

KERNFORSCHUNGSZENTRUM

KARLSRUHE

Februar 1972

KFK 1519

Institut für Angewandte Kernphysik

Einfluß der Temperatur auf die mittlere Neutronentransmission von Gold im nicht-aufgelösten Resonanzbereich

E. Schneider

GESELLSCHAFT FUR KERNFORSCHUNG M.B.H.

KARLSRUHE

Als Manuskript vervielfältigt Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

GESELLSCHAFT FÜR KERNFORSCHUNG M.B.H. KARLSRUHE

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Februar 1972

KFK 1519

Institut für Angewandte Kernphysik

Einfluß der Temperatur auf die mittlere Neutronentransmission von Gold im nicht-aufgelösten Resonanzbereich^{×)}

von

Eugen Schneider

Gesellschaft für Kernforschung mbH, Karlsruhe ^{×)}von der Fakultät für Physik der Universität (T.H.) Karlsruhe genehmigte Dissertation.

 $(1 + 1)^{1/2} = (1 + 1)^{1/2} + (1 + 1)^{1/2$

(a) A set of the s

Zusammenfassung

Der Einfluß der Temperatur auf die mittlere Neutronentransmission von Gold wurde bei Zimmertemperatur und 800 ^OC sowohl theoretisch als auch experimentell untersucht. In dem betrachteten Energiebereich von 10-60 keV können bei schweren Kernen einzelne Resonanzen nicht mehr aufgelöst werden; man mißt Mittelwerte über viele Resonanzen.

Zur Berechnung dieser Mittlewerte werden "künstliche" Resonanzquerschnitte über die Monte-Carlo-Methode erzeugt, wobei man die mittleren Parameter, wie Halbwertsbreite und Niveauabstand aus dem aufgelösten Resonanzbereich verwendet. Die experimentelle Transmission konnte nur in ihrem groben Verlauf durch die in der Literatur angegebenen Resonanzparameter beschrieben werden.

Im Gegensatz zu den Rechnungen werden bei den Messungen deutliche Fluktuationen in der Transmission beobachtet. Durch Variation der mittleren Halbwertsbreiten und Niveauabstände wurde versucht, diese an die experimentellen Transmissionen bei Zimmertemperatur und 800 ^OC anzupassen.

Wie eine weitere, hochaufgelöste Messung zeigte, treten bei den Energien, bei denen keine passenden mittleren Resonanzparameter gefunden werden konnten, starke Fluktuationen im Wirkungsquerschnitt auf. Der Verlauf um 24 keV läßt sich durch zwei breite Resonanzen beschreiben, die nicht aus der Compoundkerntheorie verstanden werden können.

Abstract

The influence of the temperature on the average neutron transmission of gold was studied both theoretically and experimentally at room temperature and at 800 °C. For heavy nuclei individual resonances can no longer be resolved in the energy-range of 10 to 60 keV considered here. One measures averages over many resonances.

To calculate those averages "artificial" resonance cross sections have to be generated by Monte-Carlo methods. The average parameters such as level-width and level-spacing are known from the resolved resonance region. The experimental transmission could only roughly be described by the resonance parameters given in the literature.

Contrary to the calculations the measurements show pronounced fluctuations in the transmission. By varying the average widths and spacings we tried to fit the experimental transmissions at room temperature and at 800 °C.

A further measurement with good resolution showed that strong fluctuations occur in the total cross section at energies where no appropriate resonance parameters could be found. The structure near 24 keV was studied in detail and could be fitted by two broad resonances, which cannot be understood in the compound nucleus picture.

.

Ei	nführung	1	
I.	Meßanordnung	5	
	I.1 Neutronendetektor	5	
	I.2 Ofen	7	
II.	Formeln zur Berechnung von Wirkungsquerschnitten	8	
	II.1 Multiniveauformel	8	
	II.2 Einniveauformel	12	
	II.3 Gemittelte Querschnitte	14	
	II.4 Dopplerverbreiterung	16	
III.	Statistisches Verhalten der Resonanzparameter	22	
	III.1 Wigner-Verteilung	22	
	III.2 Porter-Thomas-Verteilung	23	
	III.3 Die Monte-Carlo-Methode	24	
	III.4 Statistische Fehler bei Monte-Carlo-Rechnungen	26	
	III.5 Modellrechnungen mit der Monte-Carlo-Methode	27	
IV.	Monte-Carlo-Rechnungen	32	
	IV.1 Mittlere Resonanzparameter	32	
	IV.2 Beschreibung einer Neutronengeschichte	34	
	IV.3 Ergebnisse der Monte-Carlo-Rechnungen	37	
v.	Meßergebnisse	42	
	V.1 Auswertung der Transmission	42	
	V.2 Einfluß des Ofens	44	
VI.	Vergleich zwischen den Monte-Carlo-Rechnungen und		
	dem Experiment	47	
	VI.1 Verteilungsfunktionen der Mittelwerte der		
	Resonanzparameter	53	
	VI.2 Hochaufgelöste Messung	57	
	VI.3 Intermediäre Struktur bei 24 keV	57	
ы	skussion	65	
77-01	DISKUSSION		
Zusammentassung			
Literaturverzeichnis			

Einführung

Mit der Transmission mißt man den totalen Wirkungsquerschnitt, der die Wahrscheinlichkeit angibt, mit der ein Neutron mit einem Kern irgendeine Reaktion, wie Streuung, Spaltung oder Strahlungseinfang, eingeht. Dieser kann bei bestimmten Energien um mehrere Zehnerpotenzen größer sein als die geometrische Fläche eines Atomkernes. Bei schweren Kernen (A>180) beobachtet man im allgemeinen sehr schmale und eng beieinanderliegende Resonanzen, die den angeregten Zuständen des aus Targetkern und einfallendem Neutron gebildeten Compoundkernes entsprechen.

Die natürliche Resonanzform wird durch die Temperaturbewegung der Targetkerne im Kristallgitter verbreitert. Man bezeichnet diesen Effekt in Analogie zur Linienverbreiterung optischer Spektren als Dopplereffekt.

Der Einfluß der Dopplerverbreiterung auf einzelne isolierte Resonanzen ist in zahlreichen theoretischen und experimentellen Arbeiten sowohl für tiefe als auch für hohe Temperaturen eingehend untersucht worden /1 - 4/, während nur sehr wenige Studien über den Dopplereffekt im nicht-aufgelösten Resonanzbereich existieren /5/.

Obwohl das Auflösungsvermögen der Neutronenspektrometer in den letzten Jahren immer weiter verbessert werden konnte /6,7/, ist es nicht möglich, einzelne Resonanzen von schweren Elementen für Energien über einigen keV aufzulösen. Die beste Zeitauflösung, die an einem Van-de-Graaff-Beschleuniger gegenwärtig erzielt werden kann, beträgt 1.5 nsec; dies entspricht einer Energieunschärfe von $\simeq 25$ eV bei einer Neutronenenergie von 30 keV, wenn man einen Flugweg von 10 m zu Grunde legt. Längere Flugwege sind bei elektrostatischen Beschleunigern nicht sinnvoll, da wegen der quadratischen Abnahme des Neutronenflusses mit dem Abstand sehr lange Meßzeiten erforderlich wären. Bei Linearbeschleunigern ist eine Verbesserung um einen Faktor 2 in der Auflösung gegenüber Van-de-Graaff-Beschleunigern erreichbar, da wegen der hohen Intensität lange Flugwege von 200 m möglich werden. Könnte man das Auflösungsvermögen von der experimentellen Seite noch weiter verbessern, so sind diesem durch die physikalischen Effekte, wie Dopplerverbreiterung und Resonanzüberlapp, insbesondere bei höheren Energien (E > 80 keV) natürliche Grenzen gesetzt. Man kann also im keV-Bereich wegen der großen Niveaudichte nur noch Mittelwerte über viele Resonanzen messen.

Besondere Schwierigkeiten ergeben sich bei der Berechnung von Reaktorgrößen, bei denen die Detailstruktur des Wirkungsquerschnittes von Bedeutung ist, da die individuellen Resonanzparameter nicht mehr direkt gemessen werden können.

Während in einem thermischen Reaktor der Energiebereich unterhalb 100 eV, wo man die individuellen Resonanzparameter noch kennt, von Bedeutung ist, interessiert man sich in schnellen Reaktoren für Neutronenenergien zwischen 500 eV und 50 keV /8/. Der Einfluß der Temperatur auf das Reaktorspektrum ist in diesem Energiebereich am größten, wie Messungen und Rechnungen der Kugelschalentransmission an Wolfram /9/ zeigen.

Bei der Moderation schneller Spaltneutronen ist es möglich, daß ein Bruchteil von ihnen durch die Resonanzen im Einfangsquerschnitt der Reaktormaterialien eingefangen wird. Die effektiven Breiten dieser Resonanzen hängen für schwere Kerne, wie Uran, stark von der Temperatur ab.

In der Reaktortheorie führt man einen Dopplerkoeffizienten ein, der die Reaktivitätsänderung mit der Temperatur als Folge der Dopplerverbreiterung der Resonanzquerschnitte in einem Reaktor angibt.

In dem betrachteten Energiebereich sind die Parameter der einzelnen Resonanzen nicht mehr bekannt. Zur Untersuchung und Beschreibung solcher Resonanzquerschnitte ist man auf statistische Methoden angewiesen. Die mittleren Resonanzparameter, wie Niveauabstand und Halbwertsbreite, sowie die statistischen Gesetze(siehe Kap. III), nach denen die individuellen Parameter verteilt sind, studiert man

- 2 -

in dem Bereich, in dem einzelne Resonanzen aufgelöst und ausgemessen werden können /10,11/. Man nimmt an, daß die so gewonnenen Parameter im nichtaufgelösten Bereich gleich bleiben und die individuellen Halbwertsbreiten bzw. Niveauabstände denselben Verteilungsgesetzen gehorchen.

Zahlreiche Messungen von Gesamt- /12,13/ und Reaktionsquerschnitten /14-16/ weisen jedoch darauf hin, daß diese Extrapolation nicht immer gerechtfertigt ist, da zuweilen Fluktuationen im Wirkungsquerschnitt beobachtet werden, die über die erwarteten Schwankungen im Rahmen der beschriebenen Niveaustatistik weit hinausgehen.

Solche Strukturen, die in den Berechnungen mit den oben erwähnten mittleren Resonanzparametern nicht beschrieben werden können, haben verschiedene Ursachen:

Die Energieabhängigkeit des mittleren Niveauabstandes wird nach dem Fermimodell berechnet, das eine grobe Vereinfachung des Vielteilchensystems darstellt. Die Stärkefunktion S, aus der man die mittlere Halbwertsbreite berechnet, gibt das Verhättnis von mittlerer reduzierter Halbwertsbreite zu mittlerem Niveauabstand an und beschreibt nur Einteilchenresonanzen von der Breite von $\simeq 1$ MeV /17/.

Lokale Flutuationen der empirischen Mittelwerte können in vielen Fällen als Folge ihres statistischen Charakters zur Erklärung der beobachteten intermediären Strukturen im Wirkungsquerschnitt dienen. Durch einen experimentellen Wert wird der mittlere Wirkungsquerschnitt über eine endliche Anzahl von Resonanzen gemessen. Solche Stichprobenmittel von Zufallsgrößen unterliegen naturgemäß statistischen Schwankungen.

Resonanzen, deren Breiten zwischen den Breiten der Compoundresonanzen (~1 eV) und den Breiten der Riesenresonanzen aus dem optischen Modell liegen, kann man als 2-Teilchen-1-Loch-Anregungen (Doorway-Zustände) /18/ interpretieren. Solche einfachen Zustände werden an Kernen in der Nähe abgeschlossener Neutronenoder Protonenschalen erwartet. In der vorliegenden Arbeit sollte am Gold untersucht werden, inwieweit die statistischen Methoden auf den nicht-aufgelösten Resonanzbereich angewandt, speziell in bezug auf die Dopplerverbreiterung, Gültigkeit haben. Um den Einfluß von Interferenzeffekten benachbarter Niveaus untersuchen zu können, wird der Wirkungsquerschnitt einmal über eine Einniveau- und zum anderen mit einer Multiniveauformel berechnet.

Gold-197 eignet sich aus mehreren Gründen für derartige Untersuchungen; es ist das einzige in der Natur vorkommende Goldisotop. Die Rechnungen werden dadurch einfacher und die zu untersuchenden Effekte werden nicht durch andere Isotope gestört.

Die mittleren Resonanzparameter sind in neuerer Zeit im Energiebereich von O - 2000 eV /11/ sehr genau bestimmt worden. Der mittlere Niveauabstand beträgt bei 30 keV 16 eV und die mittlere Halbwertsbreite ergibt sich zu O.5 eV; für die Dopplerbreite (siehe Abschn. II.4) ergeben sich bei dieser Energie und bei Zimmertemperatur 4 eV. Nach den obigen Ausführungen ist es schwierig, mit vertretbarem Aufwand bei einer Messung des totalen Wirkungsquerschnittes von Gold einzelne Resonanzen zu "sehen" und zu analysieren.

Eine ähnliche Niveaudichte wie Gold hat das hauptsächlich als Reaktormaterial in Frage kommende Uran.

Zum Vergleich sind in Tab.I die mittleren Resonanzparameter und die Dopplerbreite bei 30 keV für Gold und Uran-238 zusammengestellt.

	s _o ∙10 ⁴	D [eV]	Γ _γ [eV]	∆ [eV]
Au-197	1.98	16.8	0.13	4
U-238	1.13	17.8	0.022 /19,20/	3.6

Tabelle I: Vergleich der mittleren Resonanzparameter von Uran und Gold

- 4 -

I. Meßanordnung

In Fig. 1 ist der experimentelle Aufbau schematisch dargestellt. Ein gepulster 3 MV van-de-Graaff-Beschleuniger lieferte über die Li⁷(p,n)Be⁷-Reaktion 10 nsec breite Neutronenimpulse für Flugzeitmessungen/21/. Die Goldprobe befand sich bei der Messung sowohl bei Zimmertemperatur als auch bei 800⁰ C in einem Vakuumofen. Um Einstreuungen von den Wänden und von dem Ofen nach Möglichkeit zu verhindern, wurde der Strahl auf einen Durchmesser von 2 cm kollimiert.

Die Ergebnisse der Messung mit geringer Auflösung ($\Delta E = 2.2$ keV bei 30 keV) wurden durch eine weitere Meßreihe mit hoher Auflösung ($\Delta E =$ 90 eV bei 30 keV) bei Zimmertemperatur überprüft. Hierbei wurde der 10 nsec breite Neutronenimpuls durch einen Mobleybuncher auf 1 nsec zusammengepreßt. Um einerseits keine zu langen Meßzeiten in Kauf nehmen zu müssen, und um andererseits eine gute Energieauflösung zu erhalten, wurde ein Flugweg von 4.92 m gewählt.

I.1 Neutronendetektor

Ein Lithium-Glas-Detektor mit 6 % Li⁶ (Ne-9o5) wurde verwendet, um die Neutronen über die Li (n, α) T-Reaktion nachzuweisen. Der Peak, den man im Impulshöhenspektum beobachtet, entspricht den Li (n, α) T-Ereignissen, wobei die Reaktionsprodukte α und Tritium jeweils zusammen im Glas eine Energie von 4.8 MeV abgeben. Der Detektor eignet sich vor allem zum Neutronennachweis bei hohem Gamma-Untergrund, da eine gute Diskriminierung gegen Gammas möglich ist. Die Energie der Neutronen wurde über die Zeit bestimmt, die sie zum Durchlaufen des Flugweges benötigten.



