

文章编号: 1007-4627(2006)02-0123-04

低能 α 粒子与中子耦合输运模拟*

师学明, 沈姚崧, 伍 钧

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

摘 要: 开发了低能 α 粒子与中子耦合输运程序, 可以计算低能 α 粒子在各种介质中的输运、含氧介质中的 (α, n) 中子产额, 跟踪次级中子。采用蒙特卡罗方法中带权重跟踪的技巧, 通过大量小权重事件的模拟成功解决了低能 (α, n) 反应中子产额太低、无法直接模拟的困难。 α 粒子的射程与阻止本领用 SRIM 程序计算, (α, n) 截面取自最新的 JENDL 带电粒子库, 次级中子跟踪使用 MCNP 程序。

关键词: 低能 α 粒子; 耦合输运; 中子产额; 次级中子

中图分类号: O571.5 **文献标识码:** A

1 概述

低能 α 粒子与中子耦合输运在铀的表面氧化研究中非常重要。利用铀同位素自发衰变放出的 α 粒子与氧 (^{17}O , ^{18}O) 作用放出中子的多少可以帮助判定铀表面氧化程度。这就需要研究 α 粒子的输运, 模拟 (α, n) 反应和中子输运。但是低能 (20 MeV 以下) 时氧的 (α, n) 反应中子产额很小 ($10^{-8} n/\alpha$), 这给直接模拟带来了很大困难。目前有许多程序可以处理带电粒子输运问题, 如 LAHET/MCNPX^[1,2], HETC-CYRIC, PHITS^[3] 等, 但它们都只适合处理中高能情况。低能 α 粒子与中子耦合输运的研究工作还未见有文献报道。

本文采用蒙特卡罗方法模拟低能 α 粒子的输运, 次级中子的输运用 MCNP4B^[4] 来模拟。 α 粒子的阻止本领由 SRIM2003^[5] 计算给出, 散射角分布由 Rossi 的多次散射角分布^[6] 给出, 能量损失统计起伏由 Vavilov^[7] 分布给出。为了提高计算效率, 采用带权重跟踪的技巧。 α 粒子每前进一步都产生一个中子, 中子的权重由该步的中子产额决定; 中子的能量、角度由 JENDL^[8] 库的 (α, n) 数据抽样得到。这样就成功地实现了 α 粒子与中子耦合的输运模拟。初步的计算表明, 程序可以给出正确的结果。

2 理论模型

带电粒子在介质中要受到库仑力的作用, 每个粒子从产生到死亡要和电子发生大量的碰撞。为了减少计算量, 经常采用 Berger 的浓缩历史方法^[9]。

浓缩历史方法的基本思想是: 把真实的物理上的随机游动划分为若干历史阶段, 每一历史阶段包括多次游动。也就是说, 把好多次随机碰撞合并为一次碰撞。作为一步游动处理。而这一步的能量, 和飞行方向的转移概率由近似的多次散射理论给出。

本文中粒子历史阶段的划分采用了常见的能量对数分割法。

2.1 能量栅格的划分

粒子每走一步, 能量按对数减少, 主能量栅格划分如下:

$$E_{i+1} = (1 - K)E_i, K = 0.917004. \quad (1)$$

为了使步长划分更细些, 可在主栅格中间划分 n_{ab} 个子栅格, 不同材料 n_{ab} 取值不同。子栅格的能量间距是:

$$\Delta E = \frac{E_i - E_{i-1}}{n_{ab}}. \quad (2)$$

收稿日期: 2005-11-20; 修改日期: 2006-01-09

* 基金项目: 中国工程物理研究院基金资助项目(20030764)

作者简介: 师学明(1978-), 男(汉族), 甘肃靖远人, 工学硕士, 从事军控核查技术研究; E-mail: sxm_shi@iapcm.ac.cn

2.2 计算轨迹步长

带电粒子的阻止本领常记作 $-dE/dS$ ，它表示带电粒子在单位距离内由于碰撞所损失的平均能量，由电子阻止本领 $(-dE/dS)_e$ 与核阻止本领 $(-dE/dS)_n$ 两部分组成。当 α 粒子能量大于 100 keV 时，电子阻止本领是最主要的，核阻止本领可以忽略。本文中阻止本领计算采用 SRIM2003^[5] 程序，将计算好的数据作为数据文件供 α 粒子输运程序计算使用。SRIM 是一个非常著名的带电粒子阻止本领与射程计算程序，可以给出原子序数小于 92 的所有元素的射程和阻止本领。本文中铀的阻止本领近似用铀的来代替。

