

PHÁT TRIỂN CHƯƠNG TRÌNH MÁY TÍNH ĐỂ KHAI THÁC TIẾT DIỆN TƯƠNG TÁC NEUTRON TỪ THƯ VIỆN SỐ LIỆU HẠT NHÂN

NGUYỄN DUY QUANG, Nguyễn Cảnh Hải

Trung tâm Vật lý – Điện tử Hạt nhân, viện NCHN, 01 Nguyễn Tử Lực, Đà Lạt.

Tóm tắt: Cơ sở dữ liệu về phản ứng hạt nhân chứa các thông tin về tiết diện bắt bức xạ, phổ, phân bố góc của sản phẩm phân hạch,... mà trọng tâm là các phản ứng gây ra bởi neutron. Hiện nay dữ liệu này được phân tích đánh giá bởi các nhà vật lý hạt nhân giàu kinh nghiệm để tạo nên các thư viện số liệu hạt nhân phục vụ cho công tác nghiên cứu khoa học trên khắp thế giới. Đối với việc tiến hành nghiên cứu trên kênh ngang của lò phản ứng hạt nhân Đà Lạt, thiết lập các số liệu hạt nhân phù hợp với mẫu nghiên cứu là cần thiết cho quá trình tính toán hiệu chỉnh như hiệu chỉnh sự suy giảm gamma, sự tán xạ nhiều lần của neutron.

Báo cáo này giới thiệu một chương trình máy tính giúp người dùng truy cập nhanh chóng tiết diện tương tác neutron trong Thư viện dữ liệu hạt nhân như ENDF, JENDL, CENDL,... Chương trình này được viết bằng ngôn ngữ lập trình Java, chạy được trên nhiều hệ điều hành cùng với thiết kế giao diện trực quan giúp người dùng có thể truy xuất đến các vùng năng lượng neutron cụ thể và đưa ra đồ thị ứng với từng loại phản ứng riêng biệt;

Từ khóa: *Thư viện số liệu hạt nhân, neutron, tiết diện, năng lượng, chương trình máy tính.*

I. MỞ ĐẦU

Tương tác của neutron với vật chất có thể chia thành hai loại: tán xạ (đàn hồi, không đàn hồi) và hấp thụ (hấp thụ phân hạch, hấp thụ bắt neutron) [1]. Bản chất của tương tác này là một quá trình mang tính xác suất và phụ thuộc vào tiết diện của chúng. Tiết diện càng lớn, khả năng xảy ra tương tác giữa neutron và vật chất càng cao. Các số liệu tiết diện này giúp hiểu rõ bản chất của tương tác cũng như cung cấp các thông tin đầu vào cơ bản cho việc mô hình hóa, mô phỏng cũng như giải quyết các bài toán hạt nhân, bảo vệ an toàn bức xạ.

