

KFK-323

**KERNFORSCHUNGSZENTRUM  
KARLSRUHE**

März 1965

KFK 323

*Gesellschaft für Kernforschung m. b. H.  
Zentralbibliothek*

*23 Juni 1965*

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik

Theorie der Neutronenthalisierung in einer zylindersymmetrischen  
Zwei-Zonen-Reaktorzone

H. Küsters



GESELLSCHAFT FÜR KERNFORSCHUNG M. B. H.  
KARLSRUHE

## **Theorie der Neutronenthalisierung in einer zylindersymmetrischen Zwei-Zonen-Reaktorzone**

Von **H. KÜSTERS**

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

Mit 11 Textabbildungen

*(Eingegangen am 10. November 1964)*

*Zusammenfassung.* Die orts- und energieabhängige Neutronenverteilung im thermischen und epithermischen Energiebereich wird auf analytischem Wege für eine zylindersymmetrische Zwei-Zonen-Einheitszelle bestimmt. Dabei wird der Moderator hinsichtlich seiner Streueigenschaften als monoatomares Gas der Masse  $M$  behandelt. In Moderator und Brennstoffzone wird  $1/v$ -Absorption vorausgesetzt. Die epithermische Lösung wird durch Entwicklung der Neutronenverteilung nach Potenzen von  $1/v$  ( $\epsilon \equiv E/kT$ ) bestimmt. Im thermischen Bereich führt die Aufstellung eines für Thermalisierungsprobleme weitgehend optimalen Systems von orthonormalen Funktionen zu einer raschen Konvergenz des Verfahrens. Bei der numerischen Auswertung wird diskutiert, welche Parameter für Thermalisierungsprobleme in heterogenen Systemen besonders wichtig sind. Der Einfluß der anisotropen Streuung der Neutronen im Moderator wird untersucht. Schließlich wird abgeschätzt, wie sehr die in  $P_1$ -Näherung berechneten Spektren von den strengen Lösungen abweichen können.

### Einleitung

Bei der Behandlung der Thermalisierung von Neutronen mit Energien unterhalb einiger Elektronenvolt spielen folgende Probleme eine Rolle: Die Temperatur-

bewegung der Moderatoratome; die chemische Bindung, mit der diese Atome in Molekül oder Kristall festgehalten werden und die daraus folgende quantenmechanische Struktur der entsprechenden Schwingungs- und

Rotationsniveaus; schließlich die von der Streuung an verschiedenen Atomen des Moleküls oder Kristalls herührenden Interferenzeffekte.

Infolge der Komplexität des Brems- und Diffusionsvorganges in diesem Energiegebiet wird die Berechnung des Neutronenspektrums bei Berücksichtigung aller genannten Probleme sehr aufwendig sein. Bei gut moderierten Reaktoren ( $H_2O$ ,  $D_2O$ ) haben jedoch die Effekte, die von der detaillierten Struktur des Vorganges der Energieübertragung abhängen, nur einen untergeordneten Einfluß auf das Neutronenspektrum. Dafür sind im wesentlichen zwei Bedingungen verantwortlich:

1. Die integrale Neutronenbilanz im betrachteten System muß gewährleistet sein.

2. Die Erfüllung des detaillierten Gleichgewichtes für das den Energietransfer bei einem Stoß des Neutrons mit der Moderators substanz beschreibende Streugesetz.

Das detaillierte Gleichgewicht garantiert, daß sich in einem quell- und absorptionsfreien Medium ein thermisches Gleichgewicht zwischen Neutronen und dem Moderator einstellt, so daß also das Neutronenspektrum durch eine Maxwell-Verteilung beschrieben wird. In einem guten Moderator mit kleiner Absorption wird demnach nur eine geringfügige Abweichung des Spektrums von der Maxwell-Verteilung bei Neutronenenergien  $E \approx kT$  ( $k =$  Boltzmann-Konstante,  $T =$  Moderatortemperatur) auftreten (die Absorption wird im folgenden in ihrer Energieabhängigkeit stets durch ein  $1/\sqrt{E}$ -Gesetz beschrieben).

Zu diesem Charakteristikum eines stark ausgeprägten thermischen Maximums tritt im stationären Fall die Forderung hinzu, daß die Gesamtneutronenabsorption im thermischen Gebiet einschließlich Neutronenausfluß gleich der in den thermischen Bereich pro Zeiteinheit hineingestreuerten Anzahl von Neutronen sein muß. Dadurch wird der thermische Teil des Spektrums stark an das epithermische Gebiet gekoppelt, in dem reine Abbremsung der Neutronen stattfindet und das Spektrum bei bereits abgeklungener  $1/\sqrt{E}$ -Absorption einen  $1/E$ -Verlauf aufweist. Die Berücksichtigung der chemischen Bindung kann dann nur zu Änderungen im Rahmen dieser beiden Bedingungen führen.

Bei der Berechnung von Reaktorspektren liegt das Hauptgewicht jedoch auf der Erfassung der *Heterogenität* eines Reaktorgitters aus Brennstoffstäben in einem Moderator. Aus diesem Grunde wird bei der Ermittlung heterogener Spektren der Moderator meist als freies Gas oder gar als schweres Gas behandelt.

Bei der mathematischen Behandlung des Neutronenthalisierungsproblems verwendet man bisher fast ausschließlich rein numerische Methoden. H. C. HONECK [1] ging von der integralen Form der Boltzmann-Gleichung aus und löste sie iterativ durch numerische Integration. Bei dieser Methode und den üblichen Multigruppenverfahren [2] erfordert die starke Variabilität des Neutronenspektrums viele Integrationsintervalle bzw. eine große Zahl von Energiegruppen. Durch theoretisch fundierte Ansätze für die Form der Verteilungsfunktion der Neutronen innerhalb der einzelnen Energiegruppen konnten K. MEETZ, K. OTT und S. SANATANI [3] die Zahl der Energiegruppen auf fünf reduzieren und für ebene

Geometrie ohne allzu großen numerischen Aufwand zu brauchbaren Ergebnissen gelangen. Einige Autoren [4–6] bestimmten mit Hilfe der Stoßwahrscheinlichkeits-Methode genähert die örtlich gemittelten Spektren im Rahmen des Schwergas-Modells. Zu einer analytischen Darstellung des Neutronenspektrums in den Moderatorbereichen eines heterogenen Reaktors im Rahmen des Schwergas-Modells gelangte H. KUNZE [7], indem er die Brennstoffstäbe wie in der monoenergetischen Behandlung durch K. MEETZ [8] zu Linien senken mit einer effektiven Absorption idealisierte. Damit erhält man also keine Information über die Spektren in den Brennstoffzonen, die sich merklich von den Spektren am Rand des Brennstabes unterscheiden können. Die Kenntnis der Brennstoffspektren ist jedoch für die Bestimmung der Neutronenökonomie eines thermischen Reaktors von primärer Bedeutung. Außerdem wird die Benutzung des Schwergas-Modells für wassermodierte ( $H_2O$ ,  $D_2O$ ) Reaktoren fragwürdig.

Das Ziel dieser Arbeit ist, auf analytischem Wege die orts- und energieabhängige Neutronenverteilung in einer zylindersymmetrischen Einheitszelle des Reaktors zu bestimmen. Der Moderator wird als monoatomares Gas einer noch zu bestimmenden Masse  $M$  behandelt; die Streuung an den schweren Brennstoffkernen wird idealisiert als isotrope Streuung im Laborsystem ohne Energieverlust. Die Anisotropie bei der Streuung an den Moderatoratomen wird berücksichtigt. Bei der mathematischen Behandlung des Problems bedenken wir, daß im Gebiet großer Energien die Abbremsung der Neutronen überwiegt, während für  $E \approx kT$  die Neutronenenergie vergleichbar ist mit der kinetischen Energie der Moderatormoleküle, so daß die Neutronen bei einem Stoß häufig auch Energie aufnehmen werden. Physikalisch sind diese beiden Energiebereiche natürlich nicht scharf getrennt, jedoch können wir vom verschiedenen Charakter des Brems- und Ausgleichsvorganges bei der Wahl des Lösungsverfahrens Gebrauch machen (epithermische Lösung im Abbremsbereich und thermische Lösung im Ausgleichsbereich). Bei der numerischen Auswertung des Verfahrens wird diskutiert, welche Parameter für Thermalisierungsprobleme in heterogenen Systemen besonders wichtig sind. Der Einfluß der anisotropen Streuung wird untersucht. Es wird abgeschätzt, wie sehr die in  $P_1$ -Näherung berechneten Spektren von den strengen Lösungen abweichen können.

## 1. Ausgangsgleichungen und Streukerne

Wir betrachten eine in axialer Richtung unendlich ausgedehnte Einheitszelle. Die Ortsabhängigkeit der Neutronenverteilung wird dann durch den Abstand  $r$  von der Symmetrieachse charakterisiert. Die Transportgleichung lautet für zylindrische Geometrie ( $\varphi$  und  $\vartheta$  sind der Azimut- bzw. Poldistanzwinkel):

$$\left. \begin{aligned} \sin \vartheta \left\{ \cos \varphi \frac{\partial \psi(r, \varepsilon, \vec{\Omega})}{\partial r} - \frac{\sin \varphi}{r} \frac{\partial \psi(r, \varepsilon, \vec{\Omega})}{\partial \varphi} \right\} + \\ + \sigma_t(\varepsilon) \psi(r, \varepsilon, \vec{\Omega}) = \int_0^{\infty} d\varepsilon' \int_{(4\pi)} d\vec{\Omega}' \times \\ \times \sigma_s(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \cdot \psi(r, \varepsilon', \vec{\Omega}') \end{aligned} \right\} \quad (1.1)$$

Dabei ist  $\Sigma_0$  der hochenergetische, konstante Streuquerschnitt des betrachteten Mediums,  $\sigma_t(\varepsilon) = \Sigma_t(\varepsilon)/\Sigma_0$ ,  $\varepsilon = E/kT$  und  $\sigma_s(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$  der mit  $\Sigma_0$  dividierte makroskopische Transferquerschnitt. Gl. (1) haben wir in jedem Medium mit folgenden Randbedingungen zu lösen:

$$\psi_M(R, \varepsilon, \vec{\Omega}) = \psi_M(R, \varepsilon, -\vec{\Omega}), \quad (1.2a)$$

$$\psi_M(\varrho, \varepsilon, \vec{\Omega}) = \psi_U(\varrho, \varepsilon, \vec{\Omega}), \quad (1.2b)$$

$$\psi_U(r, \varepsilon, \vec{\Omega}) \text{ regulär für } r \rightarrow 0, \quad (1.2c)$$

$$\psi(r, \varepsilon, \vec{\Omega}) \sim 1/\varepsilon \text{ für } \varepsilon \rightarrow \infty. \quad (1.2d)$$

$R$  bedeutet den Zellradius,  $\varrho$  den Stabradius; die Indizes  $M$  bzw.  $U$  stehen für die Moderator- bzw. Brennstoffzone.

Da sich in einem stationär betriebenen thermischen Reaktor weit oberhalb des thermischen Gebietes ein ortsunabhängiges  $1/\varepsilon$ -Spektrum einstellt [9], kann man den Thermalisierungsbereich mit Hilfe der Bedingung (1.2d) durch die homogene Gl. (1.1) beschreiben. Zur Lösung von (1.1) entwickeln wir den Fluß  $\psi(r, \varepsilon, \vec{\Omega})$  nach Kugelflächenfunktionen:

$$\psi(r, \varepsilon, \vec{\Omega}) = \sum_{l,m} \Phi_{lm}(r, \varepsilon) \cdot Y_{lm}(\vec{\Omega}). \quad (1.3)$$

Die Kugelflächenfunktionen stehen mit der zugeordneten Kugelfunktion erster Art ( $P_{lm}(\cos\vartheta)$ ) in folgendem Zusammenhang:

$$Y_{lm}(\vec{\Omega}) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_{lm}(\cos\vartheta) \cdot e^{im\varphi}, \quad (1.4)$$

wobei

$$P_{lm}(\cos\vartheta) = \left. \begin{aligned} & \frac{(-1)^{l+m}}{(2l)!!} \sin^m \vartheta \frac{d^{m+l}(\sin\vartheta)^{2l}}{(d \cos\vartheta)^{m+l}} \\ & ((2l)!! = 2 \cdot 4 \cdot \dots \cdot 2l). \end{aligned} \right\} (1.5)$$

Folgende Relationen gelten:

$$\int_{(4\pi)} Y_{lm}(\vec{\Omega}) Y_{l'm'}(\vec{\Omega}) d\vec{\Omega} = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (1.6)$$

$$Y_{l,-m}(\vec{\Omega}) = (-1)^m Y_{lm}^*(\vec{\Omega}), \quad (1.7)$$

$$P_l(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} Y_{lm}(\vec{\Omega}) Y_{lm}^*(\vec{\Omega}'). \quad (1.8)$$

(Die konjugiert komplexen Größen sind hier durch einen Stern charakterisiert.)

