

IF-UFF / 01 / 81  
RELATÓRIO TÉCNICO CIENTÍFICO  
10 de março de 1981

ESTUDO DO DESEMPENHO DA APROXIMAÇÃO DE PEQUENO  
TEMPO DE COLISÃO PARA O ESPALHAMENTO DE NEUTRONS  
USANDO DISTRIBUIÇÃO DE FREQUÊNCIAS DISCRETAS

por

A.B.d'Oliveira<sup>§</sup>, E.S.Amorim<sup>§§</sup>, O.B.Galvão<sup>§§§</sup>

§ Instituto de Física da Universidade Federal Fluminense  
§§ Escola de Comando do Estado Maior da Aeronáutica  
§§§ Nuclebrás



UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE

INSTITUTO DE FÍSICA

**ESTUDO DO DESEMPENHO DA APROXIMAÇÃO DE PEQUENO  
TEMPO DE COLISÃO PARA O ESPALHAMENTO DE NEUTRONS  
USANDO DISTRIBUIÇÃO DE FREQUÊNCIAS DISCRETAS**

Por

**A.B.d'Oliveira<sup>§</sup>, E.S. Amorim<sup>§§</sup>, O.B.Galvão<sup>§§§</sup>**

**§ INSTITUTO DE FÍSICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE  
§§ ESCOLA DE COMANDO DO ESTADO MAIOR DA AERONÁUTICA  
§§§ NUCLEBRÁS**

**Prof. AUGUSTO BRANDÃO d'OLIVEIRA**  
Instituto de Física - Universidade Fed. Fluminense  
Quilômetro de São João Batista, s/n - Caixa Postal 276  
24.000 - Niterói - RJ - Brasil.

Março de 1981

Submetido para apresentação na  
**2.<sup>a</sup> Reunião de Trabalho em Métodos em Física de Reatores**  
Itaipava-RJ-1981

Investigações prévias<sup>1</sup> mostraram que a seção de choque de espalhamento de neutrons em baixas energias é uma função complicada da energia e da direção, devido as ligações químicas e à interferência de ondas.

Recentes investigações<sup>2</sup> baseadas na representação das seções de choque, usando distribuição contínuas como conjunto de frequências discretas, permitem o cálculo das seções de choque de espalhamento diferencial duplo com base na aproximação incoerente.

O objetivo deste trabalho é avaliar<sup>te</sup> teoricamente o tratamento preconizado por Ryskamp<sup>2</sup> em relação aos modelos de Nelkin e de protons livres, repetindo os cálculos feitos por este autor, e avaliar<sup>le</sup> numericamente o seu desempenho relativo a um modelo de referência.

O programa FASTT, previamente modificado<sup>3</sup>, mostrou que a aproximação de pequeno tempo de colisão funciona bem exceto para espalhamentos onde a energia do neutron emergente é próxima da energia do neutron incidente, sendo tanto melhor quanto maior a energia. A aproximação em questão é bastante boa para energias do neutron, onde a duração da colisão é pequena comparada com os períodos naturais do movimento atômico.

Estes resultados suplementam e confirmam os resultados de Ryskamp. A aproximação estudada pode portanto ser usada quando se desejar economizar tempo de computação e espaço de memória.

### Introdução

Seções de choque de espalhamento térmico de neutrons para muitos materiais não foram medidas diretamente em experiências, e é portanto interessante podermos calculá-las a partir de vários modelos de espalhamento, através de núcleos de espalhamento.

Nas últimas décadas, investigações científicas foram realizadas para obter uma descrição satisfatória do fenômeno do espalhamento de neutrons, principalmente em reatores nucleares a água leve.

Após a ocorrência de fissão, com a liberação de neutrons,

inicia-se um processo de moderação através de colisões com os núcleos do combustível e do moderador fazendo com que a fração de neutrons possuindo altas energias MeV desloque-se para a faixa de energia de termalização [ $<1$  a  $2$  eV].

Nestas circunstancias o modelo teórico considera que os neutrons em moderação possuem uma energia muito maior do que a aquela associada ao deslocamento dos núcleos, isto é assumindo que estes estejam em repouso no sistema de laboratório. Por outro lado, sendo esta energia bastante superior as energias de ligação entre os átomos existentes do núcleo do reator e do refletor, consideramos nesta faixa de energia os núcleos como estando não ligados.

A termalização dos neutrons na faixa de energia de termalização também é traduzida como uma moderação através de colisões com os núcleos, porém a cinemática é afetada pela energia térmica dos núcleos de espalhamento. É evidente que se o núcleo tiver uma energia maior do que a do neutron incidente, o neutron espalhado poderá ganhar energia na colisão.

