

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ

ΕΘΝΙΚΟ ΚΕΝΤΡΟ ΕΡΕΥΝΑΣ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ "ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ"



Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών «Φυσική και Τεχνολογικές Εφαρμογές»

Μελέτη της ροής νετρονίων στο ΕΚΕΦΕ ''Δημόκριτος'' με τη χρήση των κωδίκων MCNP και NeuSDesc

Μεταπτυχιακή Διπλωματική Εργασία

Σιγαλός Δημήτρης

Επιβλέπων: Μιχάλης Κόκκορης, Αν. Καθηγητής ΕΜΠ

Αθήνα, Ιούλιος 2015

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τους δύο, ουσιαστικά, επιβλέποντες αυτής της εργασίας, την Καθηγήτρια Ρόζα Βλαστού-Ζάννη και τον Αναπληρωτή Καθηγητή Μιχάλη Κόκκορη για την καθοδήγηση, τις συμβουλές και την πολύτιμη βοήθεια που προσέφεραν σε όλα τα στάδια εκπόνησης αυτής της εργασίας. Και οι δύο, με τη συμπεριφορά τους, δημιούργησαν ένα ιδανικό περιβάλλον για την εκπόνηση της εργασίας αυτής στο οποίο ήταν ευχαρίστηση μου να συμμετέχω. Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω την Υποψήφια Διδάκτωρ Αντιγόνη Καλαμαρά για την βοήθεια που προσέφερε σε διάφορα σημεία της εργασίας καθώς και τα υπόλοιπα μέλη της ομάδας πυρηνικής φυσικής για την αρμονική συνεργασία.

Περίληψη

Στην παρούσα εργασία πραγματοποιήθηκε χαρακτηρισμός της δέσμης νετρονίων ενέργειας 15.3 MeV, η οποία παράγεται μέσω της αντίδρασης ³H(d,n)⁴He στον επιταχυντή Tandem Van de Graaff 5.5 MV του Ινστιτούτου Πυρηνικής και Σωματιδιακής Φυσικής στο ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος". Ο χαρακτηρισμός της δέσμης πραγματοποιήθηκε μέσω προσομοιώσεων εξαιτίας της απουσίας συστήματος παρακολούθησης σωματιδίων σε πραγματικό χρόνο (ToF). Οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν με την συνδυαστική χρήση των κωδίκων MCNP και NeuSDesc. Για να πιστοποιηθεί η ορθότητα των προσομοιώσεων χρησιμοποιήθηκε η τεχνική της πολλαπλής ενεργοποίησης στόχων, η οποία αποτελεί μια εφαρμογή της μεθόδου ενεργοποίησης. Μελετήθηκαν αντιδράσεις οι οποίες ενεργοποιούνται σε διαφορετικές ενέργειες νετρονίων, στην ενεργειακή περιοχή από 0 εως 10 MeV, στοχεύοντας στη πλήρη μελέτη του ενεργειακού φάσματος των νετρονίων. Η πιστοποίηση πραγματοποιήθηκε μέσω σύγκρισης θεωρητικών (μέσω προσομοίωσης) και πειραματικών τιμών ρυθμών ενεργοποίησης των επιλεγμένων αντιδράσεων.

Abstract

In the present work the quasi-monoenergetic neutron beam in the energy of 15.3 MeV, produced via the 3 H(d,n)⁴He reaction at the 5.5 MV Tandem Van de Graaff accelerator at the NCSR "Demokritos", has been characterized. In absence of time-of-flight capabilities the characterization has been carried out through simulation with the combined use of the MCNP and NeuSDesc codes. In order to verify the simulated neutron energy spectra the multiple foil activation technique has been applied, implementing reactions with different threshold energies ranging from 0 to 10 MeV neutron energy. The verification was held through comparison of the simulated and experimental reaction rates of the selected reactions.

Περιεχόμενα

Ευχαριστίες	3
Περίληψη	5
Abstract	7
1. Μελέτη της αντίδρασης D-T μέσω του κώδικα NeuSDesc	. 11
1.1 Θεωρητικό υπόβαθρο	. 11
1.1.1 Αλληλεπίδραση φορτισμένων σωματιδίων με την ύλη	11
1.1.2 Παραγωγή μονοενεργειακής δέσμης νετρονίων μέσω της αντίδρασης D	-T 13
1.2 Ο κώδικας NeuSDesc	. 15
1.3 Παρουσίαση της λειτουργίας του κώδικα NeuSDesc	. 16
1.3.1 Εισαγωγή δεδομένων	16
1.3.2 Εκτέλεση υπολογισμών	18
1.4 Η αντίδραση D-T στο NeuSDesc	. 20
2. Χαρακτηρισμός της δέσμης νετρονίων μέσω του κώδικα MCNP στις	22
υψηλες ενεργειες νετρονιων	. 23
2.1 Παρουσίαση και αρχές λειτουργίας του κώδικα MCNP	. 23
2.2 Σύγκριση του κώδικα MCNP με τον κώδικα NeuSDesc	. 24
2.3 Σύγκριση απλής γεωμετρίας στους κώδικες MCNP και NeuSDesc	. 25
2.4 Η μέθοδος της ενεργοποίησης	. 26
2.5 Περιγραφή του προς προσομοίωση πειράματος	. 27
2.5.1 Πειραματική διάταξη και διαδικασία	27
2.5.2 Μελέτη της αντίδρασης D-T στο πείραμα	28
2.6 Προσομοίωση του πειράματος	. 30
2.7 Θεωρητικός υπολογισμός ρυθμών ενεργοποίησης επιλεγμένων αντιδράσεων μέσω του κώδικα MCNP	. 31
2.7.1 Οι επιλεγμένες αντιδράσεις αναφοράς	31
2.7.2 Μέθοδος υπολογισμού ρυθμών ενεργοποίησης	32
2.8 Πειραματικός υπολογισμός ρυθμών ενεργοποίησης των επιλεγμένων	25
αντιορασεων	. 33

2.9 Σύγκριση πειραματικών και θεωρητικών αποτελεσμάτων - Συμπεράσματα	7
2.10 Θεωρητική μελέτη ύπαρξης οπισθοσκεδαζόμενων νετρονίων υψηλής ενέργειας4	0
 Χαρακτηρισμός της δέσμης νετρονίων στις χαμηλές ενέργειες μέσω του κώδικα MCNP) 2
3.1 Προέλευση των παρασιτικών νετρονίων της δέσμης4	.2
3.2 Πιστοποίηση του χαρακτηρισμού της δέσμης νετρονίων στις χαμηλές ενέργειες μέσω μελέτης της αντίδρασης ¹⁹⁷ Au(n,γ) ¹⁹⁸ Au	.5
3.3 Εφαρμογές της μεθόδου ενεργοποίησης στις χαμηλές ενέργειες 4	.7
3.3.1 Μέτρηση ενεργών διατομών αντιδράσεων4	7
 3.3.2 Προετοιμασία πειράματος με σκοπό την βαθμονόμηση των φίλτρων CR- 39	7
3.3.2.1 Περιγραφή των φίλτρων LR115 και CR-394	7
3.3.2.2 Περιγραφή του πειράματος – Επιλογή γεωμετρίας4	8
3.3.2.3 Εκτίμηση αναγκαίας χρονικής διάρκειας του πειράματος5	60
4. Σύνοψη και τελικά συμπεράσματα5	2
4.1 Σύνοψη5	2
4.2 Συμπεράσματα και προοπτικές5	2
Ενεργές διατομές των αντιδράσεων που μελετήθηκαν5	4
Βιβλιογραφία	9

Μελέτη της αντίδρασης D-T μέσω του κώδικα NeuSDesc

Στο παρόν κεφάλαιο γίνεται χρήση του κώδικα προσομοίωσης NeuSDesc με σκοπό τη μελέτη της αντίδρασης D-T. Θα πραγματοποιηθεί εκτενής ανάλυση της λειτουργίας του κώδικα, αφού προηγηθεί η θεωρητική εισαγωγή στις αντιδράσεις παραγωγής νετρονίων.

1.1 Θεωρητικό υπόβαθρο

1.1.1 Αλληλεπίδραση φορτισμένων σωματιδίων με την ύλη

Παρά το γεγονός της ύπαρξης μη ηλεκτρικά φορτισμένων σωματιδίων στη φύση, η γενικότερη μελέτη αλληλεπιδράσεων μεταξύ σωματιδίων πραγματοποιείται με την μελέτη μόνο των αντίστοιχων φορτισμένων που παράγονται δευτερογενώς από τις αλληλεπιδράσεις αυτές, για τον απλούστατο λόγο ότι μόνο αυτά μπορούν να ανιχνευθούν άμεσα μέσω ηλεκτρομαγνητικών αλληλεπιδράσεων. Για το λόγο αυτό κατά τη μελέτη αλληλεπιδράσεων που περιλαμβάνουν αφόρτιστα σωματίδια, όπως τα νετρόνια ή τα νετρίνα, πραγματοποιείται έμμεση παρατήρηση αυτών, μέσω φορτισμένων σωματιδίων που παράγονται αφότου τα αφόρτιστα αυτά σωματίδια αλληλεπιδράσουν με την ύλη.

Τα φορτισμένα σωματίδια μπορούν να διαχωριστούν σε δύο γενικότερες κατηγορίες: τα ελαφρά, όπως είναι τα ηλεκτρόνια και τα ποζιτρόνια, και τα βαρέα, όπως είναι τα πρωτόνια, τα νετρόνια, το δευτέριο και το τρίτιο, τα σωμάτια α και τα θραύσματα σχάσης. Όλα αυτά αλληλεπιδρούν με την ύλη πρωτίστως με δύο τρόπους αλληλεπίδρασης [1]:

- i. Μέσω ανελαστικής σκέδασης Coulomb σε ατομικά ηλεκτρόνια. Η αλληλεπίδραση έχει ως αποτέλεσμα τη διέγερση ή τον ιονισμό των ατόμων της ύλης και κατά συνέπεια τη θέρμανση τους. Κατά τις αλληλεπιδράσεις αυτές παρατηρείται μικρή μεταφορά ενέργειας ανά σκέδαση, όμως λόγω του μεγάλου πλήθους τους αποτελούν τον κυρίαρχο μηχανισμό αλληλεπίδρασης σε φυσιολογικές συνθήκες.
- ii. Μέσω ανελαστικών πυρηνικών σκεδάσεων. Παρατηρείται σύγκρουση ενός σωματιδίου με τον πυρήνα ενός ατόμου της ύλης με αποτέλεσμα την ελάττωση της ενέργειας του σωματιδίου, ενώ η πιθανότητα διέγερσης του πυρήνα στην περίπτωση ελαφρών ιόντων κρίνεται αμελητέα. Η πιθανότητα εμφάνισης τέτοιου είδους αλληλεπίδρασης είναι πολύ μικρή αλλά για πολύ χαμηλές ενέργειες των εισερχόμενων σωματιδίων είναι ο κυρίαρχος μηχανισμός απώλειας ενέργειας (βλ. σχήμα 1.1).



Σχήμα 1.1: Η απώλεια ενέργειας δευτερίων ανά μονάδα μήκους κατά την διείσδυση τους σε στόχο ΤΙΤ για τους δύο τρόπους αλληλεπίδρασης ιόντων-ύλης.

Κατά τη διείσδυση των σωματιδίων στην ύλη και κατά την αλληλεπίδρασή τους με αυτή, πραγματοποιείται σταδιακή ελάττωση της κινητικής τους ενέργειας μετά από κάθε σκέδαση μέχρι ενός σημείου όπου αυτή μηδενίζεται. Η ελάττωση της κινητικής ενέργειας του φορτισμένου σωματιδίου ανά μονάδα μήκους εισχώρησης μέσα σε ένα υλικό ονομάζεται ισχύς ανάσχεσης (stopping power) και περιγράφεται από τη σχέση

$$S = -\frac{dT}{dx}$$

οπού dT είναι το ποσό μείωσης της κινητικής ενέργειας του σωματιδίου για απειροστή μετατόπιση dx. Από τη σχέση αυτή συμπεραίνουμε ότι όσο μεγαλύτερη είναι η ισχύς ανάσχεσης τόσο μικρότερο θα είναι το μήκος διείσδυσης του σωματιδίου μέσα στο υλικό. Για το σύνολο των φορτισμένων σωματιδίων, η ελάττωση ενέργειας και ο επερχόμενος ιονισμός της ύλης μπορεί να περιγραφεί κλασικά από την σχέση Bethe-Block, ενώ γραφικά η παραπάνω συμπεριφορά μπορεί να αναπαρασταθεί από τη λεγόμενη καμπύλη Bragg (Bragg curve) [1]. Η τυπική μορφή της καμπύλης Bragg εμφανίζεται στο σχήμα 1.2 οπού παρατηρούμε την ύπαρξη της κορυφής Bragg (Bragg peak), η οποία αντιστοιχεί στο μέγιστο της ισχύος ανάσχεσης.

Η περιγραφή της ελάττωσης ενέργειας των φορτισμένων σωματιδίων μέσα στην ύλη είναι γενικότερα μια στατιστική και στοχαστική διαδικασία. Όταν μια μονοενεργειακή δέσμη σωματιδίων προσκρούει στην ύλη είναι δεδομένο ότι θα υπάρξει μια ενεργειακή διασπορά της δέσμης σε ένα πεπερασμένο εύρος γύρω από μια κεντρική τιμή, καθώς δεν είναι δυνατό κάθε σωματίδιο να απωλέσει ίση ποσότητα ενέργειας. Το παραπάνω φαινόμενο αναφέρεται ως ενεργειακός διασκεδασμός (energy straggling). Η κατανομή των ενεργειών θα σχηματίζει μια καμπύλη με μορφή ανάλογη της κατανομής Gauss, με το εύρος τιμών γύρω από την κορυφή να είναι ανάλογο του λόγου Z/A του υλικού στο οποίο προσπίπτει η δέσμη.



Σχήμα 1.2: Τυπική μορφή της καμπύλης Bragg για ένα σωμάτιο α με αρχική ενέργεια της τάξεως των μερικών MeV [1]

Αντίστοιχο φαινόμενο στατιστικής φύσης εμφανίζεται και στην περίπτωση στην οποία μελετήσουμε το μήκος που διανύει κάθε σωματίδιο μέσα στην ύλη, προτού αυτό απωλέσει το σύνολο της κινητικής του ενέργειας. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται χωρικός διασκεδασμός (range or lateral straggling).

1.1.2 Παραγωγή μονο
ενεργειακής δέσμης νετρονίων μέσω της αντίδρασης D-T

Τα νετρόνια, ως σωματίδια με απουσία ηλεκτρικού φορτίου, δεν δύναται να επιταχυνθούν σε έναν επιταχυντή ώστε να παραχθεί μια δέσμη νετρονίων συγκεκριμένης ενέργειας. Για τον λόγο αυτόν μελετήθηκαν και αναπτύχθηκαν διαφορετικοί τρόποι παραγωγής δέσμης νετρονίων, οι οποίοι και χωρίζονται σε δύο γενικότερες κατηγορίες [2]:

- μέσω ραδιοϊσοτόπων, όπου χρησιμοποιούνται κατάλληλα ραδιενεργά υλικά τα οποία, είτε αυθόρμητα είτε μέσω έκθεσης σε ακτινοβολία α ή γ, παράγουν νετρόνια σε ευρύ ενεργειακό φάσμα
- μέσω πυρηνικών αντιδράσεων, οπού κατευθύνοντας μια επιταχυνόμενη δέσμη φορτισμένων σωματιδίων (p,D,T) πάνω σε συγκεκριμένο στόχο παράγεται μια μονοενεργειακή δέσμη νετρονίων

Κατά την πραγματοποίηση πειραμάτων όπου είναι απαραίτητη μονοενεργειακή δέσμη, χρησιμοποιούνται πυρηνικές αντιδράσεις που παράγουν δέσμη νετρονίων με ενεργειακό εύρος από μερικά keV έως 20 MeV, οι πιο συχνά χρησιμοποιούμενες από τις οποίες παρουσιάζονται παρακάτω:

${}^{7}\text{Li} + {}^{1}\text{H}$	\rightarrow	$^{7}\text{Be} + \text{n}$	Q = -1.9 MeV
${}^{3}H + {}^{1}H$	\rightarrow	3 He + n	Q = -0.764 MeV
$^{2}H + ^{2}H$	\rightarrow	3 He + n	Q = 3.269 MeV
${}^{3}H + {}^{2}H$	\rightarrow	$^{4}\text{He} + n$	Q = 17.59 MeV

Κύριο αντικείμενο μελέτης της παρούσης εργασίας είναι η αντίδραση ${}^{3}H(d,n)$ ${}^{4}He$, η οποία συχνά αναφέρεται και ως D-T. Πρόκειται για εξώθερμη αντίδραση, σημαντικής αποδιδόμενης ενέργειας (17.59 MeV), μέσω της οποίας μπορούν να δημιουργηθούν νετρόνια υψηλής ενέργειας. Η παραγόμενη δέσμη νετρονίων μπορεί να θεωρηθεί μονοενεργειακή για ενέργειες δευτερίων που δεν ενεργοποιούν τις αντιδράσεις διάσπασης του δευτερίου (break up reactions) ${}^{3}H(d,np){}^{2}H$ και ${}^{3}H(d,2n){}^{3}He$, με ενεργειακό κατώφλι ενεργοποίησης τα 3.71 MeV και 4.92 MeV αντίστοιχα. Επομένως, μέσω της αντίδρασης D-T είναι δυνατό να παραχθεί μονοενεργειακή δέσμη νετρονίων ενέργειας από 14.8 μέχρι και 20.4 MeV [2].

