



## طراحی دو ماژول هسته‌ای برای محاسبه خودکار سطح مقطع‌های رادیو ایزوتوپ‌ها با

### استفاده از پیوند کدهای هسته‌ای MCNPX و NJOY

سید علیرضا موسوی شیرازی\*<sup>(۱)</sup> مهدی خاکی آرانی<sup>(۲)</sup>

(۱) گروه فیزیک، دانشکده فنی، واحد تهران جنوب، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران.\*

(۲) سازمان انرژی اتمی ایران، شرکت مسنا، تهران، ایران

تاریخ دریافت: ۱۳۹۷/۸/۱۹ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۸/۹/۱۳

#### چکیده

به دلیل اهمیت بسیار بالای تعیین سطح مقطع‌ها در محاسبات هسته‌ای، در این تحقیق، دو ماژول کاربردی هسته‌ای برمبنای برنامه Delphi 7 طراحی شده است. ماژول اول، نقش یک واسطه رابین کدهای هسته‌ای MCNPX و NJOY داشته و به منظور محاسبه سطح مقطع‌های رادیو ایزوتوپ‌ها برای گروه‌های مختلف انرژی و نیز انرژی‌هایی دلخواه از نوترون‌های فرودی، با کد MCNPX (بر مبنای کتابخانه ENDF/B-VII.0) پیوند داده می‌شود. این ماژول به ماژولی دیگر که در این تحقیق طراحی شده و نام آن AutoNJOY است پیوند داده می‌شود که هدف، تعیین سطح مقطع‌های رادیو ایزوتوپ‌ها در دماهای مختلف است. ماژول دوم با کد NJOY نیز دارای پیوند بوده و قادر است این کد را به صورت خودکار اجرا و سطح مقطع‌های میکروسکوپی را برای دماهای مختلف تعیین نماید. سپس سطح مقطع‌های به دست آمده به طور خودکار به ماژول اولی (اصلی) منتقل و نتایجش با نتایج کد MCNPX مقایسه می‌شوند. ماژول اصلی همچنین قادر است که به طور خودکار به کتابخانه ACE متصل شده و سطح مقطع‌های میکروسکوپی همه رادیو ایزوتوپ‌ها را قرائت و رسم نماید. مشاهده می‌شود که کلیه سطح مقطع‌های استخراج شده از کد NJOY تقریباً مشابه با نتایج حاصله از کد MCNPX می‌باشند و نمودارهایشان نیز بر یکدیگر منطبق‌اند. واژه‌های کلیدی: ایزوتوپ، سطح مقطع، کد MCNPX، کد NJOY، ماژول هسته‌ای

\* عهده‌دار مکاتبات:

نشانی: تهران، دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران جنوب، دانشکده فنی، گروه فیزیک، کد پستی: ۱۷۷۷۱۳۶۵۱.

پست الکترونیکی: [a\\_moosavi@azad.ac.ir](mailto:a_moosavi@azad.ac.ir)

تلفن: ۰۹۱۲۲۰۲۷۰۵۹



## ۱. مقدمه

برحسب barn-E و نیز نمودار سطح مقطع‌های تولید حرارت برحسب انرژی می‌باشد. همچنین هدف دیگر از این تحقیق، استخراج اطلاعات سطح مقطع تمامی رادیو ایزوتوپ‌ها از کتابخانه ACE و رسم سطح مقطع‌های واکنش‌های مختلف هسته‌ای بر روی یک صفحه‌نمایش می‌باشد.

k	ثابت بولتزمن
g	شماره گروه انرژی
EU	حد بالایی انتگرال برای انرژی نوترون
EL	حد پایینی انتگرال برای انرژی نوترون

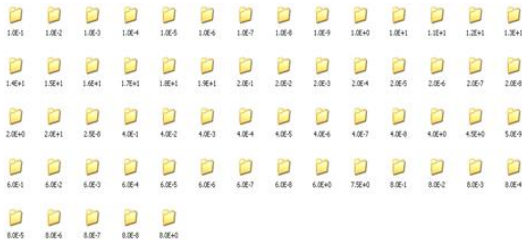
## ۲. روش کار و رویه اندازه‌گیری

۲.۱. تعیین سطح مقطع‌های مواد و رادیو ایزوتوپ‌ها با استفاده از کد MCNPX

برای این منظور، نرخ واکنش فرآیندهای هسته‌ای نظیر جذب، پراکندگی، حالت برانگیختگی اولیه، حالت برانگیختگی ثانویه و سطح مقطع‌های ماکروسکوپی کلی با استفاده از کد هسته‌ای MCNPX برای گروه‌های مختلفی از انرژی نوترون‌ها تولید می‌گردد. علاوه بر نرخ واکنش، شارهای نوترونی نیز برای گروه‌های مختلف انرژی و به‌صورت چند گروهی تعیین می‌گردند. ماژول طراحی‌شده در این تحقیق، دارای قسمت ورودی می‌باشد که در آن تعداد گروه انرژی‌های مختلف و نیز انرژی‌های ورودی تعریف می‌شوند. تعداد گروه‌های انرژی و همچنین تعداد انرژی‌های ورودی (انرژی نوترون‌های فرودی) به ترتیب ۵۸ گروه و ۶۱ انرژی ورودی می‌باشند که در محدوده ۱۰-۹ MeV تا ۲۰ MeV قرار دارند. این تعداد گروه انرژی و نیز انرژی نوترون‌های فرودی، کاملاً دلخواه و متغیر بوده و قابلیت افزایش یا کاهش رادارند و مقادیر متوسط سطح مقطع‌های ماکروسکوپی با استفاده از رابطه زیر برای

امروزه در محاسبات هسته‌ای، محاسبه و داشتن سطح مقطع‌های میکروسکوپی و ماکروسکوپی یکی از مهم‌ترین و اساسی‌ترین ابزارها در سایر دیگر محاسبات هسته‌ای از جمله نرخ شکافت، محاسبات قدرت راکتورهای هسته‌ای و حتی دزیمتری به شمار می‌رود [۱، ۲]. امروزه برای دسترسی به اطلاعات خام برای سطح مقطع‌های میکروسکوپی، برخی کتابخانه‌ها و پایگاه‌های داده هسته‌ای موجود می‌باشند نظیر: "JENDL" دارای نسخه‌های ۳.۲، ۳.۳ و ۴.۰، "JEFF" دارای نسخه‌های ۳.۰، ۳.۱ و ۳.۲، "CENDL" دارای نسخه‌های ۲ و ۳.۱، "BROND-2.2"، "IRDF-1.05"، "IAEA Standard 06" و "3, 4, 5" [ENDF/B-VII.0]. در گذشته از کد MCNP بر مبنای روش مونت کارلو برای محاسبه سطح مقطع‌ها استفاده گردیده است [۶]. سطح مقطع‌های متوسط نیز برای مواد محاسبه‌شده‌اند که این محاسبات بر اساس کتابخانه‌های ENDF/B-VII.1، JEFF-3.1.2 و JENDL-4.0 می‌باشند [۷].

