INSTYTUT FIZYKI JĄDROWEJ im. HENRYKA NIEWODNICZAŃSKIEGO POLSKIEJ AKADEMII NAUK ul. Radzikowskiego 152, 31-342 Kraków, Poland http://www.ifj.edu.pl/publ/reports/2006

Raport Nr 1979/PN

Ochładzanie dyfuzyjne impulsowego strumienia neutronów termicznych w małych układach dwustrefowych. Symulacje metodą Monte Carlo

Urszula Wiącek

PRACA DOKTORSKA

Kraków, lipiec 2006

Streszczenie

Tematyka pracy dotyczy transportu neutronów termicznych w niewielkich układach niejednorodnych. Rozpatrywane są głównie układy dwuwarstwowe, gdzie zewnętrzny moderator typu wodorowego (polietylen lub pleksiglas) otacza warstwę wewnętrzną utworzoną z innego materiału jednorodnego (typu wodorowego lub niewodorowego). Badano zjawisko dyfuzyjnego ochładzania strumienia neutronów termicznych we wspomnianych układach, metodą komputerowych symulacji Monte Carlo. Zastosowano kod transportowy MCNP. Symulowano zanik czasowy strumienia neutronów termicznych po ich wprowadzeniu do badanego systemu. Wyznaczano stałą zaniku λ podstawowej składowej eksponencjalnej tego strumienia.

Z powodu zaobserwowanych rozbieżności: symulacja MCNP – rzeczywisty eksperyment, oryginalna biblioteka zawierająca przekroje czynne na rozpraszanie neutronów termicznych na wodorze w polietylenie (*poly.01t*) była modyfikowana i dostosowana dla pleksiglasu i dla polietylenu. Z użyciem zmodyfikowanych bibliotek wyznaczony został przebieg zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w warstwie zewnętrznego moderatora (polietylen, pleksiglas) układu dwustrefowego w zależności od jej grubości i od typu rozpraszania neutronów w materiale strefy wewnętrznej.

W zakresie zmienności stałej zaniku: $12\ 000\ s^{-1} < \lambda < 34\ 000\ s^{-1}$ stwierdzono następującą zmienność współczynnika ochładzania dyfuzyjnego C_2 w warstwie zewnętrznego moderatora układu dwustrefowego dla następujących przypadków:

– w warstwie z pleksiglasu, który otacza materiał typu wodorowego współczynnik C_{2PLX}^{H} zmienia się w granicach od ok. 9500 cm⁴s⁻¹ do ok. 3480 cm⁴s⁻¹ (podczas, gdy dla jednorodnego pleksiglasu współczynnik ten wynosi $C_{PLX} = 4377$ cm⁴s⁻¹),

– w warstwie z pleksiglasu otaczającego materiał typu niewodorowego współczynnik C_{2PLX}^{nH} zmienia się w granicach od ok. 8900 cm⁴s⁻¹ do ok. 4800 cm⁴s⁻¹,

– w warstwie z polietylenu otaczającego materiał typu niewodorowego współczynnik $C_{2PE}^{\ nH}$ zmienia się w granicach od ok. 3500 cm⁴s⁻¹ do ok 1900 cm⁴s⁻¹ (podczas gdy dla jednorodnego polietylenu współczynnik ten wynosi $C_{PE} = 1958 \text{ cm}^4 \text{s}^{-1}$).

Otrzymana metodą symulacji MCNP zależność dla pleksiglasu w warstwie otaczającej ośrodek typu niewodorowego została z powodzeniem zastosowana do interpretacji rzeczywistych pomiarów przekroju czynnego absorpcji neutronów termicznych impulsową metodą Czubka.

Podziękowania

Pragnę serdecznie podziękować Panu promotorowi, Doc. dr hab. Krzysztofowi Drozdowiczowi, za życzliwą opiekę i nieocenioną pomoc okazaną mi w trakcie przygotowania Rozprawy, za zainteresowanie postępami oraz cenne wskazówki, związane z jej opracowaniem i spsosobem przedstawienia omawianych w niej problemów.

Mgr Grzegorzowi Traczowi dziękuję za cenne dyskusje i obliczenia programem NJOY, które umożliwiły zmodyfikowanie biblioteki zawierającej przekroje czynne na rozpraszanie neutronów termicznych na wodorze w polietylenie.

Dr Ewie Krynickiej dziękuję za wnikliwe dyskusje, uwagi i okazaną życzliwość oraz wskazówki dotyczące redakcji Rozprawy, a mgr Barbarze Gabańskiej za pomoc i wsparcie w czasie pracy.

Całemu Zespołowi Pracowni Fizyki Transportu Neutronów Zakładu Fizyki Środowiska i Transportu Promieniowania IFJ PAN (NZ54) pragnę gorąco podziękować za wspaniałą współpracę oraz przeprowadzenie eksperymentów, na których wynikach oparta jest Rozprawa.

A mojemu Mężowi Piotrowi dziękuję za okazoną cierpliwość, wyrozumiałość i pomoc w czasie powstawania tej pracy.

Spis treści

Stresz	czen	ie I	1
Podzie	ękow	ania	V
Spis t	reści	V	11
Spis r	ysun	ków	X
Snis t	ahel	XI	11
		-I:	
Lista s	symp	00IIXV	
Wprov	wadz	enie	1
I. Częs	ść: O	CHŁADZANIE DYFUZYJNE IMPULSOWEGO STRUMIENIA NEUTRONÓW	
TERM	ICZN	YCH W MAŁYCH UKŁADACH DWUSTREFOWYCH	5
I.1	Pod	STAWY TEORETYCZNE	6
Ι.	1.1	Oddziaływanie neutronów z materią	6
Ι.	1.2	Teoretyczny opis parametrów neutronowych	7
I.	1.3	Rozpraszanie neutronów termicznych w ośrodkach typu wodorowego1	5
<i>I.</i> 2	Імри	ILSOWY EKSPERYMENT NEUTRONOWY2	D
1.3	Осн	IŁADZANIE DYFUZYJNE STRUMIENIA NEUTRONÓW TERMICZNYCH2	8
1.5	3.1	Ośrodek jednorodny2	8
1.5	3.2	Ośrodek dwustrefowy3	D
	I.3.2	.1 Układ sferyczny	D
	I.3.2	.2 Układ cylindryczny	2
I.4	Мет	ODA WYZNACZANIA WSPÓŁCZYNNIKA OCHŁADZANIA DYFUZYJNEGO DLA	
MOD	DERAT	ORA ZEWNĘTRZNEGO W UKŁADZIE DWUSTREFOWYM	3
<i>I.</i> 5	ZMIE	ENNOŚĆ WSPÓŁCZYNNIKA OCHŁADZANIA DYFUZYJNEGO W ZEWNĘTRZNYM	
MOD	DERAT	ORZE Z PLEKSIGLASU	7
Ι.;	5.1	Warstwa wewnętrzna utworzona z materiału typu wodorowego3	B
1.3	5.2	Warstwa wewnętrzna utworzona z materiału typu niewodorowego4	4
	I.5.2	.1 Dobór Si + Cu, jako materiału referencyjnego tworzącego warstwę wewnętrzną	
	ukła	du dwustrefowego4	4
	I.5.2	.2 Symulacja MCNP eksperymentów w dwustrefowej geometrii cylindrycznej4	B
	I.5.2	.3 Zmienność współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w zewnętrznym moderatorze	
	z ple	ksiglasu otaczającym warstwę wewnętrzną utworzoną z materiału typu niewodorowego.	•
		5	0

<i>I.</i> 6	ZM	IIENNO	ŚĆ WSPÓŁCZYNNIKA OCHŁADZANIA DYFUZYJNEGO W ZEWNĘTRZNYM	
МС	DERA	TORZI	E Z POLIETYLENU	54
	I.6.1	War	stwa wewnętrzna utworzona z materiału typu niewodorowego	54
	1.6.2	Zmie	enność współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w zewnętrznym moderatorze	
	z polie	etylenu	otaczającym warstwę wewnętrzną utworzoną z materiału typu niewodorowego	56
<i>I.</i> 7	ZA	ѕтоѕс	WANIE FUNKCJI C2(λ^{\star}) W POMIARZE ABSORPCJI METODĄ CZUBKA	59
II. Cz	eść:	RZE	CZYWISTY IMPULSOWY EKSPERYMENT NEUTRONOWY	
A SY	MUL	ACJE	METODA MONTE CARLO	31
	,			20
11. I 11 -		SYMUL Donái)2
11.4		PORON		24
EK	5PER 11 0 1		OW NA WYBRANYCH PRZYKŁADACH. TESTY MCNP)4 24
	11.2.1 11.2.1	Opis	d industraday)4 27
	11.2.2 11.2		Wales z wody)/ 27
	11.2 11.2	2.2.1	Sześcien z polictylony)/ 20
	11.2 11.2	2.2.2	Wales z plaksiclasy)9 70
	11.2 11.2	2.2.3 Likka	w alec z pieksigiasu	72
	п.2.5 П 2	0 Mia	Geometria dvustrefowa sforwarna	72
	II.2 II 2	2.3.1	Geometria dvalstrefowa svlindryczna	76
П 3	11.2	2.3.2 Mody		0
11.C NE	, , 11700		FINACJA BIBLIOTEKI ZAWIERAJĄCEJ FRZERROJE CZTNNE NA ROZFRASZANIE	20
NE	U A 1	Snor	sóh modyfikacji biblioteki poly 01t	20
	11.3.1	Dob	ór ontvmalnie zmodvfikowanej biblioteki dla pleksiolasu	25
	л. <u>э.г</u> П 3	8 2 1	Walec jednorodny z pleksiglasu	35
	П.2	327	Układ dwystrefowy w geometrij cylindrycznej	39
	П.2	323	Testowe symulacie komputerowe metoda Monte Carlo z wykorzystaniem	
	zm	odvfik	owanei biblioteki	98
]	II.3.2.3	.1 Geometria dwustrefowa sfervczna	98
]	II.3.2.3	.2 Geometria dwustrefowa cylindryczna10)0
	11.3.3	Dob	ór optymalnie zmodyfikowanej biblioteki dla polietylenu10)3
	II.3	3.3.1	Sześcian z polietylenu10)3
Doda	umo	wania		17
rous	amo	wante		,1
Doda	atek.		11	6
Liter	atura	1		27

Spis rysunków

Rys.	I.1 Schemat zjawisk zachodzących podczas spowalniania i dyfuzji neutronów [według Czubek J. A., www.ifj.edu.pl/dept/no5/nz54]
Rys.	I.2 Rozkład Maxwella strumienia neutronów termicznych w ośrodku nieskończonym [Kiełkiewicz, 1987]
Rys.	I.3 Zależność przekroju czynnego na rozpraszanie neutronów termicznych na swobodnych atomach Fe i O od energii neutronów [Drozdowicz, 1999b]15
Rys.	I.4 Zależny energetycznie przekrój czynny na rozpraszanie neutronów termicznych na jądrach atomu wodoru związanych w wodzie i polietylenie w temperaturze 293 K oraz dla wodoru, jako gazu swobodnego [Drozdowicz, 1999b]
Rys.	I.5 Wzór strukturalny cząsteczki polietylenu17
Rys.	I.6 Wzór strukturalny cząsteczki pleksiglasu17
Rys.	 I.7 Energetyczna zależność całkowitych mikroskopowych przekrojów czynnych na rozpraszanie neutronów termicznych na jądrach atomów wodorów związanych w polietylenie i pleksiglasie [Sibona i in., 1991]. I.8
Rys.	I.8 Przykłady układów dwustrefowych stosowanych w impulsowych eksperymentach neutronowych
Rys.	I.9 Schemat impulsowego eksperymentu neutronowego w układzie jednorodnym
Rys.	I.10 Schemat układu dwustrefowego
Rys.	I.11 Przestrzenny rozkład strumienia neutronów termicznych w układzie dwustrefowym w danej chwili czasu dla przypadku, gdy $\Sigma_{a1} > \Sigma_{a2}$ [Czubek, 1981a]
Rys.	I.12 (a) ośrodek jednorodny (Σ_{a2} , Σ_{tr2}) i (b) ośrodek jednorodny z wprowadzonym zaburzeniem w postaci innego ośrodka (Σ_{a1} , Σ_{tr1})
Rys.	I.13 Przesunięcie energetycznego rozkładu strumienia neutronów termicznych spowodowane ucieczką neutronów poza granice ośrodka
Rys.	I.14 Schemat cylindrycznego układu dwustrefowego
Rys.	I.15 Graficzne przedstawienie sposobu wyznaczania wartości współczynnika ochładzania dyfuzyjnego C_2 w warstwie zewnętrznej układu dwustrefowego [Krynicka i in., 2005]36
Rys.	I.16 Zależność $C_{2PLX}^{H}(\lambda^{*})^{exp}$ dla zewnętrznego moderatora z pleksiglasu otaczającego materiał typu wodorowego [Krynicka i in., 2005]
Rys.	I.17 Zależności $C_{2PLX}^{H}(\lambda^{*})^{exp}$ i $C_{2PLX}^{H}(\lambda^{*})^{MCNP}$ dla zewnętrznego moderatora z pleksiglasu otaczającego materiał typu wodorowego (wodne roztwory kwasów H ₃ BO ₃ lub KCl)
Rys.	I.18 Zależność $C_{2PLX}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$ dla zewnętrznego moderatora z pleksiglasu otaczającego materiał typu niewodorowego (Si + Cu) 51

Rys.	I.19 Zależność $C_{2PE}^{\ nH}(\lambda^*)^{MCNP}$ dla zewnętrznego moderatora z polietylenu, otaczającego warstwę wewnętrzną z materiału typu niewodorowego (Si + Cu)
Rys.	II.1 Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} , dla jednorodnego walca z wody
Rys.	II.2 Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} , dla jednorodnych sześcianów polietylenowych
Rys.	II.3 Wartości stałych zaniku λ_{exp} i λ_{MCNP} dla jednorodnych walców z pleksiglasu [Wiącek, 2006] 72
Rys.	II.4 Zmiany wartości odchyłki względnej ε w zależności od wartości stałej zaniku λ_{exp} , dla jednorodnego walca z pleksiglasu
Rys.	II.5 Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla dwustrefowej geometrii sferycznej, gdzie zewnętrzny moderator z pleksiglasu otacza materiał utworzony z wodnych roztworów kwasu H ₃ BO ₃ [Wiącek, Krynicka, 2005, 2006]75
Rys.	II.6 Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla układu dwustrefowego cylindrycznego, gdzie moderator z pleksiglasu otacza materiał utworzony z wodnych roztworów kwasu H ₃ BO ₃ lub KCl o określonych stężeniach <i>k</i> [Wiącek, Krynicka 2005, 2006], [Wiącek, 2006]
Rys.	II.7 Zmiany wartości odchyłki względnej ε w zależności od wartości stałej zaniku λ_{exp} , w dwustrefowej geometrii cylindrycznej, gdzie moderator z pleksiglasu otacza materiał typu wodorowego(wodne roztwory kwasów H ₃ BO ₃ lub KCl)77
Rys.	II.8 Zależność zmiany stosunku $\sigma_{\text{Hinel}(PE)}^{mod} / \sigma_{\text{Hinel}(PE)}$ od energii dla biblioteki <i>poly.01t</i> zmienionej ze współczynnikiem modyfikacji $K_{\text{X}} = 1.20$
Rys.	II.9 Zależność zmiany stosunku $\sigma_{\text{Hel}(PE)}^{mod} / \sigma_{\text{Hel}(PE)}$ od energii dla biblioteki <i>poly.01t</i> zmienionej ze współczynnikiem modyfikacji $K_{\text{X}} = 1.20$
Rys.	II.10 Zależność zmiany stosunku $\sigma_{Htot(PE)}^{mod} / \sigma_{Htot(PE)}$ od energii dla biblioteki <i>poly.01t</i> zmienionej ze współczynnikiem modyfikacji $K_{\rm X} = 1.20$
Rys.	II.11 Wartości stałych zaniku λ_{exp} i λ_{MCNP} dla jednorodnego walca z pleksiglasu. Symulacje MCNP z użyciem dla pleksiglasu oryginalnej i zmodyfikowanej ($K_X = 1.20$) biblioteki <i>poly.01t</i> [Wiącek, 2006]. 88
Rys.	II.12 Zmiany wartości ε w zależności od λ , dla walców jednorodnych z pleksiglasu
Rys.	II.13 Schemat układów dwustrefowych w geometrii cylindrycznej, gdzie zewnętrzny moderator z pleksiglasu otaczał warstwę wewnętrzną z materiału typu niewodorowego
Rys.	II.14 Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla dwustrefowej geometrii cylindrycznej, gdzie moderator z pleksiglasu otacza materiał typu niewodorowego (Cr ₂ O ₃). Symulacje MCNP z użyciem dla pleksiglasu biblioteki $K_X = 1.15$
Rys.	II.15 Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla dwustrefowej geometrii cylindrycznej, gdzie moderator z pleksiglasu otacza materiał typu niewodorowego (CuO). Symulacje MCNP z użyciem dla pleksiglasu biblioteki $K_{\rm X} = 1.20$

- **Rys. II.20** Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla jednorodnych sześcianów z polietylenu. Symulacje MCNP z użyciem dla polietylenu oryginalnej oraz zmodyfikowanej ($K_x = 1.30$) biblioteki poly.01t. **105**
- **Rys. 0.1** Zależność $C_2^{nH}(\lambda^*)$ dla zewnętrznego moderatora (polietylen, pleksiglas) otaczającego materiał typu niewodorowego (Si + Cu). Symulacje MCNP z użyciem odpowiednio zmodyfikowanej biblioteki *poly.01t.* **108**
- **Rys. 0.3** Względna zmienność współczynnika $C_2^{nH}(\lambda^*)$ w moderatorze z pleksiglasu i z polietylenu. 111

Spis tabel

Tabela I.1 Parametry neutronowe dla pleksiglasu i polietylenu w temperaturze $T = 20^{\circ}$ C. 19
Tabela I.2 Wartości $C_{2PLX}^{H}_{exp}$ [Krynicka i in., 2000a, 2001] i $C_{2PLX}^{H}_{MCNP}$ dla zewnętrznego moderatora z pleksiglasu otaczającego materiał typu wodorowego
Tabela I.3 Współczynniki <i>a</i> i <i>b</i> dla funkcji $C_{2PLX}^{H}(\lambda^{*})^{exp}$ [Krynicka i in., 2001] i $C_{2PLX}^{H}(\lambda^{*})^{MCNP}$ 43
Tabela I.4 Odchyłki: ε , $\overline{\varepsilon}$ i <i>L</i> wartości $C_{2PLX}^{H}{}_{MCNP}$ od odpowiednich wartości $C_{2PLX}^{H}{}_{exp}$
Tabela I.5 Wartości referencyjne częstości absorpcji dla materiałów o określonych udziałach wagowych Si i Cu
Tabela I.6 Wartości stałej zaniku λ_{MCNP} w układzie, gdzie moderator z pleksiglasu otacza materiał typu niewodorowego. Symulacje MCNP z użyciem dla pleksiglasu oryginalnej, oraz zmodyfikowanej ($K_{\rm X} = 1.20$) biblioteki <i>poly.01t.</i> 49
Tabela I.7 Wartości C_{2PLX}^{nH} dla zewnętrznego moderatora z pleksiglasu otaczającego materiał typu niewodorowego (Si + Cu). Wartości wyliczone na podstawie danych otrzymanych z symulacji MCNP z użyciem dla pleksiglasu oryginalnej i zmodyfikowanej ($K_X = 1.20$) biblioteki <i>poly.01t</i> .
Tabela I.8 Wartości absorpcji α_1^{ref} i α_1^{MCNP} (wyliczonej przy pomocy krzywej $C_{2PLX}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$) 52
Tabela I.9 Wartości odchyłek względnych wartości absorpcji referencyjnej α_1^{ref} i wyliczonej α_1^{MCNP} .
Tabela I.10 Wartości λ_{MCNP} w układzie, gdzie moderator z polietylenu otacza materiał typu niewodorowego. Symulacje MCNP z użyciem dla polietylenu zmodyfikowanej biblioteki <i>poly.01t</i> ($K_X = 1.30$)
Tabela I.11 Wartości $C_{2PE}^{\ nH}_{\ MCNP}$ dla zewnętrznego moderatora z polietylenu otaczającego materiał typu niewodorowego (Si + Cu). Symulacje MCNP z użyciem dla polietylenu biblioteki zmodyfikowanej $K_X = 1.30$
Tabela I.12 Współczynniki <i>a</i> i <i>b</i> dla funkcji $C_{2PLX}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$ i $C_{2PE}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$
Tabela I.13 Wartości λ_{exp} w układzie dwustrefowym cylindrycznym, gdzie warstwa wewnętrzna utworzona jest z materiału typu niewodorowego (Cr ₂ O ₃ lub CuO)
Tabela I.14 Wartości absorpcji α_1 i α_1^{ref} dla materiałów typu niewodorowego (Cr ₂ O ₃ i CuO)60
Tabela II.1 Wartości stałych zaniku λ_{exp} i λ_{MCNP} dla jednorodnego walca z wody
Tabela II.2 Wartości stałych zaniku λ_t , λ_{exp} i λ_{MCNP} dla jednorodnych sześcianów z polietylenu 69
Tabela II.3 Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla jednorodnych walców z pleksiglasu
Tabela II.4 Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla dwustrefowej geometrii sferycznej, gdzie zewnętrzny moderator z pleksiglasu otacza materiał utworzony z wodnych roztworów kwasu H ₃ BO ₃ o określonych stężeniach <i>k</i>

Tabela II.6 Zestawienie wartości odchyłek: ε , $\overline{\varepsilon}$ i L. Symulacje MCNP z użyciem biblioteki poly.01t.78

- **Tabela II.8** Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla jednorodnego walca z pleksiglasu. Symulacje MCNP z użyciem dla pleksiglasu oryginalnej oraz zmienionej biblioteki *poly.01t*, z różnymi współczynnikami modyfikacji K_X . **86**
- **Tabela II.9** Wartości odchyłek: $\varepsilon \ \overline{\varepsilon}$ i *L* dla jednorodnego walca z pleksiglasu przy zastosowaniu oryginalnej oraz zmienionej, z różnymi współczynnikami modyfikacji K_x , biblioteki *poly.01t.* 88
- Tabela II.10 Parametry neutronowe materiałów stosowanych w impulsowym eksperymencie

 neutronowym.
 90
- **Tabela II.11** Stałe zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla dwustrefowej geometrii cylindrycznej, gdzie zewnętrzny moderator z pleksiglasu otacza warstwę wewnętrzna utworzoną z Cr₂O₃. Symulacje MCNP wykonane z użyciem dla pleksiglasu biblioteki zmodyfikowanej z różnymi współczynnikami K_X . 92

- **Tabela II.15** Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla sferycznej geometrii dwustrefowej. Symulacje MCNP z użyciem dla pleksiglasu oryginalnej i zmodyfikowanej ($K_X = 1.20$) biblioteki *poly.01t.* 99
- **Tabela II.17** Zestawienie wartości odchyłek: ε , $\overline{\varepsilon}$ i *L* dla cylindrycznej geometrii dwustrefowej. **.. 101**

Tabela II.18 Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla jednorodnych sześcianów z polietylenu.Symulacje MCNP z użyciem dla polietylenu biblioteki poly.01t zmodyfikowanej z różnymiwspółczynnikami K_X
Tabela II.19 Wartości odchyłek: ε , $\overline{\varepsilon}$ i <i>L</i> dla jednorodnych sześcianów z polietylenu
Tabela 0.1 Stosunki wartości C_{2PLX}^{nH} do C_{2PE}^{nH} . 109
Tabela 0.2 Współczynniki <i>a</i> i <i>b</i> dla funkcji $C_{2PLX}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$ i $C_{2PLX}^{H}(\lambda^*)^{exp}$

Tabela B Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla dwustrefowej geometrii cylindrycznej, gdziezewnętrzny moderator z pleksiglasu otaczał warstwę wewnętrzną utworzoną z H3BO3 + H2O.121

Lista symboli

- α średnia częstość absorpcji neutronów termicznych, $\alpha = \langle v \Sigma_a \rangle$,
- ε odchyłka względna wielkości otrzymanej z symulacji MCNP od wielkości z rzeczywistego eksperymentu (r. I.5.1),
- $\overline{\epsilon}$ średnia odchyłka względna (r. I.5.2),
- λ , λ_0 stała czasowa zaniku podstawowej składowej eksponencjalnej strumienia neutronów termicznych (r. I.1.14)
- λ^* tzw. teoretyczna funkcja stałej zaniku w układach dwustrefowych (przy zerowaniu się dynamicznego bucklingu materiałowego strefy wewnętrznej, B_{dl}^2 (r .1.2.10),
- $\lambda^{*(n)}$ stała zaniku *n-tego* rzędu składowej eksponencjalnej strumienia neutronów termicznych (r. I.2.13)
- μ średni kosinus kąta rozpraszania neutronów termicznych (r. I.1.12),
- $\mu(E')$ średni kosinus kąta rozpraszania zależny od energii (r. I.1.26),
- ρ-gęstość masy materiału (r. I.5.4),
- ρ_{nas} gęstość nasypowa materiału (str. 45),
- $\sigma_{\text{Hel}}(E_T)$ całkowity mikroskopowy elastyczny przekrój czynny na rozpraszanie neutronów termicznych na wodorze związanym dla energii E_T (str. 84),
- $\sigma_{\text{Hinel}}(E_T)$ całkowity mikroskopowy nieelastyczny przekrój czynny na rozpraszanie neutronów termicznych na wodorze związanym dla energii E_T (str. 84),
- σ_{Htot} wartość rzeczywistego, całkowitego (elastycznego + nieelastycznego) przekroju czynnego na rozpraszanie neutronów termicznych na wodorze związanym (str. 84),
- $\sigma_{\text{Htot}}^{\text{mod}}$ wartość zmodyfikowanego, całkowitego (elastycznego + nieelastycznego) przekroju czynnego na rozpraszanie neutronów termicznych na wodorze zwiazanym (str. 84),
- $\sigma_s(E)$ zależny od energii mikroskopowy przekrój czynny na rozpraszanie neutronów (str. 15),

 $\sigma_s(E \rightarrow E')$ – różniczkowy przekrój czynny na rozpraszanie neutronów,

 $\sigma_{s(PE)}^{MCNP}(E \rightarrow E')$ – różniczkowy przekrój czynny na rozpraszanie neutronów termicznych na wodorze

związanym w polietylenie, dostępny w programie MCNP (str. 81),

 $\sigma(x)$ – odchylenie standardowe wielkości x,

 $\Sigma(E' \to E, \Omega' \to \Omega)$ – funkcja scattering kernel (r. I.1.9),

- $\Sigma_a(E)$ zależny od energii makroskopowy przekrój czynny na absorpcję neutronów (r. I.1.18),
- Σ_a^T makroskopowy przekrój czynny na absorpcję neutronów w temperaturze T (r. I.1.18),
- Σ_a makroskopowy przekrój czynny na absorpcję neutronów (r. I.1.1),

- Σ_s makroskopowy przekrój czynny na rozpraszanie neutronów (r. I.1.1),
- $\Sigma_s(E)$ zależny od energii makroskopowy przekrój czynny na rozpraszanie neutronów (r. I.1.9),
- $\Sigma_t(E)$ całkowity makroskopowy przekrój czynny na transport neutronów (str. 7),
- $\Sigma_{tr}(E)$ zależny od energii makroskopowy przekrój czynny na transport neutronów (r. I.1.12),
- ϕ_T strumień neutronów w temperaturze *T* (r. I.1.6),
- $\phi(E)$ strumień neutronów w funkcji energii (r. I.1.3),
- $\phi(t)$ funkcja opisująca zmianę strumienia neutronów w czasie (r. I.1.7),
- $\phi(\mathbf{r})$ funkcja opisująca zmianę strumienia w przestrzeni (r. I.1.6),
- $\phi(\mathbf{r}, E, t)$ strumień neutronów scałkowany po kierunkach Ω (r. I.1.8),
- $\phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)$ strumień neutronów zależny od położenia, kierunku ruchu, energii neutronu i czasu (r. I.1.2),
- Ω kierunek ruchu neutronu (r. I.1.1),
- $\langle v\Sigma_a \rangle$ średnia częstość absorpcji neutronów (r. I.1.14),
- $\langle \Sigma_{adi} \rangle$ uśredniony po energii dynamiczny makroskopowy przekrój czynny na absorpcje neutronów w *i-tym* obszarze układu dwustrefowego (**r. I.3.6**),
- B^2 *buckling* geometryczny (str. 21)
- B_d^2 dynamiczny *buckling* materiałowy (r. I.2.5),
- \widetilde{B}_{di} dynamiczny *buckling* materiałowy z uwzględnieniem ochładzania dyfuzyjnego (r. I.3.6),
- *C* współczynnik dyfuzyjnego ochładzania neutronów termicznych w materiale jednorodnym (r. I.1.14),
- C_i współczynnik C w materiale tworzącym *i-tą* warstwę układu dwustrefowego (r. 1.3.5),
- C_D współczynnik ochładzania dyfuzyjnego wyliczony wg. teorii dyfuzji (r. I.1.1.23),
- C_t poprawka transportowa, czyli składowa współczynnika ochładzania dyfuzyjnego uzyskana w wyniku uwzględnienia odstępstwa od teorii dyfuzji (r. 1.1.25),
- d długość krawędzi sześcianu,
- dV-element objętości (r. I.1.1),
- D_0 stała dyfuzji neutronów termicznych (r. I.1.14),
- \widetilde{D}_0 –stała dyfuzji z poprawką wynikającą z istnienia zjawiska ochładzania dyfuzyjnego (r. I.3.1),
- D(E) współczynnik dyfuzji zależny od energii (r. I.1.10),
- $\langle D \rangle$ uśredniony po energii współczynnik dyfuzji (r. I.1.22),
- E energia,
- E_0 najbardziej prawdopodobna energia w rozkładzie energetycznym Maxwella (str. 9),
- H-wysokość walca,
- j_0 pierwsze zero funkcji Bessela pierwszego rodzaju rzędu zerowego (r. I.2.11),
- k stężenie roztworu (str. 38),

 k_B – stała Boltzmana (str. 9),

- $K_{\rm X}$ współczynnik modyfikacji biblioteki *poly.01t* (r. II.3.3),
- L odchyłka wielkości uzyskanej w oparciu o symulacje MCNP od wielkości z rzeczywistego eksperymentu, odpowiadająca metodzie najmniejszych kwadratów (r. 1.5.3),
- m_i masa *j-tego* składnika mieszaniny (str. 45),
- $m_{\rm H}$ efektywna masa wodoru biorącego udział w rozpraszaniu neutronów (str. 81),

M – masa mieszaniny (str. 45),

- M(E, T) rozkład Maxwella (r. I.1.4)
- n gęstość neutronów (liczba neutronów w jednostce objętości) (r. I.1.1),
- q_j udział wagowy *j-tego* składnika mieszaniny(str. 45),
- R promień podstawy walca,
- $S(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)$ funkcja źródła neutronów (r. I.1.1),
- \hat{S} operator rozpraszania (r. I.1.8),
- t-czas,
- T-temperatura ośrodka (r. I.1.3),
- T_n temperatura neutronów (str. 29),
- T_{rep} okres repetycji impulsu neutronowego (str. 22),
- T_{imp} czas trwania impulsu neutronów (str. 21, 23)
- v szybkość neutronów (r. I.1.1),
- v_T najbardziej prawdopodobna szybkość neutronów w temperaturze T,

Indeksy:

PE – polietylen,

PLX-pleksiglas,

H-materiał typu wodorowego,

nH – materiał typu niewodorowego,

- MCNP wielkość związana z symulacjami MCNP,
- exp wielkość związana z rzeczywistym eksperymentem,
- mod wielkość modyfikowana,
- i i ty obszar układu wielostrefowego,
- d wielkośc dynamiczna

Wprowadzenie

Tematyka niniejszej pracy dotyczy transportu neutronów termicznych w niewielkich układach niejednorodnych. Rozpatrywane są tutaj głównie układy dwuwarstwowe, które rozumieć będziemy jako układy, gdzie warstwa zewnętrzna (zewnętrzny moderator) zbudowana jest z jednorodnego materiału o określonej geometrii i określonym rozmiarze, w którym rozpraszanie zachodzi głównie na wodorze. W pracy tej rozważania dotyczą przypadków, w których moderatory wykonane są albo z pleksiglasu, albo z polietylenu. Natomiast warstwę wewnętrzną tworzą materiały, które ze względu na zawartość lub brak wodoru zostały podzielone na dwie grupy. I tak w tej pracy rozróżniamy materiały tworzące warstwę wewnętrzną, które:

– zawierają atomy wodoru związanego w danej cząsteczce, zwane materiałami typu wodorowego,

– nie zawierają atomów wodoru związanego w danej cząsteczce, zwane materiałami typu niewodorowego.

Rozróżnienie takie zostało wprowadzone ze względu na znaczne różnice w rozpraszaniu neutronów termicznych w obu rodzajach materiałów. Rozpraszanie na jądrach wodoru związanego w cząsteczkach jest silnie zależne od energii tych neutronów (i indywidualne dla różnych ośrodków typu wodorowego), a zatem zależy od rozkładu energetycznego tych neutronów.

Do tego typu bezźródłowego ośrodka, wprowadza się impuls neutronów prędkich, w wyniku czego wytwarza się w nim niestacjonarne pole neutronowe. Na skutek zderzeń z jądrami atomowymi pierwiastków neutrony prędkie wytracają energię, są spowalniane i ulegają termalizacji. Po impulsie strumień neutronów zanika w czasie w zależności od absorpcji wewnątrz ośrodka i ucieczki neutronów na zewnątrz. Ten czasowy zanik strumienia neutronów termicznych można opisać poprzez sumę składowych eksponencjalnych i pewnej funkcji ciągłej. Stosując odpowiednie założenia eksperymentalne związane z geometrią i rodzajem ośrodka można przyjąć, że po określonym czasie, w rozważanym układzie pozostaje tylko podstawowa składowa eksponencjalna czasowego zaniku strumienia neutronów termicznych λ_0 , która w pracy nazywana będzie stałą zaniku λ .

Można przyjąć, że neutrony termiczne w bezźródłowym, nieskończonym, jednorodnym ośrodku nieabsorbującym charakteryzują się rozkładem maxwellowskim odpowiadającym temperaturze ośrodka. W małych układach ograniczonych ten rozkład

1

energetyczny jest zdeformowany z powodu ucieczki neutronów poza jego granice. Ponieważ prawdopodobieństwo ucieczki dla neutronów o wyższych energiach jest większe, w związku z tym obserwuje się przesunięcie rozkładu energetycznego w kierunku niższych energii. Zjawisko to nazywa się ochładzaniem dyfuzyjnym strumienia neutronów termicznych i zależy od relacji materiałowo-geometrycznych między strefami układu. Parametrem opisującym to zjawisko jest współczynnik ochładzania dyfuzyjnego *C*, który dla układów jednorodnych jest dość dobrze określony. Parametr ten silnie zależy od sposobu rozpraszania materiałów, z których zbudowany jest ośrodek, co przejawia się w różnych zależnościach funkcji jądra rozpraszania dla przekazu energii (s*cattering kernel*), od energii neutronu i wynikających stąd różnych przekrojach czynnych na rozpraszanie i średnich kosinusach kąta rozpraszania. Sytuacja komplikuje się, kiedy rozważamy małe układy dwustrefowe.

Praca niniejsza skupia się na przebadaniu samego zjawiska i wyznaczeniu przebiegu zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w warstwie zewnętrznej układu dwustrefowego w zależności od jej grubości i od rodzaju rozpraszania neutronów w strefie wewnętrznej. Jako główne narzędzie zastosowany został program do symulacji metodą Monte Carlo – MCNP (Monte Carlo N – Particle Transport Code System). W trakcie pracy okazało się, że istnieją pewne rozbieżności pomiędzy symulacją i rzeczywistym eksperymentem (Rozdział II.2). W związku z tym, konieczne stało się lepsze dopasowanie działania kodu MCNP, aby przebadać zjawisko nie tylko jakościowo, ale także osiągnąć możliwość wyznaczenia jak najdokładniejszych relacji ilościowych (Rozdział II.3). Do programu MCNP dołączone są, dla każdego pierwiastka, biblioteki zawierające przekroje czynne na odpowiednie reakcje. W analizowanych zagadnieniach dla rozpraszania neutronów termicznych na wodorze w polietylenie użyta została biblioteka poly.01t, ENDF VI. Ponieważ nie istnieje biblioteka dedykowana dla pleksiglasu $(C_5H_8O_2)_n$, w związku z tym biblioteka poly.01t została zastosowana również dla pleksiglasu zgodnie z zaleceniami twórców programu, ze względu na zbliżone wartości przekrojów czynnych na rozpraszanie neutronów termicznych na wodorze w obu cząsteczkach (Rozdział I.1.3, Rys. I.7). Stwierdzono jednak, że otrzymywane z symulacji MCNP wyniki na tyle odbiegają od wyników z rzeczywistych eksperymentów impulsowych, że nie pozwalają na poprawną nie tylko ilościowo, ale także jakościowo analizę zaniku strumienia neutronów termicznych w małych układach. W celu poprawy zgodności symulacja – eksperyment została przeprowadzona modyfikacja istniejącej biblioteki poly.01t. Polegała ona na zmianie efektywnej masy wodoru biorącego udział w rozpraszaniu neutronów w taki sposób, aby otrzymane w ten sposób przekroje czynne na rozpraszanie, w jak najlepszym stopniu zgadzały się z ich rzeczywistymi wartościami (Rozdział II.3). W ten sposób otrzymano cały zestaw bibliotek z różnymi współczynnikami modyfikacji, przyjętymi jako miara modyfikacji. Zarówno dla pleksiglasu (Rozdział II.3.2), jak i dla polietylenu (Rozdział II.3.3) dobrano optymalnie zmodyfikowaną bibliotekę w oparciu o porównanie wyników symulacji MCNP, z ich użyciem, i wyników rzeczywistych eksperymentów. Dobrane dla każdego z nich odpowiednie biblioteki zostały użyte w symulacjach MCNP w głównej części pracy. Cały proces optymalnego dopasowania kodu nie stanowi istoty pracy, aczkolwiek jest ważny ze względu na jego wpływ na końcowe wyniki.

