

ПОВЫШЕНИЕ ТОЧНОСТИ МОДЕЛЬНОГО ОПИСАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ОЧЕНЬ ХОЛОДНЫХ НЕЙТРОНОВ С АЛМАЗНЫМИ НАНОПОРОШКАМИ



А.Ю. Незванов¹, В.А. Артемьев^{1,2}, В.В. Несвижевский³

¹ *Московский государственный индустриальный университет, Москва, Россия*

² *НИИ технологии материалов, Москва, Россия*

³ *Institut Max von Laue – Paul Langevin, Grenoble, France*

Выполненные теоретические оценки показали, что целенаправленное использование явления интенсивного когерентного Значения интегральных характеристик рассеяния (полные и транспортные сечения, альbedo нейтронов), вычисленные в упругого рассеяния медленных нейтронов нанодисперсными частицами позволяет применять материалы из композиций борновском приближении, имеют приемлемую погрешность для получения достоверных количественных оценок в рассмотренных наночастиц для конструирования новых эффективных отражателей очень холодных нейтронов (ОХН). На основе алмазных случаях. Погрешность борновского приближения при расчете интегральных характеристик рассеяния уменьшается с возрастанием нанопорошков созданы наиболее эффективные на сегодняшний день отражатели ОХН [1–4]. Отражатели нейтронов из энергии нейтронов и уменьшении размеров наночастиц.

С целью повышения точности модельного описания взаимодействий ХН и ОХН с алмазными нанопорошками была реализована компьютерная программа для численного моделирования методами Монте-Карло переноса нейтронов интересующего энергетического диапазона в нанодисперсных порошках. При математическом моделировании взаимодействий нейтронов с нанопорошками методом фазовых функций производится точный квантовомеханический расчет сечений когерентного упругого рассеяния нейтронов наночастицами. На рис. 3 изображены расчетные величины альbedo β некогогерентного отражения нейтронов от слоев насыпного алмазного нанопорошка различной толщины в зависимости от скорости нейтронов v. Некогогерентное отражение нейтронов от слоя нанопорошка обусловлено процессами многократного потенциального (когерентного) некоррелированного рассеяния нейтронов на отдельных частицах нанопорошка при движении (диффузии) нейтронов в слое материала и последующем выходе из материала обратно в вакуум. При расчетах использовалась модель монодисперсного нанопорошка алмаза с радиусом частиц a=2,5 нм. Алмазный нанопорошок имел насыпную плотность 0,35 г/см³. Состав вещества – атомы углерода ¹²C без присутствия примесей других химических элементов.

Основным механизмом взаимодействия медленных нейтронов с нанопорошком является когерентное упругое рассеяние наночастицами, которое описывается посредством введения для вещества эффективного (оптического) потенциала. Для материала прием простую модель: насыпной монодисперсный алмазный нанопорошок крупных частиц радиусом a, не содержащий примесей других химических элементов, коэффициент упаковки порошка γ (доля общего объема материала, занятого веществом). Эффективный потенциал взаимодействия нейтронов с веществом наночастиц $V(r) = \{U_0, \text{при } r \leq a \mid 0, \text{при } r > a\}$, где частиц a=2,5 нм. Алмазный нанопорошок имел насыпную плотность 0,35 г/см³. Состав вещества – атомы углерода ¹²C без нейтрона на связанном атомном ядре [5], для алмаза $U_0 = 305$ нэВ.

При расчетах многократного рассеяния нейтронов в дисперсных средах широко используется теория возмущений в форме первого борновского приближения однократного рассеяния [6]. Такой подход налагает ограничение на размеры дисперсных частиц $a^2 \ll \hbar^2/mU_0$ [7], или для алмаза $a < 11,8$ нм. Методика расчетов в борновском приближении не содержит в себе способов корректной оценки величины отклонения приближенного решения от точного результата. Поэтому без точного решения задачи не удастся заранее оценить погрешность результатов, получаемых в борновском приближении. Для достижения цели повышения точности модельного описания взаимодействия нейтронов низких энергий с нанодисперсными материалами в качестве первого важного этапа необходимо точно решить задачу рассеяния без использования борновского приближения.

