

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

С348
Т-896

В. Ф. ТУРЧИН

На правах рукописи

**Рассеяние и термализация
медленных нейтронов**

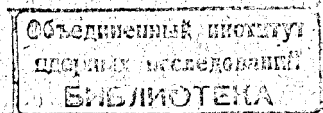
*Автореферат диссертации, представленной
на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук*

ДУБНА, 1964 г.

В.Ф. Турчин

РАССЕЯНИЕ И ТЕРМАЛИЗАЦИЯ МЕДЛЕННЫХ НЕЙТРОНОВ

**Автореферат диссертации, представленной
на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук**



- 1964 г. -

Работа выполнена в Физико-энергетическом институте
ГКИАЭ СССР

Под медленными нейтронами понимают нейтроны с энергией порядка 1 эв и меньше, которые получают путем замедления быстрых нейтронов (с энергией порядка 1 Мэв), образующихся в ядерных реакциях. Явление замедления нейтронов вследствие их соударения с атомами среды и передачи атомам части своей кинетической энергии было открыто Э. Ферми в 1934 году. С тех пор медленные нейтроны прочно вошли в арсенал физики. Изучение взаимодействия медленных нейтронов с атомными ядрами сыграло значительную роль в развитии ядерной физики. Далее, так как медленные нейтроны характеризуются длиной волны, сравнимой с расстояниями между атомами в твердых телах, они дают при рассеянии на кристаллических веществах дифракционную картину, подобную дифракционной картине при рассеянии рентгеновских лучей. Это было использовано для монохроматизации медленных нейтронов и для исследования структуры кристаллов. В отличие от рентгеновских квантов нейтроны, во-первых, обладают магнитным моментом, что позволяет исследовать с их помощью не только расположение атомов, но также и распределение магнитного момента по элементарной ячейке кристалла, и во-вторых, при той же длине волны ($\sim 10^{-8}$ см) энергия нейтрона в миллион раз меньше энергии рентгеновского кванта и сравнима с энергией движения и энергией химической связи атомов ($\sim 0,1$ эв); что позволяет использовать их для исследования динамики и связи атомов в твердых и жидких телах. Эти обстоятельства делают мед-

ленные нейтроны незаменимым инструментом для физики конденсированного состояния.

С появлением ядерных реакторов возникла проблема расчета пространственно-энергетических распределений медленных нейтронов в реакторах. Вначале для грубых оценок критической массы и других характеристик реактора использовалось приближенное представление спектра нейтронов в реакторе в виде суммы спектра замедляющихся нейтронов ("фермиевские" нейтроны) и уже замедлившихся нейтронов ("тепловые" нейтроны), причем спектр тепловых нейтронов считался максвелловским, то есть таким, каким он должен был бы стать после достижения полного равновесия со средой (чего никогда не бывает, ибо время жизни нейтрона в среде всегда конечно). Развитие реакторной техники потребовало уточнения расчетов реакторов, в частности уточнения расчетов спектров медленных нейтронов. Возникла проблема детального изучения процесса установления термодинамического равновесия между нейтронами и средой, получившего название процесса "термализации" нейтронов. В течение ряда последних лет эта проблема была одной из самых крупных, если не самой крупной проблемой теории реакторов.

Трудность этой проблемы связана с тем, что вычисление дифференциального сечения рассеяния нейтрона на системе связанных атомов есть решение задачи многих тел, причем вследствие отмеченного выше равенства (по порядку величины) энергии и длины волны медленных нейтронов энергии связи и расстояния между атомами, это решение существенно зависит от детального характера атомной структуры и межатомных связей вещества. Фундамент теории взаимодействия медленных нейтронов с веществом заложил Ферми [1], предложивший использовать борновское приближение с δ -образным квази-потенциалом в качестве взаимодействия между нейтроном и ядром, и объяснивший возрастание сечения рассеяния на связанном атоме. Рассеяние медленных нейтронов на кристалле было впервые рассмотрено Вайнштоком [2]. В дальнейшем рассеяние нейтронов на произвольных атомных системах было подвергнуто изучению в работах Плачека, Ван Хове, Эгелстаффа и др., среди которых особое значение имеет работа Ван Хове [3], в которой дифференциальное сечение рассеяния связывается с про-

странственно-временной корреляционной функцией, характеризующей движение атомов рассеивающей системы.