W celu lepszej przejrzystości, pracy została podzielona na dwie części. Pierwsza, a zarazem główna część pracy, skupia się na przedstawieniu zagadnienia związanego ze zjawiskiem ochładzania dyfuzyjnego (Rozdział I.3) i zawiera podstawowe informacje potrzebne do jego opisu. Istotnym elementem tej części jest zbadanie przebiegu zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego we wspomnianych układach dwustrefowych w geometrii cylindrycznej, w oparciu o wyniki symulacji MCNP impulsowych eksperymentów neutronowych. Przebieg zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego został zbadany, metodą opisaną w Rozdziale I.4, dla moderatora utworzonego z dwóch materiałów: pleksiglasu i polietylenu.

Dla pierwszego z nich, dla pleksiglasu, zjawisko ochładzania dyfuzyjnego zostało zbadane dla dwóch przypadków, w których ośrodek wewnętrzny tworzył materiał typu wodorowego lub typu niewodorowego. Symulacje MCNP dla przypadku, gdzie warstwa wewnętrzna utworzona była z materiału typu wodorowego zostały wykonane w nawiązaniu do rzeczywistych eksperymentów neutronowych przeprowadzonych w Pracowni Fizyki Transportu Neutronów IFJ PAN w Krakowie (Rozdział I.5.1). Natomiast dla przypadku, w którym warstwa wewnętrzna utworzona była z materiału typu niewodorowego zaplanowany został od podstaw impulsowy eksperyment neutronowy. W oparciu o wyniki symulacji MCNP zbadany został przebieg zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego dla tego przypadku. Wszystkie procedury z tym związane zostały opisane w Rozdziale I.5.2. Znaleźć tam można także opis przygotowania i przeprowadzenia zaplanowanych eksperymentów przy pomocy symulacji MCNP.

Dla moderatora utworzonego z polietylenu przebieg zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego został zbadany dla przypadku, gdzie warstwa wewnętrzna utworzona była z materiału typu niewodorowego. Procedury z tym związane oraz wykonane symulacje MCNP impulsowych eksperymentów neutronowych, zostały opisane w Rozdziale I.6.

3

Otrzymane metodą symulacji MCNP zależności mogą być zastosowane do interpretacji rzeczywistych pomiarów przekroju czynnego absorpcji neutronów termicznych, co zostało pokazane na dwóch przykładach materiałów typu niewodorowego w Rozdziale I.7.

W drugiej części niniejszej rozprawy opisano sposób przebadania i przygotowania narzędzia pracy, jakim jest program do symulacji MCNP. Program MCNP został przebadany w oparciu o liczne symulacje rzeczywistych eksperymentów impulsowych, przy zastosowaniu standardowych bibliotek przekrojów czynnych na rozpraszanie w zakresie energii termicznych neutronów na wodorze związanym w różnych cząsteczkach, ze zwróceniem szczególnej uwagi na polietylen i pleksiglas. Poświęcony jest temu Rozdział II.2. W celu zmniejszenia obserwowanych rozbieżności pomiędzy symulacją i eksperymentem, została zmodyfikowana oryginalna biblioteka *poly.01t* (na rozpraszanie neutronów termicznych na wodorze związanym w polietylenie), co zostało przedstawione w Rozdziale II.3. W oparciu o symulacje MCNP z wykorzystaniem zmodyfikowanej biblioteki *poly.01t* z różnymi współczynnikami modyfikacji, zarówno dla pleksiglasu, jak i dla polietylenu została dobrana optymalnie zmodyfikowana biblioteka, co zostało opisane w Rozdziale II.3.2 dla pleksiglasu i w Rozdziale II.3.3 dla polietylenu. Dobrane w ten sposób biblioteki zostały użyte w symulacjach MCNP w oparciu, o które zbadany został przebieg zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego we wspomnianych przypadkach (Rozdział I.5 i Rozdział I.6).

I. Część Ochładzanie dyfuzyjne impulsowego strumienia neutronów termicznych w małych układach dwustrefowych

I.1 Podstawy teoretyczne

I.1.1 Oddziaływanie neutronów z materią

Rozważając oddziaływanie neutronów z materią, za istotne uważa się jedynie oddziaływania jądrowe tych cząstek z jądrami atomowymi, których skutkiem mogą być zjawiska takie jak: rozpraszanie sprężyste neutronu (reakcja jądrowa typu (n, n), (n, 2n), (n, α) itp. z zachowaniem energii kinetycznej cząstek), rozpraszanie niesprężyste (n, n' γ), prowadzące do wzbudzenia jądra i natychmiastowej reemisji fotonu gamma, reakcje jądrowe z emisją cząstek naładowanych, wychwyt radiacyjny (n, γ) oraz reakcja rozszczepienia jądra ciężkiego (n, f) [Kiełkiewicz, 1987].

Szczególną rolę w praktycznych zastosowaniach neutronów odgrywa ich spowalnianie (moderacja) w wyniku sprężystych rozproszeń na jądrach, zwłaszcza lekkich. Z punktu widzenia mechaniki klasycznej neutron traci najwięcej ze swojej początkowej energii kinetycznej w wyniku pojedynczego zderzenia czołowego z jądrem atomu wodoru. Proces spowalniania neutronów prowadzi do osiągnięcia przez nie równowagi termodynamicznej z ośrodkiem. Stąd neutrony całkowicie spowolnione nazywamy neutronami termicznymi i do opisu termalizacji nie można już stosować prostego modelu mechanicznego zderzenia się sprężystego dwóch kul.

Oddziaływanie neutronów termicznych z materią jest skomplikowanym zjawiskiem, do którego opisu wymagane jest rozróżnienie ze względu na energie neutronów i rodzaj ośrodka, w którym zachodzi to oddziaływanie. Dla energii neutronów poniżej 1 eV, w który to zakres wchodzą energie termiczne, wartości energii neutronów i drgań termicznych ośrodka są porównywalne. Atomy budujące cząsteczkę nie tworzą sztywnego układu. Związane atomy nie mogą być traktowane jako swobodne. Mogą one ulegać drganiom zmieniając przez to wzajemne położenie względem siebie. Neutron o energii termicznej, który trafia na taki układ, "widzi" jądro atomu jako fragment cząsteczki i w zderzeniach z nim może zarówno zyskać jak i stracić pewną ilość swojej pierwotnej energii. W przypadku neutronów termicznych występuje zjawisko interferencji, gdyż długość fali de Broglie'a dla tych neutronów staje się porównywalna z odległościami między atomami w sieci krystalicznej. To wszystko powoduje, że mikroskopowe przekroje czynne na rozpraszanie dla neutronów termicznych są skomplikowanymi funkcjami energii i kierunku ruchu neutronów. Zależą one od fizycznych i chemicznych własności materiału ośrodka, temperatury, a w niektórych przypadkach również od orientacji cząsteczek w stosunku do kierunku ruchu neutronów.

I.1.2 Teoretyczny opis parametrów neutronowych

Równanie opisujące transport neutronów w ośrodku otrzymuje się rozpatrując bilans neutronów w jednostce czasu *dt* i w jednostce objętości ośrodka *dV*. Bilans ten najczęściej opisuje się za pomocą równania transportu Boltzmana [Kiełkiewicz, 1987]. W równaniu tym rozpatrujemy przestrzeń 7-mio fazową, tzn. trzy zmienne przestrzeni, dwie zmienne kąta, jedna zmienna energii i jedna zmienna czasu. W elemencie takiej przestrzeni, $dV = d\mathbf{r} d\Omega dE dt$, określamy liczbę neutronów. Ogólnie to równanie transportu, dla ośrodka niemnożącego (czyli takiego, w którym nie zachodzi zjawisko rozszczepienia), można zapisać w następujący sposób:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = S(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t) + \int dE' \int d\mathbf{\Omega}' \Sigma_s(E' \to E, \mathbf{\Omega}' \to \mathbf{\Omega}) v' n(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', E', t) - \Sigma_t(E) v n - v \nabla n \qquad \text{r. I.1.1}$$

gdzie $n = n(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)$ jest gęstością neutronów, a poszczególne człony tego równania oznaczają:

 $\frac{\partial n}{\partial t}$ – opisuje zmianę ilości neutronów w elemencie przestrzeni w jednostce czasu, $S(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)$ – opisuje ilość neutronów produkowanych w elemencie dV przez źródła w nim się znajdujące,

 $\int dE' \int d\mathbf{\Omega}' \Sigma_s (E' \to E, \mathbf{\Omega}' \to \mathbf{\Omega}) v' n(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E', t) - \text{opisuje procesy rozpraszania}$

z elementu dV' do dV, gdzie v jest szybkością neutronów,

 $\Sigma_t(E)vn$ – opisuje usunięcie neutronów z elementu dV na skutek oddziaływań elementarnych, gdzie $\Sigma_t(E)$ jest całkowitym makroskopowym przekrojem czynnym tego zjawiska, $\Sigma_t = \Sigma_a + \Sigma_s$, gdzie "*a*" oznacza absorpcję, a "*s*" rozpraszanie,

 $v\nabla n$ – opisuje ilość neutronów, które uciekają z elementu dV na skutek dyfuzji.

Równanie to można zapisać również w postaci iloczynu szybkości neutronów *v* i gęstości neutronów *n*, co daje nam wielkość skalarną zwaną strumieniem neutronów ϕ : $\phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t) = \phi = v \cdot n$ r. I.1.2 Strumień neutronów można interpretować jako sumę dróg w objętości dV, w czasie od t do t + dt przez neutrony poruszające się wewnątrz kąta bryłowego $d\Omega$ i mające energie zawarte w przedziale od E do E + dE. W najbardziej ogólnym przypadku strumień neutronów jest funkcją siedmiu zmiennych niezależnych.

Zjawiska zachodzące podczas przemieszczania się neutronu w ośrodku przedstawia schematycznie **Rys.I.1**. Neutron prędki (wysokoenergetyczny) wylatuje ze źródła i traci swoją energię w wyniku zderzeń elastycznych lub nieelastycznych w ośrodku. Utrata energii następuje do momentu, w którym energia neutronu zaczyna być porównywalna z energią ruchów termicznych jąder ośrodka. Wtedy w trakcie zderzeń z jądrem, neutron może zarówno zyskać, jak i stracić część swojej energii. W rezultacie ustala się równowaga termodynamiczna pomiędzy neutronami a ośrodkiem. W ośrodku nieskończenie dużym, przy danej temperaturze, neutrony osiągają stan równowagi termicznej z jądrami ośrodka. W tym przypadku nie mówi się już o spowalnianiu, ale o dyfuzji neutronów termicznych.





W sytuacji, kiedy mamy ośrodek bezźródłowy, czyli po impulsie neutronów nie ma ich dalszego napływu, to strumień neutronów $\phi(E)$ ma rozkład energetyczny opisany rozkładem Maxwella M(E,T) w nieskończonym ośrodku jednorodnym [Williams, 1966], [Williams, 1971]:

$$\phi(E) = v_T \cdot n_T \cdot M(E, T)$$
r. I.1.3

$$M(E,T) = \frac{E}{(k_B T)^2} exp(-\frac{E}{k_B T})$$
 r. I.1.4

gdzie:

E – energia neutronu,

T-temperatura ośrodka,

 k_B – stała Boltzmana,

 $n_{\rm T}$ – liczba neutronów przypadająca na jednostkę objętości, w temperaturze T,

 v_T – najbardziej prawdopodobna szybkość neutronów w temperaturze T.



Rys. I.2 Rozkład Maxwella strumienia neutronów termicznych w ośrodku nieskończonym [Kiełkiewicz, 1987].

Przebieg znormalizowanego rozkładu Maxwellowskiego

$$\int_{0}^{\infty} M(E,T)dE = 1$$
 r. I.1.5

pokazany jest na Rys. I.2.

Energia, przy której $\phi(E)$ osiąga maksimum, nazywa się energią najbardziej prawdopodobną $E_0 = k_B T$.

W większości zagadnień wszystkie neutrony istniejące w ośrodku dzieli się umownie na dwie grupy. Pierwsza z nich to neutrony prędkie o energiach powyżej tak zwanej energii epitermicznej równej około $E_{EPI} = 0.4$ eV (w celu fizycznego oddzielenia neutronów epitermicznych i termicznych, w eksperymentach wprowadza się warstwę kadmu, którego przekrój czynny na wychwyt neutronów termicznych ma wartość około kilku tysięcy barnów. Kadm absorbuje neutrony termiczne o energiach poniżej 0.4 eV i to sugeruje umowną wartość E_{EPI}). Drugą grupę stanowią neutrony termiczne o energiach poniżej E_{EPI} . Ze względu na to, rozpatruje się dwa rodzaje parametrów neutronowych ośrodka:

- parametry dotyczące spowalniania neutronów,

- parametry dotyczące dyfuzji neutronów.

Równanie transportu (r. I.1.1), opisujące oba procesy jest liniowym równaniem różniczkowo-całkowym. Znalezienie rozwiązania równania transportu wymaga zastosowania przybliżonych metod analitycznych, bądź numerycznych.

Rozważmy teraz izotropowe rozpraszanie neutronów w jednorodnym, bezźródłowym ośrodku [Drozdowicz, 1992, 1998]. Do ośrodka takiego wprowadzany jest impuls neutronów szybkich. Po pewnym czasie obserwuje się zanikający strumień neutronów termicznych, opisany równaniem Boltzmana, które rozważamy po wszystkich kierunkach poruszania się neutronu i zakładamy separację składowych przestrzeni, czasu i energii. Dla rozważanego przypadku równanie to przyjmuje postać

$$\phi(\mathbf{r}, E, t) = \phi(\mathbf{r})\phi(E)\phi(t)$$
r. I.1.6

Dla funkcji $\phi(t)$ opisującej zanik strumienia w czasie najbardziej istotna jest składowa podstawowa dana zależnością:

$$\phi(t) \cong e^{-\lambda t}$$
r. I.1.7

Po uwzględnieniu tych założeń w równaniu Boltzmana uzyskuje się zależność pomiędzy parametrami neutronowymi ośrodka, rozkładem energetycznym neutronów i czasowym zanikiem podstawowej składowej λ strumienia neutronów termicznych w objętości zdefiniowanej przez tak zwany *buckling* geometryczny B^2 :

$$\left(-\frac{\lambda}{\nu} + \Sigma_a(E) + D(E)B^2\right)\phi(E) = \hat{S}\phi(E)$$
r. I.1.8

gdzie \hat{S} jest operatorem rozpraszania, który pokazuje różnice pomiędzy liczbą neutronów, które od energii początkowej E' rozpraszają się do energii E oraz tych, które z energii E rozpraszają się do innej, i wyraża się następująco:

$$\hat{S}\phi(E) = \int_{0}^{\infty} \Sigma_{0}(E', E)\phi(E')dE' - \Sigma_{s}(E)\phi(E)$$
r. I.1.9

gdzie:

 $\Sigma_0(E', E) = \Sigma_0(E' \to E)$ – jest funkcją zerowego rzędu w rozwinięciu Legendre'a jądra rozpraszania (*scattering kernel*) dla przekazu energii,

 $\Sigma_s(E)$ – jest całkowitym przekrojem czynnym na rozpraszanie,

D(E) – jest współczynnikiem dyfuzji, zdefiniowanym za pomocą całkowitego przekroju czynnego

$$D(E) = \frac{1}{3\Sigma_t(E)} = \frac{1}{3(\Sigma_s(E) + \Sigma_a(E))}$$
r. I.1.10

gdzie $\Sigma_a(E)$ jest zależnym od energii makroskopowym przekrojem czynnym na absorpcję neutronów.

 B^2 jest to *buckling* geometryczny, czyli najniższa wartość własna rozwiązania równania Helmholtza, dla przestrzennej zależności strumienia neutronów $\phi(\mathbf{r})$ związana z rozmiarem skończonego systemu. Równanie Helmholtza jest rozwiązaniem szczególnego przypadku równania jednogrupowego przybliżenia dyfuzyjnego. Zakładając, że mamy ośrodek jednorodny i bezźródłowy, oraz, że neutrony są monoenergetyczne a wartości przekrojów czynnych i współczynnika dyfuzji stałe, to równanie Helmholtza można zapisać w postaci:

$$\nabla^2 \phi(\mathbf{r}) - \frac{\Sigma_a(\mathbf{r})}{D(\mathbf{r})} \phi(\mathbf{r}) = 0 \qquad r. I.1.11$$

Dla najprostszych geometrii (płaska płyta, prostopadłościan, kula, walec) *buckling* geometryczny jest dany przez znane formuły [Weinberg, Winger, 1952].

W przypadku anizotropii rozpraszania definicję współczynnika dyfuzji (r. I.1.10) można rozszerzyć:

$$D(E) = \frac{1}{3\Sigma_t(E)} = \frac{1}{3(\Sigma_{tr}(E) + \Sigma_a(E))}$$
r. I.1.12

gdzie $\Sigma_{tr} = \Sigma_s (1 - \mu)$, to makroskopowy przekrój czynny na transport zależny od makroskopowego przekroju czynnego na rozpraszanie Σ_s i średniego kosinusa kąta rozpraszania μ ,

W równaniu r. I.1.9 całkowanie ze względu na energię jest wprowadzone w granicach od zera do nieskończoności dla uproszczenia rachunków. Zostało to przyjęte, ponieważ każde

spektrum energetyczne neutronów termicznych bliskie równowagi termicznej z ośrodkiem zanika eksponencjalnie dla $E \rightarrow \infty$.

Według [Williams, 1964] rozkład energetyczny strumienia może być wyrażony w postaci następującego szeregu:

$$\phi(E) = \phi_0(E) + B^2 \phi_2(E) + B^4 \phi_4(E) + \dots$$
 r. I.1.13

Podstawowa stała zaniku λ może być opisana w analogiczny sposób:

$$\lambda = \langle v \Sigma_a \rangle + D_0 B^2 - C B^4 + F B^6 + \dots$$
 r. I.1.14

gdzie:

 $\langle v\Sigma_a \rangle$ – średnia częstość absorpcji neutronów,

 D_0 – stała dyfuzji,

C – współczynnik ochładzania dyfuzyjnego.

Jeżeli obie zależności (r. I.1.13 i r. I.1.14) wprowadzimy do równania r. I.1.8 i porównamy współczynniki przy odpowiednich potęgach B^2 , to dostajemy następujące równania:

$$\left(\Sigma_a(E) - \frac{\langle v \Sigma_a \rangle}{v}\right) \phi_0(E) = \hat{S} \phi_0(E)$$
r. I.1.15

$$\left(D(E) - \frac{D_0}{v}\right)\phi_0(E) = \hat{S}\phi_2(E)$$
r. I.1.16

$$\frac{C}{v}\phi_0(E) + \left(D(E) - \frac{D_0}{v}\right)\phi_2(E) = \hat{S}\phi_4(E)$$
 r. I.1.17

itd...

Powyższe równania (r. I.1.15, r. I.1.16, r. I.1.17, itd...), zawierają parametry dyfuzyjne dla neutronów termicznych w ośrodku ($\langle v\Sigma_a \rangle$, D_0 , C,...). Bezpośrednie wyrażenia na te parametry otrzymuje się z rozwiązania układu tych równań. Zróbmy ważne założenie, że absorpcja neutronów w ośrodku jest proporcjonalna do 1/v, które ma wpływ na całe późniejsze rozwiązanie. Dzięki temu założeniu otrzymujemy zależność na zależny od energii makroskopowy przekrój czynny na absorpcję neutronów:

$$\Sigma_a(E) = \frac{v_T \Sigma_a^T}{v}$$
r. I.1.18

gdzie Σ_a^T jest makroskopowym przekrojem czynnym na absorpcje neutronów w temperaturze *T*. Wyrażenie na średnią częstość absorpcji $\langle v \Sigma_a \rangle$ przyjmuje postać:

$$\langle v \Sigma_a \rangle = v_T \Sigma_a^T$$
 r. I.1.19

Korzystając z zależności r. I.1.18 i r. I.1.19, równanie r. I.1.15 można zapisać w postaci:

$$\hat{S}\phi_0(E) = 0$$
 r. I.1.20

która koresponduje z równaniem:

$$\phi_0(E) = M(E,T)$$
 r. I.1.21

Od strony fizycznej oznacza to, że w nieskończonym ($B^2 = 0$), bezźródłowym ośrodku, w którym absorpcję charakteryzuje zależność 1/v, rozkład strumienia neutronów termicznych jest czysto Maxellowski M(E,T). Znając funkcję $\phi_0(E)$, całkując po energii równania r. I.1.16 i r. I.1.17, oraz korzystając z warunku, że $\int \hat{S}\Phi(E)dE \equiv 0$, można wyznaczyć stałą dyfuzji D_0 , która ze współczynnikiem dyfuzji powiązana jest przez makroskopowy przekrój czynny na transport i absorpcję:

$$D_0 = \frac{\langle D(E) \rangle}{\left\langle \frac{1}{\nu} \right\rangle}$$
r. I.1.22

Wyrażenie to daje nam zależność pomiędzy stałą dyfuzji D_0 i współczynnikiem dyfuzji D(E).

Kolejna analiza układu równań, r. I.1.15 – r. I.1.17, daje wyrażenie na współczynnik ochładzania dyfuzyjnego C_D :

$$C_D = -\frac{1}{\left\langle \frac{1}{\nu} \right\rangle_0^\infty} \left[D(E) - \frac{D_0}{\nu} \right] \phi_2(E) dE$$
r. I.1.23

Istotne jest to, że równanie to zostało uzyskane w wyniku aproksymacji teorii dyfuzji i dlatego współczynnik ochładzania dyfuzyjnego jest oznaczony symbolem C_D . Podobne obliczenia zostały przeprowadzone przez Nelkina w oparciu o teorię transportu [Nelkin, 1960]. W wyniku swoich obliczeń otrzymał równania identyczne jak r. I.1.15 i r. I.1.16 i formuła na stałą dyfuzji pozostawała taka sama jak w równaniu r. I.1.22. Różnice pojawiły się w równaniu r. I.1.17, która to zależność doprowadziła do wyrażenia na współczynnik ochładzania dyfuzyjnego C, jako sumy dwóch składników:

$$C = C_D + C_t$$
 r. I.1.24

W zależności tej C_D wyrażone jest tak samo jak w równaniu r. I.1.26, natomiast składowa C_t jest wynikiem odstępstwa od teorii dyfuzji i jest nazywana poprawką transportową. Jest ona nieczuła na zmianę spektrum neutronów (jego odstępstwo od rozkładu równowagowego) i wyraża się:

$$C_{t} = \frac{1}{\left\langle \frac{1}{\nu} \right\rangle} \int_{0}^{\infty} 3[D(E)]^{2} \left(\frac{4}{15} \frac{1}{(1-b^{2}(E))\Sigma_{s}(E)} - \frac{D_{0}}{\nu} \right) M(E,T) dE$$
r. I.1.25

gdzie $b_2(E)$ – jest drugiego rzędu współczynnikiem wynikającym ze wspomnianego rozwinięcia Legrenge'a funkcji rozpraszania.

Składowa C_t może przybierać wartości zarówno dodatnie, jak i ujemne, co uzależnione jest od rodzaju zależności przekroju czynnego $\Sigma_s(E)$ od energii.

Na podstawie otrzymanych zależności można wyciągnąć wniosek, że parametry D_0 i C są rzeczywistymi stałymi dla danego materiału. Zależą one głównie od przekrojów czynnych na reakcje dla neutronów termicznych, w szczególności od zerowego rzędu funkcji jądra rozpraszania dla przekazu energii (s*cattering kernel*) $\Sigma(E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega)$, który określa trzy parametry: przekrój czynny na rozpraszanie $\Sigma_s(E)$, średni kosinus kąta rozpraszania $\mu(E)$ i odchyłkę od rozkładu Maxwella $\phi_2(E)$. Obliczenie stałej dyfuzji, D_0 , jest proste pod warunkiem, że znana jest zależność energetyczna współczynnika dyfuzji D(E). A to z kolei wymaga znajomości zależnych energetycznie przekrojów czynnych na absorpcję $\Sigma_a(E)$ i na rozpraszanie $\Sigma_s(E)$ oraz średniego kosinusa kąta rozpraszanie, dla wielu pierwiastków można przyjąć jako stały, albo opisać za pomocą modelu gazu swobodnego. Średni kosinus kąta rozpraszania, dla cięższych nuklidów, można aproksymować zależnością, która jest poprawna dla rozpraszania neutronów termicznych. Wielkość ta może być wyrażona następująco:

$$\mu(E') = \frac{\int_{0}^{\infty} \Sigma_1(E', E) dE}{\int_{0}^{\infty} \Sigma_0(E', E) dE}$$
r. I.1.26

gdzie $\Sigma_1(E', E)$ jest funkcją pierwszego rzędu w rozwinięciu Legendre'a jądra rozpraszania (*scattering kernel*) dla przekazu energii.

Przypadek ten nie zachodzi jednak dla neutronów termicznych w ośrodku typu wodorowego, gdzie zależność energetyczna $\mu(E)$ jest bardzo silna. Znacznie trudniejsza sytuacja jest ze współczynnikiem ochładzania dyfuzyjnego, *C*. Obliczenia mające na celu wyznaczenie *C* wymagają znajomości nie tylko D(E) i D_0 , ale także muszą być znane *scattering kernel* i odchyłka od rozkładu Maxwella. Konstrukcja funkcji jądra rozpraszania

dla przekazu energii dla ośrodków wodorowych jest wyjątkowo trudna. W latach 90-tych XX wieku Granada i jego współpracownicy opracowali syntetyczny model *scattering kernel* i zastosowali go do niektórych wodorowych materiałów [Granada, 1985], [Granada i in., 1987]. Zmierzyli oni również całkowity przekrój czynny dla pleksiglasu w szerokim zakresie energii neutronów powolnych i to spowodowało, że obliczenie współczynnika ochładzania dyfuzyjnego dla pleksiglasu stały się możliwe.

I.1.3 Rozpraszanie neutronów termicznych w ośrodkach typu wodorowego

Zjawisko rozpraszania neutronów termicznych uzależnione jest od rodzaju ośrodka, w którym ono zachodzi. Nieco inaczej zachodzi ono w ośrodku typu wodorowego a inaczej, gdy ośrodek jest typu niewodorowego.

Dla większości molekuł zależny od energii mikroskopowy przekrój czynny na rozpraszanie neutronów termicznych $\sigma_s(E)$ jest dobrze opisywany przez model gazu swobodnego [Drozdowicz, Gillette, 1999a]. Reguła ta obowiązuje nawet dla atomów związanych w cząsteczce. Dla cząsteczek, które w swoim składzie atomowym nie zawierają wodoru można przyjąć, że przekrój czynny na rozpraszanie neutronów termicznych ma stałą wartość i jest równy wartości przekroju czynnego na rozpraszanie neutronów na atomach swobodnych, co widać na rysunku **Rys. I.3**.



Rys. I.3 Zależność przekroju czynnego na rozpraszanie neutronów termicznych na swobodnych atomach Fe i O od energii neutronów [Drozdowicz, 1999b].

Sytuacja ta nieco się komplikuje, gdy mamy do czynienia z cząsteczką zawierającą w swoim składzie atomy wodoru. Na rozpraszanie neutronów termicznych na jądrach atomów wodoru związanych w danej cząsteczce wpływają wzajemne położenia atomów względem siebie a także dynamika cząsteczki scharakteryzowana przez mody drgań wewnętrznych. W tej sytuacji przekrój czynny na rozpraszanie neutronów i średni kosinus kąta rozpraszania są parametrami silnie zależnymi od sposobu, w jaki zachodzą te oddziaływania. W tym przypadku do opisu zależnego od energii przekroju czynnego na rozpraszanie neutronów na jądrach atomów wodoru $\sigma_s(E)$ w danej cząsteczce, nie można zastosować modelu gazu swobodnego.



Rys. I.4 Zależny energetycznie przekrój czynny na rozpraszanie neutronów termicznych na jądrach atomu wodoru związanych w wodzie i polietylenie w temperaturze 293 K oraz dla wodoru, jako gazu swobodnego [Drozdowicz, 1999b].

Zjawisko rozpraszania neutronów termicznych na jądrach atomów wodoru związanych w cząsteczkach przebiega w różny sposób w zależności od struktury, na jaką natrafia neutron. Oddziaływanie to zachodzi inaczej, kiedy neutron trafi na wodór w cząsteczce wody, a inaczej w polietylenie, czy pleksiglasie. W związku z tym wartości $\sigma_s(E)$ znacząco się różnią w zależności od rodzaju cząsteczki i pojedyncza, ogólna, dokładna zależność uzasadniona dla energetycznej zależności mikroskopowego przekroju czynnego na rozpraszanie neutronów na atomach wodoru w różnych chemicznych układach nie istnieje.
Znajomość tego parametru jest istotna i konieczna w przypadku obliczeń teoretycznych, w których rozpatrujemy transport neutronów termicznych w ośrodkach zawierających atomy wodoru. Na rysunku **Rys. I.4** pokazany został przebieg σ_s w zależności od energii neutronu termicznego rozpraszanego na wodorze związanym w cząsteczce wody i polietylenu, a także dla przypadku, kiedy atom wodoru występowałby w postaci niezwiązanej (gaz swobodny).

Materiały zawierające w swoim składzie atomy wodoru związanego w cząsteczce, takie jak: woda, polietylen, czy pleksiglas są stosowane jako moderatory dla neutronów. W pracy tej rozważania dotyczą moderatorów zbudowanych z polietylenu lub z pleksiglasu.

Pierwszy z nich, polietylen, PE $(CH_2)_n$, jest polimerem otrzymywanym w wyniku polimeryzacji etylenu. Cząsteczka ta ma atomy wodoru związane w grupie CH₂, co ma znaczenie w rozpraszaniu neutronów termicznych. Struktura tej cząsteczki przedstawiona została na **Rys. I.5**.



Rys. I.6 Wzór strukturalny cząsteczki pleksiglasu.



Rys. I.5 Wzór strukturalny cząsteczki polietylenu.

Drugi z nich polimetakrylan metylu $(C_5H_8O_2)_n$ o potocznie stosowanej nazwie pleksiglas, jest syntetycznym polimerem o dobrych właściwościach rozpraszających. Struktura tej cząsteczki (**Rys. I.6**) jest nieco bardziej skomplikowana niż cząsteczek takich jak woda, metan, czy polietylen. Ma ona atomy wodoru związane w dwóch różnych grupach, CH₂ i CH₃, co jest istotne w zjawisku rozpraszania neutronów termicznych.

Zależne od energii całkowite przekroje czynne na rozpraszanie neutronów na jądrach atomów wodoru związanych w pleksiglasie i w polietylenie, w zakresie energii termicznych, mają zbliżone wartości, co jest zobrazowane na **Rys. I.7**. Z tego rysunku widać również, że pomiędzy odpowiednimi wartościami przekrojów czynnych istnieją pewne rozbieżności. Doświadczalnie zostało to potwierdzone poprzez porównanie eksperymentalnych wartości mikroskopowych przekrojów czynnych na rozpraszanie neutronów na jądrach atomów

wodoru związanych w cząsteczce pleksiglasu [Drozdowicz, 1989], [Sibona i in., 1991] oraz polietylenu [Granada i in., 1987].



Rys. I.7 Energetyczna zależność całkowitych mikroskopowych przekrojów czynnych na rozpraszanie neutronów termicznych na jądrach atomów wodorów związanych w polietylenie i pleksiglasie [Sibona i in., 1991].

Nieco większe rozbieżności pojawiają się pomiędzy funkcjami zerowego i pierwszego rzędu jądra rozpraszania dla przekazu energii (*energy transfer scattering kernels*) w pleksiglasie i w polietylenie, co w znaczny sposób wpływa na średni kosinus kąta rozpraszania i na przekrój czynny na transport neutronów w obu materiałach. W związku z tym zjawisko rozpraszania neutronów termicznych na atomach wodoru związanych w obu cząsteczkach przebiega nieco inaczej. Oba materiały różnią się także parametrami neutronowymi, które dla pleksiglasu i polietylenu zostały zebrane z różnych źródeł w **Tabeli I.1**.

		ρ	$\langle v\Sigma_a \rangle$	D_0	С
		[g·cm ⁻³]	[s ⁻¹]	$[\mathrm{cm}^2\cdot\mathrm{s}^{-1}]$	$[\mathrm{cm}^4\cdot\mathrm{s}^{-1}]$
	[Drozdowicz, Woźnicka, 1987]	1.1764	4 120	37 312	6 192
pleksiglas	[Krynicka, 2005]	1.1764	4 170	36 540	4 377
	[Granada i in., 1987]	0.9200	5 821	27 133	2 422
	[Drozdowicz, Gillette, 1999a]	0.9200	5 811	26 553	2 160
polietylen	Informacja prywatna w oparciu o	0.9507	6 005	25 695	1 958
	[Drozdowicz, Krynicka, 2004]				

Tabela I.1 Parametry neutronowe dla pleksiglasu i polietylenu w temperaturze T = 20 °C.

I.2 Impulsowy eksperyment neutronowy

Stosowne wydaje się rozpoczęcie rozważań od opisu idei impulsowego eksperymentu neutronowego. W rzeczywistych eksperymentach tego typu może być stosowany układ jednorodny, lub dwustrefowy. Układ dwustrefowy zbudowany jest z dwóch ośrodków, zewnętrznego moderatora otaczającego ośrodek wewnętrzny, zbudowany z innego materiału. Przykłady tego typu układów pokazane zostały na **Rys. I.8**.



Rys. I.8 Przykłady układów dwustrefowych stosowanych w impulsowych eksperymentach neutronowych.

Po wprowadzeniu impulsu neutronów prędkich, o określonym czasie trwania T_{imp} i energii 14 MeV, do rozważanego, bezźródłowego ośrodka jednorodnego, wytwarza się w nim niestacjonarne pole neutronowe. Neutrony prędkie na skutek zderzeń z jądrami atomowymi pierwiastków wytracają energię, są spowalniane i ulegają termalizacji. Po impulsie strumień neutronów zanika w czasie w zależności od absorpcji wewnątrz ośrodka i ucieczki neutronów na zewnątrz. Ten czasowy zanik strumienia neutronów termicznych można opisać poprzez sumę składowych eksponencjalnych i pewnej funkcji ciągłej $A(\lambda)$, powyżej tak zwanej granicy Corngolda, λ_c , [Kazarnovskii, 1975], [Sjöstrand, 1985].

$$\phi(t) = \sum_{\lambda_k < \lambda_c} A_k e^{-\lambda_k t} + \int_{\lambda_c}^{\infty} A(\lambda) e^{-\lambda t} d\lambda$$
r. I.2.1

gdzie: λ_k jest stałą czasową zaniku *k-tej* składowej eksponencjalnej strumienia neutronów termicznych, A_k jest amplitudą *k-tej* składowej eksponencjalnej strumienia neutronów termicznych.

W większości przypadków wyższe składowe czasowego zaniku strumienia neutronów termicznych zanikają bardzo szybko. Stosując odpowiednie założenia eksperymentalne

związane z geometrią i rodzajem ośrodka można przyjąć, że po czasie t_{os} , w rozważanym układzie pozostaje tylko podstawowa składowa eksponencjalna czasowego zaniku strumienia neutronów termicznych λ_0 . W tej sytuacji równanie **r. I.2.1** może zostać uproszczone do następującej postaci:

$$\phi(t) = \sum_{k=0}^{K} A_k e^{-\lambda_k t} \to A_0 e^{-\lambda_0 t}$$
r. I.2.2

Sytuacja taka pozwala na odseparowanie podstawowej składowej czasowego zaniku strumienia neutronów termicznych λ_0 , i zanikająca krzywa, w przedziale T_z , może być opisana przez pojedynczą eksponencjalną funkcję wraz z tłem. Po tak zwanym czasie repetycji T_{rep} , po którym strumień neutronów zdążył zaniknąć pojawia się kolejny impuls neutronów szybkich. Idea impulsowego eksperymentu neutronowego w układzie jednorodnym przedstawiona została na **Rys. I.9**. W praktyce stała zaniku λ ($\lambda_0 = \lambda$) wyznaczana jest z zarejestrowanej krzywej zaniku strumienia metodą opisaną w [Drozdowicz i in., 1993a] przy użyciu programu DECON.

Proces zaniku strumienia neutronów termicznych jest zdeterminowany przez transport neutronów w układzie. Prosty analityczny opis tego zaniku opiera się na teorii dyfuzji, która pozwala na użycie formuły łączącej ze sobą podstawową składową eksponencjalną czasowego zaniku strumienia neutronów termicznych z parametrami neutronowymi ośrodka [Drozdowicz, 1993a, 1993b]. W jednorodnym skończonym ośrodku stała zaniku λ strumienia neutronów termicznych jest dana przez równanie **r. I.1.14**.