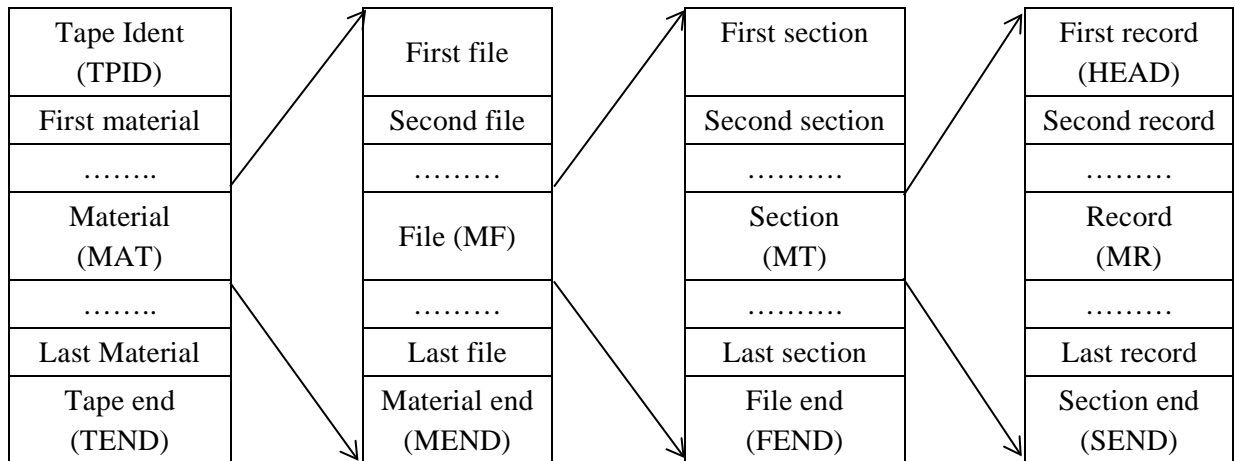
Thư viện số liệu hạt nhân cung cấp các số liệu đặc trưng cho tính xác suất của các quá trình vật lý liên quan đến hạt nhân nguyên tử, trong đó có tương tác giữa neutron và vật chất. File điện tử của các thư viện này được lưu trữ dưới định dạng quy ước chung là Evaluated Nuclear Data File (ENDF-Format). Báo cáo đưa ra một chương trình máy tính với tên gọi ENDFCrossSection để khai thác nhanh chóng và có hiệu quả các file dữ liệu này. Mục tiêu ban đầu khi xây dựng chương trình là thiết lập các số liệu tương tác neutron nhằm hỗ trợ phát triển hướng chụp ảnh neutron tại lò phản ứng hạt nhân Đà Lạt. ENDFCrossSection giúp người dùng truy xuất dữ liệu trực quan dưới dạng bảng, đồ thị và trích xuất các số liệu đối với loại phản ứng và vùng năng lượng quan tâm.

II. NỘI DUNG

II. 1. Cấu trúc tape số liệu trong thư viện ENDF và phương pháp truy xuất.

Cấu trúc của một tape số liệu ENDF được thể hiện trong hình 1. Mỗi tape là một tập hợp các cấu trúc cơ bản gọi là thanh ghi. Mỗi thanh ghi là một dòng ngang 80 ký tự và được sắp xếp theo các Section, File type, Material tương ứng với các chỉ số định danh MT, MF và MAT. Mỗi vật liệu trong thư viện ENDF được xác định bằng một trị số đơn nhất là MAT, có giá trị từ 1 đến 9999 [2]. Đối với tương tác neutron thì MF = 3 và giá trị MT dùng để xác định loại tiết diện tương tác của neutron với vật chất. Bảng 1 chỉ ra các loại tiết diện tương tác, là đối tượng truy xuất trong báo cáo này, và các giá trị MT tương ứng. Một Section, File type, hoặc Material được báo hiệu kết thúc bằng những thanh ghi đặc biệt là SEND, FEND và MEND. Hình 2 đưa ra các số liệu minh họa đối với hạt nhân vàng ¹⁹⁷Au. Như vậy việc truy

xuất số liệu hạt nhân có thể được thực hiện dựa vào các giá trị MAT, MF, MT, bắt đầu từ giá trị chỉ số dòng NS=4 cho đến thanh ghi kết thúc section SEND với NS=99999.



