

دراسة تأثير درجة الحرارة على المقاطع العرضية للأسر والتشتت النيوتروني

آلاء الأحمد¹

الملخص

تدرس هذه المقالة التأثيرات الهيكلية والديناميكية لتغيرات درجة الحرارة على المقاطع العرضية المجهرية والماكروسكوبية لتفاعلات الأسر الإشعاعي والتشتت النيوتروني المرن عبر ظاهرة اتساع دوبلر. يستند الإطار النظري إلى معالجة رياضية تنطلق من نموذج الغاز الحر وصيغة بريت-واغنر أحادية المستوى لدوال فويغت، إضافة إلى قانون التشتت الحراري العام $S(\alpha, \beta)$ لدراسة أثر الترابط الكيميائي واهتزازات الشبكة البلورية عند الطاقات المنخفضة. تضمنت الدراسة تطبيقاً عددياً على قمة الرنين الأساسية الأولى لنظير اليورانيوم ^{238}U عند طاقة $E_0 = 6.673 \text{ eV}$ ضمن مدى حراري يمتد من 300 K إلى 900 K و 1200 K. كشفت النتائج عن انخفاض الارتفاع الأقصى لقمة الرنين بنسبة 36.4% عند الانتقال من 300 K إلى 900 K، لتصل نسبة الانخفاض الكلية إلى 43.9% عند 1200 K، مع اتساع قاعدة المنحني وتضاعف العرض الكامل عند نصف القمة FWHM. يترتب على هذا التسطح تراجع مباشر في ظاهرة الحجب الذاتي الفضائي والطاقي، مما يرفع الامتصاص الماكروسكوبي الإجمالي ويؤدّ معامل التغذية الراجعة السلبية للتفاعلية.

الكلمات المفتاحية: اتساع دوبلر، المقطع العرضي النيوتروني، نموذج الغاز الحر، الحجب الذاتي.

Study of Temperature Effect on Neutron Capture and Scattering Cross Sections

Alaa Al-Ahmad²

Abstract

¹ ماجستير في الفيزياء النظرية.

² Master in Theoretical Physics.

This study investigates the structural and dynamic effects of temperature variations on microscopic and macroscopic cross sections for radiative capture, as well as elastic neutron scattering via Doppler broadening. The theoretical framework relies on a mathematical formulation based on the Free Gas Model and single-level Breit-Wigner formalism for Voigt profiles, extended by the generalized thermal scattering law $S(\alpha, \beta)$ to evaluate chemical binding and crystal lattice vibration effects at low thermal energies.

A numerical application was conducted on the primary resonance peak of ^{238}U at $E_0 = 6.673 \text{ eV}$ across a temperature range of 300 K, 900 K, and 1200 K. The results revealed a 36.4% reduction in peak height from 300 K to 900 K, reaching a total drop of 43.9% at 1200 K, along with a broadened resonance base and nearly a doubling of the Full Width at Half Maximum (FWHM). This structural flattening leads to a direct decline in spatial and energy self-shielding, increasing total macroscopic absorption and generating the Negative Doppler Reactivity Coefficient.

Keywords: Doppler Broadening, Neutron Cross Section, Free Gas Model, Self-Shielding.

1. المقدمة

إن فيزياء المفاعلات النووية وحسابات التهدة والوقاية الإشعاعية تستند إلى مفهوم المقطع العرضي النيوتروني Neutron Cross Section، وهو المقياس الكمي الذي يعبر عن الاحتمال الفيزيائي لحدوث تفاعل محدد بين نيوترون ساقط ونواة هدف. يُقاس هذا المقطع المجهرى σ بوحدة البارن barn، ويتوقف مقدار هذه الاحتمال كلياً على الطاقة الحركية النسبية للمنظومة المكونة من الجسيم الساقط والنواة المستهدفة [1,2].

في النماذج النظرية المبسطة، يُفترض غالباً أن النوى الهدف تقع في حالة سكون تام عند درجة حرارة الصفر المطلق $T = 0 \text{ K}$. غير أن الواقع التجريبي داخل قلب المفاعل أو في الوسط المهدئ يختلف بوضوح؛ إذ توجد المادة دائماً عند درجات حرارة غير معدومة $T > 0 \text{ K}$. تكتسب النوى بناءً على ذلك طاقة حركية حرارية تجعلها في حالة اهتزاز دائمة ومستمرة. تتوزع سرعات النوى في المواد الغازية والسائلة وفق قانون ماكسويل-بولتزمان، بينما تخضع في الأجسام الصلبة والوقود النووي لاهتزازات الشبكة البلورية المقيدة Anharmonic Lattice Vibrations أو ما يُعرف بالفونونات Phonons [1-3].

إن هذه الحركة الاهتزازية الحرارية تُغير من مفهوم السرعة النسبية والتصادم؛ فالنيوترون القادم بطاقة محددة في إطار المختبر يرى نواة تبتعد عنه أو تقترب منه بسرعات عشوائية. يترتب على هذا التباين الشديد تغير ظاهري في الطاقة الحركية للتصادم، وهو ما ينعكس فيزيائياً في تشوه شكل قمم الرنين Resonances الخاصة بالأسر والتشتت. تُعرف هذه الظاهرة باسم "اتساع دوبلر Doppler Broadening"، وهي تشبه إلى حد كبير ظاهرة دوبلر الصوتية والضوئية، لكنها تدرس هنا في إطار ميكانيك الكم والميكانيك الإحصائي [1-3].

تتجلى أهمية التوسع في دراسة التأثيرات الحرارية في كون المفاعلات النووية منظومات ديناميكية تتغير درجات حرارتها باستمرار بين بدء التشغيل، والوصول إلى القدرة الاسمية، وحالات الانحراف الطارئ. إن توصيف هذه التغيرات وتأثيرها على احتماليات الأسر والتشتت ليس مجرد ترف أكاديمي، بل هو الأساس الذي تقوم عليه تصميمات أنظمة الأمان الذاتي وتحسين دورة الوقود النووي [1-3].