Da  $\psi(r, \varepsilon, \vec{\Omega})$  als physikalische Größe reell sein muß und außerdem invariant ist gegenüber der Ersetzung von  $\vartheta \rightarrow \pi - \vartheta$ ,  $\varphi \rightarrow -\varphi$ , folgt

$$l+m \text{ gerade, } \Phi_{l,-m}(r, \varepsilon) = (-1)^m \Phi_{lm}(r, \varepsilon). \quad (1.9)$$

In der Moderatorzone entwickeln wir den Transferquerschnitt ebenfalls nach Kugelfunktionen:

$$\sigma_s(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) = \sum_l \frac{2l+1}{4\pi} K_l(\varepsilon', \varepsilon) P_l(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}'). \quad (1.10)$$

Einsetzen von (1.3) und (1.10) in (1.1) führt dann nach einiger Rechnung auf folgendes System von Integro-Differentialgleichungen für die Entwicklungskoeffizienten  $\Phi_{lm}(r, \varepsilon)$

$$\left. \begin{aligned} & a_{lm} \left( \frac{\partial}{\partial r} - \frac{m-1}{r} \right) \Phi_{l+1}^{m-1}(r, \varepsilon) - \\ & - b_{lm} \left( \frac{\partial}{\partial r} - \frac{m-1}{r} \right) \Phi_{l-1}^{m-1}(r, \varepsilon) + \\ & + c_{lm} \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{m+1}{r} \right) \Phi_{l-1}^{m+1}(r, \varepsilon) - \\ & - d_{lm} \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{m+1}{r} \right) \Phi_{l+1}^{m+1}(r, \varepsilon) + \\ & + \sigma_t(\varepsilon) \Phi_{lm}(r, \varepsilon) \\ & = \int_0^\infty K_l(\varepsilon', \varepsilon) \Phi_{lm}(r, \varepsilon') d\varepsilon'. \end{aligned} \right\} (1.11)$$

Hierbei sind

$$\left. \begin{aligned} & a_{lm} = \frac{1}{2\Sigma_0} \sqrt{\frac{(l-m+1)(l-m+2)}{(2l+1)(2l+3)}}; \\ & b_{lm} = \frac{1}{2\Sigma_0} \sqrt{\frac{(l+m-1)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)}}; \\ & c_{lm} = b_{l,-m}; \quad d_{lm} = a_{l,-m}. \end{aligned} \right\} (1.12)$$

Das unendliche System (1.11) wird nun in üblicher Weise durch ein endliches System angenähert, indem man fordert:

$$\Phi_{L+1}(r, \varepsilon) = 0. \quad (1.13)$$

Die Randbedingungen (1.2a) und (1.2b) lauten jetzt:

$$\left. \begin{aligned} & \Phi_{lm}^M(R, \varepsilon) = 0 \text{ für ungerade } m\text{-Werte} \\ & \Phi_{lm}^M(\varrho, \varepsilon) = \Phi_{lm}^U(\varrho, \varepsilon). \end{aligned} \right\} (1.14)$$

Der Transferquerschnitt für ein monoatomares Gas ist in den angegebenen Variablen gegeben durch

$$\left. \begin{aligned} & \sigma_s(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) = \frac{kT}{4\pi} \left( 1 + \frac{1}{M} \right)^2 \times \\ & \times \left[ \frac{\varepsilon}{\varepsilon'} \sqrt{\frac{M}{2\pi kT}} \cdot \frac{1}{z} e^{-\frac{M}{2kT} \left( \frac{\varepsilon - \varepsilon'}{z} - kT - \frac{z}{2M} \right)^2} \right] \end{aligned} \right\} (1.15)$$

Dabei ist

$M$  die Masse des Streuers (die Masse des Neutrons ist hier und im folgenden gleich Eins gesetzt),

$k$  die Boltzmann-Konstante,

$\varepsilon'$  und  $\varepsilon$  die Energie des Neutrons in Einheiten  $kT$  vor bzw. nach dem Stoß,

$z^2 = 2kT(\varepsilon' + \varepsilon - 2) |\varepsilon \varepsilon' \cos\Theta|$  das Quadrat des Impulsübertrags,

$\cos\Theta = (\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}')$  der Cosinus des Streuwinkels.

Aus der Entwicklung (1.10) folgt mit Hilfe der Orthogonalitätsrelation für die Legendre-Polynome:

$$\left. \begin{aligned} & K_l(\varepsilon', \varepsilon) = 2\pi \int_{-1}^{+1} P_l(\cos\Theta) \times \\ & \times \sigma_s(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) d(\cos\Theta). \end{aligned} \right\} (1.16)$$

Die Integrale (1.16) lassen sich einfach ausführen, wenn man die Integration über den Streuwinkel durch eine Integration über  $z$  ersetzt. Wir führen folgende

$$\text{Abkürzungen ein } \left( \text{Erf}(x) = \frac{2}{|\pi|} \int_0^x e^{-t^2} dt \right):$$

$$\left. \begin{aligned} & a = \frac{1}{2} \left( \sqrt{\bar{M}} - \frac{1}{\sqrt{\bar{M}}} \right) \\ & b = \frac{1}{2} \left( \sqrt{\bar{M}} + \frac{1}{\sqrt{\bar{M}}} \right) \end{aligned} \right\} a^2 + 1 = b^2 \quad (1.17)$$

$$\left. \begin{aligned} F_1 &= \operatorname{Erf}(b\sqrt{\varepsilon} - a\sqrt{\varepsilon'}) \mp \operatorname{Erf}(b\sqrt{\varepsilon} + a\sqrt{\varepsilon'}) \\ F_2 &= e^{-(\varepsilon-\varepsilon')} [\operatorname{Erf}(b\sqrt{\varepsilon'} - a\sqrt{\varepsilon}) \pm \\ &\quad \pm \operatorname{Erf}(b\sqrt{\varepsilon'} + a\sqrt{\varepsilon})] \\ E_1 &= e^{-(b\sqrt{\varepsilon} - a\sqrt{\varepsilon'})^2} \\ E_2 &= e^{-(b\sqrt{\varepsilon} + a\sqrt{\varepsilon'})^2} \end{aligned} \right\} (1.18)$$

Für die Wahl des Vorzeichens gilt:  
 oberes Vorzeichen für  $\varepsilon' < \varepsilon$  (Aufwärtsstreuung)  
 unteres Vorzeichen für  $\varepsilon' > \varepsilon$  (Bremsung).

Man erhält dann für die ersten beiden Kerne:

$$K_0(\varepsilon', \varepsilon) = \frac{b^2}{2\varepsilon'} (F_1 + F_2), \quad (1.20a)$$

$$\left. \begin{aligned} K_1(\varepsilon', \varepsilon) &= \frac{b^2}{2\varepsilon'} \left[ \frac{M}{\varepsilon'} \left\{ (\varepsilon b - \varepsilon' a - |M|) F_1 + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (\varepsilon' b - \varepsilon a - |M|) F_2 + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{2}{|\pi|} [ (|\varepsilon' + |\varepsilon'|) E_1 \pm (|\varepsilon' - |\varepsilon|) E_2 ] \right\} \right]. \end{aligned} \right\} (1.20b)$$

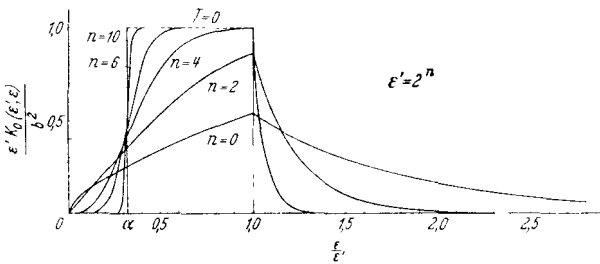


Abb. 1. Der Streukern  $K_0(\varepsilon', \varepsilon)$  für  $M = 3,6$

Stoß nehmen die Kerne die von der Abbremsstheorie bekannten Funktionsverläufe an, welche die Streuung an ruhenden Atomen ( $T=0$ ) beschreiben. Die Grenzkurven für  $T=0$  sind im Intervall  $\alpha\varepsilon' \leq \varepsilon \leq \varepsilon'$  gegeben durch  $(\alpha = \frac{M-1}{M+1})^2$ :

$$\left. \begin{aligned} K_0^B(\varepsilon', \varepsilon) &= \frac{b^2}{\varepsilon'} \\ K_1^B(\varepsilon', \varepsilon) &= \frac{b^2}{\varepsilon'} \left[ M \left( b \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon'}} - a \sqrt{\frac{\varepsilon'}{\varepsilon}} \right) \right]. \end{aligned} \right\} (1.21)$$

Bei der rechnerischen Behandlung hat man stets durch Reihenentwicklungen dafür Sorge zu tragen,

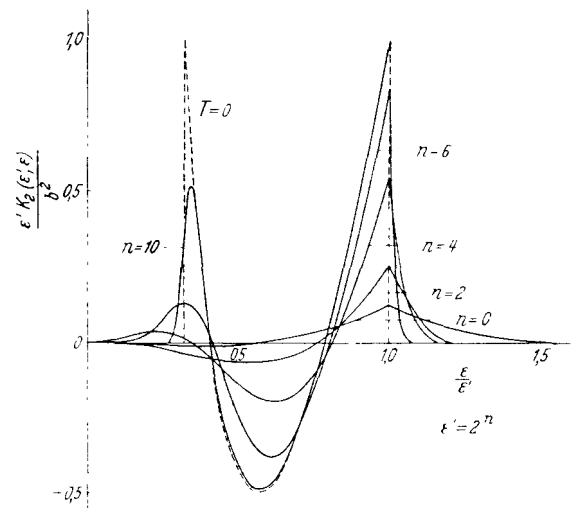


Abb. 3. Der Streukern  $K_2(\varepsilon', \varepsilon)$  für  $M = 3,6$

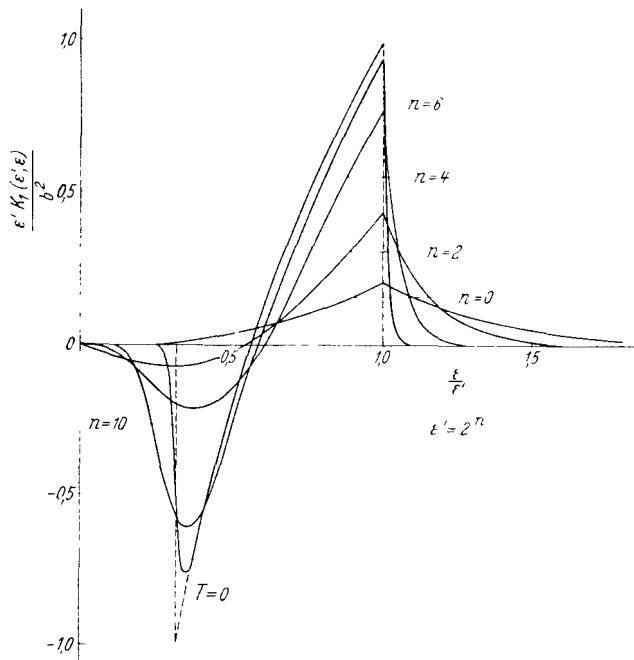


Abb. 2. Der Streukern  $K_1(\varepsilon', \varepsilon)$  für  $M = 3,6$

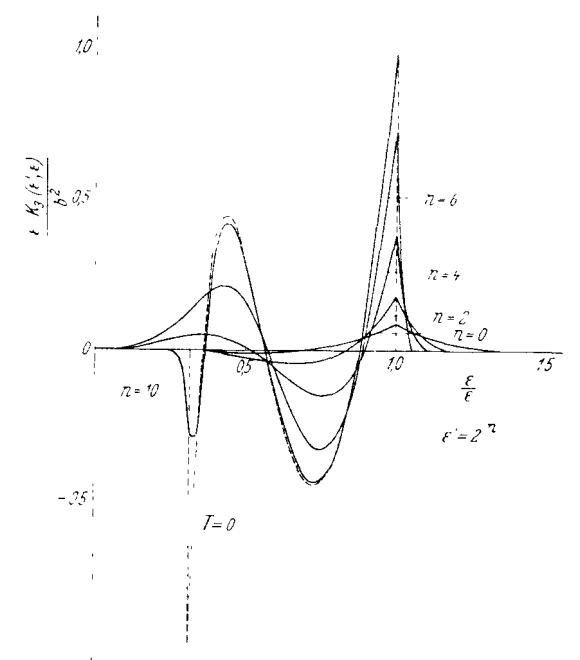


Abb. 4. Der Streukern  $K_3(\varepsilon', \varepsilon)$  für  $M = 3,6$

Da wir in der numerischen Auswertung nur die Kerne (1.20) benutzen, wollen wir hier auf die explizite Angabe der höheren Streukerne  $K_2(\varepsilon', \varepsilon)$  und  $K_3(\varepsilon', \varepsilon)$  verzichten. In den Abb. 1–4 sind die Streukerne  $\varepsilon'(K_l(\varepsilon', \varepsilon))/b^2$  für  $l=0$  bis  $l=3$  gegen den Quotienten  $\varepsilon/\varepsilon'$  aufgetragen. Die Masse ist hier  $M=3,6$  gewählt. Für sehr große Neutronenenergien  $\varepsilon' \gg 1$  vor dem

daß numerische Fehler besonders in der Funktion  $F_2$  aus (1.18) bei großen Argumenten der Fehlerfunktion vermieden werden.

Da das detaillierte Gleichgewicht für die Streukerne erfüllt ist, also

$$K_l(\varepsilon', \varepsilon) \varepsilon' e^{-\varepsilon'} = K_l(\varepsilon, \varepsilon') \varepsilon e^{-\varepsilon}. \quad (1.22)$$

kann man die Kerne z.B. für  $\epsilon' < \epsilon$  direkt aus der Darstellung für  $\epsilon' > \epsilon$  gewinnen.

Der makroskopische Streuquerschnitt ergibt sich aus dem Transferquerschnitt durch Integration über alle möglichen Endenergien und Streuwinkel. Mit

$$\sigma_s^M(\epsilon) = \frac{\Sigma_s^M(\epsilon)}{\Sigma_0^M} \text{ erhält man}$$

$$\sigma_s^M(\epsilon) = \left(1 + \frac{1}{2\epsilon M}\right) \text{Erf}(\sqrt{\epsilon M}) + \frac{e^{-\epsilon M}}{|\pi| \epsilon M}. \quad (1.23)$$

Im Brennstoffmedium nehmen wir den Stoß ohne Energieverlust an. Dann wird:

$$\Sigma_s^U(\epsilon' \rightarrow \epsilon, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \Sigma_{0U} \delta(\epsilon' - \epsilon). \quad (1.24)$$

$\delta(\epsilon' - \epsilon)$  ist die Deltafunktion,  $\Sigma_{0U}$  der über den ganzen interessierenden Energiebereich konstant angenommene Streuquerschnitt des Brennstoffs.

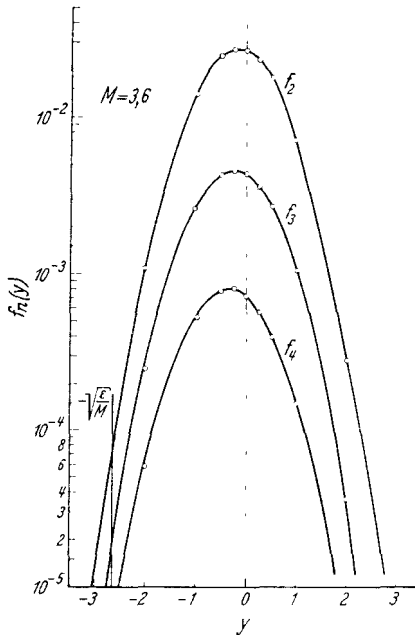


Abb. 5. Die Integranden  $f_n(y) = e^{-y^2}/(y+b|\epsilon|^n)$  für  $b|\epsilon = 6,06$ .  
○ Annäherung von  $f_n$  durch eine Gauß-Funktion

### 2. Die epithermische Lösung

Um einen möglichst guten Einblick in die mathematische Behandlung des Problems zu bekommen, werden wir explizit die Lösung in  $P_1$ -Näherung [ $L=1$  in (1.13)] bestimmen und die Erweiterung auf höhere Approximationen an den entsprechenden Stellen jeweils nur beschreiben. Wir setzen in beiden Medien  $1/\sqrt{\epsilon}$ -Absorption voraus und lösen das System (1.11) zunächst im epithermischen Gebiet  $\epsilon \gg 1$  durch Entwicklung von  $\Phi_{lm}(r, \epsilon)$  nach Potenzen von  $1/\sqrt{\epsilon}$ . Dies wird nahegelegt durch die Annahme einer  $1/\sqrt{\epsilon}$ -Absorption (Potenzen von  $1/\sqrt{\epsilon}$  sind ebenfalls zulässig):

$$\Phi_{lm}^{\text{epi}}(r, \epsilon) = \frac{c}{\epsilon} \delta_{l0} \delta_{m0} + \frac{A_{lm}(r)}{\epsilon^{\frac{3}{2}}} + \frac{B_{lm}(r)}{\epsilon^2} + \dots \quad (2.1)$$

Im Ansatz (2.1) ist die Bedingung (1.2d) aufgenommen, wonach der  $1/\epsilon$ -Anteil des Flusses ( $\sim \Phi_{00}(r, \epsilon)$ ) ortsunabhängig sein soll für große Energien.

