

13
M-13
499



ЛАБОРАТОРИЯ НЕЙТРОННОЙ ФИЗИКИ

P-499

К. Маевский

ТЕРМАЛИЗАЦИЯ НЕЙТРОНОВ
/ Обзор /

Дубна 1960 год

К. Маевский^{x/}

ТЕРМАЛИЗАЦИЯ НЕЙТРОНОВ

/Обзор/

Объединенный институт
ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

^{x/} Институт ядерных исследований в Варшаве,
Институт теоретической физики Варшавского Университета.

С о д е р ж а н и е

	Стр.
В в е д е н и е	3
§ 1. Спектр тепловых нейтронов	5
§ 2. Одноатомный газ	14
§ 3. Температура нейтронов	33
§ 4. Влияние химической связи на спектр	44
§ 5. Сравнение с экспериментом и уточнение теории	58
§ 6. Пространственная зависимость потока нейтронов	78
§ 7. Кристаллические замедлители	87
§ 8. Эффект диффузионного охлаждения	93
§ 9. Заключение	110
1. Обозначение величин и соотношения между ними	112
2. Приложения	115
3. Л и т е р а т у р а	137

В в е д е н и е

Процесс замедления нейтронов можно разделить на две части: собственно замедление в интервале энергии от ~ 1 эв до 2 Мэв /средняя энергия расщепления/ и термализация в интервале от нуля до ~ 1 эв. В первом интервале средняя энергия нейтрона велика по сравнению с энергией химической связи атомов замедлителя и их тепловой энергией. Поэтому ядра замедлителя можно считать свободными, покоящимися и независимыми. Свободными — потому что энергия отдачи значительно больше энергии химической связи и следовательно, ядро после столкновения с нейтроном отрывается от молекулы и свободно отлетает; покоящимися — так как относительная скорость только незначительно изменяется тепловым движением ядер; независимыми — потому что длина волны нейтрона так мала, что можно пренебречь явлением интерференции и считать ядра независимыми рассеивающими центрами. В этом энергетическом интервале рассеяние в системе центра масс можно считать изотропным и можно построить всю теорию замедления, исходя из законов сохранения энергии и импульса. Разработаны математические методы трактовки проблем замедления /1.2/, позволяющие определить энергетическое распределение замедляемых нейтронов. В частности, для случая энергии нейтронов значительно меньшей энергии источников, Ферми получил асимптотическое выражение для спектра нейтронов в виде $E F(E) \approx \text{const.}$, где $F(E)$ — поток нейтронов.

Область термализации характерна тем, что обмен энергией между нейтроном и ядром не является односторонним; нейтрон может как отдать часть своей энергии, так и получить энергию от ядра. Решающую роль здесь играют неупругие столкновения, при которых нейтрон может как потерять, так и получить энергию. В этом случае обмен энергией зависит не только от массы ядра и амплитуды рассеяния, как в случае замедления, но также от химической связи и температуры замедлителя.

Обмен энергией между нейтронами и атомами замедлителя приводит систему в состояние равновесия, и тогда нейтронный газ имеет распределение Максвелла с температурой, равной температуре среды. Однако, наступление равновесия зависит от многих факторов и могут наблюдаться отступления от

равновесного распределения. Задачей теории термализации является как раз определение действительного спектра нейтронов, величины отступления от равновесного распределения.

Когда мы говорим о спектре тепловых нейтронов, то следует иметь в виду, что он образуется двумя способами: во-первых, спектр в данной точке, обусловленный источниками нейтронов, которыми могут быть замедленные нейтроны со спектром Ферми $E F(E) = \text{const}$, во-вторых, спектр обуславливается диффузией с соседних точек. Вообще говоря, имеем наложение этих двух процессов, но, как увидим в § 8, можно выделить спектр, обусловленный диффузией.

Необходимо заметить, что в ряде случаев поток нейтронов является независимым от координат; это имеет место точно для бесконечной однородной среды с равномерно распределенными источниками нейтронов и приближенно тогда, когда возможно применить метод гомогенизации [2а]. Если средняя длина пробега нейтрона больше или сравнима с размерами неоднородностей, тогда нейтрон после одного столкновения может перейти в другую область среды. При этом происходит перенос энергии, так как если нейтрон приобрел энергию в одной части среды, то может отдать ее уже в другой части. Это означает, что распределение потока нейтронов по энергии практически будет независимо от координат.

В случае сильной зависимости потока нейтронов от координат, например, для очень неоднородной решетки или в реакторе с отражателем, метод гомогенизации неприменим и до сих пор нет эффективных математических методов решения этих проблем.

Поэтому в дальнейшем рассмотрим прежде всего вопросы, связанные с определением потока нейтронов независимо от положения в пространстве и только в § 6 кратко рассмотрим постановку вопроса в случае потока, зависящего от координат.

Вопрос термализации нейтронов представляет интерес с двух точек зрения. Во-первых, с точки зрения теории реакторов, потому что определение спектра нейтронов необходимо для конкретных целей расчета и строительства реакторов. В теории реакторов обычно тепловые нейтроны рассматриваются в многогруппно-

вой теории как одна моноэнергетическая группа; чтобы, однако, получить более или менее адекватную картину происходящих процессов, эффективные сечения рассеяния и поглощения усредняются в предположении, что нейтроны подчиняются максвелловскому распределению с температурой T среды. Чтобы оправдать эту процедуру, надо найти действительный спектр и температуру нейтронов с учетом химической связи и других факторов. Следовательно, определение спектра и температуры нейтронов является для теории реакторов задачей первостепенной важности. Затем, теория термализации интересна с точки зрения физики твердого тела и молекулярной физики, так как позволяет выяснить картину колебаний кристаллической решетки и динамику движения молекул в жидкостях или газах.

Совершенно ясно, что между этими двумя аспектами теории термализации - с одной стороны использованием нейтронов в качестве средства исследования структуры материи, и с другой стороны - определением спектра нейтронов с учетом влияния химической связи на процесс термализации, нет резкой границы. Здесь необходимо сотрудничество физиков твердого тела и специалистов по физике реакторов.

§ 1. Спектр тепловых нейтронов

Рассмотрим сначала качественно вопрос установления спектра нейтронов в среде. Если имеется бесконечная однородная среда и нет поглощения и источников, тогда время жизни нейтрона очевидно бесконечно, время же замедления - конечная величина, и поэтому по истечении определенного времени установится равновесное, максвелловское распределение.

Если же среда поглощает, тогда очевидно время жизни нейтрона тоже является конечной величиной и если оно сравнимо со временем замедления, тогда равновесное состояние не может наступить, так как замедляемые нейтроны поглощаются прежде чем успеют достигнуть состояния равновесия, и, следовательно, действительное распределение отличается от распределения Максвелла.

В случае импульсного источника и захвата по закону $1/v$ спектр также устанавливается максвелловский, но полное число нейтронов убывает /см. §8/.

Чтобы рассмотреть вопрос количественно, установим уравнение, которому подчиняется поток нейтронов в случае стационарных источников.

Рассмотрим с этой целью баланс нейтронов в интервале энергии dE . Число нейтронов, уходящих из этого интервала вследствие рассеяния и поглощения, равняется $[\sigma_a(E) + \sigma_s(E)] \varphi(E) dE$, где $\sigma_a(E)$ и $\sigma_s(E)$ — макроскопическое эффективное сечение соответственно поглощения и рассеяния, $\varphi(E)$ — поток тепловых нейтронов на единичный интервал энергии. Пусть нейтроны, приходящие в интервал dE из внешних источников, которыми являются замедляемые нейтроны с энергией выше некоторого граничного значения E_m , разделяющего интервал термализации от интервала замедления, даны членом $S(E) dE$. Далее пусть нейтроны, рассеянные с других интервалов dE' внутри области термализации, представлены интегралом:

$$dE \left\{ \int_0^{E_m} \sigma(E' \rightarrow E) \varphi(E') dE' \right\},$$

где $\sigma(E' \rightarrow E)$ — индикатрисса рассеяния, т.е. такая функция, что $\frac{\sigma(E' \rightarrow E)}{\sigma_s(E')} dE$ дает вероятность рассеяния нейтрона с энергией E' в интервал $E, E + dE$. Действительно, имеем следующее соотношение:

$$\sigma_s(E') \varphi(E') dE' \cdot w(E' \rightarrow E) = \sigma(E' \rightarrow E) \varphi(E') dE',$$

где $\sigma_s(E') \varphi(E') dE'$ — число соударений в интервале dE' , $w(E' \rightarrow E) dE$ — вероятность рассеяния в интервал dE ; тогда

$$w(E' \rightarrow E) dE = \frac{\sigma(E' \rightarrow E)}{\sigma_s(E')} dE.$$

Условие нормировки вероятности дает:

$$\sigma_s(E') = \int_0^{E_m} \sigma(E' \rightarrow E) dE. \quad (1.1)$$

Составляя баланс нейтронов, получим уравнение Больцмана для стационарного состояния:

$$[\sigma_a(E) + \sigma_s(E)] \varphi(E) = \int_0^{E_m} \sigma(E' \rightarrow E) \varphi(E') dE' + S(E). \quad /1.2/$$

Из этого интегрального уравнения, зная индикатрису рассеяния $\sigma(E' \rightarrow E)$, являющуюся ядром интегрального уравнения, можно определить спектр тепловых нейтронов $\varphi(E)$. Источники считаются заданными и равными:

$$S(E) = \int_{E_m}^{\infty} \sigma(E' \rightarrow E) F(E') dE', \quad /1.3/$$

где $F(E)$ - спектр замедляемых нейтронов /спектр Ферми/. Индикатрисса рассеяния $\sigma(E' \rightarrow E)$ в области замедления отлична, конечно, от индикатриссы в области термализации, хотя они и обозначаются одинаковым образом.

Относительно энергии E_m , которая отделяет область термализации от области замедления, предполагается, что она достаточно велика, чтобы рассеяние, происходящее в интервале $0 - E_m$, не могло перебросить нейтрон в область замедления. Обычно для этого достаточно принять $E_m \approx 10 \text{ кТ}$. К этому вопросу вернемся в § 6.

Если проинтегрируем уравнение /1.2/ по E , тогда получим условие сохранения нейтронов:

$$\int_0^{E_m} \sigma_a(E) \varphi(E) dE - \int_0^{E_m} S(E) dE = \int_0^{E_m} dE \int_0^{E_m} \sigma(E' \rightarrow E) \varphi(E') dE' - \int_0^{E_m} \varphi(E) dE \int_0^{E_m} \sigma(E \rightarrow E') dE' = 0.$$

Здесь мы воспользовались соотношением /1.1/ для эффективного сечения рассеяния.

Следовательно имеем

$$\int_0^{E_m} \sigma_a(E) \varphi(E) dE = \int_0^{E_m} S(E) dE. \quad /1.4/$$

Это уравнение выражает тот факт, что полное число нейтронов источника равно числу поглощенных нейтронов в интервале $0 - E_m$ /в интервале замедления нет поглощения/. Это условие, налагаемое на решение интегрального уравнения^{x/}. Второе дополнительное условие, которому должно удовлетворять ядро интегрального уравнения /1.2/, это, так называемое, условие детального равновесия:

$$\sigma(E \rightarrow E') M(E) = \sigma(E' \rightarrow E) M(E'), \quad /1.5/$$

где $M(E) = \text{Const} \left(\frac{E}{kT}\right)^2 e^{-E/kT}$ - распределение Максвелла для потока нейтронов. Это условие является выражением состояния равновесия тепловых нейтронов со средой при отсутствии поглощения. Оно является гарантией того, что в предельном случае отсутствия поглощения /и источников/, рассматриваемые нейтроны достигнут теплового равновесия со средой.

Действительно, пусть $S = 0$ и $\sigma_a = 0$, тогда имеем

$$\int_0^{E_m} \sigma(E' \rightarrow E) \varphi(E') dE' - \varphi(E) \int_0^{E_m} \sigma(E \rightarrow E') dE' = 0$$

причем использовано определение $\sigma_s(E)$ по /1.1/. Если воспользуемся условием равновесия /1.5/, то будем иметь

$$\int_0^{E_m} \sigma(E \rightarrow E') \left[\frac{\varphi(E')}{M(E')} - \frac{\varphi(E)}{M(E)} \right] M(E) dE' = 0. \quad /1.2'/$$

^{x/} Оно должно выполняться при любом захвате и источниках.

Так как $\sigma(E \rightarrow E')$, $\varphi(E)$ и $M(E)$ величины существенно положительные, то отсюда следует:

$$\frac{\varphi(E')}{M(E')} = \frac{\varphi(E)}{M(E)} = \text{const.} = 1.$$

Действительно, обозначив для удобства $\varphi/M = \psi$, перепишем уравнение /1.2'/ в виде:

$$\int_0^{E_m} \sigma(E \rightarrow E') \psi(E') dE' = \psi(E) \int_0^{E_m} \sigma(E \rightarrow E') dE' = \psi(E) \sigma_s(E) \quad /1.2''/$$

или
$$\int_0^{\infty} \frac{\sigma(E \rightarrow E')}{\sigma_s(E)} \psi(E') dE' = \psi(E).$$

Но $\frac{\sigma(E \rightarrow E')}{\sigma_s(E)} dE'$, как было уже отмечено, есть вероятность рассеяния нейтрона в интервал dE' и стало быть имеем условие нормировки /1.1'/:

$$\int_0^{\infty} \frac{\sigma(E \rightarrow E')}{\sigma_s(E)} dE' = 1.$$

Следовательно при этом условии, уравнение /1.2''/ имеет единственное решение: $\psi(E) = \psi(E') = 1$. Следовательно, для бесконечной непоглощающей среды без источников спектр нейтронов является максвелловским, независимо от вида индикатриссы рассеяния $\sigma(E' \rightarrow E)$.

Возможен еще один случай, когда нейтроны принимают максвелловское распределение независимо от вида $\sigma(E' \rightarrow E)$, а именно, когда источники имеют равновесное распределение. Пусть $S(E) = \sigma_a(E) M(E)$, тогда из условия сохранения нейтронов /1.4/ следует:

$$\int_0^{E_m} \sigma_a(E) \varphi(E) dE = \int_0^{E_m} \sigma_a(E) M(E) dE,$$

откуда $\varphi(E) = M(E)$.

Итак, не поглощение, вообще говоря, само по себе является причиной того, что нейтроны не достигают равновесного распределения; но тот факт, что источники не создают равновесного распределения.

На практике всегда имеем и поглощение и источники, излучающие нейтроны не по равновесному распределению, и поэтому действительный спектр нейтронов будет отличным от спектра Максвелла. Спектр зависит от поглощения, от источников и от индикатриссы рассеяния, которая, в свою очередь, зависит от массы, температуры и химической связи ядер замедлителя. Так как энергия связи атомов в молекулах порядка 1 эв., то при такой энергии нейтронов нельзя рассматривать ядра уже как свободные; процесс замедления существенно усложняется. Эффект химической связи зависит от химического строения замедлителя, в особенности от вибрационных и вращательных энергетических уровней, так как нейтрон при столкновении будет обмениваться энергией с атомом, входящим в состав молекулы или кристалла. Фундаментальной особенностью эффекта химической связи является квантованный обмен энергией нейтрона с атомом. Это ведет к сложному изменению эффективного сечения рассеяния с энергией нейтрона. Если энергия нейтрона $E < \hbar\omega$, тогда неупругое рассеяние с возбуждением молекул невозможно / $\hbar\omega$ квант энергии колебательного движения/, и тогда молекула проявляет себя как единая жесткая система, поэтому следует рассматривать столкновение нейтрона не с отдельным ядром, но с молекулой в целом. Вследствие этого имеем, во-первых, уменьшение средней относительной потери энергии нейтрона на одно упругое столкновение $\xi / \xi = 2 \frac{m}{M} = \frac{4E}{E}$, где M масса рассеивающего центра, которая возрастает, ибо вместо массы атома нужно взять массу молекулы/, и, во-вторых, увеличение эффективного сечения рассеяния по сравнению с эффективным сечением рассеяния свободного атома согласно формуле Ферми:

$$\sigma_0 = \left(\frac{A+1}{A}\right)^2 \sigma_f,$$

где σ_0 - сечение рассеяния связанного ядра, σ_f - сечение рассеяния свободного ядра, $A = M/m$ - массовое число.

Для водорода сечение рассеяния в воде или парафине возрастает в 4 раза. Для тяжелых ядер этот эффект имеет меньшее значение, частично, из-за того, что $\left(\frac{A+1}{A}\right)^2 \rightarrow 1$ с ростом A , частично потому, что умень-

шается частота колебаний при возрастании A и, следовательно, $\hbar\omega$ не будет уже значительно превышать E .

Для легких элементов величина сечения испытывает скачкообразное изменение с энергией. Оно возрастает, когда энергия нейтрона не равна $n\hbar\omega$ и уменьшается до значения σ_f , когда энергия нейтрона равна $n\hbar\omega$. Но не всякое столкновение ведет к возбуждению молекулы, даже когда энергия нейтрона достаточна для этого. Тогда столкновение можно рассматривать как упругое. /Рис.1/. Кроме того, в отличие от рассеяния свободными ядрами, рассеяние связанными атомами анизотропно. Так как связи атомов в молекуле различны по различным направлениям /например, в случае H_2O колебания вдоль O-H происходят с энергией 0,4 эв в направлении же перпендикулярном - с энергией $\sim 0,2$ эв/, то и вероятность рассеяния зависит от направления. Другой причиной изменения углового распределения нейтронов является рост массы рассеивателя, обусловленный химической связью. Например, свободные протоны рассеивают нейтроны под углом не больше 90° , тогда как протоны, связанные в молекулах, способны рассеивать нейтроны под любыми углами вплоть до 180° .

Определим условие применимости теории свободного атома. Средняя потеря энергии на одно столкновение равна $\xi \cdot E$, где E энергия нейтрона до столкновения, ξ - средняя логарифмическая потеря энергии на одно столкновение. Действительно, число столкновений n , в результате которых энергия нейтрона изменяется с E_0 до E_n , равно

$$n = \frac{1}{\xi} \ln \frac{E_0}{E_n},$$

отсюда
$$E_n = E_0 e^{-n\xi}.$$

Дифференцируя, получаем $dE_n = -\xi E_n \cdot dn$ и, полагая $dn = 1$, имеем требуемое соотношение.

Итак, можно сформулировать условие: атом можно считать свободным, если $\xi \cdot E \gg \omega$, или $\xi \cdot kT \gg \omega$, ибо $E \gg kT$ ($k=1$).

Следовательно, если это условие выполнено, тогда атомы замедлителя можно считать свободными, а замедлитель рассматривать как одноатомный газ.

В случае, когда замедлителем является твердое тело, тогда проявляются кристаллические эффекты. При рассеянии нейтронов в кристаллах возможны как упругие, так и неупругие столкновения. При неупругих столкновениях происходит обмен фононами между нейтроном и кристаллом. При упругих столкновениях не меняется ни состояние кристалла, ни энергия нейтрона, изменяется только направление движения нейтрона в соответствии с формулой Брэгга:

$$2a \sin \vartheta = n\lambda,$$

где $\lambda = \frac{2\pi}{p}$ - длина волны нейтрона.

Поскольку максимальная частота дебаевского спектра в кристаллах определяется температурой Дебая θ ($\omega = k\theta$), то в случае кристалла условие, что атом можно считать свободным при рассеянии нейтронов, можно представить в виде

$$\xi \cdot kT \gg k\theta \quad \text{или} \quad \xi T \gg \theta.$$

Это условие гарантирует, что направления рассеяния по формуле Брэгга расположены так тесно одно к другому, что в среднем угол рассеяния будет такой же, как для свободного атома; при столкновении нейтрона с атомом возможно любое направление рассеяния, что свойственно свободному атому. Тогда кристалл можно считать агрегатом свободных атомов.

Если $\lambda \ll 2a$, то для последовательных углов рассеяния получаем из формулы Брэгга $\sin \vartheta_{n+1} - \sin \vartheta_n \ll 1$, следовательно углы ϑ_{n+1} и ϑ_n имеют очень близкие значения.

Поскольку далее $\lambda = \frac{2\pi}{(2kT)^{1/2}}$, то условие $\lambda \ll 2a$ дает $\frac{2\pi}{(2kT)^{1/2}} \ll 2a$, где массу нейтрона полагаем равной 1.

Амплитуда колебания ядра в состоянии $n=1$, равная $\left(\frac{2}{A\omega}\right)^{1/2}$, где A - массовое число, всегда меньше постоянной решетки a . Следовательно, $2a \gg \left(\frac{2}{A\omega}\right)^{1/2} \approx \lambda \left(\frac{kT}{A\omega}\right)^{1/2}$. Учитывая, что $\xi \cdot A = 2$ условие $\lambda \ll 2a$ получим, если $\xi kT \gg \omega$.

Итак, условие $\xi \cdot kT \gg \omega$ дает право, как в случае молекул, так и в случае твердого тела, рассматривать замедлитель как состоящий из свободных атомов и применять теорию одноатомного газа. Модель одноатомного газа неплохо отражает действительное состояние в случае больших температур, но для обычных температур эта модель не подходит, поэтому необходимо учесть химическую связь и кристаллические эффекты.

Сказанное относительно условий рассеяния в кристаллах справедливо для упругого рассеяния, когда ядра не испытывают отдачи, что предполагает бесконечную массу ядер. На самом деле это, конечно, не так, и поэтому нужно учесть взаимный обмен энергией между нейтроном и ядром, которая затем переходит в энергию колебаний решетки. Вопросы неупругого рассеяния в кристаллах будут рассмотрены в § 7.

Условие $\xi \cdot kT \gg k\theta$ для кристаллов было подтверждено экспериментально Брокгаузом и Харстом [3]; при температуре T , больше температуры Дебая θ , кристалл можно рассматривать как агрегат свободных атомов.

Уравнение /1.2/ можно переписать иначе, а именно, объединив член $S(E)$ с интегралом, потребовав, однако, чтобы для $E \gg kT$ поток нейтронов $\varphi(E)$ совпадал со спектром Ферми $F(E)$.

Тогда имеем

$$\sigma_a(E) \varphi(E) = \int_0^{\infty} \sigma(E' \rightarrow E) \varphi(E') dE' - \varphi(E) \int_0^{\infty} \sigma(E \rightarrow E') dE'$$

Введя плотность замедления $q(E)$

$$\begin{aligned} \frac{dq}{dE} &= \int_0^{\infty} \sigma(E' \rightarrow E) \varphi(E') dE' - \varphi(E) \int_0^{\infty} \sigma(E \rightarrow E') dE' = \\ &= \int_0^{E_m} \sigma(E' \rightarrow E) \varphi(E') dE' + \int_{E_m}^{\infty} \sigma(E' \rightarrow E) F(E') dE' - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -\varphi(E) \int_0^{E_m} \sigma(E \rightarrow E') dE' - F(E) \int_{E_m}^{\infty} \sigma(E \rightarrow E') dE' = \\
 & = \int_0^{E_m} \sigma(E' \rightarrow E) \varphi(E') dE' - \varphi(E) \int_0^{E_m} \sigma(E \rightarrow E') dE' + S(E),
 \end{aligned}$$

запишем уравнение /1.2/ в виде:

$$\frac{dq}{dE} = \sigma_a(E) \varphi(E). \quad /1.6/$$

Если источники S - замедляемые нейтроны и нет других внешних источников, то уравнение /1.6/ справедливо для бесконечной среды.

Отсюда получаем

$$q(E) = \int_0^E \sigma_a(E) \varphi(E) dE. \quad /1.7/$$

Следовательно, плотность замедления, определяемая как число нейтронов, замедленных в 1 сек в 1 см^3 , ниже энергии E , равна полному числу поглощенных нейтронов с энергиями меньше E . В случае, если имеются внешние источники $S(E)$, уравнение /1.6/ переходит в уравнение

$$\frac{dq}{dE} = \sigma_a(E) \varphi(E) - S(E). \quad /1.8/$$

§ 2. Одноатомный газ

Рассмотрим рассеяние нейтронов атомами или молекулами, обладающими только трансляционными степенями свободы. Применим здесь теорию возмущений в борновском приближении. Возникает трудность при применении этого приближения, так как энергия нейтрона порядка 1 эв, в то время, как энергия возмущения, которой является потенциал взаимодействия между нейтроном и

нуклоном в ядре, порядка 8 Мэв. Ферми /4/ обошел эту трудность при помощи следующего рассуждения, приводимого здесь в сокращенном виде. Необходимо учесть тот факт, что для нейтронов малой энергии, а, следовательно, большой длины волны, рассеяние нечувствительно к форме потенциала. Рассеяние определяется длиной рассеяния a согласно простому соотношению $\sigma = 4\pi a^2$.

Следовательно, нужно изменить потенциал взаимодействия между нейтроном и ядром таким образом, чтобы можно было применить теорию возмущения. А именно: возьмем потенциал, радиус действия которого больше радиуса действия ядерных сил σ , но имеющий глубину меньше энергии нейтрона, так чтобы длина рассеяния осталась без изменения. Введенный таким образом псевдопотенциал Ферми имеет вид /Приложение 1/.

$$V(\vec{r}_n) = \frac{2\pi}{m} a_k \delta(\vec{r}_n - \vec{r}_k), \quad /2.1/$$

где m - масса нейтрона, a_k - длина рассеяния \vec{r}_n и \vec{r}_k радиус вектор нейтрона и соответственно ядра в лабораторной системе L . Полный потенциал взаимодействия нейтрона с молекулой будет:

$$V(\vec{r}_n) = \frac{2\pi}{m} \sum_{\nu=1}^N a_\nu \delta(\vec{r}_n - \vec{r}_\nu). \quad /2.2/$$

Эффективное поперечное сечение рассеяния в лабораторной системе L в приближении Борна будет /полагаем $\hbar=1$ /

$$\sigma_{fi}(\theta) = \left(\frac{m}{2\pi} \right)^2 \frac{k}{k_0} \left| \langle \psi_f | \int e^{i(\vec{k}-\vec{k}_0)\vec{r}_n} V(\vec{r}_n) d\vec{r}_n | \psi_i \rangle \right|^2,$$

где \vec{k}_0, \vec{k} импульс нейтрона до и после рассеяния, ψ_i, ψ_f волновые функции молекулы в начальном и конечном состояниях, θ угол рассеяния.

Если ввести вектор $\vec{x} = \vec{k} - \vec{k}_0$, подставить потенциал $V(\vec{r}_n)$ в виде /2.2/ и избавиться от δ - функций путем интегрирования по \vec{r}_n , то сечение рассеяния примет вид:

$$\sigma_{fi}(\theta) = \sum_{\nu\nu'} a_\nu a_{\nu'} \frac{k}{k_0} \langle \psi_i | e^{i\vec{x}\vec{r}_\nu} | \psi_f \rangle \langle \psi_f | e^{-i\vec{x}\vec{r}_{\nu'}} | \psi_i \rangle.$$

Просуммируем теперь по конечным состояниям рассеивающей молекулы

$$\sigma_i(\theta) = \sum_f \sigma_{fi}(\theta) = \sum_f \int_{-E}^{\infty} \delta(E_i - E_f - \epsilon) d\epsilon \sigma_{fi}(\theta). \quad /2.3/$$

Интеграл гарантирует закон сохранения энергии во время соударения, $\epsilon = \frac{1}{2m} (k^2 - k_0^2) = E_i - E_f$ - энергия обмена; E_i и E_f - начальная и конечная энергия молекулы, $E = \frac{k_0^2}{2m}$ - начальная энергия нейтрона, причем очевидно, что $\epsilon \gg -E$. В дальнейшем используем математический формализм, развитый в работе Земаха и Глаубера /5/.

Чтобы произвести суммирование в /2.3/, введем преобразование Фурье δ -функции

$$\delta(E_i - E_f - \epsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(E_i - E_f - \epsilon)t} dt.$$

Тогда

$$\begin{aligned} \sigma_i(\theta) &= \frac{1}{2\pi} \sum_f \int_{-E}^{\infty} d\epsilon \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\epsilon t} e^{i(E_i - E_f)t} \sigma_{fi}(\theta) = \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_f \sum_{\nu\nu'} a_\nu a_{\nu'} \int_{-E}^{\infty} d\epsilon \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{k}{k_0} e^{-i\epsilon t} \langle \psi_i | e^{i\mathbf{H}t} e^{i\vec{x}\vec{r}_\nu} e^{-i\mathbf{H}t} | \psi_f \rangle \cdot \\ &\quad \cdot \langle \psi_f | e^{-i\vec{x}\vec{r}_{\nu'}} | \psi_i \rangle. \end{aligned}$$

Здесь мы воспользовались тем, что $e^{-i\mathbf{H}t} \psi_f = e^{-iE_f t} \psi_f$,

где \mathbf{H} - гамильтониан молекулы. Теперь можно просуммировать по конечным состояниям, предположив, что они образуют полную систему

$$\sum_f |\psi_f\rangle \langle \psi_f| = 1.$$

Итак, имеем:

$$\sigma_i(\theta) = \frac{1}{2\pi} \sum_{\nu\nu'} a_\nu a_{\nu'} \int_{-E}^{\infty} d\epsilon \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-i\epsilon t} \frac{k}{k_0} \langle \psi_i | e^{i\mathbf{H}t} e^{i\vec{x}\vec{r}_\nu} e^{-i\mathbf{H}t - i\vec{x}\vec{r}_{\nu'}} | \psi_i \rangle. \quad /2.4/$$

Таким образом, мы получили операторную формулировку для приближения Борна с использованием псевдопотенциала Ферми.

Дифференциальное поперечное сечение, связанное с обменом энергией ϵ , получим из /2.4/

$$\sigma_i(\theta, \epsilon) = \frac{k}{2\pi k_0} \sum_{\nu\nu'} \alpha_\nu \alpha_{\nu'} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\epsilon t} \langle \psi_i | e^{i\mathbf{H}t} e^{i\vec{x}\vec{r}_\nu} e^{-i\mathbf{H}t} e^{-i\vec{x}\vec{r}_{\nu'}} | \psi_i \rangle$$

$$\sigma_i(\theta) = \int_{-E}^{\infty} \sigma_i(\theta, \epsilon) d\epsilon. \quad /2.5/$$

Дальше убедимся, что нет необходимости знать явную форму начальных молекулярных функций ψ_i .

Можем теперь применить два метода для того, чтобы упростить произведение операторов, а именно:

1. Можно считать, что оператор \vec{r}_ν - функция времени и удовлетворяет уравнению движения Гейзенберга

$$i \frac{d\vec{r}_\nu(t)}{dt} = \vec{r}_\nu(t) \cdot \mathbf{H} - \mathbf{H} \cdot \vec{r}_\nu(t).$$

Тогда $\vec{r}_\nu(t) = e^{i\mathbf{H}t} \vec{r}_\nu e^{-i\mathbf{H}t}$, и в /2.4/ будет входить выражение $\langle \psi_i | e^{i\vec{x}\vec{r}_\nu(t)} e^{-i\vec{x}\vec{r}_{\nu}(0)} | \psi_i \rangle$;

$\vec{r}_{\nu}(0)$ не зависит от времени, но для симметрии пишем аргумент 0.

2. Функция $e^{i\vec{x}\vec{r}_\nu}$ действует на импульс как оператор перемещения /вследствие правила коммутации $\vec{r}\vec{p} - \vec{p}\vec{r} = i$ /: $e^{i\vec{x}\vec{r}} \vec{p} e^{-i\vec{x}\vec{r}} = \vec{p} - \vec{x}$ и аналогично для любой функции от \vec{p}

$$e^{i\vec{x}\vec{r}} \mathbf{H}(\vec{p}) e^{-i\vec{x}\vec{r}} = \mathbf{H}(\vec{p} - \vec{x}),$$

причем это справедливо только для непосредственного рассеяния, когда $\nu = \nu'$.

Следовательно, согласно этому методу после столкновения имеем эффективный гамильтониан, в котором вместо \vec{p}_v стоит $\vec{p}_v - \vec{x}$ /нейтрон получил от ядра v импульс \vec{x} /

$$H'_v = H(\vec{p}_v - \vec{x}, \vec{r}_v)$$

и тогда имеем

$$\langle \psi_i | e^{iH_v t} e^{-iH'_v t} | \psi_i \rangle.$$

Рассмотрим теперь одноатомный газ. В случае небольших плотностей можем не принимать во внимание возможности тройных соударений /столкновение рассеивающего атома с другим атомом во время рассеяния/. Поэтому можно считать атомы свободными, имеющими гамильтониан, включающий только кинетическую энергию и не учитывать интерференционные эффекты. Тогда

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2M} \quad H' = \frac{(\vec{p} - \vec{x})^2}{2M}, \quad v = v' = 1$$

\vec{p} - импульс, M - масса атома. Так как атомные функции ψ_i суть собственные функции энергии и импульса /в явном виде они нам не будут нужны/, то для средних значений операторов в /2.4/ получим

$$\begin{aligned} \langle \psi | e^{iHt} e^{-iH't} | \psi \rangle &= \langle \psi | e^{i\frac{\hat{p}^2}{2M}t} e^{-\frac{1}{2M} [p^2 - 2\vec{p}\vec{x} + x^2]it} | \psi \rangle = \\ &= e^{\frac{it}{2M} (2\vec{p}\vec{x} - x^2)} \end{aligned}$$

где \vec{p} - является уже собственным значением импульса атома.

Если существует тепловое равновесие, то распределение импульсов атомов газа следует формуле Больцмана:

$$f_T(p) = \frac{1}{(2\pi M k T)^{3/2}} e^{-p^2/2MkT}$$

Начальные состояния атомов необходимо усреднить по этому распределению:

$$\begin{aligned} \langle \psi | e^{iHt} e^{-iH't} | \psi \rangle_T &= \int e^{\frac{it}{2M} (2\vec{p}\vec{x} - x^2)} \frac{1}{(2\pi M k T)^{3/2}} e^{-p^2/2MkT} d^3p = \\ &= e^{-\frac{x^2}{2M} (it + t^2 k T)} \end{aligned} \quad /2.6/'$$

Будем обозначать в дальнейшем искомую величину математического ожидания, усредненную по равновесному распределению, через $\langle \chi \rangle_T$. Следовательно, для трансляционного движения соответствующая величина будет $\langle \chi^t \rangle_T$ и дается формулой /2.6'/.

Подставляя теперь в формулу /2.4/, получаем /см. приложение 2 //

$$\langle \sigma(\theta, \epsilon) \rangle_T = \frac{\alpha^2}{2\pi} \frac{k}{k_0} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-it(\epsilon + \frac{x^2}{2M}) - \frac{t^2 x^2 k T}{2M}} dt =$$

$$= \alpha^2 \left(\frac{M}{2\pi k T x^2} \right)^{1/2} \frac{k}{k_0} e^{-\frac{M}{2kT x^2} \left(\epsilon + \frac{x^2}{2M} \right)^2} \quad /2.6/$$

Итак, мы получили дифференциальное поперечное сечение рассеяния атомами газа или спектр нейтронов под углом θ .

Умножая /2.6/ на число атомов N и интегрируя по углам, получим макроскопическую величину - индикатриссу рассеяния:

$$\sigma(E \rightarrow E') = N \int \langle \sigma(\theta, \epsilon) \rangle_T d\Omega \quad /2.7/$$

$$\epsilon = E' - E, \quad x^2 = 2m[E' + E - 2\cos\theta(EE')^{1/2}]$$

$$k^2 = 2mE',$$

E' - конечная энергия нейтрона

$$k_0^2 = 2mE,$$

E - начальная энергия нейтрона

Для одноатомного газа индикатрисса рассеяния была первоначально получена Вигнером-Вилькинсом и носит название ядра Вигнера-Вилькинса. Работа этих авторов не опубликована, известно только, что они получили результат классическим путем, квантово-механическим же путем получил ее впервые Клейман /6/ /тоже неопубликованная работа/. Интегрирование в /2.7/ дает

$$\sigma(E \rightarrow E') \frac{2E}{\sigma_0 \hbar^2} = e^{x^2 - x'^2} \left[\operatorname{erf}(\eta x - \zeta x') + \operatorname{erf}(\eta x + \zeta x') \right] + \left. \begin{array}{l} \\ \\ \end{array} \right\} \begin{array}{l} E < E' \\ \\ \end{array} \quad /2.8/$$

$$+ \operatorname{erf}(\eta x' - \zeta x) - \operatorname{erf}(\eta x' + \zeta x)$$

$$= \operatorname{erf}(\eta x' - \zeta x) + \operatorname{erf}(\eta x' + \zeta x) + \left. \begin{array}{l} \\ \\ \end{array} \right\} \begin{array}{l} E > E' \\ \\ \end{array}$$

$$+ e^{x^2 - x'^2} \left[\operatorname{erf}(\eta x - \zeta x') - \operatorname{erf}(\eta x + \zeta x') \right]$$

где σ_0 - эффективное поперечное сечение рассеяния свободным атомом;
дальше обозначения следующие:

$$E = x^2 \cdot kT \quad \eta = \frac{1}{2} \frac{A+1}{\sqrt{A}}$$

$$E' = x'^2 \cdot kT \quad \zeta = \frac{1}{2} \frac{A-1}{\sqrt{A}}$$

$$A = \frac{M}{m} = \frac{\text{масса ядра}}{\text{масса нейтрона}}$$

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-u^2} du$$

интеграл ошибок Гаусса.

Таким образом, мы получили для наиболее простого случая одноатомного газа индикатрису рассеяния $\sigma(E \rightarrow E')$. Она имеет довольно сложный вид и решение интегрального уравнения /1,2/ относительно $\varphi(E)$ представляет трудную задачу. Можно попытаться получить, прежде всего, численные решения в двух крайних случаях: во-первых, для рассеяния водородом, когда $A=1$, и, во-вторых, для рассеяния тяжелыми атомами, когда $\mu = 1/A$ - малая величина. Рассмотрим отдельно эти два случая, так как они играют важную роль в дальнейших более сложных проблемах.

