

УДК 539.171.4

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ С ЭНЕРГИЕЙ 14 МэВ НА ЯДРАХ ТИТАНА, ХРОМА И ЖЕЛЕЗА С ПОМОЩЬЮ ПРОГРАММЫ TALYS

© 2021 г. И. Д. Дашков^{1,2,4,*}, Н. А. Федоров^{1,2}, Д. Н. Грозданов^{1,3}, Ю. Н. Копач¹,
Т. Ю. Третьякова^{1,2,4}, И. Н. Русков^{1,3}, В. Р. Ской¹, С. Дабылова^{1,5}, Ф. А. Алиев^{1,6}, К. Храмо^{1,7},
Н. А. Гундорин¹, Р. Б. Маржохов¹, Ю. Н. Бармаков⁸, Е. П. Боголюбов⁸, В. И. Зверев⁸

¹Международная межправительственная организация
Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
“Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”, физический факультет, Москва, Россия

³Институт ядерных исследований и ядерной энергетики Болгарской академии наук, София, Болгария

⁴Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
“Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”,
Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В. Скобельцына, Москва, Россия

⁵Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

⁶Институт геологии и геофизики Национальной Академии наук Азербайджана, Баку, Азербайджан

⁷Институт химии Академии наук Молдовы, Кишинев, Республика Молдова

⁸Федеральное государственное унитарное предприятие
“Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики имени Н.Л. Духова”, Москва, Россия

*E-mail: dashkov.id15@physics.msu.ru

Поступила в редакцию 24.05.2021 г.

После доработки 01.06.2021 г.

Принята к публикации 28.06.2021 г.

С использованием программы TALYS 1.9 выполнен расчет сечений процессов, происходящих при рассеянии быстрых нейтронов на изотопах ^{48}Ti , ^{52}Cr и ^{56}Fe . Проведено сравнение результатов модельных расчетов с полученными в рамках проекта TANGRA с использованием метода меченых нейтронов данными о выходах γ -квантов для изотопов Ti, Cr и Fe, и с результатами опубликованных ранее экспериментов. Проведенный анализ чувствительности модельного описания к выбору механизма прямой реакции показал, что наиболее информативной характеристикой с этой точки зрения является дифференциальное сечение неупругого рассеяния.

DOI: 10.31857/S0367676521100136

ВВЕДЕНИЕ

Титан, хром и железо являются необходимыми составляющими конструкционных материалов, используемых в различных научно-исследовательских и промышленных установках, в том числе в реакторах на быстрых нейтронах. В связи с активными разработками новых возможностей в атомной энергетике, требуется уточнение и расширение экспериментальных данных о рассеянии нейтронов для расчета характеристик реакторов IV поколения, использующих быстрые нейтроны. При этом также важной задачей является проверка модельных расчетов сечений рассеяния быстрых нейтронов в широком энергетическом диапазоне, поскольку расширение объема экспериментальных данных влечет коррекцию пара-

метров для получения удовлетворительного согласия между модельными расчетами и экспериментом.

Неупругое рассеяние быстрых нейтронов с энергией 14.1 МэВ исследуется с применением метода меченых нейтронов (ММН) в рамках проекта TANGRA (TAGged Neutrons and Gamma RAys), выполняемого в Лаборатории нейтронной физики имени И.М. Франка Объединенного института ядерных исследований (ИЯИ ОИЯИ, Дубна) [1, 2]. Основными результатами эксперимента являются характеристики γ -излучения, возникающего при облучении ядер быстрыми нейтронами. Ранее нами были представлены сечения γ -переходов в реакциях неупругого рассеяния нейтронов на ядрах хрома [3] и выходы γ -квантов в эксперименте на ядрах железа [4]. В

этой работе мы представляем новые экспериментальные значения выходов γ -квантов для титана, а также сравнение полученных данных с расчетными значениями.

Модельные расчеты выходов γ -излучения, а также дифференциальных и интегральных сечений рассеяния нейтронов были выполнены с использованием последней версии программы TALYS 1.9 [5]. Этот широко используемый для анализа ядерных реакций с нейтронами программный код позволяет, с одной стороны, исследовать особенности взаимодействия частиц с атомными ядрами. С другой стороны, программа TALYS может быть использована в качестве генератора ядерных данных, которые по тем или иным причинам затруднительно получить экспериментальным путем. В обоих случаях важным является не только подбор наилучших с точки зрения совпадения с экспериментом параметров, но и проверка чувствительности расчетов к выбору модели реакции.

В естественной смеси каждого из рассматриваемых элементов доля наиболее распространенного изотопа превышает 70% (^{48}Ti (73.5%), ^{52}Cr (83.8%), ^{56}Fe (91.8%)). Поскольку данные изотопы дают наибольший вклад в измеряемые сечения, модельные расчеты были произведены именно для них. Для каждого ядра рассмотрены различные методы описания возбужденных состояний ядра и выбран подход, дающий наименьшее отклонение рассчитанных в TALYS 1.9 сечений от оценок ENDF или экспериментальных значений.

РАСЧЕТЫ В TALYS 1.9

TALYS 1.9 включает в себя большое количество моделей для описания ядерных реакций. В программе реализована возможность изменять параметры оптического потенциала и степень ядерной деформации, выбрать тот или иной метод описания прямых и компаунд-процессов. На данный момент для подавляющего большинства ядер созданы наборы параметров, используемых для описания всех рассчитываемых характеристик. В программе, по умолчанию, для вычисления оптического потенциала используются локальные параметры, подобранные для конкретного ядра, или, если локальные параметры не приведены, используется глобальная систематика Кенинга и Делароша [6]. Вклад компаунд-процессов в расчетные сечения составных реакций TALYS 1.9 вычисляются в рамках подхода Хаузера–Фешбаха с поправками Молдауэра на флуктуацию ширины уровней, а для прямых процессов используемый метод зависит от рассматриваемого изотопа. Для ^{48}Ti , ^{52}Cr , ^{56}Fe в базе TALYS 1.9 помимо набора параметров по умолчанию существует так называемый набор параметров “best” для описания взаимодействия нейтрона с ядром.

Набор “best” получен для улучшения соответствия различных рассчитанных величин определенным ядерным реакциям экспериментальным значениям. В эти реакции в том числе входят реакции упругого и неупругого рассеяния, нейтронного захвата, (n, p) , (n, α) и другие. По сравнению с параметрами вычислений по умолчанию, в наборах “best” для ^{48}Ti , ^{52}Cr , ^{56}Fe изменена модель вычисления плотности уровней, радиус, диффузность и глубина реальной части объемной компоненты оптического потенциала, коэффициент нормализации для средней радиационной ширины и некоторые другие параметры.

