

MÔ PHỎNG VÀ TÍNH TOÁN MỘT SỐ THÔNG SỐ TƯƠNG TÁC CỦA NEUTRON VỚI VẬT CHẤT

Châu Văn Tạo, Trương Thị Hồng Loan, Huỳnh Trúc Phương

Khoa Vật Lý - Trường Đại Học Khoa Học Tự Nhiên, ĐHQG-HCM

(Bài nhận ngày 25 tháng 9 năm 2005, hoàn chỉnh sửa chữa ngày 09 tháng 12 năm 2005)

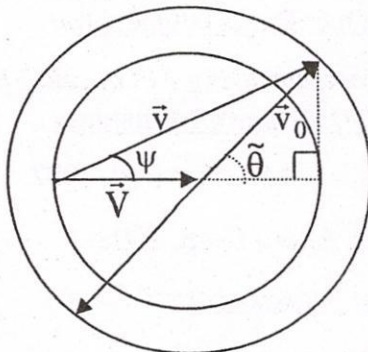
TÓM TẮT: Trong bài báo này chúng tôi xây dựng chương trình mô phỏng và tính toán các quá trình tương tác của neutron lên các môi trường vật chất. Phương pháp Monte- Carlo và công cụ phần mềm MATLAB được sử dụng làm cơ sở cho việc mô phỏng quá trình tương tác của các quá trình này. Quá trình làm chậm và nhiệt hoá neutron được tính toán và từ đó một số thông số có liên quan đã được tính và mô phỏng như: phổ năng lượng neutron sau khi truyền qua lớp vật chất, số lần va chạm trung bình để nhiệt hóa neutron, đường đi của neutron trong khối vật chất. Các kết quả mô phỏng thu được là phù hợp tốt với kết quả mô phỏng của các tác giả ở School of physics, The University of New South Wales, Sydney, Australia [6].

1. MỞ ĐẦU

Vật lý neutron là một phần của Vật lý hạt nhân. Nó đã góp phần đưa vật lý hạt nhân vào ứng dụng rộng rãi trong các ngành công, nông, y sinh... Để phát triển các ứng dụng của neutron vào thực tế thì việc nghiên cứu tương tác của neutron với vật chất là vấn đề quan trọng và được tập trung nhiều trong ngành vật lý hạt nhân hiện nay [1]. Hiểu rõ được bản chất tương tác của neutron với môi trường vật chất sẽ giúp cho việc ứng dụng vật lý neutron vào thực tiễn ngày một đa dạng và phong phú hơn. Một trong những phương pháp nghiên cứu tương tác của neutron với vật chất có hiệu quả và khá chính xác là phương pháp mô phỏng [2]. Quá trình tương tác của neutron với vật chất là quá trình ngẫu nhiên, nên phương pháp Monte Carlo là công cụ hữu hiệu cho việc mô phỏng [4]. Với sự tiện ích của mình về mặt giao diện cũng như tiện lợi trong việc tính toán và khai triển các công thức phức tạp nên phần mềm Matlab đã được sử dụng.

2. LÝ THUYẾT CƠ SỞ.

Khi neutron có năng lượng E va chạm đàn hồi với hạt nhân có số khối A, nó sẽ bị tán xạ so với phương tới với góc Ψ trong hệ phòng thí nghiệm và tương ứng với góc trong hệ khối tâm là $\tilde{\theta}$. Sau va chạm năng lượng của neutron còn lại là E'. Các công thức liên hệ giữa các đại lượng trên như sau [3]:



$$E' = E \frac{1}{(1+A)^2} \left[\cos \psi + \sqrt{\cos^2 \psi + A^2 - 1} \right]^2 \quad (1)$$

Công thức liên hệ giữa ψ và $\tilde{\theta}$:

$$\cos \psi = \frac{A \cos \tilde{\theta} + 1}{\sqrt{A^2 + 2A \cos \tilde{\theta} + 1}} \quad (2)$$