2. مشكلة البحث

تكمن المشكلة العلمية والتقنية الشاملة في أن اعتماد البيانات المجهرية للمقاطع العرضية عند درجة الحرارة الصفرية $T = 0 \text{ K}$ ، أو استخدام التقريبات الحسابية السطحية للحرارة، يُدخل خطأً نظامياً كبيراً Systematic Error في الحسابات النيوترونية، مما ينعكس سلباً على التنبؤ بمعدلات التفاعل Reaction Rates وديناميكية المفاعل. وتنبؤ أبعاد هذه المشكلة في المحاور التالية:

1. انحراف تقييم الحجب الذاتي: في قلب المفاعل غير المتجانس، تتميز النوى الثقيلة مثل اليورانيوم ^{238}U بقيم أسر هائلة عند قمم الرنين. يتسبب هذا الامتصاص العالي في صدمة للتدفق النيوتروني Flux Depression عند هذه الطاقات بالذات محلياً وفضائياً. عندما ترتفع درجة الحرارة وتنخفض القمة وتنتسج القاعدة، يقل هذا الحجب الذاتي بشكل ملحوظ، مما يتيح للنيوترونات الاختراق إلى أطراف عميقة داخل الوقود. إن عدم النمذجة الدقيقة لهذه الظاهرة يؤدي إلى أخطاء كبيرة في حساب معدل توليد البلوتونيوم ^{239}Pu وعامل التكاثر الفعال k_{eff} .

2. القصور في التنبؤ بمعامل دوبلر للتفاعلية: يُعد معامل دوبلر خط الدفاع الأول لردع أي ارتفاع فجائي في التفاعلية. إهمال التغيرات الحرارية أو استخدام نماذج خطية مبسطة يحرم المهندسين من تقدير القيمة الحقيقية للاستجابة الديناميكية للمفاعل أثناء الحوادث العابرة Transient Events مثل التحرير المفاجئ لقضبان التحكم.

3. تجاهل التشتت التصاعدي والترابط الهيكلي Thermal Up-Scattering & Chemical Binding: عند الطاقات الحرارية والمنخفضة، تتداخل طاقة النيوترون مع مستويات طاقة الاهتزاز الجزيئي والبلوري. استخدام "نموذج الغاز الحر" كنموذج مطلق دون أخذ بنية المادة في الاعتبار يؤدي إلى إهمال ظاهرة اكتساب النيوترون للطاقة من النوى الاهتزازية Thermal Up-Scattering، وهو ما يسبب انحرافاً واضحاً في حساب طيف التدفق المهدأ وتصميم المهدئات مثل الغرافيت والماء الثقيل.

3. أهداف البحث

تسعى هذه الدراسة إلى تحقيق مجموعة من الأهداف العلمية والتطبيقية المتكاملة:

1. الصياغة النظرية الشاملة والموسعة لآليات الفيزيائية والرياضية التي تحكم تأثير درجة الحرارة على المقاطع العرضية للأسر والتشتت النيوتروني.
2. اشتقاق ودراسة العلاقات الرياضية الخاصة بنموذج الغاز الحر Free Gas Model ودوال فويغت (χ و ψ) للتداخل والتسخين.

3. معالجة السلوك الفيزيائي للتشتت النيوتروني عند الطاقات المنخفضة والحرارية من خلال دمج قانون التشتت الحراري المزدوج $S(\alpha, \beta)$.
4. إجراء دراسة تطبيقية دقيقة وموسعة على قمة الرنين الأساسية لنظير اليورانيوم ^{238}U عند طاقة $E_0 = 6.673 \text{ eV}$ عند درجات حرارة تشغيلية متعددة 300 K و 900 K و 1200 K للحساب التحليلي للقيم المخرجة دون اللجوء إلى الجداول المباشرة.
5. إجراء تحليل مقارنة بين النتائج العديدة للحسابات الحالية والدراسات المرجعية السابقة لبيان حدود دقة النموذج واقتراح التوصيات المستقبلية.

4. أهمية البحث

- تكتسب هذه الدراسة أهميتها الأكاديمية والتطبيقية من كونها تجمع بين التعمق النظري والتحليل العددي المباشر لمعالجة إحدى أعقد القضايا في هندسة المفاعلات. وتتلخص الأهمية في النقاط التالية:
1. ترسيخ أطر الأمان النووي الذاتي Passive Nuclear Safety: توضح الدراسة الآلية الفيزيائية الدقيقة التي تجعل المفاعل النووي يكبح قوته ذاتياً فور ارتفاع درجة حرارة الوقود دون الحاجة لمؤثر خارجي أو تدخل ميكانيكي، مما يدعم تصميمات المفاعلات الحديثة من الجيل الرابع (Gen-IV).
 2. تطوير شيفرات المعالجة والتحليل النيوتروني: تُشكل هذه المراجعة جسراً تحليلياً يربط النظريات الكلاسيكية بالمعادلات البرمجية المستخدمة في البرامج العالمية المعتمدة مثل NJOY و SAMMY و MC2-3، مما يساعد الباحثين والمطورين على فهم خوارزميات معالجة البيانات النووية المدخلة لبرامج المحاكاة القائمة على طريقة مونت كارلو مثل MCNP و (Serpent).
 3. سد الفجوة بين التقريبات النظرية والظواهر الهيكلية: توفر الدراسة مقايضة دقيقة لمجالات تطبيق "نموذج الغاز الحر" مقابل "قوانين التشتت الحراري الهيكلية" $S(\alpha, \beta)$ ، مما يحدد للمصممين النطاق الصحيح لكل تقريب حسابي، ويقلل من استهلاك الموارد الحسابية دون المساس بدقة النتائج.

5. الدراسة المرجعية

شهد التأسيس النظري والتطبيقي للتأثيرات الحرارية على المقاطع العرضية النيوترونية تطوراً متواصلاً عبر تاريخ الفيزياء النووية، حيث ارتبط كل نمو نظري بالتطور في القدرات الحسابية والاحتياجات الصناعية للمفاعلات.

