

KFK-261

**KERNFORSCHUNGSZENTRUM
KARLSRUHE**

November 1964

KFK 261

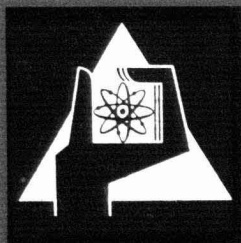
*Gesellschaft für Kernforschung m. b. H.
Zentralbücherei*

Institut für Angewandte Kernphysik

23 Juni 1965

Eine Methode zur Untersuchung der inelastischen Streuung
langsamer Neutronen an Vielteilchensystemen

Wolfgang Gläser



GESELLSCHAFT FÜR KERNFORSCHUNG M. B. H.

KARLSRUHE

Als Manuskript vervielfältigt.

Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor.

Gesellschaft für Kernforschung m. b. H.

Karlsruhe

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

November 1964

K F K 261

Institut für Angewandte Kernphysik

Eine Methode zur Untersuchung der inelastischen Streuung
langsamer Neutronen an Vielteilchensystemen

von
Wolfgang Gläser

Gesellschaft für Kernforschung m.b.H., Karlsruhe

Inhaltsverzeichnis:

Seite

1.	Einführung	1
2.	Vergleich von Doppelchopper und Drehkristall- spektrometer	2
3.	Versuchsaufbau	
3.1	Aufbau des Drehkristallspektrometers	5
3.2	Aufbau der Flugzeitanordnung	7
3.3	Detektoren	8
3.4	Flugzeitanalysator	9
4.	Theorie des Drehkristall-Flugzeit-Spektrometers	
4.1	Primäre Energieauflösung	10
4.2	Sekundäre Auflösung	12
5.	Meß- und Auswerteverfahren	
5.1	Flußkarte	16
5.2	Bestimmung der Detektorempfindlichkeit	17
5.3	Umrechnung der rohen Streudaten	19
5.4	Auflösungskorrektur	21

1. Einführung

Energie- und Richtungsverteilung der an einem Vielteilchensystem gestreuten langsamen Neutronen hängen von örtlichen Korrelationen und Geschwindigkeitskorrelationen der streuenden Kerne des Systems ab. Die Untersuchung der Neutronenstreuung liefert deshalb nicht nur Aussagen über die räumliche Struktur des Streuers, sondern auch über dessen dynamische Eigenschaften.

Mit der in diesem Bericht beschriebenen Anordnung werden in erster Linie inelastische Streuprozesse untersucht, aus denen Erkenntnisse über die dynamischen Eigenschaften der Streuer folgen. Solche Untersuchungen sind einmal von grundlegendem physikalischen Interesse, sie haben aber auch eine große Bedeutung für die Reaktortechnik. Für die Auslegung moderner thermischer Reaktoren ist es erforderlich, daß die Neutronenspektren genau vorausberechnet werden können.

Der Bereich der interessierenden Einfallenergien liegt unterhalb 1 eV (für Einfallenergien die größer als 1 eV sind, können die Kerne des Streuers im Wesentlichen als frei angesehen werden), für diesen Energiebereich ist ein thermischer Reaktor die geeignetste Neutronenquelle. Da die benötigten monochromatischen Neutronen erst aus dem kontinuierlichen Reaktorspektrum herausselektiert werden müssen, sind für solche inelastischen Streuexperimente Doppelspektrometer notwendig. Doppelspektrometer dieser Art können auf verschiedene Weise verwirklicht werden, z.B. unter Verwendung von Neutronenfiltern, unter Ausnutzung der Bragg-Reflexion an Einkristallen oder auch mit mechanischen Geschwindigkeitsselektoren.

Spektrometer mit gepulstem monochromatischem Strahl sind für viele Meßprobleme, insbesondere für solche, bei denen die Streuer in Bezug auf den einfallenden Strahl isotrop sind, den anderen Anordnungen überlegen, weil sie eine gleichzeitige Messung der Energieverteilungen in verschiedenen Richtungen ermöglichen.

Zur Erzeugung des gepulsten monochromatischen Strahles werden Doppelchopper [1, 2] und Drehkristallspektrometer [3 - 5] verwendet. Im Abschnitt 2 werden diese beiden Typen von Monochromatoren hinsichtlich Auflösung und Intensität verglichen. Das Untergrundproblem wird diskutiert.

Im Abschnitt 3 wird die am Reaktor DIORIT in Würenlingen aufgebaute Drehkristall-Flugzeit-Spektrometeranordnung näher beschrieben. Im Abschnitt 4 werden einfache Näherungsformeln für primäre und sekundäre Energieauflösung hergeleitet. Der Doppler-Effekt wird diskutiert. Ein Vergleich mit Meßergebnissen wird durchgeführt.

Im 5. Abschnitt wird schließlich ein einfaches Meß- und Auswerteverfahren zur Bestimmung zweifach differentieller Streuquerschnitte und des sogenannten "Streugesetzes" beschrieben.

2. Vergleich von Doppelchopper und Drehkristallspektrometer

Wir wollen in diesem Abschnitt die primäre Energieauflösung $(\frac{\Delta E}{E})_{pr}$ die zeitliche Breite τ des Neutronenpulses hinter dem Monochromator und die durch die Monochromatoranordnung schließlich pro sec durchgelassene Intensität I_{tr} im Falle des Doppelchoppers und des Drehkristallspektrometers vergleichen. Die für diesen Vergleich benötigten Formeln werden für den Doppelchopper ohne Ableitung angegeben [6], die entsprechenden Ausdrücke für das Drehkristallspektrometer, die im Abschnitt 4 hergeleitet werden, werden hier vorweggenommen.

Doppelchopper:

$$\left(\frac{\Delta E}{E}\right)_{pr} = \frac{4bv}{DL\omega} \quad (1)$$

$$\tau = \frac{b}{D\omega} \quad [\text{sec}] \quad (2)$$

$$I_{tr} = \frac{1}{12\pi^2} \frac{h}{D} \frac{b^2}{L^2} F\phi(E)\Delta E \quad [\text{n/sec}] \quad (3)$$

Hier bedeuten h und b Höhe und Breite der Schlitze in einem Rotor. D ist der Durchmesser und ω die Winkelgeschwindigkeit des Rotors. Es wird angenommen, daß der Doppelchopper aus zwei gleichen Rotoren besteht, die gleichsinnig in Phase laufen, L ist der Abstand der beiden Rotoren. F ist schließlich die ausnutzbare Austrittsfläche des Choppers, $\phi(E)$ der Fluß der Neutronen im durchgelassenen Energieintervall am Ort der Quelle und v die Geschwindigkeit der Neutronen.

Drehkristallspektrometer:

In den folgenden Formeln ist der Einfluß des Doppler-Effektes vernachlässigt, der erst bei großen Winkelgeschwindigkeiten und kleinen

Neutronenenergien anfängt eine merkliche Rolle zu spielen. Es wird weiter angenommen, daß die Kristallreflektivität nicht von der Winkelgeschwindigkeit ω abhängt.

$$\left(\frac{\Delta E}{E}\right)_{pr} = \sqrt{2} \frac{b'}{L'} \cotg \theta \quad (4)$$

$$\tau = \left[\frac{(b'/L')^2 + 2\beta_K^2}{2\omega^2} \right]^{1/2} \quad [\text{sec}] \quad (5)$$

$$= \frac{v}{128(\ln 2)^{3/2} \sqrt{v}} \frac{h' b'}{L'^2} \beta_K R_0 F \varphi(E) \Delta E \quad [\text{n/sec}] \quad (6)$$

Hier bedeuten h' , b' und L' Höhe, Breite und Länge der Kollimator-schlitze, β_K und R_0 sind Mosaikbreite und Reflektivität des Kristalles, θ ist der Braggwinkel und v gibt die Zahl der Reflexe pro Umdrehung an.

Es wird nun gefordert, daß mit beiden Anordnungen ein gepulster monochromatischer Strahl mit folgenden Eigenschaften herzustellen ist:

$$E = 0,1 \text{ eV} \quad \left(\frac{\Delta E}{E}\right)_{pr} = 0,05 \quad \tau = 10 \mu\text{sec} \quad (7)$$

Es gibt wegen der Zahl freier Parameter eine große Mannigfaltigkeit von Möglichkeiten, diese Strahleigenschaften zu erreichen. Wir legen deshalb zusätzlich einige geometrischen Parameter für beide Anordnungen fest, wir tun das einfach so, daß wir die Parameter bereits gebauter typischer Spektrometer übernehmen. Für einen typischen Chopper werden folgende Parameter angenommen: $D = 25 \text{ cm}$, $h = 2 \text{ cm}$, $b = 0,6 \text{ cm}$, Zahl der Schlitze $n = 3$. Mit diesen Werten folgen aus (1) und (2) ω und L und damit schließlich aus (3) I_{tr}

$$\omega = 2400 \text{ sec}^{-1} \quad (23000 \text{ Umdrehungen pro Minute})$$

$$L = 350 \text{ cm} \quad (8)$$

$$I_{tr} = 2,0 \cdot 10^{-9} F \varphi(E) \Delta E \quad [\text{n/sec}]$$

Ein typisches Drehkristallspektrometer verwendet einen Al-Kristall mit zwei (111)-Reflexen pro Umdrehung und hat folgende Parameter:

Durchmesser $D' = 3,5$ cm, $h' = 8$ cm, $\beta_K = 5,82 \cdot 10^{-3}$ (20'), $R_0 = 0,2$

Mit dem Netzebenenabstand $d_{(111)} = 2,332 \text{ \AA}$ ergibt sich für $E=0,1\text{eV}$ ein Bragg-Winkel von $\theta = 11,2^\circ$.

Aus (4) und (5) folgen nun sofort die restlichen Parameter, die die Bedingung (7) erfüllen

$$\begin{aligned} \omega &= 644 \text{ sec}^{-1} && (6150 \text{ Umdrehungen pro Minute}) \\ \frac{b'}{L'} &= 7 \cdot 10^{-3} && (24') \\ I_{\text{tr}} &= 2,85 \cdot 10^{-9} F \varnothing(E) \Delta E && [n/\text{sec}] \end{aligned} \quad (9)$$

Die Ergebnisse (8) und (9) zeigen, daß bei gleicher Auflösung der Doppelchopper dem Drehkristall gleichwertig wäre, wenn eine gleich große effektive Austrittsfläche des Strahles ausgenutzt werden könnte. Das liegt einfach an der unvollkommenen Reflektivität R_0 und der nicht optimalen "Mosaikbreite" β_K . Aus den geometrischen Abmessungen des transparenten Teils der Rotoren folgt aber sofort, daß mit dem angegebenen Drehkristall eine bis 8 mal größere Austrittsfläche als mit dem entsprechenden Doppelchopper ausgenutzt werden kann. Bei kleineren Energien wird R_0 und damit die Überlegenheit des Kristalles größer. Da die Reflektivität eines Einkristalles mit wachsender Energie aber etwa wie $1/E$ abnimmt, geht dieser Vorteil des Drehkristalls bei höheren Energien verloren. In dem für inelastische Streuexperimente interessanten Energiebereich ($< 0,5$ eV) sollte das Drehkristallspktrometer aber immer mit dem mechanischen Choppersystem konkurrenzfähig sein.

Der mit einem Drehkristall ausnutzbare Energiebereich ist auch nach unten begrenzt, was vor allem daran liegt, daß es kaum geeignete Kristalle mit genügend großem Netzebenenabstand und hoher Reflektivität gibt.

Ein weiterer Vorteil der Drehkristallanordnung kann sich daraus ergeben, daß bei dieser hinter dem Kristall in jeder Richtung monochromatische Neutronen gleichzeitig zur Verfügung stehen. Der Aufbau von mehreren Streuexperimenten in verschiedenen Richtungen hinter dem Kristallrotor (Verwendung verschiedener Einfallenergien) kann einen beträchtlichen Intensitäts- oder Zeitgewinn bringen.

Schließlich ist noch die Frage des Untergrundes zu besprechen, dem bei Streuexperimenten mit kleinen Zählraten eine große Bedeutung zukommt. Bei Doppelchopperanordnungen muß der im direkten Reaktorstrahl sehr hohe Untergrund an schnellen Neutronen durch zusätzliche Rotoren (im wesentlichen wasserstoffhaltiges Material) herabgesetzt werden. Eine Zeitabhängigkeit des Untergrundes läßt sich bei einer solchen Anordnung nicht vermeiden. Bei einer Drehkristallspektrometeranordnung befindet sich die Streuprobe im reflektierten monochromatischen Strahl und nicht im direkten Reaktorstrahl, das Untergrundproblem vereinfacht sich dadurch ganz erheblich. Von dem relativ kleinen Einkristall werden nur wenig schnelle Neutronen aus dem Strahl herausgestreut.

