

LiH Reaktör Moderatör Malzemesi İçin Hadronik Etkileşimlerin Geant4 Benzetimi

Mert ŞEKERCI^{1,*}, Veli ÇAPALI¹, Hasan ÖZDOĞAN², Abdullah KAPLAN¹

¹Süleyman Demirel Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, 32260, Isparta, Türkiye

²Akdeniz Üniversitesi, Tıp Fakültesi, Biyofizik A.B.D., 07070, Antalya, Türkiye

*yazışılan yazar e-posta: mertsekerci@sdu.edu.tr

Alınış: 01 Ağustos 2016, Kabul: 15 Kasım 2016

Özet: LiH; yoğunluğu, yüksek nötron yakalama tesir kesiti ve yüksek sıcaklıklarda kullanılmasına imkân veren fiziksel-kimyasal özellikleri sayesinde nötron moderasyonunda oldukça yaygın kullanılan bir moderatör malzemedir. Güçlü bir benzetim programı olan GEANT4 ile LiH'in nötron moderatörü olarak kullanıldığı bir ortam için düşük enerjili nötronların ve üretilen izotop-parçacıkların hadronik etkileri araştırılmıştır. Ek olarak, LiH malzemesi için düşük nötron akısında, enerji birikimi hesaplanmıştır

Anahtar kelimeler: Nükleer reaktör, moderatör malzeme, hadronik etkileşimler, Geant4, lityumhidrit

Geant4 Simulation of Hadronic Interactions for the Reactor Moderator Material LiH

Abstract: LiH is one of the most common moderator materials for neutron moderation; due to its high density, high neutron capture cross section and physical-chemical properties that provides usage at elevated temperatures. Hadronic interactions of low energetic neutrons and generated isotopes-particles have been investigated for a situation in which LiH was used as a neutron moderator by using GEANT4, which is a powerful simulation software. In addition, energy deposition along LiH material has been calculated at low neutron flux

Key words: Nuclear reactor, moderator material, hadronic interactions, Geant4, lityumhydride

1. Giriş

Dünya genelinde enerjiye olan talebin iki temel nedeni mevcuttur. Bunlardan birincisi, gelişen teknoloji ve bu teknolojinin insanların yaşamlarının her anında yer alması iken, ikincisi ise gelir seviyesindeki artışın bu gelişen teknolojinin teminini ve kullanımını kolaylaştırmasıdır. Bu nedenle, insan yaşamını kolaylaştıran teknolojik cihazların ve nüfus artışının enerji açığına ve talebine neden olduğu söylenebilir [1]. Bu talebin karşılanması için yüksek enerji üretim kapasitesine sahip nükleer enerji santrallerine ihtiyaç duyulmaktadır. Hâlihazırda mevcut ve çalışır durumda olan nükleer güç reaktörleri, fisyon reaksiyonu prensibiyle enerji üretimi gerçekleştirmektedir. Bu reaktörlerde, operasyonun sürekli ve güvenli şekilde sürdürülebilmesi için etkileşimler sonucu açığa çıkan nötronların kontrol altında tutulabilmeleri gerekmektedir. Nükleer reaksiyonlar sırasında reaktör materyallerinin yapısal dayanıklılığını etkileyebilecek nötron ve ikincil parçacık kaynaklı reaksiyonlar meydana gelmektedir. Reaktörlerde kullanılan yapısal malzemelerin, yapısının anlaşılması ve maruz kaldıkları nükleer reaksiyonlar için teorik tesir kesiti çalışmaları ve benzetim çalışmalarının yapılması gerekmektedir. Araştırma ve geliştirme çalışmalarının odak noktası; nükleer reaksiyonların yapısal bileşikler üzerindeki etkilerinin anlaşılması, özel bileşenlerin ve mikro yapıların geliştirilmesi aşamasında uygun malzemeyi üretmektir [2-10].

