

文章编号: 1007-4627(2003)03-0226-05

ENDF-VI 库次级中子数据的能量守恒问题

伊炜伟¹, 田东风², 孙伟力²

(1 中国工程物理研究院北京研究生部, 北京 100088;

2 北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

摘 要: 在评价核数据库 ENDF-VI 版的出射粒子能量分布数据(即文档 5)中, 一些核素在阈能附近的次级中子能量分布大多采用简单的近似方法描述, 例如三角形分布或矩形分布. 这些简单的近似描述, 将导致产生散射矩阵的“双峰”现象, 或使平均次级中子能量过大而产生负 KERMA(kinetic energy release in materials)因子. 针对这两个现象, 通过细致的分析, 讨论了这些现象的产生原因, 并试对相关数据做一定的修正, 以改善次级中子分布的能量守恒问题.

关键词: 阈能; 次级中子能量分布; 能量守恒

中图分类号: O571.54 **文献标识码:** A

1 引言

在评价核数据库 ENDF-VI 版的出射粒子能量分布数据(即文档 5)中, 某些核素在阈能附近的次级中子能量分布大多采用一种简单的近似方法描述, 例如描述为三角形分布(即用 3 个出射能点且线-线插值($INT=2$)描述)或矩形分布(即用两个出射能点且矩形插值($INT=1$)描述). 基于阈能附近的截面非常小, 对整体贡献不大, 在精度许可的范围内是可接受的. 但是我们发现, 这两种近似描述所带来的影响有时也是不容忽视的. 由于入射中子的第一、二入射能点的次级中子能谱形状明显不同, 而且峰值所在位置相差较大, 三角形分布将导致中间线性插值所得的能量分布函数有“双峰”现象, 给群常数的制作带来严重的影响. Tian 等^[1]曾针对日本评价核数据库第 3 版(即 JENDL-3)中类似的近似分布提出了一种修正方法, 即用第二入射能点的能谱来直接模拟阈能处能量分布, 消除了“双峰”分布, 使群散射矩阵的形状更趋合理. 但在某些情况下, 该修正方法将导致相应次级中子平均能量 \bar{E}' 偏高, 因而可能导致产生负 KERMA 因子. 过大的能谱范围和矩形分布虽未使散射矩阵形状产生明显不合理, 但却使次级中子平均能量 \bar{E}' 明显偏高, 这是产生负 KERMA 因子的主要原因之一. 而且由 \bar{E}' 计算得到的几乎所有积分量都受到了不

同程度的影响.

本文通过一系列的分析, 讨论了“双峰”现象与负 KERMA 因子的产生原因, 对 ENDF-VI 库的相关数据做了一定的修正, 改善了能谱数据的能量守恒性, 并消除了上述两种非物理现象.

2 ENDF-VI 库中次级粒子能量分布的表述

在 ENDF-VI 库中, 文档 5 包括了除弹性散射和离散非弹性散射以外的所有产生次级中子反应的次级中子能谱分布数据, 但只适用于入射中子反应和自发裂变反应^[2]. 次级粒子能量 E' 总是表达为实验室坐标系. 能量分布 $P(E \rightarrow E')$ 可由各分能量分布函数 $f_K(E \rightarrow E')$ 描述, 即

$$P(E \rightarrow E') = \sum_{K=1}^{NK} P_K(E) f_K(E \rightarrow E'), \quad (1)$$

其中 $P_K(E)$ 是 $f_K(E \rightarrow E')$ 在入射中子能量为 E 处的几率. 分能量分布函数 $f_K(E \rightarrow E')$ 由不同的表达方式来描述, 分别为任意列表函数、一般蒸发谱、简单裂变谱、蒸发谱、与能量有关的 Watt 谱和与能量有关的裂变中子谱等. 任意列表函数(即 $LF=1$)一般用来描述复杂的能量分布.

收稿日期: 2003-01-23; 修改日期: 2003-05-27

作者简介: 伊炜伟(1977-), 女(汉族), 浙江平湖人, 硕士研究生, 从事粒子输运方法和应用核物理研究.