Hình 1. Cấu trúc của một tape dữ liệu

Bảng 1. Các loại tiết diện tương tác neutron được truy xuất

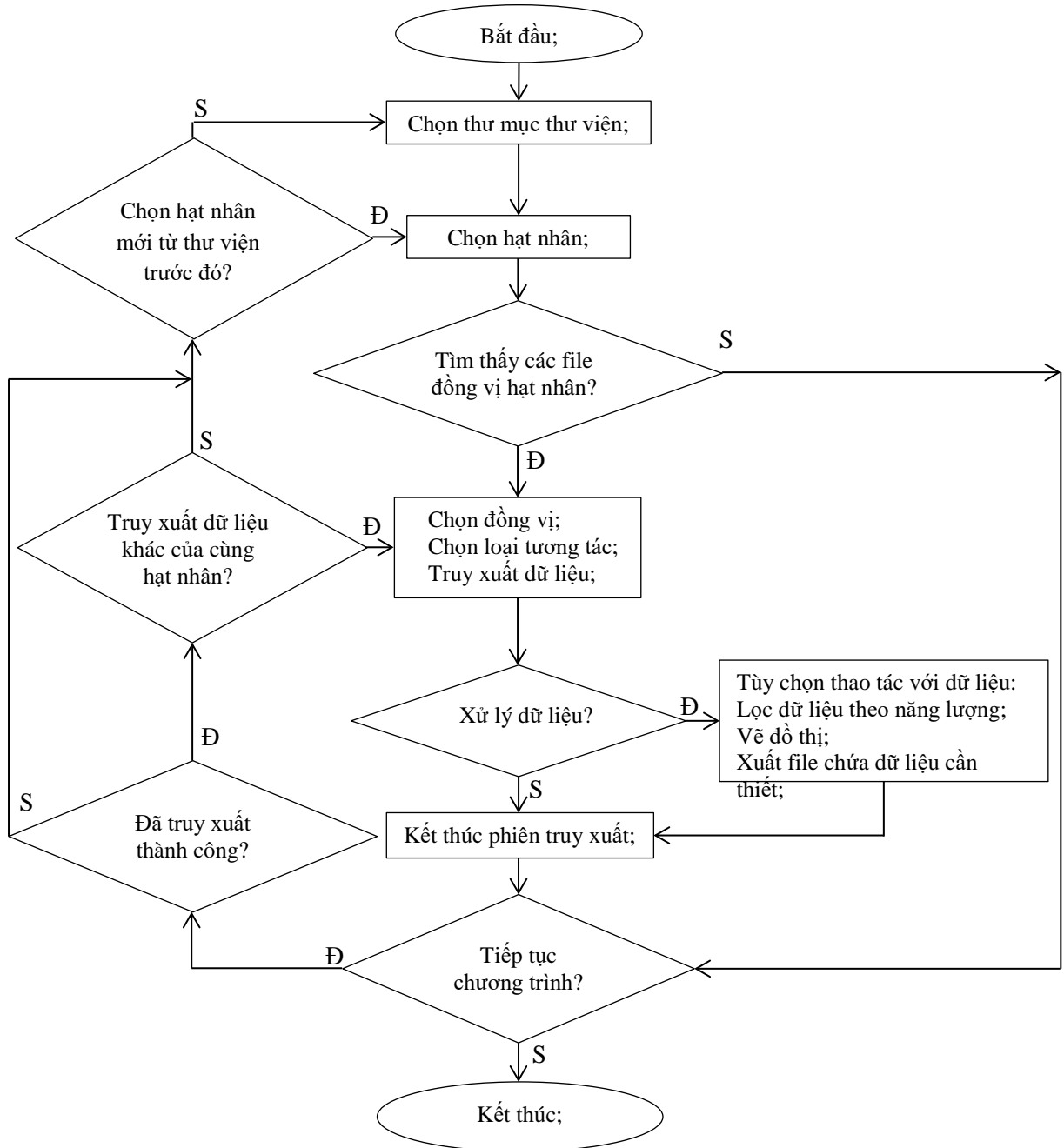
Giá trị MT	Loại tiết diện tương tác	Giá trị MT	Loại tiết diện tương tác
1	(n, total) – tiết diện tổng	37	(n, 4n)
2	(n, n ₀) – tán xạ đàn hồi	102	(n, γ)
4	(n, n') – tán xạ không đàn hồi	103	(n, p)
16	(n, 2n)	104	(n, d)
17	(n, 3n)	105	(n, t)
18	(n, fission) – tiết diện phân hạch	106	(n, ³ He)
27	(n, absorption) – tiết diện hấp thụ	107	(n, α)