Nükleer reaktörlerin tasarımında en önemli unsurlardan ikisi güvenlik ve verimliliğidir. Bu nedenle, reaktörün güvenliliğini ve verimliliğini üst düzeyde sağlamak amacıyla doğru yapısal malzeme seçimi ön plana çıkan çalışmalardandır. Reaktörün türünü, güvenliliğini ve verimliliğini belirleyen en önemli yapısal malzeme moderatör malzemedir. Moderatör malzemeler, zincirleme fisyon reaksiyonunun sürekliliğini kontrol altında tutmak için nötronların yakıt çubukları arasındaki geçişini kontrol etmek amacıyla kullanılmaktadırlar. Nötronların moderasyonu çok uzun bir zaman boyunca grafit, ağır su, lityum, berilyum ve boron gibi bazı malzemelerle sağlanmıştır. Moderatör malzeme olarak kullanılan bu malzemelerin ortak noktası; yoğun nötron akısı altında karakteristik yapısını bozmadan, yüksek basınç, sıcaklık, fiziksel korozyon ve radyasyona bağlı oluşabilecek korozyonlara dayanıklı olmalarıdır. Ayrıca; nötron moderasyonunun temel amacı, fisyon reaksiyonu sonucunda açığa çıkan nötron sayısını kontrol altında tutmaktır. Bu malzemeler, nötron moderasyonu amacıyla verimli şekilde kullanılmış olmalarına rağmen, güncel nötron moderatorlerinin yüksek verimlilikle çalışmaları beklenmektedir [11]. Bu alanda sürdürülen çalışmalar, kompozit malzemelerin de nötron moderasyonunda kullanılabilir olduğunu göstermiştir. Bu kompozit malzemelerden biri de lityumhidrit (LiH)'dir. LiH, sahip olduğu nötron yakalama oranı ile ihtiyaç duyulan yüksek sıcaklık ve basınçta verimli çalışabilmesine olanak sağlayan fiziksel-kimyasal özellikleri sayesinde nötron moderasyonunda tercih edilen bir malzemedir [12]. LiH'e ait bazı karakteristik özellikler Tablo 1'de verilmiştir.

Tablo 1. LiH'in bazı karakteristik özellikler

Kimyasal Formülü	LiH
Molekül Ağırlığı	7.95 g.mol ⁻¹
Yoğunluğu	0.78 g.cm ⁻³
Erime Noktası	688.7 °C
Kaynama Noktası	1000 °C

Fiziksel olarak gerçekleştirilmesi çeşitli sebeplerle mümkün olmayan durumlarda, benzetim çalışmalarının kullanımı ile ortamın ve olayların benzetimi sağlanarak istenilen verilerin elde edilmesi son derece yaygın bir yöntemdir. Benzer şekilde, nükleer reaktörler içerisindeki bazı etkileşimlerin ve olayların benzetilerek, LiH'in moderatör malzeme olarak kullanılmasının etkilerinin araştırılması amacıyla bu çalışma gerçekleştirilmiştir. Bu hedefler doğrultusunda, LiH malzemesi, Monte Carlo [13] hesaplama metodunu kullanan ve son derece güçlü bir hesaplama algoritması sunan Geant4 [14] programı ile simüle edilerek, benzetimi yapılan bir durumda nötronların ve ikincil parçacıkların hadronik etkileri araştırılmıştır.

2. Materyal ve Metot

Deneysel ortamların maliyet hesaplaması, risk analizi, fiziksel imkânsızlıklar veya başka nedenler ile oluşturulamaması gibi durumlarda bilgisayar ortamında benzetim çalışmalarının yapılması son derece yaygın ve kullanılan bir yöntemdir. Bu sayede; tehlikeli, yüksek maliyetli ve uzun süreli işlemlere neden olabilecek uygulamalar, gerçeğine son derece yakın sonuçlar üretebilme kabiliyetine sahip benzetim programları ile tasarlanarak istenilen çalışmalar yapılabilir. Farklı ihtiyaçlar doğrultusunda geliştirilmiş olan pek çok benzetim programı bulunmaktadır. Bu çalışmada bu programlardan biri olan Geant4 programı kullanılmıştır.

