

文章编号: 1007-4627(2018)03-0335-04

ENDF/B-VIII.β 与 ENDF/B-VII.1 中水的热中子散射截面数据对比分析

李志峰, 蔡杰进[†]

(华南理工大学电力学院, 广州 510641)

摘要: 以常见的慢化剂材料轻水为例, 分析了 ENDF/B 评价库中两个版本 ENDF/B-VIII.β 与之前 ENDF/B-VII.1 中热中子散射截面数据的差异。由于 ENDF/B-VIII.β 与 ENDF/B-VII.1 等两个版本中热中子散射截面的温度不尽相同, 为定量分析同一温度下二者的差异, 通过插值方法得到了任意温度下的热中子散射截面数据。对比发现, 二者在同一温度下的热中子散射数据存在差异。相对于 ENDF/B-VII.1 评价库版本而言, 基于 ENDF/B-VIII.β 评价库版本加工得到的束缚在水中的氢的热中子散射截面与 ENDF/B-VII.1 存在较为明显的差异, 两个版本给出的低温情况下的中子与靶核碰撞后的平均散射角余弦在热区的低能段出现极小的负值。此外, 当温度高于室温时, 在热区的低能段 ENDF/B-VIII.β 给出的平均次级中子能量要稍大于 ENDF/B-VII.1 给出平均次级中子能量。

关键词: ENDF/B-VIII.β 版本; 非弹性热中子散射截面; 平均散射角余弦; 次级中子能谱
中图分类号: TL32 **文献标志码:** A **DOI:** 10.11804/NuclPhysRev.35.03.335

1 引言

由于热中子能量与散射靶核的热运动的动能相当, 因此不能再认为散射靶核是静止的, 散射中子有可能由于散射靶核的振动向上散射获得能量。由于散射靶核与邻近靶核之间存在相互作用, 其原子核处于束缚状态, 与中子发生碰撞时不会发生自由反冲。低能热中子的德布罗意波长与材料内部原子核的间距差异较小, 因此, 与不同靶核散射的中子之间有可能发生干涉效应。基于上述因素, 热中子散射截面不仅与中子能量相关, 还与介质的物理、化学、温度等性质相关, 因此热中子散射截面数据的计算较为复杂, 美国发布的 ENDF/B 格式的评价数据库^[1]中的热中子散射数据也由多个物理模型获得, 且有着愈来愈精确的趋势。除了物理模型的改进, 最新的评价核数据库 ENDF/B-VIII.β^[2]相对于 2012 年发布的 ENDF/B-VII.1^[3]评价库版本而言, 提供了更多温度点下的热中子散射数据。

以常见的慢化剂材料轻水为例, ENDF/B-VII.1 中提供了 293.6, 350, 400, 450, 500, 550, 600, 650, 800 K 等 9 个温度点下的热中子散射数据, 而 ENDF/B-VIII.β 中提供了 283.6, 293.6, 300.0, 323.6, 350.0, 373.6,

400.0, 423.6, 450.0, 473.6, 500.0, 523.6, 550.0, 573.6, 600.0, 623.6, 650.0, 800.0 K 等 18 个温度点下的热中子散射数据^[4], 为定量分析同一温度下二者的差异, 本文拟通过插值方法得到任意温度下的热中子散射截面数据, 研究 ENDF/B-VIII.β 与 ENDF/B-VII.1 中水的热中子散射截面、散射角余弦、次级中子能谱等 3 个关键数据的差异, 并总结出相应的规律, 以便为反应堆物理计算科研人员提供参考。

2 热中子散射理论

热中子散射截面通常分为三大类^[5-6]:

(1) **相干弹性散射** 弹性散射分为相干弹性散射和非相干弹性散射, 且由于靶核处于束缚态, 热区中子在弹性散射过程中不损失能量。相干弹性散射对晶体重要, 如石墨、铍金属等;

(2) **非相干弹性散射** 对含氢的固态物质重要, 如聚乙烯、冰、氢化锆等。

(3) **非弹性散射** 非弹性散射过程会引起靶核的激发或退激发, 中子则会损失或获得能量;。

激发对应晶格中一个或多个声子产生从而使得分子振动或旋转。非弹性散射包括相干和非相干非弹性散

收稿日期: 2018-05-29; 修改日期: 2018-07-14

基金项目: 中国博士后科学基金面上项目(2017M622697), 中央高校基本科研业务费专项资金资助(2018MS75), 广东省教育厅青年创新人才类项目(2017KQNCX006), 广东省自然科学基金(2018A030313179)

作者简介: 李志峰(1988-), 男, 湖南娄底人, 助理研究员, 工学博士, 从事核能科学与工程研究; E-mail: lizhif@scut.edu.cn

[†] 通信作者: 蔡杰进, E-mail: epjjcai@scut.edu.cn.

