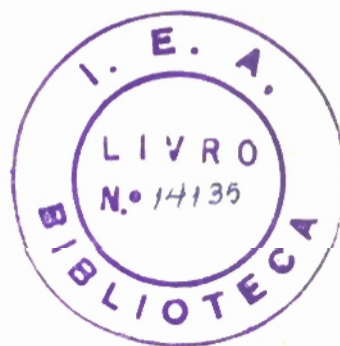


LIA QUEIROZ DO AMARAL

ESTUDO DE UM MÉTODO PARA CALIBRAR E DETERMINAR A  
RESOLUÇÃO DE ESPECTRÔMETROS PARA NEUTRONS LENTOS  
- APLICAÇÃO NUM ESPECTRÔMETRO DE TEMPO DE VÔO



TESE APRESENTADA À ESCOLA POLITÉCNICA DA  
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO PARA OBTENÇÃO  
DO TÍTULO DE " MESTRE EM CIÊNCIAS "

JUNHO DE 1969

*A memória de meu pai,  
meu orientador na vida.*

## AGRADECIMENTOS

Tôda a minha atividade científica, iniciada em 1962, foi realizada sob o patrocínio da Comissão Nacional de Energia Nuclear e desenvolveu-se na Divisão de Física Nuclear do Instituto de Energia Atômica de São Paulo; meus agradecimentos à CNEN, ao Dr. Romulo R. Pieroni, diretor do IEA, e ao Professor Dr. Marcello Damy de S. Santos, chefe da DFN, por tornarem possível meu trabalho de pesquisa e pelas facilidades oferecidas ao desenvolvimento das experiências.

Expresso minha gratidão ao Dr. Robert L. Zimmerman, atualmente professor da Escola de Engenharia de São Carlos, a quem devo minha iniciação na pesquisa científica e grande parte de minha formação profissional, e de quem sempre tenho recebido sugestões valiosas; ao Professor Dr. Karl-Erik Larsson, da Tekniska Högskolan de Estocolmo, que gentilmente cedeu-nos o projeto do chopper e que orientou com segurança meu estágio na Suécia.

Quero ressaltar que o estudo experimental das características do espectrômetro de tempo de vôo foi feito pelo grupo de espectrometria de neutrons como um todo orgânico, numa fase de trabalho de equipe em completa cooperação; agradeço, pois, a inestimável colaboração dos Pesquisadores Dr. Silvio B. Herdade, Claudio Rodriguez e Laercio A. Vinhas.

Sou grata aos colegas dos vários setores do IEA que contribuíram para o bom termo deste trabalho, em particular à pesquisadora Marieta C. Mattos, pelo valioso auxílio e espírito crítico na revisão do manuscrito, e ao bolsista Yukio Koishi, pelo desenho da capa.

Desejo manifestar meu reconhecimento ao Professor Dr. José Goldenberg, chefe do Departamento de Física da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, pelo seu apoio e pelas sugestões oportunas à elaboração desta tese.

## PREFÁCIO

O espalhamento de neutrons lentos fornece informações valiosas sobre a estrutura e a dinâmica dos átomos do sistema espalhador. Ainda que o potencial dessa técnica tenha sido notado poucos anos após a descoberta do neutron, somente após a década 1950-1960, período de intenso desenvolvimento das fontes de neutrons lentos e dos métodos experimentais da espectrometria de neutrons, é que ela pode ser explorada integralmente.

Trata-se portanto de um campo relativamente novo, em fase de grande desenvolvimento, e constitui uma das melhores linhas de pesquisa em física utilizando reatores nucleares. É um campo bastante conveniente para a formação de pesquisadores, pois abrange vários ramos da física básica; tem ainda interesse especial para a física de reatores, em estudos de moderação e termalização de neutrons.

Por ocasião do "Study Group Meeting on the Utilization of Research Reactors", promovido pela Agencia Internacional de Energia Atômica (IAEA) em São Paulo, em 1963, foi ressaltado o interesse em formar-se um grupo de pesquisas na Divisão de Física Nuclear do Instituto de Energia Atômica de São Paulo (IEA), para iniciar trabalhos nesse campo. A autora, que iniciou-se na pesquisa científica participando de um programa de medidas de secções de choque de terras raras para neutrons lentos, e que desde então se interessou pelas interações de neutrons lentos com a matéria, integrou o grupo que se formava.

A presença nesse congresso do Professor Dr. K.E.Larsson, responsável por um programa de pesquisas sobre os estados sólido e líquido utilizando espectrometria de neutrons lentos, desenvolvido na Tekniska Högskolan de Estocolmo, motivou a decisão de construir-se no IEA um espectrômetro de

tempo de voo com um "chopper" para neutrons lentos similar ao existente na Suécia, para ser utilizado em experiências de espalhamento diferencial.

Este contacto proporcionou à autora a possibilidade de um estágio de um ano na Suécia, como bolsista da IAEA, onde participou de trabalhos sobre dinâmica de líquidos hidrogenados, em particular estudo do processo de auto-difusão. Durante esse período, o Dr. S.B.Herdade, responsável pela nova linha de pesquisa com espectrometria de neutrons no IEA, supervisionava a construção de um chopper segundo o projeto sueco, com a colaboração dos físicos C.Rodríguez e L.A.Vinhas.

Após o regresso da autora, em 1965, o grupo ocupou-se simultaneamente da construção do arranjo diferencial definitivo e da utilização do chopper num arranjo provisório, para estudo de suas características operacionais e em várias medidas de secção de choque total.

Esta tese apresenta um estudo de um método para calibrar e determinar a resolução de espectrômetros para neutrons lentos, problema que despertou o interesse da autora quando foi feita a análise do funcionamento do espectrômetro de tempo de voo. São apresentadas também as características de operação do aparelho, sendo mencionadas as experiências levadas a efeito no arranjo de feixe direto. Esse arranjo provisório já foi desmontado, e iniciam-se atualmente medidas no arranjo diferencial, no qual pretendemos dar continuidade ao programa de pesquisas sobre dinâmica de líquidos hidrogenados.

<u>ÍNDICE</u>	<u>PG</u>
<u>CAPÍTULO I</u>	
INTRODUÇÃO	1
<u>CAPÍTULO II</u>	
ANÁLISE DETALHADA DO EFEITO DA RESOLUÇÃO NUM DEGRAU DE BRAGG	
II.1 - Introdução	8
II.2 - Função gaussiana aplicada a uma função linear com um degrau	11
II.3 - Simulação do efeito da resolução no degrau (110) do ferro	21
II.4 - Conclusões	26
<u>CAPÍTULO III</u>	
CARACTERÍSTICAS DO ESPECTRÔMETRO DE TEMPO DE VÔO	
III.1 - Considerações gerais	27
III.2 - Descrição do espectrômetro de tempo de vôo	29
III.3 - Resolução teórica	36
III.4 - Outras características operacionais importantes:	
a) função de transmissão do chopper	49
b) background	50
<u>CAPÍTULO IV</u>	
UTILIZAÇÃO DO ESPECTRÔMETRO DE TEMPO DE VÔO	54
<u>APÊNDICES</u> : A - Desenvolvimento do cálculo da sessão II.2	58
B - Programas para computador dos cálculos da sessão II.2	61
C - Programa para computador do cálculo da sessão II.3	64
<u>BIBLIOGRAFIA</u>	66

## CAPÍTULO I

### INTRODUÇÃO

Existe um interêsse bastante grande no estudo das interações de neutrons lentos com a matéria; chamamos neutrons lentos àqueles de energia inferior a 1 eV, ou seja, com comprimento de onda superior a 0,3 Å.

Um neutron de energia bem mais alta interage com um núcleo de um alvo individualmente, como se êsse núcleo fôsse isolado e fixo: a interação dêsse neutron se dá com o sistema de nucleons que compõem o núcleo. Essa interação pode resultar numa reação nuclear em que os produtos finais diferem dos iniciais, ou ainda o neutron pode ser espalhado elásticamente pelo núcleo.

Já um neutron lento, ao interagir com um núcleo, só pode ser espalhado ou dar origem a reações nucleares exoérgicas, e assim a maioria das interações de núcleos com neutrons lentos resulta em espalhamento ou em captura radioativa. O conhecimento das secções de choque nucleares para essas reações é sempre de interêsse no estudo das propriedades nucleares do alvo, além de ter em casos específicos bastante importância para a tecnologia de reatores nucleares.

Porém, os neutrons lentos não fornecem informações apenas sôbre propriedades nucleares; tendo comprimento de onda da ordem de grandeza das distâncias interatômicas, êles interagem com um conjunto de átomos ao serem espalhados, podendo haver interferência entre o espalhamento por núcleos vizinhos. A difração de neutrons lentos (Ba 62) permite, portanto, a determinação de estruturas atômicas. Como os neutrons possuem momento magnético, êles interagem com os momentos magnéticos dos átomos espalhadores,

dando também informações sobre as estruturas magnéticas.

Além disso, como a energia dos neutrons lentos é da ordem de grandeza da energia das ligações químicas e dos movimentos térmicos dos átomos, êles servem como partículas de prova para investigar-se a dinâmica das estruturas atômicas e magnéticas dos materiais, através de trocas de energia com o sistema espalhador. O espalhamento inelástico de neutrons lentos dá informações sobre várias propriedades de sistemas atômicos, tais como vibrações de redes cristalinas, níveis de energia moleculares e magnéticos, movimentos translacionais em sólidos e líquidos, como difusão, e outras propriedades em que o movimento é um aspecto importante.

Essas interações podem ser estudadas através de medidas de secção de choque integral e, mais eficientemente, pela distribuição angular do espalhamento elástico e inelástico de neutrons lentos. O estudo do espalhamento de neutrons por sistemas de átomos é desenvolvido de forma bastante completa por Turchin (Tu 65) e Egelstaff (Eg 65).

As mais importantes fontes de neutrons lentos são os reatores nucleares, que fornecem uma distribuição maxwelliana de neutrons térmicos (Hu 53), abrangendo um intervalo de energia de  $10^{-4}$  eV até 1 eV; a utilização desses neutrons em experiências de física nuclear e física dos estados sólido e líquido exige em geral o emprego de espectrômetros para selecionar ou analisar os neutrons pelas suas energias. Os espectrômetros para neutrons lentos empregados nessas experiências baseiam-se sempre em três princípios de operação fundamentais: difração seletiva de neutrons em cristais, análise por tempo de voo e seleção mecânica de velocidades.

As propriedades ópticas da difração de neutrons em cristais (Ba 62) podem ser resumidas na chamada "relação (ou lei) de Bragg". Quando um feixe colimado de neutrons incide sobre um conjunto de planos cristalinos paralelos, de distância interplanar  $d$ , num ângulo de incidência  $\theta$ , só serão refletidos os neutrons de comprimento de onda  $\lambda$  satisfazendo a relação



$$n \lambda = 2 d \sin \Theta \quad , \quad \text{com } n = 1, 2, 3, \text{ etc.}$$

Na verdade esta é uma condição de máxima interferência construtiva no espalhamento coerente elástico pelos vários átomos do cristal, na direção de reflexão.

Utilizando reflexão de neutrons em monocristais pode-se retirar, de um feixe polienergético, um feixe de neutrons monoenergéticos numa direção definida com relação ao feixe inicial. Este é o princípio de operação de um espectrômetro de cristal (Bo 53), que é um monocromador. O intervalo de operação deste tipo de monocromador vai depender da estrutura do cristal escolhido.

Consideremos um feixe de neutrons térmicos passando através de um policristal contendo vários grãos cristalinos orientados ao acaso. Um neutron com um certo comprimento de onda vai ser refletido somente quando encontrar um grão num ângulo de incidência tal que a relação de Bragg seja satisfeita. Como existem vários conjuntos de planos com espaçamentos diferentes, grande parte dos neutrons é refletida. Porém, o espalhamento coerente elástico devido a um certo conjunto de planos do cristal, caracterizados por um certo  $d_1$ , anula-se para comprimentos de onda maiores que  $\lambda_1 = 2 d_1$ . Por esta razão a secção de choque de espalhamento coerente elástico, em função do comprimento de onda do neutron, apresenta degraus característicos, chamados "degraus de Bragg"; esses degraus aparecem também, é claro, na secção de choque total do policristal. Existe um valor máximo  $d_m$ , um para cada rede cristalina, que depende da estrutura do cristal, existindo portanto um comprimento de onda máximo que pode ser refletido  $\lambda_m = 2 d_m$ . Neutrons de comprimento de onda maior que  $\lambda_m$  não sofrem mais espalhamento coerente elástico e são removidos do feixe incidente principalmente por captura pelo núcleo; este último degrau é chamado "Bragg cut-off". Os policristais podem portanto ser utilizados como filtros de neutrons: retiram de um feixe incidente os neutrons com comprimento de onda abaixo de um certo limite, deixando passar os demais na própria direção de incidência (Hu 53).

O berílio policristalino, refrigerado à temperatura do nitrogênio líquido para diminuir o espalhamento inelástico, é muito usado para produzir o chamado feixe de neutrons frios (Pa 61), deixando passar apenas neutrons com  $\lambda > 4 \text{ \AA}$ .

Nas técnicas de tempo de voo são produzidos pulsos de neutrons que percorrem uma distância fixa da fonte dos pulsos até um detetor; sistemas eletrônicos são usados para contar o número de neutrons que atinge o detetor em intervalos de tempo sucessivos após o instante de formação do pulso. A técnica de tempo de voo fornece uma análise em energia do feixe de neutrons, mas não uma monocromação; cada pulso contém em geral neutrons de várias velocidades. No caso de termos fontes contínuas de neutrons, esta técnica exige a utilização de um interruptor mecânico que transforme o feixe contínuo em um feixe pulsado. O aparelho mais comumente usado para esse fim é o chamado "chopper" (ou obturador), que é essencialmente um colimador rotativo. A técnica de tempo de voo pode ser usada tanto para neutrons rápidos como para neutrons lentos, diferindo porém a distância de voo, a ordem de grandeza dos tempos envolvidos e as características do obturador mecânico. O chopper original de Fermi para neutrons lentos (Fe 47) consistiu de um rotor cilíndrico, com eixo de rotação perpendicular ao feixe de neutrons, feito de camadas alternadas de material absorvedor e transmissor de neutrons lentos, paralelas ao eixo de rotação do cilindro; esse chopper de placas retas funciona também quasi como um filtro, pois neutrons muito lentos não serão transmitidos. Um chopper com placas curvas (Ho 61) pode ter uma ação semi-monocromadora, impedindo a transmissão de neutrons muito rápidos e muito lentos, além de servir como pulsador. Os choppers para neutrons lentos utilizam sempre o cádmio como material absorvedor, devido à grande ressonância apresentado pelo  $_{48}\text{Cd}^{113}$  em 0,178 eV; uma espessura de 1mm de Cd é suficiente para capturar praticamente todos os neutrons com energia abaixo de 0,25 eV.

Nas técnicas de seleção mecânica de velocidades, neutrons de uma estreita faixa de velocidades conseguem passar por um rotor, ou sistema de ro-

tores, enquanto neutrons de outras velocidades não são transmitidos. O primeiro monocromador mecânico (Du 35) consistiu de dois discos de cádmio com algumas fendas na periferia, montados com alguns metros de distância entre si num eixo paralelo ao feixe de neutrons; as aberturas são defasadas, de maneira a poderem passar somente os neutrons que atingem o segundo disco quando uma fenda estiver alinhada com a direção do feixe. O exemplo mais elaborado, com um único rotor operando como monocromador, é o seletor mecânico de velocidades com fendas helicoidais (Da 53), que pode ser projetado para produzir um feixe contínuo ou pulsado de neutrons monoenergéticos. Mais recentemente (Eg 61) foi obtida monocromatização mecânica pelo emprêgo de dois, ou mais, choppers separados por alguns metros de distância e com aberturas defasadas. A utilização de rotores especialmente projetados permite unir a seleção mecânica de velocidades à técnica de análise por tempo de voo.

Os vários tipos de espectrômetros que operam na região de neutrons térmicos e sub-térmicos utilizam sempre um desses princípios de operação, ou uma combinação deles, seja em medidas integrais de secção de choque total como também em experiências diferenciais (Eg 65) que estudam o espalhamento elástico e inelástico de neutrons lentos em sólidos e líquidos.

São muito importantes na determinação das características de qualquer espectrômetro a sua calibração e o conhecimento de sua resolução. Um método bastante usado para calibrar e determinar experimentalmente a resolução de espectrômetros para neutrons lentos consiste na medida dos degraus de Bragg que aparecem na curva de secção de choque total em função da energia do neutron, para substâncias cristalinas como Be, Fe, grafite, etc. A escolha da substância deve ser feita tendo-se em vista a região de energia de interesse e a precisão com que a distancia interplanar é conhecida.

A resolução do espectrômetro afeta o degrau descontínuo, de maneira a tornar os extremos arredondados na curva observada, assumindo a descontinuidade vertical uma inclinação finita. A posição do degrau permite fazer

a calibração do espectrômetro, e a análise da curva medida permite determinar sua resolução. O degrau pode ser considerado como teóricamente descontínuo, apesar da existência de um alargamento intrínseco determinado pelos movimentos térmicos dos átomos, pois a inclinação devida a êste efeito em cristais é fatores de dez menor que a resolução do instrumento (Go 58). O problema de determinar o ponto exato de calibração e a relação entre a resolução e a inclinação observada não havia sido tratado sistematicamente, ainda que êste método tenha sido frequentemente usado de várias maneiras alternativas.

A autora foi levada a dar especial atenção aos detalhes dêste método, visando uma compreensão completa do problema, quando foi iniciado o estudo das características de um espectrômetro de tempo de vôo em operação no IEA-R1. Êste espectrômetro utiliza um chopper para neutrons lentos construído no IEA segundo um projeto desenvolvido por Larsson (La 59). O aparelho foi projetado para ser utilizado em experiências de espalhamento de neutrons em sólidos e líquidos, com um feixe de neutrons frios obtido pelo uso de um filtro de Be policristalino. Enquanto estava sendo construído um arranjo diferencial para êsse fim (Am 67), o chopper foi utilizado no espectrômetro de tempo de vôo num arranjo de feixe direto (He 67), para estudo de suas características, medida do espectro do reator e em medidas de secção de choque total na região térmica para várias substâncias.

Esta tese compreende, no CAPÍTULO II, um estudo detalhado do efeito da resolução numa medida de um degrau de Bragg. Através dêsse estudo a autora pôde chegar a um método simples e eficiente de calibração e determinação experimental da resolução, de aplicação bastante geral.

No CAPÍTULO III são apresentadas as características operacionais do espectrômetro de tempo de vôo no arranjo de feixe direto, com ênfase especial na calibração e na resolução.

Um resumo do estudo e dos resultados dêsses dois capítulos foi publi-

cado recentemente (Am 68).

No CAPÍTULO IV fazemos considerações finais sobre a utilização do espectrômetro em medidas de secção de choque e citamos várias experiências que foram efetuadas no arranjo descrito; mencionamos também o programa de trabalho futuro.