Hình 1: Mối liên hệ giữa các góc tán xạ

Năng lượng neutron sau tán xạ trong hệ khối tâm $\tilde{\theta}$:

$$E' = E \frac{A^2 + 2A \cos \tilde{\theta} + 1}{(A + 1)^2} \quad (3)$$

Khi năng lượng ban đầu của neutron là E và chạm với hạt nhân có khối lượng M. Độ mất năng lượng trung bình tương đối của neutron lên sau một lần va chạm là [3]:

$$\frac{\bar{E}_M}{E} = \frac{2M.m}{(M + m)^2} \quad (4)$$

Số va chạm trung bình n cần thiết để làm chậm neutron từ năng lượng ban đầu E_0 đến E_n được cho bởi công thức: $n = \frac{1}{\xi} \ln \frac{E_0}{E_n}$ với ξ là lethargy.

3. XÂY DỰNG CHƯƠNG TRÌNH

3.1. Tiến trình mô phỏng

3.1.1. Bài toán 1: Sự truyền neutron qua tấm vật chất

Giả sử tấm chắn đồng nhất có bề dày h theo phương Oz, không chứa chất phân hạch, tiết diện vĩ mô toàn phần $\Sigma_t = \Sigma_c + \Sigma_s$. Trạng thái của neutron tại một thời điểm gồm ba tham số: toạ độ z ($0 \leq z \leq h$), năng lượng E và hướng bay của neutron trong bề dày vật chất $\mu = \cos\theta$ (θ là góc tán xạ so với trục z). Tiến trình thực hiện tính toán quỹ đạo của neutron được thực hiện thông qua phương pháp Monte-Carlo [5].

