

P4-2005-107

В. К. Игнатович, Е. П. Шабалин

АЛЬБЕДО НЕЙТРОНОВ

Направлено в журнал «Ядерная физика»

С помощью нового, алгебраического метода рассчитано альbedo нейтронов от произвольного вещества с целью проверки утверждения, что при использовании топлива и замедлителя активной зоны в ультрадисперсном виде можно выиграть и в размерах реактора, и в его критической массе. В приближении изотропного распределения падающих и отраженных нейтронов показано, что когерентное рассеяние на отдельных частицах в случае тепловых нейтронов очень незначительно увеличивает транспортное сечение, но при заданной толщине стенки уменьшает альbedo из-за уменьшения плотности вещества. Существенное увеличение альbedo имеет место только для нейтронов с длинами волн порядка размеров одного зерна.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики им. И. М. Франка ОИЯИ.

Перевод авторов

A new, algebraic, method is applied to calculation of neutron albedo from substance to check the claim that use of ultradispersive fuel and moderator of an active core can help to gain in size and mass of the reactor. In a model of isotropic distribution of incident and reflected neutrons it is shown that coherent scattering on separate grains in the case of thermal neutrons increases transport cross section negligibly, however it decreases albedo from a wall of finite thickness because of decrease of substance density. A visible increase of albedo takes place only for neutrons with wave length of the order of the size of a single grain.

The investigation has been performed at the Frank Laboratory of Neutron Physics, JINR.

ВВЕДЕНИЕ

Проведенное здесь исследование инициировано утверждением, сделанным в работе [1, 2], о том, что изготовление активной зоны реактора из ультрадисперсного порошка с размерами частиц порядка 10 нм позволяет уменьшить и массу топлива, и размеры активной зоны. Такое заключение основано на том, что в порошках, по сравнению с гомогенными веществами, нейтрон испытывает дополнительное когерентное рассеяние на отдельных частицах. Это уменьшает длину пробега и коэффициент диффузии, что способствует более долгому удержанию нейтронов в активной зоне и более интенсивному их размножению.

Чтобы проверить это утверждение, было решено рассмотреть вопрос об упругом альbedo тепловых и холодных нейтронов с фиксированной энергией от плоской стенки, изготовленной из ультрадисперсного порошка. В ходе исследования был найден новый, алгебраический метод расчета альbedo, отличающийся от общеизвестных. В этом методе рассматривается не преобразование потоков, а судьба одного-единственного нейтрона. При этом посредством мысленного отщепления тонкого слоя сначала находится альbedo как вероятность отражения от бесконечно толстой стенки, а затем, для определения альbedo от стенки с конечной толщиной L , снова рассматривается бесконечно толстая стенка, но мысленно от нее отщепляется слой толщиной L .

Основные понятия, необходимые для применения алгебраического метода, изложены в следующем разделе. Во втором разделе находится альbedo от бесконечно толстой стенки. Для простоты расчета делается предположение, что падающие на стенку и отраженные нейтроны имеют изотропное распределение. В третьем разделе находится альbedo от стенки с конечной толщиной. Полученный коэффициент альbedo далее сравнивается с тем, который следует из диффузионной теории, и показывается, что алгебраический метод применим в более широкой области изменения параметров, чем диффузионный.

В четвертом разделе производится оценка влияния дисперсности материала на величину альbedo. При этом крупинки порошка моделируются одинаковыми, случайно расположенными сферами, и интерференцией рассеяния на разных крупинках пренебрегается.

Из прямых аналитических расчетов следует, что перевод однородного вещества в порошковую форму приводит к увеличению альbedo только медленных нейтронов. Это увеличение заметно только для длин волн порядка размеров одного зерна порошка и особенно существенно, когда каждая крупинка порошка имеет разупорядоченную внутреннюю структуру.

В пятом разделе рассмотрено угловое распределение отражающихся нейтронов при изотропном рассеянии внутри вещества и показано, что в этом случае отклонение распределения отраженных нейтронов от изотропного не сказывается на величине альbedo.

1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ В АЛГЕБРАИЧЕСКОМ МЕТОДЕ

В основе алгебраического подхода лежат следующие понятия.

Элементарные векторы состояния

$$|\Omega\rangle \quad (1)$$

описывают нейтроны, летящие в направлении Ω . Они ортонормированы следующим образом:

$$\langle \Omega' | | \Omega \rangle = \delta(\Omega - \Omega'). \quad (2)$$

Направление Ω характеризуется углами с полярной осью, направленной вдоль внутренней нормали к стенке \mathbf{n} .

Общий вектор состояния

$$|\psi\rangle = \int d\Omega \psi(\Omega) |\Omega\rangle \quad (3)$$

описывает нейтрон, который в направлении $|\Omega\rangle$ летит с вероятностью $\psi(\Omega)$.

Изотропное состояние падающих нейтронов описывается вектором

$$|\psi\rangle = \int_{\mathbf{n}\Omega > 0} d\Omega \psi(\Omega) |\Omega\rangle = \int_{\mathbf{n}\Omega > 0} d\Omega \frac{\cos \theta}{\pi} |\Omega\rangle. \quad (4)$$

Нормировочный вектор. Для определения нормы любого состояния вводится «нормировочный вектор»

$$|\mathbf{e}\rangle = \int_{4\pi} d\Omega |\Omega\rangle. \quad (5)$$

При этом норма N любого состояния $|\phi\rangle$ определяется соотношением

$$\nu_\phi = \langle \mathbf{e} | | \phi \rangle. \quad (6)$$

В частности, норма состояний (1), (4), вычисленная с учетом (2), равна единице:

$$\langle \mathbf{e} | \Omega \rangle = \int_{4\pi} d\Omega' \delta(\Omega' - \Omega) = 1, \quad \langle \mathbf{e} | \psi \rangle = \int_{\mathbf{n}\Omega > 0} d\Omega \psi(\Omega) = 1. \quad (7)$$