ZA=1000Z+A mass parameter

7.919700+4	1.952750+2	0	0	0	07925 3 1 1
0.000000+0	0.000000+0	0	0	1	140487925 3 1 2
14048	2	0	0	0	07925 3 1 3
1.000000-5	4.946716+3	1.102400-5	4.711452+3	1.215040-5	4.487832+37925 3 1 4
1.339460-5	4.274415+3	1.476330-5	4.071547+3	1.627500-5	3.877946+37925 3 1 5
1.793810-5	3.693909+3	1.977490-5	3.518279+3	2.179560-5	3.351335+37925 3 1 6
2.402740-5	3.192010+3	2.648260-5	3.040571+3	2.919430-5	2.896044+37925 3 1 7
3.217750-5	2.758667+3	3.547230-5	2.627566+3	3.909700-5	2.502947+37925 3 1 8
4.310050-5	2.384021+3	4.750460-5	2.270982+3	5.236900-5	2.163106+37925 3 1 9
5.772020-5	2.060570+3	6.363060-5	1.962719+3	7.013260-5	1.869712+37925 3 1 10
7.731390-5	1.780957+3	8.521420-5	1.696595+3	9.393980-5	1.616091+37925 3 1 11
1.035390-4	1.539573+3	1.141410-4	1.466555+3	1.258040-4	1.397153+37925 3 1 12
.....					
9000000.00	5.140411+0	9634028.38	5.098113+0	10000000.0	5.086681+07925 3 1 4683
11000000.0	5.103951+0	12169299.0	5.182753+0	14000000.0	5.360060+07925 3 1 4684
16000000.0	5.550420+0	17239840.3	5.637110+0	18250000.0	5.684805+07925 3 1 4685
19250000.0	5.708505+0	20000000.0	5.712720+0		7925 3 1 4686
					7925 3 099999
energy (eV)	cross-section (barn)				MF NS
[1] [10]	[1] [10]	[1] [10]	[1] [10]	[1] [10]	MAT MT
					[4] [2] [3] [5]

Hình 2. Cấu trúc một section (MT=1) trong file số 3 (MF=3) đối với hạt nhân ¹⁹⁷Au

Chương trình khai thác số liệu tiết diện tương tác neutron với các hạt nhân bia được thực hiện theo sơ đồ như hình 3.



Hình 3. Sơ đồ chương trình

Để truy xuất số liệu, người dùng cần chọn đúng thư mục thư viện và loại đồng vị hạt nhân có trong thư viện đó, chương trình sẽ tự động chỉ đến tập tin chứa dữ liệu. Khi có yêu cầu truy xuất, các thanh ghi trong tập tin sẽ được đọc từ trên xuống dưới, tiết diện tương tác neutron phù hợp với các chỉ số MF, MT sẽ được trích xuất dưới dạng bảng ở một cửa sổ mới. Cửa sổ này cho phép người dùng thực hiện một số thao tác với dữ liệu như lọc tiết diện theo năng lượng neutron, vẽ đồ thị tiết diện – năng lượng hay xuất dữ liệu dưới dạng file text.

II. 2. Kết quả

Hiện tại chương trình truy xuất được số liệu tiết diện tương tác neutron của 406 đồng vị trong thư viện JENDL-4-300K. Chương trình hoàn chỉnh với tên gọi ENDFCrossSection đã được thực thi thành công, kết quả truy xuất dưới dạng bảng hoàn toàn trùng khớp với các số liệu trong thư viện.

Energy (eV)	Cross-Section
1012.20155	1.183918+1
1041.51208	1.152295+1
1079.50720	1.121141+1
1125.35592	1.092984+1
1186.21020	1.065024+1
1266.82680	1.037483+1
1387.75170	1.006188+1
1696.78200	9.380450+0
1804.27080	9.090164+0
1889.36610	8.800159+0
1952.06790	8.530016+0
2005.81230	8.240320+0
2046.12060	7.973491+0
2081.95020	7.688063+0
2113.30110	7.391720+0
2144.65200	7.044847+0
2198.39640	6.373005+0

(a)