3.1.2. Bài toán 2: Sự hãm neutron trong hộp làm chậm

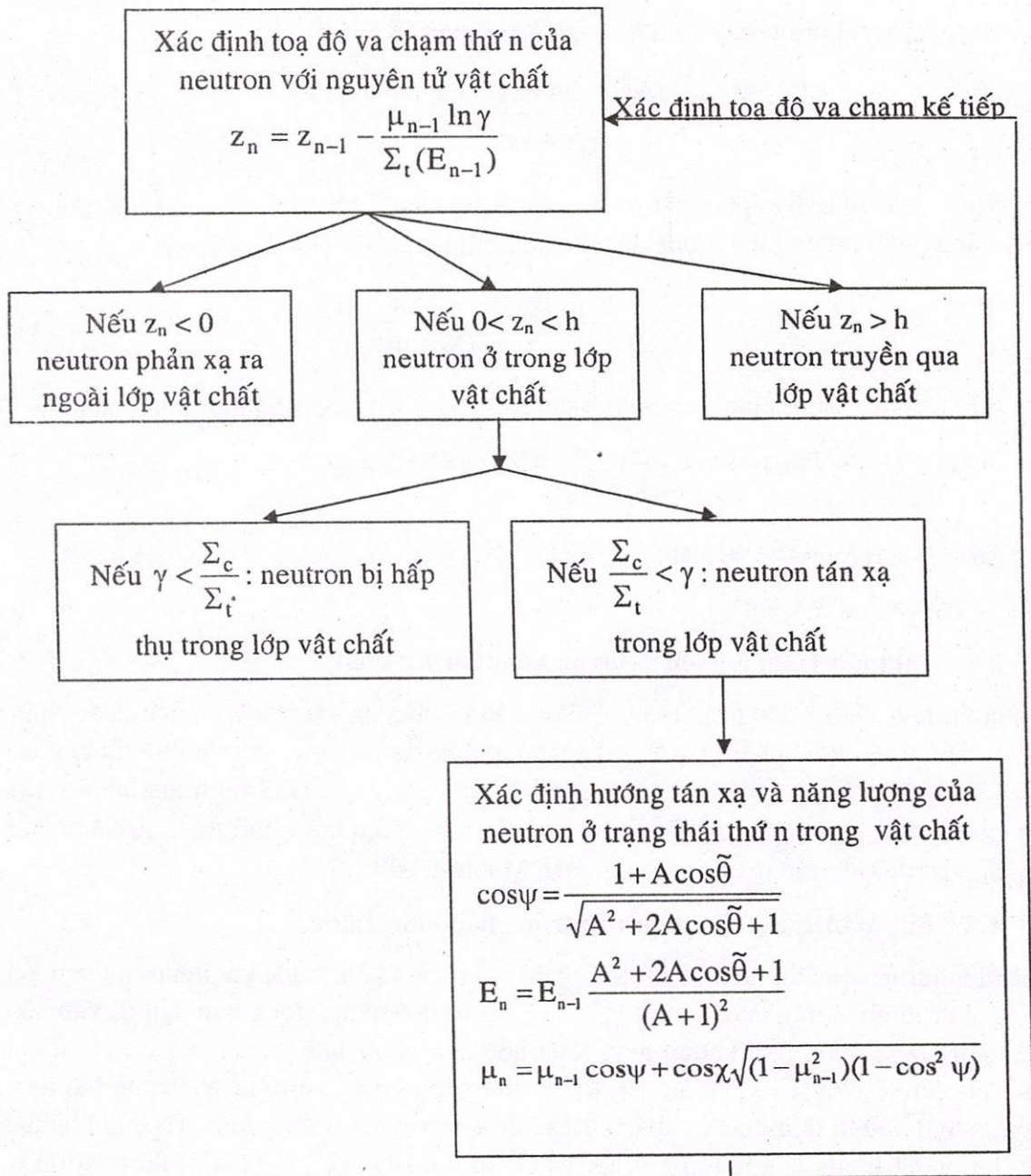
Khi neutron có năng lượng cao (MeV) thì việc làm chậm trước khi neutron tham gia vào các quá trình phản ứng là cần thiết [1]. Xét neutron có năng lượng ban đầu E_0 vào hộp có chiều sâu Oz vô hạn, nên không gian hình học bao gồm hai toạ độ (x,y). Giả sử hạt neutron bắt đầu tán xạ theo phương bất kỳ từ tâm của hộp có bề rộng w. Trong bài toán mô phỏng này ta quan tâm đến số phận của neutron trong hai trường hợp. Trường hợp thứ nhất là khi năng lượng của neutron ở lần va chạm thứ i là $E_i \leq 0,025\text{eV}$ thì neutron bị nhiệt hoá. Trường hợp thứ hai là khi $x_i > w/2$ hoặc $x_i < -w/2$ hoặc $y_i > w/2$ hoặc $y_i < -w/2$ thì neutron thoát ra khỏi hộp. Gọi s là quãng chạy tự do trung bình của neutron trong khối vật chất, thì toạ độ (x,y) của neutron tại lần va chạm thứ i được tính theo công thức:

$$\begin{aligned} x_i &= x_{i-1} + s * \sin \varphi_{i-1} \cos \theta_{i-1} \\ y_i &= y_{i-1} + s * \cos \theta_{i-1} \end{aligned}$$

với θ_{i-1} là góc tán xạ hợp bởi phương tán xạ của neutron lần i-1 với trục y ($0 < \theta_{i-1} < 2\pi$) và φ_{i-1} ($0 < \varphi_{i-1} < \pi$) là góc hợp bởi phương của neutron và hình chiếu của nó sau lần tán xạ i-1 lên mặt phẳng (xOz).

