

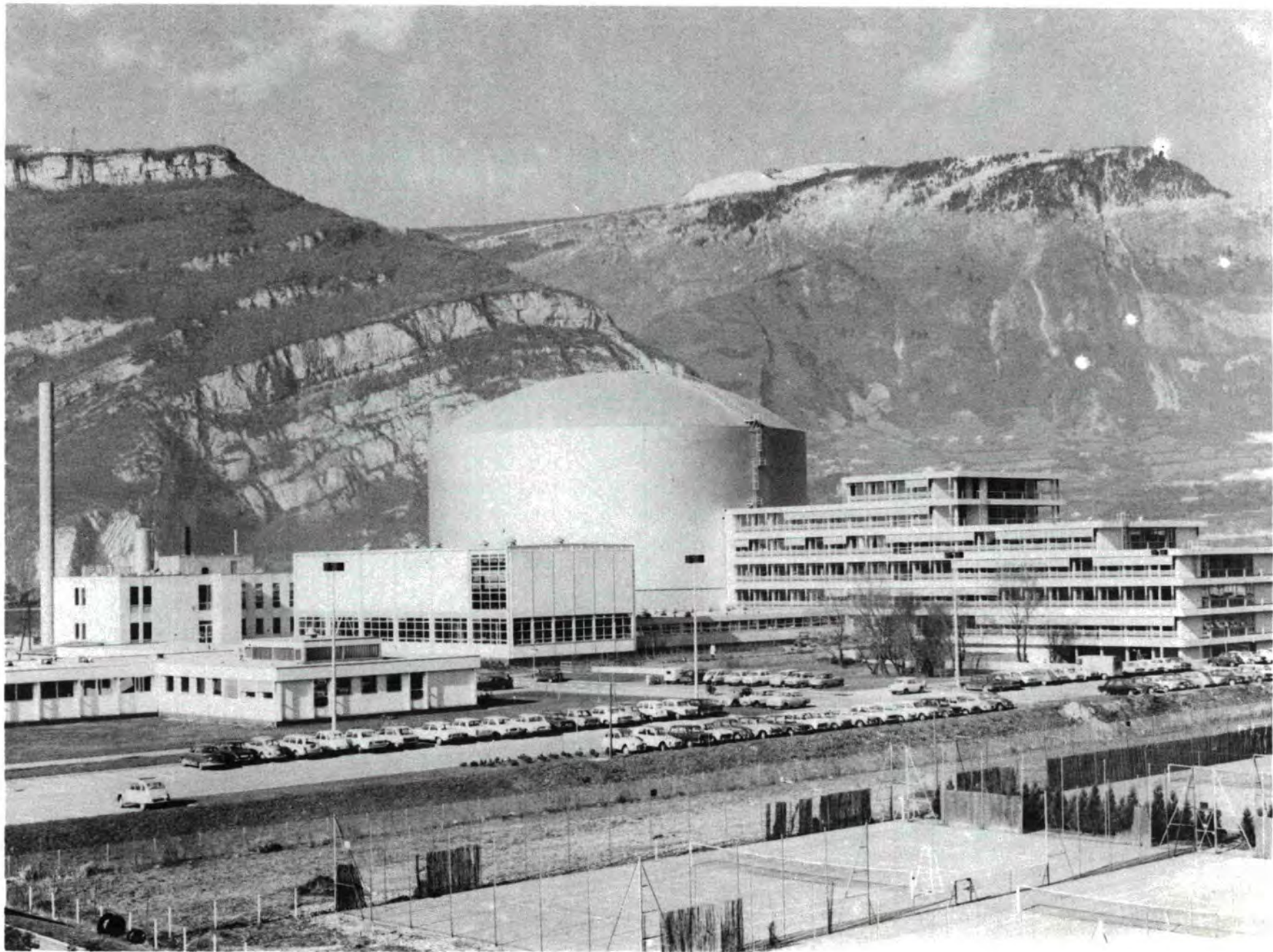
ILL

**RAPPORT ANNUEL
1972**

**RAPPORT ANNUEL
1972**

DE L'INSTITUT MAX VON LAUE - PAUL LANGEVIN

B.P. 156 Centre de Tri
38042 GRENOBLE Cedex
FRANCE
Tél. (76) 97.41.11.



Sommaire

	<u>Page</u>
<u>Introduction</u>	1
<u>Programme Scientifique</u>	
Collège 1 : Théorie (Garching)	7
Collège 2 : Théorie (Grenoble)	16
Collège 3 : Physique Nucléaire	33
Collège 4 : Propriétés des Cristaux Purs	43
Collège 5 : Structures Cristallographiques et Magnétiques	64
Collège 6 : Liquides, Gaz et Substances Amorphes	74
Collège 7 : Imperfections des Cristaux	86
Collège 8/9 : Chimie Physique/Biochimie Physique	95
Projets Nouveaux	102
<u>Publications</u> (Grenoble, Garching)	109
<u>Thèses de 3^{ème} Cycle et de Doctorat d'Etat</u>	122
<u>Ecole d'Eté Organisée par l'ILL</u>	123
<u>Fonctionnement du Réacteur</u>	124
<u>Services Techniques</u>	127
Support Scientifique	127
Support Technique	135
<u>Administration</u>	139

INTRODUCTION

INTRODUCTION

La mise en route à la fin du mois de mai des sources froide et chaude marque l'achèvement de la phase de construction du réacteur. Afin de mettre en route et de régler les premiers spectromètres à neutrons, le réacteur a fonctionné à puissance réduite du milieu du mois de juillet jusqu'au début du mois d'octobre et à pleine puissance jusqu'au milieu du mois de décembre.

En 1972 comme précédemment, en ce qui concerne l'activité scientifique, l'accent a été mis sur l'achèvement des dispositifs expérimentaux et la préparation des expériences. En automne 3 spectromètres sont entrés en pleine activité permettant d'effectuer toute une série d'expériences. La majorité des spectromètres sont dans leur phase finale de construction et fonctionneront dans les premiers mois de 1973. Il a fallu plus de temps que prévu pour résoudre les problèmes d'étalonnage, de monochromateurs, de bruit de fond et de raccordement des instruments au calculateur qui les pilote. Etant donné l'importance de ces problèmes et le grand nombre d'équipements expérimentaux qui ont dû être mis en route presque simultanément, ce long délai était inévitable. Sept des dix guides de neutrons prévus ont été achevés, deux autres ont été mis en fonctionnement, pour l'instant dans une version simplifiée.

Une attention particulière a été portée dans l'implantation des calculateurs, vu leur importance pour une utilisation rationnelle du réacteur. Le système pour l'acquisition des données CARINE qui utilise des calculateurs T 2000 de la firme Télémécanique, et qui assure le fonctionnement des diffractomètres, est pratiquement terminé et marche d'une façon satisfaisante. Le système d'acquisition des données NICOLE utilisant des calculateurs TR86 de la firme Telefunken, est prévu pour les installations de temps de vol et pour celles dans lesquelles il y a un grand nombre de canaux. Il a fait de grands progrès et on l'a déjà utilisé pour les premiers instruments. Pour le grand calculateur, l'Institut a fait une

analyse très complète de l'ensemble des calculateurs existants sur le marché international. On a considéré particulièrement les besoins spécifiques de l'Institut dans le domaine de l'analyse des données, ce qui a conduit à choisir un centre de calcul utilisant le système DEC 1070; cette installation fonctionnera au cours du premier semestre 1973.

Comme le but de l'Institut est avant tout de mettre ses installations expérimentales à la disposition des utilisateurs extérieurs, on a pris toute une série de mesures d'organisation destinées à faciliter le déroulement rationnel des expériences et à assurer le soutien optimal aux utilisateurs du réacteur qui ne viennent souvent que pour peu de temps. Dans ce contexte on a créé un Secrétariat Scientifique qui a pour fonction de centraliser tous les contacts avec les utilisateurs extérieurs du réacteur. Il tient en outre un registre des propositions d'expériences envoyées pour examen, et de celles déjà acceptées mais attendant d'être réalisées. Sur demande, ce secrétariat fournit des formulaires et donne les directives sur la procédure à suivre pour les nouvelles propositions d'expériences. En outre, il distribue des listes de toutes les propositions acceptées, des brochures avec la description de tous les spectromètres, leurs paramètres principaux ainsi que les données sur les différents canaux et guides de neutrons avec l'indication des mesures de densité de flux neutroniques. Les fonctions des collègues scientifiques qui se répartissent les activités scientifiques de l'Institut, ont été précisées. Pour cette raison, les secrétaires des 6 collèges expérimentaux ont des pouvoirs particuliers qui leur accordent une plus grande liberté de décision en ce qui concerne le déroulement du programme des expériences. La discussion des nouvelles propositions d'expériences et l'examen de leur possibilité de réalisation ont représenté en 1972 un énorme travail pour l'ensemble des collègues, c'est-à-dire pour le personnel scientifique de l'Institut. Pour chaque expérience, un chercheur de l'Institut est désigné qui devra aider l'utilisateur extérieur dans la réalisation de son expérience. Pour assurer l'assistance technique nécessaire au fonctionnement et à l'entretien des dispositifs expérimentaux, on a mis en oeuvre une réorganisation du personnel technique. Elle comprend également la création d'un service spécial qui s'occupe de la préparation et du fonctionnement des cryostats, des fours et des installations de vide.

La politique des contrats à durée limitée qui a été pratiquée exclusivement jusqu'à présent, et qui concerne l'ensemble du personnel scientifique de l'Institut, a soulevé un problème crucial. Pour assurer un fonctionnement axé sur la continuité et le développement permanent d'instruments coûteux, il est indispensable de pouvoir offrir à un nombre restreint de chercheurs qualifiés, des emplois de caractère permanent. Dans ce contexte, il est envisagé de créer 12 postes permanents pour des physiciens expérimentés dans la technique des neutrons. Pour cela il a été créé une sous-commission spéciale du Conseil Scientifique qui a examiné les premières candidatures à de tels postes. La présence de chercheurs de cette nouvelle catégorie a comme conséquence inévitable l'établissement d'un programme de recherche de haut niveau propre à l'Institut, tout en maintenant la proportion actuelle de 70 % des expériences du programme scientifique provenant de laboratoires extérieurs.

Au cours de l'année 1972, l'Institut a organisé les réunions suivantes:

25 et 26 mai	"Journées de discussion sur la diffusion des neutrons et le magnétisme"
5 et 6 juin	"Réunion sur la diffusion des neutrons en chimie"
26 juin au 1 juillet	"École d'été sur la diffusion des neutrons et le magnétisme"
19 et 20 oct.	"Journées de discussion sur les liquides, les substances amorphes et les métaux hydrogénés."

L'Institut a étendu ses relations internationales. Un programme d'échange avec les réacteurs de Brookhaven, Dubna et Risø a été fixé. Les premiers jalons ont été posés pour établir un programme de même nature avec Chalk River et Oak Ridge. Des négociations préliminaires sont en cours avec les représentants de l'EMBO, qui ont pour but d'augmenter l'activité de l'Institut dans le domaine de la biologie.

Les négociations concernant l'entrée de la Grande Bretagne comme troisième partenaire à part entière ont été menées pendant la deuxième moitié de 1972 et ont été couronnées de succès. En conséquence, un grand nombre de propositions d'expériences faites par les chercheurs anglais ont été

incluses par l'Institut dans son programme. Afin de ramener la période d'attente à une durée raisonnable pour les nouvelles propositions, nous avons défini un nouveau programme de construction, au cours d'une série de réunions. Il devra être réalisé dans les 3 années à venir et il apportera un élargissement considérable et un complément aux instruments déjà existants. Il devra se poursuivre parallèlement à l'activité expérimentale qui entre dans sa phase de plein fonctionnement.

Grenoble, le 1 mars 1973

R.L. Mössbauer

ETAT DE L'APPAREILLAGE EXPERIMENTAL

Instrument N°	Type	Canal/Neutrons	Etat du montage et de la mise au point	Début des expériences de routine
IN1	Spectromètre à 3 axes	Tube/chauds	Fonctionnement de routine	Depuis 15/2/1973
IN2	"	Tube/thermiques	"	Depuis 1/10/1972
IN3	Spectromètre à 3 axes (Tanzboden)	Guide/thermiques	Montage terminé; test jusqu'au 15/3/1973	1/4/1973
IN4	Temps de vol (cristal tournant)	tube/thermiques	" " ; " " 1/4/1973	1/4/1973
IN5	" (4 chopper)	guide/froids	" presque terminé; test jusqu'au 1/4/1973	1/4/1973
IN6	Spectromètre à 3 axes (Tanzboden)	Tube/chauds	Pièces mécaniques prêtes; début du montage 1/5/1973	1/4/1974
IN7	Chopper statistique	Tube/thermiques	Montage terminé; mise au point jusqu'au 1/4/1973	1/4/1973
IN8	Spectromètre à 3 axes	Tube/thermiques	Fourniture des pièces jusqu'au 1/6/1973; montage terminé 1/8/1973	1/4/1974
IN9	Spectromètre à cible de protons polarisés	Guide/froids	Montage du filtre de protons terminé; 1. test 1/4/1973	Automne 1973
IN10	Spectromètre à rétrodiffusion	Guide/froids	En progrès	Début 1973
D1A	Diffractomètre à 2 axes	Guide/thermiques	Montage terminé; problème d'intensité	1/5/1973
D1B	" à 2 axes	Guide/thermiques	" " " "	1/5/1973
D2	" à 2 axes	Tube/thermiques	Fonctionnement de routine	Depuis 1/8/1972
D4	" à 2 axes	Tube/chauds	Fonctionnement de routine, à l'exception des températures de mesure élevées	Depuis 1/2/1973
D5	Diffractomètre à 3 axes avec analyse de polarisation	Tube/chauds	Montage terminé; mise au point jusqu'au 1/4/1973	1/4/1973
D6	Diffractomètre "Hérisson"	Guide/thermiques	Montage terminé; problèmes de bruit de fond	?
D7	Diffractomètre pour diffusion élastique	Guide/froids	Montage terminé; en fonctionnement	1/3/1973
				.../...

Instrument N°	Type	Canal/Neutrons	Etat du montage et de la mise au point	Début des expériences de routine
D8	Diffractomètre à 4 cercles	Tube/thermiques	Montage presque terminé; mise au point jusqu'au 30/4/1973	1/5/1973
D9	" " "	Tube/thermiques	Fabrication en cours; début du montage 1/4/1973	1/3/1974
D10A	Spectromètre à 3 cercles	Guide/thermiques	Montage terminé; test du monochromateur + analyseur jusqu'au 1/10/1973	fin 1973
D10B	Diffractomètre à 4 cercles	Guide/thermiques	Fonctionnement de routine	depuis 1/11/1972
D11A	Diffusion à petits angles	Guide/froids	Fonctionnement de routine	depuis 1/7/1972
D12	Diffractomètre pour la "méthode modifiée de Laue"	Guide/thermiques	Montage commencé	fin 1973
PN1	Spectromètre de produits de fission	Tube/thermiques	Montage non terminé à cause de dégâts de corrosion dans le canal	1/8/1973
PN2	Spectromètre à électrons de conversion	Tube/thermiques	Spectromètre primaire testé; montage jusqu'au 1/5/1973	1/8/1973
PN3	Spectromètre gamma I	Tube/thermiques	Montage terminé; en fonctionnement	1/3/1973
	Spectromètre gamma II	Tube/thermiques	Montage en cours; mise au point jusqu'au 1/5/1973	1/5/1973
PN4	Spectromètre Anti-Compton	Tube/thermiques	En fonctionnement	depuis 1/6/1972

PROGRAMME SCIENTIFIQUE

COLLEGE I

"THEORY GARCHING"

ZUSAMMENFASSUNG

Die Arbeitsgebiete der theoretischen Physiker in Garching sind sehr vielfältig, da viele Gäste zu der Gruppe gehören. Es sind jedoch drei Hauptthemen erkennbar:

Die Untersuchung der Kristalldefekte auf die Verunreinigungen (seltene Erden) in einem Metall

Dies ist schon seit längerem ein Tätigkeitsgebiet der Gruppe; in diesem Jahr konnten nun die bisher erzielten Resultate in einer Synthese zusammengefasst werden: deutlicher Einfluss der Verunreinigungen auf die Temperatur beim Übergang in die supraleitende Phase; Einfluss auf die Thermokraft in der normalen Phase, mögliche regelmäßige Anordnung der Verunreinigungen in einem Gitter, wobei eine ferromagnetische Struktur erscheint, etc.. Eine Reihe von Einzelpunkten wurden eingehender untersucht, insbesondere Verunreinigungen mit nicht-magnetischem Grundzustand.

Die Untersuchung verschiedener Oberflächenprobleme

Insbesondere hat Fulde die Bedeutung einer realistischen Behandlung der d-Elektronen an der Oberfläche eines Übergangsmetalls hervorgehoben. Er hat gezeigt, dass sich die d-Anregungen an der Oberfläche qualitativ ändern. Dadurch hängt die magnetische Kopplung zwischen der Oberflächenschicht und dem Rest stark von der benutzten Methode ab; sie kann sogar das Vorzeichen wechseln. Diese Untersuchung arbeitet eine

Reihe von Faktoren heraus, die für jede seriöse Theorie der Oberflächenphänomene an Phasenübergangsmetallen wesentlich sind.

A-15-Verbindungen wurden von Dieterich untersucht

Auch hierbei handelt es sich um die Fortsetzung und Vertiefung eines Problems, das schon seit einigen Jahren bearbeitet wird. Die kürzlich erzielten Ergebnisse betrafen die Untersuchung der Grüneisenkonstante (in Gegenwart von soft modes), deren Verhalten aufgrund der sehr schwachen Fermi-Energie höchst anormal ist. Es scheint, dass dieser Effekt zwischen den bestehenden theoretischen Modellen entscheiden könne. Ausserdem hat Dieterich eine Untersuchung der Fermi-Oberfläche dieser Stoffe mit Neutronenstreuung vorgeschlagen.

Die Gruppe ist auch weiterhin aktiv auf dem Gebiet der Supraleitung, wie die Arbeit von Aoi über die Winkelabhängigkeit des kritischen Feldes einer dünnen Schicht zeigt. Es soll auch auf die sehr umfassende Arbeit von Hirst über die Theorie der Elektronenspin-Resonanz der 3d-Verunreinigung in Metallen hingewiesen werden, die eine höchst wirksame Methode zur Untersuchung der elektronischen Zustände in diesen Systemen darstellt.

Zu diesen eigenen Tätigkeitsgebieten der Gruppe kommen noch sehr verschiedenartige Arbeiten der zahlreichen Gastforscher, die das Leben der Gruppe bereichert haben.

RESUME

Les activités des théoriciens de Garching sont très diversifiées du fait notamment de la présence de nombreux visiteurs. Trois grands thèmes cependant se détachent :

L'étude des Effets de Champ cristallin sur des Impuretés de Terres Rares dans un Métal

L'activité du groupe en ce domaine est déjà ancienne; cette année a permis de faire la synthèse des résultats acquis : influence caractéristique des impuretés sur la température de transition en phase supraconductrice, influence sur le pouvoir thermoélectrique en phase normale, possibilité pour les impuretés de s'ordonner en réseau régulier avec apparition d'une structure ferromagnétique etc... Divers points ont été approfondis, en particulier le cas des impuretés dont l'état fondamental est non magnétique.

L'étude de Divers Problèmes de Surfaces

En particulier, l'importance d'un traitement réaliste des électrons d à la surface d'un métal de transition a été soulignée par Fulde qui a montré que la nature des excitations d était profondément modifiée en surface. De ce fait, le couplage magnétique entre la surface et la masse est très sensible à la méthode utilisée et peut même être d'un signe opposé à celui de la masse. Ce travail dégage un certain nombre de facteurs essentiels à toute théorie honnête des phénomènes de surface sur les métaux de transitions.

L'étude des composés de type A-15, menée par Dieterich

Ici encore, il s'agit de la continuation d'un travail en profondeur mené depuis plusieurs années. Les résultats acquis récemment ont concerné l'étude de la constante de Grüneisen du mode mou dont le comportement est très anormal du fait de la très faible énergie de Fermi. Il semble que cet effet puisse trancher entre les modèles théoriques en présence. Dieterich a d'autre part suggéré la possibilité d'étudier la surface de Fermi de ces matériaux par diffusion de neutrons.

Le groupe reste actif dans le domaine de la supraconductivité comme en témoigne le travail de Aoi sur la dépendance angulaire du champ critique d'un film mince. Il convient de souligner aussi le travail très complet de Hirst sur la théorie de la résonance de spin électronique des impuretés 3d dans les métaux, qui fournit un moyen d'étude très puissant des états électroniques dans ces systèmes.

A ces activités propres au groupe viennent s'ajouter des travaux très divers, menés par les nombreux visiteurs dont le laboratoire a bénéficié.

1. Scientific Collaborators of the College

K. Aoi	(until 30/9/1972)
T.H. Cheung	(since 15/11/1972)
W. Dieterich	
A. Eggington	(until 30/9/1972)
P. Fulde	
L. Hirst	
B. Hönerlage	(D)
M.C. Leung	
H. Mais	(D)
G. Meissner	(until 15/4/1972)
M. Klenin	
E. Østgaard	(until 31/7/1972)
M. Papoular	(until 31/8/1972)
I. Peschel	
U. Schmidt	(D)
W. Selke	(D)
G. Stollhoff	(D)
H. Takayama	(since 1/9/1972)
H. Trinkaus	(since 1/11/1972)
T. Tsuzuki	(until 31/3/1972)

D = Doctor student

G. Meissner has been nominated Professor for Theoretical Physics at the University of Saarbrücken.

2. Visiting Scientists

P.H. Handel	(University of Missouri)	23/5 - 22/7/1972
J. Hertz	(Cambridge University)	3/7 - 19/7/1972
W. Klose	(Universität Saarbrücken)	28/8 - 10/9/1972
A. Luther	(Harvard University)	18/7 - 28/7/1972
W. Tausendfreund	(University Saarbrücken)	18/7 - 24/7/1972 and 26/7 - 11.8/1972
V. Korenman	(University of Maryland)	has spent a part of his sabbatical year at our Institute.

3. Scientific Activities

3.1 - Phase Transitions

Theory of Condensation :

Heterogeneous Nucleation and Fisher's Droplet Picture.

Fisher's droplet model was applied to study the condensation of the phase transition Liquid to Gas.

A. Eggington (with D. Stauffer, C.S. Kiang, E.M. Patterson, O.P. Puri, G.H. Walker and J.D. Wise Jr.).
(Phys. Rev. B 6, 2780 (1972)).

3.2 - Excitons

Approximative Expression for the Binding Energy of Isotropic Biexcitons.

A formula was given for the binding energy of the biexciton as a function of the electron-to-hole mass ratio.

P.H. Handel

(submitted for publication).

3.3 - Liquid Crystals

Magnetic Stabilization of Nematic Turbulence

It was shown that under an applied magnetic field, turbulence starts off in a nematic liquid at higher critical Reynolds numbers. Also, the internal scale of turbulence is enlarged.

M. Papoular

(Phys. Letters 38 A, 173 (1972)).

3.4 - Superconductivity

3.4.1 - $H_c(\theta)$ and Tinkham's formula for high-field superconductors.

A theory and measurements have been done for the angular dependence of the upper critical field $H_c(\theta)$ of two-dimensional high-field superconductors (thin Al films). The results are found to be in good agreement with the theory of Fulde and Maki, and of

Werthamer, Helfand and Hohenberg. It was shown that unless the sample is very dirty and the temperature is low ($T \ll T_c$), Tinkham's formula, which was originally derived without including Pauli paramagnetism, describes well the angular dependence even in the case where H_c is limited by the Pauli paramagnetism. It was also shown that in a thin film in contrast to a bulk material, Pauli paramagnetism can limit $H_{c//}$, even at temperatures close to T_c .

K. Aoi (with R. Meservey and P.M. Tedrow)
(Phys. Rev. B 1973).

3.4.2 - Superconductors with Crystalline Field Split Impurities : Upper Critical Field and Specific Heat.

We have continued the investigation of crystalline field effects on the properties of superconductors containing rare-earth impurities. Thereby attention was focused on impurities with a nonmagnetic ground state. The upper critical field H_{c2} and the jump of the specific heat at the phase transition were calculated.

P. Fulde (with J. Keller)
(Submitted to Journal of Low Temp. Phys.)

3.5 - A-15 Compounds

3.5.1. - Anomalous Grüneisen Constants in V_3Si

The TA soft mode sound velocity of cubic V_3Si under an applied tetragonal shear strain is investigated on the basis of the linear chain model of A15 compounds. We find that the d-electrons give rise to Grüneisen constants of order g/E_F which is large compared to unity because the Fermi energy E_F is supposed to be much smaller than the electron-phonon coupling constant g .

The temperature dependence of the Grüneisen constants at low temperatures is related to the slope of the electronic density of states near E_F , thus suggesting a method to discriminate between different models for the density of states (Labbé-Friedel and Cody-Cohen-Halloran model). Modifications of the Grüneisen constants of non-transforming V_3Si -samples in the superconducting state are also

discussed.

W. Dieterich

(Z. Physik 254, 464 (1972)).

3.5.2 - Neutron Scattering as a Method

for Fermi Surface Investigations

High- T_c A15 compounds are suggested to be suitable materials for which Fermi surface investigations by means of thermal neutron scattering might be possible. The structure of the differential neutron-d-electron cross-section at small scattering angles is connected in a simple way with parameters defining the Fermi surface of the linear chain model. The magnitude of the cross-section is estimated and compared with the phonon background.

W. Dieterich

(to be published)

3.6 - Crystalline Field Effects in Metals

3.6.1 - Review of the Present State of Research

A survey was given of different physical effects which are caused by the crystalline electric field splitting of rare earth ions in metals. Thus the rare earth ions may be impurities dissolved in a metallic matrix or they may form a regular lattice. In the former case one has to distinguish the cases of normal conducting and superconducting matrix. In the case of a normal matrix the thermoelectric power shows an anomalous behaviour due to the impurity levels. If the matrix is superconducting large deviations result from the theory of Abrikosov and Gorkov which describes the influence of non-split magnetic impurities on superconductivity. A comparison of the theory with available experiments was presented. For the case that the rare earth ions form a regular lattice a discussion was given of the various aspects of the collective excitations in the paramagnetic state. Special attention was paid to the soft mode problem of exchange induced ferromagnets. Furthermore the influence of impurities was discussed on the excitation spectrum (localized modes, resonant modes, etc.) and on the magnetic ordering temperature.

P. Fulde and I. Peschel
(Adv. in Physics 21, 1 (1972))

3.6.2 - The Excitation Spectrum of Van Vleck Para- and
Ferromagnets taking the Full Level Scheme into Account

The excitation spectrum of Van Vleck paramagnets was analysed including all crystalline field energy levels. It was shown that transitions among high lying levels lead to satellite peaks in the linewidth of the low lying excitations. The effect occurs in special regions of q-space and is strongest for temperatures close to the magnetic ordering temperature.

I. Peschel, M. Klenin and P. Fulde
(J. Phys. C : Solid State Phys. 5, L194 (1972)).

3.7 - Surface Physics

3.7.1 - Surfaces of Transition Metals

The properties of transition metal surfaces were studied with particular emphasis on Ni. The renormalized atom approach was used and it was argued that the d-state excitations are narrowed at the surface and the d-hole count is reduced. The magnetic coupling of the surface layer to bulk was investigated in detail. Spin-dependent surface resonances of the Friedel type can exist, and the magnetic metals can cause antiferromagnetic coupling of the surface moment to bulk. Model calculations were presented in an attempt to describe Ni.

P. Fulde (with A. Luther and R.E. Watson)
(Submitted to Phys. Rev.)

3.7.2 - A Theory of Surfaces of Van Vleck Ferro- and Paramagnets.

Surface effects of exchange-induced Van Vleck ferro- and paramagnets were investigated. It was pointed out that surface magnetism may exist at temperatures considerably above the bulk Curie temperature and even if the bulk is an intrinsic Van Vleck paramagnet. Model calculations using a point charge model were done for a 6-, 8- and 12-fold coordination of the crystal field ligands. They demonstrate

that the magnetic surface properties are usually very different from those of the bulk.

I. Peschel and P. Fulde

(Submitted to Zeitschrift f. Physik)

3.8 - Magnetic Impurities

3.8.1 - Doubly Bottlenecked E.P.R. in Cr-Mn-Cu

In cooperation with an experimental group in Darmstadt the temperature dependence of the E.P.R. linewidth in Cr-Mn-Cu was measured. A generalization of the Hasegawa theory for the case with two species of paramagnetic impurities was derived and found to exhibit two interconnected bottlenecked conditions. Our data indicate that Cr-Mn-Cu is doubly bottlenecked, i.e. that both Cr and Mn participate dynamically in the EPR.

L.L. Hirst (with W. Schäfer, D. Seipler and B. Elschner)

(Submitted to Phys. Rev.)

