

**Forschungszentrum Karlsruhe**

Technik und Umwelt

Institut für Reaktorsicherheit

**Erstellung einer 78-Gruppenkonstanten  
Bibliothek mit Energien bis 150 MeV für  
KAPROS**

**Diplomarbeit zum Erwerb des akademischen Grades „Diplom Ingenieur“**  
Fakultät für Maschinenbau der Universität Karlsruhe (TH)

**Philipp Oberle**

**Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe**

**Oktober 2004**

# **Eidesstattliche Erklärung**

Hiermit erkläre ich an Eides statt, die vorliegende Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt zu haben.

# Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich ganz herzlich bei folgenden Personen bedanken:

- Herrn Dr. C. Broeders für die Aufgabenstellung und seine engagierte und lehrreiche Betreuung die oft über den Inhalt der Arbeit hinausging. Sein Fachwissen und seine Hilfsbereitschaft waren ausschlaggebend für das Gelingen dieser Arbeit.
- Herrn Dr. V. Heinzl als Hauptreferent dieser Arbeit
- Prof. Dr. D. G. Cacuci, Institutsleiter des Institutes für Reaktorsicherheit
- Frau Dr. C. Villagrassa-Canton-Roussel und Frau P. Rousseau für Ihre Hilfsbereitschaft und die freundschaftliche Arbeitsatmosphäre
- Frau Dr. I. Broeders für das Korrekturlesen meiner Arbeit
- Frau L. Sharp, Frau M. Zimmermann, Frau D. Stephany für Ihre Freundlichkeit und Hilfsbereitschaft
- Allen Mitarbeitern des Institutes für Reaktorsicherheit, ins Besondere der Abteilung Neutronenphysik und Reaktordynamik für die freundliche Aufnahme



UNIVERSITÄT KARLSRUHE (TH)  
Institut für Kerntechnik und Reaktorsicherheit  
Lehrstuhl o. Prof. Dr. Dr. h. c. mult. Dan G. Cacuci

Postfach 3640  
76021 Karlsruhe  
Tel: (49 (0) 7247) 82 3761  
Fax: (49 (0) 7247) 82 7761  
E-Mail: heinzel@irs.fzk.de

Universität Karlsruhe, Institut für Kerntechnik und Reaktorsicherheit  
Dr.-Ing. Priv. Doz. Volker Heinzel; Postfach 3640; D-76021 Karlsruhe

Herr Philipp Oberle  
Klosterweg 28-F205  
76131 Karlsruhe

**Dr.-Ing. Priv. Doz. Volker Heinzel**

Karlsruhe, 3. Januar 2005

### **Aufgabenstellung für Ihre Diplomarbeit:**

#### **Erstellung einer 78-Gruppenkonstanten Bibliothek mit Energien bis 150 MeV für KAPROS**

Für neutronenphysikalische Berechnung eines Beschleuniger getriebenen unterkritischen Systems insbesondere bei dynamischen Berechnungen wie z. B. Abbrandrechnungen wird das in Karlsruhe am Forschungszentrum entwickelte Programmsystem KAPROS eingesetzt. Dieses war ursprünglich für schnelle Reaktoren entwickelt. Es fand dann aber auch Anwendungen im Bereich der thermischen und epithermischen Reaktoren mit einer energetischen Obergrenze von 10 MeV. Für den Einsatz an Beschleuniger getriebenen Reaktoren, bedarf es einer Erweiterung der Wirkungsquerschnitts Bibliothek. Die Aufgabe dieser Diplomarbeit ist die Erstellung und das Testen einer Multi-Gruppen Bibliothek für das Programmsystem KAPROS für Neutronen Energien bis 150MeV für ADS Anwendungen. Für ADS Anwendungen sind jetzt Kerndaten Auswertungen bis 150-250MeV verfügbar, welche in einer Multigruppen Bibliothek ein zu bringen sind. Diese Arbeiten sind vorbereitet, müssen aber sehr sorgfältig realisiert werden da teilweise neue Datenstrukturen eingeführt werden. Nach der Erstellung einer ersten Version der Bibliothek mit etwa 20 Materialien sollen Tests und Vergleiche mit bisherigen Bibliotheken bis 10 MeV am Beispiel für eine ADS relevante Anwendung durchgeführt werden.

Arbeitsplatz: Institut für Reaktorsicherheit am Forschungszentrum Karlsruhe und Institut für Kerntechnik und Reaktorsicherheit an der Universität Karlsruhe, Fakultät Maschinenbau

Betreuer: Dr. C. Broeders

Referent: Dr. Priv. Doz. V. Heinzel

Abgabe der Arbeit: November 2004

# Zusammenfassung

Seit einigen Jahren wird die sogenannte „Accelerator Transmutation of Waste (ATW)“ als eine mögliche Lösung für die Behandlung und Wiederverwertung nuklearer Abfälle sowie als eine Möglichkeit, Energie mit einem unterkritischen System zu erzeugen, betrachtet. Hauptziel von ATW ist die Verminderung der Gefahr der langfristigen Lagerung von abgebrannten nuklearen Brennstoffen.

Am Institut für Reaktorsicherheit (IRS) des Forschungszentrums Karlsruhe konzentrieren sich einige der zur Zeit ausgeführten Arbeiten auf die Entwicklung von Beschleuniger-getriebenen Systemen. Die Entwicklung und die Validierung der theoretischen Mittel zum Kern Design und zu Sicherheitsberechnungen für Beschleuniger-getriebene Systeme sind wichtige Themen, die zur Zeit am IRS untersucht werden.

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit Kernreaktionen bei höheren Energien als in Spaltreaktoren ( $>20$  MeV) die in einem ADS-Reaktor, aufgrund der Kopplung eines unterkritischen Systems mit einer hochenergetischen Protonenquelle, auftreten können. Insbesondere wurde eine Multigruppenbibliothek mit Neutronenenergien bis 150 MeV für deterministische Reaktorberechnungen mit KAPROS erstellt. KAPROS ist ein, im Forschungszentrum Karlsruhe entwickeltes Programmsystem, mit dem vielfältige Reaktorberechnungen durchgeführt werden können. Mit Hilfe der neu erstellten Gruppenbibliothek können nun mit KAPROS z.B. deterministische Abbrandrechnungen mit Neutronenenergien bis 150 MeV berechnet werden.

Im Rahmen der Arbeit wurde eine erste Version einer 78-Gruppenbibliothek mit Energien bis 150 MeV erstellt und an einer typischen ADS Reaktorzone, durch Vergleiche von Ergebnisse mit einer Standard 69-Gruppenbibliothek mit Energien bis 10 MeV, erfolgreich getestet.

# Inhaltsverzeichnis

<b>Einleitung</b> .....	<b>1</b>
<b>Kapitel 1 Kernphysikalische Begriffsbestimmungen</b> .....	<b>5</b>
1.1 Wirkungsquerschnitte .....	5
1.2 Der Verlauf des mikroskopischen totalen Wirkungsquerschnittes .....	7
1.3 Selbstabschirmung .....	10
1.4 Die Dopplerverbreiterung von Resonanzspitzen .....	11
<b>Kapitel 2 Die mathematische Basis der Gruppenkonstantenberechnung</b> .....	<b>13</b>
2.1 Die Boltzmann-Gleichung .....	13
2.2 Gruppenkonstantenberechnung und Selbstabschirmfaktoren .....	16
2.3 Übergangswahrscheinlichkeiten für elastische und nicht elastische Streuung .....	20
2.4 Wichtungsfunktionen .....	23
<b>Kapitel 3 Die Entwicklung der nuklearen Daten vom ENDF - File bis zur SIGMN -     Bibliothek</b> .....	<b>26</b>
3.1 Entwicklungsablauf vom ENDF-File zum makroskopischen Querschnitt .....	26
3.2 Das ENDF Format .....	29
3.3 Die ENDF Interpolation .....	33
3.4 Das Programm NJOY und seine Module .....	34
3.5 Die GRUBA-Bibliothek .....	37
3.6 Das GRUBA Verwaltungsprogramm GRUMA .....	39
3.7 Die Erstellung makroskopischer Gruppenkonstanten mit GRUCAL .....	42
3.8 Das Steuerfile F78V01 für 78-Gruppenberechnungen .....	43
3.9 Die SIGMN-Struktur .....	43
<b>Kapitel 4 Validierung der Ergebnisse und eine erste Anwendung mit KAPROS</b> .....	<b>44</b>
4.1 Validierung der von HIENPROC berechneten mikroskopischen Gruppenkonstanten .....	44
4.2 Detailangaben der neuen Bibliothek .....	53
4.3 Ein erstes Anwendungsbeispiel der neu erstellten Bibliothek .....	55
4.3.1 Die Startdatei <i>run.example</i> .....	55
4.3.2 Die Eingabe-Datei <i>input.example</i> .....	56
4.3.3 Ergebnisse der Neutronenflussrechnung .....	60

<b>Kapitel 5 Spezielle Kernreaktionen oberhalb 10 MeV und die ENDF-Daten Lage</b>	
<b>oberhalb 20 MeV .....</b>	<b>63</b>
5.1 (n, xx) - Reaktionen für Energien oberhalb 10 MeV .....	63
5.2 Neutronenbilanzen für hohe Energien.....	65
5.3 Gegenwärtig vorhandene ENDF-Daten für Kernreaktionen	
oberhalb 20 MeV .....	71
<b>Kapitel 6 Zusammenfassung .....</b>	<b>73</b>
<b>Anhang A Die Gruppengrenzen der 78 Gruppen Bibliothek .....</b>	<b>75</b>
<b>Anhang B Die Abweichungen der Gruppenkonstanten zwischen NJOY und</b>	
<b>HIENPROC .....</b>	<b>76</b>
<b>Anhang C Die MT Nummern des ENDF-6 Formates.....</b>	<b>80</b>
<b>Anhang D Das Fortran-Programm STFILE und die zugehörige</b>	
<b>Eingabedatei <i>f78v01.d</i> .....</b>	<b>90</b>
<b>Anhang E Berechnungsvorschriften für Querschnittstypen mit GRUCAL</b>	
<b>im Steuerfile F78V01.....</b>	<b>97</b>
<b>Anhang F Die NJOY-Eingabe Datei input.njoy für das Beispiel</b>	
<b>Pu-239 vom ENDF-File PU239N.JHE .....</b>	<b>109</b>
<b>Anhang G Die GRUMA-Eingabe Datei <i>create_gr78lib.input_9</i>.....</b>	<b>114</b>
<b>Literaturverzeichnis.....</b>	<b>116</b>

# Abbildungsverzeichnis

0.1	Schematische Darstellung eines Beschleuniger-getriebenen Systems [6] .....	2
0.2	Vergleich des Spaltanteils zum Gesamteinfang für ausgewählte Isotope [29] .....	3
0.3	Vergleich der Zahl der Spaltneutronen pro Einfang für ausgewählte Isotope [29].....	4
1.1	Verlauf des mikroskopischen Wirkungsquerschnittes von Pu-239, [27].....	9
1.2	Dopplerverbreiterung des totalen Wirkungsquerschnittes von Eisen-56 bei einer Temperaturerhöhung um 1800 K, [30].....	12
2.1	Abwärtsstreuung über Gruppengrenzen hinaus [1].....	21
2.2	Wichtungsfunktionen [2] verschiedener Reaktortypen in linear-logarithmischer Darstellung, für die Betrachtung niedriger Energien .....	24
2.3	Wichtungsfunktionen [2] verschiedener Reaktortypen in logarithmisch- logarithmischer Darstellung, für die Betrachtung höherer Energien.....	26
3.1	Evaluations-Schaubild zur Erstellung von makroskopischen Querschnitten in der 78-Gruppenstruktur.....	28
3.2	Struktur einer ENDF Datei [3].....	29
3.3	Der Unterschied zwischen Punktdaten und Gruppendaten am Beispiel des totalen Wirkungsquerschnittes von Pu-239 [29].....	36
4.1	Vergleich des totalen Wirkungsquerschnittes von Sauerstoff –16 zwischen NJOY und HIENPROC .....	46
4.2	Ausschnitt aus Abbildung 4.1 zum Vergleich der Übereinstimmung von NJOY und HIENPROC für den totalen Wirkungsquerschnitt von O-16 oberhalb 10 MeV.....	47
4.3	Vergleich des totalen Wirkungsquerschnittes von Eisen –56 zwischen NJOY und HIENPROC .....	49
4.4	Ausschnitt aus Abbildung 4.3 zum Vergleich der Übereinstimmung von NJOY und HIENPROC für den totalen Wirkungsquerschnitt von Fe-56 oberhalb 10 MeV .....	50
4.5	Vergleich des totalen Wirkungsquerschnittes von Plutonium–239 zwischen NJOY und HIENPROC .....	51
4.6	Ausschnitt aus Abbildung 4.5 zum Vergleich der Übereinstimmung von NJOY und HIENPROC für den totalen Wirkungsquerschnitt von Pu-239 oberhalb 10 MeV .....	52
4.7	Vergleich der Neutronenflüsse der 69- und 78-Gruppenbibliothek anhand einer typischen ADS-Reaktor Zone .....	62

5.1	Vergleich der Querschnitte der (n,xn)-Reaktionen mit dem der Spaltung am Beispiel von Plutonium-239 [29] .....	64
5.2	Neutronenproduktion nach Gleichung (32), [29] .....	66
5.3	Spaltung und (n,n') pro absorbierten Neutron am Beispiel von Uran-235 [29] .....	67
5.4	Vergleich des prozentualen Anteils produzierter Neutronen pro Reaktion am Beispiel von U-235 [29] .....	67
5.5	Neutronenproduktion pro Absorption nach Gleichung (33), [29] .....	69
5.6	Spaltung pro Absorption nach der klassischen Berechnung für niedrige Energien nach Gleichung (39), [29] .....	70
5.7	Spaltung pro Absorption nach Gleichung (40), [29] .....	70

# Tabellenverzeichnis

1.2	Beispiele für nicht elastische Streuung.....	6
3.1	Beispiele für Arten von Reaktionsdaten im ENDF-System nach [3].....	30
3.2	Beispiele für Reaktionsarten im ENDF-System nach [3] .....	31
3.3	Auszug aus einer Inhaltsangabe eines ENDF-Files [30].....	32
3.4	Im ENDF-Format definierte Interpolationschemata [9].....	33
3.5	Inhalt einer GRUBA-Datei, Record 1 [18] .....	37
3.6	Inhalt einer GRUBA-Datei, Record 2, 3 [18] .....	38
3.7	Aufbau der Datensätze von GRUBA für spezielle Datentypen [18].....	40
4.1	Abweichungen zwischen NJOY und HIENPROC von Sauerstoff-16 für den elastischen und den totalen Querschnitt für die ersten neun Gruppen .....	48
4.2	Abweichungen zwischen NJOY und HIENPROC von Eisen-56 für den elastischen und den totalen Querschnitt für die ersten neun Gruppen .....	48
4.3	Abweichungen zwischen NJOY und HIENPROC von Plutonium-239 für den totalen, den elastischen und den Spaltquerschnitt für die ersten neun Gruppen .....	53
4.4	Materialien für die in dieser Arbeit Gruppenkonstanten berechnet wurden .....	54
4.5	Temperaturen für die in dieser Arbeit Gruppenkonstantenberechnungen durchgeführt wurden .....	54
4.6	Untergrundquerschnitte für die in dieser Arbeit Gruppenkonstantenberechnungen durchgeführt wurden .....	54
A.1	Die Gruppengrenzen (in eV) der 78-Gruppenstruktur .....	75
C.1	MT 1-24 des ENDF-Formats [3] .....	80
C.2	MT 25-49 des ENDF-Formats [3] .....	81
C.3	MT 50-112 des ENDF-Formats [3] .....	82
C.4	MT 113-211 des ENDF-Formats [3] .....	83
C.5	MT 212-454 des ENDF-Formats [3] .....	84
C.6	MT 455-534 des ENDF-Formats [3] .....	85
C.7	MT 535-554 des ENDF-Formats [3] .....	86
C.8	MT 555-601 des ENDF-Formats [3] .....	87
C.9	MT 602-751 des ENDF-Formats [3] .....	88
C.10	MT 752-999 des ENDF-Formats [3].....	89



# Kapitel 0

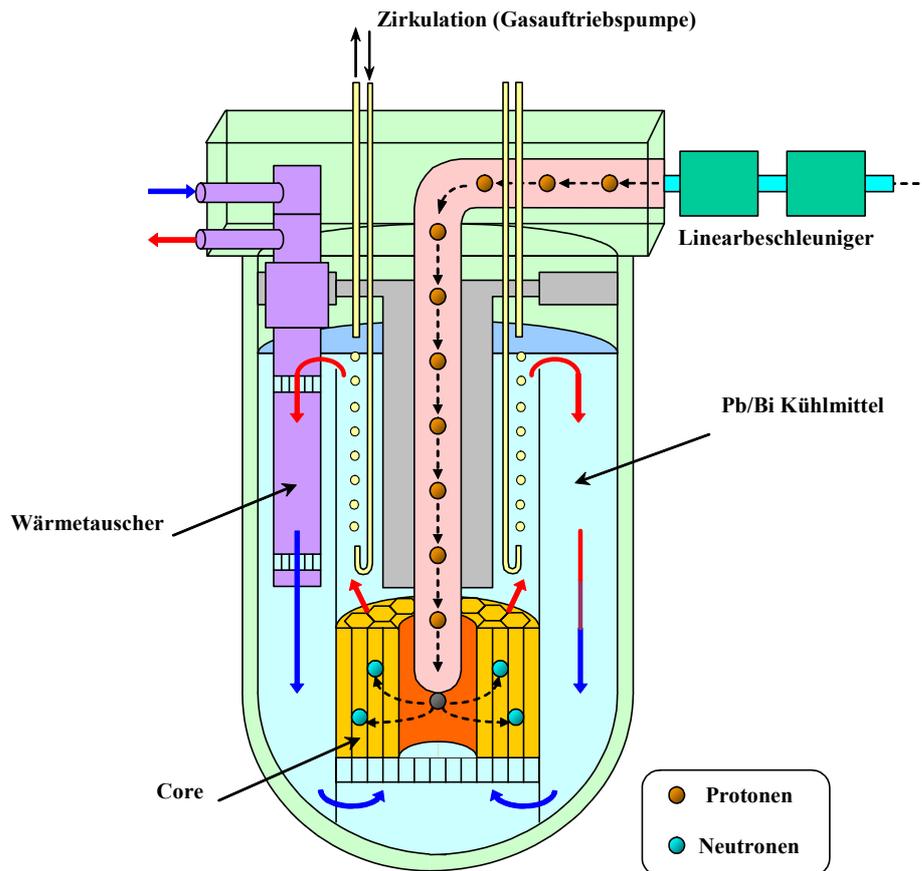
## Einleitung

Das Atomgesetz der Bundesrepublik Deutschland [4] verpflichtet Betreibern von Anlagen, in denen mit Kernbrennstoffen umgegangen wird, dazu anfallende radioaktive Reststoffe schadlos zu verwerten oder als radioaktive Abfälle geordnet zu beseitigen (direkte Endlagerung). Obwohl die direkte Endlagerung technisch realisierbar ist [7], ist sie wegen der langen Betriebsdauern dieser Lagerstätten und den damit verbundenen Sicherheitsbedenken, politisch und gesellschaftlich umstritten. Deshalb gibt es bis heute in Deutschland kein Endlager für hochradioaktive Reststoffe.

Die zweite Möglichkeit, die schadlose Verwertung der radioaktiven Abfälle, wird seit Jahren zum Teil mit der Plutonium Rezyklierung in Leichtwasserreaktoren angewendet. Die Rezyklierung teilt die radioaktiven Reststoffe in wieder verwendbare und nicht wieder verwendbare Materialien auf. Ein Teil dieser so nicht wieder verwendbaren Materialien, sind einige Plutoniumisotope und die Minoren Aktinide wie Neptunium, Americium oder Curium[6]. Die Transmutation hat zum Ziel diese radiotoxischen Isotope in kurzlebige oder stabile Kerne umzuwandeln. Anfang der neunziger Jahre wurden als geeignetes System für die Transmutation, Beschleuniger-getriebene unterkritische Systeme (ADS) vorgeschlagen.

Im Folgenden wird das Konzept eines Beschleuniger-getriebenen Systems dargestellt und die Verbindung mit dieser Arbeit erläutert.

Ein Beschleuniger-getriebener Reaktor besteht im Wesentlichen aus drei Komponenten. Dem unterkritischen Reaktor, dem Beschleuniger und dem Target (Ziel). Die beiden letzten Komponenten sorgen für eine Aufrechterhaltung der Kettenreaktion. Der Beschleuniger erzeugt hochenergetische Protonen (zwischen 0,5 und 2 GeV) die durch ein evakuiertes Stahlrohr auf ein Target, bestehend aus einem schweren Element (z.B.: Blei oder eine Blei-Wismut Legierung) geschossen wird. Die Protonen erzeugen im Target über Spallationsreaktionen ca. 20-25 freie Neutronen pro 1 GeV Protonenenergie [24]. Durch die Verwendung dieser externen Neutronenquelle kann der Reaktor im unterkritischen Zustand betrieben werden und kann so ein höheres Sicherheitsniveau als konventionelle kritische Kernreaktoren erreichen. Der prinzipielle Aufbau eines solchen Beschleuniger-getriebenen Reaktors wird in Abbildung 0.1 dargestellt. Die „Verbrennung“ der Abfälle erfolgt hauptsächlich durch Spaltungsprozesse, während Neutronenabsorptionen überwiegend zu einer Umwandlung eines radioaktiven Isotops in ein anderes führen.



**Abbildung 0.1: Schematische Darstellung eines Beschleuniger-getriebenen Systems [6]**

In Abbildung 0.2 ist der Anteil der Spaltungen bei einem Neutroneneinfang als Funktion der Neutronenenergie für die höheren Transurane Np-237 und Am-241 sowie für die Spaltstoffe U-235 und Pu-239 dargestellt. Es zeigt dass für die dargestellten Transurane die Spaltwahrscheinlichkeit ab einer Schwellenenergie von etwa 100 keV stark zunimmt.

Abbildung 0.3 zeigt die Anzahl Spaltneutronen pro Absorption. Es werden dieselben Isotope wie in Abbildung 0.2 dargestellt. Auch hier wird deutlich dass die Anzahl Spaltneutronen pro Absorption bei Americium-241 und Neptunium-237 ab ca. 100 keV stark ansteigt. Diese Graphiken verdeutlichen den möglichen energetischen Einsatzbereich von Transmutationsreaktoren. Oberhalb isotopenspezifischer Energien nimmt die Spaltrate für die effektive Vernichtung dieser Isotope stark zu.

Die Abbildungen 0.2 und 0.3 zeigen den aktuellen Stand der Verarbeitung von nuklearen Daten im Forschungszentrum Karlsruhe, Spaltraten und Anzahl Spaltneutronen bis 20 MeV, vor dieser Arbeit. Weiter von Interesse sind aber die Ereignisse bei noch höheren Energien, die in dieser Diplom-Arbeit bis Energien von 250 MeV berechnet, veranschaulicht und diskutiert werden (Kapitel 5.2).