## CAPÍTULO II

### ANÁLISE DETALHADA DO EFEITO DA RESOLUÇÃO NUM DEGRAU DE BRAGG

#### II.1 - Introdução

Degraus de Bragg característicos são observados quando efetuamos uma medida da secção de choque total  $\sigma$  de uma amostra policristalina, por transmissão. Ao fazermos incidir um feixe de neutrons colimados perpendicularmente à superfície plana de uma amostra, a transmissão, definida como a razão entre o fluxo transmitido e o fluxo incidente (ou entre a intensidade transmitida e a incidente), será dada por (Hu 53)

$$T = \exp(-n\sigma) \quad , \quad \text{donde} \quad \sigma = \frac{1}{n} \ln(T^{-1}) \quad , \quad \textcircled{1}$$

sendo  $n$  o número de átomos por barn da amostra (espessura  $\times$   $n^\circ$  átomos/cm<sup>3</sup>, em unidades de barn = 10<sup>-24</sup> cm<sup>2</sup>).

Os degraus aparecem na intensidade transmitida como função da energia do neutron, na curva de transmissão observada e na curva de secção de choque total obtida a partir dela. A análise desses degraus fornece um método para calibrar e determinar experimentalmente a resolução do espectrômetro; resta saber qual a curva que deve ser analisada, e como deve ser feita essa análise, para que o método seja o mais simples e o mais eficiente possível.

Hughes (Hu 53) cita a posição característica dos degraus de Bragg em amostras cristalinas como um excelente método de calibrar um espectrômetro de tempo de vôo, sugerindo a medida da intensidade transmitida, ou, para maior precisão, a medida da secção de choque total por transmissão.

O método foi considerado em maiores detalhes por Egelstaff (Eg 54), que analisa o inverso da transmissão em escala logarítmica. Este autor toma como medida prática da largura de resolução a diferença entre os pontos de má-

ximo e mínimo do degrau observado. Ele recomenda que seja calculado o comprimento de onda correspondente ao valor médio do degrau, que sofre um deslocamento para comprimentos de onda menores que o valor real do degrau; esse cálculo deve ser feito para cada caso, usando-se as funções de resolução e transmissão teóricas, consideradas conhecidas.

Gould (Go 58) fez a calibração de um espectrômetro de cristal usando um método de áreas equivalentes para determinar o ponto exato do degrau na curva de transmissão; a área abaixo da curva observada deve ser dividida em duas partes iguais pelo degrau teórico. Como o próprio autor menciona, esse método só é exato se o degrau teórico for simétrico. A forma do degrau observado é comparada ainda com uma convolução da função de resolução teórica com a curva de transmissão ideal.

Deruytter e colaboradores fizeram um estudo bastante preciso da calibração de um espectrômetro de tempo de voo, e usaram (De 61) o método das áreas equivalentes e também (Ce 62) o método de Egelstaff.

O recíproco da transmissão em escala linear e a intensidade transmitida também já foram usadas em calibração (Ni 62).

Quando um filtro espesso de Be refrigerado é usado para obtenção de um feixe de neutrons frios, o espectro transmitido pode ser aproximado por uma função degrau triangular; neste caso a calibração e a resolução podem ser obtidas por sua medida direta, como foi estudado por Larsson (La 59-a).

Quando nos defrontamos com a necessidade de usar este método na determinação das características do espectrômetro de tempo de voo do IEA, optamos inicialmente por um método parecido com o de Egelstaff: foi calculado qual o ponto na curva de secção de choque experimental do ferro correspondente ao ponto exato de calibração, para várias resoluções do espectrômetro (He 67-Apêndice III).

A autora sentiu entretanto que o problema não estava esgotado e que

valia a pena fazer um estudo detalhado do efeito da resolução sôbre uma medida de um degrau de Bragg, para uma compreensão completa do problema, visando chegar a uma solução geral que eliminasse a necessidade de efetuar cálculos trabalhosos para cada caso particular.

Este estudo foi desenvolvido sôb dois pontos de vista: na sessão II.2 é analisado o problema formal de aplicar uma resolução gaussiana a uma função linear com um degrau e na sessão II.3 é feita uma simulação do efeito da resolução numa medida da secção de choque total por transmissão, no caso particular do último degrau do ferro, correspondente ao plano de reflexão (110).

Uma comparação dos resultados que obtêve por êsses dois tratamentos permitiu à autôra chegar a um método simplificado que fornece o ponto exato de calibração e a meia-largura da resolução gaussiana, a partir da análise da curva de transmissão da substância policristalina. Essas conclusões estão na sessão II.4.



II.2 - Função gaussiana aplicada a uma função linear com um degrau

Consideremos o problema geral de uma função de resolução gaussiana aplicada a uma função linear  $f(x)$  que apresenta uma descontinuidade no ponto  $x = b$ , como aparece na figura 1. Esta função linear é dada por

$$f(x) = \begin{cases} f_1(x) = A_1 x + B_1 & \text{para } 0 \leq a \leq x \leq b \\ f_2(x) = A_2 x + B_2 & \text{para } b \leq x \leq c \\ 0 & \text{para } x < a \text{ ou } x > c \end{cases} \quad (2)$$

A variável  $x$  pode ser, no caso de um espectrômetro para neutrons lentos, o comprimento de onda, a velocidade, o tempo de vôo, etc., do neutron. O ponto  $b$  corresponde a um degrau de Bragg; os pontos  $a$  e  $c$  definem o intervalo onde  $f(x)$  pode ser considerada uma função linear de  $x$ , mas não representam necessariamente descontinuidades físicas.

A função de resolução normalizada é dada por

$$R(x - x_0) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \Delta x} \exp \left( - \left( \frac{x - x_0}{\Delta x} \right)^2 \right) \quad (3)$$

e sua largura na meia altura é  $\Gamma = 2 \sqrt{\ln 2} \Delta x$ .

Estamos interessados na função convolução

$$I(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x_0) R(x - x_0) dx_0 \quad , \text{ dada por}$$

$$I(x) = \int_a^x f_1(x_0) R(x - x_0) dx_0 + \int_x^c f_2(x_0) R(x - x_0) dx_0 + \int_x^b (f_1(x_0) - f_2(x_0)) R(x - x_0) dx_0 \quad .$$

Integrando e definindo as variáveis

$$y_1 = \frac{x - a}{\Delta x} \quad , \quad y_2 = \frac{c - x}{\Delta x} \quad \text{e} \quad z = \frac{x - b}{\Delta x} \quad , \text{ resulta}$$

$$I(x) = \frac{\Delta x}{2\sqrt{\pi}} \left[ (A_2 - A_1) \exp(-z^2) + A_1 \exp(-y_1^2) - A_2 \exp(-y_2^2) \right] + \frac{f_1(x) \operatorname{erf}(y_1) + f_2(x) \operatorname{erf}(y_2)}{2} + \frac{f_2(x) - f_1(x)}{2} \operatorname{erf}(z) \quad ,$$

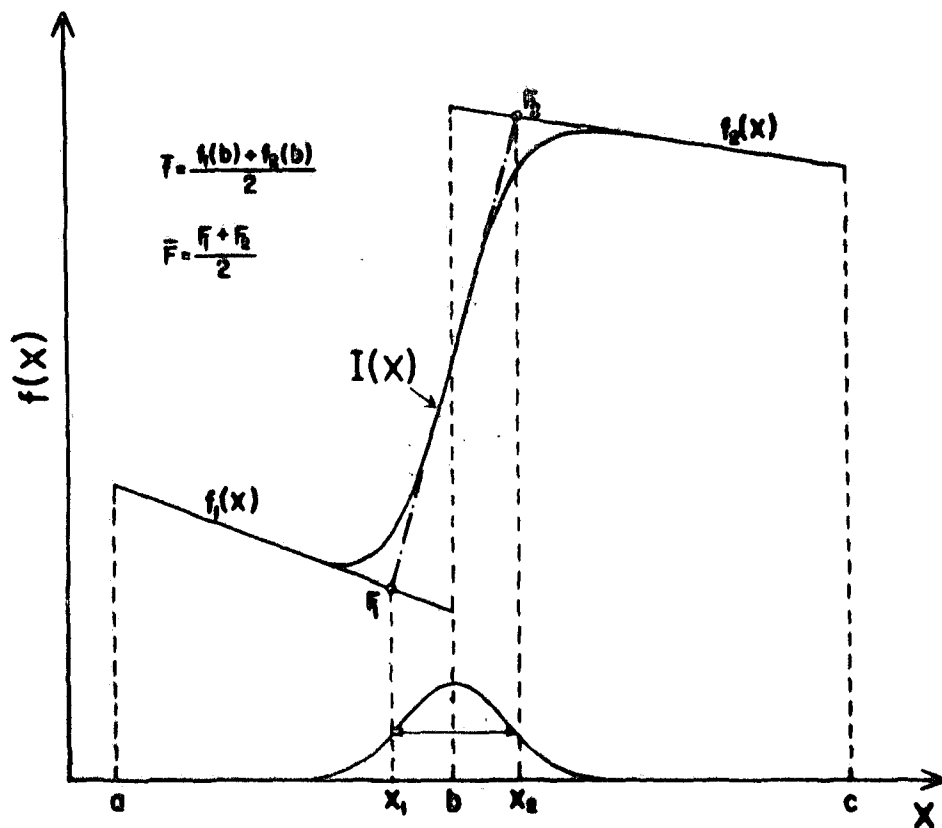


FIGURA 1

Uma função gaussiana é aplicada a uma função linear  $f(x)$  que apresenta uma descontinuidade no ponto  $x = b$ ; o resultado dessa convolução é a função  $I(x)$ . A abscissa  $\bar{x}$  correspondente ao valor médio  $\bar{F}$  e a largura do degrau  $\delta x = x_2 - x_1$  podem ser determinadas graficamente.

onde  $\text{erf}(\eta)$  é a função erro, definida como

$$\text{erf}(\eta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\eta} \exp(-t^2) dt$$

Quando  $f(x)$  representa o espectro de neutrons frios transmitido através de um filtro de Be espesso, refrigerado à temperatura do nitrogênio líquido, as simplificações

$$A_1 = B_1 = 0, \quad A_2 = \frac{1}{c-b} \quad \text{e} \quad B_2 = \frac{c}{c-b}$$

levam à discussão feita por Larsson (La 59-a), tendo o tempo de vôo como variável  $x$ .

Quando  $f(x)$  representa a transmissão de uma amostra policristalina com intervalos  $(c-b)$  e  $(b-a)$  suficientemente grandes comparados com  $\Delta x$ , o comportamento de  $f(x)$  para  $x < a$  e  $x > c$  não influencia a forma do degrau resultante, que pode ser descrito neste caso por

$$I(x) = \frac{f_1(x) + f_2(x)}{2} + \frac{(A_2 - A_1) \Delta x}{2\sqrt{\pi}} \exp(-z^2) + \frac{f_2(x) - f_1(x)}{2} \text{erf}(z),$$

que se reduz a  $f_1(x)$  para  $x \ll b - \Delta x$  e a  $f_2(x)$  para  $x \gg b + \Delta x$ .

Chamemos  $\bar{f}$  o valor medio da função  $f(x)$  na posição do degrau e  $H$  a altura do degrau, que pode ser positiva ou negativa, definidos por

$$\bar{f} = \frac{f_1(b) + f_2(b)}{2} \quad \text{e} \quad H = f_1(b) - f_2(b) \quad (4)$$

Em função da nova variável  $z$ , que exprime a distância entre uma abscissa  $x$  e a posição do degrau, em unidades de  $\Delta x$ , a curva resultante é dada por

$$I(z) = \bar{f} + \frac{1}{2} (A_1 + A_2) \Delta x \cdot z + \frac{(A_2 - A_1) \Delta x}{2\sqrt{\pi}} \exp(-z^2) - \frac{H}{2} \text{erf}(z) + \frac{1}{2} (A_2 - A_1) \Delta x \cdot z \text{erf}(z) \quad (5)$$

Para resoluções finitas ( $\Delta x \neq 0$ ), o valor observado na posição do degrau

$$I(b) = \bar{f} + \frac{(A_2 - A_1) \Delta x}{2 \sqrt{\pi}}$$

é igual a  $\bar{f}$  somente para degraus simétricos, quando  $A_1 = A_2$ . Dependendo das inclinações, a abcissa  $x'$ , correspondente ao valor médio  $\bar{f}$ , desloca-se para valores menores ou maiores que  $b$ ; essa abcissa pode ser determinada através do valor  $z'$  a ela relacionado, resolvendo-se a equação transcendente  $I(z') = \bar{f}$ . A importância desse desvio é dada por

$$\frac{(A_2 - A_1) \Delta x}{2 \sqrt{\pi} \bar{f}}$$

Gould (Go 58) mediu a curva de transmissão e tomou como verdadeira posição do degrau uma abcissa tal que dos dois lados as áreas correspondentes à diferença entre  $f(x)$  e  $I(x)$  sejam iguais. Este método seria sempre correto se as seguintes áreas fossem idênticas:

$$S_1 = \int_a^b (f_1(x) - I(x)) dx \quad \text{e} \quad S_2 = \int_b^c (I(x) - f_2(x)) dx$$

Mantendo a hipótese de que os intervalos são muito maiores que  $\Delta x$ , resulta por integração, como pode ser visto no APÊNDICE A :

$$S_1 = \frac{H \Delta x}{2 \sqrt{\pi}} + \frac{1}{8} (A_1 - A_2) (\Delta x)^2 \quad \text{e} \quad S_2 = \frac{H \Delta x}{2 \sqrt{\pi}} - \frac{1}{8} (A_1 - A_2) (\Delta x)^2$$

Pode-se ver que apenas no caso de degraus simétricos o método das áreas equivalentes leva ao ponto de calibração correto; o erro porcentual deste método é dado por

$$\frac{(A_2 - A_1) \Delta x \sqrt{\pi}}{2 H}$$

Na figura 1 vemos um degrau observado típico, com as inclinações  $A_1$  e  $A_2$  negativas. A reta tangente à curva  $I(x)$  no seu ponto de inflexão encontra a reta  $f_1(x)$  no ponto  $(x_1, F_1)$  e a reta  $f_2(x)$  no ponto  $(x_2, F_2)$ . Determinemos analiticamente as quantidades que podem ser obtidas graficamente, e que são frequentemente usadas na prática: a largura do degrau e a abcissa correspondente ao valor médio do degrau. Detalhes do cálculo podem ser vistos no APÊNDICE A.

Fazendo a derivada segunda de  $I(x)$  igual a zero, obtemos o ponto

de inflexão da curva, dado por

$$z_1 = \frac{(A_1 - A_2) \Delta x}{2 H} \quad \text{ou} \quad x_1 = b + \frac{(A_1 - A_2) (\Delta x)^2}{2 H} \quad (6)$$

O valor  $z_1$ , que exprime o desvio do ponto de inflexão em relação à posição do degrau, dá-nos portanto a ordem de grandeza da distorção na curva resultante devida à assimetria de  $f(x)$ .

É possível obter a equação da reta tangente à curva  $I(x)$  no ponto de inflexão e determinar as intersecções  $x_1$  e  $x_2$  (através dos valores  $z_1$  e  $z_2$  a elas relacionados) com a função  $f(x)$  e os correspondentes valores  $F_1$  e  $F_2$ . Cálculos analíticos levam a

$$z_1 = - \frac{1 + \operatorname{erf}(z_1)}{\frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(-z_1^2) + 2 z_1 (1 + \operatorname{erf}(z_1))} \quad e$$

$$z_2 = + \frac{1 - \operatorname{erf}(z_1)}{\frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(-z_1^2) - 2 z_1 (1 - \operatorname{erf}(z_1))}$$

Dessas duas expressões vemos que  $z_1$  e  $z_2$  são funções anti-simétricas de  $z_1$ , uma em relação à outra, ou seja,  $z_1(-z_1) = -z_2(z_1)$ .

A largura do degrau resultante,  $\int x$ , é definida por

$$\int x = x_2 - x_1 = (z_2 - z_1) \Delta x$$

Em termos da meia-largura da função de resolução gaussiana temos

$$\frac{\int x}{\Gamma} = \frac{z_2 - z_1}{2 \sqrt{\ln 2}}$$

Das propriedades de simetria de  $z_1$  e  $z_2$  decorre ser esta razão uma função par de  $z_1$ .

É também possível determinar a abcissa  $\bar{x}$  (através do  $\bar{z}$  relacionado) que corresponde ao valor médio observado  $\bar{F} = \frac{1}{2} (F_1 + F_2)$ , resolvendo-se a equação  $I(\bar{z}) = \bar{F}$ , que se reduz a uma equação transcendente do tipo  $\phi(K, z_1, \bar{z}) = 0$ , onde  $K$  é um parametro positivo  $\geq |z_1|$

$$K = \frac{(A_1 + A_2) \Delta x}{2 H} \quad (7)$$

Para um degrau simétrico

$$z_1 = \bar{z} = z' = 0, \quad x_1 = \bar{x} = x' = b \quad \text{e} \quad I(x_1) = \bar{F} = \bar{f} = I(b).$$

Neste caso resulta também

$$z_1 = -\frac{\sqrt{\pi}}{2}, \quad z_2 = +\frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad \text{e portanto}$$

$$\boxed{\frac{\delta x}{\Gamma} = \frac{\sqrt{\pi}}{2 \sqrt{\ln 2}} \approx 1,0645}$$

⑧

resultado já encontrado por Larsson (La 59-a) para o caso particular  $A_1 = A_2 = 0$ .

Para  $\Delta x \rightarrow 0$  resulta também  $z_1 \rightarrow 0$ , mas nêsse caso

$$x_1 \text{ e } x_2 \rightarrow b \quad \text{e} \quad \delta x \rightarrow 0.$$

No caso geral, quando  $A_1 \neq A_2$ , sòmente o ponto de inflexão pode ser facilmente calculado a partir da equação 5. Para todas as outras quantidades os cálculos foram feitos num computador IBM-1620-II, expandindo a função 'erf' em série e tomando o ponto de inflexão  $z_1$  como variável. As equações transcendentés foram resolvidas pelo método de Newton-Raphson (Pe 66). Os programas para computador estão no APÊNDICE B.

Nas figuras 2 e 3, curvas de  $z_1$ ,  $z_2$  e da razão  $\delta x / \Gamma$  são apresentadas como funções de  $z_1$ . Nas figuras 4(a) e 4(b) temos curvas de  $\bar{z}$  e  $z'$  como funções de  $z_1$ , tendo K como parâmetro.  $z'$  tem sinal oposto a  $z_1$  e mostra uma variação significativa com K, enquanto  $\bar{z}$  tem o mesmo sinal de  $z_1$  e é praticamente insensível a K; ambos são funções pares de  $z_1$ .

Os resultados simples e interessantes observados nessas curvas para valores pequenos de  $|z_1|$  podem ser obtidos analiticamente se desprezarmos as contribuições de  $z_1$  com expoente superior a um. Esta aproximação leva a

$$z_1 + z_2 = z_1 (\pi - 2) \quad \text{e} \quad z_2 - z_1 = \sqrt{\pi}.$$

Portanto para  $|z_1| \leq 0,1$ , a razão  $\delta x / \Gamma$  é constante e a equação 8 é válida.