3.8.2 - Theory of E.P.R. of 3d Impurities in Metals

It was shown that the generalized s-d interaction model appropriate to a 3d impurity with orbital degrees of freedom gives rise in some cases to a large spin-lattice relaxation rate in addition to the usual cross relaxation to the conduction-electron spin. The calculation showed why bottlenecking is effective for some 3d impurities and ineffective for others, leading to qualitative differences in the observed EPR behaviour. It is emphasized that, as a result of the bottlenecking phenomenon, EPR is a uniquely powerful method for determining the electronic states of 3d impurities in metals.

L.L. Hirst

(Submitted to Adv. in Physics).

COLLEGE II

"THEORY GRENOBLE"

ZUSAMMENFASSUNG

Bei den Arbeiten der theoretischen Physiker in Grenoble heben sich zunächst zwei langfristige Unternehmen ab, die beide zu einer Reihe von Veröffentlichungen geführt haben. Das erste betrifft die Untersuchung von Vibrationen, die durch Fehler in Polymerketten (wie etwa Polyäthylen) hervorgerufen werden. Schmid und Hölzl haben gezeigt, dass man die Methode von Lifshitz diesem Problem anpassen kann (unter Verwendung der Green'schen Funktionen). Sie können so die Untersuchung eines Konformationsdefektes auf eine lokalisierte Störung zurückführen, die analytisch behandelt werden kann. Das Ergebnis ist ein sehr kompakter und geschmeidiger Formalismus, der in ein bisher ganz unübersichtliches Gebiet Ordnung bringt. Die Methode wird sicher ein weites Anwendungsfeld in der Infrarot- und Raman-Spektroskopie finden. Ein weiteres umfangreiches Programm wurde von Ranninger und Natoli durchgeführt und betrifft 2-Magnonen-Resonanzzustände in Antiferromagneten. Mit verschiedenen Methoden (Bewegungsgleichungen, Störungstheorie) ist es ihnen gelungen, den Einfluss dieser Resonanzen auf die Raman- und Neutronenstreuung herauszuarbeiten, wobei die letztere viel weniger spektakuläre Effekte ergibt.

Die übrigen Arbeiten der Gruppe gelten sehr verschiedenartigen Gebieten. Zwei Themen sind besonders zu nennen: die Untersuchung von magnetischen Verunreinigungen und die Arbeiten über ungeordnete Systeme. Das Problem der magnetischen Verunreinigungen wurde sowohl im Rahmen eines s-d-Modells (Einfluss unmagnetischer Verunreinigungen, Wechselwirkung von magnetischen Verunreinigungen) als auch unter dem Aspekt "lokalisierte Spinfluktuationen" behandelt. Insbesondere haben Iche und Zawadowski eine exakte Beziehung

für ein halbgefülltes magnetisches Störstellenniveau aufgestellt, wodurch alle auf der RPA begründeten klassischen Modelle in Frage gestellt werden - ein recht unorthodoxes Resultat, das aber weitreichende Folgen hat. In ihren Arbeiten über ungeordnete Systeme behandelten Gaspard und F. Cyrot zunächst Störbänder in dotierten Halbleitern; sie gehen jetzt über diesen Rahmen hinaus und analysieren methodisch die verschiedenen für diese Probleme verwendeten Näherungen.

Die Initiative von Villain hat auch dieses Jahr zu zahlreichen Arbeiten im Zusammenhang mit Problemen der statistischen Mechanik geführt: Anomale Neutronenstreuung in Eis (in Beziehung zu dem theoretischen "Acht-Vertex-Modell"); Phasenübergang vom flüssigen zum festen Zustand, und kürzlich Untersuchung ein- bzw. zweidimensionaler magnetischer Systeme.

Insgesamt geht die Aktivität der Theoretiker weit über den Rahmen der neutronenspezifischen Probleme hinaus. Die Verbindung zu den Experimentalphysikern ist dennoch sehr eng, und viele der durchgeführten Arbeiten könnten zu Reaktorexperimenten führen (z.B. der Vorschlag von Kleban, die kinetische Energie von supraflüssigem Helium zu messen, oder die von Fischer und Radha durchgeführte Berechnung des Streuquerschnitts für fast-magnetische Verunreinigungen).

RESUME

Parmi les activités des théoriciens implantés à Grenoble, il faut détacher d'abord deux opérations de longue haleine, qui ont chacune donné lieu à une série de publications. La première a trait à l'étude des vibrations induites par les défauts dans des chaînes de polymères (style polyéthylène). Schmid et Hölzl ont montré qu'on pouvait adapter à ce problème la méthode de Lifshitz (utilisant des fonctions de Green). Ils peuvent ainsi ramener l'étude d'un défaut de conformation à une perturbation localisée, accessible à un traitement analytique : d'où un formalisme très compact et souple, qui met de l'ordre dans un domaine

jusque là confus, et qui devrait trouver une large application en spectroscopie I.R. et Raman. L'autre effort d'envergure est celui de Ranninger et Natoli sur les résonances à deux magnons dans les antiferromagnétiques. Par des méthodes diverses (équations de mouvement, perturbations) ils ont pu dégager l'influence de ces résonances sur la diffusion Raman et celle des neutrons, celle-ci donnant des effets beaucoup moins spectaculaires.

Les autres travaux du groupe ont porté sur des sujets très divers. Deux thèmes retiennent l'attention : l'étude des impuretés magnétiques et celle des milieux désordonnés. Le problème des impuretés magnétiques a été abordé à la fois dans le cadre d'un modèle s-d (influence d'impuretés non magnétiques, couplage entre impuretés magnétiques) et sous l'angle "fluctuations de spin localisées". En particulier, Iche et Zawadowski ont établi une propriété exacte pour un niveau d'impureté magnétique à demi rempli qui remet en question tous les modèles classiques fondés sur la RPA - résultat tant soit peu iconoclaste, mais riche d'implications. Les travaux menés par Gaspard et Mme Cyrot sur les milieux désordonnés portaient initialement sur les bandes d'impuretés dans les semiconducteurs dopés; ils débordent maintenant ce cadre, et se tournent vers une analyse méthodologique des différentes approximations utilisées dans ce type de problèmes.

Villain, pour sa part, a continué à animer de nombreux travaux liés à des problèmes de mécanique statistique: anomalie de diffusion des neutrons par la glace (liée au modèle théorique des "huit vertex"), transition liquide-solide, et tout récemment, étude des systèmes magnétiques à une ou deux dimensions.

Dans l'ensemble, l'activité des théoriciens déborde très largement les problèmes spécifiquement liés aux neutrons. Le couplage avec les expérimentateurs reste néanmoins solide, et les travaux susceptibles de déboucher vers des expériences sur le réacteur ont été nombreux (par exemple, la proposition de Kleban pour mesurer l'énergie cinétique de ^4He liquide, ou le calcul par Fischer et Radha de la section efficace de diffusion par des impuretés presque magnétiques).

1. Scientific Collaborators of the College

R. Benda (until Mai 31st, 1972)
K. Bohnen (D)
K. Fischer (until September 15, 1972)
J.P. Gaspard (D)
K. Hölzl
G. Iche (D)
P. Kleban
A. Kugler
K. Matho (D) (until Sept. 30, 1972)
P. Nozières (since Oct. 1st, 1972)
J. Ranninger
C. Schmid
C. Thibaudier (since Feb. 1, 1972)
J. Villain

(D) = Doctor student

2. Visiting Scientists

F. Cyrot-Lackmann (CNRS, since Nov. 1st, 1972)
L. Dobrzynski (CNRS, since Nov. 1st, 1972)
W. Kress (TU München, since Oct. 1st, 1972)
K.H. Michel (University of Antwerp, July 24-Aug. 12, 1972)
R. Natoli (CNEN Casaccia, Feb. 11 - April 20, 1972)
W. Saam (Ohio State University, June 15 - Sept. 15, 1972)
N. Szepfalusy-Menyhard (Central Research Institute, Budapest,
Nov. 11 - Dec. 11, 1972)
P. Weiss (Rutgers University, since Oct. 1, 1972).

Three times in 1972 a week of lectures and talks has been organized together with the members of College 1 (Theory Garching). During these weeks several seminars were held in which the newest theoretical results have been discussed together with the members of the various experimental colleges.

3. Scientific Activities

3.1 - Properties of Pure Crystals (J. Ranninger, C. Thibaudier,
J. Villain)

3.1.1 - Proton Imperfection in Ice and Related Problems

J. Villain and Julius Schneider have calculated the elastic neutron cross-section (diffuse scattering) in order to obtain precise information, by neutron scattering, on the interaction between bonds.

J. Villain, J. Schneider

"Correlation Functions in Non Polar Ice".

(Communication at the International Symposium of the Physics and Chemistry of Ice, Ottawa, August 1972).

The approximation applied has shown that $S(q)$ for $\vec{q} = 0$ is singular. This property has been proved to be strictly exact by J. Villain.

J. Villain

"The Three-Dimensional Eight Vertex Model and the proton-Proton Correlation Functions in Ice".

(Solid State Comm. 10, 967-970 (1972)).

Generalizing this demonstration and starting from a unitarity hypothesis, C. Thibaudier and J. Villain have calculated the transition point of the most general 8-vertex model in 3 dimensions.

C. Thibaudier, J. Villain

"On the 3-Dimensional 8-Vertex Model"

(J. of Physics C 5, 3429, 1972)).

3.1.2 - Phase Transitions

A statistical model of the transition from the liquid to the solid state has been discussed by J. Villain, who has shown that the anomaly of the compressibility as anticipated by Schneider, Brout and Thomas is probably weak or negligible.

J. Villain

"The Homogeneous Helimagnet and the Liquid-Solid Transition"

(J. de Physique, June 1972, in print).

3.1.3 - Magnons

An extensive treatment of the resonance state of 2 magnons in Heisenberg antiferromagnets has been carried out by J. Ranninger in collaboration with C.R. Natoli (Casaccia, Roma) in a series of four articles and one letter :

In the first of these papers, by means of equations of motion, the electric and magnetic dynamical susceptibility for Heisenberg antiferromagnets with anisotropic exchange interaction and effective anisotropic field has been derived. The adopted approximations correspond to RPA.

C.R. Natoli, J. Ranninger

"Two Magnon Correlations in Antiferromagnets. An Equation of Motion Study" (J. Phys. C, 6, 323 (1973)).

The main aim of the second work was to calculate the temperature dependent 2-magnon Raman scattering cross-sections. The temperature behaviour of the 2-magnon resonance frequency is essentially determined by the temperature behaviour of the magnon frequency and can be described by undamped magnons in the framework of RPA. However, such a treatment yields a very bad representation of the experimental amplitude and width of the 2-magnon resonance curve. The 2-magnon Raman scattering cross-section for CoF_2 , NiF_2 and FeF_2 has been calculated by taking into consideration the magnon width. An excellent agreement with the existing experimental results has been found.

In the framework of these calculations of the collective excitations, the frequency renormalization as well as the magnetization of the sub-lattice, should be calculated in a self-consistent way. For CoF_2 effective spin $\frac{1}{2}$ -Hamilton function has again been derived. The constants of the exchange interaction calculated in this way have yielded a better agreement with the experimental 2-magnon resonance data.

C.R. Natoli, J. Ranninger

"Two Magnon Light Scattering in Rutile Structure Heisenberg Antiferromagnets" (J. Phys. C 6, 345 (1973)).

In principal this 2-magnon resonance state can be investigated, for the case of finite momentum. It turns out, however, that the weight factors appearing in the longitudinal neutron scattering cross-section do not weigh zone border magnons as in the case of Raman scattering, but rather magnons in the middle of the zone, where the state density is small in comparison to that at the zone border. Because of this the excited Z-magnon state does not lead, by means of neutron scattering, to a sharp resonance behaviour as for light scattering. It yields only a rather unstructured broad peak which ranges from the lower to the higher band limit of the 2-magnon state. For CoF_2 the scattering cross-section for momentum transfers $Q = \frac{2\pi}{a} (1.5, 0, 0)$ and $Q = \frac{2\pi}{a} (1, 0, 1)$ has been calculated and has been compared with the experimental results of Cowley.

C.R. Natoli, J. Ranninger
"Two Magnon Neutron Scattering in CoF_2 "
(J. Phys. C 6, 370 (1973)).

In the 4th of these articles a theoretical study has been made; whether, and in which way, the different methods of equations of motion and of the diagrammatic perturbation theory favour different approximations.

Whereas one- and two-particle properties can be described in the same way by the mean field and RPA approximation, respectively, this has not been realized for higher approximations. The repetition of the calculation of the 2-magnon properties by means of the diagrammatic perturbation theory has made it possible to transform the terms obtained in the first work into a form which has a physical meaning.

For the first time the magnon frequency renormalization has been derived for anisotropic exchange interaction by diagrams.

C.R. Natoli, J. Ranninger
"Dynamical Properties of Heisenberg Antiferromagnets.
Comparison of Equation of Motion and Diagrammatic Techniques"
(J. Phys. C 6, 386 (1973)).

In a letter, J. Ranninger and C.R. Natoli have indicated that the coupling constants are not determined unambiguously. An effective anisotropy field will be added to the coupling constant of the Ising part of the Heisenberg Hamiltonian in the term for the magnon frequency. This case is especially conspicuous for CoF_2 . The presence of an anisotropy field corresponds to a weaker exchange interaction than in the case of its absence. For the 2-magnon Raman scattering cross-section, this means a resonance frequency which is higher than in the case of absence of the anisotropy field. A slightly less prominent difference is seen also in the neutron scattering cross-section.

C.R. Natoli, J. Ranninger
(Phys. Letters B5, 3315 (1972)).

3.2 - Liquids and Amorphous Substances

(Gaspard, Kleban, Kugler, Saam)

3.2.1 - Neutron Scattering Function for Chemical Liquids

P. Kleban considered the limiting case in which the inter-particle potential becomes a hard core, and a general expression for the high-frequency tail of the neutron scattering function has been obtained. The result depends only on the repulsive part of the potential and the pair correlation function at small distances. Thus information about these quantities can be obtained from inelastic neutron scattering experiments. This may prove to be especially useful in the case of liquids and dense gases where there seems to be no other means of measuring these quantities directly. Preliminary examination of existing experimental data is encouraging.

P. Kleban
"Formula for the Tail of the Neutron Scattering Function"
(ILL Report 1972).

A. Kugler has introduced an exact representation for the density-density and one-particle motion response functions, which has been termed a "generalized mean field representation". The latter is analogous to the usual mean field approximation except that the static,

effective potential is replaced by one which is dependent on both wave number and frequency. On the basis of this representation he has calculated the van Hove coherent and incoherent scattering functions and compared them with the recent experimental measurements on liquid argon by Sköld et al.. A part of the experimental data was used for the determination of the characteristic relaxation times which play an important role in the theory. The agreement between the calculated and experimental scattering functions is in general excellent and can be taken as an indication of the easy applicability of the above mentioned formalism to the calculation of scattering functions.

A.A. Kugler

"Self-Motion Response and Incoherent Scattering Functions in Classical Liquids"

(Physics and Chemistry of Liquids, 3, 205 (1972)).

A.A. Kugler

"Collective Modes, Damping and Scattering Function in Classical Liquids"

(J. of Statistical Physics, in print).

3.2.2 - Superfluid He

In close collaboration with experimentalists (R. Scherm, D. Tocchetti), P. Kleban worked on a proposal to measure the kinetic energy of superfluid He by inelastic neutron scattering. The accuracy required to determine this within reasonable error seems to be somewhat more than can be obtained with current neutron scattering techniques.

P. Kleban

"Direct Measurement of the Kinetic Energy of He by Inelastic Neutron Scattering". (ILL report, 1972).

W. Saam calculated the inelastic neutron scattering cross-sections for superfluid He⁴ with a free surface, taking advantage of total neutron reflection at a free surface to eliminate volume-proportional terms. Within an ideal fluid model, he found the cross-section to contain only ripplon peaks separated distinctly from a smooth

background due to non-resonant single-phonon processes occurring near the surface of the liquid.

W.F. Saam

"Inelastic Neutron Scattering from Superfluid He⁴ with a Free Surface" (Phys. Rev. Letters, Sept. 1972)).

3.2.3 - Heavily Doped Semiconductors

J. P. Gaspard and F. Cyrot have used the moments method to describe the density of states of the impurity band in the metallic range just above the Mott transition. The density of states is obtained from its moments by a continued fraction development.

The moments were obtained by simulating the disorder on a computer. These results were compared with different analytical mean field approximations. It has been shown that these methods describe correctly the centre of the band but they were not able to describe the band tails and by this means to predict the localization edge. It was also shown that Lifshitz's "erosion" appears only in the case of strong electron-electron interaction.

J.P. Gaspard (Thèse de 3e Cycle)

"Reconstruction de Densité d'Etats à partir d'un Nombre Fini de ses Moments. Application à l'Etude d'une Bande d'Impuretés dans un Semiconducteur Dopé".
(Orsay, March 20, 1972).

J.P. Gaspard, F. Cyrot-Lackmann

"Density of States of the Impurity Band"
(Proceedings of the 11th Conference on the Physics of Semiconductors, Warsaw, July 25-29, 1972).

3.2.4 - Theory of Disordered Systems

J.P. Gaspard and F. Cyrot-Lackmann introduced a generalized cumulant expansion having a wide range of applicability in the field of disordered materials. As an example of this they considered the density of states of the impurity band in a semiconductor. They were able to deduce a recursion relation for the moments. For binary alloys

they showed that the single site approximation (CPA) is connected with the 1-cumulant, the pair approximation with the 2-cumulant etc...

J.P. Gaspard, F. Cyrot-Lackmann

"A generalized Cumulant Expansion for Disordered Systems"
(J. Phys. C 5, 1972).

3.3 - Imperfections in Crystals

The theoretical work on imperfections carried out in College 2 can be subdivided into dilute magnetic impurities, and structural defects. The latter are described in Chapter 3.4, Physical Chemistry (K. Hölzl, C. Schmid). The work on magnetic impurities comprises two groups, Kondo-effect and almost magnetic systems.

3.3.1 - Kondo-effect

K.P. Bohnen and K. Fischer continued the investigation of the influence of non-magnetic impurities on the Kondo-effect by considering statistically distributed impurities. For such a system the resistivity was calculated by treating the non-magnetic impurities in a mean field approximation. This leads to a modified density of states and thereby also to a modified Kondo temperature. For more rigorous treatment of the non-magnetic impurities, one has to restrict the calculations to terms of low order in the exchange coupling constant J . Furthermore the calculations have been restricted to small concentrations of the non-magnetic impurities. In this case the self-energy contains in the order J^3 a new singularity $\sim T^{-1/2}$ beside the Kondo singularity. In contrast to this result for the self-energy the new singularity does not appear in the transport properties. The reason for this behaviour is the cancellation of the singularity by vertex corrections.

K.P. Bohnen, K. Fischer

(to be published)

K. Matho completed his work on electronic properties of Kondo alloys with magnetic interaction between pairs of impurities.

K. Matho, M.T. Beal-Monod

"Concentration Effects in the Thermo-Power of Kondo Dilute Alloys"

(13th Int. Conf. on Low Temp. Phys., Boulder, USA, Aug. 1972)

K. Matho

"Kondo Temperature of Interacting Magnetic Impurities"

(J. of Phys. F, in print)

K. Matho, M.T. Beal-Monod

"A Pair Description of Resistivity Maxima in Kondo Dilute Alloys" (Phys. Rev. B 5, 1899 (1972)).

3.3.2 - Almost Magnetic Systems

(Localized spin fluctuations)

K. Fischer and Radha (see College 7) calculated neutron scattering cross-sections for almost magnetic systems like Pd Ni or AlMn.

K. Fischer, P. Radhakrishna

"Long-Range Correlations in Local Spin Fluctuation Systems" (Solid State Comm. 11, 1703 (1972)).

G. Iche and A. Zawadowski (Budapest) studied further correlations in the almost magnetic limit. They discussed the case of half-filled magnetic or almost magnetic impurities in noble metals and they developed an exact canonical transform which contradicts most of what one expects from the RPA (i.e. localized spin fluctuations).

A more quantitative analysis was carried out later by G. Iche. Using scaling laws he found that at reasonable low order of perturbation theory for a spin $\frac{1}{2}$, the Kondo effect and the local spin fluctuations are basically the same effect.

G. Iche

"Localized Spin Fluctuations"

(J. Low Temp. Phys. in print).

3.4 - Physical Chemistry

3.4.1 - Polymers in Solution

J. P. Gaspard and P. Colson (Université de Liège, Belgium) developed a method to deduce the distribution of lengths of macromolecules in solution by the analysis of the decay of electric birefringence (Kerr effect). By comparing their results with the distribution of sedimentation coefficients, they deduced a flexibility parameter for the macromolecules. Application was made to DNA and DNH samples, in native and sonicated state.

P. Colson, J.P. Gaspard

"Determination of the Relaxation Spectrum of Macromolecules in Solution by the Analysis of the Electric Birefringence". (Conference : Aspects Dynamiques des Changements de Conformation dans les Macromolécules Biologiques, Orléans 1972).

3.4.2 - Bulk Polymers

K. Hölzl and C. Schmid calculated the defect induced density of phonon states for highly crystalline polyethylene (PE) with kinks (conformation $gt\bar{g}$ where g , \bar{g} and t correspond to bond rotation angles of $\pm 120^\circ$ and 0°), folds (gg $t\bar{g}g$) and other likely most probable structural defects using an approach which is new in the following respects :

a) Lifshitz's Green function method was applied to vibrations of defect-containing high polymers. This means that infinitely long chains can be treated, the results are exact for small defect concentrations and, consequently, the assignment of typical frequencies to definite defect structure is unambiguous.

b) A new category of defects, conformational defects in polymers is made accessible to Lifshitz's Green function method by canonically transforming the conformational defect matrix from an unlocalized form to a localized form.

C. Schmid, K. Hölzl

"The Hamiltonian of Irregular Polymer Skeletons as Analytic Function of the Bond Rotation Angles"(Molecular Phys., in print).

shows symmetric (S) and antisymmetric (A) resonance modes due to a fold. The broken line represents the unperturbed density of states $g_0(\omega)$. The perturbed density of states is $g(\omega) = g_0(\omega) + c(\Delta g^S(\omega) + \Delta g^A(\omega))$. Characteristic peaks are seen at ≈ 275 and 295 cm^{-1} . We have identified them as localized modes of a fictitious chain with torsional degrees of freedom only (A' and S' in the figure) which couple to the stretch-bending modes thereby being shifted and broadened. Localized modes were found at $518.3(\text{A})$, $539.8(\text{S})$, $668.0(\text{A})$ and $669.0(\text{S}) \text{ cm}^{-1}$ (fold). From local symmetry arguments the symmetric (antisymmetric) lines are expected to be mainly Raman (IR-) active in a highly crystalline sample (Hölzl and Schmid 1972A).

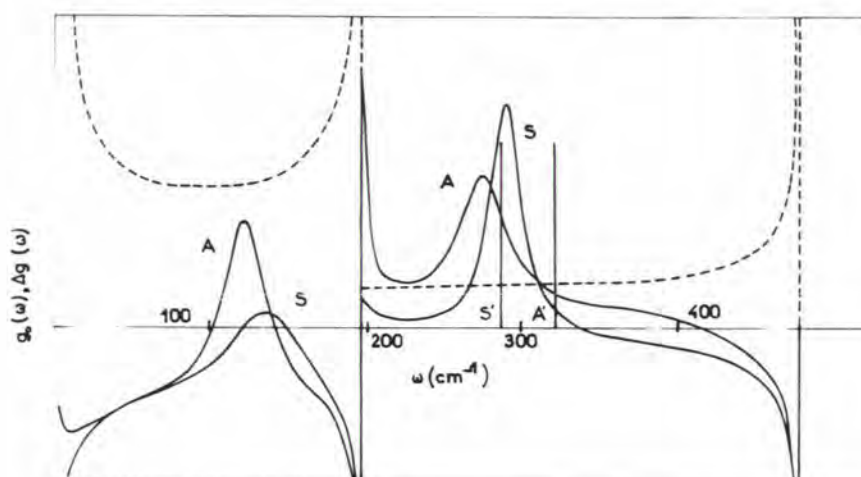


Figure 1.

The resonance modes of a tight fold.

c) The local symmetry of conformational defects has been used to classify these defects according to symmetry groups and to derive optical selection rules.

K. Hölzl, C. Schmid

"Group Theoretical Aspects of Conformational Defects in Polyethylene Chains". (J. Molecular Phys., in print).

d) In the single chain approximation (justified by the observed very small unit cell splitting of the phonon lines) the usual root sampling method has been replaced by exact complex integration, yielding smooth curves instead of histograms. Due to points a, c and d the numerical part of the calculations is drastically reduced as compared to root sampling.

C. Schmid, K. Hölzl

"A Semianalytical Method for the Exact Computation of the Phonon Green Function for Polymer Chains" (J. Pol. Sci.-Phys. Ed 10, 1881 (Oct. 1972)).

e) For the first time, defect induced modes in PE below 700 cm⁻¹ are predicted. Since this energy range comprises the purely skeletal modes the backbone approximation was adopted.

K. Hölzl, C. Schmid

"Localized and Resonance Modes in Polyethylene Below 700 cm⁻¹ due to Kinks and Folds" (J. Phys. C, as a Letter to the Editor, 5, L185-L187 (1972)).

Conformational defects induce :

- localized modes lying outside the bands of the regular chain, and, thus, having infinite life time (= zero line width) since their energy can be dissipated nowhere (harmonic approximation), and
- resonance modes falling into the ideal phonon band where, by a resonance phenomenon, they optically activate the ideal phonons, particularly at critical points. Additional resonance peaks, characteristic for the defect, may appear. As an example, Fig. 1

Conclusion

Conformational defects give rise to a number of peaks in $g(\omega)$ between 100 and 700 cm^{-1} which may be observable by neutron, IR- and/or Raman spectroscopy. The simultaneous appearance of two or more lines whose relative positions are known greatly increases the reliability of a structural analysis of polymers by spectroscopic means.

K. Hölzl, C. Schmid

"The Phonon Green Function for Polymer Chains"

(J. Pol. Sci. Phys. Ed. 10, 1853 (1972)).

K. Hölzl, C. Schmid

"The Calculation by the Green Function Method of Resonance and Localized Modes of a PE-skeleton containing Conformational Defects".

(Communication at the Conf. of the European Physical Society on "Radiation Scattering of Bulk Polymers". Strasbourg, May 1972).

4. Activities not yet Completed

4.1 - Pure Crystals

- Anharmonic Model of BaTiO_3 which explains well some Experimental Results (J. Villain)
- Application of Group Theory to the Inelastic Neutron Scattering from Plastic Crystals (J. Villain)
- Model for the Relaxation Mechanism in Nb_3Sn which explains the neutron scattering results near the Martensitic Phase Transition (J. Ranninger)
- Evaluation of Magnon Lifetimes in Anisotropic Exchange Heisenberg Antiferromagnets (J. Ranninger)
- Dipolar Interaction between 2 Isotropically Rotating Molecules (C. Thibaudier, F. Volino).

4.2 - Amorphous Materials

- Disordered Systems with Local Order - d-band of Liquid Transition Metals (J.P. Gaspard, F. Cyrot-Lackmann).

4.3 - Physical Chemistry

- Exact Phonon Green Function of Kirkwood's Model of Polyethylene (C. Schmid, K. Hölzl)
- Interpretation of Defect Induced Features in the Low Frequency Spectrum of Polyethylene (K. Hölzl, C. Schmid)
- Analytic Green Function for Torsional Vibrations of Polyethylene (C. Schmid, K. Hölzl)
- A Systematic Study of the Spectra of Rotational Isomers of Polyethylene (K. Hölzl, C. Schmid).

4.4. - Miscellaneous

- Theory of Dielectric Function and Collisional Damping of Electron Gas (A. Kugler).

COLLEGE III

"NUCLEAR PHYSICS"

ZUSAMMENFASSUNG

Das Kollegium "Kernphysik" besteht aus 5 Arbeitsgruppen:

- 1) Spaltproduktgruppe
- 2) (n,γ)-Gruppe
- 3) Dipolmoment-Gruppe
- 4) Beta-Zerfall-Gruppe
- 5) Aktivierungsanalysen-Gruppe

Die Gruppen 1 und 2 haben grosse Apparate an Strahlrohren aufgebaut und ein langfristiges Forschungsprogramm vorbereitet. Die Gruppen 3, 4 und 5 führen spezielle, zeitlich befristete Experimente an Neutronenleitern durch. Die Arbeit der Gruppen 3 und 4 dient der Untersuchung von Eigenschaften des freien Neutronen. Sie verwenden kalte, polarisierte Neutronen.

Die Ergebnisse der einzelnen Gruppen können folgendermassen zusammengefasst werden:

- 1) Das Spaltproduktspektrometer LOGENGRIN wurde getestet. Es erreichte die geforderten Spezifikationen. Darüber hinaus wurde durch Abblenden ein Massenaufklärungsvermögen $M/\Delta M = 8000$ ($\approx Q_{\beta} = 12.5$ MeV) erreicht.
- 2) Das 5.8m-Diffraktions-Gamma-Spektrometer ist funktionsbereit. Es erreichte die geforderten Spezifikationen. Das Anti-Compton-Spektrometer lieferte erste kernphysikalische Messergebnisse für den Kern Tb^{161} .
- 3) Das Instrument zur Messung des elektrischen Dipolmoments des Neutrons wurde aufgebaut. Der gemessene Neutronenfluss bestätigt die Abschätzung,

dass eine Messung während 60 Tagen eine Genauigkeit von etwa 10^{-25} cm erbringen sollte.

