13) в матрице столкновений (2), очевидное для нейтронных каналов с $l = 0$, допустимо, по-видимому, и для $l \geq 1$ при энергиях ниже порога неупругого рассеяния нейтронов при феноменологическом характере резонансных параметров схемы.

Обратим внимание на то, что сумма по $\lambda(J)$ (3) в схеме SAMMY содержит как угодно большое, но конечное число членов $N(J)$. Поэтому здесь нет необходимости в формальном выделении фоновой (нерезонансной) части $K(E)$ -матрицы, как это обычно делалось в ранних схемах R -матричной параметризации [1,3]. Фактически существующий фон учитывается соответствующим расширением суммы (3) в область как положительных, так и отрицательных значений E_{λ} , по сравнению с числом реально наблюдаемых в рассматриваемом интервале энергии резонансов.

В приложении к неделящимся ядрам подобная схема R -матричной параметризации выглядит более просто. Так, в типичном случае с одним нейтронным каналом для системы уровней с данным J и четностью полное сечение и сечение поглощения нейтронов можно представить как отношения сумм [3]:

$$\sigma(E) = 4\pi k^{-2} \sum_J g(J) \left[\sin^2 \varphi_n + \operatorname{Re} \left(e^{\frac{-2i\varphi_n - iK_{nn}^J(E)}{1 - iK_{nn}^J(E)}} \right) \right],$$

$$\sigma_a(E) = 4\pi k^{-2} \sum_J g(J) \operatorname{Re} \left(\frac{-iK_{nn}^J(E)}{|1 - iK_{nn}^J(E)|^2} \right), \quad (15)$$

где

$$K_{nn}^J(E) = \frac{1}{2} \sum_{\lambda(J)} \Gamma_{\lambda n}(E) / (E_\lambda - E - i\Gamma_{\lambda\gamma}/2).$$

Здесь параметры $\Gamma_{\lambda n}(E_\lambda)$, $\Gamma_{\lambda\gamma}$ и E_λ имеют тот же физический смысл, что и в одноуровневом приближении. Подобная же функциональная зависимость от энергии в виде отношения сумм полюсных членов получается прямым обращением матрицы $[1 - i\mathbf{K}^J(E)]$ (2) для двух и более нейтронных каналов (см. разд.6).

2. МЕТОД АДЛЕРОВ

Другой классический вариант представления резонансной матрицы $\mathbf{U}(E)$ дает формализм Капура — Пайерлса [1]. Соответствующее преобразование R -матричного выражения (11) иллюстрируется обычно как результат диагонализации симметричной матрицы уровней \mathbf{A} (9) методом ортогонального комплексного преобразования [1,12]:

$$\mathbf{VAV}^T = \tilde{\mathcal{E}} - \mathbf{E}, \quad \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{V}^T(\tilde{\mathcal{E}} - \mathbf{E})^{-1}\mathbf{V}, \quad (\mathbf{VV}^T = \mathbf{1}), \quad (16)$$

где \mathbf{V} — преобразующая матрица, а $\tilde{\mathcal{E}}$ — диагональная матрица уровней с элементами $\tilde{E}_k = \mu_k - i\nu_k$. В результате выражение для $\mathbf{U}(E)$ приводится к виду

$$\mathbf{U}(E) = e^{-i\varphi} [1 + 2i\mathbf{P}^{1/2} \tilde{\gamma}^T (\tilde{\mathcal{E}} - \mathbf{E})^{-1} \tilde{\gamma} \mathbf{P}^{1/2}] e^{-i\varphi}, \quad \tilde{\gamma} = \mathbf{V}\gamma,$$

или

$$U_{cn}(E) = e^{-i\varphi_c} [\delta_{cn} + 2iP_c^{1/2} P_n^{1/2} \sum_k \tilde{\gamma}_{kc} \tilde{\gamma}_{kn} (\tilde{E}_k - E)^{-1}] e^{-i\varphi_n}, \quad (17)$$

где параметры $\tilde{\gamma}_{kc}$ и \tilde{E}_k — комплексные и в общем случае зависящие от энергии величины [1—4].

В отличие от R -матричных методов параметризации, где резонансные сечения представляют собой в общем случае сложные функции энергии, причем зависящие от числа членов в суммах по λ , формализм Капура —

Пайерлса выглядит более удобным для приложений, так как сечения здесь записываются в виде подобных одноуровневых членов (см. ниже). Но, как уже отмечалось, параметры формализма зависят от энергии, хотя, возможно, и несущественно, так как это связано лишь с составляющей $\xi'_{\lambda\mu}$ (13), относящейся к нейтронным каналам. Поэтому в приложении к делящимся ядрам, где $\Gamma_{\lambda\gamma} + \Gamma_{\lambda\gamma} \gg \Gamma_{\lambda n}$, при диагонализации матрицы уровней **A** (13) можно положить

$$\sum_n \gamma_{\lambda n} \tilde{L}_n(E) \gamma_{\mu n} \approx i/2 \sum_n \Gamma_{\lambda n}^{1/2}(E_\lambda) \Gamma_{\mu n}^{1/2}(E_\mu),$$

и тогда матрица преобразования **V** и комплексные параметры $\tilde{E}_k = \mu_k - i\nu_k$ и $\tilde{\gamma}_{kc}$ не зависят уже от энергии. Соответствующий вариант формализма Капура — Пайерлса в приложении к задачам параметризации резонансных сечений известен как метод Адлеров (АА) [5,13].

Подставив $U_{cn}(E)$ (17) в соотношения для сечений (1), получим многоуровневые формулы АА-метода:

$$\sigma(E) = \sigma_p + 4\pi k^{-2} \sum_J g(J) \sum_n P_n(E) \sum_k \operatorname{Re} \left[(-i) e^{-2i\varphi_n} \frac{g_k + ih_k}{\mu_k - E - i\nu_k} \right], \quad (18)$$

где $g_k + ih_k = \tilde{\gamma}_{kn}^2$, σ_p — потенциальное сечение;

$$\sigma_c(E) = 4\pi k^{-2} \sum_J g(J) \sum_n P_n(E) \sum_k \operatorname{Re} \left[(-i) \frac{g_k^c + ih_k^c}{\mu_k - E - i\nu_k} \right], \quad (19)$$

$$g_k^c + ih_k^c = 2iP_c \sum_{k'} \frac{\tilde{\gamma}_{kn} \tilde{\gamma}_{kc} \tilde{\gamma}_{k'n}^* \tilde{\gamma}_{k'c}^*}{(\mu_{k'} - \mu_k) + i(\nu_{k'} + \nu_k)}. \quad (20)$$

Очевидно, что это суммы типичных брейт-вигнеровских членов с не зависящими от энергии параметрами $g_k, h_k, g_k^c, h_k^c, \mu_k, \nu_k$ в АА-методе. В приложении к делящимся ядрам обычно ограничиваются одним нейтронным каналом с $l = 0$ ($P_n = P_0 = ka$), и тогда сечения можно представить в виде [5,13]:

$$\begin{aligned} \sigma(E) &= \sigma_p + \frac{1}{\sqrt{E}} \sum_k \operatorname{Re} \left[(-i) e^{-2i\varphi_0} \frac{G_k + iH_k}{\mu_k - E - i\nu_k} \right], \\ \sigma_f(E) &= \frac{1}{\sqrt{E}} \sum_k \frac{G_k^f \nu_k + H_k^f (\mu_k - E)}{(\mu_k - E)^2 + \nu_k^2} \end{aligned} \quad (21)$$

с не зависящими от энергии параметрами

$$G_k + iH_k = (4\pi a\hbar/\sqrt{2\mu}) g(J) (g_k + ih_k),$$

$$G_k^f + iH_k^f = (4\pi a\hbar/\sqrt{2\mu}) g(J) \sum_{c(J)} (g_k^c + ih_k^c).$$

Такая форма представления резонансных сечений делящихся ядер также используется в библиотеке ENDF [5].

Формулы (18)—(21), несомненно, более удобны в приложениях, так как при произвольном числе уровней имеют однообразную энергетическую структуру, непосредственно ассоциируемую с наблюдаемыми резонансами. Однако при независимом выборе параметров АА-метода здесь возможны парадоксы «отрицательных» сечений, появляющихся в расчетах из-за знакопеременной составляющей H [14]. Поэтому на практике при ограниченном числе резонансных членов к суммам (18)—(21) добавляют некоторую фоновую часть, формируемую хвостами остальных уровней и компенсирующую, в частности, отрицательные значения. В результате появляются дополнительные параметры фона в отдельных энергетических интервалах [5,13].

В действительности же параметры формализма Капура — Пайерлса нельзя считать независимыми, так как между ними существует определенная взаимосвязь, следующая из условия унитарности $U(E)$ -матрицы (17). В отличие от R -матричных схем, где используется унитарное при любом выборе независимых параметров выражение для $U(E)$ (4), для полюсного представления (17) это условие приводит к соотношению [13,14] (приложение 2):

$$\tilde{\gamma}_{kn}^2 = 2i \sum_c P_c \sum_{k'(J)} \frac{\tilde{\gamma}_{kn} \tilde{\gamma}_{kc} \tilde{\gamma}_{k'n}^* \tilde{\gamma}_{k'c}^*}{\tilde{E}_{k'}^* - \tilde{E}_k} = \sum_c (g_k^c + ih_k^c), \quad (22)$$

где суммирование по c включает все учитываемые каналы, в том числе и радиационные. Из него, в частности, следует, что в полном сечении поглощения, определяемом подобно (19) суммированием по каналам $c \neq n$:

$$\sigma_a(E) = 4\pi k^{-2} \sum_J g(J) \sum_n P_n(E) \sum_k \operatorname{Re} \left[(-i) \frac{g_k^a + ih_k^a}{\mu_k - E - i\nu_k} \right], \quad (23)$$

параметры

$$g_k^a + ih_k^a = \tilde{\gamma}_{kn}^2 - \sum_n (g_k^n + ih_k^n).$$

Тогда, если из анализа полного сечения (для случая одного нейтронного канала, например) найдены $\tilde{\gamma}_{kn}^2$ вместе с μ_k и ν_k , то этого достаточно для

нахождения параметров $g_k^a + ih_k^a$ (23) и построения резонансного сечения $\sigma_a(E)$. Сечение радиационного захвата при этом находится как разность $\sigma_\gamma(E) = \sigma_a(E) - \sigma_f(E)$, а сечение рассеяния есть $\sigma_n(E) = \sigma(E) - \sigma_a(E)$ [14].

Преобразование параметров R -матрицы к параметрам метода Адлеров, сводящееся к диагонализации матрицы уровней A (14), можно выполнить без трудоемкой процедуры нахождения матрицы ортогонального преобразования V методом прямого обращения, реализованным в программе POLLA [15]. Действительно, если воспользоваться обычным определением элементов обратной матрицы:

$$(A^{-1})_{\lambda\mu} = M_{\lambda\mu}(E) / D(E), \quad (24)$$

где $D(E)$ — детерминант, а $M_{\lambda\mu}(E)$ — алгебраическое дополнение матрицы A , то детерминант здесь представляет собой полином по E степени N , равной рангу матрицы (числу уровней). Определив N корней этого полинома E_k методом Ньютона — Рапсона, например, представим

$$D(E) = \prod_{k=1}^N (\tilde{E}_k - E). \quad (25)$$

Алгебраические дополнения здесь — также полиномы по E степени $N - 1$ для диагональных членов и $N - 2$ для недиагональных. Предполагая затем все N корней детерминанта разными (невырожденными), запишем отношение полиномов (24) в виде разложения на простые дроби:

$$(A^{-1})_{\lambda\mu} = \sum_{k=1}^N \frac{m_{\lambda\mu}(\tilde{E}_k)}{\tilde{E}_k - E}, \quad (26)$$

где

$$m_{\lambda\mu}(\tilde{E}_k) = -M_{\lambda\mu}(\tilde{E}_k) / D'(\tilde{E}_k).$$

Подстановка (26) в выражение (11) для матрицы $U(E)$ непосредственно приводит к полюсной форме (17) с

$$\tilde{\gamma}_{kn} \tilde{\gamma}_{kc} = \sum_{\lambda\mu} \gamma_{\lambda n} m_{\lambda\mu}(\tilde{E}_k) \gamma_{\mu c}. \quad (27)$$

Такой способ преобразования формально эквивалентен диагонализации матрицы уровней A методом ортогонального преобразования (16) [12,15].