Оператор. Рассеяние, поглощение, отражение приводят к изменению векторов состояния. Эти изменения описываются с помощью операторов

$$\hat{\mathbf{F}} = \int \int |\Omega\rangle F(\Omega \leftarrow \Omega') d\Omega d\Omega' \langle \Omega'|, \quad (8)$$

где $F(\Omega \leftarrow \Omega')$ — числовая функция, описывающая переход нейтрона из направления Ω' в направление Ω . Под действием оператора $\hat{\mathbf{F}}$ состояние

$$|\phi\rangle = \int \phi(\Omega) d\Omega |\Omega\rangle$$

с нормой

$$\nu_\phi = \langle \mathbf{e} | \phi \rangle = \int \phi(\Omega) d\Omega$$

преобразуется в состояние

$$|\chi\rangle = \hat{\mathbf{F}}|\phi\rangle = \int \left[\int F(\Omega \leftarrow \Omega') d\Omega' \phi(\Omega') \right] d\Omega |\Omega\rangle \quad (9)$$

с нормой

$$\nu_\chi = \langle \mathbf{e} | \chi \rangle = \int d\Omega \int F(\Omega \leftarrow \Omega') d\Omega' \phi(\Omega'). \quad (10)$$

2. АЛЬБЕДО ОТ БЕСКОНЕЧНО ТОЛСТОЙ СТЕНКИ

Уравнение для отражения. Отделим мысленно от бесконечно толстой стенки малый слой толщиной ζ и введем оператор вероятности отражения от этого слоя $\hat{\rho}_b = \zeta \hat{\Sigma}_b$, где

$$\begin{aligned} \hat{\Sigma}_b &= \int_{\mathbf{n}\Omega < 0} \int_{\mathbf{n}\Omega' > 0} |\Omega\rangle d\Omega \Sigma_s(\Omega \leftarrow \Omega') \frac{d\Omega'}{\cos \theta'} \langle \Omega'| \equiv \\ &\equiv \int_{\mathbf{n}\Omega > 0} \int_{\mathbf{n}\Omega' < 0} |\Omega\rangle d\Omega \Sigma_s(\Omega \leftarrow \Omega') \frac{d\Omega'}{|\cos \theta'|} \langle \Omega'|. \end{aligned} \quad (11)$$

Индекс b обозначает рассеяние от слоя назад в то же полупространство, в котором находился и падающий нейтрон. Первое равенство относится к отражению от слоя слева, а второе — к отражению от него справа. Множитель $1/\cos\theta'$ показывает, что при малых углах вероятность рассеяния от слоя возрастает, поскольку возрастает количество атомов на пути нейтрона, а $\Sigma_s(\Omega \leftarrow \Omega')$ обозначает дифференциальное макроскопическое сечение рассеяния

$$\Sigma_s(\Omega \leftarrow \Omega') = N \frac{d\sigma_s(\Omega' \rightarrow \Omega)}{d\Omega}, \quad (12)$$

в которое входит плотность рассеивателей N и дифференциальное сечение $d\sigma(\Omega' \rightarrow \Omega)/d\Omega$ рассеяния из направления Ω' в направление Ω .

Введем также оператор вероятности пропускания слоя $\hat{\tau} = \hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{s}} + \hat{\rho}_f$, где

$$\hat{\mathbf{I}} = \int |\Omega\rangle d\Omega \langle \Omega|$$

есть единичный оператор,

$$\hat{\mathbf{s}} = \zeta \Sigma_t \hat{\mathbf{S}}, \quad \hat{\mathbf{S}} = \int |\Omega\rangle \frac{d\Omega}{|\cos\theta|} \langle \Omega|, \quad (13)$$

$\Sigma_t = N\sigma_t = \Sigma_a + \Sigma_s$ — макроскопическое сечение полного взаимодействия, т. е. поглощения Σ_a и полного рассеяния Σ_s ; $\hat{\rho}_f = \zeta \hat{\Sigma}_f$, причем

$$\begin{aligned} \hat{\Sigma}_f &= \int_{\mathbf{n}\Omega > 0} \int_{\mathbf{n}\Omega' > 0} |\Omega\rangle d\Omega \Sigma_s(\Omega \leftarrow \Omega') \frac{d\Omega'}{\cos\theta'} \langle \Omega'| \equiv \\ &\equiv \int_{\mathbf{n}\Omega < 0} \int_{\mathbf{n}\Omega' < 0} |\Omega\rangle d\Omega \Sigma_s(\Omega \leftarrow \Omega') \frac{d\Omega'}{|\cos\theta'|} \langle \Omega'|. \end{aligned} \quad (14)$$

Индекс f означает, что после рассеяния нейтрон оказывается по другую сторону выделенного слоя относительно падающего нейтрона. Первое равенство описывает рассеяние нейтрона, падающего на слой слева, а второе — справа.

Введем оператор $\hat{\mathbf{X}}$, преобразующий состояние $|\psi\rangle$ нейтронов, падающих на входную поверхность, в состояние нейтронов $\hat{\mathbf{X}}|\psi\rangle$, падающих на поверхность после отделенного слоя. Введем также оператор отражения $\hat{\mathbf{R}}$ от бесконечно толстой стенки. Для $\hat{\mathbf{X}}$ и $\hat{\mathbf{R}}$ можно записать систему уравнений

$$\hat{\mathbf{X}} = \hat{\tau} + \hat{\rho}_b \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}, \quad \hat{\mathbf{R}} = \hat{\rho}_b + \hat{\tau} \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}. \quad (15)$$

Выразив $\hat{\mathbf{X}}$ из первого уравнения:

$$\hat{\mathbf{X}} = (\hat{\mathbf{I}} - \hat{\rho}_b \hat{\mathbf{R}})^{-1} \hat{\tau}, \quad (16)$$

