

МЕТОДОЛОГИЯ РАСЧЁТА ГИПОТЕТИЧЕСКИХ ИЗОМЕРНЫХ γ -РЕАКТОРОВ НА ПРИМЕРЕ $^{178m2}\text{Hf}$

THE CALCULATION METHODOLOGY BY THE EXAMPLE OF $^{178m2}\text{Hf}$ HYPOTHETICAL ISOMERIC γ -REACTORS

В. Ф. Колесов, С. Н. Абрамович, А. Е. Шмаров, Е. В. Интяпина
V. F. Kolesov, S. N. Abramovich, A. E. Shmarov, E. V. Intjapina

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», Саров Нижегородской обл.

Federal Nuclear Center of Russia – All-Russian Research Institute of Experimental Physics

На примере ядерного изомера $^{178m2}\text{Hf}$ разработана методология описания кинетических явлений в изомерных γ -реакторах. Рассмотрение процессов в среде изомера основано на предположении, что в результате использования резонансного механизма NEET удастся переводить изомер в триггерное состояние и тем самым создавать условия для цепной реакции γ -распадов, подобной цепной реакции делений в нейтронных ядерных реакторах.

By example of nuclear isomer $^{178m2}\text{Hf}$ there was developed the methodology of describing kinetic phenomena in isomer gamma-reactors. The consideration of processes in isomer medium is based on a supposition that as a result of using resonance mechanism NEET it is possible to put isomer to trigger state and thereby create conditions for chain reaction of γ -decays similar to the chain reaction of fissions in neutron nuclear reactors.

Высокая энергоёмкость сред, состоящих из ядерных изомеров, создает серьезные стимулы для поиска способов высвобождения этой энергии для практического использования в стационарных или импульсных установках – источниках энергии и γ -излучения. В литературе рассмотрено много сред, состоящих из различных ядерных изомеров, на предмет обсуждения возможностей снятия запасённой в них энергии [1]. Значительное внимание исследователей привлечено к среде, состоящей из ядерного изомера $^{178m2}\text{Hf}$. В табл. 1 проведено сравнение удельных энергоёмкостей $^{178m2}\text{Hf}$ и других известных энергоносителей.

Таблица 1

Сравнение удельных энергоёмкостей некоторых материалов

Среда	Удельная энергоёмкость, ГДж/г
$^{178m2}\text{Hf}$	1,3/0,7
$^{235}\text{U}+\text{n}$	82
D+T	340
Тротил	$4 \cdot 10^{-6}$

Примечание: В строке 1, относящейся к $^{178m2}\text{Hf}$, через дробь указана энергоёмкость для стационарного и импульсного режимов высвобождения энергии, соответственно.

В настоящем докладе приведены результаты разработки методологии описания кинетических явлений в критических изомерных γ -реакторах [2]. В качестве опорной базы для формулирования расчетных алгоритмов рассматривается среда из $^{178m2}\text{Hf}$. Предполагается, что механизм снятия энергии $^{178m2}\text{Hf}$ может осуществляться за счет предсказываемого триггерного уровня, незначительно (примерно на 10 кэВ) превышающего изомерный уровень гафния. Указания на предмет существования триггерного уровня содержатся в ряде экспериментальных работ [3]. Одним из уникальных свойств $^{178m2}\text{Hf}$ является то, что энергия его триггерного уровня относительно изомерного уровня лежит в интервале энергий характеристического L -излучения атомов гафния. Явление разрядки изомера гафния через посредство указанного триггерного уровня получило аббревиатурное название NEET (Nuclear Excitation by Electron Transition),

Таким образом, используемая в докладе схема цепной реакции в среде чистого изомера гафния заключается в следующем. Случайный γ -квант производит ионизацию L -оболочки атома.

Энергия возбуждения атома, возникающая вследствие заселения вакансии на L -оболочке, с какой-то вероятностью передается ядру изомера, и ядро оказывается в триггерном состоянии. После этого происходит практически мгновенная разрядка изомерного ядра. Разрядка сопровождается высвечиванием большого количества γ -квантов, которые за счет фотопоглощения и некогерентного рассеяния производят ионизацию среды, создавая новые вакансии в атомной оболочке, в том числе и на L -оболочке, и тем самым замыкая цепную реакцию [3, 4].

Развитый метод описания кинетических характеристик изомерного γ -реактора использует приемы, близкие односточечной модели кинетики нейтронных ядерных систем [5, 6]. В итоге сформулировано условие критичности γ -реактора, найдены соотношения для временных распределений интенсивности рождения вакансий и времени генерации мгновенных и запаздывающих триггерных состояний, составлены системы уравнений кинетики и динамики, а также программа численного решения этих уравнений.

Задачи переноса в среде $^{178m2}\text{Hf}$ γ -квантов, расчета вероятности рождения γ -квантами вакансий и привязанных к моменту рождения γ -кванта временных распределений для событий рождения вакансий решаются в докладе с помощью программы Монте-Карло ТРИАДА [7], предназначенной для решения нестационарных задач совместного переноса в веществе нейтронов, γ -квантов, электронов, позитронов и тяжёлых заряженных частиц (протонов, α -частиц и т. д.) в промежуточной области энергий, а также фотонов оптического диапазона длин волн. Полученные с помощью этой программы результаты легко встраиваются в общие уравнения критичности, кинетики и динамики изомерного γ -реактора.

Разработанная методология использована в расчетах временных и энергетических характеристик конкретных гипотетических реакторов из $^{178m2}\text{Hf}$, действующих в режимах как очень быстрых, так и затянутых всплесков γ -распадов.

1. Коэффициент размножения триггерных состояний. Временные распределения интенсивности рождения вакансий. Уравнения кинетики изомерного γ -реактора

Для целей составления адекватного представления о ядерных процессах в изомерном γ -реакторе и надежного моделирования этих процессов необходимо иметь что-то подобное хорошо отработанной теории делительных ядерных реакторов. Прямое, да пожалуй и косвенное, взаимодействие алгоритмов из области делительных ядерных устройств в данном случае невозможно, поскольку перенос γ -квантов – носителей цепной реакции в изомерном реакторе и генерирование γ -квантами вакансий в электронной оболочке атомов изомера отличаются значительным своеобразием. (Подобие явлений в нейтронных и фотонных критических устройствах имеет место лишь в области их температурной и силовой динамики.)

