

NAGYENERGIÁJU RÉSZECSKÉKKEL BESUGÁRZOTT SZILÁRD TESTEK RÁCSSÉRÜLÉSEINEK STATISZTIKUS ELMÉLETE

Irta: Pál Lénárd és Németh Géza*

Neutronfizikai Osztály

Összefoglalás

Exakt valószínűségszámítási módszerekkel meghatároztuk nagyenergiájú részecskékkel besugárzott szilárd testben keletkező rácssérülések számának eloszlásfüggvényét. Az eloszlásfüggvény generátorfüggvényéből leszámaztattuk a rácssérülések számának átlagát és szórását meghatározó egyenleteket. Ezeket az egyenleteket megoldottuk azon feltevés mellett, hogy a primer bombázó részecskék neutronok és hogy a kiszakított atomok, valamint a rácspontokban rezgő atomok közötti ütközéseket ideális szilárdságu golyók között lejátszódó ütközéseknek tekinthetjük. Azt találtuk, hogy a rácshibák számának szórása hasadási neutronokkal történő besugárzás esetén nagyobb, mint a Poisson-eloszlás szórása. Ha a besugárzásnak alávetett minta vastagsága a neutronok átlagos szabad úthosszához képest kicsiny, akkor a relatív szórásra a

$$\frac{D(t)}{N_1(t)} \sim \sqrt{\left(\frac{2,1667}{Q_s b} + \frac{D_r^2(t)}{S_1(t)}\right) \frac{1}{S_1(t)}} + O\left(\frac{E_d}{E_f}\right)$$

összefüggés adódik, ahol Q_s a besugárzás hatásának alávetett anyag makroszkópikus szórási hatáskeresztmetszete, b az anyagminta vastagsága, $S_1(t)$ a t ideig tartó besugárzás alatt a minta egységnyi felületén áthaladt neutronok átlagos száma, míg D_r^2 a szórási négyzete, E_d a kiszakítási energia eV-okban és $E_f = 0,5 \cdot 10^6$ eV. $N_1(t)$ pedig a minta egységnyi felületén át, t ideig tartó besugárzás hatására kiszakított atomok átlagos számát jelenti.

1. Bevezetés

Nagyenergiájú részecskékkel /pl. gyors neutronokkal/ besugárzott szilárd testben a kristályrács egyes atomjai kiszakadnak egyensúlyi helyzetükből és hosszabb vagy rövidebb ut megtétele

* Az 1958. évi genfi II. Nemzetközi Atomenergia Konferencián előadott előadás.

után - amelynek során esetleg újabb atomokat szakítanak ki - a kristályrács valamelyik "nem törvényes" helyén mint beékelt atomok helyezkednek el. A kristályrácsban ilyen módon lyukak és beékelt atomok keletkeznek. A kiszakított atomok mozgásuk során részben ionizáció, részben rugalmatlan (rácsrezgések gerjesztése), részben pedig rugalmas ütközések révén veszítik el energiájukat. A kristályrácsnak ilyen módon átadott energia nagyobbik része fordítódik rácsrezgések gerjesztésére és csak kisebbik része atomok kiszakítására.

A besugárzás hatására előálló rácssérülés kvantitatív jellemzésére kívánatos volna kellő gondossággal kiszámítani a kiszakított atomok számának átlagát és lehetőség szerint a szórását is. Bár a sérült rácshelyek átlagos számának kísérleti meghatározására megbízható módszerek nem állnak rendelkezésre, mégis biztonnával állithatjuk, hogy az eddigi elméleti becslések és kísérleti eredmények között jelentős eltérés van. Az elméleti megfontolásokból a kiszakított atomok számának átlagára öt-hatszorosa adódik annak az értéknek, ami a kísérleti adatok alapján valószínűnek látszik. Feltehető, hogy ennek az eltérésnek valódi okát a kiszakítás elemi folyamatai között kell keresnünk, mégis szükségesnek látszik általános elméleti módszer kidolgozása az összetett folyamat valószínűségszámítási tárgyalására.

Az eddig ismeretes számítási módszerek [1], [2], [3] nem adnak lehetőséget a besugárzás hatására előálló rácssérülések valószínűségszámítási tárgyalására. A következőket (legalábbis egy adott modellre vonatkozóan) számítási módszerre márcsak azért is szükség van, hogy megbecsülhessük az azonos körülmények között besugárzott vizsgálati mintákban a kiszakított atomok számának szórását és így elválaszthassuk a folyamat valószínűségi jellegéből adódó ingadozásokat a tényleges fizikai változásoktól.

Az általunk kidolgozott módszer [4] segítségével a kiszakított atomok számának eloszlásfüggvényét határozhatjuk meg, illetve az eloszlásfüggvény generátorfüggvényéből az eloszlást jellemző félinvariánsokat (átlagérték, szórás stb.) számíthatjuk ki. Módszerünk figyelembeveszi a kiszakítás elemi aktusának valószínűségi jellegét is és így az a törekvés, ami A.E.Fein [5] számításában e jelleg figyelembevételére irányul, az általunk kö-

vetett megfontolásokban következetesen érvényesül.

