

**ИЗУЧЕНИЕ СПЕКТРА
ЧАСТОТ ГИДРИДА ЦИРКОНИЯ
МЕТОДОМ НЕУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ**

В. Н. Клинецов, Ю. В. Лисичкин, В. А. Семенов

На спектрометрах ДИН-1М и ДИН-2ПИ, установленных на реакторах ИБР-30 и ИБР-2 Объединенного института ядерных исследований (г. Дубна), измерены спектры неупругого рассеяния нейтронов (НРН) для образцов $ZrH_{1.03}$, $ZrH_{1.55}$, $ZrH_{1.94}$ и ZrH_2 при температурах 293 и 573 К. Из экспериментальных спектров НРН получены спектры частот решетки ZrH_2 и обобщенные спектры частот (ОСЧ) атома водорода в $ZrH_{1.03}$, $ZrH_{1.55}$, $ZrH_{1.94}$ и ZrH_2 . Выполнен расчет динамики ГЦК и ГЦТ решетки ZrH_2 по модели Борна—Кармана в приближении парного центрально-симметричного потенциала взаимодействия между атомами. Проведен анализ полученных результатов.

Интерес к исследованию спектра частот гидрида циркония обусловлен как прикладными задачами, так и необходимостью разработки теории гидридов переходных металлов. Экспериментальные данные о спектре частот этих материалов содержат информацию о микроскопических характеристиках взаимодействия металл—водород и водород—водород. Именно отмеченными обстоятельствами объясняется постоянно возрастающая интенсивность изучения динамики гидридов металлов, в том числе гидрида циркония, методом неупругого рассеяния нейтронов. Однако, несмотря на сравнительно большое число работ по гидриду циркония, выполненных этим методом (см., например, [1-10]), качество и объем полученных результатов пока не позволяют решить целый ряд существенных вопросов. Так, до настоящего времени из экспериментальных спектров НРН не был получен спектр колебаний решетки гидрида циркония ZrH_2 , не установлена относительная роль различных факторов, влияющих на детальную структуру и форму спектра частот (фазовый состав, неупорядоченность водородной подрешетки, взаимодействие атомов водорода); не изучены эффекты ангармонизма колебаний. Кроме того, к общим методическим трудностям обработки и анализа нейтронного эксперимента (эффекты многофононного и многократного рассеяния нейтронов, а также конечного разрешения спектрометра) для неоднородных решеток, к которым относится и гидрид циркония, добавляются новые (вклад в сечение рассеяния от атомов металла, необходимость определения векторов поляризации фононов, асимметрия колебаний для ГЦТ структуры).

В [4], где были впервые обнаружены детальная структура спектров НРН гидридов циркония в области оптических колебаний и ее зависимость от содержания водорода, никаких поправок на указанные выше эффекты не вводилось. В [6] аналогичные данные были получены для области акустических колебаний. С учетом эффектов многофононного и многократного рассеяния нейтронов восстановлен ОСЧ атома водорода $g_H(\omega)$ (произведение спектра частот решетки $g(\omega)$ на средний квадрат модуля вектора поляризации атома водорода $\langle |E_H(\omega)|^2 \rangle$). В последующих за [4, 6] работах [7-10] также определялся только ОСЧ атома водорода.

Причина в том, что, как показано в [11] на примере гидрида лития, для учета векторов поляризации и корректного анализа результатов нейтронного эксперимента необходим предварительный расчет динамики гидрида, основанный на определенных модельных представлениях. Слэгги [12], Филип и др. [13], используя модель Борна—Кармана, рассчитали для ГЦК структуры ZrH_2 спектр частот решетки и ОСЧ для атомов водорода и циркония. Однако сопоставление данных нейтронного эксперимента с указанными расчетами показало необходимость выяснения влияния на $g(\omega)$ тетрагонального искажения решетки ϵ -фазы [6, 9, 10].

Данная работа является продолжением ведущихся на спектрометрах ДИН-1М и ДИН-2ПИ исследований [6, 7, 9, 10], посвященных решению указанных выше вопросов.

1. Эксперимент

Исследовались порошкообразные образцы гидрида циркония с содержанием водорода x от 1 до 2 H/Zr. При комнатной температуре проводились измерения: 1) на спектрометре ДИН-1М для образцов с $x=1.84$ при начальной энергии $E_0=21$ и 173 мэВ; 2) на спектрометре ДИН-2ПИ для образцов с $x=1.60, 1.84, 2$ при $E_0=10$ и 12 мэВ. При температуре $T=573$ К измерения выполнялись на ДИН-1М для образцов с $x=1.03, 1.55, 1.84$ при $E_0=9$ мэВ. В экспериментах на ДИН-1М использовалось семь углов рассеяния θ в диапазоне от 25 до 122°, на ДИН-2ПИ — четыре угла рассеяния в диапазоне от 42 до 134°.