- 4) Das Instrument für die Untersuchung des Beta-Zerfalls polarisierter Neutronen ist im Teststadium. Die Messgenauigkeit für eine eventuelle Verletzung der Zeit-Umkehr-Invarianz wird bei einer Strahlzeit von 60 Tagen voraussichtlich um einen Faktor 5 auf 0.2 % verbessert.
- 5) Es wurden die ersten geologischen Proben mit Hilfe der Neutronen-Einfang-Gamma-Strahlung analysiert.

RESUME

Le Collège "Physique Nucléaire" est composé de 5 groupes de travail :

- 1) Produits de fission
- 2) Spectroscopie (n,γ)
- 3) Moment dipolaire
- 4) Désintégration β
- 5) Analyses par activation.

Les groupes 1 et 2 ont installé de grands appareils sur des canaux et préparé un programme de recherche à long terme. Les groupes 3, 4 et 5 effectuent des expériences spéciales à court terme sur des guides de neutrons. Le travail des groupes 3 et 4 a pour but d'étudier les propriétés du neutron libre, en utilisant des neutrons froids, polarisés.

Les résultats obtenus par les différents groupes peuvent être résumés comme suit :

- 1) Le spectromètre à produits de fission LOHENGRIN a été testé. Les spécifications exigées ont été obtenues. En outre, il a été atteint une résolution de masse $M/\Delta M = 8000$ ($\Delta Q_{\beta} = 12.5$ MeV), par une diminution de l'angle solide.
- 2) Le spectromètre γ à diffraction (rayon de courbure 5,8 m) est prêt à fonctionner. Les spécifications exigées ont été obtenues. Le spectromètre Anti-Compton a donné les premiers résultats (étude du noyau ^{161}Tb).

- 3) L'appareil pour la mesure du moment dipolaire électrique du neutron a été installé. Le flux de neutrons mesuré a confirmé l'estimation qu'une mesure de 60 jours donnerait une précision d'environ 10^{-25} cm.
- 4) L'appareil pour l'étude de la désintégration β des neutrons polarisés est actuellement testé. La précision de mesure pour une éventuelle violation de la conservation de l'invariance du temps sera probablement améliorée d'un facteur 5, ce qui donnerait une précision de 0,2 %. Cette estimation suppose une période de rayonnement de 60 jours.
- 5) Les premiers échantillons géologiques ont été analysés à l'aide de rayonnements γ instantanés émis après une capture neutronique.

1. Scientific Collaborators of the College

Asghar M.
 Bailleul G. (D)
 Börner H. (D)
 Greif J. (D)
 Henkelmann R. (since Febr. 1st, 1972)
 Hetzelt M. (D) (since Dec. 1st, 1972)
 Jeuch P. (D) (since Aug. 1st, 1972)
 Koch H.R.
 Maier B.P.K.
 Mampe W.
 Moll E.
 Pinston J.A.
 Roussille R. (D)
 Schrader H.
 Siegert G. (since April 1st, 1972)
 Sistemich K. (KFA, Jülich)

(D) = Doctor student.

2. Visiting Scientists

Bocquet J.P.	(UER 1, Grenoble)
Dress W.B.	(ORNL, Oak Ridge)
Gautheron J.P.	(CEN, Grenoble)
Heck D.	(GFK, Karlsruhe)
Liaud P.	(UER 1, Grenoble)
Miller P.D.	(ORNL, Oak Ridge)
Moussa A.	(UER 1, Grenoble)
Perrin P.E.J.	(CEN, Grenoble)
Schussler F.	(CEN, Grenoble)
Steinberg R.I.	(CNRS, Grenoble)
Vignon B.	(CNRS, Grenoble)

3. Survey about Experimental Facilities and their Advancement

3.1 - Mass Spectrometer for Unslowed Fission Products LOHENGRIN

(E. Moll)

The fission products are produced in a thin target of fissionable material inside the beam-tube H9. They are deflected in magnetic and electrostatic sector fields. Fission products of the same m/q arrive after $2\mu\text{s}$ in the exit slit. The intensity distribution along the exit-slit represents a velocity spectrum.

The spectrometer was tested with a point source emitting α -particles. The calculated deflection field strengths agreed (within experimental error (2 %)) with those observed in the experiment, which shows that the effective field boundaries had been correctly calculated and realized. Another test showed that the solid angle of the spectrometer is as calculated (3.2×10^{-4} sr). The focal points of the two deflection fields were found to coincide within experimental error and are separated by only 55 mm from the calculated focal point. This shows that the influence of the fringing fields on the focussing properties were correctly accounted for. The mass resolution at different points on the focal line is satisfactory.

An ionization chamber for the measurement of the specific ionization of fission products was constructed. According to measurements with heavy ions, one expects the following Z-dependence (Z = nuclear charge) of the specific ionization I :

$$\frac{\Delta I}{I} = 0.9 \frac{\Delta Z}{Z} .$$

The ionization chamber will be used for the measurement of nuclear charge distributions $P_Z(A,v)$ (A = mass number, v = velocity) of fission products.

Nuclear charge distributions can also be measured using very high mass resolution. Isobars with a mass difference of $Q_\beta = 5$ MeV will be resolved for $M/\Delta M = 20.000$. By narrowing the entrance slit we arrived at a resolving power $M/\Delta = 8000$. A further increase of resolution is hoped for in the future.

Several detector systems for the investigation of fission products (neutron-rich nuclei far from the beta-stability) have been built and (or) tested :

- a) Ge(Li) - detector for γ -rays, 40 cm^3 , $\Delta E = 2 \text{ keV}$ for ^{60}Co ;
- b) Si(Li) - detector for X-rays, 10 cm^2 , 5 mm thick, $\Delta E = 225 \text{ eV}$ for ^{55}Fe ;
- c) 4π -neutron detector with energy-independent efficiency;
- d) Several plastic-scintillator arrangements for β -counting.

These detectors will be used in connection with a tape transport-system which was developed and has reached velocities of $\approx 10 \text{ m/s}$: This allows the investigation of short-lived nuclei down to $T_{1/2} \approx 0.1 \text{ sec}$.

Publications:

G.F. Steib, E. Moll

"High-Voltage Conditioning at Large Gaps in Industrial Vacuum" (J. Phys. D, Vol. 6, 243 (1973)).

E. Moll

"The Franco-German High Flux Reactor and its Facilities for Nuclear Research" (Proceedings of the Conf. on Nuclear Structure Study with Neutrons, Budapest (1972)).

Seminars:

M. Asghar

"Préparation expérimentale des expériences avec des faisceaux séparés de produits de fission"; seminar at the Centre Nucléaire de Bordeaux-Gradignan (8/12/72).

E. Moll

"Parabel-Massenspektrometer für unabgebremste Spaltprodukte"; seminar on Heavy Ion Reactions at the University of Frankfurt/M. (1/3/72).

E. Moll

"Die kernphysikalischen Experimente am Hochflussreaktor in Grenoble"; seminar at the Institut für Technische Kernphysik der Technischen Universität Darmstadt (2/3/72).

E. Moll

"The Nuclear Physics Research Programme on the Franco-German Research Reactor"; Reactor Technology and Training Conf. at the University of Aston in Birmingham (7/4/72).

G. Siegert

"Das Auflösungsvermögen der Spaltprodukt-Parabelspektrographen LOHENGRIN in Grenoble"; Conf. on Ion-Optics at the University of Giessen (13/10/72).

3.2 - Nuclear Spectroscopy after Thermal Neutron Capture

3.2.1 - Internal Conversion Electron Spectrometer BILL

(W. Mampe)

The spectrometer has an internal target at the end of a vertical V-shaped beam tube. It is composed of two magnets. Specifications :

- . Relative line-width (FWHM) : $4 \cdot 10^{-4}$
- . Energy range : 0.03 to 10 MeV
- . Target area : 2.5 cm x 8 cm
- . Neutron flux density at the target : $3 \times 10^{14} / \text{cm}^2 \cdot \text{s}$.

The source changing tube and the electron beam tube with its collimator system have been finished and tested, and disturbing

magnetic fields compensated. Test measurements at the spectrometer magnets showed that the field distribution is satisfactory. The field stabilization device was demonstrated to have an accuracy of $< 10^{-5}$. The spectrometer is being tested by means of a radioactive electron source, and by a counter telescope or by radiographs.

3.2.2 Gamma-ray Spectrometers (H. R. Koch)

The gamma-radiation of the target (20 to 200 mg in the through channel H6-H7 at $\approx 8 \times 10^{14}$ neutrons/cm²,s) is measured simultaneously by 4 spectrometers :

GAMS I : Bent crystal spectrometer. Data :

Crystal: quartz; 110-plane; reflection orders 1, 2, 3, 4 and 5;

4 mm thick; window \varnothing 40 mm; radius of curvature 5.8 m.

Interferometric measurement of the diffraction angle : precision 0.05".

Resolving power : 1.1" to 6" , depending on source thickness. Zero-angle determined by control crystal with which a reference gamma-line is observed.

Energy range : 30 to 1000 keV; after completion of GAMS II and GAMS III : 30 to 400 keV.

Control and data-acquisition : PDP 11, in parallel with GAMS II, GAMS III and BILL.

State of development in Dec. 1972 : test measurements.

GAMS II and GAMS III : Bent crystal spectrometers, arranged on top of one another such that the rotation axes coincide.

Crystal : quartz, 12 mm thick, window 60 mm x 60 mm; radius of curvature 24 m .

Zero angle determined by symmetrical operation of the two spectrometers about the beam axis.

Energy range : 300 keV to 1.5 MeV.

The other characteristics are the same as those specified for GAMS I.

One quartz crystal has been bent and tested. It has a resolution of 1.8" for 411 keV (2nd order reflection). The peak reflectivity is 20 %; the integral reflectivity 0.5 seconds of arc. This result is satisfactory. The crystal is very regular despite its large volume.

3.2.3 Anti-Compton-Spectrometer (D. Heck)

The 30 cm³ Ge(Li) - Diode is situated at the center of an Anti-Compton shield consisting of a plastic scintillator and a NaI(Tl) -detector. The peak to Compton ratio at 1332 keV is 24 : 1. It will be used in the energy range from 300 keV to 3 MeV.

This instrument has been working since October 1972. Results on the Tb ¹⁵⁹(2n,γ) Tb ¹⁶¹ reaction have been obtained.

Publications:

D. Heck and U. Fanger

"Ein γ-Spektrometer mit Compton-Unterdrückung für Kernstrukturuntersuchungen nach Neutroneneinfang"; Report, Kernforschungszentrum Karlsruhe, Nr. 1604 (1972).

B.P.K. Maier, W. Mampe and T. von Egidy

"The Double Spectrometer BILL with Sector Fields for Conversion Electron Measurements at the HFR-ILL in Grenoble"; Contribution to the Conf. on Nuclear Structure Study with Neutrons, Budapest 1972, p. 58.

H.R.Koch, O.W.B. Schult, J.A. Pinston, R. Roussille and H. Börner

"Curved Crystal Gamma-Ray Spectrometer at the Grenoble High-Flux Reactor"; Contribution to the Conf. on Nuclear Structure Study with Neutrons, Budapest 1972, p. 40.

Seminars:

H.R. Koch

"Measurement of Angles with an Interferometer"; Crystal-Spectrometer Meeting of the SIN (Schweizer Institut für Nuklearforschung) at Fribourg (Switzerland), 1/3/1972.

3.3 - Measurement of the Electric Dipole Moment of the Neutron

(P.D. Miller, W.B. Dress)

During the second half of 1972 most of the apparatus has been assembled. The mechanical assembly of the magnetic resonance spectrometer on its turn-table, and the assembly of those on the platform, have been completed.

A detector has been developed and the counting rates have been measured as 6×10^6 n/sec. The detector uses a ⁶Li loaded glass scintillator with fairly standard photo-multiplier and fast electronic equipment.

A PDP-11 computer (furnished by the ILL) has been interfaced to a CAMAC crate containing the necessary standard and special modules for the data acquisition system.

The measurement of the neutron intensity confirms our earlier estimates that 60 days of data acquisition should produce a sensitivity of a small number times 10^{-25} cm for the dipole moment. This compares with the present upper limit of 1.0×10^{-23} cm. This estimates assumes that the apparatus is mechanically stable enough to take full advantage of the intensity available.

3.4 - Time Reversal Invariance in Polarized Neutron Decay

(P. Liaud, R.I. Steinberg)

For the weak interactions, polarized neutron decay offers the possibility of a precision test of T-invariance. The interpretation of such a test, moreover, will not be limited by uncertainties due to nuclear structure effects. The present best experimental limit on T-non-invariance has been obtained by Erokolimsky et al. (Phys. Lett. 27B (1969) 557) and is at the 1 % level.

A new experiment on T-invariance is currently about to commence at the guide tube H14. The detection chamber is composed of two sections of 4 detectors each. The decay electrons are detected by plastic scintillators, the recoil protons by thin-layer NaI(Tl) scintillators mounted at right angles to the electron detectors. The purpose of having a thin layer proton detector is to minimize background sensitivity. These detectors are made by vacuum evaporation of bulk crystals.

The data acquisition system for the experiment centers upon a start-stop magnetic tape drive. The tapes produced will be analysed off-line on a large computer.

The neutron polarizing guide for this experiment has been built at Munich and installed at the I.L.L. and is about to be tested. The polarization is to be measured with a second smaller magnetic guide. The availability of an intense beam of cold neutrons will

permit a large increase in the density of polarized neutrons in the detection region with respect to previous experiments. An overall precision of 0.2 % is hoped for based upon a 3-month beam availability.

3.5 - Activation Analysis using Neutron Capture Gamma Rays

(R. Henkelmann)

The apparatus using an 8.5 cm³ Ge(Li) detector was installed at the cold neutron guide H 16. It was used to determine the detection limits of about 30 elements in the low-energy range (0 - 1 MeV) and in the high-energy range ^x (5-8 MeV). The detection limits of the elements B, Cd, Sm, Eu and Gd are less than 10⁻⁹ g. The analysis of a number of rare earth elements in geological samples (monazite, scheelite, syenite, etc...) has recently been carried out. Further applications such as the analysis of B, Cd, In and Hg and especially of Pt and Pd in very pure Cu will be carried out.

^x R. Henkelmann, H.J. Born
"International Meetings on Activation Analysis,
Saclay, Oct. 1972
Analytical Use of Neutron Gamma Rays
(Proceedings, in press).

COLLEGE IV

"PROBLEMS OF PURE CRYSTALS"

ZUSAMMENFASSUNG

Zum Jahresende 1972 war ein Instrument in routinemässigem Betrieb (IN2, Dreiachsenspektrometer an thermischem Strahlrohr. Zwei weitere Apparaturen des Kollegiums (IN1, 3-Achsenspektrometer an der heissen Quelle, IN3, Tanzbodenspektrometer an thermischem Neutronenleiter) waren nahe der Vollendung oder im Testbetrieb. IN6 (Tanzbodenspektrometer an der heissen Quelle) und IN7 (pseudo-statist, Chopper an therm. Strahlrohr) sind im Aufbau begriffen.

Eine Berechnung des Wirkungsgrades vertikal mechanisch gebogener pyrolytischer Graphit-Kristalle wurde durchgeführt. Sie werden als Monochromatoren benützt werden. Weiter wurden Versuche mit der Technik thermisch gekrümmter Kristalle gemacht. Diese Technik wird an den Apparaturen IN3 und D10 für Messungen (hoher Auflösung) von kleinen Energieüberträgen und kleinen Energieverschiebungen verwendet werden. Die Versuchsergebnisse sind erfolgversprechend. Für jene Apparaturen, welche demnächst fertig gestellt sein werden (IN1, IN3, IN5), sind Rechnungen und Messungen über Intensität, Auflösung und Untergrund angestellt worden.

Erste erfolgreiche Phononmessungen sind am IN2 im Januar 1972 gemacht worden (Probe : Kupfer). Der routinemässige Betrieb dieser Apparatur begann im Oktober 1972. Seither sind mehrere Experimente abgeschlossen worden:

Einige Zweige der Dispersionsrelation von ZnO wurden gemessen mit dem Ziel, die Valenz- und Coulomb-Beiträge zur Bindung zu bestimmen.

Zum ersten Mal wurden Spinwellen in einem eindimensionalen Ferromagneten gefunden (CsNiF_3). Ihre Dispersion wurde entlang der c-Achse und entlang der a-Achse untersucht. Es wurde die überraschende Entdeckung gemacht, dass die Spinwellen auch dann noch wohl definiert sind, wenn die Korrelationslänge kleiner ist als die Wellenlänge.

Ein Studium der unelastischen Streuung im ferroelektrischen KNbO_3 bei Zimmertemperatur zeigte überdämpfte Streuung nur in der Nähe des Zonenzentrums, während mit Röntgenbeugung diffuse Intensität in reziproken Ebenen gefunden worden ist.

Andere Phonon-Experimente, die durchgeführt wurden, stehen im Zusammenhang mit den supraleitenden Eigenschaften der Übergangsmetallkarbide (TiC) und der A15-Verbindungen (V_3Si). Schalenmodell-Rechnungen über MgF_2 und RbI zeigten im letzteren Falle, dass ein quasi-harmonisches "atmendes" Schalenmodell mit 9 Parametern eine sehr gute Beschreibung der gemessenen Phononendispersions-Kurven erlaubt.

Schliesslich wurden theoretische Arbeiten vollendet, die zur Vorbereitung von Experimenten über diffusionsartige Bewegung in reinen Kristallen dienen. Dazu gehören die Entwicklung von Modellen für Molekülrotation, welche eine Überlagerung von Rotationsdiffusion mit sprunghafter Umorientierung zulassen.

RESUME

Vers la fin de l'année un instrument (IN2, spectromètre à trois axes sur un canal thermique) était opérationnel. Deux autres instruments du Collège (IN1, spectromètre à trois axes sur la source chaude, et IN3 spectromètre "Tanzboden" sur un guide à neutrons thermiques) étaient en cours de finition ou en période de test. IN6 (spectromètre "Tanzboden" sur la source chaude) et IN7 ("chopper" pseudo-statistique sur un canal thermique) sont en construction.

L'efficacité de cristaux courbés de graphite pyrolytique a été calculée. Ils seront utilisés comme monochromateurs. Des tests pour obtenir des cristaux courbés par la méthode du gradient de température variable ont été faits sur IN3 et D10. Cette technique des cristaux courbés sera utilisée pour des mesures nécessitant une haute résolution (pour les transferts d'énergie et faibles changements d'énergie). Les premiers résultats sont encourageants.

Par ailleurs, des efforts étaient faits pour calculer et mesurer l'intensité, la résolution et le bruit de fond d'instruments en cours de finition tels que IN1, IN3 et IN5. Les premières mesures de phonons remplies de succès avaient été faites sur IN2 en Janvier 1972 sur un cristal de cuivre. Le programme d'expérience a démarré en Octobre 1972, et plusieurs études ont été faites depuis cette date: quelques branches de la relation de dispersion de phonons ont été mesurées dans ZnO avec l'espoir de comprendre la contribution aux forces de liaisons des forces de Coulomb et des électrons de valence. Des ondes de spin ont été trouvées pour la première fois dans un ferromagnétique unidimensionnel (CsNiF_3). L'investigation des relations de dispersion s'est faite le long de l'axe c et le long de l'axe a. A notre surprise les ondes de spin étaient bien définies même quand la longueur de corrélation est plus petite que la longueur d'onde. Une étude de diffusion inélastique à température ambiante dans le ferroélectrique KNbO_3 révéla des modes de vibration fortement atténués près du centre de zone seulement, alors que des mesures effectuées aux rayons X ont montré qu'on obtient une intensité diffuse dans des plans réciproques.

D'autres mesures de phonons ont été faites relatives aux propriétés supraconductrices des carbures de métal de transition (TiC) et des composés A-15 (V_3Si). Des calculs de modèle en coquille ont été faits pour MgF_2 et RbI. Dans ce dernier cas on a trouvé qu'un modèle quasi-harmonique à enveloppes fluctuantes à 9 paramètres donne une bonne description des courbes expérimentales de dispersion de phonon. Finalement des travaux théoriques ont été effectués comme préparation d'études de mouvements aléatoires dans les solides. Ceci inclut le développement de modèles de rotation moléculaire qui permettent une superposition de diffusion rotationnelle et de réorientation par sauts discrets.

1. Scientific Collaborators of the College

1.1 - Group: Phonons and Phase Transitions

R. Almairac (D)
R. Currat
B. Dorner (since Nov. 1, 1972)
W. Drexel
G. Duesing (until Oct. 31, 1972)
P. Felix (D)
S. Roth
R. Scherm
M. Steiner (since Sept. 1, 1972)

(D) = Doctor student

1.2 - Group: Anharmonicity and Line-shapes

J. Kalus (until Oct. 1, 1972)
W. Kress (since Oct. 1, 1972)
J. Meyer (D)
E. Schedler
W. Teuchert (D) (since Feb. 1, 1972)
V. Wagner (since Oct. 1, 1972)

1.3 - Group: Magnetism

M. Bonfante (D)
A. Castets (D)
B. Hennion (CEN - Saclay)
G. Parisot
D. Tochetti
C. Vettier (D)

1.4 - Group: Random Motions and Critical Fluctuations

A. Dianoux
F. Douchin
R. E. Lechner
F. Volino
W. B. Yelon (since Sept. 15, 1972)

1.5 - Group: Laser

A. Hamelin (D)

2. Visiting Scientists

R. Comès	(Orsay)
O. Merbt	(U. München)
W. Reichardt	(Gfk-Karlsruhe)
E. Steichele	(TU München)
G. Wegener	(Mol)

3. Survey of Experimental Facilities

3.1 - Three-axis Spectrometer IN1 for High Incident Energies

(D. Tochetti)

This instrument is for inelastic scattering measurements with large energy changes at medium resolution. In collaboration with M. Bonfante, A. Castets, B. Hennion and G. Parisot, the main work on the IN1 setup has consisted in adjustment and improvements. A particular problem has been the insufficient neutron intensity. After several monochromator crystals had been tested, a Cu (220) crystal of 15 mm and a mosaic spread of 0.25° was chosen (reflectivity 10% at 0.664 \AA). The neutron flux finally obtained at the sample position is $1.1 \cdot 10^7 \text{ n cm}^{-2} \text{ sec}^{-1}$. The effective scattering angles of the monochromator are $12^\circ \leq \theta_M \leq 25^\circ$, corresponding to a wavelength $0.53 \leq \lambda \leq 1.08 \text{ \AA}$.

The vertical divergence of the beam will be increased by a factor of 2 after the plug at the beam exit has been modified. In the cylinder between monochromator and sample, a collimator without Soller slits was inserted in order to reduce the width of the beam to 2 cm, which corresponds to the average size of samples to be used.

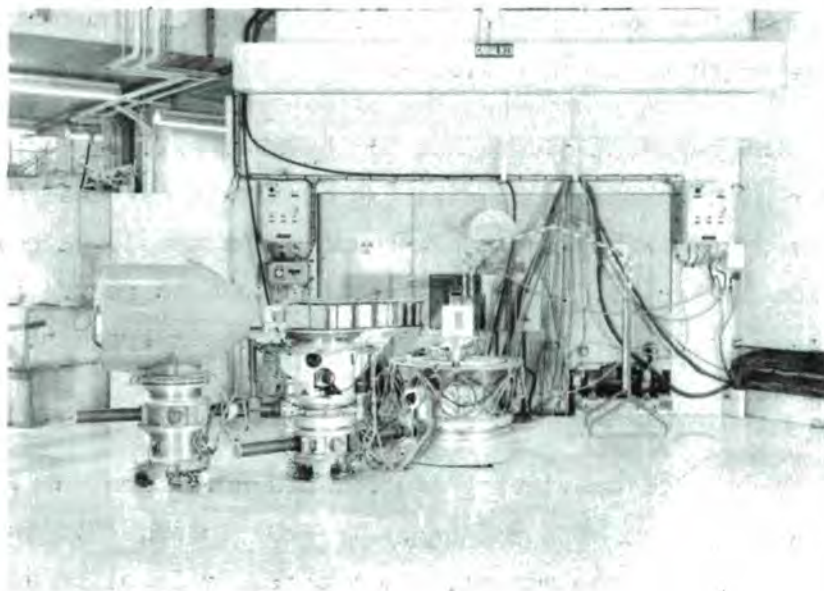
Inelastic scattering experiments have been carried out (optical spin waves in Fe_3O_4 and phonons in ZnO) in order to check the background. At the moment, the background level is 10 c/min with open beam. The background of fast neutrons is about 4 c/min. Additional shielding is planned and ordered for a further reduction of the background. The automatic control of IN1 has been realized by an operational program. Later on it will be replaced by a program compatible with IN2, IN3 and IN8.

3.2 - Three-axis Spectrometer with Double Monochromator - IN2

(G. Duesing, B. Dorner and R. Currat)

This instrument is used for measurements of dispersion curves, soft modes near phase transitions etc. with medium energy changes at medium to high resolution.

Since the departure of G. Duesing on Oct. 31, 1972, B. Dorner and R. Currat have been responsible for the instrument. First, successful phonon measurements were made by G. Duesing, R. Almairac, J. Desseaux and B. Dorner on Jan. 26, 1972 using a Cu sample and without computer control. Optical checks, computer connection, writing of control programs, refinement of the floor and a few checks with neutrons were performed during the spring and summer. The monochromating crystals for high incoming energies, especially Cu (220), were found to be rather poor by having a too small mosaic width. Finally Cu (220) and Zn (002) crystals on loan from IFF-KFA-Jülich were used. Further crystals like Cu (111) and Pyrolytic Graphite (PG)(002) were found to be acceptable. Part of the PG



- Set up of the Three-Axis Spectrometer with Double Monochromator IN2.

crystals were ordered to be vertically bent following calculations made and published by R. Currat. Filters of PG were tested and used, those of Be are being ordered. A description of the instrument including some measurements on intensity and resolution will be published by G. Duesing and B. Dorner. A user's manual by G. Duesing is available at the Institute. Investigations of physical problems started in October 1972. The following were investigated:

- 1) ZnO by B. Dorner, W. Drexel, G. Duesing, W. Wegener, K. Thoma
- 2) TiC by W. Drexel, R. Currat and W. Reichardt
- 3) CsNiF₃ by M. Steiner and B. Dorner
- 4) KNbO₃ by R. Currat, P. Felix and R. Comès

A detailed description of experiments 1 - 4 is given below. There is still further work to be done on the instrument itself. This will be carried out whenever time is available between experiments. Altogether the instrument is in good shape and has been working reasonably well.

3.3 - Three-axis Spectrometer of the "Tanzboden Type" IN3

(E. Schedler)

The apparatus is suited for investigation of small effects in lattice dynamics with medium and small energy changes at very high resolution. It is a three-axis spectrometer which can be run in a conventional way. The major difference between this device and a conventional three-axis spectrometer is the changeable distances between the monochromator and analysator crystals. These degrees of freedom are necessary in order to measure any phonons at ideal focussing conditions.

The set-up of IN3 was essentially completed by the end of 1972.

First measurements at the spectrometer with the bending device for crystals have shown that the curvature desired, as well as the reflectivity theoretically expected, can be obtained. Furthermore, considerations have been made about the calculation of neutron

counting rates, the resolution and the determination of phonon polarisation vectors for one-phonon scattering experiments on a three-axis spectrometer.

J. Kalus

"The Counting Rate of a Three-Axis Spectrometer".

(Z. Physik 254, 148 (1972))

and

J. Kalus

"The Measurement of Phonon Polarization Vectors with

Three-Axis Spectrometers" (Z. Physik 254, 162 (1972))

Another more general publication about neutron scattering will be submitted.

J. Kalus (to be submitted in Annales de Physique)

The thermal curvature of ideal single crystals which represents a new method for the production of effective neutron monochromators has been tested successfully.

J. Kalus, E. Schedler and A. Tippe (to be published)

Computer programs have been established for the following problems:

- Calculation of neutron counting rates (one-phonon scattering for any form of the momentum space elements) (J. Kalus)
- Force constants analysis on F_{cc} -lattices for fitting procedures also in nonsymmetric directions (J. Meyer)
- Calculations of dispersion curves and structure factors in Se (D. Teuchert)
- Automatic control of IN3.

3.4 - Three-axis Spectrometer for High Incident Energies IN6

(R. Scherm)

The instrument IN6 was originally designed as a triple axis spectrometer with fixed take-off angle for hot neutrons. It shares the beam hole H13 (hot source) with the four circle

diffractometer D9. In the original design the shielding of both monochromators was a big water tank, IN6 and D9 working in a horizontal and vertical plane respectively.

