



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ

Ανάπτυξη λογισμικού για τον υπολογισμό της
ενεργειακής και χωρικής κατανομής νετρονίων που
παράγονται μέσω των αντιδράσεων ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$ και
 ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$.

Μεταπτυχιακή Φοιτήτρια:
ΠΑΝΑΓΙΩΤΑ ΓΡΗΓΟΡΙΑΔΟΥ

Επιβλέπων Καθηγητής:
ΝΙΚΟΛΑΟΣ ΠΑΤΡΩΝΗΣ

20 Σεπτεμβρίου 2015

Ευχαριστίες

Ο πρώτος άνθρωπος που θα ήθελα να ευχαριστήσω είναι, ο επιβλέπων της μεταπτυχιακής εργασίας μου, ο Επίκουρος Καθηγητής κ. Νικόλαος Πατρώνης. Η καθοδήγηση του, από την ουσιαστική επίβλεψη της διπλωματικής μου εργασίας, μέχρι τη τελική διόρθωση του κειμένου ήταν πολύτιμη για την πραγματοποίηση της παρούσας εργασίας. Ένα βαθύ ευχαριστώ για την εμπιστοσύνη, την εκτίμηση που μου έδειξε και για την ελευθερία πρωτοβουλιών που με άφησε να αναλάβω σε κάθε στάδιο της συνεργασίας μας.

Επίσης, θέλω να ευχαριστήσω τον Αναπληρωτή Καθηγητή, κ. Ξενοφών Ασλάνογλου, μέλος της εξεταστικής μου επιτροπής, ο οποίος από την αρχή μέχρι το τέλος με μεγάλη προθυμία έδινε τη βοήθεια του. Ακόμη ευχαριστώ τον Αναπληρωτή Καθηγητή, Μιχάλη Κόκκορη ως μέλος της εξεταστικής μου επιτροπής, για την προσεκτική μελέτη και διόρθωση της εργασίας αυτής.

Ιδιαίτερες ευχαριστίες θέλω να απευθύνω στην Καθηγήτρια κ. Ρόζα Βλαστού καθώς και στους μεταπτυχιακούς φοιτητές και υποψήφιους διδάκτορες Αντιγόνη Καλαμαρά, Γεωργία Μαραγγούλη, Θάνος Σταματόπουλος, Ζηνοβία Ελεμέ και Αναστασία Γεωργιάδου, όπου με βοήθησαν μέσα σ' ένα ευχάριστο κλίμα συνεργασίας να αποκτήσω μια ολοκληρωμένη γνώση για τη παραγωγή δεσμών νετρονίων.

Δεν θα μπορούσα να μην ευχαριστήσω τους δικούς μου ανθρώπους. Ευχαριστώ βαθύτατα, την οικογένεια μου για την ενθάρρυνση και την στήριξη, η οποία ήταν πολύτιμη για την πραγματοποίηση της παρούσας μεταπτυχιακής εργασίας. Τέλος, στους δικούς μου ανθρώπους συγκαταλέγονται και οι φίλοι μου, εκτός από τις ουσιαστικές συμβουλές που μου προσέφεραν απλόχερα, ήταν πάνω από όλα, αληθινά δίπλα μου.

Περίληψη

Ο επιταχυντής Tandem 5 MeV T11/25 Van de Graff του Ινστιτούτου Πυρηνικής και Σωματιδιακής Φυσικής (ΙΠΣΦ) του Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. “Δημόκριτος” είναι ένας από τους ελάχιστους επιταχυντές της νότιο-Ανατολικής Ευρώπης, ο οποίος παρέχει υψηλής έντασης ιοντικές δέσμες συνεχούς ρεύματος που χρησιμοποιούνται εκτενώς από την επιστημονική κοινότητα τόσο για βασική έρευνα όσο και για εφαρμογές της Πυρηνικής Φυσικής. Μία από τις δραστηριότητες του εργαστηρίου, που λειτουργεί περισσότερο από 10 χρόνια, είναι και η γραμμή δέσμης νετρονίων.

Δέσμες νετρονίων σε διαφορετικές ενεργειακές περιοχές είναι δυνατόν να παραχθούν από διαφορετικές πυρηνικές αντιδράσεις. Κάποιες από τις πυρηνικές αντιδράσεις που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τη παραγωγή νετρονίων που αποδίδουν καλά καθορισμένες ενέργειες (~ 28) MeV με εφαρμογές σε πολλά πεδία της φυσικής και της τεχνολογίας είναι: ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$, ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$, ${}^3\text{H}(p, n){}^3\text{He}$ και ${}^2\text{H}(d, n){}^4\text{He}$.

Με σκοπό τον πλήρη χαρακτηρισμό της δέσμης νετρονίων στο ΙΠΣΦ του Ε.Κ.Ε.Φ.Ε “Δημόκριτος” στην Αθήνα, στο πλαίσιο της παρούσας εργασίας αναπτύχθηκε το λογισμικό CONY (COmputer code for Neutron Yields calculations) σε γλώσσα προγραμματισμού C++. Στα κεφάλαια που ακολουθούν περιγράφεται αναλυτικά ο τρόπος λειτουργίας του κώδικα, ο οποίος βασίζεται στον υπολογισμό του διπλού διαφορικού ρυθμού παραγωγής νετρονίων μέσω των αντιδράσεων ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$ και ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$ τόσο για λεπτούς όσο και για παχείς στόχους. Ειδικότερα, για την αντίδραση ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$ θα περιγραφεί η τεχνική υπολογισμού του διπλού διαφορικού ρυθμού παραγωγής νετρονίων, κοντά στο ενεργειακό κατώφλι της αντίδρασης αφού πρώτα περιγραφεί ο τρόπος επίλυσης μαθηματικών προβλημάτων στη συγκεκριμένη ενεργειακή περιοχή.

Τέλος κατά την αξιολόγηση των αποτελεσμάτων του κώδικα CONY, που αφορούν τον διπλό διαφορικό ρυθμό παραγωγής νετρονίων, την ενεργειακή κατανομή και τον ολικό αριθμό παραγόμενων νετρονίων, πραγματοποιήθηκε σύγκριση με αποτελέσματα του προγράμματος NeuSDesc - Neutron Source De-

scription που αναπτύχθηκε στο Ινστιτούτο IRMM του Ευρωπαϊκού Κοινού Κέντρο Ερευνών JRC στο Geel του Βελγίου.

Abstract

The neutron beam facility at NCSR "DEMOKRITOS" is driven by 5.5 MV tandem T11/25 Van de Graff accelerator that provides continuous, high intensity ion beams. Depending on the neutron production reaction used, different energy regions of neutron beams are available. Neutron fields with well defined energies are produced by means of nuclear reactions such as: ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$, ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$, ${}^3\text{H}(p, n){}^3\text{He}$ and ${}^2\text{H}(d, n){}^4\text{He}$, delivering neutrons up to the energy of 28 MeV.

In order to fully characterize the neutron beam at NCSR "DEMOKRITOS", in the framework of the present work, the CONY C++ computer code has been developed. The implementation of the code for the ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$ and ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$ reactions is discussed. The method of calculation of differential neutron yields by thin and thick targets is described. Specifically, for the reaction ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$ the mathematical singularity at near threshold energies is discussed along with the method that was used as to overcome this issue. Finally, the results of the code including the double differential neutron yields, the neutron beam energy distribution at the sample position and the total neutron yields have been compared with experimental data as well as with the results of the NeuSDesc software (JRC-IRMM: Neutron Source Description).

Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή	9
1.1	Πηγές νετρονίων	10
1.1.1	Δέσμες νετρονίων “λευκού” ενεργειακού φάσματος	11
1.1.2	Μονοενεργειακές δέσμες νετρονίων από αντιδράσεις	11
1.2	Πειραματικός χαρακτηρισμός δέσμης νετρονίων	14
1.3	Υπολογιστικός χαρακτηρισμός της δέσμης νετρονίων	16
2	Η αντίδραση ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$	18
2.1	Στόχος μεταλλικού Li και η χημική ένωση LiF	19
2.2	Ισχύς Ανασχέσεως και απώλεια ενέργειας ιόντων	19
2.2.1	Απλοί στόχοι και απώλεια ενέργειας	19
2.2.2	Σύνθετοι στόχοι και ο κανόνας του Bragg	22
2.3	Κινηματική της αντίδρασης ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$	23
2.4	Διπλός διαφορικός ρυθμός παραγωγής νετρονίων	25
2.4.1	Διαφορική ενεργός διατομή της αντίδρασης ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$, από τους H. Liskien, A. Paulsen	27
2.4.2	Το πρόβλημα απειρισμού κατά τον υπολογισμό της ροής νετρονίων	28
2.4.3	Αναλυτική εξίσωση Gibbons, Macklin	30
2.5	Ενεργειακή και γωνιακή κατανομή νετρονίων	32
3	Η αντίδραση ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$	36
3.1	Ο στόχος TiT	38

3.2	Η απώλεια ενέργειας στον στόχο	39
3.3	Κινηματική της ${}^3\text{H}(\text{d}, \text{n}){}^4\text{He}$ αντίδρασης	40
3.4	Διαφορική ενεργός διατομή της αντίδρασης	43
3.5	Ενεργειακή και γωνιακή κατανομή νετρονίων	46
4	Αποτελέσματα και έλεγχος του λογισμικού CONY	48
4.1	Σύντομη περιγραφή του κώδικα NeuSDesc	49
4.2	Ενεργειακή κατανομή νετρονίων μέσω της αντίδρασης ${}^7\text{Li}(\text{p}, \text{n}){}^7\text{Be}$	52
4.2.1	Υπολογισμοί παραγωγής νετρονίων κοντά στο ενεργειακό κατώφλι	53
4.2.2	Σύγκριση του λογισμικού CONY και του προγράμματος NeuSDesc για την αντίδραση ${}^7\text{Li}(\text{p}, \text{n}){}^7\text{Be}$	56
4.3	Σύγκριση του λογισμικού CONY με το πρόγραμμα NeuSDesc για την αντίδραση ${}^3\text{H}(\text{d}, \text{n}){}^4\text{He}$	57
5	Συμπεράσματα	58
Παράρτημα Α' Ο κώδικας CONY για την αντίδραση ${}^7\text{Li}(\text{p}, \text{n}){}^7\text{Be}$		
A'.1	Σύντομη περιγραφή του κώδικα	61
A'.2	Η συνάρτηση "differYield"	63
A'.3	Η συνάρτηση "ProtonEnerg" - Η κινηματική της αντίδρασης	65
A'.4	Η συνάρτηση "enLoss" - Ισχύς ανασχέσεως των πρωτονίων εντός του στόχου LiF	66
A'.5	Η συνάρτηση "sigmaem" - Υπολογισμός της διαφορικής ενεργού διατομής	67
A'.6	Αριθμητική ολοκλήρωση	70
Παράρτημα Β' Ο κώδικας CONY για την αντίδραση ${}^3\text{H}(\text{d}, \text{n}){}^4\text{He}$		
B'.1	Η συνάρτηση "differYield"	73
B'.2	Η συνάρτηση "DEnerg" - Η κινηματική της αντίδρασης	75
B'.3	Η συνάρτηση "enLoss" - Ισχύς ανασχέσεως δευτερίου στον στόχο T/Ti	76

B'.4 Η συνάρτηση "sigma cm" - Υπολογισμός της διαφορικής ενεργού διατομής	78
--	----

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

Τα νετρόνια ως ένα εκ των δύο συστατικά του πυρήνα, αποτελούν σπουδαίο αντικείμενο μελέτης από την ανακάλυψη τους μέχρι και σήμερα. Πολλοί είναι οι τομείς της φυσικής και της τεχνολογίας που μελετούν την αλληλεπίδραση νετρονίων με την ύλη. Ειδικότερα, για την Πυρηνική Φυσική η μελέτη του νετρονίου με τον πυρήνα παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον. Η απουσία ηλεκτρικού φορτίου καθιστά το νετρόνιο ιδανικό μέσο μελέτης της δυναμικής του πυρήνα, της δομής του, καθώς και των πυρηνικών αντιδράσεων. Επιπλέον, σημαντικός είναι ο ρόλος της Φυσικής Νετρονίων και στις εφαρμογές της Πυρηνικής Φυσικής που αφορούν στην αστροφυσική, στον σχεδιασμό και στην ασφάλεια αντιδραστήρων, συστημάτων ADS (Accelerator Driven Systems) [2], σε εφαρμογές της ιατρικής κλπ. Το 1938, λίγα μόλις χρόνια από την ανακάλυψη του νετρονίου [1], η μελέτη των πυρηνικών αντιδράσεων οδήγησε τους φυσικούς της εποχής, στην παρατήρηση της πυρηνικής σχάσης ως έναν από τους μηχανισμούς αντιδράσεων που προκαλούνται από νετρόνια. Τα νετρόνια εκτιμήθηκαν σημαντικά από την επιστημονική κοινότητα αμέσως μόλις ανακαλύφθηκε πως οι αλυσιδωτές αντιδράσεις μπορούν να χρησιμοποιηθούν για παραγωγή ενέργειας, αλλά δυστυχώς και για την παραγωγή όπλων. Έκτοτε, ένας σημαντικός αριθμός αντιδραστήρων ισχύος εγκαταστάθηκαν σε πολλά σημεία του πλανήτη μας.

Τις τελευταίες δεκαετίες στις εφαρμογές της ιατρικής, οι δέσμες νετρονίων

χρησιμοποιούνται εκτενώς τόσο στον τομέα της διάγνωσης, όσο και για θεραπευτικούς λόγους. Επίσης σημαντικός είναι ο ρόλος των νετρονίων στις ραδιοβιολογικές μελέτες, στον τομέα της βιομηχανίας, στις εφαρμογές ραδιοϊσότοπων αλλά και στη ραδιογραφία.

Η απουσία του ηλεκτρικού φορτίου στο σωματίδιο του νετρονίου οδήγησε στο εύρος των εφαρμογών που αναφέρθηκαν παραπάνω. Η έλλειψη όμως του ηλεκτρικού φορτίου σε συνδυασμό με τον μικρό χρόνο ημιζωής του εκτός του πυρήνα, καθιστά δύσκολη τόσο την παραγωγή δεσμών νετρονίων, όσο και την ανίχνευση τους. Επομένως, ο χαρακτηρισμός δεσμών νετρονίων των πηγών και των αντιδράσεων που χρησιμοποιούνται για την παραγωγή νετρονίων είναι πολύ σημαντικός. Οι πηγές νετρονίων μπορούν να ταξινομηθούν με διάφορους τρόπους, σύμφωνα με τις εφαρμογές που χρησιμοποιούνται, με την τεχνική με την οποία παράγονται τα νετρόνια ή σύμφωνα με τις ενέργειες των παραγόμενων νετρονίων κτλ. Στις επόμενες παραγράφους του κεφαλαίου αυτού περιγράφονται τα εξής:

- Πηγές Νετρονίων
- Πειραματικός χαρακτηρισμός δέσμης νετρονίων
- Υπολογιστικός χαρακτηρισμός δέσμης νετρονίων.

1.1 Πηγές νετρονίων

Η παραγωγή νετρονίων για ερευνητικούς ή για άλλου είδους εφαρμογές, μπορεί να γίνει με διαφορετικούς τρόπους ανάλογα με την επιθυμητή ενέργεια των νετρονίων, τον μηχανισμό - αντίδραση παραγωγής των νετρονίων και με την διαθέσιμη υποδομή. Σε όλες σχεδόν τις περιπτώσεις, η παραγωγή νετρονίων βασίζεται σε μία ή περισσότερες πυρηνικές αντιδράσεις. Πιο συγκεκριμένα, η πρωτογενής δέσμη φορτισμένων σωματιδίων προσπίπτει σε κατάλληλο στόχο όπου περιέχει το αντίστοιχο ισότοπο ανάλογα με την αντίδραση που χρησιμοποιούμε για την παραγωγή νετρονίων. Ένας βασικός διαχωρισμός έχει να

κάνει με το ενεργειακό φάσμα των παραγόμενων νετρονίων για τη κάθε γωνία εκπομπής.

1.1.1 Δέσμες νετρονίων “λευκού” ενεργειακού φάσματος

Δέσμες νετρονίων “λευκού” ενεργειακού φάσματος μπορούν να παραχθούν με διάφορους μηχανισμούς όπως είναι για παράδειγμα, οι αντιδράσεις θρυμματισμού και κατακερματισμού (spallation - fragmentation reactions) των πυρήνων του στόχου. Σε αυτή την περίπτωση, χρησιμοποιούνται συνήθως στόχοι βαρέων - σταθερών ισωτόπων όπου λόγου του αυξημένου μαζικού αριθμού υπάρχει πλεόνασμα νετρονίων. Το πάχος αυτών των στόχων σε αυτές τις διατάξεις παραγωγής “λευκών” δεσμών νετρονίων είναι μεγάλο, ώστε η παραγωγή νετρονίων να αυξάνει αλλά και το εύρος των ενεργειών των παραγόμενων νετρονίων να καλύπτει όσο το δυνατόν περισσότερες ενέργειες. Παραδείγματα τέτοιων δραστηριοτήτων είναι οι εγκαταστάσεις n-TOF του CERN και η δραστηριότητα LANSCE στο εθνικό εργαστήριο του Λος Άλαμος των Η.Π.Α.

Επίσης νετρόνια “λευκού” ενεργειακού φάσματος παράγονται και από αντιδράσεις (γ, n) , [19] κατά τις οποίες δέσμη ηλεκτρονίων αρκετών δεκάδων MeV βομβαρδίζει στόχο βαρέων μετάλλων. Η τεχνική αυτή για παραγωγή “λευκού” φάσματος δέσμης νετρονίων χρησιμοποιείται από τα εργαστήρια ORELA και GELINA τα οποία βρίσκονται στις Η.Π.Α και στο Βέλγιο αντίστοιχα.

1.1.2 Μονοενεργειακές δέσμες νετρονίων από αντιδράσεις

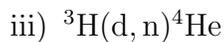
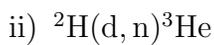
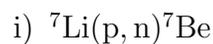
Τα τελευταία πενήντα χρόνια οι μονοενεργειακές (ή ημι-μονοενεργειακές) δέσμες νετρονίων χρησιμοποιούνται κατ' έργο στην Πυρηνική Φυσική. Στην πραγματικότητα οι παραγόμενες δέσμες νετρονίων μέσω πυρηνικών αντιδράσεων δύο σωματιδίων, ακόμη και αν ο πρωτογενής στόχος είναι πολύ λεπτός, δεν είναι απολύτως μονοενεργειακές καθώς υπάρχουν πολλοί παράγοντες που επηρεάζουν

την ενέργεια των παραγόμενων νετρονίων της δέσμης, όπως για παράδειγμα η γεωμετρία της διάταξης, τα δομικά της στοιχεία, το πάχος του στόχου κτλ.

Στη διαδικασία παραγωγής νετρονίων μέσω αντιδράσεων τα ισότοπα του υδρογόνου είναι τα ισότοπα εκείνα που χρησιμοποιούνται συχνότερα είτε μέσω αντιδράσεων, είτε μέσω αντιδράσεων μεταφοράς νουκλεονίων ή αντιδράσεων knock-out. Χαρακτηριστικά παραδείγματα τέτοιων αντιδράσεων είναι η αντίδραση ${}^2\text{H}(d, n){}^3\text{He}$ που συχνά αναφέρεται και ως D-D με τιμή $Q = 3.269 \text{ MeV}$ αλλά και η αντίδραση ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$ γνωστή ως αντίδραση D-T.

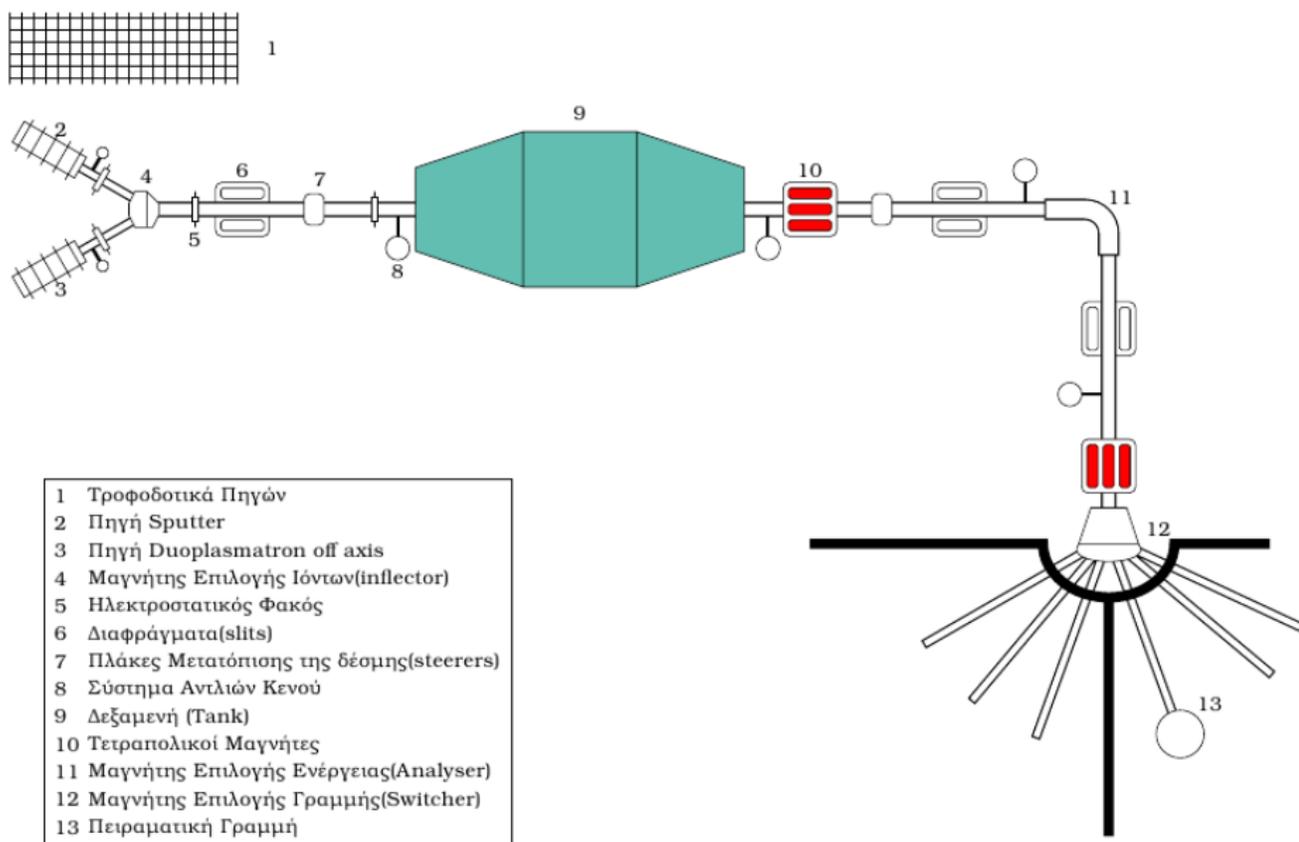
Σε πολλές περιπτώσεις, χρησιμοποιούνται βαρύτεροι πυρήνες όπως στην περίπτωση της αντίδρασης ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$ όπου τα παραγόμενα νετρόνια καλύπτουν διαφορετική ενεργειακή περιοχή λόγω της διαφορετικής τιμής Q όπου για τη συγκεκριμένη αντίδραση είναι $Q = -1.644 \text{ MeV}$. Στην περίπτωση αυτής της αντίδρασης, η δέσμη παραμένει μονοενεργειακή ή ημί-μονοενεργειακή μέχρι την ενέργεια πρωτονίων ίση με 2.4 MeV . Από αυτήν την ενέργεια και για μεγαλύτερες ενέργειες, παράγεται μια δεύτερη ομάδα νετρονίων που αντιστοιχεί στην τροφοδοσία της πρώτης διεγερμένης κατάστασης του ${}^7\text{Be}$. Αντίστοιχα η παραγόμενη δέσμη νετρονίων είναι μονοενεργειακή για την ενεργειακή περιοχή από 200 keV έως 700 keV όπου ακόμη ο παραγόμενος πυρήνας ${}^7\text{Be}$ παραμένει στη βασική κατάσταση.

