

DR-78000/7

ISSN 0328 - 1403

CNEA 431
Informe

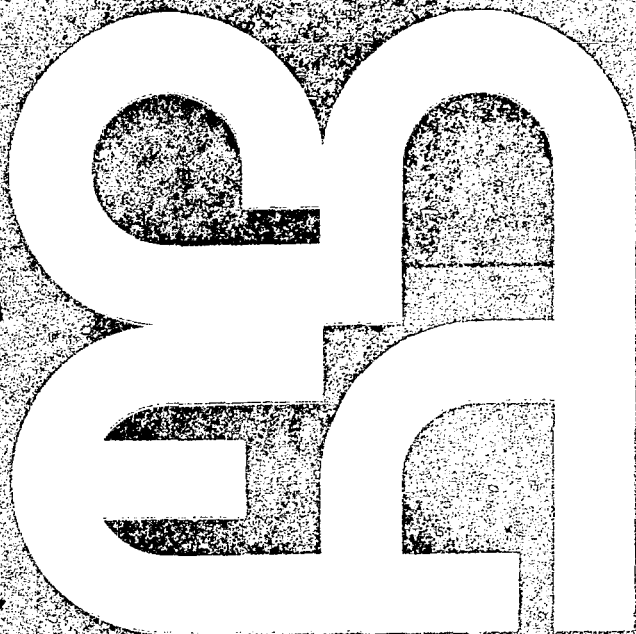
Una Evaluación del Modelo Endf/Gasket de la Dispersión de Neutrones Térmicos en Agua Pesada

M. J. Abbate
H. M. Antunes

**Comisión
Nacional
de Energía
Atómica**

República Argentina

Buenos Aires, 1977



CNEA 431
Informe

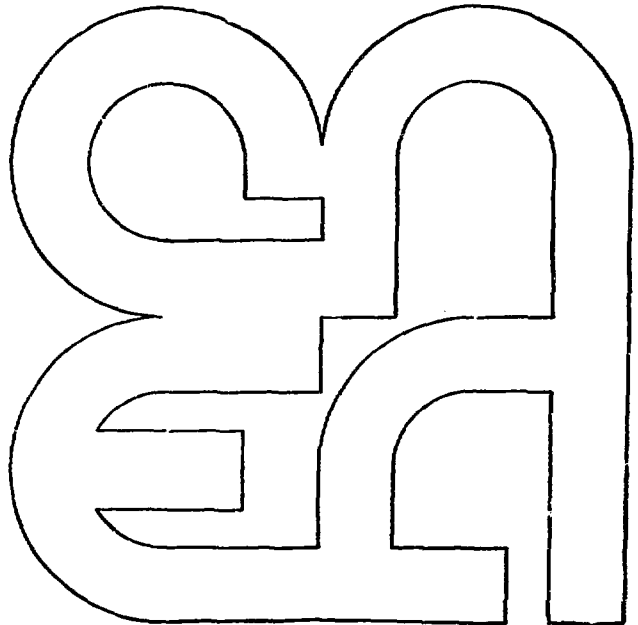
Una Evaluación del Modelo Endf/Gasket de la Dispersión de Neutrones Térmicos en Agua Pesada

M. J. Abbate
H. M. Antunez

**Comisión
Nacional
de Energía
Atómica**

República Argentina

Buenos Aires, 1977



Abbate, M.J.

Una evaluación del modelo ENDF/GASKET de la dispersión de neutrones térmicos en agua pesada. Buenos Aires, Comisión Nacional de Energía Atómica, 1977.

36 p. 26 cm. (Informe CNEA, 431)

Neutrones; Agua pesada. Antúnez, H.M.

539.125.5

546.212*2

.....

INIS CLASSIFICATION AND KEYWORDS

A31

HAYWOOD MODEL
SCATTERING
THERMAL NEUTRONS
HEAVY WATER
COMPUTER CALCULATIONS
CROSS SECTION
DECAY
DIFFUSION
DISPERSION RELATIONS

PRESIDENCIA DE LA NACION
COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA

UNA EVALUACION DEL MODELO ENDF/GASKET DE LA
DISPERSION DE NEUTRONES TERMICOS EN AGUA PESADA

M. J. Abbate* y H. M. Antunez**

Aceptado en junio de 1976

RESUMEN

El modelo ENDF/GASKET fue elegido para el tratamiento de la dispersión de neutrones térmicos en un programa de estudio del agua pesada como moderador. Ello hizo necesario para evaluarlo, un esfuerzo que se describe en el presente trabajo.

En primer término se calculó la ley de dispersión $S(\alpha, \beta)$ con ENDF/GASKET. La comparación de los valores obtenidos con otros medidos y calculados hasta la fecha mostró que el modelo no es totalmente satisfactorio desde este punto de vista. Esto se atribuye a que no tiene en cuenta efectos de coherencia y a que tanto su espectro de frecuencia continuo como el discreto deben ser mejorados. Con todo, es difícil sacar conclusiones definitivas porque los valores experimentales consultados presentan serias discrepancias entre sí.

Se calcularon los momentos de Legendre de la sección eficaz doble diferencial y sus valores microscópicos, y como fue observado en otros trabajos, la aproximación incoherente hace que no se reproduzca la sección eficaz

* Ejército Argentino.

** Servicio Naval de Investigación y Desarrollo.

total medida a energías menores que 0,006 eV. Por su parte la discrepancia que presenta el valor medio calculado del coseno del ángulo de dispersión con valores medidos podría implicar que el efecto de coherencia se manifiesta a mayores energías que las antedichas, lo cual está de acuerdo con los resultados de la comparación precitada de valores de la ley de dispersión.

Finalmente se calcularon constantes de decaimiento y parámetros de difusión para D_2O (100 %); encontrándose buen acuerdo con valores de otras fuentes.

Se propone completar esta verificación en forma diferencial mediante la medición de espectros de neutrones de bajas energías, comparándolos con los que se calculen con las secciones eficaces obtenidas a partir del modelo en cuestión.

A esta altura se vislumbran como posibles alternativas para etapas ulteriores, el mejoramiento de ENDF/GASKET o bien la evaluación del más reciente modelo de Jarvis.

SUMMARY

An evaluation of the ENDF/GASKET model for thermal neutron scattering in heavy water

The ENDF/GASKET model for computing thermal neutron scattering was selected for studies undertaken with the purpose of getting thoroughly acquainted with the behavior of the heavy water as a moderator.

As a first step in its evaluation, the scattering law $S(\alpha, \beta)$ was computed with ENDF/GASKET. A comparison of the values so obtained with others previously measured or computed showed that the model is not completely satisfactory in this respect. This is attributed to coherent scattering not included in the model and to the need of improving its frequency spectrum. Any way, the experimental values show serious discrepancies and it is difficult to reach definitive conclusions.

The Legendre moments of the double differential cross section and its microscopic values were also computed. As it was found by other authors, the incoherent approximation of ENDF/GASKET results in a drastic departure from the measured total cross section below 0,006 eV. In addition, the discrepancies between measured and calculated $\bar{\mu}$, might also imply that the coherence effects are appreciable at higher energies.

Also decay constants and diffusion parameters were computed for D_2O (100 %), and these agree well with values of other sources. The measurement and computation of neutron spectra in heavy water is presently intended for the sake of completing evaluation.

So far two alternatives are foreseen for further work: the improvement of ENDF/GASKET, or the evaluation of the more recent Jarvis model.

INTRODUCCION

Es fácil comprender que desde las etapas iniciales del programa orientado a realizar estudios sistemáticos en agua pesada como moderador, fue necesario encarar cálculos de constantes de grupo promediando las secciones eficaces para determinados intervalos de energía. Tales valores se requieren para realizar los cálculos neutrónicos a lo largo de todo el desarrollo del programa, y ya desde un principio en las estimaciones indispensables para definir los experimentos adecuados.

A su vez, las secciones eficaces de dispersión para neutrones de bajas energías deben obtenerse de la ley de dispersión $S(\alpha, \beta)$, la que se calcula a partir de un modelo molecular dado que represente las propiedades del material desde el punto de vista de la dispersión de neutrones.

El modelo elegido en primera instancia es el ENDF/GASKET [1].

El proceso de selección se basó en un estudio bibliográfico [2] que pasa revista a los modelos moleculares conocidos para el tratamiento de la dispersión de neutrones de bajas energías en agua pesada, el cual no llegó a resultados suficientemente concluyentes.

Ello nos impulsó a realizar el presente estudio, consistente en calcular con ese modelo funciones como la ley de dispersión, secciones eficaces y parámetros de difusión, y comparar los resultados con valores publicados para obtener información mucho más completa sobre la validez del modelo y sus limitaciones.