射, 由于非弹性散射中的相干散射部分也包含了不同粒子和方向的散射波的相干效应, 且散射波方向对晶格随机分布, 因此它们的非相干部分和相干部分具有相同形式, 因此一般不再细分非弹性散射中的非相干散射和相干散射。非弹性散射对所有材料都重要, 而液态水中只考虑非弹性散射^[7], 非弹性散射截面是散射率的 $S(\alpha, \beta)$ 函数^[8]:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'}(E \rightarrow E', \mu P) = \frac{\sigma_b}{4\pi k_B T} \sqrt{\frac{E'}{E}} \exp\left(-\frac{\beta}{2}\right) S(\alpha, \beta, T), \quad (1)$$

$$\alpha = \frac{E + E' - 2\sqrt{EE'} \cos\theta}{Ak_B T}, \quad (2)$$

$$\beta = \frac{E' - E}{k_B T}, \quad (3)$$

式中: E 为入射中子能量; E' 为出射中子能量; α 为动量的变化; β 为能量的变化; σ 为微观截面; σ_b 为束缚散射截面; μ 为散射角余弦; θ 为散射角; k_B 为波尔兹曼常数; A 为散射核与中子的质量比; T 为温度; Ω 为立体角。

在计算水的热中子散射数据时, ENDF/B-VII.1 评价库版本使用的是 IKE 模型^[3, 5], 而 ENDF/B-VIII.β 评价库版本使用的是的 CAB 模型^[9], 基于 CAB 模型得出的水的热中子散射数据被证实比 IKE 模型得出的数据更符合实验值^[9]。因此, 通过对比分析, 即可得出 ENDF/B-VIII.β 评价库版本相对于 ENDF/B-VII.1 评价库版本中水的热中子散射截面数据的改进效果。

3 热中子散射截面加工流程

本文使用国际上通用的核数据加工程序 NJOY^[10] 开展热中子散射截面数据的加工, 加工流程如图 1 所

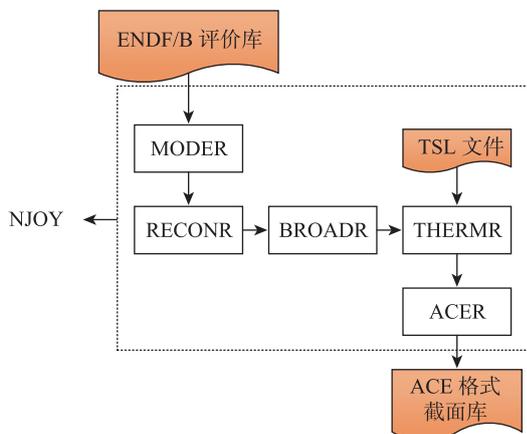


图 1 (在线彩图) ACE 格式热中子散射截面库加工流程

示。其中, NJOY 程序中的 MODER 模块的功能是将 ENDF 文件反复在二进制和 ASCII 之间转换; RECONR 模块的作用是通过 ENDF 中的共振参数和插值方案来共振重建点截面; BROADR 模块功能则是开展多普勒展宽计算, THERMR 模块的作用是在热能区产生自由的或者束缚的截面数据和散射分布信息; ACER 模块负责加工成不同类型的 ACE 格式文件。输入文件有两类, 一是原始的 ENDF/B 格式的评价数据库文件, 另外一类则是包含热化信息的热中子散射率文件 (Thermal scattering law, 简称 TSL, 下同)。

4 热中子散射数据对比

由于 ENDF/B-VIII.β 与 ENDF/B-VII.1 两个评价库版本中热中子散射截面的温度不尽相同, 为定量分析同一温度下二者的差异, 本文将通过插值方法得到任意温度下的热中子散射截面数据。本文分析 293.6, 333, 444, 555, 666, 777 K 等温度点下 ENDF/B-VIII.β 与 ENDF/B-VII.1 两个评价库版本中水中氢的热中子散射数据的差异。

