P1-2005-192

## С. А. Петроченков, А. Поляньски\*, А. Н. Соснин

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫХОДА ИЗОТОПА <sup>126</sup>I, ГЕНЕРИРУЕМОГО НЕЙТРОНАМИ С ЭНЕРГИЕЙ В ДИАПАЗОНЕ 12–50 МэВ В РЕАКЦИЯХ НА <sup>127</sup>I И <sup>129</sup>I

<sup>\*</sup> Институт ядерных проблем им. А. Солтана, Сверк, Польша

Петроченков С. А., Поляньски А., Соснин А. Н. P1-2005-192 Моделирование выхода изотопа <sup>126</sup>I, генерируемого нейтронами с энергией в диапазоне 12–50 МэВ в реакциях на <sup>127</sup>I и <sup>129</sup>I

Определены сечения выхода изотопа <sup>126</sup>I, генерируемого в кратных реакциях (n, xn) на <sup>127</sup>I и <sup>129</sup>I нейтронами с энергией в диапазоне 12–50 МэВ. Расчеты произведены с использованием двух компьютерных программ: DCM (Dubna Cascade Model), разработанной в ЛИТ ОИЯИ [1], и MCNPX-CEM2 [2] (Cascade-Exciton Model [3]), разработанной в LANL. Произведено сравнение расчетных сечений выхода данного изотопа.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2005

Petrochenkov S. A., Polanski A., Sosnin A. N.P1-2005-192Mathematical Modeling of <sup>126</sup>I Production Generated by Neutrons<br/>with Energy in the 12–50 MeV Range in Reactions on <sup>127</sup>I and <sup>129</sup>IP1-2005-192

Cross sections of <sup>126</sup>I production are generated in reactions (n, xn) on <sup>127</sup>I and <sup>129</sup>I nuclei by neutrons with energy in the 12–50 MeV range. Calculations are carried out using two computer codes: DCM (Dubna Cascade Model), developed in LIT, JINR [1], and MCNPX-CEM2 [2] (Cascade-Exciton Model [3]), developed at LANL. Calculated cross sections for the given isotope are compared to the available experimental data.

The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2005

#### введение

Проблема исследования выхода изотопов в кратных реакциях, вызываемых нейтронами с энергией в несколько десятков МэВ, имеет важное значение для исследования трансмутации радиоактивных отходов атомной энергетики. Такие исследования проводятся на экспериментальных установках, созданных с целью изучения особенностей генерации нейтронных полей в протяженных мишенях из тяжелых элементов протонами или ионами с энергией около 1 ГэВ/нуклон [4, 5]. Вследствие этого нейтронный спектр характеризуется высокоэнергетическим хвостом и ядерно-физические характеристики таких установок принципиально отличаются от условий работы обычных ядерных реакторов (включая быстрые). Помимо этого, облучение ядерного топлива интенсивными потоками нейтронов в течение длительного времени может вызывать изменение ядерно-физических характеристик мишени самого реактора (так называемое отравление, или зашлаковывание [6]). Все это обусловливает необходимость исследования каналов неупругих реакций нейтронов с ядрами.

В последние годы в ОИЯИ резко возросла активность экспериментальных исследований электроядерного метода генерации энергии и трансмутации ядерных отходов. В Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ исследовалось образование продуктов протон-ядерных реакций в мишени <sup>129</sup>I при энергии протонов 660 МэВ [7]. В Лаборатории высоких энергий произведено несколько облучений установки «Энергия плюс трансмутация» [8], в которых несколько образцов радиоактивных элементов (127 I и 129 I, 237 Np, 239 Pu и т.д.) экспонировались в поле вторичных нейтронов, генерируемых в свинцовой мишени (Ø 8,4×52 см), окруженной бланкетом из природного урана общей массой 206 кг, облучаемых протонными пучками различной энергии с нуклотрона ЛВЭ ОИЯИ. В дальнейшем планируется создание прототипной электроядерной установки SAD на базе фазотрона ОИЯИ. Тем не менее проведение экспериментов оказывается весьма дорогостоящим, требует длительного времени на подготовку и проведение. Поэтому весьма актуальным остается развитие и тестирование компьютерных программ для моделирования ядерно-физических процессов в таких установках, включая моделирование нейтронных полей и генерацию дочерних изотопов в ядерных реакциях.