A továbbiakban felépítjük a rácssérülések következetes valószínűségszámítási elméletét és rámutatunk a korábbi módszerekhez való kapcsolatára.

2. Az alapegyenletek levezetése

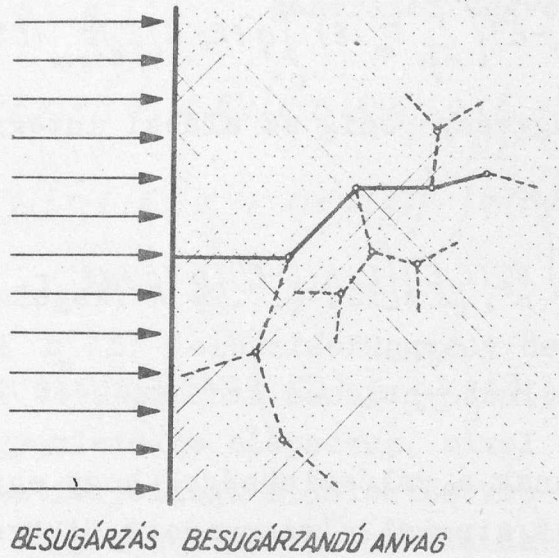
Jelöljük V_{E_0} -al egy E_0 energiájú bombázó részecske által közvetve, vagy közvetlenül kiszakított atomok tényleges számát. Határozzuk meg annak a valószínűségét, hogy $V_{E_0} = n$, azaz határozzuk meg a

$$\mathcal{P}(V_{E_0} = n) = P_n(E_0) \quad (2.1)$$

eloszlásfüggvényt. A $P_n(E_0)$ eloszlásfüggvény meghatározásához induljunk ki a következő feltevésekből. Tekintsük a besugárzás hatásának alávetett anyagot a tér egyik felében végtelen kiterjedésűnek. A tér üres felét és a besugárzandó anyagot határolja az (x, y) végtelen sík (lásd az 1. ábrán). A tárgyalás egyszerűsítése érdekében tegyük fel, hogy a bombázó részecskék által kiszakított atomok közül egyesek, vagy maguk a bombázó részecskék, nem juthatnak ki a besugárzandó anyagból az üres térbe. Természetesen véges méretű testekre is érvényesek megfontolásaink, mivel a kiszakított atomok kicsiny közepes szabad uthossza miatt meglehetősen kis térfogatra koncentrálódik az általuk kiváltott hatás. A rácshiábák térbeli eloszlására természetesen nem vonhatunk le következtetéseket. A $P_n(E_0)$ eloszlásfüggvény csupán arra ad felvilágosítást, mekkora valószínűséggel hoz létre egy E_0 energiájú bombázó részecske n kiszakított atomot a besugárzás hatásának alávetett minta egész térfogatában.

Számításaink során nem vesszük figyelembe a kiszakított atomok diffúzió útján történő beépülését szabad rácshelyekre (rekombináció), csupán a kiszakító atomnak az általa kiszakított atom helyére történő esetleges befogását vesszük számításba. Így várható, hogy a kiszakított atomok átlagos számának általunk meghatározott értéke nagyobb lesz a valódinál. Egyszerűség kedvéért tételezzük fel azt is, hogy a besugárzandó anyag csupán egyfajta atomot tartalmaz.

Jelöljük $\omega_p(E_0, E) dE$ -vel annak a valószínűségét, hogy a bombázó részecske E_0 energiája egyetlen ütközés révén az $(E, E+dE)$ intervallumba eső értékre csökken. Egyelőre semmiféle kikötést nem



1. ábra

teszünk arra vonatkozóan, hogy ez az energiacsökkenés milyen módon következik be. A bombázó részecske által eltalált atom $E_0 - E$ energiát nyer az ütközés során. Ez az energia fordítható pl. ionizációra, rácsrezgések gerjesztésére, de kedvező esetben előidézheti a kérdéses atomnak a kristályrácsból való kiszakadását is.

Jelöljük $K(E_0 - E)$ -vel annak a valószínűségét, hogy a kiszakadás tényleg bekövetkezik, ha egy atom a bombázó részecskétől $E_0 - E$ energiát nyer. Legyen továbbá $q(E_0 - E, E') dE'$ annak a valószínűsége, hogy a kiszakított atom kinetikus energiája az $(E', E' + dE')$ intervallumba esik, azon feltevés mellett, hogy a kiszakítás előtt $E_0 - E$ energiát nyert ütköző partnerétől. Az E' energiájú kiszakított atom természetesen további atomokat szakíthat ki. Legyen $\rho_{E'}$ azon kiszakított atomok száma, amelyeket a bombázó részecske által közvetlenül kiszakított atom mozgása során utódaival együtt létrehoz. Jelöljük $p_m(E')$ -vel annak a valószínűségét, hogy $\rho_{E'} = m$, azaz legyen

$$\mathcal{P}(\rho_{E'} = m) = p_m(E') \quad (2,2)$$

Könnyen belátható, hogy a $P_n(E_0)$ eloszlásfüggvény az elő-

zókben bevezetett valószínűségek segítségével a következőképpen építhető fel:

$$P_n(E_0) = \int_0^{E_0} \omega_p(E_0, E) [1 - K(E_0 - E)] P_n(E) dE + \\ + \int_0^E \omega_p(E_0, E) K(E_0 - E) \left\{ \sum_{m=0}^n P_m(E) \int_0^{E_0 - E} q(E_0 - E, E') p_{n-m}(E'') dE'' \right\} dE \quad (2.3)$$

