



**ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ**

**ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ
ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ
ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ**

**ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ
ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ**

ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ»

**ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΝΑΝΟΕΠΙΣΤΗΜΗΣ
ΚΑΙ ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ**

**ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΠΥΡΗΝΙΚΗΣ ΚΑΙ
ΣΩΜΑΤΙΔΙΑΚΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ**



Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών

«Φυσική και Τεχνολογικές Εφαρμογές»

**Μελέτη του συστήματος $d+^{13}C$ στα πλαίσια των
πυρηνικών τεχνικών EBS και NRA**

-

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

του Νίκου Κυρίτση

Επιβλέπων: Μιχάλης Κόκκορης

Αθήνα, Ιούλιος, 2022

Abstract

Carbon through its various allotropic forms, its ability to form a wide variety of polymers as well as being the main component in organic compounds finds many uses in chemistry metallurgy and semiconductor industries. ^{13}C being chemically the same as natural carbon, can be used as a tracer, allowing to follow carbon's path through chemical and biological reactions. As a consequence, there is a great need for sensitive techniques that permit the simultaneous depth profiling of ^{12}C and ^{13}C with a single measurement. One of the most promising IBA techniques in this regard is the d-NRA. More specifically the reactions $^{13}\text{C}(\text{d},\text{p})^{14}\text{C}$ $^{13}\text{C}(\text{d},\text{t})^{12}\text{C}$, $^{13}\text{C}(\text{d},\text{a}0)^{11}\text{B}$, $^{13}\text{C}(\text{d},\text{a}1)^{11}\text{B}$ and $^{12}\text{C}(\text{d},\text{p})^{13}\text{C}$ are well adapted to simultaneously provide accurate depth profiling data for ^{12}C and ^{13}C in a single measurement. However, while the cross section of the $^{12}\text{C}(\text{d},\text{p})^{13}\text{C}$ reaction is well known, there are limited experimental data on the $^{13}\text{C}(\text{d},\text{p})^{14}\text{C}$ $^{13}\text{C}(\text{d},\text{t})^{12}\text{C}$, $^{13}\text{C}(\text{d},\text{a}0)^{11}\text{B}$, $^{13}\text{C}(\text{d},\text{a}1)^{11}\text{B}$ reaction channels and these datasets are in certain cases discrepant. For this reason it is important to use theoretical calculations in order to investigate the reported differential cross sections to create more reliable datasets at various angles and to take steps towards creating a first evaluation procedure.

In the present work, a theoretical study of the $^{13}\text{C} + \text{d}$ system is carried out in the framework of the R-Matrix model. The experimental data used were taken from the IBANDL library[1]. The cross section measurements for the reactions have been carried out in the energy range of 0.49-1.65 MeV for three backscattering angles of 135° , 150° and 165° . The R-Matrix calculations were performed with the use of the AZURE2 code and involved the simultaneous analysis of the $^{13}\text{C}(\text{d},\text{p})^{14}\text{C}$ $^{13}\text{C}(\text{d},\text{t})^{12}\text{C}$, $^{13}\text{C}(\text{d},\text{a}0)^{11}\text{B}$, $^{13}\text{C}(\text{d},\text{a}1)^{11}\text{B}$ reaction channels with one, coherent set of parameters.

Εισαγωγή

Ο άνθρακας αποτελεί ένα από τα πιο σημαντικά στοιχεία όντας το 15^ο στοιχείο με την μεγαλύτερη αφθονία στον φλοιό της γης. Η ικανότητά του να σχηματίζει ένα μεγάλο πλήθος ενώσεων έχει μεγάλο εύρος εφαρμογών στην βιομηχανία, ενώ αποτελεί κοινό στοιχείο σε κάθε οργανική ένωση. Ο άνθρακας ¹³C, με φυσική αναλογία 1,1% στον φυσικό άνθρακα, όντας χημικά πανομοιότυπος με τον φυσικό άνθρακα μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως ιχνηλάτης επιτρέποντας την μελέτη της κίνησης του άνθρακα σε διάφορες χημικές και βιοχημικές διεργασίες. Κατά συνέπεια η ακριβής ποσοτική μέτρηση της κατανομής βάθους του ¹³C και η δυνατότητα της μέτρησης και του ¹²C σε μια μέτρηση είναι αναγκαία σε ένα μεγάλο πλήθος εφαρμογών. Οι πυρηνικές τεχνικές ανάλυσης με δέσμη ιόντων (Ion Beam Analysis (IBA)) αποτελούν σήμερα τις πλέον κατάλληλες και αξιόπιστες μεθόδους για την εύρεση της κατανομής βάθους κάποιου στοιχείου σε ένα δείγμα, έχοντας ήδη βρει ένα πλήθος εφαρμογών στη PIGEβιομηχανία, την επιστήμη του περιβάλλοντος και στην πολιτισμική κληρονομιά. Οι τεχνικές αυτές χρησιμοποιούν μονοενεργειακή δέσμη φορτισμένων ιόντων σε ενεργειακό εύρος μερικών MeV. Η αλληλεπίδραση των σωματιδίων της δέσμης με τους πυρήνες του στόχου παράγει σωματίδια ή ακτινοβολία σε χαρακτηριστικές ενέργειες, από τις οποίες γίνεται η αναγνώριση και ο ποσοτικός υπολογισμός των στοιχείων του στόχου. Η αλληλεπίδραση των φορτισμένων σωματιδίων, είτε της φορτισμένης δέσμης, είτε αυτών που εκπέμπονται από τις αλληλεπιδράσεις δέσμης-στόχου, με τα ηλεκτρόνια του στόχου και η απώλεια ενέργειας τους κατά τη διαδρομή τους μέσα στον στόχο δίνουν πληροφορία για την απόσταση την οποία διέσχισαν μέσα στο υλικό, επιτρέποντας και την εύρεση της κατανομής κατά βάθος των στοιχείων σε μία μόνο μέτρηση. Οι επιμέρους τεχνικές IBA ανάλογα με την αλληλεπίδραση που ανιχνεύουμε και τον τρόπο ανίχνευσης είναι οι εξής: φασματοσκοπία οπισθοσκέδασης Rutherford (Rutherford Backscattering Spectroscopy (RBS)), φασματοσκοπία ελαστικής οπισθοσκέδασης (Elastic Backscattering Spectroscopy (EBS)), Ανάλυση μέσω Ανίχνευσης Ελαστικών Σκεδαζόμενων πυρήνων (Elastic Recoil Detection Analysis (ERDA)) και Ανάλυση μέσω Πυρηνικών Αντιδράσεων (Nuclear Reaction Analysis (NRA)), υποκατηγορία της οποίας είναι η Εκπομπή Ακτίνων Γάμμα μέσω δέσμης σωματιδίων (Particle Induced Gamma Emission (PIGE)). Κάθε μία από αυτές της μεθόδους έχει τα δικά της πλεονέκτημα και μειονεκτήματα, καθιστώντας την κάθε μία κατάλληλη για διαφορετικές μετρήσεις ανάλογα με το στοιχείο που είναι να μετρηθεί, τα υπόλοιπα στοιχεία στο δείγμα, την ακρίβεια και το βάθος που θέλουμε να μετρήσουμε.

Για την περίπτωση της μέτρησης της συγκέντρωσης του ¹³C κατά βάθος οι τεχνικές NRA αποδεικνύονται ως οι καταλληλότερες. Η χρήση της PIGE εκμεταλλευόμενη τον λεπτό συντονισμό ($\Gamma=75$ eV) στα 1748 keV της αντίδρασης ¹³C(p, γ)¹⁴N είναι ιδιαίτερα καλή για τον προσδιορισμό του προφίλ του κατά βάθος με πολύ καλή ακρίβεια. Παρόλα αυτά, αυτή η μέθοδος δεν επιτρέπει τον προσδιορισμό με μία μέτρηση των υπολοίπων στοιχείων στο δείγμα και ιδιαίτερα του ¹²C που χρειάζεται, ανάλογα με τον σκοπό της μέτρησης για τον προσδιορισμό του λόγου των δύο ισοτόπων. Για αυτή την περίπτωση οι αντιδράσεις με δέσμη δευτερίων ¹³C(d,p)¹⁴C, ¹³C(d,t)¹²C, ¹³C(d,a)¹¹B, ¹³C(d,a)¹¹B για τον ¹³C και ¹²C(d,p)¹³C για τον ¹²C κρίθηκαν ως οι πλέον κατάλληλες. Όλες οι μέθοδοι IBA χρειάζονται για την εξαγωγή των αποτελεσμάτων τους πολύ καλή γνώση των ενεργών διατομών

των αντιδράσεων. Ο αναλυτικός υπολογισμός αυτών των ενεργών διατομών, με την εξαίρεση της περίπτωση των RBS και ERDA είναι αδύνατος, οπότε η χρήση αυτών των τεχνικών βασίζεται στην ύπαρξη πειραματικών δεδομένων για την κάθε αντίδραση που υπάρχουν στην βιβλιογραφία. Η αντίδραση $^{12}\text{C}(d,p_0)^{13}\text{C}$ έχει μελετηθεί εκτενώς, το ίδιο όμως δεν συμβαίνει για τις αντιδράσεις του ^{13}C με δευτέρια, όπου τα πειραματικά δεδομένα είναι περιορισμένα και παρουσιάζουν ορισμένες ασυμφωνίες μεταξύ τους. Οι αποκλίσεις μεταξύ των πειραματικών δεδομένων, καθώς και η περιορισμένη κάλυψη του ενεργειακού φάσματος και γωνιών ανίχνευσης καθιστούν απαραίτητο τον θεωρητικό υπολογισμό των ενεργών διατομών για την απόκτηση των πιο αξιόπιστων δεδομένων. Στην περίπτωση των χαμηλών ενεργειών, όπως έχουμε για την μέτρηση του ^{13}C από δευτέρια ο κυρίαρχος μηχανισμός αντίδρασης είναι μέσω του σχηματισμού του σύνθετου πυρήνα. Το μοντέλο της R-Matrix είναι σε αυτήν την περίπτωση το πλέον κατάλληλο για την θεωρητική εξαγωγή των ενεργών διατομών. Στην παρούσα εργασία έγινε μελέτη των δεδομένων της υπάρχουσας βιβλιογραφίας για τις αντιδράσεις $^{13}\text{C}(d,p_0)^{14}\text{C}$, $^{13}\text{C}(d,t_0)^{12}\text{C}$, $^{13}\text{C}(d,a_0)^{11}\text{B}$, $^{13}\text{C}(d,a_1)^{11}\text{B}$, στα πλαίσια του θεωρητικού μοντέλου της R-Matrix με την χρήση του κώδικα AZURE2 για ενέργειες δευτερίων στην ενεργειακή περιοχή 490-1650 keV, και για γωνίες ανίχνευσης 165° , 150° και 135° .

Η παρούσα εργασία χωρίζεται σε δύο μέρη. Στο πρώτο μέρος θα αναλυθούν τα γενικά χαρακτηριστικά των μεθόδων IBA και θα σχολιασθεί η καταλληλότητα της κάθε μιας για τη μέτρηση της κατανομής βάθους των ^{12}C και ^{13}C . Στο δεύτερο μέρος θα γίνει μια παρουσίαση της βασικής θεωρίας πίσω από την R-Matrix, μια αναφορά στον κώδικα AZURE2 που χρησιμοποιήθηκε για τους υπολογισμούς, και τέλος η παρουσίαση των αποτελεσμάτων που παράχθηκαν στα πλαίσια αυτής της εργασίας

Κεφάλαιο 1: Κίνητρο και Τεχνικές IBA

1.1 Κίνητρο

Ο άνθρακας είναι από τα πιο κοινά στοιχεία και σημαντικά στοιχεία. Αποτελεί το 15ο στοιχείο με την μεγαλύτερη αφθονία στον φλοιό της γης ενώ βρίσκει εφαρμογές σε πολλαπλούς τομείς της βιομηχανίας και της επιστήμης. Λόγω της ικανότητας του να φτιάχνει ένα μεγάλο αριθμό από διαφορετικά πολυμερή με διαφορετικές ιδιότητες, καθώς και τη μοναδική του θέση ως βασικό στοιχείο σε κάθε οργανική ένωση, βρίσκει εφαρμογές στη χημεία, στη βιολογία, στη μεταλλουργία και στους ημιαγωγούς. Τα δύο σταθερά ισότοπα του άνθρακα είναι τα ^{12}C και ^{13}C , με τον ^{12}C να έχει την μεγαλύτερη αφθονία στον φυσικό άνθρακα με σχετικές αναλογίες 98,9% και 1,1% για τον ^{13}C . Ο ^{13}C , όντας χημικώς ίδιος με τον φυσικό άνθρακα, αλλά ανιχνεύσιμος με ειδικές τεχνικές, μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως ιχνηλάτης. Δηλαδή κάποια ποσότητα ^{13}C να εισαχθεί σε κάποιο σύστημα, και από την κατανομή του ^{13}C που ανιχνεύεται μετά, να μελετηθεί η διαδρομή του άνθρακα μέσα από χημικές και βιοχημικές διεργασίες. Αυτή η ικανότητα του τον καθιστά σημαντικό στην έρευνα στους τομείς της χημείας και βιολογίας. Για όλα αυτά τα χαρακτηριστικά είναι αναγκαίο να βρεθεί μια μέθοδος για τον ακριβή ποσοτικό προσδιορισμό του άνθρακα κατά βάθος (και ειδικά για περιπτώσεις που η συγκέντρωσή του είναι σχετικά μικρή). Όμως ο προσδιορισμός του άνθρακα και ακόμα περισσότερο η δυνατότητα για ταυτόχρονη ποσοτική μέτρηση του ^{12}C και ^{13}C παρουσιάζει αρκετές προκλήσεις, ειδικά σε δείγματα με παρουσία άλλων ελαφρών στοιχείων σε βαρύ υπόστρωμα. Στην συνέχεια αυτού το κεφαλαίου θα κοιτάξουμε τις αρχές και τα βασικά κοινά στοιχεία των μεθόδων IBA, που αποτελούν τις πλέον κατάλληλες μεθόδους για την εύρεση κατανομής κατά βάθος. Η κάθε μέθοδος μετά θα αναλυθεί ξεχωριστά και θα εξεταστούν τα χαρακτηριστικά της για την καταλληλότητα της στο πρόβλημα ανίχνευσης του ^{13}C ώστε να καταλήξουμε στην πιο σημαντική τεχνική η οποία και τελικά θα μελετηθεί.

1.2 Τεχνικές Ανάλυσης με Δέσμη Ιόντων

Υπάρχει ένα μεγάλο πλήθος τεχνικών φασματοσκοπίας, ατομικών και πυρηνικών, που χρησιμοποιούνται για την ποιοτική ή ποσοτική ανίχνευση στοιχείων σε ένα δείγμα. Στην περίπτωση που χρειαζόμαστε ποσοτική μέτρηση κατά βάθος ενός δείγματος, τότε περιοριζόμαστε στην οικογένεια των πυρηνικών τεχνικών της ανάλυσης με δέσμη Ιόντων (IBA). Οι τεχνικές IBA που θα αναλυθούν παρακάτω είναι οι εξής:

- Φασματοσκοπία Οπισθοσκέδασης Rutherford (Rutherford Backscattering Spectroscopy (RBS))

- Φασματοσκοπία Ελαστικής οπισθοσκέδασης (Elastic Backscatering Spectroscopy (EBS))
- Ανάλυση μέσω Ανίχνευσης Ελαστικών Σκεδαζόμενων πυρήνων (Elastic Recoil Detection Analysis (ERDA))
- Ανάλυση μέσω Πυρηνικών Αντιδράσεων (Nuclear Reaction Analysis (NRA))

Όλες οι τεχνικές που αναφέρθηκαν έχουν κάποια κοινά χαρακτηριστικά. Αποτελούν τις λιγότερο καταστροφικές τεχνικές, ενώ επιτρέπουν την ταυτοποίηση των στοιχείων του επιφανειακού στρώματος ενός δείγματος, την ποσοτικοποίηση τους, και τον καθορισμό της κατανομής των στοιχείων κατά βάθος έως μερικών μικρομέτρων με ακρίβεια νανομέτρων. Χρησιμοποιούν όλες δέσμη φορτισμένων σωματιδίων, το είδος των οποίων εξαρτάται από την μέθοδο που χρησιμοποιείται και την μέτρηση για την οποία χρησιμοποιούνται. Η ταυτοποίηση των στοιχείων και η ποσοτικοποίηση τους κατά βάθος βασίζεται στις αλληλεπιδράσεις των σωματιδίων της δέσμης με τα άτομα και τους πυρήνες των στοιχείων από τα οποία αποτελείται το δείγμα. Όσο διανύουν το δείγμα, τα σωματίδια της δέσμης αλληλεπιδρούν με μικρή πιθανότητα με τους πυρήνες των στοιχείων του δείγματος. Ανάλογα με την τεχνική που χρησιμοποιείται, τα σωματίδια ή η ακτινοβολία που προκύπτει από τις πυρηνικές αλληλεπιδράσεις, ανιχνεύονται (από κάποιο ανιχνευτικό σύστημα) σε κάποια γωνία και από την ενέργεια που έχουν γίνεται η ταυτοποίηση της αντίδρασης και κατά συνέπεια των στοιχείων στο δείγμα. Η δέσμη χάνει ενέργεια μέσα στον στόχο λόγω της αλληλεπίδρασης κυρίως με τα ηλεκτρόνια του στόχου, η μέση τιμή της οποίας περιγράφεται για τις ενέργειες που μας ενδιαφέρουν στην εφαρμογή των τεχνικών IBA από την εξίσωση Bethe Bloch.

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi n z^2}{m_e v^2} \cdot \left(\frac{e^2}{4\pi \epsilon_0}\right)^2 \cdot \left[\ln\left(\frac{2m_e v^2}{I}\right) \right] \quad (1.1)$$

Αξιοποιώντας το γεγονός πως η συνολική ενέργεια που χάνει ένα σωματίδιο μέσα στο υλικό του στόχου είναι συνάρτηση της συνολικής απόστασης που διένυσε σε αυτό, μπορεί να βρεθεί η απόσταση μέσα στον στόχο στην οποία έγινε η αντίδραση, ενώ συνδυάζοντας αυτήν την πληροφορία με τον αριθμό σωματιδίων που ανιχνεύονται μπορεί να γίνει ο ποσοτικός υπολογισμός του στοιχείου που μελετάται κατά βάθος. Η στατιστική φύση της απώλειας ενέργειας οδηγεί στο γεγονός πως σωματίδια που έχουν διανύσει την ίδια απόσταση μέσα στο υλικό έχουν χάσει διαφορετικό ποσό ενέργειας, αλλάζοντας την κατανομή της ενέργειας που έχουν τα σωματίδια μέσα στον στόχο, αυξάνοντας την απόκλιση σε ένα φαινόμενο που είναι γνωστό ως energy straggling. Αυτό το φαινόμενο οδηγεί σε ένα όριο στην ακρίβεια με την οποία μπορούμε να μετρήσουμε την απώλεια ενέργειας και άρα το βάθος.

Η κάθε τεχνική ανάλογα με την φύση της αλληλεπίδρασης που μελετάει παρουσιάζει και τα δικά της ξεχωριστά χαρακτηριστικά που κάνουν την κάθε μια κατάλληλη για διαφορετικές συνθήκες, ανάλογα με το στοιχείο που μελετάται, τα άλλα στοιχεία στο δείγμα, την ενέργεια της δέσμης, τη συγκέντρωση του στοιχείου στο δείγμα, το βάθος το οποίο θέλουμε να μετρηθεί και την ακρίβεια της μέτρησης. Στη συνέχεια θα αναλυθούν τα βασικά χαρακτηριστικά της κάθε τεχνικής ξεχωριστά, μαζί με την καταλληλότητά της για το πρόβλημα της ανίχνευσης κατά βάθος του ^{13}C και του ^{12}C .

1.2.1 Φασματοσκοπία Οπισθοσκέδασης Rutherford και Φασματοσκοπία Ελαστικής οπισθοσκέδασης

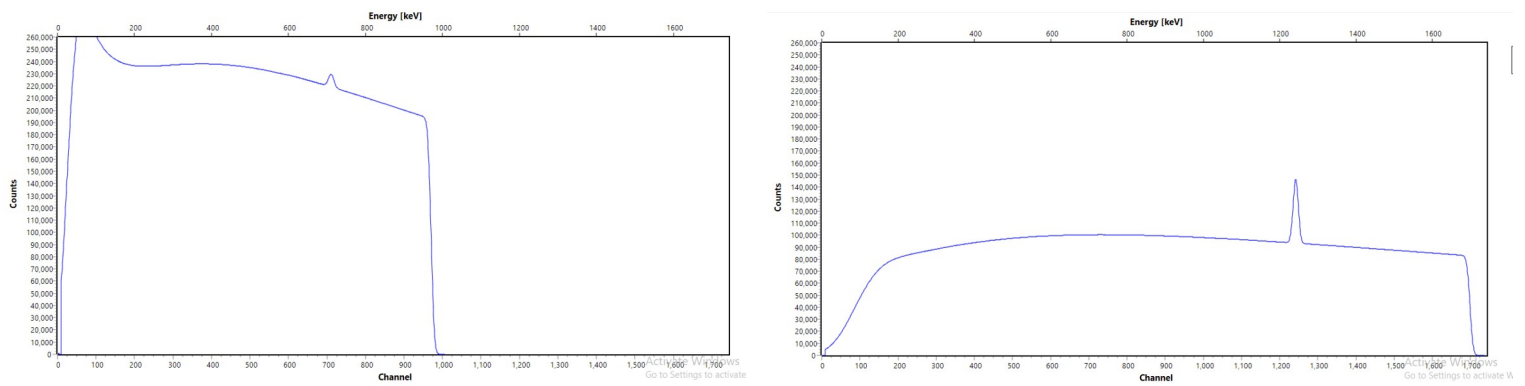
Η Φασματοσκοπία οπισθοσκέδασης Rutherford αποτελεί μια από της πιο συνήθεις τεχνικές IBA λόγω της σχετικά απλής εφαρμογής της και της εύκολης ανάλυσης του φάσματος που προκύπτει. Σε αυτή χρησιμοποιείται συνήθως μια δέσμη σωματιδίων χαμηλού Z (πρωτόνια, δευτέρια, σωματίδια α) τα οποία σκεδάζονται ελαστικά από το δυναμικό Coulomb των πυρήνων του στόχου. Η σκέδαση αυτή αποκαλείται σκέδαση Rutherford και λόγω της καθαρά ηλεκτρομαγνητικής της φύσεως η ενεργός διατομή της μπορεί να υπολογιστεί αναλυτικά και δίνεται από τον τύπο του Rutherford:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{1}{E_0} \right)^2 \frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} \quad (1.2)$$

Όπου Z_1 και Z_2 είναι ο ατομικός αριθμός των πυρήνων του στόχου και της δέσμης, e το ηλεκτρικό φορτίο του ηλεκτρονίου ϵ_0 η διηλεκτρική σταθερά του κενού, E_0 η κινητική ενέργεια των σωματιδίων της δέσμης, και θ η γωνία σκέδασης.