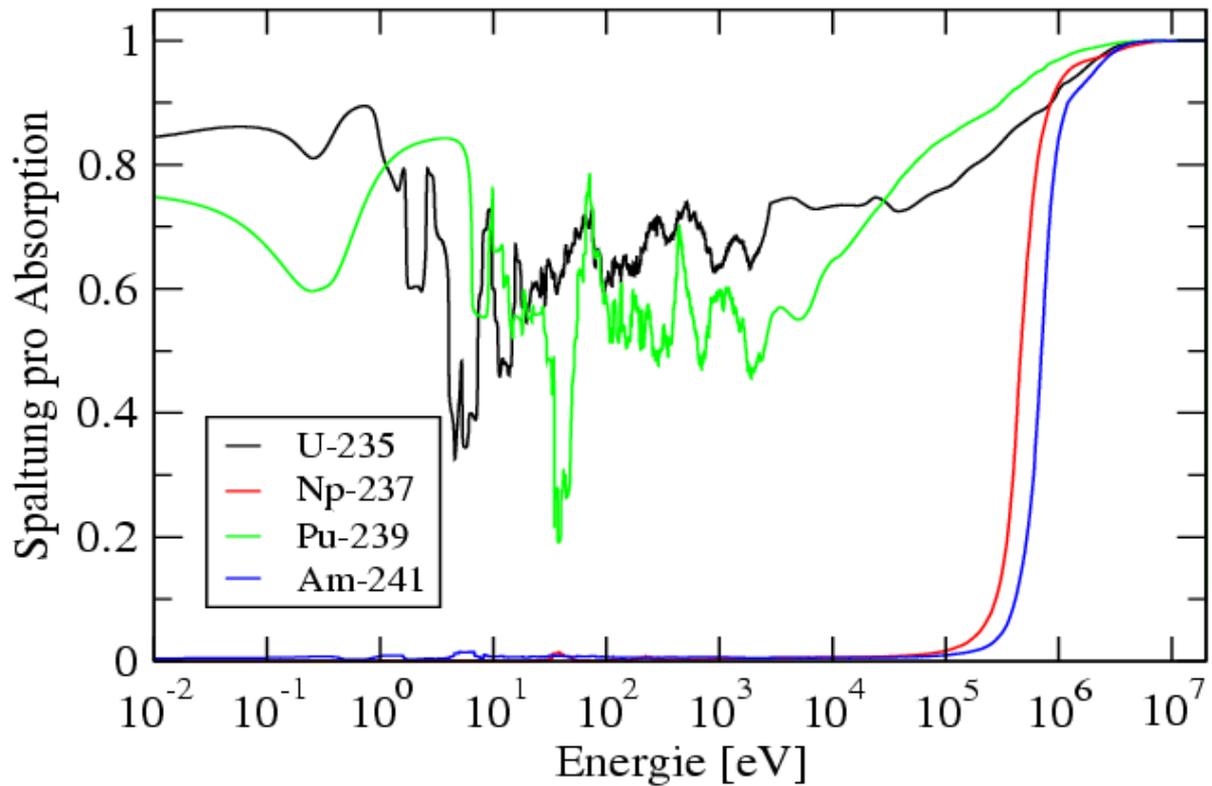


Abbildung 0.2: Vergleich des Spaltanteils zum Gesamteinfang für ausgewählte Isotope [29]

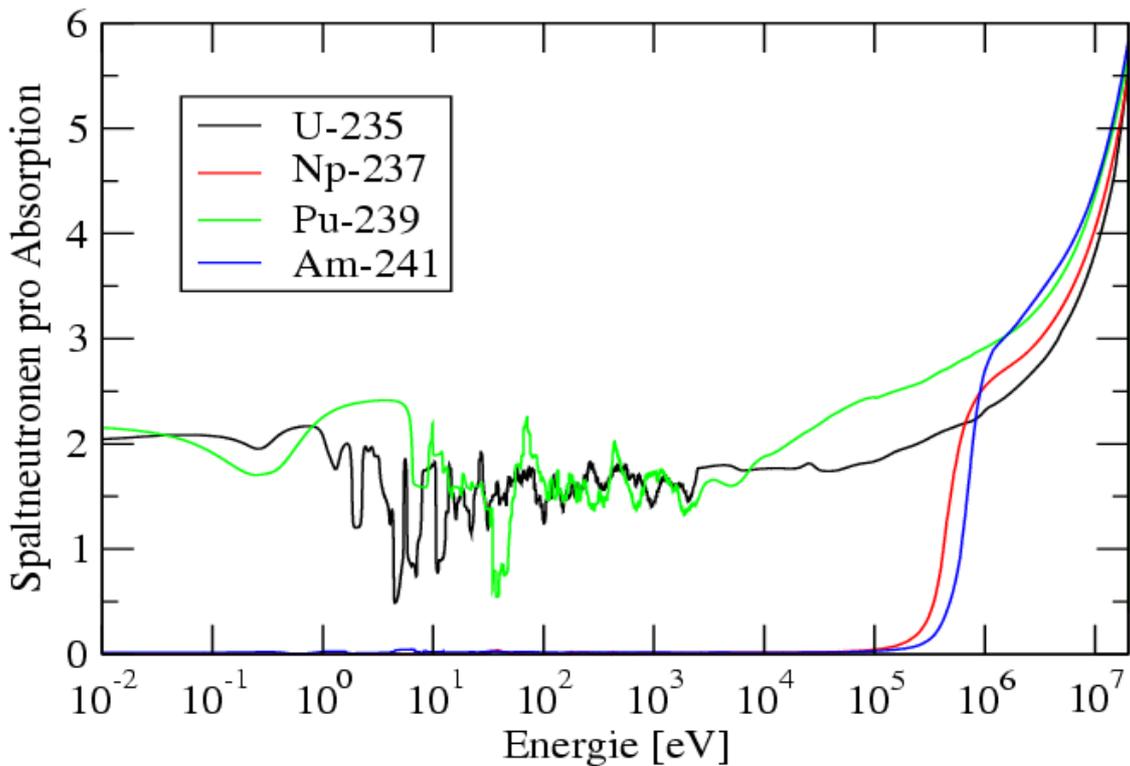


Abbildung 0.3: Vergleich der Zahl der Spaltneutronen pro Einfang für ausgewählte Isotope [29]

Für die Konstruktion und den Betrieb solcher Beschleuniger-getriebenen unterkritischen Reaktoren sind neutronenphysikalische Berechnungen essentiell. Für die Bestimmung von statischen Referenzlösungen hat sich das Monte-Carlo Programm MCNPX (Los Alamos) [32] etabliert. MCNPX ermöglicht für sehr komplexe geometrische Brennelementeanordnungen eine zuverlässige Berechnung aller notwendigen Systemparameter. Da Monte Carlo Berechnungen jedoch sehr rechenzeitaufwendig sind, werden dynamische Reaktorberechnungen (z.B. Abbrandrechnungen oder Sicherheitsuntersuchungen) mit deterministischen Multigruppen-Rechenverfahren gelöst. Ein solches Programmsystem ist das im Forschungszentrum Karlsruhe entwickelte KAPROS [1]. KAPROS wurde ursprünglich für schnelle Reaktoren entwickelt. Es fand dann aber Anwendung im Bereich der thermischen und epithermischen Reaktoren mit einer energetischen Obergrenze von 10 MeV. Für den Einsatz an Beschleuniger-getriebenen Reaktoren, bedarf es einer Erweiterung der KAPROS-Bibliotheken. In konventionellen Kernreaktoren treten praktisch keine Neutronen oberhalb Energien von 20 MeV auf. Da in Beschleuniger-getriebenen Reaktoren aber durchaus Neutronenergien von dem des Protonenstrahls (0,5 bis 2 GeV) auftreten können, erscheint eine Erweiterung der KAPROS-Bibliothek für höhere Energien wünschenswert, insbesondere um die Einflüsse dieses Energiegebietes zu analysieren.

Die Kernaufgabe der vorliegenden Arbeit ist die Erweiterung der KAPROS-Bibliothek von 10 auf 150 MeV. Besonderes Augenmerk wird dabei auf die  $(n,xn)$  Prozesse gelegt, da diese für  $x \geq 2$  oberhalb von 10 MeV eine wichtige Rolle spielen [12] und bei Berechnungen bis 10 MeV bisher nicht einzeln aufgeschlüsselt wurden.

Kapitel 1 befaßt sich mit den, für diese Arbeit wichtigsten, kernphysikalischen Begriffen. In Kapitel 2 werden die mathematischen Hintergründe der Multigruppenrechnung ausgehend von der Boltzmann Gleichung erläutert. Kapitel 3 gibt die verschiedenen Programme, Programmmodule und Daten-Formate wieder, die in dieser Diplomarbeit verwendet wurden. In Kapitel 4 folgen die Überprüfungen der mikroskopischen und der makroskopischen Gruppenkonstanten, sowie eine Erläuterung der KAPROS-Eingabe. Kapitel 5 befasst sich mit speziellen für Reaktorrechnungen wichtigen Kernreaktionen oberhalb 10 MeV, mit Neutronenbilanzen bis 250 MeV und mit den gegenwärtig vorhandenen ENDF-Daten oberhalb 20 MeV zur Berechnung von Kernreaktionen. Kapitel 6 fasst diese Arbeit zusammen und schließt mit einem Ausblick über die sinnvolle Weiterentwicklung der ENDF-Daten und der Multigruppenrechnung für Reaktorsysteme.

# Kapitel 1

## Kernphysikalische Begriffsbestimmungen

In Kapitel 1 werden wichtige Begriffe wie Wirkungsquerschnitt, Untergrundquerschnitt, unendliche Verdünnung, Resonanzselbstabschirmung und Dopplereffekt erläutert.

### 1.1 Wirkungsquerschnitte

Werden Teilchen auf Kerne geschossen, tritt ein Bruchteil der Teilchen mit den Kernen in Wechselwirkung. Für diese Wechselwirkung besteht eine gewisse Wahrscheinlichkeit und das Maß für diese Wahrscheinlichkeit wird durch die Größe des Wirkungsquerschnittes angegeben [11]. Die Einheit des Wirkungsquerschnittes, ist die der Fläche ( $\text{m}^2$ ). Da häufig Wirkungsquerschnitte in der Größenordnung von  $10^{-24} \text{ cm}^2$  vorkommen, hat man als Abkürzung das „barn“ eingeführt. Dieser Begriff stammt wohl aus einer alten Geschichte, die besagt, dass ein Forscher sehr überrascht darüber war, dass ein einzelner Querschnitt wesentlich größer als erwartet war. Darauf rief dieser : „Wow, der ist so groß wie eine Scheune“, und die Einheit barn (englisch für Scheune) war geboren [20].

Definitionsgemäß gilt:

$$1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2 \quad (1)$$

Prinzipiell gibt es für alle möglichen Wechselwirkungen, zwischen Geschossteilchen und Targetkernen, Wirkungsquerschnitte.

Die Summe der effektiven Wirkungsquerschnitte aller bei einer bestimmten Geschossteilchenenergie stattfindender Kernprozesse nennt man den totalen Wirkungsquerschnitt  $\sigma_t$ .

Er setzt sich aus dem elastischen Streuquerschnitt  $\sigma_{el}$  und dem nicht elastischen Streuquerschnitt  $\sigma_{nel}$ , der alle Kernprozesse außer der elastischen Streuung beinhaltet, zusammen [10].

$$\sigma_t = \sigma_{el} + \sigma_{nel} \quad (2)$$

Tabelle 1.1 gibt Beispiele für Arten der nicht elastischen Streuung wieder.

Art der nicht elastischen Streuung	Beschreibung
(n,n')	Absorption eines Neutrons, Emittierung eines Neutrons
(n,p)	Absorption eines Neutrons, Emittierung eines Protons
(n, $\gamma$ )	Absorption eines Neutrons, Emittierung eines $\gamma$ -Teilchens
(n, $\alpha$ )	Absorption eines Neutrons, Emittierung eines $\alpha$ -Teilchens
(n,d)	Absorption eines Neutrons, Emittierung eines Deuterons
(n,2n)	Absorption eines Neutrons, Emittierung von zwei Neutronen
(n,3n)	Absorption eines Neutrons, Emittierung von drei Neutronen
(p,p')	Absorption eines Protons, Emittierung eines Protons
(p,n)	Absorption eines Protons, Emittierung eines Neutrons
(n,fission)	Absorption eines Neutrons, Spaltung (Spaltprodukte, prompte Neutronen)
...	...

**Tabelle 1.1 : Beispiele für nicht elastische Streuung**

Für Reaktorberechnungen ist sowohl der **mikroskopische Wirkungsquerschnitt** als auch der **makroskopische Wirkungsquerschnitt** von essentieller Bedeutung.

Der mikroskopische Wirkungsquerschnitt ist materialspezifisch und wird deshalb nur für ein bestimmtes Isotop erstellt. Der makroskopische Wirkungsquerschnitt beinhaltet neben den mikroskopischen Wirkungsquerschnitten der verschiedenen Materialien, in dem betrachteten makroskopischen System, deren Mischungsverhältnis, sowie deren gegenseitige

Beeinflussung, die durch die Resonanzselbstabschirmungsfaktoren berücksichtigt werden (siehe Kapitel 1.3).

Der Zusammenhang zwischen mikroskopischen Wirkungsquerschnitt  $\sigma$  eines betrachteten Prozesses und makroskopischen Wirkungsquerschnitt  $\Sigma$  kann für  $i$  Kernarten eines Materials durch Gleichung (3) beschrieben werden (siehe z.B. Referenz [14]):

$$\sum_i N_i \sigma_i \quad (3)$$

Dabei ist  $N_i$  die Zahl der Kerne pro  $\text{cm}^3$  und Kernart. Auf die Berechnung des makroskopischen Wirkungsquerschnitts mit Hilfe des Programms GRUCAL wird in Kapitel 3.6 näher eingegangen.

## 1.2 Der Verlauf des mikroskopischen totalen Wirkungsquerschnittes

Zur Beschreibung des Verlaufs mikroskopischer Wirkungsquerschnitte werden drei Energiebereiche unterschieden, deren Grenzen isotopenspezifisch sind [10]:

1. Im Bereich thermischer Energien (0 – ca. 0,5 eV) ist der totale Wirkungsquerschnitt  $\sigma_t$  praktisch gleich dem Absorptionsquerschnitt  $\sigma_a$  und wird durch dessen charakteristische  $1/v$  – Abhängigkeit geprägt, wobei  $v$  die Geschwindigkeit des Neutrons ist. Falls in diesem Bereich keine Resonanzen auftreten, gilt :

$$\sigma_t \sim \frac{1}{v} \quad (4)$$

1. Es folgt das Energiegebiet der Resonanzen (ca. 0,5 eV – 2 MeV), das sich unterteilt in das Gebiet der Einzelresonanzen, mit bis zu einigen Hundert einzelnen Resonanzstellen im Querschnittsverlauf, und in das Energiegebiet überlagerter

Resonanzen, die auf die steigende Dichte der Resonanzen bei steigender Energie zurückzuführen ist.

Resonanzen entstehen, wenn Einschussenergie, Drehimpuls und Parität es gestatten einen definierten inneren Zustand des Atomkerns (genauer des Targetkerns und des Neutrons) anzuregen [10]. Hierbei entstehen vermehrt diskrete Anregungszustände, was zu einem stark erhöhten Reaktionsquerschnitt führt. Je höher die Anregungsenergie des einfallenden Neutrons ist, je enger liegen die diskreten Anregungszustände im Zwischenkern zusammen und je weniger ausgeprägt werden die Resonanzstrukturen. Für schwere Brennstoffkerne liegt der Resonanzbereich im Allgemeinen bei niedrigeren Energien als für leichte Kerne.

2. Im Energiegebiet schneller Neutronen (ab ca. 1 MeV) bilden sich keine Resonanzen mehr aus, der Querschnittsverlauf ist glatt und folgt breiten wellenförmigen Schwankungen, so genannten Riesenresonanzen.

Im Mittel gilt für den Querschnittsverlauf die Beziehung :

$$\sigma_t \approx 2\pi R^2 \quad (5)$$

Zwischen Kernradius R und Massenzahl A des Isotops besteht nach Referenz [24] folgender Zusammenhang :

$$R = r_0 A^{1/3} \quad (6)$$

Für  $r_0$  kann nach Referenz [8] der Näherungswert  $r_0 = 1,2 \cdot 10^{-13}$  cm verwendet werden. Gleichung (5) in Gleichung (6) eingesetzt ergibt dann :

$$\sigma_t \approx 2,88\pi A^{2/3} \quad (7)$$

Abbildung 1.1 zeigt den Verlauf eines mikroskopischen Querschnittes am Beispiel des Isotops Plutonium 239.

## Verlauf des mikroskopischen Wirkungsquerschnittes von Pu-239

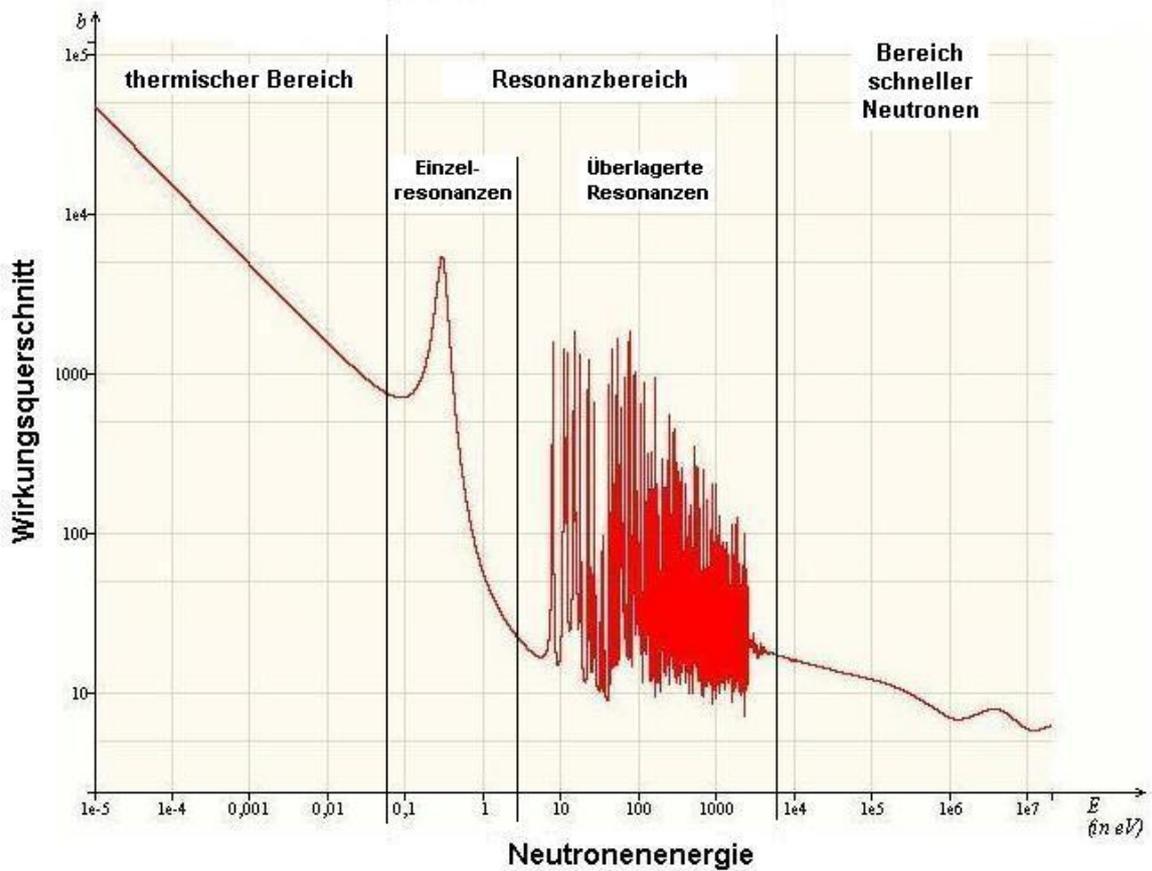


Abbildung 1.1 : Verlauf des mikroskopischen Wirkungsquerschnittes von Pu-239, [27]

### 1.3 Selbstabschirmung

Bestrahlt man eine Probe mit einem Neutronenstrahl, wird der Neutronenfluss mit zunehmender Probentiefe geringer. Dieser Effekt, dass die Probe sich selbst gegen den Neutronenstrahl abschirmt wird **geometrische Selbstabschirmung** genannt.

Für die Berechnung von makroskopischen Gruppenkonstanten für Materialmischungen muss die gegenseitige Beeinflussung der einzelnen Materialien, bedingt durch den Resonanzverlauf vieler Neutronenwirkungsquerschnitte, beachtet werden. Dieser Effekt der gegenseitigen Beeinflussung wird **energetische Selbstabschirmung** genannt und in Multigruppenreaktorberechnungen durch die Resonanzselbstabschirmungsfaktoren berücksichtigt.

Eine Methode die Selbstabschirmung in Multigruppen einzubinden ist die „Narrow-Resonance“ (auch „Bondarenko“) Näherungsmethode [1,9]. Dabei wird angenommen dass das Produkt von Neutronenfluss  $\Phi(E)$  und totalem makroskopischen Wirkungsquerschnitt  $\Sigma_t(E)$  nur schwach energieabhängig ist [1], dann gilt:

$$W(E) = \Phi(E) * \Sigma_t(E) \quad (8)$$

oder

$$\Phi(E) = \frac{W(E)}{\Sigma_t(E)} \quad (9)$$

Um den Teil des Flusses zu erhalten, der die Selbstabschirmung des Isotops  $k$  liefert, wird angenommen, dass alle anderen Isotope durch einen konstanten **Untergrundquerschnitt**  $\sigma_0$  dargestellt werden.

$$\Phi^k(E) = \frac{W(E)}{\sigma_t^k(E) + \sigma_0} \quad (10)$$

Ist nun der Untergrundquerschnitt  $\sigma_0$  viel größer als die höchste Spitze des Querschnitts  $\sigma_t$  des zu untersuchenden Materials, dann ist der Wichtungsfluss proportional zur Wichtungsfunktion  $W(E)$  (siehe Kapitel 2.2). In diesem Fall spricht man von **unendlicher Verdünnung**. Unendliche Verdünnung bedeutet, dass die Menge des zu untersuchenden

Materials unendlich klein zur Umgebung ist und somit keinen Einfluß auf den Neutronenfluß hat. Ist jedoch der Untergrundquerschnitt  $\sigma_0$  kleiner als  $\sigma_t$ , wird der Wichtungsfluss große Senken im Bereich der Spitzen von  $\sigma_t$  haben und große Selbstabschirmungseffekte können auftreten.