Quando K e  $z_1$  são da mesma ordem, esta aproximação leva às rela-

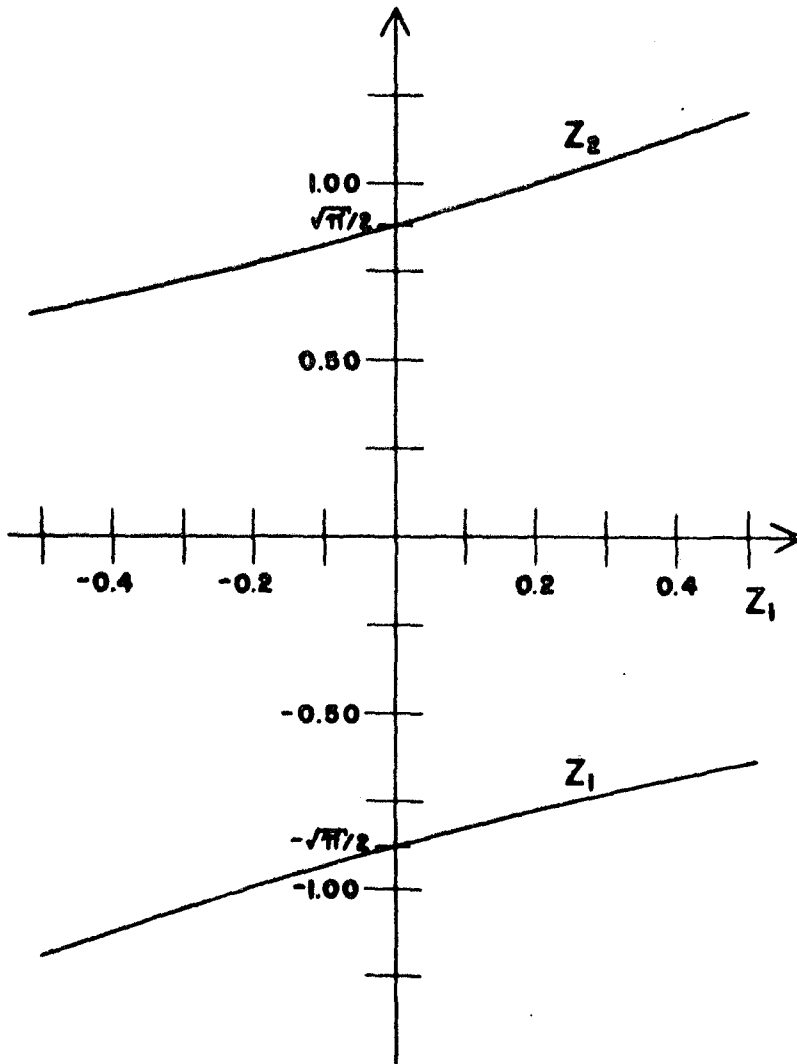


FIGURA 2

Curvas de  $z_1$  e  $z_2$  como funções do ponto de inflexão  $z_1$ , que depende dos coeficientes da função linear  $f(x)$  e da largura da função gaussiana. Para degraus simétricos  $z_1 = 0$ . As variáveis  $z$  e  $x$  estão relacionadas por

$$z = \frac{x - b}{\Delta x}$$

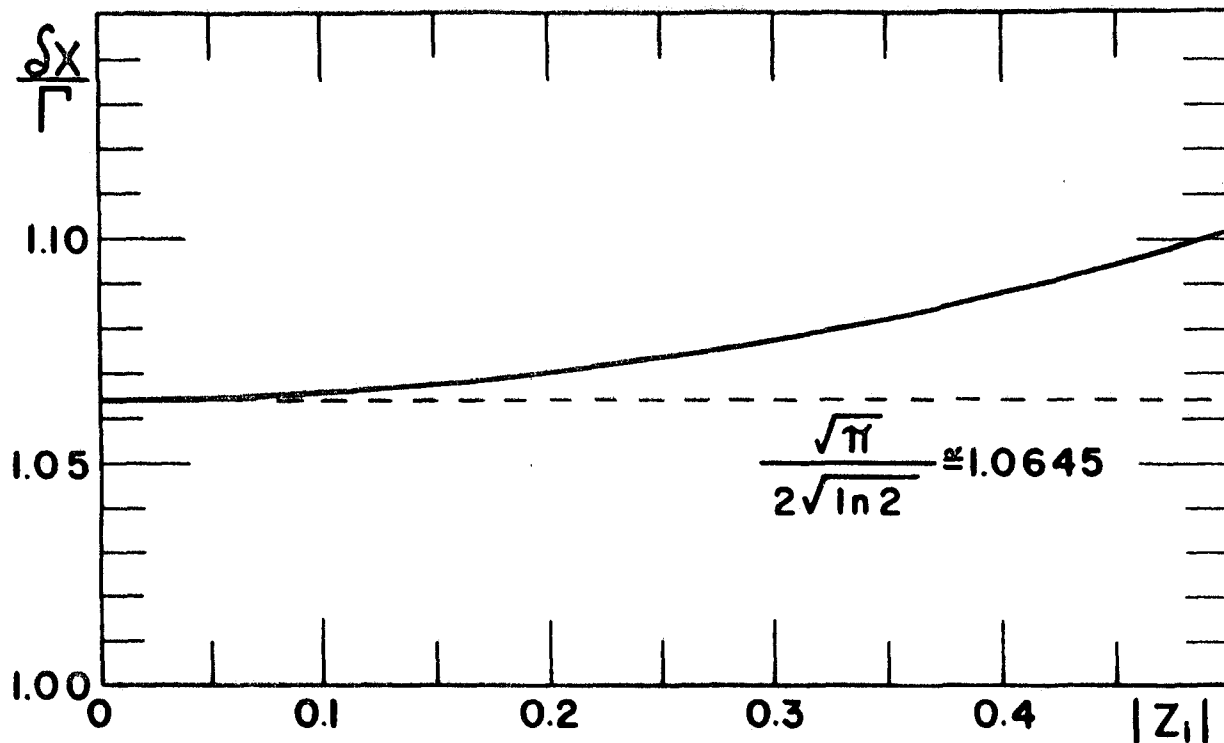


FIGURA 3

Razão entre a largura do degrau e a largura na meia-  
altura da gaussiana, como função do ponto de infle-  
xão  $z_1$ . Desprezando contribuições de  $z_1$  de se-  
gunda ordem, essa razão é constante.



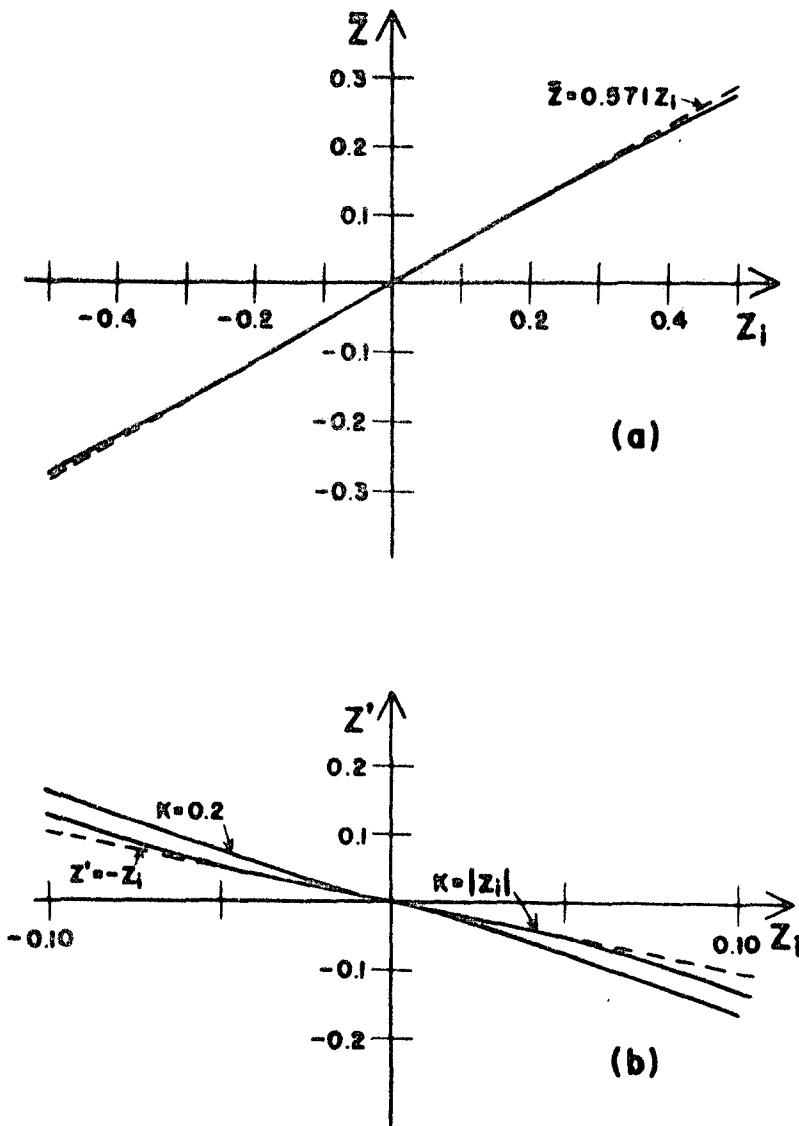


FIGURA 4

- (a) - Curva de  $\bar{z}$  como função do ponto de inflexão  $z_1$ , obtida pela solução da equação transcendente  $I(\bar{z}, z_1, K) = \bar{F}$ . Os resultados mostram que  $\bar{z}$  é praticamente insensível ao parâmetro  $K$ .
- (b) - Curva de  $z'$  como função do ponto de inflexão  $z_1$ , obtida pela solução da equação transcendente  $I(z', z_1, K) = \bar{f}$ . Os resultados são para  $K = |z_1|$  e  $K = 0,2$ .

As linhas pontilhadas mostram os resultados obtidos quando são desprezadas as contribuições de  $z_1$  de segunda ordem.

ções simplificadas

$$z' = z_1 \quad \text{e} \quad \bar{z} = \left( \frac{\pi}{2} - 1 \right) z_1 .$$

Assim, para condições tais que  $|z_1| \leq 0,2$ , o que ocorre no caso dos degraus de Bragg, o verdadeiro ponto de calibração  $b$  está relacionado ao valor médio observado  $\bar{x}$  através de

$$b = \bar{x} + \frac{\pi - 2}{8 \ln 2} \left( \frac{A_2 - A_1}{2H} \right) \Gamma^2 \quad (9)$$

Os valores  $A_1$ ,  $A_2$  e  $H$  podem ser determinados experimentalmente, numa precisão suficiente, de uma medida do degrau. Através dos valores  $\int x$  e  $\bar{x}$  determinados graficamente no degrau experimental, a largura de resolução  $\Gamma$  e o ponto de calibração  $b$  podem ser obtidos pelo uso das simples equações 8 e 9.

Se  $|A_1| > |A_2|$ , o que ocorre para o último degrau de Bragg, depois do qual não mais existe espalhamento coerente,  $b < \bar{x}$ .

Foram feitos cálculos para degraus arbitrários, usando-se a equação 5, e os resultados obtidos graficamente concordam perfeitamente com os valores esperados através da equação 9.

II.3 - Simulação do efeito da resolução no degrau (110) do ferro

Os resultados que seriam obtidos experimentalmente numa medida do último degrau do ferro, em 4,046 Å, foram simulados por um cálculo no computador IBM-1620-II. A secção de choque teórica total  $\sigma_t(\lambda)$  como função do comprimento de onda do neutron usada nesta simulação foi calculada (Vi 67) levando-se em conta todas as secções de choque parciais (coerente elástica e inelástica, incoerente elástica e inelástica e absorção) e usando-se uma temperatura de Debye de 4000 K.

Quando é feita uma medida de transmissão de uma amostra contendo n átomos/barn, a transmissão observada depende da resolução do espectrômetro de acordo com

$$T_{\text{obs}}(\lambda_0) = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} F_0 \exp(-n \sigma_t(\lambda)) R(\lambda - \lambda_0) d\lambda}{\int_{-\infty}^{+\infty} F_0 R(\lambda - \lambda_0) d\lambda} \quad (10)$$

O fator  $F_0$  contém o espectro incidente, a função de transmissão do espectrômetro, a eficiência do detetor e demais efeitos que afetam o espectro de neutrons. A variação de  $F_0$  num intervalo correspondente à largura de resolução é pequena; em particular na região de 4 Å, devido à presença de alumínio no feixe, com um degrau em 4,04 Å, essa variação é desprezível. Assim esse fator  $F_0$  foi considerado constante e cancelado.

A função de resolução foi assumida de forma gaussiana; na verdade a largura de resolução varia com  $\lambda$ , mas esse efeito não foi levado em conta porque no intervalo de interesse essa variação é desprezível.

De maneira a podermos decidir qual a melhor função para se usar na calibração, foram feitos cálculos de  $T_{\text{obs}}$ ,  $(T_{\text{obs}})^{-1}$ ,  $\ln(T_{\text{obs}})^{-1}$  e de  $\sigma_{\text{obs}} = \ln(T_{\text{obs}})^{-1} / n$ , por métodos numéricos, no intervalo de 3,0 Å a 5,0 Å, para diversos valores da largura de resolução. Também foram efetuados cálculos para vários valores de n, de maneira a determinar a in-

fluência da espessura da amostra no degrau observado.

Curvas de  $T_{obs}$  e  $\sigma_{obs}$ , para duas resoluções, aparecem na figura 5. O comprimento de onda médio, correspondente à meia-altura do degrau, e a largura do degrau foram determinados gráficamente para as quatro funções calculadas, pelo método usual de extrapolar os dois ramos da curva e achar as intersecções com a tangente ao ponto de inflexão. Os resultados aparecem na tabela I. Os programas de computador estão no APÊNDICE C.

Vê-se claramente dos resultados obtidos que a análise da transmissão observada dá a calibração mais direta e precisa, uma vez que esta é a função onde o comprimento de onda médio aproxima-se mais da posição real do degrau. Na figura 5 vê-se também que a transmissão observada é mais conveniente para a análise que a secção de choque experimental.

A razão principal para se usar a transmissão observada e não as outras funções obtidas a partir dela é que a resolução do espectrômetro está aplicada, numa convolução, na transmissão teórica e não na secção de choque teórica; tôdas as outras são funções inversas ao resultado dessa convolução.

Assim, os resultados da análise feita na sessão II.2 aplicam-se somente à transmissão: em relação à posição do degrau, o comprimento de onda médio desloca-se para valores maiores na transmissão observada, como foi predito pela fórmula 9, mas na direção oposta, para valores menores, nas demais funções inversas.

Existem algumas dificuldades em fazer um ajuste por linha reta na região  $\lambda < 4,046 \text{ \AA}$ , devido à dependência do espalhamento coerente com  $\lambda^2$ , e em relação a este aspecto a função  $\ln(T^{-1})$  pode apresentar algumas vantagens.

Entretanto, existe outra razão que favorece o uso da transmissão:

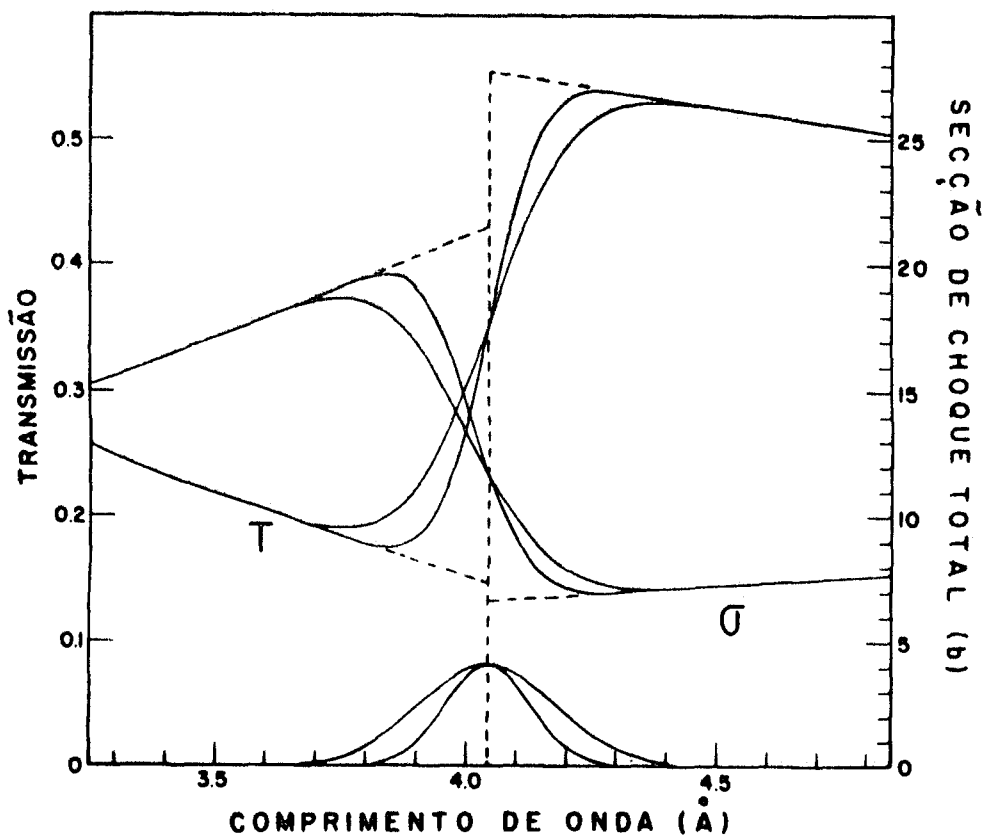


FIGURA 5

Simulação do efeito da resolução numa medida do degrau (110) do ferro. São apresentadas curvas de  $T_{obs}$  e  $\sigma_{obs}$  para duas larguras de resolução, 0,20 e 0,32 Å, para uma amostra contendo 0,089 átomos/barn. Vê-se claramente que a curva de transmissão observada é mais simétrica em relação à posição do degrau.

Comprimento de onda médio $\bar{\lambda}$ (Å)					
n (átomos/barn)	$\Gamma$ (Å)	em $T_{obs}$	em $(T_{obs})^{-1}$	em $\ln (T_{obs})^{-1}$	em $\sigma_{obs}$
0,089	0,10	4,046	4,015	4,030	4,030
0,089	0,20	4,047	3,985	4,015	4,016
0,089	0,30	4,048	3,963	4,005	4,005
0,089	0,40	4,049	3,945	3,995	3,995
0,150	0,20	4,048	3,950	3,997	3,997

TABELA I

Comprimento de onda médio  $\bar{\lambda}$ , correspondente à meia-altura do degrau; os resultados foram obtidos graficamente a partir das quatro funções calculadas. A precisão do método é de 0,04%. O degrau de Bragg ocorre em 4,046 Å; a transmissão é a função mais conveniente para a calibração.

a função de transmissão teórica é a que mais se aproxima da simetria em torno da posição do degrau.

Devido a estas razões, a transmissão observada apresenta também a vantagem de ter a menor sensibilidade ao valor de  $n$  da amostra usada na medida.

Fazendo um ajuste por linhas retas na transmissão teórica, os desvios esperados pela equação 9 concordam com os resultados gráficos da tabela I dentro da precisão do método gráfico, que é de 0,04% neste caso, por não haver flutuação estatística. As larguras da resolução aplicada concordam com os resultados obtidos da equação 8 dentro de 1%, porque existe neste caso uma imprecisão maior no método gráfico.

## II.4 - Conclusões

Através da medida da curva de transmissão de amostras policristalinas e usando as equações 8 e 9 deduzidas é possível calibrar e determinar experimentalmente a resolução de espectrômetros para neutrons lentos de maneira bastante precisa.

Este método pode ser usado de maneira bastante geral, não sendo necessário fazer a simulação do degrau esperado para calcular o comprimento de onda médio para cada resolução. Para seu uso é necessário apenas que a curva de transmissão possa ser aproximada para uma função linear da variável considerada, e que a resolução possa ser aproximada para uma gaussiana. Na maioria dos casos o desvio da abcissa  $\bar{x}$  com relação ao verdadeiro ponto de calibração é desprezível.

