

10400103

COMITETUL DE STAT PENTRU ENERGIA NUCLEARA
INSTITUTUL DE FIZICA SI INGINERIE NUCLEARA

INIS-mf-9696

ROTARESCU GHEORGHE

CONTRIBUTII LA STUDIUL MICRODINAMICII
ATOMICE IN UNELE METALE LICHIDE PRIN IMPRASTIERE
DE NEUTRONI LENTI

(REZUMATUL TEZEI DE DOCTORAT)

CONDUCATOR STIINTIFIC
Prof. Dr. Sevastian RAPEANU

BUCURESTI

-1981-

CUVINT INAINTE

Lucrarea de față, propusă ca teză pentru obținerea titlului de doctor în fizică, cuprinde principalele rezultate ale cercetărilor efectuate de autor în perioada 1975-1980 la Institutul de Fizică Atomică și Institutul de Reactori Nucleari Energetici.

Aceste cercetări se înscriu în efortul ce se întreprinde într-o serie de mari laboratoare din lume în direcția studierii proprietăților de echilibru și de transportale metalelor lichide, a elucidării naturii forțelor interatomice și a potențialului de interacțiune, măsurări ale factorilor de structură statică și dinamică, a secțiunilor eficace diferențiale și dublu diferențiale, a elaborării de noi modele teoretice și a comparării acestora cu datele experimentale.

În diferitele etape, principalele rezultate au fost publicate în reviste de specialitate sau prezentate la diferite manifestări științifice organizate în țară sau străinătate.

De asemenea, aceste cercetări au făcut obiectul unor contracte finanțate de Agenția Internațională pentru Energia Atomică de la Viena.

Țin să exprim și pe această cale recunoștința și mulțumi- rile mele conducătorului științific, Prof.dr. Sevastian Râpeanu pentru sprijinul generos acordat și îndrumarea permanentă pe toată durata desfășurării acestor cercetări.

De asemenea, autorul ține să mulțumească în mod deosebit Dr. Ion Pădureanu pentru sprijinul și discuțiile utile avute cu ocazia realizării lucrărilor ce stau la baza acestei teze.

Rămân îndatorat colegilor Cornelia Crăciun, N. Deciu, Mihai Ion și Timiș Paul pentru strânsa colaborare la efectuarea experiențelor și prelucrarea datelor experimentale. Mulțumesc, de asemenea, echipei de exploatare de la reactorul VVR-S-IFIN pentru sollicitudinea arătată în decursul efectuării experiențelor.

În final, țin să mulțumesc conducerii IRNE pentru interesul manifestat față de aceste cercetări și conducerii IFIN, pentru condițiile de lucru create la reactorul VVR-S.

I. INTRODUCERE

În ultimii cinsprezece ani starea lichidă a constituit subiectul unor importante investigații atât din punct de vedere experimental cît și teoretic.

Dintre stările de agregare ale materiei, în prezent, starea lichidă este cea mai puțin înțeleasă și de aceea pentru obținerea de informații privitoare la completarea multor goluri existente, lichidele monoatomice și în particular metalele lichide sînt în centrul atenției cercetărilor pe plan mondial /1,2,3/.

Analiza rezultatelor experimentale și teoretice obținute, pînă acum, demonstrează faptul că în numeroase din aplicațiile metalelor se întîmpină dificultăți deoarece unele proprietăți nu sînt cunoscute cu suficientă precizie, iar datele experimentale sînt incomplete.

De aceea au fost necesare eforturi în direcția elucidării naturii forțelor interatomice și a potențialului de interacțiune, măsurări ale factorilor de structură statică și dinamică, măsurări ale secțiunilor eficace diferențiale și dublu diferențiale.

De asemenea, au fost dezvoltate o serie de modele teoretice care comparate cu datele experimentale au condus la completarea informațiilor asupra metalelor.

În acest context de preocupări se înscrie prezenta lucrare care și-a propus, în principal, următoarele obiective :

- măsurarea spectrelor de împrăștiere inelastică a neutronilor lenți (energie incidentă $E_n = 5$ meV) pe Bi lichid la temperaturile de $T = 286^\circ\text{C}$ și $T = 402^\circ\text{C}$;
- măsurarea spectrelor de împrăștiere neelastice a neutronilor lenți pe Pb lichid la temperaturile de $T=350^\circ$ și $T=400^\circ\text{C}$;
- măsurarea spectrelor de împrăștiere neelastice a neutronilor lenți pe Na lichid la temperatura $T = 233^\circ\text{C}$;
- elaborarea unui program de calcul pentru prelucrarea măsurărilor experimentale dublu diferențiale și determinarea factorului de structură dinamică $S(Q,\omega)$ în vederea comparării lui cu teoria ;

- elaborarea unui program de calcul pentru obținerea factorului de structură dinamică $S(Q, \omega)$ cu ajutorul a două modele teoretice recente pentru calculul lui $S(Q, \omega)$ coerent /4/ și /5/ pentru P_b lichid și P_b lichid;

- elaborarea unui program de calcul pentru obținerea contribuției coerente /4/ și necoerente /6/ pentru N_a lichid ,

- elaborarea unui program de calcul pentru calculul comparativ al factorului de structură dinamică $S(Q, \omega)$ cu ajutorul a diferite modele teoretice și anume : modelele amintite în referințele /4/, /5/, /6/, modelul dezvoltării fononice /7/, aproximația convoluției /8/, aproximația masei efective /9/.

Pentru obținerea de informații suplimentare privind microdynamica metalelor studiate au fost calculate nomenclaturile energetice de ordinul doi, $\omega_{coh}^2(Q)$ și patru, $\omega_{coh}^4(Q)$, ale factorului de structură dinamică care constituie un test de aplicabilitate a modelelor utilizate în descrierea mișcărilor corelate în lichide.

De asemenea, s-a efectuat un studiu al influenței potențialului de interacțiune pereche asupra factorului de structură dinamică al sodiului lichid.

Lucrarea este structurată astfel : după capitolul introductiv, în capitolul II sînt sistematizate principalele aspecte teoretice legate de împrăștierea neutronilor lenți pe lichide simple.

Se face o prezentare a modelelor teoretice pentru împrăștierea coerentă și necoerentă insistîndu-se asupra modelelor bazate pe aproximația cîmpului mediu generalizat și teoria viscoelastică utilizate pentru comparația cu datele experimentale obținute în cadrul acestei lucrări. Capitolul III cuprinde descrierea spectrometrului cu timp de zbor utilizat pentru efectuarea măsurărilor de împrăștiere neelastică a neutronilor lenți și a cuptorului pentru topirea metalelor. Condițiile de realizare a experiențelor și prelucrarea datelor sînt expuse în Capitolul IV. Pe lîngă expunerea completă a modului în care se aplică corecțiile datelor experimentale s-a efectuat un studiu amănunțit al corecției de împrăștiere multiplă elaborîndu-se un program pentru calculul acesteia.

În Capitolul V sînt prezentate principalele rezultate experimentale obținute, iar Capitolul VI conține concluziile lucrării.

II. ASPECTE TEORETICE PRIVIND ÎMPRĂȘTIEREA NEUTRONILOR LENTI PE LICHIDE SIMPLE

În acest capitol este prezentat pe scurt formalismul funcțiilor de corelație propus de van Hove [10], [11] care stabilește relațiile fundamentale ce leagă secțiunile eficace dublu diferențiale de funcțiile de corelație spațio-temporale ale sistemului împrăștiator conform expresiilor :

$$\frac{d^2\sigma_{coh}}{d\Omega d\omega} = \frac{b_{coh}^2 N}{2\pi} \frac{k}{k_0} \int \exp [i(\vec{Q}\vec{r} - \omega t)] G(\vec{r}, t) d\vec{r} dt$$

$$\frac{d^2\sigma_{necoh}}{d\Omega d\omega} = \frac{b_{necoh}^2 N^0}{2\pi} \frac{k}{k_0} \int \exp [i(\vec{Q}\vec{r} - \omega t)] G_s(\vec{r}, t) d\vec{r} dt$$

unde :

\vec{k}_0 - vectorul de undă al neutronilor incidenti

\vec{k} - vectorul de undă al neutronilor împrăștiați

$\hbar\omega$ - transferul de energie în procesul de împrăștiere

$\hbar\vec{Q}$ - transferul de impuls în procesul de împrăștiere

b_{coh} , b_{necoh} - lungimile de împrăștiere coerentă și respectiv necoerentă

N - numărul de nuclee din sistemul împrăștiator.