Обратная задача — нахождение R -матричных параметров по заданным параметрам AA -метода — в общем случае неоднозначна как с математической точки зрения, так и из-за приближений самого метода.

3. КОМБИНИРОВАННЫЙ МЕТОД

При внешней привлекательности рассмотренной выше схемы параметрического представления резонансных сечений очевидна и ее ограниченность относительно небольшими интервалами энергии, где можно пренебречь изменением логарифмических производных нейтронных каналов. Но при расширении области разрешенных уровней это приводит к необходимости соответствующей коррекции параметров при переходе от одного интервала к другому. В то же время сама идея воспроизведения резонансных сечений как сумм одноуровневых членов следует, как уже отмечалось, из общих аналитических свойств матрицы $U(E)$. Ниже мы вернемся к задаче более строгого, чем в АА-методе, обоснования полюсного разложения $U(E)$ -матрицы (разд.5), но предварительно рассмотрим кажущиеся нам наглядными как с математической, так и с физической точки зрения результаты комбинированного метода многоуровневой параметризации, где функциональная зависимость сечений от энергии представляется как отношение сумм полюсных по E членов подобно (15).

В принципе результаты этого метода следуют из известной процедуры Тейхмана — Вигнера для исключения каналов реакций в матрице $U(E)$ [1]. Приведем здесь более компактный вывод, использующий матричные соотношения для $G(E)$ (7), (8). Разделим весь набор учитываемых в анализе каналов на две (в нашем случае) группы: \mathbf{n} — нейтронные каналы и \mathbf{a} — каналы реакций, включая радиационные. Соответственно, представим прямоугольную матрицу γ в виде двух блоков: $\gamma_{\mathbf{n}}$ с числом столбцов, равным числу нейтронных каналов ($\lambda \times \mathbf{n}$) и $\gamma_{\mathbf{a}}$ — ($\lambda \times \mathbf{a}$) для каналов группы \mathbf{a} . Воспользуемся также матричным тождеством (9):

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{\mathcal{E} - \mathbf{E} - \gamma \bar{\mathbf{L}} \gamma^T} = \frac{1}{\mathcal{E} - \mathbf{E} - \gamma_{\mathbf{a}} \bar{\mathbf{L}}_{\mathbf{a}} \gamma_{\mathbf{a}}^T} \left[\mathbf{1} + \gamma_{\mathbf{n}} \bar{\mathbf{L}}_{\mathbf{n}} \gamma_{\mathbf{n}}^T \frac{1}{\mathcal{E} - \mathbf{E} - \gamma \bar{\mathbf{L}} \gamma^T} \right], \quad (28)$$

где

$$(\gamma_{\mathbf{a}} \bar{\mathbf{L}}_{\mathbf{a}} \gamma_{\mathbf{a}}^T)_{\lambda\mu} = \sum_{c(\mathbf{a})} \gamma_{\lambda c} \bar{L}_c \gamma_{\mu c}, \quad (\gamma_{\mathbf{n}} \bar{\mathbf{L}}_{\mathbf{n}} \gamma_{\mathbf{n}}^T)_{\lambda\mu} = \sum_{c(\mathbf{n})} \gamma_{\lambda c} \bar{L}_c \gamma_{\mu c}$$

— скалярные произведения для каждой из групп каналов. Умножая затем справа и слева на соответствующие матрицы $\gamma_{\mathbf{a}}$ или $\gamma_{\mathbf{n}}$, получим матричные соотношения

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{\mathbf{nn}} &= \gamma_{\mathbf{n}}^T \mathbf{A}^{-1} \gamma_{\mathbf{n}} = \mathcal{R}_{\mathbf{nn}} + \mathcal{R}_{\mathbf{nn}} \bar{\mathbf{L}}_{\mathbf{n}} \mathbf{G}_{\mathbf{nn}}, \\ \mathbf{G}_{\mathbf{an}} &= \gamma_{\mathbf{a}}^T \mathbf{A}^{-1} \gamma_{\mathbf{n}} = \mathcal{R}_{\mathbf{an}} + \mathcal{R}_{\mathbf{an}} \bar{\mathbf{L}}_{\mathbf{n}} \mathbf{G}_{\mathbf{nn}}, \\ \mathbf{G}_{\mathbf{aa}} &= \gamma_{\mathbf{a}}^T \mathbf{A}^{-1} \gamma_{\mathbf{a}} = \mathcal{R}_{\mathbf{aa}} + \mathcal{R}_{\mathbf{an}} \bar{\mathbf{L}}_{\mathbf{n}} \mathbf{G}_{\mathbf{na}}, \end{aligned} \quad (29)$$

где

$$\mathcal{R}_{nn} = \gamma_n^T \mathbf{B}^{-1} \gamma_n, \quad \mathcal{R}_{an} = \gamma_a^T \mathbf{B}^{-1} \gamma_n, \quad \mathcal{R}_{aa} = \gamma_a^T \mathbf{B}^{-1} \gamma_a \quad (30)$$

— блоки редуцированной \mathbf{R} -матрицы с элементами

$$\mathcal{R}_{c'c} = \sum_{\lambda\mu} \gamma_{\lambda c'} (B^{-1})_{\lambda\mu} \gamma_{\mu c} \quad (31)$$

и матрицей уровней

$$\mathbf{B} = \mathcal{E} - \mathbf{E} - \gamma_a \bar{\mathbf{L}}_a \gamma_a^T, \quad B_{\lambda\mu} = (E_\lambda - E) \delta_{\lambda\mu} - \sum_{c \neq n} \gamma_{\lambda c} \bar{L}_c \gamma_{\mu c}. \quad (32)$$

В отличие от \mathbf{A} (9), матрица \mathbf{B} не содержит нейтронных каналов, и ее недиагональная часть $\gamma_a \bar{\mathbf{L}}_a \gamma_a^T$ предполагается не зависящей от энергии E . Тогда результат диагонализации \mathbf{B} методом ортогонального комплексного преобразования (16), например, приводит к полюсному разложению редуцированной \mathbf{R} -матрицы:

$$\mathcal{R}_{c'c} = \sum_q \bar{\gamma}_{qc'} \bar{\gamma}_{qc} / (\bar{E}_q - E) \quad (33)$$

с комплексными, не зависящими от энергии параметрами $\bar{\gamma}_{qc}$ и \bar{E}_q :

$$\bar{\gamma}_{qc} = \sum_\lambda V_{q\lambda} \gamma_{\lambda c}, \quad \bar{E}_q = \sum_\lambda V_{q\lambda}^2 E_\lambda - \sum_{\lambda\mu} V_{q\lambda} (\gamma_a \bar{L}_a \gamma_a^T)_{\lambda\mu} V_{q\mu}.$$

(Матрица преобразования \mathbf{V} здесь иная, чем при диагонализации \mathbf{A} (16), поэтому и параметры отличны от используемых в разд.2).

Для неделищихся ядер элементы редуцированной матрицы (31) в RM -приближении совпадают с $\mathcal{R}'_{c'c}(E)$ (13), и, полагая $\text{Re } \bar{L}_n = 0$, приходим непосредственно к схеме SAMMY с сечениями в виде отношений сумм полюсных членов (15). Покажем, что к подобной форме преобразуются выражения для сечений и в случае делящихся ядер. Действительно, из соотношений (29) следует:

$$\mathbf{G}_{nn} = \mathcal{R}_{nn} (\mathbf{1} - \bar{\mathbf{L}}_n \mathcal{R}_{nn})^{-1}, \quad \mathbf{G}_{an} = \mathcal{R}_{an} (\mathbf{1} - \bar{\mathbf{L}}_n \mathcal{R}_{nn})^{-1}, \quad (34)$$

и в случае, например, одного нейтронного канала и произвольного числа каналов реакций элементы матрицы столкновений (10) записываются в функциональной форме как

$$U_{cn}(E) = e^{-i\phi_c} \left[\delta_{cn} + 2iP_c^{1/2} \frac{\mathcal{R}_{cn}(E)}{1 - \bar{L}_n(E) \mathcal{R}_{nn}(E)} P_n^{1/2} \right] e^{-i\phi_n}. \quad (35)$$

При этом выражения для полного сечения и сечения поглощения нейтронов подобны (15):

$$\sigma(E) = 4\pi k^{-2} \sum_J g(J) \left[\sin^2 \varphi_n + \operatorname{Re} \left(e^{-2i\varphi_n} \frac{-iP_n(E) \mathcal{R}_{nn}^J(E)}{1 - \bar{L}_n(E) \mathcal{R}_{nn}^J(E)} \right) \right],$$

$$\sigma_a(E) = 4\pi k^{-2} \sum_J g(J) P_n(E) \operatorname{Im} \mathcal{R}_{nn}^J(E) / |1 - \bar{L}_n(E) \mathcal{R}_{nn}^J(E)|^2, \quad (36)$$

а сечение реакции в канале $c \neq n$ есть

$$\sigma_c(E) = 4\pi k^{-2} \sum_J g(J) \frac{P_c P_n |\mathcal{R}_{cn}^J(E)|^2}{|1 - \bar{L}_n(E) \mathcal{R}_{nn}^J(E)|^2} =$$

$$= 4\pi k^{-2} \sum_J \frac{g(J) P_n(E)}{|1 - \bar{L}_n(E) \mathcal{R}_{nn}^J(E)|^2} \operatorname{Re}(-i) \sum_{q(J)} \frac{\bar{g}_q^c + i\bar{h}_q^c}{\bar{E}_q - E}, \quad (37)$$

где

$$\bar{g}_q^c + i\bar{h}_q^c = 2iP_c \sum_{q'} \frac{\bar{\gamma}_{qn} \bar{\gamma}_{qc} \bar{\gamma}_{q'n}^* \bar{\gamma}_{q'c}^*}{\bar{E}_{q'}^* - \bar{E}_q} \quad (38)$$

— комплексные константы (если $P_c(E) = \text{const}$). В подобной же форме (37) записываются и суммарные по своим каналам сечения деления и радиационного захвата с

$$\bar{g}_q^f + i\bar{h}_q^f = \sum_{c(f)} (\bar{g}_q^c + i\bar{h}_q^c), \quad \bar{g}_q^\gamma + i\bar{h}_q^\gamma = \sum_{c(\gamma)} (\bar{g}_q^c + i\bar{h}_q^c). \quad (39)$$

Условие унитарности матрицы столкновений в комбинированном методе сводится к соотношениям между элементами

$$\operatorname{Im} \mathcal{R}_{nn}^J = \sum_{c \neq n} P_c |\mathcal{R}_{cn}^J|^2 \quad (40)$$

и параметрами комбинированного метода (приложение 2):

$$\bar{\gamma}_{qn}^2 = \bar{g}_q^f + i\bar{h}_q^f + \bar{g}_q^\gamma + i\bar{h}_q^\gamma, \quad (41)$$

так что для параметризации сечений здесь достаточно определить набор комплексных констант $\bar{E}_q, \bar{\gamma}_{qn}^2$ и $\bar{g}_q^f + i\bar{h}_q^f$ для всех q .

Как видим, такой способ многоуровневой параметризации представляет собой комбинацию известного в R -матричной теории преобразования матрицы U (или G) к блочной форме (метод Тейхмана — Вигнера) и процедуры диагонализации матрицы уровней в редуцированной R -матрице (33). То обстоятельство, что в отличие от АА-метода параметры $\bar{\gamma}_{qc}$ и \bar{E}_q здесь не зависят от энергии (если $\bar{L}_c(E) = \text{const}$ для $c \neq n$), обеспечивает формально тождественность результатов многоуровневой параметризации в комбинированном методе и схеме SAMMY (см. разд.4).

В задачах с двумя и более нейтронными каналами также сохраняется характерное для комбинированного метода представление сечений в виде отношения сумм, так как детерминант матрицы $(1 - L_n \mathcal{R}_{nn})$ и элементы блоков G_{nn} и G_{an} (34) преобразуются здесь к подобной одноканальному варианту форме с соответственно переопределенными параметрами (разд.6, приложение 3).

