

NUEVO MODELO PARA DESCRIBIR LA INTERACCIÓN DE NEUTRONES CON DEUTERIO SÓLIDO

Granada J.R. ^{1,2,3}

¹Física de Neutrones

Unidad de Actividad Ingeniería Nuclear, Gerencia de Área Energía Nuclear,

Centro Atómico Bariloche, CNEA

² Instituto Balseiro (CNEA-UNCuyo), ³CONICET

granada@cnea.gov.ar

En este trabajo se presenta un nuevo modelo para describir la interacción de neutrones con Deuterio sólido ($T < 18.7\text{K}$), a partir del cual se generan las secciones eficaces empleando el código NJOY con modificaciones para tratar este material. Las características principales de este sistema molecular están incorporadas en el modelo, incluyendo la densidad de estados vibracionales de la red cristalina, el tratamiento cuántico de los modos rotacionales y las vibraciones moleculares internas. Los procesos elásticos incluyendo las contribuciones coherentes e incoherentes están considerados, como así también los efectos cuánticos de correlaciones de espín. Los resultados producidos por este nuevo modelo se comparan con los mejores datos experimentales, encontrándose un excelente acuerdo.

En la actualidad, el empleo de neutrones para explorar la materia condensada demanda mayoritariamente la utilización de neutrones fríos y ultrafríos, por cuanto gran parte de los sistemas de interés poseen dimensiones meso- o nanoscópicas comparables con las longitudes de onda de tales neutrones. Las fuentes de neutrones fríos y ultrafríos, ya sean basadas en reactores o aceleradores, que se han implementado en años recientes en diferentes instalaciones, poseen un material moderador a temperaturas criogénicas de donde se emiten los neutrones re-termalizados. En particular, para la producción de neutrones ultrafríos se están construyendo fuentes en base a Deuterio Sólido, operando a temperaturas de unos pocos grados Kelvin. El diseño de tales fuentes no está optimizado, por cuanto no se contaba hasta ahora con una biblioteca de secciones eficaces para tal material, a partir de la cual se pudiesen realizar cálculos de Montecarlo para el diseño y optimización.

Durante muchos años se ha estudiado con intensidad las propiedades fundamentales del hidrógeno molecular, sobre todo en estado líquido, debido a que es uno de los sistemas más simples donde puede estudiarse los efectos de las interacciones intermoleculares sobre el movimiento rotacional. Además, los efectos puramente cuánticos dominan los niveles energéticos más bajos, por cuanto el spin nuclear total y el momento angular resultan correlacionados a través de los requerimientos de simetría sobre la función de onda de moléculas diatómicas homonucleares [1].

La capacidad de los experimentos de dispersión de neutrones para revelar el ordenamiento y el movimiento atómico sobre escalas espacio-temporales conmensurables con las de los sistemas reales ha sido apreciada desde hace mucho tiempo. Sin embargo, tal información solamente puede ser obtenida si existe un esquema teórico apropiado para interpretar los espectros de dispersión observados, el cual fue inicialmente desarrollado por Van Hove [2]. Dentro de tal esquema, Young y Koppel [3] produjeron una descripción completa del movimiento rotacional en un gas de H₂ (y D₂), donde se dan de forma explícita las secciones eficaces para las especies *orto* y *para*. Desde entonces, un gran número de modelos y técnicas computacionales se desarrollaron para describir la interacción de neutrones lentos con H₂ y D₂ líquidos, diferenciándose en sus tratamientos del movimiento traslacional y efectos de coherencia [4-10]. La única prescripción existente para calcular las secciones eficaces en hidrógeno y deuterio sólido fue elaborada por Bernnat *et al.* [11], pero en dicho trabajo no se consideraron los efectos de correlación de spin.

La necesidad en años recientes de desarrollar moderadores avanzados para la producción de neutrones fríos y ultrafríos y su empleo en estudios fundamentales [12], ha motivado un gran esfuerzo experimental para medir las propiedades neutrónicas de D₂ sólido [13-19]. El formalismo que se presenta en este trabajo se orienta a proveer un esquema teórico para entender tales experimentos y para generar las secciones eficaces necesarias para el desarrollo y optimización de fuentes nuevas y eficientes de neutrones ultrafríos.

La función de scattering de Van Hove, S(**Q**, ω) está directamente relacionada con la sección eficaz doble diferencial:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{k}{k_0} S(\mathbf{Q}, \omega) \quad (1)$$

donde **k** , **k**₀ son los vectores de onda del neutrón dispersado e incidente, $\hbar\omega = \hbar^2(k_0^2 - k^2)/2m_n$ es la pérdida de energía del neutrón, y $\hbar\mathbf{Q} = \hbar(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k})$ es el impulso transferido al sistema en el proceso.