Για περισσότερα από δέκα έτη, στην Ελλάδα, στις εγκαταστάσεις του ΙΠΣΦ του Ε.Κ.Ε.Φ.Ε “Δημόκριτος” υπάρχει η δραστηριότητα παραγωγής δεσμών νετρονίων. Από τους διάφορους μηχανισμούς παραγωγής νετρονίων που αναφέρθηκαν παραπάνω, οι ημιμονοενεργειακές δέσμες νετρονίων παράγονται μέσω των αντιδράσεων:



Στην δραστηριότητα δεσμών νετρονίων του Ε.Κ.Ε.Φ.Ε “Δημόκριτος” έχουν μέχρι στιγμής χρησιμοποιηθεί οι τρεις αυτές αντιδράσεις για την παραγωγή

δεσμών νετρονίων καλύπτοντας έτσι ένα ενεργειακό φάσμα, από 4 MeV μέχρι 21 MeV.



Σχήμα 1.1: Σχηματική απεικόνιση του επιταχυντή Tandem στο Ε.Κ.Ε.Φ.Ε “Δημόκριτος” [9].

Στο Σχήμα 1.1 εμφανίζονται τα βασικά σημεία του επιταχυντή. Συνοπτικά αναφέρονται τα εξής:

- Οι πηγές ιόντων και τα αντίστοιχα τροφοδοτικά
- Κατάλληλοι μαγνήτες για την κατεύθυνση της δέσμης αλλά και την επιλογή των κατάλληλων ιόντων
- Κατάλληλα διαφράγματα και ηλεκτροστατικοί φακοί

- Κύρια δεξαμενή του επιταχυντή
- Συστήματα κενού
- Πειραματικές γραμμές
- Πειραματικές αίθουσες

Τα ιόντα ανάλογα με το είδος τους, παράγονται σε μία εκ των δύο πηγών στη πηγή sputter ή στη duoplasmatron off axis. Τα βαρέα ιόντα όπως για παράδειγμα το οξυγόνο και ο άνθρακας δημιουργούνται στην πρώτη, ενώ τα ελαφρύτερα ιόντα όπως το υδρογόνο και το δευτέριο στη δεύτερη. Σημειώνεται πως και στις δύο πηγές παράγονται αρνητικά ιόντα με φορτίο $-e$. Έπειτα οδηγούνται στον προ-επιταχυντικό σωλήνα όπου διατηρείται διαφορά δυναμικού κάποιων δεκάδων keV. Στη συνέχεια, τα ιόντα κατευθύνονται στον κύριο επιταχυντικό σωλήνα όπου και βρίσκεται η γεννήτρια Van De Graff με μέγιστη τάση λειτουργίας 5.5 MV. Η άμεση αλλαγή των αρνητικών φορτίων σε θετικά φορτία λόγω της παρουσίας φύλλων άνθρακα, αλλά και η άπωση που οφείλεται στο ηλεκτρικό πεδίο είναι καθοριστική για την επιτάχυνση της δέσμης. Τέλος, με τον μαγνήτη επιλογής ενέργειας (analyzer) ρυθμίζεται η επιθυμητή ενέργεια της μονοενεργειακής δέσμης. Πρέπει να σημειωθεί πως σε όλη τη διαδρομή από τις πηγές μέχρι τους στόχους, διατηρείται υψηλό κενό της τάξης των 10^{-6} mbar, με σκοπό την ελαχιστοποίηση συγχρούσεων των ιόντων με τα μόρια του αέρα που οδηγούν στη μείωση της ενέργειας της δέσμης.

1.2 Πειραματικός χαρακτηρισμός δέσμης νετρονίων

Ο χαρακτηρισμός της δέσμης νετρονίων είναι μια διαδικασία αρκετά πιο πολύπλοκη σε σχέση με τον χαρακτηρισμό της δέσμης φορτισμένων σωματιδίων. Στην περίπτωση των φορτισμένων σωματιδίων, η χρήση οπτικών στοιχείων κατά μήκος της γραμμής μεταφοράς της δέσμης, καθώς επίσης και πλήθος διαγνωστικών οργάνων που βασίζονται στον ιονισμό που προκαλεί η δέσμη ιόντων

ή στην ίδια την εναπόθεση φορτίου, επιτρέπουν το σχετικά εύκολο και ακριβή χαρακτηρισμό της δέσμης.

Στην περίπτωση δεσμών νετρονίων ο χαρακτηρισμός αλλά και η ανίχνευση των νετρονίων είναι αρκετά πιο πολύπλοκη. Υπάρχουν πολλές διαβαθμίσεις ως προς την έννοια του χαρακτηρισμού. Για παράδειγμα, η πληροφορία της ολοκληρωμένης ροής της δέσμης νετρονίων, η ενεργειακή και χωρική κατανομή των εκπεμπόμενων νετρονίων αποτελούν μερικά χαρακτηριστικά δέσμης. Ο χαρακτηρισμός της δέσμης νετρονίων μπορεί να πραγματοποιηθεί είτε πειραματικά είτε υπολογιστικά.

Πειραματικά η πλέον ολοκληρωμένη μέθοδος χαρακτηρισμού της δέσμης νετρονίων είναι αυτή της μεθόδου της μέτρησης χρόνου πτήσης (Time of Flight-TOF).

Ο προσδιορισμός και η ανάλυση των κύριων χαρακτηριστικών της δέσμης νετρονίων επιτυγχάνεται με διάφορους τύπους ανιχνευτών. Σε κάθε περίπτωση όμως, ο ανιχνευτής που θα χρησιμοποιηθεί προς αυτή την κατεύθυνση θα πρέπει να παρουσιάζει καλή χρονική απόκριση ώστε να μπορεί να προσδιοριστεί με ακρίβεια ο χρόνος πτήσης των νετρονίων και κατ' επέκταση οι ενέργειες τους. Με αυτόν τον τρόπο μπορούμε να καταγράψουμε την ενεργειακή κατανομή των νετρονίων της δέσμης με την μεγαλύτερη δυνατή ακρίβεια. Για παράδειγμα οι ανιχνευτές που χρησιμοποιούνται συχνά σε εφαρμογές καταγραφής νετρονίου και διαθέτουν εξαιρετική χρονική απόκριση είναι οι σπινθηριστές NE213, BC501A [5] καθώς επίσης και ο σπινθηριστής Li-glass [7]. Απλώς για την εκτίμηση της πυκνότητας της χωρικής κατανομής των νετρονίων μπορεί να χρησιμοποιηθούν διαφορετικού τύπου ανιχνευτές όπως για παράδειγμα οι ανιχνευτές MicroMegas (Micro Mesh Gaseous Structure) [8] αλλά και πλαστικοί ανιχνευτές ιχνών CR – 39 (SSNTD -Solid State Nuclear Track Detectors) [6].

1.3 Υπολογιστικός χαρακτηρισμός της δέσμης νετρονίων

Βασικό κίνητρο για την πραγματοποίηση της παρούσας εργασίας, αποτελεί ο χαρακτηρισμός της δέσμης νετρονίων στην περίπτωση όπου δεν παρέχεται παλμική δέσμη από επιταχυντή, όπως συμβαίνει στην εγκατάσταση δεσμών νετρονίων του Ε.Κ.Ε.Φ.Ε “Δημόκριτος”. Σε αυτή την περίπτωση ο προσδιορισμός της ενεργειακής κατανομής για κάθε γωνία εκπομπής νετρονίων μέσω της τεχνικής TOF είναι αδύνατος. Επίσης, οποιαδήποτε άλλη τεχνική εφαρμοστεί για τον χαρακτηρισμό της δέσμης νετρονίων επιβάλλει, σε πρώτο στάδιο, τον (κατά τον δυνατόν ακριβή) υπολογισμό των χαρακτηριστικών της δέσμης. Επίσης έστω και αν εφαρμόσουμε τη μέθοδο ενεργοποίησης πολλαπλών στόχων (multiple foil activation analysis), θα πρέπει να πραγματοποιηθεί ο βασικός χαρακτηρισμός της δέσμης νετρονίων. Η ανάπτυξη ενός λογισμικού, υπολογισμού των χαρακτηριστικών της δέσμης νετρονίων, παρέχει τη δυνατότητα με τη χρήση κατάλληλων προγραμμάτων προσομοιώσεων, όπως είναι το GEANT4 [4] και το MCNP [3] την πλήρη περιγραφή της δέσμης. Αυτό βέβαια προϋποθέτει ότι έχει προηγηθεί λεπτομερής υπολογισμός των παραγόμενων νετρονίων όπου τα δεδομένα αυτά θα χρησιμοποιηθούν ως δεδομένα εισόδου στους υπολογισμούς Monte Carlo. Στους υπολογισμούς αυτούς, τα δομικά χαρακτηριστικά της γραμμής νετρονίων αλλά και της πειραματικής περιοχής μπορούν να ληφθούν υπόψη με πολύ μεγάλη ακρίβεια.

Επίσης, ακόμη ένα κίνητρο για την πραγματοποίηση της παρούσας εργασίας, αποτέλεσε το γεγονός της αδυναμίας πρόσβασης του χρήστη στους υπολογισμούς και στον πηγαίο κώδικα των ήδη υπαρχόντων προγραμμάτων. Η αδυναμία επέμβασης στον κώδικα, οδηγεί πολλές φορές σε αδυναμία χρήσης του προγράμματος, δεδομένου ότι σε κάθε εργαστήριο υπάρχουν πολλές φορές ιδιαιτερότητες στην διαδικασία δημιουργίας της δέσμης νετρονίων όπου δεν περιλαμβάνονται πάντα στις επιλογές ενός έτοιμου λογισμικού (π.χ η χρήση ενός ή περισσότερων επιβραδυντών της αρχικής δέσμης ή άλλες κατασκευαστικές ιδιαιτερότητες). Επιπλέον, ενδογενείς δυσκολίες στους υπολογισμούς όπως για

παράδειγμα η ύπαρξη απειρισμών, όπως περιγράφεται στο Κεφάλαιο 2 για την αντίδραση ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$, δεν μπορούν εύκολα να παρακαμφθούν όταν ο χρήστης δεν έχει πρόσβαση στον πηγαίο κώδικα.

Σύμφωνα λοιπόν με τα παραπάνω στα πλαίσια της παρούσας εργασίας δημιουργήθηκε ο κώδικας CONY (COmputer code for Neutron Yield calculations) σε γλώσσα προγραμματισμού C++ για την απόδοση της ενεργειακής και χωρικής κατανομής των παραγόμενων νετρονίων μέσω των αντιδράσεων ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$ και ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$.

Στα κεφάλαια που ακολουθούν περιγράφονται οι υπολογισμοί και η ανάπτυξη του λογισμικού CONY για τις αντιδράσεις που αναφέρθηκαν προηγουμένως. Στη συνέχεια κατά την αξιολόγηση των αποτελεσμάτων του κώδικα CONY πραγματοποιείται ένα είδος σύγκρισης με αυτά του προγράμματος NeuSDesc—Neutron Source Description του Ινστιτούτου IRMM (Institute for Reference Materials and Measurements) το οποίο παρέχει τη δυνατότητα υπολογισμών για όλες τις αντιδράσεις. Τέλος στο τελευταίο κεφάλαιο συνοψίζονται τα συμπεράσματα της παρούσας εργασίας.

Κεφάλαιο 2

Η αντίδραση ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$

Κατά την αντίδραση ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$ ένα πρωτόνιο αλληλεπιδρά με έναν πυρήνα ${}^7\text{Li}$ παράγοντας έναν πυρήνα ${}^7\text{Be}$ και ένα νετρόνιο. Πρόκειται για μια ενδόθερμη αντίδραση με τιμή $Q = -1.644 \text{ MeV}$ και ενέργεια κατωφλίου $E_{th} = 1.881 \text{ MeV}$. Η ύπαρξη του ενεργειακού κατωφλίου πρακτικά σημαίνει, πως για να πραγματοποιηθεί η συγκεκριμένη αντίδραση και επομένως για να έχουμε παραγωγή νετρονίων θα πρέπει η ενέργεια της δέσμης πρωτονίων να είναι μεγαλύτερη από την ενέργεια κατωφλίου. Η συγκεκριμένη αντίδραση μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την παραγωγή μονοενεργειακών δεσμών νετρονίων μέχρι την ενέργεια $E_p = 2.378 \text{ MeV}$. Για ενέργειες βλήματος ίσες και μεγαλύτερες από αυτήν, μια δεύτερη ενεργειακή ομάδα νετρονίων παράγεται, που αντιστοιχεί στη τροφοδοσία της πρώτης διεγερμένης κατάστασης του παραγόμενου πυρήνα ${}^7\text{Be}$ [19]. Στο συγκεκριμένο κεφάλαιο, περιγράφεται η μέθοδος υπολογισμού του διπλού διαφορικού ρυθμού παραγωγής νετρονίων μέσω της αντίδρασης ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$, ενώ ταυτόχρονα παρουσιάζονται σημαντικές πληροφορίες για την αντίδραση. Πιο συγκεκριμένα, περιγράφεται ο τρόπος υπολογισμού της απώλειας ενέργειας του ιόντος στον στόχο, οι κινηματικές εξισώσεις και η διαφορική ενεργός διατομή. Οι συγκεκριμένοι υπολογισμοί, είναι απαραίτητοι για τον υπολογισμό της ενεργειακής και χωρικής κατανομής των νετρονίων, που προκύπτουν από το διπλό διαφορικό ρυθμό παραγωγής νετρονίων (double differential neutron yield).

2.1 Στόχος μεταλλικού Li και η χημική ένωση LiF

Η παραγωγή μονοενεργειακών ή ημιμονοενεργειακών δεσμών νετρονίων μέσω της ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$ μπορεί να γίνει είτε με τη χρήση στόχων μεταλλικού λιθίου ή με στόχους χημικών ενώσεων του λιθίου όπως για παράδειγμα LiF. Η χρήση μεταλλικού λιθίου παρουσιάζει το πλεονέκτημα της αυξημένης παραγωγής νετρονίων αλλά ταυτόχρονα και το μειονέκτημα της χημικής αστάθειας του (ταχεία οξειδωση). Το μεταλλικό λίθιο ${}^7\text{Li}$ είναι ένα από τα πιο δραστικά χημικά στοιχεία, καθώς σε μικρό χρονικό διάστημα της τάξης δευτερολέπτων, οδηγεί σε ανάφλεξη του υλικού [22].

2.2 Ισχύς Ανασχέσεως και απώλεια ενέργειας ιόντων

Οι δυνάμεις Coulomb είναι οι κυρίαρχες δυνάμεις κατά την αλληλεπίδραση των φορτισμένων σωματιδίων με την ύλη. Το φορτισμένο σωματίο αλληλεπιδρά με τα ατομικά ηλεκτρόνια που βρίσκονται στον στόχο, ενώ ταυτόχρονα αλληλεπιδρά και με τον πυρήνα του ατόμου. Κατά τη διαδρομή του ιόντος μέσα στο υλικό οι συνεχόμενες συγκρούσεις που δέχεται οδηγούν στη σταδιακή μείωση της αρχικής κινητικής του ενέργειας και σε περιπτώσεις όπου το πάχος του στόχου είναι αρκετό, έχουμε τον μηδενισμό της αρχικής κινητικής ενέργειας του βλήματος.

2.2.1 Απλοί στόχοι και απώλεια ενέργειας

Ο ρυθμός απώλειας της κινητικής ενέργειας του βλήματος (φορτισμένο σωματίο) ανά μονάδα διαδρομής καλείται **ισχύς ανασχέσεως (Stopping Power)** και έχει ως μονάδες $eV/10^{15}atoms/cm^2$. Άλλες μονάδες μέτρησης για την ισχύ ανασχέσεως που εμφανίζονται στη βιβλιογραφία, είναι MeV/mm ή $MeV/mg/cm^2$ [10].

$$StoppingPower = S = \frac{dE}{dx} \quad (2.1)$$

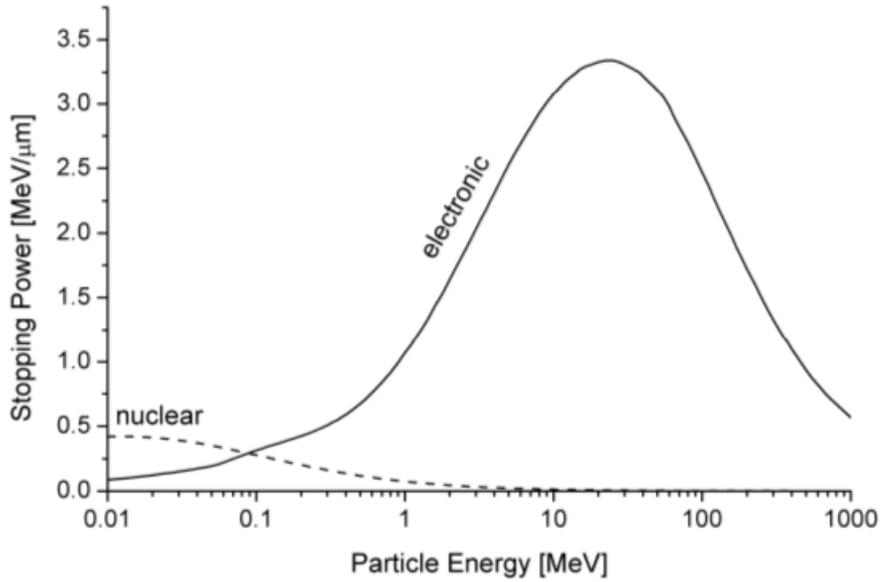
Στην περίπτωση που η κινητική ενέργεια μηδενίζεται μέσα στο υλικό, έχει νόημα να υπολογίζουμε και το **βεληνεκές (Range)**. Το βεληνεκές είναι η συνολική διαδρομή που διήνυσε το σωματίο μέσα στο υλικό μέχρι αυτό να χάσει όλη την ενέργεια του και υπολογίζεται ως εξής [12]:

$$Range = R = \int_0^{E_{max}} \left[\frac{dE}{dx} \right]^{-1} dE. \quad (2.2)$$

Η αλληλεπίδραση, μεταξύ ιόντος και ατομικών ηλεκτρονίων, οδηγεί σε μείωση της κινητικής ενέργειας του βλήματος από συνεχείς σχεδιάσεις και καλείται **Ηλεκτρονιακή Ισχύς Ανασχέσεως (electronic stopping power)**. Η αλληλεπίδραση του ιόντος με τον πυρήνα του ατόμου καλείται **Πυρηνική Ισχύς Ανασχέσεως (nuclear stopping power)** και σε πολλές περιπτώσεις θεωρείται αμελητέα. Οι δύο ποσότητες είναι συγκρίσιμες σε χαμηλές ενέργειες πρόσκρουσης του βλήματος στον στόχο και συνυπολογίζονται για να βρεθεί η ολική απώλεια ενέργειας (energy loss) του ιόντος μέσα στο υλικό. Σε υψηλές ενέργειες μπορεί να θεωρηθεί αμελητέα η πυρηνική ισχύς ανασχέσεως και ο υπολογισμός μόνον της ηλεκτρονιακής ισχύος ανασχέσεως αρκεί για να βρεθεί η ολική απώλεια ενέργειας του ιόντος μέσα στην ύλη (Σχήμα 2.1). Τέλος για πρωτόνια η πυρηνική ισχύς ανασχέσεως, μπορεί να παραλειφθεί σε όλες τις ενέργειες.

$$S_t = S_e + S_{nuclei} \quad (2.3)$$

Για τον υπολογισμό της ισχύος ανασχέσεως χρησιμοποιούνται οι ημιεμπειρικές σχέσεις των Andersen-Ziegler [10] οι οποίες θεωρούνται και οι πλέον αξιόπιστες. Για την συγκεκριμένη αντίδραση οι υπολογισμοί πραγματοποιούνται για ενέργειες πρωτονίου μέσα στην ενεργειακή περιοχή 1 MeV–10 MeV και η ηλεκτρονιακή ισχύς ανασχέσεως δίνεται από την παρακάτω σχέση.



Σχήμα 2.1: Ισχύς ανασχέσεως για διαφορετικές ενέργειες βλήματος.

$$S_e = \frac{A_6}{\beta^2} \left[\ln\left(\frac{A_7\beta^2}{1-\beta^2}\right) - \beta^2 - \sum_{i=0}^{n=4} A_{i+8} \ln(E)^i \right] \quad (2.4)$$

όπου $\beta = \frac{u}{c}$ η σχετική ταχύτητα του βλήματος και οι παράμετροι A_i κάποιες σταθερές καθορισμένες για κάθε υλικό όπου και δίνονται σε μορφή πίνακα. Τέλος η ενέργεια εκφράζεται:

$$E = \frac{\text{Ενέργεια (keV)}}{\text{Μάζα (amu)}} \quad (2.5)$$

Στον πίνακα που ακολουθεί δίνονται όλες οι παράμετροι A_i για τα στοιχεία που θα μελετηθούν.

A_i	Li	F
A_1	1.411	2.085
A_2	1.6	2.352
A_3	725.6	2157
A_4	3013	2634
A_5	0.04578	0.01816
A_6	0.00153	0.004589
A_7	$2.147 \cdot 10^4$	8517
A_8	-0.5831	-5.571
A_9	0.562	2.449
A_{10}	-0.1183	-0.3781
A_{11}	0.009298	0.02483
A_{12}	-0.0002498	-0.0005919

Πίνακας 2.1: Οι παράμετροι A_i για τα στοιχεία λίθιο και φθόριο [10].

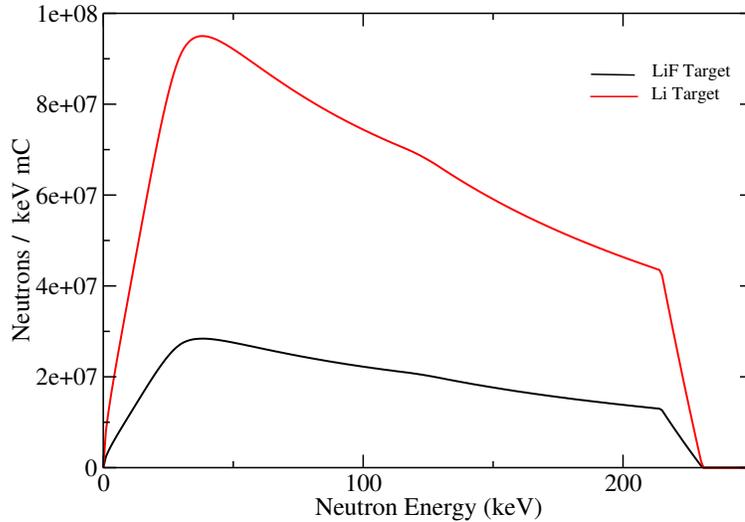
2.2.2 Σύνθετοι στόχοι και ο κανόνας του Bragg

Βασική είναι η χρήση ενός κανόνα για τον υπολογισμό της ισχύος ανασχέσεως σε σύνθετους στόχους. Ο κανόνας του Bragg είναι ένας γραμμικός, αθροιστικός κανόνας που χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό της ολικής ισχύος ανασχέσεως και εκφράζεται ως εξής [10]:

$$S_t = \sum c_i S_i. \quad (2.6)$$

Στην παραπάνω εξίσωση η ολική ισχύς ανασχέσεως δίνεται από το άθροισμα των γινομένων του στοιχείου -ισοτόπου i (c_i) επί της αντίστοιχης ισχύος ανασχέσεως S_i . Λόγω του προσθετικού κανόνα, η απώλεια ενέργειας σε έναν σύνθετο στόχο εμφανίζεται πάντα μεγαλύτερη από την απώλεια ενέργειας σε καθαρούς (χωρίς προσμίξεις) στόχους. Υπολογίζοντας την πυκνότητα των στόχων, (για το LiF έχουμε $p = 2.635 \frac{gr}{cm^3}$), λαμβάνοντας υπόψιν την αντίστοιχη στοιχειομετρία κάθε φορά, το μοριακό βάρος αλλά και το πάχος του στόχου υπολογίζεται η ολική απώλεια ενέργειας (Παράρτημα "Α.4"). Στο σχήμα 2.2, έμμεσα μπορούμε να αντιληφθούμε τον κανόνα του Bragg από την ενεργειακή κατανομή των εκπεμπόμενων νετρονίων στις περιπτώσεις όπου ο στόχος αποτελείται από

μεταλλικό και φθοριούχο λίθιο. Η διαφορά μεταξύ των δύο κατανομών οφείλεται σε μεγάλο βαθμό στο διαφορετικό ποσό ενέργειας που χάνει το πρωτόνιο μέσα στους δύο στόχους, με αποτέλεσμα να εκπέμπονται στις ίδιες ενέργειες λιγότερα νετρόνια όταν ο στόχος παρουσιάζει προσμίξεις.