Решение задачи основывается на точном вычислении дифференциального сечения когерентного упругого рассеяния нейтронов в заданном направлении элемента телесного угла $d\Omega$ на одной наночастице $d\sigma_1(\theta, \varepsilon)/d\Omega$, где θ, ε – угол рассеяния и энергия нейтрона соответственно. Выражение для дифференциального сечения имеет вид [7]:

$$d\sigma_1(\theta, \varepsilon)/d\Omega = |f(\theta, \varepsilon)|^2, \quad (1)$$

где амплитуда когерентного упругого рассеяния $f(\theta, \varepsilon)$ нейтрона на одной наночастице определяется следующим образом:

$$f(\theta, \varepsilon) = [2ik(\varepsilon)]^{-1} \times \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \{ \exp[2i\delta_l(\varepsilon)] - 1 \} P_l(\cos\theta). \quad (2)$$

Здесь $k(\varepsilon)$ – значение волнового вектора нейтрона, $\delta_l(\varepsilon)$ – фазы рассеяния, $P_l(\cos\theta)$ – полиномы Лежандра. Существует ряд эквивалентных методов определения $\delta_l(\varepsilon)$. Воспользуемся для точного определения $\delta_l(\varepsilon)$ методом фазовых функций [8], решив фазовое уравнение:

$$\frac{d}{dr} \delta'_l(r, \varepsilon) = - \left[2mV(r) / \hbar k(\varepsilon) \right] \left\{ \cos \left[\delta'_l(r, \varepsilon) \right] j_l(kr) - \sin \left[\delta'_l(r, \varepsilon) \right] n_l(kr) \right\}^2, \quad (3)$$

с начальным условием $\delta'_l(r=0, \varepsilon) = 0$. Здесь $\delta'_l(r, \varepsilon)$, $j_l(kr)$ и $n_l(kr)$ – фазовая функция и функции Риккати-Бесселя соответственно. Фаза рассеяния находится по формуле $\delta_l(\varepsilon) = \delta'_l(r=\infty, \varepsilon)$, и тем самым точно определяется дифференциальное сечение $d\sigma_1(\theta, \varepsilon)/d\Omega$. Применение метода фазовых функций имеет преимущества для описания рассеяния в плотных средах, поскольку позволяет непосредственным образом проводить количественные оценки критериев, определяющих корректность использования различных приближений [9].

Для амплитуды когерентного упругого рассеяния на одной наночастице в борновском приближении имеем $f^B(\theta, \varepsilon) = - [m/2\pi\hbar^2] V(r) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) dr$, где $q=2k(\varepsilon) \sin(\theta/2)$; θ – угол рассеяния нейтрона [7].

Нанодисперсный алмаз, получаемый методом детонационного синтеза, представляет собой кластерный материал, обладающий кристаллической структурой алмаза с характерным размером нанокристаллов около 4,3 нм [10]. Вычислим величины, характеризующие перенос нейтронов в нанодисперсных средах, и сравним результаты точных квантовомеханических расчетов с результатами борновского приближения для различных энергий нейтронов ε в диапазоне от 3·10⁻⁷ до 10⁻³ эВ, и значений радиусов a наночастиц алмаза в интервале от 2 до 5 нм.

Для сравнения выполним расчеты четырех величин.

Первая величина – дифференциальное сечение когерентного упругого рассеяния нейтронов на отдельной алмазной наночастице $d\sigma_1(\theta, \varepsilon)/d\Omega$ (1). Волновой вектор нейтрона $k(\varepsilon)=\hbar^{-1}(2m\varepsilon)^{1/2}$. Погрешность расчета величины $d\sigma_1^B/d\Omega$ в борновском приближении в сравнении с точным квантовомеханическим значением $d\sigma_1/d\Omega$ будем характеризовать величиной относительного отклонения $\omega=(d\sigma_1/d\Omega)^{-1} \cdot [(d\sigma_1/d\Omega) - (d\sigma_1^B/d\Omega)] \cdot 100\%$. Рисунки 1 и 2 выборочно иллюстрируют результаты расчетов.