Изотопы ^{48}Ti , ^{52}Cr , ^{56}Fe являются четно-четными с фиксированным значением $N - Z = 4$, при этом у ^{52}Cr число нейтронов $N = 28$. Магические свойства ^{52}Cr проявляются в повышенной, по сравнению с ^{48}Ti и ^{56}Fe , энергии возбуждения первого состояния 2_1^+ в ядерном спектре. Соответственно, значение отношения энергий для 4_1^+ и 2_1^+ состояний для ^{52}Cr заметно меньше, чем у двух других исследуемых изотопов: $E_4^+/E_2^+(\text{}^{48}\text{Ti}) \approx 2.33$, $E_4^+/E_2^+(\text{}^{52}\text{Cr}) \approx 1.65$, $E_4^+/E_2^+(\text{}^{56}\text{Fe}) \approx 2.46$. Сильное влияние оболочечных эффектов в ядрах $1f$ -оболочки не позволяет четко соотнести спектр низлежащих состояний рассматриваемых изотопов с коллективными возбуждениями определенного типа.

Существенное значение для проведения модельных расчетов имеет корректный учет деформации ядер. В программе TALYS 1.9 для первого возбужденного состояния используются параметры квадрупольной деформации β_2 , рассчитанные в работе [7] из вероятности перехода $2_1^+ \rightarrow 0_{g.s.}^+$. Соответствующие значения для исследуемых изотопов составляют: $\beta_2(\text{}^{48}\text{Ti}) = 0.269 \pm 0.007$, $\beta_2(\text{}^{52}\text{Cr}) = 0.225 \pm 0.005$, $\beta_2(\text{}^{56}\text{Fe}) = 0.239 \pm 0.005$. Такие же значения квадрупольной деформации, предлагаемые в TALYS по умолчанию, использовались в расчетах.

Одной из задач данной работы был подбор модели описания возбужденных состояний ядра-мишени для получения наименьшего расхождения между расчетом и экспериментальными/оцененными данными по упругому и неупругому рассеянию нейтронов в достаточно широком диапазоне энергий налетающего нейтрона. В TALYS 1.9 существует выбор между борновским приближением искаженных волн (DWBA) и методом связанных каналов (CC) с различными приближениями для описания природы возбужденных уровней ядра: вращательным или колебательным. В случае вращательного возбуждения первые три уровня ядерного спектра считаются частью одной вращательной полосы, для колебательного возбуж-

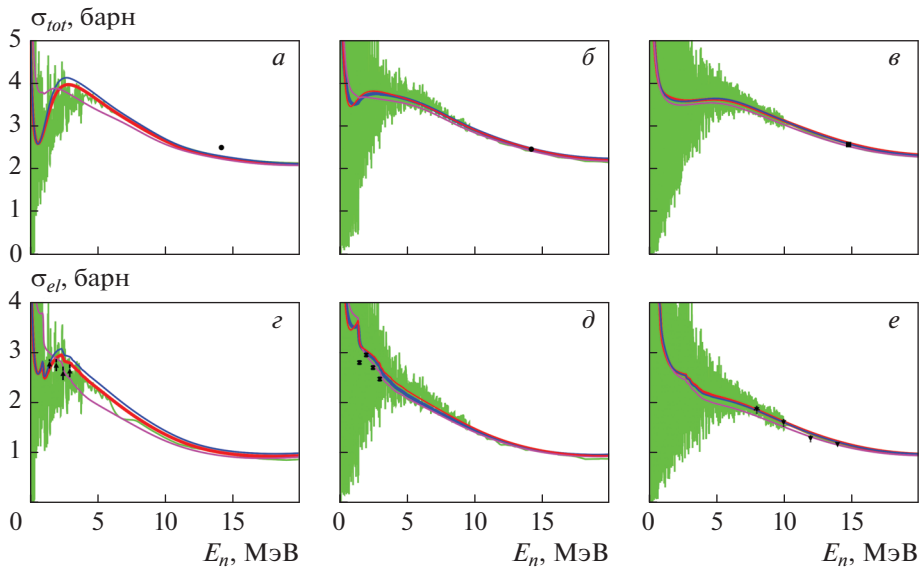


Рис. 1. Интегральные сечения взаимодействия нейтрона с ядром в зависимости от энергии налетающей частицы: полное с ^{48}Ti (а), с ^{52}Cr (б), с ^{56}Fe (в), упругого рассеяния с ^{48}Ti (з), с ^{52}Cr (д), с ^{56}Fe (е). Черные точки – экспериментальные данные, на рисунках (а, б) – из работы [10], (в) – [11], (з) – [12], (д) – [13], (е) – [14]. Зеленая линия – оценка ENDF/B-VIII.0 [8], результаты расчета в TALYS 1.9: красная линия – с использованием DWBA, пурпурная – методом связанных каналов в приближении колебательного возбуждения уровней, синяя – методом связанных каналов в приближении вращательного возбуждения уровней.

дения основное и первое возбужденное состояния связываются через однофононное квадрупольное колебание. В наших модельных расчетах параметры оптической модели не изменялись и соответствовали значениям по умолчанию, за исключением уменьшения на 15% мнимой части поверхностной компоненты оптического потенциала W_D при использовании метода связанных каналов.

Проведено сравнение рассчитанных в различных модельных подходах величин полного сечения, а также интегральных сечений упругого, неупругого рассеяний и γ -перехода $2_1^+ \rightarrow 0_{g.s.}^+$ с оцененными значениями [8, 9] и экспериментальными данными [10–20] в диапазоне энергий налетающих нейтронов от 0.1 до 20 МэВ. На рис. 1 показаны энергетические зависимости полного сечения и сечения упругого рассеяния нейтронов, на рис. 2 – сечения неупругого рассеяния и γ -перехода $2_1^+ \rightarrow 0_{g.s.}^+$ для каждого из изотопов ^{48}Ti , ^{52}Cr и ^{56}Fe . В TALYS 1.9 используется оптическая модель, поэтому расчеты не воспроизводят резонансную структуру интегральных сечений при малых энергиях. Вне резонансной области ход всех расчетных кривых хорошо воспроизводит поведение экспериментальных данных или их оценок. При энергиях налетающего нейтрона больше 13 МэВ расчетные значения для разных подходов практически совпадают.

Разница при 14.1 МэВ между рассмотренными интегральными сечениями, рассчитанными с ис-

пользованием параметров TALYS 1.9, заданных по умолчанию, и наборов “best” не превысила 8% для ^{48}Ti , 5% для ^{52}Cr и 16% для ^{56}Fe . При этом нельзя сделать однозначный вывод, улучшает или нет использование наборов “best” соответствие результатов расчетов интегральных сечений экспериментальным данным, так как для каждого изотопа некоторые характеристики могут становиться более согласованными с экспериментом, тогда как другие – наоборот.