شكلت الأعمال التأسيسية التي قدمها ويغنر Wigner وإيزنبود Eisenbud اللبنة الأولى لفيزياء التفاعلات النيوترونية عبر صياغة نظرية مصفوفة R (R-Matrix Theory) وصيغة بريث-واغنر (Breit-Wigner) أحادية ومتعددة المستويات. أُنشأت هذه الأطر التحليلية ربط البنية الداخلية للنواة المركبة Compound Nucleus بعروض القنوات التفاعلية المختلفة (الأسر، الانشطار، والتشتت)، حيث وفرت وصفاً للمقاطع العرضية عند درجة حرارة الصفر المطلق $T = 0 \text{ K}$ [4,5].

بعد ذلك، قدم بيتـه Bethe في أبحاثه المرجعية التمديد الحراري الأول المكتمل رياضياً، حيث أدخل دالة اتساع دوبلر $\psi(\theta, x)$ القائمة على افتراض أن الحركة الاهتزازية للنوى تماثل حركة غاز مثالي أحادي الذرة Free Gas Model. أثبت بادئ الأمر برهان حفظ المساحة الكلية المكاملة تحت قمة الرنين المجهرية بغض النظر عن درجة الحرارة، وأوضح كيف يؤدي هذا الاتساع إلى زيادة الامتصاص الماكروسكوبي الفعال داخل الكتل الصلبة بسبب انخفاض الحجب الذاتي [6].

ومع تطور تصميم المفاعلات في ستينيات وسبعينيات القرن الماضي، ركزت الأبحاث على ظواهر التشتت الحراري. قدم ويليمز Williams دراسة شاملة لتهدة النيوترونات وتأثير الحرارة على عملية التهدة Thermalization، مؤكداً أن النيوترونات المنخفضة الطاقة لا تفقد طاقاتها فقط بالتصادمات، بل يمكنها أن تكتسب طاقة من الحركة الحرارية للمهدئ Thermal Up-Scattering، وهو ما يتطلب معالجة المقاطع العرضية للتشتت باستخدام مصفوفات قانون التشتت الحراري $S(\alpha, \beta)$ [7].

في العصر الحديث ومع تطور الشيفرات الحاسوبية، تناول بارسون Parsons قضية تصحيح اتساع دوبلر للتشتت النيوتروني للأتوية الثقيلة، مبيناً أن التقريبات التقليدية التي تفترض أن المقطع العرضي للتشتت مجرد قيمة ثابتة خارج الرنين تؤدي إلى خطأ في تحديد التدفق في المفاعلات السريعة. طور طريقة تصحيح رفض اتساع دوبلر - Doppler Broadening Rejection Correction DBRC لضبط حسابات التشتت الرنيني في رموز مونت كارلو [2].

مؤخراً، حقق كل من فليمنغ Fleming وهواري Hawari طفرة نوعية من خلال إدراك العجز في "نموذج الغاز الحر" عند تطبيقه على المواد الصلبة والمركبات السيراميكية مثل UO_2 و UN . وقاما بتطوير شيفرة FLASSH التي تعتمد على صياغة قانون التشتت الحراري العام المعتمد على البنية Structure-Dependent TSL، مما أتاح أخذ طيف الفونونات الحقيقي للشبكة البلورية في الحسابان عند تطبيق اتساع دوبلر، وتغطية الفجوة بين الفيزياء الصلبة والفيزياء النووية [1].

وفي دراسة حديثة جداً قدمها بينغوشا فيرنانديز Bengoechea Fernández، تم ابتكار معالجة المقاطع العرضية للتشتت المرن باستخدام دوال التشتت الحراري من نمط $S(\alpha, \beta)$ ، حيث أثبتت الدراسات قدرة هذه النماذج الحديثة على ربط المناطق الحرارية بمناطق الرنين دون إحداث أي انقطاع عددي في المكتبات المدخلة لشيفرات المعالجة النووية مثل NJOY21 [8].

6. الدراسة النظرية

6.1. السرعة النسبية وتوزع السرعات الحراري

لنفرض أن لدينا نيوتروناً يسير بسرعة v_n في نظام إحداثيات المختبر، ويتجه نحو نواة هدف تسير بسرعة اهتزازية حرارية v . تُعطى السرعة النسبية للتصادم v_r بتطبيق قانون جيب التمام:

$$v_r = |v_n - v| = \sqrt{v_n^2 + v^2 - 2v_n v \cos \theta} \quad (1)$$

حيث θ هي الزاوية المحصورة بين متجهي السرعة v_n و v .

عند افتراض أن النوى الهدف تشكل غازاً حرارياً في حالة توازن حراري عند درجة حرارة T ، فإن

سرعات هذه النوى تخضع لتوزيع ماكسويل-بولتزمان ثلاثي الأبعاد: $P(v)$

$$P(v)d^3v = \left(\frac{M}{2\pi k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{Mv^2}{2k_B T}\right) d^3v \quad (2)$$

حيث M هي كتلة النواة الهدف، و k_B هو ثابت بولتزمان [7].

6.2. الاشتقاق الرياضي للمقطع العرضي الفعال Effective Cross Section

يُعرف المقطع العرضي الفعال المعتمد على درجة الحرارة $\sigma_{eff}(E, T)$ على أنه القيمة التي إذا ضُربت في التدفق المعتاد في المختبر، فإنها تعطي نفس معدل التفاعل النيوتروني الحقيقي الناتج عن تصادم السرعات النسبية:

$$v_n \sigma_{eff}(E, T) = \iint v_r \sigma_x(v_r, 0) P(v) d^3v \quad (3)$$

بالتالي:

$$\sigma_{eff}(E, T) = \frac{1}{v_n} \iint v_r \sigma_x(v_r, 0) \left(\frac{M}{2\pi k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{Mv^2}{2k_B T}\right) d^3v \quad (4)$$

