



UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI PAVIA

FACOLTA' DI SCIENZE MM.FF.NN

DIPARTIMENTO DI FISICA

CORSO DI LAUREA MAGISTRALE IN SCIENZE FISICHE

**STUDIO COMPUTAZIONALE PER
LA REALIZZAZIONE DI UN FASCIO DI
DIFFRATTOMETRIA NEUTRONICA
PRESSO IL REATTORE TRIGA DI PAVIA**

Relatore:

Dr. Silva Bortolussi

Correlatore:

Chiar.mo Prof. Saverio Altieri

**Tesi di Laurea di
Luca Reversi**

Anno Accademico 2011/2012

1 SOMMARIO

<i>INTRODUZIONE</i>	3
1. Neutron Scattering.....	5
1.1 Introduzione	6
1.2 La Diffusione dei neutroni	7
1.2.1 Sezione d'urto di scattering.....	8
1.2.2 Scattering neutronico coerente e incoerente	11
1.2.3 Magnetic Scattering.....	12
1.3 Sorgenti di neutroni	13
1.4 I Moderatori	14
1.4.1 Distribuzione di energia dei neutroni termici.....	15
1.5 Sistema di guide neutroniche.....	16
1.6 Cristallo monocromatore.....	22
1.7 Filtro.....	26
1.8 Strumenti.....	27
1.8.1 Spettrometro a tre assi.....	27
1.8.2 Backscattering spectrometers (BS).....	28
1.8.3 Diffrazione su polveri da parte di lunghezze d'onda fissate.....	29
1.8.4 Small angle neutron scattering	31
2 Metodi Monte Carlo	34
2.1 Codici Monte Carlo.....	34
2.2 Tecniche di Trasporto di Particelle.....	35
2.3 Esempi di uso di tecniche Monte Carlo.....	36
2.4 MCNP.....	38
2.4.1 La riduzione di varianza in MCNP.....	40
2.5 McStas.....	42
2.5.1 Riduzione di varianza in McStas.....	43
2.5.2 Schema di simulazione di McStas.....	43
2.5.3 Errore statistico in McStas	44
2.5.4 Simulazione con McStas.....	45
3 Simulazione del fascio per diffrattometria al reattore TRIGA di pavia: strumenti e metodi.....	48
3.1 Creazione del file di sorgente	48

3.1.1	Accoppiamento di MCNP5 e McStas.....	50
3.2	Sistema di guide neutroniche.....	58
3.2.1	Guida rettilinea.....	59
3.2.2	Guida “tapering”.....	59
3.2.3	Guida ellittica.....	60
3.2.4	Componente di McStas <i>Guide_four_side</i>	61
3.3	Monocromatore e Filtro.....	66
3.4	Campione.....	69
3.5	Monitor e Detector.....	70
3.5.1	L_monitor.....	70
3.5.2	PSD_monitor.....	70
3.5.3	Divergence_monitor e DivLambda_monitor.....	71
3.5.4	Monitor_nD.....	71
4	Risultati.....	74
4.1	La Facility.....	74
4.2	Lunghezza d’onda.....	77
4.3	Guide Neutroniche.....	80
4.3.1	Guida Tapering.....	81
4.3.2	Guida Parabolica.....	82
4.3.3	Guide ellittiche.....	84
4.4	La Focalizzazione con il monocromatore curvo.....	89
4.5	Guida Neutronica tra monocromatore e campione.....	93
4.6	Collimatore.....	98
5	CONCLUSIONI.....	102
6	Bibliografia.....	104

INTRODUZIONE

L'Università di Pavia è dotata di un reattore nucleare di ricerca TRIGA Mark II della General Atomics, che si trova presso il laboratorio di energia nucleare applicata (LENA) e che può operare alla massima potenza di 250kW. Nel reattore sono presenti diverse facilities di irraggiamento: un canale centrale, un porta campioni rotante attorno al core denominato "Lazy Susan", una colonna termica, una colonna termalizzante e quattro canali orizzontali con diverse caratteristiche tecniche.

Recentemente è stato iniziato uno studio di fattibilità di una facility per diffrazione neutronica da installare presso questo reattore. La motivazione risiede nell'interesse di un gruppo di chimici fisici dell'Università di Pavia, che compiono misure di questo tipo presso grandi laboratori europei come Institut Laue-Langevin (ILL) di Grenoble, Francia, e al Paul Scherrer Institute (PSI) di Villigen, Svizzera, con grande dispendio di risorse e tempo. La presenza di una sorgente neutronica da reattore presso l'Università e la disponibilità di una base porta-campioni e porta-rilevatore (Fig. I), ha incoraggiato uno studio computazionale per verificare quale fosse il miglior canale da attrezzare allo scopo e se ci fossero le condizioni per il funzionamento di una tale facility.

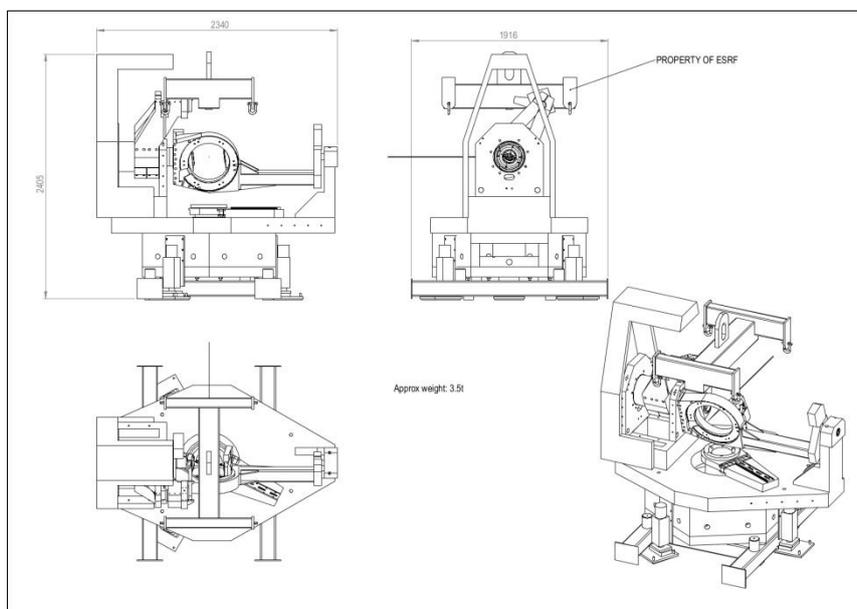


Figura I Base porta-campioni e porta-rivelatore disponibile presso l'Università di Pavia

Il reattore di Pavia è stato precedentemente simulato con il codice di trasporto Monte Carlo MCNP, usando le informazioni sulla geometria e sui materiali riportati nel Final Safety Report (1). La sorgente di neutroni è stata simulata campionando i neutroni con una distribuzione uniforme nel volume degli elementi di combustibile, con una distribuzione di energia costruita come lo spettro di Watt (2). Una validazione della simulazione del reattore con misure sperimentali di flusso neutronico eseguite in colonna termica è riportata in (3) ed una riguardo ai parametri di criticità è riportata in (4). Questo modello del reattore TRIGA è stato utilizzato per stabilire il canale migliore da poter utilizzare per la diffrattometria, e la scelta è ricaduta sul canale penetrante D che arriva fino al core attraversando il moderatore di grafite e perciò permette di avere un maggior flusso neutronico all'uscita.

Per la simulazione della facility è stato necessario l'impiego di un altro codice di trasporto Monte Carlo: McStas, in grado di simulare i processi ottica neutronica.

Per acquisire maggiori conoscenze di base, necessarie per effettuare le simulazioni e per studiare le caratteristiche ogni componente della facility, parte del lavoro è stato svolto in collaborazione con il gruppo Laboratory for Developments and Methods (LDM) presso il PSI di Villigen (Svizzera), che vanta lunga esperienza nel campo, sia dal punto di vista sperimentale (diversi fasci per diffrattometria sono stati estratti dalla sorgente neutronica di spallazione del PSI, molti componenti ottici vengono costruiti direttamente lì) che dal punto di vista computazionale (sviluppo di McStas).

La tesi si articola in 5 capitoli. Il primo è un'introduzione sulla diffrattometria neutronica, il secondo descrive i programmi MCNP e McStas, il terzo elenca gli strumenti computazionali utilizzati per le simulazioni, il quarto riporta i risultati e il quinto delinea le conclusioni e il lavoro previsto per il futuro.

1. NEUTRON SCATTERING

Nello studio dei materiali i neutroni rappresentano una sonda eccezionale in grado di mettere in evidenza specifiche proprietà del materiale non rivelabili con altre tecniche.

A differenza delle particelle cariche sono in grado di penetrare anche attraverso notevoli spessori del materiale rendendo possibile la rivelazione di materiali leggeri anche quando questi sono racchiusi in involucri di materiali ad alto Z. Inoltre, il tipo di dipendenza della sezione d'urto di interazione dal numero di massa A del materiale fa del neutrone una sonda sensibile al singolo isotopo, permettendo di distinguere fra nuclei con A poco diversi, a differenza dei raggi X che non sono in grado di discriminare fra elementi poco diversi in Z. Risulta pertanto possibile variare il contrasto di alcune immagini usando uno specifico isotopo dell'elemento da studiare, come per esempio il deuterio al posto dell'idrogeno nei sistemi biologici.

Con i neutroni di bassa energia la lunghezza d'onda può essere variata da 0.1 Å a 1000 Å in modo da poter studiare strutture atomiche e molecolari dalle più semplici alle più complesse, con la possibilità, per esempio, di definire la posizione di un singolo atomo in una biomolecola.

Con l'energia si può scendere al livello dei meV per studiare i moti diffusivi nei solidi e nei liquidi, i fononi nei cristalli e i moti vibrazionali nelle molecole; oggi è possibile scendere ai μeV o addirittura ai neV.

Sfruttando il momento di dipolo magnetico del neutrone si possono studiare le proprietà magnetiche a livello atomico di vari materiali.

I processi che si possono sfruttare sono lo scattering elastico, lo scattering inelastico e lo scattering coerente di Bragg. Lo scattering elastico a bassi angoli (Small Angle Neutron Scattering) risulta estremamente utile nello studio delle proprietà di microstrutture di polimeri, colloidi, gels, emulsioni alla scala fra 1 e 100 nm; o nello studio di membrane cellulari, proteine, virus o di processi come la fotosintesi nelle piante.

In questa tesi ci siamo occupati della diffrazione da polveri utilizzata per caratterizzare sistemi policristallini. Un set-up per questa misura consiste in un fascio di neutroni con la stessa lunghezza d'onda diretto verso il campione in polvere. I neutroni diffusi dal

campione sono rivelati in funzione del loro angolo di scattering, e ogni picco nel pattern ottenuto corrisponde a diffrazione da piani atomici con diversi spazi interplanari. Un campione ridotto in polvere è costituito da un insieme di cristalliti orientati casualmente. Se il loro numero è sufficientemente grande, ci sono abbastanza cristalliti in ogni direzione e i neutroni da essi diffusi creeranno dei patterns di diffrazione da cui si ricava la struttura policristallina del campione. Questo capitolo introduce i principi teorici alla base di questa tecnica e gli strumenti che compongono una facility di diffrattometria neutronica da polveri.

1.1 INTRODUZIONE

Lord Ernest Rutherford postulò per primo nel 1920 l'esistenza di una particella neutra, poi scoperta nel 1932 da James Chadwick (5), con un lavoro che lo condusse al premio Nobel per la Fisica nel 1935. Quattro anni dopo W.Elsasser, P. Preiswerk e H. von Halban scoprirono che i neutroni potevano essere diffratti dai solidi secondo la legge di Bragg (6). Nel 1994 la diffrazione di neutroni valse a Clifford G. Shull e Betram B. Brockhouse il premio Nobel per la Fisica con la seguente motivazione: "Clifford G. Shull ha aiutato a rispondere alla domanda "dove sono gli atomi" e Betram B. Brockhouse alla domanda "che cosa fanno".

Il neutrone è una particella massiva di 939 MeV ($1.67 \cdot 10^{-27}$ g) composta da due quarks down (carica $-1/3$) e un quark up (carica $2/3$), la sua carica è quindi nulla, mentre la somma degli spins dei tre quarks è $1/2$ e questo fa del neutrone un fermione. La sua vita media è 894 secondi e decade in un protone, un elettrone e un antineutrino; in Tabella 1 sono riassunte le caratteristiche principali del neutrone.

Massa a riposo	939.57 MeV
Carica elettrica	0
Spin	$1/2$
Momento di dipolo magnetico	$-1.913 \mu_N$
Emivita	14.9 min

Tabella 1. Proprietà fondamentali dei neutroni

Il neutrone risulta essere una sonda ideale per lo studio della materia per i seguenti motivi:

1. la lunghezza d'onda di De Broglie dei neutroni termici ($E = 5 - 100$ meV, $\lambda = 1 - 4$ Å, $T = 60 - 1000$ K) è dello stesso ordine di grandezza della distanza interatomica;

2. la carica elettrica nulla: permette ai neutroni di interagire direttamente con il nucleo atomico senza subirne la repulsione coulombiana;
3. il tipo di interazione con la materia permette al neutrone di attraversare facilmente anche grossi spessori di materiali ad alto Z, permettendo di radiografare materiali leggeri anche se racchiusi in contenitori opachi ai fotoni;
4. con i neutroni termici, che hanno un'energia di pochi meV, si possono analizzare anche molecole biologiche delicate senza correre il rischio di distruggerle;
5. il momento magnetico del neutrone può essere sfruttato per condurre analisi sui materiali sfruttando le loro caratteristiche magnetiche;
6. la dipendenza dal numero di massa A della sezione d'urto permette di discriminare isotopi diversi dello stesso elemento; per questo, per esempio, il deuterio può essere usato in biologica come tracciante o per migliorare il contrasto nell'analisi delle immagini).

1.2 LA DIFFUSIONE DEI NEUTRONI

Si definisce sezione d'urto doppio differenziale

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial E'} \quad (1.1)$$

il rapporto fra il numero di particelle con energia compresa tra E' e $E' + dE'$ rivelate nell'angolo solido $d\Omega$ nell'unità di tempo, e la densità di flusso incidente.

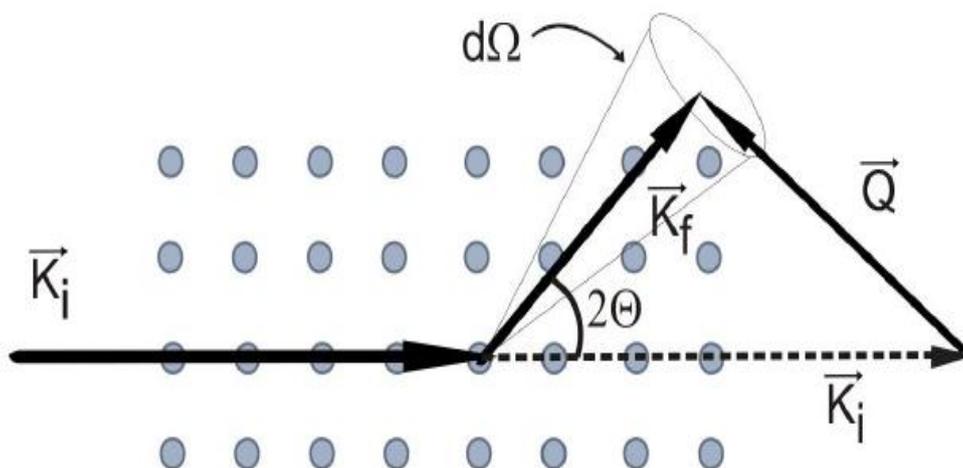


Figura 1. Geometria di un evento di scattering. Neutroni, di impulso iniziale k_i , incidono sul bersaglio e vengono diffusi in direzione $\Omega = (\theta, \phi)$ entro un intervallo angolare $d\Omega$.

La sezione d'urto differenziale si ottiene integrando la sezione d'urto doppio differenziale in dE'

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \int \frac{d^2\sigma}{dE'd\Omega} dE' \quad (1.2)$$

La sezione d'urto totale $\sigma(E)$,

$$\sigma = \int \frac{d^2\sigma}{dE'd\Omega} dE'd\Omega \quad (1.3)$$

è l'integrale su tutti gli angoli della sezione d'urto differenziale,

1.2.1 Sezione d'urto di scattering

La sezione d'urto di scattering nel caso di neutroni può essere calcolata attraverso l'approssimazione di Born. La derivazione di questa è trattata in modo rigoroso nei testi (7), (8), (9).

La funzione d'onda del sistema neutrone-nucleo può essere fattorizzata nel prodotto delle funzioni d'onda delle componenti imperturbate del sistema. Aggiungendo l'ipotesi che la sonda non perturba sensibilmente il bersaglio, lo scattering totale dato da un insieme di molecole N , è la somma dello scattering sui singoli nuclei. Possiamo quindi valutare la sezione d'urto a partire dalla regola d'oro di Fermi per la probabilità di transizione tra lo stato iniziale e lo stato finale del sistema neutrone-nucleo.

In assenza di un campo magnetico l'energia del neutrone incidente è

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1.4)$$

Sia $|\lambda_i\rangle$ lo stato iniziale di energia E_{λ} con momento $\hbar\mathbf{k}$ e normalizzato a L

$$|\lambda_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} \quad (1.5)$$

e $|\lambda_f\rangle$ lo stato finale.

La probabilità di transizione dallo stato iniziale allo stato finale è dato dalla regola d'oro di Fermi

$$W_{k_i, \lambda_i \rightarrow k_f, \lambda_f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \lambda_f | V(\mathbf{r}) | \lambda_i \rangle|^2 \delta(E + E_{\lambda_i} - E' - E_{\lambda_f}) \quad (1.6)$$

La sezione d'urto doppio differenziale in approssimazione di Born tra lo stato iniziale λ_i e lo stato finale λ_f risulta quindi essere:

$$\left(\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial E'} \right)_{\lambda_f}^{\lambda_i} = \frac{k_f}{k_i} \left(\frac{m}{2\pi \hbar^2} \right)^2 |\langle \lambda_f | V(\mathbf{Q}) | \lambda_i \rangle|^2 \delta(E_{\lambda_f} - E_{\lambda_i} - \hbar\omega) \quad (1.7)$$

Dove $V(\mathbf{Q})$ è la trasformata di Fourier dell'energia potenziale di interazione tra neutrone e nucleo $V(\mathbf{r})$:

$$V(\mathbf{Q}) = \int V(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (1.8)$$

Il vettore \mathbf{Q} rappresenta il vettore d'onda di scattering $\mathbf{Q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$

La sezione d'urto doppio differenziale dell'intero processo è la somma dell'equazione (1.7) su tutti i possibili stati iniziali e finali del sistema, e su tutti i possibili stati iniziali e finali dello spin neutronico

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial E'} = \frac{k_f}{k_i} \left(\frac{m}{2\pi \hbar^2} \right)^2 \sum_{\sigma_i \rightarrow \sigma_f} \rho_{\sigma_i} \sum_{\lambda_i \rightarrow \lambda_f} \rho_{\lambda_i} |\langle \lambda_f \sigma_f | V(\mathbf{Q}) | \sigma_i \lambda_i \rangle|^2 \delta(E_{\lambda_f} - E_{\lambda_i} - \hbar\omega) \quad (1.9)$$

Dove ρ_{λ_i} è la distribuzione di probabilità degli stati iniziali λ_i e ρ_{σ_i} è la distribuzione di probabilità degli stati iniziali di spin del neutrone σ_i .

La sezione d'urto doppio differenziale di scattering dipende dal tipo d'interazione neutrone-materia, quindi dall'energia potenziale $V(\mathbf{r})$. I neutroni termici hanno lunghezze d'onda confrontabili con le distanze interatomiche, e interagiscono con i nuclei del bersaglio mediante l'interazione forte, il cui raggio d'azione è dell'ordine delle dimensioni dei nuclei, cioè molto minore della lunghezza d'onda del neutrone. L'interazione neutrone-nucleo si può, perciò, approssimare con lo pseudo-potenziale di Fermi

$$V(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_j^N b_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \quad (1.10)$$

$$V(\mathbf{Q}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_j^N b_j e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_j} \quad (1.11)$$

Dove b_j è la lunghezza di scattering, che è caratteristica del tipo di nucleo e dell'orientazione relativa degli spin del nucleo e del neutrone incidente (10), N è il numero di nuclei nel campione e \mathbf{r}_j è la posizione del j -esimo nucleo atomico.

Sostituendo nella equazione (1.7) il potenziale (1.11)

$$\left(\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial E'}\right)_{\lambda_f}^{\lambda_i} = \frac{k_f}{k_i} \left| \sum_j b_j \langle \lambda_f | e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_j} | \lambda_i \rangle \right|^2 \delta(E_{\lambda_f} - E_{\lambda_i} - \hbar\omega) \quad (1.12)$$

Usando una proprietà della δ di Dirac

$$\delta(E_{\lambda_f} - E_{\lambda_i} - \hbar\omega) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{iE_{\lambda_f}t}{\hbar}} e^{-\frac{iE_{\lambda_i}t}{\hbar}} e^{-i\omega t} dt \quad (1.13)$$

Sostituendo la (1.13) alla (1.12) e sostituendo l'hamiltoniano H ad E si ottiene

$$\left(\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial E'}\right)_{\lambda_f}^{\lambda_i} = \frac{k_f}{k_i} \left| \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{j,j'} b_{j'} b_j \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} dt \langle \lambda_f | e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_j} e^{-\frac{iHt}{\hbar}} e^{\frac{iHt}{\hbar}} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_{j'}} | \lambda_i \rangle \right| \quad (1.14)$$

Sommando su tutti i possibili stati del sistema

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial E'} = \sum \rho_\lambda \left(\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial E'}\right)_{\lambda_f}^{\lambda_i} \quad (1.15)$$

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial E'} = \sum_\lambda \rho_\lambda \frac{k_f}{k_i} \left| \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{j,j'} b_{j'} b_j \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} dt \langle \lambda_f | e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_j} e^{-\frac{iHt}{\hbar}} e^{\frac{iHt}{\hbar}} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_{j'}} | \lambda_i \rangle \right| \quad (1.16)$$

L'equazione (1.16) è la formula più generale della sezione d'urto di scattering neutrone-nucleo. L'approssimazione di Born al primo ordine applicata ai neutroni termici corrisponde allo scattering neutronico sull'onda s (correlato al numero quantico orbitale zero). Questa formula non include la sezione d'urto riguardante la riflettività neutronica, per includerla occorre introdurre termini di ordine maggiore nell'espansione di Born.

1.2.2 Scattering neutronico coerente e incoerente

Il contributo dominante alla sezione d'urto di scattering in un esperimento di diffusione neutronica è dato dallo scattering elastico dei neutroni sui nuclei del campione. Per neutroni non polarizzati questo può essere suddiviso in due contributi separati: la diffusione coerente e quella incoerente (Eq. 1.17).

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial E'} = \left. \frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial E'} \right|_{coe} + \left. \frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial E'} \right|_{incoe} \quad (1.17)$$

Lo scattering coerente scaturisce dagli effetti d'interferenza tra i nuclei e negli esperimenti è osservato come scattering elastico di Bragg e scattering inelastico di fononi. Lo scattering coerente descrive le correlazioni tra i nuclei e indica la struttura nucleare del campione. Lo scattering incoerente a sua volta può essere suddiviso in due componenti, una dovuta allo spin nucleare (*spin-incoherence*), l'altra ai differenti isotopi (*isotopic-incoherence*). Lo scattering incoerente è osservato come un background isotropo; questo spesso viene sottratto, in fase d'analisi, allo scattering coerente in modo da eliminare il fondo.

La sezione d'urto di scattering coerente elastico è data dall'equazione:

$$\left. \frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial E'} \right|_{coe} = \delta \hbar \omega \frac{d\sigma}{d\Omega}(\mathbf{Q}) = \frac{N(2\pi)^3}{V_0} |F_n(\mathbf{Q})|^2 \delta(\mathbf{Q} - \boldsymbol{\tau}) \delta \hbar \omega \quad (1.18)$$

dove:

$\boldsymbol{\tau}$ è un vettore del reticolo reciproco

$F_n(\mathbf{Q})$ è il fattore di struttura nucleare, dato da:

$$F_n(\mathbf{Q}) = \sum_j b_j e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} e^{-W_j(\mathbf{Q}, T)} \quad (1.19)$$

La somma nella (1.19) è fatta su tutti i nuclei j in posizione r_j della cella primitiva, che è la più piccola unità di un cristallo che possiede ancora le proprietà caratteristiche del minerale stesso, b_j è la lunghezza di scattering di ogni nucleo e $-W_j(Q, T)$ è il fattore di Debye-Waller che descrive la variazione negativa dell'intensità di scattering dovuta al moto termico degli atomi o al disordine del cristallo.

In Figura 2 è descritto lo schema elementare di un evento di scattering di Bragg.

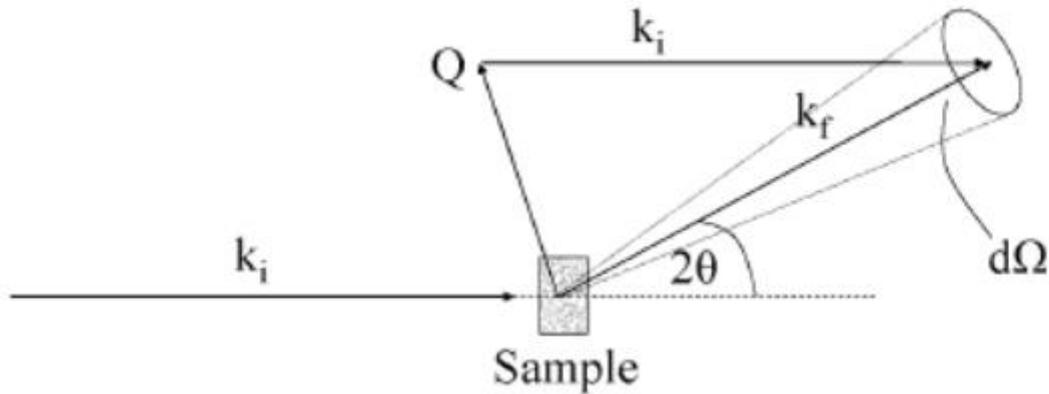


Figura 2 Esperimento di scattering dove il neutrone incidente con vettore d'onda k_i è diffuso di un angolo 2θ all'interno dell'angolo solido $d\Omega$ con vettore d'onda k_f

1.2.3 Magnetic Scattering

Per i neutroni è possibile anche lo scattering magnetico oltre a quello nucleare. Questa interazione può essere espressa in termini d'interazione dipolare dello spin neutronico con i momenti di spin orbitale degli elettroni spaiati nel campione. Si definisce l'energia potenziale magnetica U_M come la seguente quantità:

$$U_M = -\gamma\mu_k\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \quad (1.20)$$

dove $\gamma = 1.913$ è il rapporto giromagnetico del neutrone, μ_k è il magnetone nucleare, $\boldsymbol{\sigma}$ è l'operatore di spin di Pauli e \mathbf{B} è il campo magnetico creato da un elettrone spaiato

La sezione d'urto doppio differenziale può essere quindi così definita:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = (\gamma r_0)^2 \frac{k_f}{k_i} |F(\mathbf{Q})|^2 e^{2W} \sum_{\alpha,\beta} \left(\delta^{\alpha\beta} - \frac{Q^\alpha Q^\beta}{Q^2} \right) S^{\alpha\beta}(\mathbf{Q}, \omega) \quad (1.21)$$

$$S^{\alpha\beta}(\mathbf{Q}, \omega) = \sum_{i,j} e^{i\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)} \sum_{\lambda_i, \lambda_f} \rho_{\lambda_i} \langle \lambda_i | \hat{S}_i^\alpha | \lambda_f \rangle \langle \lambda_f | \hat{S}_j^\beta | \lambda_i \rangle \delta(E_{\lambda_f} - E_{\lambda_i} - \hbar\omega) \quad (1.22)$$

Dove $S^{\alpha\beta}(\mathbf{Q}, \omega)$ è la funzione di scattering magnetico e $F(\mathbf{Q})$ è il fattore di forma magnetico statico, che può essere determinato dalla trasformata di Fourier della densità di spin, $r_0 = 0.282 \cdot 10^{-12}$ cm è il raggio dell'elettrone classico e \hat{S}_i^α è l'operatore di spin dello ione i alla posizione \mathbf{r}_i .

Dalle equazioni 1.21 e 1.22 si possono dedurre alcune importanti caratteristiche dello scattering magnetico: lo scattering magnetico è proporzionale al momento magnetico $\langle \hat{S} \rangle^2$ e dipende dalla temperatura. Il fattore $F(\mathbf{Q})$ decresce molto rapidamente con \mathbf{Q} . Il fattore di polarizzazione $\left(\delta^{\alpha\beta} - \frac{Q^\alpha Q^\beta}{Q^2} \right) S^{\alpha\beta}$ permette di osservare solo le componenti magnetiche perpendicolari a \mathbf{Q} .

1.3 SORGENTI DI NEUTRONI

In generale, i neutroni si ottengono come prodotto di reazioni come la fotoproduzione, la spallazione e la fissione, che coinvolgono nuclei pesanti, o di altre reazioni con particelle cariche su nuclei leggeri.

Nella fotoproduzione i neutroni vengono ottenuti in seguito alla diseccitazione di nuclei pesanti nell'interazione con la radiazione di bremsstrahlung emessa da elettroni ad alta energia, decelerati proprio a causa dell'interazione col campo elettromagnetico degli stessi nuclei.

Il processo di spallazione consente di ottenere neutroni a partire dalla collisione fra protoni altamente energetici e un bersaglio di metallo pesante, per esempio il tantalio, i cui nuclei vengono eccitati nell'urto. La diseccitazione avviene in due fasi: nella prima, detta di "cascade", sono emessi neutroni ad alta energia, mentre successivamente, attraverso la fase di "evaporation", si osserva l'emissione di altre particelle, neutrini, pioni, protoni e, soprattutto, neutroni di energia minore. La più intensa sorgente di spallazione pulsata è la Spallation Neutron Source SNS all'Oak Ridge National Laboratory di flusso pari a $\sim 3 \cdot 10^{16}$ n/cm²s.

La fissione nucleare è la reazione che si sfrutta per produrre neutroni all'interno dei reattori nucleari bombardando alcuni nuclei pesanti (U-233, U-235, Pu-239 e Pu-241) con neutroni termici (11); ogni evento di fissione rilascia una gran quantità di energia (200 MeV) sotto forma di energia cinetica, frammenti di fissione, raggi γ e neutroni. I frammenti di fissione rimangono confinati all'interno del combustibile mentre i fotoni e i neutroni riescono a diffondersi all'esterno dell'elemento di combustibile. Normalmente è necessario un moderatore (di solito acqua, acqua pesante o grafite) per instaurare una reazione a catena autosostenentesi o per abbassare l'energia dei neutroni di fissione ai valori richiesti negli esperimenti di scattering. Il più grande reattore di ricerca

funzionante è l'High Flux Reactor (HFR) all'Institute Laue-Langevin (ILL), Francia, con una potenza termica di 58.3MW e un flusso di neutroni pari a $\sim 10^{15}$ n/cm²s nella regione del moderatore.

La tabella 2 riporta un elenco delle principali sorgenti neutroniche con le loro caratteristiche fondamentali.

Name	Location	Type	Power		Start	Instruments
ILL	Grenoble, France	R	58	MW	1971	50
ORPHEE	LLB, Paris, France	R	14	MW	1982	27
HMI	Berlin, Germany	R	10	MW	1992	22
FRM-2	Munich, Germany	R	20	MW	2004	27
SINQ	PSI, Villigen, Switzerland	CS	800	kW	1996	15
ISIS	Oxfordshire, UK	S	160	kW	1985	25
ESS	Lund, Sweden	S	5	MW	2018?	0
NCNR	NIST, Gaithersburg, USA	R	20	MW	1970	18
HFIR	OakRidge, USA	R	85	MW	1966	15
NRU	ChalkRiver, Canada	R	125	MW	1957	7
LANSCE	Los Alamos, USA	S	160	kW	19??	11
SNS	OakRidge, USA	S	1.4	MW	2006	22
OPAL	ANSTO, Sydney, Australia	R	20	MW	2007	14
JRR3M	JAERI, Japan	R	20	MW	1990	30
CARR	CIAE, China	R	60	MW	20??	0
J-PARC	Tokai, Japan	S	1	MW	2008	22

Tabella 2 Le maggiori sorgenti di neutroni nel mondo. Le sorgenti da reattori sono marcate con "R" quelle da spallazione con "S" e "CS" è una sorgente di spallazione continua.

1.4 I MODERATORI

I neutroni prodotti nelle reazioni nucleari tipicamente hanno energie dell'ordine del MeV. Per essere usati in progetti di ricerca della materia condensata, l'energia dei neutroni deve essere ridotta di vari ordini di grandezza. I neutroni riducono la loro energia attraverso un grande numero di collisioni in sequenza in materiali che hanno

una grande sezione d'urto di scattering ma una bassa sezione d'urto di assorbimento. L'idrogeno (H) è la scelta migliore perché la sua massa è praticamente la stessa del neutrone e questo gli permette di perdere gran parte della propria energia in pochi urti. Nella maggior parte dei casi, i moderatori sono costituiti da serbatoi d'acqua allo stato liquido (H₂O, 300 K), che rallenta i neutroni sino all'equilibrio termico.

Se si vogliono energie più basse è necessario usare moderatori a bassa temperatura come il metano solido (CH₄, 100K) o l'idrogeno liquido (H₂ 30K) posti dopo il moderatore di acqua.

1.4.1 Distribuzione di energia dei neutroni termici

I neutroni moderati a una temperatura T , idealmente hanno una distribuzione data dalla distribuzione di Maxwell:

$$I = I_0 v^3 e^{-\frac{mv^2}{2kT}} \quad (1.23)$$

dove I_0 è una costante, v è la velocità, k la costante di Boltzmann (Fig. 3). Si definisce temperatura equivalente dei neutroni la temperatura T che soddisfa:

$$mv^2 = 2kT \quad (1.24)$$

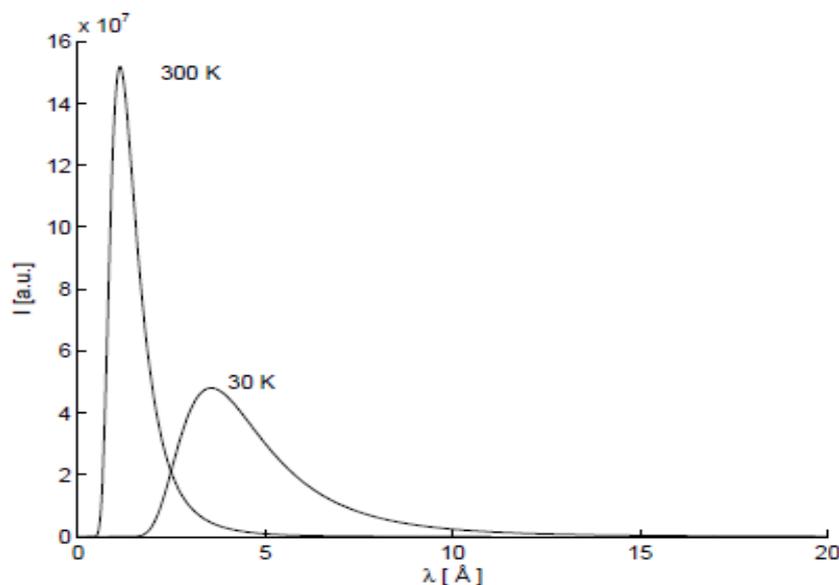


Figura 3 Distribuzione maxwelliana corrispondente a 30K (neutroni freddi) e 300K (neutroni termici)

1.5 SISTEMA DI GUIDE NEUTRONICHE

Il primo strumento per esperimenti di scattering neutronico, alla fine degli anni '40, utilizzava un fascio di neutroni estratto dal moderatore attraverso una serie di buchi nello shielding, chiamati "beam ports". L'intensità di neutroni uscente dal beam port, in generale, decresce come $1/r^2$. Questa dipendenza dall'inverso del quadrato della distanza richiedeva il posizionamento dell'apparato sperimentale il più vicino possibile alla sorgente; in questo caso però era presente un alto fondo proveniente dalla sorgente (neutroni epitermici, neutroni veloci e radiazione gamma).

