

РАССЕЯНИЕ НЕЙТРОНОВ В ПАРА- И ОРТОВОДОРОДЕ

С. И. Дроздов

В статье вычислены дифференциальные и полные сечения упругих и неупругих процессов рассеяния нейтронов на молекулах пара- и ортоводорода. Кроме вращательных степеней свободы молекулы, в гармоническом приближении учитываются также и колебания ядер. Определена средняя потеря энергии нейтрона на возбуждение уровней молекулы.

I

В работе [1] при рассмотрении рассеяния нейтронов в пара- и ортоводороде авторы исходили из того, что колебательные уровни молекулы не возбуждаются. Молекула водорода при этом рассматривалась как жесткий ротатор. В настоящей статье результаты работы [1] обобщаются на случай нейтронов с энергией, достаточной для возбуждения колебательных уровней. При этом предполагается, что колебания ядер в молекуле можно считать гармоническими. В этом случае волновая функция молекулы имеет вид

$$\Phi_{nlm}(\mathbf{r}) = Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \left(\frac{b}{n! 2^n \sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{H_n(bx)}{r} e^{-\frac{1}{2}(bx)^2}. \quad (1)$$

Здесь $Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \Theta_{lm}(\cos \vartheta) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$ — сферическая функция; углы ϑ, φ определяют ориентацию молекулы; l, m — вращательные квантовые числа; $r = R + x$ — расстояние между ядрами в молекуле (R — его равновесное значение); $H_n(bx)$ — полином Эрмита; n — колебательное квантовое число; $b = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}}$, M — масса протона, ω — собственная частота колебаний. Состояние молекулы определяется

четырьмя числами $nlmS$, где S — спин молекулы, равный нулю или единице. По принципу Паули при данном S возможны лишь такие l , при которых $(-)^S = (-)^l$.

II

Пусть до рассеяния молекула находилась в основном колебательном состоянии. Тогда, согласно [1], дифференциальное сечение рассеяния нейтрона на угол θ , в результате которого молекула совершает переход $(0l'S) \rightarrow (nl \frac{S}{1-S})$ с изменением или без изменения спина, в системе координат общего центра инерции (нейтрона и молекулы) имеет вид

$$\sigma_{0l'S, nl \frac{S}{1-S}}(\theta) = \frac{4}{9} \frac{k_{nl'}}{k} c_{1-S} \frac{1}{2l'+1} \times \\ \times \sum_{mm'} \left| \int d\mathbf{r} \Phi_{nlm}^*(\mathbf{r}) \Phi_{0l'm'}(\mathbf{r}) \frac{\cos \frac{\mathbf{r} \mathbf{q}_{nl'}}{2}}{\sin \frac{\mathbf{r} \mathbf{q}_{nl'}}{2}} \right|^2; \quad (2) \\ c_S = (3a_1 + a_0)^2 + S(S+1)(a_1 - a_0)^2; \\ c_{1-S} = (3 - 2S)(a_1 - a_0)^2.$$

Здесь a_1, a_0 — амплитуды рассеяния нейтрон — протон в триплетном и синглетном состояниях соответственно. В формуле (2) верхняя строка, т. е. c_S и косинус, относится к рас-

сеянию без изменения спина молекулы ($S \rightarrow S$), а нижняя, т. е. c_{1-S} и синус, — с изменением спина ($S \rightarrow 1-S$). Волновые числа падающего и рассеянного нейтрона обозначены соответственно через k и $k_{nl'}$; $q_{nl'} = |\mathbf{k} - \mathbf{k}_{nl'}|$.

