

KFK-103

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

März 1962

KFK 103

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik

Berechnung der Winkelverteilung bei der Streuung
langsamer Neutronen an Wasser

E. Kiefhaber

KERNREAKTOR
BAU- UND BETRIEBS-GESSELLSCHAFT M. B. H.
Verwaltung der Zentralbibliothek

27. Aug 1962



KERNREAKTOR

BAU- UND BETRIEBS-GESSELLSCHAFT M. B. H.

KARLSRUHE

Berechnung der Winkelverteilung bei der Streuung langsamer Neutronen an Wasser

Von ^[144]**E. KIEFHABER**

(Aus dem Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik des Kernforschungszentrums Karlsruhe)

Mit 4 Textabbildungen

(Eingegangen am 19. Oktober 1961)

KERNREAKTOR

Bau- und Betriebs-Gesellschaft m. b. H.
Verwaltung der Zentrallbücherei

Zusammenfassung. Die durch Einfachstreuung monoenergetischer Neutronen an leichtem Wasser erhaltene Winkelverteilung wird mit Hilfe des von M. S. NELKIN [1] hergeleiteten differentiellen Streuquerschnitts durch numerische Integration über die Endenergie berechnet und mit den entsprechenden experimentellen Ergebnissen von C. REINSCH und T. SPRINGER [2] verglichen. Bei kleinen Streuwinkeln läßt sich die Integration unter gewissen Annahmen analytisch durchführen (vgl. Abschn. 2). In einem dritten Abschnitt wird der mittlere Cosinus des Streuwinkels und die Transportweglänge von flüssigem Wasser berechnet.

1. Die Winkelverteilung bei mittleren und großen Streuwinkeln

Der differentielle Streuquerschnitt für die Streuung eines Neutrons an einem Proton des Wassermoleküls lautet nach M. NELKIN [1]:

$$\sigma_H(E_0 \rightarrow E, \vartheta, T) \left. \begin{aligned} &= \frac{\sigma_b}{4\pi} \left(\frac{E}{E_0}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{m}{2\pi \bar{E} K^2}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{K^2}{2A}\right) \times \\ &\times \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{n\omega}{2T}\right) I_n\left(\frac{K^2}{2B}\right) \times \\ &\times \exp\left[-\frac{m}{2\bar{E}K^2} \left(E - E_0 - n\omega + \frac{K^2}{2m}\right)^2\right] \end{aligned} \right\} (1)$$

mit

$$K^2 = 2(E + E_0 - 2\sqrt{E E_0} \cos \vartheta).$$

Aus [1] wurden die Ausgangsdaten zur Bestimmung der Parameter A , B , \bar{E} , m , ω übernommen, mit dem geringfügigen Unterschied, daß für das Verhältnis der Masse des Wassermoleküls zur Neutronenmasse statt 18 der genauere Wert 17,86 verwendet wurde. Die Berechnung von (1) erfolgte in der gleichen Weise wie in [1].

In [2] wird die gemessene Winkelverteilung in folgender Form angegeben:

$$4\pi \sigma(E_0, \vartheta, T) / \sigma^0. \quad (2)$$

Da die Streuung am Sauerstoff beinahe isotrop ist, kann dessen Einfluß auf die Winkelverteilung bei der theoretischen Berechnung vernachlässigt werden. Der dem Zähler von (2) entsprechende Ausdruck

$$4\pi \sigma_H(E_0, \vartheta, T) = 4\pi \int_0^\infty \sigma_H(E_0 \rightarrow E, \vartheta, T) dE \quad (3)$$

wurde durch numerische Integration über die Endenergie gewonnen. Bei der Berechnung des totalen Streuquerschnitts σ_H^0 ist es zweckmäßig, zuerst über den Streuwinkel zu integrieren, da sich diese Integration analytisch durchführen läßt. Anschließend wird wie bei (3) numerisch über die Endenergie integriert.