Due to technical reasons and especially to safety problems, the water tank shielding was abandoned in August 1972. Both spectrometers are now foreseen to work in the horizontal plane. In addition, the monochromator angle of IN6 is now variable. This meant a complete redesign of the shielding parts of both spectrometers.

The essential mechanical parts, i.e. the monochromator table, sample-, analyser- and detector- units are ordered and nearly completed. The monochromator shielding and heavy shielding along the primary beam is still in the design state, as well as the shielding of the analyser-detector unit. A special study to obtain suitable curved crystals will be made soon.

The instrument is expected to be operating at the end of 1973 or beginning of 1974.

3.5 - Statistical Chopper IN7 (W. Drexel)

The statistical chopper is a time of flight instrument using a pseudostatistically modulated incoming neutron beam with a duty cycle of 50%. It will be mainly used for coherent neutron scattering experiments on line shaped solid state excitations in small and highly absorbing samples.

The shielding of the primary spectrometer, rather complicated because of the limited space between the two neighbouring experiments, could not be accomplished in 1972. As test experiment the determination of the phonon dispersion in Au is envisaged. It is intended to check during the test period the resolution program of IN7, a modification of Cooper and Nathans' three-axis resolution program. A computer program for the determination of the energies and wave vectors of excitations causing peaks in the time of flight distribution, and a Born-von Karman fit program for a first evaluation of main symmetry phonons are available.

3.6 - Three-axis Spectrometer With a Single Crystal Monochromator IN8

(D. Tochetti, B. Dorner)

Because many proposals arrived for measurements on a three-axis spectrometer at a thermal beam tube, the Scientific Council decided in the spring to build IN8. The physical concept was discussed and defined in the summer. It will be a three-axis spectrometer with a single crystal monochromator at beam tube H10. It is designed to provide high intensity with medium resolution. By means of the one crystal monochromator it will be very useful at high incoming energies. The construction started in the fall. The instrument is expected to be in operation by the end of 1973.

4. Scientific Activities

4.1 - Phonons and Phase Transitions

4.1.1 - Phonon Dispersion in ZnO (B. Dorner, W. Drexel, G. Duesing, W. Wegener, K. Thoma)

ZnO was selected to be the first sample on IN2 because from time of flight measurements by W. Wegener and S. Hautecler it was known that with the size of the sample (2 cm^3) phonons could be investigated. Having branches up to 20 THz frequencies, these measurements would cover the range of IN2. From a theoretical point of view it was of interest to understand the valence part and the Coulomb contribution to the binding. K. Thoma from Inst. f. Theor. Physik, Darmstadt, did some preliminary model calculations before the measurements were started and is going to refine his model to fit the obtained results. W. Wegener from the CEN-SCK Mol/Belgium took part in the measurements. There was not enough time to do all the work. Dispersion branches were measured for two different directions. In the $(\xi 00)$ direction an interaction of the branches and their rearrangement was observed experimentally (see Figure 2). We would like to continue with measurements on ZnO. A short publication will come out soon.

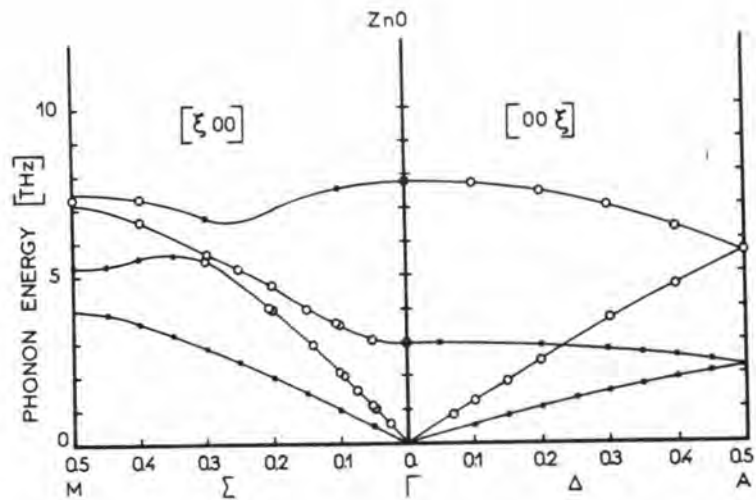


Fig. 2 Dispersion curves in ZnO at 300°K. ○,● symbols mean essentially longitudinal or transverse character of the polarization. The drawn curves are guide-lines for the eye.

4.1.2 - Phonon Dispersion of TiC on IN2

(W. Drexel, R. Currat, W. Reichardt)

TiC - a representative of the group of the transition metal carbides showing interesting superconducting and phase transitional properties - was chosen to be studied lattice dynamically by inelastic neutron scattering because it is assumed to be able to contribute to the solution of "the most basic unsolved problem in solid state physics" (J. C. Phillips): the problem of chemical bonding in the simplest compound solids. As the electronic band structure has been intensively studied in TiC, this substance should be an ideal starting point for a microscopic theory of lattice dynamics and cohesion if one knew the phonon dispersion relations.

The results obtained on IN2 up to now are shown as dots in Fig. 3. The curves are the results of a shell model calculation

by W. Drexel, with estimated parameters (no fit!). This model also served for the cross-section calculations. The measured phonon widths could be well explained with the help of the resolution program for IN2. As a consequence of the long measuring times (e.g. 500 min for the TA-phonon with $q = (0,0,0.5)$) the measurements could not be finished within the measuring period of about 10 days. This is mainly due to a lack in intensity because we are missing proper monochromators for high incident neutron energies ($E_0 \geq 50$ meV).

The measurements should be continued on IN1 (optical branches and upper parts of acoustical branches) and on IN2 (acoustical branches) when more suitable monochromators are available. Meanwhile we shall try to grow even larger samples.

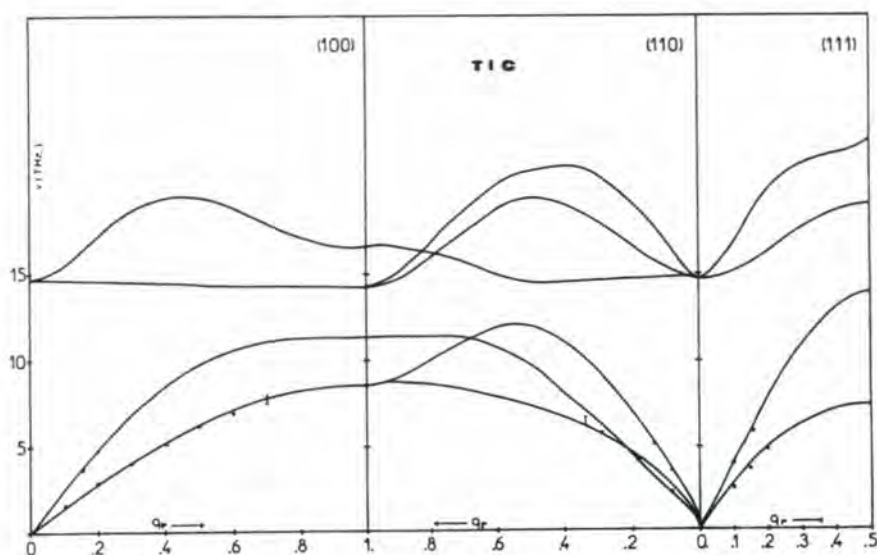


Fig. 3 Phonon dispersion in TiC

4.1.3 - Spin Waves in CsNiF₃ (M. Steiner, B. Dorner)

Using IN2 it was attempted to find magnons for the first time in a one-dimensional ferromagnet. The measurements were performed at 4.2°K. At this temperature CsNiF₃ shows a strong tendency to order along the c-axis, leading to diffuse planes in the reciprocal

lattice. These planes were found for $\Delta E = 0$. The dispersion of spin waves was investigated along the c-axis and along the a-axis (see Fig. 4) using the constant-Q method. The dispersion along q_c is equally well described by a classical Heisenberg model with energy gap and by a classical Heisenberg model without energy gap. The two models are different only for $0 \leq q_c \leq 0.1$. Spin waves were also found for 1°K. Surprisingly, the spin waves are well defined even when the correlation length is smaller than the wavelength.

M. Steiner, B. Dorner

"Spin Wave Measurements in the One-Dimensional Ferromagnet CsNiF₃"
(Solid State Comm. in press)

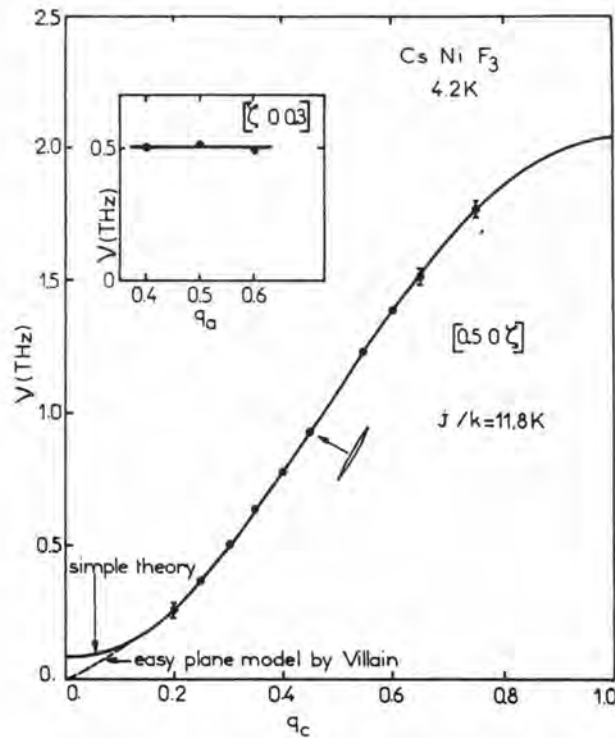


Fig. 4 Dispersion relation of the spinwaves along q_c and for different q_a in the insert. The solid and the dotted curve are the least square fits of two theoretical models to the data. The projected resolution is drawn as an ellipse.

4.1.4 - Study of Low Frequency Modes in Orthorhombic KNbO₃
on IN2 (R. Currat, P. Felix and R. Comes)

Inelastic neutron measurements were undertaken on the room temperature (ferroelectric) phase of KNbO₃ with a view to comparing the results with existing neutron data on the cubic (paraelectric) phase and diffuse X-ray and Raman measurements in all four phases.

With the rather good resolution used so far, overdamped scattering was detected only near the zone center, whereas X-ray data still show diffuse intensity distributed over reciprocal planes. Further measurements, scheduled for the beginning of 1973, with higher incident energy will be aimed at mapping out the acoustic and lowest optic dispersion surfaces where strong anisotropies are expected. Similar measurements just above the orthocubic-rhombohedral phase transition are also planned.

4.1.5 - Structural Disorder in Cubic Phase Boracites
(P. Felix)

At Orsay from Oct. 1971 until Sept. 1972, P. Felix has completed his "Thèse de 3^{ème} Cycle" on the subject of "Structural disorder in cubic phase boracites." He also has studied linear and planar correlations in VO₂, V_{1-x}Nb_xO₂ and WO₃. After his return to the ILL he has taken part in the KNbO₃ studies at IN2 (see above).

P. Felix

"Linear and Planar Correlations in VO₂, V_{1-x}Nb_xO₂ and WO₃"
(to be published)

4.1.6 - Investigation of A15 Compounds (V₃Si) (S. Roth)

Ultrasonic measurements have been carried out in cooperation with CNRS/CRTBT (Grenoble). The velocity of the soft mode driving the martensitic transition has been studied between 4° and 40°K. In magnetic fields up to 90 kG a hardening of the lattice has been observed as predicted by Dieterich and Fulde. Preliminary results have been published (see below). These investigations are regarded

as preparatory work in the project of measuring the Fermi level of V_3Si by neutron scattering. The low value of the Fermi energy strongly favored by these data (between 20° and 60°K) is essential for the feasibility of the neutron experiment.

D. Cheeke, H. Mallié, S. Roth, B. Seeber

"Influence d'un Champ Magnétique sur la Vitesse de Propagation du Mode mou dans le V_3Si "

(C. Rend. Acad. Sci. 275, 662B (1972))

4.1.7 - Lattice Dynamics of MgF_2 (R. Almairac)

It has been examined to what extent the shell model equations given by Cochran, Cowley et al (1963) can be applied to non-cubic structures, in particular the rutile structure. Using these equations, a harmonic model was established which describes the dynamics of this structure. In order to take into account the characteristic anisotropy of these compounds, the possibility of tensorial interactions was included. The model was applied to MgF_2 . This substance will soon be studied experimentally with inelastic neutron scattering.

4.1.8 - Study of the Efficiency of Vertically Bent Monochromators

(R. Currat)

Following a single geometrical approach, expressions for the bent crystal efficiency, relative to the flat crystal case, were derived in all possible configurations (underfocused, focused, overfocused). These expressions were then used to study the variation of crystal efficiency with incident neutron energy. The calculation shows that the full intensity gain can be achieved over an appreciable energy range around the focusing energy, in agreement with existing data.

The above conclusions were applied to the determination of the optimal curvatures for vertically bent graphite monochromator and analyser crystals compatible with the geometry of IN2 and IN8.

R. Currat

"The Efficiency of Vertically Bent Neutron Monochromators"

(Nucl. Instr. & Methods 107, 1 (1973))

4.2 - Anharmonicity and Line Shapes

4.2.1 - Calculations of the Microscopic Grüneisenparameter for RbI

(W. Kress)

Preliminary investigations on this substance have shown that the measured phonon dispersion curves can be well described with a quasi-harmonic "breathing shell model" containing 9 parameters. Contrary to the shell model with 11 parameters, the breathing model simplifies the adjustment, as the parameters can be derived from the optical and elastic properties and thus one need not apply a least squares fit in which all measured phonons have to be considered. In addition, no negative mechanical polarisability is found in this model. Furthermore, it is possible to calculate the Grüneisenparameters of the normal vibrations in the quasi-harmonic approximation by taking into account the change of the elastic and optic properties as a function of the outer hydrostatic pressure. The comparison with the value measured at the X-point of the Brillouin zone (for the transversal acoustic branch), shows that order of magnitude and sign are in agreement. The explicit consideration of the anharmonic coupling constants and the extension of the model beyond the quasi-harmonic approximation should improve the agreement, describe the results of the measurements to be performed, and help to explain the big difference between the elastic constants which have been measured in the range of the zero and in the range of the first sound, respectively.

4.3 - Magnetism

4.3.1 - Preparation for High Pressure Experiments (C. Vettier)

After a device had been constructed for magnetization under pressure, the magnetic properties of FeBr_2 and FeCl_2 under hydrostatic pressure and magnetic field were studied.

The study of the magnetic phase diagrams reveals the variation of the field of the metamagnetic transition at 0°K , the variation of the Néel temperature and the tri-critical point of the connections of transition lines of 1st and 2nd order, as a function of pressure.

These results, together with the measurement of the perpendicular susceptibility, allow one to determine the variation of the exchange and anisotropy parameters. The theory of the molecular field only allows for a qualitative interpretation. The technique of the Green's functions will be applied for the approximation of the random phases.

Furthermore, a high pressure cell for inelastic neutron scattering has been constructed. The necessary tests are being made at the Siloe-reactor of CENG and at CNRS.

J. Beille, H. L. Aberts, H. Bartholin, D. Bloch, C. Vettier
"Un Nouveau Dispositif Pour l'Etude de la Variation de
l'Aimantation avec la Pression; Application au Bromure Ferreux"
(C. R. Acad. Sci Paris, 275, série B, 1972)

C. Vettier, H. L. Alberts, J. Beille, D. Bloch
"Aimantation du Bromure Ferreux au Voisinage du Point de
Néel. Effet de la Température, de la Pression et du Champ
Magnétique" (C. R. Acad. Sci. Paris, 275, série B, 1972)

H. L. Alberts, D. Bloch, C. Vettier (to be published)

4.4 - Random Motions and Critical Fluctuations

The main efforts of the group have been directed towards experimental and theoretical preparation of neutron scattering studies to be carried out on the time-of-flight instrument IN5 (see College 6) and on the three-axis spectrometer D10 (see College 5), respectively. IN5 will be used by the group mainly for the study of isotropic systems (polycrystals), whereas D10 will serve for experiments on single crystals.

4.4.1 - Test of Curved Crystals on D10

(A. Tippe, W. B. Yelon, R. E. Lechner)

First tests were made using CaF_2 crystals in order to measure the curvature and reflectivity that can be obtained by establishing

a temperature gradient between the surfaces of a slab-shaped crystal. A flat CaF_2 crystal was placed in the monochromator position and the curved crystal in the analyser position with the beam passing straight through (scattering angle zero). While the analyser angle was kept fixed, the incident wavelength was varied around $\lambda = 2 \text{ \AA}$, (a region where the incident wavelength spectrum delivered by the monochromator was found to be flat); this was done in order to make sure that the same part of the volume of the analyser crystal was always illuminated. The detector was wide open and close to the analyser position and the beam was defined by 2 slits between monochromator and analyser, each 6 mm wide. Measurements were made in 20° steps of temperature difference between the front and back surface of the analyser crystal. Above $\Delta T = 40^\circ$, the peak of reflected intensity starts to broaden. The maximum peak width was obtained at $\Delta T = 100^\circ$ corresponding to a peak reflectivity of about 20%. At $\Delta T = 120^\circ$, the crystal broke. It is felt that these tests, despite the poor nominal reflectivity, are encouraging. The fairly broad mosaic of the monochromator ($\approx 0.06^\circ$), however, made absolute reflectivity values somewhat difficult to establish. These tests will be taken up again with a better monochromator and narrower slits.

4.4.2 - First Test Measurements on IN5

(F. Douchin, Y. Blanc, R. Lechner)

Flux: The shape of the neutron spectrum of guide H16 was measured using one chopper (No. 4) turning at 6000 rpm and a monitor at a distance of approximately 1 m. The flux was determined at $\lambda = 6 \text{ \AA}$ by using a 3-mm thick Vanadium plate as scatterer and He^3 -detectors mounted at a scattering angle of $\phi = 120^\circ$ flight path 4 m. The flux seems to be lower by a factor of roughly 2 than the one calculated assuming an incident neutron flux as measured by Ageron on guide H15. More precise measurements of the neutron guide spectrum will be made as soon as the detector (and monitor) efficiencies have been determined accurately.

Background: Background measurements have been performed over a period of 6 months (during which several instruments in the

neighborhood of IN5 came into operation) in order to determine the amount of shielding needed for the neutron flight path between sample and detectors. It was found that the background of the neutron guide hall presently contains an appreciable amount of epithermal neutrons. At least 5 cm of moderator (polyethylene) and 3 mm polyurethane (60% B₄C) are needed in order to reduce the background at 57 MW to about 10 times the electronic noise level of the He³-detectors (6 cts per detector per hour).

Resolution: (Lechner, Hervet, Volino)

The resolution of IN5 has been calculated as a function of incident wavelength and of energy transfer. Agreement was found with experiment, so far as measurements were made (Vanadium). Furthermore, the effect of the orientation of slab-shaped samples on the resolution in incoherent elastic scattering was calculated. It was found that in many cases this effect is large enough to require consideration. Tables have therefore been provided to allow for optimal choice of specimen orientation.

Data Treatment: (Dianoux)

If the results of TOF-experiments are to be sufficiently reliable to allow a quantitative comparison with theory, the data reduction and correction procedures form a complex system of numerical calculations which must be carried out by computer.

The general data reduction program TIFLIS developed at Karlsruhe was adapted to the ILL computer facilities (collaboration with Drexel, Abel, Suck) and is now being adjusted to the special needs of IN5, using the first experimental data (scattering from Vanadium and from a sample of NH₄I). For multiple scattering corrections, the program MSCAT (developed by Bischoff) at RPI and extended by Copley at ANL) will be used, and has already been tested.

Ancillary Equipment: A temperature variable cryostat (2°K to 380°K), a furnace (300°K to 800°K) and electron-beam welded Al-sample containers for the whole temperature range have been developed and tests of this equipment are under way. The furnace

is to be used on IN5 as well as on D10, whereas the cryostat is specially designed for IN5.

Theoretical Preparation of Experiments: Preliminary diffraction experiments have been carried out by A. Dianoux on plastic SF₆ and SeF₆. Comparison of these results to models of molecular rotation have not yet been conclusive due to Bragg contamination from the cryostat; they will be repeated under improved experimental conditions.

On the basis of data taken previously at ANL, an isotropic rotational diffusion model was derived and tested by R. E. Lechner. This model includes continuous as well as jump-like diffusion of the molecular orientation.

R. E. Lechner

"Rotational Motion of Molecules in Plastic Neopentane"

(Solid State Comm. 10, 1242 (1972))

In the frame of a more general formalism, a related model for rotation of molecules was developed where the motion is described by the superposition of rotational diffusion and discrete jumps around crystallographic axes.

C. Thibaudier and F. Volino (submitted to Molecular Physics)

The extension of previous work on the tricritical point of ND₄Cl (W. B. Yelon, D. E. Cox and W. B. Daniels, to be published) is being prepared. In particular, the susceptibility exponents γ , ν and η will be determined. Theoretical work, in collaboration with P. Kortman (Jülich) is under way, focusing on ND₄Cl and FeCl₂, both tricritical systems, in order to investigate the scaling equation of state or the breakdown of scaling (in the latter case).

4.5 - Laser group

4.5.1 - Elastic constants in ice single crystals (A. Hamelin)

The elastic constant c_{11} has been measured in hexagonal ice single crystals by Brillouin scattering at a frequency of 15 GHz, at temperatures from 250°K to 150°K. The values are in good agreement with those obtained by Dantl (1968) by ultrasonic techniques between 5 and 200 MHz.

Some preliminary experiments have been made with polymers at room temperature.

COLLEGE V

"CRYSTALLOGRAPHIC & MAGNETIC STRUCTURES"

ZUSAMMENFASSUNG

Auch das Jahr 1972 war durch den Aufbau der Experimentiereinrichtungen gekennzeichnet. Erfreulicherweise konnte das erste Gerät D 2 für den allgemeinen Benutzerbetrieb zur Verfügung gestellt werden. Die übrigen Instrumente sind soweit fertiggestellt, dass in den ersten Monaten des Jahres 73 der allgemeine Messbetrieb aufgenommen werden kann.

Die wissenschaftliche Aktivität entwickelte sich parallel zu den Messvorhaben, die am Reaktor durchgeführt wurden und geplant werden. Zu den ersten Messungen am D 2 gehören die Magnetstrukturbestimmung an einem Einkristall von Manganacetat unter Feldeinfluss (Burlet) und Messungen von Steiner an Cs Ni F_3 . Darüber hinaus wurden drei weitere Substanzen von Benutzern zur Magnetstrukturbestimmung und fünf Substanzen für kristallchemische Arbeiten vermessen.

Tippe konnte seinen Kryostaten am D 10 erfolgreich testen, und die Messung mehrerer Reflexe an einem Cu-Einkristall wird eine Bestimmung der Debye-Temperatur erlauben. Bonnet, Delapalme (CENG) und Fuess untersuchen die Differenz der magnetischen Formfaktoren von Eisen in oktaedrischer und tetraedrischer Umgebung an Granatstrukturen.

Breiten Raum nahm die Diskussion von Experimenten mit den Benutzern ein.

Am Siemens-Röntgendiffraktometer konnten 1972 insgesamt 16 verschiedene Kristalle vermessen werden. Daran waren Gruppen der Universität Grenoble, des CENG, des CNRS, der Universität Lyon und des ILL beteiligt.

Erste Ergebnisse der Messung absoluter Formfaktoren von Wolfram konnten von Schneider mit dem γ -Diffraktometer erzielt werden, obwohl noch Schwierigkeiten im Verständnis der inhomogenen Mosaikverteilung der benutzten Proben bestehen.

RESUME

L'activité principale de l'année a été - une fois de plus - l'installation des appareils dans la pile. Le premier instrument disponible pour les utilisateurs a été D2. Les autres instruments sont presque achevés, et nous pensons que des mesures peuvent commencer dans les premiers mois de l'année 73.

L'activité scientifique a été concentrée sur les expériences qui ont été effectuées ou qui sont prévues sur la pile. Parmi les premières mesures sur D2 on note la détermination de la structure magnétique de l'acétate de manganèse sous champ (Burlet) et les études de Steiner sur CsNiF_3 . En plus, trois autres composés ont été examinés sur D2 pour la détermination de leurs structures magnétiques, cinq concernant des travaux cristallographiques.

Tippe a testé avec succès son cryostat sur D10 et a mesuré plusieurs raies sur un monocristal de Cu lui permettant de préciser la température de Debye de ce corps.

Bonnet, Delapalme (C.E.N.G.) et Fuess ont étudié la différence entre les facteurs de forme magnétique de Fe^{3+} dans des sites octaédriques et tétraédriques de la structure du grenat.

Les discussions sur les expériences et avec des utilisateurs ont été nombreuses.

Seize cristaux ont été passés aux diffractomètres de rayons X Siemens. Les travaux ont été proposés par des laboratoires du CENG,

CNRS, de l'Université de Grenoble, de la Faculté des Sciences de Lyon et par l'ILL.

Les premiers résultats des mesures absolues du facteur de forme de tungstène ont été obtenus par Schneider avec le diffractomètre γ . Les difficultés existantes sont essentiellement connectées avec la distribution inhomogène des blocs de mosaïque dans les échantillons utilisés.

1. Scientific Collaborators of the College

P. Burlet		
A. Filhol	(D)	
H. Fuess		
D. Hohlwein		(since Dec. 1, 1972)
B. Klar	(D)	
Jochen Schneider	(D)	
M. Steiner		(since Sept. 1, 1972)
F. Tasset	(D)	
M. Thomas		
P. Thomas		(until June 30, 1972)
A. Tippe		
P. Wolfers	(D)	(since Sept. 1, 1972)

(D) = Doctor student

2. Visiting Scientists

T. Duc	(CNRS Grenoble)	(since April 1, 1972)
J. Lajzerowicz	(Univ. Grenoble)	
J. Schweizer	(CEN Grenoble)	

3. Survey of Experimental Facilities

3.1 - Two-axis Diffractometer for Powder Samples D1A and D1B

The facilities D1A and D1B are installed at the thermal guide tube H21 and they share a common Ge monochromator using the(311)(D1A) and the(111)(D1B) planes respectively. However, the scientific conception of the two instruments is different.

3.1.1 - High Resolution Powder Instrument D1A

(M. Steiner)

The instrument is conceived for high resolution powder work. Its characteristic features are a high take-off angle at the monochromator ($\theta_M = 58^\circ$), and the long wavelength of 3\AA . With a maximum scattering angle of $2\theta \approx 180^\circ$, the instrument should allow the registration of a large number of well-resolved intensities for structure work.

3.1.2 - Multicounter Device D1B

(P. Burlet)

The wavelength of this instrument is fixed at 2\AA . The take-off angle ($\theta_M = 18^\circ$) gives good resolution at low scattering angles. The multicounter allows simultaneous registration of a complete Debye-Scherrer diagram. The short counting times should give an opportunity to study a large number of magnetically ordered material under varying experimental conditions. The assembly of these two instruments has been continued during 1972. They will be operational by the beginning of April 1973.

3.2 - Two-axis Diffractometer D2

(P. Burlet)

The D2 facility at the thermal beam hole H11 is essentially constructed for magnetic structure work under various experimental conditions (low temperature, furnace, magnet). Single crystal measurements are possible in one plane of diffraction. The wavelength range is $0.8 \text{\AA} < \lambda < 2.2 \text{\AA}$. D2 has been operational since August 1972.

3.2 - Triple-axis Diffractometer for Polarized Neutrons D5

(J. Schweizer)

The instrument D5 works with polarized neutrons (FeCo - monochromator) at the hot source channel H4. The instrument is provided

with an analyser table allowing a polarization analysis of the scattered neutrons. The possible wavelength range is $0.5 \text{ \AA} - 1.0 \text{ \AA}$ and continuously variable. In the field of magnetism, polarization analysis is a method of accurately separating paramagnetic scattering from other types of incoherent scattering or for separating nuclear scattering and magnetic scattering for antiferromagnets. For homogeneous material, polarization analysis is a powerful method of separation of the spin-incoherent scattering which greatly lowers the background.

The installation of the instrument created considerable problems in 1972. Some unresolved problems, however, will not allow full use of the instrument before mid 1973.

3.4 - Four Circle Instrument D8 (A. Filhol)

D8 is a classical four-circle diffractometer using thermal neutrons (channel H11 shared with D2) and variable wavelengths between 0.8 \AA and 2.6 \AA . The main aim of the device is single crystal structure work.

The original version (Hilger-Watts four circle with Ferranti electronics) was abandoned in August because of the incompatibility of the Ferranti electronics with the CAMAC system. The new version, consisting of a MAN Eulerian cradle and standard CAMAC electronics, was installed at the end of the year and will be operational in April 1973.

3.5 - Triple-axis Four Circle Diffractometer D10

(A. Tuppe)

The conception of this triple-axis instrument is inverted compared with other triple axis spectrometers. The idea in this case is to filter out the inelastic contribution and to measure at a high resolution small elastic and quasielastic contributions to the whole scattered spectrum, especially near the Bragg

reflections. The instrument, at the end of the guide tube H24, may also be used as a conventional four-circle instrument without the analyser table. This second version of the instrument is operational. Its use as a triple-axis spectrometer is foreseen for Sept. 1973.