Методики измерения спектров НРН на спектрометре ДИН-1М, приготовления образцов гидрида циркония и предварительной обработки результатов изложены в [6]. Измерения, выполненные на новом спектрометре ДИН-2ПИ, в методическом плане практически не отличаются от измерений на ДИН-1М [9, 10]. Однако спектрометр ДИН-2ПИ по сравнению с ДИН-1М имеет существенно лучшие светосилу, соотношение эффекта к фону и несколько лучшее разрешение в области низких начальных энергий нейтрона. Это позволяет измерять детальную структуру спектров НРН образцами гидрида циркония одновременно в области акустических и оптических колебаний и не прибегая к нагреванию образца.

На рис. 1 представлен измеренный на спектрометре ДИН-2ПИ спектр нейтронов с начальной энергией 10 мэВ, рассеянных на угол $\theta=42^\circ$ поликристаллическим образцом $ZrH_{1.84}$ при комнатной температуре (аналогичные спектры получены на углах рассеяния 85, 114 и 133°). Исследуемый образец, приготовленный гидрированием из газовой фазы, представляет собой ϵ -фазу с ГЦТ структурой и отношением c/a , равным 0.898. Порошок гидрида засыпался в кварцевые трубки с внутренним диаметром 1 и толщиной стенки 0.3 мм, которые в измерительной камере были расставлены по образующей цилиндра диаметром 145 и высотой 180 мм. Пропускание образца при $E_0=10$ мэВ составляло 0.76.

Разрешение спектрометра $\Delta E/E$ (E — энергия рассеянного нейтрона) в области упругого пика и акустической части спектра порядка 5 %, а для оптической части около 10 %.

Вклад фона (без учета рассеяния на контейнере) составляет 2 % в максимуме оптической части спектра НРН и 3 % в акустической. Фон, обусловленный наличием кварцевого контейнера, ухудшает эти соотношения соответственно до 3 и 6 %.

Вклады многофононного и многократного рассеяния, оцененные методом, использованным в работе [6], соответственно составляют 12 и 20 % в максимуме оптической части спектра НРН, 0.6 и 40 % — в акустической.

На рис. 1 видно, что в измеренном спектре НРН наблюдается детальная структура с рядом более или менее выраженных особенностей. Слабо проявляющимся особенностям можно было бы не придавать значения,