Вторая расчетная величина – полное сечение когерентного упругого рассеяния нейтронов σ₁ на отдельной алмазной наночастице. Имеем выражение:

$$\sigma_1 = \int |f(\theta)|^2 d\Omega = 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin\theta d\theta$$

Результаты точных расчетов величины σ₁ в сравнении с борновским приближением представлены в табл. 1.

Третья расчетная величина – транспортное сечение σ_{tr} при когерентном упругом рассеянии нейтронов на отдельной алмазной наночастице. Имеем соотношения:

$$\sigma_{tr} = \int (1 - \cos\theta) |f(\theta)|^2 d\Omega = 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 (1 - \cos\theta) \sin\theta d\theta$$

Пусть $\bar{\mu}_1 = (2\pi / \sigma_1) \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \cos\theta \sin\theta d\theta$ – средний косинус угла когерентного упругого рассеяния нейтрона на наночастице. Тогда $\sigma_{tr} = \sigma_1 (1 - \bar{\mu}_1)$. Результаты точных расчетов величины σ_{tr} в сравнении с борновским приближением представлены в табл. 1.

Четвертая расчетная величина – коэффициент отражения (альbedo) нейтронов R от бесконечного полупространства, заполненного монодисперсным алмазным нанопорошком с коэффициентом упаковки γ. Материал полагаем макроскопически однородным со средней концентрацией частиц $N_0=3\gamma/4\pi a^3$, предполагаем структуру вещества наночастиц разупорядоченной. В полупространстве вне материала – вакуум. В вакууме нейтроны имеют одинаковую энергию ε и однородное распределение по направлениям скоростей v. В материале нейтроны движутся в однородном среднем поле $U=\gamma U_0$, многократно испытывают потенциальное (когерентное) рассеяние на частицах порошка и порах, когерентное и некогогерентное рассеяния на отдельных ядрах, поглощаются веществом, и часть нейтронов возвращается из материала обратно в вакуум (т.е. отражается) вследствие некогогерентных процессов многократного рассеяния.

Используя результаты работы [11], альbedo нейтронов представим в виде суммы $R=R_{coh}+R_{inc}$, где R_{coh} – когерентный альbedo надбарьерного отражения нейтронов от однородного потенциала U; R_{inc} – некогогерентный альbedo, обусловленный многократным рассеянием нейтронов на неоднородностях внутри материала. Обозначив $D(\varepsilon)=(4/3) \{ [2(1-U/\varepsilon)^{3/2} - 2+3U/\varepsilon](\varepsilon/U)^2 - U/\varepsilon \}$, – полный коэффициент прохождения диффузного потока моноэнергетических нейтронов с энергией ε > U из вакуума в материал, – получим $R_{coh}(\varepsilon)=1-D(\varepsilon)$. Полный альbedo некогогерентно отраженных от материала нейтронов будет $R_{inc}(\varepsilon)=D(\varepsilon)\beta(\varepsilon)$, где β(ε) – альbedo некогогерентного отражения нейтронов от материала, вычисленный только для доли нейтронов, прошедших из вакуума внутрь материала. В диффузионном приближении имеем $\beta(\varepsilon)=(1-\xi)/(1+\xi)$, где $\xi(\varepsilon)=(4\Sigma_c/3\Sigma_{tr})^{1/2}$; Σ_c и Σ_{tr} – макроскопические сечение поглощения и транспортное сечение нейтронов в нанодисперсном материале соответственно; Σ_c(ε)=γμσ_c(ε), σ_c(ε) - сечение поглощения нейтрона ядром. Макроскопическое транспортное сечение с учетом плотности среды Σ_{tr}(ε)=Σ_c(ε)+Σ_a+(1-γ)N₀σ_{tr}(ε), где Σ_a=γμσ_s, σ_s - сечение упругого рассеяния нейтрона связанным ядром, σ_{tr}(ε) - транспортное сечение когерентного упругого рассеяния нейтрона на потенциале U₀ наночастицы.