#### **1.4 Die Dopplerverbreiterung von Resonanzspitzen**

Ähnlich den bekannten Phänomenen in der Optik und der Akustik, kommt der Dopplereffekt in der Resonanzabsorption dadurch zustande, dass der mit dem Neutron wechselwirkende Kern nicht ruht, sondern thermische Bewegungen ausführt. Dadurch wird die Relativenergie zwischen Neutron und Kern beeinflusst. Der Dopplereffekt bewirkt, dass bei einer Erhöhung der Temperatur eine Verbreiterung der Resonanzlinien auftritt [15]. Der integrierte totale Wirkungsquerschnitt ändert sich aber, bei der Betrachtung über den gesamten Energiebereich der Resonanzspitze, praktisch nicht. Die Verbreiterung ist mit einer Reduktion des Maximalwertes des Wirkungsquerschnittes verbunden, wie dies in Abbildung 1.2 dargestellt ist. Bei schweren Kernen wirkt sich die Dopplerverbreiterung stärker aus als bei leichten. Das beruht auf der Tatsache, dass die thermische Energie eines schweren Kernes, bei gleicher Temperatur und somit auch gleicher Geschwindigkeit, größer ist als die eines leichten Kernes. Dadurch werden die Relativenergien größer bzw. kleiner und damit die Resonanz breiter. Da der Kern für höhere Temperaturen im gleichen Zeitraum aber eine größere Anzahl verschiedener energetischer Zustände durchläuft, und sich damit die Wahrscheinlichkeit eines Aufenthaltes bei einer spezifischen Energie verringert, nimmt der maximale Wirkungsquerschnitt ab.

Dopplerverbreiterung einer Resonanzspitze  
aufgrund Temperaturerhöhung

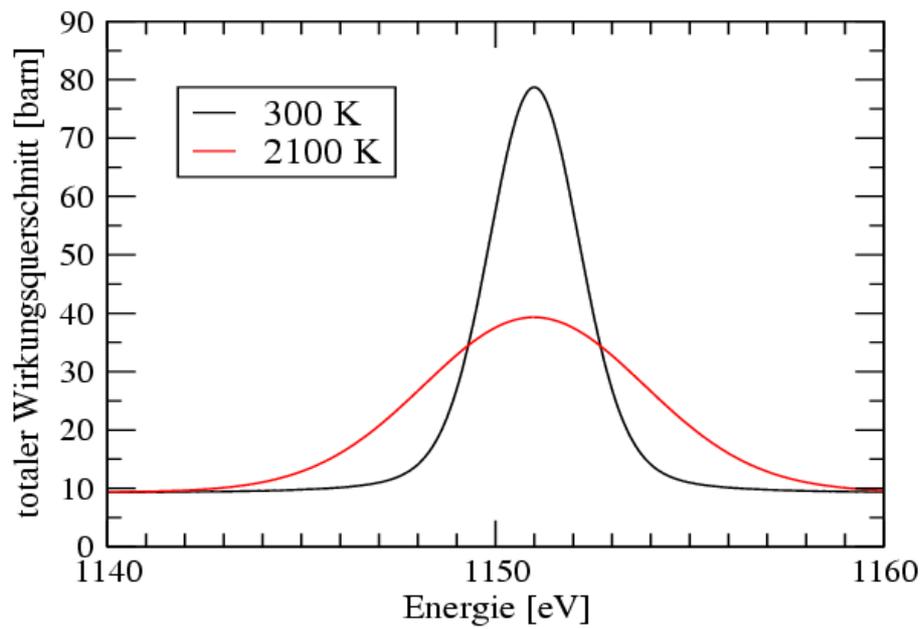


Abbildung 1.2: Dopplerverbreiterung des totalen Wirkungsquerschnittes von Eisen-56 bei einer Temperaturerhöhung um 1800 K, [30]

# Kapitel 2

## Die mathematische Basis der Gruppenkonstantenberechnung

In Kapitel 2 wird, ausgehend von der Boltzmann-Gleichung, über die Wichtungsfunktionen, die Selbstabschirmungsfaktoren und die Gruppenübergangswahrscheinlichkeiten die Gruppenkonstantenberechnung hergeleitet.

### 2.1 Die Boltzmann-Gleichung

Das Verhalten der Neutronenpopulation in einem Kernreaktor kann durch die Boltzmann-Gleichung mathematisch dargestellt werden. Die Neutronenpopulation hängt dabei von den vier physikalischen Größen Zeit, Energie, Ort und Richtung ab.

Die Boltzmann-Gleichung lautet in integro-differentieller Form:

$$\frac{1}{v} * \frac{\delta\phi(\vec{r}, \vec{\omega}, E, t)}{\delta t} + \omega * \nabla \phi(\vec{r}, \vec{\omega}, E, t) = Q(\vec{r}, \vec{\omega}, E, t) + \int \int \Sigma_t(\vec{r}', E') * P(\vec{r}, \vec{\omega}', E' \rightarrow \vec{\omega}, E) * \phi(\vec{r}', \vec{\omega}', E, t) d\vec{\omega}' dE' \quad (11)$$

hierbei bedeutet:  $\delta\phi(\vec{r}, \vec{\omega}, E, t) / \delta t$  die zeitliche Änderung der Anzahl Neutronen in Abhängigkeit von Ort, Richtung, Energie und der Zeit

$\nabla \phi(\vec{r}, \vec{\omega}, E, t)$  die Änderung der Anzahl von Neutronen in Bezug auf die örtliche Verteilung, Richtungsänderung, Energieänderung und zeitliche Änderung der Neutronenflussdichte

$Q(\vec{r}, \vec{\omega}, E, t)$	Quellterm für die Neutronen die durch (n,xn)- und Spaltungsprozesse entstehen
$\Sigma_t(\vec{r}', E')$	Totaler Neutronenquerschnitt
$P(\vec{r}, \vec{\omega}', E' \rightarrow \vec{\omega}, E)$	Normierte Übergangswahrscheinlichkeit der Neutronen mit der Richtung $\omega'$ und der Energie $E'$ zur Richtung $\omega$ und Energie $E$
$\phi(\vec{r}, \vec{\omega}, E, t)$	Neutronenflussdichte

$\vec{r}$	Ortsvektor
$\vec{\omega}$	Normierter Richtungsvektor
t	Zeit
v	Neutronengeschwindigkeit
E	Neutronenenergie

Die **Zeitabhängigkeit** der Neutronenpopulation wird kurzfristig vor allem durch die mittlere Lebensdauer der prompten und verzögerten Neutronen bestimmt. Diese mittlere Lebensdauer bestimmt das dynamische Verhalten eines Reaktors. Ein Anstieg der Neutronenzahl führt zu erhöhten Reaktionsraten im Reaktor und dadurch zu erhöhter Energiefreisetzung. Als Folge steigt die Temperatur im Brennstoff mit negativem Reaktivitätseffekt durch den Doppler Effekt und Änderung der Kühlmitteltemperatur und -dichte mit entsprechenden Reaktivitätseffekten.

Eine Senkung der Neutronenanzahl hat die entgegengesetzten Auswirkungen zur Folge. Die langfristige Zeitabhängigkeit der Neutronen im Reaktor hängt vom Brennstoffabbau, den Regelungseinflüssen und dem Brennstoffmanagement (Brennstoffumladungen nach Betriebszyklen) ab.

Die **Energieabhängigkeit** der Neutronenpopulation hängt von den verschiedenen Resonanzen und Schwellenreaktionen bei den Neutronenwirkungsquerschnitten ab. Diese Energieabhängigkeit kann durch kontinuierliche Lösungsformalismen wie z.B. die so genannten Monte-Carlo-Codes, wie MCNP oder MCNPX, berücksichtigt werden. Diese kontinuierlichen Lösungen bedürfen allerdings sehr großer Rechenkapazitäten. Mit geringerem Rechenaufwand können diskrete Lösungsformalismen wie z.B. das Multigruppenverfahren, mit dem sich diese Arbeit beschäftigt, erstellt werden. Mit wachsender Anzahl der Gruppen werden die Berechnungen genauer und aufwendiger. Die **Richtungsabhängigkeit** der Neutronen hängt von den Bewegungen der einzelnen Neutronen ab. Diese Bewegungen werden bestimmt durch Wechselwirkungen mit anderen Komponenten (Atomkernen) im Reaktor. Insbesondere die elastische und die inelastische Streuung von Neutronen an Kernen, sowie die Neutronenproduktion bei Spaltungs- und (n,xn) - Prozessen bestimmen die Richtungen der Neutronen, während z.B.: Neutron – Neutron Stöße, aufgrund extrem seltenen Auftretens, vernachlässigt werden können.

Die **örtliche Verteilung** der Neutronen hängt von der Reaktorgeometrie ab. Die Anordnung der Brennstäbe, deren Form und natürlich ihre Zusammensetzung bestimmen genau wie andere Reaktorbauteile wie Regelstäbe, Kühlmittel, Moderator, u.s.w. die lokale Neutronenanzahl. Für die örtliche Verteilung gibt es wie bei der Energieabhängigkeit zwei grundsätzliche Methoden der Berechnung.

Beim **finite Differenzen** Verfahren werden die Ortsvariablen der genäherten Boltzmann-Gleichung in einem mehr oder weniger engen Gitter diskretisiert und an den Maschenpunkten die Neutronenflussdichte bestimmt.

Beim **finite Elemente** Verfahren wird der Reaktor in relativ große Bereiche aufgeteilt. Für diese Bereiche werden die Mittelwerte der Neutronenflussdichten und der Neutronenströme, an den Rändern ermittelt. Generell ist das finite Differenzen Verfahren genauer aber auch rechenaufwendiger als das finite Elemente Verfahren. Je nach Anwendung ist so mal die eine mal die andere Methode sinnvoller.

## 2.2 Gruppenkonstantenberechnung und Selbstabschirmfaktoren

Das Grundprinzip der Gruppenkonstantenberechnung beruht auf der Forderung nach Erhaltung der betreffenden Reaktionsraten im betrachteten makroskopischen System [1]. Für ein System mit der Neutronenflussdichte  $\Phi(\vec{r}, E)$  und Neutronenwirkungsquerschnitt  $\sigma_x^k(E)$  für Material k und Reaktionstyp x beträgt die Reaktionsrate  $R_x^k$  im Gebiet V:

$$R_x^k = \int_V \int_E \sigma_x^k(E) \Phi(\vec{r}, E) d\vec{r} dE \quad (12)$$

Per Definition muss für den Mittelwert  $\langle \sigma \rangle_{x,g}^k(E)$  (Gruppenkonstante) in der Energiegruppe g gelten :

$$\langle \sigma \rangle_{x,g}^k \int_V \int_{E(g)} \Phi(\vec{r}, E) d\vec{r} dE = \int_V \int_{E(g)} \sigma_x^k(E) \Phi(\vec{r}, E) d\vec{r} dE \quad (13)$$

oder

$$\langle \sigma \rangle_{x,g}^k = \frac{\int_V \int_{E(g)} \sigma_x^k(E) \Phi(\vec{r}, E) d\vec{r} dE}{\int_V \int_{E(g)} \Phi(\vec{r}, E) d\vec{r} dE} \quad (14)$$

Gleichung (14) gilt allgemein für Wirkungsquerschnitte, sowohl für Einzelmaterialien als auch für Materialmischungen (dann ohne Index k).

Die Anwendung von Gleichung (14) erfordert die Kenntnis der Lösung für den Wichtungsfluß  $\Phi(\vec{r}, E)$  der durch Näherungen beschrieben wird (siehe Kapitel 2.2) . Die mathematische Näherung geht zunächst davon aus dass der orts- und energieabhängige Wichtungsfluss, in das Produkt einer orts- und einer energieabhängigen Komponente, aufgeteilt werden kann:

$$\Phi(\vec{r}, E) = R(\vec{r}) * \varphi(E) \quad (15)$$

Durch einsetzen von Gleichung (15) in Gleichung (14) wird die Ortsabhängigkeit eliminiert :

$$\langle \sigma \rangle_{x,g}^k = \frac{\int_{E(g)} \sigma_x^k(E) * \varphi(E) dE}{\int_{E(g)} \varphi(E) dE} \quad (16)$$

Um  $\varphi(E)$  zu ersetzen wird die „Narrow-Resonance“-Approximation (auch Bondarenko Näherung) angewendet. Dabei wird angenommen, dass das Produkt von Neutronenfluss  $\varphi(E)$  und totalem makroskopischen Neutronenwirkungsquerschnitt  $\Sigma_t(E)$  nur schwach energieabhängig ist:

$$W(E) = \varphi(E) * \Sigma_t(E) \quad (17)$$

oder

$$\varphi(E) = \frac{W(E)}{\Sigma_t(E)} \quad (18)$$

Einsetzen von Gleichung (18) in (16) ergibt:

$$\langle \sigma \rangle_{x,g}^k = \frac{\int_{E(g)} \frac{\sigma_x^k(E) * W(E)}{\Sigma_t(E)} dE}{\int_{E(g)} \frac{W(E)}{\Sigma_t(E)} dE} \quad (19)$$

Zur Bestimmung der **Selbstabschirmfaktoren** wird angenommen, dass der totale makroskopische Wirkungsquerschnitt  $\Sigma_t(E)$  zusammengesetzt ist aus dem temperaturabhängigen Resonanzwirkungsquerschnitt eines Materials k mit Teilchenzahldichte  $N^k$  und einen auf  $N^k$  bezogenen konstant angenommenen Restquerschnitt  $\sigma_0$  der anderen im betrachteten System vorkommenden Materialien.

Für  $\Sigma_t(E)$  gilt dann:

$$\Sigma_t(E) = \Sigma_t^k(E, T) + N^k * \sigma_0 \quad (20)$$

oder

$$\Sigma_t(E) = N^k * [\sigma_t^k(E, T) + \sigma_0] \quad (21)$$

Einsetzen von Gleichung (21) in (19) ergibt:

$$\langle \sigma \rangle_{x,g}^k(\sigma_0, T) = \frac{\int_{E(g)} \frac{\sigma_{x,g}^k(E) * W(E)}{\sigma_t^k(E, T) + \sigma_0} dE}{\int_{E(g)} \frac{W(E)}{\sigma_t^k(E, T) + \sigma_0} dE} \quad (23)$$

$\langle \sigma \rangle_{x,g}^k(\sigma_0, T)$  ist die Temperatur- und Untergrundspezifische Gruppenkonstante der Gruppe g,

für das Material k und eine bestimmte Reaktion x.

Für unendliche Verdünnung (siehe Kapitel Resonanzselbstabschirmung) lässt man nun den

Untergrundquerschnitt  $\sigma_0$  gegen  $\infty$  gehen, so kann man  $\sigma_t^k(E, T)$  im Nenner der Integrale

vernachlässigen:

$$\lim_{\sigma_0 \rightarrow \infty} (\sigma_t^k(E, T) + \sigma_0) = \sigma_0 \quad (24)$$

Auf Gleichung (23) angewandt ergibt sich:

$$\langle \sigma \rangle_{x,g}^k(\infty, T) = \frac{\int_{E(g)} \frac{\sigma_{x,g}^k(E) * W(E)}{\sigma_0} dE}{\int_{E(g)} \frac{W(E)}{\sigma_0} dE} \quad (25)$$

$\sigma_0$  lässt sich nun vor die Integrale ziehen und kürzen, man erhält:

$$\langle \sigma \rangle_{x,g}^k(\infty, T) = \frac{\int_{E(g)} \sigma_{x,g}^k(E) * W(E) dE}{\int_{E(g)} W(E) dE} \quad (26)$$

Die  $\sigma_0$ - und temperaturabhängigen Selbstabschirmfaktoren  $f_{x,g}^k(\sigma_0, T)$  sind wie folgt definiert [1]:

$$f_{x,g}^k(\sigma_0, T) = \frac{\langle \sigma \rangle_{x,g}^k(\sigma_0, T)}{\langle \sigma \rangle_{x,g}^k(\infty, T)} \quad (27)$$

Bei der Berechnung des effektiven makroskopischen Resonanzquerschnittes müssen folgende Vereinfachungen gültig sein, die in der Praxis nicht immer gegeben sind und für die es notwendig ist geeignete Mittelwerte für die Querschnitte der Restmaterialien zu bilden. Dies wird in dieser Arbeit aufgrund der Komplexität nicht behandelt, es kann jedoch in Referenz [1] nachgeschlagen werden :

- die Materialien des Untergrundquerschnittes  $\sigma_{0,x,g}^k$  weisen in der Gruppe g keine Resonanzen auf
- die Narrow-Resonance-Approximation ist gültig, dies ist der Fall wenn der Energieverlust bei einem Stoß eines Neutrons mit einem Zielkern groß ist, im Vergleich zu der „praktischen Resonanzbreite“  $\Gamma_p$
- die  $\sigma_0$ - und Temperaturinterpolation ist mit der gewünschten Genauigkeit möglich
- die unendlich verdünnten ( $\sigma_0 \rightarrow \infty$ ) Querschnitte  $\sigma_{x,g}^k$  sind nicht temperaturabhängig

Für den effektiven makroskopischen Resonanzquerschnitt gilt dann die Formel:

$$\Sigma_{x,g}^k(T) = N^k * \sigma_{x,g}^k * f_{x,g}^k(\sigma_{0,x,g}^k, T) \quad (28)$$

mit :

k = Resonanzmaterial; x = Reaktionstyp; g = Energiegruppe;

$N^k$  = Teilchenzahldichte des Resonanzmaterials k;

$f_{x,g}^k(\sigma_{0,x,g}^k, T)$  = Resonanz-Selbstabschirmfaktor;

$\sigma_{0,x,g}^k$  = auf  $N^k$  bezogener Untergrundquerschnitt;

$\langle \sigma \rangle_{x,g}^k$  = normalerweise temperaturunabhängiger unendlich verdünnter Querschnitt;

## 2.3 Übergangswahrscheinlichkeiten für elastische und nicht elastische Streuung

Für die Übergangswahrscheinlichkeiten von Neutronen von einer Gruppe zu einer Gruppe niedrigerer Energie, muss zunächst die Stoßkonstante  $\alpha$  definiert werden:

$$\alpha = \left( \frac{A-1}{A+1} \right)^2 \quad (29)$$

mit  $A$  = Massenzahl des vom Neutron getroffenen Kerns;

Die Energie  $E_i$  des Neutrons beträgt dann nach dem Stoss:

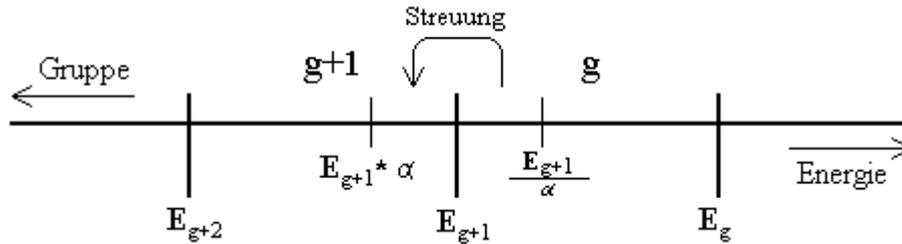
$$E_{i+1} = \alpha E_i \quad (30)$$

Die Nummer der Energiegruppe sinkt per Definition für steigende Energien.

So liegt, in dieser Arbeit für eine 78 Gruppen-Bibliothek, die erste Gruppe im Energieintervall zwischen  $10^8$  und  $1,5 * 10^8$  eV. Die 78te Gruppe liegt im Intervall von  $10^{-3}$  bis  $5 * 10^{-3}$  eV.

Die Grenzen aller 78 Gruppen können in Anhang A nachgeschlagen werden.

Abbildung 2.1 verdeutlicht die Beziehung der sinkenden Energiegruppe für steigende Energien und zeigt die Streuung von der Gruppe g in die Gruppe g+1 in Abhängigkeit der Stoßkonstanten  $\alpha$ , es gilt  $E_g > E_{g+1}$ :



**Abbildung 2.1 : Abwärtsstreuung über Gruppengrenzen hinaus [1]**

Wie mit der 69-Gruppenstruktur kann auch mit der 78 Gruppenstruktur Aufwärtsstreuung behandelt werden. Sie ist für die Erweiterung von 69- auf 78 Gruppen aber unerheblich und wird deshalb im Folgenden zur Vereinfachung vernachlässigt. So kann ein Neutron nur in eine höhere Gruppe (mit niedrigerer Energie) gestreut werden.

Nach dem gleichen Prinzip, wie für skalare Neutronenprozesse aus Kapitel 2.2, gilt für die Streuung aus einer Energiegruppe die Formel:

$$\langle \sigma \rangle_{g \rightarrow h}^k = \frac{\int_{E_{g+1}}^{E_g} W(E') dE' \int_{E_{h+1}}^{E_h} \sigma^k(E' \rightarrow E) dE}{\int_{E_{g+1}}^{E_g} W(E') dE'} \quad (31)$$

dabei ist  $g \neq h$ ; und  $\sigma^k(E' \rightarrow E) = \sigma^k(E') * P^k(E' \rightarrow E)$ ;

Die Streuwahrscheinlichkeit  $P(E' \rightarrow E)$  ist dabei wie folgt definiert:

$$P^k(E' \rightarrow E) = \frac{\sigma^k(E' \rightarrow E)}{\int_{\text{alle } E} \sigma^k(E' \rightarrow E) dE} \quad (32)$$

Einsetzen von Gleichung (31) in Gleichung (32) ergibt:

$$\langle \sigma \rangle_{g \rightarrow h}^k = \frac{\int_{E_{g+1}}^{E_g} \sigma^k(E') * W(E') dE' \int_{E_{h+1}}^{E_h} P^k(E' \rightarrow E) dE}{\int_{E_{g+1}}^{E_g} W(E') dE'} \quad (33)$$

Für die folgenden Betrachtungen der Wahrscheinlichkeiten für die elastische und nicht elastische Abwärtsstreuung wird vorausgesetzt, dass keine leichten Materialien (Massenzahl  $A < 5$ ) im betrachteten Reaktorsystem vorkommen, wie es bei einem Blei-Wismut gekühlten ADS Transmutationsreaktor der Fall wäre.

Die Wahrscheinlichkeit  $P_e$ , dass ein Neutron der Energie  $E$  nach einem elastischen Stoß die Energie  $E'$  habe, beträgt nach [1] :

$$P_e(E \rightarrow E') = \frac{1}{(1 - \alpha)E'} \quad \text{für } \alpha E' < E < E' \quad (34)$$

$$P_e(E \rightarrow E') = 0 \quad \text{sonstige Fälle} \quad (35)$$

Für die nicht elastische Streuung beträgt die Wahrscheinlichkeit  $P_{ne}$  [1]:

$$P_{ne}(E \rightarrow E') = \delta(E' - E - f(E_n)) \quad (36)$$

wobei  $\delta$  das Kroneckersymbol ist und  $f(E_n)$  eine Funktion der diskreten Anregungsenergie des Niveau  $n$  ist, welche die möglichen kinematischen Wechselwirkungen zwischen dem Neutron und dem Zielkern beschreiben kann. Ohne kinematische Effekte gilt  $f(E_n) = E_n$ .

