

11/15-mf-339.

**Laercio Antonio Vinhas**

**ESTUDO DA INTERAÇÃO DE  
NÊUTRONS LENTOS COM O  
FERRO POLICRISTALINO**

Tese apresentada à  
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
para obtenção do título de  
"DOUTOR EM CIÊNCIAS"

São Paulo - BRASIL

1970

LAERCIO ANTONIO VINHAS

ESTUDO DA INTERAÇÃO DE NÊUTRONS LENTOS  
COM O FERRO POLICRISTALINO

Tese apresentada à Universidade  
Estadual de Campinas para a obten  
ção do título de "Doutor em Ciên-  
cias".

1970

*A Iramãia*  
*do Laercio Jr.*  
*A meus Pais*

## AGRADECIMENTOS

A todos que colaboraram, direta ou indiretamente, quer com os seus conhecimentos, quer com o seu incentivo, para a realização deste trabalho o meu sincero agradecimento.

Desejo agradecer, em especial, ao meu orientador Prof. Dr. Marcello Damy de Souza Santos pelo seu incentivo, interesse e pelas valiosas sugestões.

Agradeço aos meus colegas do grupo de espectrometria de nêutrons, pesquisadores Dr. Claudio Rodriguez, Dr. Silvio B. Herdade e Ms. Lia Q. do Amaral Riske, pela inestimável colaboração durante a execução deste trabalho.

Devo agradecer ao Prof. Dr. Robert L. Zimmerman a sua ajuda e oportunas sugestões na construção e instalação do espectrômetro obturador-tempo de voo.

Sou grato aos bolsistas Yukio Koishi e Halina Bilokon, pela confecção dos desenhos, Fulvio M. Frossati pela confecção da capa e Maria J. Bechara pelo auxílio prestado no processamento dos dados. À Srta. Neide Maria de Jesus Lima sou grato pelo serviço de datilografia.

Devo, ainda, expressar o meu agradecimento ao Instituto de Energia Atômica e ao seu Diretor, Dr. Rêmulo Ribeiro Pieroni pelas facilidades oferecidas para o desenvolvimento dos trabalhos experimentais e para a edição deste texto.

L. A. V.

## ÍNDICE

CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO II - A APARELHAGEM E O ARRANJO EXPERIMENTAL	6
II.1. ESPECTRÔMETRO DE TEMPO DE VÔO	6
II.1.1. Sistema de pulsação do feixe: obturador para nêutrons lentos	7
II.1.2. Sistema de análise de tempo de vôo	10
A - Sinal de referência	10
B - Detecção dos nêutrons	11
C - Analisador de tempo	13
II.1.3. Sistema de controle da velocidade do obturador	17
II.1.4. Sistema de monitoração	19
II.2. A FONTE DE NÊUTRONS E O ARRANJO EXPERIMENTAL	20
II.3. CALIBRAÇÃO DA ESCALA DE TEMPO	25
II.4. CARACTERÍSTICAS OPERACIONAIS DO ESPECTRÔMETRO DE TEMPO DE VÔO	30
II.4.1. Radiação de fundo (background)	30
II.4.2. Função de transmissão do obturador	33
II.4.3. Resolução	37
CAPÍTULO III - A MEDIDA DA SECÇÃO DE CHOQUE TOTAL: PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL, OBTENÇÃO E TRATAMENTO DOS DADOS	47
III.1. O MÉTODO DE MEDIDA	47
III.2. AMOSTRA E PORTA AMOSTRA	49
III.3. DETERMINAÇÃO DO NÚMERO DE ÁTOMOS POR BARN	51
III.4. OBTENÇÃO DOS DADOS EXPERIMENTAIS	52
III.5. TRATAMENTO DE DADOS	55
III.5.1. Conversão do número de canal do analisador para tempo de vôo, comprimento de onda e energia do nêutron	56
III.5.2. Obtenção da secção de choque total a partir dos dados experimentais	57
CAPÍTULO IV - CONSIDERAÇÕES TEÓRICAS	59
IV.1. OBSERVAÇÕES GERAIS	59
IV.2. SECÇÃO DE CHOQUE DE ABSORÇÃO	63
IV.3. SECÇÃO DE CHOQUE PARA O ESPALHAMENTO NUCLEAR	64
IV.3.1. ESPALHAMENTO ELÁSTICO	64
A - Espalhamento coerente elástico	64

B - Espalhamento incoerente elástico	68
IV.3.2. Espalhamentos inelásticos	70
IV.4. SECÇÃO DE CHOQUE PARA O ESPALHAMENTO MAGNÉTICO	76
<b>CAPÍTULO V - RESULTADOS E DISCUSSÃO</b>	<b>80</b>
V.1. EFEITO DO ESPALHAMENTO EM PEQUENOS ÂNGULOS NA MEDIDA DA SECÇÃO DE CHOQUE TOTAL DE AMOSTRAS POLICRISTALINAS	80
V.2. SECÇÃO DE CHOQUE TOTAL DO FERRO POLICRISTALINO: RESULTADOS EXPERIMENTAIS	83
V.3. SECÇÃO DE CHOQUE INELÁSTICA TOTAL	85
V.4. SECÇÃO DE CHOQUE TOTAL: COMPARAÇÃO ENTRE OS RESULTADOS EXPERIMENTAIS E A TEORIA	88
<b>CAPÍTULO VI - CONCLUSÕES</b>	<b>94</b>
APÊNDICE I	97
APÊNDICE II	100
APÊNDICE III	102
APÊNDICE IV	106
APÊNDICE V	115
REFERÊNCIAS	119

## CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO

Os nêutrons com energias menores que 1 eV e consequentemente de comprimentos de onda, determinados pela relação de de Broglie maiores que  $0,3\text{\AA}$  são chamados nêutrons lentos.

Os nêutrons lentos podem interagir com a matéria através de três processos: captura radio-ativa pelos núcleos, espalhamento nuclear e espalhamento magnético.

Ao contrário dos nêutrons de energia mais alta ( $\gg 1$  eV) que são espalhados pelos átomos individualmente, os nêutrons lentos, possuindo comprimentos de onda da ordem de grandeza das distâncias entre os átomos, são também espalhados pelo conjunto dos mesmos, podendo haver interferência entre o espalhamento por núcleos vizinhos.

Esta interferência ocorre quando os núcleos têm propriedades físicas iguais, pois este fato assegura uma relação de fase constante entre as ondas espalhadas pelos diversos núcleos. A -

parte do espalhamento no qual ocorrem fenômenos de interferência é chamada espalhamento coerente. A difração de nêutrons lentos (Ba62) possibilita o estudo de estruturas atômicas.

A presença de quaisquer tipos de desordens na série de centros espalhadores, tais como núcleos com spins diferentes ou a existência de mais de um estado isotópico, provoca diferenças de fase ao acaso entre as ondas espalhadas pelos diferentes núcleos; esta parte do espalhamento é chamada incoerente.

O espalhamento (coerente e incoerente) pode ser elástico ou inelástico. No espalhamento elástico a energia do nêutron -- permanece inalterada enquanto que no inelástico a sua energia final é diferente da inicial, havendo portanto trocas de energia com o sistema espalhador.

Através dessas trocas de energia e pelo fato dos nêutrons lentos possuírem energia da ordem de grandeza das energias das ligações químicas e dos movimentos térmicos dos átomos, pode-se obter informações sobre várias propriedades dinâmicas dos sistemas atômicos, como vibrações de redes cristalinas, níveis de energia moleculares, movimentos translacionais em sólidos e líquidos (Eg65, Tu65), etc.

Além desses espalhamentos, como o nêutron possui um momento magnético, pode haver espalhamento magnético, resultante da interação entre os momentos magnéticos do nêutron e dos átomos espalhadores. Este tipo de espalhamento fornece informações sobre estruturas magnéticas, níveis de energia magnética e orientação



de spin em sistemas espalhadores (Eg65).

Foram propostos diversos modelos e tratamentos teóricos aproximados, visando a determinação teórica das secções de choque para as diversas interações.

Um dos primeiros trabalhos no campo foi publicado por Weinstock (We44), o qual utilizando o modelo de Debye para descrever o cristal, estudou um caso relativamente simples; considerou o material policristalino constituído por um só tipo de isótopo e sem spin e fez ainda uma outra simplificação, levando em conta no espalhamento inelástico apenas os processos nos quais há troca de um só fonon, desprezando portanto os processos de multifonons.

Finkelstein (Fi47) calculou as secções de choque para espalhamento considerando os processos de multifonons; utilizou para descrever o cristal, o modelo de Einstein que embora seja muito mais simples que o de Debye, não fornece resultados muito satisfatórios.

Cassels (Ca50) generalizou o tratamento de Weinstock para o caso de materiais policristalinos contendo vários tipos de núcleos de spins diferentes, mas também só considerou os processos de troca de um fonon.

Squires (Sq52) mostrou que a secção de choque para o espalhamento inelástico incluindo processos de multifonons podia ser calculada como a soma das secções de choque para os diferentes processos envolvendo trocas de 1,2,3... fonons. Entretanto uma dificuldade devia ser transposta: a dedução das expressões para esses processos é muito complicada e a sua soma converge muito lentamente.

Placzek (P157) resolveu o impasse, observando que a soma, lentamente convergente sôbre todos os processos de fonons, se torna rapidamente convergente quando expressa como uma expansão em série de potências da razão das massas do nêutron e do elemento espalhador.

Marshall e Stuart (Ma61) usando êste artifício introduzido por Placzek, calcularam as diferentes secções de choque de espalhamento para substâncias policristalinas, levando em conta os processos de multifonons, utilizando o modelo de Debye para descrever o cristal.

Calculando as secções de choque parciais e a total pelos diversos tratamentos teóricos acima citados, verifica-se que os mesmos apresentam resultados concordantes quanto aos espalhamentos elásticos, não acontecendo o mesmo com os inelásticos.

Embora a parte teórica da interação de nêutrons lentos com cristais tenha sido bem estudada, faltam na literatura medidas razoavelmente precisas da secção de choque de materiais policristalinos para nêutrons lentos.

Em vista disso nos propusemos a medir a secção de choque de uma amostra policristalina com uma precisão suficiente que permita verificar a validade dos resultados obtidos através dos tratamentos teóricos.

Dentre os materiais policristalinos, escolhemos o ferrô - por êste material apresentar secções de choque apreciáveis para todos os tipos de espalhamento inclusive magnético, permitindo assim um estudo mais completo.

Por outro lado não foram encontradas na literatura medidas

precisas de secção de choque total do ferro no intervalo de --- energia de 0,15 eV a 0,0025 eV. O conhecimento preciso da secção de choque total do ferro e da validade dos modelos utilizados para o cálculo das diversas secções de choque parciais para o mesmo são importantes para estudos de polarização de nêutrons, determinações de espectro de magnons, de espalhamento por ondas de spin, etc.

A investigação que realizamos sobre a interação de nêutrons lentos com uma amostra de ferro policristalino foi feita utilizando-se como fonte de nêutrons o reator IEA-R1 usando o espectrômetro obturador - tempo de voo para a análise da energia dos nêutrons.

Este equipamento experimental acha-se descrito no capítulo 2, bem como a determinação das suas características operacionais.

No capítulo 3 descrevemos o método experimental utilizado na obtenção dos dados e o tratamento dos mesmos.

As considerações teóricas e o cálculo das diferentes secções de choque parciais e da secção de choque total do ferro para nêutrons lentos são apresentados no capítulo 4.

No capítulo 5 os resultados experimentais são apresentados, analisados e discutidos.

## CAPÍTULO II - A APARELHAGEM E O ARRANJO EXPERIMENTAL

### II.1 - ESPECTRÔMETRO DE TEMPO DE VÔO

As medidas apresentadas neste trabalho foram realizadas com o espectrômetro de tempo de vôo, o qual usa para a pulsação do feixe um obturador para nêutrons lentos; o princípio de operação desse aparelho é bem conhecido e foi descrito por diversos autores (Fe47, Hu53, Eg54, La59 e Ni62).

O obturador é um colimador rotativo que colocado num feixe de nêutrons colimado de intensidade constante transforma-o em um feixe pulsado. Um pulso de nêutrons é analisado medindo-se o tempo que os nêutrons de diferentes velocidades gastam para percorrer a distância do centro do obturador até o detetor. A medida deste tempo é feita eletronicamente através de um analisador multicanal, que mede o intervalo de tempo entre o impulso elétrico proveniente de um captor magnético acoplado ao obturador, que dá um sinal cada vez que um pulso de nêutrons

é formado no centro do obturador, e o impulso proveniente do detector de nêutrons. O analisador multicanal acumula contagens - em diferentes canais correspondendo a diferentes intervalos de tempo e, portanto, a nêutrons de diferentes velocidades.

O espectrômetro de tempo de voo, cujo diagrama de blocos - está mostrado na figura 1, pode ser considerado como composto de quatro sistemas, a saber:

- a) sistema de pulsação do feixe: obturador para nêutrons lentos;
- b) sistema de análise de tempo;
- c) sistema de controle da velocidade de rotação do obturador;
- d) sistema de monitoração da intensidade do feixe.

#### II.1.1. SISTEMA DE PULSAÇÃO DO FEIXE: OBTURADOR PARA NÊUTRONS LENTOS

O obturador para nêutrons lentos foi construído no Instituto de Energia Atômica segundo um modelo desenvolvido na AB Atomenergí Estocolmo-Suecia (La58, La59). O aparelho, mostrado na figura 2, é construído por um rotor cilíndrico, de raio  $r = 5\text{cm}$  e comprimento  $14\text{cm}$ , o qual contém nove placas de aço, de espessura  $0,5\text{ mm}$ , nas quais depositou-se cádmio por método eletrolítico, com uma espessura média de  $55\mu$  em ambas as faces.

As placas acham-se separadas por espaçadores de alumínio, de espessura  $2d = 0,397\text{ cm}$ , formando dez fendas curvas de raio de curvatura nominal  $R_0 = 74,5\text{ cm}$ . A abertura total do obtura-

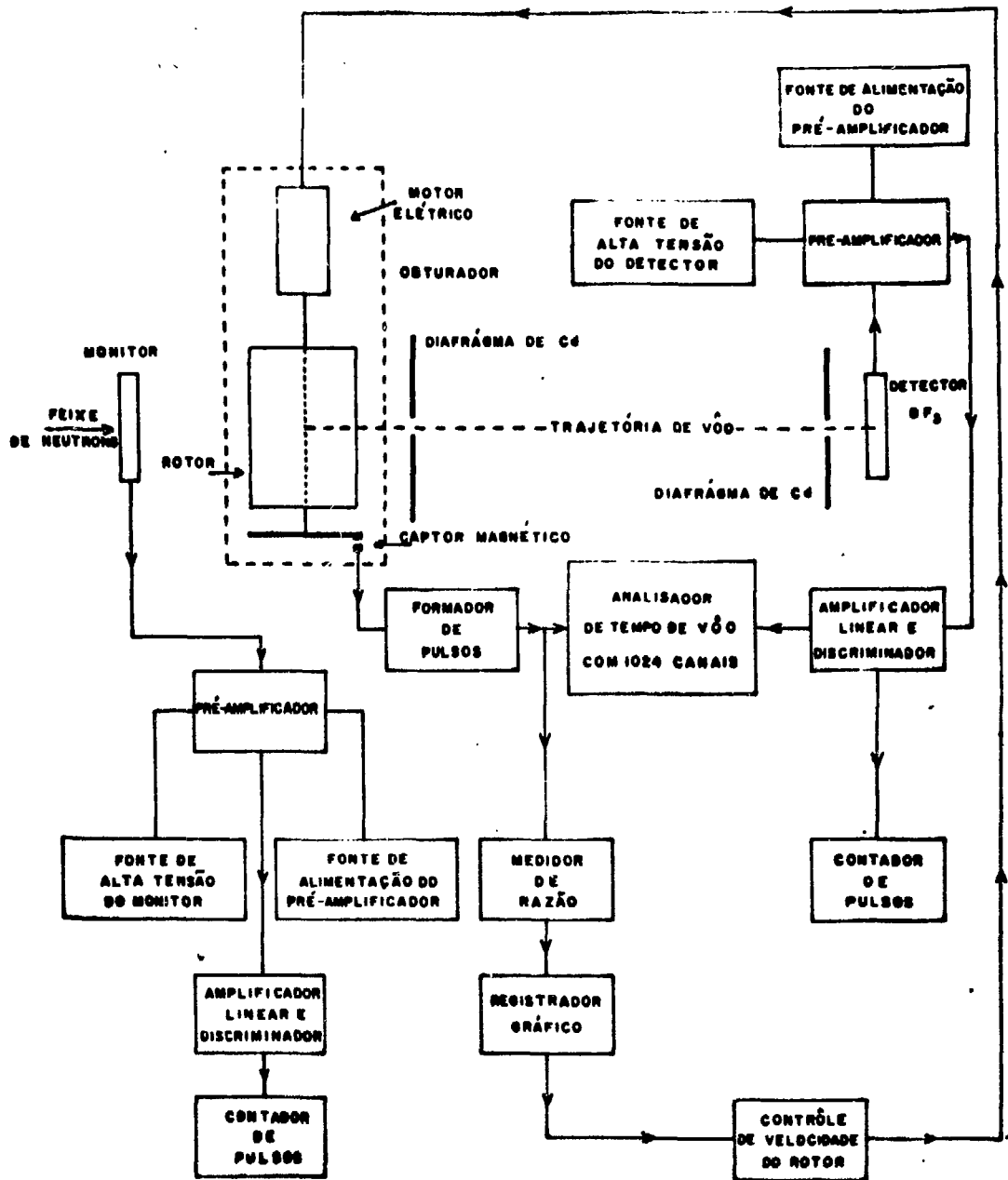
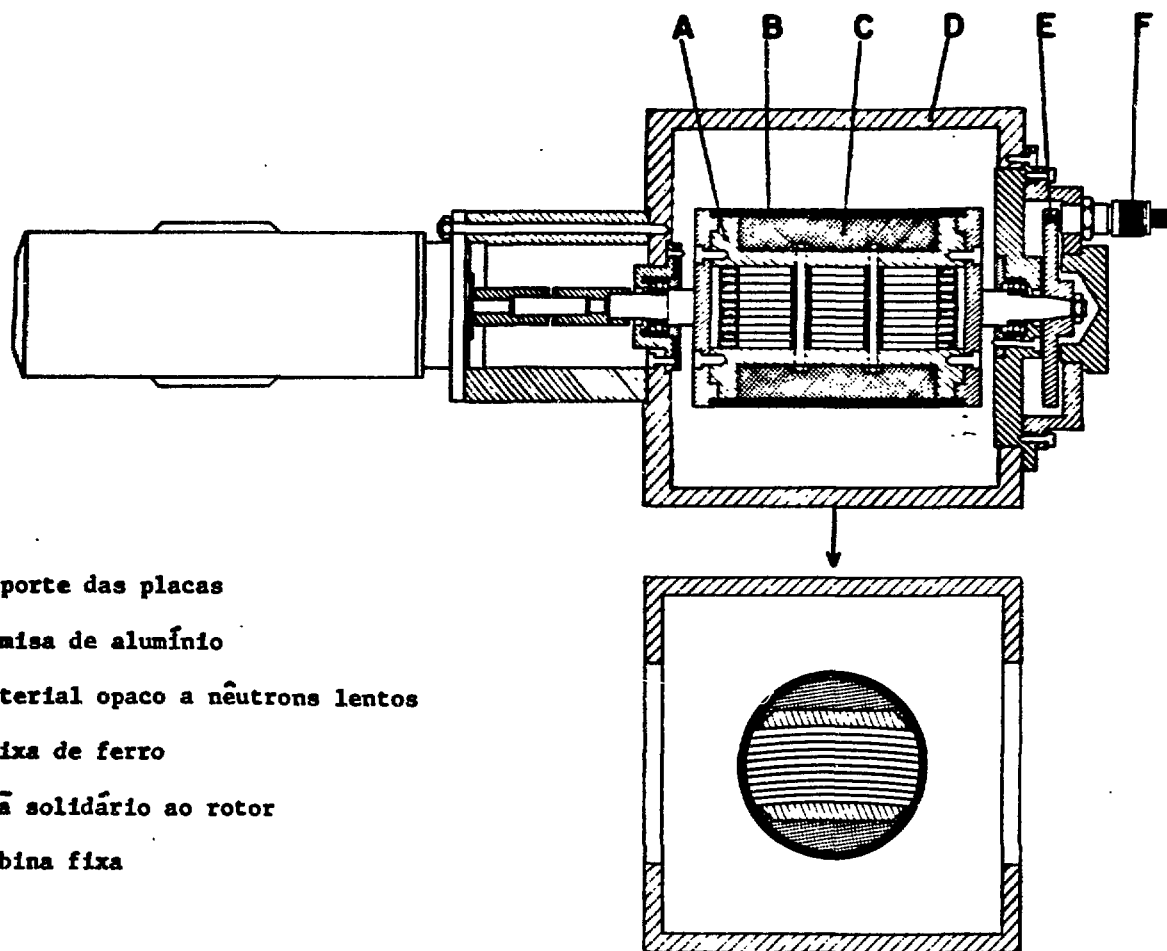


FIGURA 1

Diagrama de bloco do espectrômetro de tempo de vôo.



- A - suporte das placas
- B - camisa de alumínio
- C - material opaco a nêutrons lentos
- D - caixa de ferro
- E - ímã solidário ao rotor
- F - bobina fixa

FIGURA 2  
 Obturador, para nêutrons lentos, com fendas curvas.

dor é 11 cm x 4,5 cm.

Os espaços restantes do rotor cilíndrico foram preenchidos por uma mistura feita de partes iguais de carbeto de boro ( $B_4C$ ) e araldite, a qual apresenta uma alta absorção para nêutrons.

As fendas e o material absorvente estão inseridos num cilindro de alumínio de raio 5 cm e paredes de 0,9 cm de espessura.

O rotor gira dentro de uma caixa de ferro acionado por meio de um motor ao qual está ligado através de um acoplamento elástico; a velocidade máxima do rotor é de 15.000 rpm.

#### II.1.2 - SISTEMA DE ANÁLISE DE TEMPO DE VÔO

A análise de tempo de vôo é feita através de um sistema -- constituído por um analisador de tempo multicanal e por dois dispositivos: um que fornece ao sistema o sinal de referência, estando associado com a pulsação do feixe e outro que dá ao sistema o sinal de parada quando da chegada do nêutron ao detetor.

##### A - Sinal de referência

O sinal de referência que define o zero da escala de tempo de vôo, utilizado para disparar o analisador multicanal de tempo, provém de um captor ("pick-up") magnético.

O captor magnético é constituído por uma bobina, fixada na caixa de ferro que sustenta o obturador, e por um pequeno ímã permanente que se acha encrustado na borda de um disco de alumínio acoplado ao eixo do rotor.



Quando obturador esta girando, cada vez que o imã passa em frente a bobina, o captor magnético gera um pulso cujas amplitude e forma variam com a velocidade de rotação do obturador (figura 3a).

Tal forma de pulso, além de não ser adequada para o disparo do analisador multicanal, apresenta uma variação indesejável com a velocidade do obturador. Afim de se contornar esse problema construiu-se um circuito formador de pulso (He67) sendo o mesmo disparado pelo pulso proveniente do captor magnético. Medidas precisas de tensão de disparo indicam que a mesma é da ordem de  $+ 15 \pm 5$  mv. Sendo este valor relativamente baixo, a variação no instante de disparo do analisador devida à variação de velocidade do obturador é desprezível.

O circuito formador apresenta um pulso de saída positivo de 4,1 volts com tempo de subida de 0,3 microsegundos, mostrado na fig. 3b. Este pulso é utilizado para disparar o analisador multicanal.

A posição de disco de alumínio, e portanto do imã, em relação ao rotor pode ser ajustada de modo que o imã passe em frente a bobina exatamente no instante em que o pulso de nêutrons é formado no centro do obturador, definindo de maneira correta o instante zero da escala de tempo. Um ajuste fino pode ser obtido variando-se a posição da bobina por meio de um parafuso micrométrico.

#### B - Sinal de Parada: detecção dos nêutrons.

O sistema de detecção do feixe pulsado utiliza um detetador proporcional de trifluoreto de boro ( $\text{BF}_3$ ), fabricado pela

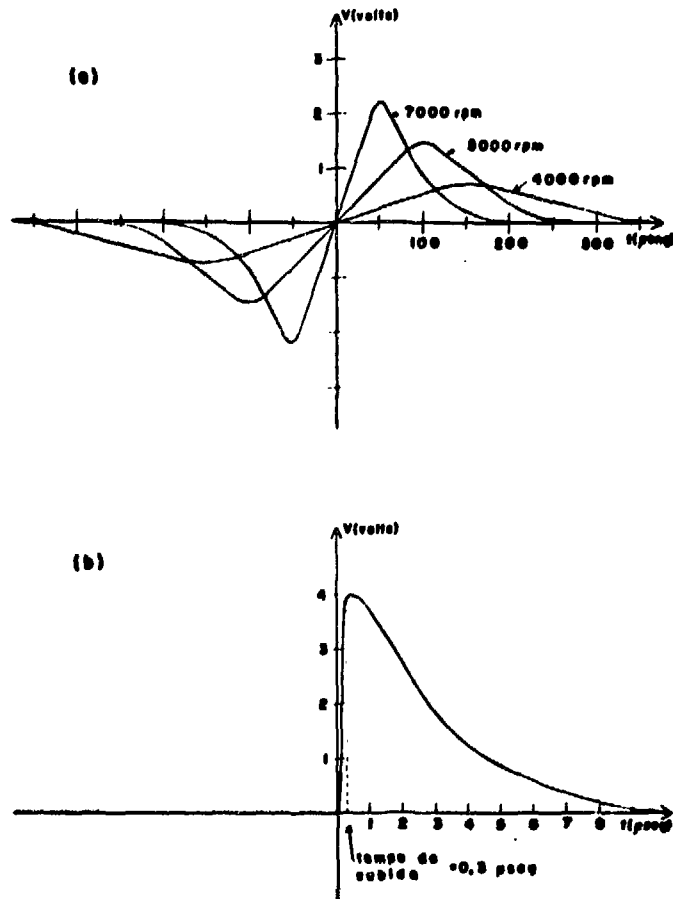


FIGURA 3

- (a) - Forma de onda do pulso do captor magnético para três velocidades de rotação do obturador.
- (b) - Pulso de saída do formador de pulso, disparado pelo sinal do captor magnético no nível de  $15 \pm 5$  mV.

N.Wood Co., no qual a pressão do gás enriquecido a 96% em  $^{10}\text{B}$  é de 60cm Hg. O detetor é de forma cilíndrica com as seguintes dimensões: 1 polegada de diâmetro e 12 polegadas de comprimento.

Este detetor foi usado com o seguinte sistema de detecção:

- a) Fonte de alta tensão, 6KV, Mesco tipo A 5003.
- b) pré-amplificador, construído pelo Serviço de Eletrônica do IEA
- c) Fonte de baixa tensão estabilizada da "Brasele S.A." modelo FEET 2a, modificada afim de fornecer os 10 volts - DC, necessários à alimentação do pré-amplificador.
- d) Amplificador e analisador de impulsos da "Brasele S.A.", modelo AA11cd, modificado de modo a fornecer, na saída - do discriminador, pulsos negativos de 500 mv, afim de satisfazer as exigências da entrada de analisador multicanal.

Estes aparelhos foram todos ligados à saída de um estabilizador eletrônico de corrente alternada, fabricado pela "Brasele S.A.", modelo EE 10A 1b, a fim de se evitar possíveis variações nos ganhos e na tensão aplicada ao contador devidas as flutuações da tensão da rede.

C - Analisador multicanal de tempo.

Utilizou-se um analisador de 1024 canais fabricado pela - Technical Measurement Corporation (TMC), que é composto de 5 - unidades:

- a) unidade computadora digital (TMC-modelo CN-1024)
- b) unidade lógica de tempo de voo (TMC-modelo 211)

- c) unidade de saída de dados (TMC-modêlo 220C)
- d) impressora (Hewlett Packard modêlo J44 561B)
- e) perfuradora de fita (Tally - modêlo 420)

Conhecendo-se a distância entre o centro do obturador e o detetor, pode-se determinar a energia (velocidade, etc) dos nêutrons medindo-se o tempo que os mesmos gastam para percorrer essa distância.

O sinal proveniente do captor magnético relacionado com a formação do pulso de nêutrons no centro do obturador dispara, na unidade lógica de tempo de voo, um oscilador que irá produzir - pulsos até a chegada do sinal proveniente da detecção do nêutron; portanto o número de pulsos produzidos será proporcional ao tempo que o nêutron gasta para percorrer a distância entre o obturador e o detetor.

A saída da unidade de tempo de voo esta ligada com a unidade de computadora digital que conta os pulsos do oscilador; através do número de pulsos contados a unidade computadora determina em que canal da memória uma contagem deve ser armazenada. Para cada nêutron detetado uma contagem é adicionada no canal correspondente ao intervalo de tempo decorrido entre a formação do pulso de nêutrons no centro de obturador e o pulso correspondente à sua detecção, obtendo-se assim a formação de um espectro da distribuição de tempo de voo dos nêutrons.

Estudos detalhados do princípio de operação e da eletrônica envolvida em um tal analisador de tempo podem ser encontrados na literatura (Ch61, Hi56, Sc56).

O aparelho oferece a possibilidade de se escolher a largura

de canal mais conveniente a ser usada, bem como o número de canais desejados. As larguras de canais possíveis são 0,25; 0,5 ; 1; 2; 4; 8; 16; 32; 64 microsegundos, e é permitido se usar 256; 512 ou 1024 canais.

