

TÍNH TOÁN TIẾT DIỆN TÁN XẠ NƠTRON NHIỆT CHO TINH THỂ BISMUTH VÀ SAPPHIRE

Lê Viết Huy¹
Phạm Ngọc Sơn²
Nguyễn Thị Minh Sang¹
Phan Bảo Quốc Hiếu²
Trương Văn Minh³

TÓM TẮT

Bài báo này trình bày các kết quả tính toán tiết diện tán xạ neutron nhiệt không đàn hồi đối với tinh thể bismuth và sapphire. Trong tính toán này các ảnh hưởng của tán xạ neutron lên dao động phonon trong các tinh thể và các tham số tinh thể nhận được thông qua sử dụng chương trình NJOY. Trong cơ sở dữ liệu ENDF (Evaluated Nuclear Data File), kết quả tính toán được định dạng ACE (A Compact ENDF) và được bổ sung vào file số liệu input phục vụ mô phỏng MCNP chùm neutron nhiệt phin lọc tại lò phản ứng Đà Lạt.

Từ khóa: Tán xạ neutron nhiệt, phin lọc neutron, NJOY

1. Mở đầu

Trong các nghiên cứu tính toán mô phỏng bài toán liên quan đến phản ứng hạt nhân gây ra bởi chùm neutron, số liệu tiết diện phản ứng của các vật liệu đối với neutron đóng vai trò quan trọng đến kết quả của phép tính toán mô phỏng. Tiết diện phản ứng quyết định tốc độ phản ứng xảy ra tương ứng với các giá trị năng lượng của chùm neutron tới. Thông thường, tiết diện phản ứng được tính toán dựa trên cơ sở lý thuyết, sau đó đánh giá bởi các giá trị đo được bằng thực nghiệm. Hiện nay, nhiều giá trị tiết diện phản ứng của các hạt nhân hay vật liệu vẫn chưa được đánh giá một cách chính xác do các hạn chế về điều kiện bố trí các thí nghiệm. Đối với thư viện tán xạ neutron nhiệt, số liệu tiết diện của một số vật liệu dạng tinh thể được sử dụng phổ biến như bismuth, sapphire vẫn chưa được cung cấp đầy đủ gây sai số cho các phép tính toán [1].

Với việc sử dụng vật liệu bismuth và sapphire ở dạng tinh thể để làm phin lọc tạo chùm neutron nhiệt trên kênh ngang của lò phản ứng, việc tính toán mô phỏng phổ neutron cũng như tính toán an toàn bức xạ trước khi tiến hành thiết kế chế tạo là khâu quan trọng quyết định tính khả thi của hệ thí nghiệm. Tuy nhiên, do số liệu thư viện phản ứng của vật liệu tinh thể bismuth và sapphire không được cung cấp trong thư viện các chương trình tính toán mô phỏng gây khó khăn cho việc mô phỏng bài toán. Do đó, việc tính toán mô phỏng đòi hỏi việc xử lý và tạo tập tin thư viện cho vật liệu bismuth và sapphire.

Chương trình NJOY [2] đã được sử dụng để xử lý và tạo tập tin thư viện tiết diện phản ứng neutron nhiệt cho vật liệu tinh thể sapphire dưới định dạng ACE tương thích với thư viện chương trình mô phỏng MCNP [3]. Tập tin thư viện tiết diện phản ứng cho sapphire đã giải quyết được tình trạng thiếu hụt thư

¹Trường Đại học Đà Lạt

Email: sangntm@dlu.edu.vn

²Viện nghiên cứu Hạt nhân

³Trường Đại học Đồng Nai

viện số liệu trong nghiên cứu mô phỏng thiết kế các chùm neutron nhiệt sử dụng pin lọc.

NJOY [4] được sử dụng như một công cụ xử lý dữ liệu hạt nhân, và có một mô-đun tích hợp LEAPR tính toán định luật tán xạ neutron nhiệt $S(\alpha, \beta)$ từ phổ tần số phonon của vật liệu tinh thể pin lọc. Mô-đun THERMR đã được sử dụng để tính toán tiết diện tán xạ không đàn hồi cho sapphire và bismuth, được xác định thông qua tần số phổ phonon.