Η αντίδραση D-T σε εργαστηριακό περιβάλλον πραγματοποιείται μέσω ακτινοβόλησης ενός σταθερού στόχου τριτίου με δέσμη επιταχυνόμενων δευτερίων. Λόγω της αέριας φύσης αλλά και της τοξικότητας του τριτίου, οι αντίστοιχοι στόχοι κατασκευάζονται μέσω σχηματισμού χημικής ένωσης του τριτίου σε κάποιο μέταλλο, με πιο συνηθισμένο το τιτάνιο (Ti). Ο στόχος θα πρέπει να είναι αρκετά λεπτός, με πάχος της τάξης ενός ή μερικών μm, έτσι ώστε τα νετρόνια που δημιουργούνται και εκπέμπονται σε κάθε γωνία, να μην έχουν μεγάλη κατανομή κινητικών ενεργειών λόγω της απώλειας ενέργειας των δευτερίων μέσα στο στόχο. Παρά ταύτα, ο στόχος δεν μπορεί να είναι υπερβολικά λεπτός διότι κάτι τέτοιο θα οδηγούσε σε ελάττωση του αριθμού των παραγόμενων νετρονίων.



Σχήμα 1.3: Η ενεργός διατομή της αντίδρασης D-T συναρτήσει της ενέργειας της εισερχόμενης δέσμης δευτερίων [3]

Σε σχέση με τις υπόλοιπες αντιδράσεις παραγωγής νετρονίων, η αντίδραση D-T παρουσιάζει, με μεγάλη διαφορά από την επόμενη, την μεγαλύτερη ενεργό διατομή, η οποία προσεγγίζει τα 5 barns για ενέργεια εισερχόμενων δευτερίων στα 105 keV, όπως φαίνεται και στο σχήμα 1.3. Αυτός ο συνδυασμός υψηλής ενεργού διατομής και χαμηλής ενέργειας εισερχόμενης δέσμης κατέστησε την αντίδραση D-T την πιο ευρέως χρησιμοποιούμενη αντίδραση σε εφαρμογές όπου είναι απαραίτητη η ύπαρξη ισχυρής και παράλληλα συμπαγούς πηγής νετρονίων.

Όσον αφορά στη γωνιακή κατανομή των εκπεμπόμενων νετρονίων, παρατηρείται ότι στο σύστημα του εργαστηρίου υπάρχει μια μείωση της ροής νετρονίων όσο αυξάνεται η γωνία παρατήρησης σε σχέση με την αρχική διεύθυνση της δέσμης δευτερίων (βλ. σχήμα 1.4). Για την παραγωγή ισοτροπικής δέσμης νετρονίων είναι απαραίτητο ο προς ακτινοβόληση στόχος να τοποθετηθεί σε κατάλληλη απόσταση έτσι ώστε να υπάρχει μικρή γωνιακή απόκλιση. Η απόσταση αυτή είναι της τάξης των μερικών cm στις περισσότερες πειραματικές διατάξεις.



Σχήμα 1.4: Η διαφορική ενεργός διατομή της αντίδρασης D-T συναρτήσει της γωνίας για $E_D = 0.75$ MeV [4]

1.2 Ο κώδικας NeuSDesc

Ο κώδικας NeuSDesc (<u>Neu</u>tron <u>Source Desc</u>ription) είναι ένα εργαλείο προσομοίωσης, μέσω του οποίου μπορούν να πραγματοποιηθούν αναλυτικοί υπολογισμοί που αφορούν πυρηνικές αντιδράσεις μεταξύ επιταχυνόμενων ιόντων και ακίνητων, ως προς το εργαστήριο, στόχων. Ο κώδικας αναπτύχθηκε στο ερευνητικό κέντρο JRC-IRMM (Joint Research Centre – Institute for Reference Materials and Measurements) που εδρεύει στο Βέλγιο. Για την προσομοίωση των πυρηνικών αντιδράσεων και την πραγματοποίηση υπολογισμών, ο κώδικας αντλεί δεδομένα από ενσωματωμένα σε αυτόν αρχεία. Αυτά περιλαμβάνουν στοιχεία που αφορούν στις υποστηριζόμενες αντιδράσεις, όπως η ενεργειακή και γωνιακή κατανομή της προκύπτουσας ροής της αντίδρασης, η ενεργός διατομή της, μεγέθη δοσιμετρίας καθώς και δεδομένα που αφορούν στην περιγραφή των ατόμων και ιόντων που αλληλεπιδρούν, συμπεριλαμβανόμενης και της ισχύος ανάσχεσης [5].

Ανάμεσα στους υπολογισμούς που μπορεί να εκτελέσει, οι οποίοι περιγράφονται αναλυτικά σε επόμενη ενότητα, περιλαμβάνεται και ο υπολογισμός της ενεργειακής κατανομής της ροής νετρονίων που προέρχονται από την αντίδραση D-T. Για την ακριβή εκτέλεση ενός τέτοιου υπολογισμού ο κώδικας NeuSDesc χρησιμοποιεί το λογισμικό SRIM-2008 (Stopping and Range of Ions in Matter), το οποίο μπορεί να προσομοιώσει τη συμπεριφορά επιταχυνόμενων ιόντων κατά τη διέλευση τους μέσα από έναν ακίνητο στόχο. Αυτό επιτυγχάνεται μέσω του ορθού υπολογισμού της ισχύος ανάσχεσης των ιόντων που προσπίπτουν στον στόχο και κατ' επέκταση την περιγραφή της επίδρασης των φαινομένων του ενεργειακού και χωρικού διασκεδασμού στην εξερχόμενη δέσμη. Ο στόχος μπορεί να αποτελείται από οποιοδήποτε υλικό ή ενώσεις υλικών, ενώ είναι δυνατόν να αποτελείται και από πολλαπλά στρώματα, καθένα από τα οποία αποτελείται από διαφορετικό υλικό [6].

Το λογισμικό SRIM-2008 για την εκτέλεση προσομοιώσεων χρησιμοποιεί τη στατιστική μέθοδο Monte Carlo. Δημιουργεί και παρακολουθεί την πορεία ενός ιόντος μέσα στο υλικό του στόχου και στη συνέχεια εκτελεί λεπτομερείς υπολογισμούς της, αποδιδόμενης στα άτομα του στόχου, ενέργειας για κάθε μια σύγκρουση ατόμου – ιόντος (BCA – Binary Collision Approximation).

1.3 Παρουσίαση της λειτουργίας του κώδικα NeuSDesc

Στην ενότητα αυτή πραγματοποιείται αναλυτική περιγραφή του περιβάλλοντος λειτουργίας του κώδικα NeuSDesc, παρουσιάζοντας όλες τις εργασίες που μπορεί να εκτελέσει ένας χρήστης του κώδικα.

1.3.1 Εισαγωγή δεδομένων

Αρχικά, μετά την εκκίνηση του προγράμματος, ο χρήστης βλέπει στην οθόνη του ένα παράθυρο όπως αυτό που εμφανίζεται στην εικόνα 1.1. Μέσω αυτού, μπορούν να επιλεγούν ή να δοθούν ως δεδομένα εισόδου τα παρακάτω στοιχεία:

- Η επιθυμητή πυρηνική αντίδραση, μέσω των παρεχόμενων επιλογών
- Η ενέργεια της δέσμης ιόντων που προσπίπτει στο στόχο, σε keV
- Το ρεύμα της δέσμης ιόντων, σε μΑ
- To pácos tou stócou, se $\mu g/cm^2$
- Το ποσοστό τριτίου (Τ) ή δευτερίου (D) που είναι εμποτισμένο μέσα σε τιτάνιο (Ti), αν χρησιμοποιείται τέτοιου είδους στόχος

- Η πίεση και το μήκος του gas cell, σε περίπτωση που χρησιμοποιείται στόχος σε αέρια κατάσταση
- Το υλικό μέσα από το οποίο εισέρχεται η προσπίπτουσα δέσμη προτού φτάσει στο στόχο καθώς και το πάχος του, σε μg/cm² ή nm
- Τη γωνία εκπομπής των νετρονίων καθώς και την απόσταση στην οποία θέλουμε να μετρήσουμε την ροή νετρονίων, σε mm

NeuSDesc ver. 1.0, EC-JRC-IRMM,	Aug-2008
Ions and neutrons Reaction: T(d,n)4He, T/Ti target Ion energy (keV): 2000	Competing reactions Neutron emission angle: O Ion energy is below threshold Ion energy in double valued region Current (uA):
Ti, Li or LiF thickn. (ug/cm2): 2123.5 T, D/Ti ratio: 1.543	Not in mono-energetic region Distance (mm):
Gas pressure (kPa): 100 Gas cell length (mm): 40 Entrance foil material: Molybdenum Entrance foil thickness: 10000	Neutron energies (MeV); Neutron yield data: Max: 16.435 Mean fluence rate (n/(cm2 s)); 0.245E+10 Average: 15.223 Mean yield (n/(sr s)); 0.245E+08 Imm Min: 14.134 Dose rate (mSv/hour); 0.492E+07
Ion E-loss in target (keV): 730.823 Ion E-loss in target (%): 100.0 E-loss in foil (keV): 1269.	% width: 14.0 Cross-section at incident ion energy: TOF (ns) neutron / gamma: 0.0 / 0.0 Total (mb): 349.8 delta-TOF (ns) neutron: 0.0 Differential (mb/sr): 31.957
General SRIM settings SRIM2008 not properly installed: Include angular straggling, I✓ for all SRIM based energy loss calculations	Spectrum Full angle spectrum Source description for MCNP List for angles Detector radius (mm): # Points used to determine average fluence: Source description for MCNP List for energies 10 200 Customize sdef card settings # Directions: 90 # Point sources: 1 1 1 1 1
# Simulated ions in SRIM: 300 Programme opened: 2015/06/20 11:53:55	Calculate spectrum Calculate spectrum, full angle Calculate spectrum, full angle Calculate MCNP sdef card Calculate spectrum, including energy straggling (starts SRIM) Calculate spectrum, full angle including energy straggling (starts SRIM) Calculate MCNP sdef card including energy straggling (starts SRIM)

Εικόνα 1.1: Το παράθυρο λειτουργίας του κώδικα NeuSDesc

Λαμβάνοντας υπόψη τα παραπάνω δεδομένα εισόδου, ο κώδικας εκτελεί αυτόματο υπολογισμό των παρακάτω μεγεθών, οι τιμές των οποίων φαίνονται στα κελιά του παραθύρου που είναι μη προσβάσιμα στον χρήστη:

- Η απώλεια ενέργειας της δέσμης μέσα στο υλικό εισόδου και στον στόχο
- Η μέγιστη, η ελάχιστη και η μέση τιμή της ενέργειας στο ενεργειακό φάσμα των νετρονίων
- Το εύρος της κορυφής της καμπύλης του ενεργειακού φάσματος των νετρονίων (σε ποσοστιαία κλίμακα)
- Ο "χρόνος πτήσης" (Time of Flight ή ToF) των νετρονίων και των ακτίνων γ από τον στόχο, όπου και παράγονται, έως το σημείο μέτρησης, σε ns
- Το σφάλμα της μέτρησης του χρόνου πτήσης, σε ns
- O mésoc rubmóc rohc netroníwn sto shmeío métrhubh, se n/(cm ^2 $\cdot s)$

- Η μέση παραγωγή νετρονίων από τον στόχο, σε $n/(sr \cdot s)$
- Ο ρυθμός ακτινοβόλησης στο σημείο μέτρησης, σε mSv/hour
- Η ολική και η διαφορική ενεργός διατομή που αντιστοιχεί στην ενέργεια της εισερχόμενης δέσμης

1.3.2 Εκτέλεση υπολογισμών

Στο κάτω μέρος του παραθύρου εισόδου μπορούν να παρατηρηθούν τέσσερα πεδία, καθένα από τα οποία περιλαμβάνει επιλογές σχετικές με την επίτευξη πιο λεπτομερών υπολογισμών όσον αφόρα στο ενεργειακό φάσμα της ροής νετρονίων. Τα αποτελέσματα των υπολογισμών αυτών αποθηκεύονται σε ένα αρχείο εξόδου, του οποίου το περιεχόμενο εξαρτάται από την επιλογή που έκανε ο χρήστης.

i. Πεδίο "Spectrum"

Στο πεδίο "Spectrum" είναι δυνατό να πραγματοποιηθούν άμεσοι υπολογισμοί καθώς χρησιμοποιούνται οι ενσωματωμένοι στον κώδικα πίνακες δεδομένων. Παρακάτω παρουσιάζονται αναλυτικά όλες οι διαθέσιμες επιλογές.

Με την επιλογή "Calculate Spectrum" υπολογίζεται και αποθηκεύεται το ενεργειακό φάσμα των νετρονίων, λαμβάνοντας υπόψη τα δεδομένα που εισήγαγε ο χρήστης. Το αρχείο εξόδου εμφανίζει τη ροή νετρονίων, σε $n/(cm^2 \cdot s)$ συναρτήσει της ενέργειας, σε MeV.

Χρησιμοποιώντας το λογισμικό SRIM-2008 είναι δυνατόν να γίνει ο ίδιος υπολογισμός, λαμβάνοντας όμως τώρα υπόψη τα φαινόμενα του ενεργειακού και χωρικού διασκεδασμού καθώς και την ύπαρξη μη ομογενούς, αλλά μονοστρωματικού, υλικού πριν την άφιξη της δέσμης ιόντων στον στόχο (ο κώδικας δεν επιτρέπει τη μελέτη σύνθετων υλικών στόχου, αλλά μόνον τη χρήση των ενσωματωμένων προεπιλογών).

Με την επιλογή λοιπόν "Calculate spectrum including energy straggling (starts SRIM)" ο κώδικας NeuSDesc εκκινεί στο υπόβαθρο το SRIM-2008 εισάγοντάς του τα δεδομένα που έχει ήδη εισαγάγει ο χρήστης στο ενεργό παράθυρο. Το αρχείο εξόδου έχει την ίδια μορφή όπως και στην επιλογή "Calculate Spectrum".

Στο πεδίο "Spectrum" εμφανίζονται δύο ακόμη επιλογές. Με την επιλογή "List for angles" ο χρήστης παίρνει ως έξοδο ένα αρχείο που περιλαμβάνει τη ροή νετρονίων, σε n/(cm²·s), συναρτήσει της γωνίας εκπομπής τους ενώ με την επιλογή "List for energies" στο αρχείο εξόδου εμφανίζεται μια λίστα που αφορά στις ενέργειες της εισερχόμενης δέσμης σε αντιστοιχία με την αναμενόμενη ροή και ενέργεια των εξερχόμενων νετρονίων, πάντα συναρτήσει των δεδομένων που εισήγαγε ο χρήστης.

ii. Πεδίο "Full angle spectrum"

Στο πεδίο "Full angle spectrum" μπορούν να πραγματοποιηθούν πιο ακριβείς υπολογισμοί της εξερχόμενης ροής νετρονίων. Η ροή αυτή τη φορά υπολογίζεται μέσω ολοκλήρωσης Monte Carlo πάνω σε μια κυκλική επιφάνεια. Η ολοκλήρωση αυτή πραγματοποιείται ορίζοντας μερικά τυχαία σημεία στην επιφάνεια του κυκλικού

δίσκου και στην συνέχεια υπολογίζοντας τη μέση ροή νετρονίων σε κάθε ένα από αυτά τα σημεία. Για να πραγματοποιηθεί ο υπολογισμός ο χρήστης θα πρέπει να εισάγει την ακτίνα του κυκλικού δίσκου, σε mm, καθώς και το πλήθος των σημείων που επιθυμεί. Και σε αυτό το πεδίο δίνεται η δυνατότητα στον χρήστη να επιλέξει αν επιθυμεί να χρησιμοποιηθεί παράλληλα και το λογισμικό SRIM-2008 μέσω των επιλογών "Calculate spectrum, full angle" και "Calculate spectrum, full angle including energy straggling (starts SRIM)". Σε αυτό το σημείο θα πρέπει να σημειωθεί ότι με χρήση του SRIM-2008 οι παραπάνω υπολογισμοί γίνονται αρκετά χρονοβόροι σε έναν τυπικό ηλεκτρονικό υπολογιστή σε σχέση με αυτούς του προηγούμενου πεδίου.

iii. Πεδίο "Source description for MCNP"

Στο πεδίο "Source description for MCNP" δίνεται η δυνατότητα στον χρήστη να λάβει ως έξοδο ένα αρχείο το οποίο μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την περιγραφή της πηγής νετρονίων στον κώδικα MCNP. Για τη βέλτιστη περιγραφή της πηγής ο κώδικας περιλαμβάνει μια ομάδα επιλογών.

