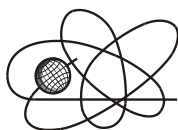




Российская Академия Наук

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

**ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ
БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ
АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ**



ИБРАЭ

RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCES

**NUCLEAR SAFETY
INSTITUTE**

Препринт ИБРАЭ № ИБРАЭ-2023-01

Preprint IBRAE-2023-01

Е.Ф. Митенкова, Н.В. Новиков, Е.В. Соловьева

**РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ НУКЛИДНОЙ КИНЕТИКИ
НА ОСНОВЕ РАСШИРЕННЫХ БИБЛИОТЕК
ОДНОГРУППОВЫХ СЕЧЕНИЙ**

Москва
2023

Moscow
2023

Митенкова Е.Ф. Решение задач нуклидной кинетики на основе расширенных библиотек одногрупповых сечений. /Е.Ф. Митенкова, Н.В. Новиков, Е.В. Соловьева — (Препринт / Ин-т проблем безопас. развития атом. энергетики РАН, № ИБРАЭ-2023-01). — М.: ИБРАЭ РАН, 2023. — 19 с. — Библиогр.: 9 назв. — 40 экз. — ISBN 978-5-907375-13-0

Неоднозначность формирования расширенных библиотек с высокопороговыми реакциями может приводить к заметным различиям в прецизионных расчетах нуклидного состава облучаемых композиций. Важность включения высокопороговых реакций в библиотеки подтверждается результатами методических расчетов по программе MZK. Проанализировано влияние расширенных библиотек на состав облучаемой стали ЧС-68 и ЭК-181.

©ИБРАЭ РАН, 2023

Mitenkova, E. Nuclide kinetics solving problems with extended single-group cross sections libraries. / E.F. Mitenkova, N.V. Novikov, E.V. Solovjeva — (Preprint / Nuclear Safety Institute RAS, 2023, № IBRAE-2023-01). — Moscow: NSI RAS, 2023. — 19 p.— Bibliogr.: 9 items — ISBN 978-5-907375-13-0

The ambiguous compilation of extended libraries with high-threshold reactions can result in noticeable nuclide composition differences in accurate calculations of nuclide kinetics problems. The importance of high-threshold reactions inclusion in libraries is confirmed by methodical calculations using MZK program. The extended libraries effect on irradiated steel ChS-68 and EK-181 composition is analyzed.

Решение задач нуклидной кинетики на основе расширенных библиотек одногрупповых сечений

Е.Ф.Митенкова, Н.В.Новиков, Е.В.Соловьева

ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

115191, Москва, ул. Б. Тульская, 52

тел.: (495) 955-22-02, факс: (495) 955-20-29, эл. почта: mit@ibrae.ac.ru

Оглавление

Оглавление.....	3
Введение	3
1 Расширенные библиотеки одногрупповых сечений.....	4
1.1 Особенности вычисления одногрупповых сечений высокопороговых реакций.....	5
1.2 Описание программы CLG.....	8
2 Методические расчеты с расширенными библиотеками.....	9
2.1 Композиция < Ru-Rh >	10
2.2 Композиция <Ce-Gd>	12
2.3 Композиция <Nd-W>	14
3 Особенности нуклидного состава облученной стали в прецизионных расчетах	15
3.1 Сталь ЧС-68.....	15
3.2 Сталь ЭК-181	16
Заключение	18
Литература	19

Введение

Задачи нуклидной кинетики представляют неотъемлемую часть базовых задач для нейтронно-физических расчетов объектов ядерной энергетики. В расчетах, связанных с выгоранием, вычислением энергораспределения, остаточного тепловыделения и др., нуклидный состав облучаемых композиций вычисляется с учетом определенных допущений и ограничений на используемые нуклиды [1, 2]. Вместе с тем при верификации и в прогностических задачах требуется вычисление нуклидного состава с большей точностью на основе максимально полной базы современных ядерно-физических данных.

Повышение надежности и точности расчетов в нуклидной кинетике во многом обусловлено реализацией прецизионных методов вычисления нейтронно-физических характеристик. Прецизионные методы должны обеспечивать гарантированную точность и устойчивость вычисляемых значений на всем временном интервале облучения ($T_{обл}$) для всех элементов системы, включая нуклиды с заметно меньшей массой по сравнению с традиционно вычисляемыми (примесные нуклиды). Прецизионные расчеты предполагают и использование расширенных библиотек, сформированных на полной базе ядерно-физических данных. Использование библиотек одногрупповых констант с расширенными цепочками переходов приводит к системам ОДУ большой размерности ~ 3000 (и более), а включение коротко- и долгоживущих изотопов — к числу обусловленности $\sim 10^{28}$ [3]. Универсальные методы решения подобных систем не существуют [2]. Стандартные пакеты MATLAB, Scilab и др. не гарантируют получения корректных решений жестких систем ОДУ большой размерности с несимметричными матрицами коэффициентов [4].

Для решения жестких систем разработана прецизионная программа MZK, которая базируется на пакете сверхточных решателей SADEL-PA10 [5]. В MZK реализованы *AL*-устойчивые неявные методы с переменным шагом интегрирования и вычислительные алгоритмы с увеличенной точностью выполнения элементарных арифметических операций, учитывающие влияние погрешностей округления. Для получения гарантированно точного решения в ходе интегрирования применен алгоритм итерационного уточнения с повышенной разрядностью [1, 3].

1 Расширенные библиотеки одногрупповых сечений

Прецизионные расчеты предполагают использование библиотек одногрупповых констант с расширенными цепочками переходов, использующие нейтронные реакции (n, d) , (n, t) , (n, nt) , $(n, {}^3\text{He})$, $(n, 3n)$, $(n, 2\alpha)$, $(n, 2p)$, $(n, p\alpha)$, (n, nd) , (n, np) , $(n, 2n\alpha)$, $(n, 3n\alpha)$ и др. (табл. 1). Сформированы расширенные библиотеки EX, EX1, EX2 одногрупповых сечений на основе JEFF 3.3 (2016 и частично 2017 г) для характерного быстрого спектра в реакторах типа БН [6]. Библиотеки EX, EX1, EX2 имеют одинаковый набор нуклидов, но различаются цепочками переходов, зависящими от включенных высокопороговых реакций и представленных с разной точностью одногрупповых сечений.

Библиотека EX содержит константы реакций mt [7] для нуклидов с зарядом ядра Z :

$Z = 90-96$ $mt = 102, 16, 17, 18$;
 $Z = 1-89$ $mt = 102, 16, 107, 103, 402, 316$;
 $Z = 1-19$ $mt = 17-45, 104-117$;
 $Z = 20-72$ $mt = 17, 22, 28, 32, 104-108, 111, 112$;
 $Z = 22-28, 40-42$ $mt = 24, 33, 34, 41-45, 109, 115-117$.

Библиотека EX1 в дополнение к AD5 содержит константы для нуклидов:

$Z = 20-72$ $mt = 33$;
 $Z = 22-28, 40-42$ $mt = 29$;
 $Z = 71-76$ $mt = 24, 25, 29, 33-45, 109, 115-117$;
 $Z = 73-76$ $mt = 17, 22, 28, 32, 104-112$;
 $Z = 1-19$ уточненные константы для $mt = 17-45, 104-117$;
 $Z = 22-28, 40-42$ уточненные константы для $mt = 24, 33, 34, 41-45, 109, 115-117$.

При формировании библиотеки EX1 учитывались аналитические оценки и результаты расчетов с разными параметрами сдвига генератора псевдослучайных чисел [8]. Библиотека EX2 включает константы для всех реакций всех нуклидов, содержащихся в JEFF 3.3. В расчетах также используются библиотеки, сформированные на базе EX2 с измененными в рамках погрешностей константами. При этом варьирование констант применяется к реакциям mt с наиболее высокими значениями погрешности.

Для уяснения значимости отдельных реакций в расширенных библиотеках проведены методические расчеты композиций с разным зарядом ядра Z – <Ru-Rh>, <Ce-Gd>, <Nd-W>.

Таблица 1. Характерные диапазоны пороговых значений (E_{\min} , E_{\max}) нейтронных реакций в JEFF 3.3 для нуклидов с $20 \leq Z \leq 76$

mt в ENDF/B	Тип реакции	E_{\min} , МэВ	E_{\max} , МэВ
11	$(n, 2nd)$	16,5	26
17	$(n, 3n)$	12	29
22	$(n, n\alpha)$	0,2	14
23	$(n, n3\alpha)$	4	30
24	$(n, 2n\alpha)$	4	23
25	$(n, 3n\alpha)$	11	27
28	(n, np)	5	16
29	$(n, n2\alpha)$	1	21
30	$(n, 2n2\alpha)$	1	23
32	(n, nd)	9	21
33	(n, nt)	10	26
34	$(n, n {}^3\text{He})$	10	27
37	$(n, 4n)$	19	30
41	$(n, 2np)$	11	25
42	$(n, 3np)$	19	29
44	$(n, n2p)$	10	25
45	$(n, np\alpha)$	3	23
104	(n, d)	3	12
105	(n, t)	3	14
106	$(n, {}^3\text{He})$	4	22

108	$(n, 2\alpha)$	1	17
109	$(n, 3\alpha)$	5	15
111	$(n, 2p)$	3	21
112	$(n, p\alpha)$	0,5	20
115	(n, pd)	8	25
116	(n, pt)	8	26
117	$(n, d\alpha)$	1	23

1.1 Особенности вычисления одногрупповых сечений высокопороговых реакций.

Наиболее точно одногрупповые сечения могут быть вычислены с помощью Монте-Карло кодов на основе библиотек с непрерывными ядерными данными. Трудности вычисления одногрупповых сечений σ_{mt} (mt – указатель реакции в ENDF файлах оцененных ядерных данных [7]) реакций с высоким порогом E_{\min} связаны с рядом факторов, обусловленных спецификой нейтронного спектра для $20 < E < 30$ МэВ и ядерными данными в области энергии E_{\max} , составляющей 20 и 30 МэВ [6, 7] в ENDF файлах. Не отвечающие нормальному распределению редкие события при высоких энергиях и слабом потоке в области E_{\max} (рис. 1, 2) приводят к не всегда корректно вычисляемой погрешности ϵ сечений высокопороговых реакций и заметной чувствительности вычисляемых σ_{mt} к параметру сдвига генератора псевдослучайных чисел [8]. Характерный быстрый рост функции $\sigma_{mt}(E_i)$ в области высоких энергий способствует появлению заметных различий сечений при разных параметрах расчета. Следует отметить существенно различный вид $\sigma_{mt}(E_i)$ для разных нейтронных реакций mt и разных нуклидов (рис. 3—5).