2. Cơ sở lý thuyết

2.1. Tán xạ neutron nhiệt không đàn hồi

Tiết diện tán xạ không đàn hồi neutron nhiệt có thể thu được chính xác từ hình dạng phân bố tần số phổ phonon [5]. Tiết diện tán xạ phi đàn hồi neutron nhiệt đối với chất khí, lỏng, rắn có thể được tính toán theo biểu thức sau [6]:

$$\sigma(E \rightarrow E', \mu) = \frac{\sigma_b}{2kT} \sqrt{\frac{E'}{E}} S(\alpha, \beta) \quad (1)$$

Với E và E' là năng lượng neutron tới và neutron thứ cấp trong hệ phòng thí nghiệm, μ là góc tán xạ (cosine) trong phòng thí nghiệm, σ_b là tiết diện tán xạ đặc trưng cho vật liệu, kT là năng lượng nhiệt (eV). Định luật tán xạ chỉ phụ thuộc vào 2 biến:

$$\alpha = \frac{E' + E - 2\sqrt{E'E}\mu}{AkT} \quad (2)$$

Với A là tỷ số tán xạ của khối lượng tán xạ so với khối lượng neutron, và năng lượng truyền:

$$\beta = \frac{E' - E}{kT} \quad (3)$$

Với β dương khi năng lượng tăng và giảm khi mất năng lượng. Đối với trong xấp xỉ kết hợp và xấp xỉ Gauss, định luật tán xạ có thể được viết:

$$S(\alpha, \beta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\beta t} e^{-\gamma(t)} dt \quad (4)$$

Với t là thời gian đo trong đơn vị của $h/(kT)$ giây. Hàm $\gamma(t)$ được cho bởi:

$$\gamma(t) = \alpha \int_{-\infty}^{\infty} P(\beta) \left[1 - e^{-i\beta t} \right] e^{-\beta/2} d\beta \quad (5)$$

Trong đó:

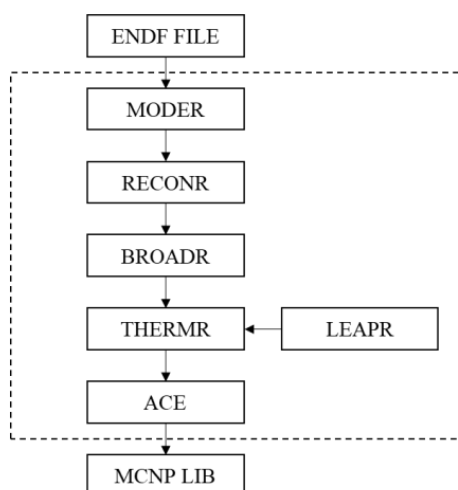
$$P(\beta) = \frac{\rho(\beta)}{2\beta \sinh(\beta/2)} \quad (6)$$

Và với $\rho(\beta)$ là phổ tần số của trạng thái kích thích như hàm β . Phổ được cho như sau:

$$\int_0^{\infty} \rho(\beta) d(\beta) = 1 \quad (7)$$

2.2. Sơ đồ tính toán

Các bước xử lý tập tin bằng chương trình NJOY2016 được trình bày như trong hình 1. Mô-đun LEAPR trong chương trình NJOY2016 được sử dụng để chuẩn bị cho định luật tán xạ $S(\alpha, \beta)$, được dùng để mô tả các hiện tượng tán xạ nhiệt xảy ra trong các vật liệu cần tính toán.



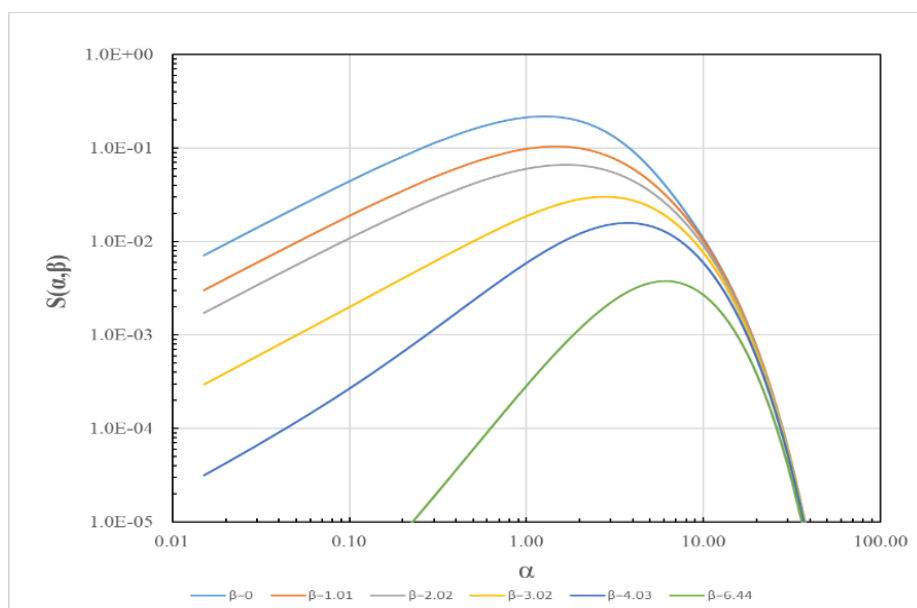
Hình 1: Các bước xử lý tập tin tiết diện của sapphire