Основным содержанием реферируемой диссертации является: дальнейшее развитие теории рассеяния медленных нейтронов применительно к проблемам, возникающим в связи с изучением термализации нейтронов; разработка на этой основе методов расчета дифференциальных сечений и их реализация в виде программы для вычислительных машин; описание результатов расчетов сечений для некоторых важнейших замедлителей и сравнение их с экспериментом с целью проверки применимости различных моделей динамики и связи атомов; вычисление стационарных и нестационарных спектров медленных нейтронов с полученными дифференциальными сечениями, сравнение их с экспериментом и анализ влияния химической связи. Методы, описанные в диссертации, используются в ЭИИ для расчета реакторов. В сочетании с существующими численными методами расчета пространственно-энергетических распределений [4] они дают возможность для любой системы рассчитать спектр медленных нейтронов с учетом химической связи атомов.

Кроме того, в диссертации содержатся и некоторые другие результаты по теории рассеяния медленных нейтронов в кристаллах и жидкостях, затронуты вопросы извлечения информации из экспериментальных данных по рассеянию медленных нейтронов и построена теория дифракции нейтронов на слоистых системах.

Диссертация отражает работы автора [5 - 15], выполненные с 1956 г. по 1964 г. Так как систематическое изложение теории рассеяния и термализации медленных нейтронов, а также оригинальные результаты, полученные до 1962 г., содержатся в книге "Медленные нейтроны" [12], опубликованной в 1963 г., эта книга включена в диссертацию в качестве "Приложения I". В основной текст диссертации, состоящий из шести глав, входят лишь оригинальные работы, выполненные в 1962 - 1964 г.г. За исходными формулами, обзором литературы, а часто также и за обсуждением тех или иных сторон рассматриваемых явлений, читатель отсылается к Приложению I.

В Главе I изложены результаты, касающиеся интегральных ха-

характеристик дифференциальных сечений рассеяния нейтронов в так называемом приближении малых времен рассеяния, которое применимо, если энергия нейтрона велика по сравнению с квантом $\hbar\omega$ колебательной энергии связанного атома. Это приближение было впервые использовано Плачеком [16] для случая, когда масса атома M много больше массы нейтрона m . Вик [17] вскрыл физический смысл этого приближения, показал, как оно может быть распространено на случай произвольных M и вычислил полное сечение рассеяния. В диссертации с помощью метода Вика получены формулы для первых трех моментов потери энергии нейтроном - обычных и "сопряженных". (Под сопряженными моментами понимаются величины, отличающиеся от обычных моментов тем, что интегрирование ведется не по конечной энергии нейтрона, а по начальной). Получена также формула для среднего косинуса угла рассеяния. Показано, что первый угловой момент дифференциального сечения рассеяния в приближении малых времен рассеяния не зависит от энергии нейтрона, что может быть использовано для вычисления транспортного сечения на основании одних лишь данных по полному сечению рассеяния.

С помощью полученных формул может быть учтено влияние движения и химической связи атомов на замедление нейтронов в надтепловой области энергий, где применимо приближение малых времен рассеяния. В частности, знание сопряженных моментов потери энергии необходимо для использования предложенного автором конечно-разностного метода вычисления плотности замедления нейтронов (Приложение I). Этот метод дает более высокую точность и имеет более широкую область применимости, чем обычно используемый метод Грейлинга-Герцеля. Параметры, входящие в формулы для моментов и характеризующие химическую связь атомов замедлителя, могут быть, как показано автором (Приложение I), вычислены через зависимость теплоемкости замедлителя от температуры.