Για να μπορούν να ανιχνευτούν τα σωματίδια που βγαίνουν από έναν χοντρό στόχο, οι ανιχνευτές τοποθετούνται στις πίσω γωνίες ($>90^\circ$). Λόγω διατήρησης της ορμής, για να παρατηρηθεί απαραίτητη προϋπόθεση είναι η μάζα των σωματιδίων της δέσμης να είναι μικρότερη από του στόχου. Όπως φαίνεται από την εξάρτηση της ενεργού διατομής από τον ατομικό αριθμό, η μέθοδος RBS είναι πολύ ευαίσθητη για βαριά στοιχεία, ενώ είναι λιγότερο ευαίσθητη για τα ελαφριά, ενώ η ενεργός διατομή μειώνεται και για τις μεγάλες γωνίες.

Για να μπορεί να θεωρηθεί μια σκέδαση, 'σκέδαση Rutherford' θα πρέπει να μπορεί να αγνοηθεί η αλληλεπίδραση μεταξύ των πυρήνων. Δηλαδή το σωματίδιο της δέσμης δεν θα πρέπει να ξεπεράσει το δυναμικό Coulomb του στοιχείου του στόχου. Για τις τυπικές ενέργειες που χρησιμοποιούνται στην RBS, αυτό περιορίζει την εφαρμογή της σε στοιχεία με υψηλό Z τα οποία παρουσιάζουν ισχυρότερο δυναμικό Coulomb. Στην περίπτωση του ^{12}C και ^{13}C οι χαμηλότερες ενέργειες που χρησιμοποιούνται ήδη ξεπερνάνε το δυναμικό Coulomb με αποτέλεσμα να μην μπορεί να εφαρμοστεί σε αυτήν την περίπτωση. Η επέκταση της RBS σε μεγαλύτερες ενέργειες είναι η Φασματοσκοπία Ελαστικής Οπισθοσκέδασης (EBS). Η διάταξη και ανίχνευση των σωματιδίων σε αυτήν είναι ακριβώς ίδια. Η διαφορά έγκειται στο γεγονός πως η σκέδαση πλέον δεν μπορεί να θεωρηθεί αμιγώς Coulomb, αλλά τα σωματίδια της δέσμης θα αλληλεπιδράσουν και με το πυρηνικό δυναμικό. Ως συνέπεια αυτού, η ενεργός διατομή της αλληλεπίδρασης δεν μπορεί να υπολογιστεί αναλυτικά και χρειάζεται να προσδιοριστεί πειραματικά, βάζοντας έναν παραπάνω παράγοντα αβεβαιότητας στην μέτρηση. Ένα από τα πλεονεκτήματα όμως που προσδίδει η πυρηνική σκέδαση των σωματιδίων, είναι πως με κατάλληλη επιλογή ενέργειας, κοντά σε κάποιον συντονισμό, η τιμή της ενεργού διατομής EBS μπορεί να είναι κατά πολύ μεγαλύτερη από την τιμή που θα αναμενόταν από μια καθαρή σκέδαση Rutherford.



Εικόνα 1.1: Φάσμα προσομοίωσης από την οπισθοσκέδαση πρωτονίων ενέργειας 1 MeV από άνθρακα σε υπόστρωμα χρυσού στις 165°, μαζί με την ίδια μέτρηση για ενέργεια 1,75 MeV. Παρατηρούμε τη μεγάλη αύξηση της ενεργού διατομή του άνθρακα για 1,75 MeV πρωτόνια λόγω την ύπαρξη συντονισμού σε αυτήν την ενέργεια.

Και στην RBS και στην EBS όταν το σωματίδιο σκεδάζεται ελαστικά με τον στόχο μειώνεται η ενέργεια του ανάλογα με την γωνία σκέδασης και τις μάζες των δύο πυρήνων. Η ενέργεια στην οποία σκεδάζεται το σωματίδιο μπορεί να υπολογιστεί από τις αρχές διατήρησης ενέργειας και ορμής:

$$E_1 = k E_0 \quad (1.3)$$

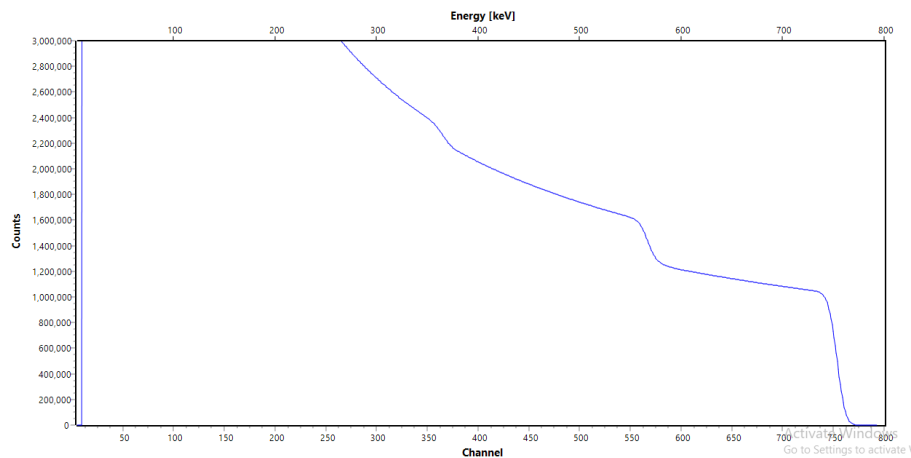
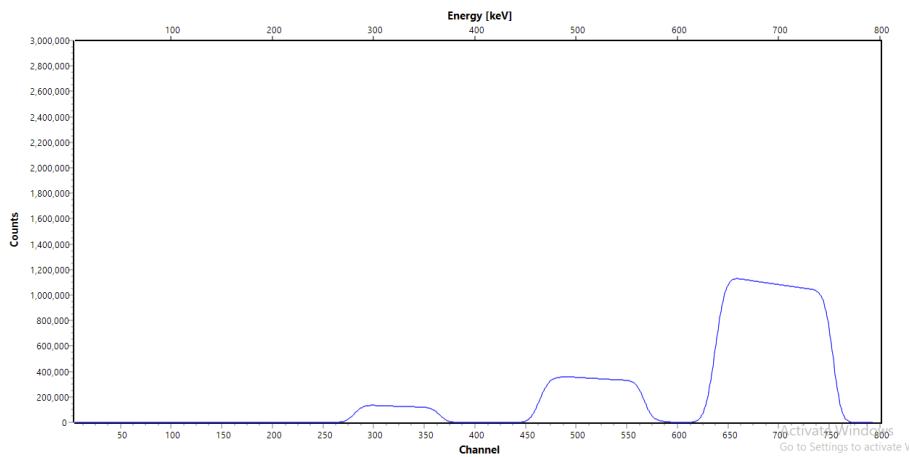
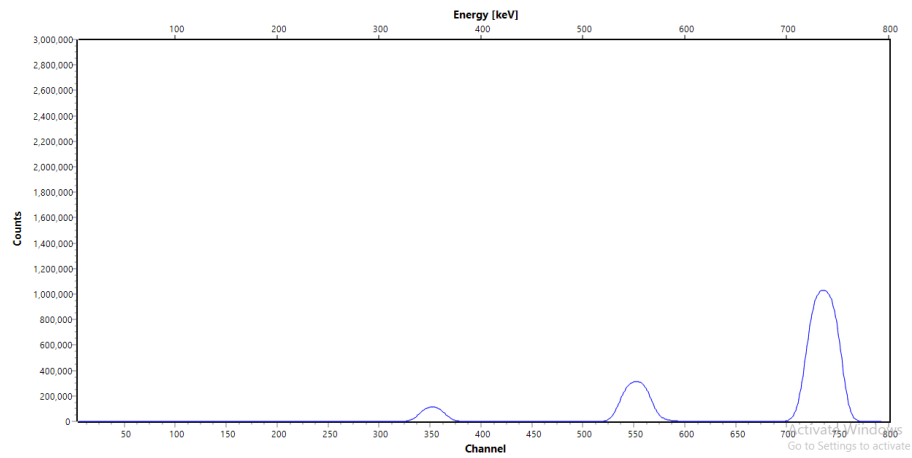
Όπου E_1 είναι η ενέργεια που αποκτά το σωματίδιο μετά την σκέδαση ενώ k είναι ο κινηματικός παράγοντας:

$$k = \left[\frac{(M_2^2 - M_1^2 \sin^2 \theta)^{1/2} + M_1 \cos \theta}{M_2 + M_1} \right]^2 \quad (1.4)$$

Όπου M_1 M_2 είναι η μάζα των σωματιδίων της δέσμης και του στόχου αντίστοιχα. Προκύπτει πως τα σωματίδια που σκεδάζονται από βαριά σωματίδια ανιχνεύονται με μεγαλύτερες ενέργειες από αυτά που σκεδάζονται από πιο ελαφριά. Η διαφορά στην ενέργεια των σκεδαζόμενων σωματιδίων από διαφορετικούς πυρήνες επιτρέπει τον διαχωρισμό τους. Όσο μεγαλύτερη είναι η γωνία ανίχνευσης τόσο πιο εύκολα ξεχωρίζουν οι κορυφές από δύο κοντινά στοιχεία, ενώ η διαφορά μεταξύ δύο διαδοχικών στοιχείων είναι μεγαλύτερη για ελαφρείς πυρήνες.

Τα σωματίδια που αλληλεπιδρούν πιο βαθιά μέσα στον στόχο χάνουν περισσότερη ενέργεια δημιουργώντας μια διεύρυνση της κορυφής στην οποία περιμένουμε από την κινηματική να εμφανιστεί στο φάσμα. Αυτό κάνει την ανάλυση του φάσματος μια σχετικά απλή διαδικασία.

Στο φάσμα της εικόνας 1.2 παρατηρούμε τα χαρακτηριστικά που αναφέραμε παραπάνω. Τα τρία στοιχεία βρίσκονται σε διαφορετικές ενέργειες στο φάσμα, κάνοντας τον διαχωρισμό τους απλό, με το βαρύτερο στοιχεία, τον Fe σε αυτήν την περίπτωση να εμφανίζεται στις μεγαλύτερες ενέργειες. Από το ύψος της κάθε κορυφής σε συνδυασμό με τις ενεργές διατομές (cross section) για το κάθε στοιχείο γίνεται η αναγνώριση των σχετικών συγκεντρώσεων, και από το πάχος της κορυφής το συνολικό πάχος του στόχου.



Εικόνα 1.2: Τυπικό φάσμα RBS για σωματίδια α 1MeV, σκεδαζόμενα στις 165° από ένα δείγμα που αποτελείται από ένα ομοιόμορφο δείγμα ίδια συγκέντρωσης Fe,Si,O, για (α) λεπτό στόχο (β) μέσου πάχους (γ) στόχου αρκετά παχύ ώστε να σταματήσει τα σωματίδια α

Ένας ακόμα σημαντικός παράγοντας που επηρεάζει τα αποτελέσματα και τα χαρακτηριστικά της μέτρησης, είναι το είδος των σωματιδίων της δέσμης. Όπως αναφέρθηκε, οι πιο συχνές δέσμες είναι πρωτόνια, δευτέρια και σωματίδια α, ενώ ανάλογα με τη μέτρηση μπορεί να χρησιμοποιηθούν και πιο βαριά στοιχεία όπως ο άνθρακας. Οι διαφορές στην χρήση της κάθε μιας δέσμης έχει να κάνει με το βάθος της μέτρησης, τη διακριτική ικανότητα βάθους (depth resolution) και την ικανότητα διαχωρισμού μαζών. Από τον κινηματικό παράγοντα προκύπτει πως η χρήση πιο βαριάς δέσμης αυξάνει την ικανότητα διαχωρισμού μάζας, ενώ από την Bethe-Bloch προκύπτει πως η απώλεια ενέργειας είναι μεγαλύτερη για τα πιο βαριά στοιχεία, αυξάνοντας το resolution με κόστος το μέγιστο βάθος στο οποίο μπορεί να φτάσει η δέσμη. Δηλαδή τα πρωτόνια έχουν το μέγιστο βάθος ανίχνευσης, ενώ τα σωματίδια α προσφέρουν καλύτερο διαχωρισμό μαζών και resolution. Τα δευτέρια είναι ένας συμβιβασμός μεταξύ των δύο προσφέροντας καλύτερο διαχωρισμό μαζών, χωρίς να μειώνεται σημαντικά το μέγιστο βάθος.

Η μέθοδος της EBS ενώ μπορεί να χρησιμοποιηθεί για ελαφριά στοιχεία όπως ο άνθρακας, παρ'όλα αυτά παρουσιάζει σημαντικές δυσκολίες στην ανίχνευση τους ειδικά σε δείγματα με άλλα ελαφριά στοιχεία σε βαρύ υπόστρωμα. Λόγω της ενέργειας που θα έχουν τα σωματίδια μετά την σκέδαση με τους πυρήνες του άνθρακα, η κορυφή θα βρίσκεται στα αριστερά του φάσματος όπου και θα υπάρχει περισσότερο υπόβαθρο από βαρύτερα στοιχεία, ενώ ο διαχωρισμός του επιφανειακού άνθρακα από άλλου βαρύτερου στοιχείου που βρίσκεται βαθύτερα δεν είναι εύκολα δυνατός.

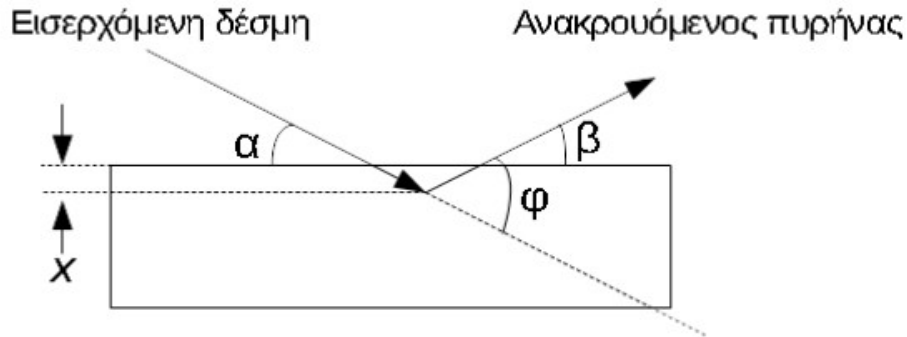
1.2.2 Ανάλυση μέσω Ανίχνευσης Ελαστικών Σκεδαζόμενων πυρήνων

Η τεχνική της ανάλυσης μέσω ανίχνευσης ελαστικών σκεδαζόμενων πυρήνων (ERDA) βασίζεται στην ελαστική σκέδαση Rutherford, όπως στην περίπτωση της RBS. Η διαφορά βρίσκεται στο πως, αντί να ανιχνεύονται τα οπισθοσκεδαζόμενα σωματίδια της δέσμης, ανιχνεύονται οι σκεδαζόμενοι πυρήνες του στόχου, σε μπροστινές γωνίες ($\varphi < 90^\circ$). Για να μπορέσουν οι πυρήνες του στόχου να φύγουν από το πλέγμα, χρειάζεται να μεταφερθεί αρκετή ενέργεια σε αυτούς. Για αυτό το λόγο, στην ERDA χρησιμοποιούνται δέσμες βαριών σωματιδίων. Η μέθοδος, αντίθετα από την RBS, είναι κατάλληλη για τον εντοπισμό ελαφριών σωματιδίων, και λόγω του υψηλού Z των σωματιδίων του στόχου και των ιόντων της δέσμης, δεν ξεπερνιέται το δυναμικό Coulomb, οπότε και η σκέδαση παραμένει σκέδαση Rutherford, επιτρέποντας τον αναλυτικό υπολογισμό της κατανομής συγκεντρώσεων κατά βάθος. Επειδή στην περίπτωση ενός κάπως παχύ στόχου, τα σωματίδια δεν έχουν αρκετή ενέργεια για να διαπεράσουν όλο τον στόχο για να ανιχνευτούν μπροστά, τυπικά στην ERDA η δέσμη των ιόντων πέφτει υπό κάποια μικρή γωνία στον στόχο, και τελικά οι πυρήνες σκεδάζονται κατά τέτοιο τρόπο ώστε να βγαίνουν από την ίδια επιφάνεια.

Όπως και στην περίπτωση της RBS η ενέργεια που αποκτάει το σωματίδιο μετά τη σκέδαση μπορεί να βρεθεί από την κινηματική της αντίδρασης. Ο παράγοντας k_r για τον σκεδαζόμενο πυρήνα είναι:

$$k_r = \frac{4 M_1 M_2 \cos^2(\varphi)}{(M_1 + M_2)^2} \quad (1.5)$$

Έτσι μπορεί να υπολογιστεί η ενέργεια του σωματιδίου για κάθε γωνία ανίχνευσης που σκεδάζεται από την επιφάνεια, ενώ από τις απώλειες ενέργειας του σωματιδίων μέσα στον στόχο μπορεί να υπολογιστεί το βάθος x από όπου σκεδάστηκε.



Εικόνα 1.3: Βασική αρχή της ERDA. Οι γωνίες ϕ, α, β είναι αντίστοιχα οι: γωνία σκέδασης, γωνία εισόδου και γωνία εξόδου. x είναι το βάθος στο οποίο το ιόν της δέσμης σκεδάζεται με την πυρήνα του στόχου.

Η ανίχνευση σε μικρές γωνίες όμως σημαίνει πως πέρα από τους ανακρουόμενους πυρήνες του στόχου, θα ανιχνεύονται και τα σκεδαζόμενα σωματίδια της δέσμης. Οι πυρήνες αυτοί δημιουργούν ένα μεγάλο υπόβαθρο στη μέτρηση. Για αυτό το λόγο είναι αναγκαίο να υπάρχει ένας τρόπος διαχωρισμού των σωματιδίων. Η πρώτη μέθοδος περιλαμβάνει την τοποθέτηση ενός λεπτού μεταλλικού φύλλου πριν τον ανιχνευτή. Επειδή τα σωματίδια της δέσμης είναι πιο βαριά από τους πυρήνες προς ανίχνευση, χάνουν περισσότερη ενέργεια μέσα στο φύλλο. Οπότε μπορεί να προσδιοριστεί ένα κατάλληλο πάχος, ώστε να σταματάει όλα τα σωματίδια της δέσμης μέσα στο φύλλο και να αφήνει μόνο τους σκεδαζόμενους πυρήνες να φτάνουν στον ανιχνευτή. Αυτή η μέθοδος δημιουργεί διαφορετικά προβλήματα. Η ακρίβεια της μέτρησης μειώνεται σημαντικά λόγω του straggling μέσα στο μεταλλικό φύλλο, ενώ η ανίχνευση πολλαπλών στοιχείων στην ίδια μέτρηση είναι δύσκολη.

Η δεύτερη παραλλαγή της τεχνικής αυτής που παρουσιάζει και μεγαλύτερο ενδιαφέρον γίνεται με τη μέτρηση του χρόνου πτήσης (Time of Flight Elastic Recoil Detection Analysis, ToF-ERDA). Σε αυτή τη μέθοδο η ενέργεια των σωματιδίων μετριέται ταυτόχρονα με τον χρόνο πτήσης τους. Για τη μέτρηση του χρόνου πτήσης χρησιμοποιούνται δύο ανιχνευτές χρόνου. Από την ταυτόχρονη μέτρηση της ενέργειας και του χρόνου πτήσης μπορεί να υπολογιστεί η μάζα των σωματιδίων ως εξής:

$$m = 2 E \left(\frac{\text{ToF}}{l} \right)^2 \quad (1.6)$$

Όπου η E ενέργεια στην οποία ανιχνεύτηκε ο ανακρουόμενος πυρήνας, ToF ο χρόνος πτήσης και l το μήκος της διαδρομής πτήσης.

Από τη μάζα μπορούν να ξεχωρίσουν τα διαφορετικά στοιχεία του στόχου οπότε μπορεί να γίνει ταυτόχρονη μέτρηση του κάθε στοιχείου με δημιουργία ξεχωριστού φάσματος για κάθε στοιχείο με αποτέλεσμα να μην υπάρχει υπόβαθρο θορύβου. Η απουσία του μεταλλικού φύλλου σε αυτή την μέθοδο σημαίνει πως η τεχνική διατηρεί την εξαιρετική ακρίβεια της.

Όλα αυτά τα χαρακτηριστικά καθιστούν την ToF-ERDA μια εξαιρετική μέθοδο. Στην περίπτωση της μέτρησης των ^{13}C και ^{12}C η μέθοδος παρουσιάζει σημαντικά πλεονεκτήματα έναντι των προηγούμενων μεθόδων. Παρόλο του χαμηλού Z του άνθρακα, λόγω της βαριάς δέσμης ιόντων που χρησιμοποιεί η μέθοδος παραμένει στην περίπτωση της σκέδασης Rutherford αφαιρώντας μια πηγή αβεβαιοτήτων στη μέτρηση από τον πειραματικό υπολογισμό της ενεργού διατομής. Επίσης, η ανίχνευση σε μπροστινές γωνίες σημαίνει πως η ενεργός διατομή της σκέδασης Rutherford θα είναι σημαντικά μεγαλύτερη σε σύγκριση με την περίπτωση της οπισθοσκέδασης. Με τη χρήση του χρόνου πτήσης καταφέρνει όχι μόνο να ανιχνεύει ταυτόχρονα τα δύο ισότοπα ανεξάρτητα από τα υπόλοιπα στοιχεία που μπορεί να υπάρχουν στο δείγμα, αλλά και να παίρνει φάσματα πολύ καθαρά από το υπόβαθρο. Παρουσιάζει επίσης πολύ καλή ακρίβεια στον υπολογισμό του βάθους της μέτρησης. Όμως εδώ εμφανίζεται και το μεγάλο μειονέκτημα της μεθόδου που περιορίζει την χρησιμότητά της για την περίπτωση της κατά βάθος ποσοτικής ανίχνευσης στοιχείων, καθώς λόγω των μεγάλων απωλειών ενέργειας των βαρέων ιόντων μέσα στο δείγμα και της μικρής γωνίας υπό την οποία πέφτει η δέσμη πάνω στο δείγμα, περιορίζεται η διεισδυτικότητα της δέσμης, με αποτέλεσμα η μέθοδος να μπορεί να κάνει ποσοτική μέτρηση μόνο στην επιφάνεια και σε πολύ μικρότερα βάθη από τις υπόλοιπες μεθόδους.

