

УДК 539.125.52

## ПРОСТАЯ МОДЕЛЬ ТРАНСПОРТА НЕЙТРОНОВ И ЕЁ ПРИМЕНЕНИЕ ДЛЯ РАСЧЁТА ФУНКЦИЙ ОТКЛИКА ШАРОВОГО НЕЙТРОННОГО СПЕКТРОМЕТРА

**А.Ю. Буки, С.А. Каленик**

*ННЦ "Харьковский физико-технический институт"  
 ул. Академическая 1, г. Харьков, Украина, 61108  
 E-mail: [abuki@ukr.net](mailto:abuki@ukr.net)*

Received 10 January 2011, accepted 11 February 2012

Разработана простая модель, обеспечивающая симуляцию распространения нейтронов в различных веществах в диапазоне энергий от  $10^{-8}$  до нескольких МэВ. Модель реализована в программном коде на C++. При проведении тестовых расчётов модель показала значительно более высокую скорость работы, чем при использовании пакета GEANT 4. С помощью разработанной модели рассчитаны функции отклика шарового нейтронного спектрометра.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** математическое моделирование, нейтроны, нейтронные поля, нейтронный спектрометр, функции отклика.

### A SIMPLE MODEL OF NEUTRON TRANSPORT AND ITS APPLICATION FOR THE CALCULATION OF THE RESPONSE FUNCTIONS FOR THE BALL NEUTRON SPECTROMETER

**A.Yu. Buki, S.A. Kalenik**

*NSC "Kharkov Institute of Physics and Technology"  
 1, Akademicheskaya st., Kharkov, Ukraine, 61108*

A simple model that provides a simulation of neutrons transportation in various materials in the energy range from  $10^{-8}$  to a few MeV had been developed. The model is implemented in code C++. In performing the test calculations the model showed a significantly higher speed than using a package GEANT 4. With the help of the model the response function of a spherical neutron spectrometer had been calculated.

**KEY WORDS:** simulation, neutrons, neutron fields, neutron spectrometer, response functions.

### ПРОСТА МОДЕЛЬ ТРАНСПОРТУ НЕЙТРОНІВ І ЇЇ ЗАСТОСУВАННЯ ДЛЯ РОЗРАХУНКУ ФУНКЦІЙ ВІДГУКУ КУЛЬОВОГО НЕЙТРОННОГО СПЕКТРОМЕТРА

**О.Ю. Буки, С.О. Каленик**

*ННЦ "Харківський фізико-технічний інститут"  
 вул. Академічна 1, м. Харків, Україна, 61108*

Розроблена проста модель, що забезпечує симуляцію розповсюдження нейтронів в різних речовинах в діапазоні енергій від  $10^{-8}$  до декількох МеВ. Модель реализована в програмному коді на C++. При проведенні тестових розрахунків модель показала значно вищу швидкість роботи, ніж при використанні пакету GEANT 4. За допомогою розробленої моделі розраховані функції відгуку кульового нейтронного спектрометра.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** математичне моделювання, нейтрони, нейтронні поля, нейтронний спектрометр, функції відгуку.

В ННЦ ХФТИ для работ с нейтронами, которые генерируются в e,n-конверторе электронного ускорителя, создан шаровой спектрометр. Спектрометр состоит из 5-ти полиэтиленовых шаров различного диаметра от 90 до 245 мм. В центре каждого шара находится таблетка индия. У изотопа  $^{115}\text{In}$  (его содержание в естественном индии 95,7%) высокое сечение поглощения нейтронов с энергиями  $E_n < 4$  эВ. В результате поглощения этим изотопом нейтрона образуется радиоактивное ядро  $^{116}\text{In}$  ( $T_{1/2} = 54$  минуты), распад которого приводит к излучению гамма-кванта в основном с энергией 412 КэВ [1]. С помощью гамма-спектрометра измеряется интенсивность гамма-излучения индиевой таблеткой и определяется величина её активации нейтронами, прошедшими через полиэтилен шара. Активация таблетки зависит от энергии нейтронов и размеров шара. Зависимость активации таблетки от энергии нейтронов называется функцией отклика и эта функция для каждого диаметра шара своя. Таким образом, поместив на время измерения набор полиэтиленовых шаров разного диаметра в поток нейтронов и затем, измерив активацию содержащихся в них таблеток индия, можно из анализа величин активации определить спектр нейтронов. Однако, для проведения этого анализа необходимо иметь функции отклика каждого из шаров, использованных в измерении.