Избранный в докладе аналитически-численный подход к описанию условий критичности и переходных процессов в γ -реакторе включает:

- процедуру определения аналитических выражений для временных (в шкале распада изомера) распределений интенсивности излучения γ -квантов и интенсивности создания γ -квантами вакансий в электронных L -оболочках атомов среды активной зоны;

- определение соотношений для коэффициента размножения триггерных состояний в активной зоне и среднего времени генерирования мгновенных и запаздывающих триггерных состояний;

- формулирование на основе баланса рождений и гибели триггерных состояний систем уравнений кинетики и динамики изомерного γ -устройства;

- расчеты с помощью программы Монте-Карло ТРИАДА вероятности создания γ -квантом типа (ij) вакансии в электронных L -оболочках атомов среды активной зоны и среднего времени [во временной шкале γ -кванта типа (ij)] генерирования этой вакансии. Расчеты вероятности γ_{ij} и среднего времени $\bar{\tau}_{ij}$ генерирования вакансий являются очень важным этапом процедуры определения критичности и кинетических характеристик изомерного γ -реактора, поскольку величины γ_{ij} и $\bar{\tau}_{ij}$ входят в основные уравнения его кинетики и динамики.

В рамках настоящего доклада средняя вероятность γ генерирования одной вакансией нового триггерного состояния является свободным параметром. Значения этого параметра для конкретных активных зон определяются из условия предполагаемой их критичности.

1.1. Коэффициент размножения триггерных состояний

Вначале дадим некоторые определения и введем обозначения для ряда опорных понятий и величин. Число возбужденных состояний уровня i ядер $^{178m2}\text{Hf}$ во всей системе в момент времени t будем называть населенностью уровня i и обозначать как $I_i(t)$. Через $J_i(t) = \lambda_{ij} I_i(t)$ будем обозначать интенсивность излучения γ -квантов при переходе ядра с уровня i на уровень j ; λ_{ij} – постоянная распада ядра посредством излучения γ -кванта относительно перехода с уровня i на уровень j (см. схему спектральных уровней $^{178m2}\text{Hf}$ на рис. 1); через $J_{ij}^3(t) = \lambda_{ij}^3 I_i(t)$ – интенсивность испускания электронов конверсии при переходе ядра с уровня i на уровень j (λ_{ij}^3 – постоянная распада ядра посредством испускания электрона конверсии относительно перехода с уровня i на уровень j); через a_{ij} – число γ -квантов (ij) на один распад изомера; $\gamma_{ij}^{(l)}$ – число вакансий типа l , образуемых одним γ -квантом типа (ij) с энергией E_{ij} ; $f_{ij}^l(t)$ – нормированное на единицу временное распределение вероятности образования вакансий типа l γ -квантом с энергией E_{ij} , излученным в момент $t = 0$; $\gamma_{ij}^{(l)\vartheta}$, $f_{ij}^{(l)\vartheta}(t)$ – то же самое, отнесенные к одному электрону конверсии с энергией E_{ij}^3 ; $\gamma^{(l)}$ – вероятность образования триггерной населенности (населенности уровня 1) вакансией типа l . (Здесь и ниже спектральные уровни $^{178m2}\text{Hf}$ нумеруются сверху вниз под номерами 1, 2, ..., 12.)

Ниже будут использованы также следующие вполне допустимые упрощения:

– вероятности образования вакансий электронами конверсии $\gamma_{ij}^{(l)\vartheta}$ равны нулю;

– вакансии типа l ($l = 1, 2, 3$) не отличаются друг от друга по эффективности образования триггерных состояний, и допустимо пользоваться единым термином числа вакансий, образуемых одним γ -квантом типа (ij) $\gamma_{ij} = \gamma_{ij}^{(1)} + \gamma_{ij}^{(2)} + \gamma_{ij}^{(3)}$ и единым термином вероятности образования триггерной населенности одной вакансией $\gamma = \gamma^{(1)} + \gamma^{(2)} + \gamma^{(3)}$;

– нормированные временные распределения вероятности образования вакансий типа l γ -квантами типа (ij) одинаковы для всех l и представляются едиными распределениями $f_{ij}(t)$;

– как показывают расчеты, распределения $f_{ij}(t)$ хорошо представляются экспонентами.

На этом основании принято $f_{ij}(t) = \Lambda_{ij} e^{-\Lambda_{ij} t}$.

Примененный в докладе подход к описанию нестационарных явлений в изомерном γ -реакторе близок к формулировкам точечной кинетики нейтронных ядерных реакторов [5, 6]. В этом приближении используются усредненные по пространству и угловым распределениям эффективности γ -квантов типа (ij) и вакансий относительно поддержания цепной реакции распадов и, таким образом, изомерный γ -реактор представляется как некая точка с неотличимыми по эффективности γ -квантами типа (ij) и вакансиями.

Коэффициент размножения триггерных состояний в изомерном γ -реакторе при указанном подходе определен как число новых триггерных состояний, производимых γ -квантами одного распада изомера (одного триггерного состояния). Чтобы получить формулу для этого $K_{\text{эф}}(t)$, достаточно отметить, что число вакансий на один распад триггерного состояния равно $\sum_{ij} a_{ij} \gamma_{ij}$. Отсюда находим, что число новых триггерных состояний на один распад изомера должно быть записано как

$$K_{\text{эф}}(t) = \gamma \sum_{ij} a_{ij} \gamma_{ij}. \quad (1)$$

Дальнейшая задача заключается в определении среднего времени генерации новых как мгновенных, так и запаздывающих триггерных состояний.