1.2.3 Ανάλυση μέσω Πυρηνικών Αντιδράσεων

Η μέθοδος της Ανάλυσης μέσω Πυρηνικών Αντιδράσεων (NRA) βασίζεται στην ανίχνευση σωματιδίων που προκύπτουν από τις ανελαστικές αντιδράσεις της δέσμης με τον πυρήνα. Το είδος του σωματιδίου μπορεί να είναι είτε φορτισμένο, όπως p, ή α, ή ακτίνες γ. Στην τελευταία περίπτωση η μέθοδος καλείται Εκπομπή Ακτίνων Γάμμα μέσω δέσμης σωματιδίων (Particle Induced Gamma Emission (PIGE)). Η NRA ανάλογα με το κανάλι εξόδου, παρουσιάζει διαφορετικά χαρακτηριστικά και χρησιμοποιούνται διαφορετικές διατάξεις για την ανίχνευση των αντίστοιχων σωματιδίων, τα οποία και θα σχολιαστούν ξεχωριστά.

Η μέθοδος PIGE βασίζεται στη χρήση φορτισμένης δέσμης για τη διέγερση του πυρήνα-στόχου σε κάποια συγκεκριμένη ενεργειακή κατάσταση, ο οποίος μετά θα αποδιεγερθεί με εκπομπή ακτίνας γ, ή εκπέμποντας κάποιο σωματίδιο αφήνοντας τον πυρήνα που προκύπτει σε διεγερμένη κατάσταση, που με τη σειρά του αποδιεγείρεται με ακτίνες γ. Επειδή οι πυρηνικές ενεργειακές καταστάσεις είναι συγκεκριμένες για κάθε διαφορετικό ισότοπο, η ενέργεια της ακτινοβολίας γ που προκύπτει από την αποδιέγερσή του, θα έχει μια χαρακτηριστική ενέργεια από την οποία μπορεί να αναγνωριστεί το κάθε ισότοπο. Για την ποσοτική μέτρηση του κάθε στοιχείου χρειάζεται επιπλέον η γνώση των ενεργών διατομών για κάθε αντίδραση. Επειδή οι ακτίνες γ καθώς διανύουν το υλικό του στόχου δεν χάνουν ενέργεια όπως τα φορτισμένα σωματίδια, οι ακτίνες γ από την αντίδραση θα εμφανίζονται σε συγκεκριμένη ενέργεια ανεξάρτητα από το βάθος από το οποίο εκπέμφθηκαν. Η απουσία της πληροφορίας του βάθους δυσκολεύει την χρήση της PIGE για υπολογισμό της κατά βάθος σύστασης κάποιου στοιχείου και κανονικά θα την περιορίζε σε απλούς ποσοτικούς προσδιορισμούς. Σε πολλές

περιπτώσεις όμως, η ενεργός διατομής της εκπομπής ακτίνων γ παρουσιάζει πολύ στενό συντονισμό όπου αποκτά πολύ μεγάλη τιμή, ενώ πέρα από αυτόν πρακτικά μηδενίζεται. Αυτό σημαίνει πως υπάρχει ένα μικρό ενεργειακό παράθυρο μέσα στο οποίο είναι δυνατό να συμβεί η αντίδραση, και λόγω της απώλειας ενέργειας της δέσμης ιόντων μέσα στον στόχο, αυτό μεταφράζεται σε ένα μικρό βάθος μέσα στον στόχο στο οποίο μπορεί να συμβεί. Έτσι καθορίζοντας την ενέργεια της δέσμης σε κάποια κατάλληλη τιμή επιλέγεται και το αντίστοιχο βάθος μέσα στο στόχο το οποίο μετριέται. Αυξάνοντας με μικρό βήμα την ενέργεια μπορεί να υπολογιστεί ποσοτικά ένα στοιχείο κατά βάθος. Λόγω του πολύ χαμηλού εύρους των συντονισμών που παρουσιάζουν κάποιες από αυτές τις αντιδράσεις, είναι δυνατόν να γίνει μέτρηση βάθους με εξαιρετική διακριτική ικανότητα. Όμως δεν παρουσιάζουν όλα τα στοιχεία κάποιον κατάλληλο συντονισμό, περιορίζοντας σημαντικά τη χρήση της αποκλειστικά σε ορισμένα μόνον ισότοπα.

Στην περίπτωση του ^{13}C υπάρχει κατάλληλη αντίδραση η οποία έχει χρησιμοποιηθεί στο παρελθόν για τη μέτρησή του. Η αντίδραση $^{13}\text{C}(p,\gamma)^{14}\text{N}$ παρουσιάζει έναν πολύ στενό συντονισμό ($\Gamma=75\text{eV}$) στα 1748 keV , ο οποίος μπορεί να χρησιμοποιηθεί για PIGE, πετυχαίνοντας πολύ καλή ακρίβεια στη μέτρηση για μεγάλο βάθος. Όμως ο περιορισμός στη χρήση στενών συντονισμών σημαίνει πως δεν γίνεται μέτρηση σε άλλα στοιχεία μέσα στον στόχο. Η πληροφορία για τη συνολική σύνθεση του στόχου όμως είναι βασική για τον υπολογισμό της απώλειας ενέργειας μέσα σε αυτόν και κατ'επέκταση για τον υπολογισμό του βάθους στο οποίο γίνεται η αντίδραση. Έτσι θα πρέπει αναγκαστικά να υπάρχει μια συνοδευτική μέτρηση. Επιπλέον, επειδή ο άνθρακας ^{12}C δεν παρουσιάζει κάποιον αντίστοιχο στενό συντονισμό, είναι αδύνατος ο υπολογισμός και των δύο ισωτόπων με την PIGE.

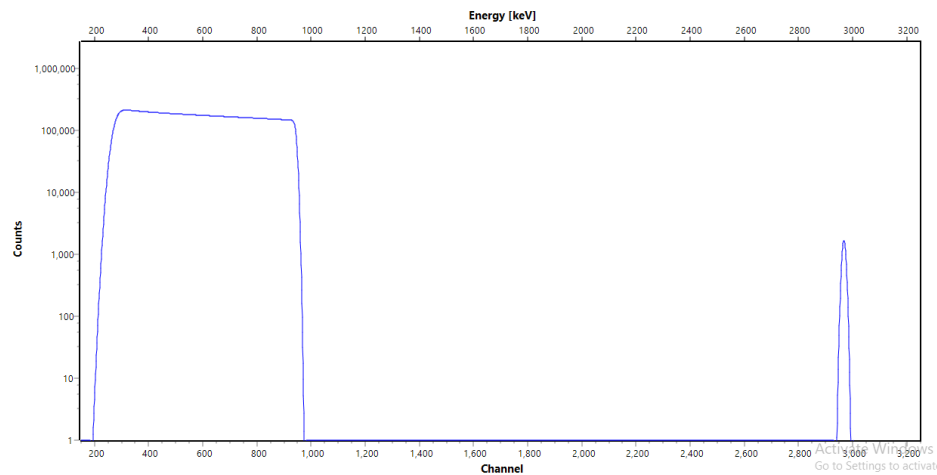
Η τελευταία μέθοδος που θα αναλυθεί σε αυτό το κείμενο είναι η περίπτωση της NRA όπου τα σωματίδια που ανιχνεύονται είναι φορτισμένα αντί για ακτίνες γ . Από πειραματικής πλευράς η μέθοδος είναι παρόμοια με την RBS και EBS. Η δέσμη εισέρχεται κάθετα στον στόχο και ανιχνεύονται τα οπισθοσκεδαζόμενα σωματίδια που προκύπτουν, με την διαφορά πως δεν ανιχνεύονται από την ελαστική σκέδαση, αλλά από ανελαστικές πυρηνικές αντιδράσεις με τους πυρήνες του στόχου. Όπως και με τις άλλες τεχνικές, το ύψος της κορυφής που προκύπτει στο φάσμα δίνει την πληροφορία για το πλήθος των πυρήνων του στοιχείου που μελετάμε, ενώ από την απώλεια ενέργειας στον στόχο επιτρέπει ο υπολογισμός του βάθους της μέτρησης. Όπως στην περίπτωση της EBS η ενεργός διατομή για την κάθε αντίδραση δεν μπορεί να υπολογιστεί αναλυτικά και είναι αναγκαίος ο πειραματικός υπολογισμός της. Ένα επιπλέον μειονέκτημα που έχει συγκριτικά με την EBS είναι οι χαμηλότερες τιμές των ενεργών διατομών στην περίπτωση των πυρηνικών αντιδράσεων σε σχέση με την ελαστική σκέδαση, με αποτέλεσμα είτε να αυξάνεται ο χρόνος μέτρησης, είτε να μειώνεται η στατιστική της μέτρησης.

Η σημαντικότερη διαφορά που προκύπτει από τις δύο μεθόδους είναι λόγω του Q-value των αντιδράσεων που χρησιμοποιούνται για την NRA, της ενέργειας δηλαδή, που απελευθερώνεται από την αντίδραση, λόγω της διατήρησης της ενέργειας, και είναι ίση με την διαφορά των μαζών ηρεμίας των σωματιδίων που αλληλεπιδρούν, και των σωματιδίων που παράγονται από την αντίδραση, όπως προκύπτει από την εξής εξίσωση:

$$Q=(M_1+M_2)c^2-(M_3+M_4)c^2 \quad (1.7)$$

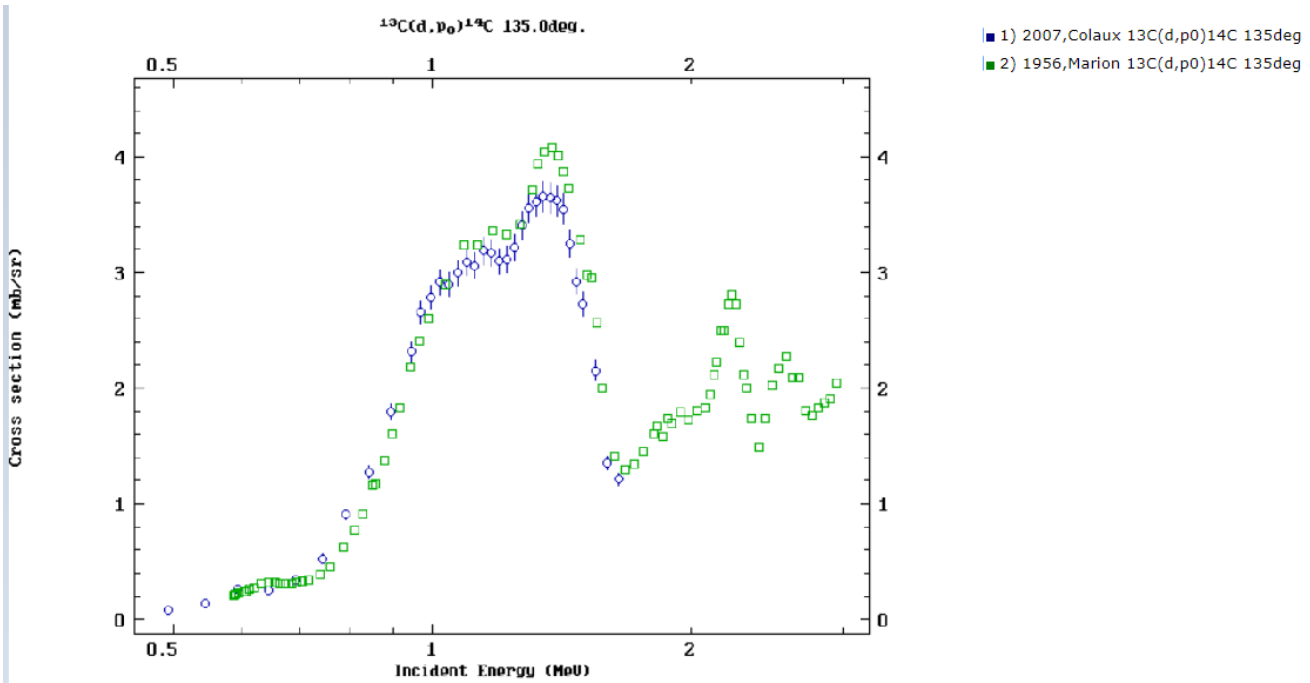
Η περίπτωση των αντιδράσεων που συνήθως χρησιμοποιούνται στην NRA, με μεγάλα θετικά Q-values, προσδίδει 2 πολύ σημαντικά πλεονεκτήματα στην NRA. Τα σωματίδια που προκύπτουν από τις πυρηνικές αντιδράσεις ανιχνεύονται σε μεγάλες ενέργειες, μεγαλύτερες από τις ελαστικές σκεδάσεις, όπου δεν υπάρχει υπόβαθρο, με αποτέλεσμα να μην υπάρχει αλληλεπικάλυψη με άλλες κορυφές. Δεύτερον, όπως και στην περίπτωση της PIGE, η κάθε αντίδραση, και άρα η ενέργεια στην οποία θα ανιχνευτεί το σωματίδιο, είναι χαρακτηριστική του κάθε ισότοπου, με αποτέλεσμα η NRA να είναι πολύ επιλεκτική για το κάθε ισότοπο στο δείγμα, και – υπό ορισμένες συνθήκες – να μπορεί να μετρήσει ταυτόχρονα πολλά στοιχεία παρόμοια μάζας σε ένα δείγμα. Αυτό κάνει την NRA μια εξαιρετική τεχνική για την μέτρηση λόγων ισότοπων του ίδιου στοιχείου όπως $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ή $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$, καθώς έχουν διαφορετικές ενέργειες στο φάσμα και μπορούν εύκολα να μετρηθούν ξεχωριστά. Επιπλέον λόγω των παρόμοιων πειραματικών διατάξεων η NRA μπορεί να χρησιμοποιηθεί ταυτόχρονα με την EBS ή την RBS για ακόμα καλύτερα αποτελέσματα.

Η επιλογή της κατάλληλης δέσμης ιόντων είναι και στην περίπτωση της NRA σημαντικό χαρακτηριστικό της μέτρησης. Αντίθετα με την EBS, ο σημαντικότερος παράγοντας είναι η διαθεσιμότητα κατάλληλων αντιδράσεων, τα Q-values και η ενεργός διατομή τους. Οι δέσμες πρωτονίων, παρόλο που παρουσιάζουν την υψηλότερη διεισδυτικότητα λόγω της χαμηλότερης απώλειας ενέργειας, δεν είναι κατάλληλες NRA, αφού στις περισσότερες περιπτώσεις παρουσιάζουν αρνητικά Q-values, και στις περιπτώσεις που είναι θετικά οι τιμές είναι συνήθως χαμηλές. Στην περίπτωση του άνθρακα ειδικά, όλες οι αντιδράσεις είναι ενδόθερμες απαγορεύοντας την χρήση τους. Όμοια, η δέσμη α δεν χρησιμοποιείται λόγω των αρνητικών Q-values και επιπλέον, των συνήθως χαμηλών τιμών της ενεργού διατομής. Για αυτό το λόγο η χρήση δέσμης δευτερίων είναι η καταλληλότερη. Οι αντιδράσεις με δευτέρια είναι συνήθως ισχυρά εξώθερμες για τα περισσότερα ελαφρά στοιχεία επιτρέποντας και την ταυτόχρονη μέτρησή τους.



Εικόνα 1.4 : Παράδειγμα φάσματος που προκύπτει από NRA, για δέσμη δευτερίων ενέργειας 1 MeV σε λεπτό στρώμα άνθρακα πάνω από χρυσό. Το φάσμα του χρυσού κυριαρχεί στις χαμηλές ενέργειες κάνοντας αδύνατον να μετρηθεί η ελαστική σκέδαση. Η αντίδραση $^{12}\text{C}(d,p)$ βρίσκεται πέρα από το φάσμα του χρυσού, επιτρέποντας την μέτρηση της με ακρίβεια.

Όλα αυτά τα χαρακτηριστικά κάνουν την NRA την καταλληλότερη τεχνική για την ανίχνευση του ^{12}C και ^{13}C . Παρέχει τη δυνατότητα για λιγότερο καταστροφική μέτρηση κατά βάθος όπως και οι υπόλοιπες IBA, είναι δυνατόν να ανιχνεύσει ταυτόχρονα πολλά ελαφρά στοιχεία στο δείγμα και μπορεί εύκολα να ξεχωρίσει τον ^{12}C από τον ^{13}C ακόμα και σε περίπλοκα δείγματα. Συγκεκριμένα, η αντίδραση $^{12}\text{C}(d,p)^{13}\text{C}$ παρουσιάζει υψηλές τιμές ενεργού διατομής, συγκρίσιμες με αυτές της ελαστικής σκέδασης, ενώ είναι πολύ καλά μελετημένη, καθιστώντας την ιδανική για την μέτρηση του ^{12}C . Για την περίπτωση του ^{13}C οι αντιδράσεις $^{13}\text{C}(d,p_0)^{14}\text{C}$, $^{13}\text{C}(d,t_0)^{12}\text{C}$, $^{13}\text{C}(d,a_0)^{11}\text{B}$, $^{13}\text{C}(d,a_1)^{11}\text{B}$ παρουσιάζουν υψηλά θετικά Q-values επιτρέποντας την μέτρηση του από όλες αυτές. Όμως ενώ υπάρχουν διαθέσιμα δεδομένα οι αντιδράσεις αυτές δεν είναι το ίδιο καλά μελετημένες, Επιπλέον, όπου υπάρχουν δύο σετ δεδομένων επιτρέποντας την σύγκριση τους, παρουσιάζονται σημαντικές διαφορές.



Εικόνα 1.5. Διάγραμμα ενεργού διατομής της αντίδρασης $^{13}\text{C}(d,p_0)^{14}\text{C}$ στις 135° από την IBANDL. Τα δεδομένα είναι από τις εργασίες των Colaux et al και Marion et al

Στην εικόνα 1.5 βλέπουμε τα δύο σετ δεδομένων που είναι διαθέσιμα για τις 135° στην αντίδραση $^{13}\text{C}(d,p_0)^{14}\text{C}$. Παρατηρούμε πως τα δύο σετ συμφωνούν στην ενέργεια των δύο κορυφών, αλλά τα δεδομένα των Marion et al υπερεκτιμούν την ενεργό διατομή σε σχέση με αυτά των Colaux et al, ιδιαίτερα στην δεύτερη κορυφή. Στην συνέχεια της εργασίας θα χρησιμοποιήσουμε τα δεδομένα των Colaux et al ως βάση για τον θεωρητικό υπολογισμό των ενεργών διατομών αυτών αντιδράσεων.

Κεφάλαιο 2 Θεωρητική Ανάλυση με R-Matrix

Όπως αναφέρθηκε παραπάνω, ο θεωρητικός υπολογισμός των ενεργών διατομών είναι απαραίτητος για 2 κυρίως λόγους. Η πραγματική ενεργός διατομή μπορεί να παρουσιάζει έντονη γωνιακή εξάρτηση και στενούς συντονισμούς που μπορεί να παραβλεφθούν σε ένα πείραμα μέτρησης ενεργών διατομών λόγω του ενεργειακού βήματος που χρησιμοποιήθηκε ή του πάχους του στόχου. Επίσης, πειραματικά δεδομένα που υπάρχουν στην βιβλιογραφία, όπως δείξαμε για την περίπτωση του ^{13}C μπορεί να καλύπτουν λίγες γωνίες ανίχνευσης και περιορισμένο ενεργειακό εύρος, ενώ εκεί που υπάρχουν παρουσιάζουν συχνά αποκλίσεις. Έτσι, η χρήση των πειραματικών δεδομένων για τη διεξαγωγή θεωρητικών υπολογισμών οδηγεί σε πιο ακριβή δεδομένα τα οποία μπορούν να επεκταθούν σε κάθε γωνία ανίχνευσης και σε ενέργειες για τις οποίες δεν υπάρχουν δεδομένα. Οι θεωρητικοί υπολογισμοί των ενεργών διατομών των αντιδράσεων $^{13}\text{C}(d,p_0)^{14}\text{C}$, $^{13}\text{C}(d,t_0)^{12}\text{C}$, $^{13}\text{C}(d,a_0)^{11}\text{B}$, $^{13}\text{C}(d,a_1)^{11}\text{B}$ που θα μελετηθούν σε αυτήν την εργασία βασίστηκαν στην θεωρία R-Matrix, και υπολογίστηκαν με την χρήση του κώδικα AZURE2. Στη συνέχεια αυτού του κεφαλαίου θα γίνει αρχικά μια επισκόπηση της θεωρίας σκέδασης και της R-Matrix. Θα εξεταστεί η λειτουργία του κώδικα AZURE2, και τέλος θα σχολιαστεί η εφαρμογή του στην περίπτωση των αντιδράσεων του συστήματος $^{13}\text{C}+d$ και θα παρουσιαστούν τα αποτελέσματα που προέκυψαν.

2.1 Θεωρία R-Matrix

Η κεντρική ιδέα της R-Matrix είναι ο διαχωρισμός του χώρου σε δύο περιοχές. Την εσωτερική περιοχή που αντιστοιχεί στον σύνθετο πυρήνα, και την εξωτερική περιοχή που αντιστοιχεί σε όλα τα κανάλια ή δυνατές αντιδράσεις, από τις οποίες μπορεί να σχηματιστεί ο σύνθετος πυρήνας ή προκύπτουν από αυτόν. Το σύνορο μεταξύ των δύο περιοχών ορίζεται την παράμετρο α που είναι η ακτίνα του καναλιού. Αυτή ορίζεται για κάθε κανάλι ξεχωριστά και πρέπει να είναι αρκετά μεγάλη ώστε πέρα από αυτήν, στην εξωτερική περιοχή, οι πυρήνες να αλληλεπιδρούν μόνο με τη δύναμη Coulomb.

Η τυπική σχέση που χρησιμοποιείται για την ακτίνα αλληλεπίδρασης είναι:

$$\alpha = r_0 (A_1^{1/3} + A_2^{1/3}) \quad (2.1)$$

Όπου A_1 , A_2 είναι ο μαζικός αριθμός των πυρήνων που αντιδράνε και r_0 μια σταθερά που παίρνει τιμές στο διάστημα 1.0-1.5 fm

Στην εξωτερική περιοχή, λόγω της απουσίας της πυρηνικής δύναμης μπορεί να υπολογιστεί η κυματοσυνάρτηση αναλυτικά. Αρχικά θα μελετήσουμε για την περίπτωση ενός σωματιδίου χωρίς σπιν.