3. Versuchsaufbau

3.1 Aufbau des Drehkristallspektrometers

Zur Erzeugung zeitlich kurzer Pulse monochromatischer Neutronen wurde an einem horizontalen Strahlrohr des Reaktors DIORIT ein Drehkristallspektrometer aufgebaut. Im Prinzip besteht dieses Spektrometer aus einem sich schnell drehenden Einkristall und je einem Neutronen-Kollimator vor und hinter dem Kristallrotor. Die verwendeten Kollimatoren sind sogenannte Soller-Kollimatoren [7]. Sie haben eine Länge von 50 cm und besitzen dreizehn 0,3 cm breite und 5 cm hohe Kanäle, die durch 0,04 cm dicke Stahllamellen voneinander getrennt sind. Auf diese Weise wird eine geometrische Kollimation des einfallenden Strahles von 20 Bogenminuten erreicht. Der Eingangskollimator ist Bestandteil eines Spezialeinsatzes in dem verwendeten Strahlrohr des Reaktors. Der von den beiden Kollimatoren eingeschlossene Winkel ($180^\circ - 2\theta$) und der Abstand d der verwendeten Netzebenen des Einkristalles bestimmen entsprechend der Bragg-Bedingung

$$n\lambda_n = 2d \sin \theta \quad (10)$$

die Wellenlänge oder Energie der Neutronen, die reflektiert werden (λ_n = Wellenlänge der reflektierten Neutronen, n = Ordnung der Reflexion).

Der wichtigste Teil der Anordnung ist der Einkristallrotor, der zwei Aufgaben zu erfüllen hat. Erstens soll er die der Bragg-Be-

dingung genügenden monoenergetischen Neutronen reflektieren und zweitens soll er bei entsprechend hoher Drehzahl nur zeitlich kurze Pulse solcher Neutronen erzeugen.

Es sei hier nur erwähnt, daß in Vorversuchen Einkristalle verschiedener Geometrie aus NaCl, Blei, Kupfer und Aluminium getestet wurden. Für den größten Teil der späteren Streuversuche wurde ein Aluminiumkristall, eine Kugel mit einem Durchmesser von 5 cm, verwendet. Dieser Kristall besitzt eine Mosaikbreite von 13'. Die Kugelform wurde gewählt, um verschiedene Netzebenenabstände wählen zu können und den Kristall nach Bedarf justieren zu können.

Der Kristall wurde mittels einer geeigneten Halterung direkt am Rotor eines Hysteresis-Synchronmotors (HM 16/1, Smiths, England) befestigt (Abb. 1). Die zum Betrieb des Synchronmotors erforderliche Spannung variabler Frequenz wurde mit einem RC-Generator (Rohde & Schwarz) und einem anschließenden 100 Watt Leistungsverstärker erzeugt. Die Drehzahl änderte sich bei diesem System in 24 Stunden weniger als ± 1 %.

Bei Verwendung der (111)-Ebenen des Al-Kristalles konnte die Kugel so justiert werden, daß pro Umdrehung nur zwei (111)-Reflexe und nahezu keine (weniger als 1 %) durch andere Ebenen bedingte Störreflexe auftraten. Die Reflexe dieses Kristallrotors wurden bei Drehzahlen zwischen 3000 bis 22000 U/min untersucht. Die Streuexperimente wurden jedoch alle bei einer Drehzahl von etwa 14450 U/min durchgeführt. Diese Drehzahl ergab sich als Kompromiß zwischen folgenden drei Erfordernissen:

- a) Zur Erreichung einer guten Zeitauflösung ist die Drehzahl möglichst groß zu wählen.
- b) Der zeitliche Abstand von zwei aufeinanderfolgenden Neutronenpulsen darf nicht kleiner werden, als der größte Flugzeitunterschied für Neutronen verschiedener Energie, die im Streuspektrum noch mit merklicher Intensität zu erwarten sind.
- c) Das Zeitintervall zwischen zwei Neutronenpulsen sollte mit 256 Zeitkanälen geeigneter Breite ($8 \mu\text{sec}$) möglichst ganz erfaßt werden.

Das mit der oben beschriebenen Anordnung (zwei (111)-Reflexe an Al) bei einer Drehzahl von 14450 U/min im Abstand von 250 cm vom Kri-

stallrotor erzeugte Spektrum "monochromatischer" Neutronen ist in der Abb. 2 dargestellt.

3.2 Aufbau der Flugzeitanordnung

Die Abb. 3 zeigt schematisch den gesamten mechanischen Aufbau des Drehkristall-Flugzeit-Spektrometers am Reaktor DIORIT. Die vom Drehkristall kommenden Neutronenpulse fallen auf die im Abstand von 250 cm aufgestellte Streuprobe. Unter Winkeln von 15° bis 125° relativ zum monochromatischen Neutronenstrahl, 200 cm von der Probe entfernt sind 6 Detektoren angeordnet. Bei diesen Detektoren handelt es sich um Szintillationszähler. Die kompletten Meßköpfe sind zur Abschirmung vor allem von langsamen Neutronen mit einer sich zur Streuprobe hin verjüngenden Schicht Bortrioxyd, die maximal 10 cm dick ist, umgeben.

Die von den Neutronen für den Weg von der Streuprobe bis zum Detektor benötigte Zeit wird mit einem Vielkanal-Flugzeitanalysator, der im Abschnitt 3.4 näher beschrieben wird, gemessen. Mit diesem Verfahren ist die Energie der Neutronen nach der Streuung und damit auch die Energieänderung im Streuprozeß eindeutig bestimmbar.

Ein am Kristallrotor angebrachter Stahlstift erzeugt beim Vorbeilauf an einem Magneten in einer auf diesem angebrachten Spule ein Start- oder Triggersignal. Dieses Signal dient als Referenzsignal für die Zeitmessung, es startet den Meßzyklus des Zeitanalysators. Der Magnet kann so justiert werden, daß das Triggersignal mit dem Start der Neutronen am Kristall oder an der Streuprobe zusammenfällt. Diese Justierung wird jedoch im allgemeinen nicht durchgeführt, die Startzeit der Neutronen am Kristall bzw. an der Probe läßt sich leicht aus Relativmessungen bestimmen. Über einen ausdrückbaren elektronischen Zähler wird die Zahl der pro Zeiteinheit gelieferten Triggerimpulse registriert, auf diese Weise ist eine laufende Drehzahlkontrolle möglich.

Im monochromatischen Neutronenstrahl befinden sich weiterhin 2 Monitorzählrohre M1 und M2. M1 ist etwa 50 cm vor der Streuprobe, M2 200 cm hinter der Probe aufgestellt.

Die zeitliche Verteilung der von diesen Detektoren nachgewiesenen Neutronen kann ebenfalls ständig registriert werden. Nach geeigneter Eichung liefert Monitor M1 ein Maß für die insgesamt auf die

Streuprobe fallenden Neutronen. M2 kann zur Messung der Transmission der Streuprobe benutzt werden.

Beide Monitore zusammen gestatten, die Geschwindigkeit der einfallenden Neutronen zu bestimmen und kontrollieren laufend das einwandfreie Arbeiten des Drehkristalles.

3.3 Detektoren

Für den Nachweis von langsamen Neutronen haben sich mit BF_3 gefüllte Proportionalzählrohre bewährt, wobei zur Erreichung einer hohen Empfindlichkeit das Bor bis über 90 % in B^{10} angereichert ist. Die bekannten Vorteile dieser Detektoren sollen hier nicht wiederholt werden. Bei der Verwendung von BF_3 -Zählrohren in Flugzeitexperimenten besteht die Hauptschwierigkeit darin, mit einer möglichst kleinen Detektordicke eine ausreichende Empfindlichkeit zu erreichen, da die endliche Detektorausdehnung in Flugrichtung der Neutronen eine zusätzliche Flugzeitunsicherheit und damit eine Verschlechterung der sekundären Energieauflösung mit sich bringt. Dieser Effekt sei an einem ausgeführten Beispiel demonstriert. Um eine Empfindlichkeit von 0,2 für thermische Neutronen (2200 m/sec) zu erreichen, wurden BF_3 -Rohre mit einem effektiven Durchmesser von 5 cm und einem Gasdruck von 70 cm (40 EB 70, 20th Century) verwendet. Die durch die Zählrohrdicke bedingte Laufzeitunsicherheit von 23 μsec für thermische Neutronen ist größer als der von allen anderen Komponenten der Anordnung zusammen bewirkte Fehler. Eine Möglichkeit, diesen Beitrag zur Laufzeitauflösung zu verkleinern, besteht darin, mit Zählrohren, die einen wesentlich höheren Füllgasdruck besitzen, zu arbeiten. Die Herstellungstechnik solcher Rohre war aber zur Zeit des Aufbaus der hier zu beschreibenden Anordnung noch zu wenig entwickelt.

Zur Lösung des Problems bot sich die Verwendung von Szintillationsdetektoren für langsame Neutronen an, bei denen im Gegensatz zu den Proportionalzählrohren schon in relativ kleinen Schichtdicken eine ausreichende Menge Absorbermaterial für Neutronen untergebracht werden kann. Vorversuche ergaben, daß die in Frage kommenden Szintillatoren mit guten optischen Eigenschaften, nämlich mit Eu aktivierte Li^6J -Einkristalle und Li-haltige Gläser wegen ihrer hohen Empfindlichkeit für γ -Strahlen für Streuexperimente mit sehr kleinen Zählraten nicht geeignet waren. Auch durch Reduktion der Dicke dieser

Szintillatoren konnte der γ -Untergrund nicht genügend unterdrückt werden.

Verwendet wurden schließlich etwa 0,5 mm dicke Zinksulfidscheiben, die mit Ag aktiviert sind und Li^6F als Neutronenabsorber enthalten. Dieser Detektortyp ist zuerst von Stedman [87] beschrieben worden und ist heute kommerziell unter der Bezeichnung NE 421 (Nuclear Enterprises) erhältlich. Die Szintillatorscheiben haben einen Durchmesser von 5". Sie wurden mit einem hochviskosen Siliconöl auf der Eintrittsfläche von Photomultipliern mit ebenfalls 5" Durchmesser befestigt. Verwendet wurden 10-stufige Multiplier vom Typ Dumont 6364. Über einen Emitterfolger, Verstärker und Integraldiskriminator wurden die Impulse in der üblichen Weise weiterverarbeitet.

Szintillator, Multiplier, zugehöriger Spannungsteiler und Emitterfolger sind in einem geschlossenen Meßkopf untergebracht.

Ein wesentlicher Nachteil des Zinksulfidszintillators ist die schlechte optische Transparenz, die zu einem breiten, von der Einfallenergie der Neutronen abhängigen Impulshöhenspektrum führt. Obwohl Zinksulfid relativ unempfindlich für γ -Strahlen ist, muß beim Nachweis sehr kleiner Neutronenintensitäten die Diskriminatorschwelle so hochgelegt werden, daß die mit diesem Detektor im Prinzip erreichbare Empfindlichkeit für Neutronen nicht ausgenutzt werden kann. Begrenzend wirkt sich in dieser Richtung auch das Rauschen des Photomultipliers aus. Arbeiten über die Trennung von Neutronenpulsen von γ -Impulsen und eventuell auch Rauschimpulsen sind im Gange.

3.4 Flugzeitanalysator

Als Flugzeitanalysator wurde eine TMC 4096-Kanal-Analysator* mit Magnetkernspeicher und einer Speicherkapazität von 10^5 Ereignissen pro Kanal verwendet. Die Eingangseinheit (TF 16) erlaubt es, bis zu 16 unabhängige Detektoren anzuschließen. Jedem Eingang sind 256 Zeitkanäle zugeordnet.

*) Dieser Analysator wurde von der Firma Technical Measurement Corporation North Haven, Conn., USA nach unseren Vorschlägen entwickelt und gebaut.

Die Kanalbreite ist in binären Schritten von 0,5 bis 64 μ sec wählbar. Der nach Eintreffen des Triggersignals beginnende aktive Meßzyklus von 256 Kanälen kann in Schritten von 128 Kanälen um maximal 1024 Kanäle verzögert werden.

Die Totzeit des Analysators beträgt 16 μ sec, sie ist im wesentlichen durch die Zykluszeit des Kernspeichers bestimmt. Die Registrierung der Ereignisse erfolgt nach einem "first come - first served" - Prinzip. Wenn innerhalb von 16 μ sec an der Eingangseinheit mehrere Ereignisse gemeldet werden, wird nur das erste berücksichtigt. Dabei ist es gleichgültig, ob diese Ereignisse nur an einem oder an verschiedenen Detektoren stattfinden. Eine Antikoinzidenzschaltung vermeidet Fehlentscheidungen beim "gleichzeitigen" Eintreffen von Ereignissen. Liegen zwei Ereignisse zeitlich weniger als 0,1 μ sec auseinander, dann werden beide verworfen. Eine automatische Zeitkorrektur sorgt dafür, daß pro Meßzyklus (256 aktive Zeitkanäle) mehrere Ereignisse registriert werden können, wenn sie nur mehr als 16 μ sec auseinander liegen. Ein 5"-Oszilloskop ermöglicht eine analoge Kontrolle der gespeicherten Information. Der gesamte Speicherinhalt kann in weniger als 10 min auf Lochstreifen ausgeschrieben werden (50 Charakter/sec 7 Spuren, BCD-Code). Ein Blockschaltbild der verwendeten Elektronik zeigt die Abb. 4.