подставим его во второе. В результате получим уравнение для $\hat{\mathbf{R}}$:

$$\hat{\mathbf{R}} = \hat{\rho}_b + \hat{\tau} \hat{\mathbf{R}} (\hat{\mathbf{I}} - \hat{\rho}_b \hat{\mathbf{R}})^{-1} \hat{\tau}. \quad (17)$$

Поскольку толщина слоя ζ может быть выбрана достаточно малой, то все матрицы $\hat{\rho}_{b,f}$ и \hat{s} малы. Поэтому уравнение можно записать в линеаризованном виде:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{R}} &= \hat{\rho}_b + \hat{\tau} \hat{\mathbf{R}} (\hat{\mathbf{I}} - \hat{\rho}_b \hat{\mathbf{R}})^{-1} \hat{\tau} = \hat{\rho}_b + (\hat{\mathbf{I}} - \hat{s} + \hat{\rho}_f) \hat{\mathbf{R}} (\hat{\mathbf{I}} + \hat{\rho}_b \hat{\mathbf{R}}) (\hat{\mathbf{I}} - \hat{s} + \hat{\rho}_f) = \\ &= \hat{\mathbf{R}} + \hat{\mathbf{R}} \hat{\rho}_b \hat{\mathbf{R}} - \hat{s} \hat{\mathbf{R}} - \hat{\mathbf{R}} \hat{s} + \hat{\rho}_f \hat{\mathbf{R}} + \hat{\mathbf{R}} \hat{\rho}_f + \hat{\rho}_b, \end{aligned} \quad (18)$$

откуда следует, что

$$\hat{\mathbf{R}} \hat{\Sigma}_b \hat{\mathbf{R}} + (\hat{\Sigma}_f - \Sigma_t \hat{\mathbf{S}}) \hat{\mathbf{R}} + \hat{\mathbf{R}} (\hat{\Sigma}_f - \Sigma_t \hat{\mathbf{S}}) + \hat{\Sigma}_b = 0. \quad (19)$$

Будем искать решение в виде

$$\hat{\mathbf{R}} = R_\infty \int_{\mathbf{n}\Omega < 0} \int_{\mathbf{n}\Omega' > 0} |\Omega\rangle d\Omega \frac{|\cos \theta|}{\pi} d\Omega' \langle \Omega' | = R_\infty |\psi\rangle \langle \mathbf{e}|. \quad (20)$$

Это значит, что под каким бы углом нейтрон ни падал на поверхность, отраженные нейтроны имеют изотропное распределение.

Умножим уравнение (19) справа на состояние $|\psi\rangle$ и слева на $\langle \mathbf{e}|$. В результате получим

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{e} | [\hat{\mathbf{R}} \hat{\Sigma}_b \hat{\mathbf{R}} + (\hat{\Sigma}_f - \Sigma_t \hat{\mathbf{S}}) \hat{\mathbf{R}} + \hat{\mathbf{R}} (\hat{\Sigma}_f - \Sigma_t \hat{\mathbf{S}}) + \hat{\Sigma}_b] | \psi \rangle = \\ = R_\infty^2 \Sigma_b - 2(\Sigma_t - \Sigma_f) R_\infty + \Sigma_b = 0, \end{aligned} \quad (21)$$

где

$$\begin{aligned} \Sigma_b &= \int_{\mathbf{n}\Omega' < 0} d\Omega \int_{\mathbf{n}\Omega' > 0} \Sigma_s(\Omega \leftarrow \Omega') \frac{d\Omega'}{2\pi}, \\ \Sigma_f &= \int_{\mathbf{n}\Omega' > 0} d\Omega \int_{\mathbf{n}\Omega' > 0} \Sigma_s(\Omega \leftarrow \Omega') \frac{d\Omega'}{2\pi} \end{aligned} \quad (22)$$

есть сечения рассеяния назад и вперед соответственно, усредненные по углам падения. Заметим, что

$$\Sigma_b + \Sigma_f = \int_{4\pi} d\Omega \int_{\mathbf{n}\Omega' < 0} \Sigma_s(\Omega \leftarrow \Omega') \frac{d\Omega'}{2\pi} = \Sigma_s \int_{2\pi} \frac{d\Omega'}{2\pi} = \Sigma_s. \quad (23)$$

Решение уравнения (21) может быть представлено в виде

$$R_\infty = \frac{\sqrt{\Sigma_t - \Sigma_f + \Sigma_b} - \sqrt{\Sigma_t - \Sigma_f - \Sigma_b}}{\sqrt{\Sigma_t - \Sigma_f + \Sigma_b} + \sqrt{\Sigma_t - \Sigma_f - \Sigma_b}}. \quad (24)$$

Поскольку $\Sigma_f + \Sigma_b = \Sigma_s$, а $\Sigma_s - \Sigma_f + \Sigma_b = 2\Sigma_b$ является аналогом транспортного сечения Σ_{tr} , то альbedo от бесконечно толстой стенки принимает вид

$$R_\infty = \frac{\sqrt{\Sigma_a + \Sigma_{tr}} - \sqrt{\Sigma_a}}{\sqrt{\Sigma_a + \Sigma_{tr}} + \sqrt{\Sigma_a}}, \quad (25)$$

из которого следует естественный результат, что при $\Sigma_a = 0$ альbedo от бесконечно толстой стенки равно единице, а при $\Sigma_{tr}/\Sigma_a \rightarrow 0$ альbedo стремится к нулю.