Dubla transformată Fourier a funcției de corelație spațio-temporală se numește factor de structură dinamică.

$$S_{coh}(Q, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int G(\vec{r}, t) \exp [i(\vec{Q}\vec{r} - \omega t)] d\vec{r} dt$$

$$S_{necoh}(Q, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int G_s(\vec{r}, t) \exp [i(\vec{Q}\vec{r} - \omega t)] d\vec{r} dt$$

Factorul de structură dinamică necoerentă $S_{necoh}(Q, \omega)$ dă informații despre mișcările individuale ale atomilor, în timp ce $S_{coh}(Q, \omega)$ dă informații asupra fenomenelor de interferență datorate mișcărilor colective ale atomilor din lichid.

În interpretarea experimentelor de împrăștiere a neutro-
nilor lenti este adesea util a considera funcția de împrăștiere
intermediară :

$$F(Q,t) = \int e^{-i\vec{Q}\vec{r}} G(\vec{r},t) d\vec{r} = \int e^{i\omega t} S(Q,\omega) d\omega$$

Funcția de împrăștiere intermediară sau funcția de core-
lație temporală arată viteza cu care impulsul transferat unui
atom la timpul zero se repartizează altui atom la timpul t. În
acest capitol sînt descrise, de asemenea, proprietățile funcți-
ilor de corelație spațio-temporale și ale factorului de struc-
tură dinamică.

În continuare sînt prezentate modelele teoretice pentru
factorul de structură dinamică insistîndu-se asupra modelelor
lui Pathak și Singwi /4/ și Lovesey /5/, /6/ utilizate pentru com-
parația cu datele experimentale.

În cadrul modelului Pathak și Singwi bazat pe aproxima-
ția cîmpului mediu generalizat factorul de structură dinamică
coerent este exprimat prin relația :

$$S(Q,\omega) = - \frac{k_B T}{\pi n \omega} \frac{\chi''_{sc}(Q,\omega)}{[1 - \psi(Q)\chi'_{sc}(Q,\omega)]^2 + [\psi(Q)\chi''_{sc}(Q,\omega)]^2}$$

unde : $\chi'_{sc}(Q,\omega)$ și $\chi''_{sc}(Q,\omega)$ sînt partea imaginară și respec-
tiv reală a funcției de răspuns ecranate,

$$\psi(Q) = \frac{3k_B T}{2n} \left[\frac{1}{S(Q)} - 1 \right] - \frac{P_4}{2}$$

este potențialul de polarizare,

$$\Gamma(Q) = \frac{Q^2}{M} \left[nP_4(Q) - k_B T \left(\frac{1}{S(Q)} - 1 \right) \right]$$

este lărgimea gaussianei alese pentru $\chi_{sc}(Q,\omega)$, iar

$$P_4(Q) = \int g(r) dr \frac{1 - \cos(\vec{Q}\vec{r})}{Q^2} (QV)^2 \phi(r)$$

este, partea de potențial a momentului de ordinul patru.

Modelul Lovesey /5/ dă pentru factorul de structură dinamică coerent următoarea expresie :

$$S(Q, \omega) = \frac{Q^2 k_B T}{M} \frac{\tau(Q) |a(Q) - b(Q)|}{\{\omega \tau(Q) [\omega^2 - a(Q)]\} + [\omega^2 - b(Q)]^2}$$

unde

$$a(Q) = \frac{3Q^2 k_B T}{M} + n \frac{Q^2 P_4(Q)}{M}$$

$$b(Q) = Q^2 k_B T / MS(Q)$$

$$\tau(Q) = [a(Q) - b(Q)]^{-1/2}$$

Factorul de structură dinamică necoerent se calculează pe baza aproximației celor trei poli introdusă de Lovesey /6/ în conformitate cu relația :

$$S_s(Q, \omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\tau(Q) \delta_1 \delta_2}{\{\omega \tau(Q) (\omega^2 - \delta_1 - \delta_2)\}^2 + (\omega^2 - \delta_1)^2}$$

unde :

$$\delta_1 = \langle \omega^2 \rangle = Q^2 k_B T / M$$

$$\delta_2 = 2\delta_1 + \Omega^2$$

$$\Omega^2 = \frac{n}{M} \frac{4\pi}{3} \int_0^\infty [dr r^2 g(r) \phi''(r) + \frac{2}{r} \phi'(r)]$$

$$\tau(Q) = \frac{1}{\xi \sqrt{\delta_2}} ; \quad \xi = MD\Omega / k_B T$$

Meritul acestor modele este că ele satisfac primele momente ale legii de împrăștiere și nu conțin parametri ajustabili.

Aproape toate mărimile dinamice pot fi calculate utilizând ca date de intrare factorul de structură statică $S(Q)$,

funcția de distribuție radială $g(r)$ și potențialul de interacțiune pereche $\phi(r)$.

Aceste considerații teoretice au fost utilizate în lucrare pentru interpretarea datelor experimentale.

III. METODA EXPERIMENTALA FOLOSITA, MASURARI SI PRELUCRAREA DATELOR IN SPECTROMETRIA CU TIMP DE ZBOR

S-au efectuat măsurări de împrăștiere neelastică a neutronilor lenți pe bismut, plumb și sodiu în stare lichidă utilizând metoda spectrometriei cu timp de zbor.

Principiul spectrometriei cu timp de zbor constă în aceea că un fascicul de neutroni este întrerupt periodic de către un obturator (chopper). După parcurgerea unei distanțe de zbor L , neutronii sînt detectați în bateria de contori și înregistrați în canalele unui analizor de timp. Aceste canale se deschid consecutiv din momentul declanșării analizorului.

Acest moment coincide cu momentul deschiderii chopperului.

În lucrare este descris în detaliu spectrometrul cu timp de zbor de la reactorul VVR-S-IFIN cu ajutorul căruia s-au efectuat măsurările, probele și cuptorul în care acestea au fost menținute în stare lichidă.

Probele au avut o puritate de 99,99%. Înregistrarea spectrelor s-a făcut la opt unghiuri de împrăștiere: $\theta = 20^\circ, 30^\circ, 40^\circ, 50^\circ, 60^\circ, 70^\circ, 80^\circ, 88^\circ$. Domeniul de energie și de transfer de impuls explorat a fost de: $E = (0,6-60) \text{ meV}$, respectiv $(0,6-2,2) \text{ \AA}^{-1}$.

Pentru a obține factorul de structură din măsurările experimentale dublu diferențiale în vederea comparării lui cu diferite modele teoretice este necesară aplicarea unor corecții datelor experimentale. Astfel, datele au fost corectate de fondul neutronilor, absorbția în probă a neutronilor împrăștiați de conținer, eficacitatea contorilor, variația în timp a fascicului de neutroni incidenti, autoabsorbția în probă și împrăștierea multiplă.