Το ακτινικό κομμάτι της εξίσωσης Schrödinger για αυτό το πρόβλημα γράφεται ως:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi}{dr^2} + V(r) \phi = E \phi \quad (2.2)$$

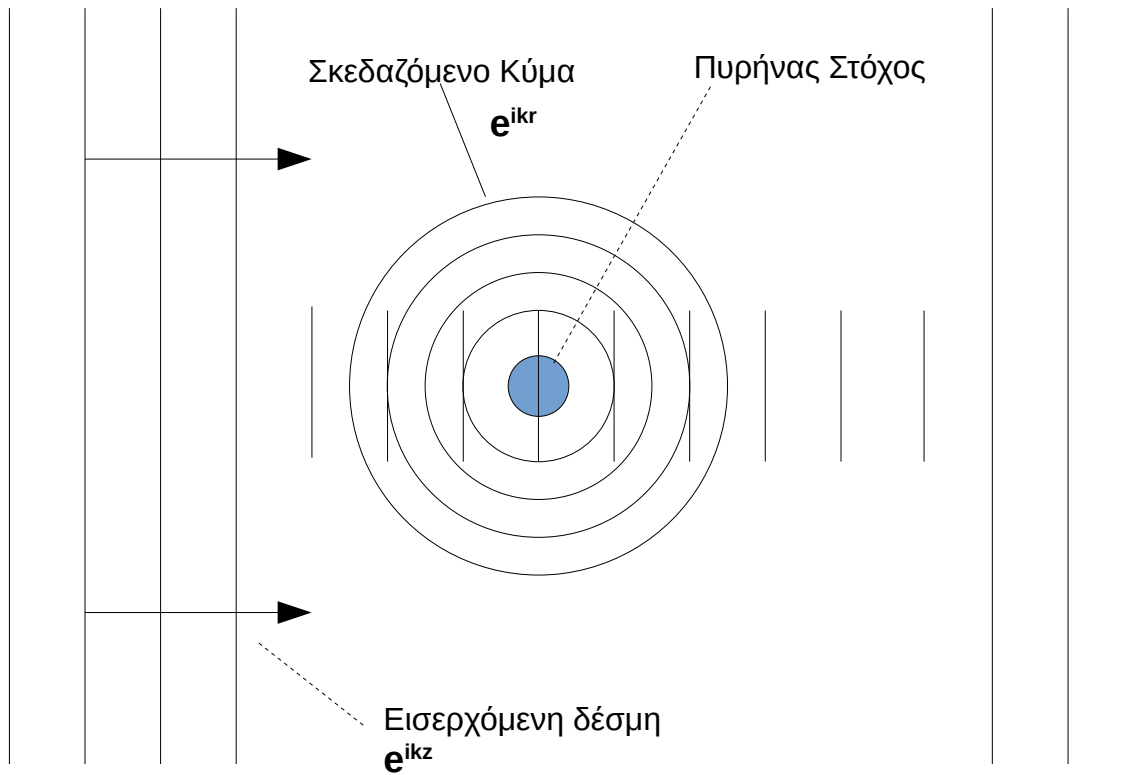
Η εισερχόμενη δέσμη που μεταδίδεται στον άξονα z μπορεί να περιγραφεί από ένα επίπεδο κύμα e^{ikz} με ορμή $p = \hbar k$ όπου k είναι ο κυματαριθμός. Το κύμα σκεδάζεται από ένα κεντρικό δυναμικό V που παράγεται από τον πυρήνα στόχο, οπότε παράγεται ένα εξερχόμενο σφαιρικό κύμα από το κέντρο της αλληλεπίδρασης Αυτό το κύμα είναι της μορφής

$$f(\theta) e^{ikr} \quad (2.3)$$

Έτσι το κύμα μετά την σκέδαση μπορεί να περιγραφεί από την υπέρθεση δύο κυμάτων, του εισερχόμενου επιπέδου και του εξερχόμενου σφαιρικού.

$$e^{ikz} + f(\theta) e^{ikr} \quad (2.4)$$

Όπου $f(\theta)$ είναι το πλάτος του εξερχόμενου κύματος και αναπαριστά την μείωση της ροής.



Εικόνα 2.1: Αναπαράσταση πυρηνικής αντίδρασης που περιγράφεται από την σκέδαση ενός κύματος από ένα κεντρικό δυναμικό.

Το εισερχόμενο επίπεδο κύμα μπορεί να αναλυθεί σε μια υπέρθεση μερικών σφαιρικών κυμάτων γωνιακής στροφορμής l

$$\Psi_{inc} = Ae^{ikz} = Ae^{ikr \cos \theta} = A \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (2.5)$$

Η γωνιακή συνάρτηση j_l είναι οι σφαιρικές συναρτήσεις Bessel που είναι λύσεις του ακτινικού κομματιού της εξίσωσης Schrodinger στην περιοχή μακριά από τον στόχο όπου τα πυρηνικό δυναμικό μηδενίζεται. Η γωνιακές συναρτήσεις P_l είναι τα πολυώνυμα Legendre.

Η ενεργός διατομή ορίζεται να είναι:

$$\sigma = (\theta) = |f(\theta)|^2 \quad (2.6)$$

Παρατηρούμε πως το εισερχόμενο επίπεδο κύμα είναι το άθροισμα ενός εισερχόμενου σφαιρικού κύματος που συγκλίνει προς τον στόχο και ενός εξερχόμενου σφαιρικού κύματος που βγαίνει από τον πυρήνα στόχο, για παράδειγμα, για $l=0$:

$$j_0(kr) = \frac{\sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi\right)}{kr} = 2i \frac{e^{-i(kr)} - e^{i(kr)}}{kr} j_l(kr) = \frac{2i}{kr} (4\pi v)^{1/2} [I - O] \quad (2.7)$$

Όπου $I [\equiv (4\pi v)^{-1/2} e^{-ikr}]$ και $O [\equiv (4\pi v)^{-1/2} e^{ikr}]$ είναι το εισερχόμενο σφαιρικό κύμα και το εξερχόμενο σφαιρικό κύμα αντίστοιχα.

Στη συνέχεια εισάγουμε την μετατόπιση φάσης δ_l και την collision function U_l , που αναφέρονται στην κυματοσυνάρτηση σε μεγάλες αποστάσεις ασυμπτωματικά, η ακτινική λύση για κάθε μερικό κύμα l είναι μια ημιτονοειδής συνάρτηση με μετατοπισμένη φάση. Δηλαδή:

$$\text{ακτινική λύση } (r \rightarrow \infty) \approx A_l \sin(kr + \delta_l) \quad (2.8)$$

το οποίο μας επιτρέπει να γράψουμε την εξωτερική κυματοσυνάρτηση ως:

$$\phi = [I - e^{2i\delta_l} O] = [I - U_l O] \quad r > a \quad (2.9)$$

η οποία ορίζει την collision function ($U_l \equiv \exp(2i\delta_l)$), η οποία μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως εναλλακτική της μετατόπισης φάσης για την παραμετροποίηση της ασυμπτωματικής συμπεριφοράς της κυματοσυνάρτησης. Η αντίστοιχη ενεργός διατομής είναι:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i (1 - U_l) P_l \cos \theta \right|^2 \quad (2.10)$$

και η ολική ενεργός διατομή:

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |1 - U_l|^2 \quad (2.11)$$

Αυτό που μετράται τελικά πειραματικά είναι η ενεργός διατομής, και άρα τα δ_l και U_l . Στη συνέχεια θα αντιστοιχίσουμε αυτές τις παραμέτρους τους εξωτερικού προβλήματος με το εσωτερικό.

Στην εσωτερική περιοχή, δηλαδή για τον πυρήνα, παίρνουμε στάσιμα κύματα για κάθε μερικό κύμα με ακτινική εξίσωση. Η εξίσωση Schrodinger για κάθε μερικό κύμα είναι:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{dX_{\lambda l}^2}{dr^2} \right) + V(r) X_{\lambda l} = E_{\lambda l} X_{\lambda l} \quad (2.12)$$

για την οποία έχουμε τη συνοριακή συνθήκη για $r=a$

$$a_l \left. \frac{dX_{\lambda l}}{dr} \right|_{r=a} = b_l X_{\lambda l}(a_l) \quad (2.13)$$

Όπου b_l είναι ένας πραγματικός αριθμός, και a_l είναι η ακτίνα που έχει διαλεχτεί για κάθε μερικό κύμα για να χωρίζει την εσωτερική από την εξωτερική περιοχή. Επειδή ο b_l είναι πραγματικός, οι X_l μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να αναπτύξουμε οποιαδήποτε συνάρτηση με βάση αυτές. Συγκεκριμένα για την εσωτερική κυματοσυνάρτηση έχουμε:

$$\phi(r) = \sum_{\lambda=0}^{\infty} C_{\lambda l} X_{\lambda l} \quad (2.14)$$

όπου

$$C_{\lambda l} = \int_0^a X_{\lambda l}^*(r) \phi_l(r) dr \quad (2.15)$$

Μια απλή εφαρμογή του θεωρήματος Green μας δίνει την λογαριθμική παράγωγο $\frac{r\phi'}{\phi}$ υπολογισμένη για $r=a$ ως μια σειρά Fourier με τα στάσιμα κύματα $X_{\lambda l}$. Πολλαπλασιάζουμε την (2.2) με $X_{\lambda l}^*(r)$ και την μιγαδική συζυγή της (2.11) με $\phi(r)$, αφαιρούμε και ολοκληρώνουμε για να καταλήξουμε τελικά στην:

$$\left(\frac{\hbar}{2m}\right) [\phi_l X_{\lambda l}^*{}' - X_{\lambda l}^* \phi_l']_{r=a} = (E_l - E_{\lambda l}) \int_0^a \phi_l X_{\lambda l}^* dr \quad (2.16)$$

Που δίνει:

$$C_{\lambda l} = \left(\frac{\hbar}{2ma}\right) \frac{X_{\lambda l}^*(a)}{(E_{\lambda l} - E_l)} [\phi_l'(a) - b\phi_l(a)] \quad (2.17)$$

Και στις δύο περιπτώσεις έχουμε πως $\phi_l' = r \frac{dr\phi}{dr}$

Εισάγοντας την εξίσωση (2.16) στην (2.13) παίρνουμε:

$$\left. \frac{\phi_l'}{\phi_l} \right|_{r=a_l} = \frac{1+b_l R_l}{R_l} \quad (2.18)$$

Για την λογαριθμική παράγωγο της εσωτερικής κυματοσυνάρτησης, όπου η συνάρτηση R ορίζεται ως:

$$R_l = \sum_{\lambda} \frac{\gamma_{\lambda l}^2}{E_{\lambda l} - E_l} \quad (2.19)$$

με τα reduced widths $\gamma_{\lambda l}^2$ του επιπέδου λ να ορίζεται ως:

$$\gamma_{\lambda l}^2 = \left(\frac{\hbar^2}{2ma_l}\right) |X_{\lambda l}(a_l)|^2 \quad (2.20)$$

Εξισώνοντας την εξωτερική λογαριθμική παράγωγο με την εσωτερική στην ακτίνα της αλληλεπίδρασης, μπορούμε να βρούμε λύση του U_l σε όρους της συνάρτησης R

$$U_l = O_l^{-1}(1 - R_l L_l)^{-1}(1 - R_l L_l^*) I_l \quad (2.21)$$

Όπου τα I_l , O_l , L_l αναφέρονται στις εισερχόμενες και εξερχόμενες κυματοσυναρτήσεις της εξωτερικής περιοχής, αλλά τώρα θα πρέπει να συμπεριλάβουμε στην κυματοσυνάρτηση τους όρους του δυναμικού Coulomb και της γωνιακής στροφορμής.

Η εξωτερική κυματοσυνάρτηση δίνεται τώρα από την:

$$\frac{d^2 \phi_l}{dr^2} - \left[\frac{l(l+1)}{r^2} + \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) \left(\frac{-E + Z_1 Z_2 e^2}{r} \right) \right] \phi_l = 0 \quad (2.22)$$

Αυτή η εξίσωση έχει λύσεις, F_l που είναι πεπερασμένες στο $r=0$, και G_l που δεν είναι πεπερασμένες στο $r=0$. Η ασυμπτωτική τους συμπεριφορά για μεγάλα r είναι:

$$F_l \sim \sin \left[kr - \eta \log(2kr) - \left(\frac{1}{2} \right) l\pi + \sigma_l \right] \quad (2.23)$$

και

$$G_l \sim \cos \left[kr - \eta \log(2kr) - \left(\frac{1}{2} \right) l\pi + \sigma_l \right] \quad (2.24)$$

που η μετατόπιση φάσης Coulomb σ_l και η παράμετρος Coulomb η δίνονται από τις:

$$\sigma_l = \arg[1 + l + i\eta] \quad (2.25)$$

και

$$\eta = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v} \quad (2.26)$$

οπότε τώρα έχουμε εισερχόμενα και εξερχόμενα κύματα:

$$I_l = (G_l - iF_l) \exp(i\omega_l) \quad (2.27)$$

και

$$O_l = (G_l + iF_l) \exp(i\omega_l) \quad (2.28)$$

όπου

$$\omega_l = \sum_{n=1}^l \tan\left(\frac{\eta}{n}\right) \quad (2.29)$$

Αυτές δίνουν

$$L_l \equiv \left(\frac{O'_l}{O_l} \right) - b_l \equiv S_l - b_l + iP_l \quad (2.30)$$

Οπότε από αυτούς τους ορισμούς την ασυμπτωτική συμπεριφορά των κυματοσυναρτήσεων παίρνουμε άμεσα the τους ορισμούς της penetration function, P_l , της συνάρτησης μετατόπισης S_l και της μετατόπισης φάσης σκέδασης Ω_l :

$$P_l = \frac{kr}{F_l^2 + G_l^2} \quad (2.31)$$

$$S_l = \frac{(F_l' F_l + G_l' G_l)}{F_l^2 + G_l^2} \quad (2.32)$$

και

$$O_l^{-1} I_l = \exp(2i\Omega_l) \quad (2.33)$$

με

$$\Omega_l = \omega_l - \tan\left(\frac{F_l}{G_l}\right) \quad (2.34)$$

Στην τελευταία σχέση ω_l είναι η μετατόπιση φάσης Coulomb και $-\tan(F_l/G_l)$ είναι η μετατόπιση φάσης σκληρής σφαίρας που από τον διαχωρισμό σε εσωτερικό και εξωτερικό χώρο. Το εσωτερικό δυναμικό υποθέτουμε πως εξαφανίζεται στην εξωτερική περιοχή, και αυτή η απότομη αλλαγή στο σύνορο εισάγει αυτή την αλλαγή φάσης.

Με αυτούς τους ορισμούς έχουμε όσα χρειαζόμαστε για να περιγράψουμε τους συντονισμούς για όλα τα μερικά κύματα για τη σκέδαση δυναμικού ενός σωματιδίου χωρίς σπιν. Αν για κάποιο μερικό κύμα l διαλέξουμε την συνάρτηση R και την εισάγουμε στην collision function (2.21) και στη συνέχεια χρησιμοποιήσουμε αυτήν την collision function στην εξίσωση της ενεργού διατομής (2.10) βρίσκουμε :

$$\sigma = \left(\frac{\pi}{k^2}\right) (2l+1) \left| -\exp(2i\Omega_l) l \left(1 + \frac{i\Gamma_{\lambda l}}{(E_{\lambda l} - E + \Delta_{\lambda l}) - \frac{i}{2}\Gamma_{\lambda l}} \right) \right|^2 \quad (2.35)$$

Όπου έχουμε:

$$\Gamma_{\lambda l} = 2P_l \gamma_{\lambda l} \quad (2.36)$$

και

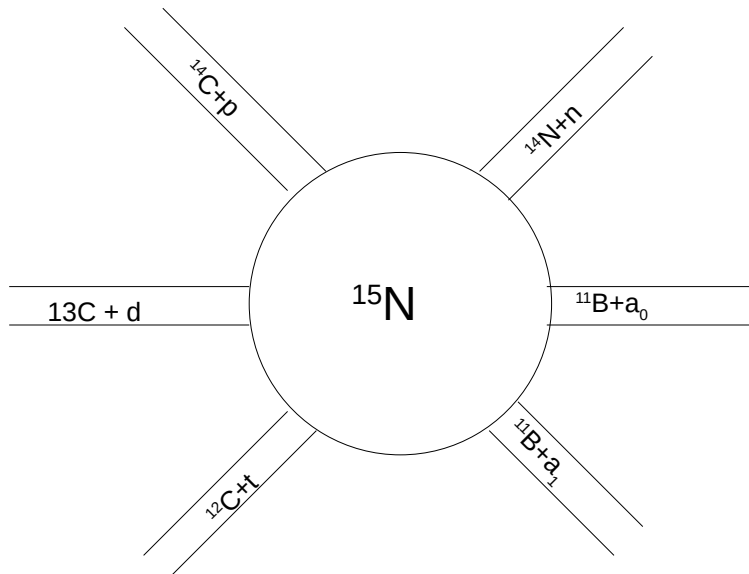
$$\Delta_{\lambda l} = (S_l - b_l) \gamma_{\lambda l}^2 \quad (2.37)$$

Το $\Gamma_{\lambda l}$ είναι το πλάτος του επιπέδου και το $\Delta_{\lambda l}$ είναι η ενεργειακή μετατόπιση του επιπέδου.

Αυτή η ενεργός διατομή περιέχει όλα τα σημαντικά στοιχεία ενός συντονισμού εκτός από τις επιπλοκές που προκύπτουν από την εισαγωγή του σπιν το οποίο έχει αγνοηθεί εδώ, και την εισαγωγή επιπλέον καναλιών αντίδρασης. Στην συνέχεια θα δούμε ακριβώς αυτά ώστε να έχουμε όλο το υπόβαθρο που χρειάζεται για την πρακτική χρήση της θεωρίας της R-Matrix στα υπολογιστικά προγράμματα.

Όπως και πριν θα δείξουμε πως ο collision matrix, του οποίου οι γραμμές και οι στήλες αφορούν κανάλια, συσχετίζεται με την R-Matrix. Για να μπορέσει να γίνει ο πρακτικός υπολογισμός της ενεργού διατομής χρειάζεται να γίνουν μέσα σε αυτό το θεωρητικό πλαίσιο κάποιες προσεγγίσεις. Περιορίζοντας τους υπολογισμούς για λίγα μόνο κανάλια αντίδρασης το πρόβλημα της αντιστροφής του πίνακα R γίνεται διαχειρίσιμο, κάτι το οποίο οδηγεί στην προσέγγιση της R-Matrix με λίγα κανάλια, πολλών επιπέδων (Few channel multi level R-Matrix).

Όπως έχουμε αναφέρει, το πρόβλημα περιγράφεται από το διαχωρισμό του χώρου σε εσωτερικό και εξωτερικό όπως φαίνεται στο σχήμα (2.2). Στον εσωτερικό χώρο σχηματίζεται ο σύνθετος πυρήνας, εδώ ο ^{15}N . Στον εξωτερικό χώρο είναι όλα τα δυνατά κανάλια από τα οποία μπορεί να σχηματιστεί ο σύνθετος πυρήνας ή στα οποία μπορεί να διασπαστεί.



Εικόνα 2.2 Σχηματική αναπαράσταση των διάφορων περιοχών στην θεωρία αντιδράσεων. Ο σύνθετος πυρήνας βρίσκεται στην εσωτερική περιοχή, ενώ στην εξωτερική δείχνονται ένα μικρό πλήθος των καναλιών αντίδρασης.

Τα πολλά κανάλια αντιδράσεων φαίνονται από την εξωτερική κυματοσυνάρτηση. Γράφουμε την ολική κυματοσυνάρτηση ως το άθροισμα των γινομένων της ακτινικής κυματοσυνάρτησης ϕ_c με την κυματοσυνάρτηση του καναλιού ψ_c για κάθε κανάλι c .

$$\Psi = \sum_c \Psi_c \phi_c \quad (2.38)$$

Όπου η κυματοσυνάρτηση του καναλιού είναι:

$$\psi_c = \frac{1}{r_c} \Phi_a \sum_{m_l} \sum_{m_s} (l s m_l m_s | J M_J) i^l i_{l m_l} X_{s m_s} \quad (2.39)$$

όπου Φ_α είναι η κατάσταση της εσωτερικής excitation των δύο σωματιδίων στο κανάλι. Έτσι το κάθε κανάλι c , καθορίζεται από τους κβαντικούς αριθμούς $c \equiv (a, l, s, J, M_J)$. Σημειώνουμε πως:

$$s = I + i, \quad J = l + s \quad (2.40)$$

όπου I, i είναι τα σπιν των δύο σωματιδίων στο κανάλι.

Στον συνολικό χώρο παραμέτρων, η εξίσωση Schrodinger για την πλήρη κυματοσυνάρτηση Ψ είναι:

$$H \Psi = E \Psi \quad (2.41)$$

καθώς και για τις καταστάσεις X_λ

$$H X_\lambda = E X_\lambda \quad (2.42)$$

μαζί με την συνοριακή συνθήκη για κάθε κομμάτι της επιφάνειας καναλιού

$$\left[\frac{(r_c dX_\lambda / dr_c)}{X_\lambda} \right]_{r_c=a_c} = b_c \quad (2.43)$$

Όπως και πριν μπορούμε να αναπτύξουμε τη συνολική κυματοσυνάρτηση πάνω στις καταστάσεις X_λ

$$\Psi = \sum_\lambda C_\lambda X_\lambda \quad (2.44)$$

με συντελεστές

$$C_\lambda = \int X_\lambda^* \Psi dV \quad (2.45)$$

όπου το ολοκλήρωμα επεκτείνεται σε όλο τον εσωτερικό χώρο καταστάσεων.

Και πάλι με χρήση του θεωρήματος Green μπορούμε να υπολογίσουμε τους συντελεστές του αναπτύγματος

$$C_\lambda = \frac{1}{E_\lambda - E} \sum_c \gamma_{\lambda c} (\phi'_c - b_c \phi_c) \frac{\hbar^2}{2m_c a_c} \quad (2.46)$$

Τα reduced widths $\gamma_{\lambda c}$ δίνονται από την σχέση:

$$\gamma = \left(\frac{\hbar^2}{2m_c a_c} \right)^{1/2} \int \Psi_c^* X_\lambda dS \quad (2.47)$$

Υπολογίζοντας την τιμή του αναπτύγματος στην επιφάνεια S υπολογίζουμε την παράγωγο της εσωτερικής κυματοσυνάρτησης στην επιφάνεια του καναλιού με όρους της τιμής της στην επιφάνεια και τελικά τον R-matrix.

