

CÁLCULO DA DISTRIBUIÇÃO ENERGÉTICA E ANGULAR DE
NÊUTRONS PRODUZIDOS NA REAÇÃO D-T PARA USO EM
MEDIDA DE PARÂMETROS NUCLEARES.

Paulo Rogério Pinto Coelho
Divisão de Física de Reatores
Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares
São Paulo - SP

SUMÁRIO

Foi desenvolvido um programa computacional (CALCDT) que calcula a distribuição energética e angular de nêutrons produzidos na reação ${}^3\text{H}(d,n){}^4\text{He}$. Esse tipo de fonte de nêutrons será utilizado num experimento de blindagem de radiação, nêutrons e gamas, sendo que a distribuição calculada será utilizada como dado de entrada (especificação de fonte) para os códigos computacionais que simularão o experimento.

1. Introdução

Têm sido muito difundidos a utilização de aceleradores de partículas para produzir nêutrons, através da reação ${}^3\text{H}(\text{d},\text{n}){}^4\text{He}$, e o uso destes nêutrons como fonte, em experimentos de Física de Reatores, tais como: medidas de comprimento de difusão, de reatividade, de transmissão de radiação em um meio, "Burn-up", de análise não destrutiva de material físsil numa amostra, etc.

No IPEN-CNEN/SP, pretendemos realizar experimentos de blindagem de radiação, nêutrons e gamas, utilizando como fonte de nêutrons os produzidos com um Acelerador Van de Graaff de 400 kV. Para a realização desse experimento, bem como em vários outros de medidas de parâmetros neutrônicos, é necessário o conhecimento da distribuição energética e angular de nêutrons na reação ${}^3\text{H}(\text{d},\text{n}){}^4\text{He}$. O objetivo do presente trabalho foi o desenvolvimento de uma metodologia de cálculo dessa distribuição.

Esse cálculo também faz-se necessário tendo em vista a medida absoluta da produção de nêutrons pela técnica de contagem da partícula $\alpha({}^4\text{He})$ associada à reação citada.

Os valores obtidos para a distribuição serão utilizados como dados de entrada (especificação de fonte) para os códigos computacionais que simularão o experimento de blindagem.

2. Detalhes do Cálculo da Distribuição

A energia do neutron emitido no alvo é função da energia na qual o dêuteron reage produzindo a reação D-T e do ângulo de emissão do nêutron em relação ao eixo de incidência dos dêuterons. A distribuição energética e angular dos nêutrons também depende da cinemática da reação e da secção de choque diferencial angular para a reação D-T.

A probabilidade de um dêuteron provocar reação, ao atravessar uma espessura dx de um alvo contendo N_t átomos de trítio por centímetro cúbico, é dada por:

$$P = N_t \sigma dx \quad , \quad (1)$$

onde σ é a secção de choque para a reação $\text{T}(\text{D},\text{n})\alpha$ e é função da

energia E do dêuteron, o qual é continuamente moderado no alvo, assim sendo é mais conveniente reescrevermos (1) como:

$$P = N_t \sigma(E) dE / (dE/dx) \quad , \quad (2)$$

onde (dE/dx) é a taxa de perda de energia do dêuteron ao ser freado, por unidade de caminho percorrido no alvo.

Neste trabalho, assumiremos que o alvo é constituído de titânio (Ti) e trítio (T). O alvo será considerado espesso o suficiente para frear todos os dêuterons incidentes, implicando, assim, em que todos os dêuterons ao serem freados no material do alvo têm uma probabilidade finita de provocar a reação $T(d,n)\alpha$ com a energia no intervalo de 0 a E_d (energia dos dêuterons incidentes). Baseando-se nisso e na equação (2), a probabilidade total de um dêuteron provocar uma reação no alvo é dada por:

$$P = N_t \int_0^{E_d} \sigma(E) dE / (dE/dx) \quad . \quad (3)$$

Deve-se utilizar a secção de choque diferencial angular, $\sigma(E, \alpha)$, para obter a distribuição angular de nêutrons. Reescrevendo a equação (3), em termos de $\sigma(E, \alpha)$, obtêm-se:

$$P(\alpha) = N_t \int_0^{E_d} \sigma(E, \alpha) dE / (dE/dx) \quad . \quad (4)$$