2. Analytische Näherung für kleine Streuwinkel

Für kleine Streuwinkel ϑ stößt die numerische Integration von (3) auf Schwierigkeiten (vgl. auch [1]), da $\sigma_H(E_0 \rightarrow E, \vartheta, T)$ als Funktion von E ein δ -funktionsartiges Maximum bei $E \rightarrow E_0$ und $\vartheta \rightarrow 0$ aufweist, wie man leicht aus (1) ersehen kann, da dann $K^2 \rightarrow 0$ strebt. Das Verhalten des differentiellen Streuquerschnitts legt es nahe, bei kleinen Streuwinkeln ϑ zur

Bestimmung von (3) die Integration über die Endenergie analytisch durchzuführen. Dies ist möglich unter bestimmten Näherungsannahmen, auf die im folgenden näher eingegangen wird.

Zunächst wollen wir für kleine Streuwinkel ϑ den mit S_0 bezeichneten Beitrag des Terms mit $n=0$ zu $\sigma_H(E_0, \vartheta, T)$ untersuchen. Wir setzen $E = E_0 + \varepsilon$ und nehmen an $|\varepsilon|/E_0 \ll 1$.

Die Energieänderungen ε , die einen merklichen Beitrag zu S_0 liefern, sind so klein, daß wir innerhalb dieser kleinen Änderungen K als konstant betrachten dürfen. Wir erhalten dann für S_0 :

$$S_0 \approx \frac{\sigma_b}{4\pi} \exp\left(-\frac{K^2}{2A}\right) I_0\left(\frac{K^2}{2B}\right) \times \\ \times \frac{1}{2} \left\{ 1 + \operatorname{erf} \left[\left(E_0 - \frac{K^2}{2m} \right) \sqrt{\frac{m}{2\bar{E}K^2}} \right] \right\}, \\ \operatorname{erf} x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-z^2} dz.$$

Durch eine analoge Betrachtung lassen sich die Beiträge S_n für $n \neq 0$ berücksichtigen. Für Anfangsenergien $E_0 < 0,15$ eV entstehen diese Beiträge durch Energieaustausch der Neutronen mit der behinderten Rotation. Wir erhalten schließlich als analytische Näherungslösung für kleine Streuwinkel ϑ :

$$\sigma(E_0, \vartheta, T) \left. \begin{aligned} &\approx \sum_{n > -\frac{E_0}{\omega}}^{\infty} \frac{\sigma_b}{4\pi} \left(1 + \frac{n\omega}{E_0}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{K^2}{2A} - \frac{n\omega}{2T}\right) \cdot I_n\left(\frac{K^2}{2B}\right) \times \\ &\times \frac{1}{2} \left\{ 1 + \operatorname{erf} \left[\left(E_0 + n\omega - \frac{K^2}{2m} \right) \sqrt{\frac{m}{2\bar{E}K^2}} \right] \right\}, \\ &K^2 = 2 [2E_0 + n\omega - 2 \cos \vartheta \sqrt{E_0(E_0 + n\omega)}]. \end{aligned} \right\} (4)$$

In den meisten Fällen sind die Argumente der Fehlerintegrale so groß, daß $\operatorname{erf} \approx 1$ gesetzt werden kann.

Die von [2] gemessenen Winkelverteilungen für Anfangsenergien von 0,039 eV und 0,078 eV bei einer Temperatur $T = 21^\circ \text{C}$ sollen mit den Ergebnissen aus NELKINs Theorie verglichen werden. Bei der theoretischen Bestimmung der Winkelverteilung (2) wurde die Energieeinteilung so gewählt, daß auch bei kleinen Winkeln noch eine genügend genaue Integration möglich war. Die Werte, die dadurch gewonnen wurden, weichen zwischen 10 und 20° um höchstens $1,8\%$ von den durch die analytische Näherung gegebenen Werten ab.

Die Kurven für $4\pi \sigma_H(E_0, \vartheta, T) / \sigma_H^0$ stimmen bei mittleren Streuwinkeln ohne Anpassung gut mit den

experimentell gefundenen Kurven überein (Abb. 1 und Abb. 2). Bei kleinen und großen Winkeln ist der Zähleruntergrund bei den Messungen beträchtlich und zusammen mit der Vielfachstreuung eventuell für die Abweichungen zwischen Theorie und Experiment verantwortlich. Außerdem ist bei kleinen Streuwinkeln die bei der Herleitung von (1) gemachte Annahme einer unbehinderten Translation nicht mehr gerechtfertigt. Das charakteristische Maximum der Winkelverteilung zwischen 20 und 30° (0,078 eV) bzw. zwischen 30 und 40° (0,039 eV) bei der Streuung an Eis in den Kurven von [2] kann nicht nachgerechnet werden, da der dafür verantwortliche Gitteraufbau des Eises in (1) nicht berücksichtigt ist. Die berechneten Kurven