Foi feito um teste minucioso (He67) das características -- operacionais do analisador multicanal associado com a unidade - de tempo de v $\hat{o}$ o, a fim de obter as fórmulas corretas para a conversão do número de canal em tempo de v $\hat{o}$ o, bem como as fórmulas para as correções devidas a perda de contagem pelo analisador.

No teste encontrou-se os resultados que se seguem:

Para larguras de canal de 0,25 até 16 microsegundos o primeiro canal tem largura zero, isto é não aceita pulsos; o segundo canal aceita pulsos de 1 a  $1 + \Delta T$  microsegundos sendo  $\Delta T$  a - largura de canal; o terceiro de  $1 + \Delta T$  até  $1 + 2\Delta T$  etc.. Para estas larguras de canal o analisador aceita apenas um pulso por - canal por ciclo de análise, e apresenta um tempo morto fixo de 16 microsegundos a partir do fim do canal que aceitou a conta--gem.

Para a largura de canal de 32 microsegundos, o primeiro canal aceita pulsos de 1 a 17 microsegundos, o segundo aceita pulsos de 17 a  $17 + \Delta T$ , o terceiro de  $17 + \Delta T$  a  $17 + 2\Delta T$  microse--gundos, etc. Também para essa largura de canal o analisador aceita apenas um pulso por canal, em cada ciclo de análise, e o tempo morto é de 16 microsegundos, ocorrendo que se uma contagem fôr aceita na primeira metade de um canal, a segunda metade dêsse canal estará bloqueada e a primeira metade do canal seguinte estarã apta a contar; se a contagem fôr aceita na segunda metade de um canal, a primeira metade do canal seguinte estará bloqueada

e a segunda metade deste canal estará apta a aceitar contagens.

Este comportamento experimental do analisador de tempo -- foi levado em conta na calibração da escala de tempo de voo do espectrômetro, bem como na dedução das fórmulas de conversão do número de canal em tempo de voo, as quais são apresentadas no apêndice I juntamente com o programa para computador, elaborado em linguagem FORTRAN, que fornece as tabelas de conversão entre o número de canal, o tempo de voo, a energia e o comprimento de onda dos nêutrons.

No apêndice II são mostradas fórmulas que possibilitam corrigir as perdas de contagens, no espectrômetro, devidas ao tempo morto do analisador, ao tempo morto do sistema de contagens e as devidas ao fato do analisador aceitar apenas um pulso por canal, em cada ciclo de análise.

Os dados que foram acumulados na memória da unidade computadora podem ser obtidos através de 4 métodos:

a) observando-se o tubo de raios catódicos da unidade ---- CN-1024; este tipo de saída dá as informações apenas de uma maneira qualitativa.

b) lendo-se os valores apresentados no mostrador da unidade de saída de dados 220C através de uma operação manual que -- avança um canal de cada vez.

c) através da impressora Hewlett-Packard Modelo J44 56F B a qual imprime, automaticamente um canal após outro, o número do canal e a contagem armazenada no mesmo na forma decimal. Para o funcionamento desta impressora, que imprime 5 linhas por segundo, é necessário que os dados cheguem a ela no código "decimal de 10 linhas".

d) através da perfuradora de fita "Tally 420", que perfura automaticamente em fita de papel, num código binário de 8 canais, as instruções destinadas a comandar a máquina perfuradora de cartões, bem como os dados (número do canal e a contagem acumulada no mesmo). Para operar a perfuradora, que tem uma velocidade de 60 caracteres por segundo, é necessário que os dados -- cheguem a ela no código "binário decimal".

A transformação dos dados, que estão armazenados na memória da unidade computadora em código binário, para os códigos necessários para operar a impressora e a perfuradora, é feita pela unidade de saída de dados 220C.

Além dessa função esta unidade conta o número de pulsos de disparo recebido pelo sistema analisador, contando portanto, o número de ciclos de análise efetuados.

Por outro lado é ainda através dessa unidade que se comanda o início e o fim da acumulação de dados, bem como se escolhe o tipo de saída: ou impressora, ou perfuradora ou ambas, e se comanda a saída de dados.

### II.1.3 - SISTEMA DE CONTRÔLE DE VELOCIDADE DO OBTURADOR

O sistema de alimentação do motor e controle da velocidade do obturador está mostrado na figura 4.

O motor é ligado à rede de tensão de 110 volts CA através de um estabilizador de voltagem. Entre o estabilizador e o motor encontra-se um reostato variável que apresenta, para uma tensão de 110 volts na entrada, uma tensão de saída variável de zero a 140 volts. Isto permite girar o rotor em qualquer rotação

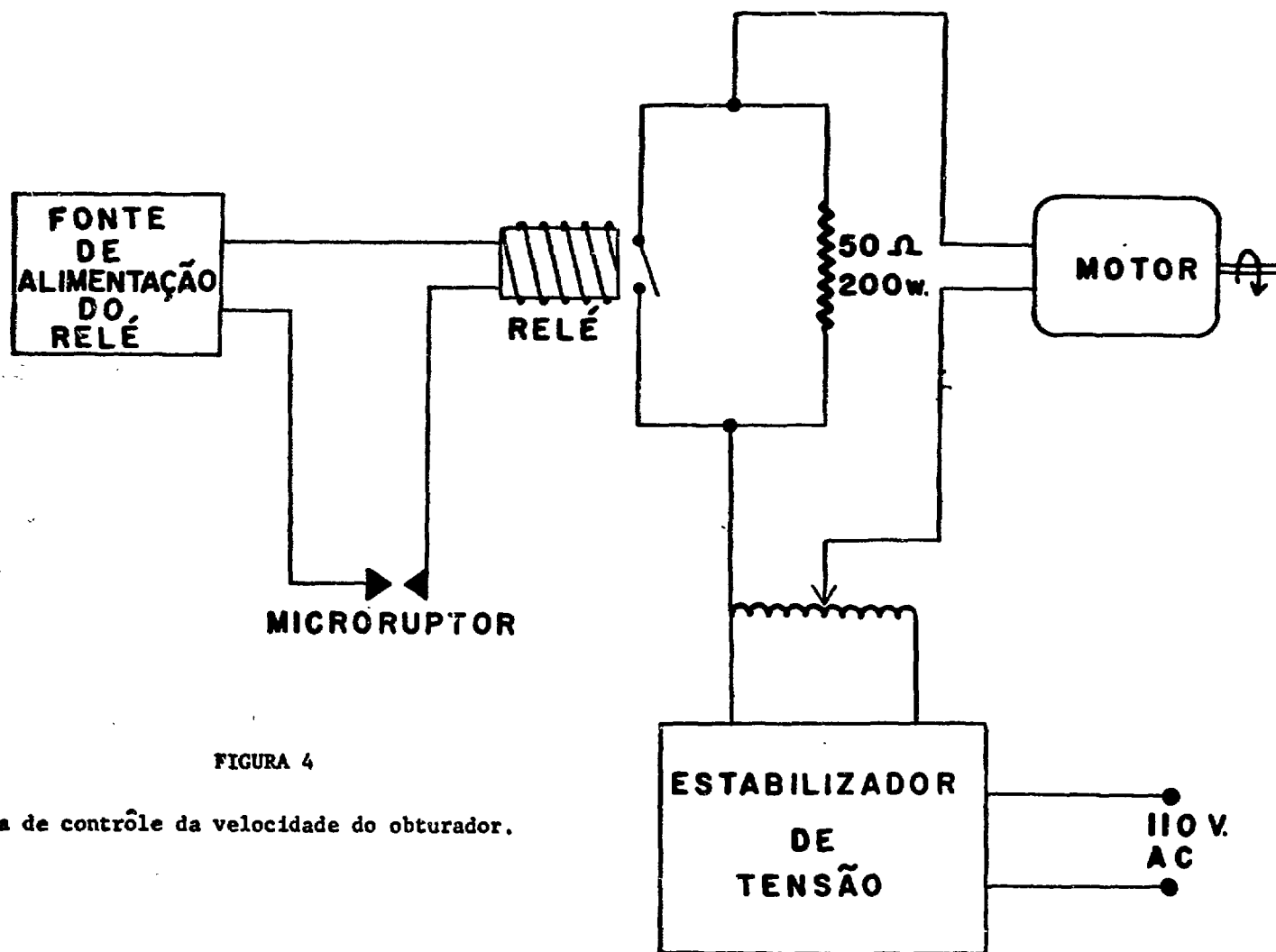


FIGURA 4

Sistema de controle da velocidade do obturador.



até o limite de 15.000 rpm; pois para um motor universal a sua velocidade de rotação  $\bar{\omega}$ , dentro de certos limites, é proporcional a tensão aplicada no mesmo.

A medida continua da velocidade é feita através de um medidor de ritmo ("rate meter") fabricado pela "Brasele S/A" utilizando-se o mesmo pulso usado para disparar o analisador multicanal. Na saída do medidor de ritmo está acoplado um registrador gráfico Mecel-Northrup.

O controle da velocidade do rotor se processa automaticamente, variando-se a tensão aplicada ao motor.

Esta variação de tensão é feita ora colocando-se em série com o motor uma resistência de 50  $\Omega$  e 200 watts, ora retirando-a, curto circuitando seus terminais. Esta operação é realizada por meio de relê que é acionado através de um microrruptor instalado na escala do registrador gráfico, sofrendo a ação do ponteiro do mesmo.

Com este sistema a velocidade de rotação do obturador é mantida constante dentro de 0,5%.

#### II.1.4 - SYSTEMA DE MONITORAÇÃO

A monitoração do feixe contínuo de neutrons é feita através de um pequeno detetor  $\text{BF}_3$ , de baixa eficiência colocado no feixe entre a fonte de neutrons (reator) e o obturador; este detetor, fabricado pela N.Wood, é cheio de gás  $\text{BF}_3$  (empobrecido até 11% de  $\text{B}^{10}$ ) a uma pressão de 30 cm Hg, tendo as seguintes dimensões: uma polegada de comprimento e 1/4 de polegada de diâmetro, apresentando uma transmissão de 99% para neutrons de velocidade

2200 metros por segundo, com uma tensão de operação de 1250 -- volts.

Este detetor é usado juntamente com o seguinte equipamento:

Fonte de alta tensão John Fluke modelo 405B cuja tensão máxima é 3.000 volts.

Pré amplificador para  $\text{BF}_3$  construído pelo Serviço de Eletrônica do IEA.

Amplificador e analisador Brasele modelo AAI 1c 1d cujas características principais foram descritas quando da descrição do -- sistema de detenção do feixe pulsado.

Contador e discriminador de impulsos Brasele modelo CDI 2a, que aceita pulsos positivos entre 5 e 105 volts e é capaz de contar até 200.000 impulsos por segundo, com tempo morto inferior a 4 microsegundos.

Afim de se evitar variações nas altas tensões e ganhos dos aparelhos, os mesmos foram ligados a um estabilizador Brasele - modelo EE 10A 1b.

Testes do sistema de monitoração feitos com fonte de  $\text{RaBe}$  demonstraram que o sistema é reprodutível dentro de 0,5%.

## II.2 - A FONTE DE NÊUTRONS E O ARRANJO EXPERIMENTAL

O arranjo experimental usado nas medidas de secção de choque do ferro bem como na determinação das características do obturador e do espectrômetro de tempo de voo está mostrado na figura 5.

A fonte de nêutrons térmicos utilizada na experiência foi

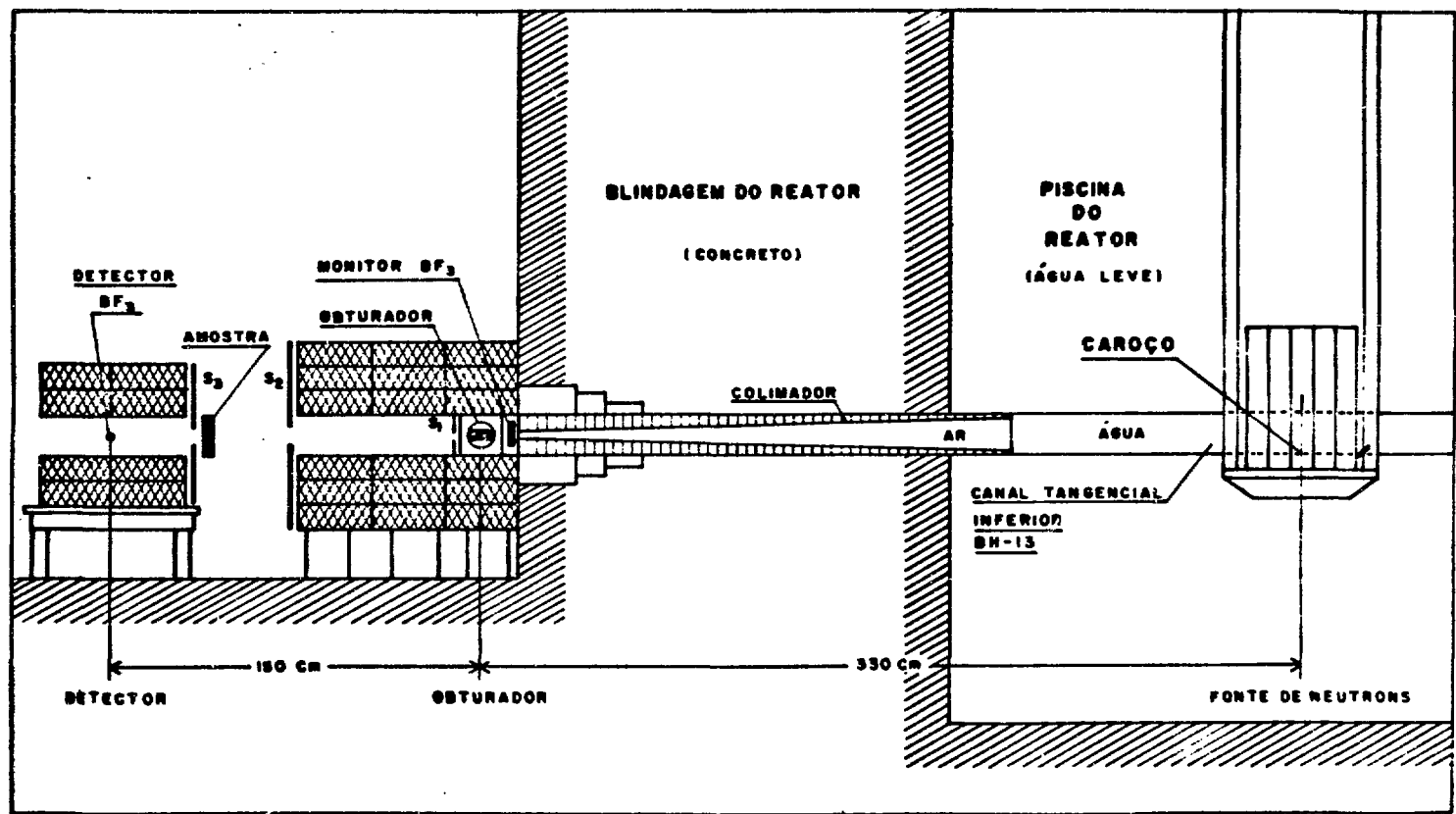


FIGURA 5

Fonte de nêutrons e arranjo experimental do espectrômetro de tempo de vôo para medidas de transmissão de nêutrons lentos.

o reator de pesquisa instalado no Instituto de Energia Atômica (Sa58). Este reator, foi projetado e construído pela Babcock-Wilcox Co. para operar continuamente a uma potência de 5 Mw, é do tipo piscina (Br52)(Ch58), tendo como material combustível urânio enriquecido em 20% no seu isótopo 235 e como moderador e refrigerante água leve. O fluxo máximo de nêutrons apresentado no centro de seu caroço é da ordem de  $10^{14}$  nêutrons/cm<sup>2</sup>.seg, sendo o fluxo térmico de  $4 \times 10^{13}$  nêutrons/cm<sup>2</sup>. seg (Di60).

Durante a maioria das medidas deste trabalho o reator operou na potência de 2 Mw, 8 horas por dia durante 3 dias por semana, apresentando no núcleo um fluxo de nêutrons térmicos da ordem de  $2 \times 10^{13}$  nêutrons/cm<sup>2</sup>.seg.

O equipamento do espectrômetro de tempo de voo foi instalado junto ao reator em frente a um de seus catorze canais experimentais. Foi escolhido um canal tangencial porque tal canal, que não "vê" diretamente o núcleo do reator, apresenta fluxos mais baixos de nêutrons rápidos e de raios gama do que os canais radiais.

Uma medida do espectro de nêutrons emergentes do canal experimental, foi feita (Vi68) utilizando-se o próprio espectrômetro de tempo de voo, cujas características foram previamente determinadas. Na figura 6 é mostrado esse espectro como função de comprimento de onda dos nêutrons. A curva se aproxima de uma Maxwelliana, com uma temperatura de cerca de 357°K.

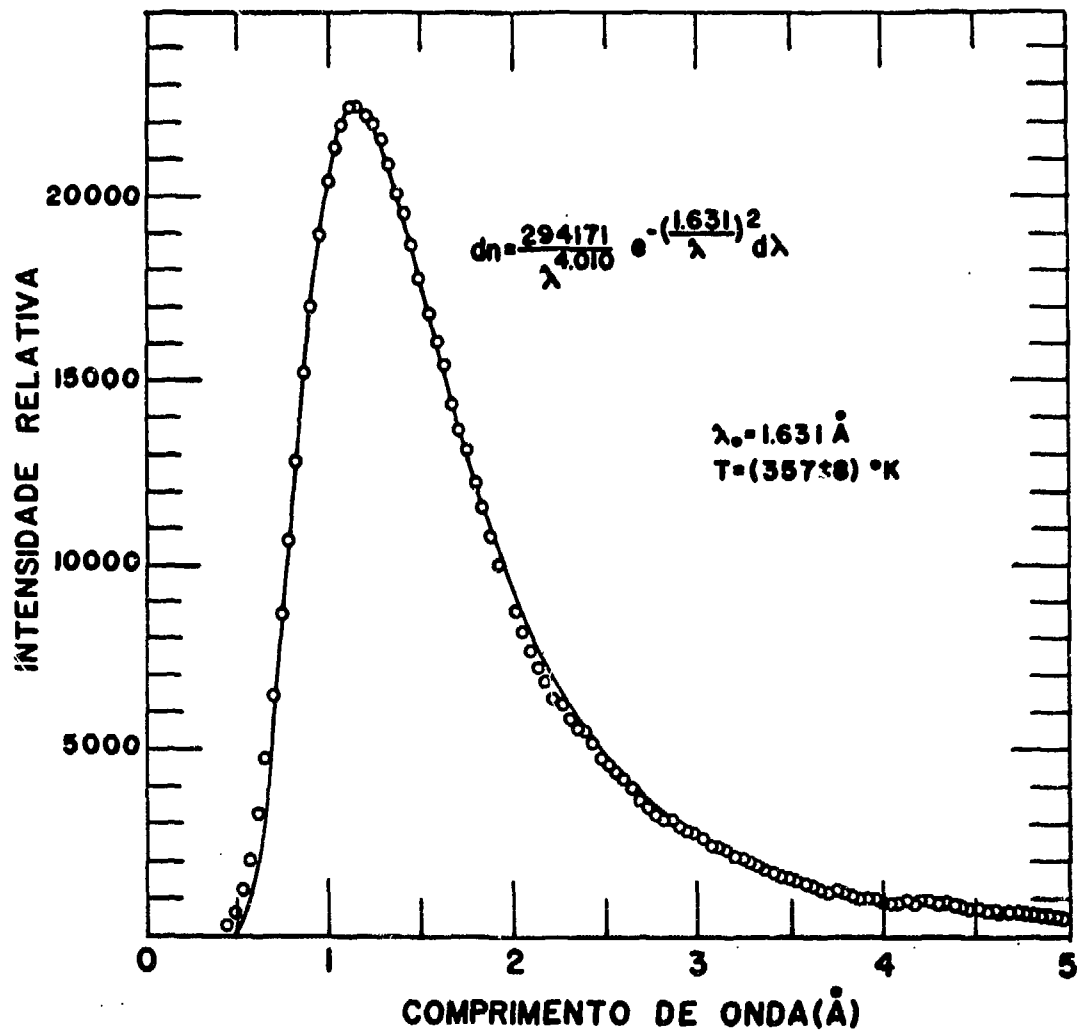


FIGURA 6

Espectro de nêutrons térmicos emergente do canal experimental utilizado.

O canal tangencial, como os demais canais experimentais do reator, é da forma cilíndrica, com um diâmetro de 6" e comprimento 300 cm até a parede externa da blindagem do reator. Foi usado um colimador feito com uma mistura de ácido bórico e políester com 2 metros de comprimento e cuja secção interna é um tronco de pirâmide cuja a base, voltada para a fonte de nêutrons, é um quadrado de lado 5cm e a base voltada para a parede externa do reator é um retângulo de lados 1cm e 2,5cm.

O obturador se acha instalado de maneira que o seu eixo de rotação fique numa posição perpendicular do feixe, a uma distância de 30cm da face externa da blindagem do reator ; o fluxo de nêutrons térmicos na posição onde se encontra o obturador é de  $2 \times 10^8 \text{ n/cm}^2 \cdot \text{seg}$  e apresenta uma razão de cádmio de 16 conforme medidas feitas através da ativação de fôlhas de ouro.

O detetor do feixe pulsado é colocado a uma distância determinada do obturador, com seu eixo longitudinal paralelo ao eixo de rotação do mesmo, (perpendicular ao feixe de nêutrons). A distância entre o centro do obturador e o detetor, distância de vôo, é variável, sendo usadas durante a experiência as distâncias de 1,50 e 3,00 m.

O detetor está recoberto com uma fôlha de cádmio de espessura 0,8mm, tendo uma janela do tamanho do feixe. Três diafragmas de cádmio laminado, indicados por  $S_1$ ,  $S_2$ , e  $S_3$  na figura 5, são usados para definir o feixe.

A blindagem do obturador, para se diminuir o efeito do feixe espalhado, bem como a blindagem do detetor, para se diminuir

a radiação de fundo, foram feitas com caixas de madeira cheias de uma mistura de parafina e ácido bórico, com dimensões 10 x 20 x 40 cm. Uma blindagem maior, constituída de uma camada de 10 cm de parafina e ácido bórico e uma de chumbo, é usada para absorver os feixes de nêutrons e de raios gama depois da sua passagem pelo detetor.

A utilização de apenas um detetor e do colimador acima descrito não dão a melhor eficiência para uma dada resolução do espectrômetro; entretanto este arranjo é conveniente em experiências para a determinação das características do espectrômetro, bem como em medidas de secção de choque total. Um colimador especialmente projetado e um conjunto de detetores serão usados quando da instalação do espectrômetro de tempo de voo associado a um filtro de Berílio para experiências de espalhamento inelástico de nêutrons (Am67).

### II.3 - CALIBRAÇÃO DA ESCALA DE TEMPO

Considera-se o espectrômetro de tempo de voo calibrado -- quando a medida do tempo de voo de nêutrons de velocidade (ou comprimento de onda) bem conhecida coincidir com o calculado -- através das expressões mostradas no apêndice I, independentemente da velocidade de rotação do obturador; para que isto ocorra é necessário que o analisador de tempo seja disparado exatamente no instante em que o pulso de nêutrons é formado no centro do obturador, pois é a partir deste ponto que se deve medir a distância de voo (La59, Ma59).

Como o analisador de tempo é disparado com o pulso proveniente do captor magnético, deve-se ajustar as posições do imã e da bobina de maneira que o pulso de disparo seja gerado exatamente no instante da formação do pulso de nêutrons no centro do obturador.

Caso isto não ocorra o pulso de disparo será formado uma fração de revolução antes (ou depois) correspondendo a um defasamento angular  $\Delta\theta$  entre o imã e a bobina no instante da formação do pulso de nêutrons. Haverá, portanto, uma diferença em tempo,  $\Delta t_1$ , inversamente proporcional a velocidade do rotor,  $\omega$ , entre o pulso de zero fornecido pelo captor e o "zero" correto para as medidas de tempo de voo. Esta diferença é dada pela relação  $\Delta t_1 = \frac{\Delta\theta}{\omega}$ , da qual decorre que se  $\Delta\theta \neq 0$ , a calibração variará com a velocidade de rotação do obturador, embora o defasamento angular seja fixo para um determinado ajuste do captor magnético.

A posição da bobina deve ser ajustada de maneira a tornar o defasamento angular nulo,  $\Delta\theta = 0$ , fazendo com que o espectrômetro fique calibrado.

Na região de energia de utilização do espectrômetro, os nêutrons de comprimento de onda bem conhecidos são aqueles correspondentes aos degraus de Bragg observados numa medida da secção de choque total de uma amostra policristalina. Os degraus aparecem como função do comprimento de onda (ou energia) na curva de transmissão observada e na curva de secção de choque total obtida a partir dela.



O estudo da posição característica desses degraus de Bragg é considerado um excelente método para se calibrar espectrômetros. O método foi sugerido e utilizado por diversos autores:

Hughes(Hu53) sugere a medida da secção de choque total, enquanto Egelstaff(Eg54) usou o inverso da transmissão em escala logaritmica e outros autores utilizaram a curva de transmissão medida (Go58,De61), o inverso da transmissão em escala linear (Ni62) e a intensidade transmitida (Ni62). Em virtude destas opções um estudo detalhado do método de calibração através dos degraus de Bragg foi feito neste laboratório (Am68,Am69) com a finalidade de se determinar qual a melhor curva a ser usada, concluindo-se que a curva de transmissão observada é a que apresenta os resultados de uma maneira mais simples e precisa.

Em vista desse resultado usou-se na calibração do nosso espectrômetro a medida da curva de transmissão de uma amostra de ferro policristalino na região de comprimento de onda do seu último degrau de Bragg (Bragg cut-off),  $4,046\text{\AA}$ , correspondente ao plano (110).

A resolução do aparelho, que como veremos adiante varia -- com a velocidade de rotação do obturador, afeta o degrau, considerado teoricamente como descontínuo, arredondando os extremos da curva observada e dando à descontinuidade uma inclinação finita, decorrendo daí a dificuldade de se saber que ponto do degrau medido deve ser tomado para calibração. Nas referências -- (Am68, Am69) são dadas expressões que permitem determinar o ponto correto de calibração como função de altura da descontinuidade e da resolução do aparelho.

Mediu-se a curva de transmissão do ferro na região do de--

grau (110) para diversas velocidades de rotação do obturador a fim de se tornar a calibração independente da mesma. O tempo de v̄o obtido experimentalmente para os n̄utrons correspondentes - ao degrau (110),  $4.046\text{\AA}$ , foi colocado em um gr̄fico como função de  $1/\omega$ . O c̄eficiente angular da melhor reta traçada pelos pontos corresponde ao defazamento  $\Delta\phi$ ; a reta deve passar pelo valor esperado tēoricamente para  $1/\omega = 0$ .

Por sucessivos ajustes da posiç̄o da bobina foi possıvel se chegar a uma reta que apresentasse uma inclinaç̄o zero, portanto  $\Delta\phi = 0$ , correspondente a uma calibração independente da velocidade de rotaç̄o do rotor, dentro de 4 microsegundos. Isto pode ser visto na figura 7 onde s̄o mostradas as sucessivas retas de calibração obtidas usando-se o degrau (110) do ferro.

Observa-se que embora a posiç̄o do degrau n̄o varie com a velocidade do obturador, o valor do tempo de v̄o medido experimentalmente n̄o concorda com o calculado, havendo entre ēies um deslocamento fixo  $\Delta t_2$ , independente da velocidade do obturador, mas que depende da dist̄ncia entre a bobina e o disco onde est̄ colocado o im̄.

Observa-se que a variaç̄o desta dist̄ncia ao longo da perpendicular ao disco acarreta uma variaç̄o no ponto de calibração e como pode ser visto na figura 7 onde s̄o mostrados os resultados para duas dist̄ncias, 0,5mm e 3,0mm, o deslocamento do ponto de calibração medido em relaç̄o ao tērico cresce quando se aumenta essa dist̄ncia. Para a dist̄ncia mınima temos  $\Delta t_2 = 38$  - microsegundos, o qual ē considerado como uma constante de calibração na escala de tempo e foi levado em conta nas f̄rmulas deduzidas para fazer a convers̄o do n̄mero de canal para compriman-

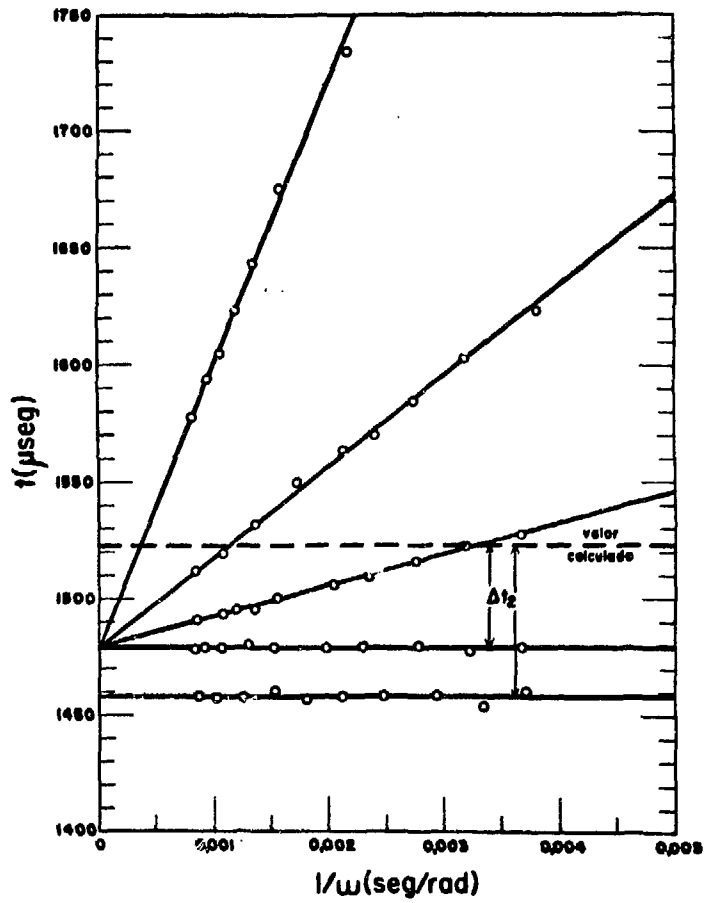


FIGURA 7

Curvas de calibração da escala de tempo do espectrômetro de tempo de voo. Os resultados são para duas distâncias entre a bobina e o ímã: 0,5 mm e 3,0 mm. Na posição mais próxima temos  $\Delta t_2 = 38 \pm 2 \mu\text{seg}$ .

to da onda, as quais são apresentadas no apêndice I.