Secțiunea eficace dublu diferențială în unități relative este dată de relația :

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\epsilon} = \frac{\left(\frac{E}{M_1} - \frac{FG \times F}{M_2}\right) \times FB \times MS}{\Delta\tau \Omega T(t) \epsilon(t) f_g(t) S \cdot d \frac{N_0}{A}}$$

- unde :
- E este intensitatea totală împrăștiată de probă + conținer
 - F este intensitatea obținută de la neutronii împrăștiați de conținerul gol
 - M₁ este monitorul pentru E
 - M₂ este monitorul pentru F
 - FG factorul geometric pentru energia E₀ a neutronilor
 - S suprafața probei în flux .
 - d grosimea probei
 - Δτ unghiul solid sub care proba vede detectorul
 - ε(t) eficacitatea contorilor
 - T(t) transmisia în aer
 - f_g(t) factorul geometric
 - MS corecția de împrăștiere multiplă

În lucrare este descris modul cum se aplică toate aceste corecții.

Pentru obținerea secțiunilor eficace în valori absolute s-a efectuat un set de măsurări pe vanadiu care este un împrăștiator necoerent, iar la temperaturi normale împrăștierea sa este predominant elastică.

Pentru aplicarea tuturor acestor corecții a fost elaborat programul de calcul TOFLEX /12/.

IV. REZULTATE OBTINUTE DIN EXPERIENȚELE DE ÎMPRĂȘTIERE NEELASTICĂ A NEUTRONILOR

Așa cum s-a arătat mărimea principală ce interesează în împrăștierea neelastică a neutronilor lenți este factorul de structură dinamică (legea de împrăștiere) $S(Q, \hbar\omega)$ care pînă la o constantă de normalizare dă probabilitatea ca un neutron să fie împrăștiat în probă cu un transfer de energie $\hbar\omega$ și de transfer de moment Q .

În lucrare s-au studiat Bi, Pb și Na lichid pentru care s-a obținut factorul de structură dinamică care a fost comparat cu o serie de modele teoretice adecvate pentru lichidele simple /13/, /14/, /15/, /16/, /17/.

Alegerea acestor metale s-a făcut din următoarele considerente :

- bismutul, plumbul și sodiul sînt lichide simple pentru care s-au elaborat modele teoretice care se pretează la comparația cu datele experimentale,

- bismutul și plumbul sînt practic împrăștiatori coerenti, iar informațiile ce se obțin privind modurile colective de mișcare nu sînt alterate de alte tipuri de mișcări,

- bismutul prezintă o stare anomală ; densitatea în stare lichidă în apropierea punctului de topire este mai mare decît în stare solidă. Aceasta se manifestă prin apariția unui pic auxiliar alături de maximul principal în factorul de structură statică,

- sodiul este un împrăștiator mixt, coerent și necoerent, și trebuie luate în considerare efectele de interferență ce apar. Acestea sînt deosebit de importante în domeniul transferurilor de impuls corespunzătoare mișcărilor colective unde structura microscopică a împrăștiatorului joacă un rol esențial,

- aceste metale au aplicații la reactorii nucleari, astfel bismutul este folosit ca mediu de transfer al căldurii, U^{233} sau U^{235} fiind dizolvat în concentrație ridicată în bismut. Numai con-

centrații mici de uraniu pot fi dizolvate în bismut chiar la temperaturi mari. Pentru a mări solubilitatea în bismut este necesar să se adauge plumb sau staniu.

De asemenea, folosirea sodiului ca agent de răcire în reactorii rapizi este foarte avantajoasă.

*Studiul funcțiilor de corelație în Bi lichid prin
împrăștiere de neutroni lenti /13/, /14/.*

Bismutul este un împrăștiator aproape complet coerent ceea ce nu ridică probleme legate de separarea împrăștierei ne-coerente. Rezultatele experimentale au fost comparate cu trei modele teoretice bazate pe existența mișcărilor colective în lichide simple /4/, /5/, /19/.

În fig.1 sînt prezentate măsurările experimentale efectuate la opt unghiuri de împrăștiere pentru temperatura $T = 286^{\circ}\text{C}$. Datelor experimentale le-au fost aplicate toate corecțiile enunțate în capitolul III, în final obținîndu-se secțiunea eficace dublu diferențială $d^2\sigma/d\Omega dE$ în unități absolute.

Aceste corecții au fost aplicate cu ajutorul programului TOFLEX /12/.

O atenție deosebită s-a acordat corecției de împrăștiere multiplă avînd în vedere că proba a fost destul de groasă (12mm) /18/. În fig.2 sînt prezentate cîteva curbe care arată variația contribuției împrăștierei multiple în funcție de energie pentru cîteva unghiuri de împrăștiere.

Se observă că pentru valori mici ale transferului de moment Q contribuția împrăștierei multiple este foarte mare. Pentru efectuarea acestor calcule s-au utilizat două modele pentru $S(Q, \hbar\omega)$ și anume modelul Pathak și Singwi /4/ și aproximația masei efective /9/. Compararea rezultatelor obținute arată o ușoară dependență de model.

După obținerea secțiunii eficace dublu diferențiale $d^2\sigma/d\Omega dE$ s-a determinat factorul de structură dinamică $S(Q, \hbar\omega)$ în funcție de transferul de energie $\hbar\omega$, la valori constante ale transferului de moment Q (fig.3).

Pentru a verifica datele experimentale s-au determinat momentele energetice din datele experimentale pentru a fi comparate cu cele teoretice.

Momentele de ordinul unu și doi sînt în limitele a 25%, față de cele teoretice, iar momentul de ordinul zero este în limitele a aproximativ 12% față de cel din referința /20/.

Factorul de structură dinamică $S(Q, \hbar\omega)$ la Q constant a fost comparat cu modele teoretice /4/ și /5/.

În fig.4 și fig.5 este prezentat $S(Q, \hbar\omega)$ comparat cu modelul lui Pathak și Singwi, respectiv modelul lui Lovesey.

Concluzia din comparația cu aceste modele este aceeași și anume că pentru valori ale lui $Q < 2 \text{Å}^{-1}$ concordanța cu datele experimentale nu este satisfăcătoare, pentru $Q > 2 \text{Å}^{-1}$ concordanța este mai bună.

La aceeași concluzie s-a ajuns și în lucrările /21/, /22/.

De asemenea, a fost calculată funcția de împrăștiere intermediară $F(Q, t)$ în funcție de timp pentru diferite valori ale lui Q care indică existența a cel puțin doi timpi caracteristici de relaxare.

Factorul de structura dinamica în Pb lichid /15/

Studiul factorului de structură dinamică al plumbului lichid la temperatura de $T = 350^\circ\text{C}$ și $T = 400^\circ\text{C}$ a fost efectuat utilizînd împrăștierea neelastică a neutronilor cu energia incidentă de 5 meV.

După aplicarea tuturor corecțiilor datelor experimentale s-a obținut factorul de structură dinamică $S(Q, \hbar\omega)$ la valori constante ale transferului de moment Q . După cum se poate observa din fig.6 pentru valori ale lui Q pînă la $1,5 \text{Å}^{-1}$ există discontinuități în forma lui $S(Q, \hbar\omega)$. De asemenea, a fost calculată funcția de împrăștiere intermediară $F(Q, t)$ care indică existența a cel puțin doi timpi caracteristici de relaxare. Factorul de structură dinamică a fost comparat cu cel obținut din modelele teoretice date în referințele /4/ și /5/. Această comparație este arătată în Fig.7. Se observă o mai bună concordanță între

datele experimentale și cele teoretice cu creșterea lui Q .

Împrăștierea neelastica a neutronilor lenti pe sodiu lichid /17/

În cadrul lucrării s-a măsurat factorul de structură dinamică pentru sodiu lichid la $T = 233^{\circ}\text{C}$ într-un domeniu de transfer de moment $1 \text{ \AA}^{-1} \leq Q \leq 2,2 \text{ \AA}^{-1}$ utilizând spectrometria cu timp de zbor. Din datele experimentale corectate cu ajutorul programului TOFLÉX /12/ s-a obținut legea de împrăștiere $S(\alpha, \beta)$.