3.2. Sơ đồ khối của chương trình tính sự truyền neutron qua tấm vật chất (Sơ đồ 1)

3.3. Sơ đồ khối của chương trình tính sự hãm neutron trong hộp làm chậm (Sơ đồ 2).



Sơ đồ 1

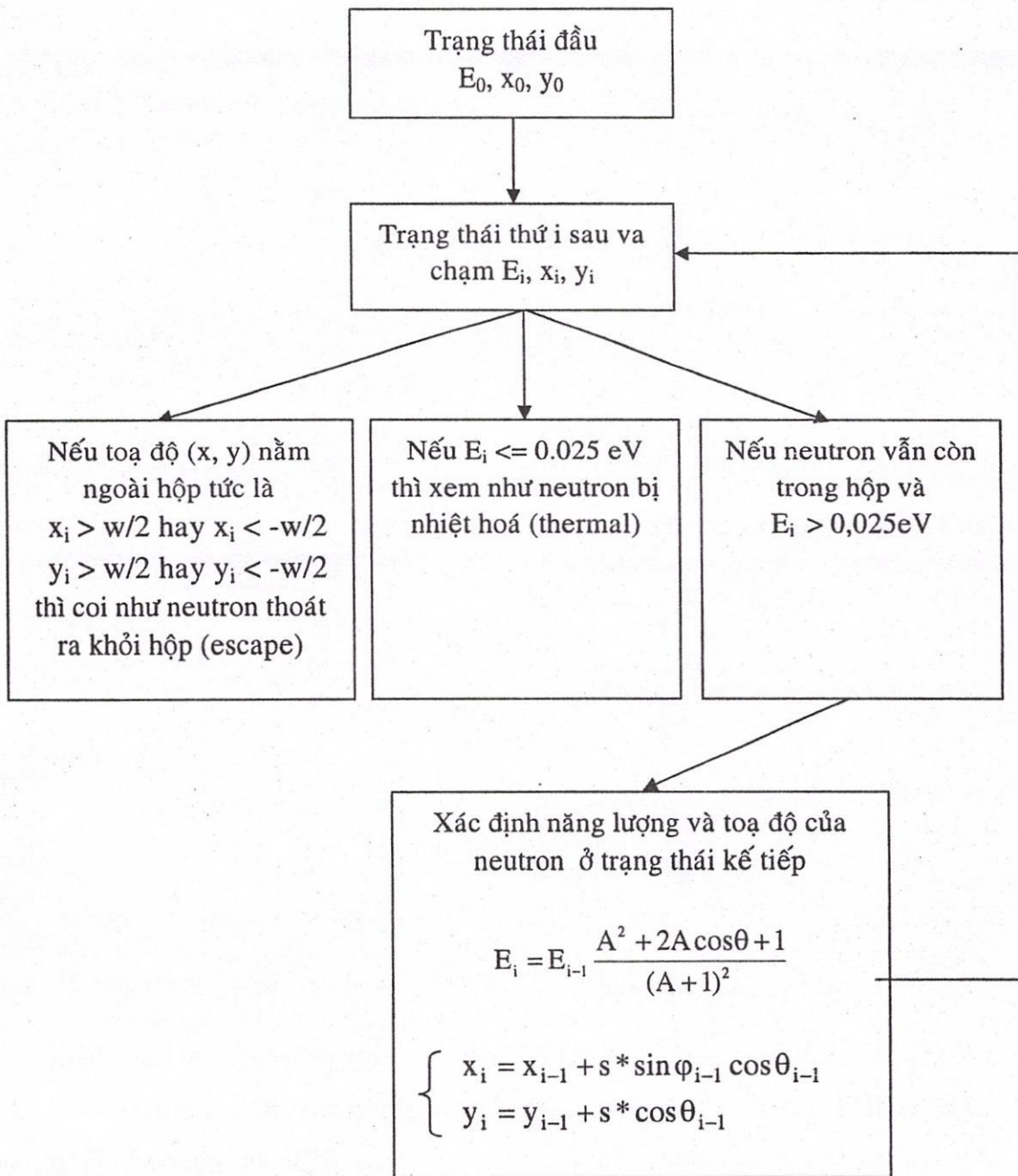
3.4. Các form chính của chương trình tính sự truyền neutron qua tấm vật chất

3.4.1. Form main.

Form chính của chương trình, khi thực thi thì form main xuất hiện đầu tiên để điều hướng người sử dụng đến các form khác như : mô phỏng sự truyền neutron qua tấm vật chất hay mô phỏng neutron trong hộp làm chậm (hình.2).

3.4.2. Form chính của bài toán truyền neutron qua tấm vật chất.

Form này cho phép nhập vào số khối A, năng lượng của neutron. Trong trường hợp năng lượng của neutron thấp (eV) thì tiết diện tương tác của neutron với nhân bia được xem như hằng số. Khi năng lượng của neutron cao (keV-MeV) chương trình sẽ thực hiện việc tính tiết diện tán xạ phụ thuộc vào năng lượng neutron thông qua pha tán xạ Trong hình.3 chúng tôi thực hiện với A=207 bề dày tấm chắn 12cm, neutron vào có năng lượng 10 keV.