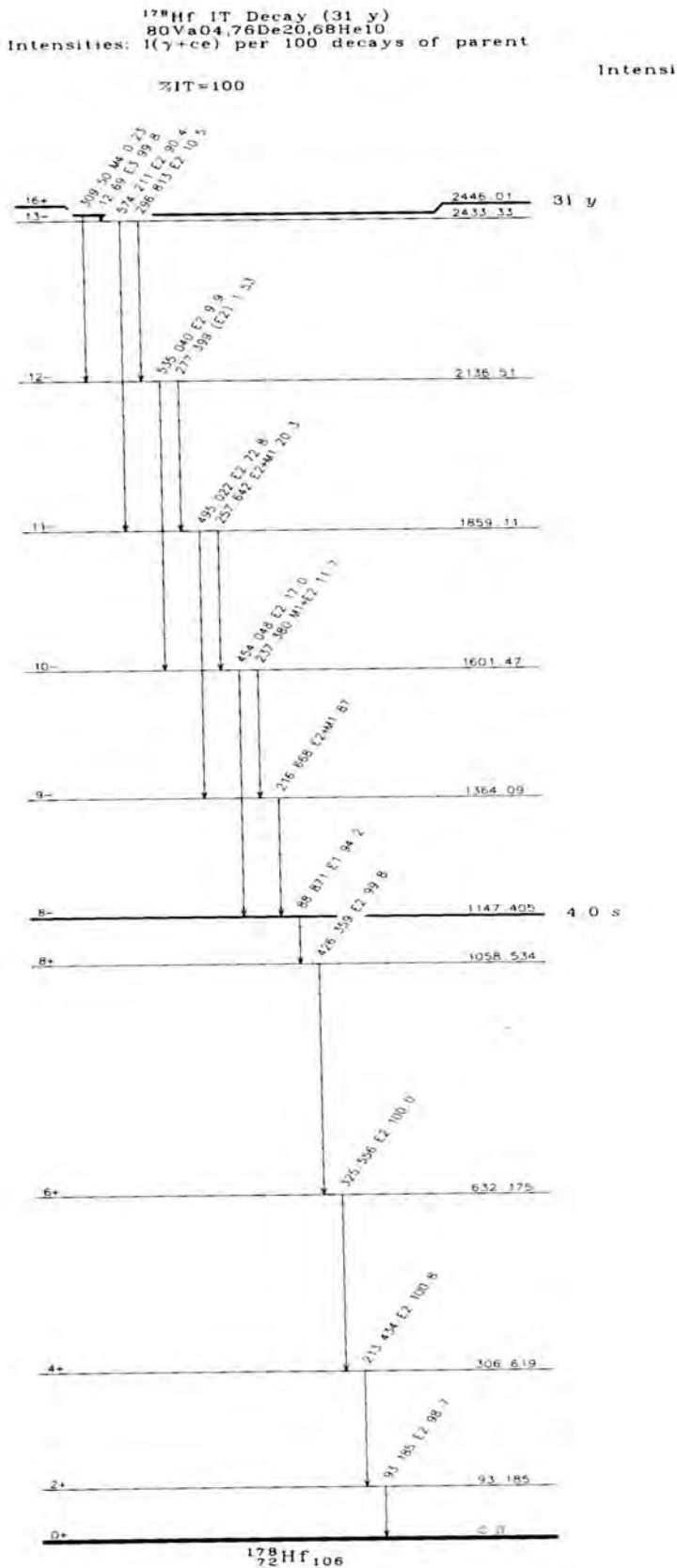


Рис. 1. Схема распада $^{178m2}\text{Hf}$

Чтобы решить эту задачу, необходимо найти абсолютные временные распределения интенсивности рождения γ -квантов типа (ij) , а затем и рождения вакансий. В этих целях, прежде всего, следует иметь в виду, что согласно принятым предположениям 1-ый, то есть триггерный уровень распадается путем мгновенного перехода на 2-ой уровень посредством испускания конверсионного электрона. Этот переход характеризуется параметрами $a_{12} = 0$; $a_{12}^{\textcircled{3}} = 1$; $\lambda_{12} = 0$; $\lambda_{12}^{\textcircled{3}} = \infty$. γ -Квантов и вакансий этот переход не генерирует.

1.2. Абсолютные временные распределения интенсивности рождения мгновенных и запаздывающих γ -квантов

В принятом предположении рождение γ -квантов начинается со 2-го уровня.

Абсолютные временные распределения интенсивности рождения γ -квантов 2-го уровня (обозначим их символами $\varphi_{23}(t)$ и $\varphi_{24}(t)$; аналогичные обозначения будут использованы и для следующих уровней) можно записать в виде

$$\varphi_{23}(t) = \alpha_1 e^{-\lambda_2^* t}; \quad \varphi_{24}(t) = \alpha_2 e^{-\lambda_2^* t},$$

где

$$\alpha_1 = (a_{23}^* + a_{24}^*) \lambda_{23}^*; \quad \alpha_2 = (a_{23}^* + a_{24}^*) \lambda_{24}^*;$$

$$a_{23}^* = a_{23} + a_{23}^{\textcircled{3}}; \quad a_{24}^* = a_{24} + a_{24}^{\textcircled{3}};$$

$$\lambda_2^* = \lambda_{23}^* + \lambda_{24}^*, \quad \lambda_{23}^* = \lambda_{23} + \lambda_{23}^{\textcircled{3}}, \quad \lambda_{24}^* = \lambda_{24} + \lambda_{24}^{\textcircled{3}}$$

(в распределениях для следующих уровней использованы также обозначения: $\lambda_3^* = \lambda_{34}^* + \lambda_{35}^*$, $\lambda_4^* = \lambda_{45}^* + \lambda_{46}^*$, $\lambda_5^* = \lambda_{56}^* + \lambda_{57}^*$, $\lambda_6^* = \lambda_{67}^*$).

Временные распределения интенсивности рождения γ -квантов i -го уровня, начиная с 3-го, зависят от постоянных распада не только i -го, но и всех более высоких уровней, поскольку интенсивность возбуждения i -го уровня в этом случае определяется распадом всех более высоких уровней. В этом случае искомые распределения можно найти с помощью решений дифференциальных уравнений, записанных на основании баланса возбуждений и распадов i -го уровня.

Согласно сказанному, интенсивность возбуждения 3-го уровня равна

$$\alpha_3 e^{-\lambda_2^* t}; \quad \alpha_3 = (a_{23}^* + a_{24}^*) \lambda_{23}^*,$$

и дифференциальное уравнение для его населенности с очевидностью может быть записано в виде

$$I_3'(t) = \alpha_3 e^{-\lambda_2^* t} - \lambda_3^* I_3(t).$$

Решение этого уравнения и абсолютные временные распределения интенсивности рождения $\varphi_{34}(t)$, $\varphi_{35}(t)$ γ -квантов типа (34), (35) 3-го уровня имеют вид соответственно

$$I_3(t) = \alpha_4 \left(e^{-\lambda_2^* t} - e^{-\lambda_3^* t} \right); \quad \alpha_4 = \frac{\alpha_3}{\lambda_3^* - \lambda_2^*};$$

$$\varphi_{34}(t) = \lambda_{34} I_3(t) = \alpha_4 \lambda_{34} \left(e^{-\lambda_2^* t} - e^{-\lambda_3^* t} \right);$$

$$\varphi_{35}(t) = \lambda_{35} I_3(t) = \alpha_4 \lambda_{35} \left(e^{-\lambda_2^* t} - e^{-\lambda_3^* t} \right).$$

Аналогично находятся формулы для интенсивности возбуждения и населенности 4-го, 5-го и 6-го уровней, а также абсолютное временное распределение интенсивности рождения γ -квантов этих уровней.

