

NEWS

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

PHYSICO-MATHEMATICAL SERIES

ISSN 1991-346X

Volume 3, Number 307 (2016), 5 – 11

## CALCULATION OF NEUTRON PASSAGE THROUGH CATALYTIC COMPOSITION (PB, BI, PO) BY MCNP PROGRAM

M.Abishev<sup>1</sup>, N. Kenzhebayev<sup>1</sup>, S.Kenzhebayeva<sup>1</sup>, A.Dzhanybekov<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Kazakh National University named after Al-Farabi, Almaty, Kazakhstan  
nurzat.kenzhebaev@gmail.com

**Key words:** Catalytic composition, MCNP, Monte-Carlo method, cyclic reaction, EXFOR, s-process.

**Abstract.** The purpose of this work is to verify the correctness of the catalyst composition with the numerical simulation (by MCNP program) and to calculate the passage of neutrons through the material. The passage of neutrons through the catalyst composition was modelled by MCNP program (Monte-Carlo N-Particle), created in the laboratory of Los Alamos (United States) was used for the simulation to calculate the reactors and the interaction of neutrons, photons and electrons with matter. With this program, it has been calculated reflection coefficient, transmission and absorption of neutrons substance and the reaction rate as a function of neutron energy. Obtained results were compared with the results of analytical calculations. Also, the analysis was made to select the geometry catalyst composition, in which reaction efficiency cyclic be maximized. The calculation of the concentration of the catalytic composition of elements was calculated in work [2].

## РАСЧЕТ ПРОХОЖДЕНИЯ НЕЙТРОНОВ ЧЕРЕЗ КАТАЛИТИЧЕСКИЙ СОСТАВ (РВ, ВІ, РО) С ПОМОЩЬЮ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА MCNP

М.Абишев<sup>1</sup>, Н.Кенжебаев<sup>1</sup>, С.Кенжебаева<sup>1</sup>, А.Джанибеков<sup>1</sup>

<sup>1</sup>КазНУ им. аль-Фараби, физико-технический факультет, г. Алматы, Республика Казахстан

**Ключевые слова:** каталитический состав, MCNP, метод Монте-Карло, циклическая реакция, EXFOR, s-процесс.

**Аннотация.** Целью данной работы является проверка правильности каталитического состава с помощью численного моделирования (программой MCNP), а также провести расчет прохождения нейтронов через вещество. В работе было смоделировано прохождение нейтронов через каталитический состав. Для моделирования была использована программа MCNP (Monte-Carlo N-Particle), созданная в лаборатории Лос-Аламос (США) для расчета реакторов и взаимодействия нейтронов, фотонов и электронов с веществом. С помощью этой программы был рассчитан коэффициент отражения, прохождения и поглощения нейтронов веществом и скорость протекания реакций в зависимости от энергий нейтронов. Результаты данных были сравнены с аналитическими расчетами. А также был сделан анализ для выбора геометрий каталитического состава, при котором эффективность циклической реакции была бы максимальной. Расчет концентраций элементов каталитического состава был вычислен в процессе работы [2].

**Введение.** На сегодняшний день одной из актуальных проблем в реакторной физике является улучшение качества отражателя нейтронов в активной зоне реактора и срок его эксплуатации.

Наилучшим отражателем является бериллий, так как его коэффициент отражения по сравнению с остальными отражателями (например графит) высок. Но у бериллия есть недостаток. После долгого облучения в нем накапливается тритий и гелий, образуя набухание и приводя к уменьшению качества отражения. Чтобы увеличить срок эксплуатации, нужно чтобы свойства и содержание элементов отражателя не менялись во время облучений. В работе [2] в качестве такого материала был предложен каталитический состав.

Каталитический состав представляет собой смесь элементов, при облучении тепловыми нейтронами концентрация элементов состава остаются постоянным. Нейтронный катализ основан на реакции захвата четырех нейтронов ядром катализатором, с последовательным распадом на альфа частицу, два электрона и два электронных антинейтрино с восстановлением начального ядра (циклическая реакция – четыре нейтронных захвата, двойной бета распад и альфа распад). Доказательством существования нейтронного катализа является s-процесс, протекающий внутри звезд. S-процесс или медленный процесс захвата нейтронов – это процесс образования более тяжелых ядер из более легких путём последовательного захвата нейтронов. Считается что s-процесс является одним из основных процессов термоядерного синтеза в массивных звёздах главной последовательности [3].