Более чувствительными к подходу, использованному для расчета, являются дифференциальные сечения, характеризующие угловое распределение рассеянных нейтронов. На рис. 3 показаны результаты расчета дифференциальных сечений при энергиях около 14 МэВ в упругом и неупругом канале.

На рис. 3а–3в показаны дифференциальные сечения упругого рассеяния нейтронов в зависимости от угла рассеяния в системе центра масс θ . Рассчитанные в трех подходах сечения сравнивались с экспериментальными [14, 21–24] и оцененными [8] значениями соответствующих сечений для энергий налетающего нейтрона близких к 14.1 МэВ. Для каждого изотопа заметно различие не только между рассмотренными подходами расчета в TALYS 1.9, но и между экспериментами и оценками ENDF/B-VIII.0. Все теоретические подходы в целом справляются с описанием упругого сечения. Только для ^{48}Ti можно отметить, что метод связанных каналов с колебательным воз-

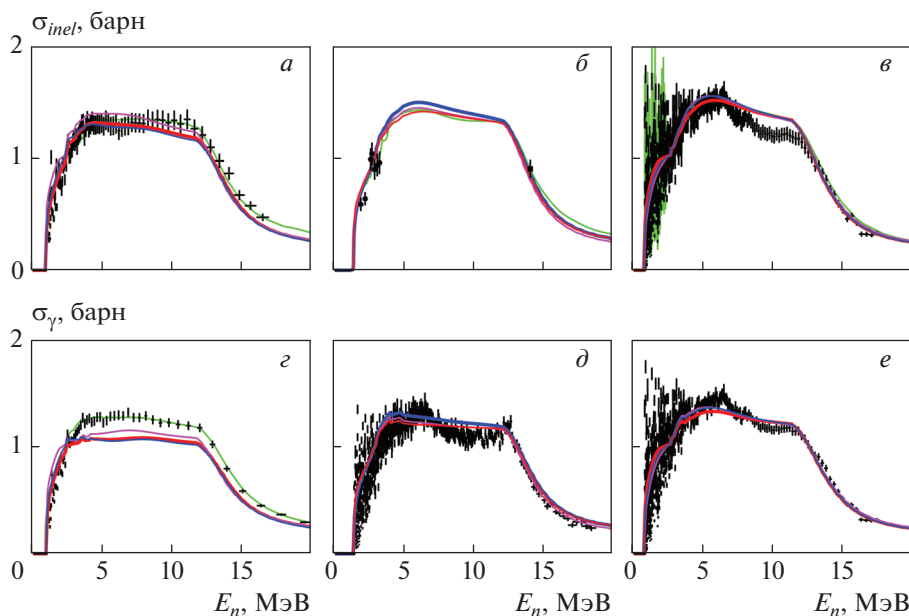


Рис. 2. Интегральные сечения в зависимости от энергии налетающего нейтрона: неупругого рассеяния σ_{inel} на ^{48}Ti (а), на ^{52}Cr (б), на ^{56}Fe (в) и γ -переходов $2^+ \rightarrow 0^+_{g.s}$ σ_γ , возникающих в процессе рассеяния, для ^{48}Ti (з), ^{52}Cr (д), ^{56}Fe (е). Черные точки – экспериментальные данные, на рисунке (а) – из работы [15], (б) – [16, 17], (в, е) – [18], (з) – [19], (д) – [20]. Зеленая линия на (з) – оценка JEFF-3.3, остальные обозначения – аналогично рис. 1.

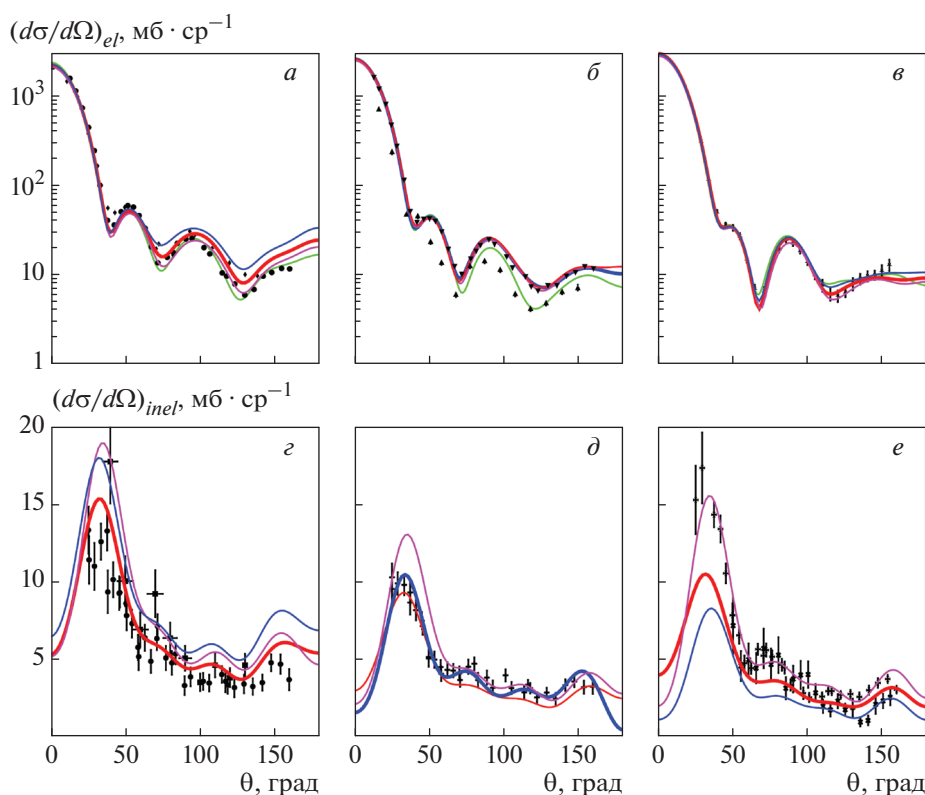


Рис. 3. Дифференциальные сечения: упругого рассеяния нейтронов на изотопах ^{48}Ti (а), ^{52}Cr (б), ^{56}Fe (в) и неупругого рассеяния нейтронов на первый возбужденный уровень изотопов ^{48}Ti (з), ^{52}Cr (д), ^{56}Fe (е) в зависимости от угла рассеяния в системе центра масс θ . Черные точки – экспериментальные данные из работ [21, 22] (а), [23, 24] (б), [14] (в), [21, 25] (з), [26] (д), [14, 27] (е), остальные обозначения см. на рис. 1.