Atrazos em pulsos provenientes de captor magnético foram também observados por Brugger (Br61) que detetou os mesmos atrasos da observação dos raios gama transmitidos pelo obturador no instante da formação do pulso de nêutrons. Segundo ele estes -- atrasos são devidos ao circuito LC do captor magnético e ao cabo de acoplamento.

Estando o espectrômetro de tempo de voo calibrado foi feita uma verificação da linearidade da escala de tempo através da observação de outros degraus do ferro, que estão no intervalo de 1 a  $4\text{\AA}$ , e do degrau (0002) do grafite em  $6,7\text{\AA}$ .

Observou-se que a escala é linear e, também, que a calibração é independente do comprimento de onda. A posição dos degraus não variou com a velocidade de rotação do obturador e o mesmo deslocamento  $\Delta t_2$  foi observado.

#### II.4 - CARACTERÍSTICAS OPERACIONAIS DO ESPECTRÔMETRO DE TEMPO DE VOO.

##### II.4.1 - Radiação de fundo (Background)

Como o conhecimento da radiação de fundo ou "background" é importante em medidas de secção de choque, faremos agora algumas considerações sobre o background característico do espectrômetro de tempo de voo.

O background do espectrômetro é composto de três contribuições, sendo duas dependentes do tempo e uma independente do mesmo: Uma das contribuições dependente do tempo é devida aos nêu-

trons rápidos, da região de ressonâncias e epitérmicos que passam através das placas de aço recobertas de cádmio e para os quais o rotor se comporta como uma fenda larga. A fim de se minimizar esta contribuição para o background instalamos, como já foi dito, o espectrômetro em frente a um dos canais tangenciais pois estes apresentam uma relação entre o fluxo de nêutrons térmicos para o fluxo de nêutrons rápidos maior que os canais radiais. A outra contribuição dependente do tempo é proveniente do espalhamento de nêutrons térmicos pelo rotor, pela amostra e pelas blindagens. Esta contribuição pode ser diminuída cobrindo-se com cádmio a área do detetor que não é atingida pelo feixe direto e usando diversos anteparos com pequenas fendas que definem o feixe ao longo da trajetória de voo. A contribuição independentemente do tempo é aquela devida a radiação de fundo do laboratório (salão do reator), que é minimizada com o uso de uma blindagem conveniente em volta do detetor.

Na figura 8 é mostrado o espectro de nêutrons que atravessa um absorvedor de cádmio de espessura 0,7mm (suficiente para absorver todos os nêutrons térmicos do feixe) com o obturador girando a 5240 rpm, medido com uma largura de canal de 8 microssegundos e uma distância de voo de 1,49 m.

A curva de background mostra dois pulsos largos correspondentes à abertura do obturador nas posições de  $0^\circ$  e  $180^\circ$ ; a diferença na forma dos dois pulsos bem como a assimetria em cada um é devida ao fato das fendas serem curvas. A largura destes pulsos é inversamente proporcional à velocidade de rota-

PROCESSO DE ATIVAÇÃO / CANAL

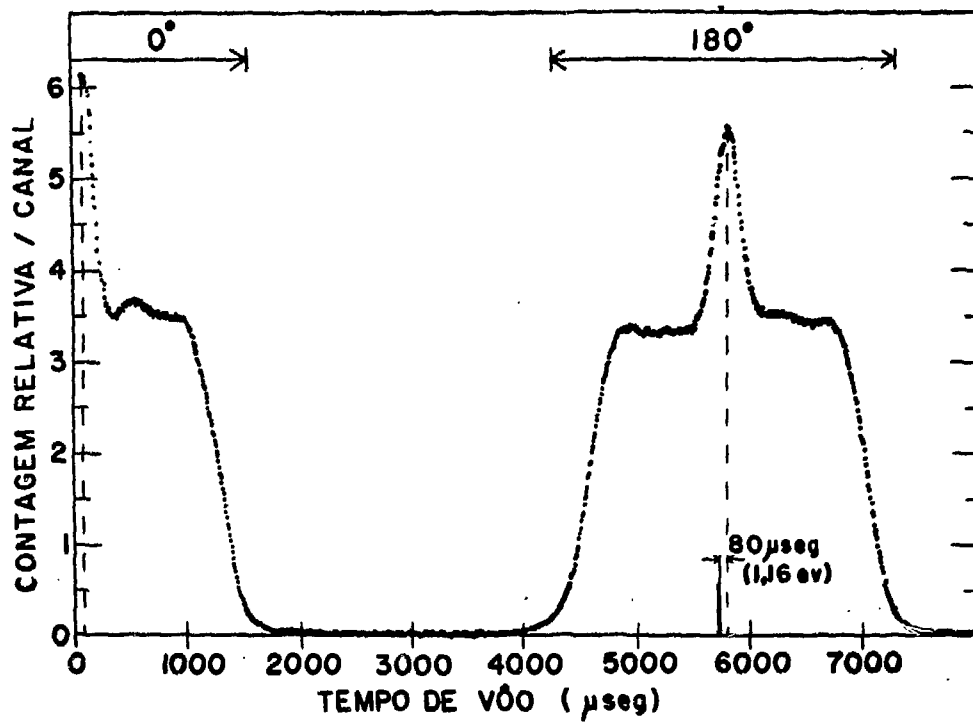


FIGURA 8

Radiação de fundo (background) medida interpondo-se uma placa de cádmio no feixe, com o obturador a 5240 rpm e uma distância de vôo de 1,49 m. A energia média dos nêutrons epitérmicos é estimada em 1,16 eV, a partir da diferença entre as posições do máximo de  $180^\circ$  e do meio período de rotação.

ção do obturador, pois depende do tempo que o mesmo fica aberto.

Os picos estreitos que aparecem superpostos aos pulsos -- largos são resultantes da colimação fina usada no nosso arranjo que faz com que apenas umas poucas fendas centrais sejam utilizadas nas posições do rotor correspondentes à transmissão máxima.

A diferença em tempo observada entre o pico do pulso correspondente a posição de  $180^\circ$  e o meio período de rotação nos possibilitou estimar a energia média dos nêutrons epitérmicos -- no feixe como 1,16 eV.

Como em medidas de secção de choque é conveniente se ter -- uma razão "sinal"/background elevada, realizamos as nossas medidas sempre na região em que o background apresenta contagens -- baixas. Pode-se fazer com que a parte do espectro de nêutrons -- de interesse coincida com esta região de baixo background variando-se a velocidade de rotação do obturador e a distância de -- vôo; pois a posição na escala de tempo do pulso de background depende praticamente apenas da velocidade de rotação, enquanto que o tempo de vôo de um determinado nêutron da região de interesse depende sômente da distância de vôo.

#### 1.4.2 - FUNÇÃO DE TRANSMISSÃO DO OBTURADOR.

A função de transmissão do obturador, que dá a probabilidade por unidade de tempo de um nêutron passar através do mesmo, é uma função  $T(t, v)$ , da velocidade do nêutron e do instante em --

que o nêutron passa pelo centro do obturador.

Estudos detalhados da função de transmissão para obturador cilíndrico com raio efetivo  $r$ , raio de curvatura das fendas  $R_0$  e velocidade angular  $\omega$  foram feitos por Larsson e colaboradores (La59) e Marseguerra e Pauli (Ma59). Estes estudos mostram que a função de transmissão pode ser considerada como função do tempo ou do ângulo de incidência entre a trajetória do nêutron e as fendas do obturador, num sistema de referência que gira junto com o rotor. A função  $T(t, v)$  ou  $T(\alpha, v)$  apresenta as seguintes propriedades:

- é simétrica em torno do ângulo  $\alpha = r \left| \frac{2\omega}{v} - \frac{1}{R_0} \right|$
- é um triângulo de base  $2d/r$  para  $v = v_0$ , sendo  $v_0$  dado pela condição  $\alpha^* = 0$  ou  $v_0 = 2\omega R_0$ .

A transmissão do obturador como uma função do comprimento de onda do nêutron e da velocidade angular do obturador é obtida pela integração (La59)(Ma59) da função  $T(t, v)$  em relação ao tempo ou a função  $T(\alpha, v)$  em relação ao ângulo  $\alpha$  e substituindo  $v$  por  $h/m\lambda$ , onde  $h$  é a constante de Planck,  $m$  a massa do nêutron e  $\lambda$  o seu comprimento de onda; resultando

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

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 do nêutron que apresenta a máxima transmissão, correspondente a velocidade  $v_0$ , dado por

$$\lambda_0 = \frac{h}{m} \frac{1}{2\omega R_0}$$

A partir das fórmulas acima pode-se determinar alguns valores característicos do obturador como a velocidade mínima e o correspondente comprimento de onda máximo dos nêutrons que são transmitidos pelo obturador na posição de  $0^\circ$ ; estes valores como função dos parâmetros do obturador são dados pelas fórmulas que seguem:

$$v_{\min} = 2\omega \left( \frac{r^2 R_0}{4dR_0 + r^2} \right)$$

$$\lambda_{\max} = \frac{h}{m} \frac{1}{2\omega} \left( \frac{4dR_0 + r^2}{r^2 R_0} \right)$$

A partir da velocidade mínima determina-se a distância de vôo máxima que pode ser usada de maneira que o nêutron mais lento de um pulso atinja o detetor antes do obturador abrir outra vez, dando origem ao pulso seguinte, evitando-se a superposição dos ciclos de análise. Esta distância máxima é dada por:

$$l_{\max} = \frac{2\pi}{\omega} v_{\min} = 4\pi \left( \frac{r^2 R_0}{4dR_0 + r^2} \right)$$

Experimentalmente a maneira mais simples de se determinar a função de transmissão do obturador consiste em estudar como um espectro conhecido de nêutrons é deformado depois de transmitido, com o rotor funcionando numa velocidade constante. Sendo o espectro incidente descrito por uma função  $I_0(\lambda)$  e o espectro medido depois do obturador, com este girando com uma velocidade angular  $\omega$ , descrito por função  $I_\omega(\lambda)$ , a função de transmissão do

obturador para esta velocidade  $\omega$  seria dada por:

$$T_{\omega}(\lambda) = \frac{I_{\omega}(\lambda)}{I_0(\lambda)}$$

Infelizmente não foi possível usar este método porque o espectro de nêutrons térmicos emergente do canal experimental onde se acha instalado o obturador não era conhecido com precisão.

Foi preciso, então recorrer a um outro método. Como a transmissão do obturador é uma função do produto  $\omega \lambda$ , ela pode ser determinada experimentalmente fixando-se uma das variáveis e estudando a intensidade transmitida como função da outra. Medimos o espectro do reator para várias velocidades de rotação do obturador, e estudamos para diversos comprimentos de onda a intensidade transmitida como função de  $\omega$ .

Para cobrirmos a região de interesse variamos a velocidade do obturador de 2.500 rpm a 11.000 rpm e tomamos comprimentos de onda de  $0,8\text{\AA}$  a  $8,2\text{\AA}$ . Para cada comprimento de onda considerado, a intensidade transmitida como uma função de  $\omega\lambda$  fornece uma curva que difere da curva de transmissão apenas por um fator constante. Se procedermos dessa maneira para diversos comprimentos de onda obteremos uma família de curvas, que depois de normalizadas dão a função de transmissão experimental. Com a finalidade de facilitar a normalização e torná-la mais significativa, as curvas foram tomadas de maneira a apresentarem regiões de superposição em  $\omega\lambda$ . A fim de diminuir o efeito da resolução foram escolhidos comprimentos de onda correspondentes a regiões do espectro emergente do reator que apresentam variações suaves.

Para a determinação experimental da função de transmissão, o

intervalo de 400 a 7.000  $\text{\AA}$ .rad/seg foi coberto por 29 curvas, uma para cada comprimento de onda, incluindo 134 pontos. O raio de curvatura das placas foi determinado a partir do máximo da curva de transmissão experimental, correspondente a abscissa  $\omega\lambda = 2.700 \text{\AA}$ .rad/seg, resultando o valor  $R_0 = 73,3 \text{ cm}$ ., este resultado apresenta um desvio de 1,6% com o valor nominal de projeto que era 74,5cm.

A curva de transmissão teórica foi calculada utilizando-se os seguintes valores  $2d = 0,397 \text{ cm}$ ,  $R_0 = 73,3 \text{ cm}$  e  $r = 4,98 \text{ cm}$ , esse valor de  $r$  é o raio efetivo do rotor, isto é a metade da distância média percorrida pelo feixe de nêutrons ao atravessar as fendas, para a colimação utilizada.

Todas as curvas experimentais foram normalizadas para a curva calculada e o resultado é apresentado na figura 9. O acôrdo entre os pontos experimentais e a curva teórica é bastante satisfatório.

Usando-se os valores de  $r$ ,  $2d$  e  $R_0$  utilizados no cálculo da curva teórica, resultou para a velocidade, do nêutron, mínima transmitida,  $v_{\min}$ , comprimento de onda máximo,  $\lambda_{\max}$ , e a distância de vôo máxima,  $l_{\max}$ , os seguintes valores:

$$v_{\min} = 0,438\omega \text{ m/seg}$$

$$\lambda_{\max} = 9040/\omega \text{\AA}$$

$$l_{\max} = 2,752 \text{ m}$$

#### II.4.3 - RESOLUÇÃO

Três contribuições devem ser consideradas na resolução to-

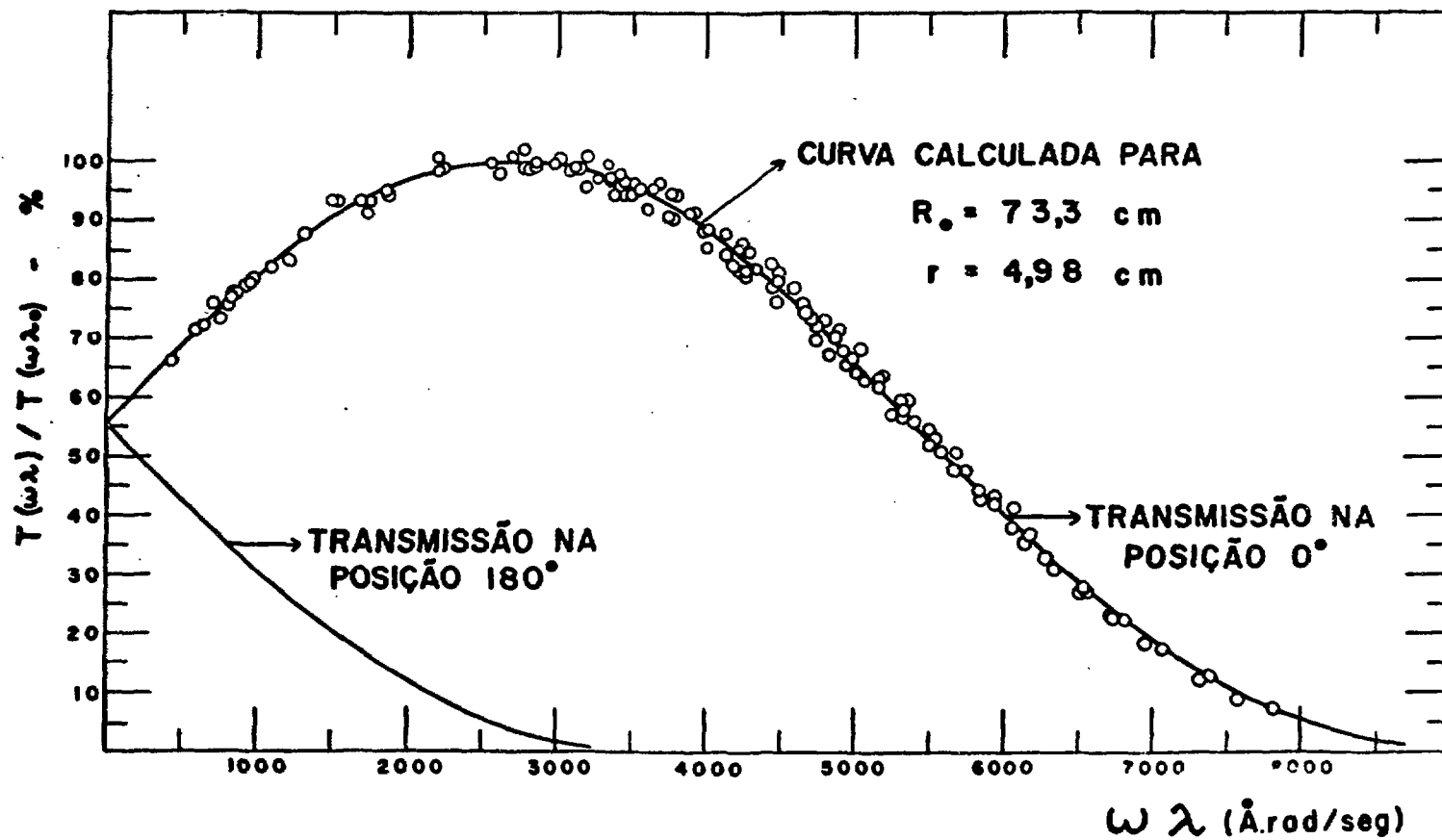


FIGURA 9  
 Função de transmissão relativa do obturador: curva teórica e os pontos experimentais.

cal  
 lar  
 que  
 são  
 a l  
 da  
 dor  
 em  
 nis  
 da  
 ma  
 dos  
 tod  
 per  
 ser  
 tan  
 sic  
 apa  
 ten  
 cur  
 are  
 alt  
 la  
 dep  
 rin

tal,  $\delta t$ , do espectrômetro de tempo de vôo: uma  $\delta t_{\omega}$ , devida à largura em tempo do pulso de nêutrons produzido pelo obturador, que depende dos parâmetros do obturador, da velocidade de rotação do mesmo e da geometria do arranjo; uma segunda  $\delta t_d$ , devida a largura finita do detetor; e finalmente outra,  $\delta t_c$ , que provém da largura de canal do analisador multicanal de tempo.

A contribuição  $\delta t_{\omega}$  é função da abertura angular do obturador,  $2d/r$ , e no nosso caso também da abertura angular do detetor em relação ao centro do obturador (He67).

Quando o obturador gira, as fendas vão varrendo as áreas emissora e detetora, sendo a função de resolução obtida através da convolução entre a função de transmissão  $T(\alpha - \alpha', v)$ , de forma triangular, e a função correspondente à emissão ou detecção -- dos nêutrons a qual, se considerarmos o fluxo constante sobre -- toda superfície emissora e a eficiência constante em toda a superfície detetora, é de forma retangular.

A função obtida, por ter um aspecto triangular, não deve ser aproximada por uma função gaussiana de mesma largura; entretanto como a aproximação por uma gaussiana tem mais sentido físico do que por um triângulo, uma vez que pequenos efeitos que aparecem na prática tendem a diminuir a largura e adicionar intensidade à cauda da curva (La59), o que se faz é aproximar a curva de resolução por uma gaussiana de mesmo máximo e mesma área (Am68, Am69). Esta função gaussiana tem uma largura na meia altura dada por  $\Gamma_{1/2} = cd/r$ ; expressando o resultado numa escala de tempo temos  $\delta t_{\omega} = c \frac{d}{\omega}$  onde  $c$  é um fator numérico que depende da geometria do sistema, sendo que para o arranjo experimental usado é  $c = 1,045$  conforme a referência (Am69). Portan

$$t_0 \delta t_{\omega} = 1,045 \frac{d}{\omega r} .$$

As outras contribuições para a resolução total são devidas ao tempo médio gasto pelo nêutron para atravessar o detector e pela largura de canal do analisador de tempo. Se o detector têm uma espessura efetiva dada por  $d_1$ , nêutrons com uma velocidade  $v$  gastarão um tempo  $\delta t_d = d_1/v$  para atravessar essa espessura. Se a espessura total do detector for pequena em relação ao livre caminho médio do nêutron no material do mesmo, a contribuição para a resolução total devida à incerteza na distância de voo pode ser considerada retangular.

A incerteza devida à largura de canal  $\delta t_c$ , também tem uma distribuição retangular.

Para se obter a resolução total somamos as três contribuições como sendo gaussianas, sendo que as distribuições retangulares foram aproximadas para gaussianas usando-se o mesmo critério adotado na aproximação de  $\delta t_{\omega}$ , isto é, gaussianas de mesma área e mesmo máximo que os retângulos (Am69).

A função resolução total é uma gaussiana, de meia largura

$$\delta t = \sqrt{(\delta t_{\omega})^2 + 0.8825\{(\delta t_d)^2 + (\delta t_c)^2\}}$$

ou

$$\delta t = \sqrt{\left(1,045 \frac{d}{\omega r}\right)^2 + 0.8825\left\{\left(\frac{d_1}{v}\right)^2 + (\delta t_c)^2\right\}}$$

Para a determinação experimental da resolução total,  $\delta t$ , do espectrômetro, mediu-se para vários valores de  $\omega$  a transmissão através de uma amostra de ferro policristalino na região do último degrau de Bragg, relativo ao conjunto de planos (110), correspondendo a nêutrons de comprimento de onda 4,046 Å. Teoricamente, como foi dito antes, um degrau de Bragg numa curva de

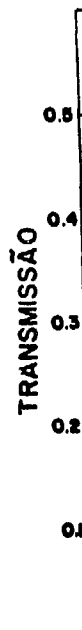
transmissão apresenta-se como uma descontinuidade vertical; entretanto a largura finita da resolução do espectrômetro tende a arredondar as bordas do degrau e a dar uma inclinação finita a descontinuidade.

Na figura 10 vemos as curvas de transmissão de uma amostra de ferro para duas velocidades de obturador. A projeção sobre o eixo dos tempos de voo, da tangente a curva experimental medida, pelo ponto de inflexão da mesma, como é mostrado na figura 10, dá o valor da largura na meia altura multiplicado por 1,0645 se a função de resolução for considerada como tendo uma forma gaussiana (Am68).

Na tabela I são apresentados os resultados obtidos através da medida de transmissão do degrau (110) do ferro para diversas velocidades de rotação. Nas medidas foi utilizada a distância de voo de 1,50 metros, largura de canal,  $\delta t_c$ , de 8  $\mu$ seg e um detector  $^{10}\text{BF}_3$  cilíndrico, de diâmetro interno 2,34 cm; este detetor pode ser considerado fino no sentido que a absorção é uma função linear da espessura; nestas condições a espessura efetiva do detetor é igual a sua espessura geométrica média,  $d_1 = 1,84$  cm. Usando-se estes valores, e o da velocidade correspondente a nêutrons de  $4,046 \text{ \AA}$  que é  $v = 97767 \text{ cm/seg}$ , a expressão para a resolução total do espectrômetro resulta

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

Na figura 11 são mostradas a curva de resolução como função da velocidade angular calculada pela expressão acima, e as larguras de resolução obtidas experimentalmente para diversos  $\omega$ . A boa concordância entre a curva calculada e os pontos experimentais



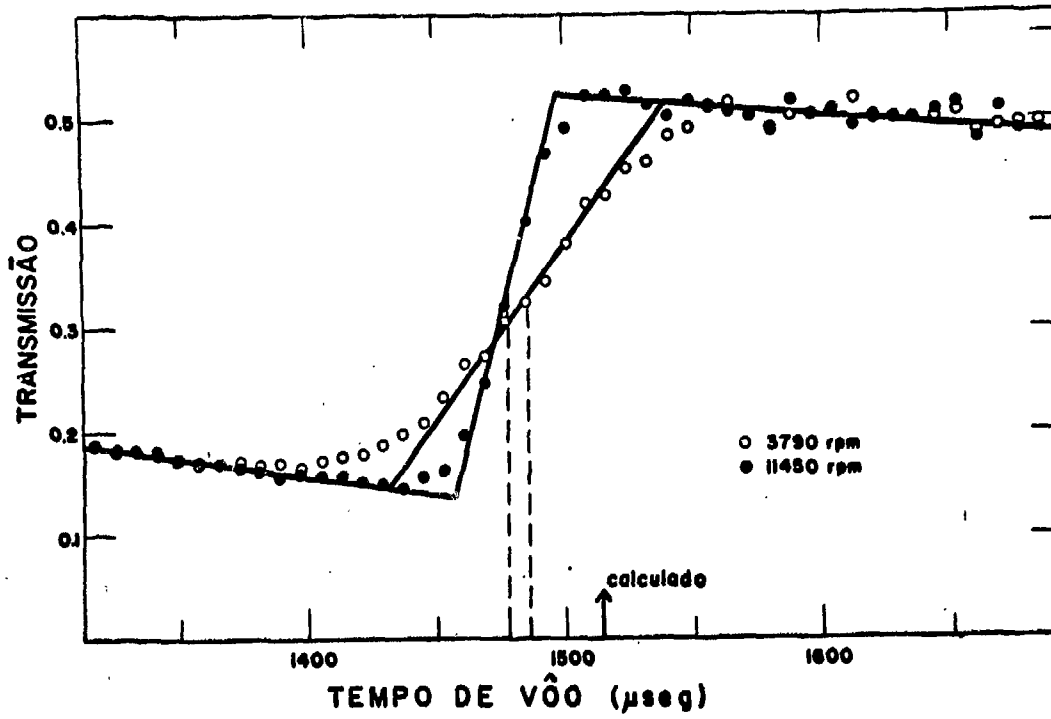


FIGURA 10

Transmissão do ferro policristalino no degrau de Bragg correspondente ao conjunto de planos (110) para duas velocidades de rotação do obturador.



TABELA I

Resolução experimental  $\delta t$  em função de  $1/\omega$ ,  
para nêutrons de  $4,046\text{\AA}$  ( $\delta t_c = 8\mu\text{seg}$ ).

AMOSTRA (*)	VELOCIDADE DO OBTURADOR RPM	$1/\omega$ $\text{rad}^{-1} \text{ seg}$	$\delta t$ $\mu\text{seg}$	$\delta t/c$
Fe - 1	10701	0,00089	$38 \pm 4$	2,5%
Fe - 2	10050	0,00095	$44 \pm 4$	2,8%
Fe - 1	7887	0,00121	$53 \pm 4$	3,4%
Fe - 2	7035	0,00135	$58 \pm 4$	3,8%
Fe - 1	6400	0,00149	$60 \pm 5$	3,9%
Fe - 2	5355	0,00177	$76 \pm 5$	4,9%
Fe - 1	4800	0,00200	$85 \pm 5$	5,5%
Fe - 1	4193	0,00228	$94 \pm 6$	6,1%
Fe - 1	3635	0,00263	$113 \pm 7$	7,4%
Fe - 1	2830	0,00338	$147 \pm 7$	9,6%
Fe - 1	2362	0,00404	$167 \pm 8$	10,9%

(\*) Fe - 1 = ferro forjado tipo "Armco"

Fe - 2 = ferro em pó p.a. "Carlo Erba", com grãos de dimen-  
sões da ordem de 2 microns

$\delta t$  (microseg)

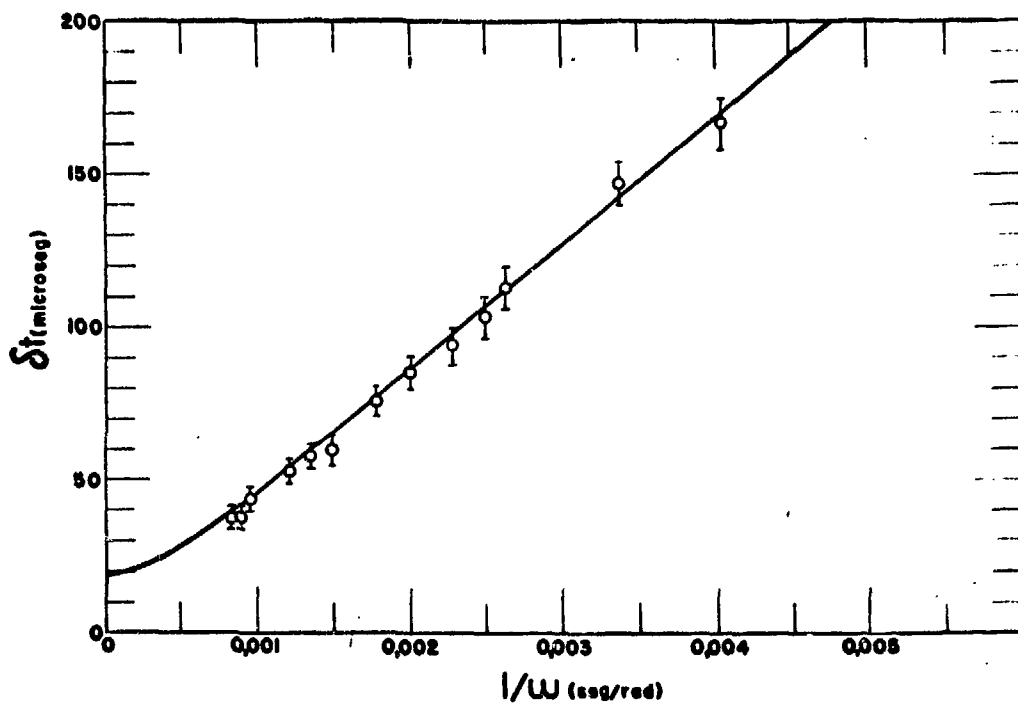


FIGURA 11

Resolução do espectrômetro em função de  $1/W$ : curva teórica e pontos experimentais para nêutrons de  $4,046 \text{ \AA}$  e para uma largura de canal de 8 microsegundos.

indica que a aproximação das diversas contribuições por gaussianas é válida.