Для эффективного протекания s-процесса в звёздах необходимы следующие условия:

- Температура вещества должна быть больше  $10^8\text{K}$  для того, чтобы могли происходить ядерные реакции с образованием нейтронов.
- Концентрация нейтронов должна превышать  $10^{10}\text{ см}^{-3}$ .
- Указанные температуры и плотности должны сохраняться в течение достаточно продолжительного времени (больше  $10^3$  лет), чтобы путем последовательного захвата нейтронов могли образовываться тяжелые ядра.

Создать модель удовлетворяющим вышесказанным условиям на земле невозможно. Но можно подобрать элементы для протекания циклической реакции и начальные концентрации этих элементов так, чтобы выполнялась циклическая ядерная реакция.

Целью данной работы является проверка правильности каталитического состава с помощью численного моделирования (программой MCNP) и провести расчет прохождения нейтронов через вещество.

**Основная часть.** В работе [2] были найдены и изучены наиболее подходящие элементы для каталитического состава и вычислены концентрации элементов этого состава. Для вычисления концентраций состава использовалась система уравнения Бэйтмана [6], которая описывает содержание и активность в цепной ядерной реакции в зависимости от времени, на основе скорости реакций и начальных содержаний:

$$\frac{dN_1(t)}{dt} = -\lambda_1 N_1(t) \quad 1)$$

$$\frac{dN_i(t)}{dt} = -\lambda_i N_i(t) + \lambda_{i-1} N_{i-1}(t) \quad 2)$$

$$\frac{dN_k(t)}{dt} = \lambda_{k-1} N_{k-1}(t) \quad 3)$$

$$N_n(t) = \sum_{i=1}^n \left[ N_i(0) \times \left( \prod_{j=i}^{n-1} \lambda_j \right) \times \left( \sum_{j=i}^n \left( \frac{e^{-\lambda_j t}}{\prod_{p=i, p \neq j}^n (\lambda_p - \lambda_j)} \right) \right) \right] \quad 4)$$

Здесь  $\lambda_i$  - это постоянная распада или скорость реакций  $i$ -го изотопа. Все сечения поглощения нейтронов (т.е. реакций  $(n, g)$ ) и периоды полураспада элементов были взяты из базы данных

ядерных реакций EXFOR [5]. Результаты вычисления системы уравнения Бэйтмана приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Массовое соотношение элементов при массе состава 1 кг

Элемент	Массовое содержание элементов
$Po^{210}$	16 г
$Pb^{206}$	0,0435 мкг
$Po^{211}$	0,0126 мкг
$Pb^{207}$	0,317 г
$Pb^{208}$	975,3 г
$Pb^{209}$	18,98 мг
$Bi^{210}$	6,73 г
$Bi^{209}$	0,7 г

Из таблицы 1 видно, что наибольшей концентрацией обладает изотоп  $Pb^{208}$ . Это связано с тем, что сечение поглощения нейтрона этого изотопа очень мала ( $\sigma = 0.23$  мб) и чтобы скорость реакций был одинаковым с остальными изотопами нужно, чтобы концентрация была высокой.

**Программа MCNP.** Характер прохождения нейтронов через вещество зависит от параметров облучающей мишени, спектра и энергий нейтронов и от сечений элементов состава. Здесь очень важную роль играют геометрические параметры мишени и спектр потока нейтронов. С помощью программы MCNP\* [7] можно рассчитать прохождение нейтронов через состав в зависимости от энергий нейтронов и толщины пластины и определить наиболее подходящую геометрию для облучений. Для применения состава в качестве отражателя и дополнительного источника энергий в реакторах [1] нужно учитывать геометрические параметры и расположение его внутри реактора. Ключевую роль здесь играет толщина состава, так как нейтроны при прохождении поглощаются составом, и остальная часть нейтронов может отразиться.