Таблица 1. Значения величины D для интегральных сечений и дифференциальных сечений, посчитанные для каждого модельного приближения (см. текст)

		DWBA	СС вращ.	СС колеб.
σ_{tot}	^{48}Ti	0.010	0.012	0.012
	^{52}Cr	0.015	0.015	0.016
	^{56}Fe	0.028	0.028	0.027
σ_{el}	^{48}Ti	0.014	0.017	0.017
	^{52}Cr	0.015	0.015	0.017
	^{56}Fe	0.037	0.037	0.037
σ_{inel}	^{48}Ti	0.011	0.013	0.012
	^{52}Cr	0.012	0.013	0.013
	^{56}Fe	0.034	0.036	0.033
σ_{γ}	^{48}Ti	0.023	0.025	0.020
	^{52}Cr	0.017	0.020	0.017
	^{56}Fe	0.027	0.028	0.027
$(d\sigma/d\Omega)_{el}$	^{48}Ti	0.026	0.017	0.038
	^{52}Cr	0.010	0.010	0.022
	^{56}Fe	0.028	0.018	0.015
$(d\sigma/d\Omega)_{inel}$	^{48}Ti	0.045	0.086	0.094
	^{52}Cr	0.054	0.022	0.059
	^{56}Fe	0.077	0.029	0.033

буждением уровней лучше соответствует оценке базы данных ENDF/B-VIII.0.

Дифференциальные сечения для неупругого рассеяния показаны на рис. 3г–3е, результаты расчета сравниваются с экспериментальными данными из работ [14, 21, 25–27]. Для всех трех изотопов наибольшее сечение в диапазоне углов от 20 до 40 градусов дает метод связанных каналов с использованием колебательного приближения. Для ^{56}Fe это приводит к лучшему соответствию кривой этого расчета экспериментальным точкам, а для ^{48}Ti и ^{52}Cr – к явной переоценке сечений при малых углах. В случае изотопов титана наилучшее согласие с экспериментом достигается в расчетах с использованием DWBA. Результаты расчетов для ^{52}Cr на малых углах не позволяют осуществить выбор между моделями, но структура сечения при $\theta > 50^\circ$ лучше воспроизводится в ротационном приближении.

Для выбора наиболее подходящего для каждого изотопа метода описания низколежащих возбужденных состояний ядер с использованием всех описанных выше данных был использован критерий χ^2 . Из-за того, что сечения процессов, использованных для подбора оптимальной модели описания низколежащих состояний, отличаются друг от друга на порядки, было принято решение нормировать χ^2 на число точек, для которых он вы-

числяется, и на усредненную на рассматриваемом интервале энергий величину сечения. Полученный критерий D характеризует относительное отклонение сечений от оцененных или экспериментальных величин, которое позволяет сравнивать качество расчета сечений различных процессов между собой:

$$D = \frac{\sqrt{\chi^2}}{N \langle \sigma \rangle}, \quad (1)$$

где N – число точек, для которых вычислялся χ^2 , $\langle \sigma \rangle$ – среднее сечение эксперимента или оценки. Полученные величины D для интегральных и дифференциальных сечений представлены в табл. 1.

Так как для разных сечений наименьшее отклонение могло соответствовать разным подходам или сразу двум подходам, было решено выбрать как “наилучший” подход тот, для которого сечения чаще всего имели для данного изотопа наименьшее отклонение от экспериментальных значений. Для ^{48}Ti и ^{52}Cr – это DWBA, для ^{56}Fe – СС с колебательным возбуждением уровней. Далее выбранные подходы были использованы для вычисления выходов γ -квантов, образующихся при облучении нейтронами с энергией около 14 МэВ образцов титана, хрома и железа при сравнении с полученными в эксперименте TANGRA данными.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В рамках проекта TANGRA создана установка с целью изучения γ -излучения, образующегося в ядерных реакциях с нейтронами энергии 14.1 МэВ. Схема установки, использованной для исследования γ -излучения от образца из титана, показана на рис. 4.

Источником нейтронов является портативный генератор меченых нейтронов ИНГ-27 [28]. Нейтроны рождаются в результате реакции $d + t \rightarrow n + \alpha$, проходящей при энергии дейтронов 80 кэВ. Возникающая одновременно с нейтроном α -частица регистрируется встроенным в генератор кремниевым α -детектором, состоящим из 8 стрипов, расположенных по вертикали и по горизонтали. Таким образом, установка позволяет фактически использовать 64 пучка меченых нейтронов. Максимальная интенсивность нейтронов, испускаемых генератором, составляет $5 \cdot 10^7 \text{ с}^{-1}$ в полный телесный угол.

В качестве образца в эксперименте был использован порошок химически чистого титана с естественным изотопным составом (8.0% ^{46}Ti , 7.8% ^{47}Ti , 73.5% ^{48}Ti , 5.5% ^{49}Ti , 5.5% ^{50}Ti), который был помещен в прямоугольный алюминиевый контейнер размером $14 \times 6 \times 6 \text{ см}^3$. Размер образ-

ца был выбран исходя из требования к наибольшей скорости набора статистики при минимизации поглощения γ -квантов в образце. Выбранная геометрия образца позволила использовать в α -детекторе только 4 центральных стрипа по горизонтали и 8 стрипов по вертикали (всего 32 пучка нейтронов).

В процессе взаимодействия нейтрона с ядрами образца происходят ядерные реакции, в том числе приводящие к возникновению возбужденных ядер и образованию соответствующего характеристического γ -излучения. Для регистрации γ -излучения и измерения выходов γ -переходов был использован детектор из сверхчистого германия (HPGe). Детектор помещался на минимальное возможное расстояние от образца, при котором используемая свинцовая защита исключала прямое попадание в него нейтронов, испускаемых генератором. Запись и предварительная обработка сигналов с детектора была проведена с помощью цифровой системы сбора и анализа данных.

Основной особенностью установки является применение метода меченых нейтронов (ММН). Метод заключается в регистрации γ -квантов в совпадении с α -частицами, попавшими на α -детектор генератора. Таким образом можно соотнести событие возникновения γ -кванта в образце рождению нейтрона в генераторе и увеличить соотношение сигнал/фон.