Ο χρήστης μέσω της επιλογής "Customize sdef card settings" μπορεί να καθορίσει το ακριβές σημείο που θα τοποθετηθεί η πηγή στη γεωμετρία του κώδικα MCNP, θέτοντας τις κατάλληλες τιμές των συντεταγμένων (x0,y0,z0) ενώ αντίστοιχα μπορεί να καθοριστεί και η κατεύθυνση της, εξερχόμενης από την πηγή, δέσμης μέσω των διανυσμάτων Vx,Vy,Vz.



Σχήμα 1.5: Η μέθοδος προσομοίωσης της πηγής νετρονίων. Με το κόκκινο βέλος αναπαρίσταται το εισερχόμενο ιόν και υπολογίζεται η πιθανότητα αυτό να αλληλεπιδράσει με το στόχο και να εκπεμφθεί νετρόνιο στην περιοχή του μπλε δακτυλίου. Δεξιά φαίνονται η ενεργειακή και γωνιακή κατανομή της αντίδρασης, δεδομένα τα οποία χρησιμοποιήθηκαν για τον υπολογισμό αυτόν.

Επιπλέον, υπάρχουν τα κελιά "# Directions" και "# Point sources" που σχετίζονται με τη μέθοδο "κατασκευής" της πηγής από τον κώδικα NeuSDesc. Η

πηγή ορίζεται από τον κώδικα έτσι ώστε τα νετρόνια να εκπέμπονται από ένα διακριτό αριθμό σημείων (point sources) με διαφορετικές πιθανότητες. Ο κώδικας χωρίζει τον χώρο σε περιοχές συναρτήσει της γωνίας (directions) και λαμβάνοντας υπόψη τα δεδομένα για την ενεργειακή και γωνιακή κατανομή της αντίδρασης, υπολογίζει την πιθανότητα εύρεσης ενός νετρονίου συγκεκριμένης ενέργειας σε αυτή την περιοχή, το οποίο προέρχεται από ένα συγκεκριμένο σημείο (point source – βλ. και σχήμα 1.5). Επομένως ως αποτέλεσμα προκύπτει μια προσομοίωση της ροής νετρονίων σύμφωνα με τη διαφορική ενεργό διατομή της επιλεγμένης αντίδρασης. Έτσι, τα κελιά αυτά μπορούν να συμπληρωθούν με κατάλληλες τιμές από τον χρήστη, ανάλογα με την επιθυμητή ακρίβεια στην προσομοίωση της πηγής.

Με την επιλογή "Calculate MCNP sdef card" / "Calculate MCNP sdef card including energy straggling (starts SRIM)" ο χρήστης μπορεί να επιλέξει αν θα χρησιμοποιήσει και τον κώδικα SRIM-2008 στον υπολογισμό. Το αρχείο εξόδου έχει τέτοια μορφή που μπορεί να τοποθετηθεί απευθείας στο πεδίο περιγραφής της πηγής (sdef) του κώδικα MCNP.

iv. Πεδίο "General SRIM settings"

Τέλος, στο πεδίο "General SRIM settings" περιλαμβάνονται ρυθμίσεις που αφορούν το πρόγραμμα SRIM-2008. Ο χρήστης μπορεί να ελέγξει αν υπάρχει σωστή επικοινωνία του NeuSDesc με το SRIM-2008 καθώς σε αντίθετη περίπτωση εμφανίζεται το μήνυμα "SRIM2008 not properly installed". Επίσης, μέσω της επιλογής "Include angular straggling for all SRIM based energy loss calculations" ενεργοποιείται η δυνατότητα προσομοίωσης των φαινομένων του ενεργειακού και χωρικού διασκεδασμού μέσω του SRIM-2008 στους υπολογισμούς που εκτελεί ο κώδικας. Επιπλέον υπάρχει η επιλογή "# Simulated ions in SRIM" όπου επιλέγεται ο αριθμός των ιόντων για τα οποία θα γίνονται οι προσομοιώσεις στο SRIM-2008, όπου όσο μεγαλύτερος είναι αυτός ο αριθμός, τόσο πιο ακριβή θα είναι και τα αποτελέσματα της προσομοίωσης.

1.4 Η αντίδραση D-T στο NeuSDesc

Στα πλαίσια της μελέτης της αντίδρασης D-T, χρησιμοποιήθηκε το πρόγραμμα NeuSDesc για τη μελέτη της ενεργειακής κατανομής των νετρονίων της εξερχόμενης δέσμης. Για το σκοπό αυτό πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις της αντίδρασης D-T για διάφορες τιμές της ενέργειας της δέσμης δευτερίων με σκοπό τη μελέτη της ύπαρξης ή μη παρασιτικών νετρονίων, νετρονίων δηλαδή που είναι εκτός της ενεργειακής περιοχής που θεωρούμε ότι αποτελεί την κύρια δέσμη. Οι προσομοιώσεις αυτές έγιναν για ενέργειες δευτερίων (E_D) στο εύρος από 2 έως 7 MeV, με βήμα 0.5 MeV.

Για κάθε μια ενεργειακή κατανομή νετρονίων ως παρασιτικά νετρόνια θεωρήθηκαν αυτά που βρίσκονταν εκτός του εύρους δυο τυπικών αποκλίσεων από το φαινομενικό ενεργειακό κέντρο της κατανομής, η οποία στις περισσότερες των περιπτώσεων αντιστοιχούσε σε μια κατανομή Gauss (βλ. σχήμα 1.6). Τα νετρόνια που βρίσκονται εντός αυτού του εύρους τα αποκαλούμε από εδώ και στο εξής ως "χρήσιμα".



Σχήμα 1.6: Η μορφή της ενεργειακής κατανομής της ροής νετρονίων για ενδεικτικές ενέργειες δευτερίων από 3 έως 7 MeV

Για να διαπιστώσουμε την συνεισφορά των παρασιτικών νετρονίων στο ενεργειακό φάσμα, υπολογίσαμε τον λόγο των παρασιτικών νετρονίων $(N_{\rm H})$ ως προς τα "χρήσιμα" νετρόνια $(N_{\rm X})$, NII/Nx, για κάθε ενέργεια δευτερίων στο εύρος που αναφέραμε προηγουμένως. Τα αποτελέσματα φαίνονται παρακάτω στο σχήμα 1.7:



Σχήμα 1.7: Ο λόγος Ν_Π/Ν_x συναρτήσει της ενέργειας δευτερίων

Όπως παρατηρούμε στο σχήμα 1.7, το ποσοστό των παρασιτικών νετρονίων είναι κάτω του 1% σε όλες τις ενέργειες δευτερίων και επομένως μπορούμε να θεωρήσουμε τη συνεισφορά τους στη τελική ενεργειακή κατανομή ως αμελητέα.

Θεωρητικά, θα αναμέναμε την ύπαρξη παρασιτικών νετρονίων για ενέργεια δευτερίων μεγαλύτερη των 4 MeV όπου και ενεργοποιούνται οι αντιδράσεις διάσπασης του δευτερίου ³H(d,np)²H και ³H(d,2n)³He. Σύμφωνα με τα παραπάνω αποτελέσματα ο κώδικας NeuSDesc φαίνεται να μην λαμβάνει υπόψη του τις αντιδράσεις αυτές.

Για να εξακριβωθεί ο παραπάνω ισχυρισμός, μελετήθηκαν οι διεθνείς βιβλιοθήκες για την ύπαρξη πειραματικών δεδομένων ενεργών διατομών των αντιδράσεων αυτών. Για την αντίδραση ³H(d,2n)³He δεν βρέθηκαν πειραματικά δεδομένα ενώ για την ³H(d,np)²H υπήρχαν δεδομένα από έναν μόνο ερευνητή [7]. Σύμφωνα με τα δεδομένα αυτά, όπως μπορούμε να παρατηρήσουμε και στο σχήμα 1.8, η αντίδραση ³H(d,np)²H παρουσιάζει υψηλότερη ενεργό διατομή συγκριτικά με την αντίδραση D-T για τις ενέργειες δευτερίων οπού υπάρχουν πειραματικά δεδομένα και, επομένως, αναμένεται η ύπαρξη σημαντικού πλήθους χαμηλοενεργειακών παρασιτικών νετρονίων λόγω της αντίδρασης αυτής.

Παρά ταύτα, εξαιτίας του γεγονότος της μη ύπαρξης ικανού πλήθους αξιόπιστων πειραματικών δεδομένων για τις αντιδράσεις διάσπασης του δευτερίου, δεν είμαστε σε θέση να εξάγουμε τελικά ένα ασφαλές συμπέρασμα ως προς το ύψος της συνεισφοράς τους στην παραγωγή παρασιτικών νετρονίων.



Σχήμα 1.8: Η ενεργός διατομή συναρτήσει της ενέργειας δευτερίων για τις αντιδράσεις 3 H(d,np) 2 H και D-T

Συνοπτικά λοιπόν, θα μπορούσαμε να πούμε ότι ο κώδικας NeuSDesc δίνει μια καθαρή από παρασιτικά νετρόνια δέσμη καθότι δεν λαμβάνει υπόψη τις αντιδράσεις διάσπασης του δευτερίου και επομένως δημιουργώντας μια κάρτα ορισμού πηγής (sdef card) για τον κώδικα MCNP αναμένουμε ότι θα έχουμε ως αποτέλεσμα μια καθαρή δέσμη, κάτι το οποίο μένει να επιβεβαιωθεί στο επόμενο κεφάλαιο.

Χαρακτηρισμός της δέσμης νετρονίων μέσω του κώδικα MCNP στις υψηλές ενέργειες νετρονίων

Στο κεφάλαιο αυτό πραγματοποιείται χαρακτηρισμός της δέσμης νετρονίων που παράγεται στο ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος" μέσω της αντίδρασης D-T. Ο χαρακτηρισμός αφορά την περιοχή της κύριας δέσμης (υψηλές ενέργειες) και θα πραγματοποιηθεί μέσω προσομοίωσης με τη χρήση του κώδικα MCNP. Για τον έλεγχο ορθότητας του χαρακτηρισμού θα εφαρμοστεί η μέθοδος της ενεργοποίησης και θα πραγματοποιηθεί σύγκριση πειραματικά υπολογιζόμενων ρυθμών ενεργοποίησης επιλεγμένων αντιδράσεων με τους αντίστοιχους που προκύπτουν μέσω της προσομοίωσης. Θα προηγηθεί παρουσίαση της λειτουργίας του κώδικα MCNP καθώς και σύγκριση της λειτουργίας του με τον κώδικα NeuSDesc.

2.1 Παρουσίαση και αρχές λειτουργίας του κώδικα MCNP

Ο κώδικας MCNP (<u>Monte Carlo N-Particle transport code</u>) είναι ένα λογισμικό προσομοίωσης πυρηνικών διεργασιών που αφορούν σε αλληλεπιδράσεις νετρονίων, ηλεκτρονίων και φωτονίων με την ύλη σε πολύπλοκες γεωμετρίες, το οποίο χρησιμοποιεί τη μέθοδο Monte Carlo. Αναπτύχθηκε στο Los Alamos National Laboratory στις ΗΠΑ και η πρώτη πλήρης έκδοσή του παρουσιάστηκε το 1977, ακολουθούμενη έκτοτε από πολλές αναβαθμίσεις. Ο κώδικας, και πιο συγκεκριμένα η έκδοση MCNP5 αυτού, χρησιμοποιήθηκε εκτενώς κατά τη διάρκεια εκπόνησης της παρούσης εργασίας.

Η μέθοδος Monte Carlo είναι μια στατιστική διαδικασία η οποία βασίζεται στην επιλογή τυχαίων αριθμών, όπως συμβαίνει για παράδειγμα με τη ρίψη ενός ζαριού. Η ανάπτυξη της μεθόδου αποδίδεται σε σημαντικούς επιστήμονες του 20ου αιώνα, όπως ο Fermi, ο von Neumann και ο Ulam. Η μέθοδος βρίσκει εξαιρετική εφαρμογή στη μελέτη της κίνησης σωματιδίων όπως π.χ. τα νετρόνια.

Σε μια τέτοια περίπτωση, ο κώδικας MCNP παρακολουθεί ένα προς ένα τα νετρόνια από τη στιγμή που εκπέμπονται από την πηγή μέχρι τη στιγμή που θα συμβεί ένα γεγονός το οποίο θεωρείται ως το τέλος της ζωής του, όπως απορρόφηση ή διαφυγή από τη γεωμετρία. Για να εκτιμηθεί το αποτέλεσμα μετά από κάθε αλληλεπίδραση ενός νετρονίου χρησιμοποιούνται οι κατάλληλες κατανομές πιθανότητας. Οι ποσότητες που έχουν οριστεί από τον χρήστη για αυτό το νετρόνιο καταγράφονται, ενώ στη συνέχεια ξεκινά πάλι η ίδια διαδικασία για ένα άλλο νετρόνιο αυτή τη φορά. Μετά το πέρας του συνόλου της διαδικασίας εξάγονται τα αποτελέσματα μαζί με εκτιμήσεις της στατιστικής ακρίβειας [8].

Για την εκτέλεση μιας προσομοίωσης με τον κώδικα, ο χρήστης δημιουργεί ένα αρχείο εισόδου σε κατάλληλη μορφή έτσι ώστε αρχικά ο κώδικας να το διαβάσει και στην συνέχεια να εκτελέσει τους ζητούμενους υπολογισμούς. Το αρχείο εισόδου

περιλαμβάνει πληροφορίες σε σχέση με τις παραμέτρους που περιγράφουν το πρόβλημα, όπως:

- Τη γεωμετρία του προβλήματος (όγκοι και επιφάνειες)
- Τη σύσταση των χρησιμοποιούμενων υλικών
- Τη θέση και τα χαρακτηριστικά της πηγής σωματιδίων
- Το είδος των υπολογισμών και τη μορφή παρουσίασης των αποτελεσμάτων που επιθυμεί ο χρήστης
- Τεχνικές μείωσης της διακύμανσης για την βελτίωση της αποδοτικότητας των υπολογισμών

Μετά το πέρας των υπολογισμών ο χρήστης θα λάβει ένα αρχείο εξόδου το οποίο θα περιλαμβάνει τα αποτελέσματα των υπολογισμών καθώς επίσης και πληροφορίες σχετικές με την ορθότητα του αρχείου εισόδου αλλά και την αξιοπιστία των αποτελεσμάτων.

2.2 Σύγκριση του κώδικα MCNP με τον κώδικα NeuSDesc

Παρά το γεγονός ότι οι κώδικες MCNP και NeuSDesc μπορούν να προσομοιώσουν πυρηνικές διεργασίες με πανομοιότυπες γεωμετρίες, δίνοντας παράλληλα και αποτελέσματα σε συμφωνία όπως θα δούμε στην συνέχεια, υπάρχουν θεμελιώδεις διαφορές στον τρόπο λειτουργίας τους.