Geant4 programının uygulama alanlarından bazıları olarak yüksek enerji fiziği, uzay benzetimleri, medikal fizik uygulamaları, hızlandırıcı ve dedektör fiziği çalışmaları gösterilebilir. Kütüphanelerindeki pek çok fizik modeli sayesinde Geant4, parçacıkların madde ile etkileşmelerini TeV enerji mertebesine kadar gerçeğine son derece yakın sonuçlarda simüle edebilmektedir [15]. Bu özellikleri sayesinde, LiH'in hadronik etkileşmeler açısından incelenmesi amacıyla benzetimi açık kaynak kodlu olarak sunulan Geant4 programı kullanılarak gerçekleştirilmiş ve moderatör malzeme olarak kullanımına yönelik elde edilen bulgular yorumlanmıştır. Elde edilen sonuçların analizinde ise nesne tabanlı ve çok fonksiyonlu bir analiz programı olan ROOT [16] yazılımı kullanılmıştır. Geant4 yazılımında, hazırlanan histogram kodlaması ile sonuçlar ROOT analiz programının işleyeceği formatta düzenlenerek grafikler ayrı ayrı yorumlanmıştır.

Amacımıza yönelik olarak bu çalışmada, termal enerjiden 20 MeV enerjiye kadar olan aralıkta veri sürülmesi yöntemini kullanan ve yüksek hassasiyetle çalışan "G4HPmodel" modeli kullanılmıştır [17]. Benzetim esnasındaki tüm fiziksel olayların simüle edilmesi için "G4PhysListFactory" modeli, LiH malzemesi için tesir kesiti hesaplamalarında ise "G4HadronicProcessStore" modeli kullanılmıştır. Yapılan benzetimlerde, elastik süreçler için "NeutronHPElastic", inelastik süreçler için "NeutronHPInelastic" ve yakalama süreçleri için "NeutronHPCapture" kütüphaneleri kullanılmıştır [17].

Benzetim çalışmasını yaptığımız durumda modeller, vakum ortamı içerisine yerleştirilmiş 30 cm yarıçaplı LiH malzemedan üretilmiş bir kürenin nötronlar ile etkileşimini incelemek amacıyla kullanılmışlardır. Hesaplamalar, çok parçacıklı sık tekrar ile gerçeğe daha yakın benzerlikte sonuç alınması amacıyla yapılmıştır. Bu amaçla; benzerim süreci, 1000000 parçacık içeren 1000 bağımsız tekrar ile gerçekleştirilmiştir. LiH malzemedan tasarlanan kürenin merkezinde 14.1 MeV enerjiye sahip nötronlar oluşturularak serbestçe ve rastgele dağılımları sağlanmıştır. Kullanılan nötronların 14.1 MeV enerjide seçilmelerinin nedeni, nötronların açığa çıkması için gerekli olan kopma enerjisinin bu değerde olmasıdır. Açıklanan örnek durum için Geant4 programının çalıştırılması ile malzemenin içinden geçen nötron parçacıklarının sayıları ve özellikleri ile hadronik etkileşmeler sonucu oluşturulan izotoplar simüle edilmiştir. Ayrıca, malzemenin 0–15 MeV enerjili nötronlar ile bombardımanı sonucunda oluşan (n,TOT) reaksiyonları için toplam reaksiyon tesir kesiti değerleri Geant4 kullanılarak hesaplanmıştır.