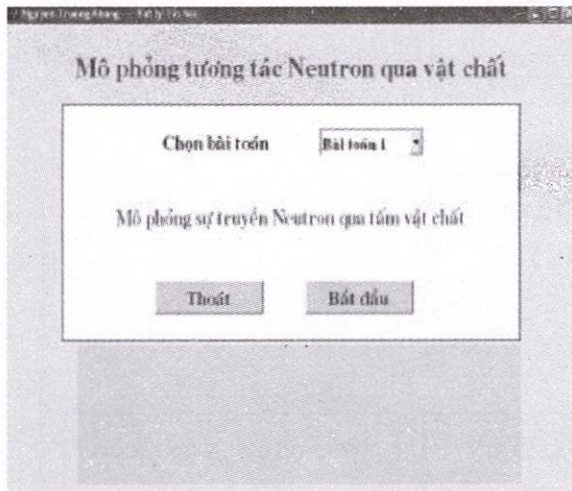
Sơ đồ 2

3.4.3. Form kết quả của bài toán truyền neutron qua tấm vật chất

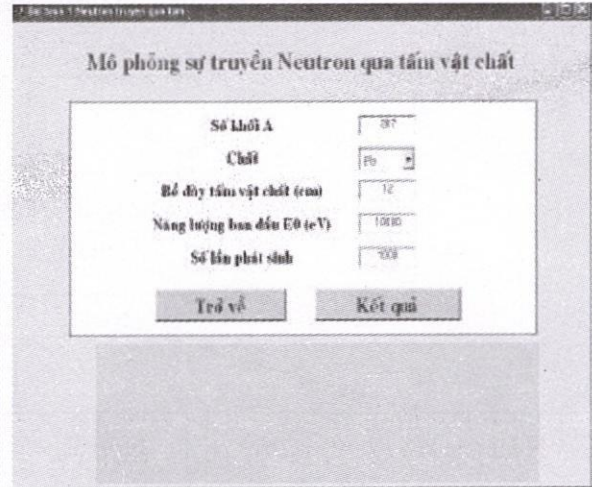
Form kết quả xuất ra số hạt neutron truyền qua tấm vật chất, số hạt nhân bị hấp thụ và bị tán xạ trong tấm vật chất. Năng lượng sau cùng của neutron khi thoát ra khỏi tấm vật chất cũng được tính. Form cũng cho phép ta truy cập đến các vấn đề liên quan đến bài toán trên như: Vẽ phổ năng lượng truyền qua, phân bố neutron theo góc tán xạ, sự phụ thuộc năng lượng của neutron theo góc tán xạ (hình.4)

3.4.4. Phổ năng lượng của neutron truyền qua.

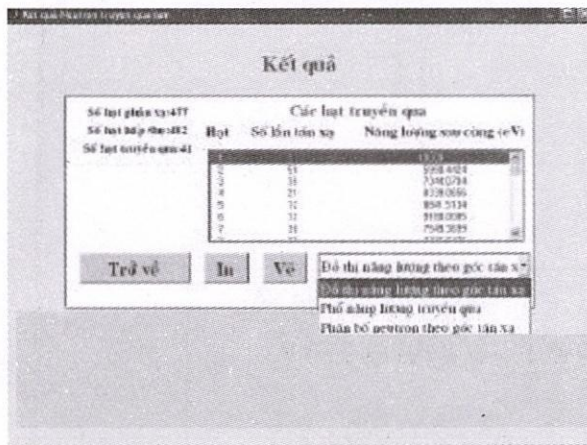
Form này thực hiện việc vẽ lại phổ neutron truyền qua bề dày lớp vật chất che chắn. Trong khi thực hiện mô phỏng với cùng bề dày là 10cm cho các vật liệu khác nhau với 10000 hạt có năng lượng 10 keV. Chương trình mô phỏng cho thấy phổ mở rộng về phía vùng năng lượng thấp với các chất có A bé, điều này phù hợp với [3]. Trong hình.5, mô phỏng với vật liệu Pb^{207} bề dày là 10cm cho 10000 hạt neutron có năng lượng 10 keV.