Sau khi được tạo ra bởi mô đun LEAPR, tập chứa thông tin của định luật tán xạ (α , β) được nhập vào tập input của NJOY2016 và xử lý bằng mô đun THERMR kết hợp cùng với tập tin tiết diện đã được xử lý lần lượt qua các mô đun MODER, RECONR và BROADR trước đó để tạo thành tập input cho mô

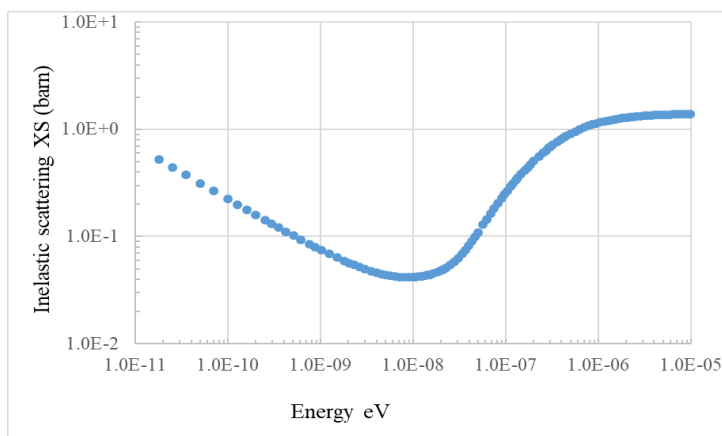
đun ACER. Mô đun ACER được sử dụng để tạo ra tập tin thư viện theo định dạng ACE tương thích với định dạng của chương trình MCNP.

3. Kết quả và thảo luận

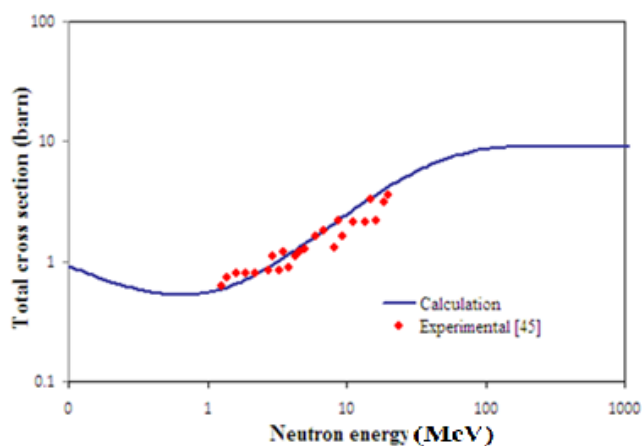
Bài báo đã tính toán hàm tán xạ $S(\alpha, \beta)$ của neutron nhiệt không đàn hồi đối với tinh thể sapphire và bismuth sử dụng mô đun LEAPR, và sau đó tiết diện tán xạ đã được tính toán sử dụng mô đun THERMR của chương trình NJOY. Các tiết diện tán xạ không đàn hồi được tính toán sử dụng số liệu tham khảo tần số phổ phonon xác định bằng thực nghiệm cho sapphire và bismuth [7, 8]. Kết quả tính toán hàm $S(\alpha, \beta)$ đối với Sapphire (Al_2O_3) được mô tả trên hình 2, kết quả tính toán tiết diện tán xạ không đàn hồi của neutron nhiệt đối với sapphire tại nhiệt độ 293,6 K được mô tả trong hình 3.



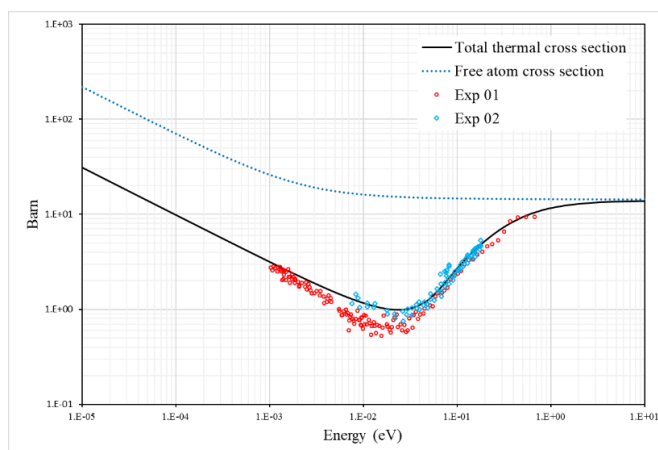
Hình 2: Hàm $S(\alpha, \beta)$, đối với tinh thể sapphire tại nhiệt độ 293,6 K, với các giá trị beta khác nhau