No caso de uma molécula de água a energia cinética é da ordem de  $0,9$  eV ( $3/2$  KT onde K é a constante de Boltzmann e T a temperatura do moderador). Esta energia é apreciável quando comparada com a energia dos neutrons de faixa térmica, e por outro lado a energia de ligação entre os átomos torna-se importante em relação à energia do neutron incidente. As seções de choque neste caso diferem consideravelmente daquelas que obtemos quando consideramos os núcleos livres em repouso.

Consequentemente a distribuição de energia do núcleo de espalhamento depende das ligações químicas e das forças intermoleculares na molécula de água. Estas também impõem novas condicionantes durante o movimento de recuo da molécula.

No tratamento quântico do problema, devemos levar em conta a existência de níveis discretos de rotação e vibração.

Nas interações do neutron com os núcleos que constituem a molécula há outras interferências que necessitam ser consideradas na faixa térmica e que são pronunciadas quando o comprimento de onda do neutron incidente for da ordem do espaçamento entre as

moléculas.

No tratamento teórico que faremos a seguir, vale

a) a interferência só ocorre entre ondas que descrevem neutrons tendo a mesma energia e o mesmo spin.

b) um alvo quando atingido por uma onda de neutrons incidente ( $e^{ikz}$ ) emite ondas secundárias independentemente através de cada núcleo existente. Se o sistema de coordenadas for individual, podemos escrever a onda (onda s) emitida pelo núcleo i em forma esférica.

$$\psi_{s_i} = -a_i \frac{e^{ik_i r_i}}{r_i} \quad (1)$$

onde  $a_i$  é o comprimento de espalhamento do núcleo i,  $k_i$  é o número de onda do neutron espalhado e  $r_i$  a distância a partir do núcleo i.

c) se a onda incidente permitir que N núcleos emitam ondas secundárias associadas a neutrons com a mesma energia e spin no sistema de laboratório, a onda resultante na posição  $\vec{r}$  é a soma coerente das ondas individuais, isto é

$$\tau_s = \sum_{i=1}^N -a_i \frac{e^{ik' |\vec{r} - \vec{R}_i|}}{r} \quad (2)$$

onde  $\vec{R}_i$  é a posição no laboratório, do iésimo centro de espalhamento no instante do espalhamento e  $k' = (2m_n E)^{1/2}/\hbar$  é a energia no sistema do laboratório dos neutrons espalhados. O número de onda do neutron espalhado pode ser diferente daquele da onda incidente  $k$ , no caso do espalhamento inelástico. Entretanto a coerência se dá se mais de um núcleo espalha com o mesmo número de onda  $K'$ .

d) o espalhamento coerente afeta apenas a distribuição angular dos neutrons espalhados; ele não afeta a seção de choque de espalhamento total.

O espalhamento inelástico de neutrons se dá com a excitação de níveis-nucleares do núcleo alvo desde que a energia do neutron incidente seja suficiente para provocar essa excitação. O mecanismo de espalhamento inelástico na faixa de energia tér

mica é diferente, e neste caso os neutrons perdem parte da energia incidente através da excitação dos graus de liberdade internos da molécula, no nível molecular, não havendo excitação de núcleos.

O espalhamento elástico é exatamente a ausência da excitação de graus de liberdade internos, sejam nucleares ou moleculares, sendo a soma das energias cinéticas do neutron e do alvo a mesma antes e depois do espalhamento.

As seções de choque de espalhamento aparecem na equação linear do transporte segundo

$$\left[ \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \sum_i C_i^i \sigma_t^i \right] \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) - \iint \sum_i C_i^i \sigma_s^i(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') d\Omega' dE' = S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \quad (3)$$

onde

$\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$  é a densidade de neutrons na posição  $\vec{r}$  de energia  $E$ , na direção  $d\vec{\Omega}$  em torno de  $\vec{\Omega}$ .  $\sigma_s^i(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega})$  é a seção de choque de espalhamento diferencial duplo associada ao nuclídeo  $i$ , e traduz a probabilidade de transferência de um neutron de energia  $E'$  e direção  $\vec{\Omega}'$  para energia  $E$  e direção  $\vec{\Omega}$ .

O somatório das seções de choque duplo-diferenciais de espalhamento é chamado de núcleo de espalhamento. Na prática procuramos obter, através do uso de equação (3) um conhecimento detalhado da densidade de neutrons  $\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$  para o sistema nuclear em considerações, e em seguida usamos  $\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$  para o cálculo da queima do combustível e nos estudos termo-hidraulicos.