Σχήμα 2.2: Ενεργειακή κατανομή νετρονίων. Πρωτόνια ενέργειας 2000 keV, προσκρούουν σε λεπτό (20 μm) στόχο μεταλλικού λιθίου (κόκκινο) και σε στόχο φθοριούχου λιθίου (μαύρο).

Πρέπει να σημειωθεί πως οι υπολογισμοί δεν περιέχουν στατιστικούς υπολογισμούς Monte Carlo και δεν μελετάται το φαινόμενο του ενεργειακού και γωνιακού διασκεδασμού (energy - angular straggling) (Κεφάλαιο 4). Οι υπολογισμοί της απώλειας της κινητικής ενέργειας κατά μήκος της διαδρομής του πρωτονίου στο υλικό του στόχου έγιναν με βήμα $\sim 0.1 \mu\text{m}$.

2.3 Κινηματική της αντίδρασης ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$

Οι εξισώσεις που περιγράφουν την κινηματική της αντίδρασης, είναι μη σχετικιστικές εξισώσεις και εκφράζονται με βάση τις παραμέτρους A, B, C και D. Σημειώνεται ότι $m_1 = m_p$, $m_2 = m_{Li}$, $m_3 = m_n$, $m_4 = m_{Be}$ [14].

$$\begin{aligned}
A &= \frac{m_1 m_4 \left(\frac{E_1}{E_T}\right)}{(m_1+m_2)(m_3+m_4)} \\
B &= \frac{m_1 m_3 \left(\frac{E_1}{E_T}\right)}{(m_1+m_2)(m_3+m_4)} \\
C &= \frac{m_2 m_3}{(m_1+m_2)(m_3+m_4)} \left(1 + \frac{m_1 Q}{m_2 E_T}\right) = \frac{E'_4}{E'_T} \\
D &= \frac{m_2 m_4}{(m_1+m_2)(m_3+m_4)} \left(1 + \frac{m_1 Q}{m_2 E_T}\right) = \frac{E'_3}{E'_T}
\end{aligned}$$

Για δεδομένη ενέργεια πρωτονίου (E_p) και γωνία εκπομπής του νετρονίου, υπολογίζεται η εκπεμπόμενη ενέργεια του νετρονίου (ελαφρύ σωματίο).

$$\begin{aligned}
E_n &= E_T [B + D + 2(AC)^{1/2} \cos \theta] \\
&= B E_T [\cos \psi \pm \left(\frac{D}{B} - \sin^2 \psi\right)^{1/2}]^2
\end{aligned} \tag{2.7}$$

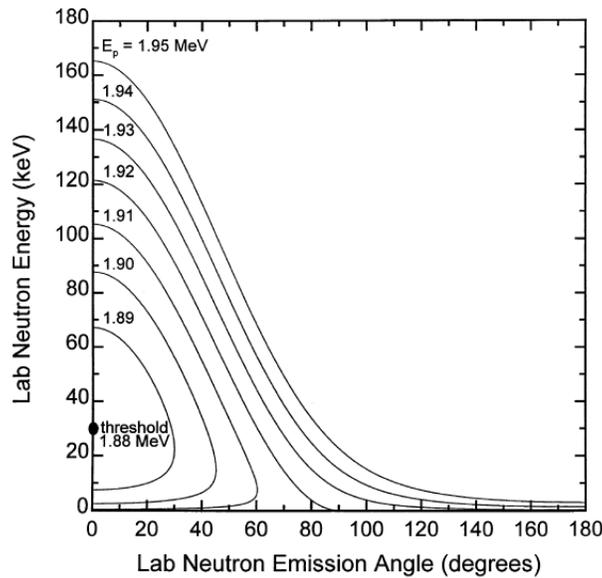
$$E_{Be} = E_T - E_n \tag{2.8}$$

όπου $E_T = E_p + Q$ και η ποσότητα Q εκφράζεται αντίστοιχα $Q = (m_p + m_{Li} - m_n - m_{He})c^2$. Επίσης η γωνία ψ αναφέρεται στη γωνία εκπομπής νετρονίου στο σύστημα εργαστηρίου, και η θ στο σύστημα κέντρου μάζας. Επιλέγεται η θετική λύση για την ενέργεια νετρονίου εκτός της περίπτωσης όπου $B > D$, $\psi_{max} = \sin^{-1} \sqrt{\frac{D}{B}}$.

Υπενθυμίζεται, πως το σημείο 1.88 MeV αποτελεί το ενεργειακό κατώφλι της συγκεκριμένης αντίδρασης. Καθώς η δέσμη πρωτονίου διέρχεται εντός του στόχου λιθίου χάνει συνεχώς ενέργεια. Στο Σχήμα 2.3 δίνεται η εξάρτηση της ενέργειας νετρονίων σε σχέση με την γωνία εκπομπής για διαφορετικές ενέργειες βλήματος. Στις περιπτώσεις εκείνες όπου το πάχος του στόχου είναι αρκετό ώστε η ενέργεια του πρωτονίου να μειωθεί σε τιμή κάτω από την ενέργεια κατωφλίου τότε αναφερόμαστε στην παραγωγή νετρονίων μέσω της διάταξης παχύ στόχου ("thick target"). Η συνεχόμενη μείωση της κινητικής ενέργειας του πρωτονίου μέσα στον στόχο οδηγεί τη γωνιακή και ενεργειακή κατανομή να εμφανίζει συγκεκριμένη συμπεριφορά. Για έναν παχύ στόχο, θα παραχθούν νετρόνια με ενέργειες και γωνίες που αντιστοιχούν σε ενέργειες πρωτονίου κάτω από την ενέργεια E_{p0}^* (αρχική ενέργεια πρωτονίου). Όπως φαίνεται και

από το Σχήμα 2.3 κάτω από μια συγκεκριμένη ενέργεια πρωτονίου, προκύπτουν δύο λύσεις για την κινητική ενέργεια των νετρονίων και τη γωνία εκπομπής τους ($< 90^\circ$). Όταν ισχύει ($E_p \geq E_p^*$) τότε η λύση είναι μονή ενώ όταν ($E_p < E_p^*$) η λύση εμφανίζεται ως διπλή. Η τιμή της ενέργειας πρωτονίου όπου για μικρότερες έχουμε διπλή λύση στην εξίσωση προσδιορισμού της κινητικής ενέργειας των νετρονίων είναι:

$$E_p^* = \frac{m_{Be}(m_{Be} + m_n - m_p)}{m_{Be}(m_{Be} + m_n - m_p) - m_p m_n} E_{th} = 1.92 \text{ MeV}. \quad (2.9)$$



Σχήμα 2.3: Ενέργεια πρωτονίου για παχύ στόχο Li [21].

2.4 Διπλός διαφορικός ρυθμός παραγωγής νετρονίων

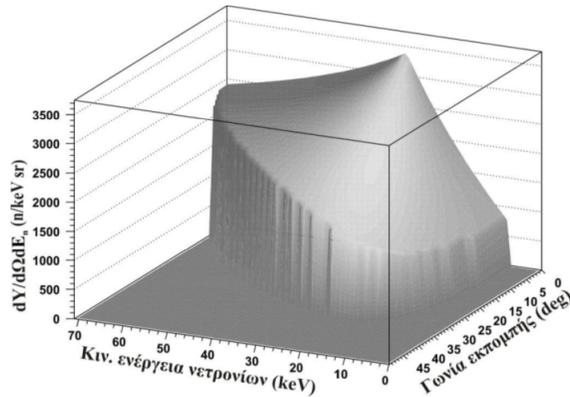
Ο διπλός διαφορικός ρυθμός παραγωγής νετρονίων, αποδίδει τον αριθμό νετρονίων που παράγονται για συγκεκριμένη αρχική ενέργεια δέσμης πρωτονίων

και πάχος στόχου για κάθε ενέργεια. Η μαθηματική αναπαράσταση του διπλού διαφορικού ρυθμού παραγωγής δίνεται μέσω της σχέσης (2.10). Ο αριθμός της ολικής ροής νετρονίων (*neutrons/mC*) προκύπτει ολοκληρώνοντας την παρακάτω σχέση ως προς τη στερεά γωνία και ταυτόχρονα ως προς την ενέργεια νετρονίου (Παράγραφος 2.5) [21]:

$$\frac{d^2Y}{d\Omega dE_n}(\theta, E_n) = \frac{f_{7\text{Li}} N_0}{e A_{\text{eff}}} \frac{d\sigma_{pn}}{d\Omega'} \frac{d\Omega'}{d\Omega} \frac{dE_p}{dE_n} \quad (2.10)$$

Ο παράγοντας $f_{7\text{Li}}$ αντιστοιχεί στο ποσοστό των πυρήνων ${}^7\text{Li}$ που υπάρχουν στον στόχο μεταλλικού λιθίου και είναι ίσος με 92.5%. Οι υπόλοιποι παράγοντες N_0 , e και A_{eff} είναι ο αριθμός Avogadro, το φορτίο ηλεκτρονίου και το ατομικό (ή μοριακό) βάρος του μεταλλικού (ή της ένωσης) λιθίου. Ο παρονομαστής αναφέρεται στην ολική ισχύ ανασχέσεως (Παράγραφος 2.2) και ο όρος $\frac{d\sigma_{pn}}{d\Omega'}$ αφορά τη διαφορική ενεργό διατομή της αντίδρασης στο σύστημα κέντρου μάζας. Οι εκφράσεις $d\Omega$ και $d\Omega'$ εκφράζουν τη διαφορική στερεά γωνία στο σύστημα εργαστηρίου και στο σύστημα κέντρου μάζας αντίστοιχα και ο όρος $\frac{dE_p}{dE_n}$ προκύπτει από μια διαφορίση της κινηματικής εξίσωσης.

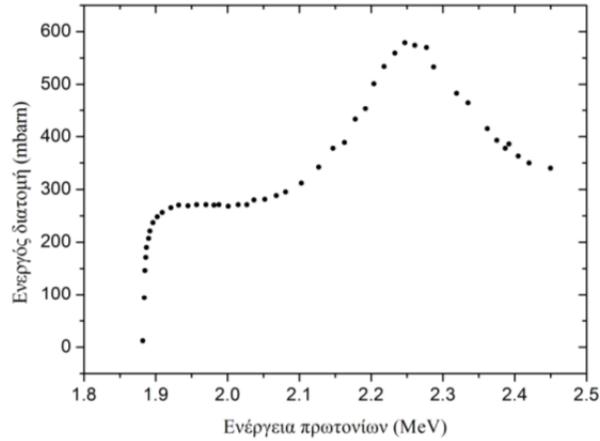
Στο σχήμα 2.4 δίνεται ένα παράδειγμα γραφικής αναπαράστασης του διπλού διαφορικού ρυθμού παραγωγής νετρονίων για συγκεκριμένες συνθήκες.



Σχήμα 2.4: Διπλή διαφορική ενεργός διατομή της αντίδρασης ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$ με στόχο καθαρού λιθίου. Η κατανομή αντιστοιχεί σε ακτινοβολία 30keV. [22].

2.4.1 Διαφορική ενεργός διατομή της αντίδρασης ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$, από τους H. Liskien, A. Paulsen

Η ολική ενεργός διατομή της αντίδρασης ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$ όπως φαίνεται και στο Σχήμα 2.5 παρουσιάζεται υψηλή, γεγονός που καθιστά την αντίδραση αυτή, σημαντική για την παραγωγή δέσμης νετρονίων. Συγκεκριμένα, η τιμή της φτάνει στα 270 mb κοντά στην ενέργεια κατωφλίου και για ενέργεια πρωτονίου 2.25 MeV αγγίζει τα 580 mb.



Σχήμα 2.5: Η ολική ενεργός διατομή της αντίδρασης ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$.

Η διαφορική ενεργός διατομή (differential cross section) υπολογίζεται από μία εξίσωση πολυωνυμικής μορφής (πολυωνύμων Legendre) που δίνεται από τους H. Liskien & A. Paulsen [15]. Η συγκεκριμένη μέθοδος υπολογισμού διαφορικής ενεργού διατομής των (p, n) και (d, n) αντιδράσεων, είναι μία από τις πιο αξιόπιστες και σχετικά εύχρηστες εξισώσεις συνοδευόμενες από δεδομένα σε μορφή πίνακα. Η εξίσωση αποδίδει την διαφορική ενεργό διατομή στο σύστημα κέντρου μάζας ως εξής:

$$\frac{d\sigma_{pn}}{d\Omega'} = \frac{d\sigma_{pn}(0^\circ)}{d\Omega'} \sum_{i=0}^{i=3} A_i(E_p) P_i(\cos \theta'). \quad (2.11)$$

Οι παράμετροι A_i και η διαφορική ενεργός διατομή σε 0° ($\frac{d\sigma_{pn}(0^\circ)}{d\Omega'}$) δίνονται από τους H. Liskien & A. Paulsen σε πίνακες για κάθε ενέργεια πρωτονίου εντός της ενεργειακής περιοχής των 20 keV-10 MeV. Δεδομένου ότι η παραμετροποίηση της διαφορικής ενεργού διατομής σε πίνακες περιλαμβάνει τιμές για συγκεκριμένες ενέργειες πρωτονίων, έπρεπε να δημιουργηθεί το κατάλληλο πρόγραμμα που θα προσδιορίζει με βάση τους πίνακες της αναφοράς [15], την αντίστοιχη παραμετροποίηση για κάθε τιμή της ενέργειας πρωτονίου. Προς αυτή την κατεύθυνση, χρησιμοποιήθηκε η τεχνική spline-fit [31] όπου επιτρέπει τον προσδιορισμό πολυωνύμων Legendre για ενδιάμεσες τιμές (interpolation).

2.4.2 Το πρόβλημα απειρισμού κατά τον υπολογισμό της ροής νετρονίων

Για μια πιο ειδική μελέτη της αντίδρασης κοντά στο ενεργειακό κατώφλι, είναι αναγκαίο να εισάγουμε δύο ακόμα κινηματικές παραμέτρους που προέρχονται από μη σχετικιστικές εξισώσεις ορμής και ενέργειας [21]. Οι τελευταίες εμπεριέχονται στους υπολογισμούς της διπλής αυτής διαφορικής μορφής και κατ'επέκταση στον υπολογισμό της συνολικής ροής νετρονίων. Καλούνται ως γ και ξ και έχουν την παρακάτω μορφή:

$$\gamma = \sqrt{\frac{m_p m_n}{m_{Be}(m_{Be} + m_n - m_p)} \left(\frac{E_p}{E_p - E_{th}} \right)} \quad (2.12)$$

$$\xi^2 = \frac{1}{\gamma^2} - \sin^2 \theta \quad (2.13)$$

Η διαφορική ενεργός διατομή $\frac{d\sigma_{pn}}{d\Omega'}$ είναι εν γένει μια συνάρτηση στο σύστημα κέντρου μάζας, συνεπώς άμεσο μέλημα είναι η εύρεση της αντίστοιχης γωνίας εργαστηρίου στην οποία εκπέμπονται τα νετρόνια. Έχοντας υπολογίσει την ενέργεια E_p^* κάτω από την οποία εμφανίζεται η διπλή λύση, οι σχέσεις που ισχύουν για τις γωνίες στο σύστημα κέντρου μάζας είναι οι ακόλουθες:

$$\theta'_1 = \theta + \sin^{-1}(\gamma \sin \theta), \quad (2.14)$$

$$\theta'_2 = \pi + \theta - \sin^{-1}(\gamma \sin \theta). \quad (2.15)$$

Η γωνία θ'_1 αντιστοιχεί σε νετρόνια που εκπέμπονται στην εμπρόσθια διεύθυνση, με μεγαλύτερη κινητική ενέργεια, ενώ η γωνία θ'_2 αφορά μεγαλύτερες γωνίες και μικρότερες ενέργειες εκπομπής νετρονίων. Στο σύστημα κέντρου μάζας η ενέργεια νετρονίου ορίζεται από την εξίσωση:

$$E'_n = \frac{m_{Be}(m_{Be} + m_n - m_p)}{(m_{Be} + m_n)^2} (E_p - E_{th}). \quad (2.16)$$

Στην περίπτωση όπου ενέργεια πρωτονίου είναι μικρότερη από την E_p^* εμφανίζεται η διπλή λύση, θα επιλεγθεί η θ'_1 εφόσον ισχύει η ανισότητα $E_n \geq E_{equal}$ όπου

$$E_{equal} = (1 + \gamma^2)E'_n. \quad (2.17)$$

Σε διαφορετική περίπτωση, όταν ισχύει $E_n < E_{equal}$ τότε επιλέγεται η θ'_2 γωνία εκπομπής στο σύστημα κέντρου μάζας. Σημαντική είναι η χρήση της Ιακωβιανής συνάρτησης (Jacobian transformations), με την οποία γίνεται η μετατροπή της διαφορικής ενεργού διατομής από το σύστημα κέντρου μάζας στο σύστημα εργαστηρίου.

$$\frac{d\Omega'}{d\Omega} = \pm \frac{\gamma}{\xi} (\cos \theta \pm \xi)^2. \quad (2.18)$$

Τέλος, με τον υπολογισμό του όρου $\frac{dE_p}{dE_n}$ θεωρητικά έχουμε όλα τα απαραίτητα στοιχεία για τον υπολογισμό του διπλού διαφορικού Εξίσωση (2.10) και κατ' επέκταση της ροής νετρονίων. Το πρόσημο + αντιστοιχεί στη γωνία $\theta' = \theta'_1$ και το πρόσημο - αφορά την περίπτωση όπου $\theta' = \theta'_2$.

$$\frac{dE_p}{dE_n} = \frac{1}{\cos \theta \pm \xi} \left[\frac{(m_{Be} + m_n)^2 E_p \xi}{m_p m_n E_p \xi (\cos \theta \pm \xi) \pm m_{Be} (m_{Be} + m_n - m_p) E_{th}} \right] \quad (2.19)$$

Δύο προβλήματα εμφανίζονται κατά τον υπολογισμό του συνολικού αριθμού

εκπεμπόμενων νετρονίων. Το πρώτο εμφανίζεται στη γειτονιά της μέγιστης τιμής θ_{max} όπου απειρίζεται ο όρος $\frac{d\Omega'}{d\Omega} \rightarrow \infty$ και ταυτόχρονα ισχύει $\frac{dE_p}{dE_n} \rightarrow 0$. Το δεύτερο πρόβλημα απειρισμού που παρουσιάζεται και είναι δυσκολότερο ως προς την επίλυση του, είναι το όριο $E_p \rightarrow E_{th}$ και θα μελετηθεί στην επόμενη ενότητα. Πιο συγκεκριμένα όταν $\theta = \theta_{max}$ ο αριθμητής στην Εξίσωση (2.10) (υπενθυμίζεται παρακάτω) για την απόδοση νετρονίων οδηγεί σε απροσδιοριστία καθώς ισχύει ο συνδυασμός $\frac{d\Omega'}{d\Omega} \rightarrow \infty$, $\frac{dE_p}{dE_n} \rightarrow 0$.

$$\frac{d^2Y}{d\Omega dE_n}(\theta, E_n) = \frac{f_{7Li} N_0}{e A_{eff}} \frac{\frac{d\sigma_{pn}}{d\Omega'} \frac{d\Omega'}{d\Omega} \frac{dE_p}{dE_n}}{-\frac{1dE_p}{pd_x}}$$

. Με σκοπό την άρση της απροσδιοριστίας αρχικά θεωρούμε το γινόμενο των δύο αυτών όρων και στη συνέχεια το όριο να τείνει στην τιμή της γωνίας θ_{max} :

$$\frac{dE_p}{dE_n} \frac{d\Omega'}{d\Omega} = \frac{\pm(m_{Be} + m_n)^2(\cos\theta \pm \xi)\gamma E_p}{m_p m_n E_p \xi(\cos\theta \pm \xi) \pm m_{Be}(m_{Be} + m_n - m_p)E_{th}} \quad (2.20)$$

$$\lim_{\theta \rightarrow \theta_{max}} \frac{d\Omega'}{d\Omega} \frac{dE_p}{dE_n} = \frac{(m_{Be} + m_n)^2 E_p}{m_{Be}(m_{Be} + m_n - m_p)E_{th}} \sqrt{\gamma^2 - 1} \quad (2.21)$$

Το πρόβλημα που δημιουργεί η γωνία, πολύ εύκολα επιλύεται θεωρώντας σε όλους τους υπολογισμούς του διπλού διαφορικού για τη ροή νετρονίων τον παράγοντα $\frac{dE_p}{dE_n} \frac{d\Omega'}{d\Omega}$ σαν ενιαίο όρο με το όριο αυτού να οδηγεί σε μια πεπερασμένη τιμή και όχι σε απροσδιοριστία. Επομένως το πρόβλημα της απροσδιοριστίας αίρεται όταν ο υπολογισμός γίνεται για το γινόμενο των δύο όρων αντί για τον επιμέρους υπολογισμό του κάθε όρου ξεχωριστά (Σχέση (2.21)).

2.4.3 Αναλυτική εξίσωση Gibbons, Macklin

Κοντά στο ενεργειακό κατώφλι της αντίδρασης (1.88 MeV), η μέθοδος υπολογισμού των Liskien, Paulsen δεν είναι εφαρμόσιμη για τον υπολογισμό της διαφορικής ενεργού διατομής, διότι η συγκεκριμένη μέθοδος αφορά ενέργειες πρωτονίου μέσα στην περιοχή 1.95-7.0 MeV. Επίσης, η παράμετρος γ η οποία εμπεριέχεται σε όλους τους υπολογισμούς του διπλού διαφορικού ρυθμού πα-

ραγωγής νετρονίων, για την οριακή τιμή όπου $E_p \rightarrow E_{th}$ απειρίζεται. Κρίνεται λοιπόν αναγκαία, η εύρεση μιας εναλλακτικής λύσης κοντά στην περιοχή του κατώφλιου 1.88-1.94 Mev με σκοπό τον υπολογισμό της διαφορικής ενεργού διατομής.

Η λύση στο πρόβλημα αυτό δόθηκε από τους Gibbons και Macklin και δεν ήταν η μοναδική σύμφωνα με τις αναφορές [16] - [20]. Πρόκειται για μία αναλυτική μορφή που αποδίδει τη διαφορική ενεργό διατομή στο σύστημα κέντρου μάζας ειδικά για την περιοχή του ενεργειακού κατώφλιου. Η θεωρητική αυτή λύση εμφανίζεται ως εξής:

$$\frac{d\sigma_{pn}}{d\Omega'} = A \frac{x}{E_p(1+x)^2}, \quad (2.22)$$

όπου με $x = \frac{\Gamma_n}{\Gamma_p}$ συμβολίζεται ο λόγος του πλάτους του νετρονίου προς το πλάτος του πρωτονίου. Η ποσότητα x εμφανίζει συναρτησιακή συμπεριφορά στη μικρή ενεργειακή περιοχή κοντά στο κατώφλι της αντίδρασης και εκφράζεται ως

$$x = C_0 \sqrt{1 - \frac{E_{th}}{E_p}}.$$

Οι σταθερές C_0 , A παίρνουν συγκεκριμένες τιμές με σκοπό οι θεωρητικές σχέσεις και τα πειραματικά δεδομένα να εμφανίζουν συμφωνία. Συνεπώς οι θεωρητικές και οι πειραματικές τιμές συμφωνούν όταν θέσουμε την παράμετρο $A = 194.913 \text{ mb/MeV} \cdot \text{sr}$ και $C_0 = 6$. Έχοντας την αναλυτική μορφή για τη διαφορική ενεργό διατομή, τις σταθερές παραμέτρους C_0 , A και συνδυάζοντας τις εξισώσεις (2.19), (2.22) και (2.18) παίρνουμε τη μεγάλη αλλά πολύ σημαντική μορφή που ακολουθεί [21]:

$$\frac{d\sigma_{pn}}{d\Omega'} \frac{d\Omega'}{d\Omega} \frac{dE_p}{dE_n} = \pm \frac{AC_0(m_{Be} + m_n)^2 (\cos \theta \pm \xi) \sqrt{m_p m_n / m_{Be} (m_{Be} + m_n - m_p)}}{(1+x)^2 [m_p m_n E_p \xi (\cos \theta \pm \xi) \pm m_{Be} (m_{Be} + m_n - m_p) E_{th}]}, \quad (2.23)$$

για ενέργειες πρωτονίων πολύ κοντά στο ενεργειακό κατώφλι. Εύκολα παρατηρούμε πως για το όριο $E_p \rightarrow E_{th}$ το γινόμενο δίνει έναν πεπερασμένο αριθμό,

μια μη μηδενική τιμή.

$$\lim_{E_p \rightarrow E_{th}} \frac{d\sigma_{pn}}{d\Omega'} \frac{d\Omega'}{d\Omega} \frac{dE_p}{dE_n} = \frac{AC_0(m_{Be} + m_n)^2 \sqrt{m_p m_n / m_{Be}(m_{Be} + m_n - m_p)}}{m_{Be}(m_{Be} + m_n - m_p)E_{th}}. \quad (2.24)$$

Συμπερασματικά, μπορούμε να πούμε πως είναι αναγκαίο στην ενεργειακή περιοχή κοντά στην ενέργεια κατωφλίου, να θεωρήσουμε διαφορετική παραμετροποίηση για τη διαφορική ενεργό διατομή από αυτήν που δίνεται από τους Liskien, Paulsen. Η αναλυτική μέθοδος για τη διαφορική ενεργό διατομή κατάλληλα συνδυασμένη σ' έναν ενιαίο παράγοντα (2.24), αποδίδει μια πεπερασμένη τιμή η οποία είναι αναγκαία κατά τον υπολογισμό της απόδοσης νετρονίων της αντίδρασης. Όλα τα μεγέθη για ενέργειες “κοντά” και “μακριά” από το ενεργειακό κατώφλι της αντίδρασης, είναι πλέον υπολογίσιμα με τις παραπάνω τεχνικές που παρουσιάστηκαν στις προηγούμενες παραγράφους. Μένει η διπλή ολοκλήρωση της σχέσης (2.10), ως προς τη γωνία και την ενέργεια εκπομπής νετρονίου, για τον υπολογισμό της συνολικής ροής νετρονίων από την ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$ αντίδραση.