Nei primi anni '60 è stato inventato un nuovo strumento, la guida neutronica, utilizzata in modo massivo per la prima volta all'ILL di Grenoble. Il principio di funzionamento è equivalente a quello della fibra ottica (12) (13), come schematizzato in Figura 4. La guida può condurre il fascio estratto dal moderatore fino allo strumento neutronico desiderato. Le lunghezze tipiche delle guide sono 10-100 m.

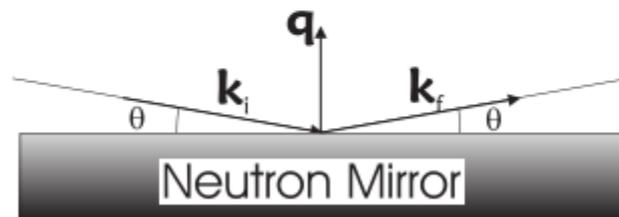


Figura 4 Riflessione neutronica

La riflessione speculare dei neutroni è stata osservata per la prima volta nel 1944 da E.Fermi e Zinn (14) e può essere descritta attraverso l'indice di rifrazione n dei neutroni. L'indice di rifrazione di un mezzo è definito come il rapporto del modulo di k nel mezzo rispetto a k_0 nel vuoto. L'interazione dei neutroni con i nuclei può essere descritta con lo pseudo-potenziale di Fermi:

$$V(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_j^N b_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \quad (1.25)$$

Se il mezzo è considerato omogeneo allora la funzione di densità di scattering presente nello pseudo potenziale si riduce a:

$$\sum_j^N b_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) = \sum_j^N N_j b_j \quad (1.26)$$

L'indice di rifrazione n può essere direttamente ricavato dalla funzione densità di scattering $\sum_j^N N_j b_j$

$$n = \frac{k}{k_0} = \sqrt{1 - \frac{4\pi \sum_j^N N_j b_j}{k_0^2}} = \sqrt{1 - \frac{\lambda^2 \sum_j^N N_j b_j}{\pi}} \quad (1.27)$$

Per $\lambda = 1 \text{ \AA}$ si può stimare l'ordine di grandezza dell'espressione $\lambda^2 \sum_j^N N_j b_j \approx 10^{-6}$. Usando l'approssimazione di Taylor per piccole x , $\sqrt{1-x} = 1 - \frac{1}{2}x$ si ottiene

$$n = \frac{k}{k_0} = 1 - \frac{\lambda^2 \sum_j^N N_j b_j}{2\pi} \quad (1.28)$$

L'indice di rifrazione dei neutroni termici e dei neutroni freddi è molto più vicino ad 1 rispetto all'indice di rifrazione della luce. Come nel caso della luce, si ha una riflessione totale se

$$\cos(\theta_c) = n \quad (1.29)$$

Se $|n - 1|$ è abbastanza piccolo allora si può scrivere

$$n^2 \approx 1 - \frac{\lambda^2 \sum_j^N N_j b_j}{\pi} \quad (1.30)$$

Si ottiene

$$1 - (\sin(\theta_c))^2 = 1 - \frac{\lambda^2 \sum_j^N N_j b_j}{\pi} \quad (1.31)$$

θ_c è definito come angolo critico del materiale. Per trasportare i neutroni su grandi distanze viene usata la riflessione totale esterna (contrariamente ai fotoni si ha $n < 1$). Il nichel grazie alla sua grande sezione d'urto di scattering coerente ha un buon angolo critico:

$$\theta_c = (0.1^\circ)\lambda \quad (1.32)$$

che lo rende il materiale più adatto per la costruzione del rivestimento interno delle guide. Per neutroni da 1 Å a 10 Å l'angolo critico del Ni passa da 0.10° a 1.00°. In tabella 3 sono elencati gli angoli critici di alcuni materiali.

Materiale	$\theta_c [^\circ]$
Al	0.048
Ni	0.1
⁵⁸ Ni	0.12
Fe	0.095
Co	0.051
Vetro	0.062

Tabella 3 Valori dell'angolo critico in diversi materiali

Il trasporto è tanto più efficiente quanto più è grande la lunghezza d'onda λ , dovuto alla crescita dell'angolo critico in funzione di λ . Questo fa sì che restino nella guida neutroni con direzioni di volo comprese in intervalli angolari maggiori)

Si definisce *critical scattering vector* la quantità:

$$Q_c = 2k \sin(\theta_c) \approx 4\pi \frac{\theta_c}{\lambda} \quad (1.33)$$

In generale per un dato materiale Q_c è indipendente da λ . Per una guida standard in nichel il *critical scattering vector* è

$$Q_{C,Ni} = 0.0219 \text{ \AA}^{-1} \quad (1.34)$$

Nelle guide neutroniche più recenti si è implementato un altro sistema per aumentare l'angolo critico, che consiste nel sovrapporre layers di circa 2 nm di vari materiali come Ni e Ti. Questi dispositivi sono chiamati *supermirrors* ed hanno un'alta riflettività (circa 80%) e angoli critici fino a 7 volte maggiori rispetto alle guide di solo Ni naturale. Queste prestazioni sono dovute alla sovrapposizione di materiali che riflettono i neutroni di lunghezze d'onda diversa come mostrato in Figura 5.

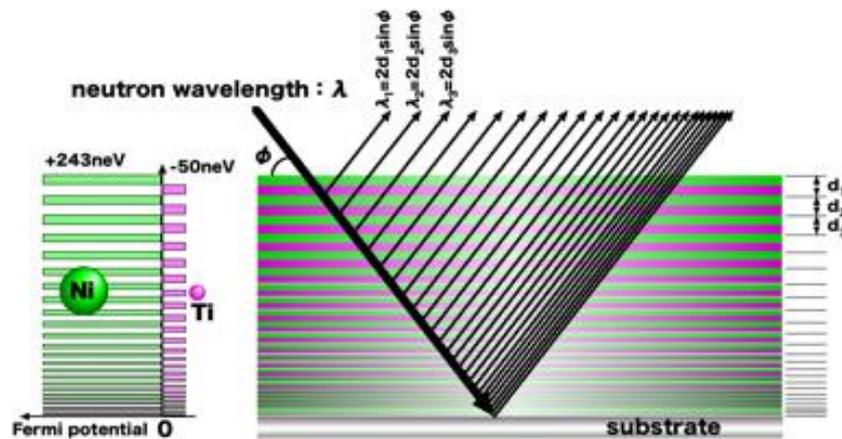


Figura 5 Schema di un supermirror. Ogni layer riflette una lunghezza d'onda diversa

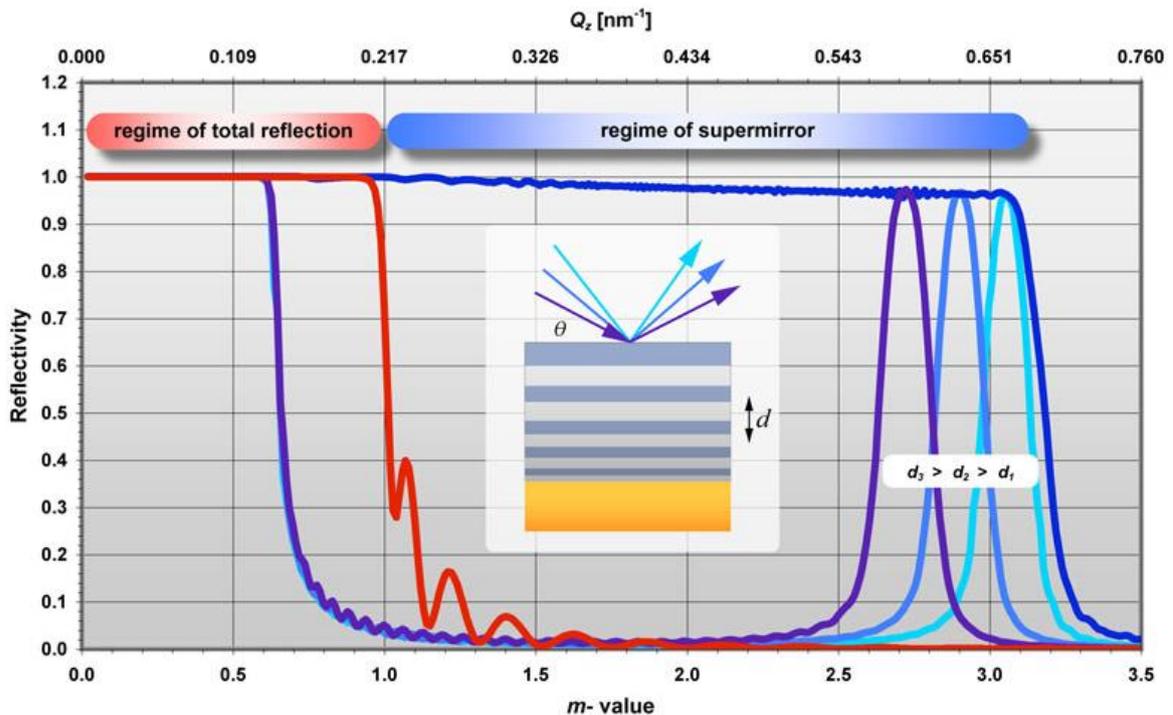


Figura 6 Riflettività teorica di uno supermirror. I layer riflettendo lunghezze d'onda differenti quando si sommano portano ad un allargamento della zona di riflessione della guida.

Le guide a supermirror sono classificate secondo il loro valore di m , con m definito come:

$$\theta_c = m \cdot \theta_c^{Ni} \quad (1.35)$$

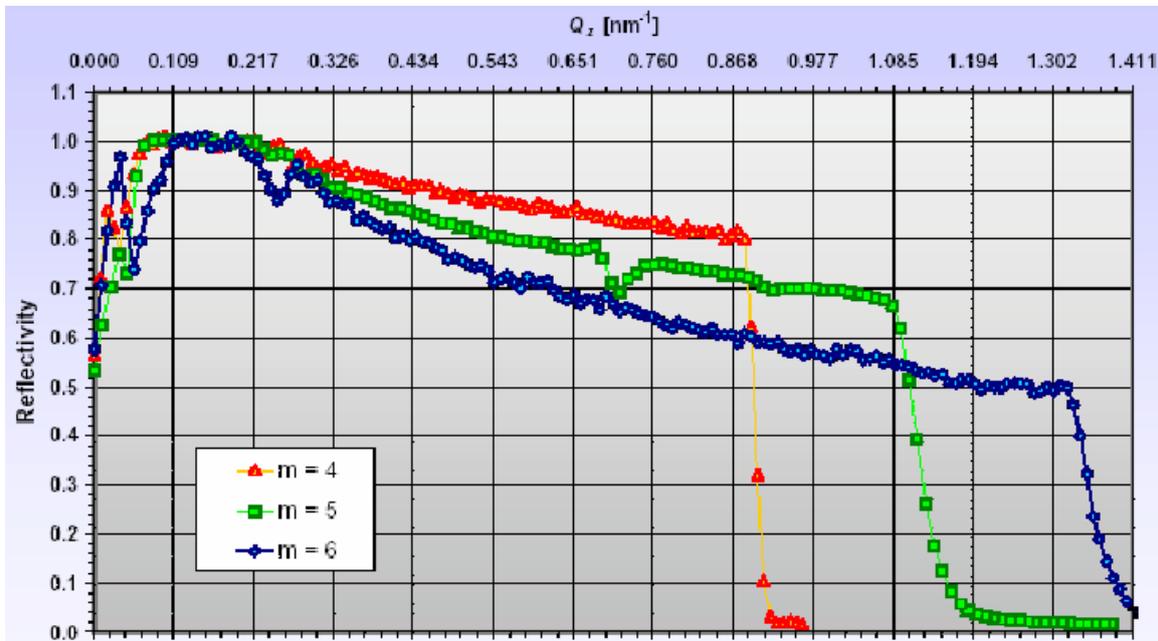


Figura 7 Grafico della riflettività per differenti valori di m ottenuti da dati sperimentali. La figura mostra la riflettività che parte da circa 1 e poi linearmente decresce da Q_c a $m \cdot Q_c$ per poi andare velocemente a 0. Le code esponenziali vicino allo 0 si suppone sia rumore

La figura 7 mostra la riflettività sperimentale delle guide con differenti valori di m .

La scelta dei vari materiali per i layer del supermirror permette anche la costruzione di guide che in presenza di un campo magnetico possono riflettere un solo stato di spin, che quindi possono essere usate come uno strumento per la polarizzazione dei neutroni.

La riflessione speculare non solo permette di trasportare i neutroni, ma è anche un mezzo per la focalizzazione del fascio nello spazio, anche se a costo di una maggiore divergenza angolare. Tale focalizzazione può essere realizzata utilizzando delle guide curvilinee (15). A causa delle imperfezioni dei materiali, queste guide non possono garantire una riflessione del 100%, anche se i neutroni hanno direzione di volo con angolo minore dell'angolo critico; per questo motivo il numero di riflessioni all'interno della guida deve essere minimizzato. Le guide usate a questo scopo si chiamano "ballistic guides" (Figura 8) (16).

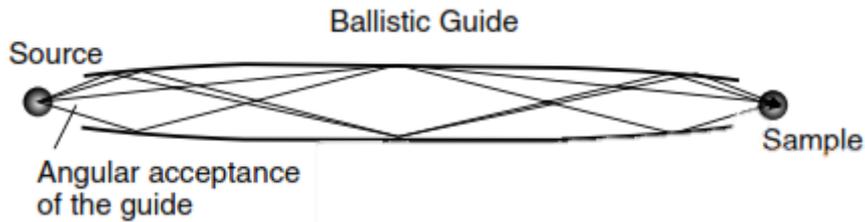


Figura 8 Ballistic guide

Questo tipo di guide riduce notevolmente il numero di riflessioni, e di conseguenza anche la divergenza e le dimensioni del fascio. Esse vengono usate sia per portare il fascio dal moderatore al monocromatore che da questo al campione.

Un altro importante compito delle guide neutroniche è quello di eliminare la componente più energetica dello spettro dei neutroni. A tale scopo le guide vengono curvate, in modo che il moderatore e il monocromatore non siano sulla stessa linea. Le lunghezze d'onda più piccole attraversano la guida, mentre quelle più lunghe vengono riflesse dalla guida e curvano con essa fino a raggiungere lo strumento successivo.

Comprendere le proprietà del fascio neutronico all'uscita dalla guida non è un compito semplice perché le variabili sono molteplici. La distribuzione nello spazio delle fasi di $p(\mathbf{k})$ all'uscita della guida non dipende solo dalla riflessione sulle pareti del *mirror* ma dipende anche dall'angolo di entrata del fascio, dal materiale della finestra della guida e da quanto è spinto il vuoto all'interno della guida. La distribuzione $p(\mathbf{k})$ può anche non essere omogenea nella sezione della guida. Questo è sicuramente il caso delle guide curvilinee dove la curvatura introduce una rottura di simmetria tra l'ingresso e l'uscita di questa.

Qualsiasi guida di neutroni diritta può essere considerata un collimatore in quanto limita la divergenza del fascio in uscita all'angolo critico $\pm\theta$. Questo vale a condizione che tutti i neutroni con una divergenza più grande dell'angolo critico facciano almeno una riflessione. Questo è vero se il rapporto tra la larghezza a e la lunghezza L della guida soddisfa la relazione:

$$\frac{a}{L} \leq \tan\theta_c \quad (1.36)$$

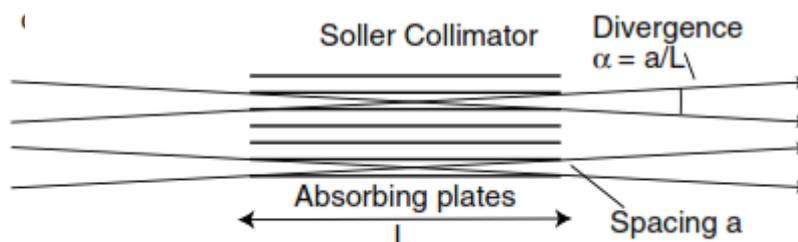


Figura 9 Soller

Se il rivestimento non è riflettente, cioè, se le pareti sono costituite da un assorbitore neutronico come cadmio (Cd) o gadolinio (Gd), allora la collimazione è ottenuta solo mediante geometria e il nome di tale dispositivo è collimatore Soller (Figura 9). Per evitare collimatori molto lunghi, il design è reso compatto aggiungendo pareti verticali e orizzontali all'interno della guida in modo da avere uno schema a *multi-channel*. In questo modo si può diminuire il rapporto a/L . Lo svantaggio del soller rispetto alla guida è che il flusso neutronico in uscita è più basso; ma d'altra parte si può ottenere una collimazione migliore.

1.6 CRISTALLO MONOCROMATORE

I neutroni sono onde di particelle e come tali sono diffratti dai reticoli. Nel caso dei piani reticolari di un cristallo, la diffrazione può essere descritto come una riflessione governata dall'equazione Bragg:

$$n\lambda = 2 \cdot d \cdot \sin\theta \quad (1.37)$$

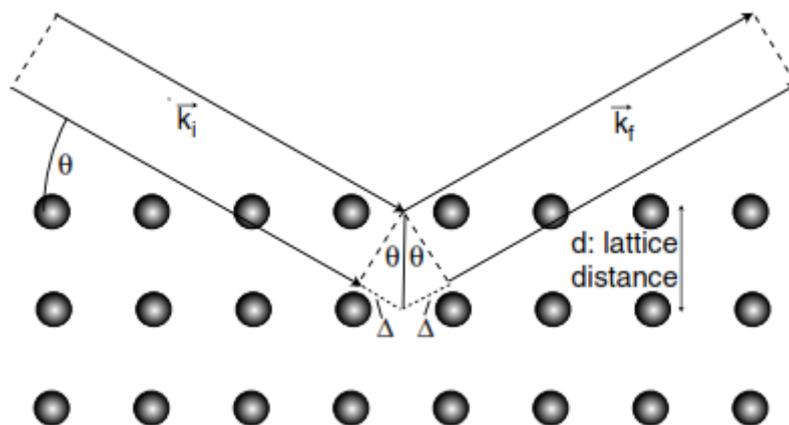


Figura 10 Bragg scattering. La lunghezza d'onda λ osservata è fissa per un particolare angolo di Bragg θ e per una particolare distanza reticolare d .

L'angolo di scattering 2θ rappresenta l'angolo tra \mathbf{k}_i e \mathbf{k}_f , d è la distanza tra i piani reticolari e n è l'ordine di diffrazione (Fig. 10).

Il cristallo posizionato ad un certo angolo rispetto al fascio agisce come un filtro di energia o di lunghezza d'onda. La riflessione di Bragg di neutroni da un singolo cristallo è stato osservato nel 1936 (17) e usata da Zinn nel 1946 per la monocromatizzazione (18).

Può essere utile riformulare l'equazione di Bragg in termini di reticolo nello spazio reciproco:

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i \quad (1.38)$$

dove $\boldsymbol{\tau}_{hkl} = h\mathbf{a}_1 + k\mathbf{a}_2 + l\mathbf{a}_3$ è il vettore del reticolo reciproco, che è perpendicolare al piano reticolare ed ha modulo $|\boldsymbol{\tau}_{hkl}| = 2\pi/d_{hkl}$. La banda $\Delta\lambda$ che il cristallo diffonde può essere definita a partire dalla divergenza $\Delta\theta$ del fascio incidente e dall'incertezza nella distanza dei piani reticolari Δd

$$\Delta\lambda = 2d\cos(\theta)\Delta\theta + 2\sin(\theta)\Delta d = \lambda\cot(\theta)\Delta\theta + \frac{\lambda}{d}\Delta d \quad (1.39)$$

La risoluzione relativa è data da

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \cot(\theta)\Delta\theta + \frac{1}{d}\Delta d \quad (1.40)$$

Per un fascio con una divergenza di 1° e angolo di scattering intorno ai 45° si ha una risoluzione di circa il 2% per un cristallo perfetto. La risoluzione può essere aumentata diminuendo la divergenza, per questo scopo potrebbe essere usato un collimatore, a costo però di una diminuzione del flusso. La miglior risoluzione è data da monocromatori montati in configurazione backscattering $2\theta=180^\circ$.

Per quanto riguarda le applicazioni pratiche, l'accettazione angolare di un cristallo ideale è troppo bassa per un uso efficiente di un fascio con una divergenza angolare alta. Per aggirare il problema i cristalli vengono costruiti in modo da introdurre una variazione nella distanza reticolare d o inducendo una mosaicità spostando l'orientamento dei singoli cristalli che compongono il monocromatore (Fig. 11).

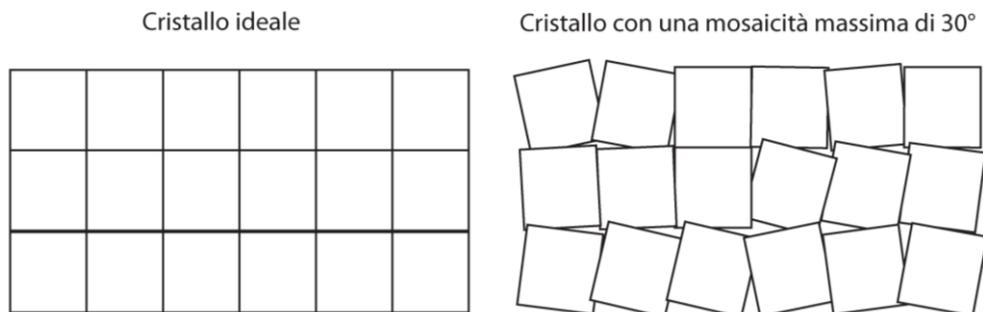


Figura 11 Confronto tra cristallo ideale e cristallo con una mosaicità

Nello spazio reciproco questo si traduce in uno spread sia in lunghezza d'onda che in direzione del vettore $\boldsymbol{\tau}$. I cristalli composti da cristalliti vengono chiamati *mosaic crystals* (19). La distribuzione angolare di cristalliti può essere determinata sperimentalmente

ruotando il cristallo rispetto all'angolo di Bragg e utilizzando un fascio monocromatico con risoluzione angolare sufficientemente elevata e misurando l'angolo di scattering.

La probabilità di trovare un cristallite con un orientamento $\theta + \Delta\theta$ è data dall'intensità del fascio così misurata in funzione dell'angolo. Normalmente è ben descritto da una funzione gaussiana

$$W(\Delta\theta) = \frac{1}{\eta\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\Delta\theta^2}{2\eta^2}} \quad (1.41)$$

Il parametro η è chiamato *mosaicity* del cristallo, e per la maggior parte dei monocromatori varia tra 10° e 40° . La mosaicità è responsabile della forma gaussiana della distribuzione della lunghezza d'onda dopo la riflessione sul monocromatore. La *mosaicity* quindi fa abbassare la risoluzione dello strumento ma permette di ottenere flussi più alti. In alcuni casi è utile distinguere tra mosaicità verticale e orizzontale in quanto spesso è necessaria una maggiore risoluzione in una delle due direzioni, quindi si può agire indipendentemente su una o sull'altra.

Le formule citate fino ad ora sono applicate ai monocromatori piatti. I monocromatori cristallini moderni sono di grandi dimensioni e sono composti da un gran numero di singole piastre che sono orientate in modo da focalizzare il fascio su piccoli campioni (20). Ciò è particolarmente importante per i neutroni termici o freddi, per cui le guide di neutroni convergenti (anche quelle a supermirrors) sono inefficienti come dispositivi di messa a fuoco a causa del basso angolo critico. I monocromatori a diverse orientazioni possono avere una messa a fuoco verticale e orizzontale accettando una divergenza di grandi dimensioni (Figura 12)

Nonostante ciò, la risoluzione energetica può essere conservata a condizione che la dimensione della sorgente (eventualmente limitata da un collimatore) sia comparabile alle dimensioni del campione nel punto di messa a fuoco e la curvatura del monocromatore sia scelta correttamente (21).

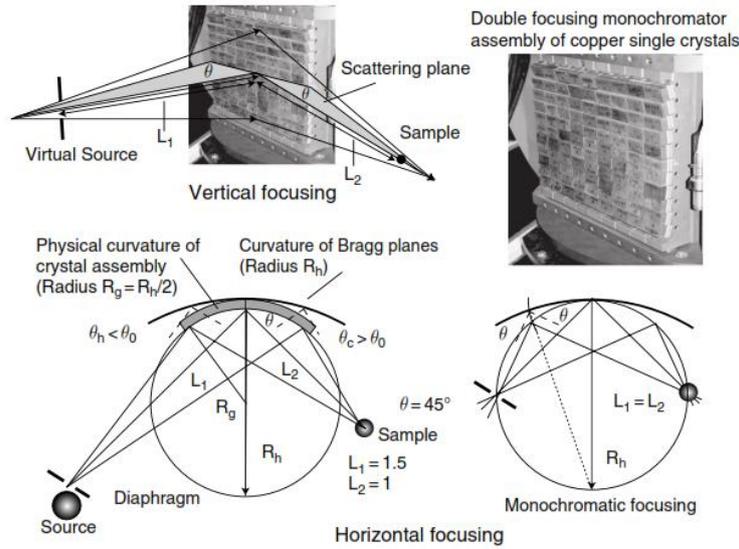


Figura 12 schema di focusing verticale e orizzontale.

Per calcolare l'intensità di un fascio riflesso da un cristallo si introduce un parametro usato in cristallografia chiamato linear reflection coefficient, e dato da:

$$I_{hkl} = \frac{\lambda^3}{N_c^2 \sin^2 \theta} |F_{hkl}|^2 \quad (1.42)$$

dove N_c e F_{hkl} sono il numero di celle unitarie per unità di volume del cristallo e il fattore di struttura del piano di riflessione (h,k,l). Il fattore di struttura misura l'intensità dell'interferenza dovuta allo scattering fatta sui vari piani di riflessione ed è data da:

$$F_{hkl} = \sum b_i e^{2\pi i(hx_i + ky_i + lz_i)} \quad i = 1, \dots, r \quad (1.43)$$

Per un cristallo di spessore l la frazione di neutroni diffusi può essere calcolata in prima approssimazione moltiplicando il valore l per il linear reflection coefficient I_{hkl} . In realtà, l'aumento dello spessore del monochromatore non porta sempre a un miglioramento del flusso a causa dell'aumento della probabilità di avere l'effetto di estinzione primaria. Questo fenomeno è causato dal back-scattering del raggio diffuso ed ha come conseguenza quella di ridurre l'intensità del fascio. Inoltre il raggio retro-diffuso non è in fase con il fascio incidente, perciò l'intensità di questo è diminuita per via dell'interferenza distruttiva. La teoria cinematica non tiene in considerazione l'effetto di estinzione primaria e per descriverla bisogna passare alla più complessa teoria della diffrazione dinamica (22) (23).

1.7 FILTRO

Dal monocromatore non vengono diffusi solo i neutroni con lunghezza d'onda λ desiderata, ma secondo la legge di Bragg vengono diffusi anche neutroni con lunghezze d'onda note come armoniche di ordine superiore, che sono $\lambda/2, \lambda/3, \dots, \lambda/n$. Le armoniche superiori di solito disturbano il fascio ed è necessario minimizzarle.

A questo scopo si possono usare lunghezze d'onda intorno a 1 \AA dove il contributo dovuto agli ordini superiori è trascurabile. La scelta di lunghezze d'onda così basse comporta lo svantaggio che se si devono analizzare strutture molto complesse i picchi di diffrazione si sovrappongono. Usando λ maggiori di 1 \AA , però, l'intensità delle armoniche superiori diventa molto importante, fino a superare in intensità il picco dovuto alla lunghezza d'onda principale. In questo caso diventa necessario usare dei metodi per eliminare questa contaminazione.

Sono descritti in letteratura numerosi filtri per neutroni, come filtri policristallini, filtri a cristallo singolo, selettori di velocità meccanici, filtri a risonanza. Il più pratico ed efficiente di questi è il filtro costruito con grafite pirolitica.

Nella grafite pirolitica i cristalliti sono orientati lungo una direzione specifica. L'asse esagonale c è altamente orientato così da sembrare un singolo cristallo mentre l'asse a ha un orientamento random. Se un fascio di neutroni parallelo all'asse c del cristallo lo attraversa, le lunghezze d'onda più piccole vengono diffuse secondo la legge di Bragg e deviate dal fascio, mentre le lunghezze d'onda più grandi vedono il filtro come trasparente perché $\lambda > 2d$.

La Figura 13 mostra la percentuale di neutroni trasmessi rispetto al vettore d'onda k

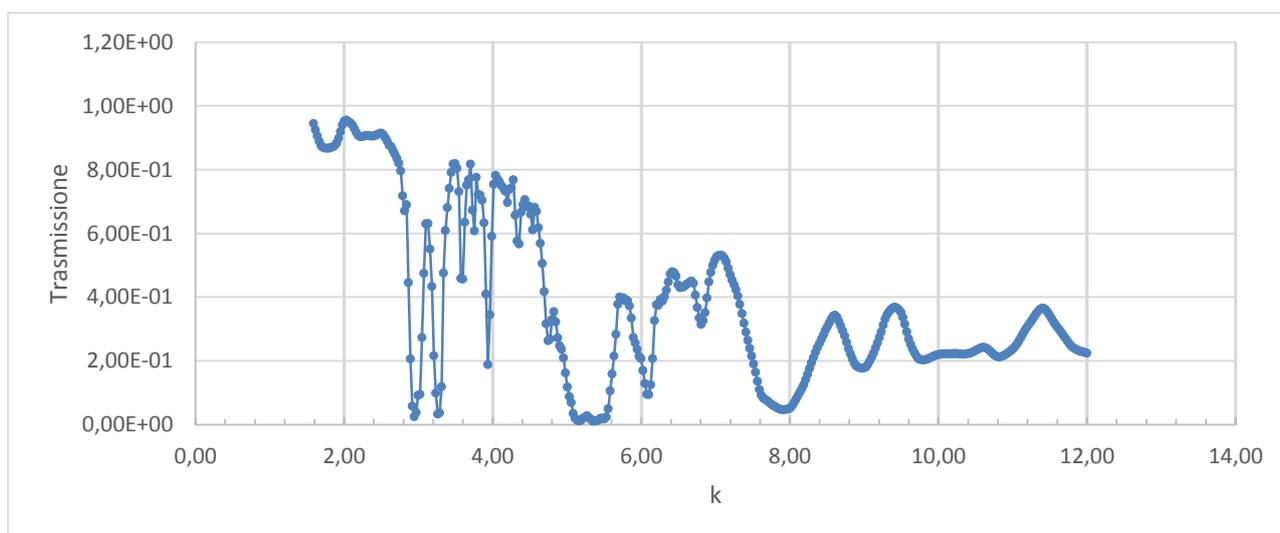


Figura 13 Grafico di trasmissione della grafite pirolitica altamente orientata PG (002) con correzioni del 3° ordine di spessore 0.05m (ILL-Grenoble)

1.8 STRUMENTI

Nelle precedenti sezioni sono stati passati in rassegna i più importanti componenti per modellare e filtrare un fascio di neutroni adatto a misure di diffrazione. Questi strumenti sono i componenti elementari per progettare la maggior parte dei più comuni spettrometri di neutroni non-polarizzati.

Di seguito verranno illustrati una serie di strumenti utilizzati per determinare la funzione di scattering $S(\mathbf{Q}, h\omega)$ sotto varie condizioni.

1.8.1 Spettrometro a tre assi

Lo spettrometro a tre assi (Figura 14) può essere considerato il capostipite di tutti gli spettrometri. In questa configurazione è possibile misurare sia il momento $\mathbf{Q}=\mathbf{k}_i-\mathbf{k}_f$ che l'energia $\hbar\omega=E_i-E_f$ dei neutroni trasferiti. Questo è possibile grazie alla monocromatizzazione del fascio di neutroni prima e dopo lo scattering sul campione. Tipicamente il monocromatore è fatto di grafite, germanio, rame o silicio. La focalizzazione è affidata sia ai monocromatori che alle guide neutroniche, questo a scapito della divergenza e di una peggiore risoluzione in \mathbf{Q} . Il secondo monocromatore è chiamato *analyzer* e nelle versioni più recenti è stato sostituito da un *multi-analyzer* costituito da più monocromatori in pila, in modo tale da analizzare le varie lunghezze d'onda. Questo strumento consente di utilizzare neutroni che vanno da energie prossime allo 0 (neutroni ultra-cold) fino a 200 meV.

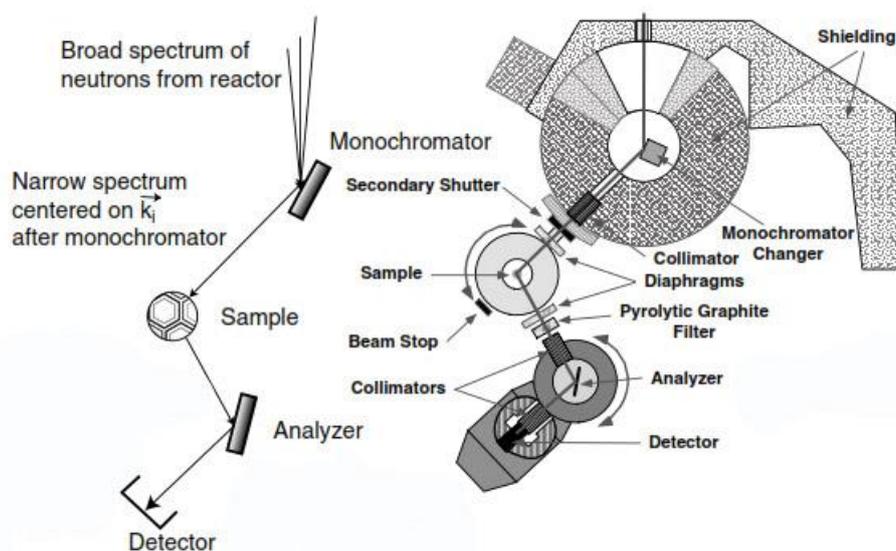


Figura 14 Spettrometro a tre assi

Uno dei maggiori problemi della spettrometro a tre assi è la grande contaminazione dovuta gli ordini di diffrazione superiore al primo. Questo strumento quindi necessita di un filtro per eliminare lo scattering spurio.