Jednym ze sposobów wyznaczenia parametrów neutronowych (Σ_a , D_0 , C) dla danego materiału, w takim układzie, jest tak zwany eksperyment *bucklingowy*. Polega on na pomiarze stałej zaniku λ dla różnych wartości B^2 , czyli dla różnych rozmiarów ośrodka, w wybranej geometrii. Dla ośrodka nieskończonego *buckling* geometryczny ma zerową wartość a wraz ze zmniejszaniem się rozmiarów geometrycznych rozważanego ośrodka rośnie. Przykładowo dla

kuli o promieniu *R buckling* geometryczny jest dany $B^2 = \left(\frac{\pi}{R}\right)^2$.



Rys. I.9 Schemat impulsowego eksperymentu neutronowego w układzie jednorodnym.

Sposób przeprowadzania eksperymentu impulsowego w układzie dwustrefowym jest taki sam, jak opisano powyżej. Złożony staje się tylko badany system (**Rys. I.10**).



Rys. I.10 Schemat układu dwustrefowego.

Jednakże w przypadku, gdy mamy do czynienia z geometrią dwustrefową, tak prosta zależność jak w równaniu r. I.1.14 już nie istnieje. Nie można, bowiem zdefiniować bucklingu geometrycznego ani dla całego układu, ani dla poszczególnych obszarów. W tym przypadku można, dla każdej ze stref oddzielnie, zdefiniować dynamiczny buckling materiałowy, będący funkcją parametrów neutronowych danego ośrodka oraz stałej zaniku λ . Dla dwustrefowej geometrii sferycznej złożonej z kuli o promieniu R_1 zbudowanej z jednorodnego materiału otoczonej warstwą kulistą, z innego jednorodnego materiału, o grubości $R_2 - R_1$, rozwiązanie analityczne można znaleźć w literaturze [Czubek, 1981a], [Woźnicka, 1981]. Równanie dyfuzji dla strumienia neutronów termicznych $\phi(\mathbf{r}, E, t)$ sprowadza się do układu dwóch równań. Strumień neutronów ϕ_1 w obszarze 1 zależy od parametrów neutronowych Σ_{a1} , D_{01} , i strumień ϕ_2 dla obszaru 2 zależy od Σ_{a2} , D_{02} . Ponadto istotne jest, aby na granicy tych dwóch ośrodków strumień neutronów termicznych zachował ciągłość. Równania te są związane, z tą samą w całym systemie, stałą zaniku λ . Ostatecznie, dla konkretnego przypadku dwustrefowej geometrii sferycznej, zależność stałej zaniku λ od parametrów geometrycznych i neutronowych można wyliczyć z następującego równania [Grosshög, Rönnberg, 1971], [Czubek, 1981a]:

$$\frac{D_{d1}\sqrt{B_{d1}^2}}{\tan\left(\sqrt{B_{d1}^2} R_1\right)} + \frac{D_{d2}\sqrt{B_{d2}^2}}{\tan\left(\sqrt{B_{d2}^2}(R_1 - R_2)\right)} = \frac{D_{d1} - D_{d2}}{R_1}$$
r. I.2.3

gdzie:

indeks i = 1, 2 wskazuje na wewnętrzną lub zewnętrzną strefę.

Dynamiczny współczynnik dyfuzji dla *i – tego* regionu jest zdefiniowany, jako:

$$D_{di} = \frac{1}{3\left(\Sigma_{tri} + \Sigma_{ai} - \left(\frac{\lambda}{\nu}\right)\right)}$$
r. I.2.4

Dynamiczny buckling materiałowy dla i - tego regionu, dla rozpatrywanego przypadku, wyraża się równaniem:

$$B_{di}^{2} = -\frac{\Sigma_{adi}}{D_{di}} = -3 \left(\Sigma_{ai} - \frac{\lambda}{v} \right) \left(\Sigma_{tri} + \Sigma_{ai} - \frac{\lambda}{v} \right)$$
r. I.2.5

Wtedy korzystając z tych zależności można z równania r. I.2.3 wyliczyć funkcję:

$$\lambda = \lambda(\Sigma_{a1}, \Sigma_{tr1}, \Sigma_{a2}, \Sigma_{tr2}, R_1, R_2)$$
 r. I.2.6

Neutrony, które przez ucieczkę z obszaru wewnętrznego (1) dostają się do obszaru zewnętrznego (2), zaburzają strumień neutronów tam się kształtujący. Analogiczna sytuacja zachodzi również w drugą stronę, gdy neutrony, które uciekły z obszaru zewnętrznego (2) do wewnętrznego (1) zaburzają tworzący się tam strumień neutronów. Spełniając odpowiednie warunki geometryczne w układzie dwustrefowym, można otrzymać szczególny przypadek fizyczny, w którym warunki korespondują z warunkami, jakie istnieją w ośrodku nieskończonym. Dobierając odpowiednią grubość warstwy zewnętrznej (2), można otrzymać sytuację, w której strumień neutronów termicznych w warstwie wewnętrznej (1) ma stałą przestrzennie wartość. Oznacza to, że istnieje równowaga pomiędzy strumieniem neutronów, który "wchodzi" do warstwy wewnętrznej (1) oraz tym, który tą warstwę "opuszcza" (**Rys. I.11**).



Rys. I.11 Przestrzenny rozkład strumienia neutronów termicznych w układzie dwustrefowym w danej chwili czasu dla przypadku, gdy $\Sigma_{a1} > \Sigma_{a2}$ [Czubek, 1981a].

Na **Rys. I.11** oznaczone symbolami wielkości R_{1g} i R_{2g} oznaczają rozmiary geometryczne, natomiast wielkość R_2 wielkość geometeyczną zwiększoną o tak zwaną długośc ekstrapolowaną.

Stały przestrzenie rozkład strumienia neutronów termicznych odpowiada teoretycznemu założeniu o zerowaniu się dynamicznego *bucklingu* materiałowego warstwy wewnętrznej:

$$B_{d1}^2 = 0$$
 r. 1.2.7

Wprowadzenie tego warunku teoretycznego sprowadza rozpatrywaną sytuację do jednego szczególnego przypadku fizycznego tego zjawiska, w którym stała zaniku λ w układzie jest równoważna przekrojowi czynnemu na absorpcję warstwy wewnętrznej (1)

$$\Sigma_{a1} = \frac{\lambda^*}{\nu}$$
 r. I.2.8

Oznaczona gwiazdką wartość stałej zaniku λ^* jest wartością teoretyczną i pojawia się tylko w sytuacji, kiedy warunek r. I.2.7 jest spełniony. Oznaczenie to zostało wprowadzona w celu odróżnienia wartości teoretycznej λ^* od wartości λ z r. I.2.5. Przy założeniu r. I.2.7 równanie r. I.2.3 sprowadza się do postaci:

$$R_1 B_{d2}^* = -\tan\left[B_{d2}^* (R_2 - R_1)\right]$$
 r. I.2.9

Oznaczony gwiazdką buckling dynamiczny B_{d2}^* zawiera teoretyczną stałą zaniku λ^* . Równanie r. I.2.9 definiuje niemierzalną funkcję z r. I.2.10, która jest niezależna od parametrów neutronowych warstwy wewnętrznej i nazywana jest krzywą teoretyczną.

$$\lambda^* = \lambda^* (\Sigma_{a2}, \Sigma_{tr2}, R_1, R_2)$$
 r. I.2.10

W praktyce dobranie grubości warstwy zewnętrznej, która gwarantuje stałą przestrzennie wartość strumienia neutronów termicznych jest niemożliwe do osiągnięcia, jeżeli parametry neutronowe obu warstw nie są dokładnie znane. W Rozdziale I.3 zostanie opisane zastosowanie otrzymanego rozwiązania (r. I.2.10) do wyznaczania parametrów neutronowych w geometrii dwustrefowej.

Rozwiązanie komplikuje się znacznie, kiedy rozważamy układ dwustrefowy w geometrii cylindrycznej. Dla tego przypadku nie istnieje już rozwiązanie analityczne i jedną z metod, która pozwala uzyskać zależność na stałą zaniku λ , jest zastosowanie rachunku zaburzeń [Woźnicka, 1981]. Polega to na tym, że najpierw rozpatrujemy ośrodek jednorodny

 $(\Sigma_{a2}, \Sigma_{tr2})$ a następnie do niego wprowadzamy zaburzenie w postaci drugiego ośrodka $(\Sigma_{a1}, \Sigma_{tr1})$ (**Rys. I.12**).



Rys. I.12 (a) ośrodek jednorodny ($\Sigma_{a2}, \Sigma_{tr2}$) i **(b)** ośrodek jednorodny z wprowadzonym zaburzeniem w postaci innego ośrodka ($\Sigma_{a1}, \Sigma_{tr1}$).

W ten sposób cały układ zostaje podzielony na kilka stref i dla każdej nich wprowadza się indywidualne warunki brzegowe. W wyniku przeprowadzanych obliczeń dostajemy wyrażenie r. I.2.11 na aproksymowaną wartość dynamicznego *bucklingu* materiałowego n - tego rzędu dla warstwy zewnętrznej, w której wielkość z gwiazdką jest konsekwencją warunku r. I.2.7:

$$(B_{d2}^{*(n)})^2 = \left(\frac{\pi}{H_{2g} + 2d_d}\right)^2 K^{(n)} + \left(\frac{j_0}{R_{2g} + d_d}\right)^2 K^{(n)}$$
r. I.2.11

gdzie:

d_d – dynamiczna długość ekstrapolowana,

 j_0 – pierwsze zero funkcji Bessela pierwszego rodzaju rzędu zerowego, $j_0 = 2.405$,

 H_{2g} , R_{2g} – geometryczne wymiary: wysokości oraz promienia podstawy zewnętrznego walca w cylindrycznym układzie dwustrefowym

 $K^{(n)}$ – zdefiniowane jest następująco:

$$K^{(n)} = 1 + \frac{\int_{V_1} \phi \phi_1^{*(n)} dV}{\int_{V_2} \phi \phi_2^{*(n)} dV}$$
 r. I.2.12

gdzie:

 ϕ - strumień neutronów w jednorodnym układzie cylindrycznym,

 $\phi_i^{*(n)}$ - *n* - *tego* rzędu aproksymacja strumienia zaburzonego w *i* - *tej* części dwustrefowego układu cylindrycznego.

W równaniu r. I.2.11 wszystkie wielkości zależą od λ^* . Formuła na dynamiczny *buckling* materiałowy zawiera w sobie uzależnienie od dynamicznych parametrów neutronowych, które z kolei zależą od stałej zaniku. Ostatecznie z równania r. I.2.11 otrzymuje się aproksymacje stałej czasowej zaniku *n* –*tego* rzędu składowej eksponencjalnej strumienia neutronów termicznych $\lambda^{*(n)}$ dla danego rozmiaru układu dwustrefowego.

$$\lambda^{*(n)} = \lambda^{*(n)} \left(K^{(n-1)} \left[\alpha^{(n-1)}, W^{(n-1)}, \lambda^{*(n-1)} \right] \right)$$
r. I.2.13

Rozwiązując równanie r. I.2.13 metodą rachunku zaburzeń otrzymujemy krzywą teoretyczną dla układu dwustrefowego :

$$\lim_{n \to \infty} \lambda^{*(n)} = \lambda^{*} (\Sigma_{a2}, \Sigma_{tr2}, R_1, R_2)$$
r. I.2.14

I.3 Ochładzanie dyfuzyjne strumienia neutronów termicznych

I.3.1 Ośrodek jednorodny

W nieskończenie dużym, jednorodnym, bezźródłowym układzie, energetyczny rozkład strumienia neutronów termicznych jest dobrze opisany przez, odpowiadający temperaturze ośrodka, rozkład Maxwella o najbardziej prawdopodobnej energii E_0 . Przedstawiony wyżej opis czasowego zaniku strumienia neutronów termicznych wynika jednoprędkościowego z czystego jednogrupowego, modelu korespondującego z wystarczająco dużym jednorodnym układem (oznacza to, że ośrodek jest nieskończony lub jego rozmiar dużo większy od średniej drogi swobodnej neutronów w tym ośrodku). W ośrodkach o małych rozmiarach obserwuje się deformację energetycznego rozkładu strumienia neutronów termicznych spowodowaną ucieczkę neutronów poza granice układu. Prawdopodobieństwo ucieczki rośnie wraz ze wzrostem szybkości i dlatego neutronów o wyższych energiach ucieka więcej. W związku z tym następuje przesunięcie rozkładu energetycznego neutronów termicznych w kierunku niższych energii. Często zakłada się, że taki rozkład nadal można opisać rozkładem Maxwella, ale o zmienionej wartości najbardziej prawdopodobnej energii na E_n , przy której obserwuje się maksymalną wartość strumienia neutronów termicznych, a która odpowiada tzw. temperaturze neutronów T_n (Rys. I.13)



Rys. I.13 Przesunięcie energetycznego rozkładu strumienia neutronów termicznych spowodowane ucieczką neutronów poza granice ośrodka.

Zjawisko to nazywane jest zjawiskiem ochładzania dyfuzyjnego i zależy ono między innymi od rozmiarów układu. Makroskopowe parametry dyfuzyjne dla neutronów

termicznych, zdefiniowane dla układu nieskończonego, do teoretycznego opisu tego przypadku nie mogą być już stosowane. Zjawisko to w małych układach uwzględnia się poprzez wprowadzenie poprawki zależnej od rozmiaru ośrodka B^2 i od współczynnika ochładzania dyfuzyjnego C,

$$\tilde{D}_0 = D_0 - C B^2$$
 r. I.3.1

co zależność według czystej teorii dyfuzji

$$\lambda = \langle v \Sigma_a \rangle + D_0 B^2$$
 r. I.3.2

sprowadza do następującej postaci:

$$\lambda_0 = \langle v \Sigma_a \rangle + \widetilde{D}_0 B^2 = \langle v \Sigma_a \rangle + D_0 B^2 - C B^4$$
r. I.3.3

Zastosowanie poprawki r. I.3.1 w teoretycznym podejściu daje dobre rezultaty nawet dla ośrodków, których rozmiary są porównywalne z odcinkiem zaledwie kilkakrotnie większym od średniej drogi swobodnej neutronów termicznych w takim ośrodku. Parametrem opisującym to zjawisko jest współczynnik ochładzania dyfuzyjnego *C*, który teoretycznie jest zdefiniowany jako parametr neutronowy dla sytemu jednorodnego. Zależy on silnie od właściwości rozpraszających materiału, od funkcji jądra rozpraszania dla przekazu energii (s*cattering kernel*) $\Sigma_s(E' \rightarrow E)$, całkowitego przekroju czynnego na rozpraszanie neutronów $\Sigma_s(E)$ a także od kosinusa kąta rozpraszania [Nelkin, 1960], [Beckurtz, 1964], [Drozdowicz, 1998], [Krynicka i in., 2005].

Obserwacja zjawiska ochładzania dyfuzyjnego niemożliwa jest w przypadku układu, do którego w sposób ciągły dostarczane są neutrony ze stacjonarnego, izotropowego źródła neutronów prędkich. Oprócz ucieczki neutronów poza granice takiego układu, jednocześnie obserwuje się ciągły ich napływ, co powoduje, że neutronów termicznych o wyższych energiach w takim układzie przybywa. Zjawisko to zostało nazwane ogrzewaniem strumienia neutronów termicznych. Zastosowanie źródła impulsowego pozwala na wyeliminowanie tego zjawiska i umożliwia obserwację ochładzania dyfuzyjnego strumienia neutronów termicznych w rozważanym układzie. Możliwe to jest dzięki temu, że po zakończeniu impulsu system staje się bezźródłowy i nie ma dalszego dopływu neutronów.

I.3.2 Ośrodek dwustrefowy

W przypadku układów jednorodnych współczynnik ochładzania dyfuzyjnego jest dość dobrze określony. Sytuacja staje się bardziej skomplikowana, gdy mamy do czynienia z ośrodkami niejednorodnymi. Rozpatrzmy układy, składające się z dwóch obszarów. W układzie takim warstwa wewnetrzna zbudowana z jednorodnego materiału o określonej geometrii i określonym rozmiarze otoczona jest warstwa zewnetrzna (moderator), o określonej grubości, wykonaną z innego materiału jednorodnego. Moderator zewnętrzny musi się charakteryzować relatywnie małymi rozmiarami, aby nie dominował w całym systemie. Rozkład energii neutronów w jednej warstwie wpływa w mniejszym lub większym stopniu na rozkład energetyczny neutronów w drugiej, co związane jest z dyfuzją neutronów pomiędzy obiema warstwami. Deformacja rozkładu energetycznego strumienia neutronów termicznych spowodowana istnieniem efektu ochładzania dyfuzyjnego może się znacznie różnic od tego, który jest obserwowany dla takiego samego materiału w układzie jednorodnym. W tej sytuacji pojawia się pytanie, czy współczynnik ochładzania dyfuzyjnego znany dla ośrodka jednorodnego jest reprezentatywny dla tego samego materiału tworzacego cienka warstwę zewnętrzna układu dwustrefowego w sytuacji, kiedy warunki brzegowe dla strumienia neutronów są bardziej skomplikowane. Problem ten zostanie wyjaśniony w dalszej części pracy.

I.3.2.1 Układ sferyczny

Zobaczmy teraz jak wygląda od strony teoretycznej zjawisko ochładzania dyfuzyjnego w układach wielostrefowych. Jak zostało już powiedziane, w takich przypadkach pojęcie *bucklingu* geometrycznego nie istnieje, zarówno dla całego układu, jaki i dla poszczególnych jego stref. Opis takiego układu używa koncepcji dynamicznego *bucklingu* materiałowego zdefiniowanego według równania r. I.3.4 i użytego indywidualnie do każdej strefy.

$$B_{di}^2 = -\frac{\Sigma_{adi}}{D_{di}}$$
r. I.3.4

Ochładzanie dyfuzyjne w *i - tym* regionie może być rozważane jako zmiana dynamicznego współczynnika dyfuzji w tym regionie [Drozdowicz, 1981]:

$$\widetilde{D}_{di} = D_{di} - C_i \widetilde{B}_{di}^2$$
r. I.3.5

W rozważanych, małych układach deformacja energetycznego rozkładu strumienia neutronów termicznych jest znacząca i rozkład ten nie może być zaniedbany. W związku z tym wprowadza się parametry uśrednione po energii $\langle x \rangle = \int_{0}^{\infty} x(E) \phi(E) dE$. Uwzględniając równania r. I.3.4 i r. I.3.5 ostatecznie otrzymujemy wyrażenie na dynamiczny *buckling* materiałowy, w którym C_i oznacza współczynnik ochładzania dyfuzyjnego dla i - tego regionu:

$$\widetilde{B}_{di}^{2} = -\frac{\left\langle \Sigma_{adi} \right\rangle}{\left\langle D_{di} \right\rangle} \cdot \frac{2}{1 + \sqrt{1 + 4\frac{\left\langle \Sigma_{adi} \right\rangle}{\left\langle D_{di} \right\rangle^{2}} \left\langle \frac{1}{\nu} \right\rangle_{i} C_{i}}}$$
r. I.3.6

W małych układach najbardziej prawdopodobna prędkość neutronów termicznych w rozkładzie energetycznym Maxwella jest mniejsza w związku z ich ucieczką z systemu. Zmiana tej prędkości v_{Ti} w *i - tym* obszarze układu wielostrefowego może być opisana w następujący sposób [Williams, 1966], [Drozdowicz, 1981]:

$$\widetilde{v}_{Ti} = v_T \left(1 - \frac{C_i}{D_{0i}} \widetilde{B}_{di}^2\right)$$
r. I.3.7

$$\langle D \rangle = \left\langle \frac{1}{\nu} \right\rangle D_0$$
 r. I.3.8

gdzie D_0 jest stałą dyfuzji związaną ze współczynnikiem dyfuzji D według zależności r. I.1.22.

Dla każdego z obszarów oddzielnie równanie r. I.3.7 jest niezależne w związku z użyciem dynamicznego *bucklingu* indywidualnego dla każdego z nich. Poprawność tej teorii została potwierdzona eksperymentalnie w dwustrefowej geometrii sferycznej [Czubek i in., 1981b].

I.3.2.2 Układ cylindryczny

Geometria sferyczna jest wygodna do obliczeń analitycznych, natomiast dosyć trudna do realizacji eksperymentalnej. W związku z tym skupmy się na geometrii cylindrycznej, która jest stosunkowa łatwa do przeprowadzania eksperymentu natomiast nieco trudniejsza do rozważań teoretycznych i wręcz niemożliwa do przeprowadzenia analitycznych obliczeń.

Rozważmy dwustrefowy układ w geometrii cylindrycznej, w którym walec o wysokości H_1 i promieniu podstawy R_1 jest otoczony warstwą cylindryczną o wysokości H_2 i promieniu podstawy R_2 . Zakładamy, że oba obszary charakteryzują się tym, że ich wysokości równe są średnicom ich podstaw ($H_1 = 2R_1$ i $H_2 = 2R_2$). W tym przypadku krzywa teoretyczna, otrzymywana za pomocą rachunku zaburzeń [Woźnicka, 1981] z uwzględnieniem zjawiska ochładzania dyfuzyjnego [Drozdowicz, Woźnicka, 1983], jest uzależniona od parametrów neutronowych ośrodka zewnętrznego i rozmiarów obu ośrodków i wyliczona w sposób numeryczny:

$$\lambda^* = \lambda^* (\Sigma_{a2}, \Sigma_{tr2}, C_2, R_1, R_2, H_1, H_2)$$
 r. I.3.9

Znając wszystkie parametry neutronowe ośrodka zewnętrznego oraz przy ustalonym rozmiarze ośrodka wewnętrznego dostajemy krzywą teoretyczną zależną tylko od rozmiaru moderatora zewnętrznego:

$$\lambda^* = \lambda^*(H_2)$$
r. I.3.10

W rzeczywistym neutronowym eksperymencie impulsowym czasowy zanik strumienia neutronów jest rejestrowany i na tej podstawie stała zaniku λ jest wyznaczana. Eksperyment jest powtarzany przy różnych rozmiarach moderatora zewnętrznego i w ten sposób uzyskuje się tzw. krzywą eksperymentalną:

$$\lambda_{exp} = \lambda_{exp}(H_2)$$
r. I.3.11

Znajomość obu krzywych oraz ich porównanie (r. I.3.10 i r. I.3.11) może być podstawą do wyznaczenia jednego z parametrów neutronowych występujących w równaniu krzywej r. I.3.9 pod warunkiem znajomości pozostałych z nich [Czubek i in., 1996].

I.4 Metoda wyznaczania współczynnika ochładzania dyfuzyjnego dla moderatora zewnętrznego w układzie dwustrefowym

Współczynnik ochładzania dyfuzyjnego neutronów termicznych dla materiału tworzącego każdą ze stref układu dwustrefowego może być wyznaczony przy pomocy eksperymentu lub wyliczony teoretycznie na podstawie klasycznej analizy zaniku impulsu neutronów termicznych [Nelkin, 1960], [Willams, 1966].

W pewnych eksperymentach [Czubek i in., 1996] stwierdzono, że współczynnik ochładzania dyfuzyjnego w cienkiej warstwie moderatora zewnętrznego (pleksiglas) w małym układzie musi być różny od takiego współczynnika znanego dla materiału jednorodnego. Okazuje się, że taki współczynnik można wyznaczyć metodą łączącą eksperyment impulsowy z obliczeniami teoretycznymi. Mianowicie, można tu wykorzystać nakreślone w Rozdziale I.2 szczególne rozwiązanie teoretyczne dla zaniku strumienia neutronów termicznych w układzie dwustrefowym przy warunku zerowania się dynamicznego *bucklingu* materiałowego w strefie wewnętrznej, (**r. I.2.7**). Wynika z niego, że teoretyczna funkcja:

$$\lambda^* = \lambda^* \left(P_2, \widetilde{R}_1, \widetilde{R}_2 \right)$$
r. I.4.1

ma jeden punkt wspólny z rzeczywistą funkcją opisującą układ dwustrefowy:

$$\lambda_{exp} = \lambda_{exp} \left(P_1, P_2, \widetilde{R}_1, \widetilde{R}_2 \right)$$
r. I.4.2

gdy $\Sigma_{a1} = \frac{\lambda}{v}$. W powyższych zależnościach oznaczono skrótowo zbiory parametrów neutronowych układu:

$$P_i = \{ \Sigma_{ai}, \Sigma_{tri}, C_i \}$$
 lub $P_i = \{ \alpha_i, D_{0i}, C_i \}$ r. I.4.3

i ogólnie zapisane rozmiary \tilde{R}_i strefy wewnętrznej (*i* =1) i zewnętrznej (*i* =2). Dla uproszczenia zapisu w równaniu r. I.4.3 średnia częstość absorpcji $\langle v \Sigma_{ai} \rangle$ została oznaczona przez α_i . Zapis ten będzie obowiązywał w dalszej części pracy:

$$\alpha_i = \langle v \Sigma_{ai} \rangle$$
 r. I.4.4

Załóżmy, że rozmiary strefy wewnętrznej są ustalone, $\tilde{R}_1 = const$. Można wówczas wykonać serię eksperymentów impulsowych, w których zmienia się zewnętrzny rozmiar strefy otaczającej, $\tilde{R}_2 = var$, zachowując stale ten sam układ materiałowy obu stref, czyli $P_1 = const$, $P_2 = const$.

Z każdego eksperymentu wyznaczamy stałą zaniku λ_{exp} , czyli otrzymujemy funkcję:

$$\lambda_{exp} = \lambda_{exp} \left(\widetilde{R}_2 \right)$$
 r. I.4.5

Można teoretycznie wyliczyć funkcję:

$$\lambda^* = \lambda^* (\widetilde{R}_2)$$
 r. I.4.6

pod warunkiem znajomości parametrów neutronowych P2. Przecięcie krzywych:

$$\lambda_{exp}(\widetilde{R}_2) = \lambda^*(\widetilde{R}_2)$$
 r. I.4.7

następuje przy wartości:

$$\lambda_{exp} = \lambda^* = \langle v \Sigma_{a1} \rangle$$
 r. I.4.8

zgodnie z założeniem r. 1.2.7. Jeżeli którykolwiek z parametrów zawartych w zbiorze P_2 ma niewłaściwą wartość, przecięcie krzywych (r. 1.4.8) nastąpi przy innej wartości:

$$\lambda_{exp} = \lambda^* \neq \langle v \Sigma_{a1} \rangle$$
 r. I.4.9

Fakty te można wykorzystać do wyznaczenia jednego z parametrów neutronowych P_2 strefy zewnętrznej, gdy znane są wszystkie pozostałe.

Wykonajmy taki eksperyment w cylindrycznej geometrii dwustrefowej: $\widetilde{R}_1 = (R_1, H_1), \quad \widetilde{R}_2 = (R_2, H_2), \quad \text{gdzie } R \text{ i } H \text{ oznaczają promienie i wysokości walców}$ w układzie pokazanym na Rys. I.14.

Dodatkowo założymy regularny kształt, tj. $H_1 = 2R_1$, $H_2 = 2R_2$ i ustalony rozmiar walca wewnętrznego $H_1 = const$.

Walec wewnętrzny wypełniamy materiałem referencyjnym o dobrze znanej wartości przekroju czynnego Σ_a na absorpcję neutronów termicznych: $\alpha_1^{ref} = \langle v \Sigma_{a1} \rangle^{ref}$.

Rozpatrujemy tutaj szczególny przypadek fizyczny, w którym stała zaniku λ w układzie jest równoważna przekrojowi czynnemu na absorpcję warstwy wewnętrznej, co zachodzi pod warunkiem zerowania się dynamicznego *bucklingu* materiałowego warstwy wewnętrznej (**r. I.2.7**). Założenie to powoduje, że istotna jest tylko wartość absorpcji warstwy wewnętrznej i uniezależniamy się od pozostałych parametrów (D_{01} , C_1), które w tej sytuacji nie muszą być znane.



Rys. I.14 Schemat cylindrycznego układu dwustrefowego.

Walec zewnętrzny zbudowany jest z materiału, dla którego są dobrze znane parametry α_2 oraz D_{02} (np. pleksiglas, polietylen). Natomiast współczynnik ochładzania dyfuzyjnego w tej warstwie stanowi parametr do wyznaczenia. Wykonujemy wspomnianą powyżej serię eksperymentów impulsowych i otrzymujemy krzywą doświadczalną, $\lambda_{exp} = \lambda_{exp}(H_2)$. Dla przyjętej geometrii cylindrycznej wyliczamy teoretyczną krzywą, $\lambda^* = \lambda^*(H_2)$, zakładając wstępną wartość współczynnika $C_2 = C_2^{(0)}$, odpowiadającą np. wartości znanej dla materiału jednorodnego. Wyznaczamy przecięcie krzywych $\lambda^{*(0)} \neq \alpha_1^{ref}$. Zmieniamy wartość parametru C_2 w krzywej teoretycznej, $C_2 = C_2^{(1)}$ i ponownie wyznaczamy punkt przecięcia. Procedury powtarzamy, aż do osiągnięcia zgodności $\lambda_{exp} = \lambda^{*(n)} = \alpha_1^{ref}$, czyli do wyznaczenia właściwej wartości $C_2 = C_2^{(n)}$ dla materiału tworzącego warstwę zewnętrzną. Opisana procedura zobrazowana jest na **Rys. I.15**.

W pewnych pomiarach C_2 dla pleksiglasu w strefie zewnętrznej [Krynicka i in., 2005] stwierdzono, że współczynnik ten nie jest wówczas stały, lecz zależy zarówno od absorpcji neutronów α_1 w strefie wewnętrznej jak i od grubości strefy zewnętrznej, $H_2 - H_1$. Okazuje się, że można nieco uogólnić tę zależność przez wyznaczenie funkcji;

$$C_2 = C_2(\lambda^*)$$
 r. I.4.10



Rys. I.15 Graficzne przedstawienie sposobu wyznaczania wartości współczynnika ochładzania dyfuzyjnego C_2 w warstwie zewnętrznej układu dwustrefowego [Krynicka i in., 2005].

I.5 Zmienność współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w zewnętrznym moderatorze z pleksiglasu

W Transportu Pracowni Fizyki Neutronów Instytutu Fizyki Jadrowej im. H. Niewodniczańskiego Polskiej Akademii Nauk w Krakowie, w rzeczywistych, impulsowych eksperymentach neutronowych przeprowadzanych w układach dwustrefowych, jako zewnętrzny moderator stosowany jest pleksiglas. Materiał ten używany jest ze względu na swoje właściwości rozpraszające, co pozwala na uzyskanie odpowiedniej liczby neutronów termicznych w takim układzie. Parametry neutronowe dla pleksiglasu (Tabela I.1): $\langle v \Sigma_a \rangle$ i D_0 sa dobrze znane, natomiast problem pojawia się w przypadku C. Wartość tego parametru dla materiału tworzącego ośrodek zewnętrzny w układzie dwustrefowym, różni się zasadniczo od wartości dla tego samego materiału w ośrodku jednorodnym i nie jest stała. Przeprowadzone eksperymenty pokazały, że na wartość parametru C₂ ma wpływ grubość pleksiglasu, a także absorpcja materiału tworzącego warstwę wewnętrzną. Ponadto stwierdzone zostało, że przebieg zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w warstwie zewnętrznej zależy od właściwości rozpraszających materiału, tworzącego warstwę wewnętrzną. Rozpraszanie neutronów termicznych w materiałach typu wodorowego zachodzi inaczej niż na materiałach typu niewodorowego. Związane jest to z różnymi wartościami przekrojów czynnych na rozpraszanie, kosinusów kata rozpraszania, oraz funkcjami jądra rozpraszania dla przekazu energii (Rozdział I.1.3). W związku z powyższym interesujące wydało się zbadanie przebiegu zjawiska ochładzania dyfuzyjnego w przypadku, gdy warstwe wewnetrzną tworzy, w jednym przypadku materiał typu wodorowego a w drugim materiał typu niewodorowego.

Rzeczywiste eksperymenty impulsowe wykonane zostały w cylindrycznej geometrii dwustrefowej, w której warstwę wewnętrzną tworzyły materiały typu wodorowego (wodne roztwory kwasów, H₃BO₃ lub KCl, o określonych stężeniach *k*). Na podstawie danych, otrzymanych eksperymentalnie, wyliczone zostały wartości współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w zewnętrznym moderatorze z pleksiglasu ($C_{2PLX}^{H}_{exp}$), otaczającym warstwę wewnętrzną zbudowaną z materiału typu wodorowego [Krynicka i in., 2000a, 2001]. Przebieg zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego $C_{2PLX}^{H}(\lambda^*)^{exp}$ jest pokazany na **Rys. I.16**, sporządzonym według danych z publikacji [Krynicka i in., 2005].



Rys. I.16 Zależność $C_{2PLX}^{H}(\lambda^{*})^{exp}$ dla zewnętrznego moderatora z pleksiglasu otaczającego materiał typu wodorowego [Krynicka i in., 2005].

I.5.1 Warstwa wewnętrzna utworzona z materiału typu wodorowego

Przy pomocy symulacji MCNP wykonałam identyczne eksperymenty neutronowe, jakie zostały przeprowadzone w rzeczywistych warunkach. Obliczenia wykonałam w dwustrefowej geometrii cylindrycznej, w której warstwa wewnętrzna utworzona z wodnych roztworów kwasów KCl i H₃BO₃ otoczona była zewnętrznym moderatorem z pleksiglasu. Procedury związane z przygotowaniem danych do symulacji MCNP, oraz ich wykonaniem zostały opisane w II części pracy poświęconej symulacjom metodą Monte Carlo (Rozdział II.2.1). W obliczeniach metodą symulacji MCNP dla pleksiglasu użyta została biblioteka zmieniona ze współczynnikiem modyfikacji $K_X = 1.20$ (procedury związane z modyfikacją biblioteki *poly.01t*, oraz uzasadnienie wyboru biblioteki dla pleksiglasu szcegółowo opisałam w rozdziale II.3.). Obliczenia te wykonałam także z użyciem biblioteki oryginalnej *poly.01t*.

Na podstawie otrzymanych danych, które zamieszczone zostały w Tabeli A i Tabeli B (stanowiących dodatek do pracy) w identyczny sposób jak w przypadku rzeczywistego eksperymentu, metodą opisaną w Rozdziale I.4, wyznaczyłam zmienność współczynnika

ochładzania dyfuzyjnego w zewnętrznym moderatorze z pleksiglasu $C_{2PLX} \stackrel{H}{}_{MCNP}$. W tym celu, dla każdego rozważanego przypadku, wyznaczyłam krzywą eksperymentalną $\lambda_{exp}(H_2)$, oraz, korzystając z rachunku zaburzeń, wyliczyłam, odpowiadającą jej krzywą teoretyczną $\lambda^*(H_2)$. Krzywe teoretyczne wyliczone zostały według algorytmu rachunku zaburzeń z następującymi wartościami parametrów geometrycznych i neutronowych pleksiglasu:

$$H_1 = 2 R_1 = 6 \text{ cm},$$

$$\alpha_2 = 4169 \text{ s}^{-1},$$

 $D_{02} = 36\ 542\ \mathrm{cm}^{-2}\mathrm{s}^{-1}$

początkowa wartość $C_2 = 4377 \text{ cm}^4 \text{s}^{-1}$.

Z punktu przecięcia obu krzywych wyliczyłam wartość stałej zaniku λ , która przy założeniu stałego przestrzennie strumienia neutronów, odpowiadała absorpcji warstwy wewnętrznej. Równoważność tych dwóch wielkości zachodzi tylko przy ściśle określonej grubości moderatora (H_2). Należało dążyć do tego, aby punkt przecięcia obu krzywych zgadzał się z referencyjną wartością częstości absorpcji poprzez modyfikację jednej z krzywych. W większości przypadków uzyskana wartość częstości absorpcji różniła się od wartości referencyjnej, co oznaczało, że jedna z krzywych jest wyznaczona nieprawidłowo. Ponieważ praktycznie brak jest możliwości zmiany krzywej eksperymentalnej a krzywa teoretyczna opiera się jedynie na przybliżeniu teorii dyfuzji, w związku z tym należało ją właśnie zmodyfikować. Krzywą teoretyczną zmieniałam poprzez dopasowanie odpowiedniej wartości współczynnika ochładzania dyfuzyjnego C_2 . Wartość C_2 dobierano tak długo, dopóki zgodności pomiędzy wartością wyliczoną i referencyjną $\alpha_1^{exp} = \alpha_1^{ref}$ nie została otrzymana (Rozdział I.4). W ten sposób dla każdego przypadku o określonej wartości częstości referencyjnej absorpcji dopasowałam wartość współczynnika ochładzania dyfuzyjnego.

Krzywą $C_{2PLX}^{H}(\lambda^*)^{MCNP}$ otrzymałam dla dwóch przypadków. Pierwszy z nich dotyczył sytuacji, w której w symulacjach MCNP dla pleksiglasu użyłam oryginalnej biblioteki *poly.01t*, natomiast drugi, kiedy zastosowałam powyższą bibliotekę odpowiednio zmodyfikowaną ($K_X = 1.20$). Wyniki przeprowadzonych obliczeń zamieszczone zostały w **Tabeli I.2**. Oznaczona symbolem wielkość $\sigma(\alpha_1^{ref})$ jest odchyleniem standardowym wartości referencyjnej częstości absorpcji.