Рассмотрим сначала случай рассеяния водородом; оказывается, что интегральное уравнение /1.2/ можно свести к дифференциальному уравнению второго порядка. Если ввести величину $\Phi(E) = \frac{\varphi(E)}{\sqrt{M(E)}}$, то ядро интегрального уравнения $\sigma(E' \rightarrow E)$ становится симметричным ядром, которое, как подметили Вигнер и Вилькинс, имеет вид функции Грина дифференциального уравнения 11 порядка:

$$\left[\frac{d}{dx} p(x) \frac{d}{dx} + R(x) \right] \left[V(x) + \frac{x\sigma_a}{\sigma_0} \right] \Phi(x) + \frac{4}{\sqrt{\pi}} \Phi(x) = 0,$$

/2.8/

где $\frac{1}{p(x)} = e^{-x^2} + \sqrt{\pi} \cdot x \operatorname{erf}(x)$

$$\frac{V(x)}{x} = \left[1 + \frac{1}{2x^2} \right] \operatorname{erf}(x) + \frac{e^{-x^2}}{x\sqrt{\pi}} = \frac{\sigma_s(E)}{\sigma_0}$$

$$R(x) = p(x) \left[p(x) e^{-x^2} - x^2 \right].$$

Это уравнение получено при следующих предположениях о бесконечном однородном замедлителе: 1/ масса атомов замедлителя равна массе нейтронов, 2/ атомы замедлителя свободны, 3/ они подчиняются максвелловскому распределению, 4/ эффективное поперечное сечение рассеяния постоянно, 5/ эффективное поперечное сечение поглощения изменяется обратно пропорционально скорости нейтрона. При выполнении этих условий интегральное уравнение /1.2/ можно преобразовать в дифференциальное уравнение /2.8/. Решение этого уравнения в виде степенного ряда можно получить для очень малых энергий нейтрона, а затем продолжить его на тепловые энергии с помощью метода конечных разностей. В последнее время Амстер /7/ рассчитал решение этого уравнения на быстродействующей счетной машине и сравнил результаты с экспериментальными данными, полученными Пулем /8/ для воды. Хотя для протонов, связанных в воде, условия 2,3 и 4 не выполняются, однако имеется согласие между теорией и экспериментом. Подробнее этот вопрос будет рассмотрен в дальнейшем. Переходя ко второму случаю, когда атомы тяжелы, нужно заметить следующее. Из теории замедления известно, что если ядро интегрального уравнения разложить в ряд по степеням $m = \frac{m}{M} = \frac{1}{A}$, то можно получить уравнение возраста Ферми, оборвав разложение на членах порядка m и σ_a/σ_s . Существование простой связи между потоком нейтронов и плотностью замедления в этом приближении делает его очень полезным, как в качестве расчетного метода в случае сложной геометрии рассматриваемой системы, так и в качестве орудия в углублении понимания физического механиз-

ма многих явлений, наблюдающихся в более сложных проблемах точной теории замедления. Такой подход возможен и в теории термализации, если атомы замедлителя достаточно тяжелы и если можно пренебречь химической связью и рассматривать замедлитель в качестве агрегата свободных атомов. Такой подход находим у Вилькинса в 1944 г. Он развил метод для бесконечной однородной среды и вывел дифференциальное уравнение второго порядка в предельном случае большой массы атомов замедлителя. Затем решил это уравнение для двух крайних случаев большой и малой энергии нейтрона и обсудил способ перехода от одного решения к другому.

В дальнейшем при выводе уравнения будем следовать более поздним работам [9,10], так как работы Вигнера-Зилькинса не опубликованы.

Итак предположим, что в интервале $0 - E_m$ поперечное сечение рассеяния $\sigma_s(E) = \sigma_s(kT) = \sigma_s = \text{const.}$, а поперечное сечение поглощения обратно пропорционально скорости.

$$\sigma_a(E) = \frac{\sigma_a(kT)}{\sqrt{E}} \sqrt{kT} = \frac{\sigma_a(kT)}{\sqrt{e}},$$

где $e = E/kT$, $\sigma_a(E)\sqrt{e} = \sigma_a(kT)$;
 $\sigma_a(E) \cdot x = \sigma_a(kT)$.

Введем далее величину $x = \sqrt{e}$, и величину $\Delta = \frac{2\sigma_a(E)}{\mu\sigma_s(E)}\sqrt{e}$, которая для поглощения по закону $1/v$ не зависит от x ;

$$\Delta = \frac{2\sigma_a(E)}{\mu\sigma_s} \cdot x = \frac{2\sigma_a(kT)}{\mu\sigma_s} = \frac{4\sigma_a(kT)}{3\sigma_s} \quad (2.10)$$

где $\xi = 2\mu$.

Величина Δ является отношением двух наиболее характерных для замедлителя величин, а именно поперечного сечения поглощения для энергии kT и замедляющей способности для той же энергии kT . Замедлитель, вообще говоря, характеризуется четырьмя параметрами σ_s , σ_a , kT и A ; энергетическое же распределение зависит от двух любых параметров, например,

Δ и A /если энергию будем измерять в единицах kT , т.е. введем безразмерную величину x /.

Для определения индикатриссы рассеяния, необходимо выполнить интегрирование по углам в формуле /2.7/

$$\begin{aligned} \sigma(E \rightarrow E') &= 2\pi N \int \langle \sigma(\theta, \epsilon) \rangle_T \sin \theta d\theta = \\ &= N a^2 \left(\frac{E'}{E}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-1}^{+1} dz e^{-i\epsilon t} e^{-\frac{x^2}{2M}(it+t^2 kT)}, \end{aligned}$$

где $dz = d\cos\theta$, $\epsilon = E' - E = \frac{1}{2m}(k^2 - k_0^2)$.

Введем эффективное поперечное сечение σ_0 вместо длины рассеяния "а", согласно формуле $\sigma_0 = 4\pi a^2 N$ и $\mu = m/M$,

$$\sigma(E \rightarrow E') = \frac{\sigma_0}{4\pi} \left(\frac{E'}{E}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-i\epsilon t} \int_{-1}^{+1} dz e^{-\mu[E'+E-2z(E'E)^{1/2}](it+t^2 kT)}.$$

/2.11/

Перепишем уравнение /1.2/, полагая верхний предел $E_m \rightarrow \infty$ в виде:

$$\sigma_a(E) \psi(E) = \int_0^{\infty} dE' \sigma(E \rightarrow E') [\psi(E') - \psi(E)],$$

где функция $\psi(E) = \varphi(E)/M(E)$ дает отклонение от спектра Максвелла $M(E)$.

Предположим теперь, что $\psi(E)$ меняется медленно в интервале изменения $\sigma(E \rightarrow E')$, и разложим ее в ряд Тейлора:

$$\psi(E') = \psi(E) + (E' - E) \frac{d\psi}{dE} + \frac{1}{2} (E' - E)^2 \frac{d^2\psi}{dE^2} + \dots$$

Подставляя это разложение в интегральное уравнение для $\psi(E)$ получим:

$$\sigma_a(E) \psi(E) = \left(\frac{d\psi}{dE}\right) \int_0^{\infty} \sigma(E \rightarrow E') (E' - E) dE' + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2\psi}{dE^2}\right) \int_0^{\infty} \sigma(E \rightarrow E') (E' - E)^2 dE' + \dots$$

или

$$\frac{\sigma_a(E)}{\sigma_s(E)} \psi(E) = \overline{\Delta E} \frac{d\psi}{dE} + \frac{1}{2} \overline{\Delta E^2} \frac{d^2\psi}{dE^2} + \dots,$$

/2.13/

где $\sigma_s \cdot \overline{\Delta E^n} = \int_0^{\infty} \sigma(E \rightarrow E') (E' - E)^n dE'$

является моментами индикатриссы рассеяния. Для вычисления моментов разложим прежде всего экспоненциальную функцию в /2.11/ в ряд по степеням μ и ограничимся членами порядка μ .

Параметром разложения является величина $i\mu Et + \mu E t^2 kT$. Согласно Вику /11/ продолжительность столкновения t порядка $1/E$; следовательно, параметр разложения будет $i\mu + \mu kT/E$. Чтобы разложение можно было оборвать на первом члене, нужно предположить, что $\mu \ll 1$ и $\mu kT/E \ll 1$.

Последнее условие можно представить как отношение средней тепловой скорости атома w_T к скорости нейтрона V :

$$\mu \frac{kT}{E} = \frac{m}{M} \frac{kT}{E} = \frac{w_T^2}{V^2} \ll 1$$

Это значит, что средняя скорость теплового движения атома должна быть малой по сравнению со скоростью нейтрона. Таким образом, индикатрисса рассеяния определяется двумя физическими параметрами: отношением масс $\mu = \frac{m}{M}$ и отношением скоростей.

Применяя это разложение, предполагаем, следовательно, что $\mu \ll 1$ и скорость нейтрона больше скорости атомов, энергия же нейтрона может быть порядка энергии атома.

Тогда /2.11/ принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \sigma(E \rightarrow E') &= \frac{\sigma_0}{4\pi} \left(\frac{E'}{E}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-1}^{+1} dz e^{-it(E'-E)} \\ &- \frac{\sigma_0}{4\pi} \left(\frac{E'}{E}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-1}^{+1} dz e^{-it(E'-E)} \mu [E'+E - 2z(EE')^{1/2}] (it + t^2 kT) = \\ &= \sigma_0 \left(\frac{E'}{E}\right)^{1/2} \delta(E'-E) + \mu \sigma_0 \left(\frac{E'}{E}\right)^{1/2} (E'+E) \left[\delta'(E'-E) + kT \delta''(E'-E) \right], \end{aligned} \quad /2.12/$$

где использовано интегральное представление δ -функции и ее производных:

$$\delta(E'-E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-it(E'-E)} dt ; \quad \delta^{(n)}(E'-E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} (-it)^n e^{-it(E'-E)} dt.$$

Определим моменты, используя вид $\sigma(E \rightarrow E')$ из /2.12/. С этой целью прежде всего представим коэффициент при производных δ -функции в виде ряда

$$f(E, \epsilon) = (E'+E) \left(\frac{E'}{E}\right)^{1/2} = 2E \left(1 + \frac{\epsilon}{2E}\right) \left(1 + \frac{\epsilon}{2E} - \frac{1}{8} \frac{\epsilon^2}{E^2} + \dots\right),$$

где $\epsilon = E' - E$.

Предполагаем, что изменение энергии нейтрона при столкновении не является большим и поэтому можем ограничиться членами $\sim \epsilon^2$. Тогда

$$f(E, \epsilon) = 2E \left(1 + \frac{\epsilon}{E} + \frac{\epsilon^2}{8E^2}\right).$$

Сначала определим σ_3 по формуле /1.1/

$$\sigma_3 = \int_0^{\infty} \sigma(E \rightarrow E') dE'$$

$$\sigma_3 = \sigma_0 \int_0^{\infty} \left(\frac{E'}{E}\right)^{1/2} \delta(E'-E) dE' + \mu \sigma_0 \int_{-E}^{\infty} f(E, \epsilon) \delta'(\epsilon) d\epsilon + \mu \sigma_0 kT \int_{-E}^{\infty} f(E, \epsilon) \delta''(\epsilon) d\epsilon.$$

Интегрируя по частям, имеем для интегралов следующие выражения:

$$\int_{-E}^{\infty} f(E, \epsilon) \delta'(\epsilon) d\epsilon = -f'(E, 0)$$

$$\int_{-E}^{\infty} f(E, \epsilon) \delta''(\epsilon) d\epsilon = 2f''(E, 0).$$

Тогда

$$\sigma_s = \sigma_0 - \mu \sigma_0 f'(E, 0) + \mu \sigma_0 kT f''(E, 0).$$

Но $f(E, 0) = 2E$; $f'(E, 0) = 2$; $f''(E, 0) = \frac{1}{2E}$,

и окончательно $\sigma_s = \sigma_0 \left(1 - 2\mu + \mu \frac{kT}{2E} \right) = \sigma_0 + O(\mu).$

Теперь определяем члены $\overline{\sigma_s \Delta E^n}$,
 $\epsilon \delta(\epsilon) = 0$, $\epsilon \delta'(\epsilon) = -\delta(\epsilon)$,

используя свойства δ -функции
и т.д.

$n=1$.

$$\begin{aligned} \overline{\sigma_s \Delta E} &= -\mu \sigma_0 \int_{-E}^{\infty} f(E, \epsilon) \delta(\epsilon) d\epsilon - 2\mu \sigma_0 kT \int_{-E}^{\infty} f(E, \epsilon) \delta'(\epsilon) d\epsilon = \\ &= -\mu \sigma_0 f(E, 0) + 2\mu \sigma_0 kT f'(E, 0) = 2\mu \sigma_0 (2kT - E). \end{aligned}$$

$n=2$.

$$\begin{aligned} \overline{\sigma_s \Delta E^2} &= \int_{-E}^{\infty} \left(\frac{E+\epsilon}{E} \right)^2 \epsilon^2 \delta(\epsilon) d\epsilon + \mu \sigma_0 \int_{-E}^{\infty} f(E, \epsilon) \epsilon^2 \delta'(\epsilon) d\epsilon + \\ &+ \mu \sigma_0 kT \int_{-E}^{\infty} f(E, \epsilon) \epsilon^2 \delta''(\epsilon) d\epsilon = 2\mu \sigma_0 kT \int_{-E}^{\infty} f(E, \epsilon) \delta(\epsilon) d\epsilon = \\ &= 2\mu \sigma_0 kT f(E, 0) = 4\mu \sigma_0 kT E. \end{aligned}$$

Моменты высшего порядка будут содержать высшие степени μ .

$$\overline{\sigma_s \Delta E^n} = \begin{cases} O(\mu^2) & \text{для } n = 3, 4. \\ O(\mu^3) & \text{для } n = 5, 6. \end{cases}$$

Итак, мы получили для первых моментов

$$\sigma_s = \sigma_0 + O(\mu)$$

$$\overline{\sigma_s \Delta E} = 2\mu \sigma_0 (2kT - E)$$

$$\overline{\sigma_s \Delta E^2} = 4\mu \sigma_0 E \cdot kT$$

Если отбросим члены со степенями μ больше первой, тогда получим

$$\overline{\Delta E} = 2\mu(2kT - E)$$

$$\overline{\Delta E^2} = 4\mu E kT$$

/2.14/

При пренебрежении тепловым движением атомов замедлителя можно получить по теории замедления для средней энергии на одно столкновение

$$\overline{E'} = E \frac{1+\alpha}{2}, \quad \text{где} \quad \alpha = \left(\frac{A-1}{A+1}\right)^2$$

Тогда
$$\frac{\overline{E'} - E}{E} = \frac{\overline{\Delta E}}{E} = \frac{\alpha - 1}{2} \approx \frac{1}{1 + \frac{A}{2}} \approx \frac{2}{A} \quad (A \gg 1)$$

С другой стороны, для средней логарифмической потери энергии имеем в том же приближении $A \gg 1$

$$\xi = \frac{2}{A} = 2\mu = \frac{\overline{\Delta E}}{E}$$

Из уравнения /2.14/ при $E \gg kT$

$$\overline{\Delta E} = E \cdot 2\mu = E \cdot \xi$$

Сравнивая это с /2.14/, можно учесть влияние теплового движения, полагая формально

$$\overline{\Delta E} = E \cdot \xi_T, \quad \xi_T = \xi \left(1 - \frac{2}{x^2}\right), \quad x^2 = E/kT$$

/2.14'/

Подставляя теперь /2.14/ в уравнение /2.13/, получим

$$\frac{\Sigma_a(E)}{2\mu\sigma_0} \psi(E) = (2kT - E) \frac{d\psi}{dE} + E kT \frac{d^2\psi}{dE^2}$$

/2.15/

Это же уравнение можно переписать при помощи безразмерной переменной

$e = E/kT$ следующим образом:

$$\frac{\sigma_a(e)}{2\mu\sigma_0} \psi(e) = (2 - e) \frac{d\psi(e)}{de} + e \frac{d^2\psi(e)}{de^2}$$

/2.16/

Если среда поглощает по закону $1/v$, то более удобно ввести переменную $x^2 = e$ и параметр Δ из /2.10/ который в этом случае независим от x .

Тогда имеем уравнение

$$\Delta \cdot \psi(x) = (3 - 2x^2) \frac{d\psi}{dx} + x \frac{d^2\psi}{dx^2}. \quad /2.17/$$

Уравнение /2.17/ исследовал Вилькинс для двух случаев: малые и большие значения x . В каждом случае имеется два независимых решения и нужно взять то, которое соответствует закону сохранения нейтронов. Для малых x имеющее физический смысл решение соответствует тому, чтобы для $x=0$ выполнялось условие равенства нулю плотности замедления $q(0) = 0$; это решение имеет вид: $\psi(x) = \sum a_n x^n$. Другое решение нужно отбросить, так как оно дает отрицательное значение $q(0)$. Для больших x нужно взять то решение, которое при $x \rightarrow \infty$ дает распределение Ферми и плотность замедления $q(\infty)$, не равную нулю.

Уравнение /2.17/ эквивалентно, как легко показать, следующему уравнению для плотности нейтронов $N(x)$, связанной с $\psi(x)$ соотношением $N(x) = x^2 e^{-x^2} \psi(x) = M(x) \psi(x)$,

$$x \frac{d^2 N(x)}{dx^2} + (2x^2 - 1) \frac{dN(x)}{dx} + (4x - \Delta) N(x) = 0. \quad /2.18/$$

Эквивалентные уравнения /2.15/-/2.18/ получены из интегрального уравнения /1, 2/ в предположении большой массы ядер замедлителя. Для $\sigma_a = \text{const}$ решением уравнения /2.18/ является вырожденная гипергеометрическая функция $F(\alpha, 2, e)$, где $\alpha = \sigma_a / 2m\sigma_0$. Однако на практике большинство замедлителей поглощает согласно закону $1/v$. Для численных расчетов Вилькинс преобразовал уравнение /2.17/ к нелинейному уравнению первого порядка путем подстановки $y = d \lg \psi / d \lg x$, что дает /предполагая независимость от энергии/

$$\frac{dy}{dx} = \Delta + 2\left(x - \frac{1}{x}\right)y - \frac{y^2}{x}. \quad /2.19/$$

В этих переменных

$$\psi(x) = \exp \int_0^x \frac{y dt}{t}.$$

и, следовательно, плотность нейтронов на единицу скорости равна

$$N(x) = x^2 e^{-x^2} \cdot \exp \left\{ \int_0^x \frac{y dt}{t} \right\}.$$

Величина $N(x)$ и поток нейтронов $\varphi(E)$ на единицу энергии совпадают с точностью до нормировки.

Уравнение /2.19/ можно решить численно, например, методом Рунге-Кутты; зная $\psi(x)$ найдем $N(x)$ или, что одно и то же, $\varphi(E)$. Для малых значений x ($x \ll 1$) Вилькинс нашел $y(x)$ в виде ряда по степеням x :

$$y_1(x) = \frac{\Delta}{3} x - \frac{\Delta^2}{36} x^2 + \frac{\Delta^3 + 36 \cdot \Delta}{270} x^3 + \dots,$$

для больших же значений x ($x \gg 1$) ряд имеет вид:

$$y_2(x) = 2x^2 - 4 + \frac{\Delta}{2} x^{-1} - 4x^{-2} + \frac{7\Delta}{4} x^{-3} + \dots$$

В предельном случае очень больших значений x ($x \rightarrow \infty$) имеем для функции $y(x)$

$$y_2(x) = 2x^2 - 4.$$

Тогда плотность нейтронов можно представить в следующем виде:

$$\int_0^x \frac{y_2 dt}{t} = \int_0^x \frac{2t^2 - 4}{t} dt = x^2 - 4 \ln x. \quad N(x) = x^2 e^{-x^2} \exp \left\{ \int_0^x \frac{y_2 dt}{t} \right\}.$$

Вычисление интеграла приводит к следующему результату:

$$\begin{aligned} N(x) &= x^2 e^{-x^2} \exp \left\{ \int_0^x \frac{y_2 dt}{t} \right\} = x^2 e^{-x^2} e^{x^2} e^{-4 \ln x} = \\ &= x^2 e^{-4 \ln x} = \frac{1}{x^2}. \end{aligned}$$

т.е., как и следовало ожидать, мы получили распределение Ферми для плотности нейтронов. В другом крайнем случае весьма малых значений x ($x \rightarrow 0$), имеем соответственно для функции y ; $y_1(x) = \frac{\Delta}{3} x$.

Тогда

$$\int_0^x \frac{y dt}{t} = \int_0^x \frac{\Delta}{3} dt = \frac{\Delta}{3} x$$

$$N(x) = x^2 e^{-x^2} e^{x^{4/3}} \approx x^2 e^{-x^2} \left[1 + \frac{\Delta}{3} x \right].$$

Следовательно, имеем спектр Максвелла для плотности нейтронов плюс небольшая добавка / в случае малого поглощения, т.е. малого Δ /.

Итак, уравнения /2.17/ и /2.18/ можно решить приближенно для разных предельных случаев, для малых или больших значений x или для малых и больших значений параметра поглощения Δ /помня при этом, что эти уравнения уже являются приближением интегрального уравнения в случае большой массы атомов замедлителя/. Остановимся теперь на поучительном примере малых значений параметра Δ , когда можно ожидать, что действительный спектр нейтронов будет немного отличаться от спектра Максвелла и попытаемся найти его при помощи теории возмущений, т.е. в виде суммы распределения Максвелла $M(E)$ плюс небольшая добавка.

С этой целью преобразуем дифференциальное уравнение /2.16/ в интегральное уравнение /которое, очевидно, не совпадает с первоначальным, исходным уравнением 1,2/.

$$\psi(e) = 1 + \int_0^e \frac{dz}{z^2} e^z \int_0^z dt \cdot t e^{-t} \frac{\sigma_a(t)}{2\mu\sigma_0} \psi(t) \quad /2.20/$$

Функция ψ есть, по определению, отклонения от спектра Максвелла, ибо $\psi = \varphi/M$, следовательно, интеграл учитывает отклонение от равновесного распределения /для малых значений параметра Δ /.

Для малых значений Δ можем применить для решения этого интегрального уравнения метод итерации; тогда с точностью до первой степени можем взять $\psi(t) = 1$ и учитывая поглощение по закону $1/v$ ($\sigma_a(t) = \sigma_a(kT)/\sqrt{t}$), имеем:

$$\psi(e) = 1 + \frac{\Delta}{4} \int_0^e \frac{dz}{z^2} e^z \int_0^z e^{-t} \sqrt{t} dt = 1 + \Delta \cdot Q(e)$$

/2.21/

$$Q(e) = \frac{1}{4} \int_0^e \frac{dz}{z^2} e^z \int_0^z e^{-t} \sqrt{t} dt.$$

Итак, действительно, спектр можно представить в случае малого поглощения в виде суммы распределения Максвелла плюс добавка, обусловленная поглощением

$$e\varphi(e) = e^2 e^{-e} [1 + \Delta \cdot Q(e)],$$

/2.22/

или

$$\varphi(E) = M(E) [1 + \Delta \cdot Q].$$

Метод представления спектра в виде такой суммы является, по-видимому, более надежным для расчета средних эффективных сечений, чем метод эффективной температуры, который будет рассмотрен в следующем параграфе. Оба эти метода можно однако применять только в случае небольшого отклонения от равновесного состояния. К сожалению, метод теории возмущений разработан до сих пор только для случая тяжелого одноатомного газа. Если сравнить кривые $E\varphi(E)$ для различных значений Δ , например, $\Delta = 0,1; 1; 5$, то можно заметить следующие закономерности. Для слабого поглощения в интервале энергии от 0 до 5 кТ, распределение, вообще говоря, имеет характер максвелловского распределения и постепенно переходит затем в распределение Ферми

$E\varphi(E) = \text{const}$. По мере роста поглощения поток нейтронов, подчиняющийся распределению Ферми становится сравнимым по величине с максимальным значением теплового потока, тепловой спектр передвигается к высшим энергиям и постепенно утрачивает свой квазиравновесный характер. В этом случае для $\Delta = 1$ существует еще зависимость спектра от температуры замедлителя, но уже значительно более слабая, чем для $\Delta = 0,1$. Для еще больших значений Δ горб распределения исчезает совершенно и $E\varphi(E)$ является уже монотонно возра-

стающей функцией энергии, стремясь к постоянному значению $E\varphi(E) = \text{const.}$ и уже не зависит от температуры замедлителя. Этот ход зависимости подтверждается экспериментом, о чем еще будет речь впереди. /Рис. 2./

Мы рассмотрели методы решения интегрального уравнения в двух предельных случаях: $A=1$ и большие значения A . Для замедлителей среднего массового числа не существует простых аналитических методов и необходимо применять непосредственно к интегральному уравнению численные методы решения. Имеются два подхода к вопросу в настоящее время, во-первых, метод итерации и, во-вторых, метод Монте-Карло.

При помощи метода итерации поступают следующим образом: исходим из пробной функции $\varphi^{(0)}(E)$, которую выбираем из физических соображений /например, можем взять решение, уже полученное при помощи модели тяжелого замедлителя/ и принимаем ее за решение интегрального уравнения /1,2/. Решение это должно удовлетворять добавочному условию сохранения нейтронов /1.4/, что позволяет определить нормировку функции $\varphi^{(0)}(E)$. При помощи уже пронормированного решения $\hat{\varphi}^{(0)}$ можем получить новое итерированное решение $\varphi^{(1)}$ и так далее, согласно схеме

$$\hat{\varphi}^{(k)} = \frac{\varphi^{(k)} \int_0^{E_m} S(E) dE}{\int_0^{E_m} \sigma_a(E) \varphi^{(k)}(E) dE}$$

$$\varphi^{(k+1)} = \frac{S(E) + \int_0^{E_m} \sigma(E' \rightarrow E) \hat{\varphi}^{(k)}(E') dE'}{\sigma_a(E) + \sigma_s(E)}$$

$$k = 0, 1, 2, \dots$$

На практике интегральное уравнение обычно заменяется системой линейных алгебраических уравнений, путем выбора N значений энергии в качестве точек сетки.

Метод этот был применен к разным конкретным проблемам, например, Нистли и Берманом /12/ к берилию, Броуном и Джонсом, а также Броуном /13/ для учета химической связи в H_2O и D_2O , Нелькин /14/ же модифицировал его и применил к исследованию кристаллического эффекта в берилии.

Второй метод, более физически наглядный - это метод Монте-Карло. В этом методе исследуются история жизни нейтрона, происходящие соударения с атомами, потери или приобретения энергии нейтроном и, наконец, поглощение. Много тысяч таких данных группируется и определяется плотность нейтронов в зависимости от энергии.

Работники Национальной Лаборатории в Ок-Ридже /Осборн и другие/ /15/ применили этот метод для модели одноатомного газа в широком интервале масс атомов замедлителя и параметра поглощения Δ . Таким образом, они проверили результаты Вигнера-Вилькинса для предельного случая тяжелого замедлителя и дали феноменологический рецепт для эффективной температуры, о чем будет идти речь дальше.

Недостатком метода Монте-Карло является слишком большое время, необходимое для получения результатов даже при употреблении математических машин. Поэтому кажется, что для бесконечной однородной среды метод итерации быстрее приводит к цели и имеет то преимущество, что может быть обобщен для учета химической связи. Метод Монте-Карло будет более подходящим для расчетов потока нейтронов, зависящего от координат.

§ 3. Температура нейтронов

В случае слабого поглощения имеем два метода для нахождения спектра нейтронов, которые можно применить в теории реакторов для нахождения средних эффективных сечений и которые достаточно просты в математическом отношении. Наиболее подходящим является рассмотренный выше метод теории возмущений. Второй метод - это метод эффективной температуры нейтронов. Предполагается, что распределение нейтронов приблизительно следует закону Максвелла, но с температурой, отличной от температуры среды, а именно выше температуры среды. Тот факт, что температура нейтронов должна быть выше температуры среды, следует из того, что приходящие нейтроны замедления имеют энергию выше энергии тепловых нейтронов. Далее, в § 8, мы рассмотрим явление, когда температура нейтронов ниже температуры среды. Изложим теперь способ введения эффективной температуры нейтронов в случае тяжелого

замедлителя, т.е. когда можно воспользоваться уравнением Вигнера-Вилькинса /10/.

Сперва установим зависимость между плотностью замедления и плотностью нейтронов.

Для этого воспользуемся определением плотности замедления /1.7/. Совершив переход от E к безразмерной переменной $x = \frac{v}{v_0} = \frac{v}{\sqrt{2kT}}$ и от потока $\varphi(E)$ к плотности нейтронов $N(x)$ /согласно соотношению $\varphi(E) = \frac{1}{v_0} N(x)$ /, получим:

$$q(x) = \int_0^x N(t) \cdot t \cdot \sigma_a(t) dt. \quad /3.1/$$

Далее проинтегрируем по x уравнение /2.18/ при условии $N(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow 0$.

Тогда

$$x N'(x) + 2(x^2 - 1) N(x) = \Delta \int_0^x N(t) dt. \quad /3.2/$$

При поглощении по закону $1/v$ имеем $\sigma_a(x) = \frac{\sigma_a}{x}$, следовательно из /3.1/ получаем

$$q(x) = \sigma_a \int_0^x N(t) dt = \frac{\xi \sigma_0}{4} \Delta \int_0^x N(t) dt \quad /3.3/$$

ибо $\sigma_a(kT) = \frac{\xi \sigma_0}{4} \Delta$ по определению параметра Δ .

Сравнивая теперь /3.2/ и /3.3/, находим

$$q(x) = \frac{1}{2} \xi \sigma_0 \left[\frac{1}{2} x N'(x) + (x^2 - 1) N(x) \right]. \quad /3.4/$$

В случае больших значений x , т.е. когда энергия нейтрона велика по сравнению с тепловой энергией замедлителя, /что имеет место в теории замедления/, этой последней величиной, т.е. тепловой энергией, можно пренебречь и тогда для нейтронов имеет место распределение Ферми $E F(E) = C$, откуда следует для плотности соотношение:

$$x^2 N(x) = C.$$

Дифференцируя это соотношение, получим $\frac{1}{2} x N'(x) = -N(x)$, что совместно с уравнением /3,4/ приводит к следующему асимптотическому значению плотности замедления:

$$q(x) = \frac{1}{2} \sigma_0 \xi x^2 N(x).$$

Используя для ξ формулу /2.14'/:

$$\xi = 2\mu \left(1 - \frac{2}{x^2}\right),$$

получаем для больших значений x :

$$q(x) = \mu \sigma_0 (x^2 - 2) N(x),$$

или, переходя к переменной $v = x v_0$, где $v_0 = \sqrt{2kT}$, T - температура среды:

$$q(v) = \mu \sigma_0 (v^2 - 2v_0^2) N(v).$$

/3.5/

Теперь предположим, что уравнение /3.5/ справедливо также и в случае скоростей, близких к тепловым скоростям, что, конечно, не совсем правильно, ибо оно получено при условии $v^2 \gg v_0^2$. Далее предположим, что спектр нейтронов можно представить с помощью распределения Максвелла с температурой T_n в интервале $0 < v < \gamma v_n$, и с помощью спектра Ферми в интервале $\gamma v_n < v$:

$$N(v) dv = \frac{4}{v\pi} \frac{v^2}{v_n^3} e^{-v^2/v_n^2} dv \quad 0 < v < \gamma v_n \quad /3.6/$$

$$\frac{dq}{dv} = N(v) \sigma_a(v) \cdot v \quad \gamma v_n < v \quad /3.7/$$

Введем $\sigma_a(v) \cdot v = \sigma_a(v_0) v_0 = \frac{3\sigma_0 v_0}{4} \Delta = \delta \sigma_0$,

где $\delta = \frac{\mu v_0}{2} \Delta$.

Тогда

$$\frac{dq}{dv} = \delta \sigma_0 N(v).$$

/3.7'/

Из уравнений /3.5/ и /3.7/ следует дифференциальное уравнение для $q(v)$;

$$q(v) = \frac{\mu}{\delta} (v^2 - 2v_0^2) \frac{dq}{dv}.$$

Интегрируя это уравнение, получим

$$\ln q = \frac{\delta}{2\sqrt{2}\mu v_0} \ln \frac{v_0\sqrt{2} - v}{v_0\sqrt{2} + v} = \alpha \ln \frac{v - \sqrt{2}v_0}{v + \sqrt{2}v_0};$$

$$\alpha = \frac{\delta}{2\sqrt{2}\mu v_0}; \text{ следовательно } q(v) = \left(\frac{v - \sqrt{2}v_0}{v + \sqrt{2}v_0} \right)^\alpha. \quad /3.8/$$

Теперь определим из уравнения /3.5/ плотность нейтронов:

$$N(v) = \frac{1}{\mu\sigma_0} \left(\frac{v - \sqrt{2}v_0}{v + \sqrt{2}v_0} \right)^\alpha / (v + \sqrt{2}v_0)(v - \sqrt{2}v_0) = \frac{1}{\mu\sigma_0} \frac{(v - \sqrt{2}v_0)^{\alpha-1}}{(v + \sqrt{2}v_0)^{\alpha+1}}.$$

Введем величину $t = \frac{v_0^2}{v_n^2}$ - отношение температуры замедлителя к температуре нейтронного газа:

$$N(v) = \frac{1}{\mu\sigma_0 v_n^2} \frac{\left(\frac{v}{v_n} - \sqrt{2t} \right)^{\alpha-1}}{\left(\frac{v}{v_n} + \sqrt{2t} \right)^{\alpha+1}}. \quad /3.9/$$

При $t=0$ мы должны получить обычное уравнение для плотности нейтронов для случая, когда пренебрегаем тепловым движением замедлителя; и действительно, получаем спектр Ферми:

$$N(v) = \frac{1}{\mu\sigma_0 v^2}.$$

Решение /3.9/ должно удовлетворять условию непрерывности в переходной точке $v = yv_n$ и условию сохранения нейтронов. Условие непрерывности требует, чтобы в точке $v = yv_n$ величины /3.6/ и /3.9/ были равны:

$$N(yv_n) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \frac{y^2}{v_n} e^{-y^2} = \frac{1}{\mu\sigma_0 v_n^2} \frac{(y - \sqrt{2t})^{\alpha-1}}{(y + \sqrt{2t})^{\alpha+1}}.$$

Откуда

$$\frac{(y - \sqrt{2t})^{\alpha-1}}{(y + \sqrt{2t})^{\alpha+1}} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \mu\sigma_0 v_n y^2 e^{-y^2}$$

Тогда плотность замедления в этой точке:

$$q(yv_n) = \frac{(y - \sqrt{2t})^\alpha}{(y + \sqrt{2t})^\alpha} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \mu \sigma_0 v_n y^2 (y^2 - 2t) e^{-y^2} \quad /3.10/$$

Из условия сохранения нейтронов получаем, предполагая, что поглощение происходит только на участке спектра Максвелла:

$$\begin{aligned} q(yv_n) &= \int_0^{yv_n} N(v) \sigma_a(v) v dv = \int_0^{yv_n} N(v) \sigma_a(v_n) v_n dv = \\ &= \frac{1}{\sqrt{t}} \int_0^{yv_n} N(v) \sigma_a(v_n) v_0 dv = \frac{\delta \sigma_0}{\sqrt{t}} \int_0^{yv_n} N(v) dv. \end{aligned}$$

Подставляя $N(v)$ для спектра Максвелла и интегрируя по частям:

$$q(yv_n) = \frac{4\delta\sigma_0}{\sqrt{\pi t}} \int_0^y z^2 e^{-z^2} dz = \frac{\delta\sigma_0}{\sqrt{t}} \left[\operatorname{erf}(y) - \frac{2y}{\sqrt{\pi}} e^{-y^2} \right]. \quad /3.11/$$

Оба выражения для $q(yv_n)$ должны быть равны между собой; это дает

$$\frac{\delta\beta}{\mu} = \frac{4y^2(y^2 - 2t)e^{-y^2}}{\sqrt{\pi t} \left[\operatorname{erf}(y) - \frac{2y}{\sqrt{\pi}} e^{-y^2} \right]} \quad ; \quad \beta = \frac{1}{v_0} = \frac{1}{2kT}. \quad /3.12/$$

Параметр t - отношение температуры нейтронов к температуре атомов замедлителя, нужно еще определить из каких-то дополнительных условий.

Можно, например, потребовать, чтобы распределения, даваемые /3.6/ и /3.9/ совпадали с распределением, которое можно получить из уравнения Вигнера-Вилькинса для предельного случая тяжелого замедлителя.

Для такого сравнения возьмем решение уравнения /2.17/ в виде ряда по степеням x /для малых значений x /:

$$\psi(x) = \sum a_n x^n,$$

где

$$a_0 = 1, \quad a_1 = \frac{\Delta}{3}, \quad a_n = \frac{1}{n(n+2)} \left[\Delta \cdot a_{n-1} + 2(n-2) a_{n-2} \right]. \quad /3.13/$$

Отсюда:

$$N(x) = x^2 e^{-x^2} \psi(x).$$

Самым лучшим способом приравнивания между собой этих решений является способ приравнивания моментов

$$M_k = \int_0^{\infty} v^k N(v) dv,$$

причем следует подставить $N(v)$ из /3.6/ в интервале от 0 до $y v_n$ и $N(v)$ из /3.9/ в интервале $y v_n$ до ∞ .

Так как в первом интервале $N \sim v^2$, то для сходимости необходимо $k > -3$; для сходимости во втором интервале необходимо $k < 1$, так как $N \sim 1/v^2$. Итак $-3 < k < 1$.

Таким образом, мы не можем определить средней величины скорости, ибо в этом случае $k=1$, а также средней величины энергии, ибо $k=2$, но можно определить другую характеристическую величину, а именно с помощью отрицательных моментов:

$$\bar{E} = \int_0^{\infty} N(v) dv / \int_0^{\infty} \frac{1}{v^2} N(v) dv.$$

Для распределения Вигнера-Вилькинса /3.13/ интегрирование нужно выполнить в первом приближении относительно Δ , принимая

$$a_0 = 1, \quad a_1 = \frac{1}{3} \Delta, \quad a_n = \frac{2(n-2)}{n(n+2)} a_{n-2}.$$

В этом случае

$$\bar{E} = \frac{1}{2} v_0^2 \left[1 + \frac{\Delta}{\sqrt{\pi}} + \dots \right].$$

Для распределения /3.6/ и /3.9/, интегрируя в соответственных интервалах, получаем:

$$\bar{E} = \frac{\frac{1}{2} v_0^2 [\operatorname{erf}(y) - \frac{2y}{\sqrt{\pi}} e^{-y^2}]}{P[(t+J)\operatorname{erf}(y) - \frac{2}{\sqrt{\pi}} J e^{-y^2}]}, \quad /3.15/$$

где $J = \frac{\alpha}{16} \left[\ln \frac{1}{5} - \frac{2\sqrt{2t}}{(y-\sqrt{2t})^2} y \right]; \quad P = \left(\frac{y-\sqrt{2t}}{y+\sqrt{2t}} \right)^\alpha = S^\alpha.$

P - вероятность того, что нейтрон достигнет тепловой энергии. Теперь довольно громоздкая процедура приравнивания /3.14/ и /3.15/ дает связь между y и t , а затем из уравнения /3.12/ можем определить t .