A $P_m(E)$ eloszlásfüggvény pedig az alábbi integrálegyenlet megoldásaként adódik:[‡]

$$P_m(E) = \int_0^E \omega_s(E, E') [1 - K(E - E')] P_m(E') dE' + \\ + \int_0^E \omega_s(E - E') K(E - E') \left\{ \sum_{m'=0}^m P_{m'}(E') \int_0^{E - E'} q(E - E', E'') P_m(E'') dE'' \right\} dE', \quad (2.4)$$

ahol $\omega_s(E, E') dE'$ annak a valószínűsége, hogy egy kiszakított atom energiája egy másik atommal elszenvedett ütközés során az $(E', E' + dE')$ intervallumba eső értékre csökken, azon feltevés mellett, hogy az ütközés előtt energiája E volt. Mivel nem kívánunk foglalkozni a kiszakított atomok térbeli eloszlásával, nem vesszük figyelembe a kiszakítás anizotrópiáját.

A (2.3) és a (2.4) alatti egyenleteket a

$$G(E_0, x) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{nx} P_n(E_0), \quad g(E, x) = \sum_{m=0}^{\infty} e^{mx} P_m(E) \quad (2.5)$$

generátorfüggvények bevezetésével a következőképpen írhatjuk fel:

$$G(E_0, x) = \int_0^{E_0} \omega_p(E_0, E) G(E, x) \left\{ 1 - K(E_0 - E) + K(E_0 - E) \int_0^{E_0 - E} q(E_0 - E, E') g(E', x) dE' \right\} dE \quad (2.6)$$

és

$$g(E, x) = \int_0^E \omega_s(E, E') g(E', x) \left\{ 1 - K(E - E') + K(E - E') \int_0^{E - E'} q(E - E', E'') g(E'', x) dE'' \right\} dE'. \quad (2.7)$$

A kiszakított atomok számát csökkenti az a lehetőség, hogy a kiszakítást végző atomok bizonyos valószínűséggel befogódhatnak az általuk kiszakított atomok helyére. Ezért a (2.4) illetve (2.7) alatti egyenletek nem tekinthetők egészen pontos egyenleteknek.

[‡] $P_m(E) = \delta_{im}$, ha E kisebb annál a legkisebb határenergianál, amelynél csak nagyobb energiamennyiség átadásakor következhet be kiszakadás.

Jelöljük $l(E')$ -vel annak a valószínűségét, hogy a kiszakítást végző atom, amelynek energiája a kiszakítás után E' , a szabaddá vált rácshelyen befogódik. Legyen $p_m^o(E)$ annak a valószínűsége, hogy egy E energiájú atom mozgása során a befogás lehetőségének figyelembevételével m kiszakítást hoz létre. Egyszerűen belátható, hogy a $g_o(E, x) = \sum_{m=0}^{\infty} e^{mx} p_m^o(E)$ generátorfüggvény a

$$g_o(E, x) = \int_0^E \omega_s(E, E') [1 - K(E - E')] g_o(E', x) dE' + \int_0^E \omega_s(E, E') K(E - E') \left\{ [1 - l(E')] g_o(E', x) + l(E') \right\} \int_0^{E-E'} q(E - E', E'') g_o(E'', x) dE'' dE' \quad (2.7')$$

egyenletnek tesz eleget. A (2.7')-ből a ω_s , K , q és l függvények ismeretében a $p_m^o(E)$ eloszlásfüggvény összes fontos jellemzője kiszámítható. Továbbiakban azonban számításainkat a (2.6) és (2.7) alatti egyenletekre alapozzuk, mivel az $l(E')$ függvényre csak erősen kvalitatív jellegű kijelentéseket tehetünk.

Tegyük fel, hogy a besugárzás hatásának alávétett minta minden felület-darabját azonos intenzitású és energia-spektrumu sugárzás éri. Jelöljük $R(t, E_1, \dots, E_k) dE_1 \dots dE_k$ -vel annak a valószínűségét, hogy t ideig tartó besugárzás alatt a szilárd anyag egységnyi felületén k az $(E_1, E_1 + dE_1), \dots, (E_k, E_k + dE_k)$ intervallumokba eső bombázó részecske hatol át. Ha most $L_n(t)$ -vel jelöljük annak a valószínűségét, hogy egységnyi felületen át t ideig tartó besugárzás hatására n kiszakított atom keletkezzék, akkor felírhatjuk, hogy

$$L_n(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \dots \int_0^{\infty} R(t, E_1, \dots, E_k) \sum_{n_1 + \dots + n_k = n} P_{n_1}(E_1) \dots P_{n_k}(E_k) dE_1 \dots dE_k. \quad (2.8)$$

Az általánosság különösebb megsértése nélkül feltehetjük, hogy

$$R(t, E_1, \dots, E_k) = R_k(t) \prod_{i=1}^k h(E_i). \quad (2.8')$$

Vezessük be a $H(t, x) = \sum_{k=0}^{\infty} e^{kx} R_k(t)$ és az $F(t, x) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{nx} L_n(t)$ generátorfüggvényeket. Segítségükkel az

$$F(t, x) = H \left\{ t, \ln \int_0^{\infty} h(E_o) G(E_o, x) dE_o \right\} \quad (2.9)$$

összefüggéshez jutunk, amiből könnyen származtathatjuk a minket érdeklő összes mennyiséget.

