الجمهوريّة الجزائريّة الدّيمقراطيّة الشعبيّة
وزارة التّعليم العالي والبحث العلمي

Université Ferhat Abbas Sétif 1
Faculté des Sciences

جامعة فرحات عبّاس، سطيف 1
كليّة العلوم

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

N°...../PHY/**2019**

THÈSE

Présentée par

BENZAID Djelloul

Pour l'obtention du diplôme de

DOCTORAT ES-SCIENCES

Filière: PHYSIQUE

Spécialité: PHYSIQUE NUCLEAIRE

THÈME

Caractérisation Théorique et Expérimentale d'un Spectromètre de Neutrons à Barrière de Surface

Soutenue publiquement le **06/02/2019**

DEVANT LE JURY COMPOSÉ DE :

Président	**BOUCENNA Ahmed**	**Pr. UFAS1, Setif**
Directeur	**SEGHOUR Abdeslam**	**Directeur de Recherche, CRNA Alger**
Examinateurs	**BELAFRITES Abdelfettah**	**Professeur, UMSB Jijel**
	FOUKA Mourad	**Maître de Recherche A, CRAAG Alger**
	KHARFI Fayçal	**Professeur, UFAS1**
Invité	**BORRAS LOPEZ Antonio**	**Maître de Conférences A, UIB Espagne**

……

Table des matières

Dédicaces **1**

Remerciements **2**

Résumé **4**

Introduction générale **4**

1 Interaction des Rayonnements avec la Matière **7**

1.1 Interaction des Neutrons avec la Matière 7

1.1.1 Classification des Neutrons 7

1.1.2 Sources de Neutrons 9

1.1.3 Sections Efficaces d'Interaction 12

1.1.4 Mécanismes d'Interaction 21

1.1.5 Cinématique des Réactions Nucléaires à Basses Energies 25

1.1.6 Phénomène d'Absorption des Neutrons. Atténuation 27

1.2 Interaction des Particules Chargées Lourdes avec la Matière 28

1.2.1 Perte d'énergie des particules chargées lourdes 28

1.3 Principes de Détection des Rayonnements Ionisants 29

1.3.1 Détecteurs de neutrons 33

2 Modélisation et Simulation du Problème de la Détection des Neutrons 36

2.1 Rappels Théorique sur les Méthodes Monte-Carlo 36

2.1.1 Introduction 36

2.1.2 Nombres aléatoires et variables aléatoires 37

2.1.3 Distribution rectangulaires 37

2.1.4 Distributions non rectangulaires : méthodes directes 38

2.1.5 Distribution non rectangulaires : Méthode du rejet (ou d'acceptation) de Von Neumann . . . 41
2.2 Codes de Simulation Monte Carlo Existants . . . 43
2.2.1 Code Geant4 . . . 43
2.2.2 Code MCNP . . . 43
2.2.3 Code SRIM . . . 44
2.3 Distributions Angulaires des produits de réaction . . . 44
2.3.1 Description générale . . . 45
2.3.2 Formats et méthodes de lecture de données . . . 46
2.3.3 Coefficient de polynômes de Legendre (LTT=1, LI=0) . . . 47
2.3.4 Exemple de données ENDF . . . 47
2.4 Modélisation du convertisseur du bore . . . 49

3 Résultats et Discussion 52
3.1 Simulation de l'interaction . . . 53
3.1.1 Section efficace totale d'interaction des neutrons avec le bore-10 . . . 54
3.1.2 Point d'arrivée du neutron sur le bore . . . 54
3.1.3 Distances traversées par les neutrons après interaction . . . 54
3.1.4 Angles d'éjection des particules chargées . . . 57
3.1.5 Pouvoirs d'arrêt des particules alpha et lithium dans le bore . . . 59
3.1.6 Parcours des particules alpha et lithium dans le bore . . . 60
3.2 Spectre en énergie . . . 64

Appendice A 71

A Transformation des Distributions Angulaires Lors du Changement de Référentiel CM-Lab 72
A.1 INTRODUCTION . . . 72
A.2 RAPPELS ET DEFINITIONS . . . 73
A.3 CALCUL DES COEFFICIENTS DE PASSAGE . . . 75
A.3.1 Quelques cas particuliers . . . 75
A.3.2 Autre relation définissant . . . 77
A.3.3 Formule de récurrence . . . 78
A.3.4 Calcul direct des coefficients $T_{\ell\ell'}$ . . . 79
A.3.5 Comparaison des deux méthode de calcul de la matrice T . . . 82

A.4 Utilisation de la matrice T dans les fichiers ENDF 83

B Publications **85**

B.1 International Journal of Modern Physics E Nuclear Physics 85

B.2 Progress in Nuclear Science and Technology 98

Appendice C **104**

C CODE DE CALCUL **104**

Dédicaces

A la mémoire de mes parents

A ma femme Fatma Zohra

A mes enfants Aroua, Firas et Mira

A Nidhal GUESSOUM

Je dédie cet humble travail

D. BENZAID

Remerciements

Je remercie Monsieur A. BOUCENNA, Professeur à l'Université Ferhat Abbas Setif 1 (UFAS1), de m'avoir honoré de présider le jury et d'avoir accepté de juger ce travail.

Lorsque, tout au début de ce travail, j'ai rencontré pour la première fois Monsieur A. SEGHOUR, Directeur de Recherche au Centre de Recherche Nucléaire d'Alger (CRNA), je ne connaissais pas grand-chose sur la détection des neutrons. Il m'a fait initier non seulement au sujet qu'il a proposé, mais aussi et surtout au domaine de la neutronique tout entière : d'abord par ses conseils permanents, par toute la documentation qu'il a mise à ma disposition et enfin par sa belle patience, que j'appréciais beaucoup. Je lui exprime toutes mes reconnaissances d'avoir suivi l'aboutissement graduel du travail, partant du plus petit code FORTRAN jusqu'à la rédaction finale du manuscrit.

Antonio BORRAS, enseignant chercheur à l'université des Îles Baléares (Espagne) a grandement contribué à l'aboutissement de ce travail de thèse. Qu'il reçoive ici mes respects, mes vifs remerciements et surtout ma plus profonde gratitude pour toute son aide précieuse qu'il a déployée en m'accueillant durant toute une année au sein de son laboratoire Environmental Radioactivity Laboratory (LaboRA).

J'adresse mes vifs remerciements à Monsieur M. FOUKA, Maître de Recherche A au Centre de Recherche en Astronomie, Astrophysique et Géophysique (CRAAG), pour ses remarques recommandations qui m'ont été fructueuses et très bénéfiques et d'avoir accepté de faire partie du jury.

Je tient à remercier Monsieur F. KHARFI, Professeur à l'UFAS1, d'avoir accepter de juger ce travail.

Monsieur A. BELLAFRITES, Professeur à l'université de Jijel a montré un grand intérêt quant au contenu de ce travail, ses remarques et critiques m'ont été très bénéfiques,

qu'il en soit vivement remerciée.

Je ne saurait comment exprimer mes remerciements à mon frère et ami S. BENTRIDI Maître de Conférence à l'Université Djilali BOUNAAMA Khemis Miliana pour son aide et soutien permanents tout au long de ce travail.

Enfin, je tiens à remercier tous mes amis et collègues de l'Université Djilali BOUNAAMA KHEMIS MILIANA pour leur soutien amical.

Introduction Générale

Du fait de leur charge électrique nulle, les neutrons n'interagissent pas directement avec la matière comme les particules chargées et les rayonnements électromagnétiques le font par le biais des forces coulombiennes. Par conséquent, il peuvent traverser des distances importantes dans la matière avant d'induire des réactions. La seule façon pour que les neutrons interagissent avec la matière est l'intervention des forces nucléaires fortes. Pour ce faire un neutron doit s'approcher de très près du noyau pour que ces interactions aient lieu. L'interaction dans ce cas peut donner naissances à des particules chargées. Ces particules contiennent toutes les informations nécessaires pour une description convenable à la situation de l'interaction. Pour étudier le comportement d'un faisceau de neutrons on est souvent ramener, dans la pratique, à utiliser des matériaux intermédiaires, appelés convertisseurs, qui permettent la conversion de l'énergie apportée initialement par les neutrons en des particules, généralement chargées, qui vont jouer ensuite le rôle de transmetteurs d'informations liées directement aux neutrons incidents.

Ces convertisseurs doivent remplir quelques conditions indispensables en fonction de l'utilisation de ces neutrons.

Parmi tous les convertisseurs de neutrons, le bore ^{10}B et le lithium ^{6}Li sont les plus répandus. Les réactions induites dans ces deux cas sont alors $^{10}B\,(n,\alpha)^{7}\,Li$ [39, 53, 52, 15, 29, 30, 48] et $^{6}Li\,(n,^{3}\,H)\,\alpha$ [35, 60].

L'objectif de ce travail de thèse est de simuler la détection de neutrons basée sur un convertisseur en bore et voir dans quelle mesure il est possible de reproduire par une simulation numérique valide un tel phénomène, sans passer par des codes de simulations commerciaux existants, tels que MCNPX qui exigent d'utiliser des algorithmes conçues au préalable. Après avoir introduit notre travail de thèse nous avons préférer de répartir le document en trois chapitres principaux. Dans le premier chapitre nous allons présenter les différents aspects de l'interaction des neutrons avec la matière. Nous y abordons particulièrement la notion de section efficace tout en détaillant les différents types de ce

paramètre nucléaire très important. L'utilisation des bases de données existants des sections efficaces exigent un traitement particulier de ces données, nous avons présenté la méthode de lecture de ces dernières pour les utiliser dans les calculs numériques.
Dans le deuxième chapitre nous allons présenter en détail le travail de simulation que nous avons achevé, qui consiste à suivre le faisceau de neutrons, neutron par neutron, depuis son arrivée sur la couche de bore, en passant par la création de paires de particules chargées jusqu'à la fin de parcours de ces derniers. Nous présentons le modèle adopter pour la simulation avec toutes les étapes que nous avons suivies pour aboutir à l'algorithmique que nous avons élaboré pour cette fin.
Le dernier chapitre est réservé pour présenter les résultats de notre code de simulation. Une discussion détaillée est introduite pour chaque résultat.

Chapitre 1

Interaction des Rayonnements avec la Matière

1.1 Interaction des Neutrons avec la Matière

Les neutrons sont des particules neutres, c'est là une forte raison qu'ils n'interagissent pas directement avec la matière, comme toutes les particules chargées le font, par le biais de l'interaction coulombienne. De ce fait ils doivent forcément s'approcher très près des noyaux du matériaux ralentisseurs pour que l'interaction nucléaire forte ait lieu. La manière dont le neutron interagit avec la matière se manifeste de plusieurs types d'interactions dont notamment la diffusion élastique, la réaction nucléaire et la capture radiative.

1.1.1 Classification des Neutrons

Les neutrons, de par leur diversité en termes d'énergie, peuvent être classés en plusieurs catégories différentes. L'énergie cinétique dans le cas classique non relativiste est donnée par la relation:

$$E_n = \frac{1}{2}mv^2 \tag{1.1}$$

dans le cas relativiste, la même énergie cinétique est exprimée par:

$$E_n = \frac{m_0c^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \tag{1.2}$$

Neutrons Froids

Ce sont des neutrons dont l'énergie: $E_n < 0.025$ eV. Dans ce cas, la température d'équilibre est tellement inférieure à la température ambiante que cette catégorie de neutrons soient sensible à la force de gravitation autour des énergies avoisinant les 10^{-7} eV.

Neutrons Thermiques

Pour une énergie: $E_n = 0.025$ eV, les neutrons se trouvent en équilibre thermodynamique avec la température ambiante du milieu. De tels neutrons ont une énergie cinétique moyenne satisfaisant à la statistique de Maxwell-Boltzmann:

$$E_n = \frac{3}{2}kT \tag{1.3}$$

Neutrons Epithermiques

Il s'agit de neutrons dont l'énergie est comprise dans l'intervalle 0.5 eV$< E_n <$1 keV.

Neutrons Intermédiaires

Ce sont des neutrons avec des énergies appartenant à l'intervalle 1 keV$< E_n <$500 keV. Cette gamme des neutrons est d'une importance primordiale car les sections efficaces y varient rapidement en fonction de leurs énergies d'incidence. Elle comprend la région des résonances.

Neutrons Rapides

On parle de neutrons rapides lorsque l'énergie se situe dans l'intervalle: 0.5 MeV$< E_n <$20 MeV. Ces neutrons sont issus de la fission (spontanées ou induites) des noyaux lourds.

Neutrons Ultra Rapides

Au delà de l'intervalle précédent lorsque l'énergie du neutron atteint des valeurs de l'ordre de quelques dizaines de MeV: 20 MeV$< E_n <$50 MeV, on parle de neutrons ultra-rapides.

Neutrons Relativistes

Tout neutron avec une énergie: $E_n >$50 MeV.

1.1.2 Sources de Neutrons

Les neutrons sont produits d'une manière naturelle ou artificielle. On citera les sources de neutrons les plus connues, à savoir:

Source à Fission

La fission nucléaire, qu'elle soit naturelle ou induite, est l'une des sources de neutrons la plus répandue, voire la plus utilisée de par son importance dans plusieurs applications comme c'est la cas des réacteurs nucléaires. En effet, la fission donne lieu à de noyaux de masses moyennes (appelés produits de fission) accompagnés d'un certains nombres de neutrons prompts. Ces derniers sont émis dans une gamme d'énergie s'étalant de $0MeV$ jusqu'à $20MeV$, selon un spectre caractéristique qui traduit la distribution de cette population neutronique. On peut citer quelques éléments lourds connus par cette propriété comme c'est le cas de $^{233,235,238}U(n,f)$ et $^{238}Pu(n,f)$ mais aussi pour la fission spontanée du ^{252}Cf [32].
La **Fig.**1.1 représente un spectre typique d'une source de fission induite par des neutrons thermiques.

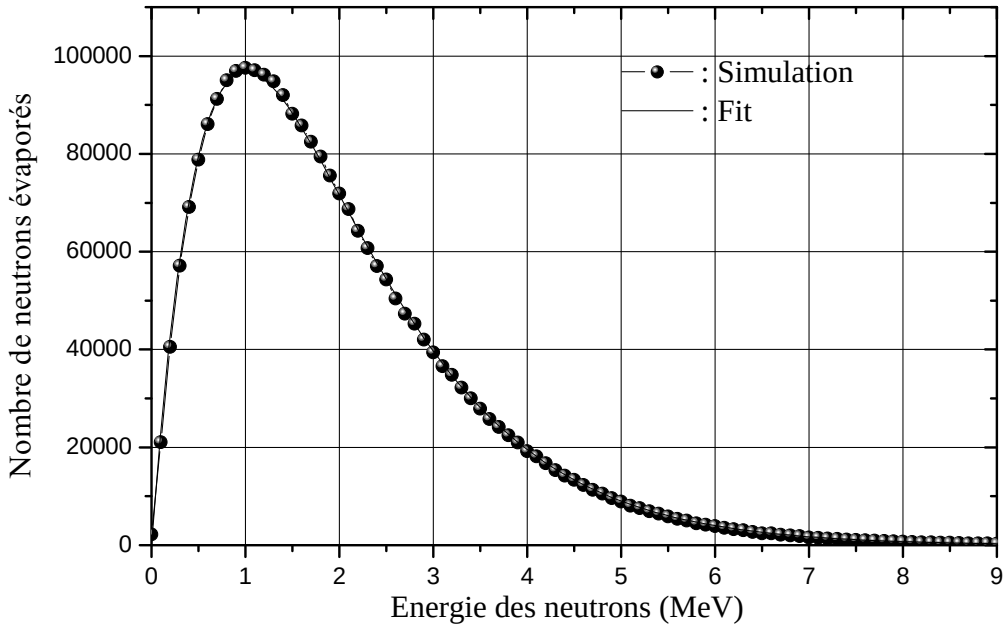

Figure 1.1: Spectre de neutron issu de la fission thermique du $^{250}_{98}Cf$ lors de la réaction $^{249}Cf(n_{th}, f)$.

L'allure représentée par l'ensemble des points dans la **Fig.** 1.1 représente la distribution des neutrons issus de la fission thermique du ^{250}Cf induite par des neutrons thermiques, reproduite par une simulation Monte-Carlo qu'on a développée dans le cadre d'une étude du phénomène de l'évaporation de ces neutrons prompts issus de la fission du ^{250}Cf. La même allure peut être reproduite par une distribution de type $Weisskopf$ [5]:

$$N(\varepsilon_n) = (0.263 \times 10^6)\ \ \varepsilon_n \exp\left(-\frac{\varepsilon_n}{T}\right) \tag{1.4}$$

où la température moyenne T est de 1 MeV. Notons que cette valeur correspond à une énergie d'excitation du noyau fissionnant de l'ordre de $30MeV$. Dans ce cas de figure le nombre total de neutrons évaporés autour de 4. Cette valeur est en bon accord avec l'expérience. De plus, la courbe ne présente aucune structure prouvant ainsi le bon tirage aléatoire des énergies cinétiques ε_n des neutrons [5].

Sources Radioactives

Etant donné que le noyau fissionnant se scinde en deux fragments plus légers tout en émettant, en plus des neutrons prompts, les produits de fission, souvent obtenus dans

un état excités se désexcitent par l'émission de neutrons, dits retardés. En particulier, le cas du californium-252 ($^{252}_{98}Cf$) qui est intéressant du fait qu'il est à la fois une source de neutron de fission et de la radioactivité des produits de fission. Dans ce cas le flux neutronique s'étale sur l'intervalle $10^6 - 10^9$ neutrons/s.

Sources Radio-Isotopes (α,n)

Peu après la découvert du neutron en 1932 par Chadwick par le biais de la réaction:

$$^4_2\alpha + ^9_4 Be \longrightarrow ^{13}_6 C^* \longrightarrow ^{12}_6 C + ^1_0 n \tag{1.5}$$

beaucoup de travaux ont été menés pour trouver d'autres sources de neutrons basées sur les résultats de l'expérience de Chadwick. En effet ce type de sources de neutrons sont fabriquées à partir d'éléments radioactifs émetteurs-α enveloppés par des couches de matière particulière de quelques éléments de numéros atomiques généralement faibles. Chadwick utilisa le polonium ^{210}Po. D'autres radio-éléments lourds émetteurs alpha sont également utilisés tels que l'américium, le plutonium, et le radium.
Le procédé de fabrication de ces sources est très simple, il suffit d'envelopper l'élément radioactif d'une couche de matériaux adéquats légers. Pour les éléments légers le béryllium et le lithium sont les plus répandus [59]. Les sources sont alors appelées $Am-Be$, $Pu-Be$ ou $Am-Li$ ou alors $Ra-Be$ [32]. Dans le cas du lithium la réaction suivante est produite:

$$^4_2\alpha + ^7_3 Li \longrightarrow ^{10}_5 B + ^1_0 n \tag{1.6}$$

Les sources basées sur le béryllium sont favorisées du fait que le taux de neutrons produits est maximal [35].

Sources de Photo-Neutrons

La production de neutrons peut être également provoquée par le bombardement de quelques noyaux atomiques en utilisant des rayon γ. Deux noyaux atomiques seulement sont utilisés dans la pratique: le ^9Be et ^2H [35].

$$^9_4Be + h\nu \longrightarrow ^8_4 Be + ^1_0 n \quad Q = -1.665 \text{ MeV} \tag{1.7}$$

$$^2_1H + h\nu \longrightarrow ^1_1 H + ^1_0 n \quad Q = -2.225 \text{ MeV} \tag{1.8}$$

Ces réactions sont endothermiques, de ce fait des photons mono-énergétiques produisent un groupes de neutrons mono-énergétiques. D'après les lois de conservation de l'énergie et la quantité de mouvement l'énergie de ces neutrons est donnée par [64]:

$$E_n = \frac{A-1}{A}\left[E_\gamma - Q - \frac{E_\gamma^2}{1862\,(A-1)}\right] + \delta \tag{1.9}$$

où E_n est l'énergie du neutron en MeV, A est le nombre de masse de la cible, E_γ est l'énergie du rayonnement γ en MeV, et Q est le bilan d'énergie également en MeV de la réaction (γ, n) en question. La quantité δ représente la dispersion en énergie qui reste relativement faible; fonction de l'angle θ qui défini la direction du neutron éjecté par rapport à l'axe d'incidence du rayonnement γ. Elle est donnée par:

$$\delta \cong E_\gamma \left[\frac{2\,(A-1)\,(E_\gamma - Q)}{931 \times A^3}\right]^{\frac{1}{2}} \cos(\theta) \tag{1.10}$$

Réactions Nucléaires

Réactions Nucléaires Produites par des Particules Chargées Accélérées

On a recours souvent à des générateurs de neutrons pour produire des faisceaux neutroniques d'intensités très exploitables intéressantes qui les rend plus rentables. En effet, des particules chargées sont accélérés (Accélérateur de Van de Graff) jusqu'à des énergies suffisantes pour provoquer des réactions nucléaires au sein des noyaux cibles. Dans ce cas de figure les réactions $D-D$ et $D-T$ sont les plus usitées [35]. Les réactions sont alors:

$${}^2_1H + {}^2_1H \longrightarrow {}^3_2He + {}^1_0n \quad Q = +3.183 \text{ MeV} \tag{1.11}$$

$${}^2_1H + {}^3_1H \longrightarrow {}^4_2He + {}^1_0n \quad Q = +17.588 \text{ MeV} \tag{1.12}$$

Les faisceaux de neutrons produits dans les deux réactions sont mono énergétiques, deux valeurs respectives 2.45 MeV pour la première et 14.1 MeV pour la deuxième.

1.1.3 Sections Efficaces d'Interaction

La section efficace est la probabilité pour qu'une interaction binaire puisse avoir lieu. En terme de l'utilité de cette grandeur on distinguera quatre classes de sections efficaces:

Section Efficace Microscopique

A l'échelle des particules mises en jeu dans une interaction binaire, on parle de section efficace microscopique qui traduit la probabilité d'occurrence de telle interaction et qui dépend uniquement des propriétés intrinsèques de la particule incidente et la cible, notée σ . Les figures **Fig.**1.2, **Fig.** 1.3 et **Fig.** 1.4 montrent des exemples de sections efficaces microscopiques pour les réactions $^{6}Li(n,T)^{4}He$, $^{10}B(n,^{4}He)^{7}Li$ et $^{249}Cf(n,totalefission)$ respectivement [21].

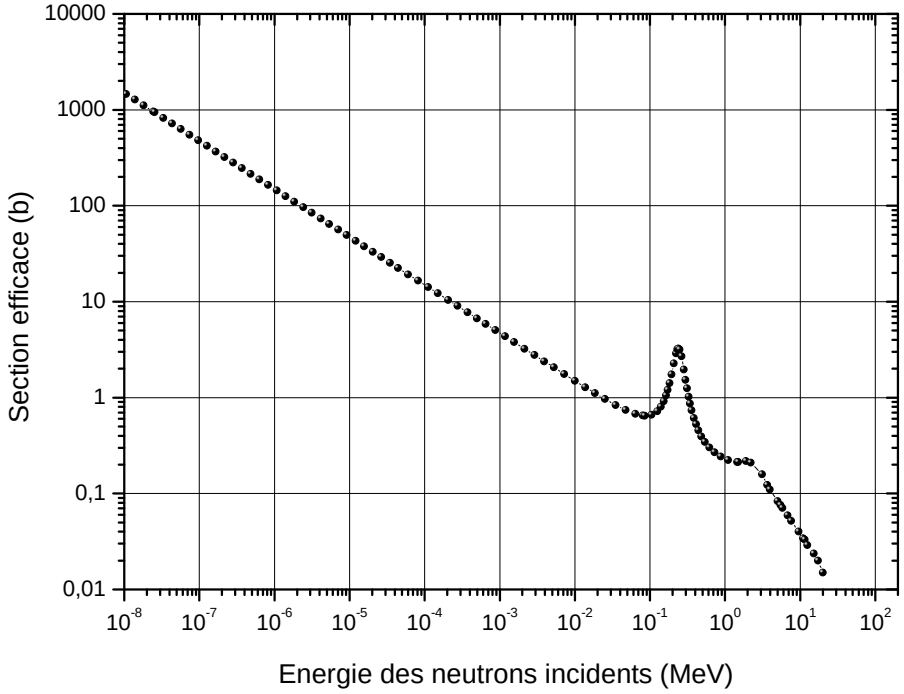

Figure 1.2: Section efficace totale de la réaction $^{6}Li(n,T)^{4}He$.

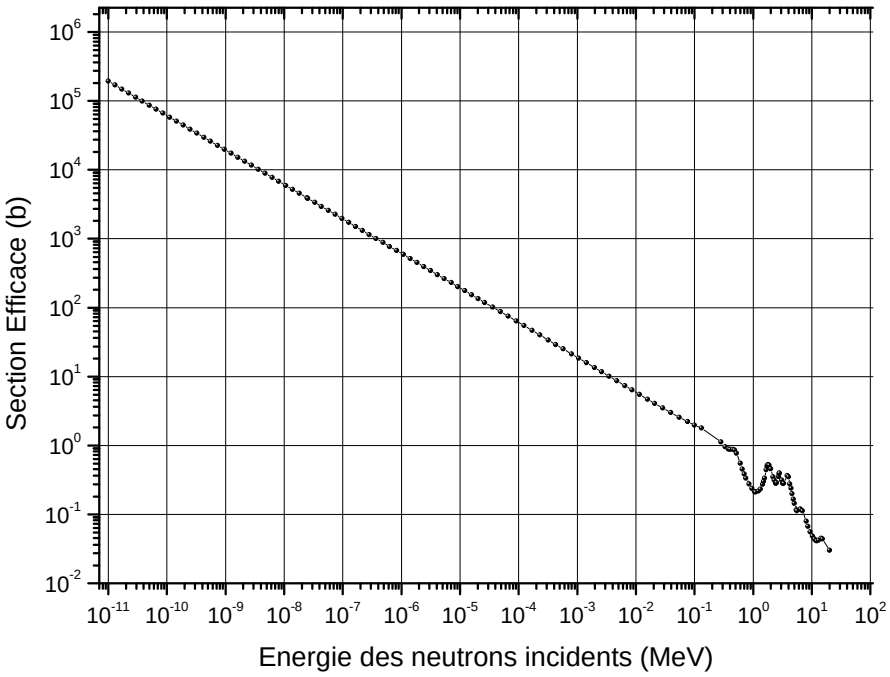

Figure 1.3: Section efficace microscopique de la réaction $^{10}B(n,^4He)^7Li$.

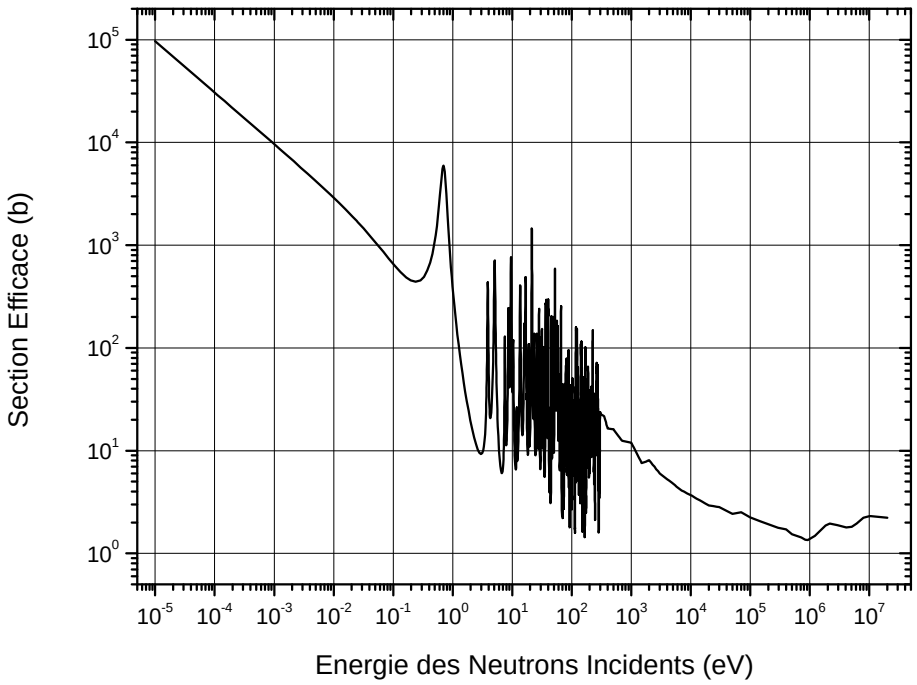

Figure 1.4: Section efficace microscopique de la réaction $^{249}Cf(n,f)$.

Section Efficace Macroscopique

La section efficace macroscopique est reliée à la section efficace microscopique par la relation:

$$\Sigma = n\sigma \tag{1.13}$$

où n est la densité atomique du matériau cible ($noyau/cm^3$), avec σ: la section efficace microscopique d'interaction exprimée en barn ($1b = 10^{-24}cm^2$).

Section Efficace Différentielle

Elle traduit la variation de la section efficace microscopique en fonction de l'angle d'émission de la particule d'intérêt à l'issue de la réaction. Elle est notée $\frac{d\sigma}{d\Omega}\,[barn/steradian]$.

Cette quantité, bien que mesurable est le plus souvent évaluée suivant des modèles qui produisent les valeurs numériques de cette grandeur fournie sous forme de tableaux. Le modèle le plus utilisé est celui de la section efficace absolue sous un développement en séries de polynômes de Legendre [22]:

$$\sigma\left(\mu = \cos\theta, E\right) = \frac{\sigma_s\left(E\right)}{2\pi}\sum_{\ell=0}^{N_L}\frac{2\ell+1}{2}a_\ell\left(E\right)P_\ell\left(E\right) \tag{1.14}$$

où $\sigma_s\left(E\right)$ est la section efficace de diffusion pour une énergie E, a_ℓ et P_ℓ sont les coefficients et les polynômes de Legendre. Les figures **Fig.**1.5, **Fig.**1.6 et **Fig.**1.7 sont des exemples de sections efficaces différentielles [21].

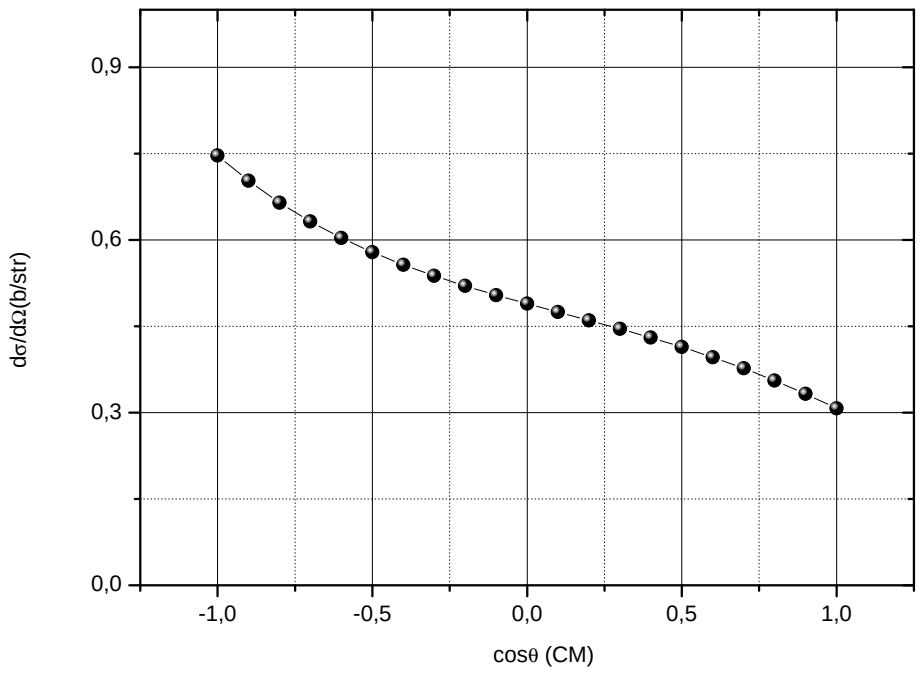

Figure 1.5: Section efficace différentielle de la réaction $^6Li(n, elastique)$ pour des neutrons d'énergie $E_n = 1.0$ eV.

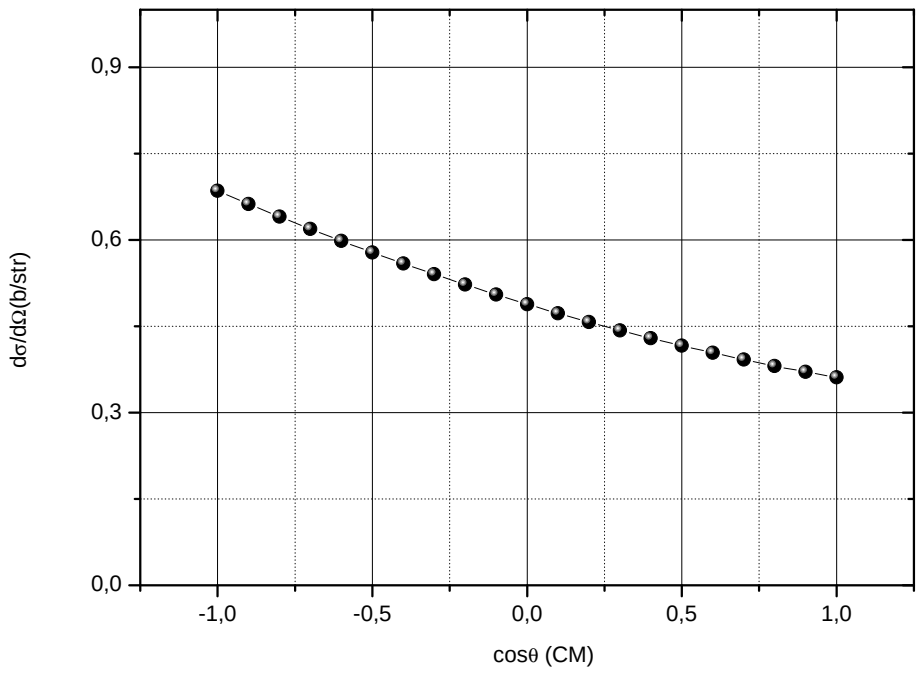

Figure 1.6: Section efficace différentielle de la réaction $^{10}B(n, elastique)$ pour des neutrons d'énergie $E_n = 1.0$ eV.

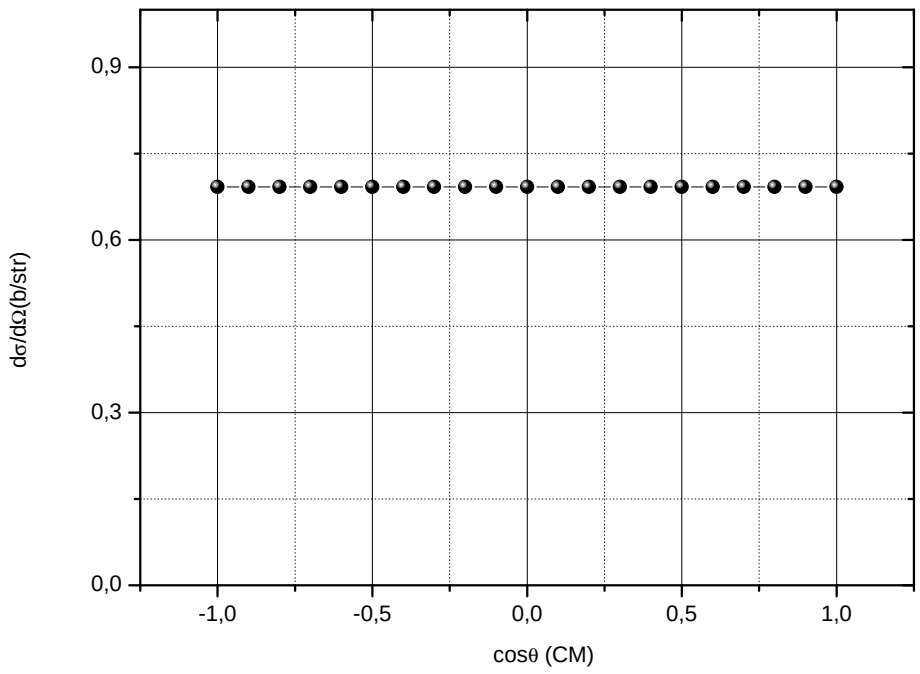

Figure 1.7: Section efficace différentielle de la réaction $^{249}Cf(n,f)$ pour des neutrons d'énergie $E_n = 2.5 \times 10^2$ eV.