A espessura da amostra deve ser escolhida para dar a melhor medida da transmissão. Chamando  $\sigma_{\max}$  e  $\sigma_{\min}$  as secções de choque máxima e mínima do degrau, a condição de máximo degrau na transmissão é obtida por

$$n^* = \frac{\ln(\sigma_{\max} / \sigma_{\min})}{\sigma_{\max} - \sigma_{\min}}$$

(11)

O valor usado na medida deve ser próximo de  $n^*$ . Para o degrau (110) do ferro  $n^* \approx 0,8$  átomos / barn.

Da conclusão que a transmissão é a função mais conveniente para se analisar, resulta que uma maneira prática e rápida de usar este método consiste em medir a intensidade transmitida através da amostra policristalina e multiplicá-la por um fator que cancele o espectro maxwelliano incidente.

Além disso, o estudo feito na sessão II.2 aplica-se a qualquer problema que envolva a convolução de um degrau descontínuo com uma gaussiana.



### CAPÍTULO III

#### CARACTERÍSTICAS DO ESPECTRÔMETRO DE TEMPO DE VÔO

##### III.1 - Considerações gerais

O espectrômetro de tempo de vôo do IEA utiliza um chopper de placas ligeiramente curvas que transmite curtos jatos de neutrons de várias energias. Um pick-up magnético ligado ao chopper fornece um sinal cada vez que um pulso de neutrons é formado no centro do chopper; este sinal determina o zero da escala de tempo, disparando um relógio eletrônico. Um analisador de tempo multicanal acumula as contagens correspondentes a pulsos enviados por um detetor em intervalos de tempo consecutivos, obtendo-se desta forma a distribuição dos neutrons segundo suas velocidades.

Os parâmetros de construção do chopper foram escolhidos (La 59) levando em conta a condição geral de que os neutrons de um pulso atinjam o detetor antes do chopper abrir novamente e impondo ainda que a função de transmissão do aparelho apresente uma região quase plana em torno de  $2 \text{ \AA}$ , com o chopper numa velocidade de rotação de 12.700 rpm, sendo a distância de vôo máxima 3 metros.

Na sessão III.2 é feita uma descrição do espectrômetro de tempo de vôo no arranjo de feixe direto. Esse arranjo, utilizado principalmente para medidas de secção de choque total, define uma área bem pequena para o feixe, menor que a abertura do chopper, o que é conveniente devido ao tamanho de algumas das amostras disponíveis, por exemplo, óxidos de terras raras.

A autora calculou em detalhe a resolução teórica para este arranjo

experimental, pois para nossas condições de geometria o problema não havia sido completamente tratado. Esse cálculo aparece na sessão III.3 .

A calibração e a determinação experimental da resolução foram feitas pela medida da curva de transmissão de amostras policristalinas e análise dos degraus de Bragg, conforme as conclusões do CAPÍTULO II, e constam da sessão III.4 . A resolução para neutrons de  $4 \text{ \AA}$  , com o chopper a 10.700 rpm, é de 2,5% no arranjo descrito. Foi feito um estudo acurado da calibração, de maneira a ser obtida uma calibração independente da velocidade de rotação do chopper, uma vez que em medidas de secção de choque total frequentemente deseja-se mudar a velocidade do chopper para cobrir diferentes intervalos de energia.

Outras características operacionais importantes do espectrômetro, estudadas na sessão III.5 , são a função de transmissão do chopper, medida e calculada pelos métodos usuais, e a radiação de fundo ("background") dependente do tempo. Considerações sobre o background são bastante importantes em experiências de feixe direto, especialmente por ser a abertura do chopper maior que a colimação do feixe.

### III.2 - Descrição do espectrômetro de tempo de vôo

Um diagrama de bloco do espectrômetro no arranjo de feixe direto aparece na figura 6.

A teoria básica de funcionamento do chopper foi descrita em detalhe por Larsson e colaboradores (La 59). O aparelho, que aparece na figura 7, consiste essencialmente de um rotor cilíndrico colocado numa caixa de aço. O cilindro tem raio  $r = 5,0$  cm e comprimento  $14,0$  cm, contendo nove chapas de aço recobertas de cádmio, de espessura  $0,5$  mm, separadas por espaçadores de alumínio formando dez aberturas (fendas) curvas de largura  $2d = 0,397$  cm e raio de curvatura nominal  $R_0 = 74,5$  cm. A abertura total do chopper é  $11$  cm x  $4,5$  cm. O restante do volume do cilindro é preenchido com uma mistura em partes aproximadamente iguais de  $B_4C$  e araldite, formando a parte opaca a neutrons. Um motor elétrico Universal, ligado por acoplamento elástico ao eixo do rotor, pode girar o chopper até  $15.000$  rpm.

A análise do tempo de vôo é feita por um analisador multicanal TMC 1024. As características de operação desse analisador foram testadas experimentalmente (He 67) para garantir uma conversão correta do número de canal para tempo de vôo. O método de correção de tempo morto para perdas no sistema de contagem é desenvolvido no apêndice I da mesma referência.

Uma bobina magnética energizada por um pequeno ímã permanente localizado num disco de alumínio ligado ao eixo do rotor fornece um sinal cuja forma e amplitude variam com a velocidade de rotação do chopper, como pode ser visto na figura 8-a. Esta forma de onda não satisfaz os requisitos de entrada do pulso de disparo do analisador TMC, além de apresentar uma variação indesejável com a velocidade do chopper. É usado um circuito formador de pulsos (He 67), disparado pelo sinal da bobina; medidas cuidadosas do ponto exato de disparo deram um valor  $+15 \pm 5$  mV para a voltagem de disparo, correspondendo a variações de  $0$  a  $2 \mu$  seg no tempo de disparo, em todo o intervalo de velocidades do chopper. Este erro é pequeno e pode ser

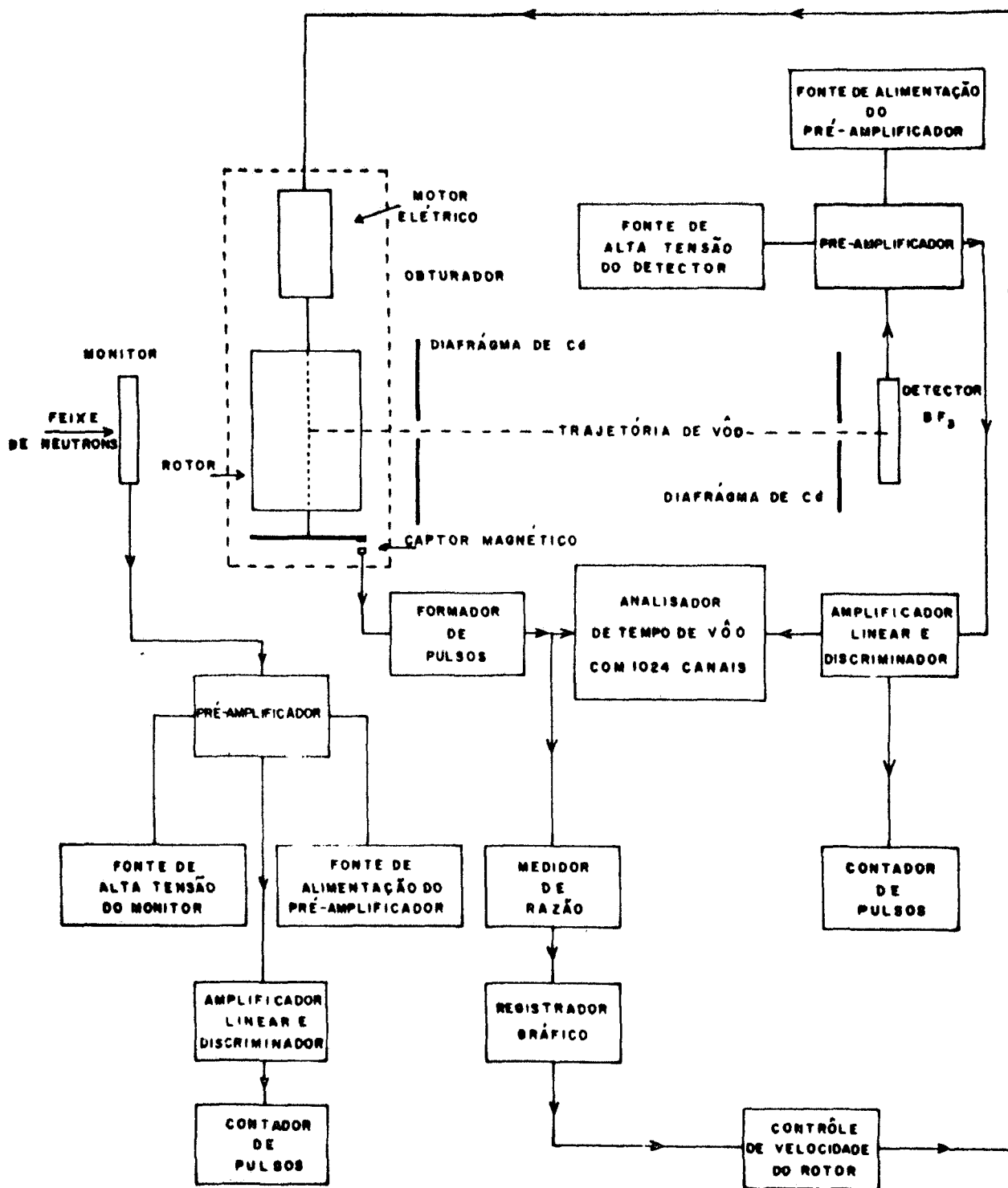
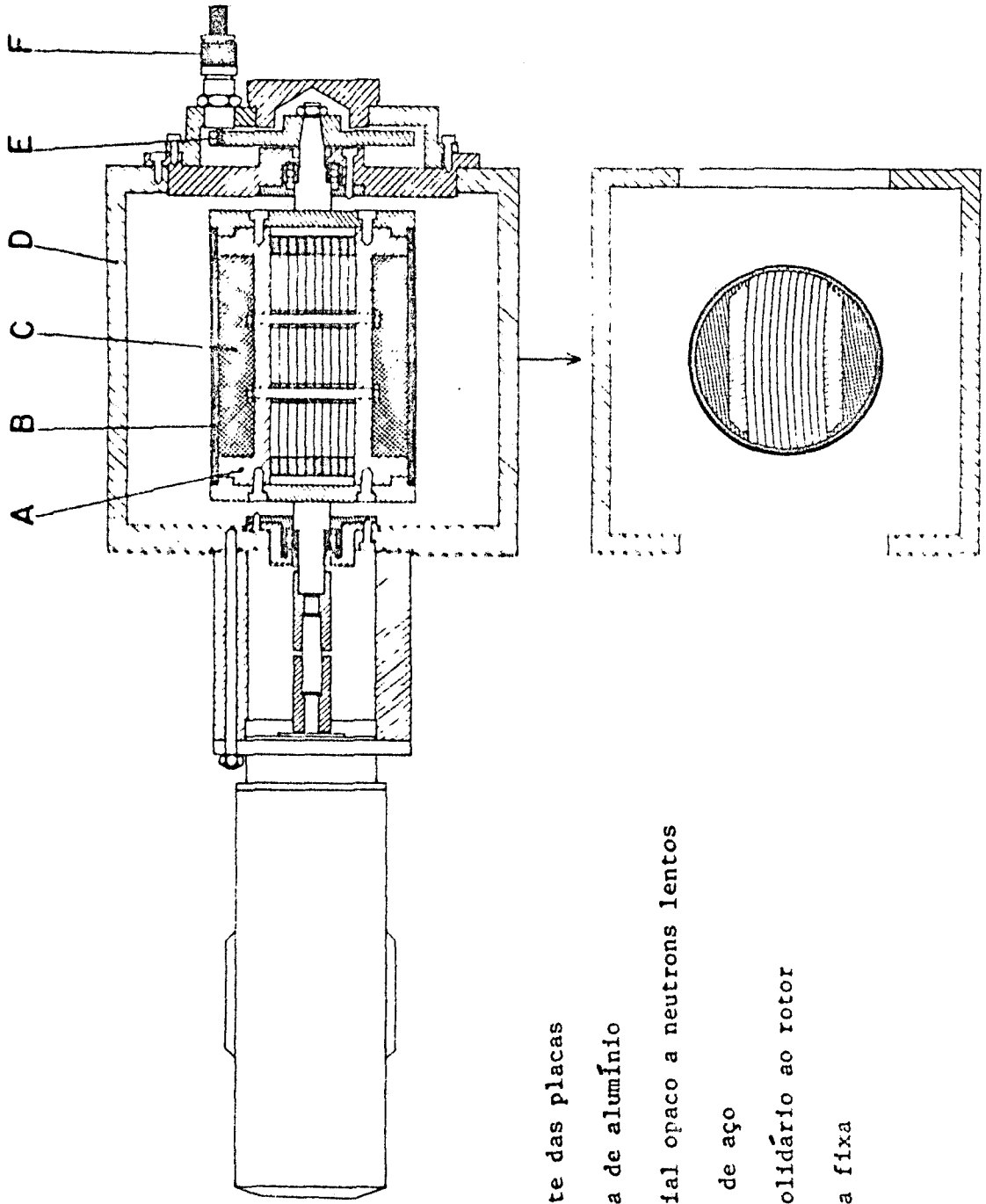


FIGURA 6

Diagrama de bloco do espectrômetro de tempo de vôo



- A - suporte das placas
- B - camisa de alumínio
- C - material opaco a neutrons lentos
- D - caixa de aço
- E - imã solidário ao rotor
- F - bobina fixa

FIGURA 7

Chopper para neutrons lentos com placas curvas

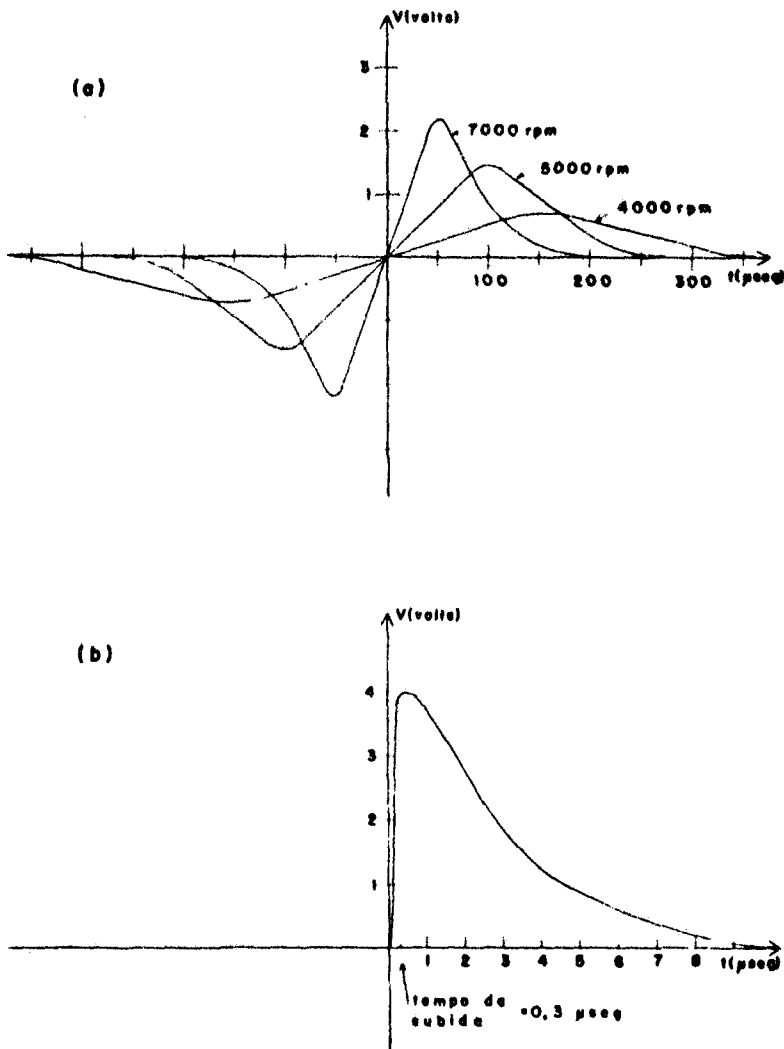


FIGURA 8

- (a) - Forma de onda do pulso do pick-up magnético para três velocidades de rotação do chopper
- (b) - Pulso de saída do formador de pulso, que é disparado pelo sinal do pick-up no nível de  $0,015 \pm 0,005$  V.

desprezado quando estudamos o problema de calibração do tempo zero. O sinal de saída do formador de pulsos, que aparece na figura 8-b, é utilizado tanto para disparar o analisador multicanal como para controlar a velocidade do chopper dentro de 0,5% (He 67).

A posição da bobina fixa pode ser ajustada manualmente, de maneira que o ímã rotativo passe em frente da bobina no momento exato em que um pulso de neutrons se forme no centro do chopper, definindo o instante zero dos neutrons. Se houver um defasamento angular  $\Delta\phi$  entre a bobina e o ímã nesse instante exato, o pulso de disparo é enviado uma fração de revolução depois (ou antes), correspondendo a uma diferença de tempo  $\Delta t_1 = \Delta\phi / \omega$ , onde  $\omega$  é a velocidade angular do chopper. A posição da bobina deve ser ajustada cuidadosamente, de maneira a termos  $\Delta\phi = 0$ , o que assegura um tempo zero correto. Esta calibração da escala de tempo é feita medindo-se o tempo de voo de neutrons de velocidade bem conhecida, como aqueles correspondentes aos degraus de Bragg de amostras policristalinas.

Todas as medidas apresentadas neste trabalho foram efetuadas com o arranjo experimental da figura 9. A fonte de neutrons é o reator tipo piscina IEA-R1 (D1 60), operando a 2 MW. O chopper foi colocado em frente de um tubo de irradiação tangencial, de forma que o caroço do reator não é visto diretamente; a fonte efetiva de neutrons é um volume de água colocado em frente ao caroço, que espalha os neutrons. O colimador é feito de uma mistura de ácido bórico e de um material plástico. O feixe de neutrons na fonte tem uma secção circular com 15 cm de diâmetro, e é reduzido pelo colimador a um retângulo de 2,5 cm x 1,0 cm na parede externa do reator. A distância do centro da fonte de neutrons ao centro do chopper é 330 cm. Na posição do chopper o fluxo térmico é de  $2.10^8$  n/cm<sup>2</sup>.seg e a razão de cádmio é 16, medidos com fôlhas de ouro.