Η βασική διαφορά μεταξύ των δύο κωδίκων είναι η μέθοδος με την οποία πραγματοποιούν υπολογισμούς. Από την μια μεριά ο κώδικας NeuSDesc πραγματοποιεί αναλυτικούς αριθμητικούς υπολογισμούς παρέχοντας μια ακριβή λύση του προβλήματος, ενώ από την άλλη μεριά ο κώδικας MCNP πραγματοποιεί στατιστικούς υπολογισμούς με βάση τη μέθοδο Monte Carlo, δίνοντας μια προσεγγιστική λύση στο πρόβλημα μέσα στα όρια ενός στατιστικού σφάλματος. Ως παράδειγμα μπορεί να χρησιμοποιηθεί ο τρόπος με τον οποίο υπολογίζουν οι δύο κώδικες την εξίσωση μεταφοράς των σωματιδίων: Με την αναλυτική μέθοδο ο υπολογισμός της εξίσωσης μεταφοράς στηρίζεται στη συμπεριφορά ενός "μέσου" σωματιδίου, ενώ η μέθοδος Monte Carlo προσομοιώνει την κίνηση μοναδικών ανεξάρτητων σωματιδίων και καταγράφει τυπικά στοιχεία της αλληλεπίδρασής τους – στη συνέχεια οι υπολογισμοί γίνονται με βάση τη μέση συμπεριφορά αυτών των σωματιδίων [8].

Το βασικό πλεονέκτημα του κώδικα MCNP είναι το γεγονός ότι μπορεί να αναπαραστήσει πλήρως πολύπλοκες γεωμετρίες. Οι αναλυτικές υπολογιστικές τεχνικές απαιτούν σχετικά απλές γεωμετρίες ώστε να είναι δυνατή η εφαρμογή τους, όπως είναι οι γεωμετρίες με σφαιρική ή κυλινδρική συμμετρία. Με τον κώδικα MCNP γίνεται δυνατή η προσομοίωση μη κυλινδρικής συμμετρίας, κάτι το οποίο συναντάται ευρέως σε πειραματικές διατάξεις.

Τα μειονεκτήματα της μεθόδου Monte Carlo είναι αποτέλεσμα της στατιστικής φύσης των υπολογισμών που πραγματοποιεί. Τα αποτελέσματα της μεθόδου

συνοδεύονται και από τις αντίστοιχες αβεβαιότητες, οι οποίες γίνονται μεγαλύτερες όσο μικρότερος είναι ο αριθμός των γεγονότων που προσομοιώνονται. Για να εξαλειφθούν αυτές οι αβεβαιότητες είναι απαραίτητος μεγάλος αριθμός γεγονότων που καθιστά τις προσομοιώσεις αρκετά χρονοβόρες σε σχέση με αντίστοιχες μέσω του κώδικα NeuSDesc.

2.3 Σύγκριση απλής γεωμετρίας στους κώδικες MCNP και NeuSDesc

Στην ενότητα αυτή στόχος μας είναι να μελετήσουμε τη λειτουργία των κωδίκων MCNP και NeuSDesc κάτω από, όσο το δυνατό, παρόμοιες συνθήκες του περιβάλλοντος προσομοίωσης. Για το σκοπό αυτό πραγματοποιήσαμε προσομοιώσεις στους δύο κώδικες χρησιμοποιώντας την γεωμετρία και τα χαρακτηριστικά του πειράματος που περιγράφεται στην υποενότητα 2.5.1, αλλά στην απλούστερη δυνατή μορφή της λόγω των περιορισμών που υπάρχουν στην περιγραφή σύνθετων γεωμετριών στον κώδικα NeuSDesc. Επομένως, δεν συμπεριλήφθηκαν το στρώμα Cu στον στόχο Cu/TiT και η φλάντζα που περιβάλλει τον στόχο, ενώ από τους λεπτούς στόχους αναφοράς διατηρήθηκε μόνο ο πρώτος κατά σειρά (Al A) σε απόσταση 2 cm περίπου από την πηγή νετρονίων.

Έχοντας ως στόχο την άμεση σύγκριση των δυο κωδίκων, για την περιγραφή της πηγής στον κώδικα MCNP χρησιμοποιήθηκε μια κάρτα ορισμού της πηγής (sdef card) προερχόμενη από τον κώδικα NeuSDesc. Τα εξερχόμενα νετρόνια γεννήθηκαν μέσω της αντίδρασης D-T με ενέργεια δέσμης δευτερίων $E_D = 2$ MeV.



Σχήμα 2.1: Ποιοτική σύγκριση της υπολογιζόμενης ροής νετρονίων σε κοινή γεωμετρία στους κώδικες MCNP και NeuSDesc

Στο σχήμα 2.1 απεικονίζεται γραφικά η υπολογιζόμενη ροή νετρονίων μέσω των δύο κωδίκων στο στόχο Al A συναρτήσει της ενέργειας. Όπως παρατηρούμε η μορφή της καμπύλης παρουσιάζει πανομοιότυπη μορφή στους δυο υπολογισμούς, κάτι το οποίο επιβεβαιώνει και την αξιοπιστία του κώδικα NeuSDesc σε προσομοιώσεις απλής γεωμετρίας. Εδώ θα πρέπει να σημειωθεί ότι η σύγκριση αυτή είναι καθαρά ποιοτική, καθώς δεν πραγματοποιήθηκε ακριβής αριθμητική σύγκριση των αποτελεσμάτων αλλά μόνο σύγκριση της κατανομής της ροής νετρονίων συναρτήσει της ενέργειας, γεγονός όμως το οποίο δεν επηρεάζει την αξιοπιστία του αποτελέσματος.

2.4 Η μέθοδος της ενεργοποίησης

Η μέθοδος της ενεργοποίησης είναι μια πυρηνική μέθοδος έμμεσης μελέτης του θυγατρικού πυρήνα που παράγεται μέσω μιας πυρηνικής αντίδρασης. Για την εφαρμογή της μεθόδου είναι απαραίτητο ο παραγόμενος θυγατρικός πυρήνας να είναι ασταθής ή να βρίσκεται σε κάποια διεγερμένη στάθμη μετά το πέρας της ακτινοβόλησης έτσι ώστε να εκπεμφθεί ακτινοβολία γ, ενώ παράλληλα θα πρέπει να έχει και κατάλληλο για πραγματοποίηση μετρήσεων χρόνο ημίσειας ζωής. Μελετώντας τον αριθμό των αποδιεγέρσεων μέσω της μέτρησης των εκπεμπόμενων ακτίνων γ, μπορούμε να εξάγουμε συμπεράσματα για τον αριθμό των πυρήνων που παράχθηκαν μέσω της αντίδρασης. Ο αριθμός των πυρήνων που παράγονται ανά δευτερόλεπτο και ανά πυρήνα του στόχου ονομάζεται ρυθμός ενεργοποίησης της αντίδρασης (reaction rate ή RR). Γνωρίζοντας τον ρυθμό ενεργοποίησης είναι πλέον δυνατός και ο υπολογισμός της ενεργού διατομής της αντίδρασης.

Σε περιπτώσεις όπου η ενεργός διατομή αντιδράσεων έχει μελετηθεί εκτενώς και υπάρχουν αρκετά δεδομένα στις διεθνείς βιβλιοθήκες, οι αντιδράσεις αυτές μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως αντιδράσεις αναφοράς για τον προσδιορισμό της ροής της δέσμης νετρονίων και κατά συνέπεια για τον υπολογισμό ρυθμών ενεργοποίησης και ενεργών διατομών αντιδράσεων για τις οποίες δεν υπάρχουν αντίστοιχα δεδομένα.

Στην περίπτωση που είναι δυνατό να πραγματοποιηθούν αρκετές αντιδράσεις αναφοράς, η μέθοδος της ενεργοποίησης μπορεί να χρησιμοποιηθεί έτσι ώστε να γίνει δυνατή η μελέτη του ενεργειακού φάσματος της δέσμης νετρονίων. Αυτό επιτυγχάνεται τοποθετώντας, παράλληλα μεταξύ τους και κάθετα ως προς τη δέσμη νετρονίων, κατάλληλους λεπτούς στόχους (foils) επιλεγμένων υλικών. Τα υλικά αυτά επιλέγονται έτσι ώστε να μπορούν να πραγματοποιηθούν αντιδράσεις κατωφλίου οι οποίες ενεργοποιούνται από νετρόνια διαφορετικών ενεργειών, συνήθως σε ένα ενεργειακό εύρος από 1 έως 10 MeV. Η παραπάνω τεχνική ονομάζεται μέθοδος πολλαπλής ενεργοποίησης στόχων (multiple foil activation technique) [9].

Για να πραγματοποιηθεί ο χαρακτηρισμός της δέσμης νετρονίων είναι απαραίτητος ο υπολογισμός του ρυθμού ενεργοποίησης των επιλεγμένων αντιδράσεων, ο οποίος γενικότερα δίνεται από τη σχέση:

$$RR = \int_{E_{n(th)i}}^{E_{n(max)}} \sigma_{i}(E) \Phi_{i}(E) dE$$
(2.1)

οπού $\sigma(E)$ η ενεργός διατομή, $\Phi(E)$ η ροή νετρονίων και E_{th} η ενέργεια κατωφλίου.

2.5 Περιγραφή του προς προσομοίωση πειράματος

Στην ενότητα αυτή θα γίνει περιγραφή της διάταξης και ανάλυση των χαρακτηριστικών του πειράματος που πραγματοποιήθηκε στο ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος", κατά το οποίο στόχοι με τη μορφή λεπτών φύλλων (foils) ακτινοβολήθηκαν με νετρόνια που παράχθηκαν από τη αντίδραση D-T. Τα αποτελέσματα του συγκεκριμένου πειράματος θα χρησιμοποιηθούν ως βάση και θα συγκριθούν με αυτά που θα προκύψουν από την προσομοίωση του με τον κώδικα MCNP.

2.5.1 Πειραματική διάταξη και διαδικασία

Η πειραματική διάταξη που χρησιμοποιήθηκε στο πείραμα περιλάμβανε τα παρακάτω στοιχεία:

- Δέσμη δευτερίων (D) ενέργειας 2 MeV, προερχόμενη από τον επιταχυντή Tandem Van de Graaff 5.5 MV του Ινστιτούτου Πυρηνικής και Σωματιδιακής Φυσικής του ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος"
- Στόχος Cu/TiT. Ο στόχος αυτός αποτελείται από ένα φύλλο Cu διαμέτρου 28.5 mm και πάχους 1 mm, πάνω στο οποίο έχει τοποθετηθεί ένα λεπτό στρώμα Ti. Μέσα στο στρώμα αυτό έχει εναποτεθεί, μέσω χημικής επεξεργασίας, τρίτιο (T) με αναλογία T/Ti = 1.543. Το φύλλο Cu είναι απαραίτητο για την αποτελεσματική απαγωγή θερμότητας από το στρώμα TiT.
- Φλάντζα, δηλαδή το δοχείο μέσα στο οποίο τοποθετείται ο στόχος Cu/TiT
- Λεπτά φύλλα (foils) αλουμινίου (Al), χρυσού (Au), κοβαλτίου (Co), σιδήρου (Fe), νιόβιου (Nb) και τιτανίου (Ti)
- Δύο λεπτά φύλλα μολυβδαινίου (Mo) πάχους 5 μm το καθένα

Η φλάντζα με τον στόχο Cu/TiT τοποθετήθηκε στο άκρο της γραμμής ακτινοβόλησης (εικόνα 2.1), ενώ τα φύλλα Μο τοποθετήθηκαν πριν τον στόχο και σχεδόν σε επαφή με αυτόν.



Εικόνα 2.1: Η γραμμή ακτινοβόλησης του πειράματος

Τα μεταλλικά φύλλα (foils) που χρησιμοποιήθηκαν είχαν την μορφή λεπτών κυκλικών δίσκων και τοποθετήθηκαν κάθετα στη δέσμη νετρονίων, διαδοχικά, το ένα εφαπτόμενο του άλλου, με το πρώτο να απέχει απόσταση 1.7 cm από την άκρη της φλάντζας. Η μορφή και η διάταξη τους απεικονίζεται στο σχήμα 2.2.



Σχήμα 2.2: Αναπαράσταση της διάταξης των λεπτών φύλλων με τη σειρά που τοποθετήθηκαν στην πειραματική διάταξη

Στον παρακάτω πίνακα δίνονται τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά των λεπτών φύλλων – στόχων, εμφανιζόμενα με τη σειρά που τοποθετήθηκαν:

Foil	Διάμετρος (mm)	Πάχος (mm)
Al A	14.35	0.55
Au B	14.22	0.53
Al c	14.35	0.54
Al 8	13.60	0.60
Al 9	13.76	0.52
Nb 2	13.30	0.50
Ti 1	14.28	0.29
Fe a	13.30	0.26
Co 2	14.25	0.30
Al 10	13.32	0.58

Πίνακας 2.1: Ονοματολογία και γεωμετρικά χαρακτηριστικά των λεπτών φύλλων που χρησιμοποιήθηκαν στο πείραμα

Οι λεπτοί στόχοι ακτινοβολήθηκαν από την παραγόμενη ροή νετρονίων για χρονικό διάστημα 93800 s (~26 h). Μετά το πέρας της ακτινοβόλησης οι λεπτοί στόχοι τοποθετήθηκαν σε υψηλής καθαρότητας ανιχνευτές Γερμανίου (HPGe) με σκοπό την μέτρηση του ενεργειακού φάσματος των ακτίνων γ που εκπέμπονται. Στην συνέχεια, μέσω της μελέτης των χαρακτηριστικών κορυφών κάθε αντίδρασης στο φάσμα των ακτίνων γ ήταν δυνατό να υπολογιστούν πειραματικά η ροή νετρονίων αλλά και οι ρυθμοί ενεργοποίησης των αντιδράσεων σε κάθε φύλλο.

2.5.2 Μελέτη της αντίδρασης D-T στο πείραμα

Η εξερχόμενη από τον επιταχυντή δέσμη δευτερίων πριν προσκρούσει στον στόχο του τριτίου περνά μέσα από τα δύο φύλλα Μο συνολικού πάχους 10 μm, τοποθετημένα σε επαφή με τον στόχο ώστε να εξασφαλιστεί όσο το δυνατόν

μικρότερη απόκλιση της δέσμης δευτερίων λόγω της επίδρασης του φαινομένου του χωρικού διασκεδασμού (lateral straggling). Τα φύλλα Μο χρησιμοποιήθηκαν με σκοπό την βελτιστοποίηση της απόδοσης του πειράματος, λαμβάνοντας υπόψη δυο παράγοντες [10]:

- την ενεργό διατομή της αντίδρασης D-T: στην ενεργειακή περιοχή ενδιαφέροντος, όσο μικρότερη είναι η ενέργεια της δέσμης δευτερίων τόσο μεγαλύτερη είναι η ενεργός διατομή της αντίδρασης
- την ένταση της δέσμης νετρονίων που δίνει ο επιταχυντής, η οποία είναι συνάρτηση του παραγόμενου ρεύματος σε αυτόν – μεγαλύτερη ένταση ρεύματος έχει ως αποτέλεσμα μεγαλύτερη ένταση δέσμης

Επομένως παρότι χρησιμοποιήθηκε δέσμη δευτερίων ενέργειας 2 MeV, χρησιμοποιώντας τα φύλλα Mo στον στόχο Cu/TiT έφτασε δέσμη ενέργειας 0.73 MeV, υπολογισμός ο οποίος πραγματοποιήθηκε πολύ εύκολα μέσα από τον κώδικα NeuSDesc. Με αυτόν τον τρόπο εκμεταλλευόμαστε την αύξηση της ενεργού διατομής της αντίδρασης από τα 0.11 barns στην ενέργεια $E_D = 2$ MeV, σε 0.35 barns για δέσμη $E_D = 0.73$ MeV έχοντας παράλληλα και βέλτιστη ισχύ δέσμης από τον επιταχυντή.

Όσον αφορά τώρα την παραγόμενη δέσμη νετρονίων, μπορούμε μέσω του κώδικα NeuSDesc να υπολογίσουμε την ενεργειακή κατανομή των νετρονίων. Όπως φαίνεται παρακάτω και στο σχήμα 2.3, τα νετρόνια εκπέμπονται έχοντας ένα αρκετά μεγάλο ενεργειακό εύρος γύρω από την κεντρική τιμή, (15.3 ± 1.1 MeV).



Σχήμα 2.3: Το ενεργειακό φάσμα της ροής νετρονίων για E_D = 2 MeV (NeuSDesc)

2.6 Προσομοίωση του πειράματος

Για την προσομοίωση του πειράματος που περιγράφηκε στην ενότητα 2.5 έγινε συνδυαστική χρήση των κωδίκων MCNP και NeuSDesc με σκοπό το χαρακτηρισμό της δέσμης νετρονίων που παράγεται μέσω της αντίδρασης D-T.

