

文章编号: 1007-4627(2019)01-0118-06

GEANT4和FLUKA计算256 MeV质子诱发散裂中子能谱

孙琪^{1,2}, 陈志强^{1,†}, 韩瑞¹, 田国玉¹, 石福栋¹

(1. 中国科学院近代物理研究所, 兰州 730000;

2. 中国科学院大学核科学与技术学院, 北京 100049)

摘要: 散裂反应产生的中子能谱等数据是ADS系统设计中的关键参数。由于涉及到的能量范围大、反应道复杂, 目前没有完善的评价核数据库可供使用, 需要使用合适的核理论模型来进行计算。CiADS (China initiative Accelerator Driven System)即将开始建设, 在第一阶段将使用能量约为250 MeV的质子束。利用FLUKA及GEANT4中的BERT_HP、BIC_HP和INCLXX_HP等物理模型列表分别计算了256 MeV质子轰击薄的铝、铁、铅和铀靶后, 在7.5°, 30°, 60°和150°等方向出射的中子双微分截面及轰击厚的铝、铁和铀靶后, 在30°, 60°, 120°和150°等方向出射的中子双微分产额, 并与已有的实验数据进行对比。结果表明, FLUKA和INCLXX_HP的计算结果整体上能够更好地符合实验数据。BIC_HP计算的薄靶结果, 除铝靶的150°和铅靶的30°外, 在5~30 MeV能量范围内要明显高于实验结果, 能够达到实验结果的2倍以上。BIC_HP计算的厚铀靶结果在30°和60°方向的5~30 MeV能量范围内要比实验结果高出70%以上, 在120°和150°方向的5 MeV以上要高于实验结果的2倍。BERT_HP计算的7.5°和30°方向上铝、铁和铅靶结果在20~100 MeV要比实验结果低40%以上, 计算的铀靶结果在20 MeV以下能够达到实验结果的2倍以上。

关键词: GEANT4; FLUKA; 散裂中子; CiADS

中图分类号: O571.55 **文献标志码:** A **DOI:** 10.11804/NuclPhysRev.36.01.118

1 引言

加速器驱动次临界系统 (Accelerator Driven Subcritical System, ADS)^[1]是一种先进的核能装置。利用来自强流质子直线加速器的中高能质子束轰击位于堆芯中的散裂靶, 产生宽能谱、高通量的次级中子驱动次临界反应堆运行, 维持反应堆中的裂变反应产生能量, 同时可以嬗变次锕系元素和长寿命裂变产物。CiADS (China initiative Accelerator Driven System)^[2-4]即将开始建设, 根据其研究发展路线图, 在第一阶段使用的质子束流能量约为250 MeV, 流强约为10 mA。ADS系统技术难度大、没有先例可循, 需要进行大量的研究来保证其运行安全可靠。由于ADS系统涉及的能量范围大(几百 MeV~几 GeV)、反应道复杂、材料种类多, 相应的实验数据比较匮乏, 目前没有完善的评价核数据库可供直接使用。而完全通过实验测

量相关的核数据既不经济也不现实, 这就需要依靠准确的核理论模型以及相应的软件程序来产生相关的数据。现在使用比较广泛, 能够进行散裂反应计算的蒙特卡洛程序有MCNP6、GEANT4^[5-7]、FLUKA^[8-10]等。其中GEANT4功能强大、免费开源、方便进行二次开发, 在核工程以及核技术相关的研究中得到越来越多的应用。GEANT4所使用的理论模型在较高能区的可靠性已经得到了比较充分的检验^[11-13]。这些检验表明, GEANT4模拟的质子轰击薄靶出射中子双微分截面和实验结果符合得较好。由于入射粒子以及次级粒子在厚靶中与靶材料之间的相互作用更加复杂, 有必要对GEANT4的厚靶模拟结果进行检验。FLUKA用于学术研究是免费的, 它的物理模型比较全面, 并且在长期的使用中进行了较多的检验, 模拟结果一般比较可靠。