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m_c a_c} \right)^{1/2} \phi_c = \sum_{c'} R_{cc'} [\phi'_{c'} - b_{c'} \phi_{c'}] \frac{\hbar^2}{2m_{c'} a_{c'}} \quad (2.48)$$

και

$$R_{cc'} = \sum_\lambda \gamma_{\lambda c} \frac{\gamma_{\lambda c'}}{E_\lambda - E} \quad (2.49)$$

Γράφοντας τώρα την ακτινική συνάρτηση της εξίσωσης (2.38) με όρους εισερχόμενου και εξερχόμενου κύματος όπως στην προηγούμενη ενότητα, η συνολική κυματοσυνάρτηση είναι:

$$\Psi = \sum_c (A_c I_c - B_c O_c) \Psi_c \left(\frac{1}{v_c} \right)^{1/2} \quad (2.50)$$

όπου A_c και B_c είναι αυθαίρετοι συντελεστές. Το εισερχόμενο και εξερχόμενο κύμα έχουν ασυμπτωτική συμπεριφορά όπως στις εξισώσεις (2.22) και (2.23) δηλαδή

$$I_c^* = O_c \approx \exp i \left[k_c r_c - \frac{1}{2} l_c \pi_c - \eta_c \ln(2k_c r_c) \right] \quad (2.51)$$

Ο collision matrix ορίζεται από την σχέση μεταξύ του εισερχόμενου και εξερχόμενου κύμα

$$B_c = \sum_{c'} U_{cc'} A_{c'} \quad (2.52)$$

Δηλαδή ο collision matrix υπολογίζει το εξερχόμενο κύμα από το εισερχόμενο κύμα.

Πολλαπλασιάζοντας την εξίσωση (2.50) με ψ_c^* και ολοκληρώνοντας σε όλη την επιφάνεια των καναλιών S , παίρνουμε:

$$\phi_c = \left(\frac{1}{v_c} \right)^{1/2} [A_c I_c - \sum_{c'} U_{cc'} A_{c'} O_{c'}] \quad (2.53)$$

από όπου έχουμε το εισερχόμενο κύμα στο κανάλι c , να οδηγεί σε εξερχόμενα κύματα σε όλα τα κανάλια. Υπολογίζοντας από αυτήν την εξίσωση την λογαριθμική παράγωγο και ταιριάζοντας αυτήν την λογαριθμική παράγωγο με την εσωτερική κυματοσυνάρτηση από την εξίσωση (2.48) βρίσκουμε τον collision matrix σε όρους του R-Matrix:

$$U_{cc'} = (k_c a_c)^{1/2} O_c^{-1} \sum_{c''} [1 - RL]_{cc''}^{-1} [\delta_{c''c'} - R_{c''c'} L_{c'}^*] I_{c'} (k_{c'} a_{c'})^{-1/2} \quad (2.54)$$

Παρατηρούμε:

$$(k_c a_c)^{1/2} O_c^{-1} l_{c'} (k_{c'} a_{c'})^{-1/2} = \exp [i(\Omega_c + \Omega_{c'})] P_c^{1/2} P_{c'}^{-1/2} \quad (2.55)$$

όπου Ω_c είναι συνδυασμός της μετατόπισης φάσης της σκληρής σφαίρας και του Coulomb που δίνεται από την εξίσωση (2.33) και $L_c \equiv S_c + iP_c$. Τότε το αποτέλεσμα για τον Collision matrix γίνεται:

$$U_{cc'} = \exp(i\Omega_c + \Omega_{c'}) P_c^{1/2} P_{c'}^{-1/2} \sum_{c''} [1 - RL]_{cc''}^{-1} (\delta_{cc''} - R_{c''c'} L_{c'}^*) \quad (2.56)$$

Αυτή είναι η μορφή του collision matrix στην few channel many levels προσέγγιση της θεωρίας. Και είναι αυτή που βολεύει περισσότερο για χρήση σε προγράμματα R-Matrix. Λόγω της αντιστροφής πινάκων που χρειάζεται για την εξαγωγή του collision matrix η σχέση αυτή είναι εύχρηστη μόνο όταν περιοριζόμαστε σε λίγα κανάλια αντίδρασης

Η σχέση μεταξύ του collision matrix και του R-matrix μας δίνει όλες τις πληροφορίες για την φύση της πυρηνικής φυσικής που περιέχεται στις αντιδράσεις. Πειραματικά όμως αυτό που μας ενδιαφέρει για τις μετρήσεις είναι ο υπολογισμός της ενεργού διατομής. Ο υπολογισμός αυτός είναι σχετικά απλός, αλλά περιλαμβάνει πολλούς υπολογισμούς που ξεφεύγουν από τα πλαίσια αυτής της εργασίας και θα

αναφέρουμε κατευθείαν το τελικό αποτέλεσμα. Η τελική μορφή της διαφορικής ενεργού διατομής για ένα ζεύγος σωματιδίων α , με σπιν καναλιού s , που καταλήγει στο ζεύγος αντίδρασης, α' , με σπιν καναλιού, s' είναι:

$$d\sigma_{\alpha's';as} = \frac{(k_a)^{-2}}{(2s+1)} \sum_{L=0}^{\infty} B_L(\alpha's';as) P_L(\cos\theta) d\Omega \quad (2.57)$$

όπου

$$\begin{aligned} B_L(\alpha's';as) &= \frac{(-1)^{s'-s}}{4} \sum_{J_1} \sum_{J_2} \sum_{l_1} \sum_{l_2} \sum_{l_1'} \sum_{l_2'} \\ &\times i^{l_1-l_2-L} Z(l_1, J_1 l_2 J_2 s L) i^{l_1'-l_2'-L} Z(l_1', J_1 l_2' J_2 s' L) \\ &\times \text{R.P.} \left[\left(\delta_{\alpha\alpha'} \delta_{l_1 l_1'} \delta_{s s'} - U_{\alpha's'l_1'} \right)^* \left(\delta_{\alpha'\alpha} \delta_{s's} \delta_{l_2 l_2'} - U_{\alpha's'l_2'} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.58)$$

Η διαφορική ενεργός διατομή μπορεί να ολοκληρωθεί σε όλες τις γωνίες και μας δίνει την ολική ενεργό διατομή για κάθε κανάλι.

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha's';as} &= \frac{4\pi}{(2s+1)k_a^2} B_0(\alpha's';as) \\ &= \frac{\pi}{(2s+1)k_a^2} \sum_{J=0}^{\infty} \sum_{l=|J-s|}^{J+s} \sum_{l'=|J-s'|}^{J+s'} (2J+1) \left| \delta_{\alpha'\alpha} \gamma_{s's} \delta_{l'l'} - U_{\alpha's'l';asl}^J \right|^2 \end{aligned} \quad (2.59)$$

Και τέλος με άθροισμα σε όλα τα εξερχόμενα κανάλια $\alpha' s'$ υπολογίζεται η συνολική ενεργός διατομή

$$\begin{aligned} \sigma_T(\alpha l) &\equiv \sum_{s, \alpha', s', l'} \frac{(2s+1)}{(2l+1)(2i+1)} \sigma_{\alpha's'l';asl} \\ &= \frac{\pi}{(2l+1)(2i+1)k_a^2} \sum_{J=0}^{\infty} (2J+1) 2 \text{R.P.} [1 - U_{\alpha, s, l; asl}^J] \end{aligned} \quad (2.60)$$

2.2 Ο κώδικας AZURE2

Ο AZURE2 είναι ένας γενικός κώδικας R-Matrix που σχεδιάστηκε κυρίως για εφαρμογές στην πυρηνική αστροφυσική. Είναι ικανός να χειριστεί πολλά κανάλια και πολλά επίπεδα και χρησιμοποιείται για την μοντελοποίηση πυρηνικών αντιδράσεων χαμηλής ενέργειας, που μπορεί να περιλαμβάνουν φορτισμένα σωματίδια, ακτίνες γ , και νετρόνια. Ο κώδικας εστιάζεται στην εύρεση ενεργειακών επιπέδων και μερικών πλατών (partial widths) από τα πειραματικά δεδομένα. Από τις παραμέτρους μπορεί να υπολογίσει την ενεργό διατομή μιας αντίδρασης και να προεκτείνει τα αποτελέσματα σε μεγαλύτερη ενεργειακή περιοχή ή ενδιάμεσες γωνίες, όπου δεν υπάρχουν πειραματικά δεδομένα.

Ο κώδικας επιτρέπει στον χρήστη να εισάγει όλα τα δεδομένα που χρειάζεται για τον υπολογισμό των ενεργών διατομών, να ελέγξει την εκτέλεση του κώδικα και να σχεδιάσει τα αποτελέσματα σε ένα εύχρηστο γραφικό περιβάλλον με σκοπό να είναι φιλικό προς τον χρήστη.

Ο χρήστης έχει την επιλογή να διαλέξει τον φορμαλισμό που θα χρησιμοποιηθεί για τους υπολογισμούς, είτε R-Matrix ή A-Matrix. Οι δύο φορμαλισμοί παράγουν ισοδύναμα αποτελέσματα με τη διαφορά στον χρόνο υπολογισμού. Ο R-Matrix χρησιμοποιείται για την περίπτωση λίγων καναλιών και πολλών επιπέδων και ο A-Matrix για πολλά κανάλια και λίγα επίπεδα.

Ο κώδικας AZURE2 χρειάζεται τα παρακάτω inputs για την παραμετροποίηση του σύνθετου πυρήνα και τον υπολογισμό της ενεργού διατομής:

1) Particle Pairs: Τα ζεύγη σωματιδίων εισόδου και ζεύγη σωματιδίων εξόδου της αντίδρασης προς μελέτη, συμπεριλαμβάνοντας τις πληροφορίες για τον ατομικό και μαζικό αριθμό, το J^π , την ενέργεια διαχωρισμού, την πιθανή ενέργεια διέγερσης στην οποία βρίσκεται το σωματίδιο, και την ακτίνα του καναλιού. Στην εργασία αυτή χρησιμοποιήθηκαν το κανάλι εισόδου $^{13}\text{C}+d$, και τα κανάλια εξόδου $^{14}\text{C}+p$ $^{12}\text{C}+t$ $^{11}\text{B}+\alpha_0$ $^{11}\text{B}+\alpha_1$ $^{14}\text{N}+n$.

2) Καταστάσεις του σύνθετου πυρήνα, που περιέχουν τις ενέργειες διέγερσης και το spin-parity της κάθε κατάστασης. Ένα σημαντικό χαρακτηριστικό για την εφαρμογή της θεωρίας R-matrix στον κώδικα είναι πως για τον ακριβή υπολογισμό της ενεργού διατομής, πρέπει να συμπεριληφθούν όλα τα ενεργειακά επίπεδα του σύνθετου πυρήνα για να ληφθούν υπόψη όλες οι δυνατές ιδιοσυναρτήσεις, το οποίο όμως θα ήταν πρακτικά και υπολογιστικά αδύνατον. Αυτό αντιμετωπίζεται στον κώδικα AZURE συμπεριλαμβάνοντας όλα τα επίπεδα του σύνθετου πυρήνα για την ενεργειακή περιοχή που ενδιαφέρει και προσθέτοντας ένα συντονισμό υποβάθρου για κάθε σχετική ομάδα j^π σε μια μεγαλύτερη ενέργεια για να προσομοιώσει της ουρές των συντονισμών στις μεγαλύτερες ενέργειες.

3) Τα κανάλια αντίδρασης για κάθε επίπεδο. Ο κώδικας AZURE2 χρησιμοποιεί τα spin-parity της κάθε κατάστασης μαζί με το spin του ζεύγους σωματιδίου για να υπολογίσει όλα τα διαθέσιμα κανάλια μαζί με το spin και την στροφορμή τους.

File | Configure

Particle Pairs | Levels and Channels | Segments | Experimental Effects | Calculate | Plot

| | Light Particle | Light Spin | Light g-Factor | Heavy Particle | Heavy Spin | Heavy g-Factor | Excitation Energy | Separation Energy | Channel Radius |
|---|----------------|------------|----------------|-----------------|------------|----------------|-------------------|-------------------|----------------|
| 1 | ^2H | 1+ | 0 | ^{12}C | 1/2- | 0 | 0 | 16.159 | 5.05 |
| 2 | ^3H | 1/2+ | 0 | ^{12}C | 0+ | 0 | 0 | 14.848 | 5.22 |
| 3 | ρ | 1/2+ | 0 | ^{14}C | 0+ | 0 | 0 | 10.207 | 4.77 |
| 4 | α | 0+ | 0 | ^{11}B | 3/2- | 0 | 0 | 10.991 | 5.34 |
| 5 | α | 0+ | 0 | ^{11}B | 1/2- | 0 | 2.125 | 13.116 | 5.34 |
| 6 | n | 1/2+ | 0 | ^{14}N | 1+ | 0 | 0 | 10.2 | 4.77 |

Edit a Particle Pair ? X

Particle Pair Type: Particle, Particle

| | | | | |
|----------------|----------|--------|---------|--------|
| Light Particle | J: 1 | Z: 1 | M: 2 | g: 0 |
| Heavy Particle | J: 0,5 | Z: 6 | M: 13 | g: 0 |

Channel Properties

Excitation Energy [MeV]: 0

Separation Energy [MeV]: 16.159

Channel Radius [fm]: 5.05

Cancel Accept

Go to Settings to activate Windows.

Εικόνα 2.3 Το γραφικό περιβάλλον του AZURE2. Στην εικόνα φαίνεται η καρτέλα για τα ζεύγη σωματιδίων με τις παραμέτρους που χρησιμοποιήθηκαν σε αυτήν την εργασία.

File | Configure | Particle Pairs | Levels and Channels | Segments | Experimental Effects | Calculate | Plot

Compound Nucleus Levels

| Include? | Fix? | Level Spin | Energy [MeV] |
|-------------------------------------|-------------------------------------|------------|--------------|
| <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | 7/2- | 16.46 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | 3/2- | 16.59 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | 1/2+ | 16.67 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | 5/2- | 16.8 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | 3/2+ | 16.91 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | 7/2- | 17.07 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | 5/2+ | 17.12 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | 3/2+ | 17.15 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | 5/2- | 17.23 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | 5/2+ | 17.37 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | 3/2+ | 17.58 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | 3/2+ | 17.67 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | 1/2- | 25 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | 1/2+ | 25 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | 3/2- | 25 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | 3/2+ | 25 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | 5/2- | 25 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | 5/2+ | 25 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | 7/2- | 25 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | 7/2+ | 25 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | 9/2- | 25 |

Channels in Selected Level

| Fix? | Channel Pair | s | l |
|-------------------------------------|--|-----|---|
| <input type="checkbox"/> | $^{13}\text{C}+^2\text{H}$ [0.000 MeV] | 1/2 | 1 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | $^{13}\text{C}+^2\text{H}$ [0.000 MeV] | 3/2 | 1 |
| <input type="checkbox"/> | $^{13}\text{C}+^2\text{H}$ [0.000 MeV] | 3/2 | 3 |
| <input type="checkbox"/> | $^{12}\text{C}+^3\text{H}$ [0.000 MeV] | 1/2 | 2 |
| <input type="checkbox"/> | $^{14}\text{C}+p$ [0.000 MeV] | 1/2 | 2 |
| <input type="checkbox"/> | $^{11}\text{B}+d$ [0.000 MeV] | 3/2 | 1 |
| <input type="checkbox"/> | $^{11}\text{B}+d$ [0.000 MeV] | 3/2 | 3 |
| <input type="checkbox"/> | $^{11}\text{B}+d$ [2.125 MeV] | 1/2 | 1 |
| <input type="checkbox"/> | $^{14}\text{N}+n$ [0.000 MeV] | 1/2 | 2 |
| <input type="checkbox"/> | $^{14}\text{N}+n$ [0.000 MeV] | 3/2 | 0 |
| <input type="checkbox"/> | $^{14}\text{N}+n$ [0.000 MeV] | 3/2 | 2 |

Channel Configuration

4 Maximum Orbital Momentum
 1 Maximum Gamma Multipolarity
 1 Maximum Gamma Multipolarities Per Decay

Channel Details (select from list to view):

17.15 MeV level with spin 3/2+ transitioning via pair key #1
 Channel configuration is
 $s = 3/2, l = 1$

Light Particle Spin: 1+
 Light Particle 2: 1
 Light Particle M: 2
 Light Particle G: 0
 Heavy Particle Spin: 1/2-
 Heavy Particle 2: 6
 Heavy Particle M: 13
 Heavy Particle G: 0
 Excitation Energy: 0
 Separation Energy: 16.159
 Channel Radius: 5.05

Partial Width: 50000 eV

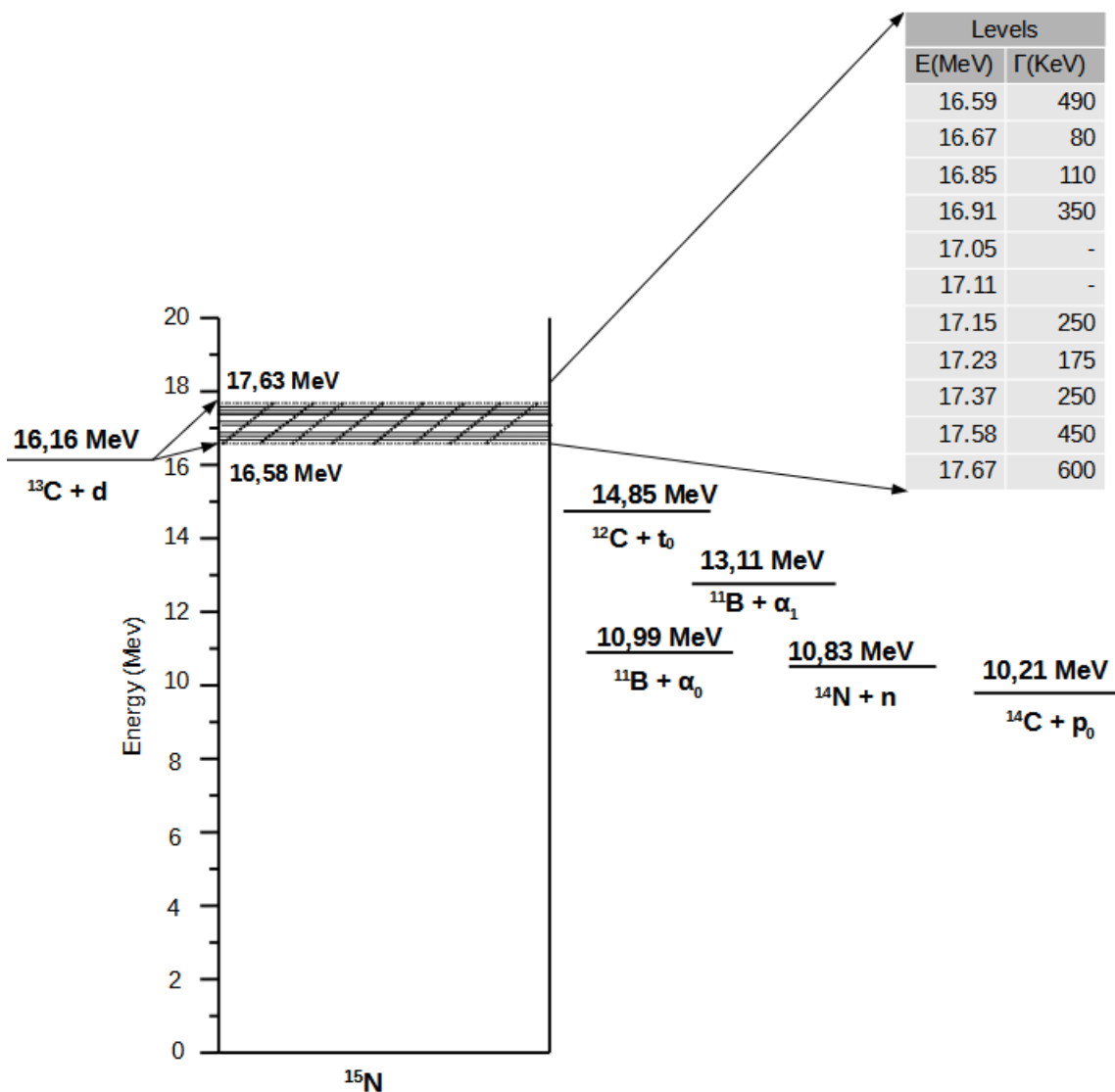
Activate Windows
 Get Settings to activate Windows.

Εικόνα 2.4 Η καρτέλα των επιπέδων και καναλιών αντίδρασης του AZURE2

2.3 Ανάλυση δεδομένων και παρουσίαση αποτελεσμάτων

Όπως αναφέραμε, για την ανάλυση χρησιμοποιήσαμε το ζεύγος $^{13}\text{C}+d$ ως κανάλι εισόδου και τα ζεύγη $^{14}\text{C}+p$ $^{12}\text{C}+t$ $^{11}\text{B}+\alpha_0$ $^{11}\text{B}+\alpha_1$ $^{14}\text{N}+n$ ως κανάλια εξόδου σε ενεργειακό εύρος 0.49-1.65 MeV που αντιστοιχεί σε ενέργεια του σύνθετου πυρήνα ^{15}N 16.58-17.63 MeV, με ενεργειακό βήμα 25 ή 50 keV, και γωνίες σκέδασης 135° 150° 165° . Στην εικόνα 2.5 φαίνεται το ενεργειακό διάγραμμα του σύνθετου πυρήνα.

Εικόνα
2.5



Ενεργειακό διάγραμμα του σύνθετου πυρήνα ^{15}N

Στο διάγραμμα φαίνονται τα ενεργειακά επίπεδα του σύνθετου πυρήνα ^{15}N που προκύπτει από τις αντιδράσεις $d+^{13}\text{C}$ για την ενεργειακή περιοχή την οποία διεγείρουμε, στο σύστημα του κέντρου μάζας. Λόγω της μεγάλης ενέργειας διαχωρισμού του δευτερίου από το ^{15}N (16.159 MeV) ο σύνθετος πυρήνας βρίσκεται σε μεγάλες ενέργειες όπου υπάρχουν πολλά αλληλεπικαλυπτόμενα επίπεδα χωρίς να είναι σε όλα γνωστά τα J^π ή ακόμα και τα πλάτη των συντονισμών. Οι πληροφορίες για τις ενέργειες των επιπέδων, τα J^π , και τα πλάτη είναι από την ιστοσελίδα του National Nuclear Data Center. Λόγω

των πολλαπλών καναλιών που είναι ανοιχτά σε όλη την ενεργειακή περιοχή των δεδομένων το κανάλι $^{14}\text{N}+n$ παρόλο που δεν υπάρχουν δεδομένα για αυτό, είναι αναγκαίο να συμπεριληφθεί για να περιορίζει την επίδραση του ολικού Γ στα υπόλοιπα κανάλια. Αυτή η επιλογή δεν είναι χωρίς ενδιαφέρον καθώς λόγω interference μπορεί το κανάλι που διαλέγουμε, δηλαδή τα l,s καθώς και εναλλακτικές αντιδράσεις όπως $(d,p1)$ $(d,p2)$ $(d,p3)$, να επηρεάσει τα υπόλοιπα κανάλια.