Section Efficace Totale

Il s'agit de la section efficace qui prend en considération de tout type d'interaction qui peut avoir lieu entre la particule incidente et la cible.

Les figures **Fig.**1.8, **Fig.** 1.9 et **Fig.** 1.10 montrent des exemples de sections efficaces totales pour les réactions $^{6}Li(n, totale)$ [20], $^{10}B(n, totale)$ et $^{249}Cf(n, totale)$ [11] respectivement.

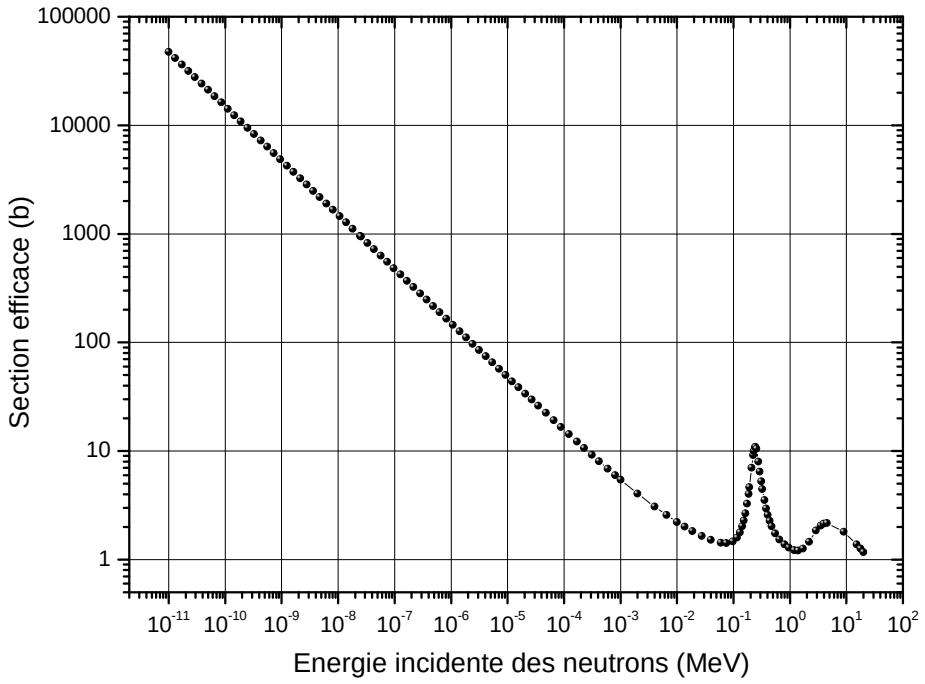

Figure 1.8: Section efficace totale de la réaction $^{6}Li(n, totale)$.

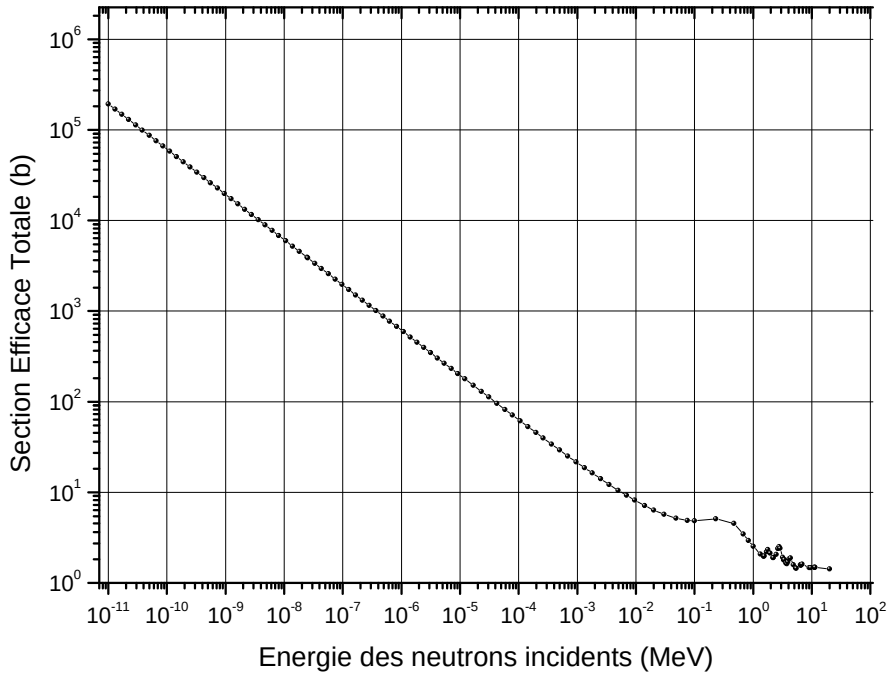

Figure 1.9: Section efficace totale de la réaction $^{10}B(n, totale)$.

Les sections efficaces peuvent avoir des figures beaucoup plus compliquée comme

celle de la réaction $^{249}Cf(n, totale)$ **Fig.**1.10 [11].

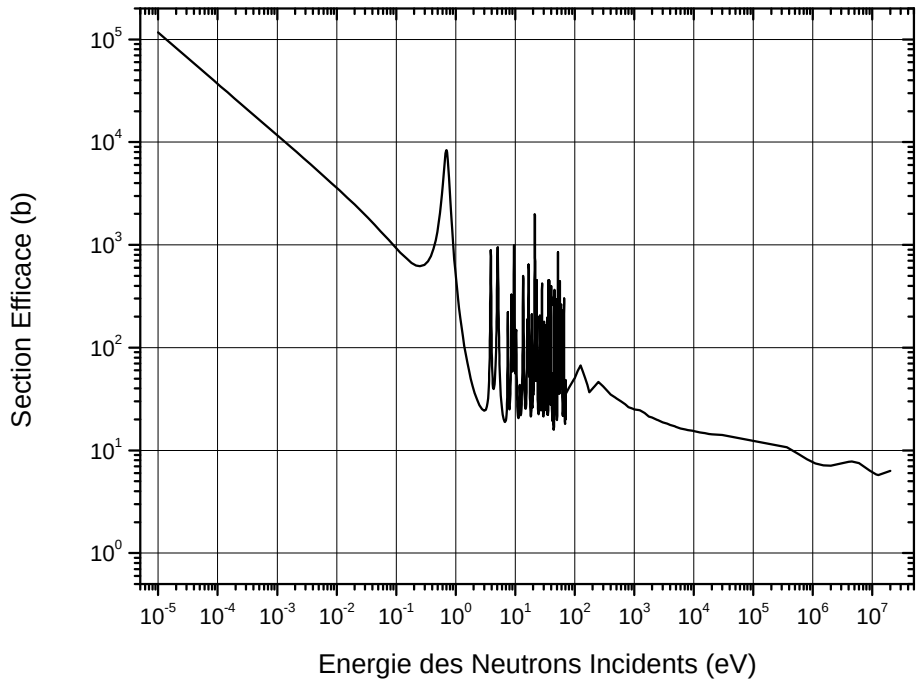

Figure 1.10: Section efficace totale de la réaction $^{249}Cf(n, totale)$.

La figure **Fig.**1.11 montre la section efficace total de la réaction $^{113}Cd(n, totale)$. On remarque rapidement l'importance de la valeur des sections efficaces correspondant aux plus basses énergie au dessous de 10 eV, en particulier celle relative à l'énergie du neutron 0.5 eV appelée énergie de coupure du cadmium [35, 19].

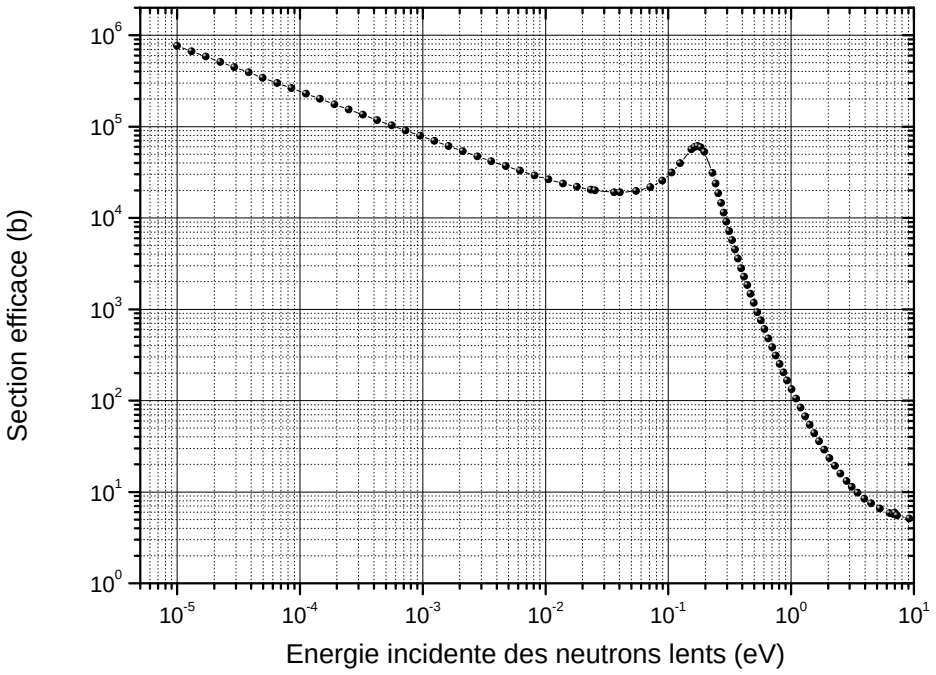

Figure 1.11: Section efficace totale de la réaction $^{113}Cd(n, totale)$.

1.1.4 Mécanismes d'Interaction

Le neutron étant une particule neutre, le mécanisme d'interaction binaire neutron-matière est exclusivement d'ordre nucléaire et dépend essentiellement de l'énergie du neutron incident et de la nature de la cible en question. Trois modes d'interaction sont distingués.

Diffusion Elastique

Par définition, la diffusion élastique est une interaction entre le neutron et le noyau cible qui conserve l'énergie cinétique totale tout en gardant les propriétés intrinsèques de chacune des deux particules. La cinématique de cette interaction est représentée dans la **Fig.**1.12.

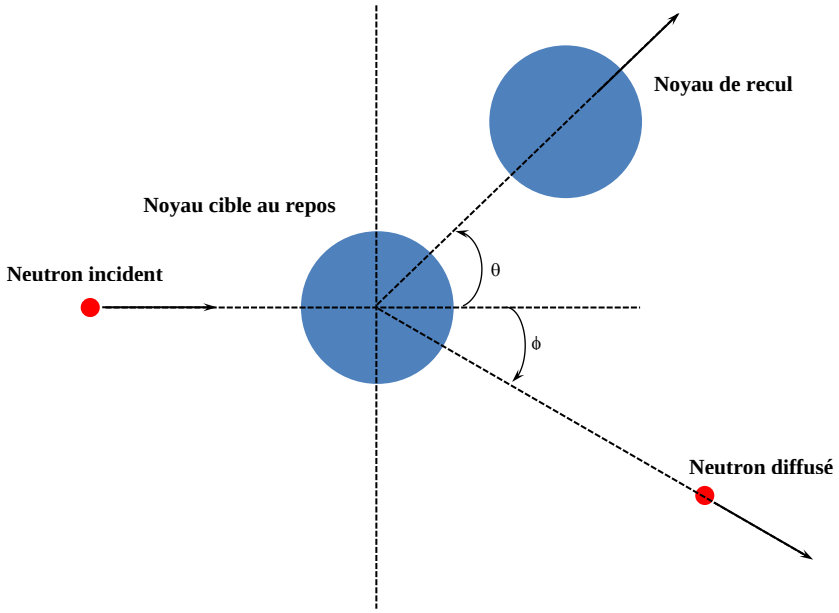

Figure 1.12: La diffusion élastique de neutrons, l'énergie cinétique totale est conservée.

Diffusion Inélastique

Suite à une diffusion inélastique qui ne conserve pas l'énergie cinétique, le noyau de recule est laissé généralement dans un état excité. Ce dernier se désexcite en se débarrassant de cet excès d'énergie sous forme de rayonnement.

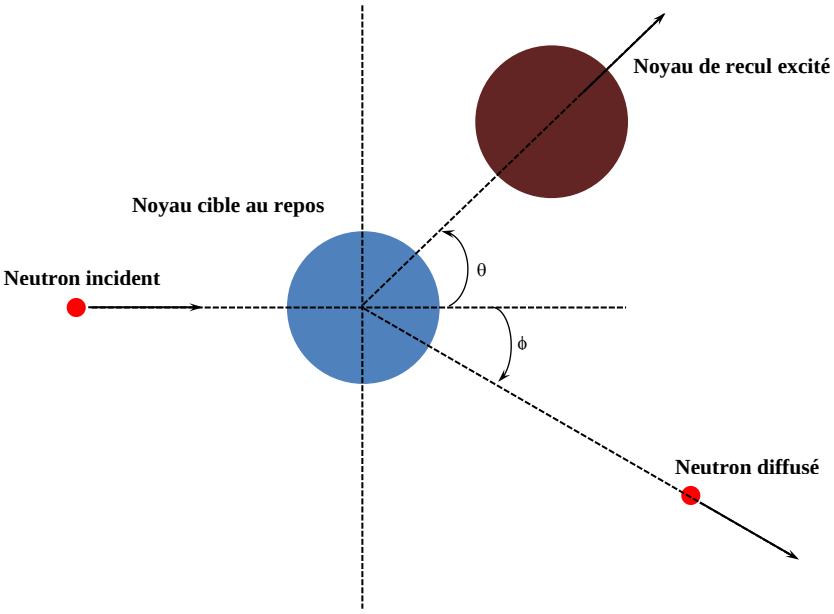

Figure 1.13: La diffusion inélastique de neutrons, l'énergie cinétique totale n'est pas conservée.

Capture Radiative

Dans ce cas le neutron est absorbé complètement par le noyau cible pour former un noyau composé avant qu'il ne se désexcite par la suite en émettant un rayonnement γ **Fig.**1.14.

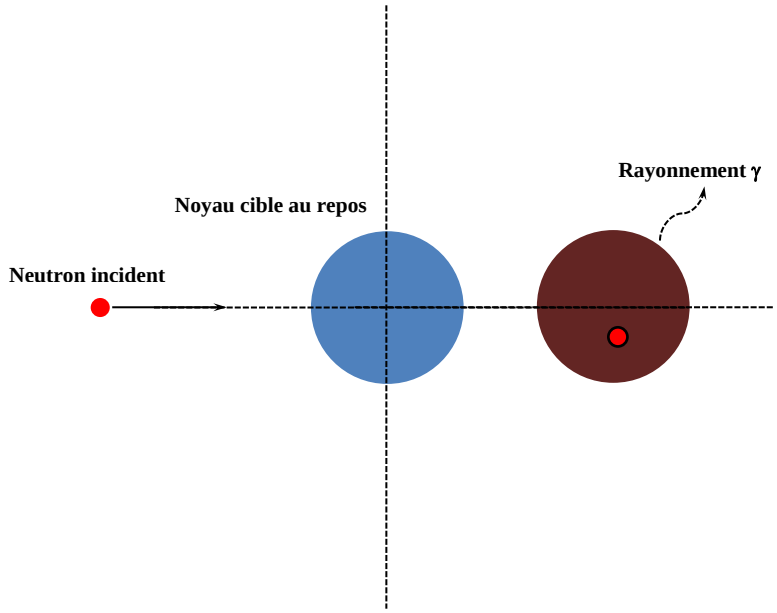

Figure 1.14: La capture radiative.

Réaction Nucléaire

Une réaction nucléaire se produit lorsque un neutron interagit avec un noyau cible, généralement au repos, et donne lieu à un nouveau noyau (appelé noyau composé) qui se désexcite en donnant deux noyaux plus légers stables ou excités. La nature des produits d'une réaction nucléaire, qu'on appelle voie ou canal de sortie dépend de plusieurs paramètres, dont les plus influents sont l'énergie du neutron incident et les sections efficaces d'interaction les plus dominantes.

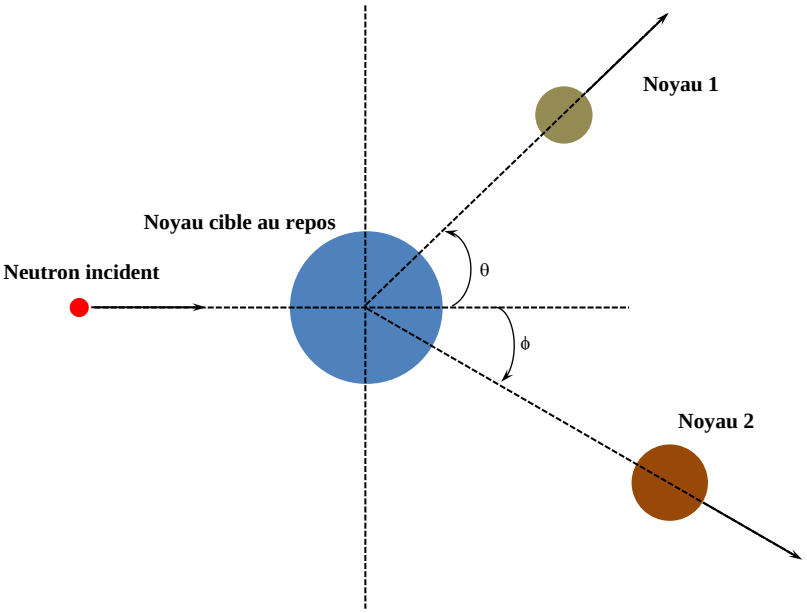

Figure 1.15: La réaction nucléaire.

1.1.5 Cinématique des Réactions Nucléaires à Basses Energies

En générale, une réaction nucléaire entre un neutron et un noyau cible, que l'on suppose au repos peut être donnée par la relation suivante:

$$^{1}n + ^{A}_{Z}X \longrightarrow ^{A_1}_{Z_1}Y_1 + ^{A_2}_{Z_2}Y_2 \tag{1.15}$$

en terme de masses sous la forme:

$$m_n + M \longrightarrow m_1 + m_2 \tag{1.16}$$

avec un bilan énergétique (en MeV) lorsque les masses sont données en unité de masse atomique, exprimé par la relation:

$$Q = (m_n + M - m_1 + m_2)c^2 \tag{1.17}$$

La valeur et le signe du bilan d'énergie Q jouent un rôle primordial sur le comportement et les propriétés des produits de réaction. En effet un neutron de masse m_n, d'énergie E_n et de quantité de mouvement $\overrightarrow{p}_n$ interagit avec une cible au repos de masse M, d'énergie $E_M = 0$ et de quantité de mouvement $\overrightarrow{p}_M = 0$, pour donner deux noyaux,

le premier de masse m_1, d'énergie E_1 et de quantité de mouvement $\overrightarrow{p}_1$ et le deuxième de masse m_2, d'énergie E_2 et de quantité de mouvement $\overrightarrow{p}_2$. Les quantités cinématiques sont exprimées dans le systèmes du laboratoire **Fig.**2.1.

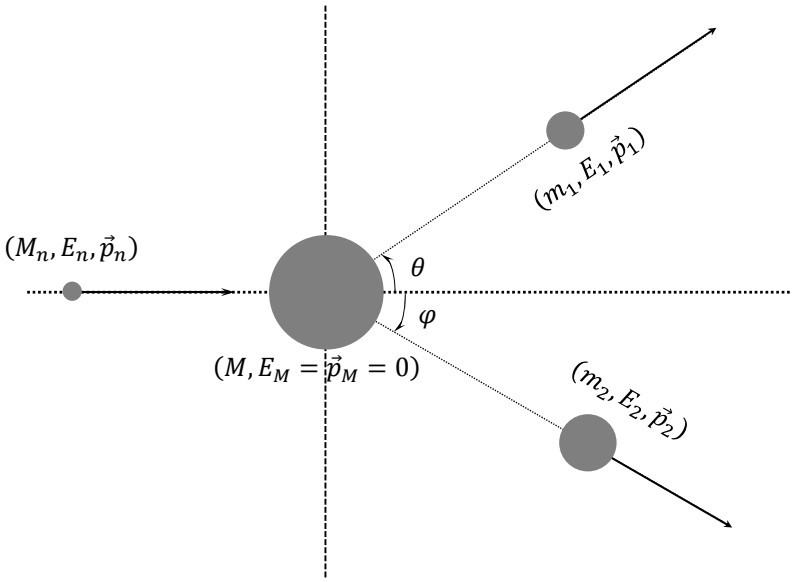

Figure 1.16: Cinématique des Réactions Nucléaires, système du laboratoire.

Les lois de conservation de l'énergie totale et de la quantité de mouvement permettent de calculer les énergies des produits de réaction comme:

$$\begin{aligned} E_1 &= \left\{ \frac{\sqrt{m_n m_1 E_n} cos\theta \pm \sqrt{m_n m_1 E_n \cos^2\theta + (m_1+m_2)\left[(m_2-m_n)E_n + m_2 Q\right]}}{m_1+m_2} \right\}^2 \\ E_2 &= \left\{ \frac{\sqrt{m_n m_2 E_n} cos\phi \pm \sqrt{m_n m_2 E_n \cos^2\phi + (m_2+m_1)\left[(m_1-m_n)E_n + m_1 Q\right]}}{m_2+m_1} \right\}^2 \end{aligned} \tag{1.18}$$

θ et ϕ sont les angles d'émission des deux particules, ils sont reliées par la relation:

$$\tan\phi = \frac{\sqrt{\dfrac{m_1 E_1}{m_2 E_2}}\sin\theta}{\sqrt{\dfrac{m_n E_n}{m_2 E_2}} - \sqrt{\dfrac{m_1 E_1}{m_2 E_2}}\cos\theta} \tag{1.19}$$

Il est d'usage d'exprimer les dernières relations dans le système du centre de masse. L'annexe A est une étude détaillée de ce dernier.

1.1.6 Phénomène d'Absorption des Neutrons. Atténuation

L'interaction des neutrons avec la matière est caractérisée par l'absorption de ses derniers par le matériau cible. L'atténuation des neutrons est donnée par la relation ci-dessous [14].

$$N = N_0 e^{-\Sigma x} \tag{1.20}$$

où N_0 est le nombre de neutrons incidents, x est la distance, N est le nombre de neutron s'échappant à l'absorption sur une distance x et Σ est la section efficace macroscopique, exprimée en unité de $longueur^{-1}$ et est exprimée par la relation (1.13):

$$\Sigma = n\sigma \tag{1.21}$$

où n est la densité atomique du matériau, i.e., nombre d'atomes cibles par unité de volume, et σ est la section efficace microscopique d'interaction exprimée en barn.

La **Fig.**1.17 montre la dépendance de l'atténuation de l'épaisseur du matériaux pour un faisceau de neutrons mono-énergétiques.

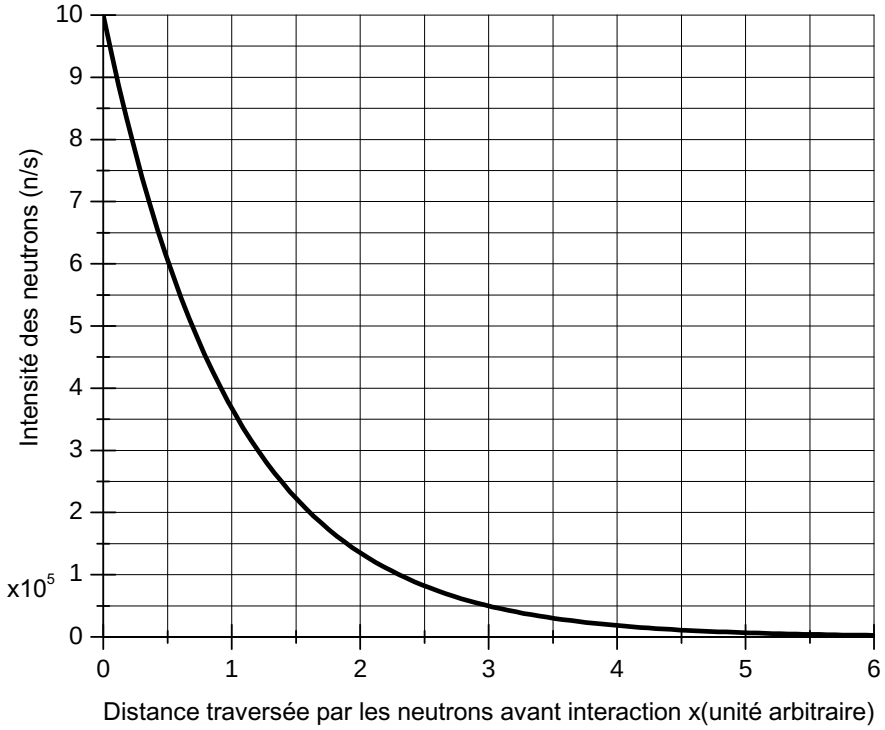

Figure 1.17: Atténuation Exponentiel des neutrons incidents sur un matériau cible donné.

1.2 Interaction des Particules Chargées Lourdes avec la Matière

L'étude de la détection d'un rayonnement dépend d'une compréhension approfondie de l'interaction des particules et des photons avec la matière, où ils déposent leur énergie par le biais de processus électromagnétiques ou nucléaires [37]. Le résultats de tels processus est une fraction de l'énergie qui est communiquée au matériau ralentisseur.
A l'intérieur du matériau, tout type de particules chargées en mouvement est susceptible de perdre une partie ou la totalité de son énergie. Des particules plus lourdes que les électrons perdent leur énergie sous forme d'excitation et d'ionisation des atomes du milieu ralentisseur, les plus proches de leurs trajectoire. Pour provoquer une ionisation élémentaire il suffit que la particule incidente cède quelques eV à l'atome cible. La la succession d'un grand nombre d'ionisation que va subir cette particule incidente qui permettra le ralentissement progressif jusqu'à son arrêt total [57].

1.2.1 Perte d'énergie des particules chargées lourdes

Le processus de perte d'énergie induit par des particules chargée lourdes (i.e., des particules dont la masse est beaucoup plus lourde que celle de l'électron) a été étudié par Bohr (1930), Bethe(1930), Bloch (1933) et autres [37]. Pour une particule chargée incidente d'énergie E de nombre de masse A et de nombre atomique Z on définit la perte d'énergie par unité de longueur ou le pouvoir d'arrêt du milieu cible donnée est exprimé dans le système CGS de Gauss par la relation [37]:

$$-\frac{dE}{dx} = 0.1535\frac{\rho z^2 Z}{A\beta^2}\left\{ln\left[\frac{2mv^2W_m}{I^2\left(1-\beta^2\right)}\right]\right\}[MeV/cm] \tag{1.22}$$

où m est la masse de l'électron, W_m est le maximum d'énergie transférable par la particule incidente à un électron atomique, δ est une correction de l'effet de densité, U est un terme relatif aux électrons des couches intérieurs(K, L, ...), qui ne participent pas à la perte d'énergie, ρ est la densité volumique du matériau ralentisseur donnée par:

$$\rho = \frac{nA}{N_A} \tag{1.23}$$

où n est la densité atomique du matériau cible ($atomes/cm^3$) par unité de volume, et N_A est le nombre d'Avogadro. La valeur moyenne du potentiel d'ionisation I est donnée en

première approximation par l'équation:

$$I \approx 11.5 \times \left(1 + 1.9 \times Z^{-2/3}\right) 10^{-6} \tag{1.24}$$

Le signe moins dans l'équation (1.22) pour dE/dx indique la diminution de l'énergie de la particule.

1.3 Principes de Détection des Rayonnements Ionisants

La détection des rayonnements nucléaires et leurs mesure dépendent, principalement, de la nature même de ces rayonnements. La classification de ces rayonnements en deux grandes catégories, à savoir particules chargées et non chargées, fait que les méthodes de mesures sont classées, elles aussi, en méthodes directes et indirectes.

Le principe de détection dans les deux méthodes est le même, un rayonnement nucléaire est détecté par la collection et la mesure de la charges électrique qu'il produit lors de son passage dans le matériau cible (milieu actif du détecteur) subissant ainsi une perte de son énergie initiale.

Les particules chargées, comme les électrons, les protons et les particules alpha interagissent directement par ionisation et excitation des atomes des matériaux cibles. Cette interaction produit un signal électrique mesurable par un système électronique. Quant aux particules neutres comme les neutrons et les rayonnements γ, elles doivent effectuer d'abord une interaction intermédiaire (nucléaire et/ou atomique) en produisant des particules chargées qui vont jouer le même rôle que celui des rayonnements chargés directement mesurables.

Toutefois il faut noter que des similitudes peuvent exister entre des rayonnements appartenant à des catégories différentes. En effet, alors que les particules chargées et les γ interagissent, par le biais de l'interaction électromagnétique à l'échelle atomique, les neutrons quant à eux interagissent à une échelle nucléaire avec le milieu cible et par conséquent ils doivent s'approcher très près des noyaux pour que cette interaction ait lieu. Cette dernière caractéristique liées aux neutrons est exploitée dans le processus de détection en choisissant des matériaux convertisseurs de neutrons en particules chargées. En effet, le choix du matériau convertisseur est conditionné surtout par la finalité de l'usage du système détecteur, lui même est défini par la nature du faisceau neutronique.

Caractéristiques des Détecteurs de Rayonnements Ionisants

Un détecteur de rayonnements Ionisants est composé de deux parties principales. Une partie dite active, qui est la zone où le processus d'interaction aura lieu et une partie dite passive qui représente la chaîne électronique d'enregistrement, d'acquisition et de traitement du signale électronique émanant de la partie active. La **Fig.**1.18 est un schéma simplifié d'un système de détection. Plusieurs caractéristiques des détecteurs peuvent être discutées, mais les plus importantes sont citées ci-dessous.

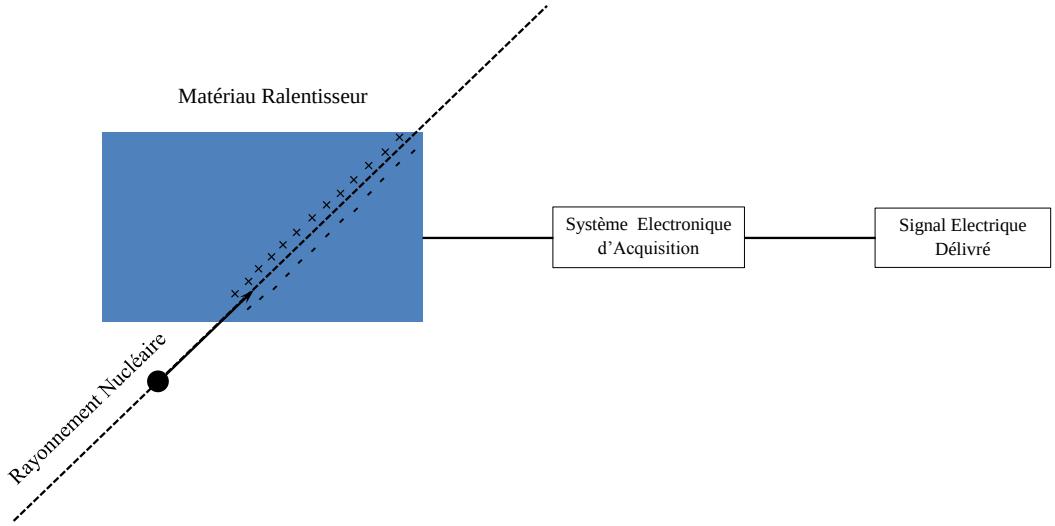

Figure 1.18: Schéma simplifié d'un système de détection de rayonnements nucléaires.

Résolution en Energie d'un Détecteur

L'une des propriétés les plus importantes d'un détecteur est sa résolution en énergie c'est son pouvoir de distinguer ou séparer un pic énergétique particulier sur sa fonction de réponse qui représente le spectre énergétique produit par la détection d'une source mono-énergétique. Cette résolution est quantifiée par la largeur à mi-hauteur du pic en question communément appelée $FWHM$ (Full Width at Half Maximum), i.e., largeur à mi-hauteur.

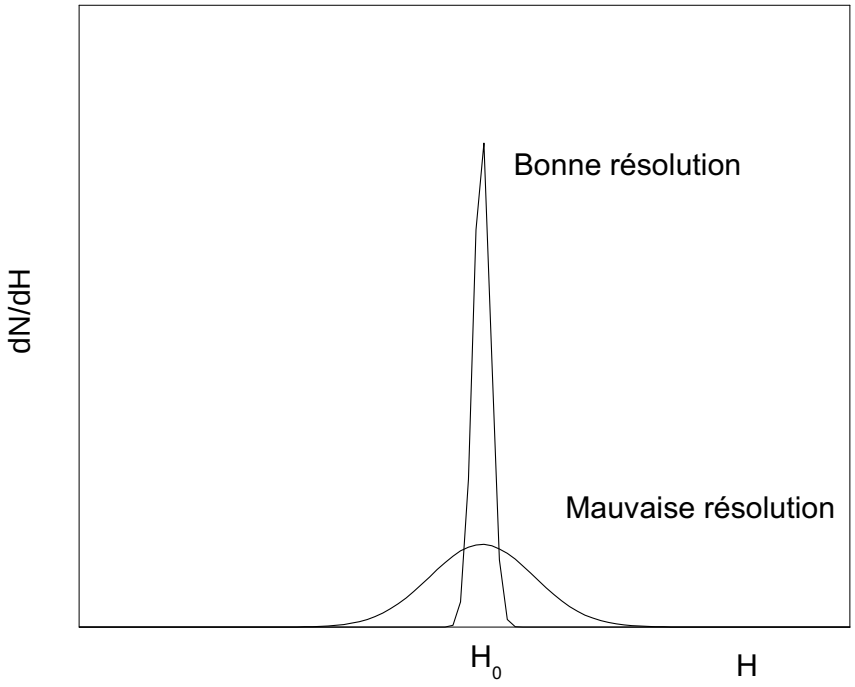

Figure 1.19: Fonction de réponse d'un détecteur avec mauvaise et bonne résolution en énergie.

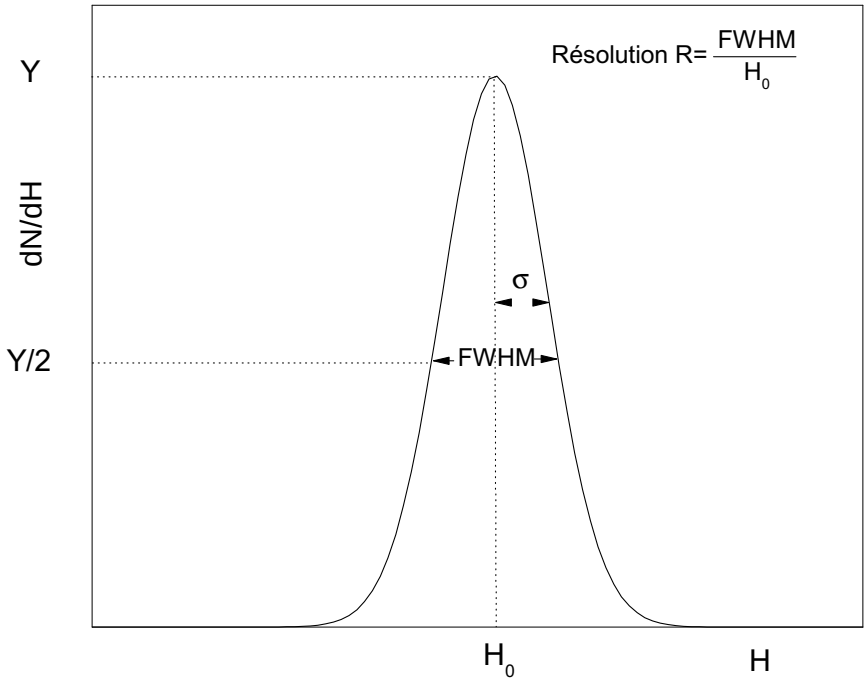

Figure 1.20: Définition de la résolution en énergie. Pour des pics de forme gaussienne avec une déviation standard σ, le FWHM est donné par 2.35σ

On définit également la résolution relative du détecteur:

$$R = \frac{FWHM}{E_0}\,(\%) \tag{1.25}$$

où E_0 es l'énergie du rayonnement incident.