Подставив (1) в (2), получаем:

$$\sigma_{0l'S, nl_1-S}^S(\theta) = \frac{4}{9} \frac{k_{nl'}}{k} c_{1-S} f_{1-S}^S(\theta); \quad (3)$$

$$f_{1-S}^S(\theta) = \frac{1}{\pi(2l'+1)} \frac{1}{n! 2^n} \sum_m \left| \int_{-1}^1 \int_{-\infty}^{\infty} dz dv e^{-v^2} \times \right. \\ \left. \times H_n(v) \Theta_{lm}(z) \Theta_{l'm}(z) \frac{\cos}{\sin} \left[\left(R + \frac{v}{b} \right) \frac{z q_{nl'}}{2} \right] \right|^2.$$

Сечение рассеяния $\sigma_{0l'S, nl_1-S}^S$ удобно представить также в ином виде. Для этого подставляем (1) в (2) и используем правило сложения моментов l, l' . Выполняя суммирование по m, m' , находим:

$$\sigma_{0l'S, nl_1-S}^S(\theta) = \frac{4}{9} \frac{k_{nl'}}{k} c_{1-S} \frac{2l+1}{n! 2^n \pi} \times \\ \times \sum_L \left| C_{l'0l0}^{L0} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^1 dv dz e^{-v^2} H_n(v) P_L(z) \times \right. \\ \left. \times \frac{\cos}{\sin} \left[\left(R + \frac{v}{b} \right) \frac{z q_{nl'}}{2} \right] \right|^2, \quad (4)$$

где $C_{l'0l0}^{L0}$ — коэффициенты Клебша — Жордана. Так как $C_{l'0l0}^{L0} \neq 0$ лишь при четной сумме $L + l' + l$, то при рассеянии без изменения спина L четно, а при рассеянии с изменением спина L нечетно. Поэтому

$$\left| \int_0^1 dz P_L(z) \frac{\cos}{\sin} xz \right| = |j_L(x)|, \quad (5)$$

причем

$$j_L(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{L+\frac{1}{2}}(x) = \\ = \frac{(-)^L}{i} (e^{ix} Q_L^+(x) - e^{-ix} Q_L^-(x)). \quad (6)$$

Введем также функцию

$$j_{-L}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{-L-\frac{1}{2}}(x) = \\ = e^{ix} Q_L^+(x) - e^{-ix} Q_L^-(x), \quad (7)$$

где $J_{\pm L \pm \frac{1}{2}}(x)$ — функция Бесселя первого рода полуцелого порядка; $Q_L^{\pm}(x)$ — полиномы от обратных степеней $x = x_0 + uv$; $x_0 = \frac{Rq_{nl'}}{2}$;

$u = \frac{q_{nl'}}{2b}$. Вследствие малости колебаний ядер в молекуле $bR \gg 1$, т. е. $x_0 \gg uv$, поэтому

$$j_L(x) \approx \frac{(-)^L}{i} (e^{ix} Q_L^+(x_0) - e^{-ix} Q_L^-(x_0)). \quad (8)$$

Подставляя (5) и (8) в (4), приходим к интегралам

$$\int_{-\infty}^{\infty} dv e^{-v^2} H_n(v) e^{\pm i v u} = (\pm)^n \sqrt{\pi} (iu)^n e^{-\left(\frac{u}{2}\right)^2}$$

и получаем:

$$\sigma_{0l'S, nl_1-S}^S(\theta) = \frac{4}{9} \frac{k_{nl'}}{k} c_{1-S} \frac{2l+1}{n!} e^{-\left(\frac{q_{nl'}}{b\sqrt{8}}\right)^2} \times \\ \times \left(\frac{q_{nl'}}{b\sqrt{8}}\right)^{2n} \sum_L \left[C_{l'0l0}^{L0} j_{(-)^n L}\left(\frac{Rq_{nl'}}{2}\right) \right]^2, \quad (9)$$

где функции $j_{(-)^n L}(x)$ определяются по формулам (6) и (7). Полученная формула, видимо, применима лишь при $n \leq 2$, поскольку при больших n колебания ядер в молекуле уже нельзя считать гармоническими.

При $E \ll \hbar\omega$ колебательные уровни не возбуждаются. В этом случае можно также пренебречь нулевыми колебаниями ядер и рассматривать молекулу как жесткий ротатор. Формула для сечений рассеяния нейтронов на жесткой молекуле получается из (9) при $b \rightarrow \infty$ [1]:

$$\sigma_{0l'S, nl_1-S}^S(\theta) = \delta_{n0} \frac{4}{9} \frac{k_{nl'}}{k} c_{1-S} (2l+1) \times \\ \times \sum_L \left[C_{l'0l0}^{L0} j_L\left(\frac{Rq_{nl'}}{2}\right) \right]^2. \quad (10)$$