Wir behandeln als erstes die Moderatorzone. Es war bisher üblich, im epithermischen Bereich  $\epsilon \gtrsim 16$  die Temperaturbewegung der Moderatoratome zu ver-

nachlässigen und mit den einfachen Ausdrücken der Streukerne (1.21) für  $T=0$  zu rechnen. Beim Test dieses Verfahrens für das unendlich ausgedehnte Medium zeigte es sich jedoch, daß durch die Unstetigkeit der Streukerne (von  $T=300^\circ\text{K}$  im termostatischen auf  $T=0$  im epithermischen Bereich) erhebliche Fehler im Spektrum entstehen können. Deshalb müssen sämtliche Integrale der rechten Seite von (1.11) mit der asymptotischen Entwicklung der temperaturabhängigen Streukerne ausgewertet werden.

Bei Aufwärtsstreuung  $\epsilon' < \epsilon$  können Beiträge zur asymptotischen Lösung nur aus der näheren Umgebung von  $\epsilon' = \epsilon$  kommen, da  $K_l(\epsilon' < \epsilon)$  für  $\epsilon' < \epsilon$  exponentiell abfällt. Im interessierenden Bereich  $\epsilon' \approx \epsilon$  ist für nicht zu große Massen ( $M \lesssim 8$ )  $F_1(\epsilon' < \epsilon) = 0$  und  $F_2(\epsilon' < \epsilon) = 1$  eine gute Näherung. Dann wird z.B.

$$K_0(\epsilon' < \epsilon) \approx \frac{b^2}{\epsilon'} e^{-(\epsilon - \epsilon')}. \quad (2.2)$$

Die Gültigkeit von (2.2) ist leicht durch Vergleich mit den Ergebnissen des exakten Streukerns nachzuprüfen; es muß etwa  $\epsilon - 4 \leq \epsilon' \leq \epsilon$  für  $\epsilon \gtrsim 16$  und  $M \lesssim 8$  sein (für  $M=2$  ist das Exponentialgesetz noch bis zu kleineren  $\epsilon'$ -Werten gültig). Da der Flußverlauf in diesem Energiegebiet praktisch noch durch die epithermische Entwicklung (2.1) beschrieben wird, so ergibt sich z.B. für den  $1/\epsilon$ -Anteil:

$$j = b^2 c e^{-\epsilon} \int_{\epsilon_u}^{\epsilon} \frac{e^{\epsilon'}}{\epsilon'^2} d\epsilon' \approx \frac{b^2 c}{\epsilon^2}.$$

Dabei sind Beiträge von der unteren Integrationsgrenze  $\epsilon_u$  vernachlässigt.

Für Abwärtsstreuung  $\epsilon' \geq \epsilon \gtrsim 16$  läßt sich  $F_1(\epsilon' > \epsilon)$  und  $F_2(\epsilon' > \epsilon)$  ersetzen durch

$$\left. \begin{aligned} F_1^{\text{as}}(\epsilon' > \epsilon) &\approx 1 + \text{Erf}(b\sqrt{\epsilon - a\sqrt{\epsilon'}}) \\ F_2^{\text{as}}(\epsilon' > \epsilon) &\approx -\frac{e^{-(a\sqrt{\epsilon'} - b\sqrt{\epsilon})^2}}{|\pi(b|\epsilon' - a|\epsilon)|} \end{aligned} \right\} \quad (2.3)$$

Man hat dann folgende Integrale auszuwerten

$$J_1^{(n)} = \int_{\epsilon}^{\infty} \frac{\text{Erf}(a\sqrt{\epsilon'} - b|\epsilon|)}{\epsilon'^{n/2+2}} d\epsilon', \quad (2.4a)$$

$$J_2^{(n)} = \int_{\epsilon}^{\infty} \frac{e^{-(a\sqrt{\epsilon'} - b\sqrt{\epsilon})^2}}{(b|\epsilon' - a\sqrt{\epsilon}|)^2 \epsilon'^{n/2+2}} d\epsilon'. \quad (2.4b)$$

Durch partielle Integration von (2.4a) stößt man auf das nicht streng auszuwertende Integral

$$I_n = \int_{-|\sqrt{\epsilon}|}^{\infty} \frac{e^{-y^2}}{(y+b|\epsilon|)^n} dy. \quad (2.5)$$

Man erhält jedoch eine ausgezeichnete Näherung, indem man den Integranden durch eine Gauß-Funktion ersetzt mit gleichem Wert und gleicher Krümmung im Maximum:

$$f_n(y) = \frac{e^{-y^2}}{(y+b|\epsilon|)^n} \approx f_n(y_M) e^{-(y-y_M)^2} \frac{f_n''(y_M)}{2f_n(y_M)}, \quad (2.6)$$

wobei  $y_M$  die Lage des Maximums von  $f_n(y)$  angibt.

In Abb. 5 ist die in (2.6) angegebene Näherung (eingekreiste Kreise) mit den exakten Integranden

für  $b \sqrt{\varepsilon} = 6,06$  verglichen ( $M = 3,6$ ). Die Abweichungen sind vernachlässigbar klein. Für nicht zu große Massen ( $M \lesssim 8$ ) darf man die untere Integrationsgrenze durch  $-\infty$  ersetzen, so daß man erhält:

$$I_n(\varepsilon) \approx \frac{\sqrt{\pi}}{(b \sqrt{\varepsilon})^n} \left( 1 + \frac{n(n+1)}{4b^2} \frac{1}{\varepsilon} \right). \quad (2.7)$$

Der Hauptbeitrag zum Integral  $J_2^{(n)}$  kommt aus der Umgebung  $\sqrt{\varepsilon}' = \frac{b}{a} \sqrt{\varepsilon}$ . Entwicklung von  $1/(b \sqrt{\varepsilon}' - a \sqrt{\varepsilon})$  liefert dann unter Benutzung von (2.7):

$$J_2^{(n)} \approx 2 \sqrt{\pi} \left( \frac{a}{b} \right)^{n+3} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}^{n+4}}. \quad (2.8)$$

Damit lassen sich alle Einstreuintegrale angeben:

$$\int_{\varepsilon_u}^{\infty} K_0(\varepsilon', \varepsilon) \frac{d\varepsilon'}{\varepsilon'^2} = \frac{\alpha_n^0}{\varepsilon^2} + \frac{\beta_n^0}{\varepsilon^{\frac{n+4}{2}}}, \quad (2.9)$$

$$\int_{\varepsilon_u}^{\infty} K_1(\varepsilon', \varepsilon) \frac{d\varepsilon'}{\varepsilon'^2} = \frac{\alpha_n^1}{\varepsilon^{\frac{n+2}{2}}} + \frac{\beta_n^1}{\varepsilon^{\frac{n+4}{2}}}. \quad (2.10)$$

Dabei ist  $\left( \alpha = \left( \frac{M-1}{M+1} \right)^2 \right)$ :

$$\left. \begin{aligned} \alpha_n^0 &= \frac{2}{n+2} \frac{1 - |\alpha|^{n+2}}{1 - \alpha} \\ \beta_n^0 &= b^2 (1 - \sqrt{|\alpha|^{n+3}}) - \frac{n+3}{2} \sqrt{|\alpha|^{n+2}} \\ \alpha_n^1 &= b^2 \sqrt{M} \left[ \frac{2b}{n+3} (1 - \sqrt{|\alpha|^{n+2}}) - \frac{2a}{n+1} (1 - \sqrt{|\alpha|^{n+1}}) \right] \\ \beta_n^1 &= b^2 \left( 1 - \frac{2M}{n+3} \right) + \\ &\quad + b^2 \sqrt{M} \left[ \left( \frac{2\sqrt{M}}{b^2} - b + \frac{n+2}{2b} \right) \sqrt{|\alpha|^{n+2}} + \right. \\ &\quad \left. + \left( \frac{2\sqrt{M}}{n+3} - \frac{n+4}{2b} \right) \sqrt{|\alpha|^{n+3}} + a \sqrt{|\alpha|^{n+4}} \right]. \end{aligned} \right\} (2.11)$$

In  $P_1$ -Näherung erhält man dann aus (1.11) mit  $\sigma_1^M = \frac{\Sigma_a(\varepsilon=1)}{\Sigma_{0M}}$ :

$$\left. \begin{aligned} \left( 1 + \frac{\sigma_1^M}{\sqrt{\varepsilon}} + \frac{1}{2M\varepsilon} \right)^M \Phi_{00}^{\text{epi}}(r, \varepsilon) - \frac{2}{\Sigma_{0M} \sqrt{6}} \times \\ \times \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right)^M \Phi_{11}^{\text{epi}}(r, \varepsilon) = \frac{c}{\varepsilon} + \frac{c\beta_0^0}{\varepsilon^2} + \\ + A_{00}^M(r) \left( \frac{\alpha_0^0}{\varepsilon^3} + \frac{\beta_0^0}{\varepsilon^2} \right) + B_{00}^M(r) \left( \frac{\alpha_0^0}{\varepsilon^2} + \frac{\beta_0^0}{\varepsilon^3} \right) + \dots \\ - \frac{1}{\Sigma_{0M} \sqrt{6}} \frac{\partial}{\partial r} \left( M \Phi_{00}^{\text{epi}}(r, \varepsilon) + \left( 1 + \frac{\sigma_1^M}{\sqrt{\varepsilon}} + \frac{1}{2M\varepsilon} \right) \times \right. \\ \times \left. M \Phi_{11}^{\text{epi}}(r, \varepsilon) = A_{11}^M(r) \left( \frac{\alpha_1^1}{\varepsilon^3} + \frac{\beta_1^1}{\varepsilon^2} \right) + \right. \\ \left. + B_{11}^M(r) \left( \frac{\alpha_1^1}{\varepsilon^2} + \frac{\beta_1^1}{\varepsilon^3} \right) + \dots \right\} (2.12) \end{aligned} \right\} (2.13)$$

Koeffizientenvergleich liefert für die einzelnen Potenzen in  $1/\sqrt{\varepsilon}$ :

a)  $1/\varepsilon$ : Gl. (2.12) identisch erfüllt.

b)  $1/\varepsilon^{\frac{3}{2}}$ :

$$\left. \begin{aligned} (1 - \alpha_1^0) A_{00}^M(r) - \frac{2}{\Sigma_{0M} \sqrt{6}} \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) A_{11}^M(r) \\ = -c\sigma_1^M \\ - \frac{1}{\Sigma_{0M} \sqrt{6}} \frac{\partial}{\partial r} A_{00}^M(r) + (1 - \alpha_1^1) A_{11}^M(r) = 0. \end{aligned} \right\} (2.14)$$

c)  $1/\varepsilon^2$ :

$$\left. \begin{aligned} (1 - \alpha_2^0) B_{00}^M(r) - \frac{2}{\Sigma_{0M} \sqrt{6}} \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) B_{11}^M(r) \\ = c\beta_0^0 - \sigma_1^M A_{00}^M(r) - \frac{c}{2M} \\ - \frac{1}{\Sigma_{0M} \sqrt{6}} \frac{\partial}{\partial r} B_{00}^M(r) + (1 - \alpha_2^1) B_{11}^M(r) \\ = -\sigma_1^M A_{11}^M(r) \end{aligned} \right\} (2.15)$$

usw. Aus (2.14) folgt für die spezielle Lösung ( $\hat{\Phi}$ ):

$$\widehat{A}_{00}^M(r) = -\frac{c\sigma_1^M}{1 - \alpha_1^0}; \quad \widehat{A}_{11}^M(r) = 0. \quad (2.16)$$

Die allgemeine Lösung ( $\tilde{\Phi}$ ) der homogenen Gl. (2.14) gewinnen wir mit dem Ansatz:

$$\left. \begin{aligned} \widetilde{A}_{00}^M(r) = A_{00} K_0(-z_1 r) \\ \widetilde{A}_{11}^M(r) = A_{11} K_1(-z_1 r) \end{aligned} \right\} (2.17)$$

mit

$$z_1 = \nu_1 \Sigma_{0M}. \quad (2.18)$$

Die Bessel-Funktionen  $K_m(-z)$  sind definiert durch

$$\left. \begin{aligned} K_m(-z) = (-1)^m K_m(z) - i\pi I_m(z) \\ K_m(z) = K_{-m}(z). \end{aligned} \right\} (2.19)$$

Unter Beachtung der Rekursionsformeln

$$\left. \begin{aligned} \frac{dK_m(z)}{dz} = -K_{m-1}(z) - \frac{m}{z} K_m(z) \\ K_{m-1}(z) - K_{m+1}(z) = -\frac{2m}{z} K_m(z) \end{aligned} \right\} (2.20)$$

steht also beim Einsetzen von (2.17) in (2.14)  $K_m(z_1 r)$  bei jedem Term und kürzt sich heraus. Das resultierende homogene Gleichungssystem ergibt:

$$\left. \begin{aligned} \nu_1 = \pm \sqrt{3(1 - \alpha_1^0)(1 - \alpha_1^1)} \\ A_{11}^{\pm} = \pm \sqrt{\frac{1 - \alpha_1^0}{2(1 - \alpha_1^1)}} A_{00}. \end{aligned} \right\} (2.21)$$

Mit  $+r$  ist also auch  $-r$  ein Eigenwert. Für die zugehörigen Eigenvektoren folgt aus (2.14) die Beziehung:

$$A_{00}^{(-)} = A_{00}^{(+)}, \quad (2.22a)$$

$$A_{11}^{(-)} = -A_{11}^{(+)}. \quad (2.22b)$$

Mit Hilfe von (2.19) und

$$\left. \begin{aligned} B_1 = -i\pi A_{00}^{(+)} \\ C_1 = A_{00}^{(+)} + A_{00}^{(-)} \end{aligned} \right\} (2.23)$$