3. A kiszakított atomok átlagos számának és szórásának meghatározása

a/ A (2.9)-ből a kiszakított atomok átlagos számát a

$$\left[\frac{\partial F(t, x)}{\partial x} \right]_{x=0} = N_1(t) \quad (3.1)$$

Vezessük be a következő jelöléseket

$$\left[\frac{\partial H(t, x)}{\partial x} \right]_{x=0} = S_1(t), \quad \left[\frac{\partial G(E_0, x)}{\partial x} \right]_{x=0} = M_1(E_0) \quad (3.1')$$

Az $S_1(t)$ mennyiség megadja a t ideig tartó besugárzás alatt a szilárd test egységnyi felületén áthaladt bombázó részecskék átlagos számát, míg $M_1(E_0)$ egy E_0 energiájú bombázó részecske által létrehozott rácshibák számának átlagát jelöli. Végül is az egységnyi felületen át történő, t ideig tartó besugárzás alatt kiszakított atomok számát az

$$N_1(t) = S_1(t) \int_0^{\infty} h(E_0) M_1(E_0) dE_0 \quad (3.2)$$

kifejezés segítségével határozhatjuk meg, ahol $M_1(E_0)$ az

$$M_1(E_0) = \int_0^{E_0} w_p(E_0, E) \left\{ M_1(E) + K(E_0 - E) \int_0^{E_0 - E} q(E_0 - E, E') m_1(E') dE' \right\} dE \quad (3.3)$$

egyenletből számítható. A (3.3) alatti egyenletben szereplő $m_1(E)$ függvényt a (2.7) generátorfüggvényből az $m_1(E) = \left[\frac{\partial g(E, x)}{\partial x} \right]_{x=0}$ szabály szerint származtathatjuk. Meghatározására az alábbi egyenlet szolgál:

$$m_1(E) = \int_0^E w_s(E, E') \left\{ m_1(E') + K(E - E') \int_0^{E - E'} q(E - E', E'') m_1(E'') dE'' \right\} dE'. \quad (3.4)$$

b/ A (2.9) egyenletből minden nehézség nélkül meghatározhatjuk a kiszakított atomok számának szórását, amit az eloszlásfüggvény ismerete nélkül közvetlenül körülményes volna kiszámítani. Jelöljük $D^2(t)$ -vel az egységnyi felületen át történő, t ideig tartó besugárzás alatt kiszakított atomok számának szórásnégyzetét.

$D^2(t)$ nyilván a következő összefüggés alapján adható meg:

$$D^2(t) = \left[\frac{\partial^2 \ln F(t, x)}{\partial x^2} \right]_{x=0} \quad (3.5)$$

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$M_2(E_0) = \left[\frac{\partial^2 G(E_0, x)}{\partial x^2} \right]_{x=0}, \quad S_2(t) = \left[\frac{\partial^2 H(t, x)}{\partial x^2} \right]_{x=0}, \quad (3.6)$$

továbbá

$$D_d^2 = \int_0^\infty h(E_0) M_2(E_0) dE_0 - \left\{ \int_0^\infty h(E_0) M_1(E_0) dE_0 \right\}^2 \quad (3.7)$$

és

$$D_r^2 = S_2(t) - S_1^2(t). \quad (3.7')$$

A (3.5)-ből azt kapjuk, hogy

$$D^2(t) = S_1(t) D_d^2 + D_r^2 \left\{ \int_0^\infty h(E_0) M_1(E_0) dE_0 \right\}^2. \quad (3.8)$$

A (3.8) meghatározásához ki kell számítani az $M_1(E_0)$, $M_2(E_0)$ momentumokat és ismerni kell a $h(E_0)$, $S_1(t)$, $S_2(t)$ függvényeket. Könnyen belátható, hogy $M_2(E_0)$ az

$$M_2(E_0) = \int_0^{E_0} w_p(E_0, E) \left\{ M_2(E) + K(E_0 - E) \int_0^{E_0 - E} q(E_0 - E, E') m_2(E') dE' \right\} dE + \\ + 2 \int_0^{E_0} w_p(E_0, E) K(E_0 - E) M_1(E) \int_0^{E_0 - E} q(E_0 - E, E') m_1(E') dE' dE \quad (3.9)$$

egyenletnek tesz eleget. $m_2(E)$ -re a (2.7)-ből a következő egyenlet adódik:

$$m_2(E) = \int_0^E w_s(E, E') \left\{ m_2(E') + K(E - E') \int_0^{E - E'} q(E - E', E'') m_2(E'') dE'' \right\} dE' + \\ + 2 \int_0^E w_s(E, E') K(E - E') m_1(E') \int_0^{E - E'} q(E - E', E'') m_1(E'') dE'' dE'. \quad (3.10)$$

A tulajdonképpeni feladat a (3.3) és a (3.4), valamint a (3.9) és a (3.10) alatti egyenletek megoldása. Ehhez mindenekelőtt ismernünk kell a w_s , w_p és q sűrűségfüggvényeket, valamint a K kiszakítási valószínűséget. Ezeknek a függvényeknek a meghatározása a kvantumelmélet feladata. Sajnos a folyamat bonyolultsága miatt ezen a téren számottevő eredmény nincsen. Amint látni fogjuk, bizonyos egyszerű esetekben meghatározhatjuk ezeket a függvényeket és a számításokat elvégezhetjük.