Без внесения сколько-нибудь заметных погрешностей применительно к области запаздывающих γ -квантов (7-ой – 11-ый уровни) можно принять, что:

– возбуждение 7-го уровня, отличающегося большим временем жизни, происходит в момент распада триггерного состояния, т. е. без задержки на вышерасположенных уровнях;

– вероятностные кривые распада 7-го и нижеследующих уровней имеют один и тот же вид экспоненты $e^{-\lambda_7^* t}$;

– поскольку сдвиг между временами рождения γ -квантов и соответствующих им вакансий в сравнении с периодом распада 7-го уровня очень мал, в области запаздывающих γ -квантов этим сдвигом можно пренебречь.

С учетом указанных упрощений абсолютное временное распределение интенсивности рождения запаздывающих γ -квантов 7-го, 8-го, ..., 11-го уровней можно представить соответственно выражениями:

$$a_{78}e^{-\lambda_7^* t}; \quad a_{89}e^{-\lambda_7^* t}; \quad a_{910}e^{-\lambda_7^* t}; \quad a_{1011}e^{-\lambda_7^* t}; \quad a_{1112}e^{-\lambda_7^* t},$$

а абсолютное суммарное распределение интенсивности рождения запаздывающих вакансий – выражением:

$$(a_{78}\gamma_{78} + a_{89}\gamma_{89} + a_{910}\gamma_{910} + a_{1011}\gamma_{1011} + a_{1112}\gamma_{1112})e^{-\lambda_7^* t}.$$

Среднее время генерации запаздывающих вакансий или соответствующих им триггерных состояний равно $\frac{1}{\lambda_7^*}$.

1.3. Абсолютные временные распределения интенсивности рождения мгновенных вакансий

Абсолютные временные распределения интенсивности рождения мгновенных вакансий были рассчитаны с помощью более сложных соотношений. Эти соотношения выведены на основании определенных выше распределений $\varphi_{ij}(t)$ интенсивности рождения мгновенных γ -квантов типа (ij) и временных распределений интенсивности образования вакансий γ -квантом типа (ij) , рожденным в момент $t = 0$. Последние распределения определялись с помощью расчётов по программе Монте-Карло ТРИАДА (см. раздел 2). Они хорошо представляются экспоненциальными выражениями типа

$$\psi_{ij}(t) = \gamma_{ij}\Lambda_{ij}e^{-\Lambda_{ij}t}. \quad (2)$$

Для определения абсолютных временных распределений интенсивности рождения мгновенных вакансий, генерируемых γ -квантами типа (ij) , – распределений $f_{ij}(t)$ – использовалась комбинация распределений φ_{ij} и (2). С этой целью было записано содержащее указанные распределения выражение для дифференциала $v_{ij}(t)$ – полного числа вакансий, генерированных γ -квантами типа (ij) . Для любого момента времени t это выражение может быть записано как

$$dv_{ij}(t) = dt\gamma_{ij}\Lambda_{ij}\int_0^t \varphi_{ij}(t-x)e^{-\Lambda_{ij}x} dx.$$

Отсюда следует, что

$$f_{ij}(t) = \frac{dv_{ij}}{dt} = \gamma_{ij}\Lambda_{ij}\int_0^t \varphi_{ij}(t-x)e^{-\Lambda_{ij}x} dx,$$

и распределение интенсивности генерирования мгновенных вакансий γ -квантами i -го уровня

$$f_i(t) = \sum_j f_{ij}(t) = \sum_j \gamma_{ij}\Lambda_{ij}\int_0^t \varphi_{ij}(t-x)e^{-\Lambda_{ij}x} dx. \quad (3)$$

С помощью интегрирования выражений (3) и дальнейших преобразований получены:

$$f_2(t) = \frac{\alpha_1 \gamma_{23} \Lambda_{23}}{\lambda_2^* - \Lambda_{23}} \left[e^{-\Lambda_{23} t} - e^{-\lambda_2^* t} \right] + \frac{\alpha_2 \gamma_{24} \Lambda_{24}}{\lambda_2^* - \Lambda_{24}} \left[e^{-\Lambda_{24} t} - e^{-\lambda_2^* t} \right] = \beta_1 e^{-\Lambda_{23} t} + \beta_2 e^{-\Lambda_{24} t} - \beta_3 e^{-\lambda_2^* t};$$

$$\beta_1 = \frac{\alpha_1 \gamma_{23} \Lambda_{23}}{\lambda_2^* - \Lambda_{23}}; \quad \beta_2 = \frac{\alpha_2 \gamma_{24} \Lambda_{24}}{\lambda_2^* - \Lambda_{24}}; \quad \beta_3 = \beta_1 + \beta_2$$

и аналогичные, хотя несколько более сложные выражения для $f_3(t)$, $f_4(t)$, $f_5(t)$, $f_6(t)$.

Суммарное абсолютное временное распределение интенсивности рождения вакансий, генерируемых всеми мгновенными γ -квантами распада триггерного состояния, и искомое среднее время генерации триггерных состояний получены равными соответственно

$$F(t) = \sum_{i=2}^6 f_i(t).$$

$$\Lambda = \frac{\int_0^{\infty} t F(t) dt}{\int_0^{\infty} F(t) dt}. \quad (4)$$

1.4. Уравнения кинетики и динамики изомерного γ -реактора

Теперь мы имеем возможность сформулировать уравнения кинетики и динамики изомерного γ -устройства, близкие точечным уравнениям нейтронных ядерных устройств.

В этих целях представим полный коэффициент размножения $K_{\text{эф}}$ в виде суммы коэффициента размножения мгновенных триггерных состояний $\tilde{K}_{\text{эф}}(t)$ и части $K_{\text{эф}}(t)$, вносимой запаздывающими триггерными состояниями, $\delta K_{\text{эф}}(t)$:

$$K_{\text{эф}}(t) = \tilde{K}_{\text{эф}}(t) + \delta K_{\text{эф}}(t);$$

$$\tilde{K}_{\text{эф}}(t) = \gamma \sum_{(ij)_{\text{МГН}}} a_{ij} \gamma_{ij} \quad (\text{уровни 2-6});$$

$$\delta K_{\text{эф}}(t) = \gamma \sum_{(ij)_{\text{зап}}} a_{ij} \gamma_{ij} \quad (\text{уровни 7-11}).$$

Существенно, что в рассматриваемом γ -реакторе имеется лишь одна группа запаздывающих триггерных состояний и составляет она примерно половину всех триггерных состояний. Постоянную распада запаздывающих триггерных состояний, равную λ_7^* , обозначим как λ .