Fig. 1. Experimenteller Aufbau

I.2 Ofen

Zur Messung der Transmission bei erhöhter Temperatur stand ein Vakuum-Ofen mit automatischer Temperatur- und Druckregelung zur Verfügung /22/. Das Gehäuse, bestehend aus einem Aluminiumzylinder, hatte an der Meßstelle ein Neutronenfenster von 1 mm Wandstärke; der einfallende Strahl wurde dadurch nur sehr wenig (~2 - 3 %) geschwächt. Das Heizrohr selbst bestand aus einem o.1 mm starken Vanadiumblech. Der Einfluß des Ofens auf die Goldtransmission konnte, wie Rechnungen ergaben, und wie Vergleichsmessungen ohne Ofen zeigten, vernachlässigt werden. Die Neutronenflüsse mit und ohne Probe wurden gleichermaßen geschwächt, so daß sich bei der Quotientenbildung der Zählraten der Einfluß des Ofens herauskürzte. Während im Innern der Heizzone Temperaturen von 800 ^OC herrschten, wurde das Ofengehäuse auf Zimmertemperatur gehalten. Eine Wasserdurchflußkühlung oberhalb und unterhalb der Neutronenzone führte die auf die Aluminiumwände abgestrahlte Wärme ab. Die Stromzuführungen zu den Heizwendeln wurden mit Teflonbuchsen gegen das Gehäuserohr des Ofens elektrisch isoliert und vakuumgerecht abgedichtet. In die den Aluminiumzylinder abschließenden Deckel, die durch V2A-Schirme gegen zu starke Erwärmung geschützt wurden, kann einerseits ein Quarzfenster zur Beobachtung und andererseits eine bewegliche, vakuumdichte Durchführung eingeschraubt werden. An diesem Durchführungsrohr waren die Leerprobe und die Meßprobe übereinanderhängend angebracht. Mit Hilfe einer Steuereinheit /23/ konnte über diese bewegliche Durchführung die Probe und Leerprobe abwechselnd in den Neutronenstrahl gebracht werden. Direkt an der Transmissionsprobe befand sich ein Chromel-Alumel-Thermoelement, das zur Messung und Regelung der Ofentemperatur diente. Bei Betrieb herrschte im Ofen ein Druck von 2·10⁻⁵ bis 2·10⁻⁶ Torr. Während der Meßdauer von 2 Tagen war die Temperatur an der Probe auf ± 3 Grad konstant.

II. Formeln zur Berechnung von Wirkungsquerschnitten

II.1 Multiniveauformel

Die Herleitung der Wirkungsquerschnittsformeln vollzieht sich in zwei Schritten:

Man versucht den Wirkungsquerschnitt σ mit der asymptotischen Form der Wellenfunktion

$$\Psi_{c}^{(as)} = I_{c} + \Sigma U_{cc} O_{c'}$$
(2.1)

für das System einfallendes Teilchen plus Targetkern zu verknüpfen.Die sogenannten Reaktionskanäle werden durch die Indizes c bzw. c' charakterisiert, die die Art der miteinander reagierenden Teilchen, sowie die Spin- und Bahndrehimpulsquantenzahlen beinhalten /24/. Die Funktionen I_c und O_c sind im wesentlichen ein- und auslaufende Kugelwellen. Das Stoßmatrixelement U_{cc}, stellt die Verbindung zwischen Eingangskanal c und Ausgangskanal c' formal her; sein numerischer Wert hängt von der spezifischen Wechselwirkung ab. Als Folge der Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeit und der Invarianz der Neutronen-Kern-Wechselwirkung gegen Zeitumkehr ist die Stoßmatrix U_{cc}, unitär und symmetrisch.

Erfolgt eine Neutronenreaktion über einen Ausgangskanal c', wie bei Streuung, Spaltung oder Strahlungseinfang, so läßt sich der Wirkungsquerschnitt für jeweils einen Spinzustand J=I±i über die Elemente der Stoßmatrix U_{pc}, durch folgende Formel ausdrücken /25/:

 $\sigma_{nc}^{(J)=\pi\chi_{ng}^{2}} \sum_{s,s'=|I-i|}^{I+i} \sum_{l=|J-s|}^{J+s} \sum_{s'=|J-s'|}^{J+s'} \left| \delta_{c's'l',nsl} - U_{c's'l',nsl}^{J} \right|^{2} (2.2)$

Hierbei bedeuten:

2mX: Neutronenwellenlänge im Schwerpunktsystem

I: Spinquantenzahl des Zielkernes

i: Spinquantenzahl des Neutrons (=1/2)

s: Kanalspin (s=I+i)

1: Bahndrehimpulsquantenzahl

Den statistischen Spinfaktor g_T berechnet man gemäß:

$$g_{J} = \frac{2J+1}{(2I+1)(2i+1)}$$
(2.3)

Gestrichene Größen beziehen sich auf den Ausgangskanal c'.

Den totalen Wirkungsquerschnitt, d.h. den Querschnitt für alle Reaktionen, die bei der betreffenden Energie möglich sind, erhält man nach Summation über alle Ausgangskanäle c' und unter Berücksichtigung der Unitarität von U über:

$$\sigma_{nT} = 2\pi \lambda^2 \Sigma g \sum_{J s=|I-i|}^{I+i} \frac{J+s}{1-Re U_{nn}^J}$$
(2.4)

Experimentell läßt sich der totale Wirkungsquerschnitt sehr genau aus der Transmission bestimmen (siehe Kap. V.1).

Im zweiten Schritt wird die Stoßmatrix mit den Parametern der Resonanzzustände im Wirkungsquerschnitt verknüpft. In den Reaktionstheorien von Kapur und Peirls /26/ bzw. von Eisenbud und Wigner /27/ wird der Konfigurationsraum in einen Außen- und Innenraum aufgeteilt. Die Resonanzparameter, als Eigenwerte und Eigenfunktionswerte der zu lösenden Schrödingergleichung, hängen vom Radius des Innenraumes (Wirkungssphäre) und von den spezifischen Randbedingungen ab /26-28/. Während Kapur und Peirls /26/ energieabhängige und komplexe Randbedingungen und damit energieabhängige Resonanzparameter zulassen, verwenden im Gegensatz dazu Wigner und Eisenbud /27/ reelle und energieunabhängige Randbedingungen und erhalten damit reelle und energieunabhängige Parameter.

Die künstliche Aufteilung des Konfigurationsraumes wird in der S-Matrix-Theorie von Humblet und Rosenfeld /29,30/ vermieden. Die analytische Struktur der S-Matrix, insbesondere ihre Pole, wird mit Hilfe der Funktionentheorie in der komplexen Energieebene studiert.

Bei der Analyse experimenteller Wirkungsquerschnitte wird fast ausschließlich der Wigner-Eisenbud-Formalismus /27/ verwendet, weil man im Prinzip wesentlich weniger Parameter zur Beschreibung von Resonanzquerschnitten benötigt als beim Humblet-Rosenfeld-Formalismus /29/. Zudem sind in dieser Theorie alle Parameter energieunabhängig und reell. Die statistischen Eigenschaften von Halbwertsbreiten und Niveauabständen (s.Kap.III) sind in dieser Darstellung in vielen Arbeiten /31/ eingehend untersucht und beschrieben worden.

Die Verbindung zwischen Stoßmatrix und Resonanzparametern wird über eine Zwischengröße, die R-Matrix, hergestellt/28/:

$$U = O^{-1} (1 - RL)^{-1} (1 - RL^*) O^*$$
(2.5)

Hierbei hängen die Diagonalmatrizen O und L nur von den bekannten Eigenschaften der radialen Neutronenwellenfunktionen (sphärische Hankelfunktionen) im Außenraum ab. Die Diagonalmatrix L läßt sich in Real- und Imaginärteil aufspalten:

$$L = S + iP$$
 (2.6)

Die Elemente S und P werden als Verschiebungsfaktoren und Eindringfak-

toren für den Kanal c bezeichnet(s. z.B. /28/). Die Randbedingungen lassen sich so wählen, daß für 1=0 (s-Wellen) die S streng und für höhere Partialwellen (1>0) näherungsweise verschwinden. Eine Hauptschwierigkeit in der R-Matrix-Theorie besteht darin, daß der Faktor (1-RL)⁻¹ durch Inversion einer Matrix mit unter Umständen sehr vielen Zeilen und Spalten berechnet werden muß. In den meisten praktischen Fällen handelt es sich jedoch um eine vergleichsweise kleine Anzahl von offenen Kanälen und man benötigt nur denjenigen Bereich der Stoßmatrix, der sich auf diese Kanäle bezieht. In den vorliegenden Messungen an Gold in dem Bereich von 15 bis 60 keV beobachtet man nur elastische Steuung und Strahlungseinfang. Die Schwelle für inelastische Neutronenstreuung liegt für Gold bei 77 keV /32,33/.

Thomas /34/ zeigte mit dem Kanal-Eliminationsverfahren, daß in vielen praktischen Fällen die Diagonalelemente der Stoßmatrix in der Form

$$U_{nn} = \exp(2i\xi) \frac{1+iR_{nn}}{1-iR_{nn}}$$
 (2.7)

mit einer "reduzierten" R-Matrix

$$R_{nn} = 1/2 \sum_{\lambda} \frac{\Gamma_{\lambda n}}{E_{\lambda} - E - 1/2i\Gamma_{\lambda \gamma}}$$
(2.8)

geschrieben werden können.

Hierbei bedeuten:

$$\begin{split} & \mathbb{E}_{\lambda}: \text{ Resonanzenergie} \\ & \Gamma_{\lambda n}: \text{ Neutronenbreite} \\ & \Gamma_{\lambda \gamma} = \sum_{i} \Gamma_{\lambda \gamma_{i}}: \text{ Totale Strahlungsbreite} \\ & \text{ i} \end{split}$$

Die Niveauverschiebung ist O gesetzt

Obige Gleichung stellt eine gute Näherung dar, falls wie in unserem Falle nur ein Kanal für elastische Streuung und viele Kanäle für Strahlungseinfang offen sind, falls alle partiellen Strahlungsbreiten viel kleiner sind als der Niveauabstand und falls schließlich die Breitenamplituden der Strahlungskanäle ungefähr symmetrisch um den Wert Null verteilt sind. Die individuellen Strahlungskanäle machen sich nur noch dadurch bemerkbar, daß die Gesamtstrahlungsbreite als Dämpfungsglied im Nenner erscheint.

II.2 Ein-Niveau-Formel

Berücksichtigt man in Gl. (2.8) nur ein Glied (λ) in der Summe, so kommt man unmittelbar auf die Ein-Niveau-Formel für den totalen Wirkungsquerschnitt/35/:

$$\sigma_{nT} = \sigma_{0} \{\cos 2\xi - X_{\lambda} \cdot \sin 2\xi\} + \sigma_{p}$$
(2.9)

mit

$$\sigma_{p} = 4\pi \chi^{2} \Sigma (21+1) \sin^{2} \xi_{1} \qquad (Potential querschnitt) \qquad (2.10)$$

$$\sigma_{o} = 4\pi \chi^{2} \frac{\Gamma_{n}}{\Gamma} \qquad (2.11), \text{ dem Querschnitt in der Resonanz und}$$

$$X_{\lambda} = \frac{2(E-E\lambda)}{\Gamma_{\lambda}}$$
(2.12)

Schreibt man

$$\sigma_{nT} = \sum_{\lambda} \sigma_{0} \{\cos 2\xi - X_{\lambda} \cdot \sin 2\xi\}_{\lambda} + \sigma_{p}, \qquad (2.13)$$

summiert man also über Ein-Niveau-Resonanzen (2.9), so erhält man eine brauchbare Näherung für den Fall weit auseinanderliegender Resonanzen (Γ << <D>; <D>: mittlerer Niveauabstand). Resonanz-Resonanz-Interferenz

ist dabei vernachlässigt.

Die Potentialstreuphasen ξ lassen sich deuten als Streuphasen für eine undurchdringliche ("harte") Kugel mit dem Radius R der Wirkungssphäre. Sie hängen nur von der Bahndrehimpulsquantenzahl 1 ab: $\xi=\xi_1$. Für die verschiedenen Partialwellen ergeben sich aus den Eigenschaften der sphärischen Hankelfunktionen folgende Ausdrücke:

s-Welle:
$$\xi_0 = -kR$$
,
p-Welle: $\xi_1 = \xi_0 - \arctan \xi_{0'}$ (2.14)
d-Welle: $\xi_2 = \xi_0 - \arctan \frac{3\xi_0}{3-\xi_0^2}$
etc.

Höhere Partialwellen als 1=1 liefern in dem betrachteten Energiebereich nur einen sehr kleinen Beitrag zum totalen Wirkungsquerschnitt und werden in den Rechnungen vernachlässigt.

Mit Hilfe der als energieunabhängig definierten, reduzierten Neutronenbreite $\Gamma_{n,s}^{l}$ läßt sich die Energieabhängigkeit der Neutronenbreite wie folgt explizit schreiben:

$$\Gamma_{n} = \sqrt{\frac{E}{E}} \sum_{11,s} v_{1}(E) \Gamma_{n,s}^{1}$$
(2.15)

 E_1 ist dabei die konventionelle Bezugsenergie von 1 eV und s der Kanalspin. Die v₁ heißen Eindringfaktoren, denn sie beschreiben die Durchlässigkeit der Zentrifugalbarriere, für

s-Wellen: v = 1 ,

p-Wellen:
$$v_1 = \frac{\xi_0}{1+\xi_0^2}$$

d-Wellen:
$$v_2 = \frac{\xi_0^4}{9+3\xi_0^2+\xi_0^4}$$

Die Summe in Gl. (2.15) erstreckt sich über alle 1- und s-Werte, die mit der Dreieckbedingung der Zusammensetzung von Drehimpulsen verträglich sind:

$$|1-s| \leq J \leq 1+s$$
 $|I-1/2| \leq s \leq I+1/2$ (2.17)

und $\Pi = (-1)^{1}$

Hierbei bedeuten J den Spin und Π die Parität der Resonanz.

II.3 Gemittelte Querschnitte

Der über das Energieintervall ΔE gemittelte Querschnitt sei definiert als:

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{\Delta E} \int \sigma(E) dE$$
 (2.18)

Das Energieintervall ∆E muß eine genügende Anzahl von Resonanzen (D≪∆E) enthalten, da sonst Formel (2.20) nicht angewendet werden darf.

Nimmt man an, das Verhältnis von mittlerer reduzierter Breite zu Niveauabstand, die sog. Stärkefunktion, hänge für jede (l,s,J)-Kombination nur von der Bahndrehimpulsquantenzahl 1 ab,

- 14 -

(2.16)

$$\frac{\langle \Gamma_{n,s}^{1} \rangle}{D_{J}} = S_{1}, \qquad (2.19)$$

so erhält man mit (2.13), d.h. unter Vernachlässigung von Niveau-Niveau-Interferenzen:

$$<\sigma> = 2\pi^2 \lambda \chi_1 \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) S_1 v_l \cos 2\xi_1 + \sigma_p;$$
 (2.20)

 $2\pi X_1$ ist die Schwerpunktswellenlänge für E = 1 eV.

Der mittlere Niveauabstand in Gl. (2.19) hängt von J über die Beziehung

$$D_{T} \propto 1/(2J+1)$$
 (2.21)

ab. Die schwache Energieabhängigkeit von D wird mit /36/

$$D_{J}(E) = D_{J}(0) \exp(-E/\theta)$$
 (2.22)

angegeben, wobei $D_J(o)$ der mittlere Niveauabstand bei thermischen Energien und Θ die Kerntemperatur ist.