1.8.2 Backscattering spectrometers (BS)

Il primo esperimento BS è stato realizzato al reattore FRM a Monaco nel 1969. In un esperimento di back-scattering il fascio neutronico incide su un monocromatore appositamente orientato, che ne seleziona la lunghezza d'onda e quindi l'energia; attraversa una volta il campione, viene riflesso di 180° dagli analizzatori, attraversa nuovamente il campione e viene infine raccolto dai detector. L'idea di base della spettroscopia neutronica a retro-diffusione è di utilizzare un angolo di Bragg tra il fascio incidente e il monocromatore prossimo a 90° in modo da avere un'alta risoluzione energetica per il fascio incidente monocromatizzato. Differenziando la relazione tra la lunghezza d'onda λ e l'angolo di incidenza θ , e tra l'energia e la lunghezza d'onda stessa, si trova la risoluzione strumentale:

$$\lambda = 2d \sin \theta \quad (1.44)$$

dove d è la distanza interplanare dei cristalli del monocromatore. Questo metodo ha permesso di migliorare la risoluzione in energia degli spettrometri a neutroni di circa due ordini di grandezza, fino ad arrivare al range del μeV . Questo perché in geometria back scattering la risoluzione energetica ha un andamento di questo tipo:

$$\frac{\Delta E}{E} = 2 \frac{\lambda}{\Delta \lambda} = 2 \cot \theta \Delta \theta + 2 \frac{\Delta d}{d} \quad (1.45)$$

La risoluzione energetica dello strumento è quindi costituita da due termini: il primo, dipendente dalla cotangente, è minimo per $\theta = 90^\circ$ (valore che si ottiene con la configurazione di backscattering), il secondo dipende esclusivamente dalla qualità del cristallo. Più un cristallo si avvicina all'ideale, minore sarà la sua mosaicità, $\Delta d \rightarrow 0$.

Per variare la lunghezza d'onda al campione si può cambiare la temperatura del monocromatore in modo da modificare la distanza dei piani reticolari d .

In Figura 15 è mostrato uno schema di un diffrattometro a backscattering presente nella linea 16 dell'ILL di Grenoble in Francia.

Per ottenere la sezione d'urto di scattering totale della polvere, bisogna calcolare la sezione d'urto media su tutte le possibili orientazioni date dal vettore di reticolo τ .

$$\sigma_{\tau} = \frac{1}{4\pi} \int \sigma_{\tau} d\Omega = V e^{-2W} \frac{1}{V_0^2} \frac{\lambda^3}{4 \sin\theta} j_r |F_N(\tau)|^2 \quad (1.46)$$

Questa formula è stata ricavata dall'equazione (1.18) e j_r rappresenta la molteplicità delle riflessioni, che in cristallografia rappresenta il numero di piani reticolari equivalenti che contribuiscono allo scattering. Un esempio è la riflessione sul reticolo cubico (100) che ha come riflessione equivalenti (010), (001), ($\bar{1}$ 00), ($0\bar{1}$ 0) e ($00\bar{1}$) quindi $j_{100}=6$.

Di solito nei diffrattometri a polveri si usano neutroni termici. Il fascio viene riflesso dal monocromatore che seleziona una lunghezza d'onda dei neutroni tipicamente nel range tra 1 Å e 2 Å. Il fascio monocromatico viene collimato attraverso un soller o una guida neutronica, di solito sotto vuoto per ridurre il background dovuto allo scattering in aria. Il fascio dopo la diffusione sul campione viene analizzato da un *banana detector* che ha tipicamente 200 canali e copre una porzione angolare di 2θ .

In Figura 17 è mostrato il diffrattometro presente sulla linea D2B dell'ILL di Grenoble.

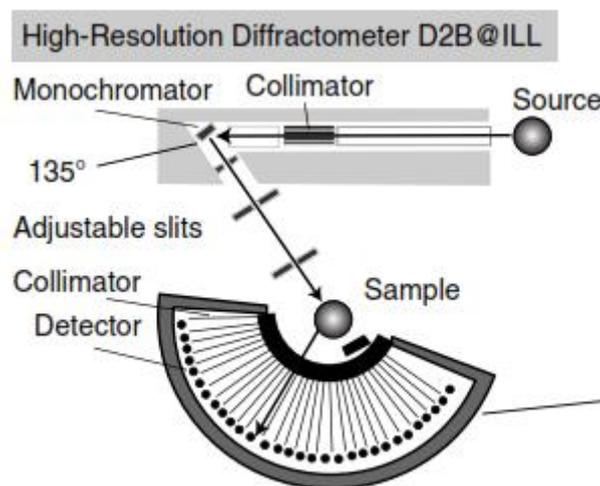


Figura 17 schema di powder diffractometers. La lunghezza d'onda e la dispersione angolare del diffrattometro è definita dal monocromatore secondo la legge di Bragg. L'intensità di scattering è registrata attraverso un detector (PSD) che copre un angolo di circa 160°. La polvere campione crea dei coni che integrati danno le linee del reticolo di diffrazione.

La risoluzione in lunghezza d'onda del diffrattometro di neutroni dipende dalla collimazione del fascio e dall'angolo di scattering del monocromatore. La FWHM di un campione di polveri può essere descritto dall'equazione:

$$\Delta^2_{FWHM} = U \tan^2\theta_{sample} + V \tan\theta_{sample} + W \quad (1.47)$$

dove i fattori U , W e V , sono funzioni complesse della divergenza del fascio e dell'angolo di scattering del monocromatore θ_{mono} . Il minimo di questa funzione si ottiene per

$$\tan\theta_{sample} = -\frac{V}{2U} \approx \tan\theta_{mono} \quad (1.48)$$

Quindi, quando l'angolo di scattering al campione è circa uguale all'angolo di scattering del monocromatore si ottiene la massima risoluzione del diffrattometro. La risoluzione non può essere migliore di 0.1° a causa dell'estinzione primaria nei cristalliti.

1.8.4 Small angle neutron scattering

Gli strumenti *Small Angle Neutron Scattering* (SANS) sono adatti ad investigare oggetti che vanno dalla scala nanometrica a quella micrometrica. Questi richiedono una particolare capacità dello strumento di misurare segnali con buona precisione per piccoli valori di Q . Attraverso la regola di Bragg possiamo scrivere la seguente equazione

$$Q = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta \quad (1.49)$$

da cui si ricava

$$Q = \frac{2\pi}{d} \quad (1.50)$$

Questo dimostra che più piccolo è il vettore Q più grande è la distanza tra piani reticolari d . Per analizzare strutture della grandezza tra 1 nm e 1000 nm, Q deve assumere valori che vanno da circa 10^{-3} a 10^{-1} \AA^{-1} . Questo è possibile solo per lunghezze d'onda che possono essere raggiunte attraverso angoli di scattering molto piccoli (SANS). Questo genere di strumenti è molto utilizzato in biologia per osservare molecole in cui l'idrogeno è stato sostituito dal deuterio in modo da avere un contrasto differente, o per vedere le variazioni di conformazione e i meccanismi di aggregazione di proteine.

In Figura 18 è mostrato lo schema di un diffrattometro SANS.

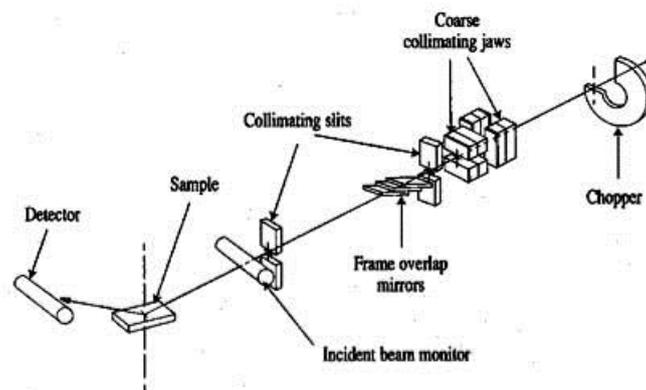


Figura 18 schema di un diffrattometro SANS

2 METODI MONTE CARLO

"During World War II physicists at Los Alamos Scientific Laboratory came a knotty problem on the behavior of neutrons. How far would neutrons travel through various materials? The question had a vital bearing on shielding and other practical considerations. But it was an extremely complicated one to answer. To explore it by experimental trial and error would have been expensive, time-consuming and hazardous. On the other hand, the problem seemed beyond the reach of theoretical calculations. The physicists have most of necessary basic data: they knew the average distance a neutron of a given speed would travel in a given substance before it collided with an atomic nucleus, what the probabilities were that the neutron would bounce off instead of being absorbed by the nucleus, how much energy the neutron was likely to lose after a given collision, and so on. However, to sum all of this up in practicable formula for predicting the outcome of a whole sequence of such events was impossible. At this crisis the mathematicians John Von Neumann and Stanislaus Ulam cut the Gordian knot with a remarkably simple stroke. They suggested a solution which in effect amounts to submitting the problem to a roulette wheel. Step by step the probabilities of the separate events are merged into a composite picture which gives an approximate but workable answer to the problem. The mathematical technique Von Neumann and Ulam applied had been known for many years. When it was revived for the secret work at Los Alamos, Von Neumann gave it the name "Monte Carlo". The Monte Carlo method was so successful on neutron diffusion problems that its popularity later spread. It is now being used in various fields, notably in operations research. "Da D.D.McCraken, "The Monte Carlo Method", ScientificAmerican, vol.192, 1955, pagg.90—95.

2.1 CODICI MONTE CARLO

In questo lavoro di tesi sono stati usati due diversi codici di programmazione che utilizzano tecniche Monte Carlo: MCNP5 1.60 (24) e McStas 1.12c (25).

Il primo è un software che simula il trasporto neutronico (oltre che di fotoni ed elettroni) ma non simula l'ottica neutronica, mentre il secondo simula solo processi di ottica neutronica. Nel caso in cui si debbano simulare processi ottici solo in una parte della geometria, mentre è necessario un trasporto completo in tutto il resto del problema i due programmi sono complementari.

Nello studio di questa tesi, è stato necessario l'utilizzo di entrambi i codici perché con MCNP5 si sono trasportati i neutroni dal core del reattore fino all'ingresso del canale laterale, mentre con McStas si è effettuata la progettazione del fascio neutronico per la facility di diffrattometria.

2.2 TECNICHE DI TRASPORTO DI PARTICELLE

Per descrivere il trasporto di neutroni esistono due differenti metodologie. La prima è il metodo deterministico che risolve l'equazione del trasporto di Boltzmann che descrive l'evolversi del moto dei neutroni entro la geometria di interesse. La risoluzione analitica dell'equazione di Boltzmann è molto complessa e risolvibile solo in pochi casi. Il secondo metodo è l'uso delle tecniche Monte Carlo. Questa tecnica non risolve esplicitamente l'equazione di Boltzmann ma ottiene le risposte simulando individualmente il percorso di ogni particella e ottenendo il comportamento medio del sistema di particelle (attraverso il teorema del limite centrale) dal comportamento medio delle particelle simulate. I metodi deterministici tipicamente forniscono informazioni abbastanza complete in tutto lo spazio delle fasi del problema. Il Monte Carlo fornisce informazioni solo su porzioni specifiche dello spazio richiesto dall'utente.

Il metodo Monte Carlo è particolarmente adatto a risolvere problemi tridimensionali e dipendenti dal tempo; è molto utile per i problemi complessi che non possono essere modellati da codici di calcolo che utilizzano metodi deterministici. Quindi, mentre il metodo deterministico usa un approccio esatto con un modello approssimato della realtà, il metodo Monte Carlo adotta un approccio statistico utilizzando modelli esatti della realtà sperimentale.

I singoli eventi probabilistici che compongono un processo sono simulati in modo sequenziale. Le distribuzioni di probabilità che disciplinano tali eventi sono statisticamente campionate per descrivere il fenomeno in maniera completa. Il processo di campionamento statistico si basa sulla selezione di numeri pseudo-casuali, prodotti da un algoritmo. Ogni particella nel metodo Monte Carlo è seguita dalla sorgente fino alla sua scomparsa che può avvenire tramite ad esempio assorbimento o uscire dalla zona di interesse. Distribuzioni di probabilità sono campionate utilizzando i dati di trasporto per determinare il risultato in ogni fase della vita della particella.

Ad esempio, simulare un evento di scattering di un neutrone nella materia significa specificare:

1. La posizione in cui avviene;

2. L'energia scambiata $\hbar\omega = E_f - E_i$;
3. L'angolo di diffusione θ , determinato dalla direzione incidente e da quella uscente del neutrone, legato al momento trasferito Q .

2.3 ESEMPI DI USO DI TECNICHE MONTE CARLO

Le tecniche basate sulla simulazione Monte Carlo adottano il campionamento di numeri random per ottenere una soluzione numerica del problema che sarebbe troppo complicata da risolvere con il metodo analitico.

Un esempio può essere dato dal calcolo degli integrali definiti:

$$\frac{1}{a-b} \int_a^b f(u) du \quad (2.1)$$

Ma $\int f(u)$ potrebbe non essere risolvibile analiticamente.

Un approccio numerico potrebbe consistere nel valutare la funzione $f(u)$ su intervalli definiti e sommare i risultati:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{n} \right) \sum_{i=1, a < u_i < b}^n f(u_i) \quad (2.2)$$

Se la funzione invece di essere valutata su intervalli regolari viene valutata in un gran numero di punti u_i random, si evitano eventuali bias di campionamento. Proprio su questo principio di scelta casuale dei punti u_i in cui valutare l'equazione (2.2) si basa l'approssimazione Monte Carlo per il calcolo degli integrali.

Le tecniche Monte Carlo possono anche essere usate per simulare l'assorbimento di una particella da parte di una lastra di materiale. Supponiamo che delle particelle, protoni, elettroni, neutroni o gamma, incidano normalmente su una piastra di materiale di spessore T . Supponiamo inoltre che ciascuna particella possa penetrare per una distanza x della piastra con una densità di probabilità:

$$f(x) dx = \alpha e^{-\alpha x} dx \quad (2.3)$$

α^{-1} rappresenta il libero cammino medio all'interno del materiale della piastra. La penetrazione può arrestarsi sia a causa di assorbimento, che a causa di una collisione che

fa variare la direzione del moto. Adottando un modello semplificato, supporremo che sia presente solo il fenomeno dell'assorbimento. Per semplificare le formule assumiamo, come unità di misura delle distanze, proprio il cammino libero medio:

$$f(x)dx = e^{-x}dx \quad (2.4)$$

Vogliamo calcolare la frazione di particelle che riescono a superare lo spessore della piastra. Con il Monte Carlo le nostre azioni necessarie sarebbero:

- Campionare x dalla densità esponenziale.
- Segnare il punteggio: 1 se $x > T$ e 0 se $x < T$.
- Dopo N campionamenti calcolare il punteggio medio e l'errore statistico.

T	N
3	1.91E3
5	1.47E4
10	2.20E6
20	4.85E10

Tabella 4 Calcolo del numero di campionamenti necessario per una precisione del 10% con il metodo Monte Carlo

Come si può notare dalla Tabella 4 per avere una precisione del 10% con un calcolo di Monte Carlo bisogna campionare un numero molto elevato di particelle; nel caso di uno spessore 20 volte la lunghezza del libero cammino medio il calcolo diventa molto impegnativo. Per questo motivo sono state implementate tecniche, dette di "riduzione di varianza" che servono per rendere il calcolo più efficiente, cioè ottenere un risultato con errore statistico basso nel minor numero di campionamenti possibile. Una tecnica di riduzione di varianza, chiamata campionamento d'importanza, consiste nel campionare la variabile aleatoria non più in maniera omogenea ma utilizzando una distribuzione di probabilità artificiale. In questo modo si può ridurre il numero di particelle necessarie al raggiungimento del 10% di errore come mostrato in Tabella 5

T	N
3	381
5	651
10	1329
20	2687

Tabella 5 Calcolo del numero di campionamenti necessario per una precisione del 10% con la tecnica di riduzione di varianza campionamento d'importanza.

I problemi Monte Carlo che non utilizzano la riduzione di varianza sono detti “analoghi”, perché il trasporto è simile a quanto avviene nella realtà, mentre i problemi con riduzione di varianza sono detti “non analoghi”.

I codici di trasporto Monte Carlo utilizzati per il lavoro di questa tesi (MCNP e McStas) hanno varie tecniche di riduzione di varianza, alcune delle quali verranno spiegate in seguito.

2.4 MCNP

MCNP (Monte Carlo N-Particle) è un codice che permette il trasporto di neutroni, fotoni ed elettroni, in ampi range energetici. Il codice è sviluppato dall’Università della California nel Los Alamos National Laboratory dal gruppo di diagnostica applicata (Group X-5), ed è il software Monte Carlo più usato per il trasporto di neutroni. Il codice può trasportare i neutroni di energia compresa tra 10^{-11} MeV e 20 MeV e fotoni ed elettroni con energia compresa tra 1keV e 1000 MeV. A MCNP sono associate librerie per le sezioni d'urto nucleari e atomiche, che vengono usate da MCNP per le informazioni relative alla probabilità di interazione tra le particelle e la materia. MCNP include nove classi di librerie:

1. Continuous-energy neutron interaction data;
2. Discrete reaction neutron interaction data;
3. Continuous-energy photoatomic interaction data;
4. Continuous-energy photonuclear interaction data;
5. Neutron dosimetry cross-sections;
6. Neutron thermal data;
7. Multigroup neutron, coupled neutron/photon, and charged particles masquerading as neutrons;
8. Multigroup photon;
9. Electron interaction data;

Le interazioni fisiche implementate nel codice MCNP per la simulazione includono tutti i processi di interazione neutronica per i quali siano presenti le sezioni d’urto nelle librerie. Per i neutroni termici è anche presente il “trattamento termico” per alcuni materiali. In generale, infatti, MCNP considera tutti i materiali come gas di Fermi, cioè come gas composti dagli elementi che formano il materiale. Questa è una approssimazione valida in quasi tutti i casi, eccetto per i neutroni termici che interagiscono con certi reticoli, in cui è importante la forma molecolare del materiale. Due esempi tipici sono l’acqua e la grafite, per cui si associa alla sezione d’urto totale il trattamento termico che corregge l’interazione a basse energie.

Nel caso dell'interazione con fotoni, MCNP include lo scattering incoerente, tiene in considerazione la fluorescenza dopo un evento di assorbimento fotoelettrico, simula lo scattering Compton, le interazioni fotonucleari, e la produzione di coppie.

Gli elettroni sono trasportati secondo il metodo detto "condensed history", che permette di seguire le particelle nonostante il numero di interazioni nella materia sia ordini di grandezza superiori a quelle delle particelle cariche. Il percorso degli elettroni è suddiviso in steps sufficientemente grandi perché le approssimazioni di scattering multiplo siano valide, ma non troppo perché il trasporto sia realistico. Le perdite di energia e i campi di direzione di volo vengono campionati dalle funzioni di densità di probabilità che provengono dalla teoria dello scattering coulombiano.

Lista Eventi

1	Scattering, produzione di un fotone
2	Fissione, produzione di un fotone
3	Cattura neutronica
4	Perdita di un neutrone
5	Scattering di fotone
6	Perdita di un fotone
7	Cattura di un fotone

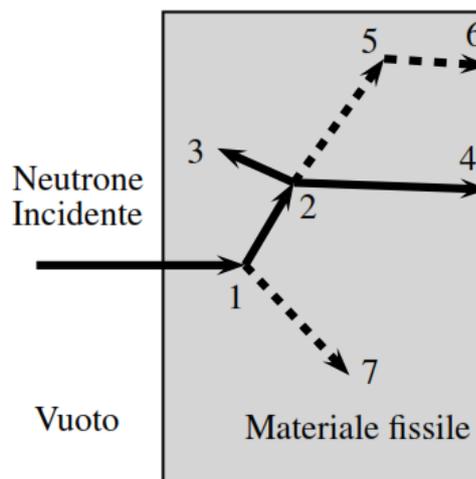


Figura 19 Esempi di interazioni possibili in un evento Monte Carlo

Per capire come avvenga il trasporto di particelle, in Figura 19 è rappresentata la storia casuale di un neutrone incidente in materiale fissile. Numeri compresi tra 0 e 1 sono campionati per determinare quale, e dove, l'interazione avrà luogo, in base alle funzioni di densità di probabilità che disciplinano i processi nei materiali interessati. Nell'esempio mostrato in Figura 19, un evento di collisione per il neutrone si verifica in posizione 1. Il neutrone è deviato nella direzione indicata, selezionata secondo le leggi dello scattering neutronico. Il fotone che è stato prodotto nella collisione viene immagazzinato temporaneamente per un'analisi successiva. Al punto 2 si verifica una fissione, con conseguente eliminazione del neutrone incidente e nascita di due neutroni in uscita e un fotone. Un neutrone e il fotone sono depositati in memoria per una successiva analisi. Il primo neutrone di fissione è catturato nell'evento 3 e termina la sua vita. Il neutrone che era stato memorizzato viene a questo punto trasportato fino alla sua uscita dalla geometria di interesse (evento 4). Il fotone prodotto nella fissione subisce una collisione all'evento 5 e fuoriesce nel punto 6. Il fotone residuo generato nel caso 1

è ora seguito e produce un evento di cattura al punto 7. La storia di questo neutrone è ora completa. Alla fine di ogni evento, si incrementa il risultato del calcolo e l'errore associato fino a che tutti le particelle completano la loro storia. Più aumenta il numero delle storie seguite, maggiore sarà la precisione ottenuta (26).

Il file di input di MCNP contiene queste quattro categorie di informazioni principali:

1. Geometria: per descrivere un modello geometrico si specificano le superfici e le celle che andranno a descrivere il sistema. Le superfici sono le equazioni che descrivono i contorni delle celle. Queste ultime sono parti di materiale omogeneo, che costituiscono l'unità geometrica attraverso cui avviene il trasporto neutronico.
2. Sorgente: in questa sezione verranno descritti il tipo e la geometria della sorgente, e, nel caso che non ci sia fissione, le particelle emesse, la loro energia e direzione di volo.
3. Materiali: in questa categoria l'utente elenca i materiali di cui è composto il modello geometrico e associa ad essi le librerie con le sezioni d'urto di interesse.
4. Tally: L'utente può incaricare MCNP di calcolare diverse quantità (tally) relative alla corrente di particelle, flusso di particelle, e deposizione di energia. I tally di MCNP sono normalizzati ad un neutrone simulato. Le correnti possono essere misurate in funzione della direzione attraverso qualsiasi insieme di superfici, segmenti di superficie, o somma di superfici del problema. È inoltre possibile calcolare flussi di particelle attraverso un qualsiasi insieme di superfici, segmenti di superficie, somma di superfici, celle, parti di celle, o somma di celle. I flussi possono anche essere ottenuti in una griglia sovrapposta alla geometria del problema (Mesh Tally). Tutti i tallies possono essere calcolati in funzione del tempo e dell'energia nel modo specificato dall'utente.

In aggiunta alle informazioni del tally, il file di output contiene tabelle di informazioni standard sintetiche per dare all'utente una migliore idea di come si svolge il problema. Queste informazioni possono fornire un'analisi della fisica del problema e l'adeguatezza della simulazione Monte Carlo. Se si verificano errori durante l'esecuzione di un problema, vengono forniti risultati dettagliati di diagnostica per il debug. Insieme a ciascun conteggio è stampato anche il suo errore statistico relativo. Tutti i risultati dei tally, fatta eccezione per i mesh tally, possono essere visualizzati graficamente, sia mentre il codice viene eseguito, sia in una modalità post-elaborazione.

2.4.1 La riduzione di varianza in MCNP

Come detto precedentemente, il modello più semplice di Monte Carlo per il trasporto di particelle è quello analogo: il programma segue ogni particella campionando le distribuzioni naturali per gli eventi fisici. Questo sistema funziona bene solo quando una frazione significativa delle particelle contribuisce al tally. Ci sono però casi in cui tale frazione è troppo bassa, e l'incertezza statistica associata al risultato lo rende non accettabile. I tallies di MCNP sono forniti nell'output insieme all'errore relativo R , definito come la deviazione standard dalla media diviso per la media stimata, R è

inversamente proporzionale a \sqrt{N} , dove N è il numero delle storie seguite; per un dato run di Monte Carlo il tempo T di run è proporzionale ad N , di conseguenza:

$$R = \frac{C}{\sqrt{T}} \quad (2.5)$$

Per migliorare la precisione dei risultati, o si aumenta il tempo di run, o si diminuisce la costante C , che dipende dai tallies e dalle scelte relative al campionamento, utilizzando le tecniche di trasporto non analogo. Queste permettono di seguire particelle che contribuiscono di più alla quantità richiesta più spesso di altre, campionando eventi rari a frequenze artificialmente alte e pesando opportunamente i tallies per non introdurre dei bias. Ciò significa che i risultati medi finali devono essere compatibili con quelli ottenuti con un corrispondente calcolo analogo. Nel run non analogo ogni particella rappresenta un numero w di particelle fisiche, che nella realtà seguirebbero altrettanti percorsi random diversi. MCNP sviluppa invece un'unica storia che "pesa" w . Alla fine i tallies sono normalizzati al peso delle particelle e al numero di storie estratte, in modo che l'utente possa adattare i risultati a qualsiasi intensità di sorgente. Se inoltre una particella è forzata a seguire un determinato percorso q volte più spesso che nella realtà, il suo peso viene diviso per q , e ciò permette appunto di non polarizzare il risultato. Esistono quattro tipi di riduzione di varianza:

1. Metodi di troncamento: eliminano zone dello spazio delle fasi non significative per la soluzione.
2. Metodi di controllo della popolazione: consistono nello "splitting" delle particelle o nella "roulette russa", accorgimenti che controllano il numero di campionamenti in una data regione;
3. Metodi di campionamento modificato: ogni evento di Monte Carlo può essere campionato da una arbitraria distribuzione di probabilità, invece che da quella fisica, purché i pesi siano corretti. Con questi metodi è possibile, ad esempio, estrarre particelle da una sorgente indirizzandole forzatamente verso una direzione (bias);
4. Metodi parzialmente deterministici, che stimano l'evento successivo in una storia o controllano la sequenza dei numeri random.

Le tecniche esplicitamente utilizzate nel trasporto di neutroni in questa tesi sono lo splitting geometrico e le weight windows, che appartengono al gruppo 2.

Nello splitting geometrico viene assegnata un'importanza ad ogni singola cella. Generalmente le celle vicino alla regione dove è posto il tally hanno importanza maggiore rispetto alle celle che si trovano distanti. Quando una particella lascia una cella con importanza I_1 e entra in una cella con importanza I_2 , a seconda del rapporto I_2/I_1 subirà diversi destini. Per esempio, se $I_2/I_1=2.75$ la particella entrante sarà divisa in tre particelle con il 75% di probabilità o in due particelle con il 25% di probabilità (splitting). Se invece $I_2/I_1=0.6$, la particella entrante sarà soppressa con una probabilità del 40% o potrà

sopravvivere con una probabilità del 60% (roulette russa). In ogni evento di splitting o di roulette russa il peso della particella sarà riarrangiato in modo da non portare bias al tally. L'importanza dovrebbe essere calcolata in modo da mantenere costante la popolazione di particelle in tutto il cammino dalla sorgente al tally.

La tecnica di riduzione di varianza con le weight windows permette di agire sulle particelle a seconda dell'energia, e controlla il peso di ciascuna particella. Per ogni cella è definito un peso massimo e un peso minimo, se una particella entra nella cella con un peso maggiore del massimo, subirà splitting con conseguente riduzione del peso in modo da rientrare nei limiti di peso definiti. Se la particella avrà un peso minore sarà soggetta alla roulette russa e quelle che resteranno in vita avranno un peso maggiore, superiore alla soglia. Le weight windows possono essere generate in modo automatico da MCNP5.

2.5 McSTAS

McStas è un software di simulazione di traccia neutronica che adotta tecniche Monte Carlo sviluppato in collaborazione tra gli istituti DTU Physics (Copenhagen DK), NBI KU (Copenhagen DK), PSI (Villigen CH) e ILL (Grenoble FR) ed è distribuito con licenza *open-source*. Il programma è compatibile con tutte le versioni dei sistemi operativi maggiormente usati come Microsoft Windows, Mac OSX, e con pacchetti già compilati per Linux di classe Debian e Red Hat Enterprise. Il software necessita solamente di un compilatore C/C++ ma per un utilizzo in ambiente grafico è richiesto anche un compilatore Perl, e un visualizzatore di plot che può essere Matlab, Scilab, o PGPLOT. È raccomandabile usare anche un programma MPI per poter utilizzare le librerie multi-core e i cluster di CPU velocizzando così il calcolo.

McStas è un software modulare che permette di simulare una serie di componenti come ad esempio: sorgenti, guide, chopper, campioni e detector. In aggiunta se i componenti già presenti all'interno del codice non dovessero essere sufficienti è possibile costruirsi di propri descrivendoli con linguaggio C++.

Grazie a questo programma è possibile simulare una facility neutronica assemblando i vari componenti in sequenza assegnando ad ognuno di loro un nome e dei parametri, che saranno poi salvati successivamente in un file *ASCII*. McStas poi tradurrà il file in linguaggio C, il quale sarà compilato in un file eseguibile.

McStas permette di costruire virtualmente esperimenti di diffrazione, spettrometria, riflettometria, small angle neutron scattering (SANS), back-scattering e neutron imaging.

2.5.1 Riduzione di varianza in McStas

Una simulazione McStas totalmente realistica richiederebbe che ogni neutrone fosse rappresentato singolarmente. In molti casi, però, solo una piccola frazione dei neutroni

generati dalla sorgente arriveranno al monitor finale che è analogo a un detector sul quale McStas registra i risultati, e seguire singolarmente anche i neutroni meno interessanti rispetto al risultato richiesto significherebbe una grande perdita di tempo-macchina e quindi un calcolo poco efficiente.

Analogamente a MCNP, un modo per accelerare il calcolo è quello di introdurre un fattore di peso per ogni neutrone simulato e aggiustare questo fattore di peso in base al percorso dello stesso. Se per esempio la riflessività di un certo componente ottico è del 10%, e solo i neutroni riflessi sono utili per la simulazione, il neutrone avrà un fattore di peso che sarà 0.10 quando attraverserà questo componente, e ogni neutrone sarà riflesso. Questo è in contrasto con la realtà, in cui solo un neutrone sarebbe riflesso in media per 10 neutroni entranti nel componente ottico. Questa tecnica di riduzione di varianza permette dunque di avere più statistica nello stesso tempo di calcolo. Naturalmente il risultato finale dev'essere normalizzato tenendo conto dei fattori di peso associati a ciascuna particella che raggiunge il monitor, affinché non risulti polarizzato a causa di tecniche che, invece, devono incidere solo sull'errore associato al risultato.

In aggiunta a questa tecnica, la maggior parte dei componenti utilizzati in McStas funziona in modo da eliminare tutti i neutroni che non hanno la possibilità di raggiungere il componente successivo per ragioni geometriche.

Da qui in poi, in analogia con la terminologia impiegata in ottica e in McStas, si indica con "raggio" l'equivalente di "traccia" in MCNP, cioè parte del cammino del neutrone associato al suo fattore di peso.

2.5.2 Schema di simulazione di McStas

Il processo di *ray tracing* attraverso il software McStas può essere così brevemente riassunto:

1. Generazione di un raggio dal componente *sorgente* con parametri: posizione, momento, peso (\mathbf{r} , \mathbf{k} , w), assegnati campionando in modo casuale le distribuzioni di probabilità che costituiscono il settaggio della sorgente.
2. Propagazione del raggio fino al prossimo componente dello strumento descritto nel file:
 - se il componente è uno strumento ottico (guide, selettori di energie, collimatore, ecc.) o un campione i parametri del raggio verranno modificati in accordo con le istruzioni del componente.
 - Se il componente è un detector, il file dove il monitor registra gli eventi sarà aggiornato con i parametri del raggio.
3. Il programma ripete lo step 2. N volte finché:
 - non ci sono più componenti nel file strumenti.

- Il fattore di peso scende al di sotto di una soglia, stabilita per eliminare raggi che sarebbero insignificanti per il risultato; a questo punto il raggio viene eliminato.
- Il raggio viene annullato per qualche altra ragione, come ad esempio l'impossibilità di raggiungere il componente successivo per ragioni geometriche o interazioni fisiche.

La somma dei pesi dei neutroni che incideranno sul componente detector rappresenterà l'intensità totale del fascio rivelata dal detector stesso.

2.5.3 Errore statistico in McStas

In un tipica simulazione, il risultato sarà costituito dal conteggio del numero di storie di neutroni (raggi) con differenti pesi che raggiungono il detector. La somma dei pesi darà una stima del numero medio dei neutroni che arrivano al rivelatore in un esperimento reale. Per dare una stima all'errore statistico si può procedere in questo modo: sia N il numero di neutroni rivelati. La deviazione standard sarà data da $\sigma(N)=\sqrt{N}$.

Quindi, l'incertezza statistica della intensità di corrente osservata diventa:

$$\sigma(I) = \frac{I}{\sqrt{N}} \quad (2.6)$$

Tuttavia, McStas simula i raggi neutronici con pesi (w) differenti; assumendo che N e w siano indipendenti, e sapendo che entrambi i parametri assumono una distribuzione gaussiana, l'errore statistico sarà dato dalla formula:

$$\sigma^2 = \frac{N}{N-1} \left[\sum_i^N \omega_i^2 - \left(\frac{\sum_i^N \omega_i}{N} \right)^2 \right] \quad (2.7)$$

Dove ω_i è il peso dell' i -esimo raggio e N è il numero totale di neutroni.

Per un campione sufficientemente grande la formula sopra citata può essere approssimata con:

$$\sigma^2 \approx \sum_i^N \omega_i^2 \quad (2.8)$$

2.5.4 Simulazione con McStas

Un run McStas inizia con il comando “*mcgui*” a terminale, che fa apparire la schermata mostrata in Figura 20. Nella barra iniziale è disponibile un menù (Neutron site) dove sono presenti degli strumenti già realizzati da usare come tutorial.



Figura 20 Interfaccia grafica iniziale del programma McStas

Per simulare un nuovo strumento si usa il tasto *Edit/New* che fa accedere ad una interfaccia come mostrato in Figura 21.

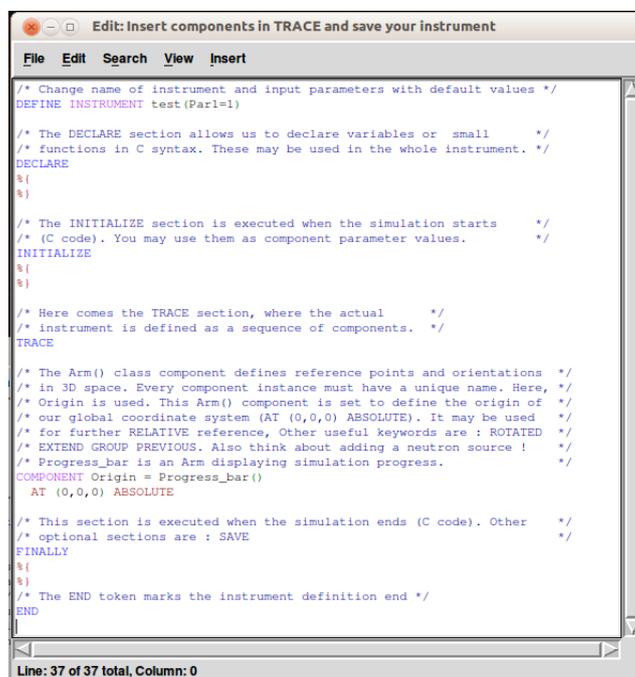


Figura 21 Interfaccia McStas dove si scrive il codice sorgente per la descrizione dello strumento

Nella sezione *DEFINE INSTRUMENT* viene definito il nome dello strumento con i principali parametri che possono essere cambiati nel pannello di *RUN*.

Nella sezione *DECLARE* vengono dichiarate le variabili poi utilizzate all'interno dell'input file.