Убывание плотности нейтронов внутри вещества. Чтобы найти альbedo от стенки, имеющей конечную толщину, необходимо найти убывание нейтронов при удалении от границы раздела. Это убывание описывается оператором \hat{X} , выражение для которого (16) можно представить следующим образом:

$$\hat{X} = (\hat{I} - \hat{\rho}_b \hat{R})^{-1} \hat{\tau} \approx \hat{I} + \hat{\rho}_b \hat{R} - \hat{s} + \hat{\rho}_f. \quad (26)$$

Оператор \hat{X} преобразует состояние $|\psi\rangle$ у входной поверхности в состояние $\hat{X}|\psi\rangle$ на глубине ζ внутри вещества. Норма этого состояния

$$\begin{aligned} \langle e | \hat{X} | \psi \rangle &= 1 - 2\zeta[\Sigma_a + \Sigma_s - \Sigma_f - \Sigma_b + \Sigma_b(1 - R_\infty)] = \\ &= 1 - 2\zeta[\Sigma_a + \Sigma_b(1 - R_\infty)] \approx \exp(-q\zeta). \end{aligned} \quad (27)$$

Это значит, что на расстоянии z от поверхности раздела в глубь вещества плотность нейтронов падает пропорционально $X(z) = \exp(-qz) = \exp(-z/L_0)$ с показателем экспоненты

$$q = 2\Sigma_a + \Sigma_{tr}(1 - R_\infty) = 2\sqrt{\Sigma_a(\Sigma_a + \Sigma_{tr})}, \quad L_0 = \frac{1}{2\sqrt{\Sigma_a(\Sigma_a + \Sigma_{tr})}}, \quad (28)$$

и оператор \hat{X} может быть представлен как

$$\hat{X}(z) = \exp(-z/L_0) |\psi\rangle \langle e|. \quad (29)$$

3. АЛЬБЕДО ОТ СТЕНКИ С КОНЕЧНОЙ ТОЛЩИНОЙ L

Теперь можно найти отражение \hat{R}_L от стенки с конечной толщиной L . Для этого запишем аналогично (15) систему уравнений для полубесконечной стенки, отделив от нее слой с конечной толщиной L :

$$\hat{X}_L = \hat{T}_L + \hat{R}_L \hat{R} \hat{X}_L, \quad \hat{R} = \hat{R}_L + \hat{T}_L \hat{R} \hat{X}_L. \quad (30)$$

Здесь $\hat{\mathbf{X}}_L = \hat{\mathbf{X}}(L)$, а $\hat{\mathbf{T}}_L$ — оператор пропускания стенки толщиной L .
Исключив $\hat{\mathbf{T}}_L$ из второго уравнения, получим

$$\hat{\mathbf{R}} = \hat{\mathbf{R}}_L + [\hat{\mathbf{X}}_L - \hat{\mathbf{R}}_L \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}_L] \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}_L. \quad (31)$$

Отсюда следует

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{R}} - \hat{\mathbf{X}}_L \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}_L &= \hat{\mathbf{R}}_L [\hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}_L \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}_L] \rightarrow \hat{\mathbf{R}}_L = \\ &= [\hat{\mathbf{R}} - \hat{\mathbf{X}}_L \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}_L] [\hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}_L \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}_L]^{-1}. \end{aligned} \quad (32)$$

Заметим, что

$$\hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}_L \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}_L = \int |\Omega\rangle d\Omega \langle \Omega| - R_\infty^2 X_L^2 |\psi\rangle \langle \mathbf{e}| = \hat{\mathbf{I}} - \alpha |\psi\rangle \langle \mathbf{e}|, \quad \alpha = R_\infty^2 X_L^2, \quad (33)$$

где $X_L = \exp(-qL)$. Обратная матрица $(\hat{\mathbf{I}} - \alpha |\psi\rangle \langle \mathbf{e}|)^{-1}$ может быть представлена в виде

$$(\hat{\mathbf{I}} - \alpha |\psi\rangle \langle \mathbf{e}|)^{-1} = \hat{\mathbf{I}} + c |\psi\rangle \langle \mathbf{e}|, \quad (34)$$

где c определяется из естественного соотношения

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{I}} &= (\hat{\mathbf{I}} - \alpha |\psi\rangle \langle \mathbf{e}|) (\hat{\mathbf{I}} - \alpha |\psi\rangle \langle \mathbf{e}|)^{-1} = (\hat{\mathbf{I}} - \alpha |\psi\rangle \langle \mathbf{e}|) (\hat{\mathbf{I}} + c |\psi\rangle \langle \mathbf{e}|) = \\ &= \hat{\mathbf{I}} - (\alpha - c + c\alpha) |\psi\rangle \langle \mathbf{e}|, \end{aligned} \quad (35)$$

из которого следует, что $\alpha - c + c\alpha = 0$, или

$$c = \frac{\alpha}{1 - \alpha} = \frac{R_\infty^2 X_L^2}{1 - R_\infty^2 X_L^2}. \quad (36)$$

Подставив (34) с учетом (36) в (32), получим

$$\hat{\mathbf{R}}_L = R_L |\psi\rangle \langle \mathbf{e}|, \quad (37)$$

где

$$R_L \equiv \langle \mathbf{e} | \hat{\mathbf{R}}_L | \psi \rangle = R_\infty \frac{1 - \exp(-2qL)}{1 - R_\infty^2 \exp(-2qL)}. \quad (38)$$

При отсутствии поглощения имеем $R_\infty = 1$, $q = 0$, и правая часть выражения (38) вырождается в неопределенное отношение $0/0$. Эту неопределенность можно раскрыть по правилу Лопиталья, продифференцировав числитель и знаменатель дроби в (38) по $\sqrt{\Sigma_a}$, и положив $\Sigma_a = 0$. Поскольку, согласно (28), $q' \equiv dq/d\sqrt{\Sigma_a} = 2\sqrt{\Sigma_{tr}}$, а $R'_\infty \equiv dR_\infty/d\sqrt{\Sigma_a} = -2/\sqrt{\Sigma_{tr}}$, согласно (25), то

$$\lim_{\sqrt{\Sigma_a} \rightarrow 0} \left(\frac{1 - \exp(-2qL)}{1 - R_\infty^2 \exp(-2qL)} \right) = \frac{q'L}{-R'_\infty + q'L} = \frac{\Sigma_{tr} L}{1 + \Sigma_{tr} L}. \quad (39)$$