Como os nossos resultados são sempre apresentados com o eixo das abcissas em comprimento de onda, é conveniente saber-se qual a resolução do aparelho nesta variável. A relação entre o tempo de voo,  $t$ , de um nêutron para o seu comprimento de onda, é dada por  $\lambda = \frac{h}{m\lambda} t$  onde  $h$  é a constante de Planck,  $m$  a massa do nêutron e  $\lambda$  a distância de voo; então a resolução em comprimento de onda é dada por

$$\delta\lambda = \frac{h}{m} \frac{\delta t}{\lambda}$$

Na figura 12a e 12b são mostradas famílias de curva em função de  $\lambda$ , tendo como parâmetro a velocidade de rotação do obturador, para largura de canal de 8  $\mu$ seg e as distâncias de voo de 1,50 e 3,00 metros.



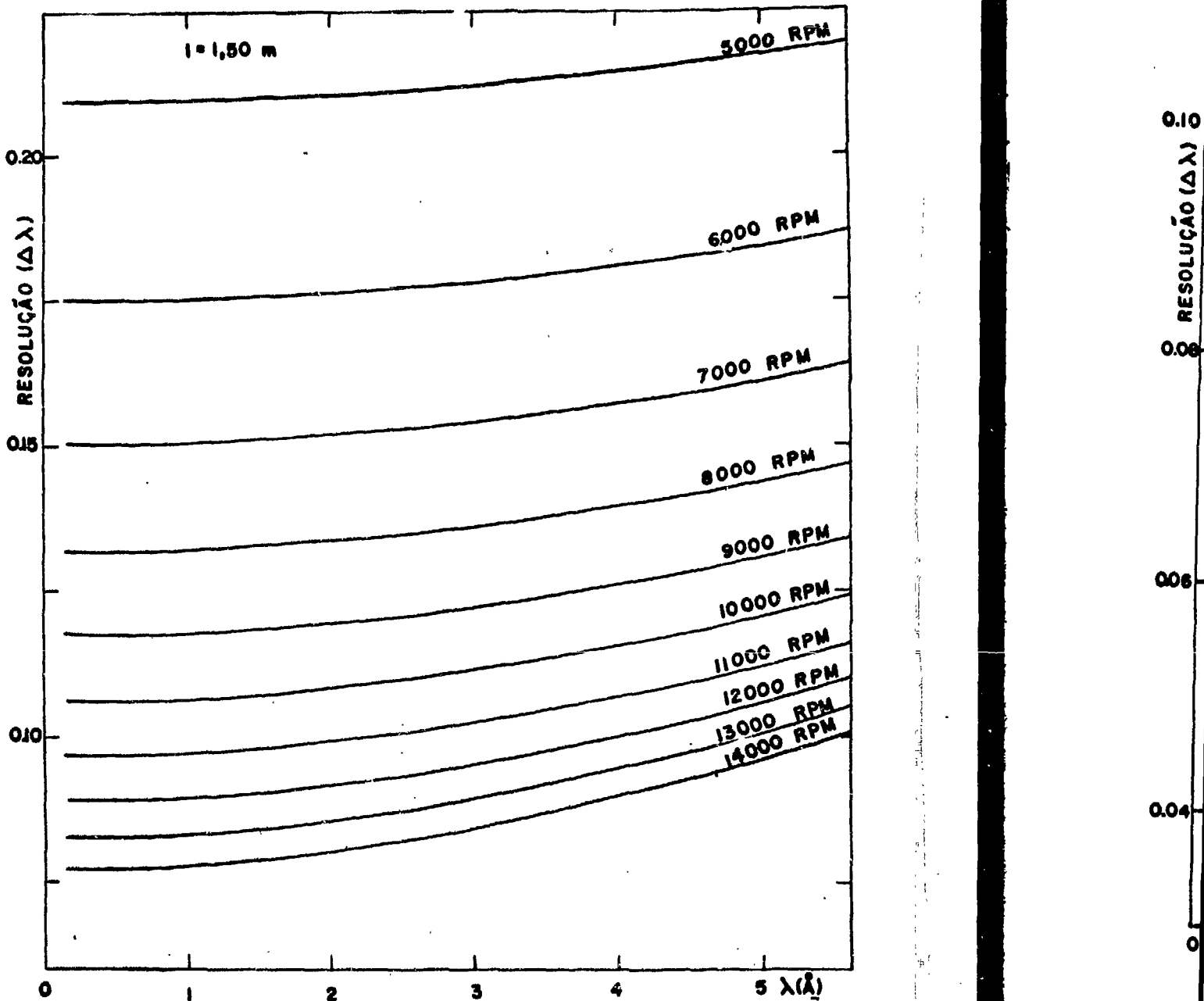


FIGURA 12(a)

Resolução do espectrômetro, em função do comprimento de onda do nêutron, para  $\delta t_c = 8 \mu\text{seg}$  e várias velocidades de rotação do obturador (distância de vôo: 1,50 m).

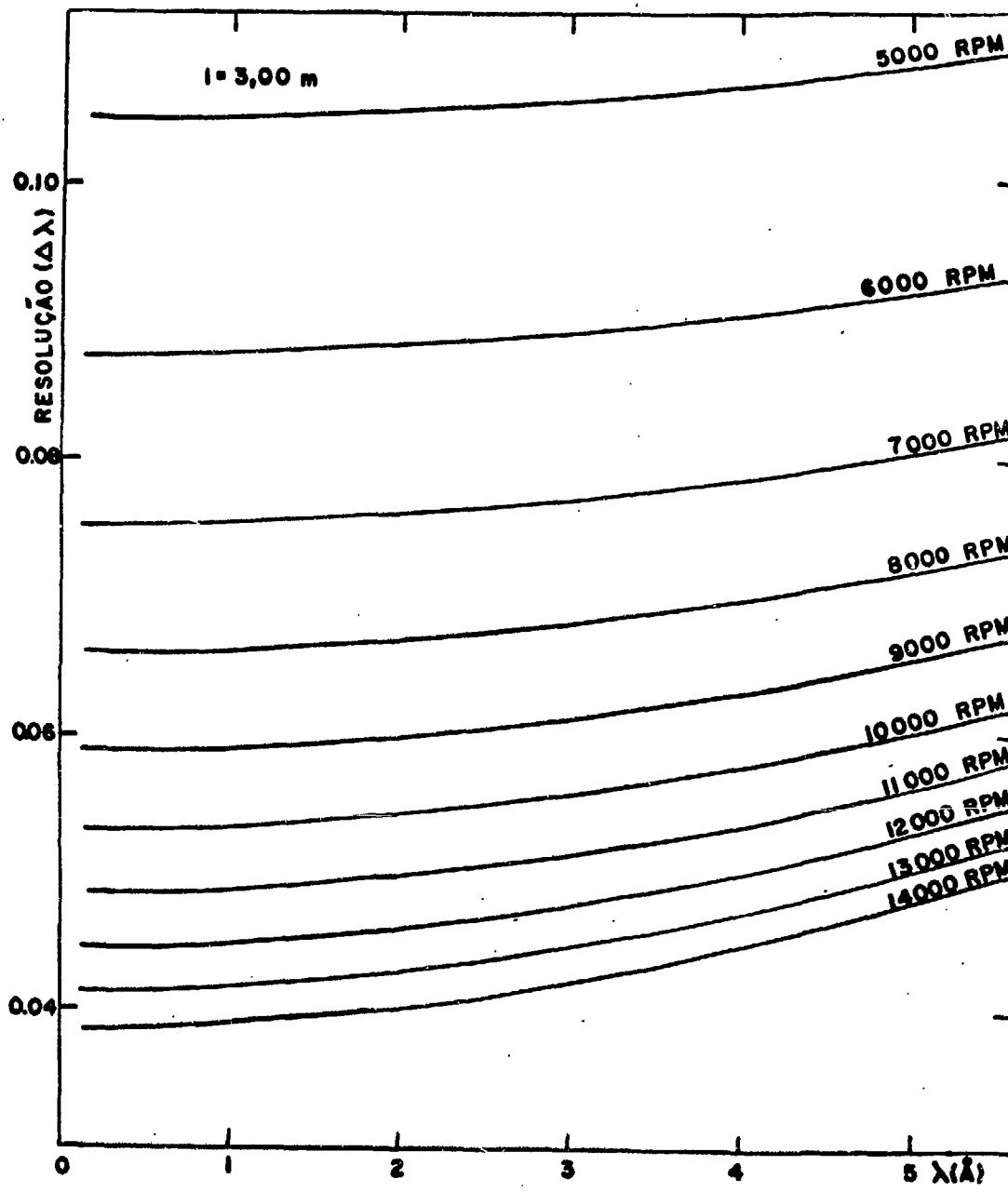


FIGURA 12(b)

Resolução do espectrômetro, em função do comprimento de onda do nêutron, para  $\delta t_c = 8 \text{ } \mu\text{seg}$ . e várias velocidades de rotação do obturador (distância de vô: 3,00 m).

CA

II

de

qu

de

um

te

Se

### CAPÍTULO III - MEDIDA DA SECÇÃO DE CHOQUE TOTAL:

#### PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL, OBTENÇÃO E TRATAMEN- TO DE DADOS.

##### III.1 - MÉTODO DE MEDIDA

Para qualquer energia (ou comprimento de onda) a secção de choque total pode ser determinada medindo-se a atenuação -- que ocorre com um feixe de nêutrons que atravessa uma amostra de espessura conhecida. Mede-se a intensidade do feixe com um detetor de nêutrons; em seguida faz-se outra medida da intensidade interpondo-se a amostra entre a fonte e o detetor. Se chamarmos as intensidades por  $I_0$  e  $I$  respectivamente,

a razão  $I/I_0$  é chamada transmissão, e a secção de choque total é dada pela relação

$$(III.1) \quad \sigma = \frac{1}{Nx} \ln \frac{1}{T}$$

onde  $N$  é o número de núcleos do alvo por  $\text{cm}^3$

$x$  é a espessura da amostra

e  $T$  é a transmissão.

Este método para se determinar secção de choque é denominado método da transmissão.

Embora o princípio da medida seja muito simples, na prática é necessária uma série de precauções para se obter resultados precisos e reprodutíveis.

A medida deve ser feita em condições de boa geometria, isto é, o ângulo sólido segundo o qual a amostra subtende o detetor e vice-versa deve ser pequeno, de modo que todo o nêutron do feixe incidente que seja absorvido ou espalhado pela amostra não atinja o detetor.

O número de átomos alvo por  $\text{cm}^3$  na amostra, bem como a espessura da mesma devem ser determinados com boa precisão pois um erro na determinação destes parâmetros da amostra acarretará um erro sistemático na secção de choque.

A resolução do espectrômetro precisa ser conhecida com precisão para se poder saber qual o seu efeito na medida de secção de choque.

As secções de choque totais medidas por transmissão podem ser determinadas com bastante precisão, pois tomando-se as precauções acima o erro na secção de choque fica apenas dependente dos erros estatísticos nas medidas de intensidades, os ---

quais podem ser reduzidos aumentando-se os tempos de contagem.

### III.2 - AMOSTRA E PORTA AMOSTRA

#### a) Amostra

A amostra de ferro utilizada no presente trabalho foi fornecida pela Companhia Carlo Erba, Milão, Italia; o ferro, obtido através de redução por hidrogênio, é apresentado na forma de pó cujos grãos, medidos com microscópio, variavam de 0,2 a 80 microns, tendo em média 2 microns.

A pureza da amostra foi verificada através de uma análise espectrográfica, encontrando-se os seguintes resultados:

Mn	100 ppm
Mg	500 ppm
Ni	150 ppm
Cu	100 ppm
P	< 10 ppm

Em vista desses resultados podemos afirmar que a nossa amostra tem uma pureza superior a 99%, e que estas impurezas, como têm secções de choque baixas não irão causar problemas na medida da secção de choque total do ferro.

#### b) Porta amostra

Para fazer-se a medida da secção de choque por transmissão a amostra foi colocada em um recipiente de alumínio com forma de um paralelepipedo; durante a realização das medidas utilizaram-se duas caixas porta amostras, uma com dimensões internas 10,00; 4,95 e 2,95cm e outra com 6,02; 4,95 e 1,98cm; sendo que 2,95 e 1,98cm são as espessuras de cada caixa da direção do feixe.



As caixas porta amostra foram feitas de alumínio por ser este elemento relativamente transparente a nêutrons; as paredes das caixas que são atravessadas pelo feixe possuem uma espessura total de 0,3cm, apresentando uma transmissão da ordem de 98%, para nêutrons no intervalo de comprimento de onda de 0,9 a 5,5Å.

A espessura de amostra de 2,95 cm foi escolhida de maneira a ter uma transmissão baixa (entre 0,1 e 0,4) na região de comprimento de onda estudada, pois neste caso o erro estatístico é reduzido a um mínimo (Ro48); por outro lado a espessura de 1,98 foi escolhida para fazer com que o degrau de Bragg do ferro correspondente ao plano 110 apresentasse uma altura máxima a fim de permitir um estudo mais detalhado da influência da resolução na medida da secção de choque.

#### c) Preparação da Amostra

Afim de se evitar a presença de água (umidade) na amostra, o que acarretaria uma elevação na secção de choque medida, o ferro policristalino foi secado a vácuo antes de ser colocado na porta amostra.

Durante a colocação do pó amostra na caixa de alumínio vai-se agitando a mesma manualmente afim de se assegurar uma boa compactação e obter a máxima uniformidade possível na densidade da amostra.

Quando o porta amostra está totalmente cheio, o mesmo é colocado novamente no vácuo com a finalidade de se remover qualquer umidade absorvida durante a preparação da amostra.

Depois dessa nova secagem, colocou-se a tampa na caixa

20

porta amostra e vedou-se com fita colante.

Foi tomado o cuidado adicional de se guardar a amostra no secador durante o intervalo entre as medidas.

### III.3 - DETERMINAÇÃO DO NÚMERO DE ÁTOMOS POR BARN.

O número de átomos por barn,  $n$ , utilizado na fórmula para o cálculo da seção de choque total é dado por

$$(III.2) \quad n = N \cdot x = N_0 \cdot 10^{-24} \frac{\rho}{A} \cdot x$$

onde  $N$  é o número de átomos por  $\text{cm}^3$ ,  $x$  é a espessura da amostra em cm,  $\rho$  a densidade do material em  $\text{g}/\text{cm}^3$ ,  $N_0$  o número de Avogadro e  $A$  a massa atômica em gramas.

No caso de amostras em pó a densidade a ser usada no cálculo não é aquela tabelada para o material, uma vez que a densidade da mesma depende da compactação do pó. Em vista disso, determinamos a densidade de cada amostra através de medidas de peso e volume.

O volume das caixas porta amostras, portanto o volume das amostras, foi determinado de duas maneiras diferentes, uma medindo-se as dimensões internas das caixas e a seguir calculando-se o volume; outra enchendo-se a caixa com água e determinando-se a massa de água contida na mesma, sendo o volume então obtido através da massa de água determinada e da sua densidade tabelada para a temperatura na qual efetuamos a medição. Os dois métodos deram resultados concordantes, sendo que o erro na determinação dos volumes é da ordem de 0,5%.

Para a determinação da massa da amostra pesa-se a caixa de alumínio vazia e depois cheia do material amostra. A massa da -

amostra é obtida através da diferença entre as duas pesagens. O erro na determinação da massa é menor que 0,1%.

A espessura das amostras foi determinada medindo-se com um paquímetro a distância entre dois lados das caixas de alumínio que são perpendiculares ao feixe; o erro na espessura é da ordem de 0,6%.

O erro no número de átomos por barn foi calculado pela expressão:

$$\Delta_n = \sqrt{\left(\frac{N_0 \cdot 10^{-24}}{A} \cdot \frac{x}{V}\right)^2 \Delta_m^2 + \left(\frac{N_0 \cdot 10^{-24}}{A} \cdot \frac{m}{V}\right)^2 \Delta_x^2 + \left(\frac{N_0 \cdot 10^{-24}}{V^2} \cdot \frac{mx}{A}\right)^2 \Delta_V^2}$$

a qual é deduzida a partir da fórmula (III.2) utilizando-se as regras usuais de propagação de erros.

Verificou-se a uniformidade da compactação do pó na amostra, bem como sua espessura medindo-se a transmissão da amostra em diversos pontos da mesma, utilizando-se o espectrômetro de cristal. As transmissões de um ponto para outro da mesma amostra variam menos de 0,5%, resultado este que nos assegura que as amostras estão bem preparadas para serem utilizadas nas medidas de secção de choque total por transmissão.

#### III.4 - OBTENÇÃO DOS DADOS EXPERIMENTAIS.

A secção de choque total do ferro foi medida no intervalo de comprimento de onda entre 0,9 e 5,5 Å. Não mediu-se para comprimentos de onda menores de 0,9 Å por ser este o limite inferior de utilização do espectrômetro, limite este devido ao fato das placas do obturador serem cadmiadas e portanto transparentes para nêutrons de comprimentos de onda menores que 0,9 Å.

Embora o limite superior de utilização do espectrômetro seja da ordem de  $10 \text{ \AA}$ , dado pela baixa intensidade do feixe de nêutrons do reator nessa região de comprimentos de onda, efetuamos nossa medida até 5,5 por ser a região de interesse.

Como a secção de choque total do ferro policristalino apresenta uma série de descontinuidades devidas a efeitos cristalinos, procurou-se realizar a medida com boa resolução; tendo isto em mente efetuamos as medidas com velocidades angulares de rotação do obturador elevadas (entre 10.000 e 13.000 rpm) pois, como já foi visto, quanto maior a velocidade de rotação melhor será a resolução.

Utilizando-se estas velocidades de rotação, para que o intervalo de comprimentos de onda entre 0,9 e 5,5 coincida com a região de baixo "background" é necessário se realizar as medidas em duas distâncias de vôo: 3,00 metros para cobrir a região de 0,9 a 3,0  $\text{ \AA}$  e 1,50 metros para a região de 3,0 a 5,5  $\text{ \AA}$ .

Ainda com a finalidade de se realizar a medida com boa resolução utilizamos uma largura de canal (8 microsegundos) relativamente estreita no analisador de tempo.

Quando se mede a secção de choque de amostras policristalinas, as mesmas devem ser colocadas mais próximas ao detetor, como está mostrado na figura 5, a fim de se evitar o espalhamento em pequenos ângulos, que será discutido posteriormente. A amostra deve ser colocada de tal maneira que suas faces fiquem normais a direção do feixe pois se isto não ocorrer estaremos introduzindo um erro na medida da transmissão pois a espessura efetiva da amostra atravessada pelo feixe será maior que a calculada.

A seguir descreveremos o procedimento experimental para a determinação de secção de choque total por transmissão. Mede-se inicialmente, durante um certo tempo, o espectro direto tomando-se o cuidado de colocar entre a fonte de nêutrons e o detector uma caixa porta amostra vazia idêntica aquela na qual se acha acondicionada a amostra. Em seguida mede-se o background correspondente, colocando-se uma placa de cádmio entre o porta amostra vazio e o detector; é usada uma placa de espessura 0,7 mm -- que é suficiente para retirar todos os nêutrons térmicos do feixe, transmitindo parcialmente os nêutrons epitérmicos.

A seguir retira-se a placa de cádmio e substitui-se o porta amostra vazio por aquele que contém a amostra e faz-se a medida do espectro transmitido. Finalmente determina-se o background da medida com amostra de maneira idêntica aquela feita para o feixe direto.

O tempo de contagem de cada uma das medidas é escolhido de acordo com o ritmo de contagens, de maneira a tornar mínimo o erro estatístico na determinação da transmissão e portanto da secção de choque.

Para cada medida são anotados: o tempo de contagem, o número de contagens acumuladas pelo canal monitor nesse intervalo de tempo, o número total de rotações do obturador (igual ao número total de pulsos de nêutrons) e a velocidade de rotação do obturador.

Deve-se anotar as contagens do monitor pois as contagens acumuladas em cada canal, em cada medida, são normalizadas pa-

ra um certo número de contagens do monitor e não como função do tempo, afim de se evitar que possíveis flutuações na potência do reator, influam na determinação da secção de choque.

O número total de pulsos de nêutrons é anotado porque o mesmo é usado no cálculo da correção de perdas de contagens devidas ao tempo morto de analisador (apêndice II), a qual é aplicada nos dados obtidos.

A saída de dados, referente as contagens acumuladas nos diferentes canais do analisador de tempo, é rotineiramente feita através de fita perfurada, a qual é, em seguida, levada a perfuradora IBM-047, que lê as informações contidas na fita, perfurando-as em cartões. Estes cartões contendo as informações relativas às contagens acumuladas na medida experimental são utilizados no processamento dos dados através do computador.

### III.5 - TRATAMENTO DE DADOS.

Com o procedimento experimental descrito no ítem anterior, obtém-se as contagens relativas ao feixe direto, ao feixe transmitido através da amostra e os respectivos "backgrounds", correspondentes a cada canal do analisador de tempo.

Como normalmente as curvas de secção de choque total são dadas em função da energia do nêutron ou de seu comprimento de onda, devemos converter o número da canal para estas duas grandezas. Esta conversão é mostrada no ítem III.5.1.

A secção de choque total, em barn por átomo, como sabemos é dada por

$$(III.3) \quad \sigma_{tot} = \frac{1}{n} \ln \frac{1}{T}$$

onde T é a transmissão, dada pela razão entre a intensidade do feixe transmitido através da amostra e a intensidade do feixe - direto. No ítem III.5.2 é mostrado como a partir dos dados obtidos experimentalmente chega-se ao valor da secção de choque total.

### III.5.1 - CONVERSÃO DO NÚMERO DE CANAL DO ANALISADOR PARA TEMPO DE VÔO, COMPRIMENTO DE ONDA E ENERGIA DO NÊUTRON.

Foram deduzidas as fórmulas para se fazer a conversão de número de canal do analisador de tempo para tempo de vôo, levando-se em conta as características do analisador multicanal descritas no ítem II.1.2C e a constante de calibração  $\Delta t_2$  mostrada no ítem II.3.

As fórmulas que dão o tempo de vôo, t, corresponde ao canal de número C, quando se usa uma largura do canal  $\Delta T$ , são as seguintes:

$$t(\mu\text{seg}) = (C - 0,5)\Delta T - (\Delta T - 1) + \Delta t_2 \quad \text{para } \Delta T \leq 16 \text{ seg}$$

$$t(\mu\text{seg}) = (C - 0,5)\Delta T - 15 + \Delta t_2 \quad \text{para } \Delta T = 32 \mu\text{seg}$$

O tempo de vôo em microsegundos/metro (inverso da velocidade) é obtido dividindo-se o tempo pela distância de vôo  $l$  expressa em metros; isto é

$$t^*(\mu\text{seg}/\text{m}) = t(\mu\text{seg})/l(\text{m})$$

Da relação  $\lambda = h/mv$ , onde h é a constante de Planck, m a massa do nêutron, v a sua velocidade e  $\lambda$  o seu comprimento de onda, obtemos as fórmulas para a conservação do tempo de vôo em micro

segundos por metro,  $t^*$ , do nêutron para seu comprimento de onda e energia E:

$$\lambda = \frac{h}{m} t^* \quad \text{ou} \quad \lambda (\text{\AA}) = \frac{t^* (\mu\text{seg}/\text{m})}{252,8302}$$

e

$$E = \frac{h^2}{2m} \frac{1}{\lambda^2} \quad \text{ou} \quad E (\text{eV}) = \frac{0,081783}{\lambda^2 (\text{\AA})^2}$$

Foi feito um programa em linguagem Fortran que utilizando estas fórmulas faz a conversão para todos os canais; sendo o mesmo mostrado no apêndice I.

### III.5.2 - OBTENÇÃO DA SECÇÃO DE CHOQUE TOTAL A PARTIR DOS DADOS EXPERIMENTAIS.

Os dados obtidos experimentalmente, antes de serem utilizados no cálculo da transmissão e da secção de choque total, devem ser corrigidos para as perdas de contagens e em seguida normalizados.

Os dados são corrigidos para os três tipos de perdas de contagens que ocorrem, a saber:

- a) perda de contagens devida ao tempo morto do analisador multicanal.
- b) perda de contagens devida ao fato do analisador aceitar apenas um pulso por canal por ciclo de análise.
- c) perda de contagens devida ao tempo morto do sistema de detecção (detetor, pré-amplificador e discriminador).

As fórmulas para o cálculo das correções relativas a estas perdas de contagens são mostradas no apêndice II.

Depois de corrigidos, os dados são normalizados para um cer



to número de contagens do canal do monitor, estando assim prontos para serem usados no cálculo da secção de choque total.

Sejam  $D_M$ ,  $R_{DM}$ ,  $A_M$ ,  $B_{AM}$  as contagens obtidas em um determinado canal do analisador para as medidas respectivamente do feixe direto, do seu background, do feixe transmitido através da amostra e o seu background;  $f_D$ ,  $f_{BD}$ ,  $f_A$  e  $f_{BA}$  os fatores de correção para perdas de contagens em cada uma das 4 medidas, e  $k_D$ ,  $k_{BD}$ ,  $k_A$  e  $k_{BA}$  os fatores de normalização das mesmas.

As intensidades, do feixe transmitido através da amostra e do feixe direto, que entrarão no cálculo da secção de choque total serão dadas por:

$$(III.4) \quad A = f_A k_A A_M - f_{BA} k_{BA} B_{AM}$$

$$(III.5) \quad D = f_D k_D D_M - f_{BD} k_{BD} B_{DM}$$

Sendo a transmissão dada por  $A/D$ , através da expressão (III.3), teremos para a secção de choque:

$$(III.6) \quad \sigma_{TOT} = \frac{1}{n} \ln \frac{D}{A} = \frac{1}{n} \ln \frac{f_D k_D D_M - f_{BD} k_{BD} B_{DM}}{f_A k_A A_M - f_{BA} k_{BA} B_{AM}}$$

Veamos agora como deve ser calculado o erro a ser atribuído no valor da secção de choque determinado pela expressão acima. Considerando-se que o valor do número de átomos por barn,  $n$ , não está afetado de erro, o erro na secção de choque será devido apenas às flutuações estatísticas nas contagens  $D_M$ ,  $B_{DM}$ ,  $A_M$  e  $B_{AM}$ .

Como o erro estatístico nas contagens é dado pela raiz quadrada das mesmas, isto é  $\Delta D_M = \sqrt{D_M}$ ,  $\Delta B_{DM} = \sqrt{B_{DM}}$ ,  $\Delta A_M = \sqrt{A_M}$  e  $\Delta B_{AM} = \sqrt{B_{AM}}$  usando-se as regras de propagação de erros nas fórmu-

das (III.4) e (III.5), teremos:

$$\Delta A = \sqrt{(f_A k_A)^2 \cdot (\Delta A_M)^2 + (f_{BA} k_{BA})^2 \cdot (\Delta B_{AM})^2}$$

$$\Delta D = \sqrt{(f_D k_D)^2 \cdot (\Delta D_M)^2 + (f_{BD} k_{BD})^2 \cdot (\Delta B_{AM})^2}$$

A partir dos erros em D e A, determina-se o erro na secção de choque:

$$\Delta \sigma = \frac{1}{n} \sqrt{\left(\frac{1}{D}\right)^2 (\Delta D)^2 + \left(\frac{1}{A}\right)^2 (\Delta A)^2}$$

As correções para perdas de contagens, a normalização dos dados, a subtração dos backgrounds, bem como o cálculo da secção de choque total e o seu erro estatístico são realizados por meio do computador IBM 1620-II através de um programa em FORTRAN II-D especialmente elaborado para estas finalidades (apêndice III).

## CAPÍTULO IV - CONSIDERAÇÕES TEÓRICAS

### IV.1 - OBSERVAÇÕES GERAIS

No cálculo teórico, a secção de choque total é obtida através da soma das secções de choque parciais para cada uma das interações possíveis entre o nêutron e o material policristalino. Portanto a secção de choque total será a soma das secções de -- choque para absorção, espalhamento nuclear e espalhamento magnético.

No espalhamento nuclear os centros espalhadores, núcleos, podem participar do fenómeno de uma maneira coletiva, havendo - interferência entre as ondas espalhadas pelos diferentes núcleos

ou atuar independentemente. No primeiro caso dizemos que o espalhamento é coerente, no segundo incoerente.