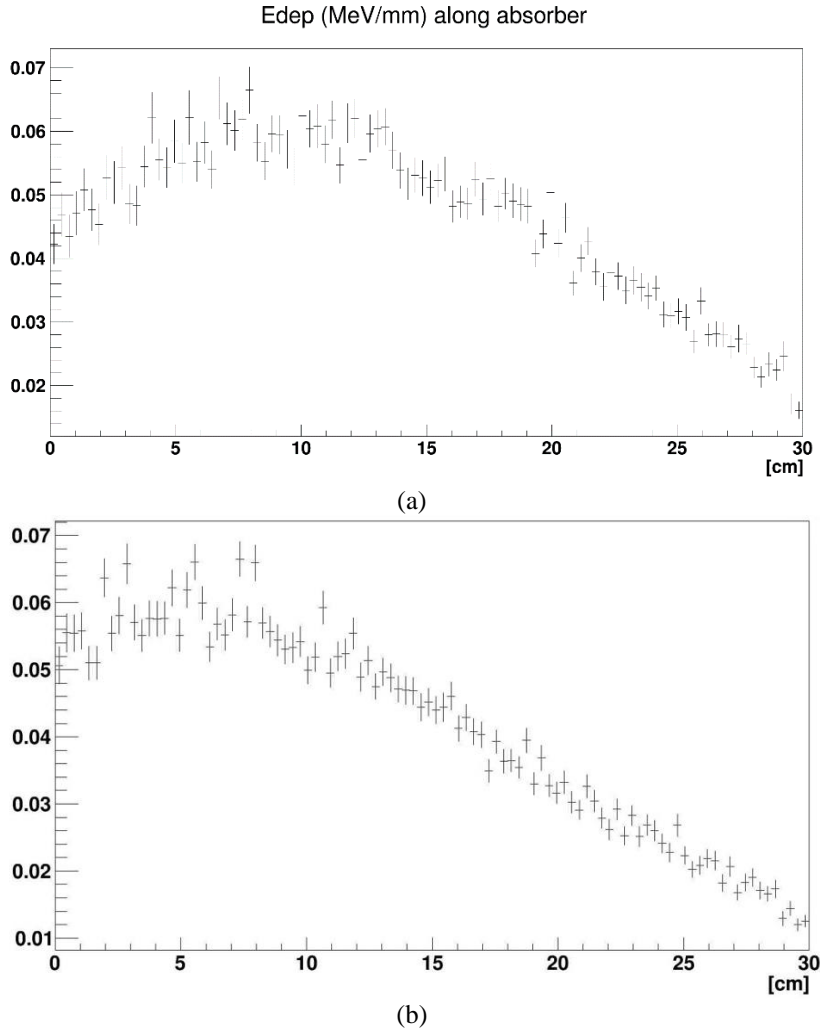
3. Bulgular

Geant4 kullanılarak gerçekleştirilen benzetim çalışmalarının sonuçlarından biri olarak, Tablo 2'de, 14.1 MeV enerjili nötronlar ile etkileşen LiH için oluşan ikincil parçacık ve yeni izotopların listesi verilmiştir. Bu listede özellikle oluşan ikincil nötronların, etkileşime giren nötronların sayısından ve enerjisinden oldukça düşük değerlerde olduğu gözlemlenmektedir. Yanı sıra üretilen ikincil parçacıklar ve izotopların düşük enerjide az sayılı parçacıklar olduğu hesaplama sonuçlarından anlaşılmaktadır.

Tablo 2. LiH ile 14.1 MeV enerjili nötronların etkileşiminin sonuçları

Parçacık	Ortalama Üretim Sayısı	E_{mean} (MeV)	$E_{\text{min}} \rightarrow E_{\text{max}}$
${}^6\text{He}$	1252	2.5337	10.421 keV \rightarrow 6.0503 MeV
${}^6\text{Li}$	8402	2.3929	13.603 keV \rightarrow 10.422 MeV
${}^7\text{Li}$	42769	2.1363	840.63 eV \rightarrow 6.126 MeV
${}^8\text{Li}$	1	1.7958	1.7958 MeV \rightarrow 1.7958 MeV
Alfa	3452	2.0792	2.4033 keV \rightarrow 12.31 MeV
Detöron	3552	5.1322	12.268 keV \rightarrow 31.17 MeV
Gama	176090	1.6219	1.0002 keV \rightarrow 6.8841 MeV
Nötron	61347	5.0264	1.5129 keV \rightarrow 13.64 MeV
Proton	884	18.117	116.26 keV \rightarrow 98.9 MeV
Triton	249	8.7618	3.6046 MeV \rightarrow 14.99 MeV

Şekil 1.a' da, 30 cm uzunluğundaki LiH malzemenin uzunluk eksenini boyunca enerji soğurması verilmiştir. Etkileşime giren nötronlar, malzeme içerisinde yol alırken neden oldukları iyonizasyon ve ikincil parçacık oluşumları sonucunda, malzeme boyunca enerjisini hızla kaybederek yaklaşık 30 cm içerisinde enerjilerini kaybetmektedirler.