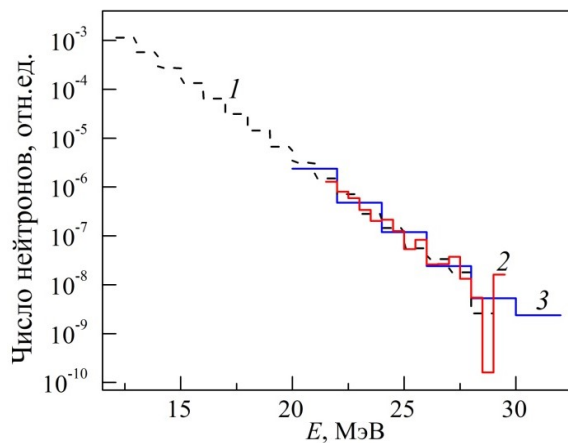


Рис. 1. Характерный быстрый спектр с шагом dE , МэВ: 1 (1), 0,5 (2), 2 (3)

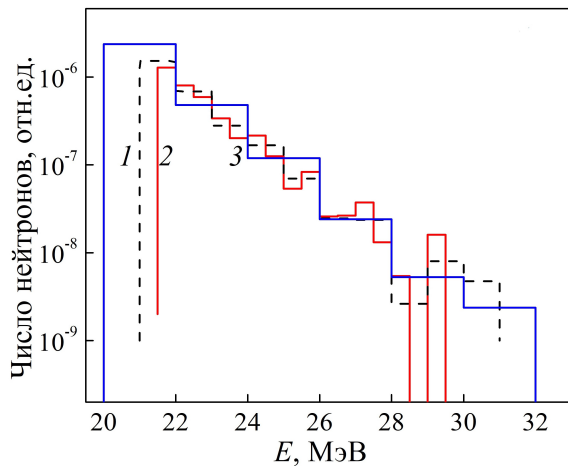


Рис. 2. Область быстрого спектра с шагом dE , МэВ: 1 (1), 0,5 (2), 2 (3)

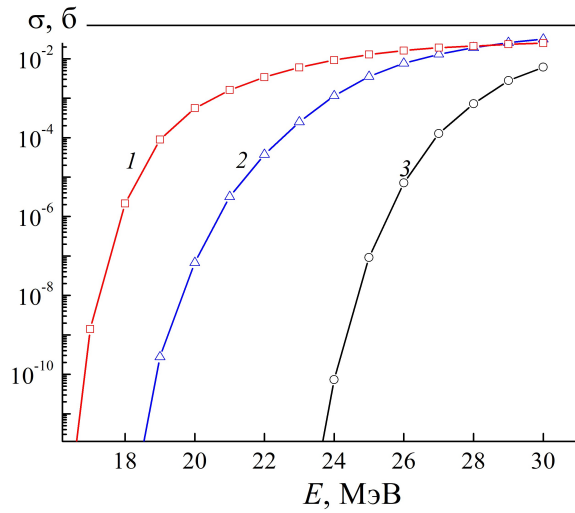


Рис. 3 Данные $\sigma_{m_i}(E_i)$ реакции $(n, 2n\alpha)$ в *endf-6* формате JEFF 3.3 у $^{44}\text{Sc}(1)$, $^{57}\text{Co}(2)$, $^{50}\text{Ti}(3)$

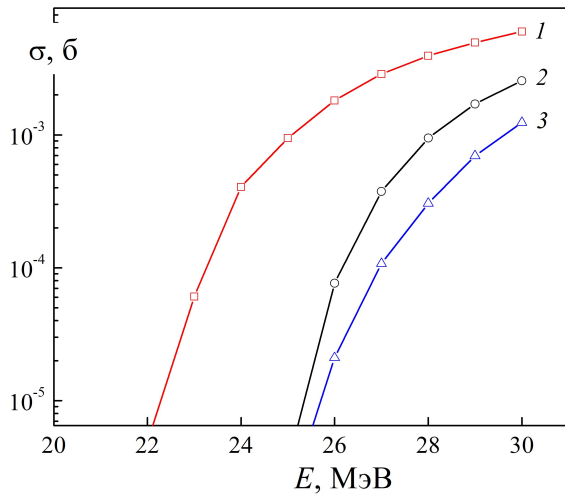


Рис. 4 Данные $\sigma_{m_i}(E_i)$ реакции (n, nt) в *endf-6* формате JEFF 3.3 у $^{63}\text{Ni}(1)$, $^{24}\text{Cr}(2)$, $^{88}\text{Zr}(3)$

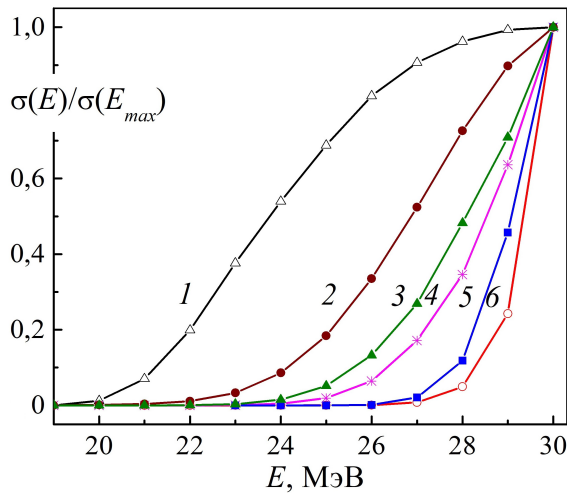


Рис. 5 Особенности $\sigma_{m_i}(E_i)$ для разных реакций: $(n, 3n)$ у ^{69}Ga (1); $(n, 2p)$ у ^{85}Rb (2), $(n, n2\alpha)$ у ^{78}Kr (3), $(n, n^3\text{He})$ у ^{92}Nb (4) и ^{170}Er (6); $(n, 2n\alpha)$ у ^{50}Ti (5)

Вычисляемая в Монте-Карло кодах погрешность ϵ высокопороговых реакций даже при значительной статистике N_s (более 1 млрд) может не соответствовать закону $\epsilon \sim (N_s)^{-1/2}$, и количество нуклидов с такого рода некорректными погрешностями сильно различается для разных реакций *mt*, тем самым затрудняя

определение необходимой статистики для надежного расчета σ_{mi} . При этом динамика ϵ от статистики N_s также заметно различается, что не связано напрямую со значением E_{min} (рис. 6). Для $(n, {}^3\text{He})$ у ${}^{82}\text{Br}$ ($E_{min} = 12,3$ МэВ) и ${}^{82}\text{Kr}$ ($E_{min} = 9,8$ МэВ) погрешность для $N_s = 750$ млн оказывается больше, чем для $N_s = 370$ млн. У ${}^{124}\text{Sb}$ ($E_{min} = 11$ МэВ) для $N_s = 170$ и 750 млн $\sigma_{mi} = 5,6 \cdot 10^{-14}$ и $1,2 \cdot 10^{-13}$ б, соответственно, при одинаковой $\epsilon \sim 20\%$. При этом с увеличением N_s не наблюдается устойчивого снижения различий σ_{mi} (рис. 7). Схожая динамика вычисляемой погрешности ϵ для разных нуклидов в рамках одного проведенного расчета не гарантирует аналогичную картину в расчетах с измененными параметрами сдвига псевдослучайных чисел (например, в программе MCNP при разных значениях bcn) [8]. Таким образом, существует реальная проблема определения достаточной статистики N_s для обеспечения надежных значений σ_{mi} .

Указанные проблемы вычисления одногрупповых сечений высокопороговых реакций обуславливают необходимость получения поверочных аналитических оценок σ_{mi} на шкале $E_{min} < E < E_{max}$. Для этого используется программа CLG.

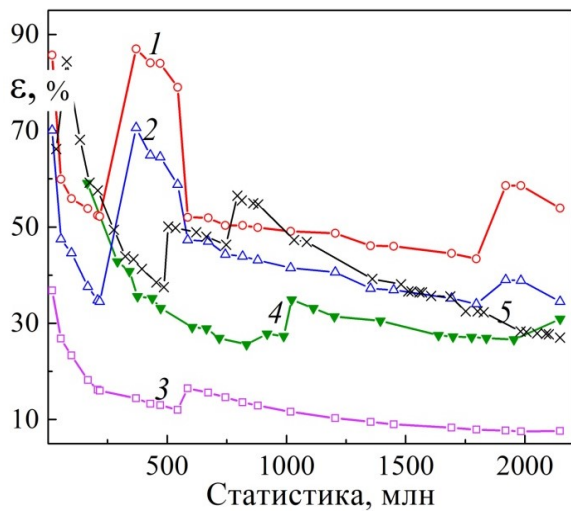


Рис. 6. Динамика погрешности для реакций $(n, {}^3\text{He})$ у ${}^{124}\text{Sn}$ с $E_{min} = 14,6$ МэВ (1), ${}^{106}\text{Ru}$ с $E_{min} = 12,9$ МэВ (2), ${}^{82}\text{Kr}$ с $E_{min} = 9,8$ МэВ (3); $(n, 2\alpha)$ у ${}^{84}\text{Kr}$ с $E_{min} = 8,1$ МэВ (4); $(n, n2\alpha)$ у ${}^{120}\text{Te}$ с $E_{min} = 3,7$ МэВ (5)

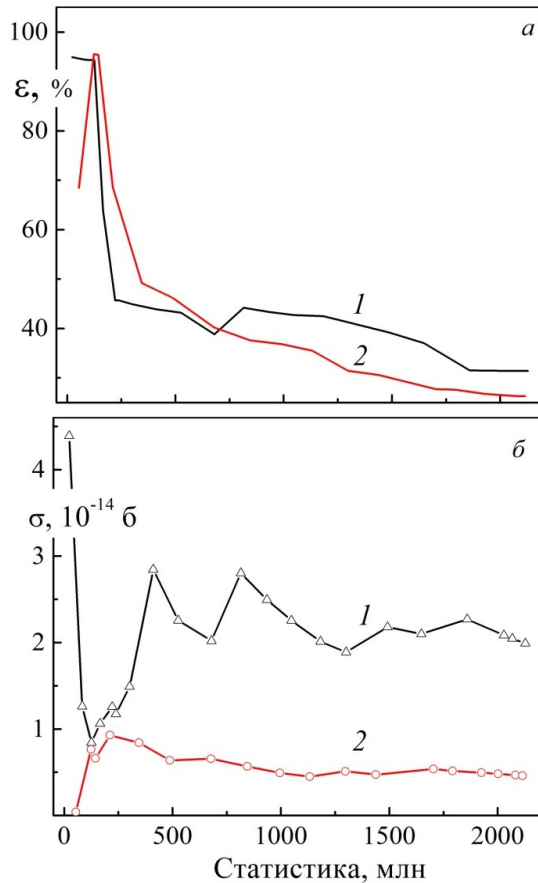


Рис. 7. Сечение (а) и погрешность (б) в MCNP реакции $(n, {}^3\text{He})$ у ${}^{60}\text{Fe}$ (1) и с $bcn=6$ (2)

1.2 Описание программы CLG.