Den durch (2.20) gegebenen Verlauf des mittleren Gesamtquerschnitts erwartet man also zu beobachten, wenn man mit einer Auflösung mißt, deren Breite ΔE jeweils so viele Resonanzen erfaßt, daß die Mittelwerte $\Gamma_{n,s}^1$ den Erwartungswerten < $\Gamma_{n,s}^1$ > hinreichend nahe kommen.

II.4 Dopplerverbreiterung

Die in Abschnitt II.2 abgeleiteten Formeln für den Wirkungsquerschnitt enthalten die Relativenergie der reagierenden Teilchen und gelten in der Form nur für ruhende Targetkerne. Um zu realistischen Wirkungsquerschnittsformeln zu gelangen, müssen die Gleichungen (2.4) und (2.9) in Analogie zur Linienverbreiterung optischer Spektren bei thermisch bewegten Atomen noch dopplerverbreitert werden. Dazu führt man einen effektiven Wirkungsquerschnitt σ_{Δ} derart ein, daß man aus ihm und dem einfallenden Fluß die Reaktionen pro Zeiteinheit (Reaktionsrate) in gleicher Weise errechnen kann, wie bei ruhenden Targetkernen:

Reaktionsrate: $n_{O}\vec{v}N\sigma_{\Delta} = \int N(\vec{u}) n_{O}\vec{w}\cdot\sigma(\vec{w}) d^{3}\vec{u}$ (2.23)

 $\vec{w} = \vec{v} - \vec{u} = \text{Relativgeschwindigkeit}$

Mit $f(\vec{u}) = N(\vec{u})/N$, der Geschwindigkeitsverteilung der Targetkerne, erhält man für den dopplerverbreiterten Wirkungsquerschnitt:

$$\sigma_{\lambda} = 1/v \int f(\vec{u}) \cdot \vec{w} \cdot \sigma(\vec{w}) d^{3}\vec{u}$$
(2.24)

Setzt man die Maxwell-Boltzmann'sche Geschwindigkeitsverteilung

$$f(\bar{u},T) = (M/2\pi kT)^{3/2} \exp\{-(M/2kT) \cdot u^2\}$$
(2.25)

in den allgemeinen Ansatz (2.24) ein und transformiert man die Geschwindigkeiten auf Polarkoordinaten im Geschwindigkeitsraum, so erhält man nach Ausführung der Integration über die Winkel:

$$\sigma_{\Delta}(E) = 1/2 \sqrt{\frac{M}{\pi m k T}} \cdot 1/E \int_{0}^{\infty} dE' \sqrt{E'} \sigma(E') \left(\exp\{-\frac{M}{m k T} (\sqrt{E} - \sqrt{E'})^{2} \} - (2.26) \right)$$

$$-\exp\{-\frac{M}{mkT}(\sqrt{E}+\sqrt{E'})^{2}\}\right)$$

 $(E=\mu v^2/2, E'=\mu w^2/2, \mu=reduz.$ Masse von Neutron und Kern)

Dieser Ausdruck ist exakt; man kann ihn noch vereinfachen, indem man den 2. Exponentialterm in der Klammer vernachlässigt, da er für Resonanzen im keV-Bereich und schwere Kerne immer kleiner als exp(-10⁷) wird.

Gleichung (2.26) reduziert sich dann mit der Abkürzung:

$$\Delta = 2\sqrt{\frac{EkT\mu}{M}} , \qquad (2.27)$$

der sog. Dopplerbreite, auf

$$\sigma(E) = \frac{1}{\Delta\sqrt{\pi E'}} \int_{0}^{\infty} dE' \sqrt{E'} \sigma(E') \exp\{-\frac{4E(\sqrt{E'}\sqrt{E'})^{2}}{\Delta^{2}}\}.$$
 (2.28)

Entwickelt man $\sqrt{E'}$ um $\sqrt{E'}$:

$$\sqrt{E'} = \sqrt{\{1 + (E' - E) / E\}E} \simeq \{1 + (E' - E) / 2E\}\sqrt{E}$$
(2.29)

und berücksichtigt man, daß die Geschwindigkeit der Targetkerne gegenüber den Neutronengeschwindigkeiten im keV-Bereich sehr klein ist ($E^{\simeq}E'$), so erhält man schließlich:

$$\sigma_{\Delta}(E) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\Delta} \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma(E') \exp\{-\frac{(E'-E)^2}{\Delta^2}\} dE'$$
(2.30)

Die in Gl.(2.27) formal eingeführte Dopplerbreite läßt sich auch anschaulich ableiten und deuten: Drückt man in Gl.(2.23) die Relativgeschwindigkeit durch die entsprechende Energie aus:

$$E' = (1/2) \cdot \mu \left| \vec{v} - \vec{u} \right|^2 = (1/2) \cdot \mu v^2 \left(1 - \frac{2\vec{u}\vec{v}}{v^2} + \cdots \right)$$
(2.31)

(μ = reduzierte Masse von Neutron und Kern) und vernachlässigt man alle Glieder 2. und höherer Ordnung in u/v, so erhält man mit E= $\mu v^2/2$ und $\vec{u} \cdot \vec{v}$ = u·v (parallele Flugrichtung von Neutron und Zielkern)

 $E' = E - \sqrt{2\mu E} u$. (2.32)

Die thermische Energie pro Freiheitsgrad hängt mit der mittleren kinetischen Energie über die Beziehung kT = $(M/2)\overline{u}^2$ zusammen. Damit läßt sich das mittlere Geschwindigkeitsquadrat der Targetkerne durch deren Temperatur ausdrücken:

$$\overline{u}^2 = 2kT/M \tag{2.33}$$

Man erhält dann für die Relativenergie:

$$E' = E - 2\sqrt{E\mu kT/M}$$
 (2.34)

m = Masse des Neutrons

M = Masse des Targetkernes

k = Boltzmann-Konstante

Die Relativenergie für Kerne, die sich mit der mittleren thermischen Energie \overline{u} in Strahlrichtung bewegen, wird um die Dopplerbreite Gl.(2.27) verringert

Der in Formel (2.30) beschriebene Wirkungsquerschnittverlauf gilt nur für ein freies Gas, da zu dessen Herleitung die Geschwindigkeitsverteilung für freie, nicht miteinander wechselwirkende Atome verwendet wurde. Diese "Idealgas-Näherung"/37-42/ kann, wie Lamb/3/ gezeigt hat, auch für einen Festkörper übernommen werden; die in der Dopplerbreite Δ vorkommende Temperatur muß durch eine effektive Temperatur T^{*}>T, die die Bindung der Targetkerne im Kristallgitter berücksichtigt, ersetzt werden.

Eine Bedingung für die Anwendbarkeit der Idealgas-Näherung auf einen Festkörper ist die Ungleichung

$$\Gamma + \Delta >> 2\theta \tag{2.35}$$

Γ ist die durch Formel (2.15) definierte natürliche Resonanzbreite, Δ die durch Gl.(2.27) zu bestimmende Dopplerbreite. θ ist die Debye-Temperatur/43/ der Probe in Energieeinheiten.

Lamb gibt eine Kurve von T^*/T als Funktion der Variablen θ/T an. Ist das Verhältnis der Temperatur T des Festkörpers zu dessen Debye-Temperatur θ größer als 1, dann ist die effektive Temperatur T^* kleiner als 1,1°T, und ist das Verhältnis größer als 2, dann besteht zwischen beiden Temperaturen praktisch kein Unterschied mehr: $T^* \simeq T$.

Setzt man die Werte von Gold (θ =180 ^OK) in Gl.(2.35) ein, so erhält man z.B. bei 30 keV:

4.6 >> 0.03 eV,

die von Lamb angegebene Bedingung für schwache Bindung ist also sehr gut erfüllt. Für die beiden effektiven Temperaturen bei Zimmertemperatur und bei 800 [°]C ergeben sich 304 [°]K bzw. 1073 [°]K.

In zahlreichen Arbeiten im aufgelösten Resonanzbereich konnte die Lamb'sche Theorie bestätigt werden. Jackson und Lynn/44/ untersuchten die 6.71 eV-Resonanz von Osmium-189 bei Zimmertemperatur und 105 ^OK. Ihre Berechnungen nach dem Lamb'schen Modell der effektiven Temperatur ergeben einen zufriedenstellenden Fit ihrer experimentellen Kurven.

Die Resonanz bei 6.24 eV in Antimon-121 wurde von Mateiciuc u.a./45/ bei Zimmertemperatur und der Temperatur des flüssigen Stickstoffs (108 $^{\circ}$ K) ausgemessen. Die Transmission für die 300 $^{\circ}$ K-Probe konnten sie gut beschreiben, während bei 108 $^{\circ}$ K die theoretische Kurve etwas vom experimentellen Verlauf abweicht.

Eine ausgedehntere Studie über den Dopplereffekt führte Bernabei/4/ an der 4.14 eV Resonanz bei Wolfram-182 für 4 verschiedene Temperaturen (4.2°K, 77.8°K, 296 und 825°K) durch. Bei der Beschreibung der Dopplerverbreiterung verglich er die Theorie von Lamb/3/ und die verfeinerte Theorie von Nelkin und Parks/46/. Er fand, daß das Lamb'sche Modell in 1. Ordnung einen guten Fit der experimentellen Daten bei allen Temperaturen ermöglicht. Die Übereinstimmung der Theorien mit dem Experiment wird umso besser, je höher die Temperatur der Probe ist.

Abweichungen von der Lamb'schen Theorie fand Albold/22/ bei der Untersuchung der 6.68 eV Resonanz von Uran-238 im Uranoxid. Hierbei muß der Einfluß der Molekülbindung auf die Gitterdynamik mitberücksichtigt werden. Zudem ist bei Uran die Bedingung schwacher Bindung für kleine Energien (≃eV) nicht erfüllt.

Die Lamb'sche Näherung für schwache Bindung scheint nach den obigen Ausführungen die Dopplerverbreiterung der Resonanzen im keV-Bereich für Gold bei Zimmertemperatur und 800 ^OC hinreichend gut zu beschreiben und wird in den Berechnungen der effektiven Wirkungsquerschnitte zu Grunde gelegt.

Alle in Abschnitt (II.2) angegebenen Wirkungsquerschnittsformeln müssen durch eine Faltung mit einer Gaußverteilung nach Formel(2.30) dopplerverbreitert werden, da für Gold im keV-Bereich die Temperaturbewegung der Targetkerne die Breite der Resonanz entscheidend beeinflußt. Bei 30 keV beträgt die mittlere natürliche Halbwertsbreite o.5 eV, während die Dopplerbreite ~ 4 eV, also das 8-fache, beträgt.

Im allgemeinen Fall läßt sich das Integral (2.30) nicht geschlossen ausführen, es müssen numerische Methoden angewandt werden. Digitale Rechenmaschinen bieten die Möglichkeit, solche Faltungen auch in Monte-Carlo-Rechnungen bei einem vertretbaren Zeitaufwand durchzuführen.

Der dopplerverbreiterte Wirkungsquerschnitt für ein einziges Niveau ergibt sich zu /35/:

$$\sigma_{\Delta} \simeq \sigma_{0} \{ \psi \cdot \cos 2\xi - \phi \cdot \sin 2\xi \} + \sigma_{p}$$
(2.36)

mit den in Ref /47,48/ tabellierten Funktionen (Voigt-Profilen):

$$\psi(\mathbf{x},\beta) = \frac{1}{\beta\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{-\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{y}}{\beta}\right)^2\} \frac{d\mathbf{y}}{1+\mathbf{y}^2}$$
(2.37)

$$\phi(\mathbf{x},\beta) = \frac{1}{\beta\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{-\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{y}}{\beta}\right)^2\} \frac{ydy}{1+y^2}$$
(2.38)

Hierbei bedeutet:

1

$$\beta = \frac{2\Delta}{\Gamma}$$
(2.39)

Ansonsten behalten alle Parameter die gleiche Bedeutung wie in Kapitel II.2.

III. Statistisches Verhalten der Resonanzparameter

Bei der Berechnung des Wirkungsquerschnittes aus den obigen Formeln müssen die Resonanzparameter, wie die Halbwertsbreite und die Niveauenergie bekannt sein. Im nichtaufgelösten Resonanzbereich ist man auf statistische Methoden angewiesen. Man nimmt an, daß die im aufgelösten Bereich verifizierten Verteilungen – die Porter-Thomas-Verteilung für die Halbwertsbreiten und die Wigner-Verteilung für die Niveauabstände – im gesamten Energiebereich Gültigkeit haben.

III.1 Wigner-Verteilung

Bei der Untersuchung des statistischen Verhaltens der Abstände benachbarter Kernniveaus, die zu einer definierten Parität und zu einem bestimmten Gesamtdrehimpuls gehören, schlug Wigner/49/ eine Verteilung der Form vor:

> $p(D) dD = 2xe^{-x^2} dx \qquad (3.1)$ mit x = $(\sqrt{\pi}D)/(2 < D^2)$, <D> mittlerer Niveauabstand

Schon vor Kenntnis dieses Verteilungsgesetzes war aus vielen Beispielen in der Quantenmechanik bekannt, daß die Wahrscheinlichkeit für ein Zusammenfallen zweier Niveaus gleich Null ist. Man beobachtet einen sog. Abstoßungseffekt bei Resonanzen mit gleichen Paritäten und Gesamtspins.

Die Wigner-Verteilung ist eine sehr gute Näherung der streng theoretisch aus der Statistik der Hamilton-Matrizen abgeleiteten Gaudin-Mehta-Verteilung/50/. Sie folgt allein aus der Unabhängigkeit der Matrixelemente und der Invarianz der Hamilton-Matrix H_{ij} gegen orthogonale Transformationen. Letztere Bedingung besagt, daß alle Arten von Wechselwirkungen gleich stark berücksichtigt werden. Die Unabhängigkeit stellt eine starke Vereinfachung des Vielteilchenproblems dar, da sie die Vernachlässigung der kollektiven Eigenschaften des Kernes beinhaltet. Zahlreiche Histogramme von experimentellen Daten aus dem aufgelösten Resonanzbereich bestätigen die Wigner-Verteilung/51/.

III.2 Porter-Thomas-Verteilung

Die reduzierten Halbwertsbreiten $\Gamma_n^{\circ} = \Gamma_n / \sqrt{E}$ für Resonanzen mit demselben Drehimpuls und derselben Parität fluktuieren sehr stark. Für ihre Verteilung fanden Porter und Thomas /52/ bei der statistischen Analyse vieler Resonanzen mehrerer Nuklide folgende Form:

$$p(\Gamma_n)d\Gamma_n = \frac{e^{-x}}{\sqrt{\pi x}}, \qquad (3.2)$$

mit x = $\Gamma_n / (2 < \Gamma_n >)$, $< \Gamma_n >$ = mittlere Halbwertsbreite

und entspricht einer χ^2 -Verteilung mit einem Freiheitsgrad.