Обозначим, далее, через $P(t)$ – число мгновенных триггерных состояний в момент t ; $C(t)$ – число предшественников запаздывающих триггерных состояний; S_0 – интенсивность спонтанных распадов гафния в активной зоне; τ – среднее время жизни мгновенных триггерных состояний; $\frac{K_{\text{эф}} - 1}{K_{\text{эф}}} = \rho$ – реактивность изомерного γ -реактора; $\tau = \Lambda K_{\text{эф}}$, $\beta = \frac{\delta K_{\text{эф}}}{K_{\text{эф}}}$ – доля запаздывающих триггерных состояний.

В указанных обозначениях можно записать следующее уравнение точечной кинетики для изомерного γ -реактора:

$$\begin{cases} \frac{dP}{dt} = \frac{K_{\text{эф}}(1-\beta) - 1}{\tau} P + (1-\beta)(\lambda C + S_0) \\ \frac{dC}{dt} = \frac{K_{\text{эф}}\beta}{\tau} P - (1-\beta)\lambda C + \beta S_0. \end{cases}$$

В терминах среднего времени генерации триггерных состояний и реактивности эти уравнений трансформируются в следующие:

$$\begin{cases} \frac{dP}{dt} = \frac{\rho - \beta}{\Lambda} P + (1 - \beta)(\lambda C + S_0) \\ \frac{dC}{dt} = \frac{\beta}{\Lambda} P - (1 - \beta)\lambda C + \beta S_0. \end{cases} \quad (5)$$

В дальнейшем будут использоваться уравнения кинетики в форме (5).

Для выполнения перехода от уравнений кинетики изомерного γ -реактора к более полным уравнениям динамики необходимо установить связь выхода энергии в активной зоне и температуры активной зоны с величинами $P(t)$, $C(t)$, а также связь с выходом энергии (или температурой) реактивности γ -реактора $\rho(t)$.

Активная зона рассматриваемого здесь изомерного γ -устройства имеет форму равновеликого цилиндра с принятым однородным (равномерным) пространственным распределением источников тепла. Рассмотрение цепной реакции γ -распадов в устройстве ограничено процессами достаточно быстрыми, так что отток тепла из активной зоны и его перераспределение в пределах активной зоны не учитываются. В этом приближении количество тепла, накопленного в активной зоне к моменту времени t , представляется соотношением

$$Q(t) = \Delta E_1 \left[S_0 t + \frac{1}{\tau} \int_0^t P(t) dt \right] + \Delta E_2 \left[S_0 t + \lambda \int_0^t C(t) dt \right]$$

или

$$Q(t) = \Delta E_1 \left[S_0 t + \frac{1 - \rho}{\Lambda} \int_0^t P(t) dt \right] + \Delta E_2 \left[S_0 t + \lambda \int_0^t C(t) dt \right]. \quad (6)$$

Здесь $\Delta E_1, \Delta E_2$ – доли энергии распада ядра ^{178}Hf , приходящиеся соответственно на уровни мгновенные (уровни 2–6) и запаздывающие (уровни 7–11).

В целях установления связи реактивности γ -устройства $\rho(t)$ с выходом энергии $Q(t)$ использованы приемы параметрического анализа динамики самогасящихся импульсных реакторов [6]. В итоге задача динамики изомерного γ -реактора сведена к решению следующей замкнутой системы уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dP}{dt} = \frac{\rho - \beta}{\Lambda} P + (1 - \beta)(\lambda C + S_0) \\ \frac{dC}{dt} = \frac{\beta}{\Lambda} P - (1 - \beta)\lambda C + \beta S_0 \\ \rho(t) = \rho_0 + at - \alpha u(t) \\ \frac{d^2 u}{dt^2} + \omega^2 u = \omega^2 Q(t) \\ Q(t) = \Delta E_1 \left[S_0 t + \frac{1 - \rho}{\Lambda} \int_0^t P(t) dt \right] + \Delta E_2 \left[S_0 t + \lambda \int_0^t C(t) dt \right] \end{cases} \quad (7)$$

при начальных условиях: $P(0) = C(0) = u(0) = \frac{du}{dt}(0) = 0$

Здесь ω – основная собственная частота колебаний активной зоны, α – энергетический коэффициент гашения реактивности, $\rho_0(t)$ – реактивность γ -реактора, определяемая внешними искусственными воздействиями, a – скорость линейного ввода реактивности.

2. Расчёт временных распределений и полных чисел образования γ -квантами вакансий в атомных оболочках ^{178}Hf

Как уже отмечалось, расчёты числа вакансий, образующихся в L -оболочке атома ^{178}Hf , проводились с использованием программы Монте-Карло ТРИАДА [7]. Моделирование переноса излучений осуществлялось в среде чистого изомера $^{178m2}\text{Hf}$, представляющего собой холодное вещество в твёрдом агрегатном состоянии. Структура вещества предполагалась аморфной со случайной локализацией атомов в пространстве. Исходным излучением являются гамма-кванты, испускаемые изомером в процессах релаксации ядерных возбуждений. Диапазон возможных энергий этих квантов простирается от ~ 10 кэВ до нескольких МэВ. Поэтому в данной задаче достаточно было рассматривать образование и совместный перенос только трёх видов взаимопревращающихся частиц: гамма-квантов, электронов и позитронов.

2.1. Вычислительные схемы и физические константы взаимодействия гамма-квантов и электронов с атомами гафния

Моделирование переноса гамма-квантов осуществляется по классической схеме последовательных столкновений, описывающей взаимодействия частицы в их хронологической последовательности. Учитываются следующие реакции:

- когерентное рассеяние;
- некогерентное рассеяние с учётом связанности электрона в атоме и доплеровского уширения рассеянных квантов;
- образование электрон-позитронных пар и триплетов;
- фотопоглощение с последующим образованием флюоресцентных квантов и Оже-электронов.

В качестве полных сечений всех указанных взаимодействий используются оценённые данные библиотеки EPDL [8]. Моделирование когерентного рассеяния проводится с использованием атомных форм-факторов упругого рассеяния, взятых из библиотеки оценённых данных EADL [9]. Некогерентное рассеяние описывается на основе релятивистской импульсной аппроксимации [10], последовательно учитывающей эффект связи электронов атома-мишени и доплеровское уширение рассеянных квантов, что является следствием конечной ширины распределения импульсов электронов атома-мишени (на которых происходит рассеяние квантов) за счёт их орбитального движения. При этом вероятность взаимодействия кванта с электронами каждой отдельной подоболочки оценивается на основе данных по одноэлектронным комптоновским профилям. Моделирование процесса фотопоглощения также проводится для каждой атомной подоболочки отдельно. Вероятности соответствующих процессов оцениваются на основе парциальных сечений фотопоглощения библиотеки EPDL.