4. Theorie des Drehkristall-Flugzeit-Spektrometers

4.1 Primäre Energieauflösung

In erster Näherung ist die primäre Energieauflösung des rotierenden Kristallspektrometers durch die geometrische Kollimation α_g vor und hinter dem Kristall gegeben. Aus der Bragg-Bedingung folgt

$$\frac{\Delta E}{E} = \sqrt{2} \alpha_g \cotg \theta \quad (11)$$

$\alpha_g = b/l$ (b = Breite, l = Länge eines Kollimatorschlitzes)

θ = Bragg-Winkel, $\sin^2 \theta = h^2 / (8 m d^2 E)$

m, E sind Masse und Energie des Neutrons.

Diese primäre Energieauflösung kann durch Verkleinerung von α_g oder von d verbessert werden. Die letzte Möglichkeit ist aber durch die kleine Zahl der geeigneten Einkristalle verhältnismäßig eingeschränkt. Die Verkleinerung von α_g ist vor allem aus Intensitätsgründen begrenzt.

Beim rotierenden Kristall wird die primäre Energieauflösung zusätzlich durch einen Doppler-Effekt beeinflusst [37]. Dieser Effekt wird am besten im Geschwindigkeitsraum veranschaulicht (Abb. 5).

In der Abb. 5 sind v_0 und v_1 die Geschwindigkeiten der einfallenden und reflektierten Neutronen im Falle des ruhenden Kristalles ($|v_0| = v$), θ ist der zugehörige Bragg-Winkel. Es gilt in diesem Falle:

$$v_0 = v_1 \text{ und } |v_0 - v_1| = \frac{h}{md} \text{ (Bragg-Bedingung)} \quad (12)$$

Im bewegten Bezugssystem (rotierender Kristall, durch + gekennzeichnet) muß die Bragg-Bedingung auch erfüllt sein, wenn die Neutronen reflektiert werden sollen. Neutronen, die im Laborsystem die Geschwindigkeit v_0 haben, werden dann offenbar unter einem anderen Bragg-Winkel reflektiert. Im bewegten Bezugssystem muß deshalb gelten:

$$|v_0^+ - v_1^+| = \frac{h}{md} \quad , \quad v_0^+ \neq v_0 \quad (13)$$

Nun ist aber im Laborsystem durch die Kollimatoren ein bestimmter Winkel (2θ) zwischen einfallendem und ausfallendem Strahl festgelegt. Ungehindert durch den zweiten Kollimator kommen deshalb nur Neutronen, die auch am drehendem Kristall ihre Richtung um 2θ ändern und deren Einfalls- und Ausfallsrichtung im Laborsystem mit der Kollimationsrichtung übereinstimmen.

Man sieht anhand der Abb. 5 leicht ein, daß eine Geschwindigkeitskomponente eines beliebigen Kristallpunktes parallel zu den reflektierenden Netzebenen bei idealer Kollimation keinen Beitrag liefern kann, da $2\theta' \neq 2\theta$. (Im Falle des drehenden Kristalles werden die Größen im Laborsystem durch einen Strich gekennzeichnet). Eine Geschwindigkeitskomponente senkrecht zu den Netzebenen erlaubt es jedoch, die oben genannten Bedingungen zu erfüllen. Es gilt dann aber $v_0' \neq v_1'$ und es tritt - verglichen mit dem stationären Fall - eine zeitliche Verschiebung der Reflexion ein, die in der Abb. 5 durch die Winkeldrehung φ angedeutet ist.

Wird berücksichtigt, daß $v_K \ll v_0$, dann können aus der Abb. 5 folgende Näherungen abgeleitet werden:

$$\begin{aligned}
 v'_1 &= v_0 \pm v_{K\perp} \sin \theta \\
 v'_0 &= v_0 \mp v_{K\perp} \sin \theta \\
 \varphi &= \pm \frac{v_{K\perp}}{v_0} \cos \theta
 \end{aligned}
 \tag{14}$$

Das obere Vorzeichen gilt, wenn $\text{sign}(v_0 v_K)$ positiv, das untere, wenn dieser Ausdruck negativ ist. φ positiv, heißt, die Reflexion erfolgt später, als dies ohne Geschwindigkeitsänderung der Fall wäre (und umgekehrt). Wenn die bei gegen null gehender Winkelgeschwindigkeit ω_K reflektierten Neutronen der Geschwindigkeit v_0 zur Zeit $t_0 = \frac{L}{v_0}$ an der Streuprobe ankommen, dann kommen die bei endlichem ω_K reflektierten Neutronen der Geschwindigkeit v'_1 zur Zeit

$$t_1 = \frac{L}{v'_1} \pm \frac{v_{K\perp} \cos \theta}{\omega_K v_0} \approx \frac{L}{v_0} \left(1 \mp \frac{v_{K\perp}}{v_0} \sin \theta \right) \pm \frac{v_{K\perp}}{\omega_K v_0} \cos \theta
 \tag{15}$$

an der Streuprobe an. L ist dabei der Abstand Kristall-Streuprobe.

Mit $t_1 - t_0 = \Delta t$ und $v_{K\perp} = \omega_K x$ folgt

$$\Delta t \approx \mp Lx \frac{\omega_K \sin \theta}{v_0^2} \pm \frac{x}{v_0} \cos \theta
 \tag{16}$$

x ist der Abstand des betrachteten Kristallpunktes von der Drehachse.

4.2 Sekundäre Auflösung

Die zeitliche Breite des Neutronenpulses an der Streuprobe wird durch mehrere Parameter, z.B. durch geometrische Kollimation α_g , Netzebenenabstand d , Mosaikstruktur β_K , endliche Kristallabmessungen und Winkelgeschwindigkeit ω_K bestimmt. Wir vernachlässigen zunächst die geometrische Ausdehnung des Kristalles und damit auch den Doppler-Effekt und berechnen den Einfluß der anderen Parameter auf die Linienbreite unter folgenden Annahmen:

$$\begin{aligned}
 \text{Transmission des 1. Kollimators: } I(\vartheta_1) &= I_0 e^{-\left(\frac{\vartheta_1}{\alpha_1}\right)^2} \\
 \text{Transmission des 2. Kollimators: } A(\vartheta_2) &= e^{-\left(\frac{\vartheta_2}{\alpha_1}\right)^2} \\
 \text{Kristallreflektivität: } R(\eta) &= R_0(B', a) e^{-\left(\frac{\eta}{B'}\right)^2}
 \end{aligned}
 \tag{17}$$

Es gilt: $\alpha' = \frac{\alpha_g}{2\sqrt{\ln 2}}$, $\beta' = \frac{\beta_K}{2\sqrt{\ln 2}}$.

$R_0(\beta', a)$ ist die maximale Reflektivität für Neutronen der interessierenden Energie, a ein Parameter für die Kristallabmessungen. Die Bedeutung der Winkel ϕ_1 , ϕ_2 und η ist aus der Abb. 6 ersichtlich, die dort noch auftretende Winkelvariable γ gibt die Drehung des Kristalles gegenüber einer Nulllage an. Alle Variablen sollen sich im positiven Sinn ändern, wenn sie den Bragg-Winkel vergrößern.

Gemäß Abb. 6 wird ein beliebiger Strahl unter dem Winkel

$$\theta' = \theta + \phi_1 + \eta + \gamma \quad (18)$$

reflektiert. θ ist der zu dem Strahl mit den Parametern $\phi_1 = 0$, $\eta = 0$ gehörende Bragg-Winkel. Wir führen die Abkürzung $\sigma' = \theta' - \theta$ ein und bekommen damit folgenden Zusammenhang zwischen den Variablen

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \sigma' - \eta - \gamma, \quad \phi_2 = \sigma' + \eta + \gamma \\ d\phi_1 &= -d\eta \quad \text{für festes } \sigma' \text{ und } \gamma \end{aligned} \quad (19)$$

Für die Intensität in einer bestimmten Richtung gilt bei festem γ näherungsweise:

$$I(\gamma, \sigma') \approx I_0 R_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp - \left\{ \left(\frac{\sigma' - \eta - \gamma}{\alpha'} \right)^2 + \left(\frac{\eta}{\beta'} \right)^2 + \left(\frac{\sigma' + \eta + \gamma}{\alpha'} \right)^2 \right\} d\eta \quad (20)$$

$$= C \exp - \left\{ \frac{2\sigma'^2}{\alpha'^2} + \frac{2\gamma^2}{\alpha'^2 + 2\beta'^2} \right\} \quad (21)$$

$$\text{mit } C = \frac{I_0 R_0 \sqrt{\pi}}{\sqrt{\left(\frac{2}{\alpha'^2} + \frac{1}{\beta'^2} \right)}}$$

Rotiert der Kristall jetzt mit einer Winkelgeschwindigkeit ω_K , dann kann offenbar für die Zahl der Neutronen, die im Zeitintervall $\frac{\gamma}{\omega_K} \dots \frac{\gamma}{\omega_K} + d\left(\frac{\gamma}{\omega_K}\right)$ in das Winkelintervall $\sigma' \dots \sigma' + d\sigma'$ fliegen, geschrieben werden:

$$dI = I\left(\frac{\gamma}{\omega_K}, \sigma'\right) d\left(\frac{\gamma}{\omega_K}\right) d\sigma' \quad (22)$$

In der folgenden Diskussion wird nur die Länge der Flugstrecke L vom Kristall bis zur Streuprobe berücksichtigt.

Neutronen, die gerade unter dem Bragg-Winkel Θ reflektiert werden und die Geschwindigkeit v haben, brauchen offenbar für die Strecke L eine Zeit

$$t_0 = \frac{L}{v} = \frac{L\lambda m}{h} = \frac{2Lmd}{h} \sin \Theta \quad (23)$$

($\lambda = \frac{h}{mv} = 2d \sin \Theta$, zu Θ gehören $\delta = 0$, $\gamma = 0$).

Die Neutronen kommen t_0 Zeiteinheiten, nachdem der Kristall die Bragg-Stellung erreicht hat, an der Streuprobe an. Neutronen der gleichen Geschwindigkeit v , die schon reflektiert wurden bevor der Kristall die Bragg-Lage erreicht hat, kommen früher an, und zwar wenn der Kristall zur Zeit der Reflexion den γ mit der Bragg-Lage bildet zur Zeit $t_0 - \frac{\gamma}{\omega_K}$. Werden die Neutronen dagegen unter dem gleichen Winkel nach dem Durchlaufen der Bragg-Lage reflektiert, kommen sie erst zur Zeit $t_0 + \frac{\gamma}{\omega_K}$ an der Streuprobe an.

Neutronen mit einer von v abweichenden Geschwindigkeit entsprechen einem von $\delta = 0$ abweichenden δ oder einem

$$\Delta t_\delta = \delta \frac{2m}{h} dL \cos \Theta \quad (24)$$

Fassen wir beide Effekte zusammen und berücksichtigen wir die oben getroffene Vorzeichenwahl, so ergibt sich für Neutronen, die in der Winkelstellung $\delta \dots \delta + d\delta$ reflektiert werden und die in das Winkелеlement $\delta \dots \delta + d\delta$ fliegen, für die Strecke L eine Flugzeit

$$t_{\delta\delta} = t_0 - \frac{\gamma}{\omega_K} + K\delta \quad (25)$$

$K = \frac{2md}{h} L \cos \Theta$, das Vorzeichen von ω_K ist positiv für $\gamma > 0$ und die Drehrichtung, die δ verkleinert.

Mit $\Delta t = t_{\delta\delta} - t_0$ wird aus (25)

$$\delta = \frac{\Delta t}{K} + \frac{\gamma}{\omega_K K} \quad (26)$$

und $d\delta = \frac{d\Delta t}{K}$ (γ, ω_K fest)

Mit (21) und (26) wird aus (22) folgender Ausdruck:

$$I\left(\frac{\gamma}{\omega_K}, \Delta t\right) d\left(\frac{\gamma}{\omega_K}\right) d\Delta t = \frac{C}{\omega_K^2} \exp \left\{ -\frac{2\left(\frac{\Delta t}{K} + \frac{\gamma}{\omega_K K}\right)^2}{\alpha'^2} + \frac{2\gamma^2}{\alpha'^2 + 2\beta'^2} \right\} d\gamma d\Delta t \quad (27)$$

Die Integration über γ ergibt nach einigen Umformungen

$$I(\Delta t) = \frac{I_0 R_0 \pi \alpha'^2 \beta'}{\left\{ 2\left[\alpha'^2 (1 + \omega_K^2 K^2) + 2\beta'^2 \right] \right\}^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{2\omega_K^2 (\Delta t)^2}{\alpha'^2 (1 + \omega_K^2 K^2) + 2\beta'^2} \right\} \quad (28)$$

Aus (28) folgt, daß die maximale Intensität im Impuls quadratisch mit der Kollimation α_g und angenähert linear mit β_K (R_0 hängt schwach von β_K ab) geht.