Die reduzierten Halbwertsbreiten, wie sie im Experiment beobachtet werden, hängen mit den aus der R-Matrix-Theorie abgeleiteten Breitenamplituden $\gamma_{\lambda n}$ über die Beziehung

$$\Gamma_{\lambda n} = 2P\gamma_{\lambda n}^2$$
(3.3)

zusammen, wobei

$$\gamma_{\lambda n} \simeq \int x_{\lambda} \Phi_n \, \mathrm{dS}$$
 (3.4)

als (3A-1)-dimensionales Oberflächenintegral über das Produkt der Wellenfunktion X_{λ} für den Zustand λ und der Kanalwellenfunktion Φ_n mit A Teilchen im Compoundsystem dargestellt werden kann. Wegen der starken Wechselwirkungen im Kern nimmt man an, daß die X_{λ} sehr kompliziert sind. Den Integrationsbereich für das Matrixelement $\gamma_{\lambda n}$ kann man sich in viele Unterbereiche des Konfigurationsraumes mit den linearen Dimensionen von etwa einem Fermi aufgeteilt denken. Das Vorzeichen eines solchen Beitrages wird mit gleicher Wahrscheinlichkeit positiv oder negativ sein. Wegen der starken Oszillation von X_{λ} über die Ausdehnung einer solchen fiktiven Zelle kann man annehmen, daß die Matrixelemente für die benachbarten Zellen sowohl im Vorzeichen als auch im Absolutbetrag nicht voneinander beeinflußt werden, d.h.sie sind voneinander unabhängig. Unter diesen Voraussetzungen kann man bei sehr vielen Zellen den zentralen Grenzwertsatz der Statistik anwenden/53/. Danach sind die reduzierten Breitenamplituden um den Mittelwert Null normalverteilt.

Kann man für eine Zufallsgröße eine Normalverteilung

$$p(\gamma_{\lambda n}) d\gamma_{\lambda n} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\gamma_{\lambda n}^2}} \exp -(\gamma_{\lambda n}/\langle \gamma_{\lambda n} \rangle)^2 d\gamma_{\lambda n}$$
(3.5)

annehmen, so ergibt sich für das Quadrat der Zufallsgröße genau die oben angeführte Porter-Thomas-Verteilung/54/.

III.3 Die Monte-Carlo-Methode

Im Folgenden soll die Monte-Carlo-Methode kurz skizziert werden, soweit sie zur Berechnung von gemittelten Wirkungsquerschnitten benötigt wird/55/:

Falls p(x) dx die Wahrscheinlichkeit dafür angibt, daß x in das Intervall (x,x+dx) fällt, und wenn gilt:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(\xi) d\xi = 1 , \qquad (3.6)$$

dann bestimmt die Integralgleichung

$$\mathbf{r} = \mathbf{P}(\mathbf{x}) = \int_{-\infty}^{\mathbf{x}} \mathbf{p}(\xi') d\xi'$$
(3.7)

x eindeutig als Funktion von r; darüberhinaus fällt x mit der Wahrscheinlichkeit $p(x) \cdot dx$ in das Intervall (x,x+dx), falls r im Intervall $o \le r < 1$ gleichverteilt ist. Man kann sich also ein Ensemble von x-Werten mit der Verteilung $p(x) \cdot dx$ verschaffen, indem man im Intervall (0,1) gleichverteilte r-Werte "auswürfelt" und durch Auflösung von (3.7) die zugehörigen x-Werte bestimmt.

Für die Wigner-Verteilung läßt sich das Integral geschlossen ausführen. Setzt man Gl.(3.1) in die Integralgleichung (3.7) ein, so erhält man:

$$\mathbf{r} = \int_{0}^{\mathbf{x}} 2\xi e^{-\xi^{2}} d\xi = 1 - e^{-\mathbf{x}^{2}}$$
(3.8)

Die Wigner-Verteilung ist nur für positive Werte definiert. Die Auflösung von Gl.(3.8) nach x ergibt mit x = $(\sqrt{\pi}D)/(2 < D>)$ den nach Wigner verteilten Niveauabstand:

$$D = \frac{2 < D}{\sqrt{\pi}} \sqrt{-\ln(1-r)}$$
(3.9)

Zur Erzeugung der reduzierten Halbwertsbreiten aus der Porter-Thomas-Verteilung kann man obiges Verfahren nicht anwenden, da das Integral (3.7) auf eine transzendente Gleichung führt:

$$r = \int_{0}^{x} \frac{e^{-x'}}{\sqrt{\pi x'}} dx' = \operatorname{erf} \sqrt{x'}, \qquad (3.10)$$

mit der Fehlerfunktion erf \sqrt{x} /53/, die nicht nach x aufgelöst werden kann.

Am zweckmäßigsten wendet man hier das von-Neumann'sche Verfahren an. Dabei bildet man den Variablenbereich $o \le x < \infty$ auf den Bereich $o \le \xi < 1$, die Verteilungsfunktion auf den Bereich $o \le p(\xi) < 1$ ab.

Mit der Transformation:

$$\xi = \frac{\sqrt{x}}{1+\sqrt{x}} \tag{3.11}$$

- 25 -

Z.B. erhält man aus der Porter-Thomas-Verteilung (3.2)

$$p(\xi) d\xi = 0.560 \frac{e^{-(\frac{\xi}{1-\xi})^2}}{(1-\xi)^2} d\xi. \qquad (3.12)$$

Der Faktor 0.560 bewirkt, daß $p(\xi)$ am Maximum gleich 1 wird. Beim von Neumann'schen Rejektionsverfahren wird nun eine gleichverteilte Zufallvariable ξ ausgewürfelt und damit $p(\xi)$ berechnet. Erfüllt eine zweite Zufallsvariable 0 $\leq \zeta < 1$ die Ungleichung

$$\zeta \leq p(\xi), \qquad (3.13)$$

dann wird die Variable ξ zur Berechnung von :

$$\Gamma = 2 \cdot \langle \Gamma \rangle \left(\frac{\xi}{1 - \xi} \right)^2$$
 (3.14)

angenommen, im anderen Fall wird ξ zurückgewiesen und zwei neue Zufallvariablen ζ und ξ ausgewürfelt u.s.f., bis obige Ungleichung (3.13) erfüllt ist.

III.4 Statistische Fehler bei Monte-Carlo-Rechnungen

Der Wirkungsquerschnitt bzw. die Transmission (Größe x) werde aus den bekannten mittleren Parametern N mal berechnet. Man faßt nun diese N-Werte in Gruppen zu je 50 zusammen und berechnet die Gruppenmittelwerte x, zu:

$$x_{i} = \frac{1}{n_{i}} \sum_{j=1}^{n_{i}} x_{j}$$
 (n_i = 50) (3.15)

x, ist dabei das Ergebnis der j-ten Monte-Carlo-Geschichte in der i-ten Gruppe.

Der Mittelwert der Monte-Carlo-Rechnung ergibt sich zu:

$$\langle \mathbf{x} \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{N} \mathbf{x}_{i}}{\sum_{i=1}^{N} \mathbf{x}_{i}}; \qquad (3.16)$$
$$\sum_{i=1}^{N} \mathbf{x}_{i}$$

Die Unsicherheit des Mittelwertes <x> ist gegeben durch die Quadratwurzel aus der Varianz, d.h. als Erwartungswert der mittleren quadratischen Abweichung.

$$\Delta \mathbf{x} = \sqrt{\langle (\mathbf{x} - \langle \mathbf{x} \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\frac{1}{N(N-1)} \sum_{i=1}^{N} (\mathbf{x}_i - \langle \mathbf{x} \rangle)^2}.$$
 (3.17)

III.5 Modellrechnungen mit der Monte-Carlo-Methode:

Die vorliegende Monte-Carlo-Analyse dient zum Verständnis der Einflüsse von Resonanzquerschnitten auf die Transmission einer dicken Goldprobe bei verschiedenen Temperaturen. Illustrative Berechnungen mit Stufenquerschnitten, die dieselben Mittelwerte des totalen Querschnittes liefern, wie man sie über die Stärkefunktion erhält (siehe Abschnitt II.3), sind in Fig. 5 dargestellt.

Rechnungen mit Stufenquerschnitten eignen sich auch zum Testen des Monte-Carlo-Programmes, da sich die Mittelwerte von Wirkungsquerschnitt und Transmission in diesem Falle analytisch berechnen lassen, und somit mit den Monte-Carlo-Werten und deren statistischen Fehlern direkt verglichen werden können.



Fig. 2. Stufenquerschnitt für Modellrechnungen

Der Wirkungsquerschnitt /56/ setzt sich zusammen aus dem Potentialquerschnitt (Breite: D- Γ), und in der Resonanz (Breite: Γ) aus dem Potentialquerschnitt $\sigma_{_{D}}$ plus Resonanzanteil $\hat{\sigma}$ (Fig. 2).

Aus diesem Wirkungsquerschnittverlauf berechnet man den Mittelwert zu:

$$\langle \sigma \rangle_{\text{anal}} = \sigma_{p} + \frac{\Gamma}{D} \hat{\sigma};$$
 (3.18)

Für die mittlere Transmission erhält man:

$$\langle T \rangle_{anal} = e^{-n\sigma} \{ 1 - \frac{\Gamma}{D} (1 - e^{-n\hat{\sigma}}) \}$$
 (3.19)

Bei den Monte-Carlo-Rechnungen wird so verfahren, daß sowohl der mittlere totale, sowie der Potentialquerschnitt und das Verhältnis $S = \Gamma/D$ eingegeben und daraus über Formel (3.18) der Resonanzanteil $\hat{\sigma}$ berechnet wird.

Bei einem Test des Monte-Carlo-Programmes ergab sich, daß für \simeq 70 % aller Fälle die analytisch berechneten Werte innerhalb der Fehlergrenzen der Monte-Carlo-Werte liegen, die der Standardabweichung entsprechen.

In Fig. 3 ist die Transmission in Abhängigkeit des Verhältnisses $S = \Gamma/D$ für vier verschiedene Probendicken dargestellt. Für den mittleren totalen


Fig. 4. Transmission in Abhängigkeit der Probendicke für verschiedene T/D

Querschnitt werden 14 barn, für den Potentialquerschnitt 9 barn (Gold bei 30 keV) eingegeben.

Für kleine Probendicken n < 0.01 Kerne/barn fallen die Monte-Carlo-Werte mit den analytisch berechneten zusammen. Es gilt:

$$e^{-n\langle\sigma\rangle} \simeq \langle e^{-n\sigma} \rangle , \qquad (3.20)$$

d.h. der Einfluß der Resonanzstruktur auf die Transmission ist vernachlässigbar. Kommt man in die Grössenordnung der mittleren freien Weglänge, dann werden die Einflüsse der Resonanzen immer stärker und zwar umso empfindlicher, je dicker die Probe und je kleiner das Verhältnis Γ/D wird, d.h. je "aufgerauhter" der Wirkungsquerschnitt wird.

Infolge des nicht-linearen Zusammenhanges zwischen Transmission und Wirkungsquerschnitt kann man die mittlere Transmission < T> nicht über den mittleren Wirkungsquerschnitt berechnen:

$$= e^{-n < \sigma >}$$
 (3.21)

Wie stark die Abweichung von der detaillierten Struktur des Wirkungsquerschnittes abhängt, soll in Fig. 4 illustriert werden. Die unterste Kurve repräsentiert das exponentielle Gesetz für einen konstanten Querschnitt, während die Kurven mit abnehmendem Verhältnis I7/D drastisch von

$$\mathbf{T} = \mathbf{e}^{-\mathbf{n} < \sigma >} \tag{3.22}$$

abweichen.

Bemerkenswert ist, daß bei allen Kurven der mittlere totale Querschnitt gleich ist.

Die Verhältnisse, wie man sie für eine dicke (0.0808 Kerne/barn) Goldprobe erwartet, zeigt Abb. 5. Der mittlere totale, sowie der Potentialquerschnitt werden über die in Abschnitt II.3 angegebenen Formeln in Abhängigkeit der Energie berechnet und den Monte-Carlo-Rechnungen zugrunde



gelegt. Die Resonanzbreiten werden im wesentlichen ³urch die Dopplerbreite bestimmt.

Die beiden unteren Kurven stellen die exponentielle Transmission für vollkommen glatten Wirkungsquerschnitt jeweils für Zimmertemperatur und 800° C dar.

Während der Unterschied in den unteren Kurven nur durch die verschiedenen Probendicken bedingt ist, werden die Monte-Carlo-Werte (obere Kurven) hauptsächlich von der Resonanzstruktur bestimmt; die Transmission für 800[°] C wird kleiner relativ zur Transmission bei Zimmertemperatur.Bei niedrigen Energien überwiegt der Resonanzeffekt, was sich in einer Zunahme der Transmission wiederspiegelt. Da sich mit zunehmender Neutronenenergie die Resonanzen immer mehr überlappen, verschwindet der Einfluß bei hohen Energien. Beide Kurven überschneiden sich dort, wo die Probenausdehnung den Resonanzeinfluß kompensiert.

Alle Kurven stellen Ergebnisse der analytischen Rechnungen (exakt) dar, während die Punkte samt Fehlerbalken über Monte-Carlo-Rechnungen (Stichprobengröße: je 10 000) ausgewürfelt wurden.

IV.1 Mittlere Resonanzparameter

Messungen im aufgelösten Resonanzbereich aus dem Jahre 1960 /57/ über die Selbstindikationsmethode ergaben für Gold einen mittleren Niveauabstand von 15,8 eV, wenn man sich nur auf den Energiebereich von 600 - 900 eV beschränkte. Unterhalb 600 eV ergibt die Steigung der Kurve für die Anzahl der Niveaus aufgetragen über der Energie einen mittleren Niveauabstand von 16.8 eV. Dieser Wert scheint auch für größere Energien (>900 eV) der richtigere zu sein.

Julien et al. /58/ analysierten im Energiebereich von 10 - 1000 eV 63 Resonanzen. Durch Kombination von totalen Einfangsdaten mit Transmissionsdaten konnten

sie den Spin für 60 Resonanzen identifizieren, 26 Resonanzen hatten den Spin J = 2 und 12 den Spin J = 1. Somit konnte die Stärkefunktion für jeden Spinzustand getrennt untersucht werden, da mindestens 10 Resonanzen /59/ eine hinreichende statistische Genauigkeit liefern. Sie fanden dabei eine spinabhängige Stärkefunktion und leiteten aus ihrer Analyse die Beziehung:

$$S_{O}(J=2) = 2.2 \cdot S_{O}(J=1)$$

ab. Die totale Strahlungsbreite konnte für alle Resonanzen als konstant ($\Gamma_{_{\rm V}}$ = 125 meV) angenommen werden.

In einer späteren Arbeit /11/ dehnten sie die Analyse von 1000 auf 2000 eV bei gleicher Zeitauflösung aus und konnten damit die statistischen Eigenschaften der Resonanzparameter für 122 Niveaus untersuchen. Im oberen Energiebereich von 1000 - 2100 eV konnten 69 Resonanzen aufgelöst werden; für 59 Niveaus konnten sie eindeutig einen Spinzustand zuordnen (32 mit Spin J = 2 und 25 mit Spin J = 1). Zeichnet man von den 122 Resonanzen ein Histogramm über die Γ_n° ohne Unterscheidung der beiden Spinzustände, so läßt sich eine theoretische χ^2 -Verteilung einpassen. Ein Monte-Carlo-Programm ergab für den Freiheitsgrad dieser angepaßten χ^2 -Verteilung ein ν_{exp} = 1.08, was ausgezeichnet mit dem theoretischen Wert von 1 für eine Porter-Thomas-Verteilung /52/ übereinstimmt.