$$4\pi\sigma_H(E_0 \rightarrow E, \vartheta = 50^\circ) \quad \text{und} \quad \sigma_H^0(E_0 \rightarrow E)$$

bei $T = 21^\circ \text{C}$ und $E_0 = 0,078 \text{ eV}$ in Abb. 3 zeigen, daß es wichtig ist, die energieabhängige Zählerempfindlichkeit genau zu kennen, oder einen für den ganzen Energiebereich schwarzen Zähler zu verwenden (siehe [2]). Die deutlichen Maxima der Kurven in Abb. 3 bei 0,02 eV und 0,0135 eV sind auf den Energieaustausch der Neutronen mit der behinderten Rotation ($\hbar\omega = 0,06 \text{ eV}$) zurückzuführen.

3. $\overline{\cos \vartheta}$ und λ_{tr}

Bei der Berechnung von $\overline{\cos \vartheta}$ und λ_{tr} können wir den bei der Winkelverteilung vernachlässigten Einfluß des Sauerstoffs in einfacher Weise berücksichtigen. Die Gesamtstreuung am H_2O -Molekül setzt sich bei nicht zu kleinen Neutronenenergien additiv aus den Anteilen der Streuung an den einzelnen Atomen zusammen:

$$\sigma = 2\sigma_H + \sigma_O.$$

Für die Streuung am Wasserstoff wird wie zuvor der differentielle Streuquerschnitt (1) verwendet. Die Streuung am Sauerstoff wird mit Hilfe des Schwergasmodells behandelt [3]. Zur Bestimmung des Parameters σ_b (bound atom cross section) für Sauerstoff wurde für $\sigma_f \mu^{-2}$ der Wert 4,24 barn aus [4] angenommen. (σ_f = free atom cross section.)

$$\sigma_b = \sigma_f \left(\frac{\mu'}{\mu} \right)^2, \quad \mu' = \frac{m_{\text{Mol}} \cdot m_N}{m_{\text{Mol}} + m_N} \cdot \frac{m_0 + m_N}{m_0 \cdot m_N}$$

$$\overline{\cos \vartheta} = \overline{\cos \vartheta}(E_0, T) = \frac{\sigma^1(E_0, T)}{\sigma^0(E_0, T)}$$

$$\sigma^0(E_0, T) = \int_0^\infty dE \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \sigma(E_0 \rightarrow E, \vartheta, T) \cdot 2\pi$$

$$\sigma^1(E_0, T) = \int_0^\infty dE \int_0^\pi \cos \vartheta \sin \vartheta d\vartheta \sigma(E_0 \rightarrow E, \vartheta, T) \cdot 2\pi$$

$$\lambda_{tr} = \lambda_{tr}(E_0, T) = \{ \Sigma(E_0, T) [1 - \overline{\cos \vartheta}(E_0, T)] \}^{-1}$$

$$\Sigma(E_0, T) = \frac{\rho \cdot L}{M} \cdot \sigma^0(E_0, T)$$

ρ = Dichte des Streumediums (Wasser: 0,9975 g cm⁻³ bei $T = 23^\circ \text{C}$),

L = Loschmidt-Zahl = 6,02 · 10²³ Moleküle pro Mol,

M = Molekulargewicht des Streumediums (18,02 g pro Mol).

Die Temperatur des Wassers soll 23° C betragen. Infolge der geringen Temperaturabhängigkeit von $\overline{\cos \vartheta}$ und λ_{tr} (vgl. [2], Tabelle 1) gelten die Kurven