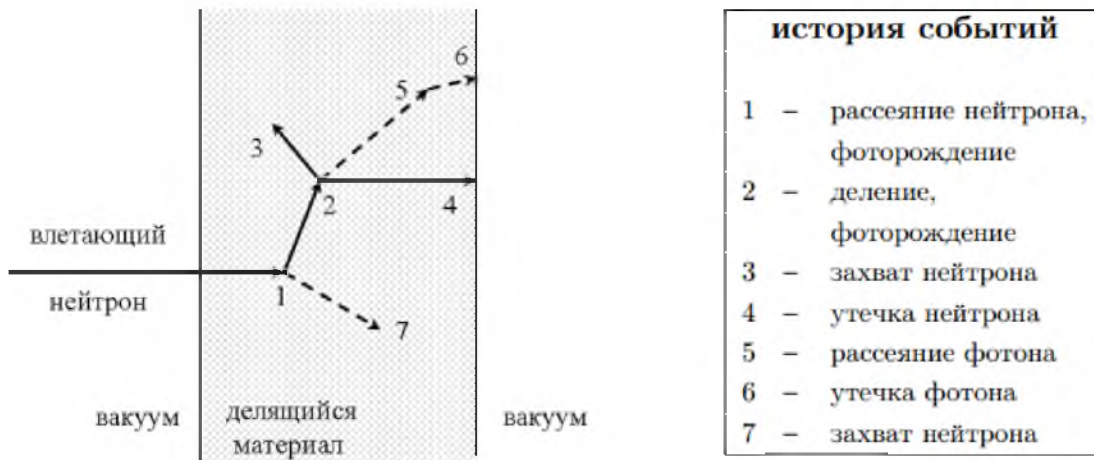


Рисунок 1 – История прохождения одного нейтрона через пластину

На рисунке 1 в плоской геометрии представлена одна из возможных траекторий нейтрона, попавшего в делящийся материал. Генератор случайных чисел выдает результаты от 0 до 1, по которым MCNP на основе распределений соответствующих вероятностей определяет вид взаимодействия и место, где это взаимодействие произошло. В данном примере нейтронное столкновение происходит в точке 1. Нейтрон рассеивается в указанном направлении, которое

\* Monte Carlo N-Particle Transport Code, MCNP – программа для моделирования протекания ядерных процессов с использованием методов Монте-Карло. Разработана в Лос-Аламосской национальной лаборатории (Los Alamos National Laboratory) в США на языках программирования ANSI C и FORTRAN (90 и 95).

моделируется согласно закону распределения вероятности рассеяния. Вместе с нейтроном рождается фотон, информация о нем временно сохраняется в памяти для последующего анализа.

В точке 2 происходит деление, в результате которого исходный нейтрон исчезает, и появляются два новых нейтрона и один фотон. Один нейтрон и один фотон сохраняются в памяти для последующего анализа. Первый нейтрон деления испытывает захват в точке 3 и исчезает. Далее идет возвращение к сохраненному ранее нейтрону. При дальнейшем моделировании он покидает систему в точке 4.

**Процесс моделирования.** В качестве параметров мишени была выбрана тонкая пластина цилиндрической формы с диаметром 30 см и толщиной 1 см, концентрации элементов были взяты из таблицы 1 и с плотностью свинца  $11,3 \text{ г/см}^3$ , так как вещество состоит из 97,53% из *Pb*. Источник нейтронов направлен перпендикулярно к поверхности цилиндра, расположенного на расстоянии 10 см от пластины и обладает монохроматическим спектром энергий. Энергия нейтроном меняется от 0,02 эВ до 10 МэВ. На рисунке 2 (а) приведена схема пластины и источника нейтронов, заданного в программе MCNP и его трехмерное изображение полученного с помощью программы (б).