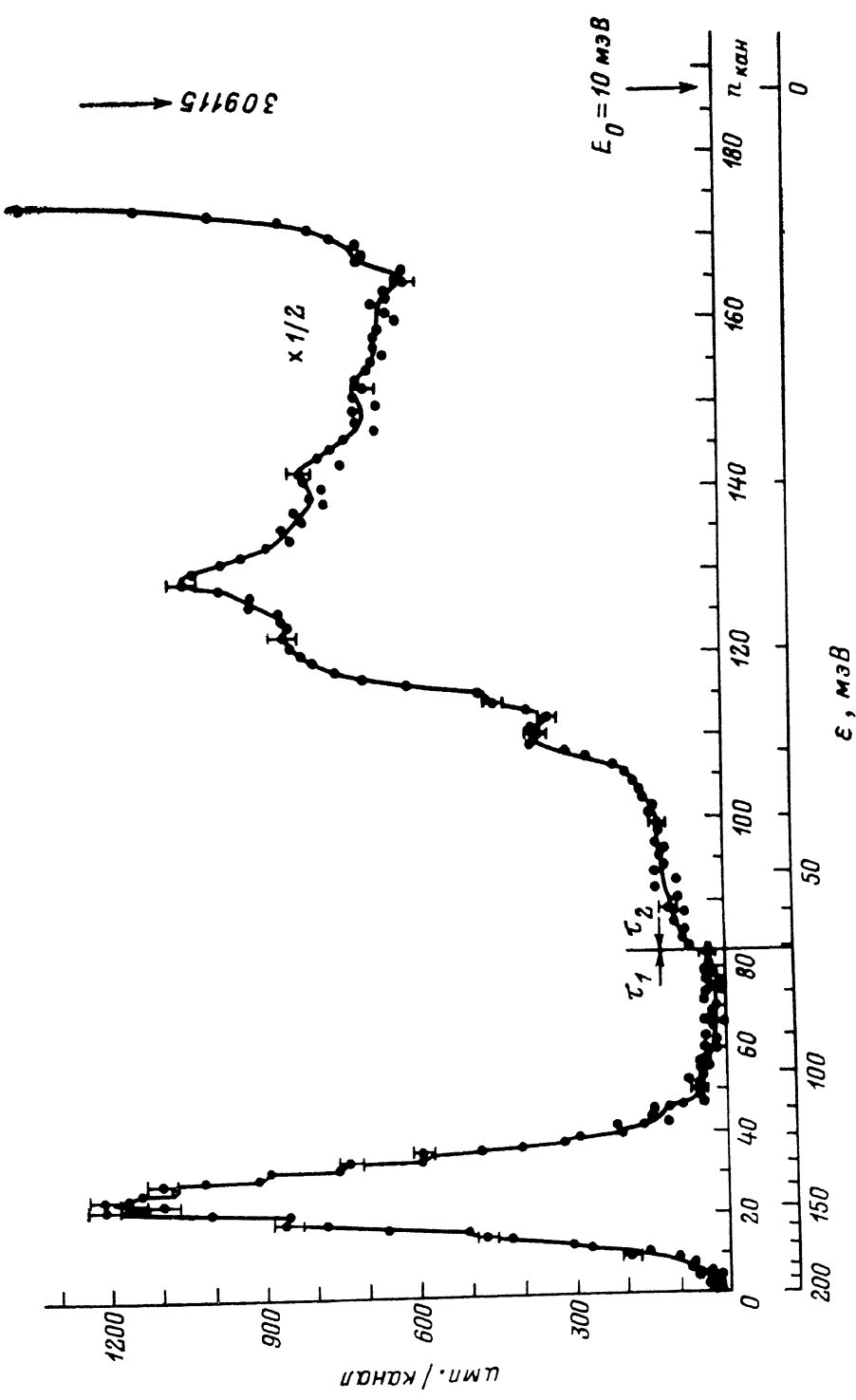


Рис. 1. Спектр НРН для $ZrH_{1.84}$ при $T=293\text{ К}$, $E_0=10\text{ мэВ}$, $\theta=42^\circ$, $\tau_1=8$, $\tau_2=32\text{ мкс}$, $\epsilon=E-E_0$.

Спектр исправлен на фон реактора и рассеяние на контейнере, ослабление в образце и контейнере потока падающих и рассеянных нейтронов, эффективность детектора и пропускание нейтронвода.

Положения особенностей в спектрах НРН и ОСЧ для гидрида циркония

T, К	Образец	Энергия колебаний $\epsilon = \hbar\omega$, мэВ		Ссылка
		акустическая область	оптическая область	
203	ZrH _{0.51}		130	} } } [4] Наст. раб. (ДИН-1М)
	ZrH _{1.03}		140	
	ZrH _{1.56}		137	
	ZrH ₂	126	143	
573	ZrH _{1.84}		137	} } } [6] и наст. раб. (ДИН-1М)
	ZrH _{1.03}	15.5	143	
	ZrH _{1.55}	16.3	142	
	ZrH _{1.84}	14.5	152	
293	ZrH _{1.84}	8.3	129	} } } [9] (ДИН-2ПИ) [8] Объединенные эксл. данные Расчет, наст. раб.
	ZrH _{1.6}	8.3	129	
	ZrH ₂	8.3	129	
	ZrH ₂	9.0	126	
	ZrH _{1.6-2.0}	9.0	123	
	ZrH ₂	17.0	131	
		20.0	149	155
		25.1	143	157
		25.1	141	159
		28.0	145	157
		29.0	143	152
		20.0	142	148
		22	142	152
		18.0	142	152
		20.0	141	157
		20.0	145	159
		19.5	145	159
		28.0	143	157
		22	143	152
		20.0	142	152
		22	142	152
		20.0	142	152

но многие из них подтверждаются спектрами НРН, полученными для других углов рассеяния, при других начальных энергиях и в измерениях на спектрометре ДИН-1М. Совокупный анализ наших и опубликованных результатов [4, 9] позволяет достаточно уверенно установить положения особенностей, наблюдающихся в экспериментальных спектрах НРН для гидрида циркония (см. таблицу).

2. Расчет динамики решетки ZrH_2

Для получения из измеренных спектров НРН спектра частот и интерпретации экспериментальных результатов предварительно был выполнен полный расчет динамики кристаллической решетки ZrH_2 , как для ГЦК