W celu poprawnej analizy otrzymanych wielkości zdefiniowałam następujące odchyłki:

– odchyłka względna ε wielkości obliczonej w oparciu o wyniki symulacji MCNP, A_{MCNP} , od wielkości obliczonej w oparciu o dane otrzymane z rzeczywistego eksperymentu, A_{exp} , jest

wyrażona równaniem r. I.5.1. Daje ona informacje o tym, w jakim stopniu i w którą stronę występują rozbieżności A_{MCNP} od A_{exp} ,

$$\varepsilon = \frac{A_{MCNP} - A_{exp}}{A_{exp}} \cdot 100\%$$
 r. I.5.1

– średnia wartość odchyłek względnych $\overline{\varepsilon}$ według równania:

$$\overline{\varepsilon} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i$$
 r. I.5.2

gdzie n oznacza liczbę przypadków,

odchyłka L, która odpowiada metodzie najmniejszych kwadratów. Wielkość ta, zdefiniowana według r. 1.5.3, sama w sobie gubi informację o braku lub występowaniu zmienności znaku odchyłki.

$$L = \frac{1}{n} \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \frac{(A_{MCNP_i} - A_{exp_i})^2}{A_{exp_i}^2}}$$
r. I.5.3

Zdefiniowane w ten sposób wielkości pozwalają na poprawne oszacowanie zgodności pomiędzy eksperymentem a symulacją. Wprowadzenie parametru *L* uniezależnia ocenę zgodności symulacji z eksperymentem od tego, w która stronę zachodzi rozbieżność i ułatwia poprawną analizę.

Otrzymane wartości $C_{2PLX}^{H}_{MCNP}$, dla rozważanych przypadków, (symulacje MCNP z zastosowaniem biblioteki *poły.01t* i z zastosowaniem biblioteki zmodyfikowanej $K_{\rm X} = 1.20$), zamieszczone zostały na wykresie **Rys. I.17**. Na rysunku tym zamieszczone zostały także wartości uzyskane, w oparciu o dane pochodzące z rzeczywistego, impulsowego eksperymentu neutronowego [Krynicka i in., 2000a, 2001]. Do odpowiednich punktów dopasowane zostały krzywe, które w matematyczny sposób opisują przebieg zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w zewnętrznym moderatorze z pleksiglasu $C_{2PLX}^{H}(\lambda^*)$.

L.P.	α_1^{ref}	$C_{2PLX exp}^{H}$	Biblioteka			
	$\sigma(\alpha_1^{ref})$	-	poly.01t		$K_{\rm x} = 1.20$	
		- 4 1-	C_{2PLX} MCNP	3	$C_{2PLX} \stackrel{H}{\underset{MCNP}{\overset{MCNP}{}}}$	3
	[s ⁻¹]		$[cm^4s^{-1}]$	[%]	$[cm^4s^{-1}]$	[%]
1	12 458	9 010	3 760	-58.27	9 135	1.39
	70					
2	13 525	8 740	3 940	-54.92	8 787	0.54
	80					
3	14 978	8 155	4 290	-47.39	8 230	0.92
	93					
4	17 224	7 460	4 522	-39.38	7 570	1.47
	114					
5	19 554	6 770	4 343	-35.85	6 884	1.68
	135					
6	21 643	6 447	3 542	-45.06	5 933	-7.97
	154					
7	20 984	6 429	4 370	-32.03	6 477	0.75
	80					
8	22 598	6 253	3 685	-41.07	5 670	-9.32
	88					
9	24 216	5 916	3 760	-36.44	5 628	-4.87
1.0	96					
10	27 470	5 517	3 886	-29.56	5 338	-3.24
11	112	5.260	2 41 4	26.40	4.601	12 (1
11	30 710	5 368	3 414	-36.40	4 691	-12.61
10	128	5.057	2,472	21.24	4.402	11.07
12	33 938	5 057	3 472	-31.34	4 482	-11.37
12	144	4.520	2.220	20.65	4.25.4	()(
13	3/212	4 538	3 238	-28.65	4 254	-6.26
1.4	160	4 205	2 410	22.41	4.100	470
14	38 818	4 395	3 410	-22.41	4 186	-4./6
1.5	168	4.(2)	2 1 2 9	22.17	2.050	16.00
15	40 444	4 626	5 1 5 8	-32.17	3 838	-10.00
16	1/0	4.254	2 125	28.00	2.922	12.22
10	42 0/5	4 3 3 4	5 1 5 5	-28.00	3 822	-12.22
17	184	1 177	2 1 6 2	20.25	2 747	16.21
1/	43 /03	44//	5 105	-29.33	5/4/	-10.31
	192					

Tabela I.2 Wartości $C_{2PLX exp}^{H}$ [Krynicka i in., 2000a, 2001] i $C_{2PLX MCNP}^{H}$ dla zewnętrznego moderatora z pleksiglasu otaczającego materiał typu wodorowego.



Rys. I.17 Zależności $C_{2PLX}^{H}(\lambda^{*})^{exp}$ i $C_{2PLX}^{H}(\lambda^{*})^{MCNP}$ dla zewnętrznego moderatora z pleksiglasu otaczającego materiał typu wodorowego (wodne roztwory kwasów H₃BO₃ lub KCl).

Wyliczone, na podstawie danych uzyskanych na drodze symulacji metodą Monte Carlo, wartości współczynnika ochładzania dyfuzyjnego, zostały porównane z odpowiednimi wartościami uzyskanymi na podstawie danych pochodzących z rzeczywistego impulsowego eksperymentu neutronowego. W idealnej sytuacji odpowiednie wartości, $C_{2PLX}^{H}_{exp}$ i $C_{2PLX}^{H}_{MCNP}$, powinny zgadzać się ze sobą w granicach błędów. Jak widzimy z **Rys. I.17** w przypadku zastosowania w symulacjach MCNP, dla pleksiglasu, biblioteki *poly.01t*, otrzymane wartości $C_{2PLX}^{H}_{MCNP}$ w sposób wyraźny odbiegają od odpowiednich wartości $C_{2PLX}^{H}_{exp}$. Wyraźnie widać, że uzyskany, w ten sposób, przebieg współczynnika ochładzania dyfuzyjnego, różni się w sposób znaczący od jego przebiegu rzeczywistego, nie tylko pod względem liczbowym, ale także i jakościowym. Lepsze wyniki otrzymałam, kiedy w symulacjach MCNP, użyłam zmodyfikowanej biblioteki $K_X = 1.20$, co również jest przedstawione na **Rys. I.17**. Do otrzymanych punktów (α_1^{ref} , C_{2PLX}^{H}) dopasowane zostały krzywe, $C_{2PLX}^{H}(\lambda^*)^{MCNP}$ (dla biblioteki zmodyfikowanej $K_X = 1.20$) i $C_{2PLX}^{H}(\lambda^*)^{exp}$ [Krynicka i in., 2001], które można zapisać następującym równaniem $C_{2PLX}^{H} = a \times (\lambda^*)^b$, a współczynniki *a* i *b* mają wartości podane w **Tabeli I.3**.

$C_{2PLX}^{H} = a \times (\lambda^{*})^{b}$					
	а	b			
	[cm ⁴]				
$C_{2PLX}^{H}(\lambda^{*})^{exp}$	$(2.615 \pm 0.341) \times 10^6$	-0.6012 ± 0.0131			
$C_{2PLX} \stackrel{H}{\to} (\lambda^*)^{MCNP}$	$(8.733 \pm 0.075) \times 10^{6}$	-0.7262 ± 0.0009			

Tabela I.3 Współczynniki *a* i *b* dla funkcji $C_{2PLX}^{H}(\lambda^{*})^{exp}$ [Krynicka i in., 2001] i $C_{2PLX}^{H}(\lambda^{*})^{MCNP}$.

Oba analizowane przebiegi współczynnika ochładzania dyfuzyjnego $(C_{2PLX}^{H}(\lambda^*)^{MCNP}$ i $C_{2PLX}^{H}(\lambda^*)^{exp})$ zachowują podobny przebieg pod względem jakościowym, natomiast można zaobserwować niewielkie rozbieżności pod względem liczbowym.

Wnioski te dodatkowo potwierdzają wyliczone odchyłki wartości $C_{2PLX MCNP}^{H}$ od odpowiednich wartości $C_{2PLX exp}^{H}$: ε , $\overline{\varepsilon}$ i L (r. I.5.1, r. I.5.2, r. I.5.3), które zostały zamieszczone w Tabeli I.4.

Tabela I.4 Odchyłki: ε , $\overline{\varepsilon}$ i *L* wartości $C_{2PLX}^{H}_{MCNP}$ od odpowiednich wartości $C_{2PLX}^{H}_{exp}$.

	Biblioteka			
	poly.01t $K_{\rm X} = 1.20$			
ε [%]	-58.27 ÷ -22.41	-16.60 ÷ 1.68		
$\overline{arepsilon}$ [%]	-36.96	-5.81		
$L \times 10^{-3}$	92.54	20.67		

Rozrzut wartości odchyłek względnych w przypadku danych otrzymanych w oparciu o wyniki symulacji MCNP z zastosowaniem biblioteki zmodyfikowanej $K_X = 1.20$ zmniejszył się w znacznym stopniu. Podobnie wygląda sytuacja, gdy rozpatrujemy pozostałe dwie odchyłki. Wartości ich zmniejszyły się wraz ze zmianą zastosowanej w obliczeniach MCNP, dla pleksiglasu, oryginalnej biblioteki *poly.01t* na zmodyfikowaną $K_X = 1.20$. Zastosowanie w tej sytuacji biblioteki zmodyfikowanej poprawia znacząco zgodność pomiędzy symulacją i eksperymentem i wydaje się być konieczne w symulacjach MCNP analizujących czasowy zanik strumienia neutronów termicznych w małych układach dwustrefowych.

I.5.2 Warstwa wewnętrzna utworzona z materiału typu niewodorowego

Przy pomocy rzeczywistych impulsowych eksperymentów neutronowych stwierdzone zostało, że przebieg zjawiska ochładzania dyfuzyjnego w moderatorze zewnętrznym zależy w znacznym stopniu od zawartości atomów wodoru w składzie materiału tworzącego warstwę wewnętrzną [Drozdowicz i in., 2001]. Zależność $C_{2PLX}^{H}(\lambda^*)$, gdy warstwa wewnętrzna była typu wodorowego została wyznaczona przy pomocy eksperymentu [Krynicka i in., 2000a], [Krynicka i in., 2001] oraz symulacji MCNP (Rozdział I.5.1).

W dalszej części pracy zbadany zostanie przebieg zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w moderatorze zewnętrznym z pleksiglasu, w przypadku, gdy warstwa wewnętrzna zbudowana jest z materiału typu niewodorowego, $C_{2PLX}{}^{nH}(\lambda^*)$. Jest to materiał, który nie posiada w swoim składzie atomów wodoru i dla tego przypadku nie istnieją dane eksperymentalne. Odpowiednie eksperymenty zostały wykonane przy użyciu symulacji MCNP. Wyniki tych eksperymentów są opisane w dalszej części pracy.

I.5.2.1 Dobór Si + Cu, jako materiału referencyjnego tworzącego warstwę wewnętrzną układu dwustrefowego

W rozważanym układzie dwustrefowym zewnętrzny moderator z pleksiglasu otaczał jednorodną warstwę wewnętrzną zbudowaną z materiału typu niewodorowego. Pierwszym krokiem w celu wyznaczenia przebiegu zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego dla pleksiglasu w takim układzie był dobór materiału referencyjnego tworzącego warstwę wewnętrzną. Współczynnik ochładzania dyfuzyjnego w moderatorze zewnętrznym zależny jest od parametrów neutronowych obu warstw takiego układu a także od ich rozmiarów. W rozważanym przypadku wartość współczynnika ochładzania dyfuzyjnego C_2 została uzależniona od absorpcji badanej próbki, przy założeniu, że pozostałe parametry obu warstw były znane i miały ściśle określone wartości.

Jako materiał referencyjny wybrałam mieszaninę dwóch pierwiastków: miedzi i krzemu (Cu + Si) o odpowiednio dobranych udziałach wagowych każdego ze składników. Istotna cecha obu pierwiastków to wartości ich przekrojów czynnych na absorpcję. Pierwszy ze składników charakteryzuje się wysoką wartością absorpcji (Σ_a (Cu) = 0.3199 cm⁻¹) natomiast drugi niską (Σ_a (Si) = 0.0085 cm⁻¹) [Mughabghab i in., 1981]. Dzięki takim własnościom obu pierwiastków, poprzez odpowiedni dobór zawartości każdego z nich możliwe było uzyskanie szerokiego zakresu absorpcji neutronów. Było to jedno z podstawowych kryteriów, którymi kierowałam się przy wyborze materiału referencyjnego. Innym powodem dokonania takiego wyboru była ogólna dostępność tych materiałów. Dzięki temu istnieje realna możliwość przeprowadzenia rzeczywistego, impulsowego eksperymentu neutronowego w rozważanym układzie.

Dla każdej z wybranych próbek wyliczyłam teoretyczną gęstość według równania r. I.5.4. Skorzystałam tutaj z formuły opracowanej dla materiału będącego mieszaniną dwóch składników, która uwzględnia gęstości i udziały wagowe poszczególnych składników.

$$\rho = \frac{1}{\frac{q_1}{\rho_1} + \frac{q_2}{\rho_2}} = \frac{\rho_1 \rho_2}{q_1 \rho_2 + q_2 \rho_1}$$
r. I.5.4
 $q_1 + q_2 = 1$
gdzie:

 q_1, q_2 – udziały wagowe poszczególnych składników mieszaniny,

 ρ_1 , ρ_2 – gęstości poszczególnych składników mieszaniny, ponadto:

$$\rho = \frac{M}{V}$$

$$M = m_1 + m_2$$

$$m_1 = Mq_1 ; m_2 = Mq_2$$

$$W = w_1 + w_2 = \frac{m_1}{\rho_1} + \frac{m_2}{\rho_2}$$

gdzie:

M – masa mieszaniny,

V – objętość mieszaniny,

m₁, m₂ – masy poszczególnych składników mieszaniny,

w1, w2 – objętości poszczególnych składników mieszaniny

W przypadku rzeczywistego, impulsowego eksperymentu neutronowego, warstwa wewnętrzna układu dwustrefowego występuje zazwyczaj w postaci luźno usypanego materiału uziarnionego. Dla tego typu materiałów zdefiniowana jest, tak zwana *gęstość nasypowa* (ρ_{nas}), określana, jako masa jednostkowej objętości luźno usypanego materiału [Boss, 1987]. W zależności od uziarnienia i sposobu usypania substancji, wartość gęstości nasypowej może być różna. Warunki zadane w teoretycznie zaplanowanym, impulsowym

eksperymencie neutronowym powinny być w jak najlepszej zgodności z warunkami rzeczywistymi. Ponieważ zastosowany, jako warstwa wewnętrzna, materiał będący mieszaniną Si + Cu, występuje w postaci proszku w związku z tym sensowne wydało się uwzględnienie w dalszych obliczeniach gęstości nasypowej. Przyjęcie, wyliczonej teoretycznie, gęstości dla wybranej mieszaniny byłoby dużym przybliżeniem rzeczywistości. W związku z tym, jako gęstość nasypowa, przyjęłam połowę wyliczonej gęstości teoretycznej

 $\rho_{nas} = \frac{\rho}{2}.$

Wybrałam 11 przypadków, materiałów o różnych udziałach wagowych krzemu i miedzi oraz o różnej gestości. Uwzględniając przyjęta gestość nasypowa, udziały wagowe i przekroje czynne na absorpcje obu składników, dla każdego przypadku, wyliczyłam absorpcje. Obliczenia te wykonałam przy pomocy programu uwzględniającego wszystkie wymienione parametry (SIGSA [Drozdowicz, Krynicka, 1995]). Dla każdej z próbek, jako wynik obliczeń, uzyskałam częstość absorpcji, która może być traktowana, jako wartość referencyjna absorpcji $\alpha_1^{ref} = \langle v \Sigma_{a1} \rangle^{ref}$. Częstość absorpcji odpowiada stałej zaniku λ dla danego rozmiaru moderatora tylko przy spełnieniu ściśle określonych warunków. Relacja ta zachodzi tylko w sytuacji, w której przestrzenny rozkład strumienia neutronów termicznych w warstwie wewnętrznej jest stały. Jest to szczególny przypadek fizyczny zachodzący przy spełnieniu warunku o zerowaniu się bucklingu dynamicznego warstwy wewnętrznej układu dwustrefowego (r. I.2.7). Poprzez zmianę wartości absorpcji warstwy wewnętrznej o ściśle określonych rozmiarach oraz dobór dla każdego z tych przypadków takiej grubości warstwy zewnętrznej, przy której zachodzi warunek r. I.2.7, otrzymałam stosunkowo szeroki przedział wartości referencyjnej częstości absorpcji $\alpha_1^{ref} = (12\ 000 \div 34\ 000)\ s^{-1}$. Wyniki tych obliczeń zamieszczone zostały w Tabeli I.5. Oznaczone symbolami q_{Si} i q_{Cu} wielkości oznaczają udziały wagowe odpowiednio krzemu (Si) i miedzi (Cu) w mieszaninie tych dwóch składników.

L.P.	$q_{ m Si}$	$q_{ m Cu}$	ρ_{nas}	α_1^{ref}
				$\sigma(\alpha_1^{ref})$
	[%]	[%]	$[g \cdot cm^{-3}]$	$[s^{-1}]$
1	35	65	2.2408	12 112
				62
2	33	67	2.3408	13 150
				67
3	28	72	2.4888	14 685
				75
4	25	75	2.6127	15 971
				82
5	22	78	2.7496	17 391
				90
6	19	81	2.9016	18 969
				98
7	17	83	3.0126	20 121
				105
8	14	86	3.1961	22 025
				115
9	9	91	3.5571	25 770
				135
10	5	95	3.9105	29 437
				155
11	1	99	4.3419	33 914
				179

Tabela I.5 Wartości referencyjne częstości absorpcji dla materiałów o określonych udziałach wagowych Si i Cu.

I.5.2.2 Symulacja MCNP eksperymentów w dwustrefowej geometrii cylindrycznej

W celu wyznaczenia zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego C_{2PLX}^{nH} , dla pleksiglasu tworzącego warstwę zewnętrzną układu dwustrefowego konieczne było wyznaczenie, dla każdego rozważanego przypadku, tak zwanej krzywej eksperymentalnej $\lambda_{exp}(H_2)$ oraz odpowiadającej jej krzywej teoretycznej $\lambda^*(H_2)$. Wyznaczenie krzywej eksperymentalnej wymagało, aby dla każdego przypadku, wykonać serie komputerowych symulacji metodą Monte Carlo, czasowego zaniku strumienia neutronów termicznych w rozważanym układzie. Obliczenia wykonywałam w dwustrefowej geometrii cylindrycznej, gdzie warstwa wewnętrzna, zbudowana z mieszaniny Si i Cu o odpowiednio dobranych udziałach wagowych i określonym rozmiarze ($H_1 = 2R_1 = 6$ cm), otaczana była zewnętrznym moderatorem z pleksiglasu o zmiennym rozmiarze ($H_2 = 2R_2$). Przyjęta do obliczeń gęstość pleksiglasu wynosiła $\rho_{C_{SHsO2}} = 1.1764 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$. Mierzony zakres stałej zaniku λ_{exp} zawierał się w przedziale $\lambda_{exp} = (11000 \div 38000) \text{ s}^{-1}$. Symulacje MCNP wykonałam przy użyciu, dla pleksiglasu, biblioteki *poly.01t* i zmodyfikowanej ze współczynnikiem $K_{\rm X} = 1.20$. Na podstawie uzyskanych wyników dla każdego przypadku i dla każdego rozmiaru moderatora zewnętrznego wyliczyłam stałą zaniku λ_{MCNP} . Uzyskane w ten sposób wyniki zamieszczone zostały w Tabeli I.6. Oznaczona symbolem $\sigma(\lambda_{MCNP})$ wielkość oznacza odchylenie standardowe stałej zaniku λ_{MCNP} . W ten sposób dla każdego przypadku wyznaczyłam tak zwaną krzywą eksperymentalną, czyli zależność stałej zaniku λ od rozmiaru moderatora ($\lambda_{exp}(H_2)$).

Tabela I.6 Wartości stałej zaniku λ_{MCNP} w układzie, gdzie moderator z pleksiglasu otacza materiał typu niewodorowego. Symulacje MCNP z użyciem dla pleksiglasu oryginalnej, oraz zmodyfikowanej ($K_{\rm X} = 1.20$) biblioteki *poly.01t*.

L.P.	H_2	Biblioteka	Biblioteka
		poly.01t	$K_{\rm X} = 1.20$
		λ_{MCNP}	λ_{MCNP}
		$\sigma(\lambda_{MCNP})$	$\sigma(\lambda_{MCNP})$
	[cm]	$[s^{-1}]$	$[s^{-1}]$
1	13.2	13 067	12 805
		14	14
	13.6	12 545	12 297
		20	16
	14.0	12 052	11 821
		18	15
	14.4	11 614	11 380
		24	13
2	12.4	14 606	14 314
		26	18
	12.8	13 946	13 660
		20	18
	13.6	12 775	12 543
		10	19
	14.0	12 271	12 038
		17	18
3	11.6	16 660	16 319
		26	22
	12.0	15 811	15 503
		21	18
	12.8	14 344	14 066
		21	14
	13.2	13 710	13 448
		17	20
4	11.2	18 055	17 715
		28	21
	11.6	17 098	16 748
		28	19
	12.4	15 405	15 099
		27	18
	12.8	14 664	14 379
		13	18
5	10.8	19 670	19 314
	11.0	22	20
	11.2	18 562	18 232
	10.0	30	32
	12.0	16 612	16 310
	10.4	17	27
	12.4	15772	15 493
		13	32

Ciąg dalszy Tabeli I.6

L.P.	H_2	Biblioteka	Biblioteka
		poly.01t	$K_{\rm X} = 1.20$
		λ_{MCNP}	λ_{MCNP}
		$\sigma(\lambda_{MCNP})$	$\sigma(\lambda_{MCNP})$
	[cm]	[s ⁻¹]	[s ⁻¹]
6	10.4	21 584	21 216
	10.0	33	23
	10.8	20 313	19 910
	11.6	18 011	23
	11.0	24	20
	12.0	17 056	16 720
		24	15
7	10.4	22 095	21 690
		54	36
	10.8	20 721	20 333
		37	30
	11.2	19 482	19 117
	11.0	26	20
	11.6	18 363	18 01 /
8	10.0	23	24.020
0	10.0	24 423 45	24 020
	10.4	22 829	22 411
	1011	48	23
	10.8	21 399	21 000
		38	29
	11.2	20 092	19 710
		36	28
9	9.0	31 361	30 869
	0.6	48	50
	9.0	2/9/8	27 555
	10.4	24 223	23 798
	10.4	38	32
	10.8	22 622	22 206
		37	25
10	8.6	36 131	35 635
		99	78
	9.0	33 340	32 874
	10.0	88	64
	10.0	27 412	26 993
	10.4	35	35
	10.4	23 444	23 030
11	8.6	38 808	38 167
	0.0	19	58
	9.0	35 703	35 177
		91	68
	9.6	31 495	31 003
		54	26
	10.0	29 032	28 585
		39	39

I.5.2.3 Zmienność współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w zewnętrznym moderatorze z pleksiglasu otaczającym warstwę wewnętrzną utworzoną z materiału typu niewodorowego

Dla każdego wybranego przypadku o określonej wartości referencyjnej częstości absorpcji α_1^{ref} , metodą opisaną w Rozdziale I.4, wyznaczyłam wartość współczynnika ochładzania dyfuzyjnego C_{2PLX}^{nH} .Otrzymane wyniki zamieszczone zostały w Tabeli I.7.

Tabela I.7 Wartości C_{2PLX}^{nH} dla zewnętrznego moderatora z pleksiglasu otaczającego materiał typu niewodorowego (Si + Cu). Wartości wyliczone na podstawie danych otrzymanych z symulacji MCNP z użyciem dla pleksiglasu oryginalnej i zmodyfikowanej ($K_X = 1.20$) biblioteki *poly.01t*.

L.P.	α_1^{ref}	Biblioteka		Bibli	oteka
	$\sigma(\alpha_1^{ref})$	poly.01t		$K_{\rm X} = 1.20$	
		C_{2PLX}^{nH}	H_2	C_{2PLX}^{nH}	H_2
	$[s^{-1}]$	$[cm^4s^{-1}]$	[cm]	$[cm^4s^{-1}]$	[cm]
1	12 112	3 170	13.95	8 930	13.76
	62				
2	13 150	3 670	13.33	8 445	13.15
	67				
3	14 685	3 928	12.60	7 934	12.44
	75				
4	15 971	4 1 1 2	12.11	7 582	11.96
	82				
5	17 391	4 285	11.66	7 100	11.52
	90				
6	18 969	4 321	11.24	6 822	11.12
	98				
7	20 121	4 180	10.99	6 525	10.87
	105				
8	22 025	4 182	10.62	6 206	10.51
	115				
9	25 770	4 203	10.04	5 725	9.95
	135				
10	29 437	4 166	9.61	5 301	9.54
	155				
11	33 914	3 860	9.23	4 795	9.16
	179				

Tabela I.7 zawiera wartości współczynnika ochładzania dyfuzyjnego C_{2PLX}^{nH} obliczone na podstawie danych uzyskanych w wyniku symulacji MCNP dla dwóch przypadków. Pierwszy z nich dotyczy sytuacji, kiedy w obliczeniach dla pleksiglasu, zastosowałam oryginalną bibliotekę *poly.01t*, natomiast drugi gdy bibliotekę *poly.01t* zmienioną ze współczynnikiem modyfikacji, $K_X = 1.20$. Dla obu przypadków, do otrzymanych punktów (α_1^{ref} , C_{2PLX}^{nH}), dopasowałam krzywe. Obrazują one zależność zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego $C_{2PLX}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$ w zewnętrznym moderatorze z pleksiglasu, który otacza warstwę wewnętrzną utworzoną z materiału typu niewodorowego (Si +Cu). Obie zależności pokazane zostały na Rys. I.18.



Rys. I.18 Zależność $C_{2PLX}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$ dla zewnętrznego moderatora z pleksiglasu otaczającego materiał typu niewodorowego (Si + Cu).

Rys. I.18 obrazuje dwa różne przebiegi zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w moderatorze zewnętrznym z pleksiglasu,który otacza materiał typu niewodorowego, $C_{2PLX}{}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$. Pomimo, że obie krzywe dotyczą tego samego układu dwustrefowego, zauważamy znaczne rozbieżności pomiędzy nimi. Obie krzywe różnią się od siebie nie tylko wartościami liczbowymi, lecz także samym charakterem ich przebiegu. Różnice pomiędzy nimi związane są z rodzajem bibliotek, użytych do obliczeń, dla pleksiglasu. Widać tu analogiczną sytuację jak dla przypadku przedstawionego w Rozdziale I.5.1. Na **Rys. I.18** przerywaną linią zaznaczona została również, wartość współczynnika ochładzania dyfuzyjnego dla pleksiglasu tworzącego układ jednorodny $(C_{PLX} = 4377 \text{ cm}^4 \text{s}^{-1})$. Widzimy, że wraz ze wzrostem absorpcji, wartość współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w zewnętrznym moderatorze z pleksiglasu zmierza do wartości C_{PLX} .

Do otrzymanych punktów (α_1^{ref} , $C_{2PLX}^{nH}_{MCNP}$), dopasowałam krzywą opisująca przebieg zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w zewnętrznym moderatorze z pleksiglasu, który otaczał materiał typowo niewodorowy $C_{2PLX}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$.

Dla interesującego przypadku, otrzymanego w oparciu o symulacje MCNP z użyciem biblioteki zmodyfikowanej z $K_X = 1.20$, zależność ta wyraża się w następujący sposób:

 $C_{2PLX}^{nH} = a \times (\lambda^*)^b$, gdzie: $a = (2.337 \pm 0.004) \times 10^6 \text{ cm}^4$, $b = -0.5927 \pm 0.0002$.

Uzyskana w opisany sposób krzywa może być wykorzystana do modyfikacji krzywej teoretycznej ($\lambda^*(H_2)$) dla przypadku, w którym zewnętrzny moderator z pleksiglasu otacza materiał typu niewodorowego.

Jednym ze sposobów sprawdzenia poprawności procedury związanej z jej wyznaczeniem było wykonanie tak zwanego *selftestu*, co polegało na wyliczeniu wartości absorpcji, dla 11 bazowych przypadków (Tabela I.5). Dla każdego przypadku, krzywą eksperymentalną porównałam z krzywą teoretyczną, zmodyfikowaną przy pomocy uzyskanej krzywej $C_{2PLX}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$. Z ich punktu przecięcia, dla każdego przypadku, odczytałam oczekiwaną wartość absorpcji (α_1^{MCNP}) i porównałam z odpowiednią wartością referencyjną (α_1^{ref}). Wyniki tego testu zamieszczone zostały w Tabeli I.8.

-		-	
L.P.	α_1^{ref}	α_1^{MCNP}	3
	$\sigma(\alpha_1^{ref})$	$\sigma(\alpha_1^{MCNP})$	
	$[s^{-1}]$	[s ⁻¹]	[%]
1	12 112	12 103	-0.07
	62	56	
2	13 150	13 154	0.03
	67	66	
3	14 685	14 683	-0.01
	82	75	
`4	15 971	15 958	-0.08
	82	86	
5	17 391	17 417	0.15
	90	101	
6	18 969	18 965	-0.02
	98	117	
7	20 121	20 147	0.13
	105	131	
8	22 025	22 041	0.07
	115	148	
9	25 770	25 737	-0.13
	135	190	
10	29 437	29 389	-0.16
	155	240	
11	33 914	33 952	0.11
	179	305	

Tabela I.8 Wartości absorpcji α_1^{ref} i α_1^{MCNP} (wyliczonej przy pomocy krzywej $C_{2PLX}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$).
Powyższe zestawienie pokazało, że odchyłki względne wartości wyliczonej α_1^{MCNP} od wartości referencyjnej α_1^{ref} przyjmują niskie wartości bliskie zeru. Poszczególne ich wartości występują zarówno ze znakiem dodatnim (5 razy), jak i ujemnym (6 razy). Podobnie jest z ich średnią wartością, która również jest bliska zeru. O dobrej zgodności obu wartości absorpcji świadczy również niska wartość odchyłki *L* (Tabela I.9). Z przeprowadzonego testu wynika, że krzywa została poprawnie wyznaczona.

Odchyłka względna	Wartość
٤ [%] ٤	-0.160 ÷ 0.150
$\overline{\mathcal{E}}$ [%]	0.001
$L \times 10^{-3}$	0.310

Tabela I.9 Wartości odchyłek względnych wartości absorpcji referencyjnej α_1^{ref} i wyliczonej α_1^{MCNP} .

I.6 Zmienność współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w zewnętrznym moderatorze z polietylenu

Wszystkie zaprezentowane do tej pory eksperymenty, zarówno przeprowadzane w rzeczywistych warunkach, jak i przy pomocy symulacji MCNP wykonane były w cylindrycznym układzie dwustrefowym, w którym jako moderator zewnętrzny zastosowano pleksiglas (Rozdział I.5). W dalszej części pracy przedstawione zostaną symulacje MCNP eksperymentów, w identycznej geometrii, lecz z użyciem moderatora wykonanego z innego materiału. Ze względu na swoje właściwości rozpraszające wybrany został polietylen.

Polietylen jest materiałem różniącym się od pleksiglasu nie tylko strukturą cząsteczki, ale i parametrami neutronowymi (Rozdział I.1.3, Tabela I.1). Z tego względu interesujące wydaje się zbadanie zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w moderatorze zbudowanym z tego materiału.

I.6.1 Warstwa wewnętrzna utworzona z materiału typu niewodorowego

W rozważanej cylindrycznej geometrii dwustrefowej zewnętrzny moderator z polietylenu otaczał jednorodną warstwę wewnętrzną zbudowaną z materiału typu niewodorowego (Si + Cu). Założone warunki eksperymentalne oraz czynności wykonane w celu określenia zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego C_{2PE}^{nH} dla zewnętrznego moderatora z polietylenu wykonałam w identyczny sposób jak zostało to zrobione dla moderatora z pleksiglasu (Rozdział I.5.2). Przyjęta do obliczeń gestość polietylenu wynosiła $\rho_{CH_2} = 0.9507 \text{ g/cm}^3$. Dla każdego przypadku wyspecyfikowanego w Tabeli I.5, wyznaczyłam krzywą eksperymentalną, czyli stałą zaniku λ_{exp} w funkcji rozmiaru moderatora H_2 ($\lambda_{exp}(H_2)$), oraz odpowiadającą jej krzywą teoretyczną $\lambda^*(H_2)$. Wyznaczenie krzywej eksperymentalnej $\lambda_{exp}(H_2)$ wymagało, abym dla każdego przypadku wykonała serie komputerowych symulacji MCNP (sposób przygotowania symulacji MCNP opisany jest w Rozdziale II.2.1), w których dla polietylenu użyłam zmodyfikowaną bibliotekę poly.01t ze współczynnikiem modyfikacji $K_{\rm X}$ = 1.30 (Rozdział II.3.3). Stałe zaniku λ_{exp} , dla każdego przypadku, wyznaczałam w funkcji grubości moderatora. Mierzony zakres stałej zaniku λ_{exp} zawarty był w przedziale $\lambda_{exp} = (11\ 700 \div 41\ 000) \text{ s}^{-1}$. Uzyskane wartości stałej zaniku λ_{exp} zamieszczone zostały W Tabeli I.10.

Tabela I.10 Wartości λ_{MCNP} w układzie, gdzie moderator z polietylenu otacza materiał typu niewodorowego. Symulacje MCNP z użyciem dla polietylenu zmodyfikowanej biblioteki *poly.01t* ($K_{\rm X} = 1.30$).

L.P.	H_2	Biblioteka
		$K_{\rm X} = 1.30$
		λ_{MCNP}
		$\sigma(\lambda_{MCNP})$
	[cm]	[s ⁻¹]
1	12.8	12 971
	12.0	19
	13.2	12 525
	13.6	12 133
	1010	21
	14.0	11 764
		26
2	12.4	13 767
	12.8	13 267
	12.0	21
	13.2	12 798
		17
	13.6	12 369
		21
3	11.6	15 509
	12.0	14 925
	12.0	14 835
	12.4	14 220
	12.1	23
	12.8	13 683
		28
4	10.8	17 594
	11.0	22
	11.2	10/13
	11.6	15 944
	11.0	26
	12.0	15 214
		22
5	10.4	19 185
	10.9	28
	10.8	18 140
	11.6	16 375
	11.0	10 5 / 5
	12.0	15 619
		19

Ciag	dalszv	Tabeli	I.10
Ciqo	aaroz y	1	1.10

Ciųg duibžy i	asen mis	
L.P.	H_2	Biblioteka
		$K_{\rm X} = 1.30$
		λ_{MCNP}
		$\sigma(\lambda_{MCNP})$
	[cm]	$[s^{-1}]$
6	10.0	21 060
		22
	10.4	19 828
		18
	11.2	17 724
		19
	11.6	16 844
		21
7	10.0	21 596
		38
	10.4	20 281
		29
	10.8	19 114
		24
	11.2	18 083
		28
8	9.6	23 936
		26
	10.0	22 414
		24
	10.4	21 015
		24
	10.8	19 765
		18
9	10.0	23 912
	10.4	28
	10.4	22 317
	10.0	29
	10.8	20 929
	11.0	15
	11.2	19 689
10	0 (19
10	8.0	33 220
	0.0	30 627
	7.0	19
	0.6	27 224
	9.0	27 234
	10.0	25 240
	10.0	23 249
11	8.0	40 708
	0.0	48
	8.6	35 780
	0.0	29
	9.0	32 835
	2.0	28
	96	28 951
	2.0	45

I.6.2 Zmienność współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w zewnętrznym moderatorze z polietylenu otaczającym warstwę wewnętrzną utworzoną z materiału typu niewodorowego

Dla każdego rozważanego przypadku o określonej wartości referencyjnej częstości absorpcji, metodą opisaną w Rozdziale I.4, wyznaczyłam wartość współczynnika ochładzania dyfuzyjnego C_{2PE}^{nH} dla zewnętrznego moderatora z polietylenu. Odpowiednie krzywe eksperymentalne $\lambda_{exp}(H_2)$ dane są punktami $\{H_2, \lambda\}$ w Tabeli I.10, uzyskanymi z symulacji MCNP ze zmodyfikowaną biblioteką $K_X = 1.30$. Tabela I.11 zawiera wartości referencyjne częstości absorpcji α_1^{ref} dla poszczególnych przypadków oraz wartości współczynnika ochładzania dyfuzyjnego $C_{2PE}^{nH}_{MCNP}$ dla polietylenu otrzymane z dopasowania odpowiednich krzywych teoretycznych $\lambda^*(H_2)$. Zostały one wyliczone według algorytmu rachunku zaburzeń z następującymi wartościami parametrów geometrycznych i neutronowych polietylenu:

$$H_1 = 2 R_1 = 6 \text{ cm}$$

$$\alpha_2 = 6005 \text{ s}^{-1},$$

$$D_{02} = 25 \ 695 \ \mathrm{cm}^{-2} \mathrm{s}^{-1}$$

początkowa wartość $C_2 = 1958 \text{ cm}^4 \text{s}^{-1}$, a potem dopasowana aż do otrzymania zgodności $\alpha_1^{\text{exp}} = \alpha_1^{\text{ref}}$. Procedury związane z wyznaczeniem krzywej $C_{2PE}^{nH} (\lambda^*)^{MCNP}$ wykonałam w identyczny sposób jak zostało to opisane w Rozdziale I.4.