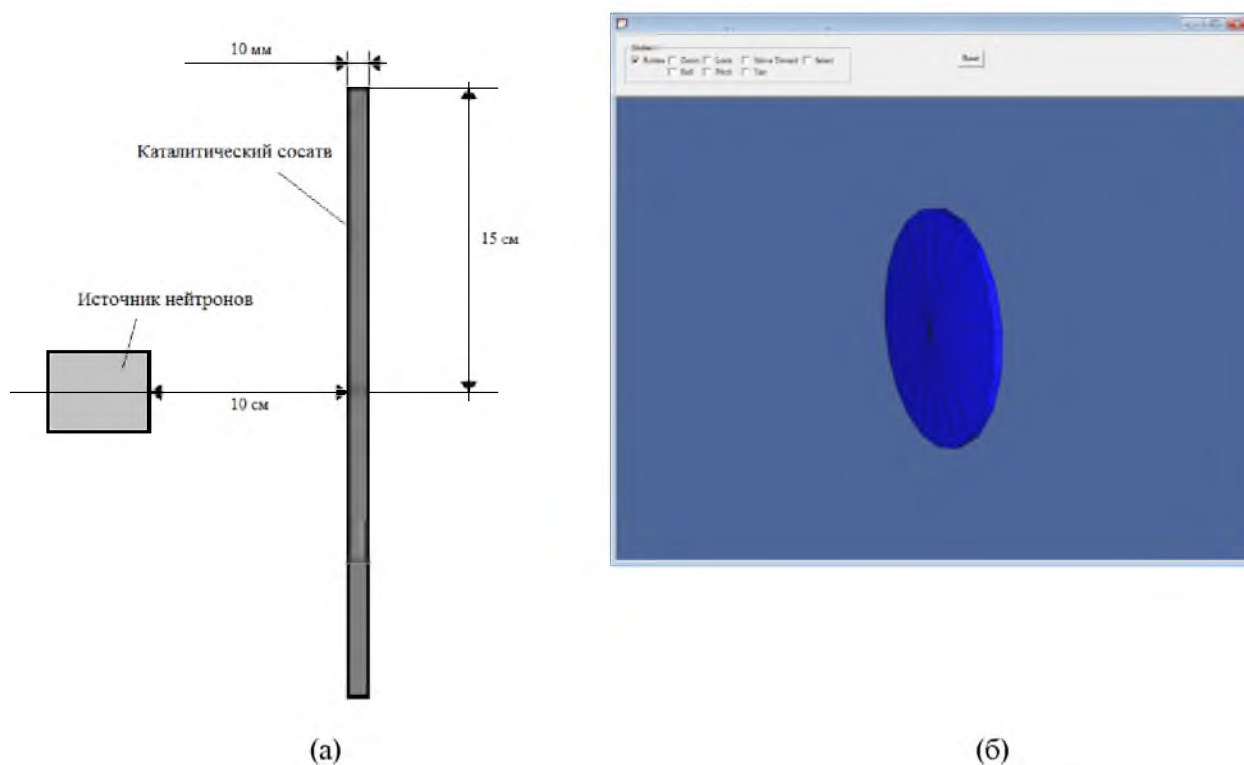


Рисунок 2 – Параметры облученной мишени (а) и его трехмерная модель, построенная в программе MCNP (б)

**Результаты моделирования.** За один цикл программа генерирует  $10^6$  нейтронов и выводит результаты в файл *runtpe*. Число циклов можно задать в файле *inp* как *nps* (number of particles). Чем больше число циклов, тем точнее сказывается на результат моделирования. Число циклов был взят  $10^6$ .

С помощью программы MCNP можно визуально посмотреть прохождение нейтронов через вещество. На рисунке 3 приведена модель пластины после облучения нейтронами (вид спереди (а) и вид с боку (б)). Красные и синие точки означают место столкновения нейтронов с ядрами вещества (если красная точка, то энергия нейтрона минимально, если синяя, то максимально).