Die Integration über Δt ergibt die Gesamtintensität J im Puls.

$$J = \frac{\pi^{3/2}}{2} I_0 R_0 \alpha'^2 \beta' \omega_K^{-1} \quad (29)$$

Die Intensität im Puls ist der Winkelgeschwindigkeit umgekehrt proportional. In dieser Näherung ist die Intensität pro Zeiteinheit unabhängig von der Drehzahl, wenn die Zahl der Umdrehungen pro Zeiteinheit groß gegen eins ist. Messungen haben eine schwache Abhängigkeit der Intensität von der Drehzahl erbracht. Die Ursache dieses Effektes ist noch nicht geklärt.

Aus (28) folgt die zeitliche Halbwertsbreite des Pulses:

$$\Delta t_{1/2} = \sqrt{\frac{\ln 2}{2}} \left[\frac{\alpha'^2 - 2\beta'^2}{\omega_K^2} - \alpha'^2 K^2 \right]^{1/2}$$

oder, wenn wir die volle Halbwertsbreite mit τ bezeichnen:

$$\tau = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{\alpha_g^2 + 2\beta_K^2}{\omega_K^2} + \alpha_g^2 K^2 \right]^{1/2} \quad (30)$$

(30) kann aufgespalten werden in einen Term τ_{ω_K} , der von der Winkelgeschwindigkeit abhängt und einen nur von geometrischen Größen abhängenden Term τ_L . Wird der Ausdruck K wieder eingesetzt, schreiben sich diese Größen

$$\tau_{\omega_K} = \left[\frac{\alpha_g^2 + 2\beta_K^2}{2\omega_K^2} \right]^{1/2}, \quad \tau_L = \frac{\sqrt{2}}{h} \text{ md } \alpha_g L \cos \varrho \quad (31)$$

Mit $\omega_K \rightarrow \infty$ geht $\tau_{\omega_K} \rightarrow 0$, mit $L \rightarrow 0$ geht $\tau_L \rightarrow 0$

Hat der Kristall eine endliche Ausdehnung, macht sich diese in der zeitlichen Breite des Pulses einmal direkt zum anderen aber auch über den Doppler-Effekt bemerkbar. Man kann nun eine weitere Größe τ_D einführen, die von der speziellen Geometrie des Kristalles abhängt, die die oben genannten Effekte berücksichtigt, auf die wir hier aber nicht näher eingehen wollen. Für die zeitliche Breite des Pulses können wir schließlich näherungsweise schreiben:

$$\tau^2 = \tau_{w_K}^2 + \tau_L^2 + \tau_D^2 \quad (32)$$

Zur Veranschaulichung der praktischen Bedeutung der in diesem Abschnitt diskutierten Effekte sind in der Abb. 7 die Quadrate der für den Al-Kristall am Ort der Streuprobe gemessenen Halbwertsbreiten τ als Funktion des reziproken Quadrates der Winkelgeschwindigkeit dargestellt. Die eingezeichneten Kurven wurden mit den Werten $\alpha_g = 9,9 \cdot 10^{-3}$, $\theta = 29,33^\circ$, $R_K = 3,78 \cdot 10^{-3}$, $L = 200$ cm, $d = 2,32 \cdot 10^{-8}$ cm und der Beziehung (32) berechnet.

5. Meß- und Auswertverfahren

5.1 Flußkarte

Um die Zahl der auf die verschiedenen Streuproben fallenden Neutronen bei sonst fester Anordnung einfach angeben zu können, wird am Ort der Streuprobe eine sogenannte Flußkarte aufgenommen. Das heißt mit einem mit geeignetem Fenster versehenen BF_3 -Zählrohr wird in einer Ebene senkrecht zum Strahl sowohl horizontal als auch vertikal die Intensitätsverteilung im einfallenden Strahl ausgemessen. Die Empfindlichkeit ϵ_F des Flußkartenzählrohrs wird mit einer von Beckurts [9] angegebenen Näherungsformel berechnet.

$$\epsilon_F \approx \frac{\pi}{2} \Sigma R \left\{ 1 - \frac{8}{3\pi} \Sigma R + \frac{1}{2} \Sigma^2 R^2 \right\} \quad (33)$$

Hier bedeuten: Σ = makroskopischer Absorptionsquerschnitt der BF_3 -Füllung des Rohres, R = Zählrohrradius, ϵ_F die über den Rohrquerschnitt gemittelte Empfindlichkeit. Absorptions- und Streueffekte in der Rohrwand werden durch Korrekturen näherungsweise berücksichtigt. Für das in einer großen Zahl von Messungen verwendete BF_3 -Rohr vom Typ RSN-86 A (Reuter-Stokes) wurde bei einer Neutronenenergie von 0,0592 eV für ϵ_F der Wert 0,0468 berechnet. Als Beispiel ist

das Ergebnis einer solchen Flußkartenmessung in der Abb. 8 veranschaulicht. Die dort angegebenen Zählraten wurden für eine konstante Zahl von Rotorumdrehungen oder Triggersignalen bestimmt. Die in die Fig. 8 eingezeichneten gestrichelten Kurven geben die Ankunftszeit der monochromatischen Neutronen am Ort der Streuprobe an. Im horizontalen Diagramm ist der Effekt der endlichen Auflösung deutlich zu erkennen. Positive Abszissen im horizontalen Diagramm entsprechen größeren Bragg-Winkeln und damit kleineren Energien, die Neutronen fallen in spätere Zeitkanäle. In vertikaler Richtung ist dieser Effekt vernachlässigbar. Strichpunktiert ist in der Abb. 9 der in den Streuversuchen maximal ausgenutzte Bereich eingetragen.

In Vergleichsmessungen werden die Zählraten für eine charakteristische Flußkartenposition und das Monitorzählrohr M1 verglichen. Die vom M1 während des Streuexperiments registrierten Impulsraten liefern damit ein eindeutiges Maß für die insgesamt auf die Probe gefallene Zahl von Neutronen.

5.2 Bestimmung der Detektorempfindlichkeit

Dem Vorteil der $\text{Li}^6\text{F-ZnS}$ -Szintillatoren, einen kleineren Fehler in der Flugzeit zu verursachen als BF_3 -Rohre gleicher Empfindlichkeit, stehen einige Nachteile gegenüber. Da die Detektorschicht für das im Szintillationsprozeß entstehende Licht nicht transparent ist, wird das in verschiedenen Schichttiefen entstehende Licht verschieden stark geschwächt. Die Energieabhängigkeit der Empfindlichkeit eines solchen Detektors wird von der eines BF_3 -Zählrohrs, die in wesentlichen durch den $(1/v)$ -Verlauf des B^{10} -Absorptionsquerschnittes gegeben ist, erheblich abweichen.

In guter Näherung kann für die Empfindlichkeit des ZnS-Detektors geschrieben werden [10]:

$$\epsilon(t) = C't \frac{e^{-Ft} - e^{-\mu t}}{\mu - Ft} \quad (34)$$

(F = Absorptionskoeffizient für Neutronen im Li^6 , μ = Absorptionskoeffizient des Szintillationslichtes, t = Flugzeit der Neutronen in $\mu\text{sec/m}$. C' ist ein Proportionalitätsfaktor).

Während sich F in einfacher Weise aus dem bekannten Li^6 -Gehalt der Scheiben berechnen läßt, müssen C' und μ experimentell bestimmt werden.

Zur Bestimmung von C' und μ werden Streuexperimente mit Neutronen verschiedener Einfallenergie am Vanadium durchgeführt. Der Einfluß der endlichen Dicke der Vanadiumprobe auf die gestreute Intensität wird korrigiert. Multiplikation der gemessenen Intensitäten mit den folgenden Faktoren ergibt die gewünschte Korrektur:

$$K_1 = \frac{Nd' \left\{ \frac{\sigma_T}{\sin \vartheta} + \frac{\sigma_a}{\sin(\varphi_v - \vartheta)} \right\}}{1 - e^{-Nd' \left\{ \frac{\sigma_T}{\sin \vartheta} + \frac{\sigma_a}{\sin(\varphi_v - \vartheta)} \right\}}} \quad \varphi_v \geq \vartheta$$

$$K_2 = K_1 e^{-\frac{\sigma_a Nd'}{\sin(\varphi_v - \vartheta)}} \quad \varphi_v \leq \vartheta$$

(35)

Hier bedeuten:

ϑ = Winkel zwischen dem einfallenden Strahl und der Streuprobe,

φ_v = Winkel zwischen dem einfallenden Strahl und der Richtung der gestreuten Neutronen,

N = Zahl der Vanadiumatome pro cm^3 ,

d' = Dicke der Vanadiumstreuprobe,

σ_T = totaler Wirkungsquerschnitt des Vanadiums für die einfallenden Neutronen,

σ_a = Absorptionsquerschnitt für die gestreuten Neutronen.

In der Korrektur (35) wurde in erster Näherung nur elastische Streuung angenommen. Vanadium wurde als Streustandard verwendet, weil es nahezu vollständig inkohärent streut und die Winkelabhängigkeit des elastischen und des totalen Streuquerschnittes einfach berechnet werden können.

Für Neutronenenergien $< 0,03$ eV wird in guter Näherung der elastische Streuquerschnitt zur Beschreibung der Streuung benutzt, inelastische Effekte können vernachlässigt werden:

$$\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} = \frac{\sigma_b}{4\pi} e^{-2W} \quad (36)$$

e^{-2W} ist dabei der Debye-Waller-Faktor.

Für σ_b wurde mit 5,13 barn und für die Debyetemperatur mit einem Wert von 399°K gerechnet. Für Neutronenenergien $> 0,03$ eV wird eine

von Placzek [11] angegebene Näherung für die Winkelabhängigkeit des totalen Streuquerschnittes benutzt:

$$\frac{d\sigma_s}{d\Omega} = \frac{\sigma_b}{4\pi} \left\{ 1 - \frac{2}{A} (1 - \cos\varphi_v) \right\} \quad (37)$$

A = Atomgewicht des Vanadiums.

Im Übergangsbereich ist die Übereinstimmung der mit beiden Auswertemethoden erzielten Ergebnisse befriedigend.

In der Abb. 9 sind die Ausdrücke (36) und (37) veranschaulicht. Abb. 10 gibt einige typische Ergebnisse für die Energieabhängigkeit der Detektorempfindlichkeit wieder. Kurve a gilt für eine Bank aus BF_3 -Rohren, die Kurven b und c für $\text{Li}^6\text{F-ZnS}$ -Szintillatoren.

5.3 Umrechnung der rohen Streudaten

Der erste Schritt bei der Auswertung der rohen Meßergebnisse besteht darin, den Zeitkanälen Energie- und Impulsänderungen zuzuordnen, die Untergrundkorrektur durchzuführen und die in den einzelnen Kanälen registrierten Zählraten in differentielle Streuquerschnitte und Streugesetzwerte umzurechnen.

Wir unterscheiden die zu verschiedenen Streuwinkeln gehörenden Detektoren durch einen Index v, die verschiedenen, einem Detektor zugeordneten Zeitkanäle durch den Index i. Die Zahlen der zu einer Messung gehörenden Datenblöcke erhalten die Bezeichnungen A_{vi} (Streuung) und B_{vi} (Untergrundmessung).

Zunächst werden die Kanalnummern in physikalischer Größe verwandelt:

$$t_{vi} = (i - i_{vo}) \Delta t_v \quad \begin{array}{l} i > i_{vo} \text{ für } i_{vo} > 0 \\ i > 0 \text{ für } i_{vo} < 0 \end{array} \quad (38)$$

$$(\overline{nw})_{vi} = P_1' \left(\frac{1}{t_{vi}^2} - \frac{1}{t_o^2} \right) \quad (39)$$

$$x_{vi} = P_2' \left(\frac{1}{t_o^2} + \frac{1}{t_{vi}^2} - \frac{2}{t_o t_{vi}} \cos\varphi_v \right)^{1/2} \quad (40)$$

Dabei bedeuten:

i_{vo} = Startzeit der Neutronen an der Streuprobe.

- Δt_v = Zeitauflösung des Analysators in $\mu\text{sec/m}$,
 t_{vi} = Flugzeit der in den i -ten Kanal des Detektors v fallenden Neutronen in $\mu\text{sec/m}$
 t_0 = Flugzeit der einfallenden monochromatischen Neutronen in $\mu\text{sec/m}$
 $(\hbar\omega)_{vi}$ = Energieänderung für Kanal vi
 κ_{vi} = Impulsänderung für Kanal vi
 P_1', P_2' = Konstanten, die von den für Energie- und Impulsänderung gewählten Einheiten abhängen
 φ_v = Winkel des v -ten Detektors relativ zum einfallenden Strahl.