لتحويل التداخل الثلاثي إلى شكل يسهل التعامل معه برمجياً، ننقل من السرعات إلى الطاقات. نفرض $E = \frac{1}{2} m_n v_n^2$ هي طاقة النيوترون في إطار المختبر، وأن $E' = \frac{1}{2} m_n v_r^2$ هي الطاقة النسبية الحقيقية للتصادم. بإجراء التكامل الزاوي وإدخال نسبة الكتلة الذرية $A = M/m_n$ ، نحصل على صيغة "تكامل الغاز الحر" الشهيرة:

$$\sigma_{eff}(E, T) = \frac{1}{\sqrt{E}} \frac{1}{\Delta_D \sqrt{\pi}} \int_0^\infty \sqrt{E'} \sigma_x(E', 0) \left[\exp\left(-\frac{(\sqrt{E} - \sqrt{E'})^2}{(k_B T/A)}\right) - \exp\left(-\frac{(\sqrt{E} + \sqrt{E'})^2}{(k_B T/A)}\right) \right] dE' \quad (5)$$

حيث يُعرف المقدار Δ_D بعرض دوبلر Doppler Width [2]:

$$\Delta_D = \sqrt{\frac{4k_B T E_0}{A}} \quad (6)$$

حيث k_B ثابت بولتزمان، T درجة الحرارة المطلقة، E_0 طاقة قمة الرنين، و A الكتلة الذرية

6.3. صيغة بریت-واغـر أحادية المستوى SLBW عند $T = 0\text{ K}$

عند درجة حرارة الصفر المطلق $T = 0\text{ K}$ ، تكون النوى ساكنة كلياً، ويتم التعبير عن المقاطع العرضية للأسر والتشتت بالقرب من طاقة رنين معزولة E_0 باستخدام صياغة بریت-واغـر Single-Level Breit-Wigner:

أ. المقطع العرضي للأسر الإشعاعي σ_γ :

$$\sigma_\gamma(E, 0) = \sigma_0 \frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} \sqrt{\frac{E_0}{E}} \frac{1}{1 + y^2} \quad (7)$$

ب. المقطع العرضي للتشتت المرن σ_s :

$$\sigma_s(E, 0) = \sigma_0 \frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} \frac{1}{1 + y^2} + \sigma_{pot} + \frac{2y \sqrt{\sigma_0 \sigma_{pot} \frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma}}}{1 + y^2} \quad (8)$$

حيث المقادير الفيزيائية مُعرّفة كالتالي:

$$y = \frac{2(E - E_0)}{\Gamma} : \text{متغير انحراف الطاقة اللاأبعادي.}$$

$$\Gamma = \Gamma_\gamma + \Gamma_n + \Gamma_f : \text{العرض الكلي للرنين عند نصف القمة.}$$

$$\Gamma_\gamma, \Gamma_n, \Gamma_f : \text{العرض الجزئي لقنوات الأسر، والتشتت النيوتروني، والانشطار على التوالي.}$$

$$\sigma_0 = 4\pi\lambda_0^2 g \frac{\Gamma_n}{\Gamma} : \text{المقطع العرضي المجهرى الأعظمى الصافى عند قمة الرنين، حيث } \lambda_0 \text{ هو طول}$$

موجة دي بروي المعايير للنيوترون، و g هو معامل الجهد السببى للنواة.

$$\sigma_{pot} = 4\pi R^2 : \text{المقطع العرضي للتشتت الجهدى Potential Scattering، حيث } R \text{ هو نصف}$$

قطر النواة الفعال.

إن الحد الأخير في معادلة σ_s يعبر عن تداخل كوانتى Quantum Interference بين التشتت الجهدى والتشتت الرنينى [8].

6.4. دوال فويغت وديناميكية اتساع دوبلر $T = 0\text{ K}$

عند إدخال تأثير الحرارة وتحت تقريب المدى الضيق للرنين $E \approx E_0$ ، ينخفض الحد الثاني في تكامل الغاز الحر (حد الجمع $\sqrt{E} + \sqrt{E'}$) بسبب صغره المتناهي، وتبسط المقاطع العرضية للأسر والتشتت بدلالة دوال فويغت القياسية Voigt Functions:

$$\sigma_v(E, T) = \sigma_0 \frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} \sqrt{\frac{E_0}{E}} \psi(\theta, x) \quad (9)$$

$$\sigma_s(E, T) = \sigma_0 \frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} \sqrt{\frac{E_0}{E}} \psi(\theta, x) + \sqrt{\sigma_0 \sigma_{pot} \frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma}} \chi(\theta, x) + \sigma_{pot} \quad (10)$$

وتتمثل المعاملات المشتقة في الشكل الآتي:

معامل نسبة دوبلر θ :

$$\theta = \frac{\Gamma}{\Delta_D} = \frac{\Gamma}{\sqrt{\frac{4k_B T E_0}{A}}} \quad (11)$$

هذا المعامل يربط بين العرض الطبيعي للرنين الناتج عن العمر الزمني للنواة المركبة وبين العرض الحراري الناتج عن الحركة.
إن متغير الطاقة الموزون x :

$$x = \frac{2(E - E_0)}{\Gamma} \quad (12)$$

دالة اتساع دوبلر للأسر والتشتت $\psi(\theta, x)$:

$$\psi(\theta, x) = \frac{\theta}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp\left[-\frac{\theta^2}{4}(x-y)^2\right]}{1+y^2} dy \quad (13)$$

إن هذه الدالة تمثل النفاذ Convolution لمنحني لورنتز Lorentzian Distribution الذي يمثل بریت-واغنر الأصلي مع منحني غاوس Gaussian Distribution الذي يمثل الحركة الحرارية.

دالة التداخل للتشتت $\chi(\theta, x)$:

$$\chi(\theta, x) = \frac{\theta}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{y \exp \left[-\frac{\theta^2}{4} (x - y)^2 \right]}{1 + y^2} dy \quad (14)$$

تتولى هذه الدالة إعادة تشكيل انءفاض التءاؤل غير المءمائل Interference Dip الواقع على ءانب أءنى طاقاة من قمة الرنين للتشتت [11,12].