Программа CLG обеспечивает получение аналитических оценок одногрупповых сечений реакций σ_{mt} с высоким порогом $E_{\min} > 10$ МэВ в быстром спектре, который характеризуется отсутствием резонансов для $E > E_{\min}$ и слабым потоком для $E > 20$ МэВ (рис. 1, 2). Программа CLG осуществляет свертку двух функций — быстро растущей $\sigma_{mi}(E_i)$ и спадающей функции распределения нейтронов $\Phi(E_j)$, вычисляемой в программе MCNP для 299 групповой энергетической сетки БНАБ-МИКРО и шага $dE = 0,5, 1, \text{ и } 2$ МэВ для $E > 18$ МэВ с учетом представления $\sigma_{mi}(E_i)$ в JEFF3.3. Для указанных энергетических интервалов с помощью программы CLG можно оценить вклад парциальных сечений в финальное σ_{mt} , что особенно важно при анализе различающихся сечений, полученных в расчетах с разными параметрами.

Следует отметить, что в результате работы процессинговых программ по подготовке ядерных данных в форматах, требуемых для использования в расчетных кодах (например, ACE-формат, формируемый с помощью NJOY для MCNP), на шкале $E_{\min} < E < E_{\max}$ появляются дополнительные точки E_i , что можно видеть на примере ${}^{64}\text{Zn}$ реакция $(n, n2\alpha)$ (табл. 3). С помощью программы CLG осуществляется оценка σ_{mt} с учетом дополнительных E_i точек. При интерполяции $\langle \text{Lin-Lin} \rangle$ вычисляемые значения σ_{mt} не зависят от количества интерполируемых точек в соответствующих энергетических интервалах. При интерполяции $\langle \text{Lin-Log} \rangle$ различие σ_{mt} , вычисленных в CLG с разным числом интерполируемых точек, не более 2%, а с учетом разных видов интерполяции — $\langle \text{Lin-Lin} \rangle$, $\langle \text{Lin-Log} \rangle$, $\langle \text{Log-Log} \rangle$ максимальное отличие составляет $\sim 10\%$ (табл. 4). Здесь свертка $\sigma_{mi}(E_i)$ с потоком проведена для вычисленного в MCNP потока с разным bcn . Аналогично у нуклида ${}^{64}\text{Zn}$ для реакции $mt=29$ $(n, n2\alpha)$ при $\langle \text{Lin-Lin} \rangle$ интерполяции $\sigma = 2,2495 \cdot 10^{-13}$ б, а при $\langle \text{Lin-Log} \rangle$ — значение изменяется от $2,2096 \cdot 10^{-13}$ до $2,2177 \cdot 10^{-13}$ б. Заметим, что для определенности в большинстве процессинговых программ используется интерполяция $\langle \text{Lin-Lin} \rangle$ [6, 8].

Таблица 3. Микросечения реакции ($n, n2\alpha$) у ^{64}Zn в JEFF3.3 и ACE формате

$E, \text{эВ}$	$\sigma, \text{б}$	$E, \text{эВ}$	$\sigma, \text{б}$	$E, \text{эВ}$	$\sigma, \text{б}$
<i>endf-6 формат</i>					
1.040890+7	0.000000+0	1.600000+7	1.66489-19	1.700000+7	4.44248-16
1.800000+7	2.73398-13	1.900000+7	4.69741-11	2.000000+7	2.582810-9
2.100000+7	5.117220-8	2.200000+7	5.035810-7	2.300000+7	2.606750-6
2.400000+7	9.715550-6	2.500000+7	2.345860-5	2.600000+7	4.490100-5
2.700000+7	8.291300-5	2.800000+7	1.481870-4	2.900000+7	2.258830-4
3.000000+7	3.368670-4	3.000000+7	0.000000+0	2.000000+8	0.000000+0
<i>ACE формат</i>					
1.040890+7	0.000000+0	1.600000+1	1.664890-19	1.620160+1	8.969332-17
1.650000+1	2.222072-16	1.661060+1	2.713227-16	1.697740+1	4.342118-16
1.697742+1	4.342206-16	1.700000+1	4.442480-16	1.750000+1	1.369211-13
1.752730+1	1.443728-13	1.800000+1	2.733980-13	1.814220+1	6.914238-12
1.849350+1	2.332019-11	1.850000+1	2.362375-11	1.866550+1	3.135272-11
1.887020+1	4.091235-11	1.887022+1	4.091328-11	1.892150+1	4.330809-11
1.900000+0	4.697410-11	...		2.200000+1	5.035810-7
2.300000+1	2.606750-6	2.400000+1	9.715550-6		

Таблица 4. Сечение, б реакции ($n, 2n\alpha$) у ^{99}Tc в CLG

Интерполяция		$dbcn=6$	$dbcn=13$
—————	$3,3729 \cdot 10^{-13}$	$3,3301 \cdot 10^{-13}$	$3,3548 \cdot 10^{-13}$
<i>Lin-Lin</i> (1 точка)	$3,3767 \cdot 10^{-13}$	$3,3338 \cdot 10^{-13}$	$3,3587 \cdot 10^{-13}$
<i>Lin-Log</i> (1 точка)	$3,1037 \cdot 10^{-13}$	$3,0642 \cdot 10^{-13}$	$3,0878 \cdot 10^{-13}$
<i>Lin-Log</i> (3 точки)	$3,0331 \cdot 10^{-13}$	$2,9944 \cdot 10^{-13}$	$3,0177 \cdot 10^{-13}$

Резкий рост функции $\sigma_{mi}(E_i)$ в области высоких энергий способствует появлению заметных различий σ_{mi} в расчетах с $dbcn$ (рис. 5). Для некоторых реакций $\sigma_{mi}(E_i)$ возрастает на порядки с увеличением энергии на $dE = 1$ МэВ, в частности, на два порядка для ($n, 3n\alpha$) у ^{60}Co , на четыре – для ($n, 2\alpha$) у ^{47}Ca и др. Важнейшая в расчетах быстрых реакторов реакция ($n, 3n$) характеризуется высоким порогом $E_{\min} > 18$ МэВ. В отличие от многих других высокопороговых реакций для реакции ($n, 3n$) при разных $dbcn$ получены согласованные сечения, что обусловлено плавным ростом $\sigma_{mi}(E_i)$, приводящим к незначительному вкладу верхних интервалов в σ_{mi} . Для большинства нуклидов вычисляемая в MCNP погрешность ϵ для реакции ($n, 3n$) не превышает 10% – у ^{69}Ga ($E_{\min} = 18,9$ МэВ) $\sigma_{mi} = 6,2 \cdot 10^{-9}$ ($\epsilon = 5\%$), ^{47}Sc ($E_{\min} = 19,8$ МэВ) $\sigma_{mi} = 2,6 \cdot 10^{-9}$ б ($\epsilon = 7\%$). При этом у нуклидов даже с большим E_{\min} в расчетах с разными $dbcn$ сечения реакции ($n, 3n$) оказываются согласованными в рамках указанных погрешностей ϵ .

При значительных различиях сечений, вычисляемых в CLG и MCNP, а также различающихся σ_{mi} при разных $dbcn$ аналитические оценки в CLG позволяют оценить необходимость в дополнительных расчетах σ_{mi} с $dbcn$. Анализ сечений подтверждает, что пороговое значение E_{\min} не является определяющим в полученных различиях σ_{mi} , и в основном эти различия связаны с видом функции $\sigma_{mi}(E_i)$, зависящей от реакции (рис. 5).

2 Методические расчеты с расширенными библиотеками

Оценка влияния высокопороговых реакций (табл. 1) на вычисляемые составы облучаемых композиций априори не представляется возможной. Заметные отличия могут наблюдаться для одних исходных композиций и практически не проявляться для других, и подобное влияние в большей степени сказывается для примесных нуклидов. Сравнительный анализ вычисляемого состава облучаемых композиций осуществляется для нуклидов с концентрацией $\rho > 10^{-40}$ г·а/см³. Для справки — на практике во многих

расчетных программах традиционно вычисляются нуклиды с массой более 10^{-23} г·а/см³, нуклиды со значениями $\rho < 10^{-23}$ г·а/см³ отнесены к примесным [3, 9].

Методические расчеты выполнены по программе MZK, обеспечивающей гарантированную точность вычисления нуклидов со значениями $\sim 10^{-50}$ г·а/см³ и даже меньших [4]. Расчеты проведены с библиотеками EX, EX1, EX2 для композиций с разным зарядом ядра $Z - \langle \text{Ru-Rh} \rangle, \langle \text{Ce-Gd} \rangle, \langle \text{Nd-W} \rangle$, представляющих естественную смесь нуклидов Ru, Rh, Ce, Gd, Nd, W, соответственно. Характерные различия нуклидов в расчетах с библиотеками EX1 и EX2 представлены относительно значений, полученных с библиотекой EX в виде $M_{\text{EX1}}/M_{\text{EX}}$ и $M_{\text{EX2}}/M_{\text{EX}}$.

Сравнительные составы облученных композиций приведены для $F_n = 2,72 \cdot 10^{15}$ н·с⁻¹ и $T_{\text{обл}} = 100$ сут. Для композиции $\langle \text{Ru-Rh} \rangle$ также представлены нуклидные составы для $T_{\text{обл}} = 10$ и 500 сут с динамикой изменения $M_{\text{EX1}}/M_{\text{EX}}$.

2.1 Композиция $\langle \text{Ru-Rh} \rangle$

Состав облученной композиции $\langle \text{Ru-Rh} \rangle$ с библиотеками EX, EX1, EX2 для $T_{\text{обл}} = 100$ сут включает ~ 240 нуклидов с $\rho > 10^{-40}$ г·а/см³, из них ~ 100 примесных с $\rho < 10^{-23}$ г·а/см³. Количество таких нуклидов меняется незначительно в расчетах с указанными библиотеками. Более заметное влияние библиотек проявляется у примесных нуклидов. В расчете с EX1 количество примесных нуклидов с различием от 10 до 50% составляет $\sim 20\%$, с EX2 $\sim 40\%$, различаются на порядок ~ 15 и ~ 20 нуклидов с EX1 и EX2, соответственно (табл.5б). У $\sim 90\%$ не примесных нуклидов различия концентраций в рамках 5%, отдельные нуклиды различаются в разы (например, ⁹¹Nb).

Количество нуклидов с $\rho > 10^{-40}$ г·а/см³ увеличивается от ~ 220 (10 сут) до ~ 270 (100 сут), количество примесных нуклидов ~ 100 практически не меняется. В расчете с EX1 количество примесных нуклидов с различием концентраций от 10 до 50% возрастает от 15 до 30%, а различающихся на порядок — уменьшается с 15 до 5. В расчете с EX2 количество примесных нуклидов с различием от 10 до 50% сначала возрастает от 15% (10 сут) до 40% (100 сут), затем уменьшается до 20% (500 сут), различающихся на порядок — уменьшается с 25 до 15 нуклидов. У $\sim 90\%$ не примесных нуклидов различия в рамках 5% сохраняются (табл. 5а, 5б, 5в).