Сравнение расчетных и экспериментальных значений сечений затрудняется тем, что существует достаточно большая неопределенность измеренных величин. Так, в соответствии с данными, приведенными в подборке [29], сечение излучения наиболее интенсивной линии в реакциях на ^{48}Ti лежит в пределах от 436 ± 58 до 760 ± 97 мб, для ^{52}Cr – от 442 ± 65 до 757 ± 56 мб, для ^{56}Fe разброс значений охватывает интервал от 392 ± 78 до 1228 ± 150 мб. Полученные нами экспериментальные значения сечений для самой интенсивной γ -линии в сравнении с другими экспериментальными данными для Ti, Cr, Fe и модельными расчетами приведены в табл. 2. Сечения, полученные в нашем эксперименте, лежат внутри диапазонов, заданных данными из литературы, но они достаточно сильно отклоняются от оцененных значений из [29]. Такие существенные расхождения в величинах измеренных сечений могут быть связаны либо с недостаточно точным определением величины нейтронного потока, либо с затруднениями в оценке эффективностей γ -детекторов. В случае экспериментальной установки TANGRA число нейтронов не могло быть посчитано, так как электроника работала в режиме совпадений и не позволяла подсчитывать полное количество испущенных нейтронов. Существенный вклад в величину полного сечения также может вносить учет поправки, включающей в себя эф-

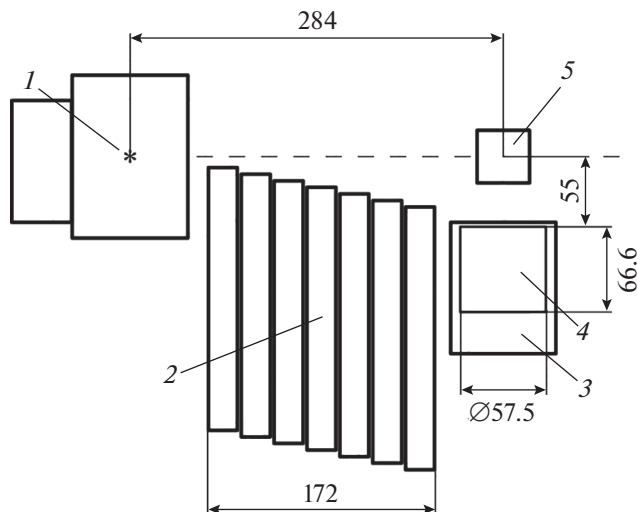


Рис. 4. Схема экспериментальной установки TANGRA с использованием детектора HPGe: 1 – нейтронный генератор ИНГ-27 (звездочкой отмечена триевая мишень), 2 – свинцовая защита, 3 – кожух детектора, 4 – кристалл HPGe, 5 – облучаемый образец. Размеры указаны в миллиметрах.

фективность регистрации γ -квантов с данной энергией и величину поглощения этих же γ -квантов в образце и корпусе детектора. Величина неопределенности этой поправки может достигать десятков процентов, в нашем случае это происходит из-за неточного задания профилей нейтронных пучков в расчетах.

Чтобы снизить влияние систематических погрешностей, была проведена нормировка экспериментальных (наших и литературных) и рассчитанных в TALYS 1.9 величин на сечение наиболее интенсивной γ -линии, регистрируемой для каждой естественной смеси изотопов. Полученные таким образом выходы сравнивались между собой.

В табл. 3–5 представлены выходы γ -квантов, полученные как в нашем эксперименте и других

Таблица 2. Значения сечений образования γ -квантов (мб) для наиболее интенсивной γ -линии в спектрах изотопов Ti, Cr и Fe, использованные для вычисления выходов γ -квантов Y_γ . Для данных, полученных в экспериментах TANGRA, приведены только статистические ошибки

Источник	Ti (983.5 кэВ)	Cr (1434.1 кэВ)	Fe (846.8 кэВ)
TALYS 1.9	659.3	750.6	684.5
TANGRA	524 ± 3	785 ± 3	535 ± 10
[29]	666 ± 61		
[19]	797 ± 27		
[20]		704 ± 37	
[30]		783 ± 30	
[31]		738 ± 52	
[18]			698 ± 29

Таблица 3. Характеристики γ -квантов, испускаемых в реакциях (n, X_γ) при облучении титана нейтронами с энергией около 14 МэВ. Измеренные выходы Y_γ для γ -квантов с энергией E_γ перехода ядра из состояния со спин-четностью J_i^P в состояние J_f^P в сравнении с другими экспериментальными данными и расчетами TALYS в выбранном подходе

E_γ , кэВ	Реакция	$J_i^P \rightarrow J_f^P$	Y_γ , %			
			TANGRA	[29]	[19]	TALYS 1.9 (DWBA)
			14.1 МэВ	14.5 МэВ	14.0 \pm 0.5 МэВ	14.1 МэВ
121.4	$^{48}\text{Ti}(n,p)^{48}\text{Sc}$	$4_1^+ \rightarrow 6_1^+$	4.5 ± 0.2		5.8 ± 0.3	11.9
130.9	$^{48}\text{Ti}(n,p)^{48}\text{Sc}$	$5_1^+ \rightarrow 6_1^+$	5.8 ± 0.2		7 ± 0.3	14.0
159.4	$^{48}\text{Ti}(n,2n)^{47}\text{Ti}$	$7/2_1^- \rightarrow 5/2_1^-$	37.8 ± 0.2	62.7 ± 6.7	22.5 ± 1.1	31.0
174.3	$^{48}\text{Ti}(n,\alpha)^{45}\text{Ca}$	$5/2_1^- \rightarrow 7/2_1^-$	6.5 ± 0.2		1.6 ± 0.1	1.2
175.4	$^{48}\text{Ti}(n,n')^{48}\text{Ti}$	$6_2^+ \rightarrow 6_1^+$			3.6 ± 0.2	3.6
227.8	$^{46}\text{Ti}(n,p)^{46}\text{Sc}$	$3_1^+ \rightarrow 4_1^+$	2 ± 0.3			1.1
370.3	$^{48}\text{Ti}(n,p)^{48}\text{Sc}$	$3_1^+ \rightarrow 4_1^+$	4.5 ± 0.4			5.7
423.6	$^{48}\text{Ti}(n,n')^{48}\text{Ti}$	$4_1^- \rightarrow 3_1^-$	4.8 ± 0.4		4.1 ± 0.2	1.8
889.3	$^{46}\text{Ti}(n,n')^{46}\text{Ti}$	$2_1^+ \rightarrow 0_{g.s}^+$	15.8 ± 0.3	1.9 ± 0.2		11.7
944.1	$^{48}\text{Ti}(n,n')^{48}\text{Ti}$	$4_2^+ \rightarrow 4_1^+$	7.6 ± 0.2	7.1 ± 0.9	7.6 ± 0.4	4.6
983.5	$^{48}\text{Ti}(n,n')^{48}\text{Ti}$	$2_1^+ \rightarrow 0_{g.s}^+$	100	100	100	100
1037.5	$^{48}\text{Ti}(n,n')^{48}\text{Ti}$	$6_1^+ \rightarrow 4_1^+$	11.6 ± 0.3		0.9 ± 0.1	9.6
1048.6	$^{46}\text{Ti}(n,n')^{46}\text{Ti}$	$3_1^- \rightarrow 4_1^+$	2.2 ± 0.2			0.2
1091.3	$^{48}\text{Ti}(n,2n)^{47}\text{Ti}$	$3/2_1^- \rightarrow 7/2_1^-$	4.1 ± 0.2			1.4
1092.7	$^{48}\text{Ti}(n,2n)^{47}\text{Ti}$	$9/2_1^- \rightarrow 7/2_1^-$			4.4 ± 0.2	2.8
1120.6	$^{46}\text{Ti}(n,n')^{46}\text{Ti}$	$4_1^+ \rightarrow 2_1^+$	8.8 ± 0.2			5.2
1121.1	$^{50}\text{Ti}(n,n')^{50}\text{Ti}$	$4_1^+ \rightarrow 2_1^+$				2.7
1284.9	$^{48}\text{Ti}(n,2n)^{47}\text{Ti}$	$11/2_1^- \rightarrow 7/2_1^-$	2.8 ± 0.2		1.3 ± 0.1	1.6
1312.1	$^{48}\text{Ti}(n,n')^{48}\text{Ti}$	$4_1^+ \rightarrow 2_1^+$	39.8 ± 0.4	35.7 ± 4.1	42.6 ± 2.1	41.0
1437.5	$^{48}\text{Ti}(n,n')^{48}\text{Ti}$	$2_2^+ \rightarrow 2_1^+$	7.5 ± 0.2	7.4 ± 1.1	6.0 ± 0.3	4.8
1542.2	$^{49}\text{Ti}(n,n')^{49}\text{Ti}$	$11/2_1^- \rightarrow 7/2_1^-$	2.5 ± 0.2			2.1
1553.8	$^{50}\text{Ti}(n,n')^{50}\text{Ti}$	$2_1^+ \rightarrow 0_{g.s}^+$	5.5 ± 0.2	0.3 ± 0.0		5.5
1750.3	$^{48}\text{Ti}(n,n')^{48}\text{Ti}$	$5_1^- \rightarrow 4_1^+$	3.3 ± 0.2	3.5 ± 2.0	4.0 ± 0.2	2.3
2240.4	$^{48}\text{Ti}(n,n')^{48}\text{Ti}$	$3_1^+ \rightarrow 2_1^+$	3.4 ± 0.4	4.8 ± 0.8	2.8 ± 0.2	2.7
2387.3	$^{48}\text{Ti}(n,n')^{48}\text{Ti}$	$2_4^+ \rightarrow 2_1^+$	1.8 ± 0.2		2.2 ± 0.2	1.1