Για την περιγραφή της πηγής νετρονίων στο περιβάλλον του κώδικα MCNP χρησιμοποιήθηκε μια κάρτα ορισμού πηγής παραγόμενη από τον κώδικα NeuSDesc ενώ τα υπόλοιπα στοιχεία της πειραματικής διάταξης εισήχθησαν στο περιβάλλον του κώδικα MCNP με τη βοήθεια του προγράμματος VisEd, όπου περιγράφηκαν με μεγάλη ακρίβεια στις διαστάσεις και τη σύσταση τους [11]. Στο σχήμα 2.4 φαίνεται η αναπαράσταση της πειραματικής διάταξης, όπως αυτή απεικονίζεται στο πρόγραμμα VisEd το οποίο συμπεριλαμβάνεται στο λογισμικό MCNP5.



Σχήμα 2.4: Η γεωμετρία του πειράματος σε πλάγια όψη όπως εμφανίζεται στο MCNP. Στο αριστερό μέρος βρίσκεται η φλάντζα με τον στόχο Cu/TiT ενώ στα δεξιά φαίνονται οι πολλαπλοί μεταλλικοί στόχοι (Το σχήμα δεν απεικονίζει την πραγματική αναλογία διαστάσεων μεταξύ φλάντζας και λεπτών φύλλων)

Επίσης, ορίστηκαν και τα επιθυμητά ενεργειακά διαστήματα μέσα στα οποία θα εκτελέσει υπολογισμούς ο κώδικας MCNP, κάτι το οποίο είναι σημαντικό για την ορθή εφαρμογή της μεθόδου ενεργοποίησης στη συνέχεια και συνεπώς την αξιοπιστία των αποτελεσμάτων που θα λάβουμε μέσω αυτής.

Μέσω της προσομοίωσης του πειράματος προσδιορίστηκε η ενεργειακή κατανομή της ροής νετρονίων σε κάθε λεπτό στόχο, η μορφή της οποίας φαίνεται στο σχήμα 2.5 για τρείς χαρακτηριστικούς στόχους της διάταξης.

Όπως παρατηρούμε, η ροή νετρονίων που δέχεται ο κάθε στόχος στην ενεργειακή περιοχή της κύριας δέσμης μειώνεται σταδιακά κατά μήκος της διάταξης. Χαρακτηριστικό στοιχείο είναι το ότι η ροή στον πρώτο στόχο της διάταξης είναι περίπου διπλάσια σε σχέση με αυτή που δέχεται ο τελευταίος, γεγονός το οποίο

θεωρείται φυσιολογικό λόγω της αύξησης της στερεάς γωνίας μέσα στην οποία εκπέμπεται η δέσμη συναρτήσει της απόστασης.



Σχήμα 2.5: Η ενεργειακή κατανομή της ροής νετρονίων σε τρία φύλλα της διάταξης, στο πρώτο (AI A), στο τελευταίο (AI 10) και σε ένα που βρίσκεται περίπου στο μέσο αυτής (AI 9)

Επίσης, παρατηρείται η ύπαρξη παρασιτικών νετρονίων σε χαμηλότερες ενέργειες τα οποία δεν είναι δυνατό να παράγονται μέσω της αντίδρασης D-T όπως είδαμε στην ενότητα 1.4. Η προέλευση αυτών των νετρονίων θα μελετηθεί εκτενώς στο επόμενο κεφάλαιο.

2.7 Θεωρητικός υπολογισμός ρυθμών ενεργοποίησης επιλεγμένων αντιδράσεων μέσω του κώδικα MCNP

Στην ενότητα αυτή πραγματοποιείται εφαρμογή της μεθόδου ενεργοποίησης για τον θεωρητικό υπολογισμό ρυθμών ενεργοποίησης επιλεγμένων αντιδράσεων που ενεργοποιούνται πάνω στα μεταλλικά φύλλα της διάταξης.

2.7.1 Οι επιλεγμένες αντιδράσεις αναφοράς

Για την επιτυχή εφαρμογή της μεθόδου πολλαπλής ενεργοποίησης οι επιλεγμένες αντιδράσεις είναι απαραίτητο να πληρούν ορισμένες βασικές προϋποθέσεις [9]:

 Ο χρόνος ημιζωής (T_{1/2}) του θυγατρικού πυρήνα θα πρέπει να είναι ικανός έτσι ώστε να μπορεί να ανιχνευθεί μετά το τέλος της ακτινοβόλησης του στόχου

- Οι ακτίνες γ που παράγονται κατά την αποδιέγερση του θυγατρικού πυρήνα θα πρέπει να είναι μεγάλης έντασης ώστε να γίνει ευκολότερη η ανίχνευσή τους
- Η ενεργός διατομή των αντιδράσεων θα πρέπει να έχει υψηλή τιμή και να είναι γνωστή με μεγάλη ακρίβεια στην ενεργειακή περιοχή ενδιαφέροντος
- Τα ενεργειακά κατώφλια (Eth) ενεργοποίησης των αντιδράσεων θα πρέπει να εκτείνονται σε όσο το δυνατό μεγαλύτερο εύρος της ενεργειακής περιοχής μελέτης της ροής νετρονίων
- Οι στόχοι που χρησιμοποιούνται θα πρέπει είναι μεγάλης καθαρότητας ώστε να αποφευχθούν τυχόν παρασιτικές αντιδράσεις, ενώ θα πρέπει να είναι γνωστή και η ακριβής ισοτοπική σύσταση τους

Λαμβάνοντας υπόψη τα παραπάνω χαρακτηριστικά επιλέχθηκαν προς μελέτη οι αντιδράσεις που φαίνονται στον πίνακα 2.2. Τα ενεργειακά κατώφλια που απεικονίζονται αντιστοιχούν στην ενέργεια πάνω από την οποία η ενεργός διατομή της εκάστοτε αντίδρασης είναι αρκετά μεγάλη έτσι ώστε να είναι δυνατή η πειραματική μέτρηση ρυθμού ενεργοποίησης και δεν αντιστοιχούν εν γένει με το πραγματικό Eth της αντίδρασης αυτής.

Αντίδραση	T _{1/2}	Eth (MeV)
27 Al(n, α) ²⁴ Na	14.96 h	6.8
$^{197}Au(n,2n)^{196}Au$	6.18 d	8.2
93 Nb(n,2n) 92 Nb ^m	10.1 d	9
⁴⁸ Ti(n,p) ⁴⁸ Sc	1.82 d	7
56 Fe(n,p) 56 Mn	2.58 h	6
${}^{59}Co(n,\alpha){}^{56}Mn$	2.58 h	9.1
${}^{59}\text{Co}(n,2n){}^{58}\text{Co}{}^{m+g}$	70.82 d	10.5

Πίνακας 2.2: Οι επιλεγμένες αντιδράσεις και τα χαρακτηριστικά τους

2.7.2 Μέθοδος υπολογισμού ρυθμών ενεργοποίησης

Για τον θεωρητικό υπολογισμό των ρυθμών ενεργοποίησης των αντιδράσεων χρησιμοποιήθηκε η σχέση 2.1, στην οποία είναι απαραίτητο να εισαχθούν για κάθε αντίδραση τα παρακάτω δεδομένα:

- i. Η ροή νετρονίων συναρτήσει της ενέργειας, υπολογισμένη μέσω προσομοίωσης στον κώδικα MCNP, λαμβάνοντας υπόψη το αντίστοιχο ενεργειακό κατώφλι ενεργοποίησης της κάθε αντίδρασης
- Η ενεργός διατομή της αντίδρασης, συναρτήσει της ενέργειας νετρονίων

Λόγω της εξάρτησης και των δύο μεταβλητών από την ενέργεια ο υπολογισμός είναι απαραίτητο να πραγματοποιηθεί για συγκεκριμένα ενεργειακά διαστήματα (ΔΕ) κάθε φορά. Το εύρος των διαστημάτων αυτών καθορίζεται από τα αντίστοιχα εύρη ενεργειών στα οποία έχουν μετρηθεί δεδομένα ενεργών διατομών στις διεθνείς βιβλιοθήκες, καθώς στον κώδικα MCNP το εύρος τους είναι επιλογή του χρήστη.

Εξαιτίας όμως του γεγονότος ότι τα δεδομένα αυτά είναι υπολογισμένα με διαφορετική ακρίβεια ως προς την ενέργεια για κάθε χρησιμοποιούμενη αντίδραση, αποφασίστηκε να προσδιοριστεί η ροή νετρονίων για συγκεκριμένα ενεργειακά διαστήματα μέσω της προσομοίωσης και στην συνέχεια να προσαρμοστούν τα δεδομένα των ενεργών διατομών πάνω σε αυτά, μέσω της μεθόδου γραφικής προσαρμογής (graph fit). Ποιο συγκεκριμένα, αναπαραστάθηκε γραφικά η ενεργός διατομή της εκάστοτε αντίδρασης συναρτήσει της ενέργειας, κάνοντας χρήση των αντίστοιχων δεδομένων των βιβλιοθηκών, και στη συνέχεια παράχθηκε μέσω της μεθόδου γραφικής προσαρμογής μια γεννήτρια συνάρτηση που περιέγραφε τη σχέση ενέργειας και ενεργού διατομής. Με τον τρόπο αυτό έγινε δυνατός ο προσδιορισμός τιμών ενεργών διατομών αντιδράσεων εντός ενεργειακών διαστημάτων της επιλογής μας.

Ως πηγή των δεδομένων ενεργών διατομών για την πλειοψηφία των μελετώμενων αντιδράσεων χρησιμοποιήθηκε η βιβλιοθήκη ENDF/B-VII.1 (USA 2011), η οποία παρέχει εκτιμήσεις (evaluations) για την ενεργό διατομή αντιδράσεων συναρτήσει της ενέργειας οι οποίες βασίζονται σε πειραματικές μετρήσεις [3] [12]. Στην περίπτωση της αντίδρασης ⁹³Nb(n,2n)⁹²Nb^m όπου δεν υπήρχαν τέτοιου είδους δεδομένων EXFOR [13]. Οι γραφικές απεικονίσεις των ενεργών διατομών των αντιδράσεων που χρησιμοποιήθηκαν μπορούν να βρεθούν στο Παράρτημα Α.



Σχήμα 2.6: Οπτικοποίηση των ενεργειακών διαστημάτων (ΔΕ) που επιλέχθηκαν για τον υπολογισμό των ρυθμών ενεργοποίησης

Συμπερασματικά λοιπόν, για κάθε αντίδραση, υπολογίστηκε αρχικά το γινόμενο $\sigma(E)*\Phi(E)$ σε κάθε ένα επιλεγμένο ενεργειακό διάστημα, ενώ στη συνέχεια αυτά τα δεδομένα αθροίστηκαν για να προκύψει τελικά ο ρυθμός ενεργοποίησης της κάθε αντίδρασης σύμφωνα με την παρακάτω σχέση:

$$RR = \sum_{\Delta E_i} \sigma_i(E) \cdot \Phi_i(E)$$
 (2.2)

Τα ενεργειακά διαστήματα που επιλέχθηκαν, όπως φαίνεται και στο σχήμα 2.6, ήταν της τάξης των 250 keV για την ενεργειακή περιοχή από 0 μέχρι 13 MeV ενώ για την περιοχή μετά τα 13 MeV τα εύρη των διαστημάτων ήταν της τάξης των 35 keV περίπου, όμοια με τα αντίστοιχα διαστήματα που χρησιμοποίησε ο κώδικας NeuSDesc για τη περιγραφή του ενεργειακού φάσματος της πηγής νετρονίων.

Τα αποτελέσματα για τους ρυθμούς ενεργοποίησης, στην περίπτωση που υπολογιστούν αμιγώς μέσω του κώδικα MCNP, δεν είναι άμεσα συγκρίσιμα με τα αντίστοιχα πειραματικά δεδομένα. Για να πραγματοποιηθεί η σύγκριση πρέπει να υπάρξει κάποιο είδος κανονικοποίησης μεταξύ της θεωρητικής (μέσω MCNP) και της πειραματικής ροής νετρονίων. Η κανονικοποίηση αυτή εκτελέστηκε με δύο διαφορετικές μεθόδους:

- 1η μέθοδος: Κανονικοποίηση της θεωρητικά υπολογιζόμενης ροής σε κάθε λεπτό στόχο στην πειραματική ροή του πρώτου στόχου (Al A) του πειράματος. Σε αυτή την περίπτωση ουσιαστικά αναπαράγουμε τη ροή νετρονίων που υπολογίστηκε για κάθε λεπτό στόχο μέσω του MCNP αλλά σε τιμές που μπορούν πλέον να συγκριθούν άμεσα με τις πειραματικές.
- 2η μέθοδος: Κανονικοποίηση της θεωρητικά υπολογιζόμενης ροής σε κάθε λεπτό στόχο στην πειραματική ροή του ιδίου (2η μέθοδος). Στη περίπτωση αυτή ουσιαστικά αναπαράγουμε τη πειραματικά υπολογισμένη ροή νετρονίων για κάθε στόχο.

Έχοντας τώρα τα παραπάνω δεδομένα για τη ροή νετρονίων, υπολογίστηκαν οι ρυθμοί ενεργοποίησης των αντιδράσεων που πραγματοποιήθηκαν σε κάθε στόχο για τις δύο διαφορετικές μεθόδους κανονικοποίησης της ροής. Τα αποτελέσματα μαζί με την ποσοστιαία απόκλιση των τιμών στις δύο μεθόδους φαίνονται παρακάτω στον πίνακα 2.3.

Παρατηρούμε ότι οι αποκλίσεις των τιμών μεταξύ των δύο μεθόδων ξεπερνούν το 10% μόνο στις περιπτώσεις του χρυσού και του τιτανίου. Το αποτέλεσμα αυτό είναι ιδιαίτερα ενθαρρυντικό καθώς πλέον αναμένουμε αντίστοιχες αποκλίσεις μεταξύ της πρώτης μεθόδου και των πειραματικών δεδομένων, κάτι το οποίο μένει να αποδειχθεί στην συνέχεια. Σχηματικά, τα αποτελέσματα του πίνακα φαίνονται συγκεντρωτικά στο σχήμα 2.7.

Foil	RR (Al A)	RR (Foil)	Απόκλιση (%)
Al A	3.915E-19	3.915E-19	0
Au B	7.800E-18	6.678E-18	14.4
Al c	3.517E-19	3.659E-19	3.9
Al 8	3.184E-19	3.527E-19	10
Al 9	2.927E-19	2.913E-19	0.5
Nb 2	1.174E-18	1.127E-18	4
Ti 1	1.512E-19	1.746E-19	13.4
Fe a	2.279E-19	2.487E-19	8.4
Co 2 (n,2n)	1.724E-18	1.719E-18	0.3
Co 2 (n,a)	6.219E-20	6.673E-20	6.8
Al 10	2.277E-19	2.527E-19	9.9

Πίνακας 2.3: Οι ρυθμοί ενεργοποίησης των αντιδράσεων σε κάθε φύλλο, υπολογισμένοι και με τις δυο μεθόδους κανονικοποίησης της ροής νετρονίων



Σχήμα 2.7: Σύγκριση των ρυθμών ενεργοποίησης μεταξύ των δυο μεθόδων υπολογισμού

2.8 Πειραματικός υπολογισμός ρυθμών ενεργοποίησης των επιλεγμένων αντιδράσεων

Μέσω των μετρήσεων που πραγματοποιήθηκαν κατά την τέλεση του πειράματος στο ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος", η περιγραφή του οποίου έγινε στην ενότητα 2.5, ήταν δυνατό να υπολογιστούν οι ρυθμοί ενεργοποίησης των επιλεγμένων αντιδράσεων μέσω δεδομένων που συλλέχθηκαν κατά τη πειραματική διαδικασία μέσω της σχέσης

$$RR_{\iota} = \frac{\lambda_{i} \cdot N_{i}(t_{B})}{N_{\tau i}[1 - e^{(-\lambda_{i} \cdot t_{B})}]}$$
(2.3)

οπού λ η σταθερά αποδιέγερσης των παραγόμενων πυρήνων, N_{τ} ο αριθμός των πυρήνων του λεπτού στόχου, t_B ο χρόνος ακτινοβόλησης του στόχου και $N(t_B)$ ο αριθμός των πυρήνων που παράγονται σε χρόνο ακτινοβόλησης t_B .

Ο αριθμός των πυρήνων του στόχου N_τ υπολογίζεται πολύ εύκολα γνωρίζοντας τη μάζα του στόχου μέσω της σχέσης

$$N_{\tau} = \frac{m \cdot N_A}{A} \tag{2.4}$$

οπού m η μάζα του στόχου σε g, N_A ο αριθμός Avogadro και A ο μαζικός αριθμός του στοιχείου από το οποίο αποτελείται ο στόχος.