Cada um desses espalhamentos por sua vez pode ser elástico, no qual a energia do nêutron permanece inalterada, ou inelástico, quando a energia final do nêutron é diferente da sua energia inicial. Neste espalhamento, no caso de cristais, o nêutron cede ou absorve energia das vibrações elásticas da rede cristalina do material espalhador; estas trocas de energia são quantizadas, sendo o quantum de energia chamado de fonon, da mesma ordem da energia cinética dos nêutrons térmicos.

Uma perda de energia pelo nêutron é acompanhada pela excitação de uma ou mais vibrações elásticas da rede, havendo a emissão de um ou mais fonons; ao contrário um ganho de energia pelo nêutron é acompanhado pelo amortecimento de uma ou mais vibrações elásticas da rede, isto é, há absorção de um ou mais fonons.

As secções de choque de espalhamento são calculadas a partir do tratamento quântico do problema geral de espalhamento -- usando-se a primeira aproximação de Born e o conceito do pseudo potencial de Fermi.

Na aproximação de Born o potencial de interação entre a partícula incidente e o sistema espalhador é considerado como uma pequena perturbação que distorce apenas ligeiramente a função de onda plana da partícula incidente; o problema é resolvido usando-se a primeira aproximação da teoria das perturbações.

A primeira vista diz-se-ia que não seria possível usar a aproximação de Born para o espalhamento de nêutron, porque o potencial nuclear não pode ser considerado como uma pequena per-

turbação e a função de onda do nêutron não pode ser considerada como uma onda plana na região de alcance das forças nucleares.

Entretanto Fermi (Fe36) mostrou que a aproximação de Born pode ser usada para calcular a secção de choque de espalhamento para nêutrons lentos, levando em conta que a forma da secção de choque é determinada pelo comportamento da função de onda numa região muito afastada do centro espalhador e o fato que embora a interação nuclear seja forte, a região na qual ela atua é muito pequena comparada com as distâncias interatômicas.

Fermi mostrou que no cálculo da secção de choque de espalhamento pode-se considerar que o alcance das forças nucleares seja zero, isto é, que o potencial de interação seja representado por uma função delta. Este potencial especial é o chamado pseudopotencial de Fermi para o qual o uso da primeira aproximação de Born é válido.

O cálculo da secção de choque para o espalhamento inelástico envolve o espectro de fonons associado às vibrações elásticas do reticulado cristalino. Sendo esse espectro bem conhecido apenas para alguns materiais, o problema é contornado utilizando-se modelos para descrever o cristal e determinar o seu espectro de fonons. O modelo que melhor descreve o cristal e mais comumente usado é o de Debye. Este modelo considera o reticulado cristalino como um meio isotrópico contínuo e elástico com  $3N$  graus de liberdade sendo as vibrações da rede substituídas por ondas elásticas. Outro modelo é o introduzido por Einstein, o qual é o modelo simplificado pois nele se considera que todos os núcleos no reticulado cristalino vibram com a mesma frequência e independentemente uns dos outros.

Além do espalhamento nuclear, os materiais que possuem momento magnético, como os elementos de primeira série de transição (Fe, Co, Ni, etc.), apresentam espalhamento magnético, devido a interação do momento magnético de seus átomos com o momento magnético do nêutron, que é 1,9 magnetons nucleares. O espalhamento magnético é constituído das mesmas partes (coerente e incoerente) que o espalhamento nuclear; entretanto como em temperaturas abaixo do ponto Curie os momentos dos átomos ferromagnéticos estão orientados numa direção definida, existindo dentro de um domínio coerência entre os nêutrons espalhados pelos vários átomos, nestas temperaturas, o espalhamento é predominantemente coerente.

Do mesmo modo que o espalhamento nuclear, o espalhamento magnético pode ser elástico e inelástico.

O espalhamento magnético inelástico ocorre em parte devido ao deslocamento térmico dos átomos magnéticos, o qual causa uma distorção no arranjo dos spins magnéticos; esta contribuição para o espalhamento é chamada magneto-vibracional. Por outro lado a interação entre os momentos magnéticos do nêutron e do centro espalhador, pode produzir mudanças no alinhamento do sistema de spins magnéticos. Se um spin magnético é girado de sua posição de equilíbrio, causará subsequentes mudanças através do sistema, essas mudanças podem ser descritas em termos de um sistema de ondas de spin magnético; da mesma forma que as ondas acústicas descrevem os deslocamentos translacionais dos átomos de suas posições de equilíbrio. A idéia original destas ondas de spin foi introduzida por Bloch (Bo30). A energia transmitida pelas ondas de spin é quantizada em "magnons" da mesma maneira que os quan

ta vibracionais são associadas com fonons; sendo o espalhamento magnético considerado inelástico quando há a aniquilação ou produção de magnons.

O problema do cálculo da secção de choque magnética inelástica foi estudado por Moorhouse (Mo51) e por Marshall (Ma54), os quais utilizaram as ondas de spin introduzidas por Bloch para descrever a dinâmica da estrutura magnética. A teoria do processo de espalhamento magnético foi considerada por Elliott e Lowde (El55) que discutiram as semelhanças e diferenças entre os espalhamentos por magnons e fonons.

#### IV.2 - SECÇÃO DE CHOQUE DE ABSORÇÃO

Como para o ferro a ressonância de energia mais baixa - se encontra em 29,2 KeV, para nêutrons de energias menores que 0,1 eV, usados nestas medidas, a secção de choque de absorção pode ser considerada como sendo proporcional ao inverso da velocidade do nêutron e portanto proporcional ao seu comprimento de onda. O coeficiente de proporcionalidade é obtido através da secção de choque de absorção na energia térmica ( $E_T = 0,0253$  eV, correspondendo ao comprimento de onda  $\lambda = 1,80 \text{ \AA}$ ) dividida pelo respectivo comprimento de onda; para o ferro o valor dessa secção de choque recomendado pelo "barn book" (BNL-325 segunda edição 1966) é:

$$\sigma_{abs}(1,80 \text{ \AA}) = (2,55 \pm 0,05) \text{ barns.}$$

Portanto para nêutrons de comprimento de onda ( $\lambda$ ) qualquer a secção de choque de absorção será dada por:

$$\sigma_{\text{abs}}(\lambda) = 1,409 \cdot \lambda \text{ (Å) barns.}$$

### IV.3 - SECÇÃO DE CHOQUE PARA O ESPALHAMENTO NUCLEAR

Os diversos trabalhos teóricos existentes na literatura sôbre o espalhamento nuclear de nêutrons lentos apresentam resultados concordantes quanto a sua parte elástica, não ocorrendo o mesmo quanto a parte inelástica; em vista disso utilizaremos no cálculo das secções de choque coerente e incoerente elásticas o tratamento comum aos diversos trabalhos teóricos, enquanto que a parte inelástica será analisada segundo alguns dos métodos encontrados na literatura.

#### IV.3.1 - ESPALHAMENTO ELÁSTICO

##### IV.3.1A- ESPALHAMENTO COERENTE ELÁSTICO

O espalhamento coerente elástico é o espalhamento no qual, além das energias do nêutron antes e depois do espalhamento serem iguais, há interferência entre as ondas de nêutrons espalhadas por diferentes núcleos.

Esta parte do espalhamento depende do arranjo cristalino e obedece à chamada lei de Bragg, segundo a qual de um feixe colimado de nêutrons incidente sôbre um conjunto de planos cristalinos paralelos, de distância interplanar  $d$ , segundo um ângulo  $\theta$ , serão refletidos apenas os nêutrons cujos comprimentos de onda  $\lambda$  satisfizerem a relação

$$(IV.1) \quad \lambda = \frac{2d}{n} \text{sen } \theta \quad n = 1, 2, 3, \dots$$



No caso de um feixe de nêutrons passando através de uma substância policristalina, a probabilidade da ocorrência da condição de Bragg é grande, pois o policristal é constituído por muitos grãos cristalinos orientados ao acaso e haverá na direção do feixe diversos conjuntos de planos com distâncias interplanares diferentes.

A relação (IV.1) mostra que quando o comprimento de onda do nêutron for maior do que duas vezes a distância interplanar,  $d$ , de uma família de planos, não haverá reflexão. Então na determinação da secção de choque coerente elástica para nêutrons de um certo comprimento de onda deve ser levada em conta a contribuição de todas as famílias de planos tais que  $d_i > \lambda/2$ . A secção de choque elástica é dada por

$$(IV.2) \quad \sigma_{\text{coer.}}^{\text{elast.}} = \frac{N\lambda^2}{2C} \sum_{\substack{h,k,l \\ d > \lambda/2}} (F^2 d^3 e^{-2\omega})_{h,k,l}$$

e será analisada tendo em vista o cálculo para o ferro que se apresenta sob a forma de cristal cúbico de corpo centrado.

Na expressão acima:

- a)  $N$  - é o número de células unitárias por centímetro cúbico, sendo dado por  $N = 1/a_0^3$  onde  $a_0$  é a constante da rede cristalina, sendo para o ferro  $a_0 = 2,86106 \text{ \AA}$ .
- b)  $\lambda$  - é o comprimento de onda do nêutron
- c)  $C$  - é o número de átomos por célula unitária; para cristais cúbicos de corpo centrado, este número é igual a 2, pois que cada célula unitária contém o átomo do centro mais 1/8 de cada um dos oito átomos dos vértices do cubo.
- d)  $h, k, l$  - são os índices de Miller de uma família de planos.

- e)  $d_{h,k,l}$  - é a distância interplanar da família de planos definida pelos índices  $h,k,l$ . A distância interplanar, para cristais cúbicos, é dada por

$$(IV.3) \quad d_{h,k,l} = \frac{a_0}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

- f)  $j_{h,k,l}$  - é o fator de multiplicidade que dá o número de possíveis orientações da célula unitária para uma determinada família de planos  $h,k,l$ . O fator de multiplicidade; no caso de cristais cúbicos, varia com a relação entre os índices de Miller da família de planos segundo tabela II abaixo:

TABELA II

Índices de Miller da família de planos	multiplicidade
$h.k.l$	48
$h.h.l$	24
$h.k.0$	24
$h.h.0$	12
$h.h.h$	8
$h.0.0$	6

- g)  $F_{h,k,l}$  - é o fator de estrutura da célula unitária para reflexão  $h,k,l$  o qual leva em conta o número, tipo e a localização dos átomos na célula unitária. Este fator é dado por:

$$(IV.4) \quad F_{h,k,l} = \sum_j b_j e^{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)}$$

sendo a somatória feita sobre todos os átomos da célula unitária, que no caso do ferro são dois.

Na expressão (IV.4)  $b_j$  é amplitude de espalhamento coerente do  $j$ 'ésimo átomo, sendo que para o ferro ambos os átomos possuem a mesma amplitude de espalhamento coerente,  $b = 0,951 \times 10^{-12}$  cm (Ri57); e  $x_j, y_j, z_j$  são as coordenadas de  $j$ 'ésimo átomo da célula unitária.

No caso do ferro, cristal cúbico de corpo centrado, os átomos da célula unitária têm coordenadas  $(0,0,0)$  e  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ .

Calculando-se o fator de estrutura teremos:

$$F_{h,k,l} = b e^{2\pi i(h \cdot 0 + k \cdot 0 + l \cdot 0)} + e^{2\pi i(h \cdot \frac{1}{2} + k \cdot \frac{1}{2} + l \cdot \frac{1}{2})}$$

$$F_{h,k,l} = b [1 + e^{\pi i(h+k+l)}]$$

portanto se  $h + k + l = n$  sendo  $n$  par temos  $F_{n,k,l} = 2b$   
e se  $h + k + l = n$  sendo ímpar temos  $F_{n,k,l} = 0$

Concluimos então que para cristais cúbicos de corpo centrado, como o ferro, só contribuem para a secção de choque coerente elástica os planos tais que a soma dos seus índices de Miller seja par.

h)  $e^{-2W}$  é o chamado fator de Debye-Waller que leva em conta as vibrações térmicas dos átomos do cristal em torno das suas posições de equilíbrio; sendo

$$W_{h,k,l} = \frac{3}{2} \frac{h_p^2}{M k_B \theta d_{h,k,l}^2} \left[ \frac{1}{4} + \left( \frac{\theta}{T} \right) \right]$$

onde  $h_p$  - constante de Planck

$k_B$  - constante de Boltzmann

$M$  - massa atômica do elemento sendo para o ferro 55,85gr.

$\theta$  - temperatura de Debye do cristal, sendo para o ferro

453°K.

$d_{h,k,l}$  - a distância interplanar da família de planos h,k,l

$$e \quad \Lambda\left(\frac{\theta}{T}\right) = \left(\frac{T}{\theta}\right)^2 \int_0^{\theta/T} \frac{\beta}{e^{\beta} - 1} d\beta$$

A secção de choque coerente elástica calculada através da expressão (IV.2), mostrada na figura 13 como função de  $\lambda$ , apresenta descontinuidades para os comprimentos de onda correspondentes a duas vezes a distância interplanar das diversas famílias de planos; estas descontinuidades são os chamados degraus de Bragg. Podemos observar também que para comprimentos de onda maiores que duas vezes a distância interplanar máxima a secção de choque coerente elástica é zero.

No apêndice IV é mostrado o programa feito em linguagem -- FORTRAN afim de se calcular esta secção de choque através do computador

#### IV - 3.1B - ESPALHAMENTO INCOERENTE ELÁSTICO

O espalhamento incoerente elástico é aquele no qual os átomos do cristal atuam independentemente, e além disso a energia do nêutron depois do espalhamento é igual a sua energia inicial.

Este espalhamento depende apenas indiretamente da estrutura do material amostra, pois esta dependência se faz apenas - através da temperatura de Dabye  $\theta$ .

A secção de choque para o espalhamento incoerente elástico é dada por (Ca50, Ma59)

$$(IV.4) \quad \sigma_{inc.}^{elast.} = \sigma_i \left( \frac{\lambda^2}{Y} (1 - \exp(-\frac{Y}{\lambda^2})) \right)$$

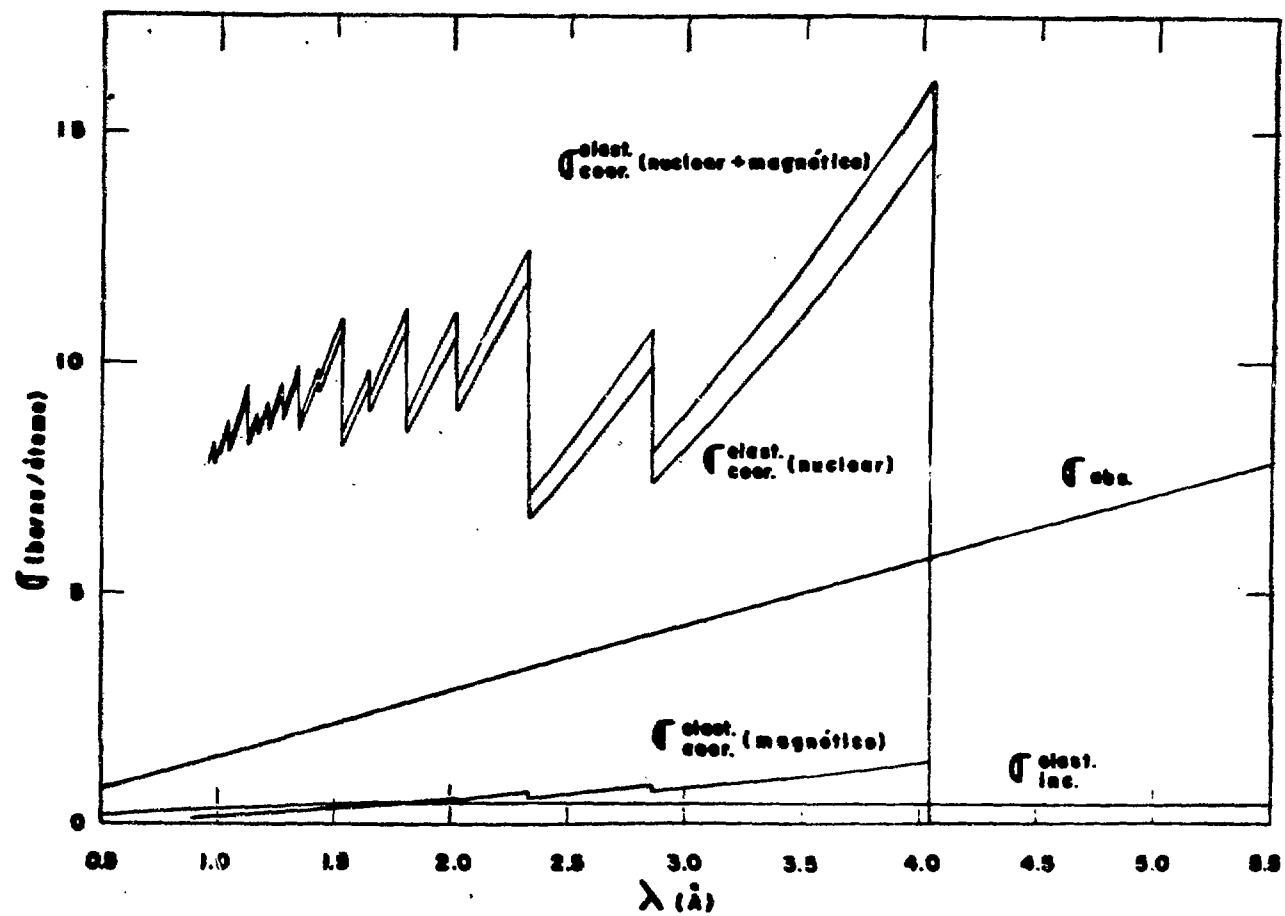


FIGURA 13

Secções de choque parciais, para o ferro policristalino, calculadas teoricamente.

onde  $\sigma_i$  é a secção de choque incoerente do elemento, que leva em conta a presença de diferentes isótopos com spin, para o ferro temos  $\sigma_i = 0,43$  barns; e  $Y$  um fator dado por

$$(IV.5) \quad Y = \frac{12 h^2 p}{M k_B \theta} \left[ \frac{1}{4} + \Lambda \left( \frac{\theta}{T} \right) \right]$$

Como veremos no item seguinte, esta expressão para a secção incoerente elástica, é obtida através da expressão geral para o espalhamento incoerente impondo-se a condição que a energia do nêutron depois do espalhamento seja igual a sua energia antes do mesmo (espalhamento elástico).

A secção de choque incoerente elástica calculada por essas expressões está mostrada na figura 13.

#### IV.3.2 - ESPALHAMENTOS INELÁSTICOS

Nos espalhamentos inelásticos, o nêutron troca energia com a rede cristalina, através de emissão ou absorção de fonons, sendo portanto sua energia final diferente da inicial.

Os diversos trabalhos (Fi47, Ca50, Ma61) que permitem calcular teoricamente as secções de choque de espalhamento nuclear -- utilizam a aproximação de Born e o conceito do pseudo-potencial de Fermi, fornecendo resultados concordantes para os espalhamentos elásticos; entretanto no caso dos espalhamentos inelásticos, apresentam resultados diferentes devido às aproximações feitas, principalmente quanto ao modelo utilizado para descrever o espectro de fonons do cristal e ao fato de considerarem no espalhamento inelástico as contribuições dos processos em que há troca de multifonons ou apenas de um fonon.

Como os diversos tratamentos seguem o mesmo raciocínio, diferindo apenas quanto às aproximações usadas, vamos analisar - mais detalhadamente o tratamento feito por Marshall e Stuart, no qual são considerados os processos de multifonons, e fazer alguns comentários sobre os outros tratamentos, apresentando - seus resultados.

Utilizando-se a aproximação de Born e o pseudopotencial de Fermi, a seção de choque diferencial para o espalhamento incoerente envolvendo  $l$  fonons é dada por

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} = \frac{\sigma_i}{4\pi} \frac{k}{k_0} \frac{1}{l!} \left(\frac{\hbar K^2}{2M}\right)^l \exp\left\{\frac{-\hbar^2 K^2 F}{2Mk_B T}\right\} \left(\prod_{i=1}^l \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_i}{\omega_i} \frac{Z(\omega_i)}{e^{\hbar\omega_i/kT} - 1}\right) \delta\left\{\frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - k_0^2) - \hbar \sum \omega_i\right\}$$

onde  $k_0$  é o vetor de onda do nêutron incidente,  $k$  é o vetor de onda do nêutron espalhado,  $K = k_0 - k$ ,  $M$  é a massa do átomo,  $m$  a massa do nêutron,  $T$  a temperatura da amostra,  $Z(\omega)$  a densidade normalizada dos estados de fonons, e  $F$  um parâmetro adimensional dado por

$$F(T) = k_B T \int_0^{\infty} d\omega (h\omega)^{-1} Z(\omega) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)$$

Quando se utiliza o modelo de Debye para descrever a densidade de estados de fonons, isto é:

$$Z(\omega) = \begin{cases} \frac{3\hbar^3 \omega^2}{(k_B \Theta)^3} & \text{para } |\omega| \leq \frac{k_B \Theta}{\hbar} \\ 0 & \text{para } |\omega| > \frac{k_B \Theta}{\hbar} \end{cases}$$

temos que  $F = \frac{Mk_B T}{2\hbar^2} Y$  sendo  $Y$  o fator dado no item anterior (expressão IV.5).

A secção de choque incoerente elástica, discutida no item anterior, é obtida através da expressão (IV.6) considerando-se que não há troca de fonons ( $l = 0$ ) e integrando-se sobre todos os ângulos  $\Omega$ .

A secção de choque incoerente inelástica poderia ser determinada somando a expressão (IV.6) para todos os valores de  $l$ ; entretanto esta soma é muito lentamente convergente e o cálculo das expressões para os diversos processos de fonons é tedioso (Sq52). O impasse é resolvido utilizando-se um artifício introduzido por Placzek (P154, P157) que consiste em reorganizar a série como uma série de potências de  $m/M$ .

Embora a secção de choque incoerente inelástica, obtida através da expressão (IV.6) somando-se para todo  $l \geq 1$ , expressa como série de  $m/M$  ainda seja lentamente convergente, a secção de choque incoerente total (elástica + inelástica) calculada somando-se a expressão (IV.6) a partir de  $l = 0$  resulta em uma série de  $m/M$  rapidamente convergente.

É interessante notar-se que se a secção de choque incoerente elástica for expandida em série de potências de  $m/M$ , ela será lentamente convergente, semelhante à incoerente inelástica; entretanto ainda que cada uma dessas séries seja lentamente convergente, a sua soma, isto é, a secção de choque incoerente total, resulta em uma série em  $m/M$  rapidamente convergente.

Somando-se (IV.6) sobre todos os valores de  $l(0,1,2,3,\dots)$  usando-se o artifício de Placzek e integrando-se sobre as energias finais  $E$  e ângulos finais  $\Omega$  teremos:

$$\sigma_{inc}^{tot} = \frac{\sigma_i}{4k_o} \sum_p \left( \frac{\hbar^2}{2k_B T} \frac{m}{M} \right)^p \frac{1}{p+1} \sum_{l=0}^p \left( \frac{k_B T}{\hbar} \right)^l \frac{(-F)^{p-l}}{l!(p-l)!}$$



$$\left\{ \prod_{i=1}^l \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_i}{\omega_i} \frac{Z(\omega_i)}{e^{\hbar\omega_i/k_B T} - 1} \right\} \left\{ (k_0 + k)^{2p+2} - (k_0 - k)^{2p+2} \right\} \quad 73.$$

onde

$$k = \left| k_0 + \left( \frac{2m}{\hbar} \right) \sum_i \omega_i \right|^{1/2}$$

Usando-se a aproximação de Debye para a densidade de estados de fonons, a expressão acima é convenientemente dada, com erros < 0,1%, por (Ma59a)

$$\sigma_{inc.}^{tot.} (N, E, T, \theta) = \sum_i \left\{ 1 + \left( \frac{m}{M} \right) A_1(x, t) + \left( \frac{m}{M} \right)^2 A_2(x, t) + \left( \frac{m}{M} \right)^3 A_3(x, t) \right\} \quad (IV.7)$$

$$\text{onde } t = \frac{T}{\theta} \quad \text{e} \quad x = \sqrt{\frac{E}{k_B \theta}}$$

sendo E a energia do nêutron; os coeficientes  $A_n(x, t)$  para um grande intervalo de x e t foram calculados por Marshall e Stuart (Ma59a)

Uma vez determinada a secção de choque incoerente total, a secção de choque incoerente inelástica pode ser facilmente obtida, subtraindo-se da incoerente total, a secção de choque incoerente elástica calculada através da expressão (IV.4), mostrada no ítem anterior. Portanto

$$\sigma_{inc.}^{inel.} = \sigma_{inc.}^{tot.} - \sigma_{inc.}^{elast.} \quad (IV.8)$$

No apêndice IV é mostrado um programa para computador, elaborado na linguagem FORTRAN-II, para o calculo da secção de choque incoerente total e um outro que, por diferença, determina a secção de choque incoerente inelástica.

Por outro lado, o cálculo da secção de choque de espalhamento coerente inelástico incluindo-se processos de multifonons

é bastante trabalhosa e complicada; entretanto utilizando-se uma aproximação introduzida por Placzek e Van Hove (Pl55), que consiste em se considerar para o espalhamento inelástico desprezíveis - os efeitos de interferência entre as ondas espalhadas pelos diferentes átomos ("aproximação incoerente"), a secção de choque coerente inelástica pode ser dada por

$$(IV.9) \quad \sigma_{\text{coer.}}^{\text{inel.}} = \frac{\sigma_c}{\sigma_i} \sigma_{\text{inc.}}^{\text{inel.}}$$

onde  $\sigma_c$  é a secção de choque coerente nuclear dada por  $4\pi b^2$  sendo  $b$  a amplitude de espalhamento coerente nuclear.

A secção de choque inelástica total mostrada na figura 14, é determinada pela soma das secções de choque coerente e incoerente inelásticas calculadas através das expressões (IV.8) e (IV.9), portanto

$$(IV.10) \quad \sigma_{\text{tot}}^{\text{inel}} = \sigma_{\text{inc}}^{\text{inel}} + \sigma_{\text{coer}}^{\text{inel}}$$

Finkelstein (Fi47) calculou a secção de choque inelástica total (coerente + incoerente) utilizando o modelo de Einstein para descrever o cristal. Neste modelo os núcleos componentes do cristal são considerados como sendo osciladores independentes cujas frequências de vibração são todas iguais. Nesta descrição -- uma colisão inelástica, na qual muitos fonons são absorvidos ou emitidos pelo reticula, ocorre quando um só oscilador faz uma transição de multifonons.

A secção de choque inelástica total, calculada por este modelo, que não leva em conta a ligação entre os átomos no cristal, é dada por

$$(IV.11) \quad \sigma_{\text{inel}}^{\text{tot}} = (\sigma_c + \sigma_i) \left( 1 - \frac{\lambda^2}{Y} \left[ 1 - \exp\left(\frac{Y}{\lambda^2}\right) \right] \right)$$

onde  $\sigma_c$  e  $\sigma_i$  são respectivamente as secções de choque coerente

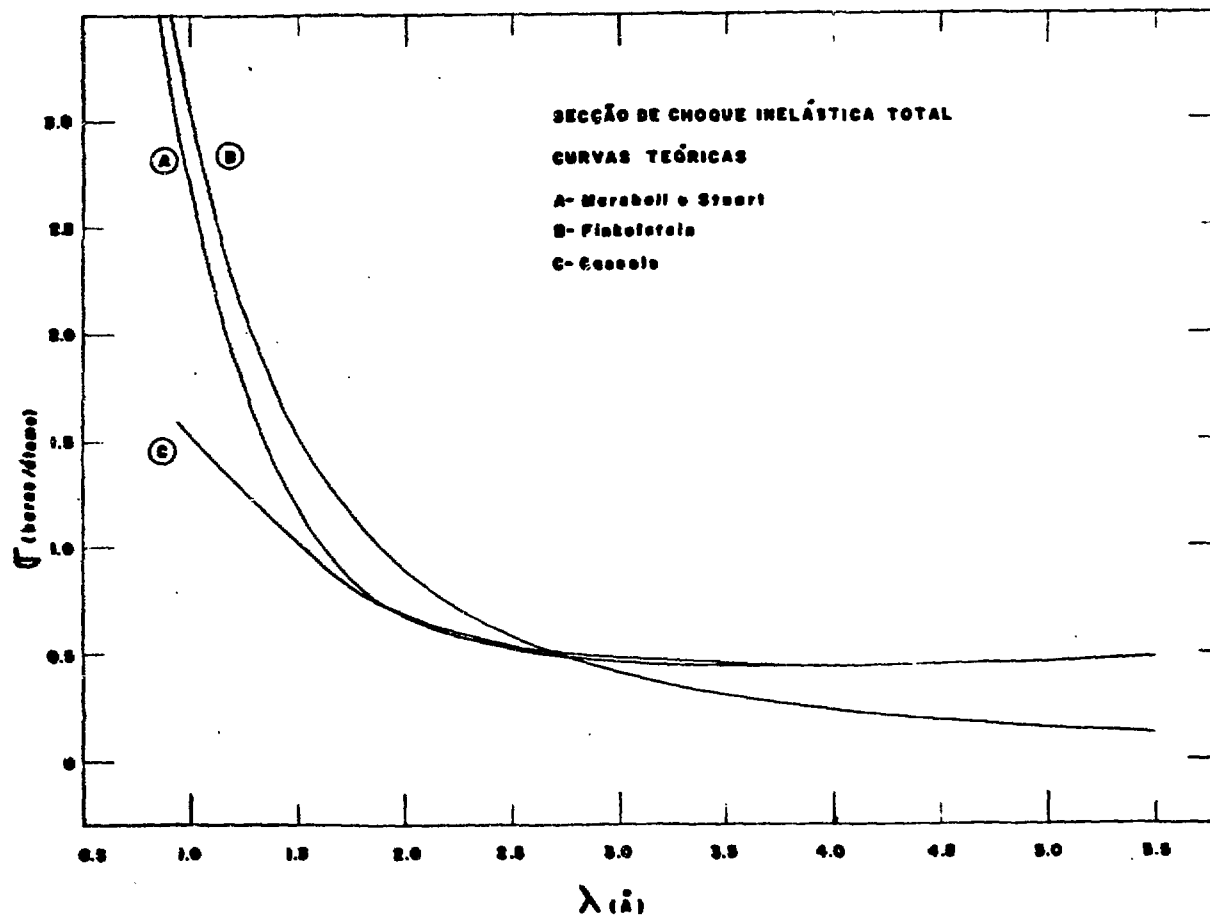


FIGURA 14

Curvas teóricas para a secção de choque inelástica total, do ferro policristalino, calculadas pelos modelos citados na figura.

e incoerente do elemento ( para o átomo livre);  $\lambda$  é o comprimento de onda do nêutron e  $Y$  é o mesmo dado pela expressão (IV.5).