Las conclusiones a que hemos llegado pueden ser de interés para otros de los muchos usuarios del modelo ENDF/GASKET.

MODELOS

El modelo ENDF/GASKET al que se refiere el presente trabajo, que se basa - en la aproximación incoherente - en un espectro de frecuencias de Haywood modificado por Koppel y Young [3], también ha sido citado bajo las denominaciones de Haywood II modificado o de Koppel y Young [4]. Dichas designaciones no son totalmente correctas o al menos completas, en el primer caso por hacer referencia sólo al espectro de frecuencias utilizado [5] y en el segundo ya que el modelo de Koppel y Young [4] se basó en un espectro de Haywood-Thorson anterior [6].

Se interpreta que la definición cabal del modelo debe incluir todos los detalles necesarios para la obtención de la ley de dispersión los que incluyen a las hipótesis acerca de la dinámica molecular como sería el caso del ENDF/GASKET según la descripción de Koppel y Houston [1].

Desde un punto de vista general conviene destacar que si bien las características moleculares pueden ser conocidas mediante la aplicación de métodos como la espectroscopía Raman, las frecuencias características de algunos modelos fueron fijadas dividiendo por $\sqrt{2}$, para tener en cuenta la diferencia de masas, las correspondientes al agua liviana en el modelo de Nelkin [7]. En la Tabla I pueden verse los valores de éstas y aquellas en algunos casos representativos.

Asimismo, debe notarse que en realidad estas frecuencias corresponden a fase gaseosa, y que en estado líquido, el que nos interesa, pueden diferir en cierta medida.

LEY DE DISPERSION PARA D₂O LIQUIDA

Cálculo

La ley de dispersión $S(\alpha, \beta)$ fue calculada a 296°K con el programa GASKET [10] en la forma habitual, para el deuterio ligado en D₂O con el modelo ENDF/GASKET [1] y con la aproximación en éste recomendada para el oxígeno, de considerar sólo su traslación libre con masa 16.

Se siguió el ejemplo de cálculo de Koppel y Houston [1] utilizando la misma red de 80 valores de intercambio de energía, medidos como $\beta = \frac{4\epsilon_0}{kT}$, para $0,0 < \beta < 58,9$ (energía máxima 1,5 eV); y otros tantos de intercambio de impulso, medidos como $\alpha = \frac{4\epsilon_0 Q^2}{2mkT}$, para $0,03 < \alpha_D < 118,3$, para el deuterio y $0,0038 < \alpha_O < 14,89$ para el oxígeno, correspondientes a iguales transferencias de momento porque

$$\alpha_0 = \frac{m_D}{m_o} \alpha_D = \frac{2,014}{16,00} \alpha_D$$

La ley de dispersión para D_2O se obtuvo sumando las anteriores según [18]:

$$S(\alpha_D, \beta)_{D_2O} = \frac{2 \sigma_b^D S(\alpha_D, \beta)_{D(D_2O)} + \sigma_b^0 S(\alpha_0, \beta)_0}{2 \sigma_b^D + \sigma_b^0}$$

donde σ_b es la sección eficaz del átomo ligado.

Se utilizó un programa preparado ad hoc [11]; los resultados pueden verse en la Figura 1.

La importancia de la contribución a $S(\alpha, \beta)_{D_2O}$ del oxígeno se muestra en la Figura 2; ella es tal que el modelo que se use para este átomo puede ser crítico para $\alpha > 5$, y para $\alpha < 0,4$ con $\beta < 1$. Conviene recordar que la contribución relativa del oxígeno a la dispersión en agua pesada es mayor que en agua, debido a que el poder de moderación del deuterio es *mucho menor* que el del hidrógeno.

Comparación con valores medidos

Los conjuntos de valores (puntuales) experimentales con que se cuenta provienen de mediciones de la sección eficaz doble-diferencial, y se los presenta, junto con algunos calculados, en la Tabla II y en las figuras allí referidas. En dicha Tabla también se asigna una sigla identificatoria a cada conjunto de valores.

Una rápida inspección de estas figuras indica que no es simple hacer comparaciones. Es necesario tener en cuenta varios o todos los conjuntos de valores de S para cubrir una región razonable en (α, β) y además no es posible seleccionar a priori un conjunto como característico o que al menos indique la tendencia de los valores experimentales.

Tales discrepancias se atribuyen fundamentalmente a deficiencias en la corrección por dispersión múltiple [16]; Whittemore estima las diferencias entre los conjuntos HY, HA y WH del orden de dicha corrección [9].

A continuación se discute la comparación entre valores medidos y calculados de S para determinados intervalos de α y β . Señálase desde ya que las curvas calculadas son lisas y no muestran la "estructura" de los conjuntos de valores experimentales. Las diferencias entre los conjuntos de valores son tan grandes que no se discute el efecto de las ligeras diferencias en T y β , así como el que los valores medidos publicados puedan corresponder a agua pesada con cierto contenido de HDO.

a).- $\beta < 3,0$. Allí se cuenta con mayor cantidad de valores experimentales. Las curvas para $\beta = 0,20; 0,5; 1,0$ y $2,4$ han sido representadas en las Figuras 3, 15, 5 y 6 respectivamente, porque para esos valores se dispone de curvas experimentales.

$\alpha > 6,0$: CA concuerda razonablemente con los valores experimentales salvo con EG, que presenta bruscas variaciones no explicadas. Como la contribución a $S(\alpha, \beta)$ del átomo de oxígeno es aquí muy importante (cf. Cálculo y Figura 2), puede inferirse que el modelo de traslación libre con masa 16 usado es aceptable para $\beta < 3,0$ para grandes intercambios de impulso.

$0,2 < \alpha < 6,0$: el acuerdo es menor, pero todos los conjuntos de valores presentan un máximo relativo que se desplaza hacia menores α al disminuir β . Los valores EG son del orden de los otros, pero dada su dispersión sería difícil compararlos con los demás con más precisión. Salvo para β pequeño (región cuasi-elástica) en casi todo este intervalo de α los valores HY son los más altos de los restantes, seguidos por los HA y a continuación por los WH y CA.

$0,01 < \alpha < 0,2$: aquí CA decrece fuertemente al disminuir α ; los valores experimentales se comportan en forma similar pero más lentamente.

b).- $\beta > 3,0$. Allí se han tenido en cuenta sólo los valores experimentales WH, con los que concuerdan razonablemente CA y MM, aunque a veces con divergencias de distintos signo. Para varios valores de β , WH y MM muestran una tendencia a subir para los valores más altos de α más marcada que la de CA, precisamente donde el modelo que CA contempla para el oxígeno puede resultar poco preciso (cf. Cálculo y Figura 2).

c).- Variaciones notables en S: la Figura 4 muestra en WH para varios valores de β un brusco crecimiento de S para $\alpha = 3$, y una caída correspondiente para $\alpha = 10$. Whittemore [9], que considera evidentes similares anomalías en HA (Figuras 5 y 6), interpreta que pueden atribuirse a dispersión coherente, con lo que se explica que no aparezcan en CA y MM (Figura 7). Así, los efectos de interferencia serían notables aún para cambios apreciables de energía e impulso, en contra de opiniones anteriores [4].

En WH (Figura 4) se cruzan en $\alpha = 1,2$ las curvas para $\beta = 5$ y $\beta = 6$, y en $\alpha = 2,5$, las curvas para $\beta = 10$ y $\beta = 11$. Estos cruzamientos aparecen en CA (Figura 1) para $\beta = 5,18$ y $\beta = 5,60$ en $\alpha = 1,6$, y para $\beta = 11,03$ y $\beta = 12,06$ en $\alpha = 3,5$. A $\beta = 5,59$ corresponden $0,14235$ eV, y a $\beta = 11,98$, $0,30504$ eV, frecuencias para las cuales el modelo ENDF/GASKET considera osciladores (Tabla I). El conjunto de valores WH sugiere pues que esas frecuencias son adecuadas.

En EG (Figura 8) se cruzan en $\alpha = 0,25$ las curvas para $\beta = 0,6$ y $\beta = 0,7$. En HY (Figura 9), en $\alpha = 0,12$ las de $\beta = 0,6$ y $\beta = 0,8$. Ellas corresponden a aproximadamente $0,02$ eV. Estos cruzamientos no aparecen en CA; esta divergencia podría estar originada en la eliminación de varios picos de vibración traslacional de la molécula de D_2O en conjunto, en energía menores que $0,025$ eV, de la banda de frecuencias propuestas por Hayward [5]. Estos modos fueron reemplazados en el modelo ENDF/GASKET por Koppel y Houston [1] por traslaciones libres de masa 20 para evitar dificultades numéricas.