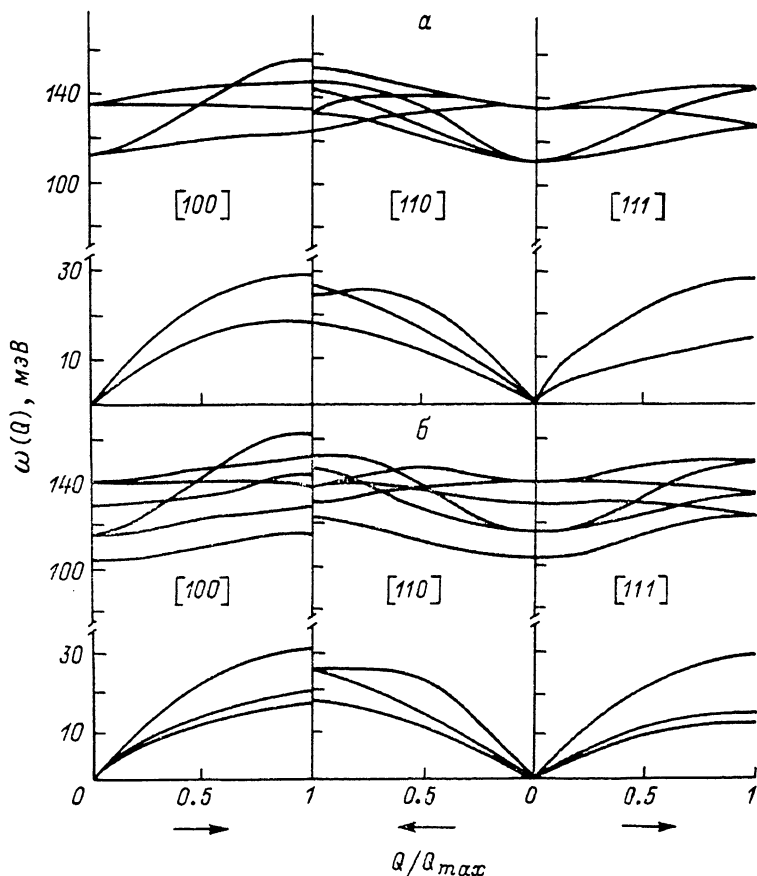


Рис. 2. Расчетные дисперсионные кривые для решетки ZrH_2 .
а — ГЦК структура, б — ГЦТ структура.

структуры (с параметром $a=4.981 \text{ \AA}$), так и для ГЦТ (с параметрами $a=4.981 \text{ \AA}$, $c=4.451 \text{ \AA}$). Расчет проводился методом силовых постоянных в приближении парного центрально-симметричного потенциала взаимодействия между атомами с набором силовых констант, определяемых первыми и вторыми производными межатомных потенциалов ($Zr-Zr$ и $Zr-H$ — первая координационная сфера, $H-H$ — первая и вторая координационные сферы). Для каждого типа структуры расчеты проводились в двух основных вариантах. В первом варианте первые производные потенциалов взаимодействия полагались равными нулю, а силовые константы, определяемые вторыми производными, были взяты из [12]. Во втором варианте учитывалось неравенство нулю первых про-

изводных и использовался набор силовых констант из [13]. При расчете ГЦТ структуры также использовались значения силовых констант, определенные в [12, 13], т. е. предполагалось, что они не зависят от степени тетрагональности решетки. Таким образом, наши расчеты для ГЦК структуры полностью аналогичны работам [12, 13].

Для каждой из 45 000 точек q -пространства (q — волновой вектор фонона), равномерно распределенных в приведенной зоне Бриллюэна (1/16 полной зоны для ГЦТ и 1/48 для ГЦК), была диагонализирована динамическая матрица и найдены частоты $\omega_s(q)$ (s — номер ветви) и вектора поляризации $\xi_s(q)$ колебаний l -го атома в элементарной ячейке ZrH_2 . Затем находились спектр частот решетки $g(\omega)$; квадрат модуля вектора поляризации колебаний l -го атома в элементарной ячейке ZrH_2 , усредненный по поверхности частоты ω , $\langle |\xi_l(\omega)|^2 \rangle$; ОСЧ атомов водорода и циркония $g_H(\omega) = \langle |\xi_H(\omega)|^2 \rangle g(\omega)$ и $g_{Zr}(\omega) = \langle |\xi_{Zr}(\omega)|^2 \rangle g(\omega)$.

Некоторые результаты первого варианта расчета представлены на рис. 2, 3. Следует отметить, что при заданных силовых константах Н--Н

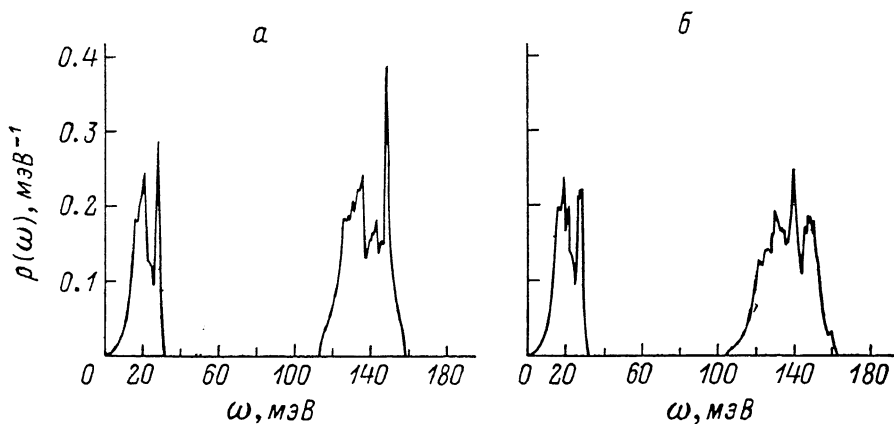


Рис. 3. Расчетный спектр частот решетки ZrH_2 .

a — ГЦК структура, b — ГЦТ структура.

