

## МОДЕЛЮВАННЯ ЕВОЛЮЦІЇ НЕЙТРОННИХ СПЕКТРІВ ЗА ДОПОМОГОЮ МОНТЕ-КАРЛО КОДУ GEANT4

В. П. Смоляр<sup>ORCID</sup>, А. О. Мілева<sup>ORCID</sup>, В. О. Тарасов<sup>ORCID</sup>, Г. Г. Небога<sup>ORCID</sup>, В. Д. Русов<sup>ORCID</sup>  
*Одеський національний політехнічний університет,  
просп. Шевченка 1, Одеса, 65044, Україна,  
e-mail: svp@onu.ua*

(Отримано 18 січня 2021 р.; в остаточному вигляді — 10 лютого 2021 р.; прийнято до друку — 11 березня 2021 р.;  
опубліковано онлайн — 20 травня 2021 р.)

За допомогою бібліотеки Монте-Карло кодів GEANT4 створено програму, що дозволяє моделювати вповільнення нейтронів у різноманітних речовинах та відстежувати еволюцію нейтронного спектра з часом. Для прикладу наведено результати розрахунків для чотирьох різних речовин: водню, вуглецю, алюмінію та заліза — і для двох типів джерел нейтронів: моноенергетичного та зі спектром поділу. Аналіз поведінки статистичних параметрів спектра, зокрема ентропії, дозволяє виділити кілька етапів становлення спектра нейтронів, які проявляються в усіх розглянутих випадках. Зроблено оцінки характерного часу настання кожного етапу в різних речовинах.

**Ключові слова:** спектр нейтронів, Монте-Карло, GEANT4, ентропія.

DOI: <https://doi.org/10.30970/jps.25.2201>

### 1. ВСТУП

Є безліч фізичних задач, для яких знання спектра нейтронів ключове. Наприклад, у фізиці ядерних реакторів — для вдосконалення та розробки нових моделей реакторів, вивчення різноманітних аварійних режимів роботи реакторів [1–7].

Особливо цікавою, на нашу думку, є розробка так званих хвильових ядерних реакторів [8–11]. У них реакції поділу відбуваються не в усьому об'ємі одночасно, як у традиційному реакторі, а лише в деякому тонкому шарі, який повільно просувається вздовж активної зони. Найголовнішою його перевагою є те, що він не вимагає активних дій оператора, адже швидкість поширення реакції залежить тільки від складу та характеристик речовини реактора. Очікується також, що такі реактори зможуть працювати на суттєво іншому складі палива, зокрема на незбагаченому (природному) урані.

Окрім того, густина виділення енергії, потоки нейтронів та глибина вигорання в таких реакторах прогноуються також істотно відмінними [12].

Для вивчення таких режимів ядерного горіння і навіть для визначення самої можливості їх існування необхідно знати форму нейтронного спектра.

Зазвичай у фізиці ядерних реакторів використовують спектр нейтронів, складений зі спектра Максвелла в тепловій ділянці, спектра поділу в ділянці швидких нейтронів та спектра Фермі-Вігнера в проміжній ділянці. Для зшивання цих спектрів використовують деякі емпіричні коефіцієнти [1–7]. При цьому для розподілу Максвелла в ділянці малих енергій у ролі параметра використовують так звану “температуру нейтронного газу”, яка не збігається з температурою середовища, але пов'язана з нею певною емпіричною формулою.

А саму цю формулу перерахунку, згідно з [1], отриману чисельною апроксимацією експериментальних спектрів декількох теплових ядерних реакторів різного типу, наявних на той момент, і досі широко використовують у фізиці ядерних реакторів [6, 7].

Відсутність повноцінної аналітичної теорії вповільнення нейтронів передусім створює проблеми під час дослідження аварійних режимів на ядерних реакторах та під час розробки фізики реакторів нового покоління, наприклад, хвильових ядерних реакторів [12, 13], імпульсних реакторів, реакторів-розмножувачів нейтронів (бустерів), підкритичних збірок [14–16], а також природних ядерних реакторів, зокрема геореактора [17].

Трохи відмінний підхід обрано в статтях [18, 19], де розглядається теорія вповільнення нейтронів з урахуванням температури середовища-вповільнювача.

Очевидно, що реакторне (паливне) середовище під час роботи реактора перебуває в нерівноважному термодинамічному стані, оскільки процеси поділу супроводжуються виділенням великої кількості енергії, нейтронів та інших частинок, змінами в нуклідному складі, теплоперенесенні, динаміці радіаційних дефектів, які призводять до зміни геометричних параметрів середовища та навіть до його руйнування.

Такі системи потрібно описувати в межах нелінійної нерівноважної термодинаміки відкритих фізичних систем, і в них можуть бути нерівноважні стаціонарні стани, які задовольняють критерій Пригожина: мінімум виробництва ентропії [20–22].

Тому в роботах [18, 19] виокремлюють дві термодинамічні підсистеми: підсистему вповільнюваних нейтронів та підсистему ядер вповільнювача. Обидві вони є відкритими фізичними системами, які взаємодіють, однак приймаємо спрощувальне припущення про те, що підсистема ядер уповільнювача через свою

інерційність до збурень перебуває в стані, близькому до свого рівноважного. Тому, нехтуючи впливом на неї підсистеми нейтронів, вважають, що вона в термодинамічній рівновазі. Це припущення дозволяє ввести в теоретичну модель температуру вповільнювального середовища й описувати розподіл енергій кінетичного руху ядер розподілом Максвелла. Підсистемі ж уповільнюваних нейтронів розглядають як нерівноважну і температуру для неї не вводять. Проте вважають, що вона за короткий час переходить у нерівноважно-стаціонарний стан, для якого можна написати стаціонарне балансове рівняння для вповільнюваних нейтронів (аналогічне до балансового рівняння для нейтронів у теорії Фермі-Вігнера), аналітичний розв'язок якого й буде спектром уповільнюваних нейтронів.

Але цікаво зробити оцінку часу, за який підсистема нейтронів переходить до стаціонарного стану за різних умов. Особливо у задачах, які передбачають, наприклад, значну зміну параметрів реакторного палива з часом (температури, хімічного та ізотопного складу і т.ін.). Як показано в [23, 24], рівняння теплопровідності в уран-плутонієвому подільному середовищі допускає виникнення так званих “режимів із загостренням”, якщо вони містять джерело енергії зі степеневою залежністю від температури. Розрахунок показника такої залежності спирається на перерізи ядерних реакцій, усереднені за спектром нейтронів. Тому, очевидно, цілком залежатиме від нього.

