П-371

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

2372/2-81

18/5-81

Р17-81-91

Н.М.Плакида

О РОЛИ ВОДОРОДА В НАГРЕВАНИИ УЛЬТРАХОЛОДНЫХ НЕЙТРОНОВ

1981

В недавних экспериментах [1-3] с помощью резонансных ядерных реакций было проведено прямое измерение содержания водорода в поверхностном слое ряда материалов, используемых для создания ловушек ультрахолодных нейтронов /УХН/. Как оказалось, в поверхностном слое порядка 200 Å содержится водород с концентрацией $n = /2 \div 3/ \cdot 10^{16}$/Н/см^2/, отнесенной к единице поверхности, что соответствует средней объемной плотности $\sim 10^{22}$/Н/см^3/. Обработка поверхности с помощью ионной бомбардировки позволяет снизить содержание водорода примерно в 10 раз [2,3] и достичь устойчивой концентрации $n = 0{,}6 \cdot 10^{16}$/Н/см^2/ после выдержки образца в вакууме [2]. Эти данные позволяют оценить коэффициент *потери УХН за счет всех неупругих процессов рассеяния на* примесном водороде, который, согласно гипотезе, высказанной в ряде работ /см., напр., [4-6] /, играет важную роль в ограничении времени хранения УХН в ловушках.

В настоящей работе мы проводим этот расчет с привлечением условия нормировки для автокорреляционной функции Ван-Хова, описывающей некогерентное рассеяние. Проводится также обсуждение температурной зависимости коэффициента потери УХН, полученной в работе [7]. Для объяснения слабой температурной зависимости в случае обезгаженного сосуда предложена модель сильно связанной примеси водорода, которая может совершать лишь туннельные переходы в области локализации.

1. НЕКОГЕРЕНТНОЕ РАССЕЯНИЕ УХН

Коэффициент потери УХН при однократном столкновении нейтрона с импульсом $\vec{p}$, определяемый как вероятность его рассеяния в состояние $p' > p_0$, где p_0 - граничный импульс хранения УХН, для некогерентного рассеяния может быть записан в виде /см., напр., [5] /:

$$\mu(p) = |A(p)|^2 \frac{\sigma_{\text{нк}}}{4\pi} n \frac{1}{mp_z} \int d^3p' S(Q, \omega), \qquad /1/$$

где $n = N/L^2$ - поверхностная плотность рассеивающих центров, в нашем случае - водорода, $\sigma_{\text{нк}}$ - сечение некогерентного рассеяния; $|A(p)|^2 = 4p_z^2/p_0^2$, p_z - нормальная составляющая импульса УХН. Динамика рассеивающей примеси описывается автокорреляционной функцией Ван-Хова:

$$S(Q,\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{-i\omega t} \frac{1}{N} \sum_i \langle e^{-i\vec{Q}\vec{R}_i(t)} e^{i\vec{Q}\vec{R}_i} \rangle , \qquad /2/$$

где $\vec{R}_i(t)$ - зависящая от времени координата примеси, $\vec{Q} = \vec{p}' - \vec{p}$, $\omega = (p'^2 - p^2)/2m$ - изменение импульса и энергии нейтрона при рассеянии. Заметим, что /1/ может быть также записана в виде интеграла от сечения некогерентного рассеяния:

$$\mu(p) = \frac{4p_z}{p_0} n \int_{E_0}^{\infty} dE' \int d\Omega \left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, dE'} \right)_{нк} . \qquad /3/$$

Поскольку вычисление функции /2/ представляет значительные трудности, формула /3/ может быть использована для "экспериментального" определения коэффициента μ, если каким-либо образом произвести полное измерение сечения некогерентного рассеяния нейтронов, не обязательно ультрахолодных, на поверхностном слое вещества, используемого для ловушки /например, при рассеянии нейтронов с малыми $p_z \ll p_0$ /.

Для теоретической оценки коэффициента потерь перепишем формулу /1/ в виде:

$$\mu(p) = \frac{2p_z}{p_0^2} n \sigma_{нк} \overline{p'} , \qquad /4/$$

вводя средний импульс рассеянных нейтронов

$$\overline{p'} = 2 \int_{E_0}^{\infty} dE' \sqrt{2mE'} \int \frac{1}{4\pi} d\Omega\, S(\vec{Q}, E' - E) . \qquad /5/$$

Поскольку граничная энергия $E_0 \sim 10^{-7}$ эВ оказывается много меньше всех характерных энергий теплового движения примеси водорода /включая диффузию при не очень низких температурах/, то интегрирование в /5/ можно распространить до нуля и положить $E = 0$. В этом случае для оценки $\overline{p'}$ можно использовать условие нормировки:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, S(\vec{Q}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_i e^{-2\kappa z_i} \approx 1 , \qquad /6/$$