3.6 - Diffractometer D12 Using the "Modified Laue Technique"

(D. Hohlwein)

D12 is a neutron camera. It will allow a quick registration of phase transition and magnetic ordering in single crystals. The separation of different orders of the same reflection is assured by using a wavelength band from a bent monochromator. A highly sensitive converter foil has been developed.

P. Thomas

"Production of Sensitive Converter Screens for Thermal Neutron Diffraction Patterns"

(J. Appl. Cryst. 5, 373, 1972)

P. Thomas

"Modifizierte Laue-Methode für thermische Neutronen"

(J. Appl. Cryst. 5, 83, 1972)

P. Thomas

"Eigenschaften und Herstellung gebogener Kupfermonochromatoren für thermische Neutronen"

(J. Appl. Cryst. 5, 78, 1972)

The instrument has been removed from the Melusine reactor and is now installed at the guide tube H23. Preliminary photographs have been taken but the question of photodensitometry has to be solved before a structure determination can be tackled.

3.7 - Siemens X-ray Diffractometer

(M. Thomas)

This instrument is a conventional four-circle device, controlled by a PDP8 computer and equipped with a cooling device covering the temperature range between 77°K and room temperature.

3.8 - Gamma Diffractometers

(J. Schneider)

Two additional γ -diffractometers have been built in connection with the laboratory CRISTAL-TEC of CENG. All three instruments are using the same γ -source which is therefore used to a greater extent. The possible combinations of neutron and gamma-experiences are explained in an ILL report.

J. Schneider

"The Gamma-Diffractometer, a Useful Help in Neutron Diffraction Experiments?"

(ILL Rep. 4172)

4. Scientific Activities

4.1 - Crystal Structure Work

4.1.1 - X-Ray Structure Determination

A considerable number of crystals have been measured on the four circle X-ray diffractometer (responsible M. Thomas). People involved came from ILL, CNRS, CENG, from Grenoble University, and from Lyon University. Most of these studies are directly related to future neutron work. Lajzerowicz and her collaborators continued their program on nitroxide free radicals. Neutron studies on these compounds should reveal interesting magnetic properties.

The crystal structure of $\text{Mn}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ has been worked out by Burlet, Burlet and Duc. In the monoclinic unit cell the (011)-planes are occupied by manganese and by one third of the acetic acid groups. The six Mn-atoms may be subdivided into two independent subgroups (see also Section 4.2 for the magnetic structure). Two studies on rare earth cobalt alloys were made by Schweizer and Tasset on Pr_2Co_7 and Y_2Co_{17} (in connection with their neutron program on rare earth cobalt alloys). The ordering phenomena in these alloys are difficult to understand and a careful data collection was necessary to get the right answer.

A redetermination of the structure of yttrium iron garnet was decided in order to determine the thermal parameters in this structure. An exact knowledge is necessary for the correction of the polarized neutron data (see Section 4.3). About 4000 reflections were measured and the 500 independent reflections were refined to a final R-value of 1.5%. These results will soon be published.

M. Bonnet, A. Delapalme, H. Fuess, M. Thomas
(Zeitschr. f. Kristall. (to be published))

In the context of the study of anomalous dispersion, a study of gadolinium acetate with X-rays was started. The aim is to handle the absorption problems and to use the rather high anomalous contribution of Gd for structure determination (Fuess, Thomas, Duc).

Besides that, precise studies on ferroelectric compounds isomorphous to Potassium dihydrogen phosphate have been made, particularly the angular deformation of the unit cell and its temperature evolution near the Curie points have been determined by Lajzerowicz, Lajzerowicz and Thomas M.

4.1.2 - Neutron Diffraction Studies

Preliminary measurements on the D2 device were done on the following substances: SF_6 and SeF_6 (Dianoux); CeRu_2 (with 20% or 40% Tl) by S. Roth; β -CuZn by Kunse, Hannover.

A study on a M-zeolith was carried out by Gallèsot from Lyon. The comparison of the diffraction pattern of a deuterated and an undeuterated sample does not reveal differences in the peak intensity. The experiment which should give an answer as to whether definite positions are occupied by hydrogen will be repeated on D1A as soon as the instrument is operational. V_4C_3 single crystals show a pronounced diffuse scattering between the Bragg peaks due to vacancy ordering. Observation was made in one plane on D2 (Sauvage, Parthé; Geneva). Further information will be obtained from a study on the four-circle instrument. The Debye temperature of Cu was measured on a single crystal between 14°K and 300°K in order to test the diffraction part of the D10 instrument and its cryostat (Tippe).

4.2 - Magnetic Structure Work

Steiner determined the magnetic moment of Ni in the three-dimensional order state of CsNiF_3 to $2\mu_B$. The magnetic properties of $\text{Mn}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ have been studied. The magnetic transition temperature is $T_N = 3.18^\circ\text{K}$. The compound is ordered in two dimensions above T_N . The three-dimensional order in the absence of a magnetic field is antiferromagnetic. The magnetic unit cell is twice the crystallographic one in the a-axis direction and consists of ferromagnetic sheets in the (011) plane (as described in Section 4.1) which are coupled antiferromagnetically. Under the application of a magnetic field, one of the two sites occupied by manganese becomes ferromagnetic (Burllet, Burllet).

The powder pattern of the CeRu_2 with 40% Tb shows magnetic ordering effects at low scattering angles (S. Roth). Powder pattern of $\text{CuFe}_2\text{GeS}_4$ (Wintenberger, CENG) and of MnSnC (Fruchart, CNRS) revealed magnetic ordering at low temperature. The elaboration of the structures is under way.

The determination of the magnetic form factors in yttrium iron garnet and terbium iron garnet revealed a pronounced difference between the iron ions in tetrahedral and octahedral environment. The X-ray measurements (Section 4.1) give the precision of the structural parameters for the corrections to be made on the polarized neutron data collected at Mélusine (Bonnet, Delapalme, Fuess).

4.3 - γ -Diffraction

The results of the study of mosaic crystals for neutron diffraction are summarized (Jo. Schneider, Diplom-Arbeit, Universität, Hamburg). The possibilities of measuring absolute structure factors with γ -rays were given at a summer school in Aarhus.

H. Meier-Leibnitz and J. Schneider

"Measurement of Structure Factors with Gamma Rays"

(Conf. on Exp. Aspects of X-Rays and Neutron Single Crystal Diffraction Method, Aarhus, Denmark, July 31-Aug. 11, 1972; Proceedings in print.

The main difficulties in these measurements arise from the inhomogeneous mosaic distribution of the available tungsten crystals. The problems were discussed in an ILL seminar:

J. Schneider

"Fundamental Principles of Extinction in Crystals"

ILL Rep. 3172)

4.4 - Scientific Computer Programs

Tran Qui Duc (CNRS) adapted the X-ray computer system of the University of Maryland to the ILL computer facilities. Smaller computer programs were added to the system by him and others, such as Dianoux, Klar, Fuess, Bonnet and Steiner.

COLLEGE VI

"LIQUIDS GASES AND AMORPHOUS MATERIALS"

ZUSAMMENFASSUNG

Im Jahr 1972 erfolgte die Fertigstellung von zwei dem Kollegium zugeordneten Spektrometern (D 4 und IN 4) sowie die ersten Probeläufe des Flugzeitspektrometers für kalte Neutronen IN 5. Im Verlauf des zweiten Trimesters 1973 wird mit diesen Apparaten das vom Wissenschaftlichen Rat genehmigte Programm begonnen werden können. Ein besonderes Problem stellt sich im Zusammenhang mit IN 5, das bereits für über eineinhalb Jahre belegt ist.

Das Kollegium ist entsprechend den hauptsächlichen Arbeitsgebieten seiner Mitglieder in drei Untergruppen aufgeteilt:

1) Struktur von Flüssigkeiten und amorphen Stoffen

Die am häufigsten verwendete Apparatur wird das Spektrometer D 4 sein, das Impulsübertragungen von bis zu 25 \AA^{-1} erlaubt. Der grösste Teil der Untersuchungen ist der Struktur flüssiger Metalle und molekularer Flüssigkeiten gewidmet.

2) Quantenflüssigkeiten

Es wurden mehrere Experimente an ^4He und an Mischungen von ^4He - ^3He vorgeschlagen. Die besonderen Experimentiereinrichtungen sind in der Planung oder im Aufbau.

3) Dynamik von Flüssigkeiten

Untersuchungen zur Dynamik von Flüssigkeiten sind für einfache Flüssigkeiten, molekulare Flüssigkeiten und flüssige Kristalle vorgeschlagen worden. Das für diese Untersuchungen am meisten benutzte Instrument wird das Multichopper-Spektrometer IN 5 sein.

Neben der Fertigstellung und Erprobung der Apparaturen wurde im Kollegium an der Vorbereitung von Experimenten und der Erstellung von Programmen für die Datenverarbeitung (unter Mithilfe anderer Forschungszentren) gearbeitet.

RESUME

L'année 1972 a été marquée par l'achèvement de deux spectromètres affectés au Collège (D4 et IN4) ainsi que par les premiers tests du spectromètre IN5 à temps de vol pour neutrons froids. Au cours du deuxième trimestre 1973 ces appareils permettront de commencer à exécuter le programme qui a été approuvé par le Conseil Scientifique. Un problème particulier se pose avec IN5 dont le plan de charge est rempli pour plus d'un an et demi.

Le Collège est divisé en trois sous-groupes qui correspondent au champ d'activité principal de leurs membres:

1) Structure des liquides et des corps amorphes

Le dispositif expérimental le plus utilisé sera le spectromètre D4 qui permet d'atteindre des valeurs du transfert de moment jusqu'à 25 \AA^{-1} . La majeure partie des études est centrée sur la structure des métaux liquides et des liquides moléculaires.

2) Liquides quantiques

Plusieurs expériences sur He^4 et les mélanges $\text{He}^4\text{-He}^3$ ont été proposées. Les dispositifs expérimentaux particuliers sont en cours d'étude ou de réalisation.

3) Dynamique des liquides

Des études sur la dynamique des liquides ont été proposées pour des liquides simples, des liquides moléculaires et des cristaux liquides. L'appareil le plus utilisé pour ces études sera le spectromètre IN5 à choppers multiples.

Parallèlement à l'achèvement et aux tests des appareils, l'activité du Collège a porté sur la préparation matérielle des expériences et sur la mise au point (avec l'aide d'autres centres de recherche) de programmes pour le traitement des données.

1. Scientific Collaborators of the College

R. Bellissent	(D)	
R. Benda		(until May 31, 1972)
P. Chieux		(since Oct. 1, 1972)
P. David		
J. Derrien	(D)	
A. Dianoux		
F. Douchin		
W. Drexel		
H. Egger		
J. P. Gaspard	(D)	
A. Hamelin	(D)	
H. Hervet		(since June 1, 1972)
W. Knoll		(since July 1, 1972)
W. Kress		(since Oct. 1, 1972)
A. Kugler		
R. Lechner		
C. Marti		(since July 1, 1972)
A. Pierre	(D)	(until Aug. 31, 1972)
J. Ranninger		
R. Scherm		
P. Seyfert		
F. Volino		

D = Doctor student

2. Visiting Scientists

A. Heidemann	(TU München, since Oct. 11, 1972)
A. J. Leadbetter	(University of Bristol - May - Sept. 1972)
W. Marshall	(Harwell)

3. Survey of Experimental Facilities

3.1 - D4 : Diffractionmeter for Liquids at the Hot Source

(H. Egger)

In 1972, the basic equipment of D4 was constructed, assembled and tested. The geometry of the apparatus, as well as the choice

of the 0.5 \AA wavelength, have required a special study of the monochromator.

At a wavelength of 0.503 \AA (Cu monochromator), the flux measured by Au neutron activation analysis at the sample position is $4 \times 10^6 \text{ n/cm}^2 \text{ s}$. The intensity measured by a He^3 counter (at a distance of 1.4m of the sample) is about 100 counts/sec for a 10% scatterer. The background level is constant for $3 < 2\theta < 140^\circ$ at 1 count/sec. The flux will be increased by a factor 1.5 to 2 in January 1973 by a new beam-hole design.

The incident beam has an angular divergence of $18'$. The total resolution of the equipment with a sample of 2cm is $50'$. The second order effects have been reduced to 10^{-4} . The overall stability of the monitor, detector and electronic devices allows a precision of 10^{-3} in the statistics.

3.2 - IN4 : Rotating Crystal Spectrometer

(W. Drexel)

IN4 is a time-of-flight spectrometer at a thermal beam tube for scattering low measurements over a large range of energy and momentum transfers with maximum values of 1% and 2% for the momentum and energy resolution, respectively. The instrument shows three characteristic features:

- Vertical scattering plane;
- Double monochromator with 2 large crystals, at least one of which rotates (for energy selection and pulsing of the neutron beam).
- Range of scattering angles 150° , covered by 210 He^3 counters at the end of a flight path of 4m for determination of the angle dependent time distribution of scattered neutrons.

The assembly of the instrument (with one rotating crystal) was finished in 1972 and the first measurements on the background and on a vanadium sample have been performed. The results showed that IN4 is operational. During the forthcoming period of test (distribution of the phonon frequency in vanadium) the background and the neutron intensity of the incoming beam will be improved.

3.3 - IN5 : "Multichopper" for Cold Neutrons

(F. Douchin)

IN5 is a time-of-flight spectrometer for high resolution measurements at low energy transfers. Four high speed choppers ($20,000 \text{ r.min}^{-1}$) are interconnected by straight neutron guides. A distance of 6.25 m between the extreme choppers allows for a good wavelength definition. The other wheels are used for the elimination of higher orders and overlap effects.

The counting system consists of 300 He^3 detectors which can be positioned and grouped on a spherical support with radius 4 m, the sample being at the center of the sphere. The background is expected to be 10c per hour and detector. For small κ -measurements another detector system is planned, and later on polarized neutrons will be used which will be produced by a bent magnetic guide as polarizer. The anticipated characteristics are as follows:

Wavelength: $3 \leq \lambda \text{ (\AA)} \leq 19$
Resolution: $1.29 \geq \Delta\lambda/\lambda \text{ (\%)} \geq 0.3$
 Q_{max} : 3.55 \AA^{-1}
Intensity (4\AA) : $2.10^5 \text{ n cm}^{-2} \text{ sec}^{-1}$ (max. repetition rate)

The neutron tests were started in December and preliminary tests have given information about resolution and intensity. Background tests have shown the existence of parasitic epithermal neutrons in the beam and in the environment of the neutron guide hall. Modifications of the shielding for the primary and secondary spectrometer have been necessary. The data acquisition programme is working satisfactorily but has to be modified for a higher through-put of data. IN5 will be fully operational by early April 1973.

3.4 - IN9 : Spectrometer with Polarized Proton Target

(P. Seyfert)

IN9 enables us to carry out inelastic scattering experiments with polarized neutrons. The spectrometer is designed for the

experimental separation of the inelastic scattering events occurring with and without spin-flip of the neutron in the sample. The slightly curved neutron guide H1E facing the Cold Source is used to produce the primary beam (wavelength $\lambda_0 = 4.8 \text{ \AA}$, polarization $P \sim 96\%$). The neutrons scattered by the sample are analysed with respect to their momentum, energy and degree of polarization.

The first two parameters are determined by measuring the time-of-flight along a defined path. A polarization filter placed immediately after the sample is used for the measurement of the degree of polarization. This filter - the particular feature of the instrument - essentially consists of a system of polarized protons. It works in the transmission mode and has an attenuation factor of 0.5 for neutrons polarized in the same sense as the protons and 0.01 for the case of antiparallel polarization vectors.

The spectrometer is at present assembled in a provisional arrangement which allows tests of the polarizing crystals (Heusler alloy, Cu_2AlMn) to be made at $\lambda \sim 4.8 \text{ \AA}$. The fabrication of these crystals has to be improved in order to obtain good monochromators. The polarized proton filter is still under development: A magnet is installed and the 4 mm microwave system is ready for mounting. The cryostat and auxiliary equipment are being tested. The preparation of LMN ($\text{La}_2\text{Mg}_3(\text{NO}_3)_{12} \cdot 24 \text{ H}_2\text{O}$, with 11% of La replaced by Nd) single crystals turned out to be difficult, but good crystals are expected to be obtained fairly soon.

4. Scientific Activities

4.1 - Subgroup "Structure of Liquids and Amorphous Materials"

4.1.1 - D4 : Preliminary studies

(H. Egger, R. Bellissent, P. Chieux)

Some measurements have been carried out at room temperature on β -As (amorphous), SiO_2 (vitreous), ND_3 (liquid), V and Ta samples. In the case of a 10% scatterer (As), $I(Q)$ can be obtained at 1% precision on the smoothed curve from 0.4 to 23 \AA^{-1}

within a day. As a sample container, quartz has proved not to be very ideal for this large Q -range, and vanadium is the better material. For molecular liquids such as ND_3 , inelasticity becomes predominant above $Q = 10 \text{ \AA}^{-1}$. Attempts will be made to improve the apparatus below $Q = 0.5 \text{ \AA}^{-1}$ and to diminish the background level for Q -values down to 0.3 \AA^{-1} . The instrument's best performance is at room temperature (except for low angular positions). At present the group is preparing additional equipment, such as vanadium containers, low temperature cryostats, high temperature furnaces, computer programs for data handling.

4.1.2 - Amorphous Materials

(P. Seyfert, A. J. Leadbetter)

A measurement of the coherent inelastic scattering function of an amorphous system (As or SiO_2) in the immediate vicinity of the first quasi-reciprocal lattice point has been proposed. Leadbetter started preliminary experiments on vitreous arsenic at Harwell.

4.1.3 - Neutron Diffraction in Molten Salts

(J. Y. Derrien)

Experimental work: Several pieces of apparatus for the measurements on D4 have been studied and built. A special effort has been made to build an efficient temperature control system for the container. An oven has been constructed for temperatures up to 1050°C and for the use of a cylindrical sample of 10 mm ϕ and 40 mm high. In the first instance, quartz will be used as container, and later, vanadium.

Theory: Radial distributions functions and simulation methods have been applied in order to study the theory of ionic crystals. It appears that an appropriate choice of the pair potential may allow determination of the thermodynamic properties and the total distribution function in a molten salt. However,

in general, such a potential does not lead to exact pair distribution function g_{aa} , g_{ab} , g_{bb} . This has been shown on CuCl.

Three isotopes of Cl in MCl salts will be used to determine these quantities experimentally and to obtain a better approximation of the pair potential.

4.1.4 - High Temperature Furnace. Behavior of Clusters in Molten Al-Sn

(W. Knoll)

a) A high temperature furnace for the investigation of solid and liquid samples at temperatures up to 2000°C with a stability of $\pm 1^\circ\text{C}/24\text{h}$ has been designed. A cylindrical tube of a Ta or V sheet serves as heating element and is heated by direct current flow. This furnace will be usable in April or May 1973.

b) For the investigation of the behavior of clusters in molten Al-Sn by means of cold neutrons, model calculations and preliminary experiments have been carried out by X-ray small angle scattering.

4.1.5 - Studies of Adsorbed Layers

(C. Marti)

a) An experiment has been prepared for the study of the net of adsorbed CF_4 on ex-foliated graphite.

b) Calculations have been made to study the diffraction pattern of randomly-oriented plane nets (3-dimensional space) and to establish a model of an adsorbed monolayer on a powdered adsorbant having, however, well-developed crystal faces.

c) In the theory of condensation of a 2-dimensional gas, the problem of the finite size of the condensate has been investigated.

d) Several other problems have been studied, such as the coupling of a Josephson function to the electromagnetic field,

the case of a cavity and the fundamental role of feedback. The variation of the surface tension with curvature, and the role of the shape on the surface energy and entropy have also been investigated.

4.2 - Subgroup "Quantum Liquids"

4.2.1 - Experiments on Liquid He

(R. Scherm)

Two different experiments on liquid He have been proposed and prepared:

a) Measurement of the condensate fraction in superfluid He⁴. Calculations have been carried out on the measuring conditions (focussing, necessary resolution). The 3-axis spectrometer IN6 on which the experiment will be performed has been designed and is under construction.

b) Measurement on a He³ submonolayer in He³-He⁴ solutions (in collaboration with CNRS-Grenoble). A detailed proposal has been submitted. Calculations have been carried out on the effects to be expected. The apparatus has been optimized and designed. A dilution refrigerator is under construction as well as the neutron apparatus.

c) Activity on lectures and seminars. R. Scherm has given the following lectures and seminars:

"Fundamentals of Neutron Scattering " (Summer School Autrans, June 1972, to be published in Ann. de Physique)

"Basic Neutron Scattering" (lecture, University of Frankfurt)

"Neutron Experiments in He" (lecture KFA - Jülich)

"Correlation and Fourier Methods in Neutron Spectroscopy" (Advanced Summer School, Harwell, 1972)

"Instrumentation of the Grenoble HFR" (Conference on Neutron Beam Utilization, Oxford 1972)

Publication: "A Search for Bose-Einstein Condensation in Superfluid He".

4.3 - Subgroup "Dynamics of liquids"

4.3.1 - Programs for IN4

(W. Drexel)

The Karlsruhe program for computing the scattering law from the time-of-flight distribution as obtained by IN4 has been adapted to the IMAG computer at the University of Grenoble.

A more special program for the evaluation of peak positions in the time-of-flight distribution resulting from coherent neutron scattering (e.g., phonon lines) to obtain the corresponding values in the (Q, ω) -space, is also available.

4.3.2 - Tests on IN5

(R. Lechner, F. Douchin)

R. Lechner in collaboration with F. Douchin has made preliminary tests on IN5 (see contribution of College 4, Subgroup "Random Motions").

4.3.3 - Cylindrical Molecules

(A. J. Dianoux, F. Volino)

A. J. Dianoux and F. Volino have calculated within a simple model the incoherent scattering law for cylindrical molecules having a preferred orientation (liquid crystals).

4.3.4 - Liquid Crystals

(F. Volino)

a) Experiments: In collaboration with H. Hervet (Collège de France), preliminary neutron diffraction experiments on liquid crystals have been carried out using the D2 diffractometer.

Results already obtained by X-ray diffraction (on MBBA) were confirmed. A first experiment was tried on the D11 small angle

scattering device in order to study the smectic-nematic transition. This revealed that one has to pay attention to the following points: Sample-holder, temperature homogeneity, partial or total deuteration of the sample, monodomains, etc. All these problems will be studied.

b) Theory: F. Volino in collaboration with C. Thibaudier and A. J. Dianoux has calculated the rotational correlation functions in plastic and liquid crystals.

F. Volino, C. Thibaudier

"Magnetic Dipolar Interaction Between Two Isotropically Rotating Molecules"

(Mol. Phys. in press)

F. Volino, C. Thibaudier

"Calcul de fonctions de corrélation de rotation pour des modèles réorientationnels par sauts, en utilisant la Théorie des Groupes" (submitted to Mol. Phys.)

F. Volino, H. Verohén, B. Meerovici

"Dynamic Nuclear Polarization (DNP) and Spin-Lattice Relaxation in Plastic Cyclohexane Doped by a Nitroxyde Free Radical" (J. Chem. Phys. 57, 6 (1972))

F. Volino, H. Verohén, B. Meerovici

"Influence of Paramagnetic Impurities on Molecular Self-Diffusion as seen by DNP and Spin-Lattice Relaxation"

(accepted in J. Chem. Phys.)

4.3.5 - Theoretical Work on Classical Liquids

(A. A. Kugler)

Using an exact representation for the density-density and self-motion response functions we have calculated the coherent and incoherent van Hove scattering functions and compared the results to the recent experimental measurements on liquid argon by Sköld et al. The agreement between the theoretically calculated and experimental scattering functions is in general

excellent. A conclusion of this work is that in liquid argon for wave vector transfers $K \geq 1 \text{ \AA}^{-1}$ no propagating density fluctuations can be produced; the damping of such density oscillations is too big. On the other hand, there are indications (on the basis of the calculations) that for $K < 1 \text{ \AA}^{-1}$ propagating density fluctuations should be possible and should therefore be detectable by means of coherent inelastic neutron scattering, for example in the region $0.1 < K < 1.0 \text{ \AA}^{-1}$.

In the case of the incoherent scattering function and the one-particle motion the latter describes, one finds a very smooth transition from the hydrodynamic diffusion regime (for $K \rightarrow 0$) to the free particle limit for very large K .

A. A. Kugler

"Self-motion Response and Incoherent Scattering Function in Classical Liquids"

(Phys. and Chem. of Liquids 3, 205 (1972))

A. A. Kugler

"Collective Modes, Damping and the Scattering Function in Classical Liquids"

(Journal of Statistical Physics - to be published).

5. Activities on Meetings, Conferences and Summer Schools

5.1 - Summer School on Liquids in Menton (July 1-13, 1972)

A. J. Dianoux, R. Lechner and F. Volino have attended this school.

5.2 - Meeting on Inelastic Neutron Scattering in Chemistry, Autrans (June 5-6, 1972)

A. J. Dianoux organized this meeting. About 50 scientists from France, Germany and England attended the meeting which was an introduction for studies using neutrons.

COLLEGE VII

"IMPERFECTIONS"

ZUSAMMENFASSUNG

An der Kleinwinkelstreuapparatur D11 wurden die ersten effektiven Neutronen-Experimente im September 1972 durchgeführt. Seit diesem Zeitpunkt sind mehrere Probleme in **grossem** Masstab untersucht worden. D11 ermöglicht es, hauptsächlich aufgrund eines Multidetektorsystems von 4000 Zählleinheiten, die Strahlzeit für die einzelnen Experimente erheblich zu vermindern. In einigen Fällen sind die Messzeiten kürzer als diejenigen mit Röntgenstrahlen.

Der enorme Datenausstoss dieser Apparatur wird belegt durch die etwa 1000 **Spektren**, die in einer Zeitperiode von 4 Monaten gemessen wurden. Die untersuchten Probleme betreffen **Präzipitationen** und Homogenität in Legierungen, die Struktur von Fehlordnungen in bestrahlten Stoffen, Phasentrennung in Gläsern und magnetische Inhomogenitäten in supraleitenden Legierungen.

Eine weitere wichtige Bereicherung für die Aktivitäten des Kollegiums war die Einführung einer neuen experimentellen Technik, der "Spin-Echo-Methode für Neutronen". Mit Hilfe dieser Technik kann man den Energiebereich für Neutronenexperimente bis zu 10^{-9} eV ausdehnen und somit eine Überlappung mit dem NMR-Bereich erreichen. Mit der Konstruktion eines Spin-Echo-Spektrometers für Neutronen wurde begonnen, und eine Reihe neuartiger Experimente wurden für diese Apparatur vorbereitet.

RESUME

Les premières expériences sur le spectromètre de diffusion aux petits angles (D 11) ont été faites en Septembre 1972. Depuis cette date, plusieurs problèmes ont été étudiés à fond. Le système à détecteurs multiples comprenant 4000 unités de comptage permet une réduction considérable du temps d'irradiation par expérience. Dans certains cas le temps de mesure est plus court qu'avec les rayons X.

Cet instrument a donc un débit énorme puisqu'on a pu obtenir 1000 spectres environ en quatre mois. Les problèmes suivants ont été étudiés : état de précipitation et d'homogénéité de certains alliages; structure de défauts dans des matériaux irradiés; séparation des phases dans des verres; inhomogénéités magnétiques dans des alliages supraconducteurs,...

L'introduction d'une nouvelle technique expérimentale dite d'écho de spin a permis d'élargir de façon importante le domaine d'activité du collège. Grâce à cette technique, il est possible d'atteindre une gamme d'énergie allant jusqu'à 10^{-9} eV, qui recouvre celle des expériences de résonance magnétique nucléaire. On a donc entrepris la construction d'un spectromètre à écho de spin. Une série d'expériences d'un type nouveau est en préparation sur cet appareil.

1. Scientific Collaborators of the College

M. Bernasson

J. Blétry

A. Freund (D)

J. Haas (D)

K. Ibel

C. Jeandey (D)

W. Just

K. Knorr

G. Kostorz

F. Livet (D)

F. Mezei

(since May 1, 1972)

G. Parisot

P. Radhakrishna
M. Roth
S. Roth
Jochen Schneider (D)
P. Thorel (since Sept. 1st, 1972)

(D) = Doctor student

2. Visiting Scientists

I. Natkaniec (JINR Dubna, Jan. 17 - July 28, 1972)
E. Seitz (since June 1st, 1972)
R. Stewart (University of Reading, July-December 1972)

3. Survey of the Experimental Facilities

3.1 - Spectrometer for Elastic Diffuse Scattering of Neutrons D 7 (W. Just)

This instrument is mainly used for disorder scattering of magnetic and non-magnetic nature. The sample is placed in a monochromatic neutron beam of long wavelength. Four groups each consisting of 8 detectors are positioned to detect the scattered intensity. A disc chopper can be installed to provide for energy analysis.