在ADS系统中, 散裂靶的候选材料主要有钨、铅

收稿日期: 2018-10-16; 修改日期: 2018-12-28

基金项目: 国家自然科学基金委员会-中国科学院大科学装置科学研究联合基金(U1832205); 国家自然科学基金资助项目(11875298, 11605257)

作者简介: 孙琪(1993-), 男, 湖南新化人, 博士研究生, 从事核数据实验测量与模拟研究; E-mail: sunqi@impcas.ac.cn

† 通信作者: 陈志强, E-mail: zqchen@impcas.ac.cn。

铍合金等。对高能质子在这些材料中的散裂反应已经进行了一定的研究^[12-13]。铀不仅是核燃料的主要组成部分,还是一种可选的散裂靶材料^[14-15]。铝合金和不锈钢一般作为质子束窗^[16]等结构材料。本文利用GEANT4和FLUKA蒙特卡洛程序,对256 MeV质子轰击这几种材料在不同角度的中子双微分截面和中子双微分产额进行了计算,并将计算结果与现有的实验数据进行对比。这些实验数据^[17-18]选自EXFOR数据库^[19-20]。在EXFOR数据库中与250 MeV最接近的入射质子能量是256 MeV。在GEANT4模拟中分别使用了INCLXX_HP, BIC_HP, BERT_HP 3种物理模型列表。

2 计算程序和公式

2.1 GEANT4

GEANT4是欧洲核子中心(CERN)主导开发的蒙特卡洛通用粒子输运软件,采用C++语言编写,能够模拟多种粒子与物质的相互作用以及输运过程。在核物理、粒子物理、放射性医学等方面得到了广泛的应用。GEANT4提供了多种描述强子与核相互作用的物理模型及相关的模型列表等供用户使用,如BERT(Bertini intranuclear cascade model)^[21-22], BIC(Binary cascade model)^[23], INCL++(Intranuclear cascade liege)^[24]等。BERT包含了Bertini核内级联模型、预平衡模型、裂变模型以及蒸发模型,能够处理由能量在10 GeV以下的长寿命强子和伽玛射线引发的核反应。BIC模拟了初级和次级粒子在核内的级联输运过程,只考虑初级或者次级粒子与核内单独核子之间的两体相互作用。当次级粒子的平均和最大能量低于阈值时级联过程终止,调用预平衡和退激模型处理剩余碎片。INCL++适用于能量范围为1 MeV/u~20 GeV/u的粒子轰击比氘重的靶核,但是对于轻核和不稳定核的可靠性没有经过全面的检验。INCL++需要配合一个退激模型来使用。本研究使用的GEANT4 10.03提供了BERT_HP, BIC_HP, INCLXX_HP等物理列表。这3个物理列表分别使用了BERT、BIC和INCL++等模型组合,其中HP表示使用高精度方法模拟能量在20 MeV以下的中子输运过程,将辐射俘获、弹性散射、裂变和非弹性散射过程进行单独处理,调用相应的评价核数据库。

2.2 FLUKA

FLUKA是欧洲核子中心(CERN)和意大利国家核物理研究院(INFN)采用FORTRAN语言联合开发

的通用蒙特卡洛模拟程序。FLUKA的使用范围很广,涵盖了辐射屏蔽、探测器设计、ADS系统及放射性治疗等方面。在FLUKA的设计和开发过程中使用了多种比较成熟的物理模型。FLUKA可以高精度地模拟多种粒子在物质中的相互作用和输运过程。本研究使用FLUKA2011.2c.6。当入射粒子动量在3~5 GeV/c以下时,FLUKA使用PEANUT(Pre-Equilibrium Approach to Nuclear Thermalization)^[25]程序包来描述非弹性强子-核相互作用,其中包括了核内级联、预平衡以及蒸发、裂变、费米碎裂、伽玛退激等过程。对于能量在20 MeV以下的中子,FLUKA使用其自带的截面数据库进行计算。

2.3 计算公式

实验测量的中子不仅随角度变化而且具有一定的能量分布,可以使用双微分截面或双微分产额对这一特点进行描述。截面描述入射粒子与靶核发生作用的概率大小,用 σ 表示,适用于薄靶。双微分截面可以根据下式计算得到:

$$\frac{d^2\sigma}{dE d\Omega} = \frac{10^{24} \cdot N_n}{N_p \cdot N \cdot x \cdot \Delta E \cdot \Delta \Omega}, \quad (1)$$