В пределах $0 < \frac{\sigma_a(kT)}{\mu\sigma_0} < 0,5$, т.е. $0 < \Delta < 1$ имеем линейную зависимость между температурой нейтронов T_n и температурой среды T :

$$T_n = T [1 + 0,30 \cdot \Delta]. \quad /3.16/$$

Для очень малых значений Δ получаем из /3.12/, /3.14/ и /3.15/ аналитическое выражение

$$T_n = T \left[1 + \frac{\Delta}{\sqrt{\pi}} + O(\alpha^2 \ln \alpha) \right] = T [1 + 0,564 \cdot \Delta]. \quad /3.17/$$

Упомянутые уже авторы /15/ из Ок-Риджа определили температуру нейтронного газа формулой

$$T_n = T \left[1 + 0,91 \frac{\sigma_a(kT)}{\mu\sigma_0} \right] \quad /3.18/$$

для $A = 1,2,9,12,16,19,25$

В случае большой массы атомов замедлителя $\xi = 2\mu$, и тогда

$$T_n = T \left[1 + 0,91 \frac{2 \cdot \sigma_a(kT)}{\xi \sigma_0} \right] = T \left[1 + 0,455 \cdot \Delta \right]. \quad /3.19/$$

Следовательно, значение эффективной температуры по формуле /3.19/ лежит между предельными значениями температур /3.16/ и /3.17/. Броун и С.Джонс, а также Броун в цитированных уже работах, вводит эффективную температуру для тяжелой воды D_2O с помощью формулы

$$T_n = T \left[1 + 1,92 \frac{\sigma_a(kT)}{\sigma_0} \right].$$

На конференции в Женеве в 1958 году был представлен вариационный метод определения эффективной температуры нейтронного газа /16/.

При помощи условия детального равновесия /1.5/, ядро интегрального уравнения /1.2/ можно симметризовать следующим образом:

$$K(E, E') = K(E', E) = \sqrt{\frac{M(E')}{M(E)}} \sigma(E' \rightarrow E)$$

$$\varphi(E) = \phi(E) \sqrt{M(E)} \quad ; \quad M(E) = \text{const} \cdot E e^{-\beta E}, \quad \beta = \frac{1}{kT}.$$

Тогда интегральное уравнение принимает вид:

$$(\sigma_a + \sigma_s) \phi(E) = \int_0^{\infty} K(E, E') \phi(E') dE'. \quad /3.20/$$

Если нет поглощения, то, как мы видели, поток нейтронов принимает распределение Максвелла $M(E)$ с температурой T . Для нахождения потока нейтронов с учетом поглощения применим вариационный метод для решения интегрального уравнения /3.20/. Определим функционал $I[\phi]$ следующим образом:

$$I(\Phi) = \int_0^{\infty} \Phi(E) dE \left[(\sigma_a + \sigma_s) \Phi(E) - \int_0^{\infty} k(E, E') \Phi(E') dE' \right].$$

Как можно показать, точное решение интегрального уравнения /3.20/ минимизирует функционал $\bar{I} / \Phi /$ /см. приложение 3/. Если введем граничную энергию для спектра тепловых нейтронов E_m , выше которой имеем спектр замедления Ферми, то $\bar{I} / \Phi /$ принимает вид:

$$I(\Phi) = \int_0^{E_m} \Phi(E) dE \left[(\sigma_a + \sigma_s) \Phi(E) - \int_0^{E_m} k(E, E') \Phi(E') dE' - 2 \int_{E_m}^{\infty} k(E, E') \Phi^*(E') dE' \right] \quad /3.21/$$

где $\Phi^*(E) = \frac{1}{\sqrt{M(E)}} \varphi^*(E)$, $\varphi^*(E) = \frac{1}{\xi E \sigma_s(E)} \exp \left\{ - \int_E^{\infty} \frac{\sigma_a(E') dE'}{\xi E' \sigma_s(E')} \right\}$.

φ^* - спектр Ферми с учетом резонансного захвата. В качестве пробной функции возьмем распределение Максвелла с эффективной температурой нейтронов $T_n > T$.

$$\varphi(E) = c E e^{-\delta E}, \quad \delta = \frac{1}{kT_n} \quad E < E_m. \quad /3.22/$$

Нужно определить постоянную нормировки C и энергию E_m . Для этого напишем условия непрерывности в точке E_m и условие нормировки.

$$\int_0^{E_m} \varphi(E) \sigma_a(E) dE + \int_{E_m}^{\infty} \varphi^*(E) \sigma_a(E) dE = 1. \quad /3.23/$$

Отсюда получим зависимость C и E_m от δ , т.е. от температуры T_n . Если поглощением в интервале замедления пренебрегаем, то условия /3.23/ дают:

$$C = \frac{e^{\delta E_m}}{\xi E_m^2 \sigma_s(E_m)} ; \quad c \int_0^{E_m} E e^{-\delta E} \sigma_a(E) dE = 1. \quad /3.25/$$

Если предположим, что поглощение происходит по закону $1/\nu$, т.е.

$$\sigma_a(E) = \mu/\sqrt{E} \quad \text{и если} \quad \sigma_a(kT) \ll \int \sigma_s(E_m), \quad E_m \gg kT,$$

то интеграл /3.25/ равен:

$$C \mu \int_0^{\infty} E^{1/2} e^{-\delta E} dE = C \frac{\mu \sqrt{\pi}}{2\delta^{3/2}} = \frac{e^{\delta E_m}}{\int \sigma_s(E_m)} \frac{\mu \sqrt{\pi}}{2\delta^{3/2}} = 1, \quad /3.26/$$

откуда
$$C = \frac{2\delta^{3/2}}{\mu \sqrt{\pi}}.$$

Используя определение потока $\varphi(E)$ по /3.22/, а также вводя Φ/E и $K/E, E'$, можем функционал I/Φ представить в виде:

$$I(\Delta) = C^2 \int_0^{E_m} dE [(\sigma_a + \sigma_s) E e^{-(\beta-2\Delta)E} - e^{\Delta \cdot E} \int_0^{E_m} \sigma(E \rightarrow E') E' e^{-(\beta-\Delta)E'} dE'] - 2C \int_0^{E_m} dE e^{\Delta \cdot E} \int_{E_m}^{\infty} \sigma(E' \rightarrow E) \varphi^*(E') dE' \quad /3.27/$$

$$\Delta = \beta - \delta.$$

Подставляя в /3.27/ значение C и умножив на $\left(\frac{\sqrt{\pi} \mu}{2}\right)^2$ имеем:

$$I(\Delta) \left[\frac{\mu \sqrt{\pi}}{2}\right]^2 = (\beta - \Delta)^3 \int_0^{E_m} \sigma_a(E) E e^{-(\beta-2\Delta)E} dE + (\beta - \Delta)^3 \int_0^{E_m} \sigma_s(E) E e^{-(\beta-2\Delta)E} dE - (\beta - \Delta)^3 \int_0^{E_m} e^{\Delta \cdot E} dE \int_0^{E_m} \sigma(E \rightarrow E') E' e^{-(\beta-\Delta)E'} dE' - \mu \sqrt{\pi} (\beta - \Delta)^{3/2} \int_0^{E_m} e^{\Delta \cdot E} dE \int_{E_m}^{\infty} \sigma(E' \rightarrow E) \varphi^*(E') dE'. \quad /3.28/$$

Рассмотрим интегралы входящие в выражение /3.28/:

$$g(\Delta) = \int_0^{E_m} \sigma_s(E) E e^{-(\beta-2\Delta)E} dE - \int_0^{E_m} e^{\Delta \cdot E} dE \int_0^{E_m} \sigma(E \rightarrow E') E' e^{-(\beta-\Delta)E'} dE'.$$

Если $(\beta - 2\Delta)E_m \gg 1$, что соответствует малой величине поглощения, то мы не сделаем большой ошибки, если верхний предел интегрирования E_m заменим на бесконечность. Тогда можем подинтегральное выражение разложить в ряд по степеням Δ и, воспользовавшись соотношением,

$$\sigma_s(E) = \int_0^{\infty} \sigma(E \rightarrow E') dE'$$

получаем /см. приложение 3/ :
$$J(\Delta) = - \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\Delta^n}{n!} M_n,$$

причем

$$M_1 = 0$$

$$M_2 = \sigma_s(\infty) \eta_2 = 2 \int_0^{\infty} E^2 e^{-\beta E} dE \int_0^{\infty} \sigma(E \rightarrow E') (E' - E) dE'$$

/3.28/

$$M_3 = \sigma_s(\infty) \eta_3 = -3 \int_0^{\infty} E^2 e^{-\beta E} dE \int_0^{\infty} \sigma(E \rightarrow E') (E' - E)^2 dE'$$

Определив остальные два интеграла входящие в /3.28/ /см. приложение 3/, имеем:

$$I(z) \approx (1-z)^3 \left[\frac{\theta \xi}{(1-2z)^{3/2}} - \sum_{n=2}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \beta^{n+2} \eta_n \right] - \alpha \theta (1-z)^{3/2} F(x, r), \quad /3.30/$$

где $\theta = \frac{\mu \sqrt{\pi \beta}}{2 \xi \sigma_s(\infty)}$, $z = \frac{\Delta}{\beta}$, $x = \Delta \cdot E_m = E_m \beta z$

$$F(r, x) = 2 \int_r^1 e^{xt} (1 - \gamma t) dt.$$

Дифференцируя по z и приравнявая к нулю, имеем

$$\sum_{n=2}^{\infty} \beta^{n+2} z^{n-1} \eta_n \left(\frac{3z}{n!} - \frac{1-z}{(n-1)!} \right) = - \frac{3\theta \xi z}{(1-2z)^{5/2}} + \frac{\theta \cdot \alpha}{(1-z)^{3/2}} \left[(1-z) \frac{\partial F}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial z} - \frac{3}{2} F \right],$$

где $\frac{\partial x}{\partial z} = t = \beta E_m$.

Тогда для определения z и t получаем окончательно два уравнения:

$$(1-z)^{3/2} \left\{ \sum_{n=2}^{\infty} \beta^{n+2} z^{n-1} \eta_n \left(\frac{3z}{n!} - \frac{1-z}{(n-1)!} \right) + \frac{3\theta z}{(1-2z)^{5/2}} \right\} =$$

$$= \theta \alpha \left[t(1-z) \frac{\partial F}{\partial x} - \frac{3}{2} F \right]$$

$$\theta = \frac{\sqrt{t(t-x)^{3/2}}}{e^{t-x}}$$

Последнее уравнение получено из /3.26/, подстановкой

$$\delta E_m = (\beta - \Delta) E_m = t - x.$$

В случае $z \ll 1$, уравнения /3.31/ можно упростить:

$$5z^2(\beta^4 \eta_2 - \beta^5 \eta_3) - z\beta^4 \eta_2 + 3\theta \{ z(1+5z) - \theta \alpha (t \frac{\partial F}{\partial x} - \frac{3}{2} F) \} = 0$$

$$\theta = t^2 e^{-t}.$$

Таким образом, в случае достаточно малого поглощения, относительный сдвиг температуры определяется первыми, отличными от нуля, моментами индикатриссы рассеяния, причем этот результат не зависит от вида индикатриссы рассеяния.

§ 4. Влияние химической связи на спектр

Рассмотрим теперь влияние химической связи на поток нейтронов сперва на примере жидких замедлителей таких как обычная и тяжелая вода. Тот факт, что рассеивающее ядро связано в молекуле, влияет на спектр посредством индикатриссы рассеяния. Поглощение же связанным ядром влияет на спектр не через индикатриссу рассеяния, т.е. недостаточно знать индикатриссу, чтобы определить этот эффект. /см. Ахизер и Померанчук /17^a/. Эффект химической связи на термализацию нейтронов исследовали между прочим Броун и С.Джон, а также Броун в цитированных уже работах /13/, затем Кригер и Нелькин /17/, и другие. Влияние межмолекулярных сил на термализацию было рассмотрено качественно Дарделем /18/.

Эффективный метод учета химической связи был разработан еще в 1941 г. Саксом и Теллером [19], развит затем и применен целым рядом других авторов. Этот, так называемый, метод тензора масс, состоит в том, что вводится эффективная масса рассеивающего ядра, имеющая свойства тензорной величины, что позволяет учесть химическую связь ядра.

Рассмотрим в качестве примера рассеяние нейтронов протоном, связанным в молекуле воды. Если нейтроны падают перпендикулярно к плоскости молекулы, то при соударении с протоном можно его считать свободным и поэтому эффективная масса протона равна 1. Если же нейтрон падает на протон вдоль линии, идущей от протона к центру массы молекулы, тогда вся молекула, как целое, испытывает отдачу и эффективная масса протона равна 18. В направлении, перпендикулярном к предыдущим направлениям, значение эффективной массы будет каким-то промежуточным. Поэтому можно считать, что масса протона является тензорной величиной и определяется при помощи формулы:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{3} \left[\frac{r_x^2 + r_y^2}{J_z} + \frac{r_y^2 + r_z^2}{J_x} + \frac{r_x^2 + r_z^2}{J_y} \right] + \frac{1}{M_0},$$

где J - главные моменты инерции молекулы, r - координаты протона относительно центра массы молекулы, M_0 - масса молекулы.

Для обычной воды эффективная масса связанного протона равна 2,1 массы протона. В случае тяжелой воды главные составляющие тензора массы следующие: 2; 3,157; 20; эффективная масса же дейтрона равна $m^* = 3,596$ протонной массы. Для кислорода эффективная масса равна 17,607 и в первом приближении можно пренебречь обменом энергии при соударении нейтрон-кислород. Для обычной воды это приближение более правильно, чем для тяжелой воды, во-первых, из-за разницы в массах кислорода и водорода, во-вторых, потому что эффективное сечение рассеяния для протона значительно больше сечения рассеяния кислорода; это ведет к тому, что в воде имеем прежде всего рассеяние водородом.

Если, следовательно, энергия нейтрона больше, чем энергия основного уровня ротационного движения, но меньше чем энергия колебания молекулы,

тогда протон /или нейтрон/ можно считать свободным с тем, однако, что его эффективная масса равна m^* , где $\frac{1}{m^*} = \frac{1}{3} \text{Sp}(\mathcal{M}^{-1})$, а \mathcal{M} - тензор массы. Иначе говоря, динамические эффекты трансляционного и ротационного движения ядра /протона, дейтрона/ на рассеяние медленных нейтронов можно свести к динамическому эффекту свободного трансляционного движения, но с измененной массой ядра /замена газа жестких ротаторов одноатомным газом с эффективной массой m^* /.

В 1951 г. теорию Сакса-Теллера обобщил Мессиа, путем учета также колебательного движения /20/.

Выведем метод тензора массы, используя формализм, выведенный ранее, и уже полученные результаты.

Для дифференциального эффективного сечения мы имели выражение /2.5/:

$$\sigma(\theta, \epsilon) = \sum_{\nu, \nu'} \sigma_{\nu\nu'}(\theta, \epsilon)$$

$$\sigma_{\nu\nu'}(\theta, \epsilon) = a_\nu a_{\nu'} \frac{k}{2\pi k_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \chi_{\nu\nu'} \rangle_T e^{-i\epsilon t} dt,$$

где

$$\langle \chi_{\nu\nu'} \rangle_T = \frac{\sum_i \chi_{\nu\nu'}^{(i)} e^{-E_i/kT}}{\sum_i e^{-E_i/kT}}$$

$$\chi_{\nu\nu'}^{(i)} = \langle \psi_i | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_\nu(t)} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_{\nu'}(t)} | \psi_i \rangle.$$

Здесь $\chi_{\nu\nu'}$ усредняется по тепловому распределению начальных состояний молекул; нужно усреднить еще относительно направлений оси вращения молекулы, но этот вопрос более сложный и вернемся к нему позже.

Для непосредственного рассеяния, т.е. для $\nu = \nu'$ имеем $a_\nu a_{\nu'} = A_\nu^2 + C_\nu^2$, а для интерференционных членов, $a_\nu a_{\nu'} = A_\nu A_{\nu'}$, где A - амплитуда когерентного, C - амплитуда некогерентного рассеяния. Не будем здесь учитывать корреляции между спинами ядер.

Если нет связи между спинами ядер замедлителя и отсутствует взаимодействие спин-орбита, тогда состояние рассеивающей молекулы можно описать с помощью квантовых чисел J , соответствующих движению ядра /например, в случае вращательного движения квантовое число J связано с моментом количества движения/ и совокупностью Z -составляющих спинов ядер. Эффект корреляции приводит к дополнительному интерференционному члену между амплитудами тождественных ядер. Будем считать, что состояние и энергия рассеивающей молекулы зависят только от числа J .

Будем дальше считать, что нейтроны имеют энергию больше расстояния между вращательными уровнями и предположим, кроме того, что энергия теплового движения молекул больше постоянной ротации B , т.е. $kT > B$ ^{x/}. Тогда вращательное движение молекулы можно рассматривать квазиклассически, что позволит определить функцию $\chi_{vv'}$ при данном положении оси вращения \vec{J} молекулы.

Представим волновую функцию молекулы в виде произведения функций, отвечающих трансляции, колебаниям и вращениям, тогда и $\langle \chi_{vv'} \rangle_T$ будет произведением соответствующих членов:

$$\langle \chi_{vv'} \rangle_T = \langle \chi_{vv'}^t \rangle_T \langle \chi_{vv'}^v \rangle_T \langle \chi_{vv'}^r \rangle_T. \quad /4.1/$$

Зависимость от \vec{J} учтена в членах соответствующих колебательному и вращательному движению. Если не принимать во внимание колебательное движение, поскольку считаем, что энергия нейтронов мала и не может возбуждать колебаний, то соответствующий фактор в /4.1/ не появится и в результате получим обобщенный метод Сакса-Теллера, так как учитываются интерференционные эффекты.

Рассмотрим вращательное движение. Рассеивающий атом ν движется по сфере радиуса $|\vec{r}_\nu(t)|$, который зависит от времени. Для соответствующей функции имеем согласно /2.4/

$$\text{x/ Постоянная ротации } B = \frac{\hbar^2}{2Mr^2} = \frac{\hbar^2}{2J}, \text{ где } J \text{ - момент инерции молекулы.}$$

$$\begin{aligned} \langle \chi_{\nu\nu'}^r \rangle_T &= \langle \Psi^r | e^{iHt} e^{i\vec{\alpha}\vec{b}_\nu(t)} e^{-iHt} e^{-i\vec{\alpha}\vec{b}_{\nu'}(t)} | \Psi^r \rangle = \\ &= \langle \Psi^r | e^{iHt} e^{-iH_\nu t} e^{i\vec{\alpha}\vec{b}_\nu} e^{-i\vec{\alpha}\vec{b}_{\nu'}} | \Psi^r \rangle, \end{aligned} \quad /4.2/$$

где H - гамильтониан вращения жесткой молекулы; здесь использовано свойство оператора \vec{b}_ν как оператора сдвига:

$$e^{i\vec{\alpha}\vec{b}_\nu} e^{-iHt} e^{-i\vec{\alpha}\vec{b}_\nu} = e^{-iH_\nu t}$$

отсюда $e^{i\vec{\alpha}\vec{b}_\nu} e^{-iHt} = e^{-iH_\nu t} e^{i\vec{\alpha}\vec{b}_\nu}$

Здесь H_ν есть H , в котором \vec{p}_ν заменено на $\vec{p}_\nu - \vec{\alpha}$. Полный момент количества движения молекулы равен:

$$\vec{L} = \sum_\nu \vec{L}_\nu = \sum_\nu \vec{b}_\nu \times \vec{p}_\nu;$$

суммирование по всем атомам, входящим в состав молекулы.

Гамильтониан вращения

$$H = \frac{\vec{\omega} \mathbf{J} \vec{\omega}}{2} = \frac{1}{2} \vec{L} \mathbf{J}^{-1} \vec{L},$$

где \mathbf{J} - момент инерции.

Подставляя в H явное выражение для \vec{L} , получаем:

$$H = \frac{1}{2} \left[\sum_\nu (\vec{b}_\nu \times \vec{p}_\nu) \mathbf{J}^{-1} (\sum_{\nu'} \vec{b}_{\nu'} \times \vec{p}_{\nu'}) \right] = \frac{1}{2} \sum_{\nu\nu'} \vec{p}_\nu \mathbf{K}_{\nu\nu'} \vec{p}_{\nu'},$$

где $\mathbf{K}_{\nu\nu'} = \mathbf{B}_\nu^+ \mathbf{J}^{-1} \mathbf{B}_{\nu'} = \mathbf{K}_{\nu'\nu}^+$

$$\mathbf{B}_\nu = -\mathbf{B}_\nu^+ = \begin{pmatrix} 0 & -b_z & b_y \\ b_z & 0 & -b_x \\ -b_y & b_x & 0 \end{pmatrix}.$$

Тогда

$$H_\nu = H + \frac{1}{2} \vec{L} \mathbf{J}^{-1} \mathbf{B}_\nu \vec{\alpha} - \frac{1}{2} \vec{\alpha} \mathbf{B}_\nu^+ \mathbf{J}^{-1} \vec{L} + \frac{1}{2} \vec{\alpha} \mathbf{K}_{\nu\nu} \vec{\alpha}.$$

Мы не можем, однако, прямо подставить H и H_V в /4.2/, ибо они содержат величины, не коммутирующие между собой. Однако мы говорили, что вращательное движение в данном приближении можно рассматривать квазиклассически. Это сводится к тому, что операторы рассматриваем как величины классические, функция же ψ^r заменяется вращательным волновым пакетом, который может иметь одновременно определенное значение момента количества движения и определенное положение оси вращения в пространстве. Существование волновых пакетов возможно в том случае, когда ротатор в достаточной степени возбужден, т.е. при условии $kT \gg B$, тогда имеем дело с большими квантовыми числами, спектр почти непрерывен и продолжительность столкновения мала по сравнению с периодом вращения.

Тепловое среднее нужно взять относительно положения оси вращения \vec{L} в пространстве и относительно момента количества движения \vec{L} , который распределен по закону Больцмана. Так как функция ψ^r тоже зависит от \vec{L} , то взятие среднего по \vec{L} оставим на дальнейший этап, так что символ $\langle \rangle_T$ пока означает только среднее по отношению к \vec{L} :

Итак в случае коммутации операторов, имеем:

$$\langle \chi_{vv}^r \rangle_T = \left\langle e^{-[\vec{L} B_V J^{-1} \vec{L} + \frac{1}{2} \vec{L} K_{VV} \vec{L}] it} \right\rangle_T e^{i \vec{L} [\vec{L}_v - \vec{L}_v']}$$

Взятие среднего от этой функции по отношению к \vec{L} сводится в данном приближении прямо к интегрированию по распределению \vec{L} , определяемого формулой Больцмана $e^{-\frac{\vec{L} J^{-1} \vec{L}}{2kT}}$

$$\langle \chi_{vv}^r \rangle_T = e^{i \vec{L} [\vec{L}_v - \vec{L}_v'] - \frac{1}{2} \vec{L} K_{VV} \vec{L} it} \frac{\int e^{-\vec{L} B_V J^{-1} \vec{L} it} e^{-\frac{\vec{L} J^{-1} \vec{L}}{2kT}} d^3 \vec{L}}{\int e^{-\frac{\vec{L} J^{-1} \vec{L}}{2kT}} d^3 \vec{L}}$$

Введем новую переменную

$$\vec{L} = \vec{e} J^{1/2} = J^{1/2} \vec{e}$$

$$J^{-1} \vec{L} = e^2; \quad d^3 \vec{L} = (2e + J^{1/2}) d^3 \vec{e},$$

тогда интеграл принимает вид /при замене \vec{B}_ν на $-\vec{B}_\nu^+$ /:

$$\frac{\int e^{-\epsilon^2/2kT} e^{i\vec{x}\vec{B}_\nu^+ J^{-1/2}\vec{\epsilon}} d^3\vec{\epsilon}}{\int e^{-\epsilon^2/2kT} d^3\vec{\epsilon}}$$

Выполнив интегрирование сначала по углам /полагая $\vec{\epsilon} = \epsilon \cos\theta$ /, а затем по $d\epsilon$, получаем окончательно /Приложение 1У/:

$$\langle \chi_{\nu\nu'}^r \rangle_T = e^{i\vec{x}[\vec{\epsilon}_\nu - \vec{\epsilon}_{\nu'}]} e^{-\frac{1}{2}\vec{x} \mathcal{K}_{\nu\nu} \vec{x}} e^{(it + t^2 \cdot kT)}. \quad /4.4/$$

Для функции трансляционного движения мы имели формулу /2.6'/

$$\langle \chi_{\nu\nu'}^t \rangle = e^{-\frac{x^2}{2M}(it + t^2 \cdot kT)}, \quad /4.5/$$

где M - масса молекулы.

Тогда следующее произведение дает нам полную функцию молекулы:

$$\langle \chi_{\nu\nu'}^r \rangle_T \langle \chi_{\nu\nu'}^t \rangle_T = e^{-\frac{x^2}{2M}(it + t^2 \cdot kT)} e^{i\vec{x}[\vec{\epsilon}_\nu - \vec{\epsilon}_{\nu'}]} e^{-\frac{1}{2}\vec{x} \mathcal{K}_{\nu\nu} \vec{x}} e^{(it + t^2 \cdot kT)}. \quad /4.6/$$

Показатель степени преобразуем к виду:

$$\frac{x^2}{2M} + \frac{1}{2}\vec{x} \mathcal{K}_{\nu\nu} \vec{x} = \frac{1}{2}\vec{x} \frac{\mathcal{I}}{M} \vec{x} + \frac{1}{2}\vec{x} \mathcal{K}_{\nu\nu} \vec{x} = \frac{1}{2}\vec{x} m_\nu^{-1} \vec{x},$$

где введен тензор массы $m_\nu^{-1} = \mathcal{K}_{\nu\nu} + M^{-1}\mathcal{I}$

/ \mathcal{I} - единичный тензор /.

Теперь можем взять среднее относительно вектора $\vec{\Omega}$

$$\langle \chi_{\nu\nu}^r \rangle_T \langle \chi_{\nu\nu}^t \rangle_T = \left\langle e^{-\frac{1}{2} \vec{k} \cdot \mathcal{M}^{-1} \cdot \vec{k} (it + t^2 \cdot kT)} \right\rangle_{\Omega} \left\langle e^{i \vec{k} \cdot [\vec{b}_{\nu} - \vec{b}_{\nu'}]} \right\rangle_{\Omega}. \quad /4.7/$$

Следует отметить, что второй член - статический интерференционный член, который может быть быстро изменяющейся функцией ориентации молекулы $\vec{\Omega}$. Член с тензором массы представляет собой динамический эффект вращения и трансляции при рассеянии ядром ν . Каждый из этих членов независим один от другого, и поэтому можем взять среднее по отдельности.

Статический член легко усредняется

$$\left\langle e^{i \vec{k} \cdot \vec{b}_{\nu\nu'}} \right\rangle_{\Omega} = \frac{1}{4\pi} \int e^{i \vec{k} \cdot \vec{b}_{\nu\nu'}} d\Omega = j_0(k b_{\nu\nu'}), \quad /4.8/$$

где $j_0(x) = \frac{\sin x}{x}$ - функция Бесселя.

Первый член /4.7/ после усреднения дает

$$e^{-\frac{k^2}{2M^*} (it + t^2 \cdot kT)},$$

где $\frac{1}{M^*} = \frac{1}{3} \text{Sp}(\mathcal{M}^{-1})$, M^* - является эффективной массой. Эффективная масса M^* вычисляется согласно результатам этого параграфа

следующим образом. Пусть J - главные моменты инерции молекулы, тогда

$$\frac{1}{M^*} = \frac{1}{3} \text{Sp}(\mathcal{M}^{-1}), \quad \text{где } \mathcal{M} - \text{тензор массы, } \mathcal{M}^{-1} = \mathcal{K} + \mathbb{I}/M,$$

M - масса молекулы, \mathbb{I} - единичный тензор, а тензор \mathcal{K} определяется

следующим соотношением: $\mathcal{K} = B^+ J^{-1} B$. Тогда имеем:

$$J^{-1} B = \begin{pmatrix} 1/J_x & 0 & 0 \\ 0 & 1/J_y & 0 \\ 0 & 0 & 1/J_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -b_z & b_y \\ b_z & 0 & b_x \\ -b_y & b_x & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{b_z}{J_x} & \frac{b_y}{J_x} \\ \frac{b_z}{J_y} & 0 & -\frac{b_x}{J_y} \\ -\frac{b_y}{J_z} & \frac{b_x}{J_z} & 0 \end{pmatrix}$$

$$B^+ J^{-1} B = \begin{pmatrix} 0 & b_z & -b_y \\ -b_z & 0 & b_x \\ b_y & -b_x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \theta & -\frac{b_z}{J_x} & \frac{b_y}{J_x} \\ \frac{b_z}{J_y} & 0 & -\frac{b_x}{J_y} \\ -\frac{b_y}{J_z} & \frac{b_x}{J_z} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{b_z^2}{J_y} + \frac{b_y^2}{J_z} & -\frac{b_x b_y}{J_z} & -\frac{b_x b_z}{J_y} \\ -\frac{b_x b_y}{J_z} & \frac{b_z^2}{J_x} + \frac{b_x^2}{J_z} & -\frac{b_y b_z}{J_x} \\ -\frac{b_x b_z}{J_y} & -\frac{b_y b_z}{J_x} & \frac{b_x^2}{J_y} + \frac{b_y^2}{J_x} \end{pmatrix}$$

Следовательно, элементы тензора m^{-1} равны:

$$m_{ii}^{-1} = \left(\frac{b_j^2}{J_k} + \frac{b_k^2}{J_j} \right) + \frac{1}{M}$$

$$m_{ij}^{-1} = -\frac{b_i b_j}{J_k}$$

Вычисляя сумму диагональных элементов, получим среднее значение и эффективную массу молекулы:

$$\frac{1}{M^*} = \frac{1}{3} \left[\frac{b_y^2 + b_z^2}{J_x} + \frac{b_x^2 + b_z^2}{J_y} + \frac{b_x^2 + b_y^2}{J_z} \right] + \frac{1}{M}$$

Таким образом, мы получили приближение Сакса-Теллера, в котором динамика трансляционного и вращательного движения сводится к динамике трансляционного движения с тем, однако, что масса ядра M_ν заменяется эффективной массой M_ν^* . Здесь при выводе получен дополнительный член, выражаемый функцией Бесселя $j_0(x b_\nu)$, который учитывает интерференционные эффекты.

Встает вопрос о том, какое влияние окажет колебательное движение молекулы на полученные выше результаты, если энергия нейтронов будет меньше пороговой энергии возбуждения этих колебаний / в случае воды $h\nu = 0,236$. Рассмотрим с этой целью подробней колебательное движение ядра ν около положения равновесия \vec{r}_ν .

В случае вращательного движения \vec{b}_v было функцией времени, теперь же \vec{b}_v постоянный вектор, имеем только колебания ядра v около положения равновесия \vec{b}_v с амплитудой $\vec{u}_v(t)$.

$$\vec{r}_v(t) = \vec{b}_v + \vec{u}_v(t).$$

Тогда

$$\langle \chi_{vv}^v \rangle_T = e^{i\vec{k}(\vec{b}_v - \vec{b}_{v'})} \langle \psi_i | e^{i\vec{k}\vec{u}_v(t)} e^{-i\vec{k}\vec{u}_v(0)} | \psi_i \rangle_T.$$

Молекулярные колебания $\vec{u}_v(t)$ можем разложить в ряд по нормальным колебаниям, введя нормальные координаты $q_\lambda(t)$,

$$\vec{u}_v(t) = \sum_{\lambda} q_\lambda(t) \vec{c}_v^{(\lambda)},$$

где $\vec{c}_v^{(\lambda)}$ - вектор амплитуды нормальных колебаний λ .

Динамическая независимость нормальных колебаний позволяет рассматривать отдельно эффект, производимый каждым из колебаний на рассеяние нейтронов. Так как нормальные координаты различных колебаний коммутируют между собой, то

$$e^{i\vec{k}\vec{u}_v(t)} = e^{i\vec{k}\sum_{\lambda} q_\lambda(t) \vec{c}_v^{(\lambda)}} = \prod_{\lambda} e^{i\vec{k}q_\lambda(t) \vec{c}_v^{(\lambda)}}.$$

Опуская постоянный фактор, имеем

$$\langle \chi_{vv}^v \rangle_T = \prod_{\lambda} \left\langle e^{i\vec{k}\vec{c}_v^{(\lambda)} q_\lambda(t)} e^{-i\vec{k}\vec{c}_v^{(\lambda)} q_\lambda(0)} \right\rangle_T$$

или

$$\langle \chi_{vv}^v \rangle_T = \prod_{\lambda} \left\langle e^{i\vec{k}\vec{c}_v^{(\lambda)} q_\lambda(t) - i\vec{k}\vec{c}_v^{(\lambda)} q_\lambda(0)} \right\rangle_T e^{\frac{1}{2} [i\vec{k}\vec{c}_v^{(\lambda)} q_\lambda(t), i\vec{k}\vec{c}_v^{(\lambda)} q_\lambda(0)]}.$$

Здесь использовано следующее операторное тождество

$$e^A e^B = e^{A+B + \frac{1}{2}[A, B]}$$

и тот факт, что коммутатор $[A, B]$ не содержит фактически операторов $q_\lambda(t)$ и $q_\lambda(0)$, и потому не подлежит усреднению.

Тогда, пользуясь теоремой Блоха /21/ для математического ожидания экспоненциальной функции координат гармонического осциллятора, усредненной по распределению Больцмана:

$$\langle e^Q \rangle_T = e^{\frac{1}{2} \langle Q^2 \rangle_T},$$

имеем /подробности см. приложение \bar{y} / для одного типа колебаний:

$$\langle \chi_{\nu}^2 \rangle_T = e^{-\frac{1}{2} [(\bar{x} \bar{z}_{\nu}^{(N)})^2 + (\bar{p} \bar{z}_{\nu}^{(N)})^2] \langle q_\lambda^2(0) \rangle_T + (\bar{x} \bar{z}_{\nu}^{(0)}) (\bar{p} \bar{z}_{\nu}^{(N)}) \langle q_\lambda(t) q_\lambda(0) \rangle_T}.$$

Представим теперь $q(t)$ при помощи операторов испускания фона a^\dagger и поглощения фона a :

$$q(t) = \frac{1}{(2NM\omega)^{1/2}} [a e^{-i\omega t} + a^\dagger e^{i\omega t}],$$

где M - масса ядра ν , ω - частота колебаний, $k=1$, N - число атомов. Операторы a и a^\dagger полностью определяются известными соотношениями:

$$a^\dagger a = n$$

$$a a^\dagger = 1 + a^\dagger a = 1 + n$$

$$[a, a] = [a^\dagger, a^\dagger] = 0,$$

где n - число фононов данного сорта. Следовательно, усреднение величин $q(t)q(0)$ и $q^2(0)$ сводится к определению среднего числа фононов в данном квантовом состоянии при температуре T . Именно,

$$\begin{aligned} q(t)q(0) &= \frac{1}{2NM\omega} [a e^{-i\omega t} + a^\dagger e^{i\omega t}] (a + a^\dagger) = \\ &= \frac{1}{2NM\omega} [a a e^{-i\omega t} + a^\dagger a^\dagger e^{i\omega t}] + \frac{1}{2NM\omega} [(1+n) e^{-i\omega t} + n e^{i\omega t}]. \end{aligned}$$

При учете только однофоновых процессов первый член нас не интересует; тогда

$$\langle q(t)q(0) \rangle_T = \frac{1}{2NM\omega} \left[(1 + \langle n \rangle_T) e^{-i\omega t} + \langle n \rangle_T e^{i\omega t} \right],$$

где $\langle n \rangle_T = \frac{\sum n e^{-n\omega/kT}}{\sum e^{-n\omega/kT}} = -\frac{d}{dx} \ln \sum e^{-xn} = -\frac{d}{dx} \ln \frac{1}{1-e^{-x}} =$
 $= \frac{1}{e^x - 1} = \frac{1}{z-1}$; $x = \omega/kT$, $z = e^x$.

Окончательно получаем:

$$\langle q(t)q(0) \rangle_T = \frac{1}{2NM\omega(z-1)} \left[z e^{-i\omega t} + e^{i\omega t} \right].$$

Аналогично для $\langle q^2(0) \rangle_T$ имеем:

$$\langle q^2(0) \rangle_T = \frac{z+1}{z-1} \frac{1}{2NM\omega}.$$

Итак функцию $\langle \chi_{\nu\nu'}^{\nu} \rangle_T$ для колебательных степени свободы можно представить в виде:

$$\langle \chi_{\nu\nu'}^{\nu} \rangle_T = \prod_{\lambda} e^{-\frac{1}{2} \left[(\vec{e}_{\nu}^{\nu} \vec{e}_{\nu'}^{\nu})^2 + (\vec{e}_{\nu}^{\nu'} \vec{e}_{\nu'}^{\nu})^2 \right] \frac{z+1}{z-1} \frac{1}{2\omega_{\lambda} NM}} \times$$

$$\times e^{\frac{(\vec{e}_{\nu}^{\nu} \vec{e}_{\nu'}^{\nu}) (\vec{e}_{\nu}^{\nu'} \vec{e}_{\nu'}^{\nu}) (z e^{-i\omega_{\lambda} t} + e^{i\omega_{\lambda} t})}{2\omega_{\lambda} NM(z-1)}}.$$

/4.9/

Если нейтроны имеют энергию, недостаточную для возбуждения колебательного движения, то колебательное состояние молекулы не будет изменяться с течением времени, следовательно, чтобы получить такую неизменную функцию, нужно в /4.9/ положить $t \rightarrow \infty$. Далее предположим, что в начальный момент все молекулы находятся в основном колебательном состоянии; это означает, что для колебаний $T = 0$ и имеем только нулевые колебания молекулы.