(der Index 1 deutet auf die Zugehörigkeit zum ersten Eigenwert hin) können wir dann die vollständige Lösung von (2.14) angeben:

$$\left. \begin{aligned} A_{00}^M(r) = -\frac{c\sigma_1^M}{1 - \alpha_1^0} + B_1 I_0(z_1 r) + C_1 K_0(z_1 r) \\ A_{11}^M(r) = A_{11} (B_1 I_1(z_1 r) - C_1 K_1(z_1 r)). \end{aligned} \right\} (2.24)$$

In (2.24) treten nur noch die *positiven* Eigenwerte auf.  $A_{11}$  ist gegeben durch:

$$A_{11} = \frac{A_{11}^{(+)}}{A_{00}} = \sqrt{\frac{1 - \alpha_1^0}{2(1 - \alpha_1^1)}}. \quad (2.25)$$

Die unbekanntnen Größen  $B_1, C_1$  sind durch die örtlichen Randbedingungen zu bestimmen. Mit der Lösung des Systems (2.15) verfährt man ähnlich. Man



erhält

$$B_{00}^M(r) = c \left\{ \frac{(\sigma_1^M)^2}{(1-\alpha_1^0)(1-\alpha_2^0)} + \frac{2M-1}{M} \right\} + \left. \begin{aligned} &+ b_{00}^{(1)} [B_1 I_0(z_1 r) + C_1 K_0(z_1 r)] + \\ &+ B_2 I_0(z_2 r) + C_2 K_0(z_2 r), \end{aligned} \right\} \quad (2.26)$$

$$B_{11}^M(r) = b_{11}^{(1)} [B_1 I_1(z_1 r) - C_1 K_1(z_1 r)] + \left. \begin{aligned} &+ b_{11}^{(2)} [B_2 I_1(z_2 r) - C_2 K_1(z_2 r)]. \end{aligned} \right\} \quad (2.27)$$

Es sind stets nur die positiven Eigenwerte einzusetzen. Die einzelnen Konstanten sind gegeben durch:

$$\left. \begin{aligned} b_{00}^{(1)} &= \sigma_1^M \frac{(1-\alpha_1^0) + (1-\alpha_2^0)}{(1-\alpha_1^0)(1-\alpha_1^0) - (1-\alpha_2^0)(1-\alpha_2^0)} \\ b_{11}^{(1)} &= \frac{16}{2\nu_1} [\sigma_1^M + (1-\alpha_2^0)b_{00}^{(1)}] \\ \nu_2 &= \frac{1}{3} (1-\alpha_2^0)(1-\alpha_2^0). \end{aligned} \right\} \quad (2.28)$$

$B_2$  und  $C_2$  sind wieder durch die örtliche Randbedingung zu berechnen.

Die von der Ortsvariablen  $r$  unabhängigen Teile der Lösung sind identisch mit den entsprechenden Termen der Lösung für das unendlich ausgedehnte Medium. Der Term  $\frac{2M-1}{M}$  des  $1/\epsilon^2$ -Gliedes in (2.26) ergibt sich aus der Temperaturabhängigkeit des Streukerns für  $\epsilon' \gg 1$ . Insbesondere für kleine Absorptionen wird diese „Korrektur“ gegenüber  $T=0$  bedeutend, so daß der (negative) Anteil des  $1/\epsilon^3$ -Gliedes dadurch sogar kompensiert werden kann. Für große Massen  $M \gg 1$  geht  $(2M-1)/M$  über in den entsprechenden Term (nämlich 2) der Schwergas-Lösung. Das läßt sich auch für die höheren  $1/\epsilon$ -Potenzen zeigen. Da bei der näherungsweise Berechnung der Einstreuintegrale  $M \lesssim 8$  vorausgesetzt war, müssen demnach die vernachlässigten Terme auch für größere Massen unbedeutend sein, so daß die gewonnene asymptotische Lösung für alle Massen brauchbar ist. Für den Testfall des unendlich ausgedehnten Mediums zeigte sich bei  $M=40$  kein Unterschied gegenüber der Lösung des Schwergasmodells.

Die Erweiterung auf höhere  $P_L$ -Näherungen ist ohne weiteres möglich. Man erhält aus (1.11) ein System von sechs gekoppelten Integro-Differentialgleichungen, das man mit dem Ansatz (2.1) löst. Lediglich die Anzahl der Eigenwerte wird in  $P_3$ -Näherung auf sechs erhöht, von denen jedoch sich jeweils zwei nur durch das Vorzeichen unterscheiden. Die verallgemeinerten Beziehungen (2.22) und (2.23) lauten jetzt ( $j$  charakterisiere die Folge der Eigenwerte):

$$\left. \begin{aligned} A_{lm}^{(-)} &= (-1)^m A_{lm}^{(+)} \\ B_j &= -i\pi A_{00}^{(+\nu_j)} \\ C_j &= A_{00}^{(+\nu_j)} - A_{00}^{(-\nu_j)}. \end{aligned} \right\} \quad (2.27)$$

Wir führen nun noch folgende Abkürzungen ein:

$$\Phi_M(\epsilon) = \frac{c}{\epsilon} - \frac{c\sigma_1^M}{1-\alpha_1^0} \frac{1}{\epsilon^3} + \left. \begin{aligned} &+ c \left[ \frac{(\sigma_1^M)^2}{(1-\alpha_1^0)(1-\alpha_2^0)} + \frac{2M-1}{M} \right] \frac{1}{\epsilon^2} + \dots \end{aligned} \right\} \quad (2.28)$$

$$\left. \begin{aligned} \chi_{00}^I(\epsilon) &= \frac{1}{\epsilon^3} + \frac{b_{00}^{(1)}}{\epsilon^2} + \dots \\ \chi_{00}^0(\epsilon) &= 1/\epsilon^2 + \dots \\ \dots & \end{aligned} \right\} \quad (2.29)$$

$$\left. \begin{aligned} \chi_{11}^1(\epsilon) &= \frac{A_{11}}{\epsilon^3} + \frac{b_{11}^{(1)}}{\epsilon^2} + \dots \\ \chi_{11}^2(\epsilon) &= \frac{b_{11}^{(2)}}{\epsilon^2} + \dots \\ \dots & \end{aligned} \right\} \quad (2.30)$$

Gibt  $H$  die Anzahl der positiven Eigenwerte an, so ist die allgemeine Lösung für den epithermischen Bereich der Moderatorzone gegeben durch:

$$\left. \begin{aligned} {}^M\Phi_{lm}^{\text{epi}}(r, \epsilon) &= \Phi_M(\epsilon) \delta_{l0} \delta_{m0} + \\ &+ \sum_{j=1}^H \{ B_j I_m(z_j r) + (-1)^m C_j K_m(z_j r) \} \chi_{lm}^j(\epsilon). \end{aligned} \right\} \quad (2.31)$$

Bei einer epithermischen Entwicklung bis  $1/\epsilon^{n/2}$  ist  $H$  in  $P_L$ -Näherung gegeben durch

$$H = \frac{(L+1)(L+3)}{8} (n-2). \quad (2.32)$$

In der *Uranzone* gehen wir wieder von (1.11) aus und lösen das System durch den Ansatz (2.1). Unter Berücksichtigung von (1.24) erhalten wir durch Koeffizientenvergleich entsprechend (2.14) und (2.15) ( $\sigma_1^u = \frac{\Sigma_a^u(\epsilon=1)}{\Sigma_0 U}$ ):

- a)  $1/\epsilon$ : identisch erfüllt.
- b)  $1/\epsilon^3$ :

$$\left. \begin{aligned} \frac{2}{\Sigma_0 U} \frac{1}{6} \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) A_{11}^u(r) &= \sigma_1^u r \\ - \frac{1}{\Sigma_0 U} \frac{1}{6} \frac{\partial A_{00}^u(r)}{\partial r} + A_{11}^u(r) &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (2.33)$$

- c)  $1/\epsilon^2$ :

$$\left. \begin{aligned} \frac{2}{\Sigma_0 U} \frac{1}{6} \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) B_{11}^u(r) &= \sigma_1^u A_{00}^u(r) \\ - \frac{1}{\Sigma_0 U} \frac{1}{6} \frac{\partial B_{00}^u(r)}{\partial r} + B_{11}^u(r) &= -\sigma_1^u A_{11}^u(r) \end{aligned} \right\} \quad (2.34)$$

usw. Die Lösungen sind direkt anzugeben. Aus der ersten Gl. (2.33) folgt:

$$A_{11}^u(r) = \frac{1}{4} c \sigma_1^u (\Sigma_0 U r). \quad (2.35)$$

Die Lösung der homogenen Gleichung  $\text{const}/r$  ist wegen (1.2c) nicht zulässig. Weiter wird:

$$\left. \begin{aligned} A_{00}^u(r) &= A_{00}^u + \frac{3}{4} c \sigma_1^u (\Sigma_0 U r)^2 \\ B_{11}^u(r) &= \frac{16}{4} \sigma_1^u A_{00}^u (\Sigma_0 U r) + \frac{3}{32} \frac{1}{6} c (\sigma_1^u)^2 (\Sigma_0 U r)^3 \\ B_{00}^u(r) &= B_{00}^u + \frac{3}{4} \sigma_1^u (A_{00}^u + c \sigma_1^u) (\Sigma_0 U r)^2 + \\ &+ \frac{9}{64} c (\sigma_1^u)^2 (\Sigma_0 U r)^4 \end{aligned} \right\} \quad (2.36)$$

usw. Es stellt sich also in  $P_1$ -Näherung die Ortsabhängigkeit der epithermischen Lösung im Brennstoff bei der vorgenommenen Energieentwicklung als Reihe nach Potenzen von  $r^2$  dar. Und zwar wird der Fluß  $\Phi_{00}(r, \epsilon)$  eine gerade, der Strom  $\Phi_{11}(r, \epsilon)$  eine ungerade Funktion in  $r$ . Dies ist natürlich eine Folgerung der örtlichen Symmetrieverhältnisse bei  $r=0$ . Die Unbekannten  $A_{00}^u, B_{00}^u$  etc. sind durch die örtlichen Randbedingungen bestimmt.

In  $P_3$ -Näherung treten Bessel-Funktionen neben Potenzen in  $r$  auf. Die spezielle Lösung des inhomogenen Problems läßt sich ohne Schwierigkeiten angeben, da

die sechs gekoppelten Gleichungen zerfallen; es ist nur die Größe  $\widehat{A}_{20}^u = -\frac{c \sigma_1^u}{15}$  von Null verschieden. Eine Partikulärlösung des homogenen Problems erhält man mit dem Ansatz:

$$\widetilde{A}_{lm}^u(r) = A_{lm}^u \cdot I_m(\kappa r) \tag{2.37}$$

mit

$$\kappa = \sum_{0U} \nu.$$

In (2.37) ist wieder die Regularitätsforderung (1.2c) berücksichtigt, wonach die bei  $r=0$  singulären Bessel-Funktionen  $K_m(\kappa r)$  nicht auftreten dürfen.

Entsprechend (2.28) bis (2.30) führen wir ein:

$$\left. \begin{aligned} \Phi_u(\varepsilon) &= \frac{c}{\varepsilon} + \frac{A_{00}^u}{\varepsilon^2} + \frac{B_{00}^u}{\varepsilon^2} + \dots \\ \psi_{00}^1(\varepsilon) &= \frac{3}{4} c \sigma_1^u \cdot \frac{1}{\varepsilon^2} + \frac{3}{4} \sigma_1^u (A_{00}^u + c \sigma_1^u) \frac{1}{\varepsilon^2} + \dots \\ \psi_{00}^2(\varepsilon) &= \frac{9}{64} (\sigma_1^u)^2 \frac{c}{\varepsilon^2} + \dots \\ \dots \\ \psi_{11}^1(\varepsilon) &= \frac{1}{4} \sigma_1^u \left\{ \frac{c}{\varepsilon^2} + \frac{A_{00}^u}{\varepsilon^2} + \dots \right\} \\ \psi_{11}^2(\varepsilon) &= \frac{3}{32} (\sigma_1^u)^2 \cdot \frac{c}{\varepsilon^2} + \dots \\ \dots \end{aligned} \right\} \tag{2.38}$$

Damit erhalten wir in  $P_1$ -Näherung die allgemeine Form der epithermischen Lösung (in höherer  $P_L$ -Näherung treten noch weitere Glieder hinzu, die Bessel-Funktionen enthalten):

$$\left. \begin{aligned} U \Phi_{lm}^{\varepsilon pi}(r, \varepsilon) \\ = \Phi_u(\varepsilon) \cdot \delta_{l0} \delta_{m0} + \sum_{j=1}^H \psi_{lm}^j(\varepsilon) (\sum_{0U} \nu)^{2m-j} \end{aligned} \right\} \tag{2.39}$$

Die Randbedingungen (1.14) bestimmen die freien Konstanten zu:

$$\left. \begin{aligned} B_j &= K_1(\kappa_j R) \\ C_j &= I_1(\kappa_j R) \end{aligned} \right\} \tag{2.40a}$$

$$B_1 = \frac{A_{11}^u(\varrho)}{A_{11} \left[ I_1(\kappa_1 \varrho) - \frac{C_1}{B_1} K_1(\kappa_1 \varrho) \right]} \tag{2.40b}$$

$$B_2 = \frac{B_{11}^u(\varrho) - b_{11}^{(1)} B_1 \left[ I_1(\kappa_1 \varrho) - \frac{C_1}{B_1} K_1(\kappa_1 \varrho) \right]}{b_{11}^{(2)} \left[ I_1(\kappa_2 \varrho) - \frac{C_2}{B_2} K_1(\kappa_2 \varrho) \right]} \tag{2.40c}$$

$$A_{00}^u = -\frac{3}{4} c \sigma_1^u (\sum_{0U} \nu)^2 + A_{00}^M(\varrho) \tag{2.40d}$$

$$\left. \begin{aligned} B_{00}^u &= - \left\{ \frac{3}{4} \sigma_1^u (A_{00}^u + c \sigma_1^u) (\sum_{0U} \nu)^2 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{9}{64} (\sigma_1^u)^2 (\sum_{0U} \nu)^4 \right\} + B_{00}^M(\varrho) \end{aligned} \right\} \tag{2.40e}$$

usw. Damit ist die vollständige Lösung für das epithermische Energiegebiet bekannt.