O eixo de rotação do chopper e o detetor de neutrons, um BF<sub>3</sub> de 12" de comprimento e diâmetro 1", estão na posição horizontal, paralelos um ao outro, e ambos perpendiculares à direção do feixe de neutrons. A

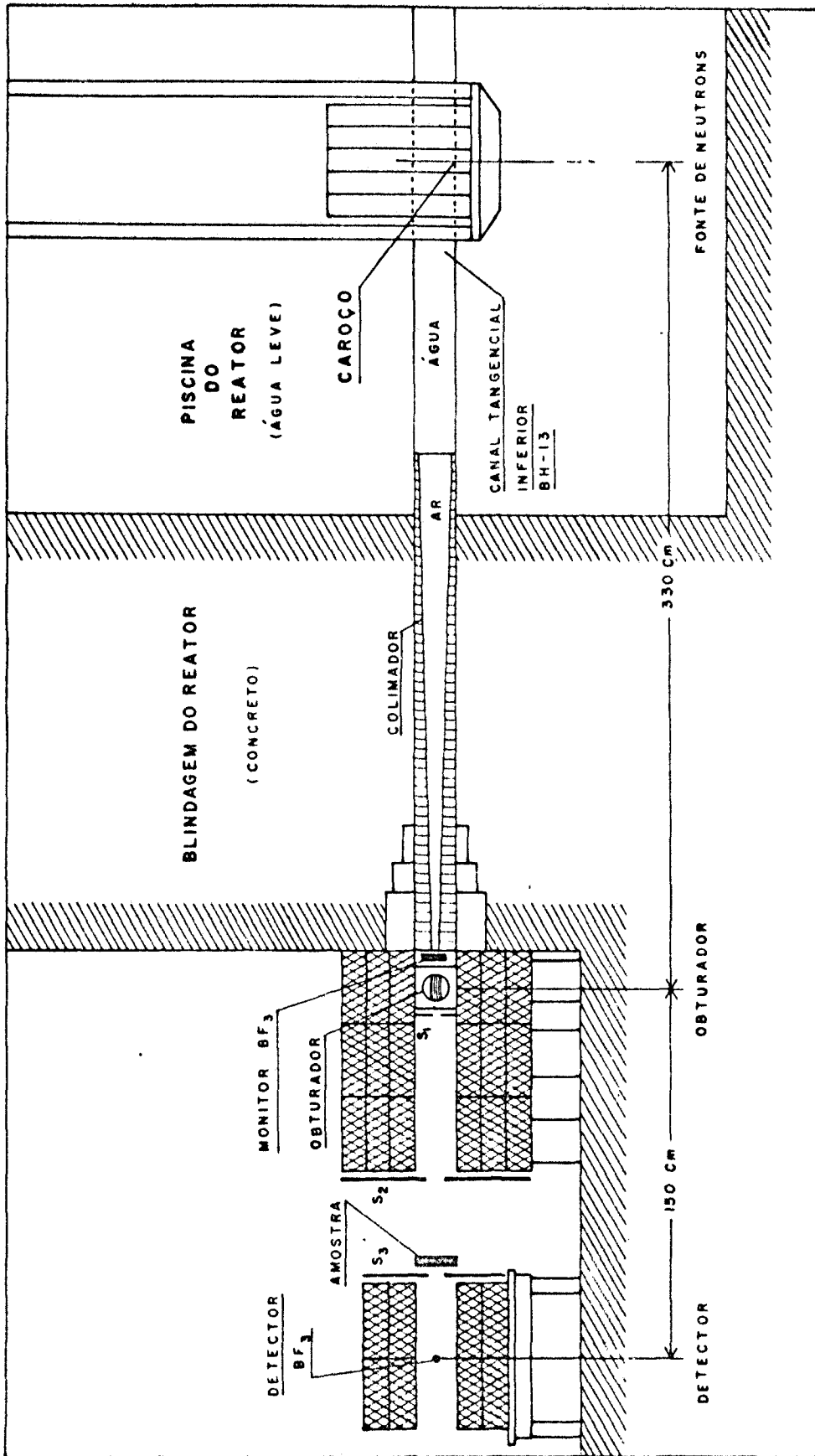


FIGURA 9

Arranjo experimental do espectrômetro de tempo de voo para medidas com o feixe direto.  
A distância de voo pode ser alterada facilmente.



distância de vôo é variável, sendo mais comumente usadas 1,5 m e 3,0 m. O detetor está recoberto de cádmio, com uma janela do tamanho do feixe; três diafragmas de cádmio definem a trajetória dos neutrons da saída do colimador até o detetor. Um detetor pequeno de baixa eficiência (99% de transmissão para neutrons lentos) de 1" de comprimento e diâmetro 1/4" está colocado entre o colimador e o chopper, como monitor da intensidade incidente. Caixas de madeira de  $5 \times 10 \times 40 \text{ cm}^3$ , enchidas com uma mistura de parafina com ácido bórico, são usadas como blindagem para o chopper e o detetor; uma blindagem maior, que não aparece na figura 8, recebe o feixe após sua passagem pelo detetor.

Nêste arranjo experimental somente algumas fendas centrais recebem o feixe na posição de máxima transmissão; o diâmetro médio atravessado pelo feixe é  $2 \bar{r} = 9,96 \text{ cm}$ . Este valor  $\bar{r}$  é usado como raio efetivo do chopper.

A utilização de um único detetor e o colimador usado não fornecem a melhor eficiência para uma dada resolução do espectrômetro. Entretanto, este arranjo é conveniente para medidas de secção de choque total e para a determinação das características do chopper. Um colimador projetado especialmente e um banco de detetores serão usados na instalação definitiva do espectrômetro, em outro tubo de irradiação, para experiências de espalhamento diferencial (Am 67).

### III.3 - Resolução teórica

Diferentes contribuições precisam ser consideradas no estudo da resolução total de um espectrômetro de tempo de voo; a mais importante é a largura em tempo do pulso de neutrons que o chopper origina, que dá uma imprecisão no instante de formação do pulso. Essa largura,  $\delta t_{\omega}$ , depende dos parâmetros de construção do chopper, de sua velocidade de rotação e da geometria do espectrômetro. Outras contribuições são a largura de canal,  $\delta t_a$ , do analisador multicanal e a imprecisão no instante de detecção, devida à espessura finita do detetor.

Calculemos em detalhe a contribuição  $\delta t_{\omega}$ , que é inversamente proporcional à velocidade angular de rotação do chopper.

Consideremos inicialmente um feixe paralelo de neutrons. A transmissão do chopper é uma função  $T(t, \nu)$  da velocidade do neutron e do instante de tempo em que o neutron passa pelo centro das fendas. O estudo dessa função de transmissão foi feito em detalhe para o caso de um chopper cilíndrico de placas curvas (La 59) e (Ma 59); a transmissão é máxima para neutrons de velocidade

$$\nu_0 = 2 \omega R_0 .$$

Para cada velocidade do neutron, essa transmissão em função do tempo dá a forma do pulso originado pelo chopper.

Num sistema de referência rigidamente ligado ao cilindro rotativo, e de maneira que a trajetória dos neutrons de velocidade  $\nu_0$  seja paralela às placas do chopper, o estudo da dependência temporal de  $T(t, \nu)$  reduz-se ao estudo da transmissão do chopper em função do ângulo de incidência  $\alpha$  entre a trajetória do neutron e as placas do chopper, ou seja, em função do ângulo de rotação do chopper (La 59). A função de transmissão obtida  $T(\alpha, \nu)$  apresenta a propriedade de ser simétrica em torno do ângulo

$$\alpha^* = \frac{r}{R_0} \left| \frac{\nu_0}{\nu} - 1 \right|$$

Para neutrons de velocidade  $v_0$  de máxima transmissão, a função  $T(\alpha, v_0)$  é um triângulo simétrico em torno de  $\alpha^* = 0$ , tendo por base a abertura angular do chopper  $2d/r$ . Para o estudo da resolução podemos nos restringir a neutrons de velocidade  $v_0$ .

A geometria essencial do espectrômetro é determinada por uma superfície emissora de diâmetro  $2D_1$  localizada a uma distância  $L_1$  do centro do chopper e por uma superfície detetora  $2D_2$  localizada a uma distância  $L_2$  do centro do chopper. À medida que o chopper gira, suas fendas varrem a área emissora; a colimação do feixe, ou abertura angular do pulso de neutrons, é determinada pela abertura angular do chopper e pelo menor dentre os ângulos  $2D_1/L_1$  e  $2D_2/L_2$ ; vamos denotar esse ângulo  $2D/L$ .

Assumindo um fluxo de neutrons constante sobre a superfície emissora efetiva e uma eficiência constante sobre a superfície detetora efetiva, a intensidade transmitida pelo chopper e detetada é dada por (La 59)

$$I(\alpha', v_0) = \int_{\alpha' - d/r}^{\alpha' + d/r} T(\alpha - \alpha', v_0) I_0(\alpha, v_0) d\alpha$$

onde  $\alpha'$  é um ângulo que varia à medida que o chopper varre a área emissora e

$$I_0(\alpha, v_0) = \begin{cases} 1 & \text{para } |\alpha| \leq D/L \\ 0 & \text{para } |\alpha| \geq D/L \end{cases}$$

A forma analítica dessa intensidade transmitida, que é a função de resolução do espectrômetro expressa em função do ângulo de rotação do chopper, depende das larguras relativas do triângulo e do retângulo. Na referência (La 59) são deduzidos os resultados para duas condições de geometria:

Caso a -  $2D/L \geq 2d/r$  - Neste caso a transmissão máxima é igual a 1 e a largura na meia altura é  $2D/L$ , sendo portanto independente da abertura angular do chopper.

Caso b -  $d/r \leq 2D/L \leq 2d/r$  - Este caso é o mais comum; a transmissão máxima varia entre 0,75 e 1 e a largura na meia altura é dada por

$$2 \bar{\alpha} = \left( 2 \frac{D}{L} + 2 \frac{d}{r} \right) - 2 \sqrt{\left( \frac{d}{r} \right)^2 - \left( \frac{d}{r} - \frac{D}{L} \right)^2} ,$$

e portanto varia no intervalo  $2d/r \geq 2 \bar{\alpha} \geq (3 - \sqrt{3}) d/r$  .

Faremos a análise para o caso em que  $2D/L \leq d/r$  , que não foi tratado em (La 59) por representar uma grande perda de intensidade com um ganho comparativamente pequeno na resolução; este é o caso da geometria descrita em nosso arranjo experimental, onde, entretanto, a intensidade não é um problema sério, uma vez que trabalhamos com o feixe direto.

A intensidade transmitida é dada pela área comum ao retângulo e ao triângulo, à medida que este se desloca, da maneira como aparece na figura 10; a função de resolução resultante apresenta três ramos distintos. .

Normalizando a área da função  $T(\alpha - \alpha')$  para a unidade, ou

$$T(\alpha - \alpha') = \frac{r}{d} (1 - \frac{r}{d} |\alpha - \alpha'|)$$

obtemos por integração a forma analítica da função de resolução:

$$I(\alpha') = 1 - \left( \frac{r}{d} \right)^2 \left[ \left( \frac{d}{r} - \frac{D}{L} \right)^2 + \alpha'^2 \right] \text{ para } 0 \leq |\alpha'| \leq D/L ,$$

$$I(\alpha') = \left( \frac{r}{d} \right)^2 2 \frac{D}{L} \left( \frac{d}{r} - \alpha' \right) \text{ para } D/L \leq |\alpha'| \leq d/r - D/L \text{ e}$$

$$I(\alpha') = \frac{1}{2} \left( \frac{r}{d} \right)^2 \left( \frac{d}{r} - \alpha' + \frac{D}{L} \right)^2 \text{ para } d/r - D/L \leq |\alpha'| \leq d/r + D/L .$$

Neste caso a transmissão máxima

$$I_{\max} = 1 - \left( \frac{r}{d} \right)^2 \left( \frac{d}{r} - \frac{D}{L} \right)^2$$

pode atingir apenas 75% nas condições mais favoráveis, dadas por  $2D/L = d/r$ .

A área sob a curva  $I(\alpha')$  é independente da abertura do chopper e igual à área da função  $I_0(\alpha)$  , ou seja,  $2D/L$  . Esta é também a área subentendida pelo triângulo determinado pelo ramo linear da curva de resolução, que tem altura  $(2D/L)(r/d)$  e base  $2d/r$  .

Uma determinação analítica da largura na meia altura dessa função de

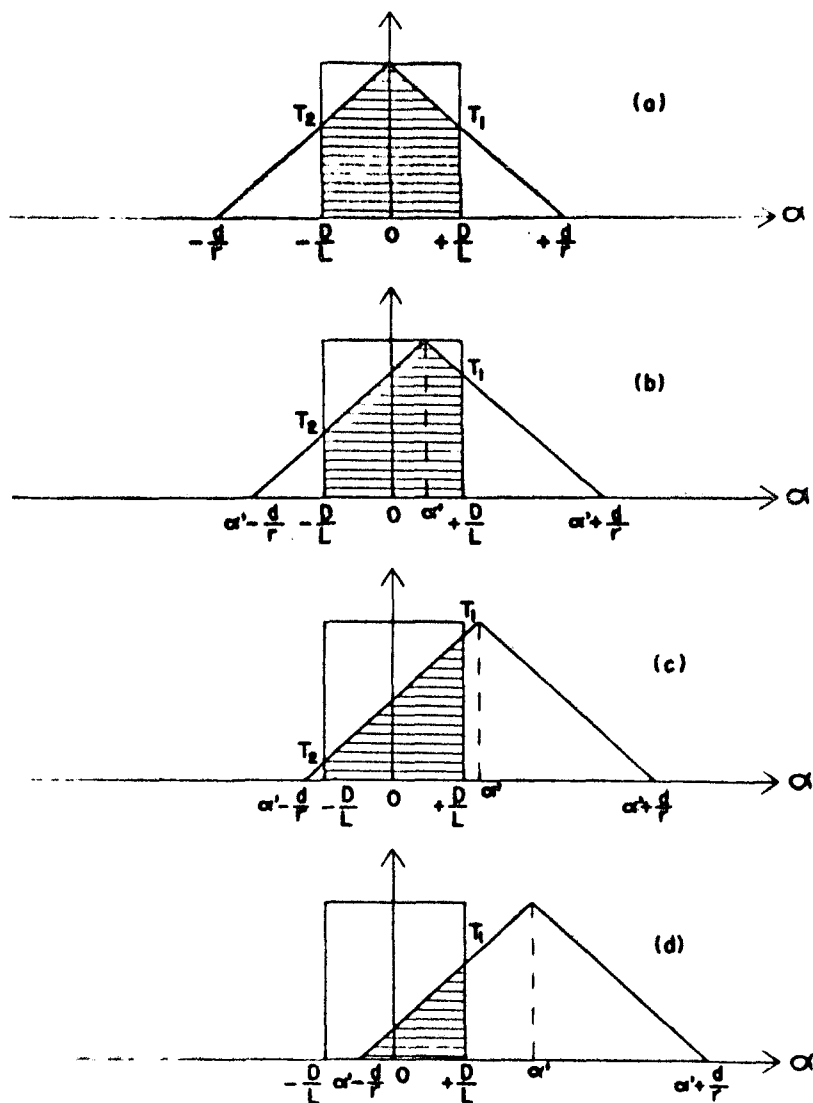


FIGURA 10

A transmissão triangular do chopper varre a superfície emissora. As áreas achuriadas representam a função de resolução  $I(\alpha', \nu_0)$  para  $2D/L \leq d/r$ . A posição (a) é a de transmissão máxima, que neste caso é  $\leq 0,75$ . As posições (b), (c) e (d) correspondem aos três ramos da curva de resolução.

resolução mostra que devemos considerar dois casos, porque  $I(\bar{\alpha})$  pode cair em ramos diferentes da curva. Resulta:

$$1) \quad 2\bar{\alpha} = 2 \left( \frac{d}{r} + \frac{D}{L} \right) - 2 \sqrt{\frac{D}{L} \left( 2 \frac{d}{r} - \frac{D}{L} \right)} \quad \text{para} \quad \frac{4}{5} \frac{d}{r} \leq 2 \frac{D}{L} \leq \frac{d}{r} ,$$

e portanto está no intervalo  $1,2 d/r \leq 2\bar{\alpha} \leq (3 - \sqrt{3}) d/r$  ;

$$2) \quad 2\bar{\alpha} = \frac{d}{r} + \frac{D}{2L} \quad \text{para} \quad 2 \frac{D}{L} \leq \frac{4}{5} \frac{d}{r} .$$

e portanto  $2\bar{\alpha} \leq 1,2 d/r$  .

Esta função não deve ser aproximada para uma função gaussiana de mesma largura; ela foi então aproximada para uma gaussiana tendo o mesmo máximo e a mesma área de  $I(\alpha')$  . A aproximação para uma gaussiana tem mais sentido que uma aproximação para um triângulo, uma vez que pequenos efeitos que aparecem na prática tendem a decrescer a largura e adicionar intensidade à cauda da curva (La 59). Esta função gaussiana tem uma largura na meia altura dada por

$$\Gamma_{1/2} = 2 \frac{D}{L} \frac{2}{I_{\max}} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \quad . \quad (12)$$

Este resultado pode ser expresso como  $\Gamma_{1/2} = c d/r$  , onde  $c$  varia entre  $2 \sqrt{\ln 2 / \pi} \sim 0,939$  e  $8/3 \sqrt{\ln 2 / \pi} \sim 1,25$  .

Exprimindo este resultado numa escala de tempo, obtemos finalmente

$$\delta_{t\omega} = \frac{\Gamma_{1/2}}{\omega} = \frac{c \cdot d/r}{\omega} \quad . \quad (13)$$

No arranjo experimental usado a colimação é determinada pela superfície detetora. Na figura 11 vemos a função de resolução para uma distância de vôo de 1,5 metros; o resultado é uma curva com máximo em 0,3516 e largura na meia altura  $2\bar{\alpha} = 0,044$  . Esta curva foi aproximada para uma gaussiana com  $c = 1,045$  , que também aparece na figura 11 . Para uma distância de vôo de 1,5 m teremos portanto

$$\Gamma_{1/2} = 0,0417 \quad \text{e} \quad \delta_{t\omega} = \frac{0,0417}{\omega}$$

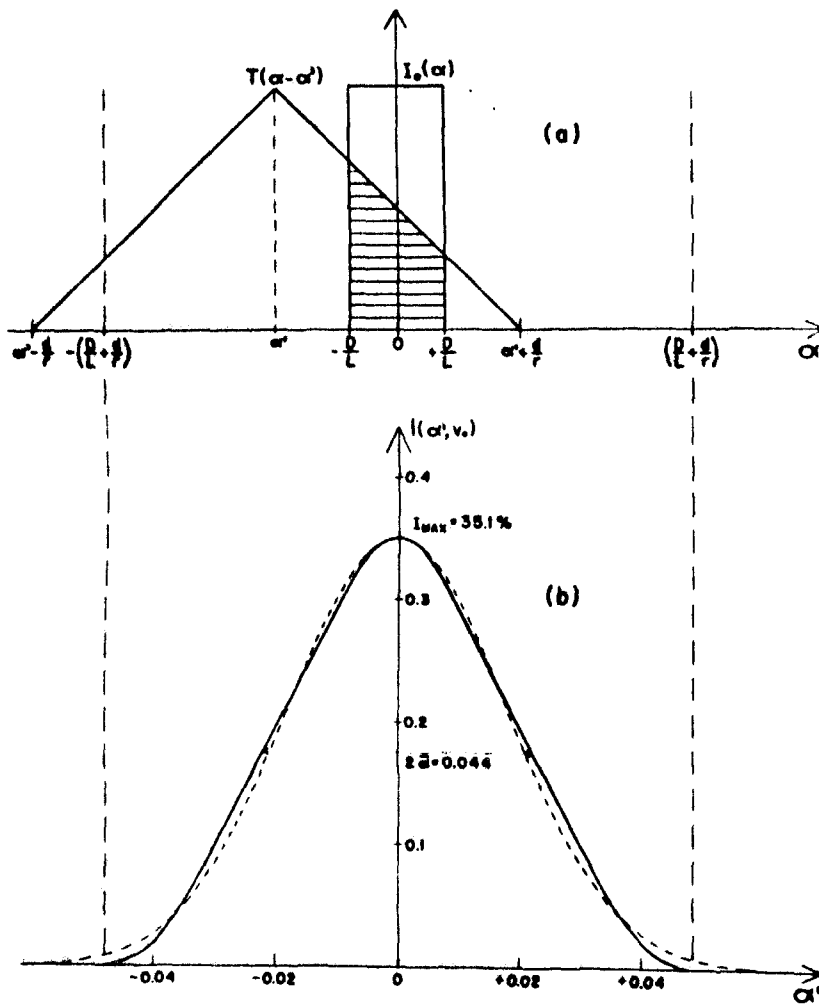


FIGURA 11

- (a) - Função de transmissão varrendo a superfície detetora no caso de nosso arranjo experimental. A área marcada representa a função de resolução  $I(\alpha', \nu_0)$ .
- (b) - Função de resolução  $I(\alpha', \nu_0)$  para uma distância de vôo de 1,5 m. A linha pontilhada mostra a aproximação por uma gaussiana de mesmo máximo e mesma área.