Datorită posibilităților limitate ale spectrometrului folosit la măsurări intervalul de transfer de energie și moment explorat în spațiul (Q, ω) a fost destul de mic și ca urmare au fost utilizate o serie de modele teoretice pentru a calcula $S(\alpha, \beta)$.

Sodiul fiind un împrăștiator mixt, coerent și necoerent legea de împrăștiere include două componente conform relației :

$$S(Q, \omega) = \frac{\sigma_{\text{necoh}}}{\sigma_{\text{T}}} S(Q, \omega)_{\text{necoh}} + \frac{\sigma_{\text{coh}}}{\sigma_{\text{T}}} S(Q, \omega)_{\text{coh}}$$

În figura 8 este prezentat $S(\alpha, \beta)$ pentru sodiu lichid calculat cu ajutorul a diferite modele teoretice.

Calculule pentru $S(\alpha, \beta)$ sînt prezentate pentru valori ale lui β în domeniul $0 \div 0,7$ și ale lui α de la $0,002$ la $0,6$.

Domniul în α corespunde unui domeniu în Q de la 1 \AA^{-1} la 16 \AA^{-1} . În teză este analizat în detaliu domeniul de valabilitate a modelelor teoretice pe diferite domenii de energie și impuls.

Pentru a calcula legea de împrăștiere cu ajutorul modelelor teoretice a fost elaborat programul "SCATLAW" /23/.

Cu ajutorul acestui program se pot obține, în afara legii de împrăștiere, următoarele mărimi : secțiuni eficace totale, secțiuni eficace de împrăștiere diferențiale și dublu diferențiale, secțiuni eficace de transport, cosinusul mediu al unghiului de împrăștiere, kernele de împrăștiere.

Pentru a studia influența potențialului de interacțiune pereche asupra factorului de structură dinamică coerent, s-a

calculat $S(Q, \omega)$ pentru Na lichid la $T = 200^\circ\text{C}$ utilizând cinci potențiale interatomice diferite pe baza teoriei lui Pathak și Singwi /16/, patru dintre aceste potențiale au o comportare oscilatorie de lungă distanță (LRO), iar unul este de tip Lennard - Jones.

Potențialul Lennard Jones s-a utilizat în calcule pentru a testa contribuția LRO asupra dinamicii.

În fig.9 este arătat factorul de structură dinamică coerent $S(Q, \hbar\omega)$ pentru trei potențiale diferite. Se observă că pentru transferuri de energie $\hbar\omega < 16$ meV influența potențialului este destul de mică. Diferențele devin ceva mai importante pentru $\hbar\omega > 16$ meV.

Alte mărimi calculate în cadrul lucrării au fost factorul de structură dinamică la frecvența zero $S(Q, \hbar\omega=0)$; momentul de ordinul patru al factorului de structură dinamică $\omega_{\text{coh}}^4(Q)$; raportul $\omega_{\text{coh}}^4(Q)/3 \cdot [\overline{\omega^2}]^2$, frecvența caracteristică Ω_0 și funcția spectrală a corelațiilor de curent longitudinale $C(Q, \omega)$. Calculul mărimilor menționate a condus la concluzia că potențialele cu "hard core" proporționale cu $1/r^{12}$ conduc la valori mai mari ale acestora.

V. CONCLUZII

5.1. S-au efectuat măsurări de împrăștiere neelastică a neutronilor lenți pe Bi și Pb lichid cu aplicarea tuturor corecțiilor necesare în vederea obținerii factorului de structură dinamică $S(Q, \omega)$. Prin transformare Fourier a lui $S(Q, \omega)$ s-a obținut funcția de împrăștiere intermediară $F(Q, t)$. O atenție deosebită s-a acordat corecției de împrăștiere multiplă în special la unghiuri mici de împrăștiere, având în vedere influența acesteia asupra rezultatelor.

5.2. Compararea rezultatelor experimentale cu trei modele teoretice relativ recente /4/, /5/, /6/ a arătat că acestea descriu în mod satisfăcător datele experimentale în regiunea valorilor intermediare ale lui Q , în timp ce, la Q mici concordanța experienței cu teoria devine nesatisfăcătoare.

5.3. S-au efectuat măsurări de împrăștiere neelastică a neutronilor pe sodiu lichid la temperatura de 233°C într-un domeniu de transfer de moment $1 \text{ \AA}^{-1} \leq Q \leq 2,2 \text{ \AA}^{-1}$. Din datele experimentale a fost determinată legea de împrăștiere $S(\alpha, \beta)$ care a fost comparată cu o serie de modele teoretice.

5.4. S-a efectuat o analiză amănunțită a valabilității modelelor teoretice pe diferite domenii de energie și impuls. Sodiul fiind un împrăștiator mixt, coerent și necoerent, $S(\alpha, \beta)$ s-a calculat pentru fiecare tip de împrăștiere.

5.5. A fost elaborat programul de calcul "SCATLAW" cu ajutorul căruia se pot calcula secțiunile eficace de împrăștiere precum și alte cantități de interes nuclear cum sînt : componentele Legendre ale kernelelor de împrăștiere $\sigma_k(E_0 \rightarrow E)$, cosinul mediu al unghiului de împrăștiere $\mu(E_0)$, secțiunile eficace de transport $\sigma_{tr}(E_0)$, kernele THERMOS $P_{ij,l}$, momentele energiei ale legii de împrăștiere $\overline{\omega^n}$.

5.6. S-a efectuat un studiu al influenței potențialului de interacțiune pereche asupra factorului de structură dinamică $S(Q, \omega)$, a momentului de ordinul patru $\omega^4(Q)$ și asupra funcției spectrale a corelațiilor de curent longitudinale $C(Q, \omega)$. În acest scop s-au utilizat patru potențiale cu oscilații la distanțe mari și un potențial de tip Lennard-Jones.

BIBLIOGRAFIE

1. S.Takeuchi, The properties of Liquid Metals, Proceedings of the International Conference held at Tokyo, (1972)
2. R.Evans, D.A.Greenwood. Liquid Metals, Proceedings of the Third International Conference held at Bristol, (1976)
3. J.Dupuy, A.J.Dianoux, Microscopic Structure and Dynamics of Liquids, Plenum Press, New York, (1978)
4. K.N.Pathak, K.S.Singwi, Phys.Rev., 2, 2427, (1970)
5. S.W.Lovesey, J.Phys.C, Solid St.Phys., 4, 3057, (1971)
6. S.W.Lovesey, J.Phys.C, Solid St.Phys., 6, 1856, (1973)
7. A.Sjölander, Ark.Fys., 14, 315, (1958)
8. G.H.Vineyard, Phys.Rev., 110, 999, (1958)
9. K.Sköld, Phys.Rev.Letters, 19, 1023, (1967)
10. L.van Hove, Phys.Rev., 95, 249, (1954)
11. L.van Hove, Physica, 24, 404, (1958)
12. I.Pădureanu, S.Râpeanu, G.Rotărescu, C.Crăciun, N.Deciu, (lucrare nepublicată)
13. I.Pădureanu, S.Râpeanu, G.Rotărescu, C.Crăciun, N.Mateescu, P.Timiş, Rev.Roum.Phys., 23, 379, (1978)
14. I.Pădureanu, S.Râpeanu, G.Rotărescu, C.Crăciun, M.Ion, Progrese în fizică, V40, (1979)
15. I.Pădureanu, S.Râpeanu, G.Rotărescu, C.Crăciun, Rev.Roum.Phys., 24, 805, (1979)
16. I.Pădureanu, S.Râpeanu, G.Rotărescu, C.Crăciun, N.Deciu, Rev.Roum.Phys., 23, 121, (1978)
17. I.Pădureanu, G.Rotărescu, S.Râpeanu, N.Deciu, C.Crăciun, D.Jovič, Rev.Roum.Phys., 22, 931, (1977)
18. G.Rotărescu, Referat de doctorat, Bucureşti, 1979
19. N.K.Ailawadi, A.Rahman, R.Zwanzig, Phys.Rev., A4, 1616, (1971)
20. D.M.North, J.E.Enderby, P.A.Egelstaff, J.Phys.C, 1, 1075 (1968)
21. O. Söderstrom, M.Davidovič, U.Dahlborg, K.E.Larsson, Neutron Inelastic Scattering, I.A.E.A., vol.II, 67, (1977)
22. R.Bansal, K.N.Pathak, Phys.Rev., A11, 1450, (1975)
23. I.Pădureanu, S.Râpeanu, G.Rotărescu, C.Crăciun, IRNE-131, (1978)