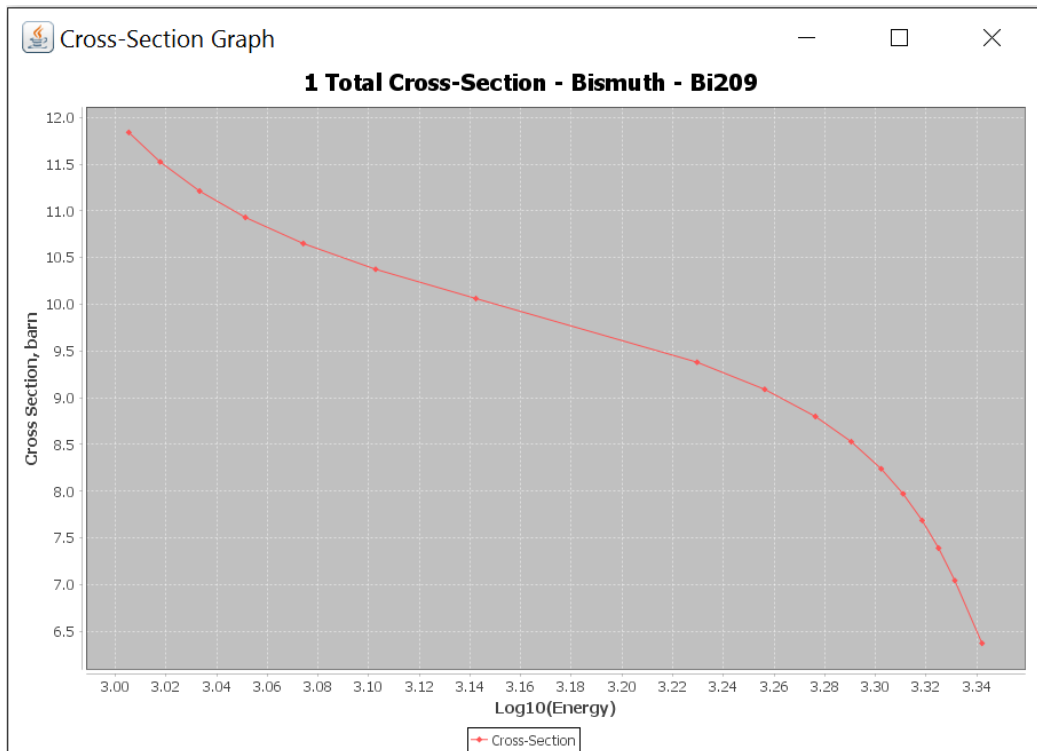
897.130600	1.515894+1	905.815200	1.462209+1	914.499800	1.417704+18325	3	1	90
924.269975	1.376033+1	936.211300	1.333912+1	951.409350	1.290920+18325	3	1	91
968.778550	1.251945+1	988.318900	1.217216+1	1012.20155	1.183918+18325	3	1	92
1041.51208	1.152295+1	1079.50720	1.121141+1	1125.35592	1.092984+18325	3	1	93
1186.21020	1.065024+1	1266.82680	1.037483+1	1387.75170	1.006188+18325	3	1	94
1696.78200	9.380450+0	1804.27080	9.090164+0	1889.36610	8.800159+08325	3	1	95
1952.06790	8.530016+0	2005.81230	8.240320+0	2046.12060	7.973491+08325	3	1	96
2081.95020	7.688063+0	2113.30110	7.391720+0	2144.65200	7.044847+08325	3	1	97
2198.39640	6.373005+0	2212.72824	6.229440+0	2222.58138	6.175370+08325	3	1	98
2225.71647	6.170359+0	2232.43452	6.192344+0	2237.80896	6.251658+08325	3	1	99
2241.83979	6.329963+0	2245.87062	6.446562+0	2249.90145	6.612717+08325	3	1	100

(b)

Hình 4. So sánh kết quả truy xuất (a) với số liệu của đồng vị ²⁰⁹Bi trong thư viện JENDL-4-300K (b)

Đồ thị biểu diễn sự phụ thuộc của tiết diện tương tác vào năng lượng neutron tới được thể hiện rõ ràng, dữ liệu được hiển thị trực quan – hình 5. Số liệu ghi nhận từ thư viện được thể hiện bằng các điểm đậm hình thoi. Các điểm số liệu này được nối với nhau bằng các đoạn thẳng mảnh. Ngoài ra các file text có thể được trích xuất theo yêu cầu của người dùng, tạo nên

các thư viện số liệu hạt nhân con, phục vụ cho quá trình nghiên cứu về tương tác của neutron với một số vật chất có trong thư viện trong các dải năng lượng cần quan tâm.