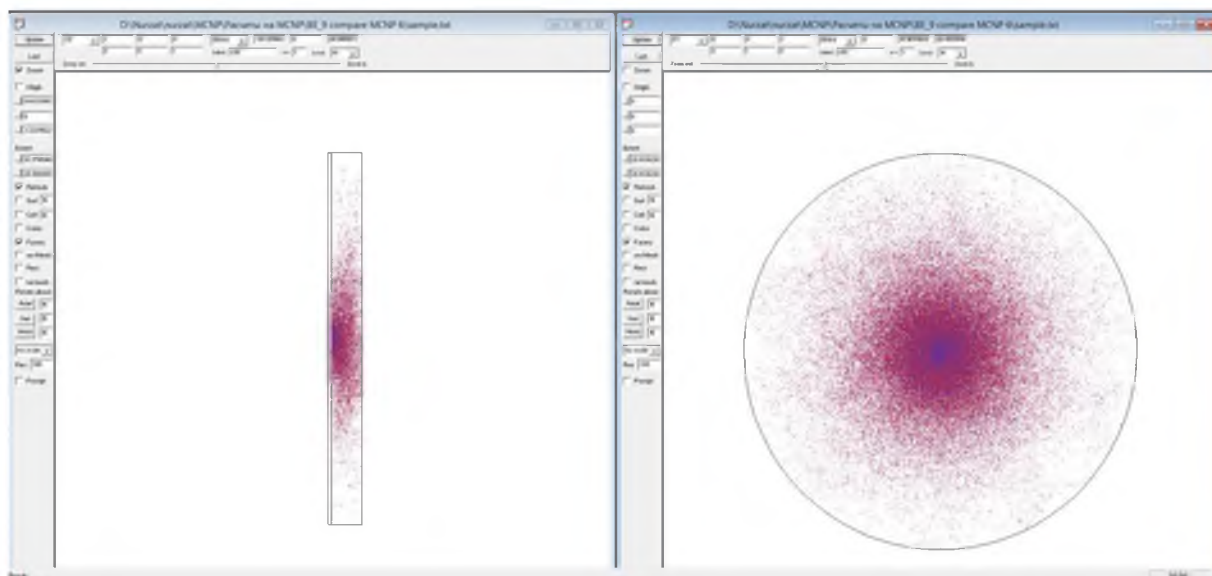


Рисунок 3 – Визуальный вывод результата прохождения нейтронов через вещество в программе MCNP

Из рисунка видно, что наибольшая концентрация столкновения нейтронов расположена ближе к центру пластины, т.е. около радиуса источника нейтронов. Вероятность нейтрона оказаться у края цилиндра ничтожно мала. Это связано с тем, что при каждом столкновении нейтрон теряет часть своей энергии и это увеличивает сечение поглощения нейтрона ядрами каталитического состава.

При изменении энергии нейтронов от 0,02 эВ до 10МэВ по логарифмической шкале, были получены следующие результаты:

- Среднее число реакций радиационного захвата нейтрона ( $n, g$ ) (рисунок 1а)
- Среднее число упругих столкновений одного нейтрона в веществе (рисунок 1б)
- Среднее число нейтронов прошедших через пластину (рисунок 1в)
- Скорость образования альфа частицы в зависимости от времени.

Результаты приведены на рисунке-4 в виде графика зависимости числа пройденных нейтронов и количества реакций от энергий. Из графика 4.а видно, что с увеличением энергий нейтронов число реакций (или вероятность реакций) уменьшается, а число пройденных нейтронов через пластину увеличивается 4.б. Обозначение “Средняя реакция ( $n, g$ )” означает вероятность прохождения этой реакции для одного нейтрона, другими словами, если через каталитический состав прошло  $10^6$  нейтронов с энергией 0,025 эВ, то в среднем 40000 нейтронов поглотится. На рисунке 4.б видно, что нейтрон в среднем упруго сталкивается 32 раза с ядрами каталитического состав, прежде чем поглотиться или выйти из вещества.

Главным результатом этого моделирования является расчет скорости реакций ( $n, \alpha$ ), т.е. скорость образования *альфа*-частиц. Поскольку в каталитическом составе должны происходить превращения четырех нейтронов в альфа-частицу, то скорость этой реакции не должно изменяться со временем. Таким образом можно проверить правильность теоретического результата каталитического состава, рассчитанного в работе [2]. Главными источниками *альфа*-частиц являются ядра  $Po^{211}$  и  $Po^{210}$ .  $Po^{211}$  выделяет  $\alpha$ -частицу в результате реакции  $Po^{211}(n, \alpha)Pb^{207}$ . С помощью программы MCNP можно рассчитать скорость ( $n, \alpha$ ) этой реакций. Результаты показаны на рисунке 4.г. Самый минимальный интервал времени равен  $10^{-8}$  с (1 shake) и время облучения равно  $10^4$  сек или  $10^{12}$  shakes (2.777 час).