4. A neutronokkal besugárzott szilárd testekben keletkező rácshibák számának átlaga és szórása

Ha a primer bombázó részecskék neutronok, akkor (legalábbis nem túl nagy energiák mellett)

$$w_p(E_0, E) = \begin{cases} (1 - \alpha)^{-1} E_0^{-1} & , \text{ ha } E_0 \geq E \geq \alpha E_0 \\ 0 & , \text{ ha } \alpha E_0 > E \end{cases} \quad (4.1)$$

ahol

$$\alpha = \left(\frac{M_2 - M_1}{M_2 + M_1} \right)^2 \quad (4.2)$$

A (4.2) alatti kifejezésben M_2 a nyugvónak tekintett atom és M_1 pedig a bombázó neutron tömege. A neutronok által kiszakított atomok újabb atomokat szakíthatnak ki.

Ismeretes, hogy ionizált atomok közötti ütközéseket bizonyos energiaérték alatt az atomok elektronhéjának árnyékoló hatása miatt ideális szilárdságu golyók ütközéseként kezelhetjük. A továbbiakban feltesszük, hogy a primer bombázó részecskék által kiszakított atomok közötti ütközéseket ilyen típusu ütközéseknek tekinthetjük. Az azonos atomok ütközésekor lejátszódó energiaátadásra ekkor a következő összefüggés érvényes:

$$w_s(E, E') = E^{-1} \quad (E \geq E' \geq 0). \quad (4.3)$$

Az egyszerűség kedvéért tételezzük fel, hogy az ütközések mindig kiszakításra vezetnek, ha az ütközés előtt mozdulatlanak tekinthető atomnak átadott energia felülmulja az E_d kiszakítási határ-energiát. Ebben az esetben könnyen belátható, hogy

$$K(E) = \begin{cases} 1, & \text{ ha } E \geq E_d \\ 0, & \text{ ha } E < E_d \end{cases} \quad (4.4)$$

és

$$q(E, E') = \delta(E - E' - E_d). \quad (4.5)$$

a/ Számítsuk ki most az

$$N_1(t) = S_1(t) \int_0^\infty h(E_0) M_1(E_0) dE_0 \quad (4.6)$$

átlagértéket a felsorolt feltételek figyelembevételével. Mindenekelőtt írjuk fel az $M_1(E_0)$ függvényt meghatározó egyenletet. A (4.1), (4.3), (4.4) és a (4.5) alapján a (3.3) és (3.4) alatti egyenletek kisebb átalakítás után a következő alakba írhatók:

$$(1-\alpha) E_0 M_1(E_0) = \int_{\alpha E_0}^{E_0} M_1(E) dE + \int_0^{(1-\alpha)E_0 - E_d} m_1(E) dE \quad (4.7)$$

$$M_1(E_0) = 0, \text{ ha } 0 \leq E_0 \leq \frac{E_d}{1-\alpha}$$

és

$$E m_1(E) = \int_0^E m_1(E') dE' + \int_0^{E-E_d} m_1(E') dE'. \quad (4.8)$$

$$m_1(E) = 1, \text{ ha } 0 \leq E \leq E_d$$

A (4.8) pontosan megegyezik a Seitz és Harrison [1], valamint Snyder és Neufeld [2] által levezetett egyenlettel. A (4.7) viszont eltér Snyder és Neufeld cikkében szereplő (6.2) alatti egyenlettől. Ha azonban feltesszük, hogy a bombázó neutron a besugárzás hatásának alávetett anyagban csak egyetlen ütközést szenved, akkor a (4.7) alatti egyenlet egyszerűbbé válik. Az így módosított egyenlet már pontosan megegyezik Snyder és Neufeld idézett egyenletével. E feltevés alapján azonban módosítani kell a (4.6) alatti egyenletet, mivel a mintán áthaladó neutronok nagy valószínűséggel csak egyetlen egyszer ütköznek. (A minta végtelen vastagságának tekinthető a kiszakított atomok átlagos szabad ut-hosszához képest, de igen vékony a bombázó neutronok átlagos szabad uthosszához viszonyítva.) Jelöljük $Q_S(E_0)$ -al az E_0 energiájú neutronok makroszkópikus szórás hatáskeresztmetszetét a besugárzás hatásának kitett, b vastagságú anyagban. A (4.6) helyett a következő kifejezés irandó:

$$N_1(t) = S_1(t) \int_0^\infty h(E_0) M_1(E_0) dE_0, \quad (4.8')$$

ahol $M_1(E_0)$ az

$$M_1(E_0) = \frac{Q_S(E_0) b}{(1-\alpha) E_0} \int_0^{(1-\alpha)E_0 - E_d} m_1(E) dE \quad (4.8'')$$

egyenlet megoldása.

b/ A szórásnégyzetre bevezetett (3.8) alatti kifejezés különösen egyszerű alakú, ha feltételezzük, hogy $S_2(t) - S_1^2(t) = S_1(t)$.