Eine Subroutine berechnet für jeden Kanal die zugehörige Detektorempfindlichkeit (Formel (34)). In der weiteren Rechnung werden nur noch solche Kanäle vi berücksichtigt, für die $i > \text{Max}(i_{v0}, 0)$ ist.

$$H_{vi} = A_{vi} - V_v B_{vi} \quad (41)$$

V_v ist das Verhältnis der in Streu- und Untergrundmessung auf die Probe gefallenen Zahl von Neutronen.

Für den schon im monochromatischen Strahl auftretenden unkorrelierten Untergrund ist eine weitere Korrektur notwendig. Da dieser Untergrund nahezu zeitunabhängig ist, genügt eine lineare Approximation. Die Mittelwerte von H_{vi} für zwei vorgegebene Zeitintervalle werden berechnet und aus diesen wird d_{vi} als lineare Funktion von t_{vi} bestimmt. In den nächsten Schritten werden dann gerechnet:

$$I_{vi} = \frac{H_{vi} - d_{vi}}{\epsilon_{vi}} \quad (42)$$

$$\left(\frac{\Delta\sigma}{\Delta\Omega\Delta t}\right) = \frac{I_{vi}}{\Delta\Omega_v N n \Delta t_v} \quad (43)$$

$$S_{vi} = P_3' \frac{t_{vi}^4}{t_0} e^{-\frac{(\hbar\omega)_{vi}}{2k_B T}} \left(\frac{\Delta\sigma}{\Delta\Omega\Delta t}\right)_{vi} \quad (44)$$

Hier bedeuten:

N = Zahl der Moleküle/ cm^2

n = Zahl der insgesamt auf die Streuprobe gefallenen Neutronen

$\Delta\Omega_v$ = Vom Detektor v erfaßter Raumwinkel

k_B = Boltzmannsche Konstante

T = Temperatur in $^\circ$ Kelvin

P_3' = von P_1' und P_2' abhängige Konstante.

Ein Beispiel einer solchen Umrechnung roher Streudaten ist in der Abb. 11 dargestellt. Kurve a zeigt die direkten Meßergebnisse, b die daraus berechneten Wirkungsquerschnitte und c schließlich die Streugesetzerte.

5.4 Auflösungskorrektur

Die Betrachtungen des Abschnittes 4 machen verständlich, daß mit den z. Zt. verfügbaren Neutronenintensitäten primäre und sekundäre Energieauflösung nicht so gut gemacht werden können, daß ihr Einfluß auf die Meßergebnisse vernachlässigt werden könnte. Aus Intensitätsgründen muß ein Kompromiß geschlossen werden. Eine unvollkommene Energieauflösung verfälscht aber die Meßergebnisse besonders bei höheren Einfallenergien und kleineren Streuwinkeln merklich. Zur Abschätzung und eventuellen Korrektur dieser Effekte wurde ein FORTRAN-Programm geschrieben, das nun kurz erläutert werden soll.

Eine wesentliche Vereinfachung des recht komplizierten Problems der Auflösungskorrektur wurde mit folgenden Annahmen erzielt.

- a) Die Verteilung der einfallenden Neutronen über t bzw. auch über E ist eine Normalverteilung.
- b) Sowohl die gemessene, als auch die bei idealer Auflösung zu erwartende Verteilung der gestreuten Neutronen lassen sich durch analytische Ausdrücke der folgenden Form beschreiben.

$$y(t) = F_1 e^{-\frac{(t-P_2)^2}{F_3}} + F_4 t - F_5 \quad (45)$$

F_1 bis F_5 sind Parameter, die z.B. durch Anpassung an die Meßkurve bestimmt werden. Während Annahme a) im allgemeinen gut erfüllt ist, ist b) oft nur eine grobe Näherung, die nur für kleine Werte $(t - P_2)$ vertretbar ist.

Sind die Konstanten in (45) bekannt und ist $F_6/2$ die Varianz der Einfallverteilung, gegeben, lassen sich gemessene und Einfallverteilung entfalten.

Für die Differenz der gemessenen und der wahren Funktionswerte ergibt sich aus einer einfachen Rechnung:

$$\bar{\delta}(t) = P_1 \left\{ \sqrt{\frac{P_3}{P_3 - P_6}} e^{-\frac{(t-P_2)^2}{P_3 - P_6}} - e^{-\frac{(t-P_2)^2}{P_3}} \right\} \quad (46)$$

Die Anpassung der Funktion $y(t)$ an die experimentelle Kurve wird nach der Gaußschen iterativen Methode der kleinsten Fehlerquadrate [12] wie folgt durchgeführt.

Sind N' Zahlenpaare (t_i, y_i) ($i = 1$ bis N') aus der Messung bekannt, dann besteht die Aufgabe darin, die Größe

$$Q = \sum_{i=1}^{N'} (y_i - y(t_i))^2 \quad (47)$$

zu einem Minimum zu machen.

Zunächst wird angenommen, es existiere ein Satz z.B. geschätzter P_j^0 ($j = 1$ bis 5). $y(t)$ wird in eine Potenzreihe um die P_j^0 entwickelt. Wird diese Reihe nach den Gliedern erster Ordnung abgebrochen und für die Differenz $P_j - P_j^0$ die Abkürzung ΔP_j eingeführt, dann gilt für $y(t)$:

$$y(t, P_1 \dots P_5) \approx y(t, P_1^0 \dots P_5^0) + \sum_{j=1}^5 \frac{\partial y}{\partial P_j} \Delta P_j \quad (48)$$

Durch Abbruch der Entwicklung nach den Gliedern erster Ordnung haben wir eine Linearisierung des Problem es erzwungen. (48) wird in (47) eingesetzt. Damit Q zum Minimum wird, müssen die partiellen Ableitungen von Q bezüglich der ΔP_j einzeln gleich Null sein. Das sich ergebende System von 5 inhomogenen linearen Gleichungen für die ΔP_j lautet:

$$\frac{\partial Q}{\partial (\Delta P_j)} = 0 = -2 \sum_i (y_i - y(t_i, P_1 \dots P_5)) \left(\frac{\partial y(t_i, P_1 \dots P_5)}{\partial (\Delta P_j)} \right) \quad (49)$$

($j = 1$ bis 5)

Die ΔP_j ergeben sich als Lösungen des Gleichungssystem es (49). Die Anfangsschätzungen P_j^0 werden um die ΔP_j verbessert.

$$P_{j\text{neu}}^0 = P_{j\text{alt}}^0 + \Delta P_j \quad (50)$$

Mit den $P_{j\text{neu}}^0$ wird (49) erneut gelöst usw. Die Iteration wird abgebrochen, wenn die ΔP_j einen vorgegebenen kleinsten Wert unter-

schreiten oder wenn eine vorgegebene Zahl von Iterationsschleifen überschritten wird.

Mit den auf diese Weise bestimmten P_j werden für die gegebenen t_i die zugehörigen $y(t_i)$ und $\bar{\sigma}(t_i)$ berechnet.

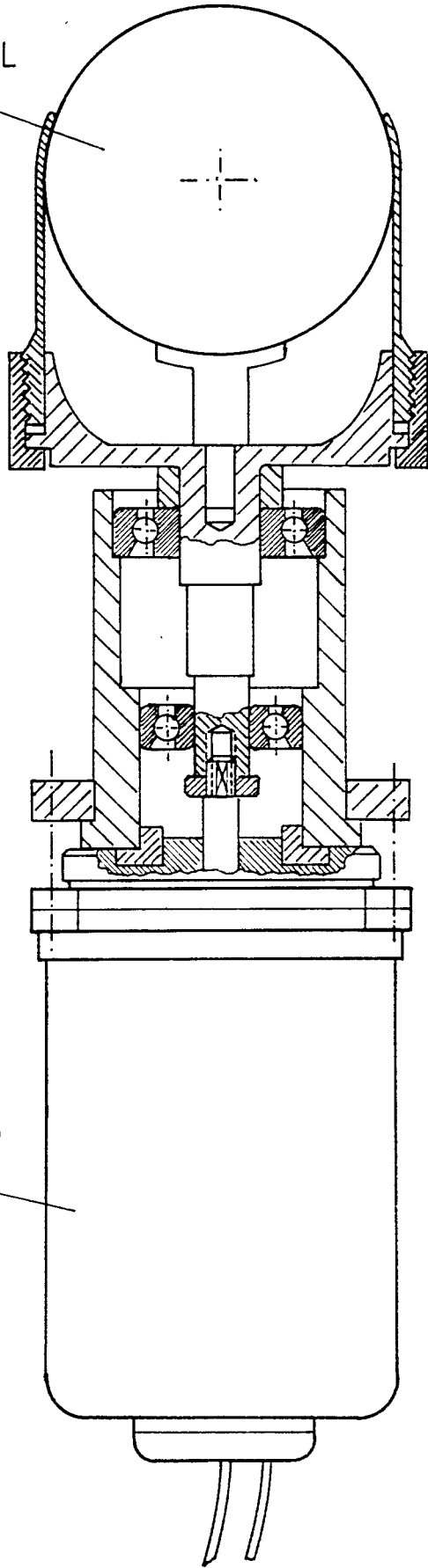
Das Ergebnis einer nach diesem Schema ausgeführten Auflösungskorrektur zeigt Abb. 12. Der von der Faltung zweier Gaußverteilungen her bekannte Effekt des "Auffüllens" der Flanken ist deutlich zu erkennen.

Der Autor möchte an dieser Stelle vor allem den Herren Dipl.-Ing. H. Ripfel und Dipl.-Phys. G. Ehret für die wertvolle Hilfe beim Aufbau der experimentellen Anordnung danken. Die Hilfsbereitschaft der Abteilungen DIORIT und AF des Eidgenössischen Instituts für Reaktorforschung hat wesentlich zum Gelingen der Arbeit beigetragen.

Literatur:

- [1] Brugger, R. M. und Evans, J. E.: Nucl. Instr. Meth. 12 (1961) 75.
- [2] Egelstaff, P. A., Cocking, S. J. und Alexander, T. K.: "Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids", IAEA, Wien (1961) 165.
- [3] Brockhouse, B. N.: "Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids", IAEA, Wien (1961) 113.
- [4] O'Connor, D. A.: Nucl. Instr. Meth. 8 (1960) 244.
- [5] Gläser, W.: "Neutron time-of-flight Methods", EANDC, Brüssel (1961) 301.
- [6] Helm, F.: unveröffentlicht.
- [7] Sailor, V. L. et al.: Rev. Scient. Instr. 27 (1956) 26.
- [8] Stedman, R.: AECL-1035 (1960).
- [9] Beckurts, K. H.: Habilitationsschrift, Karlsruhe (1960).
- [10] Harris, D., Duffil, C.: "Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids" Vol. I, IAEA, Wien (1963) 171.
- [11] Placzek, G.: Phys. Rev. 86 (1952) 377.
- [12] Mc Williams, P., Hall, W. S. und Wegner, H. E.: Rev. Scient. Instr. 33 (1962) 70.