其中:等号左侧为双微分截面($\text{b}\cdot\text{sr}^{-1}\cdot\text{MeV}^{-1}$); N_n 表示在某一方向的角度间隔 $\Delta\Omega(\text{sr})$ 内出射,处于某一能量附近的 $\Delta E(\text{MeV})$ 能量间隔内的中子数; N_p 是入射质子数; $N(\text{cm}^{-3})$ 是单位体积内的靶核数; $x(\text{cm})$ 是薄靶的厚度。对于厚靶,截面的概念已经不适用,使用产额 Y 来对其进行描述,它表示单个入射粒子所得到的中子数。相对应的双微分产额可以根据下式进行计算:

$$\frac{d^2Y}{dE d\Omega} = \frac{N_n}{N_p \cdot \Delta E \cdot \Delta \Omega}, \quad (2)$$

其中:等号左侧为双微分产额($\text{sr}^{-1}\cdot\text{MeV}^{-1}$);等号右侧各项的意义与式(1)中的相同。FLUKA计算可以直接给出双微分截面和双微分产额。GEANT4计算中得到的是中子个数,需要根据式(1)和(2)对双微分截面和双微分产额进行计算。

3 计算结果

3.1 薄靶计算结果

利用GEANT4和FLUKA程序分别计算了256 MeV质子轰击薄的铝、铁、铅以及铀靶在 7.5° , 30° , 60° 和 150° 出射方向的中子双微分截面,并将计算结果与相应的实验结果^[17]进行了对比,如图1~4所示。从