Do otrzymanych punktów (α_1^{ref} , $C_{2PE}^{nH}_{MCNP}$), dla rozważanego przypadku dopasowałam krzywą opisującą przebieg zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w zewnętrznym moderatorze z polietylenu $C_{2PE}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$. Zależność ta wyraża się w następujący sposób:

$$C_{2PE}^{nH} = a \times (\lambda^*)^b,$$

gdzie:

 $a = (575 \pm 6.2) \times 10^3 \,\mathrm{cm}^4$,

$$b = -0.5436 \pm 0.0011.$$

Na **Rys. I.19** pokazana jest zależność współczynnika ochładzania dyfuzyjnego $C_{2PE}^{nH}_{MCNP}$ dla zewnętrznego moderatora z polietylenu od teoretycznej stałej zaniku λ^* , która zawiera w sobie informacje o grubości moderatora oraz o absorpcji materiału tworzącego warstwę wewnętrzną.

L.P.	α_1^{ref}	Biblioteka $K_{\rm X} = 1.30$		
	$\sigma(\alpha_1^{ref})$	$C_{2PE} M_{MCNP}^{nH}$	H_2	
	[s ⁻¹]	$[cm^4 s^{-1}]$	[cm]	
1	12 112	3 510	13.62	
	62			
2	13 150	3 400	12.89	
	67			
3	14 685	3 045	12.10	
	75			
4	15 971	2 932	11.58	
	82			
5	17 391	2 818	11.12	
	90			
6	18 969	2 727	10.71	
	98			
7	20 121	2 635	10.45	
	105			
8	22 025	2 503	10.10	
	115			
9	25 770	2 356	9.58	
	135			
10	29 437	2 126	9.19	
	155			
11	33 914	1 981	8.84	
	179			

Tabela I.11 Wartości $C_{2PE}^{\ \ nH}_{\ MCNP}$ dla zewnętrznego moderatora z polietylenu otaczającego materiał typu niewodorowego (Si + Cu). Symulacje MCNP z użyciem dla polietylenu biblioteki zmodyfikowanej $K_{\rm X}$ = 1.30.



Rys. I.19 Zależność $C_{2PE}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$ dla zewnętrznego moderatora z polietylenu, otaczającego warstwę wewnętrzną z materiału typu niewodorowego (Si + Cu).

Uzyskana w opisany sposób krzywa może być wykorzystana do modyfikacji krzywej teoretycznej ($\lambda^*(H_2)$) dla przypadku, w którym moderator z polietylenu otacza materiał typu niewodorowego.

Na Rys. I.19, linią przerywaną, zaznaczona została wartość współczynnika ochładzania jednorodny $(C_{PF} = 1958 \text{ cm}^4 \text{s}^{-1}).$ polietylenu tworzącego układ dyfuzvinego dla Z przeprowadzonych obliczeń można wywnioskować, że wraz ze wzrostem absorpcji materiału warstwy wewnętrznej, wartość C_{2PE}^{nH} w zewnętrznym moderatorze z polietylenu zmierza do wartości CPE. Im wyższa jest wartość absorpcji materiału tworzącego warstwę wewnętrzną, tym przy cieńszej warstwie polietylenu spełniony jest warunek stałego przestrzennie strumienia neutronów termicznych. Im cieńsza warstwa polietylenu, tym mniejszy jest udział zjawiska ochładzania dyfuzyjnego tej warstwy w całym układzie. Otrzymany przebieg zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w zewnętrznym moderatorze z polietylenu, $C_{2PE}^{\ nH}(\lambda^*)^{MCNP}$, ma charakter potęgowy, podobnie jak w przypadku pleksiglasu (Rozdział I.5.2.3). Współczynniki krzywych $C_{2PLX}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$ i $C_{2PE}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$ zostały zebrane w Tabeli I.12.

$C_2^{nH} = a \times (\lambda^*)^b$			
	а	b	
	[cm ⁴]		
$C_{2PLX}{}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$	$(2.337 \pm 0.004) \times 10^{6}$	-0.5927 ± 0.0002	
$C_{2PE}{}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$	$(575 \pm 6.2) \times 10^3$	-0.5436 ± 0.0011	

Tabela I.12 Współczynniki *a* i *b* dla funkcji $C_{2PLX}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$ i $C_{2PE}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$.

I.7 Zastosowanie funkcji $C_2(\lambda^*)$ w pomiarze absorpcji metodą Czubka

Dobrym testem sprawdzającym, na ile poprawna ilościowo jest otrzymana zależność, $C_2^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$, dla zewnętrznego moderatora otaczającego ośrodek typu niewodorowego, jest wykorzystanie tej funkcji do wyznaczenia absorpcji metodą Czubka, dla materiałów, dla których istnieją wyniki z rzeczywistych eksperymentów. Ze względu na brak danych eksperymentalnych dla rozważanego układu z moderatorem z polietylenu, nie jest możliwe przeprowadzenie takiego testu dla krzywej $C_{2PE}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$. Wspomniana weryfikacja wyników została więc wykonana tylko dla krzywej wyznaczonej dla moderatora z pleksiglasu, $C_{2PLX}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$.

W celu wykonania tych testów wykorzystałam dane z rzeczywistych eksperymentów przeprowadzonych w Pracowni Fizyki Transportu neutronów IFJ PAN. Były to układy dwustrefowe cylindryczne, w których warstwy wewnętrzne utworzone były z dwóch materiałów typu niewodorowego, CuO lub Cr₂O₃, i otoczone zewnętrznymi moderatorami z pleksiglasu. Dane potrzebne do wyznaczenia krzywych eksperymentalnych dla każdego przypadku znajdują się w **Tabeli I.13**.

Odpowiednie krzywe eksperymentalne $\lambda_{exp}(H_2)$ porównałam z odpowiednimi krzywymi teoretycznymi $\lambda^*(H_2)$ i z ich punktu przecięcia wyznaczałam wartość przekroju czynnego absorpcji dla danego przypadku. Do poprawy wyliczonej krzywej teoretycznej używałam zależność $C_{2PLX}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$ (warstwa wewnętrzna typu niewodorowego), otrzymaną w oparciu o dane z symulacji MCNP (Rozdział I.5.2.3). Analogiczne obliczenia wykonałam dla przypadku, kiedy krzywa teoretyczna poprawiona była krzywą otrzymana w oparciu o dane z rzeczywistych eksperymentów, $C_{2PLX}^{H}(\lambda^*)^{exp}$ (warstwa wewnętrzna typu wodorowego) [Krynicka i in., 2000a], [Krynicka i in., 2001]. Zrobione to zostało ze względu na to, że otrzymane krzywe ochładzania dyfuzyjnego dla obu przypadków: $C_{2PLX}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$ i $C_{2PLX}^{H}(\lambda^*)^{exp}$ mają podobny charakter i zbliżone wartości. Interesujące wydało się sprawdzenie różnić pomiędzy wynikami uzyskanymi w obu przypadkach. Dla otrzymanych wartości wyliczyłam odchyłki względne wartości absorpcji obliczonej α_1 od wartości referencyjnej α_1^{ref} (**r. I.5.1**). Wyniki uzyskane z tych obliczeń zamieszczone zostały w **Tabeli I.14**. **Tabela I.13** Wartości λ_{exp} w układzie dwustrefowym cylindrycznym, gdzie warstwa wewnętrzna utworzona jest z materiału typu niewodorowego (Cr₂O₃ lub CuO).

H_2	λ_{exp}
	$\sigma(\lambda_{exp})$
[cm]	$[s^{-1}]$
Warstwa wewnętrzi	na utworzona z Cr ₂ O ₃
14.0	11 716
	32
	11 746
	36
14.4	11 298
	24
	11 246
	38
14.8	10 893
	28
	10 908
	25
Warstwa wewnętrz	ma utworzona z CuO
11.6	16 513
	36
	16 476
	42
12.0	15 629
	37
	15 624
10.4	40
12.4	14 863
	41
	14 853
12.0	20
12.8	14 142
	1/1 1/15
	14 145
	25

Tabela I.14 Wartości absorpcji α_1 i α_1^{ref} dla materiałów typu niewodorowego (Cr₂O₃ i CuO).

	α_1^{ref} $\sigma(\alpha_1^{ref})$	α_1^H $\sigma(\alpha_1^H)$	ε ^H [%]	α_1^{nH} $\sigma(\alpha_1^{nH})$	ε ^{nH} [%]
Cr ₂ O ₃	[s ⁻¹] 11 203 292	[s ⁻¹] 11 695 21	4.39	[s ⁻¹] 11 638 56	3.88
CuO	15 052 80	15 110 81	0.39	15 033 79	-0.13

Z Tabeli I.14 widać, że wyliczone wartości absorpcji, dla dwóch rozważanych materiałów, opisaną metodą, z zastosowaniem dwóch krzywych $C_{2PLX}{}^{H}(\lambda^{*})^{exp}$ i $C_{2PLX}{}^{nH}(\lambda^{*})^{MCNP}$ mają zbliżone wartości. Odchyłki względne w przypadku zastosowania krzywej $C_{2PLX}{}^{nH}(\lambda^{*})^{MCNP}$ nieznacznie zmniejszyły się.

II. Część Rzeczywisty impulsowy eksperyment neutronowy a symulacje metodą Monte Carlo

II.1 Symulacje metodą Monte Carlo

W sytuacji, gdy analityczne rozwiązanie problemu jest uciążliwe a nawet niemożliwe ze względu na złożoność rachunków, pomocne stają się metody numeryczne. Polegają one na rozwiązywaniu problemów matematycznych za pomocą operacji na liczbach. Otrzymywane ta droga wyniki sa na ogół przybliżone, a dokładność obliczeń może być z góry określona i dobierana zależnie od potrzeb. Spośród szeregu metod numerycznych, w celu wyjaśnienia problemu analizowanego w tej pracy, wybrana została metoda symulacji komputerowej Monte Carlo. Problemy transportu rozwiązywane są w oparciu o symulacje zdarzeń indywidualnych cząstek i zapis niektórych aspektów ich średniego zachowania. Średnie zachowanie całej populacji cząstek w układzie jest wnioskowane na podstawie średniego zachowania pojedynczych cząstek a dostarczone przez program informacje dotyczą tylko tego zakresu, który został określony przez użytkownika. Metody Monte Carlo mogą być używane do powtarzania pewnych procesów, takich jak oddziaływanie cząstek z materią, jako statystyczne i są szczególnie użyteczne w sytuacjach, kiedy kody komputerowe używające metod deterministycznych okazują się niewystarczające. Składające się z różnych procesów indywidualne zdarzenia probabilistyczne są symulowane w sposób sekwencyjny. Aby opisać całkowite zjawisko fizyczne rządzące zdarzeniami, rozkłady prawdopodobieństwa sa statystycznie próbkowane. Ten statystyczny proces próbkowania oparty jest na wyborze liczb przypadkowych, który dokonuje się za pomocą generatora liczb losowych. Jest to sytuacja adekwatna do sytuacji, jaka ma miejsce w kasynie i stąd wzięła się nazwa tej metody. Metoda Monte Carlo w transporcie cząstek charakteryzuje się dużym realizmem. Oznacza to, że historia każdej z cząstek jest na bieżąco śledzona od źródła aż do jej "śmierci", ale tylko w ściśle określonej przez użytkownika kategorii. Rozkłady prawdopodobieństwa kolejnych etapów życia cząstki są wybierane przypadkowo w oparciu, o podane przez użytkownika, informacje dotyczące wszystkich istotnych aspektów symulowanego procesu, takich jak np. geometria, skład materiału, charakter źródła, czy energia początkowa generowanych cząstek. Historia pojedynczej cząstki, emitowanej ze źródła, zaczyna się od wylosowania energii i kierunku jej ruchu. Następnie losuje się, w jakiej odległości od źródła nastąpi zderzenie cząstki z atomem lub jądrem. Można wtedy określić współrzędne punktu, w którym nastąpiło zderzenie i czas, jaki upłynął od chwili emisji do pierwszego zdarzenia. W wyniku zderzenia cząstki z atomem lub jądrem może ona ulec rozproszeniu albo absorpcji. W związku z tym należy wylosować typ reakcji, korzystając ze znajomości przekrojów czynnych charakteryzujących prawdopodobieństwo różnych oddziaływań. Jeśli została wylosowana absorpcja, to historia cząstki kończy się. Jeżeli wylosowane zostało rozpraszanie, to następnie konieczne jest wylosowanie kierunku ruchu i energii cząstki po zderzeniu, a także odległość do następnego zdarzenia. Postępując w ten sposób, można prześledzić historię cząstki od chwili jej powstania aż do jej straty wskutek absorpcji, lub ucieczki z rozpatrywanego obszaru. Cząstka w ciągu swojego życia może ulec wielu setkom, a nawet tysiącom zdarzeń. Trzeba zatem wykonać wiele setek czy tysięcy losowań, a ich wyniki muszą być zapamiętane. W celu adekwatnego opisu zjawiska transportu całkowita liczba historii powinna być dość duża (rzędu nawet kilkuset milionów).

Przygotowanie rzeczywistego impulsowego eksperymentu neutronowego stawia zazwyczaj wysokie wymagania związane z precyzją wykonania próbek i dostosowania całego układu pomiarowego do konkretnego przypadku. Związane to jest z czasem a także sporymi nakładami finansowymi. Materiały wykorzystywane do wykonania próbek referencyjnych muszą charakteryzować się wysoką klasą czystości. Często właśnie to sprawia największe trudności i w tym przypadku pomocne stają się symulacje metodą Monte Carlo. Tego typu obliczenia nie byłyby możliwe bez znajomości parametrów charakteryzujących daną reakcje i materiał, czyli bez znajomości przekrojów czynnych na wszystkie możliwe oddziaływania i reakcje jądrowe. Kilka ośrodków na świecie zajmuje się gromadzeniem i opracowywaniem danych jądrowych, pochodzących z pomiarów przeprowadzanych w różnych laboratoriach i instytucjach badawczych. Zdarza się, że ten sam przekrój czynny, w tym samym zakresie energii jest mierzony w kilku ośrodkach, w różny sposób, za pomocą różnej aparatury pomiarowej i z różną dokładnością. Istnieją również takie przekroje czynne i takie przedziały energii, gdzie brakuje danych pomiarowych lub obliczeniowych. Operowanie tego typu narzędziem stwarza ogromne możliwości pod warunkiem, że zawiera ono w swojej bazie wszystkie konieczne do tego celu informacje.

II.2 Porównanie wyników pochodzących z symulacji MCNP i z rzeczywistych eksperymentów na wybranych przykładach. Testy MCNP

Symulacje metodą Monte Carlo są doskonałym narzędziem, które postanowiono wykorzystać w celu wyznaczenia przebiegu zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w zewnętrznym moderatorze (pleksiglas, polietylen), otaczającym pewną objętość materiału typu niewodorowego. Przed przystąpieniem do zasadniczej części pracy postanowiłam wykonać kilka testowych obliczeń przy użyciu programu MCNP (Monte Carlo N – Particle Transport Code System), pod kątem zgodności otrzymywanych wyników z wynikami pochodzącymi z rzeczywistych impulsowych eksperymentów neutronowych, w celu przygotowania odpowiedniego narzędzia pracy.

II.2.1 Opis eksperymentu, konstrukcja zbioru danych wejściowych

Wszystkie rozważane rzeczywiste eksperymenty neutronowe wykonane były w Pracowni Fizyki Transportu Neutronów IFJ PAN w Krakowie. Wykonywane one były w temperaturze pokojowej tj. $20^{\circ}C \pm 0.4^{\circ}C$. W rzeczywistych warunkach rozważany układ o regularnym, symetrycznym kształcie (kula, sześcian, walec o średnicy równej wysokości), umieszczony na stanowisku pomiarowym, bombardowany jest przez impuls neutronów predkich. Źródłem emitowanych cząstek jest impulsowy generator neutronów predkich 14 MeV, działający w oparciu o reakcję deuter – tryt (${}^{3}T + {}^{2}D = {}^{4}He + n$). Tarcza trytowa generatora umieszczona jest blisko powierzchni układu w taki sposób, że oś generatora pokrywa się z płaszczyzną symetrii układu. Na prostopadłej osi symetrii układu przylegają do niego dwa detektory neutronów termicznych (jeden bezpośrednio nad układem a drugi pod nim). Zarówno układ jak i detektory osłonięte są warstwa kadmu, co zapobiega zaburzeniom pochodzącym od neutronów termicznych spoza układu. W osłonie kadmowej pomiędzy detektorami a układem są dwa odpowiednio wymodelowane otwory, stanowiące okienka pomiarowe. W ten sposób detektory rejestrują neutrony termiczne pochodzące wyłącznie z objętości układu. Tak wyposażone stanowisko pomiarowe pozwala na jednoczesne wykonanie dwóch niezależnych pomiarów, dla tego samego układu.

Impulsy pomiarowe z detektorów po wzmocnieniu i uformowaniu doprowadzane są do systemu kontroli pomiaru. System ten sprawdza, czy wszystkie założone warunki pomiaru mieszczą się w zadanych przedziałach. Jeśli wszystko działa poprawnie, system dostarcza

zebrane impulsy do układu rejestrującego [Burda i in., 1997, 1999a, 1999b]. Stała zaniku λ_{exp} wyznaczana jest z zarejestrowanej krzywej zaniku strumienia neutronów termicznych metodą opisaną w [Drozdowicz, 1993a] przy użyciu programu DECON, opracowanego w Pracowni Fizyki Transportu Neutronów IFJ PAN w Krakowie.

Do symulacji MCNP impulsowych eksperymentów neutronowych, opisanych w dalszej części pracy, użyłam kodu MCNP wersja 4c [Briesmeister, 2000]. Zadane warunki dotyczące geometrii, materiału, energii neutronów były identyczne jak w rzeczywistych eksperymentach.

Wszystkie symulacje MCNP były przeprowadzone w temperaturze pokojowej tj. 20°C. W celu uproszczenia, skrócenia i zwiększenia wydajności rachunków do obliczeń zastosowałam źródło neutronów o energiach początkowych z rozkładu Maxwella w temperaturze pokojowej, $E_{\rm T} = kT = 0.0253$ eV. Poprawność takiego podejścia została potwierdzona w oparciu o uzyskaną zgodność pomiędzy wynikami z symulacji przeprowadzonymi w tych samych warunkach z użyciem źródła o energii neutronów 14 MeV i źródła o rozkładzie Maxwella neutronów termicznych [Dąbrowska i in., 2000]. Rozwiązanie takie znacznie skraca czas obliczeń. W obliczeniach zastosowałam izotropowe źródło neutronów, które było generowane wewnątrz całej objętości rozważanego układu. Neutrony były emitowane podczas 100 µs impulsów i po tych impulsach były zbierane w 1000 kanałów czasowych o szerokości dostosowanej indywidualnie dla każdego przypadku. Liczbę historii w danym cyklu obliczeniowym każdorazowo dostosowałam tak, aby błąd korespondujący ze statystycznym zliczaniem w kanałach nie był większy od 0.5 %. Rozważany układ umieszczony był w próżni i neutrony, które go opuściły były natychmiast zabijane, co ewentualne zakłócenia pochodzące od eliminowało neutronów spoza układu. W rzeczywistych eksperymentach odpowiada to otoczeniu układu warstwa kadmu.

W symulacjach MCNP istotnym problemem jest właściwy dobór bibliotek zawierających przekroje czynne na rozpraszanie neutronów termicznych. W opisanych, w dalszej części pracy, symulacjach przekroje czynne na rozpraszanie neutronów termicznych dla pierwiastków: O, C, B, K, Cr, Cu, Si, Cl wzięłam z bibliotek ENDF/B-VI.0. Do opisu transportu neutronów termicznych, na wodorze związanym zastosowałam model $S(\alpha, \beta)$:

– dla wodoru związanego w wodzie: ENDF VI, *lwtr.01t* (biblioteka zawierająca przekroje czynne na rozpraszanie neutronów termicznych na wodorze w cząsteczce wody),

65

– dla wodoru związanego w polietylenie: ENDF VI, *poly.01t* (biblioteka zawierająca przekroje czynne na rozpraszanie neutronów termicznych na wodorze w poletylenie),

- dla wodoru związanego w pleksiglasie, zgodnie z zaleceniem: ENDF VI, poly.01t,

 – dla wodoru związanego w wodnych roztworach kwasów H₃BO₃ i KCl, ze względu na znikomo małe ich stężenia: ENDF VI, *lwtr.01t*.

Jako wynik każdego z obliczeń, uzyskałam liczbę cząstek przypadającą na jednostkę powierzchni w kolejnych przedziałach czasowych, co odpowiadało czasowemu rozkładowi strumienia neutronów termicznych $\phi(t)$. Z uzyskanych danych, dla każdego przypadku, wyliczyłam stałą zaniku λ_{MCNP} . i porównałam z odpowiednią wartością otrzymana w oparciu o dane z rzeczywistego eksperymentu λ_{exp} . Wartości stałej zaniku λ_{MCNP} wyliczałam przy pomocy programu DECON [Drozdowicz i in., 1993a]. W celu porównania ze sobą wartości stałych zaniku λ_{exp} i λ_{MCNP} dla każdego rozważanego przypadku wyliczyłam odchyłki względne ε , $\overline{\varepsilon}$ i L zdefiniowane według równań: r. I.5.1, r. I.5.2 i r. I.5.3. W tym przypadku przyjmują one następujące postacie:

– odchyłka względna ε wielkości obliczonej w oparciu o dane z symulacji λ_{MCNP} od wielkości uzyskanej w oparciu o dane z rzeczywistego eksperymentu λ_{exp} (daje ona informacje o tym, w jakim stopniu i w którą stronę występują rozbieżności λ_{MCNP} od λ_{exp}):

$$\varepsilon = \frac{\lambda_{MCNP} - \lambda_{exp}}{\lambda_{exp}} \cdot 100\%$$
 r. II.2.1

– średnia wartość odchyłek względnych ε :

$$\overline{\varepsilon} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i$$
 r. II.2.2

gdzie n oznacza liczbę przypadków,

– odchyłka L, odpowiadająca metodzie najmniejszych kwadratów (określa rozbieżność gubiąc informację o braku lub występowaniu zmienności znaku odchyłki):

$$L = \frac{1}{n} \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \frac{\left(\lambda_{MCNPi} - \lambda_{expi}\right)^2}{\lambda_{expi}^2}}$$
r. II.2.3

Zdefiniowane w ten sposób wielkości pozwalają na poprawne oszacowanie zgodności pomiędzy eksperymentem a symulacją. Wprowadzenie parametru *L* uniezależnia ocenę zgodności symulacji z eksperymentem od tego, w która stronę zachodzi rozbieżność i ułatwia poprawną analizę.

II.2.2 Układ jednorodny

II.2.2.1 Walec z wody

Symulacje MCNP w układzie jednorodnym wykonałam dla walca jednorodnego z wody. Gęstość wody przyjęta do obliczeń: $\rho_{H_{2O}} = 0.998098 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$. Przykład ten został wybrany ze względu na dobrze opracowaną bibliotekę zawierającą przekroje czynne na rozpraszanie neutronów termicznych na jądrach atomów wodoru związanych w cząsteczce wody (ENDF VI, *lwtr.01t*).

Obliczenia wykonałam dla czterech różnych rozmiarów walca. Procedury związane z przygotowaniem obliczeń zostały opisane w Rozdziale II.2.1. Dla czterech rozważanych przypadków wartości λ_{exp} znane były z rzeczywistych eksperymentów. Otrzymane wyniki zamieszczone zostały w Tabeli II.1 i zobrazowane na Rys. II.1.

Н	λ_{exp}	λ_{MCNP}	3
	$\sigma(\lambda_{exp})$	$\sigma(\lambda_{MCNP})$	
[cm]	$[s^{-1}]$	$[s^{-1}]$	[%]
14.80	9 728	9 687	-0.42
	35	21	
	9 785		-1.00
	55		
14.72	9 939	9 741	-1.99
	49	18	
10.80	13 728	13 504	-1.63
	50	15	
	13 749		-1.78
	22		
7.90	20 643	20 135	-2.46
	43	11	
	20 657		-2.53
	40		
	$ar{arepsilon}$ [%]		-1.69
	$L \times 10^{-3}$		6.91

Tabela II.1 Wartości stałych zaniku λ_{exp} i λ_{MCNP} dla jednorodnego walca z wody.



Rys. II.1 Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} , dla jednorodnego walca z wody.

Na podstawie przedstawionego porównania wyników da się zauważyć, że wyniki uzyskane w wyniku obliczeń numerycznych z zastosowaniem biblioteki zawierającej przekroje czynne na rozpraszanie neutronów termicznych na jądrach atomów wodoru związanego w cząsteczce wody odbiegają od odpowiednich wyników uzyskanych na drodze rzeczywistego, impulsowego eksperymentu neutronowego. Dla każdego przypadku wyliczyłam odchyłki: względną, której wartość jest z przedziału $\varepsilon = (-2.53 \div -0.42)$ %, ich średnią wartość, która wynosi $\overline{\varepsilon} = -1.69$ %, oraz odchyłkę *L*, która dla tego przypadku wynosi $L = 6.91 \times 10^{-3}$. Analizując wyniki symulacji i eksperymentu widać, że wartości stałej zaniku λ_{MCNP} , są mniejsze od odpowiednich wartości λ_{exp} . Znajduje to odzwierciedlenie w ujemnym znaku wyliczonych odchyłek względnych.

II.2.2.2 Sześcian z polietylenu

Kolejnym ważnym materiałem o silnych właściwościach rozpraszających neutrony jest polietylen. Dla tego materiału również istnieje specjalnie opracowana biblioteka zawierające przekroje czynne na rozpraszanie neutronów termicznych na jądrach atomów wodoru związanych w cząsteczce polietylenu w temperaturze pokojowej (ENDF VI, *poly.01t*). Wybrałam dane z rzeczywistych eksperymentów wykonanych dla sześcianów polietylenowych [Dąbrowska i in., 2000]. Wykonałam testowe symulacje MCNP tych eksperymentów, dla sześcianów z polietylenu (CH₂)_n o różnych krawędziach *d*. Przyjęta do obliczeń gęstość polietylenu wynosiła: $\rho_{CH2} = 0.947$ g·cm⁻³. Procedury związane z przygotowaniem i przeprowadzeniem symulacji opisane zostały w Rozdziale II.2.1. Zakres stałej zaniku λ zawierał się w przedziale $\lambda = (14500 \div 23600)$ s⁻¹. Wyliczone wartości stałej zaniku λ_{MCNP} porównałam z odpowiednimi wartościami λ_{exp} , i zamieściłam w Tabeli II.2. W tabeli tej znajdują się także wartości teoretyczne λ_t wyliczone w oparciu o dane dotyczące parametrów neutronowych podanych przez [Granada i in., 1987].

d	λ_t	λ_{exp}	λ_{MCNP}	З
		$(\sigma(\lambda_{exp}))$	$\sigma(\lambda_{MCNP})$	
[cm]	[s ⁻¹]	[s ⁻¹]	[s ⁻¹]	[%]
5.94	23 519	23 691	24 727	4.37
	23 160	(30-100)	46	
7.00	19 097	19 333	19 955	3.22
	18 902	(30-80)	18	
8.90	14 448	14 532	14 820	1.98
	14 369	(50)	41	
	$ar{\mathcal{E}}$ [%]	<u> </u>	·	3.19
	$L \times 10^{-3}$			19.26

Tabela II.2 Wartości stałych zaniku λ_t , λ_{exp} i λ_{MCNP} dla jednorodnych sześcianów z polietylenu.

Stałe zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla jednorodnych sześcianów polietylenowych zostały przedstawione na wykresie **Rys. II.2**.



Rys. II.2 Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} , dla jednorodnych sześcianów polietylenowych.

W celu porównania ze sobą wartości stałej zaniku λ_{exp} i λ_{MCNP} dla każdego przypadku, wyliczyłam odchyłkę względną $\varepsilon = (1.98 \div 4.37)$ %, ich średnią wartość, $\overline{\varepsilon} = 3.19$ % oraz odchyłkę $L = 19.26 \times 10^{-3}$. Z porównania otrzymanych wartości stałych zaniku, λ_{MCNP} i λ_{exp} , można stwierdzić, że wyniki symulacji znacznie odbiegają od wartości eksperymentalnych. Daje się to zauważyć poprzez duże wartości wyznaczonych odchyłek. Analiza wyników symulacji i eksperymentu pokazuje, że wartości stałej zaniku λ_{MCNP} są większe od λ_{exp} . Znajduje to odzwierciedlenie w dodatnich znakach wyliczonych odchyłek względnych i w tym przypadku ε mają przeciwny znak niż te uzyskane dla, rozważanego w Rozdziale II.2.2.1, walca jednorodnego z wody.

II.2.2.3 Walec jednorodny z pleksiglasu

Przy wykonywaniu obliczeń teoretycznych z użyciem kodu MCNP, w przypadku stosowania materiału wodorowego jakim jest pleksiglas, C₅H₈O₂, pojawia się problem. Jest on związany z brakiem biblioteki na rozpraszanie neutronów termicznych na jądrach atomów wodoru związanych w pleksiglasie. W tej sytuacji twórcy programu rekomendują użycie tych

samych bibliotek rozproszeniowych dla pleksiglasu, jakie są przeznaczone dla polietylenu (ENDF VI, *poly.01t*). Słuszność tego podejścia może być poparta tym, że zależne od energii całkowite przekroje czynne na rozpraszanie neutronów na jądrach atomów wodoru związanych w polietylenie i pleksiglasie, w zakresie energii termicznych, mają zbliżone wartości, aczkolwiek istnieją między nimi pewne rozbieżności (Rozdział I.1.3, **Rys. I.7**).

Testowe symulacje komputerowe metodą Monte Carlo dla pleksiglasu wykonane zostały dla jednorodnych walców o różnych rozmiarach, dla których istniały rzeczywiste eksperymenty neutronowe [Drozdowicz, Woźnicka, 1986]. Przyjęta do obliczeń gęstość pleksiglasu wynosiła: $\rho_{C5H8O2} = 1.1764 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$. Procedury związane z przygotowaniem symulacji MCNP i wykonaniem obliczeń opisane zostały w Rozdziale II.2.1. Dla każdego przypadku wyliczoną stałą zaniku λ_{MCNP} porównałam z odpowiednią wartością λ_{exp} . Uzyskane wyniki zostały zamieszczone w Tabeli II.3.

•	1	U	
Н	λ_{exp}	λ_{MCNP}	3
[cm]	$\sigma(\lambda_{exp})$	$\sigma(\lambda_{MCNP})$	Г0/ Т
[cm]	[s]	[s]	[70]
5.0	37 092	38 861	4.77
	240	45	
	37 668		3.17
	189		
	37 194		4.48
	329		
	37 099		4.75
	276		
	37 303		4.18
	221		
7.0	23 383	23 950	2.42
	53	27	
	23 413		2.29
	61		
	23 282		2.87
	105		
8.2	18 848	19 183	1.78
	44	25	
	18 846		1.79
	56		
	18 767		2.22
	39		
9.6	15 247	15 508	1.71
	53	16	
	15 223		1.87
	45		
	15 179		2.17
	47		

Tabela II.3 Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla jednorodnych walców z pleksiglasu.

Ciag	dalszv	Tabeli	II.3
	among	1 40 011	

<u> </u>			
Н	λ_{exp}	λ_{MCNP}	3
	$\sigma(\lambda_{exp})$	$\sigma(\lambda_{MCNP})$	
[cm]	$[s^{-1}]$	$[s^{-1}]$	[%]
11.6	11 967	12 207	2.01
	22	16	
	11 967		2.01
	29		
12.0	11 434	11 722	2.52
	34	16	
	11 486		2.05
	30		
17.0	8 086	8 131	0.56
	21	23	
	8 006		1.56
	28		
	8 010		1.51
	25		
	8 025		1.32
	32		
	7 968		2.05
	32		
	7 991		1.75
	21		
	7 982		1.87
	45		
	$\overline{arepsilon}$ [%]		2.40
	$L \times 10^{-3}$		5.38



Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} zostały przedstawione na wykresie **Rys. II.3** [Wiącek, 2006].

Rys. II.3 Wartości stałych zaniku λ_{exp} i λ_{MCNP} dla jednorodnych walców z pleksiglasu [Wiącek, 2006]

Analizując wyliczone wartości stałych zaniku λ_{MCNP} oraz wartości eksperymentalne λ_{exp} można stwierdzić, że otrzymane wyniki z symulacji i eksperymentu znacznie odbiegaja od siebie. Sytuacja ta jest widoczna w dużych wartościach obliczonych odchyłek: $\bar{\varepsilon} = 2.40 \%$ i $L = 5.38 \times 10^{-3}$. Analiza $\varepsilon = (0.56 \div 4.77) \%$ wyników symulacji i eksperymentu pokazuje, że wartości stałej zaniku λ_{MCNP} są większe od λ_{exp} . Znajduje to odzwierciedlenie w dodatnich znakach wyliczonych odchyłek względnych ε i w tym przypadku zachodzi analogiczna sytuacja jak dla sześcianów polietylenowych (Rozdział II.2.2.2). Przeprowadzona analiza pozwala również zauważyć, że wraz ze wzrostem stałej zaniku λ_{exp} , rośnie także wartość odchyłki względnej ε (Rys. II.4).



Rys. II.4 Zmiany wartości odchyłki względnej ε w zależności od wartości stałej zaniku λ_{exp} , dla jednorodnego walca z pleksiglasu.

Na **Rys. II.4** linią przerywaną zaznaczona została tendencja wyznaczonych wartości ε w zależności od λ_{exp} i widać, ze ma ona charakter rosnący.

II.2.3 Układy dwustrefowe

W sytuacji, kiedy stosując dla pleksiglasu bibliotekę *poly.01t* obserwuje się istotne różnice pomiędzy eksperymentem i symulacją, sensowne jest sprawdzenie i oszacowanie rozbieżności pomiędzy nimi, dla przypadku układów dwustrefowych.

II.2.3.1 Geometria dwustrefowa sferyczna

Jedne z pierwszych testowych symulacji komputerowych metodą Monte Carlo w układzie dwustrefowym wykonałam w dwustrefowej geometrii sferycznej [Czubek i in., 1980]. Wodny roztwór kwasu H₃BO₃ o odpowiednio dobranych stężeniach *k* tworzył kulistą warstwę wewnętrzną ($R_1 = 5$ cm), otoczoną zewnętrznym moderatorem z pleksiglasu (R_2). Przyjęta w tym przypadku gęstość pleksiglasu wynosiła: $\rho_{C3H8O2} = 1.178 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$. Spośród dostępnych wyników rzeczywistego impulsowego eksperymentu neutronowego wybrałam kilka punktów pomiarowych. Analizowany zakres stałej zaniku λ zawierał się w przedziale $\lambda = (11\ 800 \div 33\ 300)\ \text{s}^{-1}$. Procedury związane z przygotowaniem symulacji MCNP i wykonaniem obliczeń opisane zostały w Rozdziale II.2.1. Dla każdego przypadku, wyliczyłam stałą zaniku λ_{MCNP} i porównałam z odpowiednią wartością λ_{exp} . Dla każdego przypadku wyliczyłam odchyłki: ε , $\overline{\varepsilon}$ i *L*. Otrzymane wyniki zostały przedstawione w Tabeli II.4 i przedstawione na wykresie Rys. II.5 [Wiącek, Krynicka, 2005, 2006].

Tabela II.4 Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla dwustrefowej geometrii sferycznej, gdzie zewnętrzny moderator z pleksiglasu otacza materiał utworzony z wodnych roztworów kwasu H₃BO₃ o określonych stężeniach *k*.

k	R_2	λ_{exp}	λ_{MCNP}	3
		$\sigma(\lambda_{exp})$	$\sigma(\lambda_{MCNP})$	
[%]	[cm]	$[s^{-1}]$	[s ⁻¹]	[%]
1.750	6.50	33 272	35 229	
		486	24	5.88
		33 311		
		358		5.76
	7.50	23 357	24 296	
		163	24	4.02
		23 456		
		63		3.58
0.875	6.99	21 286	22 018	
		192	37	3.44
		21 291		
		107		3.41
	7.50	18 893	19 439	
		84	27	2.89
		18 801		
		106		3.39
	9.49	11 819	12 469	
		182	6	5.50
		11 829		
		246		5.41
	4.33			
	$L \times$	10-3		
				14.13



Rys. II.5 Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla dwustrefowej geometrii sferycznej, gdzie zewnętrzny moderator z pleksiglasu otacza materiał utworzony z wodnych roztworów kwasu H₃BO₃ [Wiącek, Krynicka, 2005, 2006].

Zestawiając otrzymane wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} można stwierdzić, że również w tym przypadku wyniki uzyskane w oparciu o symulacje MCNP znacznie odbiegają od wyników otrzymanych w oparciu o rzeczywisty eksperyment. Sytuacja ta jest widoczna w dużych wartościach obliczonych odchyłek: $\varepsilon = (2.89 \div 5.50)$ %, $\overline{\varepsilon} = 4.33$ % i $L = 14.13 \times 10^{-3}$. Analiza wyników symulacji i eksperymentu pokazuje, że wartości stałej zaniku λ_{MCNP} są większe od odpowiednich λ_{exp} . Znajduje to odzwierciedlenie w dodatnich znakach wyliczonych odchyłek względnych i w tym przypadku wszystkie wartości ε mają dodatni znak. Otrzymane wyniki potwierdzają wnioski wyciągnięte na podstawie obliczeń w układach jednorodnych (Rozdział II.2.2.2 i Rozdział II.2.2.3).