## 2. Fundamentos Teóricos

Na região onde o potencial é zero a função de onda total pode ser escrita como

$$\psi(r) = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (\text{para } r > R) \quad (4)$$

onde  $f(\theta)$  é a amplitude da onda espalhada e  $R$  é o raio além do qual o potencial é zero

$$f(\theta) = \frac{1}{2k_i} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) (e^{2i\delta_\ell} - 1) P_\ell(\cos \theta) \quad (5)$$

e para ondas s

$$f_o(\theta) = \frac{1}{2ki} (e^{2i\delta} - 1) \quad (6)$$

Em termos de amplitude de espalhamento, podemos escrever

$$\sigma_s = 4\pi |f|^2 \quad (7a)$$

$$\sigma_r = \frac{4\pi}{R} \text{Im } f - 4\pi |f|^2 \quad (7b)$$

$$\sigma_T = \sigma_s + \sigma_r = \frac{4\pi}{k} \text{Im } f \quad (7c)$$

O comprimento de espalhamento, em baixas energias, é relacionado com a amplitude de espalhamento, isto é

$$a = - \lim_{k \rightarrow 0} \text{Re } f = - \lim_{k \rightarrow 0} f$$

As seções de choque de espalhamento para átomos livres e em estado ligado diferem significativamente. Para átomos fortemente ligados numa rede cristalina, em baixas energias podemos escrever

$$\sigma_b = \left(1 + \frac{1}{A}\right)^2 \sigma_f \quad (8)$$

onde b se refere ao átomo ligado e f ao átomo livre.

A interação na faixa térmica é em geral descrita em termos do comprimento de espalhamento a, definindo-se

$$\bar{\sigma}_b = 4\pi \langle a^2 \rangle \quad (9)$$

onde  $\langle a^2 \rangle$  representa o valor médio do quadrado do comprimento de espalhamento.

A Seção de choque de espalhamento integrada em todos os ângulos é comumente expressa como a soma de uma parte correspondente ao espalhamento coerente e um correspondente ao espalhamento incoerente.

$$\sigma_s = \sigma_{\text{coh}} + \sigma_{\text{inc}} \quad (10)$$

A seção de choque de espalhamento total  $\sigma_s$  é dado por

$$\sigma_s = 4\pi \langle a^2 \rangle \quad (11)$$

e a seção de choque coerente por

$$\sigma_{coh} = 4\pi \langle a \rangle^2 \quad (12)$$

de onde obtemos:

$$\sigma_{inc} = \sigma_s - \sigma_{coh} = 4\pi \left[ \langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2 \right] \quad (13)$$

A seção de choque total não é afetada pela parte coerente, a qual só modifica a distribuição angular. Existem basicamente três fontes de incoerência 1) núcleos não idênticos numa molécula 2) spins nucleares diferentes de zero e 3) espaçamento inter nuclear variável.

Para um núcleo com spin  $I$ , o canal de decaimento tem  $j = I \pm 1/2$  dependendo da orientação relativa.

Considerando apenas o caso de ondas  $s$ , introduzimos os fatores estatísticos  $g(j)$  dados por:

$$g^+(j) = \frac{I+1}{2I+1} \quad \text{e} \quad g^-(j) = \frac{I}{2I+1} \quad (14)$$

A seção de choque de espalhamento coerente é dada por

$$\sigma_{coh} = 4\pi \left[ g^+(j) a^+ + g^-(j) a^- \right]^2 \quad (15)$$

e a seção de choque de espalhamento total como:

$$\sigma_s = 4\pi \left[ g^+(j) \left[ a^+ \right]^2 + g^-(j) \left[ a^- \right]^2 \right] \quad (16)$$

Para o hidrogênio  $\sigma_{coh} = 1.8 \text{ b}$  e  $\bar{\sigma}_h = 81.5 \text{ b}$  e conseqüentemente, o espalhamento é principalmente incoerente.

No caso de uma molécula, devemos adotar a um tratamento quântico, como feito por Fermi<sup>3</sup>.

Usando a 1ª aproximação de Born, e o pseudo potencial de Fermi, E. Fermi desenvolveu uma teoria quântica para calcular a amplitude de espalhamento de neutrons de baixas energias em nú



leos individuais de uma molécula. Seguindo de perto o trabalho posterior de L. Van Hove<sup>4</sup> podemos escrever a seção de choque diferencial dupla de espalhamento como

$$\sigma_S(\vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E) = \sigma_{coh}(\vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E) + \sigma_{inc}(\vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E) \quad (17)$$

onde

$$\sigma_{coh}(\vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E) = \frac{\sigma_{coh}}{4\pi\hbar} \sqrt{\frac{E'}{E}} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - t/\hbar)} G(\vec{r}, t) d\vec{r} dt \quad (18)$$

e

$$\sigma_{inc}(\vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E) = \frac{\sigma_{inc}}{4\pi\hbar} \sqrt{\frac{E'}{E}} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \epsilon/\hbar)} G_S(\vec{r}, t) d\vec{r} dt \quad (19)$$