Vimos portanto que a contribuição devida à largura do pulso de neutrons pode ser considerada como sendo de forma gaussiana. A imprecisão devida à largura de canal tem uma distribuição retangular; se a espessura total do detetor é pequena em comparação com o caminho livre médio do neutron no material do detetor, a função de resolução ligada à incerteza na distância de vôo pode ser considerada também retangular.

Para podermos somar essas três contribuições à resolução total do espectrômetro, vamos aproximar as duas funções retangulares para gaussianas, usando o mesmo critério adotado na aproximação de  $\delta t_w$ : gaussianas de mesmo máximo e mesma área que as funções retangulares.

Dessa maneira a resolução total do espectrômetro será uma função gaussiana, de meia largura

$$\delta t = \sqrt{(\delta t_w)^2 + 0,8825 \left[ \left( \frac{\ell}{v} \right)^2 + (\delta t_a)^2 \right]}, \quad (14)$$

onde  $\ell$  é a espessura efetiva do detetor para neutrons de velocidade  $v$ .



### III.4 - Resolução experimental e calibração

Visando obter uma calibração do tempo zero independente da velocidade de rotação do chopper e, simultaneamente, determinar experimentalmente a resolução do espectrômetro em função da velocidade do chopper, foi medida a transmissão através de uma amostra de ferro policristalino na região do último degrau de Bragg, relativo ao conjunto de planos (110) e correspondente a neutrons de  $4,046 \text{ \AA}$ , para vários valores de  $\omega$ .

Nessas medidas de transmissão subtrai-se das razões de contagens obtidas sem a amostra (RD) e com a amostra no feixe (RA) as radiações de fundo correspondentes (RBD e RBA), obtidas interpondo-se uma placa de cádmio no feixe. Assim a transmissão é dada por

$$T = \frac{RA - RBA}{RD - RBD}$$

As amostras usadas continham 0,089 e 0,10 átomos/barn, valores escolhidos para essas medidas de acordo com o que foi discutido no CAPÍTULO II.

Na figura 12 vemos curvas de transmissão em função do tempo de voo para duas velocidades do chopper. Foi utilizada uma distância de voo de 1,5 m e um contador de diâmetro interno 2,34 cm; este detetor pode ser considerado fino, no sentido que a absorção é linear com a espessura, portanto sua espessura efetiva é a espessura geométrica média ( $\ell = \pi/4 \cdot 2,34 = 1,84 \text{ cm}$ ). A largura de canal foi  $8 \mu \text{ seg}$ . Usando estes valores, a resolução total do espectrômetro para neutrons de  $4 \text{ \AA}$  resulta

$$\Delta t = \sqrt{\frac{1739}{\omega^2} \cdot 10^6 + 369,1} \quad \mu \text{ seg}$$

As larguras encontradas experimentalmente (através da equação 8) e a curva calculada pela expressão acima, em função de  $1/\omega$ , aparecem na figura 13. Como pode ser visto, a concordância é bastante boa, indicando que a aproximação por gaussianas é válida. A resolução do espectrômetro é de 2,5% para neutrons de  $4 \text{ \AA}$ , com o chopper a 10.700 rpm.

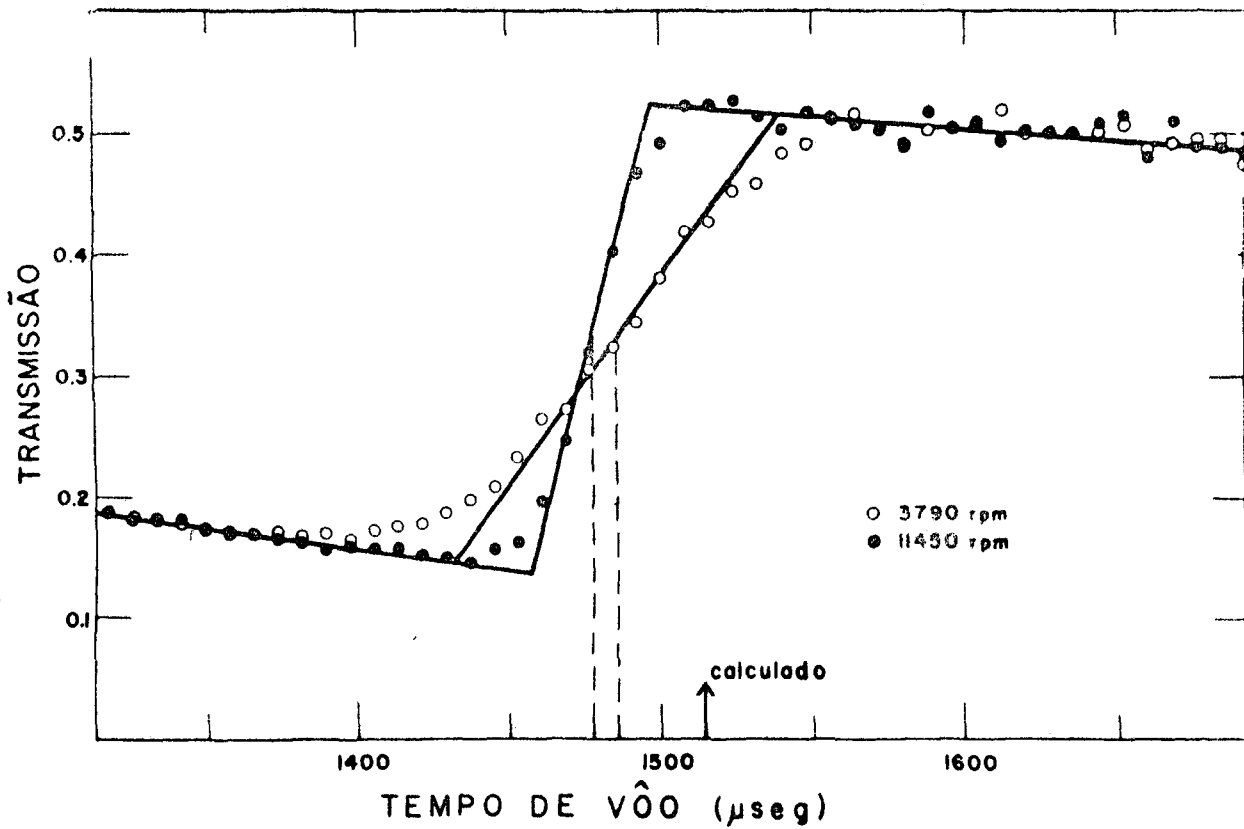


FIGURA 12

Transmissão do ferro policristalino no degrau de Bragg correspondente ao conjunto de planos (110) para duas velocidades de rotação do chopper. Estes resultados foram usados para ajustar a posição da bobina magnética e aparecem numa das retas de calibração da figura 14.

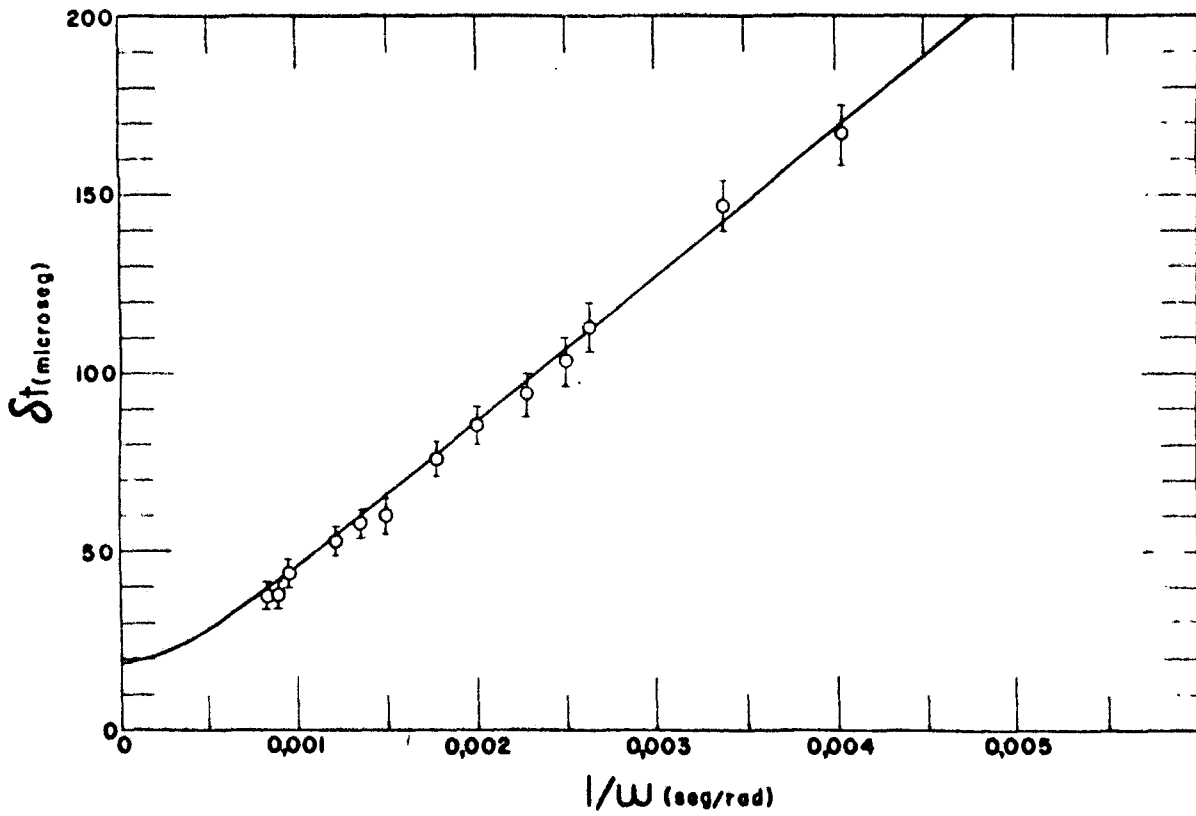


FIGURA 13

Resolução do espectrômetro em função de  $1/\omega$  : curva teórica e pontos experimentais para neutrons de 4,046 Å. A resolução com o chopper a 10.700 rpm é de 2,5% .

Para calibrar o espectrômetro, foi feito inicialmente um ajuste por retas na curva de transmissão e estimada a altura do degrau; o uso da equação 9 mostrou que a abcissa correspondente à meia altura do degrau observado sofre um desvio de apenas 0,2% em relação à posição real do degrau, para a pior resolução considerada.

O tempo de voo obtido experimentalmente para os neutrons de  $4,046 \text{ \AA}$  foi posto em gráfico como função de  $1/\omega$ . O coeficiente angular da reta obtida é o defasamento angular  $\Delta\phi$ , e a reta deve passar pelo valor esperado para  $1/\omega = 0$ . Através de ajustes manuais sucessivos da posição da bobina foi possível obter uma calibração independente da velocidade do chopper dentro de  $4 \mu\text{seg}$ . Isto pode ser visto na figura 14, onde aparecem curvas de calibração sucessivas, até que a condição  $\Delta\phi = 0$  fôsse satisfeita.

Porém, o tempo de voo medido não concorda exatamente com o valor calculado, mesmo quando o degrau não mais varia de posição com a velocidade do chopper. Foi observado um deslocamento fixo  $\Delta t_2$ , que é independente da velocidade de rotação do chopper, mas que varia com a distância entre a bobina e o disco onde o imã rotativo está colocado. Variando a posição da bobina ao longo da perpendicular ao disco, observa-se uma mudança no ponto de calibração; o deslocamento cresce com essa distância, como mostra a figura 14, onde aparecem resultados para duas distâncias, 0,5 mm e 3,0 mm.

Para a bobina na posição fisicamente mais próxima obtemos

$$\Delta t_2 = 38 \pm 2 \mu\text{seg} .$$

Brugger (Br 61) menciona também um atraso de  $50 \mu\text{seg}$  no pulso da bobina, detetado através da medida dos raios gama transmitidos por um chopper no instante de formação do pulso de neutrons, devido, segundo êle, ao circuito LC do pick-up magnético; êsse mesmo autor, num capítulo do livro editado por Egelstaff (Eg 65), menciona que a bobina deve ser colocada bem próxima ao chopper e que a distância entre os dois não deve ser alterada, corroborando assim nossos resultados.

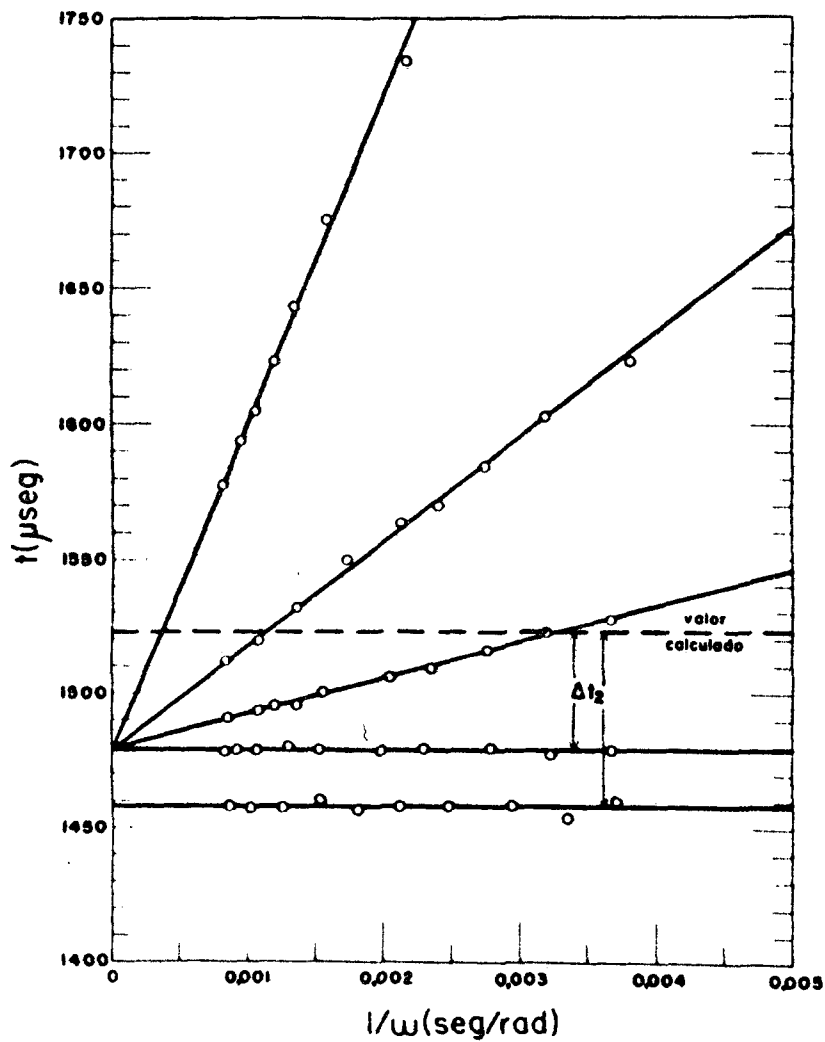


FIGURA 14

Curvas de calibração do tempo zero em função de  $1/\omega$ . A inclinação das retas é o defasamento angular  $\Delta\phi$ , e uma calibração independente da velocidade do chopper é conseguida quando  $\Delta\phi = 0$ . Os resultados são para duas distâncias entre a bobina e o disco onde o magneto está colocado: 0,5 mm e 3,0 mm. Na posição mais próxima temos  $\Delta t_2 = 38 \pm 2 \mu\text{seg}$ .

Após o ajuste final da posição da bobina, foram feitas medidas em outros comprimentos de onda, através da análise de outros degraus do ferro e do degrau (0002) da grafita. Observou-se que a calibração é independente do comprimento de onda do neutron: a posição dos degraus não variou com a velocidade do chopper e o mesmo deslocamento  $\Delta t_2$  foi observado. Este atraso determinado experimentalmente entra como uma correção constante na conversão de número de canal para tempo de voo do neutron.

Convém mencionar que grande parte das calibrações de espectrômetros de tempo de voo é efetuada numa única velocidade, aquela de operação normal do chopper, e assim o ajuste da posição da bobina é feito muitas vezes de forma tal que o deslocamento  $\Delta t_1$  compense outros desvios possíveis em direções opostas; nesses casos a calibração é válida apenas para aquela velocidade, e deve ser refeita toda vez que houver necessidade de alteração.

III.5 - Outras características operacionais importantes

a) - FUNÇÃO DE TRANSMISSÃO DO CHOPPER

A transmissão do chopper como função do comprimento de onda  $\lambda$  do neutron e da velocidade de rotação do chopper é obtida pela integração (La 59) e (Ma 61) da função de transmissão  $T(t, \nu)$  com relação ao tempo, ou da função  $T(\alpha, \nu)$  em relação ao ângulo  $\alpha$ , e substituindo-se  $\nu$  por  $h/m \lambda$ , onde  $h$  é a constante de Planck e  $m$  a massa do neutron.

Resulta:

$$T(\omega \lambda) = \begin{cases} \frac{d}{r} \left[ 1 - \frac{2}{3} \left( \frac{r}{d} \frac{m}{h} \right)^2 (\omega \Delta \lambda)^2 \right] & \text{para } 0 \leq (\omega \Delta \lambda) \leq \frac{d}{2r} \frac{h}{m} \\ \frac{8}{3} \sqrt{2d \frac{m}{h} (\omega \Delta \lambda)} - 4r \frac{m}{h} (\omega \Delta \lambda) + \frac{2}{3} \left( \frac{m}{h} \right)^2 \frac{r^3}{d} (\omega \Delta \lambda)^2 & \text{para } \frac{h}{m} \frac{d}{2r^2} \leq (\omega \Delta \lambda) \leq \frac{h}{m} \frac{2d}{r^2} \end{cases}$$

com  $\Delta \lambda = |\lambda - \lambda_0|$  para o pulso de  $0^\circ$  e

$\Delta \lambda = |\lambda + \lambda_0|$  para o pulso de  $180^\circ$ ,

sendo  $\lambda_0$  o comprimento de onda de máxima transmissão, correspondente a  $\nu_0$ .

Como a transmissão do chopper é função do produto  $(\omega \lambda)$ , ela pode ser determinada experimentalmente fixando-se uma das duas variáveis e estudando a intensidade transmitida como função da outra.