Espectros de frecuencias

También el espectro de frecuencias parece ser un punto débil del modelo ENDF/GASKET.

Whittemore, usando la técnica de extrapolación con:

$$\rho(\beta) = 2\beta \sinh(\beta/2) \left(\lim_{\alpha \rightarrow 0} (S(\alpha, \beta) / \alpha) \right)$$

obtuvo un espectro de frecuencias [9]. Se lo presenta en la Figura 10 junto con el del modelo que tratamos⁽¹⁾.

(1) No confundir con el atribuido a Koppel y Young por Whittemore [9].

Se observan grandes diferencias, pero debe acotarse:

para el modelo ENDF/GASKET, su espectro fue obtenido conociéndose valores de la ley de dispersión medidos sólo hasta $\beta = 3$;

para el espectro obtenido por Whittemore, según él mismo señala, la extrapolación debería realizarse para un intervalo de valores de α apreciablemente más bajos que los medidos por él, particularmente para $\beta > 5$ [9].

Esto implica la conveniencia de nuevas mediciones de la ley de dispersión, similares a las de Whittemore, que incluyeran α más pequeños. Su análisis conducente a extrapolar un nuevo espectro de frecuencias debe naturalmente considerar los efectos de coherencia.

Otro aspecto a tener en cuenta en una eventual revisión del espectro de frecuencias del modelo no es evidente en el de Whittemore por haber éste trabajado para α y β relativamente altos. Se trata del efecto de considerar libre la traslación de las moléculas de D_2O (cf. Modelos y Comparación con valores medidos (c)).

El trabajo de Esch [17] para agua liviana puede orientar un enfoque del tratamiento de conglomerados de moléculas en fase líquida. En su modelo dependen de la temperatura:

los tamaños de los conglomerados

la constante de difusión según la que se difunde

la distribución de frecuencias multi-gaussiana con que se representan los niveles de energía de las moléculas aglomeradas.

Hay antecedentes de opiniones en este sentido. Koppel [29] ha discutido las discrepancias de este tipo que se presentan en el caso del agua liviana para α y β pequeños atribuyéndolas a un incorrecto tratamiento (considerándola como traslación libre) de la difusión de las moléculas en el líquido, planteando el interrogante de volver a considerar al agua como una mezcla de agregados de moléculas similar a la hipótesis del modelo de Mc Murry [15]; así también Egelstaff [30] trata de explicar las anomalías en D_2O adjudicándolas al haberse supuesto que el movimiento de las moléculas es libre.

Cierto es que queda como alternativa al mejoramiento de ENDF/GASKET la evaluación, no demasiado promisorio por estar limitado a la aproximación incoherente del reciente modelo de Jarvis [18], para el que por el momento no se dispone de $S(\alpha, \beta)$ con él calculada. No se contempla la misma posibilidad para el modelo de ancho efectivo "WIMS" presentado por Butland y Chudley [19] por no ser evidente que traiga aparejada una mejor aproximación.

SECCIONES EFICACES

Con la ley de dispersión calculada en este trabajo se generó el núcleo de dispersión y sus momentos de Legendre (programa FLANGE 1 [20]), utilizando una red de 85 puntos de energía entre 0,0005 y 1,5 eV convenientemente elegida. Con $S(\alpha, \beta)$ tal como fue calculada (cf. Cálculo) con GASKET, no se puede extender en forma directa el núcleo de dispersión por encima de 1,5 eV. Se intentó hacerlo en forma aproximada con FLANGE 1, pero apareció una discontinuidad en 1,5 eV que no existe en realidad, y que ya se muestra en las Figuras 3 y sobre todo 6 de un trabajo de Boronovi [21]. El problema así planteado queda abierto por exceder los objetivos del presente trabajo.

Los valores de la sección eficaz total fueron comparados con otros medidos [22]. Estos últimos no difieren significativamente - a los fines de este cotejo - de los mucho más antiguos utilizados [23] en una comparación anterior [1], en la que por otra parte la contribución del oxígeno a la sección eficaz calculada se suma como una constante en lugar de estar incorporada en $S(\alpha, \beta)$. Las discrepancias que se evidencian en la Figura 11 (cf. Figura D O 5.3 de [1]) están dentro del 1% para energías mayores que 0,75 eV y alcanzan al 6% para valores menores. Si bien esa diferencia es pequeña, el comportamiento de ambos conjuntos de datos es distinto al disminuir la energía: los valores calculados no reproducen el efecto de coherencia que se observa en los medidos por debajo de 0,006 eV (y por lo tanto prácticamente fuera de la zona de interés para el diseño de reactores).

También el valor medio calculado del coseno del ángulo de dispersión $\bar{\mu}$ puede verse en la Figura 11, comparado con valores medidos [24]. Guardan un comportamiento similar pero la discrepancia es mayor que en el caso de las secciones eficaces y atribuible a efectos de coherencia [25] no contemplados en CA. En la zona de bajas energías los valores experimentales presentan variaciones que no permiten obtener conclusiones. Pero, para energías mayores que 0,1 eV y teniendo en cuenta que

$$\bar{\mu} = \sigma_1 / \sigma_0$$

que

$$\sigma_0 = \sigma_t$$

y que σ_t calculada coincide bien con la medida en esa región, puede concluirse que σ_t está subestimada. Esto debe ser tenido en cuenta para cálculos de difusión y transporte en aproximación P_1 .

PARAMETROS DE DIFUSION

Como otro paso de la presente evaluación, se calcularon la constante de decaimiento en función del "buckling" y los parámetros de difusión para D_2O (100%) con el método descrito por Volkis et al. [26], y las constantes de grupo obtenidas promediando los valores microscópicos de las secciones eficaces.

Constante de decaimiento

Se calculó la constante de decaimiento para 42 valores del "buckling" comprendidos entre 0,001 y 0,06 cm^{-2} . El resultado fue comparado con valores medidos según la Tabla III. Para "buckling" pequeño (geometrias grandes) el acuerdo con las mediciones de Silk y Wade [27] es razonablemente bueno, Figura 12. En el caso de valores grandes de "buckling", el cálculo sobrepasa a los resultados experimentales de Daughtry et al. [28], Figura 13.

Parámetros de difusión

Se incluyen en la Tabla IV junto con los medidos y calculados por otros autores.

Con respecto a α_0 , tanto su medición como cálculo son dificultosos por su pequeño valor. Por ese motivo, en este caso se obtuvo de:

$$\alpha_0 = \sum_a (v_a) \times v_0 = 9,66 \text{ seg}^{-1}$$

con σ_a (2.200 m/seg) = 0,001321 barn [27].

En D se observa muy buen acuerdo. C es menor que la mayor parte de los valores conocidos. Los pocos valores disponibles de F no permiten evaluar el nuestro.

CONCLUSIONES

Con respecto a $S(\alpha, \beta)$, se tomó especialmente en cuenta que la deficiente corrección por dispersión múltiple afecta gravemente la utilidad de algunos resultados experimentales para evaluar modelos teóricos (cf. Comparación con valores medidos).

Estos últimos, mucho más que para el agua, deben contener una descripción adecuada del oxígeno en el caso del agua pesada. El tratamiento de traslación libre con masa 16 resultó satisfactorio en algunos dominios de (α, β) , pero no puede garantizarse que las discrepancias que aparecen en otros no tengan su origen en la crudeza de tal modelo (cf. Comparación con valores medidos - b)).

Con estas salvedades, se ha encontrado que en general se subestima $S(\alpha, \beta)$ con ENDF/GASKET. Si a esto se suma la existencia de anomalías localizadas en energías del orden de 0,1 eV, en las curvas con β como parámetro, se presume la conveniencia de considerar la dispersión coherente en el cálculo de dicha función, ratificada por comentarios que siguen acerca de secciones eficaces.

Una observación de carácter favorable al espectro de frecuencias de ENDF/GASKET es la coincidencia de la energía de sus osciladores con la de cruzamientos de curvas $S(\alpha)$ con parámetro β , para valores similares de α en curvas medidas y calculadas. Tales cruzamientos también se observan en las curvas medidas para valores bajos de α y β ; pero no en las calculadas. Esta discrepancia podría solucionarse con la inclusión de otro oscilador de $\beta \sim 0,7$ en el modelo (cf. Comparación con valores medidos - c)). Dicho agregado implicaría refinar el tratamiento de la traslación no libre de la molécula de D_2O en fase líquida, y podría considerarse conjuntamente con el esquema de Esch [17] (cf. Espectros de frecuencias).