Таблица 4. Характеристики γ -квантов, испускаемых в реакциях (n, X_γ) при облучении ^{52}Cr нейтронами с энергией около 14 МэВ (обозначения см. в табл. 3)

E_γ , кэВ	Реакция	$J_i^P \rightarrow J_f^P$	Y_γ , %				
			TANGRA [3]	[20]	[30]	[31]	TALYS 1.9 (DWBA)
			14.1 МэВ	~14 МэВ	14.6 МэВ	14.8 МэВ	14.1 МэВ
124.5	$^{52}\text{Cr}(n,p)^{52}\text{V}$	$1_1^+ \rightarrow 2_1, 3_1^+$	3.6 ± 0.3				1.0
125.1	$^{52}\text{Cr}(n,p)^{52}\text{V}$	$4^{+*} \rightarrow 4^{+*}$					1.9
320.1	$^{52}\text{Cr}(n,d)^{51}\text{V}$	$7/2_1^+ \rightarrow 7/2_{g.s.}^-$	3.2 ± 0.4		1.8 ± 0.1		1.4
647.5	$^{52}\text{Cr}(n,n)^{52}\text{Cr}$	$4_3^+ \rightarrow 4_2^+$	9.9 ± 0.4	9.0 ± 1.9	8.9 ± 0.6		4.2
744.2	$^{52}\text{Cr}(n,n)^{52}\text{Cr}$	$6_1^+ \rightarrow 4_1^+$	11.7 ± 0.4	6.3 ± 1.3	9.1 ± 0.6	17.4 ± 3.1	8.1
749.1	$^{52}\text{Cr}(n,2n)^{51}\text{Cr}$	$2_1^+ \rightarrow 7/2_{g.s.}^+$			5.4 ± 0.2		6.4
935.5	$^{52}\text{Cr}(n,n)^{52}\text{Cr}$	$4_1^+ \rightarrow 2_1^+$	32.3 ± 0.5	33.5 ± 3.2	30.3 ± 1.6	28.6 ± 4.1	32.4
1246.3	$^{52}\text{Cr}(n,n)^{52}\text{Cr}$	$5_1^+ \rightarrow 4_1^+$	5.9 ± 0.4	1.7 ± 0.3	5.0 ± 0.5		2.8
1333.6	$^{52}\text{Cr}(n,n)^{52}\text{Cr}$	$5_1^- \rightarrow 4_1^+$	25.5 ± 0.5	25.1 ± 2.9	26.2 ± 1.4	23.5 ± 4.2	20.8
1434.1	$^{52}\text{Cr}(n,n)^{52}\text{Cr}$	$2_1^+ \rightarrow 0_{g.s.}^+$	100	100	100	100	100
1530.7	$^{52}\text{Cr}(n,2n)^{51}\text{Cr}$	$2_2^+ \rightarrow 2_1^+$	6.9 ± 0.3	6.6 ± 0.9	5.1 ± 0.4	10.1 ± 3.1	4.1
1727.5	$^{52}\text{Cr}(n,n)^{52}\text{Cr}$	$2_3^+ \rightarrow 2_1^+$	5.0 ± 0.3	4.5 ± 0.9	3.3 ± 0.5		2.5
2038.2	$^{52}\text{Cr}(n,n)^{52}\text{Cr}$	$3_1^+ \rightarrow 2_1^+$	2.3 ± 0.4	1.5 ± 0.7			1.5
2337.4	$^{52}\text{Cr}(n,n)^{52}\text{Cr}$	$2_4^+ \rightarrow 2_1^+$	1.8 ± 0.4	2.1 ± 0.9			2.4

работах, так и из расчетов TALYS 1.9 в разных подходах. Результаты расчетов и экспериментальные данные по выходам γ -линий хорошо согласуются между собой. Наблюдается небольшое систематическое завышение выходов реакций $(n, 2n)$ на железе (переходы 1238.3, 1408.5 кэВ). Хорошее согласие между относительными величинами, выходами γ -линий, полученными в различных экспериментах, при наличии сильного расхождения абсолютных величин, сечений, косвенно подтверждает предполагаемые источники систематических погрешностей. Неверная оценка относительной эффективности регистрации γ -квантов или ошибка в оценке поглощения γ -квантов образцом привели бы к более существенным по сравнению с наблюдающимся расхождением выходов, а неправильная оценка количества испущенных источником нейтронов может приводить к отклонению сечений, но не выходов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлены новые экспериментальные результаты по измерению выходов γ -квантов, ис-