Форма нейтронного спектра також набуває великого значення в медичних застосуваннях, особливо враховуючи дедалі більше зацікавлення такими методами, як борна нейтрон-захоплювальна терапія (boron neutron capture therapy, BNCT) [25–27].

У нашій роботі за допомогою моделювання методом Монте-Карло з використанням бібліотеки GEANT4 досліджено процес кінетики вповільнюваних нейтронів і часову еволюцію нейтронних спектрів та їхніх статистичних параметрів.

## II. РОЗРАХУНОК ЕВОЛЮЦІЇ СПЕКТРА

Для моделювання спектрів уповільнюваних нейтронів ми скористалися методом, описаним у [28]. Він полягає в тому, що якщо змодельовати випущення з джерела первинних частинок із наперед заданим початковим спектром, а потім методом Монте-Карло розіграти їхню подальшу долю, то можна отримати “знімки” спектра через певні проміжки часу (рис. 1). Аналізуючи різницю між цими знімками, можна буде говорити про еволюцію спектра нейтронів у цьому середовищі.

Окрім того, якщо в системі є джерело нейтронів, то очевидно, що в ній міститимуться одночасно нейтрони багатьох різних поколінь: ті, які щойно народилися (мають початковий спектр, характерний для джерела нейтронів), ті, які щойно почали вповільнюватись, а також ті, що вже вповільнилися до теплових енергій. Тому всі вони робитимуть свій внесок у повний

спектр нейтронів у такій системі. І якщо нам буде відома форма спектра через рівні (або загалом будь-які обрані) проміжки часу, то за сталого джерела нейтронів урешті-решт установиться деякий стаціонарний спектр нейтронів, який ми можемо скласти з цих проміжних знімків спектра.

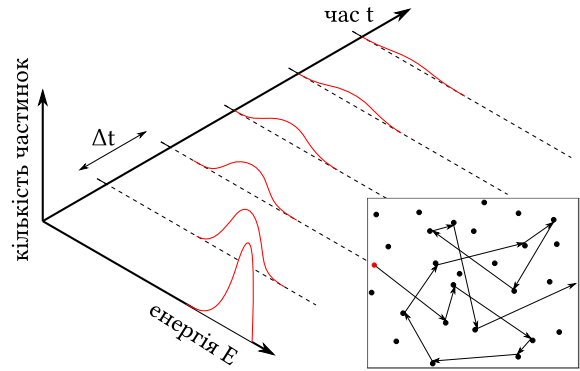


Рис. 1. Схематичне зображення моделювання випадкових кроків частинки в межах методу Монте-Карло (вставка), а також “знімки” спектра нейтронів у різні моменти часу під час уповільнення нейтронів

Fig. 1. A sketch of the random steps simulation for a particle within the Monte Carlo method (the inset), and the “snapshots” of the neutron spectrum at various times during moderation

Але є одне ускладнення. GEANT4, як і багато кодів Монте-Карло, моделюють частинки по черзі (одна за одною). Тобто кожна розіграна в межах методу Монте-Карло початкова частинка “проживає” своє життя, нічого не знаючи про всі інші — так, ніби вона лише одна. Така частинка після появи потрапляє у речовину й далі спорадично взаємодіє з цією речовиною. Її кроки випадкові (див. вставку на рис. 1), отже їхня довжина та час зіткнення з ядрами речовини-вповільнювача також непередбачені. Тому неможливо отримати інформацію про енергію такої модельованої частинки в довільний момент часу — а лише у момент випадкового зіткнення.

У [28] це ускладнення обходять так. Часову шкалу від нуля до деякого граничного часу  $T_{\max}$  розділяють на відрізки — так звані “часові біни” — та на кожному кроці частинки отримують її поточний час і фіксують, до якого часового біна вона потрапляє. Якщо в такий спосіб накопичити достатньо багато частинок, то за рахунок випадковості всіх кроків та незалежності долі кожної модельованої частинки від усіх попередніх та наступних можна накопичити розподіл таких частинок за енергіями в *кожному* часовому біні.

Саме в такий спосіб ми промодельовали появу моноенергетичних нейтронів (з початковою енергією  $E_0 = 3 \text{ MeV}$ ) та їх поступове вповільнення в нескінченному однорідному вповільнювачі з водою за температури 300 К. Результати цих розрахунків показано на рис. 2. На ньому різними кольорами показано, як змінювався спектр нейтронів із часом.

Якщо в розглянутій системі джерело нейтронів діє постійно зі сталою потужністю, то поки одні нейтро-

ни сповільнюються, у системі з'являються нові з великими енергіями. Відповідно, стаціонарний спектр нейтронів складається з усіх цих спектрів з урахуванням ширини часового біна [28]. У цьому разі сумарний спектр дуже добре узгоджується з відомою формою нейтронного спектра в теплових реакторах (див. вставку на рис. 2). Суттєва різниця є тільки в ділянці швидких нейтронів, але це не дивно, оскільки ми задавали на початку моноенергетичний спектр нейтронів, а у [6] розглядається початковий спектр поділу. Порівняння цих спектрів важливе для нас тим, що демонструє коректність складеного алгоритму побудови нерівноважних спектрів нейтронів у GEANT4.

На відміну від [28], де головне завдання — отримати стаціонарні спектри, однак результати одержали лише для водню, у цій роботі ми докладно досліджуємо саме часову еволюцію нейтронного спектра, до того ж у різних матеріалах.

Використовуючи досвід [28], щоб охопити якомога більший часовий масштаб зі збереженням необхідної деталізації, для наших розрахунків ми одразу обрали логарифмічні часові біни. З лінійною шкалою часу було б дуже важко детально простежити за розподілом нейтронів у початкових часових бінах (рис. 3,а).

На рис. 3 наведено результати тих самих розрахун-

ків, що й на рис. 2, але в іншій формі. По горизонталі відкладено час від появи початкових нейтронів у системі, по вертикалі — енергію нейтронів, а кольором показано кількість частинок. Тобто можна умовно сказати, що спектри, зображені на рис. 2 горизонтально, на цьому рисунку розташовані вертикально. Використання логарифмічних часових бінів дозволило нам охопити значний діапазон часових масштабів, тому доцільно побудувати часову еволюцію спектра також у логарифмічному масштабі (рис. 3,б).