3 三角形分布与矩形分布所产生的能量守恒问题

ENDF-VI 库中评价数据比以前有了很大改进,但是在核数据评价过程中严格保证能量守恒是极其困难的^[3],仍有一些核素存在问题.评价时通常尽可能用最少的入射能点和出射能点来近似描述数据.基于阈能附近的截面非常小,对整体贡献不大,所以在许多评价核数据库中,阈能附近的 $f_K(E \rightarrow E')$ 均采用简单近似的描述方式,这在精度许可的范围内是可接受的.例如,一些核素,在阈能附近的中子能量分布描述为三角形分布(如取底为 2 keV,高为 10^{-3} eV),如表 1 所列.而另一些核素,在阈能附近的 $f_K(E \rightarrow E')$ 近似地描述成矩形,即用两个出射能点且插值方式为矩形插值(即 $INT=1$)来描述,如表 2 所列.但是通过研究发现,目前所采用的三角形分布与矩形分布描述方式所带来的影响有时也是不可忽视的.

表 1 阈能处中子能谱为三角形的核素与反应类型

核素	反应类型
³¹ P	(n, 2n), (n, n'α), (n, n')
Ti	(n, 2n)
Ga	(n, 2n), (n, n')
⁸⁹ Y	(n, 2n), (n, n'α), (n, n'p)
Mo	(n, 2n), (n, 3n), (n, n')
⁹³ Nb	(n, 2n), (n, 3n)
¹³⁸ Ba	(n, 2n), (n, 3n), (n, n')
¹⁸¹ Ta	(n, 2n), (n, 3n), (n, n')
¹⁹¹ Ir	(n, 2n), (n, 3n), (n, n')
¹⁹³ Ir	(n, 2n), (n, 3n), (n, n')
²³⁷ U	(n, 2n), (n, 3n), (n, n')
²⁴¹ Pu	(n, 2n), (n, 3n)
²⁴³ Pu	(n, 2n), (n, 3n), (n, 4n), (n, n')
²⁴⁵ Cm	(n, 2n), (n, 3n), (n, 4n), (n, n')
²⁴⁶ Cm	(n, 3n), (n, 4n)
²⁴⁷ Cm	(n, 2n), (n, 3n), (n, 4n), (n, n')
²⁵⁰ Cf	(n, 2n), (n, 3n), (n, 4n), (n, n')
²⁵¹ Cf	(n, 2n), (n, 3n), (n, 4n), (n, n')
²⁵² Cf	(n, 2n), (n, 3n), (n, 4n), (n, n')

表 2 阈能处中子能谱为矩形的核素与反应类型

核素	反应类型
¹⁵ N	(n, 2n), (n, n'α), (n, np), (n, n')
Si	(n, n'α), (n, np), (n, n')
¹⁵¹ Eu	(n, 2n), (n, 3n), (n, n')
¹⁵³ Eu	(n, 2n), (n, 3n), (n, n')
¹⁶⁵ Ho	(n, 2n), (n, 3n), (n, 4n), (n, n')
W	(n, 2n), (n, 3n), (n, n')
¹⁸² W	(n, 2n), (n, 3n), (n, n')
¹⁸³ W	(n, 2n), (n, 3n), (n, n')
¹⁸⁴ W	(n, 2n), (n, 3n), (n, n')
¹⁸⁶ W	(n, 2n), (n, 3n), (n, n')
¹⁹⁷ Au	(n, 2n), (n, 3n), (n, 4n), (n, n')

图 1 所示为核素⁹³Nb 的(n, 3n)反应在入射能 18.0 MeV(第二个人射能点)处及阈能 16.7 MeV 处(插框图中)的次级中子能量分布.两点之间任意入射能点上的能量分布 $f_K(E \rightarrow E')$ 由线性插值得到,因此插值谱完全依赖于两个相邻能点的能谱.由插值得到的 17.35 MeV 处能谱分布如图 2 所示,很明显阈能处的次级中子三角形分布大大影响了此点的 $f_K(E \rightarrow E')$,导致了非物理的“双峰”分布,由此得到的次级中子能量分布会对群常数的制作带来严重影响.如图 3 点划线所示,第 174 群散射至其它各群(第 117—34 群)的群散射矩阵,在第 37 群(2.034 0—2.248 7 keV)处有一异常高峰.正像文献[1]中所证明的那样,此峰的出现是由图 1 所示的三角形分布所致,从而导致了群散射矩阵的形状严重不合理.