Nella sezione *INITIALIZE* si possono scrivere le funzioni e assegnare i valori ai parametri che saranno poi utili successivamente.

In *TRACE* viene scritto il programma vero e proprio, cioè la successione dei vari componenti che costituiscono lo strumento. Il menù *INSERT* permette di accedere a tutti i componenti all'interno di McStas.

FINALLY è una parte opzionale di solito utilizzata per richiamare funzioni e per stampare su schermo valori di particolare interesse.

L'input file dev'essere concluso con la parola *END* (27).

I componenti utilizzati per la descrizione della facility di interesse per questa tesi verranno descritti nel Capitolo 3.

3 SIMULAZIONE DEL FASCIO PER DIFFRATTOMETRIA AL REATTORE TRIGA DI PAVIA: STRUMENTI E METODI

Questo capitolo è dedicato ai metodi utilizzati per la simulazione del fascio neutronico, allo scopo di costruire un diffrattometro per polveri. Sono stati descritti tutti i vari componenti utilizzati per la simulazione del diffrattometro e i vari metodi per accoppiare i risultati MCNP5 con il codice McStas 1.12c.

3.1 CREAZIONE DEL FILE DI SORGENTE

La simulazione Monte Carlo del fascio di neutroni per la costruzione di una facility di diffrattometria di polveri è stata realizzata con il programma McStas (28). La sorgente è stata creata prendendo i dati provenienti dalla simulazione sviluppata con il codice MCNP.

L'accoppiamento tra i due software può essere effettuato in tre modi (29):

1. Attraverso la card SSW (Surface Source Write) del programma MCNP5. Questa card registra la posizione, l'energia, e il tempo in cui ogni neutrone attraversa la superficie indicata nella card SSW, e salva i dati in un file binario.

McStas tramite un componente specifico *Virtual_MCNP_ss_input* legge il file creato da MCNP. Questo componente ha il compito di convertire le unità di misura di MCNP (centimetri, shakes e MeV) nelle unità di misura di McStas (metri, secondi e Angstrom), ed ha anche l'incarico di ruotare gli assi di riferimento. Ciò è importante perché McStas usa l'asse z come asse della beamline, mentre la simulazione MCNP del reattore di Pavia ha l'asse z diretto verso l'alto. Il passo successivo è far registrare ad un monitor di McStas i dati provenienti dalla sorgente così convertita, usando ad esempio il componente chiamato *Monitor_nd*. Caratteristica interessante è anche la possibilità di ricreare un file MCNP

partendo dalle simulazioni McStas attraverso il componente *Virtual_MCNP_ss_Guide*. Questo può essere utile se si ha intenzione di simulare le schermature della facility in MCNP.

2. Attraverso la card PTRAC (Particle TRaCk output) di MCNP5. Questa card genera un file di output nel quale verranno scritte tutte le caratteristiche delle particelle.

Per creare un file di più ridotte dimensioni si possono impostare dei parametri della card PTRAC per filtrare solo gli eventi d'interesse, come mostrato in Tabella 7

Mnemonic	Variabili	Descrizione
X	XXX	Posizione della particella coordinata x
Y	YYY	Posizione della particella coordinata y
Z	ZZZ	Posizione della particella coordinata z
U	UUU	Direzione della particella coseno rispetto l'asse x
V	VVV	Direzione della particella coseno rispetto l'asse y
W	WWW	Direzione della particella coseno rispetto l'asse z
ERG	ERG	Energia della particella MeV
WGT	WGT	Peso della particella
TME	TME	Tempo (shake)
VEL	VEL	Velocità (cm/shake)
IMP1	FIML(1)	Importanza della cella per neutroni
IMP2	FIML(2)	Importanza della cella per fotoni
IMP3	FIML(3)	Importanza della cella per elettroni
ICL	ICL	Numero della cella
JSU	JSU	Numero della superficie
NCP	NCP	Numero di collisioni per branch

Tabella 6 Parole chiave per filtrare gli eventi nella ptrac card di MCNP

In questa tesi ad esempio si è usata la card:

```
ptrac file=ascwrite=alltype=n filter=510.jsu 1e-9 2e-8.erg
```

Il significato della stringa è: scrivi un file ASCII dove vengono raccolti solo i dati provenienti da neutroni che attraversino la superficie 510 con energia compresa tra 10^{-9} MeV e $2 \cdot 10^{-8}$ MeV.

McStas ha la possibilità di leggere questo file attraverso l'utilizzo del componente *Virtual_mcnp_output* che poi verrà convertito in un file sorgente di McStas.

3. Il terzo metodo consiste nell'accoppiare l'output di un tally di corrente di MCNP5 con la componente sorgente di McStas.

Il metodo scelto è stato il terzo perché gli altri due hanno presentato i seguenti svantaggi:

- a) il primo metodo è stato introdotto di recente nell'ultima versione di McStas e presenta ancora qualche bug, quindi è preferibile attendere una versione più stabile;
- b) il secondo metodo crea file ASCII troppo grandi, quindi difficili da gestire, e il tempo di calcolo della componente in McStas *Virtual_mcnp_output* è troppo lungo, perché questa simulazione non può essere eseguita in modalità multi-core. Inoltre, inserendo dei filtri per snellire il file ASCII, sono comparsi problemi di normalizzazione e anomalie nelle correnti di neutroni calcolate.

Riassumendo, si è svolto un calcolo MCNP con un tally dettagliato di corrente neutronica in una posizione adeguata e il risultato, in bin energetici e angolari, è stato fornito a McStas come input. Di seguito sono descritti i vari passaggi di questa fase del progetto.

3.1.1 Accoppiamento di MCNP5 e McStas

Attraverso il programma MCNP5 sono stati valutati i possibili posizionamenti della sorgente di neutroni con funzione di input per McStas per la successiva simulazione del diffrattometro. In Figura 22 sono mostrate le quattro posizioni dove sono stati inseriti i tally.

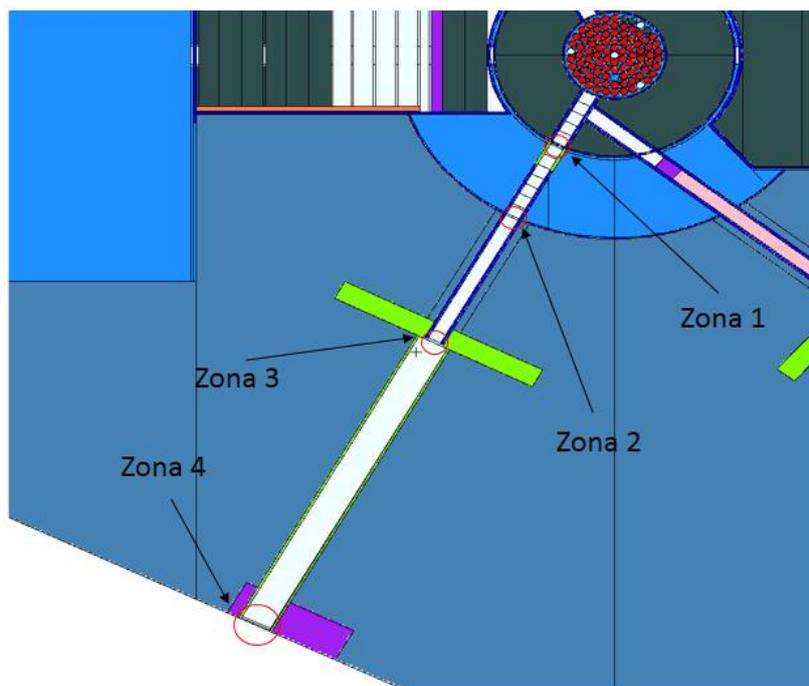


Figura 22 Celle dove sono stati eseguiti i tally di flusso per valutarne l'intensità

In Tabella 7 sono riportati i flussi neutronici calcolati nelle quattro zone del canale D, prescelto come canale di estrazione del fascio dal reattore. Nella zona 1 il flusso di neutroni termici è ovviamente più alto e il 55,6% dei neutroni provenienti dalla sorgente è nel range energetico termico.

	Energia(MeV)	Zona 1	Zona 2	Zona 3	Zona 4
Termico	< 2E-7	6,34E+11	7,03E+10	3,16E+09	2,99E+08
Epitermico	2E-7<n<5E-1	4,43E+11	3,39E+10	4,53E+09	5,65E+08
Fast	>5E-1	7,14E+10	7,66E+09	1,38E+09	2,36E+08
Totale	Totale	1,14E+12	1,12E+11	9,07E+09	1,10E+09
	Termico/Totale	55,61%	62,77%	34,84%	27,18%

Tabella 7 Flusso nel canale D in quattro posizioni. I flussi sono in n/cm² s

Poiché nelle zone 2 3 e 4 il flusso termico non è sufficientemente alto, si è deciso di installare il primo componente del diffrattometro nella zona 1.

Con MCNP5 è stata quindi calcolato il flusso in funzione di bin energetici da 1 meV e si è ottenuto lo spettro dei neutroni nel range termico, con la tipica forma maxwelliana. Il fit dello spettro (Figura 23) è stato effettuato con la funzione:

$$I = a \cdot T^{-\frac{3}{2}} \cdot E \cdot e^{-\frac{E}{T}} \quad (3.1)$$

I parametri di a e T così ottenuti sono mostrati in Tabella 8. La temperatura in kelvin corrispondente è 350.5 K.

	Valore	Errore Standard
a	3,7206E6 (K ³ /MeV) ^{1/6}	1,850E4
T	3,0204E-8 MeV/K	2,09119E-10

Tabella 8 Valori provenienti dal fit maxwelliano dei dati simulati con MCNP5

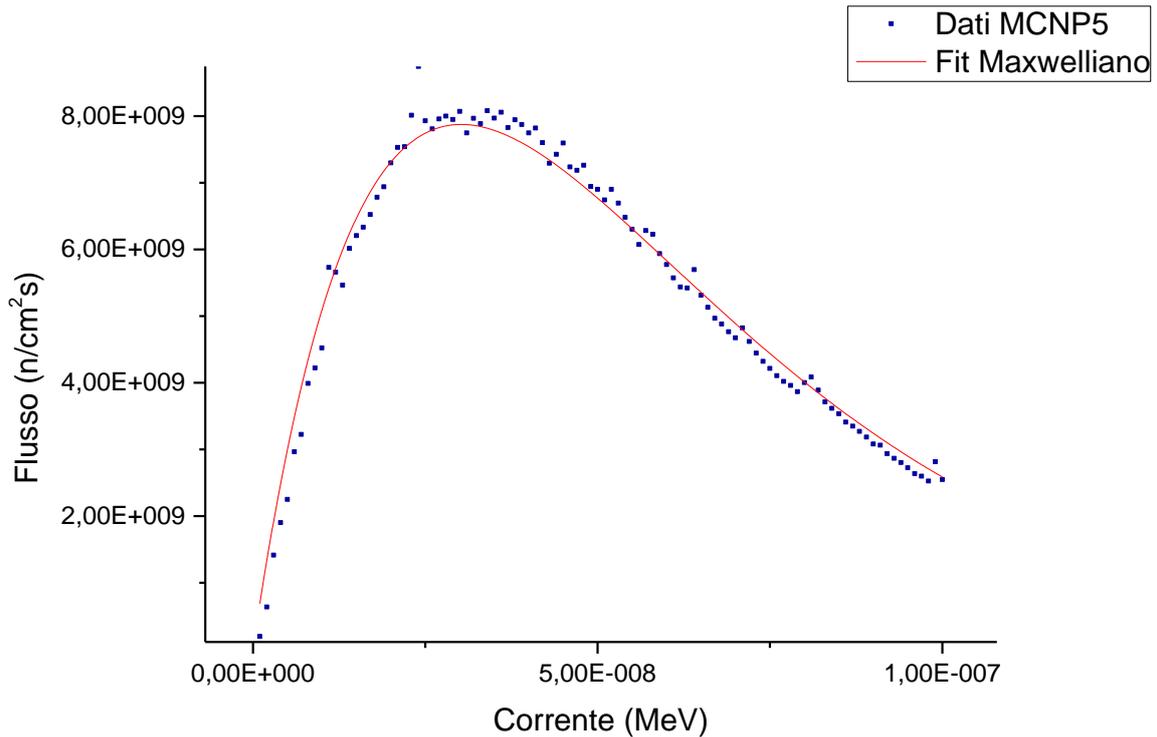


Figura 23 Spettro neutronico nel range termico nella zona 1 di Figura 22, i quadrati sono i dati di MCNP la linea continua è il fit con la funzione maxwelliana.

Per calcolare la divergenza angolare del fascio in funzione dell'energia dei neutroni, si è richiesto un secondo tally di corrente attraverso la superficie interessata, suddividendolo in bin energetici da 1 meV e in bin angolari da 0.1° . A causa della bassa statistica in ciascun bin energetico e angolare, non è stato possibile far convergere questo tally; per ovviare al problema, si è verificato che i neutroni termici di diverse energie avessero uno spettro angolare simile: si è quindi richiesto un tally di corrente con 3 bins energetici più ampi (da 0 a 50 meV, da 50 meV a 100meV, e da 100meV a 150 meV) con la stessa divisione angolare in bin da 0.1° . Queste tre distribuzioni sono state poi confrontate come mostrato in Figura 23. Il grafico mostra che le distribuzioni sono in accordo entro il 12%, valore accettabile considerando che alcuni punti sono affetti da errore statistico intorno al 10%.

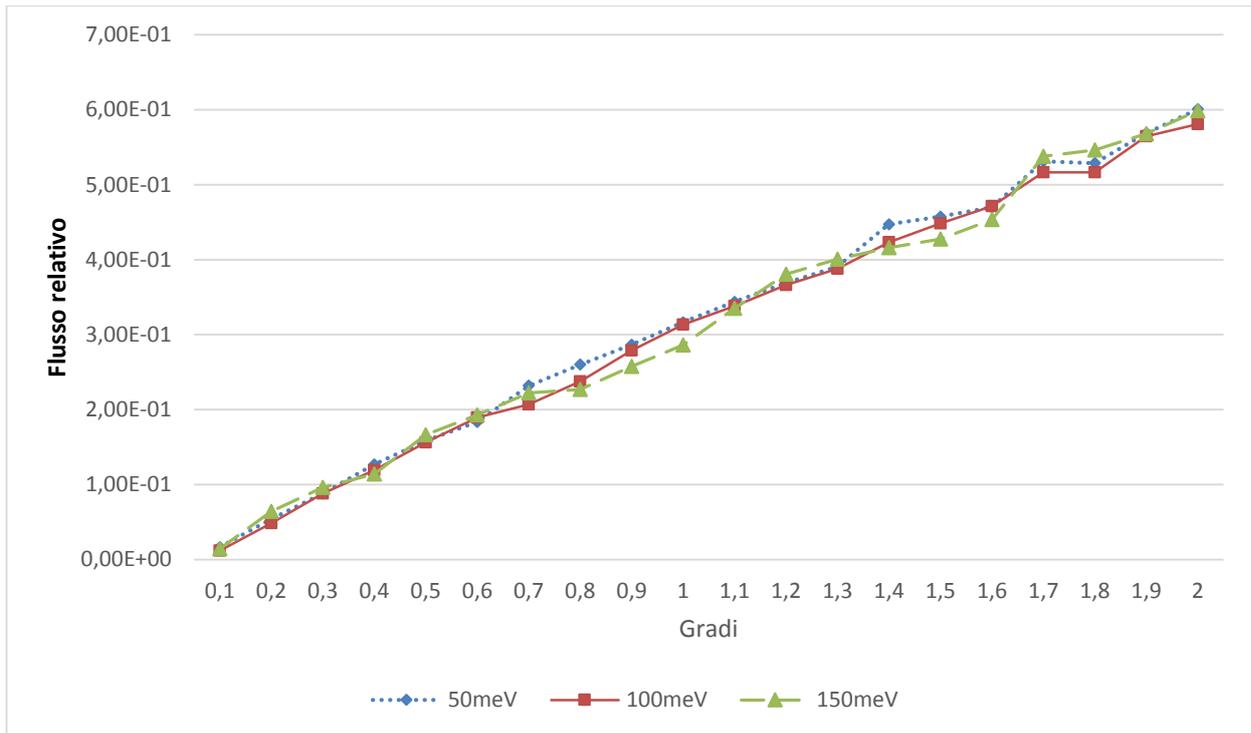


Figura 24 Confronto tra tre distribuzioni angolari ottenute per neutroni in tre intervalli energetici diversi, normalizzate allo stesso valore del primo punto.

La distribuzione angolare del fascio neutronico nella posizione scelta è stata quindi ottenuta dal calcolo suddetto, mediando le tre distribuzioni calcolate.

Attraverso il componente McStas *Source_gen* è stato possibile definire la sorgente di neutroni per McStas, utilizzando i risultati di MCNP e selezionando i parametri come riportato in Tabella 9.

Parametro	Valore
Radius	0.075
Dist	1.3
Xw	0.16
Yh	0.16
Lmin	0.1
Lmax	2.3
T1	350.5
I1	5.74E12

Tabella 9 Parametri usati nel componente *Source_gen*

Il parametro *Radius* è il raggio della superficie che costituirà la sorgente. I parametri *Dist*, *Xw* e *Yv* corrispondono alla divergenza angolare del fascio; tramite questi parametri è possibile trovare l'angolo α (Figura 25) che rappresenta la massima apertura angolare consentita dalla geometria. In questo caso corrisponde a 6.8° . *I1* è una costante moltiplicativa per impostare l'intensità della corrente del fascio



Figura 25 Schema per il calcolo della divergenza angolare del fascio neutronico

I parametri *Lmin* e *Lmax* rappresentano la minima e la massima lunghezza d'onda selezionabile da McStas e *T1* è la temperatura della maxwelliana

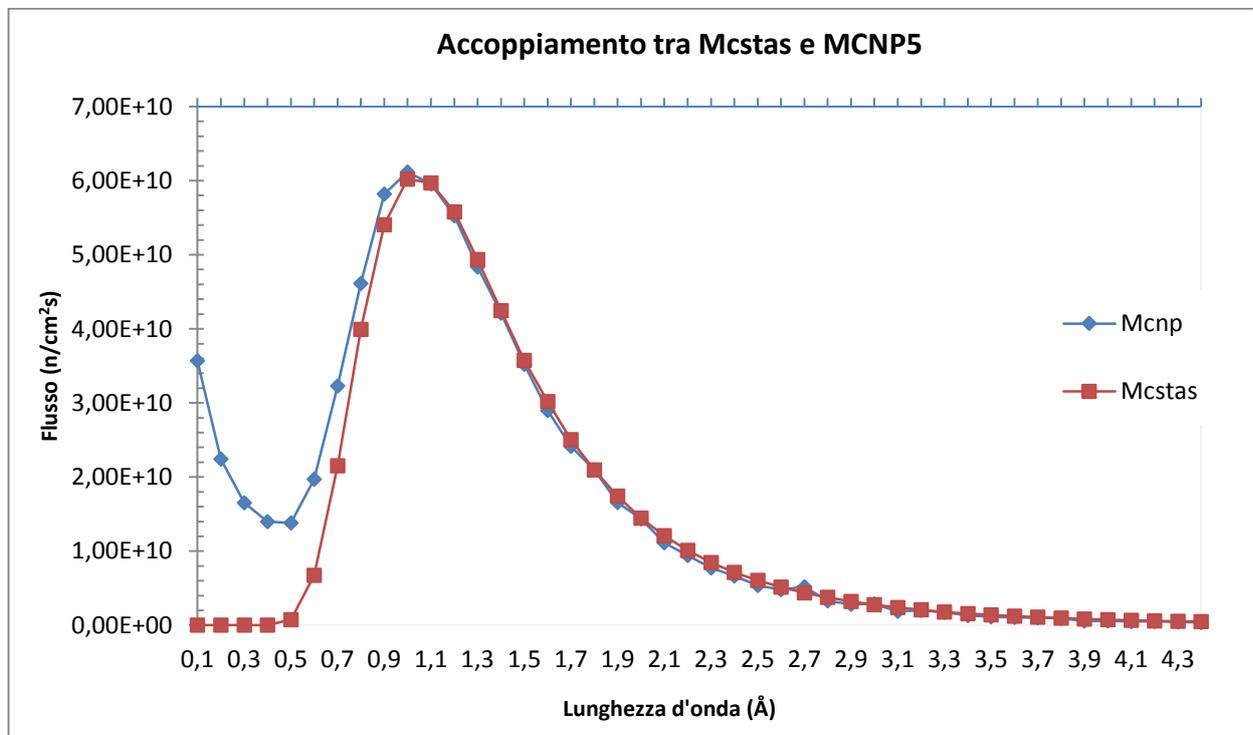


Figura 26 Grafico del flusso in simulato in MCNP5 confrontato con il flusso simulato in McStas con il componente *Source_gen*

Nella Figura 26 Grafico del flusso in simulato in MCNP5 confrontato con il flusso simulato in McStas con il componente *Source_gen* è riportato il confronto tra il flusso calcolato con MCNP5 e con McStas. Lo scarto tra i due grafici nel range energetico di interesse, cioè tra 1 Å e 2 Å è minore del 3%. Nella parte iniziale dello spettro tra 0.1 Å e 0.8 Å c'è una differenza molto evidente, dovuta al fatto che il componente di McStas *Source_Gen* simula solo i neutroni termici perché gli epitermici e i fast non contribuiscono in modo significativo negli esperimenti di diffrazione da polveri.

Nella posizione 1 è presente un'alta componente di neutroni epitermici e veloci, quindi è necessario posizionare una serie di filtri neutronici per diminuire lo spettro neutronico ad alte energie, fonte di rumore per il diffrattometro. Inoltre un consistente flusso epitermico e veloce uscente dal canale richiederebbe schermi per la radioprotezione più complessi, costosi e ingombranti.

I materiali tipicamente utilizzati per essere impiegati come filtri per i neutroni veloci sono lo zaffiro, il bismuto, l'acqua pesante e la grafite.

Lo zaffiro (0,0,1) Al_2O_3 , con l'asse orientato parallelamente al fascio, ha il minimo di scattering di Bragg nella regione termica. La cella unitaria del cristallo di zaffiro ha una forma romboedrica. Può essere utilizzato sia a temperatura ambiente che raffreddato per aumentarne la trasmissione dei termici.

Il bismuto è un semimetallo del gruppo V_B ; nella sua forma cristallina ha una cella unitaria romboedrica con due atomi di bismuto per posizione reticolare. Spesso questo cristallo viene usato anche in configurazione policristallina. Il bismuto grazie alla sua grande sezione d'urto per i fotoni viene usato come filtro per i fotoni provenienti dal core del reattore.

L'acqua pesante e la grafite vengono usati come moderatori, quindi sono candidati ottimali per poter abbassare la temperatura del fascio di neutroni e aumentare il numero dei neutroni termici a discapito dei neutroni veloci.

Si è deciso di effettuare le simulazioni attraverso i filtri sia con McStas che con MCNP aggiungendo le appropriate sezioni d'urto nelle librerie di quest'ultimo. Tali sezioni d'urto sono corredate dal trattamento termico (vedi capitolo 2) per tener conto dell'effetto della struttura cristallina sull'interazione neutronica. La sezione d'urto del bismuto è mostrata in Figura 27.

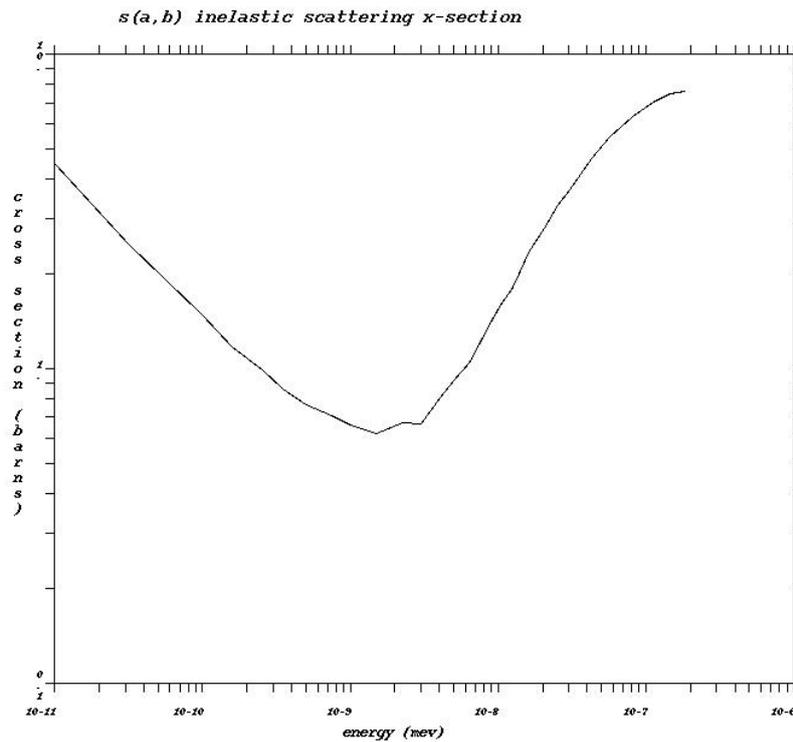


Figura 27 Sezione d'urto con trattamento termico del bismuto cristallino ricavata da dati sperimentali e inserita in MCNP5

	Elemento/ vuoto %	Elemento/ vuoto %	Elemento/ vuoto %	Elemento/ vuoto %
	Termico	Epitermico	Fast	Fotoni
Vuoto				
	100,00	100,00	100,00	100,00
Zaffiro				
5 cm	96,93	20,89	23,62	28,19
10 cm	80,99	5,70	7,37	10,51
15 cm	68,09	2,11	2,84	3,73
20 cm	52,92	0,91	1,08	Nd
Grafite				
5 cm	15,90	11,06	30,62	48,07
10 cm	6,12	2,31	10,97	Nd
15 cm	3,33	0,99	4,78	Nd

Bismuto				
1 cm	92,91	81,95	82,77	39,13
2 cm	72,82	61,47	74,26	21,32
3 cm	58,06	48,67	64,50	11,04
4 cm	46,75	44,98	55,45	7,03
5 cm	38,81	31,70	41,93	4,67
10 cm	14,04	11,48	22,36	0,65
Acqua pesante D2O				
1 cm	91,52	78,98	84,75	87,10

Tabella 10 Valori percentuali calcolati facendo il rapporto tra il valore del flusso nel canale D simulato con diversi spessori di zaffiro, grafite, bismuto, e acqua pesante sul flusso simulato con il canale vuoto.

I flussi indicati nella Tabella 10 sono stati calcolati con MCNP5 posizionando diversi spessori di materiale prima del tally di flusso. Si vede che la configurazione con 5 cm di zaffiro permette di abbattere in misura maggiore le componenti non desiderate del fascio e allo stesso tempo attenua molto poco la parte termica.

Questa configurazione è stata anche simulata con McStas. A questo riguardo è emerso un problema: in condizioni simili i risultati non sono in accordo, come illustrato in Figura 28: con 5 cm di zaffiro la simulazione MCNP5 dà un valore di circa il 97% dei neutroni termici trasmessi, mentre con lo stesso spessore McStas stima il 79%.

Evidentemente la discrepanza risiede nelle sezioni d'urto utilizzate; quelle inserite in MCNP sono state sperimentalmente ottenute e descritte in formato ACE (adatto ad MCNP), da un gruppo della Comisión Nacional de Energía Atómica (Bariloche, Argentina). Il confronto di queste sezioni d'urto con altri dati sperimentali si sta ancora portando avanti, in particolare il confronto con le sezioni d'urto di McStas è un progetto che partirà a breve. In generale, i fattori che possono influenzare la costruzione di queste librerie possono essere i diversi tipi di cristalli di zaffiro utilizzati, dalla loro orientazione rispetto al fascio e dalle temperature a cui sono stati fatti gli esperimenti.

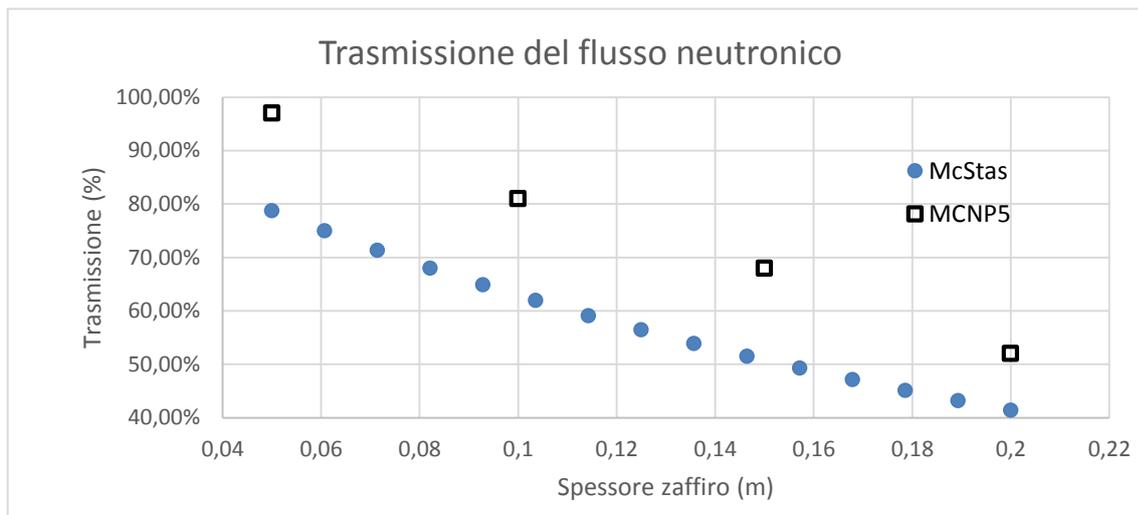


Figura 28 Grafico della trasmissione dei neutroni termici attraverso un cristallo di zaffiro calcolato con McStas e MCNP5

Per questo progetto di tesi si è scelto allora di adottare la scelta più conservativa in termini di flusso disponibile, quindi sono stati usati i valori provenienti da McStas con 5 cm di zaffiro.

Data l'alta sezione d'urto del bismuto per interazione con i fotoni, e la bassa sezione d'urto per interazione con neutroni termici, è stato inserito anche un filtro di 1 cm di bismuto in modo da diminuire il fondo di γ proveniente dal core del reattore, senza interferire troppo con il flusso termico.

3.2 SISTEMA DI GUIDE NEUTRONICHE

Per ottimizzare il flusso neutronico è necessario introdurre una guida di neutroni tra la sorgente e il campione, in questo caso, tra i filtri di zaffiro e bismuto e il campione. In questa tesi sono state simulate quattro diverse geometrie di guide:

1. Guida rettilinea.
2. Guida "tapering".
3. Guida parabolica.
4. Guida ellittica.

La guida rettilinea è stata usata come termine di paragone per le altre guide.

3.2.1 Guida rettilinea

La guida rettilinea è il più comune tipo di guida per trasporto di neutroni in una facility per ottica neutronica (Figura 29).

La geometria di una guida rettilinea non ha un sistema di focus e i neutroni intrappolati all'interno compiono molte riflessioni sulle pareti. Questo su lunghe distanze, comporta una perdita di neutroni perché il coefficiente di riflessione delle pareti per i neutroni non è il 100%, anche se sono soddisfatte le condizioni energetiche e angolari per subire una riflessione all'interno della guida. Questo tipo di guida non comporta un aumento di divergenza angolare.

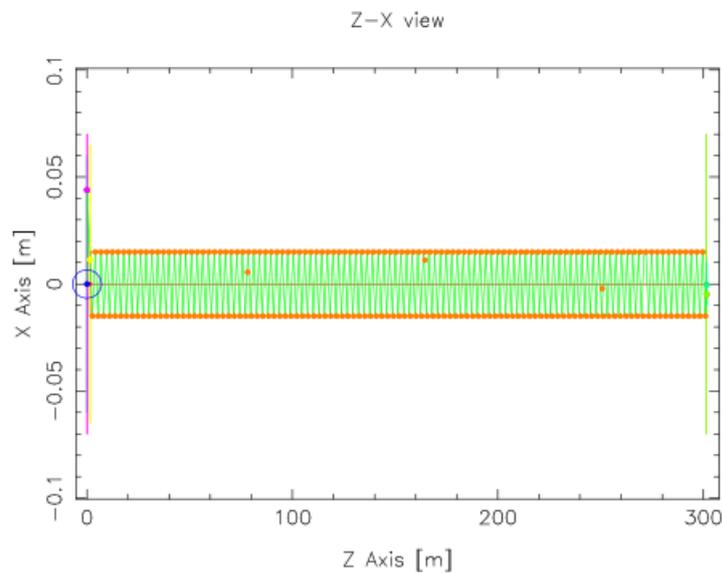


Figura 29 Schema di una guida rettilinea simulata in McStas. In verde si può vedere l'alto numero di riflessioni del raggio neutronico sulla guida (arancio).

3.2.2 Guida "tapering"

La guida tapering, mostrata in Figura 30, ha un geometria più complessa rispetto alla guida rettilinea, infatti le sue pareti vanno a restringersi sulla parte finale. Questa configurazione permette di focalizzare il fascio sul componente successivo, però ha anche l'effetto di far aumentare la divergenza del fascio ad ogni riflessione sulla guida. La divergenza angolare incrementa con il doppio dell'angolo σ che la guida forma tra la linea centrale della guida a e la linea che congiunge la sorgente al target b .

$$\sigma = a \cos \left(\frac{a}{b} \right) \quad (3.2)$$

In questa configurazione, la guida trasmette meno neutroni rispetto alla guida rettilinea, ma il flusso al campione sarà più alto perché più focalizzato.

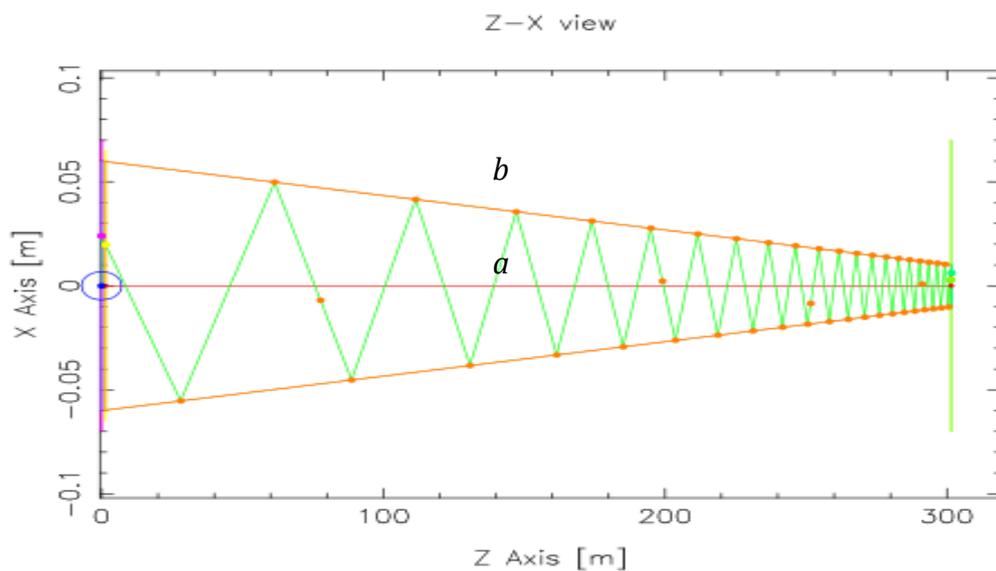


Figura 30 Schema di una guida tapering simulata in McStas

3.2.3 Guida ellittica

L'ellisse è l'unica curva matematica che riesce a focalizzare tutti i raggi da qualsiasi punto della sorgente in un unico punto del target, con una singola riflessione (30).