ALUMINIUMKRISTALL



HYSTERESIS MOTOR

ABB. 1

AUFBAU DES KRISTALLCHOPPERS

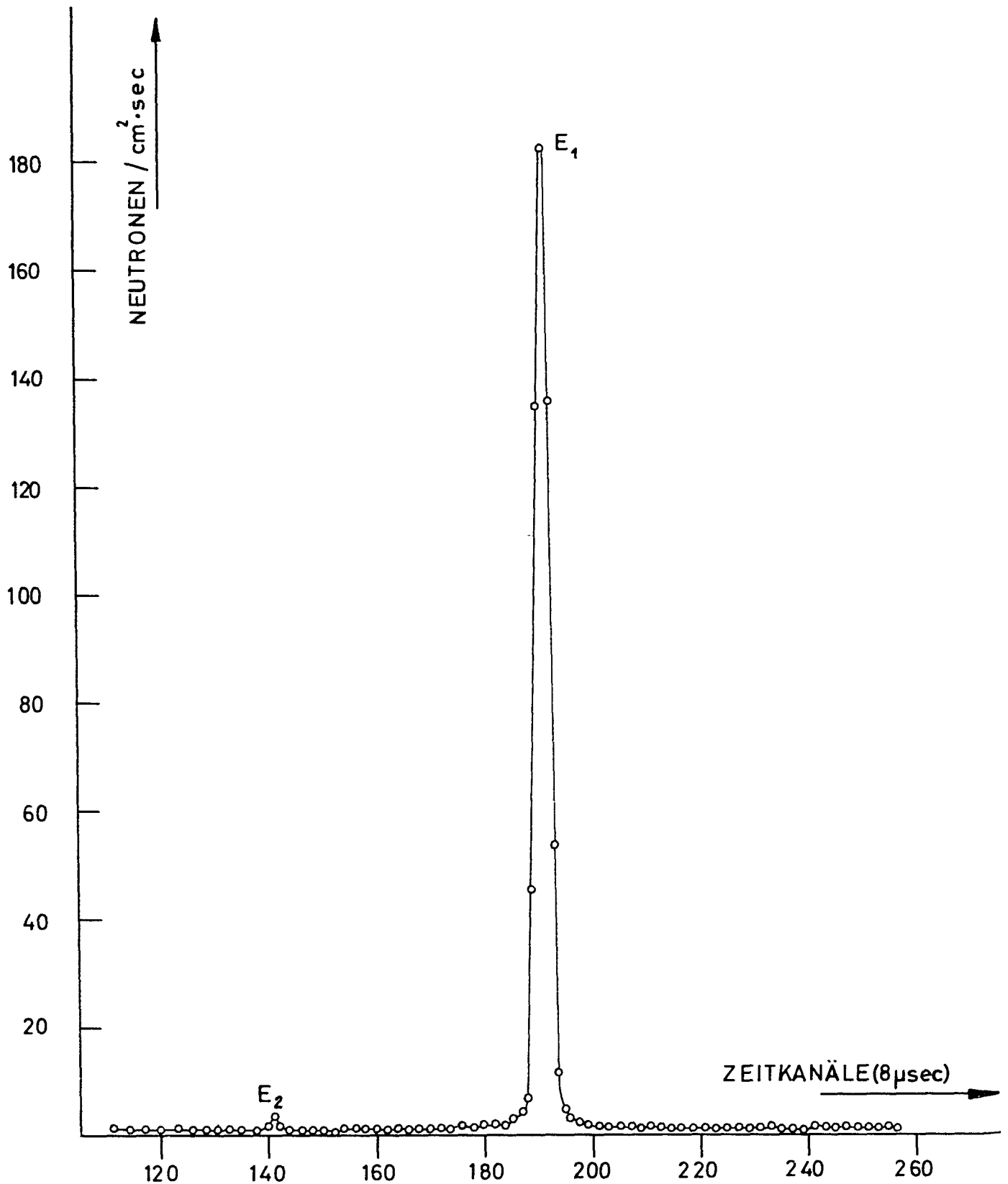


ABB. 2

MIT DEM (111)- REFLEX AN ALUMINIUM ERZEUGTES SPEKTRUM
 "MONOCHROMATISCHER" NEUTRONEN
 (BRAGG-WINKEL = 14,6° , ENERGIE DER 1. ORDNUNG $E_1 = 0,0592 \text{ eV}$,
 ENERGIE DER 2. ORDNUNG $E_2 = 0,237 \text{ eV}$)