Як видно на рис. 3,б, початковий спектр справді був моноенергетичним (йому відповідає тонка неперервна жовта лінія, коли всі нейтрони були в одному енергетичному біні). Приблизно з моменту  $10^{-9}$ – $10^{-8}$  с спектр починає помітно змінюватись. Після  $10^{-8}$  с вже не лишається сліду від початкового моноенергетичного спектра. Далі спектр упорядковано зміщується в бік менших енергій і приблизно в  $10^{-5}$  с встановлюється та за формою нагадує спектр Максвелла (стан рівноваги зі середовищем). Надалі цей спектр поступово згасає, але його форма вже не змінюється.

Оскільки наша програма легко дозволяє змінювати склад речовини, ми провели аналогічні розрахунки для деяких інших матеріалів (а саме: C, Al, Fe). Розглянемо їх докладніше.

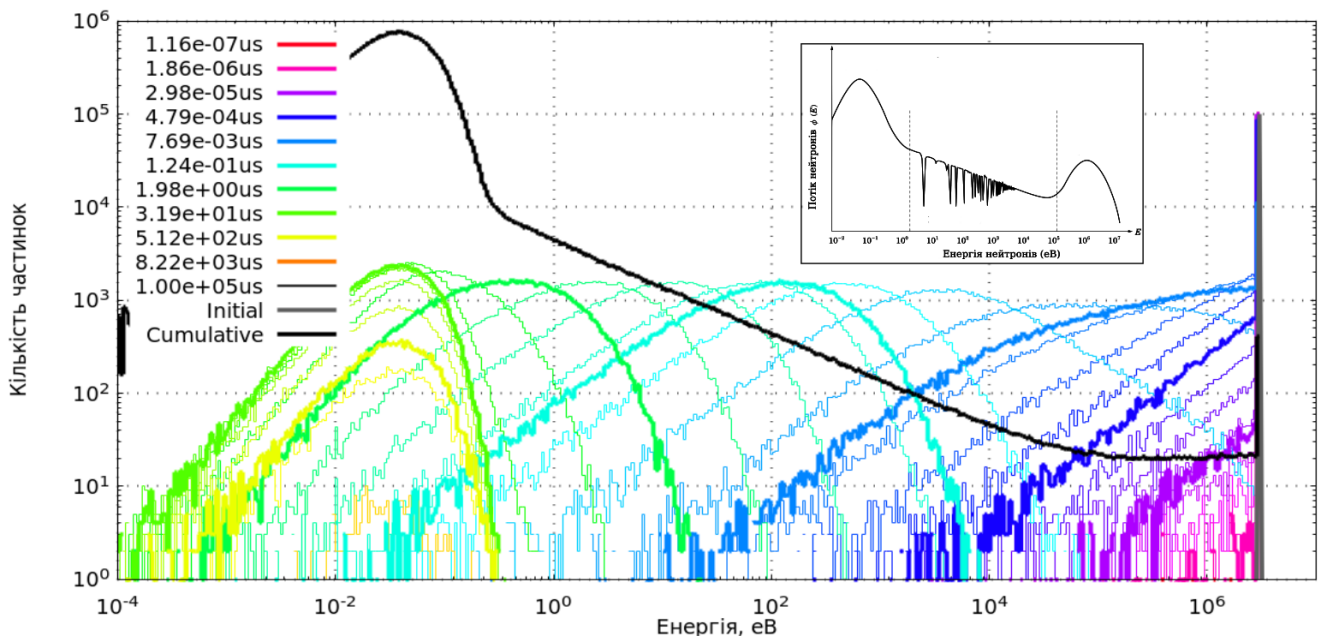


Рис. 2. Змодельована еволюція спектра нейтронів у водні за температури 300 К. Початковий спектр був моноенергетичним з енергією  $E_0 = 3$  MeV. Жирними лініями показані знімки спектра в моменти часу, вказані на рисунку. На вставці для порівняння показано форму нейтронного спектра в теплових ядерних реакторах, яку типово наводять у літературі [6]. Відмінність у ділянці швидких нейтронів пояснюємо тим, що на вставці початковим спектром нейтронів є спектр поділу, але зараз для нашого розгляду це не суттєво

Fig. 2. The simulated evolution of a neutron spectrum in hydrogen at temperature 300 K. The initial spectrum is monoenergetic with energy  $E_0 = 3$  MeV. Thick lines show the spectrum snapshots taken at the times mentioned in the legend. The inset shows the form of the neutron spectrum in thermal nuclear reactors which is typically found in literature [6]. The difference in the fast neutrons area is due to the fact that the initial neutron spectrum used in the inset corresponds to the fission spectrum.

However, it is irrelevant to our current considerations

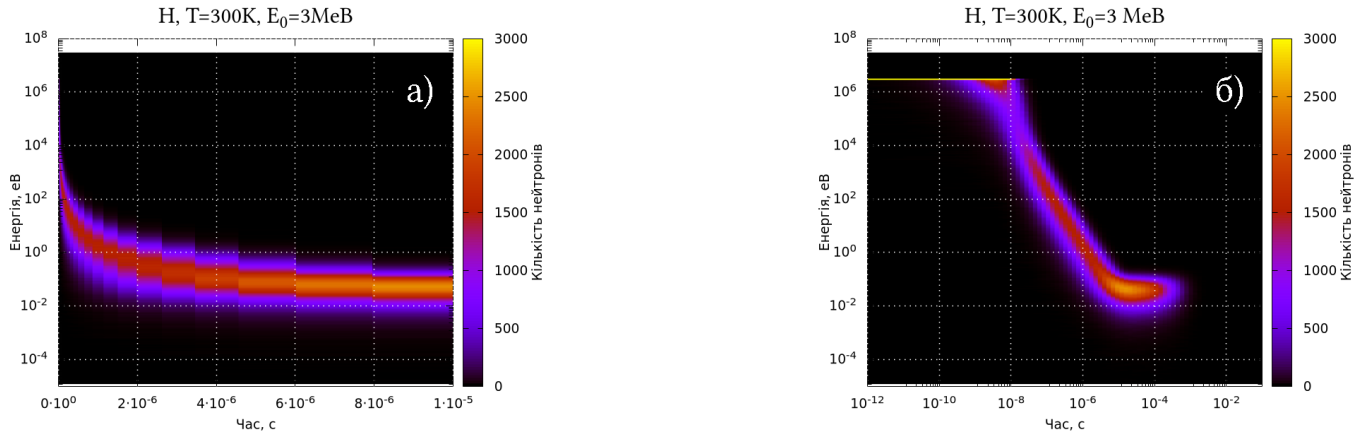


Рис. 3. Змодельована еволюція спектра нейтронів у водні за температури 300 К. В обох випадках під час розрахунків використовували логарифмічні часові біни, але на рис. (а) показано лінійну шкалу часу для порівняння з логарифмічною (б). Початковий спектр був моноенергетичним з енергією  $E_0 = 3\text{ MeV}$

