

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

Nguyễn Thị Minh Sang⁽¹⁾, Phạm Ngọc Sơn⁽²⁾, Nguyễn An Sơn⁽¹⁾, Phan Bảo Quốc Hiếu⁽²⁾

⁽¹⁾ Trường Đại học Đà Lạt, 01 Phù Đổng Thiên Vương, Đà Lạt

⁽²⁾ Viện nghiên cứu hạt nhân, 01 Nguyễn Tử Lực, Đà Lạt

(sangntm@dlu.edu.vn)

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. Kết quả tính toán được định dạng theo cơ sở dữ liệu ACE 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, neutron phin lọc, NJOY

1. MỞ ĐẦU

Trong các nghiên cứu tính toán mô phỏng các 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. Số liệu 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 được 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 viện số liệu trong nghiên cứu mô phỏng thiết kế các chùm neutron nhiệt sử dụng phin 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 phin 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 tỉ 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:

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

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

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

Trong đó:

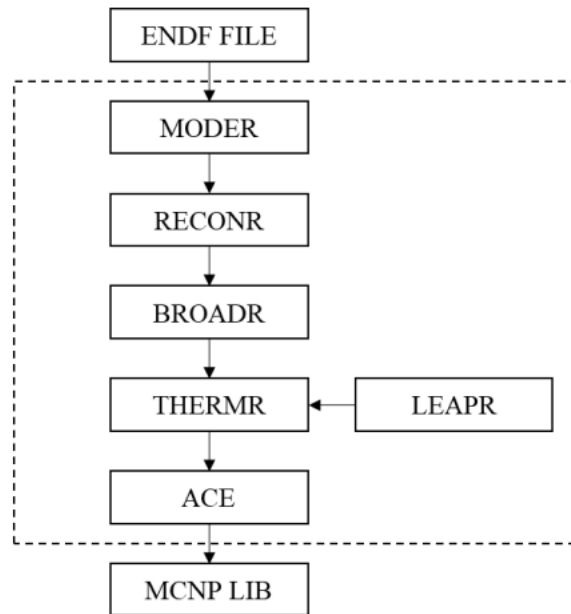
$$P(\beta) = \frac{\rho(\beta)}{2\beta \sinh(\beta/2)} \quad (6)$$

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

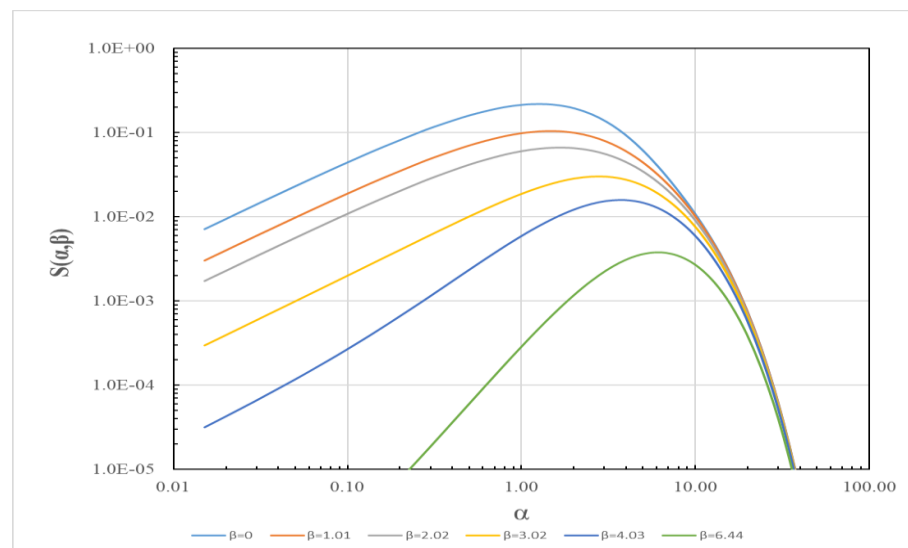
Các bước xử lý tập tin bằng chương trình NJOY2016 được trình bày như trong Hình 1. Mô đun LEAPR trong chương trình NJOY2016 được sử dụng để chuẩn bị cho định luật tán xạ $S(\alpha, \beta)$, được dùng để mô tả các hiện tượng tán xạ nhiệt xảy ra trong các vật liệu cần tính toán.



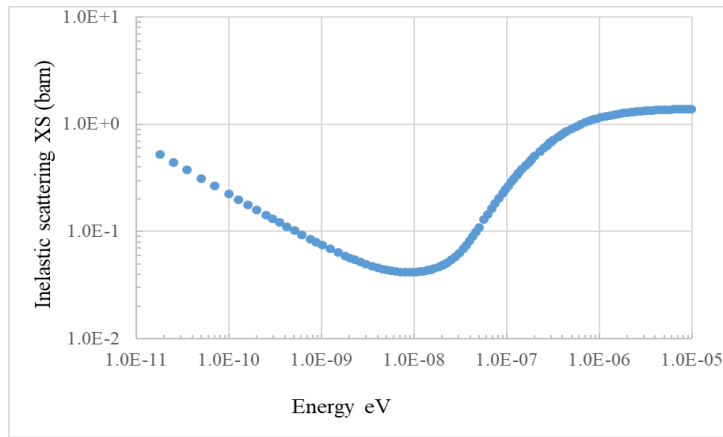
Hình 1. Các bước xử lý tập tin tiết diện của Saphire.