2.5 Ενεργειακή και γωνιακή κατανομή νετρονίων

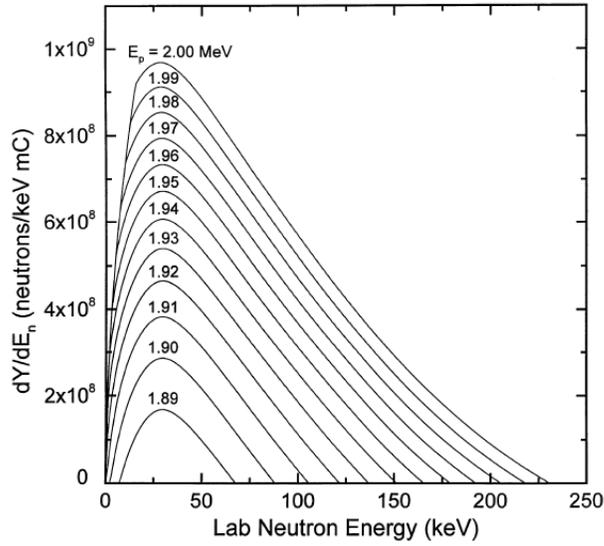
Ξεκινώντας από τη σχέση,

$$\frac{d^2Y}{d\Omega dE_n}(\theta, E_n) = \frac{f_{Li} N_0}{e A_{eff}} \frac{d\sigma_{pn}}{d\Omega'} \frac{d\Omega'}{d\Omega} \frac{dE_p}{dE_n} - \frac{1 dE_p}{pd_x}$$

και ολοκληρώνοντας ως προς τη γωνία θ προκύπτει η ενεργειακή κατανομή. Τα όρια ολοκλήρωσης επιλέγονται για δεδομένη γεωμετρία, που εκφράζεται κάθε φορά από την τιμή της μέγιστης γωνίας εκπομπής και ταυτόχρονα από τη γωνία ανίχνευσης των νετρονίων.

$$\frac{dY}{dE_n}(E_n) = 2\pi \int_0^{\theta_{max}(E_{p0})} \frac{d^2Y}{d\Omega dE_n}(\theta, E_n) \sin \theta d\theta. \quad (2.25)$$

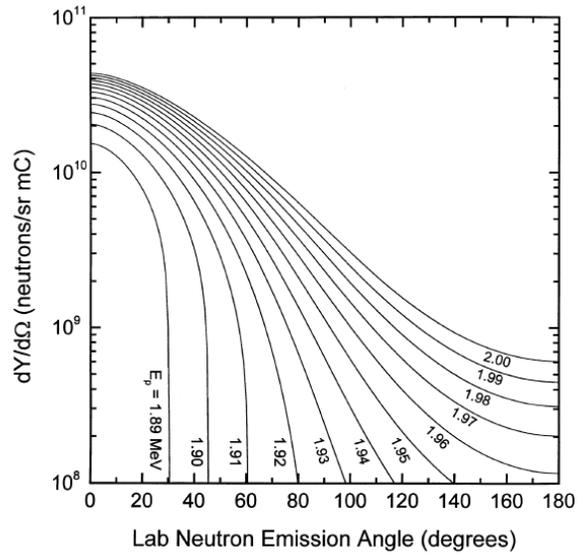
Παρακάτω απεικονίζεται η ενεργειακή κατανομή των νετρονίων για δεδομένες ενέργειες πρωτονίου στην ενεργειακή περιοχή 1.89 – 2.00 MeV (Σχήμα 2.6). Η ενεργειακή κατανομή των παραγόμενων νετρονίων είναι ανεξάρτητη από την χρήση καθαρού μεταλλικού στόχου λιθίου ή διαφορετικά στόχου ένωσης λιθίου.



Σχήμα 2.6: Ενεργειακή κατανομή νετρονίων για παχύ στόχο φυσικού λιθίου, σε ενέργειες πρωτονίου κοντά στην ενέργεια κατωφλίου [21].

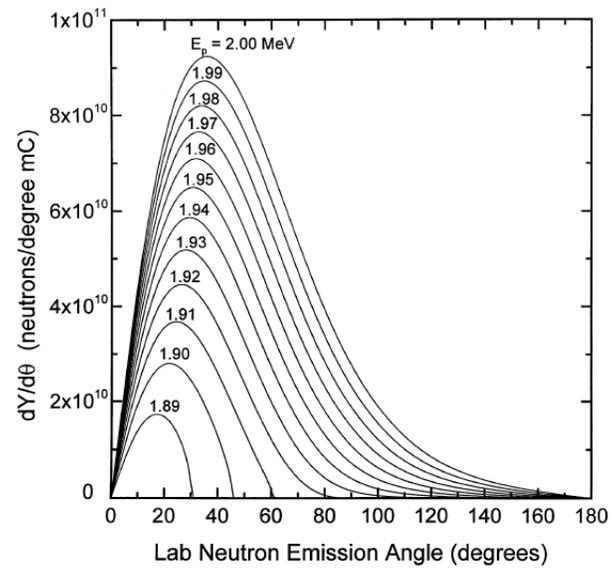
Τυχόν σφάλματα κατά την απόδοση της ενεργειακής κατανομής οφείλονται σε συγκεκριμένους παράγοντες. Αυτοί αφορούν πειραματικά δεδομένα για την ενεργό διατομή, τις πυρηνικές μάζες, κάποιο μικρό σφάλμα λόγω της ισχύος ανασχέσεως και τέλος υπολογιστικά σφάλματα κατά την αριθμητική ολοκλήρωση (κανόνας του τραπεζίου). Ταυτόχρονα μια ολοκλήρωση ως προς την ενέργεια νετρονίου αποδίδει τη γωνιακή κατανομή των εκπεμπόμενων νετρονίων της αντίδρασης (Σχήμα 2.7).

$$\frac{dY}{d\Omega}(\theta) = \int_{E_{n,min}}^{E_{n,max}(E_{p0})} \frac{d^2Y}{d\Omega dE_n}(\theta, E_n) dE_n \quad (2.26)$$



Σχήμα 2.7: Γωνιακή κατανομή των παραγόμενων νετρονίων για ενέργειες πρόσπτωσης των πρωτονίων σε παχύ στόχο λιθίου, κοντά στο κατώφλι της αντίδρασης [21].

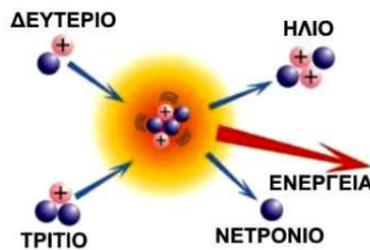
Είναι σημαντικό να σημειωθεί, πως ενώ η διαφορεική μορφή της γωνιακής κατανομής των νετρονίων $\frac{dY}{d\Omega}(\theta)$ εμφανίζει μέγιστο σε 0° (Σχήμα 2.7), η μέγιστη κορυφή στο φάσμα των εκπεμπόμενων νετρονίων δεν θα είναι στην εμπρόσθια διεύθυνση. Στην πραγματικότητα δεν εκπέμπονται νετρόνια σε 0° . Το γεγονός αυτό φαίνεται καλύτερα στο επόμενο σχήμα όπου πραγματοποιείται ολοκλήρωση ως προς τη στερεά γωνία όπου περιλαμβάνεται ο όρος $2\pi \sin \theta$ (Σχήμα 2.8). Τέλος η μέγιστη ροή νετρονίων παρατηρείται στην εμπρόσθια διεύθυνση μεταξύ $20^\circ - 40^\circ$.



Σχήμα 2.8: Απόδοση νετρονίων σε μονάδες $\frac{\text{neutrons}}{\text{mC}}$ έχοντας πολλαπλασιαστεί ο όρος $2\pi \sin \theta$ κατά τον υπολογισμό της γωνιακής κατανομής [21].

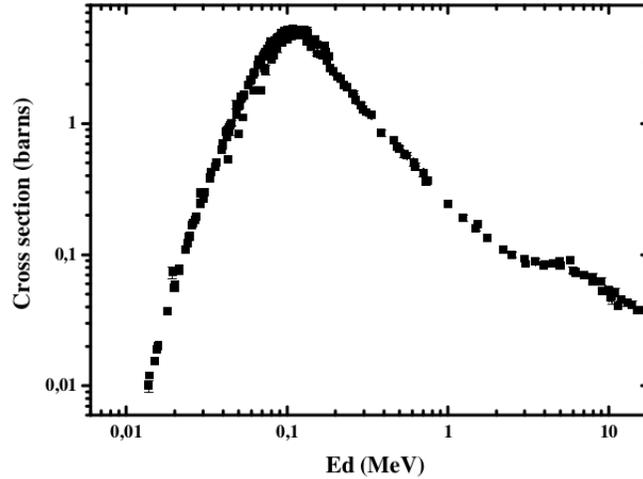
Κεφάλαιο 3

Η αντίδραση ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$



Σχήμα 3.1: Σχηματική αναπαράσταση της αντίδρασης ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$.

Η αντίδραση ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$, είναι μια εξώθερμη αντίδραση με αποδιδόμενο ποσό ενέργειας $Q=17.589\text{ MeV}$. Πλεονεχτεί έναντι άλλων αντιδράσεων για την παραγωγή δέσμης νετρονίων υψηλής ενέργειας, λόγω της μεγάλης ενεργού διατομής (Σχήμα 3.2) που εμφανίζει. Ένα ακόμη πλεονέκτημα της αντίδρασης αυτής είναι ότι για σχετικά μικρές ενέργειες βλήματος, η παραγόμενη δέσμη νετρονίων είναι σχετικά “καθαρή”, με την έννοια ότι δεν υπάρχουν δευτερογενείς ομάδες παρασιτικών νετρονίων εκτός από τις αντιδράσεις διάσπασης του δευτερίου (break up reactions) ${}^3\text{H}(d, np){}^2\text{H}$, ${}^3\text{H}(d, 2n){}^3\text{He}$ οι οποίες ενεργοποιούνται αφού ξεπεράσει η ενέργεια βλήματος την ενέργεια των 3.71 MeV και 4.92 MeV αντίστοιχα.

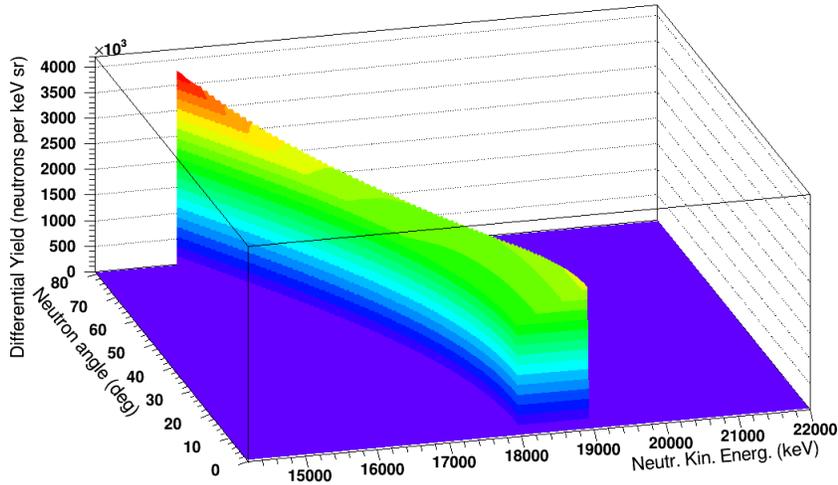


Σχήμα 3.2: Ενεργός Διατομή της αντίδρασης D-T.

Σ' αυτό το κεφάλαιο με αντίστοιχο τρόπο θα περιγραφεί ο τρόπος υπολογισμού του διπλού διαφορικού ρυθμού παραγωγής νετρονίων για την αντίδραση D-T με σκοπό και πάλι την απόδοση της ενεργειακής και χωρικής κατανομής των νετρονίων. Ένα παράδειγμα γραφικής αναπαράστασης του διπλού διαφορικού ρυθμού παραγωγής νετρονίων εμφανίζεται στο Σχήμα 3.3. Η μέθοδος υπολογισμού είναι ίδια με αυτήν που παρουσιάστηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο, παρουσιάζονται εκτενώς στο κεφάλαιο αυτό οι σημαντικές διαφορές σε σχέση με την αντίδραση ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$.

$$\frac{d^2N}{dE_n d\Omega}(\theta, E_n) = \frac{N_0 p}{e A_{eff}} \frac{d\sigma}{d\Omega'} \frac{d\Omega'}{d\Omega} \left(\frac{dE_d}{dx} \right)^{-1} \frac{dE_d}{dE_n} \quad (3.1)$$

Υπενθυμίζεται πως $\frac{d\sigma}{d\Omega'} \frac{d\Omega'}{d\Omega}$ αποδίδει τη διαφορική ενεργό διατομή στο σύστημα εργαστηρίου, η ισχύς ανασχέσεως εκφράζεται με τον όρο $\left(\frac{dE_d}{dx} \right)^{-1}$ και τέλος ο όρος $\frac{dE_d}{dE_n}$ προκύπτει από τη διαφορίση της κινηματικής εξίσωσης της ενέργειας δευτερίου.



Σχήμα 3.3: Γραφική αναπαράσταση του διπλού διαφορικού ρυθμού παραγωγής νετρονίων της αντίδρασης D-T. Η κατανομή αντιστοιχεί σε δέσμη δευτερίου ενέργειας 2500 keV προσπίπτει σε στόχο πάχους 20 μm .

3.1 Ο στόχος TiT

Η αντίδραση D-T πραγματοποιείται μέσω ακτινοβόλησης ενός στόχου τριτίου από δέσμη δευτερίων. Ο στόχος τριτίου που συνήθως χρησιμοποιείται για την παραγωγή δεσμών νετρονίων έχει μεταλλική μορφή δίσκου τιτανίου όπου έχουν εμφυτευτεί ιόντα τριτίου. Η μορφή αυτή του στόχου επιβάλλεται λόγω της επικινδυνότητας του τριτίου για τον ανθρώπινο οργανισμό. Επομένως η χρήση μιας σταθερής μορφής του τριτίου όπως αυτής του TiT ικανοποιεί τις προδιαγραφές ασφαλείας ακόμη και για ακτινοβόληση με δέσμες δευτερίων που ξεπερνούν σε ένταση τα 100 μA . Κατά τους θεωρητικούς υπολογισμούς του ολικού αριθμού παραγόμενων νετρονίων, η στοιχειομετρία των πυρήνων παραμένει σταθερή. Η πυκνότητα του στόχου TiT υπολογίστηκε θεωρώντας την αναλογία πυρήνων τριτίου - τιτανίου ίση με 1.543 [25] και βρέθηκε ίση με $\rho_{TiT} = 1.850 \text{ gr/cm}^3$. Το πάχος του στόχου TiT είναι της τάξης των μερικών μm ώστε η παραγωγή των νετρονίων να παρουσιάζει μικρό ενεργειακό εύρος για συγκεκριμένη γωνία. Επίσης το θερμικό φορτίο που επιδέχεται ένας λεπτός στόχος είναι πιο εύκολα

διαχειρίσιμο από αυτό ενός στόχου όπου η απώλεια ενέργειας εντός του στόχου είναι μεγαλύτερη.

3.2 Η απώλεια ενέργειας στον στόχο

Όπως και στην αντίδραση ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$, έτσι και σε αυτήν την αντίδραση ο υπολογισμός της ισχύος ανασχέσεως του σωματιδίου βλήματος εντός του στόχου TiT γίνεται με βάση τη θεωρία των Andersen-Ziegler. Επιπλέον, για την αντίδραση D-T υπολογίζεται η ηλεκτρονιακή ισχύς ανασχέσεως για χαμηλότερες ενέργειες βλήματος από αυτές των 1 MeV. Αυτό προκύπτει από το γεγονός η αντίδραση ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$ είναι εξώθερμη αντίδραση σε αντίθεση με την ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$ που συζητήθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο όπου δεν έχει έννοια η μελέτη της διαδρομής του σωματιδίου βλήματος για ενέργειες κάτω από την ενέργεια κατωφλίου. Ειδικότερα, για ενέργειες βλήματος 10 keV–1 MeV ισχύει η σχέση [10]:

$$\frac{1}{S_e} = \frac{1}{S_{Low}} + \frac{1}{S_{High}} \quad (3.2)$$

όπου,

$$S_{Low} = A_2 E^{0.45} \quad (3.3)$$

$$S_{High} = \frac{A_3}{E} \log \left[1 + \frac{A_4}{E} + A_5 E \right]. \quad (3.4)$$

ενώ για 1 MeV–10 MeV υπενθυμίζεται η σχέση:

$$S_e = \frac{A_6}{\beta^2} \left[\ln \left(\frac{A_7 \beta^2}{1 - \beta^2} \right) - \beta^2 - \sum_{i=0}^{n=4} A_{i+8} \ln(E)^i \right]. \quad (3.5)$$

Η ενέργεια E εκφράζει την αρχική κινητική ενέργεια της δέσμης πρωτονίου που

προσπίπτει στον στόχο. Συνεπώς στην περίπτωση της D-T αντίδρασης, είναι αναγκαίος ο συσχετισμός που εμφανίζεται στην παρακάτω εξίσωση και αφορά την απώλεια ενέργειας που υφίσταται το πρωτόνιο και το δευτέριο μέσα στον στόχο [24].

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)(\varepsilon) = \left(\frac{dE}{dx}\right)(2\varepsilon) \quad (3.6)$$

Τέλος οι σταθερές παράμετροι A_i που πρέπει να χρησιμοποιηθούν κατά τον υπολογισμό των σχέσεων (3.2) και (3.5), εμφανίζονται στον πίνακα 3.1 και αντιστοιχούν στα στοιχεία από τα οποία αποτελείται ο στόχος TiT.

A_i	Ti	H
A_1	4.862	1.262
A_2	5.496	1.44
A_3	5165	242.6
A_4	568.5	1.210^4
A_5	0.009474	0.1159
A_6	0.01122	0.0005099
A_7	4443	54360
A_8	-8.371	-5.052
A_9	3.251	2.049
A_{10}	-0.4513	-0.3044
A_{11}	0.02694	0.01966
A_{12}	-0.0005886	-0.0004659

Πίνακας 3.1: Οι παράμετροι A_i για στοιχεία υδρογόνο και τιτάνιο.

3.3 Κινηματική της ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$ αντίδρασης

Για την ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$ αντίδραση, το ποσό ενέργειας που προσδίδεται στα προϊόντα (νετρόνιο και ήλιο ${}^4\text{He}$) είναι 17.589 MeV, η οποία όπως είναι γνωστό υπολογίζεται από τη διαφορά μαζών μεταξύ των πυρηνικών μαζών που συμμε-

τέχουν πριν και μετά την αντίδραση:

$$Q = (m_1 + m_2 - m_3 - m_4)c^2. \quad (3.7)$$

Οι κινηματικές παράμετροι που αναφέρθηκαν (Ενότητα 2.3), για τον υπολογισμό της ενέργειας εκπεμπόμενων νετρονίων (ελαφρύ σωματίο) επισημαίνονται και πάλι, μόνο που στην συγκεκριμένη αντίδραση έχουμε $m_1 = m_d$, $m_2 = m_{^3H}$, $m_3 = m_n$, $m_4 = m_{^4He}$. Υπενθυμίζεται πως οι τονισμένες ποσότητες αντιστοιχούν στο σύστημα κέντρου μάζας. Οι παράμετροι A, B, C και D υπολογίζονται ως εξής: [14]

$$\begin{aligned} A &= \frac{m_1 m_4 \left(\frac{E_1}{E_T}\right)}{(m_1 + m_2)(m_3 + m_4)} \\ B &= \frac{m_1 m_3 \left(\frac{E_1}{E_T}\right)}{(m_1 + m_2)(m_3 + m_4)} \\ C &= \frac{m_2 m_3}{(m_1 + m_2)(m_3 + m_4)} \left(1 + \frac{m_1 Q}{m_2 E_T}\right) = \frac{E'_4}{E_T} \\ D &= \frac{m_2 m_4}{(m_1 + m_2)(m_3 + m_4)} \left(1 + \frac{m_1 Q}{m_2 E_T}\right) = \frac{E'_3}{E_T} \end{aligned}$$

και ικανοποιούν τις σχέσεις:

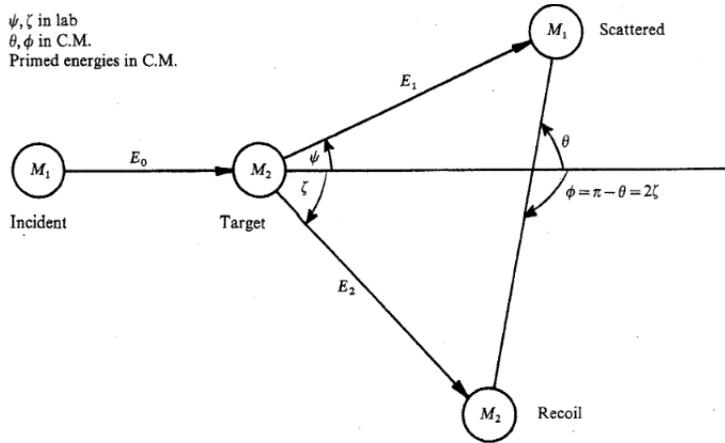
$$A + B + C + D = 1 \quad (3.8)$$

$$AC = BD \quad (3.9)$$

$$E_T = E_1 + Q = E_3 + E_4. \quad (3.10)$$

Η ενέργεια ελαφρού προϊόντος της αντίδρασης (νετρόνιο) υπολογίζεται από το παραπάνω σύστημα εξισώσεων και σύμφωνα με τον συμβολισμό του σχήματος 3.4 προκύπτει:

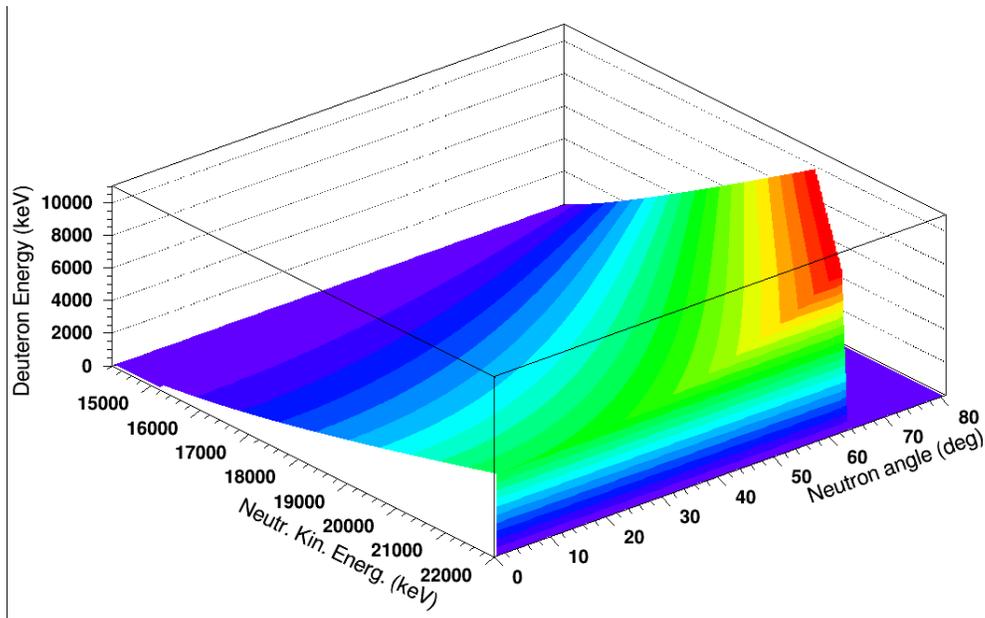
$$\begin{aligned} \frac{E_3}{E_T} &= B + D + 2(AC)^{1/2} \cos \theta \\ &= B \left[\cos \psi \pm \left(\frac{D}{B} - \sin^2 \psi \right)^{1/2} \right]^2 \end{aligned} \quad (3.11)$$



Σχήμα 3.4: Γραφική αναπαράσταση των χαρακτηριστικών μαζών και γωνιών της αντίδρασης σύμφωνα με τον συμβολισμό των Maryon, Young [14] όπου οι γωνίες ψ και ζ αναφέρονται στο σύστημα αναφοράς εργαστηρίου ενώ οι γωνίες θ και ϕ στο σύστημα κέντρου μάζας.