Для того, чтобы получить и исследовать функции отклика надо выполнить с достаточной точностью ряд расчётов распространения нейтронов разных энергий в полиэтиленовых шарах. Как показала оценка, использование для этого популярного вычислительного пакета GEANT 4 требует неприемлемо большого количества времени.

Таким образом, целью настоящей работы является разработка оптимальной для расчёта функций отклика методики и, получение с её помощью функций отклика для шарового нейтронного спектрометра ХФТИ.

### МЕТОДИКА РАСЧЁТА

Сокращение времени необходимого для выполнения рассматриваемых расчётов можно достичь путём упрощения модели распространения нейтронов в веществе (транспорта нейтронов). Рассмотрим основные моменты моделирования прохождения нейтронов через вещество. Эту задачу можно разделить на две части. Моделирование распространения нейтронов, которые находятся в тепловом равновесии с веществом (тепловых нейтронов) и моделирование распространения нейтронов с энергией выше тепловой.

Характерной особенностью тепловых нейтронов является то, что в результате многократных столкновений с ядрами атомов вещества их средняя энергия не изменяется. Принципы предельно упрощённой модели распространения тепловых нейтронов в веществе и их реализация в вычислительной программе NT-t (neutron transportation-thermal) описаны в нашей работе [2].

Нейтроны с энергией выше тепловой в результате столкновения с ядрами атомов изменяют направление движения, и теряют часть своей кинетической энергии до тех пор, пока не станут тепловыми или не поглотятся.

Рассмотрим, как с ростом энергии нейтрона проявляются возможные типы его взаимодействия с ядрами. Поглощение нейтрона – процесс, сечение которого наиболее велико при тепловых и низких энергиях. Упругое рассеяние нейтрона на ядрах – имеет существенный вклад в полное сечение при различных энергиях. Расчёт кинематики этого процесса относительно прост и, с достаточной для наших расчётов точностью, можно считать, что его зависимость от вида ядра участвующего в рассеянии состоит только в его атомном номере. Неупругое рассеяние нейтрона на ядре – возникает, начиная от энергии возбуждения первого уровня ядра. Расчёт его кинематики более сложен, чем упругого рассеяния, и сильно зависит от индивидуальных свойств ядра. При более высоких энергиях идут процессы возбуждения гигантских резонансов, квазиупругого рассеяния нейтрона на нуклонах ядра т.д.

Ограничимся учётом только процессов поглощения и упругого рассеяния. В этом случае, граница применимости рассматриваемой модели транспорта нейтронов будет при энергиях несколько выше, чем энергии возбуждения первого уровня рассматриваемых ядер. Такое определение применимости модели учитывает то, что важно не полное отсутствие неупругого рассеяния, а малая значимость его вклада в полное сечение взаимодействия нейтронов с веществом<sup>1/</sup>. Исходя из значений энергии первых уровней ядер, можно ожидать, что в случае большинства лёгких и многих средних ядер граница применимости этой модели будет при энергиях нейтронов в несколько МэВ.

Как сказано выше, мы планируем работы с нейтронами, генерируемыми e,n-конвертором. Так как средняя энергия этих нейтронов около одного МэВ, то рассмотренное ограничение для модели транспорта нейтронов можно считать приемлемым.

Результат расчёта транспорта нейтронов в веществе представляет собой сумму большого количества расчётов, каждый из которых моделирует движение отдельного нейтрона.

Траектория движения нейтрона в веществе представляет собой ломаную линию, в которой прямые отрезки – движение свободное от взаимодействий, а точки излома – столкновение с ядрами. Длина каждого из отрезков (длина свободного пробега) обратно пропорциональна сечению взаимодействия  $\sigma[\text{см}^2]$  с тем ядром, к которому движется нейтрон и концентрации ядер. Другими словами, длина свободного пробега

$$l \propto \frac{1}{\mu(E)}, \quad (1)$$

где  $\mu(E)$  – макроскопическое сечение взаимодействия с размерностью  $[\text{см}^{-1}]$ . Концентрация ядер определяет среднее расстояние между ядрами, но в каждом конкретном случае величина этого расстояния может быть больше или меньше среднего, то есть имеет вероятностный характер. Для решения таких задач принято использовать метод Монте-Карло, состоящий в розыгрыше с помощью случайных чисел реализации вероятности того или иного значения рассматриваемой величины. В подходе Монте-Карло выражение (1) приобретает вид