También con respecto al espectro de frecuencias del ENDF/GASKET, quedan por aclarar sus diferencias con otro [9] obtenido también por la técnica $\lim_{\alpha \rightarrow 0} S(\alpha, \beta)/\alpha$ con valores experimentales para β grandes. (cf. Espectros de frecuencias, Figura 10).

En lo que toca a las secciones eficaces totales calculadas y medidas, que presentan en general pequeñas diferencias, los valores calculados no reproducen el efecto de coherencia observado en los medidos debajo de los 0,006 eV. Dicho efecto aparece como notable en energías del orden de 0,1 eV por la discrepancia entre valores de $\bar{\mu}$ medidos y calculados con el modelo en estudio. Por otra parte, el que σ_1 resulte subestimada en el cálculo debe ser tenido en cuenta en problemas de neutrónica que se resuelven con la aproximación P_1 . (cf. Secciones eficaces).

El acuerdo observado entre valores calculados y medidos de cantidades integrales como constantes de decaimiento y parámetros de difusión es satisfactorio (c.º Parámetros de difusión).

Como conclusión final se propone completar esta evaluación mediante la medición de espectros de neutrones de bajas energías, comparándolos con los que se calculen con las secciones eficaces obtenidas a partir de ENDF/GASKET [43].

A esta altura se vislumbran como posibles alternativas para etapas ulteriores el mejoramiento de ENDF/GASKET, o bien la evaluación del más reciente modelo de Jarvis [18].

AGRADECIMIENTOS

El presente trabajo se realizó con el apoyo del Departamento Investigaciones y Desarrollos del Ejército Argentino a través del proyecto "Física de Neutrones y Reactores".

TABLA I
 Frecuencias características (en eV) de algunos modelos

GRADO DE LIBERTAD	H ₂ O	D ₂ O			
	NELKIN [7]	H ₂ O/√2	HONECK [8]	WHITTEMORE [9]	ENDF/GASKET [1]
ROTACION	0,060	0,0424	0,050	0,048 *	0,050* (β=1,96)
DEFORMACION SIMETRICA	0,205	0,145	0,150	0,146	0,14235 (β=5,59)
ESTIRAMIENTO SIMETRICO	0,474	0,335	0,350	0,331	0,30504 (β=11,98)
ESTIRAMIENTO NO SIMETRICO	0,488	0,345	0,350	0,346	0,30504 (β=11,98)

* El espectro continuo de frecuencias presenta allí un máximo.

TABLA II
 Conjuntos de valores calculados y medidos de la ley de dispersión
 en D_2O (por átomo de D)

SIGLA	METODO	ORIGEN	T (°K)	α_D	β	GRAFICA	FIGURA
CA	CALCULO MODELO ENDF/GASKET	ESTE INFORME	296	0,03 a 118,3	0 a 58,9	$0,03 < \alpha_D < 40$; $0,2 < \beta < 14,4$	1, 2, 3, 5, 6, 7 y 15
EG	MEDIDOS	EGELSTAFF [12]	297	0,2 a 10	0,2 a 2,8	Puntos unidos por curvas para facilitar su representación	3, 5, 6 8 y 15
HY	MEDIDOS	HAYWOOD [13]	295	0,04 a 8	0,2 a 3	Curvas con el "mejor ajuste" recomendado por su autor.	3, 5, 6 9 y 15
HA	MEDIDOS	HARLING [14]	299	0,13 a 20	0 a 7,5	Curvas "ajustadas a ojo" por su autor por mucha dispersión en las mediciones y diferencias no explicables para β positivo y negativo, $0,13 < \alpha_D < 18$; $0,25 < \beta < 3$. Puntos experimentales para grandes β negativos.	3, 5, 6 14 y 15
WH	MEDIDOS (CORREGIDOS POR DISPERSION MULTIPLE)	WHITTEMORE [9]	300	0,5 a 40	1 a 14	Curvas siguiendo los puntos experimentales.	4 y 7
						Curvas alisadas.	5
MM	CALCULO MODELO MC MURRY	MC MURRY [9], [15]	300	0,2 a 40	1 a 10	$0,2 < \alpha < 40$; $1 < \beta < 9$	7

TABLA III
Constante de decaimiento (seg⁻¹)

Nº	B ²	MEDIDAS		CALCULADAS	DIFERENCIA
	cm ⁻²	[27]	[28] (1)	D ₂ O (100 %)	%
1	0,001000	221,58 ± .17		208.	-6,1
2	0,001690	358,09 ± .49		347.	-3,1
3	0,003595	731,8 ± 3,7		730.	-0,24
4	0,004360	872. ± 6.		883.	1,3
5	0,005540	1110. ± 9.		1128.	1,6
6	0,006140	1215. ± 10.		1237.	1,8
7	0,007330	1462. ± 18. (1)		1471.	0,61
8	0,0291		5484. ± 52.	5557.	1,3
9	0,0314		5861. ± 73.	5977.	2,0
10	0,03375		6291. ± 78.	6402.	1,8
11	0,03389		6306. ± 79.	6427.	1,9
12	0,03856		7208. ± 97	7256.	0,7
13	0,04308		7950. ± 109.	8042.	1,2
14	0,04745		8594. ± 97.	8786.	2,2
15	0,05284		9454. ± 96.	9684.	2,4
16	0,05766		10190. ± 86.	10469.	2,7
17	0,05933		10363. ± 98.	10738.	3,6

(1) Promedio de varios valores.

TABLA IV
Parámetros de difusión

REF.	a_0 Seg ⁻¹	D cm ² /seg x 10 ⁵	C cm ⁴ /seg x 10 ⁵	F cm ⁶ /seg x 10 ⁵	OBSERVACIONES	TEMP. °C
[25]		1,98	5,76		Calculado, modelo ENDF/GASKET.	23
[8]		2,072	5,129	7,39	Calculado, modelo HONECK.	20
[31]	0,00	2,08 ± ,05	3,72 ± ,50		Fuente pulsada.	20
[32]		2,09 ± ,02	6,6 ± ,02	13, ± 10. (1)	Estático, longitud de relajación.	23
[33]	10,00	2,045 ± 0,44	4,706 ± ,381		Fuente pulsada.	21
[34]		2,00 ± ,01	5,25 ± ,25		Fuente pulsada.	22
[35]		2,15 ± ,07				
[36]		2,09 ± ,02			Con envenenamiento.	20
[37]		2,08 ± ,05	3,72 ± ,50		Fuente pulsada.	20
[38]		2,039 ± ,013	4,18 ± ,18		Fuente pulsada.	28
[28]		1,983 ± ,003	4,65 ± ,18		Fuente pulsada.	25
[39]	6,82	2,01				20
[27]	9,56	2,021 ± ,006			Fuente pulsada.	25
[40]		2,057	4,73		Calculado, modelo NELKIN/HONECK	20
[41]	18,0	2,09 ± ,02	8,1 ± ,3		Fuente pulsada.	20
[42]		1,966 ± ,137	3,56 ± 1,08		Fuente pulsada.	21
Este tra-	9,66	2,02	3,62	1,95	Calculado, modelo ENDF/GASKET, ajuste con 4 términos. D ₂ O (100 %)	23
bajo.	9,66	2,02	3,51		Id. con 3 términos.	23

(1) No recomendado por su autor.