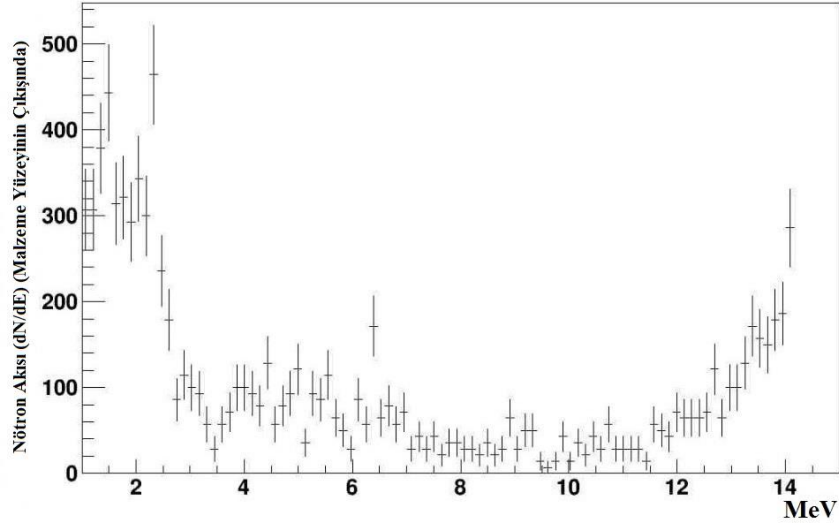


Şekil 1. a) LiH b) BeO malzemelerinin 30cm boyunca enerji soğurma grafiği

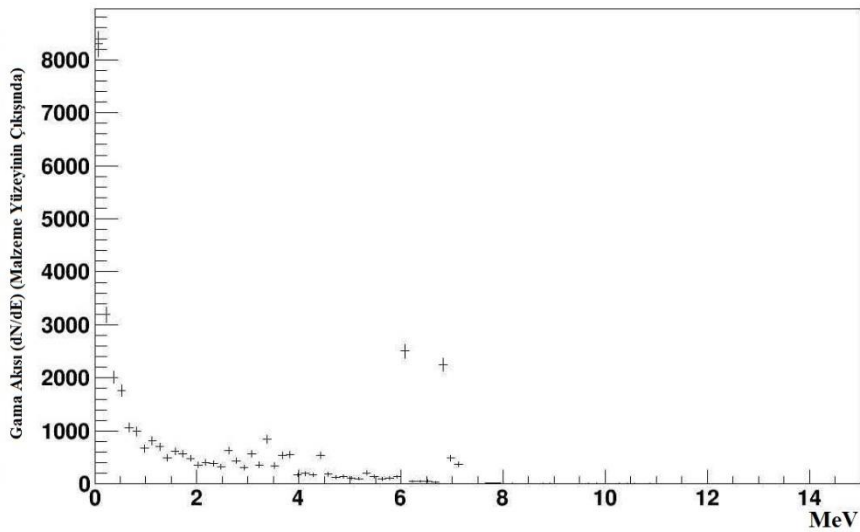
Bu kaybın büyük kısmı malzemenin ilk 10 cm'lik bölgesinde gerçekleşirken, 10-30 cm arasındaki bölgede sistematik bir düşüş meydana gelmektedir. Bu sistematik düşüşün sebebi, az sayıdaki yüksek enerjili parçacıkların malzeme içerisinde daha fazla serbest yol kat ederek malzemenin sınırlarına kadar ulaşabilmesindedir.

Şekil 1.b' de moderatör malzeme olarak kullanılan ve daha önceki çalışmalarımızda incelediğimiz BeO ait enerji soğurma grafiği LiH malzeme ile karşılaştırılmak amacıyla gösterilmiştir [18]. LiH malzemesinin, nötron enerji soğurması incelendiğinde BeO malzemesine soğurma enerjisi bakımından hesaplanan mesafeler için benzer sonuçlar verdiği görülmektedir.

LiH moderatör malzemesinin yüzeyinin çıkışında nötron akısı grafiği Şekil 2'de verilmiştir. Bu şekilde görüldüğü üzere düşük enerjilerdeki termal nötronlar ile ikincil oluşan 14 MeV enerji bölgesindeki nötronların akısı, diğer enerji aralıkları için oldukça yüksektir.