Кроме альbedo, полезно иногда знать и пропускание T_L . Подставив в первое уравнение (30) $\hat{\mathbf{R}}_L$ из второго, получим

$$\hat{\mathbf{X}}_L = \hat{\mathbf{T}}_L + (\hat{\mathbf{R}} - \hat{\mathbf{T}}_L \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}_L) \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}_L, \quad (40)$$

откуда следует

$$\hat{\mathbf{T}}_L = (\hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{R}}^2) \hat{\mathbf{X}}_L (\hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}_L \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}_L)^{-1}. \quad (41)$$

Подставив сюда (20), (29) и используя соотношения (33)–(36), получим

$$\hat{\mathbf{T}}_L = T_L |\psi\rangle \langle \mathbf{e}|, \quad (42)$$

где

$$T_L \equiv \langle \mathbf{e} | \hat{\mathbf{T}}_L | \psi \rangle = \exp(-qL) \frac{1 - R_\infty^2}{1 - R_\infty^2 \exp(-2qL)}. \quad (43)$$

Сравнение с диффузионными формулами альbedo. Выражения (25) и (38) отличаются от формул альbedo, получаемых в диффузионном приближении. В случае отражения от бесконечно толстой стенки диффузионное альbedo (см., например, [3], формула (6.3.6), [4], формула (3.3)) имеет вид

$$R_\infty = \frac{1 - 2 \frac{D}{L_D}}{1 + 2 \frac{D}{L_D}}, \quad (44)$$

где $D = 1/3(\Sigma_a + \Sigma_{tr})$ — коэффициент диффузии, $L_D = 1/\sqrt{3\Sigma_a(\Sigma_a + \Sigma_{tr})}$ — диффузионная длина. Формула (44) легко приводится к виду

$$R_\infty = \frac{\sqrt{\Sigma_a + \Sigma_{tr}} - \sqrt{(4/3)\Sigma_a}}{\sqrt{\Sigma_a + \Sigma_{tr}} + \sqrt{(4/3)\Sigma_a}}, \quad (45)$$

из которого следует, что при $\Sigma_{tr} < \Sigma_a/3$ альbedo, которое представляет собой вероятность отражения и должно быть положительной величиной, становится отрицательным.

Альbedo от стенки с конечной толщиной (см., например, [3], формула (6.3.5)) приводится в виде

$$R_L = \frac{1 - 2 \frac{D}{L_D} \coth\left(\frac{L}{L_D}\right)}{1 + 2 \frac{D}{L_D} \coth\left(\frac{L}{L_D}\right)}, \quad (46)$$

и из него сразу следует абсурдный результат: при $L \rightarrow 0$, когда вероятность отражения должна стремиться к нулю, выражение (46) стремится к минус единице.

Абсурдные результаты свидетельствуют о том, что диффузионный подход справедлив только при $\Sigma_{\text{tr}} \gg \Sigma_a$ и $L \gg L_D$. Поскольку полученные нами выражения (25) и (38) не приводят к абсурду ни при каких значениях параметров, мы можем утверждать, что наш подход справедлив в более широкой области, чем диффузионный.

4. ОЦЕНКА ПАРАМЕТРОВ ДЛЯ УЛЬТРАДИСПЕРСНОГО ВЕЩЕСТВА

Воспользуемся теперь полученными формулами для альбедо R_∞ (25) от бесконечно толстой стенки, альбедо R_L (38) от стенки толщиной L и глубины проникновения L_0 (28). Чтобы оценить роль ультрадисперсности, нужно найти ее вклад в транспортное сечение Σ_{tr} , которое можно представить в виде суммы $\Sigma_{\text{tr}} = \Sigma_{\text{tr}}^c + \Sigma_N$ двух слагаемых. Первое, Σ_{tr}^c , описывает когерентное рассеяние на крупинке в целом, а второе, Σ_N , относится к рассеянию на отдельных ядрах крупинки. Второе слагаемое, в свою очередь, тоже разбивается на две части: изотропную некогерентную $\Sigma_N^{ic} = 4\pi N_0 |b_{ic}|^2$, где b_{ic} — некогерентная часть амплитуды рассеяния ядер, и когерентную Σ_N^c .

Когерентное рассеяние на отдельных ядрах, вообще говоря, не изотропно. Оно описывает дифракцию на кристаллической решетке крупинки и сильно зависит от длины волны нейтрона. В случае тепловых нейтронов ($\lambda = 1,8 \text{ \AA}$), вследствие произвольной ориентации кристаллической решетки каждой крупинки, когерентное рассеяние можно считать изотропным и представлять в виде $\Sigma_N^c = 4\pi N_0 |b_c|^2$, где b_c — когерентная часть амплитуды рассеяния ядер.