### 3. Die thermische Lösung

Wir wollen zunächst den Gang der Rechnung zur Bestimmung der thermischen Lösung unseres Problems skizzieren, bevor wir ins mathematische Detail gehen. Wir setzen die in Abschnitt 2 gewonnene epithermische Lösung kontinuierlich bis zu  $\varepsilon=0$  fort, indem wir mit einer Dämpfungsfunktion multiplizieren, die für große Energien Eins wird und für kleine

Energien hinreichend stark verschwindet:

$$\Phi_{lm}^*(r, \varepsilon) = g_\lambda(\varepsilon) \Phi_{lm}^{\varepsilon pi}(r, \varepsilon). \tag{3.1}$$

Hierbei ist

$$g_\lambda(\varepsilon) = e^{-\varepsilon} \left( e^\varepsilon - \sum_{k=0}^{\lambda} \frac{\varepsilon^k}{k!} \right). \tag{3.2}$$

Diese Dämpfungsfunktion hat die geforderten Eigenschaften:

$$g_\lambda(\varepsilon) = \begin{cases} 1 & \text{für } \varepsilon \rightarrow \infty \\ \varepsilon^{\lambda+1} & \text{für } \varepsilon \rightarrow 0. \end{cases} \tag{3.3}$$

$\lambda$  muß stets so groß sein, daß der letzte in der asymptotischen Entwicklung berücksichtigte Term durch Multiplikation mit (3.2) für  $\varepsilon \rightarrow 0$  regulär wird.

Nun bleibt die Differenz des tatsächlichen Spektrums und dieser fortgesetzten Lösung zu bestimmen:

$$\Delta \Phi_{lm}(r, \varepsilon) = \Phi_{lm}(r, \varepsilon) - \Phi_{lm}^*(r, \varepsilon). \tag{3.4}$$

Einsetzen von (3.4) in die Boltzmann-Gleichung in der  $P_L$ -Darstellung (1.11) liefert ein inhomogenes System für  $\Delta \Phi_{lm}(r, \varepsilon)$ . Kürzen wir das System (1.11) ab durch  $\underline{B}_L \cdot \Phi_{lm}(r, \varepsilon) = 0$ , so wird also:

$$\underline{B}_L \Delta \Phi_{lm}(r, \varepsilon) = -\underline{B}_L \Phi_{lm}^*(r, \varepsilon) \equiv Q_{lm}(r, \varepsilon). \tag{3.5}$$

Für  $\varepsilon \gg 1$  lösen die Größen  $\Phi_{lm}^*(r, \varepsilon)$  das System (3.5) näherungsweise ( $g_\lambda(\varepsilon) = 1$ ) und damit verschwindet auch die Inhomogenität  $Q_{lm}(r, \varepsilon)$  entsprechend. Im thermischen Bereich ( $\varepsilon \approx 1$ ) entwickeln wir nun die Differenz  $\Delta \Phi$  und die Inhomogenität  $Q$  nach einem System orthonormaler Funktionen  $\omega_p(\varepsilon)$ :

$$\int_0^\infty \omega_p^+(\varepsilon) \omega_p(\varepsilon) d\varepsilon = \delta_{pp'}. \tag{3.6}$$

Hierbei ist  $\omega_p^+(\varepsilon)$  die zu  $\omega_p(\varepsilon)$  adjungierte Funktion.

Folgende beiden Bedingungen sind an das Basissystem zu stellen:

a) die Garantie des detaillierten Gleichgewichtes für den Streukern bei der Darstellung in diesem System,

b) die Adjungierten der Basisfunktionen müssen exponentiell abklingen, da sonst divergente Integrale auftreten können.

Die erste Forderung hat bei nicht symmetrischem Streukern zur Folge, daß

$$\omega_p(\varepsilon) = \varepsilon e^{-\varepsilon} \omega_p^+(\varepsilon). \tag{3.7}$$

Betrachtet man nämlich die bei der Berechnung der Inhomogenität  $Q_{lm}$  auftretenden Kernmatrixelemente  $k_{pp'} = \int_0^\infty d\varepsilon \omega_p^+(\varepsilon) \int_0^\infty K(\varepsilon', \varepsilon) \omega_{p'}(\varepsilon') d\varepsilon'$ , so entspricht dies einer Darstellung des Streukerns durch

$$K(\varepsilon', \varepsilon) = \sum_{p', p} k_{p' p} \omega_{p'}^+(\varepsilon') \omega_p(\varepsilon).$$

Erfüllung des detaillierten Gleichgewichtes (1.22) führt auf (3.7).

Die Bedingung b) resultiert aus einer Betrachtung der Inhomogenitätsentwicklung. Mit

$$Q_{lm}(r, \varepsilon) = \sum_p q_{lm}^p(r) \omega_p(\varepsilon) \tag{3.8}$$

folgt wegen (3.6):

$$q_{lm}^p(r) = \int_0^\infty Q_{lm}(r, \varepsilon) \omega_p^+(\varepsilon) d\varepsilon. \tag{3.9}$$

Wenn sich die strenge epithermische Lösung bestimmen läßt, so ist  $Q_{lm}(r, \epsilon)$  für  $\epsilon \gg 1$  Null und alle Momente (3.9) sind eindeutig angebar. Da man jedoch die epithermische Lösung nur näherungsweise bestimmen kann (z.B. bis zu einer Potenz  $1/\epsilon^n$ ), so ist bei  $1/\sqrt{\epsilon}$ -Absorption

$$Q_{lm}(r, \epsilon) = O\left(\frac{1}{\epsilon^{n+1/2}}\right) \text{ für } \epsilon \gg 1.$$

Falls die adjungierten Funktionen  $\omega_p^+(\epsilon)$  nur Polynome vom Grade  $p$  in  $\epsilon$  sind [mit (3.6) ergeben sich dann für  $\omega_p^+(\epsilon)$  die Laguerre-Polynome, s. weiter unten], so sind diese für  $p \geq n - 1/2$  unbrauchbar, da in (3.9) die Integration bis Unendlich geführt wird. Da man zur Beschreibung des thermischen Spektralbereiches mindestens vier Basisfunktionen benötigt, muß also  $n > 7/2$  sein. Nun ist die Bestimmung der epithermischen Lösung für größere  $n$ -Werte aufwendig und aus physikalischen Gründen unnötig, andererseits kann wegen des semikonvergenten Charakters der asymptotischen Reihenentwicklung  $n$  ohnehin nicht sehr

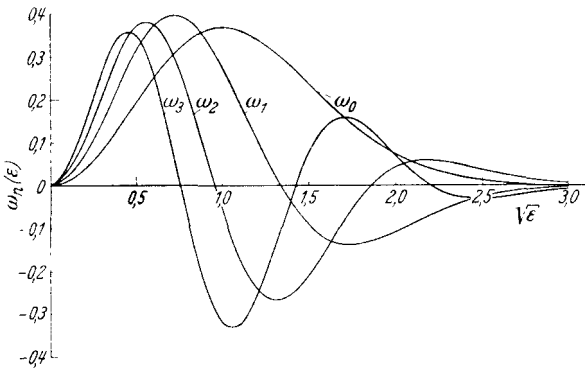


Abb. 6. Die Basisfunktionen  $\omega_n(\epsilon) = \epsilon e^{-(1+S_n)\epsilon} P_n(\epsilon)$  für  $S_n = n/S$

groß gewählt werden. Bei Verwendung der Laguerre-Polynome erhält man in der numerischen Durchführung außerdem wegen der Wichtung  $\epsilon^p$  eine starke Empfindlichkeit des thermischen Spektrums auf die Genauigkeit der epithermischen Lösung [7].

Diese Betrachtungen führten zur Aufnahme eines exponentiell abklingenden Anteils in den adjungierten Funktionen, wodurch alle angeführten Schwierigkeiten behoben sind. Damit läßt sich das interessierende Energiegebiet ohne Einführung eines cut offs behandeln, die beiden Teillösungen im thermischen und epithermischen Bereich gehen kontinuierlich ineinander über. Für die adjungierten Funktionen setzen wir an:

$$\omega_p^+(\epsilon) = e^{-S_p \epsilon} P_p(\epsilon). \tag{3.10}$$

$S_p$  soll eine vom Grad der Entwicklung abhängige Größe sein, die die Stärke der Dämpfung bestimmt.  $P_p(\epsilon)$  ist ein Polynom in  $\epsilon$  vom Grade  $p$ . Für  $S_p \equiv 0$  erhält man für  $P_p(\epsilon)$  gerade die Laguerreschen Polynome  $L_p^{(1)}(\epsilon)$ . Wird die Dämpfung unabhängig vom Grad der Ordnung gewählt, also  $S_p \equiv S = \text{const}$ , so ergibt sich folgendes orthonormierte System:

$$\left. \begin{aligned} \bar{\omega}_p^+(\epsilon) &= (1 + 2S)e^{-S_p \epsilon} L_p^{(1)}[(1 + 2S)\epsilon] \\ \bar{\omega}_p(\epsilon) &= \epsilon e^{-\epsilon} \bar{\omega}_p^+(\epsilon). \end{aligned} \right\} \tag{3.11}$$

Um größere Fehler bei der numerischen Bestimmung der Quellmomente  $q_{lm}^p$  zu vermeiden, sollten die adjungierten Funktionen für  $\epsilon \gtrsim 16$  nicht zu große Werte

annehmen. Für den Dämpfungsfaktor ist dann etwa  $S \approx 0,5$  plausibel. Da das Spektrum bei  $\epsilon \approx 1$  in der Moderatormitte praktisch durch eine Maxwell-Verteilung beschrieben wird, läßt sich leicht zeigen, daß die Konvergenz bei Entwicklung nach diesem System unbefriedigend ist. Damit wollen wir uns nun allgemeinen Dämpfungsfaktoren zuwenden.

Aus einer Tabelle der Funktionen  $\bar{\omega}_p^+(\epsilon)$  kann man schließen, daß eine lineare Abhängigkeit der Dämpfung vom Grad der Ordnung  $S_p = \text{const} \cdot p$  die gewünschten Eigenschaften für das Basissystem liefern wird. Damit tritt auch automatisch die Maxwell-Verteilung als erstes Glied ( $p=0$ ) einer Entwicklung nach diesem System auf. Dies erweist sich aus Konvergenzgründen als vorteilhaft, wie sich beim Test der Methode im Modellfall des unendlich ausgedehnten Mediums herausstellte.

Bei dem Orthonormierungsverfahren der Basisfunktionen ist nur die sukzessive Bestimmung der Koeffizienten der Polynome  $P_p(\epsilon)$  möglich. Diese Polynome schreiben wir in der Form:

$$P_p(\epsilon) = N_p \sum_{k=0}^p \gamma_{pk} \epsilon^k \text{ mit } \gamma_{p0} = 1. \tag{3.12}$$

Aus der Orthogonalitätsrelation (3.6) erhält man

$$\sum_{(k,l)=0}^{p,p'} \gamma_{pk} \gamma_{p'l} \cdot \frac{(k+l+1)!}{(1+S_p+S_{p'})^{k+l}} = 0 \text{ für } p \neq p'. \tag{3.13}$$

Sukzessive Auflösung liefert für jedes  $p$  und  $p'$  ein lineares inhomogenes Gleichungssystem. Wir führen noch folgende Abkürzungen ein:

$$\left. \begin{aligned} \gamma_{pk}^* &= \gamma_{pk} \cdot (k+1)! \\ f_{kl} &= \frac{(k+l+1)!}{(k+1)!(l+1)!} = \prod_{v=1}^l \frac{k+1+v}{(v+1)!} \\ M_{p'k}^{pp} &= \frac{1}{(1+S_p+S_{p'})^k} + \sum_{l=1}^{p'} \gamma_{p'l}^* f_{kl} \frac{1}{(1+S_p+S_{p'})^{k+l}} \\ D_{p'}^p &= -1 - \sum_{l=1}^{p'} \frac{\gamma_{p'l}^*}{(1+S_p+S_{p'})^l} \end{aligned} \right\} \tag{3.14}$$

Dann erhält man die Koeffizienten  $\gamma^*$  aus

$$\sum_{k=1}^p \gamma_{pk}^* M_{p'k}^{pp} = D_{p'}^p \text{ für } p' = 0, 1, \dots, m-1. \tag{3.15}$$

Für  $p' = p$  erhält man die Normierungskonstanten zu

$$N_p = 1 / \sqrt{\sum_{(k,l)=0}^p \gamma_{pk}^* \gamma_{pl}^* f_{kl} / (1+2S_p)^{k+l+2}}. \tag{3.16}$$

Beim Testfall des unendlich ausgedehnten Mediums erwies sich die Dämpfung

$$S_p = \frac{p}{8} \tag{3.17}$$

als besonders geeignet, obwohl auch  $S_p = p/10$  oder  $S_p = 2p/(8+p)$  nur eine geringfügige Konvergenzverschlechterung zur Folge hatten. Es ist zu betonen, daß sogar der Fall relativ starker Absorption ( $\Delta = \frac{4 \sum_a(\epsilon=1)}{\xi \sum_0 M} = 1$ , vgl. [10]) mit nur vier Basisfunktionen vollständig beschrieben werden kann.

In den Abb. 6 und 7 sind die ersten vier Basisfunktionen bzw. deren Adjungierte aufgetragen.