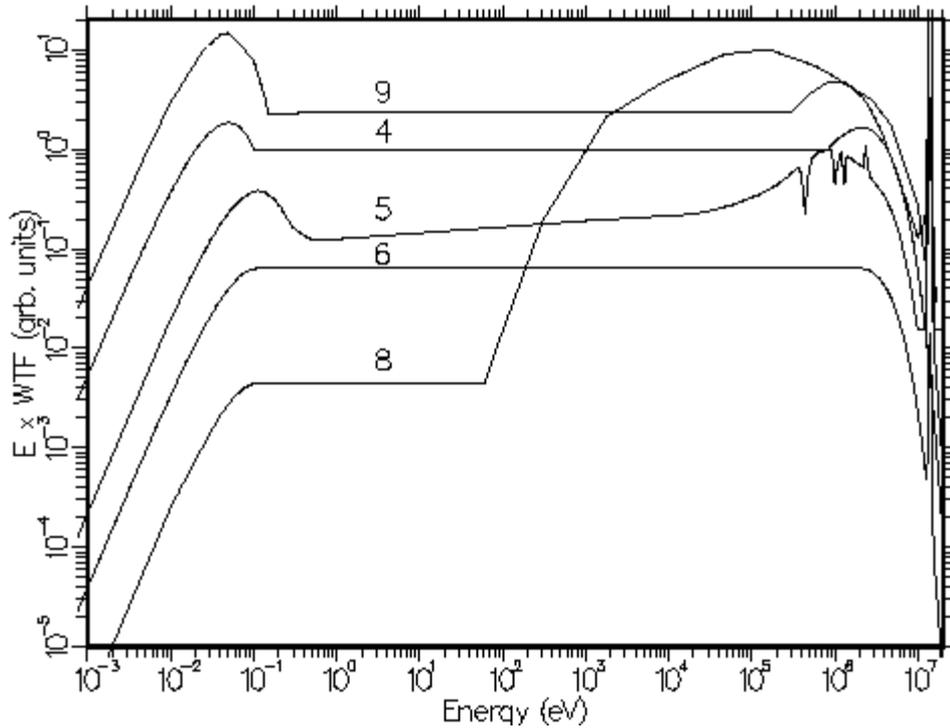
Ausführlicher sind die Übergangswahrscheinlichkeiten für die elastische und die nicht elastische Streuung in Referenz [1] beschrieben.

## 2.4 Wichtungsfunktionen

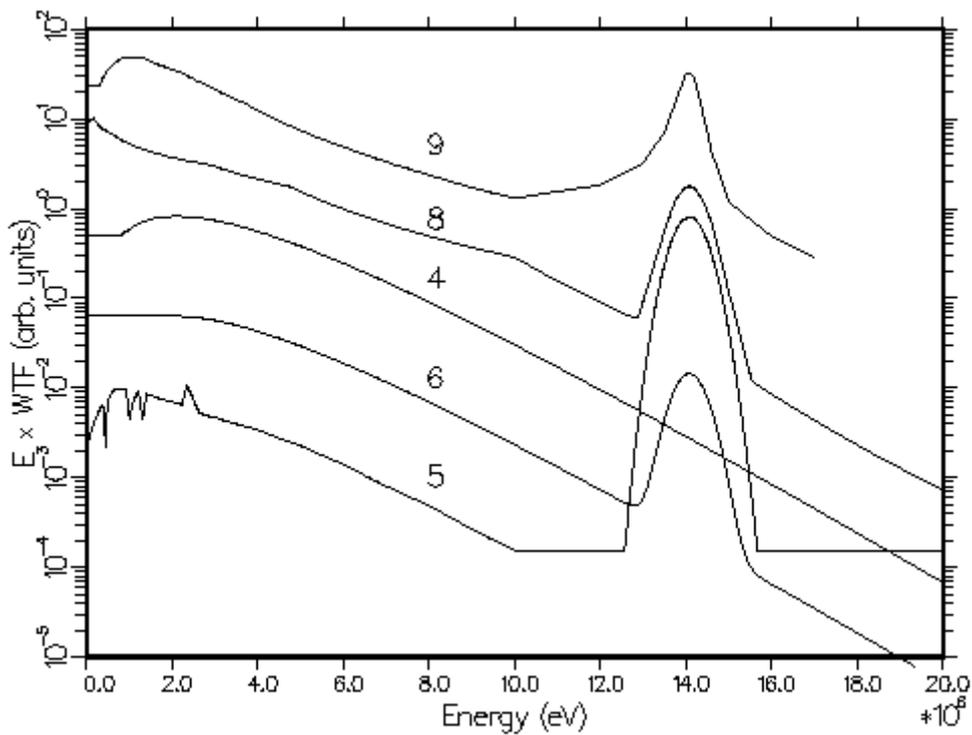
Mit der „Narrow Resonance“ Näherung ist das Wichtungsspektrum durch Gleichung (17)  $W(E) = \varphi(E) * \sum_l(E)$  beschrieben (siehe Kapitel 2.2). Der Neutronenfluss kann im Prinzip aus der Boltzmann Gleichung berechnet werden, z.B. mit einer sehr feinen Energiediskretisierung (sehr viele Energiegruppen). In der Praxis wird für eine Diskretisierung mit mindestens drei Gruppen per Energiedekade gearbeitet.

Im Folgenden werden Standardwichtungsfunktionen aus NJOY [2], anhand zweier verschiedener Darstellungsarten derselben Wichtungsfunktionen dargestellt. In Abbildung 2.2 sind die Produkte der Wichtungsfunktionen mit der Energie logarithmisch über der Energie, ebenfalls logarithmisch, aufgetragen. Durch diese Darstellungsart werden die relativ niedrigen Energien explizierter in der Abbildung dargestellt, als in Abbildung 2.3, in der das Produkt von Energie und Wichtungsfunktion logarithmisch über der linear dargestellten Energie aufgetragen ist, und somit den energetisch oberen Teil der Wichtungsfunktionen genauer zeigt.

Die Wichtungsfunktionen in den Abbildungen 2.2 und 2.3 sind Standardwichtungsfunktionen aus NJOY [2] für verschiedene Reaktortypen. Die Funktionen sind durch Wichtungsfunktionsnummern gekennzeichnet, die später einzeln erläutert werden. In Abbildung 2.2 lässt sich der „energetische Lebenslauf“ eines Neutrons in einem Reaktorsystem, wie z.B. einem konventionellen Leichtwasserreaktor, gut verfolgen. Die Neutronen entstehen bei Energien von etwa 2 MeV mit einem charakteristischen Spaltungsspektrum. Viele von ihnen werden durch Kollisionen mit Kühlmittel oder Moderator abgebremst, was einen  $1/\text{Energie}$  – Verlauf zur Folge hat. Schließlich erreichen sie thermisches Gleichgewicht, dadurch entsteht der Temperatur entsprechend eine Maxwell-Verteilung. Abbildung 2.3 eignet sich für das Verfolgen des „Lebenslaufes“ eines Neutrons das in einem Fusions- oder ADS-Reaktor auftritt. Die Neutronen entstehen in einem Fusionsreaktor durch die Deuterium-Tritium Reaktion bei ca. 14 MeV was sich in den Wichtungsfunktionen durch die Spitzen bei dieser Energie zeigt. Dann werden sie durch Streuungsprozesse abgebremst und verfolgen ab etwa 1 MeV einen ähnlichen energetischen Verlauf wie die Neutronen die bei der Spaltung entstehen.



**Abbildung 2.2: Wichtigkeitsfunktionen [2] für verschiedene Reaktortypen, in logarithmisch-logarithmischer Darstellung, für die Betrachtung niedriger Energien**



**Abbildung 2.3: Wichtigkeitsfunktionen [2] verschiedener Reaktortypen in linear-logarithmischer Darstellung, für die Betrachtung höherer Energien**

Die Wichtungsfunktionen (IWT), von denen einige in den Abbildungen 2.2, 2.3 dargestellt werden, sind in NJOY [2] wie folgt definiert:

- IWT = 2 : Konstante Wichtungsfunktion, wird normalerweise für sehr feine Gruppenstrukturen verwendet (z.B.: für 620, 640 Gruppenstrukturen)
- IWT = 3 :  $1/\text{Energie}$  ( $1/E$ ), wird für Berechnungen von Resonanzintegralen verwendet
- IWT = 4 : thermisch analytisch +  $1/E$  + Spaltung, ermöglicht das anpassen von Thermischen- und Spaltungsneutronenfluss
- IWT = 5 : Druckwasserreaktor Spektrum mit zusätzlicher Fusionsspitze
- IWT = 6 : IWT = 4 mit zusätzlicher Fusionsspitze
- IWT = 7 : Wichtungsfunktion für einen schnellen Reaktor
- IWT = 8 : Wichtungsfunktion für einen schnellen Reaktor, mit Fusionsspitze als auch einem thermischen Bereich für äußere Bereiche des Systems
- IWT = 9 : „CLAW“ Wichtungsfunktion : thermische-,  $1/E$ -, Spaltungs- und Fusionsbereiche sind enthalten

Die Wichtungsfunktion IWT 5 die in dieser Arbeit für die ADS-Anwendung benutzt wurde, wurde oberhalb von 20 MeV mit einer  $1/\text{Energie}$  – Funktion bis 250 MeV erweitert [25].

## **Kapitel 3**

# **Die Entwicklung der nuklearen Daten vom ENDF - File bis zur SIGMN - Bibliothek**

In diesem Kapitel wird zunächst der Entwicklungsablauf vom mikroskopischen ENDF-Datenformat zu SIGMN-Dateien, die makroskopische Querschnittsdaten beinhalten, beschrieben. Anschließend wird auf die einzelnen Daten-Formate, Programme und Module, die in diese Arbeit verwendet werden, explizit eingegangen.

### **3.1 Entwicklungsablauf vom ENDF-File zum makroskopischen Querschnitt**

Das ENDF Format wurde ursprünglich für den Gebrauch der US amerikanischen nuklearen Daten „ENDF/B“ entwickelt. Heute wird das ENDF Format nicht nur vom amerikanischen ENDF/B VI benutzt, sondern wird weltweit, wie von den europäischen JEF –Daten, den JENDL – Daten in Japan und den BROND – Daten in Russland, verwendet [9].

Das ENDF Format beinhaltet komprimierte ausgewertete, Temperatur unabhängige, Punktdaten, Interpolationsvorschriften und Berechnungsformeln. Eine genauere Beschreibung des ENDF – Formates ist Kapitel 3.2 zu entnehmen.

Wie in Abbildung 3.1 dargestellt, können die ENDF- Daten mittels verschiedener Module des Programms NJOY (Kapitel 3.3) verarbeitet werden. Dies geschieht teilweise sequentiell, teilweise mit den Ausgangs-ENDF-Daten. Zunächst werden von den Modulen MODER und RECONR PENDF-Daten erzeugt. Bei den PENDF-Daten handelt es sich um, mit vorgegebener Genauigkeit, linear interpolierbare Punktdaten. Dem entsprechend sind die PENDF-Files um einiges größer als die ENDF-Files. Der Energiebereich der PENDF-Punktdaten ist derselbe wie der der ENDF-Daten (in dieser Arbeit meist bis 150, 200 oder 250 MeV). NJOY verarbeitet diese PENDF - Files mittels der Module BROADR, UNRESR und GROUPT weiter in GENDF-Files, die bereits gewichtete Gruppendaten beinhalten. Da GENDF eine komplizierte, schwer verarbeitbare Datenstruktur besitzt werden diese Daten mit dem NJOY-Modul MATXS in das Format MATXS übertragen.

NJOY kann prinzipiell für alle Kernreaktionen die in einem ENDF-File unter MF-3 (Querschnittsdaten, siehe Kapitel 3.2) gespeichert sind, Gruppenkonstanten berechnen. In den derzeitig verfügbaren ENDF-Daten sind einzelne (n,xn) Reaktionen, wie z.B. (n,2n), (n,3n), oberhalb 20 MeV jedoch nicht als Querschnittsdaten vorhanden (siehe Kapitel 5.3). Deshalb werden, mit dem am IRS entwickelten und für diese Arbeit verfeinerten Programm HIENPROC [25], Gruppenkonstanten oberhalb 20 MeV erstellt. Hierfür verwendet man die ENDF- und die PENDF-Daten von NJOY als Eingabedaten. Die zusätzlichen Informationen zur Berechnung der Gruppenkonstanten werden aus den ENDF Recoil-Spektren entnommen, die unter dem ENDF-File MF-6 gespeichert sind (siehe Kapitel 5.3).

Die Gruppenkonstanten-Daten aus HIENPROC werden dann mit den MATXS-Daten aus NJOY (für Energien unterhalb 20 MeV), die mit Hilfe des Programms NJOYPROC für das Programm GRUMA in ein kompatibles Format gebracht wurden, verknüpft und als gemeinsame Eingabe für das Programm GRUMA, das die GRUBA-Bibliothek erstellt, verwendet (Kapitel 3.4, 3.5).

In der GRUBA - Bibliothek sind die Gruppenkonstanten als Mittelwerte über Energiebereiche im KAPROS-Format für einzelne Isotope und Elemente gespeichert.

In der 78-Gruppenstruktur sind die GRUBA – Querschnittsdaten schwach systemabhängige mikroskopische Daten. Für reaktorspezifische Berechnungen kann nun das Programm GRUCAL makroskopische Wirkungsquerschnitte berechnen. Hierfür benötigt es neben den mikroskopischen Gruppenkonstanten von der GRUBA-Bibliothek, Daten über die Materialmischungsverhältnisse im zu berechnenden System, sowie ein Steuerfile mit Berechnungsvorschriften. Die Ergebnisse speichert GRUCAL dann in einem SIGMN-File.

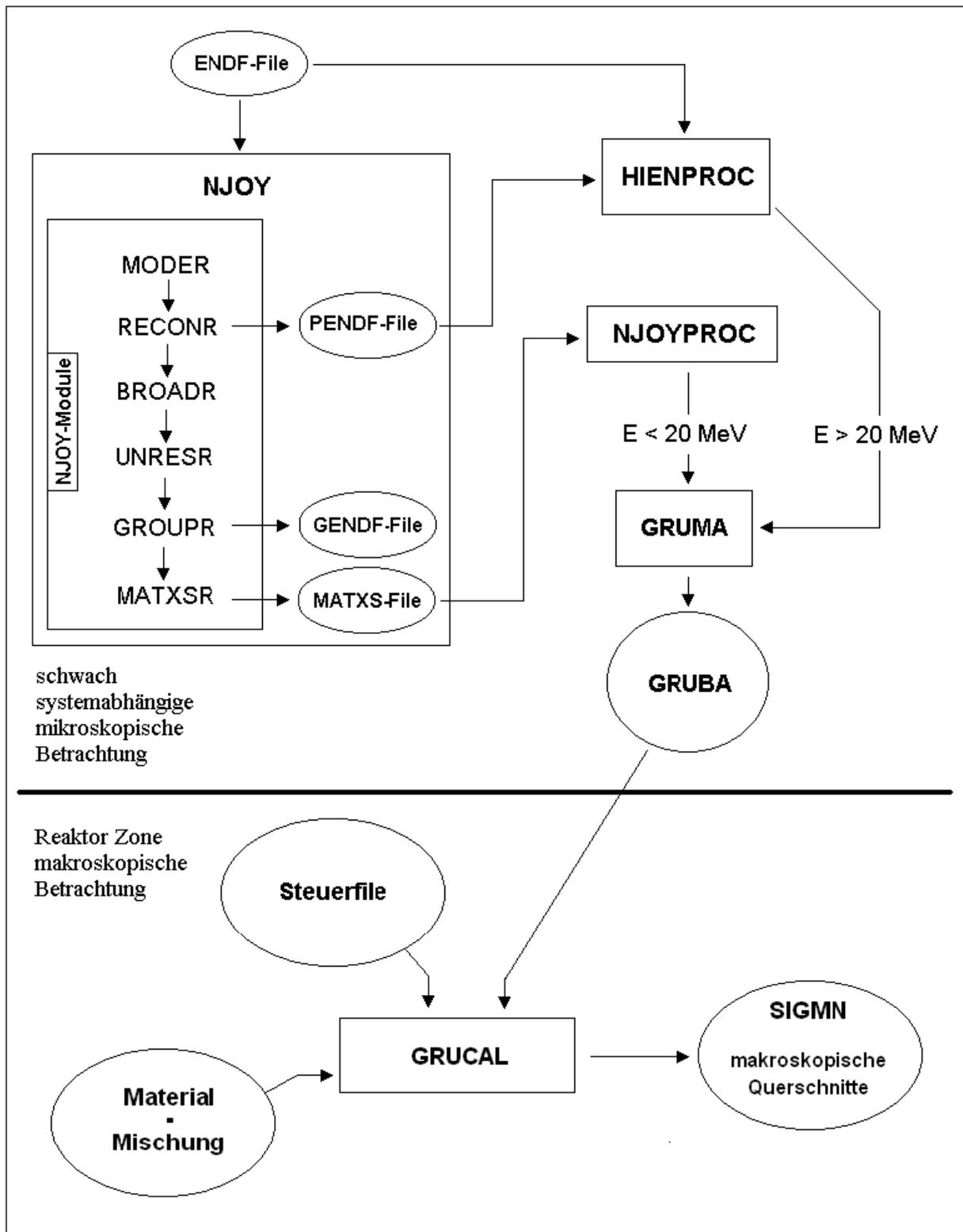
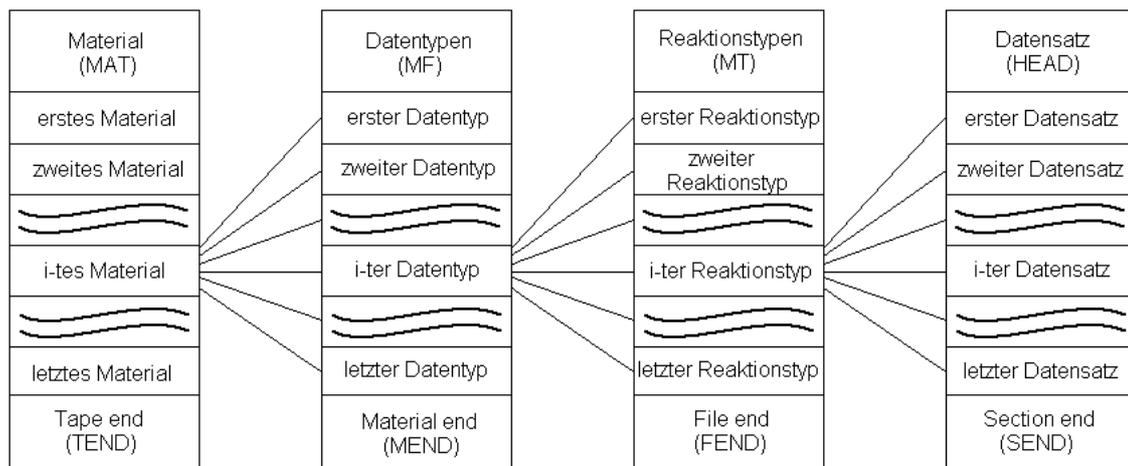


Abbildung 3.1: Darstellung der Arbeitsschritte zur Erstellung von makroskopischen Querschnitten in der 78-Gruppenstruktur

## 3.2 Das ENDF Format

Das Evaluated Nuclear Data File Format [3] (ausgewertete nukleare Daten Dateien) stellt verschiedene Informationen für kernphysikalische Reaktionen zur Verfügung, die für Reaktorberechnungen benötigt werden.

Diese Informationen sind in Baumstruktur geordnet. Die vier Hauptunterteilungen sind in Abbildung 3.2 dargestellt und werden im Folgenden erläutert.



**Abbildung 3.2: Struktur einer ENDF Datei [3]**

Die erste Unterteilung ist die des **Materials (MAT)**. Ein „Material“ kann entweder ein einzelnes Isotop, eine Mischung verschiedener Isotope desselben Elementes oder eine Mischung verschiedener Isotope verschiedener Elemente sein. Jedem Material in einer ENDF Bibliothek ist eine eindeutige Zahl (1-9999) zugeordnet. Für jedes Element gibt es einhundert MAT Zahlen (Z01-99), wobei Z der Ordnungszahl des Elementes entspricht. Für die beiden letzten Ziffern orientiert man sich an dem leichtesten der am häufigsten auftretenden Isotope (meist das leichteste stabile Isotop) eines Elements und ordnet dessen Grundzustand die Zahl 25 zu [9]. Bei verschiedenen Isotopen eines Elementes erhöht sich die MAT Nummer jeweils um drei (ein Grundzustand, zwei metastabile Zustände) in Richtung höherer Massenzahl. Am Beispiel Eisen wird diese Zuordnung deutlicher. Das leichteste unter den am häufigsten auftretenden Isotopen von Eisen ist Eisen-54, der Grundzustand dieses Isotops erhält also die MAT Zahl 2625. Die zwei ersten metastabilen Zustände dieses Isotops erhalten die MAT Nummern 2626 und 2627. Eisen-55 hat für den Grundzustand die Nummer 2628 und Eisen-56 für den Grundzustand die Nummer 2631.

Der zweite Abschnitt ordnet jedem Material **Daten-Typen (MF)** zu. Hierzu gehören unter anderem Reaktionswirkungsquerschnitte, Energie- und Winkelbeziehungen emittierter Teilchen, Teilchenstreuung, Photonenproduktion durch Neutronenreaktionen, Photon-Atom Wechselwirkungen, Produktion von Radionukliden und Zerfallsdaten (inklusive Spaltprodukte) und ähnliche. Diese Daten Typen werden systemintern als „File Types“ bezeichnet und mit „MF“ abgekürzt.

Eine Auflistung verschiedenen Reaktionsdaten enthält Tabelle 3.1 [3].

MF	Beschreibung
1	Allgemeine Information
2	Resonanz Parameter Daten
3	Reaktionswirkungsquerschnitte
4	Winkelbeziehungen für emittierte Partikel
5	Energiebeziehungen für emittierte Partikel
6	Energie-Winkelbeziehungen für emittierte Partikel
7	Streuungen thermischer Neutronen
8	Radioaktivität und Spaltungsproduktausbeute
9	Multiplikatoren für Entstehung radioaktiver Nuklide
10	Wirkungsquerschnitte für die Entstehung radioaktiver Nuklide
12	Multiplikatoren für Photonen Entstehung
13	Wirkungsquerschnitte für Photonen Entstehung
14	Winkelbeziehungen für Photonen Entstehung
15	Energiebeziehungen für Photonen Entstehung
23	Photo- oder elektro-atomare Wechselwirkungsquerschnitte
26	Elektro-atomare Winkel- und Energieverteilung
27	Atomarer Formfaktor oder Streuungsfunktionen für photo-atomare Wechselwirkungen
28	Atomare Ruhedaten
30	Daten Kovarianzen von Parameter Kovarianzen und Empfindlichkeiten
31	Daten Kovarianzen für nu(bar)
32	Daten Kovarianzen für Resonanz Parametern
33	Daten Kovarianzen für Reaktionswirkungsquerschnitte
...	...

**Tabelle 3.1 : Beispiele für Arten von Reaktionsdaten im ENDF-System nach [3]**

Die dritte Einteilung der ENDF Daten ist die der **Reaktionstypen (MT)**.

ENDF kürzt Reaktionstypen mit „MT“ ab. Reaktionstypen sind z.B.: elastische Streuung, inelastische Streuung, Absorbitionsereignisse, Spalttereignisse, u.s.w.

Neutronen Ereignisse werden mit (n,xxx) bezeichnet, wobei x alle möglichen Ausgangspartikel beschreiben kann. Photonenergebnisse sowie Ereignisse mit geladenen Teilchen werden mit (y,xxx) bezeichnet. Ereignisse die alle möglichen Partikel im Eingangskanal zulassen, werden (z,xxx) genannt.

Die Reaktionstypen sind von 1-999 durchnummeriert. Als Beispiel werden die ersten 18 in Tabelle 3.2 wiedergegeben. Eine vollständige Auflistung kann nach Referenz [3], Anhang C entnommen werden.