Efficacité de Détection

C'est un paramètre décisif pour ce qui est de la qualité d'un détecteur de rayonnement. Elle est définie comme le rapport du nombre de particules ionisantes réellement détectées rapportées au nombre total arrivant sur le détecteur. On distingue deux types d'efficacités [35]:

Efficacité Absolue

Elle dépend du détecteur et de la géométrie source-détecteur.

$$\epsilon_{abs} = \frac{Nombre\ d'impulsion\ enregistrées}{Nombre\ de\ Radiations\ Emises\ par\ la\ Source} \tag{1.26}$$

Efficacité Intrinsèque

Elle dépend de la géométrie du détecteur.

$$\epsilon_{int} = \frac{Nombre\ d'impulsion\ enregistrées}{Nombre\ de\ Radiations\ Arrivant\ sur\ le\ Détecteur} \tag{1.27}$$

Temps Mort d'un Détecteur

Indépendamment des qualités du détecteur et d'électronique qui l'accompagne la vitesse d'enregistrement du détecteur atteint toujours sa limite. En effet le temps qui sépare deux événements successifs dans le cas où le détecteur est aveugle (n'enregistre aucun signal même si ce dernier existe) est appelé temps mort.

1.3.1 Détecteurs de neutrons

D'après ce qui a été discuté plus haut la détection des neutrons est strictement liée à l'interaction nucléaire dont le type dépend principalement de l'énergie du neutron à détecter. Ainsi les détecteurs de neutrons, d'une part sont conçus en fonction du mécanisme d'interaction neutron-matière le plus efficace pour un faisceau neutronique donné et d'autre part leur conception qui doit prendre en considération le spectre énergétique de ce dernier. D'où on distingue deux grandes classes de détecteurs de neutrons, à savoir:

Détecteurs de neutrons lents

Un détecteur de neutrons lents est conçu de manière à produire des particules chargées lourdes à travers de réactions nucléaires exothermiques. La distance traversée par les produits de réaction dans le détecteur a une importance primordiale. En effet, la portion de l'énergie détectée dépend grandement de la taille de la partie active du détecteur qui doit être suffisamment large pour détecter l'énergie déposée par les produits de réaction [35]. Si le matériau utilisé est solide le procédé de fabrication est plus simple et la taille à former est plus facile contrairement aux détecteurs à base gazeuse qui demandent un plus grand soin pour atteindre des tailles plus ou moins pratiques pour la détection.
Parmi les réactions les plus utilisées dans le cas des neutrons lents nous citons la réaction $^{10}B(n,\alpha)$, de section efficace très importante de $3842b$, mais également les réactions $^{6}Li(n,\alpha)$ de section efficace $940b$ et $^{3}He(n,p)$ de section efficace $5331b$ [11].
La réaction de capture de neutron de la part du gadolinium $^{157}Gd(n,\gamma)^{158}Gd$ et les réactions de fission induites par des neutrons sont également utilisées. La première produit

des électrons rapides facilement convertibles en signaux électriques quant à la deuxième elle donne des produits de fission également facilement enregistrables.
Nous citons également les détecteurs basés sur les réactions produites sur le bore. Les plus répandus sont les tubes proportionnels BF_3 favorables pour leur concentration en bore la plus élevée.

Détecteurs de neutrons rapides

Les neutrons rapides peuvent provoquer les mêmes réactions que les neutrons lents. Néanmoins la section efficace décroît rapidement avec l'énergie des neutrons incidents ce qui rend l'efficacité de détection beaucoup moins importante que celle relatives aux neutrons lents. De ce fait d'autre méthodes de détections sont favorisées mais en règle générale on introduit des modifications sur les méthodes que nous avons déjà évoquées pour les neutrons lents mais aussi et surtout on emploie des méthodes complètement différentes pour atteindre une efficacité de détection importante acceptable.
Le processus de conversion le plus important utilisé pour les neutrons rapides est la diffusion élastique[35]. En effet, le neutron incident transfert une partie de son énergie cinétique au noyau diffusé donnant lieu à un noyau de recul. Le transfert d'énergie est trop faible dans le cas des neutrons lents. Par contre cette quantité est d'autant plus importante que l'énergie incidente dépasse l'ordre du keV et le noyau de recul est facilement détectable.
Les compteurs basés sur la modération des neutrons rapides sont utilisés. La modération des neutrons consiste à entourer, par exemple, le détecteur par quelques centimètres d'hydrogènes qui absorbent pratiquement toute l'énergie incidente des neutrons en les rendant en fin de compte des neutrons lents facilement détectables. La probabilité d'absorption devra croître rapidement avec l'accroissement de l'épaisseur du modérateur du fait de l'importance des section efficaces d'absorption qui sont plus importantes pour des neutrons d'énergies plus basses.
Ces facteurs font que l'efficacité des détecteurs de neutrons lents modérés avec une source ne neutrons mono-énergétique doit montrer un maximum pour des modérateurs d'épaisseur spécifique.

Détecteurs à scintillation

Les détecteurs à scintillation basés sur la détection des rayonnements lumineux bénéficient des produits de réactions qui sont des particules chargées et qui peuvent produire ces rayonnements dans la partie active du détecteur. La méthode permet la conversion de l'énergie déposée par les particules incidentes en photons lumineux qui à leurs tour produisent un signale enregistrable.

Détecteurs à semi-Conducteurs

Les détecteurs à semi-conducteurs prennent en considération le grand avantage du gap d'énergie entre la bande de valence et la bande de conduction qui distingue ce type de matériaux. Cette propriété fait qu'une faible quantité d'énergie permet de déplacer les électrons de la bande de valence à la bande de conduction en laissant derrière des trous. L'application d'un champ électrique les électrons et les trous migrent en produisant un signale électrique mesurable. En effet, un gap de $E_g = 1.12eV$ seulement est suffisant pour exciter un électron de la bande de valence à la bande de conduction. Le trou produit par le déplacement de l'électron dans la bande de valence possède une charge électrique positive [37]. L'efficacité des détecteurs au silicium pour des particules chargées est importante. Pour les neutrons il faut tout de même utiliser des convertisseurs adéquats.

Chapitre 2

Modélisation et Simulation du Problème de la Détection des Neutrons

2.1 Rappels Théorique sur les Méthodes Monte-Carlo

2.1.1 Introduction

Le terme méthodes de Monte-Carlo, désigne une famille de méthodes algorithmiques visant à calculer une valeur numérique approchée en utilisant des procédés aléatoires, c'est-à-dire des techniques probabilistes [66]. Le nom de ces méthodes, qui fait allusion aux jeux de hasard pratiqués à Monte-Carlo, a été inventé en 1947 par Nicholas Metropolis, et publié pour la première fois en 1949 dans un article coécrit avec Stanislaw Ulam [44].

Les méthodes de Monte-Carlo sont particulièrement utilisées pour calculer des intégrales en dimensions plus grandes que 1 (en particulier, pour calculer des surfaces et des volumes). Elles sont également couramment utilisées en physique des particules, où des simulations probabilistes permettent d'estimer la forme d'un signal ou la sensibilité d'un détecteur. La comparaison des données mesurées à ces simulations peut permettre de mettre en évidence des caractéristiques inattendues, par exemple de nouvelles particules.

La méthode de simulation de Monte-Carlo permet aussi d'introduire une approche statistique du risque dans une décision financière. Elle consiste à isoler un certain nombre de variables-clés du projet, tels que le chiffre d'affaires ou la marge, et à leur affecter une distribution de probabilité. Pour chacun de ces facteurs, un grand nombre de tirages

aléatoires est effectué dans les distributions de probabilité déterminées précédemment, afin de trouver la probabilité d'occurrence de chacun des résultats.

Le véritable développement des méthodes de Monte-Carlo s'est effectué sous l'impulsion de John Von Neumann et Stanislaw Ulam notamment, lors de la Seconde Guerre mondiale et des recherches sur la fabrication de la bombe atomique. Ils ont utilisé ces méthodes probabilistes pour résoudre des équations aux dérivées partielles dans le cadre du projet Monte-Carlo N-Particle transport (MCNP). Les méthodes $Monte-Carlo$ permettent des simulations de phénomènes physiques ayant un caractère probabiliste. La problématique qui se pose souvent dans ce genre de problème est d'approcher une grandeur physique μ difficile à évaluer [1]. On connaît une variable aléatoire X, dont l'espérance mathématique $E(X)$ approche la grandeur μ avec une précision acceptable. L'algorithme d'évaluation de $f(.)$ est plus simple (en complexité algorithmique) que celui de la grandeur μ à l'aide d'autres méthodes. La méthode repose sur l'utilisation d'une suite de variables aléatoires afin d'estimer la solution du problème [47].

2.1.2 Nombres aléatoires et variables aléatoires

2.1.3 Distribution rectangulaires

Les méthodes de Monte-Carlo utilisent des nombres aléatoires, i.e., tirés au sort obtenus en utilisant plusieurs techniques, par exemples celles utilisant des tables. Les nombre aléatoires fournis par les calculateurs sont des nombres pseudo-aléatoires : ils diffèrent des nombres aléatoires en ce que, lorsque le ou les premiers sont arbitrairement choisis, toute la suite est complètement déterminée : la séquence est alors reproductible, ce qui permet de vérifier les programmes dans lesquels ils sont utilisés. Le point important est que leurs propriétés sont identiques à celles des nombres aléatoires. Ceci en fait ne peut être prouvé, mais on peut soumettre les nombres pseudo-aléatoires aux mêmes tests que les nombres aléatoires, et les utiliser si les testes sont satisfaits. Une des formules les plus utilisées pour engendrer une suite de nombres pseudo-aléatoires à distribution uniforme est :

$$x_i = ax_{i-1} + c \text{ (modulo m)} \tag{2.1}$$

ceci signifie que le nombre x_i est égal au reste de la division par m de $ax_{i-1} + c$, où m, a et c sont des constantes. Les nombres obtenus ont une distribution uniforme (dite aussi rectangulaire). La plupart des calculateurs donnent des séquences de nombres pseudo-

aléatoires à distribution rectangulaire sur $[0,1]$. Ces nombres r_i sont obtenus facilement à partir des x_i donnés par l'équation (2.1) en remarquent que le reste d'une division est inférieur au diviseur. Par suite : $r_i = x_i/(m-1)$.

Les nombres aléatoires peuvent être générés à partir de processus physiques aléatoires ou à partir de tableaux élaborés pour ce but [17].

Dans la pratique les méthodes $Monte-Carlo$ utilisent des séries de nombres pseudo aléatoires, c'est à dire des nombres qui satisfont aux mêmes conditions que les nombres aléatoires mais qui sont générés par des algorithmes (déterministes) qui génèrent toujours la même série pour une condition initiale fixe (donnée de départ).

On a souvent besoin de nombres aléatoires r distribués uniformément sur l'intervalle $[0,1]$. Pour engendrer une distribution de probabilité uniforme sur un intervalle quelconque $[a,b]$, on associe à tout nombre r un nombre ξ donné par:

$$\xi = a + (b-a)\, r \tag{2.2}$$

2.1.4 Distributions non rectangulaires : méthodes directes

On a souvent besoin d'engendrer des fonctions de distribution, c'est à dire d'engendrer des nombres aléatoire ξ dont la distribution n'est pas uniforme entre a et b (a et/ou b pouvant être infinis), mais vaut $f(x)$. Ceci signifie que, si on engendre un tel ensemble de nombres ξ,la proportion de ces nombres tels que $x \leq \xi \leq x+dx$ vaut $f(x)dx$. Une manière équivalente d'exprimer cela est de dire que la probabilité que ξ tombe dans l'intervalle $[x, x+dx]$ vaut f(x)dx. Soit F(x) la fonction de répartition de f(x), définie par :

$$F(x) = \int_a^x f(u)du \tag{2.3}$$

Pour $a \leq x \leq b$, on a $0 \leq F(x) \leq 1$. Etant donné un nombre aléatoire r à distribution uniforme sur $[0,1]$, un nombre aléatoire x on lui associe ξ défini par :

$$r = F(\xi) = \int_a^{\xi} f(u)\, du \tag{2.4}$$

La fonction de distribution de ξ, soit $g(x)$, est telle que :

$$dP = Prob\{x \leq \xi \leq x+dx\} = g(x)dx \tag{2.5}$$

La probabilité dP que ξ tombe dans l'intervalle dx est égale à celle pour que r tombe dans l'intervalle dF, qui vaut dF :

$$dP = dF = \frac{dF}{dx}dx = f(x)dx \tag{2.6}$$

comparant les équations (2.5) et (2.6), on voit que $f(x) = g(x)$. Par conséquent la variable aléatoire ξ suit la distribution $f(x)$. Cette technique est la manière la plus directe de générer des variables aléatoire suivant une certaine distribution. Elle peut être appliquée chaque fois que l'équation (2.4) a une solution analytique ou peut être résolue par rapport à ξ. Afin d'obtenir la distribution $f(x)$, il faut tout d'abord engendrer un grand nombre N de nombres aléatoires r et en déduire les nombres aléatoires associés ξ. Puis on compte combien de valeurs $\Delta n(x)$ de ξ sont situées dans l'intervalle $[x-\Delta x/2, x+\Delta x/2]$: on a alors : $\Delta n(x)/N = f(x)\Delta x$. Ainsi on peut construire l'histogramme de la distribution. Bien sûr, la précision obtenue est d'autant meilleure que N est plus grand et Δx plus petit.

Remarque :L'équation (2.4) montre que, lorsque ξ est distribué suivant $f(x)$, $r = f(x)$ suit une distribution rectangulaire sur $[0, 1]$. Souvent, la distribution $f(x)$ est connue à une fonction de normalisation près. Il faut alors travailler sur $P(x) = Af(x)$ avec A tel que :

$$\int_a^b p(x)dx = 1 = A = \int_a^b f(x)dx \tag{2.7}$$

On a alors :

$r = \int_a^\xi p(x)dx = A = \int_a^\xi f(x)dx$

$$r = \frac{\int_a^\xi f(x)dx}{\int_a^b f(x)dx} \tag{2.8}$$

Nous allons prendre comme exemple la distribution de Poisson de densité ρ. La fonction de distribution s'écrit :

$$f(t) = \rho e^{-\rho t} \tag{2.9}$$

Le temps moyen au bout duquel survient un événement (qui est aussi le temps moyen séparant deux événements successifs), s'écrit :

$$\bar{t} = \int_0^\infty t f(t)dt = 1/\rho \tag{2.10}$$

On a donc :

$$\bar{t} = \tau = 1/\rho \tag{2.11}$$

Une telle loi décrit par exemple la désintégration d'une source radioactive, l'émission d'électrons de la cathode d'une diode à vide, les instants de collision d'une particule soumise à des chocs aléatoires, etc...

On peut appliquer la relation (2.8) : un nombre r étant tiré d'une distribution rectangulaire sur $[0,1]$, on lui associe ξ tel que :

$$r = \frac{\int_0^{\xi} \rho e^{-\rho t} dt}{\int_0^{\infty} \rho e^{-\rho t} dt} = 1 - e^{-\rho \xi}$$

c'est à dire :

$$\xi = -\frac{1}{\rho} ln(1-r) \tag{2.12}$$

ou encore, puisque $1-r$ est aussi un nombre aléatoire à distribution uniforme sur $[0,1]$:

$$\xi = -\frac{1}{\rho} ln(r) = -\tau ln(r) \tag{2.13}$$

Les instants aléatoires ξ ainsi construits simulent les instants auxquels surviennent les événements poissoniens de densité ρ.

On peut montrer dans ce cas, que la variable aléatoire x suit la distribution $f(x)$.

Cette méthode peut être appliquée chaque fois que l'équation (2.4) a une solution analytique ou peut être résolu par rapport à x.

Un deuxième exemple très intéressant est celui de la construction d'une distribution gaussienne. L'intégrale de la fonction :

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \tag{2.14}$$

n'ayant pas d'expression analytique, on passe à deux dimensions, puis en coordonnées polaires $\{\rho, \theta\}$:

$P(x,y)dxdy = f(x)f(y)dxdy = \frac{1}{2\pi\sigma^2} exp[-(x^2+y^2)/2\sigma^2]dxdy$

$P(\rho,\theta)\rho d\rho d\theta = \frac{1}{2\pi\sigma^2} exp(-\rho^2/2\sigma^2)\rho d\rho d\theta$ la distribution sur θ est uniforme (coefficient de $d\theta$ indépendant de θ) : un nombre aléatoire r_1 sur $[0,1]$ donne donc (cf. équation (2.2)) $\theta = 2\pi r_1$. La distribution sur ρ vaut $P(\rho) = A\rho exp(-\rho^2/2\sigma^2)$ d'où, par le changement de variables $u = \rho^2/2\sigma^2$, un second nombre r_2.

$$r_2 = \left(\int_0^{\rho} e^{-\rho'^2/2\sigma^2} \rho' d\rho' \right) / \left(\int_0^{\infty} e^{-\rho'^2/2\sigma^2} \rho' d\rho' \right) = \int_0^{\rho^2/2\sigma^2} e^{-u} du / \int_0^{\infty} e^{-u} du \tag{2.15}$$

d'où $r_2 = 1 - e^{-\frac{\rho^2}{2\sigma^2}}$ et $\rho^2 = -2\sigma^2 ln(1-r_2)$, ou encore :

$$\theta = 2\pi r_1 et \rho = \sqrt{-2\sigma^2 \ln r_2} = \sqrt{-2 \ln r_2} \tag{2.16}$$

Ainsi, à partir de deux nombre aléatoire r_1 et r_2 à distribution rectangulaire sur $[0,1]$, on engendre deux nombres x et y à distribution *gaussienne*, donnés par $x = \rho\cos\theta$ et $y = \rho\sin\theta$, soient :

$$\begin{cases} x = \sqrt{-2\ln r_2}\cos 2\pi r_1 \\ y = \sqrt{-2\ln r_2}\sin 2\pi r_1 \end{cases} \tag{2.17}$$

2.1.5 Distribution non rectangulaires : Méthode du rejet (ou d'acceptation) de Von Neumann

Lorsque l'intégrale (2.8) n'a pas d'expression analytique, ou lorsqu'il n'est pas possible de résoudre l'équation (2.8) par rapport à ξ, d'autres méthodes doivent être utilisées, parmi lesquelles la méthode du rejet due à Von Neumann [1]. [68]

Soit à générer une variable aléatoire ξ de densité $f(x)$ bornée [1], $\forall x(M \leq \infty)$,

$$f(x) \leq M \tag{2.18}$$

Si $f(x) \neq 0$ pour $x \in [0,1]$, on peut toujours faire le changement de variables :

$$0 \leq y = \frac{x-a}{b-a} \leq 1, \quad 0 \leq f^*(y) = \frac{1}{M} f[a + (b-a)y] \leq 1 \tag{2.19}$$

Générer $(x, f(x))$ revient donc à générer $(y, f^*(y))$.

On engendre alors des paires de nombres aléatoires r_1, r_2 à distribution rectangulaire dans $[0,1]$. On compare r_1 à la quantité $\frac{1}{M}[a + (b-a)r_2]$, l'algorithme suivi est le suivant :

Tirer (r_1, r_2)	à partir d'une distribution uniforme $[0,1]$			
SI	$\frac{1}{M}[a + (b-a)\,r_2]$	$\leq$	r_1	ALORS $\xi = a + (b-a)\,r_2$
SINON				
SI	$\frac{1}{M}[a + (b-a)\,r_2]$	$>$	r_1	ALORS (r_1, r_2) est rejeté
Aller au début	pour tirer une autre paire (r_1, r_2)			

(2.20)

Les nombres aléatoire ξ ainsi sélectionnés suivent la distribution $f(x)$.

[1] John von Neumann, né Neumann János Lajos en 1903 à Budapest et mort en 1957 à Washington, est un mathématicien et physicien américano-hongrois. Il a apporté d'importantes contributions tant en mécanique quantique qu'en analyse fonctionnelle, en théorie des ensembles, en informatique, en sciences économiques ainsi que dans beaucoup d'autres domaines des mathématiques et de la physique. Il a de plus participé aux programmes militaires américains.

Montrons que la variable ξ générée à l'aide de l'algorithme précédent (2.20) est bien issue de la densité $f(x)$. Sans perte de généralité, on peut supposer que $a = 0$, $b = 1$.

Le taux de couples acceptés est proportionnel à $f^*(x)$, c'est à dire $f(x)$ ici. Une méthode plus générale consiste à considérer une variable aléatoire Y de densité g, plus simple que f. On commence par former Y de densité g. Les valeurs de Y sont acceptées $(\xi = Y)$ avec une probabilité $h(Y)$ dépendant de Y. En d'autres termes, le taux de valeurs acceptées est $gh \int gh$ et ξ a une densité proportionnelle à $g(x)h(x)$. Pour générer ξ, on procède comme suit. Supposons qu'il existe M tel que $f/g \leq M \leq \infty$. On pose $h = f/gM$, et d'après ce qui précède, ξ a pour densité $f/M \int gh = f$. De plus, $P(Yaccepted) = \int gh = 1/M$. L'algorithme utilisé est le suivant : Notons que le test à l'étape 2 accepte la valeur de Y avec la probabilité requise. D'autre part, le nombre d'essais avant que Y ne soit accepté suit une loi géométrique de moyenne M, et l'algorithme est d'autant plus rapide que M est petit. On peut simplifier les calculs en appliquant la méthode à une fonction f^* proportionnelle à f, si seulement on connaît une borne de f^*g.

Montrons comment on peut simuler une loi normale par cette méthode du rejet [1]. La variable $Z \in N(0,1)$ si sa densité est de la forme $\phi(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\dfrac{x^2}{2}}$, $-\infty < x < +\infty$. Au lieu de Y de densité φ, on va générer $Y' = |Y|$ de densité $f(x) = \dfrac{2}{\sqrt{2\pi}} e^{-\dfrac{x^2}{2}}$, $0 < x < +\infty$ (en vertu de la symétrie de la loi normale standard), qu'on sait générer.

Détermination de M. $\dfrac{f(x)}{g(x)} = \dfrac{f(1)}{g(1)} = \sqrt{\dfrac{2}{\pi}} e^{x - x^2/2}$. Le maximum est obtenu (en annulant la dérivée) au point $x^* = 1$. D'où,

$$M = max \frac{f(x)}{g(x)} = \frac{f(1)}{g(1)} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{1/2} \tag{2.21}$$

$$\frac{f(x)}{Mg(x)} = exp\{x - \frac{x^2}{2} - \frac{1}{2}\} = exp\{-\frac{(x-1)^2}{2}\} \tag{2.22}$$

On en déduit l'algorithme :

$$\begin{array}{lll} \text{Generer } r_1, & Y = -Log((r_1)) \text{ (Variable de loi Exp(1))} & \\ \text{Generer } r_2, & & \\ \text{SI } r_2 \leq exp\{-\dfrac{(Y-1)^2}{2}\}, & \text{ALORS} \quad Z' = Y & \\ \text{SINON} & \text{Aller en 1.} & \end{array} \tag{2.23}$$

2.2 Codes de Simulation Monte Carlo Existants

Les codes de simulation basés sur les méthodes Monte Carlo sont de plus en plus nombreux depuis l'avènement de ces techniques. Le développement de tels codes est motivé par les besoins de plus en plus croissant non seulement dans le domaine de la simulation de phénomènes physiques mais également dans toute la sciences.

2.2.1 Code Geant4

GEANT4 (Geomtry And Tracking) est un ensemble de composants d'un code de calcul pour la simulation du passage des particules à travers la matière. Depuis sont apparition le code s'applique dans les domaines de la physiques des hautes énergies, physique nucléaire, physique des accélérateurs mais également dans la physique médicale et spatiale [28].

Le code comprend un ensemble complet pour tous les domaines de la simulation de détection : géométrie, suivi de particules, réponse de détecteur, gestion de suivi et d'événement. La nature multidisciplinaire de l'ensemble d'outils fait qu'il fournit un ensemble abondant de processus physiques pour la manipulation de diverse modes d'interaction particules-matière pour des intervalles différents d'énergies. Notons que suivant le processus physique des modèles adaptés sont disponibles.

La conception orienté objet de GEANT4 permet aux utilisateurs de comprendre, d'adapter ou de généraliser l'outil à tous les domaines.

2.2.2 Code MCNP

MCNP (Monte Carlo N Particle) est un code de simulation Monte Carlo à N particules utilisable l'interaction rayonnements-matière d'une manière générale.[43]. Il comprend des domaines d'applications diverses mais non limités, à savoir: la radio-protection et la dosimétrie, la radiothérapie et physique médicale, conception et analyse de détecteurs nucléaires, calcul et simulation des réacteurs nucléaires. Le code traite des configurations arbitraires à 3D de cellules matérielles avec des géométriques les plus complexes.

MCNP contient plusieurs enregistreurs (tallies) flexibles : courant de surface, courant de flux, flux de volume, détecteurs ponctuels ou annulaires, énergie déposée par la particule, énergie de fission, impulsion générée par le dépôt d'énergie ou de la charge, ainsi que des

tallies de mailles et radiographie.

2.2.3 Code SRIM

SRIM est une collection de packages qui permet le calcul de divers propriétés dans le transport d'ions dans la matière [54]. Les aspects les plus importants de la perte d'énergie des ions dans la matière sont calculés dans SRIM. Le code inclue des calculs rapide qui produisent des tables du pouvoir d'arrêt et de parcours ainsi que les distributions de straggling pour n'importe quel ion pour n'importe quelle énergie et n'importe quelle cible.

2.3 Distributions Angulaires des produits de réaction

Dans ce paragraphe nous allons présenter les données nucléaires des plus importantes que nous avons utilisées dans notre travail. Nous avons respecté les notations et les codes utilisés dans le fichier de données nucléaires évaluées ENDF [23].
ENDF (pour Evaluated Nuclear Data Files) sont des formats et librairies conçu par le groupe de travail pour l'évaluation des sections efficace (CSEWG : Cross Section Evaluation Working Groupe). Ce sont des laboratoires, industriels et universités canadiens et américains, et sont maintenu par le centre national pour les données nucléaires (NNDC). La dernière version des formats ENDF fournit des représentations de sections efficaces et distributions pour les neutrons, production de photons des réactions de neutrons, un taux limité de production de particules chargées des réactions nucléaires, donnée d'interaction photon-atomique, données de diffusion de neutrons thermiques, et enfin production de radionucléides et désintégration (y compris produits de fission).
Le système ENDF a été développé dans le but d'archiver et gérer les données nucléaires évaluées pour les utiliser dans les applications de la technologie nucléaire.
Le système ENDF est divisé en formats et procédures. Les formats décrit comment les données sont classées quant aux procédures elles déterminent quelle type de données doivent être incluses, quelle format doit être utilisé dans des circonstances particulières.

Dans ce qui suit nous allons exposé les différents paramètres, dont les sections efficaces, exposés dans la référence précédente.

2.3.1 Description générale

Le fichier 4 est utilisé pour la description des distributions angulaires des particules émises. Il est utilisé pour des réactions avec des neutrons incidents seulement.

Les distributions angulaires sont exprimées comme des distributions de probabilités normalisées, i.e.,

$$\int_{-1}^{+1} f(\mu, E)d\mu = 1 \tag{2.24}$$

où $f(\mu, E)d\mu$ est la probabilité pour qu'une particule incidente d'énergie E soit diffusée dans l'intervalle $d\mu$ autour d'un angle dont son cosinus est μ. Les unités de $f(\mu, E)$ sont $(unite - cosinus)^{-1}$. A cause de la symétrie azimutale, en générale, de la distribution angulaire des neutrons diffusés, la distribution peut être représentée par un développement en séries de polynômes de Legendre :

$$f(\mu, E) = \frac{2\pi}{\sigma_s(E)}\sigma(\mu, E) = \sum_{l=0}^{NL} \frac{2l+1}{2} a_l(E)P_l(\mu) \tag{2.25}$$

où :

μ est le cosinus de l'angle de diffusion dans le système de référence.

E est l'énergie de la particule incidente dans le système du laboratoire.

σ_s est la section efficace de diffusion, e.g., diffusion élastique à l'énergie E telle qu'elle est donnée dans le Fichier 3 pour un type particulier de réaction (MT).

l est l'ordre du polynôme de Legendre.

$\sigma(\mu, E)$ section efficace différentielle de diffusion en unité de barns par steradian.

a_l est le l^{eme} coefficient du polynôme de Legendre; il faut noter que le coefficient d'ordre zéro $a_0 = 1$ et il n'est pas donné dans le Fichier.

Les distributions angulaires peuvent être données par l'une des deux formes, ou bien dans le système de coordonnées du centre de masse (CM) ou bien dans le système de coordonnées du laboratoire (LAB). Dans la première forme, les distributions sont données sous forme de valeurs tabulées pour la distribution de probabilité normalisée, $f(\mu, E)$, en fonction de l'énergie incidente. Dans la deuxième forme, les coefficients du développement en polynômes de Legendre, $a_l(E)$, sont tabulés en fonction de l'énergie du neutron incident.

Les sections efficaces différentielles absolues sont obtenues en combinant les données des Fichiers 3 et 4. Si les distributions tabulées sont données, la section efficace différentielle absolue (en barn par steradian) est obtenue par :

$$\sigma(\mu, E) = \frac{\sigma_s(E)}{2\pi} f(\mu, E) \tag{2.26}$$

où $\sigma_s(E)$ est donnée dans le Fichier 3 (pour le même nombre MT) et $f(\mu, E)$ est donnée dans le Ficher 4. Si les distribution angulaires sont présentées comme des coefficients de polynômes de Legendre, les sections efficaces différentielles absolues sont obtenues par :

$$\sigma(\mu, E) = \frac{\sigma_s(E)}{2\pi} \sum_{l=0}^{NL} \frac{2l+1}{2} a_l(E) P_l(\mu) \tag{2.27}$$

où $\sigma_s(E)$ est donnée dans le Ficher 3 (pour le même nombre MT) et les coefficients $a_l(E)$ sont donnés dans le fichier 4. Les matrices de transformation pour la conversion des coefficients du polynômes de Legendre du système de coordonnées CM à celui du LAB sont présentées dans l'appendice A.

2.3.2 Formats et méthodes de lecture de données

Le Fichier 4 est divisé en sections, chacune contient des données pour une réaction de type particulier (nombre MT) et ordonnée par ordre croissant du nombre MT. Chaque section commence d'habitude par un enregistrement entête et se termine par un second enregistrement. On définit les quantités suivantes:

LTT : Cette notation est introduite pour la représentation utilisée et peut avoir les valeurs suivantes :

LTT=0, toutes les distributions angulaires sont isotropes.

LTT=1, les données sont fournies comme des coefficients de développement de Legendre.

LTT=2, les données sont fournies comme des distributions de probabilité tabulées, $f(\mu, E)$

LTT=3, la région à basse est énergie représentée par les coefficients de Legendre; plus haute région est représentée par des données tabulées.

LI : Notation pour spécifier si les distributions angulaires étaient toutes isotropes.

LI=0, pas toutes isotropes.

LI=1, toutes isotropes.

LCT : Notation pour specifier le système de référence utilisé : LCT=1, les données sont fournies dans le système du laboratoire LAB. LCT=2, les données sont fournies dans le systèmes du centre de masse CM.

NE : Nombre de points de l'énergie incidente auxquels les distributions angulaires sont fournies.

NL : Ordre le plus élevé du polynôme de Legendre qui est donnée à chaque énergie

(NL≤NM).

NM : L'ordre maximum du polynôme de Legendre requis pour décrire les distributions angulaires dans l'un des deux systèmes de coordonnées LAB et CM. NM doit être pair.

NP : Nombre des points angulaires (cosinus) utilisés pour donner les distributions de probabilités tabulées pour chaque énergie.

La structure d'une section dépend des valeurs de LTT (i.e., la représentation utilisée : les coefficient du développement en séries de polynômes de Legendre $a_l(E)$ ou la distribution de probabilité normalisée tabulée $f(\mu, E)$) mais elle commence toujours par un enregistrement entête sous la forme:

$[MAT, 4, MT/ZA, AWR, 0, LTT, 0, 0]\, HEAD$

2.3.3 Coefficient de polynômes de Legendre (LTT=1, LI=0)

Quand LTT=1 (les distributions angulaires sont fournies en termes de coefficients de polynômes de Legendre), la structure de la section est donnée sous la forme suivante :

$[MAT, 4, MT/ZA, AWR, 0, LTT, 0, 0]\, HEAD(LTT = 1)$

$[MAT, 4, MT/0.0, AWR, LI, LCT, 0, 0]\, CONT(LI = 0)$

$[MAT, 4, MT/0.0, 0.0, 0, 0, NR, NE/\mathrm{E}_{int}\ TAB2$

$[MAT, 4, MT/T, \mathrm{E}_1, \mathrm{LT}, 0, \mathrm{NL}, 0/\ a_l(E_1)\ LIST$

$[MAT, 4, MT/T, \mathrm{E}_2\ , \mathrm{LT}, 0, \mathrm{NL}, 0/\ a_l(E_2)\ LIST$

$[MAT, 4, MT/T, \mathrm{E}_{NE}\ , \mathrm{LT}, 0, \mathrm{NL}, 0/\ a_l(E_{NE}) LIST$

$[MAT, 4, 0/0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0]\, SEND$

Notons que T et LT font référence, respectivement, à la température (en K) et au test pour la dépendance en température. Néanmoins, ces valeurs sont en principe zéro.