LEGENDA FIGURILOR

- Fig.1.** Spectrele de împrăștiere a neutronilor pe Bi lichid la $T = 286^{\circ}\text{C}$.
- Fig.2.** Factorul de corecție de împrăștiere multiplă pentru Bi lichid.
- Fig.3.** $S(Q, \hbar\omega)$ pentru Bi la $T = 286^{\circ}\text{C}$.
- Fig.4.** $S(Q, \hbar\omega)$ experimental comparat cu modelul lui Pathak și Singwi /6/.
- Fig.5.** $S(Q, \hbar\omega)$ experimental comparat cu modelul lui Lovesey /7/.
- Fig.6.** $S(Q, \hbar\omega)$ pentru Pb la Q constant, $T = 350^{\circ}\text{C}$.
- Fig.7.** $S(Q, \hbar\omega)$ pentru Pb la diferite valori ale lui Q împreună cu modelele teoretice (... datele experimentale, - modelul P-S, - modelul L)
- Fig.8.** $S(\alpha, \beta)$ pentru sodiu lichid calculat cu ajutorul a diferite modele teoretice : *** P-S+L, $\Delta\Delta\Delta$ L+L, --- modelul masei efective, — — — aproximația convoluției, . . . modelul gazului cu masă efectivă, ooo modelul gazului fără masă efectivă, +++ modelul dezvoltării fononice, — datele experimentale ale lui Randolph.
- Fig.9.** Factorul de structură dinamică coerent $S(Q, \hbar\omega)$ obținut pentru sodiu la $T = 200^{\circ}\text{C}$ pentru trei potențiale diferite.

Bi
 $T = 286^{\circ}\text{C}$

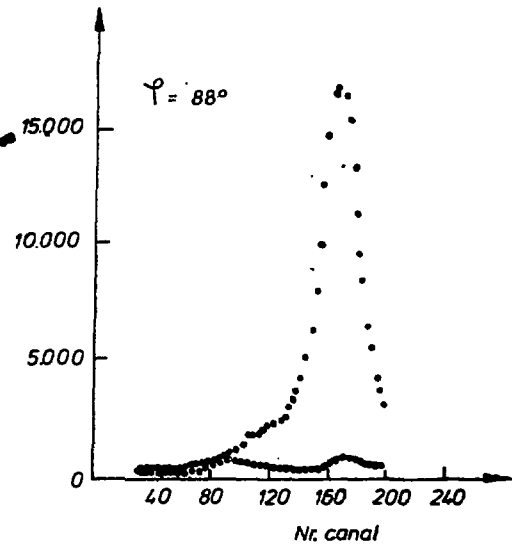
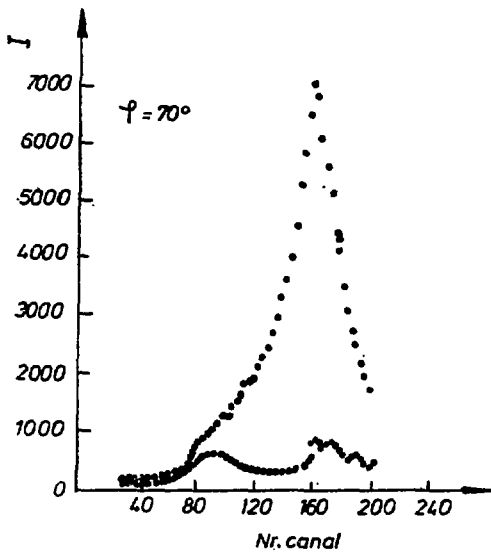
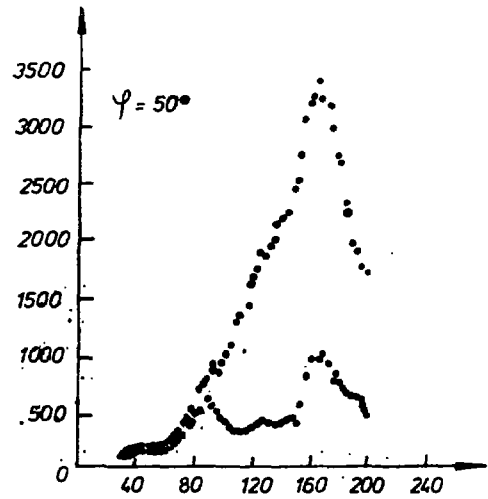
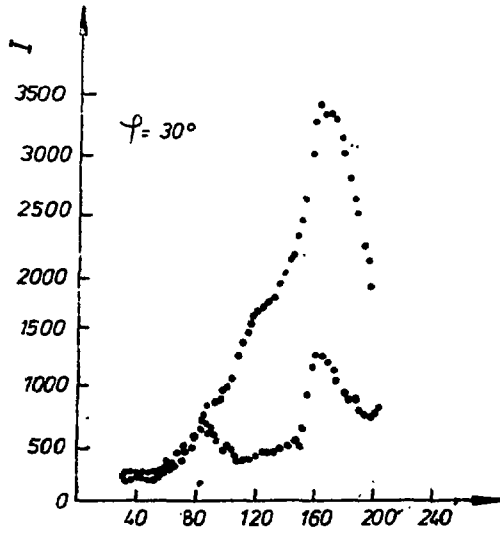