II.2.3.2 Geometria dwustrefowa cylindryczna

Kolejną grupę testowych obliczeń wykonałam w dwustrefowej geometrii cylindrycznej, w oparciu o dane z rzeczywistych eksperymentów neutronowych [Krynicka i in., 2000, 2001]. Warstwa wewnętrzna o stałym rozmiarze ($H_1 = 2R_1 = 6$ cm) składająca się z wodnego roztworu kwasu KCl lub H₃BO₃ o różnych stężeniach *k* otoczona była zewnętrznym moderatorem z pleksiglasu o zmiennej grubości ($H_2 = 2R_2$). Przyjęta gęstość pleksiglasu wynosiła $\rho_{C_{5HsO2}} = 1.1764$ g·cm⁻³. Do obliczeń udziały wagowe izotopów boru ¹⁰B i ¹¹B w wodnych roztworach kwasu H₃BO₃ wzięłam z [Krynicka i in., 2000b]. Testy porównawcze zostały przeprowadzone w stosunkowo szerokim zakresie stałej zaniku λ : 12 000 s⁻¹ < λ < 48 000 s⁻¹. Zadane warunki dotyczące geometrii, stosowanego materiału, energii neutronów były identyczne jak w przypadku rzeczywistych eksperymentów. Procedury związane z przygotowaniem symulacji MCNP i wykonaniem obliczeń opisane zostały w Rozdziale II.2.1. Otrzymane wyniki zamieszczone zostały w Tabeli A i Tabeli B, zamieszczonych jako dodatek do pracy oraz przedstawione na wykresie **Rys. II.6** [Wiącek, Krynicka, 2005, 2006], [Wiącek, 2006].



Rys. II.6 Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla układu dwustrefowego cylindrycznego, gdzie moderator z pleksiglasu otacza materiał utworzony z wodnych roztworów kwasu H₃BO₃ lub KCl o określonych stężeniach *k* [Wiącek, Krynicka 2005, 2006], [Wiącek, 2006].

Analizując otrzymane wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i porównując je z λ_{exp} stwierdzamy, że odpowiednie wartości stałych zaniku wykazują istotne rozbieżności. Widoczne to jest poprzez duże wartości wyliczonych odchyłek, które zostały zamieszczone w Tabeli II.5.

	$KCl + H_2O$	$H_3BO_3 + H_2O$	Całość
٤ [%] ٤	1.30 ÷ 2.36	0.85 ÷ 4.92	0.85 ÷ 4.92
$\overline{\mathcal{E}}$ [%]	1.84	2.49	2.24
$L \times 10^{-3}$	2.03	2.27	1.58

Tabela II.5 Wartości odchyłek: ε , $\overline{\varepsilon}$ i *L* dla cylindrycznego układu dwustrefowego, w którym zewnętrzny moderator z pleksiglasu otaczał warstwę wewnętrzną utworzoną z wodnych roztworów kwasów KCl lub H₃BO₃.

W oparciu o otrzymane wartości stwierdzić można, że wraz ze wzrostem wartości stałej zaniku λ_{MCNP} wzrasta wartość odchyłki względnej ε , co widoczne jest na **Rys. II.7**.



Rys. II.7 Zmiany wartości odchyłki względnej ε w zależności od wartości stałej zaniku λ_{exp} , w dwustrefowej geometrii cylindrycznej, gdzie moderator z pleksiglasu otacza materiał typu wodorowego(wodne roztwory kwasów H₃BO₃ lub KCl).

Przedstawiona zależność wykazuje charakter rosnący, co zaznaczone jest linią przerywaną. Również w tym przypadku, w całym analizowanym zakresie stałej zaniku λ odchyłka względna ϵ przyjmuje wartości dodatnie. Otrzymane wyniki potwierdzają

wcześniejsze spostrzeżenia (Rozdział II.2.2.2, Rozdział II.2.2.3 i Rozdział II.2.3.1), że odpowiednie wartości λ_{MCNP} są większe od odpowiednich λ_{exp} .

Na podstawie porównania wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla wszystkich rozpatrywanych przypadków, zarówno dla układów jednorodnych (Rozdział II.2.2) jak i dwustrefowych (Rozdział II.2.3), możemy stwierdzić, że pomiędzy obiema wartościami istnieją istotne rozbieżności. Wyliczone odchyłki względne ε , dla rozpatrywanych przypadków, w których dla pleksiglasu zastosowana została oryginalna biblioteka na rozpraszanie neutronów termicznych na jądrach atomów wodoru w polietylenie w temperaturze pokojowej (ENDF VI, *poly.01t*), osiągają duże wartości, dochodzące nawet do 6%. W przypadku symulacji MCNP analizujących czasowy zanik strumienia neutronów termicznych w małych układach nie daje to wystarczająco dobrych rezultatów. Wyniki uzyskane w ten sposób są niewystarczająco dokładne i dają nam jedynie informacje jakościowe o badanych zjawiskach. Dla wszystkich przypadków wyliczone odchyłki zostały zebrane w **Tabeli II.6**.

	ε [%]	$\overline{\mathcal{E}}\left[\% ight]$	$L \times 10^{-3}$							
Układy jednorodne										
Sześcian z polietylenu	1.98 ÷ 4.37	3.19	19.26							
Walec z pleksiglasu	0.56 ÷ 4.77	2.40	5.38							
	Układy dwustrefowe									
Sferyczny										
Warstwa wewnętrzna: H ₃ BO ₃	2.89 ÷ 5.88	4.33	14.13							
Moderator: pleksiglas										
Cylindryczny										
Warstwa wewnętrzna: H ₃ BO ₃	$0.85 \div 4.92$	2.49	2.27							
Moderator: pleksiglas										
Cylindryczny										
Warstwa wewnętrzna: KCl	$1.30 \div 2.36$	1.84	2.03							
Moderator: pleksiglas										

Tabela II.6 Zestawienie wartości odchyłek: ε , $\overline{\varepsilon}$ i *L*. Symulacje MCNP z użyciem biblioteki *poly.01t*.

Takie zlecane podejście, polegające na zastosowaniu dla pleksiglasu biblioteki dedykowanej dla polietylenu, *poly.01t*, w symulacjach MCNP analizujących czasowy zanik strumienia neutronów termicznych w małych układach, nie daje wystarczająco dokładnych

wyników. Sytuacja ta świadczy o tym, że biblioteka ta daje jedynie zgrubne przybliżenie zjawisk transportu neutronów termicznych w małych objętościach. Na dokładność wyników symulacji MCNP ma także wpływ stopień znajomości udziałów wagowych poszczególnych składników tworzących stosowany materiał. I tak, jeśli materiał tworzący warstwę wewnętrzną zawierał nawet niewielkie ilości naturalnego boru (Rozdział II.2.3), sytuacja komplikowała się. Bor naturalny występuje w postaci mieszaniny ¹⁰B (około 20%) i ¹¹B (około 80%). Pierwszy z nich charakteryzuje się dużym przekrojem czynnym na absorpcje neutronów ($\sigma_a = 3837$ b) [Mughabghab i in., 1981] i nawet niewielkie wahania w ich wzajemnym stosunku mogą mieć duży wpływ na stałą zaniku λ . Ze względu na przybliżone dane dotyczące abundancji boru w eksperymentach z wodnymi roztworami kwasu H₃BO₃, wyniki symulacji MCNP dla tych przypadków obarczone są istotnymi błędami do 6%, podczas gdy dane eksperymentalne mają błędy nie przekraczające 0.5%.

II.3 Modyfikacja biblioteki zawierającej przekroje czynne na rozpraszanie neutronów termicznych na jądrach atomów wodoru związanych w polietylenie

Jak zostało zauważone z przeprowadzonych obliczeń testowych, pomiędzy wartościami stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} istnieją rozbieżności.

Do tej pory, w II części pracy zostało pokazane, że dostępna w programie MCNP biblioteka zawierająca przekroje czynne na rozpraszanie neutronów termicznych na atomach wodoru w polietylenie (ENDF VI, *poly.01t*) nie jest wystarczająco dokładna do symulacji MCNP czasowego zaniku strumienia neutronów termicznych w małych i złożonych obiektach. Ponadto okazało się, że zalecane przez twórców programu MCNP, zastosowanie powyższej biblioteki dla pleksiglasu nie daje dobrych rezultatów w tego typu obliczeniach (Rozdział II.2). W tej sytuacji najlepszym rozwiązaniem byłoby stworzenie od podstaw nowej biblioteki dedykowanej specjalnie dla rozpraszania neutronów termicznych na jądrach atomów wodoru w pleksiglasie w temperaturze pokojowej. Ze względu na to, że w warunkach amatorskich jest to niemożliwe do wykonania, pojawił się inny pomysł związany z modyfikacją istniejącej biblioteki *poly.01t* w celu lepszego dostosowania jej do potrzeb obliczeniowych.

II.3.1 Sposób modyfikacji biblioteki poly.01t

Aby poprawić efektywność i użyteczność obliczeń pojawił się pomysł, aby zmodyfikować istniejącą bibliotekę zawierającą przekroje czynne na rozpraszanie neutronów termicznych na atomach wodoru w polietylenie i w ten sposób optymalnie dostosować jej parametry do potrzeb obliczeniowych dla pleksiglasu. W tym procesie skorzystano z danych w formacie ENDF i przy pomocy programu NJOY zmieniono ich wartości. Idea tej modyfikacji polegała na tym, żeby uzyskać jak najbardziej zbliżone wartości zmodyfikowanych przekrojów czynnych na rozpraszanie neutronów termicznych na jądrach atomów wodoru związanych w cząsteczce polietylenu do wartości rzeczywistych tych przekrojów czynnych w cząsteczce pleksiglasu [Krynicka i in., 2006].

Pierwsza modyfikacja polegała na prostej zmianie wartości przekrojów czynnych na rozpraszanie neutronów termicznych na atomach wodoru związanych w polietylenie. Wykonano to przez wprowadzenie stałego współczynnika *R*, przez który przemnożone zostały różniczkowe przekroje czynne na rozpraszanie neuronów na atomach wodoru

80

związanego w polietylenie $\sigma_{s(PE)}^{H}(E' \rightarrow E)$ dla całego zakresu energii neutronów termicznych. Ta modyfikacja wprowadziła proporcjonalną zmianę w przekrojach czynnych na rozpraszanie neutronów na atomach wodoru w polietylenie, w wyniku której otrzymane przekroje czynne miały korespondować z przekrojami czynnymi na rozpraszanie neutronów na atomach wodoru w pleksiglasie. Podstawą tego rozumowania było założenie, że stosunek całkowitego, rzeczywistego przekroju czynnego na rozpraszanie neutronów termicznych na wodorze w pleksiglasie $\sigma_{s(PLX)}(E_T)$ do całkowitego przekroju czynnego na rozpraszanie neutronów termicznych na wodorze związanym w polietylenie, dostępnego w programie MCNP $\sigma_{s(PE)}^{MCNP}(E_T)$, dla charakterystycznej wartości energii $E_T = 0.0253$ eV (jest to najbardziej prawdopodobna energia neutronów termicznych z energetycznego rozkładu Maxwella w temperaturze pokojowej) daje pewną stałą wartość *Q*:

$$\frac{\sigma_{s(PLX)}(E_T)}{\sigma_{s(PE)}^{MCNP}(E_T)} = Q$$
r. II.3.1

,

Zakładając powyższą równość można przypuszczać, że przemnożenie przez tą stałą wartość Q przekrojów czynnych na rozpraszanie neutronów termicznych na wodorze w polietylenie, dla całego zakresu energii, pozwoli na otrzymanie przekrojów czynnych na rozpraszanie neutronów termicznych na wodorze w pleksiglasie, w tym rozważanym zakresie energii:

$$\sigma_{s(PLX)}(E \to E') = Q \cdot \sigma_{s(PE)}^{MCNP}(E \to E')$$
r. II.3.2

Gdyby powyższe rozumowanie okazało się słuszne, to pozwoliłoby to na utworzenie zadawalającej biblioteki przekrojów czynnych dla pleksiglasu. Metoda ta i zmodyfikowane biblioteki rozproszeniowe uzyskane w ten sposób okazały się w dalszym ciągu niewystarczające do obliczeń numerycznych symulujących czasowe przebiegi strumienia neutronów termicznych w badanych układach. Dlatego taka najprostsza metoda modyfikacji liniowej została odrzucona.

W związku z powyższym pojawiła się koncepcja, że wartości przekrojów czynnych na rozpraszanie neutronów termicznych na jądrach atomów wodoru związanych w cząsteczce polietylenu trzeba zmienić w sposób nieliniowy. W module LEAPR programu NJOY jednym z parametrów jest masa pierwiastka wyrażona w jednostkach masy neutronu. W naszym przypadku pod uwagę bierzemy atom wodoru, którego masa powinna być trochę mniejsza od jedności. Zmiana tej masy na tzw. efektywną masę wodoru (m_H), spowodowałaby zmianę różniczkowych przekrojów czynnych na rozpraszanie neutronów termicznych na jądrach atomów wodoru. Podejście to jest związane z teoretycznym modelem nieelastycznego rozpraszania neutronów, w którym wewnętrzne ruchy atomów w cząsteczce są reprezentowane przez serie oscylacji mających rzeczywistą średnią częstotliwość i sztuczne masy wibrującego atomu [Krynicka i in., 2006]. W tego typu modyfikacji należało dobrać dla wodoru, biorącego udział w rozpraszaniu neutronów, jedną efektywna masę, dla której wyniki symulacji Monte Carlo dawały zgodność z eksperymentem. W praktyce masa wodoru była tak długo zmieniana, dopóki dla najbardziej prawdopodobnej energii neutronów termicznych o rozkładzie energetycznym Maxwella ($E_T = 0.0253$ eV), nie uzyskaliśmy zgodności zmodyfikowanego całkowitego nieelastycznego przekroju czynnego na rozpraszanie neutronów termicznych na jądrach atomów wodoru związanych w polietylenie z oczekiwaną jego wartością w pleksiglasie. W celu określenia rodzaju modyfikacji wprowadzony został parametr K_X (**r. II.3.3**) nazwany współczynnikiem modyfikacji, który jest formalnym wskaźnikiem modyfikacji i mówi, w jakim stopniu biblioteka została zmieniona.

$$K_{X} = \frac{\sigma_{\text{Hinel}(PE)}^{mod}(E_{T})}{\sigma_{\text{Hinel}(PE)}(E_{T})}$$
r. II.3.3

Współczynnik modyfikacji K_X informuje nas o tym, w jakim stopniu została zwiększona wartość całkowitego, nieelastycznego przekroju czynnego na rozpraszanie neutronów termicznych na jądrach atomów wodoru związanych w polietylenie dla energii $E_T = 0.0253$ eV. Przykładowe wartości współczynnika modyfikacji K_X oraz odpowiadające mu wartości efektywnej masy wodoru zostały zamieszczone w Tabeli II.7

Tabela II.7 Wartości współczynnika modyfikacji K_X oraz odpowiadające mu wartości efektywnej masy wodoru dla zmodyfikowanej biblioteki *poly.01t*.

Współczynnik modyfikacji K _X	Efektywna masa wodoru m_H
1.05	0.9513
1.10	0.9075
1.15	0.8675
1.20	0.8306
1.25	0.7964
1.30	0.7647
1.35	0.7352
1.40	0.7076
1.45	0.6818
1.50	0.6576

Wartość współczynnika modyfikacji $K_{\rm X} = 1.20$ odpowiada efektywnej masie wodoru $m_{\rm H} = 0.8306$ i oznacza, że dla energii $E_T = 0.0253$ eV, zmieniona wartość całkowitego nieelastycznego przekroju czynnego $\sigma_{\rm Hinel(PE)}^{mod}(E_T)$ jest 1.2 razy większa od jego pierwotnej wartości $\sigma_{\rm Hinel(PE)}(E_T)$.

W ten sposób uzyskano serię zmodyfikowanych bibliotek na rozpraszanie neutronów termicznych na atomach wodoru, które miedzy sobą różniły się współczynnikiem modyfikacji. Przykładowe energetyczne zależności stosunku wartości zmodyfikowanych do niezmodyfikowanych całkowitych przekrojów czynnych na rozpraszanie neutronów termicznych na jądrach atomów wodoru związanych w polietylenie pokazane zostały na rysunkach: **Rys. II.8**, **Rys. II.9** i **Rys. II.10**.



Rys. II.8 Zależność zmiany stosunku $\sigma_{\text{Hinel}(PE)}^{mod} / \sigma_{\text{Hinel}(PE)}$ od energii dla biblioteki *poly.01t* zmienionej ze współczynnikiem modyfikacji $K_{\text{X}} = 1.20$.



Rys. II.9 Zależność zmiany stosunku $\sigma_{\text{Hel}(PE)}^{mod} / \sigma_{\text{Hel}(PE)}$ od energii dla biblioteki *poly.01t* zmienionej ze współczynnikiem modyfikacji $K_{\text{X}} = 1.20$.



Rys. II.10 Zależność zmiany stosunku $\sigma_{Htot(PE)}^{mod} / \sigma_{Htot(PE)}$ od energii dla biblioteki *poly.01t* zmienionej ze współczynnikiem modyfikacji $K_x = 1.20$.

W praktyce cały proces doboru optymalnej biblioteki polegał na wykonaniu, z wykorzystaniem otrzymanych bibliotek, serii symulacji komputerowych impulsowego eksperymentu neutronowego i porównaniu, uzyskanych w ten sposób wyników, z wynikami eksperymentalnymi. Obliczenia wykonane zostały w szerokim zakresie stałej zaniku λ . Cały cykl symulacji komputerowej powtarzany był tak długo, dopóki nie została osiągnięta zadawalająca zgodność pomiędzy symulacją a eksperymentem.

II.3.2 Dobór optymalnie zmodyfikowanej biblioteki dla pleksiglasu

II.3.2.1 Walec jednorodny z pleksiglasu

W celu doboru odpowiednio zmodyfikowanej biblioteki *poly.01t* dla pleksiglasu wybrałam wyniki rzeczywistych impulsowych eksperymentów neutronowych wykonanych w geometrii cylindrycznej, analizowanych w Rozdziale II.2.2.3 [Drozdowicz, Woźnicka, 1986]. Jednorodne walce o różnych rozmiarach zbudowane były z pleksiglasu. Wszystkie czynności dotyczące przygotowania symulacji MCNP oraz wykonania obliczeń zostały już opisane w Rozdziale II.2.1 i Rozdziale II.2.2.3 tej pracy. Procedury obliczeniowe wykonałam używając dla pleksiglasu biblioteki *poly.01t* zmienianej z różnymi współczynnikami modyfikacji K_x . Dla każdego przypadku, wyliczoną stałą zaniku λ_{MCNP} porównałam z λ_{exp} . Otrzymane wyniki zostały przedstawione w **Tabeli II.8**. Dla każdego z rozważanych przypadków wyliczyłam odchyłki względne ε , $\overline{\varepsilon}$ i *L*, które zamieszczone są w **Tabeli II.9**.

Porównując otrzymane wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} można stwierdzić, że w zależności od stopnia modyfikacji, wyniki symulacji są w lepszej lub gorszej zgodności z odpowiednimi wartościami eksperymentalnymi. Pokazuje to przedstawione w **Tabeli II.9** zestawienie oszacowanych odchyłek, które przyjęłam jako podstawę doboru optymalnie zmodyfikowanej biblioteki.

Tabela II.8 Wartości stałych zaniku λ_{MCVP} i λ_{exp} dla jednorodnego walca z pleksiglasu. Symulacje MCNP z użyciem dla pleksiglasu oryginalnej oraz zmienionej biblioteki *poły.01t*, z różnymi współczynnikami modyfikacji K_X .

	1.40	3	[%]	0.62	-0.92	0.34	0.60	0.05	-2.18	-2.30	-1.75	-2.76	-2.75	-2.34
×	$K_{\rm x} =$	λ_{MCNP}	$\sigma(\lambda_{MCNP})$ $[s^{-1}]$	37 321 63 63					22 874 12			18 328 14		
modyfikacji <i>K</i>	.25	ы	[%]	1.69	0.13	1.41	1.67	1.12	-0.80	-0.93	-0.37	-1.43	-1.42	-1.00
ółczynnikiem	$K_{\rm x} =$	λ _{MCNP}	$\sigma(\lambda_{MCNP})$ $[s^{-1}]$	37 719 70					23 195 38			18 579 30		
sniona ze wspo	1.20	3	[%]	2.09	0.53	1.81	2.07	1.51	-0.38	-0.51	0.05	-1.04	-1.03	-0.61
iblioteka zmie	$K_{\rm x} =$	λ_{MCNP}	$\sigma(\lambda_{MCNP})$ $[s^{-1}]$	37 868 32					23 293 33			18 652 16		
B	1.15	ω	[%]	2.52	0.95	2.24	2.50	1.94	0.16	0.03	0.59	-0.54	-0.53	-0.11
	$K_{\rm x} =$	λ_{MCNP}	$\sigma(\lambda_{MCNP})$ $[s^{-1}]$	38 027 56					23 420 37			18 747 22		
oteka	110.	з	[%]	4.77	3.17	4.48	4.75	4.18	2.42	2.29	2.87	1.78	1.79	2.22
Biblio	hod	λ_{MCNP}	$\sigma(\lambda_{MCNP})$ $\left[\mathrm{s}^{-1} ight]$	38 861 45					23 950 27			19 183 25		
λ_{exp}	$\sigma(\Lambda_{exp})$		[s ⁻¹]	37 092 240	37 668 189	37 194 329	37 099 276	37 303 221	23 383 53	23 413 61	23 282 105	18 848 44	18 846 56	18 767 39
Н			[cm]	5.0	<u>.</u>	<u>.</u>	·	<u>.</u>	7.0	<u>.</u>		8.2	<u>.</u>	

86

		:1.4	з	[%]	-2.75	-2.59	-2.31	-2.11	-2.11	-1.59	-2.04	-2.57	-1.60	-1.65	-1.83	-1.13	-1.41	-1.30
	X	$K_{\rm x} =$	λ_{MCNP}	$\sigma(\lambda_{MCNP})$ $[s^{-1}]$	14 828	1		11 714 22	<u>.</u>	11 252	14	7878 27						
	modyfikacji K	$K_{\rm x} = 1.25$	ω	[%]	-1.50	-1.35	-1.06	-0.89	-0.89	-0.41	-0.86	-1.70	-0.69	-0.74	-0.92	-0.21	-0.50	-0.39
	otzynnikiem :		λ_{MCNP}	$\sigma(\lambda_{MCNP})$ $[s^{-1}]$	15 018	10	·	11 860 23		11 397 18		7 951 22						
	sniona ze wspo	1.20	3	[%]	-1.00	-0.84	-0.55	-0.53	-0.53	-0.07	-0.38	-1.50	-0.51	-0.56	-0.75	-0.04	-0.33	-0.21
	iblioteka zmie	$K_{\rm x} =$	λ_{MCNP}	$\sigma(\lambda_{MCNP})$ $[s^{-1}]$	15 095	10		11 904 19		11 442 24		7 965 18						
	В	1.15	з	[%]	-0.44	-0.28	0.01	-0.11	-0.11	0.50	0.04	-1.04	-0.05	-0.10	-0.29	0.43	0.14	0.25
		$K_{\rm x} =$	λ_{MCNP}	$\sigma(\lambda_{MCNP})$ [s ⁻¹]	15 180	05		11 954 16		11 491 23		8 002 26						
	oteka	110.	ω	[%]	1.71	1.87	2.17	2.01	2.01	2.52	2.05	0.56	1.56	1.51	1.32	2.05	1.75	1.87
~	Biblic	hou	λ_{MCNP}	$\sigma(\lambda_{MCNP})$ $[s^{-1}]$	15 508	10	·	12 207 16		11 722 16		8 131 23						
v Tabeli II.8	λ_{exp}	$\sigma(\Lambda_{exp})$		$[s^{-1}]$	15 247	55 15 223 45	45 15 179 47	11 967 22	11 967 29	11 434 34	11 486 30	8 086 21	8 006 28	8 010 25	8 025 32	7 968 32	7 991 21	7 982 45
Ciag dalszy	Н			[cm]	9.6			11.6		12.0		17.0						

87

E

	Biblioteka	Biblioteka zmieniona z współczynnikiem modyfikacji K_X :										
	poly.01t	$K_{\rm X} = 1.15$	$K_{\rm X} = 1.20$	$K_{\rm X} = 1.25$	$K_{\rm X} = 1.4$							
ε [%]	0.56 ÷ 4.77	-1.04 ÷ 2.52	-1.50 ÷ 2.09	-1.70 ÷ 1.69	$-2.76 \div 0.62$							
$ar{arepsilon}$ [%]	2.40	0.37	-0.11	-0.46	-1.60							
$L \times 10^{-3}$	6.95	1.05	0.98	1.15	3.60							

Tabela II.9 Wartości odchyłek: $\varepsilon \ \overline{\varepsilon}$ i *L* dla jednorodnego walca z pleksiglasu przy zastosowaniu oryginalnej oraz zmienionej, z różnymi współczynnikami modyfikacji K_X , biblioteki *poly.01t*.

Analizując uzyskane wartości oszacowanych odchyłek stwierdzić można, że najlepszą zgodność z eksperymentem uzyskuje się w przypadku symulacji MCNP z zastosowaniem dla pleksiglasu biblioteki zmodyfikowanej $K_X = 1.20$, co ma odzwierciedlenie w najniższych wartościach wyliczonych odchyłek dla tego przypadku ($\varepsilon = (-1.50 \div 2.09)\%$, $\overline{\varepsilon} = -0.11\%$ i $L = 0.98 \times 10^{-3}$). Porównanie stałych zaniku λ_{MCNP} uzyskanych z symulacji z użyciem zmodyfikowanej ($K_X = 1.20$) biblioteki *poly.01t* z wartościami λ_{exp} zostało przedstawione na **Rys II.11** [Wiącek, 2006].



Rys. II.11 Wartości stałych zaniku λ_{exp} i λ_{MCNP} dla jednorodnego walca z pleksiglasu. Symulacje MCNP z użyciem dla pleksiglasu oryginalnej i zmodyfikowanej ($K_X = 1.20$) biblioteki *poly.01t* [Wiącek, 2006].

Dla lepszego zobrazowania sytuacji na wykresie zamieszczone zostały także punkty $(\lambda_{exp}, \lambda_{MCNP})$ stanowiące porównanie wartości stałych zaniku λ_{MCNP} otrzymanych w oparciu
o symulacje MCNP z użyciem dla pleksiglasu oryginalnej biblioteki, *poly.01t*, z wartościami pochodzącymi z eksperymentu λ_{exp} . Z **Rys. II.11** widać, że wartości λ_{MCNP} uzyskane w wyniku symulacji MCNP z użyciem biblioteki zmodyfikowanej $K_X = 1.20$, są w lepszej zgodności z odpowiednimi, λ_{exp} , niż w przypadku użycia biblioteki *poly.01t* (**Tabela II.9**).

Na Rys. II.12 pokazana została zależność odchyłki względnej ε od stałej zaniku λ_{exp} .



Rys. II.12 Zmiany wartości ε w zależności od λ_{exp} , dla walców jednorodnych z pleksiglasu.

Z rysunku **Rys. II.12** widać, że pomimo doboru optymalnie zmodyfikowanej biblioteki nie został wyeliminowany efekt wzrostu wartości odchyłki względnej ε przy rosnącej wartości stałej zaniku λ_{exp} , co zostało zaznaczone linią przerywaną.

II.3.2.2 Układ dwustrefowy w geometrii cylindrycznej

W związku z tym, że zasadnicze symulacje Monte Carlo miały być wykonane w układzie dwustrefowym cylindrycznym, gdzie zewnętrzny moderator z pleksiglasu otacza warstwę wewnętrzną typu niewodorowego, sensowne wydało się przeprowadzenie obliczeń testowych weryfikujących dobór optymalnej biblioteki dla pleksiglasu w takim układzie. Symulacje MCNP wykonałam w oparciu o dane z rzeczywistych, impulsowych eksperymentów. Warstwa wewnętrzna w kształcie walca o określonych rozmiarach ($H_1 \cong 2R_1 = 6 \text{ cm}$) utworzona była z tlenku chromu Cr₂O₃ lub z tlenku miedzi CuO i otaczana zewnętrznym moderatorem z pleksiglasu, o zmiennym rozmiarze ($H_2 \cong 2R_2$). Oba materiały typu niewodorowego były w postaci proszków, zielonego i czarnego (**Rys. II.13**). Materiały użyte w eksperymentach musiały spełniać kilka podstawowych warunków. Istotne było to, aby były to materiały typu niewodorowego, oraz charakteryzujące się wysoką klasą czystości ze względu na wyeliminowanie potencjalnych "zanieczyszczeń", mogących wpłynąć na zmianę wartości rzeczywistej ich absorpcji Σ_a . Stanowiły one tak zwane materiały referencyjne o znanych wartościach absorpcji. Wartości parametrów neutronowych materiałów wykorzystanych w powyższych eksperymentach zamieszczone zostały w **Tabeli II.10**.

Materiał	ρ	Makroskopowy przekrój czynny		
		Absorpcja Σ_a	Rozpraszanie Σ_s	
	[g·cm ⁻³]	[cm ⁻¹]	[cm ⁻¹]	
CuO	2.3905*	0.0684	0.2089	
Cr ₂ O ₃	2.0905*	0.0509	0.1494	
pleksiglas	1.1764	0.0190	2.9849	

Tabela II.10 Parametry neutronowe materiałów stosowanych w impulsowym eksperymencie neutronowym.

Indeks * oznacza, że jest to gęstość nasypowa, jaką miał dany materiał tworzący warstwę wewnętrzną w rzeczywistych eksperymentach.



Rys. II.13 Schemat układów dwustrefowych w geometrii cylindrycznej, gdzie zewnętrzny moderator z pleksiglasu otaczał warstwę wewnętrzną z materiału typu niewodorowego.

Symulacje MCNP wykonałam dla wszystkich przeprowadzonych eksperymentów. Zadane warunki dotyczące geometrii, stosowanego materiału, energii neutronów były identyczne jak w przypadku rzeczywistego, impulsowego eksperymentu neutronowego. Wszystkie czynności dotyczące przygotowania oraz wykonania obliczeń wykonałam w identyczny sposób jak to zostało opisane w Rozdziale II.2.1 tej pracy. W symulacjach MCNP, dla pleksiglasu użyłam zmienionej, z różnymi współczynnikami modyfikacji, biblioteki *poly.01t*. Wyliczone stałe zaniku λ_{MCNP} porównałam z λ_{exp} , co dla pierwszego materiału (Cr₂O₃) zostało pokazane w **Tabeli II.11** i na **Rys. II.14**, a dla drugiego materiału (CuO) w **Tabeli II.12** i na **Rys. II.15**. W celu porównania odpowiednich stałych zaniku, λ_{MCNP} i λ_{exp} , dla każdego przypadku wyliczyłam odchyłki względne: ε , $\overline{\varepsilon}$ i *L*.

Analizując wartości wyliczonych odchyłek można stwierdzić, że najlepszą zgodność z eksperymentem uzyskuje się w sytuacji, kiedy w symulacjach MCNP dla pleksiglasu użyta zostanie:

– dla pierwszego przypadku (warstwa wewnętrzna utworzona z Cr₂O₃), biblioteka zmieniona ze współczynnikiem modyfikacji $K_{\rm X} = 1.15$. Wartości wyliczonych odchyłek względnych wynoszą wówczas: $\varepsilon = (-0.45 \div 0.20)$ %, $\overline{\varepsilon} = -0.22$ % i $L = 1.22 \times 10^{-3}$.

– dla drugiego przypadku (warstwa wewnętrzna utworzona z CuO), biblioteka zmieniona ze współczynnikiem modyfikacji $K_{\rm X} = 1.20$. Wartości wyliczonych odchyłek względnych wynoszą wówczas: $\varepsilon = (-0.18 \div 0.34)$ %, $\overline{\varepsilon} = 0.11$ % i $L = 0.67 \times 10^{-3}$.

Tabela II.11 Stałe zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla dwustrefowej geometrii cylindrycznej, gdzie zewnętrzny moderator z pleksiglasu otacza warstwę wewnętrzna utworzoną z Cr₂O₃. Svmulacie MCNP wykonane z użyciem dla pleksiglasu biblioteki zmodyfikowanej z różnymi współczynnikami K_y.

$ \begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$					1			-				1	1	
$ \begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$		1.40	ω	[%]	-1.86		-2.11	-1.98		-1.53	-1.78	-1.92	-1.86	7.64
$ \begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	Kx XX	$K_{\rm X} =$	λ_{MCNP}	$\sigma(\lambda_{MCNP}) \ [\mathrm{s}^{-1}]$	11 498	21		11 074	14		10 699 17			
$ \begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	modyfikacji I	1.25	ω	[%]	-0.83		-1.08	-0.98		-0.52	-0.83	-0.96	-0.87	3.62
$ \begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	ółczynnikiem	$K_{\rm X} =$	λ_{MCNP}	$\sigma(\lambda_{MCNP})$ $[s^{-1}]$	11 619	29		11 187	19		10803 16			
$ \begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	miona ze wspo	1.20	ω	[%]	-0.60		-0.85	-0.54		-0.08	-0.24	-0.38	-0.45	2.09
$ \begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	blioteka zmie	$K_{\rm X} =$	λ_{MCNP}	$\sigma(\lambda_{MCNP})$ $[s^{-1}]$		11 646	14	11 237	26		$10\ 867$			
$ \begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	Bi	1.15	ω	[%]	-0.20		-0.45	-0.27		0.20	-0.23	-0.37	-0.22	1.22
$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$		$K_{\rm X} =$	λ_{MCNP}	$\sigma(\lambda_{MCNP})$ $[s^{-1}]$	11 693	21		11 268	20		$10\ 868$ 14			
$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	a <i>poly.01t</i>		ω	[%]	1.49		1.23	1.49		1.96	1.57	1.43	1.53	6.30
$\begin{array}{c c c} H_2 & \lambda_{exp} & \\ \hline \sigma(\lambda_{exp}) & \\ \hline \sigma(\lambda_{exp}) & \\ \hline & \sigma(\lambda_{exp}) & \\ \hline & & \\ \hline \\ \hline$	Bibliotek		λ_{MCNP}	$\sigma(\lambda_{MCNP})$ $\left[\mathrm{s}^{\text{-1}} ight]$	11 891	23		11 466	25		11 064 17			
$\begin{array}{c c} H_2 \\ \hline [cm] \\ 14.0 \\ 14.8 \\ \hline 14.8 \\ \hline \hline \mathcal{E} \end{array}$	λ_{exp}	$\sigma(\lambda_{exp})$		[s ⁻¹]	11 716	32	11 746 36	11 298	24	11 246 38	10 893 28	10 908 25	[%	10^{-3}
	H_2			[cm]	14.0			14.4			14.8		<u>ں</u> ا	$L \times T$

92

Tabela II.12 Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla dwustrefowej geometrii cylindrycznej, gdzie moderator z pleksiglasu otacza materiał typu niewodorowego (CuO). Symulacje MCNP z użyciem dla pleksiglasu biblioteki zmodyfikowanej z różnymi współczynnikami K_X .

	r							1		1	1		
	1.40	3	[%]	-1.44	-1.22	-1.18	-1.15	-1.12	-1.05	-0-99	-1.01	-1.15	4 08
rx X	$K_{\rm X} =$	λ_{MCNP}	$\sigma(\lambda_{MCNP})$ $[s^{-1}]$	16 275 30	5	15 444 17		14 697 22		14 002 17			
modyfikacji <i>k</i>	1.25	3	[%]	-0.48	-0.25	-0.27	-0.24	-0.28	-0.22	-0.11	-0.13	-0.25	0 95
dczynnikiem	$K_{\rm X} =$	X MCNP	$\sigma(\lambda_{MCNP})$ $[s^{-1}]$	16 434 28)	15 587 28	•	14 821 18		14 127 21			
niona ze wspó	1.20	3	[%]	-0.18	0.05	0.10	0.13	0.02	0.09	0.34	0.32	0.11	0.67
blioteka zmie	$K_{\rm X} =$	λ_{MCNP}	$\sigma(\lambda_{MCNP})$ $\left[\mathrm{s}^{-1} ight]$	16484 30)	15 644 22	<u> </u>	14 866 18	<u> </u>	14 190 23	<u> </u>		
Bi	1.15	3	[%]	0.15	0.37	0.45	0.48	0.48	0.55	0.67	0.65	0.48	1 77
	$K_{\rm X} =$	λ_{MCNP}	$\sigma(\lambda_{MCNP})$ $[s^{-1}]$	16 537 25		15 699 24	•	14 935 29		14 237 27	<u> </u>		
ı poly.01t		3	[%]	1.71	1.94	2.04	2.07	1.98	2.05	2.31	2.28	2.05	LC L
Biblioteka		λ_{MCNP}	$\sigma(\lambda_{MCNP})$ $[s^{-1}]$	16 796 22		15 948 19		15 157 16		14 468 27			
λ_{exp}	$\sigma(\lambda_{exp})$		[S ⁻¹]	16 513 36	16 476 42	15 629 37	15 624 40	14 863 41	14 853 26	14 142 29	14 145 25	[0/	0 ⁻³
H_2			[cm]	11.6		12.0	I	12.4	I	12.8	I	<u>6</u>] <u>3</u>	$I_{i} \times 1$

93



Rys. II.14 Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla dwustrefowej geometrii cylindrycznej, gdzie moderator z pleksiglasu otacza materiał typu niewodorowego (Cr₂O₃). Symulacje MCNP z użyciem dla pleksiglasu biblioteki $K_X = 1.15$.