взаимодействия спектр оптических частот уже достаточно сложен и для ГЦК структуры. Тетрагональное искажение, как и следовало ожидать, приводит к увеличению количества ветвей для некоторых направлений q . Расщепление максимальной частоты поперечных акустических колебаний при этом, как видно, порядка 10 %. Спектр частот решетки ZrH_2 при переходе от ГЦК к ГЦТ также становится богаче деталями и изменяет свою форму. Например, в области оптических частот спектр заметно уширяется. Расчет также показал, что переход от ГЦК к ГЦТ структуре практически не изменяет величину $\langle |\xi_H(\omega)|^2 \rangle$ (наибольшее различие наблюдается в области акустических частот и не превышает 10 %). В обоих случаях зависимость $\langle |\xi_H(\omega)|^2 \rangle$ от частоты гладкая.

Во втором варианте расчета при переходе от ГЦК к ГЦТ структуре все результаты были аналогичны изложенным выше, хотя $\omega_s(q)$, $\langle |\xi_H(\omega)|^2 \rangle$ и $g(\omega)$, $g_H(\omega)$, естественно, отличались от полученных выше. Было выяснено, что различие величины $\langle |\xi_H(\omega)|^2 \rangle$ при переходе от первого ко второму варианту расчета обусловлено только изменением максимальной частоты акустических колебаний, которое связано с соответствующей разницей силовых констант.

Для оценки влияния величины Н—Н взаимодействия в обоих основных вариантах расчета проводилась вариация соответствующих силовых констант. Оказалось, что величина Н—Н взаимодействия и для ГЦК и для ГЦТ структур заметно влияет не только на оптическую часть спектра колебаний, но и на акустическую. Уменьшение величины Н—Н взаимодействия увеличивает различие $g(\omega)$, $g_H(\omega)$ и $\langle |\xi_H(\omega)|^2 \rangle$ при переходе

от ГЦК к ГЦТ решетке. В частности, при равенстве нулю констант $H-H$ взаимодействия в области акустических колебаний в среднем существенно возрастает величина $\langle |S_H(\omega)|^2 \rangle$ и меняется вид ее зависимости от ω . При этом, например, отношение площади акустической части ОСЧ к площади оптической (параметр, играющий важную роль при расчете ядерных реакторов с гидридциркониевым замедлителем [1, 13]) увеличивается почти в два раза по сравнению с описанными выше основными вариантами расчета. Частота оптических колебаний при переходе от ГЦК к ГЦТ структуре расщепляется, разность частот в ГЦТ решетке порядка 10% частоты в ГЦК.

Некоторые другие результаты расчета будут представлены ниже в сопоставлении с экспериментальными данными.

3. Обсуждение результатов

На рис. 4 представлены полученные из экспериментальных спектров НРН ОСЧ атома водорода в области акустических колебаний. ОСЧ для $ZrH_{1.03}$, $ZrH_{1.55}$ и $ZrH_{1.84}$ получены из измерений на спектрометре ДИН-1М, выполненных при начальной энергии нейтронов 9 мэВ и температуре образца 573 К [6]. ОСЧ ZrH_2 получен из измерений на спектрометре

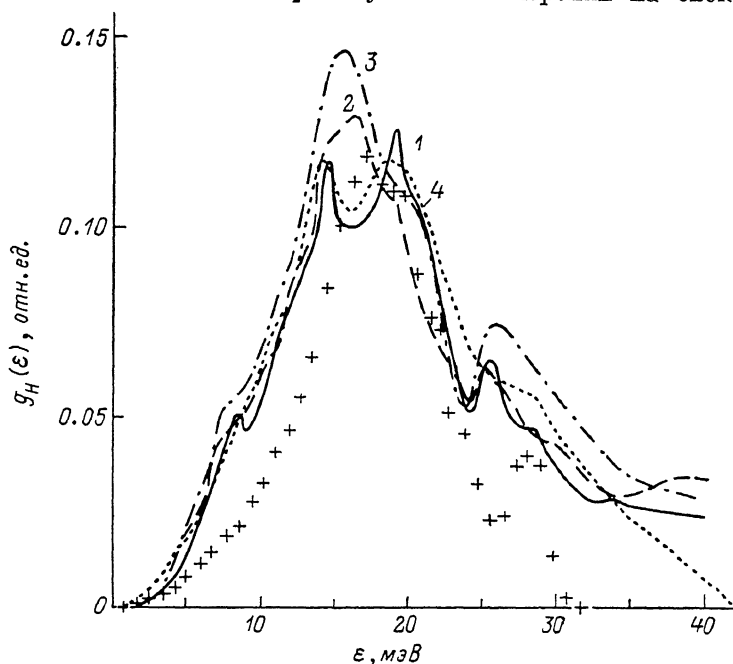


Рис. 4. Акустическая часть ОСЧ атома водорода в решетке гидрида циркония.