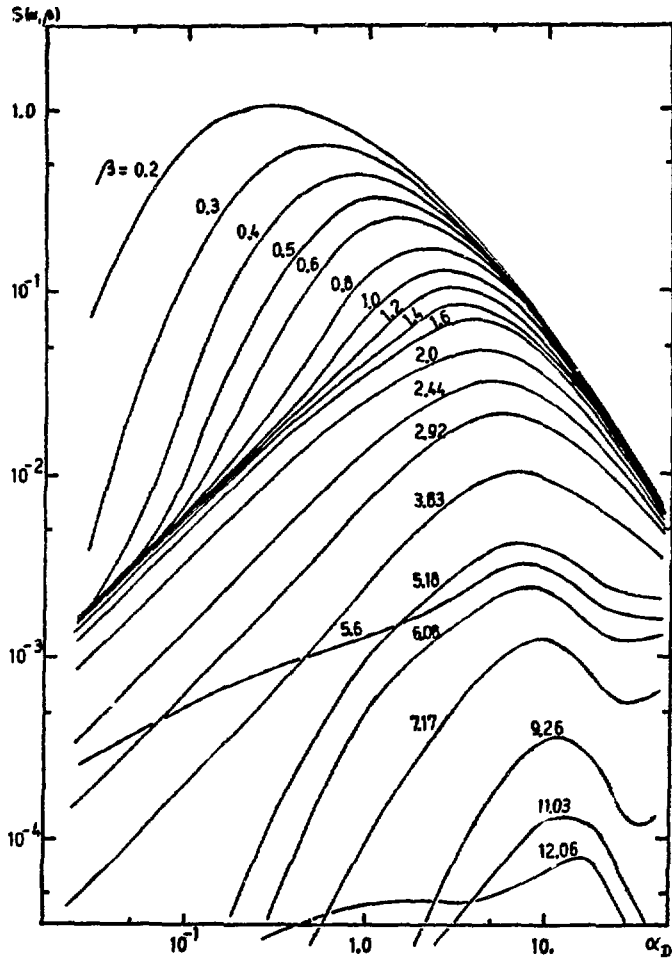


FIGURA 1

Ley de dispersión de D_2O , calculada con ENDF/GASKET

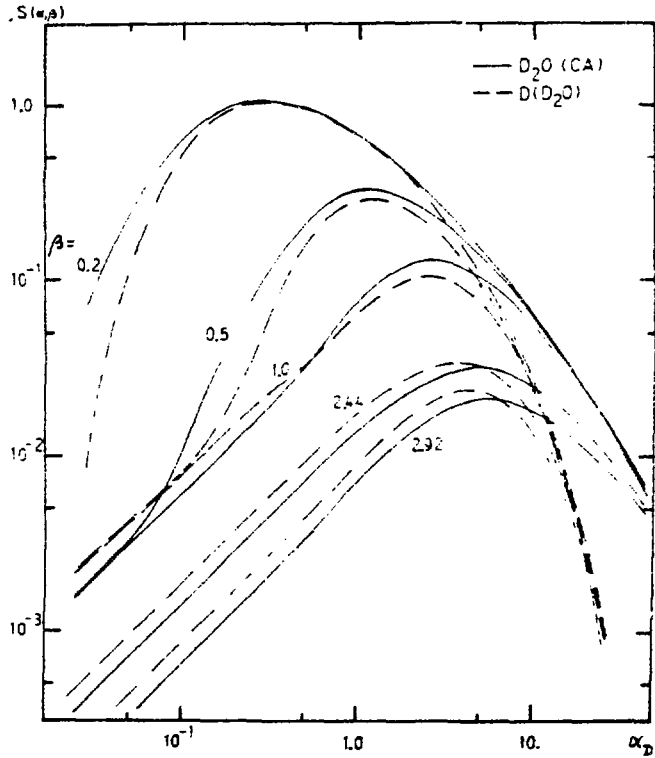


FIGURA 2

Contribución del oxígeno a la ley de dispersión calculada

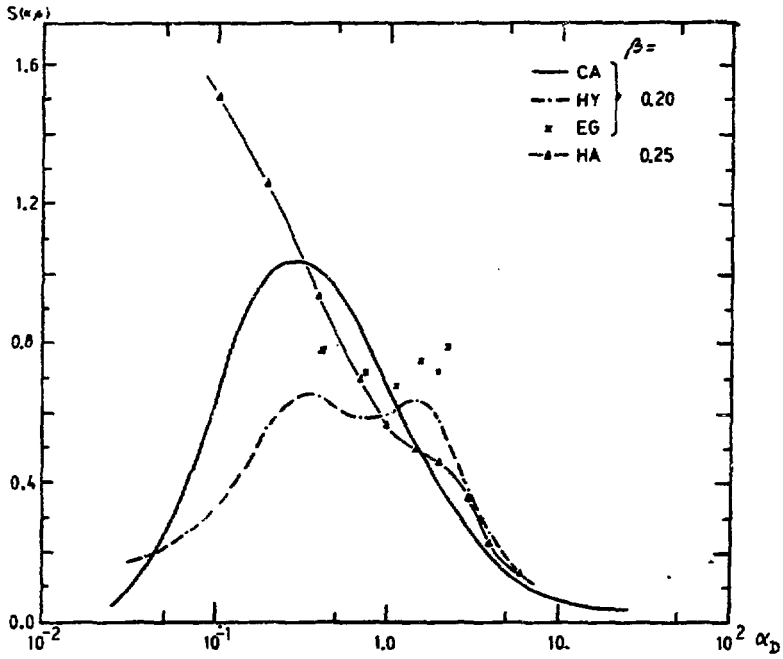


FIGURA 3
Ley de dispersión
Comparación de valores calculados y medidos . $\beta = 0,20$

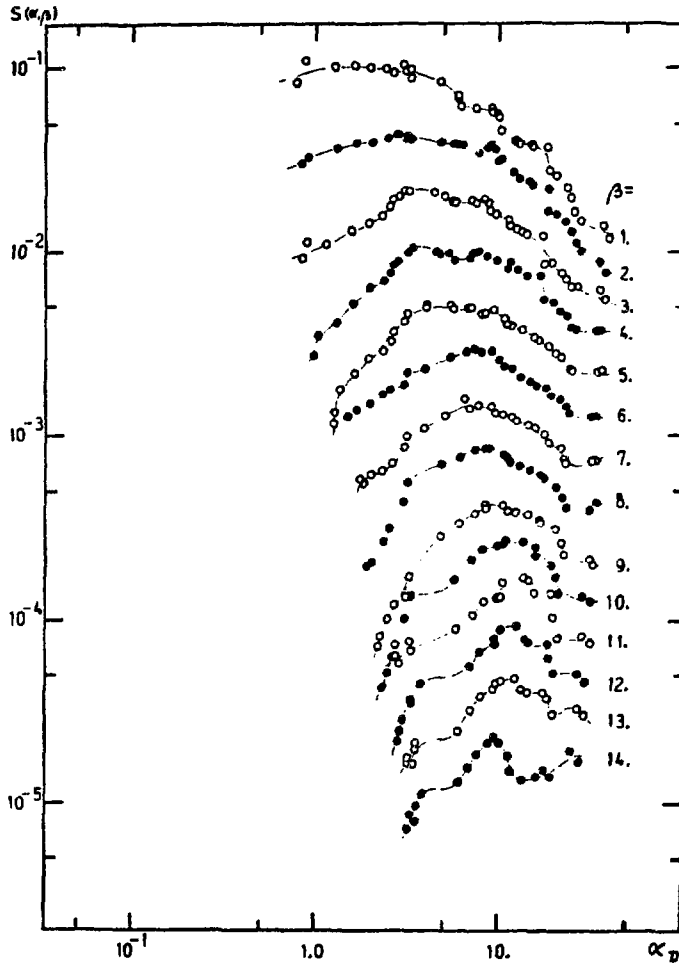


FIGURA 4

Ley de dispersión medida por Whittmore [9] (WH)

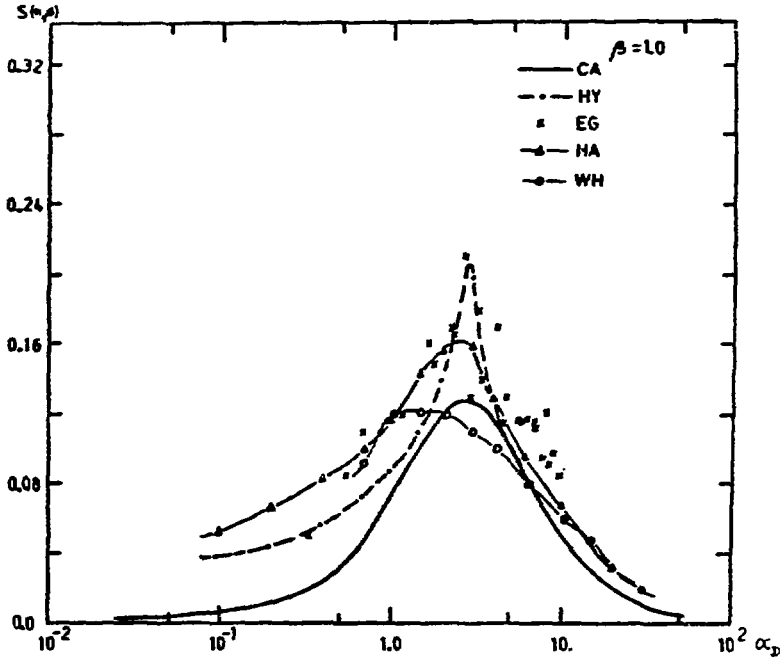


FIGURA 5
Ley de dispersión
Comparación de valores calculados y medidos . $\beta = 1,00$