MT		Beschreibung
1	(n,total)	Totaler Neutronenwirkungsquerschnitt
2	(z,z <sub>0</sub> )	Elastische Streuungswirkungsquerschnitt für Partikel der Reaktion
3	(z,nonelastic)	nicht elastischer Neutronenwirkungsquerschnitt
4	(z,n)	Entstehung eines Neutrons im Ausgangskanal
5	(z,alles)	Summe aller Reaktionen die nicht mit einer anderen MT Nummer erfasst sind
6-9		In Version 6 verboten
10	(z,continuum)	
11	(z,2nd)	Entstehung von zwei Neutronen, einem Deuteron und einem Rest
12-15		nicht vergeben
16	(z,2n)	Entstehung von zwei Neutronen und einem Rest
17	(z,3n)	Entstehung von drei Neutronen und einem Rest
18	(z,fission)	Entstehung von Spaltprodukten

**Tabelle 3.2 : Beispiele für Reaktionsarten im ENDF-System nach [3]**

Die vierte Einteilung ist die der **Datensätze**. Für ENDF Daten gibt es fünf mögliche Datensätze, die **TEXT**, **CONT**, **LIST**, **TAB1**, **TAB2** heißen. Das Format CONT verfügt wiederum um sechs Unterformate DIR, HEAD, SEND, FEND, MEND und TEND.

Der Datensatz TEXT besitzt das Zusatzformat TPID.

Jeder Datensatz enthält die Grundsteuerzahlen MAT, MF, MT als auch eine Sequenznummer. Als Beispiel für einen Datensatz ist in Tabelle 3.3 ein Auszug aus der Inhaltsangabe eines ENDF-6 Files (Quelle: NRG-2003 [30]) von Eisen-56 dargestellt, die erste Zeile wurde als Erklärung hinzugefügt und ist im ENDF-File selbst nicht enthalten:

MF	MT		MAT	Zeilennr.
1	451	1147	02631 1451	817
2	151	327	02631 1451	818
3	1	3965	02631 1451	819
3	2	3718	02631 1451	820
3	3	2423	02631 1451	821
3	4	2308	02631 1451	822
3	5	14	02631 1451	823
3	16	9	02631 1451	824
3	22	13	02631 1451	825
3	28	11	02631 1451	826
3	51	1746	02631 1451	827
3	52	1436	02631 1451	828
3	53	1042	02631 1451	829
3	54	881	02631 1451	830
3	55	872	02631 1451	831
3	56	795	02631 1451	832
3	57	794	02631 1451	833
3	58	693	02631 1451	834
3	59	687	02631 1451	835
3	60	667	02631 1451	836
3	61	667	02631 1451	837

**Tabelle 3.3 : Auszug aus einer Inhaltsangabe eines ENDF-Files [30]**

### 3.3 Die ENDF Interpolation

Viele ENDF-Daten [3, 9] sind als Werte Tabellen für ein vordefiniertes Gitter mit einem Interpolationsgesetz versehen, um die Werte zwischen den Gitterpunkten zu berechnen. Die am meisten verwendeten sind ein-dimensionale „Linien-Papier“ Interpolationsschemata mit linearen und logarithmischen Achsen, die auch in dieser Arbeit Anwendung fanden. Die Funktion  $y(x)$  wird durch eine Serie von tabellarisierten Werten,  $x$  und  $y(x)$  Paaren, mit einer Interpolationsmethode zwischen den Eingabewerten, dargestellt. Die Paare sind nach steigenden  $x$ -Werten sortiert. Die Anzahl Paare ist vorgegeben. Das gesamte Gebiet in dem  $x$  definiert ist, wird in eine Anzahl Interpolationsbereiche unterteilt. Ein Interpolationsbereich wird als ein Bereich definiert, in dem, mit der unabhängigen Variable  $x$ , ein festgelegtes Interpolationsschemata benutzt werden kann.

Die geläufigsten ENDF-Interpolationsschemata sind in Tabelle 3.4 aufgelistet.

Weitere können Referenz [3, 9] entnommen werden.

INT	Interpolationsart
1	$y$ ist konstant über $x$ (konstant, Histogramm)
2	$y$ ist linear über $x$ (linear-linear)
3	$y$ ist linear über $\ln(x)$ (linear-logarithmisch)
4	$\ln(y)$ ist linear über $x$ (logarithmisch-linear)
5	$\ln(y)$ ist linear über $\ln(x)$ (logarithmisch-logarithmisch)

**Tabelle 3.4: einige im ENDF-Format definierte Interpolationsschemata [3, 9]**

In dieser Arbeit wurde sowohl mit INT 2 als auch mit INT 5 interpoliert. Die Unterschiede die sich daraus für die Gruppenkonstanten ergaben sind in Kapitel 4.1 dokumentiert.

### 3.4 Das Programm NJOY und seine Module

Das Programm NJOY [2] ist das wichtigste international verbreitete Verarbeitungsprogramm für nukleare Daten. Es wird zur Umwandlung von nuklearen Daten im ENDF-Format in anwendungsorientierte Formate angewendet. NJOY beruht zum einen auf physikalischen Grundlagen wie der Reaktortheorie, der Resonanztheorie oder der Streuungstheorie und orientiert sich zum anderen auf Anwendungen wie den Transporttheorien und Reaktorkernberechnungen.

NJOY wurde ursprünglich für US amerikanische Daten im ENDF/B-Format entwickelt, hat sich aber mittlerweile zusammen mit dem ENDF-Format, weltweit etabliert und unterstützt nukleare Datenbibliotheken wie JEF in Europa, JENDL in Japan, CENDF in China oder BROND in Russland. Das NJOY System ist ein modular aufgebauter Computer Code, der dafür entwickelt wurde Daten in ENDF-Format zu lesen, auf verschiedene Weise zu verarbeiten und als Ergebnis Datenbibliotheken für verschiedene Anwendungen zu erzeugen. Jedes Modul in NJOY ist ein eigenständiges Programm, das über Eingabe- und Ausgabedateien und wenigen Systemvariablen mit den anderen Modulen kommuniziert. Das Hauptprogramm, das den Datenfluss zwischen den Modulen steuert und eine Bibliothek für gemeinsame Funktionen und Subroutinen enthält, heißt **NJOY**. Im Folgenden werden die Module aus Abbildung 3.1, die in dieser Arbeit verwendet wurden, erläutert. Beschreibungen über weitere Module können Referenz [2] entnommen werden.

Das Modul **MODER** wird zur Umwandlung der ENDF, PENDF und GENDF NJOY binär Codes in formatierte Codes wie ASCII, BCD, EBCDIC, etc. benutzt.

Diese Umwandlung ist in beide Richtungen möglich.

Allgemein werden binär Codes in NJOY durch negative Vorzeichen der Tapes gekennzeichnet, während formatierte Codes durch positive Vorzeichen deklariert sind.

MODER kann auch benutzt werden um Daten von einem Tape zum anderen zu kopieren ohne dabei das Format zu ändern.

Eine weitere Anwendung ist die Erstellung eines neuen Tapes, welches ausgewählte Daten eines oder mehrerer ENDF, PENDF oder GENDF Tapes enthält.

Mit dem **RECONR** Modul lassen sich aus den ENDF-Files Punktquerschnitte mit Hilfe von Resonanzparametern und Interpolationen rekonstruieren. Die Ergebnisdaten sind mit vorgegebener Genauigkeit linear interpolierbare energieabhängige Punktdaten (PENDF).

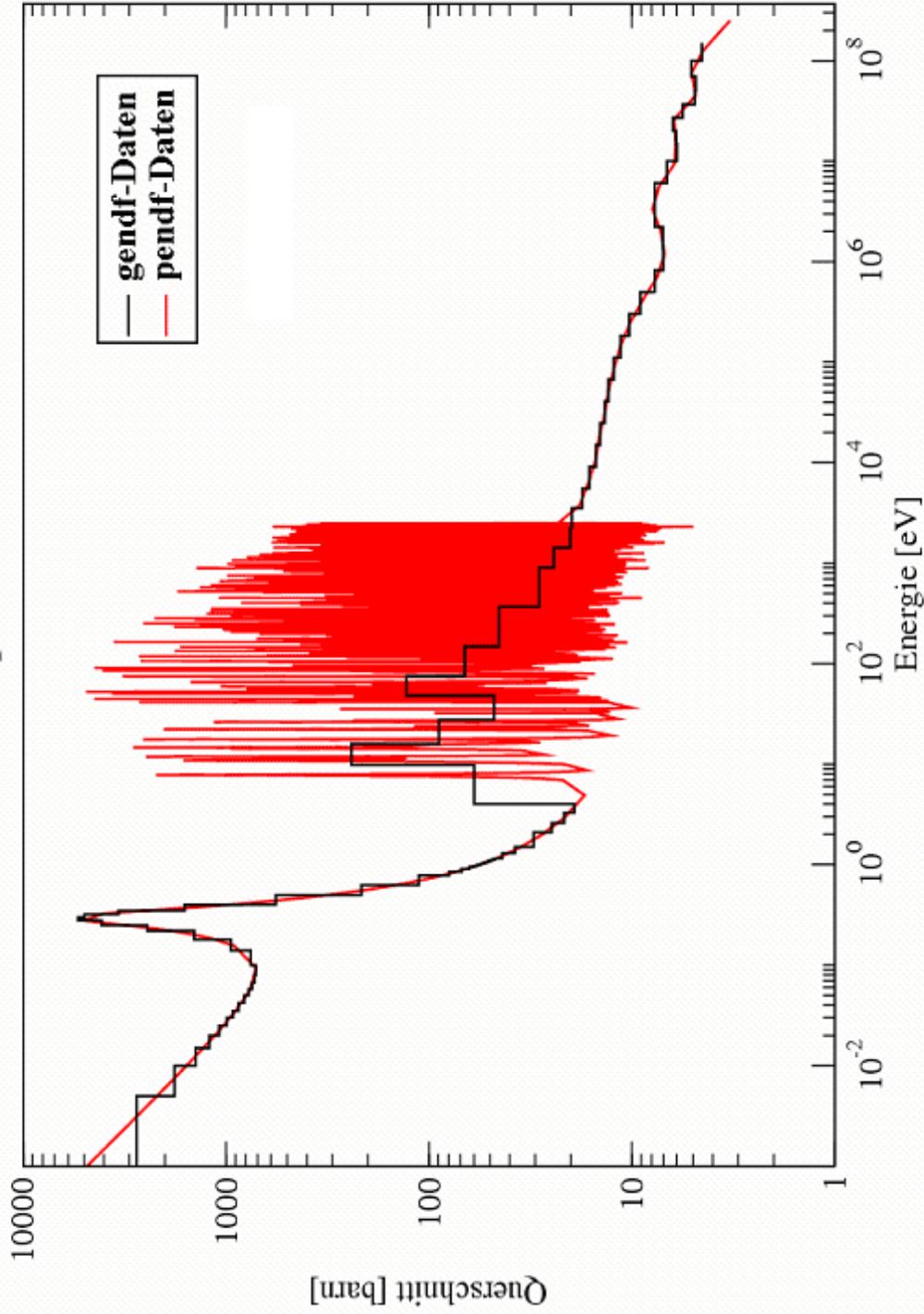
Redundante Reaktionen (z.B.: totale und elastische Reaktionen) werden genau so rekonstruiert, dass die Summe ihrer Teile ihrem Gesamtwert über allen Energien entspricht. Die in Kapitel 1.4 beschriebene Dopplerverbreiterung (-verdünnung) von Resonanzspitzen bei einer Temperaturerhöhung (-senkung) eines Systems, wird durch das Modul **BROADR** berechnet. Die Ausgangs-Punktdatei von RECONR gelten für die Temperatur 0 Kelvin. Mit BROADR werden Punktdatei für bis zu zehn verschiedene Temperaturen erstellt. Mit dem **UNRESR** Modul werden in den unaufgelösten Energiebereichen die Resonanzselbstabschirmung (Kapitel 1.3) berechnet. Diese unaufgelösten Energiebereiche treten bei höheren Energien auf, bei denen genaue Messungen nicht mehr möglich sind und erstrecken sich bis in den Bereich in dem die Resonanzabschirmung keine Rolle mehr spielt. UNRESR approximiert die Resonanzselbstabschirmung durch Mittelwertbildung des Resonanzverlaufes. Die Ausgangsdatei von UNRESR sind ebenfalls noch Punktdatei. Das Modul **GROUPT** produziert Multigruppen Wirkungsquerschnitte, Matrizen für die Gruppen Übergangswahrscheinlichkeiten durch Streuung und Matrizen für die Photonen Produktion. Hierbei werden entsprechende Wichtungsfunktionen (siehe Kapitel 2.2) verwendet. Die Ausgangsdatei besitzen inhaltlich GENDF – Datei, die wesentlich weniger Informationen besitzt als PENDF – Datei. Dementsprechend sind die Dateien um ein Vielfaches kleiner. Ein Vergleich zwischen PENDF (Punktdatei) und GENDF (Gruppendatei) – Datei ist in Abbildung 3.3 am Beispiel Plutonium-239 dargestellt.

Das **MATXSR** Modul formatiert das komplizierte GENDF Format, zur einfacheren Weiterverwendung in das MATXSR-Format, welches wiederum von NJOYPROC in ein GRUBA kompatibles Format umgewandelt wird, mit dem dann die GRUBA Bibliothek (Kapitel 3.5) erstellt wird.

In Anhang F ist die NJOY Eingabe-Datei *input.njoy* aufgeführt. Sie gibt an welche NJOY Module mit welchen Spezifikationen verwendet werden sollen. So werden z.B. bei dem Modul BROADR die verschiedenen Temperaturen, für die Querschnitte berechnet werden sollen, angegeben.

Die Spezifikationen eines Moduls stehen in den Zeilen nach dem Modulnamen und Enden mit „0/“. Das Modul GROUPT wird zweimal aufgerufen, da Gruppenkonstanten für maximal 10 Untergrundquerschnitte berechnet werden können, in diesem Beispiel aber für 19 verschiedene Untergrundquerschnitte Gruppenkonstanten berechnet werden sollen. Die in *input.njoy* enthaltenen Gruppengrenzen werden auch in Anhang A aufgeführt.

### Punktdaten und Gruppendaten als Vergleich am Beispiel von Pu-239



**Abbildung 3.3:** Der Unterschied zwischen Punktdaten und Gruppendaten am Beispiel des totalen Wirkungsquerschnittes von Plutonium-239 [29]

### 3.5 Die GRUBA-Bibliothek

Die GRUBA-Dateien enthalten gruppen- und isotopenabhängige neutronenphysikalische Daten für verschiedene Datentypen wie Wirkungsquerschnitte, Transfer Elemente und Abschirmfaktoren [16,17]. Sie sind Voraussetzung zur Berechnung makroskopischer Wirkungsquerschnitte mit dem Querschnittsprogramm GRUCAL ( siehe Kapitel 3.6). Der Inhalt der GRUBA-Dateien besteht aus Angaben über die Gruppeneinteilung, die vorhandenen Datentypen und Isotope, sowie eine Identifikation der jeweiligen Datei. Tabelle 3.5 und 3.6 zeigen den Inhaltsteil einer GRUBA-Datei [18]:

Record	Wort	Inhalt	Kürzel
1	1, 2	Identifikation des GRUBA-Files	ID
1	3	Datum	NDTM
1	4	Anzahl Gruppen	NGR
1	5	Max. Anzahl Intervalle in einer Gruppe	MST
1	6	Anzahl Datentypen	NTYP
1	7	Anzahl Materialien	NMAT
1	8	Kennziffer für Datenübernahme aus anderen Gruppen: 0 keine Übernahme 1 Übernahme	KUBRG
1	9	Kennziffer für Datenübernahme von anderen Materialien oder Datentypen : 0 keine Übernahme 1 Übernahme	KUBRM
1	10	Anfangsadresse der Gruppengrenze	
1	11	Anfangsadresse der Intervallzahlen pro Gruppe	
1	12	Anfangsadresse der Datentypnamen	
1	13	Anfangsadresse der Materialnamen	
1	14	Anfangsadresse der Namen der Basismaterialien	
1	15,16,...	Anfangsadresse für jeden Gruppenblock	
1	15+NGR	Maximal belegte Adresse	

**Tabelle 3.5: Inhalt einer GRUBA-Datei, Record 1 [18]**

Record	Wort	Inhalt	Kürzel
2	1,2,3....	Gruppengrenzen	GR(i), NGR
2	NGR+1,....	Anzahl Intervalle pro Gruppe	NST(i), NGR
3	1,2,3...	Datentypnamen	TYPF(i), NTYP
3	NTYP*2+1,...	Materialnamen	MATF (i), NMAT
3	NTYP*2+ NMAT*2+1,...	Namen der Basismaterialnamen	BASF(i), NMAT

**Tabelle 3.6 : Inhalt einer GRUBA-Datei, Record 2, 3 [18]**

Die Aufteilung in Records kann sich ändern, wenn durch entsprechend große Werte von NGR, NTYP oder NMAT Recordgrenzen überschritten werden.

Die Daten sind nach Energiegruppen geordnet, die aus Adressteil und Datenteil bestehen.

Die Struktur der Daten ist variabel, so dass eine Unterteilung der Energiegruppen in Feinintervalle möglich ist. Bei Übereinstimmung der Daten mit Daten einer anderen Gruppe oder Isotopen erlauben Verweise eine zusätzliche Komprimierung der Daten. Hierfür werden Basisisotope deklariert auf die dann verwiesen wird. Bei unterschiedlichen Daten für dasselbe Isotop, z.B. durch verschiedene Messungen, werden nur die abweichenden Daten gespeichert. Dies ermöglicht zusätzlich eine kompakte Struktur der Daten.

In den GRUBA-Dateien sind keinerlei physikalische Größen angegeben. Allgemein gilt für Energien die Einheit [eV], für Wirkungsquerschnitte die Einheit [barn]. Die Gruppen sind, wie auch in NJOY, nach Energien geordnet, mit fallenden Energien für höhere Gruppen (Gruppe 1 höchstenergetische Gruppe). Weitere Einzelheiten über Arbeitsvorschriften sind den Referenzen [17,18] zu entnehmen.

### 3.6 Das GRUBA Verwaltungsprogramm GRUMA

Das Programmsystem GRUMA dient zur Erstellung und Verwaltung von GRUBA-Bibliotheken. Es ermöglicht [17]:

- Erstellen einer GRUBA-Datei
- Aufnehmen, Ersetzen oder löschen von Daten auf einem GRUBA-File
- Erweitern einer GRUBA-Datei um Datentypen oder Isotope
- Drucken von Daten und der Inhaltsangabe einer GRUBA-Datei
- Sortieren einer Eingabedatei mit aufzunehmenden Daten in die für einen Aufnahmelauf erforderliche Reihenfolge

Für das Lesen der Daten einer GRUBA-Datei sind Programme wie die allgemein einsetzbare Leseroutine GRUSEEK verfügbar. In Tabelle 3.7 ist der Aufbau der Datensätze für die einzelnen Datentypen aufgelistet [18].

Im Folgenden wird die Datei *mod\_gr78lib.sh* erklärt, die mit der Eingabedatei *create\_gr78lib.input\_9* (siehe Anhang G) die neueste Unix Version von GRUMA (GRUMA2000) startet. Die Zeilennummerierung dient der Erklärung, sie ist in der Datei selbst nicht enthalten.

***mod\_gr78lib.sh :***

1. rm G78\* GRUMA.FT24 GRUMA.FT25 GRUMA.FT26 GRUMA.FT27  
GRUMA.FT28
2. ln -s INIT\_G78.bin GRUMA.FT24
3. ln -s xs\_bin.njoy\_all GRUMA.FT25
4. ln -s xs\_bin.hien\_all GRUMA.FT26
5. GRUMA2000<create\_gr78lib.inpt\_9>create\_gr78lib.out

Zeile 1 löscht alle Dateien vorheriger GRUMA Anwendungen. Zeile 2 verbindet die Datei mit Initialisierungsdaten (z.B. werden alle F-Faktoren 1 gesetzt) mit dem GRUMA System Namen GRUMA.FT24 [25]. Zeile 3-4 ordnet den Gruppenkonstanten aus NJOY (<10 MeV) und die Gruppenkonstanten aus HIENPROC (>10 MeV) den entsprechenden GRUMA

System Namen zu. Zeile 5 startet GRUMA2000 mit der Eingabedatei *create\_gr78lib.input\_9* und der Ausgabedatei *create\_gr78lib.out*.

Datentyp	NVARB	Anzahl Daten	Daten
Wirkungs- querschnitt	0	1	S
	0	NST	(S(I),I=1,NST)
Abschirm- faktor	1	2+NS*NT	NT,NS,((F(IS,IT),IS=1,NS),IT=1,NT)
	2	3+NT+NE+ NE*NS*NT	NT,NS,NE,(T(IT,IT=1,NT),E(IE),IE=1,NE), (((F(IE,IS,IT),IE=1,NE),IS=1,NS),IT=1,NT)
	3	2+NT+NS*NT	NT,NS,(T(IT),IT=1,NT), ((F(IS,IT),IS=1,NS),IT=1,NT)
	4	2+NT+NS	NT,NS,(T(IT),IT=1,NT),(S0(IS),IS=1,NS) ((F(IS,IT),IS=1,NS),IT=1,NT)
	5	1+NT	NT,(F(IT),IT=1,NT)
	6	2+2*NT+NS +NT*NS	NT,NS,(T(IT),IT=1,NT),(S0(IS),IS=1, NS), (TP(IT),IT=1,NT), ((F(IS,IT),IS=1,NS),IT=1,NT)
Übergangs- wahr- scheinlich- keiten	0	KSTRB	(P(I),I=KGR1,IGRL)
	1	KSTRB*NST	((P(I,K),K=1,NST),I=KGR1,IGRL)
	3	KSTRB+1	IGRE,(P(I),I=IGRE,IGRL)
	4	KSTRB*NS+1	IGRE,((P(I,K),K=1,NST),I=IGRE,IGRL)
	5	(KSTRB+2) *NT+NT+1	NT,(T(K),K=1,NT),(IGRE,IGRL,(P(I,K),I=I GRE,IGRL),K=1,NT)

**Tabelle 3.7: Aufbau der Datensätze von GRUMA für spezielle Datentypen [18]**

Dabei bedeuten:

- S Wirkungsquerschnitt
- F Abschirmfaktor
- P Übergangswahrscheinlichkeit
- NVARB Verarbeitungskennziffer
- NST Anzahl Intervalle der betrachteten Energiegruppe

- NT Anzahl Temperaturen  
 Als Standardtemperaturen sind festgelegt:  
 für NT=2 900K und 2100K  
 NT=3 300K, 900K und 2100K  
 NT=4 300K, 900K, 1500K und 3100K
- NS Anzahl sigma0-Werte, für die f-Faktoren gespeichert sind.  
 Sind keine sigma0-Werte gespeichert, so sind f-Faktoren vorgesehen für die 7  
 Standard-sigma0-Werte :  
 0. 10. 100. 1000. 10.E4 10.E5 10.E6 barn
- S0 sigma0-Werte
- NE Anzahl Energiepunkte
- T Temperaturen
- TP Temperaturprofil der unendlich verdünnten Querschnitte (siehe Referenz [1])
- E Energiepunkte
- KGR betrachtete Ausstreugruppe
- KGR1 KGR+1
- IGRE erste Einstreugruppe
- IGRL letzte Einstreugruppe
- KSTRB Streubreite = IGRL-KGR für Streuung ab Gruppe KGR1=KGR+1  
 = IGRL-IGRE+1 für Streuung ab Gruppe IGRE

Weitere Einzelheiten über Arbeitsvorschriften von GRUMA sind den Referenzen [17, 18, 26]  
 zu entnehmen.