Στο κανάλι εισόδου που μελετήθηκε προστίθεται το σπιν του στόχου $^{13}\text{C } I_2 = 1/2^-$ μαζί με το σπιν των δευτερίων $I_1 1^+$ φτιάχνοντας συνολικό σπιν $s = 1/2$ ή $3/2$. Αυτό το σπιν μαζί με την γωνιακή στροφορμή συνδυάζονται για να φτιάξουν το σπιν του της ενεργειακής κατάστασης του σύνθετου πυρήνα. Αντίστοιχα, για τα κανάλια εξόδου, τα πρωτόνια και τρίτια έχουν $I_1 1/2^+$ και οι αντίστοιχοι πυρήνες ^{12}C και $^{14}\text{C } I_2 = 0^+$, τα σωματίδια α $I_1 = 0^+$ και ο πυρήνας ^{11}B έχει $I_2 = 3/2^-$ στην θεμελιώδη κατάσταση και $1/2^-$ στην πρώτη διεγερμένη. Στον πίνακα 1 βλέπουμε όλους τους δυνατούς συνδυασμούς l,s για κάθε J^π μέχρι και $7/2$ που χρησιμοποιήθηκε σε αυτήν την εργασία. Η γωνιακή στροφορμή περιορίστηκε για κάθε κανάλι σε τιμές $l \leq 4$

| J^π | $d+^{13}\text{C}$ | | $p+^{14}\text{C}$ | | $t + ^{12}\text{C}$ | | $\alpha_0 + ^{11}\text{B}$ | | $\alpha_1 + ^{11}\text{B}$ | | $n + ^{14}\text{N}$ | |
|---------|-------------------|-----|-------------------|-----|---------------------|-----|----------------------------|-----|----------------------------|-----|---------------------|-----|
| | l | s | l | s | l | s | l | s | l | s | l | s |
| $1/2^+$ | 1 | 1/2 | 0 | 1/2 | 0 | 1/2 | 1 | 3/2 | 1 | 1/2 | 0 | 1/2 |
| | 1 | 3/2 | | | | | | | | | 2 | 3/2 |
| $1/2^-$ | 0 | 1/2 | 1 | 1/2 | 1 | 1/2 | 2 | 3/2 | 0 | 1/2 | 1 | 1/2 |
| | 2 | 3/2 | | | | | | | | | 1 | 3/2 |
| $3/2^+$ | 1 | 1/2 | 2 | 1/2 | 2 | 1/2 | 1 | 3/2 | 1 | 1/2 | 2 | 1/2 |
| | 1 | 3/2 | | | | | 3 | 3/2 | | | 0 | 3/2 |
| | 3 | 3/2 | | | | | | | | | 2 | 3/2 |
| $3/2^-$ | 2 | 1/2 | 1 | 1/2 | 1 | 1/2 | 0 | 3/2 | 2 | 1/2 | 1 | 1/2 |
| | 0 | 3/2 | | | | | 2 | 3/2 | | | 1 | 3/2 |
| | 2 | 3/2 | | | | | | | | | 3 | 3/2 |
| $5/2^+$ | 3 | 1/2 | 2 | 1/2 | 2 | 1/2 | 1 | 3/2 | 3 | 1/2 | 2 | 1/2 |
| | 1 | 3/2 | | | | | 3 | 3/2 | | | 2 | 3/2 |
| | 3 | 3/2 | | | | | | | | | 4 | 3/2 |
| $5/2^-$ | 2 | 1/2 | 3 | 1/2 | 3 | 1/2 | 2 | 3/2 | 2 | 1/2 | 3 | 1/2 |
| | 4 | 3/2 | | | | | 4 | 3/2 | | | 1 | 3/2 |
| | 4 | 3/2 | | | | | | | | | 3 | 3/2 |
| $7/2^+$ | 3 | 1/2 | 4 | 1/2 | 4 | 1/2 | 3 | 3/2 | 3 | 1/2 | 4 | 1/2 |
| | 3 | 3/2 | | | | | | 3/2 | | | 2 | 3/2 |
| $7/2^-$ | 4 | 1/2 | 3 | 1/2 | 3 | 1/2 | 2 | 3/2 | 4 | 1/2 | 3 | 1/2 |
| | 2 | 3/2 | | | | | 4 | 3/2 | | | 3 | 3/2 |
| | 4 | 3/2 | | | | | | | | | | |

Πίνακας 1: Κανάλια αντιδράσεων για J επιπέδου $\leq 7/2$ και $l \leq 4$

Στο ελαστικό κανάλι επιπλέον, λόγω της σχετικής χαμηλής ενέργειας των δευτερίων $E_d \leq 1.65 \text{ MeV}$, η μέγιστη τιμή της γωνιακής στροφορμής που χρησιμοποιήθηκε ήταν $l=2$. Παρατηρούμε πως στα

κανάλια $p+^{14}\text{C}$, $t + ^{12}\text{C}$ και $\alpha_1 + ^{11}\text{B}$ για κάθε J^π παρουσιάζουν μόνο ένα πιθανό συνδυασμό (l,s) οπότε και τα κανάλια εξόδου καθορίζονται πλήρως από αυτό.

Η ακτίνα καναλιού είναι παράμετρος του μοντέλου και δεν αντιστοιχεί σε πραγματική πυρηνική ακτίνα και για αυτό είναι σημαντικό να εκτιμηθεί η επίδραση της πάνω στην ενεργό διατομή. Στην περίπτωση αυτή βρέθηκε πως η αυξομείωση της ακτίνας για κάθε κανάλι δεν επηρεάζει σημαντικά την ενεργό διατομή και έτσι σε όλα τα κανάλια πήρε τελικά την τιμή $a = 1.4(A_1^{1/3} + A_2^{1/3}) \text{ fm}$

Έξτρα πόλοι υποβάθρου συμπεριλήφθηκαν για κάθε J^π που χρησιμοποιήθηκε σε ενέργεια 25 MeV για να ληφθεί υπόψη η συνεισφορά των σταθμών στις μεγαλύτερες ενέργειες.

Στον πίνακα 2 παρατίθενται όλες οι παράμετροι που χρησιμοποιήθηκαν μαζί με τις αντίστοιχες τιμές της βιβλιογραφίας όπου υπάρχουν. Υπάρχει μια πολύ καλή συμφωνία με τις τιμές της βιβλιογραφίας, με τις μεγαλύτερες αποκλίσεις στα Γ , E να παρατηρούνται στις χαμηλότερες ενέργειες στις οποίες όπως θα δούμε λόγω της σημαντικά χαμηλότερης ενεργού διατομής ήταν πιο δύσκολο να βρεθεί η συνεισφορά τους.

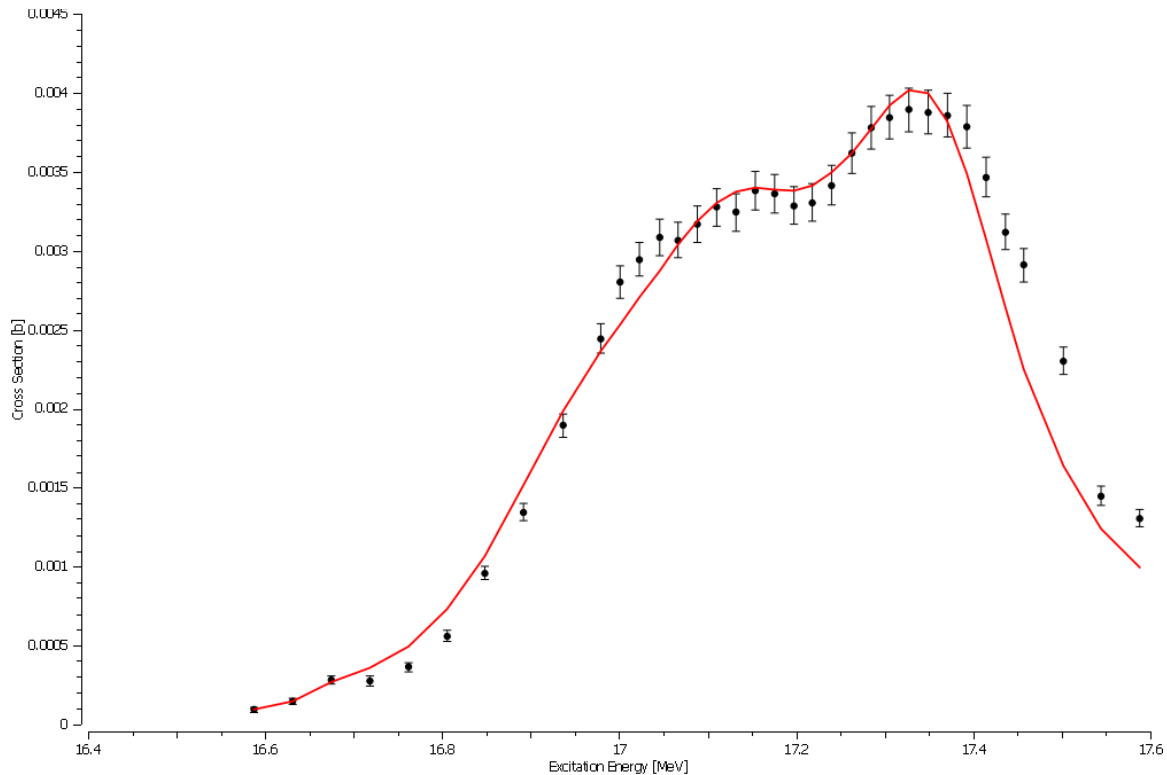
| Βιβλιογραφία | | | Σε αυτήν την εργασία | | | | | | | |
|---------------------|--------|-------------|----------------------------|--------|---------|----------------------------|---------------------------|--------------------|---------------------------|--------------------|
| Αριθμός Συντονισμού | E(MeV) | J^π | $\Gamma_{\text{ολ}}$ (keV) | E(MeV) | J^π | $\Gamma_{\text{ολ}}$ (keV) | Γ_{d} (keV) | (l,s) _d | Γ_{p} (keV) | (l,s) _p |
| 1 | 16,59 | 3/2- | 490 | 16,59 | 3/2- | 490 | 7 | (2,1/2) | 3 | (1,1/2) |
| 2 | 16,67 | 1/2+ | 80 | 16,67 | 1/2+ | 134 | 20 | (1,1/2) | 1 | (0,1/2) |
| 3 | 16,85 | 5/2 | 110 | 16,8 | 5/2- | 112 | 5 | (2,3/2) | 0 | - |
| 4 | 16,91 | - | 350 | 16,91 | 3/2+ | 310 | 25 | (1,1/2) | 38 | (2,1/2) |
| 5 | 17,05 | - | - | 17,07 | 7/2- | 305 | 20 | (2,3/2) | 30 | (3,1/2) |
| 6 | 17,11 | - | - | 17,12 | 5/2+ | 480 | 100 | (1,3/2) | 0 | - |
| 7 | 17,15 | (1/2+,3/2+) | 250 | 17,15 | 3/2+ | 250 | 50 | (1,3/2) | 40 | (2,1/2) |
| 8 | 17,23 | - | 175 | 17,23 | 5/2- | 208 | 35 | (2,3/2) | 3 | (3,1/2) |
| 9 | 17,37 | - | 250 | 17,37 | 5/2+ | 245 | 25 | (1,3/2) | 45 | (2,1/2) |
| 10 | 17,58 | 3/2+ | 450 | 17,58 | 3/2+ | 450 | 50 | (1,1/2) | 0 | - |
| 11 | 17,67 | 3/2+ | 600 | 17,67 | 3/2+ | 600 | 150 | (1,3/2) | 0 | - |

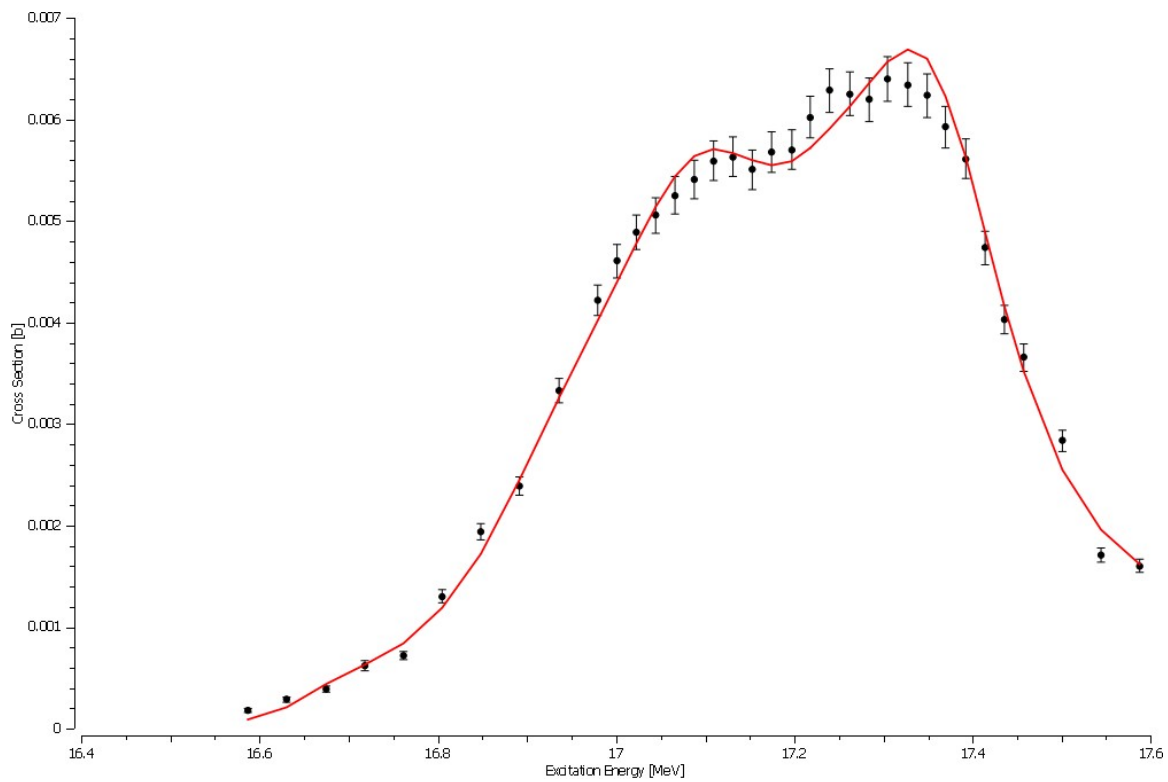
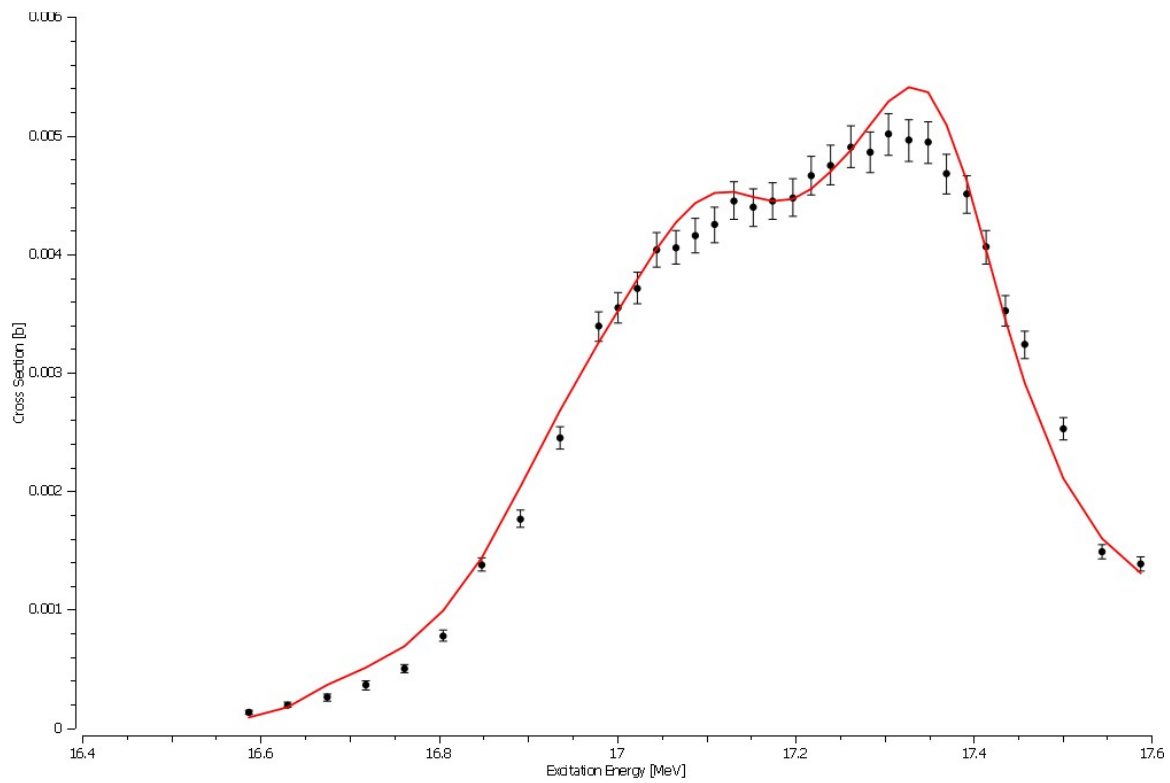
Σε αυτήν την εργασία

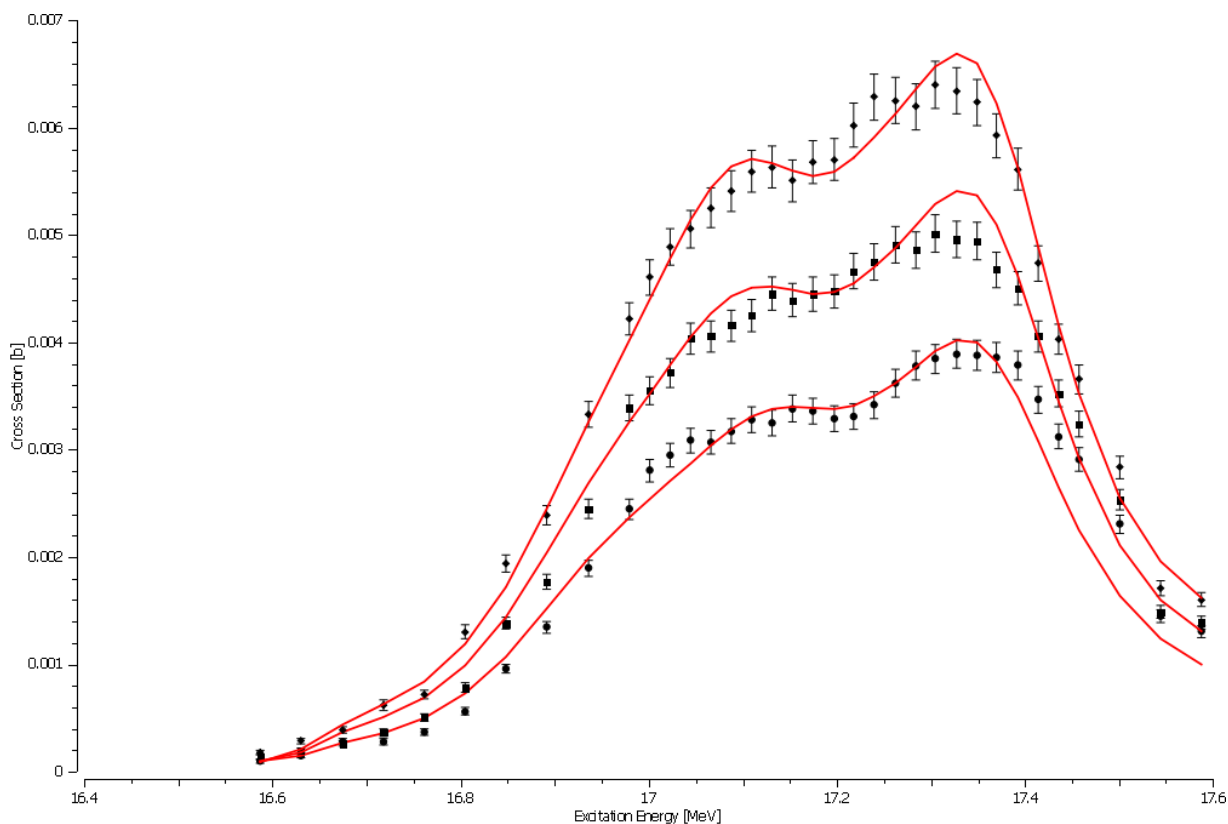
| Αριθμός Συντονισμού | Γ_t (keV) | $(l,s)_t$ | $\Gamma_{\alpha 0}$ (keV) | $(l,s)_{\alpha 0}$ | $\Gamma_{\alpha 1}$ (keV) | $(l,s)_{\alpha 1}$ | Γ_n (keV) | $(l,s)_n$ |
|------------------------|------------------|-----------|---------------------------|--------------------|---------------------------|--------------------|------------------|--------------------|
| 1 | 7 | (1,1/2) | 23 | (0,3/2) | 6 | (2,1/2) | 444 | (3,3/2) |
| 2 | 3 | (0,1/2) | 20 | (1,3/2) | 7 | (1,1/2) | 83 | (2,3/2) |
| 3 | 0 | - | 0 | - | 7 | (2,1/2) | 100 | (1,3/2) |
| 4 | 50 | (2,1/2) | 50 | (3,3/2) | 7 | (1,1/2) | 140 | (0,3/2) |
| 5 | 25 | (3,1/2) | 0 | - | 0 | - | 230 | (3,3/2) |
| 6 | 15 | (2,1/2) | 145 | (1,3/2) | 10 | (3,1/2) | 210 | (2,3/2) |
| 7 | 0 | - | 40 | (3,3/2) | 10 | (1,1/2) | 110 | (2,3/2) |
| 8 | 13 | (3,1/2) | 3 | (2,3/2) | 4 | (2,1/2) | 150 | (1,3/2) |
| 9 | 17 | (2,1/2) | 60 | (3,3/2) | 0 | - | 98 | (4, 3/2) |
| 10 | 40 | (2,1/2) | 0 | - | 0 | - | 290 60 | (0,3/2) (2,3/2) |
| 11 | 150 | (2,1/2) | 220 | (3,3/2) | 50 | (1,1/2) | 30 | (0,3/2) |

Πίνακας 2: Παράμετροι R-Matrix που χρησιμοποιήθηκαν για την εξαγωγή της θεωρητικής ενεργού διατομής με της αντίστοιχες τιμές της βιβλιογραφίας.