La *Ley de Scattering* de un sistema molecular es [1]:

$$S(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \left\langle \sum_{l,l'} \sum_{v,v'} \overline{a_{lv}^* a_{l'v'}} \exp\{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_{lv}(0)\} \exp\{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_{l'v'}(t)\} \right\rangle \quad (2)$$

donde **R**_{l ν} (t) denota la posición del átomo ν dentro de la molécula l ,

$$\mathbf{R}_{l\nu}(t) = \mathbf{a}_l + \mathbf{b}_\nu(t) + \mathbf{u}_\nu(t) \quad (3)$$

y puede ser escrito como la suma de contribuciones inter ($l \neq l'$)- e intra ($l = l'$)-moleculares (también aludidas como términos *exterior* e *interior*, respectivamente. En la Ec.(2) los *brackets* denotan el promedio sobre la función de distribución de equilibrio de los operadores dependientes del tiempo, sobre el espacio de fases completo del sistema

dispersos, usualmente denominada *Función Intermedia de Scattering* $\chi(\mathbf{Q},t)$. En función de las longitudes de scattering coherente b_c^v , e incoherente, b_i^v , la amplitud de scattering para el núcleo v es:

$$a_v = b_c^v + 2b_i^v (\mathbf{S}_v \cdot \mathbf{s}) [S_v (S_v + 1)]^{-1/2} \quad (4)$$

donde \mathbf{S}_v y \mathbf{s} son los operadores de spin para el nucleído v y el neutrón, respectivamente.

La molécula de deuterio está formada por dos bosones, y por lo tanto su función de onda total debe ser simétrica ante el intercambio de dos núcleos idénticos. Consecuentemente, si el spin nuclear total \mathbf{S} es par la función de onda espacial debe ser simétrica, y antisimétrica si \mathbf{S} es impar, lo cual conduce respectivamente, a la existencia de estados *orto* con $S=0,2$ acoplados a $J=0,2,4,\dots$, y estados *para* con $S=1$ acoplados a $J=1,3,5,\dots$, donde J designa al momento angular total de la molécula.

Sin considerar por el momento los modos vibracionales, podemos escribir el término 'exterior' de la función intermedia de scattering como:

$$\begin{aligned} \chi^{out}(\mathbf{Q},t) &= \sum_{l \neq l'} \langle \exp\{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{a}_l(0)\} \exp\{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{a}_{l'}(t)\} \rangle \cdot \sum_{v,v'} \langle \overline{b_{lv}^*} \exp\{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{b}_{lv}(0)\} \overline{b_{l'v'}} \exp\{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{b}_{l'v'}(t)\} \rangle \\ &= I_d(\mathbf{Q},t) \cdot u(\mathbf{Q}) \end{aligned} \quad (5)$$

No existe correlación entre átomos pertenecientes a diferentes moléculas, luego

$$u(\mathbf{Q}) = |\sum_v \langle b_{lv} \exp\{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{b}_v(0)\} \rangle|^2 = 4 (b_c)^2 j_0^2 (Qd/2) \quad (6)$$

que es el factor de estructura molecular donde d ($= 0.74 \text{ \AA}$) es la distancia interatómica y j_0 es la función esférica de Bessel de orden cero. El primer factor en Ec.(5), $I_d(\mathbf{Q},t)$, representa la contribución debida a centros moleculares pertenecientes a diferentes moléculas.

La contribución 'interior' en la Ec.(2) es la transformada de Fourier de la correspondiente función intermedia de scattering:

$$\begin{aligned} \chi^{inner}(\mathbf{Q},t) &= \sum_l \langle \exp\{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{a}_l(0)\} \exp\{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{a}_l(t)\} \rangle \cdot \sum_{JJ'} \sum_{\pi\pi'} A_{\pi\pi'}(J) f_{\pi\pi'}(\mathbf{Q}; J, J') e^{-i(\omega_J - \omega_{J'})t} \\ &= I_s(\mathbf{Q},t) \cdot v(\mathbf{Q},t) \end{aligned} \quad (7)$$

El primer factor, $I_s(\mathbf{Q},t)$, es la contribución *self* de los centros moleculares determinada por la dinámica de la red en el caso de sistemas sólidos. El segundo factor, $v(\mathbf{Q},t)$, contiene toda la complejidad asociada a las rotaciones moleculares con paridad definida

para cada especie molecular. Los coeficientes $A_{\pi\pi'}$ y las funciones $f_{\pi\pi'}$ en la última ecuación contienen los valores específicos de las secciones eficaces resultantes de la Ec.(4) para cada transición rotacional, y los correspondientes elementos de la matriz rotacional, respectivamente [3,4,10].

Como es evidente de las definiciones de $I_d(\mathbf{Q},t)$ e $I_s(\mathbf{Q},t)$ en las Ecs.(5) y (7),

$$I_d(\mathbf{Q},t) = I(\mathbf{Q},t) - I_s(\mathbf{Q},t) \quad (8)$$

de donde resulta que la función intermedia de scattering total es;

$$\chi(\mathbf{Q},t) = 4 b_c^2 j_0^2(Qr/2) \{I(\mathbf{Q},t) - I_s(\mathbf{Q},t)\} + v(\mathbf{Q},t) \cdot I_s(\mathbf{Q},t) \quad (9)$$

y donde $I(\mathbf{Q},t)$ ahora contiene las contribuciones debidas a todos los centros moleculares del sistema.