Ekkor

$$D^2(t) = S_1(t) \int_0^{\infty} h(E_0) M_2(E_0) dE_0, \quad (4.9)$$

illetve a relatív szórásnégyzet

$$\frac{D^2(t)}{N_1(t)} = \frac{\int_0^{\infty} h(E_0) M_2(E_0) dE}{\int_0^{\infty} h(E_0) M_1(E_0) dE_0} \quad (4.10)$$

A tulajdonképpeni feladat $M_2(E_0)$ meghatározása. Írjuk át a (3.9) és a (3.10) egyenleteket a (4.1), (4.3), (4.4) és a (4.5) összefüggések figyelembevételével. Rövid számítás után azt kapjuk, hogy

$$(1-\alpha) E_0 M_2(E_0) = \int_{\alpha E_0}^{E_0} M_2(E) dE + \int_0^{(1-\alpha)E_0 - E_d} m_2(E) dE + 2 \int_0^{(1-\alpha)E_0 - E_d} m_1(E) M_1(E_0 - E_d - E) dE, \quad (4.11)$$

$$M_2(E_0) = 0, \quad \text{ha} \quad 0 \leq E_0 \leq \frac{E_d}{1-\alpha}$$

és

$$E m_2(E) = \int_0^E m_2(E') dE' + \int_0^{E-E_d} m_2(E') dE' + 2 \int_0^{E-E_d} m_1(E-E_d-E') m_1(E') dE', \quad (4.12)$$

$$m_2(E) = 1, \quad \text{ha} \quad 0 \leq E \leq E_d.$$

Ha ismét feltesszük, hogy a b vastagságú anyagban a bombázó neutronok mindössze egyetlen ütközést szenvednek, akkor a (4.11) az

$$M_2(E_0) = \frac{Q_5(E_0) b}{(1-\alpha) E_0} \int_0^{(1-\alpha) E_0 - E_d} m_2(E) dE \quad (4.12')$$

egyenlettel helyettesíthető. A szórásnégyzetet pedig a (4.9) helyett a

$$D^2(t) = S_1(t) \int_0^{\infty} h(E_0) M_2(E_0) dE_0 \quad (4.13)$$

formula segítségével számíthatjuk. (Általánosságban a (3.8)-ból a megfelelő kifejezést úgy kapjuk meg, hogy $M_1(E_0)$ -t és $M_2(E_0)$ -t $\mathcal{M}_1(E_0)$ -al és $\mathcal{M}_2(E_0)$ -al helyettesítjük.)

c/ A (4.6) és (4.10) alatti kifejezések hasznosításához ki kell számítanunk a $g(E, x)$ generátorfüggvény első, illetve második momentumát. Célszerűnek látszik ezért megvizsgálni a (4.1), (4.3), (4.4) és (4.5) feltételek figyelembevételével származtatható

$$E g(E, x) = \int_0^E g(E', x) dE' - \int_0^{E-E_d} g(E', x) [1 - g(E - E_d - E')] dE' \quad (4.14)$$

egyenletet és megkeresni megoldását. Legyen

$$U(z, x) = \int_0^{\infty} e^{-zE} g(E, x) dE. \quad (4.15)$$

Rövid számolás után azt találjuk, hogy

$$U(z, x) = z^{-1} \left\{ 1 - (1 - e^{-x}) e^{E_1(z E_d)} \right\}^{-1}, \quad (4.16)$$

ahol $E_1(z E_d) = \int_{z E_d}^{\infty} e^{-y} / y dy$

Ebből minden nehézség nélkül megkaphatjuk a $p_m(E)$ eloszlásfüggvényt[Ⓝ] is, azonban számunkra fontosabb az $m_1(E)$ és $m_2(E)$ momentumok meghatározása. Vezessük be a következő jelöléseket:

$$\mu_1(z) = \int_0^{\infty} e^{-zE} m_1(E) dE \quad \text{és} \quad \mu_2(z) = \int_0^{\infty} e^{-zE} m_2(E) dE \quad (4.16')$$

A (4.16) alatti kifejezésből a

$$\mu_1(z) = \left[\frac{\partial U(z, x)}{\partial x} \right]_{x=0} \quad \text{és} \quad \mu_2(z) = \left[\frac{\partial^2 U(z, x)}{\partial x^2} \right]_{x=0}$$

összefüggések alapján felírhatjuk, hogy

$$\mu_1(z) = \frac{1}{z} \exp \left\{ E_1(z E_d) \right\} \quad (4.17)$$

és

$$\mu_2(z) = 2z \mu_1^2(z) - \mu_1(z). \quad (4.18)$$

A (4.17) és (4.18) felhasználásával előállíthatjuk $m_1(E)$ és $m_2(E)$ aszimptotikus kifejezését $E \gg E_d$ értékekre. Egyszerű meggondolásokkal az

$$m_1(E) = e^{-c} \left(\frac{E}{E_d} + 1 \right) + \dots \quad (4.19)$$

és

$$m_2(E) \sim e^{-2c} \frac{E^2}{E_d^2} + e^{-c} (4e^{-c} - 1) \frac{E}{E_d} + e^{-c} (3e^{-c} - 1) + \dots \quad (4.20)$$