Questa è la scelta più logica per una guida neutronica, dove si desidera ridurre al minimo il numero di riflessioni in modo tale da non ridurre l'intensità del fascio (31) (32).

McStas non incorpora un componente per la realizzazione di guide che abbia al suo interno l'equazione dell'ellisse, ma per costruire guide ellittiche McStas usa piccole frazioni di guide tapering (Figura 31).

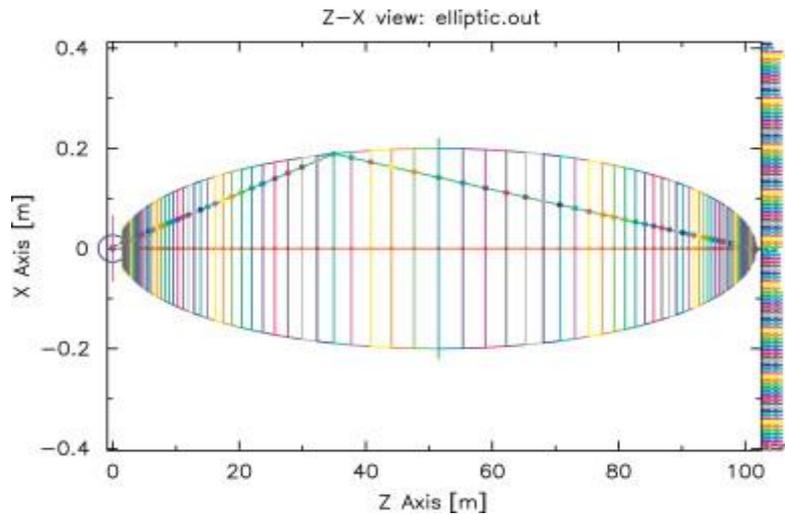


Figura 31 schema di guida ellittica simulata con il componente standard di McStas per le guide ellittiche.

3.2.4 Componente di McStas *Guide_four_side*

I componenti standard di McStas non sono capaci di simulare vere guide ellittiche ma grazie alla collaborazione con il dr. Tobias Panzner e il dr. Uwe Filges del PSI (Villigen, Svizzera) ci è stato concesso l'utilizzo del componente *Guide_four_side* che simula una guida ellittica attraverso l'equazione dell'ellisse, senza passare per le guide tapering.

Guide_four_side costruisce la guida con quattro pareti controllabili indipendentemente, delle quali si possono definire sia le pareti interne sia le pareti esterne. Ogni singola parete può avere una geometria ellittica, parabolica o rettilinea indipendentemente dalla forma delle altre.

- Nel caso delle rettilinee la geometria delle pareti segue la seguente equazione:

$$z = \frac{l}{w_2 - w_1} x - w_1 \quad (3.3)$$

Dove w_1 è la larghezza iniziale della guida sull'asse x e w_2 è la larghezza finale della guida sull'asse x ed l è la lunghezza della guida.

- Nel caso delle paraboliche la geometria delle pareti segue la seguente equazione:

$$z = b - ax^2 \quad (3.4)$$

Dove a determina la convessità e b il punto d'intersezione con l'asse z.

- Nel caso dell'ellittico la geometria delle pareti segue la seguente equazione:

$$\frac{x^2}{b^2} + \frac{(z+z_0)^2}{a^2} = 1 \quad (3.5)$$

con b e a il semiasse minore e maggiore e il centro dell'ellisse situato in $(0, -z_0)$.

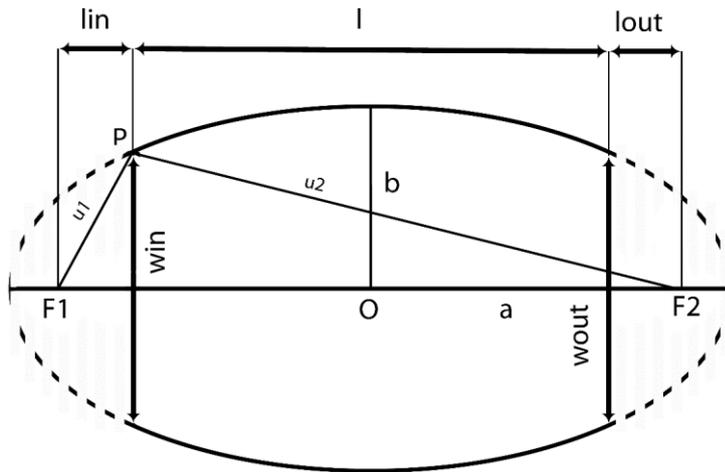


Figura 32 Schema geometrico di una guida ellittica con i parametri utilizzati da McStas

La traccia del neutrone uscente dal punto focale F1 può essere calcolata nel seguente modo (Figura 32):

$$u_1 = \sqrt{(lin)^2 + \left(\frac{win}{2}\right)^2} \quad (3.6)$$

$$u_2 = \sqrt{(lout + l)^2 + \left(\frac{win}{2}\right)^2} \quad (3.7)$$

La selezione della geometria viene fatta attraverso i parametri del componente lin e $lout$ che rappresentano la distanza focale, $wout$ e win che rappresentano l'apertura iniziale e finale della guida (Figura 32).

- Se lin e $lout$ sono uguali a 0 e $wout$ e win sono uguali fra loro la guida è rettilinea.
- Se lin e $lout$ sono uguali a 0 e $wout$ e win sono diversi fra loro la guida è tapering.

- Se lin è uguale a 0 e $lout$ è diverso da 0 indipendentemente dai valori assunti da $wout$ e win la guida è parabolica focalizzante.
- Se $lout$ è uguale a 0 e lin è diverso da 0 indipendentemente dai valori assunti da $wout$ e win la guida è parabolica defocalizzante.
- Se lin e $lout$ sono diversi da 0 indipendentemente dai valori assunti da $wout$ e win la guida è ellittica.

In questo componente è possibile specificare anche il tipo di supermirror utilizzato e i suoi attributi (Figura 33) sono:

- R_0 che indica l'inizio della curva nel grafico di riflessione.
- α che indica la pendenza della retta che va dal punto R_1 al punto R_m che rappresenta la perdita di riflettività quando si passa dal regime di mirror ($m < 1$) a super-mirror ($m > 1$).

$$\alpha = \frac{R_0 - R_M}{(m-1) \cdot q_c} \quad (3.8)$$

α è data in radianti.

- q_c è l'angolo critico di scattering di solito è quello del nichel naturale.
- w è la lunghezza di cut-off.
- m è il parametro che caratterizza un super-mirror ed è calcolato:

$$q_1 = m \cdot q_c \quad (3.9)$$

Parametro	Parametro McStas	Valore
R_0	R0	0.99
α	alphax, alphas	6.07
	alphau, alphad	5.62
q_c	Qcxl, Qcxr, Qcyu, Qcyd	0.0217
w	Wxr, Wxl, Wyu, Wyd	0.003
m	myu, myd	4
	mxr, mxl	0

Tabella 11 Valori usati per i super-mirror simulati

In Tabella 11 sono elencati i valori sperimentali dei super-mirror con $m=4$ provenienti dal database del PSI in collaborazione con la Swiss Neutronics (33).

Le pareti laterali delle guide sono state impostate a $m=0$, questo parametro rende le pareti laterali totalmente assorbenti, in quanto il focus sull'asse x degraderebbe la risoluzione dello strumento.

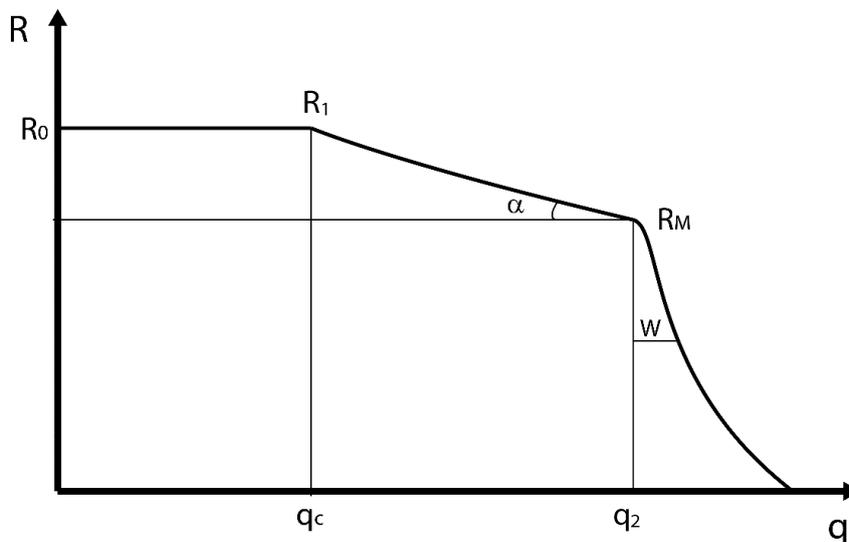


Figura 33 Schema del grafico di riflettività di un super-mirror con i parametri utilizzati dal componente *Guide_four_side* di McStas per descrivere la curva.

Parametri generali

Parametri	Unità di misura	Descrizione
l:	m	Lunghezza delle guide (DEFAULT = 0)
R0:	1	Riflettività (DEFAULT = 0.99)
rwallthick:	m	Spessore della parete destra (DEFAULT = 0.001 m)
lwallthick:	m	Spessore della parete sinistra (DEFAULT = 0.001 m)
uwallthick:	m	Spessore della parete alta (DEFAULT = 0.001 m)
dwallthick:	m	Spessore della parete bassa (DEFAULT = 0.001 m)
w1r:	m	Spessore della guida in entrata lato destro (negative x-axis) (DEFAULT = 0)
w2r:	m	Spessore della guida in uscita lato destro (negative x-axis) (DEFAULT = 0)
w1l:	m	Spessore della guida in entrata lato sinistro (positive x-axis) (DEFAULT = 0)
w2l:	m	Spessore della guida in uscita lato sinistro (positive x-axis) (DEFAULT = 0)
h1d:	m	Altezza alla entrata della guida inferiore (negativa asse y) (DEFAULT=0)
h2d:	m	Altezza alla uscita della guida inferiore (negativa asse y) (DEFAULT=0)
h1u:	m	Altezza alla entrata della guida superiore (positivo asse y) (DEFAULT=0)
h2u:	m	Altezza alla uscita della guida superiore (povitivo asse y) (DEFAULT=0)
linwr:	m	Parete destra orizzontale: distanza tra il 1° punto focale e l'entrata della guida (DEFAULT=0)

loutwr:	m	Parete destra orizzontale: distanza tra il 2° punto focale e l'uscita della guida (DEFAULT=0)
linwl:	m	Parete sinistra orizzontale: distanza tra il 1° punto focale e l'entrata della guida (DEFAULT=0)
loutwl:	m	Parete sinistra orizzontale: distanza tra il 2° punto focale e l'uscita della guida (DEFAULT=0)
linhd:	m	Parete bassa verticale: distanza tra il 1° punto focale e l'entrata della guida (DEFAULT=0)
louthd:	m	Parete bassa verticale: distanza tra il 2° punto focale e l'uscita della guida (DEFAULT=0)
linhu:	m	Parete alta verticale: distanza tra il 1° punto focale e l'entrata della guida (DEFAULT=0)
louthu:	m	Parete alta verticale: distanza tra il 2° punto focale e l'uscita della guida (DEFAULT=0)

Parametri delle pareti interne

Rreflect	str	Nome del file per la riflessione per la parete destra interna
Lreflect	str	Nome del file per la riflessione per la parete sinistra interna
Dreflect	str	Nome del file per la riflessione per la parete alta interna
Ureflect	str	Nome del file per la riflessione per la parete bassa interna
Qcxr:	AA-1	Critical scattering vector per la parete destra verticale interna (DEFAULT = 0.0217)
Qcxl:	AA-1	Critical scattering vector per la parete sinistra verticale interna (DEFAULT = 0.0217)
Qcyd:	AA-1	Critical scattering vector per la parete bassa interna (DEFAULT = 0.0217)
Qcyu:	AA-1	Critical scattering vector per la parete alta interna (DEFAULT = 0.0217)
alphaxr:	AA	Pendenza della curva di riflettività per il lato destro verticale interno (DEFAULT=6.07)
alphaxl:	AA	Pendenza della curva di riflettività per il lato sinistro verticale interno (DEFAULT=6.07)
alphayd:	AA	Pendenza della curva di riflettività per il lato basso interno (DEFAULT=6.07)
alphayu:	AA	Pendenza della curva di riflettività per il lato alto interno (DEFAULT=6.07)
mrx:	1	m-value della parete a destra interna (DEFAULT = 3.6)
mxl:	1	m-value della parete a sinistra interna (DEFAULT = 3.6)
myd:	1	m-value della parete bassa interna (DEFAULT = 3.6)
myu:	1	m-value della parete a alta interna (DEFAULT = 3.6)
Wxr:	AA-1	Spessore del cut-off del supermirror per la parete destra interna (DEFAULT = 0.003)
Wxl:	AA-1	Spessore del cut-off del supermirror per la parete sinistra interna (DEFAULT = 0.003)
Wyu:	AA-1	Spessore del cut-off del supermirror per la parete alta interna (DEFAULT = 0.003)
Wyd:	AA-1	Spessore del cut-off del supermirror per la parete bassa interna (DEFAULT = 0.003)

Parametri delle pareti interne

R0reflect:	str	Nome del file per la riflessione per la parete destra esterna
-------------------	-----	---

LOreflect:	str	Nome del file per la riflessione per la parete sinistra esterna
DOreflect:	str	Nome del file per la riflessione per la parete alta esterna
UOreflect:	str	Nome del file per la riflessione per la parete bassa esterna
QcxrOW:	AA-1	Critical scattering vector per la parete destra verticale esterna (DEFAULT = 0.0217)
QcxlOW:	AA-1	Critical scattering vector per la parete destra verticale esterna (DEFAULT = 0.0217)
QcydOW:	AA-1	Critical scattering vector per la parete bassa esterna (DEFAULT = 0.0217)
QcyuOW:	AA-1	Critical scattering vector per la parete alta esterna (DEFAULT = 0.0217)
alphaxrOW :	AA	Pendenza della curva di riflettività per il lato destro verticale esterno (DEFAULT=6.07)
alphaxlOW:	AA	Pendenza della curva di riflettività per il lato sinistro verticale esterno (DEFAULT=6.07)
alphaydOW :	AA	Pendenza della curva di riflettività per il lato basso esterno (DEFAULT=6.07)
alphayuOW :	AA	Pendenza della curva di riflettività per il lato alto esterno (DEFAULT=6.07)
mxrOW:	1	m-value della parete a destra esterna (DEFAULT = 3.6)
mxlOW:	1	m-value della parete a sinistra esterna (DEFAULT = 3.6)
mydOW:	1	m-value della parete bassa esterna (DEFAULT = 3.6)
myuOW:	1	m-value della parete a alta esterna (DEFAULT = 3.6)
WxrOW:	AA-1	Spessore del cut-off del supermirror per la parete destra esterna (DEFAULT=0.003)
WxlOW:	AA-1	Spessore del cut-off del supermirror per la parete sinistra esterna (DEFAULT=0.003)
WyuOW:	AA-1	Spessore del cut-off del supermirror per la parete alta esterna (DEFAULT=0.003)
WydOW:	AA-1	Spessore del cut-off del supermirror per la parete bassa esterna (DEFAULT=0.003)

Tabella 12 Tabella dei parametri usati nel componente *Guide_four_side* di McStas

Nella Tabella 12 sono riportati i parametri usati in questo lavoro di tesi. I valori specifici non sono stati indicati perché nella maggior parte dei casi sono variabili al fine di ottimizzare il fascio.

3.3 MONOCROMATORE E FILTRO

Per selezionare una determinata lunghezza d'onda dallo spettro termico si utilizza un monocromatore.

Il componente utilizzato in McStas per costruire il monocromatore è *Monochromator_curved* (parametri riportati in Tabella 13).

Il componente tiene in considerazione gli ordini di diffrazione superiori al primo e la mosaicità del cristallo monocromatore. Questo genere di componente permette di focalizzare il fascio sul campione, tenendo conto del fatto che, in genere, il monocromatore non è un singolo cristallo ma una serie di barre orientabili in modo da formare una parabola.

Per questa tesi è stata usata la sola focalizzazione verticale perché la focalizzazione orizzontale introduce una perdita di risoluzione del diffrattometro. Questo è dovuto all'aumento della divergenza angolare e all'allargamento della banda energetica selezionata dal monocromatore. La Figura 34 mostra l'aumento del range energetico nel caso di focalizzazione orizzontale (cerchi) a confronto con il risultato ottenuto senza focalizzazione orizzontale, che consiste in un range energetico selezionato più stretto (triangoli).

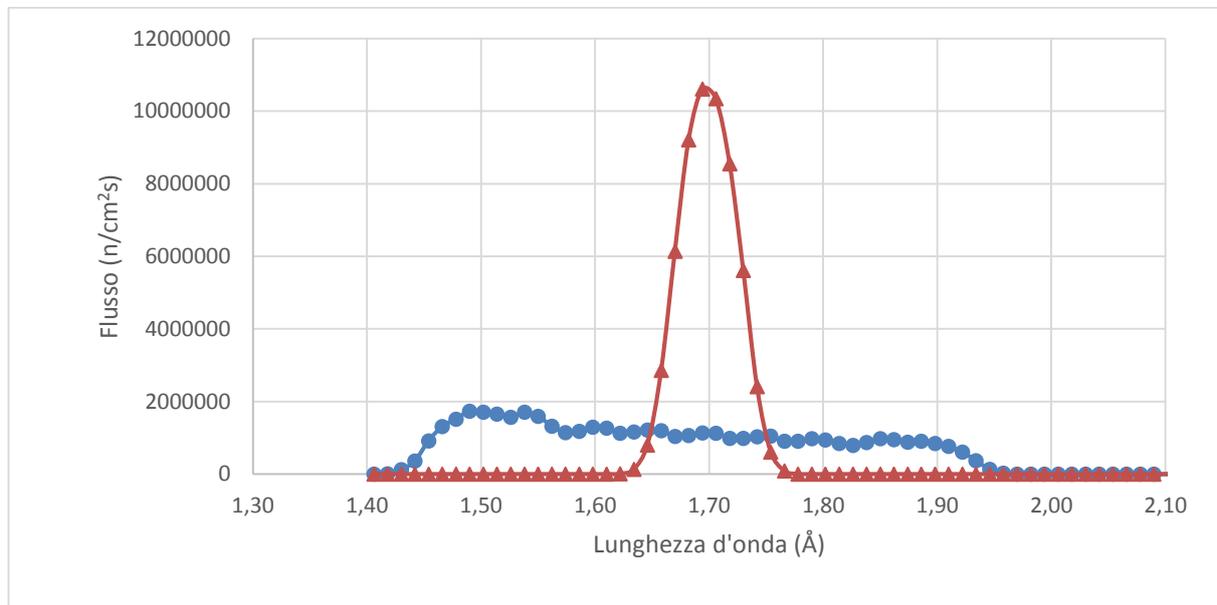


Figura 34 Paragone tra range di lunghezze d'onda selezionate con le stesse impostazioni del monocromatore aggiungendo la focalizzazione orizzontale. I triangoli arancio rappresentano la lunghezza d'onda selezionata senza focus mentre i cerchi blu rappresentano il monocromatore in configurazione di focus orizzontale con il focus a 1 m di distanza.

Il parametro per la curvatura del monocromatore è stata stimata attraverso la formula

$$RV = 2 \cdot L \cdot \sin(\vartheta) \quad (3.10)$$

Dove L è la distanza tra il monocromatore e il campione e ϑ è l'angolo di rotazione del monocromatore rispetto alla direzione del fascio. L'ottimizzazione della curvatura è stata effettuata tramite simulazioni McStas.

I materiali usati per la costruzione del monocromatore sono la grafite pirolitica (0,0,2) e il germanio (3,1,1). Il primo è usato per selezionare lunghezze d'onda prossime a 2 Å mentre il germanio è usato per lunghezze d'onda prossime a 1 Å.

Parametri	Valori Germanio	Valori Grafite	Descrizione
Zwidth	0.22	0.22	Lunghezza della barra
Yheight	0.01	0.01	Altezza della barra
Gap	0.0003	0.0003	Distanza tra due barre adiacenti
NH	1	1	Numero di barre orizzontali (no focus=1)
NV	20	20	Numero di barre verticali
Mosaich	30	30	Mosaicità orizzontale
Mosaicv	35	35	Mosaicità verticale
R0	1	Nd	Massima riflessione
T0	0.5	0.5	Massima trasmissione
DM	1.7056	Nd	Distanza tra i piani reticolari
RV	Variabile	Variabile	Parametro per trovare il punto di focus verticale
RH	0	0	Parametro per trovare il punto di focus orizzontale
reflect	Nd	HOPG.rfl	File ascii dove sono scritti i valori della riflessione per vettore scattering

Tabella 13 Tabella dei parametri usati in questa tesi per il componente *Monochromater_curved*

Per la grafite, le percentuali di neutroni riflesse sono state ottenute sperimentalmente dall'ILL di Grenoble (Francia) (34) e sono riportate in un file dedicato. Per quanto riguarda il germanio non è a disposizione una libreria, quindi il cristallo è stato costruito imponendo la distanza reticolare *DM* e la riflessione massima *R0*.

Il monocromatore di grafite presenta il problema di avere un'alta trasmissione delle armoniche superiori al primo ordine a causa della sua struttura reticolare. Questo richiede l'uso di un filtro per sopprimerle perché aumenterebbero il numero di picchi nello spettro ottenuto dal campione, e a basse lunghezze d'onda questo produrrebbe sovrapposizioni di picchi rendendo il grafico incomprensibile. In McStas questo equivale

ad usare il componente *Filter_graphite* o *Filter_gen*, in cui gli unici parametri selezionabili sono le grandezze geometriche del filtro.

3.4 CAMPIONE

Il campione simulato con McStas è SiO_2 , biossido di silicio, perché è un materiale d'interesse per la diffrazione di polveri.

Il componente specifico di McStas che permette lo scattering di polveri è *PowderN*. La polvere viene simulata come un contenitore cilindrico riempito del materiale in esame. Il materiale viene descritto in un file ASCII dove si specifica:

Vc: grandezza dei cristalli nella polvere [\AA^3].

Sigma_abs: sezione d'urto di assorbimento [barns].

Sigma_inc: sezione d'urto di scattering incoerente [barns].

Debye_Weller: Valore del fattore di Debye-Weller 1.

Delta d/d: valore dello spessore delta d/d per tutte le linee 1.

I parametri del componente PowerD sono elencati in Tabella 14.

Parametri	Valori	Descrizione
D_phi	6	Angolo massimo di volo
Radius	0.005	Raggio del campione
Yheight	0.1	Altezza del campione
DW	0.8	Fattore di Debye-Weller
Pack	0.7	Fattore di impacchettamento
Reflections	SiO2_quartza.lau	Nome del file ASCII associato alla polvere
barns	1	Seleziona il tipo di polvere

Tabella 14 Tabella dei parametri del componente PowerN

Il parametro D_{ϕ} è utile per ridurre il tempo di calcolo, perché seleziona solo i neutroni che escono dal campione con una direzione di volo che forma un angolo con l'asse del fascio primario minore di D_{ϕ} . In questo modo, con una corretta scelta dell'angolo D_{ϕ} , solo i neutroni che incidono sul detector vengono trasportati.

3.5 MONITOR E DETECTOR

Per controllare il comportamento del fascio nelle varie fasi del percorso sono stati istituiti diversi monitor, che sono appositi componenti di diagnostica.

3.5.1 L_monitor

Questo componente calcola la corrente neutronica in funzione della lunghezza d'onda. In Tabella 15 sono indicati i parametri di *L_monitor*.

Parametri	Descrizione
xwidth	Grandezza sull'asse x
ywidth	Grandezza sull'asse y
nchan	Numero di bin in lambda
filename	Nome del file dove verranno salvate le informazioni
Lmin	Lunghezza d'onda minima acquisibile dal monitor
Lmax	Lunghezza d'onda massima acquisibile dal monitor

Tabella 15 Tabella dei parametri utilizzati nel monitor *L_monitor*

3.5.2 PSD_monitor

PSD_monitor è usato come beam detector, avendo $n \times m$ pixel che rivelano la posizione dei neutroni nel fascio. I suoi parametri sono elencati in Tabella 16.

Parametri	Descrizione
xwidth	Grandezza sull'asse x
ywidth	Grandezza sull'asse y
filename	Nome del file dove verranno salvate le informazioni
ny	Numero di pixel per riga
nx	Numero di pixel per colonna

Tabella 16 Tabella dei parametri utilizzati nel monitor *PSD_monitor*

3.5.3 Divergence_monitor e DivLambda_monitor

Divergence_monitor è utilizzato per controllare la divergenza del fascio in x e in y mentre *DivLambda_monitor* controlla la divergenza in una data direzione in funzione della lunghezza d'onda. In Tabella 17 sono riportati i parametri disponibili per questo monitor.

Parametri	Descrizione
xwidth	Grandezza sull'asse x
ywidth	Grandezza sull'asse y
filename	Nome del file dove verranno salvate le informazioni
ny	Numero di pixel per riga
nx	Numero di pixel per colonna
hmaxdiv	Divergenza verticale massima del fascio
vmaxdiv	Divergenza orizzontale massima del fascio
lambda_0	Lunghezza d'onda minima
lambda_1	Lunghezza d'onda massima

Tabella 17 Tabella dei parametri utilizzati nel monitor *Divergence_monitor* e *DivLambda_monitor*.

3.5.4 Monitor_nD

Il *Monitor_nD* è il più generico di McStas e attraverso il parametro *options* permette di simulare molti tipi di rivelatori reali. In questo lavoro di tesi è stato utilizzato per ottenere lo spettro finale prodotto dallo scattering sul campione. Infatti questo monitor è stato configurato in *banana_mode* (a semicerchio intorno al campione) per simulare il miglior detector possibile per una facility di questo tipo. Il monitor restituisce un grafico della corrente neutronica in funzione dell'angolo. In Tabella 18 sono elencati i parametri di questo monitor.

Parametri	Valori	Descrizione
Xwidth	3	Grandezza sull'asse x
Ywidth	0.09	Grandezza sull'asse y
Filename	detector.dat	Nome del file dove verranno salvate le informazioni
Bins	3200	Numero di canali
Options	banana, theta	Opzioni del monitor
Min	-110	Limiti inferiore del valore settato in options
Max	110	Limiti superiore del valore settato in options

Tabella 18 Tabella dei parametri utilizzati nel monitor Monitor_nD

I risultati delle simulazioni effettuate utilizzando i componenti descritti sono presentati nel capitolo successivo.

4 RISULTATI

In questo capitolo sono descritti i risultati delle simulazioni. L'obiettivo di questa tesi è ottimizzare il set-up della facility per ottenere un flusso neutronico minimo di 10^5 n/cm²s sul campione e una divergenza angolare massima di 0.2° lungo la direzione parallela al fascio.

4.1 LA FACILITY

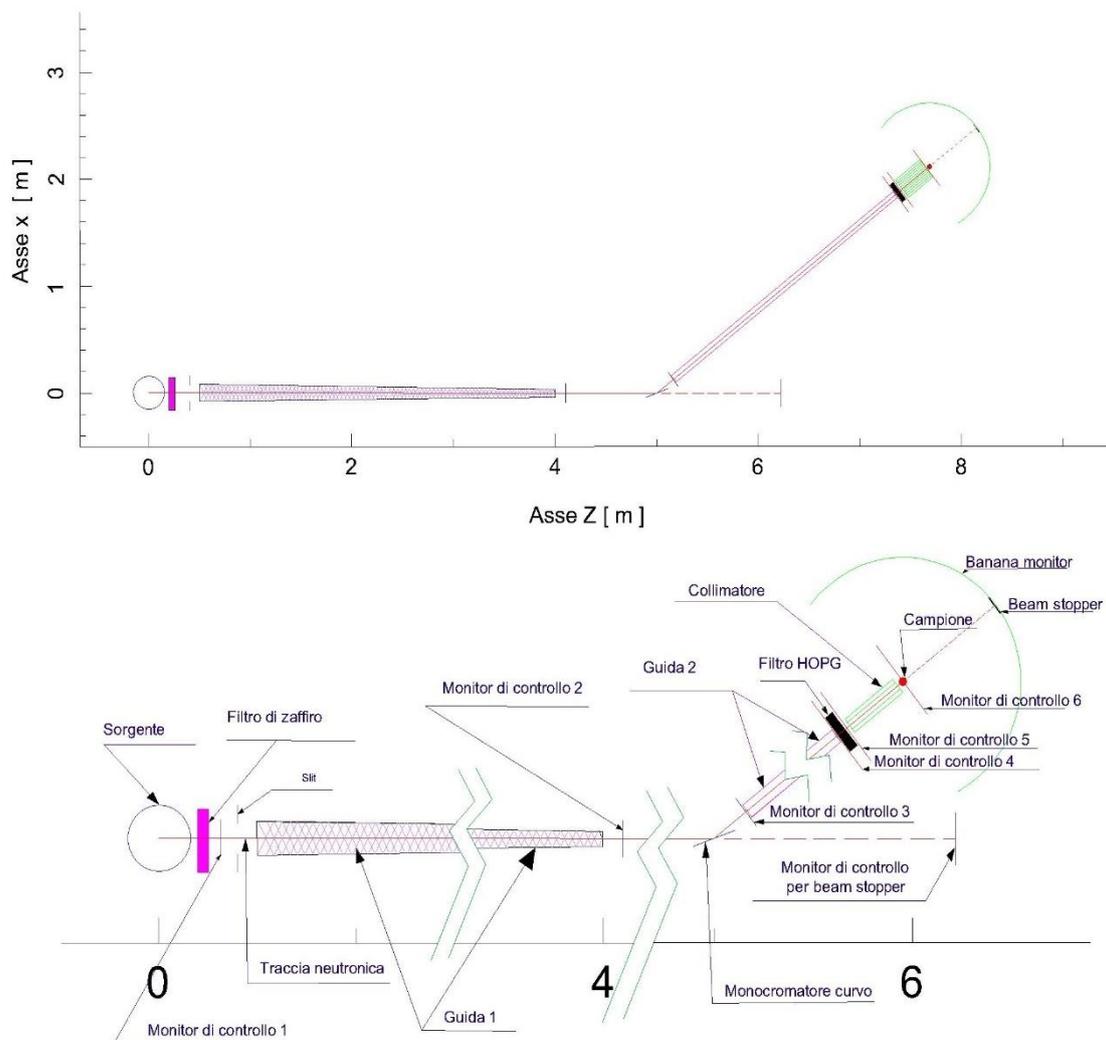


Figura 35 Schema della facility per diffrazione: l disegno in scala (in alto) ea descrizione dei componenti (in basso).

Figura 35 è illustrato lo schema della facility per diffrazione: in alto è riportata la figura in scala mentre in basso sono illustrati più dettagli riguardo ogni componente utilizzato:

1. Sorgente: la sorgente è di forma circolare con raggio 7.8 cm e la sua intensità è stata calcolata con MCNP5 poi convertita per McStas (vedi capitolo 3).
2. Filtro di zaffiro, per abbattere la componente ad alta energia del fascio; misura 5 cm di spessore.
3. Monitor di controllo 1: una serie di monitor di McStas per controllare che le caratteristiche (intensità, divergenza angolare, spettro energetico, e posizione spaziale) della sorgente siano corrette (Figura 36).

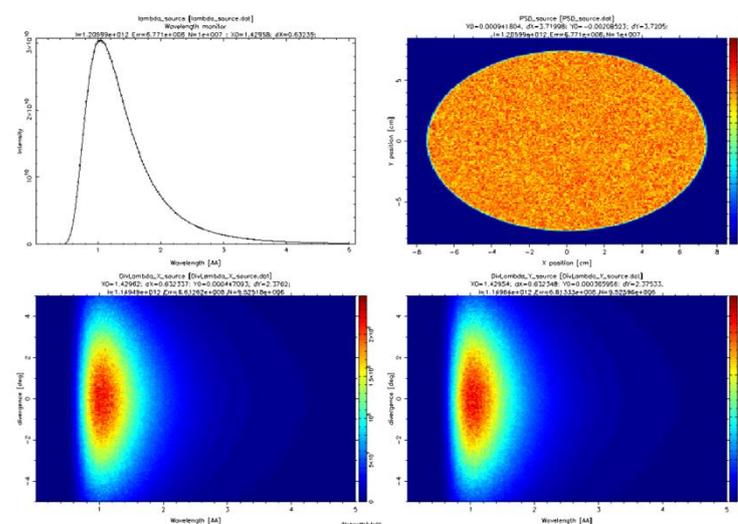


Figura 36 Monitor di controllo 1. In alto a sinistra monitor per il controllo della lunghezza d'onda. In alto a destra monitor per la distribuzione spaziale dei neutroni, in basso monitor per il controllo della divergenza in x e in y

4. Slit: Questo componente di McStas serve per eliminare tutti i neutroni che non hanno la possibilità di entrare nel componente successivo.
5. Traccia neutronica: il percorso ideale che fa un neutrone; al monocromatore si divide in due in quanto il neutrone può prendere due strade. In un caso può attraversare il monocromatore e essere rivelata dai monitor di controllo per beam stopper (linea tratteggiata) nell'altro è diffusa dal monocromatore e arriva al campione, per poi incidere sul beam stopper o, in caso di diffrazione sul campione, essere rivelata dal *banana monitor*.
6. Guida 1: una guida neutronica che porta i neutroni dalla sorgente al monocromatore, l'apertura iniziale è di 15 x 15 cm, l'ottimizzazione dell'apertura finale e della forma della guida è descritta nella sezione 4.3.
7. Monitor di controllo 2: 3 monitor che controllano la divergenza angolare del fascio in x e y e la distribuzione spaziale di neutroni.
8. Monocromatore curvo: serve a monocromatizzare il fascio e a focalizzarlo sul campione. Questa ottimizzazione è descritta nella sezione 4.4.
9. Monitor di controllo per beam stopper: questi monitor di McStas sono stati utilizzati per controllare il fascio che non viene diffuso dal monocromatore.

10. Monitor di controllo 3: utilizzati per controllare la divergenza angolare, la distribuzione in lambda e la distribuzione spaziale del fascio.
11. Guida 2: utilizzata per portare il fascio dal monocromatore al filtro in grafite le dimensioni e la forma sono oggetto dell'ottimizzazione in sezione 4.5.
12. Monitor di controllo 4: utilizzato per vedere la distribuzione delle lunghezze d'onda del fascio.
13. Filtro HOPG: utilizzato per abbattere le armoniche secondarie solo nel caso del monocromatore in grafite pirolitica (HOPG). Il filtro ha uno spessore di 5 cm.
14. Monitor di controllo 5: serie di 5 monitor di McStas, di cui uno viene utilizzato per rivelare l'abbattimento delle armoniche secondarie dopo il filtro di grafite, gli altri quattro vengono utilizzati per controllare la divergenza angolare (in x e y), la distribuzione spaziale, e la distribuzione di lunghezze d'onda della sola armonica principale del fascio prima di entrare nel collimatore (Figura 37).