A variação de energia do neutron é dada por

$$\epsilon = E' - E \quad (20)$$

e a variação do momentum é dada por

$$\hbar \vec{k} = m(\vec{V}' - \vec{V}) \quad (21)$$

O par de funções de distribuição  $G$  e  $G_S$

$$G(\vec{r}, t) = G_S(\vec{r}, t) + G_d(\vec{r}, t) \quad (22)$$

descrevem a dinâmica do sistema

Em termos da função de espalhamento

$$S(\vec{k}, \epsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \epsilon t/\hbar)} G(\vec{r}, t) d\vec{r} dt \quad (23)$$

podemos escrever as seções de choque como

$$\sigma_{coh}(\vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E) = \frac{\sigma_{coh}}{4\pi\hbar} \sqrt{\frac{E'}{E}} S(\vec{k}, \epsilon) \quad (24)$$

$$\sigma_{inc}(\vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E) = \frac{\sigma_{inc}}{4\pi\hbar} \sqrt{\frac{E'}{E}} S_S(\vec{k}, \epsilon) \quad (25)$$

Introduzindo as funções de espalhamento  $\chi$ , de natureza intermediária entre  $G$  e  $S$ ,

$$\chi_{coh}(\vec{k}, \epsilon) = \int e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r})} G(\vec{r}, t) d\vec{r} \quad (26)$$

$$\chi_{inc}(\vec{k}, t) = \int e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r})} G_S(\vec{r}, t) d\vec{r} \quad (27)$$

as seções de choque podem ser descritas como

$$\sigma_{coh}(\vec{\Omega}', E', \vec{\Omega}, E) = \frac{\sigma_{coh}}{4\pi h} \sqrt{\frac{E}{E'}} \frac{1}{2v} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\epsilon t/\hbar} \chi_{coh}(\vec{k}, t) dt \quad (28)$$

$$\sigma_{inc}(\vec{\Omega}', E', \vec{\Omega}, E) = \frac{\sigma_{inc}}{4\pi h} \sqrt{\frac{E}{E'}} \frac{1}{2v} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\epsilon t/\hbar} \chi_{inc}(\vec{k}, t) dt \quad (29)$$

### Descrição quântica da dinâmica do espalhamento

Usando um tratamento quântico da dinâmica do espalhamento por um sistema de N núcleos da mesma espécie podemos calcular as funções de espalhamento intermediário a partir das seguintes equações.

$$\chi_{coh}(\vec{k}, t) = \frac{1}{N} \sum_{\ell, \ell'} \sum_{i=1}^N P_i(T) \langle \psi_i | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_\ell(0)} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_\ell(t)} | \psi_i \rangle \quad (30)$$

e

$$\chi_{inc}(\vec{k}, t) = \frac{1}{N} \sum_{\ell=1}^N \sum_i P_i(T) \langle \psi_i | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_\ell(0)} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_\ell(t)} | \psi_i \rangle \quad (31)$$

Para o estado quântico representado por  $\psi_i$ , com energia  $E_i$  a probabilidade do sistema existir inicialmente nesse estado é

$$P_i(T) = \frac{e^{-E_i/kT}}{\sum_i e^{-E_i/kT}} \quad (32)$$

Como os estados quânticos  $\psi_i$  geralmente não são conhecidos em detalhe, surge a necessidade de devolver métodos aproximados para calcular as funções de espalhamento intermediário nas substâncias de interesse.

### 3. A Aproximação Incoerente e o Modelo de Nelkin

As informações sobre interferências associadas ao espalhamento de neutrons estão contidas em  $G_d(\vec{r}, t)$  desde que a interferência resulta da adição de amplitudes de ondas oriundas dos diferentes átomos.

Como visto anteriormente, para o hidrogenio,  $\sigma_{in} \gg \sigma_{co}$  logo se

rã razoável admitirmos que  $G_d(\vec{r}, t) = 0$  e, conseqüentemente, es  
crevemos :

$$\chi_{co}(\vec{k}, t) = \chi_{inc}(\vec{k}, t) \quad (33)$$

A equação (12) associada as equações (13), (14), (16) e (19) permitem escrever :

$$\sigma_s(E') f_s(\vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E) = \frac{\sigma_{co} + \sigma_{inc}}{4\pi\hbar} \sqrt{\frac{E'}{E}} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\epsilon t/\hbar} \chi_{inc}(\vec{k}, t) dt. \quad (34)$$

Esta aproximação é de grande valia visto que o cálculo de  $G_d$  é com  
plexo e extenso e por outro lado convém resaltar que esta apro-  
ximação é voltada para meios constituídos de  $H_2O$ .

O restante desta Seção é dedicada para a apresentação dos vários mo  
delos para  $\chi_{inc}(\vec{k}, t)$ . Inicialmente apresentamos a expressão para  
um oscilador harmônico com uma distribuição de frequência e para  
a simplificação deste modelo, isto é, para um oscilador harmôni-  
co isotrópico e com frequências discretas (modelo de Nelkin<sup>7</sup>).