где мы учли, что $Q_z = p'_z - i\kappa$, $\kappa = \sqrt{p_0^2 - p_z^2}$ и при суммировании по z_i - нормальной составляющей координаты примеси предположили, что примеси расположены в поверхностном слое толщиной $\ell \ll 1/2\kappa$, так что $\exp(-2\kappa z_i) \approx 1$ для всех $z_i < \ell$. При этих предположениях в классическом пределе, $\omega \ll T$,

$$2 \int_0^{\infty} d\omega\, S(\vec{Q}, \omega) = 1 , \qquad /6а/$$

формула /5/ может быть записана в виде соотношения

$$\overline{p'} = \int_0^{\infty} d\omega \sqrt{2m\omega}\, S(\omega) \Big/ \int_0^{\infty} d\omega\, S(\omega) = \overline{(2mE')^{1/2}} \approx (2m\overline{E'})^{1/2} , \qquad /7/$$

из которого следует, что $\overline{p'}$ /5/ действительно определяется как средний по распределению энергии рассеянных нейтронов импульс. В результате $\overline{p'}$ можно экспериментально оценить по средней энергии $\overline{E'}$ вылетающих из ловушки нейтронов [8,9].

Таким образом, для коэффициента потерь /4/ получим оценку

$$\mu = \frac{2p_z}{p_0^2} n\sigma_{нк} (2mE')^{1/2} \approx 1\cdot 10^{-3}, \qquad /8/$$

где были приняты следующие значения для числовых параметров:

$$p_z \approx p_0 \approx 10^6 см^{-1}, \qquad \sigma_{нк} \approx 80\cdot 10^{-24} см^2, \qquad /9/$$
$$n = 3\cdot 10^{16} см^{-2}, \qquad \overline{E'} \approx 10 \text{ мэВ}.$$

Полученную теоретическую оценку /8/ можно сравнить с наблюдаемой в эксперименте [7] величиной μ для неочищенной поверхности /1 на рис.3/:

$$\mu \approx 0{,}75\cdot 10^{-3} \qquad /8а/$$

при $T \approx 80$ К, соответствующей средней тепловой энергии квазисвободной примеси водорода $\overline{E'} \approx 3/2\ T \approx 10$ мэВ. Заметим, что значения μ после очистки поверхности / II и III на рис.3 в [7]/ мало изменяются в области низких температур по сравнению с величиной до очистки поверхности, что, по-видимому, указывает на небольшое изменение концентрации водорода после очистки /в отличие от экспериментов [2,3] /.

2. МОДЕЛЬ СИЛЬНОСВЯЗАННОЙ ПРИМЕСИ ВОДОРОДА

Полученные выше оценки коэффициента μ не учитывают в явном виде температурной зависимости $\overline{p'(T)}$, которая определяется автокорреляционной функцией /2/. В случае достаточно высокой концентрации водорода /оценка /9//, можно предположить, что бо́льшая часть водорода расположена вблизи поверхности и относительно слабо связана. В этом случае модель почти свободного движения водорода приводит к корневой зависимости от температуры /см. формулу /9/ в [5] /, наблюдаемой в работе [7] для неочищенной поверхности.

После обезгаживания стенок сосуда в работе [7] наблюдалось понижение μ до величины $\mu \approx 2{,}5\cdot 10^{-4}$, слабо зависящей от температуры и материала стенок сосуда. Если предположить, что и в этом случае водород играет основную роль в нагревании УХН, то необходимо как-то объяснить отсутствие температурной зависимости μ.

Рассмотрим для этого модель сильно связанной примеси водорода /который не может быть удален нагреванием [6] /. Акустические колебания этой примеси не дают заметного вклада в рассеяние, так как в сечение рассеяния входит малая величина $m/M \approx 10^{-2}$ - отношение массы нейтрона и эффективной массы M акустических колебаний /см. формулу /6/ в работе [5]/. Возможные локальные колебания примеси при сильной связи должны иметь большую частоту, $\hbar\omega_0 \approx 100$ мэВ, и дают экспоненциально малый вклад при $T < 10^3$ K. /см. формулу /7/ в [5] /. Остается однако еще одна возможность тепловых возбуждений такой примеси - перераспределение ее /туннелирование относительно нескольких эквивалентных относительно примесного узла/ положений равновесия, которые всегда существуют ввиду трехмерного характера движения примеси. Рассеяние УХН на этих низколежащих возбуждениях и может приводить к нагреванию УХН *.