η λύση που αντιστοιχεί στο πρόσημο $-$ να ισχύει μόνο στην περίπτωση όπου, $B > D$, $\psi_{max} = \sin^{-1} \sqrt{\frac{D}{B}}$.

Στις πυρηνικές αντιδράσεις, όπου υπάρχουν μόνο δύο προϊόντα συνηθίζεται να προσδιορίζεται η κινητική ενέργεια του ενός από τα δύο, γνωρίζοντας την ενέργεια του σωματιδίου βλήματος και τη γωνία εκπομπής του. Στην παρούσα εργασία, όπως και στην περίπτωση της ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$ αντίδρασης έτσι και στην D-T αντίδραση επιλέχθηκε η αντίστροφη φορά υπολογισμού της κινηματικής. Με βάση την ενέργεια του νετρονίου E_n και τη γωνία θ_n , γίνεται ο υπολογισμός της αντίστοιχης ενέργειας του σωματιδίου βλήματος (δευτέριο) από που στη συνέχεια και με βάση την εξίσωση (3.1) υπολογίζονται, οι υπόλοιποι όροι που καθορίζουν τον ρυθμό παραγωγής των νετρονίων για το συγκεκριμένο ζεύγος (E_n, θ) .

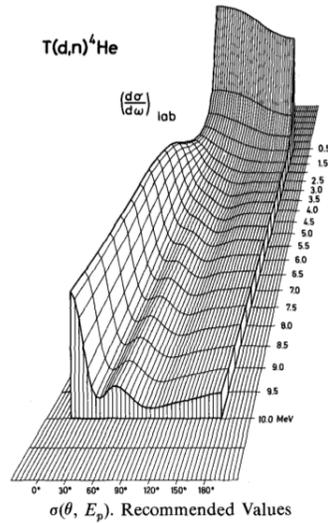


Σχήμα 3.5: Ενεργειακή κατανομή νετρονίων και γωνίες εκπομπής από 0 – 80° για διαφορετικές ενέργειες βλήματος.

Όπως φαίνεται και στο παραπάνω σχήμα για γωνίες εκπομπής νετρονίων από 0° – 80° για την ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$ αντίδραση, μονοσήμαντα ορίζεται για κάθε ζευγάρι των μεγεθών E_n και θ_n η αρχική ενέργεια βλήματος.

3.4 Διαφορική ενεργός διατομή της αντίδρασης

Για τον υπολογισμό της διαφορικής ενεργού διατομής χρησιμοποιείται και όπως και στο προηγούμενο κεφάλαιο η παραμετροποίηση της διαφορικής ενεργού διατομής σύμφωνα με τους H. Liskien, A. Paulsen [15]. Σε μορφή πίνακα δίνονται οι τιμές $\frac{d\sigma_{dn}(0^\circ)}{d\Omega'}$ καθώς επίσης και οι συντελεστές των πολυωνύμων Legendre (ενδεικτικά στον Πίνακα 3.2) όπου σύμφωνα με την εξίσωση (2.11) γίνεται ο υπολογισμός της διαφορικής ενεργού διατομής στο σύστημα κέντρου μάζας. Όπως φαίνεται και από τον πίνακα 3.1, οι συντελεστές των πολυωνύμων Le-



Σχήμα 3.6: Η διαφορική ενεργός διατομή συναρτήσει της γωνίας εκπομπής και της αρχικής ενέργειας σωματιδίου βλήματος (δευτέριο) [15].

gendre καθώς και οι τιμές $\frac{d\sigma_{dn}(0^\circ)}{d\Omega'}$ δίνονται για συγκεκριμένες τιμές ενεργειών. Φυσικά στην πραγματικότητα απαιτείται η γνώση των αντίστοιχων συντελεστών για οποιαδήποτε τιμή ενέργειας. Όπως περιγράφηκε και στο προηγούμενο κεφάλαιο, αυτό έγινε μέσω προσαρμογής (fit) μιας ομαλής καμπύλης (spline fit), για τον κάθε συντελεστή και παράμετρο που υπεισέρχονται στον υπολογισμό της διαφορικής ενεργού διατομής στο σύστημα κέντρου μάζας. Στη συνέχεια, με χρήση της εξίσωσης (3.12) υπολογίζεται η διαφορική ενεργός διατομή στο σύστημα αναφοράς του εργαστηρίου.

$$\begin{aligned} \frac{d\Omega}{d\Omega'} &= \frac{\sin \psi d\psi}{\sin \theta d\theta} = \frac{\sin^2 \psi}{\sin^2 \theta} \cos(\theta - \zeta) \\ &= \frac{\sqrt{AC} \left(\frac{D}{B} - \sin^2 \psi\right)^{1/2}}{\frac{E_3}{E_T}}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Αξίζει να σημειωθεί πως για τον υπολογισμό της ολικής ροής νετρονίων από την ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$ αντίδραση, όλα τα μεγέθη που εμφανίζονται στην Εξίσωση

ENERGY (MEV)	SIGMA-0 (MB/SR)	A0	A1	A2	A3	A4	A5	A6	A7
0.020	4.3	1.000							
0.030	19.6	1.000							
0.040	52.9	1.000							
0.050	106.0	1.000							
0.060	175.	1.000							
0.070	250.	1.000							
0.080	315.	1.000							
0.090	367.	1.000							
0.100	394.	1.000							
0.150	317.	1.000							
0.200	199.	1.000							
0.250	133.	1.000							
0.300	95.2	1.000							
0.350	77.5	1.000							
0.400	63.5	0.999	0.004	-0.003					
0.450	53.0	0.998	0.013	-0.011					
0.500	45.5	0.997	0.021	-0.018					
0.550	39.4	0.995	0.030	-0.025					
0.600	35.5	0.993	0.038	-0.031					
0.650	31.9	0.989	0.046	-0.035					
0.700	29.4	0.986	0.053	-0.039					
0.750	27.0	0.983	0.060	-0.043					
0.800	25.0	0.978	0.067	-0.045					
0.850	23.4	0.973	0.072	-0.045					
0.900	22.0	0.968	0.077	-0.045					
0.950	20.8	0.963	0.082	-0.045					
1.000	19.8	0.957	0.087	-0.044					
1.100	17.9	0.946	0.094	-0.040					
1.200	16.7	0.931	0.100	-0.032	0.000	0.001			
1.300	15.8	0.915	0.105	-0.023	0.000	0.003			
1.400	15.0	0.898	0.110	-0.013	0.000	0.004	0.000	0.001	
1.500	14.3	0.878	0.113	0.002	0.000	0.005	0.000	0.002	
1.600	13.8	0.858	0.116	0.016	0.000	0.007	0.001	0.002	
1.700	13.3	0.835	0.120	0.029	0.001	0.008	0.004	0.003	

Πίνακας 3.2: Οι τιμές της διαφορικής ενεργού διατομής σε 0° και οι συντελεστές των πολυωνύμων Legendre για μια μικρή περιοχή ενεργειών του δευτερίου σύμφωνα με την παραμετροποίηση των H. Liskien, A. Paulsen [15] για την αντίδραση ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$.

(3.1) υπολογίζονται ξεχωριστά, καθώς όλες οι όροι αποδίδουν πεπερασμένες τιμές σε αντίθεση με την περίπτωση της ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$ αντίδρασης όπου κατά την ενέργεια κατωφλίου υπήρχαν προβλήματα απειρισμού σε συγκεκριμένους όρους. Στο Παράρτημα Β' δίνεται ο κώδικας υπολογισμού της ενεργειακής κατανομής των αντιδράσεων καθώς επίσης και οι διάφορες συναρτήσεις που υπολογίζουν τις κινηματικές εξισώσεις, την απώλεια ενέργειας στον στόχο, τη διαφορική ενεργός διατομή κ.ο.κ.

3.5 Ενεργειακή και γωνιακή κατανομή νετρονίων

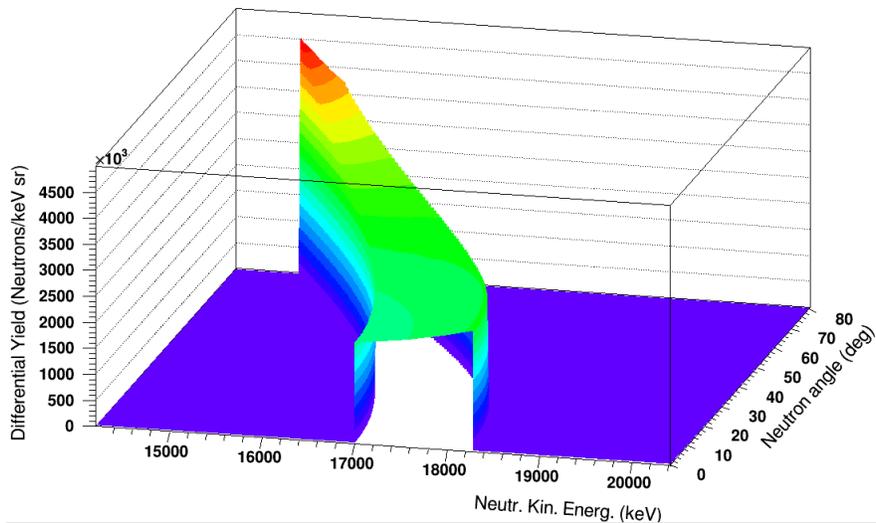
Ο υπολογισμός της γωνιακής κατανομής νετρονίων από την αντίδραση D-T δίνεται από την ολοκλήρωση της σχέσης 3.1 ως προς την ενέργεια των παραγόμενων νετρονίων. Η γωνιακή κατανομή των νετρονίων δίνεται με το παρακάτω ολοκλήρωμα,

$$\frac{dY}{d\Omega}(\theta) = \int_{E_{n,min}}^{E_{n,max}(E_{d0})} \frac{d^2Y}{d\Omega dE_n}(\theta, E_n) dE_n. \quad (3.13)$$

Αντίστοιχα ολοκληρώνοντας ως προς τη γωνία τον διπλό διαφορικό ρυθμό παραγωγής νετρονίων όπως διατυπώθηκε και στο προηγούμενο κεφάλαιο, προκύπτει η ενεργειακή κατανομή.

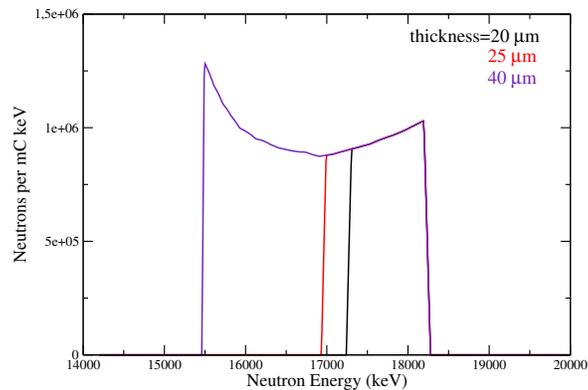
$$\frac{dY}{dE_n}(E_n) = 2\pi \int_0^{\theta_{max}(E_{d0})} \frac{d^2Y}{d\Omega dE_n}(\theta, E_n) \sin \theta d\theta \quad (3.14)$$

Υπενθυμίζεται πως ο όρος $2\pi \sin \theta$ προκύπτει από την ολοκλήρωση ως προς την στερεά γωνία στο σύστημα εργαστηρίου θεωρώντας κάθε φορά αζιμουθιακή συμμετρία. Από τον υπολογισμό της γωνιακής κατανομής, τα ενεργητικά νετρόνια εμφανίζονται σε μικρές γωνίες ως προς την διεύθυνση της αρχικής δέσμης $0^\circ - 20^\circ$ και σε μεγαλύτερες γωνίες εμφανίζονται νετρόνια χαμηλότερης ενέργειας εκπομπής όπως φαίνεται και στο επόμενο σχήμα.



Σχήμα 3.7: Γραφική απεικόνιση του διπλού διαφορικού ρυθμού παραγωγής νετρονίων. Η κατανομή αντιστοιχεί σε αρχική ενέργεια δευτερίων 2000 keV και πάχος στόχου 25 μm (CONY).

Τέλος, παρουσιάζεται ενδεικτικά, η ενεργειακή κατανομή νετρονίων για διαφορετικά πάχη στόχων.



Σχήμα 3.8: Η ενεργειακή κατανομή νετρονίων μετά από ολοκλήρωση ως προς τη γωνία με μέγιστη τιμή 12° . Οι υπολογισμοί αντιστοιχούν σε διάφορα πάχη στόχων T/Ti και για ενέργεια δέσμης δευτερίων ίση με 2000 keV και συγκριμένης γεωμετρίας.

Κεφάλαιο 4

Αποτελέσματα και έλεγχος του λογισμικού CONY

Στο κεφάλαιο αυτό περιγράφεται εν συντομία ο κώδικας CONY (*CO*mputer code for *N*eutron *Y*ield calculations) ο οποίος υπολογίζει τον διπλό διαφορικό ρυθμό παραγωγής νετρονίων μέσω των αντιδράσεων ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$ και ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$. Πιο συγκεκριμένα ο κώδικας CONY αποδίδει τον διπλό διαφορικό ρυθμό παραγωγής νετρονίων ως συνάρτηση της γωνίας εκπομπής και της ενέργειας νετρονίου για κάθε mC πρωτονίων. Όπως ήδη έχει αναφερθεί, ο κώδικας CONY αποτελείται από μια συλλογή συναρτήσεων σε γλώσσα προγραμματισμού C++ όπου υπολογίζεται ο αριθμός παραγόμενων νετρονίων από τις αντιδράσεις. Ειδικότερα για την αντίδραση ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$ ο υπολογισμός γίνεται για τον σύνθετο στόχο Ti/T, και στη συνέχεια για τους στόχους λιθίου και φθοριούχου λιθίου υπολογίζεται ο αριθμός παραγόμενων νετρονίων της αντίδρασης ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$. Η επιλογή των στόχων και των αντιδράσεων παραγωγής νετρονίων έγινε με βάση την υπάρχουσα υποδομή στο Ινστιτούτο Πυρηνικής Φυσικής και Σωματιδιακής Φυσικής Ε.Κ.Ε.Φ.Ε “Δημόκριτος”.

Τα αποτελέσματα του λογισμικού, που αναπτύχθηκε στα πλαίσια της παρούσας εργασίας, συγκρίθηκαν όπου αυτό ήταν εφικτό με τα αντίστοιχα του κώδικα NeuSDesc-Neutron Source Description ο οποίος αναπτύχθηκε στο Ινστιτούτο IRMM (Institute for Reference Materials and Measurements) [28]. Το

πρόγραμμα NeuSDesc παρέχει την δυνατότητα υπολογισμού του ρυθμού παραγωγής νετρονίων μέσω πολλών αντιδράσεων μεταξύ των οποίων και οι αντιδράσεις που εξετάζονται στα πλαίσια της παρούσας εργασίας. Επίσης υπάρχει η δυνατότητα υπολογισμού της ενεργειακής κατανομής των νετρονίων από κυλινδρικούς στόχους. Το βασικό μειονέκτημα του κώδικα NeuSDesc είναι ότι δεν υπάρχει πρόσβαση στον κώδικα από τον χρήστη με σκοπό την αλλαγή της γεωμετρίας των αντιδράσεων ή διαφορετικών μηχανισμών και διατάξεων για παραγωγή νετρονίων. Παρόλα αυτά ο κώδικας παρέχει ένα πεδίο σύγκρισης και αξιολόγησης των αποτελεσμάτων του κώδικα CONY.

Στο κεφάλαιο αυτό, παρουσιάζονται ενδεικτικά μερικά από τα αποτελέσματα που αποδίδονται από τα δύο προγράμματα. Τα αποτελέσματα αφορούν κυρίως την ενεργειακή κατανομή των παραγόμενων νετρονίων από τις αντιδράσεις ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$ με στόχο μεταλλικού Li και με στόχο LiF καθώς επίσης και για την αντίδραση ${}^3\text{H}(dn){}^4\text{He}$ με χρήση στόχου T/Ti.

4.1 Σύντομη περιγραφή του κώδικα NeuSDesc

Οι υπολογισμοί από τον κώδικα, παρέχουν αξιόπιστα αποτελέσματα για τη ροή των παραγόμενων νετρονίων αλλά και τις αντίστοιχες ενέργειες τους. Οι υπολογισμοί του κώδικα για την δέσμη νετρονίων βασίζονται στην κινηματική από τις αναφορές [26], [27]. Όσον αφορά τον υπολογισμό της απώλειας ενέργειας των ιόντων της δέσμης μέσα στον στόχο, διαχωρίζεται ο στόχος σε διαμερίσεις και προσμετράται κάθε φορά η απώλεια ενέργειας σε κάθε διαμέριση [10], [11]. Ο υπολογισμός της ισχύος ανασχέσεως και της απώλειας ενέργειας καθώς η δέσμη διανύει τον στόχο, γίνεται μέσω του μοντέλου των Andersen-Ziegler όπου οι χαρακτηριστικές σταθερές της παραμετροποίησης δίνονται για κάθε στοιχείο σε πίνακα [10].

Επίσης συμπεριλαμβάνονται υπολογισμοί με την τεχνική Monte Carlo [13] αφού επιλεχθεί (από το παράθυρο χρήσης) η λειτουργία του κώδικα SRIM-2008 για τον υπολογισμό της ισχύος ανασχέσεως. Με αυτήν την επιλογή γίνεται και ο

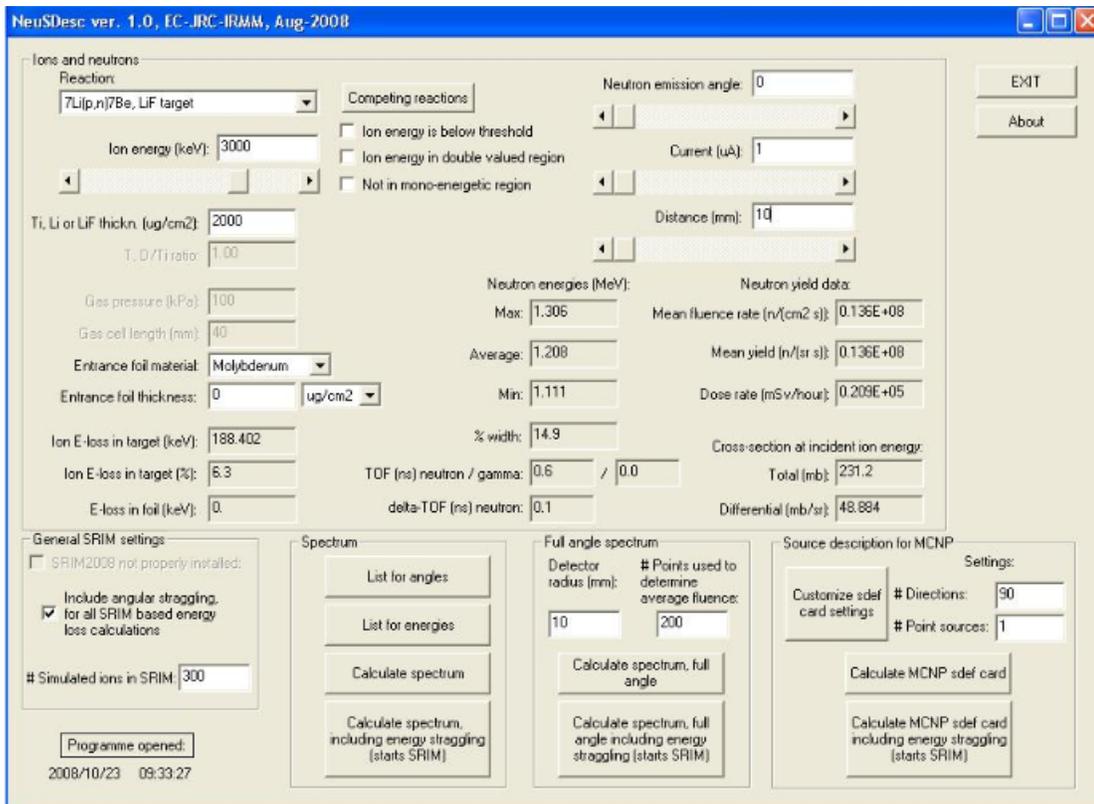
υπολογισμός του ενεργειακού και γωνιακού διασκεδασμού της δέσμης (energy straggling, angular straggling).

Ο ενεργειακός διασκεδασμός αφορά τα φορτισμένα σωματίδια και την ενέργεια που χάνουν καθώς διανύουν το υλικό του στόχου. Πιο συγκεκριμένα, η απώλεια ενέργειας για το συγκεκριμένο μήκος διαδρομής δεν είναι απολύτως η ίδια για όλα τα σωματίδια που διανύουν το ίδιο πάχος στόχου. Πρόκειται για μια στατιστική διαδικασία όπου αν κανείς καταγράψει την τελική ενέργεια όλων των εξερχόμενων σωματιδίων από ένα συγκεκριμένου πάχους στόχο, θα προκύψει μια κατανομή όμοια με την κατανομή Gauss. Φυσικά το κέντρο της κατανομής αντιστοιχεί στην ενέργεια που υπολογίζεται από την παραμετροποίηση των Andersen-Ziegler και το εύρος της κατανομής θα αντιστοιχεί στον ενεργειακό διασκεδασμό.

Αντίστοιχα γίνεται μέσω της μεθόδου Monte-Carlo και ο υπολογισμός του γωνιακού διασκεδασμού της δέσμης όταν χρησιμοποιείται ο κώδικας SRIM [13]. Στο σημείο αυτό πρέπει να αναφερθεί πως όταν συμπεριλαμβάνονται οι υπολογισμοί αυτοί τα αποτελέσματα είναι πιο κοντά στα αντίστοιχα πειραματικά όσον αφορά την ενεργειακή κατανομή των νετρονίων.

Στο σχήμα 4.1 παρουσιάζεται το παράθυρο χρήσης του κώδικα και όλες οι πληροφορίες που πρέπει να δοθούν με σκοπό να πραγματοποιηθούν οι υπολογισμοί. Ο χρήστης πρέπει να εισάγει τα εξής:

- Τον τύπο της πυρηνικής αντίδρασης
- Αρχική κινητική ενέργεια του προσπίπτοντος ιόντος (keV)
- Πίεση και μήκος της κυψελίδας (αν χρησιμοποιείται) (kPa και mm αντίστοιχα)
- Επιλογή υλικού του παράθυρου εισόδου
- Επιλογή πάχους του παράθυρου εισόδου (mm ή mg/cm^2)
- Επιλογή του κώδικα SRIM ώστε να συμπεριλαμβάνει αναλυτικούς υπολογισμούς



Σχήμα 4.1: Το παράθυρο χρήσης του κώδικα NeuSDesc [28]

- Γωνία εκπομπής των νετρονίων από συγκεκριμένη γεωμετρία κάθε φορά
- Ένταση της δέσμης ιόντων (μA)
- Απόσταση μέτρησης ροής νετρονίων (mm ή cm)
- Απόσταση όπου τοποθετείται ο στόχος ή αλλιώς η ακτίνα ανίχνευσης νετρονίων σε (mm)
- Επιλογή αντιδράσεων ώστε να υπολογιστούν τα παρασιτικά νετρόνια από τη διάσπαση του δευτερίου break-up reaction

Με σκοπό την άμεση σύγκριση αποτελεσμάτων του προγράμματος NeuSDesc με το πρόγραμμα CONY, οι υπολογισμοί του ενεργειακού και γωνιακού διασχε-

δασμού δεν περιλαμβάνονται στα αποτελέσματα που ακολουθούν καθώς στην παρούσα εκδοχή του κώδικα CONY δεν περιλαμβάνεται ο ενεργειακός και γωνιακός διασκεδασμός της δέσμης φορτισμένων σωματιδίων.