Hình 5. Đồ thị thu được tương ứng với số liệu của ^{209}Bi

```
Bismuth 209Bi83
Type: 1 Total Cross-Section
Energy from: 1000.0 to: 2200.0 eV
Number Of Rows: 17
```

	Energy (eV)	Cross-Section (barn)
267	1012.20155	1.183918+1
268	1041.51208	1.152295+1
269	1079.50720	1.121141+1
270	1125.35592	1.092984+1
271	1186.21020	1.065024+1
272	1266.82680	1.037483+1
273	1387.75170	1.006188+1
274	1696.78200	9.380450+0
275	1804.27080	9.090164+0
276	1889.36610	8.800159+0
277	1952.06790	8.530016+0
278	2005.81230	8.240320+0
279	2046.12060	7.973491+0
280	2081.95020	7.688063+0
281	2113.30110	7.391720+0
282	2144.65200	7.044847+0
283	2198.39640	6.373005+0

Hình 6. Dữ liệu được xuất ra dưới dạng file text.

II. 3. Bàn luận

Chương trình được viết hoàn toàn bằng ngôn ngữ Java nên có thể thực thi trên nhiều hệ điều hành khác nhau, đáp ứng nhu cầu đa dạng của người dùng máy tính. Ngoài ra ngôn ngữ Java còn giúp cho việc hiệu chỉnh và nâng cấp chương trình dễ dàng hơn. Điều đó khiến cho chương trình có tiềm năng trong việc trích xuất các dữ liệu với chỉ số MF khác, tương ứng với

các thông tin về thông số cộng hưởng, phân bố theo góc và năng lượng,... cũng như tính toán và xử lý trực tiếp dữ liệu cần quan tâm.

III. KẾT LUẬN

Chương trình máy tính giúp truy cập nhanh chóng tiết diện tương tác neutron với vật chất trong thư viện số liệu hạt nhân đã được phát triển và kiểm tra. Các dữ liệu truy xuất được chính xác, đáng tin cậy, đáp ứng được việc tra cứu phục vụ các nghiên cứu liên quan. ENDFCrossSection với tiềm năng nâng cấp xử lý dữ liệu là một công cụ phù hợp để thiết lập các số liệu hạt nhân cần thiết cho việc tính toán hiệu chỉnh, thiết kế và che chắn bức xạ cho các hệ thí nghiệm trên các kênh neutron của lò phản ứng hạt nhân Đà Lạt.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Paul Reuss, "Neutron Physics", *EDP Sciences*, p97, 2008.
2. M. Herman, A. Trkov, "ENDF-6 Formats Manual", *National Nuclear Data Center, Brookhaven National Laboratory*, p11, 2009.

A COMPUTER PROGRAM FOR EXTRACTION NEUTRON CROSS-SECTION DATA FROM EVALUATED NUCLEAR DATA LIBRARY

NGUYEN DUY QUANG, Nguyen Canh Hai

Center for nuclear physics & nuclear electronics, NRI, 01 Nguyen Tu Luc, Da Lat

Abstract: Nuclear reaction database contains evaluated nuclear reaction cross sections, spectra, angular distributions, etc. with emphasis on neutron induced reactions. The data were evaluated by nuclear data experts to produce recommended libraries for nuclear science and technology. In the case of research activities at Dalat nuclear reactor, nuclear data is needed by many processes, such as the calibrations of gamma attenuation and neutron multi-scattering.

This paper introduces a computer program to help user access neutron cross-section data from data-files such as ENDF, JENDL, CENDL, etc. The program has been written in Java so it may run properly in different platforms. User can access into the database for extraction of cross-sections in type of table or graph.

Key words: Nuclear data library, neutron, cross-section, energy, computer program.