

УДК 530.145;539.27

## О МЕХАНИЗМЕ РАССЕЯНИЯ МЕДЛЕННЫХ НЕЙТРОНОВ В ВОДОРОДОСОДЕРЖАЩИХ СРЕДАХ

К. В. Владимирский

*Рассмотрено рассеяние медленных нейтронов в водородосодержащих средах при энергиях, близких к порогу разрушения вещества. Показано, что, наряду с детально исследованными ранее процессами возбуждения молекулярных колебаний, высока вероятность рассеяния нейтронов, сопровождающегося изменением электронного состояния молекул. Эти процессы связаны с поглощением порций энергии, значительно превышающих энергию молекулярных колебаний. Соответственно изменятся сечения рассеяния, весь ход взаимодействия потока нейтронов с веществом в области энергий, где ранее предполагалась возможность анализа, не учитывающего химических связей.*

Исследования рассеяния медленных нейтронов химически связанными протонами [1 – 3] возникли в связи с выяснением роли примеси легких ядер как фактора, искажающего энергетический спектр нейтронов в спектрометре по времени замедления нейтронов в свинце [4 – 6]. В работах [1, 2] приведены результаты наблюдений радиационного захвата нейтронов ядрами марганца и кобальта, которые проводились с внесением в зону реакции контролируемых количеств водородосодержащих веществ. Выход реакции, счет гамма-квантов, сопоставлялся с оценками возможного влияния рассеяния на водороде. В этих вычислениях использовались сечения рассеяния на свободных протонах, возможное влияние химических связей не учитывалось. Было обнаружено значительное, выходящее за рамки возможных ошибок, превышение обнаруженных изменений выхода реакции над вычисленным в области энергий нейтронов  $\approx 1 - 100$  эВ. Удовлетворительного объяснения этих расхождений работы [1, 2] не содержат.

В работе [1] обсуждались исследования Э. Ферми, теория рассеяния нейтронов на химически связанных атомах водорода, рассеяния, сопровождающегося возбуждением колебательных степеней свободы молекул [7]. Эта теория дает порядок величины изменений сечений рассеяния на водороде, который позволяет объяснить указанные выше расхождения в результатах измерений и численных оценок, но она не распространяется на энергии нейтронов  $\geq 1$  эВ и не объясняет всю совокупность экспериментальных результатов, относящихся к большим энергиям.

В развитие этих представлений в работе [3] было высказано естественное предположение: при увеличении энергии нейтронов сверх 1 эВ рассеяние на связанных атомах водорода должно сопровождаться не только возникновением молекулярных колебаний, но и изменением электронного состояния участвующих в рассеянии водородосодержащих молекул. Такое изменение модели явлений позволяет перейти к рассмотрению процессов, происходящих при энергиях нейтронов порядка десятков и даже сотен эВ, сопоставимых с условиями экспериментов работы [2], но вводит в трудную, малоисследованную область, в изучение сложных, многоканальных задач теории радиационного разрушения вещества.

В настоящей работе исследуется вероятность возникновения возбужденных состояний химически связанного атома водорода при облучении медленными нейтронами. По существу, здесь необходимы современные многочастичные методы [8 – 11], детальное исследование сложных задач, таких, как рассеяние нейтронов на молекулах воды. В нашей работе используются традиционные одночастичные методы с тем, чтобы на простой модели получить сведения о вероятности изменения состояния химически связанного атома водорода при соударении нейтрона с протоном, его ядром. Используется подход А. Б. Мигдала в теории неадиабатических процессов [12, 13]. Методами теории возмущений рассматривается изменение состояния атома при внезапном, быстром по сравнению с электронными периодами, изменении скорости ядра. Вычисления выполняются в системе координат, в которой ядро покоится после соударения с нейтроном. Полная вероятность изменения состояния атома будет

$$1 - w_i = 1 - \left| \int \psi_i \psi_i^* e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} dV \right|^2. \quad (1)$$

Здесь  $\psi_i$  – волновая функция исходного состояния,  $w_i$  – вероятность атому остаться в исходном состоянии,  $\mathbf{q} = m\mathbf{v}/\hbar$ ,  $m$  – масса электрона,  $\mathbf{v}$  – скорость, которую приобретает ядро атома в результате соударения с нейтроном.

Простейший случай, вероятность возбуждения или ионизации свободного атома водорода, находящегося в основном состоянии  $\psi_0 = (\pi a^3)^{-1/2} e^{-r/a}$ , просчитан в [13] до конца. Для  $qa \ll 1$  формула (1) дает

$$1 - w_i \approx q^2 a^2, \quad (2)$$

где  $a$  – борковский радиус. Для переданной ядру атома энергии  $13.6 \text{ эВ}$ , половины атомной единицы,  $q^2 a^2 = m/M$ . Здесь  $m$  и  $M$  – массы электрона и протона соответственно. Для рассматриваемой задачи этот результат означает, что в указанных условиях вероятность неупругих процессов мала, рассеяние происходит так же, как на свободных протонах.