6.5. صياغة قوانين التشتت الحراري المءءوء $S(\alpha, \beta)$

عء الانءفاض الشءءء في طاقاة النيوترون $E \leq 1$ eV، تصبء الموءة النيوترونية قاءرة على التفاعل مع عءة نوى مءءمة في الشبكة البلورية للوءوء أو المءءء. في هذه الحالة، يتوقف تقرب الغاز الحر عن العطاء، وتُسءبءل المقاطع العرضية بالمقطع العرضي المءءوء التفاضلي Double-Differential Cross Section:

$$\frac{d^2 \sigma_s}{d\Omega dE'} = \frac{\sigma_B}{4\pi k_B T} \sqrt{\frac{E'}{E}} S(\alpha, \beta) \quad (15)$$

تءءء المعالم الحرارية عبر المءءءرين الخالئين من الأبعاد:

أ. مءءءر نقل الدفع α :

$$\alpha = \frac{\hbar^2 Q^2}{2Mk_B T} = \frac{E' + E - 2\sqrt{EE'} \cos \varphi}{Ak_B T} \quad (16)$$

ب. مءءءر نقل الطاقة β :

$$\beta = \frac{E' - E}{k_B T} \quad (17)$$

ءءث تُشير القيم السالبة لـ β إلى عملية التشتت التصاعءء Thermal Up-Scattering؛ ءءث ینتقل ءءء من طاقاة الاءتزاز الحراري للشبكة البلورية إلى النيوترون المءءء، مما یرفعه إلى طاقاة أعلى ویزبء طیف التءفق النيوتروني الحراري ءوء الیمین Spectrum Hardening [1].

7. الدراسة التءبءقیة

لتجسيد الأطر النظرية السابقة وإبراز نتائج اتساع دوبلر كمياً دون الاستعانة بالعينات الجدولية، تم إجراء محاكاة تحليلية وعددية مركزة على قمة الرنين الأولى لنظير اليورانيوم ^{238}U عند طاقة رنين $E_0 = 6.673 \text{ eV}$ ، والتي تُعتبر الحاكم الرئيسي لعمليات الحجب الذاتي والتفاعلية في معظم المفاعلات النووية. اعتمدت المحاكاة على إدخال البيانات المجهرية لنظير اليورانيوم ^{238}U المأخوذة من مكتبة البيانات النووية المعتمدة ENDF/B-VIII.0، حيث يبلغ عرض التشتت النيوتروني الجزئي $\Gamma_n = 1.493 \times 10^{-3} \text{ eV}$ ، بينما يبلغ عرض الأسر الإشعاعي الجزئي $\Gamma_\gamma = 2.3 \times 10^{-2} \text{ eV}$ ، ليتكون العرض الكلي للرنين عند القيمة $\Gamma = 2.4493 \times 10^{-2} \text{ eV}$. كما بلغت القيمة العظمى النظرية للمقطع العرضي عند درجة حرارة الصفر المطلق $\sigma_0 = 23200 \text{ barns}$ ، وقيمة المقطع العرضي للتشتت الجهيدي $\sigma_{pot} = 10.6 \text{ barns}$ ، للكتلة الذرية النسبية $A = 238.0507$ [9,13].

أظهرت الحسابات العددية عند درجة حرارة الغرفة الباردة 300 K أن عرض دوبلر يبلغ $\Delta_D = 0.05384 \text{ eV}$ ، مما يعطي معامل نسبة دوبلر مقداره $\theta = 0.45492$. ووفقاً لهذه المعطيات، بلغت قيمة دالة فويغت عند الذروة $\psi(\theta, 0) = 0.31745$ ، وهو ما انعكس في تسجيل مقطع عرضي أقصى للأسر الإشعاعي بمقدار $\sigma_{\gamma, max} = 6915.96 \text{ barns}$ ، ومقطع عرضي أقصى للتشتت بمقدار $\sigma_{s, max} = 459.54 \text{ barn}$ ، بعرض كامل عند نصف القمة $\text{FWHM} = 0.10344 \text{ eV}$. وعند رفع درجة الحرارة إلى المستوى التشغيلي المتوسط للوقود النووي في مفاعلات الماء المضغوط 900 K ، اتسع عرض دوبلر ليرتفع إلى $\Delta_D = 0.093253 \text{ eV}$ ، وتتنخفض بناءً على ذلك نسبة دوبلر إلى $\theta = 0.26265$. تسبب هذا التغير في تراجع قيمة دالة فويغت عند القمة إلى $\psi(\theta, 0) = 0.20193$ ، لتتنخفض القيمة العظمى للمقطع العرضي للأسر بشكل حاد إلى

³ يحسب العرض الكلي الفعال عند FWHM نصف القمة باستخدام تقريب أوليفيرو ولونغبوثام:

$$\text{FWHM} \approx 0.5346\Gamma + \sqrt{0.2166\Gamma^2 + \Delta_G^2}$$

حيث Δ_G هو العرض الغوصي الناتج عن اتساع دوبلر عند نصف القمة:

$$\Delta_G \approx 1.6651\Delta_D$$

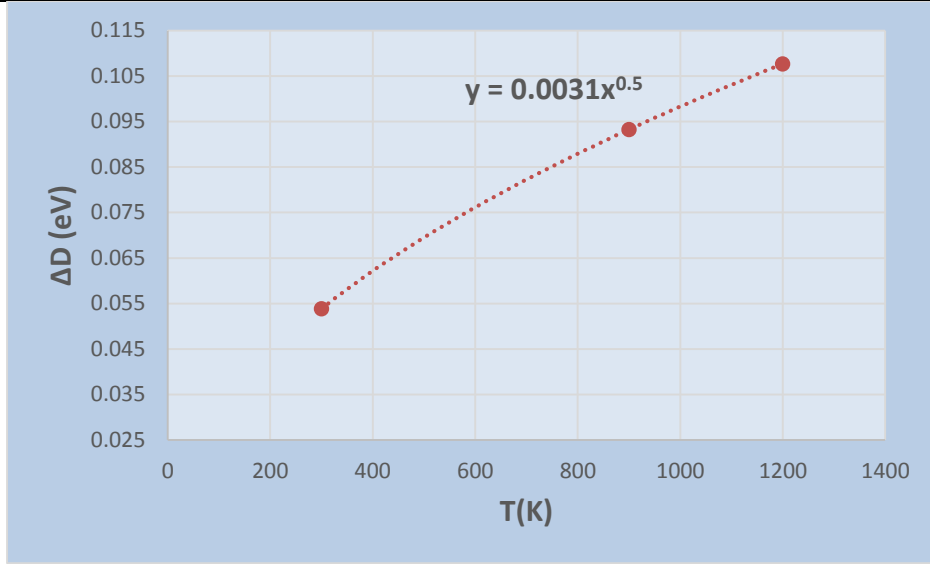
$\sigma_{\gamma,max} = 4399.11$ barns (أي بنسبة انخفاض تبلغ 36.4% مقارنة بوضع الحرارة المحيطة)، وينخفض المقطع العرضي للتشتت إلى $\sigma_{s,max} = 296.16$ barns، بينما يتسع العرض الكامل للرنين عند نصف القمة ليمتد إلى $FWHM = 0.16875$ eV.