Окончательное выражение для альbedo нейтронов с энергией ε: при ε>U альbedo нейтронов от полубесконечного нанодисперсного материала $R(\varepsilon)=1-D(\varepsilon)[1-\beta(\varepsilon)]$, при ε≤U имеем $R(\varepsilon)=1$. Результаты точных расчетов величины альbedo R в сравнении с борновским приближением представлены в табл. 1 для алмазного нанопорошка (без химических примесей) с γ=0,6.

Сравнительный анализ представленных результатов точных квантовомеханических расчетов и борновского приближения позволяет сделать следующие выводы. Дифференциальные характеристики рассеяния нейтронов наночастицами (дифференциальное сечение когерентного упругого рассеяния), вычисленные в борновском приближении, содержат значительные отклонения от вычисленных точных величин в исследуемом диапазоне энергий нейтронов и размеров алмазных наночастиц.

Дальнейшее развитие работ планируется в направлениях учета реального распределения частиц нанопорошка по размеру и форме, учета химического состава примесей в веществе наночастиц, уточнения оптических потенциалов наночастиц, исследованию и описанию неупругих и некогогерентных процессов взаимодействий нейтронов веществом наночастиц.

Разработка адекватных расчётных моделей, с приемлемой точностью описывающих взаимодействие нейтронов с наноструктурированными материалами, необходима для достоверной интерпретации экспериментальных результатов и планирования практических применений отражателей нейтронов.

Доклад подготовлен в рамках выполнения базовой части государственного задания ФГБОУ ВПО «МГИУ» (код проекта 3094).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Несвижевский В.В. Взаимодействие нейтронов с наночастицами. // Ядерная физика. 2002, Т. 65, вып. 3, сс. 426-434.
- Артемьев В.А. Оценка отражения нейтронов от нанодисперсных материалов. // Атомная энергия. 2006, т. 101, вып. 6, сс. 445-448.
- Игнатович В.К., Шабалин Е.П. Алгебраический метод расчета альbedo нейтронов. // Ядерная физика. 2007, Т. 70, вып. 2, сс. 288-296.
- Lychagin E.V., Muzychka A.Yu., Nesvizhevsky V.V., Pignol G., Protasov K.V., Strelkov A.V. Storage of very cold neutrons in a trap with nano-structured walls. // Physics Letters B. 2009, Vol. 679, pp. 186-190.
- Игнатович В.К. Физика ультрахолодных нейтронов. М.: Наука, 1986. – 272 с.
- Свергун Д.И., Фейгин Л.А. Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние. М.: Наука, 1986. – 280 с.
- Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1974. – 752 с.
- Бабиков В.В. Метод фазовых функций в квантовой механике. М.: Наука, 1976. - 288 с.
- Артемьев В.А., Витовский Н.А., Михнович В.В. Скопления точечных дефектов и их влияние на рассеяние носителей заряда в полупроводниках. // Физика и техника полупроводников. 1989, Т. 23, вып. 8, сс. 1395-1399.
- Алексенский А.Е., Байдакова М.В., Вуль А.Я., Давыдов В.Ю., Певцова Ю.А. Фазовый переход алмаз–графит в кластерах ультрадисперсного алмаза. // Физика твердого тела. 1997, т. 39, № 6, сс. 1125-1134.
- Артемьев В.А. Возможность накопления холодных нейтронов в сосудах из наноматериалов. // Труды I-й Международной конференции «Функциональные наноматериалы и высокочистые вещества», 29 сентября – 3 октября 2008 г., г. Суздаль. Под общ. ред. акад. Солнцева К.А., акад. Третьякова Ю.Д., член-корр. РАН Бурханова Г.С. – Специальный выпуск № 6, часть 1 журнала «Перспективные материалы», декабрь 2008 г., сс. 121-125.

Таблица 1. Результаты количественных расчетов величин в борновском приближении в сравнении с результатами точных квантовомеханических расчетов методом фазовых функций. - борновское приближение.