Ο αριθμός των πυρήνων που παράγονται κατά την ακτινοβόληση *N(t_B)* υπολογίζεται μετά την ανάλυση των μετρήσεων του ανιχνευτή μέσω της σχέσης

$$N(t_B) = \frac{N_{\gamma}}{\epsilon \cdot I_{\gamma} \cdot f_c \cdot D}$$
(2.5)

όπου N_{γ} ο αριθμός των ακτίνων γ που αποτελούν την χαρακτηριστική κορυφή της εκάστοτε μελετώμενης αντίδρασης, ε η απόλυτη απόδοση (efficiency) του ανιχνευτή HPGe που χρησιμοποιήθηκε (για την συγκεκριμένη ενέργεια της κορυφής), I_{γ} η ένταση της κορυφής, f_c ένας διορθωτικός παράγοντας με τον οποίο υπολογίζεται το ισοζύγιο ανάμεσα στην παραγωγή και την αποδιέγερση πυρήνων κατά τη διάρκεια της ακτινοβόλησης και D ένας διορθωτικός παράγοντας για τις αποδιεγέρσεις των παραχθέντων πυρήνων από το πέρας της ακτινοβόλησης μέχρι το τέλος της μέτρησης.

Με τη βοήθεια των παραπάνω σχέσεων υπολογίστηκαν πειραματικά οι ρυθμοί ενεργοποίησης των αντιδράσεων σε κάθε λεπτό στόχο. Τα αποτελέσματα φαίνονται στον πίνακα 2.4 καθώς και στο σχήμα 2.8.

Foil	RR (Πειρ.)
Al A	3.799E-19
Au B	7.441E-18
Al c	3.556E-19
Al 8	3.430E-19
Al 9	2.834E-19
Nb 2	1.139E-18
Ti 1	1.746E-19
Fe a	2.214E-19
Co 2 (n,2n)	1.745E-18
Co 2 (n,a)	5.879E-20
Al 10	2.433E-19

Πίνακας 2.4: Οι τιμές των πειραματικά υπολογιζόμενων ρυθμών ενεργοποίησης για τις επιλεγμένες αντιδράσεις



Σχήμα 2.8: Οι πειραματικοί ρυθμοί ενεργοποίησης για κάθε μελετώμενη αντίδραση

2.9 Σύγκριση πειραματικών και θεωρητικών αποτελεσμάτων -Συμπεράσματα

Έχοντας πραγματοποιήσει θεωρητικούς και πειραματικούς υπολογισμούς των ρυθμών ενεργοποίησης των αντιδράσεων που μας ενδιαφέρουν, μπορούμε πλέον να συγκρίνουμε τα αποτελέσματα αυτά με σκοπό να διαπιστώσουμε το βαθμό συμφωνίας τους. Σε πρώτο βαθμό θα πραγματοποιηθεί σύγκριση των αποτελεσμάτων μεταξύ της 2ης θεωρητικής μεθόδου και των πειραματικών αποτελεσμάτων:

Foil	RR (Foil)	RR (Πειρ.)	Απόκλιση (%)
Al A	3.915E-19	3.799E-19	3
Au B	6.678E-18	7.441E-18	10.2
Al c	3.659E-19	3.556E-19	2.8
Al 8	3.527E-19	3.430E-19	2.7
Al 9	2.913E-19	2.834E-19	2.7
Nb 2	1.127E-18	1.139E-18	1
Ti 1	1.746E-19	1.746E-19	0
Fe a	2.487E-19	2.214E-19	11
Co 2 (n,2n)	1.719E-18	1.745E-18	1.5
Co 2 (n,a)	6.673E-20	5.879E-20	11,9
Al 10	2.527E-19	2.433E-19	3.7

Πίνακας 2.5: Σύγκριση πειραματικών και θεωρητικών (2η μέθοδος) τιμών των ρυθμών ενεργοποίησης

Όπως παρατηρούμε στον πίνακα 2.5, αλλά και στο σχήμα 2.9 παρακάτω, υπάρχουν διαφοροποιήσεις μεταξύ των τιμών, οι οποίες όμως στην πλειοψηφία των αντιδράσεων δεν ξεπερνούν το 10%.



Σχήμα 2.9: Σύγκριση πειραματικών και θεωρητικών (2η μέθοδος) τιμών των ρυθμών ενεργοποίησης

	Στην	συνέχεια	πραγματοποιούμε	σύγκριση	$\tau\omega\nu$	αποτελεσμάτων	της	1ης
θεωρ	ητικής	μεθόδου μ	ιε τις πειραματικές τ	τιμές των ρι	υθμών	ν ενεργοποίησης:		

Foil	RR (Al A)	RR (Πειρ.)	Απόκλιση (%)
Al A	3.915E-19	3.799E-19	3
Au B	7.800E-18	7.441E-18	4.6
Al c	3.517E-19	3.556E-19	1.1
Al 8	3.184E-19	3.430E-19	7.2
Al 9	2.927E-19	2.834E-19	3.2
Nb 2	1.174E-18	1.139E-18	3
Ti 1	1.512E-19	1.746E-19	13.4
Fe a	2.279E-19	2.214E-19	2.8
Co 2 (n,2n)	1.724E-18	1.745E-18	1.2
Co 2 (n,a)	6.219E-20	5.879E-20	5.5
Al 10	2.277E-19	2.433E-19	6.4

Πίνακας 2.6: Σύγκριση πειραματικών και θεωρητικών (1η μέθοδος) τιμών των ρυθμών ενεργοποίησης



Σχήμα 2.10: Σύγκριση πειραματικών και θεωρητικών (1η μέθοδος) τιμών των ρυθμών ενεργοποίησης

Όπως παρατηρούμε στον πίνακα 2.6 και στο σχήμα 2.10, οι θεωρητικές και πειραματικές τιμές παρουσιάζουν σημαντικό βαθμό συμφωνίας, με τις αποκλίσεις να μην ξεπερνούν το 10% με εξαίρεση τις τιμές του τιτανίου.

Συμπερασματικά λοιπόν, συγκρίνοντας τα αποτελέσματα των δύο μεθόδων θεωρητικού υπολογισμού των ρυθμών ενεργοποίησης με τα αντίστοιχα πειραματικά (βλ. και σχήμα 2.11), μπορούμε να ισχυριστούμε ότι πετυχαίνουμε εξαιρετική αναπαραγωγή των πειραματικών αποτελεσμάτων, στηρίζοντας τον ισχυρισμό και στην εξαιρετική συμφωνία που παρουσιάζουν οι τιμές για την αντίδραση ²⁷Al(n,α)²⁴Na στα φύλλα αλουμινίου η οποία και χρησιμοποιείται ευρέως ως αντίδραση αναφοράς σε πειραματικές μετρήσεις. Για την περίπτωση των ρυθμών ενεργοποίησης της αντίδρασης ⁴⁸Ti(n,p)⁴⁸Sc οπού παρατηρούνται οι μεγαλύτερες αποκλίσεις ως πιθανότερη αιτία μπορεί να θεωρηθεί κάποιου είδους αστοχία στην περιγραφή της ενεργού διατομής συναρτήσει της ενέργειας.

Τέλος, αξίζει να σημειώσουμε και τον μικρό αριθμό δεδομένων που απαιτούνται για την πραγματοποίηση θεωρητικών υπολογισμών – απαιτείται ουσιαστικά μόνο ο υπολογισμός της ροής νετρονίων στα λεπτά φύλλα μέσω προσομοίωσης – γεγονός το οποίο καθιστά το αποτέλεσμα ακόμη πιο εντυπωσιακό.



Σχήμα 2.11: Σύγκριση των ρυθμών ενεργοποίησης των αντιδράσεων που υπολογίστηκαν και με τις τρεις εφαρμοζόμενες μεθόδους

2.10 Θεωρητική μελέτη ύπαρξης οπισθοσκεδαζόμενων νετρονίων υψηλής ενέργειας

Στα πλαίσια του χαρακτηρισμού της δέσμης νετρονίων στο ενεργειακό εύρος μεταξύ 6 και 17 MeV μέσω της μεθόδου ενεργοποίησης, κρίθηκε σκόπιμο να ελεγχθεί η συνεισφορά των οπισθοσκεδαζόμενων νετρονίων υψηλής ενέργειας στην υπολογιζόμενη ροή νετρονίων για κάθε στόχο. Τα νετρόνια αυτά οφείλονται σε σκεδάσεις στους διαδοχικούς λεπτούς στόχους που βρίσκονται τοποθετημένοι μετά τον κάθε μελετώμενο στόχο της πειραματικής διάταξης. Μια μεγάλη συνεισφορά στη ροή από αυτού του είδους νετρόνια θα δημιουργούσε προβλήματα στην αξιοπιστία της μεθόδου ενεργοποίησης, καθώς οι ρυθμοί ενεργοποίησης των μελετώμενων αντιδράσεων θα είχαν άμεση εξάρτηση από τον αριθμό των λεπτών στόχων στη διάταξη του πειράματος.

Για την διερεύνηση του ζητήματος πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις με τον κώδικα MCNP στις οποίες έγινε μέτρηση της ροής νετρονίων σε τέσσερα επιλεγμένα λεπτά φύλλα της διάταξης, έχοντας αφαιρέσει κάθε φορά τα φύλλα που ήταν τοποθετημένα μετά από αυτό στην κατεύθυνση της δέσμης.

Οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν για τα φύλλα Al A, Al c, Al 8 και Ti 1 της πειραματικής διάταξης. Στον πίνακα 2.7 φαίνονται οι θεωρητικά υπολογιζόμενες ροές νετρονίων με πλήρη και τροποποιημένη πειραματική διάταξη ενώ γίνεται και σύγκριση των δύο τιμών αυτών.

Foil	Ροή n (Πλήρης) n/cm ²	Ροή n (Τροπ.) n/cm ²	Απόκλιση (%)
Al A	1.961E+6	1.954E+6	-0.36
Al c	1.763E+6	1.758E+6	-0.28
Al 8	1.598E+6	1.591E+6	-0.44
Ti 1	1.308E+6	1.304E+6	-0.31

Πίνακας 2.7: Σύγκριση της ροής νετρονίων σε επιλεγμένα φύλλα-στόχους με και χωρίς την παρουσία επόμενων φύλλων στη πειραματική διάταξη

Μέσω των παραπάνω δεδομένων, παρατηρούμε ότι υπάρχει μια μείωση της ροής νετρονίων όταν αφαιρεθούν τα φύλλα που βρίσκονται τοποθετημένα μετά τον υπό μελέτη στόχο. Η μείωση αυτή παρατηρείται και στα τέσσερα επιλεγμένα φύλλα, όμως το γεγονός ότι αποτελεί κάτω από 1% της ροής νετρονίων σε αυτά μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι η συνεισφορά αυτή είναι αμελητέα και επομένως δεν θα επηρεάζει την αξιοπιστία της μεθόδου ενεργοποίησης. Τα δεδομένα του πίνακα σχηματικά απεικονίζονται στο σχήμα 2.12.



Σχήμα 2.12: Σύγκριση της ροής νετρονίων σε επιλεγμένα φύλλα-στόχους με και χωρίς την παρουσία επόμενων λεπτών φύλλων στη πειραματική διάταξη

Με βάση τα αποτελέσματα του ελέγχου αυτού καθώς και τα αποτελέσματα των συγκρίσεων θεωρητικών και πειραματικών ρυθμών ενεργοποίησης αντιδράσεων, πιστοποιήθηκε η αξιοπιστία των προσομοιώσεων που πραγματοποιήθηκαν με τη συνδυαστική χρήση των κωδίκων MCNP και NeuSDesc. Κατά συνέπεια, μπορούμε να εμπιστευθούμε την θεωρητική ενεργειακή κατανομή της δέσμης νετρονίων που υπολογίστηκε μέσω της προσομοίωσης στις υψηλές ενέργειες, πάνω δηλαδή από τα ενεργειακά κατώφλια των αντιδράσεων που ενεργοποιούνται πάνω στην διάταξη των στόχων.

Κεφάλαιο 3₀

Χαρακτηρισμός της δέσμης νετρονίων στις χαμηλές ενέργειες μέσω του κώδικα MCNP

Όπως είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο κατά τον θεωρητικό υπολογισμό της ροής νετρονίων μέσω του κώδικα MCNP σε κάθε λεπτό στόχο της διάταξης του πειράματος, η δέσμη νετρονίων μπορεί να διαχωριστεί σε δυο περιοχές:

- Την περιοχή της κύριας δέσμης που αντιστοιχεί σε ενέργειες από 14 έως 17 MeV
- Την περιοχή των παρασιτικών νετρονίων που αφορά στο εύρος από 0 έως 14 MeV, με εστίαση όμως στην περιοχή από 0 έως 6 MeV όπου το πλήθος τους είναι συγκρίσιμο με αυτό της κύριας δέσμης

Στο κεφάλαιο αυτό γίνεται προσπάθεια χαρακτηρισμού της δέσμης στην περιοχή ενεργειών μεταξύ 0 και 6 MeV μέσω της μελέτης αυτών των παρασιτικών νετρονίων, καθώς στο προηγούμενο κεφάλαιο μελετήσαμε με τη μέθοδο της ενεργοποίησης μόνο την περιοχή της κύριας δέσμης. Τα συμπεράσματα της μελέτης αυτής χρησιμοποιήθηκαν για την προετοιμασία πειράματος με σκοπό τη βαθμονόμηση φίλτρων CR-39, το οποίο πραγματοποιήθηκε στο ΕΚΕΦΕ ¨Δημόκριτος¨, καθώς και για τη διόρθωση πειραματικών μετρήσεων ενεργών διατομών αντιδράσεων.

3.1 Προέλευση των παρασιτικών νετρονίων της δέσμης

Κατά τη μελέτη της αντίδρασης D-T στον κώδικα NeuSDesc, στην ενότητα 1.4, εξάγαμε το συμπέρασμα ότι η παραγωγή παρασιτικών νετρονίων στην παραγόμενη δέσμη είναι σχεδόν αμελητέα. Όμως, κατά την προσομοίωση του πειράματος με τον κώδικα MCNP, στους λεπτούς στόχους ανιχνεύτηκε σημαντική ροή νετρονίων εκτός της ενεργειακής περιοχής της κύριας δέσμης.

Σύμφωνα με τα παραπάνω δεδομένα η ροή αυτή δεν μπορεί παρά να προέρχεται από σκεδάσεις νετρονίων της εισερχόμενης δέσμης με διάφορα υλικά, σύμφωνα με τη γεωμετρία του πειράματος. Για να ελεγχθεί ο ισχυρισμός αυτός πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις με τον κώδικα MCNP κατά τις οποίες μελετήθηκε, ξεχωριστά και σε συνδυασμούς, η συνεισφορά συγκεκριμένων στοιχείων της πειραματικής διάταξης στην παραγωγή των παρασιτικών αυτών νετρονίων.

Τα στοιχεία της διάταξης που μελετήθηκαν σε αυτές τις προσομοιώσεις είναι η φλάντζα, ο στόχος Cu/TiT και η διάταξη του συνόλου των λεπτών στόχων (foils). Για την άμεση σύγκριση των αποτελεσμάτων των διάφορων προσομοιώσεων χρησιμοποιήθηκε η ροή νετρονίων που μετράται στον πρώτο στόχο της διάταξης (Al A). Όπως παρατηρούμε στο σχήμα 3.1, σημαντική ροή παρασιτικών νετρονίων

παρατηρείται σε δύο διαφορετικές ενεργειακές περιοχές, από 0 έως 6 MeV και από 11 έως 14 MeV, και για αυτό το λόγο οι περιοχές αυτές μελετήθηκαν ξεχωριστά.



Σχήμα 3.1: Η ροή νετρονίων συναρτήσει της ενέργειας για τον πρώτο στόχο της πειραματικής διάταξης. Διακρίνονται δύο περιοχές ύπαρξης παρασιτικών νετρονίων

Στους παρακάτω πίνακες 3.1 και 3.2 περιέχονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων για τις δύο ενεργειακές περιοχές που αναφέραμε, όπου στην πρώτη στήλη αναφέρονται τα στοιχεία της γεωμετρίας τα οποία μελετήθηκαν κάθε φορά. Οι ροές νετρονίων που εμφανίζονται αφορούν την ολοκλήρωση της ροής στις δύο αυτές περιοχές.