$$l = -\frac{1}{\mu(E)} \times \ln(1 - \xi), \quad (2)$$

где  $\xi$  – случайное число, равномерно распределенное в интервале (0,1). В вычислительных машинах для получения значений  $\xi$  используется генератор псевдослучайных чисел. В нашем случае рассматривается два канала взаимодействия нейтронов с веществом: поглощение (capture) и упругое (elastic) рассеяние, сечения которых, соответственно  $\sigma_c(E)$  и  $\sigma_e(E)$ , берутся из базы данных [3] (этой же базой пользуется пакет GEANT 4). Вещество, в котором мы рассматриваем распространение нейтронов – полиэтилен. Его плотность  $\rho = 0,934 \text{ г/см}^3$ , формула  $\text{C}_n\text{H}_{2n}$ . Из этой формулы и атомного веса составляющих следует, что плотность водорода в полиэтилене  $\rho_H = \rho \times 2/14$ , а углерода  $\rho_C = \rho \times 12/14$ . Соответствующие концентрации ядер  $p_H = \rho_H/M_H$  и  $p_C =$

<sup>1/</sup> Так, в ядре  $^{12}\text{C}$  энергия возбуждения первого уровня 4,4 МэВ. Этот элемент входит в состав полиэтилена. Однако для полиэтилена, как будет показано в следующем пункте, рассматриваемая модель действует до 10 МэВ.

$\rho_C/M_C$ , где  $M_H$  – масса атома водорода, а  $M_C$  – углерода. Отсюда для поглощения нейтронов ядрами водорода макроскопическое сечение будет  $\mu_{с,Н} = \sigma_{с,Н}(E) \times \rho_H$ , и для упругого рассеяния на ядрах водорода  $\mu_{е,Н} = \sigma_{е,Н}(E) \times \rho_H$ . Аналогично записываются макроскопические сечения в случае углерода  $\mu_{с,С}$  и  $\mu_{е,С}$ . Как легко видеть, здесь первый индекс характеризует тип взаимодействия, а второй соответствует участвующему во взаимодействии ядру. И так, на пути нейтрона может встретиться с вероятностью  $\mu$  один из двух видов ядер и вступить с этим нейтроном в одно из двух видов взаимодействий. Розыгрыш каждой из четырёх ситуаций определяет соответствующую ей длину свободного пробега  $l$ . Величина  $l$  обратно пропорциональна реализации вероятности соответствующей ей процесса. Поэтому считается реализовавшимся процесс, которому соответствует наименьшее значение  $l$ .

В том случае, когда выбранное  $l$  отвечает поглощению, то расчет траектории этого нейтрона прекращается, и начинается расчёт для следующего нейтрона. Если же реализуется вариант упругого рассеяния, то новое направление движения нейтрона и связанная с этим направлением его скорость (кинетическая энергия) зависят от прицельного параметра  $d$  и находятся из решения задачи упругого столкновения двух тел, одно из которых (ядро атома) покоится. Найдём значение прицельного параметра.

Проекция ядра на плоскость перпендикулярную к направлению движения нейтрона до столкновения есть круг. Пусть начало координат в центре круга, а максимальное значение  $d = 1$ . Так как попадание нейтрона в любую точку этого круга равновероятно, то координаты точки попадания  $x$  и  $y$  можно получить в результате розыгрыша случайных чисел, равномерно распределённых в интервале  $[0,1]$  и, таким образом, найти значение

$$d = \sqrt{x^2 + y^2}. \quad (3)$$

Если в результате розыгрыша получаем  $d > 1$ , то тогда  $x$  и  $y$  разыгрываются заново.

При упругом столкновении нейтрона с покоящимся ядром, имеющим атомный вес  $A$ , угол рассеяния нейтрона в лабораторной системе координат будет

$$\theta = \arccos \left( \frac{A \cos(\pi - 2 \arcsin(d)) + 1}{\sqrt{A^2 + 2A \cos(\pi - 2 \arcsin(d)) + 1}} \right), \quad (4)$$

азимутальный угол  $\varphi$  - равновероятен в интервале от  $0^\circ$  до  $360^\circ$ , скорость нейтрона после рассеяния

$$V = V_n \frac{\sqrt{A^2 + 2A \cos(\pi - 2 \arcsin(d)) + 1}}{A + 1}, \quad (5)$$

где  $V_n$  – скорость налетающего нейтрона.