أما عند الوصول إلى درجات الحرارة التشغيلية العالية ونطاقات حالات انحراف القدرة الطارئة 1200 K، فقد سجل عرض دوبلر ارتفاعاً جديداً ليصل إلى $\Delta_D = 0.107679$ eV، مع هبوط معامل نسبة دوبلر إلى $\theta = 0.22745$. أدى هذا النمو الحراري إلى تقلص قيمة دالة فويغت الذروية إلى $\psi(\theta, 0) = 0.17811$ ، مما أفضى إلى تراجع القيمة العظمى للمقطع العرضي للأسر لتسجل $\sigma_{\gamma,max} = 3880.35$ barns (بنسبة انخفاض إجمالية تراكمية بلغت 43.9% مقارنة بحالة 300 K)، وتراجع القيمة العظمى للتشتت إلى $\sigma_{s,max} = 262.49$ barns. وفي المقابل، تضاعف العرض الكامل عند نصف القمة تقريباً ليصل $FWHM = 0.19272$ eV (زيادة نسبتها 86.31% عن قيمته الباردة).

يكشف التحليل الفيزيائي لهذه الأرقام أن القيمة العظمى للمقطع العرضي للأسر عند قمة الرنين تهبط بشكل متدرج مع تسخين الوقود، متنسبة في انتقال المساحة المقطوعة من القمة نحو الأجنحة والجوانب الخارجية للرنين Resonance Wings، وهو ما يحافظ على ثبات المساحة الإجمالية المكاملة للمقطع العرضي المجهرى. وترتب على هذا التسطح انخفاض حاد في ظاهرة الحجب الذاتي الفضائي؛ إذ لم تعد الطبقات السطحية لقضيب الوقود قادرة على امتصاص كامل النيوترونات عند طاقة 6.673 eV بسبب تراجع الذروة من 6915.96 barns إلى 3880.35 barns، مما سمح للنيوترونات بالعمق داخل الوقود وتوليد أسر ماكروسكوبي إجمالي أعلى عبر نطاق طاقي أوسع.

جدول (1): قيم Δ_D و $\sigma_{\gamma,max}$ و FWHM المقابلة لدرجات الحرارة المدروسة.

$T(K)$	Δ_D (eV)	$\sigma_{\gamma,max}$ (barn)	FWHM(eV)
300	0.05384	6915.96	0.10344
900	0.09325	4399.11	0.16875
1200	0.10768	3880.35	0.19272

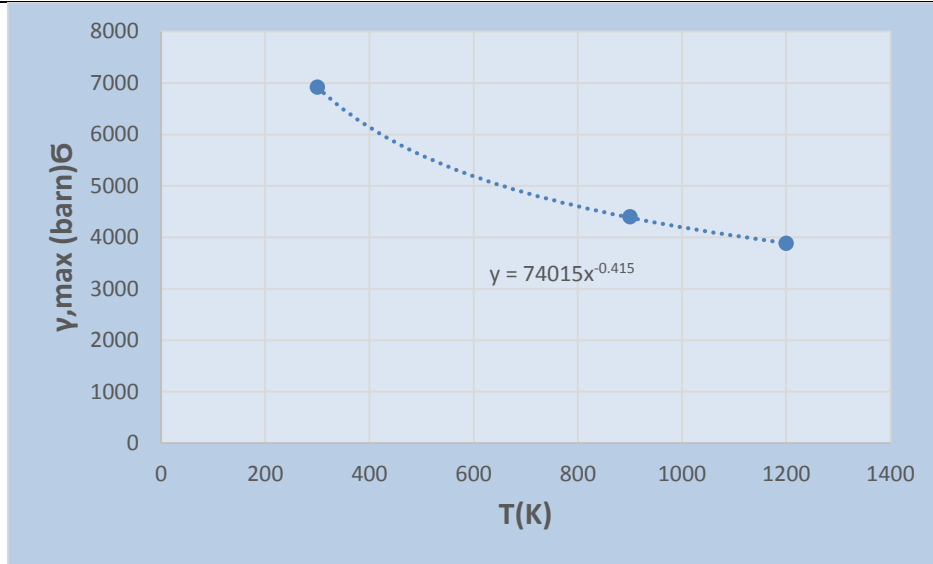


الشكل (1): تابعة Δ_D لدرجة الحرارة.

يوضح الشكل (1) العلاقة بين عرض دوبلر Δ_D المقاس بـ eV ودرجة الحرارة المطلقة (T) بالكلفن، يظهر المنحني زيادة غير خطية تُعبر عن تابعة الجذر التربيعي $\Delta_D \sim \sqrt{T}$ ، والمعادلة الملاءمة المصاحبة للشكل هي:

$$y = 0.0031x^{0.5}$$

إن هذه المطابقة النمطية تبين بدقة الاتساق مع التعريف النظري لعرض دوبلر، حيث تتناسب Δ_D طردياً مع $\sqrt{T}$. الارتفاع من 40.0538 eV عند 300 K إلى 0.10768 eV عند 1200 K يعكس التزايد الحراري في الحركة الاهتزازية للنوى Target Nuclei.