Отметим также, что в своей общей формулировке комбинированный метод не содержит ограничений по числу как каналов деления, так и каналов радиационного захвата (не требует обязательно RM -приближения). В явном виде учитывается и фактор сдвига уровня, что важно вблизи порога неупругого рассеяния, например (разд.6). Поэтому и параметризация здесь имеет более универсальный смысл, чем в схеме SAMMY.

4. ПАРАМЕТРЫ КОМБИНИРОВАННОГО МЕТОДА

Алгоритмы R -матричных методов многоуровневого анализа сечений неделящихся ядер [7,11,3] могут служить основой для построения схемы независимого определения параметров комбинированного метода из анализа данных по резонансным сечениям неделящихся ядер, так как общая структура представления энергетической зависимости (15) и (36), (37) во многом подобна. Анализ полного сечения и сечения поглощения (36) дает нам параметры $\mathcal{R}_{nn}(E) - \bar{\gamma}_{qn}^2$ и \bar{E}_q , а данные по сечению деления определяют $\bar{g}_q^f + i\bar{h}_q^f$ (39). Однако с реализацией здесь схемы SAMMY подобный независимый анализ теряет свою актуальность, а наша задача практически сводится к нахождению параметров комбинированного метода по известным параметрам R - или K -матрицы (3).

Для этого воспользуемся RM -приближением (12) и установим соотношения между редуцированными матрицами \mathcal{R}_{nn} , \mathcal{R}_{In} и \mathcal{R}_{If} , где индекс f относится к оставшимся после исключения радиационного захвата каналам (в нашем случае к каналам деления), и соответствующими блоками

$R'(E)$ -матрицы (13). Запишем обратную матрицу уровней \mathbf{B}^{-1} (31) в этом приближении как

$$\mathbf{B}^{-1} = \frac{1}{\mathcal{E}' - E - \gamma_f \bar{L}_f \gamma_f^T} = \frac{1}{\mathcal{E}' - E} \left[1 + \gamma_f \bar{L}_f \gamma_f^T \frac{1}{\mathcal{E}' - E - \gamma_f \bar{L}_f \gamma_f^T} \right], \quad (42)$$

где $\mathcal{E}' = \mathcal{E} - i\Gamma_\gamma/2$ — диагональная матрица с элементами $E'_\lambda = E_\lambda - i\Gamma_{\lambda\gamma}/2$, а γ_f — прямоугольная матрица ($\lambda \times f$) с числом столбцов, равным числу каналов деления. Умножая затем обе части этого тождества справа и слева на соответствующие матрицы γ_n и γ_f (γ_n^T и γ_f^T), имеем

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{nn} &= \mathcal{R}'_{nn} + \mathcal{R}'_{nf} \bar{L}_f \mathcal{R}'_{fn}, & \mathcal{R}_{fn} &= \mathcal{R}'_{fn} + \mathcal{R}'_{ff} \bar{L}_f \mathcal{R}'_{fn}, \\ \mathcal{R}_{ff} &= \mathcal{R}'_{ff} + \mathcal{R}'_{ff} \bar{L}_f \mathcal{R}'_{ff}, & (\mathcal{R}'_{ff} &= (1 - \mathcal{R}'_{ff} \bar{L}_f)^{-1} \mathcal{R}'_{ff}). \end{aligned} \quad (43)$$

Эти соотношения следуют также из эквивалентности двух форм редуцированной \mathcal{R} -матрицы (31) и (33).

Для конкретного примера с двумя каналами деления $f = 1, 2$, реализованного в схеме SAMMY, элементы матрицы \mathcal{R}'_{ff} (при $\bar{L}_{1,2} = iP_{1,2}$) записываются в виде

$$\mathcal{R}_{11} = \frac{1}{D} (R'_{11} - iP_2 \rho_{12}), \quad \mathcal{R}_{22} = \frac{1}{D} (R'_{22} - iP_1 \rho_{12}), \quad \mathcal{R}_{12} = \frac{1}{D} R'_{12}, \quad (44)$$

где

$$\rho_{12} = R'_{11} R'_{22} - (R'_{12})^2 = \sum_{\lambda=1}^N \frac{\alpha_\lambda}{E'_\lambda - E'},$$

$$\alpha_\lambda = \sum_{\mu \neq \lambda}^N \frac{(\gamma_{\lambda 1} \gamma_{\mu 2} - \gamma_{\lambda 2} \gamma_{\mu 1})^2}{E'_\mu - E'_\lambda},$$

$$D = |1 - \mathcal{R}'_{ff} \bar{L}_f|_2 = 1 - \sum_{\lambda=1}^N \frac{a_\lambda}{E'_\lambda - E},$$

$$a_\lambda = iP_1 \gamma_{\lambda 1}^2 + iP_2 \gamma_{\lambda 2}^2 + P_1 P_2 \alpha_\lambda, \quad (45)$$

а элементы \mathbf{R}' -матрицы (13) есть суммы по произвольному, но конечному числу уровней N (приложение 3). Умножая затем числитель и знаменатель элементов (44) на произведение

$$\prod_{\lambda=1}^N (E'_\lambda - E),$$

получим отношения полиномов по степеням E . Дальнейшие преобразования подобны рассмотренным в разд.2 для АА-метода (код POLLA [14]) и сводятся к нахождению различных N корней полинома знаменателя:

$$D(E) \prod_{\lambda=1}^N (E'_\lambda - E) = \prod_{q=1}^N (\bar{E}_q - E). \tag{46}$$

Представляя отношение полиномов в виде разложений на простые дроби (28)

$$\mathcal{R}_{11} = \sum_{q=1}^N \bar{\gamma}_{q1}^2 / (\bar{E}_q - E), \quad \mathcal{R}_{22} = \sum_{q=1}^N \bar{\gamma}_{q2}^2 / (\bar{E}_q - E), \quad \mathcal{R}_{12} = \sum_{q=1}^N \bar{\gamma}_{q1} \bar{\gamma}_{q2} / (\bar{E}_q - E),$$

найдем параметры

$$\begin{aligned} \bar{\gamma}_{q1}^2 &= \Theta_q [R'_{11}(\bar{E}_q) - iP_2 \rho_{12}(\bar{E}_q)], & \bar{\gamma}_{q2}^2 &= \Theta_q [R'_{22}(\bar{E}_q) - iP_1 \rho_{12}(\bar{E}_q)], \\ \bar{\gamma}_{q1} \bar{\gamma}_{q2} &= \Theta_q R'_{12}(\bar{E}_q), & \Theta_q &= \prod_{\lambda=1}^N (E'_\lambda - \bar{E}_q) / \prod_{q' \neq q}^N (\bar{E}'_{q'} - \bar{E}_q). \end{aligned} \tag{47}$$

Это преобразование реализуется программой SIGMA [16], и формально оно эквивалентно схеме с диагонализацией матрицы \mathbf{B} методом ортогонального преобразования [12].

Таким же способом находятся и параметры полюсного разложения для элементов \mathcal{R}_{fn} матрицы (43):

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{1n} &= \frac{1}{D} [R'_{1n} - iP_2 (R'_{22} R'_{1n} - R'_{12} R'_{2n})] = \sum_{q=1}^N \frac{\gamma_{q1} \gamma_{qn}}{\bar{E}_q - E}, \\ \mathcal{R}_{2n} &= \frac{1}{D} [R'_{2n} - iP_1 (R'_{11} R'_{2n} - R'_{21} R'_{1n})] = \sum_{q=1}^N \frac{\gamma_{q2} \gamma_{qn}}{\bar{E}_q - E}, \end{aligned} \tag{48}$$

где

$$\begin{aligned} \bar{\gamma}_{q1} \bar{\gamma}_{qn} &= \Theta_q \{R'_{1n}(\bar{E}_q) - iP_2 [R'_{22}(\bar{E}_q) R'_{1n}(\bar{E}_q) - R'_{12}(\bar{E}_q) R'_{2n}(\bar{E}_q)]\}, \\ \bar{\gamma}_{q2} \bar{\gamma}_{qn} &= \Theta_q \{R'_{2n}(\bar{E}_q) - iP_1 [R'_{11}(\bar{E}_q) R'_{2n}(\bar{E}_q) - R'_{21}(\bar{E}_q) R'_{1n}(\bar{E}_q)]\}. \end{aligned} \tag{49}$$

Определив эти произведения вместе с (47), найдем непосредственно и параметры $\bar{\gamma}_{qn}^2$. Заметим, что здесь коэффициенты проницаемости каналов деления P_1 и P_2 — не зависящие от энергии величины, выделенные нами лишь для сохранения методической общности выводов. Практически их можно положить равными единице, заменив $\sqrt{2}\bar{\gamma}_{q1,2} = \bar{\Gamma}_{q1,2}^{1/2}$ и $\sqrt{2}\gamma_{\lambda 1,2} = \Gamma_{\lambda 1,2}^{1/2}$.

В табл.2 приведен набор параметров комбинированного метода для ^{239}Pu :

$$\bar{E}_q = \bar{\mu}_q - i\bar{\nu}_q, \quad \bar{\Gamma}_{qn}^0 = (2ka/\sqrt{E}) \gamma_{qn}^2, \quad \bar{G}_q^f = (2ka/\sqrt{E}) \sum_{c(f)} \bar{g}_q^c,$$

$$(\bar{H}_q^f = (2ka/\sqrt{E}) \sum_{c(f)} \bar{h}_q^c \approx \text{Im } \bar{\Gamma}_{qn}^0),$$

приводящих к тождественным с SAMMY резонансным сечениям (см. рисунок).

Нет принципиальных сложностей в расширении подобной схемы преобразования R -матричных параметров и в случае трех и более каналов деления, если имеются соответствующие данные относительно вклада каждого из них. Заметим также, что обратная задача — преобразование параметров комбинированного метода к R -матричным — кажется нам вполне реализуемой.

Таблица 2. Параметры комбинированного метода ^{239}Pu

#	$\bar{\mu}_q$, эВ	$\bar{\nu}_q$, эВ	$\text{Re } \bar{\Gamma}_{qn}^0$, эВ ^{1/2}	$\text{Im } \bar{\Gamma}_{qn}^0$, эВ ^{1/2}	G_q^f , эВ ^{1/2}	J
1	-1.5002E+2	1.1810E-1	3.5017E-2	1.7724E-5	2.8239E-2	1
2	-1.5467E+2	1.3426E-2	3.4454E-5	3.7983E-9	3.2718E-9	1
3	-6.7253E+0	6.8977E-1	4.7096E-3	3.0707E-5	3.8197E-3	0
4	-1.6705E-1	2.8381E-1	6.6072E-5	-1.6508E-6	6.6140E-5	0
5	2.9665E-1	4.8305E-2	1.4710E-4	-3.2058E-6	8.7230E-5	1
6	7.8170E+0	4.1188E-2	2.8289E-4	8.3775E-6	1.5322E-4	1
7	1.0931E+1	9.5041E-2	5.4277E-4	-4.0432E-5	4.3818E-4	1
8	1.1898E+1	2.9328E-2	2.8319E-4	2.8369E-5	9.7870E-5	1
9	1.4330E+1	4.4169E-2	1.5920E-4	3.5923E-5	1.0799E-4	1
10	1.4677E+1	3.4783E-2	4.9908E-4	-3.4116E-5	2.1878E-4	1
11	1.5481E+1	3.8772E-1	5.1584E-4	5.9756E-5	4.8787E-4	0
12	1.7657E+1	3.7323E-2	4.2908E-4	7.3761E-6	2.0912E-4	1
13	2.2266E+1	5.2288E-2	5.4865E-4	-1.1649E-5	3.3026E-4	1
14	2.3933E+1	3.0612E-2	1.7329E-5	3.7853E-6	7.0465E-6	1
15	2.6269E+1	4.0083E-2	3.0108E-4	6.5730E-6	1.5438E-4	1
16	2.7288E+1	2.0749E-2	2.8568E-5	-5.9072E-7	1.9461E-6	1
17	3.2341E+1	8.5920E-2	1.5299E-4	-1.0403E-5	1.1499E-4	0