Şekil 2. LiH malzeme yüzeyinin çıkışındaki nötron akısı



Şekil 3. LiH malzeme yüzeyinin çıkışındaki gama akısı

Nötron akısına benzer şekilde, ikincil parçacık olarak oluşan gamalara ait malzeme yüzeyinin çıkışındaki akı değerlerinin oluşturduğu grafik Şekil 3’de verilmiştir. Bu grafik ve Tablo 2 incelendiğinde, oluşan ikincil gamaların maksimum enerjisinin yaklaşık 6.88 MeV mertebesinde olduğu ve düşük enerjili gamaların, yüksek enerjili gamalara göre daha fazla sayıda olduğu görülmektedir. Tablo 2’de de oluşan gamalar için ortalama enerji değeri yaklaşık olarak 1.6 MeV olduğu ve yoğunluğun düşük enerjili gamalar üzerinde biriktiği gözlemlenmiştir.

4. Sonuç ve Yorum

Bu çalışmada LiH malzemesinin nötron moderatörasyon özellikleri Geant4 benzetim kodu ile araştırılmıştır. Araştırmalar sonucunda nötron ile etkileşen LiH moderatör malzemesi için oluşan yeni parçacıklar, oluşan ikincil nötron sayıları ve enerjileri, malzeme içerisinde nötron emilimi ve kat ettiği yol ile nötron ve gama akıları hesaplanmıştır. Oluşan hesaplama verileri, “HistoManager” kodu ile analiz dosyaları haline getirilerek ROOT analiz yazılımı aracılığı ile grafik olarak yorumlanmıştır. Sonuçlar, aşağıdaki şekilde özetlenebilir:

1. Moderatör malzeme olarak kullanılan LiH’in benzetim çalışmasında, yaklaşık 30 cm’lik bir kalınlıkta hazırlanmış örneğin, 14.1 MeV enerjili nötronların enerjilerini soğurarak yavaşlatabildiği gözlemlenmiştir. Böylece; geliştirilen benzetim kodunun LiH için uyumlu sonuçlar verdiği gözlemlenmiştir.
2. Oluşan ikincil nötronların malzeme içerisine gönderilen nötronlara oranla enerji ve sayı bakımından oldukça düşük değerlerde olduğu hesaplanmıştır.
3. Hem nötron hem de gamalar için akı değerleri incelendiğinde yaklaşık 2 MeV enerjiye kadar olan enerji bölgesinde yoğun seviyede bir akı oluşumu mevcut iken, yüksek enerjili nötron ve gamalar için akı değerleri oldukça düşüktür.
4. Bu çalışma ile reaktör tür ve yapılarına göre farklılık gösteren nötron çoğalma faktörlerinin ve nötron sayılarının göz önünde bulundurulacağı bir benzetim kodu geliştirilmiştir. Böylece, LiH ve farklı diğer moderatör malzemelerinin reaktör türlerine göre deneysel olanaksızlıklar durumunda benzetim çalışmalarının yapılabileceği gibi yeni malzeme geliştirme çalışmalarında bir literatür kaynağı teşkil edebileceği gösterilmiştir.

LiH malzemenin tüm bu incelemeler ve hesaplamalar neticesinde sahip olduğu fiziksel ve kimyasal özelliklerinden dolayı, nötron moderasyonunda moderatör malzeme olarak kullanılabileceği gözlemlenmiştir.

Teşekkür ve Bilgi

Bu çalışma; Süleyman Demirel Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Koordinasyon Birimi tarafından desteklenmiştir (Proje No: 4599-D2-16).

Kaynaklar

- [1] Doğan S. S., Çapalı V., Özdoğan H., Kaplan A., 2014. Eriyik Tuz Reaktörlerinde Yakıt Malzemesi Olarak Kullanılan Na Çekirdeğinin Üretim Tesir Kesiti Hesaplamaları, *Süleyman Demirel University Journal of Science (e-journal)*, 9(2): 100-106.