Оценим величину Σ_{tr}^c для рассеяния на крупинке в целом, полагая, что среда состоит из шариков вещества радиусом a . Амплитуда рассеяния шарика, вычисленная по теории возмущений, равна

$$\begin{aligned} B &= N_0 b_c \int d^3r \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) = \frac{2\pi N_0 b_c}{iq} \int_{-a}^a r dr \exp(iqr) = \\ &= -\frac{4\pi N_0 b_c a}{q^2} \left(\cos(qa) - \frac{\sin(qa)}{qa} \right). \end{aligned} \quad (47)$$

Соответственно дифференциальное сечение рассеяния

$$d\sigma_s^c(\Omega) = |B|^2 d\Omega = a^2 \frac{u^2}{q^4} \left(\cos(qa) - \frac{\sin(qa)}{qa} \right)^2 d\Omega, \quad (48)$$

где $u = 4\pi N_0 b_c$ соответствует оптическому потенциалу среды $U = \hbar^2 u / 2m \approx 10^{-7} \text{ эВ}$. Транспортное сечение σ_{tr} , которое мы теперь будем вычислять в

соответствии с общепринятым определением как

$$\sigma_{\text{tr}}^c = \int_{4\pi} d\Omega \frac{d\sigma_s^c(\Omega)}{d\Omega} (1 - \cos \theta) = \int_{4\pi} |B|^2 (1 - \cos \theta) d\Omega,$$

равно

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{tr}}^c &= \int_{4\pi} a^2 \frac{u^2}{q^4} \left(\cos(qa) - \frac{\sin(qa)}{qa} \right)^2 (1 - \cos \theta) d\Omega = \\ &= a^2 \frac{2\pi u^2}{2k^4} \int_0^1 \left(\cos(2kax) - \frac{\sin(2kax)}{2kax} \right)^2 \frac{dx}{x} = a^2 \frac{\pi u^2}{k^4} f(2ka), \end{aligned} \quad (49)$$

где функция $f(2ka)$ имеет асимптотики

$$\begin{aligned} f(2ka) &= \int_0^{2ka} (x \cos x - \sin x)^2 dx / x^3 \approx \\ &\approx \begin{cases} \frac{1}{2} (\ln(2ka) + 0,27) & \text{при } 2kr \gg 1 \\ \frac{4}{9} (ka)^4 & \text{при } 2kr \ll 1. \end{cases} \end{aligned} \quad (50)$$

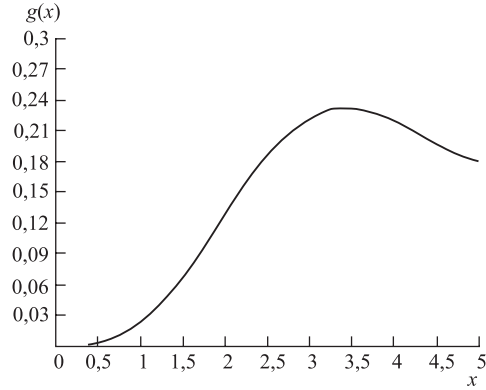
Макроскопическое транспортное сечение может быть определено как

$$\Sigma_{\text{tr}}^c = \gamma N_1 \sigma_{\text{tr}}^c = \gamma N_0 \frac{\sigma_{\text{tr}}^c}{4\pi N_0 a^3 / 3} = \gamma \Sigma_N^c F, \quad F = 6\pi \frac{N_0}{k^3} g(2ka), \quad (51)$$

где N_1 — число крупинок в единице объема, если бы в них можно было перевести весь сплошной материал, $\gamma \leq 0,74$ — плотность упаковки, а функция

$$g(2ka) = \frac{f(2ka)}{2ka} \approx \begin{cases} \frac{\ln(2ka) + 0,27}{4ka} & \text{при } 2kr \gg 1 \\ 2(ka)^3 / 9 & \text{при } 2kr \ll 1, \end{cases} \quad (52)$$

как показывает численный расчет (см. рисунок), имеет максимум $\max(g) \approx 0,25$ при $2ka \approx 3,5$, т.е. при $a \approx 0,28\lambda$. Таким образом, для тепловых нейтронов с длиной волны $\lambda = 1,8 \text{ \AA}$ максимум $g(x)$ соответствует $a = 0,5 \text{ \AA}$, а для холодных нейтронов с длиной волны 12 \AA , которые соответствуют температуре замедлителя $T = 4 \text{ К}$, максимум функции $g(2ka)$ достигается при $a = 3,36 \text{ \AA}$. Оба эти значения a меньше или порядка межатомного, тогда как крупинки ультрадисперсного вещества предполагаются имеющими размеры, по крайней мере, больше 1 нм. Мы будем принимать $a = 1,5 \text{ нм}$, при этом всегда будет $2ka \gg 3,5$, что дает нам право в дальнейшем всегда пользоваться асимптотическим выражением для $g(x)$ при больших $x \gg 1$.



Функция $g(x)$ (52) вблизи максимума

Заметим, что множитель γ входит во все параметры формулы (25) и потому альbedo R_∞ его не содержит:

$$R_\infty = \frac{\sqrt{\Sigma_a + \Sigma_N^{ic} + \Sigma_N^c(1+F)} - \sqrt{\Sigma_a}}{\sqrt{\Sigma_a + \Sigma_N^{ic} + \Sigma_N^c(1+F)} + \sqrt{\Sigma_a}}. \quad (53)$$

Отсюда сразу следует, что альbedo от бесконечно толстой ультрадисперсной среды всегда выше, чем от сплошной.

С другой стороны, по этой же причине глубина проникновения

$$L_0 = \frac{1}{2\gamma\sqrt{\Sigma_a(\Sigma_a + \Sigma_N^{ic} + \Sigma_N^c(1+F))}} \quad (54)$$

содержит γ в знаменателе, и это увеличивает L_0 . Следовательно, альbedo $R_L \propto R_\infty[1 - \exp(-2L/L_0)]$ от стенки с конечной толщиной L в случае ультрадисперсной среды может оказаться меньше, чем от сплошной.

В таблице приведены расчеты для различных веществ и для нейтронов с различной длиной волны. В первой колонке указано вещество, отражающее нейтроны, С1 обозначает графит, С2 — алмаз. Ве — бериллий с идеальной кристаллической решеткой, а С1' и Ве' — порошки графита и бериллия, зерна которых имеют полностью разупорядоченную структуру.