#	$\bar{\mu}_q, \text{эВ}$	$\bar{\nu}_q, \text{эВ}$	$\text{Re } \bar{\Gamma}_{qn}^0, \text{эВ}^{1/2}$	$\text{Im } \bar{\Gamma}_{qn}^0, \text{эВ}^{1/2}$	$G_q^f, \text{эВ}^{1/2}$	J
18	3.5486E + 1	2.2233E - 2	4.5290E - 5	9.3945E - 8	3.6117E - 6	1
19	4.1457E + 1	2.7630E - 2	5.1534E - 4	- 1.8391E - 5	5.5075E - 5	1
20	4.1736E + 1	4.9397E - 2	1.4254E - 4	1.7746E - 5	8.4850E - 5	1
21	4.4531E + 1	2.2201E - 2	9.1891E - 4	4.7583E - 7	9.0465E - 5	1
22	4.7657E + 1	1.3654E - 1	7.5621E - 4	- 4.5742E - 5	6.6420E - 4	0
23	4.9837E + 1	3.7252E - 1	5.7772E - 4	2.1183E - 5	5.4210E - 4	0
24	5.0144E + 1	1.3747E - 2	4.5954E - 4	- 6.4607E - 7	8.3470E - 5	1
25	5.2648E + 1	2.6489E - 2	1.3041E - 3	- 1.0559E - 5	2.2238E - 4	1
26	5.5704E + 1	3.0902E - 2	2.0164E - 4	9.5319E - 6	7.8965E - 5	1
27	5.7521E + 1	4.8474E - 1	2.9440E - 3	- 1.2090E - 3	2.7907E - 3	0
28	5.9292E + 1	6.6270E - 2	5.7717E - 4	1.1906E - 5	4.2957E - 4	1
29	6.2810E + 1	3.9221E + 0	2.4702E - 3	1.6033E - 3	2.4498E - 3	0
30	6.3171E + 1	5.3839E - 2	7.9248E - 5	3.1718E - 6	5.3465E - 5	1
31	6.5343E + 1	1.6554E - 1	1.8308E - 4	- 2.8108E - 4	1.5898E - 4	0
32	6.5793E + 1	8.5382E - 2	1.1950E - 3	- 4.1060E - 5	7.6350E - 4	1
33	7.4168E + 1	3.0427E - 2	3.6807E - 4	6.1105E - 5	1.7860E - 4	1
34	7.4940E + 1	1.7167E - 1	3.3310E - 4	- 8.2165E - 5	2.9091E - 4	0
35	7.5033E + 1	6.4628E - 2	2.4163E - 3	- 3.6803E - 5	1.6664E - 3	1
36	7.9085E + 1	2.4000E - 2	4.8085E - 6	6.3463E - 7	5.7680E - 7	1
37	8.1183E + 1	8.9264E - 1	4.4572E - 4	- 9.0978E - 4	4.1511E - 4	0
38	8.2774E + 1	2.6000E - 2	3.6395E - 5	9.8468E - 7	3.5931E - 6	1
39	8.5531E + 1	9.9764E - 1	5.3377E - 3	8.8836E - 4	5.1770E - 3	0
40	8.5618E + 1	1.6023E - 2	8.8554E - 4	2.2929E - 6	1.6208E - 4	1
41	9.0850E + 1	2.0675E - 2	1.2811E - 3	- 2.2217E - 6	2.2797E - 4	1
42	9.3079E + 1	2.0269E - 2	6.9940E - 5	1.0630E - 6	4.9900E - 6	1

400	9.9424E + 2	3.7805E - 2	5.9838E - 4	- 3.9601E - 5	2.5650E - 4	1
401	9.9797E + 2	1.5213E - 1	1.1571E - 3	2.1899E - 4	1.0418E - 3	1
402	9.9866E + 2	3.9174E - 2	1.0874E - 2	- 1.4656E - 4	5.3470E - 4	1
403	1.0050E + 3	2.3595E - 2	2.4363E - 3	2.6225E - 6	6.1425E - 5	1
404	1.0093E + 3	2.2617E + 0	5.8504E - 3	5.0642E - 5	5.7900E - 3	0
405	1.1000E + 3	4.3992E - 2	3.6784E - 2	- 2.6026E - 5	1.7553E - 2	1

5. ПОЛЮСНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ U-МАТРИЦЫ

В отличие от матричной формы представления энергетической зависимости элементов $U_{cn}(E)$ [$G_{cn}(E)$] в схеме SAMMY (2), комбинированный метод определяет математически тождественные функциональные соотношения для этих элементов в виде отношений сумм полюсных по E членов с

выделенными явно факторами $L_n(E)$ (35). Но здесь по-прежнему сохраняется сложная зависимость сечений от энергии, и учет доплеровского уширения резонансов, например, возможен лишь численным интегрированием. Вместе с тем определяемые в комбинированном методе довольно простые выражения для элементов матриц G_{nn} и G_{an} (34) явно иллюстрируют возможность их дальнейшего преобразования к эквивалентным полюсным разложениям.

Хотя сама идея полюсного разложения матрицы столкновений, как уже отмечалось, следует из формализма теории резонансных реакций Юмбле — Розенфельда [8], лишь в последние годы в работах Хванга [17,18] установлены и программно реализованы алгоритмы прямого преобразования R -матричных выражений для $U(E)$ (4), (11) к тождественным полюсным формам (код WHOPPER [17]).

Рассмотрим пример подобного преобразования для случая одного нейтронного канала и произвольного числа каналов реакций, для которых предполагается $L_c = iP_c = \text{const}$ ($c \neq n$). По аналогии с комбинированным методом элементы матрицы столкновений $U_{cn}(E)$ определяются здесь как отношения функций энергии (35), и, в частности, диагональный элемент есть

$$U_{nn}(E) = e^{-2i\varphi_n} [1 - \mathcal{R}_{nn}(E) L_n(E)]^{-1} [1 - \mathcal{R}_{nn}(E) L_n^*(E)], \quad (50)$$

где

$$\mathcal{R}_{nn} = \sum_{q=1}^N \bar{\gamma}_{qn}^2 / (\bar{E}_q - E).$$

Логарифмические производные нейтронных каналов $L_n = L_l$ есть функции переменной $\rho = ka = \alpha E^{1/2}$, которые можно представить в виде отношений известных полиномов степени l по k , или \sqrt{E} (приложение 1):

$$\bar{L}_l(\sqrt{E}) = i\alpha\sqrt{E} \bar{\Phi}_l(\sqrt{E}) / \Phi_l(\sqrt{E}), \quad \bar{L}_l^*(\sqrt{E}) = \bar{L}_l(-\sqrt{E}). \quad (51)$$

Аналогично и фазовый множитель в (50) можно записать как

$$e^{-2i\varphi_n} = e^{-2i\rho} \Phi_l(-\sqrt{E}) / \Phi_l(\sqrt{E}). \quad (52)$$

Подставим эти выражения в (50) и умножим числитель и знаменатель на $\prod_{q=1}^N (E - \bar{E}_q)$. Тогда U_{nn} приобретает вид отношения полиномов степени $2N + l$ по \sqrt{E} :

$$U_{nn} = e^{-2i\rho} Q^{(2N+l)}(-\sqrt{E}) / Q^{(2N+l)}(\sqrt{E}), \quad (53)$$

где

$$Q^{(2N+l)}(\sqrt{E}) = \alpha^{-l} \left[\Phi_l(\sqrt{E}) \prod_{k=1}^N (E - \bar{E}_k) + i\alpha\sqrt{E} \bar{\Phi}_l(\sqrt{E}) \sum_{k=1}^N \bar{\gamma}_{kn}^2 \prod_{k' \neq k}^N (E - \bar{E}_{k'}) \right].$$

Определяя затем $2N+l$ корней этого полинома $\tilde{E}_k^{1/2}$ и предполагая их невырожденными, представим отношение в (53) в виде разложения на простые дроби:

$$U_{nn} = e^{-2i(\rho - \pi l/2)} \left(1 + i \sum_{k=1}^{2N+l} \frac{r_{kn}}{\tilde{E}_k^{1/2} - E^{1/2}} \right), \quad (54)$$

где

$$r_{kn} = i \prod_{k'=1}^{2N+l} (\tilde{E}_k^{1/2} + \tilde{E}_{k'}^{1/2}) / \prod_{k' \neq k}^{2N+l} (\tilde{E}_k^{1/2} - \tilde{E}_{k'}^{1/2})$$

— комплексные константы.

Выделим в сумме по k (54) N_1 членов ($1 \leq k \leq N_1$) с $\text{Re } \tilde{E}_k^{1/2} > 0$, ассоциируемых с наблюдаемыми в рассматриваемом интервале энергии резонансами, и преобразуем U_{nn} к виду

$$U_{nn}(E) e^{-2i(\rho - \pi l/2)} \left(W_{nn}^0(E) + 2i\sqrt{E} \sum_{k=1}^{N_1} \frac{r_{kn}}{\tilde{E}_k - E} \right), \quad (55)$$

где

$$W_{nn}^0(E) = 1 + i \sum_{k=N_1+1}^{2N+l} \frac{r_{kn}}{\tilde{E}_k^{1/2} - E^{1/2}} + i \sum_{k=1}^{N_1} \frac{r_{kn}}{\tilde{E}_k^{1/2} + E^{1/2}} \quad (56)$$

не имеет полюсов в нашем интервале, формируя плавно зависящий от энергии фон. В результате мы пришли к часто используемому в теории ядерных реакций представлению U как суммы резонансной и нерезонансной составляющих. По своей форме оно подобно соответствующему результату формализма Капура — Пайерлса (17) с не зависящими от энергии параметрами $\tilde{E}_k = \mu_k - i\nu_k$, $\tilde{\gamma}_{kn}^2$, но с обязательным даже в одноуровневом случае выделением фоновой части (56), скоррелированной с параметрами резонансов N_1 . Используя $U_{nn}(E)$ (55) в определении полного сечения (1), получим такое же, как и в АА-методе, многоуровневое выражение (18) с потенциальным сечением

$$\sigma_p(E) = 2\pi k^{-2} \sum_J g(J) [1 - \operatorname{Re} e^{-2i(\rho - \pi l/2)} W_{nn}^{0J}(E)]. \quad (57)$$

Несложно также построить и полюсную форму для суммарного по всем каналам реакций сечения поглощения $\sigma_a(E)$ (1). Для этого снова обратимся к разложению $U_{nn}(E)$ (55) и представим

$$1 - |U_{nn}|^2 = 2\operatorname{Re} (-i) \sum_{k=1}^{2N+1} \frac{r_{ka}}{\tilde{E}_k^{1/2} - E^{1/2}}, \quad (58)$$

где $r_{ka} = r_{kn} \left(1 - i \sum_{k'=1}^{2N+1} \frac{r_{k'n}^*}{\tilde{E}_{k'}^{1/2} - \tilde{E}_k^{1/2}} \right)$ — также не зависящие от энергии

величины. Выделяем затем в сумме по k (58) N_1 резонансных членов (или N_{1J} для каждой из независимых систем J) и формируем из них сумму с полюсами в физической области E подобно (55), а остальные члены относим к нерезонансному фону. В конечном счете снова приходим к результату АА-метода (18), но с выделенным и формально определенным фоновым сечением поглощения:

$$\sigma_a(E) = \sigma_a^0(E) + 4\pi k^{-2} \sqrt{E} \sum_J g(J) \sum_{k=1}^{N_{1J}} \operatorname{Re} (-i) \frac{r_{ka}}{\tilde{E}_k - E}, \quad (59)$$

где

$$\sigma_a^0 = 2\pi k^{-2} \sum_J g(J) \operatorname{Re} \left[(-i) \left(\sum_{k=N_{1J}+1}^{2N_J+1} \frac{r_{ka}}{\tilde{E}_k^{1/2} - E^{1/2}} + \sum_{k=1}^{N_{1J}} \frac{r_{ka}}{\tilde{E}_k^{1/2} + E^{1/2}} \right) \right].$$