Если в надтепловой области энергий для вычисления спектра нейтронов достаточно иметь лишь интегральные характеристики сечений, то в тепловой области энергий необходимо иметь многогрупповые матрицы дифференциальных (по энергии) сечений рассеяния. Проблема вычисления этих матриц посвящены две следующие

главы.

В Главе 2 описывается программа УПРАС ("Универсальная программа расчета сечений"), написанная на международном языке программирования АЛГОЛ-60 и автоматически переведенная на язык вычислительной машины М-20. Программа УПРАС служит для вычисления закона рассеяния и многогрупповых матриц $\sigma(E_i \rightarrow E_j)$ и $\sigma_0(E_i \rightarrow E_j)$ нулевого и первого угловых моментов дважды дифференциального сечения рассеяния в некогерентном гауссовом приближении. Применимость этого приближения для расчетов спектров нейтронов проанализирована в Приложении I. При вычислении сечений могут быть учтены следующие три модуса движения атома:

1. Акустические колебания с произвольным спектром;
2. Оптические колебания с δ -образным спектром. (Оптические колебания со спектром конечной ширины могут быть учтены как акустические).
3. Диффузионное движение в жидкости со средне-квадратичным смещением, которое при $|t| \rightarrow \infty$ возрастает пропорционально $|t|$.

Матрицы могут иметь размерность 50x50. Вычисляются также интегральные характеристики сечений: полное сечение рассеяния σ_j , средняя логарифмическая потеря энергии ξ , средний косинус угла рассеяния $(\cos \theta)$ и др.

Исходная информация, необходимая для работы программы УПРАС - это обобщенный спектр частот движения атома (равный взвешенной сумме обобщенных спектров для каждого из указанных трех модусов). Он может быть определен из экспериментов по рассеянию медленных нейтронов или же с помощью той или иной теоретической модели.

В Главе 3 описывается программа ПРАССИВ ("Программа расчета сечений интегрированием по времени"), служащая, главным образом, для проверки моделей динамики атомов путем сравнения теоретических предсказаний с экспериментальными данными и для извлечения из экспериментальных данных обобщенных спектров атомных колебаний. Программа ПРАССИВ вычисляет в некогерентном гауссовом приближении дифференциальные сечения рассеяния нейтронов

путем непосредственного интегрирования по времени известного выражения для закона рассеяния как преобразования Фурье с введением под знак интеграла обрезавшего фактора. Вследствие наличия обрезавшего фактора в результате расчета получаются дифференциальные сечения, усредненные по гауссовой функции разрешения с некоторой шириной δ , которой можно придать произвольную зависимость от начальной и конечной энергии нейтрона, то есть как раз те функции, которые измеряются на эксперименте.

Вычисления могут быть проведены с произвольным спектром колебаний атома, а также с учетом диффузионного движения, если речь идет о жидкости. Диффузионное движение в жидкости учитывается по модели, предложенной автором (Приложение I), сущность которой заключается в построении пространственно-временной корреляционной функции, удовлетворяющей квантово-механическим требованиям и обладающей правильным асимптотическим поведением при больших и малых временах. Данные об экспериментальном подтверждении этой модели приводятся в Главе 4.

Программа ПРАССИВ может вычислять как дважды дифференциальные сечения, так и дифференциальные сечения $\sigma(E_0 \rightarrow E)$ и $\sigma(E_0 \rightarrow E)$, а также их интегральные характеристики. Она может быть использована для расчета многогрупповых матриц, если задать δ , не превышающее ширины группы.