Στοιχείο γεωμετρίας	Ροή n ×10 ⁴ (n/cm ²)	Συνεισφορά (%)
Πλήρης γεωμετρία	1.51	100
Πηγή	0.05	3.5
Foils	0.55	36.5
Ti	0.56	37.3
Φλάντζα	0.46	30.3
Foils + Ti	1.1	72.2
Foils + Φλάντζα	0.98	67
Ti + Φλάντζα	1	66.2

Πίνακας 3.1: Οι ροές νετρονίων συναρτήσει των στοιχείων της γεωμετρίας στην ενεργειακή περιοχή 0-6 MeV

Συνδυάζοντας τα δεδομένα του πίνακα 3.1, καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι στην ενεργειακή περιοχή 0-6 MeV τα παρασιτικά νετρόνια προέρχονται κατά ποσοστό 96,5% από σκεδάσεις νετρονίων της εισερχόμενης δέσμης στα τρία στοιχεία της γεωμετρίας, με το κάθε ένα από αυτά να συνεισφέρει περίπου το 1/3 της συνολικής ροής νετρονίων σε αυτή την ενεργειακή περιοχή. Συνολικά, θα μπορούσαμε να πούμε ότι η φλάντζα με τον, περιεχόμενο σε αυτήν, στόχο Cu/TiT ευθύνονται για το 67% των παρασιτικών νετρονίων ενώ η διάταξή των λεπτών στόχων ευθύνεται για το υπόλοιπο 33%.

Στοιχείο γεωμετρίας	Poή n × 10 ³ (n/cm ²)	Συνεισφορά (%)
Πλήρης γεωμετρία	2.05	100
Πηγή	0.13	6.3
Foils	0.3	14.4
Ti	0.53	25.6
Φλάντζα	1.55	75.5
Foils + Ti	0.63	30.7
Foils + $\Phi\lambda$ άντζα	1.7	82.8
Τi + Φλάντζα	1.86	90.6

Πίνακας 3.2: Οι ροές νετρονίων συναρτήσει των στοιχείων της γεωμετρίας στην ενεργειακή περιοχή 11-14 MeV

Αντίστοιχα τώρα, μέσω του πίνακα 3.2 συμπεραίνουμε ότι στην ενεργειακή περιοχή 11-14 MeV η μεγαλύτερη συνεισφορά παρασιτικών νετρονίων προέρχεται από σκεδάσεις νετρονίων στην φλάντζα (75%), ενώ ο στόχος Cu/TiT και οι λεπτοί στόχοι συνεισφέρουν 15% και 10% αντίστοιχα.



Σχήμα 3.2: Η ενεργειακή κατανομή της ροής νετρονίων σε δύο φύλλα της διάταξης, στο πρώτο (Al A) και στο τελευταίο (Al 10) κατά σειρά

Εδώ θα πρέπει να αναφέρουμε ότι τα παραπάνω αποτελέσματα είναι αντιπροσωπευτικά (και στις δύο ενεργειακές περιοχές) όσον αφορά στη συνεισφορά των λεπτών στόχων μόνο για τη ροή παρασιτικών νετρονίων στο στόχο Al A, καθώς αυτή η ροή είναι αποτέλεσμα οπισθοσκεδάσεων λόγω των διαδοχικών φύλλων της διάταξης. Όπως βλέπουμε και στο σχήμα 3.2, η ροή παρασιτικών νετρονίων μειώνεται κατά μήκος της διάταξης των λεπτών φύλλων, επιβεβαιώνοντας τον παραπάνω ισχυρισμό.

3.2 Πιστοποίηση του χαρακτηρισμού της δέσμης νετρονίων στις χαμηλές ενέργειες μέσω μελέτης της αντίδρασης ¹⁹⁷Au(n,γ)¹⁹⁸Au

Στην ενότητα αυτή θα προσπαθήσουμε να ελέγξουμε την αξιοπιστία του θεωρητικού χαρακτηρισμού της δέσμης νετρονίων στην ενεργειακή περιοχή από 0 έως 6 MeV όπου παρατηρήθηκε σημαντική ροή παρασιτικών νετρονίων.

Για να πιστοποιηθεί η ορθότητα του χαρακτηρισμού της δέσμης νετρονίων για την περιοχή των παρασιτικών νετρονίων είναι απαραίτητη η μελέτη μιας αντίδρασης η οποία έχει μηδενικό ενεργειακό κατώφλι και αρκετά μεγάλη ενεργό διατομή στην ενεργειακή περιοχή αυτή, έτσι ώστε να είναι δυνατή η πειραματική μέτρηση της ροής νετρονίων. Για τον σκοπό αυτό επιλέχθηκε η αντίδραση ¹⁹⁷Au(n,γ)¹⁹⁸Au για την οποία η ενεργός διατομή είναι μεγάλη στην ενεργειακή περιοχή από 0 έως 6 MeV και αμελητέα στην περιοχή της κύριας δέσμης. Σημαντικό, επίσης, είναι και το γεγονός ότι η αντίδραση αυτή είναι εκτενώς μελετημένη στις διεθνείς βιβλιοθήκες ενεργών διατομών.

Αρχικά θα πραγματοποιηθεί ο θεωρητικός υπολογισμός του ρυθμού ενεργοποίησης της αντίδρασης αυτής με τη χρήση της μεθόδου ενεργοποίησης, την οποία χρησιμοποιήσαμε και για την μελέτη της κύριας δέσμης. Θα χρησιμοποιηθούν τα δεδομένα της προσομοίωσης που υπολογίστηκαν μέσω του κώδικα MCNP για τον στόχο Au B του πειράματος και ο υπολογισμός θα πραγματοποιηθεί μέσω της σχέσης:

$$RR = \sum_{\Delta E_i} \sigma_i(E) \cdot \Phi_i(E)$$
 (2.2)

Η ροή νετρονίων που χρησιμοποιήθηκε στη σχέση υπολογίστηκε μέσω της προσομοίωσης και κανονικοποιήθηκε στην τιμή της πειραματικής ροής του πρώτου στόχου της διάταξης (Al A), αξιοποιώντας τα δεδομένα της αντίδρασης ¹⁹⁷Au(n,2n)¹⁹⁶Au για αυτό τον σκοπό. Τα δεδομένα για την ενεργό διατομή της αντίδρασης ¹⁹⁷Au(n,γ)¹⁹⁸Au αντλήθηκαν από την βιβλιοθήκη ENDF/B-VII.1 (USA 2011) [3]. Τα ενεργειακά διαστήματα ΔΕ δεν επιλέχθηκαν αυθαίρετα αλλά ήταν ταυτόσημα με τα αντίστοιχα διαστήματα στα οποία είχε υπολογιστεί η ενεργός διατομή της αντίδρασης. Τα αποτελέσματα του υπολογισμού φαίνονται παρακάτω στον πίνακα 3.4.

Επειδή ο πειραματικός υπολογισμός του ρυθμού ενεργοποίησης της αντίδρασης 197 Au(n, γ) 198 Au εμπεριέχει μεγάλη αβεβαιότητα λόγω της μεγάλης διακύμανσης της ενεργού διατομής συναρτήσει της ενέργειας δεν θα πραγματοποιηθεί άμεση σύγκριση των ρυθμών ενεργοποίησης. Αντί αυτού, θα πραγματοποιήσουμε έναν θεωρητικό υπολογισμό του αριθμού των ακτίνων γ (N $_{\gamma}$) που θα έπρεπε να ανιχνευτούν από έναν ανιχνευτή HPGe χρησιμοποιώντας τον θεωρητικό ρυθμό ενεργοποίησης της αντίδρασης και στην συνέχεια θα συγκρίνουμε την τιμή αυτή με την αντίστοιχη

πειραματική. Για τον υπολογισμό αυτόν θα χρησιμοποιήσουμε τις σχέσεις που παρουσιάστηκαν στην ενότητα 2.8:

$$RR_{i} = \frac{\lambda_{i} \cdot N_{i}(t_{B})}{N_{\tau i}[1 - e^{(-\lambda_{i} \cdot t_{B})}]} \quad (2.3) \quad , \qquad N(t_{B}) = \frac{N_{\gamma}}{\epsilon \cdot I_{\gamma} \cdot f_{c} \cdot D} \quad (2.5)$$

όπου συνδυάζοντάς τες προκύπτει η σχέση υπολογισμού του αριθμού N_{γ} :

$$N_{\gamma} = \varepsilon \cdot I_{\gamma} \cdot f_{c} \cdot D \cdot RR \cdot N_{\tau} \cdot \frac{1 - e^{(-\lambda \cdot t_{B})}}{\lambda}$$
(3.1)

Όπως συμπεραίνουμε, η σχέση αποτελείται κυρίως από πειραματικά υπολογιζόμενους παράγοντες με εξαίρεση τον ρυθμό ενεργοποίησης της αντίδρασης (RR) τον οποίο υπολογίσαμε θεωρητικά μέσω του κώδικα MCNP χρησιμοποιώντας τη μέθοδο της ενεργοποίησης. Τα δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν για τον υπολογισμό φαίνονται στον πίνακα 3.3.

Μέγεθος	Τιμή
3	1.14E-02
I_{γ}	0.96
f_c	0.86
D	2.35E-02
N_{τ}	4.62E+21
λ	2.98E-06
$t_{B}(s)$	93800

Πίνακας 3.3: Οι τιμές των παραμέτρων που χρησιμοποιήθηκαν για τον υπολογισμό του N_{ν}

Με την χρήση των δεδομένων αυτών και του θεωρητικού ρυθμού ενεργοποίησης που υπολογίσαμε προηγουμένως μπορούμε πλέον να υπολογίσουμε το μέγεθος N_{γ} . Συγκεντρωτικά τα αποτελέσματα των παραπάνω υπολογισμών φαίνονται στον πίνακα 3.4.

	MCNP	Πείραμα	Απόκλιση
Poή n (n/cm ² ·s)	3.55E+06	3.02E+06	14.9%
RR	3.44E-20	3.63E-20	5.2%
Νγ	2866	3180	9.9%

Πίνακας 3.4: Σύγκριση των πειραματικών και θεωρητικών τιμών που υπολογίστηκαν για την αντίδραση¹⁹⁷Au(n,γ)¹⁹⁸Au

Παρατηρούμε ότι η θεωρητική εκτίμηση για τον αριθμό των ακτίνων γ είναι λίγο μικρότερη από την πειραματικά προσδιοριζόμενη τιμή. Το αποτέλεσμα αυτό μπορεί να χαρακτηριστεί αναμενόμενο λόγω της μη ακριβούς περιγραφής του πειραματικού περιβάλλοντος στον κώδικα MCNP, καθότι δεν συμπεριλήφθηκε στην προσομοίωση το σύνολο των στοιχείων που αποτελούσαν τη γραμμή ακτινοβόλησης, όπως π.χ. το σύστημα ψύξης της φλάντζας και το σύστημα στήριξης των λεπτών φύλλων. Επίσης, δεν προσομοιώθηκαν και τα υπόλοιπα αντικείμενα που υπήρχαν στο δωμάτιο ακτινοβόλησης καθώς και τα τοιχώματα αυτού. Επομένως είναι αναμενόμενο η πειραματική ροή νετρονίων σε αυτή την ενεργειακή περιοχή να είναι μεγαλύτερη της θεωρητικής λόγω σκεδάσεων των νετρονίων στα στοιχεία που αναφέρθηκαν προηγουμένως.

Συμπερασματικά λοιπόν, η συμφωνία των πειραματικών δεδομένων με τους θεωρητικούς υπολογισμούς εντός εύρους 10% θεωρείται πολύ ικανοποιητική και πιστοποιεί την αξιοπιστία των προσομοιώσεων και της θεωρητικής ενεργειακής κατανομής της δέσμης νετρονίων και στην περιοχή των χαμηλών ενεργειών.

3.3 Εφαρμογές της μεθόδου ενεργοποίησης στις χαμηλές ενέργειες

3.3.1 Μέτρηση ενεργών διατομών αντιδράσεων

Κατά τον πειραματικό προσδιορισμό ενεργών διατομών αντιδράσεων με τη μέθοδο της ενεργοποίησης είναι συχνό φαινόμενο η ροή νετρονίων που μετράμε στον επιλεγμένο στόχο να προέρχεται από διαφορετικές, από την μελετώμενη, αντιδράσεις. Αυτό παρατηρείται όταν χρησιμοποιείται μη μονοϊσοτοπικός στόχος με συνέπεια να ενεργοποιούνται παρασιτικές αντιδράσεις μέσω άλλων ισοτόπων του στοιχείου που αποτελεί τον στόχο. Επομένως, είναι ιδιαίτερα χρήσιμο να μπορούμε να διακρίνουμε το μέρος της συνολικής ροής νετρονίων που συνεισφέρουν οι παρασιτικές αντιδράσεις μετήσουμε την αντίδραση που μας ενδιαφέρει.

Αυτό μπορούμε να το επιτύχουμε χρησιμοποιώντας τη μέθοδο της ενεργοποίησης. Η μέθοδος εφαρμόστηκε για την διόρθωση της ενεργού διατομής της αντίδρασης ¹⁷⁶Hf(n,2n)¹⁷⁵Hf, όπου μελετήθηκε η πιθανή συνεισφορά της αντίδρασης ¹⁷⁴Hf(n,γ)¹⁷⁵Hf χρησιμοποιώντας την θεωρητικά προσδιοριζόμενη ροή νετρονίων στις χαμηλές ενέργειες όπου κυρίως ενεργοποιείται η συγκεκριμένη αντίδραση. Η παραπάνω μέθοδος χρησιμοποιήθηκε κατά την εκπόνηση μεταπτυχιακής διπλωματικής εργασίας και τα αποτελέσματα μπορούν να αναζητηθούν εκεί [14].

3.3.2 Προετοιμασία πειράματος με σκοπό την βαθμονόμηση των φίλτρων CR-39

Κατά την διάρκεια εκπόνησης της παρούσης διπλωματικής εργασίας ήταν προγραμματισμένη η εκτέλεση ενός πειράματος στο ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος" το οποίο περιελάμβανε την ακτινοβόληση με δέσμη νετρονίων των φίλτρων LR115 και CR-39, με σκοπό τη βαθμονόμηση των φίλτρων CR-39 μέσω ανίχνευσης θερμικών νετρονίων και σωματίων α.

Στα πλαίσια της εκτέλεσης του πειράματος αυτού, πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις με τον κώδικα MCNP πριν την έναρξη της ακτινοβόλησης, με σκοπό την εύρεση της βέλτιστης διάταξης για την ομαλή εκτέλεσή του καθώς και για τον προσδιορισμό της χρονικής διάρκειας ακτινοβόλησης.

3.3.2.1 Περιγραφή των φίλτρων LR115 και CR-39

Τα φίλτρα LR115 και CR-39 χρησιμοποιούνται για την ανίχνευση και την δοσιμετρία θερμικών, επιθερμικών και, σε μερικές περιπτώσεις, ταχέων νετρονίων. Τα χαρακτηριστικά τους είναι τα εξής:

- Το φίλτρο LR115, με χημική σύσταση Li₂B₄O₇, αποτελείται από ένα φύλλο πολυεστέρα πάχους 100μm πάνω στο οποίο τοποθετείται ένα λεπτό (12 μm) φύλλο νιτρικής κυτταρίνης (cellulose nitrate) εμπλουτισμένο με λίθιο (Li) και βόριο (B). Η ανίχνευση νετρονίων πάνω στο LR115 γίνεται έμμεσα μέσω ανίχνευσης των σωματίων α που παράγονται μέσω των αντιδράσεων (n,a) στα άτομα Li και B του φύλλου, καθώς τα σωματίδια α αφήνουν ένα ίχνος πάνω σε αυτό το οποίο μπορεί να παρατηρηθεί αργότερα μέσω ειδικού οργάνου.
- Το φίλτρο CR-39 αποτελείται από πολυμερές υλικό (C₁₂H₁₈O₇) και χρησιμοποιείται για την ανίχνευση φορτισμένων σωματιδίων όπως τα σωμάτια α, αλλά η μέθοδος ανίχνευσης διαφέρει σε σχέση με το φίλτρο LR115. Τα φορτισμένα σωματίδια που προσπίπτουν στο φύλλο προκαλούν διάσπαση χημικών δεσμών σε αυτό με αποτέλεσμα την δημιουργία ενός ίχνους το οποίο μπορεί αργότερα να παρατηρηθεί με οπτικό μικροσκόπιο μετά από χημική επεξεργασία των φίλτρων CR-39.