Подобное представление в виде суммы резонансных членов и фоновой части возможно, очевидно, и для сечений в отдельных каналах реакций $s \neq n$. Это следует, например, из полюсного разложения (34):

$$\begin{aligned} G_{cn} P_n^{1/2} &= \mathcal{R}_{cn} (1 - \mathcal{R}_{nn} \bar{L}_n)^{-1} P_n^{1/2} = \\ &= (\alpha \sqrt{E})^{l+1/2} (\Phi_l / \Phi_l^*)^{1/2} \mathcal{R}_{cn} [\Phi_l(\sqrt{E}) - i\alpha \sqrt{E} \bar{\Phi}_l(\sqrt{E}) \mathcal{R}_{nn}]^{-1}, \quad (60) \end{aligned}$$

где фактор проницаемости $P_n = P_l$ выбран в виде (приложение 1) $P_l(\sqrt{E}) = (\alpha \sqrt{E})^{2l+1} / \Phi_l(\sqrt{E}) \Phi_l^*(\sqrt{E})$ и $L_n = L_l(\sqrt{E})$ (51). Схема разложения аналогична уже использованным ранее процедурам с преобразованием к отношению полиномов по \sqrt{E} и последующим разложением на простые дроби:

$$\begin{aligned}
 G_{cn} P_n^{1/2} &= (\alpha \sqrt{E})^{1/2} (\Phi_l / \Phi_l^*)^{1/2} \left[E^{1/2} \mathcal{R}_{cn} \prod_{q=1}^N (E - \bar{E}_q) / Q^{(2N+1)} (\sqrt{E}) \right] = \\
 &= (\alpha \sqrt{E})^{1/2} (\Phi_l / \Phi_l^*)^{1/2} \sum_{k=1}^{2N+1} \frac{\tilde{r}_{kc}}{\tilde{E}_k^{1/2} - E^{1/2}}, \\
 \tilde{r}_{kc} &= \tilde{E}_k^{1/2} \sum_{q=1}^N \tilde{\gamma}_{qc} \tilde{\gamma}_{qn} \prod_{q' \neq q}^N (\tilde{E}_k - \bar{E}_{q'}) / \prod_{K' \neq k}^{2N+1} (\tilde{E}_k^{1/2} - \tilde{E}_{K'}^{1/2}). \quad (61)
 \end{aligned}$$

Сечение реакции (n, c) для отдельной системы J определяется квадратом модуля (61) и может быть приведено к виду

$$\begin{aligned}
 \sigma_c^J(E) &= 4\pi k^{-2} g(J) P_c |G_{cn} P_n^{1/2}|^2 = \\
 &= 2\pi k^{-2} g(J) \operatorname{Re}(-i) \sum_{k=1}^{2N+1} \frac{r_{kc}}{\tilde{E}_k^{1/2} - E^{1/2}}, \quad (62)
 \end{aligned}$$

где

$$r_{kc} = 4i \tilde{r}_{kc} \alpha \tilde{E}_k^{1/2} \sum_{k'=1}^{2N+1} \frac{\tilde{r}_{k'c}^*}{\tilde{E}_{k'}^{1/2*} - \tilde{E}^{1/2}} P_c.$$

Дальнейшие преобразования с выделением N_{1J} резонансных членов в сумме (62) и формированием фонового сечения подобны уже рассмотренным примерам (57), (61) и приводят в конечном счете к выражению для сечения $\sigma_c(E)$, совпадающему по форме с (59) (с заменой индекса a на c).

Таким образом, строгое полюсное разложение элементов \mathbf{U} -матрицы по переменной k (или \sqrt{E}) приводит к формулам АА-метода, дающим наиболее простое представление энергетической зависимости резонансных сечений как сумм одноуровневых членов и нерезонансного фона. Однако корректный выбор параметров АА-метода и фоновой части сечений, приводящий к эквивалентным SAMMY результатам, устанавливается здесь соответствующим преобразованием параметров \mathbf{R} -матрицы, или комбинированного метода. К сожалению, обратное преобразование — от полюсного представления к параметрам \mathbf{R} -матрицы — в общем случае весьма проблематично, так как параметры полюсов вне интервала резонансных энергий определяются в основном фоновой частью сечений, мало информативной с точки зрения однозначного определения этих параметров. Поэтому здесь могут оказаться полезными результаты модельных оценок вклада нерезонансных процессов при относительно низких энергиях [2,3].

Более общий вариант преобразования матрицы столкновений (11) к полюсной по \sqrt{E} форме, учитывающий несколько нейтронных каналов, реализуется многоцелевым кодом WHOPPER [17]. Здесь так же, как и в методе POLLA [15], строится полюсное разложение непосредственно для элементов матрицы \mathbf{A}^{-1} (26), где

$$A_{\lambda\mu} = (E_\lambda - E) \delta_{\lambda\mu} - i\Gamma_{\lambda\mu}^a/2 - \sum_n \gamma_{\lambda n} L_n(\sqrt{E}) \gamma_{\mu n}, \quad (63)$$

$\Gamma_{\lambda\mu}^a = \Gamma_{\lambda\gamma} \delta_{\lambda\mu} + \Gamma_{\lambda\mu}^f$ и $L_n = L_{l(n)}(\sqrt{E})$ (51). Решения детерминантного уравнения $|\mathbf{A}(\sqrt{E})|_N = 0$ определяют полюсы $\tilde{E}_k^{1/2}$, число которых равно $2N + \Sigma l$, где N — ранг матрицы \mathbf{A} (приложение 3). Соответствующее представление \mathbf{A}^{-1} аналогично (26):

$$(\mathbf{A}^{-1})_{\lambda\mu} = \frac{M_{\lambda\mu}(\sqrt{E})}{D(\sqrt{E})} = \sum_{k=1}^{2N+\Sigma l} \frac{m_{\lambda\mu}(\tilde{E}_k^{1/2})}{\tilde{E}_k^{1/2} - E^{1/2}}, \quad (64)$$

где

$$m_{\lambda\mu}(\tilde{E}_k^{1/2}) = (-1)^{N+1} M_{\lambda\mu}(\tilde{E}_k^{1/2}) \prod_l \Phi_l(\tilde{E}_k^{1/2}) \alpha^l / \prod_{k' \neq k}^{2N+\Sigma l} (\tilde{E}_k^{1/2} - \tilde{E}_{k'}^{1/2}).$$

Подставляя затем (64) в (11), получим строгое полюсное разложение для элементов \mathbf{U} -матрицы:

$$U_{cn} = e^{-i\Phi_c} \left[\delta_{cn} + iP_c^{1/2} P_n^{1/2} \sum_{k=1}^{2N+\Sigma l} \beta_k^{cn} / (\tilde{E}_k^{1/2} - E^{1/2}) \right] e^{-i\Phi_n}, \quad (65)$$

где

$$\beta_k^{cn} = 2 \sum_{\lambda\mu} \gamma_{\lambda c} \gamma_{\mu n} m_{\lambda\mu}(\tilde{E}_k^{1/2})$$

— комплексные константы. Дальнейшая процедура выделения N_1 резонансных членов и фоновой составляющей подобна рассмотренной выше (57), (61) с добавлением в общем случае сечений упругого рассеяния между разными нейтронными каналами.

6. РЕЗОНАНСНЫЕ СЕЧЕНИЯ НЕУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ

Рассмотренные математически тождественные методы параметризации резонансных сечений — R -матричный, комбинированный и со строгим полюсным разложением \mathbf{U} -матрицы (метод Хванга) — практически реали-

зованы в области энергий ниже порога неупругого рассеяния нейтронов. Этого вполне достаточно для основных делящихся ядер. Но для многих неделящихся изотопов резонансная структура сечений наблюдается и выше порога — как в полных, так и в сечениях возбуждения первого уровня [5,7,11].

Для неделящихся ядер R -матричный подход в RM -приближении эквивалентен комбинированному методу с редуцированной матрицей $\mathbf{R}(E)$ (13). Формально учет неупругого рассеяния сводится к соответствующему увеличению числа нейтронных каналов n (ранга матрицы \mathbf{G}_{nn} (34)) и выборе логарифмических производных неупругих каналов (51) при энергиях $E - E_{th}$, где E_{th} — энергия порога.

В простейшем примере с одним каналом упругого рассеяния (n) и одним каналом неупругого (n') элементы \mathbf{G}_{nn} матрицы (34) преобразуются аналогично (44) к характерной для комбинированного метода функциональной форме как отношение сумм:

$$G_{nn}(E) = \sum_{\lambda=1}^N \frac{\gamma_{\lambda n}^2 - \bar{L}_n \alpha_{\lambda}}{E'_{\lambda} - E} / \left[1 - \sum_{\lambda=1}^N \frac{a_{\lambda}}{E'_{\lambda} - E} \right],$$

$$G_{n'n}(E) = \sum_{\lambda=1}^N \frac{\gamma_{\lambda n'} \gamma_{\lambda n}}{E'_{\lambda} - E} / \left[1 - \sum_{\lambda=1}^N \frac{a_{\lambda}}{E'_{\lambda} - E} \right], \quad (66)$$

где

$$\alpha_{\lambda} = \sum_{\mu \neq \lambda}^N (\gamma_{\lambda n} \gamma_{\mu n'} - \gamma_{\mu n} \gamma_{\lambda n'})^2 / (E'_{\mu} - E'_{\lambda}),$$

$$a_{\lambda} = \gamma_{\lambda n}^2 \bar{L}_n + \gamma_{\lambda n'}^2 \bar{L}_{n'} - \bar{L}_n \bar{L}_{n'} \alpha_{\lambda}.$$

Соответственно и формулы для сечений, определяемых этими элементами, подобны приведенным в разд.3. Но здесь учитываются особенности энергетической зависимости, определяемые функцией $L_n(E - E_{th})$, вблизи порога, причем не только при $E > E_{th}$, но и при отрицательных $E - E_{th}$ (эффект закрытого канала [1,2] в полном сечении и сечении радиационного захвата).

Комбинированный метод, эквивалентный в RM -приближении соответствующему варианту SAMMY [7], в полной мере отражает эти особенности и без особых сложностей может быть распространен на случай нескольких упругих и неупругих нейтронных каналов. Но преобразование (66) к полюсной форме в общем случае — более сложная задача, чем для только упругого рассеяния (разд.5). В принципе, элементы \mathbf{U} -матрицы являются здесь функциями двух переменных — начальной и конечной энергий нейтрона.

Однако, если ограничиться областью энергий ниже, например, второго уровня ядра-мишени (учитывая лишь первый эффективный для системы с определенным полным моментом и четностью уровень), то можно построить реализуемый алгоритм преобразования результатов комбинированного метода (66) к эквивалентным полюсным формам лишь по одной переменной \sqrt{E} .

Действительно, задача полюсного разложения сводится здесь в основном к представлению G_{nn} и $G_{n'n}$ в виде отношения полиномов. В нашем случае, умножая числитель и знаменатель (66) на фактор

$$\Phi_l(\rho) \Phi_{l'}(\rho') \prod_{\lambda=1}^N (E'_\lambda - E),$$

представим знаменатель отношения в виде

$$F_1(\sqrt{E}) - \sqrt{E - E_{\text{th}}} F_2(\sqrt{E}),$$

где $F_1(\sqrt{E})$ и $F_2(\sqrt{E})$ — полиномы по \sqrt{E} (мы не будем здесь выписывать их явные выражения). Умножая затем обе части отношения на

$$F_1(\sqrt{E}) + \sqrt{E - E_{\text{th}}} F_2(\sqrt{E}),$$

в результате придем в знаменателе к полиному по \sqrt{E} вида

$$F_1^2(\sqrt{E}) - (E - E_{\text{th}}) F_2^2(\sqrt{E})$$

со степенью $2(2N + l + l')$. Корни этого полинома $\tilde{E}_k^{1/2}$ определяют полный набор полюсов в соответствующем полюсном разложении (66):

$$G_{n'n} = \sum_{k=1}^{2(2N+l+l')} \frac{d_k^{n'n} \sqrt{E} + f_k^{n'n} \sqrt{E - E_{\text{th}}}}{\tilde{E}_k^{1/2} - E^{1/2}}, \quad (67)$$

где $d_k^{n'n}$, $f_k^{n'n}$, d_k^{nn} , f_k^{nn} — комплексные константы, определяемые параметрами \mathbf{R} -матрицы по схемам, подобным уже рассмотренным выше (разд.5).