В Главе 4 рассматривается влияние химической связи и динамики атомов на дифференциальные сечения рассеяния медленных нейтронов. § I посвящен рассеянию нейтронов на многоатомных кристаллах (то есть кристаллах, элементарная ячейка которых состоит из различных атомов). Как показано в Приложении I, функция, определяющая рассеяние нейтронов в некогерентном приближении, есть фоновый спектр $g(\omega)$ кристалла, помноженный на средний квадрат модуля поляризационного вектора $\langle |\xi(\omega)|^2 \rangle$, которая имеет смысл спектра колебаний данного (ζ -го) атома. Эта функция была исследована для простого случая линейной двухатомной цепочки со связями различной жесткости. Показано, что благодаря зависимости $\langle |\xi(\omega)|^2 \rangle$ от ω , форма акустической части спектра может сильно исказиться, меняется также и полный вес акустических колебаний (вплоть до фактора 1/2), поэтому

обычное рассмотрение рассеяния нейтронов на двухатомном кристалле, в котором этот эффект не учитывается, следует рассматривать как весьма приближенное.

В § 2 рассматривается влияние диффузионного движения атомов жидкости на дифференциальное и полное сечение рассеяния медленных нейтронов. Эксперименты Хайнлота [18] показали, что при переходе льда в воду полное сечение рассеяния очень медленных нейтронов скачкообразно возрастает. Расчеты, проведенные с помощью программы ПРАССИВ по упомянутой выше модели диффузионного движения, дали значение скачка, согласующееся с экспериментальным значением, что следует рассматривать как экспериментальное подтверждение модели. Увеличение сечения происходит, как оказалось, за счет дополнительного неупругого рассеяния с потерей нейтроном энергии порядка 0,005 эв.

В § 3 параметры, характеризующие разрешение δ в программе ПРАССИВ, связываются с параметрами, характеризующими разрешение двойного нейтронного спектрометра; обсуждается определение спектра фононов из экспериментальных данных по дифференциальным сечениям; приводятся экспериментальные данные для гидрида циркония, полученные на двойном спектрометре медленных нейтронов на реакторе ИБР и результаты теоретического расчета с использованием программы ПРАССИВ.

В § 4 описываются некоторые расчеты дифференциальных сечений и их интегральных характеристик по программам УПРАС и ПРАССИВ для воды, графита, бериллия, гидридов циркония и лития. Проводится сравнение с экспериментальными данными.

В Главе 5 на основе результатов, полученных в предыдущих главах, исследуется процесс термализации нейтронов и анализируется влияние химической связи атомов на стационарные и нестационарные спектры медленных нейтронов. В § I дается общая характеристика проблемы. В § 2 приводятся результаты вычисления стационарных спектров нейтронов в бесконечной среде, отравленной поглотителем $1/\nu$, для трех важнейших водородосодержащих замедлителей: воды, гидрида циркония и гидрида лития. Вычисляется зависимость эффективной температуры нейтронного газа от се-

чения поглощения, а отсюда - эффективная масса связанного атома водорода. Результаты расчетов хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными. В § 2 исследуется также влияние химической связи атомов на ретермализацию нейтронов, то есть на изменение температуры нейтронного газа вблизи температурного разрыва. Вычисляется длина ретермализации для графита и оценивается эффективная масса графита.

В § 3 описывается программа ТЕДИ, с помощью которой в P_1 -приближении вычисляются в зависимости от времени спектры медленных нейтронов от импульсного источника (плотность N и ток J) в ограниченной среде. По программе ТЕДИ были проведены расчеты для воды и графита. В § 3 приведены: зависимость константы распада α от геометрического фактора B^2 ; зависимость от времени средней скорости нейтронов в процессе термализации; асимптотические спектры при некоторых значениях B^2 ; зависимость от B^2 средней скорости асимптотического спектра, усредненной по плотности N и по току J . Проводится сравнение с экспериментальными данными.

Сечения, использованные для расчетов, описанных в §§ 2, 3, были получены с использованием программы УПРАС.