### 3.7 Die Erstellung makroskopischer Gruppenkonstanten mit GRUCAL

Das Mehrgruppenquerschnittsprogramm GRUCAL ermöglicht die Berechnung makroskopischer Gruppenkonstanten. Die berechneten Wirkungsquerschnitte sind material-, mischungs-, und materialsammenabhängig. Die Datensätze die zur Berechnung der makroskopischen Gruppenkonstanten verwendet werden, sind :

1. die mikroskopischen Gruppenkonstanten die in der Gruppenkonstantenbibliothek GRUBA gespeichert sind
2. die Materialmischverhältnisse des betrachteten Systems die im MISCH-Block gespeichert sind
3. die „Steuerfiles“ die angeben welche Querschnittstypen berechnet werden sollen
4. gegebenenfalls ein Testdatenfile in GRUMA Form als so genannte Sekundär Eingabe

In dem Steuerfile wird angegeben welche Querschnittstypen berechnet werden sollen und welche der in GRUCAL vorhandenen Formeln dafür verwendet werden sollen. Für die Verwendung einer bestimmten Formel können im Steuerfile Bedingungen gestellt werden, z.B. für die Anzahl der zur Berechnung benutzten Daten. Dadurch ist es möglich, denselben Querschnittstyp material- und gruppenabhängig auf verschiedene Weise zu berechnen. Formeln für gleiche makroskopische Querschnittstypen werden in Formelgruppen zusammengefasst, um Steuerfiles mit mehreren Querschnittstypen, die gleiche Berechnungsvorschriften haben, zu vereinfachen. Das Steuerfile besteht aus drei Sätzen:

- Satz 1 enthält die Querschnittsangaben außer dem Namen
- Satz 2 enthält den Namen
- Satz 3 enthält die Formelangaben

Die Berechnungen werden gruppenweise durchgeführt, d.h. dass für jede Gruppe die mikroskopischen Daten der GRUBA-Bibliothek und unter Umständen auch Sekundärdaten, eingelesen werden. Nach Berechnung aller makroskopischer Daten der Gruppe wird ein Gruppenblock in SIGMN-Struktur erstellt und auf eine Hilfsdatei geschrieben [5]. Die

Berechnungsformeln für GRUCAL sind im Anhang E aufgeführt. Weitere Einzelheiten über Arbeitsvorschriften sind auch Referenz [5] zu entnehmen.

### **3.8 Das Steuerfile F78V01 für 78-Gruppenberechnungen**

Das Steuerfile hat die Aufgabe Berechnungsvorschriften und Berechnungsformeln für das KAPROS-Modul GRUCAL, das makroskopische Gruppenkonstanten berechnet, zu liefern. Das Steuerfile F78V01 für die 78-Gruppenbibliotheken basiert auf dem Steuerfile für die 69-Gruppenbibliotheken F69UD06. Es wurde für Energien oberhalb 20 MeV erweitert. Neuerungen im Steuerfile F78V01 waren die Einführung zusätzlicher Multiplikatoren (2, 3, 4) für die (n,2n), (n,3n) und (n,4n) Reaktionen, sowie die Berechnungsformeln für diese Reaktionen. Das FORTRAN Programm zur Erstellung neuer Steuerfiles STFILE und die Eingabedatei *f78v01.d*, mit den markierten Änderungen zur Vorgängereingabedatei *f69ud06.d*, zur Erzeugung des neuen Steuerfiles F78V01 sind in Anhang D aufgeführt.

### **3.9 Die SIGMN-Struktur**

Die SIGMN-Struktur enthält nach Gruppen geordnete makroskopische Gruppenkonstanten für Materialien und Materialmischungen. Es besteht aus einem Erklärungsteil (Labelsatz), welcher Angaben über Inhalt und Aufbau des SIGMN-Files beinhaltet und den Gruppenteilen, die für jeweils eine Energiegruppe die makroskopischen Daten enthalten. Die Gruppenkonstanten werden nach Skalar- und Vektortypen unterschieden. Skalarmtypen bestehen aus genau einem Wort pro Energiegruppe und Materialmischung. Alle sonstigen Daten sind Vektortypen. Die Namen der Querschnittstypen bestehen aus jeweils zwei Wörtern zu je acht Zeichen. Das erste Wort enthält den Querschnittsnamen, der im Steuerfile festgelegt wird. Das zweite Wort kann eine Materialspezifikation enthalten, die über die GRUCAL – Eingabe festgelegt wird. Für die Verwendung der SIGMN-Daten ist das Standard Leseprogramm WQRG [26] verfügbar.

## Kapitel 4

# Validierung der Ergebnisse und eine erste Anwendung mit KAPROS

In Kapitel 4 werden die vom neuen Programm HIENPROC berechneten mikroskopischen Gruppenkonstanten einer Gültigkeitsprüfung unterzogen. Dann werden die Dateien *run.example* und *input.example*, welche die Eingabe für das Programmsystem KAPROS steuern, erläutert. Anschließend erfolgt eine erste Überprüfung der Ergebnisse mit dem Vergleich des Neutronenflusses basierend auf der bestehenden 69-Gruppenbibliothek mit dem Ergebnis der neuen 78-Gruppenbibliothek anhand eines typischen ADS-Spektrums.

### 4.1 Validierung der von HIENPROC berechneten mikroskopischen Gruppenkonstanten

Das Programm HIENPROC [25] wurde für die Gruppenkonstantenberechnungen oberhalb 20 MeV entwickelt. Um die Gültigkeit der HIENPROC-Ergebnisse zu überprüfen, werden Gruppenkonstanten über den gesamten Energiebereich der ENDF-Ausgangsdaten berechnet und diese dann mit den NJOY-Ergebnissen verglichen. Zum Zeitpunkt dieser Arbeit berechnete NJOY, ausgehend von den verfügbaren Daten im ENDF-B Format, den totalen, den elastischen und den Spaltquerschnitt über die 20 MeV Grenze hinaus.

In den folgenden Abbildungen (4.1-4.6) werden die Gruppenkonstanten für den totalen Querschnitt von NJOY und HIENPROC graphisch verglichen. Die Abweichungen, aller 78 Gruppen werden für das leichte Isotop Sauerstoff-16, das Strukturmaterial Eisen-56, sowie für das schwere Spaltmaterial Plutonium-239 diskutiert. Für die Erstellung der KAPROS Bibliotheken werden von den HIENPROC Ergebnissen allerdings nur Daten oberhalb von 10 MeV verwendet. Dies entspricht den ersten (energetisch höchsten) neun Gruppen. Deshalb wird für diese drei Materialien dieser besonders interessierende Energiebereich einzeln vergrößert und die jeweils größte Abweichung als Relativ- und Absolutwert angegeben. In den Tabellen 4.1- 4.3 werden außerdem die Abweichungen für den elastischen Wirkungsquerschnitt und für Plutonium auch der des Spaltquerschnittes angegeben. In

Anhang B werden für die sonstigen Materialien, für die in dieser Arbeit Gruppenkonstanten berechnet wurden (Blei-208, Wismut-209, Uran-235, Neptunium-237, Uran-238 und Americium-241), die größten relativen und absoluten Abweichungen, sowie die durchschnittlichen relativen und absoluten Abweichungen der drei überprüfbaren Reaktionen für die ersten neun Gruppen aufgeführt.

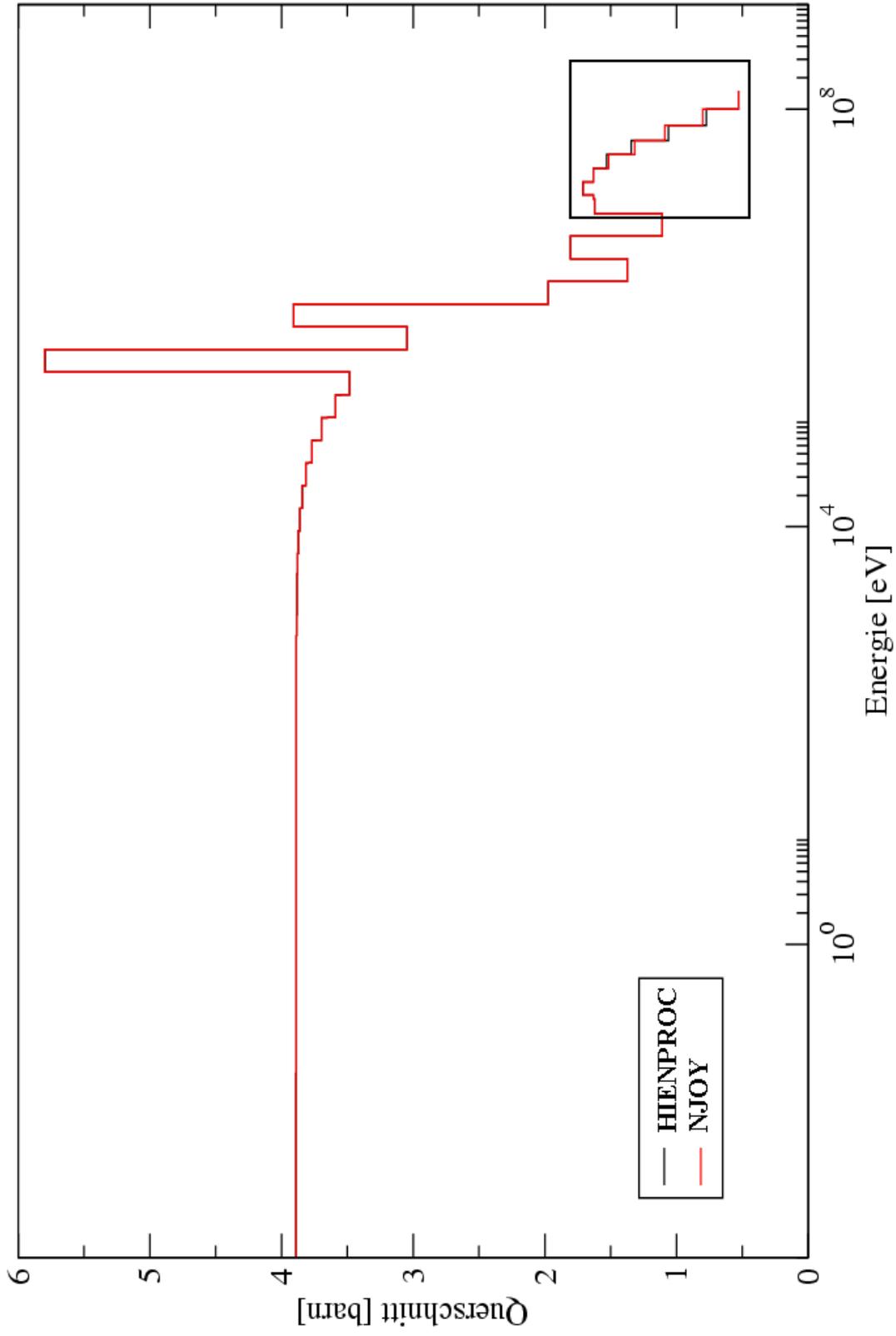
Als Wichtungsfunktion in HIENPROC wurde das in Kapitel 2.2 beschriebene Druckwasserreaktorspektrum mit zusätzlicher Fusionsspitze (IWT 5) aus NJOY (bis 20 MeV) mit einer zusätzlichen  $1/\text{Energie}$  – Funktionserweiterung bis 250 MeV [25] verwendet.

Zunächst wurden die Gruppenkonstantenberechnungen mit dem linear-linear Interpolationsgesetz (INT 2) für die Wichtungsfunktion durchgeführt.

Dabei ergaben sich teilweise erhebliche Abweichungen zwischen HIENPROC und NJOY im Resonanzbereich. Nach dem Umstieg auf die logarithmisch-logarithmisch Interpolation der Wichtungsfunktion in HIENPROC (INT 5), mit der auch die NJOY Rechnungen durchgeführt wurden, verschwanden diese Abweichungen vollends, die Rechenzeit stieg aber deutlich.

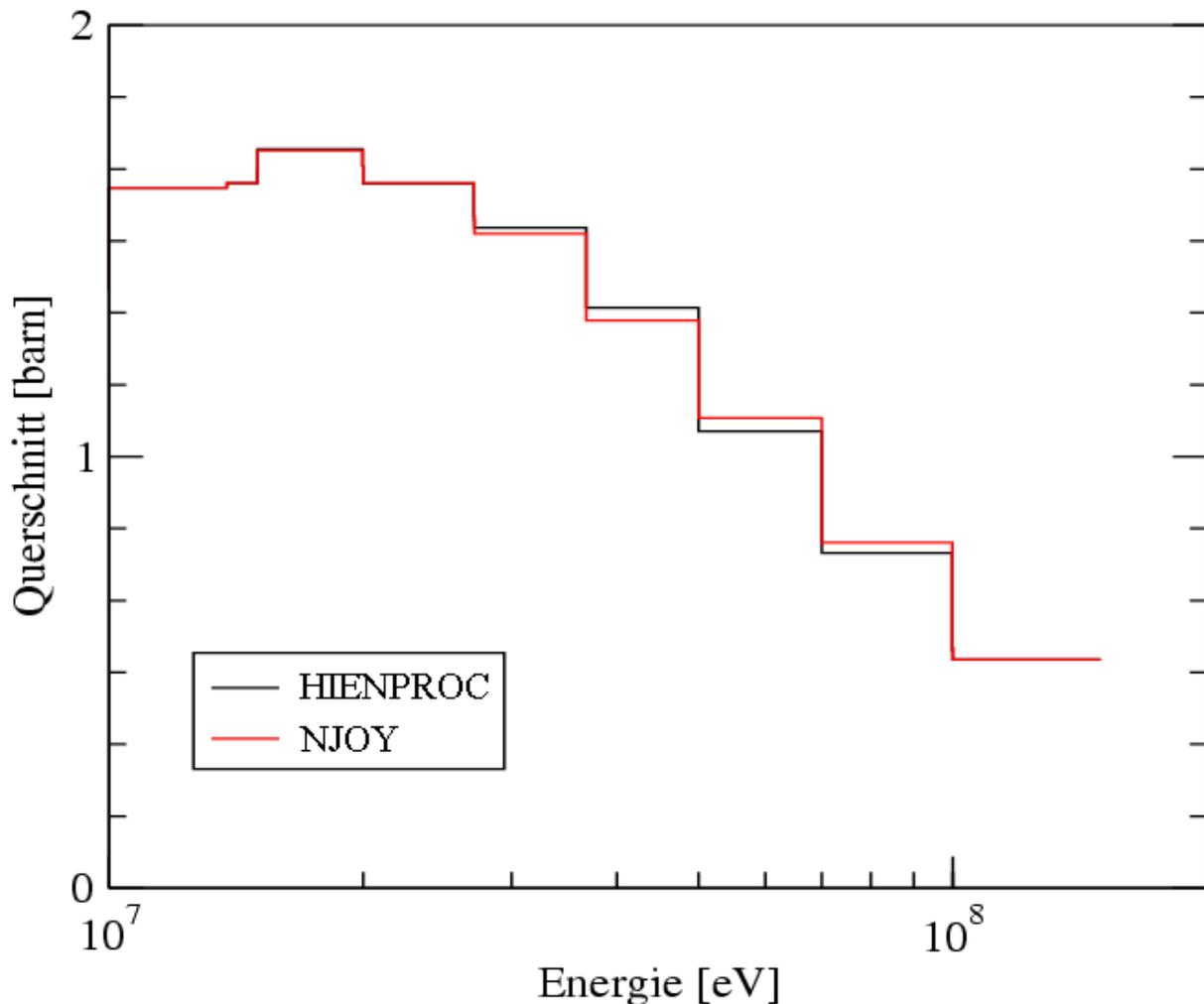
Für die Abweichungen oberhalb 10 MeV die in den Abbildungen 4.2, 4.4, 4.6 erkennbar und in den Tabellen 4.1- 4.3 aufgeführt sind, waren im Gegensatz zu den Abweichungen im Resonanzbereich, trotz intensiver Überprüfung des HIENPROC Programm Codes, keine Ursachen zu finden.

### Vergleich der Gruppenkonstanten von Sauerstoff-16



**Abbildung 4.1:** Vergleich der Gruppenkonstanten des totalen Wirkungsquerschnittes von Sauerstoff-16 zwischen NJOY und HLENPROC

## Ausschnitt oberhalb 20 MeV für O-16



**Abbildung 4.2: Ausschnitt aus Abbildung 4.1 zum Vergleich der Übereinstimmung von NJOY und HIENPROC für den totalen Wirkungsquerschnitt von O-16 oberhalb 10 MeV**

Abbildung 4.1 zeigt für Sauerstoff-16 die perfekte Übereinstimmung der Gruppenkonstanten des totalen Wirkungsquerschnittes für Energien bis 20 MeV. In dem vergrößerten Ausschnitt in Abbildung 4.2 sind in den Gruppen 2-5 einige geringfügige Abweichungen erkennbar.

Die größte relative Abweichung liegt in der zweiten Gruppe und beträgt 3,07 %.

Dieser recht große relative Fehler kommt auch dadurch zustande, weil die absoluten Querschnitte für diese Gruppe sehr niedrig sind, was der zugehörige absolute Fehler von 0,025 barn bestätigt. Der durchschnittliche relative Fehler der ersten neun Gruppen (> 10 MeV) beträgt 0,14 %.

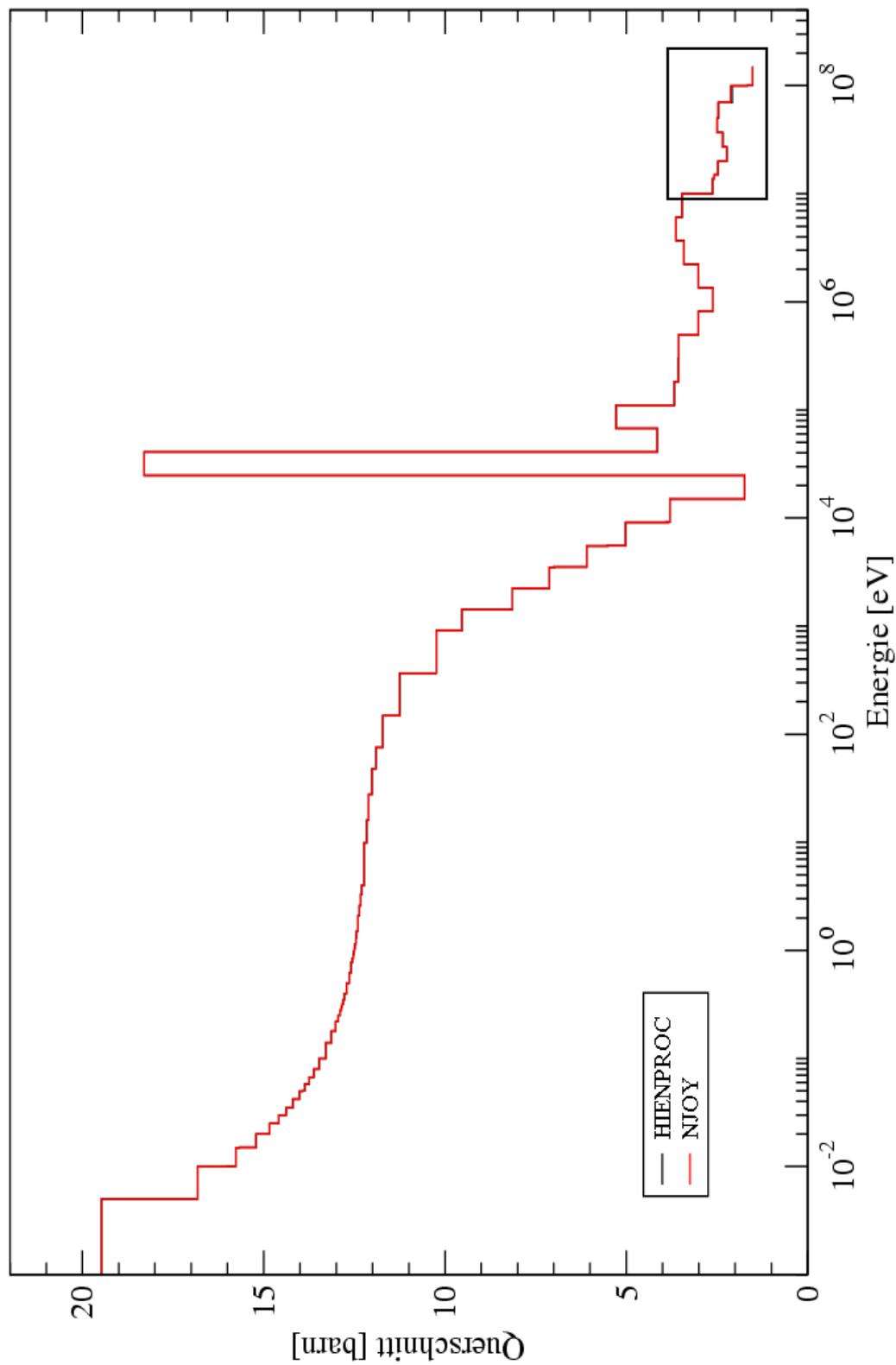
	totaler Querschnitt	elastischer Querschnitt
maximale absolute Abweichung	0,0288 barn	0,0222 barn
durchschnittliche absolute Abweichung	0,0013 barn	0,0010 barn
maximale relative Abweichung	3,07 %	5,68 %
durchschnittliche relative Abweichung	0,17 %	0,14 %

**Tabelle 4.1 : Abweichungen zwischen NJOY und HIENPROC von Sauerstoff-16 für den elastischen und den totalen Querschnitt für die ersten neun Gruppen**

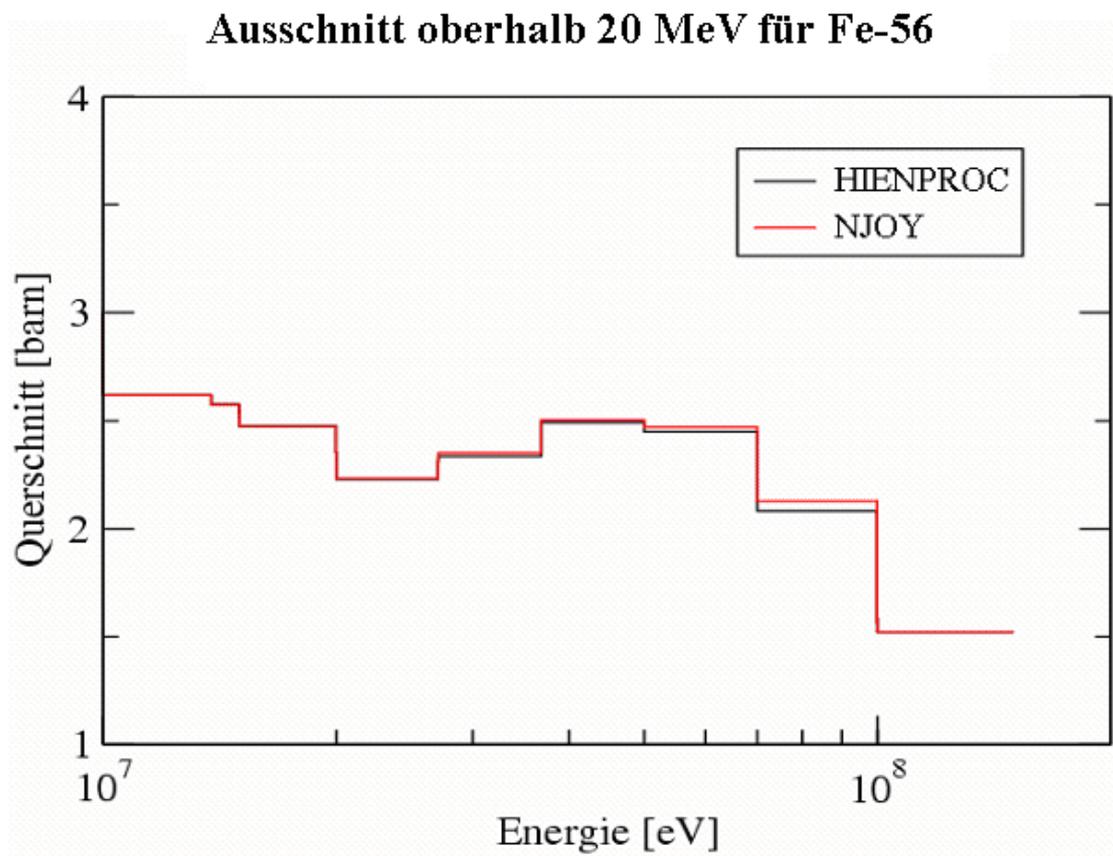
	totaler Querschnitt	elastischer Querschnitt
maximale absolute Abweichung	0,0496 barn	0,0351 barn
durchschnittliche absolute Abweichung	0,0013 barn	0,0012 barn
maximale relative Abweichung	2,39 %	2,46 %
durchschnittliche relative Abweichung	0,06 %	0,09 %

**Tabelle 4.2 : Abweichungen zwischen NJOY und HIENPROC von Eisen-56 für den elastischen und den totalen Querschnitt für die ersten neun Gruppen**

### Vergleich der Gruppenkonstanten von Eisen-56



**Abbildung 4.3:** Vergleich der Gruppenkonstanten des totalen Wirkungsquerschnittes von Eisen-56 zwischen NJOY und HIENPROC



**Abbildung 4.4:** Ausschnitt aus Abbildung 4.3 zum Vergleich der Übereinstimmung von NJOY und HIENPROC für den totalen Wirkungsquerschnitt von Fe-56 oberhalb 10 MeV

Ähnlich wie beim Vergleich mit Sauerstoff zeigt der Vergleich zwischen NJOY und HIENPROC mit Eisen-56 in Abbildung 4.3 die nahezu perfekte Übereinstimmung der Gruppenkonstanten für Energien bis 20 MeV.