Die weitere Rechnung ist nun ohne Schwierigkeiten durchführbar. In  $P_1$ -Näherung erhält man für die Quellmomente in der Moderatorzone:

$$\left. \begin{aligned}
 q_{00}^p(r) = & \int_0^\infty \omega_p^+(\varepsilon) \left\{ \int_0^\infty K_0(\varepsilon', \varepsilon) g_\lambda(\varepsilon') d\varepsilon' - \right. \\
 & \left. - \sigma_t^M(\varepsilon) g_\lambda(\varepsilon) \Phi_M(\varepsilon) \right\} d\varepsilon + \\
 & + \sum_{j=1}^H (B_j I_0(\alpha_j, r) + C_j K_0(\alpha_j, r)) \times \\
 & \times \int_0^\infty \omega_p^+(\varepsilon) \left\{ \int_0^\infty K_0(\varepsilon', \varepsilon) g_\lambda(\varepsilon') \chi_{00}^j(\varepsilon) d\varepsilon' + \right. \\
 & \left. + g_\lambda(\varepsilon) \left[ \frac{2\nu_j}{16} \chi_{11}^j(\varepsilon) - \sigma_t^M(\varepsilon) \chi_{00}^j(\varepsilon) \right] \right\} d\varepsilon \\
 \equiv & I_p + \sum_{j=1}^H (B_j I_0(\alpha_j, r) + C_j K_0(\alpha_j, r)) I_{0p}^{(j)},
 \end{aligned} \right\} (3.18)$$

$$\left. \begin{aligned}
 q_{11}^p(r) = & \sum_{j=1}^H (B_j I_1(\alpha_j, r) - C_j K_1(\alpha_j, r)) \times \\
 & \times \int_0^\infty \omega_p^+(\varepsilon) \left\{ \int_0^\infty K_1(\varepsilon', \varepsilon) g_\lambda(\varepsilon') \chi_{11}^j(\varepsilon) d\varepsilon' + \right. \\
 & \left. + g_\lambda(\varepsilon) \left[ \frac{\nu_j}{16} \chi_{00}^j(\varepsilon) - \sigma_t^M(\varepsilon) \chi_{11}^j(\varepsilon) \right] \right\} d\varepsilon \\
 \equiv & \sum_{j=1}^H (B_j I_1(\alpha_j, r) - C_j K_1(\alpha_j, r)) I_{1p}^{(j)}.
 \end{aligned} \right\} (3.19)$$

Bei einer Entwicklung des Differenzspektrums  $\Delta\Phi_{lm}(r, \varepsilon)$  nach der Basis  $\omega_p(\varepsilon)$  führt die Form der Größen  $q_m^p(r)$  auf folgenden Ansatz für die spezielle Lösung  $\widehat{\Delta\Phi}$  des inhomogenen Systems (3.5):

$$\left. \begin{aligned}
 \widehat{\Delta\Phi}_{lm}(r, \varepsilon) = & \delta_{l0} \sum_{p=0}^N \gamma_p^M \omega_p(\varepsilon) + \\
 & + \sum_{j=1}^H [B_j I_m(\alpha_j, r) + (-1)^m C_j K_m(\alpha_j, r)] \times \\
 & \times \sum_{p=0}^N \tau_{lm}^{jp} \omega_p(\varepsilon).
 \end{aligned} \right\} (3.20)$$

$N+1$  gibt die Anzahl der berücksichtigten Basisfunktionen an. Die beiden  $P_1$ -Gleichungen für Fluß und Strom müssen identisch in  $r$  beim Einsetzen von (3.20) erfüllt werden. Dies führt auf folgendes System für die Energievariable allein:

$$\left. \begin{aligned}
 \sum_p \gamma_p^M \left\{ \sigma_t^M(\varepsilon) \omega_p(\varepsilon) - \int_0^\infty K_0(\varepsilon', \varepsilon) \omega_p(\varepsilon') d\varepsilon' \right\} \\
 = \sum_p I_p \omega_p(\varepsilon),
 \end{aligned} \right\} (3.21)$$

$$\left. \begin{aligned}
 \sum_p \left\{ \sigma_t^M(\varepsilon) \tau_{00}^{jp} \omega_p(\varepsilon) - \frac{2\nu_j}{16} \tau_{11}^{jp} \cdot \omega_p(\varepsilon) - \right. \\
 \left. - \tau_{00}^{jp} \int_0^\infty K_0(\varepsilon', \varepsilon) \omega_p(\varepsilon') d\varepsilon' \right\} = \sum_p I_{0p}^{(j)} \omega_p(\varepsilon),
 \end{aligned} \right\} (3.22)$$

$$\left. \begin{aligned}
 \sum_p \left\{ \sigma_t^M(\varepsilon) \tau_{11}^{jp} \omega_p(\varepsilon) - \frac{\nu_j}{16} \tau_{00}^{jp} \omega_p(\varepsilon) - \right. \\
 \left. - \tau_{11}^{jp} \int_0^\infty K_1(\varepsilon', \varepsilon) \omega_p(\varepsilon') d\varepsilon' \right\} = \sum_p I_{1p}^{(j)} \omega_p(\varepsilon)
 \end{aligned} \right\} (3.23)$$

für  $j = 1, 2, \dots, H$ .

Durch Multiplikation von (3.21) bis (3.23) mit  $\omega_p^+(\varepsilon)$  und nachfolgender Integration erhält man ein inhomogenes lineares Gleichungssystem für die gesuchten Koeffizienten  $\tau_{lm}^{jp}$  und  $\gamma_p^M$ :

$$\left. \begin{aligned}
 \varepsilon_0 \vec{\tau}_{00} - \frac{2\nu_j}{16} \vec{\tau}_{11} = \vec{I}_0^j \\
 - \frac{\nu_j}{16} \vec{\tau}_{00} + \varepsilon_1 \vec{\tau}_{11} = \vec{I}_1^j \\
 \varepsilon_0 \vec{\gamma}_M = \vec{I}^M.
 \end{aligned} \right\} j = 1, \dots, H \quad (3.24)$$

Dabei sind die Matrizen  $\varepsilon_0$  und  $\varepsilon_1$  gegeben durch die Differenz der Matrix des totalen Querschnittes und der Matrix der Streukerne.

$$\left. \begin{aligned}
 \varepsilon_0 = (\sigma_t^M)_{pp} - (K_0)_{pp} \\
 \varepsilon_1 = (\sigma_t^M)_{pp} - (K_1)_{pp}.
 \end{aligned} \right\} (3.25)$$

Die Bestimmung der allgemeinen Lösung der homogenen Gl. (3.5) ist leicht möglich. Eine Partikulärlösung gewinnen wir mit dem Ansatz

$$\Delta\widetilde{\Phi}_{lm}^M(r, \varepsilon) = K_m(-\lambda_M r) \sum_{p=0}^N R_{lm}^p \omega_p(\varepsilon). \quad (3.26)$$

Unter Beachtung von (2.20) erhält man ein System von Integralgleichungen für die Energievariable allein.

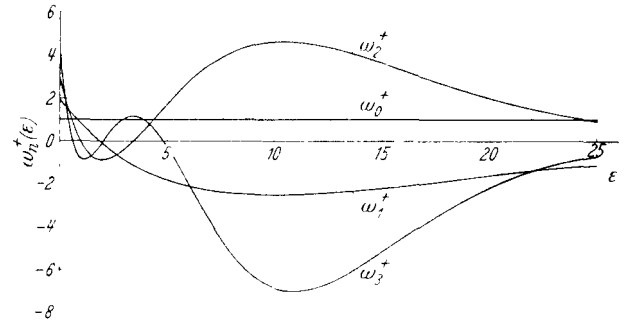


Abb. 7. Die adjungierten Basisfunktionen  $\omega_p^*(\varepsilon) = e^{-\lambda_M \varepsilon} \cdot P_n(\varepsilon)$  für  $\lambda_M = n/\delta$

Die im Argument der Bessel-Funktion auftretende Größe  $\lambda_M$  ist wieder gegeben durch

$$\lambda_M = \mu_M \cdot \Sigma_{0M}, \quad (3.27)$$

wobei  $\mu_M$  ein Eigenwert für den thermischen Bereich des Moderators sein soll. Multipliziert man das entstehende System mit  $\omega_p^+(\varepsilon)$  und integriert anschließend, so erhält man ein homogenes lineares Gleichungssystem, das bei  $P_1$ -Näherung in der Form identisch ist mit den Glh. (3.24) mit verschwindenden rechten Seiten:

$$\left. \begin{aligned}
 \varepsilon_0 \vec{R}_{00} - \frac{2\mu_M}{16} \vec{R}_{11} = 0 \\
 - \frac{\mu_M}{16} \vec{R}_{00} + \varepsilon_1 \vec{R}_{11} = 0.
 \end{aligned} \right\} (3.28)$$

Daraus folgt:

$$\left. \begin{aligned}
 (\varepsilon_1 \varepsilon_0 - \frac{\mu_M^2}{3}) \vec{R}_{00} = 0 \\
 \vec{R}_{11} = \frac{16}{2\mu_M} \varepsilon_0 \vec{R}_{00}.
 \end{aligned} \right\} (3.29)$$

Aus dem Verschwinden der Determinante der ersten Matrixgleichung (3.29) erhält man die zulässigen Eigenwerte  $\mu_M$ . Die Anzahl der positiven Eigenwerte ist identisch mit der Anzahl der berücksichtigten Basisfunktionen, also  $N+1$ . Da sich jeweils zwei Eigenwerte nur durch das Vorzeichen unterscheiden, ist die Umformung der Lösung auf nur positive Eigenwerte möglich [mit Hilfe von (2.19)]. Die allgemeine Lösung ergibt sich dann durch Überlagerung der

Partikulärlösungen zu:

$$\left. \begin{aligned} \Delta \tilde{\Phi}_{lm}(r, \varepsilon) \\ = \sum_{j=0}^N \{ B_H^{jM} I_m(A_M^j r) + (-1)^m C_H^{jM} K_m(A_M^j r) \} \times \\ \times \sum_{p=0}^N R_{lm}^{jp} \omega_p(\varepsilon). \end{aligned} \right\} (3.30)$$

Die  $2(N+1)$  unbekannt Konstanten  $B_H^{jM}$  und  $C_H^{jM}$  sind durch die örtlichen Randbedingungen zu bestimmen.

In  $P_3$ -Näherung ergibt sich eine relativ komplizierte Eigenwertgleichung an Stelle von (3.29). Dazu sei auf den Anhang verwiesen.

In der *Uranzone* gehen wir entsprechend vor. Mit dem (2.38) entsprechenden Ansatz für die spezielle Lösung der inhomogenen Gl. (3.5),

$$\left. \begin{aligned} \Delta \widehat{\Phi}_{lm}^u(r, \varepsilon) = \delta_{l0} \sum_{p=0}^N \gamma_p^u \omega_p(\varepsilon) + \\ + \sum_{j=0}^H (\Sigma_{0U} r)^{2j-m} \sum_{p=0}^N T_{lm}^{jp} \omega_p(\varepsilon) \end{aligned} \right\} (3.31)$$

erhält man wiederum ein inhomogenes Gleichungssystem, das für jede Potenz in  $r$  erfüllt werden muß. Treibt man die epithermische Entwicklung bis zur Potenz  $1/\varepsilon^2$ , so ergeben sich folgende Matrixgleichungen:

$$\left. \begin{aligned} \mathfrak{A} \vec{\gamma}^u - \frac{4}{16} \vec{T}_{11}^1 = \vec{W} \\ \mathfrak{A} \vec{T}_{00}^1 - \frac{8}{16} \vec{T}_{11}^2 = \vec{W}_0^1 \\ \mathfrak{A} \vec{T}_{00}^2 = \vec{W}_0^2 \\ \mathfrak{A} \vec{T}_{11}^1 - \frac{2}{16} \vec{T}_{00}^1 = \vec{W}_1^1 \\ \mathfrak{A} \vec{T}_{11}^2 - \frac{4}{16} \vec{T}_{00}^2 = \vec{W}_1^2. \end{aligned} \right\} (3.32)$$

Dabei ist:

$$\left. \begin{aligned} \mathfrak{A} = (\sigma_1^u)_{pp'} \\ \text{Matrix des Absorptionsquerschnittes} \\ \mathfrak{A} = (\sigma_t^u)_{pp'} = \mathfrak{A} + \delta_{pp'} \\ \text{Matrix des totalen Querschnittes} \end{aligned} \right\} (3.33)$$

$\vec{T}_{lm}^j$  ist der Spaltenvektor der Entwicklungskoeffizienten; die Elemente der Inhomogenitätsvektoren  $\vec{W}$

sind gegeben durch  $\left( j_{\beta}^{\pm} = \int_0^{\infty} \omega_p^{\pm}(\varepsilon) \frac{g_{\lambda}(\varepsilon)}{\varepsilon^{\frac{3}{2}}} d\varepsilon \right)$ :

$$\left. \begin{aligned} W_p = -B_{00}^u \sigma_1^u j_{\beta}^{\pm} \\ W_{0p}^1 = -\frac{3}{4} (\sigma_1^u)^2 (A_{00}^u + c \sigma_1^u) j_{\beta}^{\pm} \\ W_{0p}^2 = -\frac{9}{64} (\sigma_1^u)^3 j_{\beta}^{\pm} \\ W_{1p}^1 = -\frac{16}{4} A_{00}^u (\sigma_1^u)^2 j_{\beta}^{\pm} \\ W_{1p}^2 = -\frac{3}{32} 16 c (\sigma_1^u)^3 j_{\beta}^{\pm}. \end{aligned} \right\} (3.34)$$

Bei der Bestimmung der homogenen Lösung berücksichtigen wir im Ansatz wieder die Regularitätsforderung (1.2c). Mit  $A_U = \Sigma_{0U} \mu_U$  wird

$$\Delta \tilde{\Phi}_{lm}^v(r, \varepsilon) = I_m(A_U r) \sum_{p=0}^N Z_{lm}^p \omega_p(\varepsilon). \quad (3.35)$$

Wir erhalten in  $P_1$ :

$$\left. \begin{aligned} (\mathfrak{A} \mathfrak{Z} - \frac{\mu_U^2}{3}) \vec{Z}_{00} = 0 \\ \vec{Z}_{11} = \frac{16}{2\mu_U} \mathfrak{A} \vec{Z}_{00}. \end{aligned} \right\} (3.36)$$

Damit haben wir die allgemeine Lösung des homogenen Problems gefunden zu

$$\Delta \tilde{\Phi}_{lm}^v(r, \varepsilon) = \sum_{j=0}^N B_H^{jU} I_m(A_U^j r) \sum_{p=0}^N Z_{lm}^{jp} \omega_p(\varepsilon). \quad (3.37)$$

Die  $3(N+1)$  Unbekannten  $B_H^{jM}$ ,  $C_H^{jM}$  und  $B_H^{jU}$  sind durch die Bedingungen (1.14) eindeutig bestimmt. Wegen  $\Phi_{lm}(r, \varepsilon) = \Delta \Phi_{lm}(r, \varepsilon) + \Phi_{lm}^*(r, \varepsilon)$  ist (1.14) nur auf  $\Delta \Phi_{lm}(r, \varepsilon)$  anzuwenden, da die Forderungen für  $\Phi_{lm}^*(r, \varepsilon)$  schon erfüllt sind. Wir haben also in  $P_1$ :

$$\left. \begin{aligned} \Delta \Phi_{11}^M(R, \varepsilon) = 0 \\ \Delta \Phi_{00}^M(\varrho, \varepsilon) = \Delta \Phi_{00}^U(\varrho, \varepsilon). \\ \Delta \Phi_{11}^U(\varrho, \varepsilon) = \Delta \Phi_{11}^U(\varrho, \varepsilon) \end{aligned} \right\} (3.38)$$

Wir erhalten zunächst aus der ersten Gl. (3.38):

$$\frac{B_H^{jM}}{C_H^{jM}} = \frac{K_1(A_M^j R)}{I_1(A_M^j R)} \quad \text{für } j=0, 1, \dots, N. \quad (3.39)$$

Das verbleibende System von  $2(N+1)$  Gleichungen löst man zweckmäßig numerisch auf. Und zwar haben wir zunächst bei bekannten rechten Seiten:

$$\left. \begin{aligned} \Delta \tilde{\Phi}_{00}^v(\varrho, \varepsilon) - \Delta \tilde{\Phi}_{00}^M(\varrho, \varepsilon) \\ = \Delta \widehat{\Phi}_{00}^M(\varrho, \varepsilon) - \Delta \widehat{\Phi}_{00}^U(\varrho, \varepsilon) \\ \Delta \tilde{\Phi}_{11}^v(\varrho, \varepsilon) - \Delta \tilde{\Phi}_{11}^M(\varrho, \varepsilon) \\ = \Delta \widehat{\Phi}_{11}^M(\varrho, \varepsilon) - \Delta \widehat{\Phi}_{11}^U(\varrho, \varepsilon). \end{aligned} \right\} (3.40)$$