Rys. II.15 Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla dwustrefowej geometrii cylindrycznej, gdzie moderator z pleksiglasu otacza materiał typu niewodorowego (CuO). Symulacje MCNP z użyciem dla pleksiglasu biblioteki $K_X = 1.20$.

Wykonane obliczenia, mające na celu dobór dla pleksiglasu optymalnie zmodyfikowanej biblioteki *poly.01t*, wykonane zostały dla dwóch rodzajów geometrii: jednorodnego walca i dwustrefowej geometrii cylindrycznej. Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} uzyskane w wyniku symulacji MCNP z wykorzystaniem biblioteki zmodyfikowanej z różnymi współczynnikami modyfikacji K_X , porównane zostały z odpowiednimi wartościami λ_{exp} uzyskanymi na drodze eksperymentu. Odchyłki względne wyliczone dla każdego z rozważanych przypadków zostały zebrane w Tabeli. II.13.

Tabela II.13 Wartości odchyłek: ε , $\overline{\varepsilon}$ i *L*. Symulacje MCNP wykonane z użyciem dla pleksiglasu biblioteki zmienionej z różnymi współczynnikami modyfikacji K_X .

	Biblioteka	Biblioteka z	zmieniona ze wspo	ółczynnikiem moć	lyfikacji K _X					
	poly.01t	$K_{\rm X} = 1.15$	$K_{\rm X} = 1.20$	$K_{\rm X} = 1.25$	$K_{\rm X} = 1.40$					
		Walec jednorod	lny z pleksiglasu							
ε [%]	0.56 ÷ 4.77	-1.04 ÷ 2.52	-1.50 ÷ 2.09	-1.70 ÷ 1.69	$-2.76 \div 0.62$					
$ar{\mathcal{E}}$ [%]	2.40	0.37	-0.11	-0.46	-1.60					
$L \times 10^{-3}$	6.95	1.05	0.98	1.15	3.60					
Układ dwustrefowy cylindryczny: zewnętrzny moderator z pleksiglasu										
	otacza warstwę wewnętrzną z Cr ₂ O ₃									
ε [%]	1.23 ÷ 1.96	-0.45 ÷ 0.20	-0.85 ÷ -0.08	-1.08 ÷ -0.52	-2.11 ÷ -1.53					
$ar{\mathcal{E}}$ [%]	1.53	-0.22	-0.45	-0.87	-1.86					
$L \times 10^{-3}$	6.30	1.22	2.09	3.62	7.64					
1	Układ dwustrefov	wy cylindryczny:	zewnętrzny moder	rator z pleksiglasu	l					
		otacza warstwę w	vewnętrzną z CuO							
٤ [%]	1.71 ÷ 2.31	$0.15 \div 0.67$	-0.18 ÷ -0.34	-0.48 ÷ -0.11	-1.44 ÷ -0.99					
$ar{\mathcal{E}}$ [%]	2.05	0.48	0.11	-0.25	-1.15					
$L \times 10^{-3}$	7.27	1.77	0.67	0.95	4.08					

Wykonane obliczenia pozwoliły na dokonanie wyboru optymalnie zmodyfikowanej biblioteki dla rozpraszania neutronów termicznych na jądrach atomów wodoru związanych w pleksiglasie. Analiza została przeprowadzona w oparciu o porównanie wyliczonych wartości λ_{MCNP} z λ_{exp} oraz zachowanie wszystkich wyliczonych odchyłek: ε , $\overline{\varepsilon}$ i *L*. Zakres zmienności odchyłki względnej ε dostarcza informacji o tym, czy jest ona znakozmienna, czy odpowiednie wartości λ_{MCNP} są większe czy mniejsze od odpowiednich wartości λ_{exp} . Wartość $\overline{\varepsilon}$ dostarcza informacji o wartości średniej wszystkich odchyłek względnych z uwzględnieniem ich znaków, natomiast minimalizacja *L* odpowiada metodzie najmniejszych kwadratów, która sama w sobie gubi wskazówkę o występowaniu, bądź braku znakozmienności odchyłek. Dopiero wprowadzenie tych trzech odchyłek: ε , $\overline{\varepsilon}$ i *L* pozwala na przeprowadzenie wiarygodnej analizy oraz ocenę uzyskanych rozbieżności.

Zakres λ_{exp}	Współczynnik modyfikacji biblioteki poly.01t						
$[s^{-1}]$	K_{X}						
Walec jednorodny z pleksiglasu							
7 900 ÷ 37 700 1.20							
Układ dwustrefowy cylindryczny: zewnętrzny moderator z pleksiglasu							
otacza warstwę	wewnętrzną z Cr ₂ O ₃						
10 890 ÷ 11 750	1.15						
Układ dwustrefowy cylindryczny	zewnętrzny moderator z pleksiglasu						
otacza warstwę wewnętrzną z CuO							
14 100 ÷ 16 500 1.20							

Tabela II.14 Zakresy stałej zaniku λ oraz optymalnie dopasowane biblioteki K_X .

W Tabeli II.14 zebrane zostały zakresy stałej zaniku λ_{exp} , dla których dobierałam optymalnie zmodyfikowaną bibliotekę. Dla dwóch przypadków (walec jednorodny z pleksiglasu, oraz układ dwustrefowy cylindryczny z warstwą wewnętrzną z CuO) przeprowadzona analiza wskazuje, że optymalnie zmodyfikowana dla pleksiglasu biblioteka ma współczynnik $K_X = 1.20$. Natomiast trzeci przykład (układ dwustrefowy cylindryczny z warstwą wewnętrzną z Cr₂O₃) wskazuje na bibliotekę zmodyfikowaną ze współczynnikiem $K_X = 1.15$. Zakres stałej zaniku λ_{exp} w pierwszym przypadku (walec jednorodny z pleksiglasu) jest stosunkowo szeroki, natomiast w dwóch pozostałych (układy dwustrefowe z warstwą wewnętrzną utworzoną z Cuo i Cr₂O₃) wąski. Do ogólnych obliczeń potrzebna jest biblioteka, z użyciem której symulacje MCNP dają dobrą zgodność z eksperymentem w szerokim zakresie stałej zaniku λ . Biorąc pod uwagę powyższe argumenty i analizując wyliczone odchyłki, jako optymalną bibliotekę dla pleksiglasu przyjmuję bibliotekę zmodyfikowaną ze współczynnikiem $K_X = 1.20$ (**Rys. II.16**).



Rys. II.16 Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla trzech rozważanych przypadków. Symulacje MCNP z użyciem dla pleksiglasu biblioteki zmodyfikowanej ($K_X = 1.20$).

Analizując wszystkie trzy rozważane przypadki można stwierdzić, że symulacje MCNP z użyciem biblioteki zmodyfikowanej ze współczynnikiem $K_x = 1.20$ pozwalają na uzyskanie wyników będących w dobrej zgodności z wynikami eksperymentalnymi. Obliczenia wykonane przy użyciu oryginalnej biblioteki wykazują tendencje wzrostu rozbieżności pomiędzy symulacją a eksperymentem wraz ze wzrostem stałej zaniku λ_{exp} . Analizując cały dostępny przedział zmienności λ_{exp} można stwierdzić, że pomimo optymalnej modyfikacji oryginalnej biblioteki nie udało się uzyskać idealnej zgodności. Związane jest to z tym, że modyfikacja nie zmienia oryginalnej biblioteki w zasadniczy sposób. Pomimo to wygenerowanie takiej zmodyfikowanej biblioteki stwarza duże możliwości obliczeniowe. Użycie jej w obliczeniach komputerowych metodą Monte Carlo dla pleksiglasu daje dużo lepszą zgodność między symulacją a eksperymentem, niż w przypadku stosowania oryginalnej biblioteki *poly.01t*.

II.3.2.3 Testowe symulacje komputerowe metodą Monte Carlo z wykorzystaniem zmodyfikowanej biblioteki

W celu określenia na ile przeprowadzona modyfikacja jest uniwersalna, wykonałam testowe symulacje MCNP eksperymentów neutronowych, które nie były bezpośrednio związane z procesem modyfikacji biblioteki. Spośród rzeczywistych impulsowych eksperymentów neutronowych wybrałam eksperymenty w geometriach dwustrefowych, w których moderator zewnętrzny utworzony był z pleksiglasu. Były to eksperymenty w geometrii sferycznej i cylindrycznej analizowane w Rozdziale II.2.3 tej pracy. W obu seriach symulacji MCNP dla pleksiglasu użyłam bibliotekę *poly.01t* zmienioną ze współczynnikiem modyfikacji $K_X = 1.20$.

II.3.2.3.1 Geometria dwustrefowa sferyczna

Metodą Monte Carlo, wykonałam serię symulacji MCNP w dwustrefowej geometrii sferycznej gdzie warstwę wewnętrzną tworzył wodny roztwór kwasu H₃BO₃, o określonych stężeniach *k* (Rozdział II.2.3.1). Wszystkie czynności dotyczące przygotowania symulacji MCNP i przeprowadzenia obliczeń wykonałam w identyczny sposób jak to zostało opisane w Rozdziale II.2.1 tej pracy. Obliczone wartości λ_{MCNP} porównałam z λ_{exp} . Wyniki zostały zamieszczone w **Tabeli II.15** i przedstawione na wykresie **Rys. II.1**7.

Można stwierdzić, że w tym przypadku użycie w symulacjach MCNP biblioteki zmienionej, ze współczynnikiem modyfikacji $K_X = 1.20$ dla pleksiglasu, daje duże lepsze wyniki niż w przypadku stosowania biblioteki *poly.01t*.

Rozbieżności pomiędzy wartościami, λ_{MCNP} i λ_{exp} , zmniejszyły się w momencie zastosowania biblioteki zmodyfikowanej $K_{\rm X} = 1.20$. Wniosek taki został wyciągnięty w oparciu o analizę porównawczą wyliczonych odchyłek uwzględniającą wartości odchyłek względnych ε , ich wartość średnią $\overline{\varepsilon}$ oraz odchyłkę *L*. Obliczone wartości poszczególnych odchyłek zamieszczone zostały w Tabeli II.16.

k	R_2	λ_{exp}	Biblioteka				
		$\sigma(\lambda_{exp})$	poly.0	01 <i>t</i>	$K_{\rm X} = 1$.20	
			λ_{MCNP}	3	λ_{MCNP}	3	
			$\sigma(\lambda_{MCNP})$		$\sigma(\lambda_{MCNP})$		
[%]	[cm]	$[s^{-1}]$	$[s^{-1}]$	[%]	$[s^{-1}]$	[%]	
1.750	6.50	33 272	35 229	5.88	34 418	3.44	
		486	24		41		
		33 311		5.76		3.32	
		358					
	7.50	23 357	24 296	4.02	23 940	2.50	
		163	24		23		
		23 456		3.58		2.06	
		63					
0.875	6.50	24 776	24 590	-0.75	24 307	-1.89	
		112	82		71		
		24 771		-0.73		-1.87	
		111					
	6.99	21 286	22 018	3.44	21 758	2.22	
		192	37		62		
		21 291		3.41		2.19	
		107					
	7.50	18 893	19 439	2.89	19 111	1.15	
		84	27		23		
		18 801		3.39		1.65	
		106					
	9.49	11 819	12 469	5.50	12 308	4.14	
		182	6		9		
		11 829		5.41		4.05	
		246					

Tabela II.15 Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla sferycznej geometrii dwustrefowej. Symulacje MCNP z użyciem dla pleksiglasu oryginalnej i zmodyfikowanej ($K_X = 1.20$) biblioteki *poly.01t*.

Tabela II.16 Zestawienie wartości odchyłek: ε , $\overline{\varepsilon}$ i *L* dla dwustrefowej geometrii sferycznej, gdzie moderator z pleksiglasu otacza warstwę wewnętrzną utworzoną z wodnych roztworów kwasu H₃BO₃.

	Biblioteka					
	poly.01t	$K_{\rm X} = 1.20$				
ε [%]	-0.75 ÷ 5.88	-1.89 ÷ 4.14				
$ar{\mathcal{E}}$ [%]	4.33	2.67				
$L \times 10^{-3}$	14.13	8.98				



Rys. II.17 Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} oraz λ_{exp} w dwustrefowej geometrii sferycznej. Symulacje MCNP z użyciem oryginalnej i zmodyfikowanej ($K_X = 1.20$) biblioteki *poly.01t*.

II.3.2.3.2 Geometria dwustrefowa cylindryczna

Druga grupa obliczeń mająca na celu oszacowanie poprawności zmodyfikowanej biblioteki wykonana została w dwustrefowej geometrii cylindrycznej, w której wodne roztwory kwasów H₃BO₃ lub KCl tworzyły warstwę wewnętrzną (Rozdział II.2.3.2). Wszystkie czynności, dotyczące przygotowania symulacji MCNP i przeprowadzenia obliczeń, wykonałam w identyczny sposób jak to zostało opisane w Rozdziale II.2.1 tej pracy. Obliczone wartości λ_{MCNP} porównałam z λ_{exp} . Wyniki zostały zamieszczone w Tabeli A i Tabeli B, stanowiących dodatek do tej pracy i przedstawione na wykresie **Rys. II.18** [Wiącek, 2006].

W oparciu o otrzymane wyniki w dalszym ciągu obserwuje się rozbieżności pomiędzy wartościami, λ_{exp} i λ_{MCNP} , jednak wyliczone wartości odchyłek względnych ε , średniej wartości odchyłek względnych $\overline{\varepsilon}$ oraz odchyłki L zmniejszyły się znacząco, co zostało pokazane w Tabeli II.17.



Rys. II.18 Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} oraz λ_{exp} dla dwustrefowej geometrii cylindrycznej. Symulacje MCNP z użyciem dla pleksiglasu oryginalnej oraz zmodyfikowanej ($K_x = 1.20$) biblioteki *poly.01t* [Wiącek, 2006].

	Bi	blioteka <i>poly.0</i>)1t	Biblioteka $K_{\rm X} = 1.20$			
	3	$\overline{\mathcal{E}}$	$L \times 10^{-3}$	3	$\overline{\mathcal{E}}$	$L \times 10^{-3}$	
	[%]	[%]		[%]	[%]		
$KCl + H_2O$	1.30 ÷ 2.36	1.84	2.03	-0.99 ÷ 0.31	-0.19	0.35	
$H_3BO_3 + H_2O$	1.30 ÷ 2.36	2.49	2.27	-0.54 ÷ 3.35	0.77	0.90	
Sumarycznie	1.30 ÷ 2.36	2.24	1.58	-0.99 ÷ 3.35	0.40	0.56	

Tabela II.17 Zestawienie wartości odchyłek: ε , $\overline{\varepsilon}$ i *L* dla cylindrycznej geometrii dwustrefowej.

Wykonane obliczenia potwierdzają wcześniej wyciągnięty wniosek. Wykonując symulacje MCNP z użyciem dla pleksiglasu biblioteki zmodyfikowanej $K_{\rm X} = 1.20$ otrzymujemy lepszą zgodność z eksperymentem niż w przypadku stosowania biblioteki *poly*.01t. W analizowanym przypadku odchyłki względne występują zarówno ze znakiem dodatnim (jest ich 139), jak i ujemnym (występują w liczbie 77) i mają niskie wartości, co świadczy o poprawności stosowanego przybliżenia. Pomimo optymalnej modyfikacji, w dalszym ciągu obserwuje się wzrost wartości odchyłek względnych ε ze wzrostem stałej zaniku λ_{exp} , co zostało pokazane na **Rys. II.19**. Świadczyć to może o tym, że przeprowadzona modyfikacja nie zmienia w sposób zasadniczy charakteru oryginalnej biblioteki.



Rys. II.19 Zmiany wartości ε w zależności od λ_{exp} , dla dwustrefowego układu cylindrycznego. Symulacje MCNP z użyciem dla pleksiglasu oryginalnej oraz zmodyfikowanej ($K_X = 1.20$) biblioteki *poly.01t*.

Przeprowadzone obliczenia testowe potwierdziły słuszność stosowania w symulacjach MCNP dla pleksiglasu biblioteki zmodyfikowanej $K_{\rm X} = 1.20$. Przeprowadzona analiza pozwoliła na stwierdzenie, że symulacje MCNP z użyciem tej biblioteki pozwalają na uzyskanie wyników będących w dobrej zgodności z wynikami eksperymentalnymi. W związku z tym biblioteka ta została użyta w symulacjach MCNP do rozwiązania głównego problemu tej pracy [Rozdział I.4].

II.3.3 Dobór optymalnie zmodyfikowanej biblioteki dla polietylenu

II.3.3.1 Sześcian z polietylenu

Testowe symulacje MCNP przeprowadzone dla sześcianów z polietylenu, przedstawione w Rozdziale II.2.2.2, pokazały znaczne rozbieżności (nawet powyżej 4 %) pomiędzy symulacja a eksperymentem. W związku z tym, również dla polietylenu postanowiłam dopasować optymalnie zmodyfikowaną bibliotekę poly.01t. W tym celu wybrałam wyniki rzeczywistych eksperymentów przeprowadzonych na sześcianach z polietylenu krawedzi *d*, analizowane Rozdziale II.2.2.2 0 W tej pracy [Dąbrowska i in., 2000]. Przygotowanie symulacji MCNP oraz przeprowadzenie obliczeń zostało wykonane w identyczny sposób jak w Rozdziale II.2.1 i Rozdziale II.2.2.2. Do obliczeń dla polietylenu użyłam zmodyfikowaną, z różnymi współczynnikami modyfikacji K_X , bibliotekę *poly.01t*. Wartości wyliczonych stałych zaniku λ_{MCNP} porównałam z odpowiednimi wartościami λ_{exp} . Otrzymane wyniki zamieszczone zostały w Tabeli II.18. W celu analizy otrzymanych wyników wyliczyłam wartości poszczególnych odchyłek: ε , $\overline{\varepsilon}$ i L, które zamieszczone są w Tabeli II.19.

Na podstawie przeprowadzonych obliczeń, spośród wszystkich wygenerowanych bibliotek wybrałam tę, przy użyciu której wyniki symulacji MCNP w jak najlepszym stopniu zgadzały się z wynikami eksperymentalnymi. Porównując wartości stałych zaniku, λ_{exp} , i λ_{MCNP} , stwierdziłam, że najmniejsze rozbieżności pomiędzy symulacją a eksperymentem uzyskiwane są w sytuacji, kiedy do symulacji MCNP dla polietylenu zastosowana zostanie biblioteka zmodyfikowana ze współczynnikiem modyfikacji $K_X = 1.30$. W tym przypadku wyliczone odchyłki względne ε pojawiają się zarówno ze znakiem dodatnim, jak i ujemnym ($\varepsilon = (-0.12 \div 0.61)$ %), ich wartość średnia jest bliska zero ($\overline{\varepsilon} = 0.01$ %), natomiast odchyłka *L*, która uniezależnia się od znaku odchyłki względnej ma niską wartość ($L = 2.61 \times 10^{-3}$). Zależność stałej zaniku λ_{MCNP} od λ_{exp} dla sześcianów z polietylenu z użyciem w symulacjach MCNP dla polietylenu oryginalnej oraz zmodyfikowanej ze współczynnikiem $K_X = 1.30$ biblioteki *poly.01t*, została przedstawiona na **Rys. II.20**.

d	λ_{exp}	poly.01t		$K_{\rm X} = 1.10$		$K_{\rm X} = 1.20$		$K_{\rm X} = 1.25$	
	$(\sigma(\lambda_{exp}))$	λ_{MCNP}	3	λ_{MCNP}	3	λ_{MCNP}	3	λ_{MCNP}	3
[cm]	$[s^{-1}]$	$ \sigma(\lambda_{MCNP}) \\ [s^{-1}] $	[%]						
5.94	23 691	24 727	4.37	24 301	2.57	24 043	1.49	23 931	1.01
	(30 ÷ 100)	46		23		20		27	
7.00	19 333	19 955	3.22	19 631	1.54	19 434	0.52	19 361	0.14
	(30 ÷ 80)	18		27		24		33	
8.90	14 532	14 820	1.98	14 769	1.63	14 643	0.76	14 576	0.30
	(50)	41		20		22		22	

Tabela II.18 Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla jednorodnych sześcianów z polietylenu. Symulacje MCNP z użyciem dla polietylenu biblioteki *poly.01t* zmodyfikowanej z różnymi współczynnikami K_X .

Cd. Tabeli II.18

d	λ_{exp}	$K_{\rm X} = 1.30$		$K_{\rm X} = 1.35$		$K_{\rm X} = 1.40$		$K_{\rm X} = 1.50$	
	$(\sigma(\lambda_{exp}))$	λ_{MCNP}	3	λ_{MCNP}	3	λ_{MCNP}	3	λ_{MCNP}	3
[cm]	[s ⁻¹]	$\sigma(\lambda_{MCNP})$ [s ⁻¹]	[%]	$ \sigma(\lambda_{MCNP}) \\ [s^{-1}] $	[%]	$ \sigma(\lambda_{MCNP}) $ [s ⁻¹]	[%]	$ \sigma(\lambda_{MCNP}) \\ [s^{-1}] $	[%]
5.94	23 691	23 836	0.61	23 720	0.12	23 618	-0.31	23 439	-1.06
	(30 ÷ 100)	38		20		21		35	
7.00	19 333	19 242	-0.47	19 184	-0.77	19 112	-1.14	18 949	-1.99
	(30 ÷ 80)	18		25		24		21	
8.90	14 532	14 514	-0.12	14 461	-0.49	14 405	-0.87	14 313	-1,51
	(50)	22		13		18		16	

Tabela II.19 Wartości odchyłek: ε , $\overline{\varepsilon}$ i *L* dla jednorodnych sześcianów z polietylenu.

Biblioteki	3	$\overline{\mathcal{E}}$	$L \times 10^{-3}$
	[%]	[%]	[%]
poly.01t	1.98 ÷ 4.37	3.19	19.26
$K_{\rm X} = 1.10$	$1.54 \div 2.57$	1.92	11.38
$K_{\rm X} = 1.20$	0.52 ÷ 1.49	0.92	5.83
$K_{\rm X} = 1.25$	0.14 ÷ 1.01	0.49	3.56
$K_{\rm X} = 1.30$	-0.12 ÷ 0.61	0.01	2.61
$K_{\rm X} = 1.35$	-0.77 ÷ 0.12	-0.38	3.07
$K_{\rm X} = 1.40$	-1.14 ÷ -0.31	-0.78	4.91
$K_{\rm X} = 1.50$	-1.99 ÷ -1.06	-1.52	9.04



Rys. II.20 Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla jednorodnych sześcianów z polietylenu. Symulacje MCNP z użyciem dla polietylenu oryginalnej oraz zmodyfikowanej ($K_X = 1.30$) biblioteki *poly.01t*.



Rys. II.21 Zmiany wartości odchyłki względnej ε w zależności od wartości stałej zaniku λ_{exp} , dla sześcianów z polietylenu. Symulacje MCNP z użyciem dla polietylenu, oryginalnej oraz zmodyfikowanej ($K_X = 1.30$) biblioteki *poly.01t*.

Przedstawiona na **Rys. II.21** zależność odchyłki względnej ε od stałej zaniku λ_{exp} dla przypadku kiedy w symulacjach MCNP dla polietylenu użyta została biblioteka zmodyfikowana $K_X = 1.30$, w dalszym ciągu ma charakter rosnący. Tendencja ta jednak jest słabsza niż w przypadku stosowania oryginalnej biblioteki *poly.01t*.

Przeprowadzone obliczenia pozwoliły na stwierdzenie, że symulacje MCNP wykonywane dla sześcianów z polietylenu z biblioteką zmodyfikowaną ze współczynnikiem modyfikacji $K_{\rm X} = 1.30$ pozwalają na uzyskanie wyników będących w dobrej zgodności z wynikami eksperymentalnymi. Użycie tej biblioteki, w symulacjach MCNP dla małych układów z polietylenem, daje dużo lepsze wyniki niż w przypadku stosowania ogólnodostępnej biblioteki *poly.01t*, co jest wyraźnie widoczne na **Rys. II.20**.

W związku z powyższymi wnioskami biblioteka ta została zastosowana w symulacjach MCNP dla zewnętrznego moderatora z polietylenu w układzie dwustrefowym do rozwiązania jednego z głównych problemów tej pracy [Rozdział I.6].

Podsumowanie

W opracowanej, w Pracowni Fizyki Transportu Neutronów IFJ PAN oraz stosowanej od lat metodzie wyznaczania absorpcji próbki tworzącej warstwę wewnętrzną układu dwustrefowego, ważna jest znajomość dokładnych wartości parametrów neutronowych ośrodka zewnętrznego ($\langle v \Sigma_{a2} \rangle$, D_{02} , C_2) oraz rozmiarów obu ośrodków. Metoda ta opiera się na wykorzystaniu wyników eksperymentu i obliczeń teoretycznych. W obliczeniach teoretycznych wykorzystuje się parametry geometryczne i neutronowe rozważanego układu. Precyzyjna znajomość danych dotyczących tych parametrów wpływa na dokładność wyznaczenia krzywej teoretycznej. Rozmiary obu ośrodków, absorpcja i stała dyfuzji ośrodka zewnętrznego są dobrze określone, natomiast problem pojawia się w przypadku współczynnika ochładzania dyfuzyjnego C_2 w zewnętrznym moderatorze. W układzie jednorodnym C2 ma znaną, stałą wartość. Sytuacja zmienia się zasadniczo, gdy rozważamy ten sam materiał jako cienką warstwę zewnętrzną układu dwustrefowego. W takim układzie, w zależności od absorpcji oraz rozmiarów obu ośrodków, współczynnik ochładzania dyfuzyjnego zmienia swoją wartość. Może on być przedstawiony jako funkcja jednego z parametrów, od których zależy jego wartość. Ponadto istotne jest również to, że zmienność tego współczynnika zależy od tego, z jakiego rodzaju materiału utworzona jest warstwa wewnętrzna (materiał typu wodorowego czy materiał typu niewodorowego). Istotne jest to ze względu na różnice w sposobie rozpraszania neutronów w obu typach materiałów. Przejawia się to w różnych zależnościach funkcji jądra rozpraszania dla przekazu energii (scattering kernels) (a zatem i całkowitego przekroju czynnego na rozpraszanie) od energii neutronu i wynikających stąd różnych przekrojach czynnych na rozpraszanie i średnich kosinusach kąta rozpraszania.

Dla pierwszego przypadku (warstwa wewnętrzna utworzona z materiału typu wodorowego) eksperymenty były przeprowadzone w Pracowni Fizyki Transportu Neutronów IFJ PAN. Na podstawie danych otrzymanych z rzeczywistych impulsowych eksperymentów neutronowych i obliczeń teoretycznych, wyznaczona została zmienność parametru C_2 w zewnętrznym moderatorze z pleksiglasu.

Natomiast dla drugiego przypadku (materiał typu niewodorowego), przebieg zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w zewnętrznym moderatorze z pleksiglasu i polietylenu został zbadany w niniejszej pracy, na podstawie wyników otrzymanych w oparciu o symulacje eksperymentów metodą Monte Carlo, przy pomocy kodu MCNP.

107

W rozważanym układzie dwustrefowym zaplanowany został impulsowy eksperyment neutronowy i wykonane zostały całe serie symulacji MCNP tego eksperymentu. W symulacjach MCNP dla pleksiglasu i polietylenu użyta została oryginalna biblioteka *poly.01t*, oraz odpowiednio zmodyfikowana dla każdego z nich. Dla każdego z wybranych przypadków materiału tworzącego warstwę wewnętrzną o określonej absorpcji, znaleziona została odpowiednia wartość współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w pleksiglasie C_{2PLX}^{nH} i w polietylenie C_{2PE}^{nH} . Oprócz wspomnianej absorpcji na współczynnik ochładzania dyfuzyjnego ma wpływ także grubość warstwy zewnętrznej. Oba te parametry wpływają na wartość teoretycznej stałej zaniku λ^* i zmienność współczynnika ochładzania dyfuzyjnego można przedstawić w funkcji λ^* . Zależności $C_{2PLX}^{nH}(\lambda^*)$ i $C_{2PE}^{nH}(\lambda^*)$ zostały otrzymane przez dopasowanie do punktów { α_1^{ref} , C_{2PLX}^{nH} } i { α_1^{ref} , C_{2PE}^{nH} } odpowiednich krzywych. Obie zależności $C_{2PLX}^{nH}(\lambda^*)$ i $C_{2PE}^{nH}(\lambda^*)$, zarówno dla pleksiglasu, jak i dla polietylenu przedstawia **Rys. 0.1**.



Rys. 0.1 Zależność $C_2^{nH}(\lambda^*)$ dla zewnętrznego moderatora (polietylen, pleksiglas) otaczającego materiał typu niewodorowego (Si + Cu). Symulacje MCNP z użyciem odpowiednio zmodyfikowanej biblioteki *poly.01t*.

Z wykresu **Rys. 0.1** widać, że obie funkcje $C_{2PE}{}^{nH}(\lambda^*)$ i $C_{2PLX}{}^{nH}(\lambda^*)$ mają podobny przebieg malejący, a różnią się natomiast nachyleniem i wartościami liczbowymi. Odpowiednie wartości współczynnika ochładzania dyfuzyjnego dla pleksiglasu są większe od odpowiednich wartości dla polietylenu.

Wyliczone zostały także stosunki współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w pleksiglasie do odpowiednich wartości w polietylenie $C_{2PLX}^{nH}/C_{2PE}^{nH}$, co zostało przedstawione w Tabeli 0.1 i pokazane na Rys. 0.2.

λ^*	$C_{2PLX}^{ nH}$	$C_{2PE}^{ nH}$	C_{2DIV}^{nH}
$\sigma(\lambda^*)$			$\frac{\frac{2TLA}{C_{2PE}}}{RH}$
$[s^{-1}]$	$[cm^4s^{-1}]$	$[cm^4s^{-1}]$	[-]
12 112	8 930	3 510	2.54
62			
13 150	8 445	3 400	2.48
67			
14 685	7 934	3 045	2.61
75			
15 971	7 582	2 932	2.59
82			
17 391	7 100	2 818	2.52
90			
18 969	6 822	2 727	2.50
98			
20 121	6 525	2 635	2.48
105			
22 025	6 206	2 503	2.48
115			
25 770	5 725	2 356	2.43
135			
29 437	5 301	2 126	2.49
155			
33 914	4 795	1 981	2.42
179			

Tabela 0.1 Stosunki wartości $C_{2PLX}^{\ nH}$ do $C_{2PE}^{\ nH}$.



Rys. 0.2 Stosunek wartości współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w pleksiglasie do jego wartości w polietylenie.

Rys. 0.2 pokazuje zależność pomiędzy funkcjami $C_{2PLX}{}^{nH}(\lambda^*)$ i $C_{2PE}{}^{nH}(\lambda^*)$, gdzie ich stosunek $C_{2PLX}{}^{nH} / C_{2PE}{}^{nH}$ wykreślony został w funkcji λ^* . Wyliczona wielkość nie ma stałej wartości, wykazuje tendencję malejącą. Stosunek C_{PLX} / C_{PE} dla ośrodków jednorodnych wynosi 2.24.

Dla dwóch rozważanych moderatorów tworzących cienką warstwę zewnętrzną układu dwustrefowego wyliczyłam również funkcje względne w odniesieniu do wartości C_2 dla ośrodków nieskończonych: C_{2PLX}^{nH} / C_{PLX} oraz C_{2PE}^{nH} / C_{PE} . Są one przedstawione na **Rys. 0.3**.

Wartość współczynnika ochładzania dyfuzyjnego C_2 , dla zewnętrznego moderatora w układzie dwustrefowym nie jest taka sama jak wartość współczynnika *C* dla tego samego materiału tworzącego ośrodek jednorodny. Z przeprowadzonych obliczeń wynika, że zmiana współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w moderatorze tworzącym cienką warstwę zewnętrzną układu dwustrefowego C_2^{nH} (warstwa wewnętrzna utworzona z materiału typu niewodorowego) związana jest z rodzajem materiału, z którego zbudowany jest ten moderator. Przeprowadzone obliczenia potwierdziły także stwierdzenie, że na zmianę C_2^{nH} wpływają właściwości rozproszeniowe materiałów tworzących warstwę wewnętrzną rozważanego układu dwustrefowego.



Rys. 0.3 Względna zmienność współczynnika $C_2^{nH}(\lambda^*)$ w moderatorze z pleksiglasu i z polietylenu.

Otrzymany przebieg zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego w zewnętrznym moderatorze z pleksiglasu, który otacza warstwę wewnętrzną zbudowaną z jednorodnego materiału typu niewodorowego $C_{2PLX}^{\ nH}(\lambda^*)^{MCNP}$ zachowuje podobny charakter jak dla przypadku, w którym warstwa wewnętrzna utworzona jest z materiału typu wodorowego $C_{2PLX}^{\ H}(\lambda^*)^{exp}$, otrzymanego w oparciu o rzeczywiste eksperymenty (**Rys. 0.4**).

W zależności od rodzaju materiału, tworzącego warstwę wewnętrzną, współczynnik ochładzania dyfuzyjnego przyjmuje różne wartości liczbowe, dla takiej samej wartości absorpcji. Sytuacja przedstawiona na rysunku **Rys. 0.4** pokazuje, że otrzymana przy pomocy symulacji MCNP krzywa $C_{2PLX}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$ znajduje się blisko otrzymanej przy pomocy eksperymentu krzywej $C_{2PLX}^{H}(\lambda^*)^{exp}$. Wartości parametrów funkcji $C_{2PLX}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$ i $C_{2PLX}^{H}(\lambda^*)^{exp}$ dla pleksiglasu są zbliżone (**Tabela 0.2**).



Rys. 0.4 Krzywe przebiegu zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego dla zewnętrznego moderatora z pleksiglasu otaczającego materiał typu wodorowego $C_{2PLX}^{H}(\lambda^*)^{exp}$ oraz typu niewodorowego $C_{2PLX}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$.

- · ·	• • • • • •						
$C_{2PLX} = a \times (\lambda^*)^b$							
	а	b					
	$[cm^4]$						
$C_{2PLX}{}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$	$(2.337 \pm 0.004) \times 10^{6}$	-0.5927 ± 0.0002					
$C_{2PLX}^{H}(\lambda^{*})^{exp}$	$(2.615 \pm 0.341) \times 10^6$	-0.6012 ± 0.0131					

Tabela 0.2 Współczynniki *a* i *b* dla funkcji $C_{2PLX}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$ i $C_{2PLX}^{H}(\lambda^*)^{exp}$.

W analizie tej sytuacji należy uwzględnić to, że położenia obu krzywych obarczone są pewną niepewnością. W przypadku krzywej $C_{2PLX}^{H}(\lambda^*)^{exp}$, otrzymanej w oparciu o dane z eksperymentów, istotne znaczenie odgrywa dokładność procedur związanych z przygotowaniem eksperymentów, oraz przeprowadzanych obliczeń. W przypadku krzywej $C_{2PLX}^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$ uzyskanej przy pomocy symulacji MCNP, związane jest to z dokładnością przeprowadzanych symulacji oraz obliczeń a także dokładnością stosowanych bibliotek. Słuszność użycia odpowiednio zmodyfikowanej biblioteki *poly.01t* została potwierdzona poprzez wykonanie całych serii obliczeń w różnych konfiguracjach geometrycznych oraz materiałowych (Rozdział II.3). Wyznaczona, w sposób przedstawiony w Rozdziale I.4 tej pracy, funkcja zmienności współczynnika ochładzania dyfuzyjnego dla moderatora z pleksiglasu $C_{2PLX}{}^{nH}(\lambda^*)$ otaczającego materiał typu niewodorowego, wykorzystana została podczas wyliczenia krzywej teoretycznej $\lambda^*(H_2)$. Została ona zastosowana w pomiarze metodą Czubka absorpcji dwóch rzeczywistych materiałów typu niewodorowego. Otrzymane w ten sposób wartości przekroju czynnego absorpcji porównałam z odpowiednimi wartościami referencyjnymi. Wykonałam także porównanie z wynikami interpretacji tych samych pomiarów, gdy krzywa teoretyczna $\lambda^*(H_2)$ poprawiana była dotychczas znaną zależnością $C_{2PLX}{}^{H}(\lambda^*)$ (otrzymaną eksperymentalnie dla wewnętrznego ośrodka typu wodorowego).

Rekomendowane w opisie programu MCNP podejście, polegające na użyciu w obliczeniach zarówno dla polietylenu jak i dla pleksiglasu biblioteki *poly.01t*, wprowadza zniekształcenie odpowiednich krzywych przebiegu zmienności ochładzania dyfuzyjnego w zewnętrznym moderatorze z tych materiałów. Dopiero zastosowanie w symulacjach MCNP bibliotek odpowiednio zmodyfikowanych, pozwala na otrzymanie krzywych $C_2^{nH}(\lambda^*)^{MCNP}$ zbliżonych zarówno jakościowo jak i ilościowo do ich rzeczywistego przebiegu. Zaobserwowana sytuacja wskazuje na to, iż zjawisko ochładzania dyfuzyjnego w małych układach dwustrefowych jest złożonym zjawiskiem fizycznym.

