

В. ЖУМАБЕКОВА, М. ХАСАНОВ

(Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан)

## МОДЕЛИРОВАНИЕ РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С МЕТАЛЛИЧЕСКИМ БЕРИЛЛИЕВЫМ МАТЕРИАЛОМ В ОБЛАСТИ НИЗКИХ ЭНЕРГИЙ

**Аннотация.** В настоящей работе рассматриваются особенности моделирования взаимодействия тепловых нейтронов с металлическим бериллиевым материалом. С целью изучения этих особенностей был написан программный код на языке «C++» и для расчета был применен метод Монте-Карло. С помощью этой программы был рассчитан энергетический спектр нейтронов после взаимодействия с металлическим бериллиевым образцом, имеющий форму прямоугольного параллелепипеда с линейными размерами 10x20x20см, а также было сделано визуализация нейтронных треков с помощью библиотеки OpenGL.

**Ключевые слова:** когерентное, некогерентное, ядерная база данных.

**Тірек сөздер:** когеренттік, некогеренттік емес, ядролық деректер базасы.

**Keywords:** coherent, non-coherent, nuclear reaction database.

**Введение.** Как известно, нейтроны в области тепловых энергий имеют длины волн, сопоставимые с межплоскостными расстояниями твердого тела, и при облучении образца нейтроны взаимодействуют со всей кристаллической решеткой, а не отдельно с ядрами и заметно проявляются такие эффекты, как упругое когерентное рассеяние и неупругое некогерентное рассеяние. В случае упругого когерентного рассеяния энергия нейтрона не изменяется после взаимодействия с кристаллом, оно является хорошо известным Брегговским рассеянием, относящиеся к нейтронам. В случае неупругого некогерентного рассеяния энергия нейтрона изменяется за счет обмена энергией нейтрона с фононами кристалла. Каждый из этих типов рассеяния вносит свой вклад во взаимодействия нейтрона с кристаллом, описываемое сечением, и соотношение этих вкладов является характерной чертой для каждого материала.

**Теоретическая часть.** Известно, что для моделирования процессов излучения методом Монте-Карло важной частью является задание сечений всех необходимых видов взаимодействия, поэтому расчет сечений когерентного упругого и некогерентного неупругого взаимодействия нейтрона с образцом материала является первостепенной задачей в тепловой области энергий. Так как металлический бериллий по своей структуре является поликристаллом, для расчета сечений при когерентном упругом рассеянии существует аналитическая формула для всех типов поликристаллов:

$$\sigma_{coh} = \frac{S^2}{8\pi NB} \sum_{\mathbf{d} > \mathbf{0}} F d e^{-2W} \quad (1)$$

Здесь  $w$  – коэффициент Валлера-Дебая,  $d$  – межплоскостное расстояние,  $F$  – структурный фактор,  $S$  – сечения когерентного рассеяние.

Формула (1) пригодна для многих материалов и достаточно хорошо описывает процесс когерентного упругого рассеяние нейтронов в некотором приближении, но использование ее к прикладным расчетам методом Монте-Карло является крайне затратным с точки зрения машинного кода, а при большом количестве розыгрышей, которое необходимо для получения статистики процесса, следовательно, точных результатов, данная формула становится вовсе непригодным. В таких случаях для вычисления сечений наиболее целесообразно использовать экспериментальные данные, представленные в формате ENDF/B-6 (база данных ядерных констант). Дифференциальное сечение когерентного упругого рассеяния в формате ENDF/B-6 представлено в виде:

$$\frac{d^2\sigma}{dE d\Omega(E \rightarrow E', \mu, T)} = \frac{1}{E} \sum_{i=1}^{E_i < E} s_i(T) \delta(\mu - \mu_i) \delta(E - E_i) \quad (2)$$

где  $E$  – энергия взаимодействующего нейтрона (эВ),  $E'$  – энергия вторичного нейтрона (эВ),  $\mu$  – косинус угла рассеяния,  $T$  – температура замедлителя (К),  $E_i$  – энергии границ Брэгга (эВ),  $S_i$  – пропорциональны структурным множителям (эВ-барн)  $\mu_i$  – косинусы углов рассеяния, соответствующие границам Брэгга.