Es conveniente separar las componentes elástica e inelástica, lo cual significa en el formalismo dependiente del tiempo:

$$\chi(\mathbf{Q},t) = \chi(\mathbf{Q},0) + \chi(\mathbf{Q},t \neq 0) \quad (10)$$

Pero como $I_s(\mathbf{Q},0) = 1$ según se observa directamente de su definición en Ec.(7), e $I(\mathbf{Q},0) = |F(\mathbf{Q},0)|^2$, que es simplemente el factor de estructura de la red de los centros moleculares, encontramos

$$\chi^{el}(\mathbf{Q},0) = \{4 b_c^2 j_0^2(Qr/2) |F(\mathbf{Q})|^2 + v(\mathbf{Q},0) - u(\mathbf{Q})\} \chi^{vib}(\mathbf{Q},0). \quad (11)$$

Finalmente, en el marco de la aproximación incoherente para el término inelástico [1], $I(\mathbf{Q},t \neq 0) \cong I_s(\mathbf{Q},t \neq 0)$, y así

$$\chi^{inel}(\mathbf{Q},t) = v(\mathbf{Q},t) \cdot I_s(\mathbf{Q},t) \cdot \chi^{vib}(\mathbf{Q},t). \quad (12)$$

Las ecuaciones (11) y (12) son las expresiones básicas para describir la interacción de neutrones lentos con deuterio sólido, y donde la función intermedia de scattering vibracional ha sido explícitamente incluida.

Para calcular el término elástico, y aparte de la evaluación simple de la contribución coherente que involucra el factor de estructura para la red hcp ($a = 3.605 \text{ \AA}$, $c = 5.882 \text{ \AA}$, [11]) del D_2 sólido, debemos recordar que [4,10]:

$$\text{Para o-}D_2 : v(\mathbf{Q},0) = 2 [b_c^2 + b_i^2] + [b_c^2 + \frac{1}{2} b_i^2] j_0(Qd)$$

$$\text{Para p-}D_2 : v(\mathbf{Q},0) = 2 [b_c^2 + b_i^2] + [b_c^2 - b_i^2] j_0(Qd)$$

(13)

lo cual, luego de aproximaciones menores despreciando pequeños efectos de segundo orden dependientes de la energía debidos a correlaciones estructurales y de spin, conduce a

$$\begin{aligned}\chi^{\text{el}}(\mathbf{Q},0) &= 4 b_c^2 j_0^2 (Qr/2) |F(\mathbf{Q})|^2 \chi^{\text{vib}}(\mathbf{Q},0) && \text{(Elástica Coherente)} \\ &+ 2 (1+\alpha) b_i^2 \chi^{\text{vib}}(\mathbf{Q},0) && \text{(Elástica Incoherente)}\end{aligned}\tag{14}$$

con $\alpha = 1/4$ para o-D₂, $-1/2$ para p-D₂, 0 para n-D₂. Las Ecs. (12) y (14) son las expresiones centrales del presente modelo.

Las leyes de scattering $S(\mathbf{Q},\omega)$, núcleos de transferencia de energía $\sigma(E,E')$, y secciones eficaces $\sigma(E)$ para el scattering inelástico en orto- y para-deuterio sólido, fueron calculadas empleando el código NJOY [20], el cual está basado en una expansión en fonones del movimiento de la red, y el formalismo de Young-Koppel [3] para la descripción cuántica de las rotaciones. Como parte de los datos de entrada, se empleó la densidad de estados para deuterio sólido obtenida por Schmidt *et al.* [21,22], la cual se muestra en la Fig.1. La componente elástica incoherente producida por NJOY fue modificada para incluir el efecto de las correlaciones de spin, según lo indicado en la Ec.(14). El factor de estructura de la red, $|F(\mathbf{Q})|^2$, fue calculado empleando nuestro código CRIPO [23], al cual se lo multiplicó por el factor de Debye-Waller $\chi^{\text{vib}}(\mathbf{Q},0)$ (también calculado por NJOY) y el factor de estructura molecular para obtener la componente elástica coherente.

En nuestros cálculos hemos usado los valores $\sigma_c = 5.59$ b, $\sigma_i = 2.05$ b, para las secciones eficaces coherente e incoherente de átomo ligado, respectivamente, y $\sigma_a = 0.0005$ b para la sección eficaz de absorción a $E = 0.0253$ eV [24], así como $\hbar\omega_r = 0.0074$ eV y $\hbar\omega_v = 0.371$ eV para las energías moleculares de rotación y vibración [25].