4.2 Ενεργειακή κατανομή νετρονίων μέσω της αντίδρασης ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$

Οι υπολογισμοί στον κώδικα CONY εκτελούνται μέσω εξωτερικών συναρτήσεων αφού πρώτα έχουν δοθεί από τον χρήστη τα στοιχεία:

- i) Αρχική ενέργεια δέσμης πρωτονίων ή δευτερίων (keV)
- ii) Πάχος στόχου (μm)

Η βασική συνάρτηση του κώδικα “difYield” υπολογίζει τον διπλό διαφορικό ρυθμό παραγωγής νετρονίων των αντιδράσεων για κάθε ενέργεια και γωνία εκπομπής των παραγόμενων νετρονίων.

Οι υπόλοιπες συναρτήσεις καλούνται από τη βασική συνάρτηση και παρέχουν την ισχύ ανασχέσεως των πρωτονίων εντός του στόχου, τη διαφορική ενεργό διατομή της αντίδρασης αλλά και την ενέργεια του πρωτονίου ή δευτερίου που αντιστοιχεί σε κάθε ζεύγος ενέργειας και γωνίας εκπεμπόμενων νετρονίων.

Ο κώδικας παρέχει τρεις τύπους αποτελεσμάτων. Αρχικά δημιουργεί ένα αρχείο κειμένου που περιέχει έναν πίνακα. Το κάθε στοιχείο του πίνακα αντιστοιχεί στον διπλό διαφορικό ρυθμό παραγωγής νετρονίων ανά mC φορτίων δέσμης πρωτονίων. Η σειρά του στοιχείου στον πίνακα δηλώνει την ενέργεια του εκπεμπόμενου νετρονίου και ο αριθμός της στήλης δηλώνει τη γωνία εκπομπής. Το δεύτερο είδος αποτελεσμάτων οδηγεί και πάλι σε ένα αρχείο εξόδου, το οποίο περιέχει τα αποτελέσματα της ολοκλήρωσης (γωνιακή ολοκλήρωση) ως προς στη στερεά γωνία. Αποτελείται από δύο στήλες όπου η πρώτη στήλη αντιστοιχεί σε ενέργειες νετρονίων keV και η δεύτερη στον αριθμό των εκπεμπόμενων νετρονίων ανά keV. Τέλος κατά την διπλή ολοκλήρωση ως προς στερεά γωνία αλλά και ως προς την ενέργεια αποδίδεται ο ολικός αριθμός παραγόμενων

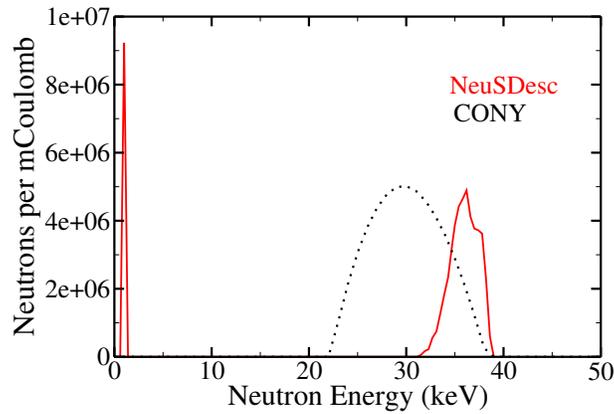
νετρονίων της αντίδρασης για συγκεκριμένη γεωμετρία της αντίδρασης. Προκειμένου ο κώδικας CONY να αποδώσει την ενεργειακή κατανομή νετρονίων αλλά και την ολική ροή των νετρονίων απαιτούνται πρόσθετες πληροφορίες που θα πρέπει να πληκτρολογήσει ο χρήστης. Συγκεκριμένα, θα πρέπει να δοθεί η μέγιστη γωνία που καλύπτει ο στόχος καθώς επίσης και την ενεργειακή περιοχή που επιθυμεί ο χρήστης να υπολογίσει την ολική ροή νετρονίων.

4.2.1 Υπολογισμοί παραγωγής νετρονίων κοντά στο ενεργειακό κατώφλι

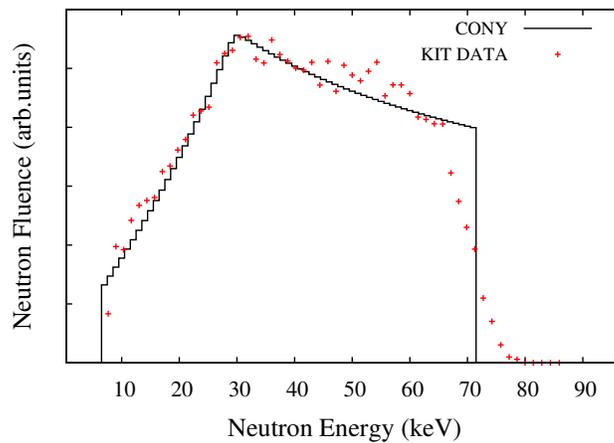
Με σκοπό τον προσδιορισμό της ενεργειακής κατανομής των νετρονίων κοντά στο ενεργειακό κατώφλι της αντίδρασης (1.88 MeV), υιοθετήθηκε η παραμετροποίηση της διαφορικής ενεργού διατομής από τους Gibbons-Macklin [16] ενώ για ενέργειες μεγαλύτερες από 1.92 MeV χρησιμοποιήθηκε η παραμετροποίηση των Liskien & Paulsen [15] (Υποενότητα 2.4.3). Μέσω της παραμετροποίησης αυτής όσον αφορά ενέργειες πρωτονίων μέσα στην περιοχή των 1.88 – 1.92 MeV αλλά και κατάλληλων μαθηματικών χειρισμών, επιλύθηκαν προβλήματα απειρισμού συγκεκριμένων όρων του διπλού διαφορικού ρυθμού παραγωγής νετρονίων. Η επίλυση των υπολογιστικών προβλημάτων κοντά στην ενέργεια κατωφλίου ήταν απαραίτητη για τον ορθό υπολογισμό της ενεργειακής κατανομής των νετρονίων.

Αυτό φαίνεται και στο Σχήμα 4.2 όπου παρουσιάζονται οι υπολογισμοί μέσω του κώδικα CONY και του NeuSDesc για ενέργεια δέσμης πρωτονίων $E_p = 1.88$ MeV. Όπως εύκολα μπορεί να κανείς να διακρίνει από το σχήμα 4.2 ο κώδικας CONY αποδίδει την αναμενόμενη ενεργειακή κατανομή για την ενέργεια αυτή, η οποία είναι ελάχιστα μεγαλύτερη από την ενέργεια κατωφλίου της αντίδρασης ενώ, αντίθετα το λογισμικό NeuSDesc αποτυγχάνει πλήρως στον υπολογισμό της ενεργειακής κατανομής.

Στο σχήμα 4.3 απεικονίζεται [22] η συμφωνία των θεωρητικών υπολογισμών από τη μέθοδο που περιγράφηκε και χρησιμοποιείται από τον κώδικα CONY για τη περιοχή του ενεργειακού κατωφλίου, με τα αντίστοιχα πειραματικά δεδομένα



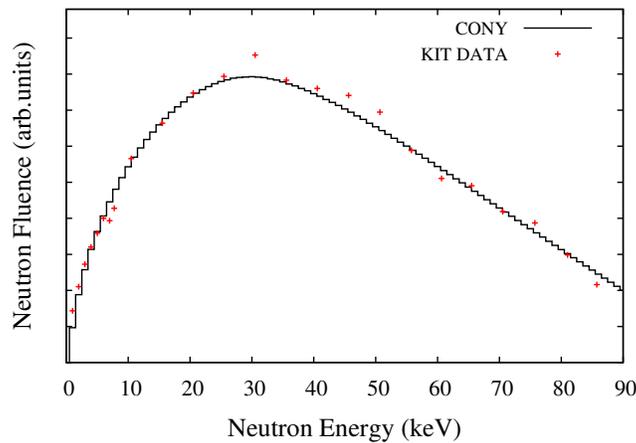
Σχήμα 4.2: Αριθμός παραγόμενων νετρονίων και οι αντίστοιχες ενέργειες, για ενέργεια πρωτονίου $E_p = 1.88$ MeV, πάχος στόχου (LiF) 10 μm και μέγιστη γωνία εκπομπής 12° .



Σχήμα 4.3: Το πειραματικό φάσμα αντιστοιχεί σε ενέργεια πρωτονίου $E_p = 1892$ keV και πάχος στόχος λιθίου 30 μm ο ανιχνευτής βρισκόταν σε απόσταση ενός μέτρου από τον στόχο λιθίου και σε 0° σε σχέση με τη δέση πρωτονίων. Με τις ίδιες συνθήκες πραγματοποιήθηκε και ο θεωρητικός υπολογισμός μέσω του λογισμικού CONY.

[22] από το Ινστιτούτο της Καρλσρούης KIT (Karlsruhe Institute of Technology) όπου το πειραματικό φάσμα προκύπτει από την μέτρηση χρόνου πτήσης νετρονίων, που παράγονται από την αντίδραση ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$. Η συμφωνία των

αποτελεσμάτων με την τεχνική μέτρησης χρόνου πτήσης των παραγόμενων νετρονίων αλλά και η ομαλή συμπεριφορά που εμφανίζει η ενεργειακή κατανομή κοντά στο ενεργειακό κατώφλι όπως φαίνεται στο σχήμα 4.4, επιβεβαιώνουν την ορθότητα των αποτελεσμάτων του κώδικα.

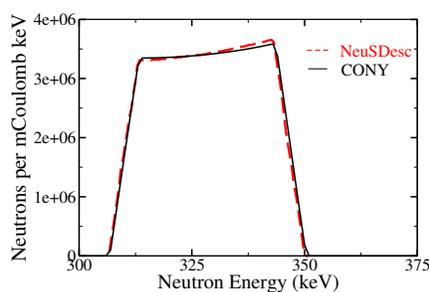


Σχήμα 4.4: Η ολοκληρωμένη ως προς την στερεά γωνία κατανομή νετρονίων, όπως προσδιορίστηκε από τους Ratynski & Käppeler [23]. Οι αντίστοιχοι θεωρητικοί υπολογισμοί μέσω του κώδικα CONY έχουν πραγματοποιηθεί, για τον βομβαρδισμό στόχου λιθίου, πάχους 30 μm από πρωτόνια ενέργειας 1912 keV και με μέγιστη γωνία εκπομπής των νετρονίων 64° .

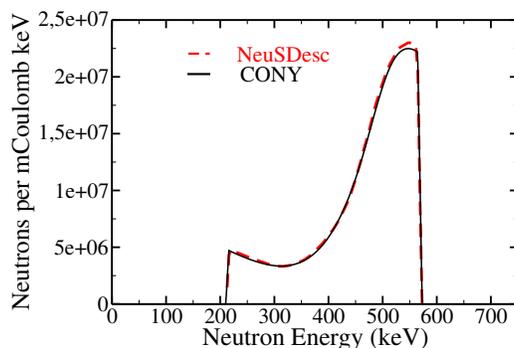
Από τα παραπάνω σχήματα συμπεραίνουμε ότι ο κώδικας NeuSDesc δεν μπορεί να αποδώσει την ενεργειακή κατανομή των νετρονίων για ενέργειες κοντά στην ενεργειακή περιοχή του ενεργειακού κατωφλίου της αντίδρασης. Αντίθετα, από την σύγκριση διαφορετικών πειραματικών δεδομένων για την ίδια ενεργειακή περιοχή αποδεικνύεται ότι το λογισμικό CONY μπορεί να αποδώσει με επιτυχία όλες τις λεπτομέρειες των πειραματικών φασμάτων.

4.2.2 Σύγκριση του λογισμικού CONY και του προγράμματος NeuSDesc για την αντίδραση ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$

Για ενέργειες βλήματος μεγαλύτερες από την ενέργεια καταψήλιου τα αποτελέσματα από τους δύο κώδικες εμφανίζουν πολύ καλή συμφωνία. Ενδεικτικά στα Σχήματα 4.5 και 4.6 παρουσιάζονται για διάφορες ενέργειες βλήματος και διαφορετικά πάχη στόχου ένωσης λιθίου, τα παραγόμενα νετρόνια και τις αντίστοιχες ενέργειες τους.



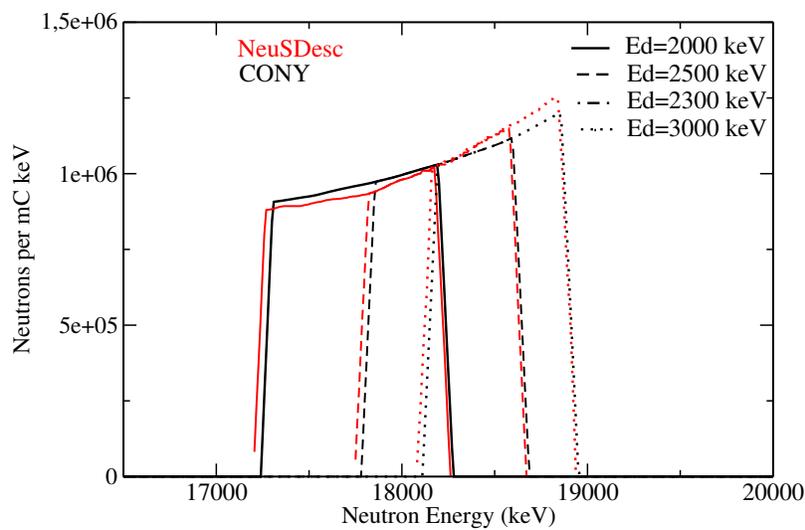
Σχήμα 4.5: Η ενεργειακή κατανομή αντιστοιχεί σε αρχική κινητική ενέργεια πρωτονίου 2100 keV και στόχο LiF πάχους 1 μm και με διάμετρο του ανιχνευτή 10 cm και ο οποίος βρίσκεται σε απόσταση 47.6 cm, καλύπτοντας έτσι γωνίες από $0^\circ - 12^\circ$. Τα ίδια δεδομένα εισήχθησαν στον κώδικα NeuSDesc.



Σχήμα 4.6: Κατανομή νετρονίων προκύπτουσα από δέσμη πρωτονίου ενέργειας 2300 keV η οποία προσπίπτει σε στόχο LiF. Σε αυτή την περίπτωση θεωρήθηκε στόχος πάχους 10 μm τοποθετημένος σε απόσταση 47.6 cm από ανιχνευτή διαμέτρου 10 cm καλύπτοντας γωνίες από $0^\circ - 12^\circ$.

4.3 Σύγκριση του λογισμικού CONY με το πρόγραμμα NeuSDesc για την αντίδραση $^3\text{H}(d, n)^4\text{He}$

Στο σχήμα 4.7 δίνονται τα αποτελέσματα της ενεργειακής κατανομής των νετρονίων από τα δύο προγράμματα CONY και NeuSDesc, για διάφορες ενέργειες δευτερίων.



Σχήμα 4.7: Για τις παραπάνω κατανομές και για διαφορετικές ενέργειες δευτερίων, θεωρήθηκε ο στόχος να βρίσκεται σε απόσταση 47.6 cm από τον αρχικό. Επίσης η διαμέτρος του στόχου είναι 10 cm ανιχνεύοντας νετρόνια μέχρι και 12° .

Κεφάλαιο 5

Συμπεράσματα

Στην παρούσα εργασία πραγματοποιήθηκε η ανάπτυξη του λογισμικού CONY σε γλώσσα προγραμματισμού C++. Ο κώδικας αποδίδει τον διπλό διαφορικό ρυθμό παραγωγής νετρονίων συναρτήσει, της γωνίας και ενέργειας εκπομπής των νετρονίων που παράγονται από τις αντιδράσεις ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$ και ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$. Στα Κεφάλαια 2 και 3 περιγράφηκε η μέθοδος υπολογισμού του διπλού διαφορικού ρυθμού παραγωγής των παραπάνω αντιδράσεων σύμφωνα με την αναφορά [21]. Οι υπολογισμοί εκτελούνται σε εξωτερικές συναρτήσεις, η δομή των οποίων παρουσιάζεται αναλυτικά στα Παραρτήματα Α' και Β'.

Πιο συγκεκριμένα, ο κώδικας παρέχει τρεις τύπους αποτελεσμάτων:

- i) Δημιουργεί ένα αρχείο κειμένου που περιέχει έναν πίνακα, όπου το κάθε στοιχείο του πίνακα αντιστοιχεί στο διπλό διαφορικό ρυθμό παραγωγής νετρονίων ανά mC πρωτονίων. Η σειρά του στοιχείου στον πίνακα, δηλώνει την ενέργεια του εκπεμπόμενου νετρονίου ενώ ο αριθμός της στήλης δηλώνει τη γωνία εκπομπής του νετρονίου.
- ii) Ένα δεύτερο είδος αποτελεσμάτων είναι ένα αρχείο εξόδου σε μορφή πίνακα. Ο πίνακας αποτελείται από δύο στήλες, όπου η πρώτη στήλη αντιστοιχεί σε ενέργειες νετρονίων (keV) και η δεύτερη δηλώνει τον αριθμό των παραγόμενων νετρονίων ανά keV. Ο αριθμός των παραγομένων νετρονίων προκύπτει από την γωνιακή ολοκλήρωση του διπλού διαφορικού ρυθμού

παραγωγής νετρονίων [21].

- iii) Τέλος το τρίτο είδος αποτελεσμάτων αφορά τον ολικό αριθμό παραγόμενων νετρονίων ο οποίος προκύπτει από τη διπλή ολοκλήρωση του διπλού διαφορικού ρυθμού παραγωγής νετρονίων των αντιδράσεων ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$ και ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$ για συγκεκριμένη γεωμετρία.

Για την αξιολόγηση των αποτελεσμάτων του κώδικα CONY πραγματοποιήθηκε σύγκριση τόσο με πειραματικά δεδομένα όσο και με άλλες υπολογιστικές μεθόδους για την παραγωγή νετρονίων μέσω των αντιδράσεων ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$ και ${}^3\text{H}(d, n){}^4\text{He}$. Ειδικότερα, για την αντίδραση ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$ κοντά στο ενεργειακό κατώφλι της αντίδρασης, το οποίο αντιστοιχεί σε ενέργεια πρωτονίου $E_p = 1.88$ MeV, η σύγκριση των αποτελεσμάτων με τα πειραματικά δεδομένα από το Ινστιτούτο της Καρλσρούης (KIT - Karlsruhe Institute of Technology) οδηγεί στο συμπέρασμα πως αποδίδει αξιόπιστα αποτελέσματα [22]. Επίσης η συμφωνία μεταξύ του κώδικα CONY και του προγράμματος NeuSDesc - Neutron Source Description [28], το οποίο αναπτύχθηκε στο Ινστιτούτο IRMM (Institute for Reference Materials and Measurements) επιβεβαιώνουν την ορθότητα των υπολογισμών του λογισμικού CONY.

Το λογισμικό CONY σύμφωνα με τα παραπάνω μπορεί να χρησιμοποιηθεί στον σχεδιασμό πειραμάτων νετρονίων δεδομένου ότι παρέχει ασφαλή συμπεράσματα τόσο ως προς τη ροή των νετρονίων όσο και ως προς την ενεργειακή τους κατανομή. Επιπλέον ένα σημαντικό στοιχείο όπου πρέπει να τονιστεί είναι, πως ο πηγαίος κώδικας του λογισμικού CONY είναι σε γλώσσα προγραμματισμού C++ χωρίς εξαρτήσεις από βιβλιοθήκες ή άλλου είδους αρχεία που εξαρτώνται από το λογισμικό του υπολογιστή. Αυτό πρακτικά σημαίνει ότι μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε οποιοδήποτε λειτουργικό σύστημα αλλά και ότι ο χρήστης έχει την δυνατότητα επέμβασης στον ίδιο των κώδικα ώστε να μπορεί να το εξειδικεύσει, αν χρειαστεί, στις επιμέρους ανάγκες του κάθε πειράματος.

Επιπλέον, η παραγωγή του διπλού διαφορικού ρυθμού παραγωγής νετρονίων, επιτρέπει τη χρήση του λογισμικού CONY και του αρχείου που παράγεται, ως δεδομένα εισόδου σε προγράμματα προσομοιώσεων όπως για παράδειγμα είναι

το MCNP [3] και το GEANT4 [4]. Τα προγράμματα προσομοιώσεων μπορούν να αποδώσουν με μεγαλύτερη ακρίβεια τα χαρακτηριστικά της παραγόμενης δέσμης νετρονίων. Συγκεκριμένα, αποδίδονται πληροφορίες τόσο για τη σκέδαση νετρονίων στη γραμμή παραγωγής νετρονίων όσο και για τη σκέδαση νετρονίων από τα διαφορετικά μέρη και συστατικά του στόχου (στόχοι αναφοράς, κύριος στόχος). Ταυτόχρονα, με αυτόν τον τρόπο συνυπολογίζονται τα νετρόνια που σχεδιάζονται στον περιβάλλοντα χώρο, παρέχοντας έτσι μια όσο το δυνατόν πληρέστερη και λεπτομερή περιγραφή της χωρικής και ενεργειακής κατανομής των νετρονίων.

Υπενθυμίζεται πως η υπολογιστική μέθοδος για τον χαρακτηρισμό της δέσμης νετρονίων χρησιμοποιείται ως μία εναλλακτική τεχνική για την απόδοση βασικών χαρακτηριστικών των νετρονίων της δέσμης, όταν δεν υποστηρίζεται εργαστηριακά η παλμική λειτουργία του επιταχυντή για την πραγματοποίηση μετρήσεων χρόνου πτήσης των νετρονίων. Το γεγονός αυτό αποτέλεσε και το βασικό κίνητρο της εργασίας αυτής, καθώς η υποδομή στο Ινστιτούτο Πυρηνικής και Σωματιδιακής Φυσικής του Ε.Κ.Ε.Φ.Ε “Δημόκριτος” στην Αθήνα δεν υποστηρίζει προς το παρόν παλμική λειτουργία του επιταχυντή, συνεπώς ο υπολογισμός των χαρακτηριστικών της δέσμης νετρονίων είναι και ο μοναδικός τρόπος προσδιορισμού της ενεργειακής κατανομής των νετρονίων. Στο σημείο αυτό θα πρέπει να τονιστεί η σημαντικότητα της ενεργειακής κατανομής των νετρονίων της δέσμης στον προσδιορισμό της ενεργού διατομής αντιδράσεων ή στον προσδιορισμό της ολικής ροής μέσω αντιδράσεων αναφοράς.

Στο μέλλον θα είχε ιδιαίτερο ενδιαφέρον η ανάπτυξη του κώδικα CONY για την απόδοση της ενεργειακής και χωρικής κατανομής νετρονίων που παράγονται από άλλες αντιδράσεις όπως για παράδειγμα η αντίδραση ${}^2\text{H}(d, n){}^3\text{He}$. Επιπλέον η συνεισφορά των παρασιτικών αντιδράσεων διάσπασης (break up) του δευτερίου ${}^2\text{H}(d, pn){}^2\text{H}$ και ${}^2\text{H}(d, 2n){}^2\text{H}$. Τελειώνοντας, θα ήταν σίγουρα χρήσιμο να ληφθούν υπόψη σε μια μελλοντική έκδοση του λογισμικού CONY, τα φαινόμενα ενεργειακού και γωνιακού διασχεδασμού για την λεπτομερέστερη απόδοση της ενεργειακής και χωρικής κατανομής νετρονίων με μεγαλύτερη ακρίβεια.