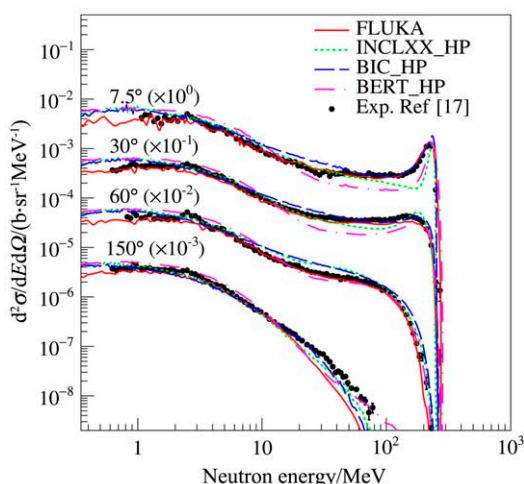


图 1 (在线彩图) 256 MeV 质子轰击薄铝靶中子双微分截面

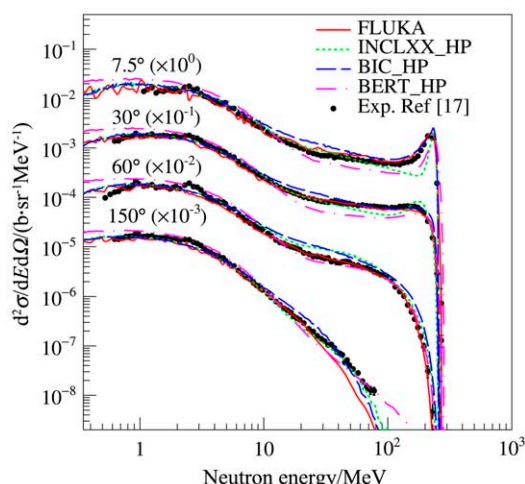


图 2 (在线彩图) 256 MeV 质子轰击薄铁靶中子双微分截面

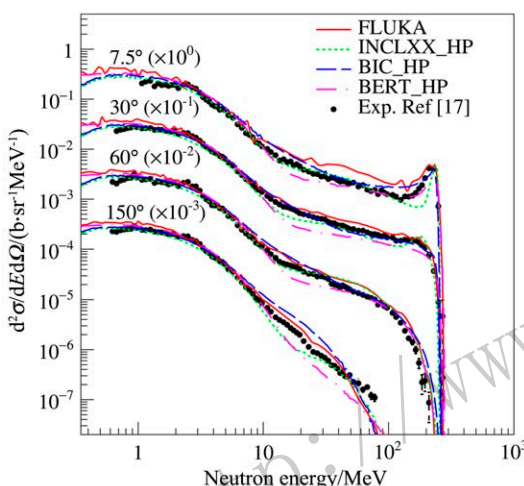


图 3 (在线彩图) 256 MeV 质子轰击薄铅靶中子双微分截面

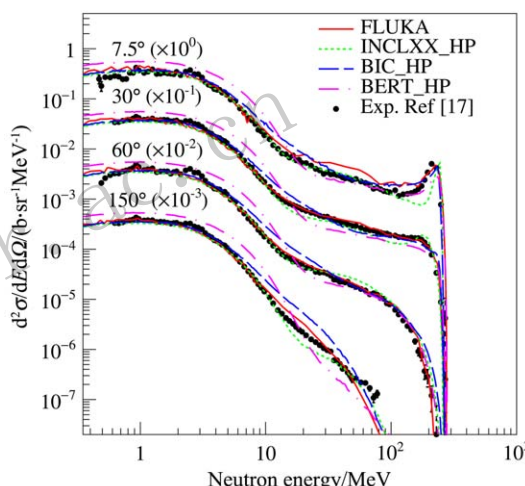


图 4 (在线彩图) 256 MeV 质子轰击薄铀靶中子双微分截面

图中可以看出，计算结果总体上能够较好地重现实验数据。模拟中使用的薄靶参数在表 1 中给出。

表 1 256 MeV 质子轰击薄靶模拟参数

靶材料	半径/cm	厚度/cm	密度/(g·cm ⁻³)
²⁷ Al	0.50	0.20	2.70
天然铁	0.50	0.08	7.87
天然铅	0.50	0.07	11.35
²³⁸ U	0.50	0.05	18.98

对于铝靶和铁靶，BERT_HP 模型在 7.5° 和 30° 方向的计算结果对 20~200 MeV 能量范围内的实验数据存在 40% 以上的低估。FLUKA 在 150° 方向的计算结果在 20 MeV 以上要明显低于实验数据，低估能够达到 90% 以上。对于铀靶，BERT_HP 模型的计算结果在 20 MeV 以下要明显高于实验结果，能够达到实验结果的 2 倍以上。FLUKA 在 7.5° 方向计算的铅靶和铀靶结果在 20~200 MeV 能量范围内要比相应的实验数据

高 50% 以上。INCLXX_HP 模型的计算结果不能很好地重现 7.5° 方向上所有靶在 100 MeV 以上的实验数据。这部分主要是预平衡过程的贡献。除铝靶在 150° 方向和铅靶在 30° 方向的计算结果外，BIC_HP 模型的所有计算结果在 5~30 MeV 范围内要比实验数据高 50% 以上，计算结果甚至能够达到实验结果的 2 倍。

3.2 厚靶计算结果

图 5~7 分别给出了利用 GEANT4 和 FLUKA 程序计算的 256 MeV 质子轰击厚的铝、铁和铀靶在 30°, 60°, 120° 和 150° 出射方向的中子双微分产额，以及相应的实验结果^[18]。从图中可以看出，计算结果整体上能够很好地符合实验数据。计算中使用的厚靶材料的尺寸等相关参数和实验参数一致，在表 2 中给出。

对于铝靶和铁靶，在小角度方向 (30° 和 60°)，BERT_HP 的计算结果在 20~100 MeV 能量范围内对实验结果存在 40% 的低估，在大角度方向 (120° 和 150°)，