- [2] Tel E., 2010. Study on Some Structural Fusion Materials for (n,p) Reactions up to 30 MeV Energy, *Journal of Fusion Energy*, 29(4): 332-336.
- [3] Aydın A., 2010. Pre-Equilibrium ^3He -Emission Spectra at 62 MeV Proton Incident Energy, *Journal of Fusion Energy*, 29(5): 476-480.
- [4] Sarpün İ.H., 2015. Double Differential Alpha, Proton and Deuteron Emission Cross Section Calculations for the Structural Fusion Materials $^{46,48}\text{Ti}$, *Journal of Fusion Energy*, 34(3): 592-597.
- [5] Demir B., Sarpün İ.H., Kaplan A., Çapalı V., Aydın A., Tel E., 2015. Double Differential Cross Section and Stopping Power Calculations of Light Charged Particle Emission for the Structural Fusion Materials $^{50,52}\text{Cr}$, *Journal of Fusion Energy*, 34(4): 808-816.
- [6] Tel E., Aydın A., 2012. Investigation of Lead Target Nuclei Used on Accelerator-Driven Systems for Tritium Production, *Journal of Fusion Energy*, 31(1): 73-78.
- [7] Özdoğan H., Çapalı V., Kaplan A., 2015. Reaction Cross-Section, Stopping Power and Penetrating Distance Calculations for the Structural Fusion Material ^{54}Fe in Different Reactions, *Journal of Fusion Energy*, 34(2): 379-385.
- [8] Sahan M., Tel E., Sahan A., Kara A., Aydın A., Kaplan A., Sarpün İ. H., Demir B., Akca S., Yildiz E., 2014. Calculations of Double-Differential Neutron Emission Cross Sections for ^9Be Target Nucleus at 14.2 MeV Neutron Energy, *Journal of Fusion Energy*, 34(3): 493-499.
- [9] Sarpün İ. H., Aydın A., Kaplan A., Koca H., Tel E., 2014. Comparison of Fission Barrier and Level Density Models in (a,f) Reactions of Some Heavy Nuclei, *Annals of Nuclear Energy*, 70: 175-179.
- [10] Kaplan A., Sarpün İ.H., Aydın A., Tel E., Çapalı V., Özdoğan H., 2015. (g,2n) Reaction Cross Section Calculations of Several Even-Even Lanthanide Nuclei Using Different Level Density Models, *Physics of Atomic Nuclei*, 78(1): 53-64.
- [11] Mocko M., Daemen L. L., Harlt M. A., Huegle T., Muhrer G., 2010. Experimental study of potential neutron moderator materials, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 624(1): 173-179.
- [12] Shpil'rain E.E., Yakimovich K.A., Medl'nikova T.N., Polishchuk A.Y., 1987. Thermophysical Properties of Lithium Hydride, Deuteride and Tritide and of Their Solutions with Lithium, *New York: American Institute of Physics, USA*, p. 213.
- [13] Metropolis, N., Ulam, S., 1949. The Monte Carlo Method, *Journal of the American Statistical Association*, 44(2): 335-341.
- [14] Agostinelli S; et al. Geant4 Colloboration, 2003. Geant4 - a simulation toolkit, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 506(3): 250-303.
- [15] Demir B., Kaplan A., Çapalı V., Özdoğan H., Sarpün İ. H., Aydın A., Tel E., 2015. Neutron Production Cross-Section and Geant4 Calculations of the Structural Fusion Material ^{59}Co for (a,xn) and (g,xn) Reactions, *Journal of Fusion Energy*, 34(3): 636-641.
- [16] Brun R., Rademakers F., 1997. ROOT: An object oriented data analysis framework, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 389(1-2): 81-86.
- [17] Geant4 Collaboration, "Geant4 User's Guide for Application Developers," 2014. <http://geant4.web.cern.ch/geant4> (Erişim Tarihi: 05/04/2016)
- [18] Çapalı V., Şekerci M., Özdoğan H., Kaplan A., 2016. Reaction Cross Section Calculations in Neutron Induced Reactions and GEANT4 Simulation of Hadronic Interactions for the Reactor Moderator Material BeO, *Suleyman Demirel University Journal of Natural and Applied Sciences*, 20 (2): 161-166.

Veli Çapalı e-posta: velicapali@sdu.edu.tr

Hasan Özdoğan e-posta: hasanozdogan@akdeniz.edu.tr

Abdullah Kaplan e-posta: abdullahkaplan@sdu.edu.tr