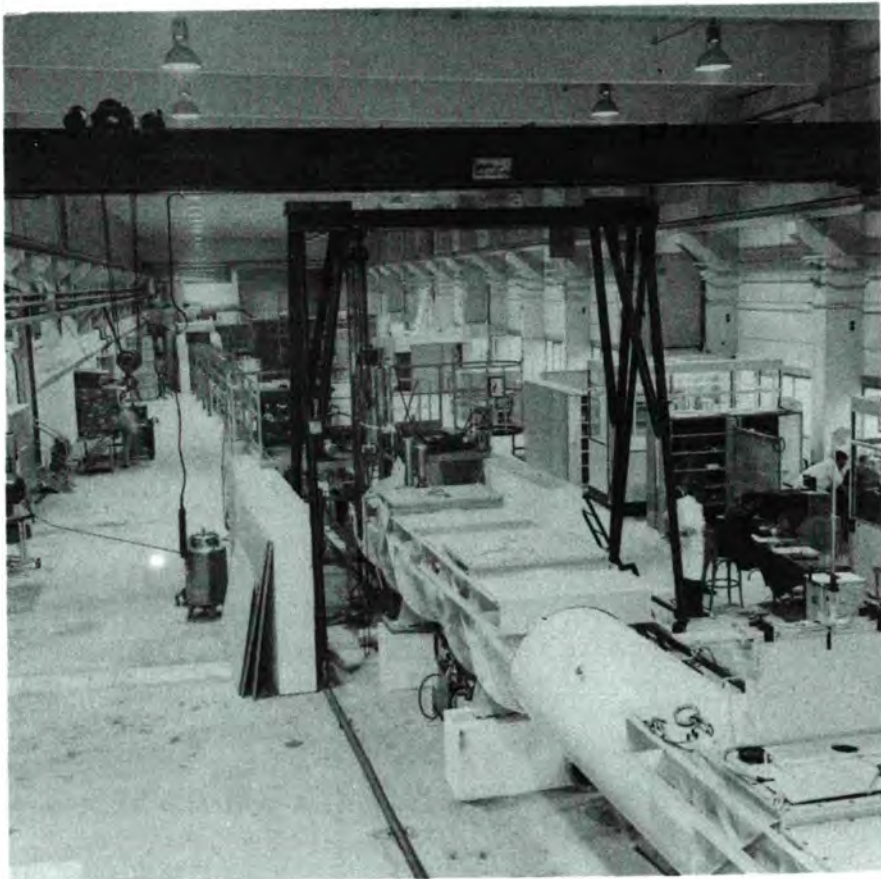
The installation of D 7 has been completed to the point of operation with unpolarized neutrons. The mechanical side, i.e. monochromator axis, sample area and detector systems, are in their final state. The hardware, i.e. data collection, time-of-flight unit and motor control, has been installed and is working satisfactorily. Software programmes for data acquisition, for the dialogue user-experiment-computer, and a preliminary automatic control, have been developed. The background problem proved to be more severe than expected and it has not yet been satisfactorily resolved. For this reason, only very preliminary measurements on Pb(Si) (Seitz, KFA Jülich) have been performed to date.

J. Blétry was working on the development of the spin flipper system for D 7.

3.2 - Small Angle Scattering Device D 11 (K. Ibel)

D 11 is designed for investigations of large structures (inhomogeneities from 5 to 20000 Å).

The instrument became operational in September 1972 and has revealed surprising new capabilities. Many experiments have been performed and the throughput of D11 has proved to be much larger than anticipated, due to the extremely high neutron intensity at the sample.



Set-up of the Small Angle Scattering Device D11

3.3 - Time-of-Flight Spectrometer for Elastic Scattering

(Julius Schneider)

The apparatus is designed for the investigation of elastic scattering effects separated from all inelastic contributions, using a white neutron beam and a novel double chopper (one classical and one pseudorandom) with time-of-flight.

Construction, test-runs and transport of the statistical chopper to Munich have been accomplished. First measurements of the separation mechanism have been started in Munich.

A continuous flow cryostat for the temperature range 77°K to 400° K has been constructed and tested successfully.

4. Scientific Activities

4.1 - Defect Structure of Solids (G. Kostorz, M. Roth, R. Stewart)

Neutron small angle scattering experiments have been started and preliminary results were obtained concerning the following problems :

The precipitation processes have been studied in Al-Mg alloys in the 7-15 % Mg contents range after annealing of several months at room temperature. A clear indication of the occurrence of Guinier-Preston zones has been found, but for the quantitative evaluation of the data, many further experiments will be necessary, preferably on single crystal samples (M. Roth).

The composition and size of the precipitates in $Al_{1-3x}Mg_xZn_{2x}$ alloys have been investigated. Significant results have been obtained and their evaluation is in progress (G. Kostorz).

Experiments were carried out on fast neutron irradiated (10^{20} n/cm² dose) germanium and gallium arsenide in order to obtain information about defect aggregates and their associated local atomic strain. The data will be analysed and compared in more detail with a proposed theoretical model (R. Stewart).

On the other side, further evaluation of the enhanced plasticity effects in superconductors has been performed by G. Kostorz based on the experiments carried out at the Argonne National Laboratory.

G. Kostorz

"Plasticity of Lead Single Crystals in the Superconducting and Normal States at 4.2°K".

(J. of Low Temperature Physics, 10 (1973) 167)

G. Kostorz

"Plasticity of Niobium and Niobium-Molybdenum Single Crystals in the Superconducting and Normal States"

(Acta Met. June 1972)

G. Kostorz

"Plasticity of Lead Alloy Single Crystals in the Superconducting and Normal States at 4.2°K".

(Phil. Mag. July 1972)

G. Kostorz

"The Influence of the Superconducting Phase Transition on the Plastic Properties of Metals and Alloys" (Review)

(Phys. Stat. Solidi, Aug. 1972)

G. Kostorz

"Enhanced Plasticity in the Superconducting State"

(Proceedings of the Thirteenth Int. Conf. on Low Temperature Physics, August 1972).

Preparatory work has been performed concerning new experiments on the phonon spectra of Fe - Ni, invar type alloys in cooperation with CENG and the University of Missouri, and on a small angle scattering programme to study the problems related to the performance of the cold neutron source influenced by the distribution of Si impurities formed by thermal neutron capture in Al (G. Kostorz).

4.2 - Magnetism of Alloys

(K. Fischer, K. Knorr, F. Mezei, P. Radhakrishna, S. Roth)

The theoretical study of dilute magnetic alloys (Kondo-effect spin fluctuations) has been continued. This problem has been reviewed from the point of view of neutron experiments by a lecture given at the ILL Summer School, Autrans, (July 1972).

F. Mezei, P. Radhakrishna

"Dilute Alloys"

(Annales de Physique, t. 7, n° 4, 269 (1972)).

The neutron scattering expected from spin fluctuations in Pd Ni and Al Mn has been calculated. From the results, neutron experiments at the HFR seem quite promising, but at the same time rather difficult, due to the small value of the cross-section.

K. Fischer, P. Radhakrishna

"Long-Range Correlations in Local Spin Fluctuation Systems"

(Solid State Comm. 11, 1703 (1972)).

The charge density oscillations around 3d-impurities have also been investigated theoretically, mainly in view of the possible manifestation of the Kondo effect in NMR experiments.

F. Mezei

"NMR-experimental Test for the Existence of the Kondo Resonance" (13th Int. Conf. on Low Temperature Physics)

Preliminary neutron diffraction and small angle scattering experiments have been carried out by studying the coexistence of superconductivity and magnetic order in $Ce_{1-x}Ru_2Tb_x$. A new small angle scattering effect has been found, whose temperature

dependence above T_c scaled with the sample susceptibility, and which persisted in the superconducted phase. These phenomena, which we suppose to be connected with some kind of magnetic order, have yet to be investigated in more detail (S. Roth).

Preliminary neutron measurements on the spin density distribution in Ni Ti alloy have been started on the Polarized Neutron Diffractometer D 5 in order to prepare for later studies on diffuse scattering. Accessory magnetic measurements were performed at the CNRS Laboratory at Grenoble.

Furthermore, in connection with the preparation of neutron scattering experiments which can be started after the completion of the Diffuse Scattering Apparatus D 7, transport properties of the Pt Co and Cu Mn systems and Cu Fe-films have been investigated in collaboration with the CNRS. For this purpose simple preparation studies have been made concerning the Cu Fe and the rare earth crystalline field systems.

K. Knorr, C.S. Lim, J.D. Leslie

"Kondo Effect in Dilute Alloy Films of Cu Fe Deposited at Room and He-Temperature".

(Solid State Comm. 10, 637 (1972)).

4.3 - Specific Problems (C. Jeandey, K. Knorr, F. Mezei)

4.3.1. - Mössbauer Effect

On-line Mössbauer experiments are being prepared in order to study the point defects created by neutron capture. Besides instrumental and technical work, in view of the later on-line measurements, perturbed angular correlation experiments have been performed in order to investigate the quadrupole coupling frequencies resulting from the hyperfine interaction of ^{181}Ta with the oxygen polyhedra formed by a number of different ligands. (C. Jeandey).

P. Boyer, C. Jeandey, A. Tissier, P. Vuillet, J.I. Vargas

"Quadrupole Coupling and Structure of Novel β -Generated Octocoordinated ^{181}Ta complexes".

(6th Int. Hot Atom Chemistry Symposium, BNL, 1972).

C. Jeandey, (in collaboration with J.P. Mathieu, CENG-Grenoble), has prepared a number of Hf compound samples and has tested them as Mössbauer absorbers.

4.3.2 - Neutron Spin Echo

F. Mezei has worked out a new technique in polarized neutron spectroscopy, which has been given the name "Neutron Spin Echo" (NSE). The NSE principle may be used for the investigation of extremely small energy scattering effects, which contain a new class of neutron experiments, concerning e.g. the diffusion in solids, the motion of vortex lines in superconductors, the hyperfine interactions. The construction of a NSE spectrometer has been started.

F. Mezei

"Neutron Spin Echo. A New Concept in Polarized Thermal Neutron Techniques".

(Z. Physik, in print).

4.3.3 - Plasma Oxydation of Metals

K. Knorr, (in cooperation with CNRS), has studied the plasma oxydation of metals. The ellipsometrical data have shown that uniform oxide layers can be formed on Ta, Nb, Zr, V, W, Ti, Mo, Al, Zn, La, and U.

K. Knorr

"Computation of Phonon Spectra of Superconductors from Tunneling Characteristics"

(2nd General Conf. 1972, European Phys. Society, Wiesbaden)
(Verhandl. DPG (VI), 7, 792 (1972)).

K. Knorr, J.D. Leslie

"Ellipsometrical Determination of Barrier Thickness of Metal-Insulator-Metal Tunnel Junctions".

(Solid State Comm., in print).

4.3.4 - Miscellaneous

J. Blétry has proposed a high speed tempering device.

J. Blétry

"Etude des Trempes Ultrarapides à partir de l'Etat Liquide dans des Appareils à Pistons et à Saut de Ski".

(J. Phys. D : Appl. Phys., 6 (1973)).

COLLEGE 8/9

"PHYSICAL BIOCHEMISTRY / PHYSICAL CHEMISTRY"

ZUSAMMENFASSUNG

Während in der ersten Hälfte des Jahres 1972 nur über die Möglichkeiten der Neutronenstreuung diskutiert wurde, z. B. bei einem Treffen in Autrans vom 5. - 6. Juni, konnten ab September die ersten Experimente an der Kleinwinkelstreuapparatur D 11 durchgeführt werden.

Erste Versuche an Eis, Katalysatoren, Proteinen, DNS, Nucleohistonen und Lösungen von synthetischen Polymeren dienten zur Erforschung der Eigenschaften der Kleinwinkelstreuanlage. Mit zunehmender Vervollkommnung des Geräts (Installation des Geschwindigkeitselektors und Anschluss an den Prozessrechner NICOLE) wurden vor allem im letzten Reaktorzyklus systematische Messungen an verschiedenen Eiweißen in H_2O/D_2O -Mischungen durchgeführt, und einige Projekte konnten erfolgreich abgeschlossen werden.

RESUME

La première moitié de l'année 1972 a été consacrée à la discussion des possibilités de la diffusion des neutrons, entre autre lors d'une réunion à Autrans du 5 au 6 Juin. A partir de Septembre 1972, les premières expériences ont pu être exécutées sur le spectromètre de diffusion aux petits angles (D 11).

Des expériences préliminaires sur la glace, des catalyseurs, des protéines, la DNS, des nucléohistones et les solutions de polymères synthétiques ont servi à explorer les caractéristiques du spectromètre

de diffusion aux petits angles. L'instrument devenant de plus en plus perfectionné (après l'installation du sélecteur de vitesse et le raccordement au calculateur NICOLE), des mesures systématiques sur diverses albumines dans des mélanges H_2O/D_2O ont été faites, en particulier pendant le dernier cycle du réacteur, et plusieurs projets ont pu être achevés avec succès.

1. Scientific Collatorators of the College

U. Arndt	(since Sept. 1st, 1972)
P. Chenavas	
A. J. Dianoux	
E. Duée	
H. Fuess	
J. Haas	(D)
K. Hölzl	
K. Ibel	
B. Klar	(D)
Mme J. Lajzerowicz	
T. Peterlin	(D)
C. Schmid	
G. Stirling	(since Nov. 1st, 1972)
H. Stuhmann	
M. Thomas	
A. Tippe	

(D) = Doctor student

2. Visiting Scientists

Short-term visitors who have performed experiments on the D11 instrument came from the Institut Pasteur in Paris, the Universities of Mainz and Saarbrücken, the MPI Göttingen, the CEN Saclay and the Institut de Recherches sur la Catalyse in Villeurbanne.

3. Survey of Experimental Facilities and their Progress

3.1 - "Igel" - Diffractometer D6

Responsible: B. Klar

The diffractometer D6 allows the simultaneous measurements of the intensity of many single crystal reflections according to the "modified Laue-method". A hundred BF_3 -detectors are installed on a sphere surrounding the single crystal. Every detector can be moved automatically on a circular domain. The single crystal is mounted in an Eulerian cradle. All parameters are controlled by a PDP 11.

Until July 1972 the apparatus was run at a neutron guide of the reactor EL3 at Saclay. The experiments could be restarted in November at the neutron guide H24 of the High Flux Reactor.

During the running in Saclay, it could be shown that the reflections are at the calculated positions and that the detectors are surely moved to them. In a short time about 600 reflections of 1-Methyl-Thymin-9-Methyl-Adenin were measured. As this data set had been obtained with a poor flux and as it remained incomplete, these measurements will be repeated in Grenoble.

B. Klar

"Single crystal neutron diffractometer with 100 movable detectors," (9th Int. Congr. of Crystallography, Kyoto (1972)).

3.2 - Small Angle Scattering Device D11

Responsible: K. Ibel

This instrument is mentioned here (although it is allocated to College 7), as practically all the scientific work of this college in 1972 has been carried out on this device. (For details see report of College 7).

3.3 - Single Crystal Television Diffractometer D14

Responsible: U. Arndt

A diffractometer is being constructed specifically for structural studies on single crystals of biological macromolecules. The instrument makes use of the screenless rotation method which has proved to be a most efficient way of exploring the reciprocal lattice by photographic techniques in X-ray crystallography. With very large unit cells several hundred reflections occur simultaneously and data can be collected very rapidly if these reflections are recorded at the same time. The success of the method has led to the evolution in Cambridge, England, of an X-ray instrument in which the photographic film is replaced by a position-sensitive detector which consists of a phosphor screen viewed by a television camera. The completion of this instrument and the construction at ILL of a neutron diffractometer are proceeding in parallel: the digitisation and processing of the camera output by means of fast electronic circuitry interfaced to a dedicated PDP11 computer are identical for the X-ray and neutron versions.

The neutron phosphor is a flat $\text{Li}^6\text{F}/\text{ZnS}$ screen 500 mm in diameter. It is optimised for maximum light output for incident neutrons at the selected wavelength which may lie between 1.5\AA and 4\AA . The screen may be placed at varying distances from the specimen to give maximum Bragg angles of between 6° and 25° . The spatial resolution is equivalent to 300×300 resolution elements and the system effectively counts individual neutrons with a detection efficiency of between 30% and 60%.

The electronic and mechanical design of the instrument has been completed and construction has commenced. A start has been made on the development of the software.

4. Scientific Activities

4.1 - Meeting in Autrans (June 5-6, 1972)

Until summer 1972 preparatory work was done on the proposals to be executed at the various facilities of the High Flux Reactor. A meeting on the applications of neutron scattering to some chemical problems was organized in June 5-6 at Autrans, for physical

chemists who are using different methods of molecular spectroscopy and who wanted to be informed of what can be done by neutron spectroscopy.

4.2 - Experimental Work done on D11 (Small angle scattering device)

The experimental activity began to develop with the start of the small angle scattering device. Studies on ice (Haas, ILL), catalysts (Renouprez, Lyon), protein solutions (Ibel, Stuhrmann, Fuess, ILL) and later on DNA solutions (Ibel, Stuhrmann, ILL) soon revealed the power of this apparatus.

4.2.1 Myoglobin, Lysozyme, Catalase, Fibrinogen

At the beginning of September 1972, neutron small angle scattering curves of macromolecules in solution (myoglobin in various H₂O/D₂O-mixtures, containing 2% of the protein) were measured here for the first time. Although at that time only a small part of the scattering pattern on the two-dimensional detector could be used because of the poor output facilities, the precision of the scattering curve was about 1% after 10 minutes measuring time. As long as the velocity selector was not installed zero angle scattering was extrapolated from small angle scattering experiments, because it is not influenced by the actual wavelength distribution of the incident neutrons. Myoglobin and lysozyme were measured in different H₂O/D₂O-mixtures. After the installation of the velocity selector in October and the direct access to the NICOLE-system in November, the data production rose considerably. Several projects were finished in December: myoglobin (exp. no. 08 02 001), lysozyme (exp. no. 08 02 006) and catalase (exp. no. 08 02 001). A great part of the work on fibrinogen (exp. no. 08 02 008) has also been done (Stuhrmann, Margueri).

The protein concentrations in the solutions varied from $c = 1$ mg to 20 mg/ml and in some cases c went up to 250 mg/ml. The range of momentum transfer covered three magnitudes of $Q = 4\pi/\lambda \sin \theta$ ($\lambda =$ wavelength, $2\theta =$ scattering angle): Q varied from 10^{-3} \AA^{-1} up to $1,0 \text{ \AA}^{-1}$, which corresponds roughly to distances of between 6000 \AA and 6 \AA in the physical space.

The collimation errors in general were small compared with the distortion of the scattering curves by the wavelength distribution (rms = 15%) of the neutrons in the primary beam. The precision of coherent "small angle" scattering at $Q = 0,7\text{\AA}^{-1}$ of a 10% myoglobin solution in D_2O reached 1% after 10 minutes' measurement, though the incoherent scattering of the heavy water D_2O and the protons in the myoglobin amounted to more than 90% of the total scattering. The measurements are in agreement with the calculations starting with the known myoglobin model. In the small angle region zero-angle scattering and the radius of gyration of the myoglobin molecule ($c = 30$ mg/ml) reaches a precision of 1% after 1 second measuring time. Therefore the rate of the proton exchange of proteins in D_2O was studied. Although the resolution of the time scale already reached about 3 seconds in favourable cases, these measurements must be regarded as quite preliminary. As the neutron flux would allow a better time resolution, several improvements are in progress: a new mixing device, reduction of the dead time of the detector and faster transmission of the data to magnetic tape.

4.2.2 - DNA and Nucleohistone

DNA (Bram, Ibel, Stuhrmann, exp. no. 08 02 003 and 08 02 005) have been measured down to $Q = 8 \cdot 10^{-4} \text{\AA}^{-1}$. These measurements were not as systematic as those of the proteins mentioned above. They serve as a basis for more extensive studies which will proceed during the next months. Some short experiments on Nucleohistone (Ibel, Lawrence, exp.no. 08 02 002) have also been carried out.

4.2.3 - Polystyrene

Small angle scattering of polystyrene (Jannink, Cotton, Farnoux, exp. no. 09 01 001) in deuterated solvents (C_6D_6) is very intense. Thus very small concentrations of the polymers in solution have been measured with high precision. From these studies valuable contributions to the thermodynamics of dilute and semidilute solutions are expected.

4.2.4 - Data Reduction on D11

The fast production of data very soon raised serious problems in data reduction. It necessitated three to four weeks work to get the results in a reduced form ready to be plotted, without corrections for collimation and polychromasie. Thus the only feedback available was offered by the visualization unit which gives a very impressive but nevertheless only a qualitative idea of what is actually measured. Thanks to the increasing effort of the computer staff, considerable progress has been made: Quantitative data will be available within a week. The slow feedback of quantitative data still presents a severe problem which will be solved when a computer is installed at ILL.

A few measurements have been analyzed in a semi-quantitative way. They are very promising. A rigorous treatment of the data (several hundred spectra)- including corrections for the sensitivity of the detector channels, corrections for the absorption, collimation and wavelength distribution - is in progress.

NEW PROJECTS

ZUSAMMENFASSUNG

Auf dem Gebiet neuer Projekte konzentrierte sich die Aktivität im Jahre 1972 im wesentlichen auf 3 Bereiche: Entwicklung neuartiger Monochromatoren, Weiterentwicklung eines elektronischen Choppers und Polarisierung von Neutronen mit magnetischen Spiegeln.

Die Untersuchung von Cu-Ge-Monochromatoren (2 cm ϕ) mit einem Gittergradienten verliefen äusserst positiv. Im Augenblick sind Versuche im Gange, Cu-Ge-Kristalle mit 5 cm ϕ zu züchten. Ebenso wurden erfolgreiche Versuche mit einem zusammengesetzten Monochromator-System durchgeführt, welches Neutronen auf eine kleine Fläche fokussiert. Das System besteht aus 15 Si-Kristallen, welche mittels einer Si_3N_4 -Schicht auf einer der beiden Seiten gebogen wurden.

Auch die Untersuchungen zur Lösung der Probleme eines elektronischen Choppers machten Fortschritte. Lithiumferrit wurde als Monochromator gewählt. Eine spezielle Technik zum Ziehen dieser Kristalle wurde weiterentwickelt. Zum Studium der Untergrundverhältnisse wurde eine Testapparatur am Reaktor Mélusine aufgebaut.

Die Technik, polarisierte Neutronen mittels magnetischer Spiegel zu erzeugen, wurde weiteruntersucht. Ein mathematisches Modell zur Berechnung der Polarisation, welche von einem magnetischen Spiegel erzeugt wird, ergab Resultate, die in sehr guter Übereinstimmung mit dem Experiment stehen. Ausserdem wurde ein neuartiger Stern-Gerlach-Magnet zum genauen Nachweis der Neutronenpolarisation konzipiert.

RESUME

L'activité en 1972 du groupe „Projets nouveaux" s'est concentrée essentiellement sur trois domaines: le développement des monochromateurs nouveaux, l'étude et la construction d'un chopper électronique et la polarisation de neutrons par les miroirs magnétiques.

L'étude des monochromateurs Cu-Ge (2 cm ϕ) avec un gradient réticulaire a été très positive. Actuellement des manipulations sont en cours afin de tirer des cristaux Cu-Ge d'un diamètre de 5 cm. Par ailleurs, des essais avaient été effectués avec succès pour l'étude d'un système monochromateur permettant de focaliser des neutrons sur une petite surface. Le système consiste en 15 cristaux de Si, qui étaient courbés au moyen d'une couche en Si_3N_4 sur une de 2 faces.

L'étude d'un chopper électronique a également progressé. Le Lithiumferrite a été choisi comme monochromateur. Une technique pour le tirage de ces cristaux a été développée. Un appareil de test a été installé au réacteur Mélusine pour étudier les conditions du bruit de fond.

L'étude de la technique pour la création des neutrons polarisés au moyen d'un miroir magnétique a progressé. Un modèle mathématique pour le calcul de la polarisation engendrée par un miroir magnétique a donné des résultats qui sont conformes aux expériences. Par ailleurs, un nouvel aimant Stern-Gerlach pour la détection précise de la polarisation neutro-nique a été conçu.

1. Scientific Collaborators of this Group

C. Berthet
A. Boeuf (Euratom, Ispra)
B. Hamelin
S. Mazkedian (Euratom, Ispra)
F. Rustichelli (Euratom, Ispra)

2. Scientific Activities

2.1 - Special Monochromators (A. Boeuf, F. Rustichelli)

The studies on monochromators Cu-Ge with a gradient in the lattice spacing have been continued. During a beginning phase the study of crystals with small diameter, $\phi \sim 2$ cm, has been completed.

The crystals have been tested in a white neutron beam and compared with ordinary mosaic crystal monochromators. These studies showed a clear differentiation in the behaviour of crystals with a gradient in the lattice spacing. Following these positive results, a study in collaboration with the LETI, was undertaken in order to obtain larger diameter Cu-Ge crystals, that is, of $\phi \sim 5$ cm.

A composite monochromator system focussing the neutrons on a small surface was developed. The system is composed of 15 Si crystals which were bent by forming a Si_3N_4 layer on one of the two faces. The tests in a white neutron beam permitted the verification of the regularity of the focussing, the linearity of the focussed neutron flux as a function of the number of crystals, as well as the spectral distribution of the diffracted neutron beam.

The theoretical studies of neutron optics particularly in relation to the dynamical theory of neutron diffraction have been continued. In this framework, S. Mazkedian prepared a thesis at the ILL on the asymmetric Bragg diffraction.

A. Freund, F. Rustichelli, F. Vanoni

"Croissance et caractérisation de monocristaux cuivre-germanium presque parfaits" (C. R. Acad. Sci. Paris, 274, 1280 - 1283 (juin 1972))

F. Rustichelli

"Crystals with a Gradient in the Lattice Parameter on Neutron Monochromators" (I.A.E.A.-SM 155/F-2 Proceedings of the Inelastic Neutron Scattering Conference (Grenoble March 1972))

A. Freund, P. Guinet, J. Mareschal, F. Rustichelli, F. Vanoni

"Cristaux à gradient de maille" (Journal of Crystal Growth 13/14, 726-730 (1972))

A. Boeuf, F. Rustichelli

"Composite Focussing Neutron Monochromator System"
(Nucl. Instr. and Meth. (1973) in print)

B. Klar, F. Rustichelli

"Dynamical Neutron Diffraction by Ideally Curved Crystals"
(Il Nuovo Cimento (1973) in print)

S. Mazkedian

"Contributo allo studio della diffrazione dei neutroni da
cristalli perfetti" (Thesis at the University of Parma, 1972)

2.2 - Electronic Chopper (C. Berthet)

Equipment was installed at the Mélusine Reactor in order to show that it was feasible to produce a magnetically pulsed beam. In the last year, three problems were specially considered: The growing of the monochromator crystal, the cooling of the coil, and the reduction of background.

a) The Monochromator

In order to produce a magnetically pulsed beam, a lithium ferrite monochromator was chosen. For its production the flux-melt technique has been abandoned essentially because of the size and the high saturation field of the crystal thus obtained. The Bridgman and Czockralski techniques were tried.

To grow crystals by the Czockralski method, two problems must be solved:

- the loss of lithium from the ferrite at temperatures in excess of 1000°C (Pointon and Saull. Journal of the Ceramic Society);
- the small thermal conductivity of ferrite.

An adequate furnace with a pulling-head is not available. Therefore, after some attempts the Bridgman technique was adopted. We use a furnace with a graphite resistor. The load was placed into a Pt-Rh crucible sealed with a Pt-Rh cap welded in vacuum. Since the crucible cannot be lowered through the temperature gradient, the

furnace itself is slowly cooled during growth. The cooling rate is calculated so as to give a rate-growth of 5 mm/hour.

b) The coil

The first coils were made with an aluminium tube. They were cooled by liquid nitrogen and placed in a cryostat. The choice of the material for the cryostat is difficult, since it must be transparent to neutrons and have a low electrical conductivity (pulsed magnetic field induced Eddy currents). Therefore quartz is tried. The dimensions of the cryostat are also limited. For these reasons the vacuum is difficult to achieve.

Several different coils are being tried at present. They consist of an aluminium helicoidal strip cooled by air pressed through holes. Good results are expected by this simple cooling method.

c) The background

Because of the second-order wavelength and multiple reflections it is difficult to cancel all the nuclear intensity. For this reason it is expected to operate the spectrometer using the cross-correlation technique.

Besides the background of the chosen pulsing method, there is the background component caused by the apparatus. The fast neutron beam in the Mélusine Reactor is very high and the scattering of fast neutrons by the instrument near the monochromator must be reduced. Borated paraffine blocks and boron carbide dissolved in epoxy glue sheets have been placed on all sides near the crystal. In this way the background is decreased by a factor s . This problem will no longer exist when the Electronical Chopper is installed at a neutron guide.

2.3 - Polarization of Neutrons (B. Hamelin)

2.3.1 - Polarization of Neutrons by Magnetic Mirrors (^{49}Fe , ^{49}Co , ^{2}V)

The purpose of this study is the investigation of the possibility of the polarization of neutrons by magnetic mirrors.