[Ⓝ] Ha $E \gg E_d$, akkor aránylag egyszerű eljárással a $p_m(E) \sim (1 - e^{-c})^{m-1} e^{-c - E/E_d} L_{m-1} \left(\frac{1}{1 - e^{-c}} \frac{E}{E_d} \right)$ összefüggéshez jutunk, ahol $C = 0,577$ és $L_{m-1}(y)$ a Laguerre polinom.

asszimptotikus kifejezéseket kapjuk. A (4.19) és (4.20) formulában szereplő C állandó az un. Euler-féle állandó ($C = 0,577$). A $d^2(E) = m_2(E) - m_1^2(E)$ szórásnégyzetre azt találjuk, hogy

$$d^2(E) \sim (2e^{-C} - 1)e^{-C} \left(\frac{E}{E_d} + 1 \right) + \dots \quad (4.20')$$

Leibfried [6] nem pontosan erre az eredményre jutott, mivel nem veszi következetesen figyelembe egyenletei összeállításánál az E_d kiszakítási határenergia szerepét. Leibfried formulája és a (4.20') közötti különbség a főtagban is jelentkezik, bár értéke nem jelentős. Leibfriednél a főtag $0,15 m_1(E)$, míg a (4.20') szerint $0,123 m_1(E)$.

Az $m_1(E)$ és $m_2(E)$ birtokában a (4.7) és (4.11) felhasználásával kiszámíthatjuk az $M_1(E_0)$ és $M_2(E_0)$ momentumokat.

A (4.7) alatti egyenletből $E_0/E_d = e^{u_0}$ és $M_1(E_d e^{u_0}) = F(u_0)$ helyettesítéssel a $V(z) = \int_0^\infty e^{-u_0 z} F(u_0) du_0$ Laplace-transzformáltra a

$$V(z) = V_0(z) V_1(z) \quad (4.21)$$

összefüggés származtatható, ahol

$$V_0(z) = \frac{(1-\alpha)^{z+1}}{(1-\alpha)(z+1) - 1 + \alpha^{z+1}} \quad (4.22)$$

és

$$V_1(z) = \frac{1}{\Gamma(z+1)} \int_0^\infty u^{z-1} e^{-u + E_1(u)} du \quad (4.23)$$

Ahhoz, hogy $F(u_0)$ nagy u_0 értékekhez tartozó alakját meghatározhassuk, ismernünk kell a $V(z)$ függvény mindazon pólusait, amelyek valós része nem negatív. A $V(z)$ egyik tényezője, a $V_0(z)$, a neutronok lassításának elméletéből jól ismert. A $V_1(z)$ nem negatív valós részű pólusait Németh Géza határozta meg. A $V_0(z)$ -re és a $V_1(z)$ -re vonatkozó ismereteink birtokában a

$$V(z) = \frac{e^{-C}}{z-1} - \frac{1-e^{-C}}{\xi z} + V_2(z) \quad (4.23')$$

előállításához jutunk, ahol $V_2(z)$ a $Re z > -1$ tartományban holomorf függvény. A (4.23')-ből $M_1(E_0)$ -ra a következő asszimptotikus formulát kapjuk:

$$M_1(E_0) \sim e^{-C} \frac{E_0}{E_d} - \frac{1-e^{-C}}{\xi} + \dots \quad (4.24)$$

A (4.11)-ből a (4.7)-re alkalmazott eljárás megismétlésével $M_2(E_0)$ -ra a következő asszimptotikus formulát származtathatjuk:

$$M_2(E_0) \sim e^{-2c} \left(\frac{E_0}{E_d} \right)^2 + \left[2 \left(e^{-c} - \frac{1-e^{-c}}{\xi} \right) - 1 \right] e^{-c} \frac{E_0}{E_d} + \dots \quad (4.25)$$

A szórásnégyzet főtagja pedig

$$D^2(E_0) \sim (2 e^{-c} - 1) e^{-c} \frac{E_0}{E_d} + \dots \quad (4.26)$$

alakban írható fel. Láthatjuk, hogy a primer bombázó neutron ütközéseinek számításbavétele a rácshibák számának relativ szórásnégyzetét (legalábbis annak nagy E_0 értékekhez tartozó főtagját) nem befolyásolja.