В этом формате косинус угла рассеяния является дискретной величиной, зависящая от энергий самого нейтрона и от энергии границ Брэгга для данного материала и определяется формулой:

$$\mu_i = 1 - \frac{E_i}{E} \quad (3)$$

Так как энергия вторичного нейтрона  $E'$  при упругом когерентном рассеянии равно энергии нейтрона до взаимодействия, проинтегрировав выражение (2) и умножив на  $2\pi$ , получаем следующую формулу :

$$\sigma(E, T) = \frac{1}{E} \sum_{i=1}^{E_i < E} s_i(T) \quad (4)$$

где сумма  $\sum_{i=1}^{E_i < E} s_i(T)$  является структурным множителем и представлена в формате ENDF/B-6 в виде таблицы с соответствующими энергиями границ Брэгга для определенной температуры.

Некогерентное неупругое рассеяние представляет собой взаимодействия нейтронов с звуковыми фонами кристалла. За счет этих взаимодействия нейтрон может не только терять энергию, но также приобретать, забирая часть энергий у фононов, что приводит к смещению спектра энергий у нейтронов внутри образца. Сечение некогерентного неупругого процесса можно рассчитать с помощью формулы (5).

$$\sigma_{spn} = \frac{\sigma_{bat}}{36A} \left( \frac{\theta_D}{E} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (5)$$

где  $\sigma_{bat}$  – амплитуда когерентного рассеяния,  $\theta_D$  – характеристическая температура Дебая.  $E$  – энергия нейтрона до взаимодействия. Формула (5) является однофононным приближением и не учитывает рассеяние нейтрона на многих фононах, соответственно, использование формулы (5) приводит к некоторым неточностям. В данной работе для расчета сечения некогерентного неупругого рассеяние вместо формулы (5) был использован специальный алгоритм программного комплекса Vrand, который учитывает как однофононное, так и многофононное взаимодействие.

**Алгоритм программы.** Как было сказано выше, для моделирование взаимодействия нейтрона с материалом методом Монте-Карло нужно рассчитать сечение когерентного упругого и некогерентного неупругого рассеяния. С этой целью был разработан специальный алгоритм для расчета сечения когерентного упругого рассеяния, обрабатывающий экспериментальные данные из ядерных баз данных и вычисляющий сечение для заданной энергий. Результат этого вычисления приведен в виде графика, где показана зависимость сечения когерентного рассеяния нейтронов от температуры материала и от энергий налетающего нейтрона.

Из графика видно, что сечение когерентного упругого рассеяние для металла Ве-9 уменьшается экспоненциально с ростом энергий нейтрона, что и объясняется экспоненциальным членом в аналитической формуле (1).

Расчет сечения некогерентного неупругого рассеяние производится с помощью алгоритма программного комплекса Vrand в основной программе и вычисляется при каждом розыгрыше столкновения.

Результат вычисленного сечения когерентного упругого рассеяния оцифровывается в файл формата dat и привязывается к основной программе, предназначенной для моделирования взаимодействия нейтрона с металлом Ве-9. Основная программа представляет из себя код, написанный на языке программирования C++, который учитывает структурные характеристики материала. В программе задается тип материала, размеры (10x20x20)см. Начальные энергии нейтронов являются

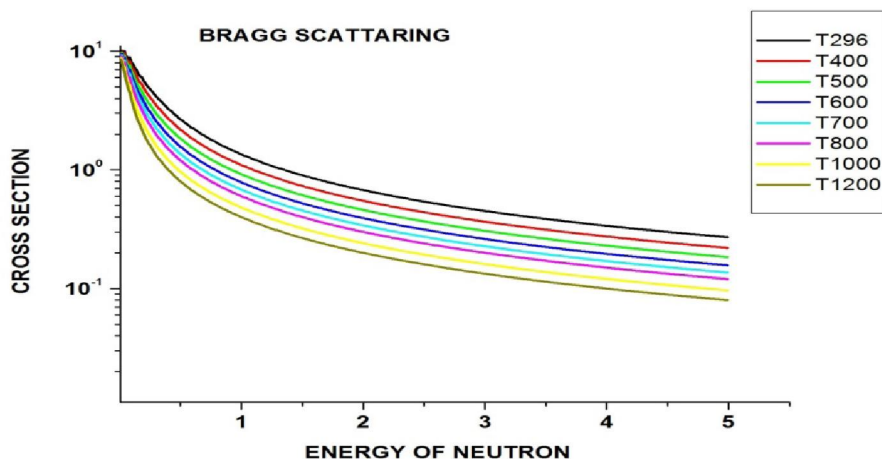


Рисунок 1 – сечение когерентного рассеяние в металлическом Be-9

монохроматическим равной 0,5 (эв) и направлены в направлений x (10см). При взаимодействии нейтрона с материалом энергий нейтронов смещаются за счет энергетического обмена с фононами, в случае покидания нейтронов области материала регистрируется значение ее энергий.