Die Mischung der beiden Spinfamilien ist nur erlaubt, wenn gilt:

$$g_{+}\Gamma_{n+}^{O} = g_{-}\Gamma_{n-}^{O}$$
 (4.1)

(+ steht jeweils für den Spinzustand J = I + 1/2). Nach Zusammenfassen aller Resonanzen von 4 - 2150 eV ergab sich eine Spinunabhängige Stärkefunktion von

$$s_0 = 2.0 + 0.24 - 0.21$$

Dieser Wert stimmt gut mit den theoretischen Vorausberechnungen nach dem optischen Modell für den Massenbereich um 190 /60-63/ überein.

Da in beiden Arbeiten jeweils eine gute Statistik zur Untersuchung der Resonanzparameter vorlag, handelt es sich offenbar um eine lokale Fluktuation

- 33 ---

der Stärkefunktion.

Für den mittleren Niveauanstand erhält Julien für beide Energiebereiche übereinstimmend:

Die für die Monte-Carlo-Rechnungen zugrundegelegten mittleren Resonanzparamter sind in Tabelle II zusammengefaßt.

A	s _o ·10 ⁴	s ₁ ·10 ⁴	D _o [eV]	D ₁ [eV]	Γ _γ [ev]	R' [Fm]
197	1.98	0.3	16.8	8.4	0.13	8.69

IV.2 Beschreibung einer Neutronengeschichte

In Fig. 6 ist der Wirkungsquerschnitt über den Bereich von 160 eV einmal um 20 keV (untere Kurve) und um 60 keV (obere Kurve) dargestellt, wie man ihn über das Monte-Carlo-Programm mit einer Multiniveauformel (2.4) erhält. Es wurde jeweils dieselbe Zufallszahlenfolge zum Berechnen der individuellen Resonanzparameter aus der Wigner- bzw. Porter-Thomas-Verteilung verwendet.

والمراجعة مراجع السرائي التراجي

Die Auswahlregeln für die Kopplung von Spins und Bahndrehimpulsen ergeben bei einem Grundzustandsspin $I^{\pi} = 3/2^{+}$ für Gold-197 die möglichen Zustände für den Gesamtspin des Compoundkernes 1^{+} , 2^{+} , 0^{-} , 1^{-} , 2^{-} und 3^{-} , wenn man Partialwellen mit 1>1 (d.f,....Wellen) vernachlässigt. Die Spins und Paritäten sind an den Resonanzspitzen eingezeichnet. Die Resonanzenergien, die über das Monte-Carlo-Programm ausgewürfelt wurden, werden durch die Pfeile auf der Abszisse angedeutet.



Fig. 6. Simulierter Wirkungsquerschnittsverlauf bei 20 und 60 keV

Die Kurven repräsentieren nach den Gesetzen der Resonanzstatistik mögliche Wirkungsquerschnittsverläufe für ruhende Targetkerne. Die Dopplerbreite, über die der Wirkungsquerschnitt noch gemittelt werden muß, um die Temperaturbewegung der Targetkerne zu berücksichtigen, beträgt $\Delta(20 \text{ keV}) = 3.3 \text{ eV}$ bzw. $\Delta(60 \text{ keV}) = 5.6 \text{ eV}.$

Vergleicht man die beïden übereinander liegenden Kurven, so lassen sich über den Energieverlauf der mittleren Parameter folgende Aussagen machen:

Die Halbwertsbreiten werden mit zunehmender Energie größer. Während die p-Wellen-Resonanzen bei 20 keV kaum beobachtet werden, treten sie bei 60 keV deutlich in Erscheinung. Allgemein rücken die Resonanzen mit zunehmender Energie enger aneinander; das bedeutet, daß Interferenzeffekte zwischen Niveaus mit dem gleichen Spin und der gleichen Parität zunehmen.

Studiert man den Verlauf des Wirkungsquerschnittes für 2 Resonanzen, deren Abstand man immer mehr verkleinert, dann ändert sich die Form drastisch /64/. Wird der Abstand kleiner als die einzelnen Breiten, dann beobachtet man eine einzige Resonanzspitze, deren Breite sowohl von der Differenz der einzelnen Breiten als auch von deren Abständen abhängt /65/. Diese schmale Spitze ist einer breiten, fast gestaltlosen Untergrundresonanz, deren Breite von der Summe der ursprünglichen Breiten abhängt, überlagert. Dieser Effekt sollte aber als Folge des Abstoßungseffektes in der Wigner-Verteilung benachbarter Resonanzen selten beobachtet werden. Bei höheren Energien, wo die mittleren Niveauabstände kleiner (Gl. 2.22), die Breiten aber größer (Gl. 2.15) werden, können solche Interferenzeffekte den Wirkungsquerschnitt beeinflussen.

Der mittlere totale Wirkungsquerschnitt für einen Energiepunkt (z.B. bei 20 keV) wird gebildet aus dem Mittelwert über 1000 Neutronengeschichten, wie eine in Fig. 6 dargestellt ist. Vor der Mittelung wurde jeder einzelne Wirkungsquerschnittsverlauf bei der entsprechenden Energie noch dopplerverbreitert.

- 36 -

IV.3 Ergebnisse der Monte-Carlo-Rechnungen

Die über die mittleren Resonanzparameter berechneten Transmissionswerte sind sowohl für die Einniveau-Formel als auch für die Multiniveauformel jeweils bei Zimmertemperatur und 800°C in Tabelle III zusammengefaßt:

Einniveau				Multiniveau			
Energie [keV]	< _T > 11 ⁰ C	<т> 800 ⁰ с	<u>∆<t></t></u> <t> [%]</t>	т> 11 ⁰ с	<т> 800 ⁰ с	<u>Δ<t></t></u> < T > [%]	
<u> </u>						·····	
10	0.3649	0.3497	4.16	0.3708	0.3557	4.07	
15	0.3703	0.3599	2.80	0.3760	0.3649	2.95	
20	0.3768	0.3701	1.77	0.3817	0.3736	2.12	
24	0.3822	0.3778	1.15	0.3873	0.3815	1.49	
30	0.3902	0.3886	0.41	0.3945	0.3920	0.63	
40	0.4028	0.4044	-0.39	0.4075	0.4071	0.09	
50	0.4144	0.4182	-0.91	0.4180	0.4205	-0.59	
60	0.4250	0.4302	-1.22	0.4285	0.4322	-0.86	

Tabelle III: Berechnete Transmission und Temperatureffekt

Zum Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen (siehe Abschnitt V) sind die Monte-Carlo-Werte (glatte Kurven) in Fig. 7 eingezeichnet.

Die beobachtete Transmissionsänderung mit der Temperatur wird durch zwei gegenläufige Effekte beeinflußt.

a) Die thermische Ausehnung der erwärmten Probe bewirkt eine Zunahme der Transmission.

$$T = e^{-n} t^{\sigma} t , \qquad (4.2)$$

(4.3)

weil sich die Teilchendichte gemäß:

$$n_{t} = \frac{n_{o}}{(1+\alpha t)^{2}} \quad (Kerne/barn)$$



Fig. 7. Berechnete und gemessene Transmissionswerte

-38 verringert. Hierbei bedeuten n bzw. n die Probendicken jeweils bei der Temperatur t und 0° C.

Der Ausdehnungskoeffizient im Temperaturbereich um 800°C beträgt:

$$\alpha = 18.56 \ 10^{-6} \ \left[^{\circ} \text{C}^{-1}\right] \ . \ /66/$$

b) Dopplerverbreiterung der Resonanzen:

Die gemessenen Transmissionsdaten sind Energiemittelwerte über viele Resonanzen,

$$T \geq \langle e^{-n} t^{\sigma} t \rangle, \qquad (4.4)$$

wobei σ_t der dopplerverbreiterte totale Wirkungsquerschnitt (Gl. 2.30) bei der Temperatur t^o C ist.

Der Dopplereffekt wirkt sich auf eine Resonanz in erster Linie durch eine Verbreiterung ihrer Linienform aus. Die Resonanzstruktur wird durch die Temperaturbewegung der Targetkerne geglättet. In den Modellrechnungen (Fig. 4) wurde gezeigt, daß bei einer Zunahme des Verhältnisses Γ/D bei gleichem <D>, also bei einer effektiven Verbreiterung der Resonanzen, bei gleicher Probendicke und gleichem mittlerem Wirkungsquerschnitt die Transmission kleiner wird.

Im Experiment überlagern sich die beiden Einflüsse a) und b). Unterhalb 40 keV überwiegt, wie die Monte-Carlo-Rechnungen zeigen, die Doppler-Verbreiterung, während bei Energien größer 45 keV die 1073⁰ K-Kurve über die bei Zimmertemperatur gemessene Transmission zu liegen kommt. Der Wirkungsquerschnitt ist bereits so geglättet, daß eine Verbreiterung der Resonanzen um einen Faktor

$$\frac{\Delta (1073^{\circ} K)}{\Delta (304^{\circ} K)} = 1.88$$

nicht mehr ins Gewicht fällt. In diesem Energiebereich überwiegt der Einfluß der Probenausdehnung. In dem Zwischenbereich um 45 keV heben sich beide Effekte gegenseitig auf.

Der Verlauf der mittleren Transmission bei 24 keV in Abhängigkeit von der

Temperatur für Einniveau- und Multiniveaurechnungen ist in Fig. 8 (Tabelle IV) dargestellt. Die Dopplerverbreiterung der Resonanzen überwiegt bis 400° C, während sich im Temperaturbereich von 400 - 600° C beide Effekte aufheben. Bei Temperaturen über 700° C macht sich die Probenausdehnung stärker bemerkbar, die Transmission wird wieder größer. Die beobachtete Transmissionsänderung liegt in der Größenordnung der Standardabweichung; da jedoch die einzelnen Punkte nicht stark von einem mittleren Verlauf abweichen, kann man von einem realen Effekt sprechen. Es zeigte sich auch, daß bei einer Erhöhung der Anzahl der Neutronengeschichten die Mittelwerte sich kaum mehr ändern, während die Standardabweichungen abnehmen.

Die Transmissionswerte $\langle T \rangle$, die über eine Multiniveauformel berechnet wurden,liegen durchweg über den entsprechenden Einniveau-Werten. Man kann dies so erklären, daß die Interferenzminima zwischen zwei interferierenden Niveaus (siehe auch Fig. 6) die Transmission allgemein etwas anheben. Bei zunehmender Dopplerverbreiterung werden diese Minima "zugeschüttet"; dementsprechend beobachtet man bei den Multiniveaurechnungen einen etwas größeren Temperatureffekt ($\Delta T/T=$ relative Änderung der Transmission mit der Temperatur) wie in Tabelle III ersichtlich ist, als bei Einniveaurechnungen, bei denen dieser Effekt vernachlässigt wird. Der Unterschied zwischen beiden Kurven fällt nicht allzu sehr ins Gewicht, da sich die Fehlerbalken beider Rechnungen überlappen. In den weiteren Auswertungen der Meßdaten wird ausschließlich der Multiniveauformalismus verwendet.

t	n _t •10 ²	<t>±Δ<<td><t></t></td></t>	<t></t>	<t> <u>+</u> ∆ <t></t></t>
[°c]	Kerne/barn	Multi-Niveau	Ein-Niveau	
100	8.06	0.3849 ± 0.0029	0.3806 ± 0.0039	
200	8.03	0.3834 ± 0.0029	0.3792 ± 0.0038	
300	8.01	0.3816 ± 0.0030	0.3778 ± 0.0037	
400	7.98	0.3819 ± 0.0030	0.3773 ± 0.0036	
500	7.95	0.3809 ± 0.0031	0.3770 ± 0.0035	
600	7.92	0.3813 ± 0.0032	0.3770 ± 0.0034	
700	7.88	0.3810 ± 0.0032	0.3775 ± 0.0033	
800	7.85	0.3815 ± 0.0033	0.3778 ± 0.0032	

Tabelle IV:Änderung	der	Transmission	mit der	Temperatur	bei 24	keV

A CARLES AND

- 40 -



Fig. 8. Transmission bei 24 keV in Abhängigkeit von der Temperatur

- 41

V Meßergebnisse

V.1 Auswertung der Transmission

Die Neutronentransmission T einer Probe berechnet man aus dem Verhältnis zweier Zählraten:

 $T = \frac{Z - U}{Z - U}$ (5.1)

 Z_{m} ist dabei die Anzahl der Impulse, die man in einem Neutronendetektor zählt, wenn sich zwischen Neutronenquelle und Nachweisgerät eine Probe befindet, Z_{O} ist die entsprechende Zählrate, wenn man die Probe aus dem Neutronenstrahl entfernt (siehe Fig. 1).U_m und U_O sind die Untergrundzählraten jeweils mit und ohne Probe.

Die Meßdaten wurden mit Hilfe eines Fortran-Programmes /67/ ausgewertet. Es wurden die Transmission (Gl. 5.1), deren relativer Fehler

$$\frac{\Delta T}{T} = \sqrt{\frac{Z_{m} + (\delta U_{m})^{2}}{(Z_{m} - U_{m})^{2}} + \frac{Z_{o} + (\delta U_{o})^{2}}{(Z_{o} - U_{o})^{2}}} \cdot 100 [\$]$$
(5.2)

 $(\delta U_{_{\rm O}},\ \delta U_{_{\rm M}}$ statistische Fehler im Untergrund), der Wirkungsquerschnitt

$$\sigma = -\frac{1}{n} \cdot \ln T \tag{5.3}$$

(n = Anzahl der Targetkerne pro Flächeneinheit)
und dessen Fehler

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma} = \frac{1}{n \cdot \sigma} \quad \frac{\Delta T}{T}$$
(5.4)

in Abhängigkeit der Neutronenenergie berechnet.

- 42 -

Die totale Zeitauflösung ∆t der experimentellen Anordnung setzt sich aus drei Anteilen zusammen /68/

$$\Delta t = \sqrt{\Delta t_1^2 + \Delta t_2^2 + \Delta t_3^2}$$
(5.5)

mit

 $\Delta t_1 =$ Breite des Neutronenimpulses (vom Beschleuniger) $\Delta t_2 =$ Laufzeitunterschiede der Neutronen in der Detektorsubstanz $\Delta t_3 =$ Zeitunsicherheit durch den elektronischen Aufbau.

Aus der Zeitauflösung (Gl. 5.5), welche sich für die vorliegende Messung zu $\Delta t/1 = 15$ nsec/m ergab, errechnet man über die Beziehung:

$$\frac{\Delta E}{E} = 0.028 \quad \frac{\Delta t/\text{nsec}}{1/\text{m}} \sqrt{E/\text{MeV}}$$
(5.6)

die Energieauflösung. Damit ergibt sich für die verwendete Meßanordnung eine Energieunschärfe von 2.2 keV bei 30 keV. Für Gold ergibt sich aus dem aufgelösten Resonanzbereich ein mittlerer Niveauabstand von 16.8 eV. Ein Meßpunkt stellt somit einen Mittelwert über ≃ 130 Resonanzen dar.

Die Probendicke von n = 0.0808 Kerne/barn entspricht ungefähr einer mittleren freien Weglänge

$$\lambda = \frac{1}{N \sigma} \qquad (N=Kerne/cm^3) \qquad (5.7)$$

für Gold bei 30 keV und läßt einen kräftigen Resonanzstruktureffekt erwarten (siehe Abschnitt III.5).

Die gemessenen Transmissionswerte, von denen jeder das Mittel von drei experimentellen Meßreihen darstellt, sind in Tabelle V sowohl für Zimmertemperatur als auch für 800[°] C zusammengestellt. Mit den entsprechenden über die Multiniveauformel berechneten Werten sind die experimentellen Ergebnisse in Fig. 7 eingezeichnet. Die Fehler der Meßwerte bewegen sich von 1.2 % bei 14 keV bis 0.5 % bei 57 keV. Die relative Änderung der mittleren Transmission beim Erhitzen der Probe von 284° K auf 1073° K ist ebenfalls in Tabelle V aufgeführt.