Размер частиц	Расчетные величины	Значения энергий нейтронов ε, эВ						
		3·10 ⁻⁷	10 ⁻⁶	3·10 ⁻⁶	10 ⁻⁵	3·10 ⁻⁵	10 ⁻⁴	3·10 ⁻⁴
a = 2 нм	σ ₁ , М ²	1.892 × 10 ⁻²⁰	1.793 × 10 ⁻²⁰	1.542 × 10 ⁻²⁰	9.449 × 10 ⁻²¹	3.585 × 10 ⁻²¹	1.112 × 10 ⁻²¹	3.744 × 10 ⁻²²
		1.808 × 10 ⁻²⁰	1.718 × 10 ⁻²⁰	1.487 × 10 ⁻²⁰	9.284 × 10 ⁻²¹	3.579 × 10 ⁻²¹	1.111 × 10 ⁻²¹	3.743 × 10 ⁻²²
	σ _{tr} , М ²	1.877 × 10 ⁻²⁰	1.746 × 10 ⁻²⁰	1.419 × 10 ⁻²⁰	6.849 × 10 ⁻²¹	1.148 × 10 ⁻²¹	1.394 × 10 ⁻²²	1.926 × 10 ⁻²³
		1.793 × 10 ⁻²⁰	1.672 × 10 ⁻²⁰	1.368 × 10 ⁻²⁰	6.726 × 10 ⁻²¹	1.151 × 10 ⁻²¹	1.393 × 10 ⁻²²	1.925 × 10 ⁻²⁴
	R, отн.ед.	0.992	0.987	0.988	0.986	0.974	0.947	0.909
		0.992	0.987	0.987	0.986	0.974	0.947	0.909
a = 3 нм	σ ₁ , М ²	2.094 × 10 ⁻¹⁹	1.858 × 10 ⁻¹⁹	1.340 × 10 ⁻¹⁹	5.439 × 10 ⁻²⁰	1.872 × 10 ⁻²⁰	5.681 × 10 ⁻²¹	1.901 × 10 ⁻²¹
		1.898 × 10 ⁻¹⁹	1.704 × 10 ⁻¹⁹	1.266 × 10 ⁻¹⁹	5.399 × 10 ⁻²⁰	1.869 × 10 ⁻²⁰	5.679 × 10 ⁻²¹	1.900 × 10 ⁻²¹
	σ _{tr} , М ²	2.057 × 10 ⁻¹⁹	1.748 × 10 ⁻¹⁹	1.094 × 10 ⁻¹⁹	2.313 × 10 ⁻²⁰	3.361 × 10 ⁻²¹	3.792 × 10 ⁻²²	4.996 × 10 ⁻²³
		1.864 × 10 ⁻¹⁹	1.600 × 10 ⁻¹⁹	1.030 × 10 ⁻¹⁹	2.320 × 10 ⁻²⁰	3.363 × 10 ⁻²¹	3.789 × 10 ⁻²²	4.994 × 10 ⁻²³
	R, отн.ед.	0.995	0.993	0.992	0.986	0.972	0.942	0.901
		0.995	0.992	0.992	0.986	0.972	0.942	0.901
a = 5 нм	σ ₁ , М ²	4.096 × 10 ⁻¹⁸	2.975 × 10 ⁻¹⁸	1.391 × 10 ⁻¹⁸	4.328 × 10 ⁻¹⁹	1.458 × 10 ⁻¹⁹	4.398 × 10 ⁻²⁰	1.468 × 10 ⁻²⁰
		3.222 × 10 ⁻¹⁸	2.515 × 10 ⁻¹⁸	1.336 × 10 ⁻¹⁸	4.300 × 10 ⁻¹⁹	1.456 × 10 ⁻¹⁹	4.397 × 10 ⁻²⁰	1.468 × 10 ⁻²⁰
	σ _{tr} , М ²	3.894 × 10 ⁻¹⁸	2.470 × 10 ⁻¹⁸	6.964 × 10 ⁻¹⁹	8.302 × 10 ⁻²⁰	1.104 × 10 ⁻²⁰	1.227 × 10 ⁻²¹	1.590 × 10 ⁻²²
		3.050 × 10 ⁻¹⁸	2.073 × 10 ⁻¹⁸	6.831 × 10 ⁻¹⁹	8.272 × 10 ⁻²⁰	1.101 × 10 ⁻²⁰	1.225 × 10 ⁻²¹	1.589 × 10 ⁻²²
	R, отн.ед.	0.998	0.996	0.993	0.985	0.967	0.932	0.889
		0.998	0.995	0.993	0.984	0.967	0.932	0.889