در این تحقیق، دو ماژول جدید برای محاسبه سطح مقطع‌های هسته‌ای و سطح مقطع‌های تولید حرارت طراحی‌شده است. هدف اصلی از طراحی این دو ماژول این است که بتوان یک اتصال بین کدهای هسته‌ای MCNPX و NJOY برقرار کرد بطوریکه این دو ماژول به‌طور خودکار اجرا شده و نیز به‌طور خودکار، تمامی سطح مقطع‌های هسته‌ای و نیز سطح مقطع‌های تولید حرارت رادیو ایزوتوپ‌ها را برای دماهای مختلف و گروه‌های مختلف انرژی و نیز انرژی‌های نوترون فرودی دلخواه به دست آورده و یک مقایسه نیز بین نتایج انجام دهد. هدف دیگر، رسم برخی از نمودارهای بسیار مهم و مفید از جمله نمودار سطح مقطع‌های ماکروسکوپی برحسب cm-1-E و سطح مقطع‌های میکروسکوپی



شکل ۲- زیرپوشه‌های تولیدشده به همراه برچسب‌های آن‌ها

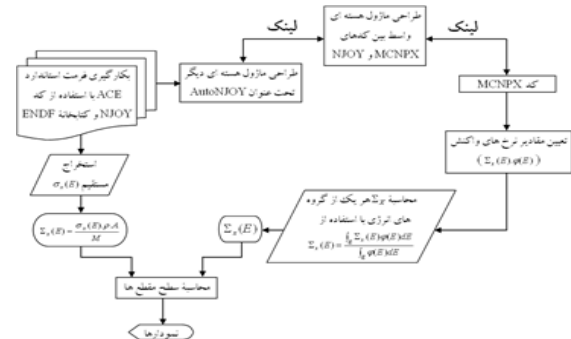
با کلیک کردن بر روی گزینه "Run MCNP"، نرخ واکنش هر یک از گروه‌های انرژی تعریف شده در ماژول، به صورت خودکار توسط کد MCNPX محاسبه می‌شود و سپس بر شار گروه مربوطه تقسیم می‌شود. بدین ترتیب، سطح مقطع‌های ماکروسکوپی برای هر یک از گروه‌های انرژی با توجه به اینکه فقط یک شار به ازای یک گروه انرژی می‌باشد به دست می‌آید. سپس دیتاهای به دست آمده شامل  $\sigma_s$ ،  $\sigma_a$  و به طور خودکار از کد MCNPX به برنامه Delphi 7 وارد می‌شود مطابق جدول ۱:

جدول ۱- سطح مقطع‌های به دست آمده برای سه عنصر اکسیژن، نیتروژن و هیدروژن (به ترتیب از ماده ۱ تا ۳) برای واکنش‌های مختلف

ماده	گروه انرژی نوترونی	$\Sigma_t$	$\Sigma_a$	$\Sigma_s$	$\Sigma_{s1}$	$\Sigma_{s2}$	$\Sigma_{(n,2)}$	$\Sigma_{(n,3n)}$
1 (O)	1	2.93E-01	4.61E-05	2.93E-01	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
1 (O)	1	2.93E-01	4.61E-05	2.93E-01	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
2 (N)	1	1.90E-03	6.94E-04	1.21E-03	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
3 (H)	1	1.15E+01	1.61E-01	1.12E+01	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
		.	.	.	.	.	.	.
1 (O)	1	58	5.48E-02	4.03E-03	3.35E-02	7.72E-05	2.21E-03	7.64E-05
2 (N)	1	58	8.34E-05	7.89E-06	5.47E-05	1.70E-07	3.28E-07	5.50E-07

آن‌ها تعیین می‌شود [۸]:

$$\Sigma_x = \frac{\int_g \Sigma_x(E) \times \phi(E) \times dE}{\int_g \phi(E) \times dE} \quad (1)$$

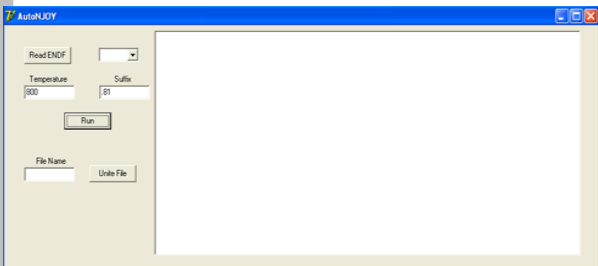


شکل ۱- فلوجارت مربوط به عملکرد این دو ماژول کاربردی

برنامه Delphi 7 بکار رفته در این ماژول به گونه‌ای نوشته شده است که قادر به اجرای خودکار کد MCNPX می‌باشد. به این معنی که هر یک از انرژی‌های نوترون فرودی به طور خودکار در جلوی عبارت "erg" در کارت sdef قرار گرفته و سپس ماژول برای این انرژی به طور خودکار اجرا گردیده و فایل خروجی به عنوان یک زیرپوشه ذخیره سازی می‌گردد و انرژی نوترون فرودی را نیز به عنوان برچسب خود به همراه می‌گیرد.

پس از کلیک کردن بر روی گزینه‌ای بنام "Run MCNP"، کد MCNPX به طور خودکار به تعداد n بار یعنی به تعداد انرژی‌های نوترون فرودی اجرا می‌شود و نتایج مربوطه نمایش داده می‌شوند. پس از آن نتایج یک پوشه تحت عنوان: "MCNP\_Out" که به صورت یک دسته فایل می‌باشد ذخیره سازی می‌شود. این پوشه شامل تعداد زیادی زیرپوشه به تعداد انرژی‌های نوترون‌های فرودی می‌باشد چنانکه هر زیرپوشه شامل اجرای کد MCNPX به ازای انرژی نوترون فرودی تعریف شده می‌باشد. زیرپوشه‌ها به همراه برچسب‌های آن‌ها در شکل ۲ نمایش داده شده‌اند:

NJOY Linker طراحی شده در این تحقیق، کد NJOY با برنامه Delphi 7 اتصال برقرار کرده و به‌طور خودکار اجرا می‌گردد. صفحه‌نمایش این ماژول مطابق شکل ۴ می‌باشد:



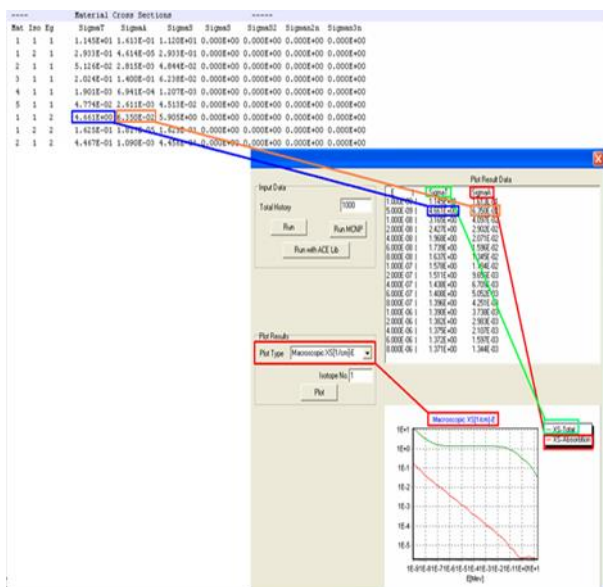
شکل ۴- صفحه‌نمایش مربوط به ماژول AutoNJOY و اجرای خودکار این کد در واقع کد NJOY از کتابخانه ENDF استفاده می‌کند و سطح مقطع‌ها را در فرمت استاندارد ACE تشکیل می‌دهد. محاسبات سطح مقطع‌ها با استفاده از پهن سازی و نیز درونیابی بر روی سطح مقطع‌های موجود در کتابخانه ENDF صورت می‌پذیرد. روش به‌کارگیری شده برای پهن سازی سطح مقطع‌های موجود در کتابخانه ENDF این است که سطح مقطع‌های میکروسکوپی اولیه و خام جذب و پراکندگی از کتابخانه JENDL-3.2 در دمای ۳۰۰ کلوین به‌صورت جفت دیتا گرفته می‌شود و این دیتاها توسط معادلات ۲-۴ برای نوترون‌های چند گروهی پردازش می‌شوند و از آن طریق سطح مقطع‌های میکروسکوپی جدید جذب و پراکندگی در بازه انرژی هر یک از گروه‌های نوترونی تعیین می‌شوند. معادلاتی که برای طیف ماکسول و طیف رزونانس و طیف شکافت استفاده شده‌اند به ترتیب عبارت‌اند از [۹، ۱۰]:

$$\sigma_{macs}(T) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\int_{E_L}^{E_U} \sigma(E, T) \cdot E \cdot \exp\left(\frac{-E}{kT}\right) dE}{\int_{E_L}^{E_U} E \cdot \exp\left(\frac{-E}{kT}\right) dE} \quad (2)$$

$\sigma_{macs}(T)$ : سطح مقطع میکروسکوپی برای طیف ماکسول

3 (H)	1	58	3.23E-02	1.82E-06	3.23E-02	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
-------	---	----	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------

برای مثال، نمودارهای هر دو سطح مقطع جذب و سطح مقطع کل میکروسکوپی حاصل شده از کد MCNPX برای هیدروژن ( ) برای محدوده وسیعی از انرژی‌های نوترون فرودی در شکل ۳ نمایش داده شده است.



شکل ۳- صفحه‌نمایش ماژول در حال نشان دادن نمودارهای سطح مقطع‌های میکروسکوپی جذب و کل برای هیدروژن .  
 ۲.۲. تعیین سطح مقطع‌های رادیو ایزوتوپ‌ها با استفاده از کد NJOY  
 در این تحقیق، سطح مقطع‌های رادیو ایزوتوپ‌ها و عناصر علاوه بر کد MCNPX با کد NJOY نیز به‌دست آمده و مقایسه شده است. لذا ماژول دیگری تحت عنوان "AutoNJOY" جهت ایجاد ارتباط بین برنامه Delphi 7 و کد NJOY طراحی می‌شود که سطح مقطع‌های رادیو ایزوتوپ‌ها بتوانند به‌طور خودکار در دماهای مختلف و دلخواه تعیین شوند. از این رو توسط

زمان اجرای کد NJOY

پس از آن با کلیک کردن بر روی دکمه "Unite File"، سطح مقطع‌های جدید مربوط به ایزوتوپ مورد نظر به یک فایل که در قسمت "File Name" ماژول (مطابق شکل ۵) نام‌گذاری شده است تجمیع می‌شود. در این حالت مشخصه‌های ایزوتوپ در همان دمای دلخواهی که به ماژول AutoNJOY داده شده است به طور خودکار از فایل تولید شده جدید تحت عنوان New Folder جزو دسته فایلها می‌باشد کپی گرفته می‌شود و در فایل "xsdir" که جزو دسته فایلها کد MCNPX می‌باشد چسبانده می‌شود. برای مثال، مشخصه‌های ایزوتوپ در دمای ۳۰۵ کلوین به صورت زیر به دست می‌آید:

c.999170 ali1 0 1 5921469 6611 0 0 ۱۰۰۱۸۱  
2.628E-08

بدین ترتیب، سطح مقطع‌های تولید شده این ایزوتوپ در دمای جدید از این پس برای برنامه Delphi 7 تعریف می‌شود. پس از کلیک بر روی دکمه "Run with ACE" Lib، سطح مقطع‌های محاسبه شده توسط کد NJOY به ماژول اولی (اصلی) منتقل می‌شود و در نهایت با سطح مقطع‌های محاسبه شده از کد MCNPX مقایسه می‌گردد.

### ۳. نتایج

نمودارهای سطح مقطع‌های میکروسکوپی کل و نیز سطح مقطع‌های تولید حرارت برای برخی از عناصر مانند اکسیژن، نیتروژن

و هیدروژن که توسط این ماژول از کدهای NJOY و MCNPX استخراج و حاصل شده‌اند، در شکل‌های ۶ تا ۱۱ برای محدوده وسیعی از انرژی‌های نوترون فرودی نمایش داده شده‌اند. در این تحقیق، ۶۱ انرژی برای نوترون فرودی به طور دلخواه در نظر گرفته شده است.

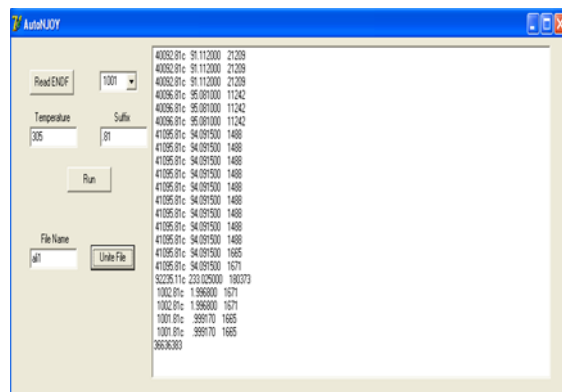
$$\sigma_{res}(T) = \int_{E_L}^{E_U} \sigma(E,T) \cdot \frac{1}{E} dE \quad (۳)$$