В данной работе сравниваются расчетные данные, полученные с использованием двух компьютерных программ: DCM, разработанной в ЛИТ ОИЯИ [1], и MCNPX-CEM2 [2] (включающей Cascade-Exciton Model [3]), разработанной в LANL. Проведено сравнение с имеющимися экспериментальными данными.

#### РАСЧЕТЫ С ПОМОЩЬЮ МСNPX-СЕМ2

Для расчетов использовалась каскадно-экситонная модель, которая включена в программу MCNPX, а также испарительная модель GEM2. В рамках этой модели рассчитываются как полные сечения реакции, так и парциальные сечения образования дочерних изотопов.

Для расчета выхода изотопов в ядерных реакциях применяется только та часть программы MCNPX, которая для моделирования неупругих взаимодействий частиц с ядрами использует каскадно-экситонную модель CEM2. В принципе есть также возможность применяеть для расчетов неупругого канала реакции модель Бертини, Isabel и INCL-4. В этом случае полное неупругое сечение реакции нейтронов определенной энергии с ядром-мишенью было рассчитано с использованием систематики BARPOL [9, 10].

### РАСЧЕТЫ С ПОМОЩЬЮ DCM

В расчетах использована одна из версий программы, разработанной в ЛИТ ОИЯИ, осуществляющая моделирование взаимодействий и переноса адронов в протяженных многокомпонентных средах. Для расчета выхода изотопов в ядерных реакциях используется только та часть программы, которая моделирует неупругие взаимодействия частиц с ядрами. Парциальное сечение каналов реакции с выходом конкретных изотопов определяется пересчетом полного неупругого сечения пропорционально количеству ядер конкретного изотопа, рожденных в определенном числе неупругих взаимодействий. Здесь также полное неупругое сечение реакции нейтронов различной энергии с ядром-мишенью было рассчитано с использованием систематики BARPOL [9, 10]. Расчетная статистика составила от  $1 \cdot 10^6$  до  $2 \cdot 10^6$  неупругих взаимодействий.

#### ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ И ВЫВОДЫ

Парциальные сечения выходов кратных неупругих нейтронных реакций (n, xn) на ядрах носят ярко выраженный пороговый характер. При этом реакция <sup>126</sup>I $(n, 2n)^{127}$ I имеет порог около 12 МэВ, реакция <sup>126</sup>I $(n, 4n)^{129}$ I имеет порог около 25 МэВ.

Полученные сечения образования <sup>126</sup>I в реакциях <sup>127</sup>I с нейтронами с энергией в диапазоне от 12 до 50 МэВ показаны на рис. 1. На этом рисунке приводятся данные, полученные с использованием библиотеки MENDL-2N [11], экспериментальные данные EXFOR [12] программ MCNP-X и DC. В



Рис. 1. Сечения образования  $^{126}$ I в реакциях  $^{127}$ I с нейтронами с энергией в диапазоне от 12 до 50 МэВ

последнем случае для сравнения приводятся данные, в которых нормировка сечений производится с использованием полных сечений, полученных с помощью систематики BARPOL, и сечений, найденных с помощью MCNPX (сечения, полученные с помощью этих двух источников, несколько отличаются, тем не менее, как видно из рисунка, эти отличия мало сказываются на конечных результатах). Из рис. 1 видно качественное согласие результатов: положения максимума распределения во всех случаях совпадают, совпадает и значение порога реакции. Тем не менее оценки, полученные с использованием программы DCM, дают завышенные значения сечения в максимуме (около 100 мб) и заниженные значения при высоких энергиях (около 35–50 МэВ), в то время как библиотечные данные и расчеты хорошо совпадают в максимуме распределения, но расходятся при более высоких энергиях.

Полученные сечения образования <sup>126</sup>I в реакциях <sup>129</sup>I с нейтронами с энергией в диапазоне от 25 до 50 МэВ приводятся на рис. 2, на котором нет сравнения с экспериментальными данными. На рис. 2 приводится сравнение сечений, полученных по программе DCM с различной нормировкой (опять различие конечных результатов оказывается невелико). Сравнение с данными, полученными по программе MCNPX, снова показывает качественное совпа-



Рис. 2. Сечения образования  $^{126}$ I в реакциях  $^{129}$ I с нейтронами с энергией в диапазоне от 25 до 50 МэВ

дение порога реакции и положения максимума распределения, однако абсолютные значения в максимуме значительно расходятся (вплоть до нескольких сотен миллибарн). Данные, взятые из библиотеки, и рассчитанные по программе MCNPX совпадают. Поведение распределений при более высоких энергиях, видимо, повторяет качественно поведение для случая <sup>127</sup>I (DCM даст заниженные, а MCNPX — завышенные результаты по сравнению с библиотечными.