Для $T=0$, $\frac{1}{Z} \rightarrow 0$ и $t \rightarrow \infty$ получаем из /4.9/

$$\langle \chi_{\nu\nu'} \rangle_{T=0} = \prod_{\lambda} e^{-\frac{1}{2} \left[(\vec{\alpha} \vec{c}_{\nu}^{(\lambda)})^2 + (\vec{\alpha} \vec{c}_{\nu'}^{(\lambda)})^2 \right] \frac{1}{2\omega_{\lambda} NM}} \quad /4.10/$$

Учитывая, что точная функция молекулы является произведением трех функций, получаем

$$\langle \chi_{\nu\nu'} \rangle_T = e^{-\frac{1}{2} (\vec{\alpha} \vec{m}_{\nu}^{-1} \vec{\alpha})(it + t^2 kT)} e^{i\vec{\alpha}(\vec{b}_{\nu} - \vec{b}_{\nu'})} \prod_{\lambda} e^{-\frac{1}{2} \left[(\vec{\alpha} \vec{c}_{\nu}^{(\lambda)})^2 + (\vec{\alpha} \vec{c}_{\nu'}^{(\lambda)})^2 \right] \frac{1}{2\omega_{\lambda} NM}}$$

Первые два члена уже усреднены по ориентации молекулы $\vec{\Omega}$. Последний член зависит от $\vec{\Omega}$ через $\vec{c}_{\nu}^{(\lambda)}$, эта зависимость связана с анизотропным характером колебаний. Усредняя показатель степени, получаем выражение

$$e^{-x^2 \gamma_{\nu\nu'}}$$

где

$$\gamma_{\nu\nu'} = \sum_{\lambda} \frac{1}{12\omega_{\lambda} NM} \left[(c_{\nu}^{(\lambda)})^2 + (c_{\nu'}^{(\lambda)})^2 \right] -$$

средняя квадратичная амплитуда нулевых колебаний.

Окончательно имеем:

$$\langle \chi_{\nu\nu'} \rangle_T = j_0(x b_{\nu\nu'}) e^{-x^2 \gamma_{\nu\nu'}} e^{-\frac{x^2}{2M_{\nu}^*} (it + t^2 kT)} \quad /4.11/$$

и дифференциальное поперечное сечение рассеяния выражается аналогично /2.6/

$$\begin{aligned} \sigma_{\nu\nu'}(\theta, \epsilon) &= a_{\nu\nu'} \frac{k}{2\pi k_0} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\epsilon t} \langle \chi_{\nu\nu'} \rangle_T dt = \\ &= a_{\nu\nu'} \left(\frac{M_{\nu}^*}{x^2 2\pi kT} \right)^{1/2} \frac{k}{k_0} j_0(x b_{\nu\nu'}) e^{-x^2 \gamma_{\nu\nu'}} e^{-\frac{M_{\nu}^*}{2x^2 kT} \left(\epsilon + \frac{x^2}{2M_{\nu}^*} \right)^2}. \end{aligned} \quad /4.12/$$

Итак, мы получили такой же результат, как для одноатомного газа; учет вращения молекулы находит свое выражение в том, что вместо массы ядра входит эффективная масса M_v^* .

Если введем величины:

$$\zeta_{vv'} = \frac{1}{[1 + 8 \delta_{vv'} M_v^* kT]^{1/2}}$$

$$\beta_{vv'} = \frac{1 - \zeta_{vv'}}{2kT \zeta_{vv'}}$$

$$T' = T \zeta_{vv'}$$

$$M_v' = M_v^* \zeta_{vv'}$$

то экспоненциальный член переходит

$$e^{\epsilon \beta_{vv'}} e^{-\frac{M_v'}{kT} \left(\epsilon + \frac{x^2}{2M_v'} \right)^2}$$

и для непосредственного рассеяния ядром ν получаем

$$\sigma_{vv'}(\theta, \epsilon) = e^{\epsilon \beta_{vv'}} \sigma'_{vv'}(\theta, \epsilon),$$

где $\sigma'_{vv'}(\theta, \epsilon)$ дифференциальное поперечное сечение ядра ν соответствующей модели одноатомного газа с фиктивной температурой T' и фиктивной массой M_v' . Это очень удобный вид поперечного сечения, который позволяет свести задачу термализации нейтронов с учетом химической связи к исследованию свободного газа.

Что касается влияния в жидкости междумолекулярных сил на спектр нейтронов, то эффекты эти сводятся, главным образом, к торможению вращения. Вопрос этот еще будем рассматривать после того, как рассмотрим некоторые эксперименты, относящиеся к нахождению спектра нейтронов.

§ 5. Сравнение эксперимента с теорией и дальнейшее уточнение теории

Рассмотрим теперь экспериментальную сторону вопроса о спектре нейтронов, в особенности в обычной воде и водородистом цирконии ZrH_2 , хотя вопросы кристаллов будут рассмотрены позже. Необходимо отметить трудность построения теории в случае жидкости, в данном случае воды. Если в случае газов, особенно малой плотности, и кристаллов можно развить довольно точную теорию, так как здесь ясен и понятен механизм и динамика явления, то для жидкостей из-за сложности динамики это не так просто; теорию возможно построить только при больших упрощающих предположениях. Поэтому здесь можно ожидать всяких "неприятностей" при сравнении с экспериментом. Из развитой уже модели можно составить себе общую картину поведения при рассеянии водой нейтронов. Для нейтронов с энергией большой по сравнению с 0,4 эв. /колебательная энергия протона в молекуле воды равна 0,2; 0,4эв/ рассеяние должно происходить так, как в случае свободного одноатомного газа. Когда энергия нейтрона находится в пределах от 0,2 эв до 1 эв, т.е. когда она сравнима с энергией колебательного движения, протон нужно считать связанным в молекуле воды и поперечное сечение увеличивается в 4 раза. Для еще меньшей энергии мы имеем рассеяние жесткой молекулой H_2O , нулевые же колебания учтены поправочным коэффициентом.

Нам не известно в деталях движение молекулы в жидкости, но следует ожидать, что на молекулу действуют межмолекулярные силы. Брокгауз /22/ измерял энергетическое распределение падающих холодных нейтронов, рассеянных водой под углом 90° и обнаружил пик в распределении при энергии 0,06 эв; это говорит за то, что нейтрон взял такую величину энергии за счет заторможенного вращения молекулы. Следовательно квант энергии заторможенного вращательного движения молекулы воды равен 0,06 эв. Из этих же опытов следует, что за время замедления трансляционное движение можно считать свободным.

Из этих данных следовало бы, что межмолекулярные силы не играют роли для нейтронов с энергией выше 0,1 эв, но препятствуют обмену энергии между нейтронами и вращательным движением, когда энергия нейтронов мень-

ше /наинизший вращательный уровень свободной молекулы воды равен 0,006 эв/.

Переход от свободного протона к свободно вращающейся жесткой молекуле H_2O , затем к заторможенному вращению, но свободному трансляционному движению, можно описать с помощью понятия эффективной массы протона, которая зависит от энергии падающих нейтронов. Для энергии нейтронов от 1 эв до 0,2 эв, эффективная масса возрастает с 1 до 2,1 /это значение определяется тензором массы молекулы H_2O /.

При энергии нейтронов ниже 0,2 эв необходимо учесть как температуру замедлителя, так и торможение вращения, и эффективная масса для энергий, меньших 0,06 эв, возрастает до 18 едйниц.

Обмен энергией между нейтронами и молекулами при энергии теплового движения сводится прежде всего к обмену с вращательным движением молекулы. И если это вращательное движение сильно тормозится, а это, по-видимому, следует из опыта, то кажется несомненным большое влияние свойств жидкости на индикатрису рассеяния, а, следовательно, и на спектр нейтронов. Из этих качественных рассуждений следовало бы, что индикатрисса рассеяния нейтронов в воде будет отличаться как от индикатриссы рассеяния для одноатомного газа, так и от индикатриссы рассеяния для агрегата свободных молекул воды.

Что же дает эксперимент? Из опыта следует, что свойства замедления воды для медленных нейтронов более похожи на свойства одноатомного газа, чем это следовало бы из приведенных выше качественных рассуждений и моделей.

В упомянутой уже работе /8/ Пул измерял замедление нейтронов в воде, изменяя при этом ее поглощающие свойства путем добавления борной кислоты. Полученный им спектр состоял из двух частей - максвелловская часть и спектр Ферми при более высоких энергиях. Условия опыта были так подобраны, чтобы в максимальной степени воссоздать идеальную ситуацию бесконечной однородной среды поглощающей по закону $1/v$. Была получена однородная смесь замедлителя с поглотителем и поскольку утечка нейтронов мала по сравнению с поглощением, то это дает право автору утверждать, что теория и эксперимент относятся к почти одинаковым физическим условиям. Все измерения

Пуля находятся в хорошем согласии с расчетами Амстера /7/ с помощью модели свободного одноатомного газа /Рис. 3/.

Брокгауз /22/ измерял энергетическое распределение нейтронов с начальной энергией в интервале 0,03-0,06 эв при рассеянии под разными углами тонким слоем воды, и получил результаты тоже в согласии с теорией одноатомного газа, но с величиной массы, равной массе молекулы H_2O . Это указывает на то, что только трансляционное движение молекул имеет достаточно малую энергию, чтобы мог произойти обмен с тепловыми нейтронами. Кригер /23/ представил на конференции в Гатлинбурге результаты своих расчетов, в которых принята довольно сложная картина взаимодействия нейтронов со средой, а именно: замедляемые до энергии, близкой к kT , нейтроны имеют распределение, характерное при замедлении свободным водородом, в процессе же термализации нейтроны взаимодействуют со свободными атомами газа, но с массой, равной массе молекулы 18. Полученный им результат, по-видимому, указывает на значительное отклонение от спектра, характерного для свободного водорода. Чтобы понять лучше это совпадение между опытом и моделью одноатомного газа, необходимо глубже рассмотреть механизм обмена энергией между нейтронами и трансляционным движением, заторможенным вращением и колебательным движением. Как уже об этом говорилось, из данных Брокгауза следует, что трансляционное движение можно считать свободным. Частоты молекулярных колебаний для воды имеют такие же характеристические значения 0,2; 0,4; 0,43 эв. как для свободных молекул.

Когда энергия нейтрона уменьшается до 0,2 эв, то эффективное рассеяние изменяется от значения для свободного протона до значения для жесткой молекулы H_2O . Это изменение связано с ростом эффективного сечения рассеяния и с уменьшением средней логарифмической потери энергии на одно столкновение ξ . Произведение же этих величин, т.е. замедляющая способность $\xi \sigma_s$ для воды, остается почти такой же как для свободного водорода. Это не является, по-видимому, результатом подобия обоих замедлителей, но вероятнее всего-случайной компенсацией роста σ_s и уменьшения ξ .

Попытаемся рассчитать произведение $\sigma_s \cdot \xi$ с учетом заторможенности вращения, свободной трансляции и нулевых колебаний молекулы воды. Полученное значение $\sigma_s \cdot \xi$ для воды немного меньше измеренной величины, но пока не выяснена причина этого расхождения.

Однако прежде чем перейдем к этим расчетам и исследованию механизма термализации более подробно для воды, остановимся на другом характерном примере противоположного свойства, а именно — на отличии от максвелловского спектра в случае водородистого циркония; это тем более необходимо, что развитый здесь формализм применим затем к воде. В случае среды кристаллического строения легче развить количественную картину и учесть межуатомную связь при расчете процесса термализации. Опыт находится в полном согласии с теоретическим представлением о механизме явления; согласно этой модели атом водорода движется в изотропной потенциальной яме гармонического осциллятора, имеющей уровни $E_n = n\omega$, где $\omega = 0,13$ эв. Эта модель соответствует реальному положению вещей, ибо атом водорода находится в окружении атомов циркония, а именно в центре тетраэдра, образованного атомами циркония. В такой ситуации атом водорода может обмениваться энергией с нейтроном только квантами $\omega = 0,13$ эв., т.е. значительно больше, чем тепловая энергия кТ.

Из этого следует, что спектр нейтронов не может находиться в равновесии с атомами замедлителя, т.е. не будет спектром Максвелла. Тогда для реакторов зависимость реактивности от температуры замедлителя не может быть, как это обычно можно сделать, даже приближенно /при слабом поглощении/ описана с помощью температуры нейтронов. Рассмотрим случай ZrH_2 , когда протон связан в кристалле, и случай воды вместе, чтобы можно было лучше понять механизм рассеяния и замедления.

Преобразуем формулу /4.9/ для случая, когда рассеивающее ядро является протоном, т.е. когда $M = m$, затем рассмотрим только непосредственное рассеяние $\nu = \nu'$ и опустим значок ν . Тогда функция колебательного движения будет:

$$\langle \chi_{\nu\nu}^{\nu} \rangle_T = \prod_{\lambda} e^{-\frac{(\hbar^2 c^2(\lambda))^2}{2m\omega_{\lambda} N} \frac{z+1}{z-1}} e^{\frac{(\hbar^2 c^2(\omega))^2 \sqrt{z} (\sqrt{z} e^{-i\omega_{\lambda} t} + \frac{1}{\sqrt{z}} e^{-i\omega_{\lambda} t})}{2m\omega_{\lambda} N (z-1)}},$$

где $z = e^{\omega/kT}$.

Воспользуемся теперь формулой для функции Бесселя с помощью производящей функции /24/

$$e^{\frac{x}{2}(y + \frac{1}{y})} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} y^n I_n(x). \quad /5.2/$$

Вводя обозначения:

$$y = \frac{1}{\sqrt{z}} e^{i\omega t}$$

$$x = \frac{(\frac{1}{2}e^{\frac{\omega}{2kT}})^2 \sqrt{z}}{m\omega_\lambda N(z-1)}$$

и учитывая, что $\frac{\sqrt{z}}{z-1} = \frac{1}{2\sinh \frac{\omega}{2kT}}$, $\frac{z+1}{z-1} = \operatorname{ctgh} \frac{\omega}{2kT}$,

получим с помощью производящей функции для бesselевых функций от мнимого аргумента:

$$\langle \chi^v \rangle_T = \prod_{\lambda} e^{-\frac{(\frac{1}{2}e^{\frac{\omega}{2kT}})^2}{2m\omega_\lambda N} \operatorname{ctgh} \frac{\omega}{2kT}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in_\lambda \omega_\lambda t} e^{-\frac{n_\lambda \omega_\lambda}{2kT}} I_{n_\lambda}(x). \quad /5.3/$$

Для малых значений x бesselевые функции можно разложить в ряд и взять только первый член разложения:

$$I_n(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!(n+k)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{n+2k} \approx \left(\frac{x}{2}\right)^{|n|} \frac{1}{|n|!},$$

причем $I_{-n}(x) = (-1)^n I_n(x)$.

Ряд /5.3/ представляет собой разложение колебательной функции в ряд Фурье; коэффициенты при $e^{in_\lambda \omega_\lambda t}$ являются вероятностями нахождения системы в состоянии n_λ с энергией $n_\lambda \omega_\lambda$ и полная энергия обмена $\epsilon = \sum n_\lambda \omega_\lambda$ является суммой вклада всех колебаний.

Функция колебательного движения $\langle \chi^v \rangle_T$ может быть записана также в следующем виде, который будет удобен для дальнейших расчетов

$$\langle \chi^{\nu} \rangle_T = e^{\frac{1}{N} \sum_{\lambda} (\vec{x} \vec{z}(\lambda))^2 f(\omega_{\lambda}, T, t)},$$

/5.4/

где функция $f(\omega_{\lambda}, T, t) = \frac{1}{2m\omega_{\lambda}} \left[(1+n_{\lambda})(e^{-i\omega_{\lambda}t} - 1) + n_{\lambda}(e^{i\omega_{\lambda}t} - 1) \right]$.

получена из /5.1/ путем перехода от переменной Z к переменной n при помощи соотношения $n = \frac{1}{z-1}$. Покажем, что из формулы /5.4/ путем соответствующего предельного перехода получается выражение, определяющее рассеяние свободным водородом.

Для свободного протона, т.е. когда энергия нейтрона велика по сравнению с $k\theta$ и $T \gg \theta$, рассеяние определяется только функцией трансляционного движения:

$$\langle \chi^+ \rangle_T = e^{-\frac{x^2}{2m} (it + t^2 kT)}$$

/5.5/

В формуле /5.4/ мы должны положить $t \rightarrow 0$, так как условие $E \gg k\theta$ означает, что продолжительность столкновения мала по сравнению с периодом колебаний. Тогда с точностью до членов порядка t^2 будем иметь:

$$f(\omega, T, t) = \frac{1}{2m\omega} \left[(\langle n \rangle_T + 1)(e^{-i\omega t} - 1) + \langle n \rangle_T (e^{i\omega t} - 1) \right] \approx$$

$$\approx -\frac{it}{2m} - \frac{t^2}{2m} \omega \left(\langle n \rangle_T + \frac{1}{2} \right),$$

где $\omega \left(\langle n \rangle_T + \frac{1}{2} \right)$ - средняя энергия осциллятора \bar{E} , которая при $T \gg \theta$ переходит в $\bar{E} = kT$. Следовательно, /5.4/ в предельном случае рассеяния на свободном протоне переходит в формулу:

$$\langle \chi^{\nu} \rangle_T = e^{-\frac{1}{N} \sum (\vec{x} \vec{z}(\lambda))^2 \frac{(it + t^2 kT)}{2m}}$$

/5.6/

Используя известное соотношение полноты для нормальных колебаний в кристалле /25^а/ см. также приложение У1/

$$\frac{1}{N} \sum_{\lambda} c_{\lambda}^2 = 1,$$

закключаем, что формулы /5.5/ и /5.6/ совпадают.

В случае, если частоты всех колебаний одинаковы /Эйнштейновская модель кристалла/ тогда, вынося f за знак суммы, получаем из /5.4/

$$\langle \chi^v \rangle_T = e^{-\hbar^2 f(\omega, T, t)} \quad /5.7/$$

Обратимся теперь к кристаллу ZrH_2 ; он имеет структуру такого рода, что каждый атом водорода окружен 4 атомами циркония, находящимися в вершинах тетраэдра. Экспериментальные данные для этого кристалла можно хорошо описать с помощью модели осциллятора Эйнштейна для оптических колебаний решетки. Как известно, двухатомная кристаллическая решетка имеет акустический спектр /спектр Дебая/, являющийся результатом колебаний водорода в одинаковой фазе с атомами циркония /энергия в интервале 0.-0,025 эв/, и оптический спектр / в данном случае принимая одну частоту, это просто будет уровень с энергией 0,13 эв/, являющийся результатом колебаний водорода и атомов циркония с противоположной фазой. Тот факт, что водород расположен в середине тетраэдра вполне симметрично, заставляет предполагать что три нормальные колебания атома водорода, соответствующие трем возможным перемещениям из положения равновесия, имеют одинаковую частоту. Можно принять, что атом водорода находится в потенциальном поле изотропного гармонического осциллятора.

Следовательно, оптической частоте колебаний водорода ω_0 соответствует функция

$$\langle \chi_0^v \rangle_T = e^{-\hbar^2 f(\omega_0, T, t)} \quad /5.8/$$

Применение модели осциллятора Эйнштейна для динамики водородного атома в оптических колебаниях решетки ZrH_2 требует некоторого оправдания. С этой целью рассмотрим наглядную, но не точную картину линейной цепочки тяжелых и легких атомов, расположенных попеременно. Если масса тяжелых атомов много больше массы легких атомов, то, очевидно, колебания атомов обоого вида в противоположной фазе можно свести к колебаниям

легких атомов в фиксированной решетке-цепочке тяжелых атомов. Тогда и частота будет одна, хотя, вообще говоря, будем иметь некоторое распределение частот с шириной порядка отношения массы легкого атома к массе тяжелого, что для ZrH_2 составляет $1/91$, или примерно 1%. Для трехмерной решетки картина усложняется и следовало бы сказанное приближение уточнить.

Довольно трудным делом является трактовка динамики протона в акустических колебаниях решетки. Для случая длинноволновых колебаний можно предположить, что атом водорода будет следовать за движением соседнего атома циркония, т.е. колебаться в фазе с атомами циркония. Эти колебания можно учесть в дебаевском приближении и, часть суммы в показателе экспоненциальной функции /5.4/ можно вычислить, воспользовавшись имеющимися теоретическими методами решения вопроса неупругого рассеяния медленных нейтронов кристаллом Дебая /25/.

Однако для коротковолновой части спектра предположение о движении всех атомов элементарной ячейки кристалла в одной фазе неправильно так же, как и применение модели Дебая. Однако, так как до сих пор мы не имеем разработанной динамики движения протонов в коротковолновой части акустического спектра, то применим предыдущую формулу для длинноволновой части и в этом случае, учитывая одинаковым образом весь акустический спектр.

Для непрерывного акустического спектра в кристалле динамика протона учитывается функцией, которую получим из формулы /5.4/, переходя от суммы к интегралу /см. приложение У1/:

$$\langle \chi_a^v \rangle_T = e^{\kappa^2 \int_0^{\kappa_0} P(\omega) f_0(\omega, T, t) d\omega},$$

Поскольку колебания атома водорода происходят в одной фазе с атомами циркония, то здесь входит функция f_0 , которая в отличие от функции f из /5.4/, имеет в знаменателе массу M атома циркония. Но $\kappa^2 = 2m[E^4 E - 2z(\epsilon \epsilon')^2]$ содержит m - массу нейтрона, поэтому имеем

$$\kappa^2 f_0 = \mu \kappa^2 f,$$

где f уже из /5.4/.

Тогда

$$\langle \chi_a^v \rangle_T = e^{-\frac{\chi^2 \mu}{2M}} \int_0^{k\theta} P(\omega) f d\omega, \quad /5.9/$$

где θ - температура Дебая, $\mu = \frac{m}{M} = \frac{1}{91}$, $P(\omega) = \frac{3\omega^2}{k^3\theta^3}$ - распределение частот акустического спектра.

Однако, в этом виде /5.8/ и /5.9/ было бы трудно использовать для проведения конкретных расчетов. Проведем дальнейшее упрощение, считая что акустические колебания вызывают только уширение энергетического распределения нейтронов, которые обмениваются энергией лишь с оптически-ми колебаниями. Для этого разложим в ряд по степеням ωt и сохраним только члены включительно с t^2 :

$$f(\omega, \tau, t) = -\frac{1}{2m} \left[it + t^2 \left(n + \frac{1}{2} \right) \omega \right].$$

Тогда

$$\langle \chi_a^v \rangle_T = e^{-\frac{\chi^2}{2M} it \int_0^{k\theta} P(\omega) d\omega} e^{-\frac{\chi^2}{2M} t^2 \int_0^{k\theta} P(\omega) \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) d\omega}$$

Учитывая, что распределение P нормировано к единице, и обозначая $\bar{E} = \int_0^{k\theta} \omega P(\omega) \left(n + \frac{1}{2} \right) d\omega$ - среднюю энергию на одну степень свободы акустических колебаний, имеем:

$$\langle \chi_a^v \rangle_T = e^{-\frac{\chi^2}{2M} (it + t^2 \bar{E})} \quad /5.10/$$

Если $\theta \lesssim T$, то \bar{E} будет немного больше kT , но можно принять, что в классическом случае $\bar{E} = kT$, тогда для полной функции, т.е. для произведения /5.8/ и /5.10/, будет:

$$\langle \chi_a^v \rangle_T = e^{\frac{\chi^2}{2M} f(\omega, \tau, t)} e^{-\frac{\chi^2}{2M} (it + t^2 kT)} \quad /5.11/$$

Акустическая часть функции /5.10/ имеет такой же вид, как для свободного трансляционного движения с массой M атома циркония, но не протона /она учитывает динамику протона, связанного с атомами циркония и следующего за их колебаниями/.

Для дифференциального поперечного сечения рассеяния получаем из /2.5/

$$\langle \sigma(\theta, \epsilon) \rangle_T = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \langle \sigma_n(\theta, \epsilon) \rangle_T$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma_n(\theta, \epsilon) \rangle_T &= \frac{a^2}{2\pi} \frac{k}{k_0} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\epsilon t} \langle X^{\nu} \rangle_T dt = \\ &= \frac{a^2}{2\pi} \frac{k}{k_0} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\epsilon t} e^{-\frac{\chi^2}{2m\omega_0} \operatorname{ctgh} \frac{\omega_0}{2kT}} e^{in\omega_0 t} e^{\frac{n\omega_0}{2kT}} I_{-n}(\chi) e^{-\frac{\chi^2}{2M}(it+t^2kT)} dt \end{aligned}$$

Здесь вы ввели вместо $e^{\chi^2 f(\omega_0, T, t)}$ ее выражение через /5.3/ и кроме того, учли тот факт, что обмен энергии $n\omega_0$ между нейтроном и оптическими колебаниями решетки соответствует член n в формуле /5.3/. Поперечное сечение, соответствующее получению энергии нейтроном, будет $\langle \sigma_{-n} \rangle$.

Интегрируя и подставляя $a^2 = \frac{\sigma_0}{4\pi}$, имеем:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_n(\theta, \epsilon) \rangle_T &= \frac{\sigma_0}{4\pi} \left(\frac{E'}{E} \right)^{1/2} \left(\frac{M}{2\pi kT \chi^2} \right)^{1/2} e^{-\chi^2 \gamma} e^{\frac{n\omega_0}{2kT}} I_{-n}(\chi) \times \\ &\times e^{-\frac{M}{2kT \chi^2} \left(\epsilon + n\omega_0 + \frac{\chi^2}{2M} \right)^2}, \end{aligned} \quad /5.12/$$

где

$$\gamma = \frac{1}{2m\omega_0} \operatorname{ctgh} \frac{\omega_0}{2kT}.$$

Следовательно, акустический член привел к уширению энергетического распределения /появление в экспоненте члена $\chi^2/2M$ /. Для интересующего нас интервала температур, когда $\omega_0/kT \gg 1$, можно разложить выражение /5.12/ по степеням $e^{-\omega_0/kT}$.

Разлагая теперь в ряд по степеням $e^{-\omega_0/kT}$ имеем для γ :

$$\operatorname{ctgh} \frac{\omega_0}{2kT} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\omega_0}{2kT} \right)^{2n} \frac{1}{(2n)!} = 1 + \frac{1}{2!} \left(\frac{\omega_0}{2kT} \right)^2 + \dots$$

Следовательно, взяв только первый главный член, получим

$$e^{-\gamma x^2} = e^{-\frac{x^2}{2m\omega_0}}$$

Разложение бесселевой функции дает:

$$\begin{aligned} I_{-n} \left(\frac{x^2}{2m\omega_0 \operatorname{Sinh} \frac{\omega_0}{2kT}} \right) &= \left(\frac{1}{2 \operatorname{Sinh} \frac{\omega_0}{2kT}} \cdot \frac{x^2}{2m\omega_0} \right)^{|n|} \cdot \frac{1}{|n|!} = \\ &= \left(\frac{x^2}{2m\omega_0} \right)^{|n|} \frac{1}{|n|!} \left(\frac{1}{2 \operatorname{Sinh} \frac{\omega_0}{2kT}} \right)^{|n|} \approx \left(\frac{x^2}{2m\omega_0} \right)^{|n|} \frac{1}{|n|!} e^{-\frac{|n|\omega_0}{2kT}} \end{aligned}$$

Окончательно для поперечного сечения вместо /5.12/ имеем

$$\begin{aligned} \langle \sigma_n(\theta, \epsilon) \rangle_T &= \frac{\sigma_0}{4\pi} \left(\frac{E'}{E} \right)^{1/2} \left(\frac{M}{2\pi kT x^2} \right)^{1/2} \left(\frac{x^2}{2m\omega_0} \right)^{|n|} \frac{1}{|n|!} \times \\ &\times e^{\frac{(n-|n|)\omega_0}{2kT}} e^{-\frac{M}{2kT x^2} \left(\epsilon + n\omega_0 + \frac{x^2}{2M} \right)^2} \end{aligned} \quad /5.13/$$

В этой формуле содержится одновременно и масса M атома циркония и масса m атома водорода. Член, соответствующий передаче энергии нейтроном колебаниям молекулы для $n \neq 0$, не зависит в первом приближении, как следует из /5.13/, от температуры.

Математическая форма /5.12/ оказалась удобной для программирования расчетов на электронной машине. Для данной энергии E падающих нейтронов и угла рассеяния θ , можно рассчитать распределение по энергиям рассеянных нейтронов $\sigma(\theta, \epsilon)$.

Расчетное выражение имело вид

$$\frac{4\pi}{\sigma_0} \langle \sigma(\theta, \epsilon) \rangle_T = \sum_{n=-\infty}^{\infty} F_n(\theta, \epsilon)$$

$$F_n(\theta, \epsilon) = \left(\frac{E'}{E}\right)^{1/2} (4\pi kT M \zeta)^{-1/2} e^{-3/A} e^{\frac{n\omega_0}{2kT}} I_{-n}(3/B) e^{-\frac{[E'-E+n\omega_0+\mu\zeta]^2}{4kT M \zeta}}, \quad /5.14/$$

где

$$\zeta = E' + E - 2(EE')^{1/2} \cos\theta$$

$$\mu = 1/g_1$$

$$\omega_0 = 0,13 \text{ эВ}$$

$$A = \omega_0 \operatorname{tgh} \frac{\omega_0}{2kT}$$

$$B = \omega_0 \operatorname{sinh} \frac{\omega_0}{2kT}$$

Пользуясь приведенными значениями параметров, можно было с помощью быстродействующей электронной машины, могущей в течение одной минуты рассчитать сто значений $\sigma(\theta, \epsilon)$, сравнить полученные теоретические данные с опытными данными для $2r \text{ H}_2$. Совпадение результатов оказалось вполне хорошее. Сначала расчеты были проведены для распределения холодных нейтронов с энергией 0,004 эВ, рассеянных под углом 90° . При неупругих соударениях нейтроны получают энергию от кристаллической решетки и тогда энергетическое распределение рассеянных нейтронов позволяет сделать заключение относительно механизма соударения и динамики решетки.

Полученная экспериментальная кривая хорошо согласуется с расчетной кривой /рис.4/.

Непрерывные энергетические состояния решетки в интервале энергии от 0 до 0,025 эВ образуют акустический спектр. Затем при энергии 0,13 эВ существует максимум, соответствующий оптическим колебаниям. Ширина этого максимума обусловлена акустическими колебаниями /явление Доплера/ и пропорциональна квадратному корню из температуры. Так как вероятность

получения нейтроном энергии от кристаллической решетки зависит от заполнения оптического уровня, а это последнее возрастает экспоненциально с температурой, то для сравнения результатов измерения делались при двух температурах, а именно 24°C и 393°C . При температуре 393°C возбуждается также второй энергетический уровень $2\omega_0$ и, следовательно, на экспериментальной кривой должен быть второй максимум при такой энергии рассеянных нейтронов, что действительно и наблюдается. Величина максимума совпадает с теоретическим значением, но ширина значительно больше расчетной ширины. Это можно объяснить тем, что второй максимум на экспериментальной кривой обусловлен также нейтронами, испытывающими двойное рассеяние, тогда как теоретическая величина не учитывает многократного рассеяния. Для первого максимума при энергии $0,13$ эв вероятность больше чем одного столкновения мала и поэтому здесь мы не наблюдаем дополнительного, кроме доплеровского, уширения кривой распределений. Для очень малых энергий рассеянных нейтронов /ниже $0,03$ эв/ мы не можем теоретически рассчитать распределения энергии, ибо нет точного учета взаимодействия нейтронов с акустическими колебаниями протона в решетке, как об этом уже говорилось. Но оптические колебания протона в решетке ZrH_2 правильно отражают действительный механизм взаимодействия медленных нейтронов с протоном. Опыт подтверждает модель, согласно которой обмен энергией возможен только квантами ω_0 , большими по сравнению с тепловой энергией kT , что имеет своим следствием невозможность равновесия спектра нейтронов с атомами замедлителя. Действительный спектр нейтронов в водородистом цирконии будет значительно отличаться от спектра Максвелла. Индикатрисса рассеяния $\sigma(E \rightarrow E')$, которую получим из /5.13/ интегрированием по углам, будет функцией дискретной переменной $\epsilon = n\omega_0$, которая изменяется скачками ω_0 , большими по сравнению с энергией теплового движения kT . Поэтому вполне ясна причина невозможности достижения равновесия со средой в случае кристалла ZrH_2 .

Перейдем теперь к менее строгому рассмотрению процесса термализации в воде, где, как нам уже известно, опыт показал отсутствие влияния химической связи на рассеяние нейтронов, в противоположность только что рассмотренному примеру водородистого циркония.

Чтобы применить развитый выше математический формализм, надо соответственно модифицировать модель. В этом случае модель будет наложением двух картин: молекулярной и кристаллической, поскольку структура жидкости является как бы переходной от одной картины к другой. Предполагаем, что функция χ является произведением трех функций, описывающих колебательное, вращательное и трансляционное движение:

$$\begin{aligned} \langle \chi \rangle_T &= \langle \chi^v \rangle_T \langle \chi^r \rangle_T \langle \chi^t \rangle_T = \\ &= e^{-\frac{1}{N} \sum (\vec{x}^2 \vec{z}_\lambda)^2 f(\omega_\lambda, T, t)} = \prod_\alpha e^{-x^2 \lambda_\alpha f(\omega_\alpha, T, t)} \end{aligned} \quad /5.15/$$

Условие нормировки теперь будет $\lambda_v + \lambda_t + \lambda_r = 1$. В этой модели предполагается, что атом водорода занимает вполне определенное положение равновесия в пространстве, и отклонение от этого положения подчиняется динамике гармонического осциллятора. Молекула H_2O при этом имеет фиксированное окружение, как в случае кристаллической решетки. Молекулярная картина дает возможность представления волновой функции в виде произведения функций, отвечающих разным видам движения. Функция для каждого вида движения будет определена при рассмотрении движения атома водорода, исходя из молекулы H_2O как основной динамической ячейки.

Когда энергия обмена с нейтронами уменьшается, тогда продолжительность времени в течение которого нужно знать движение атома водорода увеличивается, согласно доказанному положению Вика о связи между энергией и продолжительностью столкновения. Для очень малых энергий обмена модель решетки, согласно которой окружение данной молекулы H_2O является фиксированным, становится не адекватной действительности. В этом случае нужно учесть более детально динамику жидкости, что не является вполне возможным. Поэтому при построении функции χ , будем все же исходить из этой упрощенной модели для воды. Итак предполагаем, что колебательное движение будем иметь в основном тот же самый динамический характер, как в случае свободной молекулы. Вращательное движение заменим крутильными гармоническими колебаниями около фиксированного положения молекулы, трансляционное же движение, грубо

говоря, соответствует акустическим колебаниям решетки. Каждому виду колебаний припишем одну частоту и амплитуду. Как увидим, это довольно хорошее приближение к действительности /за исключением вращательного движения/ в интересующем нас для процесса термализации интервале энергии.

Каждый из факторов в /5.15/ имеет два предельных значения. Во-первых, в случае большой энергии, т.е. когда $\omega t \ll 1$. Разлагая, как прежде, функцию f в ряд, получаем:

$$e^{-\frac{x^2}{2m} \lambda_\alpha (it + t^2 \cdot \bar{E}_\alpha)}, \quad /5.16/$$

где

$$\bar{E}_\alpha = \omega_\alpha (n + \frac{1}{2}) = kT \quad \left(\frac{\omega}{kT} \ll 1 \right).$$

Второй предельный случай имеем, когда при столкновении нет обмена энергии /упругое столкновение/. Тогда в формуле /5.3/ нужно положить $n=0$ это дает:

$$e^{-x^2 \delta_\alpha}, \quad /5.17/$$

где

$$\delta_\alpha = \frac{\lambda_\alpha}{2m\omega_\alpha} \operatorname{ctgh} \frac{\omega_\alpha}{2kT}.$$

Перейдем теперь к определению вида отдельных членов произведения /5.15/. Что касается колебательной функции, то можно принять с хорошим приближением, что колебания не отличаются от колебаний свободной молекулы имеющей частоты 0,2; 0,4 и 0,43 эв, следовательно для нейтронов с энергией меньшей 0,2 эв для этой функции можно взять предельный случай упругого столкновения /5.17/. Этот вопрос был рассмотрен также Кригером и Нелькиным /17/, которые пришли к тому же виду волновой функции колебательного движения молекулы H_2O . Таким образом:

$$\langle X^v \rangle_T = e^{-x^2 \delta_v}. \quad /5.18/$$

Надо учесть то обстоятельство, что в начальный момент времени все молекулы

могут находиться в основном состоянии колебательного движения, чему соответствует принятие для этого движения $T=0$. Тогда $\operatorname{ctgh} \frac{\omega_{\kappa}}{2kT} = 1$ и $\delta_{\nu} = \lambda_{\nu}/2m\omega_{\nu}$. Это можно получить непосредственно также из формулы /4.10/. Следовательно, колебательная функция учитывает в этом приближении лишь нулевые колебания молекул. Для энергии нейтронов меньшей 0,2 эв мы должны знать только отношение $\lambda_{\nu}/\omega_{\nu}$. Если нужно учесть также нейтроны с энергией 0,2 эв, то необходимо принять во внимание обмен энергией с колебаниями наименьшей частоты 0,2 эв, учитывая при этом вклад колебаний высших частот в упругое рассеяние. Для нейтронов с энергией большей 0,4 эв, вероятно, можно принять, что все колебания имеют какую-то среднюю частоту ω_{ν} . Мы будем рассматривать для простоты только случай нейтронов с энергией меньшей 0,2 эв.

Относительно функции, описывающей вращательное движение молекулы H_2O нужно заметить, что точное установление ее вида с учетом торможения вращения со стороны других молекул в силу междумолекулярного взаимодействия, как уже отмечалось, пока не удается при данном состоянии теории жидкости. Поэтому вводится приближение, согласно которому потенциал заторможенного вращения заменяется потенциалом гармонического осциллятора. Однако это является грубым приближением, ибо потенциал заторможенного вращения связан с непрерывной энергетической полосой, и, следовательно, имеет более сложную динамику, чем динамика малых крутильных колебаний около фиксированного положения равновесия, которое вводится для упрощения картины.