При $l = l'$, $n = 0$ из (9) находим дифференциальное сечение упругого рассеяния, которое всегда происходит без изменения спина молекулы:

$$\sigma_{0l'S, 0l'S}^S(\theta) = \frac{4}{9} c_S (2l'+1) e^{-\left(\frac{q}{b\sqrt{8}}\right)^2} \times \\ \times \sum_L \left[C_{l'0l'0}^{L0} j_L\left(\frac{qR}{2}\right) \right]^2, \quad (11)$$

где $q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$. Из формулы (11) следует, что вероятность упругого рассеяния на большие углы $\frac{q}{b\sqrt{8}} > 1$ ($\theta > \sqrt{\frac{\hbar\omega}{E}}$) экспоненциально мала; при упругом рассеянии нейтроны в основном летят вперед:

$$\sigma_{0l'S, 0l'S}(\theta) \approx \frac{4}{9} c_S (2l' + 1) \times \\ \times \sum_L \left[C_{l'0l'0l}^{L0} \left(\frac{qR}{2} \right) \right]^2; \quad \theta < \sqrt{\frac{\hbar\omega}{E}}. \quad (11')$$

С другой стороны, при неупругом рассеянии весьма вероятно рассеяние на большие углы. Действительно, в (9) при $l' \neq l$ или $n \neq 0$ функция $q_{nl'l'}(\theta)$ в нуль не обращается и меняется медленнее, чем функция $q(\theta)$ в (11). Поэтому, как видно из сравнения формул (9) и (11), вероятность неупругого рассеяния на большие углы оказывается относительно большой. Это и понятно, так как в этом случае нейтрон в среднем передает молекуле больший импульс, чем при упругом рассеянии.

III

Полные сечения рассеяния с переходом молекулы из состояния $(0l'S)$ в состояние (nl_{1-S}^S) получаются интегрированием (9) по всем углам рассеяния. Производя при этом замену переменной интегрирования

$$q_{nl'l'}^2 = k^2 + k_{nl'l'}^2 - 2kk_{nl'l'} \cos \theta;$$

$$q_{nl'l'} dq_{nl'l'} = kk_{nl'l'} \sin \theta d\theta,$$

получаем:

$$\sigma_{0l'S, nl_{1-S}^S} = \frac{8\pi}{9} \frac{2l' + 1}{(kR)^2} \frac{1}{n! (bR\sqrt{8})^{2n}} c_{1-S}^S \times \\ \times \sum_L (C_{l'0l'0l}^{L0})^2 \int_{|k-k_{nl'l'}|R}^{(k+k_{nl'l'})R} x^{2n+1} j_{(-)nL}^2 \left(\frac{x}{2} \right) \times \\ \times e^{-\left(\frac{x}{bR\sqrt{8}} \right)^2} dx. \quad (12)$$

В частности, полное сечение упругого рассеяния имеет вид

$$\sigma_{0l'S, 0l'S} = \frac{8\pi}{9} \frac{2l' + 1}{(kR)^2} c_S \sum_L (C_{l'0l'0l}^{L0})^2 \times \\ \times \int_0^{2kR} x j_L^2 \left(\frac{x}{2} \right) e^{-\left(\frac{x}{bR\sqrt{8}} \right)^2} dx, \quad (13)$$

откуда нетрудно получить приближенную формулу ($E > \hbar\omega$)

$$\sigma_{0l'S, 0l'S} \approx \frac{16\pi}{9} (2l' + 1) c_S \frac{0,577 + \ln 2bR}{(kR)^2}. \quad (13')$$

Таким образом, сечение упругого рассеяния уменьшается обратно пропорционально энергии нейтрона.