Таблица 5а. Концентрация (г·а/см³) нуклидов $\langle \text{Ru-Rh} \rangle$ для $T_{\text{обл}} = 10$ сут

Нуклид	EX	EX1	EX2	$M_{\text{EX1}}/M_{\text{EX}}$	$M_{\text{EX2}}/M_{\text{EX}}$
⁸⁸ Y	$5,28 \cdot 10^{-23}$	$6,81 \cdot 10^{-22}$	$6,87 \cdot 10^{-22}$	12,9	13
⁸⁸ Zr	$1,66 \cdot 10^{-21}$	$1,69 \cdot 10^{-20}$	$1,69 \cdot 10^{-20}$	10,1	10,1
⁹¹ Nb	$1,22 \cdot 10^{-16}$	$2,22 \cdot 10^{-16}$	$2,40 \cdot 10^{-15}$	1,8	19,7
⁹³ Tc	$7,11 \cdot 10^{-18}$	$7,25 \cdot 10^{-18}$	$7,05 \cdot 10^{-18}$	1,02	1
⁹⁴ Ru	$4,36 \cdot 10^{-16}$	$4,53 \cdot 10^{-16}$	$4,53 \cdot 10^{-16}$	1,04	1,04
Примесные					
⁸³ Kr	$1,24 \cdot 10^{-32}$	$4,16 \cdot 10^{-33}$	$1,27 \cdot 10^{-32}$	0,33	1,02
⁸⁵ Kr	$4,63 \cdot 10^{-32}$	$6,07 \cdot 10^{-32}$	$6,09 \cdot 10^{-32}$	1,31	1,32
⁸⁴ Rb	$1,18 \cdot 10^{-33}$	$4,80 \cdot 10^{-33}$	$2,57 \cdot 10^{-32}$	4,1	22
⁸⁵ Rb	$1,79 \cdot 10^{-28}$	$1,90 \cdot 10^{-28}$	$1,87 \cdot 10^{-28}$	1,06	1,04
⁸³ Sr	$9,89 \cdot 10^{-38}$	$1,89 \cdot 10^{-36}$	$3,20 \cdot 10^{-36}$	19	32
⁸⁵ Sr	$9,25 \cdot 10^{-28}$	$1,08 \cdot 10^{-27}$	$1,07 \cdot 10^{-27}$	1,17	1,16
⁸⁶ Sr	$2,87 \cdot 10^{-24}$	$8,19 \cdot 10^{-25}$	$2,91 \cdot 10^{-24}$	0,3	1
⁸⁶ Y	$2,04 \cdot 10^{-33}$	$7,34 \cdot 10^{-33}$	$8,23 \cdot 10^{-32}$	3,6	40,4
⁸⁷ Y	$1,02 \cdot 10^{-27}$	$1,80 \cdot 10^{-27}$	$1,42 \cdot 10^{-26}$	1,8	14
⁸⁶ Zr	$9,17 \cdot 10^{-35}$	$1,10 \cdot 10^{-33}$	$1,10 \cdot 10^{-33}$	12	12
⁸⁹ Nb	$1,47 \cdot 10^{-30}$	$2,84 \cdot 10^{-30}$	$3,08 \cdot 10^{-29}$	1,9	21
¹⁰² Nb	$1,97 \cdot 10^{-36}$	$5,61 \cdot 10^{-36}$	$5,61 \cdot 10^{-36}$	2,8	2,8
¹⁰⁴ Mo	$7,36 \cdot 10^{-31}$	$1,39 \cdot 10^{-30}$	$1,51 \cdot 10^{-30}$	1,9	2,05
⁹⁷ Rh	$6,40 \cdot 10^{-34}$	$7,47 \cdot 10^{-34}$	$6,56 \cdot 10^{-34}$	1,17	1,02

Таблица 5б. Концентрация (г·а/см³) нуклидов <Ru-Rh> для T_{обл} = 100 сут

Нуклид	EX	EX1	EX2	M _{EX1} /M _{EX}	M _{EX2} /M _{EX}
⁸⁶ Sr	2,28·10 ⁻²²	2,21·10 ⁻²³	2,31·10 ⁻²²	0,1	1,02
⁸⁸ Y	3,38·10 ⁻²⁰	7,47·10 ⁻²⁰	7,52·10 ⁻²⁰	2,21	2,22
⁸⁸ Zr	1,31·10 ⁻¹⁹	2,40·10 ⁻¹⁹	2,40·10 ⁻¹⁹	1,8	1,8
⁹⁰ Nb	6,99·10 ⁻²³	7,39·10 ⁻²³	1,12·10 ⁻²²	1,06	1,6
⁹¹ Nb	1,65·10 ⁻¹⁵	2,64·10 ⁻¹⁵	2,43·10 ⁻¹⁴	1,6	14,7
⁹³ Tc	7,05·10 ⁻¹⁸	7,19·10 ⁻¹⁸	6,99·10 ⁻¹⁸	1,02	1
Примесные					
⁸⁰ Se	5,21·10 ⁻³⁷	8,57·10 ⁻³⁸	5,36·10 ⁻³⁷	0,16	1,03
⁸³ Kr	9,70·10 ⁻³⁰	1,43·10 ⁻³⁰	9,95·10 ⁻³⁰	0,15	1,03
⁸⁵ Kr	6,63·10 ⁻²⁹	1,26·10 ⁻²⁸	1,27·10 ⁻²⁸	1,9	1,92
⁸⁴ Rb	6,85·10 ⁻³¹	1,69·10 ⁻³⁰	2,93·10 ⁻³⁰	2,5	4,3
⁸⁵ Rb	4,05·10 ⁻²⁶	4,56·10 ⁻²⁶	4,50·10 ⁻²⁶	1,13	1,11
⁸³ Sr	1,09·10 ⁻³⁵	3,29·10 ⁻³⁵	5,56·10 ⁻³⁵	3	5,1
⁸⁶ Y	4,70·10 ⁻³²	1,00·10 ⁻³¹	9,21·10 ⁻³¹	2,1	19,6
⁸⁷ Y	2,25·10 ⁻²⁶	3,73·10 ⁻²⁶	2,39·10 ⁻²⁵	1,7	10,6
⁸⁷ Zr	1,97·10 ⁻²⁹	3,46·10 ⁻²⁹	3,46·10 ⁻²⁹	1,8	1,8
⁸⁹ Nb	2,01·10 ⁻²⁹	3,42·10 ⁻²⁹	3,15·10 ⁻²⁸	1,7	15,7
¹⁰⁴ Mo	6,93·10 ⁻³⁰	1,31·10 ⁻²⁹	1,42·10 ⁻²⁹	1,9	2,05
¹⁰⁵ Mo	4,77·10 ⁻³³	7,88·10 ⁻³³	2,60·10 ⁻³²	1,7	5,5
⁹⁷ Rh	2,56·10 ⁻³²	2,98·10 ⁻³²	2,62·10 ⁻³²	1,17	1,02
¹¹⁶ Cd	3,50·10 ⁻³⁵	3,50·10 ⁻³⁵	4,15·10 ⁻³⁵	1	1,2

Таблица 5в. Концентрация (г·а/см³) нуклидов <Ru-Rh> для T_{обл} = 500 сут

Нуклид	EX	EX1	EX2	M _{EX1} /M _{EX}	M _{EX2} /M _{EX}
⁸⁶ Sr	5,62·10 ⁻²¹	5,74·10 ⁻²²	5,71·10 ⁻²¹	0,1	1,02
⁸⁸ Y	1,28·10 ⁻¹⁸	1,49·10 ⁻¹⁸	1,50·10 ⁻¹⁸	1,17	1,17
⁸⁸ Zr	1,53·10 ⁻¹⁸	1,73·10 ⁻¹⁸	1,73·10 ⁻¹⁸	1,13	1,13
⁹⁰ Nb	3,62·10 ⁻²²	3,81·10 ⁻²²	5,67·10 ⁻²²	1,05	1,6
⁹¹ Nb	1,76·10 ⁻¹⁴	2,23·10 ⁻¹⁴	1,28·10 ⁻¹³	1,3	7,3
Примесные					
⁸³ Kr	1,16·10 ⁻²⁷	1,49·10 ⁻²⁸	1,19·10 ⁻²⁷	0,13	1,03
⁸⁵ Kr	4,27·10 ⁻²⁶	5,67·10 ⁻²⁶	5,71·10 ⁻²⁶	1,33	1,34
⁸⁴ Rb	5,02·10 ⁻²⁹	6,09·10 ⁻²⁹	7,02·10 ⁻²⁹	1,2	1,4
⁸⁵ Rb	1,85·10 ⁻²⁴	2,01·10 ⁻²⁴	2,00·10 ⁻²⁴	1,09	1,08
⁸³ Sr	1,35·10 ⁻³⁴	2,47·10 ⁻³⁴	4,14·10 ⁻³⁴	1,8	3,1
⁸⁵ Sr	2,47·10 ⁻²⁵	2,74·10 ⁻²⁵	2,77·10 ⁻²⁵	1,11	1,12
⁸⁶ Y	8,41·10 ⁻³¹	1,11·10 ⁻³⁰	5,35·10 ⁻³⁰	1,3	6,4
⁸⁷ Y	3,04·10 ⁻²⁵	3,75·10 ⁻²⁵	1,40·10 ⁻²⁴	1,2	4,6
⁸⁶ Zr	1,02·10 ⁻³¹	1,25·10 ⁻³¹	1,26·10 ⁻³¹	1,23	1,24
⁸⁷ Zr	2,14·10 ⁻²⁸	2,40·10 ⁻²⁸	2,41·10 ⁻²⁸	1,13	1,13
⁸⁹ Nb	2,14·10 ⁻²⁸	2,89·10 ⁻²⁸	1,66·10 ⁻²⁷	1,4	7,8
¹⁰² Nb	6,54·10 ⁻³⁵	1,86·10 ⁻³⁴	1,86·10 ⁻³⁴	2,8	2,8
¹⁰⁴ Mo	2,45·10 ⁻²⁹	4,64·10 ⁻²⁹	5,03·10 ⁻²⁹	1,9	2,05

^{108}Ru	$5,51 \cdot 10^{-34}$	$7,43 \cdot 10^{-34}$	$7,43 \cdot 10^{-34}$	1,35	1,35
^{97}Rh	$1,34 \cdot 10^{-31}$	$1,56 \cdot 10^{-31}$	$1,37 \cdot 10^{-31}$	1,17	1,02

Динамика отношения $M_{\text{EX1}}/M_{\text{EX}}$, отражающая изменение различий концентраций нуклидов при облучении от 10 до 500 сут, показывает, что с увеличением времени облучения различие уменьшается для большинства нуклидов, но может оставаться практически неизменным. Для отдельных нуклидов различие может возрастать, например, ^{94}Ru (табл.6). Аналогичная картина для $M_{\text{EX2}}/M_{\text{EX}}$.