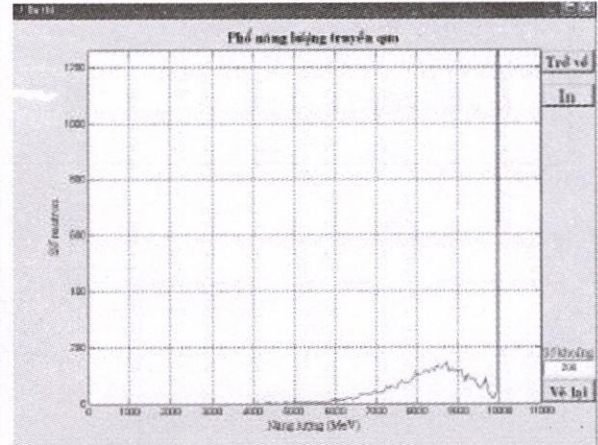
Hình 2: Form chính của chương trình



Hình 3: Form sự truyền neutron qua tấm vật chất.



Hình 4: Form kết quả sau phát sinh



Hình 5: Phổ năng lượng truyền qua tấm vật chất Pb²⁰⁷ có bề dày 10cm

3.5. Các form chính của chương trình tính sự hãm neutron trong hộp làm chậm

3.5.1. Form chính bài toán hãm neutron trong hộp chất làm chậm

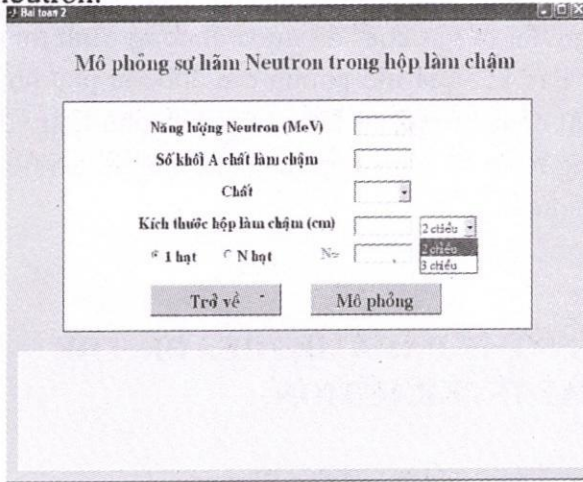
Khi ta đưa vào năng lượng của neutron và số khối chất làm chậm A. Form cho phép ta tùy chọn một hạt hay N hạt để thực hiện mô phỏng (hình.7). Nếu chọn một hạt thì chương trình sẽ tính toán và mô phỏng đường đi của neutron này. Nếu ta cho N hạt thì chương trình sẽ thực thi tính toán và cho kết quả về quá trình tương tác của từng hạt như: năng lượng sau cùng, số lần va chạm, quãng đường đi được....