Fig. 3. The simulated evolution of a neutron spectrum in hydrogen at temperature 300 K. We use the logarithmic time bins for the calculations in both cases, but in (a) we plotted the graph in linear time to compare with the logarithmic time (b). The initial spectrum is monoenergetic with energy  $E_0 = 3\text{ MeV}$

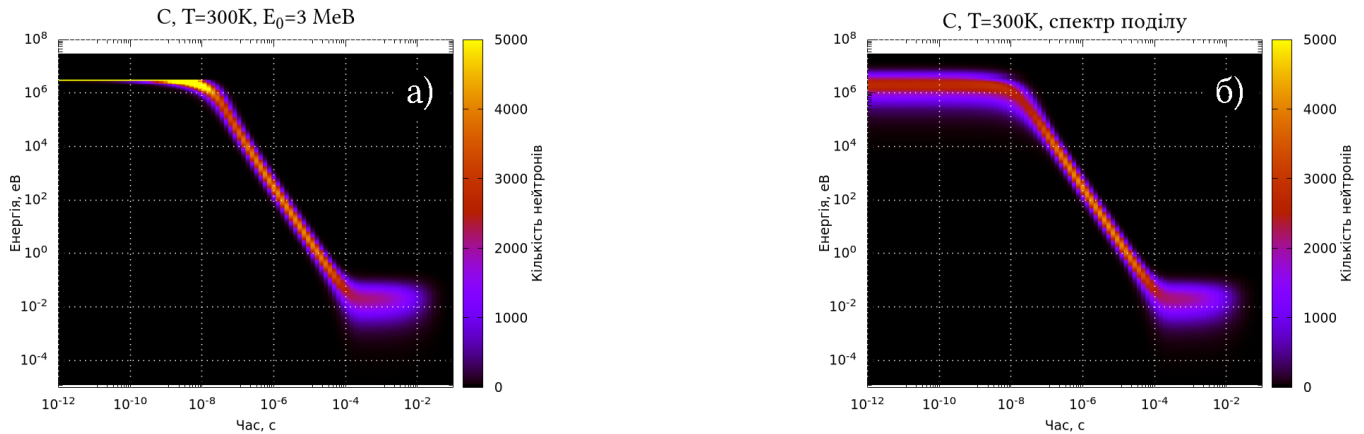


Рис. 4. Змодельована еволюція спектра нейтронів у вуглеці за температури 300 К. (а) Початковий спектр — моноенергетичний з енергією  $E_0 = 3\text{ MeV}$ . (б) Початковий спектр поділу

Fig. 4. The simulated evolution of a neutron spectrum in carbon at temperature 300 K. (a) The initial spectrum is monoenergetic with energy  $E_0 = 3\text{ MeV}$ . (b) The initial fission spectrum

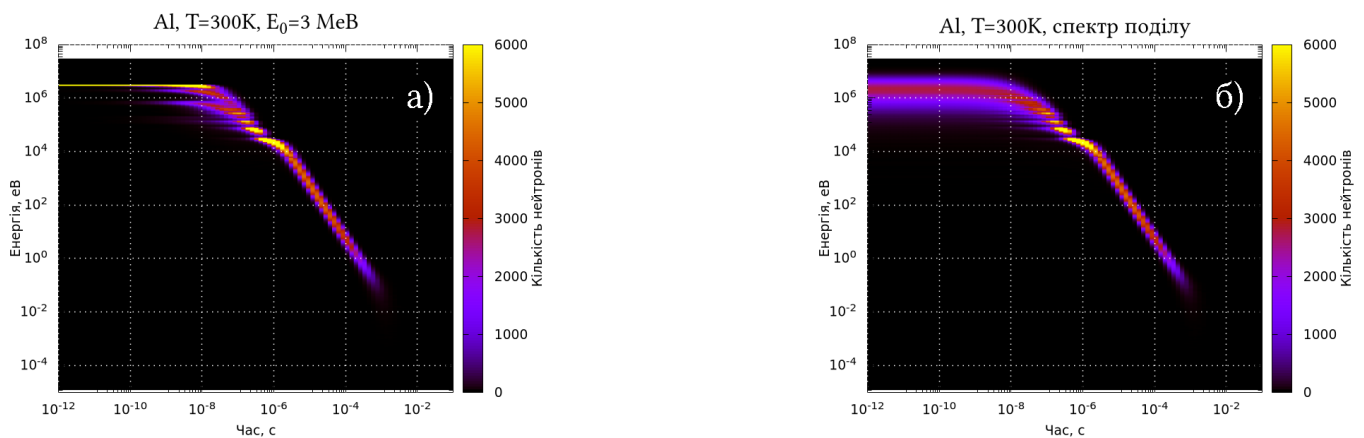


Рис. 5. Змодельована еволюція спектра нейтронів в алюмінії за температури 300 К. (а) Початковий спектр — моноенергетичний з енергією  $E_0 = 3\text{ MeV}$ . (б) Початковий спектр поділу

Fig. 5. The simulated evolution of a neutron spectrum in aluminium at temperature 300 K. (a) The initial spectrum is monoenergetic with energy  $E_0 = 3\text{ MeV}$ . (b) The initial fission spectrum