2.3.4 Exemple de données ENDF

Dans le tableau ci-dessous nous présentons une partie du fichiers de données de sections efficaces :

1.093200-1	1.445600-2	7.116500-4	3.238200-4			525	4	800	34
0.000000+0	1.500000+7	0	0	4	0	525	4	800	35
1.090000-1	1.453700-2	5.964200-4	2.284500-4			525	4	800	36
0.000000+0	1.600000+7	0	0	4	0	525	4	800	37
1.082500-1	1.458800-2	4.634800-4	1.129900-4			525	4	800	38
0.000000+0	1.700000+7	0	0	4	0	525	4	800	39
1.072200-1	1.459600-2	3.435800-4	4.248100-6			525	4	800	40
0.000000+0	1.800000+7	0	0	4	0	525	4	800	41
1.060700-1	1.458500-2	2.358300-4	-9.910500-5			525	4	800	42
0.000000+0	1.900000+7	0	0	4	0	525	4	800	43
1.053900-1	1.463200-2	1.402500-4	-1.971100-4			525	4	800	44
0.000000+0	2.000000+7	0	0	4	0	525	4	800	45
1.048000-1	1.469000-2	5.413900-5	-2.908500-4			525	4	800	46
0.000000+0	0.000000+0	0	0	0	0	525	4	099999	
5.010000+3	9.926921+0	0	1	0	0	525	4	801	1
0.000000+0	9.926900+0	0	2	0	0	525	4	801	2
0.000000+0	0.000000+0	0	0	1	21	525	4	801	3
21	2					525	4	801	4
0.000000+0	1.000000-5	0	0	4	0	525	4	801	5
1.151800-2	1.388400-3	5.279100-4	2.194400-4			525	4	801	6
0.000000+0	1.000000+6	0	0	4	0	525	4	801	7
2.755500-2	3.293900-3	1.152600-3	5.111200-4			525	4	801	8
0.000000+0	2.000000+6	0	0	4	0	525	4	801	9
3.411900-2	4.062100-3	1.295300-3	6.096800-4			525	4	801	10
0.000000+0	3.000000+6	0	0	4	0	525	4	801	11
3.584800-2	4.266600-3	1.228200-3	6.102500-4			525	4	801	12
0.000000+0	4.000000+6	0	0	4	0	525	4	801	13
4.161700-2	4.967000-3	1.278800-3	6.669100-4			525	4	801	14
0.000000+0	5.000000+6	0	0	4	0	525	4	801	15

2.4 Modélisation du convertisseur du bore

Dans ce paragraphe nous allons présenter le modèle du convertisseur du bore que nous proposons pour la conversion des neutrons en particules chargées. Le modèle consiste à couvrir une couche d'un matériaux semi-conducteur d'une couche mince en bore de forme cylindrique son épaisseur s'étale dans l'intervalle [0.1 μm, 14.0 μm], qui est équivalente à une densité superficielle pour le bore de 23.50 μg/cm^2 à 3.29 mg/cm^2. Un faisceau de neutrons mono énergétiques arrive sur une incidence normal sur l'une des bases du cylindre. Chaque neutron du faisceau doit d'abord traverser une distance X_n dans le cylindre avant d'interagir avec l'un des noyaux constituants la cible. Les directions des particules produites sont situées sur le même plan que celui du neutron incident. Les distances traversées dans la couche du bore par les neutrons incidents avant interaction, par les particules alpha et lithium sont représentées désignées par X_n, X_α et X_{Li} (Fig. 2.1). La réaction suivante est alors produite :

$$^{10}B\,(n,\alpha)^7\,Li \tag{2.28}$$

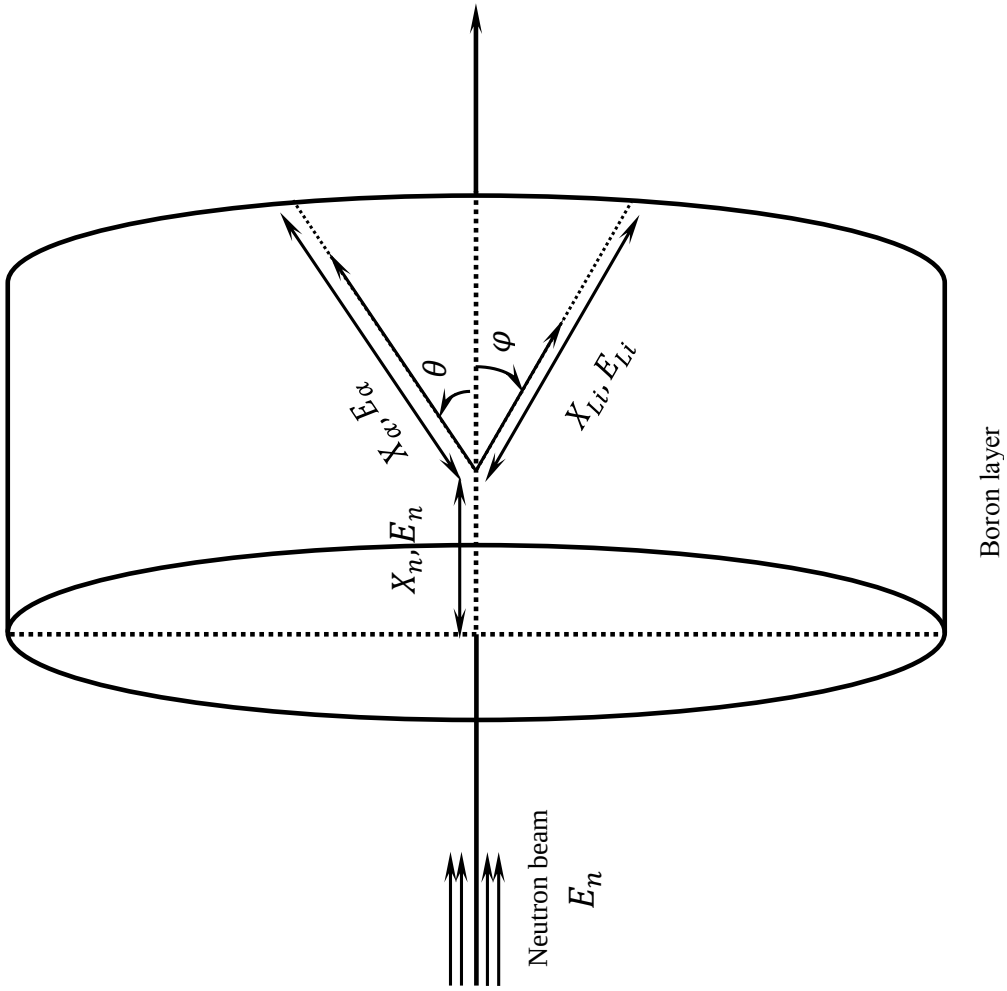

Figure 2.1: Cinématique de la réaction nucléaire $^{10}B\,(n,\alpha)^{7}\,Li$.

Chapitre 3

Résultats et Discussion

Dans ce chapitre nous présentons les résultats que nous avons obtenus par notre code de simulation pour un faisceau de neutrons mono-énergétique de 1 MeV pour une cible d'une couche de bore de différentes épaisseurs adéquates à la détection de ce type de neutrons. Nous avons respecté l'ordre naturel des phénomènes qui se produisent tout au long du processus de l'interaction des neutrons avec le bore c'est-à-dire nous commençons d'abord par analyser le phénomène de l'atténuation ensuite le point d'impact ou l'interaction se produit, ensuite la perte d'énergie des particules chargées produites est prise en considération et enfin les particules chargées et les neutrons qui s'échappent de la couche du bore avec le restant de l'énergie. Les lois de conservation de l'impulsion et de l'énergie de la réaction (2.28) permettent de calculer les énergies cinétiques des produits de réaction, soit dans le système du laboratoire :

$$\begin{aligned} E_\alpha &= \left\{ \frac{\sqrt{m_n m_\alpha E_n}\cos\theta \pm \sqrt{m_n m_\alpha E_n \cos^2\theta + (m_\alpha + m_{Li})\left[(m_{Li} - m_n)E_n + m_{Li}Q^*\right]}}{m_\alpha + m_{Li}} \right\}^2 \\ E_{Li} &= \left\{ \frac{\sqrt{m_n m_{Li} E_n}\cos\phi \pm \sqrt{m_n m_{Li} E_n \cos^2\phi + (m_{Li} + m\alpha)\left[(m_\alpha - m_n)E_n + m_\alpha Q^*\right]}}{m_{Li} + m_\alpha} \right\}^2 \end{aligned} \quad (3.1)$$

où m_i ($i = n,\ \alpha,\ Li$) sont les masses du neutron, de la particule alpha et celle de la particule lithium respectivement, tandis que E_i ($i = n,\ \alpha,\ Li$) sont leurs énergies cinétiques respectivement. Les angles d'émission des deux particules chargées sont reliées simplement par [49] :

$$\tan\phi = \frac{\sqrt{\dfrac{m_\alpha E_\alpha}{m_{Li}E_{_{Li}}}}\sin\theta}{\sqrt{\dfrac{m_n E_n}{m_{Li}E_{_{Li}}}} - \sqrt{\dfrac{m_\alpha E_\alpha}{m_{Li}E_{_{Li}}}}\cos\theta} \quad (3.2)$$

Une fois les particules chargées produites, le processus de l'interaction de ces particules à l'intérieur de la couche du bore commence. En prenant en considération le fait que ces particules vont perdre leurs énergies par excitation et par ionisation les formules pour les pertes d'énergie des particules chargées peuvent être utilisées. Dans le paragraphe suivant nous allons suivre les particules chargées sur leur passage dans la couche du bore en simulant, par la méthode de Monte-Carlo, leur interaction avec le matériau ralentisseur, tout en considérant les paramètres nécessaires pour atteindre l'objectif de ces particules, i.e., la perte totale de l'énergie avant la sortie ou alors la sortie avec le reste de l'énergie cinétique.

3.1 Simulation de l'interaction

Dans le cadre du modèle que nous avons proposé, et dans le but de simuler l'interaction des neutrons avec les noyaux du bore, nous allons suivre six étapes différentes.

1. Le premier paramètre à prendre en considération est le point d'arrivée du neutron sur la couche du bore. Il s'agît de la position $M(x, y)$ de chaque neutron émanant du faisceau incident, qui arrive sur l'une des bases du cylindre boré.

2. Dans la deuxième étape on doit calculer la distance traversée par le neutron X_n, à partir du point d'arrivée du neutron sur la base du cylindre, avant de subir une interaction avec un noyau du bore.

3. Le troisième paramètre à prendre en considération sont les angles d'éjection θ et ϕ des particules α et lithium.

4. Dans la quatrième étape nous allons calculer les pertes d'énergies des particules chargées produites.

5. La cinquième étape est réservée au calcul des parcours R_i, où i représente α ou $Lithium$, des particules chargées dans le bore.

6. Et finalement le nombre de coups enregistrés obtenus à partir des particules qui s'échappent de la couche avec le reste d'énergie.

Tous ses paramètres, ($M(x, y)$, X_n, θ, ϕ, R_i et comptage) sont obtenus en utilisant la méthode de Monte-Carlo.

Il faut noter toutefois que les paramètres que nous allons étudier dépendent grandement des sections efficaces d'interaction totale et différentielle. Ces quantités prennent une place considérable dans notre étude.

3.1.1 Section efficace totale d'interaction des neutrons avec le bore-10

La plupart des sources de neutrons produisent des neutrons rapides [65, 56, 51]. Les Fig. 3.2 et 3.3 montrent les sections efficaces totales, bien connues, en fonction de l'énergie des neutrons pour différentes échelles d'énergie pour notre interaction d'intérêt $^{10}B\,(n,\alpha)^{7}\,Li$ [33, 10]. Nous nous intéressons aux neutrons rapides d'énergie s'étalant entre 0.5 et 5.0 MeV données dans ce cas dans le système du centre de masse.

Les section efficaces différentielles sont données sous forme de coefficient de polynôme de Legendre [11].

3.1.2 Point d'arrivée du neutron sur le bore

La position de chaque neutron arrivant sur la surface apparente de la couche du bore de forme cylindrique est déterminée en utilisant la méthode de réjection de Von Neumann, l'une des méthodes les plus populaires utilisées dans ce type d'algorithmes [58, 62, 16, 18, 47].

La méthode de réjection est une technique qui permet de générer des échantillons caractérisés par des distributions désirées par échantillonnage à partir d'une distribution différente initiale [13]. Soient $M(x_M, y_M)$ la position de chaque neutron arrivant sur la cible. La procédure consiste à tirer au hasard les coordonnées x_M et y_M dans la limite de la longueur du diamètre du cylindre. La méthode du tir au hasard est appliquée pour la détermination des angles d'éjection. Les plans de référence sont donc formés par projection de la position $M(x_M, y_M)$ perpendiculairement à l'axe ox, tel qu'un segment parallèle à l'axe *oy* est obtenu. Le dernier représente une face du rectangle (plan) formé de cette manière.

3.1.3 Distances traversées par les neutrons après interaction

L'atténuation du faisceau de neutrons par la couche du bore absorbante peut être représentée en terme de nombre de neutrons restant après absorption de ces neutrons. Le processus

suit l'expression (1.20) bien connue suivante:

$$N = N_0 e^{-\Sigma x} \tag{3.3}$$

où N_0 et N sont, respectivement, le nombre initial de neutrons entrant dans l'absorbeur et le nombre de neutrons transmis sans subir d'interaction, s'échappant à une distance x. Σ étant la section efficace macroscopique.

Sachant que x a une nature aléatoire, qui suit la densité de distribution donnée par (1.20) on peut procéder pour déterminer ces distances par la méthode Monte-Carlo [58, 47].

Le code que nous avons développé reproduit parfaitement le nombre de neutrons qui s'échappent de la couche absorbante du bore de différentes épaisseurs. La Fig. 3.1 est une comparaison entre la courbe théorique [14], en remplaçant les paramètres par les valeurs correspondant au problème, donnée par la relation (3.3), et la courbe simulée. Notons que l'épaisseur nécessaire pour l'absorption complète du faisceau de neutron est d'environ quelques dixaines de milimètres.

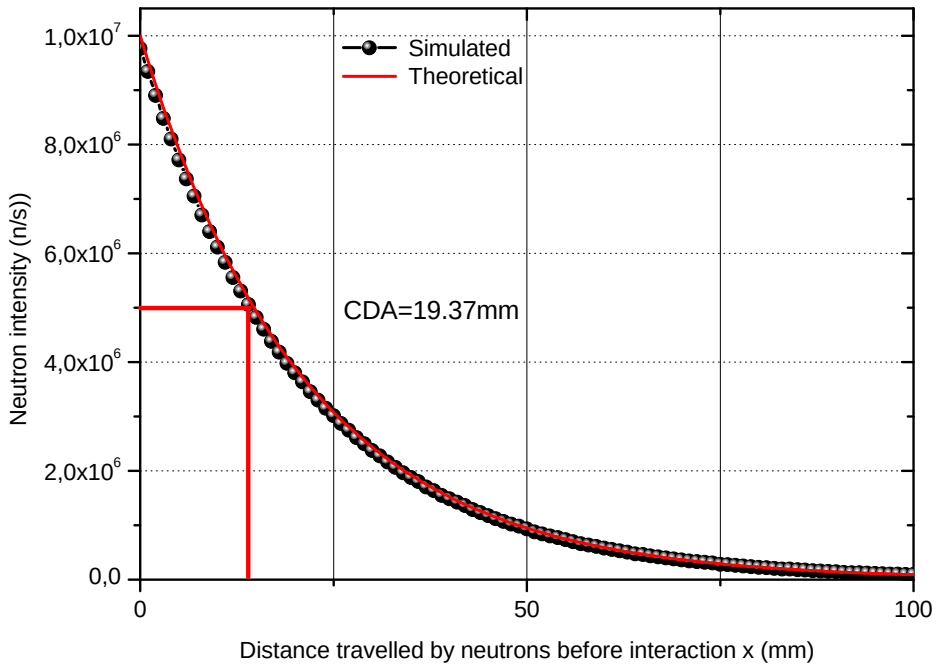

Figure 3.1: Distance traversée par les neutrons avant interaction.

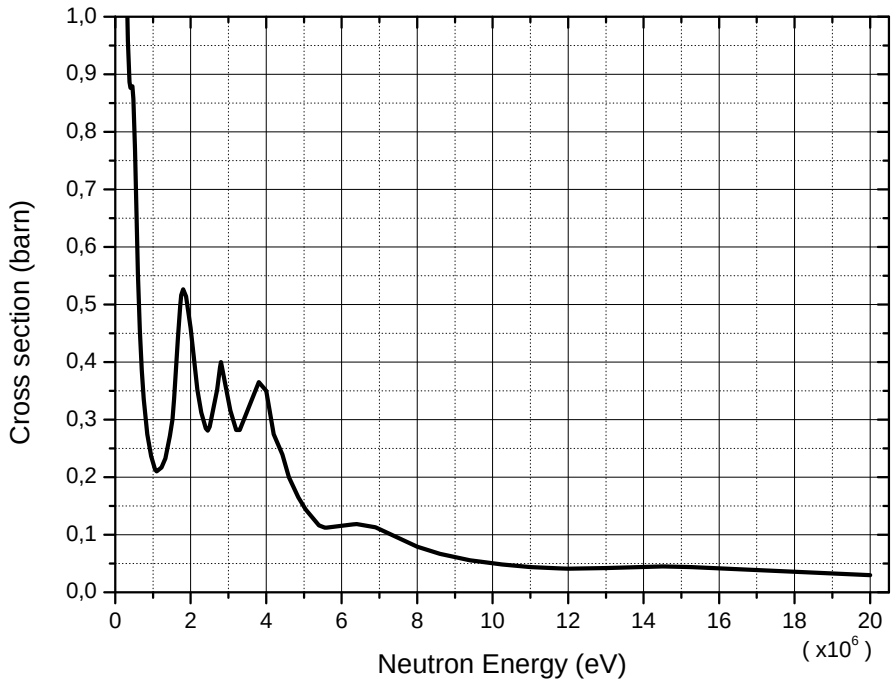

Figure 3.2: Cross section versus fast neutron energy for $^{10}B\,(n,\alpha)^{7}\,Li$.

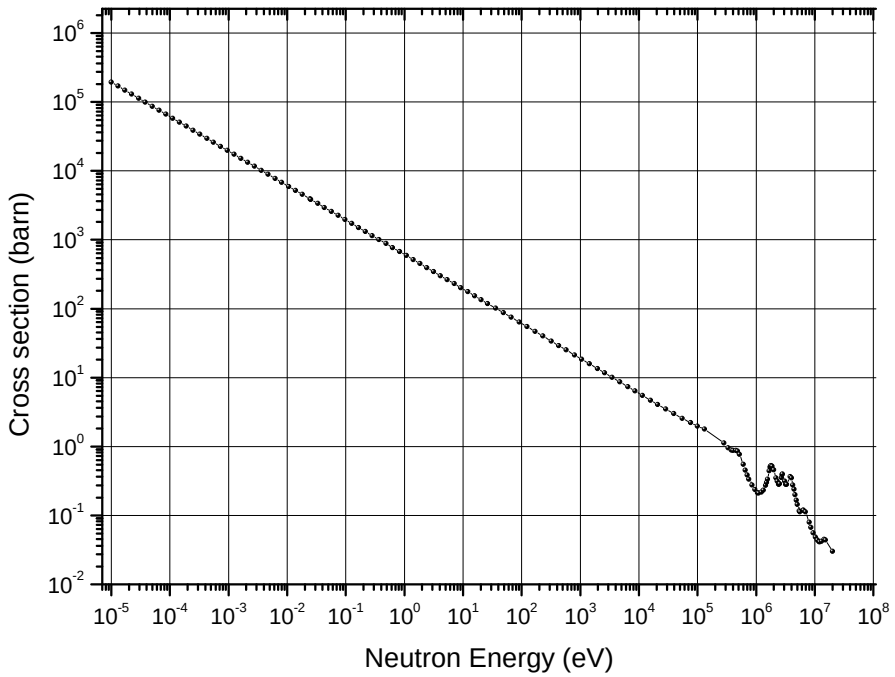

Figure 3.3: Cross section versus neutron energy for $^{10}B\,(n,\alpha)^{7}\,Li$.

La fonction de distribution F peut être écrite comme:

$$F(x) = \int_0^x P(x')\,dx' \tag{3.4}$$

Il est bien établi que si ξ est uniformément distribué sur l'intervalle $[0,1]$ alors la variable

$$\rho^* = F^{-1}(\xi)$$

a une fonction de distribution F. En effet, si $F^*(\rho)$ est la fonction de distribution de ρ^* :

$$\begin{aligned} F^*(\rho) &= P(\rho^* < \rho) \\ &= P(F^{-1}(\xi) < \rho) \\ &= P(\xi < F(\rho)) \\ &= F(\rho) \end{aligned}$$

Il s'ensuit que ρ^* a une densité de probabilité $P(\rho)$ [47]. La fonction de distribution est analytiquement inversible, on peut donc facilement déterminer ρ à partir de la densité P,

$$\rho = F^{-1}(\xi) = -\frac{1}{\Sigma}\ln(1-\xi)$$

ou

$$\rho = F^{-1}(\xi) = -\frac{1}{\Sigma}\ln\xi \tag{3.5}$$

car la variable aléatoire ξ fait également partie de l'intervalle $[0,1]$. La relation (A.5) est décisive pour la détermination de la distance x traversée par un neutron quelconque arrivant à la couche du bore. Cette distance dépend fondamentalement de la section efficace macroscopique Σ, qui est reliée à la densité atomique du bore et à la section efficace microscopique par:

$$\Sigma = n\sigma \tag{3.6}$$

où n et σ sont la densité atomique du bore et la section efficace microscopique respectivement. Pour un faisceau de neutrons incidents de 1.0 MeV on a $n = 1.41 \times 10^{23} atoms/cm^3$ et σ=2.537 b, il s'ensuit que la valeur de la section efficace macroscopique est Σ=3.578×$10^{-2} mm^{-1}$.

3.1.4 Angles d'éjection des particules chargées

L'un des angle d'éjection, e.g. θ pour les particules alpha, peut être également déterminé en utilisant la méthode de réjection.

Supposons que $\sigma(\cos\theta, E)$ soit une fonction bornée dans un intervalle quelconque $[a, b]$, i.e., $\sigma(\cos\theta, E) \leq \sigma_{Max}$ et donc $\sigma(\cos\theta, E)/\sigma_{Max} \leq 1$ avec $\sigma(a) = 0$. La méthode de réjection consiste à tirer des paires de nombre aléatoires (r_1, r_2) uniformément distribués dans $[0, 1]$. Alors, r_1 est comparé à la quantité $\frac{1}{\sigma_{Max}}[a + (b-a)\, r_2]$. L'algorithme utilisé pour aboutir à ce processus est le suivant:

Tirer (r_1, r_2)	à partir d'une distribution uniforme $[0, 1]$				
SI	$\frac{1}{\sigma_{Max}}[a + (b-a)\, r_2]$	$\leq$	r_1	ALORS	$\cos\theta = a + (b-a)\, r_2$
SINON					
SI	$\frac{1}{\sigma_{Max}}[a + (b-a)\, r_2]$	$>$	r_1	ALORS	(r_1, r_2) rejected
ALLER au début	pour tirer une autre paire (r_1, r_2)				

(3.7

Cet algorithme nous assure que les nombre aléatoires $\cos\theta$ suivent la distribution $\sigma(\cos\theta, E)$. Les sections efficaces $\sigma(\cos\theta, E)$ utilisées dans ce travail sont celles de [11]. Nous avons utilisé les données sous forme de coefficient de polynômes de Legendre $a_\ell(E)$, en fonction de l'énergie des neutrons incidents.

Les sections efficaces différentielles absolues (en barn par steradian) sont obtenues pour des distributions quelconques données sous forme de tableaux en utilisant l'expression [23]

$$\sigma(\mu = \cos\theta, E) = \frac{\sigma_s(E)}{2\pi} \sum_{\ell=0}^{N_L} \frac{2\ell+1}{2} a_\ell(E)\, P_\ell(E) \tag{3.8}$$

où $\sigma_s(E)$ est la section efficace de diffusion, e.g., section efficace élastique à l'énergie E. Dans cette étude, des neutrons d'énergie 1.0 MeV dans le centre de masse et les coefficients de Legendre correspondants, comme ils sont lus à partir du fichier de la base de donnée, sont pris en considération. Ils sont donnés dans le tableau Table 3.1.

Le code reproduit la distribution angulaire suivant les angles d'éjection. Les résultat obtenus sont comparés aux valeurs données par [11] qui sont en parfait accord Fig. 3.4.

Table 3.1: Legendre polynomial coefficients for 1.0 MeV neutron energy.

energy (MeV)	$\ell = 0$	$\ell = 1$	$\ell = 2$	$\ell = 3$	$\ell = 4$
1.00	1.00	2.7555×10^{-2}	3.2939×10^{-3}	1.1526×10^{-3}	5.1112×10^{-4}

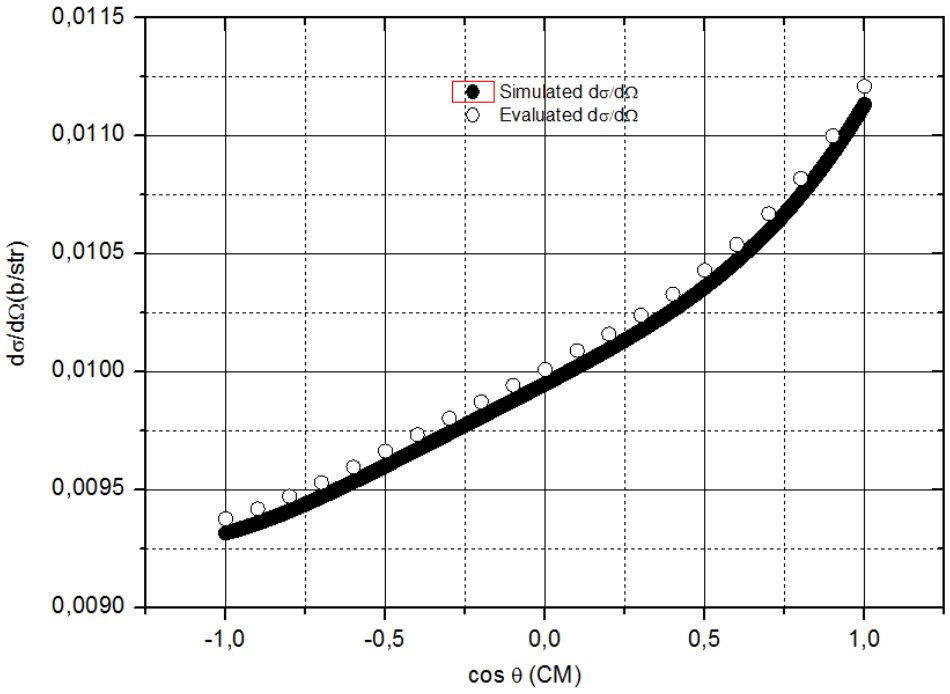

Figure 3.4: Distribution angulaire des particules émises.

Une fois l'angle θ calculé, le second angle pour la particule lithium peut être facilement déduit de la relation (3.2). Tout ce dont on a besoin c'est de calculer la perte d'énergie de ces particules dans le matériau ralentissur. Pour ce faire on peut utiliser le code SRIM.

3.1.5 Pouvoirs d'arrêt des particules alpha et lithium dans le bore

Le code SRIM, Stopping and Range of Ions in Matter, est un code très connu développé par J. F. Ziegler et J. P. Biersack [54]. C'est un code basé sur la méthode Monte Carlo

et fournit des outils qui permettent de manipuler plusieurs paramètres dont les pouvoirs d'arrêt et les parcours des particules chargées en fonction de l'énergie de ces particules et d'autres paramètres en relation avec les différents matériaux ralentisseurs. Pour tirer profit de SRIM nous avons ajusté les résultats donnés par le code avec des fonctions adéquates. Le pouvoir d'arrêt peut être donc considéré comme la somme de deux fonctions exponentielles différentes. Le choix de deux fonctions au lieu d'une seule permet d'éviter des désagréments pour les valeurs se trouvant au maximum de la courbe.

$$\frac{dE}{dx}\left(MeV/\left(mg/cm^2\right)\right) = Y_0 + A_1 \times e^{-E/T1} + A_2 \times e^{-E/T_2} \tag{3.9}$$

3.1.6 Parcours des particules alpha et lithium dans le bore

Pour les parcours de ces particules, une fonction polynomiale unique permet d'ajuster les résultats données par SRIM:

$$R\left(\mu m\right) = B_0 + B_1 \times E + B_2 \times E^2 \tag{3.10}$$

où l'énergie des particules E est donnée en MeV.

Les meilleurs paramètres du fit sont donnés dans le tableau Table 3.2.

Table 3.2: Parameters of the stopping power and range fit functions **in Boron**.

	Energy range (MeV)	$Y0$	$A1$	$A2$	$T1$	$T2$	$B0$	$B1$	$B2$
^4He	$[0.00, 0.50]$	2.1370	-0.463	-1.577	0.0104	0.1366	0.23861	1.64824	0.38192
	$[0.50, 10.0]$	-6294.360	6294.9790	1.90127	324942.65	2.43332	0.23861	1.64824	0.38192
^7Li	$[0.00, 1.50]$	3.596	-3.06	-0.39	0.444	0.015	0.43112	1.12231	0.07747
	$[1.50, 10.0]$	0.7963	1.7073	1.7073	6.6493	6.6477	0.43112	1.12231	0.07747

Les Figs. 3.5 et 3.6 est une comparaison des pouvoirs d'arrêts données par SRIM et celles des fonctions fit. Notons le parfait accord entre les deux courbes.

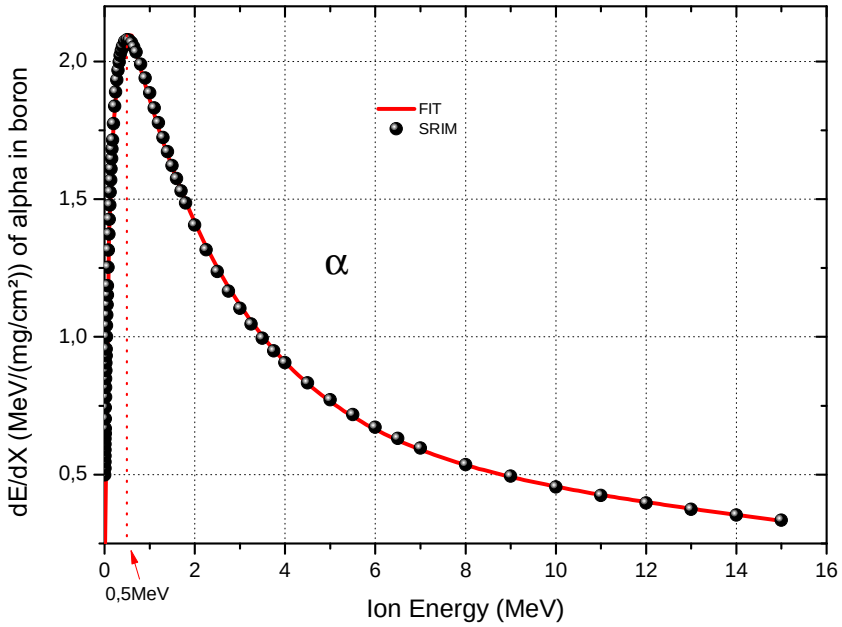

Figure 3.5: Pouvoirs d'arrêt des particules alpha dans le bore

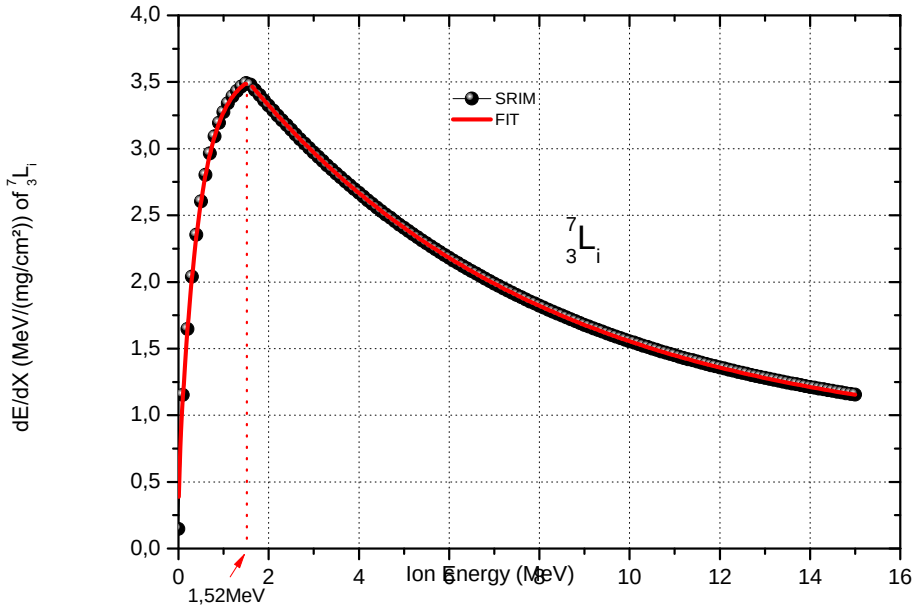

Figure 3.6: Pouvoirs d'arrêt des particules alpha dans le bore

Les Figs. 3.7 et 3.8 est une comparaison des parcours données par SRIM et celles des fonctions fit. Notons le parfait accord entre les deux courbes.

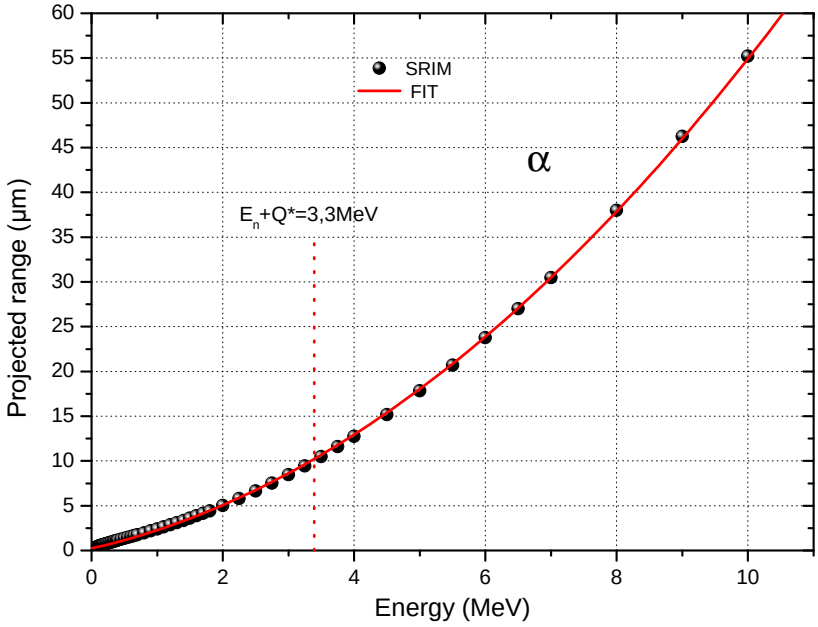

Figure 3.7: Parcours des particules alpha dans le bore

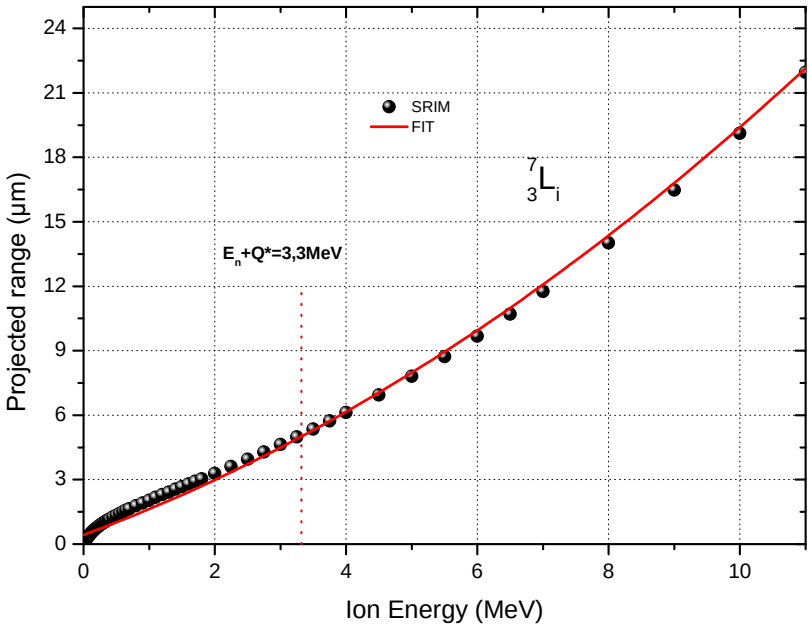

Figure 3.8: Parcours des particules lithium dans le bore

3.2 Spectre en énergie

La Fig. 3.9 représente le spectre en énergie des produits de réaction. Deux pics bien définis caractéristiques de la réaction neutron bore produisant deux particules chargées alpha et lithium et correspondant à une épaisseur absorbante de 0.10 μm. Il est clair que la perte d'énergie est d'autant plus importante que la particule est plus lourde d'une part et possède plus de charge d'autre part. Et par conséquent le pic sur la gauche de la figure correspond aux particules lithium tandis que celui sur la droite aux particules alpha. D'autre part les résultats obtenus en utilisant cet algorithme ont été comparés à ceux calculés en utilisant le code de simulation GEANT4 pour la même épaisseur [15], et montrant ainsi un accord raisonnable. En fait, ces courbes de GEANT4 ont été obtenues par la collection de particules après la couche convertisseur, éliminant celle qui s'échappent de la détection à cause de la disposition de la couche du bore elle-même vis-à-vis de la zone active du silicium.