$\sigma_{res}(T)$  : سطح مقطع میکروسکوپی برای طیف رزونانس

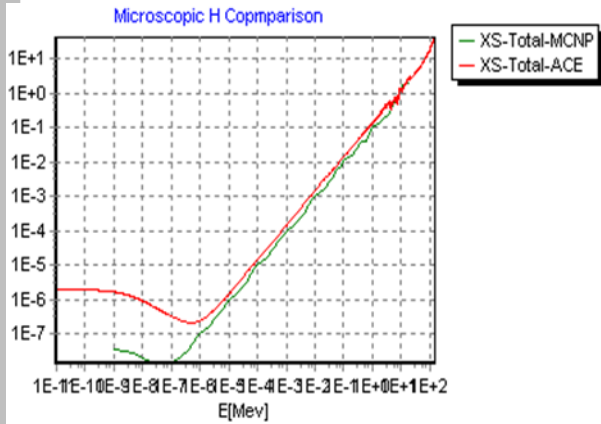
$$\sigma_{fis} = \frac{\int_{E_L}^{E_U} \sigma(E,T) \cdot \sqrt{\frac{4}{\pi a^3 b}} \cdot \exp\left(-\frac{ab}{4} - \frac{E}{a}\right) \cdot \sinh \sqrt{bEdE}}{\int_{E_L}^{E_U} \sqrt{\frac{4}{\pi a^3 b}} \cdot \exp\left(-\frac{ab}{4} - \frac{E}{a}\right) \cdot \sinh \sqrt{bEdE}} \quad (۴)$$

$\sigma_{fis}$  : سطح مقطع میکروسکوپی برای طیف شکافت

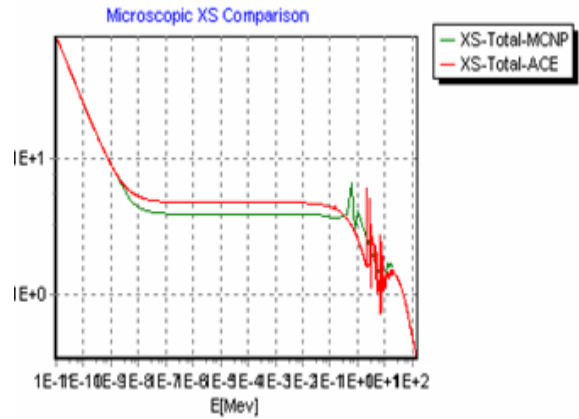
بطوریکه: a و b به ترتیب عبارت‌اند از: ۰.۹۸۸ و ۲.۲۴۹. در این قسمت، تمامی سطح مقطع‌ها از کد NJOY و فرمت استاندارد کتابخانه ACE استخراج می‌گردند. بنابراین کد NJOY، کتابخانه‌ها را خوانده و آن‌ها را به فایل‌های TAPE تبدیل می‌نماید. در ماژول AutoNJOY پس از کلیک کردن بر روی گزینه "Read ENDF" رادیو ایزوتوپ‌ها از کتابخانه ENDF خوانده می‌شوند و زمانی که دمای دلخواه به قسمت مربوطه در این ماژول وارد می‌شود، سطح مقطع‌های جدید در همان دمای دلخواه داده شده به ماژول توسط کلیک بر روی دکمه "Run" تولید می‌شود. مقادیر جدید سطح مقطع برای برخی از انرژی‌هایی که از قبل در کتابخانه موجود نمی‌باشند از طریق درون‌یابی تعیین می‌شوند. صفحه‌نمایش این ماژول مطابق شکل ۵ می‌باشد:



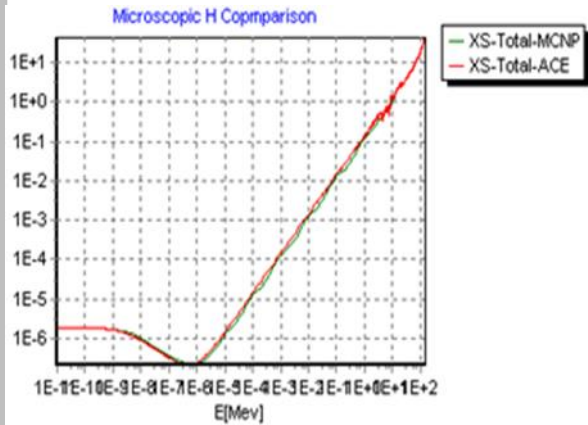
شکل ۵- صفحه‌نمایش ماژول هسته‌ای AutoNJOY



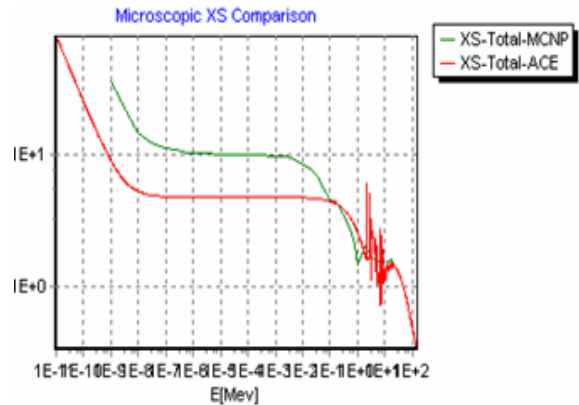
شکل ۹- نمودارهای سطح مقطع‌های تولید حرارت برای اکسیژن ( $H^O$ ) که توسط این ماژول از کدهای MCNPX و NJOY استخراج شده است.



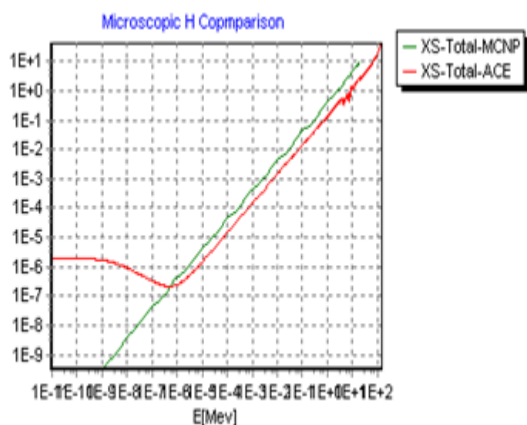
شکل ۶- سطح مقطع‌های میکروسکوپی کل برای اکسیژن ( $\sigma_i^O$ ).



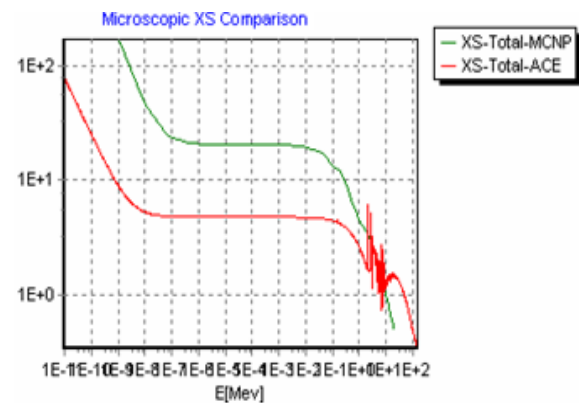
شکل ۱۰- نمودارهای سطح مقطع‌های تولید حرارت برای نیتروژن ( $H^N$ ) که توسط این ماژول از کدهای MCNPX و NJOY استخراج شده است.