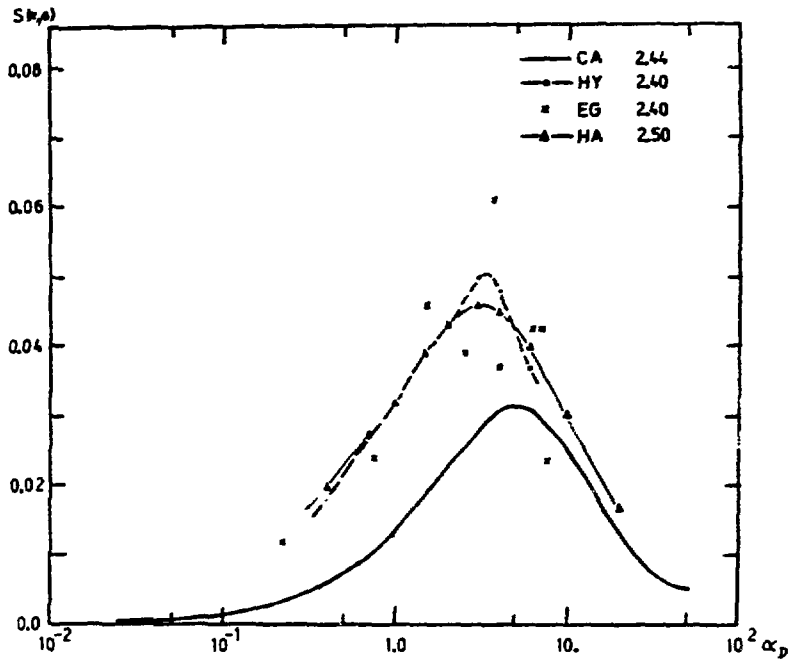


FIGURA 6
Ley de dispersión
Comparación de valores calculados y medidos. $\beta = 2,40$

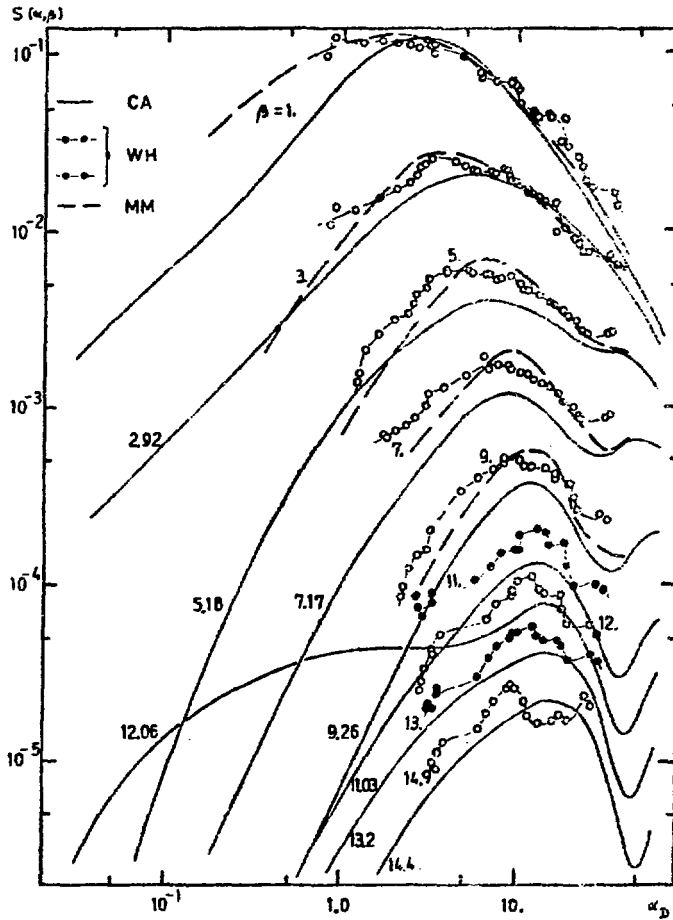


FIGURA 7

Ley de dispersión

Comparación de valores calculados y medidos - $\beta > 1,0$

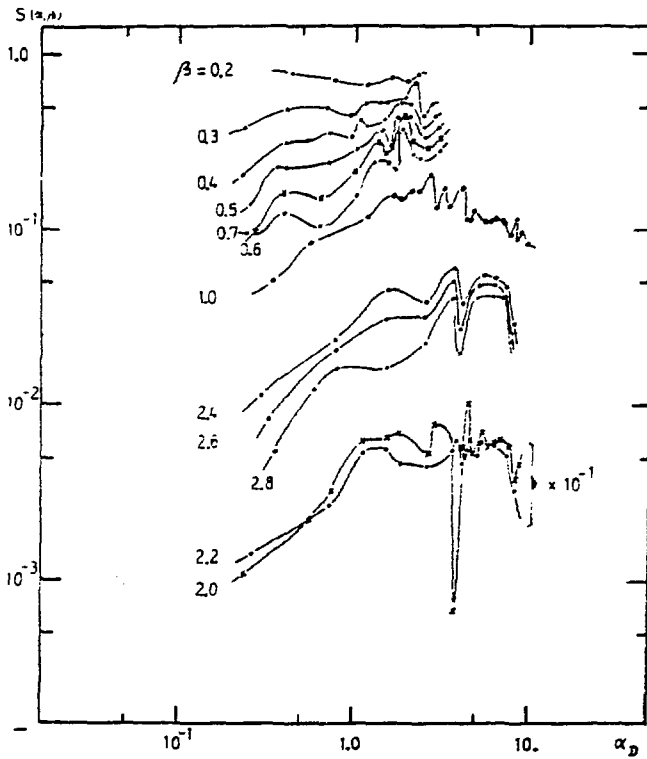


FIGURA 8

Ley de dispersión medida por Egelstaff [12] (EG)

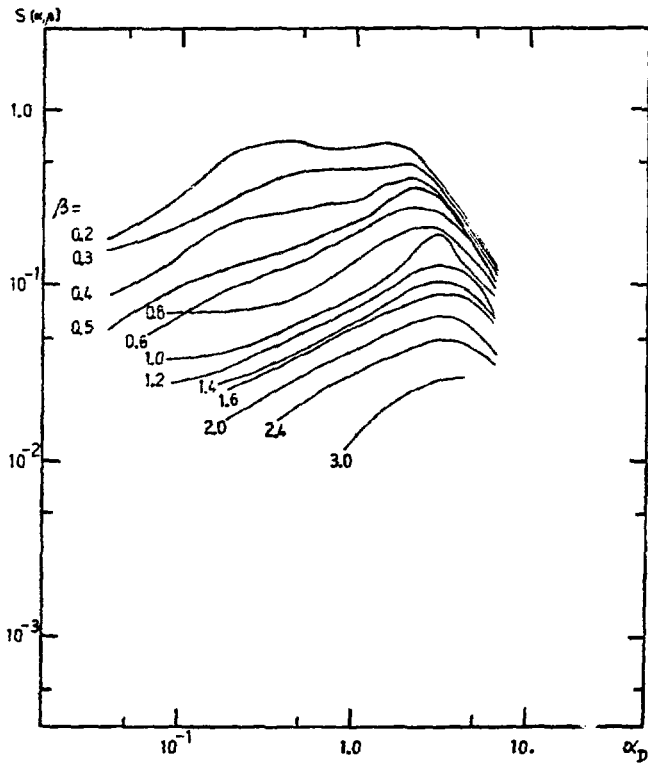


FIGURA 9

Ley de dispersión medida por Haywood [13] (HY)