Когда скорость нейтрона в результате ряда упругих соударений с ядрами уменьшится до скорости тепловых нейтронов, расчёт его дальнейшего движения передаётся в подпрограмму, разработанную на базе вышеупомянутой программы NT-t [2], которая и была предназначена для расчёта движения тепловых нейтронов.

На каждом шаге перемещения нейтрона контролируется его нахождение внутри заданного объёма (например, в объёме полиэтиленового шара). В случае, если нейтрон вылетает за границы этого объёма, его сопровождение прекращается и начинается розыгрыш движения следующего нейтрона. Если нейтрон попадает в объём, которому присвоены свойства детектора (например, в объём занятый индием), его координаты, энергия и направление импульса фиксируются. В результате, на выходе мы получаем файл, в котором записаны параметры всех попавших в детектор нейтронов.

Описанная программа, названная нами NT-q (neutron transportation - quick), написана на языке C++. К её достоинствам относятся максимальная простота и физическая прозрачность. Следствием простоты программы является высокая скорость её работы. Так сравнение времени решения нескольких задач с помощью пакета GEANT 4 и этих же задач, используя программу NT-q, показало, что в последнем случае выигрыш по времени счёта был около 10 раз.

Важность быстродействия вычислительной программы в решении задач спектрометра иллюстрирует следующее. До конечного просчёта функций отклика для пяти шаров, необходимо было провести много других расчётов этой функции с целью её исследования и проверки, а достаточно детальный расчёт функции отклика для одного из больших шаров требовал времени работы персонального компьютера около суток даже в случае использования программы NT-q.

### ТЕСТИРОВАНИЕ МЕТОДИКИ

Та часть программы NT-q, в которой рассчитывается транспорт тепловых нейтронов, тестировалась ранее как отдельная программа NT-t (см. [2]). Поэтому в первую очередь необходимо проверить работу первой части программы, которая отвечает за транспорт нетепловых нейтронов. В этом плане представляет интерес сравнение с расчётом работы [4], где рассмотрено прохождение через полиэтиленовую пластину толщиной 5 см

нейтронов с начальной энергией  $E_0 = 2$  МэВ падающих на неё перпендикулярно. Результаты расчёта работы [4] и расчёта выполненного при тех же начальных условиях на NT-q приведены на рис.1, как и в [4], в единицах летаргии  $U = \ln(E_0/E)$ , где  $E$  – энергия нейтрона после прохождения пластины. Так как для тепловых нейтронов при начальной энергии  $E_0 = 2$  МэВ величина  $U = 18$ , то следовательно почти весь рисунок отражает работу программы с нетепловыми нейтронами. Как видно из этого рисунка результаты нашего расчёта и работы [4] довольно близки.

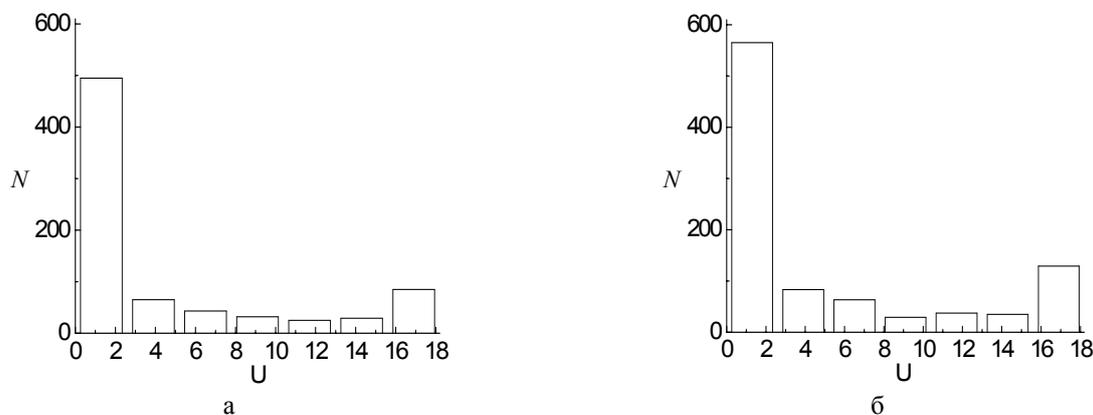


Рис. 1. Летаргия ( $U$ ) нейтронов с энергией  $E_0 = 2$  МэВ падающих перпендикулярно на полиэтиленовую пластину толщиной 5 см. Расчёты выполнены для  $10^4$  нейтронов. а – расчёт работы [4]; б – расчёт настоящей работы.