A seção de choque de espalhamento duplo diferencial pode ser  
expressa em termos de  $\mu$  é o cosseno do ângulo entre  $\vec{\Omega}'$  e  $\vec{\Omega}$  e pa-  
ra tanto estabeleceremos as expressões de  $\hbar\vec{k}$  e a de  $\chi_{inc}(\vec{k}, t)$  as  
sociada a um oscilador harmônico com um espectro contínuo  $f(\omega)$   
normalizado dos possíveis modos vibracionais.

$$\hbar^2 k^2 = 2m (E' + E - 2u\sqrt{EE'}) \quad (35)$$

$$\chi_{inc}(\vec{k}, t) = e^{-\frac{k^2}{2Am}} \gamma(t) \quad (36)$$

onde

$$\gamma(t) = \int_0^{\infty} f(\omega) \frac{\hbar}{\omega} \left[ \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right) (1 - \cos\omega t) - i \sin \omega t \right] d\omega$$

Se definirmos a função  $S_s(\vec{k}, E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\epsilon t/\hbar} - \frac{k^2}{2Am} \gamma(t) dt$  pod  
emos escrever

$$\sigma_s(E' \rightarrow E_1, u) = \frac{\sigma_b}{4\pi\hbar} \sqrt{\frac{E'}{E}} S_s(k, \epsilon) \quad (37)$$

onde  $\sigma_b = \sigma_{co} + \sigma_{inc}$ .

Nelkin<sup>5</sup> propôs uma distribuição onde o deslocamento rotacional de uma molécula pela oscilação com frequência simples, de oscilador em movimento de torsão, ou seja :

$$f(w) = \sum_{q=1}^4 \frac{1}{A_q} \delta(w - \nu_q) \quad (38)$$

onde  $\delta(x)$  é a função delta de Dirac e :

$$A_1 = 18 \quad \nu_1 = 0 \quad (\text{movimento de translação})$$

$$A_2 = 2.32 \quad h\nu_2 = .06\text{eV} \quad (\text{movimento de rotação})$$

$$A_3 = 5.84 \quad h\nu_3 = .203\text{eV} \quad (\text{vibração, 'bending'})$$

$$A_4 = 2.94 \quad h\nu_4 = .481\text{eV} \quad (\text{vibração, 'stretching'})$$

Partindo-se da definição de  $\gamma(t)$  poderemos escrever :

$$\coth\left(\frac{h\nu}{2kT}\right)(1 - \cos \omega t) - i \operatorname{sen} \omega t = \frac{e^{h\nu/kT}(1 - e^{i\omega t}) + 1 - e^{i\omega t}}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (39)$$

$$\gamma(t) = A\bar{n} \sum_{q=1}^4 \frac{1}{A_q \omega_q} \{ (\bar{n} + 1)(1 - e^{i\omega_q t}) + \bar{n}(1 - e^{-i\omega_q t}) \} \quad (40)$$

onde

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{h\nu_q/kT} - 1}$$

$\bar{n}$  representa o número médio de estados quânticos excitados do oscilador harmônico pela temperatura do moderador T.

Nestas condições obtém-se a seção de choque de espalhamento duplo diferencial na forma :

$$\sigma_s(E' \rightarrow E, u) = \frac{\sigma_b}{4\pi\bar{n}} \sqrt{\frac{E'}{E}} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\operatorname{Re}(t)} \left[ \cos \operatorname{Im}(t) + i \operatorname{sen} \operatorname{Im}(t) \right] dt \quad (41)$$

onde

$$R_e(t) = -\frac{\hbar k^2}{2m} \left[ \frac{kTt^2}{A_1 \bar{n}} + \sum_q \frac{1}{A_q \omega_q} (2\bar{n} + 1)(\cos \omega_q t - 1) \right]$$

$$\text{Im}(t) = -\frac{\epsilon t}{\hbar} + \frac{\hbar k^2}{2m} \left( \frac{t}{A_1} \mp \sum_q \frac{\text{sen } W_q t}{A_q W_q} \right)$$

Sendo a parte imaginária do integrando uma função ímpar, o resultado da integração indicada será zero. A integração restante é efetuada sobre uma função par logo permitindo trocar os limites de integração para duas vezes o resultado da integração entre zero e  $\infty$ . Esta expressão resultante é facilmente integrável numericamente, em consequência fornecendo uma expressão de uso fácil e prático para a aproximação de Nelkin.