1 — $ZrH_{1.84}$, 2 — $ZrH_{1.55}$, 3 — $ZrH_{1.03}$, 4 — ZrH_2 . Т, К: 1—3 — 573, 4 — 293. 1—4 — эксперимент; 5 — расчет для ГЦТ структуры, первый вариант (силовые константы из [12]).

ДИН-2ПИ, выполненных при начальной энергии 12 мэВ и комнатной температуре [9]. $ZrH_{1.03}$ при температуре измерений соответствует $(\alpha+\delta)$ -фазе с основным содержанием δ -фазы (ГЦК структура), $ZrH_{1.55}$ — только δ -фазе, $ZrH_{1.84}$ и ZrH_2 — ϵ -фазе (ГЦТ структура).

На основании рис. 4 можно отметить следующее. В каждом экспериментальном ОСЧ в той или иной степени проявляется детальная структура, зависящая от фазового состава образца. ОСЧ для $ZrH_{1.03}$ и $ZrH_{1.55}$, так же как и для $ZrH_{1.84}$ и ZrH_2 , довольно близки по форме, что связано с практически одинаковым фазовым составом соответствующих образцов. В то же время для образцов ϵ -фазы ($ZrH_{1.84}$ и ZrH_2) наблюдаются особенности при энергиях колебаний около 14 и 19 мэВ, которые отсутствуют для образцов $ZrH_{1.03}$ и $ZrH_{1.55}$.

Сравнение акустической части ОСЧ $ZrH_{1.84}$ и ZrH_2 , полученных при разных температурах, не дает основания говорить о заметных эффектах ангармонизма. Теоретические оценки, сделанные в квазигармоническом приближении в [14], также дают для области акустических колебаний незначительный эффект ангармонизма, сравнимый с точностью нашего эксперимента. Учитывая это, можно считать полученные нами ОСЧ в области акустических колебаний не зависящими от температуры. Сравнивая их с расчетным ОСЧ для ГЦТ структуры (рис. 4), можно констатировать следующее. Расчетный ОСЧ, полученный с учетом тетрагонального искажения решетки, согласуется с экспериментальными ОСЧ для ϵ -фазы лучше, чем расчет, выполненный Слэгги без учета этого искажения (сравнение расчета Слэгги с экспериментом см. в [6]). Интересно отметить, что аналогичные расчеты (рис. 5), выполненные при уменьшении силовых констант Н—Н взаимодействия, еще лучше согласуются с экспериментальными ОСЧ для ϵ -фазы. Экспериментальные ОСЧ для

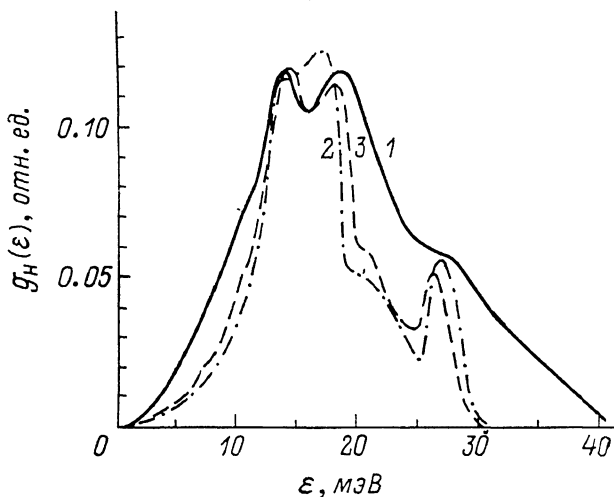


Рис. 5. Акустическая часть ОСЧ атома водорода для ZrH_2 .

1 — эксперимент; 2, 3 — расчет, силовые константы Н—Н взаимодействия равны нулю, другие константы, как в [14]. 2 — ГЦК структура, 3 — ГЦТ структура.

$ZrH_{1.03}$ и $ZrH_{1.55}$ лучше согласуются с расчетами для ГЦК структуры. Таким образом, сопоставление полученных нами экспериментальных и расчетных данных подтверждает высказанное в [6] предположение о том, что изменение детальной структуры акустической части спектров НРН при переходе от $ZrH_{1.03}$ и $ZrH_{1.55}$ к $ZrH_{1.84}$ и ZrH_2 связано с переходом от ГЦК к ГЦТ решетке. Как видно из рис. 4, изменения детальной структуры экспериментальных ОСЧ, наблюдающиеся с изменением содержания водорода в пределах одной фазы, менее значительны.

В области оптических колебаний наши экспериментальные данные, полученные при комнатной температуре, в основном подтверждают результаты работы [4] относительно изменения детальной структуры спектров НРН в зависимости от содержания водорода.