При рассеянии медленных нейтронов ($E \ll \hbar\omega$) молекулу можно считать жесткой. В этом случае полные сечения рассеяния имеют вид [1]

$$\sigma_{0l'S, nl_{1-S}^S} = \delta_{n0} \frac{8\pi}{9} \frac{2l' + 1}{(kR)^2} c_{1-S}^S \sum_L (C_{l'0l'0l}^{L0})^2 \times \\ \times \int_{|k-k_{nl'l'}|R}^{(k+k_{nl'l'})R} x j_L^2 \left(\frac{x}{2} \right) dx. \quad (14)$$

Входящие в (14) интегралы берутся с помощью формулы из работы [4]

$$2 \int_0^x x j_L^2(x) dx = 0,5772 + \ln 2x - Ci 2x - \\ - x^2 \left[j_0^2(x) + \sum_{n=1}^{L-1} \frac{2n+1}{n(n+1)} j_n^2(x) + \right. \\ \left. + \frac{1}{L} j_L^2(x) \right]; \\ Cix = - \int_x^\infty \frac{\cos t}{t} dt; \quad (15)$$

IV

Расстояние между вращательными уровнями молекулы значительно меньше вибрационного кванта ($\frac{\hbar^2}{MR^2} = 0,00736$ эв, $\hbar\omega = 0,546$ эв [2]). Поэтому если энергия нейтрона E больше расстояния между колебательными уровнями $\hbar\omega$, можно пренебречь влиянием вращательных состояний на энергию рассеявшегося нейтрона: $k_{nl'l'} \approx k_n$; $q_{nl'l'} \approx q_n = |\mathbf{k} - \mathbf{k}_n|$. В этом случае интересно найти сечение возбуждения n -го колебательного уровня при произвольном состоянии

вращения после рассеяния:

$$\sigma_{0l'S, n_{1-S}}(\theta) = \sum_l \sigma_{0l'S, nl_{1-S}}(\theta).$$

В правую часть этого равенства подставляем формулы (3). При этом квадрат интеграла в (3) представляем в виде произведения двух интегралов, после чего под знаком интеграла производим суммирование по l, m , используя соотношение

$$\begin{aligned} \sum_{lm} \Theta_{lm}(z) \Theta_{lm}(y) \Theta_{l'm}(z) \Theta_{l'm}(y) = \\ = \delta(y-z) \frac{2l'+1}{2}. \end{aligned}$$

Интегралы, содержащие $\delta(y-z)$ и полиномы Эрмита, просто берутся [3]. В результате находим, что сечение возбуждения n -го колебательного уровня молекулы при произвольном конечном состоянии вращения не зависит от исходного вращательного состояния l' и имеет вид (индекс l' опускаем)

$$\begin{aligned} \sigma_{0S, n_{1-S}}(\theta) = \frac{2}{9} \frac{k_n}{k} c_{S_{1-S}} \frac{1}{n!} \int_0^1 dz \times \\ \times \left(\frac{q_n z}{b \sqrt{8}} \right)^{2n} (1 \pm (-)^n \cos q_n R z) e^{-\left(\frac{q_n z}{b \sqrt{8}} \right)^2}. \end{aligned} \quad (16)$$

В этой формуле верхний знак относится к рассеянию без изменения, а нижний — с изменением спина молекулы. Используя условие малости колебаний ядер в молекуле ($bR \gg 1$), дифференциальное сечение неупругого рассеяния (16) в области малых и больших углов рассеяния θ можно приближенно представить в виде

$$\begin{aligned} \sigma_{0S, n_{1-S}}(\theta) = \frac{2}{9} \frac{k_n}{k} c_{S_{1-S}} \frac{1}{n! (2n+1)!} \left(\frac{k\theta}{b \sqrt{8}} \right)^{2n}; \\ \theta < \frac{b \sqrt{8}}{k} \sim \sqrt{\frac{\hbar \omega}{E}}; \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{0S, n_{1-S}}(\theta) = \frac{2}{9} \frac{k_n}{k} c_{S_{1-S}} \frac{\sqrt{2\pi} (2n-1)!!}{(2n)!!} \frac{b}{2k \sin \frac{\theta}{2}}; \\ \theta > \frac{b \sqrt{8}}{k}. \end{aligned} \quad (18)$$

Из этих формул следует, что неупругое рассеяние с возбуждением колебательных

уровней связано с рассеянием на большие углы $\theta > \sqrt{\frac{\hbar \omega}{E}}$, в отличие от упругого рассеяния, которое происходит в основном на малые углы [ср. (9) и (11)]. Полное сечение неупругого рассеяния с возбуждением n -го колебательного уровня молекулы получается интегрированием (16) по всем углам рассеяния. Приближенное выражение, однако, можно получить, интегрируя по всем углам формулу (18), так как область малых углов не дает существенного вклада при $E \gg \hbar \omega$. Получаем:

$$\sigma_{0S, n_{1-S}} = \frac{8\pi}{9} \frac{k_n}{k} c_{S_{1-S}} \frac{\sqrt{2\pi} (2n-1)!!}{(2n)!!} \frac{b}{k}, \quad (19)$$

откуда следует, что вероятность возбуждения колебательного уровня уменьшается с его энергией.