Necessitamos conhecer os valores dessas probabilidades em função de ângulos dados no sistema de coordenadas do laboratório (S.L.), visto que nesse sistema de coordenadas é feita a detecção da partícula emitida na reação citada. Por outro lado, na reação considerada, a emissão de nêutrons é isotrópica no Sistema de Coordenadas do Centro de Massa (S.C.M.) para dêuterons de energias inferiores a 300 keV ⁽²⁾; e nesse trabalho consideraremos no máximo $E_d = 250$ keV. A relação entre os valores da secção de choque nos dois sistemas de coordenadas (S.C.M. e S.L.) é dada por:

$$\sigma(E, \psi) d\Omega(\psi) = \sigma(E, \theta) d\Omega(\theta) \quad , \quad (5)$$

onde ψ e θ são os ângulos, no S.L. e no S.C.M. respectivamente, formados pelos raios centrais, dos ângulos sólidos, dentro dos quais são emitidos os nêutrons, com relação à direção de incidência dos

dêuterons que provocam a reação. Nos casos aqui considerados temos:

$$\sigma_{CM}(E) = 4\pi\sigma(E, \theta) \quad (6)$$

Por definição, tem-se que:

$$d\Omega(\alpha) = 2\pi\text{sen}\alpha d\alpha \quad ; \quad (7)$$

de (5), (6) e (7), obtêm-se:

$$\sigma(E, \psi) = \frac{\sigma(E)}{4\pi} \frac{\text{sen}\theta d\theta}{\text{sen}\psi d\psi}. \quad (8)$$

A probabilidade $P(\psi_1 - \psi_2)$ que um nêutron seja emitido entre os ângulos ψ_1 e ψ_2 devido a reação de um dêuteron de energia E_d com alvo espesso é baseada na equação (4):

$$P(\psi_1 - \psi_2) = N_t \int_{\psi_1}^{\psi_2} \int_0^{E_d} \sigma(E, \psi) dE / (dE/dx) d\Omega(\psi). \quad (9)$$

Usando as equações (7) e (8) na equação (9) obtêm-se:

$$P(\psi_1 - \psi_2) = N_t \int_{\psi_1}^{\psi_2} \int_0^{E_d} \frac{\sigma(E)}{4\pi} \left(\frac{\text{sen}\theta d\theta}{\text{sen}\psi d\psi} \right) dE / (dE/dx) 2\pi \text{sen}\psi d\psi. \quad (10)$$

Demonstra-se (1) que:

$$\frac{\text{sen}\theta d\theta}{\text{sen}\psi d\psi} = \frac{(\gamma^2 + 2\gamma \cos\theta + 1)^{3/2}}{1 + \gamma \cos\theta}, \quad (11)$$

onde, baseado nas equações da cinemática da reação, demonstra-se que:

$$\gamma = \sqrt{\frac{M_1 m_1}{M_2 m_2} \times \frac{(M_1 + M_2)}{(m_1 + m_2)} \times \frac{E}{E + Q(1 + \frac{m_1}{m_2})}}, \quad (12)$$

sendo que os valores das massas envolvidas (M_1, M_2, m_1 e m_2) e da energia liberada na reação (Q) estão apresentados no Apêndice.

O ângulo θ pode ser expresso como função de ψ e γ , como se segue:

$$\theta = \arcsen \psi \left[\gamma \cos \psi + \sqrt{(1 - \gamma^2) + \gamma^2 \cos^2 \psi} \right] \quad (13)$$

Temos que dE/dx em alvo de TiT_N é dado por (3):

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{TiT_N} = \frac{48}{48+3N} \left(\frac{dE}{dx}\right)_{Ti} + \frac{3N}{48+3N} \left(\frac{dE}{dx}\right)_T \quad (14)$$

onde N é o número médio de trítio em cada molécula e $(dE/dx)_{Ti}$ e $(dE/dx)_T$ são as taxas de perda de energia do dêuteron no titânio e no trítio, respectivamente. Normalmente, N varia de 1,8 a 1,0 nos alvos de TiT_N utilizados para experiências.