В Главе 6 развита теория когерентного рассеяния медленных нейтронов на системах, имеющих слоистую структуру. Эта теория может иметь практическое применение для осуществления монохроматизации и отражения длинноволновых нейтронов с помощью искусственно созданной слоистой системы с периодической (в направлении, перпендикулярном к плоскости слоев) амплитудой когерентного рассеяния медленных нейтронов на единицу объема. Такую систему можно получить, например, нанося друг на друга очень тонкие (порядка десяти межатомных расстояний) слои веществ, или изотопов, с противоположными по знаку амплитудами когерентного рассеяния. Осуществление этого способа дает возможность фокусировать широкие пучки нейтронов и распространить дифракционные методы на область более длинных волн нейтронов.

Теория когерентного рассеяния нейтронов на слоистых системах строится на основе общей теории многократного рассеяния

волн Лакса [19]. С помощью применения принципа Гюйгенса получено одномерное уравнение типа уравнения Шредингера, описывающее когерентное рассеяние медленных нейтронов в слоистой среде. Решение этого уравнения ищется в виде суперпозиции падающей и отраженной волн. Получена система двух дифференциальных уравнений для амплитуд падающей и отраженной волн, обладающая тем достоинством, что в нее входят лишь определенные интегральные характеристики функции пространственного распределения амплитуды рассеяния, а не сама функция. Эта система решается для случая бесконечной периодической среды. Вычисляется спектральная линия отражения и глубина проникновения волн для случая полубесконечной среды. Расчеты по полученным формулам показывают, что при определенном выборе материалов и идеальной геометрии уже несколько десятков слоев достаточно для получения высокого коэффициента отражения.

ЛИТЕРАТУРА

1. E. Fermi, *Ricerca Scientifica* 7, 13 (1936)
2. R. Weinstock, *Phys. Rev.* 65, 1 (1944)
3. L. Van Hove, *Phys. Rev.* 95, 249 (1954)
4. Г.И. Марчук. Методы расчета ядерных реакторов. Госатомиздат, 1961 г.
5. В.Ф. Турчин, *ЖЭТФ*, 33, 124 (1957).
6. В.Ф. Турчин, *ЖЭТФ*, 34, 219 (1958).
7. В.Ф. Турчин. Решение уравнения замедления нейтронов с помощью сопряженных моментов. Сб. "Нейтронная физика", стр. 66. Атомиздат, 1961 г.
8. В.Ф. Турчин. Рассеяние нейтронов на кристаллах в некогерентном приближении. Там же, стр. 74.

9. В.Э. Турчин. Рассеяние нейтронов в жидкостях. *Inelastic Scattering of Slow Neutrons in Solids and Liquids*, p. 259. Vienna, 1961 г.
10. В.Э. Турчин, В.В. Смелов, Г.А. Илясова. Материалы совещания по физике медленных нейтронов, стр.178, Дубна, 1962г.
11. И.И. Бондаренко, Э.Г. Лифоров, М.Н. Николаев, В.В. Орлов, В.А. Парфенов, В.А. Семенов, В.И. Смирнов, В.Ф. Турчин. Двойной спектрометр медленных нейтронов на реакторе ИБР. *Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids, Vol. I, p. 127, Vienna, 1963*.
12. В.Ф. Турчин. Медленные нейтроны. Госатомиздат, 1963 г.
13. Л.В. Майоров, В.Ф. Турчин. Универсальная программа расчета сечений рассеяния медленных нейтронов. Математический Институт АН СССР им. Стеклова, 1963 г.
14. В.Ф. Турчин, В.А. Тарасов. Атомная Энергия (в печати).
15. Л.В. Майоров, В.Ф. Турчин, Ч.С. Джеквич. Влияние химической связи атомов на термализацию нейтронов. Доклад, направленный на Женевскую конференцию 1964 г.
16. G. Flaszek, *Phys. Rev.* 86, 377 (1952)
17. G.C. Wick, *Phys. Rev.* 94, 1228 (1954)
18. K. Heintloth, *Z. für Phys.* 163, 218 (1961)
19. M. Lax, *Rev. Mod. Phys.* 23, 287 (1951)