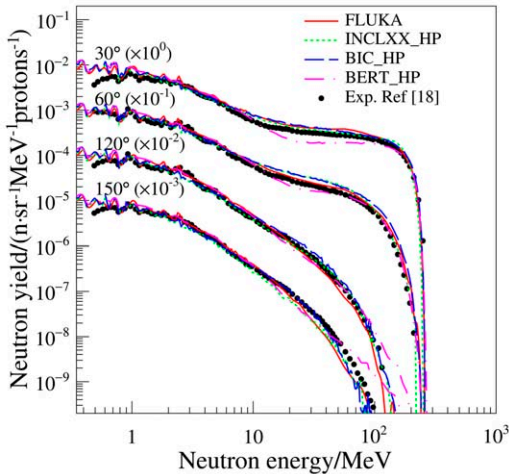


图 5 (在线彩图) 256 MeV质子轰击厚铝靶中子双微分产额

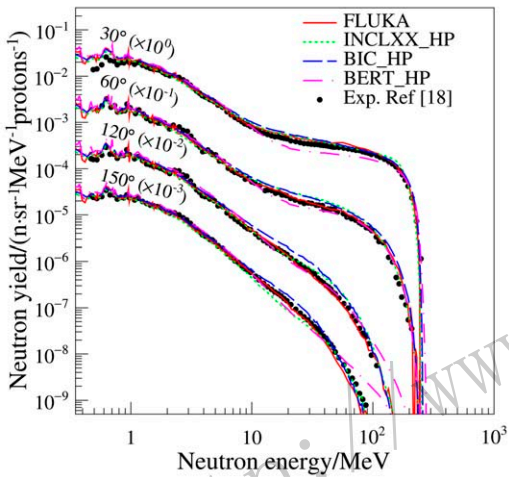


图 6 (在线彩图) 256 MeV质子轰击厚铁靶中子双微分产额

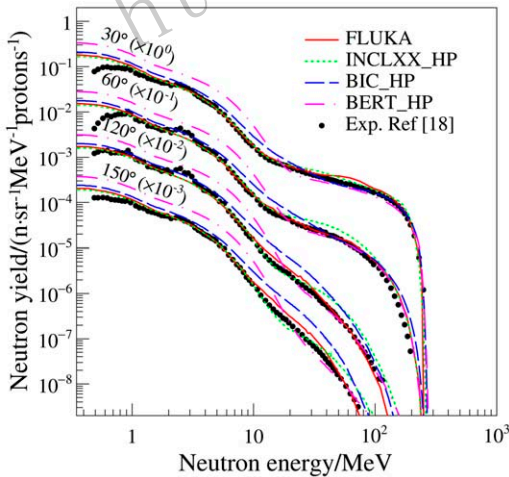


图 7 (在线彩图) 256 MeV质子轰击厚铀靶中子双微分产额

表 2 256 MeV 质子轰击厚靶实验靶参数

靶材料	半径/cm	长度/cm	密度/ (g·cm ⁻³)	质子在靶中的射程/cm
²⁷ Al	8.00	20.00	2.72	18.51
天然铁	8.00	8.00	7.86	7.16
²³⁸ U	4.00	5.00	18.98	4.25

BERT_HP 的计算结果在 50 MeV 以上要高于相应的实验结果, 计算结果能够达到实验结果的 2 倍以上。对于铀靶, BERT_HP 的计算结果在 20 MeV 以下要明显高于相应的实验数据, 能够达到实验结果的 3 倍以上, 而在 20 MeV 以上和实验数据符合得较好。BIC_HP 的计算结果在 120° 和 150° 两个角度对 5 MeV 以上的实验结果存在明显的高估, 计算结果可以比实验结果高出 1 倍以上。INCLXX_HP 在 60° 和 120° 方向的计算结果对 20~100 MeV 能量范围内的实验数据存在 50% 以上的高估。FLUKA 在 150° 方向的计算结果在 10~40 MeV 能量范围内要比实验结果高 50% 以上。对比薄靶和相应厚靶的计算结果可以发现, 入射质子以及次级粒子在靶中的输运过程对最终的计算结果存在较大的影响。