利用阻止本领，可以计算出能量栅格内每两个相邻能量点区间内的“子射程” ΔR_i ，由此得到各能量点对应的“射程” R_i ：

$$\Delta R_i = \int_{E_i}^{E_{i+1}} \frac{1}{-dE/dS} dE, \quad (3)$$

$$R_i = \int_{E_i}^0 \frac{1}{-dE/dS} dE. \quad (4)$$

α 粒子每次前进的距离 ΔS 和所处介质的宏观截面 Σ_i 、粒子距离介质边界的距离 d 以及 α 粒子在介质内的“子射程”有关。记 α 粒子与介质发生下次碰撞的距离为 l ，则由直接抽样法可知：

$$l = -\ln\xi/\Sigma_i, \quad (5)$$

其中 ξ 是 0 到 1 之间的随机数。于是得轨迹步长

$$\Delta S = \min\left(d, l, \frac{\Delta R_n}{n_{sb}}\right). \quad (6)$$

2.3 α 粒子在一个步长内能量损失的统计起伏

α 粒子在每一个步长内损失的能量相对平均值有统计起伏 δE 。本文采用 Vavilov^[7] 分布描述能量损失统计起伏。设 α 粒子的能量为 E ， $E_{i+1} < E \leq E_i$ ，则经过能量损失修正， α 粒子前进 ΔS 距离所损失的能量可以表示为

$$\Delta E = \frac{E_i - E_{i+1} + \delta E}{\Delta R_i} \Delta S. \quad (7)$$

当 α 粒子能量小于 2 MeV 时作能量截断，粒子运动历史结束。

2.4 带电粒子多次散射角分布

带电粒子飞行 ΔS 距离后，偏转极角 Θ 由 Rossi^[6] 的多次散射角分布给出：

$$P(\Theta^2) = \frac{1}{\langle \Theta^2 \rangle} \exp\left(-\frac{\Theta^2}{\langle \Theta^2 \rangle}\right). \quad (8)$$

$\langle \Theta \rangle$ 的表达式可参考文献 [6]。散射后的辐角在 $0-2\pi$ 间均匀抽样产生。

2.5 次级中子的跟踪

α 粒子在介质中损失能量 ΔE ，产生的中子数为^[10]

$$Y(E, \Delta E) = \int_E^{E-\Delta E} \frac{N\sigma_{an}(E)}{-dE/dS} dE, \quad (9)$$

其中， N 为介质的核子数密度， σ_{an} 为介质的 (α, n) 反应截面。JENDL 的带电粒子库中给出了 0—15 MeV 范围内 ^{17}O 和 ^{18}O 等 12 种同位素核的 (α, n) 反应截面。由于 $Y(E, \Delta E)$ 很小，如果按照常规的模拟方法，在氧气中大概每模拟 108 个 α 粒子才可能打出 1 个中子。这样，中子模拟的效率势必非常低，而且统计起伏巨大，无法给出可信的结果。

本文采用直接模拟法， α 粒子每走一步都会产生一个中子，该中子的权重即为 $Y(E, \Delta E)$ 。中子产生的位置在 α 粒子每一步的轨迹上随机产生。即

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + \xi \Delta S \boldsymbol{\Omega}. \quad (10)$$

其中， \mathbf{r}_0 和 $\boldsymbol{\Omega}$ 分别为 α 粒子初始位置和飞行方向， ΔS 由 (3) 式给出， ξ 为 0—1 之间的随机数。

中子的能量和角度从 JENDL 库中抽样得到。中子的输运过程由 MCNP 程序来实现。

3 程序初步验证

为了检验阻止本领计算的可靠性，利用 (9) 式计算了 α 粒子在氧和二氧化铀中的中子产额，并和厚靶的 (α, n) 产额实验数据^[11] 做了比较。计算中取 $\Delta E = E$ ，即求得 α 粒子损失全部能量所放出的中子数，单位为 $10^{-8} n/\alpha$ (见表 1)。可见，计算值与实验值吻合良好，计算值几乎都在实验误差之内。

表1 厚靶(α, n)中子产额比较 $10^{-8} n/\alpha$

E / MeV	O_2		UO_2	
	(实验值)	(计算值)	(实验值)	(计算值)
4.0	1.64 ± 0.14	1.648	0.51 ± 0.03	0.517
4.5	2.93 ± 0.24	3.082	0.91 ± 0.05	0.932
5.0	5.18 ± 0.43	4.457	1.60 ± 0.09	1.642
5.5	6.46 ± 0.52	6.479	1.99 ± 0.10	2.020