Dużą część pracy stanowią przykłady symulacji MCNP impulsowych eksperymentów neutronowych wykonanych w Pracowni Fizyki Transportu Neutronów IFJ PAN, w których autorka brała udział. Przedstawione w Rozdziale II.2 przykłady dotyczą eksperymentów przeprowadzonych w różnych kombinacjach geometrii i materiałów. Porównanie wyników symulacji MCNP i eksperymentu miało na celu zbadanie ich zgodności. Z powodu stwierdzenia rozbieżności ten fragment pracy został bardziej rozwinięty. Obszerna liczba przykładów pokazała, że obserwowane rozbieżności nie są tylko kwestią pojedynczego przypadku. Zostało również stwierdzone, że są one spowodowane brakiem, przy kodzie MCNP, odpowiedniej biblioteki na rozpraszanie neutronów termicznych na jądrach atomów wodoru związanych w cząsteczce pleksiglasu. Twórcy programu MCNP zalecają zastosowanie dla rozpraszania neutronów termicznych na jądrach atomów wodoru w pleksiglasie tej samej biblioteki, co dla polietylenu (ENDF VI, *poly.01t*). Okazało się, że w przypadku analizy czasowego zaniku strumienia neutronów termicznych w małych układach daje to jedynie zgrubne przybliżenie zjawisk fizycznych zachodzących w takich ośrodkach a czasami także niezgodności jakościowe. Przejawia się to w sporych

rozbieżnościach, dochodzących nawet do 6 %, pomiędzy wynikami uzyskanymi na drodze symulacji MCNP i uzyskanymi z rzeczywistego, impulsowego eksperymentu neutronowego. Najwłaściwszym sposobem rozwiązania tego problemu byłoby stworzenie od podstaw biblioteki na rozpraszanie neutronów termicznych na jądrach atomów wodoru związanych w cząsteczce pleksiglasu. W warunkach "amatorskich" jest to niemożliwe do wykonania. W związku z tym zastosowany został inny pomysł polegający na modyfikacji istniejącej biblioteki na rozpraszanie neutronów termicznych na jądrach atomów wodoru związanych w cząsteczce polietylenu, w celu dostosowania jej dla pleksiglasu. Metoda ta polega na nieliniowej zmianie wartości przekrojów czynnych na rozpraszanie neutronów termicznych na jądrach atomów wodoru związanych w polietylenie poprzez zmianę masy wodoru biorącego udział w rozpraszaniu. W Rozdziale II.3 przedstawiony został sposób modyfikacji oraz dobór wariantu optymalnego dla pleksiglasu. Zaprezentowane zostały również wyniki symulacji MCNP impulsowego eksperymentu neutronowego, wykorzystujące takie zmodyfikowane biblioteki. Przykłady te pokazały, że zastosowanie dla pleksiglasu w symulacjach MCNP biblioteki zmienionej ze współczynnikiem modyfikacji $K_{\rm X}$ = 1.20 daje dużo lepszą zgodność z eksperymentem niż w przypadku stosowania oryginalnej biblioteki poly.01t.

Drugim rozważanym materiałem, który został zastosowany jako zewnętrzny moderator układu dwustrefowego był polietylen, materiał także o silnych właściwościach rozpraszających neutrony. W Rozdziale II.2.2.2, na przykładzie sześcianów polietylenowych, pokazane zostało, że wyniki otrzymane w oparciu o symulacje MCNP, z zastosowaniem dla polietylenu oryginalnej biblioteki *poly.01t*, wykazują znaczące rozbieżności z wynikami pochodzącymi z eksperymentu. W związku z tym również dla polietylenu została dobrana odpowiednio zmodyfikowana biblioteka (Rozdział II.3.3). W oparciu o przeprowadzone testowe symulacje MCNP stwierdzono, że najlepszą zgodność pomiędzy symulacją i eksperymentem uzyskuje się, kiedy dla polietylenu zostanie użyta biblioteka *poly.01t* zmieniona ze współczynnikiem modyfikacji $K_{\rm X} = 1.30$.

Otrzymane biblioteki zostały wykorzystane w symulacjach MCNP tworzących zasadnicza część pracy.

Wszystkie analizowane w pracy rzeczywiste eksperymenty neutronowe przeprowadzane były w temperaturze $(20.0 \pm 0.4 \text{ lub } \pm 0.1)^{\circ}$ C. Biblioteka *poly.01t* dedykowana jest nominalnie dla rozpraszania neutronów termicznych w polietylenie w temperaturze 300K, czyli około 27°C. W nowszej wersji programu MCNP5 ta sama biblioteka dedykowana jest dla temperatury 294K. Analizowane tutaj metody impulsowe są czułe na nawet nieznaczne zmiany temperatury, co jest widoczne w wartościach stałej zaniku λ. Obserwowane różnice między λ_{exp} i λ_{MCNP} mogą być również spowodowane powyższą sytuacją.

Z przeprowadzonych obliczeń wynika, że w symulacjach MCNP małych układów dwustrefowych, ta sama biblioteka nie może zostać użyta dla polietylenu jak i dla pleksiglasu. Ponadto, biorąc pod uwagę wartości współczynników modyfikacji dla obu materiałów, widzimy, że modyfikacja biblioteki dla polietylenu ($K_X = 1.30$) jest silniejsza niż dla pleksiglasu ($K_X = 1.20$). Świadczyć to może o tym, że obliczenia numeryczne MCNP są bardzo czułą metodą i aby uzyskać wiarygodne wyniki analizy czasowego zaniku strumienia neutronów termicznych wymagane jest dysponowanie dobrze opracowanymi bibliotekami na rozpraszanie neutronów termicznych, w szczególności dla materiałów zawierających silne centra rozproszeniowe w postaci atomów wodoru związanych w cząsteczkach.

Nie należy też zapominać, że obliczenia teoretyczne opierają się na pewnym sposobie podejścia do zagadnienia (neutronowe parametry dynamiczne) i z pewnymi założeniami upraszczającymi. Dlatego też należy uważać otrzymaną funkcję $C_2(\lambda^*)$ za właściwą do takiego podejścia teoretycznego. Trzeba jednak pamiętać, że oprócz uzasadnionego wpływu zjawiska fizycznego mogą one zawierać także kompensacje niedoskonałości teorii.

Ostatecznie można stwierdzić, że cel pracy został osiągnięty – przebadano zmienność współczynnika ochładzania dyfuzyjnego neutronów termicznych w zewnętrznym moderatorze układu dwustrefowego otaczającego ośrodek typu niewodorowego. Na przykładzie dwóch różnych materiałów tworzących moderator zewnętrzny (polietylen i pleksiglas), stwierdzono, ten sam charakter zależności $C_2^{nH}(\lambda^*)$ (**Rys. 0.1**) jest zbliżony ponadto do znanej wcześniej zależności $C_2^{H}(\lambda^*)$, gdy ośrodek wewnętrzny jest typu wodorowego (**Rys. 0.4**).

Istotnym osiągnięciem jest również fakt, że rozwiązanie powyższego zagadnienia fizycznego, przy pomocy symulacji metodą Monte Carlo, zostało opisane nie tylko jakościowo, ale również ilościowo z zadawalającą dokładnością. Potwierdzono to dobrymi wynikami zastosowania otrzymanej funkcji $C_{2PLX}^{nH}(\lambda^*)$ w interpretacji rzeczywistych pomiarów przekroju czynnego absorpcji neutronów termicznych w dwóch materiałach typu niewodorowego. Oznacza to, iż oprócz przebadania zjawiska fizycznego skonstruowano narzędzie pozwalające na wykonywanie tak dokładnych symulacji komputerowych, że mogą służyć nie tylko do projektowania eksperymentów z neutronami termicznymi, ale w pewnych przypadkach całkowicie je zastąpić.

Dodatek

Tabela A Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla dwustrefowej geometrii cylindrycznej, gdzie zewnętrzny moderator z pleksiglasu otaczał warstwę wewnętrzną utworzoną z KCl + H₂O.

k	Ra	λ	Symulacie N	MCNP z użyci	em dla pleksigla	su biblioteki
	112	$\sigma(\lambda_{exp})$	poly	2.01t	zmodyfikowar	nei $K_{\rm x} = 1.20$
		O(Nexp)	λ_{MCNP}	3	λ_{MCNP}	ε
			$\sigma(\lambda_{MCNP})$	_	$\sigma(\lambda_{MCNP})$	_
[%]	[cm]	$[s^{-1}]$	[s ⁻¹]	[%]	[s ⁻¹]	[%]
11.5	12.8	13 482	13 754		13 463	
		23	29	2.02	24	-0.14
		13 494				
		22		1.93		-0.23
	13.2	12 887	13 153		12 875	
		42	26	2.06	17	-0.09
		12 872		2 1 0		0.02
	12.6	103	12 (02	2.18	12 250	0.02
	13.6	12 399	12 602	1.64	12 359	0.22
		12 252	15	1.04	18	-0.32
		12 332		2.02		0.06
	14.0	11 898	12 114	2.02	11 875	0.00
	11.0	50	12 111	1.82	16	-0.19
		11 885		1.02		0.12
		51		1.93		-0.08
13.0	12.4	14 423	14 708		14 396	
		75	20	1.98	17	-0.19
		14 410				
		46		2.07		-0.10
		14 428				
		71		1.94		-0.22
	12.8	13 757	14 022	1.02	13 728	0.01
		80	18	1.93	17	-0.21
		15 / 52		1.06		0.17
		13 725	-	1.90		-0.17
		52		2 16		0.02
	13.2	13 145	13 411	2.10	13 139	0.02
	10.2	84	25	2.02	21	-0.05
		13 144				
		62		2.03		-0.04
		13 173				
		62		1.81		-0.26
	13.6	12 590	12 859		12 592	
		39	24	2.14	22	0.02
		12 598		2.07		0.05
		63	4	2.07	4	-0.05
		12 5/4		2.27		0.14
		/8		2.27		0.14

Ciąg dalszy 7	Fabeli A					
k	R_2	λ_{exp}	Symulacje MCNP z użyciem dla pleksiglasu bibliotel			su biblioteki
		$\sigma(\lambda_{exp})$	poly	v.01t	zmodyfikowar	nej $K_{\rm X} = 1.20$
			λ_{MCNP}	3	λ_{MCNP}	3
50 (7			$\sigma(\lambda_{MCNP})$		$\sigma(\lambda_{MCNP})$	
[%]	[cm]	[s ⁻¹]	[s ⁻¹]	[%]	[s ⁻¹]	[%]
15.0	11.6	16 474	16 757		16 396	
		49	26	1.72	20	-0.47
		16 453				
		39		1.85		-0.35
		16 416		2.00		0.12
		<u> </u>		2.08		-0.12
		10 334		1 3 5		0.83
		03 16.462		1.55		-0.85
		97		1 79		-0.40
		16 534		1.79		-0.40
		94		1.35		-0.83
	12.0	15 595	15 866		15 557	
		67	22	1.74	24	-0.24
		15 578				
		44		1.85		-0.13
		15 595				
		59		1.74		-0.24
		15 583				
		19		1.82		-0.17
	12.4	14 764	15 109	2.24	14 806	0.00
		51	27	2.34	31	0.28
		14 8/4		1 50		0.46
		14 760		1.38		-0.40
		14 /00 84		2 36		0.31
		14 889		2.50		0.51
		97		1.48		-0.56
	12.8	14 125	14 399		14 105	
	12.0	41	30	1.94	24	-0.14
		14 104				
		114		2.09		0.01
		14 077				
		50		2.29		0.20
		14 162				
		53		1.67		-0.40

Ciąg dalszy '	Fabeli A					
k	R_2	λ_{exp}	Symulacje MCNP z użyciem dla pleksiglasu bibliote			su biblioteki
		$\sigma(\lambda_{exp})$	poly	v.01t	zmodyfikowan	nej $K_{\rm X} = 1.20$
		_	λ_{MCNP}	З	λ_{MCNP}	3
F0 / 1	r ı	- 1-	$\sigma(\lambda_{MCNP})$		$\sigma(\lambda_{MCNP})$	
[%]	[cm]	[S ⁻¹]	$[S^{-1}]$	[%]	[s ⁻¹]	[%]
18.0	10.8	19 370	19 622		19 237	
		62	29	1.30	28	-0.69
		19 204		• • •		0.15
		37		2.18		0.17
	11.2	18 258	18 499	1.22	18 132	0.00
		19.254	28	1.32	28	-0.69
		18 234		1.24		0.67
		18 157	-	1.34		-0.07
		86		1.88		-0.14
		18 225	-	1.00	-	-0.14
		10 223		1 50		-0.51
	11.6	17 137	17 462	1.50	17 115	0.01
	11.0	53	22	1.90	21	-0.13
		17 185		_		
		62		1.61		-0.41
		17 183				
		94		1.62		-0.40
		17 160				
		59		1.76		-0.26
	12.0	16 225	16 524		16 195	
		50	22	1.84	18	-0.18
		16 232				
		35	-	1.80		-0.23
		16 213		1.02		0.11
		/6	-	1.92		-0.11
		16 216		1.00		0.12
	12.4	<u> </u>	15 669	1.90	15 257	-0.13
	12.4	15 551	13 008	2.07	13 337	0.04
		15 3//	15	2.07	12	0.04
		10 044		2.11		0.08

Ciąg dalszy T	fabeli A					
k [%]	R_2	λ_{exp}	Symulacje MCNP z użyciem dla pleksiglasu biblio			su biblioteki
	[cm]	$\sigma(\lambda_{exp})$	poly	v.01t	zmodyfikowar	nej $K_{\rm X} = 1.20$
		$[s^{-1}]$	λ_{MCNP}	3	λ_{MCNP}	3
			$\sigma(\lambda_{MCNP})$	[%]	$\sigma(\lambda_{MCNP})$	[%]
			$[s^{-1}]$		$[s^{-1}]$	
21.0	10.4	21 544	21 890		21 445	
		84	42	1.61	30	-0.46
		21 532				
		67		1.66	-	-0.40
		21 547				
		117		1.59		-0.47
		21 538		1 (2		0.42
	10.0	20.005	0.0.500	1.63	00.105	-0.43
	10.8	20 095	20 522	2.12	20 125	0.15
		20.176	41	2.12	43	0.15
		20176		1 71		0.25
		20 157		1./1		-0.23
		20 137		1.81		-0.16
		20.152		1.01		-0.10
		89		1.84		-0.13
	11.2	18 944	19 263		18 889	
	-	85	21	1.68	22	-0.29
		18 924				
		77		1.79		-0.18
		18 883				
		128		2.01		0.03
		18 893				
		66		1.96		-0.02
	11.6	17 797	18 154		17 790	
		102	30	2.01	20	-0.04
		17 755		2.25		a a a
		100		2.25	4	0.20
		17812		1.02		0.12
		<u> </u>	4	1.92	4	-0.12
		1/839		1.65		0.39
		51	1	1.05	1	-0.37

Ciąg dalszy T	fabeli A					
k	R_2	λ_{exp}	Symulacje MCNP z użyciem dla pleksiglasu biblioteki			su biblioteki
		$\sigma(\lambda_{exp})$	poly	v.01t	zmodyfikowanej $K_{\rm X}$ = 1.20	
			λ_{MCNP}	3	λ_{MCNP}	3
		_	$\sigma(\lambda_{MCNP})$		$\sigma(\lambda_{MCNP})$	
[%]	[cm]	$[s^{-1}]$	$[s^{-1}]$	[%]	$[s^{-1}]$	[%]
23.6	10.0	23 972	24 324		23 841	
		59	44	1.47	26	-0.55
		24 079				
		83		1.02		-0.99
		23 939				
		77		1.61		-0.41
		23 921		1 50		
		104		1.68		-0.33
	10.4	22 259	22 663	1.01	22 256	0.01
		98	. 26	1.81	. 33	-0.01
		22 334		1 47		0.25
		116		1.4/		-0.35
		22 305		1 6 1		0.22
		22 240		1.01		-0.22
		22 249		1.86		0.03
	10.8	20 791	21 207	1.00	20.814	0.05
	10.0	76	21 207	2.00	20 814	0.11
		20 787	29	2.00		0.11
		76		2 02		0.13
		20 774				0110
		160		2.08		0.19
		20 827		-		-
		71		1.82		-0.06
	11.2	19 490	19 900		19 512	
		37	32	2.10	23	0.11
		19 512				
		62		1.99		0.00
$\overline{\mathcal{E}}$ [%]		1.	84	-0.19		
	$L \times 10^{-3}$		2.	03	0.3	5

Tabela B Wartości stałych zaniku λ_{MCNP} i λ_{exp} dla dwustrefowej geometrii cylindrycznej, gdzie zewnętrzny moderator z pleksiglasu otaczał warstwę wewnętrzną utworzoną z H₃BO₃ + H₂O.

k	R_2	λ_{exp}	Symulacje N	ICNP z użyci	em dla pleksigla	su biblioteki
		$\sigma(\lambda_{exp})$	poly.	.01t	zmodyfikowa	nej $K_{\rm X} = 1.20$
		(),	λ_{MCNP}	3	λ_{MCNP}	3
			$\sigma(\lambda_{MCNP})$		$\sigma(\lambda_{MCNP})$	
[%]	[cm]	[s ⁻¹]	[s ⁻¹]	[%]	[s ⁻¹]	[%]
1.0	10.4	22 037	22 620		22 128	
		122	49	2.65	34	0.41
		22 090		• • •		0.1 -
		184		2.40		0.17
		22 102		2.24		0.12
		22 003		2.34		0.12
		189		2 80		0.57
	10.8	20 722	21.125	2.00	20 724	0.57
	10.0	144	37	1.94	33	0.01
		20 647				
		97		2.32		0.37
		20 625				
		68		2.42		0.48
		20 683		0.1.4		
	11.2	120	10.015	2.14	10,410	0.20
	11.2	19 355	19 817	2 20	19 4 19	0.22
		19 299		2.39	26	0.33
		88		2.68		0.62
		19 367		2.00		0.02
		71		2.32		0.27
		19 362				
		91		2.35		0.29
1.1	10.0	24 386	24 887		24 421	
		105	70	2.05	66	0.14
		24 229		2.72		0.70
		80		2.72		0.79
		24 297		2 43		0.51
		24 278		2.73		0.51
		86		2.51		0.59
	10.4	22 724	23181		22734	
		111	42	2.01	46	0.04
		22 643				
		119		2.38		0.40
		22 630		0.40		0.46
		154		2.43		0.46
		22 693		2.15		0.19
	10.8	21 170	21.624	2.13	21 220	0.18
	10.0	73	21 024 <u>4</u> 2	2 14	40	0.28
		21 083			UT	0.20
		84		2.57		0.69
		21 050]]	
		68		2.73		0.85
		21 054				
		148		2.71		0.83

Ciąg dalszy Ta l	beli B					
k	R_2	λ_{exp}	Symulacje M	ICNP z użyci	em dla pleksigla	su biblioteki
		$\sigma(\lambda_{exp})$	poly.	.01t	zmodyfikowa	nej $K_{\rm X} = 1.20$
			λ_{MCNP}	3	λ_{MCNP}	3
[0/]	[cm]	r11	$\sigma(\lambda_{MCNP})$	F0/1	$\sigma(\lambda_{MCNP})$	[0/]
[/0]		[S]		[%0]		[%0]
1.2	10.0	23 003	25 506	2.00	25 042	0.15
		24 875	00	2.00		0.15
		112		2.54		0.67
		24 945				
		116		2.25		0.39
		24 944		2.25		0.00
	10.4	96	22.724	2.25	22.225	0.39
	10.4	25 250	23 /24	2.01	23 235	-0.09
		23 157	40	2.01	51	-0.07
		173		2.45		0.34
		23 222				
		114		2.16		0.06
		23 208				0.10
	10.9	127	22.10(2.22	21 (00	0.12
	10.8	21 050	22 106	2 20	21 690	0.28
		21 628		2.20	. 55	0.20
		85		2.21		0.29
		21 808				
		112		1.37		-0.54
		21 724		1.54		0.1.6
1 4	0.6	88	29.942	1.76	29.251	-0.16
1.4	9.0	120	28 843	1.81	28 331	0.08
		28 293	/0	1.01	12	0.00
		81		1.94		0.20
		28 403				
		139	-	1.55		-0.18
		28 223		2.20		0.45
	10.0	26 177	26.706	2.20	26.170	0.45
	10.0	104	20 /00	2 02	20170	-0.03
		26 172		2.02	01	0.05
		81		2.04		-0.01
		26 036				
		164		2.57		0.51
		26 094		2.25		0.20
	10.4	93 24 235	24 710	2.33	24.248	0.29
	10.7	102	40	1.96	24 240	0.05
		24 251				
		198		1.89		-0.01
		24 269				
		196	{	1.82		-0.09
		24 144		2 34		0.43
1	1	150	1	4.J T	1	0.15

Ciag dalszy Ta l	beli B					
k	R_2	λ_{exp}	Symulacje MCNP z użyciem dla pleksiglasu biblic			su biblioteki
		$\sigma(\lambda_{exp})$	poly.	.01t	zmodyfikowar	nej $K_{\rm X} = 1.20$
			λ_{MCNP}	3	λ_{MCNP}	3
F0/ 1	[and]	r -la	$\sigma(\lambda_{MCNP})$	50/3	$\sigma(\lambda_{MCNP})$	F0 / 7
[%]			[S ⁻¹]	[%]	[S ⁻¹]	[%]
1.6	9.0	33 413	34 448	2 10	33 811	1 10
		233	/2	3.10	82	1.19
		35 299		3 4 5		1.54
		33 356		5.45		1.04
		329		3.27		1.36
		33 341				
		339		3.32		1.41
	9.6	29 662	30 322		29 819	
		134	75	2.23	59	0.53
		29 561		2.57		0.07
		162		2.57		0.8/
		29 037		2.24		0.55
		29 513		2.27		0.55
		95		2.74		1.04
	10.0	27 216	27 934		27 409	
		174	51	2.64	42	0.71
		27 196				
		226		2.71		0.78
		27 177		2 70		0.05
		154		2.79		0.85
		148		2 74		0.81
1.8	9.0	34 696	35.928	2.17	35 319	0.01
		614	56	3.55	60	1.80
		34 586				
		419		3.88		2.12
		34 692				
		517		3.56		1.81
		34 684		2.50		1.02
	0.6	3/1	21.420	3.59	20.049	1.83
	9.0	76	51 420	2 43	50 948 16	0.89
		30 762		2.15	0	0.09
		145		2.14		0.60
		30 742				
		101		2.21		0.67
		30 705				
	10.0	104		2.33		0.79
	10.0	28 155	28 856	2 40	28 379	0 00
		28 107	. 37	2.49	48	0.80
		150		2.34		0.65
		28 147	1			0.00
		116		2.52		0.82
		28 129				
		85		2.58		0.89

Ciąg dalszy Tal	beli B					
k	R_2	λ_{exp}	Symulacje MCNP z użyciem dla pleksiglasu bibliote			su biblioteki
		$\sigma(\lambda_{exp})$	poly	.01t	zmodyfikowar	nej $K_{\rm X} = 1.20$
			λ_{MCNP}	3	λ_{MCNP}	3
F0/1	[]	r -12	$\sigma(\lambda_{MCNP})$	50 / 3	$\sigma(\lambda_{MCNP})$	50 (]
[%]	[cm]	[s ⁻¹]	[s ⁻¹]	[%]	[s ⁻¹]	[%]
2.0	8.2	44 019	44 942	• • •	44 244	0.51
		310	178	2.10	137	0.51
		43 / 54		2 72		1 1 2
		43 705	-	2.12		1.12
		430		2.83		1 23
		43 680		2.05		1.23
		443		2.89		1.29
	8.6	39 823	41 063		40 358	
		306	136	3.11	132	1.34
		39 792				
		173		3.19		1.42
		39 889		• • •		
		594		2.94		1.18
		40 411		1.61		0.12
	9.0	36 705	37.407	1.01	36 787	-0.13
	9.0	120	92	1 91	50 787	0.22
		36 777	, , , , , , , , , , , , , , , , , , , ,	1.91		0.22
		207		1.71		0.03
2.1	8.2	45 174	45 963		45 162	
		351	185	1.75	75	-0.03
		44 987				
		206		2.17		0.39
		45 065		1.00		0.22
		<u> </u>	-	1.99		0.22
		363		1 73		-0.04
	8.6	41 054	41 904	1.75	41 220	0.01
		451	151	2.07	81	0.40
		40 920				
		268		2.40		0.73
		41 150				
		339	-	1.83		0.17
		40 861		0.55		0.00
	0.0	14/	27.000	2.55	27.400	0.88
	9.0	5/ 525 188	37 998	1 27	5/480	-0.11
		37 350	47	1.4/		-0.11
		163		1.73		0.35
		37 512	1		1	
		197		1.30		-0.09
		37 539				
		332		1.22		-0.16
Ciąg dalszy Tal	beli B					
-----------------	--------	-------------------------	-------------------------------------	--------------	---	-------
k	R_2	λ_{exp}	Symulacje N	ICNP z użyci	em dla pleksiglasu biblioteki	
		$\sigma(\lambda_{exp})$	poly.01t		zmodyfikowanej $K_{\rm X}$ = 1.20	
			λ_{MCNP}	3	λ_{MCNP}	3
[%]	[cm]	[s ⁻¹]	$\sigma(\lambda_{MCNP}) \ [s^{-1}]$	[%]	$\sigma(\lambda_{\scriptscriptstyle MCNP}) \ [{ m s}^{-1}]$	[%]
2.2	8.2	46 202	47 217		46 477	
		380	160	2.20	71	0.60
		46 145		2.22		0.70
		236		2.32		0.72
		43 902		2.86		1 25
		45 985		2.00		1.20
		361		2.68		1.07
	8.6	41 413	42 868		42 282	
		250	107	3.51	84	2.10
		41 480				
		383		3.35		1.93
		41 318		2 75		2.22
		434		5.75		2.33
		169		2.09		0.92
	9.0	37 831	38 834	2.07	38 331	0.52
		284	42	2.65	48	1.32
		37 876				
		211		2.53		1.20
		37 910		2.44		1 1 1
		328	-	2.44		1.11
		235		2.62		1.29
2.3	8.2	46 901	48 179		47 468	
		234	156	2.72	95	1.21
		47 184				
		219		2.11		0.60
		47 142		2 20		0.00
		<u> </u>	-	2.20		0.69
		263		2 26		0.75
	8.6	42 572	43 717	2.20	43 070	0.75
		216	141	2.69	90	1.17
		42 131				
		260	-	3.76		2.23
		42 602		2 (2		1.10
		199	4	2.62		1.10
		42 032		2 50		0.98
	9.0	38 727	39 445	2.50	38 926	0.20
		143	51	1.85	40	0.51
		38 572]			
		131		2.26		0.92

Ciąg dalszy Tabeli B									
k	R_2	λ_{exp}	Symulacje N	ICNP z użyci	em dla pleksiglasu biblioteki				
		$\sigma(\lambda_{exp})$	poly.01t		zmodyfikowanej $K_{\rm X} = 1.20$				
			λ_{MCNP}	З	λ_{MCNP}	3			
50 (3			$\sigma(\lambda_{MCNP})$		$\sigma(\lambda_{MCNP})$				
[%]	[cm]	[s ⁻¹]	[s ⁻¹]	[%]	[s ⁻¹]	[%]			
2.4	8.2	47 823	49 037		48 442				
		239	100	2.54	115	1.29			
		48 184							
		397		1.77		0.54			
		47 785				1.07			
		469		2.62	-	1.37			
		48 348		1 42		0.10			
	9.(386		1.43	10	0.19			
	8.6	43 143	44 456	2.04	43 789	1.50			
		102	134	5.04	82	1.30			
		43 238		2 77		1 23			
		42 371		2.11		1.23			
		221		4 92		3 35			
		43 212		,=		0.00			
		285		2.88		1.34			
		42 642		-					
		332		4.25		2.69			
		42 766							
		523		3.95		2.39			
	9.0	38 701	40 035		39 504				
		291	49	3.45	44	2.07			
		39 032							
		274		2.57		1.21			
		38 569		2.00		2.42			
		520		3.80		2.42			
		38 923		2.96		1.40			
		243		2.80	-	1.49			
		136		3 1 1		1 74			
		38 920	1	5.11	1	1./ T			
		342		2.86		1.50			
Ē [%]			2.49		0.77				
$I \times 10^{-3}$			2 27		0.00				
$L \times 10^{+1}$			2.27		0.90				

Literatura

Beckurtz K. H., Wirtz K. (1964) *Neutron Physics*. Berlin, Springer.

Boss J. (1987) *Mieszanie materiałów ziarnistych.* Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa.

Briesmeister J. F. (2000) Monte Carlo N-particle Transport Code System. Version 4C. La–13709–M Los Alamos National Laboratory.

Burda J., Igielski A., Janik W., Kosik M., Kurowski A., Zalewski T. (1997) *Instrumentation system for pulsed neutron generator*. Rept. INP No. 1774/E, Institute of Nuclear Physics, Kraków.

Burda J., Drozdowicz K., Gabańska B., Igielski A., Janik W., Kosik M., Krynicka E., Kurowski A., Woźnicka U., Zalewski T. (1999a) *Time-dependent neutron field experimental set-up at the pulsed neutron generator in the Institute of Nuclear Physics*. Nukleonika vol. **44** No. 4, 511.

Burda J., Dąbrowska J., Drozdowicz K., Gabańska B., Igielski A., Janik W., Kosik M., Krynicka E., Kurowski A., Woźnicka U., Zalewski T. (1999b) *Pomiary przekroju czynnego absorpcji neutronów termicznych dla skał wykonane na dwudetektorowym stanowisku pomiarowym przy impulsowym generatorze neutronów.* Rept. INP No. 1818/PN, Institute of Nuclear Physics, Kraków.

Czubek J. A., Drozdowicz K., Igielski A., Krynicka-Drozdowicz E., Sobczyński Z., Woźnicka U. (1980) *Thermal neutron absorption cross-section for small samples (experiments in spherical geometry)*. Rept. INP No. 1119/AP, Institute of Nuclear Physics, Kraków.

Czubek J. A. (1981a) *A method for measurement of thermal neutron absorption cross-section in small samples.* J. Phys. D: Appl. Phys. 14, 779.

Czubek J. A., Drozdowicz K., Igielski A., Krynicka-Drozdowicz E., Sobczyński Z., Woźnicka U. (1981b) *Thermal neutron absorption cross-section for small samples: experiments in spherical* geometry.

J. Phys. D: Appl. Phys. 14, 977.

Czubek J. A., Drozdowicz K., Gabańska B., Igielski A., Krynicka E., Woźnicka U. (1996) *Thermal neutron macroscopic absorption cross-section measurement applied for geophysics*. Prog. Nucl. Energy **30**, 295.

Dabrowska J., Drozdowicz K., Woźnicka U. (2000)

The MCNP code in planning and intepretation of thermal neutron pulsed experiments. Proc. of the Monte Carlo 2000 conf. on "Advanced Monte Carlo for Radiation Physics, Particle Transport Simulation and Applications", Lizbon, Portugal.

Drozdowicz K. (1981) Energy corrections in pulsed neutron measurements. J. Phys. D: Appl. Phys. **14**, 793.

Drozdowicz K., Woźnicka U. (1983) Energy correction in pulsed neutron measurement for cylindrical geometry. J. Phys. D: Appl. Phys. **16**, 245.

Drozdowicz K., Woźnicka U. (1986) *High precision thermal neutron diffusion parameters for Plexiglas.* Rept. INP No. 1319/AP, Institute of Nuclear Physics, Kraków .

Drozdowicz K., Woźnicka U. (1987) *High-precision thermal neutron diffusion parameters for Plexiglas*. J. Phys. D: Appl. Phys. **20**, 985.

Drozdowicz K. (1989) *Total cross-section of Plexiglas in the thermal neutron region*. Ann. Nucl. Energy **16**,275.

Drozdowicz K. (1992) *Thermal neutron diffusion cooling coefficient for Plexiglas*. Chalmers University of Technology, S–412 96 Göteborg, ISSN 0281-9775.

Drozdowicz K., Gabańska B., Igielski A., Krynicka E. (1993a) *Fitting the decaying experimental curve by a sum of exponentials.* Rept. INP No. 1635/PN, Institute of Nuclear Physics, Kraków.

Drozdowicz K., Gabańska B., Igielski A., Krynicka E., Woźnicka U. (1993b) Methodology of measurement of thermal neutron time decay constant in Canbera 35+ MCA sytatem. Rept. INP No. 1651/PN, Institute of Nuclear Physics, Kraków.

Drozdowicz K., Krynicka E. (1995) *Thermal neutron diffusion parameters in homogenous mixtures.* Rept. INP No. 1694/PN, Institute of Nuclear Physics, Kraków.

Drozdowicz K. (1998) *The diffusion cooling coefficient for thermal neutrons in Plexiglas*. J. Phys. D: Appl. Phys. **31**, 1800.

Drozdowicz K., Gillette V. H. (1999a) *The thermal neutron diffusion cooling coefficient in polyethylene*. Ann. Nucl. Energy **26**, 1159. Drozdowicz K. (1999b)

Thermal neutron diffusion parameters dependent on the flux energy distribution in finite hydrogenous media. Rept. INP No. 1838/PN, Institute of Nuclear Physics, Kraków. Drozdowicz K., Krynicka E., Woźnicka E., Igielski A., Kurowski A. (2001) The thermal neutron absorption of mixtures of hydrogenous and non-hydrogenous substances measured In two-region geometry.

Rept. INP No. 1891/PN, Institute of Nuclear Physics, Kraków.

Drozdowicz K., Krynicka E. (2004)

Dependence of the thermal neutron macroscopic scattering properties of polyethylene on the temperature.

11th International Seminar on Neutron Scattering Investigation in Condensed Matter, Institute of Physics Adam Mickiewicz University, Poznań.

Granada J. R. (1985) Slow neutron scattering by molecular gases: A synthetic scattering function. Phys. Rev. B **31**, 4167.

Granada J. R., Dawidowski J., Mayer R. E. and Gillette V. (1987) *Thermal Neutron cross-section and transport properties in polyethylene*. Nucl. Instrum. Methods A **261**, 573.

Grosshög G., Rönnberg G. (1971) *Thermal neutron decay in a spherical moderator with a central cavity*. J. Nucl. Energy **25**, 361.

Hehn G., Schweizer M., Haas K. (1992) New calculation of neutron response functions of Bonner spheres with helium-3 detectors. Kerntechnik **57**, 251.

Kazarnovskii M. V. (1975) Theory of nonstationary thermalization of neutrons. Nuclear reactions and interaction of neutrons and matter. Proc. Lebedev Phys. Inst. 63 1.

Kiełkiewicz M. (1987) *Teoria reaktorów jądrowych*. Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa.

Krynicka E., Drozdowicz K., Gabańska E., Janik W., Dąbrowska J. (2000a) Measurements of the thermal neutron absorption Σ_a of model systems (refrence KCl solution) in two-region geometry. Rept. INP No. 1857/PN, Institute of Nuclear Physics, Kraków.

Krynicka E., Gabańska B., Woźnicka U., Kosik M. (2000b) Measurements of the thermal neutron absorption Σ_a of boron of unknown isotopic ratio. Rept. INP No. 1860/PN, Institute of Nuclear Physics, Kraków. Krynicka E., Gabańska E., Woźnicka U., Dąbrowska J., Burda J. (2001) Interpretation problem of Czubek's Σ_a measurement method. Reference experiment on H_3BO_3 solutions. Rept. INP No. 1890/PN, Institute of Nuclear Physics, Kraków.

Krynicka E., Drozdowicz K., Woźnicka U., Wiącek U., Gabańska B. (2005) *Thermal neutron diffusion cooling in two-region small systems*. J. Phys. D: Appl. Phys. **38**, 2967.

Krynicka E., Wiącek U., Drozdowicz K., Gabańska B., Tracz G. (2006) *MC simulations of the pulsed thermal neutron flux in two-zone systems with Plexiglas – using the MCNP code with a modified hydrogen-data library.* Nucl. Instrum. Methods B, w druku.

Mughabghab S. F., Divadeenam M., Holden N. E. (1981) *Neutron Cross Sections, Volume I Neutron resonance parameters and thermal cross sections.* National Nuclear Data Center, Brookhaven National Laboratory, Upton, New York.

Nelkin M. (1960) *The decay of a thermalized neutron pulse.* Nucl. Sci. Eng. **7**, 210.

Sibona G., Mayer R. E, Gillette V. H., Bonetto C. Granada J. R. (1991) *Thermal neutron cross-sections and diffusion parameters of Plexiglas*. Ann. Nucl. Energy **18**, 689.

Sjöstrand N. G. (1985) *The pulsed neutron method for diffusion, slowing down and reactivity measurements.* Proc. Workshop on Subcritical Reactivity Measurements, August 27/29. Albuquerque, New Mexico, pp.95-127.

Weinberg A. M., Wigner E. P. (1952) *The physical theory of neutron chain reactors*. University of Chicago, p. 442.

Wiącek U., Krynicka E. (2005)
Monte Carlo simulations of the pulsed thermal neutron flux in two-region hydrogenous systems (using standard MCNP data libraries).
Rept. INP No. 1958/PN, Institute of Nuclear Physics, Kraków.

Wiącek U. (2006) Modelling of the non-stationary thermal neutron transport in hydrogenous media using the MCNP code. Nucl. Instrum. Methods A **562**, 830.

Wiącek U., Krynicka E. (2006) Decay of the pulsed thermal neutron flux in two-zone hydrogenous systems – Monte Carlo simulations using MCNP standard data libraries. Nucl. Instrum. Methods B **243**, 92. Williams M. M. R. (1964) *The energy-dependent Milne problem with a simple scattering kernel.* Nucl. Sci. Eng. **18**, 260.

Williams M. M. R. (1966) *The slowing Down and Thermalization of Neutrons*. Amsterdam: North-Holland.

Williams M. M. R. (1971) *Mathematical methods in particle transport theory*. London: Butterworths.

Woźnicka U. (1981)Solution of the thermal neutron diffusion equation for a two-region system by perturbation calculation.J. Phys. D: Appl. Phys. 14, 1167.