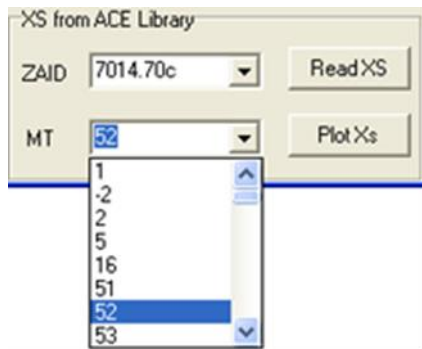
شکل ۷- سطح مقطع‌های میکروسکوپی کل برای نیتروژن ( $\sigma_i^N$ ).



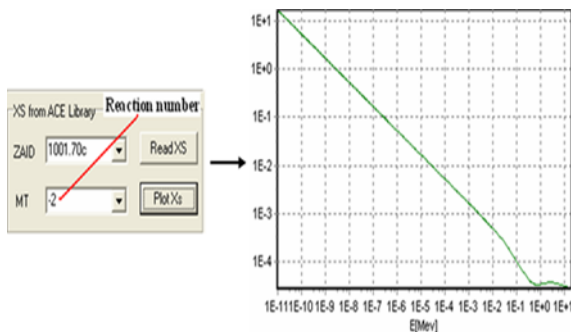
شکل ۱۱- نمودارهای سطح مقطع‌های تولید حرارت برای هیدروژن ( $H^H$ ) که توسط این ماژول از کدهای MCNPX و NJOY استخراج شده است.



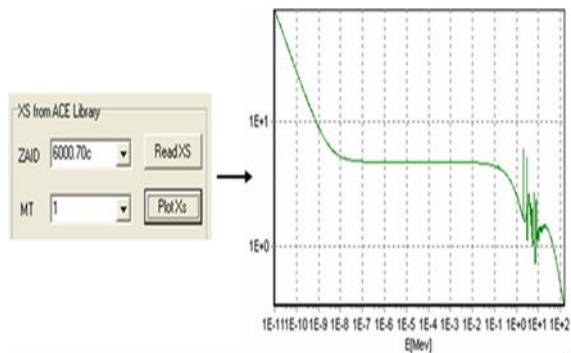
شکل ۸- سطح مقطع‌های میکروسکوپی کل برای هیدروژن ( $\sigma_i^H$ ).



شکل ۱۳- نمایان شدن شماره واکنش‌ها بر روی صفحه‌نمایش.



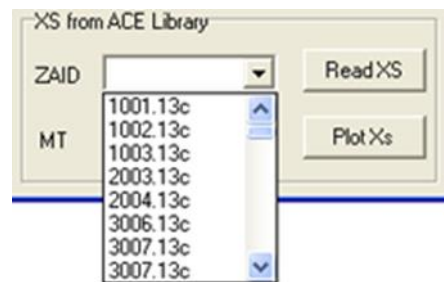
شکل ۱۴- سطح مقطع‌های میکروسکوپی جذب استخراج‌شده توسط این ماژول برای ایزوتوپ هیدروژن (c۱۰۰۱.۷۰).



شکل ۱۵- سطح مقطع‌های میکروسکوپی کل استخراج‌شده توسط این ماژول برای ایزوتوپ کربن (c۶۰۰۰.۷۰).

همان‌طوری که مشاهده می‌شود توسط این ماژول، با اجرا کردن خودکار کد NJOY، مقادیر سطح مقطع کلیه رادیو ایزوتوپ‌ها به ازای دماهای مختلف، خودکار وار به‌دست‌آمده و به‌صورت نموداری ترسیم می‌گردد. همچنین با اجرا کردن کد MCNPX بدون نیاز به محاسبات دستی و به‌صورت کاملاً خودکار، تمامی سطح مقطع‌ها برای تعداد گروه‌های مختلف انرژی و انرژی‌های دلخواه نوترونی تعیین و ترسیم می‌شود.

این ماژول همچنین قادر است که به‌صورت خودکار به کتابخانه ACE متصل شود و سطح مقطع‌های میکروسکوپی همه عناصر و ایزوتوپ‌هایشان که دارای ZAJD های مختلف هستند را بخواند. در ابتدا با کلیک بر روی دکمه "Read XS"، کتابخانه ACE خوانده می‌شود و سپس ZAJD ایزوتوپ‌ها مطابق شکل ۱۲ بر روی صفحه‌نمایش ظاهر می‌شوند:



شکل ۱۲- نمایان شدن ایزوتوپ‌ها بر روی صفحه‌نمایش علامت دیگری تحت عنوان: "MT" بر روی این صفحه‌نمایش وجود دارد بطوریکه با کلیک کردن بر روی "Plot XS"، شماره واکنش‌های رادیو ایزوتوپ‌ها همگی بر روی آن ظاهر می‌شوند.

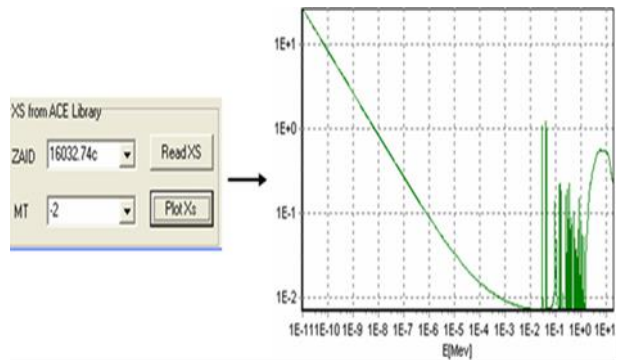
این شماره واکنش‌ها توصیف‌کننده نوع سطح مقطع‌های دلخواه می‌باشند. برای مثال، کلیک بر روی ۱ و ۲ باعث می‌شود که سطح مقطع‌های میکروسکوپی جذب و کل به ترتیب نمایش داده شوند.



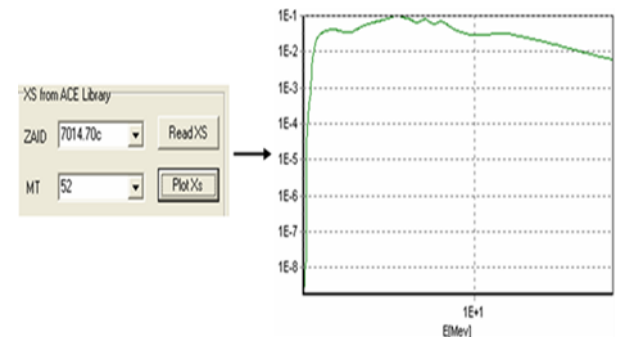
افزایش تعداد گروه‌های محاسباتی برای محاسبه سطح مقطع‌ها از طریق کد MCNPX (طبق رابطه ۱) می‌باشد. در این قسمت، نتایج به‌دست‌آمده از ماژول حاضر در این تحقیق با نتایج به‌دست‌آمده از روش‌های موجود، در قالب دو جدول‌های ۲ و ۳ با یکدیگر مقایسه گردیده و نمایش داده‌شده‌اند [۱۱، ۱۲، ۱۳]. تفاضل ( $\pm$ ) نتایج نیز در این دو جدول محاسبه گردیده‌اند.