A secção de choque inelástica total calculada pela expressão (IV.11) está mostrada na figura 14.

Cassels (Ca50) utilizando o modelo de Debye para descrever o espectro de fonons do cristal, calculou as secções de choque inelásticas considerando apenas os processos nos quais ocorre a troca de um fonon, desprezando os processos nos quais ocorrem trocas de multifonons.

Esta aproximação não torna os cálculos mais simples pois as secções de choque coerente inelástica e incoerente inelástica -- são obtidas através de um número grande de integrações sendo que, ainda, alguns integrandos devem ser determinados através de diagramas gráficos. Na referência (Ca50) encontram-se os resultados obtidos por Cassels para o ferro, os quais são mostrados na figura 14.

Observando-se a figura 14 constatamos que as secções de choque inelásticas totais calculadas pelos três modelos, apresentam resultados diferentes. No capítulo V faremos comparação dos mesmos com os resultados obtidos experimentalmente.

#### IV.4 - SECÇÃO DE CHOQUE PARA O ESPALHAMENTO MAGNÉTICO

O espalhamento magnético ocorre devido à interação entre os momentos magnéticos dos átomos espalhadores e do nêutron; portanto, o ferro sendo uma substância ferromagnética, possuindo um momento magnético de 2,22 magnetons nucleares, apresenta espalhamento magnético.

Nos materiais ferromagnéticos, em temperaturas abaixo da temperatura de Curie ( $T_c$ ), os momentos magnéticos dos átomos dentro de um domínio simples têm uma orientação definida, o que acarreta uma coerência entre as ondas de nêutrons espalhadas pelos diversos átomos; nestas condições o espalhamento magnético tem um carácter predominantemente coerente.

Como a medida da secção de choque foi feita na temperatura ambiente, portanto muito abaixo da temperatura de Curie (da ordem de  $0,25 T_c$ ) as secções de choque para o espalhamento magnético, com exceção da coerente elástica, são muito baixas, da ordem de  $0,05\%$  com relação as secções de choque nucleares e de absorção; podemos então despreza-las.

Portanto, dos espalhamentos magnéticos, estudaremos apenas a parte coerente elástica.

A secção de choque para o espalhamento magnético coerente elástico, no caso de um feixe de nêutrons não polarizados, é calculada através da mesma expressão (IV.2) usada para a secção de choque coerente elástica nuclear, havendo uma alteração apenas quando ao fator de estrutura (Ha39, Ba62). Temos:

$$(IV.12) \quad \sigma_{\text{coer.}}^{\text{elast.}} = \frac{N\lambda^2}{2C} \sum_{\substack{d > \lambda/2 \\ h, k, l}} (q^2 F_{\text{mag}}^2 d_j e^{-2W})_{h, k, l}$$

Nesta expressão todos os símbolos têm o mesmo significado que na expressão (IV.2), e ainda:

a)  $q$  é um vetor definido (Ha39, Ba62) como

$$\vec{q} = \vec{e}(\vec{e} \cdot \vec{k}) - \vec{k}$$

onde  $\vec{k}$ , chamado de vetor de magnetização, é um vetor unitário na direção do momento magnético atômico e  $\vec{e}$ , chamado de vetor de espalhamento, é um vetor unitário na direção perpendicular ao pla-

no de espalhamento.

Da definição de  $\vec{q}$  temos:

$$q^2 = 1 - (\vec{e} \cdot \vec{k})^2 = \text{sen}^2 \alpha$$

sendo  $\alpha$  o ângulo entre os vetores de magnetização e espalhamento. Portanto para se determinar o valor de  $q^2$  é necessário se conhecer a orientação relativa entre o alinhamento dos momentos magnéticos e os planos de espalhamento. No caso do ferro policristalino, em que os momentos magnéticos só se podem alinhar segundo a direção de um dos eixos do cubo representativo da célula unitária, o valor médio de  $q^2$  será  $\frac{2}{3}$ , para todas as reflexões  $(h, k, l)$

b)  $\Gamma_{\text{mag}}$  é o fator de estrutura magnético, que semelhantemente ao nuclear, no caso de ferro, é dado por  $F_{\text{mag}} = 2p$ , sendo que  $p$  é a amplitude de espalhamento magnético.

A amplitude de espalhamento magnético é dada por

$$p = \left( \frac{e^2}{mc^2} \right) \gamma \cdot S_{\text{ef}} \cdot f$$

onde  $(e^2/mc^2)$  é o raio clássico do elétron

$\gamma$  é o momento magnético do nêutron expresso em magnetons nucleares.

$S_{\text{ef}}$  é o número quântico efetivo do spin do átomo magnético.

$f$  é o fator de forma magnético característico dos elétrons responsáveis pelo momento magnético atômico.

O número quântico efetivo do spin para os átomos de ferro é  $S_{\text{ef}} = 1.11$ , valor este determinado através do momento magnético do ferro, 2,22 magnetons nucleares, obtido através de estudos de magnetização saturada, e da razão giromagnética do ferro que é aproximadamente 2.

No cálculo da secção de choque magnética coerente elástica utilizamos os fatores de forma magnéticos determinados teoricamente por Steinberger e Wick (St49) para os diversos planos de reflexão  $(h,k,l)$  do ferro.

A secção de choque para o espalhamento magnético coerente elástico para o ferro calculada pela expressão (IV.12) está mostrada na figura 13, juntamente com a secção de choque para o espalhamento coerente elástico nuclear.

Nesta figura observa-se que as posições dos degraus de Bragg para o espalhamento nuclear e magnético, se encontram nos mesmos comprimentos de onda; isto ocorre porque para o ferro, as células unitárias magnética e cristalográfica são idênticas.

Na figura 13 ainda é mostrada a curva de secção de choque total para o espalhamento coerente elástico, incluindo a parte nuclear e a parte magnética.

## CAPÍTULO V. - RESULTADOS E DISCUSSÃO

### V.I - EFEITO DO ESPALHAMENTO EM PEQUENOS ÂNGULOS NA MEDIDA DE SECÇÃO DE CHOQUE DE AMOSTRAS POLICRISTALINAS

No caso de amostras policristalinas, para se obter uma medi-  
da precisa da secção de choque total é necessário que, além dos  
cuidados usuais em medidas de secção de choque por transmissão -  
(descritos no capítulo III desta tese) se tome precauções adicio-  
nais quanto à geometria (Eg57) utilizada a fim de se evitar o --  
efeito de espalhamento em pequenos ângulos.

Este efeito, discutido por Krueger e colaboradores(Kr50) e  
por Weiss (We51), provém da refração que a onda de nêutrons so--  
fre ao atravessar as superfícies dos micro-cristais do pó; por--  
tanto os nêutrons espalhados em pequenos ângulos não devem ser -  
considerados como removidos do feixe incidente, na medida de sec-  
ção de choque, pois eles são espalhados devido a efeitos de su--  
perfícies e não por interação com os núcleos e átomos.



Com a finalidade de se estudar a influência do espalhamento em pequenos ângulos na medida da secção de choque total do ferro, fizemos diversas medidas preliminares variando-se a geometria. Esta variação foi feita mudando-se a distância entre a amostra e o detetor; com isso consegue-se variar o ângulo segundo o qual o detetor subtende a amostra e vice-versa.

Os resultados obtidos para a secção de choque total em medidas feitas com duas distâncias diferentes entre a amostra e o detetor estão mostrados na figura 15.

Observa-se que o valor obtido para a secção de choque aumenta quando se aumenta a distância entre a amostra e o detetor, isto é quando se melhora a geometria. Como para a menor distância entre a amostra e o detetor (32 cm) já estamos trabalhando em condições de boa geometria, isto significa que para a outra distância (225 cm) estamos considerando como removidos do feixe os nêutrons espalhados em pequenos ângulos.

Weiss (We51) mostrou que os ângulos de espalhamento dos nêutrons espalhados por este efeito são menores de  $29^\circ$ . Afim de se obter os valores experimentais corretos para a secção de choque total, a medida foi feita colocando-se a amostra a 32 cm do detetor, pois com esta distância os nêutrons espalhados até  $39^\circ$  são incluídos no feixe transmitido, contornando-se assim o problema causado pelo espalhamento em pequenos ângulos. Por outro lado a geometria usada é suficientemente boa para tornar desprezível a fração de nêutrons que sofrendo interação com os átomos e núcleos, ainda atingem o detetor.

Dos resultados na figura 15 podemos concluir que o efeito de espalhamento em pequenos ângulos aumenta com o comprimento de

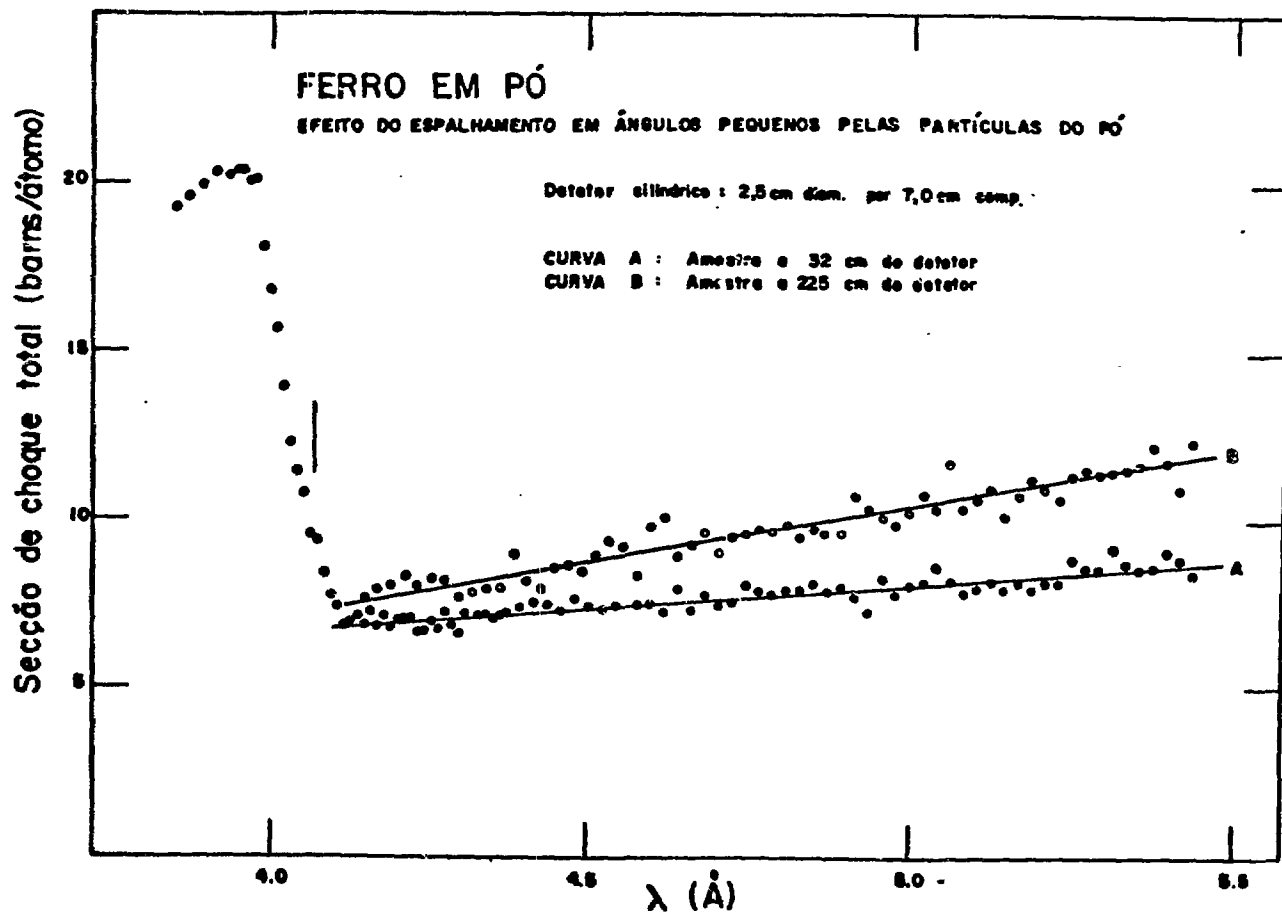


FIGURA 15  
Efeito do espalhamento em pequenos ângulos na medida da secção de choque total.

onda de nêutrons incidente, pois para comprimentos de onda grandes, a diferença entre as curvas de secção de choque medidas com distâncias diferentes, entre amostra e detector, aumenta. Este resultado observado é concordante com as teorias existentes (Ha49, Hu46).

## V.2 - SECÇÃO DE CHOQUE TOTAL DO FERRO POLICRISTALINO:

### RESULTADOS EXPERIMENTAIS.

Utilizando-se o arranjo experimental descrito no capítulo II e através do método de medida mostrado no capítulo III, mediu-se a secção de choque total do ferro policristalino para nêutrons lentos. Foram obtidos 300 pontos experimentais, cobrindo o intervalo de comprimento de onda entre 0,9 e 5,5Å, correspondendo ao intervalo de energia de 0,11 eV. a 0,0028 eV. Os valores obtidos experimentalmente da secção de choque total mostrados na figura 16, representam a média de, pelo menos, duas determinações independentes. Os erros atribuídos aos pontos são apenas os de natureza estatística, calculados de acôrdo com o procedimento descrito no ítem III.5.2 desta tese.

Para a maioria dos pontos experimentais esse erro é menor que 2%, sendo que apenas os pontos correspondentes a comprimentos de onda grandes apresentam erros maiores que esse valor, mas nunca superiores a 5%.

Na figura estão indicados apenas os erros em alguns pontos a fim de mostrar o seu valor; para os pontos correspondentes aos comprimentos de onda menores que 3,4Å os erros são da ordem dos círculos traçados ou menores.

Um simples exame da figura mostra que os resultados experimentais, além de precisos, foram obtidos com uma boa resolução e em

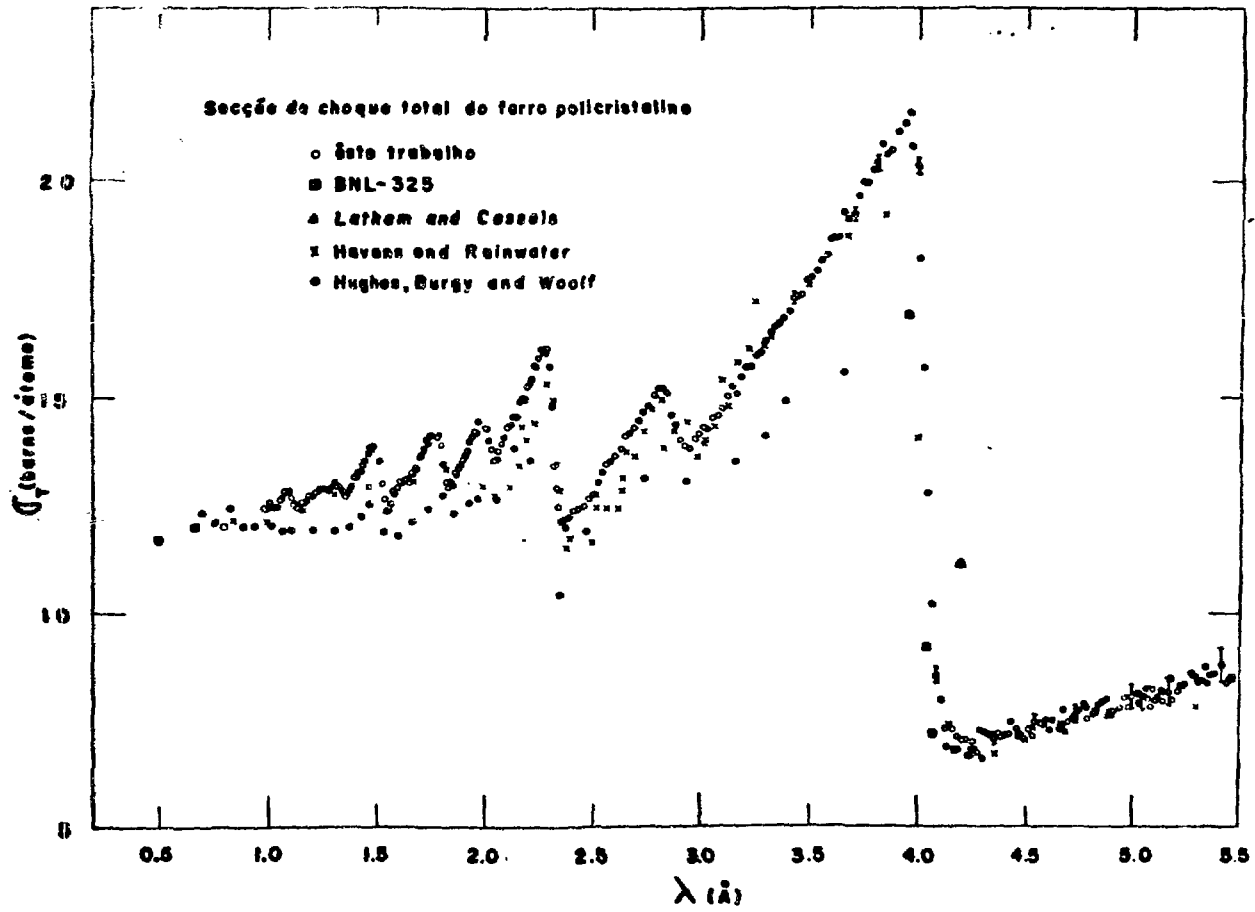


FIGURA 16

Secção de choque total do ferro policristalino para nêutrons lentos: resultados experimentais.

um gr  
na cu  
compa  
rã f  
para  
xiste  
ses r  
sido  
para  
bem c  
lariz  
Attrav  
a mal  
V.3 -  
tal A  
deter  
contr  
clear  
expre  
rico  
tica  
util  
los  
lham

um grande número de pontos, podendo-se observar os degraus de Bragg na curva de secção de choque total de praticamente  $1\text{\AA}$  em diante. A comparação dos modelos teóricos com os resultados experimentais se rá feita posteriormente nos itens V.3 e V.4.

Na figura 16 são também mostrados todos os resultados obtidos para a secção de choque total do ferro, nesta região de energia, e xistentes na literatura (Ha50, Hu51, La52, Hu58). Observando-se ês ses resultados verifica-se que a secção de choque total não havia sido determinada com precisão e em um número suficiente de pontos para possibilitar uma análise da validade dos modelos teóricos, bem como para ser usada em outras experiências como estudo de polarização de nêutrons, determinação de espectro de magnons, etc. Através dessas medidas anteriores não se consegue sequer observar a maioria dos degraus de Bragg.

### V.3 - SECÇÃO DE CHOQUE INELÁSTICA TOTAL

Os valores experimentais para a secção de choque inelástica to tal (coerente + incoerente) são obtidos subtraindo-se dos valores determinados experimentalmente para a secção de choque total, as contribuições devidas à absorção e aos espalhamentos coerente (nuclear + magnético) e incoerente elástico, calculadas através das expressões mostradas no capítulo IV.

Como no cálculo destas contribuições todos os tratamentos tê ricos apresentam resultados concordantes a secção de choque inelástica total obtida experimentalmente, como foi exposto acima, pode ser utilizada para verificar a validade dos resultados apresentados pe los diversos tratamentos teóricos para a secção de choque de espalhamento inelástico.

Na figura 17 são mostrados os resultados experimentais para a secção de choque inelástica total bem como as curvas teóricas calculadas pelos três tratamentos citados no capítulo IV.

A cada valor experimental é atribuído o mesmo erro da secção de choque total experimental utilizada na sua determinação. Os pontos experimentais na figura 17, para os comprimentos de onda maiores que  $4\text{\AA}$  foram determinados como a média de cada 3 pontos, com a finalidade de se reduzir o erro estatístico.

Observando-se a figura 17 vemos que a curva teórica que melhor descreve os pontos experimentais, em todo intervalo, é a calculada por Marshall e Stuart (Ma61); enquanto a curva calculada por Cassels (Ca50) concorda com os resultados experimentais apenas para comprimentos de onda médios e grandes, e o modelo de Finkelstein (Fi47) oferece resultados razoáveis apenas para comprimentos de onda pequenos.

Da observação acima podemos concluir que o tratamento teórico dado por Cassels para o espalhamento inelástico apresenta bons resultados na região de comprimentos de onda onde os processos que contribuem para a secção de choque são principalmente aqueles que envolvem apenas a troca de um fonon (comprimentos de onda médios e longos), entretanto o mesmo não apresenta resultados satisfatórios para comprimentos de onda pequenos, onde os processos de multifonons, desprezados pelo mesmo, são os principais responsáveis pelo espalhamento inelástico.

A aproximação de Finkelstein apresenta resultados razoáveis para comprimentos de onda pequenos porque considera os processos de multifonons e porque nêutrons desses comprimentos de onda não "sen-

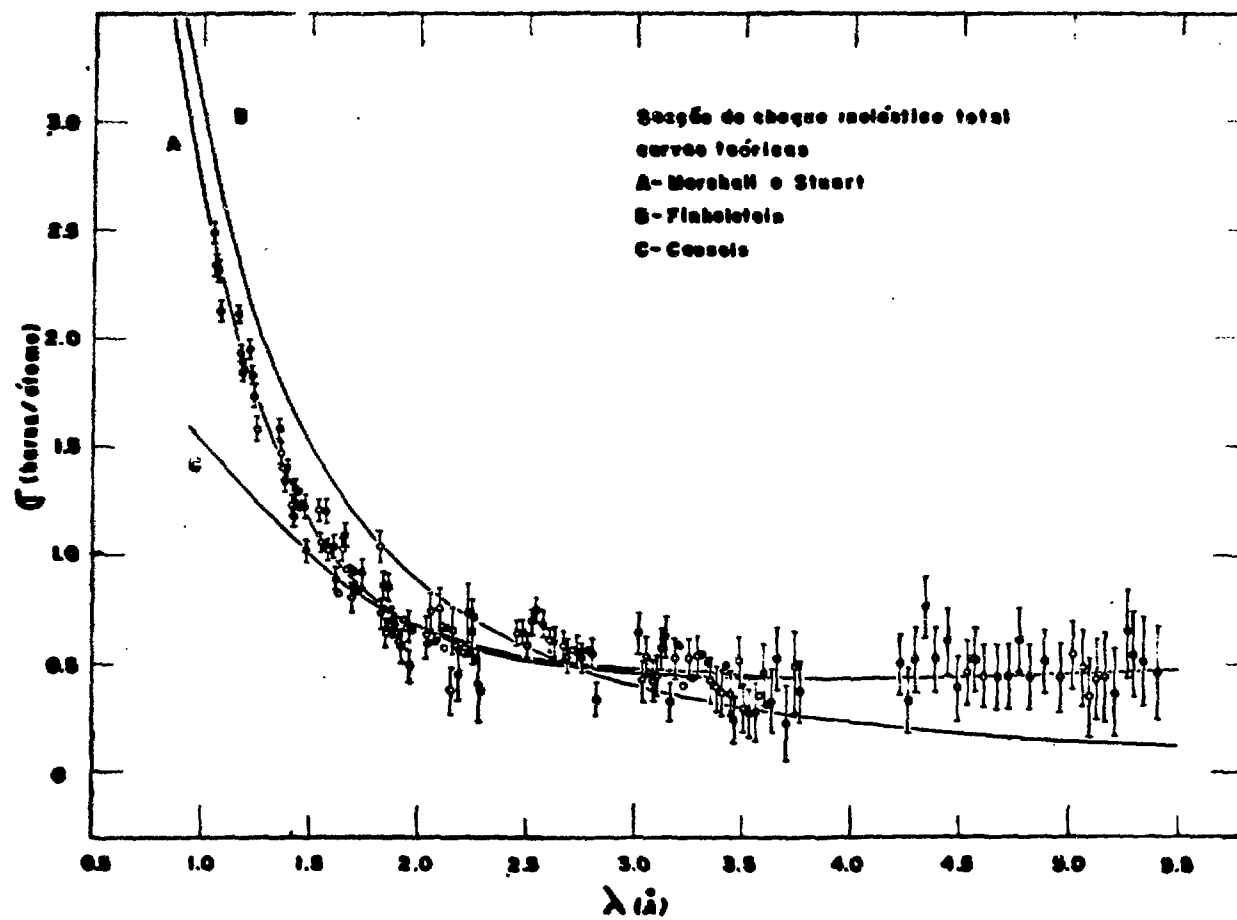


FIGURA 17

Seção de choque inelástica total para o ferro policristalino.  
 Resultados experimentais e curvas teóricas.

tem as ligações entre os átomos, interagindo como se os mesmos fôsem osciladores independente; entretanto na região de comprimentos de onda grandes onde a ligação entre os átomos passa a ter grande influência este modelo falha, pois o mesmo não considera a ligação entre os átomos.

A boa concordância entre os pontos experimentais e a curva -- calculada por Marshall e Stuart, nos permite concluir a validade da aproximação incoerente (P155); mostra também que a secção de choque inelástica, principalmente na região de comprimentos de onda pequenos, deve ser calculada considerando-se os processos de multi fonons e que a utilização do modelo de Debye para descrever o espectro de fonons do cristal é uma excelente aproximação para o cálculo da secção de choque inelástica.

Em vista dessas conclusões, no ítem seguinte, onde calculamos a secção de choque teórica total, utilizaremos o método de Marshall e Stuart no tratamento das secções de choque inelásticas.

#### V.4 - SECÇÃO DE CHOQUE TOTAL: COMPARAÇÃO ENTRE OS RESULTADOS EXPERIMENTAIS E A TEORIA.

A secção de choque total do ferro policristalino é calculada considerando-se as contribuições de todas as secções de choque parciais, sendo dada por

$$\sigma_T = \sigma_{abs} + (\sigma_{coer}^{elast} + \sigma_{inc}^{elast} + \sigma_{coer}^{inel} + \sigma_{inc}^{inel})_{nucleares} + \sigma_{coer,mag}^{elast}$$

As secções de choque parciais envolvidas na expressão acima são calculadas através das expressões mostradas no capítulo IV, sendo que as secções de choque inelásticas foram calculadas pelo método de Marshall e Stuart.

Foi elaborado um programa para computador, em linguagem -----



Foi elaborado um programa para computador, em linguagem FORTRAN -II-D, que calcula a secção de choque total considerando tôdas as secções de choque parciais, sendo o mesmo mostrado no apêndice IV.

Utilizando esse programa, calculamos a secção de choque total do ferro policristalino usando para a temperatura de Debye do ferro os diversos valores existentes na literatura:  $420^{\circ}\text{K}$  (Se40),  $453^{\circ}\text{K}$  (Co42),  $462^{\circ}\text{K}$  (Ze51) e  $467^{\circ}\text{K}$  (Ha56). Verifica-se que as diferenças entre as secções de choque totais calculadas com as diferentes temperaturas é no máximo 0,5% em todo o intervalo de comprimentos de onda em estudo (de 0,9 a  $5,5\text{\AA}$ ).

Em vista disso mostraremos apenas os resultados obtidos para a secção de choque total calculada teoricamente utilizando-se para a temperatura de Debye o valor  $453^{\circ}\text{K}$ , pois o mesmo é praticamente a média dos valores tabelados.

Nas figuras 18 e 19 são mostradas as diversas secções de choque parciais. A partir destas figuras, podemos ver que na região de comprimentos de onda pequenos a interação do nêutron com o ferro policristalino é feita predominantemente através do espalhamento coerente inelástico; enquanto que para comprimentos de onda médios (de 1 a  $4\text{\AA}$ ) o processo dominante é o espalhamento coerente elástico e a partir do comprimento de onda ( $4,046\text{\AA}$ ) onde este espalhamento deixa de contribuir, a principal interação que contribue para a secção de choque total é a absorção.

A secção de choque do ferro policristalino, para nêutrons lentos, calculada teoricamente está mostrada na figura 20, juntamente com os valores obtidos experimentalmente.