Um dos refinamentos introduzidos neste modelo foi a análise da anisotropia espacial da vibração dos fonons em cada molécula de  $\text{H}_2\text{O}^6$ . Um modelo simples da dinâmica molecular fornece 6 modos de vibração. A função intermediária torna-se

$$\chi_{\text{inc}}(\vec{k}, t) = \chi_1(\vec{k}, t) + \chi_2(\vec{k}, t) \quad (42)$$

onde

$$\chi_1(\vec{k}, t) = \exp \left[ \frac{\hbar}{2m} \sum_{q=1}^3 (k_{x1} A_{1q} + k_{y1} A_{3q} + k_{z1} A_{5q})^2 f_q \right]$$

$$\chi_2(\vec{k}, t) = \exp \left[ \frac{\hbar}{2m} \sum_{q=1}^3 (k_{x2} A_{2q} + k_{y2} A_{4q} + k_{z2} A_{6q})^2 f_q \right]$$

Sendo  $A_{ij}$  auto valores normalizados e  $k_{xi}$ ,  $k_{yi}$  e  $k_{zi}$  os componentes de  $\vec{k}$ .

#### 4. Aproximação do Tempo de Colisão Reduzida

Parks<sup>1</sup> mostrou que a seção de choque de espalhamento de neutrons é uma função complicada da energia e direção dos neutrons devido a ação das ligações químicas e da interferência das ondas associadas a propagação dos neutrons.

A seção de choque de espalhamento de neutrons duplo diferenciável em termos de um oscilador harmônico exibindo uma distribuição de frequências contínuas e a sua simplificação para uma distribuição de frequências discretas dadas pela equação (4) e condicionantes associadas é escrita segundo

$$\sigma_s(E' \rightarrow E, \mu) = \frac{\sigma_b}{4\pi^2 \hbar} \sqrt{\frac{E}{E'}} \int_0^\infty e^{R_e(t)} \cos(\text{Im}(t)) dt \quad (43.1)$$

$$\text{onde } R_e(t) = -\frac{\hbar R^2}{2\pi A} \left[ \frac{kTt^2}{A_1 \hbar} + \sum_q \frac{1}{A_q \omega_q} (2\bar{n}_q + 1) (\cos \omega_q t - 1) \right] \quad (43.2)$$

$$Im(t) = -\frac{\epsilon t}{\hbar} + \frac{\hbar k^2}{2m} \left( \frac{t}{A_1} + \sum_q \frac{\sin \omega_q t}{A_q \omega_q} \right) \quad (43.3)$$

$$\sum_q \frac{1}{A_q} = 1$$

$A_1$  é a massa da molécula dividida pela massa do neutron  $m$ ,  $A$  é a massa do núcleo de espalhamento dividido por  $m$  e  $A_q$  é a amplitude de frequência  $\omega_q$ .

Se a energia do neutron incidente é grande o tempo de colisão é pequeno comparado com o período natural associado ao deslocamento do átomo, isto é, se  $t \ll 1$  poderemos estabelecer que

$$\cos \omega_q t \approx 1 - \left(\frac{\omega_q t}{2}\right)^2 \quad \text{e} \quad \sin \omega_q t \approx \omega_q t \quad (44)$$

Estas aproximações transformam as equações (43.2) e (43.3)

$$Re(t) = -\frac{k^2 t^2}{2m\Lambda} T_{ef} \quad (45)$$

$$Im(t) = -\frac{\epsilon t}{\hbar} + \frac{\hbar k^2 t}{2m A} \quad (46)$$

$$\text{onde } T_{ef} = \frac{T}{A_1} + \frac{\hbar}{2K} \sum_q \frac{\omega_q}{A_q} (\bar{n}_q + 1)$$

A integral da equação (43.1) com o auxílio das relações anteriores permite-nos escrever

$$\sigma_S(E' \rightarrow E, \mu) = \frac{b}{4} \sqrt{\frac{E'}{E}} \left( \frac{A_m}{2k T_e \hbar^2 k^2} \right)^{1/2} \exp \left[ \frac{-A_m}{2k T_e \hbar^2 k^2} \left( \epsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2Am} \right)^2 \right] \quad (47)$$

A equação (47) é semelhante a aproximação das mais simples conhecido como a aproximação do gás de protons livres. Neste modelo não há vibração ou rotação somente considerada a translação a frequência de distribuição  $f(\omega)$  tem o valor 1 (para  $\omega=0$ ) e zero o valor de  $\gamma(t)$  associado a equação (36) torna-se  $\gamma(t) = Krt^2 - i\hbar t$ .

Nestas circunstâncias a seção de choque duplo diferencial descrita pela equação (47) é obtida com a diferença de  $T_e = T$  ou

seja a temperatura do meio espalhamento.