Для моделирования траекторий электронов и позитронов используется смешанная вычислительная схема, комбинирующая последовательную схему катастрофических столкновений, т. е. столкновений с углом рассеяния θ или потерей энергии W , превышающими некоторые пороговые значения θ_k и W_k , с группировкой «мягких» столкновений и описанием глобального результата большого их числа в приближении многократного рассеяния. При этом учитываются следующие виды взаимодействий электронов (позитронов):

- упругое рассеяние на атоме;
- неупругое столкновение;
- тормозное излучение;
- двухфотонная аннигиляция для позитронов.

2.2. Структура электронных оболочек в атоме и способы образования в них вакансий

В исходном состоянии все электронные уровни атома заняты. В результате внешних воздействий различной природы атомная система может возбуждаться и переводить электроны из исходного положения на более высоко лежащие энергетические уровни. Если переданная элек-

трону энергия возбуждения превысит энергию его связи в атоме, он может вылететь из него. При этом на той оболочке, где он изначально находился, образуется вакансия. Такое возбуждённое состояние атомной системы не является устойчивым. Электроны, расположенные на более высоких оболочках и имеющие возможность снизить свою потенциальную энергию, стремятся занять образованную вакансию. Один из таких электронов в конечном итоге переходит на вакантный уровень, создавая автоматически новую вакансию, но уже на более высоком атомном уровне. Вновь созданная вакансия заполняется электроном с ещё более высоко лежащего уровня. Каскад таких переходов продолжается до тех пор, пока вакансия не перейдёт на самую внешнюю атомную оболочку. Наличие достаточно большого числа электронов на различных оболочках приводит к чрезвычайно широкому набору различных вариантов реализации описанного каскада. Правила отбора для квантовых чисел накладывают ограничение на некоторые виды переходов. Тем не менее, в таких сложных квантовых системах, как атом гафния, образование одной исходной вакансии, например на К-оболочке, может привести к случайному каскаду переходов, имеющему несколько тысяч различных вариантов реализации. Упрощённое рассмотрение позволяет разделить все внутриатомные переходы на два типа: радиационные и безрадиационные. В первом случае перемещение электрона на нижнюю оболочку сопровождается вылетом из атома характеристического кванта, энергия которого определяется разницей энергий связи электрона на исходном и вновь занимаемом уровнях. Во втором случае перестройка атомных уровней сопровождается вылетом Оже-электронов. Все указанные процессы в программе ТРИАДА моделируются с использованием физических констант из библиотеки оценённых данных EADL [9], где они приведены в виде условных вероятностей образования флюоресцентных квантов и Оже-электронов при заполнении вакансии, предварительно образованной на соответствующей атомной оболочке.

3. Результаты расчёта критических и динамических параметров конкретных вариантов изомерного γ -реактора

Рассматриваемый в докладе конкретный γ -реактор не имеет отражателя, форма его активной зоны – сплошной равновеликий цилиндр из металлического $^{178m2}\text{Hf}$. Плотность гафния $13,1 \text{ г/см}^3$. Другие принятые в расчетах характеристики гафния: выход энергии в одном распаде ядра $E = 2,446 \text{ МэВ}$, теплоемкость $C_0 = 0,1438 \text{ Дж/(г}\cdot\text{°C)}$, среднее время жизни относительно спонтанного распада $44,7 \text{ лет} = 1,411 \cdot 10^9 \text{ с}$, временная постоянная спонтанного распада $0,605 \cdot 10^{-9} \text{ с}^{-1}$, удельная интенсивность и мощность распадов $3,459 \cdot 10^{12} \text{ расп./(г}\cdot\text{с)}$, $0,846 \cdot 10^{13} \text{ МэВ/(г}\cdot\text{с)} = 1,354 \text{ Дж/(г}\cdot\text{с)}$ [11, 12]. Согласно справочнику [13] при температуре 930 °C линейный температурный коэффициент расширения для металлического гафния равен $8,4 \cdot 10^{-6} \text{ °C}^{-1}$. Отсюда получено, что при 1000 °C объемный температурный коэффициент расширения гафния $\frac{1}{V_0} \frac{dV}{dt}$ равен

$\sim 2,6 \cdot 10^{-5} \text{ °C}^{-1}$. Это значение объемного температурного коэффициента расширения принято в докладе в качестве опорной характеристики гафния, не зависящей от температуры активной зоны. На основании данных сборника статей [14] модуль Юнга и коэффициент Пуассона металлического гафния при 1000 °C приняты равными $1,4 \cdot 10^6 \text{ кг/см}^2$ и $0,30$ соответственно.

В отсутствие перераспределения и оттока тепла спонтанный распад ядер $^{178m2}\text{Hf}$ приводит к повышению его температуры на $9,416 \text{ °C}$ за секунду. Целесообразно отметить также, что температура плавления гафния равна $\sim 2200 \text{ °C}$, температура кипения – $\sim 5400 \text{ °C}$.

Оценка критических параметров изомерного γ -реактора основана здесь на рассчитанных с помощью программы ТРИАДА числах вакансий (γ_{ij}), рожденных γ -квантами типа (ij) от распада изомера, и на предположениях относительно требуемой для достижения критического состояния вероятности образования триггерного состояния одной вакансией (число γ). Программа ТРИАДА использована также в целях расчета временных распределений интенсивности и средних времен рождения вакансий γ -квантами, излучаемыми в момент $t = 0$. Из расчетов следует, что временные распределения интенсивности рождения вакансий близки экспоненциальным, поэтому в большинстве случаев ниже используются только средние времена рождения вакансий, равные периоду экспоненты $\bar{\tau}_{ij} = \Lambda_{ij}^{-1}$.

Расчеты выполнены для конкретных вариантов изомерного γ -реактора диаметром от 0,5 до 30 см. Из расчетов следует, что числа вакансий на γ -квант и на распад изомера, а также средние времена рождения вакансий γ -квантами, как это и должно быть, возрастают с увеличением размера активной зоны: сначала быстро, затем медленнее. Числа вакансий на γ -квант и средние времена рождения вакансий в зависимости от типа γ -кванта и диаметра активной зоны изменяются соответственно от 0,52 до 3,11 и от 0,77 до 34 пс. Полные числа вакансий на распад изомера в зависимости от диаметра активной зоны изменяются от 6,26 до 15,82.