Однако в приложениях, где используется параметрическое представление резонансных сечений для широкого энергетического интервала, можно по-видимому, ограничиться приближенным вариантом полюсного разложения, где в матрице уровней (9) не учитывается энергетическая зависимость логарифмических производных неупругих каналов [4]:

$$\gamma_{\lambda n'} \bar{L}_{n'}(E) \gamma_{\mu n'} \approx \gamma_{\lambda n'} \bar{L}_{n'}^{1/2}(E_\lambda) \bar{L}_{n'}^{1/2}(E_\mu) \gamma_{\mu n'}.$$

Тогда процедура полюсного разложения элементов матрицы \mathbf{A}^{-1} математически не отличается от рассмотренной ранее схемы для делящихся ядер

(разд.5) и может быть реализована в случае произвольного числа нейтронных каналов, например, кодом WHOPPER (63)—(65) [17]. Матрица столкновений при этом преобразуется к виду (65), где собственно особенности энергетической зависимости выше порога неупругого рассеяния учитываются соответствующими факторами проницаемости $P_n(E - E_{th})$ в числителе $U_{n'n}$ (65). Хотя такое приближение формально не эквивалентно уже R -матричной параметризации (66), практически оно не приводит к заметной разнице в резонансных сечениях и к парадоксам «отрицательных значений», как в АА-методе. В специальных случаях, когда анализируется, например, форма резонанса, расположенного непосредственно вблизи энергии порога, можно воспользоваться приближением слабой энергетической зависимости в ограниченном интервале логарифмических производных для каналов упругого рассеяния и точно учесть эту зависимость в неупругих каналах. Тогда матрица уровней A (9) определяется для энергии $E - E_{th}$, и полюсные разложения элементов A^{-1} строятся по переменной $\sqrt{E - E_{th}}$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Как мы видим, прогресс в спектрометрии резонансных нейтронов и практическая реализация R -матричной схемы SAMMY в многоуровневом анализе и оценке резонансных сечений привели к существенному расширению объема данных о параметрах резонансов [5—7]. Используемое в этой схеме RM -приближение, а также и пренебрежение энергетической зависимостью фактора сдвига уровня, представляются вполне приемлемыми для большинства ядер. Конечно, остаются сомнения относительно однозначности определения наборов параметров R (или K)-матрицы, и здесь с появлением новых данных возможны изменения, например, включение в анализ 3-го канала деления для ^{235}U . Статистический анализ распределения R -матричных параметров не обнаруживает заметных отличий от известных закономерностей, но в новых данных более очевидно проявляются промежуточные структуры (см. рисунок). Их интерференция с компаунд-резонансами весьма интересна с точки зрения анализа «размазывания» промежуточных состояний («spread») и проверки соответствующих правил сумм [1—3,9].

Преобразование R -матричных параметров к параметрам других формализмов, или, вернее, практических методов многоуровневого представления сечений (комбинированного и метода Хванга), с использованием современных программ обращения комплексных матриц высокого ранга оказалось, в конечном счете, задачей, вполне реализуемой на РС. Здесь мы хотели бы привлечь внимание к комбинированному методу как наиболее близкому по

своей структуре к R -матричной параметризации. Независимое определение параметров комбинированного метода для делящихся ядер может дать ответ на вопрос об однозначности выбора соответствующих параметров R -матрицы, а для неделящихся ядер оценить погрешности от пренебрежения фактором сдвига уровней в SAMMY, особенно в области энергий, где эффективны $l \geq 1$, и вблизи порога неупругого рассеяния. Заметим также, что функциональная форма энергетической зависимости $U(E)$ (35) более предпочтительна, чем R -матричная (2), для статистической теории средних по резонансам сечений [1—4].

Наконец, переход к строгому полюсному разложению элементов U -матрицы по переменной импульса (\sqrt{E}) служит как методическим обоснованием АА-метода, так и практическим рецептом для построения соответствующих параметров уровней и определения фоновой части сечений. Представление здесь сечений в виде сумм одноуровневых членов дает возможность элементарного учета температурного уширения резонансов путем замены их брейт-вигнеровской формы энергетической зависимости известными доплеровскими функциями Ψ и X (профили Войта) [5,17]. С его использованием многие стандартные методы одноуровневого приближения — усреднение сечений по резонансам, анализ функций пропускания нейтронов для широких по энергии пучков, расчеты факторов самоэкранирования резонансов в задачах переноса нейтронов в средах — могут быть перенесены без существенных изменений и на многоуровневое представление [3].

Наш обзор относится в основном к проблемам обоснованного выбора методов для оценки и представления накопленных к настоящему времени больших массивов данных о резонансной структуре нейтронных сечений с помощью наборов не зависящих от энергии параметров. Их использование в современных библиотеках ядерных данных есть, несомненно, качественный прогресс в информационном обеспечении прикладных задач. Вместе с тем многократное увеличение объема данных о нейтронных резонансах дает также богатый материал для совершенствования как методов теории резонансных реакций, так и физических представлений о механизме ядерных реакций и структуре состояний составного ядра.

Можно привести ряд примеров эффективности многоуровневого представления сечений: от R -матричного анализа легких ядер [11] до параметризации резонансов при высоких энергиях [19]. Интересные для физики деления результаты получены при многоуровневой интерпретации данных по угловым распределениям осколков деления для выстроенных ядер [20]. Несомненно, что резкое увеличение объема данных по нейтронным резонансам рано или поздно должно привлечь к себе внимание теоретиков, и, возможно, оно станет стимулом для утверждения новых физических идей.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

ЛОГАРИФМИЧЕСКИЕ ПРОИЗВОДНЫЕ
И ФАЗЫ ДЛЯ НЕЙТРОННЫХ КАНАЛОВ

Приведем здесь основные соотношения для логарифмических производных внешних решений L_c и фаз рассеяния φ_c в матрице столкновений $U(E)$ (4). Согласно общему определению [3—5]

$$L_c = \left[x_c O_l^{-1}(x_c) \frac{d}{dx_c} O_l(x_c) \right]_{x_c = \rho_c} = S_c(\rho_c) + iP_c(\rho_c), \quad (1.1)$$

$$e^{-2i\varphi_c} = I_l(\rho_c) / O_l(\rho_c), \quad \rho_c = k_c a_c, \quad (1.2)$$

где $O_l(x_c)$ и $I_l(x_c) = O_l^*(x_c)$ — функции параметра $x_c = k_c r_c$, являющиеся радиальными решениями задачи о рассеянии во внешней области $r_c \geq a_c$, где нет ядерного взаимодействия. Вронскиан этой пары решений есть

$$I_l(x_c) O_l'(x_c) - O_l(x_c) I_l'(x_c) = 2i, \quad (1.3)$$

и, соответственно, для реальной и мнимой частей L_c (1.1) имеем

$$S_c(\rho_c) = \frac{1}{2} \rho_c \left[\frac{d}{dx_c} |O_l(x_c)|^2 \right]_{x_c = \rho_c} / |O_l(\rho_c)|^2, \\ P_c(\rho_c) = \rho_c / |O_l(\rho_c)|^2. \quad (1.4)$$

Значения $S_c(\rho_c)$ определяют факторы сдвига уровня (9), а $P_c(\rho_c)$ — факторы проницаемости канала c . В определение $U(E)$ (4) входят логарифмические производные

$$\bar{L}_c = L_c - b_c, \quad (1.5)$$

отличающиеся от L_c на в общем произвольную вещественную константу граничного условия b_c [3].

Для нейтронных каналов с положительной энергией решения $O_l(x)$ ($x = x_n$) представляют собой линейную комбинацию сферических функций Бесселя [3] и могут быть записаны в форме:

$$O_l(x) = -x[n_l(x) - ij_l(x)] = e^{i(x - \pi l/2)} x^{-l} \Phi_l(x), \quad (1.6)$$

где

$$\begin{aligned}\Phi_0 &= 1, & \Phi_1(x) &= x + i, & \Phi_2(x) &= x^2 + 3ix - 3, \\ \Phi_l(x) &= x^2 \Phi_{l-2}(x) + i(2l-1) \Phi_{l-1}(x),\end{aligned}\quad (1.7)$$

что следует из рекуррентных соотношений

$$\begin{aligned}O_l(x) &= (l/x) O_{l-1}(x) - O'_{l-1}(x), & O_0(x) &= e^{ix}, \\ lO_l(x) + xO'_l(x) &= xO_{l-1}(x) \quad (l \geq 1).\end{aligned}\quad (1.8)$$

Последнее соотношение определяет также и логарифмические производные нейтронных каналов $L_l(\rho)$ (1.1) при $x = \rho = k_n a_n = \alpha \sqrt{E} = 0,22 \cdot 10^{-3} a_n \sqrt{E}$ [эВ], (a_n — радиус ядра в единицах 10^{-13} см):

$$l + L_l(\rho) = i\rho \frac{\bar{\Phi}_l(\rho)}{\Phi_l(\rho)} = \frac{i\rho \bar{\Phi}_l(\rho) \Phi_l^*(\rho)}{\Phi_l(\rho) \Phi_l^*(\rho)} = i\rho \left[1 + i \sum_{k=1}^l \frac{1}{\rho_k^{(l)} - \rho} \right], \quad (1.9)$$

где $\bar{\Phi}_l(\rho) = \rho \Phi_{l-1}(\rho)$, $\rho_k^{(l)}$ — корни полинома $\Phi_l(\rho)$ (1.7). Различные формы представления $L_l(\rho)$ иллюстрируют здесь структуру зависимости логарифмической производной от ρ как отношения полиномов или разложения по простым полюсам. Очевидно и удобство выбора для нейтронных каналов константы граничных условий $b_l = -l$, так что

$$\bar{L}_l(\rho) = L_l(\rho) + l = \bar{S}_l(\rho) + iP_l(\rho), \quad (1.10)$$

и для $l = 0, 1, 2$ имеем

$$\begin{aligned}\bar{L}_0(\rho) &= i\rho, & \bar{L}_1(\rho) &= i\rho \frac{\rho}{\rho + i} = \frac{\rho^2 + i\rho^3}{1 + \rho^2} = i\rho \left[1 + i \frac{1}{-i - \rho} \right], \\ \bar{L}_2(\rho) &= i\rho \frac{\rho(\rho + i)}{\rho^2 + 3i\rho - 3} = \frac{\rho^2(3 + 2\rho^2 + i\rho^3)}{9 + 3\rho^2 + \rho^4} = i\rho \left[1 + i \sum_{k=1}^2 \frac{1}{\rho_k^{(2)} - \rho} \right], \\ & \left(\rho_{1,2}^{(2)} = -\frac{3}{2}i \pm \frac{\sqrt{3}}{2} \right).\end{aligned}\quad (1.11)$$

Реальная и мнимая части $\bar{L}_l(\rho)$ (1.10) выражаются через функции $\Phi_l(\rho)$ как (1.4):

$$\bar{S}_l(\rho) = S_l(\rho) + l = \frac{1}{2} \rho \frac{[\Phi_l(\rho) \Phi_l^*(\rho)]}{\Phi_l(\rho) \Phi_l^*(\rho)}; \quad P_l(\rho) = \frac{\rho^{2l+1}}{\Phi_l(\rho) \Phi_l^*(\rho)}. \quad (1.12)$$

Фазы рассеяния нейтронов $\varphi_l(\rho)$ (1.2) можно также записать в виде

$$e^{-2i\varphi_l} = (-1)^l e^{-2i\rho} \Phi_l^*(\rho) / \Phi_l(\rho) \quad (1.13)$$

или

$$\operatorname{tg} (\varphi_l - \rho - \pi l / 2) = \operatorname{Im} \Phi_l(\rho) / \operatorname{Re} \Phi_l(\rho),$$

что приводит к известным соотношениям для фаз [3]:

$$\varphi_0 = \rho, \quad \varphi_1 = \rho - \operatorname{arctg} \rho, \quad \varphi_2 = \rho - \operatorname{arctg} \frac{3\rho}{3 - \rho^2}. \quad (1.14)$$

Логарифмические производные нейтронных каналов — аналитические функции $\rho(\sqrt{E})$, что и используется нами при полюсном разложении $U(E)$ (5). Как аналитическое продолжение в область отрицательных энергий, можно рассматривать и логарифмические производные закрытых нейтронных каналов

$$L_l^-(|\rho|) = L_l(i\rho) = S_l^-(|\rho|), \quad P_l^-(|\rho|) = 0, \quad (1.15)$$

необходимые, в частности, для анализа энергетической зависимости вблизи порога неупругого рассеяния E_{th} , где $\rho = \alpha\sqrt{E - E_{\text{th}}}$ [1,2].