4 结论

本文使用 GEANT4 和 FLUKA 蒙特卡罗程序分别计算了 256 MeV 质子轰击薄的铝、铁、铅和铀靶在 7.5°, 30°, 60° 和 150° 等方向出射的中子双微分截面及轰击厚的铝、铁和铀靶在 30°, 60°, 120° 和 150° 出射的中子双微分产额。GEANT4 的计算中使用了 BERT_HP, BIC_HP, INCLXX_HP 3 个物理模型列表。通过计算结果与相应实验结果的对比可以发现, 计算结果和实验结果的整体趋势是一致的, FLUKA 和 INCLXX_HP 的计算结果能更好地重现实验数据, 而 BIC_HP 和 BERT_HP 的计算结果与实验结果存在较大的差异。BIC_HP 计算的薄靶结果, 除铝靶的 150° 和铅靶的 30° 外, 在 5~30 MeV 能量范围内对实验数据存在 50% 以上的高估。BIC_HP 计算的厚铀靶结果在 30° 和 60° 方向的 5~30 MeV 能量范围内及在 120° 和 150° 方向的 5 MeV 以上要明显高于实验数据, 能够达到实验结果的 2 倍以上。BERT_HP 计算的 7.5° 和 30° 方向上铝、铁和铅靶结果在 20~100 MeV 存在 40% 以上的低估, 计算的铀靶结果在 20 MeV 以下能够达到实验结果的 2 倍以上。总的来看, 在 ADS 系统的设计过程中, 可以使用 FLUKA 及 GEANT4 中的 INCLXX_HP 模型列表进行相关的模拟计算。这些计算模型和程序还需要进一步的优化来提高模拟的精确度, 也需要进行进一步的实验来进行检验。

参考文献:

[1] BOWMAN C D, ARTHUR E D, LISOWSKI P W, *et al.* Nucl Instr and Meth A, 1992, **320**: 336.

- [2] XIAO Guoqing, XU Hushan, WANG Sicheng. *Nuclear Physics Review*, 2017, **34**(3): 275. (in Chinese)
(肖国青, 徐珊珊, 王思成. 原子核物理评论, 2017, **34**(3): 275.)
- [3] ZHAN Wenlong, XU Hushan. *Bulletin of Chinese Academy of Sciences*, 2012, **27**(3): 375. (in Chinese)
(詹文龙, 徐珊珊. 中国科学院院刊, 2012, **27**(3): 375.)
- [4] LUO Peng, WANG Sicheng, HU Zhengguo, *et al. Physics*, 2016, **45**(9): 569. (in Chinese)
(骆鹏, 王思成, 胡正国, 等. 物理, 2016, **45**(9): 569.)
- [5] AGOSTINELLIS, ALLISON J, AMAKO K, *et al. Nucl Instr and Meth A*, 2003, **506**: 250.
- [6] ALLISON J, AMAKO K, APOSTOLAKIS J, *et al. IEEE Transactions on Nuclear Science*, 2006, **53**: 270.
- [7] ALLISON J, AMAKO K, APOSTOLALIS J, *et al. Nucl Instr and Meth A*, 2016, **835**: 186.
- [8] FERRARI A, SALA P R, FASSO A, *et al. CERN-2005-10, INFN/TC05/11, SLAC-R-773*, 2005.
- [9] BATTISTONI G, MURARO S, SALA P R, *et al. AIP Conference Proceeding*, 2007, **896**: 31.
- [10] BATTISTONI G, BOEHLER T, CERUTTI F, *et al. Ann Nucl Energy*, 2015, **82**: 10.
- [11] ZHANG Suyalatu, LUO Fei, CHEN Zhiqiang, *et al. Nuclear Physics Review*, 2016, **33**(3): 370. (in Chinese)
(张苏雅拉吐, 罗飞, 陈志强, 等. 原子核物理评论, 2016, **33**(3): 370.)
- [12] ZHANG Suyalatu, CHEN Zhiqiang, Han Rui, *et al. Nuclear Physics Review*, 2014, **31**(2): 235.
- [13] SONG Lin, CHEN Zhiqiang, Han Rui, *et al. Nuclear Physics Review*, 2018, **35**(1): 100. (in Chinese)
(宋林, 陈志强, 韩瑞, 等. 原子核物理评论, 2018, **35**(1): 100.)
- [14] HILSCHER D, JAHNKE U, GOLDENBAUM F, *et al. Nucl Instr and Meth A*, 1998, **414**: 100.
- [15] KHUSHVAKTOV J H, ADAM J, BALDIN A A, *et al. Applied Radiation and Isotopes*, 2018, **137**: 102.
- [16] WU Hongli, WANG Xiangqi, HU Guojun, *et al. High Power Laser and Particle Beams*, 2013, **25**(10): 2675.
- [17] MEIER M M, AMIAN W B, GOULDING C A, *et al. Nuclear Science and Engineering*, 1992, **110**: 289.
- [18] MEIER M M, GOULDING C A, MORGAN G L, *et al. Nuclear Science and Engineering*, 1990, **104**: 339.
- [19] OTUKA N, DUPONT E, SEMKOVA V, *et al. Nuclear Data Sheets*, 2014, **120**: 272.
- [20] ZERKIN V V, PRITYCHENKO B. *Nucl Instr and Meth A*, 2018, **888**: 31.
- [21] GUTHRIE M P, ALSMILLER R G, BERTINI H W. *Nucl Instr and Meth*, 1968, **66**(1): 29.
- [22] BERTINI H W, GUTHRIE M P. *Nucl Phys A*, 1971, **169**: 670.
- [23] FOLGER G, IVANCHENKO V N, WELLISCH J P. *European Physical Journal A*, 2004, **21**(3): 407.
- [24] MANCUSI D, BOUDARD A, CUGNON J, *et al. Physical Review C*, 2014, **90**: 054602.
- [25] COLLAZUOL G, FERRARI A, GUGLIELMI A, *et al. Nucl Instr and Meth A*, 2000, **449**: 609.