A equação (47) tem sido proposto por Ryskamp e quando integrada sobre o cosseno do ângulo de espalhamento  $\mu$  fornece para um espalhamento de neutrons para energias inferiores a seguinte expressão :

$$\sigma_s(E' \rightarrow E) = \frac{\sigma_{\text{free}}}{E'} \operatorname{erf}\left(\frac{E}{k T_{\text{ef}}}\right)^{1/2} \quad E' > E \quad (48)$$

O princípio do equilíbrio térmico ou do balanço detalhado é satisfeito forçosamente através da expressão :

$$M(E_1, T) G(\vec{r}_1, \vec{\Omega}_1, E_1 \rightarrow \vec{r}, \vec{\Omega}, E) = M(E, T) G(\vec{r}, -\vec{\Omega}, E \rightarrow \vec{r}_1, -\vec{\Omega}_1, E) \quad (49)$$

### 5. Implementação Numérica e Resultados

As expressões anteriores foram implementadas no programa FASTT permitindo o cálculo da equação (48) e das expressões da seção de choque de espalhamento de neutrons diferencial preconizados por Nelkin e a do gás de protons livres.

Os parâmetros de projeto utilizado nos cálculos a seguir acham-se expostos na Tabela 1.

A análise de Ryskamp mostrou através de cálculos que as seções de choque duplo diferencial é fortemente orientada para frente ('forward peaked') quando a energia do neutron incidente é próxima da energia do neutron espalhado.

Nota-se que quando a energia perdida pelo neutron na colisão é grande, o espalhamento é levemente orientado para trás ('backward peaked'). O neutron incidente pode ser espalhado para trás com qualquer energia devido ao movimento das moléculas.

Há uma diferença acentuada quando a seção de choque de espalhamento diferencial é calculada pelo modelo de Nelkin ou pelo modelo dos protons livres.

O modelo de Nelkin preconiza uma seção de choque mais elevada quando a energia dos neutrons incidentes é próxima da energia do neutron espalhado. Pequena elevação e esta diferença aparecem na Figura 1. A elevação é devida as ligações químicas re

presentadas pelas frequências associadas ao movimento da molécula segundo descrição anterior.

As tres aproximações foram calculadas pelo programa FASTT<sup>7</sup> contendo a estrutura de 35 grupos existentes no programa LASER.<sup>8</sup>

TABELA 1  
PARÂMETROS DE PROJETO-FASTT

Elemento	Concentração (átomos/cm <sup>3</sup> ) x 10 <sup>-24</sup>
U-235	.33772x10 <sup>-3</sup>
U-236	.89728x10 <sup>-4</sup>
U-238	.21325x10 <sup>-1</sup>
Pu-239	.29330x10 <sup>-4</sup>
Pu-240	.17314x10 <sup>-4</sup>
Pu-241	.72921x10 <sup>-5</sup>
Pu-242	.77179x10 <sup>-6</sup>
Xe-135	.63985x10 <sup>-8</sup>
Sm-149	.48520x10 <sup>-7</sup>
FIS.PRO	.25499x10 <sup>-3</sup>
B-10	.31074x10 <sup>-5</sup>
Hidrogênio	.49224x10 <sup>-1</sup>
Oxigênio no combustível	.41127x10 <sup>-1</sup>
Zr	.38984x10 <sup>-1</sup>
Dimensões	
Combustível- raio externo (cm)	.480570
Revestimento - raio externo (cm)	.559816
Moderador - raio externo (cm)	.986138
Temperatura do Moderador	562,5 <sup>o</sup> F



As seções de choque diferencial de espalhamento para a água foram calculadas através do modelo de Nelkin e de protons livres a uma temperatura de  $561^{\circ}\text{K}$ , e o modelo do tempo curto de colisões a uma temperatura de  $1468^{\circ}\text{K}$ , utilizando-se as equações (48) e (49).

A Figura 2 mostra a seção de choque de espalhamento total em função da energia calculada através do programa FASTT. Nesta Figura observamos que o modelo do tempo curto de colisões leva-nos a obtenção de uma seção de choque intermediária entre os dois modelos básicos considerados.

A Figura 1 ilustra o fato que o modelo do tempo curto de colisão apresenta um bom desempenho a exceção de energias próximas da energia do neutron incidente face os resultados estabelecidos pelo modelo de Nelkin.

## 6. Conclusões

Os cálculos desenvolvidos suplementam e confirmam os resultados de Ryskamp no que tange a obtenção das seções de choque de espalhamento diferencial baseadas na aproximação incoerente sem a necessidade de expandir  $f(\omega)$  a regiões de frequência negativa e sem utilizar uma integração no plano complexo.

Esta aproximação apresenta um bom desempenho quando o intervalo de tempo de colisão é menor do que o período natural do movimento atômico.

A aplicação numérica revela que aplicando-se o modelo à faixa térmica obtem-se um resultado intermediário entre os modelos de Nelkin e de protons livres.

A aproximação estudada pode ser usada quando se deseja economizar tempo de computação e espaço de memória.