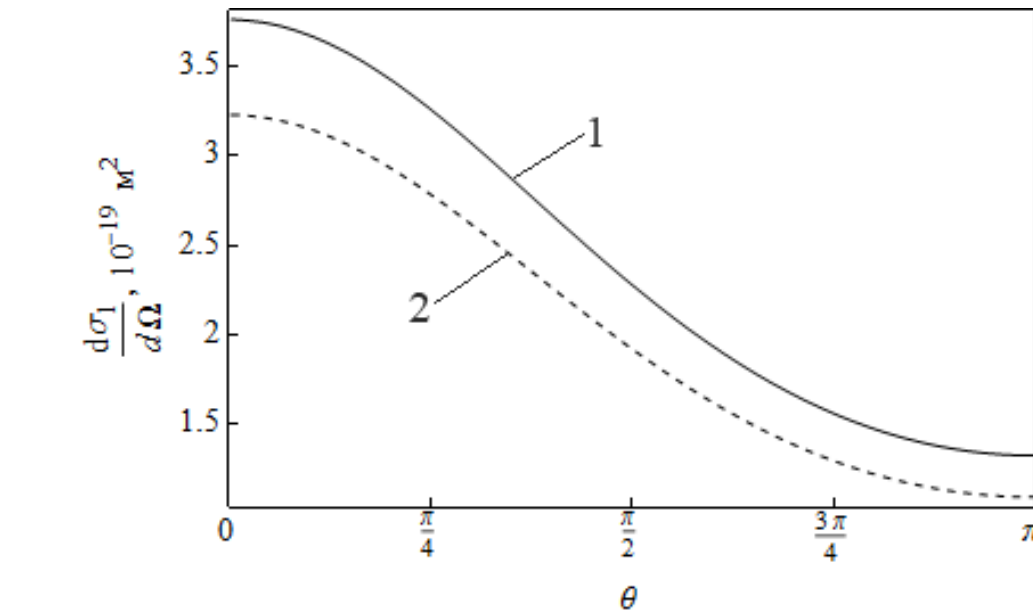


Рис. 1. Расчетные зависимости дифференциального сечения $d\sigma_1/d\Omega$ от угла рассеяния нейтронов q на отдельной алмазной наночастице; ε=10⁻⁶ эВ, a=5 нм.

1 – борновское приближение, 2 – точный квантовомеханический расчет.