V

В том случае, когда энергия нейтрона значительно больше расстояния между колебательными уровнями молекулы, можно получить довольно простое выражение для средней потери энергии нейтрона, рассеивающегося под углом θ (в системе общего центра инерции нейтрона и молекулы):

$$\Delta \bar{E}(\theta) = \frac{\sum_{nl} (E_{nl} - E_{0l'}) (\sigma_{0l'S, nlS}(\theta) + \sigma_{0l'S, nl_{1-S}}(\theta))}{\sum_{nl} (\sigma_{0l'S, nlS}(\theta) + \sigma_{0l'S, nl_{1-S}}(\theta))}, \quad (20)$$

где $E_{nl} = n\hbar\omega + \frac{\hbar^2}{MR^2} l(l+1)$ — уровни молекулы, а суммирование производится по всем уровням. Подставляя формулы (3) в выражение (20) и полагая $k_{nl'} \approx k$, $q_{nl'} \approx q$, получаем:

$$\begin{aligned} \Delta \bar{E}(\theta) = \frac{\hbar \omega (c_S \sum_{nl} n f_S(\theta) + c_{1-S} \sum_{nl} n f_{1-S}(\theta))}{c_S \sum_{nl} f_S(\theta) + c_{1-S} \sum_{nl} f_{1-S}(\theta)} + \\ + \frac{\frac{\hbar^2}{MR^2} (c_S \sum_{nl} l(l+1) f_S(\theta) + c_{1-S} \sum_{nl} l(l+1) f_{1-S}(\theta))}{c_S \sum_{nl} f_S(\theta) + c_{1-S} \sum_{nl} f_{1-S}(\theta)} - \\ - E_{0l'}. \end{aligned} \quad (20')$$

Суммы, стоящие в знаменателе этой формулы и первой скобке числителя, вычисляются

способом, указанным в [3]:

$$\sum_{nl} f_{1-S}(\theta) = \frac{1}{2} \int_0^1 dz (1 \pm e^{-\left(\frac{qz}{2b}\right)^2} \cos qRz); \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \sum_{nl} n f_{1-S}(\theta) &= \\ &= \frac{1}{4} \left(\frac{q}{2b}\right)^2 \int_0^1 dz \cdot z^2 (1 \mp e^{-\left(\frac{qz}{2b}\right)^2} \cos qRz). \quad (22) \end{aligned}$$

С помощью соотношения

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 dy \sum_{lm} l(l+1) \Theta_{lm}(z) \Theta_{lm}(y) \Theta_{l'm}(z) \Theta_{l'm}(y) F(y) = \\ = \frac{2l'+1}{2} \left[l'(l'+1) - \frac{d}{dz} (1-z^2) \frac{d}{dz} \right] F(z) \end{aligned}$$

вычисляется сумма

$$\begin{aligned} \sum_{nl} l(l+1) f_{1-S}(\theta) &= \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{qR}{2}\right)^2 \int_0^1 dz (1-z^2) \times \\ &\times (1 \mp \cos qRz \cdot e^{-\left(\frac{qz}{2b}\right)^2}) + \frac{1}{2} l'(l'+1) \times \\ &\times \int_0^1 dz (1 \pm e^{-\left(\frac{qz}{2b}\right)^2} \cos qRz). \quad (23) \end{aligned}$$