L'évolution des deux pics en fonction des différentes épaisseurs de la couche du bore est représentée sur les figures Figs. 3.9, 3.10, 3.11, 3.12, 3.13, 3.14, 3.15, 3.16, 3.17, 3.18, 3.19 et 3.20. Remarquons que le premier pics commence à s'élargir pour des épaisseurs plus grandes que 0.6 μm, cela est du à l'accroissement de la perte d'énergie à l'intérieur du convertisseur. Cet élargissement est beaucoup plus important pour des épaisseurs plus importantes.

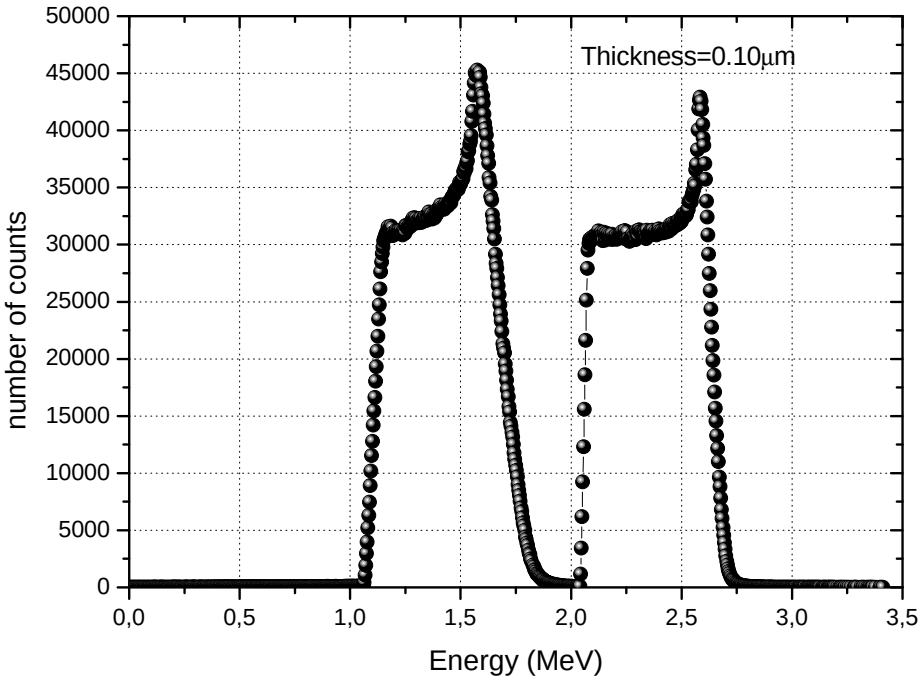

Figure 3.9: Spectre collectés derrière une couche de bore d'épaisseur 0.10 μm

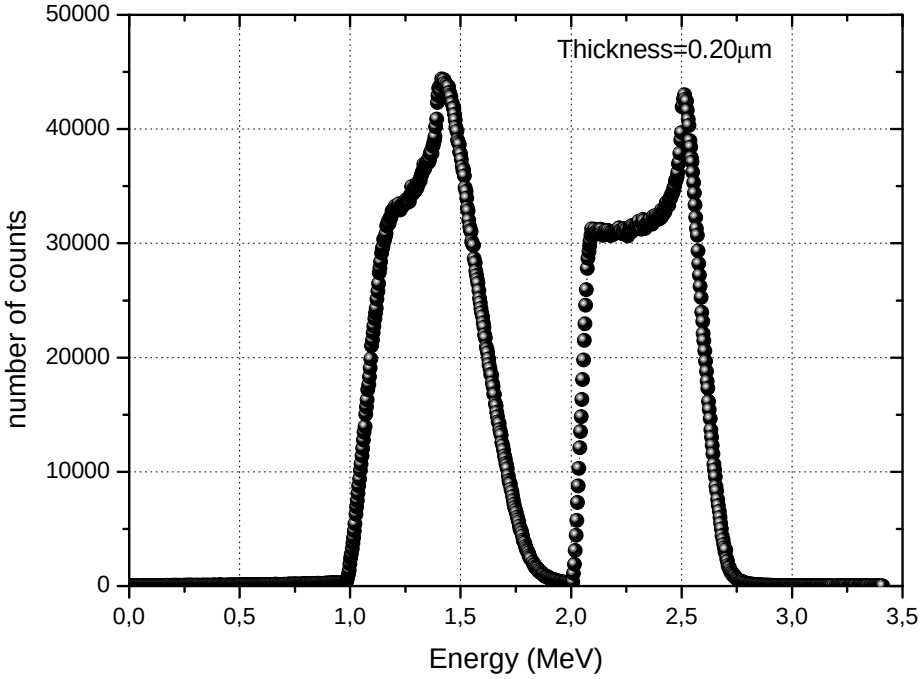

Figure 3.10: Spectre collecté derrière une couche de bore d'épaisseur 0.20 μm

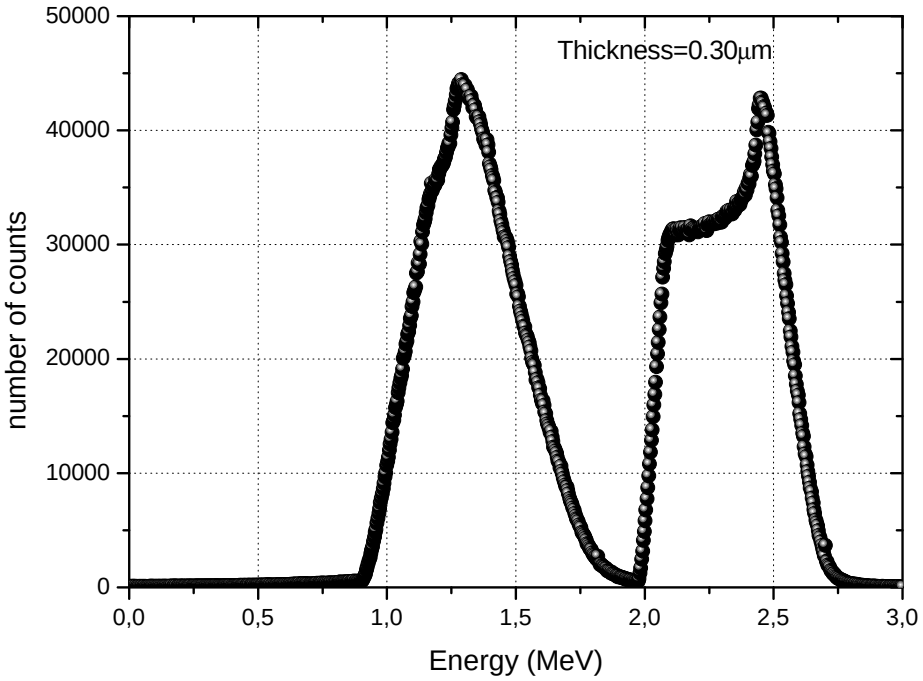

Figure 3.11: Spectre collecté derrière une couche de bore d'épaisseur 0.30 μm

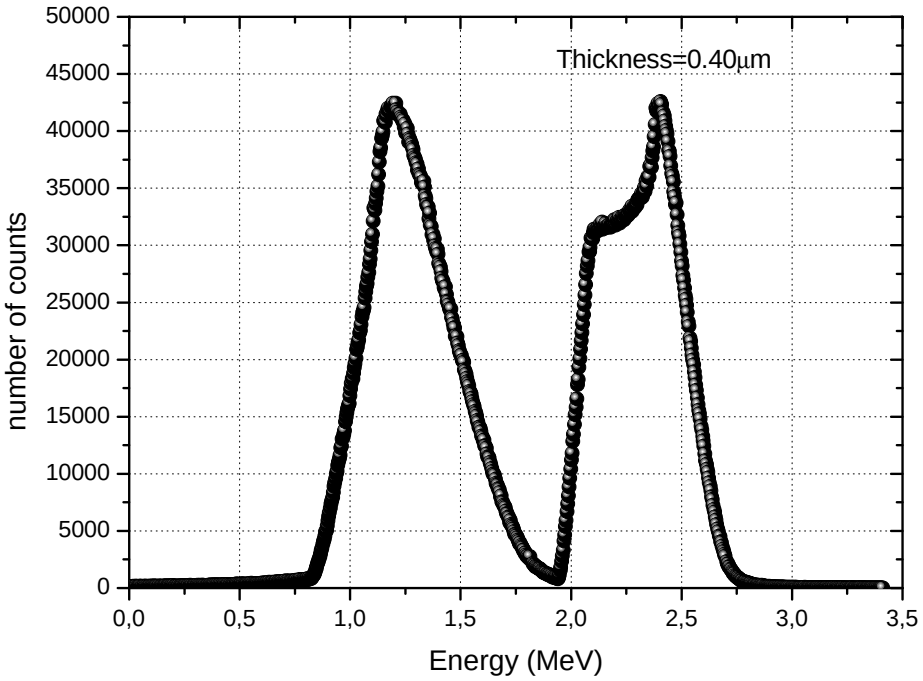

Figure 3.12: Spectre collecté derrière une couche de bore d'épaisseur 0.40 μm

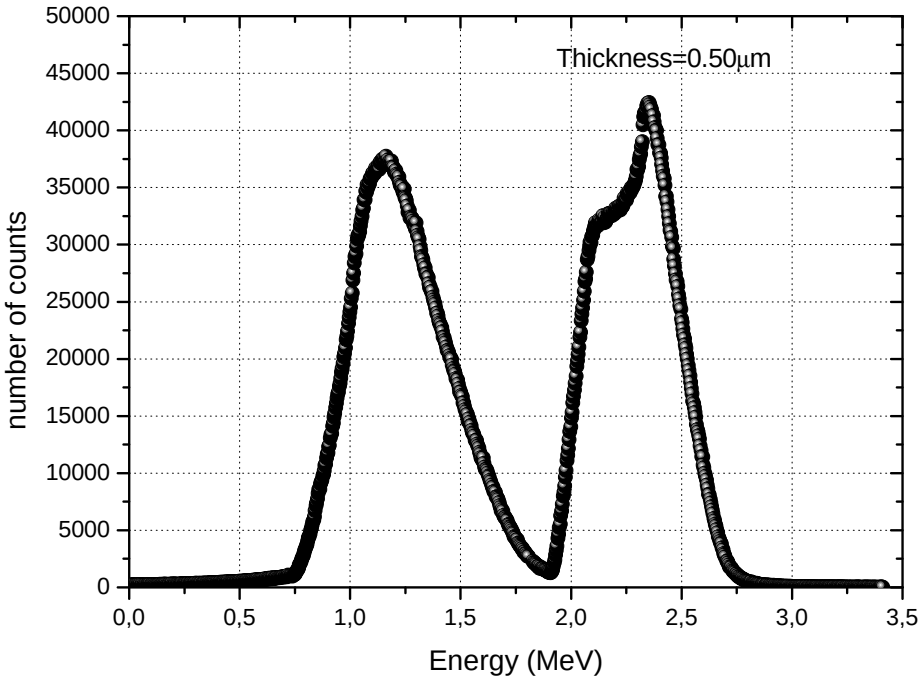

Figure 3.13: Spectre collecté derrière une couche de bore d'épaisseur 0.50 μm

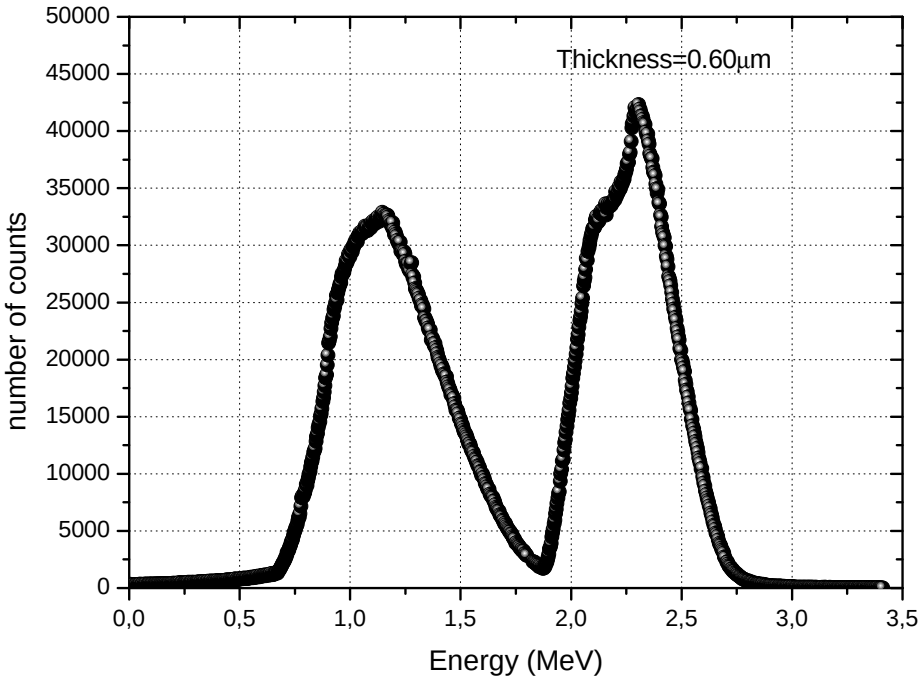

Figure 3.14: Spectre collecté derrière une couche convertisseur de bore d'épaisseur 0.60 μm

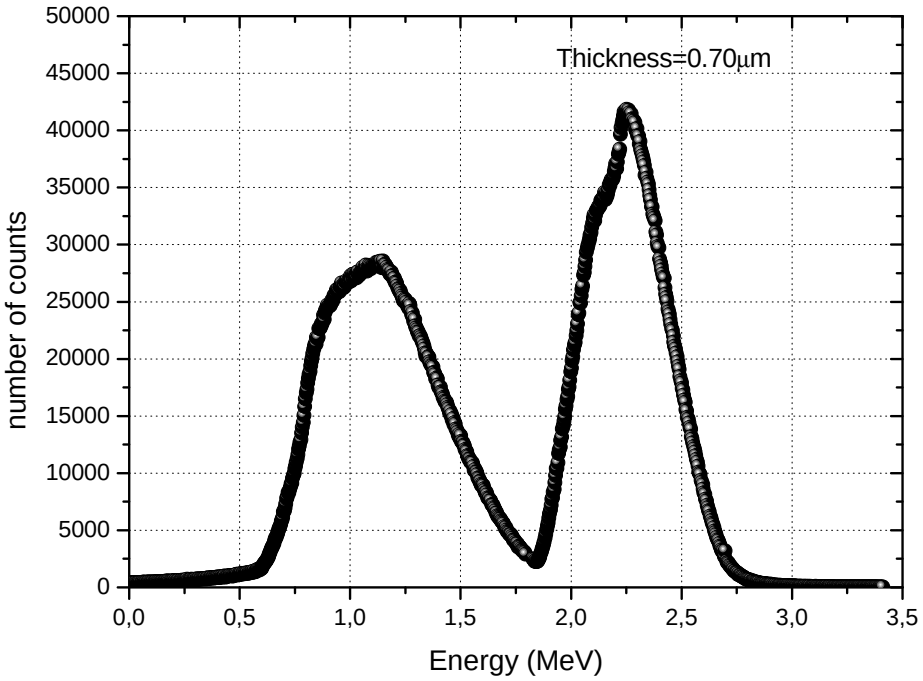

Figure 3.15: Spectre collecté derrière une couche de bore d'épaisseur 0.70 μm

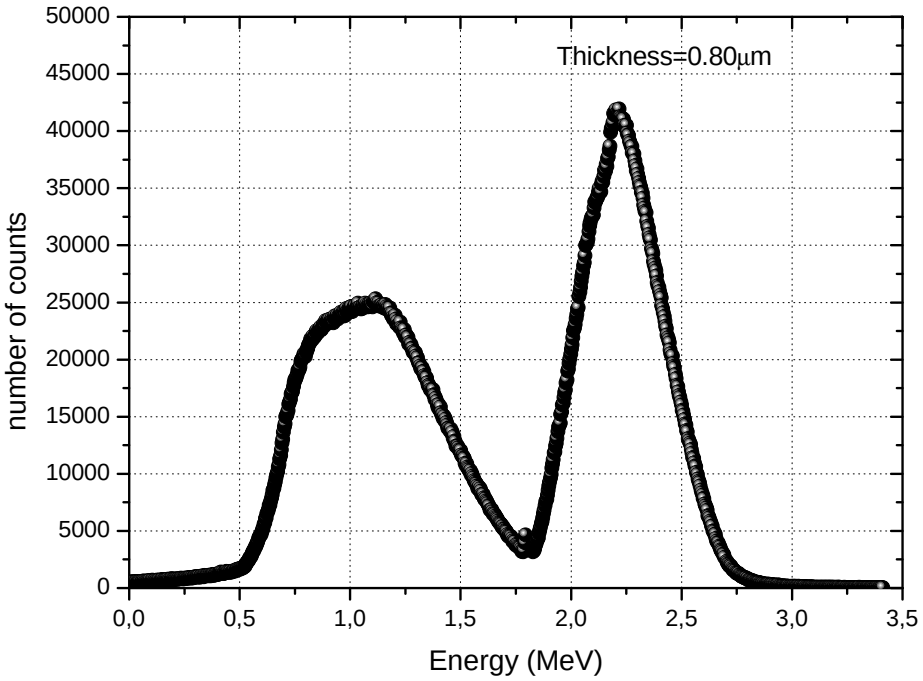

Figure 3.16: Spectre collecté derrière une couche de bore d'épaisseur 0.80 μm

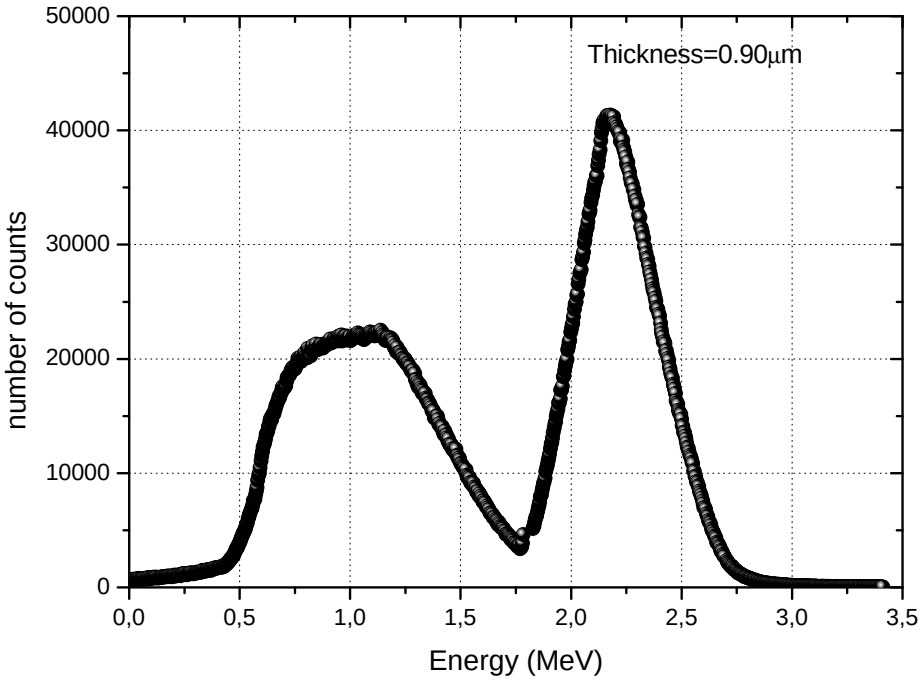

Figure 3.17: Spectre collecté derrière une couche de bore d'épaisseur 0.90 μm

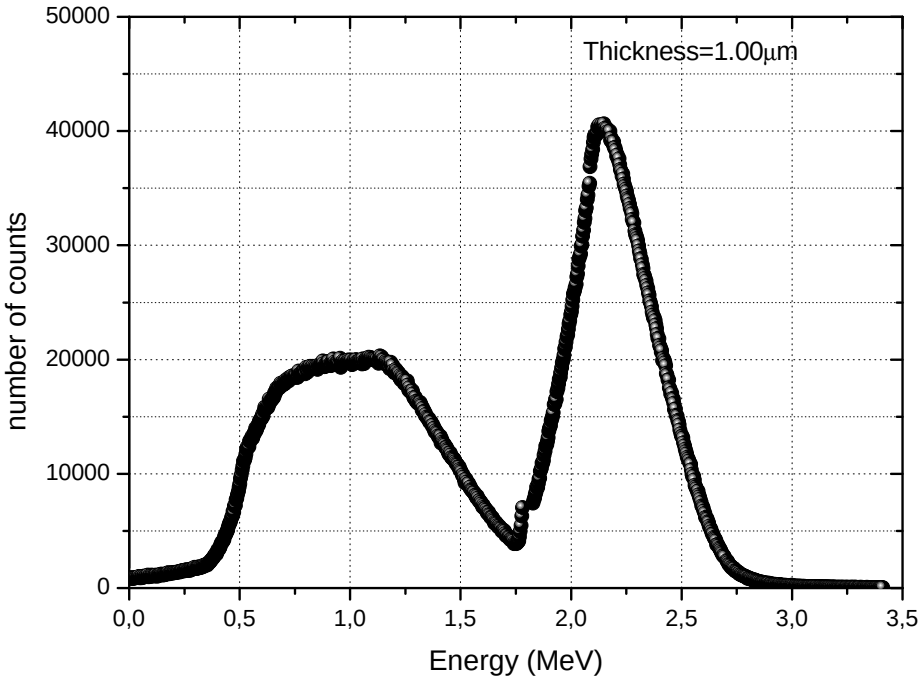

Figure 3.18: Spectre collecté derrière une couche de bore d'épaisseur 1.00 μm

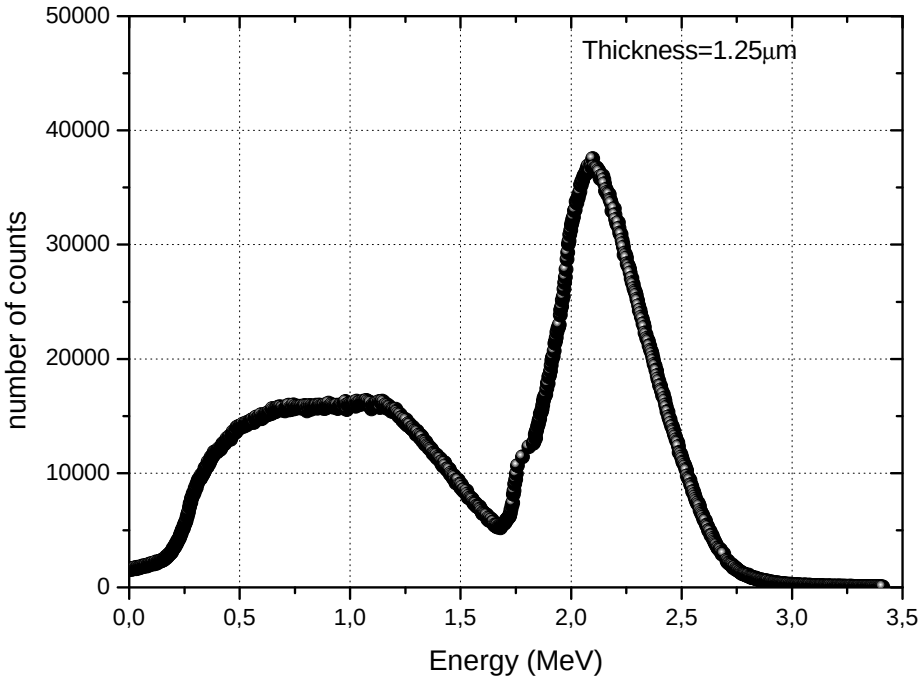

Figure 3.19: Spectre collecté derrière une couche de bore d'épaisseur 1.25 μm

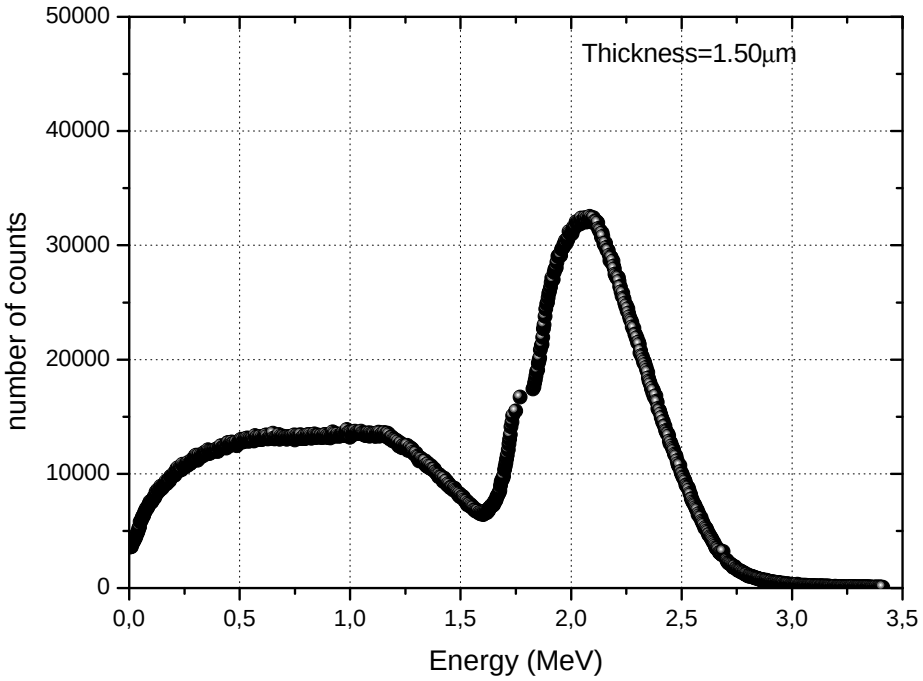

Figure 3.20: Spectre collecté derrière une couche de bore d'épaisseur 1.50 μm

Conclusion Générale

Nous avons développé un code qui permet de simuler l'interaction des neutrons avec la matière. Pour une première application, le modèle que nous avons proposé est une cible borée de forme cylindrique.

La qualité du modèle a été testée à travers les principaux résultats obtenus, i.e., la reproduction du spectre des énergies des produits de réaction, l'atténuation des neutrons du faisceau incidents et la distribution angulaire.

L'algorithme a été validé par utilisation d'un faisceau de neutrons de 1.0 MeV d'énergie et une cible de bore d'épaisseurs définies. L'algorithme peut être facilement généralisé pour d'autres valeurs des énergies et d'épaisseurs mais également pour d'autres matériaux différents. Avant de généraliser la situation pour d'autres énergies incidentes, nous avons besoin de valider ses résultats en les comparant avec ceux données par les codes de simulation existants. Ensuite, le principal avantage du code introduit dans ce travail par rapport à d'autres codes génériques polyvalents tels que GEANT4 est sa simplicité, nécessitant moins de ressources de calcul pour obtenir des résultats de précisions similaires. Le présent travail peut être considéré comme un premier pas vers des situations plus complexes impliquant l'interaction de neutrons rapides avec des matériaux, tels que la détection de neutrons et la spectrométrie. Le principe d'un spectromètre à neutrons de silicium à l'état solide repose sur une détection indirecte des neutrons. En effet, une quantité importante des produits de particules chargées issues de l'interaction des neutrons incidents avec le matériau intermédiaire est recueillie dans une taille appropriée de la zone active du spectromètre, qui est placée juste derrière la couche de conversion. Bien sûr, une partie de ces particules est perdue à cause de la géométrie du détecteur et des spectres de la Fig. **??** peut avoir des formes légèrement différentes. La fonction de réponse du spectromètre dépend fondamentalement du matériau convertisseur intermédiaire utilisé.

Appendix A

Transformation des Distributions Angulaires Lors du Changement de Référentiel CM-Lab

A.1 INTRODUCTION

Les distributions angulaires des particules émises par une réaction nucléaire sont évidemment toujours mesurées dans le référentiel du laboratoire, mais analysées dans le référentiel du centre de masse, généralement par un développement en polynômes de Legendre, pour en déduire des informations nucléaire $(\ell, j, \pi ...)$.

Par contre ces mêmes distributions angulaire sont utilisées dans le système du laboratoire pour le calcul de certaines corrections expérimentales (par exemple diffusions multiples).

L'objet de la présente note est de résoudre le problème qui se pose de la façon suivante : connaissant dans un système de référence une distribution angulaire caractérisée par les coefficients de son développement en polyômes de Legendre, comment obtenir les coefficients de ce développement dans l'autre système de référence.

Le paragraphe I, après quelques rappels, montre que cette transformation s'effectue à l'aide d'une matrice de passsage T dont les éléments $T_{\ell\ell'}$ calculés par des formules démontrées au paragraphe II.

Dans les fichiers de données neutroniques ENDF, la matrice de passage est donnée uniquement dans le cas de la diffusion élastique. Le calcul et l'utilisation de cette matrice sont étendus ici au cas le plus général d'une réaction nucléaire afin d'exploiter

pleinement toutes les informations relatives aux distributions angulaires données dans les fichiers ENDF, dans la mesure où celles-ci sont présentées sous forme de développement en polynômes de **Legendre**. Cette utilisation est décrite dans le paragraphe III.

Enfin plusieurs méthodes sont présentées et comparées dans cette note, méthodes qui permettent de constituer la matrice de passage lors de la création de nouveaux fichiers.

A.2 RAPPELS ET DEFINITIONS

Soit une particule de masse m_1, d'énergie E, frappant une particule au repos de masse m_2 et produisant une particule de masse m_3 (dont on mesure la distribution angulaire) et une particule de masse m_4. Soit Q le bilan énergétique de la réaction.

La section efficace différentielle, exprimée dans le centre de masse, est[1] $\dfrac{d\overline{\sigma}}{d\overline{\Omega}}\left(\overline{\mu},\overline{E}\right)$ dans l'angle solide $d\overline{\Omega} = 2\pi d\overline{\mu}$, exprimée dans le laboratoire elle est $\dfrac{d\sigma}{d\Omega}(\mu, E)$ dans l'angle solide $d\Omega = 2\pi d\mu$ μ et $\overline{\mu}$ sont les cosinus de l'angle entre les directions de m_1 et m_3 dans les systèmes du centre de masse et du laboratoire respectivement. La formule de transformation de la section efficace entre les deux référentiels s'écrit [1] :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\mu, E) = \frac{d\overline{\sigma}}{d\overline{\Omega}}\left(\overline{\mu},\overline{E}\right)\frac{d\overline{\mu}}{d\mu} \tag{A.1}$$

μ et $\overline{\mu}$ sont liés, dans le cas non relativiste, par [2] :

$$\frac{\sqrt{1-\overline{\mu}^2}}{\gamma+\overline{\mu}} = \frac{\sqrt{1-\mu^2}}{\mu} \tag{A.2}$$

avec :

$$\gamma = \sqrt{\frac{m_1 m_3}{m_2 m_4}\frac{\overline{E}}{\overline{E}+Q}} \tag{A.3}$$

et $\overline{E}$ est l'énergie cinétique totale disponible dans le centre de masse :

$$\overline{E} = \frac{m_2}{m_1+m_2}E \tag{A.4}$$

Le paramètre γ représente le rapport entre la vitesse du centre de masse dans le système du laboratoire et la vitesse de la particule m_3 dans le système du centre de masse.

Pour une diffusion élastique :

[1] Toutes les quantités exprimées dans le centre de masse sont surmentées d'une barre, par exemple : $\overline{\mu}$, $\overline{E}$, $\overline{\sigma}$.

$$Q = 0 \quad \text{et} \quad \gamma = \frac{m_1}{m_2} = const \tag{A.5}$$

Tous les calculs ultérieurs sont faits dans le cas général de la relation (A.3) où γ n'est pas une constante, avec néanmoins la restriction $\gamma \leq 1$. En effet, dans ce cas, qui correspond à la majorité des situations physiques avec $Q > 0$ ou $Q < 0$, μ et $\overline{\mu}$ varient tous deux entre -1 et $+1$ et sont liés par une relation biunivoque. Par contre, si $\gamma > 1$, il existe deux valeurs de μ pour une seule valeur de $\overline{\mu}$. C'est par exemple le cas dans une diffusion inélastique où $\gamma = \infty$ à l'énergie seuil E_s. La bande d'énergie incidente pour laquelle $\gamma > 1$ avec $Q < 0$ est limitée par :

$$E_s < \overline{E} < \frac{E_s}{1 - \dfrac{m_1 m_3}{m_2 m_4}}$$

Si $m_1 = m_3,\ m_2 = m_4 = 100$, $E_s = 1MeV$, la largeur de cette bande de $0.1keV$.

La distribution angulaire peut s'écrire sous la forme [] :

dans le centre de masse :

$$\frac{d\overline{\sigma}}{d\overline{\Omega}}\left(\overline{\mu}, \overline{E}\right) \equiv \frac{d\overline{\sigma}}{d\overline{\Omega}}\left(\overline{\mu}\right) = \frac{1}{4\pi} \sum_{i=0}^{\infty} \left(2\ell + 1\right) \overline{a}_\ell P_\ell \left(\overline{\mu}\right) \tag{A.6}$$

dans le laboratoire :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}\left(\mu, E\right) \equiv \frac{d\sigma}{d\Omega}\left(\mu\right) = \frac{1}{4\pi} \sum_{i=0}^{\infty} \left(2\ell + 1\right) a_\ell P_\ell \left(\mu\right) \tag{A.7}$$

où $P_\ell\left(\mu\right)$ sont les polynômes de Legendre d'ordre ℓ. Les coefficients a_ℓ sont équivalents aux coefficients B_ℓ de la référence [3] au facteur $4\pi i^2$ près.

La section efficace $\sigma\left(E\right)$, intégrale de la section efficace différentielle dans 4π, est la même dans les deux rréférentiels, soit :

$$\sigma\left(E\right) =_{4\pi} \overline{\sigma}\left(\overline{\mu}\right) d\overline{\Omega} =_{4\pi} \sigma\left(\mu\right) d\Omega = \overline{a}_0 = a_0 \tag{A.8}$$

Connaissant les coefficients $\overline{a}_\ell$, déduits de l'analyse de la distribution angulaire, les coefficients a_ℓ s'écrivent [4], en utilisant l'orthogonalité des polynômes de Legendre et la relation (A.1),

$$a_\ell = 2\pi \int_{-1}^{+1} P_\ell\left(\mu\right) \frac{d\sigma}{d\Omega}\left(\mu\right) d\mu = 2\pi \int_{-1}^{+1} P_\ell\left(\mu\right) \frac{d\overline{\sigma}}{d\overline{\Omega}}\left(\overline{\mu}\right) d\overline{\mu}$$

soit :

$$a_\ell = \frac{1}{2}\sum_{\ell'=0}^{\infty}(2\ell'+1)\,\overline{a}_{\ell'}\int_{-1}^{+1}P_\ell(\mu)\,P_{\ell'}(\overline{\mu})\,d\overline{\mu} \tag{A.9}$$

Posons, par définition :

$$T_{\ell\ell'} = \frac{2\ell'+1}{2}\int_{-1}^{+1}P_\ell(\mu)\,P_{\ell'}(\overline{\mu})\,d\overline{\mu} \tag{A.10}$$

il vient alors

$$a_\ell = \sum_{\ell=0}^{\infty} T_{\ell\ell'}\overline{a}_{\ell'} \tag{A.11}$$

qui est la relation de transformation cherchée. Les coefficients $T_{\ell\ell'}$ peuvent être considérés comme les éléments d'une matrice carrée $T_{\ell\ell'} = \{T_{\ell\ell'}\}$.