جدول ۲- سطح مقطع‌های میکروسکوپی کل برای هیدروژن، مستخرج از ماژول معرفی‌شده در این تحقیق و نیز روش‌های موجود و مقایسه بین نتایج

تفاضل مقادیر استخراج‌شده از ماژول در مقایسه با مقادیر روش‌های موجود ( $\pm$ )	سطح مقطع میکروسکوپی کل ( $\sigma_T$ ) استخراج‌شده از روش‌های موجود برحسب Barn	سطح مقطع میکروسکوپی کل ( $\sigma_T$ ) استخراج‌شده از ماژول موجود در این تحقیق برحسب Barn	انرژی نوترونی برحسب eV
-1.30E+01	1190.027	1.18E+03	0.00001
-7.42E+00	1133.425	1.13E+03	0.00001094
-1.36E+01	1079.624	1.07E+03	0.00001219
-1.23E+01	1.03E+03	1.02E+03	0.00001344
2.43E+00	979.4698	9.82E+02	0.00001438
-9.29E+00	932.8909	9.24E+02	0.00001625
-1.41E+01	8.89E+02	8.75E+02	0.00001812
-1.39E+01	846.3568	8.33E+02	0.00002
-3.86E+00	7.68E+02	7.64E+02	0.00002375
-8.92E+00	731.4214	7.23E+02	0.00002656
-7.19E+00	6.64E+02	6.56E+02	0.00003219
-3.77E+00	602.0675	5.98E+02	0.00003875
-2.15E+00	5.73E+02	5.71E+02	0.0000425
-9.36E+00	546.2552	5.37E+02	0.00004813
-1.60E+00	520.2992	5.19E+02	0.00005156
-8.84E-01	472.084	4.71E+02	0.0000625
-4.05E-01	449.7055	4.49E+02	0.00006875
-6.75E+00	4.28E+02	4.22E+02	0.00007813
-2.35E+00	408.0518	4.06E+02	0.00008438
-3.27E+00	3.70E+02	3.67E+02	0.0001031
-1.20E+00	352.7033	3.52E+02	0.0001125
-2.51E+00	336.0057	3.34E+02	0.000125
-2.07E+00	3.20E+02	3.18E+02	0.0001375
-4.30E-01	304.9295	3.05E+02	0.00015
3.52E-01	2.77E+02	2.77E+02	0.0001812
-5.75E+00	263.6451	2.58E+02	0.0002094
-3.99E+00	251.193	2.47E+02	0.0002281
-1.61E+00	2.39E+02	2.38E+02	0.0002469
-2.72E+00	228.0226	2.25E+02	0.000275
-2.65E+00	217.2513	2.15E+02	0.0003031
-1.62E+00	2.07E+02	2.05E+02	0.0003313
-2.45E+00	197.2526	1.95E+02	0.0003687
-2.38E+00	187.9755	1.86E+02	0.0004063
-1.43E+00	1.79E+02	1.78E+02	0.0004437
-2.40E+00	162.6997	1.60E+02	0.0005469



شکل ۱۶- سطح مقطع‌های میکروسکوپی جذب استخراج‌شده توسط این ماژول برای ایزوتوپ سولفور ( $^{16}\text{O}$ ).



شکل ۱۷- سطح مقطع‌های میکروسکوپی واکنش ( $n,3n$ ) استخراج‌شده توسط این ماژول برای ایزوتوپ نیتروژن ( $^{14}\text{N}$ ).

مطابق شکل‌های ۶ تا ۱۱، این‌طور مشاهده می‌شود که برای محدوده نوترون‌های حرارتی تا سریع، سطح مقطع‌های هسته‌ای و سطح مقطع‌های تولید حرارت استخراج‌شده از کد NJOY تقریباً مشابه با نتایج به‌دست‌آمده از کد MCNPX می‌باشد و نمودارهای استخراج روش کار بیان شد سطح مقطع‌های به‌دست‌آمده از کد MCNPX (نمودار سبز) فقط برای ۵۸ گروه انرژی و با استفاده از روش محاسباتی طبق رابطه ۱ و با استفاده از برنامه‌نویسی 7 Delphi در نظر گرفته‌شده است حال آنکه در نمودار قرمز رنگ، سطح مقطع‌ها توسط کد NJOY و به‌طور مستقیم از کتابخانه ACE و عمدتاً با تعداد گروه انرژی‌های زیاد به‌دست‌آمده است. راه‌حل از بین بردن این اختلاف، در