Fig.1

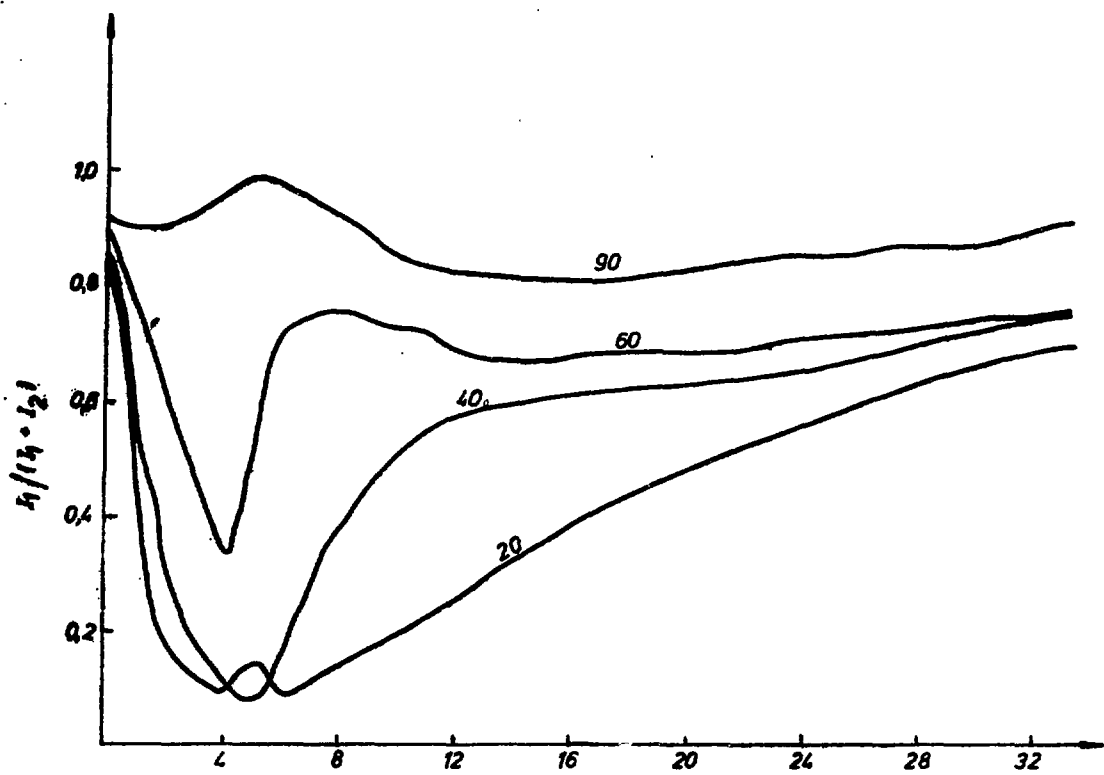


Fig.2

Bi
T = 286°C

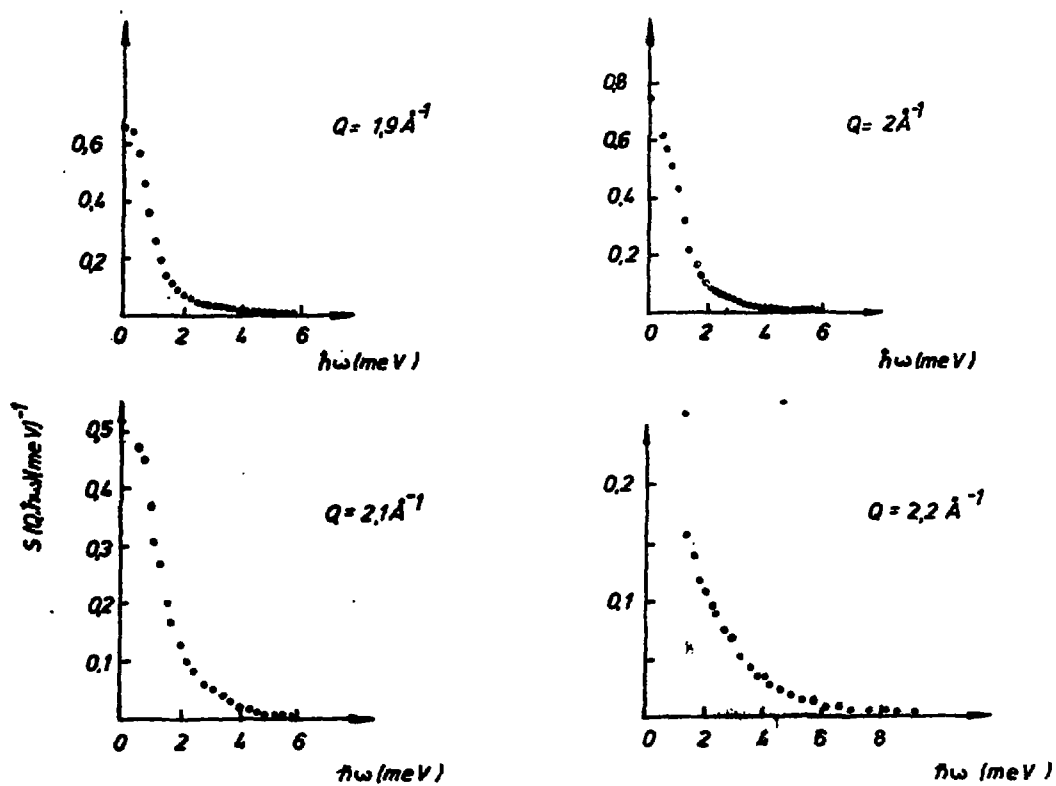


Fig.3

Bi
T = 286 °C