La relation inverse (passage du laboratoire au centre de masse) s'écrit :

$$\overline{a}_\ell = \sum_{\ell'=0}^{\infty} T^{-1}_{\ell\ell'}a_{\ell'} \tag{A.12}$$

où $T^{-1}_{\ell\ell'}$ sont les éléments de la matrice inverse T^{-1}, définis par :

$$T^{-1}_{\ell\ell'} = \frac{2\ell'+1}{2}\int_{-1}^{+1}P_\ell(\overline{\mu})\,P_{\ell'}(\mu)\,d\mu \tag{A.13}$$

A.3 CALCUL DES COEFFICIENTS DE PASSAGE

A.3.1 Quelques cas particuliers

Le calcul direct des coefficients $T_{\ell\ell'}$, par leur définition sous forme d'intégrale est long et délicat sauf pour des valeurs de ℓ ou ℓ' petites.

pour $\ell = 0$

$$T_{0\ell'} = \delta_{0\ell'} \tag{A.14}$$

pour $\ell = 1$

La relation (2) peut se mettre sous la forme :

$$\mu = \frac{(\gamma+\overline{\mu})}{\sqrt{1+2\gamma\overline{\mu}+\gamma^2}} \tag{A.15}$$

qui fait apparaître une fonction génératrice des polynômes de Legendre, d'où :

$$\mu = (\gamma + \overline{\mu})_{n=0}^{\infty} (-\gamma)^n P_n(\overline{\mu}) \quad \text{avec} \quad \gamma < 1 \tag{A.16}$$

or, par définition :

$$T_{1\ell'} = \frac{2\ell'+1}{2}{}_{-1}^{+1} \mu P_{\ell'}(\overline{\mu})\, d\overline{\mu} \tag{A.17}$$

En insérant (A.16) dans (A.17) il vient :

$$T_{1\ell'} = \frac{2\ell'+1}{2}{}_{-1}^{+1} {}_{n=0}^{\infty} \left\{ -(-\gamma)^{n+1} P_n(\overline{\mu}) + (-\gamma)^n \overline{\mu} P_n(\overline{\mu}) \right\} P_{\ell'}(\overline{\mu})\, d\overline{\mu} \tag{A.18}$$

La relation de récurrence sur les polynômes de Legendre donne :

$$\overline{\mu} P_n(\overline{\mu}) = \frac{n+1}{2n+1} P_{n+1}(\overline{\mu}) + \frac{n}{2n+1} P_{n-1}(\overline{\mu}) \tag{A.19}$$

d'où, en inversant la sommation et l'intégrale dans (A.18) :

$$T_{1\ell'} = \frac{2\ell'+1}{2}{}_{n=0}^{\infty} \left\{ -(-\gamma)_{-1}^{n+1\,+1} P_n(\overline{\mu}) P_{\ell'}(\overline{\mu})\, d\overline{\mu} + (-\gamma)^n \frac{n+1}{2n+1}{}_{-1}^{+1} P_{n+1}(\overline{\mu}) P_{\ell'}(\overline{\mu})\, d\overline{\mu} + (-\gamma)^n \frac{n}{2n+1}{}_{-1}^{+1} P_{n-1}(\right. \tag{A.20}$$

La relation d'orthogonalité des polynômes de Legendre implique que la somme n'a de terme non nul que pour $n = \ell' - 1$, ℓ' ou $\ell' + 1$ soit :

$$T_{1\ell'} = \frac{2\ell'+1}{2} \left\{ -(\gamma)^{\ell'+1} \frac{2}{2\ell'+1} + (-\gamma)^{\ell'-1} \frac{\ell'}{2\ell'-1} \frac{2}{2\ell'+1} + (-\gamma)^{\ell'+1} \frac{\ell'+1}{2\ell'+3} \frac{2}{2\ell'+1} \right\} \tag{A.21}$$

$$T_{1\ell'} = \frac{\ell'}{2\ell'-1} (-\gamma)^{\ell'-1} - (-\gamma)^{\ell'+1} \frac{\ell'+2}{2\ell'+3} \tag{A.22}$$

pour $\ell' = 0$

L'intégrale de la définition (A.10) des coefficients $T_{\ell\ell'}$ peut être calculée en introduisant une nouvelle variable u qui représente le logarithme du rapport de l'énergie qu'aurait la particule m_3 émise à 0° et de l'énergie qu'elle a dans l'angle solide dw (énergies mesurées dans le système du laboratoire). Alors, d'après [9] :

$$\begin{aligned}\mu(u) &= 1-\frac{(1+\gamma)^2}{2\gamma}(1-e^{-u}) \\ &= \frac{1}{2\gamma}\left[(1+\gamma)e^{-\frac{u}{2}}-(1-\gamma)^{\frac{u}{2}}\right]\end{aligned}$$

avec $< u < Log\left(\frac{1+\gamma}{1-\gamma}\right)^2$

Reportant ces relations dans la définition (A.10), il vient :

$$T_{\ell\ell'} = -\frac{2\ell'+1}{2}\int_0^{Log\left(\frac{1+\gamma}{1-\gamma}\right)^2} P_\ell\left[\mu(u)\right]P_{\ell'}\left[\overline{\mu}(u)\right]\frac{d\mu}{du}du \tag{A.23}$$

L'intégrale se réduit alors, en utilisant les expressions développées des polynômes de Legendre, à la somme d'intégrales de fonctions exponentielles. Néanmoins les calculs deviennent rapidement fastidieux pour des valeurs de ℓ et ℓ' grandes.

Dans le cas $\ell' = 0$ on trouve :

$T_{00} = 1$

$T_{10} = \frac{2}{3}\gamma$

$T_{20} = \frac{9\gamma^2-3}{3\gamma^2} + \frac{3(1-\gamma^2)^2}{32\gamma^3}Log\left(\frac{1+\gamma}{1-\gamma}\right)^2$

$T_{30} = 0$

$T_{40} = \frac{35(3-8\gamma^2+9\gamma^4)}{96\gamma^4} - \frac{35(1-\gamma^2)^3}{128\gamma^5}Log\left(\frac{1+\gamma}{1-\gamma}\right)^2 - \frac{5}{2}T_{20} + \frac{3}{8}$

$T_{50} = 0$ et de façon générale $T_{2k+1,0} = 0$ pour $k > 1$.

A.3.2 Autre relation définissant

Les relations (A.16) et (A.22) permettent de définir une nouvelle expression de μ. En effet la relation (A.16) développée s'écrit :

$$\mu = \sum_{n=0}^{\infty}\left\{-(-\gamma)^{n+1}P_n(\overline{\mu}) + (-\gamma)^n\overline{\mu}P_n(\overline{\mu})\right\} \tag{A.24}$$

En utilisant la relation de récurrence (A.19)

$$\mu = \sum_{n=0}^{\infty}\left\{-(-\gamma)^{n+1}P_n(\overline{\mu}) + (-\gamma)^n\left[\frac{n+1}{2n+1}P_{n+1}(\overline{\mu}) + \frac{n}{2n+1}P_{n-1}(\overline{\mu})\right]\right\} \tag{A.25}$$

soit :

$$\mu = \sum_{n=0}^{\infty} -(-\gamma)^{n+1}P_n(\overline{\mu}) + \sum_{n=0}^{\infty}(-\gamma)^n\frac{n+1}{2n+1}P_{n+1}(\overline{\mu}) + \sum_{n=0}^{\infty}(-\gamma)^n\frac{n}{2n+1}P_{n-1}(\overline{\mu}) \tag{A.26}$$

En effectuant les changements d'indice $m = n + 1$ dans la deuxième somme et $\ell = n - 1$ dans la troisième, il vient :

$$\mu = \sum_{n=0}^{\infty} - (-\gamma)^{n+1} P_n(\overline{\mu}) + \sum_{m=0}^{\infty} (-\gamma)^{m-1} \frac{m}{2m-1} P_m(\overline{\mu}) + \sum_{\ell=-1}^{\infty} (-\gamma)^{\ell+1} \frac{\ell+1}{2\ell+3} P_\ell(\overline{\mu}) \tag{A.27}$$

Les termes correspondants à $m = 0$ dans la deuxième somme et $\ell = -1$ dans la troisième sont nuls. Donc, les trois indices n, m, ℓ pouvant partir de zéro, les trois sommes se regroupent en une seule :

$$\mu = \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \frac{n}{2n-1} (-\gamma)^{n-1} - \frac{n+2}{2n+3} (-\gamma)^{n+1} \right\} P_n(\overline{\mu}) \tag{A.28}$$

or le terme entre crochets est, d'après la relation (A.22), T_{1n} d'où :

$$\mu = \sum_{n=0}^{\infty} T_{1n} P_n(\overline{\mu}) \tag{A.29}$$

A.3.3 Formule de récurrence

Les relations (A.14) et (A.22) peuvent servir de base à une formule de récurrence sur ℓ [5] pour déterminer les coefficients $T_{\ell\ell'}$ ($\ell > 1$).

Partant de la définition :

$$T_{\ell\ell'} = \frac{2\ell'+1}{2} \int_{-1}^{+1} P_{\ell+1}(\mu) P_{\ell'}(\overline{\mu}) \, d\overline{\mu} \tag{A.30}$$

et en utilisant la relation (A.19), il vient :

$$T_{\ell+1,\ell'} = \frac{2\ell'+1}{2} \frac{2\ell+1}{\ell+1} \int_{-1}^{+1} \mu P_\ell(\mu) P_{\ell'}(\overline{\mu}) \, d\overline{\mu} - \frac{2\ell'+1}{2} \frac{\ell}{\ell+1} \int_{-1}^{+1} P_{\ell-1}(\mu) P_{\ell'}(\overline{\mu}) \, d\overline{\mu} \tag{A.31}$$

Le second terme est par définition $-\dfrac{\ell}{\ell+1} T_{\ell-1,\ell'}$.

Le premier terme est calculé en utilisant la relation (A.29) et en inversant la sommation et l'intégrale

$$I \equiv \int_{-1}^{+1} \mu P_\ell(\mu) P_{\ell'}(\overline{\mu}) \, d\overline{\mu} = \sum_{n=0}^{\infty} T_{1n} \int_{-1}^{+1} P_{\ell-1}(\mu) P_{\ell'}(\overline{\mu}) \, d\overline{\mu} \tag{A.32}$$

La relation de composition des harmoniques sphériques [6] permet d'écrire :

$$P_n(\overline{\mu})\,P_{\ell'}(\overline{\mu}) = \sum_{m=|n-\ell'|}^{n+\ell'} \langle n\ell' 00|\ m0\rangle^2\, P_m(\overline{\mu}) \tag{A.33}$$

d'où :

$$I = \sum_{n=0}^{\infty} T_{1n} \sum_{m=|n-\ell'|}^{n+\ell'} \langle n\ell' 00|\ m0\rangle^2 \int_{-1}^{+1} P_\ell(\mu)\,P_m(\overline{\mu})\,d\overline{\mu} \tag{A.34}$$

La dernière intégrale est, par définition $\dfrac{2}{2m+1}T_{\ell m}$ d'où :

$$I = 2\sum_{n=0}^{\infty} T_{1n} \sum_{m=|n-\ell'|}^{n+\ell'} \langle n\ell' 00|\ m0\rangle^2 \frac{T_{\ell m}}{2m+1} \tag{A.35}$$

et la relation de récurrence cherchée s'écrit :

$$T_{\ell+1,\ell'} = (2\ell'+1)\frac{2\ell+1}{\ell+1}\left\{\sum_{n=0}^{\infty} T_{1n} \sum_{m=|n-\ell'|}^{n+\ell'} \langle n\ell' 00|\ m0\rangle^2 \frac{T_{\ell m}}{2m+1}\right\} - \frac{\ell}{\ell+1}T_{\ell-1,\ell'} \tag{A.36}$$

Cette formule est calculée par le programme CDMLABR (voir annexe 1).

A.3.4 Calcul direct des coefficients $T_{\ell\ell'}$

Le calcul des coefficients $T_{\ell\ell'}$ par la relation de récurrence (A.36) semble simple mais, en fait, se heurte rapidement à des problèmes de précision numérique (les deux termes du second membre deviennent extrêmement voisins). Une méthode de calcul direct apparaît donc nécessaire.

Cette méthode consiste, partant de la définition (A.10), c.a.d.,

$$T_{\ell\ell'} = \frac{2\ell'+1}{2}\Big|_{-1}^{+1} P_\ell(\mu)\,P_{\ell'}(\overline{\mu})\,d\overline{\mu}$$

à transformer le polynôme $P_\ell(\mu)$ en une fonction explicite de $\overline{\mu}$.

Or $P_\ell(\mu)$ est une fonction implicite de $\overline{\mu}$ et γ par l'intermédiaire de μ, fonction que l'on peut développer en série de Taylor au voisinage de $\gamma = 0$, soit :

$$P_\ell[\mu(\overline{\mu},\gamma)] = \sum_{\pi=0}^{\infty} \gamma^\pi \frac{1}{\pi!}\left|\frac{\partial^\pi P_\ell(\mu)}{\partial\gamma^\pi}\right|_{\gamma=0} \tag{A.37}$$

Les dérivées partielles $\dfrac{\partial^\pi P_\ell(\mu)}{\partial\gamma^\pi}$ sont de la forme [7].

$$\frac{\partial^{\pi} P_{\ell}(\mu)}{\partial \gamma^{\pi}} = \left(1 + 2\gamma\overline{\mu} + \gamma^2\right)^{-\frac{\pi}{2}} \pi! \sum_{p=\ell-\pi}^{\infty} b_{\ell,p}^{\pi} P_{\ell}(\mu) \tag{A.38}$$

avec :

$$b_{\ell,p}^{\pi} = \frac{(p+1)(p+2-\pi)}{(2p+3)(\pi+1)} \frac{\partial^{\pi} P_{\ell}(\mu)}{\partial \gamma^{\pi}} b_{\ell,p+1}^{\pi} - \frac{p(p+\pi-1)}{(2p-1)(\pi+1)} b_{\ell,p-1}^{\pi} \tag{A.39}$$

et

$$b_{\ell,p}^{0} = \delta_{\ell,p}$$

Ce résultat se démontre par récurrence. On suppose la relation (A.38) vraie pour une certaine valeur de , puis en la dérivant par rapport à ,

$$\frac{\partial^{\pi+1} P_{\ell}(\mu)}{\partial \gamma^{\pi+1}} = -\pi \left(1 + 2\gamma\overline{\mu} + \gamma^2\right)^{-\frac{\pi}{2}} (\gamma + \overline{\mu}) \pi! \sum_{p=\ell-\pi}^{\ell+\pi} b_{\ell,p}^{\pi} P_p(\mu) + \left(1 + 2\gamma\overline{\mu} + \gamma^2\right)^{-\frac{\pi}{2}} \frac{\partial \mu}{\partial \gamma} \pi! \sum_{p=\ell-\pi}^{\ell+\pi} b_{\ell,p}^{\pi} \frac{\partial P_{\ell}(\mu)}{\partial \mu} \tag{A.40}$$

Le coefficient devant la première sommation de (A.40) peut se mettre sous la forme, en utilisant (A.15)

$$-\pi \left(1 + 2\gamma\overline{\mu} + \gamma^2\right)^{-\frac{\pi+1}{2}} \mu$$

De plus, à l'aide de la relation de récurrence (A.19), le premier terme s'écrit

$$-\pi \left(1 + 2\gamma\overline{\mu} + \gamma^2\right)^{-\frac{\pi+1}{2}} \pi! \sum_{p=\ell-\pi}^{\ell+\pi} b_{\ell,p}^{\pi} \left[\frac{p+1}{2p+1} P_{p+1}(\mu) + \frac{p}{2p+1} P_{p-1}(\mu)\right] \tag{A.41}$$

Par ailleurs, toujours d'après (A.15)

$$\frac{\partial \mu}{\partial \gamma} = \left(1 - \mu^2\right) \left(1 + 2\gamma\overline{\mu} + \gamma^2\right)^{-\frac{1}{2}} \tag{A.42}$$

Le second terme de (A.40) s'écrit donc :

$$\left(1 + 2\gamma\overline{\mu} + \gamma^2\right)^{-\frac{\pi+1}{2}} \pi! \sum_{p=\ell-\pi}^{\ell+\pi} b_{\ell,p}^{\pi} \left(1 - \mu^2\right) \frac{\partial P_{\ell}(\mu)}{\partial \mu} \tag{A.43}$$

or,

$$\left(1 - \mu^2\right) \frac{\partial P_{\ell}(\mu)}{\partial \mu} = (p+1) \mu P_p(\mu) - (p+1) P_{p+1}(\mu)$$

Développons $\mu P_p(\mu)$ à l'aide de la relaiton (A.19)

$$\left(1-\mu^2\right)\frac{\partial P_p(\mu)}{\partial \mu}=\frac{p(p+1)}{2p+1}\left[P_{p-1}(\mu)-P_{p+1}(\mu)\right]$$

La relation (A.40) s'écrit alors :

$$\begin{aligned}\frac{\partial^{\pi+1}P_\ell(\mu)}{\partial\gamma^{\pi+1}} &= -\pi\left(1+2\gamma\overline{\mu}+\gamma^2\right)^{-\frac{\pi+1}{2}}\pi!\sum_{p=\ell-\pi}^{\ell+\pi}b_{\ell,p}^{\pi}\left[\frac{p+1}{2p+1}P_{p+1}(\mu)+\frac{p}{2p+1}P_{p-1}(\mu)\right]\\ &\quad+\left(1+2\gamma\overline{\mu}+\gamma^2\right)^{-\frac{\pi+1}{2}}\pi!\sum_{p=\ell-\pi}^{\ell+\pi}b_{\ell,p}^{\pi}\frac{p(p+1)}{2p+1}\left[P_{p-1}(\mu)+P_{p+1}(\mu)\right]\end{aligned}$$

soit en regroupant les termes

$$\frac{\partial^{\pi+1}P_\ell(\mu)}{\partial\gamma^{\pi+1}}=\left(1+2\gamma\overline{\mu}+\gamma^2\right)^{-\frac{\pi+1}{2}}(\pi+1)!\sum_{p=\ell-\pi}^{\ell+\pi}\left[\frac{p(p+1-\pi)}{(2p+1)(\pi+1)}P_{p-1}(\mu)-\frac{(p+1)(p+\pi)}{(2p+1)(\pi+1)}P_{p+1}(\mu)\right]b_{\ell,p}^{\pi} \tag{A.44}$$

La sommation se décompose de la façon suivante :

$$\sum_{p=\ell-\pi}^{\ell+\pi}b_{\ell,p}^{\pi}\frac{p(p+1-\pi)}{(2p+1)(\pi+1)}P_{p-1}(\mu)-\sum_{p=\ell-\pi}^{\ell+\pi}b_{\ell,p}^{\pi}\frac{(p+1)(p+\pi)}{(2p+1)(\pi+1)}P_{p+1}(\mu)$$

puis, faisant les décalages d'indices $p-1\rightarrow p$ dans la première somme et $p+1\rightarrow p$ dans la seconde, il vient :

$$\sum_{p=\ell-\pi-1}^{\ell+\pi-1}b_{\ell,p+1}^{\pi}\frac{(p+1)(p+2-\pi)}{(2p+3)(\pi+1)}P_p(\mu)-\sum_{p=\ell-\pi+1}^{\ell+\pi+1}b_{\ell,p-1}^{\pi}\frac{p(p+\pi-1)}{(2p-1)(\pi+1)}P_p(\mu)$$

Regroupant alors ces deux sommes :

$$\sum_{p=\ell-(\pi+1)}^{\ell+(\pi+1)}\left[\frac{(p+1)(p+2-\pi)}{(2p+3)(\pi+1)}b_{\ell,p+1}^{\pi}-\frac{p(p+\pi-1)}{(2p-1)(\pi+1)}b_{\ell,p-1}^{\pi}\right]P_p(\mu)$$

Le terme entre crochets est exactement $b_{\ell,p}^{\pi}$, donc si la relation (A.38) est vraie pour π, elle est vraie pour toute valeur supérieure de π.Or cette relation est triviale pour $\pi=0$ ($P_\ell(\mu)=P_\ell(\mu)$), et de ce fait vraie pour tout π.

La relation (A.37) s'écrit alors :

$$P_\ell(\mu) = \sum_{\pi=0}^{\infty} \gamma^\pi \frac{1}{\pi!} \left| \left(1 + 2\gamma\overline{\mu} + \gamma^2\right)^{-\frac{\pi}{2}} \pi! \sum_{p=\ell-\pi}^{\ell+\pi} b_{\ell,p}^{\pi} P_p(\mu) \right|_{\gamma=0}$$

or, si $\gamma = 0$, $\mu = \overline{\mu}$ d'après (A.15), donc :

$$P_\ell(\mu) = \sum_{\pi=0}^{\infty} \gamma^\pi \sum_{p=\ell-\pi}^{\ell+\pi} b_{\ell,p}^{\pi} P_p(\overline{\mu}) \tag{A.45}$$

En reportant cette relation dans la définition (A.10), il vient :

$$T_{\ell\ell'} = \sum_{\pi=0}^{\infty} \gamma^\pi \sum_{p=\ell-\pi}^{\ell+\pi} b_{\ell,p}^{\pi} \frac{2\ell'+1}{2} \int_{-1}^{+1} P_\ell(\overline{\mu}) P_{\ell'}(\overline{\mu}) \, d\overline{\mu} \tag{A.46}$$

or

$$\frac{2\ell'+1}{2} \int_{-1}^{+1} P_\ell(\overline{\mu}) P_{\ell'}(\overline{\mu}) \, d\overline{\mu} = \delta_{p\ell'}$$

La sommation sur p se limite au seul terme $p = \ell'$, avec la condition $\ell - r \leq \ell' \leq \ell - r$ soit $r \geq |\ell - \ell'|$, et la relation (A.46) s'écrit :

$$T_{\ell\ell'} = \sum_{r=|\ell-\ell'|}^{\infty} \gamma^\pi b_{\ell\ell'}^{\pi} \tag{A.47}$$

qui à l'aide de la définition (A.39) permet donc de calculer directement les coefficients $T_{\ell\ell'}$.

Cette formule est caluléE par le programme **CDMLABD** (voir annexe 2).

A.3.5 Comparaison des deux méthode de calcul de la matrice T

Les éléments de la matrice de passage ont été calculés, dans le cas $\gamma = 0$ et $\ell_{\max} = 19$, à l'aide des deux formulations précédentes (récurrente et directe) afin de comparer la précision et la rapidité de calcul de celles-ci. Le tableau I présente, dans sa partie supérieure, un extrait de la matrice calculée par la méthode récurrente et, dans sa partie inférieure, le même extrait calculé par la méthode directe. L'examen de ce tableau permet de constater deux types de différences :

- les coefficients $T_{\ell\ell'}$, rigoureusement nuls dans la méthode directe (et qui le sont analytiquement) ne le sont pas dans la méthode récurrente (soulignés en tiretés).

- les termes soulignés en trait pliein, calculés par la méthode récurrente, sont approchés voire faux du fait de la précision numérique limitée, malgré l'utilisation de 30 chiffres significatifs pour effectuer le calcul.

De plus le calcul direct est 200 fois plus rapide que le calcul récurrent (0.17 secondes au lieu de 35 secondes sur ordinateur CDC 7600).

Ceci montre la supériorité de la méthode directe qui est rapide et qui permet de s'affranchir des problèmes de précision numérique.

A.4 Utilisation de la matrice T dans les fichiers ENDF

Dans les fichiers **ENDF**, les distributions angulaires font l'objet de la "**file 4**" [8].

Pour une réaction elles sont données pour une série d'énergies croissantes.

Les distributions angulaires sont présentées sous deux formes, et pour chacune de ces formes, elles sont données dans le système du laboratoire ou du centre de masse :

- **Cas 1** soit directement sous forme de distributions de probabilités normalisées $P(\mu, E)$ telles que

$$\int_{-1}^{+1} P(\mu, E)\, d\mu = 1 \tag{A.48}$$

$P(\mu, E)\, d\mu$ est la probabilité qu'un neutron d'énergie incidente E soit diffusé dans un intervalle $d\mu$ autour d'un angle dont le cosinus est μ.

La distribution angulaire s'écrit alors :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\mu, E) = \frac{\sigma(E)}{2\pi} P(\mu, E) \tag{A.49}$$

Dans ce cas le changement de référentiel peut s'effectuer à l'aide des transformations cinétiques classiques sur les angles et les sections efficaces [1]. Ce problème n'a pas été abordé ici.

- **Cas 2** soit à partir des coefficients du développement en polynômes de Legendre, tabulés à partir de $\ell = 1$ (il est sous-entendu que $a_0 = 1$).

Dans ce cas la distribution angulaire s'écrit :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\mu, E) = \frac{\sigma(E)}{4\pi} \sum_{\ell=0}^{\ell_{\max}} (2\ell + 1)\, a_\ell(E)\, P_\ell(\mu) \tag{A.50}$$

Appendix B

Publications

B.1 International Journal of Modern Physics E Nuclear Physics

International Journal of Modern Physics E
Vol. 26, No. 9 (2017) 1750058 (12 pages)
© World Scientific Publishing Company
DOI: 10.1142/S0218301317500586

Int. J. Mod. Phys. E 2017.26. Downloaded from www.worldscientific.com
by 193.194.80.6 on 07/10/18. Re-use and distribution is strictly not permitted, except for Open Access articles.

Monte-Carlo modeling and simulation of neutrons detection process using Boron-10

D. Benzaid[*,§], A. Seghour[†,¶] and A. Borras[‡,‖]

[*]*Department of Physics,*
Ferhat Abbas University, SETIF, Algeria

[†]*Centre de Recherche Nucléaire d'Alger,*
02, Bd. Frantz Fanon, BP 399, Alger-RP, 16000 Algiers, Algeria

[‡]*Environmental Radioactivity Laboratory – LaboRA,*
University of the Balearic Islands,
Cra. Valldemossa Km 7.5, 07122, Palma de Mallorca, Spain
[§]*d.benzaid@univ-dbkm.dz*
[¶]*seghour@crna.dz*
[‖]*toni.borras@uib.es*

Received 23 March 2017
Revised 17 August 2017
Accepted 3 September 2017
Published 25 September 2017

The interaction of a mono-energetic neutron beam with a target layer of Boron-10 is studied to characterize the behavior of neutrons and produced charged particles inside the layer. The detection system is modeled through a Monte-Carlo simulation. The quality of the simulation method and controlling parameters is assessed with the response function. The Von Neumann rejection sampling method is used to model the interaction process. The obtained results show high agreement with previous results.

Keywords: Neutron interaction; boron; Monte-Carlo simulation; rejection sampling method; neutron energy spectrum.

PACS Number(s): 24.10.Lx, 29.40.Wk, 25.40.Fq, 28.20.−v

1. Introduction

Neutrons cannot interact with matter by means of the Coulomb force, as they carry no charge. Thus, they can travel through matter with almost no interaction and are nearly invisible to common size detector.[15] The interaction of these charge-less particles with a particular category of materials, called converters, makes their indirect detection more efficient by collecting the particle products resulting from their interaction with such materials. Boron-10 is among the most popular converters. The neutron-induced reaction is then $^{10}\mathrm{B}(n,\alpha)^{7}\mathrm{L}i$,[3,11,12,17,21,23,24] which yields two

Int. J. Mod. Phys. E 2017.26. Downloaded from www.worldscientific.com
by 193.194.80.6 on 07/10/18. Re-use and distribution is strictly not permitted, except for Open Access articles.

possible de-excitation branches from the excited ^{11}B compound nucleus, namely

$$^{1}n + {}^{10}\mathrm{B} \rightarrow \begin{cases} (^{7}\mathrm{L}_i)^* + {}^{4}\mathrm{He} \\ {}^{7}\mathrm{L}_i + {}^{4}\mathrm{He} \end{cases} . \tag{1}$$

The first branch, which is the most probable, with $Q^* = 2.309\,\mathrm{MeV}$ and L_i produced in its first excited state, de-excites promptly and emits a significant γ-ray energy. In that case, the properties of charged particle products mainly depend on the neutron energy and its corresponding cross-section.

This model is widely applied in various research fields such as in Boron neutron capture therapy in medicine,[10,32] neutron detection and spectrometry in nuclear physics[13,17,19,24,25] and other important applications such as oil well logging.[9] Improving the knowledge related to these reactions allows to optimize the exploitation of this process, specially when precise information on the particle products is needed. This study aims to develop an algorithm which relates the obtained energy spectrum with the incident neutron energy. We consider the 1.0 MeV neutron energy as a first approach to validate the model and simulation algorithm. The configuration of the Boron layer converter is explained in Sec. 2. Afterwards, the simulation method and the obtained results are exposed in Secs. 2 and 3. Finally, the main results are explained in Sec. 4.

2. Modeling of the Boron Converter

The proposed converter model is a Boron made cylindrical layer. Its thickness range is [0.1 μm, 14.0 μm], which is equivalent to a superficial Boron density ranging from 23.50 μg/cm^2 to 3.29 mg/cm^2. A normal incident 1.0 MeV mono energetic neutron beam arrives to the surface of one of the cylinder bases. Each neutron travels first a distance X_n before interacting with one of the constituent nuclei of the target. The directions of produced particles are in the same plane as the incident neutron. The planes formed by each triplet (n, α, L_i) are not assumed to be related to each other.

The distances traveled by the incident neutron before interaction, the alpha particle and lithium particle in the Boron layer are represented by X_n, X_α and X_{L_i} (Fig. 1).

The energy and momentum conservation laws (1) lead to the particle products energies in the laboratory system

$$E_\alpha = \left\{ \frac{\sqrt{m_n m_\alpha E_n}\cos\theta \pm \sqrt{m_n m_\alpha E_n \cos^2\theta + (m_\alpha + m_{\mathrm{L}_i})[(m_{\mathrm{L}_i} - m_n)E_n + m_{\mathrm{L}_i}Q^*]}}{m_\alpha + m_{\mathrm{L}_i}} \right\}^2 ,$$

$$E_{\mathrm{L}_i} = \left\{ \frac{\sqrt{m_n m_{\mathrm{L}_i} E_n}\cos\phi \pm \sqrt{m_n m_{\mathrm{L}_i} E_n \cos^2\phi + (m_{\mathrm{L}_i} + m\alpha)[(m_\alpha - m_n)E_n + m_\alpha Q^*]}}{m_{\mathrm{L}_i} + m_\alpha} \right\}^2 , \tag{2}$$

Int. J. Mod. Phys. E 2017.26. Downloaded from www.worldscientific.com
by 193.194.80.6 on 07/10/18. Re-use and distribution is strictly not permitted, except for Open Access articles.

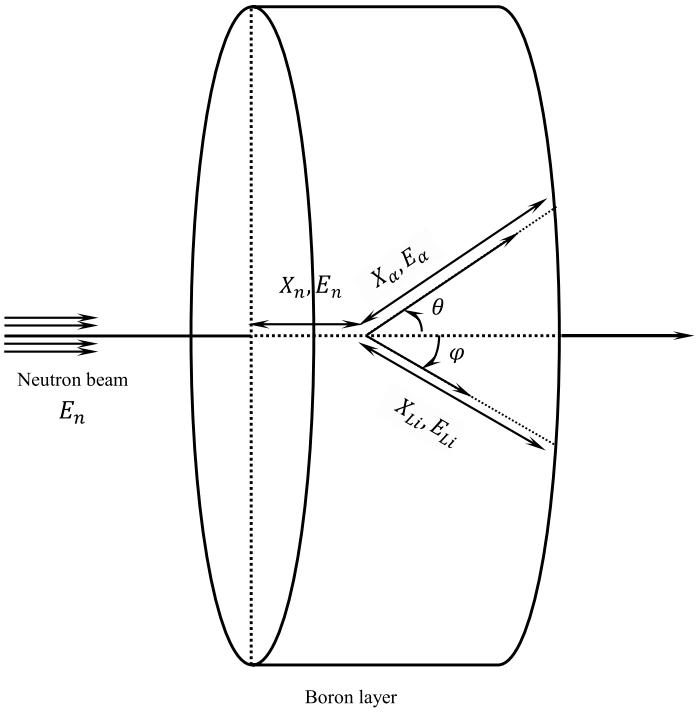

Fig. 1. Kinematics of the nuclear reaction $^{10}\mathrm{B}(n,\alpha)^{7}\mathrm{L}_i$.

where m_i $(i = n, \alpha, \mathrm{L}_i)$ indicate the masses of the neutron, the alpha particle and lithium, respectively, while E_i $(i = n, \alpha, \mathrm{L}_i)$ are their respective kinetic energies. Their emission angles θ and ϕ are simply related by

$$\tan\phi = \frac{\sqrt{\dfrac{m_\alpha E_\alpha}{m_{\mathrm{L}_i} E_{\mathrm{L}_i}}}\sin\theta}{\sqrt{\dfrac{m_n E_n}{m_{\mathrm{L}_i} E_{\mathrm{L}_i}}} - \sqrt{\dfrac{m_\alpha E_\alpha}{m_{\mathrm{L}_i} E_{\mathrm{L}_i}}}\cos\theta}. \tag{3}$$

3. Interaction Simulation

In order to properly simulate the interaction within our model, five important steps are needed. First the position of each neutron emanating from the mono energetic beam, and denoted by $M(x, y)$, has to be defined. In the second step, the distance X_n traveled by the neutron inside the cylinder before undergoing interaction with the constituent nuclei of the Boron layer must be calculated. Third, the ejection planes angles θ and ϕ are defined. In the fourth step, the charged particles' energy loss in the absorbing medium is obtained. Finally, in the fifth and the last step the number of counts obtained from escaped particle energies after their travel through the absorber is computed and stored. All these parameters, ($M(x, y)$, X_n, θ, ϕ and counts) are obtained using a Monte-Carlo method algorithm. Most neutron sources produce fast neutrons.[22,28,33] Figures 2 and 3 show the well-known total cross-section versus neutron energy curve for different energy scales for our interaction

Int. J. Mod. Phys. E 2017.26. Downloaded from www.worldscientific.com
by 193.194.80.6 on 07/10/18. Re-use and distribution is strictly not permitted, except for Open Access articles.

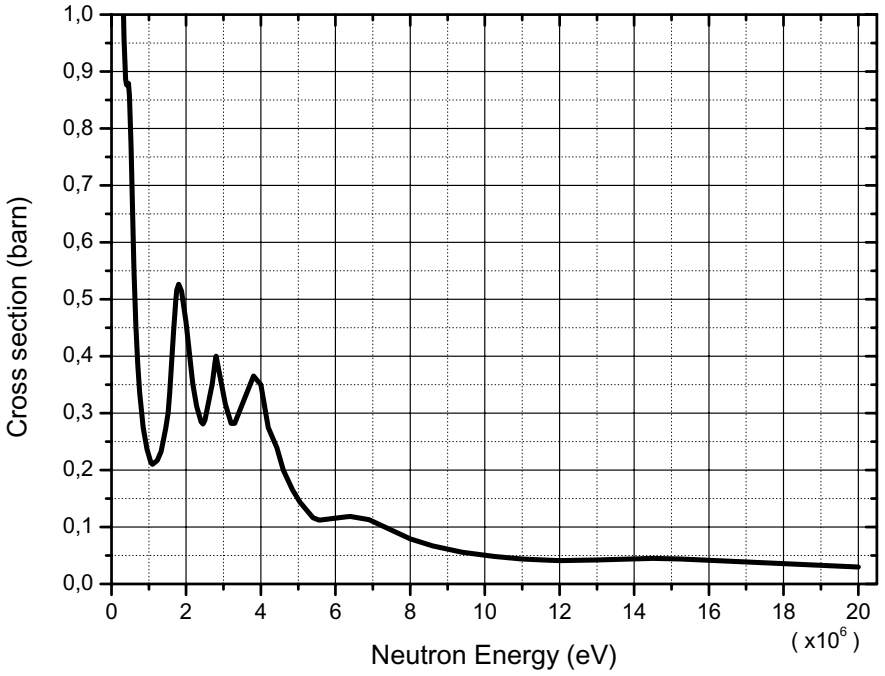

Fig. 2. Cross-section versus fast neutron energy for $^{10}\mathrm{B}(n,\alpha)^{7}\mathrm{L}_i$.