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.

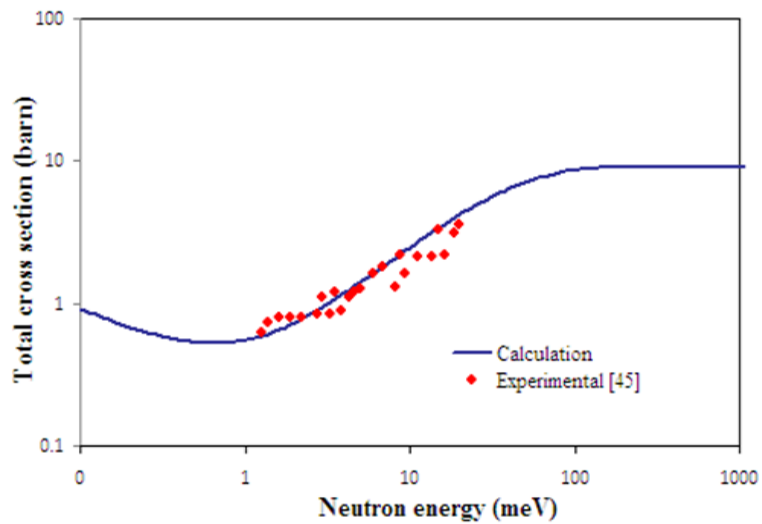


Hình 2. Hàm $S(\alpha, \beta)$, đối với tinh thể sapphire tại nhiệt độ 293,6 K, với các giá trị beta khác nhau

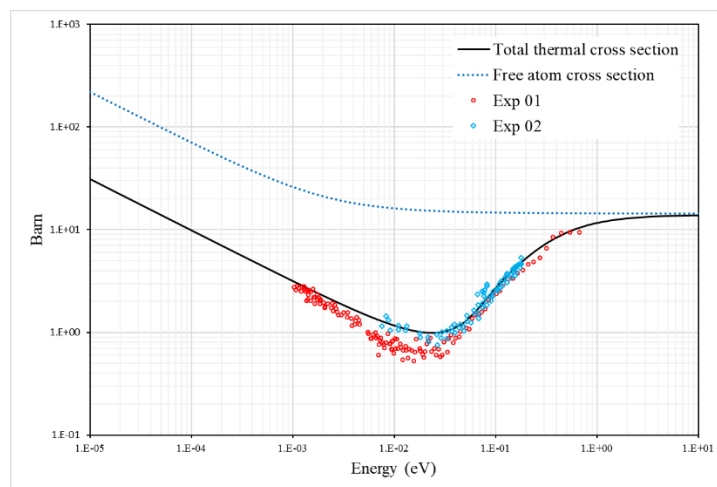


Hình 3. Kết quả tính toán tiết diện tán xạ không đàn hồi của neutron nhiệt đối với tinh thể Sapphire tại 293,6 K

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.



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

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. R. MacFarlane, "New thermal neutron scattering files for ENDF/B-VI release 2," Los Alamos National Lab. 1994.
- [2]. R. Macfarlane, D. W. Muir, R. Boicourt, A. C. Kahler III, and J. L. Conlin, "The NJOY Nuclear Data Processing System, Version 2016," Los Alamos National Lab. (LANL), Los Alamos, NM (United States) 2017.
- [3]. B. Kiedrowski *et al.*, "MCNP5–1.60 Feature Enhancements & Manual Clarifications-LA-UR-10-06217," LANL, Los Alamos, Tech. Rep., 2010.
- [4]. R. E. MacFarlane and D. W. Muir, "The NJOY Data Processing System Version 91," LA-I 2740-M (1994).
- [5]. W. Kress, "Phonon Dispersion Curves, One-Phonon Densities of States and Impurity Vibrations of Metallic Systems," Physik Daten, No. 26-1. Fachinformationszentrum, Karlsruhe (1987)
- [6]. D. E. Parks, M. S. Nelkin, I. R. Beyster, and N. F. Wikner, Slow Neutron Scattering and Thermalization, W. A. Benjamin, Inc., New York (1970). 16,2284 (1975).
- [7]. Aizawa and T. Matsumoto, "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 (1983)
- [8]. P. Cucka and C. S. Barrett, "The Crystal Structure of Bi and of Solid Solutions of Pb, Sn, Sb and Te in Bi," Acta Cryst., IS, 865 (1962) .

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

Nguyen Thi Minh Sang⁽¹⁾, Pham Ngoc Son⁽²⁾, Nguyen An Son⁽¹⁾, Phan Bao Quoc Hieu⁽²⁾

⁽¹⁾ Dalat University, 01 Phu Dong Thien Vuong, Dalat

⁽²⁾ Nuclear Research Institute, 01 Nguyen Tu Luc, Dalat

(sangntm@dlu.edu.vn)

Abstract: This paper presents the calculated results of the thermal neutron inelastic scattering cross sections of Bismuth and Sapphire crystals. In this calculations, the effects of thermal neutron scattering on crystal's phonon vibration and lattice parameters were taken into account by using the NJOY code. This calculated results were 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*