为了检验程序,我们设计了一个模型。假设能量为 5.5 MeV、各项同性的 α 点源位于球形介质的中心,改变球的半径,记录泄露出球外表面的中子数。当球半径小于 α 粒子射程时,随着球半径的增大, α 粒子与氧作用次数增多,产生中子数增加,泄漏中子数增加。当球半径大于 α 粒子射程时,中子产生项不再增加,而中子在球内被吸收的几率增加,因此泄漏中子数将减小。表 2 和表 3 分别给出了介质为氧气和二氧化铀时,泄漏中子数随球半径的变化情况,计算结果按源粒子数做了归一,即给出了一个 α 粒子与介质作用而引起的中子泄漏数。氧气和二氧化铀的密度分别取 1.429×10^{-3} 和 10.8 g/cm^3 。计算中,取 α 粒子截断能量为 2 MeV,此时 α 粒子在氧气和二氧化铀中的射程分别为 2.703 和 $9.64 \times 10^{-4} \text{ cm}$ 。显然,计算结果完全符合前面的分析,而且和表 1 中厚靶的实验数据符合。计算中

源粒子数均为 40 000。

表2 泄露出氧气外表面的中子数

半径 /cm	泄漏中子数 ($10^{-8} n/\alpha$)	半径 /cm	泄漏中子数 ($10^{-8} n/\alpha$)
2.0	5.952 6	2.9	6.267 8
2.5	6.254 9	3.0	6.267 7
2.7	6.263 5	5.0	6.265 5
2.8	6.268 0	9.0	6.262 1

表3 泄露出二氧化铀外表面的中子数

半径 /cm	泄漏中子数 ($10^{-8} n/\alpha$)	半径 /cm	泄漏中子数 ($10^{-8} n/\alpha$)
0.000 5	1.529 9	0.02	1.978 6
0.001	1.990 2	0.10	1.930 6
0.002	1.989 6	0.5	1.705 7
0.005	1.987 6	1.00	1.465 0

4 小结

本文成功地开发了低能 α 粒子与中子耦合输运程序,通过厚靶中子产额实验初步检验了程序的正确性。本文的方法可用于铀的表面氧化研究中。

参 考 文 献:

- [1] Prael R E, Lichtenstein H. User's Guide to LCS: The LAHET Code System. 1989, LA-UR-89-3014.
- [2] Hendricks John S, Mckinney Gregg W. MCNPX EXTENSIONS. VERSION 2.5.0. 2004, LA-UR-04-0570.
- [3] Iwase Hiroshi, Niita Koji, Nakamura Takashi. Journal of Nuclear Science and Technology, 2002, 39: 1 142.
- [4] Briesmeister Judith F. MCNP4B, General Monte Carlo Code for Neutron and Photon Transport. 1997, LA-7396-M.
- [5] Ziegler J F. The Stopping and Range of Ions in Matter; Instruction Manual, 2002.
- [6] Prael R E. Multiple Coulomb Scattering Methods in LAHET3 and MCNPX. 2002, LA-UR-02-0425.
- [7] Vavilov P V. Soviet JETP, 1957, 5(5): 749.
- [8] JENDL (α, n) Reaction Data File. 2003. <http://www.ndc.tokai.jaeri.go.jp/ftpnd/jendl-an-2003.html>.
- [9] 杜书华, 张树发. 输运问题的计算机模拟. 长沙: 湖南科学技术出版社, 1988, 648—649.
- [10] Matsunobu Hiroyuki, Oku Takeshi, Iijima Shungo. Data Book for Calculating Neutron Yields from (α, n) Reaction and Spontaneous Fission. Japan Atomic Energy Research Institute, 1992, 5—6.
- [11] Jacobs J G H, Liskien H. Ann Nucl Energy, 1983, 10: 541.

Simulation of Alpha-neutron Coupled Transportation in the Low Energy Region*

SHI Xue-ming, SHEN Yao-song, WU Jun

(*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China*)

Abstract: A new code package of alpha-neutron coupled transportation is developed. It can be used to simulate the transportation of alpha particle in media, to compute the neutron yield in media contains oxygen and to track the history of the secondary neutrons. The secondary neutrons are simulated efficiently by tracking lots of neutrons with small weight, which is determined by the alpha-neutron yield. The stopping power and range of alpha particle in media are given by SRIM code, the alpha-neutron cross section is from charged particle library in JENDL, and the neutrons are treated by MCNP code.

Key words: low energy alpha particle; coupled transportation; neutron yield; secondary neutron

* **Foundation item:** China Academy of Engineering Physics Foundation(20030764)