Στις εικόνες 2.6-2.9 φαίνονται τα αποτελέσματα που προέκυψαν από την ανάλυση για κάθε μια από τις 4 αντιδράσεις τα οποία και θα σχολιασθούν στην συνέχεια.

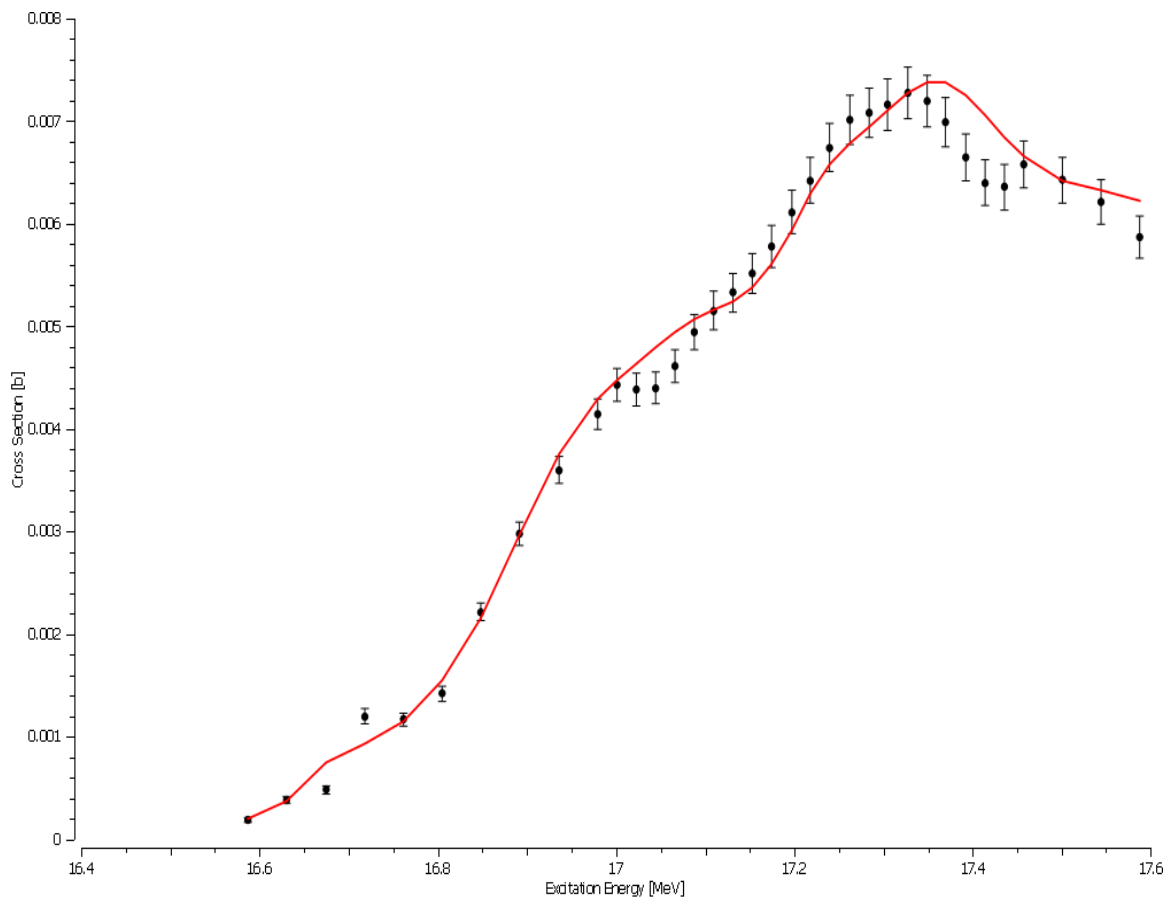
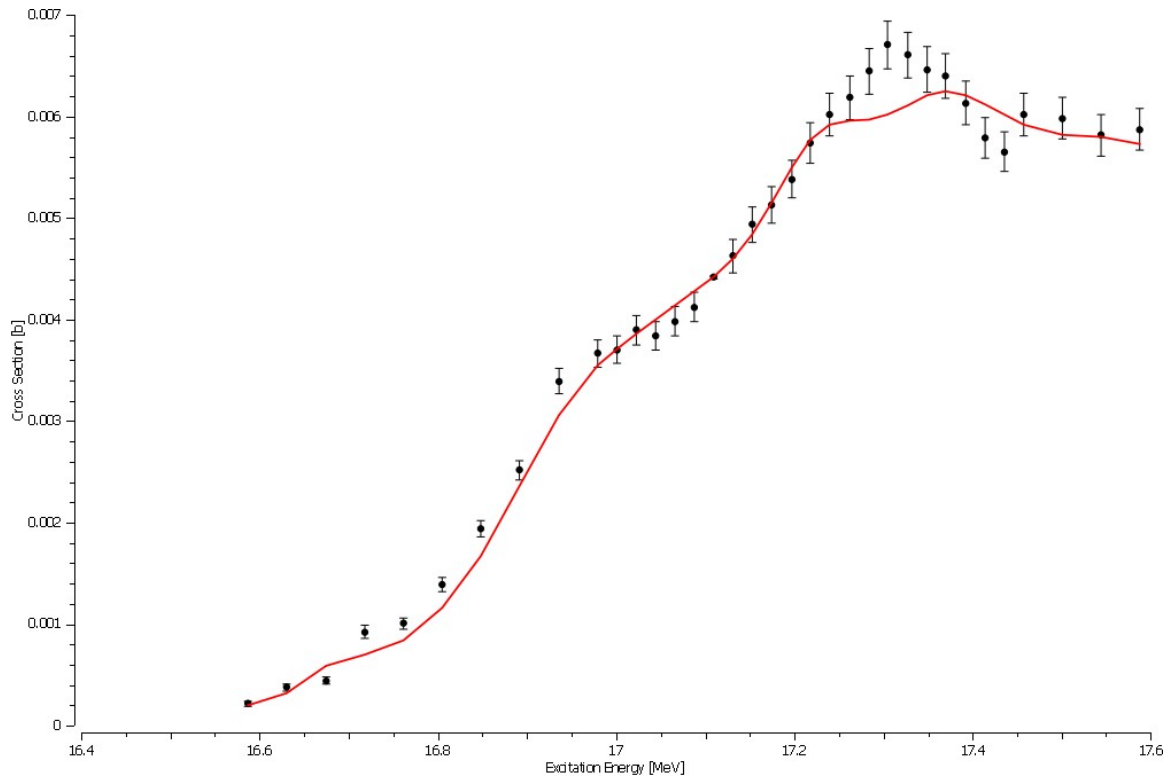


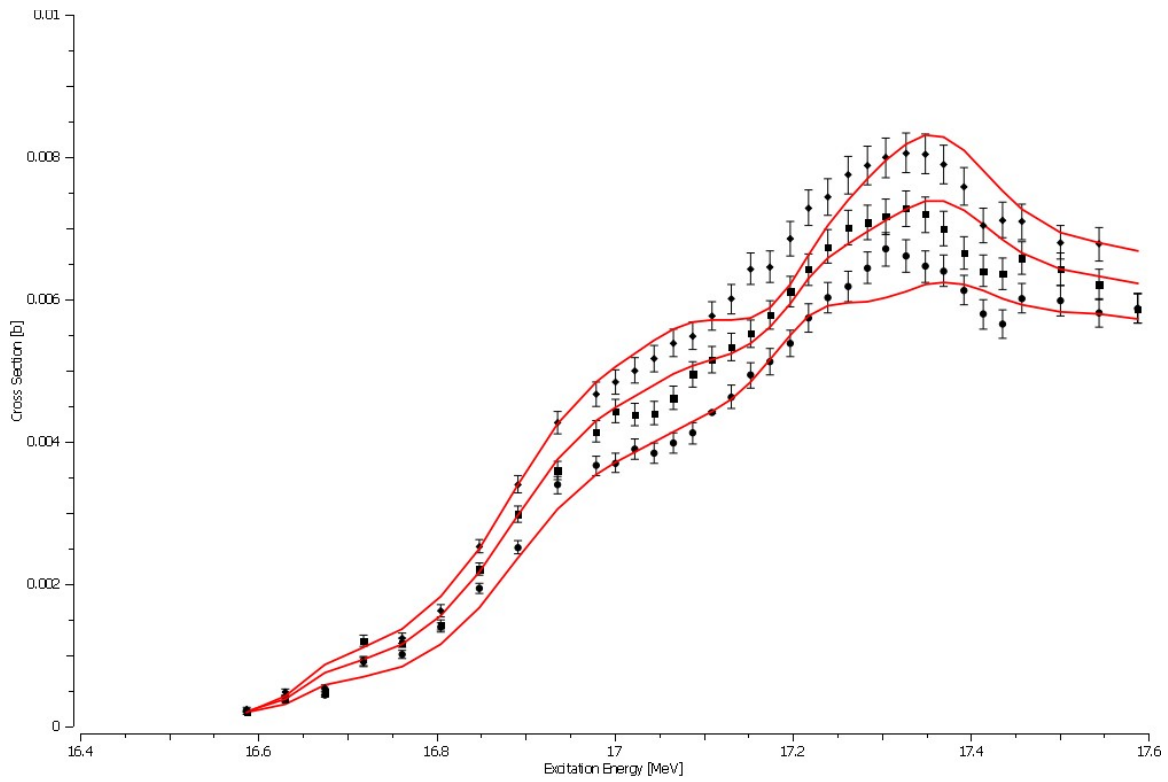
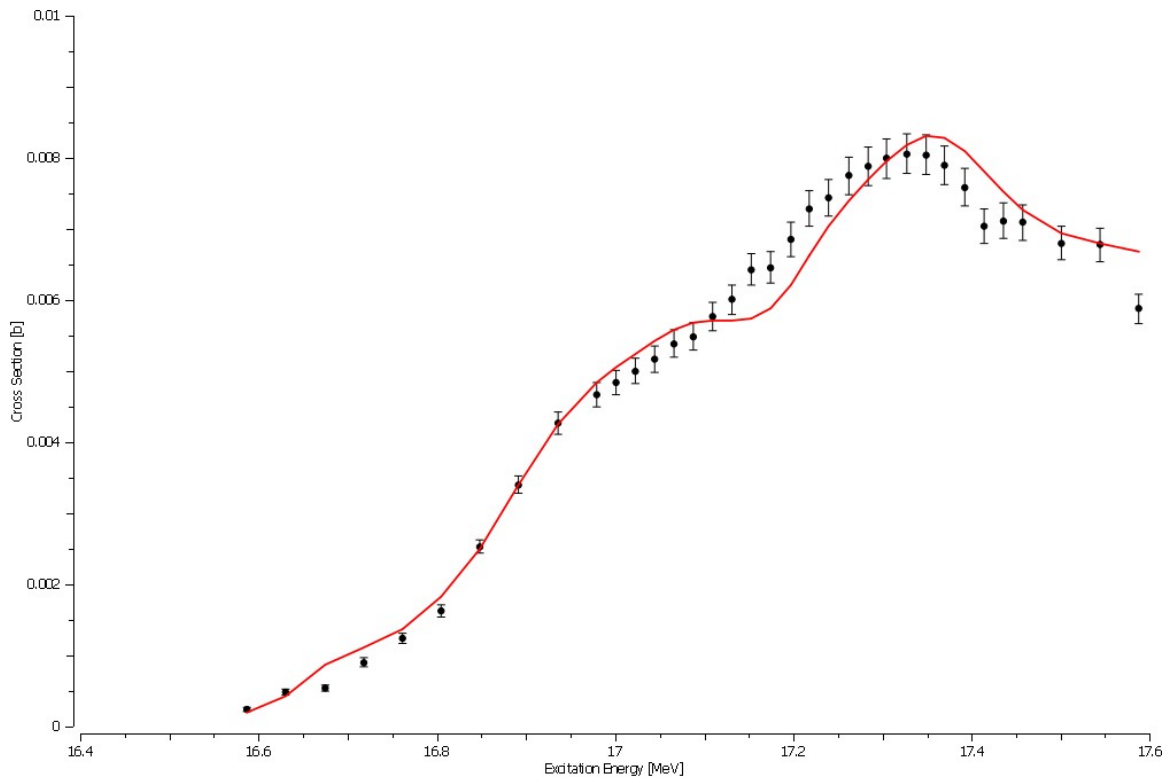




Εικόνα 2.6 α-δ: Η θεωρητική αναπαραγωγή μαζί με τα πειραματικά δεδομένα για την αντίδραση $^{13}\text{C}(d,p)^{14}\text{C}$, για 135° (α) 150° (β) 165° (γ) και όλες τις γωνίες μαζί (δ)

Στην εικόνα 2.6 βλέπουμε τα πειραματικά δεδομένα μαζί με την θεωρητική αναπαραγωγή για την αντίδραση $^{13}\text{C}(d,p)^{14}\text{C}$. Παρατηρούμε πως η R-Matrix κατάφερε να φέρει καλά την θεωρητική καμπύλη πάνω στα δεδομένα και αναπαράγει την γενική συμπεριφορά της εξάρτησης της ενεργού διατομής από την ενέργεια και την γωνία. Οι δύο κορυφές περίπου στα 17.05 MeV και 17.35 MeV, δημιουργούνται από την συνεισφορά διαφόρων συντονισμών σε αυτές τις ενέργειες με την κύρια συνεισφορά να είναι από τα επίπεδα στα 17.07 και στα 17.37. Η μεγάλη εξάρτηση από τη γωνία οδήγησε στον χαρακτηρισμό αυτών των επιπέδων με J^π $7/2^-$ και $5/2^+$ αντίστοιχα. Η ενεργός διατομή πέφτει απότομα στις μεγαλύτερες και μικρότερες ενέργειες και τα επίπεδα 17.58 και 17.67 είναι κλειστά για αυτήν την αντίδραση. Η επίδραση των επιπέδων κάτω από τα 16.91 είναι χαμηλή και δύσκολο να υπολογιστεί

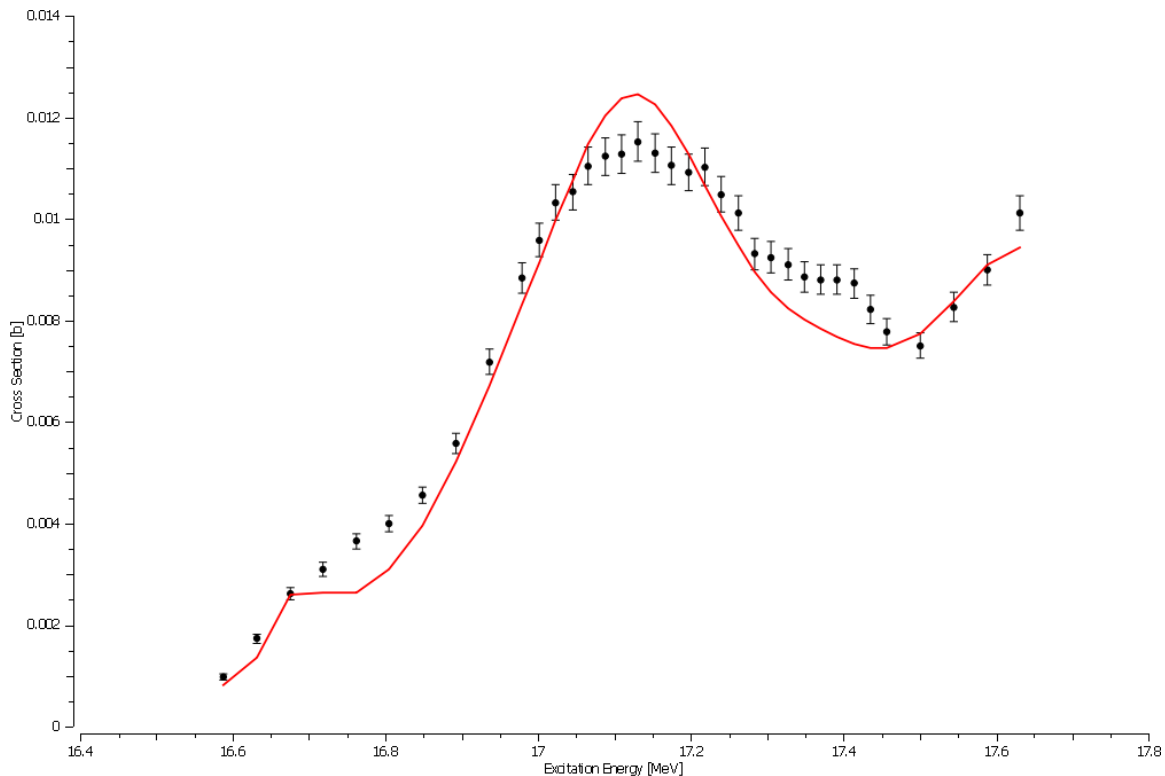


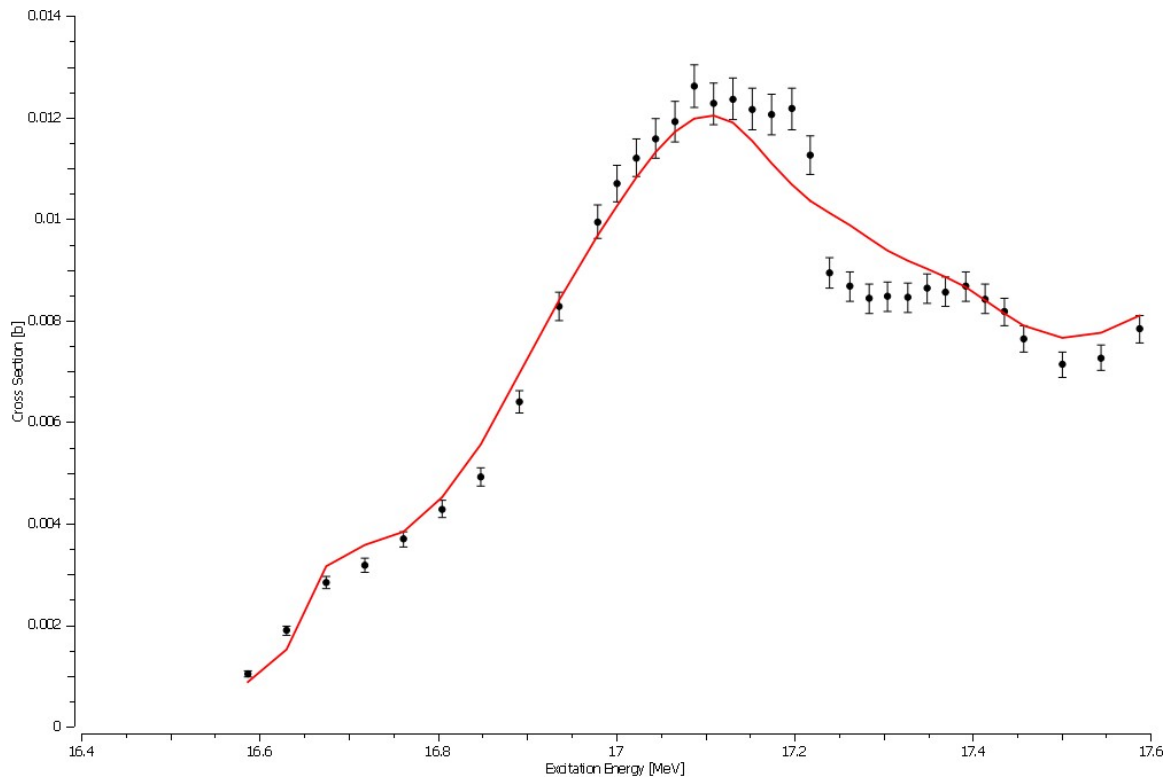
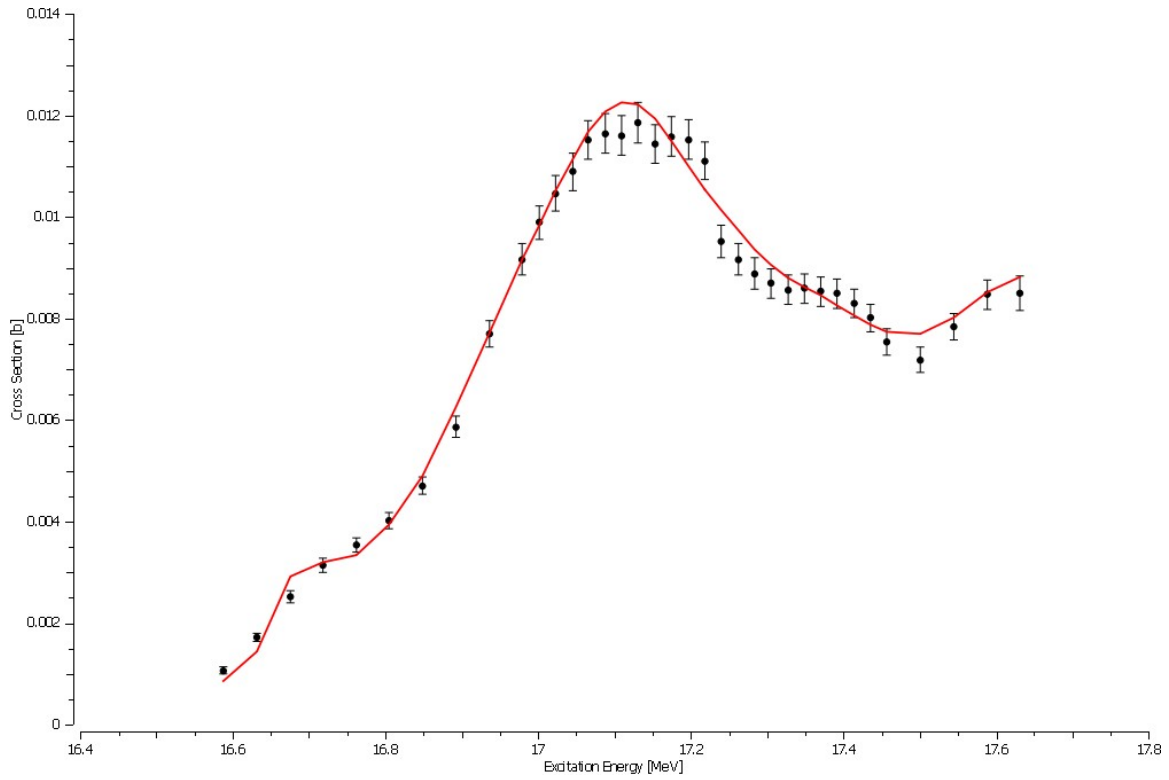