A fim de poder melhor comparar os dados experimentais com a

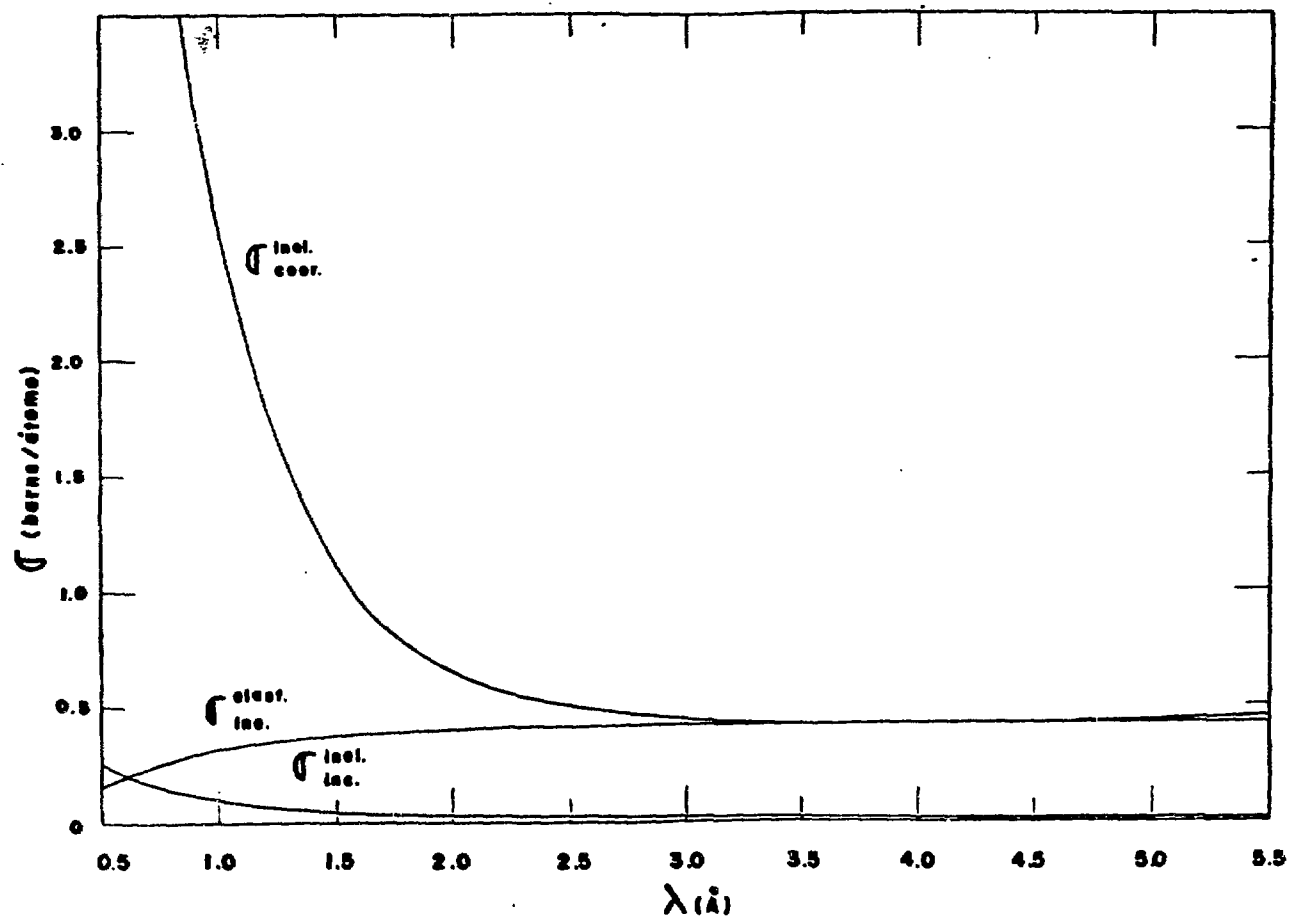


FIGURA 18

Secções de choque para os espalhamentos incoerente elástico, incoerente inelástico e coerente inelástico calculadas teoricamente.

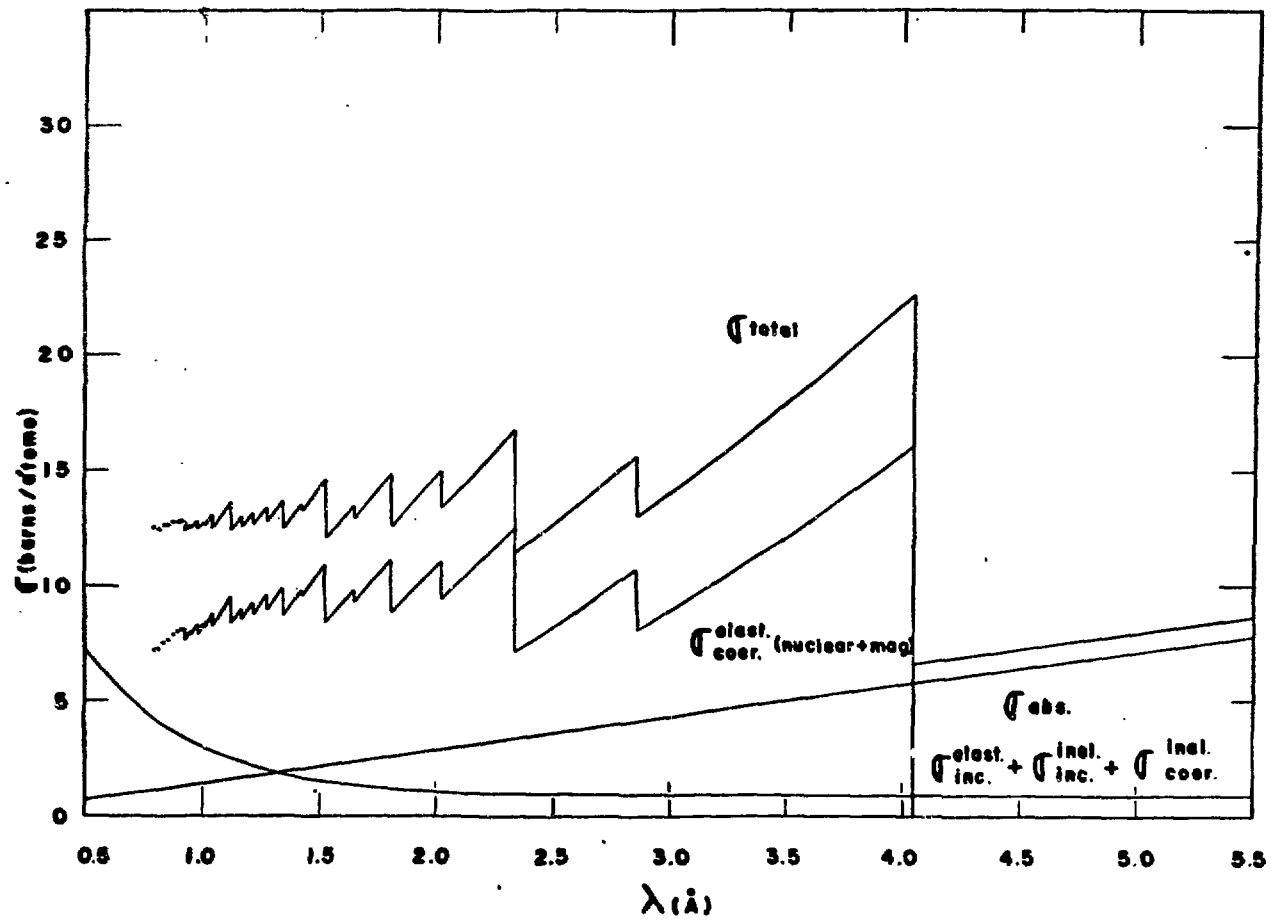


FIGURA 19

Secções de choque parciais e secção de choque total,  
para o ferro policristalino, calculadas teoricamente.

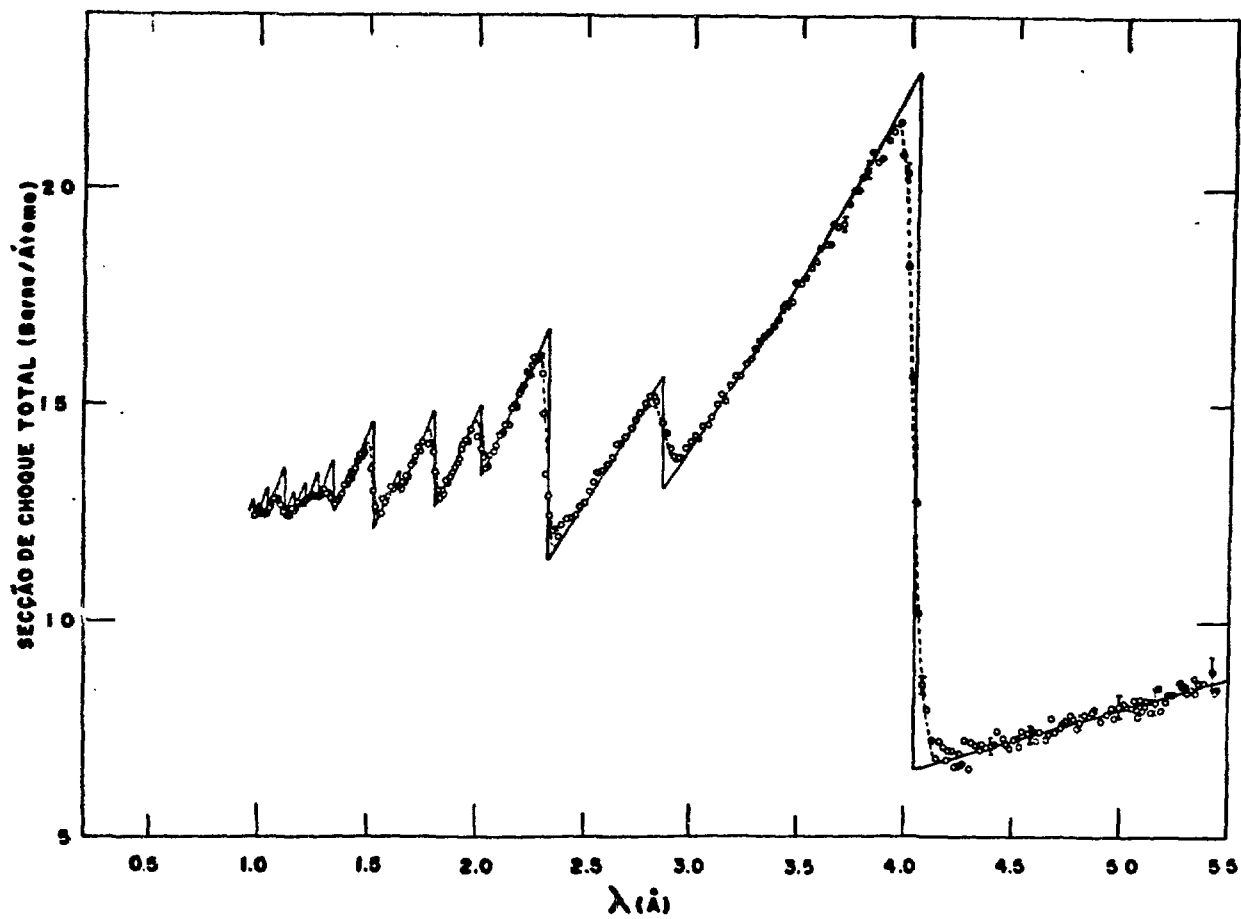


FIGURA 20

Secção de choque total do ferro policristalino- Os círculos indicam os resultados experimentais.  
 A linha cheia corresponde a curva calculada teoricamente.  
 A linha interrompida representa a curva teórica afetada pela resolução.

teoria, é também mostrada na figura 20 a curva teórica afetada pela resolução do aparelho utilizado na medida; a maneira de se calcular o efeito da resolução está descrita no Apêndice V.

Observa-se que o efeito da resolução em uma medida de secção de choque total de uma amostra policristalina faz-se notar, principalmente, arredondando as extremidades dos degraus de Bragg e fazendo com que as descontinuidades assumam inclinações finitas.

Na figura 20 pode ser visto que há uma excelente concordância entre os valores da secção de choque total do ferro policristalino e a curva calculada teoricamente; isto indica a validade dos diversos modelos e expressões utilizados no cálculo das secções de choque parciais.

## CAPÍTULO VI - CONCLUSÕES

Os resultados obtidos neste trabalho para o ferro, que perfazem um total de 300 pontos experimentais, no intervalo de energia de 0,11 eV à 0,0028 eV (de 0,9 à 5,5 Å em comprimento de onda), -- além de constituírem uma contribuição para o melhor conhecimento da secção de choque total para nêutrons lentos desse material, permitem fazer uma análise sobre a validade dos diversos modelos que visam determinar as secções de choque teoricamente.

Através de comparação entre as curvas teóricas e os valores -- obtidos experimentalmente para a secção de choque inelástica total (coerente + incoerente), observa-se que, no caso do ferro, para -- nêutrons de comprimentos de onda maiores que 2Å o espalhamento inelástico ocorre, principalmente, devido aos processos nos quais a -- troca de energia entre o nêutron e o reticulado cristalino é feita através de um só fonon; pois para estes comprimentos de onda, o modelo de Cassels que calcula a secção de choque inelástica considerando apenas os processos de troca de um só fonon, oferece resulta

dos concordantes com os dados experimentais. Verifica-se também -- que para nêutrons de comprimentos de onda pequenos o espalhamento inelástico se dá principalmente através de processos de multifonons, pois para êstes comprimentos de onda a teoria de Cassels apresenta da resultados falhos, enquanto que a curva calculada através do tratamento dado por Marshall e Stuart, considerando os processos de -- multifonons, descreve muito bem os pontos experimentais.

A boa concordância entre a secção de choque inelástica calculada pelo modelo de Marshall e Stuart com os resultados experimentais, em todo o intervalo estudado indica a validade da chamada -- "aproximação incoerente" de Placzek (P155) e mostra que a aproximação de Debye para descrever o espectro de fonons do cristal é excelente nos estudos sobre o espalhamento inelástico; pois estas aproximações são fundamentais em tal modelo.

A curva teórica para a secção de choque total do ferro policristalino, calculada por meio das expressões, mostradas no capítulo IV, deduzidas utilizando a aproximação de Born e o conceito do pseudopotencial de Fermi e usando o modelo de Debye para descrever o espectro de fonons do cristal, apresenta resultados bastantes satisfatórios quando comparados aos valores obtidos experimentalmente; verifica-se portanto a validade dos modelos utilizados e a propriedade das aproximações feitas.

Através dos resultados obtidos para as diversas secções de choque parciais que compõem a secção de choque total do ferro policristalino podemos observar que para nêutrons de comprimentos de onda menores que  $1 \text{ \AA}$ , a interação dos mesmos com o policristal se dá principalmente através do espalhamento coerente inelástico, enquanto que

para nêutrons de 1 a  $4\text{\AA}$  a interação predominante é o espalhamento coerente elástico; para comprimentos de ondas grandes, onde este - espalhamento, devido a lei de Bragg, não pode mais ocorrer, a principal interação passa a ser a absorção.

Uma outra contribuição desta tese é a elaboração de um conjunto de programas para computador que permitem calcular a secção de choque total e as diversas secções de choque parciais para qualquer amostra policristalina, utilizando-se os modelos e expressões cuja validade foi verificada através da medida de secção de choque total do ferro policristalino feita nesta tese.

Em resumo, as mais significativas contribuições desta tese são a medida de secção de choque total do ferro policristalino, para nêutrons lentos, feita com boa precisão e o estudo das interações dos nêutrons lentos com o policristal, analisando a validade dos diversos modelos e aproximações.



APÊNDICE IPrograma FORTRAN para a conversão do número de canal em tempo de voo, comprimento de onda e energia do nêutron.

Este programa faz a conversão do número de canal, do analisador, para tempo de voo, comprimento de onda e energia, levando em conta as características do analisador multicanal descritas no item II.1.2C e a constante de calibração  $\Delta t_2$  mencionada no item II.3.

O tempo de voo correspondente ao canal número C, usando-se uma largura de canal  $\Delta T$   $\mu\text{seg}$ , é dado por

$$t(\mu\text{seg}) = (C - 0,5)\Delta T - (\Delta T - 1) + \Delta t_2$$

para  $\Delta T \leq 16 \mu\text{seg}$

$$t(\mu\text{seg}) = (C - 0,5)\Delta T - 15 + \Delta t_2$$

para  $\Delta T = 32 \mu\text{seg}$

As fórmulas de conversão de tempo de voo para  $\mu\text{seg/m}$ , comprimento de onda ( $\text{\AA}$ ) e energia (eV) são

$$t^*(\mu\text{seg/m}) = t(\mu\text{seg})/L(\text{m})$$

$$\lambda(\text{\AA}) = t^*(\mu\text{seg/m})/252,8302$$

$$E(\text{eV}) = 0.081783/\lambda^2(\text{\AA})^2$$

onde L é a distância de voo.

Um número arbitrário de canais pode ser processado usando apenas um cartão de dados contendo: a largura de canal em  $\mu\text{seg}$ , a distância de voo em metros, o número do primeiro canal, do último canal a ser processado e a constante de calibração  $\Delta t_2$  em  $\mu\text{seg}$ .

Os resultados, obtidos através da impressora, são dados na forma de uma tabela com colunas correspondentes ao número de ca-

98.

nal, tempo de vôo ( $\mu\text{seg}$ ),  $\mu\text{seg/m}$ , comprimento de onda ( $\text{\AA}$ ) e ener  
gia (eV).

Na p $\bar{a}$ gina seguinte  $\bar{e}$  mostrado o pr $\bar{o}$ grama em FORTRAN II-D.

```

C   CHOPPER-CONVERSAO DO NUMERO DE CANAL EM TEMPO DE VOO,
C   COMPRIMENTO DE ONDA DO NEUTRON E SUA ENERGIA
C   DELTA=LARGURA DE CANAL EM MICROSEGUNDOS
C   DIST=DISTANCIA DE VOO EM METROS
C   CAL=CONSTANTE DE CALIBRACAO
C   N1=PRIMEIRO CANAL
C   N2=ULTIMO CANAL
C   C=1=NUMERO DE CANAL
C   TMS=TEMPO DE VOO EM MICROSEGUNDOS
C   WL=COMPRIMENTO DE ONDA DO NEUTRON EM ANGSTROMS
C   E=ENERGIA DO NEUTRON EM EV
1   READ 100, DELTA, DIST, N1, N2, CAL
   PRINT 101, DELTA, DIST, CAL
   PRINT 102
   IF(DELTA-16.0)2,2,3
2   DO 10 I=N1,N2
   C=I
   TMS=(C-0.5)*DELTA-(DELTA-1.0)+CAL
   TMSM=TMS/DIST
   WL=TMSM/252.8302
   E=0.081783/(WL*WL)
   PRINT 103, I, TMS, TMSM, WL, E
10  CONTINUE
   GO TO 4
3   DO 20 I=N1,N2
   C=I
   TMS=(C-0.5)*DELTA-15.0+CAL
   TMSM=TMS/DIST
   WL=TMSM/252.8302
   E=0.081783/(WL*WL)
   PRINT 103, I, TMS, TMSM, WL, E
20  CONTINUE
4   PAUSE
   GO TO 1
100 FORMAT (F4.0, F7.4, 2I4, F6.2)
101 FORMAT (25X, 23HTABLE OF CONVERSION FOR/30X, 6HDELTA=F4
   .0/30X, 5HDIST
   I=F7.4/30X, 4HCAL=F6.2/)
102 FORMAT (8X, 1I1, 11X, 3HTMS, 12X, 4HTMSM, 12X, 2HWL, 13X, 6HEN
   ERGY//)
103 FORMAT (6X, I4, 6X, F9.3, 6X, F9.3, 8X, F8.3, 8X, E11.5)
   END

```

APÊNDICE IICorrecções devidas a perdas de contagens no espectrômetro de tempo de voo.

Três tipos de perdas de contagens devem ser considerados:

a) perda de contagens devida ao tempo morto  $T$  do analisador multicanal de tempo ( $T = 16\mu\text{seg}$ , para o analisador TMC usado neste trabalho).

Para larguras de canal menores que o tempo morto do analisador multicanal, a contagem corrigida é dada por

$$N_i = C_i \frac{N_B}{N_B - \sum_{j=i-1}^{j=1-T/\Delta T} C_j}$$

sendo  $N_i$  - a contagem corrigida, no canal  $i$ , para o tempo morto do analisador multicanal.

$N_B$  - o número de ciclos de análise (igual ao número de pulsos de disparo).

$C_i$  - contagem observada no canal  $i$ .

$C_j$  - contagem observada no canal  $j$ .

$T$  - tempo morto do analisador multicanal.

$\Delta T$  - largura de canal utilizada.

b) perda de contagens devida ao fato que o analisador registra, no máximo, uma contagem por canal por ciclo de análise. A possibilidade da incidência de mais de um pulso em um canal, por canal, por ciclo de análise, deve ser levada em conta nesta correção.

A contagem  $N_{ti}$ , contagem no canal  $i$  corrigida para o tempo morto do analisador e incidência múltipla num mesmo canal, é dada por

$$N_{ti} = N_i \left( 1 + \frac{aT}{2} + \frac{(aT)^2}{3} + \dots \right)$$

onde  $a$  é aproximadamente igual a

$$a \approx \frac{N_i}{(N_B - N_i) \Delta T}$$

c) perda de contagens devida ao tempo morto  $\tau$  do sistema detector-amplificador-analisador. Este tempo morto altera a fórmula para correção de contagens múltiplas, que passa a ser

$$N_{ti} = N_i \left( 1 + \frac{a}{2} \frac{(\Delta T - \tau)^2}{\Delta T} + \frac{a^2}{3} \frac{(\Delta T - 2\tau)^2}{\Delta T} + \dots \right)$$

Uma vez feitas estas correções para incidências múltiplas, devemos fazer a correção usual para tempo morto

$$N_{ci} = \frac{N_{ti}}{1 - R\tau}$$

com

$$R = \frac{N_{ti}}{N_B \Delta T}$$

As fórmulas de correção para a largura de canal de  $32 \mu\text{seg}$ , que não são mostradas aqui pois esta largura de canal não foi utilizada neste trabalho, podem ser encontradas na referência (He67).

APÊNDICE III

Programa para o tratamento dos dados e cálculo da secção de choque total, para medidas de transmissão feitas com espectrômetro de tempo de voo.

Utilizando-se este programa, os seguintes cálculos podem ser feitos, para cada canal do analisador:

- correções para perdas de contagens, segundo as fórmulas do apêndice II.
- normalização das contagens em relação ao tempo ou à leitura no canal de monitor.
- subtração da radiação de fundo.
- cálculo da secção de choque total, para medidas de transmissão.
- cálculo do erro na secção de choque total segundo as fórmulas mostradas no item III.5.
- cálculo do comprimento de onda para cada número de canal.

Nas páginas seguintes é apresentada a listagem do programa, em linguagem FORTRAN II-D.

```

C   PROGRAMA PARA O TRATAMENTO DOS DADOS
C   F CALCULO DA SECCAO DE CHOQUE TOTAL,
C   PARA MEDIDAS DE TRANSMISSAO
C   FEITAS COM O ESPECTROMETRO DE TEMPO DE VOO
C   TEMPOS DADOS EM SEGUNDOS
C   NUMERO MAXIMO DE CANAIS 256
C   LARGURA MAXIMA DE CANAL 32 MICROSEGUNDOS
C   T- TEMPO MORTO DO ANALISADOR MULTICANAL
C   TAU- TEMPO MORTO DO SISTEMA DE DETCCAO
C   DELTA- LARGURA DE CANAL
C   N1- PRIMEIRO CANAL
C   N2- ULTIMO CANAL
C   BURST- NUMERO TOTAL DE PULSOS DE NEUTRONS
C   FATOR DE NORMALIZACAO
C   RPM- VELOCIDADE DO OBTURADOR EM RPM
C   M- INDICADOR DA AMOSTRA
C   Y(I)- CONTAGENS EM CADA CANAL
C   CTE- NUMERO DE ATOMOS DE INTERESSE POR BARN NA AMOSTR
      A
C   DIST- DISTANCIA DE VOO EM METROS
C   CAL- CONSTANTE DE CALIBRACAO
C   DIMENSION Y(256),F(256),R(256),D(256),FD(256),A(256),
      FA(256)
C   COMMON DELTA,DELAY,A,Y,FA,R,D,ED,M1,N2
1  READ 2, T, TAU, DELTA, N1, N2, DELAY
2  FORMAT (3F14.8, 2I4, I2)
   PRINT 23, DELTA, DELAY
23 FORMAT (10X, 6HDELTA=F14.8, 10X, 6HDELAY=I2//)
30 READ 3, BURST, FATOR, RPM, M
3  FORMAT (F9.0, E14.8, F6.0, I2)
   READ 4, (Y(I), I=N1, N2)
4  FORMAT (7(4X, F7.0))
   DO 5 I=N1, N2
5  F(I)=BURST
   IF(T-DELTA)6, 7, 7
7  ENE=N1
   M1=T/DELTA+ENE
   DO 8 I=M1, N2
   M2=I-M1+N1
   M3=I-1
   DO 9 J=M2, M3
9  F(I)=F(I)-Y(J)
8  CONTINUE
   DO 10 I=M1, N2
   F(I)=BURST/F(I)
   R(I)=Y(I)*F(I)/((BURST-Y(I)*F(I))*DELTA)
   F(I)=F(I)*(1.+(R(I)/2.)*((DELTA-TAU)**2)/DELTA+(R(I)*
     *2/6.)*((DELTA
1A-2.*TAU)**3)/DELTA)
   R(I)=(Y(I)*F(I))/(BURST*DELTA)
   F(I)=F(I)/(1.-(R(I)*TAU))
   R(I)=(Y(I)**.5)*(F(I)/FATOR)
10 Y(I)=Y(I)*(F(I)/FATOR)
   GO TO 11
6  M1=N1+1
   DO 12 I=M1, N2
   F(I)=F(I)-(Y(I)+Y(I-1))/2.+(Y(I)*Y(I-1))/(4.*BURST)
   F(I)=(BURST-(Y(I)+Y(I-1))/4.)/F(I)
   R(I)=(Y(I)*F(I))/((2.*BURST-Y(I)*F(I))*T)

```

```

F(I)=F(I)*(1.+(R(I)/2.)*((T-TAU)**2)/T+(R(I)**2/6.)*(
(T-2.*TAU)**3
2)/T)
R(I)=(Y(I)*F(I))/(BURST*DELTA)
F(I)=F(I)/(1.-(R(I)*TAU))
R(I)=(Y(I)**.5)*(F(I)/FATOR)
12 Y(I)=Y(I)*(F(I)/FATOR)
11 DO 51 I=M1,N2
    IF(F(I)-1.3)51,51,52
51 CONTINUE
    GO TO 56
52 I1=1
    DO 53 I=I1,N2
        K=N2+I1-I
        IF(F(K)-1.3)53,53,54
53 CONTINUE
54 I2=K
    PRINT 55,M,I1,I2
55 FORMAT (5X,2HM=I2,5X,3HI1=I4,5X,3HI2=I4/)
56 IF(SENSE SWITCH 1)13,14
13 GO TO (14,16,32,33),M
14 DO 17 I=M1,N2
    D(I)=Y(I)
17 ED(I)=R(I)
    IF(SENSE SWITCH 1)15,24
15 IF(SENSE SWITCH 3)30,26
16 IF(SENSE SWITCH 2)18,19
18 K1=M1+5
    K2=N2-5
    DO 20 I=K1,K2
        DO 21 J=1,5
            K3=I-J
            K4=I+J
21 Y(I)=Y(K3)+Y(K4)+Y(I)
    Y(I)=Y(I)/11.
20 R(I)=(Y(I)/11.)**.5
    IF(M-4)19,35,19
19 DO 22 I=M1,N2
    D(I)=D(I)-Y(I)
22 ED(I)=(ED(I)**2+R(I)**2)**.5
    IF(SENSE SWITCH 3)30,24
24 IF(SENSE SWITCH 4)25,26
25 PUNCH 31,(I,D(I),ED(I),I=M1,N2)
26 PRINT 28,RPM,M,BURST,FATOR
28 FORMAT (10X,4HRPM=F7.0/10X,2HL=I2/10X,6HBURST=F9.0/10
X,6HFATOR=E14
3.8//)
    IF(SENSE SWITCH 1)42,41
42 IF(M-1)41,30,41
41 PRINT 29
29 FORMAT (7X,1HN,6X,5HCOUNT,6X,5HERROR,2IX,1HN,6X,5HCOU
NT,6X,5HERROR
9)
    PRINT 31,(I,D(I),ED(I),I=M1,N2)
31 FORMAT (5X,I4,3X,F8.0,3X,F8.0)
    PAUSE
    GO TO 1
32 DO 34 I=M1,N2
    A(I)=Y(I)

```



```

34 EA(I)=R(I)
   GO TO 30
33 IF(SENSE SWITCH 2)18,35
35 CALL LINK (SECCH)
   END

```

```

DIMENSION A(256),Y(256),EA(256),R(256),D(256),ED(256)
        ,WL(256)
COMMON DFLTA,DFLAY,A,Y,EA,R,D,ED,M1,N2
READ 36,CTF,RPM,CORA,CORB,DIST,CAL
36 FORMAT (E14.8,F6.0,2E14.8,F6.3,F6.2)
   PRINT 38,CTE,CORA,CORB,RPM,DIST,CAL
38 FORMAT (9X,4HCTE=E14.8,6X,5HCORA=E14.8,6X,5HCORB=E14.
      8/9X,4HRPM=F7.
      8.0,13X,5HDIST=F6.3,14X,4HCAL=F6.2/)
   PRINT 39
39 FORMAT (1H ,3(5X,1HN,5X,2HWL,3X,13HCROSS SFCTION,3X,5
      HERROR,3X))
   DELTA=DELTA*1.E6
   EWL=(0.5*DELTA)/(DIST*252.8302)
   DO 37 I=M1,N2
   A(I)=A(I)-Y(I)
   EA(I)=EA(I)**2+R(I)**2
   C=I
   IF(DELTA-16.0)62,62,61
62 WL(I)=((C-0.5+DELAY*256.)*DELTA-(DELTA-1.0)+CAL)/(DIS
      T*252.8302)
   GO TO 43
61 WL(I)=((C-0.5+DELAY*256.)*DELTA-15.0+CAL)/(DIST*252.8
      302)
43 Y(I)=(LOGF(D(I)/A(I)))/CTF-(CORA+CORB*WL(I))
   R(I)=((ED(I)/D(I))**2+EA(I)/(A(I)**2))**.5/CTF
   IF(SENSE SWITCH 4)70,37
70 PUNCH 71,WL(I),EWL,Y(I),R(I)
71 FORMAT (4(E14.8))
37 CONTINUE
   J=(N2-M1)/3+2
   JF=M1+J
   DO 60 I=M1,JF
   I2=I+J
   I3=I+2*J
   IF(I3-N2)63,63,64
63 PRINT 40,I,WL(I),Y(I),R(I),I2,WL(I2),Y(I2),R(I2),I3,W
      L(I3),Y(I3),R
      5(I3)
40 FORMAT (1H ,3(3X,I4,1X,F7.3,1X,E12.6,1X,E11.5))
   GO TO 60
64 PRINT 50,I,WL(I),Y(I),R(I),I2,WL(I2),Y(I2),R(I2)
50 FORMAT (1H ,2(3X,I4,1X,F7.3,1X,E12.6,1X,E11.5))
60 CONTINUE
   PAUSE
   CALL LINK (TVSC)
   END

```

APÊNDICE IV

Programas de computador para o cálculo das secções de choque parciais e total teoricamente.