In der Vergrößerung in Abbildung 4.4 ist die größte absolute Abweichung in der zweiten Gruppe erkennbar. Sie beträgt 0,05 barn oder 2,39 %. Der durchschnittliche relative Fehler des totalen Wirkungsquerschnittes in den ersten neun Gruppen von Sauerstoff-16 beträgt 0,06 %.

### Vergleich der Gruppenkonstanten von Plutonium-239

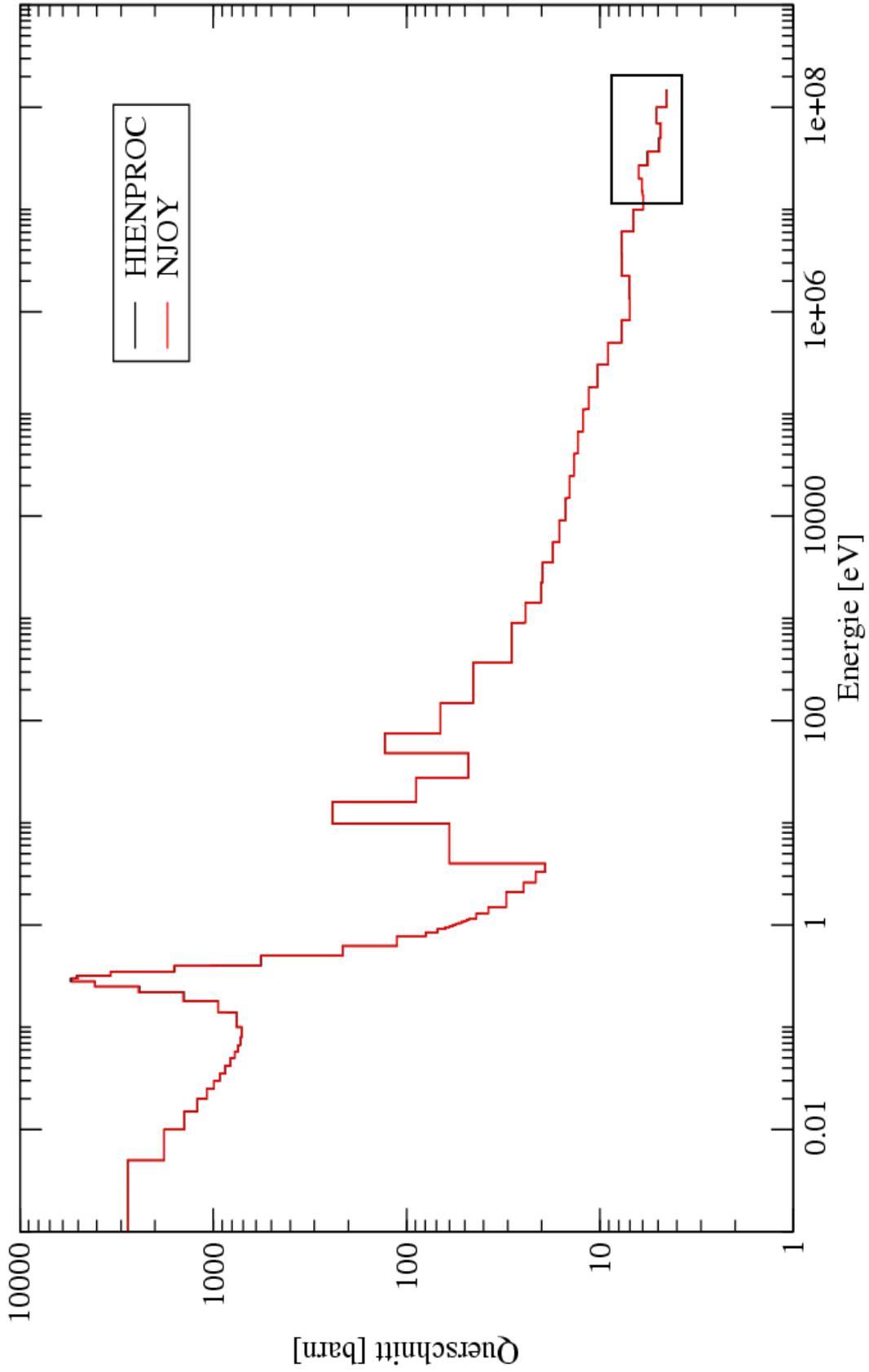
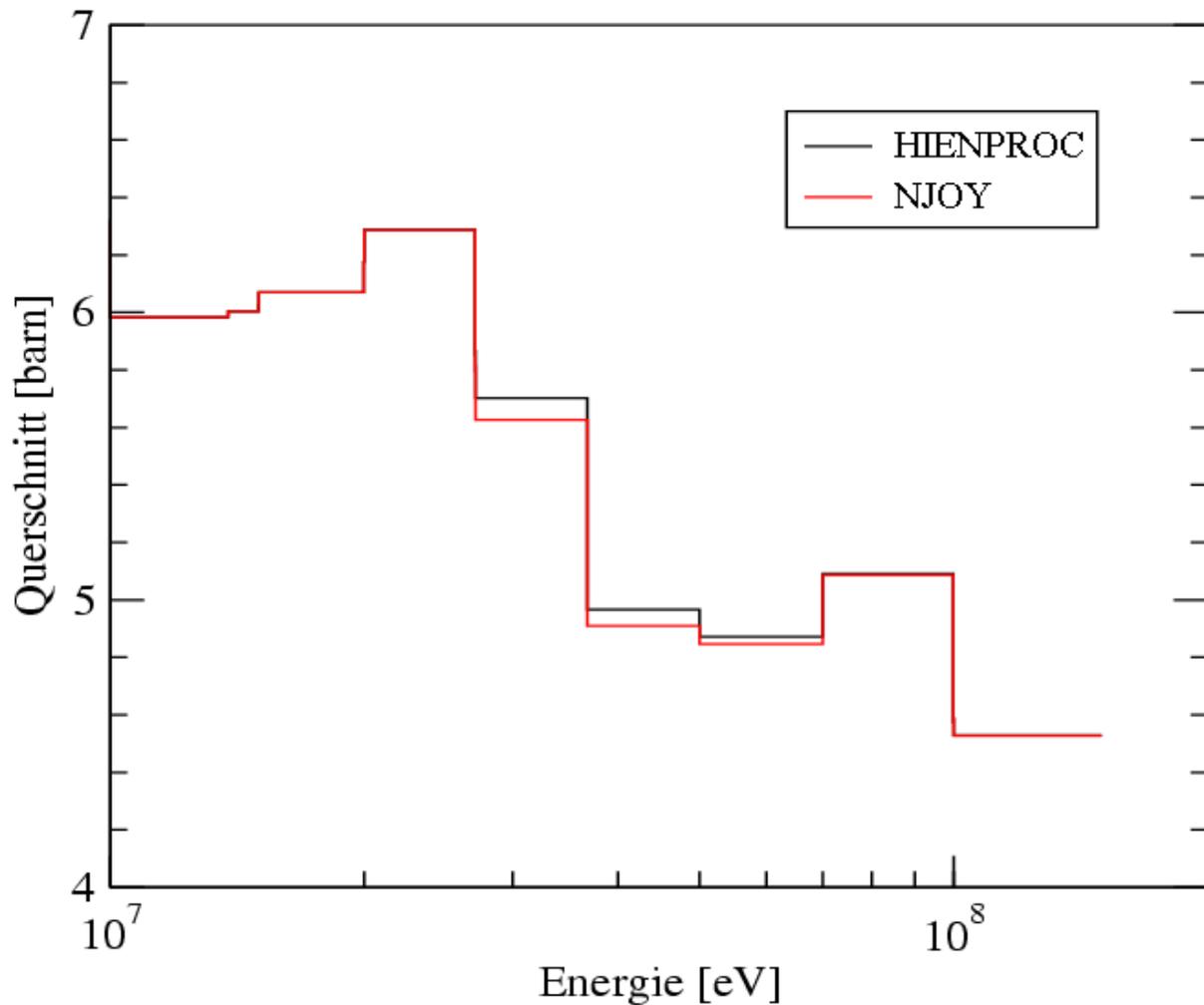


Abbildung 4.5: Vergleich der Gruppenkonstanten des totalen Wirkungsquerschnittes von Plutonium-239 zwischen NJOY und HIENPROC

## Ausschnitt oberhalb 20 MeV für Pu-239



**Abbildung 4.6: Ausschnitt aus Abbildung 4.5 zum Vergleich der Übereinstimmung von NJOY und HIENPROC für den totalen Wirkungsquerschnitt von Pu-239 oberhalb 10 MeV**

Analog zu den Vergleichen mit Sauerstoff-16 und Eisen-56 zeigt der Vergleich zwischen NJOY und HIENPROC für Plutonium-239 in Abbildung 4.5 eine nahezu perfekte Übereinstimmung der Gruppenkonstanten im Energiebereich bis 20 MeV. In dem vergrößerten Ausschnitt in Abbildung 4.6 sind wiederum ab der fünften Gruppe (energetisch aufwärts gehend) Abweichungen erkennbar.

Die größte relative Abweichung liegt in der fünften Gruppe und beträgt 1,35 %.

Der zugehörige absolute Fehler beträgt 0,077 barn. Der durchschnittliche relative Fehler in den ersten neun Gruppen (> 10 MeV) beträgt 0,04 %.

	totaler Querschnitt	elastischer Querschnitt	Spaltungsquerschnitt
maximale absolute Abweichung	0,0775 barn	0,0585 barn	0,016 barn
durchschnittliche absolute Abweichung	0,002 barn	0,002 barn	0,0007 barn
maximale relative Abweichung	1,35 %	1,98 %	0,87 %
durchschnittliche relative Abweichung	0,039 %	0,074 %	0,036 %

**Tabelle 4.3 : Abweichungen zwischen NJOY und HIENPROC von Plutonium-239 für den totalen, den elastischen und den Spaltquerschnitt für die ersten neun Gruppen**

Die Abweichungen in den ersten neun Gruppen sind akzeptabel, eine weitere Analyse dieser Abweichungen erscheint aber sinnvoll.

## 4.2 Detailangaben der neuen Bibliothek

Die neue 78-Gruppenkonstantenbibliothek wurde mit neun verschiedenen Materialien, die für ADS-Untersuchungen große Bedeutung haben, erstellt. Die Materialien sind mit den dazugehörigen Quellen und den ENDF MAT Nummern in Tabelle 4.4 aufgeführt. Außerdem wurden, für die temperaturabhängige Resonanzabschirmung, die Berechnungen für sechs verschiedene Temperaturen sowie für 19 verschiedene Untergrundquerschnitte, durchgeführt. Die Temperaturen sind in Tabelle 4.5, die Untergrundquerschnitte in Tabelle 4.6, aufgelistet.

Material	ENDF-Quelle	MAT-Nummer (im ENDF-System)
Sauerstoff-16	LANL/HE.1 High Energy File [28]	825
Eisen-56	NRG-2003 Rev.1 [30]	2631
Blei-208	NRG-2003 Rev.1 [30]	8237
Wismut-209	NRG-2003 Rev.1 [30]	8325
Uran-235	JENDL High Energy File [29]	9228
Uran-238	JENDL High Energy File [29]	9237
Neptunium-237	JENDL High Energy File [29]	9346
Plutonium-239	JENDL High Energy File [29]	9437
Americium-241	JENDL High Energy File [29]	9543

**Tabelle 4.4: Materialien für die in dieser Arbeit Gruppenkonstanten berechnet wurden**

Temperaturen [K]	300	900	1200	1500	2100	3000
------------------	-----	-----	------	------	------	------

**Tabelle 4.5: Temperaturen für die in dieser Arbeit Gruppenkonstantenberechnungen durchgeführt wurden**

Untergrund- querschnitte [barn]	0,001	1	10	30	60	100	300
	600	1000	3000	6000	10000	30000	60000
	$10^5$	$5 \cdot 10^5$	$10^6$	$10^8$	$10^{10}$		

**Tabelle 4.6: Untergrundquerschnitte für die in dieser Arbeit Gruppenkonstantenberechnungen durchgeführt wurden**

## 4.3 Ein erstes Anwendungsbeispiel der neu erstellten Bibliothek

In den Unterkapiteln 4.3.1 und 4.3.2 werden die Skripte der Dateien *run.example*, welches KAPROS steuert, und *input.example*, das für die Eingabe der verschiedenen KAPROS Optionen zuständig ist, beschrieben. Anschließend erfolgt mit dieser Eingabe eine erste Überprüfung der KAPROS Ergebnisse mit einer nulldimensionalen Berechnung.

### 4.3.1 Die Startdatei *run.example*

Die Datei *run.example* enthält die Steuerung einer KAPROS-Rechnung.

Im Folgenden wird der Programmtext wiedergegeben und die einzelnen Kommandos der Datei erklärt [19]. Die Zeilennummerierung dient zur Vereinfachung der Erklärung, sie ist nicht in der Datei enthalten.

1. `#!/bin/sh`
2. `rm peps*.ps ft18`
3. `touch ft18`
4. `ln -s ft18 KSUX.$USER.FT18`
5. `ksuxgo input.example`
6. `ghostview - landscape peps00001.ps`
7. `exit`

Zeile 1 : Durch diesen Kommentar wird festgelegt, welches Programm für die Ausführung des Skriptes verwendet wird. Da möglicherweise unterschiedliche Shells verwendet werden, kann es je nach Shell (sh, csh, ksh,...) zu Syntaxfehlern bei der Ausführung des Skriptes kommen. Durch die Angabe der ausführenden Shell wird dafür gesorgt, dass nur die „richtige“ Shell verwendet wird.

Zeile 2 : löscht alle Dateien im Verzeichnis mit Namen `peps*.ps` und die Ausgabedatei `ft18`

Zeile 3 : ermöglicht dass die eingetragenen Zugriffs- und Modifikations-Zeitstempel der Datei `ft18` direkt geändert werden können [19]

Zeile 4 : Verknüpft die Ausgabe-Datei `ft18` mit der Datei `KSUX.$USER.FT18`, wobei für `$USER` der Benutzername eingesetzt wird

Zeile 5 : Startet KAPROS unter Verwendung der Eingabedatei *input.example*

Zeile 6 : Startet das Graphikprogramm GHOSTVIEW, dass die Postscript-Datei peps00001.ps darstellt

Zeile 7 : Beendet das Programm

### 4.3.2 Die Eingabe-Datei *input.example*

Die Eingabe-Datei *input.example* bildet die Eingabe für KAPROS. Sie wird durch das Startprogramm *run.example* (Kapitel 4.3.1) verwendet. *Input.example* kann sowohl für 69- als auch für 78-Gruppenrechnungen benutzt werden. Zeilen die mit „\*\$“ beginnen werden von KAPROS als Kommentar interpretiert und in der Rechnung nicht benutzt. Die mit „\*\$“ beginnenden Zeilen der folgenden Eingabe sind Zeilen aus einer Eingabe für eine 69-Gruppenrechnung, aus der die Eingabe für die 78-Gruppenrechnung abgeleitet wurde. *Input.example* definiert zunächst die Eingabe Blöcke mit verschieden zu wählenden Parametern für die KAPROS-Module auf. Anschließend werden mit der GO-Anweisung die KAPROS-Module GRUCAL, das für die Berechnung makroskopischer Gruppenkonstanten zuständig ist, das Modul DIFF0, das die null-dimensionale Multigruppen-Diffusionsgleichung berechnet und das Modul PLFLUX, das die graphische Aufbereitung der Flüsse ermöglicht, gestartet. Die „\*\$\*\$“ Zeilen weisen auf das Ende einer Datenblock Eingabe hin.

Im Folgenden wird der Programmtext wiedergegeben und die wichtigsten Eingaben des Programms, den Referenzen [21, 22, 23] entnommen, erläutert. Die Zeilennummerierung dient zur Vereinfachung der Erklärung, sie ist im Dateitext nicht enthalten.

1. \*KSPARM VERON
2. \*KSIOX DBN=GRUCAL,TYP=CARD,PMN=PRDUM,IND=1
3. 'ARBFELD ' 819200
4. 'GRUBA '
5. \*\$ '/opt/KAPROS/data/G69P5E65B '
6. 'G78P5001 '
7. 'STEUER '
8. '/opt/KAPROS/gruba/stfile/F78V01 '
9. \*\$ '/opt/KAPROS/data/F69UD06 '

10. \*\$ 'FORMELN' 1 1  
 11. \*\$ 'COMMON '  
 12. \*\$ 'TRACE '  
 13. \*\$ 'DATEN ' 7 10  
 14. 'GRUCAL '  
 15. \*\$ 'WIMSLIB' ' ' ' ' '  
 16. 'HIENGLIB' ' ' ' ' '  
 17. 'MISCH '  
 18. 'DATBLOCK'  
 19. 'TYP '  
 20. 'ZUSATZ ' 2  
 21. 'SN2N '  
 22. 'SN3N '  
 23. 'DRUCKWQ'  
 24. 1  
 25. ' ' ' 1 10  
 26. 'GRUCEND '  
 27. \*\$\*\$  
 28. \*KSIOX DBN=MISCH,IND=1,TYP=CARD,PMN=PRDUM  
 29. 1  
 30. 9 ' ' 'PU239 ' 'PU239 '  
 31. 'U 235 ' 900. 1.80E-5  
 32. 'U 238 ' 900. 4.63E-3  
 33. 'NP237 ' 900. 1.57E-6  
 34. 'PU239 ' 900. 1.14E-3  
 35. 'AM241 ' 900. 4.55E-5  
 36. 'O ' 900. 1.24E-2  
 37. 'FE 56 ' 900. 1.58E-2  
 38. 'PB208 ' 900. 6.73E-3  
 39. 'BI209 ' 900. 8.15E-3  
 40. \*\$\*\$  
 41. \*KSIOX DBN=INPUT DIFF0,IND=1,TYP=CARD,PMN=PRDUM  
 42. \*\$ 0 69 1 1 0 0  
 43. 0 78 1 1 0 0

44. 'BUCKLING' 1 0.  
 45. \*\*\$  
 46. \*KSIOX DBN=INPUT ENERGY,TYP=CARD,PMN=PRDUM  
 47. \*\$ 'G069'  
 48. 'G078'  
 49. \*\*\$  
 50. \*KSIOX DBN=INPUT PLFLUX,TYP=CARD,PMN=PRDUM  
 51. 'TEXT'  
 52. ' 78 GROUP TEST '  
 53. \*\$ ' 69 GROUP TEST '  
 54. \*\$ 'CNTR'  
 55. 'NOPR'  
 56. \*\$ 'ETYP' 1  
 57. \*\$ 'SFISS '  
 58. 'FUVE'  
 59. 'EXTR' 1.0001E-5 2.99999E+9 1.E-11 1.E+20  
 60. 'PNCH' 18  
 61. \*\$ 'NORM'  
 62. \*\$ 'NOPL'  
 63. 'SEPL' 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1  
 64. \*\$ 'SEPL' 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0 0  
 65. 'PLDA' 26 -1 -55 23.5 15.5 0.2 0.9 0.6 0.5  
 66. \*\*\$  
 67. \*GO SM=GRUCAL,ML=0  
 68. \*GO SM=DIFF0U  
 69. \*GO SM=PLFLUX,ML=0

Programmerläuterung:

Zeile 1 : Protokoll zur Kontrolle des Datentransfers

Zeile 2 : Aufruf der GRUCAL-Eingabe

PMN bietet die Möglichkeit der Eingabe Überprüfung, durch die Option PRDUM wird keine Überprüfung vorgenommen

Zeile 3 : Größe des Arbeitsfeldes in Byte

Zeile 4 : Datasetname des Gruba-Files

Zeile 5 : Pfad für die 69 Gruppenkonstantenbibliothek (ausgeblendet)

Zeile 6 : Pfad für die 78 Gruppenkonstantenbibliothek

Zeile 7 : Datasetname des Steuerfiles

Zeile 8 : Pfad des Steuerfiles für die 78 Gruppenberechnungen

Zeile 9 : Pfad des Steuerfiles für die 69 Gruppenberechnungen (ausgeblendet)

Zeile 10-13 : Eingabegrößen für die Fehlersuche (siehe [21])

Zeile 14 : Start der GRUCAL Eingabe

Zeile 15, 16 : Schlüsselwort für die Gruppenidentifikation  
WIMSLIB → 69 Gruppen; HIENGLIB → 78 Gruppen