Сопоставление эксперимента с расчетом в оптической части спектра колебаний затрудняется тем, что для образцов нестехиометрического состава необходимо учитывать эффекты неупорядоченности водородной подрешетки, которые должны возрастать с понижением содержания водорода. Поскольку наши расчеты выполнены для полностью упорядоченной решетки ZrH_2 , ниже мы рассмотрим экспериментальный спектр частот только для этого образца.

При температуре 573 К оптическая часть измеренных спектров НРН практически не имеет детальной структуры. Это объясняется главным образом резким возрастанием многофононного рассеяния и возможными

эффектами ангармонизма. Предварительный анализ рассматриваемых здесь и в работе [7] результатов измерения спектров НРН для образцов $ZrH_{1.84}$ в диапазоне температур от 293 до 773 К показал неприменимость гармонического приближения в области оптических колебаний. С ростом температуры резко увеличивается наблюдаемая полуширина оптического пика, хотя изменения средней энергии оптических колебаний в пределах экспериментальных погрешностей незаметны. Однако рост наблюдаемой полуширины обусловлен как сильным увеличением многофононного рассеяния, так и уменьшением времени жизни оптических колебаний. Сделанные нами оценки, учитывающие соответствующие поправки на многофононное рассеяние, показывают, что полуширина оптического пика в ОСЧ атома водорода при $T=573$ К примерно на 18 % больше, чем при $T=293$ К.

Вместе с тем в теоретической работе [14] на основе квазигармонического приближения для оптических колебаний гидрида циркония при

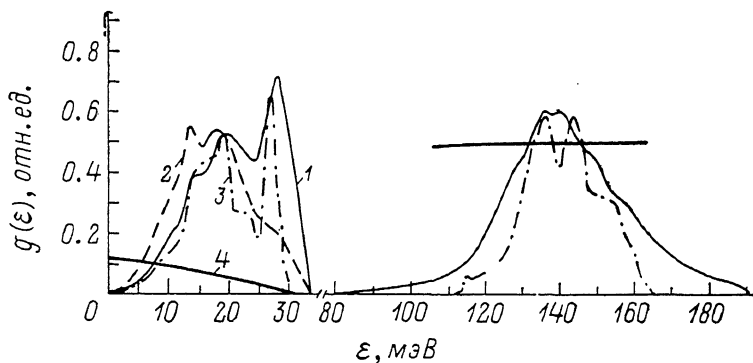


Рис. 6. Спектры частот решетки ZrH_2 .

1 — спектр частот решетки ZrH_2 , полученный из экспериментального ОСЧ атома водорода при комнатной температуре; 2 — экспериментальный ОСЧ атома водорода для ZrH_2 (кривая 4 на рис. 4, исправленная на вклад циркония); 3 — спектр частот решетки ZrH_2 , рассчитанный в [14] для ГЦК структуры; 4 — средний квадрат модуля вектора поляризации атома водорода в решетке ZrH_2 . Расчет для ГЦК структуры использован для получения кривой 1 из кривой 2.

увеличении температуры от 300 до 800 К было получено 15%-ное понижение частоты при отсутствии заметного уширения. В связи с этим вопрос о температурной зависимости оптической части спектра частот гидрида циркония требует отдельного обсуждения и в данной работе далее не рассматривается.

Имея в распоряжении расчетную зависимость $\langle |\xi_H(\omega)|^2 \rangle$, из экспериментального ОСЧ атома водорода можно получить спектр частот $g(\omega)$ решетки ZrH_2 . Однако предварительно необходимо исправить экспериментальные $g_H(\omega)$ в области акустических колебаний на вклад от рассеяния на цирконии (представленные на рис. 4 данные получены без учета этого эффекта). В экспериментальных работах, где проводилось получение ОСЧ из спектров НРН, вкладом рассеяния на атомах циркония пренебрегали (см., например, [8]) на том основании, что по отношению к рассеянию на водороде он составляет величину порядка нескольких процентов. Неверность этой оценки связана с предположением о том, что во всей области акустических частот отношение $\langle |\xi_H(\omega)|^2 \rangle / \langle |\xi_{Zr}(\omega)|^2 \rangle$ составляет величину порядка 10^{-2} [8]. Как показывает расчет (рис. 6), это не так. Средний квадрат модуля вектора поляризации атома водорода в области акустических колебаний уменьшается от значения порядка 10^{-2} при $\omega=0$ до 0 при максимальной частоте акустических колебаний. Тогда как $\langle |\xi_{Zr}(\omega)|^2 \rangle$ во всей области акустических частот порядка 1. Поэтому в случае, например, ZrH_2 вклад от рассеяния на цирконии составляет около 4 % при $\epsilon=\hbar\omega=0$, 10 % при $\epsilon=20$ мэВ и 40 % при $\epsilon=30$ мэВ (следует отметить, что ошибка определения вклада цир-

кония в области максимальных частот акустических колебаний возрастает).