La ley de scattering producida por el presente modelo para deuterio sólido a 5 K se muestra en la Fig.2, en la forma de $S(\alpha,\beta) = kT S(Q,\omega)$, donde $\alpha = \frac{\hbar^2 Q^2}{2M} \frac{1}{kT}$ y $\beta = \frac{\hbar\omega}{kT}$ siendo M la masa molecular. Podemos apreciar en la Fig.2a el comportamiento bastante convencional del ortodeuterio, donde los procesos inelásticos están controlados por interacciones fonónicas, tanto para procesos de up- ($\beta < 0$) y down- ($\beta > 0$) scattering, como lo revelan los picos observados a $\beta = \pm 11.5, \pm 21$, correspondientes a los máximos agudos en la densidad de estados a 0.005 eV y 0.009 eV, respectivamente.

En la Fig.2.b podemos ver que la rama de *down-scattering* para p-deuterio es controlada por procesos fonónicos, como es también el caso de *up-scattering* para muy pequeñas transferencias de impulso. Sin embargo, cuando esta última magnitud aumenta, la probabilidad de up-scattering se incrementa y toma una estructura compleja. La particularidad dominante es el pico en $\beta = -17.1$, correspondiente a la energía rotacional transferida al neutrón en la transición $J = 1 \rightarrow 0$ sin mediación fonónica,

cuando la molécula *para* se convierte en *orto*. Se observa también un pico en $\beta = -5.7$ ($\hbar\omega = -0.0024$ eV), el cual está asociado a una transición $J = 1 \rightarrow 0$ de up-scattering ($\hbar\omega = -0.0074$ eV) acoplada con la creación de un fonón con energía preferencial de 0.005 eV (ver Fig.1), mientras que el pico en $\beta = -28.8$ resulta de la misma transición $J = 1 \rightarrow 0$ acoplada con la aniquilación de un fonón ($\hbar\omega = -0.005$ eV). Finalmente, el pico observado a $\beta = -37.9$ ($\hbar\omega = -0.0164$ eV) es debido a procesos similares de up-scattering que involucran acoplamiento rotón-fonón, pero en este caso con energías para el último cercanas a 0.009 eV.

Los núcleos de transferencia de energía para orto- y para-deuterio sólido se presentan en la Fig.3 para neutrones con energía incidente $E = 0.0001$ eV y algunas temperaturas. El incremento en la probabilidad de upscattering en el sistema orto-D₂ es evidente, causado en todos los casos por aniquilación de fonones. Un comportamiento muy diferente muestra el para-D₂ . el cual va desde un régimen de 'interacción rotacional' a bajas temperaturas caracterizado por las particularidades discutidas en la Fig.2.b, hasta un régimen de 'interacción fonónica' a altas temperaturas, produciendo prácticamente los mismos resultados que el orto-D₂ en este límite.

En la Fig.4 se muestra la sección eficaz total del orto-deuterio, calculada según el presente modelo conjuntamente con los datos experimentales de Refs.[16] y [26] para algunas temperaturas, en el rango térmico de energías. La gran contribución de la dispersión elástica coherente debida al factor de estructura *hcp* domina la sección eficaz a estas energías, y el desacuerdo con los puntos medidos es una clara indicación que las muestras no eran perfectamente policristalinas. Sin embargo, y a pesar de las dificultades imaginables para lograr una alta precisión en la normalización de los resultados en esas mediciones, se puede observar un muy satisfactorio acuerdo entre experimento y cálculo más allá del primer corte de Bragg, una región dominada por las componentes inelástica total y elástica incoherente (incluyendo los efectos de correlación de spin) de la sección eficaz total (ver ventana en Fig.4).

La comparación entre los resultados del presente modelo y los datos existentes de secciones eficaces se completa con las curvas presentadas en la Fig.5, donde los valores calculados para orto- y normal- deuterio sólido se comparan con las mediciones de Refs. [26] y [27] alrededor de 18K. A esta temperatura las secciones eficaces inelásticas del orto y para deuterio son muy similares (ver Fig.3), y por lo tanto las diferencias observadas por debajo del primer corte de Bragg se deben exclusivamente a los efectos de correlación de spin sobre la contribución elástica incoherente, como se indica en la segunda línea de la Ec.(14).

Por último, se presenta en la Fig.6 la variación predicha de la sección eficaz inelástica del deuterio sólido a 5 K en el rango de energía de los neutrones ultrafríos, para las dos especies moleculares. Se incluye en esta misma figura la sección eficaz de absorción y la inelástica para una muestra de orto-D₂ 'real', esto es, conteniendo 1.5% de contaminación de para-D₂ , lo cual es típicamente lo alcanzable cuando se busca purificar orto-deuterio. Tanto los procesos de absorción como los de upscattering son los causantes de pérdidas en el flujo de neutrones ultrafríos, y por ende las respectivas secciones eficaces pueden ser utilizadas para calcular la vida media de esos neutrones dentro de un sistema de deuterio sólido, en función de la fracción de paradeuterio.