Вещество	$\lambda, \text{Å}$	$g(2ka), \text{см}^{-3}$	$N_0 \cdot 10^{-23}$	F	Σ_N	Σ_{tr}	Σ_a	R_∞	γL_0
C1	1,8	0,023	0,837	0,0009	0,46	0,4604	0,00042	0,94	36
C2	1,8	0,023	1,76	0,0019	0,97	0,9708	0,00088	0,94	17
C1	12	0,096	0,837	0,25	0,00084	0,1158	0,0028	0,73	27
C1'	12	0,096	0,837	0,25	0,46	0,6758	0,0028	0,88	11,5
C2	12	0,096	1,76	0,53	0,00176	0,5142	0,0059	0,81	9
Be	1,8	0,023	1,23	0,0013	0,9274	0,9286	0,001	0,93	16
Be	6	0,06	1,23	0,12	0,0012	0,1123	0,0033	0,71	25,5
Be'	6	0,06	1,23	0,12	0,9274	1,037	0,0033	0,89	8,4

В колонках таблицы приведены: λ — длина волны нейтронов, $g(2ka)$ — значение функции $g(2ka)$ при указанной длине волны и $a = 1,5$ нм, $N_0 \cdot 10^{-23}$ — атомарная плотность вещества, F — поправка к Σ_N^c , обусловленная когерентным рассеянием на крупинках порошка. Σ_N — упругое макроскопическое сечение рассеяния на отдельном атоме. При длине волны $1,8 \text{ Å}$ это сечение равно $\Sigma_N = \Sigma_N^c + \Sigma_N^{ic}$. При длинах волн 6 и 12 Å это сечение не содержит когерентной части, т. е. $\Sigma_N = \Sigma_N^{ic}$. Если же крупинки порошка имеют полностью разупорядоченную структуру, то в Σ_N снова нужно включить Σ_N^c . Σ_{tr} — макроскопическое транспортное сечение с учетом поправки на когерентное рассеяние отдельных крупинок Σ_{tr}^c , Σ_a — макроскопическое сечение поглощения ядрами вещества при длинах волн, указанных во второй колонке. R_∞ — альbedo от бесконечно толстой стенки, γL_0 — глубина проникновения, умноженная на коэффициент упаковки γ . В случае, когда $\gamma = 0,74$, длина L_0 на 35% больше указанной в последней колонке. Для сплошного вещества следует взять $\gamma = 1$, и в пятой колонке поправку $F = 0$.

Ультрадисперсный порошок бериллия представляет большой интерес с точки зрения использования его для холодного замедлителя при температуре ≈ 30 К. Длина волны холодных нейтронов в этом случае составляет $\approx 6 \text{ Å}$, и при такой длине волны когерентная часть ядерного рассеяния Σ_N^c исключается. Тем не менее, как видно из таблицы, альbedo от полубесконечной среды благодаря когерентному рассеянию на крупинках достигает 71% . Однако глубина проникновения оказывается довольно большой, и поэтому, чтобы получить альbedo $\sim 60\%$, требуется стенка толщиной более 35 см. Ситуация может быть значительно улучшена, если использовать порошок бериллия с полностью разупорядоченной структурой каждого зерна. Тогда, как это следует из последней строчки таблицы, можно достичь альbedo 77% при толщине стенки всего 11 см.

При не полностью разупорядоченной структуре отдельного зерна вклад Σ_N^c будет не полным. Величину этого вклада при различной технологии при-

готовления порошка можно контролировать по пропусканию холодных нейтронов через порошковые образцы.

5. УГЛОВОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ОТРАЖЕННЫХ НЕЙТРОНОВ ПРИ ИЗОТРОПНОМ РАССЕЙАНИИ

Выше мы воспользовались простой моделью (20) для оператора отражения. Посмотрим теперь, как изменятся наши результаты, если мы учтем, что отраженные нейтроны имеют неизотропное распределение. Наиболее просто это сделать в случае изотропного рассеяния, когда оператор рассеяния имеет вид

$$\begin{aligned}\hat{\Sigma}_b &= \Sigma_s \int_{\mathbf{n}\Omega < 0} \int_{\mathbf{n}\Omega' > 0} |\Omega\rangle \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{d\Omega'}{\cos \theta'} \langle \Omega' | \equiv \\ &\equiv \Sigma_s \int_{\mathbf{n}\Omega > 0} \int_{\mathbf{n}\Omega' < 0} |\Omega\rangle \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{d\Omega'}{|\cos \theta'|} \langle \Omega' |, \quad (55)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{\Sigma}_b &= \Sigma_s \int_{\mathbf{n}\Omega > 0} \int_{\mathbf{n}\Omega' > 0} |\Omega\rangle \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{d\Omega'}{\cos \theta'} \langle \Omega' | \equiv \\ &\equiv \Sigma_s \int_{\mathbf{n}\Omega < 0} \int_{\mathbf{n}\Omega' < 0} |\Omega\rangle \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{d\Omega'}{|\cos \theta'|} \langle \Omega' |, \quad (56)\end{aligned}$$

где Σ_s — постоянная. Оператор отражения запишем в общем виде

$$\hat{\mathbf{R}} = \int_{\mathbf{n}\Omega < 0} \int_{\mathbf{n}\Omega' > 0} |\Omega\rangle d\Omega |\cos \theta| \mathcal{R}(\Omega \leftarrow \Omega') \frac{d\Omega'}{2\pi} \langle \Omega' |, \quad (57)$$

при этом в качестве альбеда будем принимать

$$R = \int_{\mathbf{n}\Omega < 0} \int_{\mathbf{n}\Omega' > 0} d\Omega |\cos \theta| \mathcal{R}(\Omega \leftarrow \Omega') \frac{d\Omega'}{2\pi} = \int_{\mathbf{n}\Omega' > 0} \tilde{R}(\Omega') \frac{d\Omega'}{2\pi}, \quad (58)$$

где

$$\tilde{R}(\Omega') = \int_{\mathbf{n}\Omega < 0} d\Omega |\cos \theta| \mathcal{R}(\Omega \leftarrow \Omega') \quad (59)$$

представляет собой коэффициент отражения для заданного угла падения Ω' . Таким образом, альbedo в (58) определено как коэффициент отражения (59), усредненный по углам падения. На основе принципа детального равновесия можно показать, что при отсутствии поглощения функция $\mathcal{R}(\Omega \leftarrow \Omega')$ симметрична относительно перестановки аргументов. Мы примем, что она симметрична и при наличии поглощения, т. е.

$$\mathcal{R}(\Omega \leftarrow \Omega') = \mathcal{R}(\Omega' \leftarrow \Omega) = \mathcal{R}(\mu, \mu'), \quad (60)$$

где $\mu = \cos \theta$.