пускаемых в ходе нейтрон-ядерных реакций на ^{48}Ti , ^{52}Cr и ^{56}Fe . Результаты хорошо согласуются с другими экспериментальными данными, за исключением нескольких γ -линий, соответствующих реакциям $(n, 2n)$ на железе. По-видимому, параметры, используемые в TALYS по умолчанию, не позволяют хорошо описать эти реакции, а изменение способа возбуждения низколежащих состояний существенно не меняет ситуацию. В то же время, в TALYS существует возможность подстройки некоторых параметров вычислений под конкретное ядро, в том числе, с целью улучшения описания реакции $(n, 2n)$, в то же время систематического завышения сечений $(n, 2n)$ на хrome и титане не наблюдается.

В рамках данной работы расчеты по модели DWBA, модели CC во вращательном и колебательном подходах проводились при неизменных деформационных и оптических параметрах. Сравнение расчетных величин с экспериментальными и оцененными данными показало, что подход DWBA является наиболее подходящим для ^{48}Ti и ^{52}Cr , для

Таблица 5. Характеристики γ -квантов, испускаемых в реакциях (n, X_γ) при облучении железа нейтронами с энергией около 14 МэВ (обозначения см. табл. 3)

E_γ , кэВ	Реакция	$J_i^P \rightarrow J_f^P$	Y_γ , %		
			TANGRA [4]	[18]	TALYS 1.9 (CC vib.)
			14.1 МэВ	14.5 МэВ	14.1 МэВ
123.5	$^{56}\text{Fe}(n,p)^{56}\text{Mn}$	$5_1^+ \rightarrow 4_1^+$	6 ± 1		5.9
126.0	$^{56}\text{Fe}(n,d)^{55}\text{Mn}$	$7/2_1^- \rightarrow 5/2_{g.s.}^+$			
212.0	$^{54}\text{Fe}(n,p)^{54}\text{Mn}$	$5_1^+ \rightarrow 4_1^+$	5.9 ± 0.8		5.1
212.0	$^{56}\text{Fe}(n,p)^{56}\text{Mn}$	$4_1^+ \rightarrow 0_{g.s.}^+$			
335.5	$^{56}\text{Fe}(n,p)^{56}\text{Mn}$	$3_1^+ \rightarrow 2_1^+$	2.2 ± 0.8		1.1
411.9	$^{56}\text{Fe}(n,2n)^{55}\text{Fe}$	$1/2_1^- \rightarrow 3/2_1^-$	5.3 ± 0.7	6.8 ± 0.8	6.4
477.2	$^{56}\text{Fe}(n,2n)^{55}\text{Fe}$	$7/2_2^- \rightarrow 5/2_1^-$	4.6 ± 0.7	6.4 ± 0.9	3.5
846.8	$^{56}\text{Fe}(n,n')^{56}\text{Fe}$	$2_1^+ \rightarrow 0_{g.s.}^+$	100	100	100
	$^{57}\text{Fe}(n,2n)^{56}\text{Fe}$				
931.3	$^{56}\text{Fe}(n,2n)^{55}\text{Fe}$	$5/2_1^- \rightarrow 3/2_{g.s.}^-$	12.0 ± 0.8	10.7 ± 0.9	17.4
1037.8	$^{56}\text{Fe}(n,n')^{56}\text{Fe}$	$4_2^+ \rightarrow 4_1^+$	8.2 ± 0.8	6.0 ± 0.5	6.5
1238.3	$^{56}\text{Fe}(n,n')^{56}\text{Fe}$	$4_1^+ \rightarrow 2_1^+$	43.8 ± 1.1	36.0 ± 0.2	48.6
	$^{57}\text{Fe}(n,2n)^{56}\text{Fe}$				
1289.6	$^{56}\text{Fe}(n,\alpha)^{53}\text{Cr}$	$7/2_2^- \rightarrow 3/2_{g.s.}^-$	1.7 ± 0.5		1.7
1303.4	$^{56}\text{Fe}(n,n')^{56}\text{Fe}$	$6_1^+ \rightarrow 4_1^+$	9.2 ± 0.6	9.3 ± 0.6	9.4
1303.4	$^{57}\text{Fe}(n,2n)^{56}\text{Fe}$				
1316.4	$^{56}\text{Fe}(n,2n)^{55}\text{Fe}$	$7/2_2^- \rightarrow 3/2_{g.s.}^-$	5.6 ± 0.5	6.8 ± 0.8	7.7
1408.1	$^{54}\text{Fe}(n,n')^{54}\text{Fe}$	$2_1^+ \rightarrow 0_{g.s.}^+$	4.0 ± 0.6	3.0 ± 0.6	5.8
1408.5	$^{56}\text{Fe}(n,2n)^{55}\text{Fe}$	$7/2_2^- \rightarrow 3/2_{g.s.}^-$			
1670.8	$^{56}\text{Fe}(n,n')^{56}\text{Fe}$	$6_2^+ \rightarrow 4_1^+$	4.5 ± 0.5	6.9 ± 0.7	5.0
1810.8	$^{56}\text{Fe}(n,n')^{56}\text{Fe}$	$2_2^+ \rightarrow 2_1^+$	6.7 ± 0.5	4.8 ± 0.6	3.1
1810.8	$^{57}\text{Fe}(n,2n)^{56}\text{Fe}$	$2_2^+ \rightarrow 2_1^+$			
2113.1	$^{56}\text{Fe}(n,n')^{56}\text{Fe}$	$2_3^+ \rightarrow 2_1^+$	2.5 ± 0.7	1.9 ± 0.6	1.9
2523.1	$^{56}\text{Fe}(n,n')^{56}\text{Fe}$	$2_4^+ \rightarrow 2_1^+$	2.5 ± 0.8	2.7 ± 0.6	1.0
2598.5	$^{56}\text{Fe}(n,n')^{56}\text{Fe}$	$3_1^+ \rightarrow 2_1^+$	3.4 ± 0.5	4.5 ± 0.6	2.1

^{56}Fe была выбрана модель CC с возбуждением колебательных уровней.