Согласно Брокгаузу /22/ нужно приписать частоте крутильных колебаний значение 0,06 эв, полученное при рассеянии слоем воды холодных нейтронов под углом 90° . Амплитуду λ_r можно получить, рассматривая предельный случай большой энергии нейтронов $E \gg \omega_r$, когда можно ожидать такого же рассеяния, как в случае свободно вращающейся жесткой молекулы H_2O . Такое рассеяние можно описать с помощью модифицированного метода тензора массы Сакса-Теллера, рассмотренного Кригером и Нелькиным, которые получили для $\lambda_r = 0,43$. Это получено путем взятия среднего по всем ориентациям молекулы \vec{I} , так чтобы иметь эквивалентное изотропное движение. Приближение /5.18/ получено путем подобной процедуры, примененной к крутильным колебаниям жесткой молекулы. Взятие среднего по всем ориентациям

молекулы для получения эквивалентного изотропного движения является несовершенной процедурой и поэтому нельзя ожидать, что можно точно определить распределение момента количества движения, переданного заторможенному вращению, с помощью нашей модели изотропного осциллятора. Вследствие этого нельзя ожидать хорошего согласия при сравнении полученных расчетных результатов для $\sigma(\theta, \epsilon)$ в зависимости от угла рассеяния с экспериментом. Лучшее согласие будет, наверное, для интегрального поперечного сечения.

Следовательно в случае заторможенного вращения получаем следующее выражение для функции $\langle x^r \rangle_T$:

$$\langle x^r \rangle_T = e^{-\frac{x^2 \lambda_r}{2m\omega_r} \operatorname{ctgh} \frac{\omega_r}{2kT}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\omega_r t} e^{-\frac{n\omega_r}{2kT}} I_{-n}(x). \quad /5.19/$$

Наконец, перейдем к определению функции трансляционного движения. Мы уже отмечали, что для кристаллов этому движению соответствуют акустические колебания, поэтому в данной модели воды подставим для функции трансляционного движения функции вида /5.11/

$$\langle x^t \rangle_T = e^{-\frac{x^2}{2 \cdot 18 m} (it + t^2 \cdot kT)} \quad /5.20/$$

Это оправдывается еще и тем, что для воды температура Дебая θ мала / $\theta = 300^\circ \text{K}$ / и поэтому трансляционное движение можно рассматривать как свободное, а оно как раз имеет вид /5.20/ с массой $M = 18$ м. Сравнивая эту функцию с предыдущими /5.19/ или /5.18/, получаем для λ_t значение $1/18$. Следовательно, из этого вида функции трансляционного движения явствует, что распределение рассеянных нейтронов с энергией меньшей чем $\omega_r = 0,06$ эв, будет такое же, как для рассеяния идеальным одноатомным газом с массой 18, что подтверждают эксперименты Брокгауза.

Окончательно для полной функции $\langle x \rangle_T$ молекулы воды будем иметь:

$$\langle x \rangle_T = e^{-x^2(\gamma_v + \gamma_r)} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\omega_r t} e^{-\frac{n\omega_r}{2kT}} I_{-n}(x) e^{-\frac{x^2}{2M} (it + t^2 kT)}$$

Подставив $\langle \chi \rangle_T$ в выражение для дифференциального сечения рассеяния, получим выражение, аналогичное /5.12/, со следующими значениями параметров: γ нужно заменить на $\gamma_v + \gamma_r$
 ω_0 " " на ω_r
 $M = 18m$.

Преобразуя к виду /5.14/, удобному для расчетов, имеем следующие параметры для воды:

$$\omega_r = 0,06 \text{ эв.}$$

$$\mu = 1/18$$

$$B = \frac{\omega_r}{\lambda_r} \sinh \frac{\omega_r}{2kT} = 0,203 \text{ эв.}$$

$$\frac{1}{A} = \frac{1}{\frac{\omega_r}{\lambda_r} \tanh \frac{\omega_r}{2kT}} + \frac{\omega_v}{\lambda_v}$$

$$A = 0,0971 \text{ эв.}$$

$$kT = 0,0255 \text{ эв.}$$

Полученные теоретические результаты сравниваются с опытом в следующей таблице:

E (эв.)	Теория			Эксперимент	
	Свободный Н		В о д а		В о д а
	σ_{tot}	$\int \cdot \sigma$	$\int \cdot \sigma$	σ_{tot}	σ_{tot}
0,02	21,7	-	-	54,8	56,7
0,0537	20,9	4,9	2,7	36,6	39,2
0,0860	20,7	9,5	11,7	34,0	34,5
0,1170	20,6	11,9	11,7	31,4	31,7
0,20	20,5	12,7	13,0	27,5	27,7

Имеет место хорошее совпадение теории с экспериментом. Из таблицы видно, что для свободного водорода и водорода, связанного в воде, имеем почти одинаковое значение замедляющей способности. Таким образом, теоретическая картина, учет торможения вращения путем введения изотропного гармонического осциллятора с эффективной массой $m^* = \frac{1}{3} S_p(m^{-1}) = 2,10$ и учет нулевых колебаний молекулы приводит к хорошему согласию с экспериментом.

Интересно было бы рассмотреть интервал энергии выше 0,2 эв, когда необходимо учитывать неупругие колебательные переходы. Упрощенный расчет проведенный Дарделем /18/, не выявил большого влияния этого эффекта на процесс замедления. Учет поглощения в этом интервале, по-видимому, изменил бы результат. Например, Pu^{239} имеет резонансное поглощение при 0,3 эв; было бы интересно исследовать влияния химической связи на абсорбцию.

Производились также измерения спектра нейтронов в реакторах, в которых замедлителем являлась тяжелая вода. Измерения делались на реакторе CP-3 в Аргонне /26/ и на норвежском реакторе Иенер /27/. Для обоих реакторов отношение состава было почти одинаковое: $N_u/N_{D_2O} = 0,084$.

Измерения показали, что в обоих случаях спектр нейтронов является максвелловским с температурой на 20-25% больше температуры замедлителя 325° К. Сравнение с теоретической формулой /3.19/ не будет совсем точно, ибо эта формула применима к однородному одноатомному реактору, тогда как в данном случае имеем гетерогенные реакторы с тяжелой водой в качестве замедлителя. Однако, если применить эту формулу для оценки величин, считая, что в среднем свойства D_2O соответствуют одноатомному газу, тогда для параметра поглощения Δ имеем

$$\Delta = \frac{4 \cdot \sigma_a(325^\circ)}{\sigma_s \cdot \xi} = \frac{4 \cdot 0,084 \cdot 6,6 \cdot 0,7}{2,3,3 \cdot 0,725 + 4 \cdot 0,125} = 0,29$$

где приняты следующие значения: для дейтерия - $\xi = 0,725$, $\sigma_s = 3,3$ барна; для кислорода - $\xi = 0,125$, $\sigma_s = 2$ барна; для урана - $\sigma_a = 6,6$ барна; коэффициент 0,7 учитывает тот факт, что в гетерогенном реакторе плотность тепловых нейтронов в уране равна 70% плотности тепловых нейтронов в замедлителе. Применяя теперь формулу /3.19/, получаем для эффективной температуры нейтронов:

$$T_n = T [1 + 0,46 \Delta] = 1,13 T,$$

т.е. на 13% больше температуры среды, тогда как эксперимент дает на 20-25% больше. Это разногласие указывает частично, во всяком случае, на несоответствие модели одноатомного газа в применении к тяжелой воде.

В случае экспериментов Пула с обычной водой получается, что при температуре среды 291°K и эффективном сечении поглощения $\sigma_a = 4,6$ барна на один атом водорода, значение температуры нейтронов на 26% больше температуры среды.

Формула же /3.19/ в этом случае дает

$$\Delta = \frac{2\sigma_a(kT)}{\sigma_s} = \frac{2 \cdot 4,6}{20} = 0,46, \quad \xi = 1$$

$$T_n = 1,21 T,$$

т.е. на 21% выше температуры среды, что в пределах ошибок эксперимента, оцениваемых Пулом в 35°K , дает неплохое согласие теории с экспериментом. Учитывая тщательность этих опытов, тот факт, что поглощение меняется в довольно широких пределах от 1,5 до 7,6 барна на один атом водорода и что измерения делались при двух температурах 291°K и 369°K , совпадение между теорией и опытом говорит за то, что для обычной воды применима формула для температуры нейтронов, а, следовательно, и модель одноатомного газа. Таким образом, как ни странно, но химическая связь в этом случае мало влияет на форму спектра.

Дело, по-видимому, в том, что индикатрисса рассеяния $\sigma(E \rightarrow E')$, полученная путем интегрирования выражения типа /5.13/, является почти непрерывной функцией $\epsilon = h\omega_r$, ибо энергия ω_r вращательного движения одного порядка с тепловой энергией, поэтому в результате обмена энергией может установиться равновесие со средой, в противоположность случаю для $Z_r \text{H}_2$.

§ 6. Пространственная зависимость потока нейтронов

Зависимость потока нейтронов от координат имеет важное значение для реакторов с отражателем. Благодаря поглощению нейтронов ураном, которое не следует точно закону поглощения $1/v$, характеристический спектр активной зоны значительно передвинут в сторону больших скоростей по сравнению со спектром Максвелла. Центральная часть активной зоны характеризуется спектром, зависящим от состава активной зоны. На периферии же активной зоны начинают играть роль нейтроны, термализованные в отражателе, в котором благодаря малому поглощению происходит процесс термализации и приближение к состоянию равновесия. Это сказывается тем, что по мере перехода от центральной части активной зоны к периферии возрастает деление ядер, обусловленное тепловыми нейтронами.

Пространственная зависимость потока нейтронов возникает также при соприкосновении двух сред с разной температурой. Пока нет ясности относительно зависимости спектра от расстояния от граничной поверхности. Интересно было бы определить расстояние, характеризующее переход от равновесного состояния в одной среде к равновесному состоянию в другой среде.

Наконец, возникает вопрос пространственной зависимости потока в случае неоднородных сред. До сих пор рассмотрены только некоторые простейшие проблемы, и делались попытки определения потока нейтронов в этих случаях [27^a].

Вопросы пространственной зависимости потока находятся пока еще в начальной стадии разработки. Сложность решения этой проблемы допускает применение упрощенной модели, вроде, например, модели тяжелого одноатомного газа. Даже такая упрощенная модель, наверное, не отвечающая действительному обмену энергией между нейтронами и атомами замедлителя, будет существенным элементом в попытках решения этого вопроса.

Учет пространственной зависимости потока нейтронов для бесконечной однородной среды возможно наиболее просто провести в диффузионном приближении. Это требует однако доказательства, что закон Фика справедлив отдельно для каждой величины скорости. Этот вопрос обсуждался [9] для приближения P_1 в теории транспорта, но в общем случае не доказано

применение закона Фика для каждой группы нейтронов в многогрупповой теории. Уравнения транспорта /1.2/ в приближении P_1 для одного измерения имеют вид /с точностью до членов порядка $\mu = m/M$ /

$$\begin{aligned} \sigma_a \varphi_0(z, u) + \frac{\partial \varphi_1(z, u)}{\partial z} &= - \frac{\partial q}{\partial u} \\ (\sigma_a + \sigma_s) \varphi_1(z, u) + \frac{1}{3} \frac{\partial \varphi_0}{\partial z} &= \int du' \sigma_1(u' \rightarrow u) \varphi_1(z, u'), \end{aligned} \quad /6.1/$$

где

$$- \frac{\partial q}{\partial u} = \int du' \sigma_0(u' \rightarrow u) \varphi_0(z, u') - \sigma_s(u) \varphi_0(z, u) \quad /6.2/$$

$$\sigma_\ell(u' \rightarrow u) = 2\pi \int_{-1}^{+1} dz \sigma(u' \rightarrow u, z) P_\ell(z), \quad \ell = 0, 1. \quad /6.3/$$

Независимой переменной вместо энергии взята летаргия $\frac{E}{kT} = e^{-u}$. Для того, чтобы из этих уравнений получить известное уравнение возраста-диффузии, нужно доказать, что во втором уравнении /6.1/ величина интеграла порядка $\mu \varphi_1(z, u)$. Для доказательства надо использовать выражение для $\sigma(u' \rightarrow u, z)$, данное формулой /2.12/. Далее, т.к. $\sigma_a(E)$ тоже имеет порядок μ , то, пренебрегая этими членами, получаем закон Фика:

$$\varphi_1(z, u) = - \frac{1}{3\sigma_s} \frac{\partial \varphi_0}{\partial z}. \quad /6.4/$$

Тогда первое уравнение /6.1/ переходит в уравнение диффузии /обобщаем на три измерения/

$$(-D \nabla^2 + \sigma_a) \varphi_0(\vec{r}, u) = - \frac{\partial q(\vec{r}, u)}{\partial u}, \quad /6.5/$$

где коэффициент диффузии

$$D = \frac{1}{3\sigma_s(u)} = \frac{1}{3\sigma_0}.$$

Уравнение диффузии можно получить, не пренебрегая членами порядка μ , а именно, из второго уравнения /6.1/ получаем транспортное сечение

$$\sigma_t = -\frac{1}{\varphi_1} \frac{1}{3} \frac{\partial \varphi_0}{\partial z} = \sigma_a + \sigma_s - \int du' \sigma_1(u' \rightarrow u) \frac{\varphi_1(u', z)}{\varphi_1(u, z)}, \quad /6.6/$$

что ведет к закону Фика в виде:

$$\varphi_1(z, u) = -\frac{1}{3\sigma_t} \frac{\partial \varphi_0}{\partial z} = -D_t \frac{\partial \varphi_0}{\partial z}, \quad /6.7/$$

где

$$D_t = \frac{1}{3} \frac{1}{\sigma_s(1 - \overline{\cos \theta}) + \sigma_a} = \frac{1}{3\sigma_t}.$$

Для средней величины $\overline{\cos \theta}$ получаем из сравнения /6.7/ с /6.6/

$$\sigma_t = \sigma_a + \sigma_s(1 - \overline{\cos \theta}) = \sigma_a + \sigma_s \left[1 - \sigma_s^{-1} \int du' \sigma_1(u' \rightarrow u) \frac{\varphi_1(u', z)}{\varphi_1(u, z)} \right] \quad /6.8/$$

$$\overline{\cos \theta} = \sigma_s^{-1} \int du' \sigma_1(u' \rightarrow u) \frac{\varphi_1(u', z)}{\varphi_1(u, z)}$$

а также уравнение диффузии - возраста:

$$\left(-D_t \nabla^2 + \sigma_a \right) \varphi_0(\vec{r}, u) = -\frac{\partial q(\vec{r}, u)}{\partial u}. \quad /6.9/$$

Чтобы можно было продвинуться дальше в разработке теории, необходимо вернуться немного к предыдущим уравнениям и определить плотность замедления q с помощью потока нейтронов φ .

Из уравнения /2.18/, переходя от x к E /ибо $E = x^2 kT$ /, получим для N /или φ /уравнение:

$$\varphi + E \frac{d\varphi}{dE} + EkT \frac{d^2\varphi}{dE^2} = \frac{\sigma_a}{\xi \sigma_0} \varphi = \frac{1}{4} \Delta \cdot \varphi. \quad /6.10/$$

Для бесконечной среды мы имели соотношение /3.1/

$$q(E) = \int_0^E \sigma_a(E) \varphi(E) dE ; \quad \frac{dq}{dE} = \sigma_a(E) \varphi(E) \quad /6.11/$$

Но из /6.10/ получаем:

$$\sigma_a \cdot \varphi = \left[\varphi + E \frac{d\varphi}{dE} + E k T \frac{d^2 \varphi}{dE^2} \right] \xi \sigma_0 = \left\{ \frac{d}{dE} \left[\varphi \cdot (E - kT) + E k T \frac{d\varphi}{dE} \right] \right\} \xi \cdot \sigma_0$$

Сравнивая /6.10/ и /6.11/ имеем:

$$\sigma_a(E) \varphi(E) = \frac{dq}{dE} = \frac{d}{dE} \left[\varphi \cdot (E - kT) + E k T \frac{d\varphi}{dE} \right] \xi \sigma_0 ,$$

что дает для плотности замедления следующие выражения:

$$q(E) = \left[\varphi \cdot (E - kT) + E k T \frac{d\varphi}{dE} \right] \xi \sigma_0 , \quad /6.12/$$

или

$$q(E) = \xi \sigma_0 E k T M(E) \frac{d\varphi}{dE} .$$

Для распределения Максвелла $\varphi(E) = \text{const.}$, следовательно $q=0$ /при равновесии число ускоряемых нейтронов равно числу замедляемых нейтронов/. Введем летаргию $u = \ln \frac{kT}{E}$ или $E = kT e^{-u}$. Тогда получаем соотношение для $q(u)$:

$$q(u) = \xi \sigma_0 \left[\varphi(u) (1 - 2e^u) - e^u \varphi'(u) \right]$$

$$\frac{1}{\xi \sigma_0} \frac{dq}{du} = -2e^u \varphi(u) + (1 - 3e^u) \varphi'(u) - e^u \varphi''(u) = -\frac{\sigma_a}{\xi \sigma_0} \varphi(u) . \quad /6.13/$$

Эти соотношения выведены для потока независимого от координат, но они справедливы в общем случае, поэтому, подставляя производную плотности замедления в уравнение /6.9/, имеем /здесь φ_0 отвечает прежнему φ /

$$\left(\frac{\sigma_a - D \nabla^2}{\xi \sigma_0} \right) \varphi_0(\vec{r}, u) = 2 \frac{kT}{E} \varphi_0 - (1 - 3 \frac{kT}{E}) \frac{\partial \varphi_0}{\partial u} + \frac{kT}{E} \frac{\partial^2 \varphi_0}{\partial u^2} . \quad /6.14/$$

Если теперь перейти к пределу большой энергии нейтронов, полагая $kT \rightarrow 0$, или $E/kT \rightarrow \infty$, то получим обычное уравнение возраста-диффузии:

$$(-D\nabla^2 + \sigma_a) \varphi_0 = -\sigma_0 \xi \frac{\partial \varphi_0}{\partial u} = -\frac{\partial q}{\partial u},$$

ибо $q = \xi \sigma_0 \varphi_0$, что следует из /6.13/ в пределе $kT \rightarrow 0$.

Однако в общем случае уравнение /6.14/ не может быть сведено к уравнению вида диффузии с соответственно измененными параметрами, ибо оно содержит вторую производную потока нейтронов.

Его можно привести к такому виду после упрощения, не переходя к пределу $kT \rightarrow 0$.

А именно, для надтеплого интервала энергии можно сначала решить уравнение, опустив член со второй производной, а затем доказать, что для полученного решения $\varphi_0'' \sim \frac{1}{2} \varphi_0'$, тогда, подставляя это соотношение в уравнение /6.14/, исключаем вторую производную:

$$\frac{1}{\xi \sigma_0} \frac{\partial q}{\partial u} = -2e^u \varphi_0 + (1 - 3,5e^u) \varphi_0'$$

и получаем уравнение диффузии с модифицированными параметрами:

$$(-D\nabla^2 + \sigma_a') \varphi_0 = -\xi' \sigma_0 \frac{\partial \varphi_0}{\partial u}, \quad /6.15/$$

где $\sigma_a' = \sigma_a - 2\xi \frac{kT}{E}$; $\xi' = \xi(1 - 3,5 \frac{kT}{E})$.

В этом измененном уравнении возраста-диффузии тепловые эффекты учтены в некоторой степени с помощью модифицированных параметров, зависящих от тепловой энергии.

В области еще более низких энергий нейтронов, т.е. в тепловой области, уравнение /6.14/ требует особого подхода для его решения. В теории реакторов тепловые нейтроны трактуются как одна моноэнергетическая группа, что соответствует разделению энергетических и пространственных переменных

$$\varphi_0(\vec{r}, u) = \varphi(\vec{r}) f(u),$$

в результате чего уравнение /6.14/ принимает вид:

$$\left(\frac{\bar{\sigma}_\alpha - D \nabla^2}{\xi \sigma_0} \right) f(u) \varphi(\vec{r}) = \left[2 \frac{kT}{E} f - (1 - 3 \frac{kT}{E}) \frac{df}{du} + \frac{kT}{E} \frac{d^2 f}{du^2} \right] \varphi(\vec{r}).$$

Проинтегрируем теперь по du /для того чтобы перейти к одногрупповой теории/:

$$\frac{1}{\xi \sigma_0} \int_{u_t}^{\infty} \bar{\sigma}_\alpha(u) f(u) du - \frac{\nabla^2}{\xi \sigma_0} \int_{u_t}^{\infty} D(u) f(u) du = \frac{q(\vec{r}, u_t)}{\xi \sigma_0}$$

или

$$-\bar{D} \nabla^2 \varphi(\vec{r}) + \bar{\sigma}_\alpha \cdot \varphi(\vec{r}) = q(\vec{r}, u_t),$$

/6.16/

где

$$\bar{D} = \int_{u_t}^{\infty} D(u) f(u) du,$$

$$\bar{\sigma}_\alpha = \int_{u_t}^{\infty} \bar{\sigma}_\alpha(u) f(u) du$$

причем $f(u)$ нормирована к единице:

$$\int_{u_t}^{\infty} f(u) du = 1,$$

что вытекает из требования

$$\varphi(\vec{r}) = \int_{u_t}^{\infty} \varphi_0(\vec{r}, u) du,$$

и $q(\vec{r}, u_t)$ определено следующим образом:

$$q(\vec{r}, u_t) = \xi \sigma_0 \left\{ f(u_t) [1 - 2e^{u_t}] - e^{u_t} \frac{df(u_t)}{du} \right\} \varphi(\vec{r}).$$

/6.17/

При интегрировании по du мы имели справа выражение:

$$\int_{u_t}^{\infty} \left[2e^u \varphi_0(\vec{r}, u) - (1 - 3e^u) \frac{d\varphi_0}{du} + e^u \frac{d^2 \varphi_0}{du^2} \right] du = - \int_{u_t}^{\infty} \frac{1}{\xi \sigma_0} \frac{\partial q(\vec{r}, u)}{\partial u} du =$$

$$= - \frac{1}{\xi \sigma_0} q(\vec{r}, u_t).$$

Из уравнения /6.16/ можно определить $\varphi(\vec{r})$, если нам известна функция $f(u)$ для определения средних значений, параметров $\bar{\sigma}_a, \bar{D}$, а также $q(\vec{r}, u)$ из /6.17/. Следовательно, задача сводится к определению функции $f(u)$. В случае слабого поглощения $f(u)$ будет спектром Максвелла и тогда легко найти средние значения параметров. В случае же сильного поглощения, как например в реакторе без отражателя, когда $\varphi(\vec{r})$ удовлетворяет уравнению:

$$\nabla^2 \varphi + B^2 \varphi = 0$$

для $f(u)$ получаем

$$\begin{aligned} (\sigma_a - D \nabla^2) \varphi_0(\vec{r}, u) &= f(u) [\sigma_a - D \nabla^2] \varphi(\vec{r}) = \\ &= f(u) [\sigma_a + B^2 D] \varphi(\vec{r}) = - \frac{\partial q(\vec{r}, u)}{\partial u} ; \end{aligned}$$

отсюда

$$(\sigma_a + B^2 D) f(u) = - \frac{1}{\varphi(\vec{r})} \frac{\partial q(\vec{r}, u)}{\partial u} \quad /6.18/$$

Следовательно, если для потока независимого от положения мы имеем соотношение

$$\sigma_a(u) \varphi(u) = - \frac{\partial q}{\partial u} ,$$

то в данном случае, чтобы /6.18/ имело тот же самый вид, необходимо сделать замену $\sigma_a \rightarrow \sigma_a + DB^2$ и, кроме того, $\frac{\partial q}{\partial u}$ должно быть пропорционально $\varphi(\vec{r})$.

Итак, точное разделение переменных в уравнении /6.14/ возможно, во-первых, тогда, когда $\varphi(\vec{r})$ собственная функция оператора ∇^2 , и, во-вторых, когда $\frac{\partial q}{\partial u}$ пропорционально $\varphi(\vec{r})$.

Формально, чтобы перейти от уравнения /1.2/ к уравнению для пространственно зависимого потока, нужно произвести замену:

$$\begin{aligned} \sigma_a &\rightarrow \sigma_a - D \nabla^2 & D &= \frac{1}{3} [\sigma_a + \sigma_s (1 - \overline{\cos \theta})]^{-1} \\ \varphi(E) &\rightarrow \varphi(E, \vec{r}) , \end{aligned}$$

что дает уравнение

$$(\sigma_a - D\nabla^2)\varphi(\vec{r}, E) = \int_0^{E_m} \sigma(E' \rightarrow E)\varphi(\vec{r}, E') dE' + \int_0^{\infty} \sigma(E' \rightarrow E)F(\vec{r}, E') dE' - \varphi(\vec{r}, E) \int_0^{E_m} \sigma(E \rightarrow E') dE', \quad /6.19/$$

или иначе

$$(\sigma_a - D\nabla^2)\varphi(\vec{r}, E) = \frac{\partial q(\vec{r}, E)}{\partial E}.$$

В связи с решением уравнения диффузии остается определить верхнюю границу теплового интервала E_m . При выборе этой энергии необходимо принимать во внимание два момента, которые могут друг другу противоречить. Во-первых, требуется, чтобы E_m имело довольно большое значение, такое, чтобы можно было пренебречь вероятностью рассеяния нейтрона в высшую энергетическую группу. Иначе говоря, нейтроны не могут уйти из интервала $0 - E_m$, разве только могут быть поглощены. На основании разных соображений величина 20 кТ была бы достаточной для того, чтобы выполнить это условие. Однако, тогда E_m находится уже в области спектра Ферми. Во-вторых, нужно потребовать, чтобы поток нейтронов можно было с хорошим приближением представить в виде произведения:

$$\varphi_0(\vec{r}, E) = \varphi(\vec{r}) f(E).$$

Но это можно сделать с хорошим приближением только в области максвелловского спектра, т.е. в интервале $0 - 4 \text{ кТ}$, в области же спектра Ферми этого хорошо сделать нельзя. Отсюда следовало бы, что для E_m нужно взять 4 кТ . Но тогда не выполняется первое условие и в уравнении /6.19/ для исправления положения надо добавить член, учитывающий рассеяние за интервал $0 - E_m$, что усложняет связь между диффузией и замедлением. Кажется поэтому разумным взять для E_m значение возможно больше, и для улучшения условий для разделения переменных ввести вторую группу низкоэнергетических нейтронов от 4 кТ до $E_m = 20 \text{ кТ}$.

Как отсюда видно, вопрос граничной энергии E_m не является простым; это отражает тот факт, что между областью замедления и областью термализации нет резкой границы, и при решении конкретных задач необходимо в каждом случае определять переходную область. Вопрос о выборе E_m связан, с другой стороны, с определением возраста по Ферми.

По определению возраст равен:

$$\tau = \int_{E_m}^{E_0} \frac{1}{3 \xi \sigma_s^2} \frac{dE}{E}, \quad /6.20/$$

где $E_0 = x_0^2 kT$ - энергия нейтронов источника. Будем считать, что эффективный возраст должен равняться разности квадратов полной длины миграции и длины диффузии в чистом спектре Максвелла:

$$\tau = M^2(x_0) - L^2 = M^2(x_0) - \frac{1}{3\sigma_s\sigma_a} \quad /6.21/$$

Согласно результатам Когена /28/, имеем для M^2 :

$$M^2(x_0) = \frac{1}{3\sigma_s\sigma_a} + \frac{1}{3\mu\sigma_s^2} \left[\ln x_0 - 0,821108 + 0,56345 \Delta + \dots \right].$$

Тогда из /6.20/ получим:

$$\tau = \frac{1}{3,2\mu\sigma_s^2} \left[\ln(x_0^2 kT) - \ln E_m \right] = \frac{1}{3\mu\sigma_s^2} \left[\ln x_0 + \frac{1}{2} \ln \frac{kT}{E_m} \right].$$

Сравнивая между собой выражения /6.20/ и /6.21/, имеем

$$E_m = kT \left[e^{0,821108 - 0,56345 \Delta} \right]^2 = 5,167 kT e^{-1,127 \Delta}$$

Однако, разделение квадрата длины миграции на квадрат диффузии и возраст является неоднозначной процедурой и поэтому полученное значение для E_m тоже неоднозначно. Физически реальной величиной является только длина миграции в целом.

§ 7. Кристаллические замедлители

Вопрос взаимодействия медленных нейтронов с решеткой кристалла сводится прежде всего к динамике колебаний кристалла, т.е. к теории твердого тела. Сколько-нибудь подробное математическое рассмотрение этого вопроса здесь трудно привести, и необходимо для установления интересующего нас спектра нейтронов ограничиться наиболее простой картиной колебаний кристалла.

В общем случае нужно различать два типа рассеяния, которое претерпевают нейтроны в кристаллах, а именно, когерентное и некогерентное рассеяние. Согласно квантовой механике всякое рассеяние, сопровождающееся изменением внутреннего состояния /спин, энергия и т.д./ рассеивающего ядра является некогерентным, т.к. изменение внутреннего состояния является причиной отсутствия интерференции между падающей и рассеянной волной. Это понятие когерентности относится к отдельному рассеивателю.

Существует некогерентность другого вида при наличии многих рассеивающих центров, а именно при отступлении от идеальной решетки, от правильного расположения атомов, или при отсутствии тождественности рассеивателей; из-за непостоянства фазовых соотношений между волнами, рассеянными разными центрами, возникает некогерентность, приводящая к диффузионному рассеянию. Такая некогерентность может быть вызвана тепловым движением ядер в узлах решетки, нерегулярным распределением изотопов, неупорядоченным расположением компонент в сплавах и т.д. Нас здесь, понятно, будет интересовать некогерентность, обусловленная тепловым движением ядер. Некогерентное рассеяние в свою очередь может быть упругим или неупругим; если энергия нейтрона не меняется, то имеем упругое рассеяние, но оно может быть некогерентным, если имеем изменение спина, которое будет разным от ядра к ядру, или же некогерентность может быть обусловлена изотопным составом. Если же имеем изменение энергии при рассеянии при взаимодействии нейтрона с тепловыми колебаниями атомов решетки, когда нейтрон отдает или поглощает фононы, тогда это неупругое /некогерентное/ тепловое рассеяние. В случае некогерентного рассеяния складываются интенсивности рассеянных волн /но не амплитуды/, и суммарное сечение некогерентного рассеяния будет определяться выражением $N \cdot \sigma_{\text{неког.}}$, где N число рассеивающих атомов.

Когерентное же рассеяние, обусловленное интерференцией падающей и рассеянной волны, определяется квадратом суммы амплитуд рассеяния отдельных атомов. В результате того, что при сложении амплитуд вводятся различные фазовые углы, когерентное рассеяние будет иметь резко выраженную угловую анизотропию и макроскопическое эффективное сечение когерентного рассеяния будет сложной функцией структурного фактора и длины волны нейтрона. Упругое когерентное рассеяние приводит к соотношению Брэгга, давая резко выраженные максимумы в определенных направлениях, удовлетворяющих условию $\vec{k}_0 - \vec{k} = 2\pi\vec{z}$, где \vec{z} т.н. вектор обратной решетки. Как известно из теории рассеяния лучей Рентгена, для длины волны большей двукратной величины постоянной решетки, когерентное рассеяние отсутствует. Это означает, что например, в случае бериллия, нейтроны с длиной волны $\lambda = 3,95 \text{ \AA}$ или с энергией 0,0052 эв, не испытывают вообще когерентного рассеяния. Это явление связано с т.н. холодными нейтронами. Для достаточно малых энергий нейтрона нельзя выполнить условия Брэгга и упругое рассеяние исчезает. Имеется только одно значение вектора обратной решетки, удовлетворяющее еще этому условию, это то значение, которому соответствует упругое рассеяние в прямом направлении, которое всегда разрешено. Неупругое рассеяние будет поэтому возможно также только вблизи прямого направления.

Отступление атомов кристалла от жесткой конфигурации в результате теплового движения и нулевых колебаний приводит к ослаблению когерентного упругого рассеяния Брэгга /ослабление учитывается т.н. фактором Дебая - Уоллера/, и появлению неупругого рассеяния, при котором нейтроны обмениваются энергией с кристаллом. Это температурное диффузное рассеяние. Оно может быть когерентным и некогерентным. Для некогерентного неупругого однофонного рассеяния, имеется только единственное условие, а именно: нейтрон после рассеяния может иметь любую энергию в пределах /в случае поглощения фонона/

$$E = \frac{k_0^2}{2m} \leq E' \leq \frac{k_0^2}{2m} + \omega_{\max.},$$

где $\omega_{\max.}$ - максимальная частота колебаний кристалла, равная, например, в случае спектра Дебая, температуре Дебая $k\theta$, k_0 - начальный

^{x/} k - постоянная Больцмана.

импульс нейтрона. Для когерентного же неупругого рассеяния интерференция между волнами, рассеянными разными ядрами, накладывает еще условие для импульса:

$$\vec{k}_0 - \vec{k} = \vec{q} + 2\pi \vec{z}.$$

Интерференция является результатом корреляции между колебаниями ядер; в случае эйнштейновской модели кристалла невозможно когерентное рассеяние, поскольку между колебаниями атомов нет корреляции. Из условия для импульса следует, что температурное диффузное рассеяние имеет интерференционные максимумы вблизи направлений Брэгга. Расчет показывает, что для скорости нейтрона больше скорости звука в кристалле, неупругое рассеяние ведет к появлению максимумов во всех направлениях, но они наиболее интенсивны в направлениях Брэгга. Для скоростей же нейтрона, меньших скорости звука, неупругое рассеяние нейтрона возможно только вблизи направлений Брэгга. Это свойство когерентного рассеяния можно понять, учитывая тот факт, что наиболее эффективными в процессе неупругого рассеяния являются фононы малой энергии /малое \vec{q} / /см. Приложение У1/.

Расчет неупругого когерентного рассеяния, требующий большой вычислительной работы /суммирование по векторам обратной решетки/, оказывается в интересующем нас интервале тепловых энергий нейтронов малой величины, играющей роль поправки.

Из этих видов рассеяния нас будет интересовать прежде всего неупругое некогерентное рассеяние, которое соответствует обмену энергии между нейтроном и тепловыми колебаниями решетки; оно зависит от температуры решетки и связано с природой колебаний решетки кристалла. Неупругое рассеяние можно выразить как взаимодействие между нейтроном и фононами с помощью псевдопотенциала Ферми. Для получения точного выражения неупругого сечения рассеяния разработан специальный математический формализм /6,25, 29, 31/; сечение рассеяния выражено с помощью частоты как функции волнового числа колебаний кристалла. Теперь вернемся к вопросу образования спектра нейтронов. В случае газового тяжелого замедлителя, при решении интегрального уравнения для потока нейтронов $\psi(E)$ мы ограничились неполным знанием индикатриссы рассеяния $\sigma(E \rightarrow E')$, а именно только

первыми двумя моментами. Можно предположить, что подобное приближение будет также достаточно для теории термализации нейтронов в случае тяжелого кристаллического замедлителя. Следовательно можно предположить, что разложение по степеням μ /отношение масс/ позволит получить разумное приближение для спектра нейтронов. Впервые процедуру разложения по степеням отношения масс применил Плачек /32/ для получения полного неупругого эффективного сечения поликристаллов, причем это сделано для некогерентного рассеяния, в котором пренебрегается интерференционными эффектами. Эти эффекты учтены в работе Плачека и Ван Гоффа /33,34/, а также в работе Сингви и Котари /29/. Мы ограничимся некогерентным приближением для выявления основных закономерностей, поскольку когерентное рассеяние является только поправкой. Некогерентное приближение, очевидно, является очень плохим для упругого рассеяния, которое прежде всего обусловлено интерференционными эффектами, но довольно хорошим для неупругого рассеяния /6/.

Моменты $\sigma(E \rightarrow E')$ убывают в случае одноатомного газа как μ , поскольку передаваемая энергия была мала. В кристалле передаваемая энергия не мала, а мала вероятность $1 \sim \mu$ / рассеяния с изменением энергий. Поэтому использование моментов $\sigma(E \rightarrow E')$ и замена интегрального уравнения дифференциальным для кристалла не проходит.

Учет влияния динамики кристалла на рассеяние нейтронов и расчет эффективного сечения рассеяния выполняются обычно с помощью упрощенной модели Дебая, в которой скорость звуковых волн фононов предполагается независимой от длины волны, направления распространения и поляризации. Эта модель хорошо аппроксимирует эффекты, при определении которых проводится усреднение по всем колебаниям. Можно ожидать, что получим хорошие результаты для величины и зависимости от энергии полного неупругого сечения для некогерентного рассеяния. Однако, для расчета других эффектов, как, например, углового или энергетического распределения нейтронов, необходимо учесть детали колебательного спектра, и здесь простая модель Дебая не является вполне подходящей. Однако ради простоты будем придерживаться этой модели.

При рассмотрении обмена фононами между нейтроном и кристаллом будем учитывать только однофононные процессы. Для многофононного рассеяния как когерентного, так и не когерентного, связь между рассеянием нейтро-

нов и динамическими свойствами кристаллов более сложная /за исключением случая нейтронов большой энергии /35//. Поэтому с точки зрения определения спектра частот кристалла по данным рассеяния нейтронов эти процессы менее интересны^{x/}. Однако, возникает вопрос, каким образом можно отделить однофононные процессы от многофононных. Для случая простого кристалла, однофононные когерентные процессы можно отличить от всех других процессов, изучая распределение нейтронов по энергиям для каждого направления рассеяния; это распределение состоит из конечного числа дискретных значений энергии в виде резких пиков на сплошном фоне однофононного некогерентного и многофононного рассеяния. Следовательно, последние два вида спектра нельзя между собой отличить. Однако нужно учесть, что вклад многофононного рассеяния в эффективное сечение является всегда преобладающим в случае больших энергий падающих нейтронов и часто значителен даже в предельном случае нулевой энергии нейтронов /36/, поэтому можно было бы произвести опыт по рассеянию в таких условиях, которые позволили бы или пренебречь эффектами многофононных рассеяний, или учесть их как небольшую поправку, что дает возможность выделить однофононное некогерентное рассеяние.