На рис. 6 показаны исправленный на вклад циркония экспериментальный ОСЧ атома водорода и полученный из него спектр частот решетки ZrH_2 . В акустической части кривые 1 и 2 для энергии колебаний больше 30 мэВ малонадежны. В оптической части кривые 1 и 2 практически совпадают. При сравнении кривых 1 и 3 следует иметь в виду, что расчетный спектр частот не усреднен по разрешению спектрометра. Из этого рисунка видно, что форма акустической части спектра частот решетки довольно сильно отличается от формы ОСЧ атома водорода. Это еще раз подтверждает вывод о том, что особенности, наблюдаемые в спектре НРН или ОСЧ гидридов в области акустических частот, нельзя отождествлять с особенностями спектра частот решетки [11].

На рис. 6, 3 видно, что расчетные спектры в целом удовлетворительно согласуются с экспериментальными. Спектр частот, рассчитанный для ГЦТ структуры, богаче деталями, но форму распределения и соотношение главных максимумов в области акустики описывает даже несколько хуже, чем спектр для ГЦК структуры. Ввиду довольно приближенного характера использованной модели и с учетом того, что подгонка силовых констант под экспериментальные данные пока не проводилась, не следует придавать этому обстоятельству слишком большого значения. Кроме того, необходимо отметить, что обобщенные экспериментальные данные разных работ по положению особенностей, наблюдающихся в спектрах НРН и ОСЧ атома водорода в решетке гидридов циркония, достаточно хорошо согласуются с соответствующими расчетными, полученными для ГЦТ структуры (см. таблицу). Расчет воспроизводит все обнаруженные в эксперименте особенности, причем наблюдаемые экспериментально при 129, 143 и 157 мэВ воспроизводятся только при учете тетрагонального искажения решетки. Однако предсказываемые расчетом пики при 123 и 148 мэВ экспериментально не обнаружены.

Таким образом, на базе полученных экспериментальных данных по спектру частот гидрида циркония возможно уточнение модели Борна—Кармана прежде всего за счет улучшения подгонки расчета в области акустических колебаний, информацией о детальной структуре которой авторы работ [12, 13] не располагали. Кроме того, в [12, 13] подгонка констант проводилась на основе измерений ϵ -фазы гидрида циркония, но без учета тетрагонального искажения решетки. Следовательно, вся наблюдаемая ширина и детальная структура оптической части спектра частот приписывались влиянию Н—Н взаимодействия. Как показывают изложенные выше результаты, это должно было привести к завышению Н—Н взаимодействия.

Л и т е р а т у р а

- [1] Мак-Рейнольдс А., Хелкин М., Розенблют М., Уиттмор У. Тр. II Междунар. конф. по использованию атомной энергии в мирных целях. М.: Атомиздат, 1959, с. 648—674.
- [2] Woods A. D. B., Brockhause B. N., Sakamoto M., Sinclair R. N. In: Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and liquids. IAEA, Vienna, 1961, p. 487—498.
- [3] Wittemore W. L., Hom A. K. Bull. Am. Phys. Soc., 1963, vol. 8, N 8, p. 606.
- [4] Couch J. G., Harling O. K., Clune L. C. Phys. Rev. B, 1971, vol. 4, N 8, p. 2675—2681.
- [5] Петрунин В. Ф., Долуханян С. К., Землянов М. Г. и др. ФТТ, 1981, т. 23, № 7, с. 1926—1960.
- [6] Семенов В. А., Лисичкин Ю. В. ФТТ, 1982, т. 24, № 12, с. 3575—3581.
- [7] Семенов В. А., Лисичкин Ю. В. Препринт ФЭИ-1402. Обнинск, 1983.
- [8] Белишкин А. В., Бысковану И., Крәчун К. Н. и др. Сообщение ОИЯИ Р14-84-243. Дубна, 1984.
- [9] Козлов Ж. А., Лисичкин Ю. В., Пядуреану И. и др. Сообщение ОИЯИ Р3-85-805. Дубна, 1985.
- [10] Бысковану И., Козлов Ж. А., Пядуреану И. и др. Сообщение ОИЯИ Р3-86-791. Дубна, 1986.

- [11] *Zemlyanov M. G., Brovman E. G., Chernoplekov N. A., Shitikov Yu. L.* In: *Inelastic Scattering of Neutrons*. IAEA, Vienna, 1965, vol. 2, p. 431—451.
- [12] *Slaggie E. L.* *J. Phys. Chem. Sol.*, 1968, vol. 29, N 6, p. 923—934.
- [13] *Filip V., Costescu C., Anghel V.* *Thermal Reactor Benchmark Calculations, Techniques, Results and Applications*. EPRI-NP-2855, February 1983, BNL. Upton, N. Y., p. 285—304.
- [14] *Slaggie E. L.* *Phys. Rev. B*, 1970, vol. 2, N 6, p. 2230—2242.

Поступило в Редакцию
26 января 1988 г.
В окончательной редакции
14 июня 1988 г.