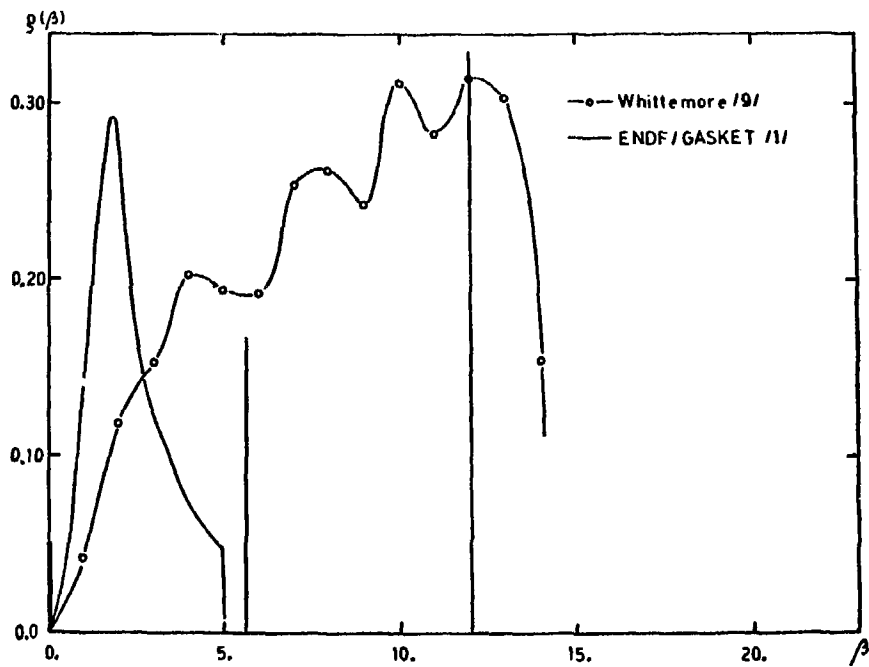


FIGURA 10
Espectros de frecuencias

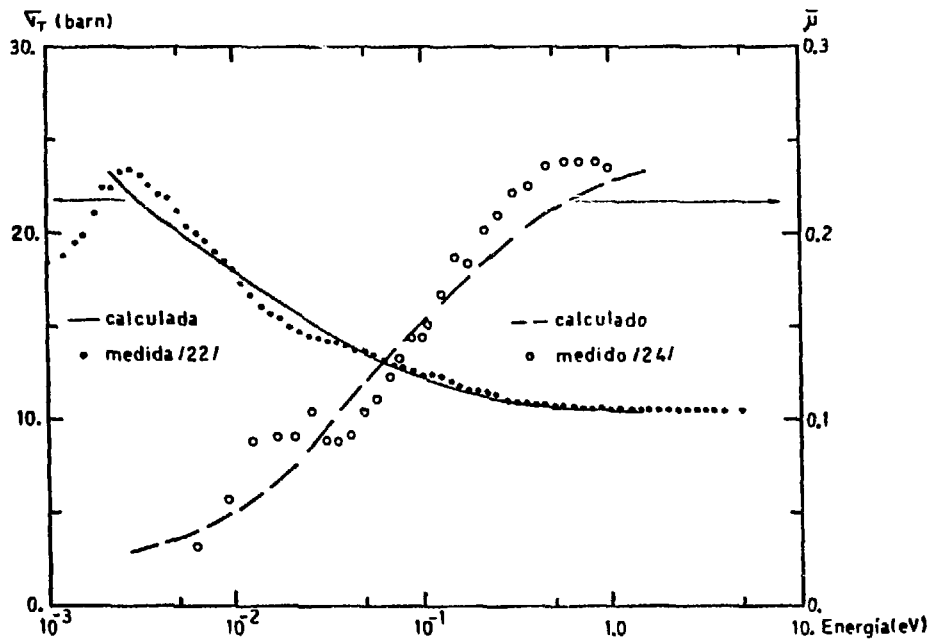


FIGURA 11
Sección eficaz total y coseno del ángulo de dispersión

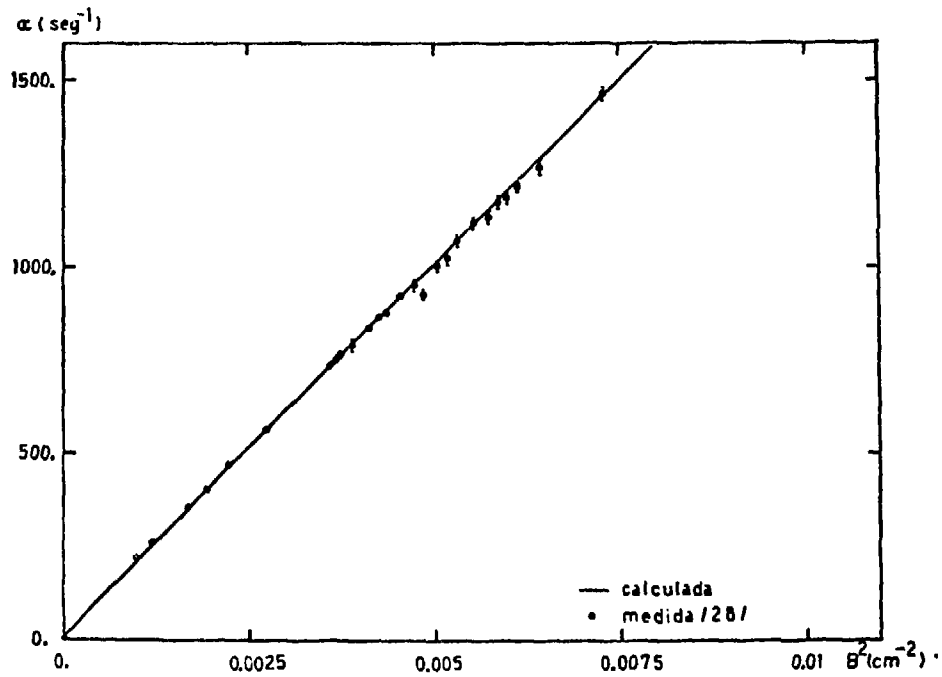


FIGURA 12
Constante de decaimiento . $B^2 < 0,01 \text{ cm}^{-2}$

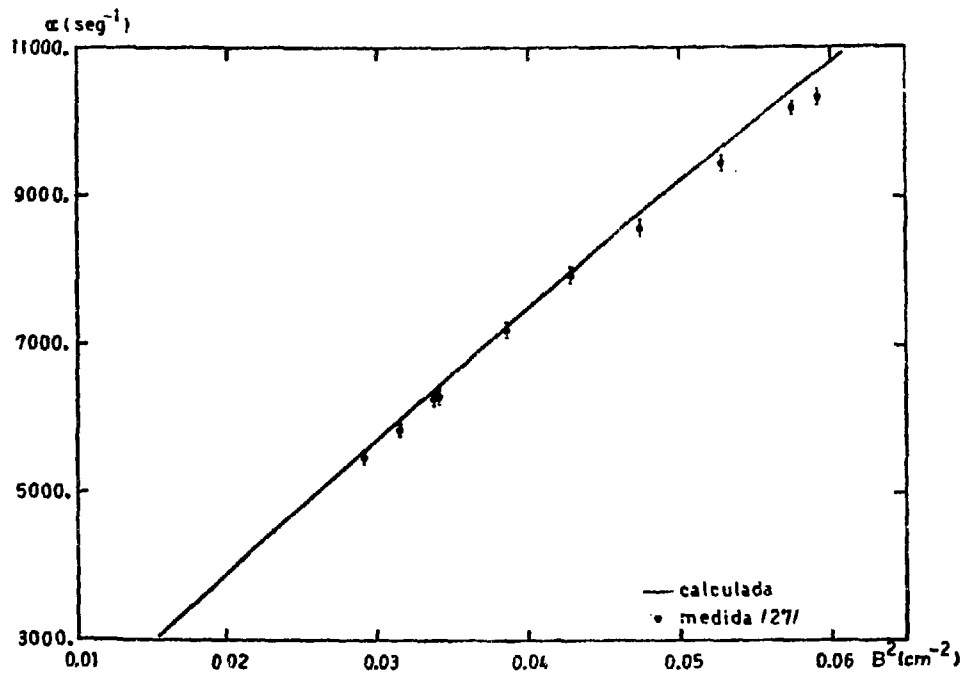


FIGURA 13
 Constante de decaimiento . $B^2 > 0,01 \text{ cm}^{-2}$

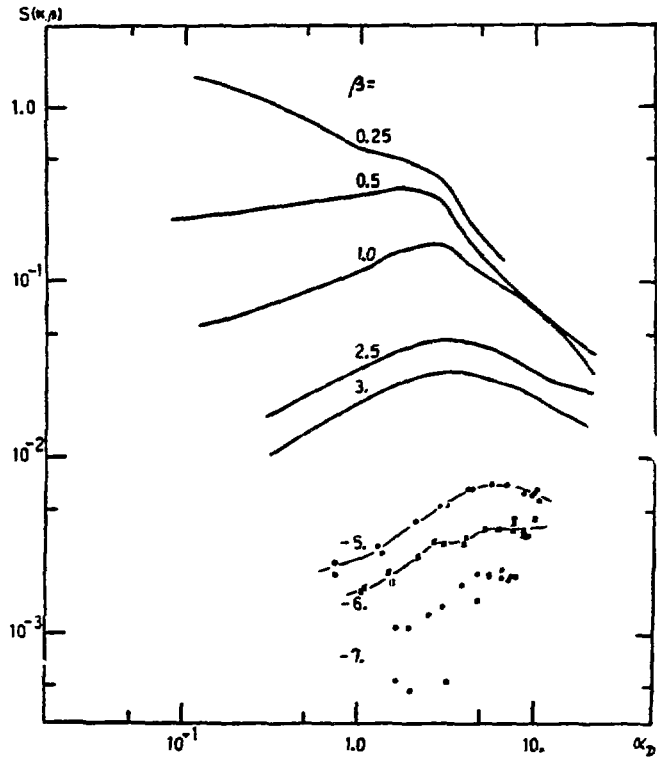


FIGURA 14

Ley de dispersión medida por Harling [14] (HA)