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

СООТНОШЕНИЯ УНИТАРНОСТИ

По своей форме основное выражение для матрицы столкновений в R -матричной теории (4) унитарно и симметрично при произвольных значениях вещественных параметров. Если же использовать альтернативное представление через матрицу уровней (10), то условию унитарности $UU^+ = 1$ отвечает соотношение для матриц G (7):

$$G - G^* = 2iGPG^* \quad (2.1)$$

или, используя определение (8), матричное тождество

$$A^* - A = 2i\gamma P\gamma^T, \quad A_{\lambda\mu}^* - A_{\lambda\mu} = 2i \sum_c \gamma_{\lambda c} P_c \gamma_{\mu c}, \quad (2.2)$$

соответствующее определению матрицы уровней A (9).

Переход к формализму Капура — Пайерлса заключается в диагонализации матрицы уровней A методом ортогонального преобразования (16):

$$\tilde{\epsilon} - E = VAV^T, \quad (VV^T = 1).$$

Запишем тождество (2.2) в виде

$$\mathbf{V}\mathbf{A}^*\mathbf{V}^+ - \mathbf{V}\mathbf{A}\mathbf{V}^+ = 2i \mathbf{V}\boldsymbol{\gamma}\mathbf{P}\boldsymbol{\gamma}^T\mathbf{V}^+, \quad [\mathbf{V}^+ = (\mathbf{V}^T)^*] \quad (2.3)$$

или

$$(\mathbf{V}\mathbf{V}^+) \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^* - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} (\mathbf{V}\mathbf{V}^+) = 2i\tilde{\boldsymbol{\gamma}}\mathbf{P}\tilde{\boldsymbol{\gamma}}^+, \quad \tilde{\boldsymbol{\gamma}} = \mathbf{V}\boldsymbol{\gamma}.$$

Тогда

$$(\mathbf{V}\mathbf{V}^+)_{kk'} = 2i \sum_c (\tilde{\gamma}_{kc} P_c \tilde{\gamma}_{k'c}^*) / (\tilde{E}_{k'}^* - \tilde{E}_k). \quad (2.4)$$

Умножив затем обе части этого выражения на $\tilde{\gamma}_{kn}^*$ и просуммировав по k' , получим соотношения между параметрами формализма

$$\tilde{\gamma}_{kn} = 2i \sum_c \sum_{k'} (\tilde{\gamma}_{k'n}^* \tilde{\gamma}_{kc} \tilde{\gamma}_{k'c}^* P_c) / (\tilde{E}_{k'}^* - \tilde{E}_k), \quad (2.5)$$

отвечающими свойству унитарности матрицы \mathbf{U} (17). Вводя здесь комбинации параметров, используемые в формулах для сечений (3)

$$g_k^c + ih_k^c = 2i \sum_{k'} (\tilde{\gamma}_{kn} \tilde{\gamma}_{kc} \tilde{\gamma}_{k'n}^* \tilde{\gamma}_{k'c}^* P_c) / (\tilde{E}_{k'}^* - \tilde{E}_k), \quad (2.6)$$

можно записать соотношение унитарности (2.5) также в виде

$$\tilde{\gamma}_{kn}^2 = \sum_c (g_k^c + ih_k^c). \quad (2.7)$$

В общем случае здесь возможна зависимость от энергии через факторы проицаемости $P_c(E)$. Лишь в приближении Адлеров, где в формулах (2.4)—(2.6) предполагается $P_c(E) \approx \text{const}$, это соотношения между комплексными константами. Исключение каналов радиационного захвата резко уменьшает число параметров в (2.5), и, например, в частном случае одинаковых радиационных ширин уровней $\Gamma_{\lambda\gamma} = \Gamma_\gamma$ имеем

$$\tilde{\gamma}_{kn} = 2i \sum_{c \neq c(\gamma)} \sum_{k'} (\tilde{\gamma}_{k'n}^* \tilde{\gamma}_{kc} \tilde{\gamma}_{k'c}^* P_c) / (\tilde{E}_{k'}^* - \tilde{E}_k - i\Gamma_\gamma). \quad (2.8)$$

Комбинированный метод (разд.3) использует блочное представление матрицы \mathbf{G} , и в этом случае соотношение унитарности (2.1) можно записать, например, как

$$\mathbf{G}_{nn} - \mathbf{G}_{nn}^* = 2i[\mathbf{G}_{nn} \mathbf{P}_n \mathbf{G}_{nn}^* + \mathbf{G}_{na} \mathbf{P}_a \mathbf{G}_{an}^*]. \quad (2.9)$$

Подставляя \mathbf{G}_{nn} и \mathbf{G}_{an} (34), получим соответствующее соотношение между редуцированными \mathbf{R} -матрицами:

$$\mathcal{R}_{nn} - \mathcal{R}_{nn}^* = 2i \mathcal{R}_{na} \mathbf{P}_a \mathcal{R}_{an}^*, \quad (\text{Im } \mathcal{R}_{nn} = \sum_{c \neq n} P_c |\mathcal{R}_{cn}|^2). \quad (2.10)$$

Если для элементов этих матриц используется R -матричная форма (31), то будем иметь тождество, подобное (2.2) для матрицы уровней \mathbf{B} (32):

$$B_{\lambda\mu}^* - B_{\lambda\mu} = 2i \sum_{c \neq n} \gamma_{\lambda c} P_c \gamma_{\mu c}, \quad (2.11)$$

а для \mathcal{R}_{cn} с диагональной матрицей уровней (33) получим по схеме, подобной рассмотренной для формализма Капура — Пайерлса, соотношение между параметрами комбинированного метода:

$$\bar{\gamma}_{qn} = 2i \sum_{q'} \bar{\gamma}_{q'n}^* \sum_{c \neq n} (\bar{\gamma}_{qc} P_c \bar{\gamma}_{q'c}^*) / (\bar{E}_{q'}^* - \bar{E}_q). \quad (2.12)$$

Если умножить обе части (2.12) на γ_{qn} и ввести параметры $\bar{g}_q^c + i\bar{h}_q^c$ (37), то придем к соотношению:

$$\bar{\gamma}_{qn}^2 = \sum_{c \neq n} (\bar{g}_q^c + i\bar{h}_q^c). \quad (2.13)$$

Хотя внешне эти выводы подобны полученным выше для формализма Капура — Пайерлса (2.6)—(2.8), здесь нет слагаемых, содержащих нейтронные каналы $P_n(E)$. Таким образом, в рамках общего предположения о слабой энергетической зависимости проницаемостей для каналов реакций $P_c (c \neq n)$, соотношения унитарности комбинированного метода (2.12), (2.13) есть правила сумм для комплексных, не зависящих от энергии параметров метода.

ПРИЛОЖЕНИЕ 3

ОПРЕДЕЛИТЕЛИ МАТРИЦ $(1 - \bar{\mathbf{R}}\bar{\mathbf{L}})$

Для двух каналов (1 и 2) этот определитель можно довольно просто привести к виду

$$\begin{aligned} & |1 - \bar{\mathbf{R}}\bar{\mathbf{L}}|_2 = \\ & = 1 - R_{11}\bar{L}_1 - R_{22}\bar{L}_2 + (R_{11}R_{22} - R_{12}R_{21})\bar{L}_1\bar{L}_2 = 1 - \sum_{\lambda=1}^N \frac{a_\lambda^{(2)}}{E_\lambda - E}, \end{aligned} \quad (3.1)$$

где

$$a_{\lambda}^{(2)} = \gamma_{\lambda 1}^2 \bar{L}_1 + \gamma_{\lambda 2}^2 \bar{L}_2 - \bar{L}_1 \bar{L}_2 \sum_{\mu \neq \lambda}^N \frac{(\gamma_{\lambda 1} \gamma_{\mu 2} - \gamma_{\lambda 2} \gamma_{\mu 1})^2}{E_{\mu} - E_{\lambda}}, \quad (3.2)$$

и элементы \mathbf{R} -матрицы (5) (или \mathcal{R} -матрицы (33)) есть суммы по конечному числу уровней N .

В случае трех каналов представим определитель как сумму:

$$\begin{aligned} & |\mathbf{1} - \mathbf{R}\bar{\mathbf{L}}|_3 = \\ & = 1 - \sum_{i=1}^3 R_{ii} \bar{L}_i + \sum_{i=1}^3 \sum_{k>i}^3 \bar{L}_i \bar{L}_k \begin{vmatrix} R_{ii} & R_{ik} \\ R_{ki} & R_{kk} \end{vmatrix} - \bar{L}_1 \bar{L}_2 \bar{L}_3 \begin{vmatrix} R_{11} R_{12} R_{13} \\ R_{21} R_{22} R_{23} \\ R_{31} R_{32} R_{33} \end{vmatrix}, \quad (3.3) \end{aligned}$$

где последний детерминант

$$\begin{aligned} & |\mathbf{R}|_3 = \begin{vmatrix} R_{11} R_{12} R_{13} \\ R_{21} R_{22} R_{23} \\ R_{31} R_{32} R_{33} \end{vmatrix} = \\ & = \sum_{\lambda=1}^N \sum_{\mu \neq \lambda}^N \sum_{\nu \neq \mu}^N \frac{\gamma_{\lambda 1} \gamma_{\mu 2} \gamma_{\nu 3}}{(E_{\lambda} - E)(E_{\mu} - E)(E_{\nu} - E)} \begin{vmatrix} \gamma_{\lambda 1} \gamma_{\lambda 2} \gamma_{\lambda 3} \\ \gamma_{\mu 1} \gamma_{\mu 2} \gamma_{\mu 3} \\ \gamma_{\nu 1} \gamma_{\nu 2} \gamma_{\nu 3} \end{vmatrix} \quad (3.4) \end{aligned}$$

с суммированием по индексам уровней $\lambda, \mu \neq \lambda, \nu \neq \mu$. Последующее разложение на простые дроби дает нам шесть произведений вида

$$\frac{1}{E_{\lambda} - E} \frac{1}{E_{\mu} - E_{\lambda}} \frac{1}{E_{\nu} - E_{\mu}},$$

отличающихся перестановками индексов λ, μ и ν . Но при этих перестановках меняется, соответственно, лишь знак определителя в правой части (3.4), что, в конечном счете, приводит к полюсному разложению:

$$|\mathbf{R}|_3 = \sum_{\lambda}^N \frac{1}{E_{\lambda} - E} \sum_{\mu \neq \lambda}^N \sum_{\nu \neq \mu}^N \frac{1}{(E_{\mu} - E_{\lambda})(E_{\nu} - E_{\mu})} \begin{vmatrix} \gamma_{\lambda 1} \gamma_{\lambda 2} \gamma_{\lambda 3} \\ \gamma_{\mu 1} \gamma_{\mu 2} \gamma_{\mu 3} \\ \gamma_{\nu 1} \gamma_{\nu 2} \gamma_{\nu 3} \end{vmatrix}^2. \quad (3.5)$$