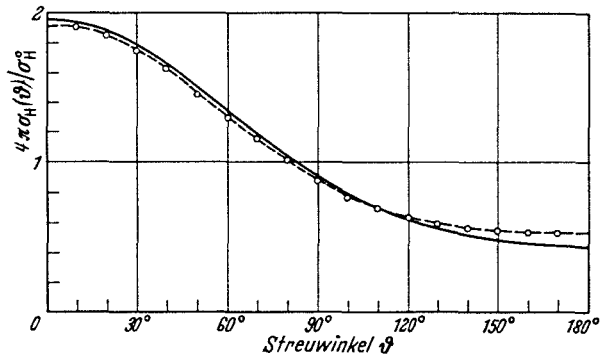


Abb. 1. Winkelverteilung der an H_2O gestreuten Neutronen; Anfangsenergie der Neutronen: $E_0 = 0,039 \text{ eV}$; Temperatur des Wassers: $T = 21^\circ \text{C}$. Streuwinkel ϑ . ---○--- C. REINSCH und T. SPRINGER [2]. ——— NELKINS Theorie

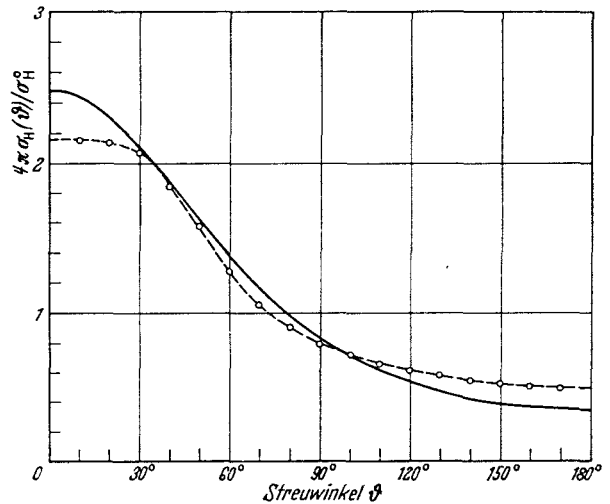


Abb. 2. Winkelverteilung wie in Abb. 1 mit $E_0 = 0,078 \text{ eV}$. Streuwinkel ϑ . ---○--- C. REINSCH und T. SPRINGER [2]. ——— NELKINS Theorie

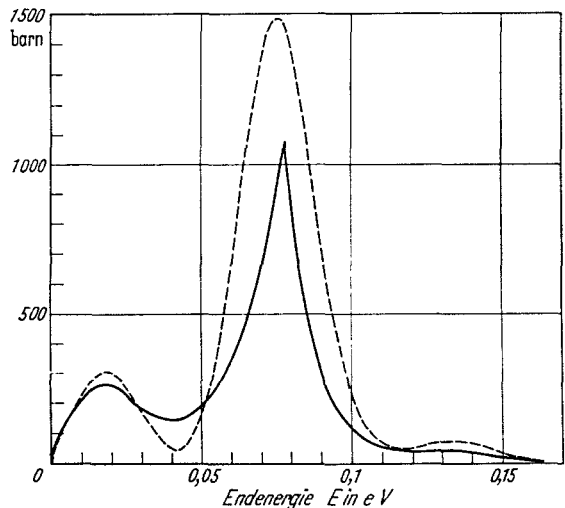


Abb. 3. Abhängigkeit des zweifach differentiierten Streuquerschnitts $4\pi\sigma_H(E_0 \rightarrow E, \vartheta, T)$ bei fest vorgegebenem Streuwinkel $\vartheta = 50^\circ$ und des einfach differentiierten Streuquerschnitts $2\sigma_H^0(E_0 \rightarrow E, T)$ von der Endenergie E . Anfangsenergie der Neutronen: $E_0 = 0,078 \text{ eV}$; Temperatur des Wassers: $T = 21^\circ \text{C}$. Endenergie E in eV. --- $4\pi\sigma_H(E, \vartheta = 50^\circ)$. ——— $2\sigma_H^0(E)$

in Abb. 4 allgemein für Zimmertemperatur. Die Unstetigkeiten dieser Kurven liegen bei $E_{01} = \hbar\nu_1 = 0,2 \text{ eV}$ und $E_{02} = \hbar\nu_2 = 0,48 \text{ eV}$. ν_1 und ν_2 sind die

Frequenzen der inneren Schwingungen des Moleküls. Die Verwendung der free-atom-approximation in [1] bedingt, daß die Parameter A , B , \bar{E} , m , ω sich sprunghaft mit der Anfangsenergie ändern. Die Sprungstellen liegen genau bei den oben angegebenen An-