Einsetzen der entsprechenden analytischen Ausdrücke  $\Delta \Phi_{lm}$  in (3.40) führt auf eine inhomogene Matrixgleichung. Dazu führen wir ein:

$$\mathfrak{M}_{lm}^U = \begin{pmatrix} R_{lm}^{00} I_m(A_U^0 \varrho) \dots R_{lm}^{N0} I_m(A_U^N \varrho) \\ \vdots \\ R_{lm}^{0N} I_m(A_U^0 \varrho) \dots R_{lm}^{NN} I_m(A_U^N \varrho) \end{pmatrix}, \quad (3.41)$$

$$X_{lm}^{jp} = R_{lm}^{jp} I_m(A_M^j \varrho) + (-1)^m \frac{C_H^{jM}}{B_H^{jM}} K_m(A_M^j \varrho), \quad (3.42)$$

$$\mathfrak{M}_{lm}^M = \begin{pmatrix} X_{lm}^{00} \dots X_{lm}^{N0} \\ X_{lm}^{0N} \dots X_{lm}^{NN} \end{pmatrix}, \quad (3.43)$$

$$\mathfrak{A} = \begin{pmatrix} \mathfrak{M}_{00}^U - \mathfrak{M}_{00}^M \\ \mathfrak{M}_{11}^U - \mathfrak{M}_{11}^M \end{pmatrix}, \quad (3.44)$$

$$\vec{B}_M = \begin{pmatrix} B_H^{0M} \\ \vdots \\ B_H^{NM} \end{pmatrix}; \quad \vec{B}_U = \begin{pmatrix} B_H^{0U} \\ \vdots \\ B_H^{NU} \end{pmatrix}; \quad \vec{B} = \begin{pmatrix} \vec{B}_U \\ \vec{B}_M \end{pmatrix}. \quad (3.45)$$

Die Inhomogenität in (3.40) kürzen wir ab durch den Vektor

$$\vec{J} = \begin{pmatrix} \vec{J}_{00} \\ \vec{J}_{11} \end{pmatrix}. \quad (3.46)$$

Dann ergibt sich:

$$\Re \vec{B} = \vec{J} \tag{3.47}$$

als eindeutig lösbares System von  $2(N+1)$  Gleichungen für die  $2(N+1)$  unbekannt Komponenten von  $\vec{B}_U$  und  $\vec{B}_M$ .

Damit ist die vollständige Lösung in  $P_1$ -Näherung angegeben. In  $P_3$ -Approximation führt die Bestimmung der  $9(N+1)$  Unbekannten auf ein (3.47) entsprechendes System.

Der orts- und energieabhängige Neutronenfluß  $\Phi(r, \epsilon)$  ist bei der gewählten Normierung der Kugelfunktionen (1.6) gegeben durch  $|\sqrt{4\pi} \Phi_{00}(r, \epsilon)$ . Den Faktor  $|\sqrt{4\pi}$  können wir in die multiplikativ bei jedem Term von  $\Phi_{00}(r, \epsilon)$  stehende Normierungskonstante  $c$  des  $1/\epsilon$ -Anteils der Lösung aufnehmen. Dann ist also:

$$\Phi(r, \epsilon) \equiv \Phi_{00}(r, \epsilon). \tag{3.48}$$

Wir haben damit folgende Darstellung gefunden:

$$\left. \begin{aligned} \Phi_M(r, \epsilon) = & \sum_{p=0}^N \omega_p(\epsilon) \left\{ \gamma_p^M + \sum_{j=0}^H (B_j I_0(z_j r) + \right. \\ & + C_j K_0(z_j r)) \tau_{00}^p + \sum_{j=0}^N (B_H^j I_0(A_H^j r) + \\ & \left. + C_H^j K_0(A_M^j r)) R_{00}^p \right\} + g_\lambda(\epsilon) \Phi_M^{epi}(r, \epsilon) \end{aligned} \right\} \tag{3.49}$$

$$\left. \begin{aligned} \Phi_U(r, \epsilon) = & \sum_{p=0}^N \omega_p(\epsilon) \left\{ \gamma_p^U + \sum_{j=1}^H (\Sigma_{0j} r)^{2j} T_{00}^p + \right. \\ & \left. + \sum_{j=0}^N B_H^j I_0(A_H^j r) Z_{00}^p \right\} + g_\lambda(\epsilon) \Phi_U^{epi}(r, \epsilon). \end{aligned} \right\} \tag{3.50}$$

Die epithermischen Lösungen sind aus (2.31) und (2.38) zu entnehmen.

Aus (3.49) und (3.50) lassen sich die räumlichen Mittelwerte elementar auswerten:

$$\left. \begin{aligned} \bar{\Phi}_U(\epsilon) = & \frac{2}{\rho^2} \int_0^\rho \Phi_U(r, \epsilon) r dr \\ \bar{\Phi}_M(\epsilon) = & \frac{2}{R^2 - \rho^2} \int_\rho^R \Phi_M(r, \epsilon) r dr. \end{aligned} \right\} \tag{3.51}$$

#### 4. Ergebnisse und Schlußfolgerungen

Die dargestellte Methode wurde zur Berechnung der Neutronenspektren für eine Reaktorzelle ( $R = 9,5$  cm,  $\rho = 1,6$  cm) mit natürlichem Uran als Brennstoff und schwerem Wasser als Moderator angewendet. Es wurde mit folgenden Wirkungsquerschnitten ( $40^\circ\text{C}$  Moderatortemperatur) gerechnet:

$$\begin{aligned} \Sigma_a^u(\epsilon = 1) &= 0,347 \text{ cm}^{-1}; & \Sigma_a^m(\epsilon = 1) &= 7,74 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^{-1}; \\ \Sigma_{0U} &= 0,387 \text{ cm}^{-1}. \end{aligned}$$

##### 4a) Genauigkeit des Verfahrens

Die Entwicklung der epithermischen Neutronenverteilung wurde stets nach der Potenz  $1/\epsilon^2$  abgebrochen. Im thermischen Bereich wurden fünf Basisfunktionen berücksichtigt.

Zur Kontrolle des Rechenverfahrens und der verwendeten Näherung im epithermischen Bereich ist die

von der zur Behandlung des Problems speziell gewählten Methode vollkommen unabhängige Neutronenbilanzgleichung für die Wigner-Seitz-Zelle ( $1/\epsilon$ -Absorption vorausgesetzt) geeignet:

$$\left. \begin{aligned} V_U \Sigma_a^u(\epsilon = 1) \int_0^\infty \bar{\Phi}_U(\epsilon) \frac{d\epsilon}{\epsilon} + \\ + V_M \Sigma_a^m(\epsilon = 1) \int_0^\infty \bar{\Phi}_M(\epsilon) \frac{d\epsilon}{\epsilon} = V_M c \cdot (\xi \Sigma_0)_M. \end{aligned} \right\} \tag{4.1}$$

Dabei ist  $\bar{\Phi}(\epsilon)$  der in der betreffenden Zone örtlich gemittelte skalare Neutronenfluß,  $c$  die Normierungskonstante des  $1/\epsilon$ -Anteils,  $V_U$  bzw.  $V_M$  die Brennstoff- und Moderatorvolumina und  $\xi$  das mittlere logarithmische Energiedekrement pro Stoß. Die rechte Seite von (4.1) gibt die Anzahl der in der Zeiteinheit in den Thermalisierungsbereich hineinkommenden Neutronen an.

Die integrale Aussage (4.1) läßt jedoch auch eine differentielle Interpretation zu. Zunächst fällt bei den betrachteten Systemen die Absorptionsrate im Moderator ( $A_M$ ) in (4.1) nicht ins Gewicht:  $A_M \approx 0,01 A_U$ . Da bei der angenommenen  $1/\epsilon$ -Absorption der Hauptbeitrag bei der Integration in (4.1) aus der Umgebung  $\epsilon = 1$  kommt (das thermische Spektrum nimmt von  $\epsilon = 1$  auf  $\epsilon = 10$  um den Faktor 100 ab), muß also, falls (4.1) erfüllt ist, das Gebiet um  $\epsilon = 1$  richtig berechnet sein. Da man jedoch dann und nur dann ein korrektes thermisches Spektrum nach dem hier beschriebenen Verfahren erhält, wenn die epithermische Lösung richtig ist (diese bildet die Quelle in der Bestimmungsgleichung für das thermische Spektrum), wird also durch (4.1) insbesondere das Verhältnis des thermischen Maximums der mittleren Verteilung im Uran zu einem repräsentativen Wert bei epithermischen Energien festgelegt. Infolge der starken Verknüpfung der Lösungen an der Grenzfläche Uran/Moderator wird dann auch das mittlere Spektrum im Moderator indirekt durch (4.1) geprüft. Der Fehler der Bilanzgleichung beträgt in den berechneten Fällen etwa 0,1%.

##### 4b) Wesentliche Parameter für das Thermalisierungsproblem im heterogenen System

Bei der Behandlung des Moderators als monoatomares Gas tritt als erstes die Frage auf, welche Masse  $M$  man in den Streukernen (1.20) zu wählen hat. Bei Rechnungen für das unendlich ausgedehnte Medium erhält man dann eine schwache Abhängigkeit der Spektren von  $M$ , wenn  $\Sigma_a(\epsilon = 1)/(\xi \Sigma_0)$  konstant gehalten wird (vgl. [10]). Dieser Quotient ist auch für die Spektren in heterogenen Systemen die entscheidende Größe, denn aus (4.1) und der Diskussion in 4a folgt, daß wegen der schwachen Moderatorabsorption durch das Produkt  $(\xi \Sigma_0)_M$  bei vorgegebenen  $\Sigma_a^u(\epsilon = 1)$  praktisch das mittlere Spektrum im Uran festgelegt ist (abgesehen von Geometrie- und Normierungsfaktoren).  $(\xi \Sigma_0)_M$  ist aber für das betrachtete System bekannt, z.B. für  $\text{D}_2\text{O}$  ist  $(\xi \Sigma_0)_M = 0,178 \text{ cm}^{-1}$ . Wie man bei gegebenem Bremsvermögen die einzelnen Faktoren  $\xi$  und  $\Sigma_{0M}$  wählt, wird auf das mittlere Spektrum im Uran in erster Näherung keinen Einfluß haben. Allein das Spektrum im Moderator wird sich

dabei, allerdings auch nur im Rahmen der Bilanzgleichung, stärker ändern können. In Abb. 8 sind die Spektren für  $M=2$  und  $M=8$  mit  $(\xi \Sigma_0)_M = 0,178$  verglichen. Bei gleicher Normierung  $c$  ergibt sich nur etwa 1% Unterschied in den mittleren Uranspektren bei  $\epsilon = 1$ . Lediglich die Flußdepression  $\bar{\Phi}_M(\epsilon)/\bar{\Phi}_U(\epsilon)$  wird bei praktisch unverändertem  $\bar{\Phi}_U(\epsilon)$  bei  $\epsilon = 1$  mit

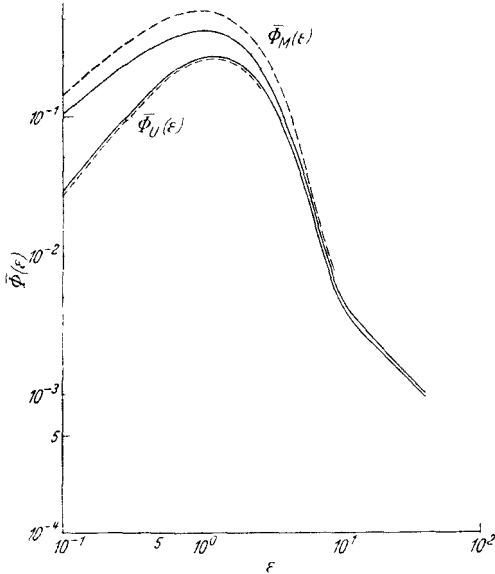


Abb. 8. Örtlich gemittelte Spektren in einer Wigner-Seitz-Zelle aus natürlichem Uran ( $\rho = 1,6$  cm) und  $D_2O$  ( $R = 9,5$  cm) für verschiedene Moderator-Massen:  $M = 8$  (gestrichelt) und  $M = 2$ . Das Bremsvermögen ist in beiden Fällen  $\xi \Sigma_0 = 0,178$  cm<sup>-1</sup>

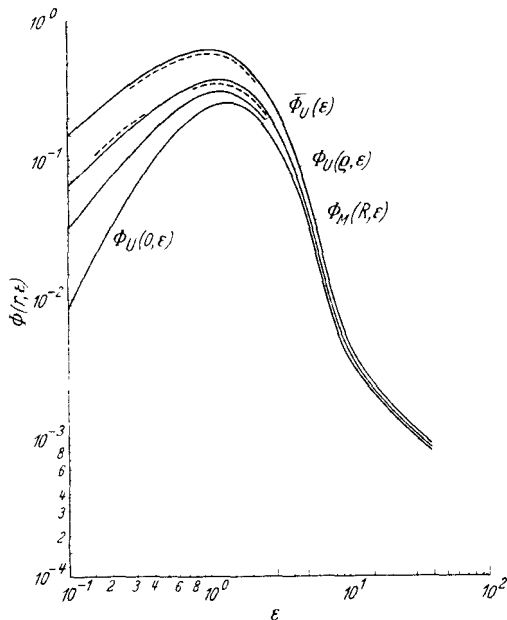


Abb. 9. Vergleich von Spektren in der Wigner-Seitz-Zelle mit den von H. KUNZE [7] angegebenen Lösungen (gestrichelt).  $\rho = 1,6$  cm,  $R = 9,5$  cm;  $\xi \Sigma_0 = 0,233$  cm<sup>-1</sup>

wachsender Masse größer (Abnahme der freien Weglänge im Moderator). Setzt man für  $\Sigma_{0,M}$  den Streuquerschnitt des Moderators ein ( $\Sigma_{0,M} = 0,353$  cm<sup>-1</sup>), so erhält man aus  $(\xi \Sigma_0)_M = 0,178$  die effektive Masse  $M = 3,26$ . Die mittleren Spektren im Uran sind für  $M = 2$ ,  $M = 3,26$  und  $M = 3,6$  (Sachs-Teller-Masse) im Rahmen der Zeichengenauigkeit nicht zu unterscheiden. Es ist besonders darauf hinzuweisen, daß eine gesonderte Berücksichtigung der Streuung am

Sauerstoff nicht notwendig ist, da diese im Bremsvermögen  $(\xi \Sigma_0)_M$  bereits enthalten ist. Eine Änderung des Streuquerschnittes  $\Sigma_{0,U}$  im Uran um 10% hat einen vernachlässigbaren Einfluß auf die Uranspektren.