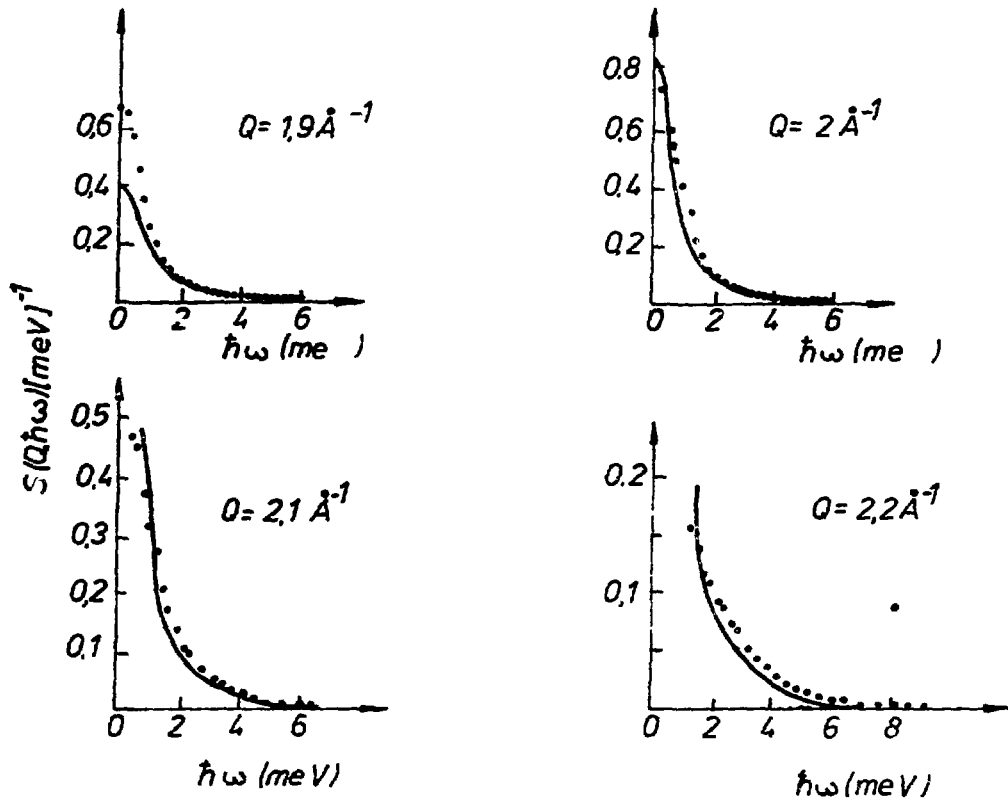


Fig.4

Bi
T = 402°C

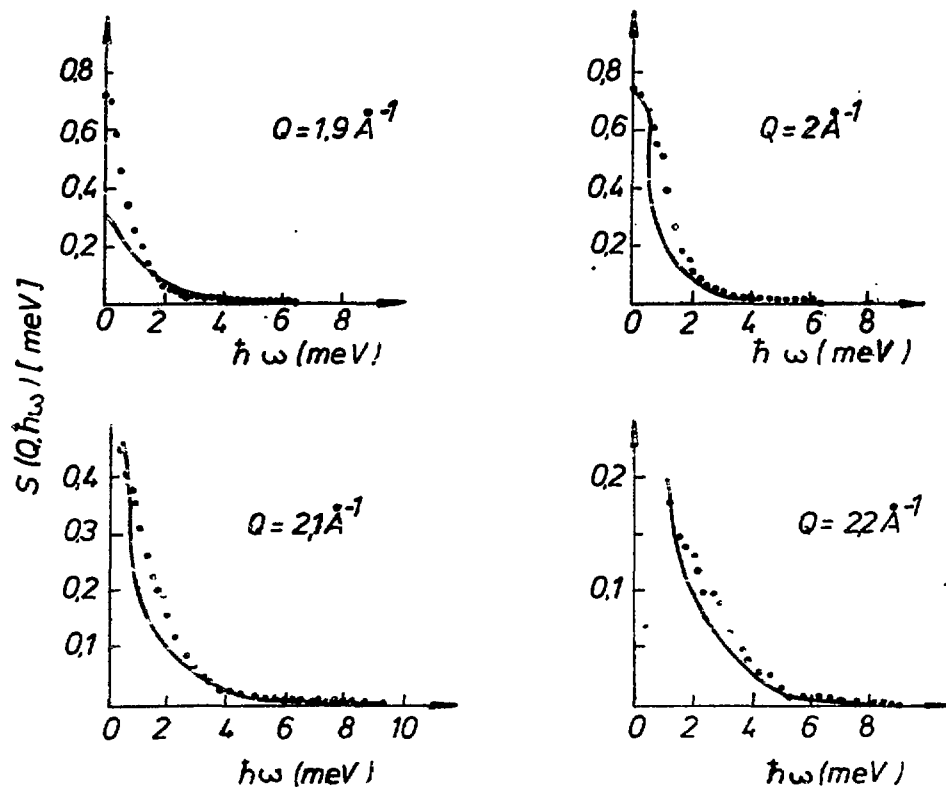


Fig. 5

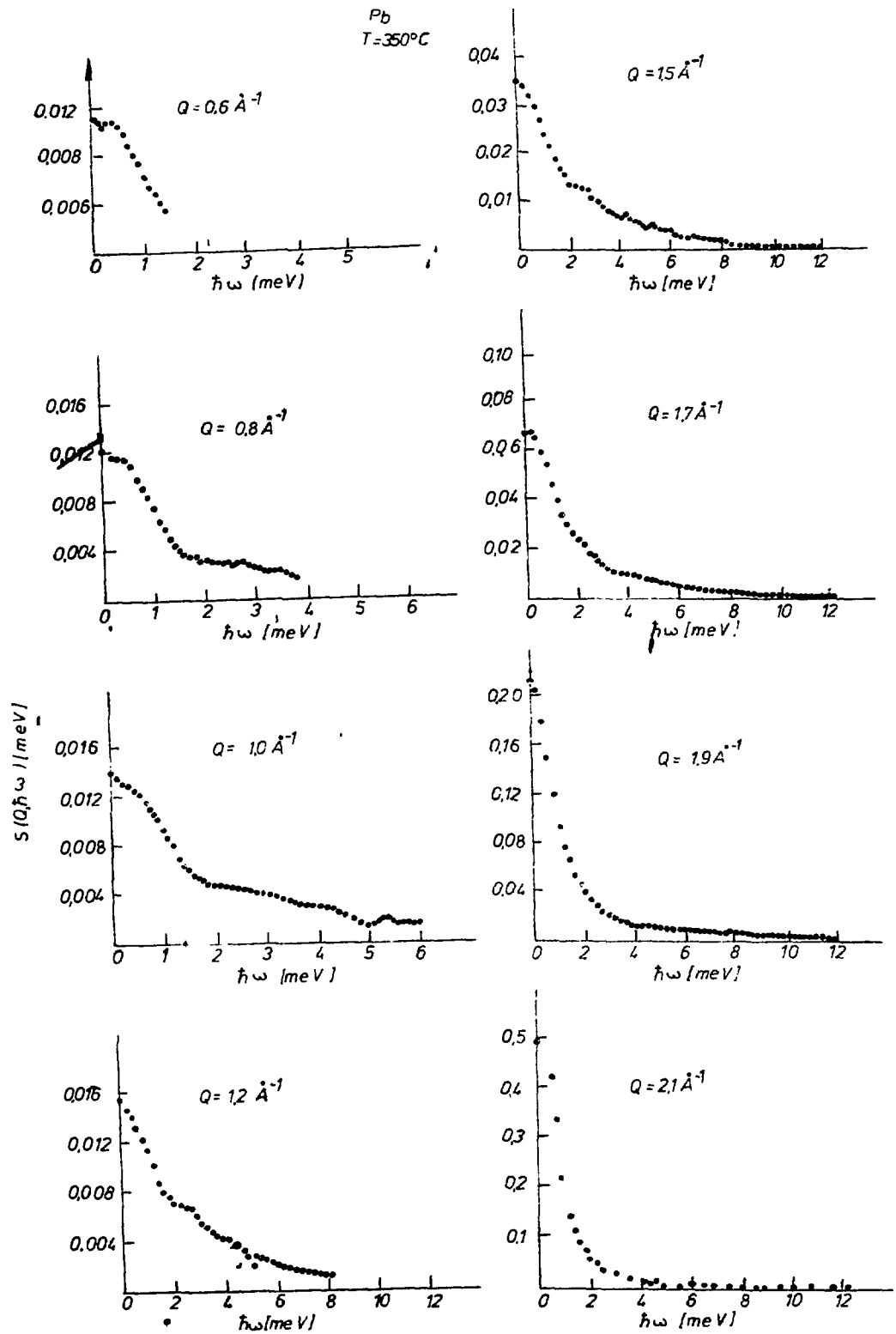


Fig. 6