Se medirmos o espectro do reator, para várias velocidades do chopper, a intensidade transmitida em cada comprimento de onda particular considerado, como função de  $(\omega \lambda)$ , fornece uma curva proporcional à curva de transmissão. Se considerarmos vários comprimentos de onda, obteremos uma família de curvas; estas várias curvas normalizadas dão a função de transmissão experimental do chopper.

Com esta finalidade, o espectro transmitido foi medido para várias velocidades do chopper, variando de 2.500 rpm a 11.000 rpm. Comprimentos de onda de 0,81 Å até 8,2 Å foram considerados. As curvas foram tomadas de maneira a apresentarem regiões de superposição em  $\omega\lambda$ , de forma a tornar mais fácil e significativa a normalização experimental. Para minimizar os efeitos da resolução foram escolhidos comprimentos de onda de regiões suaves do espectro. Para a determinação experimental da curva de transmissão o intervalo de 400 até 7.900 Å.rd/seg foi coberto com 29 curvas, uma para cada comprimento de onda, com um total de 134 pontos.

O raio de curvatura  $R_0$  das placas foi determinado a partir do máximo da transmissão, observado para  $\omega\lambda_0 = 2.700 \text{ Å.rd/seg}$ , resultando um valor  $R_0 = 73,3 \text{ cm}$ . Este resultado apresenta um desvio de 1,6% com relação ao valor nominal do projeto, que era 74,5 cm.

A curva calculada usou os valores  $\bar{r} = 4,98 \text{ cm}$  e  $R_0 = 73,3 \text{ cm}$ . Todas as curvas experimentais foram normalizadas para a calculada, e o resultado é apresentado na figura 15. O acôrdo entre os pontos experimentais e a curva teórica é bastante satisfatório.

#### b) - BACKGROUND

O chopper foi projetado para experiências com neutrons térmicos e sub-térmicos; neutrons rápidos e da região de ressonância passam através das placas de cádmio, como se o rotor contivesse apenas uma grande abertura total. Esta é uma contribuição dependente do tempo do background (radiação de fundo).

O espectro dos neutrons que atravessaram um absorvedor de cádmio de espessura 0,7 mm, com o chopper girando a 5.240 rpm, foi medido com uma largura de canal de 8  $\mu\text{seg}$  e uma distância de vôo de 1,49 cm e pode ser visto na figura 16.

A curva de background apresenta dois máximos, correspondentes ao



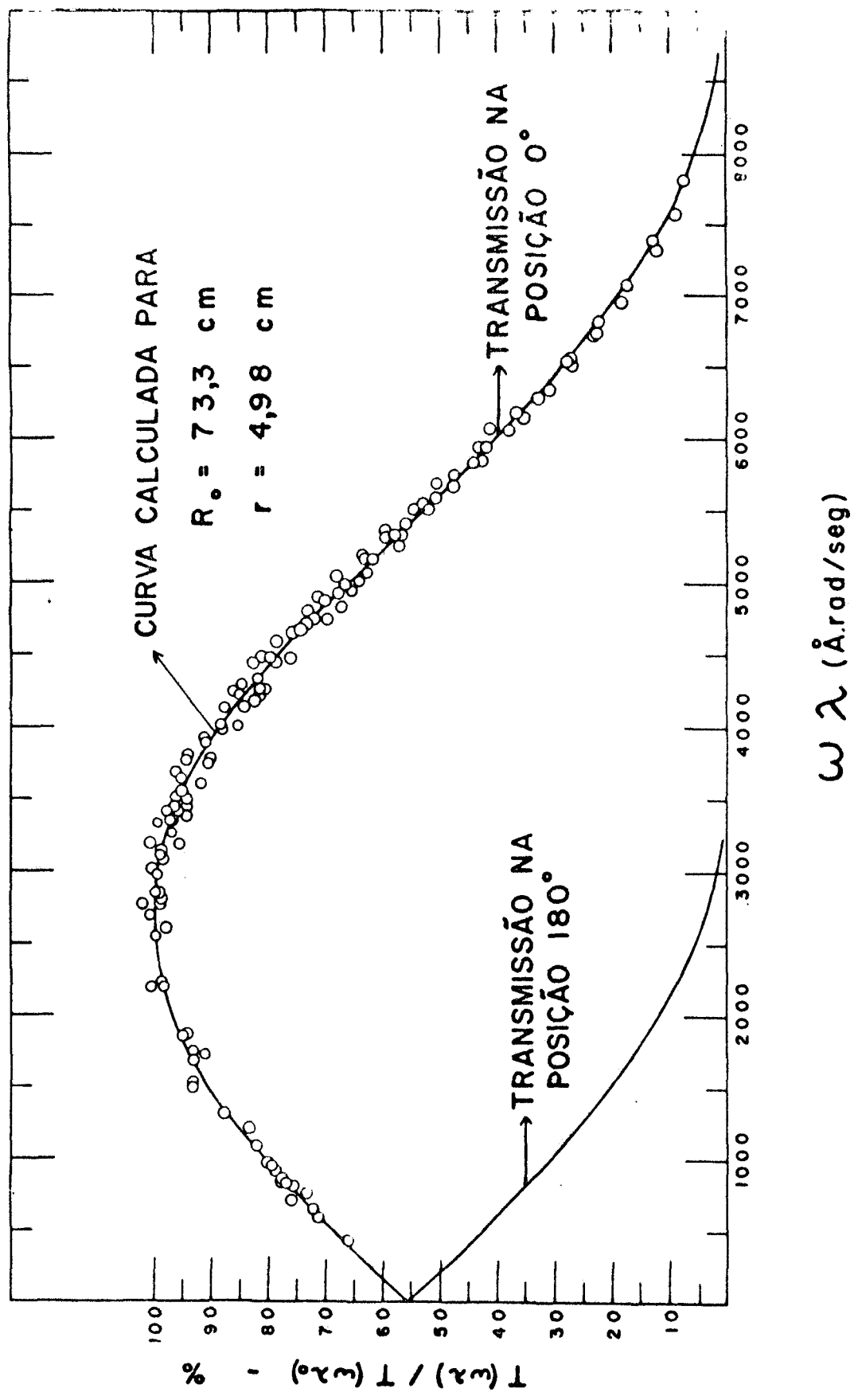


FIGURA 15

Função de transmissão relativa do chopper em função de  $(\omega\lambda)$ ; curva teórica e pontos experimentais.

$\omega\lambda$  (A.rad/seg)

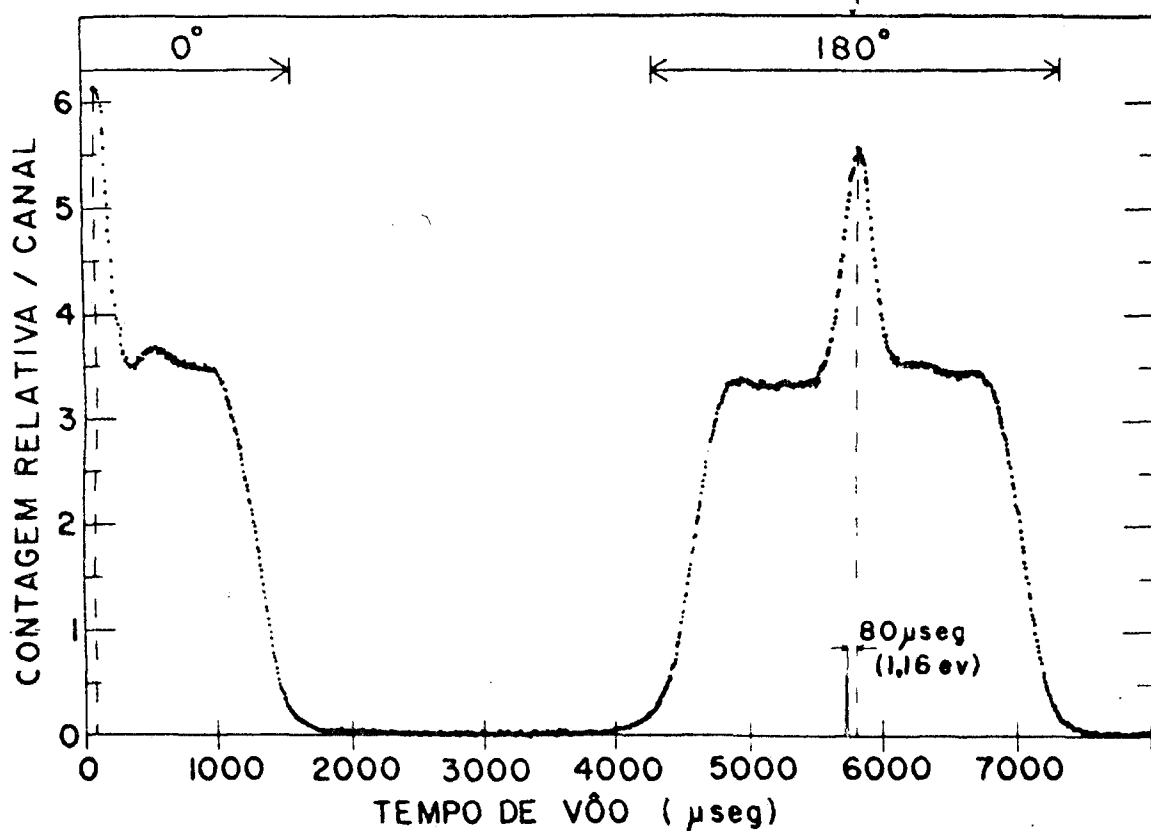


FIGURA 16

Radiação de fundo (background) medida interpondo-se uma placa de cádmio no feixe, com o chopper a 5.240 rpm e uma distância de vôo de 1,49 m . Os picos estreitos aparecem porque apenas algumas fendas centrais transmitem na posição de máximo. A energia média dos neutrons epi-têrmicos é estimada em 1,16 eV , a partir da diferença entre as posições do máximo de 180° e de meio período de rotação.

chopper aberto nas posições de  $0^\circ$  e  $180^\circ$ ; no caso de um chopper com placas retas as duas posições seriam indistinguíveis. A largura desses dois picos é proporcional a  $1/\omega$ . Entre os máximos existe uma região plana, correspondendo a uma radiação de fundo independente do tempo.

Os picos estreitos que aparecem na figura resultam das condições de colimação e geometria: apenas algumas fendas centrais são utilizadas quando o chopper está na posição de máxima transmissão. A diferença de forma entre os picos de  $0^\circ$  e  $180^\circ$ , bem como a assimetria de cada um, são devidas à curvatura das fendas.

Através da diferença observada entre o máximo de  $180^\circ$  e metade do período de rotação, a energia média dos neutrons epitérmicos no feixe é estimada em 1,16 eV.

## CAPÍTULO IV

### UTILIZAÇÃO DO ESPECTRÔMETRO DE TEMPO DE VÔO

O espectrômetro de tempo de vôo descrito é bastante adequado para medidas de secção de choque total. Como a função de transmissão do chopper é relativamente plana, um grande intervalo de comprimentos de onda, de  $0,7 \text{ \AA}$  até  $10 \text{ \AA}$ , pode ser coberto variando-se a velocidade de rotação do chopper, o que pode ser feito sem ser necessária uma nova calibração do aparelho a cada mudança.

Outra flexibilidade é a facilidade em alterar-se a distância de vôo. É possível assim trabalhar quase sempre na região de menor background; além disso, o background epi-térmico pode ser reduzido pelo uso de filtros convenientes.

Uma vantagem do espectrômetro de tempo de vôo sobre aparelhos mono-canais está na rapidez da tomada de dados; os pontos referentes às várias energias são obtidos simultaneamente, diminuindo dessa forma a probabilidade de erros relativos entre eles. Por outro lado, porém, a estatística não é a mesma para todos os pontos, piorando à medida que o comprimento de onda cresce. Assim, o espectrômetro de tempo de vôo é bastante conveniente quando estamos interessados principalmente no comportamento da curva de secção de choque como função da energia do neutron.

No arranjo de feixe direto foram feitas medidas de secção de choque total de várias substâncias; os programas que desenvolvemos para processamento dos dados constam do apêndice II de (He 67).

A secção de choque do ouro, considerado como um elemento padrão, foi medida como um teste de confiança quanto às condições de operação do

espectrômetro (He 67). Foi medida a secção de choque do ferro policristalino, tendo sido feita uma análise das várias componentes da secção de choque total: absorção, espalhamento coerente elástico e inelástico, espalhamento incoerente e espalhamento magnético (Vi 67). Mediu-se também a secção de choque do óxido de urânio natural processado e purificado no IEA, de interesse no projeto de elementos combustíveis de reatores (Ro 67).

A autôra esteve particularmente interessada em medidas feitas com óxidos de lutécio e érbio, que completaram (Zi 67) um programa de pesquisas com terras raras em que esteve anteriormente envolvida (Am 64), e que utilizava um espectrômetro de cristal e um seletor mecânico de velocidades (Bi 64). O Brasil possui uma grande fonte de terras raras nas areias monazíticas e uma indústria local equipada para separar e purificar as terras raras individualmente; êste foi um dos motivos dêsse projeto. As terras raras estão entre os elementos de maior secção de choque de absorção abaixo de 1 MeV; o conhecimento exato dessas secções de choque é de bastante importância nos cálculos de física de reatores, uma vez que as terras raras estão presentes nos fragmentos de fissão nuclear. Além disso, a maioria delas apresenta momento magnético atômico, devido aos eletrons orbitais desemparelhados, resultando um espalhamento paramagnético dos neutrons lentos. Através da análise do comportamento da curva de secção de choque total em função da energia do neutron, pudemos separar as contribuições devidas ao espalhamento e absorção nucleares e ao espalhamento paramagnético. O lutécio é dos poucos elementos que apresentam uma ressonância nuclear na região térmica; pudemos determinar os parâmetros de Breit-Wigner dessa ressonância em 0,145 eV.

Tôdos êstes trabalhos sôbre medidas de secção de choque são citados na publicação da IAEA Nuclear Data Unit, CINDU-8 (Jan 69), e as tabelas com os valores numéricos estão catalogadas nos DASTAR.

Nêste arranjo foi feito também um trabalho de tese de Mestrado (Le 68), sôbre medidas de secção de choque do chumbo nos estados líquido e sô-

lido, como monocristal e policristal. Os monocristais de chumbo foram crescidos no Instituto Tecnológico de Aeronáutica, sendo utilizados no arranjo diferencial do IEA como filtros de raios gama e neutrons rápidos.

Foi levado a efeito ainda um extenso programa de medidas com líquidos hidrogenados, para estudos de dinâmica molecular através da análise da secção de choque de espalhamento por átomo de hidrogênio, obtida a partir da secção de choque total. Foram feitas medidas com vários álcoois (Ro 68), para verificar as variações na liberdade de movimento dos átomos de hidrogênio. As secções de choque da água, polietileno e uma série grande de compostos metálicos foram medidas por S.B.Herdade (He 68) para estudo do grupo metálico, trabalho de sua tese de doutoramento (He 69).

Em resumo, podemos dizer que no arranjo preliminar o espectrômetro de tempo de voo, com suas características de operação completamente conhecidas, teve aplicação em diversas experiências, possibilitando estudos de vários tipos de interação de neutrons lentos com a matéria.

O programa de pesquisas sobre dinâmica de líquidos hidrogenados terá continuidade no arranjo diferencial (Am 67), atualmente em fase inicial de operação. Neste arranjo, um filtro de berílio refrigerado à temperatura do nitrogênio líquido deixa passar apenas os neutrons com comprimento de onda superior a  $3,95 \text{ \AA}$ , ou seja, energia inferior a  $0,0052 \text{ eV}$ . Este "espectro de neutrons frios" corresponde a cerca de 5% do espectro maxwelliano e tem uma energia média de  $0,0034 \text{ eV}$  e uma largura de  $0,002 \text{ eV}$  ( $1 \text{ \AA}$ ). O feixe incide na amostra e os neutrons espalhados numa certa direção são analisados por um espectrômetro de tempo de voo; o chopper construído no IEA está colocado após a amostra. Podem ser estudadas dessa forma as transferências de energia e quantidade de movimento entre o neutron e o sistema espalhador.

No espectro espalhado aparece o pico elástico, reproduzindo o espectro incidente na amostra, e a contribuição inelástica; o espalhamento

inelástico dá-se com ganho de energia pelo neutron.

Nas experiências com líquidos hidrogenados, em que o espalhamento incoerente devido ao hidrogênio é dominante, interessa-nos mais o degrau abrupto em  $3,95 \text{ \AA}$ ; através de seu alargamento, medido pela inclinação do degrau, podemos estudar as pequenas transferências de energia correspondentes ao espalhamento quase-elástico, ligado ao processo de auto-difusão. Este é o campo de pesquisa em que a autora trabalhou em seu estágio na Suécia, em particular participando de medidas desse efeito no álcool propílico, em várias temperaturas e em diversos ângulos de espalhamento (La 66) .

Em estudo comparativo sobre espectrometria de neutrons lentos e outros métodos competitivos, Janik (Ja 68) menciona que o espalhamento incoerente de neutrons é o melhor método para se investigar os processos de difusão em sólidos e líquidos, e especialmente os processos em que ocorrem saltos, tanto os de caracter translacional como rotacional.

Pretendemos iniciar no arranjo diferencial do IEA pesquisas nessa linha, dando sequência ao estudo de dinâmica de líquidos hidrogenados.