Hình 3: Kết quả tính toán tiết diện tán xạ không đàn hồi của neutron nhiệt đối với tinh thể Sapphire tại 293,6 K



Hình 4: Kết quả tính toán tiết diện neutron toàn phần đối với tinh thể Bismuth tại 293,6 K



Hình 5: Kết quả tính toán tiết diện neutron toàn phần đối với tinh thể Sapphire tại 293,6 K

Kết quả tính toán tiết diện neutron toàn phần được so sánh với dữ liệu thực nghiệm. Kết quả cho thấy sự phù hợp tốt với dữ liệu thực nghiệm như mô tả trong các hình 4 và hình 5.

Dựa trên kết quả so sánh giữa thư viện tạo ra bằng chương trình NJOY2016 với các điểm đo được bằng thực nghiệm của các công bố nước ngoài, tập tin thư viện tiết diện được tạo thành có đủ khả năng để áp dụng trong các tính toán, thiết kế và chế tạo chùm neutron nhiệt sử dụng tinh thể sapphire và bismuth làm phin lọc.

4. Kết luận

Chương trình NJOY2016 đã được sử dụng để xử lý và tạo tập tin thư viện tiết diện phản ứng neutron nhiệt

cho vật liệu tinh thể sapphire và bismuth dưới định dạng ace tương thích với thư viện chương trình mô phỏng MCNP. Tập tin thư viện tiết diện phản ứng cho sapphire đã giải quyết được tình trạng thiếu hụt thư viện số liệu trong nghiên cứu mô phỏng thiết kế các chùm neutron nhiệt sử dụng phin lọc.

Việc xử lý và tạo tập tin thư viện thành công cho sapphire và bismuth bằng chương trình NJOY2016 mở ra một hướng mới trong việc nghiên cứu xử lý và cập nhật thư viện số liệu cho các chương trình tính toán mô phỏng hiện đang được sử dụng tại đơn vị, nhằm nâng cao độ chính xác và khả năng tự chủ trong tính toán thiết kế các hệ thí nghiệm.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. R. MacFarlane (1994), "New thermal neutron scattering files for ENDF/B-VI release 2", *Los Alamos National Lab*, <https://doi.org/10.2172/10192168>
2. R. Macfarlane, D. W. Muir, R. M. Boicourt, A. C. Kahler, & J.I. Conlin, J. L (2017), "The NJOY nuclear data processing system, version 2016", <https://doi.org/10.2172/1338791>
3. B. Kiedrowski et al. (2010), "MCNP5–1.60 Feature Enhancements & Manual Clarifications-LA-UR-1 0-06217", *LANL, Los Alamos, Tech. Rep.*
4. R. E. MacFarlane and D. W. Muir (1994), "The NIOY Data Processing System Version 91", *LA-I 2740-M*
5. W. Kress (1987), "Phonon Dispersion Curves, One-Phonon Densities of States and Impurity Vibrations of Metallic Systems", *Physik Daten*, No. 26-1. Fachinforrnationszentrum, Karlsruhe
6. D. E. Parks, M. S. Nelkin, I. R. Beyster, and N. F. Wikner (1975), "Slow Neutron Scattering and Thermalization", W. A. Benjamin, Inc., New York (1970), 16,2284
7. Aizawa and T. Matsumoto (1983), "Total Neutron Cross Sections of Magnesium, Aluminum, Sapphire, Zirconium, Niobium and Molybdenum in Energy Range from 0.001 to 0.3 eV", *J. Nucl. Sci. Technol.*, 20, 713
8. P. Cucka and C. S. Barrett (1962), "The Crystal Structure of Bi and of Solid Solutions of Pb, Sn, Sb and Te in Bi", *Acta Cryst.*, 15, 865

CALCULATIONS OF THERMAL NEUTRON SCATTERING CROSS SECTIONS FOR BISMUTH AND SAPPHIRE CRYSTALS***ABSTRACT***

This paper presents the calculated results of the thermal neutron inelastic scattering cross sections of Bismuth and Sapphire crystals. In this calculation, the effect of thermal neutron scattering on crystal's phonon vibration and lattice parameters were taken into account by using the NJOY code. This calculated result was updated into the related ACE format data file for MCNP simulation of thermal neutron beams filtered at the Dalat research reactor.

Keywords: *Thermal neutron scattering, neutron filters, NJOY code*

(Received: 5/9/2019, Revised: 2/10/2019, Accepted for publication: 30/11/2020)