Найдем матричный элемент уравнения (19) между состояниями $\langle \Omega |$ и $|\Omega' \rangle$:

$$\langle \Omega | \left[\hat{\mathbf{R}} \hat{\Sigma}_b \hat{\mathbf{R}} + (\hat{\Sigma}_f - \Sigma_t \hat{\mathbf{S}}) \hat{\mathbf{R}} + \hat{\mathbf{R}} (\hat{\Sigma}_f - \Sigma_t \hat{\mathbf{S}}) + \hat{\Sigma}_b \right] |\Omega' \rangle = 0, \quad (61)$$

Подставив сюда (55)–(57) и выражение

$$\hat{\mathbf{S}} = \int |\Omega \rangle \frac{d\Omega}{|\cos \theta|} \langle \Omega | \quad (62)$$

для $\hat{\mathbf{S}}$, приведем уравнение к виду

$$\frac{\alpha}{2} [1 + \mu Q(\mu)] [1 + \mu' Q(\mu')] = (\mu + \mu') \mathcal{R}(\mu, \mu'), \quad (63)$$

где $\alpha = \Sigma_s / \Sigma_t$,

$$Q(\mu) = \int_0^1 \mathcal{R}(\mu, \mu') d\mu' = \int_0^1 \mathcal{R}(\mu, \mu') d\mu'. \quad (64)$$

Отсюда получается интегральное уравнение

$$\mathcal{R}(\mu, \mu') = \frac{\alpha}{2} \frac{[1 + \mu Q(\mu)] [1 + \mu' Q(\mu')]}{\mu + \mu'}. \quad (65)$$

Введем обозначение $H(\mu) = 1 + \mu Q(\mu)$. Тогда уравнение (65) запишется следующим образом:

$$\mathcal{R}(\mu, \mu') = \frac{\alpha}{2} \frac{H(\mu) H(\mu')}{\mu + \mu'}. \quad (66)$$

Проинтегрируем (66) по μ' , умножим результат на μ и приведем уравнение к виду

$$H(\mu) = 1 + \frac{\alpha \mu}{2} H(\mu) \int_0^1 \frac{H(\mu')}{\mu + \mu'} d\mu', \quad (67)$$

откуда следует, что

$$\frac{1}{H(\mu)} = 1 - \frac{\alpha\mu}{2} \int_0^1 \frac{H(\mu')}{\mu + \mu'} d\mu'. \quad (68)$$

Это полностью совпадает с уравнением (5) из главы 9.3 книги [6], полученным с помощью кинетического уравнения, где также приводится его решение.

Однако для определения альbedo само решение не требуется. Действительно, проинтегрируем обе части уравнения (63) по $d\mu$ и $d\mu'$. В результате получим уравнение для альbedo

$$\alpha(1 + R)^2 = 4R. \quad (69)$$

Решение этого уравнения

$$R = \frac{\sqrt{\Sigma_t} - \sqrt{\Sigma_a}}{\sqrt{\Sigma_t} + \sqrt{\Sigma_a}} \quad (70)$$

полностью совпадает с (25), поскольку в данном случае $\Sigma_{tr} = 2\Sigma_b \equiv \Sigma_s$.

Таким образом, отклонение от изотропии, по крайней мере в случае изотропного рассеяния, никак не сказалось на величине альbedo, найденного с помощью простой модели (20).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Итак, нам удалось найти новый, алгебраический подход к расчету альbedo от различных веществ. Этот подход имеет более широкую применимость по сравнению с диффузионным. Он приводит к такому же угловому распределению отражаемых нейтронов, как и обычное кинетическое уравнение. С помощью этого подхода мы смогли оценить роль когерентного рассеяния на отдельных крупинках в ультрадисперсных материалах. Из этих оценок видно, что для тепловых нейтронов ультрадисперсность не дает выигрыша, но она может оказаться полезной для холодных нейтронов, особенно если возможно создание порошковых материалов с разупорядоченной внутренней структурой каждого зерна.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Артёмьев В. А.* Оценка критических параметров реакторов на тепловых нейтронах с активной зоной из наноструктурного материала // ВАНТ. Сер. «Физика ядерных реакторов», 2003. Вып. 1–2. С. 7–12.

2. *Артемов В. А.* Оценка критических параметров реакторов на тепловых нейтронах с активной зоной из наноструктурного материала. // АЭ. 2003. Т. 94, Вып. 3. С. 231–233.
3. *Бекуц К., Вирту К.* Нейтронная физика. М.: Атомиздат. 1968. С. 119.
4. *Гермогенова Т. А. и др.* Альbedo нейтронов. М.: Атомиздат, 1973.
5. *Гуревич И. И., Тарасов Л. В.* Физика нейтронов низких энергий. М.: Наука, 1965. С. 232.
6. *Кейз К., Цвайфель П.* Линейная теория переноса. М.: Мир, 1972.

Получено 13 июля 2005 г.

Редактор *Е. К. Аксенова*

Подписано в печать 12.08.2005.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 1,13. Уч.-изд. л. 1,37. Тираж 350 экз. Заказ № 54990.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: publish@pds.jinr.ru

www.jinr.ru/publish/