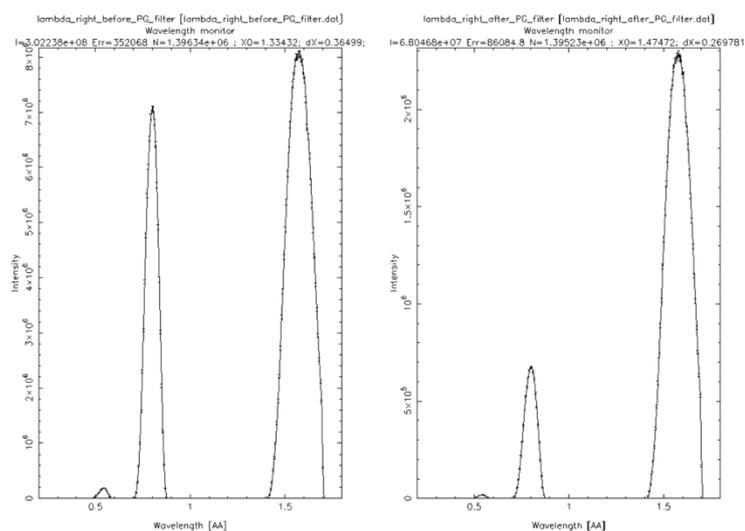


Figura 37 A sinistra monitor di controllo 4. A destra monitor di controllo 5 per il controllo della distribuzione in lambda del fascio

15. Collimatore: per abbattere la divergenza angolare e quindi per aumentare la risoluzione dello strumento. Questa ottimizzazione verrà descritta nella sezione 4.6.
16. Monitor di controllo 6: serie di monitor di McStas che simulano il campione di grandezza massima (11 x 1.2 cm) e minima (2 x 1 cm), controllando la divergenza angolare e la distribuzione spaziale del fascio attraverso rivelatori di intensità di corrente.
17. Campione: diossido di silicio sotto forma di quarzo, dimensioni: 11 x 1.2 cm.
18. Beam stopper: utilizzato per fermare il fascio non diffuso dal campione, in modo da non saturare il *banana monitor*, dimensioni: 20 x 3 cm.
19. *Banana monitor*: monitor finale di McStas, simula il rivelatore che raccoglie lo spettro proveniente dal campione; dimensioni: 9 cm di altezza, 1 m di raggio, 180° di copertura angolare.

Per una migliore comprensione delle ottimizzazioni fatte, questo elenco servirà nelle seguenti sezioni come riferimento per la posizione delle componenti del diffrattometro con la dicitura (posizione numero).

L'ottimizzazione dei vari componenti del fascio è stata eseguita nei seguenti steps:

- Ricerca della miglior lunghezza d'onda per la configurazione con monocromatore di grafite pirolitica (HOPG) e di germanio.
- Ottimizzazione del fascio attraverso diverse geometrie della guida che porta il fascio dalla sorgente al monocromatore per ottenere la maggior intensità possibile al campione.
- Ottimizzazione della curvatura del monocromatore per focalizzare il fascio sul campione.
- Ottimizzazione della geometria della guida che porta il fascio dal monocromatore al campione.
- Ottimizzazione del collimatore per portare la divergenza angolare del fascio lungo l'asse x (asse del fascio) entro 0.1° e 0.2°

4.2 LUNGHEZZA D'ONDA

La prima simulazione è stata effettuata per scegliere la lunghezza d'onda selezionata dal monocromatore.

Il diffrattometro è stato simulato con una guida iniziale di tipo tapering (posizione 6) e con un monocromatore curvo di grafite pirolitica (HOPG) o di germanio (posizione 8) la cui curvatura è data dalla formula (3.10), il segnale è stato raccolto su un monitor 11×1.2 cm (posizione 16) dove è presente il campione.

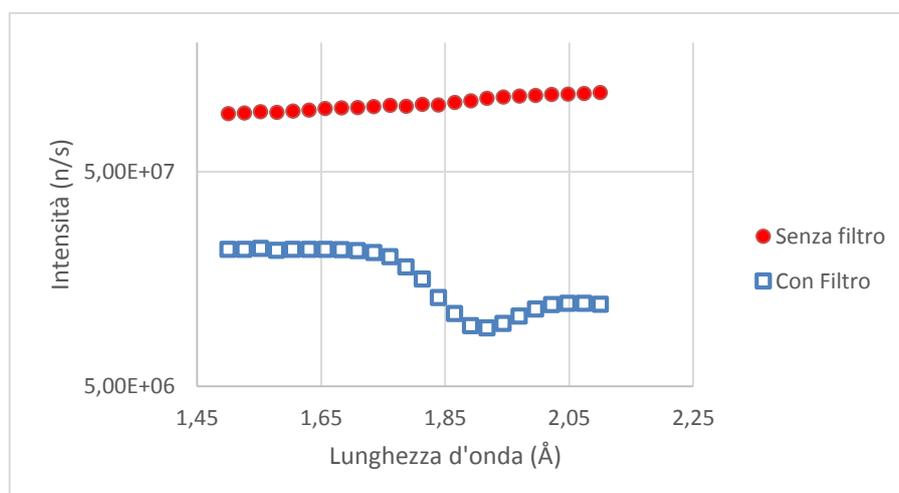


Figura 38 Grafico dell'intensità rilevata al campione in funzione della lunghezza d'onda (posizione 16). I cerchi rossi rappresentano la corrente di neutroni al campione senza filtro per le armoniche superiori, i quadrati blu rappresentano la corrente al campione con un filtro per le armoniche superiori.

Inizialmente è stato testato il diffrattometro configurato con il monocromatore di grafite pirolitica (HOPG) in Figura 38 sono riportati i valori totali (armonica principale e armoniche di ordine superiore) della corrente di neutroni nella posizione del campione (posizione 16) in funzione della lunghezza d'onda. Il grafico a cerchi rossi rappresenta il risultato senza il filtro che si usa per abbattere le armoniche superiori alla prima, invece il grafico a quadrati blu rappresenta il risultato nella configurazione con un filtro di grafite pirolitica altamente orientata di 5 cm di spessore. In Figura 39 è riportato il confronto tra la corrente dell'armonica principale e quella delle armoniche secondarie.

Per un monocromatore di grafite pirolitica è opportuno scegliere una lunghezza d'onda superiore a 1.5 Å perché a lunghezze inferiori le armoniche superiori al primo ordine diventano rilevanti e creano rumore nello spettro finale.

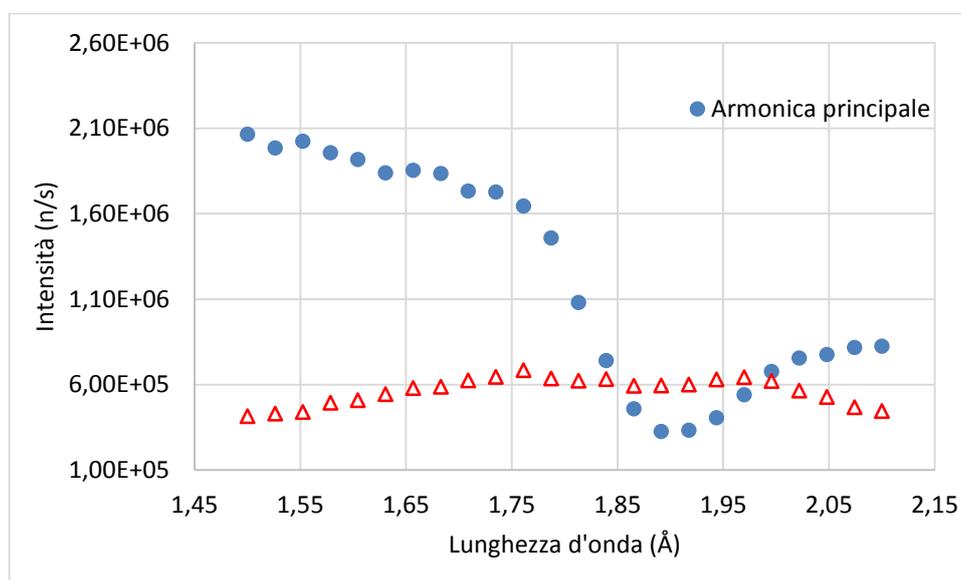


Figura 39 Grafico della corrente di neutroni dell'armonica principale (cerchi) e delle armoniche secondarie (triangoli) in funzione della lunghezza d'onda per il monocromatore in grafite pirolitica (posizione 16).

Per determinare la miglior lunghezza d'onda da selezionare con il monocromatore di grafite pirolitica si deve massimizzare il rapporto tra armonica principale e armoniche secondarie; nella Figura 39 si può vedere che questo rapporto è massimo per lunghezze d'onda prossime a 1.45 Å. Bisogna però tener conto che le armoniche superiori alla prima sono sottostimate perché il componente che simula la sorgente di McStas taglia la coda a basse lunghezze d'onda (Figura 26), ma questo viene in parte compensato da una sottostima nel filtraggio dovuto a imprecisioni della trattazione del filtro per lunghezze d'onda inferiori a 1 Å. Quindi è stato ritenuto opportuno optare per una lunghezza d'onda di 1.58 Å, dove l'armonica principale ha un'intensità di $1.96 \cdot 10^6$ n/s mentre le armoniche secondarie hanno un'intensità di $4.96 \cdot 10^5$ n/s.

A causa della presenza di neutroni veloci nel canale è stato opportuno valutare anche l'uso di un monocromatore di germanio che, grazie alla sua struttura cristallina a forma di diamante, sopprime gli ordini di diffrazione superiori al primo. Nella Figura 40 è riportato il grafico della corrente in funzione della lunghezza d'onda (posizione 16) ottenuta utilizzando il monocromatore di germanio.

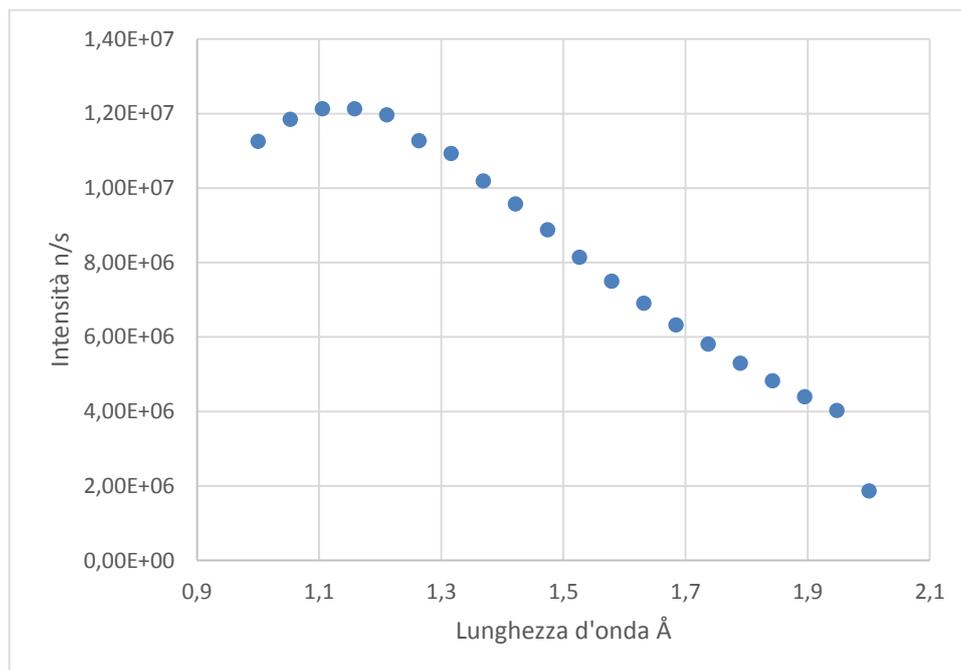


Figura 40 Grafico dell'intensità in posizione del campione in funzione della lunghezza d'onda per il monocromatore di germanio (posizione 16).

Il grafico in Figura 40 ha un massimo per la lunghezza d'onda di 1,16 Å, quindi questa è stata selezionata come armonica principale da utilizzare. Nella Figura 41 e nella Tabella 19 si riporta l'intensità (posizione 16), da queste si può osservare, nel caso del monocromatore di germanio, come le armoniche secondarie sono irrilevanti se confrontate con l'armonica principale, quindi a differenza del caso con la grafite non è necessario introdurre un filtro per rimuovere i neutroni veloci.

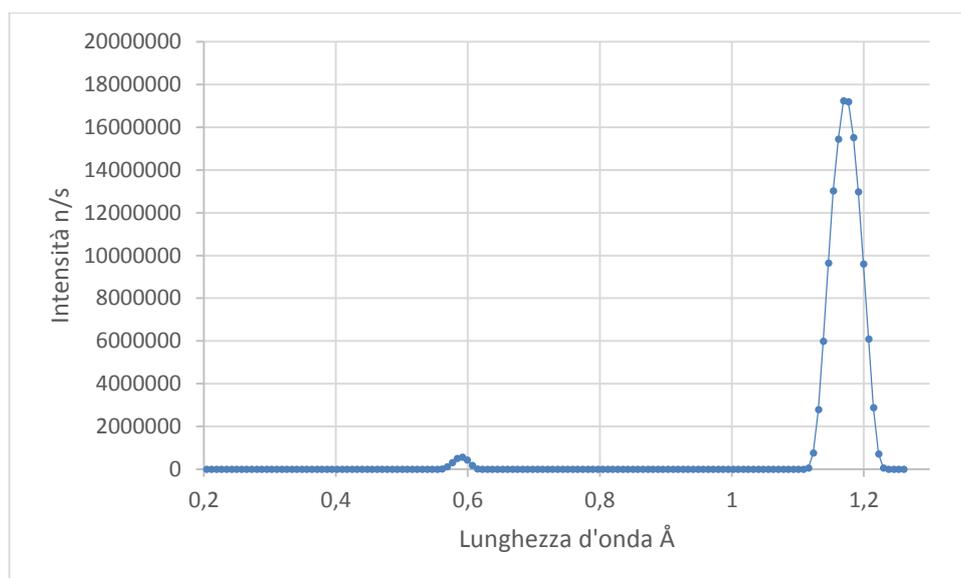


Figura 41 Grafico dello spettro selezionato dal monocromatore di germanio. Il picco principale è centrato in 1.16 Å mentre le armoniche successive sono a 0.58 Å e 0.38 Å (posizione 16).

Numero Armonica	Intensità del picco(n/s)	Errore (n/s)
Prima Armonica (1.16 Å)	1.30E8	1E5
Seconda Armonica (0.58 Å)	2.12E6	2E3
Terza Armonica (0.38 Å)	4.11E1	1.1E1

Tabella 19 Intensità totale dei picchi selezionati dal monocromatore calcolata facendo la somma dei bins (posizione 16).

Entrambe le configurazioni del monocromatore sono state utilizzate per l'ottimizzazione del diffrattometro in questa tesi; la grafite (HOPG) ha il vantaggio di poter selezionare lunghezze d'onda più grandi che portano ad un incremento della distanza tra i picchi dello spettro analizzato, anche se comporta lo svantaggio del rumore proveniente dalle armoniche superiori; di contro, con il germanio, viene selezionata una lunghezza d'onda inferiore ma non si ha il problema delle armoniche secondarie.

4.3 GUIDE NEUTRONICHE

Fissata la lunghezza d'onda selezionata con il monocromatore di germanio o di grafite pirolitica (HOPG), l'ottimizzazione del fascio prosegue cambiando la geometria delle guide. Il primo test effettuato è con la configurazione più semplice utilizzando la guida rettilinea. In Tabella 20 sono elencanti i valori della corrente neutronica al campione, utilizzando i due tipi di monocromatore. Questo set-up serve da termine di paragone per

le altre configurazioni. Tutte le prove sono state effettuate con un monitor posto alla stessa distanza dal monocromatore, di dimensioni 11 x 1.2 cm, pari alle dimensioni massime di un campione per diffrazione e con un monitor posto nella stessa posizione di 1 x 2 cm che rappresenta il campione di dimensioni minime che si potrebbe misurare in una facility di questo tipo (posizione 16). Di conseguenza, i risultati ottenuti in questa fase di ottimizzazione riguardano l'intensità di neutroni che si avrebbe sul campione (posizione 17) nelle configurazioni "monocromatore (posizione 8) più guida (posizione 6)" testate.

Tipo di monocromatore	Intensità [n/s]	Errore[n/s]
Grafite Pirolitica	4.83E06	1E5
Germanio	2.56E7	7.2E4

Tabella 20 Tabella delle intensità di corrente di neutroni in posizione 16 con guida rettilinea

4.3.1 Guida Tapering

Per simulare la guida Tapering è stato cambiato il solo valore di apertura *guideh* nella parte finale della guida.

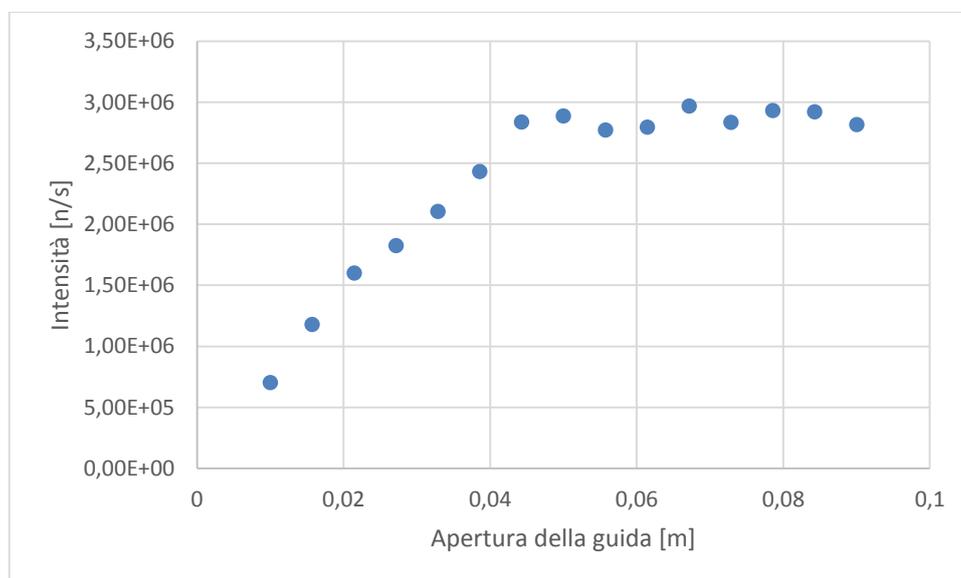


Figura 42 Grafico dell'intensità di neutroni in funzione della apertura della parte finale della guida con il monocromatore in grafite pirolitica (posizione 16).

In Figura 42 è graficata la corrente neutronica al campione in funzione dell'apertura della guida. L'errore statistico associato a ciascun valore è inferiore all'1%. Il risultato

migliore si ha per un valore di *guideh* di 0.068 m corrispondente a una corrente di $5 \cdot 10^6$ n/s con un aumento prestazionale del 3.5% rispetto all'impiego della guida rettilinea.

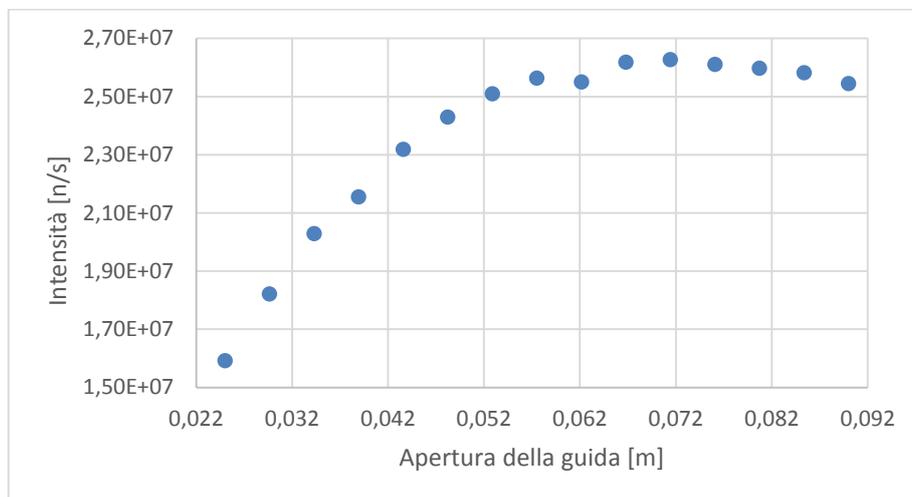


Figura 43 Grafico dell'intensità di neutroni in posizione 16 in funzione della apertura della parte finale della guida con il monocromatore di germanio.

Il grafico in Figura 43 rappresenta la corrente neutronica ottenuta impiegando il monocromatore di germanio e una guida tapering, in funzione dell'apertura di quest'ultima. L'errore statistico associato ai diversi valori è circa 0.5%. In questo caso, è stata selezionata una lunghezza d'onda più piccola rispetto alla grafite, e questo si riflette sulle performance della guida neutronica. Infatti l'angolo critico (1.33) di una guida è proporzionale alla lunghezza d'onda. La differenza tra la corrente ottenuta con la guida rettilinea e il valore ottenuto con la guida tapering nel punto massimo differiscono solo del 2.7% nel caso del monocromatore di germanio. La guida tapering permette di avere un flusso omogeneo su tutto il monitor 11 x 1.2 cm quindi è sconsigliata per l'utilizzo con campioni più piccoli perché ha un basso potere focalizzante.

4.3.2 Guida Parabolica

Le guide paraboliche hanno un comportamento diverso rispetto alle guide tapering, perché hanno un maggior potere focalizzante. Questo fa sì che per lunghezze d'onda sufficientemente grandi si riesca a focalizzare il fascio su campioni molto piccoli. La focalizzazione è simulata agendo sul parametro *lout* della guida.

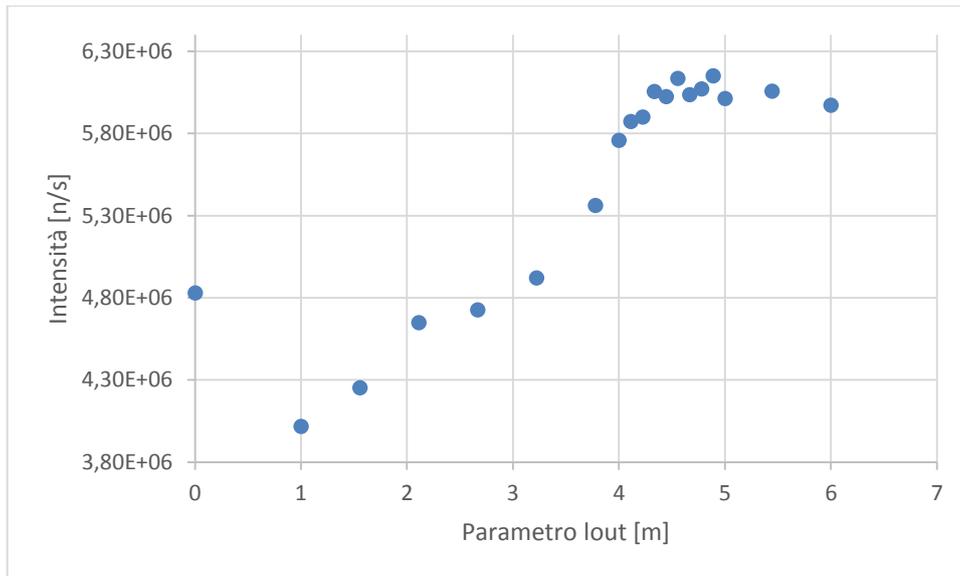


Figura 44 Ottimizzazione del parametro *lout* per una guida parabolica con monocromatore di grafite (posizione 16).

La Figura 44 mostra l'andamento della corrente in posizione 16 in funzione del parametro *lout*, che regola la curvatura della guida. Il massimo dell'intensità di corrente di neutroni si ha per un valore del parametro *lout* che va da 4 a 5 m e può essere stimato in $6 \cdot 10^6$ n/s. Al valore 0 corrisponde la guida rettilinea e si può osservare come la corrente sia più bassa rispetto al valore massimo. L'errore statistico associato ai valori ottenuti è circa 1.5%.

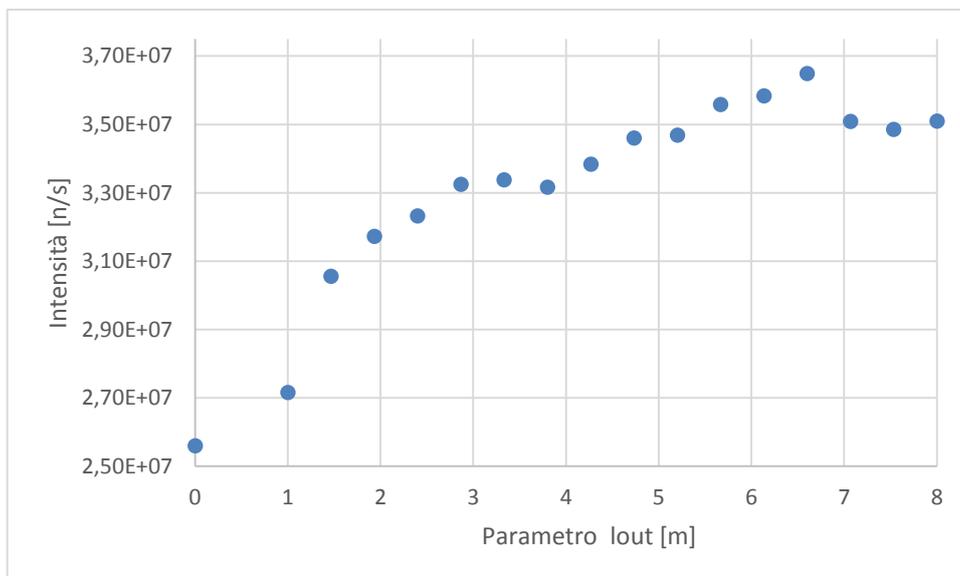


Figura 45 Ottimizzazione del parametro *lout* per una guida parabolica con monocromatore di grafite (posizione 16).

Il grafico riportato in Figura 45 mostra l'andamento dell'intensità di corrente di neutroni nel caso del monocromatore di germanio e della guida parabolica, quindi a 1.16 \AA : il valore massimo si ha per il valore del parametro pari a 6.6 metri con un'intensità di $3.65 \cdot 10^7 \text{ n/s}$. L'errore statistico è circa 2%.

Contrariamente alle aspettative, si è visto che le capacità di focalizzazione di questa guida non sono adeguate per campioni di piccole dimensioni, ma risulta più efficace per il campione di $11 \times 1.2 \text{ cm}$.

4.3.3 Guide ellittiche

Per simulare delle guide ellittiche è stato variato il parametro *lout* e *lin* del componente *Guide_four_side*.

Per effettuare l'ottimizzazione, in configurazione con il monocromatore di grafite pirolitica, si è tenuto fisso il parametro *lout* a 4.5 metri che corrispondeva alla massima corrente nel caso della guida parabolica, ed è stato variato il parametro *lin*.

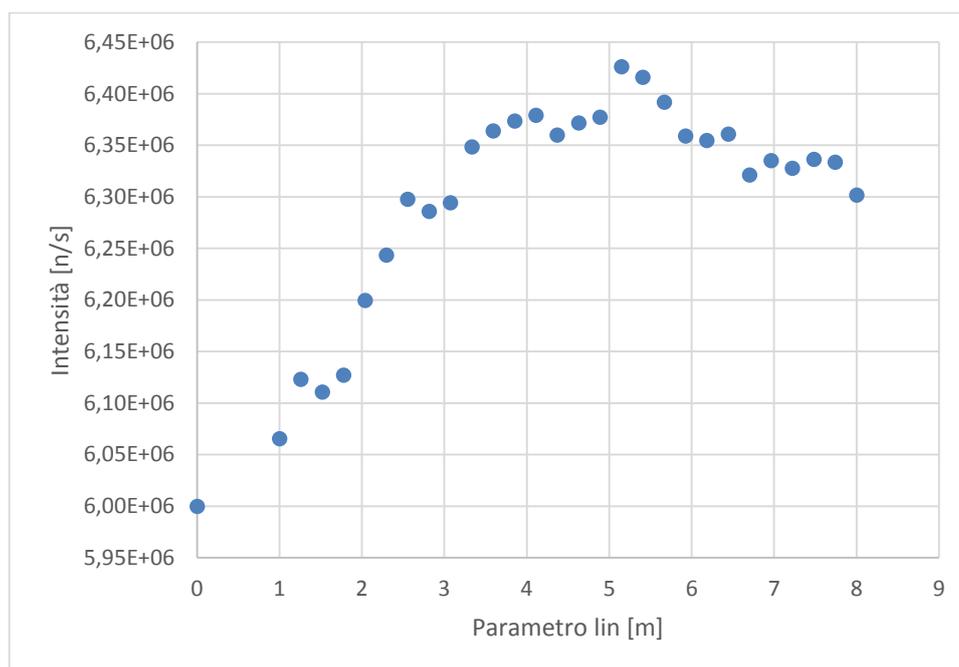


Figura 46 Ottimizzazione del parametro *lin* della guida con il monocromatore in grafite pirolitica tenendo fisso il parametro *lout* (posizione 16).

La Figura 46 mostra il risultato della simulazione con *lout* fisso e *lin* variabile, con un errore statistico di circa l'1%. Il massimo si ha per *lin* pari a 5.3 metri corrispondente a una corrente di $6.43 \cdot 10^6 \text{ n/s}$.

A questa ottimizzazione ne è seguita una seconda più fine, questa volta tenendo fisso il parametro *lin* pari a 5.3 e variando il parametro *lout*. Il risultato è mostrato in Figura 47.

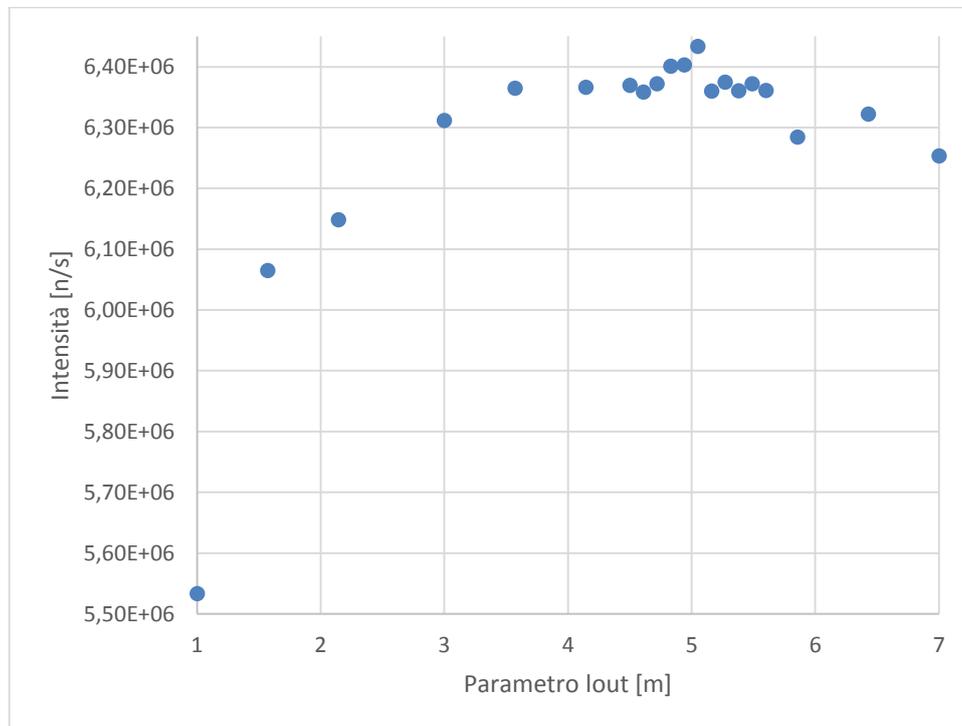


Figura 47 Ottimizzazione del parametro *lout* della guida con il monocromatore di grafite pirolitica tenendo fisso il parametro *lin* (posizione 16).

Il miglior risultato si ha per un valore intorno ai 5 metri. I punti tra 4 e 5.5 metri sono molto vicini tra di loro e le fluttuazioni sono dovute all'errore statistico, che è intorno al 7%. Con questo tipo di guide è molto difficile abbassare l'errore statistico perché il tempo necessario per le simulazioni è molto alto. Quindi il valore di *lout* scelto è 4.8 metri.

In questo caso, il flusso sul campione non è uniforme ma varia in funzione della posizione. La Figura 48 mostra l'intensità di corrente di neutroni nella posizione del campione. Il campione come detto precedentemente può avere una grandezza massima di 11 x 1.2 cm, anche se in esperimenti di diffrazione spesso i campioni sono più piccoli. Questo tipo di guide permette di focalizzare il fascio su una porzione più piccola di spazio: ipotizzando un campione di 2 x 1 cm si ha un flusso di $(5.4 \pm 0.02) \cdot 10^5$ n/cm²s, invece per un campione di massima grandezza si avrà un flusso medio al campione di $(4.9 \pm 0.01) \cdot 10^5$ n/cm²s (Figura 49).