Таблица 6. Динамика $M_{\text{EX1}}/M_{\text{EX}}$ для <Ru-Rh>

Нуклид	$T_{\text{обл}}, \text{сут}$		
	10	100	500
^{81}Kr	10,5	2,41	1,3
^{83}Kr	0,33	0,15	0,13
^{85}Kr	1,31	1,90	1,33
^{84}Rb	4,1	2,5	1,2
^{85}Rb	1,06	1,13	1,09
^{83}Sr	19	3	1,8
^{85}Sr	1,17	1,4	1,11
^{86}Sr	0,3	0,1	0,1
^{86}Y	3,6	2,1	1,3
^{87}Y	1,8	1,7	1,2
^{88}Y	12,9	2,21	1,17
^{86}Zr	12	2	1,23
^{87}Zr	2,55	1,8	1,13
^{88}Zr	10,1	1,8	1,13
^{89}Nb	1,9	1,7	1,4
^{91}Nb	1,8	1,6	1,3
^{102}Nb	2,8	2,8	2,8
^{104}Mo	1,9	1,9	1,9
^{93}Tc	1,02	1,02	1,02
^{94}Ru	1,04	1,35	1,35
^{97}Rh	1,17	1,17	1,17

2.2 Композиция <Ce-Gd>

Состав облученной композиции <Ce-Gd> для $T_{\text{обл}} = 100$ сут в расчете с библиотеками с EX, EX1, EX2 включает ~350 нуклидов, из них ~150 примесных. Для <Ce-Gd>, в отличие от <Ru-Rh>, вычисляемые нуклидные составы с EX1 и EX2 отличаются незначительно. Количество примесных нуклидов с различием от 10 до 90% составляет ~25%, различающихся на порядок ~10%. У ~90% не примесных нуклидов различия в рамках 5%, у отдельных нуклидов — в разы (табл.7).

Таблица 7. Концентрация ($\text{г} \cdot \text{а} / \text{см}^3$) нуклидов <Ce-Gd> для $T_{\text{обл}} = 100$ сут

Нуклид	EX	EX1	EX2	$M_{\text{EX1}}/M_{\text{EX}}$	$M_{\text{EX2}}/M_{\text{EX}}$
^{129}Xe	$1,98 \cdot 10^{-18}$	$2,05 \cdot 10^{-18}$	$2,02 \cdot 10^{-18}$	1,03	1,02
^{131}Xe	$6,00 \cdot 10^{-16}$	$6,99 \cdot 10^{-16}$	$6,99 \cdot 10^{-16}$	1,17	1,17
^{130}Ba	$5,72 \cdot 10^{-21}$	$5,95 \cdot 10^{-21}$	$5,82 \cdot 10^{-21}$	1,04	1,02
^{131}Ba	$1,43 \cdot 10^{-16}$	$1,66 \cdot 10^{-16}$	$1,66 \cdot 10^{-16}$	1,16	1,16
^{134}Ba	$2,25 \cdot 10^{-12}$	$2,35 \cdot 10^{-12}$	$2,28 \cdot 10^{-12}$	1,05	1,01
^{134}La	$9,99 \cdot 10^{-17}$	$1,07 \cdot 10^{-16}$	$1,01 \cdot 10^{-16}$	1,07	1,01

^{134}Ce	$6,92 \cdot 10^{-14}$	$7,40 \cdot 10^{-14}$	$7,03 \cdot 10^{-14}$	1,07	1,02
^{140}Nd	$1,97 \cdot 10^{-18}$	$2,14 \cdot 10^{-18}$	$2,03 \cdot 10^{-18}$	1,09	1,03
^{148}Sm	$2,45 \cdot 10^{-18}$	$1,04 \cdot 10^{-18}$	$2,46 \cdot 10^{-18}$	0,42	1,01
^{149}Sm	$1,17 \cdot 10^{-14}$	$3,34 \cdot 10^{-16}$	$1,16 \cdot 10^{-14}$	0,03	1
Примесные					
^{124}Sb	$2,89 \cdot 10^{-34}$	$3,92 \cdot 10^{-34}$	$3,93 \cdot 10^{-34}$	1,36	1,36
^{122}Te	$5,34 \cdot 10^{-38}$	$3,84 \cdot 10^{-38}$	$7,85 \cdot 10^{-38}$	0,84	1,47
^{124}Te	$7,88 \cdot 10^{-31}$	$4,62 \cdot 10^{-30}$	$4,63 \cdot 10^{-30}$	5,9	5,9
^{125}I	$1,97 \cdot 10^{-34}$	$1,10 \cdot 10^{-34}$	$1,07 \cdot 10^{-34}$	0,56	0,54
^{124}Xe	$5,11 \cdot 10^{-38}$	$5,40 \cdot 10^{-39}$	$6,33 \cdot 10^{-38}$	0,1	1,2
^{125}Xe	$5,28 \cdot 10^{-36}$	$1,89 \cdot 10^{-36}$	$6,67 \cdot 10^{-36}$	0,4	1,3
^{126}Xe	$2,17 \cdot 10^{-28}$	$3,11 \cdot 10^{-29}$	$3,04 \cdot 10^{-29}$	0,16	0,14
^{128}Cs	$5,76 \cdot 10^{-34}$	$6,62 \cdot 10^{-34}$	$6,40 \cdot 10^{-34}$	1,15	1,11
^{143}Pm	$3,25 \cdot 10^{-36}$	$1,65 \cdot 10^{-36}$	$3,83 \cdot 10^{-36}$	0,5	1,2
^{144}Sm	$1,57 \cdot 10^{-30}$	$1,54 \cdot 10^{-30}$	$3,69 \cdot 10^{-30}$	1	2,4
^{146}Sm	$1,63 \cdot 10^{-23}$	$3,16 \cdot 10^{-24}$	$1,64 \cdot 10^{-23}$	0,2	1,01
^{158}Sm	–	$8,01 \cdot 10^{-31}$	$1,90 \cdot 10^{-30}$	–	–
^{159}Sm	$2,52 \cdot 10^{-30}$	$3,64 \cdot 10^{-30}$	$5,20 \cdot 10^{-30}$	1,44	2,06
^{160}Sm	$3,45 \cdot 10^{-33}$	$6,44 \cdot 10^{-33}$	$2,71 \cdot 10^{-32}$	1,9	7,8

Динамика $M_{\text{EXI}}/M_{\text{EX}}$ представлена для $T_{\text{обл}}$ от 10 до 500 сут. Анализ показывает, что с увеличением времени облучения для большей части нуклидов различие уменьшается, но может оставаться практически неизменным (табл.8).

Таблица 8. Динамика $M_{\text{EXI}}/M_{\text{EX}}$ для <Ce-Gd>

Нуклид	$T_{\text{обл}}, \text{сут}$		
	10	100	500
^{124}Sb	1,27	1,36	1,52
^{123}Te	292	33,3	6,9
^{124}Te	5,9	5,9	2,6
^{125}Te	1,42	1,39	1,32
^{125}I	0,39	0,56	1,04
^{126}I	28	2,1	1,6
^{126}Xe	0,02	0,16	0,73
^{127}Xe	1,28	1,52	1,75
^{128}Cs	1,19	1,15	1,05
^{129}Cs	1,23	1,22	1,12
^{130}Cs	1,14	1,13	1,07
^{143}Pm	0,01	0,5	1,04
^{144}Pm	1,89	1,01	1,01
^{146}Sm	$3,7 \cdot 10^{-3}$	0,2	1
^{147}Sm	0,16	1	1
^{148}Sm	0,34	0,42	1
^{149}Sm	$2,9 \cdot 10^{-3}$	0,03	0,13

2.3 Композиция <Nd-W>

Состав облученной композиции <Nd-W> для $T_{\text{обл}} = 100$ сут включает ~ 420 нуклидов, из них ~180 примесных. В расчетах с библиотеками EX1 и EX2 количество примесных нуклидов с различием от 10 до 80% оставляет ~15%, при этом 30% различаются на порядок и более. У ~ 10% не примесных нуклидов различия концентраций от 5 до 50%, более порядка — у ~20 и ~ 40 нуклидов с EX1 и EX2, соответственно (табл.9). Подобные различия обусловлены не только уточнением констант, но и включением в библиотеку EX2 дополнительных реакций для нуклидов с $Z = 72$ — 76.