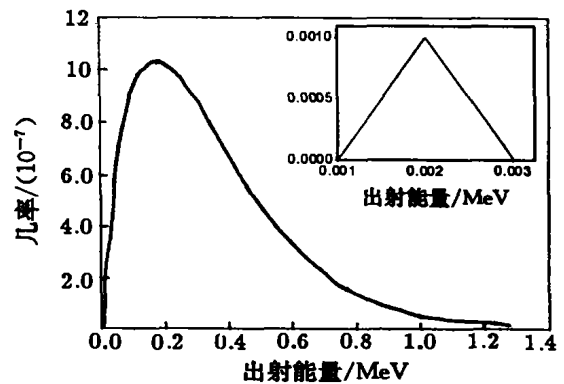


图 1 入射能为 18.0 MeV(第二个人射能点)及 16.7 MeV 阈能处的次级中子能量分布

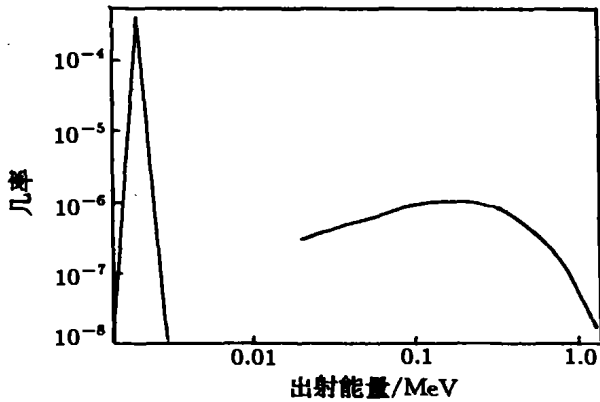


图 2 由图 1 插值所得到的 17.35 MeV 处的能谱分布

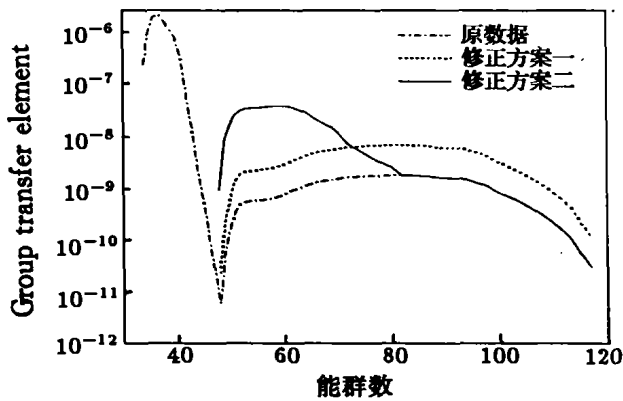


图 3 ⁹³Nb (n, 3n) 反应的第 174 群散射至其它各群 (117—48) 的群散射矩阵 (群常数由 NJOY 程序计算, 中子群结构选为 Vitamin-j 175 群结构^[4])

前面提到, 能谱范围过大和矩形分布可能直接导致 KERMA 因子为负. KERMA 因子可由能量平衡方法计算得到, 即从可提供能量中减去分配给中子和光子的能量就得到由带电粒子带走的能量:

$$k(E) = (E + Q - \bar{E}_n - \bar{E}_\gamma)\sigma(E), \quad (2)$$

其中, Q 是反应 Q 值, \bar{E}_n 是反应中次级中子的平均总能量, \bar{E}_γ 是反应中次级光子的平均总能量. 能量平衡方法的缺点是, 有时 KERMA 因子依赖于两个大数之差. 为了得到准确的结果, 需确保中子、光子产额与平均能量是稳定、可靠的. 但有时由于误差、近似或是格式的限制, 评价者高估了次级中子、光子的能量分布, 就有可能会出现负 KERMA 因子. 中子 KERMA 因子的计算为

$$k(E) = (E + Q - \bar{E}_n)\sigma(E), \quad (3)$$

即从可提供能量中只减去分配给中子的能量, 而光子能量沉积在当地. 从公式(3)来看, E 为入射中子能量, Q 为反应 Q 值, 这两者对于确定的反应道都是非常精确的. 若 $k(E)$ 为负, 通常是由于 \bar{E}_n 估计过大. \bar{E}_n 是由 ENDF-VI 库文档 5 中相关反应道的数据计算得到的, 这反映的正是次级中子能谱数据不能确保能量守恒而带来的问题.

以 ¹⁸⁴W 的 (n, 3n) 反应为例, 如图 4 点线所示, 修改前入射中子能量为 13.676 MeV 处采用了矩形分布. 矩形分布导致了能谱分布高能段权重过大, 从而使次级中子平均能量 \bar{E}_n 明显偏高.