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

Calculation of Spallation Neutron Spectra Induced by 256 MeV Protons with GEANT4 and FLUKA

SUN Qi^{1,2}, CHEN Zhiqiang^{1,†}, HAN Rui¹, TIAN Guoyu¹, SHI Fudong¹

(1. Institute of Modern Physics, Chinese Academy of Sciences, Lanzhou 730000, China;

2. School of Nuclear Science and Technology, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract: Neutron spectra produced through spallation reaction are key parameters in the design of Accelerator Driven Subcritical Systems. Since the energy span is large and reaction channels are complicated, no complete evaluated nuclear data library is ready for use. Suitable theoretical models are required to calculate the data. The CiADS (China initiative Accelerator Driven System) is going to be constructed in China. At the first stage, the adopted proton energy is about 250 MeV. FLUKA and GEANT4 are used to calculate the double differential cross sections at 7.5°, 30°, 60° and 150° induced by 256 MeV protons bombarding on thin aluminum, iron, lead and uranium targets, respectively. The double differential neutron yields at 30°, 60°, 120° and 150° are also calculated for 256 MeV protons bombarding on thick aluminum, iron and uranium targets, respectively. Three model lists INCLXX_HP, BIC_HP and BERT_HP implemented in GEANT4 are used separately. The calculation results are compared with corresponding experimental data. It is shown that results calculated with FLUKA and INCLXX_HP in GEANT4 fit the corresponding experimental data much better. The calculation results with BIC_HP overestimate the experimental data for thin targets in 5~30 MeV for more than 100%, except for aluminum at 150° and lead at 30°. For uranium target, the results calculated with BIC_HP is greater than the experimental results by more than 70% in the energy range 5~30 MeV at 30° and 60° and by more than 100% in the energy range above 5 MeV at 120° and 150°. In 20~100 MeV for aluminum, iron and lead targets, calculation results at 7.5° and 30° with BERT_HP underestimate the experimental data by more than 40%. And for uranium target, the experimental data up to 20 MeV are overestimated by more than 100%.

Key words: GEANT4; FLUKA; Spallation neutrons; CiADS

Received date: 16 Oct. 2018; **Revised date:** 28 Dec. 2018

Foundation item: Joint Large-Scale Scientific Facility Funds of NSFC and CAS(U1832205); National Natural Science Foundation of China(11875298, 11605257)

† **Corresponding author:** CHEN Zhiqiang, E-mail: zqchen@impcas.ac.cn.