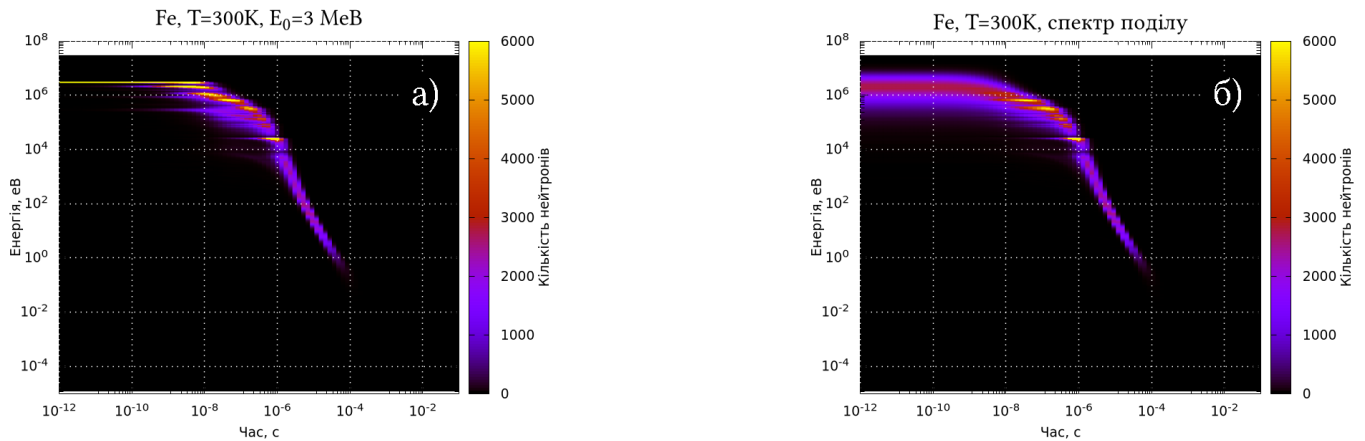


Рис. 6. Змодельована еволюція спектра нейтронів у залізі за температури 300 К. (а) Початковий спектр — моноенергетичний з енергією  $E_0 = 3$  MeV. (б) Початковий спектр поділу

Fig. 6. : The simulated evolution of a neutron spectrum in iron at temperature 300 K. (a) The initial spectrum is monoenergetic with energy  $E_0 = 3$  MeV. (b) The initial fission spectrum

Еволюція спектра у вуглеці (рис. 4,а) візуально відрізняється від еволюції у водні. На початку спектр також був моноенергетичний (горизонтальна жовта пряма), а потім починає зміщуватись до менших енергій, але трохи плавніше, ніж у водні. Також протягом усього періоду вповільнення (аж до  $t \sim 10^{-4}$  с) він помітно вужчий, ніж у водні. Максвеллівський спектр в цьому разі досягається за час  $\sim 10^{-4}$  с, що на порядок більше, ніж відповідний час у водні ( $\sim 10^{-5}$  с)<sup>1</sup>.

На графіку рис. 4,б початковим був спектр поділу. Протягом перших  $10^{-8}$  секунд початковий спектр залишався сталим, уповільнення нейтронів почалося вже після  $10^{-8}$  секунд. Після цього бачимо проміжок часу ( $10^{-8}$ – $10^{-4}$  с), у якому відбувся перехід від великих енергій до теплових. Причому, починаючи вже приблизно з  $10^{-7}$  с, цю картину не можна відрізнити від попередньої для початкового моноенергетичного спектра (рис. 4,а).

На наступній ділянці ( $10^{-4}$ – $0.1$  с) нейтрони вже вповільнені до теплових енергій, і їх розподіл описується розподілом Максвелла для температури, близької до температури середовища.

Наступним ми дослідили енергетичний спектр уповільнення нейтронів в алюмінії (рис. 5). Обидва випадки тут об'єднує те, що вони містять прояви резонансів алюмінію на проміжку ( $\sim 10^4$ – $10^6$  eV). Окрім того, порівняно з попередніми розглянутими випадками, в алюмінії більшість нейтронів поглинається, не встигнувши набути теплових енергій, проте за час близько  $10^{-3}$  с залишковий спектр упритул наближається до теплових енергій, що відповідають обраній температурі середовища-вповільнювача.

Нарешті, розглянемо процес установлення енерге-

тичного спектра нейтронів у залізі (рис. 6). На рисунку видно, що, як і у випадку з алюмінієм, для заліза характерні резонанси, і вони також мають свій прояв в еволюції спектра нейтронів у цьому матеріалі. Резонанси в залізі розташовано дещо нижче, у ділянці  $10^3$  –  $10^6$  eV. Порівняно з іншими розглянутими речовинами видно, що в залізі ніколи не встановиться тепловий спектр. Це можна пояснити тим, що нейтрони будуть поглинатись середовищем раніше, ніж їхні енергії набудуть значень теплової ділянки. Це не залежатиме від щільності ядер, але матиме вплив на характерний час установлення спектра.

### III. ЕВОЛЮЦІЯ СТАТИСТИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ СПЕКТРА НЕЙТРОНІВ

Цікаво також розглянути поведінку різних статистичних параметрів спектрів під час уповільнення нейтронів. На рис. 7 для водню показано такі статистичні параметри: ентропію, середню та інтегральну енергії, повну кількість нейтронів та дисперсію спектра нейтронів. Усі ці параметри ми розраховували для кожного часового біна вже після Монте-Карло моделювання в GEANT4. Для цього ми використали часові “знімки” спектра на кшталт тих, що зображені на рис. 2. Кількість частинок  $n(E_i)$  отримали, просто порахувавши всі, що були зареєстровані у відповідному  $i$ -му часовому біні. Інтегральна енергія є простою сумою енергій усіх частинок, віднесених до певного часового біна, а середня енергія  $\bar{E}$  — це просте середнє арифметичне енергій усіх нейтронів, віднесених до певного часового біна. Дисперсію спектра ми порахували за стандартною формулою:

$$\sigma_E^2 = \frac{1}{N} \sum_i n(E_i) \cdot (E_i - \bar{E})^2, \quad (1)$$

де  $N$  — повна кількість частинок у відповідному часовому біні.

<sup>1</sup> Значимо, що швидкість уповільнення напрямку залежить від щільності атомів уповільнювача, яка визначає довжину вільного пробігу нейтрона між зіткненнями. Тому тут і надалі ми порівнюємо вповільнення в речовинах, узятих за нормальних умов.