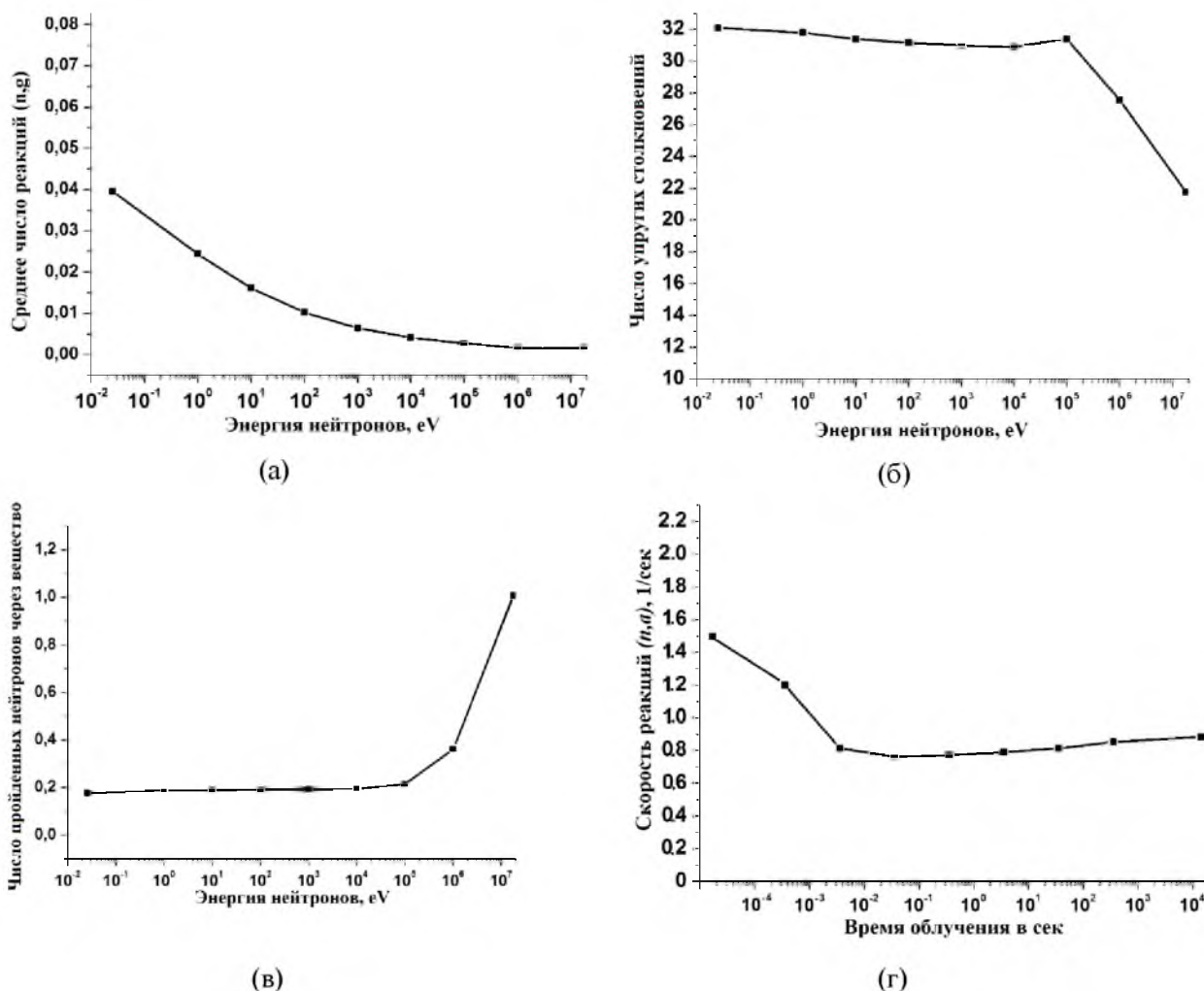


Рисунок 4 – Визуальный вывод результата прохождения нейтронов через вещество в программе MCNP

Из рисунка 4.г можно сделать вывод, что скорость реакций (n,a) становится стабильным после времени облучения  $10^{-3}$  сек и число образованных ядер гелия не меняется со временем. Эти результаты моделирования являются подтверждением того, что начальное условие концентраций (таблица-1) было верным.

**Заключение.** В работе было изучено и смоделировано с помощью программы MCNP прохождение нейтронов через каталитический состав, т.е. скорости реакций (n,a),(n,n),(n,g). А также был получен результат зависимости реакций (n,a) от времени и сделано сравнение с теоретическими результатами. В дальнейшем будет проводиться моделирование с учетом образования гелия из радиоактивного распада и будет сделан анализ сечений возбужденных ядер-претендентов с целью стабилизации катализа, написаны программы по определению процентного содержания элементов в каталитическом составе, проводится численные эксперименты с целью стабилизации состава и увеличения устойчивости цикла.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Кунаков С., Кенжебаев Н. Моделирование накопления трития в бериллиевом материале при нейтронном облучении. //Известия НАН РК. – 2014. – №2. – С. 82-86.
- [2] М.Абишев, М.Хасанов, Н.Кенжебаев. О циклической реакции с участием тепловых нейтронов. // Вестник НАН РК. – 2013. – № 6. – С. 12.