Substituindo (11) em (10), obtém-se:

$$P(\psi_1 - \psi_2) = \frac{N_t}{2} \int_{\psi_1}^{\psi_2} \sin\psi \int_0^{E_d} \sigma(E) \frac{(\gamma^2(E) + 2\gamma(E)\cos\theta + 1)^{3/2}}{(1 + \gamma(E)\cos\theta)(dE/dx)_{TiT_N}} dE d\psi \quad (15)$$

A probabilidade de um nêutron ser emitido entre os ângulos ψ_1 a ψ_2 , com a energia entre E_1 e E_2 , devido a reação de um dêuteron de energia E_d com alvo espesso de TiT_N , é dada por:

$$P(\psi_1 - \psi_2, E_1 - E_2) = \frac{N_t}{2} \int_{\psi_a}^{\psi_b} \sin\psi \int_{E_b}^{E_s} \sigma(E) \frac{(\gamma^2(E) + 2\gamma(E)\cos\theta + 1)^{3/2}}{(1 + \gamma(E)\cos\theta)(dE/dx)_{TiT_N}} dE d\psi \quad (16)$$

onde ψ_a e ψ_b definem o intervalo de ângulo de emissão de nêutrons entre os ângulos ψ_1 e ψ_2 , com energia entre E_1 e E_2 e, $E_b - E_s$ é o intervalo de energia que os dêuterons podem ter, entre a energia 0 e E_d para, ao provocarem a reação $H^3(d,n)He^4$, emitir nêutrons dentro dos intervalos de ângulo e energia considerados.

Utilizando as equações da cinemática da reação, foram desenvolvidas as equações:

$$\psi = \arcsen \left\{ \sqrt{\frac{\gamma^{-2} - \left[\frac{c - (1 + \gamma^{-2})}{2} \right]^2}{c}} \right\} \quad (17)$$

onde:

$$c = \frac{E_{\text{nêutron}}}{\frac{m_1 M_1}{(m_1 + m_2)^2} E_{\text{dêuteron}}} \quad (18)$$

$$E_{\text{nêutron}} = \frac{m_1 \cdot M_1}{(m_1 + m_2)^2} \cdot E_{\text{dêuteron}} (\cos\psi + \gamma^{-1} \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2\psi})^2, \quad (19)$$

onde $\gamma = \gamma(E_{\text{dêuteron}})$ e $E_{\text{dêuteron}}$ deve ser obtido por processo iterativo, a partir de ψ e $E_{\text{nêutron}}$ dados.

Aplicando os valores apropriados em (17) e (18) obtêm-se ψ_a e ψ_b e, utilizando em (19), os pares de valores de ψ e $E_{\text{nêutron}}$ convenientes para a emissão de nêutrons nos intervalos de ângulo e energia considerados, obtêm-se o intervalo correspondente ($E_b - E_s$) para a energia dos dêuteron incidentes.

A probabilidade calculada pela equação (16), em termos de porcentagem, é dada por:

$$P(\psi_1 - \psi_2, E_1 - E_2) = \frac{N_t \int_{\psi_a}^{\psi_b} \sin\psi \int_{E_b}^{E_s} \sigma(E) \frac{\gamma^2(E) + 2\gamma(E)\cos\theta + 1}{(1 + \gamma(E)\cos\theta)} \frac{3/2}{(dE/dx)_{Ti} T_N} dE d\psi}{N_t \int_0^{E_d} \sigma(E) / (dE/dx)_{Ti} T_N dE} \quad (20)$$

O denominador pode ser calculado em termos do S.C.M., visto que nos dois sistemas o número total de nêutrons emitidos tem que ser o mesmo.

Para calcular esta probabilidade é necessário substituir os valores apropriados nas equações (12), (13), (14), (17), (18) e (19) e, posteriormente, introduzir os resultados obtidos na equação (20).

Uma vez que $\sigma(E)$ e (dE/dx) variam com a energia E , as equações devem ser calculadas para todas as energias, e as integrais devem ser calculadas utilizando métodos numéricos. Em vista disso, foi desenvolvido um programa computacional (CALCDT) para calcular a probabilidade de emissão de nêutrons por faixa de ângulo e energia com que são emitidos. Esse programa computacional está discutido no Apêndice.

3. Resultados e Conclusões

A distribuição energética e angular dos nêutrons emitidos na reação $T(d,n)\alpha$, foi calculada utilizando o programa CALCDT apresentado no Apêndice B. Para possibilitar a comparação de nossos resultados com outros existentes na Literatura, utilizamos os mesmos in-

tervalos de ângulos e energias utilizados no trabalho de Santoro e outros ⁽⁴⁾. Os resultados obtidos com o CALCDT e os publicados por Santoro estão respectivamente apresentados nas tabelas I e II.

Analisando os dados apresentados nas duas tabelas, conclui-se que os resultados obtidos são satisfatórios, tendo sido alcançada boa concordância na maioria dos casos. As discrepâncias de valores encontrados, devem-se ao fato de não termos considerado em nosso cálculo a fração molecular relativa ($\%D_1^+$; $\%D_2^+$; + D_3^+) no feixe de dêuterons incidentes, visto não terem sido publicados esses valores no trabalho de Santoro.