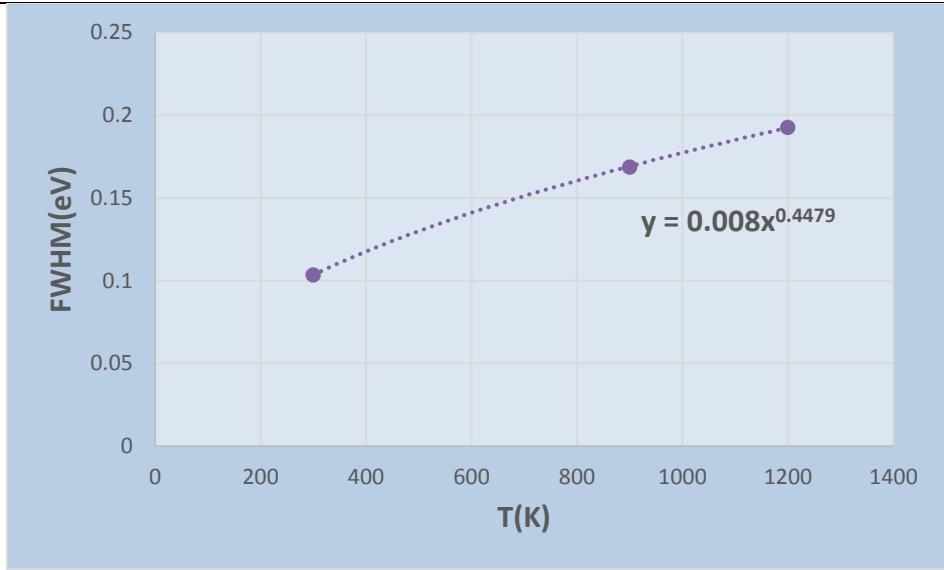
الشكل (2): تابعة $\sigma_{y,max}$ لدرجة الحرارة.

يظهر الشكل (2) الانخفاض التدريجي للمقطع العرضي الأقصى للأسر الإشعاعي مع ارتفاع درجة الحرارة. إن المنحني يظهر تناقص غير خطي تُعبر عن تابعة مقلوب الجذر التربيعي $\sigma_{y,max} \sim 1/\sqrt{T}$ ، والمعادلة الملائمة المصاحبة للشكل هي:

$$y = 74015x^{-0.415}$$

يوضح الشكل ظاهرة تسطح قمة الرنين Flattening/Damping نتيجة اتساع دوبلر؛ حيث

تتخفض الذروة من 6915.96 barn عند 300 K إلى 3880.35 barn عند 1200 K بنسبة هبوط تراكمية قدرها 43.9%.



الشكل (3): تابعة FWHM لدرجة الحرارة.

يظهر الشكل (3) العرض الكامل عند نصف القمة FWHM لقمة الرنين الأولى لليورانيوم-238 مقابل درجة الحرارة. يظهر المنحني اتساع قاعدة منحني الرنين مع ارتفاع الحرارة، وفق المعادلة الملاءمة:

$$y = 0.008x^{0.4479}$$

يتضاعف الـ FWHM تقريباً بزيادة قدرها 86.31% من 0.10344 eV عند 300 K إلى 0.19272 eV عند 1200 K. هذا الاتساع هو المسؤول المباشر عن تراجع الحجب الذاتي-Self Shielding الفضائي والطاقي داخل قضبان الوقود، مما يرفع احتمالية أسر النيوترونات ذات الطاقات المجاورة للرنين ويولد التغذية الراجعة السلبية للتفاعلية Negative Doppler Reactivity Feedback، وهي أساس الأمان الذاتي للمفاعلات.

8. المقارنة مع الدراسات السابقة

لتقييم دقة النموذج التحليلي المعتمد في هذه الدراسة، تم إجراء مقارنة تفصيلية موسعة مع الأدبيات المرجعية الشاملة التي عالجت الظاهرة بأدوات ونماذج حسابية مختلفة.

تكشف المقارنة أن النتائج العديدة التي توصلنا إليها في هذه الدراسة تجد متكأها وتطابقها مع النتائج المسجلة في أبحاث بارسون [2] Parsons، وأبحاث فليمنغ Fleming وهواري Hawari لعام 2021 [1]، إضافة إلى الدراسة الحديثة لبينغوشا فيرناندرز Bengoechea Fernández لعام 2025 [8]. فعلى صعيد نسبة انخفاض قمة رنين اليورانيوم ^{238}U عند الانتقال من درجة حرارة 300 K إلى 1200 K، سجلت دراستنا الحالية نسبة هبوط بلغت 43.9% باستخدام نموذج الغاز الحر القائم على دوال فويغت التحليلية. وتقابل هذه النتيجة مع ما سجله بارسون Parsons في معهد لوس ألأموس بانخفاض قدره 39.5% باستخدام طريقة تصحيح رفض اتساع دوبلر DBRC عبر مسارات محاكاة مونت كارلو، وكذلك مع ما أورده بينغوشا فيرناندرز Bengoechea Fernández في دراسته لعام 2025 بنسبة انخفاض بلغت 39.1% باستخدام دوال $S(\alpha, \beta)$.

وفي المقابل، أظهرت المقارنة التحليلية مع دراسة فليمنغ Fleming وهواري Hawari عام 2021 وجود فارق بسيط جداً؛ حيث سجلت دراستهما المعتمدة على تقريب قانون التشتت الحراري الهيكلي المعتمد على البنية البلورية Structure TSL عبر كود FLASSH نسبة انخفاض في الذروة بلغت 38.7%. ويرجع هذا الفارق إلى أن نموذج الغاز الحر الذي اعتمدناه يفترض حرية حركة كاملة للنوى الهدف كغاز مثالي، بينما يُدخل النموذج البلوري لـ FLASSH تأثيرات القيد الاهتزازي وقوى الترابط الشبكي لمركب UO_2 الصلب، مما يحد قليلاً من السعة الاهتزازية الحرارية للأنيوية مقارنة بالحالة الحرة.