Pb

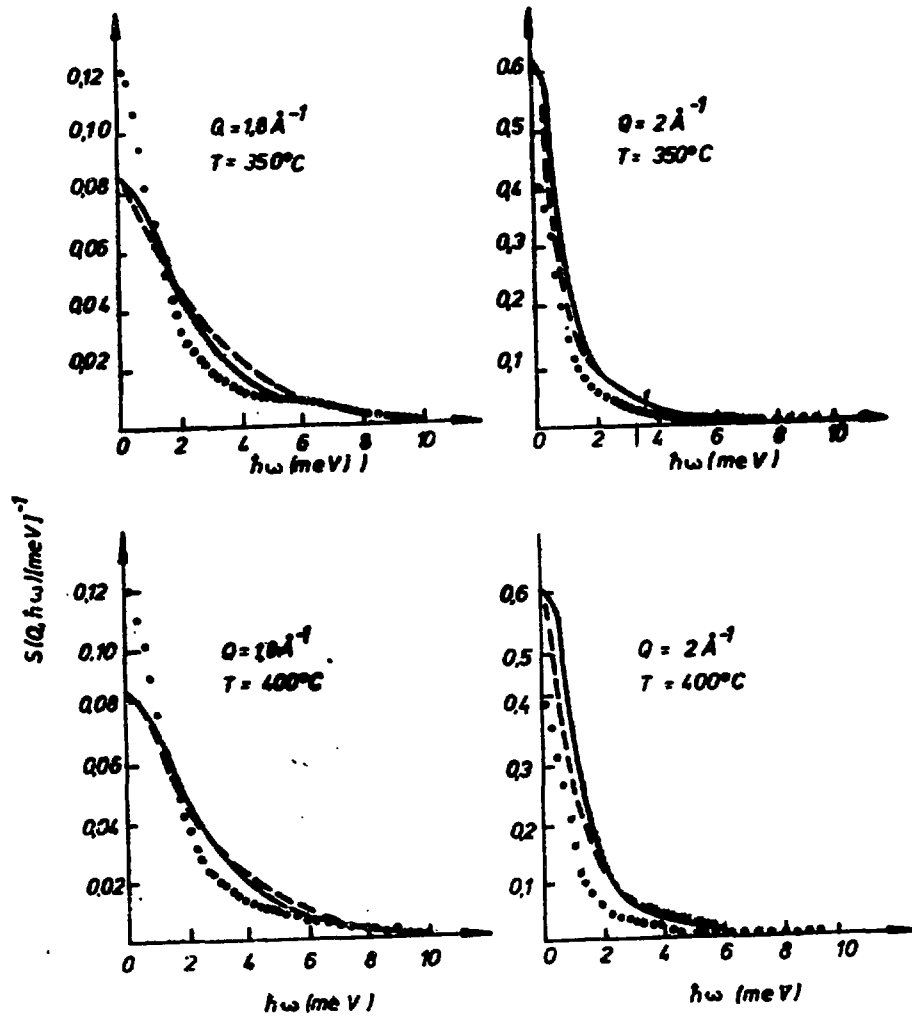


Fig.7

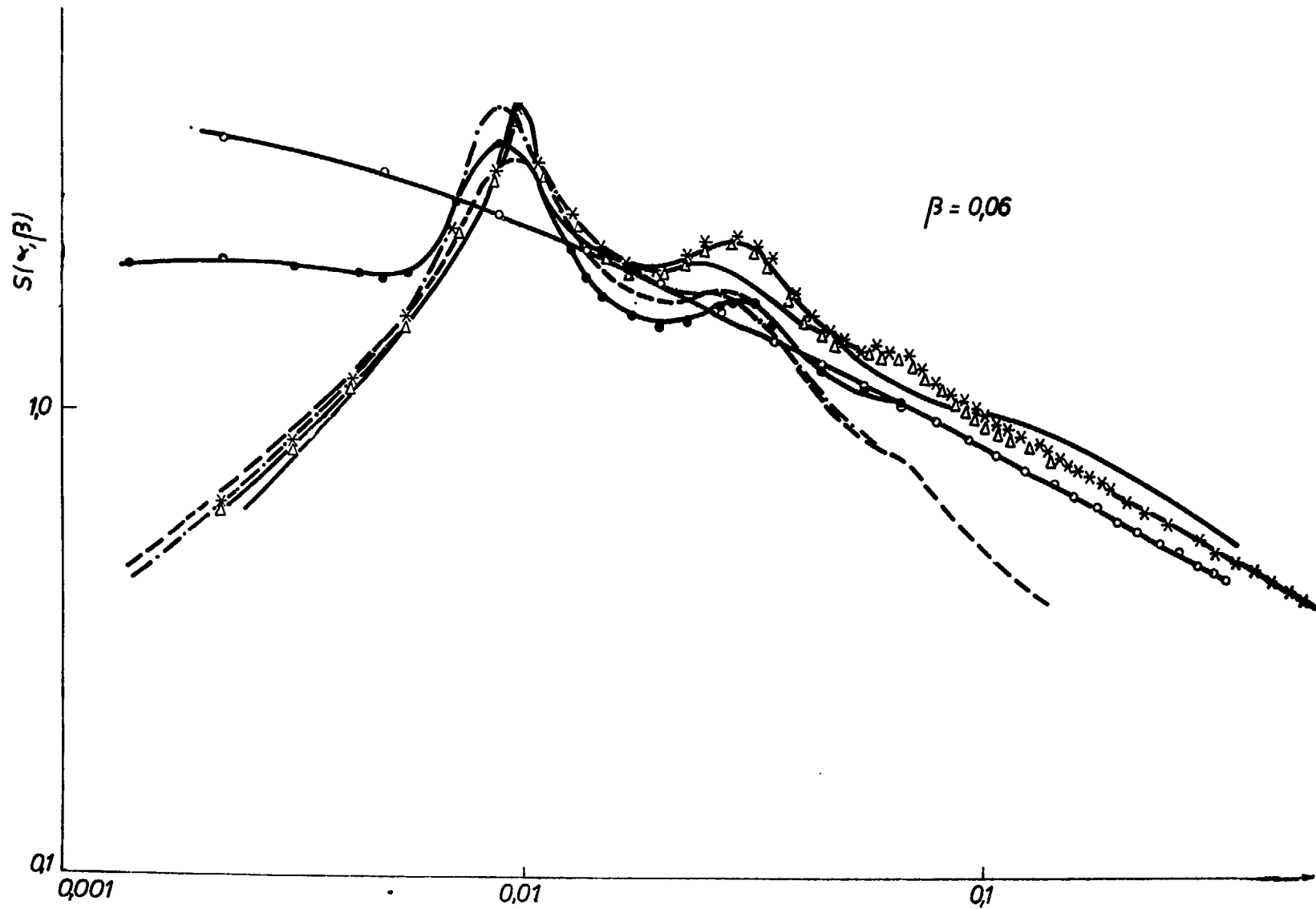


Fig. 8

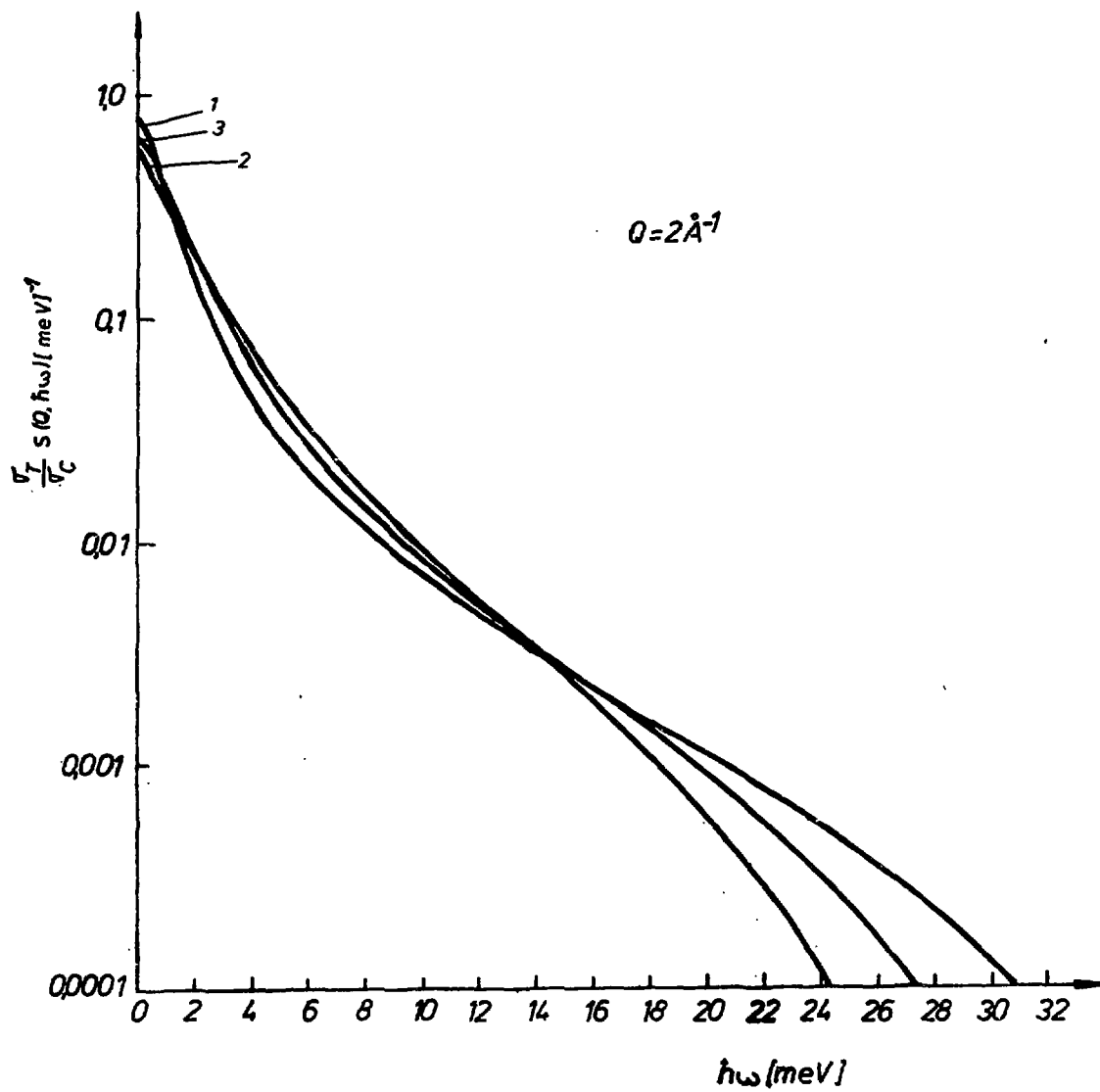


Fig.9