Причины такого расхождения еще не достаточно ясны. Расчеты по программе DCM при энергии нейтронов выше 50 МэВ показывают, что сечения реакции резко (на порядок величины) возрастают. Очевидно, причиной эффекта является резкое обрезание каскадных процессов в ядре именно при этой энергии. Возможно, плавное распределение вероятности каскадных и испарительных процессов при взаимодействии нейтронов в ядрах позволит устранить видимое расхождение.

С другой стороны, в экспериментах на установке «Энергия плюс трансмутация» образцы облучались на поверхности уранового бланкета. По сути, в эксперименте получены интегральные данные, которые зависят от режима облучения (распределения пучка с ускорителя по времени) и от конкретных условий в точке облучения (для вычисления сечения реакции исходя из данных гамма-спектрометрических измерений необходимо точное знание нейтронного спектра в месте расположения образца во время облучения). Определение нейтронного спектра в эксперименте представляет собой весьма непростую задачу. Что касается расчетных данных, они также отличаются для случаев использования различных вычислительных программ (типичные спектры нейтронов см. на рис. 3).



Рис. 3. Расчетные спектры, полученные с помощью программы MCNPX (для поверхности четырех секций бланкета установки) и по программе DCM (средний на поверхности бланкета)

На сегодняшний день трудно сделать вывод о том, какой набор данных (особенно для случая <sup>129</sup>I) является более точным, данный вопрос требует дальнейшего исследования.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке в рамках проекта МНТЦ-1372.

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. Polanski A., Sosnin A. N., Toneev V.D. JINR Preprint E2-91-562. Dubna, 1991.
- 2. Hughes H. G., Prael R. E., Little R. C. // MCNPX. The LAHET/MCNP Code Merger, LA-UR-97-4891, LANL (April 1997).

- 3. Mashnik S. G., Smolyansky S. A. JINR Preprint E2-94-353, Dubna, 1994.
- 4. Кривопустов М. И. и др. О первом эксперименте по калориметрии уранового бланкета на модели U/Pb-сборки электроядерной установки «Энергия плюс трасмутация» на пучке синхрофазотрона при энергии протонов 1,5 ГэВ. Препринт ОИЯИ P1-2000-168, Дубна, 2000 (направлено в Kerntechnik).
- Krivopustov M. I. et al. First Experiments on Transmutation Studies of I-129 and Np-237 Using Relativistic Protons of 3.7 GeV // Radioanalytical and Nuclear Chemistry. 1997. V. 222. P. 267.
- 6. Brandt R. et al. Transmutation of Radioactive Waste with the Help of Relativistic Heavy Ions. JINR Report E1-97-349, Dubna, 1997; Kerntechnik. 1998. V. 63. P. 167.
- 7. Адам И. и др. Исследование образования продуктов протон-ядерных реакций в мишени <sup>129</sup>I при энергии протонов 660 МэВ. // Письма в ЭЧАЯ, 2004. Т. 1, № 4(121), С. 53–64.
- Chultem D. et al. Measurement of Neutron Component in a Shower Generated in a Lead Target by Relativistic Nuclear Beam // Nucl. Instr. Meth. A. 1996. V. 381. P. 488.
- Prael R. E. et al. Comparison of Nucleon Cross-Sections Parameterization Methods for Medium and High Energies // Rep. Los Alamos National Laboratory LA-UR-98-58-13, 1998; Plots Supplement to Comparison of Nucleon Cross Sections Parameterization Methods for Medium and High Energies // Rep. Los Alamos National Laboratory LA-UR-98-58-43, 1998.
- 10. Барашенков В. С. Сечения взаимодействия частиц и ядер с ядрами. Дубна: ОИЯИ, 1993. С. 346.
- Shubin Yu. N. Cross section data library MENDL-2 to study activation as transmutation of materials irradiated by nucleons of intermediate energies // Report INDC(CCP)-385 (IAEA, May 1995).
- 12. EXFOR http://www-nds.iaea.org/exfor/exfor00.htm

Получено 2 декабря 2005 г.

Редактор М. И. Зарубина

Подписано в печать 30.01.2006. Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная. Усл. печ. л. 0,37. Уч.-изд. л. 0,45. Тираж 365 экз. Заказ № 55202.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований 141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6. E-mail: publish@pds.jinr.ru www.jinr.ru/publish/