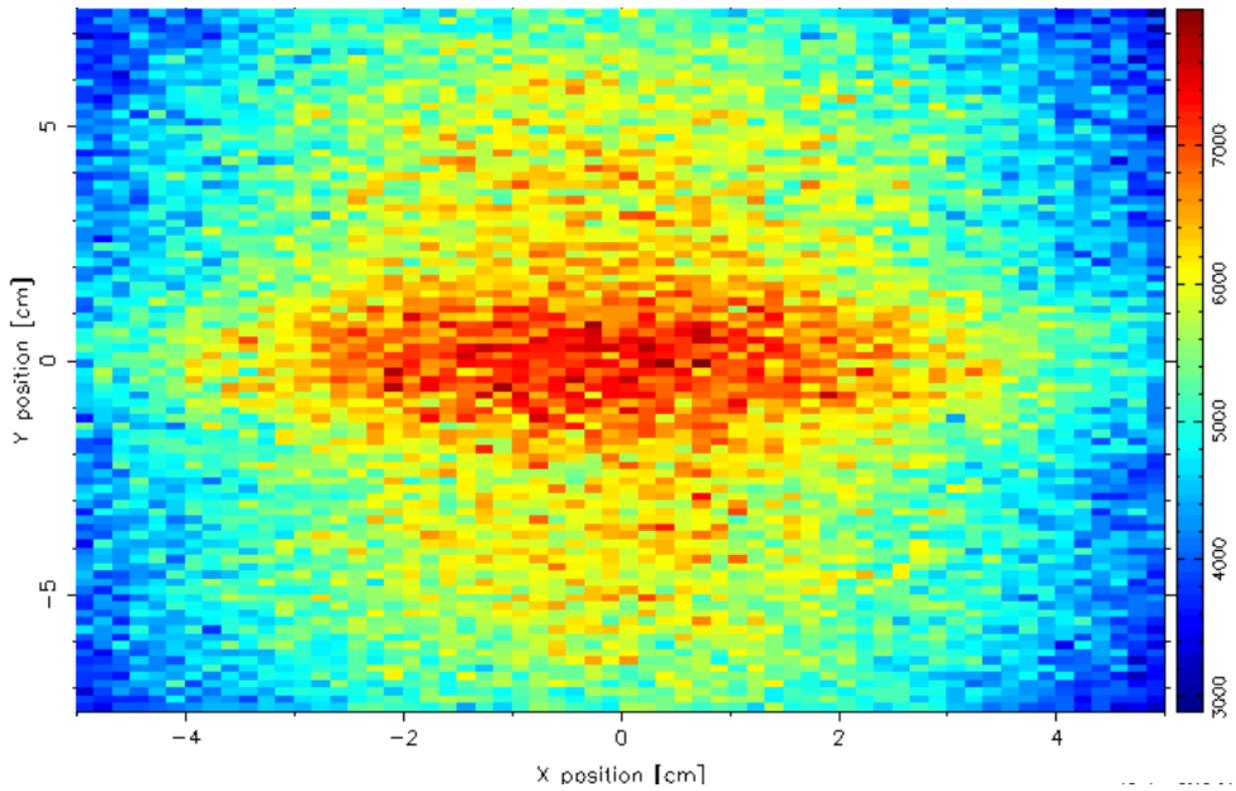


Figura 48 Distribuzione spaziale di neutroni in un monitor 10 x 15 cm posizionato a 1 cm dal campione (posizione 15)

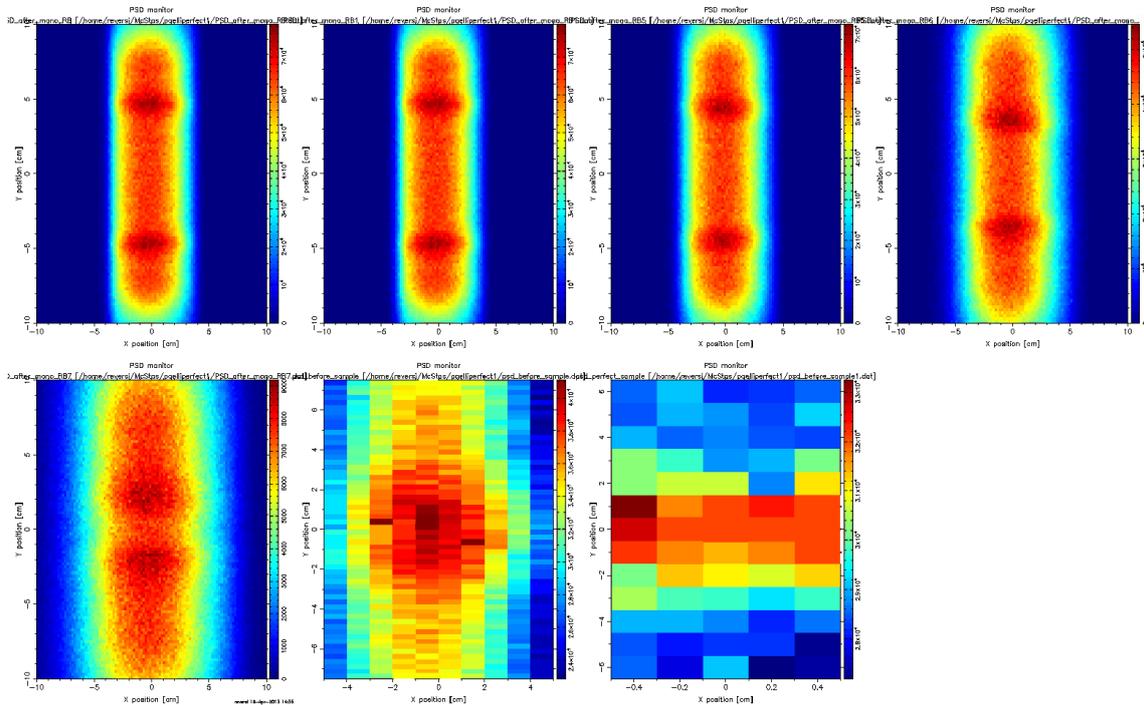


Figura 49 Distribuzione spaziale di neutroni in vari punti del fascio neutronico tra il monocromatore e il campione a 1.58 Å. Tutti i monitor sono 20 x 20 cm tranne gli ultimi due che sono sul campione e sono 16 x 10 e 12 x 1.2.

Anche nel caso del monocromatore di germanio è stata prima fissata una lunghezza d'onda per il parametro *lout*, corrispondente al massimo della focalizzazione con la guida parabolica, pari a 6.6 m. Il massimo di intensità si ottiene per un valore che oscilla tra i 3.5 e 5.5 metri con un errore dello 0.7% circa (Figura 50).

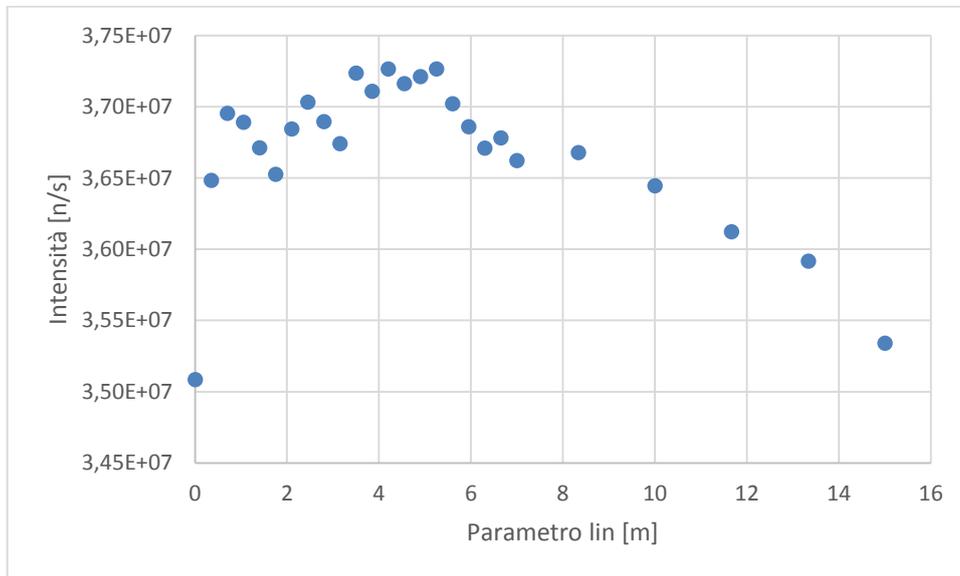


Figura 50 Ottimizzazione del parametro *lin* della guida con il monocromatore in germanio tenendo fisso il parametro *lout* (posizione 16).

Come nel caso precedente, è stato bloccato il valore *lin* a 5 metri e fatto variare il valore *lout* il risultato ottenuto è illustrato in Figura 51.

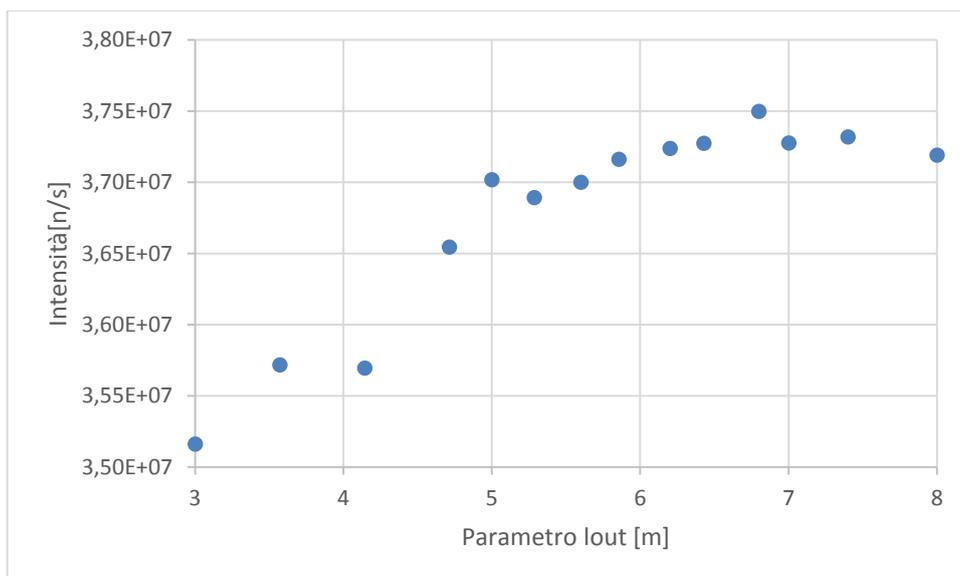


Figura 51 Ottimizzazione del parametro *lout* della guida con il monocromatore di germanio tenendo fisso il parametro *lin* (posizione 16).

Il miglior valore di l_{out} si attesta tra 6.5 e 7.5 metri con un'intensità di $(3.75 \pm 0.01) \cdot 10^7$ n/s. Anche in questo caso la focalizzazione ottenuta è migliore rispetto all'uso delle guide rettilinee e paraboliche. Infatti, i flussi medi su un campione di 11 x 1.2 e su uno 2 x 1 sono $(2.60 \pm 0.03) \cdot 10^6$ n/cm²s nel primo caso e $(2.70 \pm 0.06) \cdot 10^5$ n/cm²s nel secondo.

In questo caso le differenze tra i due campioni sono meno marcate a causa della lunghezza d'onda selezionata più corta che permette una focalizzazione minore (Figura 52).

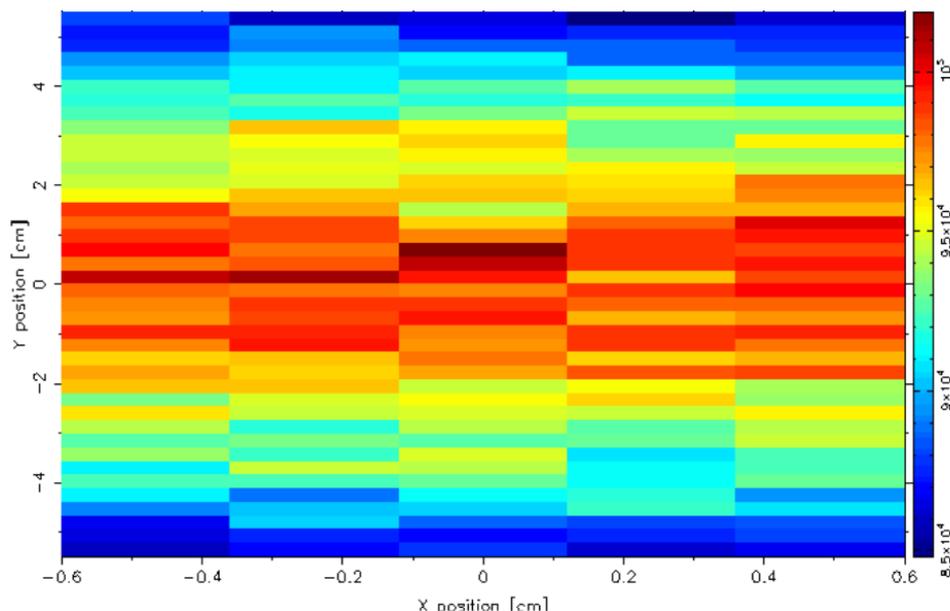


Figura 52 Distribuzione spaziale di neutroni in un monitor 11 x 1.2 cm (posizione 16).

I risultati di queste simulazioni mostrano che è vantaggiosa la configurazione con le guide ellittiche perché permettono una focalizzazione migliore. Nel campione da 11 x 1.2 cm si ha un incremento di prestazioni del 3% rispetto alle guide paraboliche mentre sul campione di 2 x 1 cm si ha un incremento del 7% e del 10% rispettivamente per la lunghezza d'onda di 1.12 Å e 1.58 Å. Il miglioramento rispetto alla guida rettilinea è ancora più marcato: per il campione da 11 x 1.2 cm si ha un incremento del 34% e 31% rispettivamente, per la configurazione col monocromatore di germanio e di grafite (HOPG). Per il campione da 2 x 1 cm si ha un incremento rispettivamente del 37% e 38%.

4.4 LA FOCALIZZAZIONE CON IL MONOCROMATORE CURVO

Fissate le lunghezze d'onda per il monocromatore di grafite pirolitica (HOPG) e per quello di germanio, e ottimizzate la prima serie di guide, si è passati all'ottimizzazione del fascio attraverso un'ulteriore focalizzazione sul campione per mezzo del monocromatore curvo (posizione 8).

L'ottimizzazione viene effettuata attraverso il parametro RV del componente *Monochromator_curved* che regola la curvatura del monocromatore.

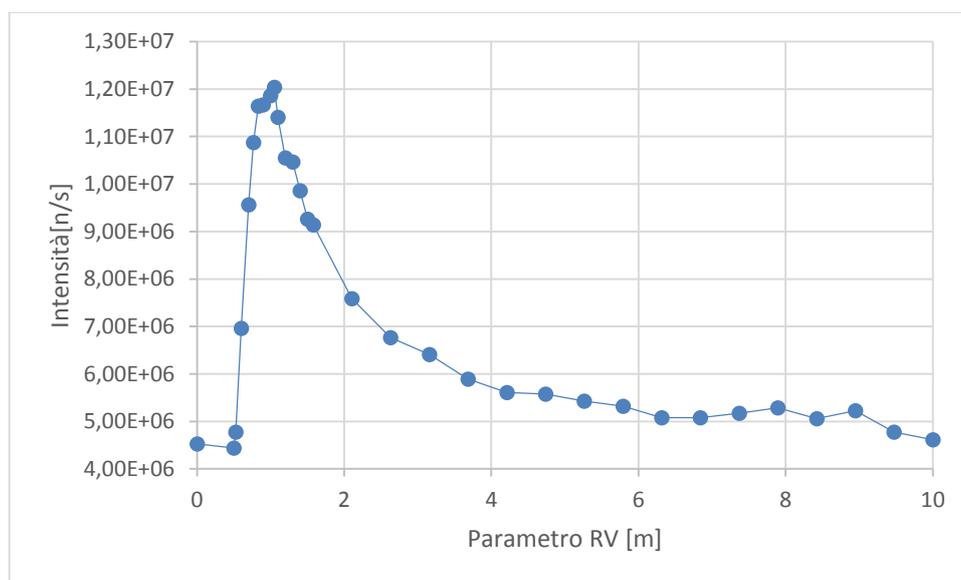


Figura 53 Grafico della corrente di neutroni al campione in funzione del parametro RV con il monocromatore di grafite pirolitica. Monitor da 11 x 1.2 cm (posizione 16).

In Figura 53 è mostrato l'andamento della corrente in funzione del parametro RV nel caso del campione 11 x 1.2 cm. Al valore 0 corrisponde il monocromatore piatto. All'aumentare del parametro l'intensità raggiunge un massimo che si ha per 1.05 m, poi la funzione comincia a scendere fino ad arrivare allo stesso valore d'intensità del monocromatore in configurazione piatto, questo perché il fascio viene focalizzato al di là del campione.

La Figura 54 riporta lo stesso grafico della Figura 53 ma nel caso del campione più piccolo (2 x 1 cm). Il massimo d'intensità neutronica sul campione si ha per un valore del parametro RV pari a 0.95 metri.

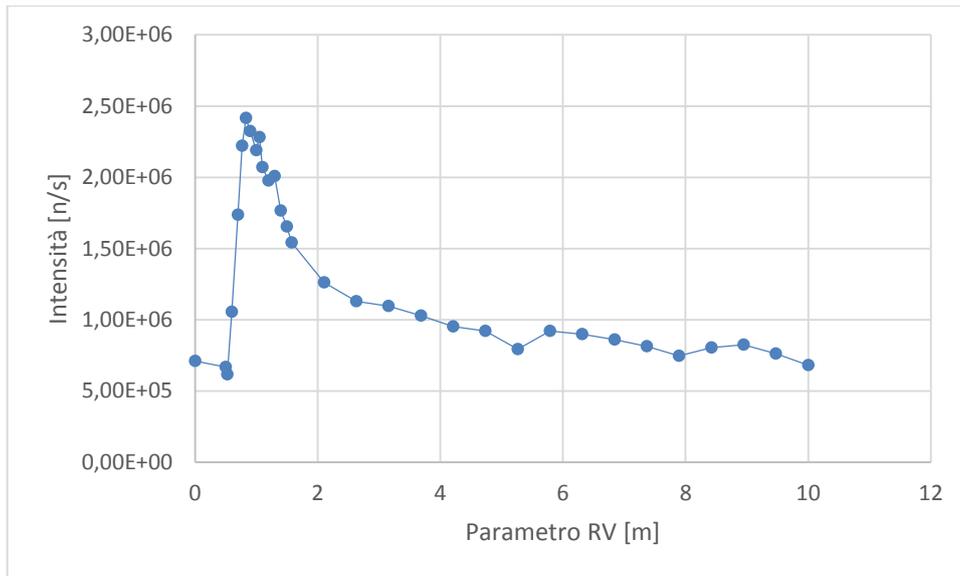


Figura 54 Grafico dell'intensità di corrente di neutroni in funzione del parametro RV con il monocromatore in grafite pirolitica e le guide ellittiche ottimizzate con monitor di 2x1 cm (posizione 16).

L'intensità così risultante è $(1.20 \pm 0.05) \cdot 10^7$ n/s per il campione di 11 x 1.2 cm mentre per il campione da 2 x 1 cm è $(2.90 \pm 0.02) \cdot 10^6$ n/s. Per quanto riguarda il flusso nel primo caso si ha un flusso medio di $(9.10 \pm 0.38) \cdot 10^5$ n/cm²s mentre nel secondo $(1.45 \pm 0.10) \cdot 10^6$ n/cm²s.

La Figura 55 mostra la disomogeneità di corrente di neutroni lungo l'asse y. Il massimo è posizionato intorno al punto 0 che rappresenta il centro del campione, l'intensità decresce all'aumentare del valore assoluto di y.

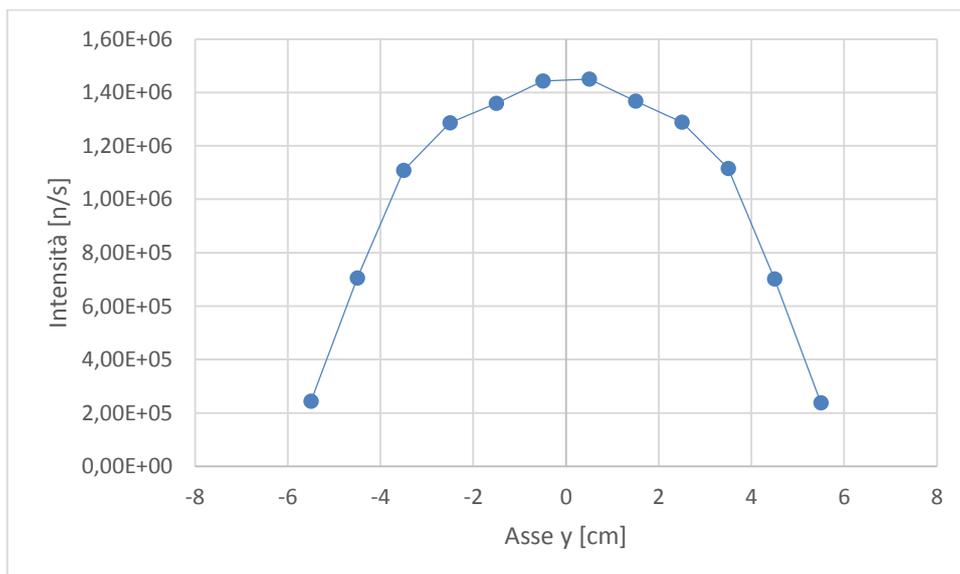


Figura 55 Intensità di corrente di neutroni in un campione 12x1.2 cm lungo l'asse y del campione che è l'asse perpendicolare al fascio incidente e parallelo all'asse del campione (posizione 16).

Anche in questo caso si è provato a variare i parametri della guida ellittica per affinare la focalizzazione ma il risultato non è cambiato. I valori scelti per i parametri *lin* e *lout* della guida sono quindi 5.3 e 4.8 metri.

Per quanto riguarda il monocromatore di germanio l'andamento della corrente di neutroni al campione in posizione 16 è mostrato in Figura 56.

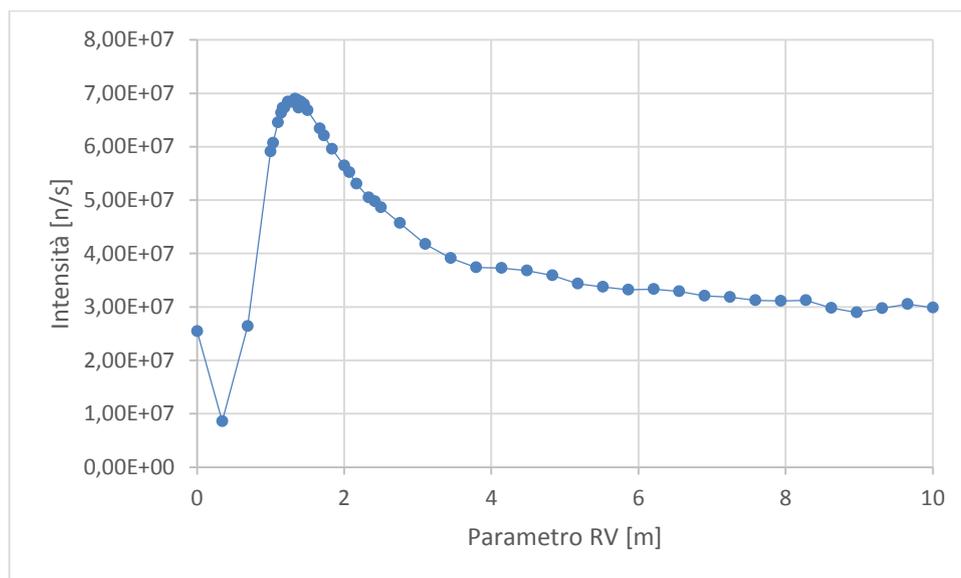


Figura 56 Grafico dell'intensità di corrente di neutroni in funzione del parametro RV con il monocromatore di germanio e le guide ellittiche ottimizzate per un campione 11x1.2 cm (posizione 16).

L'errore statistico associato ai valori di corrente mostrati in questo grafico è stato minimizzato il più possibile, fino a valori di circa 0.5%, compatibilmente con il tempo macchina, perché questo parametro si è dimostrato essere il più importante per la focalizzazione del fascio. Nell'intorno del punto di massimo è stata effettuata una scansione molto approfondita minimizzando l'errore statistico al di sotto dello 0.1% ed effettuando spostamenti del parametro *RV* di 0.5 cm per rivelare precisamente il punto di massimo.

La massima corrente si ha per un valore del parametro *RV* di 1.320 m con un'intensità pari a $(6.8900 \pm 0.0035) \cdot 10^7$ n/s. Nel caso del campione più piccolo (2 x 1 cm) il grafico ha un altro profilo, e il massimo della focalizzazione si ha per un valore di *RV* pari a 1.23 m (Figura 57).

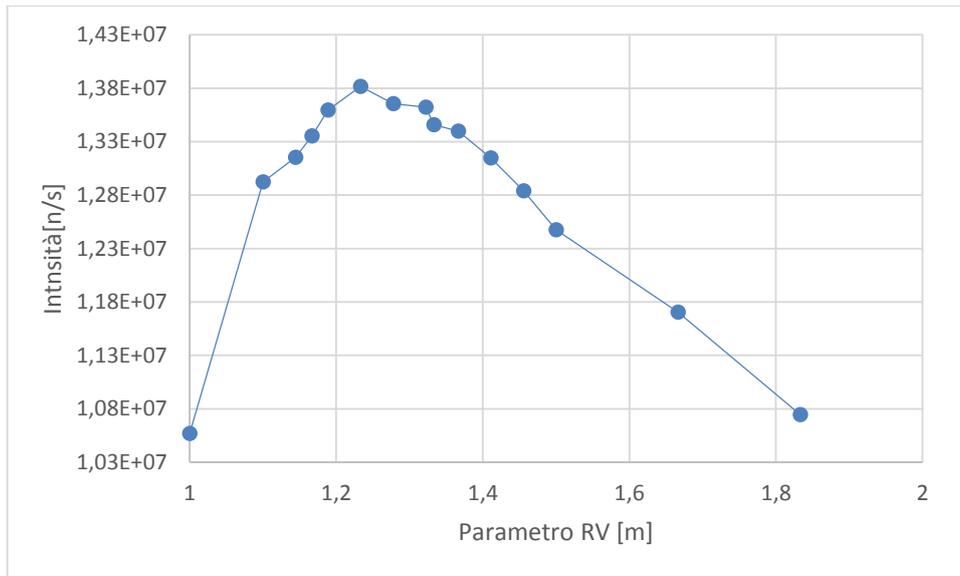


Figura 57 Grafico dell'intensità di corrente di neutroni in funzione del parametro RV con il monocromatore in germanio e le guide ellittiche ottimizzate con monitor di 2x1 cm

In questa fase di ottimizzazione, è preferibile perseguire una maggior intensità di corrente sul campione piccolo piuttosto che su quello grande, si è quindi scelto di dare al parametro RV il valore 1.23 m.

Per quanto riguarda la distribuzione della corrente di neutroni nel campione anche in questa configurazione c'è una disomogeneità nel piano x-y, infatti il fascio è molto più focalizzato al centro.

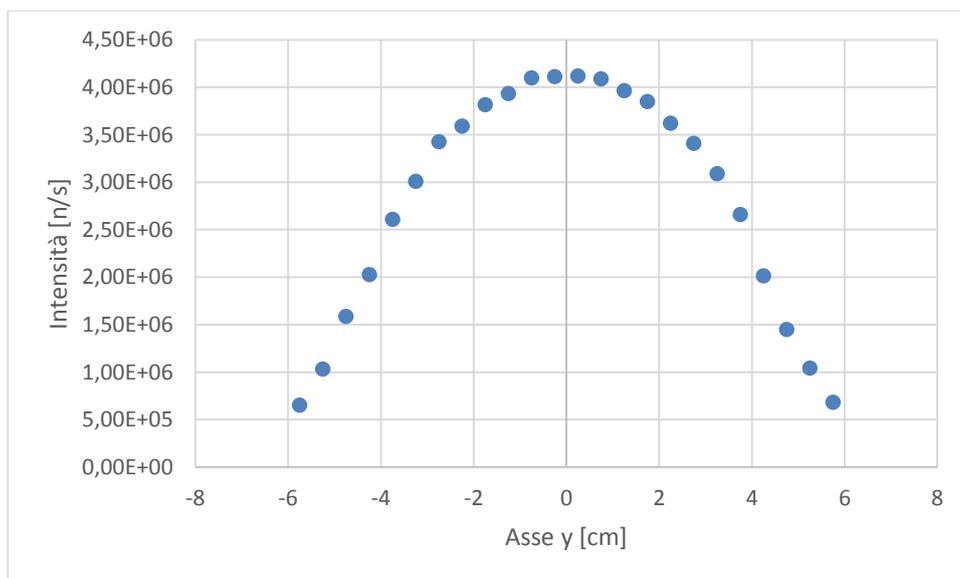


Figura 58 Intensità di corrente di neutroni in un campione 12x1.2 cm lungo l'asse y del campione che è l'asse perpendicolare al fascio incidente e parallelo all'asse del campione.

Nel grafico in Figura 58 è mostrato l'andamento dell'intensità di corrente lungo l'asse y cioè perpendicolarmente rispetto alla direzione del fascio incidente e parallelo all'asse del campione. Anche con la simulazione che utilizza il monocromatore in germanio la corrente al centro è più intensa. Il flusso sul campione da 2 x 1 cm ha un valor medio di $(6.97 \pm 0.11) \cdot 10^6$ n/cm²s mentre nel campione più grande 11 x 1.2 cm il flusso medio è di $(4.80 \pm 0.08) \cdot 10^6$ n/cm²s.

Il parametro RV del monocromatore curvo *Guide_four_side* si è dimostrato essere il più importante ai fini dell'ottimizzazione del fascio neutronico e i dati ottenuti sono riassunti in Tabella 21.

Focus monocromatore	Intensità a 1.58 Å [n/s]	Intensità a 1.16 Å [n/s]
Campione 11x 1.2 cm	1.2 · 10 ⁷	6.84 · 10 ⁷
Campione 2x 1 cm	2.9 · 10 ⁶	1.38 · 10 ⁷

Tabella 21 Risultati dell'ottimizzazione della curvatura del monocromatore attraverso il parametro RV per le lunghezze d'onda 1.58Å e 1.16Å (posizione 16).

4.5 GUIDA NEUTRONICA TRA MONOCROMATORE E CAMPIONE

Questa guida neutronica è utilizzata per portare il fascio dal monocromatore al campione (posizione 11); anche in questo caso si è cercato di ottimizzare attraverso l'impiego di guide rettilinee, paraboliche ed ellittiche.

L'ottimizzazione parabolica viene effettuata tramite il parametro *lout* come mostrato in Figura 59. In questo caso la differenza tra *lout* 0 (guida rettilinea) e *lout* diverso 0 (guida parabolica) non sembra essere marcata e avere l'effetto di focalizzare il fascio sul campione (posizione 16).

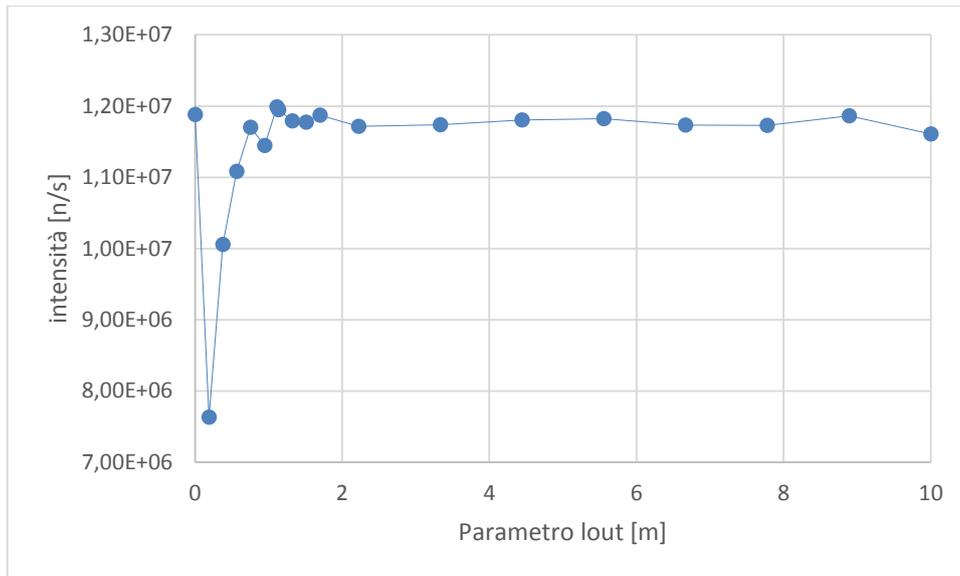


Figura 59 Ottimizzazione guida parabolica tra monocromatore di grafite pirolitica e campione di 11 x 1.2 cm

Nel caso della grafite pirolitica il fascio è ben collimato per cui non è necessario utilizzare le guide paraboliche. Per quanto riguarda la focalizzazione sul monitor che rappresenta il campione da 2 x 1 cm non è possibile esprimere un parere perché il tempo macchina per far convergere la simulazione ad un errore al di sotto del 3% è troppo lungo. Anche nel caso delle guide ellittiche non si ha un incremento prestazionale questo è indice della buona ottimizzazione fatta nelle fasi precedenti.

L'ultima guida simulata è quella tapering e il risultato è mostrato in Figura 60.

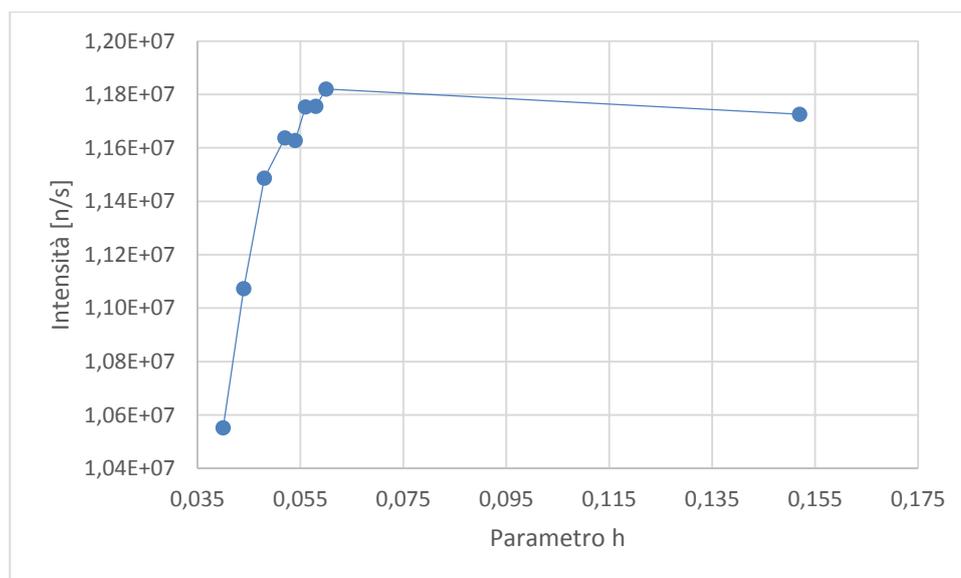


Figura 60 Ottimizzazione guida tapering tra monocromatore di grafite pirolitica e campione di 11 x 1.2 cm

Il risultato migliore si ha per 0.057 cm che corrispondono ad una apertura totale della guida di 11.4 cm, che è circa la grandezza del campione.

L'intensità di corrente neutronica in posizione 16 sul monitor 11 x 1.2 cm è $(1.18 \pm 0.01) \cdot 10^7$ n/s. La corrente in questo caso non migliora se confrontata con il risultato senza guida tra il monocromatore e il campione, anzi peggiora. Questo è dovuto alle pareti laterali della guida che sono costruite in modo d'assorbire tutti i neutroni che incidano su di esse. Questo porta a una diminuzione dell'intensità neutronica ma, d'altra parte, non fa aumentare la divergenza angolare sull'asse x, che a sua volta comporterebbe una diminuzione della risoluzione del detector finale.

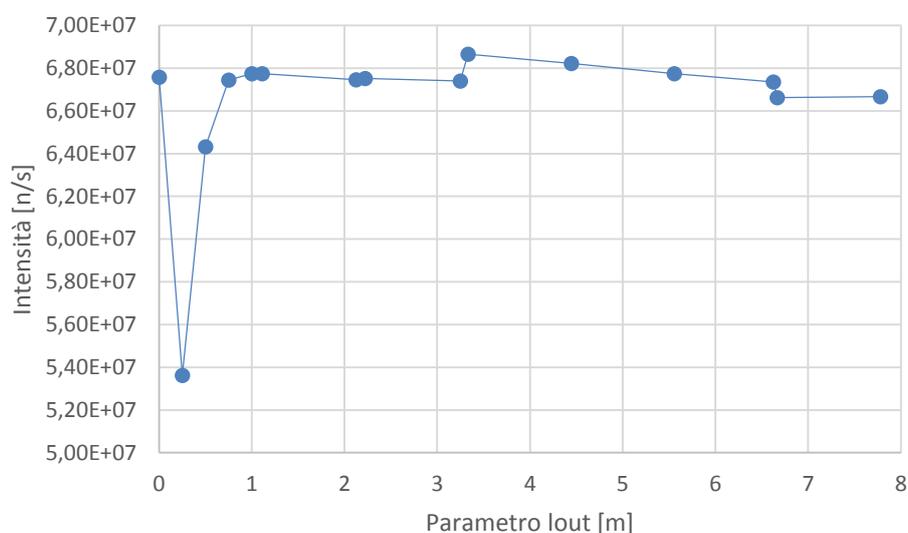


Figura 61 Ottimizzazione guida parabolica tra monocromatore di germanio e campione di 11 x 1.2 cm

Anche nel caso della lunghezza d'onda più corta (1.16 \AA) la guida parabolica, come mostrato in Figura 61, non produce miglioramenti significativi rispetto alla guida rettilinea. Infatti con la guida rettilinea si ha un'intensità di $(6.76 \pm 0.07) \cdot 10^7$ n/s mentre con la guida parabolica si ha un massimo per il parametro *lout* a 3.3 metri con $(6.87 \pm 0.08) \cdot 10^7$ n/s. Purtroppo questo dato non può essere considerato definitivo perché l'errore statistico è ancora troppo elevato.