Ентропію в одиниці об'єму розраховували із суто статистичних міркувань:

$$S = k_B \sum_i n(E_i) \ln \left( \frac{4\pi m_n \sqrt{2m_n E_i}}{(2\pi\hbar)^3} \cdot (\Delta E)_i \right) - \ln(n(E_i)!), \quad (2)$$

де  $k_B$  — стала Больцмана,  $m_n$  — маса нейтрона,  $E_i$  — енергія, що відповідає  $i$ -му енергетичному біну,  $(\Delta E)_i$  — ширина  $i$ -го енергетичного біна,  $n(E_i)$  — кількість нейтронів у  $i$ -му енергетичному біні.

Для аналізу поведінки графіків на рис. 7 зручно

розділити їх на чотири окремі ділянки (позначені римськими цифрами):

- I.  $0 - 5 \cdot 10^{-9}$  с;
- II.  $5 \cdot 10^{-9} - 10^{-7}$  с;
- III.  $10^{-7} - 10^{-5}$  с;
- IV.  $10^{-5} - 10^{-3}$  с.

Помітно, що всі криві змінюють свій характер в однакові моменти часу – приблизно на вказаних границях цих чотирьох ділянок.

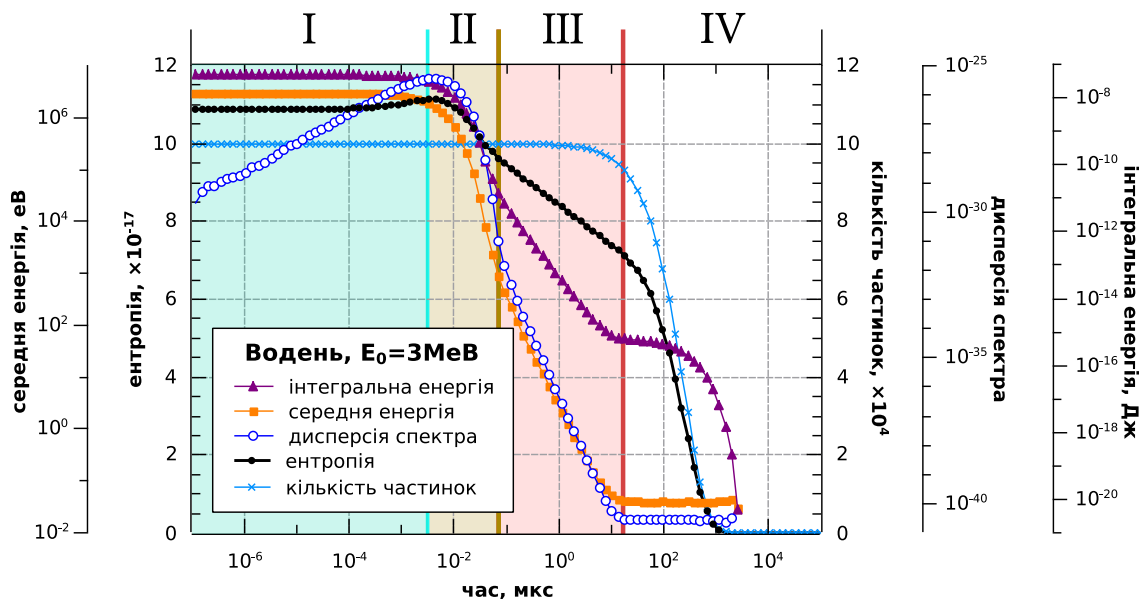


Рис. 7. Еволюція статистичних параметрів спектра нейтронів у водні за температури 300 К. Початковий спектр — моноенергетичний з енергією  $E_0 = 3$  МеВ. Можна чітко виділити чотири етапи встановлення спектра (позначені римськими цифрами)

Fig. 7. The evolution of the statistical parameters of a neutron spectrum in hydrogen at temperature 300 K. The initial spectrum is monoenergetic with energy  $E_0 = 3$  MeV. Four distinct stages of the spectrum relaxation may be singled out (marked with Roman numbers)

На ділянці (I) кількість частинок, їхня середня енергія, а отже і інтегральна енергія, залишаються практично незмінними. Оскільки початковий спектр тут був моноенергетичним, то щойно нейтрони починають взаємодіяти з ядрами речовини-вповільнювача, дисперсія їхнього спектра стрімко зростає, а тому трохи зростає й ентропія. Після проходження максимуму на ділянці (II) усі криві починають спадати, окрім загальної кількості частинок, яка поки що зберігається майже такою самою, як на початку. На цій ділянці спостерігається найстрімкіше зменшення дисперсії та середньої енергії спектра, що автоматично тягне за собою й помітне спадання ентропії. Ділянка (III) містить монотонне й досить поступове спадання всіх кривих. На ній починає зменшуватись і загальна кількість нейтронів. Після проходження межі й виходу на ділянку (IV) стрімко зменшується кількість нейтронів, що пояснює таке саме зменшення повної енергії та ентропії спектра. Оскільки

ки на цій ділянці наявна термічна рівновага нейтронів із середовищем, форма спектра (середня енергія та дисперсія) вже не змінюється.

Ці закономірності дуже добре узгоджуються з раніше наведеним рис. 3,б для водню.

Аналогічно ми побудували залежність статистичних параметрів спектрів у вуглеці, алюмінії та залізі. Графіки поведінки ентропії спектра нейтронів в усіх розглянутих речовинах для порівняння наведено на рис. 8. Як бачимо, у них можна виділити якісно такі самі ділянки, як і на рис. 7.

На першій ділянці ентропія в усіх речовинах поводить однаково та трохи зростає, сягаючи максимуму. Ділянка (II) повноюцінно виділяється лише у водні, а ділянка (III) виразна також на графіку для вуглецю. Утім, її протяжність значно більша за відповідну ділянку для водню. У залізі та алюмінії ділянки (II) та (III) слабше виражені й узагалі важко відділяються одна від одної. Цікаво також, що у водні та

алюмінії за нормальних умов вихід ентропії на ділянку (IV) відбувається практично одночасно, тоді як у залізі та вуглеці він відрізняється більш як на три порядки величини.

На останній (IV) ділянці, як і раніше, маємо однакове зменшення ентропії в усіх речовинах (такий самий кут нахилу всіх кривих). Проте видно, що характерний час установлення стаціонарного спектра нейтронів найменший для заліза, а найбільший — для вуглецю.