Only a few facts were known before this study was started:

- 1) A good polarization (80 - 90 %), depending on the quality of the alloy, can be obtained for neutrons having a wavelength $1 \text{ \AA} < \lambda < 3 \text{ \AA}$.
- 2) The degree of polarization decreases rapidly when λ increases
- 3) It was in apparent contradiction with 2) that some experimentalists had obtained a degree of polarization of 80 - 85 % for neutrons having a wavelength $50 \text{ \AA} < \lambda < 100 \text{ \AA}$. An experimental and theoretical study explains these results.

The following conclusions were reached by B. Hamelin:

- a) The degree of polarization depends only on the ratio $\frac{\sin\theta}{\lambda}$
- b) The degree of polarization reaches its maximum near $\left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right)_{\text{critical}}$ ($P \sim 90\% - 95\%$) and then decreases with $\frac{\sin\theta}{\lambda}$ ($P \sim 50\%$ for $\frac{\sin\theta}{\lambda} = 0,25 \text{ mrd/\AA}$)

To explain these results we have supposed that the mirror surface has a thin layer (50 to 100 \AA) in which the saturation induction is not reached. A mathematical model has been applied to calculate the polarization given by such a mirror. The results obtained from this calculation are in very good agreement with the experimental data. As a conclusion, the existence of a thin disturbing layer of about 60 \AA was presumed.

Furthermore, some thin-film mirrors (50 Fe, 50 Co) with a non reflecting thin film have been tested. (By means of a mathematical model one may suppose that such a thin film exists and thus one may avoid neutron reflexions on the glass substratum). Unfortunately the results were negative as we did not succeed in making thin film alloys with good and homogeneous composition. The same effect can certainly be obtained with a thin film mirror of pure cobalt. This project will be tackled in 1973.

2.3.2 - Stern-Gerlach Magnet

For the detection of neutron polarization (for $\lambda > 4 \text{ \AA}$) with great accuracy a Stern-Gerlach magnet was envisaged.

However, there are 2 drawbacks:

- 1) The solid angle for the incoming beam is very small.
- 2) The area with strong gradient is very close to a pole. This means that neutrons are intercepted by a pole (particularly for great wavelengths) and consequently the accuracy for the polarization measurements decreases.

Thus a new Stern-Gerlach magnet has been conceived, the features of which are the following:

- 1) The magnetic gradient is the same as for the conventional type.
- 2) The magnetic field and gradients can be calculated easily in an analytic way.
- 3) There are no neutron losses at the poles and thus the accuracy is only limited by statistics (better than 1 %).
- 4) The solid angle of the incoming beam is much bigger than in the conventional case.

PUBLICATIONS

THESES

ECOLE D'ETE

PUBLICATIONS

1972

(by authors, in alphabetical order)

I.L.L. Grenoble

- | | | |
|--|---|---|
| P. AGERON | The High-Flux Reactor at the Institut Laue-Langevin | Endeavour (May 1972) <u>31</u> , N° 113, 67 |
| U. W. ARNDT | Neutron Studies on Single Crystals of Biological Macromolecules | Harwell School on Neutron Beams in Research, 25-29/9/1972. (Proceedings of the Conf. in print) |
| J. BLETRY | Etude de Trempe Ultrarapides à partir de l'Etat Liquide | J. of Physics D : Applied Physics <u>6</u> , 256 (1973) |
| A. BOEUF ^x
F. RUSTICHELLI ^x | Composite Focusing Neutron Monochromator System (Oct. 1972)

^x I.L.L. Grenoble, France and C.C.R. Euratom, Ispra, Italy | Nucl. Instr. and Meth. (in print) |
| M. BONFANTE ^x
B. HENNIION ^x
F. MOUSSA ^x
G. PEPY ^x | Temperature Dependence of Spin Wave Spectrum in MnO

^x Phys. des Solides, C.E.A. Saclay, France | IAEA Symp. on Neutron Inelastic Scattering Grenoble, March 6-10 (1972) (Annales de Physique : 1972, p. 631) |
| M. BONFANTE ^x
B. HENNIION ^x
F. MOUSSA ^x
G. PEPY ^x | Spin Waves in MnO at 4.2°K

^x Phys. des Solides, C.E.A. Saclay, France | Solid State Comm. <u>10</u> , 535 (1972) |
| H. BÖRNER | (See H. R. KOCH) | |
| M. NAUCIEL ^x
G. SARMA ^x
<u>A. CASTETS</u> | Spin One Heisenberg Ferromagnet in the Presence of Biquadratic Exchange

^x Un. Louis Pasteur, Strasbourg, France
^{xx} Phys. du Solide, C.E.A. Saclay, France | Phys. Rev. B <u>5</u> , N° 11 4603 (1972) |

A. CASTETS M. NAUCIEL-BLOCH x	Intrinsic Biquadratic Exchange and Sublattice Magnetizations in Canted Ferrimagnets	Solid State Comm. <u>10</u> , 1121 (1972)
	xUn. Louis Pasteur, Strasbourg, France	
M. NAUCIEL-BLOCH x A. CASTETS R. PLUMIER xx	Sublattice Magnetizations and Magne- tostrictive Effects in Sulphospinel Mn Cr ₂ S ₄ .	Phys. Letters A <u>39</u> , N°4 311 (1972)
	xUn. Louis Pasteur, Strasbourg, France	
	xxC.E.N. Saclay, France	
R. CURRAT	The Efficiency of Vertically Bent Neutron Monochromators	Nucl. Instr. and Meth. <u>107</u> , 1 (1973)
F. CYROT-LACKMANN	Electronic Structure of Disordered Systems	J. Phys., Coll. C3, suppl au n°5-6, Tome 33, p.C3-1 (Mai-Juin 1972)
F. CYROT-LACKMANN	Adsorption of Transition Metals Atoms on a Transition Metal Sub- strate	J. of Vacuum Science and Technology <u>9</u> , 1045 (1972)
F. CYROT-LACKMANN	Spectral Limits in Disordered Systems	J. of Physics C : Solid State Phys. <u>5</u> , 300 (1972)
F. CYROT-LACKMANN	(See J.P. GASPARD)	
M. CYROT	Electronic Properties of Narrow Energy Bands	Phil. Mag. <u>25</u> , N° 5, 1031 (1972)
M. CYROT	Theory of Mott Transitions. Applications to Transition Metal Oxide	J. Phys. <u>33</u> , 125 (1972)
M. CYROT	Irreversible Effects and Pinning	J. Phys. <u>33</u> N° 8-9, 803 (1972)
P. DAVID	Analyse Spectrale d'un Système Physique représentable par un Réseau Electronique Actif Linéaire et Stationnaire (Février 1972)	Annales des Télécommunications (in print)
P. DAVID	Théorie des Sources de Bruit Ramenées et Expression du Théorème de Thévenin concernant un Réseau Electronique Actif Linéaire et Stationnaire (Avril 1972)	Annales des Télécommunications (in print)

C. DELESTRE M. MENDES	Sequential Bayes Deconvolution in Physical Experiments by Splines	1st Conf. on Spectral Lines, Knoxville, Tenn. (USA), Aug. 28- Sept. 1 (1972). (Proceedings of the Conf. in print)
B. DORNER	(See M. STEINER)	
B. DREYFUS	Phonon-Spin Interactions	Int. Conf. on Phonon Scattering in Solids, Paris, July 3-6 (1972). (Proceedings of the Conf. p. 207 (1972)).
H.C. WATSON ^x E. DUEE W.D. MERCER ^x	Low Resolution Structure of Glyceraldehyde 3-Phosphate Dehydrogenase ^x Molecular Enzymology Lab. Dept. of Biochemistry, Un. of Bristol, England	Nature New Biology, <u>240</u> , 130 (1972)
K. FISCHER P. RADHAKRISHNA	Long-Range Correlations in Local Spin Fluctuation Systems	Solid State Comm. <u>11</u> , 1703 (1972)
A. FREUND Jochen SCHNEIDER	Two New Experimental Diffraction Methods for a Precise Measurement of Crystal Perfection	3rd Conf. "Croissance Cristalline", July 1971, Marseille - France (J. Crystal Growth <u>13-14</u> , 247 (1972))
A. FREUND P. GUINET ^x J. MARECHAL ^x F. RUSTICHELLI ^x F. VANONI ^x	Cristaux à Gradient de Maille ^x CEN Grenoble, France ^x CCR Euratom, Ispra, Italy	3rd Conf. "Croissance Cristalline", July 1971, Marseille - France (J. Crystal Growth <u>13-14</u> , 726 (1972))
A. FREUND F. RUSTICHELLI F. VANONI ^x	Croissance et Caractérisation de Monocristaux Cuivre-Germanium presque parfaits (Note présentée par L. Néel) ^x DRF-G/phys. du Solide, CEN, Grenoble, France	C. Rend. Acad. Sci. <u>274</u> , 1280 B (1972)

M.J. COOPER ^x K.D. ROUSE ^x <u>H. FUESS</u> ^{xx}	A Neutron Diffraction Study of ZnS and ZnTe ^x AERE Harwell, Didcot, England ^{xx} Harwell and ILL, Grenoble, France	Acta Cryst. A <u>29</u> , 49 (1973)
<u>H. FUESS</u> A. KALLEL ^x	Refinement of the Crystal Structure of Some Rare Earth Vanadates RVO_4 (R = Dy, Tb, Ho, Yb) ^x Diffraction Neutronique, CEN Grenoble, France	J. of Solid State Chem. <u>5</u> , 11-14 (1972)
J.P. GASPARD F. CYROT-LACKMANN	Application of the Moment's Method to the Calculation of the Density of States of the Impurity Band	Congrès de Menton, France, on "Perspec- tives de Calcul de la Structure électronique des Solides Ordonnés et Désordonnés", 21-24 Sept. 71 J. Phys. C3, <u>33</u> , C3-175 (1972)
J.P. GASPARD F. CYROT-LACKMANN	A Generalized Cumulant Expansion for Disordered Systems	J. Phys. C <u>5</u> , 3047 (1972)
<u>J.P. GASPARD</u> F. CYROT-LACKMANN ^x	Density of States of the Impurity Band ^x Phys. des Solides, Orsay, France	11th Int. Conf. on the Physics of Semi- conductors, July 25-29 (1972), Varsovie, Pologne (Proceedings of Conf. Vol. 1)
P. COLSON ^x <u>J.P. GASPARD</u>	Determination of the Relaxation Spectrum of Macromolecules in Solution by the Analysis of the Electric Birefringence ^x Un. de Liège, Institut de Chimie, Sart-Tilman, Belgium	Conf. on Macromolecules Sept. 19 (1972) Orléans, France (Proceedings of the Conf. in print)
K. HÖLZL C. SCHMID	Phonon Green's Function for Polymer Chains : Treatment of Conformational Defects	J. Polymer Sci.-Phys. Ed. <u>10</u> , 1853 (1972)
K. HÖLZL C. SCHMID	Group Theoretical Aspects of Confor- mational Defects in Polyethylene Chains (Oct. 1972)	Molecular Physics (in print)
K. KREBS ^x <u>K. HÖLZL</u>	Binding Energy of Metals in Pseudo- Ion Approximation. ^x Phys. Division, Ispra, Varese, Italy.	Phys. Kondens. Materie <u>15</u> , 87 (1972).

K. HÖLZL C. SCHMID	Localized and Resonance Modes in Polyethylene below 700 cm^{-1} due to Kinks and Folds	J. Phys. C, as a Letter to the Editor <u>5</u> , L185 (1972)
K. HÖLZL	(See C. SCHMID)	
<u>G. ICHE</u> A. ZAWADOWSKI ^x	Partial Cancellation in the Electron-Hole and Electron-Electron Correlation in the Symmetric Anderson Model ^x Central Research Institute for Physics Budapest, Hungary	Solid State Comm. <u>10</u> , N° 11, 1001 (1972)
G. ICHE	Localized Spin Fluctuations (July 1972)	J. Low Temperature Phys. (in print)
INSTITUT LAUE-LANGEVIN	Rapport d'Activité (1971) - en français - en allemand	
B. JACROT	La Diffusion des Neutrons	La Recherche <u>3</u> , N° 22, 325 (1972)
J. KALUS ^x	The Counting Rate of a Three-Axis Spectrometer ^x Phys. Dept. of Techn. Un. Munich, Garching, Germany and ILL Grenoble, France	Z. Physik <u>254</u> , 148 (1972)
J. KALUS	The Measurement of Phonon Polarization Vectors with Three-Axis Spectrometers	Z. Physik <u>254</u> , 162 (1972)
J. KALUS	Influence of the Thermal Motion of Atoms in a Solid on the Neutron Scattering	Summer School on Neutron Scattering and Magnetism, Autrans (France), June 26-July 2 (1972) Annales de Physique : t. <u>7</u> , N°4, 247 (1972)
J. KALUS	High Resolution Apparatus for Neutron Scattering Experiments	Harwell School on Neutron Beams in Research, England, Sept. 25-29 (1972) (Proceedings of the Conf. in print)
B. KLAR	Single Crystal Neutron Diffraction with 100 Movable Detectors (Aug. 1972)	Acta Cryst. (in print)
B. KLAR F. RUSTICHELLI	Dynamical Neutron Diffraction by ideally curved Crystals (Oct. 1971)	Nuovo Cimento (in print)

<u>K. KNORR</u> <u>C.S. LIM</u> ^x <u>J.D. LESLIE</u> ^x	Kondo Effect in Dilute Alloy Films of Cu-Fe deposited at Room and Helium Temperature ^x CRTBT Grenoble, France	Solid State Comm. <u>10</u> , 637 (1972)
<u>K. KNORR</u> <u>J.D. LESLIE</u> ^x	Ellipsometrical Determination of Barrier Thicknesses of Metal- Insulator-Metal Tunnel Junctions (Dec. 1972) ^x CRTBT Grenoble, France	Solid State Comm. (in print)
<u>H.R. KOCH</u> <u>O.W.B. SCHULT</u> ^x <u>J.A. PINSTON</u> <u>R. ROUSSILLE</u> <u>H. BORNER</u>	Curved Crystal Gamma-Ray Spectrometers at the Grenoble High Flux Reactor (Invited paper) ^x Technische Universität Munich, Germany	Conf. on Nuclear Structure Study with Neutrons, Budapest, Hung., July 31-Aug. 5 (1972) (Proceedings of the Conf. p. 40 (1972))
G. KOSTORZ	Enhanced Plasticity in the Supercon- ducting State	13th Int. Conf. on Low Temperature Phys., Boulder, Colorado, USA Aug. 21-25 (1972) (Proceedings of the Conf. in print)
<u>B.S. BROWN</u> ^x <u>T.S. BLEWITT</u> ^x <u>T. SCOTT</u> ^x <u>N. TEPLY</u> ^{xx} <u>G. KOSTORZ</u>	Low Temperature Neutron Irradiation Effects in Superconducting Technetium and Niobium ^x Argonne Nat. Lab, Illinois, USA ^{xx} Oakland Un., Rochester, Michigan, USA	
G. KOSTORZ	Plasticity of Lead Single Crystals in the Superconducting and Normal States at 4.2 K	J. Low Temperature Phys. <u>10</u> , 167 (1973)
G. KOSTORZ	Plasticity of Lead Alloy Single Crystals in the Superconducting and Normal States at 4.2 K (June 1972)	Phil. Mag. (in print)
G. KOSTORZ	The Influence of the Superconducting Transition on the Plastic Properties of Metals and Alloys (Review Article) (Jan. 1973)	Physica Status Solidi (in print)

G. KOSTORZ	Plasticity of Niobium-Molybdenum Single Crystals in the Superconducting and Normal States (Revised version : Oct. 1972)	Acta Metallurgica (in print)
A. KUGLER	Collective Modes Damping and Scattering Function in Classical Liquids (April 1972)	J. Statistical Phys. (in print)
A. KUGLER	Self-Motion Response and Incoherent Scattering Function in Classical Liquids	Phys. and Chem. of Liquids <u>3</u> , 205 (1972)
A.J. LEADBETTER	Vibrational Excitations in Glasses	Int. Conf. on Phonon Scattering in Solids, Paris, July 3-6 (1972) (Proceedings of the Conf. p. 338 (1972))
R. LECHNER	Rotational Motion of Molecules in Plastic Neopentane	Solid State Comm. <u>10</u> , 1247 (1972)
H. MAIER-LEIBNITZ	New Instrumentation (especially at the High-Flux Reactor ILL)	IAEA Symposium on Neutron Inelastic Scattering, Grenoble, March 6-10 (1972) (Proceedings of the Conf. p. 681 (1972))
T.V. EGIDY ^x B. MAIER W. MAMPE	The Double Spectrometer "Bill" with Sectorfields for Conversion Electron Measurements at the HFR-ILL in Grenoble ^x Technische Universität Munich, Germany.	Conf. on Nuclear Structure Study with Neutrons, July 31-Aug. 5 (1972) Budapest Hungary (Proceedings of the Conf. p. 58 (1972)).
W. MAMPE	(See B. MAIER)	
K. MATHO M.T. BEAL-MONOD ^x	A Pair Description of Resistivity Maxima in Kondo Dilute Alloys ^x Phys. des Solides, Orsay, France	Phys. Rev. B <u>5</u> , N° 5 1899 (1972)

K. MATHO M.T. BEAL-MONOD *	Kondo Temperature of Interacting Magnetic Impurities (April 1972) *Phys. des Solides, Orsay, France	J. of Phys. F (in print)
K. MATHO M.T. BEAL-MONOD *	Concentration Effects in the Thermo- Power of Kondo Dilute Alloys *Phys. des Solides, Orsay, France	13th Int. Conf. on Low Temp. Physics, Boulder, Colorado, USA Aug. 21-25 (1972) (Proceedings of the Conf. in print)
M. MENDES	(See C. DELESTRE)	
F. MEZEI	Neutron Spin Echo : A New Concept in Polarized Thermal Neutron Techniques	Z. Phys. <u>255</u> , 146 (1972)
F. MEZEI P. RADHAKRISHNA	Dilute Alloys	Summer School on Neu- tron Scattering and Magnetism, Autrans, France, June 26 - July 2 (1972) (Annales de Physique t. <u>7</u> , N° 4, 269 (1972))
F. MEZEI G. GRÜNER *	NMR Experimental Test for the Existence of the Kondo Resonance *Imperial College, London, England	13th Int. Conf. on Low Temp. Physics, Boulder, Colorado, USA Aug. 21-25 (1972) (Proceedings of the Conf. in print)
E. MOLL	The Franco-German High Flux Reactor and its Facilities for Nuclear Research	Conf. on Nuclear Structure Study with Neutrons, July 31 - Aug. 5 (1972) Budapest, Hungary (in print)
G.F. STEIB * E. MOLL	High Voltage Conditioning at Large Gaps in Industrial Vacuum *Inst. Sciences Nucléaires, Grenoble, France	J. Phys. D : Applied Physics, <u>6</u> N° 2, 243 (1973)

R.L. MÖSSBAUER	Magnetic Neutron Scattering in Relation to some other Experimental Methods	Summer School on Neutron Scattering and Magnetism, Autrans France, June 26 - July 2 (1972) (Annales de Physique : t. <u>7</u> , N° 4,287 (1972))
J.A. PINSTON	(See H.R. KOCH)	
P. RADHAKRISHNA	(See F. MEZEI and K. FISCHER)	
C.R. NATOLI ^x <u>J. RANNINGER</u>	Two Magnon Light and Neutron Scattering in CoF_2	Physics Letters A <u>39</u> , 105 (1972)
C.R. NATOLI ^x <u>J. RANNINGER</u>	Two Magnon Correlations in Heisenberg Antiferromagnets. An Equation of Motion Study	J. Phys. C <u>6</u> , 323 (1973)
C.R. NATOLI ^x <u>J. RANNINGER</u>	Two Magnon Light Scattering in Rutile Structure Heisenberg Antiferromagnets	J. Phys. C <u>6</u> , 345 (1973)
C.R. NATOLI ^x <u>J. RANNINGER</u>	Two Magnon Neutron Scattering in CoF_2	J. Phys. C <u>6</u> , 370 (1973)
C.R. NATOLI ^x <u>J. RANNINGER</u>	Dynamical Properties of Heisenberg Antiferromagnets. Comparison of Equation of Motion and Diagrammatic Techniques	J. Phys. C <u>6</u> , 386 (1973)
	^x CNEN Casaccia, F.N.A., Italy	
D. CHEEKE ^x , H. H. MALLIE ^x <u>S. ROTH</u> B. SEEBER ^{xx}	Influence d'un Champ Magnétique sur la Vitesse de Propagation du Mode Mou dans le V_3Si ^x C.N.R.S. Grenoble, France ^{xx} Forschungslabor für Festkörperchemie, Munich, Germany	C. Rend. Acad. Sci. <u>275</u> , 662 B (1972)
R. ROUSSILLE	(See H.R. KOCH)	
F. RUSTICHELLI	(See A. BOEUF, A. FREUND and B. KLAR)	

M. ANTONINI ^x M. CORCHIA ^x M. NICOTERA ^x <u>F. RUSTICHELLI</u>	Curved Silicon Crystals as Neutron Monochromators ^x Comitato Nazionale per l'Energia Nucleare, Ispra, Italy	Nucl. Instr. and Methods <u>104</u> , 147 (1972)
<u>F. RUSTICHELLI</u> and Ispra, Varèse, Italy	Crystals with a Gradient in the Lattice Parameter as Neutron Monochromators	IAEA Symposium on Neutron Inelastic Scattering, Grenoble, March 6-10 (1972) (Proceedings of the Conf. p. 697 (1972))
W. F. SAAM	Inelastic Neutron Scattering from Superfluid He ⁴ with a Free Surface (Sept. 1972)	Phys. Rev. Letters (in print)
R. SCHERM	Nuclear Scattering	Summer School on Neutron Scattering and Magnetism, Autrans France, June 26 - July 2 (1972) (Annales de Physique t.7, N° 5, p. 349 (1972))
C. SCHMID K. HÖLZL	Phonon Green's Function for Polymer Chains: A Semianalytic Method for the Exact Computation of the Green's Function for regular Polymers	J. Pol. Sci. - Phys. Ed. <u>10</u> , 1881 (Oct. 1972)
C. SCHMID K. HÖLZL	The Hamiltonian of Irregular Polymer Skeletons as Analytic Function of the Bond Rotation Angles (June 1972)	Molecular Physics (in print)
C. SCHMID	(See K. HÖLZL)	
H. MAIER-LEIBNITZ ^x <u>Jochen SCHNEIDER</u>	Measurement of Structure Factors with Gamma Rays ^x Technische Universität Munich Germany	Conf. on Exp. Aspects of X-Rays and Neutron Single Crystal Diffraction Method Aarhus, Denmark, July 31 - Aug. 11 (1972). (Proceedings of the Conf. in print)
Jochen SCHNEIDER	(See A. FREUND)	
Julius SCHNEIDER	(See J. VILLAIN)	
M. STEINER B. DORNER	Spin Wave Measurements in the One-Dimensional Ferromagnet CsNiF ₃ (Dec. 1972) (Work performed in co-operation with the Institut für Kristallographie Tübingen, Germany).	Solid State Comm. (in print)

- | | | |
|--|---|--|
| C. THIBAUDIER
J. VILLAIN | On the 3-Dimensional Eight-Vertex Model | J. Phys. C <u>5</u> , 3429 (1972) |
| C. THIBAUDIER
F. VOLINO | Dipolar Interaction between Two Isotropically Rotating Molecules (Sept. 1972) | Molecular Physics (in print) |
| P. THOMAS | Production of Sensitive Converter Screens for Thermal Neutron Diffraction Patterns | J. Appl. Cryst. <u>5</u> , part 5, 373 (1972) (Short Communications) |
| P. THOMAS | Eigenschaften und Herstellung gebogener Kupfermonochromatoren für thermische Neutronen | J. Appl. Cryst. <u>5</u> , part 2, 78 (1972) |
| P. THOMAS | Modifizierte Laue-Methode für thermische Neutronen | J. Appl. Cryst. <u>5</u> , part 2, 83 (1972) |
| G. BREYNAT ^x
P. THOMAS
VU HONG LAC ^{xx} | Mesure du rendement comparatif de différents convertisseurs utilisés pour la détection photographique de neutrons thermiques

^x Section des Accélérateurs, CEN, Grenoble, France

^{xx} Section d'Application des Radioéléments, CEN, Grenoble | B.I.S.T.(C.E.A.)
N° 172, p. 55
(Juillet-Août 1972) |
| J. BEILLE ^x
H.L. ALBERTS ^x
H. BARTHOLIN ^x
D. BLOCH ^x
C. VETTER | Un Nouveau Dispositif pour l'étude de la Variation de l'Aimantation avec la pression, application au Bromure Ferreux

^x Laboratoire de Magnétisme C.N.R.S. Grenoble, France | C. R. Acad. Sci. Paris t. <u>175</u> , (13 Nov. 1972) Série B, 719 |
| C. VETTER
H.L. ALBERTS ^x
J. BEILLE ^x
D. BLOCH ^x | Aimantation du Bromure Ferreux au Voisinage du Point de Néel. Effet de la Température, de la Pression et du Champ Magnétique

^x Laboratoire de Magnétisme C.N.R.S. Grenoble, France | C. R. Acad. Sci. Paris t. <u>275</u> , (18 Dec. 1972) Série B, 915 |

J. VILLAIN Julius SCHNEIDER	Correlation Functions in Non-Polar Ice	Int. Symp. on the Physics and Chemistry of Ice, Ottawa, Canada, Aug. 14-18 (1972) (Proceedings of the Conf. in print)
G. AUVERT ^x <u>J. VILLAIN</u>	Entropy and Correlation Functions of Ice Ih Completely Polarized in the C-Direction ^x Lab. de Spectrométrie Physique St. Martin d'Hères, France	Int. Symp. on the Physics and Chemistry of Ice, Ottawa, Ca- nada, Aug. 14-18 (1972) (Proceedings of the Conf. in print)
J. VILLAIN	The Homogeneous Helimagnet and the Liquid-Solid Transition (June 1972)	J. Phys. (in print)
J. VILLAIN	(See C. THIBAUDIER)	
F. VOLINO	(See C. Thibaudier)	

INSTRUMENT DESCRIPTION

G. DUESING	Users Guide to the Three-Axis Spectrometer (High Flux Reactor, Grenoble) - Oct. 1972.
------------	--

I.L.L. Garching

K. AOI R. MESERVEY P.M. TEDROW	$H_c(\theta)$ and Tinkham's Formula for High-Field Superconductors.	Phys. Rev. B (in print).
W. DIETERICH	Anomalous Grüneisen Constants in V_3Si .	Z. Physik <u>254</u> , 464 (1972)
A. EGGINGTON D. STAUFFER C.S. KIANG E.M. PATTERSON D.P. PURI G.H. WALKER J.D. WISE Jr.	Heterogeneous Nucleation and Fisher's Droplet Picture.	Phys. Rev. B <u>6</u> , 2780 (1972)
P. FULDE I. PESCHEL	Some Crystalline Field Effects in Metals.	Advances in Physics <u>21</u> , 1 (1972)
L.L. HIRST	Theory of E.P.R. of 3d Impurities in Metals	Advances in Physics (in print)
M. PAPOULAR	Magnetic Stabilization of Nematic Turbulence	Phys. Lett. <u>38A</u> , 173 (1972)
I. PESCHEL M. KLENIN P. FULDE	On the Excitation Spectrum of Van Vleck Paramagnets	J. Phys. C : Solid State Phys. <u>5</u> , L194 (1972)
I. PESCHEL P. FULDE	Surfaces of Van Vleck-Ferro and Paramagnets	Z. für Physik (in print)

LIST OF THESES

- A. CASTETS Thèse de 3ème Cycle : Février 1972 (Paris)
Contribution à l'Etude de l'Influence d'un Terme
d'Echange Biquadratique sur l'Evolution Thermique
d'un Système de Spins.
- R. BELLISSENT Thèse de 3ème Cycle : Juin 1972 (Paris)
Etude par Diffraction de Neutrons de la Structure
du Cerium et du Praséodyme à l'Etat Liquide.
- K. BOHNEN Thèse de Doctorat d'Etat : Déc. 1972 (Aix-la-Chapelle)
Der Einfluss von nicht-magnetischen Fehlstellen auf den
Kondo-Effekt.
- J.P. GASPARD Thèse de 3ème Cycle : Mars 1972 (Orsay)
Reconstruction de Densité d'Etats à partir d'un Nombre
Fini de ses Moments. Application à l'Etude d'une Bande
d'Impuretés dans un Semiconducteur Dopé.
- S. MAZKEDIAN Thèse 3ème Cycle : Oct. 1972 (Parme, Italie)
Contributo allo Studio della Diffrazione dei Neutroni
da Cristalli Perfetti.
- Jochen SCHNEIDER Diplomarbeit : Oct. 1972 (Hambourg)
Untersuchung der Mosaikstruktur von Monochromator-
Kristallen für Neutronenbeugungsinstrumente mit Hilfe
eines Gammastrahlen-Diffraktometers.