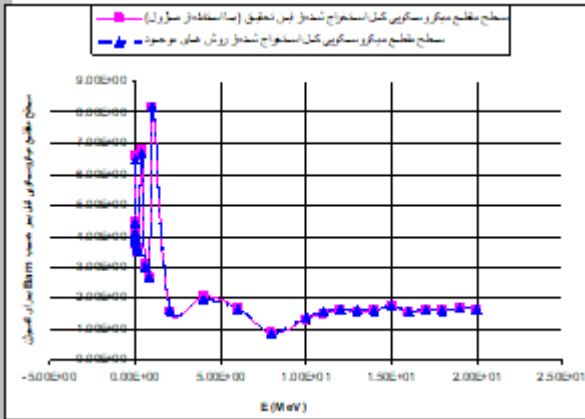
-1.50E-03	6.127505	6.13E+00	500000	-1.32E+00	147.8176	1.47E+02	0.0006562
0.00E+00	5.57E+00	5.57E+00	600000	-8.18E-01	140.9176	1.40E+02	0.0007188
-1.07E-04	5.132107	5.13E+00	700000	-2.34E+00	1.34E+02	1.32E+02	0.0008125
3.48E-04	4.781652	4.78E+00	800000	-7.90E-01	128.0904	1.27E+02	0.000875
4.58E-04	4.49E+00	4.49E+00	900000	-1.03E+00	122.134	1.21E+02	0.0009687
-5.32E-04	3.850532	3.85E+00	1200000	-6.79E-01	1.16E+02	1.16E+02	0.001063
1.86E-04	3.54E+00	3.54E+00	1400000	-1.39E+00	111.0885	1.10E+02	0.001188
-3.73E-04	3.291373	3.29E+00	1600000	-1.47E+00	105.9721	1.05E+02	0.001312
-2.43E-04	3.082243	3.08E+00	1800000	-1.10E+00	1.01E+02	1.00E+02	0.001438
2.22E-02	2.88E+00	2.90E+00	2000000	-4.01E-01	96.47087	9.61E+01	0.001562
2.16E-02	2.727377	2.75E+00	2200000	-1.07E+00	92.06436	9.10E+01	0.00175
2.07E-02	2.591348	2.61E+00	2400000	-1.21E+00	8.79E+01	8.67E+01	0.001937
1.98E-02	2.47E+00	2.49E+00	2600000	-3.65E-01	83.90463	8.35E+01	0.002094
1.98E-02	2.361176	2.38E+00	2800000	-1.42E+00	80.13116	7.87E+01	0.002375
1.96E-02	2.2624	2.28E+00	3000000	-5.90E-01	7.65E+01	7.60E+01	0.002563
3.75E-02	2.15E+00	2.19E+00	3200000	-7.87E-01	73.13693	7.24E+01	0.002844
-2.13E-02	2.052308	2.03E+00	3600000	-6.50E-01	69.90019	6.93E+01	0.003125
1.73E-02	1.942683	1.96E+00	3800000	-2.75E-01	6.68E+01	6.66E+01	0.003406
1.73E-04	1.83E+00	1.83E+00	4200000	-4.62E-01	63.92153	6.35E+01	0.003781
-1.56E-04	1.721156	1.72E+00	4600000	-9.75E-01	61.16461	6.02E+01	0.00425
-3.58E-04	1.622358	1.62E+00	5000000	-8.31E-01	56.07133	5.52E+01	0.005156
4.07E-04	1.51E+00	1.51E+00	5500000	-5.43E-01	53.72314	5.32E+01	0.005625
-1.96E-04	1.418196	1.42E+00	6000000	-6.96E-01	5.15E+01	5.08E+01	0.00625
2.53E-04	1.333747	1.33E+00	6500000	-6.14E-01	49.40432	4.88E+01	0.006875
-4.04E-04	1.26E+00	1.26E+00	7000000	-3.73E-01	47.42252	4.71E+01	0.0075
1.32E-02	1.177793	1.19E+00	7500000	-2.73E-02	4.55E+01	4.55E+01	0.008125
1.29E-02	1.117065	1.13E+00	8000000	-2.41E-01	43.78149	4.35E+01	0.009062
1.21E-02	1.06E+00	1.07E+00	8500000	-5.15E-01	41.88496	4.14E+01	0.01031
1.13E-02	1.011669	1.02E+00	9000000	-1.14E-01	4.01E+01	4.00E+01	0.01125
1.15E-02	0.9656373	9.77E-01	9500000	-3.73E-01	38.46301	3.81E+01	0.01281
1.11E-02	9.23E-01	9.34E-01	10000000	-3.96E-01	36.92562	3.65E+01	0.01437
1.08E-02	0.8843188	8.95E-01	10500000	-2.64E-02	3.55E+01	3.55E+01	0.01562
1.05E-02	0.8482309	8.59E-01	11000000	-4.40E-01	34.17	3.37E+01	0.01812
-1.11E-02	8.05E-01	7.94E-01	12000000	-2.71E-01	32.94124	3.27E+01	0.02
9.62E-03	0.7545846	7.64E-01	12500000	-9.51E-02	3.18E+01	3.17E+01	0.02199
-1.58E-05	0.7112158	7.11E-01	13500000	-1.95E-01	30.60466	3.04E+01	0.0253
-3.06E-03	0.6261576	6.23E-01	15500000	-1.97E-01	2.95E+01	2.93E+01	0.02877
-1.70E-03	0.5878048	5.86E-01	16500000	-9.93E-02	28.56926	2.85E+01	0.03225
-4.60E-06	5.53E-01	5.53E-01	17500000	-8.11E-02	27.69112	2.76E+01	0.03649
3.58E-05	0.5227642	5.23E-01	18500000	-6.94E-02	2.69E+01	2.68E+01	0.04132
6.37E-03	0.489132	4.96E-01	19500000	-1.21E-01	26.11129	2.60E+01	0.04807
1.62E-05	4.83E-01	4.83E-01	20000000	-6.25E-02	25.41247	2.54E+01	0.05469
				-7.69E-02	2.47E+01	2.47E+01	0.06406
				-8.01E-02	24.15015	2.41E+01	0.075
				-2.84E-02	23.59844	2.36E+01	0.0875
				-6.16E-02	2.31E+01	2.30E+01	0.1063
				-3.65E-02	22.63648	2.26E+01	0.1281
				-5.94E-03	22.23594	2.22E+01	0.1563
				-2.03E-02	2.19E+01	2.19E+01	0.2
				-4.04E-02	21.55042	2.15E+01	0.2656
				-2.94E-02	21.26938	2.12E+01	0.3594
				-3.03E-03	20.84303	2.08E+01	0.75
				2.37E-03	20.68763	2.07E+01	1.25
				-7.00E-05	2.06E+01	2.06E+01	2.563
				1.70E-03	20.4383	2.04E+01	68.75
				2.26E-02	2.00E+01	2.00E+01	3500
				1.03E-01	18.79682	1.89E+01	12500
				1.16E-01	17.98423	1.81E+01	20000
				4.46E-02	1.63E+01	1.63E+01	40000
				5.17E-02	14.81828	1.49E+01	60000
				4.84E-02	13.65157	1.37E+01	80000
				-5.09E-03	1.27E+01	1.27E+01	100000
				-3.85E-03	10.92385	1.09E+01	150000
				4.12E-04	9.643588	9.64E+00	200000
				-2.99E-04	7.95E+00	7.95E+00	300000
				3.63E-04	6.876637	6.88E+00	400000

جدول ۳- سطح مقطع‌های میکروسکوپی کل برای

اکسیژن، مستخرج از ماژول معرفی شده در این تحقیق و

نیز روش‌های موجود و مقایسه بین نتایج

تفاضل مقادیر استخراج شده از ماژول در مقایسه با مقادیر روش‌های موجود (±)	سطح مقطع میکروسکوپی کل ( $\sigma_T$ ) استخراج شده از روش‌های موجود بر حسب Barn	سطح مقطع میکروسکوپی کل ( $\sigma_T$ ) استخراج شده از ماژول موجود در این تحقیق بر حسب Barn	انرژی نوترونی بر حسب eV
9.42E-02	6.48E+00	6.57E+00	1.00E-09
1.05E-02	4.45E+00	4.47E+00	5.00E-09
3.59E-02	4.12E+00	4.16E+00	1.00E-08
-1.26E-03	4.01E+00	4.01E+00	2.00E-08
6.22E-03	3.92E+00	3.93E+00	3.90E-08
9.85E-03	3.89E+00	3.90E+00	6.02E-08
1.42E-02	3.87E+00	3.88E+00	1.00E-07



شکل ۱۹- سطح مقطع‌های میکروسکوپی کل برای اکسیژن، مستخرج از ماژول معرفی شده در این تحقیق و نیز روش‌های موجود

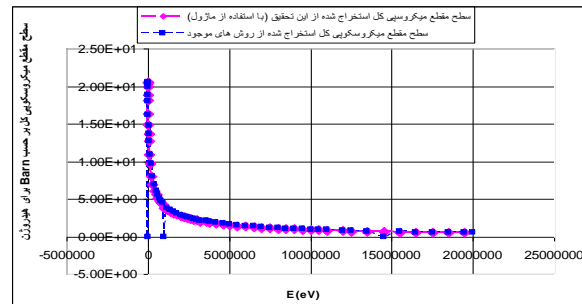
۴. نتیجه‌گیری

ماژول‌های طراحی شده در این تحقیق می‌توانند به‌طور عملی برای محاسبات سطح مقطع‌ها برای تمامی محاسبات هسته‌ای در راکتورها و نیز پرتو پزشکی مورد استفاده قرار بگیرند.