Aun cuando un gran esfuerzo experimental se ha realizado para medir algunas propiedades neutrónicas en este sistema, se ha reconocido también que la morfología de la muestra real causa interacciones elásticas adicionales que incrementan las secciones eficaces para neutrones fríos y ultrafríos, tentativamente atribuibles a dispersión a pequeños ángulos causada por inhomogeneidades [26]. Esto asigna mayor importancia a la disponibilidad de un modelo de átomo ligado para aislar tales efectos y producir las secciones eficaces requeridas para predecir el comportamiento de un campo neutrónico dentro del deuterio sólido. Es de esperar que el formalismo presente [28] sirva para satisfacer estas finalidades.

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por el Proyecto PICT 52963 de la ANPCyT y el Contrato de Investigación IAEA RC N° 14161.

REFERENCIAS

- [1] Lovesey S.W., *Theory of Neutron Scattering from Condensed Matter* (Clarendon Press, Oxford) 1984.
- [2] Van Hove L., *Phys.Rev.* **95** (1954) 249.
- [3] Young J.A. and Koppel J.U., *Phys.Rev.* **135** (1964) A603; Koppel J.U. and Young J.A., *Nukleonika* **8**(1966) 40.
- [4] Sears V.F., *Can.J.Phys.* **44** (1966) 1279.
- [5] Keinert J. and Sax J., *Kerntechnik* **51** (1987) 19.
- [6] Granada J.R., *Proceedings of the Conference on Nuclear Data for Science and Technology*, (Saikon Publ., Mito, Japan) 1988, p.161.
- [7] Bernnat W. *et al.*, *Proceedings of the Conference on Nuclear Data for Science and Technology*, (Saikon Publ.,Mito, Japan) 1988, p.477.
- [8] Morishima N. and Mizobuchi D., *Nucl. Instr. Meth.* **A350** (1994) 275.
- [9] Granada J.R. and Gillette V.H., *Physica* **B348** (2004) 6.
- [10] Guarini E., *J.Phys.: Condens. Matter* **15** (2003) R775.
- [11] Bernnat W., Keinert J. and Mattes M., in *Advanced Cold Moderators, Proceedings of the 6th. Internat. Workshop on Advanced Cold Moderators*, ISSN 1433-5506, edited by H. Conrad, (FZ Julich, Germany) 2002, p.9.
- [12] Ignatovich V.K., *The Physics of Ultracold Neutrons*, (Clarendon Press, Oxford) 1990.
- [13] Serebrov A. *et al.*, *Nucl.Instr.Meth.* **A440** (2000) 658.
- [14] Morris C.L. *et al.*, *Phys.Rev.Lett.* **89** (2002) 272501.
- [15] Saunders A. *et al.*, *Phys.Lett.* **B 593** (2004) 55.
- [16] Atchison F. *et al.*, *Phys.Rev.Lett.* **95** (2005) 182502-1.
- [17] Atchison F. *et al.*, *Phys.Rev.Lett.* **99** (2007) 262502-1.
- [18] Atchison F. *et al.*, *Phys.Rev.* **C 71** (2005) 054601.
- [19] Altarev I. *et al.*, *Eur.Phys.J.* **A 37** (2008) 9.
- [20] MacFarlane R.E. and Muir D.W., LANL Report LA-12740-M (1994).
- [21] Schmidt J.W. *et al.*, *Phys.Rev.***B 30** (1984) 6308.
- [22] Colognesi D. *et al.*, *Phys.Rev.* **B 76** (2007) 174304.
- [23] Kropff F. and Granada J.R., Unpublished Report CAB (1974).
- [24] *Neutron News* **3** (1992) 29.
- [25] Herzberg G., *Molecular Spectra and Molecular Structure*, Vol.2 (van Nostrand-Reinhold, Princeton) 1945.
- [26] Kasprzak M., *PhD Thesis*, University of Vienna (2008).
- [27] Seiffert W.D., Report EUR 4455d (1970).
- [28] Granada J.R. , *EPL* **86**, 66007 (2009).