**SUMMER SCHOOL ORGANIZED BY
I.L.L.**

Summer School on Neutron Scattering and Magnetism

(Autrans, France - June 26 - July 2, 1972)

F. MEZEI P. RADHAKRISHNA	Dilute Alloys	Ann. Phys. t.7, N° 4, 269 (1972)
J. KALUS	Influence of the Thermal Motion of Atoms in a Solid on the Neutron Scattering	Ann. Phys. t.7, N°4, 247 (1972)
R.L. MOSSBAUER	Magnetic Neutron Scattering in Relation to some other Experimental Methods	Ann. Phys. t.7, N° 4, 287 (1972)
R. SCHERM	Nuclear Scattering	Ann. Phys. t.7, N° 5, 349 (1972)

FONCTIONNEMENT DU REACTEUR

FONCTIONNEMENT DU REACTEUR

On peut distinguer deux périodes dans l'année 1972.

Une première période a été consacrée à la fin des essais de montée en puissance du Réacteur et à la mise au point des sources chaude et froide.

Une deuxième période, à partir du 16 Juillet 1972, peut être considérée comme le début de la marche normale du Réacteur comme source de neutrons destinée aux physiciens.

1. Période de Démarrage du Réacteur

Les événements marquants de cette période sont les suivants :

- 6 au 27 Janvier

Fin des essais de montée en puissance.

- Jusqu'au 13 Mars

Travaux divers sur le Réacteur (Canaux, etc...).

- 13 au 20 Mars

Fonctionnement à divers paliers de 10^{-3} Puissance Nominale à Puissance Nominale (57 MW) pour test du Réacteur, et premiers essais sur l'expérience D2 (H 11).

- Jusqu'à fin Avril

Montage des sources froide et chaude.

- Jusqu'au 23 Mai

Essais sur cellule de rupture et cellule d'essais de la source froide : essais de simulation sans neutrons.

Retrait de l'élément combustible (AK 001) limité par Commission de Sureté à 12 jours équivalents à pleine puissance.

Mise en place du premier élément combustible normal (AK 002).

- 29 Mai au 10 Juin

Fonctionnement à divers paliers pour essais en neutrons des sources chaude et froide et mesures des flux et spectres de neutrons.

La centrale hélium de la source froide se révèle assez puissante pour fonctionner avec une turbine et un compresseur (puissance frigorifique dans la source à puissance nominale = 5,2 kW). Ceci conduit à un gain de puissance électrique de 0,5 MW.

La source chaude ne pose pas de problème.

- 10 Juin au 16 Juillet

Travaux divers, montage et essais sans neutrons sur les expériences. Réparation des barres de sécurité du Réacteur.

L'activité globale du Service a été marquée pendant cette période :

- . par la prise en main du Réacteur par son équipe,
- . par le plein succès du montage et des essais sources froide et chaude,
- . par la période de marche semi-industrielle de la détritiation.

De nombreuses modifications et des aménagements ont dû être effectués durant cette période.

2. Période de Fonctionnement du Réacteur

Un certain nombre de cycles de fonctionnement à puissance progressivement augmentée en fonction des besoins des expériences ont été effectués.

1) Cycles N1, N2, N3 : 16 Juillet - 9 Septembre.

Ces cycles ont été effectués à des puissances de l'ordre de 5 MW.

2) Arrêt du 9 au 22 Septembre

Arrêt nécessité par divers travaux dus, notamment, à un incident mécanique sur le chariot porte-sources du spectromètre à produits de fission.

3) Cycles N4 et N5 : 22 Septembre - 10 Novembre

Ces cycles ont été effectués à 5, 30 puis 57 MW à partir du 9 Octobre jusqu'à usure complète du coeur AK 002. Ce coeur a duré 42 jours équivalents à pleine puissance au lieu des 36 prévus.

- 4) Arrêt du 10 au 14 Novembre pour rechargement du coeur AK 003 et observation du canal H9.
- 5) Cycle N6 du 14 Novembre au 15 Décembre

Ce cycle, effectué à 57 MW, a été volontairement arrêté à partir du 15.12.72 pour effectuer une observation générale des canaux et améliorer leur étanchéité. Cette décision a été prise à la suite de la mise hors d'état par corrosion du bloc mécanique de PN1 constatée le 12 Novembre.

Le phénomène de formation d'acide nitrique par radiolyse de l'air humide ayant été sous-estimé, on avait construit des canaux insuffisamment étanches; on pouvait craindre une détérioration progressive des pièces oxydables des bouchons avec transports d'ions ferreux nuisibles à la bonne tenue des doigts de gants.

Les mesures prises : nettoyage des doigts de gants, reprise de l'étanchéité des canaux, séchage complet et mise sous hélium, permettront d'être, dorénavant, à l'abri des phénomènes de corrosion dans les parties en pile des expériences.

Le redémarrage du Réacteur a eu lieu le 24 Janvier 1973.

La puissance intégrée en 1972 a été d'environ 4.730 MW X jour, ce qui correspond à 83 jours équivalents à la pleine puissance.

Depuis le 16 Juillet, les physiciens ont disposé des neutrons fournis par le Réacteur pendant 125 jours à diverses puissances (puissance moyenne : 30 MW), le Réacteur étant immobilisé pour pannes et travaux divers pendant 41 jours).

Le coefficient d'utilisation du Réacteur pendant cette période a donc été d'environ 75 %. Pendant le dernier cycle d'un mois à 57 MW ce coefficient a même été de 100 % (1 seul arrêt de 1/2 heure en 31 jours de fonctionnement).

SERVICES TECHNIQUES

SERVICE TECHNIQUE

SUPPORT SCIENTIFIQUE

1. Etude et Construction des Expériences

S'appuyant sur des industriels allemands et français, ainsi que sur l'atelier de l'ILL, le groupe a construit ou participé à la mise en service de 16 spectromètres, dont certains sont désormais en exploitation, et d'autres encore en achèvement d'équipement.

a) Etudes

Au montage de ces appareils, dont les études avaient été exécutées l'année précédente, se sont ajoutées les études de certains équipements importants, tels que électro-aimants, machines tournantes, fours électriques, les compléments de protections exigés au fur et à mesure des utilisations, ainsi que les études de 5 nouvelles grandes machines qui utilisent à 90% des éléments normalisés à l'ILL.

b) Montage et Mise au Point

<u>Février 72:</u>	3 appareils prêts 2 à caractère conventionnel (D2, D8); 1 avec des techniques nouvelles (IN2).
<u>Mars-Avril 72:</u>	3 autres appareils, (IN1, D4, D5), installés pour les canaux H4 et H8.
<u>Juin 72:</u>	Installation de 3 appareils, (D7, D10, IN9), sur les conduits de neutrons.
<u>Septembre 72:</u>	Mise en place des appareils pour les canaux H17 et H18, des équipements pour H12, H6, H7, H22. Un nouveau D8 sur H11, ainsi qu'un nouveau diffractomètre γ .

Décembre 72: Installation des appareils IN3, S11, IN5.

c) Développements Particuliers

Les principaux ont été la mise au point des tables multi-directionnelles (Tanzboden) en février; un plateau pour charges lourdes (500 kg) sur pneumatique en juin; lancement en fabrication d'une série de choppers à disques en mai; aéroglisseurs pour charges lourdes en septembre.

d) Fabrications Extérieures

280 fabrications ont été passées à l'extérieur.

2. Electronique

L'année 1972 a été occupée essentiellement au montage des expériences. Au cours de l'année, 12 expériences ont été mises au point pour les physiciens. La cadence des montages était, dans la deuxième partie de l'année, 5 expériences par trimestre. Les préparations pour 16 autres expériences sont dans un stade tel que l'on peut continuer à travailler en 1973 au même rythme.

Bien qu'une partie importante de l'électronique des expériences et des traitements de données ait été fournie par le LETI (CENG) et le DVZ (GfK), on est parvenu - grâce à une répartition rationnelle du travail - à disposer d'un personnel compétent qui peut intervenir à tout moment après le démarrage des expériences et donc assurer un bon fonctionnement.

Une standardisation et compatibilité considérables, tout en utilisant le plus largement possible les offres commerciales, ont permis de constituer un stock de réserve et d'appareils de mesure homogène et peu coûteux. En outre un magasin pour composants a été mis en service, ouvert à tous les agents de l'Institut.

Le groupe Electronique a pour principe d'effectuer - dans les mesures du possible - toutes les tâches qui lui sont confiées et ceci avec le minimum de dépenses matérielles possible. Cette tâche qui a été particulièrement difficile dans cette première année de

montage, a néanmoins pu être accomplie, grâce à une excellente collaboration entre les groupes participant aux travaux de montage et les fournisseurs, si bien que les expériences ont pu se dérouler en temps voulu. Ceci a seulement été possible (vu le nombre relativement faible dont est constitué le groupe Electronique (17 agents)) en engageant pour une courte durée des aides pour les travaux de montage et de câblage (leur nombre maximum en automne s'élevait à 10), ainsi que la passation de pratiquement tous les travaux de fabrication à l'industrie.

En 1972 les appareils suivants ont été étudiés et développés à l'ILL:

2.1 - Amplificateur-Discriminateur des Détecteurs de Neutrons

Cet amplificateur bon marché, en plusieurs versions, est employé en environ 650 exemplaires à l'Institut, et intéresse beaucoup d'autres centres de recherches.

2.2 - Automatisation des Petites Expériences en Standard-NIM

Ce système est compatible au système de comptage et horloge de la société Wenzel-Elektronik. Il a été utilisé pour 5 expériences. Différents modules se trouvent dans d'autres expériences comme équipements complémentaires.

2.3 - CAMAC-Interface pour le Centre de Calcul NICOLE

(Développé en collaboration avec le LEM-GfK).

2.4 - Mesure de Temps de Vol

Cette électronique qui a été développée avec l'Institut für Angewandte Kernforschung à Karlsruhe permet de connecter jusqu'à 128 détecteurs indépendants. Elle a été utilisée à l'ILL pour 4 expériences. Deux exemplaires seront envoyés à Karlsruhe, deux ont été commandés par le Hahn-Meitner-Institut à Berlin, et en outre les principes de base pour la construction ont été communiqués à l'Institut für Festkörperforschung à Jülich.

2.5 - CAMAC-Interface pour le PDP11

Publication dans le CAMAC-Bulletin No. 4, automne 1972.

2.6 - Rallonge pour l'"omnibus" du PDP11 à 200 m

Publication dans "DECUS", automne 1972.

2.7 - CAMAC Modules

a) Derandomizing CAMAC-Input-modul

Publication dans CAMAC-Bulletin (en préparation)

b) CAMAC input register

c) CAMAC stepping motor drive

d) CAMAC universal interface

Publication dans CAMAC-Bulletin No. 4, automne 1972.

e) CAMAC test-modules (9 différents types)

f) CAMAC relais-command-modul

2.8 - Asservissement Optique pour le Spectromètre "Tanzboden"

2.9 - Pilotage Optique pour les Diffractomètres Gamma GAMS 1-3 (PN3)

2.10 - Pilotage du Champ Magnétique pour le Spectromètre à Electrons de Conversion (PN2)

3. Informatique

L'activité du groupe a été essentiellement concentrée:

- sur la prise en charge de la responsabilité des installations de traitement de données, prévues pour le fonctionnement automatique des expériences;
- sur la programmation du système et des expériences, et
- sur le support à la prise en charge des instruments et les tests des systèmes annexes.

3.1 - Système CARINE (2 T2000)

Les expériences pour les instruments D2, D5, D8, D10, IN1, IN2 ont été mises en fonctionnement automatique.

Le Hard- et Software ont été développés afin d'utiliser le système de visualisation disponible des 2 calculateurs de processus T2000.

Un système de programme a été créé, qui permet le transfert des données à l'aide de bandes magnétiques des calculateurs de processus au centre de calcul scientifique.

3.2 - Système NICOLE (2 TR 86)

Pour les expériences D7, D11, PN1, IN5, un fonctionnement automatique a été adopté dans une première version, qui a résolu les problèmes principaux d'accumulation des données.

La procédure d'exploitation remise par la GfK, a pu être testée en pratique en automne, après de nombreuses modifications du système réalisées en collaboration avec les programmeurs de la GfK.

Le temps consacré à la codification des programmes des expériences en langage assembleur a été considérable. En plus, des programmes ont été développés pour la séparation du système double-processeur en un ordinateur de processus et d'essai, l'installation d'une protection de programmes en cas de manque de secteur et l'exploitation des données de spectres par un centre de calcul scientifique.

3.3 - Petit Calculateur (3 PDP11)

Le fonctionnement automatique de l'instrument D6 a été réalisé et mis en service à Saclay, puis à Grenoble.

Un système de fonctionnement à bandes magnétiques pour utilisation multiple a été développé et un moniteur pour les différents modules CAMAC a été créé.

Un PDP 11 a été mis à la disposition de l'expérience S1 4 (DEM) sur lequel a été commencé en commun la mise en service du programme d'expérience par simulation sur un centre de calcul scientifique.

4. Cryogénie - Vide

Ce service agit comme service général pour tout l'ILL en ce qui concerne le vide, la cryogénie et les fours.

4.1 - Vide

- Installation de l'atelier d'entretien du matériel de vice (1.5.72);
- Entretien courant de:
 - 120 pompes mécaniques (dont 40 contaminées)
 - 20 pompes secondaires;
 - 3 détecteurs de fuite (Hélium);
- 50 réparations;
- Assistance technique pour la détection de fuites, avec utilisation continue de 2 détecteurs de fuites (plus de 1000 tests);
- Assistance technique dans la conception des installations de vide nouvelles (en particulier, pompage propre sur les conduits de neutrons).

4.2 - Cryogénie

Mise en place de l'infrastructure de distribution des fluides cryogéniques:

a) Azote liquide

- Un troisième point principal de distribution, avec un tank de 2800 l, fonctionne à l'extrémité du bâtiment conduits de neutrons (octobre 1972).
- Une installation à haute sécurité pour la maintenance d'échantillons à 77°K fonctionne depuis novembre 1972.
- Consommation totale d'azote liquide en 1972: 76.627 litres.

b) Hélium liquide

- Mise en service de la distribution d'hélium liquide grâce à 10 réservoirs de 100 l.
- Contrat de fourniture d'hélium liquide passé avec CEN G et CNRS.

- Distribution self-service d'hélium liquide: tout utilisateur peut disposer immédiatement de 30 l d'hélium liquide, à n'importe quelle heure du jour ou de la nuit, sans demande préalable.

- Consommation 1972: 1325 l (100 l/semaine en décembre 1972).

c) Récupération d'Hélium Gazeux

Construction et démarrage de l'installation de récupération d'hélium gazeux (september 1972).

d) Dispositifs Expérimentaux

Assistance technique à la mise en place des dispositifs expérimentaux:

- Cryostats hélium (9)

Etude, définition de spécifications, et commande de 9 cryostats hélium, dont 6 à température variable;

Réception, essais et mise en route de 5 de ces cryostats.

- Cryostats azote liquide (4)

Etude et commande d'un cryostat à température variable;

Etude et construction d'un cryostat à température variable;

Etude et construction de deux cryostats à température fixe.

- Groupes de pompages (15)

Lancement, après étude et construction d'un prototype, de la construction de 15 groupes de pompage associés aux cryostats.

- Régulations de température (13)

Achat de trois régulations à diodes As-Ga (1.5 T 300)

Lancement de la fabrication de dix régulations du même type.

5. Exploitation des Expériences

5.1 - Personnel

Recherche et recrutement de 8 nouveaux techniciens.

5.2 - Equipements Communs

a) Protections biologiques autour des expériences:

Les travaux faisant l'objet du marché 6585/99 sont terminés.

b) Conduits de Neutrons Principaux:

Les travaux de construction (marchés AL 9C 24 et AL 9C 25) sont terminés.

La mise en place des protections, l'équipement de l'obturateur général sont terminés.

Equipement de vide en cours de finition: commandes, automatismes, sécurités.

c) Conduits de Neutrons Spéciaux:

Les travaux de construction (marché 6977/80) sont terminés, ainsi que les mises en place des protections standard.

Equipement de vide en cours de réalisation.

d) Hall des Conduits:

Participation à l'élaboration des protections autour des expériences.

Aménagements divers: circulations, distributions de fluides, implantation des matériels.

5.3 - Exploitation des Dispositifs Expérimentaux

Mise à la disposition des physiciens de 19 collaborateurs (dont trois pour l'élaboration de cristaux). Les dispositifs concernés sont: PN1, PN2, PN3, PN4, IN2, IN5, IN9, D1A, D1B, D5, D6, D7, D10, D11, D12, Si4.

5.4 - Principaux Evénements

19 mai 1972: Fin de la construction des conduits de neutrons principaux.

8 décembre 1972: Fin de la construction des conduits de neutrons spéciaux.

SERVICE TECHNIQUE

SUPPORT TECHNIQUE

1. Service Fabrication, Aménagement, Entretien

1.1 - Fabrications Mécaniques

a) Ateliers Principaux

Les ateliers ont assuré environ 10.000 heures de travail qui ont permis de servir 520 demandes de travaux se répartissant comme suit:

40 pour le réacteur, 40 diverses pour besoins généraux, 440 pour le bureau d'études et les physiciens.

Cette année a été caractérisée par un considérable accroissement des petits travaux de modification d'adaptation sur les constituants des expériences. Il en est résulté une charge permanente à très court terme, et toujours importante en regard des moyens disponibles. Dans leur ensemble, les délais exigés des expérimentateurs n'ont été tenus qu'au prix de beaucoup de difficultés.

b) Atelier Libre Service

Cet atelier donne aux techniciens et expérimentateurs la possibilité d'assurer eux-mêmes directement leurs petits travaux d'usinage et de fabrication mécanique. Une moyenne de 30 heures de travail par jour sont effectuées, soit l'équivalent de 4 agents à plein temps.

1.2 - Essais et Développements

Un groupe de 6 techniciens polyvalents participe au montage, à la mise au point et aux essais de certains dispositifs expérimentaux

en étroite relation avec le groupe d'étude et de construction et les responsables de chaque expérience. Il effectue la mesure des grandeurs physiques sur demande du réacteur ou des expérimentateurs.

Il met à la disposition des techniciens de l'Institut, sous forme de prêts contrôlés, des appareils d'usage particulier. Enfin il étudie et réalise certains éléments complémentaires de dispositifs expérimentaux existants.

1.3 - Aménagement et Entretien

- a) Etudier et coordonner la réalisation de tous les nouveaux locaux et compléments d'infrastructure nécessités par le développement de l'Institut.
- b) Réaliser et installer tout ou partie des aménagements correspondants (fluides, petit équipement, mobilier).
- c) Réaliser pour les expériences, sur demande des physiciens, tous les branchements aux réseaux de fluides et tous les petits aménagements annexes.
- d) Assurer toutes les manutentions et transports à l'intérieur de l'Institut.
- e) Assurer, en partie par ses moyens, en majorité par contrats avec des firmes extérieures, l'entretien et la maintenance des installations techniques extérieures au réacteur.
- f) Réaliser la mise en conformité des installations avec les règlements de sécurité en vigueur.
- g) Assurer le nettoyage et l'entretien général des bâtiments, des espaces verts et de la voirie.

Au cours de l'année, 320 demandes de travaux et 520 demandes de manutentions ont été satisfaites.

2. Sécurité et Radioprotection

2.1 - Sécurité Générale

- Installation et mise en service de la détection deutérium dans le réacteur (niveau D) autour des installations de la source froide.

- Extension du réseau de téléalarmes.
- Contrôles avec l'aide d'organismes officiels (ALPAVE, MINES...
 - . des installations électriques (Décret du 14.11.1962)
 - . des appareils de levage et de manutention
 - . des appareils sous pression de gaz construits à l'ILL et soumis au décret du 18.1.1943.
- Installation d'une extinction automatique par CO₂ sur les groupes Diesel.
- Comité d'Hygiène et de Sécurité
 - . Compte rendus de réunions, rapport à l'Inspecteur du Travail, relance des travaux, etc.
- Gardiennage
 - . Mise en place du gardiennage entrée réacteur et conduits des neutrons, problèmes divers.
- Analyses de sûreté sur:
 - . les installations générales du réacteur et des laboratoires;
 - . les installations particulières (détritiation, dispositifs de physique nucléaire);
 - . préparation et compte-rendus des réunions avec les services intéressés.
- Participation aux projets d'aménagements divers
 - . Atelier traitements de surfaces, laboratoire hydrogène, réseau de diffusion etc.

2.2 - Radioprotection

- Laboratoire:
 - . Renforcement de l'équipement et des moyens de mesure (spectro 4000 canaux avec détecteur Ge-Li);
 - . Analyses journalières liées au fonctionnement des installations du réacteur et de la détritiation;
 - . Analyses particulières: recherche du tritium dans les urines, prélèvements avant interventions, étalonnages, etc.
- Aménagement des zones de travail et protections:
 - . dans réacteur, détritiation, conduits des neutrons, dispositifs expérimentaux;
 - . amélioration et renforcement des protections biologiques, balisages;

- . Sécurité radiologique des dispositifs expérimentaux;
 - . Mesures autour de chaque expérience; gammas et neutrons;
 - . Protection accès aux casemates des faisceaux primaires réacteur;
 - . Matérialisation et signalisation des faisceaux secondaires sur les aires de travail (barrières optiques);
 - . Protection accès aux faisceaux primaires des monochromateurs conduits de neutrons (obturateurs partiels, balises clignotantes).
- Interventions:
 - . Préparation et surveillance de tous les travaux en milieu actif ou contaminé;
 - . Intervention en cas d'incidents (démontages et réparations au réacteur: barres de sécurité, détritiation, pompes à vide, dispositifs physique nucléaire: H9, canal β , H6/H7);
 - . Contrôle de la contamination: matériel, linge.
 - Gestion des sources radioactives et des matériaux de protection: commandes, stockage, contrôles, estimation des besoins etc.
 - Dosimétrie du personnel:
 - . gestion des films, stylos, fiches;
 - . liaison avec le service médical du CENG.
 - Equipements d'intervention et matériels divers:
 - Commande et gestion de vêtements, appareils portatifs, produits de décontamination.
 - Travaux et petites études diverses en laboratoire et dans les installations.

ADMINISTRATION

ADMINISTRATION

Au cours de l'année 1972, le nombre des agents de l'Institut est passé de 307 à 344. L'âge moyen du personnel était de 32,6 ans.

La répartition entre les différents domaines, catégories, nationalités est la suivante (entre parenthèses : les chiffres de l'année précédente)

	<u>Allemands</u>	<u>Français</u>	<u>Divers</u>	<u>Total</u>
1. <u>Cadres et Employés</u>				
- Chercheurs à contrats limités	28 (30)	20 (18)	17 (18)	65 (66)
- Boursiers Thèse	15 (10)	21 (21)	3 (3)	39 (31)
- Ingénieurs des Services Techniques	7 (8)	24 (21)	1 (-)	32 (29)
- Autres Ingénieurs et Cadres Administratifs	7 (8)	11 (12)	-	18 (20)
2. <u>Personnel Non Cadre</u>	21 (14)	166 (140)	3 (4)	190 (158)
3. <u>TOTAL I.L.L.</u>	78 (70)	242 (212)	24 (25)	344 (307)

En 1972, les dépenses du personnel se sont élevées à 20.728.700 Francs par rapport à 15.531.800 Francs en 1971. L'augmentation de 33,4 % s'explique, outre par l'augmentation du nombre des postes, par l'augmentation générale de 7,6 % en moyenne, par la croissance des dépenses pour la prime d'ancienneté ainsi que par les avancements dans le cadre des normes en usage au C.E.A. L'horaire hebdomadaire de travail est passé de 42 heures à 41,5 heures au 1er Octobre 1972. Les dépenses de personnel se composent des éléments suivants :

- Rémunérations	15.979.730 Francs
- Versement forfaitaire de l'employeur	855.945 Francs
- Charges sociales	3.893.025 Francs

Les charges sociales comprennent :

. Cotisations à la Sécurité Sociale	14,87 %
. Versements à la retraite complémentaire	6,69 %
. Cotisations à l'Assurance Chômage	0,33 %
. Versement au Fonds d'Aide au Logement	0,60 %
. Cotisation au Fonds Social du Comité d'Entreprise (Oeuvres sociales)	1,87 %

En liaison avec ces dépenses, citons également les frais supportés par l'I.L.L. et financés sur d'autres titres du Budget pour le service d'autobus, la subvention au prix des repas et le coût de la formation permanente du personnel. Le montant de 0.8 % de la somme salariale légalement prévu à cet effet comme charge minima de chaque employeur, est dépassé de très loin à l'I.L.L. - surtout si l'on fait la somme des dépenses pour les enseignants des différents cours de langues, pour l'équipement des laboratoires de langues (en collaboration avec le C.N.R.S., le C.E.A. et l'I.S.N.) pour le matériel pédagogique, pour les voyages et les frais de séjour pour cours extérieurs, pour frais de secrétariat et d'organisation, en particulier pour les heures d'absence du personnel, ainsi occasionnées.

Le contrôle médical du personnel est effectué par le service de médecine du travail du C.E.N.G. Le travail occasionné par la Sécurité Sociale et par les remboursements au titre de la Mutuelle apparaît avec évidence si l'on sait que les demandes que l'I.L.L. a dû préparer pour la Sécurité Sociale et régler dans le cadre de la Mutuelle ont concerné près de mille personnes - les familles des agents de l'I.L.L. bénéficiant également de ces avantages.

Les questions concernant le logement des agents - qu'il s'agisse de l'attribution de prêts, de la recherche de logements et de l'équipement et la gérance des 15 appartements d'hôtes meublés par l'I.L.L., occupent de plus en plus le bureau du personnel qui, avec le commencement de la phase expérimentale et les allées et venues constantes d'expérimentateurs, doit faire face, chaque jour, à des demandes de logement et d'aide pour surmonter les difficultés d'adaptation et le contact avec les autorités.

En 1972 se sont constituées à l'I.L.L. - à côté du syndicat autonome I.L.L. - des sections de la C.F.D.T. et de la C.G.T. Le dialogue avec les représentants du personnel exige, du fait des divergences d'opinions, de terminologie et de langue existant dans les différents pays, beaucoup de temps et de patience.

Dans le domaine financier, l'adaptation de la comptabilité (budgétaire et générale) au système mécanographique d'une société de services, a pu être achevée de façon satisfaisante. Ainsi ont pu être obtenues de meilleures analyses comptables et des informations actualisées qui ont permis une surveillance de la gestion financière de l'Institut, plus proche de la réalité.

En ce qui concerne l'exécution du Budget 1972, l'Institut a dû appliquer, pour la première fois, les "Directives pour l'Etablissement et l'Exécution du Budget", approuvées par le Comité de Direction le 21 Octobre 1970 (Règlement Budgétaire 1972). Lors de la mise en application de ce règlement budgétaire, il est apparu que, pour les prévisions comme pour l'exécution, le système de la délimitation entre les différentes natures de dépenses et les différents chapitres est trop détaillé et, de ce fait, ne reflète pas la réalité. C'est la raison pour laquelle la Direction de l'Institut a été, au cours de l'année 1972, obligée à plusieurs reprises de demander l'accord du Sous-Comité financier, afin d'effectuer des virements de crédits entre les différents chapitres et natures de frais. Afin de permettre, à l'avenir, des prévisions plus réalistes et une plus grande flexibilité et, afin de satisfaire au souhait exprimé par les associés de prévoir les besoins financiers de l'Institut non plus en crédits d'engagement mais en crédits de paiement, l'Institut a commencé à rédiger le projet d'un nouveau règlement budgétaire.

En ce qui concerne les approvisionnements, l'année 1972 a été caractérisée par l'achèvement de l'installation du magasin. Bien que l'Institut ait, comme auparavant, recours à l'infrastructure existante au C.E.N.G., les besoins spécifiques de l'Institut et, en particulier, les besoins en matériel allemand, ont rendu nécessaire l'installation d'un magasin propre à l'Institut.

La collaboration pour les questions d'achat avec le C.E.N.G. et la G.F.K. a été, comme auparavant, indispensable pour l'I.L.L. même si, d'autre part, le nombre croissant de problèmes spécifiques à l'I.L.L. lors d'études de marché et de contrats compliqués (construction d'appareils, éléments combustibles, calculateurs) accroissent de plus en plus le travail du petit Bureau d'Achats de l'I.L.L.

Mentionnons, en conclusion, le travail du Secrétariat Administratif lors de la préparation des réunions du Comité de Direction et de ses Sous-Comités, lors de l'exploitation de leurs résultats ainsi que le travail occasionné par les négociations sur l'adhésion du "Science Research Council".

Il est possible de prévoir dès aujourd'hui que les problèmes liés à l'arrivée d'un nouvel associé en provenance d'un troisième pays - citons à ce sujet, par exemple, trois langues officielles, la révision des règlements actuels, des difficultés d'adaptation particulièrement propres aux collaborateurs anglais qui arrivent en France avec d'autres habitudes et d'autres espérances ainsi que le problème scolaire qui se pose de nouveau d'une manière élargie et plus urgente - entraîneront pour les services administratifs un surcroît de travail tant en qualité qu'en quantité.