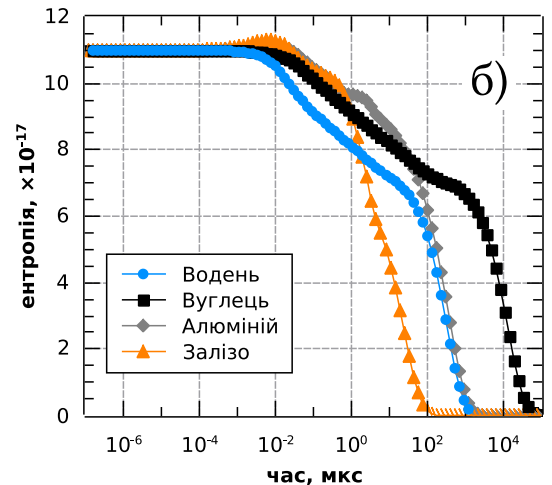
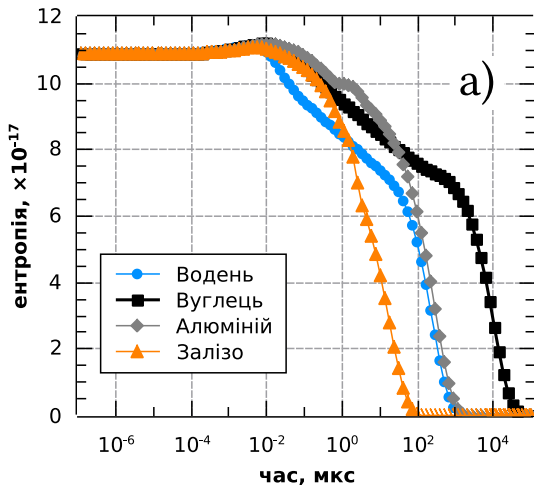


Рис. 8. Динаміка ентропії спектра нейтронів у різних речовинах: у водні, вуглеці, алюмінії та залізі за температури 300 К. (а) Початковий спектр — моноенергетичний з енергією  $E_0 = 3$  MeV. (б) Початковий спектр поділу  
 Fig. 8. Dynamics of the neutron spectrum entropy in various media: in hydrogen, carbon, aluminium, and iron, at temperature 300 K. (a) The initial spectrum is monoenergetic with energy  $E_0 = 3$  MeV. (b) The initial fission spectrum

Отже, застосований метод дозволяє отримати дуже наочні картини еволюції спектрів нейтронів із часом у різних речовинах і якісно виокремити в них характерні етапи зміни та встановлення спектра. А одержані в такий спосіб оцінки часу настання кожного з цих етапів можна використати для визначення характерного часу та кроку чисельного моделювання в багатьох ядернофізичних задачах з участю нейтронів. І хоча характерний час настання того чи іншого етапу прямо залежить від щільності атомів уповільнювача (що більша щільність, то менший час), послідовність цих етапів та характер поведінки вказаних кривих від неї не залежатимуть (криві просто зміщуватимуться в бік менших або більших інтервалів часу, але форма залишиться сталою).

**ВИСНОВКИ**

Ми розробили програму з використанням класів бібліотеки GEANT4, яка дозволяє відстежувати зміну спектра нейтронів під час їх уповільнення в деякому середовищі. Форма та склад середовища може бути задана довільно, залежно від конкретної задачі. Це може бути як скінченне середовище, так і квазі-нескінченне (наприклад, із розміром видимого Всесвіту). Також це може бути як гомогенне (з одного матеріалу), так і гетерогенне середовище. У цій ро-

боті ми досліджували характерні особливості еволюції нейтронних спектрів у часі залежно від речовини, тому неоднорідність розглядуваного середовища нас поки що не цікавила.

Проаналізовано динаміку спектрів уповільнення нейтронів для двох типів джерел: із початковим моноенергетичним спектром та з початковим спектром поділу, виділено окремі етапи формування спектра. Моноенергетичний спектр дуже зручний для аналізу поведінки нейтронів у різних речовинах, адже він найменше вуалює особливості самої речовини. Спектр поділу ж цікавий тому, що він має практичне застосування в реакторних задачах.

Запропонованим методом показано, що рівновага системи нейтронів із речовиною (якій відповідає спектр Максвелла) у вуглеці за нормальних умов досягається за час  $\sim 10^{-4}$  с — приблизно на порядок більший за відповідний час у водні. Окрім того, протягом усього періоду уповільнення він лишається помітно вужчим, ніж у водні. Цікаво зазначити, що застосований метод дуже наочно проявив ефекти резонансів для алюмінію та заліза, а також той факт, що в алюмінії та залізі не може встановитися тепловий спектр нейтронів.

Ми також дослідили поведінку деяких статистичних параметрів спектра під час уповільнення нейтронів і чітко визначили декілька стадій цього про-

цесу. Провели порівняльний аналіз характеру зміни ентропії як одного з найвиразніших статистичних показників для кількох речовин: водню, вуглецю, алюмінію та заліза.

Розроблена програма дозволяє встановлювати різні параметри середовища-вповільнювача (його гео-

метрію, розміри, склад та температуру) та досліджувати, як це впливатиме на динаміку еволюції спектра нейтронів та характерний час його встановлення, що може бути корисним для моделювання роботи ядерних реакторів (зокрема, розроблюваних хвильових реакторів), теорії вповільнення нейтронів та ін.