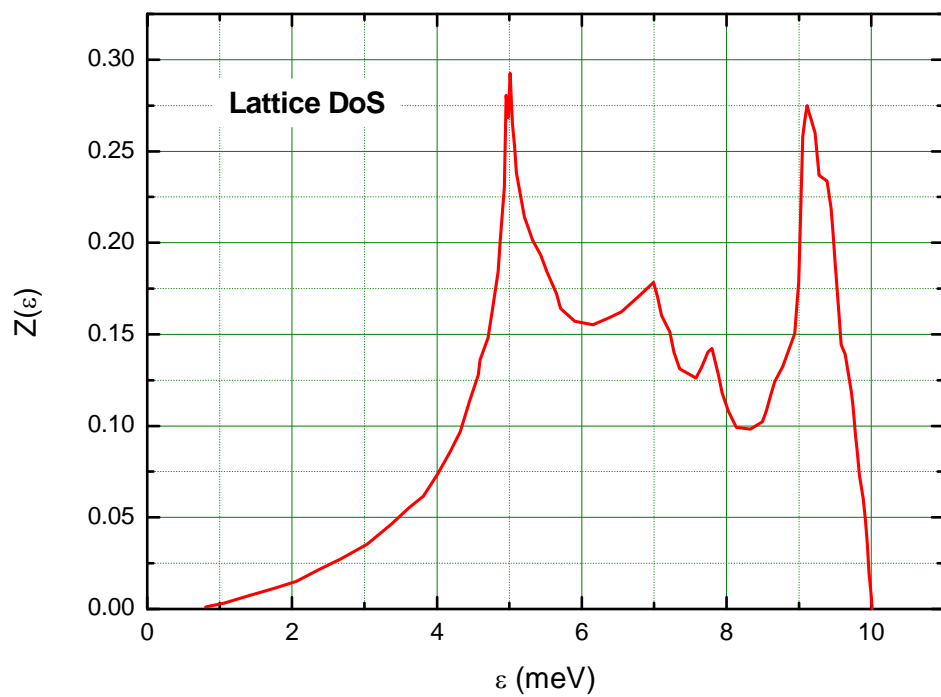


Fig.1: Densidad de estados vibracionales en D_2 sólido, de ref.[21]

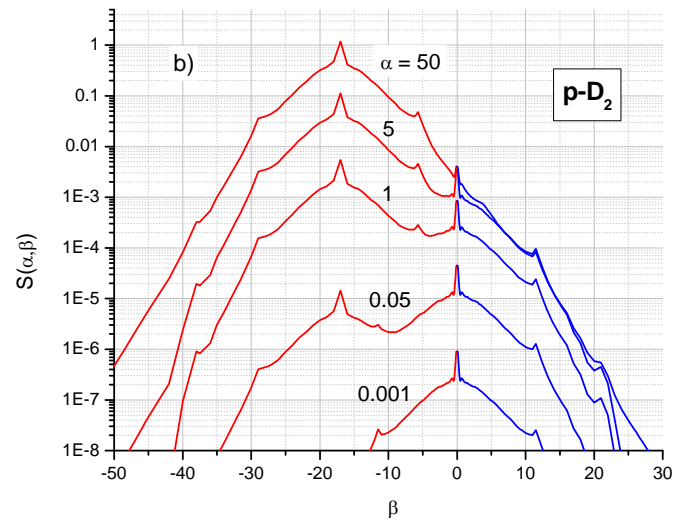
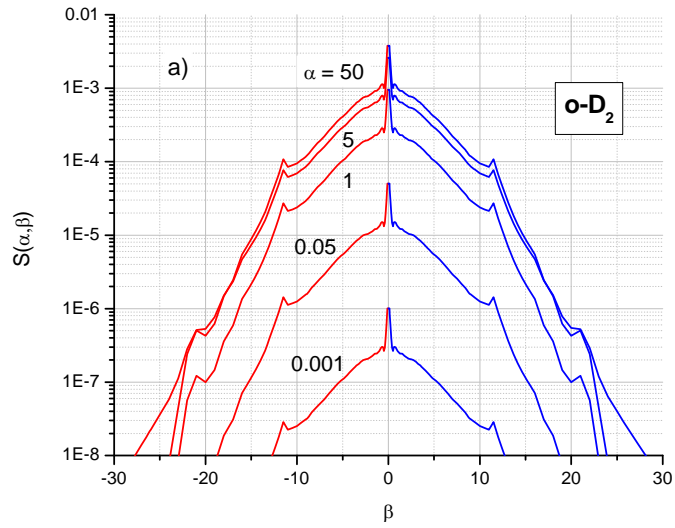


Fig.2) Ley de Scattering a pequeñas transferencias de impulso para D_2 sólido a 5K, a) orto, b) para.