Tabelle V: Experimentelle Ergebnisse

Energie	<t></t>	<t></t>	<u>Δ<t></t></u> <t></t>	σ _{tot}	
[keV]	11 ⁰ C	800 ⁰ C	[%]	[b]	
14.24	0.4019	0.3828	4.75	14.26 ±	0.23
15.24	0.4016	0.3871	3.61	14.09 ±	0.19
16.36	0.3957	0.3843	2.88	14.10 ±	0.17
17.60	0.3848	0.3814	0.88	14.27 ±	0.15
18.99	0.3898	0.3785	2.89	13.94 ±	0.14
20.55	0.3962	0.3790	4.34	13.57 ±	0.12
22.31	0.4044	0.3919	3.09	13.16 ±	0.11
24.31	0.3901	0.3878	0.58	13.45 ±	0.10
26.59	0.4007	0.3904	2.57	12.96 ±	0.08
29.20	0.3914	0.3861	1.35	13.11 ±	0.08
32.22	0.4032	0.3986	1.14	12.60 ±	0.08
35.73	0.4074	0.3974	2.45	12.33 ±	0.08
39.85	0.3953	0.3863	2.27	12.58 ±	0.07
44.73	0.3929	0.3928	0.02	12.53 ±	0.07
50.56	0.4105	0.4074	0.75	11.87 ±	0.06
57.61	0.4182	0.4232		11.53 ±	0.12

V.2 Einfluß des Ofens

Die mit der Ofenanordnung gemessene Transmission von Gold zeigt ein ausgeprägtes Minimum um 40 keV. Der Schluß liegt nahe, daß dieses durch die breite Resonanz im totalen Wirkungsquerschnitt von Aluminium bei 35 keV verursacht wird. Um diesem vermuteten Einfluß genau abschätzen zu können, muß der Wirkungsquerschnittsverlauf von Aluminium in dem betreffenden Energiebereich bekannt sein. Eine hochaufgelöste Messung von Garg et al. /69/ wurde herangezogen, um diese mit einer Multiniveauformel zu fitten /68/, wobei folgende Resonanzparameter für die beiden den Energiebereich von 15-80 keV beeinflussenden Resonanzen gewonnen wurden.

E _R (keV)	$\Gamma_{\mathbf{R}}$ (keV)
34.75	3.0
87.00	8.3

Die in BNL - 325 /69/ für diese beiden Resonanzen angegebenen Breiten ergeben keinen zufriedenstellenden Fit der von Garg /69/ gemessenen Kurve.

Befindet sich im Strahl außer der Meßprobe (z.B. Gold) noch ein zusätzliches Material (z.B. Aluminium), dann mißt man im Detektor eine Zählrate von:

$$Z_{\rm m} = \frac{1}{\delta E} \int_{\delta E} \varepsilon(E^{\prime}) \cdot \phi_{\rm O}(E^{\prime}) \cdot \exp \{-(n_{\rm Al} \cdot \sigma_{\rm Al}(E^{\prime}) + n_{\rm Au} \cdot \sigma_{\rm Au}(E^{\prime})\} \cdot f(E, E^{\prime}, \delta E) dE^{\prime}$$
(5.8)

wobei $\varepsilon(E')$ die Nachweiswahrscheinlichkeit des Detektors darstellt; $\phi_{O}(E')$ ist der einfallende, ungeschwächte Fluß und f(E,E', δE) die Auflösungsfunktion der Meßanordnung.

Der Ofenmantel, bestehend aus Aluminium, stand während des Transmissionsexperimentes ständig im Strahl. Ohne Goldprobe mißt man somit im Detektor die Zählrate:

$$Z_{o} = \frac{1}{\delta E} \int_{\delta E} \phi_{o} \quad (E') \cdot \varepsilon(E') \quad \exp \{-n_{Al} \cdot \sigma_{Al} \quad (E')\} \cdot f(E,E', \ \delta E) dE' \quad (5.9)$$

Die beiden Funktionen $\phi(E')$ und $\epsilon(E')$ werden innerhalb der Auflösungsbreite als konstant angenommen.

Hat das schwächende Material oder die zu untersuchende Substanz innerhalb §E einen glatten Wirkungsquerschnitt, dann kürzen sich die durch die Auflösung bedingten Fehler bei den Quotientenbildung

$$T = Z_{\rm m}/Z_{\rm o}$$
(5.10)

heraus.

Die Untergrundzählraten U und U seien bei dieser Betrachtung vernachlässigt.

Durch ein Rechenprogramm wurde die Transmission nach Formel (5.10) numerisch für verschiedene Auflösungsbreiten untersucht. Hierbei wurde der mittlere totale Wirkungsquerschnitt von Gold σ_{Au} nach Formel (2.20) aus dem mittleren Resonanzparametern S₀ und S₁ bzw. <D₀ und <D₁ berechnet. Die Rechnungen zeigen, daß erst bei Auflösungsbreiten von 8 keV und darüber eine merkliche Abweichung von der reinen Gold-Transmission beobachtet wird.

Da in den Berechnungen nach Formel (2.20) eventuelle Fluktuationen im Goldquerschnitt nicht berücksichtigt werden konnten, wurden zur Kontrolle noch zwei gesonderte Messungen einer Goldscheibe einmal ohne und einmal mit einer 2 mm dicken Aluminiumscheibe im Strahl bei gleicher Auflösung durchgeführt. Die beiden Kurven stimmen innerhalb der experimentellen Genauigkeit überein; der Einfluß des Aluminiums kann somit vernachlässigt werden.

Die beobachteten Strukturen müssen demnach dem Goldquerschnitt zugeschrieben werden.

VI Vergleich zwischen den Monte-Carlo-Rechnungen und dem Experiment

Die experimentellen Werte können nur in ihrem groben Verlauf durch Monte-Carlo-Werte beschrieben werden. Sowohl bei den theoretischen Werten, als auch beim Experiment überwiegt im Energiebereich unterhalb 45 keV der Einfluß der Dopplerverbreiterung der Resonanzen über den Einfluß der Probenausdehnung. Die gemessene Transmission bei 57.61 keV liegt für 1073[°] K über dem entsprechenden Wert bei Zimmertemperatur in Übereinstimmung mit den Rechnungen.

Starke Unterschiede zeigen sich jedoch, wenn man den detaillierten Energieverlauf der gemessenen mit dem der berechneten Transmissionswerte vergleicht. Während die Rechnung einen stetigen, glatten Verlauf wiedergibt, beobachtet man beim Experiment starke Fluktuationen mit der Breite von einigen keV. Solche intermediären Resonanzen, die in ihrer Breite zwischen den Breiten der Compoundresonanzen ($\Gamma_{c} \simeq 1$ eV) und den vom optischen Modell abgeleiteten Breiten der Riesenresonanzen ($\Gamma_{OM} \simeq 1$ MeV) liegen, sind unter anderem bei Gold von Seth /12/ in einer früheren Messung über einen größeren Energiebereich beobachtet worden. Bei den vorliegenden Messungen für zwei Temperaturen spiegeln sich im Temperatureffekt ($\Delta T/T$) die Fluktuation wieder. In den Maxima unterscheiden sich die beiden Kurven für 304[°] K und 1073[°] K stärker als in dem Minima.

Derartige Fluktuationen müssen ihre Ursache in der detaillierten Resonanzstruktur des Wirkungsquerschnittes haben und müssen sich auch in den mittleren Resonanzparametern, über die die gemittelten Transmissionswerte berechnet werden, niederschlagen.

Die Rechnungen wurden mit sehr langsam veränderlichen statistischen Mittelwerten durchgeführt. Eventuelle durch eine endliche Stichprobengröße (endliche Anzahl von Resonanzen im Mittelungsintervall) verursachte Schwankungen wurden absichtlich dadurch verringert, daß jeweils sehr große Stichproben benutzt wurden. Deshalb sind die gerechneten Transmissionskurven zwangsläufig glatt. Im Gegensatz dazu zeigen die gemessenen Daten starke Fluktuationen. Diese können zunächst ihre Ursache haben in der endlichen Anzahl von Resonanzen (Stichprobengröße), die bei einem Meßpunkt erfaßt werden; dann aber auch in echten Fluktuationen

- 47 -

der drei Hauptparameter Niveaudichte, mittlere Strahlungsbreite und mittlere Neutronenbreite. Die mittlere Niveaudichte schwankt offenbar selbst für kleine Stichproben bemerkenswert wenig /58/.Dasselbe gilt für die Strahlungsbreite. Es liegt also nahe, Schwankungen der mittleren reduzierten Neutronenbreite bzw. der Stärkefunktion als Ursache anzunehmen und den experimentellen Verlauf durch Anpassen der s-Wellen Stärkefunktion S an die Kurve bei Zimmertemperatur zu beschreiben. Stimmen auch die experimentellen Transmissionswerte für 800° C mit den entsprechenden über die so gefundenen Stärkefunktionswerte berechneten Transmissionen überein, dann wird das mittlere Resonanzverhalten durch diesen Stärkefunktionswert richtig wiedergegeben.

E keV	s _o 10 ⁴	т (800 ⁰ с)
20.55	1.505	0.3925
22.31	1.30	0.4038
24.31	1.90	0.3849
26.59	1.60	0.3995
29.20	2.03	0.3887
32.22	1.785	0.4018
35.73	1.77	0.4072
39.85	2.505	0.3927
44.73	2.96	0.3897
50.56	2.385	0.4117
57.61	2.435	0.4198
·		

Tabelle VI: Angepaßte Stärkefunktionen

In Tabelle VI sind die an die Transmissionswerte bei Zimmertemperatur angepaßten Stärkefunktionswerte zusammen mit den Transmissionen bei 800° C zusammengestellt. Die Ergebnisse für Zimmertemperatur sind dieselben wie in Tab. V. Ein Vergleich mit dem Experiment (Fig. 9) zeigt, daß die so gefundenen Stärkefunktionen die Transmissionen bei 800° C nicht richtig wiedergeben. Im Gegensatz zu den Messungen ergeben sich in den Maxima der Transmission relativ kleine und in den Minima große Temperatureffekte.



Man kann sich das Ergebnis der Rechnungen mit angepaßten Stärkefunktionen folgendermaßen qualitativ verdeutlichen:

Die Dopplerbreite ist in dem betrachteten Energiebereich rund 7 mal größer als die natürliche Linienbreite. Die angepaßten Stärkefunktionen bewegen sich zwischen $1.3 \cdot 10^{-4}$ und $3.0 \cdot 10^{-4}$, die mittleren Halbwertsbreiten können sich also von Energieintervall zu Energieintervall um einen Faktor 2 ändern. Schmale Resonanzen werden durch die Dopplerverbreiterung in ihren Maxima stark abgesenkt und nehmen im wesentlichen Gaußform mit der Dopplerbreite an, sie verlieren ihre natürliche Form vollständig. Beim Erhöhen der Temperatur auf 800° C ändern sich die aus solchen schon weitgehend "verschmierten" zusammengesetzten Strukturen nur noch wenig, man beobachtet einen kleinen Temperatureffekt. Umgekehrt: In den Minima der Transmission mit relativ großen Stärkefunktionswerten ist die Resonanzstruktur durch Dopplerverbreiterung viel weniger verwaschen, die Struktur ändert sich beim Erhitzen von Zimmertemperatur auf 800° C stärker, man beobachtet einen relativ größeren Temperatureffekt

Man kann nun versuchen, durch gleichzeitiges Anpassen der Stärkefunktion und des mittleren Niveauabstandes eine bessere Übereinstimmung zwischen Rechnung und Experiment zu erzielen. Einen Hinweis, daß auch der mittlere Niveauabstand in gewissen Grenzen fluktuieren muß, erhält man durch Vergleich des totalen Wirkungsquerschnittes mit dem Einfangsquerschnitt/70-72/ in Fig. 10.

Man beobachtet in σ_{γ} (E) dieselben Fluktuationen bei denselben Energien wie in $\sigma_{\rm T}$ und im Temperatureffekt. Den gemittelten Wirkungsquerschnitt für Stahlungseinfang beschreibt man mit /35/:

$$\langle \sigma_{\gamma} \rangle = 2\pi^{2} \tilde{\chi}^{2} \sum_{J,I} \sum_{J} \sum_{D,J} \frac{\Gamma_{\gamma,I}}{D_{J}} \langle \frac{\Gamma_{n}}{\Gamma} \rangle_{I,J} , \qquad (6.1)$$

wobei die Mittelung über die Verteilung der partiellen Breiten für elastische Streuung durch Klammern <***> angedeutet wird. Die $\Gamma_{\gamma,1}$ ändern sich von Resonanz zu Resonanz nicht.

Eine Abschätzung ergab, daß sich die Fluktuationen im Einfangsquerschnitt

- 50 -



mit dem Einfangsquerschnitt

- 51 -

von Gold nicht allein durch die Schwankungen des Faktors $< \prod_n / \prod >$ erklären lassen, man muß auch lokale Fluktuationen im mittleren Niveauabstand in Betracht ziehen.

Um eine konsistente Beschreibung der mikroskopischen Resonanzstruktur und damit der Transmission zu erhalten, müssen beide Parameter S und D an die experimentellen Daten bei Zimmertemperatur und erhöhter Temperatur angepaßt werden. Es genügt dabei nicht, nur eine einzige Größe, beispielsweise die Transmission bei Zimmertemperatur durch ein Zahlenpaar S und D zu "fitten". Wie die Rechnungen zeigen, können verschiedene Wertepaare zu derselben Transmission führen, sie ergeben aber völlig verschiedene Temperatureffekte. Damit die Bestimmung eindeutig wird, muß noch die Transmission bei 800° C durch dasselbe S und D richtig wiedergegeben werden.

Ε	s _o	Do
[keV]		[eV]
26.59	1.90	25
32.22	2.23	30
44.73	2.51	10
50.56	2.73	25
57.61	2.102	10

Tabelle VII: Angepaßte Stärkefunktionen und mittlere Niveauabstände

In Tab. VII sind die mittleren Resonanzparameter S_0 und D_0 zusammengefaßt, für die Übereinstimmung zwischen Rechnung und Experiment innerhalb der statistischen Genauigkeit erzielt werden konnte. In den anderen Fällen wurde der Temperatureffekt immer zu klein berechnet, wenn man S_0 und D_0 in vertretbaren Grenzen variiert.

Es muß angenommen werden, daß bei den Energien um 24,29 und 38 keV starke Fluktuationen den Wirkungsquerschnitt bestimmen, die bei der Mittelung über 1000 Neutronengeschichten in den Berechnungen "verwischt" werden. Um diese Aussage überprüfen zu können, wurde noch eine weitere, hochaufgelöste Messung an 2 verschiedenen Probendicken durchgeführt (siehe Abschnitt VI.2).

Zur Simulation solcher ausgeprägter Strukturen muß man sich einzelne Neutronengeschichten, wie in Fig. 6 dargestellt, verschaffen, die jeweiligen Energiemittelwerte über eine solche Resonanzleiter (Folge von Resonanzen) berechnen und die Ergebnisse direkt mit den experimentellen Mittelwerten vergleichen. Besteht keine Übereinstimmung, dann muß eine neue Resonanzleiter ausgewürfelt werden.