4c) Einfluß der anisotropen Streuung im Moderator

Auf diesen Effekt liefert ebenfalls die Bilanzgleichung einen Hinweis. Da die rechte Seite von (4.1) nicht von der Anisotropie abhängt, wird sich bei isotroper Streuung lediglich ein etwas besser thermalisiertes Spektrum im Moderator einstellen als bei anisotroper Streuung. Die Rechnung liefert, daß sich  $\bar{\Phi}_U(\epsilon)$  bei  $\epsilon = 1$  um weniger als 0,1% ändert.

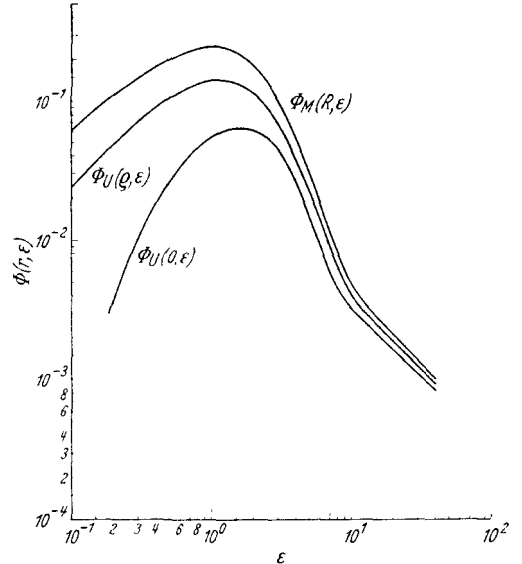


Abb. 10. Spektren in einer Wigner-Seitz-Zelle mit großem Brennstabradius,  $\rho = 2,5$  cm;  $R = 9,5$  cm;  $\xi \Sigma_0 = 0,178$  cm<sup>-1</sup>

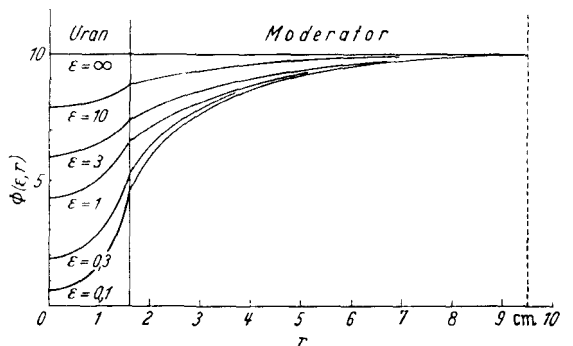


Abb. 11. Die örtliche Neutronenverteilung in der Wigner-Seitz-Zelle für verschiedene Neutronenenergien,  $\rho = 1,6$  cm;  $R = 9,5$  cm;  $\xi \Sigma_0 = 0,178$  cm<sup>-1</sup>

4d) Vergleich mit den Ergebnissen von H. KUNZE

In Abb. 9 sind die von H. KUNZE [7] in Schwergasnäherung gewonnenen Lösungen in der Moderatormitte und am Rand des Brennstabes (gestrichelt) mit den Ergebnissen dieser Arbeit verglichen. Man erkennt, daß zur Brennstabmitte infolge der starken Absorption eine deutliche Härtung und Depression eintritt. Die Maxima der Spektren liegen bei  $\epsilon = 1$  (Zellrand),  $\epsilon = 1,2$  (Stabrand),  $\epsilon = 1,24$  (mittleres Spektrum im Uran) und  $\epsilon = 1,35$  (Stabmitte). Der Härtungseffekt ist noch ausgeprägter bei dem in Abb. 10 dargestellten Fall eines Uranstabes mit großem Radius  $\rho = 2,5$  cm.

4e) Einfluß höherer Kugelfunktionsnäherungen

Wenn man aus den berechneten Spektren die örtliche Verteilung der Neutronen in der Wigner-Seitz-Zelle für verschiedene Werte  $\epsilon$  aufträgt (Abb. 11), so wird für kleiner werdende Neutronenenergie  $\epsilon$  das Verhältnis  $\Phi_M(R)/\Phi_V(r=0)$  wegen der starken  $1/\sqrt{\epsilon}$ -Absorption im Uran immer größer. Nun ist aus Zellrechnungen für monoenergetische Neutronen bekannt [11–12], daß durch eine  $P_1$ -Näherung die Flußdepression unterschätzt wird. Da der Fehler mit zunehmender Absorption im Brennstoff größer wird, kann man also erwarten, daß bei einer höheren  $P_L$ -Approximation zusätzlich zu einer Vergrößerung der Flußdepression gegenüber  $P_1$ -Näherung noch eine Härtung der Spektren im Uran resultieren wird. In  $P_3$ -Approximation wird für die hier betrachteten Geometrien die Depression um etwa 15% größer ( $\epsilon=1$ ) als in  $P_1$ -Näherung. Bei der Variation der Masse des Moderators von  $M=2$  auf  $M=8$  haben wir jedoch bereits eine größere Flußdepression erzielt ( $\approx 25\%$ , s. Abb. 8), wobei sich das mittlere Spektrum im Uran praktisch nicht änderte. Da außerdem die Bilanzgleichung (4.1) bei unveränderter rechter Seite auch für die exakte Lösung gilt, kann man erwarten, daß größere Abweichungen des hier in  $P_1$ -Approximation berechneten mittleren Spektrums im Brennstoff nicht auftreten. Die verbleibende Unsicherheit im Wert der Flußdepression kann man dann hinreichend gut dadurch beheben, daß man die spektralgemittelte Wirkungsquerschnitte im Uran und Moderator in eine möglichst genaue transporttheoretische Rechnung für monoenergetische Neutronen einsetzt und die zugehörige Flußdepression in der Wigner-Seitz-Zelle ermittelt.

4f) Abweichungen des Absorptionsquerschnittes vom  $1/\sqrt{\epsilon}$ -Gesetz

In dieser Arbeit kann die Energieabhängigkeit des Absorptionsquerschnittes nur von der Form  $1/\sqrt{\epsilon}$  oder als Reihe nach Potenzen von  $1/\sqrt{\epsilon}$  behandelt werden. Die Abweichungen dieses  $1/\sqrt{\epsilon}$ -Querschnittes vom tatsächlichen Verlauf sind für Natururan nicht sehr groß, obwohl  $U^{235}$  bei 0,25 eV eine (allerdings nicht sehr hohe) Resonanz aufweist. Jedoch ist  $U^{235}$  nur zu 0,7% im Natururan enthalten,  $U^{238}$  weist dagegen praktisch im ganzen betrachtete Energiegebiet ein  $1/\sqrt{\epsilon}$ -Verhalten des Absorptionsquerschnittes auf. Da außerdem das Spektrum im Bereich der Resonanz fast um zwei Größenordnungen kleiner ist als bei  $\epsilon=1$ , wird die Resonanz sich nicht stark auf das Spektrum auswirken können. Bei größerem Gehalt des Brennstoffes an  $U^{235}$  gilt dieses Argument natürlich nicht mehr. Daher können wir annehmen, daß in natürlichem Uran das Spektrum durch den Unterschied des tatsächlichen Verlaufs Absorptionsquerschnittes und des angenommenen  $1/\sqrt{\epsilon}$ -Gesetzes in erster Näherung nicht beeinflusst wird. Das ungestörte, örtlich gemittelte Spektrum im Brennstoff können wir dann zur Bestimmung energetisch gemittelter Absorptions- oder Spaltquerschnitte im Uran verwenden.

4g) Die chemische Bindung

Obwohl das dargestellte Verfahren für den Fall eines freien Moderator-gases entwickelt wurde, ist eine

Erweiterung in Hinsicht auf Effekte der chemischen Bindung ohne weiteres möglich. Dazu kann man die epithermische Lösung und deren Fortsetzung bis zu kleinen Energien direkt übernehmen. Das Aufsuchen der thermischen Lösung im Ausgleichsbereich hat man dann z.B. unter Verwendung experimentell bestimmter Streukerne durchzuführen. Die Ergebnisse dieser Untersuchung werden in einer späteren Arbeit diskutiert.

Den Herren Dr. K. OTT, Dr. W. HÄFELE und Dipl.-Phys. E. KIEFHABER möchte ich für viele anregende Diskussionen recht herzlich danken. Herrn Professor W. KOFINK und Herrn Professor K. WIRTZ danke ich für ihr reges Interesse am Fortgang dieser Arbeit.

Literatur: [1] HONECK, H. C.: Nuclear Sci. and Eng. 8, 193 (1960). — [2] LESLIE, D. C.: Report AEEW-M-211 (1963). — [3] MEETZ, K., K. OTT u. S. SANATANI: Nukleonik 3, 155 (1961). — [4] MÄRKL, H.: Nukleonik 4, 39 (1962). — [5] MOKKEL, A., u. I. DEVOOGHT: Nukleonik 4, 236 (1962). — [6] MÄRKL, H.: Nukleonik 6, 39 (1964). — [7] KUNZE, H.: Nuclear Sci. and Eng. 15, 1 (1963). — [8] MEETZ, K.: Proc. 2nd Intern. Conf. Peaceful Uses Atomic Energy, Genf 16, 611 (1958). — [9] HÄFELE, W.: Nukleonik 1, 197 (1959). — [10] HURWITZ, H., M. S. NELKIN, and G. J. HABETLER: Nuclear Sci. and Eng. 1, 280 (1956). — [11] KÜSTERS, H.: Report KFK-15, Karlsruhe (1959). — [12] KÜSTERS, H., u. K. OTT: Nukleonik 4, 91 (1962).

Anhang

Das Eigenwertproblem für den thermischen Bereich in  $P_3$ -Näherung

Wir gehen aus vom System (1.11). Mit dem Ansatz  $\Phi_{lm}(r, \epsilon) = K_m(-\kappa r) \cdot \chi_{lm}(\epsilon)$ , ( $\kappa = r \Sigma_{0M}$ ), erhalten wir ein System von Gleichungen für  $\chi_{lm}(\epsilon)$ . Wir entwickeln die sechs Komponenten  $\chi_{lm}(\epsilon)$  nach dem Basissystem  $\omega_p(\epsilon)$ :

$\chi_{lm}(\epsilon) = \sum_{p=0}^N A_{lm}^p \omega_p(\epsilon)$ . Dann ergibt sich folgendes System von Matrixgleichungen:

$$\left. \begin{aligned} \xi_0 \vec{A}_{00} - \frac{2\nu}{16} \vec{A}_{11} &= 0 \\ -\frac{\nu}{16} \vec{A}_{00} + \xi_1 \vec{A}_{11} - \frac{\nu}{130} \vec{A}_{20} - \frac{\nu}{15} \vec{A}_{22} &= 0 \\ \frac{2\nu}{130} \vec{A}_{11} + \xi_2 \vec{A}_{20} - \left[ \frac{12}{35} \nu \vec{A}_{31} - 0 \right] & \\ -\frac{\nu}{15} \vec{A}_{11} + \xi_2 \vec{A}_{22} + \frac{\nu}{170} \vec{A}_{31} - \left[ \frac{3}{14} \nu \vec{A}_{33} - 0 \right] & \\ - \left[ \frac{3}{35} \nu \vec{A}_{20} + \frac{\nu}{170} \vec{A}_{22} + \xi_3 \vec{A}_{31} = 0 \right] & \\ - \left[ \frac{3}{14} \nu \vec{A}_{22} + \xi_3 \vec{A}_{33} = 0 \right] & \end{aligned} \right\} \quad (A.1)$$

Dabei ist entsprechend (3.25)

$$\xi_n = (\sigma_t)_{pp} - (K_n)_{pp} \quad (A.2)$$

und

$$\vec{A}_{lm} = \begin{pmatrix} A_{lm}^0 \\ \vdots \\ A_{lm}^N \end{pmatrix}$$

Das System (A.1) kann man nun wieder zu einer Übermatrix  $\xi$  zusammenfassen:



$$\mathfrak{H}(\nu) = \begin{pmatrix} \mathfrak{E}_0 & -\frac{2\nu}{16} \mathfrak{E} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu}{16} \mathfrak{E} & \mathfrak{E}_1 & \frac{\nu}{130} \mathfrak{E} & -\frac{\nu}{15} \mathfrak{E} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2\nu}{16} \mathfrak{E} & \mathfrak{E}_2 & 0 & -\sqrt{\frac{12}{35}} \nu \mathfrak{E} & 0 \\ 0 & -\frac{\nu}{15} \mathfrak{E} & 0 & \mathfrak{E}_2 & \frac{\nu}{170} \mathfrak{E} & -\sqrt{\frac{3}{14}} \nu \mathfrak{E} \\ 0 & 0 & -\sqrt{\frac{3}{35}} \nu \mathfrak{E} & \frac{\nu}{170} \mathfrak{E} & \mathfrak{E}_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\sqrt{\frac{3}{14}} \nu \mathfrak{E} & 0 & \mathfrak{E}_3 \end{pmatrix}$$

$\mathfrak{E}$  ist die Einheitsmatrix vom selben Grad wie die Matrizen  $\mathfrak{E}_n$ .

Mit

$$\vec{A} = \begin{pmatrix} \vec{A}_{00} \\ \vdots \\ \vec{A}_{33} \end{pmatrix}$$

haben wir dann:

$$\mathfrak{H}(\nu) \cdot \vec{A} = 0. \quad (\text{A.3})$$

Aus dem Verschwinden der Determinante folgen die zulässigen Eigenwerte  $\nu$ . Man geht dabei so vor, daß man die Determinante der Matrix  $\mathfrak{H}(\nu)$  als Funktion des Eigenwertes  $\nu$  berechnet und die Nullstellen dieser

Funktion aufsucht. Man braucht nur die positive  $\nu$ -Skala zu durchlaufen, da die Eigenwerte quadratisch auftreten. Dies sieht man sofort, wenn man das System (A.1) nach  $\vec{A}_{00}$  auflöst. Es ergibt sich dann

$$(\nu^6 + \nu^4 \cdot \mathfrak{M} + \nu^2 \cdot \mathfrak{N} + \mathfrak{P}) \vec{A}_{00} = 0, \quad (\text{A.4})$$

wobei die in (A.4) auftretenden Matrizen sich direkt durch Produkte der  $\mathfrak{E}_n$  ausdrücken lassen. Es ergeben sich also bei Berücksichtigung von  $(N+1)$  Basisfunktionen  $3(N+1)$  positive Eigenwerte  $\nu$ .

*Anschrift:* Dr. H. KÜSTERS

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik des Kernforschungszentrums Karlsruhe  
75 Karlsruhe