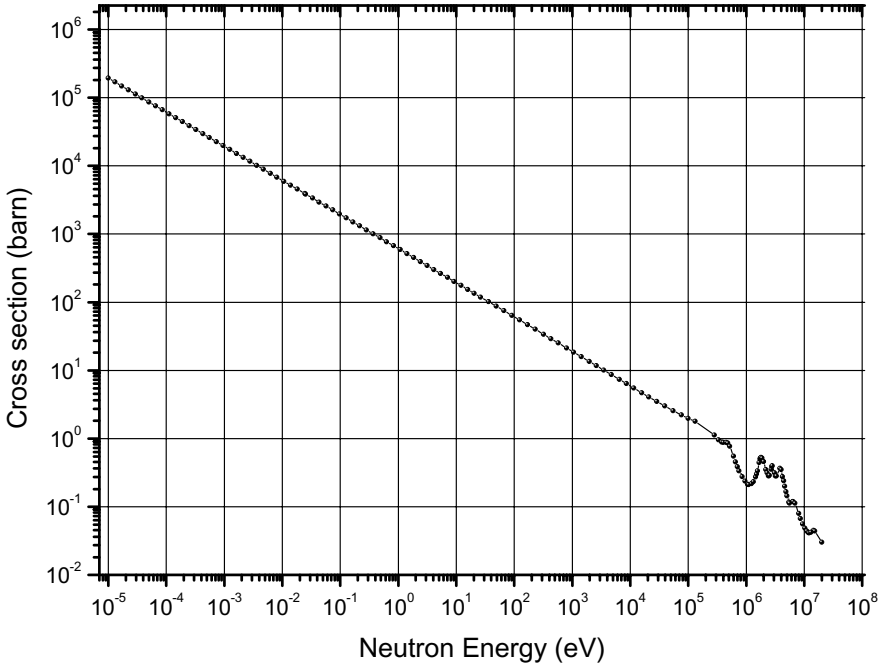

Fig. 3. Cross-section versus neutron energy for $^{10}\mathrm{B}(n,\alpha)^{7}\mathrm{L}_i$.

of interest $^{10}\mathrm{B}(n,\alpha)^{7}\mathrm{L}_i$.[2,14] We are interested in the fast neutrons with energies ranging between 0.5 MeV and 5.0 MeV in the center of mass system (CM).

The incident neutron beam attenuation when entering the converter medium can be represented in terms of surviving number of neutrons after the absorption

Int. J. Mod. Phys. E 2017.26. Downloaded from www.worldscientific.com
by 193.194.80.6 on 07/10/18. Re-use and distribution is strictly not permitted, except for Open Access articles.

by the medium has taken place. The process follows the well-known expression:

$$N = N_0 e^{-\Sigma x}, \tag{4}$$

where N_0 and N are, respectively, the initial number of neutrons entering the absorber and the number of transmitted neutrons, escaping at a distance x without interaction. Σ is the macroscopic cross-section.

The position of each neutron arriving at the surface of the apparent front base of the cylindrical Boron layer is determined using Von Neumann rejection sampling method, one of the most popular methods used in this type of algorithms.[6,7,20,29,31] Rejection Sampling is a technique to generate samples characterized with a desired distribution by sampling from an initially different distribution.[5] Let $M(x_M, y_M)$ be the position of any neutron reaching the target. The procedure consists on drawing coordinates x_M and y_M in the cylinder diameter length range. The random drawing method is applied to determine the ejection angles. The reference planes are then formed by projecting the position $M(x_M, y_M)$ perpendicularly to the x-axes, such that a parallel segment to the y-axes is obtained. The latter represents one side of the rectangle (plane) formed by that way. Given x random nature, which follows the density distribution function given in (4) one can proceed to determine these distances by a Monte-Carlo method.[20,29]

The distribution function F can be written as

$$F(x) = \int_0^x P(x')dx'. \tag{5}$$

It is well-known that if ξ is uniformly distributed in the interval $[0, 1]$ then the variable

$$\rho^* = F^{-1}(\xi)$$

has a distribution function F. Indeed if $F^*(\rho)$ is the distribution function of ρ^*

$$\begin{aligned} F^*(\rho) &= P(\rho^* < \rho) \\ &= P(F^{-1}(\xi) < \rho) \\ &= P(\xi < F(\rho)) \\ &= F(\rho). \end{aligned}$$

It follows that ρ^* has as the probability density $P(\rho)$.[20] The distribution function is analytically invertible, so one can then easily determine ρ from the density P,

$$\rho = F^{-1}(\xi) = -\frac{1}{\Sigma}\ln(1-\xi)$$

or

$$\rho = F^{-1}(\xi) = -\frac{1}{\Sigma}\ln\xi \tag{6}$$

because the random variable ξ belongs to the interval $[0, 1]$ as well. Relation (6) is decisive to determine the distance x traveled by any neutron reaching the Boron

Int. J. Mod. Phys. E 2017.26. Downloaded from www.worldscientific.com
by 193.194.80.6 on 07/10/18. Re-use and distribution is strictly not permitted, except for Open Access articles.

layer. This distance depends mainly on the macroscopic cross-section Σ, which is related to Boron atomic density and microscopic cross-section by

$$\sum = n\sigma, \tag{7}$$

where n and σ are Boron atomic density and microscopic cross-section, respectively. For a 1.0 MeV neutron energy incident beam one has $n = 1.41 \times 10^{23}$ atoms/cm^3 and $\sigma = 2.537$ b, and so it follows that the value for the macroscopic cross-section is $\Sigma = 3.578 \times 10^{-2}\,\mathrm{mm}^{-1}$.

One of the ejection angles, e.g., θ for the alpha particle, can also be determined using rejection sampling.

Suppose that $\sigma(\cos\theta, E)$ is a bounded function defined in any interval $[a, b]$, i.e., $\sigma(\cos\theta, E) \leq \sigma_{\mathrm{Max}}$ and hence $\sigma(\cos\theta, E)/\sigma_{\mathrm{Max}} \leq 1$ with $\sigma(a) = 0$. The rejection method consists then on drawing pairs of random numbers (r_1, r_2) uniformly distributed in $[0, 1]$. Then, r_1 is compared to the quantity $\frac{1}{\sigma_{\mathrm{Max}}}[a+(b-a)r_2]$. The used algorithm to perform such process is the following:

Draw (r_1, r_2)	from a uniform distribution $[0, 1]$		
IF	$\dfrac{1}{\sigma_{\mathrm{Max}}}[a + (b - a)r_2] \leq r_1$	THEN	$\cos\theta = a + (b - a)r_2$
ELSE			
IF	$\dfrac{1}{\sigma_{\mathrm{Max}}}[a + (b - a)r_2] > r_1$	THEN	(r_1, r_2) rejected
GOTO the beginning	to draw an other pair(r_1, r_2).		

(8)

This algorithm ensures us that the random numbers $\cos\theta$ follow the distribution $\sigma(\cos\theta, E)$. Cross-sections $\sigma(\cos\theta, E)$ used in this work are those of Ref. 26. The data in form of Legendre polynomial expansion coefficients $a_\ell(E)$, as a function of incident neutron energy, have been used. Absolute differential cross-sections (in barns per steradian) are obtained for any given tabulated distributions by using the formula[8]

$$\sigma(\mu = \cos\theta, E) = \frac{\sigma_s(E)}{2\pi} \sum_{\ell=0}^{N_L} \frac{2\ell + 1}{2} a_\ell(E) P_\ell(E), \tag{9}$$

where $\sigma_s(E)$ is the corresponding scattering cross-section, e.g., elastic scattering at energy E. In this study, 1.0 MeV neutron energy in the CM system and the corresponding Legendre polynomials coefficients, as they are read from the data base file, are considered. They are given in Table 1.

Once θ angle is calculated, the second angle for the lithium particle can be easily determined from (3). Then we need now to calculate and estimate the energy loss experienced by these particles across the medium. To do this, one can use SRIM code.

Table 1. Legendre polynomial coefficients for 1.0 MeV neutron energy.

Neutron energy (MeV)	$\ell = 0$	$\ell = 1$	$\ell = 2$	$\ell = 3$	$\ell = 4$
1.00	1.00	2.7555×10^{-2}	3.2939×10^{-3}	1.1526×10^{-3}	5.1112×10^{-4}

Int. J. Mod. Phys. E 2017.26. Downloaded from www.worldscientific.com
by 193.194.80.6 on 07/10/18. Re-use and distribution is strictly not permitted, except for Open Access articles.

SRIM is a very well known code developed by Ziegler *et al.*[27] It is a Monte-Carlo method and provides tools to manipulate different parameters of stopping and ranges versus energy of charged particles and other parameters related to different absorber materials. To take advantage of SRIM we have fitted the results, given by the code, with adequate functions. The stopping power can then be considered as

Table 2. Parameters of the stopping power and range fit functions in Boron.

	Energy range (MeV)	$Y0$	$A1$	$A2$	$T1$	$T2$	$B0$	$B1$	$B2$
^{4}He	$[0.00, 0.50]$	2.1370	-0.463	-1.577	0.0104	0.1366	0.23861	1.64824	0.38192
	$[0.50, 10.0]$	-6294.360	6294.9790	1.90127	324942.65	2.43332	0.23861	1.64824	0.38192
^{7}L$_i$	$[0.00, 1.50]$	3.596	-3.06	-0.39	0.444	0.015	0.43112	1.12231	0.07747
	$[1.50, 10.0]$	0.7963	1.7073	1.7073	6.6493	6.6477	0.43112	1.12231	0.07747

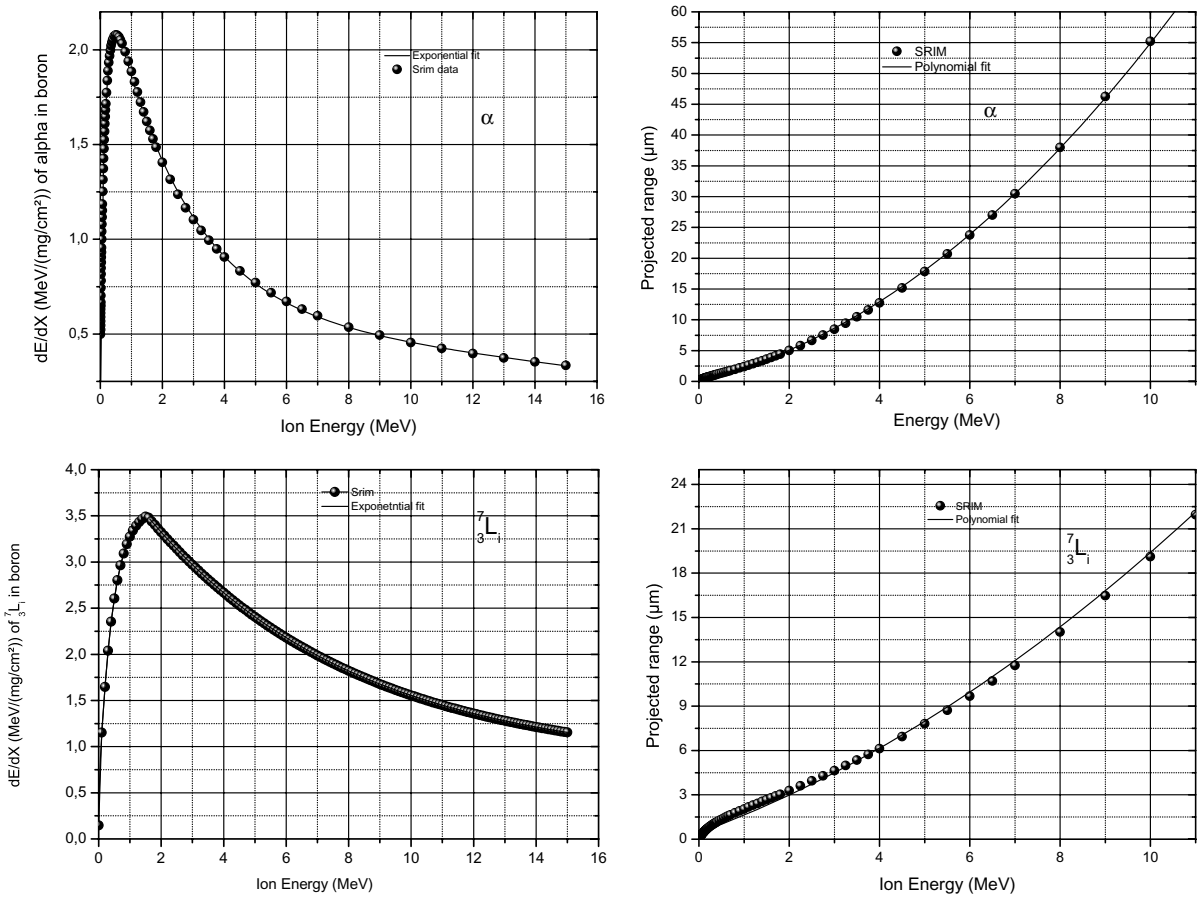

Fig. 4. Stopping powers and ranges of alpha and lithium in boron.

a sum of two different exponential functions. The choice of two functions instead of one permits to avoid disagreements for the values at the maximum of the curve.

$$\frac{dE}{dx}(\text{MeV}/(\text{mg}/\text{cm}^2)) = Y_0 + A_1 \times e^{-E/T1} + A_2 \times e^{-E/T_2}, \tag{10}$$

whereas for the range, a single polynomial function allows us to fit data given by SRIM

$$R(\mu\text{m}) = B_0 + B_1 \times E + B_2 \times E^2, \tag{11}$$

where the charged particles energy E is given in MeV.

The best fitting parameters are given in Table 2.

Fig. 4 compares the curves plotted using SRIM data and those given by the corresponding fit functions. Notice the good agreement between the graphs.

4. Results and Discussion

We compare in Fig. 5 the simulated number N of particles that cross a given width of the absorber to the theoretical curve given by (4). A perfect agreement is obtained between theoretical and simulated models. We notice that the needed thickness to almost completely attenuate the neutron beam is about 100 mm.

Our developed code gives the angular distribution according to the ejection angles. Obtained results are compared to the given ones in Ref. 26 and we got a good and satisfying fitting Fig. 6.

The outgoing energy spectrum in Fig. 7 shows two defined and characteristic peaks corresponding to an absorber thickness of 0.40 μm. It is quite clear that a more important energy loss is obtained for highly charged particles. Hence, the first peak in the left of the figure corresponds to the lithium particle while the second one is the alpha particle. On other hand, the results obtained using this algorithm have been compared to those calculated using a GEANT4 simulation for the same

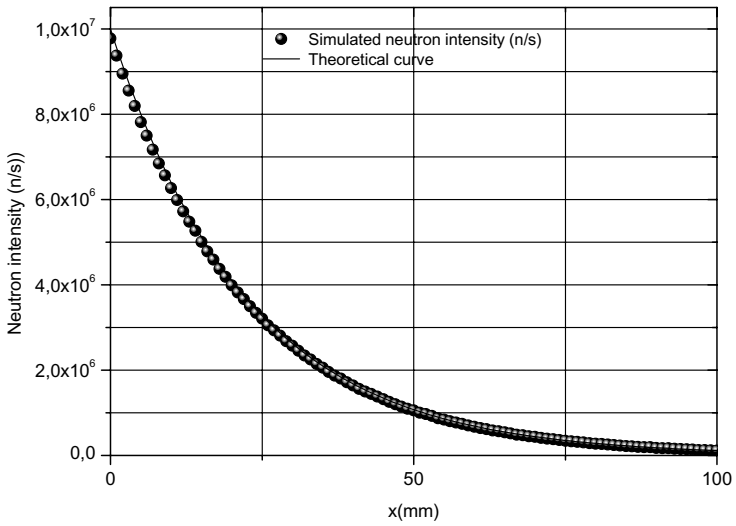

Fig. 5. Distance traveled by neutron before interaction.

Int. J. Mod. Phys. E 2017.26. Downloaded from www.worldscientific.com
by 193.194.80.6 on 07/10/18. Re-use and distribution is strictly not permitted, except for Open Access articles.

Int. J. Mod. Phys. E 2017.26. Downloaded from www.worldscientific.com
by 193.194.80.6 on 07/10/18. Re-use and distribution is strictly not permitted, except for Open Access articles.

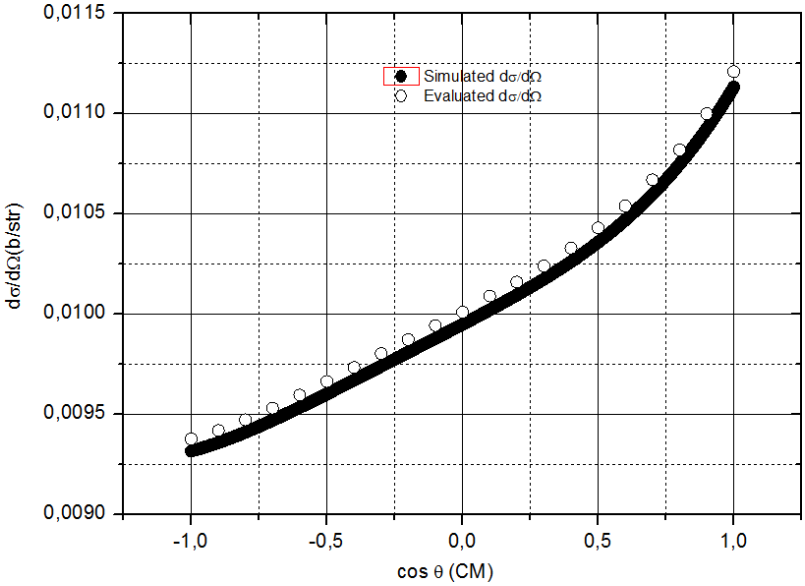

Fig. 6. Angular distribution of emitted particles.

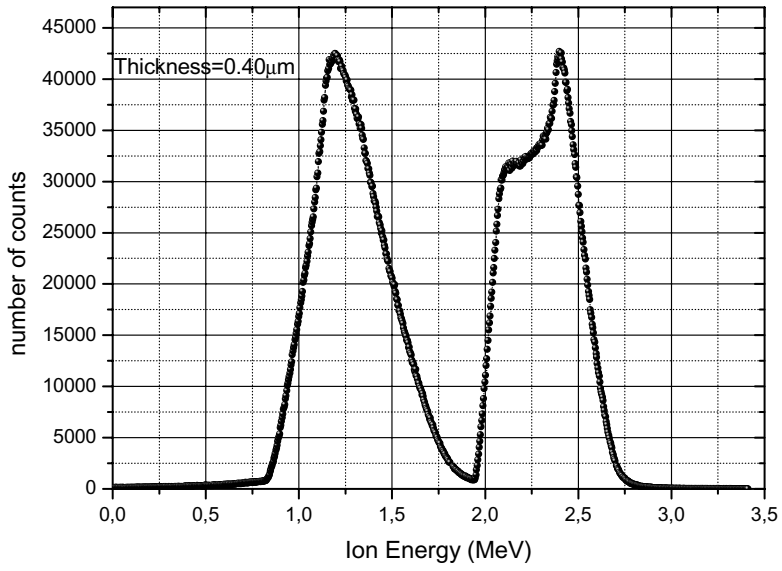

Fig. 7. Spectra collected behind the boron converter layer for 0.40 μm thickness.

thickness in Ref. 3, and they showed a reasonable good agreement. The fact is that these GEANT4 curves are obtained by collecting particles behind the converter layer, eliminating those escaping from the detection because of the disposition of the Boron layer itself *vis-a-vis* with the silicon active zone.

The evolution of the two peaks according to increasing thickness is represented in Fig. 8. Due to the increasing of energy loss into the converter, the first peak starts to be enlarged for thicknesses larger than 0.6 μm. This enlargement is much more significant for thicknesses over 0.9 μm.

Int. J. Mod. Phys. E 2017.26. Downloaded from www.worldscientific.com
by 193.194.80.6 on 07/10/18. Re-use and distribution is strictly not permitted, except for Open Access articles.

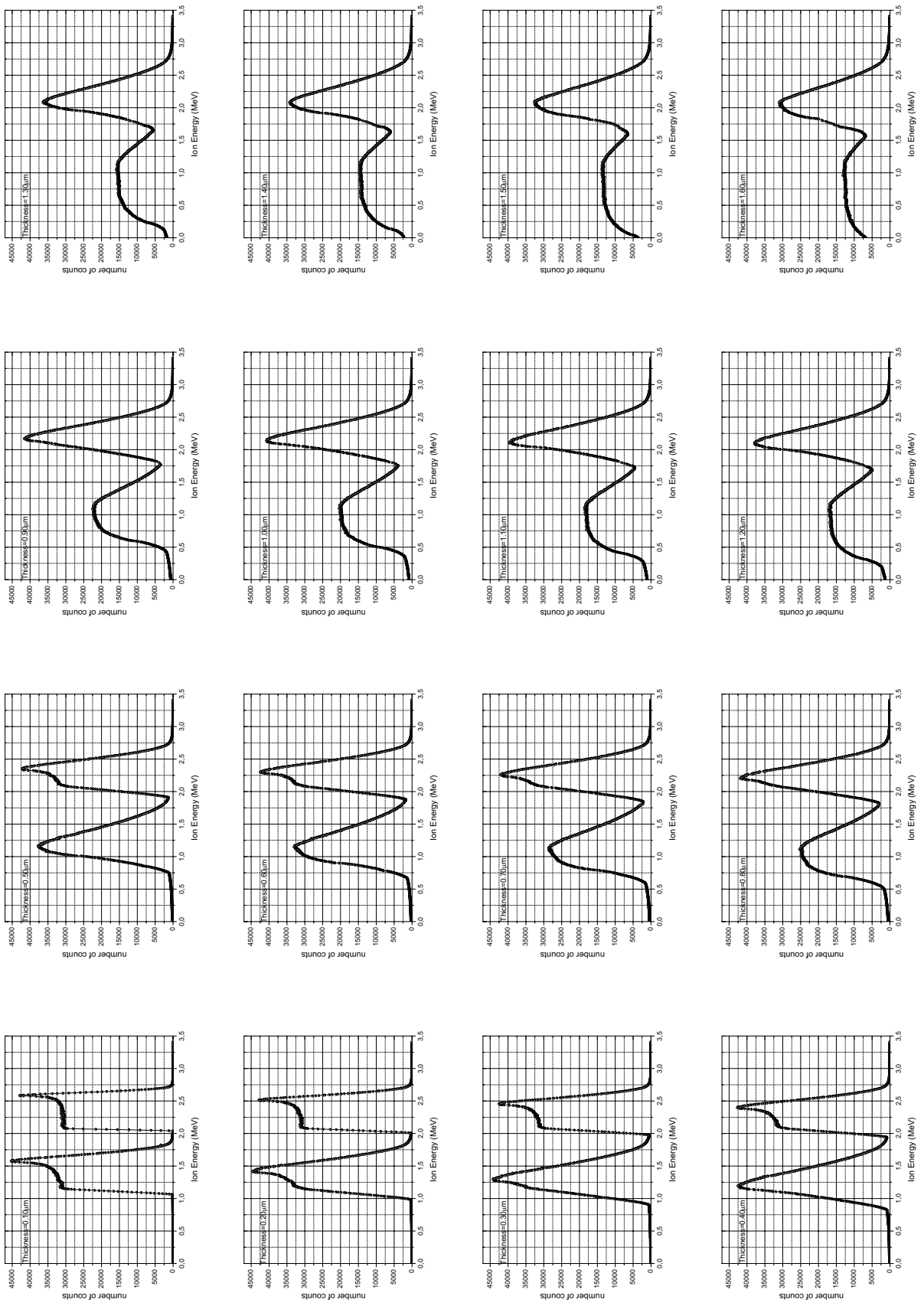

Fig. 8. Comparison of spectra collected behind the boron converter layer for different thicknesses.

Int. J. Mod. Phys. E 2017.26. Downloaded from www.worldscientific.com
by 193.194.80.6 on 07/10/18. Re-use and distribution is strictly not permitted, except for Open Access articles.

5. Conclusion

A simulation algorithm for neutron interaction with materials has been developed. As its first application, a cylindrical form Boron layer target model has been proposed. The quality of this model has been tested through its main outputs, i.e., energy spectra of particle products, attenuation of incident neutron beam and angular distribution reproduction. The algorithm has been validated with a 1.0 MeV neutron beam incident to a generic thickness Boron layer, although it can easily be extended to a wider range of incident energy beams and different materials. Before generalizing the situation to other incident energies, one first needs to validate these results by comparing them with those given by existing simulation codes. Then main advantage of the code introduced in this work compared to other multipurpose generic codes such as GEANT4 is its simplicity, needing less computational resources to achieve similar accuracy results.

The present work can be considered as a first step to more complex situations involving interaction of fast neutrons with materials, such as neutron detection and spectrometry. The principle of a solid state silicon neutron spectrometer, is based on an indirect detection of neutrons. Indeed, a huge amount of the charged particle products issued from the interaction of incident neutrons with intermediate material are collected in an appropriate size of the spectrometer active zone, which is placed just behind the converter layer. Of course a part of these particles are lost because of the geometry of the detector and the spectra of Fig. 8 may have slightly different forms. The response function of the spectrometer depends fundamentally on the intermediate material used in front of the active zone.

Acknowledgment

D. B. thanks the staffs of the Environmental Radioactivity Laboratory (LaboRA) of the University of Balearic Islands (Spain) who continuously supported him to finalize this work during his stay at the Laboratory.

References

1. J. M. Blatt and V. F. Weisskopf, *Theoretical Nuclear Physics* (John Wiley and Sons, New York, USA, 1958).
2. Brookhaven National Laboratory, National Nuclear Data Center, Available at: http://www.nndc.bnl.gov/sigma.
3. F. Z. Dehimi and A. Seghour, *Ann. Nucl. Energy* **77** (2015) 369.
4. Y. Chen, *Stat. Probab.* **72** (2005) 277.
5. L. Cheng, Z. Lu and L. Zhang, *Reliab. Eng. Syst. Saf.* **142** (2015) 9.
6. M. H. DeGroot and M. J. Schervish, *Probability and Statistics*, 4th edn. (Addison-Wesley, 2012).
7. I. G. Dyadkin and K. G. Hamilton, *Comput. Phys. Commun.* **107** (1997) 258.
8. ENDF-6 Formats Manual, Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File, ENDF/B-VI and ENDF/B-VII, National Nuclear Data Center (2009).
9. C. M. Frankle and G. E. Dale, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **723** (2013) 24.

10. T. Fujimoto *et al.*, *Appl. Radiat. Isot.* **106** (2015) 220.
11. G. Giorginis and V. Khryachkov, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **562** (2006) 737.
12. G. Giorginis and V. Khryachkov, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **538** (2005) 550.
13. S. Hunt, C. Iliadis and R. Longland, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **811** (2016) 108.
14. Java-based nuclear information software (JANIS), OECD Nuclear Energy Agency, Version 4.0.2 (2014), Available at: http://www.oecd-nea.org/janis/.
15. G. F. Knoll, *Radiation Detection and Measurement*, 3rd edn. (John Wiley and Sons, New York, 2000).
16. D. S. McGregor *et al.*, *Radiat. Phys. Chem.* **78** (2009) 874.
17. D. S. McGregor, T. C. Unruh and W. J. McNeil, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **591** (2008) 530.
18. D. S. McGregor, S. L. Bellinger and J. K. Shultis, *J. Cryst. Growth* **372** (2013) 99.
19. W. A. Metwally, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **338** (2014) 48.
20. B. Morillon, Méthode de Monte-Carlo Non Analogue, Application A la Simulation des Neutrons, CEA Saclay Direction des Réacteurs Nucléaires Département de Mécanique et Technique, Service d'Etude des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées (1996) (in French).
21. K. A. Nelson, N. S. Edwards, N. J. Hinson, C. D. Wayant and D. S. McGregor, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A Accel. Spectrom. Detect. Assoc. Equipm.* **767** (2014) 14.
22. M. S. Sabra, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **358** (2015) 245.
23. A. Seghour and F. Z. Seghour, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **555** (2005) 347.
24. A. Seghour, F. Z. Seghour and B. Saichi, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res A* **589** (2008) 66.
25. I. Stefanescu *et al.*, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **727** (2013) 109.
26. The Chinese Evaluated Nuclear Data Library, CENDL-3.1, Material 525 (Boron), REV1-MAR09.
27. J. F. Ziegler, J. P. Biersack and M. D. Ziegler, Stopping and Range in Matter, SRIM 2013, Available at: http://www.srim.org.
28. J. H. Vainionpaa *et al.*, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **350** (2015) 88.
29. J. V. Neumann, *Natl. Bur. Stand. Appl. Math.* **12** (1951) 36.
30. M. Wang, G. Audi, A. H. Wapstra, F. G. Kondev, M. MacCormick, X. Xu and B. Pfeiffer, *Chin. Phys. C* **36** (2012) 1603.
31. X. Wang, *J. Comput. Appl. Math.* **114** (2000) 231.
32. T. Watanabe *et al.*, *Cancer Lett.* **370** (2016) 27.
33. U. Wicek and J. Dankowski, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **349** (2015) 96.

Int. J. Mod. Phys. E 2017.26. Downloaded from www.worldscientific.com
by 193.194.80.6 on 07/10/18. Re-use and distribution is strictly not permitted, except for Open Access articles.

B.2 Progress in Nuclear Science and Technology

Progress in NUCLEAR SCIENCE and TECHNOLOGY, Vol. 2, pp.794-797 (2011)

ARTICLE

Monte Carlo Simulation of Prompt Neutron Evaporation by Fragments in Low Energy Nuclear Fission

Djelloul BENZAID [1,*], Mohamed DJEBARA [2] and Abdeslam SEGHOUR [3],

[1]*Centre Universitaire de Khemis Miliana, Route de Theniat El Had BP 44225, Ain Defla, Algeria*
[2]*Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene, Alger, Algeria*
[3]*Centre de Recherche Nucléaire d'Alger, Algeria*

In this work, we performed a Monte Carlo simulation of the evaporation of prompt neutron in the fission at low energy. We are interested in the reaction $^{249}Cf(n_{th},f)$ we have a detailed experimental study of isotonic distributions at different kinetic energies. The statistical Fong model is used to calculate the intrinsic excitation energy shared between the two fragments of fission. The simulation reproduces correctly mass and isotonic distributions. However, only the peak located at N=59 of the local even-odd effect has been found.

KEYWORDS: Monte-Carlo, Neutron, even-odd effect, nuclear fission

I. Introduction

In this work we have simulated the process of evaporation of prompt neutrons using the Monte-Carlo method, in order to provide possible explanations to some experimental facts by simulating the phase between the excited state of the compound nucleus and the end of the evaporation of neutrons by the fragments, a phase that is practically impossible to detect experimentally. We go back to the primary mass distributions, i.e., before evaporation of neutrons, from the measured charge distributions of the reaction, representing the fragments at the scission phase.[1)]

The potential energy of deformation *P* is calculated in the framework of the liquid drop model,[2)] and the sharing of intrinsic excitation energy is done using the Fong mode,[3)] assuming that the two fragments are at the same temperature, while minimizing *P* with respect to deformation parameters α_{31} and α_{32}. In our simulation the evaporation of neutrons is supposed certain once the total excitation energy of fragment E_{ex} is greater than the sum of the evaporated neutron separation energy B_n and its kinetic energy ε_n which is assumed to follow a maxwellian distribution.

In this work we discuss the effect of evaporation of neutrons on different observables, in particular isotonic initial distribution. We also try to see to what extent the observed structures in the local even-odd effect can be or not related to the process of evaporation.

II. Even-Odd Effect

The charge distribution represents the charge measured at the scission point since there is no proton evaporation. The measurement of this observable is an effective means of investigating the scission point.

The charge even-odd effect is defined as:

$$\delta_p = \frac{Y_e - Y_o}{Y_e + Y_o} \times 100(\%) \qquad (1)$$

where: Y_o and Y_e represents respectively, the yields of all charges in the odd and even charge distribution of fragments.

We also define similarly the neutron pairing effect δ_n.

Unlike the charge distributions, the pairing effect of neutrons represents the final isotonic distribution since it is measured after evaporation of neutrons.

III. Simulation of Neutron Evaporation Process Using Monte-Carlo Method

The process of evaporation of prompt neutrons in fission at low energy of $^{249}Cf(n_{th},f)$ is simulated by the Monte-Carlo method. This method is essentially based on the random drawing of quantities, such as the number of initial mass, evaporated neutron energy and the excitation energy of fission fragments, following distributions pre-selected on the basis of experimental results and if necessary assumptions. Our simulated results are compared with those obtained by Djebara *et al.*[1)]

The path of fission starts from by absorption of the target nucleus of a thermal neutron and ends with the fragmentation of the formed compound nucleus into two lighter fragments in excited states.

Our simulation program is based on the following key elements:

1. Determination of yields of primary masses from experimental charge yields by drawing random mass of the fragment following a gaussian distribution.
2. Potential energy is calculated from the liquid drop

*Corresponding author, E-mail:benzaidhd@yahoo.com

© 2011 Atomic Energy Society of Japan, All Rights Reserved.
Atomic Energy Society of Japan

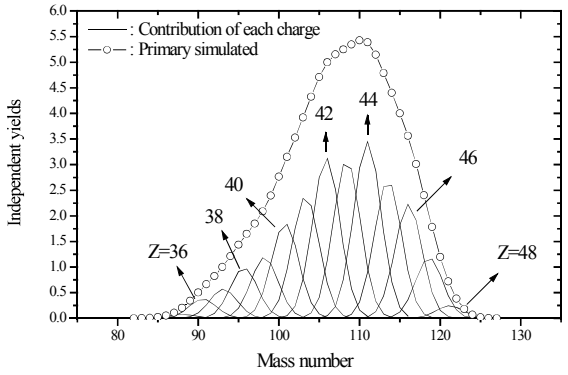

Fig. 1 Experimental isotopic distribution

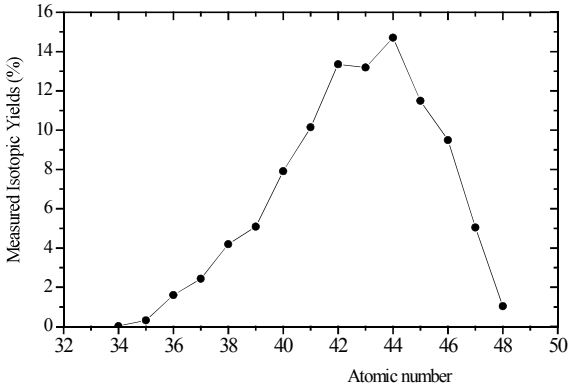

Fig. 2 Independent and total simulated mass distributions

model minimizing it with respect to deformation parameters α_{31} and α_{32}.