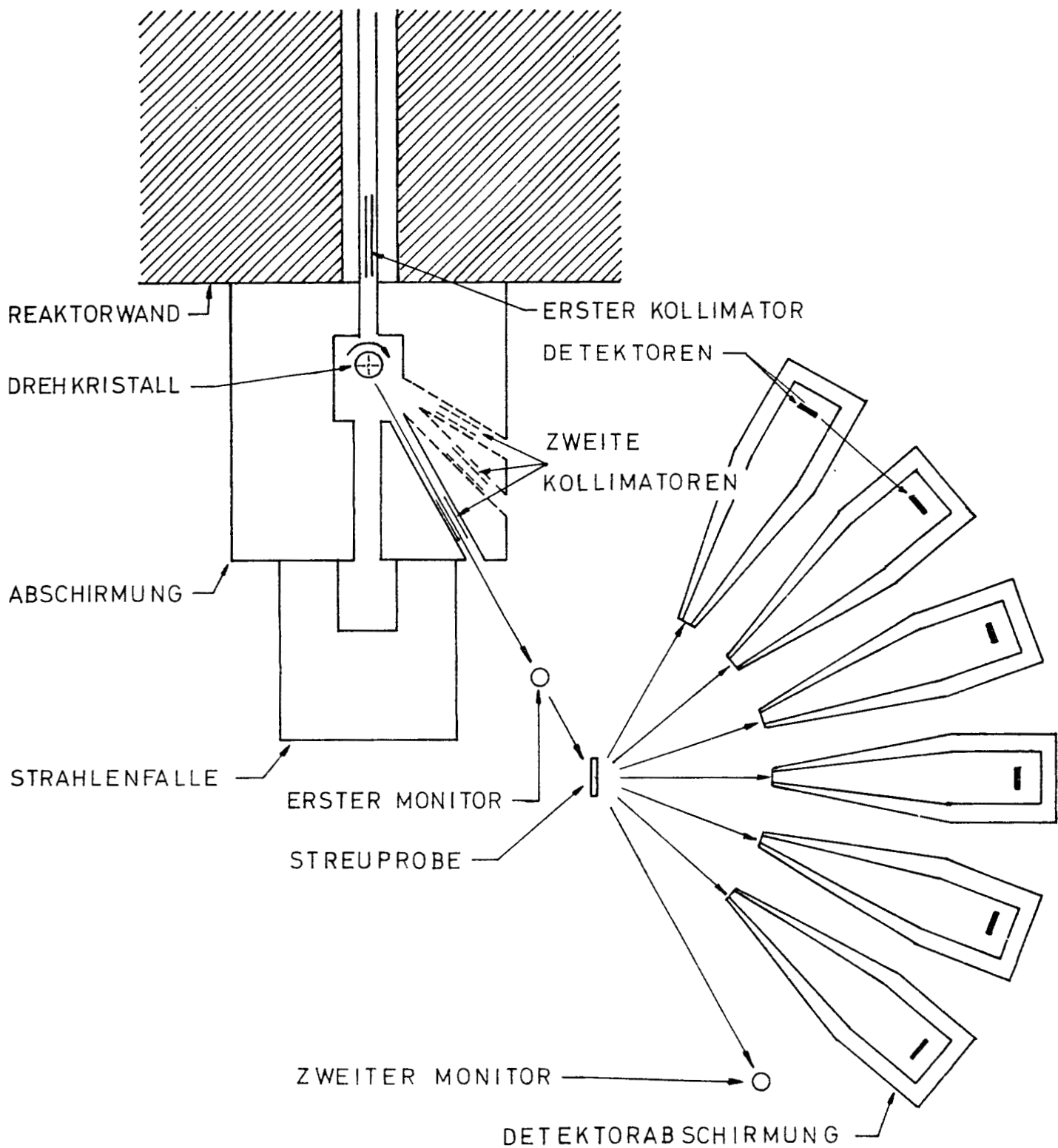


ABB. 3
 SCHEMA DES MECHANISCHEN VERSUCHSAUFBAUES
 AM REAKTOR DIORIT

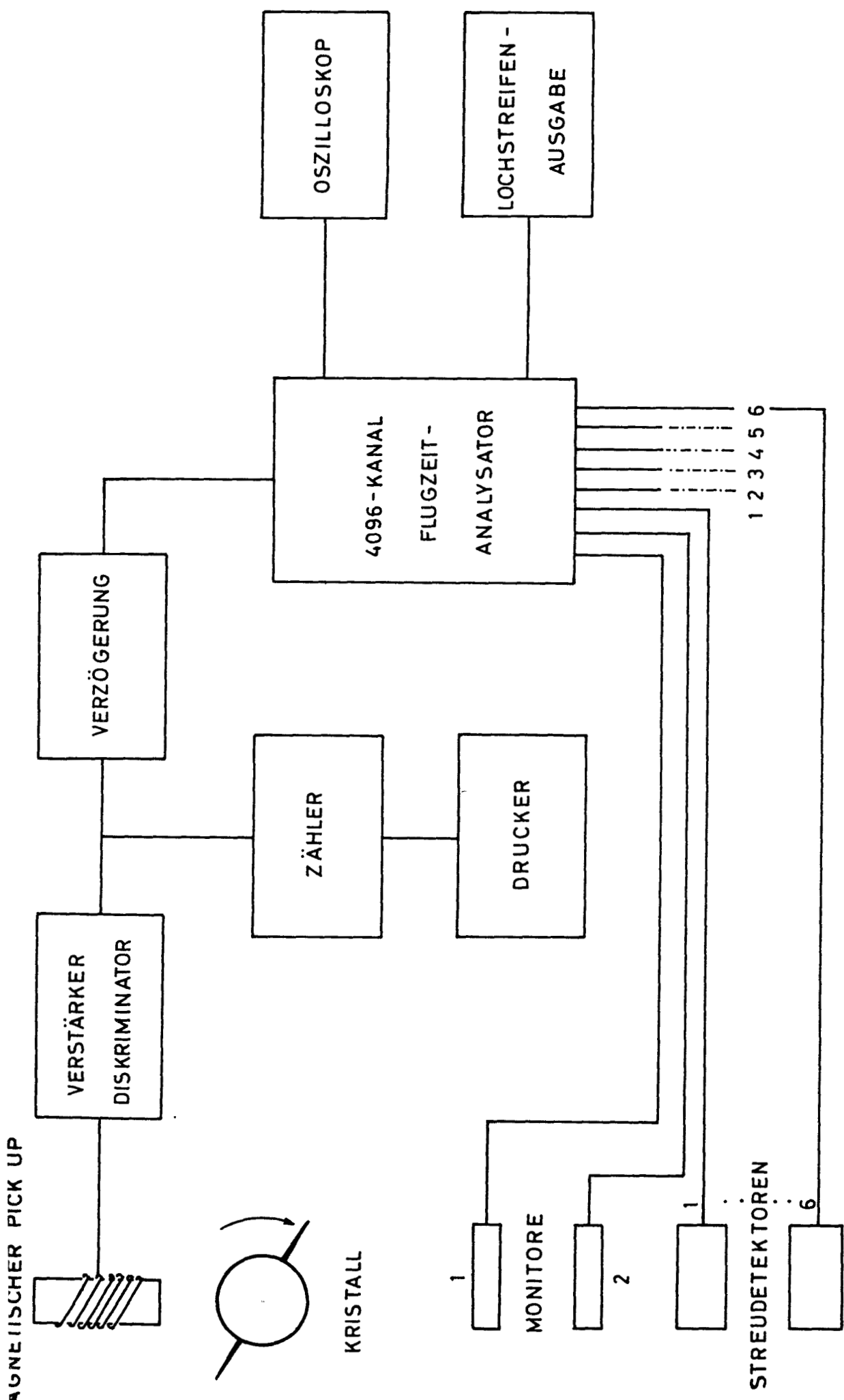


ABB. 4
 BLOCKDIAGRAMM DER FÜR DIE FLUGZEITMESSUNGEN
 VERWENDETEN ELEKTRONIK

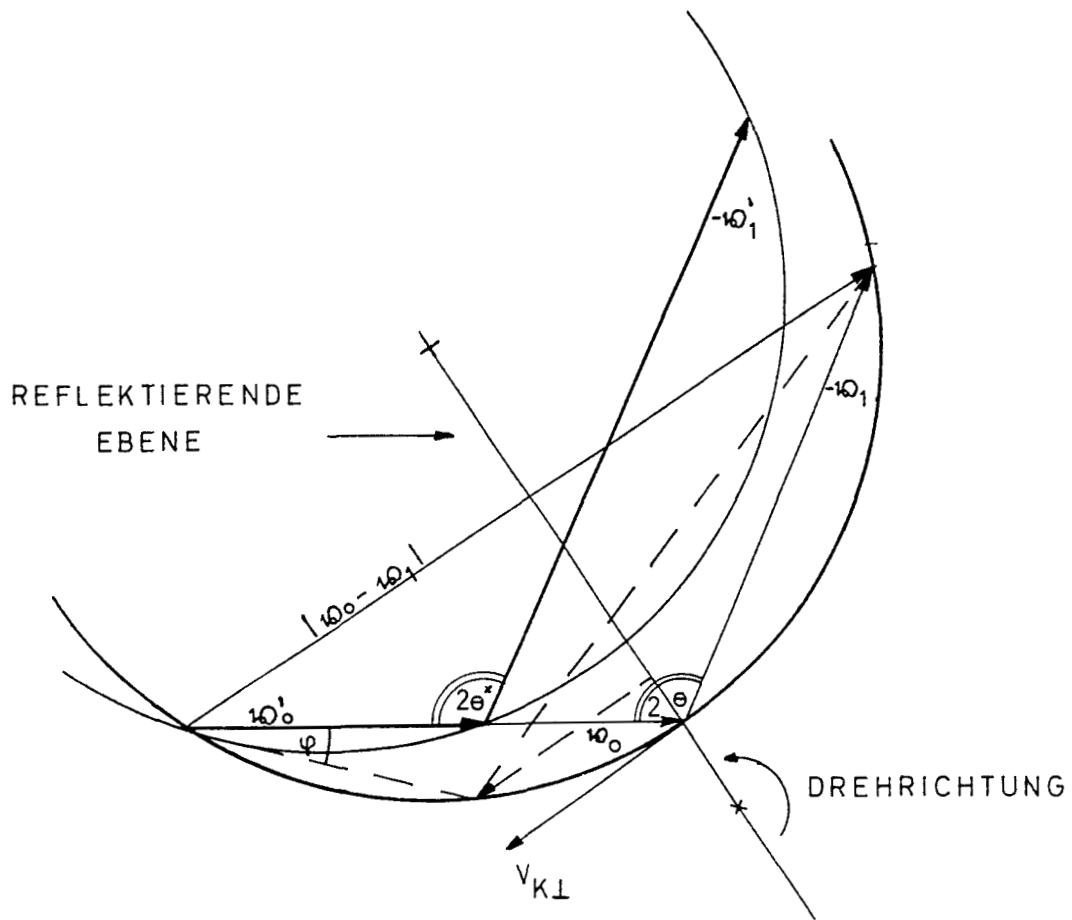


ABB. 5 DOPPLEREFFEKT AM ROTIERENDEN KRISTALL

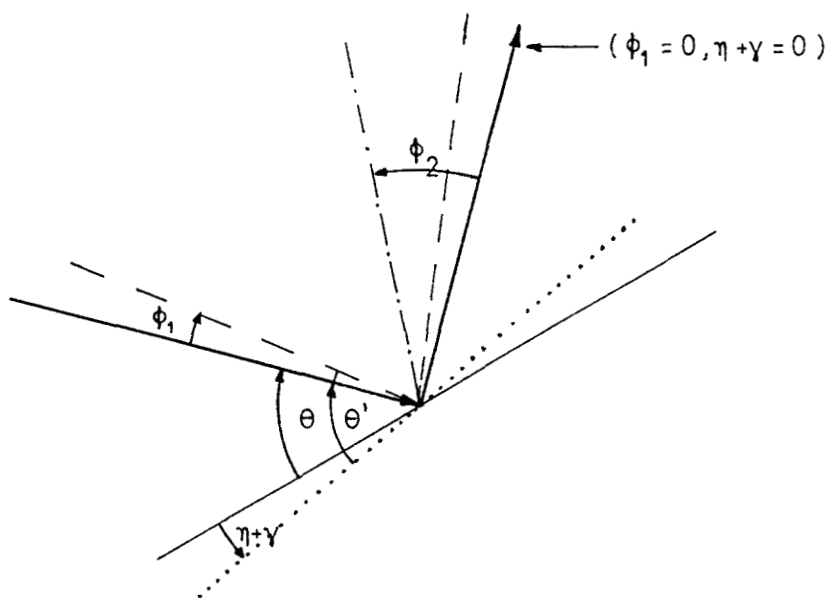


ABB. 6 WINKELBEZIEHUNGEN FÜR DIE REFLEXION AN EINEM DREHENDEN KRISTALL MIT MOSAIKSTRUKTUR

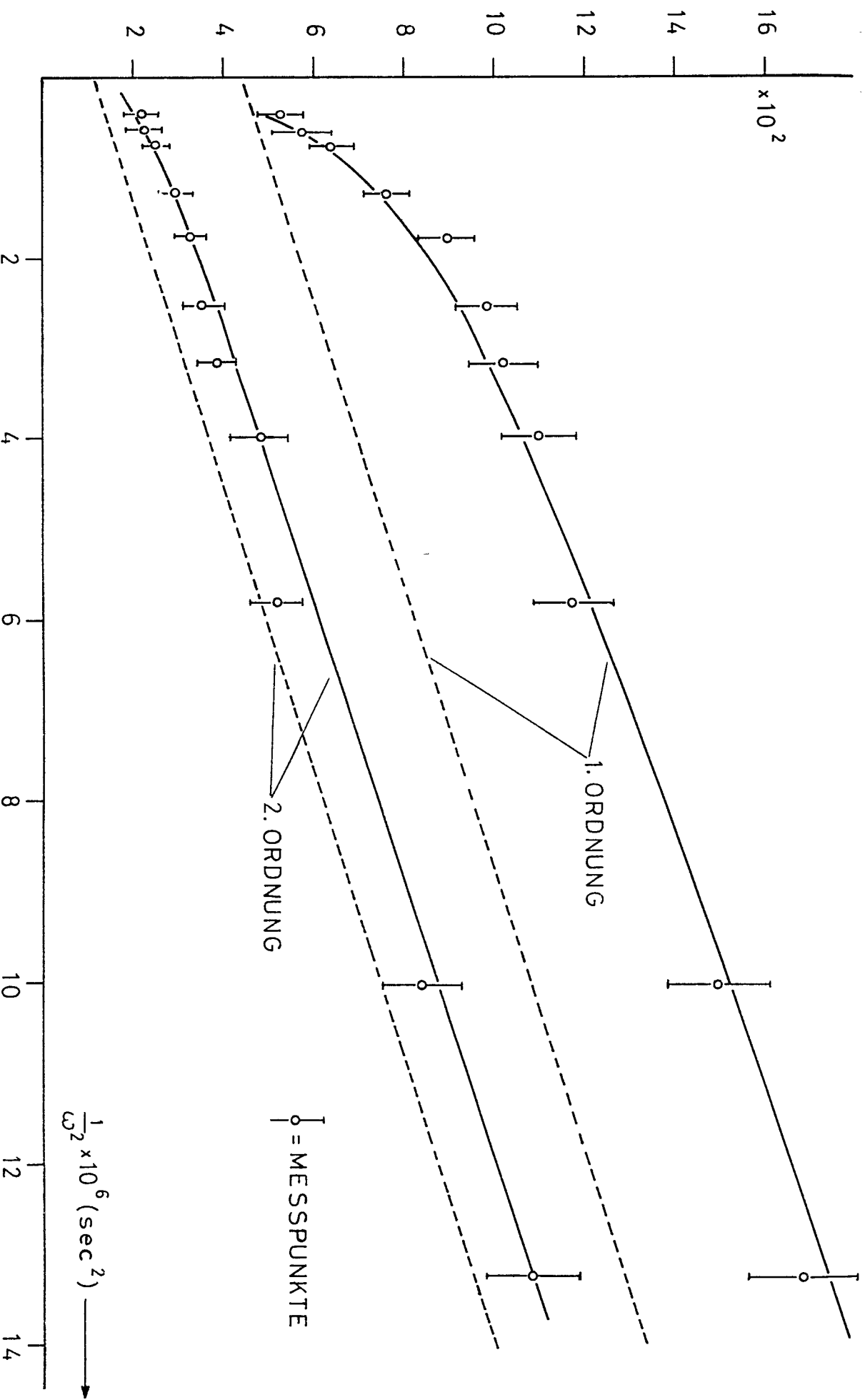


ABB. 7 DREHZAHLABHÄNGIGKEIT DER HALBWERTSBREITEN DER
 MONOCHROMATISCHEN LINIEN ERSTER UND ZWEITER ORDNUNG
 RECHNUNG OHNE DOPPLEREFFEKT -----
 RECHNUNG MIT DOPPLEREFFEKT —————

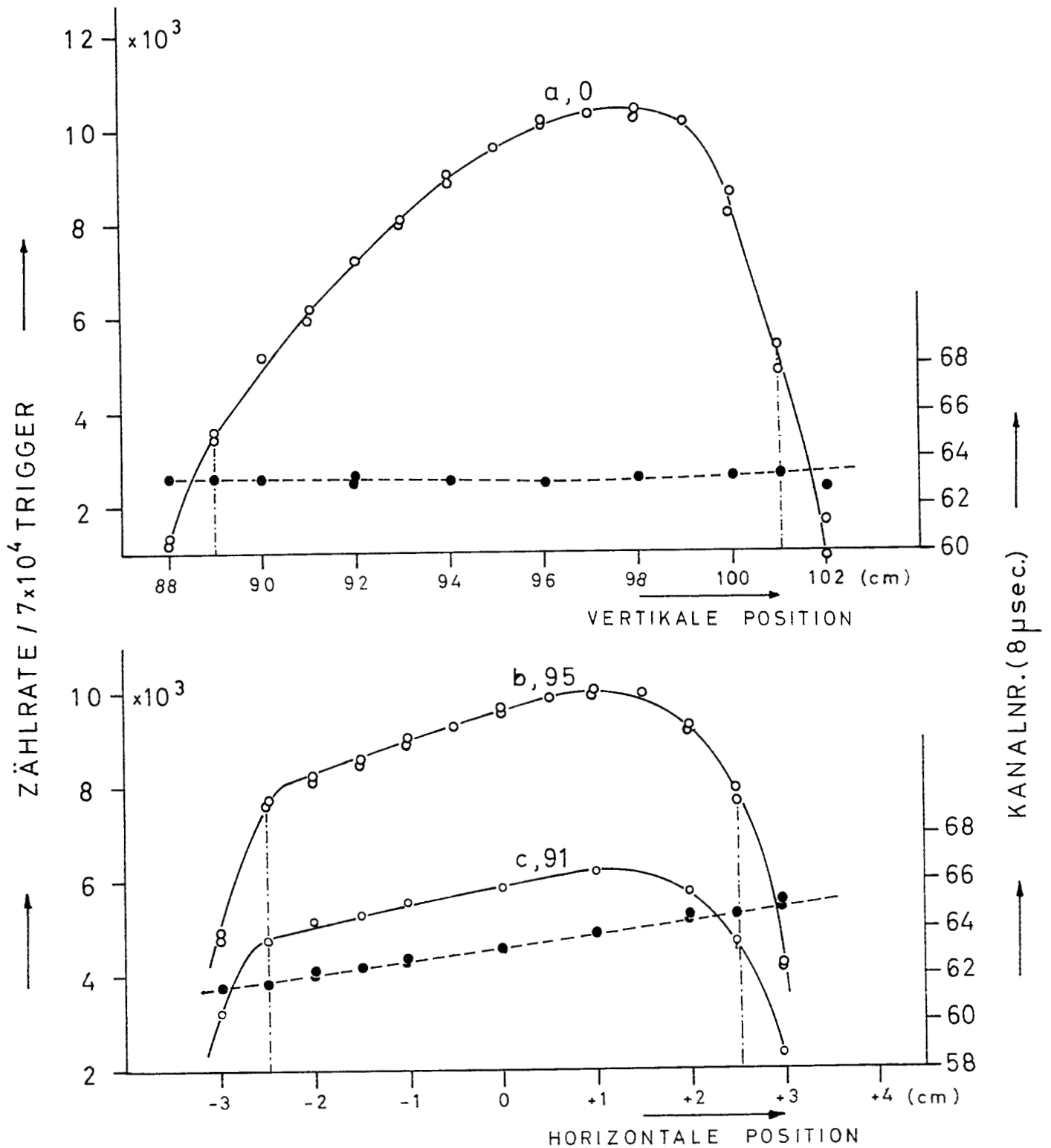


ABB.8 FLUSSKARTE FÜR $E_0 = 0,0592 \text{ eV}$
 (o = ZÄHLRATEN • = ANKUNFTSZEITEN) KURVE
 a IST FÜR DIE HORIZONTALE POSITION 0
 b und c SIND FÜR DIE VERTIKALEN
 POSITIONEN 95 UND 91 AUFGENOMMEN