Παράρτημα Α΄

Ο κώδικας CONY για την αντίδραση ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$

Ο κώδικας CONY παρέχει το διπλό διαφορικό ρυθμό παραγωγής νετρονίων της αντίδρασης ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$ ως συνάρτηση της γωνίας εκπομπής και της ενέργειας του νετρονίου για κάθε mC πρωτονίων. Στο Κεφάλαιο 2 παρουσιάστηκε η μέθοδος υπολογισμού του διπλού διαφορικού ρυθμού παραγωγής νετρονίων για την ενδόθερμη αντίδραση ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$. Παρακάτω παρουσιάζονται οι βασικές συναρτήσεις οι οποίες χρησιμοποιούνται από το πρόγραμμα και αφορούν την κινηματική των αντιδράσεων, την απώλεια ενέργειας των ιόντων στον στόχο, τη διαφορική ενεργό διατομή καθώς επίσης και τις αντίστοιχες συναρτήσεις παραμετροποίησης. Ο κώδικας έχει γραφεί σε γλώσσα προγραμματισμού C++.

Α΄.1 Σύντομη περιγραφή του κώδικα

Το κύριο τμήμα του προγράμματος είναι μικρό καθώς όλοι οι υπολογισμοί για την απόδοση του ολικού αριθμού παραγόμενων νετρονίων εκτελούνται από εξωτερικές συναρτήσεις.

Η πιο σημαντική συνάρτηση του κώδικα CONY είναι η συνάρτηση που υπολογίζει το διπλό διαφορικό ρυθμό παραγωγής νετρονίων και ονομάζεται “differ Yield” (differential yield).

Οι υπόλοιπες συναρτήσεις καλούνται από τη βασική συνάρτηση differYield αποδίδοντας την ισχύ ανασχέσεως του πρωτονίου εντός του στόχου φθοριούχο λιθίου, τη διαφορική ενεργό διατομή της αντίδρασης αλλά και την ενέργεια των πρωτονίων η οποία αντιστοιχεί σ' ένα και μοναδικό ζεύγος γωνίας και ενέργειας εκπομπής νετρονίου.

Ο κώδικας αποδίδει τρία είδη αποτελεσμάτων, όπου τα δύο είδη αποτελεσμάτων παρέχονται σε αρχεία κειμένου. Πιο συγκεκριμένα, το πρώτο είδος αποτελεσμάτων παρέχεται σε μορφή πίνακα όπου κάθε στοιχείο του πίνακα αντιστοιχεί στο διπλό διαφορικό ρυθμό παραγωγής νετρονίων για κάθε mC πρωτονίων. Ο αριθμός της σειράς του στοιχείου αντιστοιχεί στην ενέργεια νετρονίου σε μονάδες keV ενώ ο αριθμός της στήλης αντιστοιχεί στη γωνία εκπομπής του νετρονίου σε μονάδες deg. Η δεύτερη επιλογή εξόδου δημιουργεί και πάλι ένα αρχείο κειμένου το οποίο εκφράζει την ενεργειακή κατανομή των νετρονίων. Το αρχείο περιέχει δύο στήλες, στην μία εμφανίζεται η ενέργεια των νετρονίων σε keV και στην άλλη ο αριθμός των παραγόμενων νετρονίων neutrons/mC keV για κάθε αρχική ενέργεια πρωτονίου. Ο αριθμός των παραγόμενων νετρονίων προκύπτει από την ολοκλήρωση ως προς την στερεά γωνία παρέχοντας με αυτόν τον τρόπο την ενεργειακή κατανομή των νετρονίων στο δείγμα αν η διάταξη μπορεί να θεωρηθεί σημειακή πηγή νετρονίων. Στην περίπτωση αυτή ο χρήστης πρέπει να δώσει ως δεδομένα εισόδου εκτός από την ενέργεια της δέσμης πρωτονίων, το πάχος του στόχου και τα όρια ολοκλήρωσης που αφορούν τη γωνία ανίχνευσης νετρονίων. Τέλος το τελευταίο είδος αποτελεσμάτων προκύπτει με τη διπλή ολοκλήρωση του διπλού διαφορικού ρυθμού παραγωγής νετρονίων δηλαδή και ως προς την στερεά γωνία και ως προς την ενέργεια των νετρονίων. Το αποτέλεσμα αυτής της διπλής ολοκλήρωσης είναι ένας αριθμός και αφορά τον συνολικό αριθμό παραγόμενων νετρονίων για συγκεκριμένη γεωμετρία σε συγκεκριμένη ενεργειακή περιοχή.

A'.2 Η συνάρτηση “differYield”

Τα ορίσματα που δέχεται η συνάρτηση differYield είναι τέσσερα και αντιστοιχούν στην αρχική ενέργεια της δέσμης πρωτονίων Ep_0 , την ενέργεια εξόδου των πρωτονίων από τον στόχο φθοριούχο λιθίου $Epexit$, την ενέργεια των παραγόμενων νετρονίων En αλλά και τη γωνία εκπομπής τους θ_n . Η συνάρτηση επιστρέφει τη τιμή του ολικού αριθμού παραγόμενων νετρονίων για κάθε mC πρωτονίων. Οι υπολογισμοί αφορούν τη θεωρία που περιγράφηκε στο Κεφάλαιο 2 (2.3, 2.4). Παρακάτω παρουσιάζεται η δομή της συνάρτησης differYield.

```
double differYield (double Ep0,double En, double theta ,double Epexit)
{
  double mp=938.78329 ,mLi=6535.36791 ,mn=939.56564 ,mBe=6536.22973;
  double A = 164.913E-24 ;
  double C0 = 6.;
  int sign;
  double f = 0.925;
  double N0 = 6.0221367E23;
  double e = 1.60217733E-16;
  double Aeff = 25.931;
  double density = 2.635;
  double StopPower;
  double g ,Eth ,Estar ,Q, ksi ,Eeq ,thetacm ,thetamax ,x ,dif ,difYield ;
  Q = mp+mLi-mBe-mn;
  Eth = -Q/(1.-mp/(mBe+mn))*1000.;
  Estar = mBe*(mBe+mn-mp)*Eth/(mBe*(mBe+mn-mp)-mp*mn);

  double Ep;

  if (En==0.)
    En=0.00000001;

  Ep=ProtonEnerg (En, theta *180./3.141592654);
  g=sqrt (mp*mn*(Ep/(Ep-Eth))/(mBe*(mBe+mn-mp)));

  ksi = sqrt (1./(g*g)-pow (sin (theta) ,2.));
  thetamax= 3.141592654;
  Eeq = (-1.+g*g)*mBe*(mBe+mn-mp)*(Ep-Eth)/pow ((mBe+mn) ,2.);
  x = C0*sqrt (1.-(Eth/Ep));
  StopPower = enLoss (1.,Ep)/0.0001;
  if (Ep>Estar)
  {
    thetacm = theta + asin (g*sin (theta));
    sign = 0;
  }
  else
  {
    thetamax=asin (1./g);
    if ( En >= Eeq )
    {
      thetacm = theta + asin (g*sin (theta));
      sign = 0;
    }
    else
    {
      thetacm = 3.141592654 + theta - asin (g*sin (theta));
      sign = 1;
    }
  }
}
```

```

    }
}

if (Ep<=Ep0 && theta<=thetamax && Ep>Epexit)
{
  if (Ep<=1925.)
  {
    if (sign == 0)
    {
      dif = A*C0*pow((mBe+mn),2.)*(cos(theta)+ksi)
        *sqrt(mp*mn/(mBe*(mBe+mn-mp)))
        /(pow((1.+x),2.)*(mp*mn*Ep*ksi*(cos(theta)+ksi)
          +mBe*(mBe+mn-mp)*Eth));

    }
    else
    {
      dif = (-1.)*A*C0*pow((mBe+mn),2.)*(cos(theta)-ksi)*
        sqrt(mp*mn/(mBe*(mBe+mn-mp)))
        /(pow((1.+x),2.)*(mp*mn*Ep*ksi*(cos(theta)-ksi)
          -mBe*(mBe+mn-mp)*Eth));

    }
  }
  else
  {
    if (sign == 0)
    {
      dif = pow((mBe+mn),2.)*(cos(theta)+ksi)*g*Ep
        *sigmacm(Ep,thetacm)*1.E-27
        /(mp*mn*Ep*ksi*(cos(theta)+ksi)+mBe*(mBe+mn-mp)*Eth);

    }
    else
    {
      dif = (-1.)*pow((mBe+mn),2.)*(cos(theta)-ksi)*g*Ep
        *sigmacm(Ep,thetacm)*1.E-27
        /(mp*mn*Ep*ksi*(cos(theta)-ksi)-mBe*(mBe+mn-mp)*Eth);

    }
  }
}
else
{
  dif = 0.;
}
difYield = f*N0*dif/(e*Aeff*StopPower/density);

return difYield*2.*3.141592654*sin(theta);
}

```

A'.3 Η συνάρτηση “ProtonEnerg” - Η κινηματική της αντίδρασης

Η συνάρτηση ProtonEnerg είναι μια εξωτερική συνάρτηση η οποία καλείται από τη βασική συνάρτηση differYield. Δέχεται ως ορίσματα την ενέργεια σε μονάδες MeV και τη γωνία εκπομπής σε deg των νετρονίων και αποδίδει την αρχική ενέργεια πρωτονίου που προκάλεσε την αντίδραση σε μονάδες keV. Όπως αναφέρθηκε και στην παράγραφο 2.3 στις πυρηνικές αντιδράσεις δύο σωματιδίων, συνηθίζεται ο προσδιορισμός μίας εκ των δύο κινητικής ενέργειας των προϊόντων, αν γνωρίζεται η γωνία εκπομπής και η αρχική ενέργεια βλήματος. Στην παρούσα εργασία επιλέγεται η αντίστροφη φορά των υπολογισμών δηλαδή από την ενέργεια και τη γωνία εκπεμπόμενου σωματιδίου υπολογίζεται η αρχική κινητική ενέργεια του βλήματος, αυτό φαίνεται άλλωστε και από τα ορίσματα της συνάρτησης ProtonEnerg η οποία παρουσιάζεται παρακάτω.

```
double ProtonEnerg (double En,double thn)
{
  double mp=938.78329,mLi=6535.36791,mn=939.56564,mBe=6536.22973;
  double Pn,Pnx,Q,Pp;
  En=En/1000.;
  Pn=sqrt(2.*mn*En);
  Pnx=Pn*cos(thn*3.14159265/180.);
  Q=mp+mLi-mn-mBe;
  double a,b,c,D;
  a=0.5*(1./mp-1./mBe);
  b=Pnx/mBe;
  c=Q-Pn*Pn*0.5*(1./mn+1./mBe);
  D=b*b-4.*a*c;

  Pp=(-b+sqrt(D))/(2.*a);

  if (Pp<0.)
  {
    Pp=(-b-sqrt(D))/(2.*a);
  }
  return Pp*Pp/(2.*mp)*1000.;
}
```

A'.4 Η συνάρτηση “enLoss” - Ισχύς ανασχέσεως των πρωτονίων εντός του στόχου LiF

Για την ορθή ροή του προγράμματος απαιτείται αμέσως μετά τη κλήση των παραπάνω συναρτήσεων και η κλήση της συνάρτησης “enLoss” η οποία επιστρέφει την συνολική απώλεια ενέργειας του πρωτονίου μέσα στον στόχο LiF σε μονάδες keV. Τα ορίσματα που δέχεται η συνάρτηση είναι η ενέργεια του πρωτονίου σε μονάδες keV και το πάχος του στόχου σε μονάδες μm. Η συνάρτηση “enLoss” καλεί ακόμη δύο συναρτήσεις που ονομάζονται “zieglLi” και “zieglF”. Οι τελευταίες εμφανίζονται απαραίτητες για τον υπολογισμό της ισχύος ανασχέσεως για κάθε ενέργεια πρωτονίου σύμφωνα με την αναφορά [10]. Λόγω του ότι ο στόχος είναι σύνθετος πρέπει να ληφθούν υπόψιν τόσο οι αλληλεπιδράσεις των πρωτονίων με τους πυρήνες του λιθίου όσο και με τους πυρήνες του φθορίου (βλέπε παράγραφο 2.2.2).

```
double enLoss (double pathLeng, double incEnergy)
{
    double energLoss = 0.0;
    double finalEnLoss = 0.0;
    double density = 2.635;
    double atomweight=25.931;
    if (pathLeng<=1)
    {
        energLoss=pathLeng*1.0e-4*density*(zieglLi(incEnergy)+zieglF(incEnergy))
        *6.02231e5/atomweight;
        finalEnLoss=energLoss;
    }
    else
    {
        int k;
        double restPath;
        k=static_cast<int>(pathLeng/1.0);
        for (int i=0;i<k;i++)
        {
            energLoss = 1.0*1.0e-4*density*(zieglLi(incEnergy)+zieglF(incEnergy))
            *6.02231e5/atomweight;
            incEnergy = incEnergy-energLoss;
            finalEnLoss = finalEnLoss + energLoss;
        }
        restPath = pathLeng-static_cast<int>(k)*1.0;
        energLoss = restPath*1.0e-4*density*(zieglLi(incEnergy)+zieglF(incEnergy))
        *6.02231e5/atomweight;
        finalEnLoss = finalEnLoss + energLoss;
    }
    return finalEnLoss;
}
double zieglLi(double energy)
{
    const double coeffLi [12] = {1.411,1.6,725.6,3013.0,0.04578,0.00153,
    2.147e4,-0.5831,0.562,-0.1183,
    0.009298,-0.0002498};
```

```

double atomWeight = 6.941;
double bsq;
double stoppingPower;
double sum=0.0;
energ=energ/1.007276;
bsq=1.0-pow((1.0/(energ/938272.0+1.0)),2);

for (int i=0;i<5;i++)
{
sum=sum+coeffLi[i+7]*pow(log(energ),i);
}
stoppingPower=(coeffLi[5]/bsq)*(log(coeffLi[6]*bsq/(1-bsq))-bsq-sum);
energ=1.007276*energ;
return stoppingPower;
}
double zieg1F(double energ)
{
const double coeffF [12]={2.085,2.352,2157,2634,0.01816,0.004589,
8517,-5.571,2.449,-0.3781,0.02483,-0.0005919};

double bsq;
double stoppingPower;
double sum=0.0;
energ=energ/1.007276;
bsq=1.0-pow((1.0/(energ/938272.0+1.0)),2);
for (int i=0;i<5;i++)
{
sum=sum+coeffF[i+7]*pow(log(energ),i);
}
stoppingPower=(coeffF[5]/bsq)*(log(coeffF[6]*bsq/(1-bsq))-bsq-sum);
energ=1.007276*energ;
return stoppingPower;
}

```

Α'.5 Η συνάρτηση “sigmacm” - Υπολογισμός της διαφορικής ενεργού διατομής

Στις υποενότητες 2.4.1, 2.4.2 και 2.4.3 αναπτύχθηκε η μέθοδος υπολογισμού του διπλού διαφορικού ρυθμού παραγωγής νετρονίων της αντίδρασης ${}^7\text{Li}(p, n){}^7\text{Be}$ τόσο κοντά στο ενεργειακό κατώφλι όσο και μακριά από αυτό, με την τεχνική της παραμετροποίησης σύμφωνα με τις αναφορές [16] [15] αντίστοιχα. Η συνάρτηση “sigmacm” διαβάζει από εξωτερικά αρχεία σε μορφή πίνακα, τους παράγοντες A_i και $\frac{d\sigma_{pn}(0^\circ)}{d\Omega'}$ και υπολογίζει για την κάθε ενέργεια πρωτονίου και γωνία θ' (πολική γωνία εκπομπής νετρονίου στο σύστημα αναφοράς κέντρου μάζας) την ενεργό διατομή. Οι πίνακες που περιέχουν τους παράγοντες αυτούς (εξίσωση 2.11) αποδίδουν τιμές οι οποίες δεν συμπίπτουν κατά κανόνα με τις ενέργειες για τις οποίες εκτελείται ο υπολογισμός. Για τον λόγο αυτό,

καλούνται δύο επιπλέον συναρτήσεις οι “spline” και “splint” [31], οι οποίες παρέχουν τη δυνατότητα υπολογισμού των παραγόντων για οποιαδήποτε ενέργεια πρωτονίου. Ακολουθεί η δομή των συναρτήσεων sigmacm, spline και splint.

```

double sigmacm (double Ep,double theta)
{
if (Ep>=1925. && Ep<=3700.)
{
Ep=Ep/1000.;
ifstream incoef ;
incoef.open("coef.dat");
ifstream insigma0;
insigma0.open("sigma0.dat");

int l=22;
double dummy1;
char dummy2[8];
double Energy [22] , a [22][3] , sigma0 [22] , min=10. , temp, ds ;
double a0 [22] , a1 [22] , a2 [22] , y2 [22];
double s_0 , a_0 , a_1 , a_2 ;
for (int i=0; i < 22; i++)
{
for (int k=0; k < 3; k++)
{
incoef >> Energy [ i ] >> dummy1 >> a [ i ] [ k ] >> dummy2 >> dummy1 ;
}
insigma0 >> dummy1 >> sigma0 [ i ] >> dummy2 >> dummy1 ;
a0 [ i ] = a [ i ] [ 0 ] ;
a1 [ i ] = a [ i ] [ 1 ] ;
a2 [ i ] = a [ i ] [ 2 ] ;
y2 [ i ] = 0. ;
}

incoef.close ();
insigma0.close ();
spline (Energy , l , sigma0 , l , 1e30 , 1e30 , y2 , l ) ;

s_0 = splint (Energy , l , sigma0 , l , y2 , l , Ep) ;

spline (Energy , l , a0 , l , 1e30 , 1e30 , y2 , l ) ;
a_0 = splint (Energy , l , a0 , l , y2 , l , Ep) ;

spline (Energy , l , a1 , l , 1e30 , 1e30 , y2 , l ) ;
a_1 = splint (Energy , l , a1 , l , y2 , l , Ep) ;

spline (Energy , l , a2 , l , 1e30 , 1e30 , y2 , l ) ;
a_2 = splint (Energy , l , a2 , l , y2 , l , Ep) ;

ds = s_0 * (a_0 + a_1 * cos (theta) + a_2 * 0.25 * (3. * cos (2. * theta) + 1.)) ;
return ds ;
}
else
cerr << "\nproton_energy_out_of_data_range_!" << endl ;
}

void spline ( double x [] , int o , double y [] , int t , const double ypl ,
const double ypn , double y2 [] , int m)
{
int i , k , n ;

```

```

double p, qn, sig, un;
n=m;
double u[n-1];
if (yp1>0.99e30)
    y2[0]=u[0]=0.0;
else {
    y2[0] = -0.5;
    u[0]=(3.0/(x[1]-x[0]))*((y[1]-y[0])/(x[1]-x[0])-yp1);
}

for (i=1 ; i<n-1;i++) {
    sig=(x[i]-x[i-1])/(x[i+1]-x[i-1]);
    p=sig*y2[i-1]+2.0;
    y2[i]=(sig-1.0)/p;
    u[i]=(y[i+1]-y[i])/(x[i+1]-x[i])-(y[i]-y[i-1])/(x[i]-x[i-1]));
    u[i]=(6.0*u[i]/(x[i+1]-x[i-1])-sig*u[i-1])/p;
}

if (ypn > 0.99e30)
    qn=un=0.0;
else {
    qn=0.5;
    un=(3.0/(x[n-1]-x[n-2]))*(ypn-(y[n-1]-y[n-2])/(x[n-1]-x[n-2]));
}
y2[n-1]=(un-qn*u[n-2])/(qn*y2[n-2]+1.0);
for (k=n-2;k>=0;k--)
    y2[k]=y2[k]*y2[k+1]+u[k];
}

double splint ( double xa [],int w,double ya [],int z ,
                double y2a [],int s, double x)
{
int k;
double h,b,a;

int n=w;
int klo=0;
int khi=n-1;
while (khi-klo>1) {
    k=(khi+klo) >> 1;
    if (xa[k] > x) khi=k;
    else klo=k;
}

h= xa[khi]-xa[klo];
if (h==0.0)
    cerr <<"Bad_xa_input"<<endl;
a=(xa[khi]-x)/h;
b=(x-xa[klo])/h;
double y=a*ya[klo]+b*ya[khi]+((a*a*a-a)*y2a[klo]+
    (b*b*b-b)*y2a[khi])*(h*h)/6.0;
return y;
}

```

A'.6 Αριθμητική ολοκλήρωση

Όπως επισημάνθηκε στην αρχή του Παραρτήματος τα δύο είδη αποτελεσμάτων του κώδικα προκύπτουν από αριθμητικές ολοκληρώσεις. Στη μία περίπτωση πραγματοποιείται ολοκλήρωση ως προς τη στερεά γωνία και στην άλλη παράλληλα εκτελείται ολοκλήρωση ως προς τη στερεά γωνία εκπομπής και ως προς την ενέργεια εκπομπής των νετρονίων. Στις δύο περιπτώσεις η ποσότητα που ολοκληρώνεται είναι ο διπλός διαφορικός ρυθμός παραγωγής νετρονίων. Οι συναρτήσεις “trapzd” και “qtrap” πραγματοποιούν την αριθμητική ολοκλήρωση [31]. Η πρώτη συνάρτηση εκτελεί το βήμα της ολοκλήρωσης και η δεύτερη υπολογίζει τον αριθμό των βημάτων που απαιτούνται για μεγαλύτερη ακρίβεια (σταθερά EPS). Ο μέγιστος αριθμός βημάτων ορίζεται από τον ακέραιο αριθμό JMAX κάθε φορά. Οι συναρτήσεις “trapzd” και “qtrap” για την αριθμητική ολοκλήρωση εμφανίζονται παρακάτω.

```
double trapzd (const double a, const double b, const int n,
              double protonE, double neutronE, double Epexit)
{
    double x,tnm,sum,del;
    static double s;
    int it,j;

    if (n==1){
        return (s=0.5*(b-a)*(differYield(protonE,neutronE,a,Epexit)
            +differYield(protonE,neutronE,b,Epexit)));
    }else{
        for (it=1,j=1;j<n-1;j++) it <<=1;
        tnm=it;
        del=(b-a)/tnm;
        x=a+0.5*del;
        for (sum=0.0,j=0;j<it;j++,x+=del)sum +=
            differYield(protonE,neutronE,x,Epexit);
        s=0.5*(s+(b-a)*sum/tnm);
        return s;
    }
}

double qtrap (const double a, const double b, double protonE,
             double neutronE, double Epexit)
{
    const int JMAX=20;
    const double EPS=1.0e-3;
    int j;
    double s, olds=0.0;
    for (j=0;j<JMAX;j++){
        s=trapzd (a,b,j+1,protonE,neutronE,Epexit);
        if (j>5)
            if (fabs(s-olds)<EPS*fabs(olds) ||
                (s==0.0 && olds == 0.0)) return s;
            olds=s;
    }
    cerr <<"Too_many_steps_in_routine_gtrap"<<endl;
    return 0.0;
}
```

}

Παράρτημα Β΄

Ο κώδικας CONY για την αντίδραση ${}^3\text{H}(\text{d}, \text{n}){}^4\text{He}$

Σύμφωνα με την θεωρία που αναπτύχθηκε στο Κεφάλαιο 3 εκτελούνται οι υπολογισμοί από τον κώδικα CONY για το διπλό διαφορικό ρυθμό παραγωγής των νετρονίων μέσω της αντίδρασης ${}^3\text{H}(\text{d}, \text{n}){}^4\text{He}$. Οι κινηματικές εξισώσεις που περιγράφουν την εξώθερμη αντίδραση D–T σύμφωνα με την αναφορά [14], η απώλεια ενέργειας του δευτερίου στον στόχο Ti/T [10] καθώς επίσης και ο υπολογισμός της διαφορικής ενεργού διατομής της αντίδρασης συνιστούν εκ νέου, τις βασικές εξωτερικές συναρτήσεις του κώδικα.

Ο κώδικας σε πλήρη αντιστοιχία με τον προηγούμενο, παρέχει τριών ειδών αποτελέσματα. Το πρώτο είδος αποτελεσμάτων είναι ένα αρχείο πίνακα του οποίου τα στοιχεία εκφράζουν το διπλό διαφορικό ρυθμό παραγωγής νετρονίων για κάθε mC δευτερίου. Η σειρά του πίνακα στην οποία βρίσκεται το στοιχείο αντιστοιχεί στην ενέργεια των εκπεμπόμενων νετρονίων, ενώ ο αριθμός της στήλης εκφράζει την αντίστοιχη γωνία εκπομπής. Επίσης παρέχεται η ενεργειακή κατανομή των νετρονίων σε ξεχωριστό αρχείο εξόδου καθώς επίσης και ο ολικός αριθμός παραγομένων νετρονίων της αντίδρασης D-T. Στην περίπτωση της ενεργειακής κατανομής έχει προηγηθεί η ολοκλήρωση του διπλού διαφορικού ρυθμού παραγωγής νετρονίων ως προς τη στερεά γωνία ενώ στην περίπτωση του ολικού αριθμού παραγομένων νετρονίων έχει προηγηθεί διπλή

ολοκλήρωση και ως προς τη στερεά γωνία αλλά και ως προς την ενέργεια του νετρονίου στην περιοχή ενδιαφέροντος. Στα ένθετα που ακολουθούν παρουσιάζονται οι εξωτερικές συναρτήσεις και η σημασία κάθε μίας από αυτές, στον υπολογισμό του διπλού διαφορικού ρυθμού παραγωγής νετρονίων.