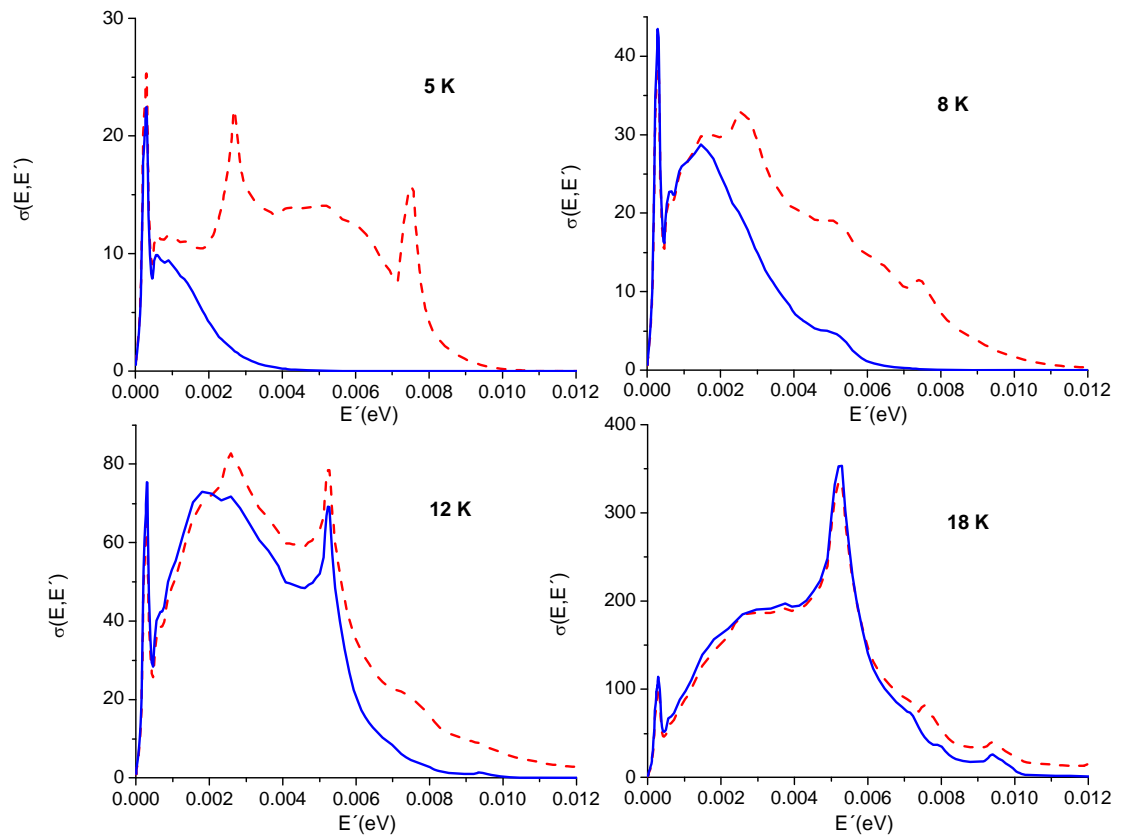


Fig. 3: Núcleos de transferencia de energía para ortho- (curvas continuas) y para- (trazos) deuterio sólido a diferentes temperaturas, para una energía incidente $E = 0.0001$ eV.

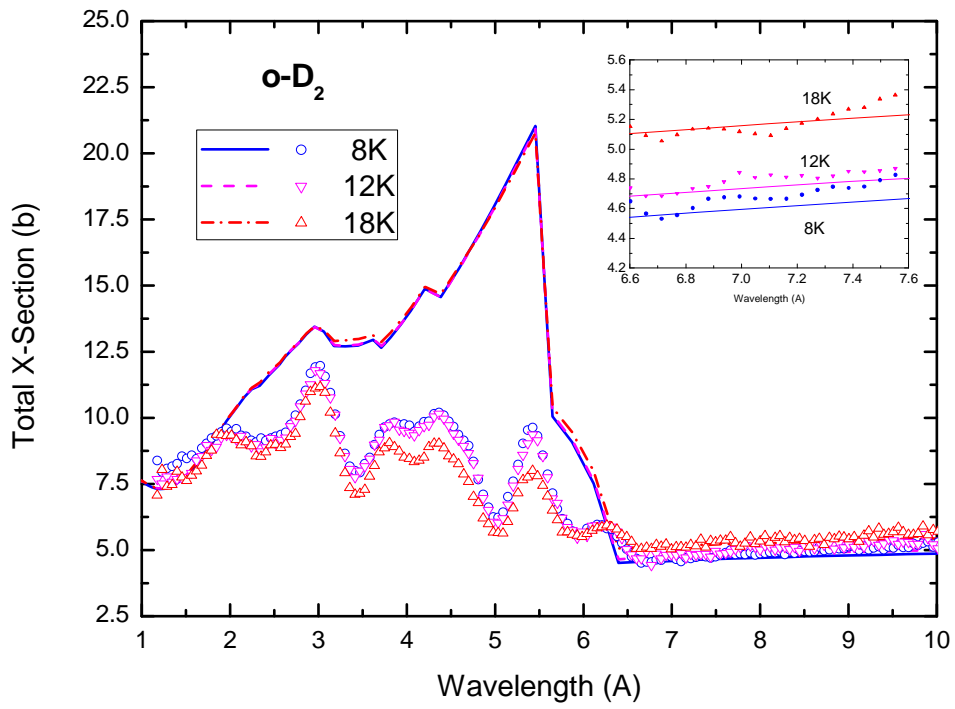


Fig.4: Comparación entre las secciones eficaces totales del $o\text{-D}_2$ sólido calculadas y medidas [16,26]. El inserto muestra esta comparación más allá del primer corte de Bragg, sobre una escala expandida.