همان‌گونه که در شکل‌های ۱۸ و ۱۹ مشاهده می‌شود، سطح مقطع‌های میکروسکوپی کل برای یک ایزوتوپ از هیدروژن و اکسیژن که از ماژول موجود در این تحقیق مستخرج شده بود به‌طور کاملاً دقیق با مقادیر سطح مقطع میکروسکوپی به‌دست آمده از روش‌های موجود در بازه انرژی نوترون‌های حرارتی تا نوترون‌های سریع مطابقت دارد و منحنی آن‌ها نیز به‌طور کاملاً خوبی با یکدیگر همپوشانی دارند.

1.50E-02	3.85E+00	3.87E+00	2.00E-07
1.22E-02	3.84E+00	3.86E+00	1.00E-06
1.24E-02	3.68E+00	3.69E+00	7.50E-02
3.03E-02	3.61E+00	3.64E+00	1.00E-01
-2.75E-02	3.50E+00	3.48E+00	2.00E-01
9.52E-02	6.70E+00	6.80E+00	4.00E-01
6.47E-02	3.04E+00	3.11E+00	6.00E-01
1.01E-02	2.71E+00	2.72E+00	8.00E-01
-4.73E-02	8.20E+00	8.15E+00	1.00E+00
-3.54E-02	1.62E+00	1.58E+00	2.00E+00
9.90E-02	1.98E+00	2.08E+00	4.00E+00
5.00E-02	1.64E+00	1.69E+00	6.00E+00
-2.76E-02	8.93E-01	8.65E-01	8.00E+00
-5.93E-02	1.37E+00	1.32E+00	1.00E+01
-5.45E-02	1.56E+00	1.51E+00	1.10E+01
1.26E-02	1.64E+00	1.65E+00	1.20E+01
-7.98E-03	1.59E+00	1.58E+00	1.30E+01
-1.64E-02	1.61E+00	1.59E+00	1.40E+01
3.22E-03	1.76E+00	1.77E+00	1.50E+01
-2.63E-02	1.58E+00	1.55E+00	1.60E+01
-3.04E-02	1.64E+00	1.61E+00	1.70E+01
2.82E-03	1.62E+00	1.62E+00	1.80E+01
4.69E-03	1.69E+00	1.69E+00	1.90E+01
-9.35E-04	1.64E+00	1.64E+00	2.00E+01

همچنین شکل‌های ۱۸ و ۱۹ به ترتیب سطح مقطع‌های میکروسکوپی کل را برای یکی از ایزوتوپ‌های هیدروژن و اکسیژن در دمای ۳۰۰ K نمایش می‌دهند:



شکل ۱۸- سطح مقطع‌های میکروسکوپی کل برای هیدروژن، مستخرج از ماژول معرفی شده در این تحقیق و نیز روش‌های موجود

- [1] M. M. Sarker, S. I. Bhuiyan, S. Bosu, M. T. Chowdhury, "A comparative study of WIMSLIB group constants processed through NJOY'99 from ENDF/B-VI and JENDL-3.3 for 20Ca, 12Mg, 15P, 16S, 14Si, 22Ti, and 23V," *Progress in Nuclear Energy*, vol. 49, pp. 529-533, 2007.
- [2] M. Košťál, F. Cvachovec, B. Jánský, V Rypar, V Juříček and et al., "Neutron deep penetration through reactor pressure vessel and biological concrete shield of VVER-1000 Mock-Up in LR-0 reactor," *Annals of Nuclear Energy*, vol. 94, pp. 672-683, 2016.
- [3] K. J. R. Rosman, P. D. P. Taylor, "Isotopic compositions of the elements 1997 (Technical Report)," *Pure and Applied Chemistry*, vol. 70, pp. 217-235, 1998.
- [4] M. Berglund, M. E. Wieser, "Isotopic compositions of the elements (IUPAC Technical Report)," *Pure and Applied Chemistry*, vol. 83, pp. 397-410, 2009.
- [5] G. Audia, A. H. Wapstrab, C. Thibaulta, "The AME2003 atomic mass evaluation: (II). Tables, graphs and references," *Nuclear Physics A*, vol. 729, pp. 337-676, 2003.
- [6] Y. P. Mahlers, "VVER-1000 neutronics calculation with ENDF/B-VII data," *Annals of Nuclear Energy*, vol. 36, pp. 1224-1229, 2009.
- [7] B. Pritychenko, "Calculations of Nuclear Astrophysics and Californium Fission Neutron Spectrum Averaged Cross Section Uncertainties Using ENDF/B-VII.1, JEFF-3.1.2, JENDL-4.0 and Low-fidelity Covariances," *Nuclear Data Sheets*, vol. 123, pp. 119-123, 2015.
- [8] W. L. Dunn, J. Kenneth Shultis, "Exploring Monte Carlo Methods," Academic Press is an imprint of Elsevier (USA) Chapter 10, 2012.
- [9] S. Keiichi, N. Tsuneo, S. Hidemitsu, K. Hiromitsu, Curves and tables of neutron cross sections in JENDL-3.2. JAERI-Data/Code 97-003, 1997.
- [10] N. Tsuneo, S. Keiichi, C. Satoshi, F. Tokio, N. Yutaka and et al, "Japanese evaluated nuclear data library," version 3 revision-2; JENDL-3.2. *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 32, pp. 1259-1271, 1995.
- [11] W. Haeck and B. Verboomen, "A Validated MCNP(X) Cross Section Library based on JEFF 3.1," OPEN REPORT SCK • CEN-BLG-1034 Rev. 0, Belgium , 2006.
- [12] J. Eduard. Hoogenboom, A. Khotylev and M. Tholammakkil, "Generation of Multi-Group Cross Sections and Scattering Matrices with the Monte Carlo Code Mcnp5," *Proceeding of the Joint International Topical Meeting on Mathematics & Computation and Supercomputing in Nuclear Applications*, American Nuclear Society-ANS, Monterey, CA (United States), Apr 15-19, 2007.
- [13] M. Kerby and G. Mashnik, "Total reaction cross sections in CEM and MCNP6 at intermediate energies," *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, vols. 356-357, pp. 135-145, 2015.