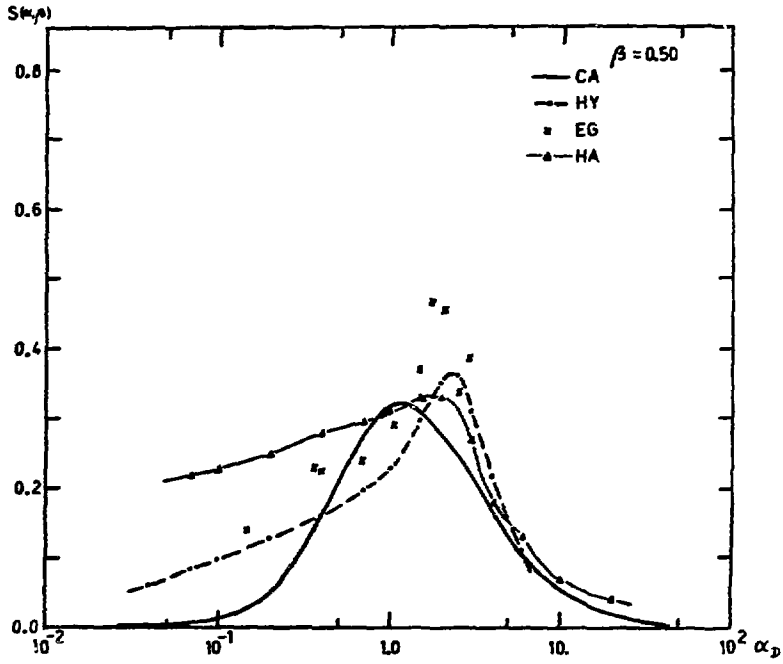


FIGURA 15
Ley de dispersión
Comparación de valores calculados y medidos. $\beta = 0,50$

BIBLIOGRAFIA

- (1) J. U. KOPPEL and D. H. HOUSTON, "Reference manual for ENDF thermal neutron scattering data", GA-8774 (1968).
- (2) M. J. ABBATE y J. V. LOLICH, "Revisión y selección de modelos moleculares para el tratamiento de la dispersión de neutrones de bajas energías en D_2O ", Com. J. 6, 61ª Reunión AFA, Buenos Aires (1975). A ser publicado en "Comunicaciones AFA".
- (3) H. M. ANTUNEZ et. al., "Integral neutron thermalization", GA-7480 (1966).
- (4) J. U. KOPPEL and J. A. YOUNG, Nukleonik, 7, 408 (1965).
- (5) B. C. HAYWOOD, referido por M. J. POOLE en Proc. of the IAEA symposium on pulsed neutron research, Karlsruhe, Vol. 1, 434 (5/1965).
- (6) B. C. HAYWOOD and J. M. THORSON, Brookhaven conf. neutron thermalization proc., BNL-719, Vol. 1. 26 (1962).
- (7) M. S. NELKIN, Phys. Rev. 119, 741 (1960).
- (8) H. C. HONECK, Trans. Am. Nucl. Soc., 5, 47 (1962).
- (9) W. WHITTEMORE, Nucl. Sci. Eng., 33, 195 (1968).
- (10) J. U. KOPPEL, "Gasket - a unified code for thermal neutron scattering", GA-7417 (rev.), (1967).
- (11) M. J. ABBATE, "NYR201 - Suma de leyes de dispersión", ACNYR, NYR201, CAB, (1974).
- (12) P. A. EGELSTAFF, "Compilation of early scattering law data", AERE-R 3931, Harwell, Berk., (1962).
- (13) B. C. HAYWOOD, "A compilation of the scattering law for heavy water at 22°C and 150°C", AERE-R 4582, Harwell, Berk., (1964).
- (14) O. K. HARLING, "Compilation of doubly differential cross sections and the scattering law for H_2O and D_2O at 299°K and for H_2O at 268°K", NBWL-436, Richland, Wash., (1967).
- (15) H. L. MC MURRY, "Model for calculating the slow neutron scattering by liquid D_2O ", IN-1020, Idaho Nuclear Co., (1966).

- (16) E. L. SLAGGIE, *Symp. neutron thermalization and reactor spectra*. Ann Arbor vol. 1, 311, IAEA, Vienna (1968).
- (17) L. J. ESCH et al., *Nucl. Sci. Eng.*, 46, 223 (1971).
- (18) R. G. JARVIS, *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 12, 673 (1969). *Symp. neutron thermalization and reactor spectra*, Ann Arbor, Vol. 1, 261, IAEA, Vienna (1968). *Comunicación privada*.
- (19) A. BUTLAND and C. CHUDLEY, *Jnl. Brit. Nucl. Soc.*, 13 (1), 99 (1974).
- (20) H. C. HONECK and Y. D. NALIBOFF, "Flange - 1", ACC, Ref. Mat. Abstract 247, ANL, Argonne, Ill. (1966).
- (21) G. M. BORGONONI, "Neutron scattering kernels calculations at epithermal energies", GA-5950 (1970).
- (22) F. KROPFF et al., "Total neutron cross-section for D₂O at 20 °C", EXFOR 30283, Nuclear Data Section, IAEA, Vienna (1973).
- (23) D. J. HUGHES and J. A. HARVEY, "Neutron cross sections", BNL-325, 2nd Ed., BNL (1958).
- (24) H. M. ANTUNEZ et al., "Integral neutron thermalization", GA-6824 (1965).
- (25) F. J. McCROSSON et al., "Testing of ENDF/B - Themos cross sections for H₂O, D₂O, C, ZrH₂, (C₂H₄)_x, Be, BeO, C₆H₆ and UO₂", DP-1276 (ENDF-158), Savannah River Lab. Aiken (1971).
- (26) J. VOLKIS et al., "Método de cálculo para la obtención de parámetros de difusión", CAB/1972/6.
- (27) M. SILK and B. WADE, *Jnl. Nucl. En.*, 23, 1 (1969).;
id. id., 625 (1969)
id. id., 369 (1969).
- (28) J. W. DAUGHTRY et al., "The diffusion parameters of heavy water" *Pulsed neutron research, Karlsruhe*, Vol. 1, 65 (1965).
- (29) A. J. GOODJOHN and G. C. POMRANING, "Reactor physics in the resonance and thermal region", Vol. I, The MIT Press, Cambridge, London (1966).
- (30) P. A. EGELSTAFF, *Symp. inelastic scatt. of neutrons in solids and liquids*, Vol. 1, Chalk River (Canada), IAEA, Vienna, 65 (1963).

- (31) N. K. GANGULY and A. W. WALTNER, *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 4, 282 (1961).
- (32) D. E. PARKS et al., *Nucl. Sci. Eng.*, 33, 209 (1968).
- (33) B. K. MALAVIYA and A. E. PROFIO, *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 6, 58 (1963).
- (34) G. KUSSMAUL and H. MEISTER, *Jnl. Nuc. Ener., Part A/B*, 17, 441 (1963).
- (35) D. W. HONE, *Jnl. Nuc. Ener., Part A, Reactor Sci.*, 11, 34 (1959).
- (36) N. P. BAUMANN, *Nucl. Sci. Eng.*, 14, 179 (1962).
- (37) N. K. GANGULY et al., *Nucl. Sci. Eng.*, 17, 223 (1963).
- (38) F. R. WESTAFF and A. W. WALTNER, *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 5 (2), 386 (1962).
- (39) K. H. BECKURTS and K. WIRTZ, "Neutron Physics", Springer-Verlag, New York Inc., (1964).
- (40) H. C. HONECK, *Nucl. Sci. Eng.*, 16, 140 (1963).
- (41) P. B. PARKS et al., *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 8, 436 (1965).
- (42) H. G. JONES et al., *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 8, 431 (1965).
- (43) A. E. PROFIO and H. M. ANTUNEZ, "Medición del espectro de energías de neutrones en grafito", *Com. AFA*, octubre 1967.