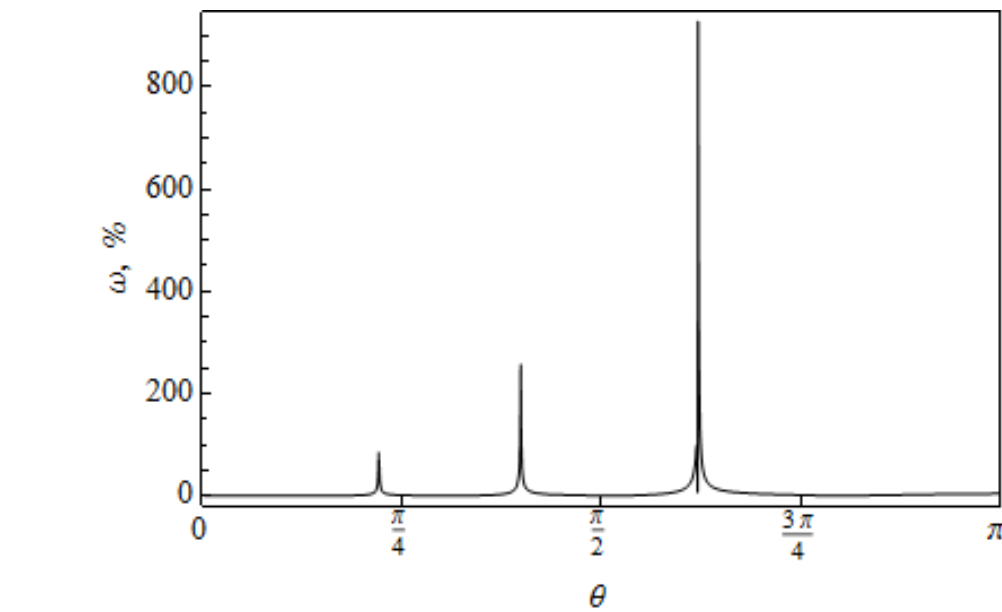
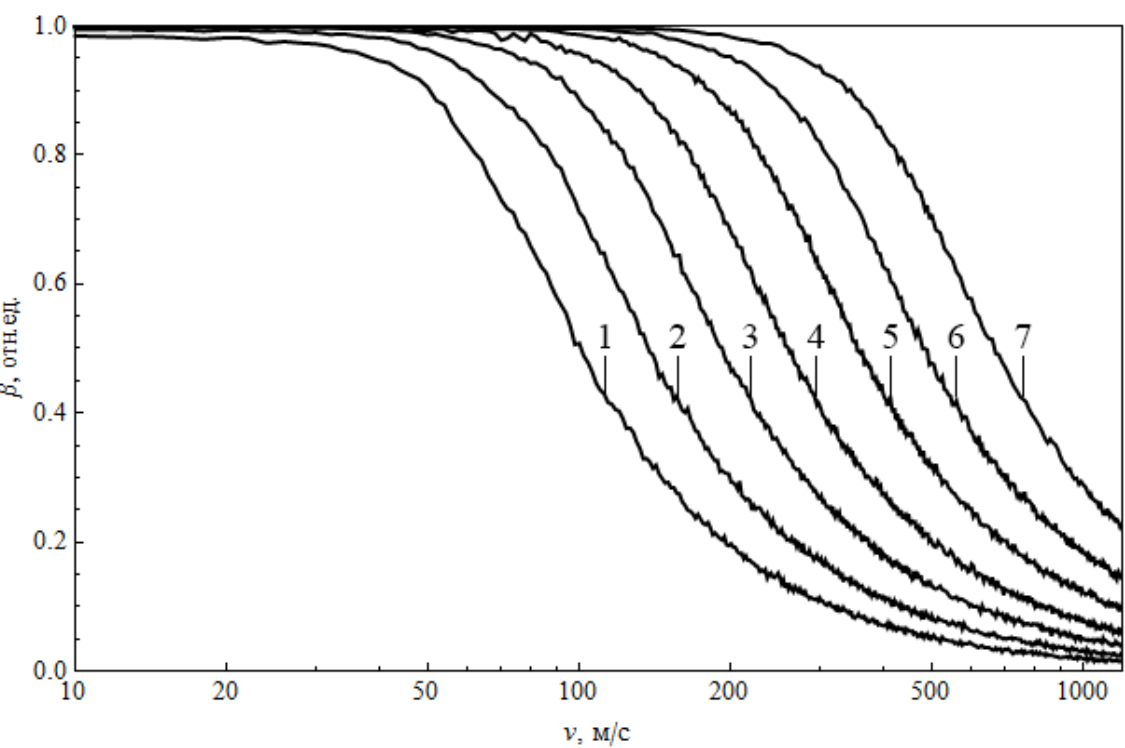


Рис. 2. Расчетная зависимость относительной погрешности ω вычисления дифференциального сечения в борновском приближении от угла θ рассеяния нейтронов на отдельной алмазной наночастице; ε=10⁻⁴ эВ, a=3 нм.

Рис. 3. Расчетные зависимости величины альbedo нейтронов β от скорости нейтронов v для слоев насыпного алмазного нанопорошка различной толщины. Насыпная плотность монодисперсного алмазного нанопорошка 0,35 г/см³, радиус алмазных наночастиц a=2,5 нм. Толщины слоев насыпного нанопорошка: 1 мм (1), 3 мм (2), 1 см (3), 3 см (4), 10 см (5), 30 см (6), 1 м (7). Состав материала – атомы ¹²C.