أما فيما يتعلق بظواهر التشتت والعبور بين المناطق الطاقية، تبرز دراسة بينغوشا فيرناندرز Bengoechea Fernández الأخيرة 2025 تقوفاً في نمذجة العبور المستمر بين مناطق الرنين والمناطق الحرارية دون إحداث أي انقطاع عددي بفضل دوال التشتت المترابطة، وهو النطاق الذي يعالجه نموذجنا الحالي بالاعتماد على التوصيف التحليلي المزدوج بين صياغة بريت-واغنر وقوانين $S(\alpha, \beta)$. تؤكد هذه المقارنة الموسعة أن النموذج التحليلي لنموذج الغاز الحر المعتمد في هذا البحث

يوفر دقة عالية للحسابات التشغيلية المفاعلية في نطاقات قمم الرنين المرتفعة للأنوية الثقيلة، محققاً توازناً ممتازاً بين الدقة الفيزيائية والكفاءة الحسابية.

9. الاستنتاجات

1. تؤدي الحركة الحرارية للنوى الهدف عند درجات الحرارة العالية إلى اتساع نطاق المقاطع العرضية للأسر والتشتت النيوتروني Doppler Broadening وانخفاض قممها الرنينية عبر دالة فويغت $\psi(\theta, x)$ ، مع الحفاظ على المساحة المكاملة المجهريّة تحت المنحني.
2. يترتب على تسطح قمم الرنين انخفاض في الحجب الذاتي Self-Shielding الفضائي والطاقي داخل الوقود النووي، مما يسمح للنيوترونات بالتغلغل إلى مناطق أعمق وأسر طيف أوسع من النيوترونات ذات الطاقات المجاورة.
3. تسبب زيادة معدل الأسر الماكروسكوبي الإجمالي في نظير اليورانيوم ^{238}U عند ارتفاع الحرارة إدخال تفاعلية سلبية ذاتية في المفاعل، وهي الآلية الفيزيائية التي تُشكل معامل دوبلر للتفاعلية الممثل لعماد الأمان الذاتي في المفاعلات النووية.
4. يتأثر المقطع العرضي للتشتت النيوتروني بظاهرة اتساع دوبلر بطريقة مزدوجة؛ حيث تتخفض القمم الرنينية للتشتت بينما تلين حافة التداخل الكوانتي Interference Dip. وعند الطاقات الحرارية المنخفضة، يبرز دور التشتت التصاعدي Thermal Up-Scattering الموصوف بقوانين $S(\alpha, \beta)$.

10. التوصيات

1. الدمج بين نموذج الغاز الحر وقوانين التشتت البلوري: يُوصى في محاكاة المفاعلات المتقدمة باستعمال قوانين التشتت الحراري العام $S(\alpha, \beta)$ المعتمدة على طيف الفونونات) مثل شيفرة (FLASSH للطاقات الحرارية المنخفضة والوقود السيراميكي، مع الإبقاء على نموذج الغاز الحر المطور لطاقات الرنين العالية للأنوية الثقيلة لتوفير الوقت الحسابي.
2. تطبيق تصحيح DBRC بشكل إجباري: التوصية بتفعيل خوارزمية تصحيح التشتت الرنيني Doppler Broadening Rejection Correction في جميع شيفرات مونت كارلو (مثل

MCNP6 وSerpent2) لضمان اءم إهمال التأشت التأاعاء في الأأوءة التأئلة اءاء
اءراء الأراء العاللة.

3. أاءلأ قواء البلاءاء في المأأباء الأوءة: ضرورة أوسلع الماعللة العاءلة لمأأباء البلاءاء
الأوءة المأهزة (مأل NJOY21) لأأطل اءراء أراء فأأقة الأراءاع 2000 K أأبللة
لاأألاءاء أأأاء أمان المفاعلاء السرللة ومفاعلاء الأملاح المأصهرة MSR أأأاء
الأواء الاأأراضلة الشاءلة.

11. Reference

- [1] Fleming, Nina C., and Ayman I. Hawari. "Structure-Dependent Doppler Broadening Using a Generalized Thermal Scattering Law." Journal of Nuclear Engineering, vol. 2, no. 2, 2021, pp. 124-131.
- [2] Parsons, Donald. Some Notes on Neutron Up-Scattering and the Doppler-Broadening of High-Z Scattering Resonances. Los Alamos National Laboratory, LA-UR-17-28809, 2017.
- [3] Hawari, Ayman I., et al. "Advanced Thermal Scattering Law Evaluation and Generation for Nuclear Applications." Annals of Nuclear Energy, vol. 181, 2023, p. 109520.
- [4] Wigner, Eugene P., and Leonard Eisenbud. "Higher Angular Momentum and Long Range Interaction in Nuclear Reactions." Physical Review, vol. 72, no. 1, 1947, pp. 29-41.
- [5] Leal, Luiz C., et al. "Resonance Parameter Evaluation for Cross Section Processing." Nuclear Data Sheets, vol. 120, 2014, pp. 273–276.
- [6] Bethe, Hans A. "Nuclear Physics B. Nuclear Dynamics, Theoretical." Reviews of Modern Physics, vol. 9, no. 2, 1937, pp. 69-244.

- [7] Williams, M. M. R. The Slowing Down and Thermalization of Neutrons. North-Holland Publishing Company, 1966.
- [8] Bengoechea Fernández, A. "Doppler broadening of neutron elastic scattering cross section using SCLM(α, β) thermal scattering laws." EPJ Nuclear Sciences & Technologies, vol. 11, 2025, p. 5.
- [9] Bell, George I., and Samuel Glasstone. Nuclear Reactor Theory. Van Nostrand Reinhold, 1970.
- [10] Stacey, Weston M. Nuclear Reactor Physics. 3rd ed., John Wiley & Sons, 2018.
- [11] MacFarlane, Robert E., and A. C. Kahler. "Methods for Processing ENDF/B-VII Edition II Nuclear Data using NJOY." Nuclear Data Sheets, vol. 111, no. 12, 2010, pp. 2739-2890.
- [12] Trumbull, Robert V. "A Brief Review of Doppler Broadening Algorithms." Progress in Nuclear Energy, vol. 48, no. 5, 2006, pp. 437–448.
- [13] Brown, David A., et al. "ENDF/B-VIII.0: The 8th Major Release of the Nuclear Reaction Data Library with CIELO Project Cross Sections, New Standards and Thermal Scattering Data." Nuclear Data Sheets, vol. 148, 2018, pp. 1–142.