**Результаты моделирования.** Результатом моделирования является энергетическое распределение нейтронов после взаимодействия с материалом. Ниже приведен график этого распределения.

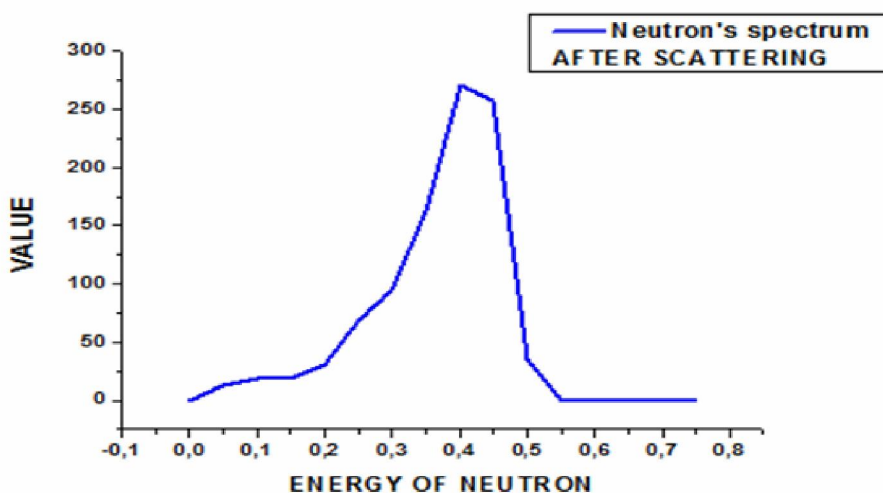


Рисунок 2 – энергетическое распределение нейтронов после взаимодействия с образцом.

**Заключение.** Как видно из графика распределений, хотя и сечение когерентного упругого рассеяния составляет 6,1 барн, при энергии нейтрона 0,5 эв большинство нейтронов изменяют свою начальную энергию, то есть происходит обмен энергий нейтрона с фононами. Это объясняется тем, что средняя длина свободного пробега нейтрона при 0,5 эв составляет не более одного сантиметра, в то время как толщина пластины – 10 см, то есть нейтрон, прежде чем покинуть пластину, совершает некоторое число столкновений, соответственно с каждым числом столкновений растет вероятность некогерентного неупругого рассеяние, что и приводит к изменению начальной энергий нейтрона.

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1 Франк-Коменский А.Д Моделирование траекторий нейтронов при расчете реакторов методом Монте-Карло. – М.: Атомиздат, 1978. 96 с.
- 2 Мухин К.Н. Экспериментальная ядерная физика. – М.: Атомиздат, 1974.
- 3 Библиотека оцененных ядерных данных. ENDF-6/B.

## REFERENCES

- 1 Frank-Komensky A.D. Modelirovanie traektorii neutronov pri raschete reaktorov metodom monte karlo. M.: Atomizdat, 1978. 96 s.
- 2 Muhin K.N. Experementalnaya yademaya phisika. M.: Atomizdat, 1974. 96 s.
- 3 Nuclear reaction database ENDF-6\B.

## Резюме

*В. Жұмабекова, М. Хасанов*

(Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан)

## БАЯУ НЕЙТРОНДАРДЫҢ ВЕ-9 МЕТАЛЫНДА ШАШЫРАУ ҮДЕРІСІН ҮЛГІЛЕУ

Бұл жұмыста баяу нейтрондардың Ве-9 металында когеренттік және когеренттік емес шашырау үдерістері қарастырылып, осы үдерістерді үлгілеу мақсатында с++ бағдарламалау тілінде арнайы алгоритм құрылды. Есептеулердің нәтижесінде нейтрондардың Ве-9 металында шашырағаннан кейінгі энергетикалық үлестірімі алынды.

**Тірек сөздер:** когеренттік, когеренттік емес, ядролық деректер базасы.

## Summary

*V. Zhumabekova , M. Khasanov*

(Al-Farabi kazakh national university, Almaty, Kazakhstan)

## SIMULATION OF THERMAL NEUTRON SCATTERING FOR BE-9 METTAL

In this article was considered thermal neutron scattering such as coherent and non-coherent neutron scattering. Program code has been written for simulating of these processes and as a result neutron energy spectrum has been obtained after interaction with Be-9 mettal .

**Keywords:** coherent, non-coherent, nuclear reaction database.