VI.1 Verteilungsfunktionen der Mittelwerte der Resonanzparameter

Eine so gewonnene Folge von Halbwertsbreiten und Niveauabständen gehorcht den von der Resonanzstatistik geforderten Verteilungsfunktionen nach Porter-Thomas und Wigner, da sie über jene Verteilungen erzeugt wurde. Im allgemeinen werden sich für die Mittelwerte der Halbwertsbreiten und der Niveauabstände über eine Leiter andere Werte ergeben, als in die Monte-Carlo-Rechnungen eingegeben wurde. Es handelt sich innerhalb eines herausgegriffenen Energieintervalles um eine endliche Stichprobe aus einem Ensemble mit unendlich vielen Elementen.

Interessiert man sich für die Verteilung des Stichprobenmittels der Halbwertsbreiten:

$$\overline{\Gamma} = \frac{1}{N} \sum_{\substack{\substack{\Sigma \\ i=1}}}^{N} \Gamma_{i} ,$$

(6.2)

wobei die Γ_{i} nach Porter-Thomas (Gl. 3.2) mit dem Erwartungswert $\langle I \rangle$ verteilt sind, dann hat man das N-dimensionale Integral:

$$p(\overline{\Gamma}) \ d\overline{\Gamma} = \int_{i=1}^{N} \prod_{i=1}^{N} (x_i) \ dx_i$$

$$x_i = 1/2 \ \frac{\Gamma_i}{\langle \Gamma \rangle}$$
(6.3)

zu bilden, wobei die Integration über alle Fälle zu erstrecken ist, bei denen $\overline{\Gamma}$ in das Intervall d $\overline{\Gamma}$ fällt.

mit

Setzt man Gl.(3.2) in Gl.(6.3) ein, so erhält man schließlich als Verteilung des Stichprobenmittels

- 53 -

$$p(\overline{\Gamma}) d\overline{\Gamma} = 1/\Gamma(N/2) \cdot e^{-x} \frac{N/2-1}{4} dx$$

mit

Diese Verteilung hat den Mittelwert

 $x = N/2 \frac{\overline{\Gamma}}{\langle \Gamma \rangle}$.

$$\mathbf{x} = \mathbf{N}/2 \tag{6.5}$$

und die Varianz

mit

var x =
$$\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = N/2$$
. (6.6)

Gleichung (6.4) stellt eine χ^2 -Verteilung /53/ mit N Freiheitsgraden dar. Man beachte : $\Gamma(N/2)$ ist dabei die Gamma-Funktion mit dem Argument N/2.

Analog erhält man mit Gl.(6.3) und der Wigner-Verteilung Gl.(3.1) die Verteilung des Stichprobenmittels der Niveauabstände:

$$p(\overline{D}) \ d\overline{D} = 2/\Gamma(N) \ e^{-x} x^{2N-1} \cdot dx$$

$$x = \frac{\sqrt{\pi}}{2 \langle D^{>}} \sqrt{\sum_{i=1}^{N} D_{i}^{2}}$$
(6.7)

Es gibt Hinweise /73/, daß die Niveauabstände stark korreliert sind. In diesem Falle würde sich für die Varianz der in (6.7) angegebenen Verteilung kleinere Werte ergeben. Formel (6.7) wurde ohne Annahme von Korrelationen berechnet.

In einem Monte-Carlo-Programm wurde die Streuung der reduzierten Halbwertsbreiten, der Niveauabstände und der Stärkefunktionen um den eingegebenen Mittelwert bei 1000 Neutronengeschichten untersucht. Die "Resonanzleitern" erstrecken sich über2.2keV, was der Auflösungsbreite bei 30 keV entspricht. In den in Fig. 11 dargestellten Histogrammen wurden die ausgewürfelten Werte von 0.... Γ_{max} , 0.... D_{max} bzw. S = 0 ... S_{max} in 100 gleiche Intervalle eingeteilt und abgezählt wieviele Werte in die einzelnen Intervalle fallen. Durchschnittlich passen 195 Resonanzen in das vorgegebene Intervall ΔE .

(6.4)







Fig. 11b. Verteilungsfunktionen der Mittelwerte von Γ_n^{O} und D

- 55 -

In Tabelle VIII sind die eingegebenen und die über die 1000 Neutronengeschichten errechneten Mittelwerte mit den entsprechenden Standardabweichungen dargestellt:

Tabelle VIII

	<t>⁽⁰⁾[eV]</t>	< D> [eV]	<\$>
Eingabe	3.168 10 ⁻³	16	1.98 10-4
Berechnet	$3.161 \cdot 10^{-3}$	15.96	1.98 · 10 ⁻⁴
Standard- abw.	$3.31 \cdot 10^{-4}$	0.595	2.15 · 10 ⁻⁵

Die eingezeichneten Kurven entsprechen χ^2 -Verteilungen höheren Grades (Gl. 6.4) mit den jeweiligen in Tabelle VIII angegebenen Mittelwerten und Standardabweichungen.

Das Verfahren, einzelne Resonanzleitern zu erzeugen und mit dem Experiment zu vergleichen, wurde von verschiedenen Autoren /74,75/ zur Auswahl einer Resonanzstruktur zur Berechnung der mittleren Wirkungsquerschnitte im nicht-aufgelösten Bereich angewandt. Sie untersuchten u.a. den komplizierten Energieverlauf von Alpha (Verhältnis von Einfang- zu Spaltquerschnitt) bei verschiedenen spaltbaren Kernen. Im allgemeinen konnten sie die experimentellen Werte gut anpassen. Allerdings gelang es Ohnishi /74/ nicht, eine passende Resonanzleiter für den Spaltquerschnitt im Energiebereich von 0.454 - 0.583 keV bei Plutonium zu finden. Eine Erklärung für diese Schwierigkeit wird nicht angegeben. Eine Untersuchung,wie sich der Dopplerkoeffizient mit der Energie für eine solche Resonanzleiter ändert, wurde noch nicht durchgeführt, wurde aber von Ishiguro et al. /75/ angekündigt.

Eine Analyse der vorliegenden Meßpunkte nach diesem komplizierten Verfahren soll nicht vorgenommen werden, es soll nur noch gezeigt werden, daß an den Stellen, an denen der Temperatureffekt nicht durch Monte-Carlo-Rechnungen beschrieben werden konnte, starke Fluktuationen im Wirkungsquerschnitt auftreten.

VI.2 Hochaufgelöste Messung

Um eine genauere Aussage über die Feinstruktur des Wirkungsquerschnittes machen zu können, wurde noch eine hochaufgelöste Messung an zwei verschiedenen Probendicken durchgeführt. Die Energieauflösung ergab sich bei 30 keV zu $\Delta E = 90$ eV, es wurden also Mittelwerte über ungefähr 5-6 Resonanzen gemessen. Der aus diesen Messungen berechnete Wirkungsquerschnitt ist in Fig. 12 für die beiden Probendicken 0.5 cm und 1.37 cm dargestellt. Einem Punkt der Messungen mit geringerer Auflösung (Fig. 7) ensprechen hier 35 Punkte. Es zeigen sich deutliche Strukturen um 23,30,36, und 39 keV. Diese Energiewerte liegen gerade in den Intervallen, in denen der Temperatureffekt nicht durch Monte-Carlo-Rechnungen beschrieben werden konnte. Als Maß für die Stärke der Fluktuation in der Transmission kann man die mittlere quadratische Abweichung s² vom Mittelwert in einem Intervall, das einem schlecht aufgelösten Meßpunkt entspricht, definieren:

$$s^{2} = 1/n \sum_{i=1}^{n} (\langle T \rangle - T_{i} \rangle^{2}$$
 (n=35) (6.8)

Die mittlere quadratische Abweichung vom Transmissions-Mittelwert für die dicke Probe ist in Fig. 13 zusammen mit dem prozentualen Temperatureffekt $(\Delta T/T \cdot 100 \ [\%]$) dargestellt. Man sieht, daß bei den Energiewerten mit großem Temperatureffekt auch die mittleren quadratischen Abweichungen große Werte annehmen, während in dem Minima der Transmission (Fig. 7) die Abweichungen kleiner sind. Am deutlichsten zeigt sich dieser Effekt bei den Energien um 39.85 und 44.73 keV. Bei 39.85 beobachtet man einen kräftigen Temperatureffekt, dementsprechend auch eine große mittlere quadratische Abweichung s²; bei 44.73 verschwindet der Temperatureffekt fast vollständig, und die mittlere quadratische Abweichung macht einen deutlichen Sprung zum minmalen Werten. Bemerkenswert ist, daß es sich hier um zwei völlig verschiedene Größen handelt, die aber deutlich miteinander korreliert sind.

VI.3 Intermediäre Struktur bei 24 keV

Bei 23.2 keV beobachtet man in der hochaufgelösten Messung eine Struktur, (Fig. 12) die einer Breit-Wigner-Resonanz mit Interferenz stark ähnelt. In dem Bereich von 23. bis 23.3 keV ändert sich der Wirkungsquerschnitt um ungefähr 17 barn.





1



- 59 -



Fig. 13. Vergleich des Temperatureffektes der Transmission mit der mittleren quadratischen Abweichung s² der einzelnen Transmissionswerte aus der hochaufgelösten Messung von deren Mittelwert

Dieser Verlauf soll aus zweierlei Gründen näher untersucht werden:

Erstens kann diese intermediäre Resonanz einen Hinweis auf die Ursache solcher Fluktuationen geben. In zweiter Linie ist die Struktur bei 24 keV von besonderem Interesse für die Auswertung von Kugelschalentransmissionsdaten an Gold /10/, die einen Referenzwert für den Einfangsquerschnitt liefern. Die dabei benutzten Antimon-Beryllium-Neutronenquellen liefern Neutronen mit einer schmalen Energieverteilung zwischen etwa 22 und 24 keV.

Mit einem Least-Squares-Fit-Programm /76/ wurde versucht, die Resonanzparameter für diese intermediäre Resonanz zu ermitteln. Es ergaben sich jedoch Schwierigkeiten, das Interferenzminimum bei 23 keV mit nur einer einzigen Resonanz zu beschreiben. Bessere Übereinstimmung konnte erzielt werden, wenn man bei 22.7 keV eine zweite Resonanz mit gleichem Spin $J=2^+$ und gleicher Parität annahm.

Der in Fig. 14 dargestellte Fit ergab für diese beiden Resonanzen die in Tab. IX aufgeführten Resonanzparameter:

E _R [keV]	$\Gamma_{a}[keV]$	$\Gamma_{_{_{_{_{T}}}}}[keV]$	R[Fm]
22.739	3.4 10 ⁻³	2.8 10 ⁻²	9.7
23.238	2.3 10 ⁻²	9.2 10 ⁻²	9.7

Tabelle IX: Resonanzparameter für die intermediären Resonanzen um 24 keV.

Im folgenden soll versucht werden, eine Interpretation für die intermediäre Resonanz bei 23.238 keV zu geben:

Setzt man die totale reduzierte Breite dieser Resonanz $\Gamma_{\rm T}^{(0)} = 0.60$ eV in die Porter-Thomas Verteilung (Gl. 3.2) mit einer mittleren reduzierten Halbwertsbreite aus dem aufgelösten Resonanzbereich ein, so erhält man für die Wahr-

- 61 -



Fig. 14 Least-Squares-Fit der intermediären Resonanzen bei 22.74 und 23.24 keV

- 62 -

scheinlichkeit einer solchen Halbwertsbreite,

$$p(\Gamma) = \frac{e^{-95}}{\sqrt{\pi \cdot 95}} \simeq 0.$$

Eine Compoundresonanz mit dieser Breite ist also beliebig unwahrscheinlich.

Zudem zeigen die Messungen mit den verschiedenen Probendicken, daß dieser Resonanz eine Feinstruktur überlagert ist, die außerhalb der statistischen Genauigkeit liegt.

Eine andere Erklärung liegt nahe, nämlich daß diese Resonanz allein durch statistische Fluktuation der einzelnen Resonanzparameter zustande kommt. Es ist aber sehr unwahrscheinlich, daß sich rein zufällig eine solche Resonanzform mit Interferenz ergibt.

Es gibt noch die Möglichkeit, daß es sich um eine einfache Anregung des Compoundkernes handelt, um einen sog. Doorway Zustand. Ein Beispiel wäre eine Anregung vom folgenden Typus:

Das einfallende Neutron reagiert mit einem Nukleon, das sich in einem gebundenen Zustand unterhalb der Fermi-Energie befindet (Fig. 15) und hebt dieses auf einen angeregten Zustand, wobei es selbst Energie abgibt und eingefangen wird.



Fig. 15. Einfache Anregungszustände des Compoundkernes

Die Wahrscheinlichkeit, daß das eingefallene Neutron bei einem Stoß mit dem angeregten Teilchen seine Energie wieder aufnimmt und den Kern durch den Eingangskanal verläßt, bezeichnet man im Doorway-State-Konzept/77/ mit Γ^{\dagger} (Entkommbreite). Entsprechend definiert man eine Breite Γ^{\ddagger} , die angibt, mit welcher Wahrscheinlichkeit dieser zwei-Teilchen-ein-Loch-Zustand zu komplizierteren (N+1)-Teilchen-N-Loch- und schließlich zu Compoundzuständen führt. Die Breite einer Doorway-Resonanz ergibt sich zu $\Gamma_{d} = \Gamma^{\ddagger} + \Gamma^{\ddagger} + I$,wobei I das Mittelungsintervall ist, über das die Compoundresonanzen ausgeschmiert werden. Weidenmüller und Mahaux /77/ zeigen, daß der Doorway-State-Formalismus formal dem R-Matrix Formalismus gleich ist, so daß die in Tabelle 9 angegebenen Parameter Γ_{a} und Γ_{m} direkt als Γ^{\ddagger} bzw. $\Gamma^{\ddagger} + \Gamma^{\ddagger} + I$ gedeutet werden können.

Eine eindeutige Aussage, ob es sich hier wirklich um einen derartigen Doorway-Zustand handelt, kann nicht gemacht werden, da die Feinstruktur nicht aufgelöst werde konnte.



Fig. 16. Feinstruktur einer Doorway-Resonanz

In Fig. 16 ist schematisch dargestellt, wie man sich das Zustandekommen eines Doorway-Zustandes aus den Compoundresonanzen vorstellt /78/. Bei entsprechender mittlerer Energieauflösung beobachtet man statt der Feinstruktur eine einzige Resonanz, deren Breite zwischen den Breiten der Einteilchenresonanzen im optischen Modell von der Größenordung 1 MeV und den Breiten der Compoundresonanzen (≃eV) liegen.
Diskussion

Der Verlauf der mittleren Transmission sowohl bei Zimmertemperatur als auch bei 800[°] C konnte nur in seinem groben Verlauf durch die Monte-Carlo-Rechnungen mit den mittleren Resonanzparametern aus dem aufgelösten Resonanzbereich beschrieben werden. Es wurde gezeigt, daß die mikroskopische Struktur im Wirkungsquerschnitt, die in dem betrachteten Energiebereich sehr stark variieren kann, die Transmissionsänderung mit der Temperatur wesentlich beeinflußt.

Die beobachteten intermediären Strukturen, die durch die übliche Resonanzstatistik nicht beschrieben werden können, haben verschiedene Ursachen:

Die Energieabhängigkeit des mittleren Niveauabstandes wird nach dem Fermimodell berechnet, das eine starke Vereinfachung des Vielteilchensystems darstellt. In neuerer Zeit wurden Korrelationen zwischen den Niveauabständen benachbarter Niveaus beobachtet /73/, die im einzelnen noch nicht geklärt sind. Die Verteilungsfunktionen für die individuellen Parameter wurden abgeleitet, ohne die kollektiven Eigenschaften des Atomkernes zu berücksichtigen.