В § 5 мы получили

$$\langle G(\theta, \epsilon) \rangle_T = \alpha^2 \left(\frac{E'}{E} \right)^{1/2} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\epsilon t} \langle X^v \rangle_T dt, \quad (7.11)$$

где

$$\langle X^v \rangle_T = e^{-\sum_{\lambda} \frac{(\hbar^2 c_{\lambda}^2)^2}{2\omega_{\lambda} NM} \frac{z+1}{z-1}} e^{\sum_{\lambda} \frac{(\hbar^2 c_{\lambda}^2)^2 \sqrt{z}}{2\omega_{\lambda} NM (z-1)} (\sqrt{z} e^{-i\omega_{\lambda} t} + \frac{1}{\sqrt{z}} e^{i\omega_{\lambda} t})}.$$

Здесь ω_{λ} - частота нормальных колебаний типа λ . При рассмотрении рассеяния ограничимся членами порядка μ и однофононными процессами /поскольку ограничиваемся некогерентным приближением/; с этой целью разложим функцию $\langle X^v \rangle_T$ в ряд по степеням μ и оставим только члены, соответствующие неупругому рассеянию нейтронов с поглощением или излучением одного фонона.

^{x/} Многофононные процессы маловероятны при низких температурах и малых энергиях нейтронов.

За эти процессы ответственен следующий член разложения экспоненциальной функции в ряд:

$$\sum_{\lambda} \frac{(\vec{e} \vec{e}_{\lambda})^2 \sqrt{z}}{2\omega_{\lambda} N M(z-1)} (\sqrt{z} e^{-i\omega_{\lambda} t} + \frac{1}{\sqrt{z}} e^{i\omega_{\lambda} t}).$$

Тогда выражение /7.1/ примет вид:

$$\langle \sigma(\theta, \epsilon) \rangle_T = \alpha^2 \left(\frac{E'}{E} \right)^{1/2} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\epsilon t} dt \left\{ \sum_{\lambda} \frac{(\vec{e} \vec{e}_{\lambda})^2 (z e^{-i\omega_{\lambda} t} + e^{i\omega_{\lambda} t})}{2\omega_{\lambda} N M(z-1)} \right\} \quad /7.2/$$

В случае кристалла нужно вместо дискретного спектра частот ввести спектр Дебая с непрерывным распределением частот $P(\omega) = 3\omega^2/k^3\theta^3$, тогда сумма по λ перейдет в интеграл /пренебрегая поляризацией волн, см. приложение У1 /:

$$\begin{aligned} \langle \sigma(\theta, \epsilon) \rangle_T &= \alpha^2 \left(\frac{E'}{E} \right)^{1/2} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\epsilon t} dt \left\{ \frac{\pi^2}{2M} \int_0^{k\theta} \frac{z e^{-i\omega t} P(\omega) d\omega}{\omega(z-1)} + \frac{\pi^2}{2M} \int_0^{k\theta} \frac{e^{i\omega t} P(\omega) d\omega}{\omega(z-1)} \right\} \\ &= \alpha^2 \left(\frac{E'}{E} \right)^{1/2} \frac{\pi^2}{2M} \left\{ \int_0^{k\theta} \frac{z P(\omega) \delta(\epsilon + \omega) d\omega}{\omega(z-1)} + \int_0^{k\theta} \frac{P(\omega) \delta(\epsilon - \omega) d\omega}{\omega(z-1)} \right\}. \end{aligned} \quad /7.3/$$

$k\theta$ / - температура Дебая, θ - входящий в $\sigma(\theta, \epsilon)$ угол рассеяния/.

Интегрируя по углам, согласно /2.7/ получим:

$$\begin{aligned} \sigma(E \rightarrow E') &= \frac{3}{k^3\theta^3} M \sigma_0 \left(\frac{E'}{E} \right)^{1/2} (E' + E)(E' - E) \frac{1}{e^{|\epsilon|/kT} - 1}, \quad |E' - E| \ll k\theta \\ &= 0, \quad |E' - E| \gg k\theta \end{aligned} \quad /7.4/$$

Полученное выражение /7.4/ для индикатриссы рассеяния будет довольно хорошим приближением, если спектр фононов дается, по крайней мере, качественно распределением Дебая и если можно пренебречь эффектами интерференции. Эти условия выполняются более точно для бериллия, чем для других кристаллических замедлителей, для которых, однако, это приближение может

служить для оценки влияния кристаллических эффектов на спектр тепловых нейтронов.

С помощью /7.4/ можно определить моменты индикатриссы рассеяния

$$\sigma_s(E) \overline{\Delta E^n} = \int_0^{E_m} \sigma(E \rightarrow E') (E' - E)^n dE'. \quad /7.5/$$

Все они будут порядка M в отличие от моментов для газового тяжелого замедлителя /2.14/, для которого первый и второй моменты порядка M , остальные же более высокого порядка относительно M .

Интегральное уравнение для функции $\psi = \varphi/M(E)$ имеет вид:

$$\sigma_a(E) \psi(E) = \int_0^{E_m} \sigma(E \rightarrow E') [\psi(E') - \psi(E)] dE'. \quad /7.6/$$

Это уравнение по сравнению с уравнением /2.15/ для тяжелого газового замедлителя, должно отличаться учетом кристаллической связи.

Как следует из теоретического рассмотрения, приведенного в § 1, и как подтверждается экспериментом /3/, кристаллическими эффектами можно пренебречь в том случае, когда температура кристалла выше температуры Дебая θ . В случае графита и бериллия это условие невыполнимо, поэтому результат Нелькина для бериллия /14/ является неожиданным. В женевском обзоре Нелькина и Когена /37/ приводится другой результат, а именно наличие максвелловского спектра с температурой 465°K для кристалла и с температурой 395°K для свободного газа /Рис.5/. Дальнейшие соображения приведены в следующем параграфе.

§ 8. Эффект диффузионного охлаждения

До сих пор мы рассматривали стационарное состояние бесконечного однородного замедлителя с источниками, которыми были замедленные нейтроны, и получили уравнения, позволяющие определить поток и температуру нейтронов, которая в этом случае оказывается выше температуры среды.

Если нейтроны находятся в тепловом равновесии с атомами замедлителя, то они принимают распределение Максвелла с температурой T среды. Однако на практике состояние равновесия не достигается, ибо вследствие поглощения и утечки, которая появляется в случае среды конечных размеров, нейтроны исчезают из среды, из источников же поступают нейтроны с большей энергией, которые лишь постепенно замедляются до тепловых энергий. Вследствие этого результирующий спектр тепловых нейтронов отличается от спектра Максвелла. В случае хорошего замедлителя время замедления мало по сравнению со временем жизни теплового нейтрона /временем термализации/, поэтому и отклонение от равновесия невелико. Однако в сильно поглощающей среде и в случае замедлителей малых размеров, где сказывается сильно утечка нейтронов, спектр может значительно отклоняться от равновесного. В этом случае играет роль процесс диффузии и так как коэффициент диффузии пропорционален скорости, то более быстрые нейтроны диффундируют быстрее и поэтому высокоэнергетическая часть спектра становится беднее, а температура нейтронов ниже температуры среды. Это явление называют диффузионным охлаждением.

Чтобы рассмотреть этот вопрос, обратимся к нестационарному процессу, в результате которого нейтроны постепенно приближаются к состоянию равновесия со средой. Это имеет место в импульсном методе, разработанном Дарделем и Сиострандом /38, 39/, а также советскими физиками /40/. Метод заключается в том, что в начальный момент времени в замедлитель впускается мгновенно импульс нейтронов, который затем в процессе замедления поглощается и диффундирует. Утечка и поглощение вызывают уменьшение плотности нейтронов со временем по экспоненциальному закону с постоянной времени, равной сумме вероятностей поглощения и утечки: $e^{-t(\lambda_a + DV^2)}$. В этом методе в отличие от стационарного метода, где источники все время испускают нейтроны, поток нейтронов замедляется и термализуется, приближаясь, в случае бесконечной среды, к равновесному состоянию со средой. В этом случае плотность замедления для больших энергий равна нулю, поскольку нет источников замедляемых нейтронов.

Рассмотрим сначала бесконечную среду в отсутствие поглощения и предположим, что в процессе термализации нейтроны имеют распределение

Максвелла с температурой T_n , отличной от температуры среды. Рассмотрим вопрос с помощью уравнения диффузии.

Кинетическое уравнение Больцмана в общем случае имеет вид /для изотропного рассеяния/:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial f(E, \vec{\Omega}, \vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\Omega} \operatorname{grad} f(E, \vec{\Omega}, \vec{r}, t) + \sigma_a(E) f(E, \vec{\Omega}, \vec{r}, t) = \\ = \iint dE' d\Omega' f(E', \vec{\Omega}', \vec{r}, t) \sigma(E' \rightarrow E) - \iint dE' d\Omega' f(E', \vec{\Omega}', \vec{r}, t) \sigma(E \rightarrow E') + S(E, \vec{\Omega}, \vec{r}, t).$$

Проинтегрируем это уравнение по всем направлениям $\vec{\Omega}$ и введем следующие обозначения интегралов:

поток нейтронов $\varphi(E, \vec{r}, t) = \int f(E, \vec{\Omega}, \vec{r}, t) d\Omega$,

плотность потока $\vec{j}(E, \vec{r}, t) = \int \vec{\Omega} \cdot f(E, \vec{\Omega}, \vec{r}, t) d\Omega$.

Тогда получим

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \varphi(E, \vec{r}, t)}{\partial t} + \sigma_a(E) \varphi(E, \vec{r}, t) + \int \vec{\Omega} \operatorname{grad} f(E, \vec{\Omega}, \vec{r}, t) d\Omega = \\ = \int_0^{\infty} dE' \varphi(E', \vec{r}, t) \sigma(E' \rightarrow E) - \varphi(\vec{r}, E, t) \int_0^{\infty} \sigma(E \rightarrow E') dE' + S(E, \vec{r}, t).$$

Преобразуем теперь интеграл в левой части, используя соотношение

$$\operatorname{div}(\vec{\Omega} f) = \vec{\Omega} \operatorname{grad} f - f \operatorname{div} \vec{\Omega} = \vec{\Omega} \operatorname{grad} f.$$

Тогда

$$\int \vec{\Omega} \operatorname{grad} f d\Omega = \operatorname{div} \int \vec{\Omega} f d\Omega = \operatorname{div} \vec{j}.$$

Применив закон Фика теории диффузий $\vec{j} = -D \nabla \varphi$, получим диффузионное уравнение для бесконечной среды без источников /полагая $S = 0$ / и без замедляемых нейтронов, что равносильно $q(\infty) = 0$ /см. 8,33/

$$\left[\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} + \sigma_a(E) - D(E) \nabla^2 \right] \varphi(\vec{r}, E, t) = \frac{\partial q(E, \vec{r}, t)}{\partial E},$$

где
$$\frac{\partial q}{\partial E} = \int_0^{E_m} dE' \sigma(E' \rightarrow E) \varphi(E', \vec{r}, t) - \varphi(E, \vec{r}, t) \int_0^{E_m} \sigma(E \rightarrow E') dE'. \quad /8.1/$$

В случае однородной бесконечной среды, когда нет поглощения, имеем следующее уравнение для нестационарного процесса:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \int_0^{E_m} dE' \sigma(E' \rightarrow E) \varphi(E', t) - \varphi(E, t) \int_0^{E_m} \sigma(E \rightarrow E') dE'. \quad /8.2/$$

В дальнейшем можем для верхнего предела вместо E_m взять бесконечность, поскольку нет замедляемых нейтронов.

Предположим, что $\varphi(E, t)$ дается распределением Максвелла с температурой $T_n(t)$, связанной с температурой среды T соотношением $\beta(t) = 1 - T/T_n$, где введена новая величина $\beta(t)$. Умножим затем обе стороны уравнения /8.2/ на E и проинтегрируем по dE .

Слева имеем тогда изменение числа нейтронов со временем, умноженное на энергию нейтронов E и проинтегрированную по всему спектру. Это равно изменению со временем средней энергии нейтронов /или температуры нейтронов, выраженной с помощью параметра β /.

В результате имеем:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{1 - \beta(t)} \right) = - \frac{2v_0 M_2 \beta}{3 \sqrt{\pi}}, \quad /8.3/$$

где
$$M_2 = \frac{1}{(kT)^2} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \sigma(E \rightarrow E') (E' - E)^2 M(E) dE dE' \quad /8.4/$$

$$v_0 = \sqrt{2kT}.$$

Величина M_2 - средний квадрат энергии обмена между нейтронами и средой и характеризует взаимодействие между тепловыми нейтронами и атомами замедлителя.

В случае малых значений β / т.е. небольшого отличия T_n от T / получаем

$$T_n = T(1 + e^{-\delta t}) \quad , \quad \text{где} \quad \delta = \frac{2}{3\bar{L}} v_0 M_2 . \quad /8.5/$$

Следовательно, T_n стремится к T по экспоненциальному закону с постоянной времени $1/\delta$, называемой временем термализации. Это время приближения к равновесию значительно больше времени замедления. Например, для тяжелой воды $1/\delta$ равно 58 μ сек, тогда как время замедления составляет всего 10 μ сек.

Если предположить наличие поглощения в среде, тогда путем формальной замены $\varphi(E, t) = \varphi_0 e^{-\lambda t}$ уравнение диффузии можно свести к уравнению /8.2/ для $\varphi_0(E, t)$ и получить аналогично температуру T_n нейтронов.

Поглощение по закону $1/v$ не вносит никакого изменения в процесс термализации и пространственно-энергетическое распределение потока, а только ведет к экспоненциальному уменьшению во времени потока с постоянной $\lambda = \sigma_a \cdot v$.

Рассмотрим теперь замедлитель, в котором наряду с замедлением имеется диффузия, так что поток нейтронов меняется не только вследствие столкновений, но также из-за диффузии нейтронов. Если в элемент объема нейтроны приходят или уходят, то в нем меняется распределение нейтронов по скоростям, потому что поток нейтронов имеет иное распределение чем плотность нейтронов, в случае же диффузии роль играет поток нейтронов. Поток имеет всегда большую среднюю энергию, чем плотность нейтронов. Поэтому элемент объема теряет энергию, если из него уходят нейтроны, т.е. если лапласиан является положительным, и вследствие этого понижается температура нейтронов по сравнению с температурой среды. Если теперь между нейтронным газом и средой имеется сильное взаимодействие, то температуры быстро выравниваются путем обмена энергии, в противном случае требуется более

длительное время. Такое явление диффузионного охлаждения наблюдается в нестационарных процессах, как например, в случае импульсного режима и в случае систем, для которых лапласиан ∇^2 положителен и определяется геометрическим параметром.

Если же в элемент объема имеется приток нейтронов, то энергия нейтронов повышается и температура нейтронов становится выше температуры среды. Такое явление имеет место, как мы уже видели, в случае бесконечной однородной среды и для других систем, которые имеют лапласиан отрицательный и равный материальному параметру L^{-2} . Рассмотрим баланс энергии и условия равновесия по методу Дарделя, в котором вводится понятие теплопередачи между нейтронами и атомами замедлителя, ведущей к выравниванию температур. Более физический подход имеется в уже цитированной работе Антонова и др., где введены две группы нейтронов /двухгрупповая теория/. Мы рассмотрим позже более совершенную теорию, в которой учитывается зависимость параметров среды от энергии, но метод Дарделя, дополненный затем Бекуртсом /41/ является физически наглядным.

Рассмотрим баланс энергии в элементе объема в среде без поглощения. Потеря энергии вследствие диффузии будет определяться величиной изменения плотности нейтронов $D \nabla^2 \varphi$ /умноженной на среднюю энергию, на которую поток превышает энергию нейтрона, т.е. $\bar{E}_d - \frac{3}{2} k T_n$. Эта потеря энергии в равновесии должна равняться энергии, приобретенной нейтронами вследствие теплопередачи от замедлителя, т.е. $\gamma \cdot \frac{3}{2} k (T - T_n) N$, где γ - коэффициент теплопередачи.

Итак, имеем

$$N \gamma \frac{3}{2} k (T - T_n) = -D \nabla^2 \varphi (\bar{E}_d - \frac{3}{2} k T_n).$$

Полагая

$$D \nabla^2 \varphi = -B^2 D \varphi = -B^2 D v N,$$

получаем
$$\frac{3}{2} k \gamma (T_n - T) = -D B^2 v (\bar{E}_d - \frac{3}{2} k T_n).$$

Среднюю энергию потока получим, предполагая распределение Максвелла

$$\bar{E}_d = \frac{\int_0^{\infty} D(v) \frac{1}{2} v^2 N(v) dv}{\int_0^{\infty} D(v) N(v) dv} = \frac{3}{2} k T_n + k T_n^2 \frac{d \ln D}{d T_n} . \quad /8.7/$$

Полагая дальше коэффициент диффузии $D(T_n) = D \cdot v$, имеем

$$T_n - T = - \frac{2}{3} \gamma T^2 B^2 \left[\frac{d D(T_n)}{d T_n} \right]_{T_n = T} . \quad /8.8/$$

В первом приближении для коэффициента диффузии возьмем линейную зависимость от температуры

$$D(T_n) = D(T) + (T_n - T) \frac{dD}{dT} .$$

Тогда, подставляя из уравнения /8.8/ в последнее уравнение:

$$D(T_n) = D(T) - c B^2$$

$$c = \frac{2}{3} \frac{T^2}{\gamma} \left(\frac{dD}{dT} \right)^2 \quad /8.9/$$

постоянная охлаждения.

Итак, если $B^2 > 0$, то температура нейтронов меньше температуры среды T , если же $B^2 < 0$, то T_n больше T . Обратимся теперь к более полной математической теории, которая учитывает зависимость коэффициента диффузии и других величин от энергии /42/. Предположим, что пространственное распределение потока нейтронов может быть описано с помощью теории диффузии с соответствующим лапласианом B^2 , характеризующим размеры системы.

Будем исходить из уравнения /8.1/, причем введем разделение переменных и, кроме того, сведем задачу формально к стационарной задаче:

$$\varphi(E, \vec{r}, t) = \varphi_\lambda(E) \chi(\vec{r}) e^{-\lambda t} .$$

Полагая затем

$$\nabla^2 \chi(\vec{r}) + B^2 \chi(\vec{r}) = 0 ,$$

получим уравнение для определения собственного значения параметра λ :

$$\left[-\frac{\lambda}{v} + \sigma_a(E) + DB^2\right] \varphi_\lambda(E) = \int_0^\infty \sigma(E' \rightarrow E) \varphi_\lambda(E') dE' - \varphi_\lambda(E) \int_0^\infty \sigma(E \rightarrow E') dE' \quad /8.10/$$

Для получения низшего собственного значения постоянной λ применим вариационный принцип Релея-Ритца /43/. Чтобы можно было сформулировать вариационную задачу, нужно чтобы интегральное уравнение имело симметричное ядро. Такое ядро можно образовать, используя принцип детального равновесия.

Введем функцию $\phi_\lambda(E) = \varphi_\lambda(E) / \sqrt{M(E)}$, удовлетворяющую уравнению /8.10/, если ядро $\sigma(E' \rightarrow E)$ переходит в симметричное ядро:

$$K(E, E') = \sigma(E' \rightarrow E) \sqrt{\frac{M(E')}{M(E)}}.$$

Умножим уравнение с новым ядром $K(E, E')$ на $\phi_\lambda(E)$ и проинтегрируем по энергии:

$$-\lambda \int_0^\infty \frac{1}{v} \phi_\lambda^2(E) dE + \int_0^\infty \sigma_a(E) \phi_\lambda^2(E) dE + \int_0^\infty \sigma_s(E) \phi_\lambda^2(E) dE + B^2 \int_0^\infty D(E) \phi_\lambda^2(E) dE = \int_0^\infty \int_0^\infty dE dE' K(E, E') \phi_\lambda(E') \phi_\lambda(E),$$

причем введено $\sigma_s(E) = \int_0^\infty \sigma(E \rightarrow E') dE'$.

Переходя обратно к функции $\varphi_\lambda(E)$, получаем

$$\lambda \int_0^\infty \frac{1}{v} \frac{\varphi_\lambda^2(E)}{M(E)} dE = \int_0^\infty (\sigma_a + \sigma_s + DB^2) \frac{\varphi_\lambda^2(E)}{M(E)} dE - \int_0^\infty \int_0^\infty \sigma(E' \rightarrow E) \frac{\varphi_\lambda(E') \varphi_\lambda(E)}{M(E)} dE dE'.$$

Введем обозначения

$$J = B^2 \int_0^{\infty} D(E) \frac{\varphi_{\lambda}^2(E)}{M(E)} dE = \frac{1}{3} B^2 \int_0^{\infty} \lambda_{tr}(E) \frac{\varphi_{\lambda}^2(E)}{M(E)} dE$$

$$K = \int_0^{\infty} \frac{1}{v} \frac{\varphi_{\lambda}^2(E)}{M(E)} dE$$

/8.12/

$$I = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \sigma(E \rightarrow E') \varphi_{\lambda}(E) \left[\frac{\varphi_{\lambda}(E')}{M(E')} - \frac{\varphi_{\lambda}(E)}{M(E)} \right] dE dE'$$

В случае поглощения по закону $1/v$ интеграл

$$\int_0^{\infty} \sigma_a(E) \frac{\varphi_{\lambda}^2(E)}{M(E)} dE = (v \cdot \sigma_a) \int_0^{\infty} \frac{1}{v} \frac{\varphi_{\lambda}^2(E)}{M(E)} dE = (v \cdot \sigma_a) \cdot K$$

Подставляя, получаем окончательное выражение для λ :

$$\lambda = (v \cdot \sigma_a) + \frac{J - I}{K}$$

/8.13/

Для применения вариационного принципа в качестве пробной функции возьмем распределение Максвелла с температурой нейтронов T_n , которая будет вариационным параметром /аналогично как в § 3/.

Введем переменную $\epsilon = E/kT$ и параметр $\beta = \frac{T}{T_n} - 1$. Пробная функция имеет тогда вид:

$$\varphi_{\lambda}(E) = M(E) e^{-\beta \epsilon}; \quad M(E) = \frac{E}{(kT)^2} e^{-E/kT}$$

Стационарное наименьшее значение λ получим, минимизируя уравнение /8.13/ относительно параметра β . Прежде всего нужно найти интегралы K, J, I .

Подставляя пробную функцию, получаем для K :

$$K = \int_0^{\infty} \frac{1}{v} M(E) e^{-2\beta E} dE = \int_0^{\infty} \frac{1}{v} \frac{E}{(kT)^2} e^{-\epsilon(1+2\beta)} dE =$$

$$= \int_0^{\infty} \frac{\epsilon}{v} e^{-\epsilon(1+2\beta)} d\epsilon = \frac{1}{\sqrt{2kT}} \int_0^{\infty} \epsilon^{1/2} e^{-\epsilon(1+2\beta)} d\epsilon = \frac{1}{v_0} (1+2\beta)^{-3/2} \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$

Следовательно, имеем $K = \frac{\sqrt{\pi}}{2v_0} (1+2\beta)^{-3/2}$. /8,14/.

Далее для интеграла J получим

$$J = \frac{1}{3} B^2 \int_0^{\infty} \lambda_{tr}(E) M(E) e^{-2\beta E} dE =$$

$$= \frac{(kT)^\alpha}{3} B^2 C \int_0^{\infty} \frac{E^\alpha}{(kT)^\alpha} \epsilon e^{-\epsilon(1+2\beta)} d\epsilon =$$

$$= \frac{(kT)^\alpha}{3} B^2 C \int_0^{\infty} \epsilon^{\alpha+1} e^{-\epsilon(1+2\beta)} d\epsilon.$$

Здесь принято, что транспортная длина $\lambda_{tr}(E) = CE^\alpha$.

Интеграл, как и раньше K , вычисляется элементарно:

$$J = \frac{(kT)^\alpha}{3} B^2 C [1+2\beta]^{-(\alpha+2)} \Gamma(\alpha+2).$$

Теперь, используя интегральное представление функции $\Gamma(\alpha+2)$, имеем

$$\frac{1}{3} (kT)^\alpha C \Gamma(\alpha+2) = \frac{1}{3} (kT)^\alpha C \int_0^{\infty} e^{-\epsilon} \epsilon^{\alpha+1} d\epsilon = \frac{C}{3} \int_0^{\infty} E^\alpha \epsilon e^{-\epsilon} d\epsilon =$$

$$= \frac{1}{3} \int_0^{\infty} \lambda_{tr}(E) M(E) dE = D_0 \frac{\sqrt{\pi}}{2v_0}.$$

Определяем среднее значение D_0 с помощью

$$D_0 = \frac{\frac{1}{3} \int_0^{\infty} \lambda_{tr}(E) v \cdot \frac{1}{v} M(E) dE}{\int_0^{\infty} \frac{1}{v} M(E) dE} = \frac{\frac{1}{3} \int_0^{\infty} \lambda_{tr}(E) M(E) dE}{\sqrt{\pi}/2v_0}$$

так как

$$\int_0^{\infty} \frac{1}{v} M(E) dE = \frac{1}{\sqrt{2kT}} \int_0^{\infty} \epsilon^{1/2} e^{-\epsilon} d\epsilon = \frac{\sqrt{\pi}}{2v_0}.$$

Окончательно получаем для интеграла J

$$J = \frac{\sqrt{\pi}}{2v_0} D_0 \beta^2 (1+2\beta)^{-(\alpha+2)} \quad /8.15/$$

Величина интеграла I зависит от механизма обмена энергией между нейтронами и замедлителем. Поскольку в общем случае индикатрисса нам не известна, и мы вынуждены ограничиться первыми ее моментами, воспользуемся разложением интеграла I по степеням β . Член пропорциональный нулевой степени β , как легко видеть, равен нулю. Дальше член первого порядка относительно β пропорционален интегралу

$$\iint \sigma(E \rightarrow E') M(E) (E' - E) dE dE',$$

который, как можно показать воспользовавшись принципом детального равновесия, равен тоже нулю /см. приложение № 3 /.

Отличным от нуля является член пропорциональный β^2 и тогда

$$I = -\frac{1}{2} \beta^2 M_2, \quad /8.16/$$

где M_2 определено уравнением /8.4/.

Подставляя полученные величины интегралов в уравнение /8.13/, дифференцируя и приравнявая к нулю, получаем для λ :

$$\lambda = (v \cdot \sigma_a) + D_0 \beta^2 (1 - c \beta^2), \quad /8.17/$$

где $c = (\alpha + \frac{1}{2})^2 \frac{\sqrt{\pi} D_0}{M_2 v_0}$ - постоянная охлаждения.

Прежде чем сравнить полученные результаты с экспериментальными данными, нужно проверить, с какой точностью получены эти результаты, для чего перейдем к случаю тяжелого газа.

Для тяжелого газа, согласно результатам § 2, имеем

$$\int_0^{\infty} \sigma(E \rightarrow E') (E' - E)^2 dE' = 4\mu\sigma_0 E kT.$$

Тогда параметр

$$M_2' = \frac{4\mu\sigma_0 kT}{(kT)^2} \int_0^{\infty} M(E) E dE.$$

Интеграл равен

$$\int_0^{\infty} E M(E) dE = \int_0^{\infty} \frac{E^2}{(kT)^2} e^{-E/kT} dE = kT \int_0^{\infty} \epsilon^2 e^{-\epsilon} d\epsilon = 2kT.$$

Итак, параметр M_2 для тяжелого газа равен $4360 = 8\mu 60$. Рассматривая модель тяжелого газа с помощью данного вариационного метода, для интеграла I получаем:

$$I = -\frac{1}{2} \beta^2 (1+2\beta)^{-3}$$

Подставив теперь в уравнение /8.13/, получаем для параметра λ :

$$\lambda = (v \cdot \sigma_a) + D_0 B^2 [1 - c' B^2 + 2\alpha (\alpha + \frac{1}{2})^{-3} (c' B^2)^2 + \dots], \quad /8.18/$$

где

$$c' = (\alpha + \frac{1}{2})^2 \frac{\sqrt{\pi} D_0}{M_2' v_0} \quad /8.19/$$

Теперь надо принять какое-то значение для α . Часто в согласии с экспериментом принимается $\alpha = 0$ или $\alpha = \frac{1}{2}$. Например, для бериллия и графита принимается $\alpha = 0$, для воды же $\alpha = \frac{1}{2}$, в других случаях $\lambda_{tr}(E)$ имеет, вообще говоря, более сложную зависимость от энергии. Ограничимся простой зависимостью, полагая $\alpha = 0$ и $\alpha = \frac{1}{2}$:

В случае $\alpha = 0$

$$\begin{aligned} \lambda &= (v \cdot \sigma_a) + D_0 B^2 [1 - c_0' B^2] \\ c_0' &= 0,443 \frac{D_0}{v_0 M_2'} \end{aligned} \quad /8.20/$$

В случае $\alpha = \frac{1}{2}$

$$\begin{aligned} \lambda &= (v \cdot \sigma_a) + D_0 B^2 [1 - c_1' B^2 + (c_1' B^2)^2] \\ c_1' &= 1,772 \frac{D_0}{v_0 M_2'} \end{aligned} \quad /8.21/$$

Полученные значения в случае тяжелого газа вариационным методом нужно сравнить теперь с точными значениями, полученными путем решения уравнения /8.10/ для собственных значений λ , которое запишем в виде

$$\left[D(E) B^2 - \frac{\delta \lambda}{v} \right] \varphi = \frac{dq_\lambda}{dE}, \quad \text{где} \quad \delta \lambda = \lambda - (\sigma_a \cdot v). \quad /8.22/$$

Для тяжелого газа мы имели для плотности замедления:

$$q(E) = \xi \sigma_0 E kT M(E) \frac{d\psi}{dE}, \quad \text{где} \quad \psi(E) = \frac{\varphi(E)}{M(E)}.$$

Тогда предыдущее уравнение /8.22/ принимает вид:

$$\frac{B^2 D(E) - \frac{\delta\lambda}{v}}{\xi \sigma_0} \psi(E) M(E) = \frac{d}{dE} \left[E kT M(E) \frac{d\psi}{dE} \right]. \quad /8.23/$$

Сделав замену переменного $\epsilon = E/kT$ и функции $p(\epsilon) = \frac{1}{\psi(\epsilon)} \frac{d\psi}{d\epsilon}$, получаем дифференциальное уравнение:

$$\epsilon \frac{dp}{d\epsilon} + (2 - \epsilon) p(\epsilon) + \epsilon p^2(\epsilon) = \Sigma(\epsilon), \quad /8.24/$$

где
$$\Sigma(\epsilon) = \frac{B^2 D - \delta\lambda/v}{\xi \sigma_0}.$$

Исследование этого уравнения произведено в работах Гурвитца и Нельки-на /43/. В частности, они получили решение методом теории возмущений для случая, когда Σ мало по сравнению с 1.

Тогда для $\alpha = 0$ и $\alpha = \frac{1}{2}$, $\varphi_\lambda(E)$ получается с точностью до B^2 , а постоянная λ с точностью до B^4 .

Для $\alpha = 0$

$$\lambda = (v \cdot \sigma_a) + D_0 B^2 [1 - C_0'' B^2], \quad /8.25/$$

$$C_0'' = 0,592 \frac{D_0}{v_0 M_2'}.$$

Для $\alpha = \frac{1}{2}$

$$\lambda = (v \cdot \sigma_a) + D_0 B^2 [1 - C_1'' B^2 + 1,07 (C_1'' B^2)^2], \quad /8.26/$$

$$C_1'' = 2,004 \frac{D_0}{v_0 M_2'}.$$

Сравнение полученных данных в случае $\alpha = 1/2$, т.е. /8.21/ и /8.26/, показывает, что для λ получается правильный порядок для высших поправок; что же касается постоянной охлаждения, то в случае вариационного метода значение ее меньше на 12% значения, полученного с помощью теории возмущений. В случае $\alpha = 0$ разница между значениями постоянной C достигает уже 25%. Из этого следует, что температура нейтронного газа не совсем точно отражает отклонение потока нейтронов от равновесия, поэтому не совсем правильно пользоваться выражением для этой температуры T_n , полученным из условия минимума λ . Обратимся теперь к сравнению полученных данных с экспериментом. Поскольку нас в данном случае интересует влияние химической связи на поток и поведение нейтронов, то величиной, которая характеризует взаимодействие нейтронов со средой, является M_2 .

Рассмотрим поэтому отношение этой величины, определенной уравнением /8.4/ для любой среды, к ее значению для тяжелого газового замедлителя $43\sigma_0$.

В случае бериллия и графита зависимость λ_{tr} от энергии позволяет принять для α значение нулевое. Это подтверждено опытами, в частности, Толстовым и сотр. /44/. Поэтому из уравнения /8.25/ имеем для этого отношения:

$$\frac{M_2}{M_2'} = \frac{M_2}{43\sigma_0} = 0,148 \frac{D_0}{v_0 \sigma_0 \xi C} \quad /8.27/$$

Измерения величин, входящих в это отношение, произведенные Антоновым и сотр. /40/, Бекурстом /41/, дают для бериллия и графита соответственные значения:

бериллий $0,22 \pm 0,07$
графит $0,32 \pm 0,05$.

Из этого следует, что кристаллическая связь в бериллии и графите уменьшает среднюю квадратичную передачу энергии в 3-5 раз.

Теоретическое значение этого отношения можно подсчитать, используя индикатрису рассеяния по модели Дебая:

$$\frac{M_2}{4\zeta\sigma_0} = F\left(\frac{\theta}{T}\right) = \frac{3\mu\sigma_0}{k^3\theta^3} \frac{1}{4\zeta\sigma_0} \int_0^\infty \int_0^\infty \left(\frac{E'}{E}\right)^{1/2} (E'+E)(E'-E)^3 \frac{M(E)}{e^{\frac{E-E'}{kT}} - 1} dE dE' \quad /8.28/$$

Эта функция θ/T /где θ - температура Дебая/ была рассчитана с помощью электронной машины для разных значений θ/T . В случае бериллия, принимая для θ значение 930°K , что следует из значения теплоемкости при $T=293^\circ\text{K}$, получаем для $F(\theta/T)$ значение 0,6. Это соответствует значению $C=1,1 \text{ см}^2$, полученному с помощью уравнения /8.27/, экспериментальное же значение $C=3 \pm 1 \text{ см}^2$. Следовательно имеется расхождение между теорией и экспериментом в случае бериллия, которое пока не устранено. Нелькин считает, что опыт дает слишком большое значение, ибо в случае графита, как сейчас убедимся, нет расхождения между теорией и экспериментом. Однако надо заметить, что совпадение в случае графита может быть случайным, потому что, во-первых, использованная в уравнении /8.28/ индикатрисса рассеяния $\sigma(E \rightarrow E')$ получена была прежде всего для бериллия, и для графита применяется по качественным соображениям; во-вторых Сингви и Котари /45/ получили для бериллия еще меньшее значение C чем здесь, принимая, что λ_{tr} зависит от энергии более сложным образом, тогда как мы приняли здесь $\alpha=0$, т.е.

$\lambda_{tr} = C \omega v t$. Постоянная C очень чувствительная к зависимости λ_{tr} от энергии.

Для графита согласно модели Брукса и Крумгансля, нужно принять, что колебания, перпендикулярные к плоскости решетки кристалла, имеют температуру Дебая $\theta_z = 900^\circ\text{K}$, тогда как колебаниям, параллельным плоскости решетки, соответствует $\theta_{xy} = 2500^\circ\text{K}$. Тогда по формуле /7.28/ имеем

$$\frac{M_2}{4\zeta\sigma_0} = \frac{1}{3} F\left(\frac{\theta_z}{T}\right) + \frac{2}{3} F\left(\frac{\theta_{xy}}{T}\right) = 0,28.$$

Опыт же дает $0,32 \pm 0,05$.

Для воды принимается $\lambda_{tr}(E) \sim E^{1/2}$, т.е. $\alpha = 1/2$ и для C нужно поэтому взять значение из /8.26/. Последние опытные данные дают для M_2 значение 48 ± 7 барнов на один атом водорода.

Так как самый низкий колебательный уровень молекулы H_2O равен 0,2 эв, то тепловые нейтроны не имеют достаточной энергии для взаимодействия с колебательным движением и взаимодействуют только с H_2O как с жесткой системой. Поэтому экспериментальное значение величины C можно использовать для оценки степени торможения молекулярного вращения.

Если вращение свободное, тогда $\sigma_3 \cdot \overline{\Delta E^2}$ можно рассчитать довольно точно с помощью метода тензора массы, полагая $m^* = 2,1$ и $\sigma_0 = 80$ барн. Это дает значение $M_2 = 80$ барн. В случае несвободных полностью вращений, но свободных трансляций получается для $M_2 = 33$ барн. Экспериментальное же значение $M_2 = 48 \pm 7$ лежит между этими значениями. Это подтверждает, следовательно, предположение о заторможенности вращений. Теоретическое значение постоянной термализации γ для воды, рассматриваемой как одноатомный газ с массой 18, равно 6μ сек, подтверждено тоже экспериментально Дарделем /38/.

Обратимся к вопросу влияния химической связи на поведение нейтронов в случае кристаллов. Как следует из рассмотрения в § 7, отношение параметра M_2 , определенного уравнением /8.4/, для кристаллического замедлителя к тому же параметру M_2' для свободного тяжелого газа, величина этого отношения указывает на влияние кристаллической связи на механизм обмена энергией нейтрона со средой. Такое же заключение можно сделать из рассмотрения моментов индикатриссы рассеяния $\sigma(E \rightarrow E')$. Образует момент первого порядка

$$\sigma_3 \cdot \overline{\Delta E} = \int_0^{\infty} \sigma(E \rightarrow E') (E' - E) dE' \quad /8.29/$$

Для свободного тяжелого газа, согласно результатам § 2, имеем

$$\sigma_3 \cdot \overline{\Delta E} = 2 \mu \sigma_3 (2kT - E) = 2 \mu \sigma_3 E (2\epsilon - 1).$$

В случае кристалла нужно найти интеграл

$$\sigma_3 \cdot \overline{\Delta E} = \frac{3 \mu \sigma_3}{k^3 \theta^3} \int_0^{\infty} \left(\frac{E'}{E} \right)^{1/2} (E' + E) (E' - E)^2 \frac{dE'}{e^{\frac{E'-E}{kT}} - 1} \quad /8.30/$$

Соответственно момент второго порядка в случае свободного газа равен:

$$\sigma_s \overline{\Delta E^2} = 2 \xi \sigma_s E kT = 4 \mu \sigma_s E kT. \quad /8.31/$$

В случае же кристалла, имеем:

$$\sigma_s \overline{\Delta E^2} = \frac{3 \mu \sigma_s}{k^3 \theta^3} \int_0^{\infty} \left(\frac{E'}{E} \right)^{1/2} (E' + E)(E' - E)^3 \frac{dE'}{e^{\frac{E' - E}{kT}} - 1} \quad /8.32/$$

Диаграмма зависимости отношения соответственных моментов для кристалла и свободного газа, а именно отношение моментов первого порядка $\frac{\Delta E}{2 \mu E}$ и отношение моментов второго порядка $\frac{\Delta E^2}{4 \mu E kT}$, приведенная в обзоре Пуля, Нелькина и Стоуна /рис.6/, указывает на то, какое существенное влияние имеет кристаллическая связь на величину момента.

