

C.N.E.A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
Nº 1	AÑO 1980

02.80.13

483

SECCION EFICAZ TOTAL DEL BENCENO ENTRE 0.001 eV y 225.eV

M.J.ABBATE - H.S.WIO - J.V. LOLICH

CENTRO ATOMICO BARILOCHE

C.N.E.A.INTRODUCCION:

Se ha iniciado, en la División Neutrones y Reactores del Centro Atómico Bariloche (CAB), un programa de investigación sobre las propiedades neutrónicas del benceno /1/. Así fué posible observar que los valores experimentales conocidos de su sección eficaz total, no eran suficientemente confiables como para efectuar precisas comparaciones con resultados teóricos.

En efecto, los valores de Rush/2/ si bien abarcan desde 2.0 hasta 0.0006eV son sólo 17 con lo cual la función queda poco definida. Por su parte los resultados de Antonini y Paoletti/3/ muestran mucha dispersión y cubren el intervalo desde 0.1 a 0.001 eV. Finalmente puede citarse la medición de Sprevak y otros/4/ que comprendió desde 21.6 hasta 0.00205 eV.

Dichos datos están representados en la figura 1 resultando que para energías menores que 0.004eV hay buen acuerdo entre ellos; en el intervalo entre este valor y 0.05eV los resultados de Rush son levemente superiores a los de Sprevak mientras que los de Antonioni son bastante inferiores; para mayores energías, los pocos puntos de Rush son superiores a los de Sprevak.

Las diferencias citadas son del orden de las que aparecen normalmente, entre valores medidos y calculados, las cuales se suelen interpretar como evidencia de grados de libertad molecula-

res no totalmente bien descriptos por la teoría, por lo tanto es de interés medir la sección eficaz total del benceno en un intervalo de energías desde 0.001 hasta valores que aseguren una correcta normalización.

Desde el punto de vista teórico y de acuerdo con un análisis previo realizado /1/, se llegó a la conclusión de que los modelos existentes para el benceno no daban una descripción satisfactoria de sus propiedades neutrónicas. Ello llevó a formular un nuevo esquema teórico apto para representar la dinámica de sistemas moleculares complejos. Es claro que una comparación entre los resultados obtenidos con este esquema y valores medidos de la sección eficaz total es hábil para evaluar parcialmente su bondad.

## 2. EXPERIMENTOS

Dicha función fue medida por el método de transmisión, usando la técnica de tiempo de vuelo para determinar la energía de los neutrones.

La fuente pulsada de neutrones estaba constituida por el haz pulsado de electrones de 24 MeV del acelerador lineal del CAB, un blanco pesado de plomo y un bloque de parafina.

El dispositivo se completó con un tubo de vuelo de 17.68 m. Los neutrones ingresan por un precolimador de 10.cm de diámetro y el haz es definido con otro colimador de 5.cm colocado a 8.22m, que es la zona donde se ubica la muestra.

Los neutrones fueron detectados con un banco compuesto por 7 detectores de  $\text{He}^3$ .

El sistema de adquisición de datos, hasta su almacenaje "on-line" en la computadora IBM/360 mod.44 del CAB, ya ha sido descrito anteriormente/5/.

La técnica de medición utilizada fue la ya implementada y verificada en el laboratorio, en la cual se sustrae el fondo intercalando un filtro negro, para los neutrones de interés, en el lugar de la muestra. Además se evita la normalización con monitor, entre las mediciones sin muestra y con muestra, alternandolas en ciertos intervalos de tiempo (método "sample-in sample-out").

Para el presente caso cada medición fue de 2.7 min y se

efectuaron 200 pares de estas mediciones con cada una de las dos muestras utilizadas, intercalando otras con el filtro, de la misma duración.

Los portamuestras se construyeron en aluminio. Uno de ellos implicó un espesor de muestra de  $0.442 \pm 0.001$  cm, cuidadosamente medido para poder obtener valores absolutos de la sección eficaz /5/; el otro proporcionaba un espesor de 0.146 cm y sus resultados se podían normalizar con los del anterior.

La reducción de datos se efectuó en la forma habitual realizando correcciones por fondo, tiempo medio de emisión de los neutrones y tiempos muertos de la electrónica.

Los contenidos de los canales de tiempo fueron agrupados convenientemente resultando una resolución en energías del 10% desde 225 a 3.5eV; del 5% hasta 0.4eV y del 2.3% en el resto del intervalo.

El error relativo resultó menor que el 2% desde la máxima energía hasta 0.16eV; menor que el 1% hasta 0.008eV; menor que el 5% hasta 0.0015eV y superior al 10% para menores energías.

Según ya se dijo los valores correspondientes a la muestra gruesa son tomados como absolutos y coinciden perfectamente con los recomendados para altas energías (150.4 barn/4/). Los de la muestra fina se normalizaron con los anteriores en el intervalo de 1.0 a 0.01eV.

### 3. CALCULOS TEORICOS

Se utilizó un esquema teórico desarrollado especialmente, a publicarse, para calcular la sección eficaz de dispersión total del benceno, por medio del sistema de programas GASKET-FLANGE /6/. A estos valores se les sumó una sección eficaz de absorción "1/v", con 1.9932 barn para 0.0253eV.

Como puede verse en la comparación entre valores medidos y calculados que se muestra en la figura 2, el acuerdo obtenido es sumamente bueno (mejor que el 5%). resultando mayores discrepancias sólo en el intervalo entre 0.002 y 0.007eV, donde alcanzan hasta un 12%.

Esto último se puede atribuir a la simplificada descrip-

ción de las rotaciones, para la cual se consideró una forma fenomenológica que reprodujera los resultados obtenidos por Gläser/7/ para el espectro de frecuencias a bajas energías.

#### 4. CONCLUSIONES

En general se puede concluir que los cálculos realizados reproducen en forma satisfactoria a los valores experimentales de la sección eficaz total del benceno, los cuales fueron obtenidos con muy buenas precisión y resolución en energías, y constituyen un conjunto de datos, de dicha función, mucho más completo que los conocidos a la fecha.

Es de suponer que una descripción más correcta, la cual está en estudio actualmente, permitirá representar mejor la región de energías menores que 0.02eV. Sin embargo, sería posible que resultara un menor acuerdo en la zona entre 0.01 y 0.05eV que el obtenido aquí, debido a que los cálculos se realizan en aproximación incoherente y el máximo de la función que se registra en dicha zona, es atribuible a efectos de coherencia originados en el carbono.

#### Bibliografía:

- 
- /1/H.S.Wio, J.V.Lolich y M.J.Abbate, "Estudios sobre modelos de dispersión de neutrones en  $C_6H_6$ ", com. VI Reunión Científica de la AATN, Alta Gracia, Córdoba (Nov. 1977).
  - /2/J.J.Rush et al., J.Chem.Phys. 37, 234 (1962).
  - /3/B.Antonini y A.Paoletti, Physica 30, 1647 (1964).
  - /4/D.Sprevak et al., "Neutron thermalization in Benzene", USAEC Report GA-8185, (1967).
  - /5/R.Granada, "Determinación de la sección eficaz total del HDO", T.Especial, CNEA-UNC, CAB-IB, (1973).
  - /6/M.J.Abbate, J.V.Lolich and T.F.Parkinson, Nucl.Sci.Eng. 60, 471 (1976)
  - /7/W.Gläser, G.Ehret and A.Merkel, Proc.of the Symp.on Inelastic Scattering of Neutrons, Bombay, Vol.II, 167 (1965).
-