Таблица 9 Концентрация (г·а/см³) нуклидов <Nd-W> для $T_{\text{обл}} = 100$ сут

Нуклид	EX	EX1	EX2	$M_{\text{EX1}}/M_{\text{EX}}$	$M_{\text{EX2}}/M_{\text{EX}}$
¹³⁴ Ba	$3,82 \cdot 10^{-21}$	$9,22 \cdot 10^{-20}$	$9,22 \cdot 10^{-20}$	24	24
¹³⁵ Ba	$4,86 \cdot 10^{-17}$	$5,18 \cdot 10^{-17}$	$5,01 \cdot 10^{-17}$	1,06	1,03
¹³⁷ La	$1,17 \cdot 10^{-14}$	$1,49 \cdot 10^{-14}$	$1,49 \cdot 10^{-14}$	1,3	1,3
¹³⁷ Ce	$6,39 \cdot 10^{-17}$	$8,18 \cdot 10^{-17}$	$8,18 \cdot 10^{-17}$	1,3	1,3
¹⁴⁸ Ce	$5,78 \cdot 10^{-23}$	$7,86 \cdot 10^{-23}$	$1,05 \cdot 10^{-22}$	1,4	1,8
¹³⁹ Pr	$1,90 \cdot 10^{-17}$	$2,09 \cdot 10^{-17}$	$2,03 \cdot 10^{-17}$	1,10	1,07
¹⁴⁰ Nd	$7,18 \cdot 10^{-12}$	$7,82 \cdot 10^{-12}$	$7,40 \cdot 10^{-12}$	1,09	1,03
¹⁷² Yb	$7,06 \cdot 10^{-24}$	$7,44 \cdot 10^{-21}$	$8,31 \cdot 10^{-21}$	~10 ³	~1,2·10 ³
¹⁷³ Yb	$3,18 \cdot 10^{-21}$	$1,80 \cdot 10^{-18}$	$1,95 \cdot 10^{-18}$	~5,7·10 ²	~6·10 ²
¹⁷⁵ Lu	$2,08 \cdot 10^{-19}$	$3,09 \cdot 10^{-19}$	$4,69 \cdot 10^{-16}$	1,5	~2·10 ³
¹⁷⁶ Lu	$1,39 \cdot 10^{-17}$	$1,42 \cdot 10^{-17}$	$1,62 \cdot 10^{-17}$	1,02	1,16
¹⁷⁷ Lu	$3,57 \cdot 10^{-19}$	$3,66 \cdot 10^{-19}$	$3,91 \cdot 10^{-17}$	1,02	~10 ²
¹⁷⁵ Hf	$1,10 \cdot 10^{-19}$	$2,11 \cdot 10^{-19}$	$8,24 \cdot 10^{-16}$	1,9	~7,5·10 ³
¹⁷⁶ Hf	$9,56 \cdot 10^{-17}$	$1,19 \cdot 10^{-16}$	$5,83 \cdot 10^{-12}$	1,2	~6·10 ⁴
¹⁷⁴ Hf	$1,05 \cdot 10^{-24}$	$3,98 \cdot 10^{-18}$	$4,04 \cdot 10^{-18}$	~3,7·10 ⁶	~3,8·10 ⁶
¹⁷⁸ Hf	$2,83 \cdot 10^{-13}$	$1,09 \cdot 10^{-11}$	$5,71 \cdot 10^{-11}$	40	~2·10 ²
¹⁷⁷ Ta	—	$1,52 \cdot 10^{-16}$	$1,52 \cdot 10^{-16}$	—	—
¹⁷⁸ Ta	$6,49 \cdot 10^{-19}$	$1,35 \cdot 10^{-15}$	$1,35 \cdot 10^{-15}$	~2·10 ³	~2·10 ³
¹⁸² Re	$4,19 \cdot 10^{-22}$	$4,54 \cdot 10^{-16}$	$4,54 \cdot 10^{-16}$	~10 ⁴	~10 ⁴
¹⁸³ Re	$7,07 \cdot 10^{-15}$	$8,90 \cdot 10^{-12}$	$8,90 \cdot 10^{-12}$	~1,2·10 ³	~1,2·10 ³
¹⁸³ Os	$7,68 \cdot 10^{-25}$	$3,51 \cdot 10^{-19}$	$3,51 \cdot 10^{-19}$	~4,6·10 ⁵	~4,6·10 ⁵
¹⁸⁴ Os	$3,42 \cdot 10^{-17}$	$2,55 \cdot 10^{-14}$	$2,55 \cdot 10^{-14}$	~7,5·10 ²	~7,5·10 ²
Примесные					
¹²⁸ Te	$6,99 \cdot 10^{-35}$	$1,23 \cdot 10^{-34}$	$1,21 \cdot 10^{-34}$	1,75	1,73
¹³⁰ Xe	$6,77 \cdot 10^{-31}$	$2,15 \cdot 10^{-29}$	$2,16 \cdot 10^{-29}$	31,8	31,9
¹³¹ Xe	$3,24 \cdot 10^{-27}$	$5,87 \cdot 10^{-27}$	$5,79 \cdot 10^{-27}$	1,81	1,78
¹³² Ba	$9,09 \cdot 10^{-29}$	$2,51 \cdot 10^{-28}$	$3,34 \cdot 10^{-28}$	13	3,7
¹⁴² Ba	$1,22 \cdot 10^{-32}$	$5,59 \cdot 10^{-26}$	$5,59 \cdot 10^{-26}$	~4,6·10 ⁶	~4,6·10 ⁶
¹³⁶ La	$4,96 \cdot 10^{-24}$	$4,96 \cdot 10^{-24}$	$6,01 \cdot 10^{-24}$	1	1,21
¹⁴⁹ Ce	$4,99 \cdot 10^{-28}$	$1,01 \cdot 10^{-27}$	$5,14 \cdot 10^{-27}$	2	10
¹⁶⁵ Ho	$1,19 \cdot 10^{-39}$	$2,09 \cdot 10^{-38}$	$2,60 \cdot 10^{-38}$	18	22
¹⁶⁹ Ho	$1,45 \cdot 10^{-40}$	$5,00 \cdot 10^{-40}$	$3,13 \cdot 10^{-39}$	3,5	21,5
¹⁶⁷ Er	$6,22 \cdot 10^{-37}$	$2,70 \cdot 10^{-33}$	$3,86 \cdot 10^{-33}$	~4,3·10 ³	~6,2·10 ⁵
¹⁶⁸ Er	$1,57 \cdot 10^{-33}$	$5,66 \cdot 10^{-31}$	$1,87 \cdot 10^{-30}$	~3,6·10 ²	~1,2·10 ³
¹⁶⁹ Er	$4,21 \cdot 10^{-32}$	$2,81 \cdot 10^{-29}$	$3,74 \cdot 10^{-29}$	~6,5·10 ²	~9·10 ²
¹⁷¹ Er	$2,26 \cdot 10^{-31}$	$4,26 \cdot 10^{-31}$	$5,17 \cdot 10^{-31}$	1,9	2,3
¹⁷² Er	$9,45 \cdot 10^{-31}$	$1,02 \cdot 10^{-30}$	$1,36 \cdot 10^{-30}$	1,1	1,45

^{168}Tm	$2,07 \cdot 10^{-37}$	$2,59 \cdot 10^{-34}$	$3,47 \cdot 10^{-34}$	$\sim 1,2 \cdot 10^3$	$\sim 1,7 \cdot 10^3$
^{169}Tm	$9,31 \cdot 10^{-32}$	$9,13 \cdot 10^{-29}$	$1,22 \cdot 10^{-28}$	$\sim 10^3$	$\sim 1,3 \cdot 10^3$
^{170}Tm	$1,68 \cdot 10^{-32}$	$1,09 \cdot 10^{-30}$	$4,88 \cdot 10^{-29}$	65	$\sim 2,9 \cdot 10^3$
^{171}Tm	$2,81 \cdot 10^{-29}$	$1,93 \cdot 10^{-27}$	$2,72 \cdot 10^{-26}$	70	$\sim 10^3$
^{172}Tm	$7,00 \cdot 10^{-29}$	$4,29 \cdot 10^{-27}$	$5,64 \cdot 10^{-26}$	$\sim 6 \cdot 10^2$	$\sim 8 \cdot 10^2$
^{174}Tm	$2,34 \cdot 10^{-32}$	$1,42 \cdot 10^{-31}$	$2,21 \cdot 10^{-30}$	6	$\sim 10^2$
^{175}Tm	$1,32 \cdot 10^{-32}$	$1,74 \cdot 10^{-30}$	$1,75 \cdot 10^{-30}$	130	130
^{169}Yb	$9,34 \cdot 10^{-37}$	$7,94 \cdot 10^{-33}$	$2,98 \cdot 10^{-30}$	$\sim 8,5 \cdot 10^3$	$\sim 3,2 \cdot 10^6$
^{170}Yb	$2,14 \cdot 10^{-31}$	$4,31 \cdot 10^{-27}$	$6,23 \cdot 10^{-27}$	$\sim 2 \cdot 10^4$	$\sim 3 \cdot 10^4$
^{171}Yb	$8,95 \cdot 10^{-29}$	$1,99 \cdot 10^{-25}$	$1,21 \cdot 10^{-24}$	$\sim 2,2 \cdot 10^3$	$\sim 1,3 \cdot 10^4$
^{170}Lu	$4,84 \cdot 10^{-43}$	$2,62 \cdot 10^{-36}$	$5,05 \cdot 10^{-36}$	$\sim 5,4 \cdot 10^6$	$\sim 10^7$
^{171}Lu	$4,32 \cdot 10^{-36}$	$3,70 \cdot 10^{-32}$	$7,99 \cdot 10^{-32}$	$\sim 8,5 \cdot 10^3$	$\sim 1,8 \cdot 10^4$
^{172}Lu	$5,52 \cdot 10^{-33}$	$1,57 \cdot 10^{-28}$	$8,11 \cdot 10^{-28}$	$\sim 2,8 \cdot 10^4$	$\sim 1,5 \cdot 10^5$
^{173}Lu	$2,71 \cdot 10^{-27}$	$1,48 \cdot 10^{-23}$	$2,86 \cdot 10^{-23}$	$\sim 5,4 \cdot 10^3$	$\sim 10^4$
^{174}Lu	$9,95 \cdot 10^{-25}$	$3,38 \cdot 10^{-24}$	$3,91 \cdot 10^{-21}$	3,4	$\sim 4 \cdot 10^5$
^{182}Lu	$2,41 \cdot 10^{-25}$	$2,41 \cdot 10^{-25}$	$5,74 \cdot 10^{-25}$	1	2,4
^{172}Hf	$2,59 \cdot 10^{-33}$	$1,70 \cdot 10^{-26}$	$2,47 \cdot 10^{-26}$	$\sim 6,5 \cdot 10^6$	$\sim 9,5 \cdot 10^6$
^{173}Hf	$2,75 \cdot 10^{-29}$	$7,37 \cdot 10^{-26}$	$2,86 \cdot 10^{-25}$	$\sim 2,6 \cdot 10^3$	$\sim 10^4$
^{186}Hf	–	$9,31 \cdot 10^{-30}$	$9,31 \cdot 10^{-30}$	–	–

3 Особенности нуклидного состава облученной стали в прецизионных расчетах

Анализ влияния расширенных библиотек на нуклидный состав облучаемых конструкционных материалов важен, прежде всего, для определения оценок погрешности вычисляемых нуклидов, включая примесные, что представляет практический интерес при решении разных задач ядерной энергетики. Рассмотрены особенности составов облученной стали ЧС-68 (X16N15M2ГТФР) и ЭК-181 (16X12В2ФТаР), полученных в прецизионных расчетах по программе MZK с библиотеками EX, EX1, EX2 для $T_{\text{обл}}$ от 10 до 1000 сут и нейтронного потока $F_n = 2,72 \cdot 10^{15} \text{ н} \cdot \text{с}^{-1}$.

3.1 Сталь ЧС-68

Облученная сталь ЧС-68 для $T_{\text{обл}} = 100$ сут включает ~ 420 нуклидов с $\rho > 10^{-40} \text{ г} \cdot \text{а} / \text{см}^3$, из них половина – примесные. У четверти примесных нуклидов различия от 10 до 80%, более порядка — у ~ 10 и ~ 20 нуклидов с EX1 и EX2, соответственно. У $\sim 90\%$ не примесных нуклидов различия в рамках 5%, на порядок различаются ~ 15 нуклидов (табл.10).