Следствием такого влияния кристаллических эффектов на индикатрису рассеяния, является более жесткий спектр $\varphi(E)$ в случае кристалла по сравнению со свободным газом. Это проверено для графита и бериллия /37/.

Этот результат противоречит ранее полученным результатам тех же по существу авторов /14/. Это говорит о необходимости дальнейшего тщательно как теоретического, так и экспериментального исследования.

Можно предположить, что дополнительные условия, налагаемые на $\sigma(E \rightarrow E')$, а именно-принцип детального равновесия и условие сохранения нейтронов, играют роль в вопросах установления спектра, и эту роль нужно выяснить.

Второе условие дополняется требованием, чтобы асимптотически для больших энергий поток $\varphi(E)$ стремился к спектру Ферми C/E , причем постоянная C определяется следующим образом. Для плотности замедления в случае газового тяжелого замедлителя имеем:

$$q(E) = \xi \sigma_0 \left[(E - kT) \varphi(E) + E kT \frac{d\varphi}{dE} \right].$$

Для $E \gg kT$ плотность замедления $q(\infty) = \xi \sigma_0 E \cdot \varphi(E)$.
С другой стороны, q определяется из условия сохранения:

$$q(\infty) = \int_0^{\infty} \sigma_a(E) \varphi(E) dE.$$

Приравнивая, получаем

$$E \varphi(E) = C = \int_0^{\infty} \frac{\sigma_a(E)}{\xi \sigma_0} \varphi(E) dE. \quad /8.33/$$

В случае, когда нет источников быстрых нейтронов, тогда $q(\infty) = 0$, что предполагалось при дискуссии уравнения /8.1/ и дальше, в этом параграфе.

§ 9. З а к л ю ч е н и е

Все растущая заинтересованность процессами термализации и признание значения спектра тепловых нейтронов для определения поведения новых проектируемых типов реакторов, стимулируют развитие новых и улучшение существующих математических методов /37/. Необходимо отметить дальнейшее интенсивное использование модели свободного водорода, а также модели тяжелого газового замедлителя для расчетов потока нейтронов и средних по потоку значений эффективных сечений. Эти расчеты весьма полезны для целей проектирования новых реакторов, применение же математических машин привело к тому, что такие расчеты являются уже стандартными. Корнгольд /46/ в Брукхавене рассматривал процесс термализации в бесконечной однородной среде с точки зрения получения максимума информации из аналитической трактовки уравнения Больцмана; руководящей мыслью является исследование уравнения Больцмана для потока нейтронов, без применения численных методов или ограничения случаем очень тяжелого замедлителя. Полученные результаты относятся к асимптотическому разложению потока нейтронов по обратным степеням kT/E . Ранее разработанные методы Плачком /35/ и Виком /11/ для трактовки эффективного сечения рассеяния в асимптотической области расширены и применены к интегралу соударений $\int \sigma(E' \rightarrow E) \varphi(E') dE'$. В специальном случае идеального одноатомного газа применение разложения по степеням отношения масс приводит в первом приближении к уже известному уравнению Вилькинса и дает более точное дифференциальное уравнение, когда учтены члены с более высокими степенями этого отношения. По существу уточняются и дальше разрабаты-

ваются методы, которые показали уже свою пригодность в конкретных случаях. Разрабатываются также проблемы термализации для случая пространственной зависимости потока нейтронов, так как значение этих вопросов все более возрастает вместе с ростом роли реакторов, в которых имеются большие градиенты температуры. В случае малых реакторов процесс термализации происходит, главным образом, в отражателе, имеющем иную температуру, чем активная зона; в таких условиях появляется дополнительная причина отступления от спектра Максвелла.

Недавно Коттвитц /47/ в Ханфорде получил аналитическое решение для следующей идеализированной задачи: найти энергетическое и пространственное распределение потока нейтронов для непоглощающей бесконечной среды, состоящей из тяжелого одноатомного газа, температура которого имеет постоянное значение в одном полупространстве и другое постоянное значение в другом полупространстве. Применение модели тяжелого газа и приближения P_1 приводит к дифференциальному уравнению в частных производных, в котором можно разделить переменные для каждого полупространства. Каждая собственная функция энергии этого уравнения является произведением распределения Максвелла и многочленов Лягерра первого порядка. Коэффициенты разложения в ряд определяются из условия непрерывности потока и плотности потока нейтронов на границе температурного скачка. Интересное общее заключение можно получить, если проинтегрировать дифференциальное уравнение; тогда асимптотические значения потока, проинтегрированные по энергии, одинаковы для обоих полупространств для больших расстояний от границы.

Хотя проблема, рассмотренная Коттвитцем, является слишком абстрактной, чтобы можно было результаты ее применить в теории реакторов, однако сам факт получения аналитического решения для пространственно-зависимого потока является очень полезным для контроля применяемых численных методов в случае более сложных вопросов. В особенности появляется возможность определения точности многогруппового метода, применяемого при расчетах теплового потока, зависящего от координат.

Другой приближенный метод расчета спектра, зависящего от координат, развил Гриффин в Лос-Аламосе. Многогрупповой метод Карлсона /48/ применяется для расчета потока в полубесконечной среде как функция расстояния

от граничной поверхности. Источники падающих на граничную поверхность нейтронов монохроматические. Рассчитываются многогрупповые эффективные сечения как для ускоряемых, так и для замедляемых нейтронов в тепловом интервале. Относительно замедлителя делается два разных предположения:

1. Замедлитель - газ Максвелла с массой M и температурой T .
2. Замедлитель - кристалл Дебая с массой M , температурой T и температурой Дебая θ .

В первом случае расчеты проведены точно, во втором случае - в первом приближении относительно m/M в случае некогерентного рассеяния.

Мы указали на несколько направлений, в которых проводятся исследования по спектру нейтронов. Они имеют целью развитие методов исследований для вопросов более простых, чем в случае реактора, но вместе с тем позволяют получить физическое понимание происходящих в реакторе процессов.

Обозначения величин и соотношения между ними

Масса нейтрона $m = 1$.

Масса ядра замедлителя M .

Отношение масс $\mu = \frac{m}{M}$.

Массовое число замедлителя $A = \frac{M}{m} = \frac{1}{\mu}$.

Наиболее вероятная скорость нейтрона при термическом равновесии с атомами замедлителя: $v_0 = \sqrt{2kT/m} = \sqrt{2kT}$.

Соответствующая этой скорости энергия нейтрона: $E_0 = \frac{m}{2} v_0^2 = kT$.

Безразмерная величина отношения скоростей: $x = \frac{v}{v_0} = \sqrt{E/kT}$; $e = x^2 = E/kT$

Эффективное сечение поглощения в случае закона $1/v$:

$$\sigma_a(E) = \frac{\sigma_a(kT)}{\sqrt{E}} \sqrt{kT} = \sigma_a(kT) \sqrt{\frac{kT}{E}} = \frac{\sigma_a(kT)}{x};$$

$$\sigma_a(x) = \frac{\sigma_a'}{x}.$$

Параметр поглощения $\Delta = \frac{4\sigma_a(kT)}{3\sigma_0}$ в случае поглощения по закону%

Параметр поглощения в общем случае любого закона поглощения:

$$\Delta = \frac{4\sigma_a(E)\sqrt{E}}{3\sigma_0 kT}.$$

Средняя логарифмическая потеря энергии на одно столкновение

$$\xi = \ln \frac{E'}{E} = 2\mu.$$

Поперечное эффективное сечение связанного атома /ядро жестко связано с положением начала координат/:

$$\sigma_0 = 4\pi a^2, \text{ где } a - \text{длина рассеяния.}$$

Макроскопическая величина получится умножением на N :

$$\sigma_0 = 4\pi a^2 N.$$

Если ядро может испытывать отдачу, то эффективное сечение рассеяния свободного атома меньше в $(A/A+1)^2$ раза. Распределение Максвелла /для

плотности нейтронов/ $N(v) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \frac{v^2}{(2kT)^{3/2}} e^{-v^2/2kT} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \frac{v^2}{v_0^3} e^{-(v/v_0)^2}$

Распределение Максвелла в зависимости от энергии нейтрона:

$$N(E) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{E}}{(kT)^{3/2}} e^{-E/kT}$$

Поток нейтронов с распределением Максвелла:

$$\varphi(v) = v \cdot N(v) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{v}{v_0}\right)^3 e^{-(v/v_0)^2} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} x^3 e^{-x^2}$$

Поток нейтронов в зависимости от энергии:

$$\varphi(E) = v \cdot N(E) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{2kT} \frac{E}{(kT)^2} e^{-E/kT} = C \frac{E}{(kT)^2} e^{-E/kT},$$

или это же можно получить из $\varphi(v)$:

$$\varphi(E) = \varphi(v) \frac{dv}{dE} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{2kT} \frac{E}{(kT)^2} e^{-E/kT}$$

Те же величины, выраженные с помощью переменной x или e :

$$N(x) = N(v) \frac{dv}{dx} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \frac{v^2}{v_0^3} e^{-(v/v_0)^2} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} x^2 e^{-x^2},$$

$$\text{или } N(x) = N(E) \frac{dE}{dx} = 2xkT \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{E}}{(kT)^{3/2}} e^{-E/kT} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} x^2 e^{-x^2}.$$

Соотношение между $\varphi(E)$ и $\varphi(e)$ получим из: $\varphi(E)dE = \varphi(e)de$,
 $E \varphi(E) = e \varphi(e)$, $\varphi(e) = kT \cdot \varphi(E)$.

Если $\varphi(E)$ не является распределением Максвелла, тогда, введя распределение Максвелла $M(E)$, можно представить $\varphi(E)$ в виде: $\varphi(E) = M(E)\psi(E)$, где $\psi(E)$ дает меру отклонения от спектра Максвелла $M(E)$.

$$\varphi(e) = kT M(E) \psi(E) = M(e) \psi(E) = M(e) \psi(e),$$

$$\text{ибо } M(e) = kT M(E) = e e^{-e} = \frac{E}{kT} e^{-E/kT}.$$

Следовательно

$$\varphi(e) = e e^{-e} \psi(e).$$

Летаргия $u = \ln kT/E$, отсюда $E = kT e^{-u}$.

Из $\varphi(E)dE = -\varphi(u)du$, получаем $\varphi(u) = E\varphi(E) = e\varphi(e)$.

Плотность нейтронов в общем случае неравновесного распределения:

$$N(x) = x^2 e^{-x^2} \psi(x).$$

Для распределения Максвелла $\psi(x) = \text{const.} = \frac{4}{\sqrt{\pi}}$ /или можно пронормировать к единице, т.е. $C = 1/4$. Между потоком нейтронов на единицу энергии $\varphi(E)$ и плотностью нейтронов на единицу скорости имеем соотношение:

$$\varphi(E) = \frac{1}{\sqrt{2kT}} N(x) = \frac{1}{v_0} N(x).$$

Спектр замедленных нейтронов - спектр Ферми $E F(E) = \text{const.}$

Для плотности нейтронов спектр Ферми будет $N(x) = \frac{\text{const.}}{x^2}$.

Постоянная $\text{const.} = \lim_{x \rightarrow \infty} [x^2 \cdot N(x)] = \frac{\Delta}{2} \int_0^{\infty} N(t) dt = \frac{2}{3\sigma_0} q(\infty)$,

$q(\infty)$ - плотность замедления; $q(\infty) = \frac{3\sigma_0}{4} \Delta \int_0^{\infty} N(t) dt$.

П Р И Л О Ж Е Н И Я

Приложение 1. Псевдопотенциал Ферми /17^a/

Покажем, что теорией возмущения можно пользоваться в случае рассеяния нейтрона свободным ядром, если определенным образом выбрать потенциал взаимодействия. Для применимости приближения Борна необходимо, чтобы энергия нейтрона была больше потенциала взаимодействия между нейтроном и ядром. Энергия падающего нейтрона в системе центра масс:

$$E = \frac{k_0^2}{2\mu} = \frac{1}{2\mu\lambda}, \quad \text{где } \mu = \frac{Mm}{M+m} \text{ приведенная масса, } k_0 = 1/\lambda$$

начальный импульс нейтрона. Для медленных нейтронов λ в системе центра масс значительно больше радиуса действия ядерных сил $r_0 \approx 10^{-13}$ см.

Представим потенциал в виде прямоугольной ямы; это является допустимым, поскольку при $\lambda \gg r_0$ рассеяние нечувствительно к форме потенциала.

Глубина ямы U_0 , радиус действия r_0 . Борновское приближение дает для амплитуды рассеяния:

$$f(\theta) = -\frac{\mu}{2\pi} \int U(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}} d\vec{r}, \quad \text{где } \vec{k} = \vec{k} - \vec{k}_0, \quad \vec{r} - \text{радиус вектор}$$

определяющий относительное положение нейтрона и ядра. Подставим $U(r) = U_0$ и воспользуемся тем, что $\lambda \gg r_0$ или $\alpha r_0 \ll 1$, полагая $e^{i\vec{k}\vec{r}} \approx 1$, тогда

$$a = f(\theta) = 2\mu U_0 r_0^3.$$

Поскольку действительный потенциал взаимодействия порядка 8 Мэв, то нельзя применить теорию возмущения для тепловых нейтронов. Можно выбрать потенциальную яму таким образом, чтобы получить точное значение амплитуды рассеяния, которая для медленных нейтронов не зависит от угла рассеяния θ . Потребуем, чтобы новый потенциал удовлетворял соотношению:

$$U_0 r_0^3 = V_0 \alpha^3 = \frac{a}{2\mu}.$$

Для того, чтобы амплитуда рассеяния не зависела от угла рассеяния, новый потенциал тоже должен удовлетворять требованию: $\alpha \ll \lambda$.

Отсюда видим, что если $\alpha \approx 10^{-10}$ см, оставаясь меньше чем λ , тогда $V_0 = 10^{-8} U_0 \approx 10^{-3}$ эв, что конечно мало в сравнении со средней тепловой энергией нейтрона 0,025 эв. При такой форме потенциала можно применять теорию возмущения.

Из требования применимости борновского приближения

$$\frac{a}{2\mu\alpha^3} = V_0 \ll \frac{1}{2\mu\lambda^2},$$

следует, что $a \ll \lambda$. Поскольку $a \approx 10^{-12}$ см, то это условие выполняется. Примем для потенциала форму

$$V(\vec{r}) = -\frac{2\pi}{\mu} a \delta(r_n - R), \quad //$$

где r_n и R — радиус вектора нейтрона и ядра; это означает, что координаты протона и ядра должны совпадать для того, чтобы эти частицы взаимодействовали между собой; иными словами радиус действия ядерных сил принимается равным нулю. Это справедливо, ибо мы приняли, что $\alpha \ll \lambda$. Пользуясь энергией взаимодействия в виде // мы получаем сферически симметричное рассеяние, как и должно быть в случае медленных нейтронов. Для использования теперь псевдопотенциала Ферми для рассеяния нейтронов на связанных ядрах, нужно предположить, что радиус действия α этого потенциала мал в сравнении с амплитудой нулевых колебаний ядра в молекуле или кристалле. Тогда волновая функция системы нейтрон-ядро на расстоянии большем чем α от ядра зависит от потенциала взаимодействия через длину рассеяния. Псевдопотенциал дает таким образом такую же асимптотическую функцию рассеяния, а следовательно и такое же поперечное сечение, как и настоящий потенциал.

Подробную дискуссию см. G. Breit, Phys. Rev. 71, 215 (1947).

V.A. Lippmann and J. Schwinger, Phys. Rev. 79, 469 (1950).

Рассмотрим теперь поперечное сечение для связанного ядра. Если энергия нейтронов мала и недостаточна для того чтобы возбудить колебания или вращения молекулы, и если температура замедлителя слишком мала, чтобы могли играть роль неупругие соударения второго рода, при которых нейтрон получает энергию за счет колебательного или вращательного движения молекулы, то молекула испытывает при столкновении с нейтроном отдачу как материальная точка с массой M_0 , равной массе молекулы. Тогда приведенная масса системы нейтрон-молекула равна

$$\frac{1}{\mu_0} = \frac{1}{m} + \frac{1}{M_0} = \frac{M_0 + m}{mM_0}.$$

В случае быстрых нейтронов ядро ν можно рассматривать как свободное и тогда приведенная масса равна:

$$\frac{1}{M_f} = \frac{1}{m} + \frac{1}{M_\nu} = \frac{M_\nu + m}{m M_\nu}$$

Так как ответственный за рассеяние псевдопотенциал в обоих случаях одинаков, то отношение длины рассеяния связанного ядра a_e к длине рассеяния свободного ядра a_f равно

$$\frac{a_e}{a_f} = \frac{M_0}{M_\nu} \frac{M_\nu + m}{M_0 + m}, \quad a = \frac{1}{2\pi} \mu \int V(r) d^3 r.$$

В случае жидкости или твердого тела, можно считать что $M_0 \rightarrow \infty$, так что

$$\frac{a_e}{a_f} = 1 + \frac{m}{M_\nu} = \frac{M_\nu + m}{M_\nu} = \frac{A+1}{A},$$

где $A = \frac{M_\nu}{m}$.

Отсюда отношение поперечных сечений: $\sigma_e = \left(\frac{A+1}{A}\right)^2 \sigma_f$.

Для протона, связанного, например, в парафине, $\sigma_e = 4\sigma_f$.

Приложение 11

Получим выражение для средней величины дифференциального сечения свободного атомного газа:

$$\begin{aligned} \langle \psi | e^{iNt} e^{-iN't} | \psi \rangle_T &= \int e^{\frac{it}{2M} (2\vec{p}\vec{z} - \kappa^2)} \frac{1}{(2\pi M \kappa T)^{3/2}} e^{-p^2/2M\kappa T} d^3 p = \\ &= \frac{1}{(2\pi M \kappa T)^{3/2}} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} e^{\frac{it}{2M} (2p\kappa \cos\theta - \kappa^2)} e^{-\frac{p^2}{2M\kappa T}} p^2 dp \sin\theta d\theta d\varphi, \end{aligned}$$

полярная ось вдоль \vec{x} , $\vec{p}\vec{x} = px \cos\theta$;

$$\begin{aligned} & \frac{2\pi}{(2\pi m k T)^{3/2}} \int_{-1}^{+1} \int_0^{\infty} e^{\frac{it}{2M}} (2pxm - x^2) e^{-\frac{p^2}{2MkT}} p^2 dp d\mu = \\ & = \frac{2\pi}{(2\pi m k T)^{3/2}} e^{-it\frac{x^2}{2M}} \int_{-1}^{+1} \int_0^{\infty} e^{\frac{itpxm}{M}} e^{-\frac{p^2}{2MkT}} p^2 dp d\mu = \\ & = \frac{2\pi}{(2\pi m k T)^{3/2}} e^{-it\frac{x^2}{2M}} \frac{M}{itx} \int_{-1}^{+1} \frac{1}{p} \left[e^{\frac{itxp}{M}} e^{-\frac{p^2}{2MkT}} p^2 dp - e^{-\frac{itxp}{M}} e^{-\frac{p^2}{2MkT}} p^2 dp \right] \\ & = \frac{2\pi M}{(2\pi m k T)^{3/2}} e^{-it\frac{x^2}{2M}} \frac{1}{itx} \left[\int_0^{\infty} e^{\frac{itxp}{M}} e^{-\frac{p^2}{2MkT}} p dp - \int_0^{\infty} e^{-\frac{itxp}{M}} e^{-\frac{p^2}{2MkT}} p dp \right]. \end{aligned}$$

Во втором интеграле сделаем замену переменного $p \rightarrow -p$, $dp \rightarrow -dp$,

тогда
$$\int_0^{\infty} e^{-\frac{itxp}{M}} e^{-\frac{p^2}{2MkT}} p dp = - \int_{-\infty}^0 e^{\frac{itxp}{M}} e^{-\frac{p^2}{2MkT}} p dp.$$

Собирая оба интеграла в один и интегрируя затем по частям получим

$$\begin{aligned} & \frac{2\pi M}{(2\pi m k T)^{3/2}} e^{-it\frac{x^2}{2M}} \frac{1}{itx} \int_0^{\infty} e^{\frac{itxp}{M}} e^{-\frac{p^2}{2MkT}} p dp = \\ & = \frac{2\pi M}{(2\pi m k T)^{3/2}} e^{-it\frac{x^2}{2M}} \frac{1}{itx} \left[e^{\frac{itxp}{M}} e^{-\frac{p^2}{2MkT}} (-MkT) \right]_{-\infty}^{+\infty} + \\ & + \frac{2\pi MkT}{(2\pi m k T)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{p^2}{2MkT}} \frac{itx}{M} e^{-it\frac{x^2}{2M}} e^{\frac{itxp}{M}} dp. \end{aligned}$$

Первый проинтегрированный член, очевидно, равен нулю, а дальше нужно взять интеграл

$$e^{-it \frac{x^2}{2M}} \frac{2\pi M k T}{(2\pi M k T)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{p^2}{2M k T}} e^{\frac{it x p}{M}} dp = \frac{2\pi M k T \sqrt{2\pi M k T}}{(2\pi M k T)^{3/2}} e^{-it \frac{x^2}{2M}} e^{-\frac{t^2 x^2}{2M k T}}$$

/последний интеграл табличный, см. Рыжик стр. 163, № 4/. Итак, окончательно

$$\langle \psi | e^{iHt} e^{-iH't} | \psi \rangle_T = \langle \chi \rangle_T = e^{-\frac{x^2}{2M} (it + t^2 k T)}$$

Тогда, используя тот же интеграл, имеем

$$\begin{aligned} \langle \sigma(\theta, \epsilon) \rangle_T &= \frac{\alpha^2}{2\pi} \frac{k}{k_0} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-it(\epsilon + \frac{x^2}{2M}) - \frac{t^2 x^2 k T}{2M}} dt = \\ &= \frac{\alpha^2}{2\pi} \left(\frac{2\pi M}{x^2 k T} \right)^{1/2} \frac{k}{k_0} e^{-\frac{M}{2kTx^2} \left(\epsilon + \frac{x^2}{2M} \right)^2} \end{aligned}$$

Приложение III

1. Покажем, что точное решение интегрального уравнения минимизирует функционал I / Φ .

$$I(\Phi) = \int_0^{\infty} \Phi(E) dE \left[\sigma(E) \cdot \Phi(E) - \int_0^{\infty} k(E, E') \Phi(E') dE' \right]$$

$$\sigma(E) = \sigma_a(E) + \sigma_s(E).$$

$$\begin{aligned} \delta I(\Phi) &= \int_0^{\infty} \delta \Phi \cdot dE \left[\sigma(E) \cdot \Phi(E) - \int_0^{\infty} k(E, E') \Phi(E') dE' \right] + \\ &+ \int_0^{\infty} \Phi dE \left[\sigma(E) \cdot \delta \Phi(E) - \int_0^{\infty} k(E, E') \delta \Phi(E') dE' \right]. \end{aligned}$$

Благодаря тому, что ядро интегрального уравнения симметрично, можем сделать перестановку переменных интегрирования во втором интеграле, а именно $E \leftrightarrow E'$, тогда имеем:

$$\int_0^{\infty} \phi(E') dE' \int_0^{\infty} k(E, E') \delta\phi(E) dE = \int_0^{\infty} \delta\phi(E) dE \int_0^{\infty} k(E, E') \phi(E') dE'.$$

Подставляя и группируя члены, получаем:

$$\delta I(\phi) = 2 \int_0^{\infty} \delta\phi(E) dE \left[\sigma(E) \phi(E) - \int_0^{\infty} k(E, E') \phi(E') dE' \right] = 0;$$

отсюда вследствие произвольности $\delta\phi$, получим искомое интегральное уравнение

$$\sigma(E) \phi(E) = \int_0^{\infty} k(E, E') \phi(E') dE'.$$

Если разделим интервал энергии на две части, а именно от 0 до E_m - в которой ищем спектр тепловых нейтронов, и область $E_m - \infty$ - где спектр замедления Ферми, тогда функционал будет иметь следующий вид:

$$I(\phi) = \int_0^{E_m} \phi dE \left[\sigma(E) \phi(E) - \int_0^{E_m} k(E, E') \phi(E') dE' - 2 \int_{E_m}^{\infty} k(E, E') \phi^*(E') dE' \right]$$

где ϕ^* спектр Ферми.

Действительно, варьируя, получаем:

$$\sigma(E) \phi(E) = \int_0^{E_m} k(E, E') \phi(E') dE' + \int_{E_m}^{\infty} k(E, E') \phi^*(E') dE'.$$

2. Представление интеграла $J(\Delta)$ в виде ряда. Сделав подстановку

$$\sigma_3(E) = \int_0^{\infty} \sigma(E \rightarrow E') dE',$$

получаем для $J(\Delta)$ выражение:

$$J(\Delta) = \iint dE dE' M(E) \sigma(E \rightarrow E') e^{\Delta \cdot E} (e^{\Delta \cdot E} - e^{\Delta \cdot E'})$$

Разлагая подинтегральное выражение в ряд по степеням Δ и группируя члены, имеем

$$e^{\Delta \cdot E} (e^{\Delta \cdot E} - e^{\Delta \cdot E'}) = - \left[\Delta (E' - E) + \frac{1}{2} \Delta^2 \{ (E' - E)^2 + 4E(E' - E) \} + \right. \\ \left. + \frac{\Delta^3}{3!} \{ 3E(E'^2 - E^2) + E'^3 - E^3 \} + \dots \right].$$

При подстановке в интеграл получим следующий результат. Первый член обращает интеграл в нуль. Действительно, сделав замену переменных $E \rightleftharpoons E'$ и воспользовавшись условием детального равновесия

$$M(E) \sigma(E \rightarrow E') = M(E') \sigma(E' \rightarrow E)$$

и тем условием, что при замене $E \rightleftharpoons E'$ выражение $M(E) \sigma(E \rightarrow E')$ не меняется, имеем:

$$\iint dE dE' M(E) \sigma(E \rightarrow E') (E' - E) = - \iint dE dE' M(E) \sigma(E \rightarrow E') (E' - E),$$

откуда следует равенство нулю этого интеграла. Второй член состоит из двух частей, а именно

$$\iint dE dE' M(E) \sigma(E \rightarrow E') (E' - E)^2 + 4 \iint dE dE' E M(E) \sigma(E \rightarrow E') (E' - E).$$

Второй интеграл можно преобразовать следующим образом:

$$\iint dE dE' M(E) \sigma(E \rightarrow E') E (E' - E) = \frac{1}{2} \iint dE dE' M(E) \sigma(E \rightarrow E') E (E' - E) + \\ + \frac{1}{2} \iint dE dE' M(E) \sigma(E \rightarrow E') (E - E') E' = - \iint dE dE' M(E) \sigma(E \rightarrow E') (E' - E)^2.$$

Следовательно для второго члена получаем выражение:

$$- \iint dE dE' M(E) \sigma(E \rightarrow E') (E' - E)^2 = 2 \iint dE dE' E M(E) \sigma(E \rightarrow E') (E' - E).$$

Третий член рассматриваем аналогичным образом: первая часть приводит к исчезновению интеграла, второй же член дает:

$$3 \iint dE dE' M(E) \sigma(E \rightarrow E') E (E' + E) (E' - E) = \frac{3}{2} \iint dE dE' M(E) \sigma(E \rightarrow E') E (E' + E) (E' - E) \\ - \frac{3}{2} \iint dE dE' M(E) \sigma(E \rightarrow E') E' (E' + E) (E' - E) =$$

$$= -\frac{3}{2} \iint dE dE' M(E) \sigma(E \rightarrow E') (E' + E) (E' - E)^2 = -3 \iint dE dE' E M(E) \sigma(E \rightarrow E') (E' - E)^2.$$

Окончательно имеем для $J(\Delta)$;

$$J(\Delta) = - \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\Delta^n}{n!} M_n,$$

где $M_1 = 0$, $M_2 = 2 \iint dE dE' E M(E) \sigma(E \rightarrow E') (E' - E)$

$$M_3 = -3 \iint dE dE' E M(E) \sigma(E \rightarrow E') (E' - E)^2$$

моменты индикатриссы рассеяния.

3. Определение интегралов.

$$\int_0^{E_m} \sigma_a(E) E e^{-(\beta - 2\Delta)E} dE = \mu \int_0^{\infty} \sqrt{E} e^{-(1-2z)\beta E} dE = \frac{\mu \sqrt{\pi}}{2(1-2z)^{3/2} \beta^{3/2}},$$

полагая $\sigma_a(E) = \mu/\sqrt{E}$, $E_m \rightarrow \infty$.

Рассмотрим интеграл

$$\int_0^{E_m} e^{\Delta \cdot E} dE \int_{E_m}^{\infty} \sigma(E' \rightarrow E) \varphi^*(E') dE'.$$

Если E_m достаточно велико, то индикатрисса рассеяния равна:

$$\sigma(E' \rightarrow E) = \sigma_3(E') \frac{\alpha}{E'}; \quad \gamma E' < E < E', \quad E' > E_m,$$

где $\alpha = \frac{(M+1)^2}{4\pi}$, $\gamma = \left(\frac{M-1}{M+1}\right)^2$.

Тогда интеграл принимает вид:

$$\int_0^{E_m} e^{\Delta \cdot E} dE \int_{E_m}^{\infty} \frac{\alpha}{E'} \frac{dE'}{E'^2} = \frac{\alpha}{3} \int_{E_m}^{\infty} \frac{dE'}{E'^2} \int_0^{E_m} e^{\Delta \cdot E} dE.$$

Установим более точно пределы интегрирования. Мы имеем следующие неравенства:

$$0 < E < E_m$$

$$rE' < E < E'$$

отсюда

$$rE' \leq E \leq E_m$$

$$E_m \leq E' \leq E_m/r$$

Итак пределы интегрирования равны:

$$rE' \leq E \leq E_m$$

$$E_m \leq E' \leq \frac{E_m}{r}$$

Тогда интеграл равен:

$$\frac{\alpha}{\pi} \int_{E_m}^{E_m/r} \frac{dE'}{E'^2} \int_{rE'}^{E_m} e^{\Delta \cdot E} dE = \frac{\alpha}{\pi} \int_{rE_m}^{E_m} e^{\Delta \cdot E} dE \int_{E_m}^{E/r} \frac{dE'}{E'^2} = \frac{\alpha}{\pi} \int_r^1 e^{xt} \left(1 - \frac{r}{t}\right) dt,$$

где $t = E/E_m$, $x = \Delta \cdot E_m$.

Приложение IV

Определим среднее значение вращательной функции молекулы, т.е. формулу /4.4/. Имеем

$$\langle \chi_{v_1}^r \rangle_T = e^{i\vec{k} \cdot (\vec{b}_v - \vec{b}_{v'})} e^{-\frac{1}{2} \vec{k} \cdot \mathcal{K}_{vv'} \cdot \vec{k}} \frac{\int e^{-\ell^2/2kT} e^{it\vec{k} \cdot B_v^+ J^{-1/2} \vec{\ell}} d^3\vec{\ell}}{\int e^{-\ell^2/2kT} d^3\vec{\ell}}$$

Интеграл в знаменателе равен:

$$\int e^{-\ell^2/2kT} \ell^2 d\ell \sin\theta d\theta d\varphi = 4\pi \int_0^\infty e^{-\ell^2/2kT} \ell^2 d\ell = (2\pi kT)^{3/2}$$

Числитель представим в следующем виде:

$$\int e^{-l^2/2\kappa T} e^{it\vec{x} B_\nu^+ J^{-1/2} \vec{l}} l^2 dl \sin\theta d\theta d\varphi = 2\pi \int_0^{+\infty} \int_{-1}^{+1} e^{itx l B_\nu^+ J^{-1/2}} e^{-l^2/2\kappa T} l^2 dl d\mu =$$

$$= \frac{2\pi}{itx B_\nu^+ J^{-1/2}} \left\{ \int_0^{+\infty} e^{itx l B_\nu^+ J^{-1/2}} e^{-l^2/2\kappa T} l dl - \int_0^{+\infty} e^{-itx l B_\nu^+ J^{-1/2}} e^{-l^2/2\kappa T} l dl \right\}.$$

Дальше процедура та же, что для получения интеграла в приложении 11. Сделав замену переменного во втором интеграле и собрав оба выражения в скобках в один интеграл, получим

$$\frac{2\pi}{itx B_\nu^+ J^{-1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-l^2/2\kappa T} e^{itx l B_\nu^+ J^{-1/2}} l dl = \frac{2\pi}{itx B_\nu^+ J^{-1/2}} \left\{ (\kappa T) e^{-l^2/2\kappa T} e^{itx l B_\nu^+ J^{-1/2}} \right\}_{-\infty}^{+\infty} +$$

$$+ (\kappa T) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-l^2/2\kappa T} e^{itx l B_\nu^+ J^{-1/2}} dl \cdot itx B_\nu^+ J^{-1/2} \left. \right\} = 2\pi\kappa T \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-l^2/2\kappa T} e^{itx l B_\nu^+ J^{-1/2}} dl =$$

$$= (2\pi\kappa T)^{3/2} e^{-\frac{t^2 \vec{x} B_\nu^+ J^{-1/2} B_\nu \vec{x} \kappa T}{2}} = (2\pi\kappa T)^{3/2} e^{-\frac{t^2 \kappa T \vec{x} K_{\nu\nu} \vec{x}}{2}}$$

Подставив, получаем искомую функцию

$$\langle \chi_{\nu\nu}^r \rangle_T = e^{i\vec{x} (\vec{v}_\nu - \vec{v}_\nu)} e^{-\frac{1}{2} \vec{x} K_{\nu\nu} \vec{x} (it + t^2 \kappa T)}$$

Приложение У.