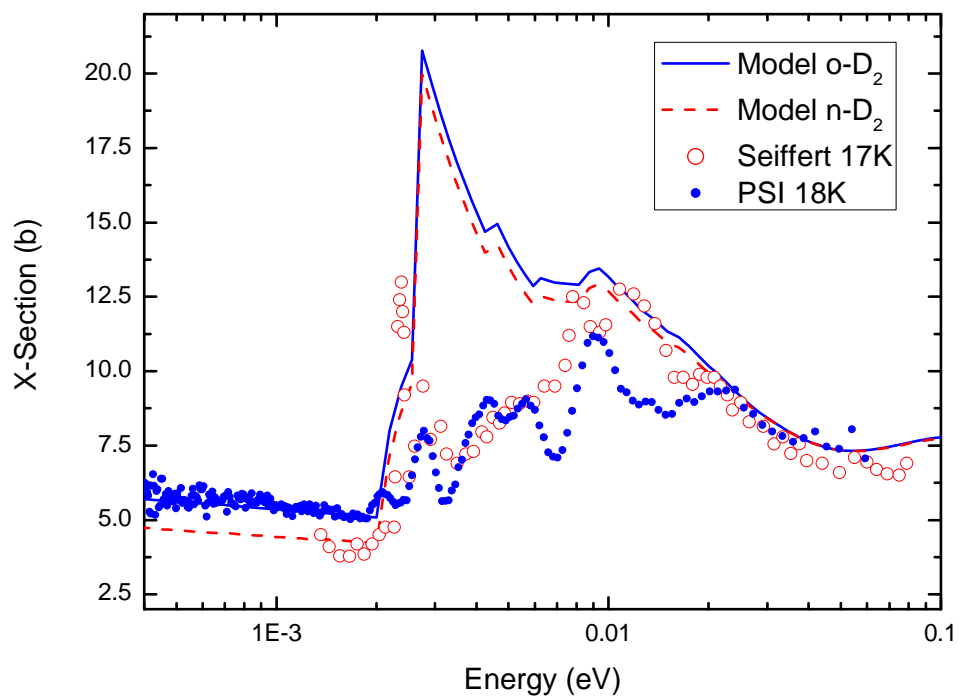


Fig.5: Secciones eficaces totales calculadas para orto- y normal-deuterio a 18 K, comparadas con los datos experimentales de refs. [26] y [27].

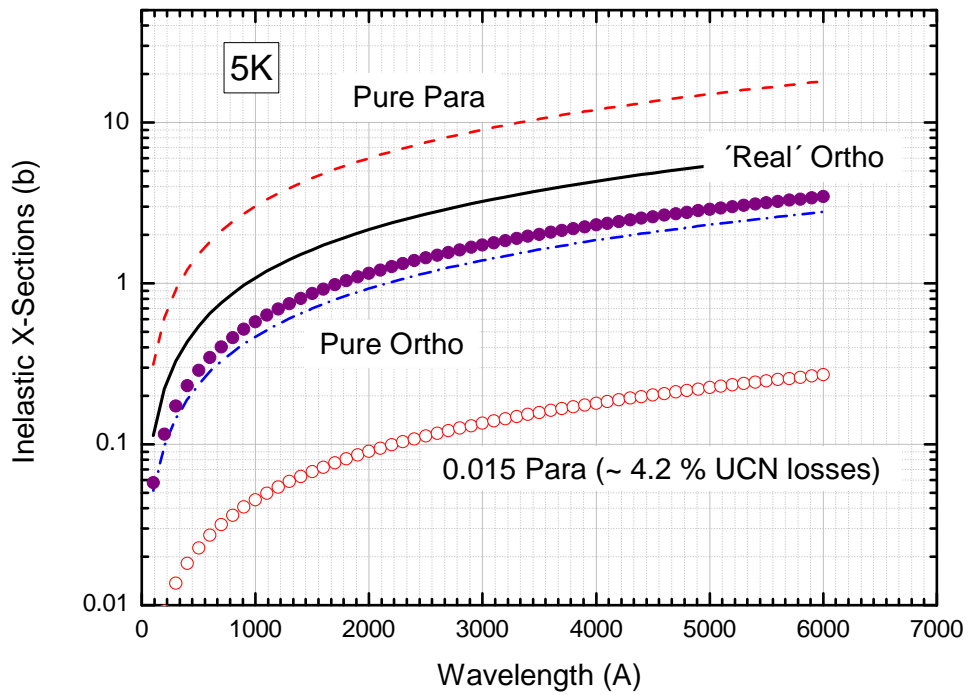


Fig.6: Variación de las secciones eficaces inelásticas para ambas especies de deuterio sólido a 5 K, de la correspondiente a una muestra 'real' de ortoD₂ conteniendo 1.5% de para, y de la sección eficaz de absorción en D₂.

New Model to describe the interaction of Slow Neutrons with Solid Deuterium

J. R. Granada*

Abstract - A new scattering kernel to describe the interaction of slow neutrons with solid Deuterium was developed. The main characteristics of that system are contained in the formalism, including the lattice's density of states, the Young-Koppel quantum treatment of the rotations, and the internal molecular vibrations. The elastic processes involving coherent and incoherent contributions are fully described, as well as the spin-correlation effects. The results from the new model are compared with the best available experimental data, showing very good agreement.