3.3.2.2 Περιγραφή του πειράματος – Επιλογή γεωμετρίας

Όπως αναφέραμε προηγουμένως, για τη βαθμονόμηση των φίλτρων CR-39 είναι απαραίτητη η δημιουργία σωματίων α μέσω των αντιδράσεων ⁶Li(n,a)³H και ¹⁰B(n,a)⁷Li πάνω στο φίλτρο LR115. Κατά τη μελέτη των ενεργών διατομών των δύο αυτών αντιδράσεων (βλ. Παράρτημα A, αντλήθηκαν μέσω της βιβλιοθήκης IRDF-2002/G), παρατηρήθηκε ότι αυτές παρουσιάζουν σημαντικό εύρος στην ενεργειακή περιοχή των θερμικών και επιθερμικών νετρονίων, ενώ οι τιμές τους μειώνονται δραματικά για ταχέα νετρόνια. Επομένως για την επιτυχία του πειράματος θα έπρεπε να επιτευχθεί επιβράδυνση των νετρονίων της δέσμης, τα οποία παράχθηκαν μέσω της αντίδρασης ²H(d,n)³He (D-D) με χρήση του επιταχυντή Tandem Van de Graaff 5.5 MV στο ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος". Για την παραγωγή νετρονίων χρησιμοποιήθηκε η αντίδραση D-D έναντι της D-T λόγω της παραγωγής χαμηλότερης ενέργειας νετρονίων, τα οποία είναι δυνατό να θερμοποιηθούν ευκολότερα, ενώ παράλληλα η παραγόμενη δέσμη παρουσιάζει και μεγαλύτερη ένταση.

Για να επιτύχουμε την μείωση της ενέργειας των νετρονίων, δηλαδή τη θερμοποίηση τους, ήταν απαραίτητη η παρεμβολή ενός κατάλληλου υλικού μεταξύ της δέσμης νετρονίων και του φίλτρου LR115. Το υλικό αυτό αποφασίστηκε να είναι η παραφίνη, το πάχος της οποίας θα έπρεπε να βελτιστοποιηθεί έτσι ώστε να υπάρχει σημαντική ροή θερμικών νετρονίων με όσο το δυνατό χαμηλότερη ροή ταχέων νετρονίων. Η τελευταία όμως θα έπρεπε να μην είναι αμελητέα καθώς μέσω αυτής θα γινόταν ο πειραματικός προσδιορισμός της ροής νετρονίων μέσω κατάλληλων στόχων αναφοράς. Για την διεξαγωγή του πειράματος χρησιμοποιήθηκε δέσμη δευτερίων 2.8 MeV, προερχόμενη από τον επιταχυντή, η οποία κατευθυνόταν σε δοχείο όπου ήταν τοποθετημένο αέριο δευτέριο (gas cell). Μέσω της αντίδρασης D-D παράγονταν νετρόνια ενέργειας 6 MeV, χωρίς την ύπαρξη χαμηλοενεργειακών παρασιτικών νετρονίων στην ενεργειακή κατανομή τους [15]. Με την παραγόμενη δέσμη νετρονίων ακτινοβολήθηκαν οι στόχοι της διάταξης (βλ και σχήμα 3.3), δηλαδή η παραφίνη, τα φίλτρα LR115 και CR-39 καθώς και δύο λεπτά φύλλα ινδίου (In) τα οποία τοποθετήθηκαν πριν και μετά τον όγκο της παραφίνης και χρησιμοποιήθηκαν για τον πειραματικό υπολογισμό της ροής νετρονίων. Το ίνδιο προτιμήθηκε έναντι του αλουμινίου λόγω ύπαρξης κατάλληλων αντιδράσεων αναφοράς με υψηλότερη ενεργό διατομή στην ενεργειακή περιοχή της κύριας δέσμης.



Σχήμα 3.3: Η διάταξη του πειράματος βαθμονόμησης των φίλτρων CR-39 (Η αναλογία των διαστάσεων των στοιχείων που απεικονίζονται δεν αντιστοιχεί στην πραγματικότητα)

Για την εύρεση του βέλτιστου πάχους της παραφίνης πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις της γεωμετρίας του πειράματος με τον κώδικα MCNP για διαφορετικά πάχη. Μελετήθηκαν πάχη παραφίνης από 7.5 έως 15 cm και στο σχήμα 3.4 φαίνεται η ενεργειακή κατανομή της ροής νετρονίων για κάθε περίπτωση. Παρά το γεγονός της υψηλής ροής στα ταχέα νετρόνια τελικά επιλέχθηκε το πάχος των 7.5 cm λόγω της υψηλότερης ροής θερμικών νετρονίων σε σχέση με τις υπόλοιπες περιπτώσεις.



Σχήμα 3.4: Το ενεργειακό φάσμα της ροής νετρονίων συναρτήσει του πάχους της παραφίνης

3.3.2.3 Εκτίμηση αναγκαίας χρονικής διάρκειας του πειράματος

Προϋπόθεση για την επιτυχία του πειράματος ήταν η μέτρηση των ιχνών που δημιούργησαν τα σωμάτια α στα φίλτρα CR-39 της διάταξης. Η μέτρηση αυτή όμως δεν μπορεί να πραγματοποιηθεί όταν τα ίχνη είναι πυκνά κατανεμημένα πάνω στα φίλτρα, με τον αριθμό των 30000 ιχνών ανά cm² του φίλτρου να κρίνεται επιθυμητός για την επιτυχή καταμέτρηση των ιχνών. Για το λόγο αυτό, έπρεπε να καθοριστεί η χρονική διάρκεια έκθεσης των φίλτρων στη δέσμη νετρονίων πριν την εκτέλεση του πειράματος, έτσι ώστε να είναι δυνατή η αξιοποίηση τους.

Ο υπολογισμός αυτός μπορεί να επιτευχθεί αν προσδιοριστεί ο αριθμός των σωματίων α που δημιουργούνται μέσω των αντιδράσεων ⁶Li(n,a)³H και ¹⁰B(n,a)⁷Li που πραγματοποιούνται πάνω στο φίλτρο LR115, κάτι το οποίο είναι δυνατό να μελετηθεί θεωρητικά υπολογίζοντας τον ρυθμό ενεργοποίησης των αντιδράσεων αυτών στον κώδικα MCNP.

Συνεπώς, εφαρμόστηκε η μέθοδος της ενεργοποίησης για την ενεργειακή περιοχή των θερμικών και επιθερμικών νετρονίων, εκτιμώντας ότι τα ικανοποιητικά αποτελέσματα της μεθόδου για την αντίδραση ¹⁹⁷Au(n,γ)¹⁹⁸Au μας επιτρέπουν να πραγματοποιήσουμε μια αρκετά καλή προσέγγιση των ρυθμών ενεργοποίησης. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων φαίνονται στον πίνακα 3.5.

Για τον υπολογισμό του εκτιμώμενου χρόνου ακτινοβόλησης των φίλτρων t_B , θα πρέπει να υπολογιστεί πρώτα ο αριθμός N_{α} των σωματίων α που παράγονται ανά δευτερόλεπτο και ανά cm² στο φίλτρο LR115 και για τις δύο αντιδράσεις που πραγματοποιούνται. Ο αριθμός N_{α} υπολογίζεται μέσω των σχέσεων

$$N_{\alpha} = A \cdot f_{n} \qquad (3.2)$$
$$A = N_{A} \cdot \rho_{LR115} \cdot d_{eff} \cdot \varepsilon \cdot RR \qquad (3.3)$$

όπου A ο αριθμός των σωματίων a που δημιουργούνται ανά εισερχόμενο νετρόνιο και ανά cm² στο φίλτρο LR115, N_A ο αριθμός Avogadro, ρ_{LR115} η πυκνότητα του φίλτρου LR115, d_{eff} το ενεργό μήκος (effective length) των νετρονίων που εισέρχονται στο φίλτρο LR115, ε το ποσοστό των ιχνών των σωματίων a που ανιχνεύονται στο φίλτρο CR-39 σε σχέση με τον συνολικό αριθμό αυτών που παράχθηκαν, RR ο ρυθμός ενεργοποίησης της εκάστοτε αντίδρασης και f_n η ροή νετρονίων ανά δευτερόλεπτο που παρέχει ο επιταχυντής στο ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος" για τη συγκεκριμένη πειραματική διάταξη. Οι τιμές των μεγεθών που χρησιμοποιήθηκαν για τον υπολογισμό του χρόνου ακτινοβόλησης καθώς και τα αποτελέσματα των υπολογισμών για κάθε αντίδραση φαίνονται στον πίνακα 3.5.

Γνωρίζοντας πλέον τον αριθμό N_{α} μπορεί να υπολογιστεί και ο απαιτούμενος χρόνος ακτινοβόλησης t_B μέσω αναλογίας. Επομένως, για την παρατήρηση 30000 ιχνών ανά cm² στο φίλτρο CR-39 απαιτείται χρονικό διάστημα t_B = 5515 s (~ 1.5 h).

Μέγεθος	⁶ Li(n,a) ³ H	$^{10}B(n,a)^{7}Li$	
RR (α/n)	1.32E-24	1.22E-25	
d_{eff} (µm)	5.52	4.06	
$\rho_{LR115} (g/cm^3)$	2.45		
3	0.55		
$f_n(n/s)$	1E+07		
A ($\alpha/n \cdot cm^2$)	4.5E-06	9.4E-07	
$N_{\alpha} (\alpha/s \cdot cm^2)$	4.5	0.94	

Πίνακας 3.5: Τα μεγέθη που χρησιμοποιήθηκαν για τον υπολογισμό του χρόνου ακτινοβόλησης των φίλτρων CR-39

Κατά τη διάρκεια συγγραφής της παρούσης εργασίας δεν είχαν ανακοινωθεί τα αποτελέσματα της καταμέτρησης των ιχνών στα φίλτρα CR-39 που χρησιμοποιήθηκαν κατά την εκτέλεση του πειράματος. Στην περίπτωση κατά την οποία η εκτίμησή μας για τον χρόνο t_B αποδειχθεί ρεαλιστική, τότε θα επιβεβαιωθεί η ορθή λειτουργία της μεθόδου ενεργοποίησης στις χαμηλές ενέργειες νετρονίων.

Κεφάλαιο 4°

Σύνοψη και τελικά συμπεράσματα

4.1 Σύνοψη

Στην παρούσα εργασία πραγματοποιήθηκε χαρακτηρισμός της δέσμης νετρονίων ενέργειας 15.3 MeV, η οποία παράγεται μέσω της αντίδρασης ${}^{3}H(d,n)^{4}He$ στον επιταχυντή Tandem Van de Graaff 5.5 MV του Ινστιτούτου Πυρηνικής και Σωματιδιακής Φυσικής στο ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος". 0 γαρακτηρισμός πραγματοποιήθηκε μέσω προσομοιώσεων εξαιτίας της απουσίας συστήματος παρακολούθησης σωματιδίων σε πραγματικό γρόνο (ToF). Οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν με την συνδυαστική χρήση των κωδίκων MCNP και NeuSDesc. Για την προσομοίωση της παραγόμενης δέσμης νετρονίων χρησιμοποιήθηκε ο κώδικας NeuSDesc, ενώ τα δεδομένα της προσομοίωσης αυτής εισήχθησαν στον κώδικα MCNP για την πραγματοποίηση προσομοιώσεων πλήρους γεωμετρίας.

Για να πιστοποιηθεί η ορθότητα των προσομοιώσεων χρησιμοποιήθηκε η τεχνική της πολλαπλής ενεργοποίησης στόχων, η οποία αποτελεί μια εφαρμογή της μεθόδου ενεργοποίησης. Μελετήθηκαν αντιδράσεις οι οποίες ενεργοποιούνται σε διαφορετικές ενέργειες νετρονίων, στην ενεργειακή περιοχή από 0 εως 10 MeV, στοχεύοντας στη πλήρη μελέτη του ενεργειακού φάσματος των νετρονίων. Πραγματοποιήθηκε σύγκριση θεωρητικών (μέσω της προσομοίωσης) και πειραματικών τιμών ρυθμών ενεργοποίησης των επιλεγμένων αντιδράσεων και διαπιστώθηκε εξαιρετική συμφωνία θεωρητικών και πειραματικών αποτελεσμάτων, με συνέπεια την πιστοποίηση της ορθότητας των προσομοιώσεων.

4.2 Συμπεράσματα και προοπτικές

Μέσω της μελέτης της αντίδρασης D-T στον κώδικα NeuSDesc και της σύγκρισης των εξαγόμενων αποτελεσμάτων με αντίστοιχα αποτελέσματα του κώδικα MCNP, πιστοποιήθηκε η αξιοπιστία του κώδικα NeuSDesc για προσομοιώσεις απλής γεωμετρίας. Εξαιτίας του γεγονότος αυτού συμπεραίνουμε ότι ο κώδικας NeuSDesc μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την περιγραφή της δέσμης στον κώδικα MCNP, μέσω δημιουργίας μιας κάρτας ορισμού πηγής (sdef card).

Με τη συνδυαστική χρήση των δύο κωδίκων και την εφαρμογή της μεθόδου ενεργοποίησης επιτυγχάνουμε εξαιρετική αναπαραγωγή πειραματικών δεδομένων για ενέργειες νετρονίων που αφορούν στην ενεργειακή περιοχή της κυρίως δέσμης. Παράλληλα, η ίδια μέθοδος αποδεικνύεται χρήσιμη και για τη μελέτη της δέσμης νετρονίων στις χαμηλές ενέργειες νετρονίων.

Παρά την εξαιρετική επιτυχία των προσομοιώσεων για τη συγκεκριμένη πειραματική διάταξη, επιβάλλεται ο έλεγχος αξιοπιστίας τους σε υψηλότερες ενέργειες δέσμης δευτερίων, μεγαλύτερες των 4 MeV, όπου και ενεργοποιούνται οι αντιδράσεις διάσπασης του δευτερίου ³H(d,np)²H και ³H(d,2n)³He. Παράλληλα η μέθοδος που χρησιμοποιήθηκε για τον υπολογισμό των ρυθμών ενεργοποίησης μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη διόρθωση αποτελεσμάτων ενεργών διατομών αντιδράσεων (n,2n) οι οποίες "μολύνονται" από αντιδράσεις (n,γ) και (n,3n), όπως συμβαίνει π.χ στις αντιδράσεις ¹⁹³Ir(n,2n)¹⁹²Ir και ¹⁷⁶Hf(n,2n)¹⁷⁵Hf οι οποίες "μολύνονται" από τις αντιδράσεις ¹⁹¹Ir(n,γ)¹⁹²Ir και ¹⁷⁴Hf(n,γ)¹⁷⁵Hf αντίστοιχα.



Ενεργές διατομές των αντιδράσεων που μελετήθηκαν







⁵⁹Co(n,2n)⁵⁸Co^{m+g}



10-5

Incident Energy (MeV)

10-5

10-10

10-5





Βιβλιογραφία

- [1] D. J. Wagenaar, Charged Particle Interactions, 1994
- [2] S. Cierjacks, Neutron Sources For Basic Physics and Applications, Pergamon Press, 1983
- [3] Evaluated Nuclear Data File (ENDF), <u>https://www-nds.iaea.org/exfor/endf.htm</u>
- [4] H. Liskien and A. Paulsen, Neutron production cross sections and energies for the reactions $T(p,n)^3He$, $D(d,n)^3He$ and $T(d,n)^4He$, Nuclear data tables 11, 569-619, 1973
- [5] E. Birgersson and G. Lövestam, *NeuSDesc Neutron Source Description Software Manual*, 2008
- [6] SRIM Textbook, "SRIM The Stopping and Range of Ions in Matter", 2008
- [7] C. H. Poppe, C. H. Nolbrow, and R. R. Borchers, *Neutrons from D+T and D+H*, Physical Review 129, 733, 1963
- [8] MCNP5 Manual Vol. I and II, 2003
- [9] Μ. Λάμπρου, Διπλωματική Εργασία, Τομέας φυσικής ΕΜΠ, 2010
- [10] Α. Καλαμαρά, Μεταπτυχιακή Διπλωματική Εργασία, Τομέας Φυσικής ΕΜΠ, 2013
- [11] J. K. Shultis and R. E. Faw, An MCNP Primer, 2004-2006
- [12] National Nuclear Data Center, <u>http://www.nndc.bnl.gov/</u>
- [13] Experimental Nuclear Reaction Data (EXFOR), <u>https://www-nds.iaea.org/exfor/exfor.htm</u>
- [14] Α. Σπηλιώτης, Μεταπτυχιακή Διπλωματική Εργασία, Τομέας Φυσικής ΕΜΠ, 2015
- [15] R. Vlastou et al., Characterization of the neutron flux distribution at the Athens Tandem Accelerator NCSR "Demokritos", Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 269, 2011