- 
- [1] A. M. Weinberg, E. P. Wigner, *The Physical Theory of Neutron Chain Reactors* (The University of Chicago Press, 1958).
- [2] S. M. Feinberg, S. Shikhov, V. Troyanskii, *The Theory of Nuclear Reactors. Vol. 1, Elementary Theory of Reactors* (Atomizdat, Moscow, 1978).
- [3] G. Bartolomey, G. Bat', V. Baibakov, M. Altukhov, *Basic Theory and Methods of Nuclear Power Installation Calculations* (Energoatomizdat, Moscow, 1989).
- [4] S. Shirokov, *The Nuclear Reactor Physics* (Naukova Dumka, Kyiv, 1998).
- [5] *Handbook of Nuclear Engineering*, edited by D. G. Cacuci (Springer, 2010); <https://doi.org/10.1007/978-0-387-98149-9>.
- [6] *Nuclear Reactor Design*, edited by Y. Oka (Springer, 2014); <https://doi.org/10.1007/978-4-431-54898-0>.
- [7] W. M. Stacey, *Nuclear Reactor Physics, 3rd ed.* (Wiley, 2018); <https://doi.org/10.1002/9783527812318>.
- [8] R. Lopez-Solis, J.-L. François, *Int. J. Energy Res.* **42**, 953 (2018); <https://doi.org/10.1002/er.3854>.
- [9] S. Fomin, Y. Mel'nik, V. Pilipenko, N. Shul'ga, in *Nuclear Science and Safety in Europe*, edited by T. Čechák, L. Jenkovszky, I. Karpenko (Springer Netherlands, Dordrecht, 2006), p. 239; [https://doi.org/10.1007/978-1-4020-4965-1\\_20](https://doi.org/10.1007/978-1-4020-4965-1_20).
- [10] V. N. Pavlovich, E. N. Khotyaintseva, V. D. Rusov, V. N. Khotyaintsev, A. S. Yurchenko, *At. Energy* **102**, 181 (2007); <https://doi.org/10.1007/s10512-007-0027-x>.
- [11] V. D. Rusov *et al.*, *Energies* **4**, 1337 (2011); <https://doi.org/10.3390/en4091337>.
- [12] V. D. Rusov *et al.*, *Sci. Technol. Nucl. Install.* **2015**, 703069 (2015); <https://doi.org/10.1155/2015/703069>.
- [13] V. Rusov *et al.*, *Prog. Nucl. Energy* **83**, 105 (2015); <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2015.03.007>.
- [14] V. F. Kolesov, *Aperiodic Pulse Reactors. Vol. 1* (RFNC-VNIIEF Publishing, Sarov, 2006).
- [15] A. V. Lukin, *Physics of the Pulse Nuclear Reactors* (RFNC-VNIIEF Publishing, Snezhinsk, 2006).
- [16] A. V. Arapov, in *Problems of the Physics of High Energy Density. XII Kharitonov Thematic Scientific Readings* (RFNC-VNIIEF Publishing, Sarov, 2010), p. 22.
- [17] V. D. Rusov *et al.*, *J. Geophys. Res. Solid Earth* **112**, B09203 (2007); <https://doi.org/10.1029/2005JB004212>.
- [18] V. D. Rusov, V. A. Tarasov, S. A. Chernenchenko, A. A. Kakaev, V. P. Smolyar, *Eur. Phys. J. A* **53**, 179 (2017); <https://doi.org/10.1140/epja/i2017-12363-9>.
- [19] V. Rusov *et al.*, preprint arXiv:1801.06142v.1[nucl-th] (2018).
- [20] I. Prigogine, *Introduction to Thermodynamics of Irreversible Processes* (John Wiley & Sons, New York, 1968).
- [21] I. Bakhareva, *Nonlinear Nonequilibrium Thermodynamics* (Saratov University Publishing, 1976).
- [22] I. Kvasnikov, *Thermodynamics and Statistical Physics. Vol. 3. Theory of Nonequilibrium Systems* (Editorial URSS, 2003).
- [23] V. Rusov, V. Tarasov, S. Chernenchenko, *Probl. At. Sci. Technol.* **72**, 123 (2011).
- [24] V. Rusov, *et al.*, *World J. Nucl. Sci. Technol.* **3**, 9 (2013); <https://doi.org/10.4236/wjnst.2013.32A002>.
- [25] J. K. Rockhill, G. E. Laramore, in *Clinical Radiation Oncology, 4th ed.*, edited by L. L. Gunderson, J. E. Tepper (Elsevier, Philadelphia, 2016), p. 373; <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-24098-7.00020-4>.
- [26] M. Suzuki, *Int. J. Clin. Oncol.* **25**, 43 (2020); <https://doi.org/10.1007/s10147-019-01480-4>.
- [27] S. W. Streitmatter, R. D. Stewart, G. Moffitt, T. Jevremovic, *Cells* **9**, 2302 (2020); <https://doi.org/10.3390/cells9102302>.
- [28] V. Smolyar, V. Tarasov, A. Mileva, V. Rusov, preprint arXiv:2012.11402[physics.comp-ph] (2020).

#### SIMULATION OF THE NEUTRON SPECTRA EVOLUTION WITH GEANT4 MONTE CARLO CODE

V. P. Smolyar, A. O. Mileva, V. O. Tarasov, H. H. Neboha, V. D. Rusov  
*Odesa National Polytechnic University,  
 Department of Theoretical and Experimental Nuclear Physics,  
 1, Shevchenko Ave., Odesa, UA-65044, Ukraine,  
 e-mail: svp@opu.ua*

The knowledge of neutron spectrum is essential in many different physical problems. First of all, in nuclear reactor physics it is required for the improvement and development of the new generation reactors, as well as for the study of various emergency states. It is especially interesting for the so-called wave nuclear reactors (in which the nuclear fission reactions take place in a narrow layer which slowly and gradually propagates along the reactor core), which is a very promising technology being actively



developed around the world. In order to study the operation modes, and even the very possibility of their existence, it is necessary to have a detailed knowledge of the form of the neutron spectrum in them.

In the tasks involving a substantial change in the nuclear fuel parameters with time (e.g. temperature, chemical and isotopic composition etc.), the neutron spectrum can also change drastically, which may lead to some exotic phenomena such as the so-called “blow-up” modes, when the parameters may grow to infinity in a finite time. In fissile materials such phenomena are known to depend on the nuclear reaction cross-sections together with the neutron spectrum.

In addition, the form of neutron spectrum becomes more important in medical applications, especially considering the rising interest to such methods as boron neutron capture therapy (BNCT).

Here, using the GEANT4 Monte Carlo code, we develop software able to simulate the process of neutron moderation in various media and track the evolution of the neutron spectrum with time. As an example, we show the calculation results for four different media — hydrogen, carbon, aluminum and iron, and two different types of neutron source — a monoenergetic source and the one having a fission spectrum. We analyze the behavior of a number of statistical parameters of the neutron spectrum, particularly, the entropy. This lets us single out several stages of the neutron spectrum formation, which manifest themselves in all considered cases. We estimate the characteristic time of each of these stages onset in different media.

**Key words:** neutron spectrum, Monte Carlo, GEANT4, entropy.