Подставив соотношения (21) – (23) в (20'), находим, что средняя потеря энергии зависит от исходного вращательного состояния молекулы и имеет вид (в системе общего центра инерции):

$$\begin{aligned} \Delta \bar{E}(\theta) &= \frac{(\hbar k)^2}{2M} \times \\ &\times \frac{(1 - \cos \theta) [c_S(1 - I(\theta)) + c_{1-S}(1 + I(\theta))]}{c_S(1 + I(\theta)) + c_{1-S}(1 - I(\theta))}; \quad (24) \\ I(\theta) &= \int_0^1 dz e^{-\left(\frac{qz}{2b}\right)^2} \cos qRz \approx e^{-\left(\frac{q}{2b}\right)^2} j_0(qR). \end{aligned}$$

Как и следовало ожидать, средняя потеря обращается в нуль при $\theta \rightarrow 0$, так как в области малых углов происходит в основном лишь упругое рассеяние. Средняя потеря энергии максимальна при рассеянии на большие углы, что соответствует угловым распределениям (17), (18) неупруго рассеянных нейтронов.

Средняя потеря энергии нейтрона (в системе общего центра инерции) при рассеянии в произвольном направлении получается интегрированием числителя и знаменателя формулы (24) по всем углам рассеяния. При этом область малых углов $\theta < \sqrt{\frac{\hbar \omega}{E}}$ не дает существенного вклада, так что

$$\Delta \bar{E} = \frac{(\hbar k)^2}{2M}. \quad (25)$$

Таким образом, в пределе высоких энергий средняя потеря энергии на возбуждение уровней молекулы пропорциональна энергии падающего нейтрона. Это означает, что при столь высокой энергии ядра в молекуле можно считать свободными. В этом случае средняя потеря $\Delta \bar{E}$ представляет собой кинетическую энергию ядер молекулы, которую они приобрели после рассеяния нейтрона (в системе центра инерции нейтрона и молекулы).

Если энергия нейтрона невелика, так что при рассеянии происходит возбуждение лишь небольшого числа n_0 колебательных уровней, то в формуле (20) для средней потери энергии суммирование по n следует производить численно. Суммируя в этой формуле по всем l , получаем:

$$\begin{aligned} \Delta \bar{E}(\theta) &= \frac{\hbar \omega \sum_{n=0}^{n_0} n (\sigma_{0S, nS}(\theta) + \sigma_{0S, n1-S}(\theta))}{\sum_{n=0}^{n_0} (\sigma_{0S, nS}(\theta) + \sigma_{0S, n1-S}(\theta))} + \\ &+ \frac{\frac{\hbar^2}{MR^2} \sum_{n=0}^{n_0} (\bar{\sigma}_{0S, nS}(\theta) + \bar{\sigma}_{0S, n1-S}(\theta))}{\sum_{n=0}^{n_0} (\sigma_{0S, nS}(\theta) + \sigma_{0S, n1-S}(\theta))}, \end{aligned}$$

где $\bar{\sigma}_{0S, n1-S}(\theta)$ имеет вид (при $l' = 0$):

$$\begin{aligned} \sigma_{0S, n1-S}(\theta) &= \\ &= \sum_l l(l+1) \sigma_{0l'S, n1l'S}(\theta) = \\ &= \frac{1}{18} \frac{k_n}{k} \frac{1}{nl} c_{1-S} (q_n R)^2 \int_0^1 dz (1-z^2) \times \\ &\times (1 \mp (-)^n \cos qRz) \left(\frac{qz}{b\sqrt{8}}\right)^{2n} e^{-\left(\frac{qz}{b\sqrt{8}}\right)^2}. \quad (26) \end{aligned}$$

Простое выражение для этой величины в области малых и больших углов θ , а также для ее интеграла по углам нетрудно получить из сравнения формул (26) и (16) — (19).

Автор выражает благодарность Б. Т. Гейлиману, Н. М. Полиевктову-Николадзе и А. И. Ахиезеру за обсуждение результатов работы.

ЛИТЕРАТУРА

- | | |
|---|--|
| 1. J. Schwinger, E. Teller, Phys. Rev. 52, № 4, 286 (1937). | 3. P. Morse, Phys. Rev. 90, № 1, 51 (1953). |
| 2. A.M.L. Messiah, Phys. Rev. 84, № 2, 204 (1951). | 4. M. Hamermesh, J. Schwinger, Phys. Rev. 69, № 5, 145 (1946). |