Важным элементом динамики изомерного γ -реактора является коэффициент гашения реактивности, представленный в уравнениях (7) множителем α . Оценка коэффициента гашения реактивности выполнена на базе расчета для некоторых вариантов γ -реактора величин γ_{ij} и $\sum_{ij} a_{ij} \gamma_{ij}$

не только для случая нормальной плотности $^{178m2}\text{Hf}$, но и пониженной, и высокой его плотности при соответствующем изменении диаметра активной зоны, удовлетворяющего условию постоянства массы $^{178m2}\text{Hf}$.

Информация о полученных значениях $\sum_{ij} a_{ij} \gamma_{ij}$ позволила делать однозначные заключения о коэффициенте γ (вероятности возбуждения нового триггерного состояния одной вакансией), удовлетворяющем требованию достижения критичности. Указанные значения γ существенно (в 2–2,8 раз) различаются в зависимости от того, хотим ли мы иметь дело с просто критической системой ($K_{эф} = 1$) или с системой, критической по мгновенным триггерным состояниям ($\bar{K}_{эф} = 1$). Коэффициент γ уменьшится в два раза и при увеличении диаметра активной зоны от 0,5 см до 30 см.

3.1. Конструктивная схема и динамические параметры конкретного варианта изомерного γ -реактора

Приведенная выше информация делает возможной прорисовку, так сказать, квазиреалистичного облика γ -реактора и определение его динамических свойств.

Прежде всего, необходимо остановить выбор на наиболее приемлемом размере активной зоны. Следует иметь в виду, что самые жесткие требования к необходимым значениям коэффициента γ предъявляются в быстром импульсном режиме работы γ -реактора. В этом режиме цепную реакцию поддерживают только мгновенные вакансии, а запаздывающие вакансии полностью исключены из процесса. Существенно и то, что работе γ -реактора в быстром импульсном режиме будут всегда предшествовать медленные подготовительные операции, во время которых реализуется полный $K_{эф}$ и, следовательно, необходимо принимать меры к гарантированному удержанию γ -реактора в подкритическом состоянии по полному $K_{эф}$.

Ввиду отмеченных факторов в качестве наиболее приемлемой выбрана активная зона диаметром и высотой 5 см, объемом $98,175 \text{ см}^3$ и массой $^{178m2}\text{Hf}$ 1286,1 г. Эта активная зона имеет более высокий в сравнении с активной зоной в 30 см ресурс резервной реактивности. К тому же она более удобна для операции быстрого схлопывания при генерировании быстрой импульсной цепной реакции.

Конструктивную схему и принцип действия этого γ -реактора в быстром импульсном режиме можно представить, например, следующими.

Имеется двадцать пять круглых пластинок из металлического $^{178m2}\text{Hf}$ диаметром 5 см, толщиной 2 мм. Пластины размещены в трубе и в начальный момент, в целях радикального подавления их ядерного взаимодействия, разведены на значительные расстояния (рис. 2). Примерно однородное смыкание пластинок происходит со скоростью внешней пластинки порядка одной десятой километра, одного или нескольких километров за секунду. В начальный момент коэффициент размножения мгновенных триггерных состояний в системе

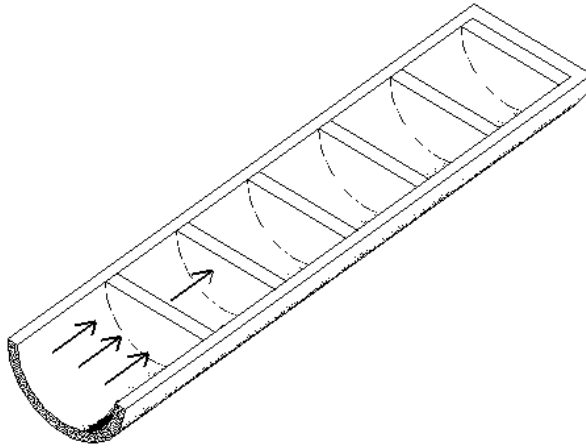


Рис. 2. Схема стартовой геометрии γ -реактора

$\tilde{K}_{эф}$ равен $\sim 0,2$, полный $K_{эф} - \sim 0.6$. В сомкнутом состоянии активной зоны $\tilde{K}_{эф} = 1$, $K_{эф} = 2$. В целях упрощения расчетов предполагалось, что все увеличение $\tilde{K}_{эф}$, вносимое при глобализации активной зоны ($\Delta\tilde{K}_{эф} = 0,8$), происходит на последних 5 см смыкания пластинок.

Прежде чем приступить к расчетам общей динамики указанного варианта γ -реактора нужно отметить, что в этом конкретном γ -реакторе $\sum_{ij} a_{ij}\gamma_{ij}$ и $\sum_{(ij)_{МГН}} a_{ij}\gamma_{ij}$ равны соответственно 14,34 и 6,94. Следовательно, чтобы достигнуть в этом реакторе стационарного критического или мгновенного критического состояния, параметр γ (вероятность возбуждения одной вакансии нового триггерного состояния) должен быть не ниже 0,07 и 0,144 соответственно.

Расчитанное с помощью распределения $F(t)$ время генерации мгновенных триггерных состояний Λ получено равным $5,60 \cdot 10^{-11}$ с. Вследствие малости параметра Λ переходные процессы на мгновенных триггерных состояниях в рассматриваемом γ -реакторе отличаются исключительно большой скоростью изменений и соответственно очень короткой длительностью всплеск энерговыделения.

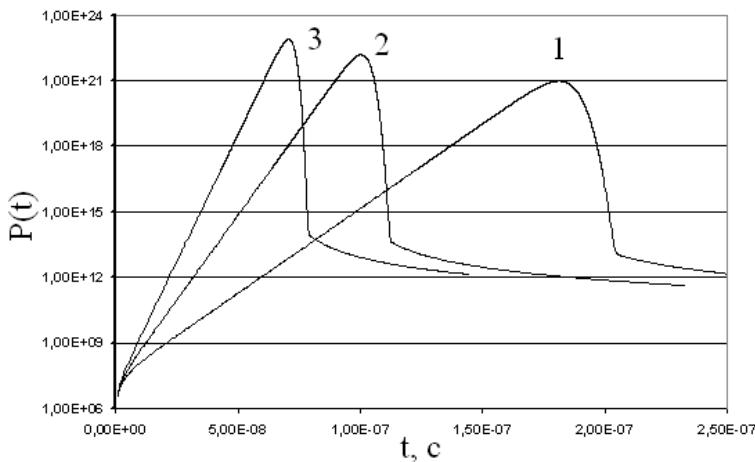


Рис. 3 Ступенчато генерированные импульсы распадов изомера в активной зоне рассматриваемого γ -реактора:
 1 – $\rho_0 = 0,5262$; 2 – $\rho_0 = 0,5362$; 3 – $\rho_0 = 0,5462$

На рис. 3 показаны импульсы распадов изомера в активной зоне γ -реактора, генерированные в условиях ступенчатого ввода реактивности по мгновенным триггерным состояниям на уров-

не 1, 2 и 3 % ($\rho_0 = 0,5262, 0,5362$ и $0,5462$, соответственно). Указанные импульсы распадов изомера сопровождаются значительным выходом энергии, равным соответственно $2,74 \cdot 10^4$; $2,19 \cdot 10^5$ и $7,40 \cdot 10^5$ МДж, и имеют ширины на половине высоты 14, 7 и 4,8 нс.