APÊNDICE ADESENVOLVIMENTO DO CÁLCULO DA SESSÃO II.2

Calculamos inicialmente as integrais

$$S_1 = \int_a^b [f_1(x) - I(x)] dx \quad e \quad S_2 = \int_b^d [I(x) - f_2(x)] dx .$$

Passando para a variável  $z$  e usando a equação 5 para  $I(z)$  temos

$$S_1 = \Delta x \int_0^{\frac{a-b}{\Delta x}} \left[ \frac{1}{2} (A_2 - A_1) \Delta x \cdot z(1 + \operatorname{erf} z) - \frac{H}{2} (1 + \operatorname{erf} z) + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} (A_2 - A_1) \Delta x \cdot \exp(-z^2) \right] dz .$$

Mudando para a variável  $y = |z| = -z$  resulta

$$S_1 = \frac{H\Delta x}{2} \int_0^{\frac{b-a}{\Delta x}} (1 - \operatorname{erf} y) dy + \frac{1}{2} (A_2 - A_1) (\Delta x)^2 \int_0^{\frac{b-a}{\Delta x}} y(1 - \operatorname{erf} y) dy - \frac{(A_2 - A_1) (\Delta x)^2}{2\sqrt{\pi}} \int_0^{\frac{b-a}{\Delta x}} \exp(-y^2) dy .$$

Como  $\frac{b-a}{\Delta x} \gg 1$  as integrais podem ser aproximadas por

$$\int_0^{\frac{b-a}{\Delta x}} (1 - \operatorname{erf} y) dy \approx \frac{1}{\sqrt{\pi}} , \quad \int_0^{\frac{b-a}{\Delta x}} \exp(-y^2) dy \approx \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad e$$

$$\int_0^{\frac{b-a}{\Delta x}} y(1 - \operatorname{erf} y) dy \approx \frac{1}{4} , \quad \text{donde}$$

$$S_1 = \frac{H\Delta x}{2\sqrt{\pi}} + \frac{1}{8} (A_1 - A_2) (\Delta x)^2 .$$

Para a outra integral de área,  $z$  é positivo e obtemos

$$S_2 = \frac{H\Delta x}{2} \int_0^{\frac{d-b}{\Delta x}} (1 - \operatorname{erf} z) dz - \frac{1}{2} (A_2 - A_1) (\Delta x)^2 \int_0^{\frac{d-b}{\Delta x}} z(1 - \operatorname{erf} z) dz + \frac{(A_2 - A_1) (\Delta x)^2}{2\sqrt{\pi}} \int_0^{\frac{d-b}{\Delta x}} \exp(-z^2) dz .$$



Como  $\frac{d-b}{\Delta x} \gg 1$ , resulta

$$S_2 = \frac{H \Delta x}{2 \sqrt{\pi}} - \frac{1}{8} (A_1 - A_2) (\Delta x)^2$$

Calculemos agora características da curva  $I(x)$  de convolução; a derivada dessa função é

$$I' = \frac{dI}{dx} = \frac{dI}{dz} \frac{dz}{dx} = \frac{1}{2} (A_1 + A_2) + \frac{1}{2} (A_2 - A_1) \operatorname{erf}(z) - \frac{H}{\Delta x \sqrt{\pi}} \exp(-z^2)$$

A derivada segunda é dada por

$$\frac{d^2 I}{dx^2} = \frac{1}{\Delta x} \left[ \frac{2H}{\Delta x \sqrt{\pi}} z \exp(-z^2) + \frac{1}{\sqrt{\pi}} (A_2 - A_1) \exp(-z^2) \right]$$

Igualando esta derivada segunda a zero obtemos o ponto de inflexão:

$$\frac{2H}{\Delta x} z_1 + A_2 - A_1 = 0, \text{ donde } z_1 = \frac{(A_1 - A_2) \Delta x}{2H}$$

A equação da reta tangente à curva  $I(z)$  pelo ponto  $z_1$  é

$$T(z) = I'(z_1) \cdot (z \Delta x + b) + R$$

o valor  $R$  é obtido impondo-se  $T(z_1) = I(z_1)$ . Resulta

$$T(z) = \bar{f} + \frac{1}{2} (A_1 + A_2) \Delta x \cdot z - \frac{H}{\sqrt{\pi}} z \exp(-z_1^2) - H \operatorname{erf}(z_1) \left[ \frac{1}{2} + z_1 \cdot z \right]$$

As intersecções  $x_1$  e  $x_2$  são determinadas impondo-se

$$f_1(z_1) = T(z_1) \quad \text{e} \quad f_2(z_2) = T(z_2)$$

Interessa-nos agora calcular  $\bar{z}$  tal que  $I(\bar{z}) = \bar{F} = \frac{1}{2} (F_1 + F_2)$ ,

sendo  $F_1 = f_1(z_1)$  e  $F_2 = f_2(z_2)$ .

$$\text{Fazemos } A_1 z_1 + A_2 z_2 = (A_1 + A_2) z_1 + A_2 (z_2 - z_1) \quad \text{e}$$

$$A_1 z_1 + A_2 z_2 = (A_1 + A_2) z_2 + A_1 (z_1 - z_2)$$

Substituindo, obtemos duas equações que somadas dão a relação

$$\frac{(A_1 + A_2) \Delta x}{2H} (2\bar{z} - z_1 - z_2) - 2z_1 \left[ \frac{\exp(-\bar{z}^2)}{\sqrt{\pi}} + \bar{z} \operatorname{erf}(\bar{z}) + \frac{z_1 - z_2}{2} \right] - \operatorname{erf}(\bar{z}) = 0$$

Chamando  $K = \frac{(A_1 + A_2) \Delta x}{2H}$  obtemos uma equação transcendente

do tipo  $\Phi(K, z_1, \bar{z}) = 0$ , que nos permite ter  $\bar{z}$  em função de  $z_1$  e  $K$ .

Podemos também determinar  $z'$  tal que  $I(z') = \bar{f}$ , através de

$$K z' - z_1 \left( \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-z'^2) + z' \operatorname{erf}(z') \right) - \frac{1}{2} \operatorname{erf}(z') = 0$$

Para  $z_1$  pequeno e  $K \sim |z_1|$  obtemos relações simplificadas:

da equação acima, desprezando potências de  $z_1$ , resulta  $z' \approx -z_1$ ;

$$z_1 \approx - \frac{\sqrt{\pi} + 2 z_1}{2(1 + \sqrt{\pi} z_1)} \quad \text{e} \quad z_2 \approx + \frac{\sqrt{\pi} - 2 z_1}{2(1 - \sqrt{\pi} z_1)}$$

$$z_1 + z_2 \approx z_1 (\pi - 2) \quad \text{e} \quad z_2 - z_1 \approx \sqrt{\pi}$$

Da equação que nos dá  $\bar{z}$  resulta

$$\bar{z} \approx z_1 \left( \frac{\pi}{2} - 1 \right)$$

APENDICE B

PROGRAMAS PARA COMPUTADOR DOS CALCULOS DA SESSAO  
11.2

```
C PROGRAMA DEGRAU
C CONVOLUCAO DE UMA FUNCAO GAUSSIANA COM UMA FUNCAO LINEAR
C QUE APRESENTA UM DEGRAU DESCONTINUO
C CHAVE 2 LIGADA PARA CALCULAR DEGRAU COM OUTROS PARAMETROS
C CHAVE 2 DESLIGADA PARA CALCULAR MESMO DEGRAU COM OUTRA
C RESOLUCAO
  RPI=SQRT(3.1415927)
  F=2.*SQRT(LOGF(2.))
  1 READ 100,B,H,FM,A,C
  READ 106,ENE
  PRINT 107,ENE
  PRINT 101,B,H,FM,A,C
  2 READ 102,GAMA,WLO,DW,N
  DELTA=GAMA/F
  X=(A+C)*DELTA/(2.*H)
  ZI=((A-C)*DELTA)/(2.*H)
  WLI=B+ZI*DELTA
  PRINT 103,GAMA,DELTA,X,ZI,WLI
  PRINT 104
  DO 10 I=1,N
  Y=I
  WL=WLO+(DW*Y)
  Z=(WL-B)/DELTA
  FR=FM+H*(X*Z-ZI/(RPI*EXPF(Z**2))-ERFE(Z)*(0.5+ZI*Z))
  10 PRINT 105,WL,Z,FR
  IF(SENSE SWITCH 2)1,2
100 FORMAT(5E14.8)
106 FORMAT(E14.8)
107 FORMAT(5X,4HENE=E14.8)
101 FORMAT(5X,9HBRAGG WL=E14.8/5X,13HBRAGG HEIGHT=E14.8/5
  1X,11HMEAN VALUE=E14.8/5X,12HINCLINATIONS,5X,E14.8,5X,
  2E14.8//)
102 FORMAT(3F6.3,14)
103 FORMAT(5X,5HGAMA=F6.3,5X,6HDELTA=F6.3/5X,2HK=E14.8,5X
  1,3HZI=E14.8,5X,4HWLI=E14.8/)
104 FORMAT(3X,2HWL,10X,1HZ,13X,2HFR,9X/)
105 FORMAT(1X,F6.3,1X,E14.8,1X,E14.8)
  END
```

```

C PROGRAMA CALRESO
C CALCULO DOS PONTOS CORRESPONDENTES AOS VALORES EXTRAPOLA-
C DOS DE MAXIMO, MINIMO, VALOR MEDIO E DA RELACAO ENTRE A
C LARGURA DO DEGRAU E A RESOLUCAO APLICADA, EM FUNCAO DO
C PONTO DE INFLEXAO ZI
C CHAVE 4 LIGADA NAO LE K NEM CALCULA ZM
C CHAVE 2 LIGADA PARA UMA NOVA SERIE ZI COM MESMA SERIE K
  DIMENSION C(50)
  A=SQRT(3.1415927)
  B=2.*SQRT(LOGF(2.))
  1 READ 100,ZI0,DZI,NZI
  DO 10 I=1,NZI
  X=I
  ZI=ZI0+X*DZI
  ER=ERFE(ZI)
  EX=1./(A*EXPF(ZI**2))
  Z1=-0.5*(1.+ER)/(EX+Z1*(1.+ER))
  Z2=0.5*(1.-ER)/(EX-Z1*(1.-ER))
  RATIO=(Z2-Z1)/B
  PRINT 101,ZI,Z1,Z2,RATIO
  IF(SENSE SWITCH 4)10,70
70 IF(I-1)3,2,3
  2 IF(SENSE SWITCH 2)3,4
  4 READ 104,NC
  READ 105, (C(J),J=1,NC)
  3 DO 20 J=1,NC
  IF(ABS(C(J))-ABS(ZI))20,60,60
60 Y=ZI
  L=0
  30 ERY=ERFE(Y)
  EXY=1./(A*EXPF(Y**2))
  FUN=C(J)*(2.*Y-Z1-Z2)-Z1*(2.*EXY+2.*Y*ERY+Z1-Z2)-ERY
  DFUN=2.*(C(J)-Z1*ERY-EXY)
  ZM=Y-FUN/DFUN
  L=L+1
  IF(ABSF((ZM-Y)/ZM)-1.E-6)50,40,40
40 Y=ZM
  GO TO 30
50 DZ=ZI-ZM
  RZ=ZI/ZM
  PRINT 102,C(J),ZM,DZ,RZ,L,FUN
  20 CONTINUE
  PRINT 103
  10 CONTINUE
  GO TO 1
100 FORMAT(2E14.8,14)
101 FORMAT(5X,3HZ1=E14.8/5X,3HZ2=E14.8/5X,6
  1HRATIO=E14.8/)
102 FORMAT(5X,2HK=E14.8,5X,3HZM=E14.8,5X,4HI-M=E14.8,5X,4
  1HI/M=E14.8,5X,2HL=13,3X,4HFUN=E14.8)
103 FORMAT(//)
104 FORMAT(14)
105 FORMAT(12F6.3)
  END

```

```
C PROGRAMA ZELINHA
C CALCULO DE ZL CORRESPONDENTE A FM(B) PARA VARIOS ZI
C E VARIOS K
  DIMENSION C(50),ZI(50)
  A=SQRT(3.1415927)
  1 READ 100,NZI,NC
  READ 101, (ZI(I),I=1,NZI)
  READ 101, (C(J),J=1,NC)
  DO 10 I=1,NZI
  PRINT 102,ZI(I)
  DO 20 J=1,NC
  IF(ABS(C(J))-ABS(ZI(I)))20,30,30
30 Y=-ZI(I)
  L=0
  40 ERY=ERFE(Y)
  EXY=1./(A*EXPF(Y**2))
  FUN=C(J)*Y-ZI(I)*EXY-ERY*(0.5+ZI(I)*Y)
  DFUN=C(J)-EXY-ZI(I)*ERY
  ZL=Y-FUN/DFUN
  L=L+1
  IF(ABS((ZL-Y)/ZL)-1.E-6)60,50,50
50 Y=ZL
  GO TO 40
  60 DZ=ZI(I)+ZL
  RZ=ZI(I)/ZL
  PRINT 103,C(J),ZL,DZ,RZ,L,FUN
  20 CONTINUE
  PRINT 104
  10 CONTINUE
  GO TO 1
100 FORMAT(2I4)
101 FORMAT(12F6.3)
102 FORMAT(5X,3HZI=E14.8/)
103 FORMAT(5X,2HK=E14.8,5X,3HZL=E14.8,5X,4HI+L=E14.8,5X,4
1HI/L=E14.8,5X,2HL=13,3X,4HFUN=E14.8)
104 FORMAT(//)
  END
```

## APENDICE C

## PROGRAMA PARA COMPUTADOR DO CALCULO DA SESSAO 11.3

```

C PROGRAMA RESEFFECT
C CALCULO DO EFEITO DA RESOLUCAO NUMA MEDIDA DE TRANSMISSAO
C NUM DEGRAU DE BRAGG
C CHAVE 2 LIGADA PARA PROCESSAR NOVOS DADOS COM OUTRO VALOR
C DE ENE (ATOMOS POR BARN DA AMOSTRA)
  DIMENSION SIGMA(200),WL(200),T(200),F(200),WLI(200),T
  11(200),TR(200),RTR(200),RTRLOG(200),SIGMAR(200)
  READ 100, NP, WLO, DWL
  READ 101, (SIGMA(I), I=1, NP)
  DO 11 I=1, NP
    X=1
  11 WL(I)=WLO+X*DWL
  20 READ 102, ENE
    DO 21 I=1, NP
  21 T(I)=1.0/EXPF(ENE*SIGMA(I))
  25 READ 103, RESW
    K1=RESW/DWL+1.0
    K=4*K1+1
    CM=K1
    SUBT=(2.*CM+1.0)*DWL
    DO 26 I1=1, K
      C=I1
      DFW=C*DWL-SUBT
  26 F(I1)=1.0/(1.0645*RESW*EXPF(DFW*DFW/(0.36067*RESW*RES
  IW)))
    M1=1+2*K1
    M2=NP-2*K1
    DO 30 I=M1, M2
      L1=I-2*K1
      L2=I+2*K1
      DO 40 J=L1, L2
        L=J+1-L1
        WLI(L)=WL(J)
  40 TI(L)=T(J)
      TR(I)=0.
      DO 50 M=1, K
        PR=F(M)*TI(M)*DWL
  50 TR(I)=TR(I)+PR
      RTR(I)=1./TR(I)
      RTRLOG(I)=LOGF(RTR(I))
  30 SIGMAR(I)=RTRLOG(I)/ENE
      PRINT 104, ENE, RESW
      PRINT 105
      PRINT 106, (WL(I), TR(I), RTR(I), RTRLOG(I), SIGMAR(I), I=
  1M1, M2)
      IF(SENSE SWITCH 2)20,25
  100 FORMAT (14, 2F6.3)
  101 FORMAT (7(1X, F9.3))
  102 FORMAT (E14.8)
  103 FORMAT (F6.3)
  104 FORMAT (18X, 44HCALCULO DA TRASMISSAO AFETADA PELA RES

```

```
10LUCAO//18X,4HENE=E14.8/18X,5HRESW=E14.8/)  
105 FORMAT (8X,2HWL,8X,11HTRANSMISSAO,6X,12HINV. TRANSM.,  
13X,16HLOG INV. TRANSM.,1X,16HSECCAO DE CHOQUE/)  
106 FORMAT (6X,F6.3,6X,E11.5,6X,E11.5,6X,E11.5,6X,E11.5)  
END
```

BIBLIOGRAFIA

- (Am 64) - L.Q.Amaral, M.Abreu, F.G.Bianchini and M.C.Mattos, Publicação  
IEA 86 (1964)
- (Am 67) - L.Q.Amaral, C.Rodriguez, S.B.Herdade e L.A.Vinhas, Publicação  
IEA 152 , pag 77 (1967)
- (Am 68) - L.Q.Amaral, L.A.Vinhas, C.Rodriguez and S.B.Herdade, Nuclear  
Instruments & Methods 63 , 13 (1968)
- (Ba 62) - G.E.Bacon, Neutron Diffraction , 2nd edition , Oxford Univer-  
sity Press (1962)
- (Bi 64) - F.G.Bianchini, M.Abreu, L.Q.Amaral and O.W.Martins, Publicação  
IEA 78 (1964)
- (Bo 53) - L.B.Borst and V.L.Sailor, Rev. Sci. Instr. 24 , 141 (1953)
- (Br 61) - R.M.Brugger and J.E.Evans, Nucl. Instr. & Meth. 12 , 75 (1961)
- (Ce 62) - H.Ceulemans, A.Deruytter, M.N.Mevergnies and H.Pollak, in Pile  
Neutron Research in Physics , 195 (IAEA, Vienna, 1962)
- (Da 53) - J.G.Dash and H.S.Sommers Jr., Rev. Sci. Instr. 24 , 91 (1953)
- (De 61) - A.Deruytter, H.Ceulemans, M.N.Mevergnies and H.Moret, in Neutron  
Time-of-Flight Methods , 275 (Euratom, Brussels, 1961)
- (Di 60) - Directory of Nuclear Reactors , vol III , 25 (IAEA, 1960)
- (Du 35) - J.R.Dunning, G.B.Pegram, G.A.Fink, D.P.Mitchell and E.Segré ,  
Phys. Rev. 48 , 704 (1935)
- (Eg 54) - P.A.Egelstaff, Journal Nucl. Energy 1 , 57 (1954)
- (Eg 61) - P.A.Egelstaff, S.J.Cocking and T.K.Alexander, in Inelastic Scatter-  
ing of Neutrons in Solids and Liquids , 165 (IAEA, 1961)
- (Eg 65) - Thermal Neutron Scattering , edited by P.A.Egelstaff , Academic  
Press (1965)
- (Fe 47) - E.Fermi, J.Marshall and L.Marshall, Phys. Rev. 72 , 193 (1947)
- (Go 58) - F.T.Gould, Columbia University CU-179 (1958)
- (He 67) - S.B.Herdade, L.Q.Amaral, C.Rodriguez and L.A.Vinhas, Publicação  
IEA 136 (1967)



- (He 68) - S.B.Herdade, in Neutron Inelastic Scattering , vol II , 197  
(IAEA, 1968)
- (He 69) - S.B.Herdade, tese de doutoramento apresentada à Universidade  
de Campinas em maio de 1969
- (Ho 61) - S.Holmryd, K.E.Larsson and K.Otnes, Nucl. Instr. & Meth. 12 ,  
355 (1961)
- (Hu 53) - D.J.Hughes, Pile Neutron Research , Addison-Wesley Publishing  
Company (1953)
- (Ja 68) - J.A.Janik, report 600/PS , Cracow Institute of Nuclear Physics  
(1968)
- (La 59) - K.E.Larsson, U.Dahlborg, S.Holmryd, K.Otnes and R.Stedman, Arkiv  
f. Fysik 16 , 199 (1959)
- (La 59-a) K.E.Larsson, and K.Otnes, Arkiv f. Fysik 15 , 49 (1959)
- (La 66) - K.E.Larsson, L.Q.Amaral, N.Ivanchev, S.Rapeanu, L.Bergstedt and  
U.Dahlborg, Phys. Rev. 151 , 126 (1966)
- (Le 68) - J.Leser, tese de mestrado apresentada ao Instituto Tecnológico  
de Aeronáutica em dezembro de 1968
- (Ma 59) - M.Marseguerra and G.Pauli, Nucl. Instr. & Meth. 4 , 140 (1959)
- (Ni 62) - T.Niewiadomski, A.Szkatula and J.Sciensinski, Nukleonika 7 , 231  
(1962)
- (Pa 61) - H.Palevski, in Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and  
Liquids , 265 (IAEA, Vienna, 1961)
- (Pe 66) - R.H.Pennington, Introductory Computer Methods and Numerical Ana-  
lysis , Collier-Macmillan Student Editions (1966)
- (Ro 67) - C.Rodriguez, L.A.Vinhas, S.B.Herdade e L.Q.Amaral, Publicação  
IEA 152 , pag 91 (1967)
- (Ro 68) - C.Rodriguez, L.A.Vinhas e L.Q.Amaral, Ciência e Cultura 20 , 131  
(1968)
- (Tu 65) - V.F.Turchin, Slow Neutrons , Israel Program for Scientific Trans-  
lations (1965)
- (Vi 67) - L.A.Vinhas, S.B.Herdade, C.Rodriguez e L.Q.Amaral, Publicação  
IEA 152 , pag 83 (1967)

(Zi 67) - R.L.Zimmerman, L.Q.Amaral, R.Fulfaro, M.C.Mattos, M.Abreu and  
R.Stasiulevicius, Nucl. Physics A95 , 683 (1967)