Совершенно иной результат формула (1) дает для возбужденных исходных состояний. Соответствующие вычисления были проведены (по другому поводу) еще в работе [14], посвященной теории металлов. Содержащийся в (1) интеграл (обозначим его  $I$ ) представляет компоненту Фурье от распределения плотности заряда электрона в атоме водорода. Этот интеграл был вычислен в пренебрежении анизотропией распределения заряда:

$$I \approx \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{R_{nl}^2(r)}{4\pi} e^{-iqr \cos \vartheta} r^2 dr \sin \vartheta d\vartheta d\phi = \frac{1}{q} \int_0^\infty R_{nl}^2(r) r \sin qr dr. \quad (3)$$

Здесь  $R_{nl}(r)$  – радиальная собственная функция атома водорода,  $n$  и  $l$  – главное и азимутальное квантовые числа,  $\vartheta$  – угол между направлениями векторов  $\mathbf{q}$  и  $\mathbf{r}$ . В нашем случае, для области энергий нейтронов, непосредственно примыкающей к области, рассмотренной Ферми, нецелесообразно использовать приведенные в [14] решения, точные для произвольных значений  $q$ . Вместо этого, для  $qa \ll 1$  положим в формуле (3)  $\sin qr \approx -qr \frac{1}{6} q^3 r^3$ .

В этом случае

$$I \approx 1 - \frac{1}{6} \overline{r^2} q^2 a^2; \quad (4)$$

и формула (1) дает

$$1 - w_i \approx \frac{1}{6} n^2 [5n^2 + 1 - 3l(l+1)] q^2 a^2. \quad (5)$$

Здесь  $\overline{r^2}$  – среднее значение  $r^2$ , соответствующее радиальной собственной функции  $R_{nl}(r)$  [13].

Формула (5) дает вероятность неупругих процессов для возбужденных состояний свободного атома водорода. Ее можно использовать для оценки вероятности таких же процессов для химически связанных атомов. Если представить волновую функцию исходного состояния  $\psi_i$  для связанного атома в виде разложения по полной системе собственных функций свободного атома, то, принимая во внимание асимметрию структуры водородосодержащих молекул, можно заключить, что в этом разложении практически не будет представлено сферически симметричное основное состояние  $\psi_0$ . В правой части уравнения (1), соответственно, будут преобладать члены, содержащие  $n^4$ , вероятность неупругих процессов будет отнюдь не мала. Таким образом, можно считать, что на шкале энергий нейтронов за область генерации молекулярных колебаний (десятые эВ) следует область электронных возбуждений. Эти процессы связаны с поглощением порций энергии, значительно превышающих энергию молекулярных колебаний. Соответственно изменятся сечения рассеяния, весь ход взаимодействия потока нейтронов с веществом в области энергий, где ранее предполагалась возможность анализа, не учитывающего химических связей. Оценка энергии этих процессов следует из данных оптической спектроскопии [15], для молекулы воды известен ряд переходов с энергиями  $\approx 10$  эВ. Но, помимо этого, как в экспериментах [2], так и в данных оптической спектроскопии, содержатся свидетельства существования переходов с энергиями  $\approx 100$  эВ. Эти данные можно рассматривать как указание на возможное расширение области возникновения возбужденных состояний. Но необходимо подчеркнуть, что здесь речь идет о процессах более сложных, чем то, что можно получить из приведенных выше формул, описывающих одноэлектронные переходы.

Следующие из формулы (5) оценки не заменяют более строгих вычислений. Тем не менее, на основании проведенного анализа можно высказать некоторые следствия общего характера. При изучении взаимодействия медленных нейтронов с веществом часто используется представление о некоторой граничной энергии, выше которой можно рассматривать рассеивающие ядра как свободные, пренебрегая влиянием химических связей. Для рассеяния нейтронов на химически связанном протоне в работе [7] указывается граничное значение 1 эВ. Недавние исследования [8] приводят к более осторожной оценке 1 – 10 эВ. Учитывая вероятность возникновения в указанных условиях сложных процессов возбуждения и ионизации, трудно ожидать здесь существования какой-либо четкой границы, более вероятно скорее разнообразие структурно-чувствительных результатов.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Бергман А. А., Владимирский К. В., Самсонов А. Е. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 11 – 12, 29 (1995).
- [2] Бергман А. А., Самсонов А. Е. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 1, 3 (1998).
- [3] Владимирский К. В. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 11, 49 (1998).
- [4] Шапиро Ф. Л. Труды ФИАН, **24**, 3 (1964). Исаков А. И., *ibid.*, 68. Попов Ю. П. *ibid.*, 111. Бергман А. А. *ibid.*, 169.
- [5] Бергман А. А., Маликжонов А. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 4, 71 (1972).
- [6] Бергман А. А., Стависский Ю. А., Челноков В. Б. и др. Ядерные константы, Атомиздат, **7**, 50 (1971).
- [7] Fermi E. *Ric. Scientifica*, **7** (2), 13 (1936).  
Ферми Э. Научные труды, **1**, М., Наука, 1971, с. 741.
- [8] Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике, изд. 2, М., Наука, 1971.
- [9] Скорняков Г. В., Тер-Мартirosян К. А. *ЖЭТФ*, **31**, 775 (1956).
- [10] Фаддеев Л. Д. *ЖЭТФ*, **39**, 1459 (1960).
- [11] Меркурьев С. П., Фаддеев Л. Д. Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц, М., Наука, 1985.
- [12] Мигдал А. Б. *ЖЭТФ*, **9**, 1163 (1939).
- [13] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория, изд. 4, М., Наука, 1989.
- [14] Bethe H. *Ann. Phys.*, **87**, 55 (1928).
- [15] Кизель В. А. Практическая молекулярная спектроскопия, М., изд. МФТИ, 1998.

Поступила в редакцию 18 апреля 2000 г.