Существенного расхождения значений γ -выходов, вычисленных в различных подходах, не наблюдалось.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Быстрицкий В.М., Валкович В., Грозданов Д.Н. и др. // Письма в ЭЧАЯ. 2015. Т. 12. С. 486; Bystritsky V.M., Valković V., Grozdanov D.N. et al. // Phys. Part. Nucl. Lett. 2015. V. 12. P. 325.
2. Ruskov I.N., Kopatch Yu.N., Bystritsky V.M. et al. // Phys. Proc. 2015. V. 64. P. 163.
3. Грозданов Д.Н., Федоров Н.А., Копач Ю.Н. и др. // ЯФ. 2020. Т. 83. С. 200; Grozdanov D.N., Fedorov N.A., Kopatch Yu.N. et al. // Phys. Atom. Nucl. 2020. V. 83. P. 384.
4. Fedorov N.A., Grozdanov D.N., Kopatch Yu.N. et al. // Eur. J. Phys. A. 2021. V. 57. P. 194.
5. Koning A.J., Rochman D. // Nucl. Data Sheets. 2012. V. 113. P. 2841.
6. Koning A.J., Delaroche J.P. // Nucl. Phys. A. 2003. V. 713. P. 231.

7. *Raman S., Nestor C.W., Tikkanen P.* // *Atom. Data Nucl. Data Tabl.* 2001. V. 78. P. 1.
8. *Brown D.A., Chadwick M.B., Capote R. et al.* // *Nucl. Data Sheets.* 2018. V. 148. P. 1.
9. *Plompen A.J.M., Cabellos O., De Saint Jean C. et al.* // *Eur. Phys. J. A.* 2020. V. 56. P. 181.
10. *Дюмин А.И., Каминкер Д.М., Попова Г.Н., Смолин В.А.* // *Изв. АН СССР. Сер. физ.* 1972. Т. 36. С. 852; *Дюмин А.И., Каминкер Д.М., Попова Г.Н., Смолин В.А.* // *Bull. Acad. Sci. USSR. Phys. Ser.* 1973. V. 36. P. 771.
11. *Тутубалин А.И., Ключарев А.П., Божко В.П. и др.* // *ВАНТ. Сер. Ядерн. конст.* 1973. № 11. С. 17.
12. *Корж И.А., Мищенко В.А., Можжухин Е.Н. и др.* // *Укр. физ. журн.* 1977. Т. 22. С. 87.
13. *Корж И.А., Мищенко В.А., Можжухин Е.Н. и др.* // *ЯФ.* 1977. Т. 26. С. 1151.
14. *El-Kadi S.M., Nelson C.E., Purser F.O. et al.* // *Nucl. Phys. A.* 1982. V. 390. P. 509.
15. *Olacel A., Belloni F., Borcea C. et al.* // *Phys. Rev. C.* 2017. V. 96. Art. No. 014621.
16. *Van Patter D.M., Nath N., Shafroth S.M. et al.* // *Phys. Rev.* 1962. V. 128. P. 1246.
17. *Lychagin A.A., Simakov S.P., Devkin B.V. et al.* // *Nucleon Induced Reactions. Proc. V Int. Symp. (Smolenice, 1988).* P. 272.
18. *Negret A., Borcea C., Plompen A.J.M.* // *Phys. Rev. C.* 2013. V. 88. Art. No. 027601.
19. *Dashdorj D., Mitchell G.E., Becker J.A. et al.* // *Nucl. Sci. Engin.* 2007. V. 157. P. 65.
20. *Mihailescu L.C., Borcea C., Koning A.J., Plompen A.J.M.* // *Nucl. Phys. A.* 2007. V. 786. P. 1.
21. *Schmidt D., Mannhart W., Xichao R.* // *PTB-Neutronenphysik Rep.* 2006. № 50. Art. No. 1.
22. *Pierre C. St., Machwe M. K., Lorrain P.* // *Phys. Rev.* 1959. V. 115. P. 999.
23. *Christodoulou E.G., Tsirliganis N.C., Knoll G.F.* // *Nucl. Sci. Engin.* 1999. V. 132. P. 273.
24. *Han Y.L.* // *Chin. Phys. C.* 2004. V. 28. P. 512.
25. *Леценко Б.Е., Гуртовой М.Е., Кухленко А.С., Стрижак В.И.* // *ЯФ.* 1972. Т. 15. С. 10; *Leshchenko B.E., Gurtovoi M.E., Kukhlenko A.S., Strizhak V.I.* // *Sov. J. Nucl. Phys.* 1972. V. 15. P. 5.
26. *Schmidt D., Mannhart W.* // *PTB-Neutronenphysik Rep.* 1998. № 31. Art. No. 48S.
27. *Schmidt D., Mannhart W., Klein H., Nolte R.* // *PTB-Neutronenphysik Rep.* 1994. № 20. Art. No. 158 S.
28. http://vniia.ru/eng/production/incl/prospekt_element_eng.pdf.
29. *Simakov S.P., Pavlik A., Vonach H., Hlavac S.* Report INDC(CCP)-413. Vienna, 1998. P. 144.
30. *Obložinský P., Hlaváč S., Maino G., Mengoni A.* // *Nuovo Cim. A.* 1992. V. 105. P. 965.
31. *Yamamoto T., Hino Y., Itagaki S., Sugiyama. K.* // *J. Nucl. Sci. Tech.* 1978. V. 15. No. 11. P. 797.

Simulation of 14 MeV neutron scattering by titanium, chrome, and iron using the TALYS code

**I. D. Dashkov^{a, b, d, *}, N. A. Fedorov^{a, b}, D. N. Grozdanov^{a, c}, Yu. N. Kopach^a, T. Yu. Tretyakova^{a, b, d},
I. N. Ruskov^{a, c}, V. R. Skoya^a, S. Dabylova^{a, e}, F. A. Aliev^{a, f}, C. Hramco^{a, g}, N. A. Gundorin^a,
R. B. Marzhokhov^a, Yu. N. Barmakov^h, E. P. Bogolyubov^h, V. I. Zverev^h**

^aJoint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

^bLomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

^cInstitute for Nuclear Research and Nuclear Energy of the Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria

^dSkobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

^eGumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan

^fInstitute of Geology and Geophysics Azerbaijan National Academy of Sciences, Baku, Azerbaijan

^gInstitute of Chemistry of Moldova Academy of Science, Kishinev, Moldova

^hDukhov All-Russia Research Institute of Automatics, Moscow, Russia

*e-mail: daschkov.id15@physics.msu.ru

The TALYS 1.9 software was used to calculate the cross sections of the processes occurring during the scattering of fast neutrons by ^{48}Ti , ^{52}Cr , and ^{56}Fe . Comparison of the model calculations results with experimental data obtained within the framework of the TANGRA project using the method of tagged neutron and with the results of previously published experiments was done. The analysis of the model sensitivity to the choice of the direct reaction mechanism showed that the most informative characteristic from this point of view is the differential cross section of inelastic scattering.