- [3] Burbidge E., Burbidge G.R., Fowler W.A., Hoyle F.. Synthesis of the Elements in Stars. //Reviews of Modern Physics 29. – 1957. – №4. – С.547.
- [4] И.Н. Хаустов, С.Т. Тихомиров, С.Д. Бейзин. Функция возбуждения и выходы изотопов висмута и свинца в реакции  $^{203}\text{Tl}$  с ионами  $^3\text{He}$ . //Известия АН КазССР. – 1990. – №2. – С.3.
- [5] Otto Schwerer. EXFOR Formats Description for Users. – IAEA Nuclear Data Section, 2014. P 3.
- [6] H. Bateman. Solution of a System of Differential Equations Occurring in the Theory of Radio-active Transformations. // Proc. Cambridge Phil. Soc. IS. – 1910. – №423. – С.12-19.
- [7] P. Parvaresh, M. Sohrabpour. // Design and testing of a neutron porosity probe using MCNP code. // Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry. – 2004. – № 260. – PP 335-337.

#### REFERENCES

- [1] Kunakov S., Kenzhebaev N. Modelling the accumulation of tritium in beryllium materials under neutron irradiation. *News of the National Academy of Sciences of Kazakhstan*. **2014**. 2. 82-86. (in Russ)
- [2] Abishev M., Hasanov M., Kenzhebaev N. Cyclic reactions involving thermal neutrons. *Journal of National Academy of Sciences of Kazakhstan*. **2013**. 6. 12-16.
- [3] Burbidge E., Burbidge G.R., Fowler W.A., Hoyle F. Synthesis of the Elements in Stars. *Reviews of Modern Physics*. **1957**. 4. 547-554.
- [4] Khaustov I.N., Tikhomirov S.V., Baisin S.D. The excitation function and outputs of bismuth and lead isotopes in  $^{203}\text{Tl}$  reactions  $^3\text{He}$  ions. *News of the Academy of Sciences of the Kazakh SSR*. **1990**. 2. 3-8.
- [5] Otto Schwerer. EXFOR Formats Description for Users. *IAEA Nuclear Data Section*, **2014**. 3-345.
- [6] Bateman H. Solution of a System of Differential Equations Occurring in the Theory of Radio-active Transformations. *Proc. Cambridge Phil. Soc. IS*. **1910**. 423. 12-19.
- [7] Parvaresh P., Sohrabpour M. Design and testing of a neutron porosity probe using MCNP code. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*. **2004**. 260. 335-337.

#### НЕЙТРОНДАРДЫҢ КАТАЛИЗДЫҚ ҚОСПА (Pb, Bi, Po) АРҚЫЛЫ ӨТУІН MCNP ПРОГРАММАЛЫҚ КОМПЛЕКСІ АРҚЫЛЫ МОДЕЛЬДЕУ

М. Абишев, Н. Кенжебаев, С. Кенжебаева, А. Джанибеков

**Түйін сөздер:** Катализдік қоспа, MCNP, Монте-Карло әдісі, циклдық реакция, EXFOR, s-процесі.

**Аннотация.** Жұмыстың мақсаты катализдік қоспаның дұрыстығын сандық модельдеу (MCNP программасы бойынша) тексеру және нейтрондардың заттан өтуін есептеулер жүргізу болып табылады. Жұмыста MCNP программалық комплексі арқылы нейтрондардың катализдік қоспа арқылы өтуі модельденді және зерттелді, яғни (n, $\alpha$ ), (n,n), (n,g) реакциялар жылдамдығы зерттелді. Сонымен қатар, (n, $\alpha$ ) реакция жылдамдығының уақытқа тәуелділік графигі алынды және алынған нәтижелер теориялық нәтижемен салыстырылды.

Болашақта радиоактивті ыдырау нәтижесінде пайда болған гелий ядросы ескерілетін модельдеу жасалады және катализді тұрақтандыру мақсатында қозған ядролардың көлденең қимасына анализ жасалады.

Поступила 04.04.2016 г.