Per quanto riguarda il campione di 2 x 1 cm il massimo si ha per la configurazione con guide rettilinee come mostrato nella Figura 62 (lo 0 del parametro *lout* è la guida rettilinea) con un'intensità di $(1.42 \pm 0.10) \cdot 10^6$ n/s. Anche in questo caso non si può esprimere un parere definitivo a causa dell'errore statistico.

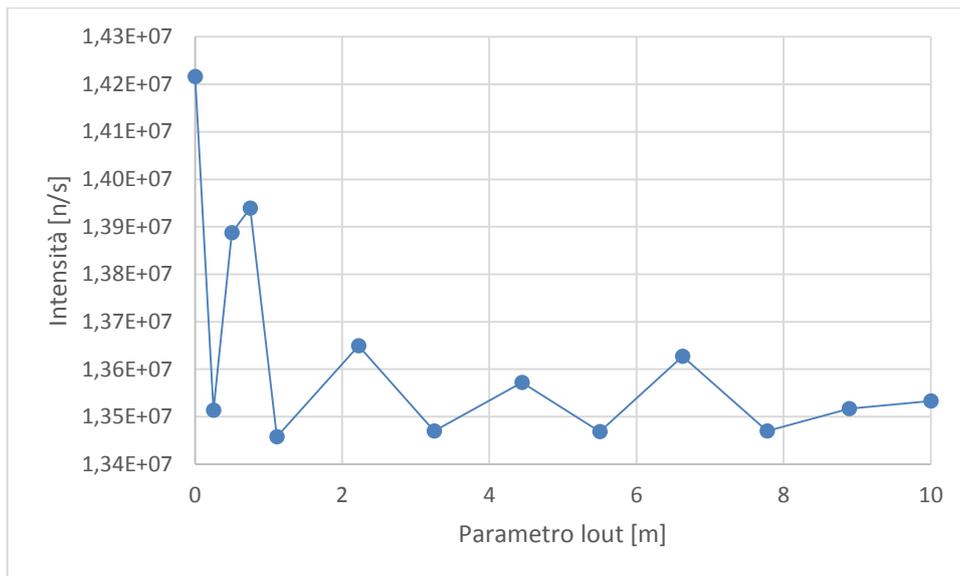


Figura 62 Ottimizzazione guida parabolica tra monocromatore di germanio e campione di 2 x 1.2 cm

Provando varie configurazioni di guide ellittiche, sia per il campione da 11 x 1.2 cm che per quello da 2 x 1 cm, l'intensità di neutroni non migliora rispetto alla guida rettilinea. Il miglior risultato è riportato in Figura 63, dove per un valore di *lout* 1 m e *lin* di 2.2 m l'intensità è di $(6.78 \pm 0.08) \cdot 10^7$ n/s.

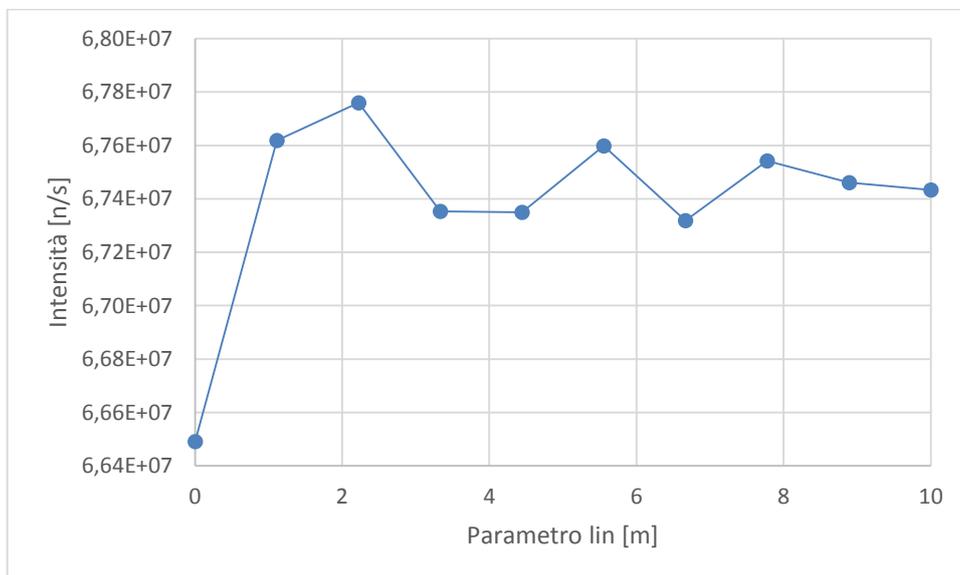


Figura 63 Ottimizzazione guida ellittica tra monocromatore di germanio e campione di 11 x 1.2 cm

L'ultima prova è stata effettuata con le guide tapering. I risultati delle simulazioni effettuate sono riportati in Figura 64.

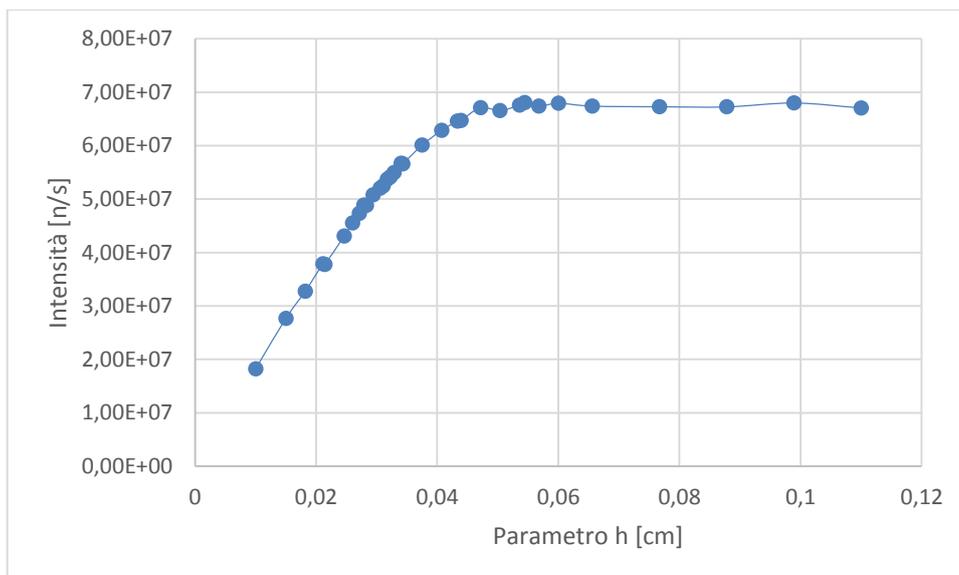


Figura 64 Ottimizzazione guida tapering tra monocromatore di germanio e campione di 11 x 1.2 cm

Il massimo d'intensità si ha per un valore di 5.5 cm che corrisponde ad un'apertura totale della guida di 11 cm con un'intensità di $(6.82 \pm 0.03) \cdot 10^7$ n/s. Questo era un risultato atteso in quanto è pari all'altezza del campione.

Per quanto riguarda il monitor che rappresenta il campione da 2 x 1 cm l'intensità arriva molto più velocemente al valore massimo (Figura 65) ma poi rimane costante all'aumentare del parametro h , quindi come valore ottimizzato si è scelto h pari a 5.5 cm.

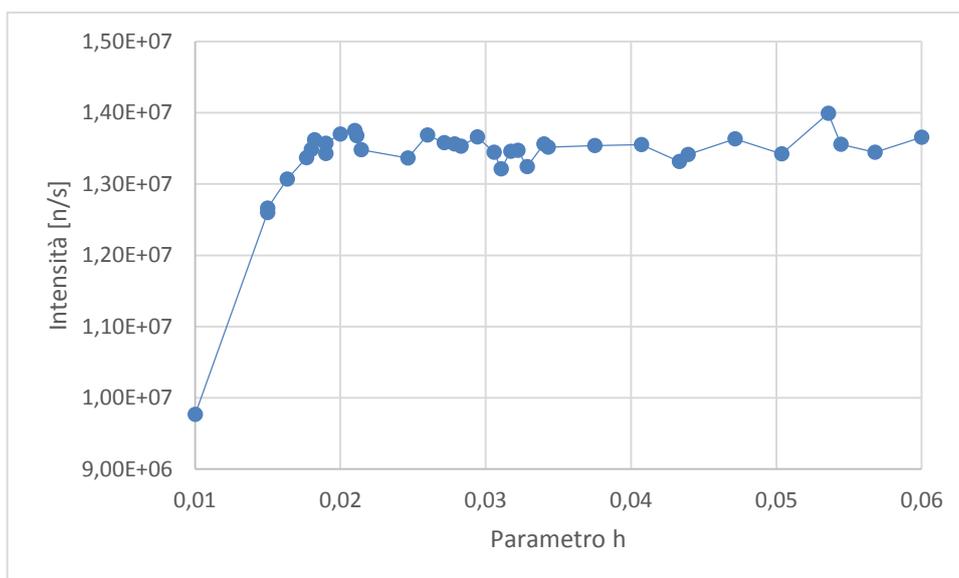


Figura 65 Ottimizzazione guida tapering tra monocromatore di germanio e campione di 2 x 1.2 cm

Anche in questo caso come nel caso della lunghezza d'onda 1.58 Å i valori d'intensità di corrente sono più bassi rispetto alla configurazione senza guida tra il campione e il monocromatore, dovuto allo stesso motivo citato precedentemente.

Per la guida tra monocromatore e campione (posizione 11) si è deciso quindi di utilizzarne una di tipo tapering sia per la configurazione con il monocromatore di germanio sia per la configurazione con il monocromatore di grafite pirolitica, perché né le guide paraboliche né le guide ellittiche sembrano apportare miglioramenti significativi. Questo indica che il fascio è ben collimato.

L'utilizzo della guida in questa parte della facility è utile anche perché in questo modo il fascio di neutroni resta sotto vuoto e non c'è quindi l'interazione dei neutroni con l'aria che produrrebbe una diminuzione d'intensità, un aumento della divergenza angolare e farebbe aumentare la banda energetica selezionata.

4.6 COLLIMATORE

Il fascio così ottenuto ha un'intensità molto elevata ma ha anche una divergenza angolare in x troppo grande, che comporta molto rumore al monitor finale, rendendo illeggibile lo spettro proveniente dal campione. Grazie a un collimatore posto davanti al campione è possibile ridurre questa divergenza fino a farla rientrare nei valori previsti tra 0.1° e 0.2°.

La divergenza angolare nella posizione del campione (posizione 16) senza collimatore, è riportata in Figura 66; nella configurazione con il germanio la divergenza è di circa 2.4°, nella configurazione con la grafite è di circa 2°.

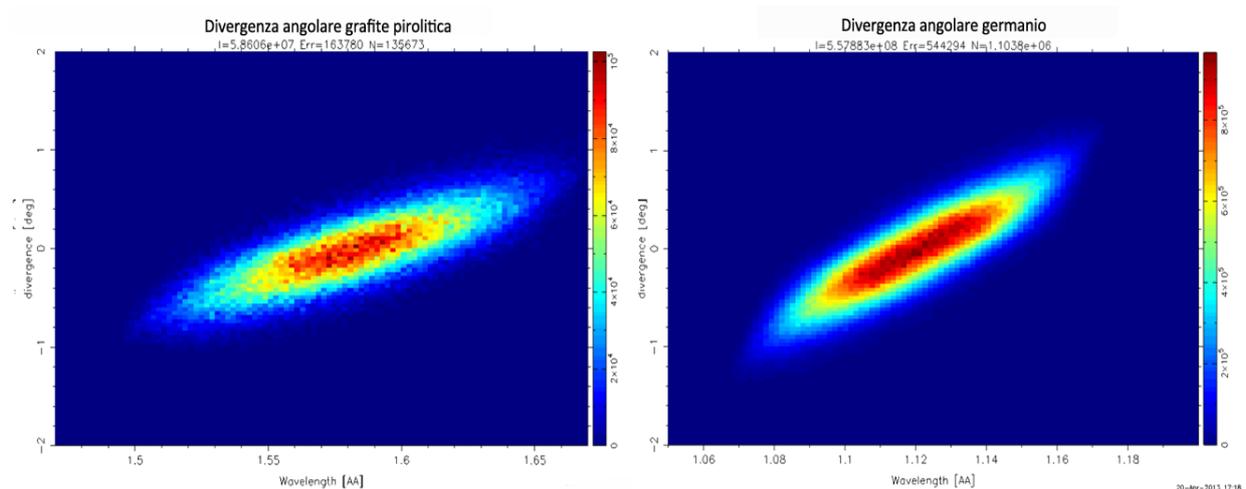


Figura 66 Divergenza angolare senza collimatore. A sinistra è visibile la divergenza del fascio proveniente dal monocromatore in germanio, a destra quella proveniente dal monocromatore in grafite. Il monitor è posizionato sul campione (posizione 16).

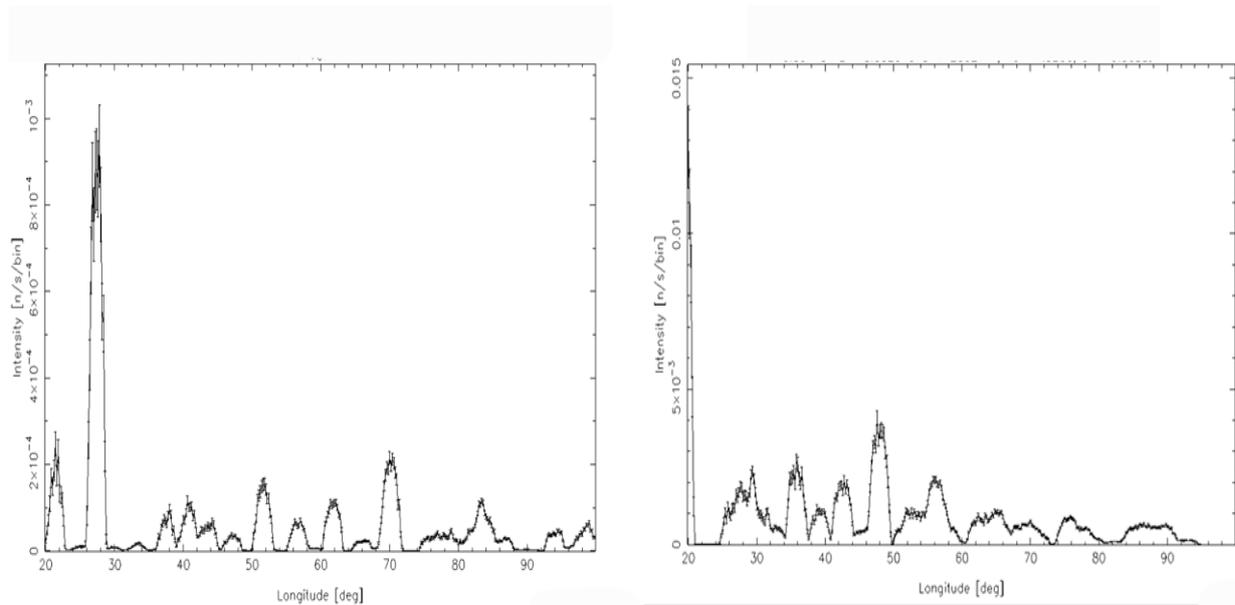


Figura 67 Spettri del composto SiO_2 . A sinistra il composto analizzato con lunghezza d'onda 1.58 \AA , a destra il campione analizzato con lunghezza d'onda 1.16 .

Nella Figura 67 è mostrata l'analisi di un campione di SiO_2 con il fascio non collimato, cioè il pattern acquisito da un detector posizionato in (posizione 19). Posizionando un collimatore prima del campione che permetta di ottenere una divergenza massima di 0.1° , si ottengono i risultati mostrati in Tabella 22.

Divergenza angolare	Flusso a 1.58 \AA [$\text{n}/\text{cm}^2\text{s}$]		Flusso a 1.16 \AA [$\text{n}/\text{cm}^2\text{s}$]	
	Campione 11x 1.2 cm	Campione 2x 1 cm	Campione 11x 1.2 cm	Campione 2x 1 cm
1°	$(6.41 \pm 0.01) \cdot 10^5$	$(9.5 \pm 0.01) \cdot 10^5$	$(3.522 \pm 0.001) \cdot 10^6$	$(5.333 \pm 0.015) \cdot 10^6$
0.5°	$(4.52 \pm 0.06) \cdot 10^5$	$(6.5 \pm 0.1) \cdot 10^5$	$(2.55 \pm 0.004) \cdot 10^6$	$(3.703 \pm 0.014) \cdot 10^6$
0.2°	$(2.24 \pm 0.03) \cdot 10^5$	$(3.15 \pm 0.08) \cdot 10^5$	$(1.124 \pm 0.003) \cdot 10^6$	$(1.590 \pm 0.008) \cdot 10^6$
0.1°	$(1.12 \pm 0.01) \cdot 10^5$	$(1.53 \pm 0.04) \cdot 10^5$	$(5.66 \pm 0.02) \cdot 10^5$	$(8.060 \pm 0.07) \cdot 10^5$
0.05°	nd	nd	$(2.75 \pm 0.01) \cdot 10^5$	$(3.884 \pm 0.03) \cdot 10^5$

Tabella 22 Risultati dell'ottimizzazione della divergenza angolare per le lunghezze d'onda 1.58 \AA e 1.16 \AA

Nella Figura 68 sono raffigurati gli spettri acquisiti con 4 differenti configurazioni del collimatore che portano ad una divergenza di 1° , 0.2° , 0.1° e 0.05° . Gli spettri corrispondono tutti alla lunghezza d'onda 1.16 \AA ,

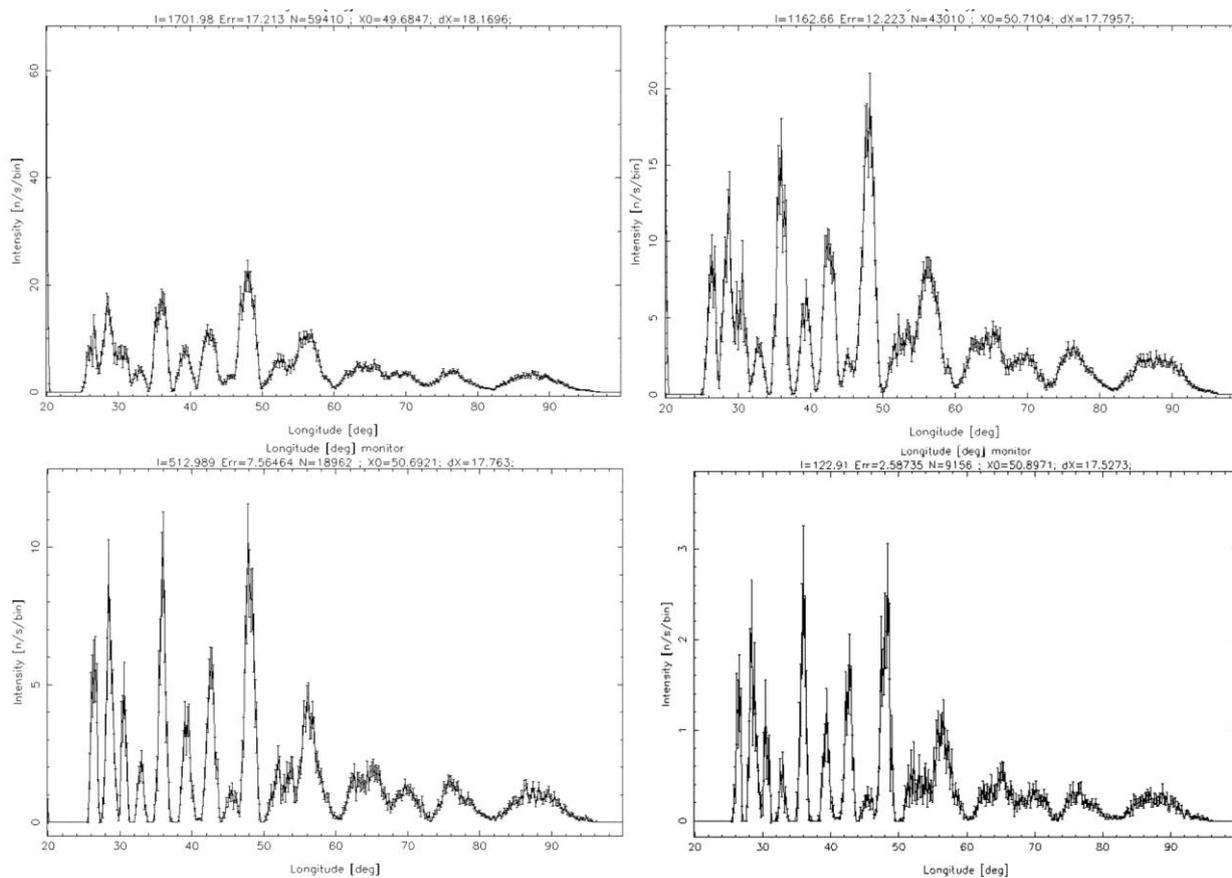


Figura 68 Spettri del composto SiO_2 preso con lunghezza d'onda 1.16 \AA . Lo spettro in alto a sinistra corrisponde a una divergenza del fascio di 1° , quello in alto a destra a una divergenza di 0.2° , quello in basso a sinistra a una divergenza 0.1° , e quello in basso a destra a una divergenza di 0.05° . Tutti i grafici stati acquisiti in posizione 19.

I risultati ottenuti con quest'ultima ottimizzazione dimostrano che la configurazione migliore è costituita da un monocromatore in germanio e da un collimatore che permetta di ottenere una divergenza angolare di 0.1° . Non si notano miglioramenti significativi rispetto alla configurazione con divergenza angolare di 0.01° .

5 CONCLUSIONI

Questa tesi è dedicata a uno studio di fattibilità per la costruzione di una facility di diffrazione neutronica da polveri presso il reattore TRIGA Mark II dell'Università di Pavia. Attraverso calcoli Monte Carlo è stato simulato un set-up lungo uno dei canali orizzontali disponibili, comprendente un monocromatore, una serie di guide, un filtro e un collimatore. Ciascuna di queste componenti è stata ottimizzata variandone le caratteristiche geometriche e i materiali in modo da ottenere un flusso neutronico di almeno 10^5 n/cm² s in corrispondenza del campione.

Per effettuare le simulazioni, sono stati usati due codici di trasporto: MCNP e McStas, in particolare il secondo è necessario per simulare i processi di ottica neutronica, sulla quale si basa la monocromatizzazione del fascio e il suo trasporto attraverso le guide.

Data la novità dell'argomento presso il Dipartimento di Fisica di Pavia, parte di questa tesi si è svolta in collaborazione con il gruppo Laboratory for Developments and Methods del PSI di Villigen, Svizzera, dove è operante una sorgente di spallazione molto intensa, da cui sono stati estratti vari fasci dedicati a diffrazione. Il gruppo diretto dal dr Uwe Filges è esperto sia nel design Monte Carlo di fasci di questo tipo, sia nella progettazione e costruzione dei diversi componenti ottici, sia nel monitoraggio dei fasci.

La facility simulata (Figura 35) è costituita, nell'ordine, da: un filtro di zaffiro, una guida tra la sorgente e il monocromatore, un monocromatore, che può essere di grafite pirolitica o germanio, per selezionare una lunghezza d'onda da trasportare fino al campione, una guida tra il monocromatore e il campione, un collimatore, il campione, un beam stopper e il detector.

In McStas, per ciascuno di questi elementi, è definito un componente le cui caratteristiche si impostano definendone i parametri. Variando i parametri sono state analizzate diverse soluzioni e sono state valutate in base all'intensità di neutroni ottenuta nella posizione del campione e al pattern di diffrazione prodotto da un campione di SiO₂ in polvere.

La migliore configurazione fra quelle provate consiste in:

- Un filtro di zaffiro di 5 cm.
- Una guida ellittica tra la sorgente e il monocromatore con parametri *lin* e *lout* rispettivamente di 5 e 6.6 metri.
- Un monocromatore in germanio con raggio di curvatura RV 1.23 metri.
- Una guida tapering tra il monocromatore e il campione con apertura di 5.5 cm.
- Un collimatore che porta la divergenza angolare a 0.1° .

Questo set-up permette di ottenere un flusso neutronico sul campione di 11×1.2 cm pari a $(5.66 \pm 0.02) \cdot 10^5$ n/cm²s e un flusso sul campione da 2×1 cm pari a $(8.06 \pm 0.07) \cdot 10^5$ n/cm²s con una divergenza angolare massima di 0.1° . Il pattern di diffrazione così ottenuto presenta picchi sufficientemente risolti (Figura 68) per l'analisi della struttura del campione.

Questo risultato dimostra che, in principio, è possibile costruire una facility di questo tipo presso il reattore di Pavia. Rimane da approfondire lo studio di ottimizzazione degli elementi e la scelta del rivelatore in base ai vari tipi di campioni che si intendono analizzare. Un'altra parte del lavoro che andrà affrontata, sempre attraverso il trasporto Monte Carlo, è la progettazione del beam stopper e degli schermi per la radioprotezione, che richiedono uno studio a parte. Infine, per la definizione di un progetto esecutivo, il processo di ottimizzazione deve riguardare anche i costi dei componenti, dato che i risultati migliori sono spesso garantiti dagli ultimi ritrovati tecnologici o da prototipi la cui costruzione richiede molto tempo e ingenti risorse.

6 BIBLIOGRAFIA

1. , **General Atomics:** *Technical Foundation of Triga*. San Diego, 1958.
2. **B.E.Watt:** *Energy spectrum of neutrons from thermal fission of 235-U*. 1952, Vol. Phys. Rev. 87.
3. **S.Altieri, S.Bortolussi:** *Thermal Neutron Irradiation Field Design for Boron Neutron Capture Therapy of Human Explanted Liver*. Vol. 34, pp. 4700-4705, Pavia , December 2007, Vol. Medical Physics.
4. **A.Borio di Tigliole, A.Cammi, M.Clemena, V.Memoli, L.Pattavina, E. Previtali:** *Benchmark evaluation of reactor critical parameters and neutron fluxes distributions at zero power for the TRIGA Mark II reactor of the University of Pavia using the Monte Carlo code MNCP 2010*, Vol. Progress in Nuclear Energy, 52(5)494-502.
5. **J. Chadwick:** *Proc. Roy. Soc. A*, 136:692, 1932.
6. **H. von. Halban, P. Preiswerk:** *Comptes Rendus*. 203:73, 1938.
7. **G. L. Squires:** *Introduction to the Theory of Thermal Neutron Scattering*. 1978.
8. **S. W Lovesey:** *Theory of neutron scattering from condensed matter*., 1984.
9. **S. W Lovesey, E. Balcar:** *Theory of Magnetic Neutron and Photon Scattering*. 1989.
10. **NIST** <http://www.ncnr.nist.gov/resources/n-lengths/>.
11. **E. Fermi:** *Collected Papers*. Univ. Chicago, 1952, Vol. I.
12. **D. F. R. Mildner:** *Acceptance Diagrams For Curved Neutron Guides*. 1990.
13. **J. R. D. Copley:** *Optimized design of the chopper disks and the neutron guide in a disk chopper neutron time-of-flight spectrometer*. 1990.

14. **E. Fermi and W.H. Zinn.** 103, 1946, Vol. Rev 70.
15. **A.C. Komarek, P.Boni, M.Braden:** *Parabolic versus elliptic focusing – Optimization of the focusing design of a cold triple-axis neutron spectrometer by Monte-Carlo simulations*, Koln, Germany, 2010, Vol. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A.
16. **M.Utsuro, V.K.Ignatovich:** *Handbook of Neutron Optics.* 2010.
17. **P.N. Powers, D.P. Mitchell** 1936, Vol. Rev 50.
18. **Zinn, W.H.** 1947, Vol. Phys Rev 71.
19. **Lucia Alianelli:** *Characterization and modelling of imperfect crystals for thermal neutron diffraction.* Grenoble, PHD Thesis, 2002.
20. **J.Kilda:** *Towards ideal focusing monochromators.* Grenoble, 1995, Vol. Physica B 213&214.
21. **V. Wagner, A. Magerl:** *Focusing Bragg Optics.* Nuclear Instr. Methods A, 1994.
22. **S. Werner, H. Rauch:** *Neutron Interferometry.* : Oxford University Press, 2000.
23. **V.F. Sears:** *Neutron Optics* Oxford University Press, 1989.
24. **Team, X-5 Monte Carlo. MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5 - Volume I: Overview and Theory.** Los Alamos National Laboratory, revised 2/2008 (2008).
25. **McStas** www.mcstas.org 2013.
26. **LABORATORY, OAK RIDGE NATIONAL.** *Manuale di MCNP.* Los Alamos.
27. **McStas manual** <http://www.mcstas.org/documentation/manual/>.
28. **K. Nielsen, K. Lefmann:** *Monte Carlo simulations of neutron-scattering instruments using McStas..* Riso National Laboratory , 2000, Vol. Physica B 283 .
29. **E. Klinkbya, B.Lauritzen, E. Nonbol, P.K. Willendrup, U.Filges, M. Wohlmuther, F.X. Gallmeier:** *Interfacing MCNPX and McStas for simulation of neutron transport..* 2013, Vol. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment.
30. **Des. McMorrow, Jens Als-Nielsen:** *Elements of Modern X-Ray.* John Wiley and sons, 2001.
31. **Christian Schanzer, Peter Boni, Uwe Filges, Thomas Hils:** *Advanced geometries for ballistic neutron guides.* 2004, Vol. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A.

32. Sebastian Mühlbauera, Martin Stadlbauer, Peter Boni, Christan Schanzer, Jochen Stahn, Uwe Filges: *Performance of an elliptically tapered neutron guide. Volumes 385–386, Part 2, Garching, Germany , 2006, Vol. Physica B: Condensed Matter.*

33. Swiss Neutronics <http://www.swissneutronics.ch/>. 2013

34. B.Hennion, E.Farhi: *La diffusion inelastique des neutrons, Grenoble , 2000.*

Ringraziamenti

Dopo i tre anni più importanti, più significativi, e per adesso i più dolcemente difficili della mia vita, in cui ho potuto capire molto di me stesso, mi trovo a scrivere quelle pagine che da tanto ho meditato (e 'mo che ce scrivo).

Andrò a braccio sperando di non dimenticare nessuno, ma se tu, mio caro lettore, non dovessi trovare i tuoi dati anagrafici nelle prossime righe... dimmelo e ti ringrazierò molto volentieri di persona, per il solo fatto che tu abbia interesse a leggere questa tesi (anche se hai letto solo i ringraziamenti... si dico a te con la faccia da furbetto).

Bene, si comincia partiamo con gli addetti ai lavori.

Il grazie più grande va sicuramente alla Dr. Silva Bortolussi. Ha respirato questa tesi con me, ci ha tenuto da matti che tutto andasse per il verso giusto, anche in momenti di estremo sconforto, come quando mi sono trovato a dare ad ogni neutrone un nome tant'erano pochi. Ha tolto tempo preziosissimo alle sue attività di ricerca per starmi affianco e ascoltare le mie stupide domande. Ha costruito nei miei confronti un rapporto alla pari, non professore e tesista, ma due persone che si arrovellano insieme nelle difficoltà e che esultano insieme come bambini al momento giusto (MCNP fa anche questo effetto). Grazie per questo momento di crescita e scusami per tutte le volte che mi avresti voluto uccidere.

Il secondo grazie va al Prof. Saverio Altieri con lui avevo già sostenuto un esame e la sua presenza autorevole mi suscitava un po' di timore...nulla di più sbagliato. Avendo a che fare con lui in maniera più ravvicinata, ho scoperto una persona elegante, simpatica, ironica. Lo ringrazio anche per avermi dato l'opportunità di approfondire questa tesi all'estero.

Special thanks to Dr. Uwe Filges who hosted me at his Institution, offering valuable help and allowing me learning the fundamentals of this discipline. Special thanks also to Dr Tobias Panzner without his help and teaching most of this thesis would not have been possible. Thanks to Dr. Emmanouela Rantsiou to accommodate me in his office.

Ringrazio il Dr. Paolo Ghigna perché senza di lui questa tesi non sarebbe nemmeno stata pensata. Grazie per l'interesse e l'incoraggiamento ad esplorare questo campo di studio a me nuovo.

Un ringraziamento fatto col cuore va a tutto l'ufficio che si occupa di BNCT a Pavia (e fidatevi non è solo retorica). Nel giro di un pomeriggio mi hanno fatto sentire uno di loro, con il dovuto mix di gentilezza e goliardia. Mi sono sentito sempre benvenuto e in una botte di ferro. Grazie Ian, Nico, Maria e Rubèn.

Qui i ringraziamenti per molti si ripetono perché vorrei ringraziare tutte le persone che hanno condiviso con me un (povero) pasto alla mensa e le serate a Pavia. Grazie Silva, Nico, Cristina, Francesca, (prima le donne siate cavalieri non vi arrabbiate) Claudio, Ian,

Andrea, Alessandro, Marco. Grazie a voi ho sentito Pavia come fosse casa mia e per la prima volta mi sono legato ad un posto che non fosse il mio paese natale.

Adesso c'è lui il più importante di tutti, non me ne voglia nessuno il mio mitico coinquilino!! Giuseppe Spinozzi! Che dire di lui... il mio autista personale, il mio psicologo, commercialista, esattore delle tasse, compagno di merende è stata una conoscenza irripetibile. Un fratello maggiore che sa qual è il momento giusto per pararti il... e qual è il momento giusto per farti sganassare dalle risate (poverino ogni tanto è un po' fulminato). Ha sudato su questa tesi con me e per me, senza nulla chiedere, né tantomeno avere. Un grazie va sicuramente anche a Cinzia e Noemi che ci hanno preparato pasti squisiti.

Non hanno mai capito di cosa trattasse questa tesi (forse la colpa è mia che non mi sono mai espresso in modo chiaro), ma in prima persona, quotidianamente, nonostante le difficoltà di quest'ultimo periodo, ne hanno respirato tutte le emozioni e mi hanno aiutato nei momenti difficili della mia vita: un Grazie commosso va a Mia Madre e Mio Padre. Non mi hanno mai fatto mancare nulla, mai. Non solo dal punto di vista materiale. Hanno riposto in me tutte le loro speranze e aspettative, anche nei momenti più bui, e spero di non averli delusi neanche per un secondo. GRAZIE

Un grazie pieno di sentimento va a Francesca, con cui ho condiviso gli ultimi anni. A Lei che è la mia ragazza, compagna, fidanzata, amica, spalla, coscienza, guida, grazie per tutto quanto, per tutta la gioia che mi dà, per le risate, i sorrisi, le emozioni, la comprensione, l'aiuto, la fiducia, perché crede in me, il suo amore, per come è, perché lei c'è. Sempre. E mi sopporta (ognuno ha le sue croci). Potrei scrivere pagine intere ma mi fermo qua, perché so quanto odia che si parli di lei, ma soprattutto perché QUELLO CHE HO DA DIRTI, SARA' A VOCE...

Ah!!! dimenticavo Grazie a Thor! E cibo! cibo! cibo!

Le mani tremano il sospiro diventa affannoso ma siamo arrivati alla fine di questa avventura.

THE END

MA OGNI FINE È UN NUOVO INIZIO.