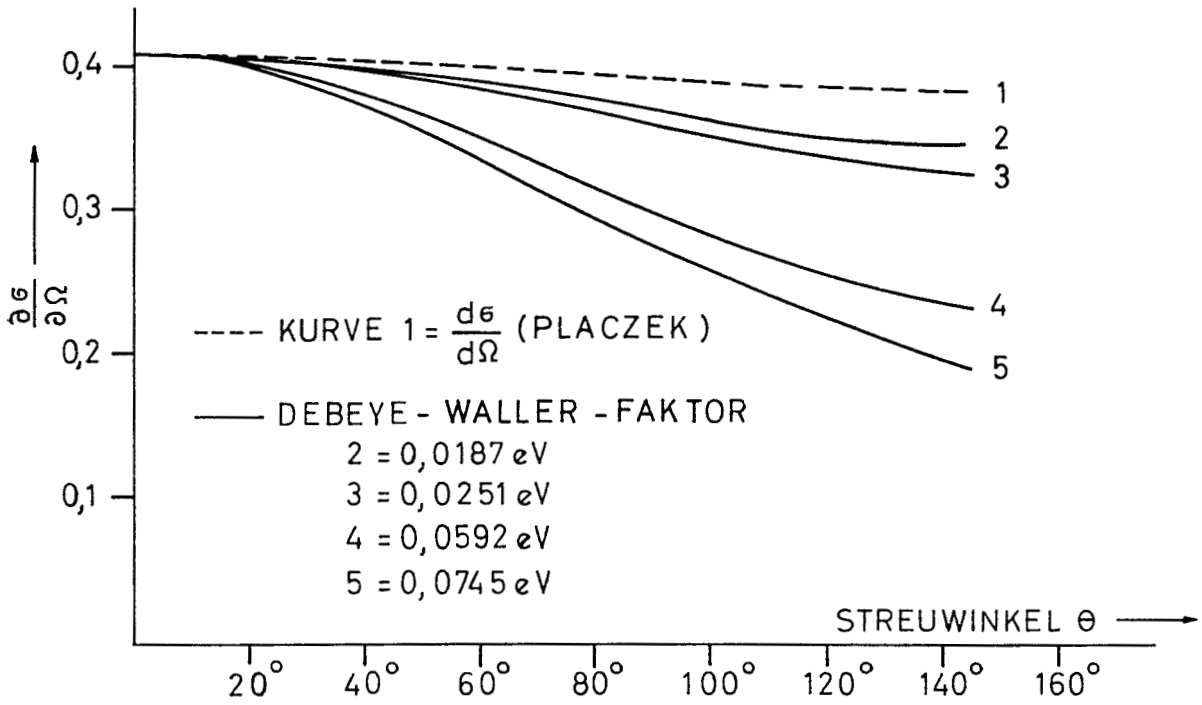


ABB.9 WINKELABHÄNGIGKEIT DER STREUUNG AM VANADIUM

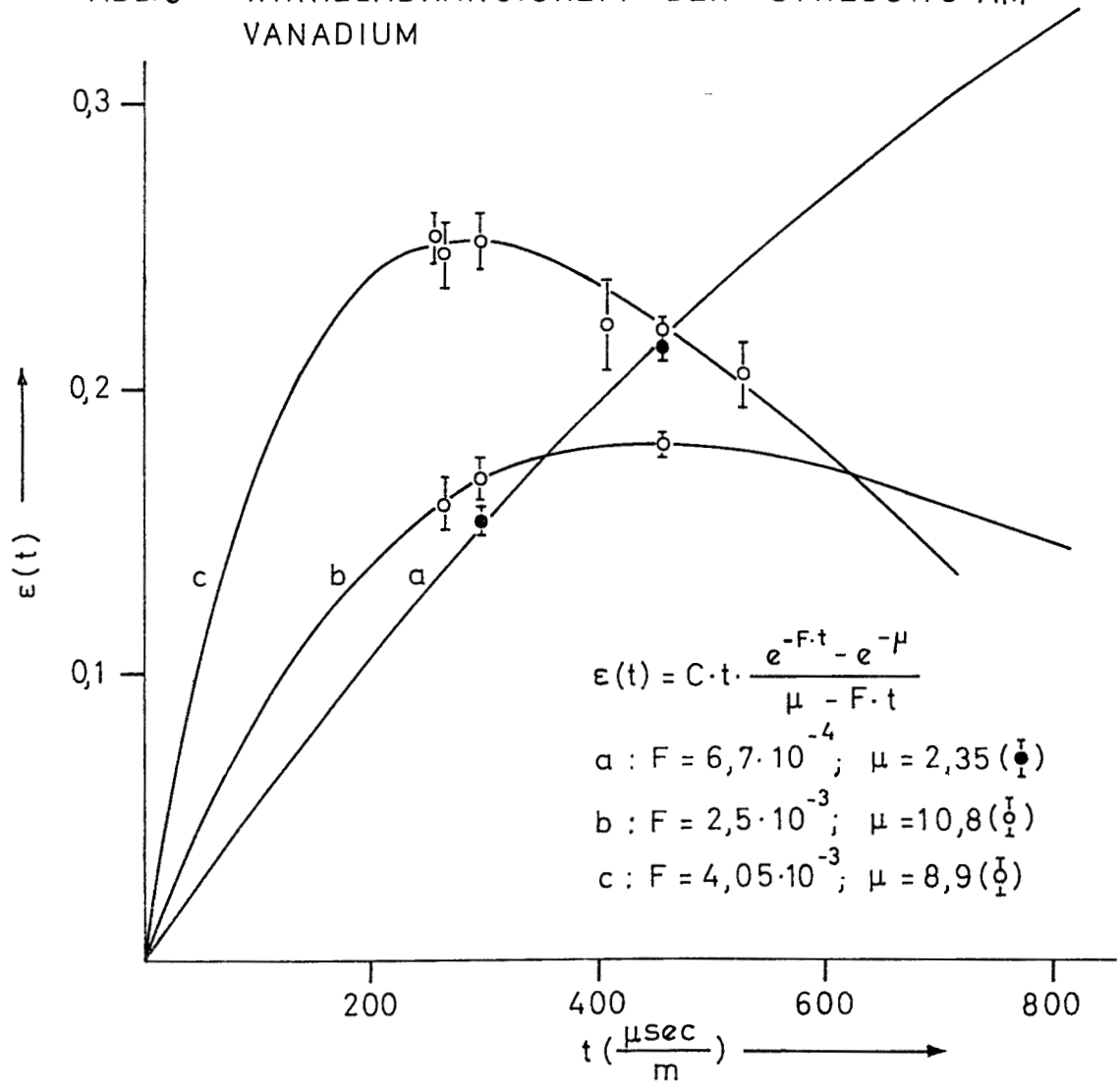
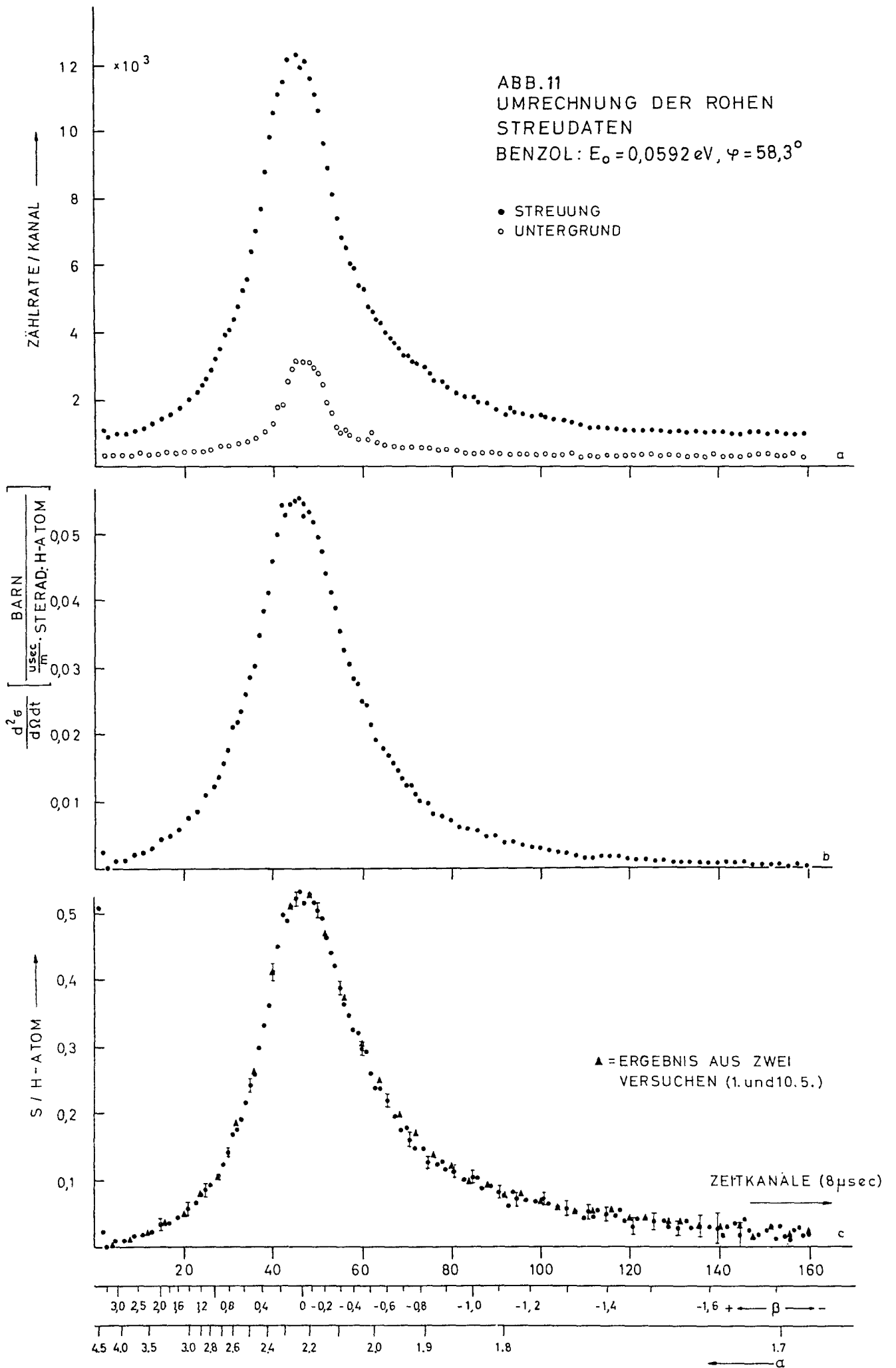


ABB.10 ENERGIEABHÄNGIGKEIT DER EMPFINDLICHKEIT ϵ FÜR VERSCHIEDENE VERWENDETE STREUDETEKTOREN

ABB.11
 UMRECHNUNG DER ROHEN
 STREUDATEN
 BENZOL: $E_0 = 0,0592 \text{ eV}$, $\varphi = 58,3^\circ$



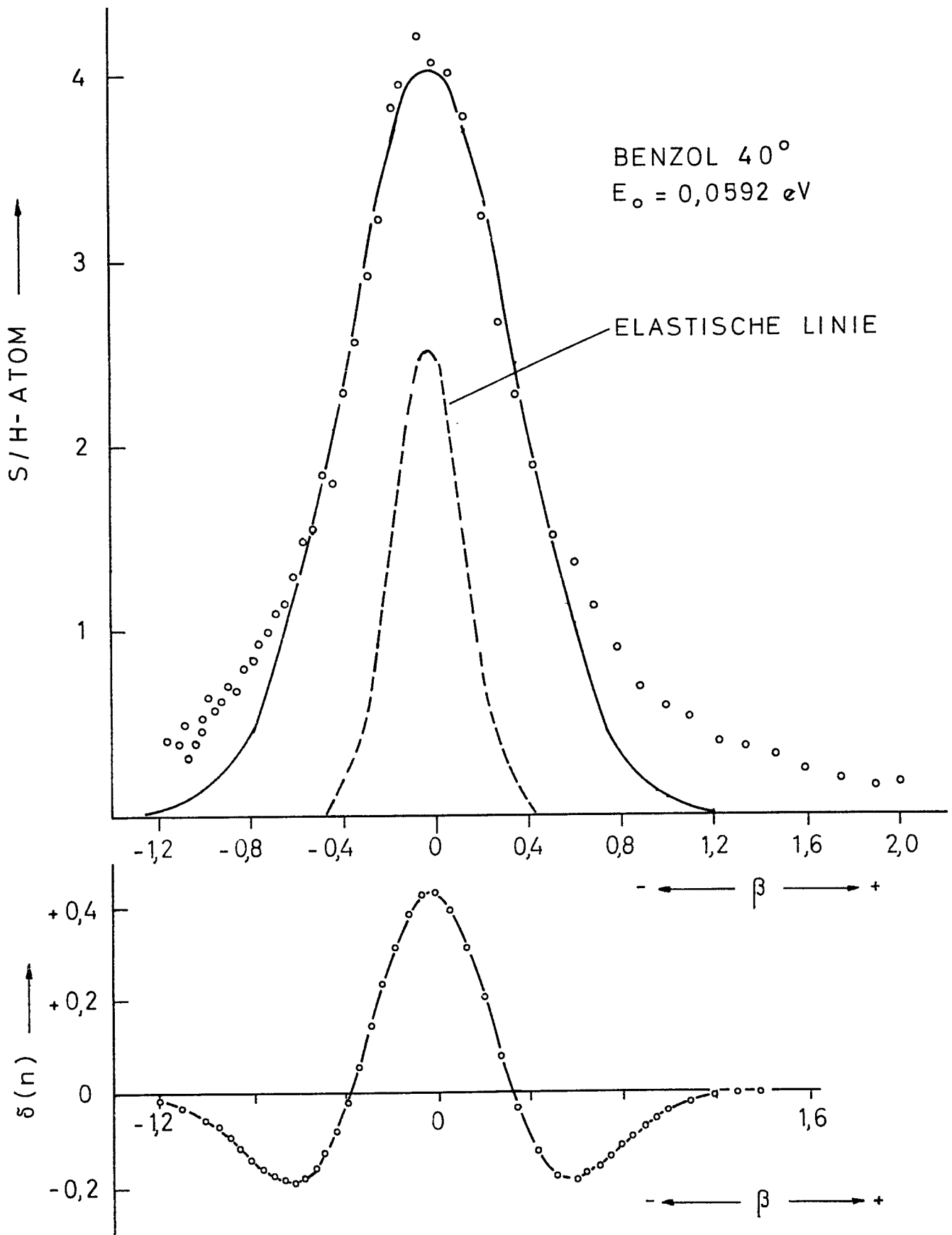


ABB.12 BEISPIEL EINER MIT DEM PROGRAMM 4001 DURCHFÜHRTE AUFLÖSUNGSKORREKTUR, — ZWISCHEN $\beta = -0,6$ und $\beta = +0,6$ AN DIE MESSPUNKTE ANGEPAßTE NORMALVERTEILUNG