Die Stärkefunktion, die im optischen Modell abgeleitet wird, ist eine Größe, die den Wirkungsquerschnitt beschreibt, wenn man die Compoundresonanzen über den Energiebereich von 1 MeV mittelt. Zudem ist eine mögliche Spinabhängigkeit der Stärkefunktion in Betracht zu ziehen. Die statistische Analyse von Resonanzen im aufgelösten Bereich /11/ hat gezeigt, daß im Energiebereich von O - 1000 eV die s-Wellen Stärkefunktion für den Spinzustand J = 2 ungefähr doppelt so groß ist wie für den Spinzustand J = 1. Ein ähnliches Verhalten im nicht aufgelösten Bereich darf nicht ausgeschlossen werden. Möglicherweise übt eine Fluktuation der Stärkefunktion und des mittleren Niveauabstandes für p-Wellen einen verstärkenden Einfluß auf den Temperatureffekt aus. Diese kann aber, da eine begrenzte Anzahl von Meßpunkten zur Verfügung stand, nicht abgeleitet werden.

Das Verfahren, über die Resonanzstatistik mikroskopische Wirkungsquerschnitte zu erzeugen, versagt auch, wenn man intermediäre Strukturen beschreiben will,

- 65 -

die ihre Ursache im Reaktionsmechanismus haben.

Der Verlauf des totalen Wirkungsquerschnittes um 24 keV kann gut durch eine Breit-Wigner Formel beschrieben werden. Wegen der großen Breite und der dieser Resonanz überlagerten Feinstruktur kann diese nicht als Compoundresonanz interpretiert werden. Es handelt sich hier möglicherweise um einen Doorway-Zustand. In Spaltquerschnitten beobachtet man ähnliche intermediäre Strukturen, die man als Spaltung über Niveaus im zweiten Minimum /79/ der Spaltbarriere erklärt.

Bei der Bestimmung des Dopplerkoeffizienten in der Reaktortheorie wird die Reaktivitätsänderung mit der Temperatur berechnet, wobei man sich statistische Resonanzquerschnitte erzeugt. Die mittleren Parameter und damit der Dopplerkoeffizient können sich von Energiegruppe zu Energiegruppe ändern, je nachdem welche mikroskopische Resonanzstruktur in dem jeweiligen Energieintervall dominierend ist.Diese kann im einzelnen nur im Experiment bestimmt werden.

Intermediäre Strukturen können auch die Ursache von Diskrepanzen in Standardquerschnitten sein, die aus verschiedenen Messungen erhalten wurden. Der Einfangsquerschnitt von Gold bei 24 keV wird häufig als Eichpunkt verwendet. Die verschiedenen Auswertungen von Schalentransmissionsmessungen, in denen die Resonanzstruktur des totalen Wirkungsquerschnittes wesentlich eingeht, ergeben unterschiedliche Werte. Der Einfluß der in dieser Arbeit bei 24 keV gemessenen intermediären Resonanz auf diesen Referenzquerschnitt wird in einer gesonderten Studie untersucht.

Eine Messung der mittleren Transmission bei tieferen Temperaturen könnte die hier gefundenen Ergebnisse erhärten. Beim Abkühlen der Probe auf die Temperatur des flüssigen Stickstoffs nimmt die Dopplerbreite ab und kommt in die Größenordnung der mittleren Halbwertsbreiten. Es wird erwartet, daß dadurch der Temperatureffekt größer wird und damit eine genauere Aussage über die Resonanzstruktur gemacht werden kann.

- 66 -

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wird der Einfluß des Dopplereffektes bei Zimmertemperatur und 800°C auf die mittlere Neutronentransmission von Gold sowohl theoretisch als auch experimentell untersucht. In dem Energiebereich, in dem die Messungen durchgeführt wurden, konnten wegen der hohen Niveaudichte einzelne Resonanzen nicht mehr aufgelöst werden.

Zur Beschreibung und Untersuchung des Temperatureinflusses auf die Transmission werden "künstliche" Resonanzquerschnitte über die Monte-Carlo-Methode erzeugt. Die mittleren Resonanzparameter, wie mittlere Halbwertsbreite und mittlerer Niveauabstand, sowie die Verteilungsfunktionen der individuellen Parameter kennt man aus der Untersuchung von Resonanzen im aufgelösten Resonanzbereich und setzt deren Gültigkeit im gesamten Energiebereich voraus.

Um den Einfluß von Interferenzeffekten zwischen benachbarten Resonanzen mit gleichem Spin und gleicher Parität studieren zu können, wurde der Wirkungsquerschnitt sowohl über eine Multiniveauformel als auch über eine Einniveauformel berechnet.

Die beobachtete Transmissionsänderung mit der Temperatur wird durch zwei gegenläufige Effekte bewirkt. Einmal dehnt sich die Probe beim Erwärmen aus, die Transmission wird größer. Zum anderen wird durch die Temperaturverbreiterung der Resonanzen der Wirkungsquerschnitt geglättet, was sich in einer Abnahme der Transmission zeigt.

Die Transmission konnte sowohl bei Zimmertemperatur als auch bei 800[°] C nur in ihrem groben Verlauf durch die in der Literatur angegebenen mittleren Resonanzparameter beschrieben werden. Bei niedrigen Energien (< 45 keV) überwiegt die Dopplerverbreiterung der Resonanzen, bei höheren Energien überlappen sich die Resonanzen teilweise, die Transmission ändert sich bei Temperaturerhöhung im wesentlichen durch Probenausdehnung.

- 67 -

Beim Experiment zeigen sich deutliche Fluktuationen in der Transmission, die auch im Temperatureffekt ($\Delta T/T$ = relative Änderung der mittleren Transmission beim Erhöhen der Temperatur) und parallel dazu im Einfangsquerschnitt beobachtet werden. Es wurde versucht, durch Zulassen lokaler Fluktuationen der mittleren Resonanzparameter diese an den experimentellen Verlauf der mittleren Transmission sowohl bei Zimmertemperatur als auch bei 800° C anzupassen.

Dies konnte nur für einige Meßpunkte erreicht werden. Durch eine weitere hochaufgelöste Messung konnte gezeigt werden, daß in den Fällen, in denen die statistische Beschreibung keinen zufriedenstellenden Fit des Experimentes ergab, starke Fluktuationen im totalen Wirkungsquerschnitt auftreten.

Der detaillierte Wirkungsquerschnittsverlauf im Energiebereich um 24 keV, der eingehender untersucht wurde, konnte durch zwei interferierende Breit-Wigner-Resonanzen gut beschrieben werden. Diese konnten wegen ihrer großen Breite nicht als Compound-Resonanzen gedeutet werden. Es handelt sich hier möglicherweise um sogenannte Doorway-Zustände.

- 68 -

Literaturverzeichnis

- /1/ H.A. Bethe, Phys. Rev. 51, 450, (1937)
- /2/ H.H. Landon, Phys. Rev. 94, 1215, (1954)
- /3/ W.E. Lamb, Phys. Rev. 55, 190, (1939)
- /4/ A. Bernabei, BNL-860-(T-344), (1964)
- /5/ R.N. Huang, Nucl. Sci. Engin. 36, 67, (1969)
- /6/ E.R. Rae, W.N. Good in J.A. Harvey, Experimental Neutron Resonance Spectroscopy, Acad. Press, S. 28, (1970)
- /7/ F.W.K. Firk, E. Melkonian, in J.A. Harvey, Experimental Neutron Resonance Spect., Acad. Press, S. 101, (1970)
- /8/ R. Froelich, Theorie der Dopplerkoeffizienten schneller Reaktoren unter Berücksichtigung der gegenseitigen Abschirmung der Resonanzen, (1964), unveröffentlicht
- /9/ S.C. Cohen, J.L. Russell, J.C. Young, Trans. ANS. 10,2; 579, (1967)
- /lo/ F.H. Fröhner, 2nd Int. Conf. on Nucl. Data for Reactors I, Helsinki, S. 197, (1970)
- /11/ R.N. Alves, J. Julien, J. Morgenstern, C. Samour, Nucl. Phys. A 131, 450, (1969)
- /12/ K.K. Seth, Phys. Lett., 16,3; 306, (1965)
- /13/ K.H. Böckhoff, A. Dufrasne, (1971), unveröffentlicht
- /14/ C.D. Bowman, G.S. Sidhu, M.L. Stelts, J.C. Browne, in Proc. of the 3rd Conf. Neutr. Cross Sect. Technol. II, 584, (1971)
- /15/ B.H. Patrick, M.G. Sowerby, M.G. Schomberg, Journ. Nucl. Energy 24, 269, (1970)
- /16/ E. Schneider, F.H. Fröhner, in 2nd Int. Conf. on Nucl. Data for Reactors I, Helsinki, 201, (1970)
- /17/ G. Baumgärtner, P. Schuck, "Kernmodelle", B.I. Mannh., (1968)
- /18/ H. Feshbach, A.V. Kerman, R.H. Lemmer, Ann. Phys. 41, 230, (1967)
- /19/ F.J. Rahn, H. Camarda, Proc. of the 3rd Conf. Neutron Cross Sect. Technol. II, 658, (1971)
- /20/ G. Carraro, W. Kolar, Proc. of the 3rd Conf. Neutron Cross Sect. Technol. II, 701, (1971)

- /21/ J. Spaepen, Neutron-Time-of-Flight Methods, EANDC Brüssel, (1961)
- /22/ E. Albold, Dissertation, Universität Karlsruhe, (1968)

/23/ W. Eckert, (1968), unveröffentlicht

- /24/ J.M. Blatt, V.F. Weisskopf, "Theoretische Kernphysik", Teubner Leipzig, S. 268, (1959)
- /26/ P.L. Kapur, R. Peirls, Proc. R. Soc. A 166, 277, (1938)
- /27/ E.P. Wigner, L. Eisenbud, Phys. Rev. 71, 29, (1947)
- /28/ A.M. Lane, R.G. Thomas, Rev. Mod. Phys. 30, 257, (1958)
- /29/ J. Humblet, L. Rosenfeld, Nucl. Phys. 26, 529, (1961)
- /30/ D.B. Adler, F.T. Adler, BNL-6977, (1966)
- /31/ C.E. Porter, "Statistical Theory of Spectra", Acad. Press, New-York, (1965)
- /32/ E.H. Auerbach, S.O. Moore, Phys. Rev. 135 B, 895, (1964)
- /33/ M. Lederer, J.M. Hollander, I. Perlman, "Table of Isotopes", John Wiley, (1967)
- /34/ R.G. Thomas, Phys. Rev. 97, 224, (1955)
- /35/ F.H. Fröhner, General Atomic Rep. Nr. 8380, (1968)
- /36/ A. Gilbert, A.G.W. Cameron, Can. Journ. Phys. 43, 1446, (1965)
- /37/ H.A. Bethe, G. Placzek, Phys. Rev. 51, 51, (1937)
- /38/ H.A. Bethe, Rev. Mod. Phys., 9, 69, (1937)
- /39/ A.W. Solbrig, Jr., Am. J. Phys. 29, 257, (1961)
- /40/ G.I. Bell, LA-Rep. Nr. 2322, (1959)
- /41/ G.W. Hinman, J.B. Sampson, General Atomic Rep. Nr. 3603, (1962)
- /42/ F.H. Fröhner, Nucl. Instr. Meth., 49, 89, (1967)
- /43/ Ch. Kittel, "Intoduction to Solid State Physics", John Wiley, (1966)
- /44/ H.E. Jackson, J.E. Lynn, Phys. Rev. 127, 461, (1962)
- /45/ V. Mateiciuc, L. Aldea, Journ. Nucl. Energy 24, 245, (1970)
- /46/ M. Nelkin, D.E. Parks, Phys. Rev. 119, 1060, (1960)

/47/ M. Born, "Optik", Springer, Berlin, (1933)

- 70 -

- /48/ E. Melkonian, W.W. Havens, L.J. Rainwater, Phys. Rev., 92, 7o2, (1953)
- /49/ E.P. Wigner, Proc. Conf. on Neutron Phys. by Time-of-Flight, Gatlinburg, S 59, (1956)
- /50/ M.L. Mehta, M. Gaudin, Nucl. Phys. 18, 420, (1960)
- /51/ J.B. Garg, J. Rainwater, Phys. Rev. 134, 5B; B985, (1964)
- /52/ C.E. Porter, R.G. Thomas, Phys. Rev. 104,2; 483, (1956)
- /53/ J. Matews, R.L. Walker, "Mathematical Methods of Physics", Benjamin, New York, 383, (1970)
- /54/ D.P. Laue, "Die statistische Theorie der Kernreaktionen", (1963), unveröffentlicht
- /55/ J.M. Hammersley, D.C. Handscomb, "Monte-Carlo Methods", London, (1964)
- /56/ D. Bogart, T.T. Semler, Conf. on Nucl. Technol., (1966)
- /57/ J.S. Desjardins, J.L. Rosen, W.W. Havens, J. Rainwater, Phys. Rev., 120, 2214, (1960)
- /58/ J. Julien, S. de Barros, J. Morgenstern, Nucl. Phys. 76, 391, (1966)
- /59/ K.K. Seth, Nucl. Data 2, 5 und 6, 299, (1966)
- /60/ H. Feshbach, C.E. Porter, V.F. Weisskopf, Phys. Rev. 96, 448, (1954)
- /61/ J. Morgenstern, R.N. Alves, J. Julien, C. Samour, Nucl. Phys. A123, 561, (1969)
- /62/ P.A. Moldauer, Nucl. Phys. 47, 65, (1963)
- /63/ B. Buck, F. Perey, Phys. Rev. Lett. 8, (1962)
- /64/ C.D. Bowman, E.G. Bilpuch, H.W. Newson, Ann. Phys., 17, 319, (1962)
- /65/ M.S. Moore, J.A. Harvey, "Experimental Neutron Resonance Spectroscopy", Acad. Press, S 384, (1970)
- /66/ Gmelin`s Handbuch, Gold GL, 479, (1954)
- /67/ E. Schneider, "Trami, Ein Fortran-Programm zur Auswertung von Transmissionsexperimenten", (1971), unveröffentlicht
- /68/ G. Rohr, Dissertation, Universität Karlsruhe, (1967)
- /69/ J.B. Garg, in M.D. Goldberg, S.F. Mughabghab, BNL-325
 2nd Ed., (1966)
- /70/ D. Kompe, Nucl. Phys., A133, 513, (1969)

- /71/ M.P. Fricke, W.M. Lopez, Phys. Lett. 29B, 393, (1969)
- /72/ W.P. Pönitz, D. Kompe, H.O. Menlove, Journ. Nucl. Energy 22, 505, (1968)
- /73/ H. Camarda, G. Hacken, F. Rahn, BNL-50276 (T-603), 41, (1970)
- /74/ T. Ohnishi, Y. Ueda, Journ. Nucl. Sci. Technol. 6,12; 715, (1969)
- /75/ Y. Ishiguro, S. Katsuragi, Nucl. Sci. Engin. 40, 25, (1970)
- /76/ F.H. Fröhner, "Formanalysenprogramm zur Bestimmung von Resonanzparametern", (1971), unveröffentlicht
- /77/ C. Mahaux, H.A. Weidenmüller, "Shell Model Approach to Nuclear Reactions, North Holland, Amsterdam, (1969)
- /78/ K.N. Müller, Dissertation, Universität Karlsruhe, (1969)
- /79/ V.M. Strutinsky, Nucl. Phys. A95, 420, (1967)