Таблица 10 Концентрация ($\text{г} \cdot \text{а} / \text{см}^3$) нуклидов ЧС-68 для $T_{\text{обл}} = 100$ сут

Нуклид	EX	EX1	EX2	$M_{\text{EX1}}/M_{\text{EX}}$	$M_{\text{EX2}}/M_{\text{EX}}$
^{42}Ca	$2,04 \cdot 10^{-22}$	$2,41 \cdot 10^{-22}$	$2,71 \cdot 10^{-22}$	1,18	1,33
^{45}Ca	$1,04 \cdot 10^{-18}$	$4,12 \cdot 10^{-19}$	$4,11 \cdot 10^{-19}$	0,4	0,4
^{45}Sc	$2,12 \cdot 10^{-19}$	$1,18 \cdot 10^{-19}$	$1,19 \cdot 10^{-19}$	0,6	0,6
^{48}Ti	$6,22 \cdot 10^{-12}$	$8,82 \cdot 10^{-13}$	$8,82 \cdot 10^{-13}$	0,14	0,14
^{52}Mn	$3,03 \cdot 10^{-15}$	$7,33 \cdot 10^{-19}$	$7,33 \cdot 10^{-19}$	$\sim 2,4 \cdot 10^{-4}$	$\sim 2,4 \cdot 10^{-4}$
^{53}Mn	$2,52 \cdot 10^{-9}$	$2,28 \cdot 10^{-11}$	$2,28 \cdot 10^{-11}$	0,01	0,01
^{56}Co	$2,52 \cdot 10^{-12}$	$2,19 \cdot 10^{-17}$	$2,19 \cdot 10^{-17}$	$\sim 8,7 \cdot 10^{-6}$	$\sim 8,7 \cdot 10^{-6}$
^{57}Co	$6,73 \cdot 10^{-9}$	$1,38 \cdot 10^{-10}$	$1,38 \cdot 10^{-10}$	0,02	0,02
^{97}Te	$1,17 \cdot 10^{-15}$	$1,13 \cdot 10^{-15}$	$1,17 \cdot 10^{-15}$	0,97	1
^{101}Rh	$4,37 \cdot 10^{-22}$	$4,45 \cdot 10^{-22}$	$4,34 \cdot 10^{-22}$	1,02	1,01

Примесные					
³² Si	2,17·10 ⁻³⁸	4,82·10 ⁻³⁹	5,41·10 ⁻³⁹	0,22	0,25
³⁵ S	1,33·10 ⁻³³	2,04·10 ⁻³³	2,33·10 ⁻³³	1,5	1,8
³⁶ Cl	3,01·10 ⁻³⁵	1,41·10 ⁻³⁵	1,43·10 ⁻³⁵	0,47	0,48
³⁸ Ar	4,85·10 ⁻²⁹	3,70·10 ⁻²⁹	5,45·10 ⁻²⁹	0,8	1,1
⁴¹ Ca	2,84·10 ⁻²⁹	3,25·10 ⁻²⁹	3,58·10 ⁻²⁹	1,15	1,26
⁵⁹ Cr	4,45·10 ⁻³⁷	7,37·10 ⁻³⁷	2,04·10 ⁻³⁶	1,7	4,6
⁵¹ Mn	5,74·10 ⁻²⁵	6,88·10 ⁻²⁷	6,88·10 ⁻²⁷	0,01	0,01
⁵² Fe	4,04·10 ⁻³⁰	6,40·10 ⁻³⁰	8,54·10 ⁻³⁰	1,6	2,1
⁵⁵ Co	2,46·10 ⁻²¹	4,25·10 ⁻²⁴	4,25·10 ⁻²⁴	~1,7·10 ⁻³	~1,7·10 ⁻³
⁵⁴ Co	1,05·10 ⁻³⁴	4,83·10 ⁻³⁷	2,70·10 ⁻³⁶	~4,6·10 ⁻³	~2,6·10 ⁻²
⁷⁹ Se	5,28·10 ⁻³⁵	5,94·10 ⁻³⁵	5,86·10 ⁻³⁵	1,12	1,10
⁸¹ Se	1,64·10 ⁻³⁵	3,58·10 ⁻³⁵	3,13·10 ⁻³⁵	2,2	1,9
⁸¹ Kr	1,94·10 ⁻³⁶	2,59·10 ⁻³⁶	2,73·10 ⁻³²	1,33	~1,4·10 ³
⁸⁸ Rb	2,27·10 ⁻²⁸	3,16·10 ⁻²⁸	4,65·10 ⁻²⁸	1,4	2,01
⁸³ Sr	3,69·10 ⁻³⁰	6,05·10 ⁻³⁰	1,02·10 ⁻²⁹	1,6	2,8
⁸⁵ Y	2,66·10 ⁻²⁷	2,73·10 ⁻²⁷	3,43·10 ⁻²⁷	1,03	1,3
⁹⁶ Ru	1,41·10 ⁻²⁸	1,59·10 ⁻²⁸	1,46·10 ⁻²⁸	1,13	1,04

Динамика различий концентраций представлена для EX1, EX2 при изменении $T_{\text{обл}}$ от 10 до 1000 сут. Анализ показывает, что с увеличением времени облучения отношение $M_{\text{EX1}}/M_{\text{EX}}$ может заметно изменяться (⁵²Mn, ⁵⁴Co) или оставаться постоянным (⁵⁹Cr, ⁵¹Mn, ⁸⁰Kr) (табл.11). Динамика различий для EX1 и EX2 имеет схожий вид.

Таблица 11 Динамика отношения $M_{\text{EX1}}/M_{\text{EX}}$ и $M_{\text{EX2}}/M_{\text{EX}}$ для ЧС-68

Нуклид	$M_{\text{EX1}}/M_{\text{EX}}$			$M_{\text{EX2}}/M_{\text{EX}}$		
	$T_{\text{обл}}, \text{сут}$					
	10	100	1000	10	100	1000
⁵⁹ Cr	1,65	1,66	1,66	4,56	4,59	4,59
⁵¹ Mn	0,01	0,01	0,02	0,01	0,01	0,02
⁵² Mn	1,7·10 ⁻⁵	2,4·10 ⁻⁴	1,3·10 ⁻³	1,7·10 ⁻⁵	2,4·10 ⁻⁴	1,3·10 ⁻³
⁵⁴ Co	0,03	4,6·10 ⁻³	2,8·10 ⁻³	0,17	2,6·10 ⁻²	1,5·10 ⁻²
⁵⁶ Co	1,4·10 ⁻⁶	8,7·10 ⁻⁶	3,2·10 ⁻⁵	1,4·10 ⁻⁶	8,7·10 ⁻⁶	3,2·10 ⁻⁵
⁵⁷ Co	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02
⁸¹ Se	2,25	2,19	1,85	1,96	1,91	1,65
⁸¹ Br	1,12	1,13	1,17	1,12	1,12	1,14
⁸⁰ Kr	0,8	0,81	0,9	0,8	0,82	0,91
⁸³ Rb	1,5	1,39	1,3	2,34	2,05	1,79
⁸³ Sr	1,65	1,64	1,56	2,79	2,77	2,54
⁸⁵ Y	1,03	1,03	1,18	1,34	1,3	1,84
⁹⁶ Ru	1,11	1,13	1,13	1,03	1,03	1,04

3.2 Сталь ЭК-181

Облученная сталь ЭК-181 для $T_{\text{обл}}=100$ сут включает ~1050 нуклидов с $\rho > 10^{-40}$ Г·а/см³, из них ~330 примесных. У ~ 10% не примесных нуклидов различия от 5 до 50%, отличие более порядка у ~40 и ~50 нуклидов с EX1 и EX2, соответственно (табл. 12). Примесные нуклиды с различием от 10 до 80% составляют ~15% и ~20% (с EX1 и EX2, соответственно) и ~25% — с различием более порядка для обеих библиотек.

Таблица 12. Концентрация (г·а/см³) нуклидов ЭК- 181 для $T_{\text{обл}} = 100$ сут

Нуклид	EX	EX1	EX2	$M_{\text{EX1}}/M_{\text{EX}}$	$M_{\text{EX2}}/M_{\text{EX}}$
⁴⁴ K	$4,92 \cdot 10^{-22}$	$1,08 \cdot 10^{-21}$	$9,54 \cdot 10^{-22}$	2,2	1,9
⁴² Ca	$1,99 \cdot 10^{-20}$	$2,35 \cdot 10^{-20}$	$2,65 \cdot 10^{-20}$	1,2	1,3
⁴⁵ Ca	$6,36 \cdot 10^{-16}$	$5,76 \cdot 10^{-16}$	$5,75 \cdot 10^{-16}$	0,90	0,91
⁵⁶ Cr	$1,31 \cdot 10^{-17}$	$1,18 \cdot 10^{-17}$	$1,17 \cdot 10^{-17}$	0,9	0,9
⁵² Mn	$4,97 \cdot 10^{-13}$	$1,20 \cdot 10^{-16}$	$1,20 \cdot 10^{-16}$	$\sim 2,4 \cdot 10^{-4}$	$\sim 2,4 \cdot 10^{-4}$
⁵⁶ Co	$6,55 \cdot 10^{-13}$	$5,69 \cdot 10^{-18}$	$5,69 \cdot 10^{-18}$	$\sim 8,7 \cdot 10^{-6}$	$\sim 8,7 \cdot 10^{-6}$
⁵⁷ Co	$1,75 \cdot 10^{-9}$	$3,57 \cdot 10^{-11}$	$3,57 \cdot 10^{-11}$	0,02	0,02
⁵⁷ As	$1,50 \cdot 10^{-13}$	$1,63 \cdot 10^{-13}$	$1,54 \cdot 10^{-13}$	1,1	1,03
⁸³ Kr	$4,35 \cdot 10^{-20}$	$6,18 \cdot 10^{-20}$	$6,18 \cdot 10^{-20}$	1,42	1,42
⁸⁵ Rb	$4,87 \cdot 10^{-19}$	$8,28 \cdot 10^{-19}$	$1,09 \cdot 10^{-18}$	1,7	2,2
⁸⁴ Sr	$1,38 \cdot 10^{-23}$	$1,55 \cdot 10^{-23}$	$1,59 \cdot 10^{-23}$	1,12	1,15
⁸⁵ Sr	$4,87 \cdot 10^{-19}$	$1,03 \cdot 10^{-18}$	$1,44 \cdot 10^{-18}$	2,12	2,96
⁸⁷ Y	$1,32 \cdot 10^{-19}$	$2,99 \cdot 10^{-19}$	$2,99 \cdot 10^{-19}$	2,26	2,26
¹¹⁰ Sn	$7,57 \cdot 10^{-21}$	$7,92 \cdot 10^{-21}$	$7,38 \cdot 10^{-21}$	1,05	0,97
¹³¹ Cs	$4,25 \cdot 10^{-19}$	$4,95 \cdot 10^{-19}$	$4,95 \cdot 10^{-19}$	1,17	1,17
¹³⁴ Ba	$8,02 \cdot 10^{-15}$	$8,39 \cdot 10^{-15}$	$8,11 \cdot 10^{-15}$	1,05	1,01
¹³⁴ La	$3,56 \cdot 10^{-19}$	$3,80 \cdot 10^{-19}$	$3,62 \cdot 10^{-19}$	1,07	1,02
¹⁷³ Yb	$2,26 \cdot 10^{-22}$	$1,28 \cdot 10^{-19}$	$1,38 \cdot 10^{-19}$	$\sim 5,6 \cdot 10^2$	$\sim 6 \cdot 10^2$
¹⁷⁵ Lu	$3,08 \cdot 10^{-20}$	$3,43 \cdot 10^{-20}$	$3,27 \cdot 10^{-17}$	1,1	$\sim 10^3$
¹⁷⁶ Lu	$9,85 \cdot 10^{-19}$	$1,70 \cdot 10^{-18}$	$1,24 \cdot 10^{-15}$	1,7	$\sim 10^3$
¹⁷⁷ Lu	$5,25 \cdot 10^{-18}$	$2,17 \cdot 10^{-17}$	$7,99 \cdot 10^{-14}$	4,2	$\sim 1,5 \cdot 10^4$
¹⁷⁵ Hf	$1,48 \cdot 10^{-20}$	$5,69 \cdot 10^{-17}$	$5,83 \cdot 10^{-17}$	$\sim 3,8 \cdot 10^3$	$\sim 3,9 \cdot 10^3$
¹⁷⁶ Hf	$6,93 \cdot 10^{-18}$	$8,59 \cdot 10^{-18}$	$4,12 \cdot 10^{-13}$	1,25	$\sim 6 \cdot 10^4$
¹⁸⁵ Ta	$1,02 \cdot 10^{-16}$	$1,40 \cdot 10^{-15}$	$1,98 \cdot 10^{-15}$	14	20
Примесные					
⁵⁴ Co	$2,74 \cdot 10^{-35}$	$1,26 \cdot 10^{-37}$	$7,01 \cdot 10^{-37}$	$\sim 4,6 \cdot 10^{-3}$	$\sim 2,6 \cdot 10^{-2}$
⁷⁵ Zn	$1,10 \cdot 10^{-36}$	$1,36 \cdot 10^{-36}$	$2,10 \cdot 10^{-36}$	1,2	2,3
⁶⁵ Ga	$1,08 \cdot 10^{-34}$	$1,17 \cdot 10^{-34}$	$1,17 \cdot 10^{-34}$	1,1	1,1
⁸⁹ Kr	$5,32 \cdot 10^{-36}$	$6,87 \cdot 10^{-36}$	$1,28 \cdot 10^{-35}$	1,3	2,4
⁸² Rb	$6,98 \cdot 10^{-38}$	$2,33 \cdot 10^{-37}$	$3,21 \cdot 10^{-37}$	3,3	4,6
⁸³ Rb	$7,69 \cdot 10^{-28}$	$1,21 \cdot 10^{-27}$	$1,37 \cdot 10^{-27}$	1,6	1,8
⁸³ Sr	$4,98 \cdot 10^{-30}$	$8,90 \cdot 10^{-30}$	$1,18 \cdot 10^{-29}$	1,8	2,4
⁸⁵ Y	$4,18 \cdot 10^{-27}$	$4,44 \cdot 10^{-27}$	$4,89 \cdot 10^{-27}$	1,06	1,17
⁹⁵ Ru	$1,50 \cdot 10^{-36}$	$1,72 \cdot 10^{-36}$	$1,55 \cdot 10^{-36}$	1,14	1,03
⁹⁶ Ru	$9,17 \cdot 10^{-29}$	$1,03 \cdot 10^{-28}$	$9,46 \cdot 10^{-29}$	1,12	1,03
⁹⁹ Pd	$4,74 \cdot 10^{-29}$	$4,86 \cdot 10^{-29}$	$4,74 \cdot 10^{-29}$	1,03	1
¹¹⁸ Ag	$1,26 \cdot 10^{-33}$	$6,35 \cdot 10^{-33}$	$6,35 \cdot 10^{-33}$	5	5
¹⁷⁰ Sb	$3,66 \cdot 10^{-32}$	$3,89 \cdot 10^{-32}$	$3,64 \cdot 10^{-32}$	1,07	1,01
¹³⁸ Xe	$7,37 \cdot 10^{-37}$	$1,14 \cdot 10^{-36}$	$2,51 \cdot 10^{-36}$	1,6	3,4
¹²⁹ Cs	$1,01 \cdot 10^{-29}$	$1,23 \cdot 10^{-29}$	$1,18 \cdot 10^{-29}$	1,22	1,17
¹²⁹ Ba	$6,52 \cdot 10^{-31}$	$8,00 \cdot 10^{-31}$	$7,63 \cdot 10^{-31}$	1,23	1,17
¹⁴² Ba	$1,61 \cdot 10^{-30}$	$2,22 \cdot 10^{-30}$	$4,29 \cdot 10^{-30}$	1,4	2,7
¹⁶⁸ Er	$1,11 \cdot 10^{-34}$	$4,00 \cdot 10^{-32}$	$1,25 \cdot 10^{-31}$	$\sim 3,6 \cdot 10^2$	$\sim 1,1 \cdot 10^3$