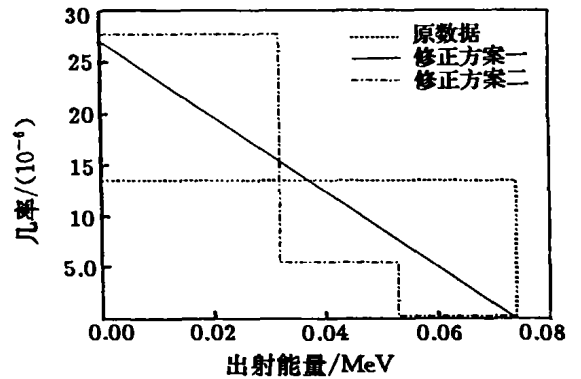


图 4 ¹⁸⁴W (n, 3n) 反应修正后阈能处次级中子分布

4 阈能处次级中子能谱数据的修正

为了避免“双峰”和负 KERMA 因子的问题, 本文试图通过对 ENDF-VI 库中相关数据做一定的修正来改善能谱数据的能量守恒性, 以消除上述两种非物理现象.

针对三角形分布如采用文献[1]所建议的修正方法, 即用第二入射能点的能谱来直接模拟阈能处的分布, 如图 3 点线所示, 第 48 能群以下的跃迁矩阵元为 0, 消除了双峰分布, 可以使散射矩阵的形状更趋合理. 但这样修正将导致中间各入射能点上的次级中子能谱范围偏大, 使相应次级中子平均能量 \bar{E}_n 偏高, 从而将可能产生负 KERMA 因子. 例如, ⁹³Nb (n, 3n) 反应, 在 17.0 MeV 处的中子 KERMA 因子为 -439.84 eV · barns.

为了避免这一问题, 在用第二入射能点的能谱形状来模拟阈能处能谱之前, 先要确定阈能处能谱范围. 次级中子能量为入射中子能量与反应 Q 值之和减去激发态能量, 即

$$E' = E + Q - U. \quad (4)$$

要确定能谱范围只须确定次级中子能量的最大值 E'_{\max} , E'_{\max} 可取剩余核激发至第一激发态时的 E' , 对 $^{93}\text{Nb}(n, 3n)$ 反应, 按公式(4)得 E'_{\max} 大约为 0.18 MeV. 而原库第二入射能点的 E'_{\max} 为 1.285 MeV, 显然过大. 以 0.18 MeV 为能谱最大值, 保持第二入射能点能谱的形状并重新归一化, 用修正后的第二入射能点能谱来模拟阈能处的次级中子能谱. 由此所得到的群散射矩阵如图 3 实线所示, 很明显已无双峰现象, 形状基本合理.

ENDF-VI 库中子数据所产生的负 KERMA 因子主要是由于次级中子平均能量 \bar{E}' 偏高, 这有两个主要原因: 能谱范围过大或矩形分布导致的能谱分布高能段权重过大. 如核素 ^{151}Eu 的 $(n, 3n)$ 反应, $Q=14.354$ MeV, 当入射能 $E=14.45$ MeV 时, 库中给出 $E'_{\max}=0.3$ MeV, 按式(4)得到 E'_{\max} 大约为 0.1 MeV. 原库中所给能谱范围明显过大, 按本文定义的方法进行修正, 即将能谱范围缩小并重新归一化, 则阈能附近的能量守恒性能得以大大改善.

而 ^{184}W 的 $(n, 3n)$ 反应, 其能谱范围大致适当, 产生负 KERMA 因子主要是由于能谱分布高能段权重过大而引起. 针对此情况, 可有两种修正方案.

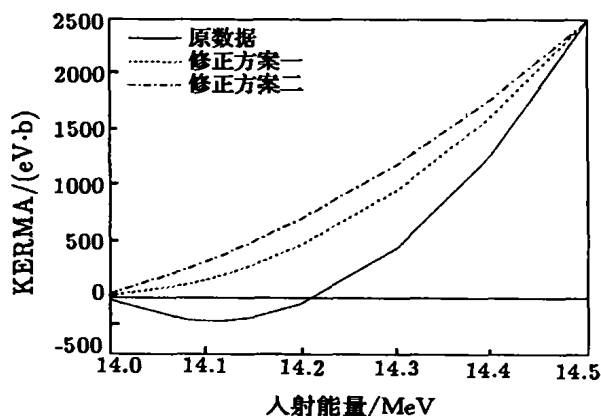


图 5 $^{184}\text{W}(n, 3n)$ 反应, 中子 KERMA 因子(由 NJOY 程序计算, 光子沉积在当地)

方案一, 把次级粒子出射能谱的插值方式由矩形插值改为线-线插值, 即 $\text{INT}=2$, 并重新归一化, 如图 4 所示. 做如此修正基于两点. 第一, 次级粒子能谱为准高斯分布, 如图 4 中不论修正方案一或方案二的形状, 都基本上满足. 一般低能处的贡献很小, 可忽略准高斯分布的前半段. 第二,

ENDF-VI 库中某些核素在入射能为阈能附近时的次级中子能谱, 其形状从整体上看近似为直角三角形, 且入射能越大, 能谱峰越往高能方向移动.