B'.1 Η συνάρτηση “differYield”

Η συνάρτηση differYield εμφανίζεται και πάλι ως η βασική συνάρτηση του προγράμματος. Καλείται από το κύριο τμήμα του προγράμματος περιέχοντας όλη τη πληροφορία που χρειάζεται, για την απόδοση της ενεργειακής και χωρικής κατανομής των παραγόμενων νετρονίων. Στη συνάρτηση differYield καλούνται και οι υπόλοιπες εξωτερικές συναρτήσεις όπως παρουσιάζεται παρακάτω, για τον υπολογισμό του διπλού διαφορικού ρυθμού παραγωγής νετρονίων (3.1) σύμφωνα με την αναφορά [21]. Τα ορίσματα που δέχεται είναι η ενέργεια του δευτερίου Ed_0 , η ενέργεια εξόδου των δευτερίων από τον στόχο T/Ti Ed_{exit} , η ενέργεια των παραγόμενων νετρονίων E_n αλλά και η αντίστοιχη γωνία εκπομπής θ_n . Όπως αναφέρθηκε στη παράγραφο 3.4 εμφανίζεται αναγκαία η γνώση της διαφορικής ενεργού διατομής στο σύστημα αναφοράς του κέντρου μάζας και στο σύστημα αναφοράς του εργαστηρίου. Τους κατάλληλους υπολογισμούς για τη μετατροπή αυτή, τους πραγματοποιεί η συνάρτηση “Jac” η οποία δέχεται ως ορίσματα την ενέργεια του δευτερίου σε μονάδες keV και τη γωνία εκπομπής των νετρονίων σε deg.

```

double differYield (double Ed0, double En, double theta ,double Edexit)
{
double Q, difYield ,Edeu, thetacm ,gamma, dif , thickness;
double m1=1875.6, m2=2808.9, m3=939.566, m4=3727.4 ;
double N0 = 6.0221367E23;
double e = 1.60217733E-16;
double Aeff = 49.5;
double density = 1.85;
double StopPower;
Q =17589.;

Edeu=DENerg (En, theta *180./3.14159);
StopPower=enLoss (1. ,Edeu)/0.0001;

if (Edeu>Edexit && Edeu<=Ed0){
gamma=sqrt (((m1*m3)/(m2*m4))* (Edeu/(Edeu+(Q*(1.+m1/m2))));
if (gamma>0){
thetacm=acos((-gamma*pow(tan(theta),2)+sqrt(1+pow(tan(theta),2)-
pow(gamma,2)*pow(tan(theta),2)))/(1+pow(tan(theta),2)));
if (sigmacm(Edeu, thetacm)>0){
dif=1.E-27*(sigmacm(Edeu, thetacm)/ jac (Edeu, theta *180/3.1415))*
diffenerg (En, theta *180/3.14159);
} else{
sigmacm (Edeu, thetacm)=sigmacm (Edeu, thetacm);

```

```

        dif=0;
        }

    }

} else{
    sigmacm(Edeu, thetacm)=sigmacm(Edeu, thetacm);
    dif=0.;
    difYield=0;
    }

    difYield =1.54*(N0*dif*density)/(Aeff*e*StopPower);

    return difYield*2*3.1415*sin(theta);

}

double Jac(double Edeu, double theta)
{
    double m1=1875.6,m2=2808.7,m3=939.566,m4=3727.42,E1,Et,E3,dscm,thetacm,A,B,C,D,gamma,jacb; //in Mev/c2
    double Q=17.589,psi;
    theta=theta*3.14159/180;
    Edeu=Edeu/1000.;

    if(theta <=1.658 && theta >0){
        gamma=sqrt(((m1*m3)/(m2*m4))*(Edeu/(Edeu+(Q*(1+m1/m2)))));
        thetacm=acos((-gamma*pow(tan(theta),2)+sqrt(1+pow(tan(theta),2))-
        pow(gamma,2)*pow(tan(theta),2)))/(1+pow(tan(theta),2)));
    } else{
        gamma=sqrt(((m1*m3)/(m2*m4))*(Edeu/(Edeu+(Q*(1+m1/m2)))));
        thetacm=acos((-gamma*pow(tan(theta),2)-sqrt(1+pow(tan(theta),2))-
        pow(gamma,2)*pow(tan(theta),2)))/(1+pow(tan(theta),2)));
    }

    Et=Edeu+Q;
    A=(m1*m4*(Edeu/Et))/((m1+m2)*(m3+m4));
    B=(m1*m3*(Edeu/Et))/((m1+m2)*(m3+m4));
    C=((m2*m3)/((m1+m2)*(m3+m4)))*(1+(m1*Q)/(m2*Et));
    D=((m2*m4)/((m1+m2)*(m3+m4)))*(1+(m1*Q)/(m2*Et));

    if(thetacm >1.658 && theta >0){
        psi=3.14159+atan(sin(thetacm)/(cos(thetacm)+gamma));
    } else{
        psi=atan(sin(thetacm)/(cos(thetacm)+gamma));
    }

    jacb=(sqrt(A*C)*sqrt((D/B)-pow(sin(psi),2)))/(B*(cos(psi)+sqrt(((D/B)-pow(sin(psi),2))))*
    (cos(psi)+sqrt(((D/B)-pow(sin(psi),2)))));

    return jacb;
}

```

B'.2 Η συνάρτηση “DEnerg” - Η κινηματική της αντίδρασης

Η συνάρτηση DEnerg επιστρέφει την ενέργεια του δυτερίου σε μονάδες keV έχοντας λάβει ως ορίσματα, την ενέργεια των παραγόμενων νετρονίων E_n σε μονάδες keV και τη γωνία εκπομπής θ_n σε μονάδες deg. Ταυτόχρονα με την συνάρτηση DEnerg καλείται η συνάρτηση “diffenerg” η οποία υπολογίζει τον όρο $\frac{dE_d}{dE_n}$ σύμφωνα με την αναφορά [17] (Παράγραφος 3.3). Οι δύο συναρτήσεις παρουσιάζονται στο ένθετο που ακολουθεί.

```
double DEnerg (double En,double theta)
{
    double m1,m2,m3,m4,Ed;
    double Q=17.589;
    En=En/1000;
    theta=theta*3.14159/180.;
    m1=1875.6,m2=2808.9,m3=939.566,m4=3727.4;

    Ed=(1/pow(((m1*m3)-(m2*m4)),2))*(En*m2*(m1+m2)*m4*(m3+m4)+pow(m1,2)*m3*m4*Q+m1*m2*m3*m4*Q-m1*m2*pow(m4,2)*Q-
    pow(m2,2)*pow(m4,2)*Q+En*m1*(m1+m2)*m3*(m3+m4)*cos(2*theta)-
    sqrt(2)*sqrt((En*m1*pow((m1+m2),2)*m3*(m3+m4)*pow(cos(theta),2)*(-En*(m3+m4)*(m1*m3-2*m2*m4)+
    2*m4*(m1*m3-2*m2*m4)*Q+En*m1*m3*(m3+m4)*cos(2*theta)))));

    return Ed*1000;
}

double diffenerg(double En,double theta)
{
    double difenerg,Ed;
    theta=theta*3.14159/180.;
    En=En/1000.;
    difenerg=1.32084E-14*(2.28669E14+3.85126E13*cos(2*theta)-(3.00287E8*(En*pow(cos(theta),2)*
    (8.944E10+8.22436E9*cos(2*theta))+pow(cos(theta),2)*
    (-1.14091E12+8.944E10*En+8.22436E9*En*cos(2*theta)))))/
    (sqrt(En*pow(cos(theta),2)*(-1.14091E12+8.944E10*En+8.22436E9*En*cos(2*theta))));

    return difenerg;
}
```

B'.3 Η συνάρτηση “enLoss” - Ισχύς ανασχέσεως δευτερίου στον στόχο T/Ti

Ο υπολογισμός της ισχύος ανασχέσεως των δευτερίων εντός του στόχου T/Ti εκτελείται από την συνάρτηση enLoss για ενέργειες από 10 keV-10 MeV ενέργειες δευτερίου. Τα ορίσματα που δέχεται η συνάρτηση είναι το πάχος του στόχου δηλαδή το μήκος κατά το οποίο αλληλεπιδρούν τα πρωτόνια με τα ιόντα του στόχου και η αρχική ενέργεια του δευτερίου. Πιο συγκεκριμένα για δεδομένο μήκος και αρχική κινητική ενέργεια υπολογίζεται η ολική απώλεια ενέργειας των δευτερίων. Αυτό όμως που απαιτείται από την συνάρτηση “differYield” κατά τη κλήση της enLoss, είναι η ισχύς ανασχέσεως συνεπώς τίθεται το πρώτο όρισμα ίσο με τη μονάδα με αποτέλεσμα να επιστρέφει την απώλεια ενέργεια ανά μm δηλαδή την ισχύ ανασχέσεως. Σύμφωνα με τις αναφορές [10] η ισχύς ανασχέσεως υπολογίζεται από τις συναρτήσεις “zieglbeH” και “zieglbeTi” για ενέργειες δευτερίου 10 keV- 1 MeV ενώ από τις “zieglabH” και “zieglabTi” για ενέργειες 1 MeV-10 MeV.

```
double enLoss (double pathLeng, double incEnerg)
{
    double energLoss = 0.0, enl=0.0, energLoss1=0.0, energLoss2=0.;
    double finalEnLoss2 = 0.0, finalEnLoss1=0.0, fl=0.0, fin=0.0;
    double density = 1.85;
    double atomweight=48.875;
    int k;
    double restPath;
    k=static_cast<int>(pathLeng/0.1);

    for (int i=0;i<k;i++)
    {

        if(incEnerg<1000 && incEnerg>0){
            energLoss1 = 1.0e-5*density*(1.5*zieglbeH(incEnerg)+zieglbeTi(incEnerg))*6.02231e5/atomweight;
            if(incEnerg-energLoss1 >=0){
                incEnerg = incEnerg-energLoss1;
                finalEnLoss1 = finalEnLoss1 + energLoss1;
            }
        }
        if(incEnerg>=1000){
            energLoss2 = 1.0e-5*density*(1.5*zieglabH(incEnerg)+zieglabTi(incEnerg))*6.02231e5/atomweight;
            incEnerg = incEnerg-energLoss2;
            finalEnLoss2 = finalEnLoss2 + energLoss2;
        }

    }

    fl=finalEnLoss1+finalEnLoss2;
    enl=energLoss1+energLoss2;
    restPath = pathLeng-static_cast<int>(k)*0.1;
    energLoss = restPath*1.0e-4*fl;
    fin=energLoss+fl;

return fin;
}
```

```

}

double zieglabH(double energ)
{
const double coeffH [12]={1.262,1.44,242.6,1.2e+4,0.1159,0.0005099,5.436E4,-5.052,
2.049,-0.3044,0.01966,-0.0004659};

double bsq;
double stoppingPower;
double sum=0.0;
energ=energ/2;
energ=energ/1.007276;
bsq=1.0-pow((1.0/(energ/938272.0+1.0)),2);

for (int i=0;i<5;i++)
{
sum=sum+coeffH[i+7]*pow(log(energ),i);
}
stoppingPower=(coeffH[5]/bsq)*(log(coeffH[6]*bsq/(1-bsq))-bsq-sum);

return stoppingPower;
}

double zieglabTi(double energ)
{
const double coeffTi [12] = {4.862,5.496,5165,568.5,0.009474,0.01122,4443,-8.371,3.251,
-0.4513,0.02694,-0.0005886};

double bsq;
double stoppingPower;
double sum=0.0;
energ=energ/2;
energ=energ/1.007276;

bsq=1.0-pow((1.0/(energ/938272.0+1.0)),2);

for (int i=0;i<5;i++)
{
sum=sum+coeffTi[i+7]*pow(log(energ),i);
}
stoppingPower=(coeffTi[5]/bsq)*(log(coeffTi[6]*bsq/(1-bsq))-bsq-sum) ;

return stoppingPower;
}

double zieglbeH(double energ)
{
const double coeffH [12]={1.262,1.44,242.6,1.2e+4,0.1159,0.0005099,5.436E4,-5.052,2.049,
-0.3044,0.01966,-0.0004659};
double stoppingPower ,SLOW,SHigh;
energ=energ/2;
energ=energ/1.007276;
SLOW=coeffH[1]*pow(energ,0.45);
SHigh=(coeffH[2]/energ)*log(1+(coeffH[3]/energ))+coeffH[4]*energ);
stoppingPower=(SLOW*SHigh)/(SHigh+SLOW);

return stoppingPower;
}

double zieglbeTi(double energ)
{
const double coeffTi [12] = {4.862,5.496,5165,568.5,0.009474,0.01122,4443,-8.371,3.251,

```

```

-0.4513,0.02694,-0.0005886};
double stoppingPower ,SLOW,SHigh;
energ=energ/2;
energ=energ/1.007276;
SLOW=coeffTi[1]*pow(energ,0.45);
SHigh=(coeffTi[2]/energ)*log(1+(coeffTi[3]/energ)+coeffTi[4]*energ);
stoppingPower=(SLOW*SHigh)/(SHigh+SLOW);

return stoppingPower;
}

```

B'.4 Η συνάρτηση “sigmacm” - Υπολογισμός της διαφορικής ενεργού διατομής

Τέλος μία από τις βασικότερες συναρτήσεις, η συνάρτηση sigmacm η οποία παίρνοντας ως δεδομένα την ενέργεια του δευτερίου και τη γωνία εκπομπής των νετρονίων στο σύστημα αναφοράς κέντρου μάζας υπολογίζει τη διαφορική ενεργό διατομή της αντίδρασης D-T σύμφωνα με την αναφορά [15].

Σε εξωτερικό αρχείο βρίσκονται οι πίνακες για τους παράγοντες A_i και $\frac{d\sigma_{dn}(0^\circ)}{d\Omega'}$ για συγκεκριμένες ενέργειες δευτερίου οι οποίες εν γένει δεν συμπίπτουν κατά κανόνα με τις ενέργειες για τις οποίες γίνεται ο υπολογισμός. Για τον λόγο αυτό παρακάτω παρουσιάζονται εκτός από την συνάρτηση sigmacm και οι συναρτήσεις “spline” και “splint” [31] οι οποίες επιτυγχάνουν υπολογισμούς των παραγόντων για κάθε ενέργεια δευτερίου.

```

double sigmacm(double Edeu, double thetacm)
{ Edeu=Edeu/1000.;

ifstream incoef ;
incoef.open("coefd.dat");
ifstream insigma0;
insigma0.open("sigma0d.dat");

const int l=61;
double Energy[l];
double a[9][l]={0};
double sigma0[l];
double y2[l]={0};

double s_0,lc[9];
int k;

```

```

int m=0;
int n=0;
double dummy;
double temp=100.0, temp2;
double energ ,mm;

for (int i=0;i<303;i++)
{
    incoef>>energ>>mm>>temp2;
    m=static_cast<int>(mm);

    if (energ>temp){
        n++;
    }
    a[m][n]=temp2;
    temp=energ;
}

for (k=0;k<1;k++){
    insigma0>>Energy[k]>>sigma0[k];
}

spline (Energy,1,sigma0,1,1e30,1e30,y2,1);
for (k=0;k<9;k++){
    spline (Energy,1,a[k],1,1e30,1e30,y2,1);
}

double x = cos(thetacm);
double sum=0;
s_0=splint (Energy,1,sigma0,1,y2,1,Edeu);

for (k=0;k<9;k++){
    lc[k]=splint (Energy,1,a[k],1,y2,1,Edeu);
}

sum=lc[0]+lc[1]*x+lc[2]*(0.5*(3*x*x-1))+lc[3]*0.5*(5*pow(x,3)-3*x)
+lc[4]*(1.0/8.0)*(35*pow(x,4)-30*x*x+3)
+lc[5]*(1.0/8.0)*(63*pow(x,5)-70*pow(x,3)+15*x)
+lc[6]*(1.0/16.0)*(231*pow(x,6)-315*pow(x,4)+105*x*x-5)
+lc[7]*(1.0/16.0)*(429*pow(x,7)-693*pow(x,5)+315*pow(x,3)-35*x)
+lc[8]*(1.0/128.0)*(6435*pow(x,8)-12012*pow(x,6)+6930*pow(x,4)-1260*x*x+35);

incoef.close();
insigma0.close();
double ds_cm;
ds_cm = s_0*sum;
if(Edeu>=0.2 && Edeu<=9.5){
    double ds_cm;
    ds_cm = s_0*sum;
}
else{
    ds_cm =s_0*sum*0.;
}
return ds_cm;
}

```

```

void spline ( double x[],int o, double y[],int t , const double yp1, const double ypn,double y2 [],int m)
{
  int i,k,n;
  double p,qn,sig,un;
  n=m;
  double u[n-1];
  if (yp1>0.99e30)
    y2[0]=u[0]=0.0;
  else {
    y2[0] = -0.5;
    u[0]=(3.0/(x[1]-x[0]))*((y[1]-y[0])/(x[1]-x[0])-yp1);
  }

  for (i=1 ; i<n-1;i++) {
    sig=(x[i]-x[i-1])/(x[i+1]-x[i-1]);
    p=sig*y2[i-1]+2.0;
    y2[i]=(sig-1.0)/p;
    u[i]=(y[i+1]-y[i])/(x[i+1]-x[i]) - (y[i]-y[i-1])/(x[i]-x[i-1]);
    u[i]=(6.0*u[i]/(x[i+1]-x[i-1])-sig*u[i-1])/p;
  }
  if (ypn > 0.99e30)
    qn=un=0.0;
  else {
    qn=0.5;
    un=(3.0/(x[n-1]-x[n-2]))*(ypn-(y[n-1]-y[n-2])/(x[n-1]-x[n-2]));
  }
  y2[n-1]=(un-qn*u[n-2])/(qn*y2[n-2]+1.0);
  for (k=n-2;k>=0;k--)
    y2[k]=y2[k]*y2[k+1]+u[k];
}

double splint ( double xa [],int w,double ya [],int z,double y2a [],int s, double x)
{
  int k;
  double h,b,a;

  int n=w;
  int klo=0;
  int khi=n-1;
  while (khi-klo>1) {
    k=(khi+klo) >> 1;
    if (xa[k] > x) khi=k;
    else klo=k;
  }

  h= xa[khi]-xa[klo];
  if (h==0.0)
    cerr <<"Bad_xa_input"<<endl;
  a=(xa[khi]-x)/h;
  b=(x-xa[klo])/h;
  double y=a*ya[klo]+b*ya[khi]+((a*a*a-a)*y2a[klo]+(b*b*b-b)*y2a[khi])*(h*h)/6.0;
  return y;
}

```

Βιβλιογραφία

- [1] J. Chadwick, F.R.S. Proc. Roy. Soc, A, 136, p. 692-708, 1932.
- [2] Accelerator - driven Systems (ADS) and Fast Reactors (FR) in Advanced Nuclear Fuel Cycles A Comparative Study, OECD Nuclear Energy Agency (2002), available on the NEA webpage on /Accelerator-driven Systems (ADS) and Fast Reactors (FR) in Advanced Nuclear Fuel Cycles.
- [3] MCNP A General Monte Carlo n-particle transport code, version 5, Los Alamos National Laboratories, Los Alamos, New Mexico (April 2011).
- [4] S. Agostinelli et al. Nucl. Instrum. Meth. A 506, p250-303 (2003).
- [5] N. Patronis, M. Kokkoris, D. Giantsoudi, G. Perdikakis, R. Vlastou, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. A 578 (2007) 351-355.
- [6] M. Zamani. D. Sampsonidis and E. Savvidis, Radiation Measurements 26 pp. 87-92 (1996).
- [7] W.R. McMurray, N.J. Pattenden and G.S. Vatail, Nucl. Instrum. Meth. 114, p429 (1974).
- [8] G. Charpak, J. Derré, Y. Giomataris, Ph Rebourgeard, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. A 478 26-36 (2002).
- [9] Αθανάσιος Σταματόπουλος, Έλεγχος Αξιοπιστίας Διαφορικών Ενεργών Διατομών Ελαστικής Σκέδασης Πρωτονίων σε στόχο Φυσικού Βορίου.

- Μεταπτυχιακή Εργασία. Αθήνα : Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, ΣΕΜ-ΦΕ, 2014.
- [10] H.H. Andersen, J.F. Ziegler, Hydrogen: Stopping powers and ranges in all elements, Pergamon Press, New York, 1985.
- [11] J. F. Ziegler, Helium Stopping Powers and Ranges in all elements. New York: Pergamon Press, 1977.
- [12] Αθηνά Πάκου, Πειραματικές Μέθοδοι στην Πυρηνική Φυσική, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων 1999.
- [13] SRIM. www.srim.org
- [14] J. B. Marion and F. C. Young, Nuclear Reaction Analysis - Graphs and Tables, North - Holland Publishing Company, Amsterdam (1968).
- [15] H. Liskien, A. Paulsen, At. Data Nucl. Data Tables 15 (1975) 57.
- [16] J. H. Gibbons, R.L. Macklin, Phys. Rev. 114 (1959) 571.
- [17] A. I. M. Ritchie, J. Phys. D 9 (1976) 15.
- [18] H. H. Barschall et al., Neutron sources for basic physics and applications, Pergamon Press, New York, 1983.
- [19] J. B. Marion, J. L. Fowler, Fast Neutron Physics, Interscience, New York, 1997.
- [20] K. K. Seckharan et. al., Nucl. Instr. Meth. 133 (1976) 253.
- [21] C. L. Lee, X. -L. Zhou / Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B 152 (1999) 1-11.
- [22] Νικόλαος Ε. Πατρώνης, ΜΕΤΡΗΣΗ ΤΗΣ ΕΝΕΡΓΟΥ ΔΙΑΤΟΜΗΣ ΣΥΛΛΗΨΗΣ ΝΕΤΡΟΝΙΟΥ ΑΠΟ ΤΟ ΑΣΤΑΘΕΣ ΚΑΙΣΙΟ 135, Διδακτορική Διατριβή.

- [23] W. Ratynski and F. Käppeler, Physical Review C 37 (1988) 90.
- [24] E. M. GUNNERSEN and G. James, Nucl. Instr. Meth. 8 (1960) 173-184, North - Holland PUBLISHING CO.
- [25] Αντιγόνη Καλαμαρά, Εφαρμογή της αντίδρασης ${}^3\text{H}(\text{d}, \text{n}){}^4\text{He}$ στην παραγωγή υψηλοενεργειακή δέσμης νετρονίων 17.5 MeV για τη μελέτη της αντίδρασης ${}^{241}\text{Am}(\text{n}, 2\text{n}){}^{240}\text{Am}$, Διπλωματική εργασία.
- [26] J. Monahan. Fast Neutron Physics, Part I, p 49. New York Interscience Publisers 1960.
- [27] H. Horstman and H. Liskien, Relativistic calculations in kinematic parameters for nuclear reaction. s.l.: CBNM EURATOM 1968. report EUR 3668 e.
- [28] Evert Birgesson and Goran Lovestam, Software Manual, NeuSDesc-Neutron Sources Description. IRMM 2007.
- [29] Χρίστος Λαμπούδης, Μελέτη των χαρακτηριστικών της δέσμη νετρονίων και προσδιορισμός παραμέτρων συντονισμού της σύλληψης νετρονίων στο ${}^{234}\text{U}$ με την μέθοδο της ολικής απορρόφησης, στην πειραματική διάταξη n_{TOF} του CERN, Διδακτορική Διατριβή.
- [30] Γεώργιος Περδικάκης, Μελέτη των αντιδράσεων (n, 2n) σε πυρήνες της περιοχής των ακτινιδίων, Διδακτορική Διατριβή.
- [31] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery Numerical Recipes in C++ - The art of scientific computing, 2nd edition, Cambridge University Press,(2002).