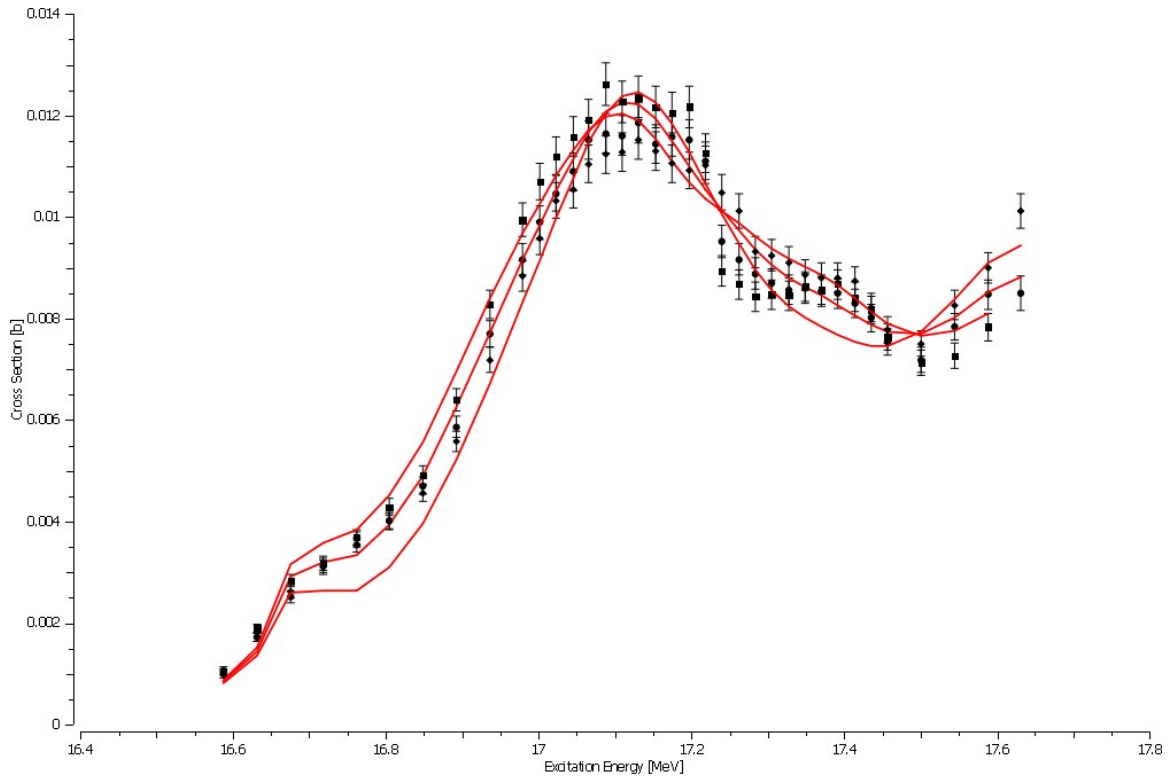
Εικόνα 2.7 α-δ: Η θεωρητική αναπαραγωγή μαζί με τα πειραματικά δεδομένα για την αντίδραση $^{13}\text{C}(d,t)^{12}\text{C}$, για 135° (α) 150° (β) 165° (γ) και όλες τις γωνίες μαζί (δ)

Στην εικόνα 2.7 βλέπουμε τα αντίστοιχα αποτελέσματα για την αντίδραση $^{13}\text{C}(d,t)^{12}\text{C}$. Και πάλι αναπαράγεται η γενικότερη συμπεριφορά της καμπύλης, με καλή συμφωνία στο μεγαλύτερο κομμάτι του ενεργειακού φάσματος. Παρατηρείται μια απόκλιση στις 165° στα 17.2 MeV όπου πέφτει η ενεργός διατομή σε σχέση με τα πειραματικά δεδομένα και δεν διατηρεί την ίδια γωνιακή κατανομή. Επιπλέον η κορυφή είναι μετατοπισμένη στα δεξιά. Λόγω των πολλών αλληλοεπικαλυπτόμενων συντονισμών στην περιοχή αυτή είναι δύσκολο να εξακριβωθεί το αίτιο αυτής της διαφοράς. Και σε αυτήν την περίπτωση η συνεισφορά των χαμηλότερων επιπέδων είναι σημαντικά μικρότερη.

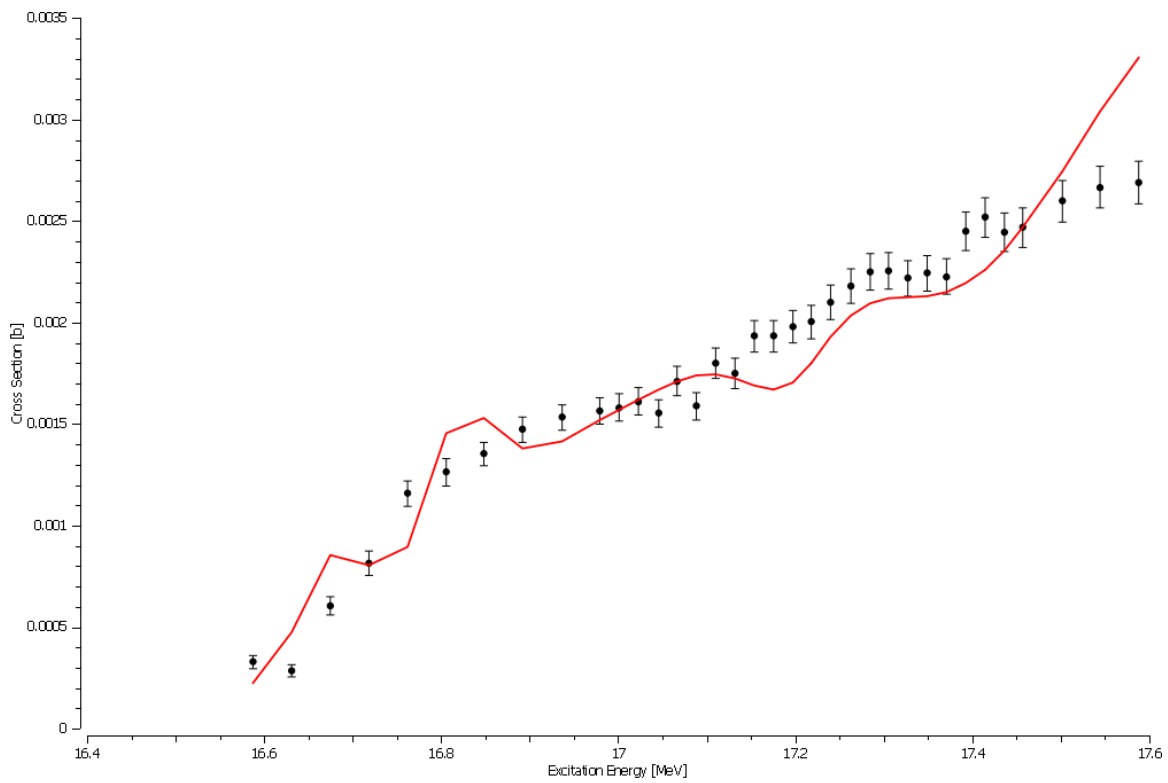
Στην εικόνα 2.8 βλέπουμε τα αποτελέσματα για την $^{13}\text{C}(d,\alpha_0)^{11}\text{B}$. Επιτύχαμε μια ικανοποιητική συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα αλλά με κάποιες σημαντικές αποκλίσεις. Η πρώτη κορυφή που εμφανίζεται περίπου στα 17.1 MeV αντιστοιχεί στον συντονισμό που δίνεται στην βιβλιογραφία στα 17.11 MeV με άγνωστο πλάτος και J^π . Ο συντονισμός αυτός επηρεάζει κυρίως αυτήν την αντίδραση και σε αυτήν την εργασία του δόθηκαν οι τιμές $E = 17.12\text{MeV}$ $J^\pi = 5/2^+$ και $\Gamma = 480\text{KeV}$. Η ενεργός διατομή στις χαμηλότερες ενέργειες παρουσιάζει ισχυρότερη γωνιακή κατανομή σε σχέση με τα δεδομένα, αντίθετα με τις προηγούμενες αντιδράσεις. Επίσης, στο ενεργειακό διάστημα 17.2-17.4 MeV τα θεωρητικά δεδομένα παρουσιάζουν την αντίθετη γωνιακή εξάρτηση, ενώ η αναπαραγωγή βελτιώνεται και πάλι στις μεγαλύτερες ενέργειες. Αυτές οι διαφορές πιθανόν να οφείλονται σε λάθος ανάθεση J^π ή s.l. Παρατηρούμε όμως πως παρόμοια συμπεριφορά δεν παρατηρείται στις άλλες αντιδράσεις.

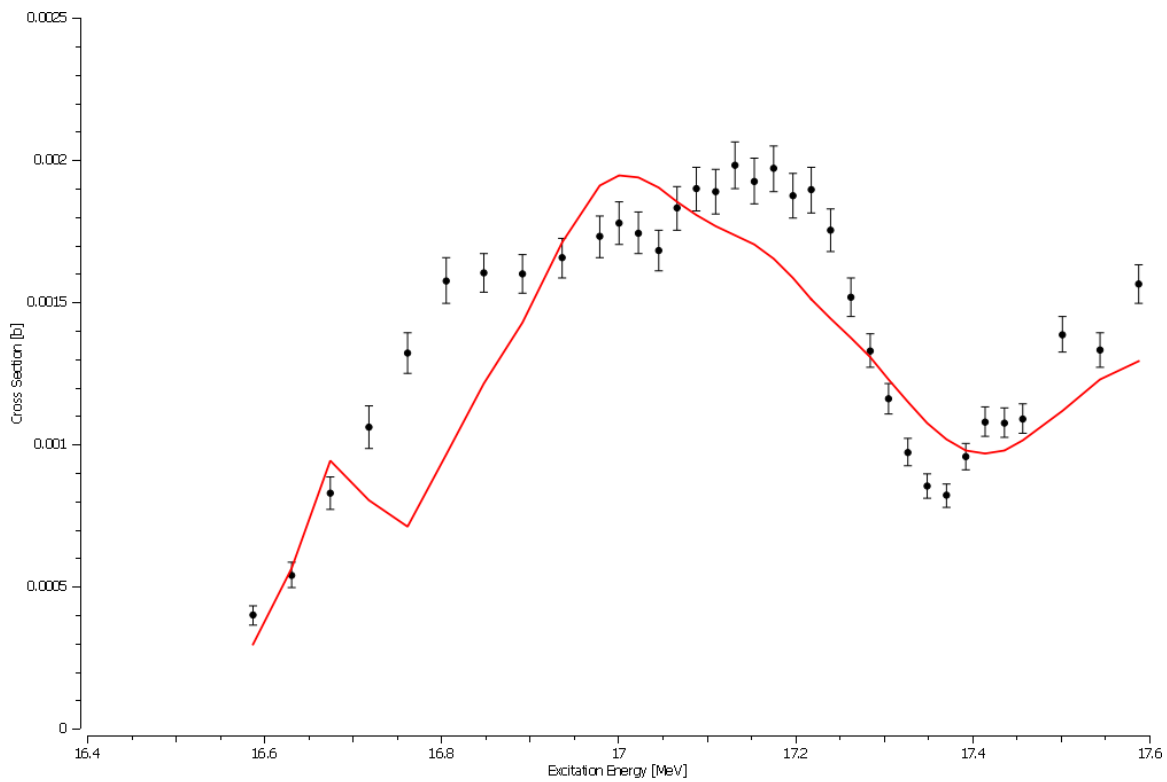
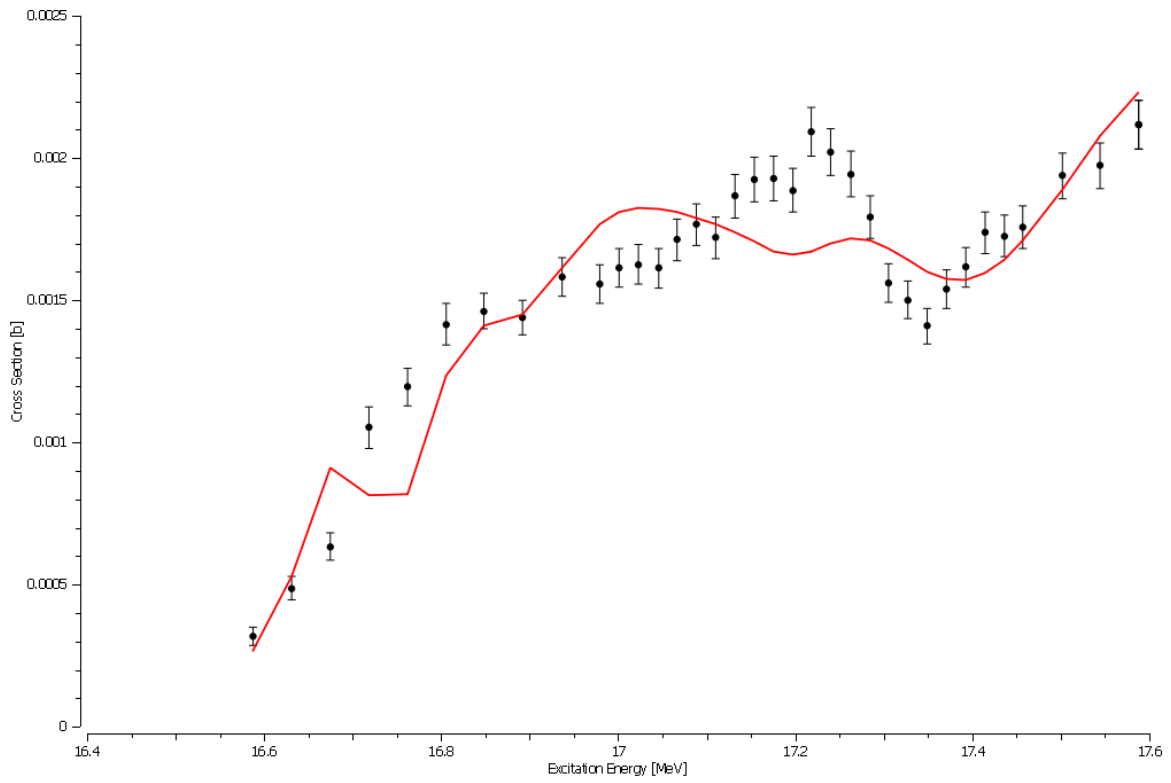


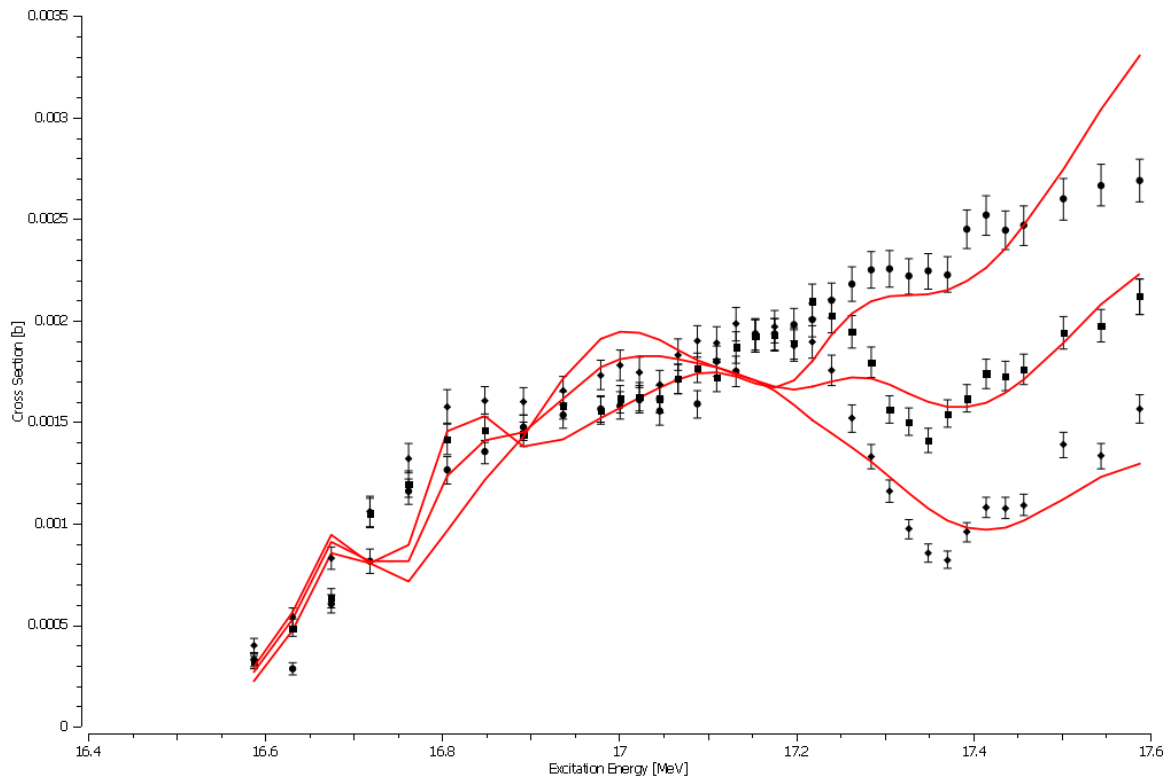




Εικόνα 2.8 α-δ: Η θεωρητική αναπαραγωγή μαζί με τα πειραματικά δεδομένα για την αντίδραση $^{13}\text{C}(d, \alpha)^{11}\text{B}$, για 135° (α) 150° (β) 165° (γ) και όλες τις γωνίες μαζί (δ)







Εικόνα 2.9 α-δ: Η θεωρητική αναπαραγωγή μαζί με τα πειραματικά δεδομένα για την αντίδραση $^{13}\text{C}(d,\alpha_1)^{11}\text{B}$, για 135° (α) 150° (β) 165° (γ) και όλες τις γωνίες μαζί (δ)

Τέλος, στην εικόνα 2.9 βλέπουμε τα αποτελέσματα για την $^{13}\text{C}(d,\alpha_1)^{11}\text{B}$. Αυτή η αντίδραση παρουσιάζει τις μεγαλύτερες αποκλίσεις από τα πειραματικά δεδομένα. Παρ' όλα αυτά επιτυγχάνεται η ποιοτική αναπαραγωγή της συμπεριφοράς της ενεργού διατομής. Ιδιαίτερα φέρνει αρκετά καλά την γωνιακή εξάρτηση της ενεργού διατομής στις υψηλότερες ενέργειες. Οι μεγαλύτερες αποκλίσεις παρουσιάζονται στην περιοχή των χαμηλών ενεργειών ανάμεσα στα 16.7-16.9 MeV. Αντίθετα με τα υπόλοιπα κανάλια, τα χαμηλότερα επίπεδα έχουν μεγαλύτερη συνεισφορά στην ενεργό διατομή και είναι το μόνο κανάλι στον οποίο μπορέσαμε να δούμε το επίπεδο στα 16.8 MeV, το οποίο χαρακτηρίστηκε με $J^\pi = 5/2^-$.

Συμπεράσματα – Μελλοντικές Προοπτικές

Στα πλαίσια αυτής της εργασίας έγινε μελέτη στο πλαίσιο της θεωρίας της R-Matrix, των διαθέσιμων δεδομένων για τις αντιδράσεις του συστήματος $d+^{13}\text{C}$, με σκοπό την διεξαγωγή ενός πρώτου βήματος για τη δημιουργία αξιολογημένων δεδομένων, για χρήση στην ανίχνευση του ^{13}C μέσω των τεχνικών NRA. Συγκεκριμένα, χρησιμοποιήθηκαν δεδομένα για τις αντιδράσεις $^{13}\text{C}(d,p)^{14}\text{C}$, $^{13}\text{C}(d,t)^{12}\text{C}$, $^{13}\text{C}(d,\alpha_0)^{11}\text{B}$, $^{13}\text{C}(d,\alpha_1)^{11}\text{B}$ στο ενεργειακό διάστημα 0.49-1.65 MeV για τρεις γωνίες 135° , 150° , 165° , με τη χρήση του κώδικα AZURE2. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν από αυτήν την εργασία αναπαρήγαγαν σε ικανοποιητικό βαθμό τα πειραματικά δεδομένα με ένα ενιαίο σετ παραμέτρων, ιδιαίτερα για τις αντιδράσεις $^{13}\text{C}(d,p)^{14}\text{C}$, $^{13}\text{C}(d,t)^{12}\text{C}$ παρουσιάζοντας όμως και αποκλίσεις ιδιαίτερα για την $^{13}\text{C}(d,\alpha_1)^{11}\text{B}$ τα αίτια των οποίων δεν είναι ξεκάθαρα.

Είναι σημαντικό για την συνέχιση της παρούσας εργασίας να διεξαχθούν επιπλέον πειράματα με τα οποία να δημιουργηθεί ένα δεύτερο σετ πειραματικών δεδομένων με το οποίο θα μπορούσε να γίνει μια μελλοντική διαδικασία αξιολόγησης ώστε να βελτιωθεί η ακρίβεια και η αξιοπιστία των τεχνικών IBA για την μέτρηση του ^{13}C . Ιδιαίτερα είναι χρήσιμο να μελετηθούν οι ίδιες ενέργειες και αντιδράσεις για επιπλέον γωνίες συμπεριλαμβανομένου και του ελαστικού καναλιού, για να μπορέσουν να διαλευκανθούν τα αίτια των αποκλίσεων. Επιπλέον η επέκταση των μετρήσεων και μιας μεταγενέστερης αξιολόγησης σε μεγαλύτερες ενέργειες είναι αναγκαία για τη χρήση των τεχνικών IBA σε μεγαλύτερα βάθη.

Βιβλιογραφία

J.L. Colaux+(2007), Jour. Nucl. Instrum. Methods in physics Res., Sect. B, Vol.254, p.25

<https://www-nds.iaea.org/exfor/ibandl.htm>

K. S. Krane, *Introductory Nuclear Physics*. JOHN WILEY & SONS, 1988.

A.M. Lane, R.G. Thomas, Rev. Mod. Phys. 30 (1958) 257.

E. Vogt notes, R-Matrix Theory, JINA, Notre Dame 2004.

AZURE2 user manual

<https://www.nndc.bnl.gov/>