^{169}Tm	$6,66 \cdot 10^{-33}$	$6,46 \cdot 10^{-30}$	$6,65 \cdot 10^{-30}$	$\sim 9,7 \cdot 10^2$	$\sim 10^3$
^{170}Tm	$2,50 \cdot 10^{-33}$	$8,08 \cdot 10^{-32}$	$3,76 \cdot 10^{-30}$	32	$\sim 1,5 \cdot 10^3$
^{169}Yb	$6,67 \cdot 10^{-38}$	$5,62 \cdot 10^{-34}$	$2,08 \cdot 10^{-31}$	$\sim 8 \cdot 10^3$	$\sim 3 \cdot 10^6$
^{170}Yb	$1,53 \cdot 10^{-32}$	$3,04 \cdot 10^{-28}$	$4,36 \cdot 10^{-28}$	$\sim 1,9 \cdot 10^4$	$\sim 2,8 \cdot 10^4$
^{171}Yb	$6,39 \cdot 10^{-30}$	$1,41 \cdot 10^{-26}$	$3,86 \cdot 10^{-26}$	$\sim 2,2 \cdot 10^3$	$\sim 6 \cdot 10^3$
^{172}Yb	$4,99 \cdot 10^{-25}$	$5,26 \cdot 10^{-22}$	$5,88 \cdot 10^{-22}$	$\sim 10^3$	$\sim 1,2 \cdot 10^3$
^{172}Lu	$5,73 \cdot 10^{-34}$	$1,14 \cdot 10^{-29}$	$5,71 \cdot 10^{-29}$	$\sim 2 \cdot 10^4$	$\sim 10^5$
^{173}Hf	$1,94 \cdot 10^{-30}$	$5,21 \cdot 10^{-27}$	$1,99 \cdot 10^{-26}$	$\sim 2,6 \cdot 10^3$	$\sim 10^4$

Динамика $M_{\text{EXI}}/M_{\text{EX}}$ представлена для $T_{\text{обл}}$ от 10 до 1000 сут. Анализ показывает, что с увеличением времени облучения различие концентраций нуклидов может заметно уменьшаться (^{168}Er , ^{169}Tm), так и оставаться постоянным (^{89}Kr , ^{95}Ru , ^{131}Ba) (табл.13).

Таблица 13. Динамика $M_{\text{EXI}}/M_{\text{EX}}$ для ЭК-181

Нуклид	Сутки		
	10	100	1000
^{83}Kr	1,56	1,42	1,12
^{89}Kr	1,3	1,3	1,3
^{81}Rb	1,8	2	1,95
^{82}Rb	3,7	3,3	1,8
^{83}Rb	1,7	1,6	1,25
^{84}Sr	1,16	1,12	1,09
^{85}Sr	2,2	2,12	1,60
^{85}Y	1,3	1,06	1,14
^{87}Y	2,3	2,26	2,10
^{95}Ru	1,15	1,14	1,13
^{118}Ag	5	5	5
^{128}Cs	1,19	1,15	1,03
^{129}Cs	1,23	1,22	1,09
^{131}Cs	1,17	1,17	1,15
^{129}Ba	1,23	1,23	1,09
^{131}Ba	1,17	1,17	1,15
^{168}Er	$3,6 \cdot 10^3$	$3,6 \cdot 10^2$	40
^{169}Er	$8,2 \cdot 10^3$	$6,6 \cdot 10^2$	63
^{169}Tm	$1,1 \cdot 10^4$	$9,7 \cdot 10^2$	92
^{170}Tm	$1,8 \cdot 10^2$	32	13
^{170}Yb	$1,8 \cdot 10^5$	$1,9 \cdot 10^4$	$2,6 \cdot 10^3$
^{171}Yb	$2 \cdot 10^4$	$2,2 \cdot 10^3$	$2,4 \cdot 10^2$
^{172}Yb	10^4	10^3	$1,1 \cdot 10^2$
^{173}Yb	$5,6 \cdot 10^3$	$5,6 \cdot 10^2$	60

Заключение

В задачах нуклидной кинетики расчеты по программе MZK с расширенными библиотеками одногрупповых сечений подтверждают важность включения высокопороговых реакций в расчетные библиотеки. Неоднозначность формирования расширенных библиотек с высокопороговыми реакциями может

приводить к заметным различиям нуклидного состава облучаемых композиций. Библиотека EX2, включающая однокрупные сечения для всех реакций и нуклидов в JEFF3.3 (2016 г) и JEFF3.3 (2017 г), рассматривается в качестве базовой библиотеки. Вариантные расчеты с библиотеками, сформированными на основе EX2 с варьированием сечений в рамках указанных погрешностей, позволят оценить точность вычисляемых нуклидов (в том числе, и примесных) и обеспечить надежность представляемых финальных результатов нуклидного состава. Такие варианты расчеты требуют продолжения.

Результаты прецизионных расчетов по программе MZK с расширенными библиотеками могут быть востребованы в бенчмарк-расчетах и практических задачах для уточнения нуклидного состава различных композиций при разных сценариях облучения.

Литература

1. Митенкова Е.Ф., Соловьева Е. В., Маничев В.Б., Кожевников Д.Ю. Программа MZK для решения жестких систем в задачах нуклидной кинетики. — Атомная энергия, 2021, т. 130, вып.6, с. 323–326.
2. Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. М., «Мир», 1999, 645с.
3. Митенкова Е.Ф., Соловьева Е.В., Кожевников Д.Ю. Прецизионная программа MZK для расчета примесных нуклидов в задачах нуклидной кинетики/ Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, № ИВРАЕ–2022–02. М: ИВРАЭ РАН, 2022, 17 с.
4. Маничев В. Б., Митенкова Е. Ф., Фельдман Э. О., Кожевников Д. Ю., Соловьева Е. В. Достоверность и точность решения задач нуклидной кинетики. — Информационные технологии, 2020, т. 26, № 4, с. 231–238.
5. Жук Д.М., Маничев В.Б., Сахаров М.К. SADEL – библиотека «сверхточных» решателей для программного комплекса ПА10 (SADEL-PA10). // В сб. научных трудов комплекса ПА10 (SADEL-PA10). // МЭС-2012 - М.: ИПИМ РАН, 2012, с. 147–153.
6. Plompen A. et al. The joint evaluated fission and fusion nuclear data library, JEFF-3.3", Eur. Phys. J. A, 2020, v. 56, № 7, p. 181–288.
7. ENDF-102 Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File ENDF-6. BNL-NCS-44945-01/04-Rev., 2001.
8. Митенкова Е.Ф., Новиков Н.В., Соловьева Е.В. Однокрупные сечения высокопороговых реакций для прецизионных нейтронно-физических расчетов — Атомная Энергия, т.133, вып. 4, 2022, с. 219 – 223.
9. Croff A. ORIGEN2: a versatile computer code for calculating the nuclide compositions and characteristics of nuclear materials. — Nucl. Technol., 1983, v. 62, p. 335–352.