В работе [5], где собственно и был предложен шаровой нейтронный спектрометр, приведено большое количество экспериментальных значений функций отклика для шаров диаметром 5 и 8 дюймов. В работе [6] для таких же шаров функции отклика рассчитаны. Таким образом, имеется замечательная возможность сравнения результатов расчёта по нашей методике с данными, как измерений, так и других расчётов. На рис. 2 представлены данные по функциям отклика работ [5,6] и расчёты по программе NT-q. Результаты расчетов нормированы по максимуму значений функций работы [5]. Линии, соединяющие экспериментальные точки из работы [5], не являются результатом расчётов. Тестирование по расчёту функций отклика проверяет результат совместной работы блока расчёта транспорта быстрых и блока расчёта тепловых нейтронов.

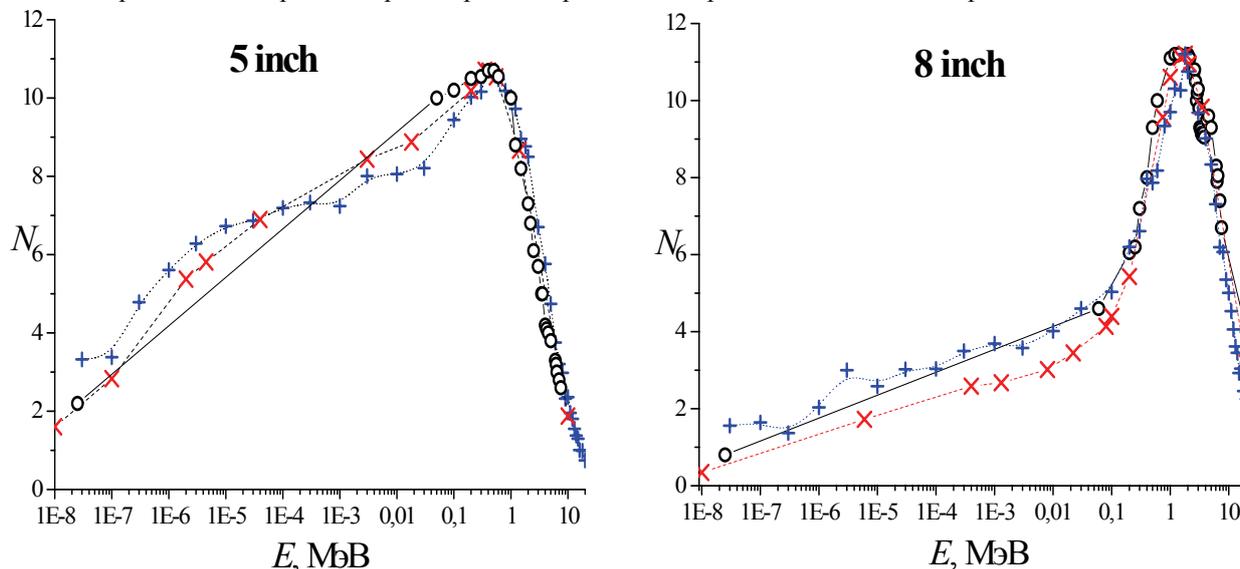


Рис. 2. Расчёт функций отклика полиэтиленовых шаров диаметром 5 дюймов (левый рисунок) и диаметром 8 дюймов (правый рисунок). Открытыми кружками обозначены данные измерений работы [5], наклонными крестами – расчёт работы [6], прямыми крестами – расчёт настоящей работы. Вертикальная шкала в условных единицах.

Как можно видеть из этих рисунков, согласие расчетов между собой и с данными измерений удовлетворительное, а близость сравниваемых данных в районе 10 МэВ указывает на то, что в случае полиэтилена программа NT-q может применяться вплоть до этой энергии.

#### ФУНКЦИИ ОТКЛИКА ДЛЯ ШАРОВ НЕЙТРОННОГО СПЕКТРОМЕТРА

На рис.3 приведены функции отклика 5-ти полиэтиленовых шаров нейтронного спектрометра ХФТИ рассчитанные с помощью программы NT-q. Хорошо видимая в нижней части рисунка некоторая изломанность линий соединяющих точки объясняется статистической ошибкой в расчёте этих точек  $\Delta N = N^{1/2}$ .