方案二, 用修正后的能谱来模拟阈能处的次级中子能谱. 以 ^{184}W 的 $(n, 3n)$ 反应为例, 分别以原库阈能处能谱最大值为能谱最大值, 保持 14.5 MeV 处能谱的形状并重新归一化, 来模拟入射能为 13.676 MeV 处的分布, 如图 4 所示.

这样修正不仅消除了负 KERMA 因子, 而且它所产生的散射矩阵形状也更为合理. 分别由修正前、后的数据计算中子 KERMA 因子, 结果如图 5 所示. 可以看出修正后数据所得的中子 KERMA 因子均为正, 比原库结果更为合理.

5 结论

在评价核数据库中, 阈能附近的次级中子能量分布的能谱范围和能谱形状的近似描述, 难以严格地保证能量守恒, 这将可能导致产生一些非物理现象. 阈能处的三角形分布产生了阈能附近次级中子能谱的“双峰”现象, 致使散射矩阵形状严重不合理, 对于这种情况我们提出了用能谱范围缩小的下一入射能点的能谱来模拟阈能处次级中子能谱的修正方法. 阈能处能谱范围过大和矩形分布都会导致次级中子平均能量偏高, 从而产生负 KERMA 因子. 适当减小能谱范围, 改矩形插值为线-线插值. 或用范围缩小的下一入射能点能谱模拟阈能处次级中子能谱, 都能改善阈能附近的能量守恒, 减小或消除负 KERMA 因子. 虽然阈能附近的次级中子平均能量分布对大多数积分量的整体影响很小, 但有时也是不能忽略的. 从修正前后结果的比较可以看出, 修正后的数据消除了这两种不合理现象, 对能谱数据的能量守恒有了大大的改善.

本文解决了由阈能处能谱近似和阈能与第二入射能点之间插值所导致的两种非物理现象. 在我们的研究工作中还发现了某些核素在远离阈能的入射能点上也出现了负 KERMA 因子, 据分析, 亦是评价数据的能量不守恒所致, 使次级中子平均能量 \bar{E}' 偏高. 这类现象的改善需依赖于更合理的核反应模型修正或更精确的实验测量来改善评价数据的能量守恒性, 还有待继续研究.

参 考 文 献:

- [1] Tian Dongfeng, Hasegawa Akira, Nakagawa Tsuneo, *et al.* Benchmark Tests of Principal Fissile Nuclide Data in JENDL-3 with Simple Fast Critical Assemblies[J]. *Journal of Nuclear Science and Technology*. 1993, 30(11): 1 087.
- [2] Rose P F, Dunford C L. ENDF-102, Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File ENDF-6 [R]. Brookhaven National Laboratory Report, BNL-NCS-44945, 1990.
- [3] MacFarlane R E. Energy Balance of ENDF-VI[Z]. <http://t2.lanl.gov/publications/gheat/paper.ps>.
- [4] MacFarlane R E, Muir D W. The NJOY Nuclear Data Processing System, Version 91[R]. Los Alamos National Laboratory Report, LA-12740-M, 1994.

Energy-balance Problem of Secondary Neutrons of ENDF-VI Data

YI Wei-wei¹, TIAN Dong-feng², SUN Wei-li²

(1 *Beijing Department of Graduate School, China Academy of Engineering Physics, Beijing 100088, China;*
2 *Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China*)

Abstract: In file 5 of ENDF-VI, the arbitrary tabulated function ($LF=1$) was applied to some threshold reactions of some nuclides. The energy distribution of secondary spectrum was given approximately as a triangular shape or rectangular shape at the threshold energy for some nuclides. The triangular shape distributions would cause two-peaked energy distribution near the threshold energy, which must affect the group transfer matrix. The rectangular shape make the \bar{E}_n too large, that may lead to a negative neutron KERMA(kinetic energy release in materials) factor. This will affect almost all of the integral quantities of the neutronics calculation. In this paper, we will discuss the reason of these abnormal behaviors, and how to improve the energy balance to eliminate the problem.

Key words: threshold energy; energy distributions of secondary neutron; energy balance