К сожалению, реализация процедуры ступенчатого ввода реактивности в применении к рассматриваемому γ -реактору сталкивается с практически непреодолимыми затруднениями. Ввиду очень высокого фона спонтанных распадов изомера даже большие скорости смыкания активной зоны оказываются недостаточными для полного преодоления фактора преждевременного развития импульса ядерных распадов.

Сказанное иллюстрирует табл. 2, представляющая быстрые импульсы распадов в γ -реакторе, выход энергии и другие параметры импульсов при старте с уровня мгновенной критичности ($\rho_0 = \beta = 0,5162$) и при скоростях смыкания активной зоны 0,1; 1 и 10 км/с. Как видим, при высоких, но еще достижимых скоростях смыкания активной зоны выход энергии в импульсах не превышает 22 % от полной энергии изомеров.

Таблица 2

Характеристики импульсов распада изомера в зависимости от скорости смыкания активной зоны

Скорость смыкания активной зоны, км/с	0,1	1	10
Скорость ввода реактивности a, c^{-1}	$1,6 \cdot 10^3$	$1,6 \cdot 10^4$	$1,6 \cdot 10^6$
Выход энергии за импульс $Q(\infty)$:			
в МДж	176,9	$0,857 \cdot 10^4$	$0,375 \cdot 10^6$
в долях полной энергии ядер-изомеров	$1,04 \cdot 10^{-4}$ (~0,01 %)	$5,03 \cdot 10^{-3}$ (~0,5 %)	0,220 (22 %)
Ширина импульса на половине высоты, нс	70	21	6,0

Импульсы распадов в γ -реакторе, данные по которым приведены на рис. 3 и в табл. 2, относятся к разряду переходных процессов, развивающихся, практически, всецело под влиянием распада мгновенных триггерных состояний. Но в γ -реакторе, как и в реакторах на основе деления ядер, могут иметь место также стационарные или сравнительно медленно изменяющиеся процессы, в которых наряду с мгновенными триггерными состояниями столь же полноправно проявляют себя запаздывающие триггерные состояния. В случае медленных переходных процессов выход энергии за импульсы равен $2\rho_0/\alpha$, а ширина импульса на половине высоты может составлять секунды, минуты и часы.

Заключение

Прежде всего следует отметить исключительные трудности практической реализации изомерного γ -реактора. На примере изомера $^{178m2}\text{Hf}$, часто обсуждаемого в печати, хорошо видно, насколько серьезны проблемы создания на базе ядерного изомера критического γ -устройства. Кажутся почти непреодолимыми трудности наработки этого изомера, отделения его от ядер в основном состоянии, обращения с этим чрезвычайно радиоактивным веществом. Еще не доказана и от того кажется призрачной надежда на перевод ядер $^{178m2}\text{Hf}$ в триггерное состояние с помощью резонансного механизма NEET.

Тем не менее очень заманчиво было продемонстрировать, какими свойствами обладал бы изомерный γ -реактор, будь он реализован на практике. Это и сделано в докладе. В этих целях разработаны алгоритмы описания статистики, кинетики и динамики γ -реактора на базе $^{178m2}\text{Hf}$, составлены соответствующие вычислительные программы. В результате расчетов показаны замечательные свойства γ -реактора как источника стационарного и в особенности импульсного γ -излучения, а также и дополнительные проблемы, связанные с трудностями ввода в γ -устройстве избыточной реактивности.

Список литературы

1. Collins C. B., et al. Modern Trend in Laser Physics, V. 14, № 2, 2004, p. 154.

2. Колесов В. Ф., Абрамович С. Н., Шмаров А. Е., Интяпина Е. В. Методология расчета гипотетических изомерных γ -реакторов на примере $^{178m2}\text{Hf}$ // ВАЯТ, Сер.: Физика ядерных реакторов, 2007, вып. 2, с. 59–86.
3. Firestone Richard B. Table of Isotopes // Lawrence Berkeley National Laboratory, University of California. Eighth Edition, 1998.
4. Karpeshin F. F., Zhang Jing-Bo, Zhang Wei-Ning. Resonance Conversion as a Catalyzer of Nuclear Reactions. Chinese Physics Letters, 2006, V. 23, № 9, P. 2391–2394.
5. Кипин Дж.Р. Физические основы кинетики ядерных реакторов: Пер. с англ. М.: Атомиздат, 1967.
6. Колесов В. Ф. Аперриодические импульсные реакторы. г. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 1999.
7. Шмаров А. Е. Программа «VISUAL TRIADA» – инструмент численного моделирования совместного переноса гамма-квантов, электронов и позитронов в веществе методом Монте-Карло // VI Межотр. конф. по радиационной стойкости, 14–20 октября 2002 г., г. Саров / Сб. докладов. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2003. С. 29–135.
8. Perkins S. T., Cullen D. E., and Seltzer S. M. Tables and Graphs of Photon-Interaction Cross Sections Derived from the LLNL Evaluated Photon Data Library (EPDL), $Z = 50$ –100. // Lawrence Livermore National Laboratory / Livermore, CA, 1991. Vol. 6. Part B, Rev. 4.
9. Perkins S. T. Cullen D. E. and Seltzer S. M. Tables and Graphs of Atomic Subshell and Relaxation Data Derived from the LLNL Evaluated Atomic Data Library (EADL), $Z = 1$ –100 // Lawrence Livermore National Laboratory / Livermore, CA, 1991. Vol. 30.
10. Ribberfors R. // Phys. Rev. B12(1975)2067.
11. Справочник химика. М., Л.: Химия, 1964. т. 2.
12. Таблицы физических величин: справочник. / Под ред. И. К. Кикоина. М.: Атомиздат, 1976.
13. Физические величины: справочник. / Под ред. И. С. Григорьева и Е. З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991 (с. 224).
14. Гафний: сб. переводов. / Под ред. Л. Н. Комисаровой. М.: Иностран. литер., 1955. С. 7–21.