图 2 为不同温度下两个不同评价库版本给出的束缚在水中氢的散射角余弦对比。图 3 为不同温度下两个不同评价库版本给出的束缚在水中氢的次级中子能谱对比。

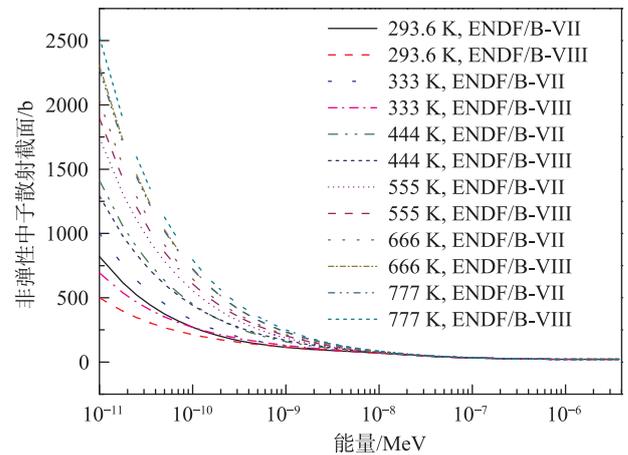


图 2 (在线彩图) 不同温度两个评价库版本给出的热中子散射截面对比

当温度升高时, 从图 2 可以得出, 束缚在水中氢的热中子散射截面随着温度的上升而增大, 这与文献^[5]给出结论一致; 从图 3 可以得出, 束缚在水中氢的平均散射角余弦随着温度的上升而基本不变; 从图 4 可以得出, 束缚在水中氢的次级中子能谱随着温度的上升而略有变化。

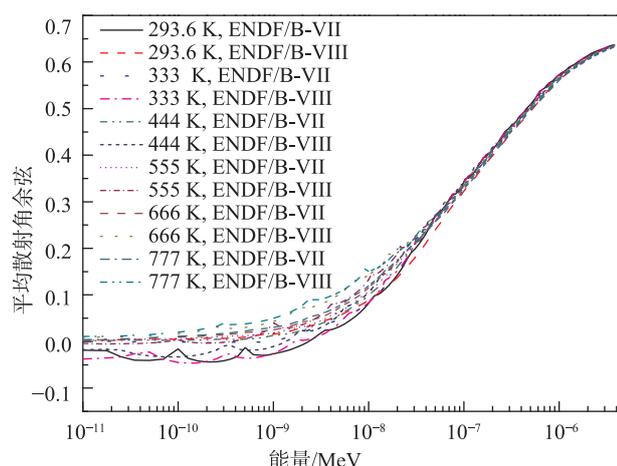


图3 (在线彩图) 不同温度两个评价库版本给出的中子与靶核的散射角余弦对比

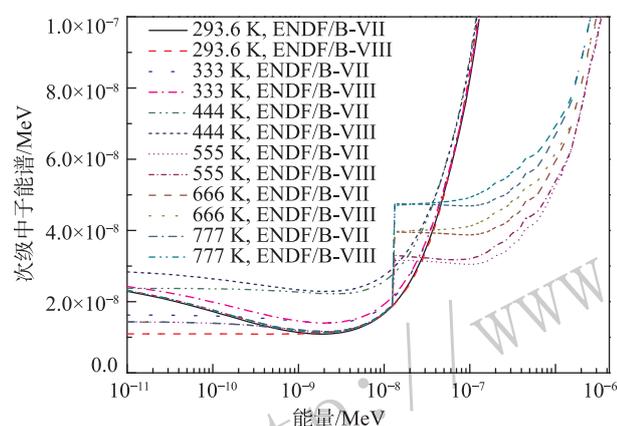


图4 (在线彩图) 不同温度两个评价库版本给出的次级中子能谱对比

此外, 同一温度下 ENDF/B-VIII.β 给出的热中子散射截面与 ENDF/B-VII.1 给出的热中子散射截面存在差异。从图3可以看出, 当温度较低时, ENDF/B-VII.1 与 ENDF/B-VIII.β 给出的散射角余弦在热能区的低能段出现了很小的负值, 表明采用该库数据存在很小的几率在散射后向后运动; 当温度为666和777 K时, 在整个热区 ENDF/B-VIII.β 给出的散射角余弦要稍大于 ENDF/B-VII.1 给出的散射角余弦。从图4可知, 在除室温(293.6 K)外的大部分温度点下, 在热区 ENDF/B-VIII.β 给出的平均次级中子能量要稍大于 ENDF/B-VII.1 给出平均次级中子能量, 在温度为333 K时这种差异最为明显。

5 结论

本文使用插值方法获得了任意温度下的束缚在水中氢的热中子散射数据, 并对比了基于 ENDF/B-VIII.β 与 ENDF/B-VII.1 两个不同评价库版本加工出的同一温度下的热中子散射数据, 获得了以下结论:

(1) 束缚在水中氢的热中子散射截面随着温度的上升而增大;

(2) 同一温度下 ENDF/B-VIII.β 给出的热中子散射截面与 ENDF/B-VII.1 给出的热中子散射截面存在差异;

(3) 在热区的低能段 ENDF/B-VII.1 与 ENDF/B-VIII.β 给出的散射角余弦出现了很小的负值;

(4) 当温度高于室温时, 在热区的低能段 ENDF/B-VIII.β 给出的平均次级中子能量要稍大于 ENDF/B-VII.1 给出平均次级中子能量, 表明其热中子向上散射现象将稍微增强。

参考文献:

- [1] HAWARI A I. *Nuclear Data Sheets*, 2014, **118**: 171.
- [2] OUADIE K, ABDELOUAHED C, ABDELHAMID J, *et al.* *Nuclear Engineering and Technology*, 2017, **49**(8): 1610.
- [3] CLADWICK M B, HERMAN M, OBLOZINSKY P, *et al.* *Nuclear Data Sheets*, 2011, **112**: 2887.
- [4] BROWN D. Preparing for the ENDF/B-VIII[C]//EPJ Web of Conference. USA: [S.N.], 2017: 1.
- [5] MATTES M, KEINERT J. Thermal Neutron Scattering Data for the Moderator Materials H₂O, D₂O and ZrH_x in ENDF-6 Format and as ACE Library for MCNP(X) Codes[R]. Germany: IKE, 2005.
- [6] HAWARI A I, GILLETE V H. *Nuclear Data Sheet*, 2014, **118**: 176.
- [7] SQUIRES G L. Thermal Neutron Scattering Data for the Moderator Materials H₂O, D₂O and ZrH_x in ENDF-6 Format and as ACE Library for MCNP(X) Codes[R]. New York: Cambridge University Press, 1978.
- [8] WANG Guanbo, WANG Kan, YU Ganglin. *Atomic Energy Science and Technology*, 2011, **45**(7): 785. (in Chinese) (王冠博, 王侃, 余纲林. *原子能科学技术*, 2011, **45**(7): 785.)
- [9] DAMIAN J I M, GRANADA J R, MALASPINA D C. *Annals of Nuclear Energy*, 2014, **65**: 280.
- [10] MACFARLANE R E, MUIR D W. A Code System for Producing Point-wise and Multi-group Neutron and Photon Cross Sections from ENDF/B Evaluated Nuclear Data[M]. New Mexico: LANL, 1994.

Comparison of the Thermal Neutron Scattering Cross Section of Water Based on ENDF/B-VIII.β and ENDF/B-VII.1

LI Zhifeng, CAI Jiejing[†]

(*School of Electric Power, South China University of Technology, Guangzhou 510641, China*)

Abstract: This work takes the traditional moderator material H₂O for example, the differences between ENDF/B-VIII.β and ENDF/B-VII.1 versions from the ENDF/B nuclear evaluated library are analyzed. In order to compare the thermal neutron scattering data between ENDF/B-VIII.β and ENDF/B-VII.1 versions under the same temperature, the interpolation method is used to obtain the thermal neutron scattering data under arbitrary temperatures. There are some differences between ENDF/B-VIII.β and ENDF/B-VII.1 versions, the thermal neutron scattering cross sections of H bound in H₂O within ENDF/B-VIII.β is different with that of ENDF/B-VII.1, the scattering angle cosines of the neutron and target nuclei from the two libraries are slightly smaller than zero in lower energy range within thermal range. Moreover, the second scattering energy spectrum from ENDF/B-VIII.β is slightly harder than that from the ENDF/B-VII.1 in higher energy range within thermal range when the temperature is higher than room temperature.

Key words: ENDF/B-VIII.β version; inelastic thermal neutron scattering cross section; average scattering angle cosine; scattering neutron energy spectrum

<http://www.npr.ac.cn>

Received date: 29 May. 2018; **Revised date:** 14 Jul. 2018

Foundation item: China Postdoctoral Science Foundation (2017M622697); Fundamental Research Funds for Central Universities (2018MS75); Youth Innovative Talents Project (Nature Science Category) of Guangdong Provincial Education Department (2017KQNCX006); Natural Science Foundation of Guangdong, China (2018A030313179)

[†] **Corresponding author:** CAI Jiejing, E-mail: epjjcai@scut.edu.cn.