Теорема Блоха: $\langle e^Q \rangle_T = e^{\frac{1}{2} \langle Q^2 \rangle_T}$, где Q - любая функция координат осциллятора. Представим Q в виде: $Q = \lambda a + \lambda^* a^\dagger$, причем λ, λ^* могут зависеть от времени колебания. Чтобы найти матричный элемент функции Q надо расположить в определенном порядке

операторы a и a^\dagger . Имеем следующее соотношение для некоммутирующих операторов:

$$e^{\lambda a + \lambda^* a^\dagger - \frac{1}{2}|\lambda|^2} = e^{\lambda^* a^\dagger} e^{\lambda a},$$

откуда
$$e^{\lambda a + \lambda^* a^\dagger} = e^{\lambda^* a^\dagger} e^{\lambda a} e^{\frac{1}{2}|\lambda|^2}$$

Следовательно, при таком расположении оператор поглощения a стоит впереди оператора испускания a^\dagger . Матричный элемент в n возбужденном состоянии найдем путем разложения $e^{\lambda a^\dagger}$ и $e^{\lambda a}$ в ряд, оборвав их на n члене:

$$\langle e^Q \rangle_n = \sum_{p=0}^n \frac{|\lambda|^2 p}{(p!)^2} \langle (a^\dagger)^p a^p \rangle_n e^{\frac{1}{2}|\lambda|^2}$$

Действие операторов a и a^\dagger на вектор состояния ψ_n :

$$a \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1}$$

$$[a^\dagger \psi_n] = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}.$$

Разлагая скобки в ряд, имеем:

$$\langle (a^\dagger)^p a^p \rangle_n = \frac{n!}{(n-p)!}$$

Тогда

$$\langle e^Q \rangle_n = \sum_{p=0}^n \frac{n!}{(p!)^2 (n-p)!} |\lambda|^2 p e^{\frac{1}{2}|\lambda|^2}$$

Усредняя оператор e^Q по тепловому распределению, получим:

$$\langle e^Q \rangle_T = \frac{\text{Sp} e^{-Ht} e^Q}{\text{Sp} e^{-Ht}} = [1 - e^{-\omega/\kappa T}] \sum_n e^{-n\omega/\kappa T} \langle e^Q \rangle_n,$$

ибо

$$\text{Sp} e^{-Ht} = \sum_n e^{-n\omega/\kappa T} = \frac{1}{1 - e^{-\omega/\kappa T}}$$

Положим $z = e^{-\omega/\kappa T}$, тогда

$$\langle e^Q \rangle_T = (1-z) \sum_{n,p} \frac{n! |\lambda|^2 p z^n}{(p!)^2 (n-p)!} e^{\frac{1}{2}|\lambda|^2} = (1-z) \sum_{n,p=0}^{\infty} \frac{|\lambda|^2 p z^p}{(p!)^2} \frac{d^p}{dz^p} z^n e^{\frac{1}{2}|\lambda|^2}.$$

Сумма по n является геометрическим рядом, следовательно:

$$\begin{aligned} \langle e^Q \rangle_T &= (1-z) \sum_{p=0}^{\infty} \frac{|\lambda|^2 p}{(p!)^2} z^p \frac{d^p}{dz^p} \left(\frac{1}{1-z} \right) e^{\frac{1}{2} |\lambda|^2} = \\ &= \sum_p (p!)^{-1} |\lambda|^2 p \frac{z^p}{(1-z)^p} e^{\frac{1}{2} |\lambda|^2} = e^{\left[\frac{1}{2} + \frac{z}{1-z} \right] |\lambda|^2} \end{aligned}$$

$$\text{Но } \langle Q^2 \rangle_T = |\lambda|^2 \langle 2n+1 \rangle_T = 2|\lambda|^2 \left[\frac{1}{2} + \frac{z}{1-z} \right],$$

следовательно

$$\langle e^Q \rangle_T = e^{\frac{1}{2} \langle Q^2 \rangle_T}$$

В нашем случае имеем:

$$\begin{aligned} e^{a q(t)} e^{b q(0)} &= e^{a q(t) + b q(0) + \frac{1}{2} a b [q(t), q(0)]} \\ &= e^{a q(t) + b q(0)} e^{\frac{1}{2} a b [q(t), q(0)]}, \end{aligned}$$

где обозначено:

$$\begin{aligned} a &= i \vec{x} \vec{z}_v^{(A)} \\ b &= -i \vec{x} \vec{z}_{v'}^{(A)} \end{aligned}$$

По теореме Блоха получаем для первого множителя:

$$\langle e^{a q(t) + b q(0)} \rangle_T = e^{\frac{1}{2} \langle [a q(t) + b q(0)]^2 \rangle_T}$$

$$\begin{aligned} \text{Тогда } \langle e^{a q(t)} e^{b q(0)} \rangle_T &= \langle e^{a q(t) + b q(0)} \rangle_T e^{\frac{1}{2} a b [q(t), q(0)]} \\ &= e^{\frac{1}{2} \langle [a q(t) + b q(0)]^2 \rangle_T} + \frac{a b}{2} \langle [q(t), q(0)] \rangle_T, \end{aligned}$$

так как, поскольку коммутатор не усредняется, то можно формально таким образом представить результат усреднения. Теперь окончательно учитывая,

$$\text{что } \langle q^2(t) \rangle_T = \langle q^2(0) \rangle_T,$$

$$\begin{aligned} \text{имеем: } \langle e^{a q(t)} e^{b q(0)} \rangle_T &= e^{\frac{1}{2} \langle a^2 q^2(t) + b^2 q^2(0) \rangle_T} + \langle a b q(t) q(0) \rangle_T \\ &= e^{-\frac{1}{2} [(\vec{x} \vec{z}_v^{(A)})^2 + (\vec{x} \vec{z}_{v'}^{(A)})^2] \langle q^2(0) \rangle_T} + (\vec{x} \vec{z}_v^{(A)}) (\vec{x} \vec{z}_{v'}^{(A)}) \langle q_\lambda(t) q_\lambda(0) \rangle_T \\ &= e \end{aligned}$$

Приложение У1. Колебания кристалла

Функция колебательного движения:

$$\langle X_{\nu\nu'}^{\nu} \rangle_T = \langle \psi_i | e^{i\vec{x} \cdot \vec{r}_{\nu}(t)} e^{-i\vec{x} \cdot \vec{r}_{\nu}(0)} | \psi_i \rangle_T. \quad /1/$$

Дифференциальное сечение рассеяния выражается формулой:

$$\sigma(\theta, \epsilon) = \frac{k}{k_0} \sum_{\nu, \nu'} a_{\nu} a_{\nu'} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-i\epsilon t} \langle X_{\nu\nu'}^{\nu} \rangle_T. \quad /2/$$

Рассмотрим сумму $\sum_{\nu\nu'} a_{\nu} a_{\nu'} \langle X_{\nu\nu'}^{\nu} \rangle_T$

Полагая $\vec{r}_{\nu}(t) = \vec{r}_{\nu} + \vec{u}_{\nu}(t),$

где \vec{r}_{ν} определяет положение равновесия атомов в кристалле, $u_{\nu}(t)$ — смещения атомов, имеем:

$$\sum_{\nu\nu'} A_{\nu} A_{\nu'}^* \langle e^{i\vec{x} \cdot (\vec{u}_{\nu} - \vec{u}_{\nu'})} \rangle_T; \quad A_{\nu} = a_{\nu} e^{i\vec{x} \cdot \vec{r}_{\nu}}. \quad /3/$$

Вспользуемся теорией Блоха для нахождения средних величин, зависящих от координат гармонического осциллятора:

$$\langle e^{i\vec{x} \cdot (\vec{u}_{\nu} - \vec{u}_{\nu'})} \rangle_T = e^{(M_{\nu\nu'} - M_{\nu} - M_{\nu'})}$$

где введены обозначения:

$$M_{\nu} = \frac{1}{2} \langle (\vec{x} \cdot \vec{u}_{\nu})^2 \rangle_T$$

$$M_{\nu\nu'} = \langle (\vec{x} \cdot \vec{u}_{\nu}) (\vec{x} \cdot \vec{u}_{\nu'}) \rangle_T. \quad /4/$$

Подставляя это в уравнение /3/, получаем /заменяв $e^{M_{\nu\nu'}}$ через $1 + [e^{M_{\nu\nu'}} - 1]$,

$$\sum_{\nu\nu'} A_{\nu} A_{\nu'}^* e^{M_{\nu\nu'}} e^{-M_{\nu}} e^{-M_{\nu'}} = \sum_{\nu\nu'} A_{\nu} A_{\nu'}^* e^{-M_{\nu}} e^{-M_{\nu'}} [1 + (e^{M_{\nu\nu'}} - 1)] =$$

$$= \sum_{\nu\nu'} A_\nu A_{\nu'}^* e^{-M_\nu} e^{-M_{\nu'}} + \sum_{\nu\nu'} A_\nu A_{\nu'}^* e^{-M_\nu} e^{-M_{\nu'}} (e^{M_{\nu\nu'}} - 1).$$

Заменим A_ν на амплитуду рассеяния a_ν :

$$\sum_\nu a_\nu e^{-M_\nu} e^{i\vec{k}\vec{b}_\nu} \sum_{\nu'} a_{\nu'} e^{-M_{\nu'}} e^{-i\vec{k}\vec{b}_{\nu'}} + \\ + \sum_{\nu\nu'} a_\nu e^{-M_\nu} a_{\nu'} e^{-M_{\nu'}} e^{i\vec{k}(\vec{b}_\nu - \vec{b}_{\nu'})} (e^{M_{\nu\nu'}} - 1).$$

Введем т.н. атомный фактор $a_\nu^\tau = a_\nu e^{-M_\nu}$, тогда получаем окончательное выражение:

$$\left| \sum_\nu a_\nu^\tau e^{i\vec{k}\vec{b}_\nu} \right|^2 + \sum_{\nu\nu'} a_\nu^\tau a_{\nu'}^\tau e^{i\vec{k}(\vec{b}_\nu - \vec{b}_{\nu'})} (e^{M_{\nu\nu'}} - 1). \quad /5/$$

Первый член это когерентное, упругое рассеяние, удовлетворяющее условию Брэгга; зависимость от температуры дается фактором Дебая-Уоллера e^{-M_ν} , который для жесткой решетки равен 1. Второй член - это температурное диффузное рассеяние. Если предположим, что между колебаниями атомов нет корреляции, тогда среднее от произведения равно произведению средних, т.е. $M_{\nu\nu'}$ тогда равно:

$$M_{\nu\nu'} = \langle \vec{x} \vec{u}_\nu \rangle_T \langle \vec{x} \vec{u}_{\nu'} \rangle_T.$$

Но среднее от \vec{u}_ν исчезает. В самом деле, среднее равно:

$$\langle u_\nu \rangle_T = \sum_i \langle \psi_i | u_\nu | \psi_i \rangle \frac{e^{-\epsilon_i/kT}}{\sum_j e^{-\epsilon_j/kT}},$$

однако $\langle \psi_i | u_\nu | \psi_i \rangle = 0$, поэтому $\langle u_\nu \rangle_T = 0$.

Следовательно для $\nu \neq \nu'$, $M_{\nu\nu'} = 0$, и тогда член в скобках в уравнении /5/ равен нулю для $\nu \neq \nu'$. Остаются только члены с $\nu = \nu'$:

$$M_{\nu\nu} = \langle (\vec{x} \vec{u}_\nu)^2 \rangle_T = 2M_\nu.$$

Температурное рассеяние определяется тогда формулой

$$\sum_\nu a_\nu^2 (1 - e^{-2M_\nu}). \quad /6/$$

Диффузное рассеяние более сильно в тех направлениях, в которых рассеяние Брэгга ослаблено. Однако действительности более отвечает предположение о том, что, вообще говоря, между колебаниями разных атомов имеется корреляция, которая описывается плавно убывающей функцией расстояния между атомами $\mathbf{v}' - \mathbf{v}$. Тогда сумма по атомам решетки для температурного диффузного рассеяния будет содержать интерференционные члены, подобные членам когерентного рассеяния в направлениях Брэгга, но только для такого кристалла, эффективные размеры которого определяются тем, как быстро функция корреляции убывает с расстоянием.

Поэтому можно ожидать широких интерференционных максимумов диффузного рассеяния в направлениях Брэгга.

Определим сейчас величину $M_{vv'}$. С этой целью разложим колебания атомов по нормальным колебаниям решетки.

$$\begin{aligned} \vec{u}_v(t) &= \frac{1}{\sqrt{NM}} \sum_q \vec{e}_q e^{i\vec{q}\vec{r}_v} \frac{1}{\sqrt{2\omega_q}} (a e^{-i\omega_q t} + a^+ e^{i\omega_q t}) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{NM}} \sum_q \vec{e}_q \xi_q e^{i\vec{q}\vec{r}_v}, \end{aligned} \quad /7/$$

где ξ_q - амплитуда, \vec{e}_q - единичный вектор поляризации, \vec{q} - вектор распространения упругой волны. Тогда получим:

$$M_{vv'} = \frac{1}{NM} \sum_q e^{i\vec{q}(\vec{r}_v - \vec{r}_{v'})} (\vec{e}_q \vec{e}_q) \langle |\xi_q|^2 \rangle_T,$$

где $\langle |\xi_q|^2 \rangle_T = \langle |\xi_q(t) \xi_q(0)| \rangle_T$.

Если пренебречь поляризацией волн, то имеем:

$$M_{vv'} = \frac{x^2}{NM} \sum_q e^{i\vec{q}(\vec{r}_v - \vec{r}_{v'})} \langle |\xi_q|^2 \rangle_T. \quad /8/$$

Перейдем к непрерывному спектру, заменяя сумму по q интегралом и умножая на $N \frac{3}{4\pi q_m^3}$, где q_m - максимальное значение вектора q , а $\frac{4\pi}{3} q_m^3$ - объем сферы в пространстве \vec{q} , эквивалентный объему интегрирования $(\frac{2\pi}{a})^3$ по кубической решетке с постоянной a /в простейшем случае кубической решетки/

$$\sum_q \rightarrow N \frac{3}{4\pi q_m^3} \int_0^{q_m} d\vec{q}$$

Следовательно имеем:

$$M_{vv'} = \frac{\kappa^2}{M} \frac{3}{4\pi q_m^3} \int_0^{q_m} \langle |\xi_q|^2 \rangle_T e^{i\vec{q}(\vec{r}_v - \vec{r}_{v'})} d\vec{q}.$$

Заменим приближенно $e^{i\vec{q}(\vec{r}_v - \vec{r}_{v'})}$ на $1 + M_{vv'}$ и подставим в формулу для температурного рассеяния:

$$\begin{aligned} \sum_{vv'} a_v^T a_{v'}^T \frac{\kappa^2}{M} \frac{3}{4\pi q_m^3} \int_0^{q_m} e^{i(\vec{x} + \vec{q})(\vec{r}_v - \vec{r}_{v'})} \langle |\xi_q|^2 \rangle_T d\vec{q} = \\ = \frac{\kappa^2}{M} \frac{3}{4\pi q_m^3} \int_0^{q_m} \left| \sum_v a_v^T e^{i(\vec{x} + \vec{q})\vec{r}_v} \right|^2 \langle |\xi_q|^2 \rangle_T d\vec{q}. \end{aligned} \quad /9/$$

Эта формула соответствует поглощению или излучению одного фонона. Для многофононных процессов нужно взять $(M_{vv'})^n$. Из формулы /9/ следует, что в направлениях, отличающихся от направлений Брэгга на величину импульса фонона \vec{q} , имеем дифракционные максимумы. Эффективность этих фононов определяется средним квадратом амплитуды $\langle |\xi_q|^2 \rangle_T$, а именно

$$\begin{aligned} \langle |\xi_q(t) \xi_q(\omega)| \rangle_T &= \frac{1}{2\omega_q} [a e^{-i\omega_q t} + a^+ e^{i\omega_q t}] (a + a^+) = \\ &= \frac{1}{2\omega_q(z-1)} [z e^{-i\omega_q t} + e^{i\omega_q t}]; \end{aligned}$$

отбрасывая многофононные процессы и полагая $z = e^{\omega/kT}$. Следовательно, наиболее эффективными являются фононы низкой энергии.

Для определения интеграла /9/ необходимо установить связь между ω_q и \vec{q} . Это довольно трудно потому, что эта связь зависит от межуатомных сил в кристалле, а следовательно от рода кристалла. Однако для длинноволнового спектра, колебания кристалла можно рассматривать с точки зрения непрерывной среды, и тогда можно принять, что

$$\omega_q = cq,$$

где c - скорость звука в кристалле, которая может зависеть от направления распространения и поляризации упругих волн, но приблизительно не зависит от частоты. Вводя температуру Дебая для кристалла: $k\theta = \omega_m = cq_m$,

получим вместо /9/

$$\frac{\kappa^2}{2M} \frac{3}{k^3\theta^3} \int_0^{k\theta} \frac{(z e^{-i\omega t} + e^{i\omega t})}{\omega_q(z-1)} \left| \sum_v a_v^T e^{i(\vec{x} + \vec{q})\vec{r}_v} \right|^2 \omega^2 d\omega. \quad /10/$$

Подставляя это в формулу /2/, получим дифференциальное сечение рассеяния для неупругого однофононного процесса. Если возьмем простейший случай некогерентного приближения, тогда

$$\left| \sum_{\nu} a_{\nu}^{\tau} e^{i(\vec{k} + \vec{q}) \cdot \vec{r}_{\nu}} \right|^2 = \sum_{\nu} a_{\nu}^2 e^{-2M_{\nu}} = \sum_{\nu} a_{\nu}^2 e^{-M_{\nu\nu}},$$

где имеем

$$M_{\nu\nu} = \frac{\kappa^2}{2M} \frac{3}{9m} \int_0^{q_m} \frac{\omega d\omega}{(e^{\omega/kT} - 1)} \left[e^{\omega/kT} e^{-i\omega t} + e^{i\omega t} \right].$$

Если заменим $e^{-M_{\nu\nu}}$ единицей, то тем самым получим дифференциальное сечение рассеяния в приближении $\mu = \frac{m}{M}$.

Следовательно имеем:

$$\sum a_{\nu}^2 = N a^2 = \frac{\sigma_0}{4\pi}$$

$$\sigma(\theta, \epsilon) = \left(\frac{E'}{E}\right)^{1/2} \frac{\kappa^2}{2M} \frac{\sigma_0}{4\pi} \frac{3}{k^3 \theta^3} \left\{ \int_0^{k\theta} \frac{\omega d\omega \delta(\epsilon + \omega) e^{\omega/kT}}{(e^{\omega/kT} - 1)} + \int_0^{k\theta} \frac{\omega \delta(\epsilon - \omega) d\omega}{(e^{\omega/kT} - 1)} \right\}.$$

Интегрируя по углам, получим индикатрису рассеяния:

$$\sigma(E \rightarrow E') = \frac{3\sigma_0 \mu}{k^3 \theta^3} \left(\frac{E'}{E}\right)^{1/2} (E' + E)(E' - E) \frac{1}{e^{\frac{E' - E}{kT}} - 1} \quad \text{для } |E' - E| \leq k\theta$$

$$= 0 \quad \text{для } |E' - E| > k\theta.$$

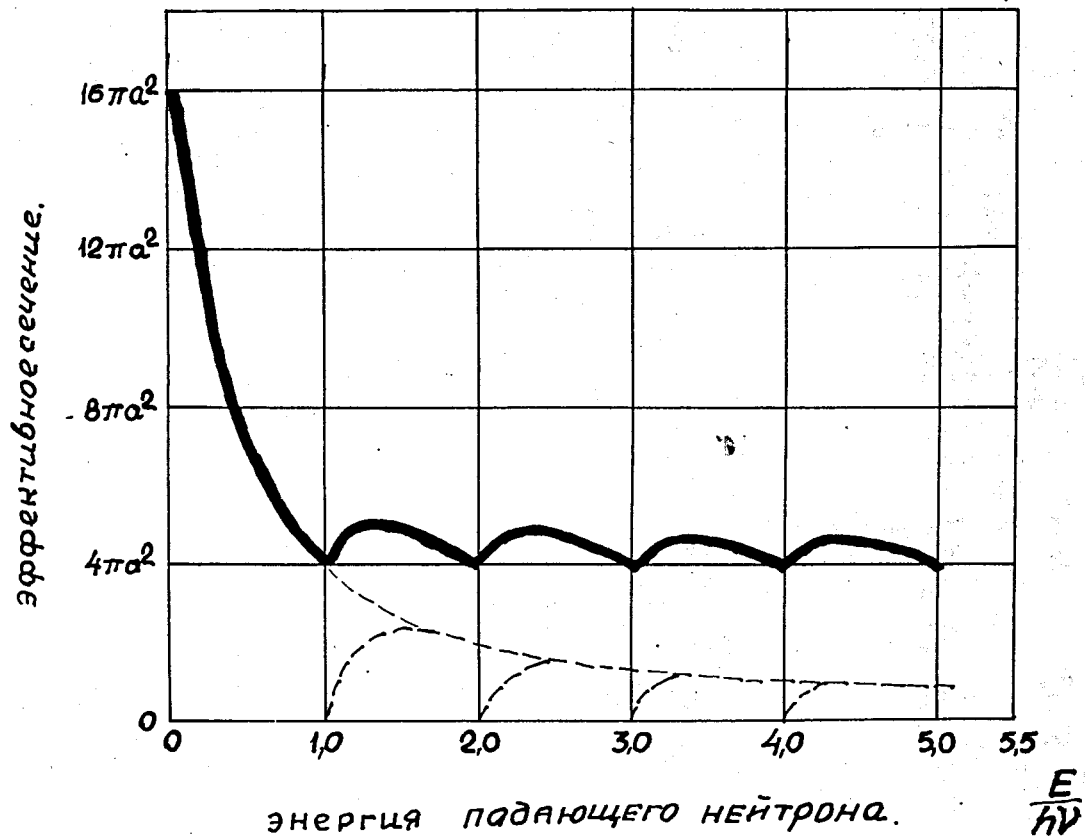


Рис. 1. Теоретическая кривая зависимости эффективного сечения связанного протона от энергии падающих нейтронов.

— тяжелый кристалл
 - - - - - тяжелый газовый замедлитель

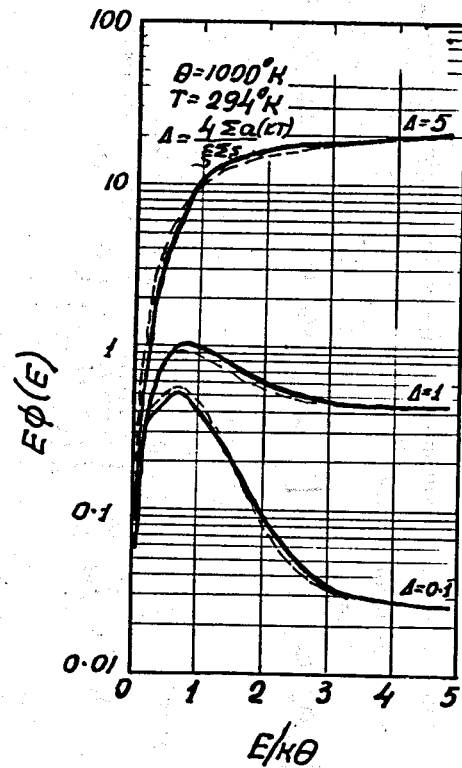


Рис. 2. Влияние поглощения на спектр нейтронов в случае тяжелого замедлителя.

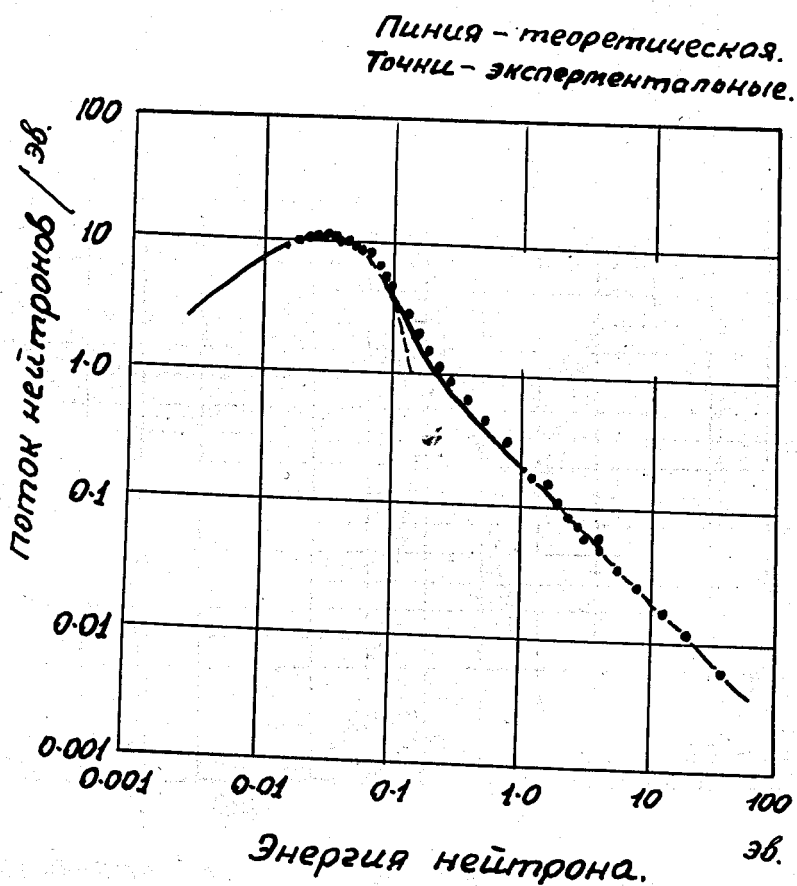


Рис. 3. Сравнение экспериментальной кривой с расчетной кривой Амстера для ядра Вигнера-Вилькинса. Непрерывная линия - теория, точки - эксперимент. Поглощение по закону $1/v$ / При скорости $v = 2200 \text{ мсек}^{-1}$ /. Сечение рассеяния водородом 20 барн /надтепловое значение/. Сечение поглощения водородом 0,33 барна.

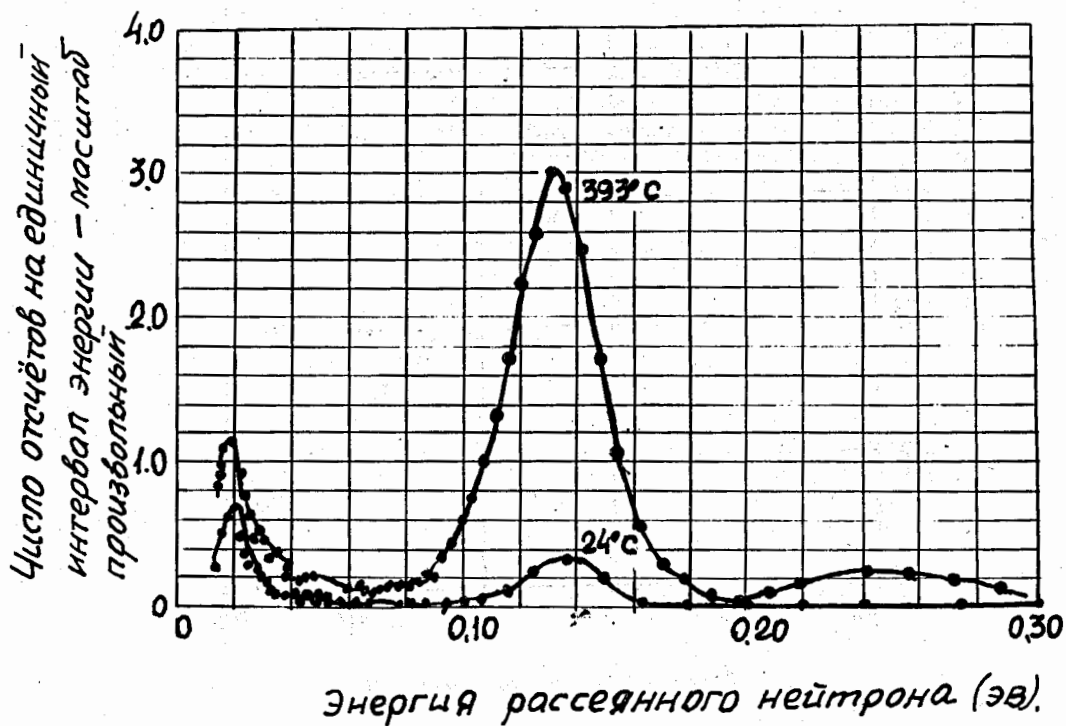


Рис. 4. Распределение нейтронов по энергиям после рассеяния под углом 90° в образце ZrH_2 . Энергия падающих нейтронов 0,004 эв. Акустический спектр расположен слева, спектр оптический или уровень Эйнштейна - справа.

$\varphi(E)$ в произвольных единицах.

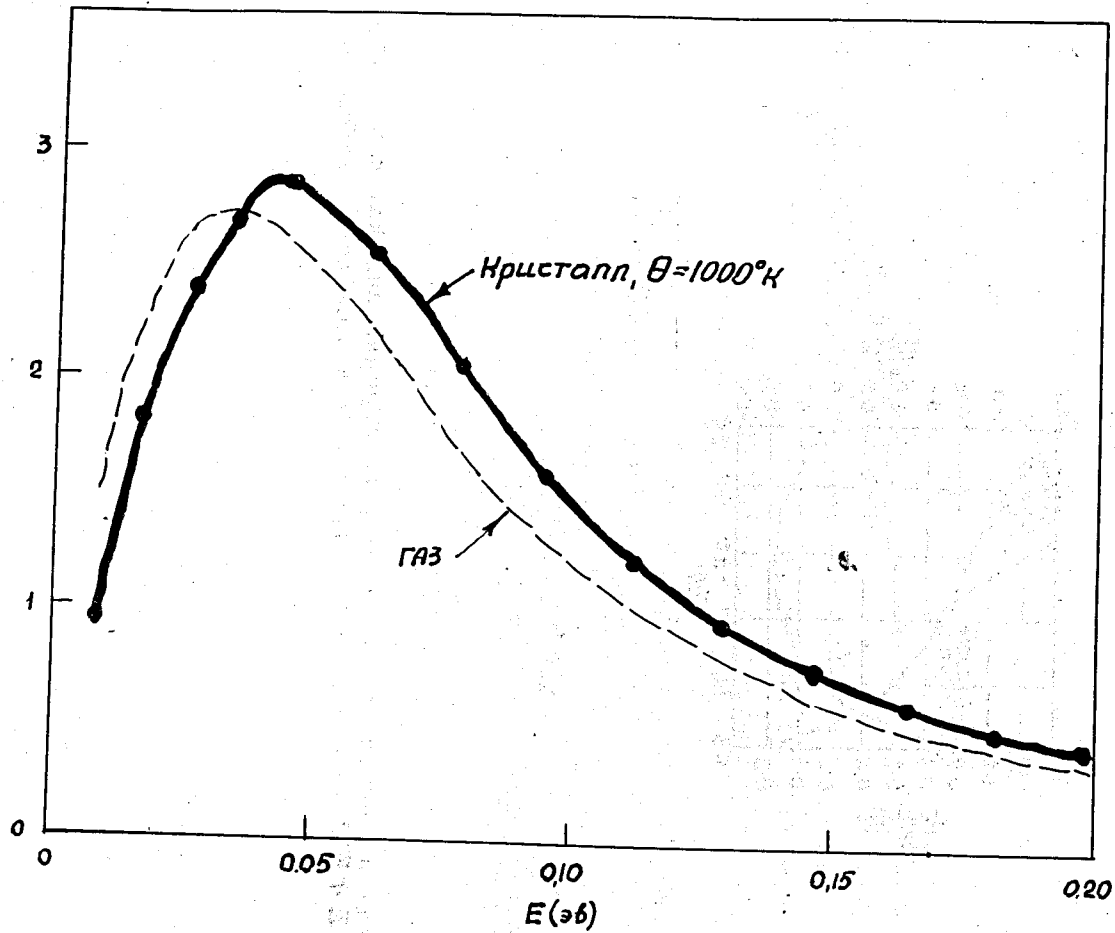


Рис. 5. Спектр, рассчитанный по модели тяжелого газового и кристаллического замедлителя при $T=294^\circ\text{K}$, для параметра $\Delta=1$.

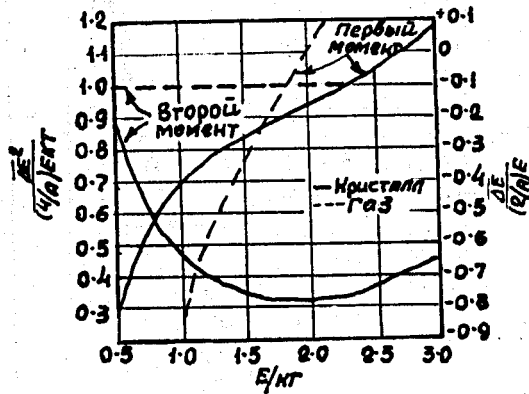


Рис. 6. Отношение моментов первого и второго порядка индикатриссы рассеяния $\sigma(E \rightarrow E')$ тяжелого кристалла Дебая к тяжелому свободному газу.

Л и т е р а т у р а

1. Placzek G. Phys.Rev. 69, 423 (1946).
2. Marshak R.E. Rev.Mod. Phys. 19, 185 (1947)
- 2а. Галанин А.Д. Теория ядерных реакторов на тепловых нейтронах.
3. Brockhouse and D. Hurst. Phys.Rev. 88, 542 (1952).
4. E. Fermi Ricerca Scientifica 1, 13 (1936).
5. Zemach A.C. and Glauber R.J. Phys.Rev. 101, 118 (1956).
6. Kleinman D.A. 'The Theory of Neutrons Scattering in Crystals' Brown University, Thesis and Unpublished Notes (1951).
7. Amster H. Nuclear Science and Engineering 2, 394 (1957). The Wigner-Wilkins Calculated Thermal Neutron Spectra compared with Measurement in a Water Moderator.
8. M.J. Poole 'Measurements of neutron spectra in Moderators and reactor lattices'. Journal of Nuclear Energy 3/4 325 (1957).
9. Hurwitz H. Nelkin M.S., Habetler G.J. Nuclear and Science Eng. 1, 280 (1956).
10. Cohen E.R. Geneva Conference, paper P/611 (1955).
11. Wick G.C. Phys.Rev. 94, 1228 (1954).
12. Nielstlie J.W. and Berman A.T. Report, PWAC - 137 (1956).
13. Brown H.D. and St. John D.S. Du Pont Report Rp/R 2031 (1954). Brown H.D. Du Pont Report DP-64 (1956).
14. Nelkin M.S. Nuclear Science and Eng. 2, 199 (1957). Nelkin M.S. Nuclear Science and Eng. 2, 373 (1957).
15. Coveyou, Bate and Osborne J. Nucl. Energ. 2, 153 (1956).
16. S.I. Drosdow, D.F. Zaretsky, L.P. Kudrin. TKh. Sedelnikow Geneva P/2023 (1958).
17. Krieger T.J. and Nelkin M.S. Physical Review 106, 290 (1957).
- 17а. Ахиезер и Померанчук. "Некоторые вопросы теории ядра".
18. Dardel G.F. Trans Roy. Inst. Technol. 75,1 (1954). Stockholm 'The interaction of neutrons with matter studied with a pulsed neutron source.
19. Sachs R.G. and Teller E. Phys. Rev. 60 (1941).
20. Messiac A.M.L. Phys.Rev. 84, 204 (1951).
21. Bloch F. Z. Physik 74, 295 (1932).
22. Brockhouse B.N. Supplemento del Nuovo Cimento (1957) (Proceedings of the Varenna Conference the Condensed State of Simple Systems); Acta Cryst. 10, 827 (1957)
23. Krieger T.J. Zweifel P.F. and Keaveney D.M. 'Calculation of Wigner - Wilkins Spectra with $M=18$ kernel and $M=1$ Source'. Gatlinburg Conference on Neutron Thermalisation April 28 - 30, 1958.

24. М.А. Лаврентьев и Б.В. Шабат. "Методы теории функции комплексного переменного", Москва, 1958, гл. У11, стр. 594.
25. Glauber R.J. Phys.Rev. 98, 1692 (1955).
- 25а R.E. Peierls 'Quantum Theory of Solids', Oxford 1956.
26. Zinn W.H. Phys.Rev. 71, 752 (1947). Sturm W. Phys.Rev. 71, 757 (1947).
27. Goedkoop J.A. Proceedings of the Kjeller Conference on Heavy Water Reactors — Kjeller per Lillestrøm, Norway (1953) p. 163.
- 27а. Hiroshi Takamizashi 'The Thermal Neutron Spectrum in a Heterogeneous Reactor'. Nuclear Science and Engineering, Vol. 5, N. 5 338 (1959).
- W. Häftele 'Neutronen spektrien in heterogenen Platten reaktoren'. Nukleonik, B-1, H.6, 15 (1959).
- E. Kern. 'Neutronen temperatur eines aus kleinen Bereichen verschiedener Temperatur zusammengesetzten Moderators'. Nukleonik, B1, H. 8, 286 (1959).
28. Cohen E.R. 'The Neutron Velocity Spectrum in Heavy Moderator' Nuclear Science and Engineering 2 227 (1957).
29. K.S. Singwi and L. Kothari, Geneva Conference 1955, P/870.
30. L. Van Hove Phys.Rev. 95, 249 (1954).
31. G. Placzek and L. Van Hove Phys.Rev. 93 1207 (1954).
32. G. Placzek Phys.Rev. 93, 895 (1954).
33. G. Placzek and L. Van Hove Nuovo Cimento, Ser. X, 1, 233 (1955).
34. G. Placzek, B.R.A. Nijboer and L. Van Hove, Phys.Rev. 82, 392 (1951).
35. G. Placzek Phys.Rev. 86, 377 (1952).
36. Squires G.L. Proc. Roy. Soc. A 212, 192 (1952).
37. M.S. Nelkin and E.R. Cohen 'Recent Work in Neutron Thermalization' Geneva P/1839 (1958).
38. G.F. Dardel 'The interaction of neutrons with matter studied with a pulsed neutron source'. Transactions of the Royal Institute of Technology Stockholm, N 75 (1954).
39. G.F. Dardel and N.G. Sjöstrand. 'Diffusion Measurements with pulsed neutron sources' Progress in Nuclear Energy Series I, Vol. 2, (1958).
40. Антонов А.В., Исаков А.Т., Мурин И.Д., Неупокоев Б.А., Франк И.М., Шапиро Ф.Л., Штраних И.З. "Изучение диффузии нейтронов в бериллии, графите и воде импульсным методом". Изд. АН СССР, стр. 158 /1955/.
41. Beckurts K.H. Nuclear Science and Eng. 2, 516 (1957).
42. Nelkin M.S. 'The Diffusion cooling of neutrons in a finite moderator'. J. of Nucl. Energy 8, 48 (1958).
43. H. Hurwitz and M.S. Nelkin 'The thermal neutron spectrum in a diffusing medium' Nuclear Science and Eng. Vol. 3 1 (1958).
44. Толстов К.Д., Шапиро Ф.Л., Штраних И.В. "Средние скорости нейтронов в различных средах". Сессия АН СССР 1-5 июля 1955. Заседание ОФМН, стр. 108.

45. K.S. Singwi and L.S. Kothari 'Diffusion cooling of neutrons in a finite solid moderator assembly' *J. of Nucl. Energy* Vol. 8, 59 (1958).
46. Noel Corngold, Brookhaven National Laboratory 'Energy distribution of neutrons slowing down in a gas of point particles' *Bull. Am. Phys. Soc.* 3' 1 (1958) Abstract A8
а также Gatlinburg Conference on Neutron Thermalisation.
47. D.A. Kottwitz 'Thermal neutron flux in a medium with a temperature discontinuity' *Bull. Am. Phys. Soc.* 3' 1 (1958) Abstract A 7.
48. Carlson B. 'Recent Developments in the Transport Equation by High Speed Digital Computers' *Geneva 1958.*
49. K. Wirtz, K.H. Beckurts *Elementare Neutronenphysik*, Springer, 1958.
50. *Progress in Nuclear Energy, Series I Vol. II* (1958).
51. McReynolds A.W., Nelkin M., Rosenbluth M.N. and Whitmore W.L. 'Neutron Thermalisation by Chemically bound Hydrogen and Carbon'. *Geneva Conference P/1540* (1958).
52. Schofield P. and A. Hassitt 'The Calculation of thermal Neutron Spectra' *Geneva Conference P/18* (1958).
53. Kothari L.S. and Singwi K.S. 'Slowing down of neutrons in beryllium from 1, 44 eV to thermal energy' *J. Nucl. Energ.* 5, 342 (1957).
54. Singwi K.S. and Kothari L.S. 'Diffusion cooling of neutrons in a finite solid moderator assembly'. *J. Nucl. Energ.* 8, 63 (1958).
55. Bhandari R.C. 'Scattering of thermal neutrons in beryllium'. *J. Nucl. Energ.* 6, 104 (1957).
56. Kazarnovsky M.V., Stepanov A.V., Shapiro F.L. 'Neutron Thermalization and diffusion in Heavy media' *Geneva Conference P/2148* (1958).
57. Kazarnovsky M.V. "Пространственно-энергетическое распределение нейтронов в тяжелом газообразном замедлителе". *ЖЭТФ*, 33, 1533 /1957/.
58. Смелов В.В. "К вопросу о термализации нейтронов". *Атомная энергия*, № 10 /1957/.
59. A.M. Weinberg and E.P. Wigner 'The Physical Theory of Neutron Chain Reactors' *Chicago Press 1958.*
Неопубликованные работы
(см. M.S. Nelkin and E.R. Cohen, *Geneva 1958*, 15/P /1839).
60. *Conference on Neutron Thermalisation, Gatlinburg, Tennessee April 28-30, 1958.*
61. R.S. Stone and R.E. Slovacek — KAPL (Knolls Atomic Power Laboratory) — unpublished.
62. B. Dunne, M. Stearns and R. Stahl — General Atomic, unpublished.
63. M.N. Rosenbluth — General Atomic — unpublished
64. M.N. Rosenbluth and M.O. Stern — General Atomic (1957) unpublished.
65. E.R. Cohen and E. Vaughan — *Atomics International*, unpublished.
66. M.S. Nelkin — General Atomic — unpublished.
67. D. St. John — Du Pont Savannah River — unpublished.
68. Wilkins J.E. Jr., Report CP — 2481 (1944) unpublished.
69. P.A. Egelstaff Chalk River — unpublished.
70. L. Anderson, unpublished (KAPL).