Ha a besugárzásnak alávetett minta a bombázó neutronok átlagos szabad úthosszához képest vékonynak tekinthető, akkor nagyon valószínű, hogy minden egyes neutron csupán egyszer ütközik a mintán való áthaladása közben. Ekkor a (4.8'') és a (4.12') egyenletek alapján számíthatjuk ki az $M_1(E_0)$ és $M_2(E_0)$ momentumokat. Rövid számolás után a következő eredményt kapjuk:

$$M_1(E_0) \sim Q_s b \left[\frac{1-\alpha}{2} e^{-c} \frac{E_0}{E_d} + \dots \right] \quad (4.27)$$

$$M_2(E_0) \sim Q_s b \left[\frac{(1-\alpha)^2}{3} e^{-2c} \frac{E_0^2}{E_d^2} + \frac{1-\alpha}{2} (2 e^{-c} - 1) e^{-c} \frac{E_0}{E_d} + \dots \right] \quad (4.28)$$

A szórásnégyzetre a

$$D^2(E_0) \sim Q_s b (1-\alpha)^2 e^{-2c} \frac{E_0^2}{E_d^2} \left(\frac{1}{3} - \frac{Q_s b}{4} \right) + \frac{Q_s b}{2} (1-\alpha) (2 e^{-c} - 1) e^{-c} \frac{E_0}{E_d} + \dots \quad (4.29)$$

formula adódik. Figyelemreméltó, hogy ebben az esetben a relativ szórásnégyzet igen jelentős lehet, hiszen

$$\frac{D^2(E_0)}{M_1(E_0)} \sim 2(1-\alpha) e^{-c} \frac{E_0}{E_d} \left(\frac{1}{3} - \frac{Q_s b}{4} \right) + 2 e^{-c} - 1 + \dots \quad (4.30)$$

Végezetük tegyük fel, hogy a bombázó neutronok energiaspektruma a hasadási neutronok energiaspektrumával egyezik meg, azaz legyen

$$h(E_0) = \frac{1}{E_f \sqrt{2\pi e}} e^{-E_0/2 E_f} \operatorname{sh} \sqrt{\frac{E_0}{E_f}}, \quad (4.31)$$

$$E_f = 0,5 \cdot 10^6 \text{ eV} .$$

A (3.8) alapján a (4.31) felhasználásával végtelen kiterjedésűnek tekinthető mintában a rácssérülések számának relativ szórására a következő kifejezést kapjuk:

$$\frac{D(t)}{N_1(t)} \sim \sqrt{\left(0,625 + \frac{D_r^2(t)}{S_1(t)}\right) \frac{1}{S_1(t)}} + O\left(\frac{E_d}{E_f}\right), \quad (4.32)$$

ahol $O\left(\frac{E_d}{E_f}\right)$ az $\frac{E_d}{E_f}$ hányados zérusnál magasabb hatványait tartalmazó kifejezés.

Ha a besugárzásnak alávetett mintát a bombázó neutronok átlagos szabad uthosszához képest vékonynak tekintjük, akkor a (3.8) alatti kifejezésben M_1 és M_2 helyett \mathcal{M}_1 és \mathcal{M}_2 értékeivel kell számolnunk.

Tegyük fel, hogy Q_5 nem függ E_0 -tól. Ebben az esetben a (4.27) és (4.28) alapján azt kapjuk, hogy

$$\frac{D(t)}{N_1(t)} \sim \sqrt{\left(\frac{2,1667}{Q_5 b} + \frac{D_r^2(t)}{S_1(t)} - 1\right) \frac{1}{S_1(t)}} + O\left(\frac{E_d}{E_f}\right), \quad (4.33)$$

ahol $O\left(\frac{E_d}{E_f}\right)$ jelentése mint a (4.32)-ben.

A (4.32) és a (4.33) alatti formulák azt mutatják, hogy a rácshibák számának relativ szórása az $S_1(t)$ növekedésével sokkal lassabban csökken, mint a Poisson-eloszlás relativ szórása.

Fein [5] megkísérelte az elméleti becslések és a kísérleti adatok közötti eltérést csökkenteni. Feltette, hogy az E_d kiszakítási határenergia nem állandó, hanem valamilyen valószínűségi törvény szerint bizonyos határok között változhat.

Jelöljük Fein után $f(E_d) dE_d$ -vel annak a valószínűségét, hogy a kiszakítási energia E_d és $E_d + dE_d$ közötti értéket vegyen fel. Fein [5] megmutatta, hogy a kísérleti adatokkal való egyezés érdekében az $f(E_d)$ sűrűségfüggvény maximumához olyan nagy E_d értéket kellene rendelni, ami felette valószínűtlen.

Véleményünk szerint a jobb egyezés érdekében az általunk levezetett (2.6) és (2.7) alatti egyenletekben szereplő q és K függvények mikrofizikai elméletére kellene a legfőbb figyelmet irányítani és a kísérleti adatok összehasonlításánál pedig óvatossággal kellene eljárni.

I r o d a l o m

- [1] Seitz, F. and Harrison, W.A., Phys. Rev., 98. 1530. (1955)
Seitz, F. and Koehler, J.S., Solid State Physics, (Academic Press Inc., New York, 1956) Vol. 2. pp. 381. ff
- [2] Snyder, W.S. and Neufeld, J., Phys. Rev., 97. 1636. (1955)
- [3] Snyder, W.S. and Neufeld, J., Phys. Rev., 103. 862. (1956)
- [4] Pál, L., Energia és Atomtechnika, 10. 255. (1957)
- [5] Fein, A.E., Phys. Rev., 109. 1076. (1958)
- [6] Leibfried, G., Nukleonik, 1. 57. (1958)

KFKI Közlemények 6.évf. 4.szám, 1958.