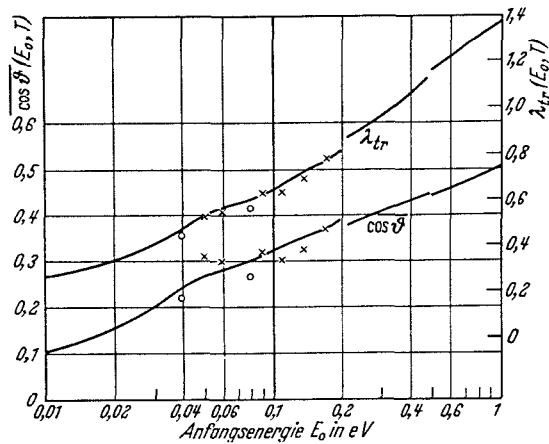


Abb. 4. Abhängigkeit der Transportweglänge $\lambda_{tr}(E_0, T)$ und des mittleren Cosinus des Streuwinkels $\overline{\cos \vartheta}(E_0, T)$ von der Anfangsenergie E_0 der Neutronen. Temperatur des Wassers: $T = 23^\circ \text{C}$. Anfangsenergie E_0 in eV. \circ C. REINSCH und T. SPRINGER [2], \times W. L. WHITTEMORE and A. W. Mc. REYNOLDS [5]. ——— NELKINS Theorie

fangsenergien, für die die Kurven in Abb. 4 Unstetigkeiten aufweisen. In dem Intervall $0,15 \text{ eV} < E_0 < 0,2 \text{ eV}$ werden zwei verschiedene Parametersätze zur Berechnung von (1) verwendet, je nachdem ob der Energieübertrag $|E - E_0|$ kleiner oder größer als $0,1 \text{ eV}$ ist. Daher sind die Kurven für $\overline{\cos \vartheta}$ und λ_{tr} in diesem Bereich etwas ungenau (vgl. auch [1]).

Aus Abb. 1 und 2 erkennt man, daß die theoretischen Werte für $\overline{\cos \vartheta}$ beim Vergleich mit [2] höher als die experimentellen Werte liegen müssen.

In [5] wird die Winkelverteilung nur zwischen 30 und 150° angegeben. Die aus den gemessenen Kurven berechneten Werte für $\overline{\cos \vartheta}$ enthalten wegen der vermutlich vorgenommenen Extrapolation auf 0 und 180° eine kleine Unsicherheit. Zur Bestimmung der „experimentellen“ Werte für λ_{tr} wurden für σ^0 die experimentellen Werte aus [4] und die Meßergebnisse für $\overline{\cos \vartheta}$ verwendet. Zum Vergleich mit dem in der Literatur [6] angegebenen Wert $\overline{\lambda_{tr}}^{\text{Max}} = 0,427 \text{ cm}$ wurde $\lambda_{tr}(E_0, T)$ aus Abb. 4 über eine Maxwell-Verteilung der Anfangsenergien gemittelt. Dabei ergab sich $\overline{\lambda_{tr}}^{\text{Max}} = 0,458$. Die geringe Abweichung zwischen dem experimentellen und dem theoretischen Wert ist wahrscheinlich darauf zurückzuführen, daß NELKINS Theorie etwas zu kleine Werte für σ^0 und zu große Werte für $\overline{\cos \vartheta}$ liefert.

Herrn Dr. W. HÄFELE und Herrn Dr. T. SPRINGER möchte ich für wertvolle Anregungen und Hinweise zu diesem Thema danken.

Literatur: [1] NELKIN, M.S.: Phys. Rev. 119, 741 (1960). [2] REINSCH, C., u. T. SPRINGER: Z. Naturforsch. 16a, H. 1 (1961). — [3] HURWITZ jr. H., M.S. NELKIN and G. J. HABETLER: Nuclear Sci. Eng. 1, 300 (1956). — [4] HUGHES, D.J., and J.A. HARVEY: Neutron Cross Sections, BNL 325, July 1, 1955. — [5] WHITTEMORE, W.L., and A.W. McREYNOLDS: Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids IAEA Conf. 11.—14. Okt. 1960 in Wien. — [6] KÜCHLE, M.: Nukleonik 2, 131 (1960).