3. Total excitation energy is shared between the two fragments using the model of Fong. The energy released Q is calculated from the mass table of Audi and Wapstra.[4)]
4. Simulation of evaporation according the model of Fong.[3)]

IV. Definition of Different Important Quantities

1. Primary Mass Yields

The primary mass distributions are constructed from the measured charge distributions (**Fig. 1**) by drawing random mass of light fragment following a gaussian distribution :

$$Y(A'|Z)=\frac{Y(Z)}{\sigma_A\sqrt{2\pi}}\exp\left[-\frac{(A'-\overline{A})^2}{2\sigma_A^2(Z)}\right] \quad (2)$$

where: $Y(Z)$ and σ_A represent, respectively, experimental charge distribution and the standard deviation of the distribution and is given by:

$$\sigma_A(Z)=0.04Z+0.20 \quad (3)$$

$\overline{A}$ is the mean of mass number before evaporation of neutrons. It is given by UCD[a] hypothesis as:

$$\overline{A}=\frac{A_F}{Z_F}(Z-0.5) \quad (4)$$

A_F and Z_F are, respectively, the mass and charge of the nucleus undergoing fission.

The primary yields are obtained simply by adding all isotopic contributions:

$$Y(A')=\sum_i Y(A'|Z_i)=\sum_i\frac{Y(Z)}{\sigma_A\sqrt{2\pi}}\exp\left[-\frac{(A'-\overline{A})^2}{2\sigma_A^2(Z)}\right] \quad (5)$$

Figure 2 represents simulated total and independent mass yields.

[a] UCD hypothesis (Unchanged Charge Density) supposes that the ratio (Z/A) remains unchanged for both of nuclei undergoing fission and the two fragments of fission before evaporation.

2. Potential Energy

The motion of a point on the nuclear surface can be described by a series expansion of legendary polynomials:

$$R(\theta)=R_0\left[1+\alpha_2P_2(\cos\theta)+\alpha_3P_3(\cos\theta)+\cdots\right]$$

Assuming that the deformation is most likely octupole deformation, we can content ourselves with the term P_3 in the previous development. In this case, the mutual Coulomb energy of two fragments is given as a function of the parameters of deformation, by the expression:

$$C(\alpha_{31},\alpha_{32})=\frac{Z_LZ_He^2}{R_{0L}(1+0.9314\alpha_{3L})+R_{0H}(1+0.9314\alpha_{3H})} \quad (6)$$

where R_{0L} and R_{0H} represent the radius of the light and heavy fragments respectively. These are given by:

$$R_0=r_0A^{1/3} \quad (7)$$

with $r_0=1.5Fermi$.

As for the deformation energies, if we limit ourselves to terms P_3, they can be calculated from the expression:

$$D_i(\alpha_{3i})=0.7143\alpha_{3i}^2E_{Si}(0)-0.2041\alpha_{3i}^2E_{Ci}(0) \quad (8)$$

with $i\equiv L$, H, and where $E_{Si}(0)$ and $E_{Ci}(0)$ represent, respectively, the surface energy and Coulomb energy of the fragment and are given according to the model of the liquid drop model by:

$$E_{Si}(0)=0.014A^{2/3}amu \quad (9)$$

$$E_{Ci}(0)=0.000627\frac{Z_i^2}{A_i^{1/2}}amu \quad (10)$$

The potential energy is, then, given by:

$$P(\alpha_{31},\alpha_{32})=C(\alpha_{3L},\alpha_{3H})+D(\alpha_{3L})+D(\alpha_{3H}) \quad (11)$$

3. Sharing of Excitation Energy between the Heavy and Light Fragments

Let G be the total intrinsic excitation energy of the compound nucleus formed by the thermal incident neutron and the fissile nucleus, it is defined as the difference between the energy release Q and the potential energy of the compound

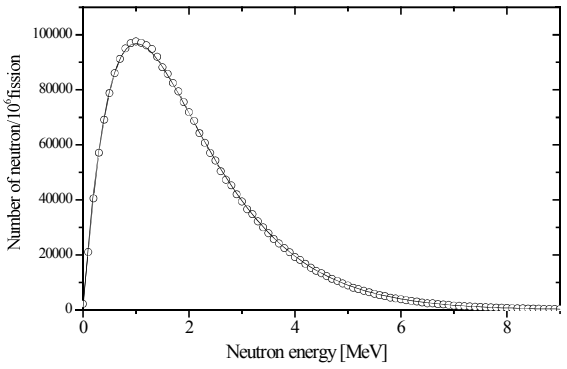

Fig. 3 evaporated neutron energy distribution

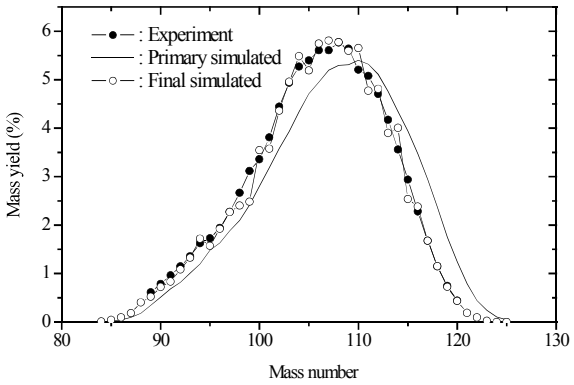

Fig. 4 Mass yield

nucleus:

$$G = Q - P \tag{12}$$

The internal excitation energy corresponds most likely to the minimum of potential energy. The problem is therefore to minimize $P(\alpha_{31},\alpha_{32})$ with respect to the parameters of deformation α_{31} and α_{32}.

Substituting Eqs. (6) and (8) by Eq. (11) one can obtain the potential energy expressed as a function of the parameters α_{31} and α_{32}. On the other hand, it is assumed that the configuration at the scission point is that which corresponds to the minimum potential energy and thus to the maximum of the excitation energy, E_{exL}:

$$\frac{\partial P(\alpha_{31},\alpha_{32})}{\partial \alpha_{31}} = 0 \quad \text{and} \quad \frac{\partial P(\alpha_{31},\alpha_{32})}{\partial \alpha_{32}} = 0 \tag{13}$$

Energy G is the sum of the energies of the two fragments:

$$G = G_L + G_H \tag{14}$$

such that G_L and G_H are the intrinsic excitation energy of light and heavy fragments, respectively.

The two fragments are formed in contact; their temperatures should be the same, $T \sim 1$ MeV. According to the statistical model of the nucleus,[5] we have:

$$\frac{G_L}{G_H} = \frac{A_L}{A_H} \tag{15}$$

We finally obtain the total excitation energy E_{exL} of the light fragment by adding the intrinsic excitation energy G_L and the deformation energy D_L and finally:

$$E_{exL} = G_L + D_L \tag{16}$$

This energy will allow to simulate the evaporation of neutrons from light fragments, and thus determines the mass distribution and the final isotonic distributions and other important quantities.

4. Neutron Emission

The distribution of kinetic energies of evaporated neutrons is assumed to follow a maxwelienne distribution with nuclear temperature T of around 1 MeV. The kinetic energy of a neutron evaporated is drawn, then, randomly following a maxwelienne. The neutrons can be evaporated if the following condition is satisfied:

$$E_{exL} > B_n + \varepsilon_n \tag{17}$$

where ε_n and B_n represent, respectively, the kinetic energy of evaporated neutron and the separation energy.

The distribution of neutron energies obtained by our simulation (**Fig. 3**) can be represented by the following maxwelienne formula:

$$N(\varepsilon_n) = 2.63\times10^5 \varepsilon_n \exp\left(-\frac{\varepsilon_n}{T}\right) \tag{18}$$

with $T \approx 1$ MeV.

Note that the most probable value of energy of neutrons is around 1 MeV and is identical to the experimental value showing a satisfactory drawing of these quantities.

V. Results and Discussions

1. Final Mass Distribution

The final mass distribution integrated over the kinetic energy is obtained after evaporation of neutrons. **Figure 4** represents the result of our simulation. Yields are normalized to 100%.

We have introduced the primary mass distribution for comparison. Note that the distribution after evaporation of neutrons is shifted to lighter masses. This shift is more important for the portion of the high masses than low ones. A fact which is due to the increased number of neutrons evaporated with the mass number A. This implies both that the width of the final distribution is smaller than the initial distribution, and secondly the maximum final distribution increases slightly from the initial distribution. The surface distribution is always maintained.

2. Isotonic Distribution

Isotonic distributions integrated over kinetic energy is obtained after adding all independent yields of fragments having the same number of neutrons N:

$$Y(N) = \sum_A Y(A,N) \tag{19}$$

We have shown in **Fig. 5** simulated and measured neutron distributions, we have also introduced, for comparison, the primary distribution. Note that the experimental distribution

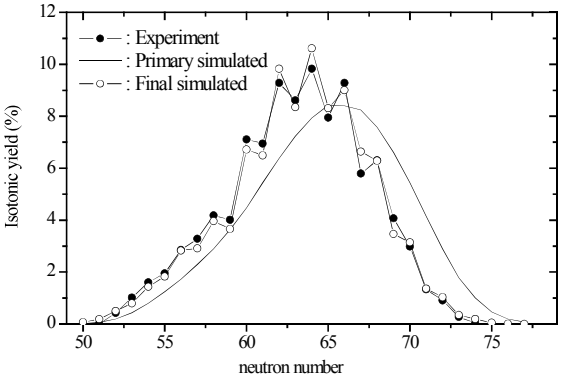

Fig. 5 Isotonic yield

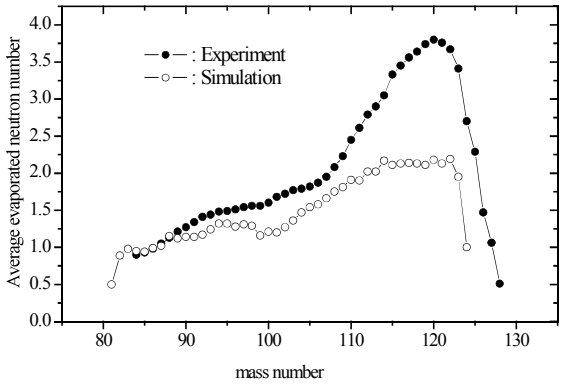

Fig. 6 Average evaporated neutron number

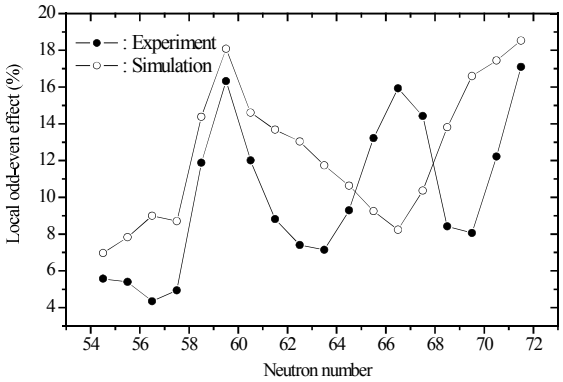

Fig. 7 Average evaporated neutron number

is well reproduced by our simulation.

We also note the great similarity between the experimental curve and simulated one that are very structured, fragments with an even number (N) of neutrons are more advantaged than those with neighbors odd number of neutrons ($N \pm 1$).

The favored production of even isotones compared to odd ones is taken into account by the average even-odd effect given by:

$$\delta_n = \frac{Y_e - Y_o}{Y_e + Y_o} \times 100(\%) \qquad (20)$$

where Y_e and Y_o represent the sum of all even and odd isotones yield in the isotonic distribution of fragments.
The neutron even-odd, calculated according to Eq. (20) is equal to 11%, a value to be compared to the experimental value (9.5 ± 0.7)% .

3. Average Number of Evaporated Neutrons

Figure 6 represents a comparison between the evolution of the number of neutrons evaporated by fission fragments to that obtained by our simulation. The agreement is satisfactory; the general shape of the experimental spectrum is reproduced except that the simulated values are slightly lower than the experimental values. The disagreement is more important around the mass $A = 120$.

4. Local Even-Odd Effect

For more detailed information, we can study the so called local even-odd effect using Tracy method.[6] This method consist of estimating the local even-odd effect by the following formula:

$$d_3\left(N+\frac{3}{2}\right) = \exp\left\{(-1)^{N+1}\left[(L_3 - L_0) - 3(L_2 - L_1)\right]\right\} \qquad (21)$$

L_0, L_1, L_2 and L_3 are the natural logarithms of isotonic yields N, $N+1$, $N+2$, $N+3$. On this interval, the even-odd effect can be estimated by the previous formula.

We represent in **Fig. 7** the simulated and the measured local even-odd effect. The experimental peak located at $N \sim 60$ is reproduced in an acceptable manner. A fact which suggests that the peak may be caused to evaporation of neutrons.

VI. Conclusion

In our work we have simulated the process of evaporation of neutrons by light fragments of fission. We used the model of Fong to calculate the excitation energy and its partition between the two fragments. The yields of primary masses are constructed assuming that the yield of for each partial charge Z follow a Gaussian distribution. Mass and neutron yields are reproduced in a very satisfactory way. Neutron even-odd simulated is about 11%. The peak located at N ~ 60 in the local even-odd effect is reproduced. Thus, we conclude that it is due to evaporation of neutrons. The second peak is not reproduced. It can not be combined with a simple neutron evaporation.

References

1) M. Djebara, *Mass, nuclear charge and kinetic energy distributions of fragments of fission of* $^{249}_{98}Cf(n_{th}, f)$ *and* $^{229}_{98}Th(n_{th}, f)$, Doctorate dissertation, USTHB (1994), [In French].
2) N. Bohr, J. A. Wheeler, *Phys. Rev.*, **56**, 426-450 (1939).
3) P. Fong, *Phys. Rev.*, **102**, 434-448 (1956).
4) G. Audi ,A. H. Wapstra, *Nucl. Phys.*, **A595**, 409-480 (1995).
5) R. R. Roy, B. P. Nigam, *Nuclear Physics, theory and experiment*, John Wiley and sons (1993).
6) B. L. Tracy, J. Chaumont, R. Klapisch, J. M. Nitschke, A. M. Poskanzer, E. Roeckl, C. Thibault, *Phys. Rev.*, **C5**, 222-234 (1972).

Appendix C

CODE DE CALCUL

Dans cet annexe des parties du code de calcul, que nous avons développé dans le langage de programmation FORTRAN, sont présentées.

```
1:          PROGRAM SIMULATION !version 3
2:          !ce programme permet de tester le calcul
3:          !des énergies des particules détectables
4:          !anisi que le nombre
5:          !de particules détectables en fonction de
6:          !l'énergie pour une énergie du neutron donnée Tn
7:          !dans la ré 10B(n,a)7Li en tenant compte
8:          !des angles d'éjection des deux particules détectables
9:          USE NUCLEAR_REACTIONS
10:         IMPLICIT NONE
11:         CHARACTER(LEN=20)::THICK_CAR
12:         CHARACTER(LEN=100)::spectrum
13:         REAL,DIMENSION(0:10000)::Ec !Charged particle energy
14:         INTEGER,PARAMETER::M=1
15:         REAL,DIMENSION(1:M)::Eneut
16:         REAL,DIMENSION(0:100)::EFFICIENCY_alpha,EFFICIENCY_lithium
17:         INTEGER,DIMENSION(0:1000000)::nbr!nombre de particules chargée ayant une
    énergie arrangée
18:         REAL::h,E,En,Ea,EL,x,y,del1,del2,theta,phi,theta_limit,phi_limit
19:         REAL::alpha_limit,beta_limit
20:         REAL::w,Ecm,Elab,DEa,DEL
21:         REAL::Jacob_LAB_TO_CM,Jacob_CM_TO_LAB
22:         REAL::costheta,Thlab,Thcm,a,b,SIGMA,SIGMA_m
23:         REAL::r,ran1,r1,r2,rx1,rx2,ry1,ry2
24:         REAL::Xn,X_alpha_B,X_Lithium_B,RANGE_ALPHA_B,RANGE_LITHIUM_B
25:         REAL::X_alpha_Si,X_Lithium_Si,x_bor,y_bor,L_xy
26:         REAL::DE_DX_ALPHA_Si,DE_DX_LITHIUM_Si,DE_DX_ALPHA_B
27:         REAL::RANGE_ALPHA_Si,RANGE_LITHIUM_Si,DE_DX_LITHIUM_B
28:         REAL::L_boron,D_boron,Nn,Nc_alpha,Nc_lithium,THIC,LL  !Nn is the total
    number of neutrons entring realy the borated zone, and Nc the number of neutrons
    having undergone interaction
29:         INTEGER::L,i,ii,IE,n,j,idum,idum1,idum2,LMAX
30:         INTEGER::idumx1,idumx2,idumy1,idumy2
31:
32:         REAL,PARAMETER::xmn=1.00866491585,xmB=10.012936949, !masses en uma  Ref.
    :[1]   M. Wang, G. Audi, A.H. Wapstra, F.G. Kondev, M. MacCormick, X. Xu an B.
    Pfeiffer, The AME2012 atomi mass evaluation (II). Tables, graphs and references.
    Chinese Physics C, Vol. 36, No. 12, Dec. 2012.
33:     &   xma=4.00260325413,xmL=7.01600343659,
34:     &   Q=2.789944701127504, Q_exit=2.309944701,! bilan en MeV (fondamental et
    excité)
35:     &   sigma_mac=4.462905954E-2, ! !unité mm-1!macroscopic cross section (lab)
36:                                   !detail :
37:                                   !sigma_lab=sgima_CM*Jacob=2.537240E-
    24cm²*1.24749=3.165181528E-24cm²
38:                                   !sigma_mac_Lab=n*sigma_lab=1.41E+23*3.165181528E-
    24cm²=4.462905954E-2mm-1, Jacob=1.24749 (Pour En_CM=1MeV)
39:
40:                                   !&  =0.2127E-3, !thickness of boron (mm): (13.8712µm
    is equivalent to 3.26mg/cm²) and
41:                             !&  D_boron=0.2127E-3, !diameter of boron (mm)   (0.4255µm
    is equivalent to 100.0µg/cm²) and
42:     &   L_Silicon=1.0, !thickness of silicon (mm)     (0.2127µm is equivalent to
    50.0µg/cm²)
43:     &   D_Silicon=1.0 !diameter of silicon (mm)
44:
45:         idum=-100
46:         idum1=-200
47:         idum2=-300
48:         idumx1=-400
49:         idumx2=-500
50:         idumy1=-600
51:         idumy2=-700
52:
53:         LMAX=5
54: ******************************
55: ******************************
56:         SIGMA_m=9.377E-3 !valeur maximale de la section efficace differentielle en
    b/str pour des neutrons d'énergie 1MeV.
57: *                                                                    **************
58: *                                                                    **************
59:                             !Rem. : il faut revoir cette valeur peut être ** ********
    ** est la bonne valeur
```

```
261:         endif
262:
263:         if(phi.LT.PI/2.) then
264:                         call ENERGIE(EL,IE,n)  !ce passage est également à revoir
265:                      nbr(IE)=nbr(IE)+1
266:                Nc_lithium=Nc_lithium+1. !comptage du nombre de réaction des
    neutrons avec le bore
267:
268:         endif
269: ************************************************
270:
271: ************************************************
272:         ENDIF
273:         ENDIF !fin si de if principal
274:
275:         ENDDO !fin de la boucle DO principale
276:
277:         CLOSE(10)
278:
279:         EFFICIENCY_alpha(L)=Nc_alpha/Nn
280:         EFFICIENCY_lithium(L)=Nc_lithium/Nn
281:
282: ****************  AFFICHAGE nombre de particules détectées  *********
283:         OPEN(20,file=spectrum,status='unknown')
284:
285:                 DO j=1,n
286:                 IF(nbr(j).NE.0.) WRITE(20,2) Ec(j),nbr(j),j
287:                   WRITE(*,*)Ec(j),nbr(j),j
288:                 ENDDO
289:
290:         CLOSE(20)
291: 2               format(3x,f20.3,5x,I6,5x,I6)
292:
293:        ENDDO !fin de la boucle thickness
294:
295:         !WRITE(*,*)'Resuls are in : nbr_energie.dat'
296:
297:             OPEN(40,file='efficiency.dat',status='unknown')  !calcul de l'efficacité
298:                 DO L=1,10
299:                 THIC=L_boron*1E-3 !longueur du bore en µm
300:                WRITE(40,*)THIC,EFFICIENCY_alpha(L),EFFICIENCY_lithium(L)
301:             ENDDO
302:             CLOSE(40)
303:
304:       READ(*,*)
305:       CONTAINS
306:
307: ************************************************************************
308:         SUBROUTINE ENERGIE(Energy,IE,n)!E:énergie,IE:numéro de case
309:         IMPLICIT NONE
310:         REAL::Energy
311:         INTEGER::IE,n,i
312:         IE=0
313:
314:         do i=1,n
315:                 if(Energy.LE.(i+0)*h.AND.Energy.GE.(i-1)*h)then
316:                         IE=i
317:                 endif
318:         enddo
319:                         Energy=Ec(IE) !énergie=[((i-1)+(i+1))/2]*h
320:         END SUBROUTINE ENERGIE !fin de la subroutine energie
321:
322:         END !fin du programme principale
323:
324:
325:  !****************** SUBROUTINE SECTION EFFICACE **************
326:         SUBROUTINE CROSS_SECTION(SIGMA,X,En,I,LMAX)
327:         IMPLICIT NONE
328:         INTEGER::L,I,LMAX
329:         INTEGER,PARAMETER::M=1,N=4
330:         REAL,DIMENSION(0:LMAX)::P !Polynomes de Legendre
331:         REAL,DIMENSION(1:M,0:N)::AL
332:         REAL,DIMENSION(1:M)::En
```

```
614: * le code SRIM de James F. ZIEGLER ********************************************
615:         FUNCTION RANGE_ALPHA_Si(ENERGY)
616:         IMPLICIT NONE
617:         REAL::RANGE_ALPHA_Si,ENERGY !parcours R(µm) micro mètre, Energy en MeV
618:         REAL,PARAMETER::B0=0.29532,B1=2.76718,B2=0.41402
619:        IF (ENERGY.GE.0..AND.ENERGY.LE.10.0) THEN
620:        RANGE_ALPHA_Si=B0+B1*ENERGY+B2*ENERGY**2
621:        ELSE
622:        WRITE(*,*)"ENERGY OUT OF RANGE 5"
623:        ENDIF
624:       END
625: ******************** FIN DU PROGRAMME FUNCTION RANGE_ALPHA ******************
626:
627: ********************** RANGE FUNCTION LITHIUM ****************************
628: **** La fonction utilisée est le résultat d'un fit polynomial d'ordre 2 des valeurs
     du
629: * Range (parcours), dans le silicium, d'une particule lithium de [0,15] MeV
     d'énergie fournies par
630: * le code SRIM de James F. ZIEGLER ********************************************
631:         FUNCTION RANGE_LITHIUM_Si(ENERGY)
632:         IMPLICIT NONE
633:         REAL::RANGE_LITHIUM_Si,ENERGY !parcours R(µm) micro mètre, Energy en MeV
634:         REAL,PARAMETER::B0=0.47219,B1=1.77282,B2=0.07767
635:        IF (ENERGY.GE.0..AND.ENERGY.LE.10.0) THEN
636:        RANGE_LITHIUM_Si=B0+B1*ENERGY+B2*ENERGY**2
637:        ELSE
638:        WRITE(*,*)"ENERGY OUT OF RANGE 6"
639:        ENDIF
640:        END
641: ******************** FIN DU PROGRAMME FUNCTION RANGE_LITHIUM ******************
642:
643: ********************** RANGE FUNCTION ALPHA-BORON ****************************
644: **** La fonction utilisée est le résultat d'un fit polynomial d'ordre 2 des valeurs
     du
645: * Range (parcours), dans le bore, d'une particule alpha de [0,15] MeV d'énergie
     fournies par
646: * le code SRIM de James F. ZIEGLER ********************************************
647:         FUNCTION RANGE_ALPHA_B(ENERGY)
648:
649:         IMPLICIT NONE
650:         REAL::RANGE_ALPHA_B,ENERGY !parcours R(µm) micro mètre, Energy en MeV
651:         REAL,PARAMETER::B0=0.23861,B1=1.64824,B2=0.38192
652:        IF (ENERGY.GE.0..AND.ENERGY.LE.10.0) THEN
653:        RANGE_ALPHA_B=B0+B1*ENERGY+B2*ENERGY**2
654:        ELSE
655:        WRITE(*,*)"ENERGY OUT OF RANGE 7"
656:        ENDIF
657:        END
658: ******************** FIN DU PROGRAMME FUNCTION RANGE_ALPHA_B ******************
659:
660: ********************** RANGE FUNCTION ALPHA-BORON ****************************
661: **** La fonction utilisée est le résultat d'un fit polynomial d'ordre 2 des valeurs
     du
662: * Range (parcours), dans le bore, d'une particule lithium de [0,15] MeV d'énergie
     fournies par
663: * le code SRIM de James F. ZIEGLER ********************************************
664:
665:                 FUNCTION RANGE_LITHIUM_B(ENERGY)
666:
667:        IMPLICIT NONE
668:         REAL::RANGE_LITHIUM_B,ENERGY !parcours R(µm) micro mètre, Energy en MeV
669:         REAL,PARAMETER::B0=0.43112,B1=1.12231,B2=0.07747
670:        IF (ENERGY.GE.0..AND.ENERGY.LE.10.0) THEN
671:        RANGE_LITHIUM_B=B0+B1*ENERGY+B2*ENERGY**2
672:        ELSE
673:        WRITE(*,*)"ENERGY OUT OF RANGE 8"
674:        ENDIF
675:
676:        END
677: ******************** FIN DU PROGRAMME FUNCTION RANGE_LITHIUM_B ******************
```

Bibliographie

[1] A. Aissani, Modélisation et Simulation, OPU (2011).

[2] AMSTER H., J. Appl.Phys.27 (1956) 307.

[3] AMSTER H., J. App. Phys. 29 (1958) 623.

[4] N. BAKHVALOV, Méthodes Numériques, Edition Mir Moscou (1976).

[5] D. BENZAID, M. Djebara and S. Seghour, Monte Carlo Simulation of Prompt Neutron Evaporation by Fragments in Low Energy Nuclear Fission, Progress in NUCLEAR SCIENCE and TECHNOLOGY, Vol. 2, pp.794-797 (2011).

[6] Olivier BERSILLON et Roger PERRIER, Transformation des Distributions Angulaires lors du Changement de Référentiel Centre de Masse - Laboratoire, Centre d'Etudes de Bruyères-le-Châtel 1977.

[7] J. M. Blatt and V. F. Weisskopf, Theoretical nuclear physics, John Wiley and sons.

[8] BLATT J. M., BIEDENHARN L. C., Rev. Mod. Phys. 24 (1952) 258.

[9] BNL-NCS-50496 (1975).

[10] Brookhaven National Laboratory, National Nuclear Data Center, http://www.nndc.bnl.gov/sigma

[11] The Chinese Evaluated Nuclear Data Library, CENDL-3.1, Material 525 (Boron), REV1-MAR09 2009.

[12] Yuguo Chen, Another look at rejection sampling through importance sampling, Statistics and Probability 72 (2005) 277-283.

[13] Lei Cheng, Zhenzhou Lu and Leigang Zhang, Application of Rejection Sampling Based Methodology to Variance Based Parametric Sensitivity Analysis, Reliability Engineering and System Safety 142 (2015) 9-18.

[14] Bernard L Cohen, Concepts of Nuclear Physics, TATA McGraw-Hill publishing company LTD (1994).

[15] F.Z. Dehimi, A. Seghour, Neutron energy spectrum in a reactor exit channel with a single surface barrier sensor using GEANT4, Annals of Nuclear Energy 77 (2015), pp. 369-575.

[16] Morris H. DeGroot and Mark J. Schervish, Probability and Statistics, Fourth Edition (2012), Addison Wesley.

[17] Démidovitch B. and Maron I., Eléments de calcul numérique, Edition Mir (1973).

[18] Iosif G. Dyadkin and Kenneth G. Hamilton, A Family of Enhanced Lehmer Random Number Generators, with Hyperplane Suppression, and Direct Support for Certain Physical Applications.

[19] Bob D'Mello et al., The Replacement of Cadmium as a Thermal Neutron Filter, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 577 (2007) 690-695.

[20] ENDF/B-VI.8, USA 2001, National nuclear data center, (http://www.nndc.bnl.gov/)

[21] ENDF/B-VII.1, USA 2001, National nuclear data center, (http://www.nndc.bnl.gov/).

[22] ENDF-MANUAL, Members of the Cross Sections Evaluation Working Group, ENDF-6 Formats Manual, Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data Files, ENDF/B-VI and ENDF/B-VII, A. Trkov, M. Herman and D. A. Brown, National Nuclear Data Center, Brookhaven National Laboratory, www.nndc.bnl.gov.

[23] ENDF-6 Formats Manual, Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File, ENDF/B-VI and ENDF/B-VII, National Nuclear Data Center, (2009).

[24] EVANS R. D., Le noyau atomique, p.461, Dunod, 1961.

[25] C. M. Frankle and G. E. Dale, Unconventional Neutron Sources for Oil Well Logging, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 723 (2013) 24-29.

[26] http://www.fluka.org/fluka.php?id=about

[27] Takuya Fujimoto et al., Potential of Boron Neutron Capture Therapy (BNCT) for Malignant Peripheral Nerve Sheath Tumors (MPNST), Applied Radiation an Isotopes 106 (2015) 220-225.

[28] http://geant4.web.cern.ch/geant4/support/about.shtml

[29] Georgios Giorginis and Vitali Khryachkov, The Cross-Section of the $^{10}B(n,\alpha)^{7}L_i$ Reaction Measured in the MeV Energy Range, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 562 (2006) 737-740.

[30] Georgios Giorginis and Vitali Khryachkov, The Effect of Particle leaking and its implications for measurements of the (n,a) reaction on light Elements by Using Ionization Chambers, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 538 (2005) 550-558.

[31] S. Hunt, C. Iliadis and R. Longland, Characterization of a ^{10}B-doped Liquid Scintillator as a Capture-Gated Neutron Spectrometer, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 811 (2016) 108-114.

[32] Osamu Iwamoto, Systematics of Prompt Fission Neutron Spectra, Journal of Nuclear Science and Technology, Vol. 45, No. 9, p. 910-919 (2008).

[33] Java-based nuclear information software (JANIS), OECD Nuclear Energy Agency, Version 4.0.2 (2014). http://www.oecd-nea.org/janis/

[34] Yevgeni A. KARLIN et al., Applied Radiation and Isotopes 48 10-12 pp 1563-1566 1997

[35] G. F. Knoll, Radiation Detection and measurement, third ed., John Wiley and Sons, New York, 2000.

[36] William R. LEO, Techniques for Nuclear and Particle Physics Experiments, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1987.

[37] Claud LEROY and Pier-Giorgio Rancoita, Principles of Radiation Interaction in Matter and Detection, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd, 2009.

[38] MARSHAK, BROOKS, HURWITZ, Nucleonics (1948) 53.

[39] D.S. McGregor, T.C. Unruh and W.J. McNeil, Thermal neutron detection with pyrolytic Boron nitride, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 591 (2008), pp. 530-533.

[40] D.S. McGregor, Steven L. Bellinger and J. Kenneth Shultis, Present status of micro structured-semiconductor neutron detectors, Journal of Crystal Growth 372 (2013) 99-110.

[41] D. S. McGregor et al. Perforated Diode Neutron Detector Modules Fabricated from High-Purity Silicon, Radiation Physics and Chemistry, 78 (2009) 874-881.

[42] MESIAH A., Mécanique Quantique, Tome 2, p.909, Dunod, 1964.

[43] https://mcnp.lanl.gov/

[44] Nicholas METROPOLIS and Stanislaw ULAM, The Monte Carlo Method, Journal of the American Statistical Association, 247(1949)44 335-341, USA.

[45] W. A. METWALLY, Existing NaI Detectors; an Efficient Alternative to He-3 Detectors, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 338 (2014) 48-51.

[46] MICHALOWICZ A., Cinématique des réactions nucléaires, Dunod, 1964.

[47] B. MORILLON, (in French) Méthode de Monte-Carlo Non Analogue, Application A la Simulation des Neutrons, CEA Saclay Direction des Réacteurs Nucléaires Département de Mécanique et Technique, Service d'Etude des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées, (1996).

[48] K. A. Nelson, N. S. Edwards, N. J. Hinson,C. D. Wayant, D. S. McGregor, A suspended Boron foil multi-wire proportional counter neutron detector, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 767 (2014) 14.

[49] S. Ouichaoui, Introduction à la physique nucléaire, OPU.

[50] Francesco PISCITELLI, BORON-10 LAYERS NEUTRON REFLECTOMETRY AND THERMAL NEUTRON GASEOUS DETECTORS, Università degli Studi di Perugia, Italy, 29/10/2013.

[51] M. S. Sabra, Validation of Neutron Production on Thick Targets Bombarded with 120 GeV Protons, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 358 (2015) 245-250.

[52] A. Seghour et F. Z. Seghour, Neutron Energy Spectra Unfolding from Foil Activation Detector Measurements with MINUIT, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 555 (2005) 347-355.

[53] A. Seghour, F. Z. Seghour and B. Saichi, Neutron Distribution in a Reactor Exit Channel by Neutron-Charged Particle Converter and CR-39, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 589 (2008) 66-71.

[54] J. F. Ziegler, J. P. Biersack and M. D. Ziegler, Stopping and Range in Matter, SRIM 2013, http://www.srim.org.

[55] I. STEFANESCU et al., Development of a Novel Macro-structured Cathode for Large-Area Neutron Detectors Based on ^{10}B-Containing Solid Converter, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 727 (2013) 109-125.

[56] J. H. Vainionpaa et al., Development of High Flux Thermal Neutron Generator for Neutron Activation Analysis, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 350 (2015) 88-93.

[57] L. Valentin, Physique subatomique, noyaux et particules, I. Approche élémentaire, OPU (1988)

[58] J. Von Neumann, Various Techniques Used in Connection with Random Digits. Nat. Bureau Stand. App. Math. 12 (1951), pp. 36–38.

[59] VYKYDAL et al., Characterization of the Graphite Pile as a Source of Thermal Neutrons, Radiation Physics and Chemistry, 116(2015) 65-68.

[60] Guan-bo Wang et al., Neutron characterization study for D-T, $p-^7Li$ neutron sources with new BCA based direct collision coupling method, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A757 pp 40-47 2014.

[61] M. Wang, G. Audi, A.H. Wapstra, F.G. Kondev, M. MacCormick, X. Xu and B. Pfeiffer, The AME2012 Atomic Mass Evaluation (II). Tables, Graphs and References. Chinese Physics C 3 (2012).

[62] Xiaoqun Wang, Improving sampling method in quasi-Monte Carlo methods, Journal of Computational and Applied Mathematics 114 (2000) 231-246.

[63] Tsukuba Watanabe et al., L-Phenylalanine Preloadding Reduces the $^{10}B\,(n,\alpha)^{7}\,L_i$ Dose to the Normal Brain by Inhibiting the Uptake of Boronophenylalanine in Boron Neutron Capture Therapy for Brain Tumors, Cancer Letters 370 (2016) 27-32.

[64] A. Watenberg, Photo-Neutron Sources, NAtional Research Concil, Preliminary Report No. 6 July, 1949.

[65] U. Wicek and J. Dankowski, Monte Carlo Modeling of Distributions of the d-d and d-t Reaction Products in a Dedicated Measuring Chamber at the Fast Neutron Generator, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 349 (2015) 96-102.

[66] WIKIPEDIA the free Incyclopedia, Méthode de Monte-Carlo, https://fr.wikipedia.org/wiki/Méthode de Monte-Carlo

[67] ZWEIFEL P. F., HURWITZ H., J. Appl. Phys. 25 (1954) 1241.

[68] WIKIPEDIA the free Incyclopedia, Biographie de John Von Neumann, https://fr.wikipedia.org/wiki/John von Neumann.