3.5.2. Form mô phỏng đường đi của neutron trong hộp chất làm chậm

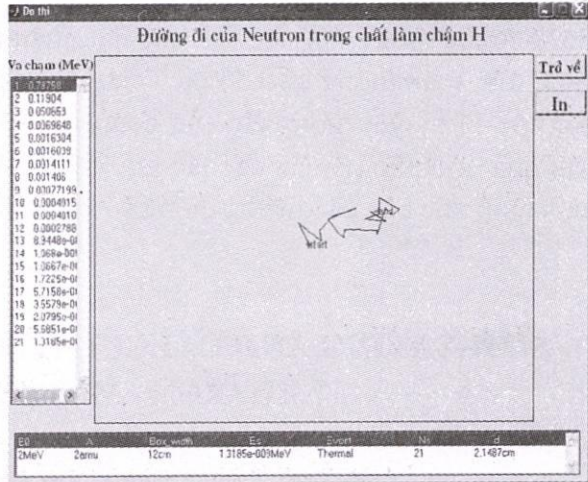
Form này mô tả năng lượng của neutron sau mỗi lần va chạm của neutron. Vẽ lại đường đi của neutron trong hộp làm chậm đồng thời ghi lại các thông số có liên quan như: năng lượng ban đầu và năng lượng sau cùng của neutron, số khối A chất làm chậm, bề rộng hộp làm chậm, số lần tán xạ của neutron, quãng đường đi được d trước khi neutron bị nhiệt hoá hoặc thoát ra khỏi hộp. Chúng tôi đã thực hiện mô phỏng với nhiều vật liệu có bề dày khác nhau và với nhiều năng lượng của neutron tới. Kết quả cho thấy sau mỗi lần va chạm với hạt nhân nhẹ độ mất năng lượng trung bình là lớn hơn nhiều so với các hạt nhân trung bình và nặng. Các kết quả mô phỏng là phù hợp với [6]. Trong Hình 8 chỉ ra việc mô phỏng cho neutron có năng lượng 2MeV qua hộp làm chậm H² bề dày 12cm.

3.5.3. Form xuất kết quả mô phỏng của N hạt neutron trong hộp chất làm chậm

Form này xuất hiện khi trong form main hãm neutron trong hộp chất làm chậm ta chọn mô phỏng N hạt. Form cho phép vẽ phổ năng lượng truyền qua trong hộp làm chậm, tính toán tỷ lệ năng lượng sau tán xạ, hệ số Lethargy và số lần cần thiết để nhiệt hoá neutron có năng lượng ban đầu E_0 trong các chất khác nhau. Trong Hình 9 chỉ ra việc thực hiện việc mô phỏng neutron có năng lượng 2MeV trong khối làm chậm C^{12} với 2000 hạt neutron.



Hình 7: Form chính của sự hãm neutron trong hộp làm chậm



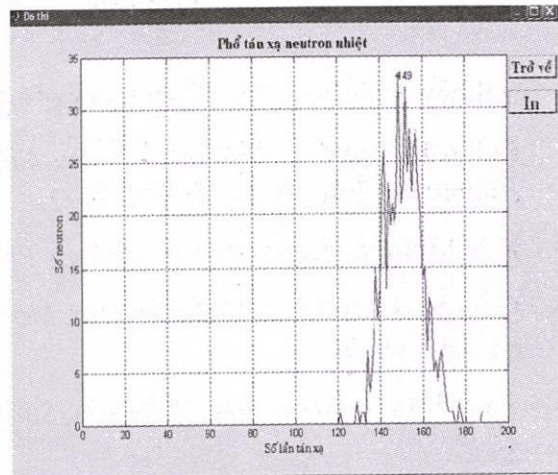
Hình 8: Đường đi của neutron trong hộp chất làm chậm D²

3.5.4. Phổ số lần va chạm để nhiệt hoá neutron.

Form này cho phép xác định số lần va chạm trung bình của neutron có năng lượng xác định với các hạt nhân của vật chất để bị nhiệt hoá. Chương trình đã thực hiện việc mô phỏng cho neutron có năng lượng 2MeV trên các nguyên tử có số khối A khác nhau. Kết quả thu được cho thấy đối với các nguyên tử có số khối càng lớn thì số lần va chạm cần để nhiệt hoá neutron càng lớn. Điều này phù hợp với lý thuyết [3]. Trong hình.10, thực hiện việc mô phỏng neutron có năng lượng 2MeV trong khối làm chậm O^{16} với 2000 hạt neutron.