Ao interagir com o alvo o D_2^+ se dissocia em dois D_1^+ e o D_3^+ se dissocia em três D_1^+ com energias cinéticas que correspondem respectivamente a 1/2 e 1/3 de E (energia E_d do dêuteron incidente no alvo). Considerando esse fato nos cálculos, conclui-se que grandes variações na fração molecular relativa correspondem a alterações da ordem de 2% na porcentagem de emissão de nêutrons por intervalo angular ⁽³⁾ e grandes variações nessa porcentagem por intervalo de energia.

Tabela I - Distribuição Energética e Angular de Nêutrons emitidos na Reação $^3\text{H} (d,n) ^4\text{He}$ ($E_d=250$ keV), obtidos com o CALCDT (100% D_1^+).

Intervalo de Energia (keV)	Intervalo Angular		
	0° a 40°	40° a 90°	90° a 180°
14920 a 15680	0,0325	0,0014	0
14550 a 14920	0,0804	0,0916	0
14190 a 14550	0,0101	0,2345	0
13800 a 14190	0	0,0636	0,2031
13500 a 13800	0	0	0,1948
12840 a 13500	0	0	0,0871
TOTAL	0,1228	0,3911	0,4850

Tabela II - Distribuição Energética e Angular de Nêutrons emitidos na Reação ${}^3\text{H} (d,n) {}^4\text{He}$ ($E_d=250$ keV), publicados por SANTORO.

Intervalo de Energia (keV)	Intervalo Angular		
	0° a 40°	40° a 90°	90° a 180°
14920-15680	0,0130	0,0	0,0
14550-14920	0,0902	0,0697	0,0
14190-14550	0,0168	0,2460	0,0
13800-14190	0,0	0,0750	0,2163
13500-13800	0,0	0,0	0,2088
12840-13500	0,0	0,0	0,0642
TOTAL	0,1200	0,3907	0,4895

4. Agradecimento

A J.R. Maiorino meus agradecimentos pelas valiosas discussões que mantivemos no decorrer da realização deste trabalho.

5. Referências Bibliográficas

- /1/ LAMARSH, J.R. - Introduction to nuclear reactor theory. 2ed. Addison-Wesley Publishing Company, 1972, cap.2, p. 24-31.
- /2/ BENVENISTE, J.; MITCHELL, A.C.; SCHRADER e ZENGER, J.H.- The problem of measuring the absolute yield of 14-MeV neutrons by means of an alpha counter. Nucl. Instr. and Meth. 7 (1960) 306.
- /3/ FEWELL, T.R. - An evaluation of the alpha counting technique for determining 14-MeV neutron yields. Nucl. Instr. and Meth. 61 (1968) 61-71.
- /4/ SANTORO, R.T.; ALSMILLER, R.G. Jr.; BARNES, J.M. e CHAPMAN, G.T. - Calculation of neutron and gamma-ray energy spectra for fusion reactor shield design: Comparison with experiment. Nucl. Sci. Eng. 78 (1981) 259-272.

Apêndice

1) Dados utilizados nos cálculos:

Massa do nêutron $\rightarrow M_1 = 1,008665$

Massa do dêuteron $\rightarrow m_1 = 2,014102$

Massa do trítio $\rightarrow m_2 = 3,016030$

Massa do alfa $\rightarrow M_2 = 4,002603$

Energia liberada na reação $\rightarrow Q = 17589 \text{ keV}$

Densidade do $\text{TiT}_N \rightarrow \rho_{\text{TiT}_N} = 4,28 \text{ g/cm}^3$

2) Programa CALCDT

Esse programa possibilita o cálculo da distribuição energética e angular dos nêutrons emitidos na reação $T(d,n)\alpha$. Ele foi escrito em linguagem FORTRAN, baseado nas equações desenvolvidas nesse trabalho e considerando a perda de energia do dêuteron no alvo de TiT_N .

As integrais existentes na equação do texto foram calculadas utilizando o método de quadratura de Gauss-Legendre para $n=20$.

Valores de $\sigma/4\pi$, $(dE/dx)_{Ti}$ e $(dE/dx)_T$ foram obtidos da referência 3 para o conjunto de energia aí citados. No programa fazem-se extrapolações desses valores, utilizando o método de interpolação cúbica "SPLINE", para as energias correspondentes aos pontos de quadratura de Gauss, visto que essas energias não coincidem com as energias tabeladas.