REFERÊNCIAS

1. E. Parks et al, Slow neutron scattering and thermalization, W.A. Benjamin, Inc. N.Y.(1970).
2. J.M. Ryskamp, Trans. Am. Nucl. Soc. 33,298 (1979).
3. E. Fermi, Ric. Sci. 1 , 13 (1936).
4. L. Van Hove, Phys Rev 95, 249 (1954).
5. M. Nelkin, Phys. Rev. 119, 741 (1960).
6. J.U. Koppel and J.A. Young, Nucl. Sci. Eng. 19, 412 (1964).
7. J.M. Ryskamp, D.R. Harris and M. Becker, Trans.Am. Nucl. Soc. 33,827 (1979).
8. C.G. Poncelet, LASER, a depletion program for lattice calculations based on MUFT and THERMOS, WCAP-6073 (1966).

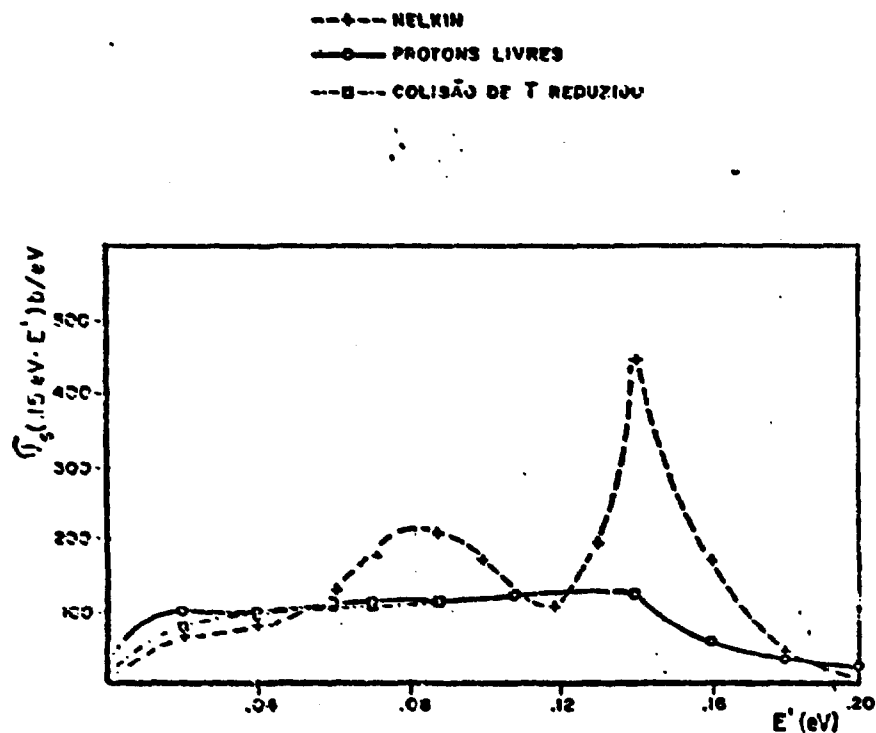


Figura 1 - Seção de choque microscópica diferencial de espalhamento de Nelkin, Protons livres e de colisões com tempo reduzido a  $561^{\circ}\text{K}$  e para neutrons incidentes com  $E=0,14\text{eV}$ .

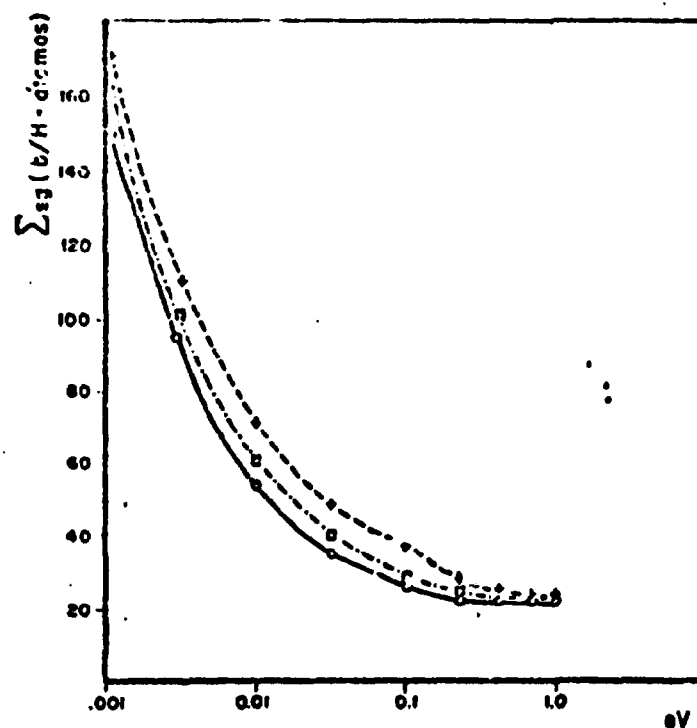


Figura 2 - Seção de choque macroscópica de espalhamento computado com as aproximações de Nelkin, Protons livres e tempo reduzido  $T=561^{\circ}\text{K}$ .