N	E0	A	Box width	Es	Event	No	d
1	2MeV	12cmu	12cm	3.551e-007MeV	Escape	35	
2	2MeV	12cmu	12cm	2.4829e-008MeV	Thermal	109	5.5380cm
3	2MeV	12cmu	12cm	1.861e-008MeV	Thermal	109	3.3981cm
4	2MeV	12cmu	12cm	3.8523e-005MeV	Escape	63	
5	2MeV	12cmu	12cm	2.997e-008MeV	Thermal	135	4.3117cm
6	2MeV	12cmu	12cm	0.6008532MeV	Escape	47	
7	2MeV	12cmu	12cm	3.1657e-005MeV	Escape	75	
8	2MeV	12cmu	12cm	2.2476e-008MeV	Thermal	123	2.2567cm
9	2MeV	12cmu	12cm	4.6709e-008MeV	Escape	90	
10	2MeV	12cmu	12cm	2.983e-008MeV	Thermal	125	1.2444cm
11	2MeV	12cmu	12cm	5.835e-006MeV	Escape	84	
12	2MeV	12cmu	12cm	2.1516e-008MeV	Thermal	110	2.0549cm
13	2MeV	12cmu	12cm	0.0053025MeV	Escape	43	
14	2MeV	12cmu	12cm	2.4683e-008MeV	Thermal	126	2.7117cm
15	2MeV	12cmu	12cm	0.0017373MeV	Escape	59	
16	2MeV	12cmu	12cm	2.3396e-008MeV	Thermal	135	4.2712cm
17	2MeV	12cmu	12cm	2.4957e-008MeV	Thermal	111	1.7684cm
18	2MeV	12cmu	12cm	4.136e-008MeV	Escape	87	
19	2MeV	12cmu	12cm	1.9263e-008MeV	Thermal	108	3.1920cm
20	2MeV	12cmu	12cm	0.0091477MeV	Escape	31	

Hình 9: Kết quả mô phỏng N hạt neutron trong hộp làm chậm hai chiều C^{12}



Hình 10: Phổ số lần va chạm trung bình để nhiệt hoá neutron trong hộp O^{16}

4. KẾT LUẬN

Quá trình tương tác của neutron với vật chất chủ yếu là quá trình tán xạ đàn tính và hấp thụ đã được mô phỏng thông qua phương pháp Monte-Carlo và được thiết kế dựa trên phần mềm Matlab. Các bài toán liên quan đến các quá trình này như: phổ năng lượng neutron sau khi truyền qua lớp vật chất, số lần va chạm trung bình để nhiệt hóa neutron, đường đi của neutron trong khối vật chất. Chương trình cũng đã thực hiện việc mô phỏng neutron trong các hộp không gian hai, ba chiều. Các tiết diện tương tác của neutron có năng lượng tương đối cao với các hạt nhân nguyên tử vật chất đã được chương trình thực hiện tính toán thông qua độ dịch chuyển pha. Các kết quả mô phỏng thu được là phù hợp tốt với lý thuyết tương tác của neutron với vật chất trong [1], [3] cũng như phù hợp với kết quả mô phỏng của các tác giả [6]. Chương trình sẽ được tiếp tục cải thiện để cải tiến độ chính xác của các giá trị thông số vật lý thu được.

SIMULATING AND CALCULATING SOME PARAMETRES OF THE NEUTRON - MATERIAL INTERACTION

Chau Van Tao, Truong Thi Hong Loan, Huynh Truc Phuong
Faculty of physics – University of Natural Science, VNU – HCM

ABSTRACT: In this paper, the neutron- material interaction was simulated and caculated. The simulation was based on the Monte-Carlo method and Matlab software tool. The processes of moderation and thermalization of neutron in material were estimated. From the simulating results some parameters such as spectrum of neutron after transferring through material, the averaged number of collisions for thermalizing neutron, the path of neutron in material was calculated and showed. The results of the simulation and calculation in this paper match with the simulating results of the research from the School of physics, The University of New South Wales, Sydney, Australia [6].

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. Anthony Foderaro, *The elementary of neutron interaction theory*, MIT press, 1971
- [2] Rubin H. Landau, Manuel J. Páez, *Computational Physics – Problem solving with computers*, John Wiley & Son, 1997.
- [3]. K.N.Mukhin, *Experimental Nuclear Physics*, Vol.1, Mir Publishers Moscow, 1987.
- [4]. George Casella, *Introduction to Monte Carlo Staticcal Methods*, University of Florida, 1999.
- [5] Averill M. Law, W. David Kelton, *Simulation Modeling and Analysis*, McGraw-Hill, 2000.
- [6]. <http://www.phys.unsw.edu.au/3rdyearlab/neutron/neutron.html>.