Estes programas foram elaborados, em linguagem FORTRAN II-D, utilizando-se as expressões mostradas no capítulo IV.

Os comentários sôbre cada programa bem como a sua finalidade são apresentados juntamente com as respectivas listagens, nas páginas seguintes.

```

C      CALCULO TEORICO DA SECCAO DE CHOQUE PARA O
C      ESPALHAMENTO COERENTE ELASTICO
C      (PARA ELEMENTOS QUE SE APRESENTAM COM A FORMA
C      CRISTALINA CUBICA)
C      AO- CONSTANTE DA REDE
C      OR- ORDEM DE REFLEXAO
C      C- NUMERO DE ATOMOS POR CELULA UNITARIA
C      N- NUMERO DE PLANOS UTILIZADOS NO CALCULO
C      AM- PFSO ATOMICO
C      TETA- TEMPERATURA DE DEBYE
C      FDEBYE- FUNCAO DE DEBYE
C      TM,UM,VM- INDICES DE MILLER MINIMOS
C      FM- FATOR DE MULTIPLICIDADE
C      T,U,V- INDICES DE MILLER
C      F- FATOR DE ESTRUTURA
C      CONDICAO DE CHAVE-
C      CHAVE 1 LIGADA.CALCULA A SECCAO DE CHOQUE
C      COERENTE ELASTICA(NUCLEAR+MAGNETICA)
C      CHAVE 1 DESLIGADA CALCULA A SECCAO DE CHOQUE
C      COERENTE ELASTICA APENAS NUCLEAR
C      DIMENSION FM(100),T(100),U(100),V(100),F(100),WL(400)
C      ,SIGMAT(400),
C      ,SWAL(400)
15 READ 99,CO,COI
   READ 100,AO,OR,C,N
   READ 101,AM,TETA,FDEBYE
   READ 102,TM,UM,VM
   IF(SENSESWITCH 1)71,72
71 PRINT 109
   GO TO 73
72 PRINT 103
73 ENE=1./(AO**3.)
   PRINT 106,AO,AM,TETA,FDEBYE
   RLM=SQRT(TM*TM+UM*UM+VM*VM)
   DMAX=AO/RLM
   IF(SENSE SWITCH 1)20,21
20 READ 104,(FM(I),T(I),U(I),V(I),F(I),I=1,N)
   GO TO 25
21 READ 107,(FM(I),T(I),U(I),V(I),I=1,N)
   READ 108,EFF
25 SM=2.*DMAX+COI
   M=(SM-CO)/COI+1.0
   DO 30 J=1,M
   X=J
   WL(J)=CO+X*COI
   IF(WL(J)-SM)1,1,2
1 SIGMAT=0.
   DO 3 I=1,N
   RL=SQRT(T(I)*T(I)+U(I)*U(I)+V(I)*V(I))
   IF(RL-RLM)2,4,4
4 D=AO/RL
   WM=((3.*6.6252E-27*6.6252E-27)/((AM/6.023E+23)*1.3804
   E-16*D*D*2.*T
   IETA))*(0.25+FDEBYE)
   R=2.*D
   S=R+COI
   IF(WL(J)-S)33,3,3
33 IF(WL(J)-R)11,44,44
44 IF(SENSE SWITCH 1)22,23

```

```

22 SIGMA=(ENE/(2.*C))*FM(I)*(D/OR)*F(I)*1.0E-24*RR*FXPF
    (+2.*WM)
    GO TO 26
23 F(I)=EFE
    GO TO 22
26 RR=R*1.0E+8
    SIGMAR=SIGMA*1.0E+24
    PRINT 105,RR,T(I),U(I),V(I),SIGMAR
    IF(WL(J)-R)11,29,3
11 IF(SENSE SWITCH 1)27,28
27 SIGMA=(ENE/(2.*C))*FM(I)*(D/OR)*F(I)*1.0E-24*WL(J)*WL
    (J)*EXPF(-2.*
    2WM)
    GO TO 29
28 F(I)=EFE
    GO TO 27
29 SIGMAT=SIGMA+SIGMAT
    3 SIGMA=0.
    WAL(J)=WL(J)*1.0E+8
    CIGMAT(J)=SIGMAT*1.0E+24
30 CONTINUE
    2 PRINT 112
    L=(M-1)/4+2
    LF=1+L
    DO 60 K=1,LF
    K2=K+L
    K3=K+2*L
    K4=K+3*L
    IF(K4-M)61,61,62
61 PRINT 110,WAL(K),CIGMAT(K),WAL(K2),CIGMAT(K2),WAL(K3)
    ,CIGMAT(K3),W
    3AL(K4),CIGMAT(K4)
    GO TO 60
62 PRINT 111,WAL(K),CIGMAT(K),WAL(K2),CIGMAT(K2),WAL(K3)
    ,CIGMAT(K3)
60 CONTINUE
    IF(SENSE SWITCH 2)81,500
81 DO 90 I=1,M
90 PUNCH 119,WAL(I),CIGMAT(I)
119 FORMAT(2E14.8)
500 PAUSE
    GO TO 15
99 FORMAT (2E14.8)
100 FORMAT (E14.8,2F3.0,14)
101 FORMAT (3E14.8)
102 FORMAT (3F3.0)
106 FORMAT (1H0,58X,13HCTF. DA RFDE=E14.8/1H ,58X,13HPFSO
    ATOMICO=E14.
    68/1H ,58X,13HTEMP. DEBYF=E14.8,/1H ,58X,13HFUNC. DF
    BYF=E14.8, //1
    7H0,45X,2H2D,20X,12HPLANO(H,K,L),14X,16HSFCCAO DE CHOQ
    UE)
109 FORMAT (1H ,45X,53HCALCULO TEORICO DA SECCAO DE CHOQU
    E COERENTE EL
    4ASTICA/1H ,62X,19H(NUCLEAR+MAGNETICA))
103 FORMAT (1H ,45X,53HCALCULO TEORICO DA SECCAO DE CHOQU
    E COERENTE EL
    5ASTICA)
104 FORMAT (4F4.0,E14.8)

```

109.

```
107 FORMAT (4F4.0)
108 FORMAT(F14.8)
105 FORMAT (1H 40X,F14.8,4X,3(4X,F5.1),8X,E14.8)
112 FORMAT (1H ,8X,4(9HCOMP.ONDA,4X,11HSEC. CHOQUE,10X))
110 FORMAT (1H ,9X,3(F6.3,4X,E14.8,10X),F6.3,4X,E14.8)
111 FORMAT (1H ,9X,3(F6.3,4X,F14.8,10X))
END
```

```

C      CALCULO TFORICO DA SECCAO DE CHOQUE INCOERENTE TOTAL.
C      METODO DE MARSHALL - STUART
      DIMENSION TE(40),F13T(40),F15T(40),X(40),A(40),B(40),
      C(40),AX(40),
      1BX(40),CX(40),S(40),XI(40),SI(40)
      READ 100,SINC,PATO,TETA,TEMP
      PRINT 99,SINC,PATO,TETA,TEMP
      READ 100,WLI,WLF,DWL
      READ 102,NT,NX,NA,NB,NC
      READ 103,(TE(I),I=1,NT)
      RT=TEMP/TETA
      RM=.1008982E+01/PATO
      ETETA=.13804F-15*TETA/.1602E-11
      READ 104,(F13T(I),I=1,NT)
      READ 104,(F15T(I),I=1,NT)
      CALL INTAIT(NT,TE,F13T,RT,F13)
      CALL INTAIT(NT,TE,F15T,RT,F15)
      READ 103,(X(I),I=1,NX)
      DO 10 I=1,NX
      READ 104,(A(J),J=1,NA)
      READ 104,(B(J),J=1,NB)
      READ 104,(C(J),J=1,NC)
      CALL INTAIT(NA,TE,A,RT,AT)
      AY(I)=AT
      CALL INTAIT(NB,TE,B,RT,BT)
      BX(I)=BT
      IF(RT-0.5)1,2,2
1      CT=0.
      GO TO3
2      CALL INTAIT(NC,TE,C,RT,CT)
3      CX(I)=CT
      S(I)=SINC*(1.+AX(I)*RM+BX(I)*RM*RM+CX(I)*RM*RM*RM)
10     CONTINUE
      PRINT 105,(X(I),AX(I),BX(I),CX(I),S(I),I=1,NX)
      PRINT 106
      WL=WLI
12     WL=WL+DWL
      IF(WL-WLF)4,4,5
4      E=.81796E-01/(WL*JL)
      XE=(E/ETETA)**0.5
      IF(XE-0.01)6,7,7
7      IF(XE-1.40)8,8,9
8      DO 20 I=1,NX
      IF(XE-X(I))33,32,20
32     SIGMA=S(I)
      GO TO 42
33     K=I
      GO TO 34
20     CONTINUE
34     L1=K-3
      L2=K+2
      IF(L1)35,35,36
35     JI=1
      GO TO 37
36     JI=L1
37     IF(L2-NX)38,38,39
38     JF=L2
      GO TO 41
39     JF=NX

```

```

41 NINT=JF-JI+1
DO 30 J=JI,JF
IM=J-JI+1
XI(IM)=X(J)
30 SI(IM)=S(J)
CALL INTAIT(NINT,XI,SI,XF,SAI)
SIGMA=SAI
GO TO 42
9 AM=-2.+(0.75*F13)/(XF*XF)-(3.0*F15)/(64.0*(XF**6.))
BM=3.-1.5*F13/(XF*XF)
CM=-4.
SIGMA=SIN^*(1.+AM*RM+BM*RM*RM+CM*RM*RM*RM)
42 PRINT 107,WL,SIGMA,XF
IF(SENSF SWITCH 1)43,12
43 PUNCH 109,WL,SIGMA
GO TO 12
6 PRINT 108,WL,XF
GO TO 12
5 STOP
100 FORMAT (4E14.8)
102 FORMAT(5I3)
103 FORMAT (15F5.2)
104 FORMAT (5E14.8)
99 FORMAT (1H ,49X,44HCALCULO DA SECCAO DE CHOQUE INCOER
ENTE TOTAL//5
84X,11HSIGMA INC.=E14.8/54X,11HPESO ATOM.=E14.8/54X,11
HTEMP.DEBYE=E
914.8/54X,12HTEMPERATURA=E14.8//39X,1HX,12X,14A,16X,1H
B,16X,1HC,14X
5,5HSIGMA/)
105 FORMAT (1H ,36X,F5.2,3X,E14.8,3X,E14.8,3X,E14.8,3X,E1
4.8)
106 FORMAT (1H ,60X,2HWL,4X,13HS. INC. TOTAL,6X,1HX)
107 FORMAT (1H ,57X,F6.2,3X,E12.6,3X,F7.3)
108 FORMAT (1H ,57X,F6.2,18X,F7.3,3X,41HA SECCAO DE CHOQU
E NAO PODE SF
5R CALCULADA)
109 FORMAT (2E14.8)
END

```

```

SUBROUTINE INTAIT(N,X,Y,XP,YP)
DIMENSION X(40),Y(40),Z(40)
DO 20 J=1,N
20 Z(J)=Y(J)
L=N-1
DO 10 K=1,L
I=K+1
DO 10 I=I,N
10 Z(I)=(Z(K)*(X(I)-XP)-Z(I)*(X(K)-XP))/(X(I)-X(K))
YP=Z(N)
RETURN
END

```

```

C   CALCULO DA SECCAO DE CHOQUE INFLASTICA TOTAL
C   (COERENTE+INCOERENTE)
C   PELO METODO DO OSCILADOR INDEPENDENTE (FINKELSTEIN)
20  READ 100,WLI,WLF,DWL
    READ 101,SIGINC,SIGCOF,PATO,TFTA,FDFBYE
    PRINT 102,SIGINC,SIGCOF,PATO,TFTA,FDFBYE
    PATO=PATO/.6023E+24
    Y=(.333553E-53/(PATO*.13804E-15*TFTA))*(0.25+FDFBYE)
    F=.1579144E+03*Y
    WL=WLI
10  WL=WL+DWL
    IF(WL-WLF)1,1,2
1   WA=WL*1.0E-08
    SIGMA=(SIGINC+SIGCOE)*(1.0-((WA*WA/F)*(1.0-(1.0/EXPF(
    F/(WA*WA))))))
1)  PRINT 103,WL,SIGMA
    GO TO 10
2   PAUSE
    GO TO 20
100 FORMAT (3F7.3)
101 FORMAT (5F14.8)
102 FORMAT (1H ,18X,44H)CALCULO DA SECCAO E CHOQUE INELAS
    TICA TOTAL/29
    2X,21H(COERENTE+INCOERENTE)//26X,11HSIGMA INC.=E14.8/2
    GX,11HSIGMA C
    30F.=F14.8/26X,11HPESO ATOM.=E14.8/26X,11HTEMP.DFBYE=E
    14.8/26X,11HF
    40UNC.DFBYE=E14.8//24X,2HWL,5X,13HS. INELASTICA)
103 FORMAT (1H ,21X,F7.3,2X,E14.8)
    END

```



```

C   CALCULO TEORICO DA SECCAO DE CHOQUE TOTAL
C   CALCULO TEORICO DA SECCAO DE CHOQUE PARA O
C   ESPALHAMENTO INCOERENTE ELASTICO
C   CALCULO TEORICO DA SECCAO DE CHOQUE INELASTICA TOTAL
C   (METODO DE MARSHALL E STUART)
    DIMENSION WL(300), SINCT(300), SCOEL(300), SINEL(300), SS
      CEAB(300), SR(
1300), SIGMAT(300)
13  READ 100, NINC, NCOE
    READ 101, SINC, PATO, TETA, FDFBYE
    READ101, SABS, SCOF
    READ 102, (WL(I), SINCT(I), I=1, NINC)
    READ 103, (SCOEL(I), I=1, NCOE)
    PRINT200
    PATO=PATO/.6023E+24
    Y=(.33355311E-53/(PATO*.138E-15*TETA))*(0.25+PDFBYE)
    F=.15791441E+03*Y
    DO 10 I=1, NINC
    WA=WL(I)*1.0E-08
    SIGABS=(SABS/1.8)*WL(I)
    SINCEL=((SINC*WA*WA)/F)*(1.0-(1.0/EXPF(F/(WA*WA))))
    SINCIN=SINCT(I)-SINCEL
    SCOEIN=SCOF*SINCIN/SINC
    IF(I-NCOE)1, 1, 2
  1  SIGMAT(I)=SIGABS+SINCEL+SINCIN+SCOEIN+SCOEL(I)
    PRINT 900, WL(I), SIGMAT(I), SIGABS, SINCEL, SINCIN, SCOEIN
      , SCOEL(I)
    GO TO 3
  2  SIGMAT(I)=SIGABS+SINCEL+SINCIN+SCOEIN
    PRINT 901, WL(I), SIGMAT(I), SIGABS, SINCEL, SINCIN, SCOEIN
  3  IF(SENSE SWITCH 2)51, 52
51  PUNCH102, WL(I), SIGMAT(I)
52  IF(SENSE SWITCH 1)4, 10
  4  SINFL(I)=SINCIN+SCOEIN
    SSCEAB(I)=SINCIN+SCOEIN+SINCEL
    IF(I-NCOE)5, 5, 6
  5  SR(I)=SIGABS+SINCEL+SCOEL(I)
    GO TO 10
  6  SR(I)=SIGABS+SINCEL
10  CONTINUE
    IF(SENSE SWITCH 1)11, 13
11  PRINT 201
    PRINT 902, (WL(I), SIGMAT(I), SINEL(I), SR(I), SSCEAB(I), I
      =1, NINC)
    GO TO 13
100  FORMAT (2I4)
101  FORMAT (4E14.8)
102  FORMAT(2F14.8)
103  FORMAT (14X, E14.8)
200  FORMAT (1H ,55X,34HSECCOES DE CHOQUE PARCIAIS E TOTAL
      //15X, 13HCOMP
      2. DE ONDA, 3X, 14HSEC. CHOQ. TOTAL, 6X, 8HABSORCAO, 6X, 14HES
        P. INC. ELAST.,
      33X, 14HESP. INC. INEL., 3X, 14HESP. COER. INEL., 3X, 14HESP. C
        OE. ELAST.)
201  FORMAT (1H ,31X, 13HCOMP. DE ONDA, 3X, 14HSEC. CHOQ. TOTAL
      , 3X, 14HS. C. IN
      9EL. TOTAL, 3X, 14HABS. +FLASTICAS, 3X, 14HINEL. TOT+INCEL)
900  FORMAT (14X, 7(E14.8, 3X))

```

114.

```
901 FORMAT (14X,6(E14.8,3X))
902 FORMAT (31X,5(E14.8,3X))
END
```

APÊNDICE VEfeito da resolução em uma medida de secção de choque total, por transmissão.

Conhecendo-se o espectro de nêutrons incidente,  $D(\lambda)$ , a secção de choque total calculada teoricamente  $\sigma_t(\lambda)$  e a resolução do instrumento, podemos simular por cálculos qual seria o efeito da resolução na curva de secção de choque obtida em uma medida experimental, utilizando tal instrumento.

No caso, o espectro de nêutrons incidente foi medido experimentalmente; a seguir, para efeito de cálculo, determinamos qual a melhor equação que descrevia os pontos experimentais, encontrando-se

$$D(\lambda) = \frac{294171}{\lambda^{4,010}} \exp - \left( \frac{1,631}{\lambda} \right)^2$$

Este espectro depois de atravessar uma amostra, contendo  $n$  átomos por barn e cuja secção de choque é  $\sigma_t(\lambda)$ , é dado por

$$A(\lambda) = D(\lambda) e^{-n\sigma_t(\lambda)}$$

A secção de choque que se deve obter em uma medida experimental por transmissão, portanto afetada de resolução, será

$$\sigma_t(\lambda_0) = \frac{1}{n} \frac{\int D(\lambda) R_{\lambda_0}(\lambda) d\lambda}{\int A(\lambda) R_{\lambda_0}(\lambda) d\lambda}$$

sendo  $R_{\lambda_0}(\lambda)$  a função resolução do aparelho centrada em um particular valor  $\lambda_0$ ; tal função no nosso caso, como foi visto no item II.4.3, é da forma gaussiana e sua largura na meia altura varia com o comprimento de onda.

Nos cálculos considerou-se que o valor da gaussiana para abscissas maiores que duas larguras na meia altura da mesma é igual a zero.

116.

Os cálculos foram feitos utilizando-se o computador IBM-1620 -II, sendo o programa elaborado em linguagem FORTRAN mostrado na página seguinte.

```

C   FRESEC - FFFITO DA RESOLUCAO SOBRE
C   UMA CURVA TEORICA DE SECCAO DE CHOQUE
DIMENSION SIGMA(300),WL(300),D(300),A(300),F(300),DI(
    300),AI(300)
11 READ 100,WLI,WLF,DWL
    NP=(WLF-WLI)/DWL+1.0
    READ 101,(SIGMA(I),I=1,NP)
    PRINT 108
    DO 10 I=1,NP
        X=I-1
        WL(I)=WLI+X*DWL
10 D(I)=.29417143E+06/((WL(I)**4.01)*EXPF((1.631*1.631)/
    (WL(I)*WL(I))
    1))
    READ 100,H,RAIO,DIA
7   READ 100,WLIP,WLFP,RPM,CANAL,DIST
    READ 100,ENE
    DO 60 I=1,NP
60 A(I)=D(I)/EXPF(ENE*SIGMA(I))
    NI=(WLIP-WLI)/DWL+1.0
    NF=(WLFP-WLI)/DWL+1.0
    W=.10472E+00*RPM
    DTW=((1.04*H)/(RAIO*W))*1.0E+06
    DO 20 I=NI,NF
        V=.39557E+00/WL(I)
        DTD=DIA/V
        RESOL=SQRT(DTW*DTW+0.3825*(DTD*DTD+CANAL*CANAL))/(25
            2.8*DIST)
        K1=RESOL/DWL+1.0
        K=4*K1+1
        CM=K1
        SUBT=(2.*CM+1.0)*DWL
        DO 30 J=1,K
            C=J
            DFW=C*DWL-SUBT
30 F(J)=1.0/(1.0645*RESOL*EXPF((DFW*DFW)/(0.36067*RFSOL*
            RESOL)))
            LIF=1+2*K1
            LIS=NP-2*K1
            M1=1-2*K1
            M2=1+2*K1
            IF(M1-LIF)1,2,2
1   L1=LIF
            GO TO 3
2   L1=M1
3   IF(LIS-M2)4,5,5
4   L2=LIS
            GO TO 6
5   L2=M2
6   DO 40 I1=L1,L2
            L=I1+1-L1
            DI(L)=D(I1)
40 AI(L)=A(I1)
            DR=0.
            AR=0.
            DO 50 M=1,K
                PRD=F(M)*DI(M)*DWL
                PRA=F(M)*AI(M)*DWL
            DR=DR+PRD

```

118.

```
50 AR=AR+PRA
   SIGMAR=LOGF(DR/AR)/ENF
   NC=1
20 PRINT 109,1,WL(1),SIGMAR
   IF(NC-NP)7,8,8
   8 GO TO 11
100 FORMAT (5E14.8)
101 FORMAT(14X,E14.8)
108 FORMAT (1H ,53X,39HSFCCAO DE CHOQUE AFTADA PFLA RESO
          LUCAO//57X,1H
          21,8X,2HWL,12X,5HSIGMA/)
109 FORMAT (1H ,55X,14,5X,F7.3,5X,E14.8)
   END
```

BIBLIOGRAFIA

- (Am67) - Amaral, L.Q., Rodriguez, C., Herdade, S.B e Vinhas, L.A.,  
Publicação IEA-152 (1967) 77.
- (Am68) - Amaral, L.Q., Vinhas, L.A., Rodriguez, C. and Herdade, S.B.,  
Nucl. Instr. and Meth. 63(1968)13.
- (Am69) - Amaral, L.Q., tese de mestrado, Escola Politécnica da USP  
S.P. (1969).
- (Ba62) - Bacon, G.E., Neutron Diffraction, Oxford University Press,  
London (1962).
- (Br52) - Breazeale, W.M., Nucleonics 10(11) (1952)56.
- (Br61) - Brugger, R.M., and Evans, J.E., Nucl. Instr. and Meth 12  
(1961)75.
- (Ca50) - Cassels, J.M., Progr. in Nucl. Phys. 1(1950)185.
- (Ch58) - Chastain Jr., J.W., U.S. Research Reactor Operation and  
Use, Addison Wesley, New York(1958).
- (Ch61) - Chase, R.L., Nuclear Pulse Spectrometry, McGraw Hill, New  
York (1961).
- (Co42) - Cork, J.M., Heat, Wiley, New York (1942).
- (De61) - Deruytter, A., Ceulemans, H., Mevergnies, M.N. and Moret,  
H., in Neutron Time-of-Flight Methods, 275, Euraton,  
Brussels(1961).
- (Di60) - Directory of Nuclear Reactor, III(1960)25, Vienne.
- (Eg54) - Egelstaff, P.A., J.Nucl. Energy 1(1954)57.
- (Eg57) - Egelstaff, P.A., J. Nucl. Energy 5(1957)203.
- (Eg65) - Egelstaff, P.A., (ed) - Thermal Neutron Scattering, Aca-  
demic Press (1965).
- (E155) - Elliot, R.J., and Lowde, R.D., Proc. Roy.Soc.(London)  
A230(1955)230.
- (Fe36) - Fermi, E., Ricerca Scient. VII-2(1936)13 and report ----  
USAEC NP-2385(1951).
- (Fe47) - Fermi, E., Marshall, J. and Marshall, L., Phys. Rev. 72  
(1947)193.
- (Fi47) - Finkelstein, R.J., Phys. Rev.72(1947)907.

- (Go58) - Gould, F.T., Columbia University, CU-179(1958).
- (Ha39) - Halpern, O. and Johnson, M.M., Phys.Rev.55(1939)898.
- (Ha49) - Halpern, O. and Gerjuoy, E., Phys. Rev. 76(1949)1117.
- (Ha51) - Havens Jr., W.W. and Rainwater, L.J., Phys. Rev.83(1951).  
1123.
- (Ha56) - Handbuch der Physik (S.Flugge)14,(1956)282.
- (He67) - Herdade, S.B., Amaral, L.Q., Rodriguez, C. and Vinhas, L.A.,  
Publicação IEA-136(1967).
- (Hi56) - Higinbotham, W.A., Proceedings of the First International  
Conference on the Peaceful Uses of Atomic Energy, U.N.,  
Geneva, 4(1956)53.
- (Hu46) - Hulst, H.C. Van de, PhD teses, publ. Weley (1957).
- (Hu50) - Hughes, D.J., Burgy, M.T. and Woolf, W.E., Phys.Rev. 80  
(1950)481.
- (Hu53) - Hughes, D.J., Pile Neutron Research, Addison Wesley(1953)
- (Hu58) - Hughes, D.J., report BNL-325.
- (Kr50) - Krueger, H.H.A., Meneghetti, D., Ringo, G.R. and Winsberg,  
L., Phys.Rev. 80(1950)507.
- (La52) - Lathan, L. and Cassels, J.M., Proc. Phys.Soc (London)  
65A(1952)241.
- (La58) - Larsson, K.E., Stedman, R and Palevsky, H., J.Nucl. Ener  
gy 6(1958)222.
- (La59) - Larsson, K.E., Dahlborg, U., Holmryd, S., Otnes, K. and -  
Stedman, R., Arkiv for Fysik Band 16, nr 19(1959)199.
- (Ma54) - Marshall, W., Proc. Phys.Soc.(London) 67A(1954)85.
- (Ma59) - Marseguerra, M. and Pauli, G., Nucl. Instr. and Meth  
4(1959)140.
- (Ma59a) Marshall, W. and Stuart, R.N., report UCRL-5568(1959).
- (Ma61) - Marshall, W. and Stuart, R.N., Inelastic Scattering of  
Neutrons in Solids and Liquids, 75, IAEA, Vienna(1961).
- (Mo51) - Moorhouse, R.G., Proc. Phys. Soc.(London)64A(1951)1097.
- (Ni62) - Niewiadomski, T., Szkatula, A. and Sciesinski, T., Nukleo  
nika VII nr 4(1962)231.



- (P151) - Placzek, G., Nijboer, B.R.A. and Hove, L. Van, Phys. Rev. 82(1951)392.
- (P154) - Placzek, G., Phys. Rev. 93(1954).
- (P155) - Placzek, G. and Hove, L. Van, Nuovo Cim. 1(1955)233.
- (P157) - Placzek, G., Phys. Rev. 105(1957)1240.
- (Ri57) - Ringo, G.R., Handbuch der Physik (S. Flugge) 32(1957)552.
- (Ro48) - Rose, M.E. and Shapiro, M.M., Phys. Rev. 74(1948)1853.
- (Sa58) - Santos, M.D. de Souza, and Toledo, P.S. de, Proc. of the Second International Conference on the Peaceful Uses of Atomic Energy, U.N., Geneva, 10(1958)259.
- (Sc56) - Schumann, R., Rev. Sci. Instr. 27(1956)686.
- (Se40) - Seitz, F., Modern Theory of Solids, McGraw Hill, New -- York (1940).
- (Sq52) - Squires, G.L., Proc. Roy. Soc. (London) 212A(1952)192.
- (St49) - Steinberger, J. and Wick, G.C., Phys. Rev. 76(1949)994.
- (Tu65) - Turchin, V.F., Slow Neutron, Israel Programs for Scientific Translations (1965).
- (Vi68) - Vinhas, L.A. e Rodriguez, C., Ciência e Cultura 20 II (1968)132.
- (We44) - Weinstock, R., Phys. Rev. 65(1944)1.
- (We51) - Weiss, R.J., Phys. Rev. 83(1951)379.
- (Ze51) - Zemansky, M.W., Heat and Thermodynamics, McGraw Hill, New York (1951).