В простейшей модели рассмотрим систему примесей, имеющих 2 уровня с энергией перехода между ними $\Gamma_i = E_{ia} - E_{is}$, где E_{ia} и E_{is} - энергия антисимметричного ψ_{ia} и симметричного ψ_{is} состояний в узле i. Гамильтониан такой системы в псевдоспиновом представлении имеет вид /см. например, [10] /:

$$H = -\sum_i \Gamma_i S_i^z, \qquad /10/$$

где S_i^z - z - компонента оператора спина $S = 1/2$. Функция /2/ в псевдоспиновом представлении с учетом только неупругого рассеяния может быть записана в виде [10]:

$$S(Q,\omega) = \frac{1}{N}\sum_i \gamma_i(Q)\, 4 < S_i^x | S_i^x >_\omega , \qquad /11/$$

где формфактор рассеяния

$$\gamma_i(Q) = |<\psi_{is}| e^{i\vec{Q}\vec{R}_i} |\psi_{ia}>| \quad . \qquad /12/$$

Корреляционная функция x -компоненты спина для модели /10/ легко вычисляется:

$$4 < S_i^x | S_i^x >_{\omega > 0} = 2 < S_i^z > \frac{1}{e^{\beta\omega} - 1}\delta(\omega - \Gamma_i), \qquad /13/$$

где $2<S_i^z> = \mathrm{th}(\beta\Gamma_i/2)$, $\beta = 1/T$. Подставляя /11/ в общее выражение для $\overline{p'}$ /5/, получаем:

---

*В работе [4] была рассмотрена возможность нагревания УХН на сверхтонком переходе протона Δ, который приводит к слабой температурной зависимости типа /14/. Трудно, однако, предположить, что величина Δ достигает значений ~ 1 мэВ, чтобы вклад этих процессов был бы заметен /см. /15//.

$$p'(T) = \frac{1}{N}\sum_i \gamma_i(\Gamma_i)\sqrt{2m\Gamma_i}\,\frac{2}{e^{\beta\Gamma_i}+1} = \int_{E_0}^{\Gamma_0} d\Gamma\,F(\Gamma)\gamma(\Gamma)\sqrt{2m\Gamma}\,\frac{2}{e^{\beta\Gamma}+1}\,, \qquad /14/$$

где $F(\Gamma)$ - нормированное распределение энергий возбуждения в примесных узлах, $\gamma(\Gamma)$ - усредненный по углам формфактор /12/ при $Q^2 = 2m\Gamma$.

Обсудим полученное выражение /14/ для $\overline{p'(T)}$. Полагая для оценок $\gamma(\Gamma)=1$ и принимая достаточно плавное распределение частот $F(\Gamma)=\mathrm{const}$, по порядку величины получаем

$$\overline{p'} \approx \frac{2}{3}\sqrt{2m\Gamma_0}\,(1-0{,}3\frac{\Gamma_0}{T}) \qquad \text{при} \qquad (\Gamma_0 < T)\,, \qquad /15/$$

где Γ_0 - максимальная энергия возбуждений в примесных узлах. При этом температурная зависимость $\overline{p'(T)}$ может наблюдаться лишь в области $T \ll \Gamma_0$, когда происходит "вымораживание" возбуждений в большинстве примесных узлов. Полагая для оценок $\Gamma_0 \approx 2$ мэВ ≈ 25 К, находим $\overline{p'} \approx 0{,}7\cdot 10^8$см$^{-1}$ и, согласно /4/, $\mu \approx 2\cdot 10^{-4}$ при $n = 2\cdot 10^{16}$ 1/см^2. Очевидно, что полученная оценка носит лишь качественный характер ввиду модельного характера расчета, однако она показывает, что гипотеза о существенной роли водорода при нагревании УХН не противоречит результатам, полученным в /7/. При этом слабая зависимость μ от дополнительной обработки поверхности обезгаженного сосуда /напыление CO_2, D_2O / может быть объяснена низкой плотностью конденсированных веществ, не обеспечивающей отражение УХН.

Тщательное измерение энергетического распределения нейтронов, вылетающих из сосуда для хранения УХН, в широкой области температур позволило бы сделать более определенные выводы о роли водорода в проблеме хранения УХН.

В заключение автор выражает благодарность В.И.Лущикову и В.В.Голикову за обсуждение экспериментальных результатов и В.К.Игнатовичу за полезные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Lanford W.A., Golub R. Phys.Rev.Lett., 1977, 39, p.1509.
2. Bugeat J.P., Mampe W. Zeit.Phys., 1979, B35, p.273.
3. Mampe W., Bugeat J.P. Phys.Lett., 1980, 78A, p.293.
4. Игнатович В.К., Сатаров Л.М. Препринт ИАЭ-2820, М., 1977.
5. Blokhintsev D.I., Plakida N.M. phys.stat.sol.(b), 1977, 82, p.627.
6. Yates D.J.C. Phys.Lett., 1979, 72A, p.479.

7. Косвинцев Ю.Ю. и др. ОИЯИ, Р3-80-91, Дубна, 1980.
8. Stoica A.D., Strelkov A.V., Hetzelt M. Zeit.Phys., 1978, B29, p.349.
9. Стрелков А.В., Хетцельт М. ЖЭТФ, 1978, 78, с.23.
10. Блинц Р., Жекш Б. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. "Мир", М., 1975, гл.5.

Рукопись поступила в издательский отдел
6 февраля 1981 года.