В результате и для определителя 3-го порядка получаем представление, подобное (3.1):

$$|\mathbf{1} - \mathbf{R}\bar{\mathbf{L}}|_3 = 1 - \sum_{\lambda=1}^N \frac{a_{\lambda}^{(3)}}{E_{\lambda} - E},$$

$$\begin{aligned}
 a_{\lambda}^{(3)} = & \sum_{i=1}^3 \gamma_{\lambda i}^2 \bar{L}_i - \sum_{\mu \neq \lambda} \frac{1}{E_{\mu} - E_{\lambda}} \sum_{i=1}^3 \sum_{k>i}^3 \bar{L}_i \bar{L}_k \left| \begin{array}{cc} \gamma_{\lambda i} & \gamma_{\lambda k} \\ \gamma_{\mu i} & \gamma_{\mu k} \end{array} \right|^2 + \\
 & + \sum_{\mu \neq \lambda} \sum_{\nu \neq \mu} \frac{\bar{L}_1 \bar{L}_2 \bar{L}_3}{(E_{\mu} - E_{\lambda})(E_{\nu} - E_{\mu})} \left| \begin{array}{ccc} \gamma_{\lambda 1} \gamma_{\lambda 2} \gamma_{\lambda 3} \\ \gamma_{\mu 1} \gamma_{\mu 2} \gamma_{\mu 3} \\ \gamma_{\nu 1} \gamma_{\nu 2} \gamma_{\nu 3} \end{array} \right|^2. \tag{3.6}
 \end{aligned}$$

Соответствующее преобразование определителя n -го порядка использует известное разложение по различным главным минорам матрицы $Q = \mathbf{RL}$ [21]:

$$\begin{aligned}
 |1 - Q|_n = & 1 - \sum_{i=1}^n Q_{ii} + \\
 & + \sum_{i=1}^n \sum_{k>i}^n \left| \begin{array}{cc} Q_{ii} & Q_{ik} \\ Q_{ki} & Q_{kk} \end{array} \right| + \dots + (-1)^n \left| \begin{array}{c} Q_{11} Q_{12} \dots Q_{1n} \\ \dots \dots \dots \\ Q_{n1} Q_{n2} \dots Q_{nn} \end{array} \right|, \tag{3.7}
 \end{aligned}$$

а сами миноры представляют собой так называемые определители Грама [22], вычисляемые в нашем случае следующим образом:

$$\begin{aligned}
 & \left| \begin{array}{c} Q_{11} Q_{12} \dots Q_{1m} \\ \dots \dots \dots \\ Q_{m1} Q_{m2} \dots Q_{mm} \end{array} \right| = \\
 = & \frac{1}{m!} \sum_{\lambda=1}^N \sum_{\mu \neq \lambda}^N \dots \sum_{\theta \neq \theta-1}^N \frac{1}{(E_{\lambda} - E)(E_{\mu} - E) \dots (E_{\theta} - E)} \left| \begin{array}{c} \gamma_{\lambda 1} \gamma_{\lambda 2} \dots \gamma_{\lambda m} \\ \gamma_{\mu 1} \gamma_{\mu 2} \dots \gamma_{\mu m} \\ \dots \dots \dots \\ \gamma_{\theta 1} \gamma_{\theta 2} \dots \gamma_{\theta m} \end{array} \right|^2. \tag{3.8}
 \end{aligned}$$

Разложение на простые дроби дает здесь $m!$ произведений вида

$$\frac{1}{E_{\lambda} - E} \frac{1}{E_{\mu} - E_{\lambda}} \frac{1}{E_{\nu} - E_{\mu}} \dots \frac{1}{E_{\theta} - E_{\theta-1}}$$

с различными перестановками индексов, при которых квадрат детерминанта $|\gamma|_m$ не изменяется. В итоге снова приходим к представлению (3.1):

$$|1 - \mathbf{RL}|_n = 1 - \sum_{\lambda=1}^N \frac{a_{\lambda}^{(n)}}{E_{\lambda} - E}, \tag{3.9}$$

$$\begin{aligned}
 a_{\lambda}^{(n)} = & \sum_{i=1}^n \gamma_{\lambda i}^2 \bar{L}_i - \sum_{\mu \neq \lambda}^N \frac{1}{E_{\mu} - E_{\lambda}} \sum_{i=1}^n \sum_{k>i}^n \bar{L}_i \bar{L}_k \left| \begin{array}{c} \gamma_{\lambda i} \gamma_{\lambda k} \\ \gamma_{\mu i} \gamma_{\mu k} \end{array} \right|^2 + \\
 & + \sum_{\mu \neq \lambda}^N \sum_{\nu \neq \mu}^N \frac{1}{(E_{\mu} - E_{\lambda})(E_{\nu} - E_{\mu})} \sum_{i=1}^n \sum_{k>i}^n \sum_{j>i}^n \left| \begin{array}{c} \gamma_{\lambda i} \gamma_{\lambda k} \gamma_{\lambda j} \\ \gamma_{\mu i} \gamma_{\mu k} \gamma_{\mu j} \\ \gamma_{\nu i} \gamma_{\nu k} \gamma_{\nu j} \end{array} \right|^2 \bar{L}_i \bar{L}_k \bar{L}_j + \dots \\
 & + (-1)^{n-1} \sum_{\mu \neq \lambda}^N \sum_{\nu \neq \mu}^N \dots \sum_{\theta \neq \nu}^N \times \\
 & \times \frac{\bar{L}_1 \bar{L}_2 \dots \bar{L}_n}{(E_{\mu} - E_{\lambda})(E_{\nu} - E_{\mu}) \dots (E_{\theta} - E_{\theta-1})} \left| \begin{array}{c} \gamma_{\lambda 1} \gamma_{\lambda 2} \dots \gamma_{\lambda n} \\ \gamma_{\mu 1} \gamma_{\mu 2} \dots \gamma_{\mu n} \\ \dots \dots \dots \\ \gamma_{\theta 1} \gamma_{\theta 2} \dots \gamma_{\theta n} \end{array} \right|^2, \quad (3.10)
 \end{aligned}$$

где суммирование по i, k, j, \dots относится к различным главным минорам детерминанта $|\gamma|_n$ — последнего члена в (3.10).

Таким же способом можно доказать, что детерминант соответствующей матрицы уровней \mathbf{A} (9) равен

$$\begin{aligned}
 D(E) = |\mathbf{A}| &= |\mathbf{1} - \mathbf{RL}|_n \prod_{\lambda=1}^N (E_{\lambda} - E) = \\
 &= \prod_{\lambda=1}^N (E_{\lambda} - E) - \sum_{\lambda=1}^N a_{\lambda}^{(n)} \prod_{\mu \neq \lambda}^N (E_{\mu} - E). \quad (3.11)
 \end{aligned}$$

Приведем здесь более простой вариант доказательства, использующий матричное соотношение (7) в форме

$$\mathbf{GL} = \gamma^T \mathbf{A}^{-1} \gamma \bar{\mathbf{L}} = (\mathbf{1} - \mathbf{RL})^{-1} - \mathbf{1}.$$

Из этого равенства, в частности, для диагональных элементов (nn) имеем

$$\begin{aligned}
 (\mathbf{GL})_{nn} &= \sum_{\lambda\mu} \gamma_{\lambda n} (\mathbf{A}^{-1})_{\lambda\mu} \gamma_{\mu n} \bar{L}_n = \sum_{\lambda\mu} \gamma_{\lambda n} \frac{M_{\lambda\mu}(E)}{D} \gamma_{\mu n} \bar{L}_n = \frac{|\mathbf{1} - \mathbf{RL}|_{n-1}}{|\mathbf{1} - \mathbf{RL}|_n} - 1 = \\
 &= \sum_{\lambda=1}^N (a_{\lambda}^{(n)} - a_{\lambda}^{(n-1)}) \prod_{\mu \neq \lambda}^N (E_{\mu} - E) / \left[\prod_{\lambda=1}^N (E_{\lambda} - E) |\mathbf{1} - \mathbf{RL}|_n \right], \quad (3.12)
 \end{aligned}$$

где $M_{\lambda\mu}(E)$ — алгебраическое дополнение \mathbf{A} -матрицы (26). Из равенства знаменателей очевидным образом следует соотношение (3.11).

Для метода Адлеров, где пренебрегается энергетической зависимостью логарифмических производных, мы определяем, таким образом, в явном виде характеристический полином матрицы уровней \mathbf{A} , N корней которого \bar{E}_k соответствуют полюсам $\mathbf{U}(E)$ -матрицы (17). Таким же точно способом, но с исключенными нейтронными каналами, находятся и корни определителя матрицы \mathbf{B} (33) в комбинированном методе. При переходе же к полюсному разложению матрицы столкновений по волновому числу k (или \sqrt{E}) (6) наше функциональное представление определителя $D(\sqrt{E})$ (3.11) явно учитывает зависимость логарифмических производных каналов от $\rho = ka$ (приложение 1). При энергиях ниже порога неупругого рассеяния нейтронов число корней уравнения $D(\sqrt{E}) = 0$ (3.11) равно

$$2N + l_{n1} + l_{n2} + \dots, \quad (3.13)$$

где n_i — различные возможные для фиксированного значения полного момента и четности каналы упругого рассеяния нейтронов, что следует непосредственно из определения коэффициентов $a_{\lambda}^{(n)}$ (3.10) и рационального представления $\bar{L}_i(\rho)$ (1.9).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Лейн А., Томас Р.** — Теория ядерных реакций при низких и средних энергиях. М.: ИЛ, 1960.
2. **Lynn J.E.** — The Theory of Neutron Resonance Reactions. Oxford: Clarendon Press, 1968.
3. **Лукьянов А.А.** — Структура нейтронных сечений. М.: Атомиздат, 1978.
4. **Froëner F.H.** — Applied Neutron Resonance Theory, KFK-2669, 1978.
5. **Rose P.F., Dunford C.L.** — ENDF-102 Data Formats and Procedures for Evaluated Nuclear Data File ENDF-6, BNL-NCS-44945, 1990.
6. **Derrien H., de Saussure G., Larson N.M., Leal L.C., Perez R.B.** — In: Nucl. Data for Science and Technology. Proc. Int. Conf., Mito, Japan, 1988. JAERI, 1988, p.83, 573.
7. **Larson N.M.** — In: Nuclear Data Evaluation Methodology, Proc. Int. Symp. BNL, 1992, World Sc. Publ. Co., 1993, p.285.
8. **Humblet J., Rosenfeld L.** — Nucl. Phys., 1961, v.26, p.529.
9. **Mahaux C., Weidenmuller H.A.** — Shell-Model Approach to Nuclear Reactions. Amsterdam, North-Holland Publ. Co., 1969.
10. **Вайнберг А., Вигнер Е.** — Физическая теория ядерных реакторов. М.: ИЛ, 1961.
11. **Hale G.M.** — In: Nuclear Data Evaluation Methodology. Proc. Int. Symp. BNL, 1992, World Sc. Publ. Co., 1993, p.306.
12. **Гантмахер Ф.Р.** — Теория матриц. М.: Наука, 1988.

13. **Adler F.T., Adler D.B.** — In: Neutron Cross-Sections Technology. Proc. Int. Conf., Washington, 1966. CONF-660303, Am. Phys. Soc., 1966, v.2, p.873; Phys. Rev. C, 1972, v.6, p.986.
14. **Lukyaynov A.A.** — In: Nuclear Data Evaluation Methodology. Proc. Int. Symp. BNL, 1992, World Sc. Publ. Co., 1993, p.295.
15. **de Saussure G., Perez R.B.** — Report ORNL-2599, 1969.
16. **Сираков И.А.** — В печати.
17. **Hwang R.N.** — Nucl. Sci. Eng., 1987, v.96, p.192.
18. **Hwang R.N.** — In: Nuclear Data Evaluation Methodology. Proc. Int. Symp. BNL, 1992, World Sc. Publ. Co., 1993, p.316.
19. **Хеннер В.К., Белозерова Т.С.** — Сообщения ОИЯИ Р4-95-114, Р4-95-115, Дубна, 1995.
20. **Bogdzel A.A., Furman W.I. et al.** — Prep. JINR E3-96-220, Dubna, 1996;
Varabanov A.L., Furman W.I. — In: Nuclear Data for Science and Technology. Proc. Int. Conf., Gatlinburg, 1994, ANS Publ. USA, 1994, p.448.
21. **Смирнов В.И.** — Курс высшей математики. М.: Наука, 1974, т.3, ч.1, с.28.
22. **Беллман Р.** — Введение в теорию матриц. М.: Наука, 1969.