Zeile 17-18 : Enthält Mischungszusammensetzung für alle Mischungen wird in Zeile 32  
berechnet

Zeile 19-22 : Steuerung der zu berechnenden Querschnitte

Zeile 23-25 : Steuerung der Druckausgabe

Zeile 26 : Ende der GRUCAL-Eingabe

Zeile 28 : Aufruf der Mischungseingabe

Zeile 30 : Einlesen der Neutronengeschwindigkeit  $1/v$  und Spaltspektrum CHI, die in  
KAPROS unter dem Isotop Pu239 gespeichert sind

Zeile 31-39 : Einlesen der Isotope die in der Mischung enthalten sind  
mit Angabe der Temperatur und der Dichte,  
hier für ADS mit Pb/Bi Kühlung

Zeile 41 : Aufruf der DIFF0-Eingabe

Zeile 42, 43 : 0 Konstante  
NG Anzahl Energiegruppen  
NM Anzahl Mischungen  
ND Druckausgabe 0= nein 1= ja  
Alpha Zeitkonstante  
NAD -1 nur adjungierte Rechnung  
0 nur reale Rechnung  
+1 reale und adjungierte Rechnung

Zeile 44 : Start der Buckling Eingabe  
KBU = 0 Bucklingeingabe energiegruppen- und mischungsunabhängig  
= 1 Bucklingeingabe nur mischungsabhängig  
= 2 Bucklingeingabe energiegruppen- und mischungsabhängig  
= 3 Bucklingeingabe nur energiegruppenabhängig

Bucklingwerte : M=1

M= NM (Anzahl Mischungen)

M= NG (Anzahl Energiegruppen)

Zeile 46 : Aufruf der Spezifikation der Energiegruppenstruktur

Zeile 47, 48 : Eingabe der Energiegruppe

Zeile 50 : Aufruf der Eingabe für PLFLUX

Ermöglicht die graphische Darstellung von energieabhängigen Spektren welche in FLUX0-Struktur gespeichert sind

Zeile 52, 53 : Text im Plot

Zeile 54 : eine Reihe von Kontrollausdrucken werden ausgegeben

Zeile 55 : Ein Teil der Standarddruckausgabe wird unterdrückt

Zeile 59 : Begrenzung des Energiebereiches der dargestellten Daten

Zeile 60 : die graphisch darzustellenden Daten werden nach FT18 ausgeschrieben

Zeile 63, 64 : Auswahl möglicher Zeichnungen

Zeile 65 : Einstellungen von Plotparametern zur Gestaltung der Zeichnung

Zeile 67 : Aufruf des KAPROS Moduls GRUCAL,

ML = Message Level (Steuerung der Kontrollausgabe von KAPROS)

Zeile 68 : Aufruf des KAPROS Moduls DIFF0

Zeile 69 : Aufruf des KAPROS Moduls PLFLUX,

ML = Message Level (Steuerung der Kontrollausgabe von KAPROS)

### **4.3.3 Ergebnisse der Neutronenflussrechnung**

Zu einer ersten Überprüfung der neuen 78-Gruppenbibliothek, wurde eine Neutronenflussberechnung mit der erprobten 69-Gruppenbibliothek und dem entsprechenden Steuerfile anhand einer typischen ADS-Reaktor Zone ohne Fremdneutronenquelle durchgeführt. Anschließend folgte die Neutronenflussberechnung mit der neuen 78-Gruppenbibliothek und dem neuen Steuerfile mit derselben Reaktor Zone. Die 69-Gruppenkonstantenbibliothek wurde auf Basis der ENDF/B 6.5 Daten erstellt. Die

78-Gruppenkonstantenbibliothek wurde mit den in Kapitel 4.1 validierten, mikroskopischen Gruppenkonstanten, deren Quellen in Tabelle 4.4 aufgelistet sind, erzeugt. Das Ergebnis wird in Abbildung 4.7 dargestellt. Der Neutronenfluss wurde bis zu einer Dichte von  $10^{-22} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$  berechnet. Der obere energetische Grenzwert dieser Flussdichte liegt für die 78-Gruppenberechnung bei 50 MeV, da oberhalb dieser Grenze ohne Fremdquelle keine Neutronen entstehen. Im Falle des Einsatzes einer Fremdquelle mit hochenergetischen Neutronen, wäre eine Berechnung der Flussdichte bis zum oberen energetischen Grenzwert der 78-Gruppenbibliothek von 150 MeV möglich. Ein solcher Fall soll in einer weiterführenden Untersuchung betrachtet werden. Der energetische Grenzwert liegt für die 69-Gruppenberechnung beim Maximum der zugehörigen Bibliothek von 10 MeV.

Die  $k_{\text{eff}}$  Werte für die beiden Strukturen betragen:

69-Gruppenstruktur  $k_{\text{eff}}$  : 1,5407

78-Gruppenstruktur  $k_{\text{eff}}$  : 1,5612

Die  $k_{\text{eff}}$  Werte, zusammen mit der guten Übereinstimmung der Neutronenflüsse oberhalb 1 eV, wobei die Abweichungen bei niedrigen Energien ( $< 1 \text{ eV}$ ) nicht geklärt werden konnten und weitere Überprüfungen sinnvoll erscheinen, zeigen, dass diese ersten Ergebnisse zufrieden stellend sind. Eine mögliche Ursache für die Abweichungen könnten die verschiedenen ENDF-Quellen sein die für die Erstellung der mikroskopischen Gruppenkonstanten verwendet wurden. So wurden für die 78-Gruppenbibliothek die in Tabelle 4.4 aufgelisteten Quellen LANL/HE.1 High Energy File [28], NRG-2003 Rev.1 [30] und JENDL High Energy File [29] verwendet, während die 69-Gruppenbibliothek mit ENDF/B-6.5 erstellt wurde. Der Grund hierfür war der größere Informationsgehalt der genannten neueren ENDF-Quellen oberhalb 20 MeV, im Vergleich zu ENDF/B-6.5 und auch zu dessen Nachfolger ENDF/B-6.8 [27].

Eine genauere Analyse der Ursachen für die Abweichungen sollte in einer nächsten Stufe durchgeführt werden.

### Vergleich der Neutronenflüsse einer typischen ADS-Reaktor-Zone

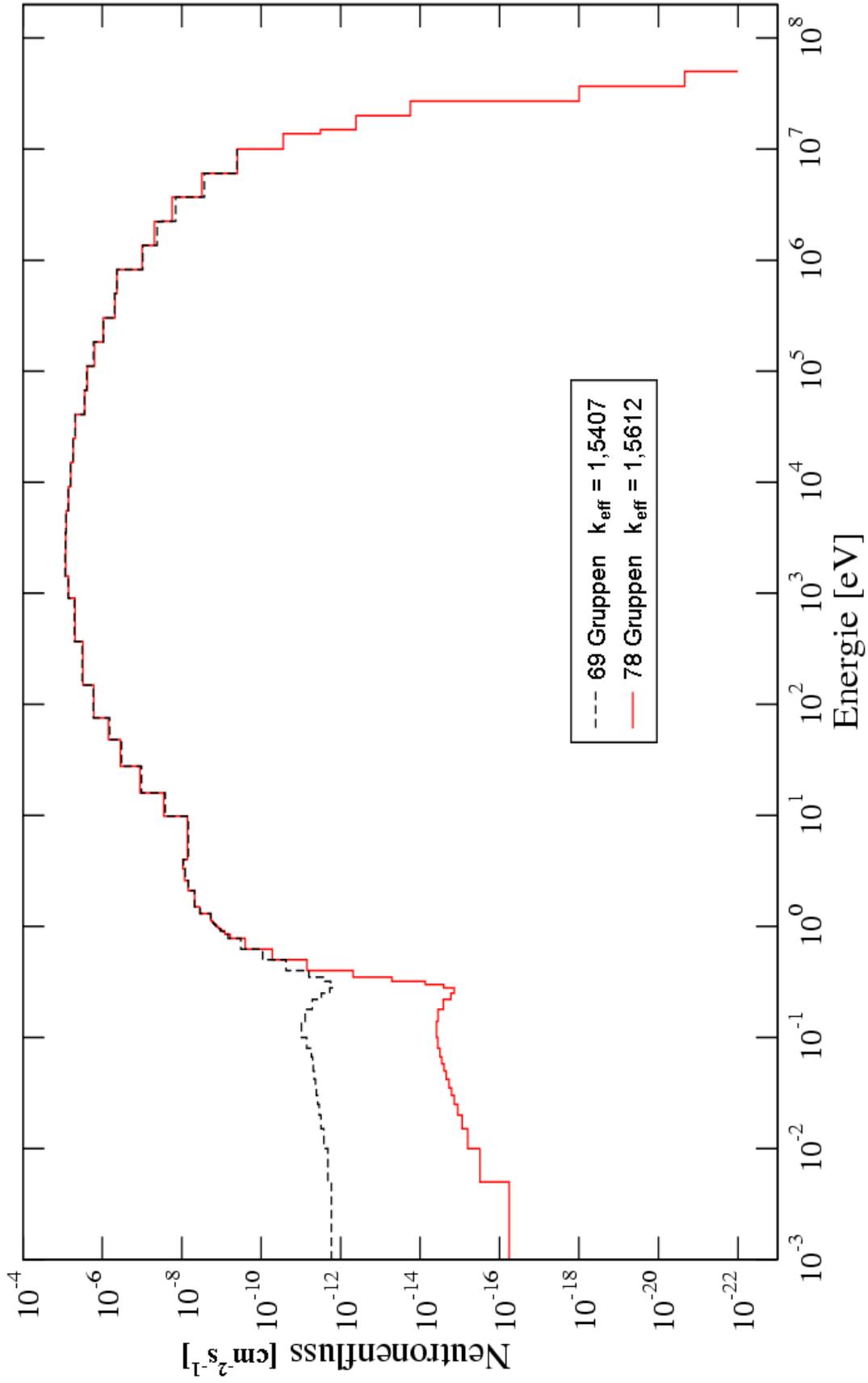


Abbildung 4.7: Vergleich der Neutronenflüsse der 69- und 78-Gruppenbibliothek anhand einer typischen ADS-Reaktor-Zone

## Kapitel 5

# Spezielle Kernreaktionen oberhalb 10 MeV und die ENDF-Daten Lage oberhalb 20 MeV

In Kapitel 5 werden zunächst die Besonderheiten der (n,xx) Reaktionen und ihre Auswirkungen auf Neutronenbilanzen diskutiert und Neutronenbilanzen bis 250 MeV graphisch dargestellt. Anschließend werden die gegenwärtig vorhandenen ENDF-Daten oberhalb von 20 MeV erläutert.

### 5.1 (n, xx) - Reaktionen für Energien oberhalb 10 MeV

Unter dem Begriff „(n,xx) – Reaktionen“ sind hier eine Vielzahl Reaktionen zusammengefasst. Das „n“ steht dabei für ein in den Kern eintretendes Neutron. Die „xx“ stehen für alle möglichen austretenden Nukleonen, Nukleonkombinationen oder auch Zahlen. Im Folgenden spielen die (n,xn) Reaktionen, wie (n,2n), (n,3n), u.s.w., die größte Rolle, aber auch Reaktionen wie die (n,p), (n,2p), (n,2n3p) oder gar (n,2n3p3d5α) Reaktion sind hier unter dem Begriff (n,xx) Reaktionen zusammengefasst, wobei letztere allerdings eher theoretische Natur besitzt.

Bei Neutronenenergien über 10 MeV spielen vermehrt (n,xx) Reaktionen eine Rolle, die unterhalb von 10 MeV so gut wie nicht auftreten.

So hat laut einer Studie zur Aktinidenumwandlung [12], bei Blei die (n,2n) Reaktion 93% ihrer, über den gesamten Energiebereich, entstehenden Neutronen oberhalb von 10 MeV. Bei anderen Schwellenreaktionen wie ((n,3n), (n, 4n), (n, p), (n, 2p) liegt dieser Wert sogar bei 99 %. Aufgrund der relativ gesehenen geringen Bedeutung dieser (n,xx) Reaktionen bei Energien unterhalb von 10 MeV, wurden bisher in den KAPROS Bibliotheken nur die (n,2n)- Reaktionen berücksichtigt. Oberhalb 10 MeV gewinnen diese Reaktionen jedoch stark an Bedeutung. Abbildung 5.1 verdeutlicht dies in dem es die Wirkungsquerschnitte der (n,2n) bis (n,4n) Reaktionen, sowie den Wirkungsquerschnitt für Spaltung, für das Isotop Plutonium-239, zeigt. Der maximale Wirkungsquerschnitt der (n,3n)-Reaktion liegt bei

22 MeV und beträgt 0,26 barn. Der Wirkungsquerschnitt für Spaltung beträgt für die gleiche Energie 2,33 barn. Für dieses Beispiel beträgt der Wirkungsquerschnitt der (n,3n) Reaktion über 11 % des Spaltquerschnittes.

Im Energiebereich zwischen 10 und 20 MeV betragen die Wirkungsquerschnitte der (n,2n) und (n,3n) Reaktionen zusammen immer mehr als 10 % des Spaltquerschnittes.

Diese Sachverhalte legen nahe das die (n,xx) und unter diesen vor allem die (n,xn) Reaktionen für Reaktorberechnungen oberhalb 10 MeV berücksichtigt werden müssen.

### Vergleich der (n,xn) Querschnitte mit dem Spaltungsquerschnitt für Pu-239

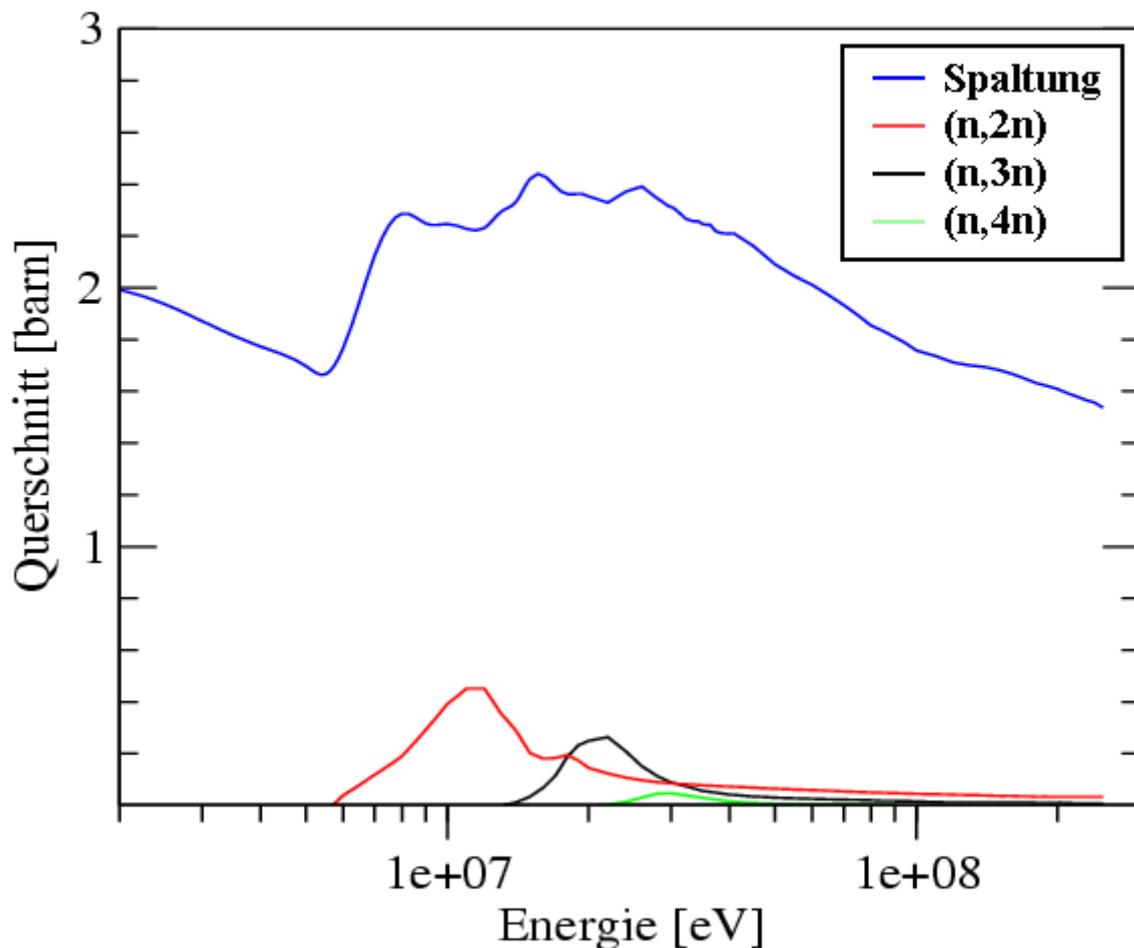


Abbildung 5.1: Vergleich der Querschnitte der (n,xn)-Reaktionen mit dem der Spaltung am Beispiel von Plutonium-239 [29]

## 5.2 Neutronenbilanzen für hohe Energien

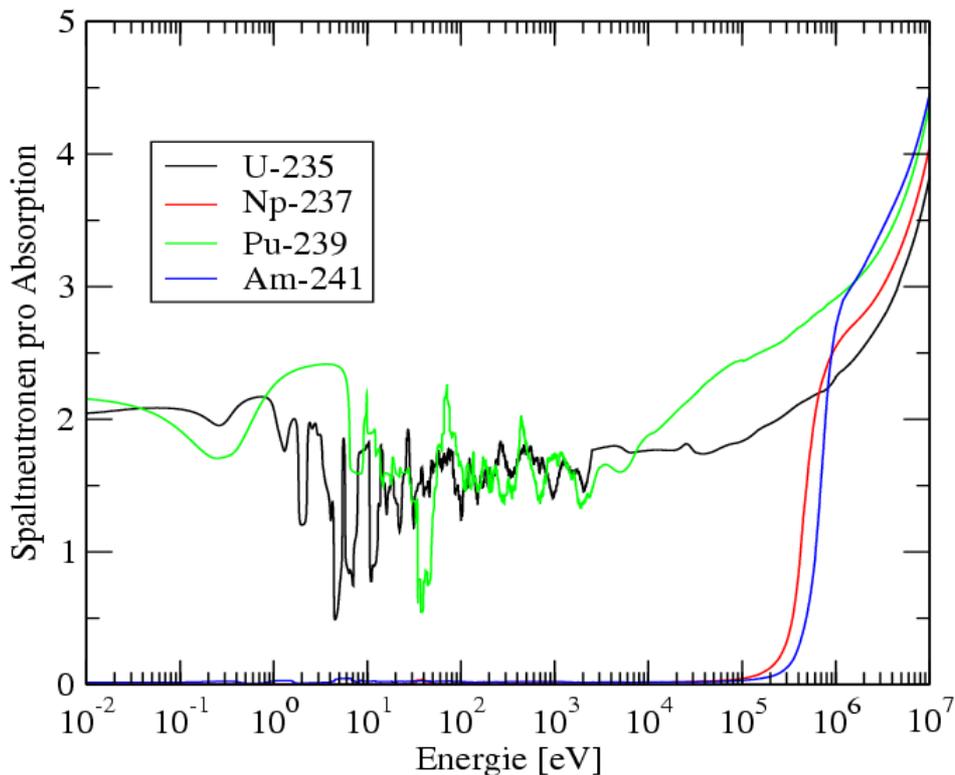
Die entscheidende kernphysikalische Reaktion der Transmutation ist die Spaltung. Nur durch Spaltung kann ein schweres langlebiges Aktinid wie z.B. Neptunium-237 in leichtere Isotope transmutiert werden. Aus diesem Aspekt heraus ergibt sich ein Interesse an der Menge von produzierten Neutronen die eine Spaltung auslösen können und an der Wahrscheinlichkeit eines solchen Spaltereignisses.

Bei der klassischen Berechnung der Neutronenbilanz nach Gleichung (37) wird für die Neutronenproduktion lediglich die Spaltung und bei der Neutronenabsorption lediglich die Spaltung und die (n,γ)-Reaktion berücksichtigt.

$$\eta = \frac{\nu^* \sigma_f}{\sigma_f + \sigma_\gamma} \quad (37)$$

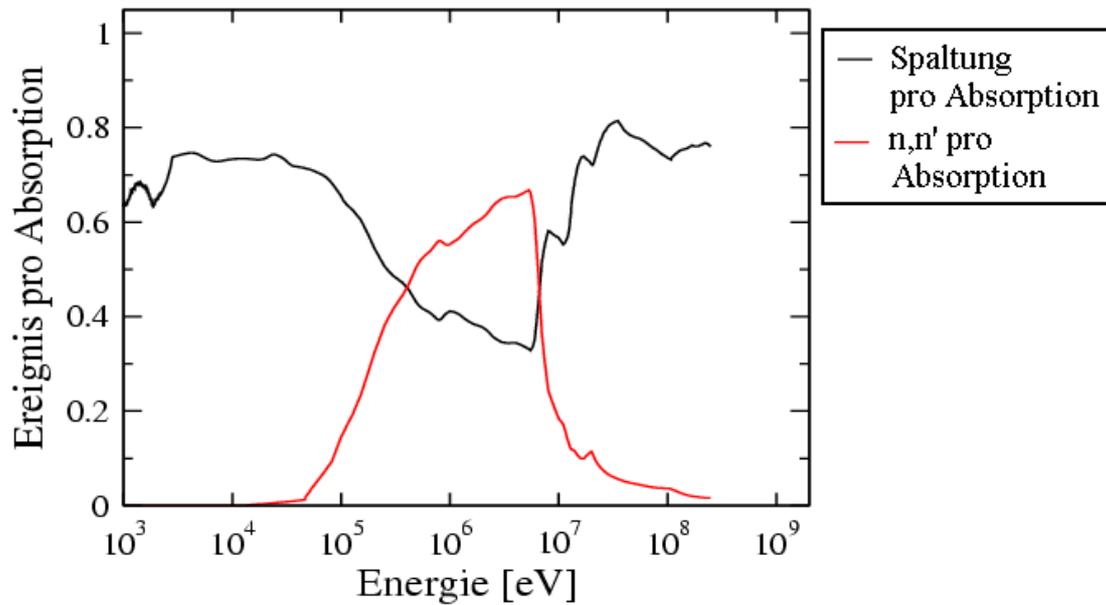
$\nu$  ist die durchschnittliche Anzahl prompter Neutronen pro Spaltung ( $\nu$  trägt die ENDF-Bezeichnung MT = 456).  $\sigma_f$  ist der Wirkungsquerschnitt für Spaltung (MT 18). Das Produkt im Zähler von Gleichung (37) ist somit eine gute Näherung für die Neutronenproduktion bei Energien bis 10 MeV. Die Summe aus dem Wirkungsquerschnitt für Spaltung  $\sigma_f$  und dem Wirkungsquerschnitt für Gamma-Partikel Emission  $\sigma_\gamma$  (MT 102) gibt die Anzahl absorbiertes Neutronen im System wieder. Abbildung 5.2 zeigt die klassische Neutronenproduktion nach Gleichung (37). Schon hier wird ersichtlich, dass die Spaltrate für manche Aktinide, wie die dargestellten Neptunium-237 und Americium-241, ab einer Schwellenenergie die hier ca. 200 keV beträgt, stark zunimmt.

## Neutronenproduktion nach klassischer Berechnung



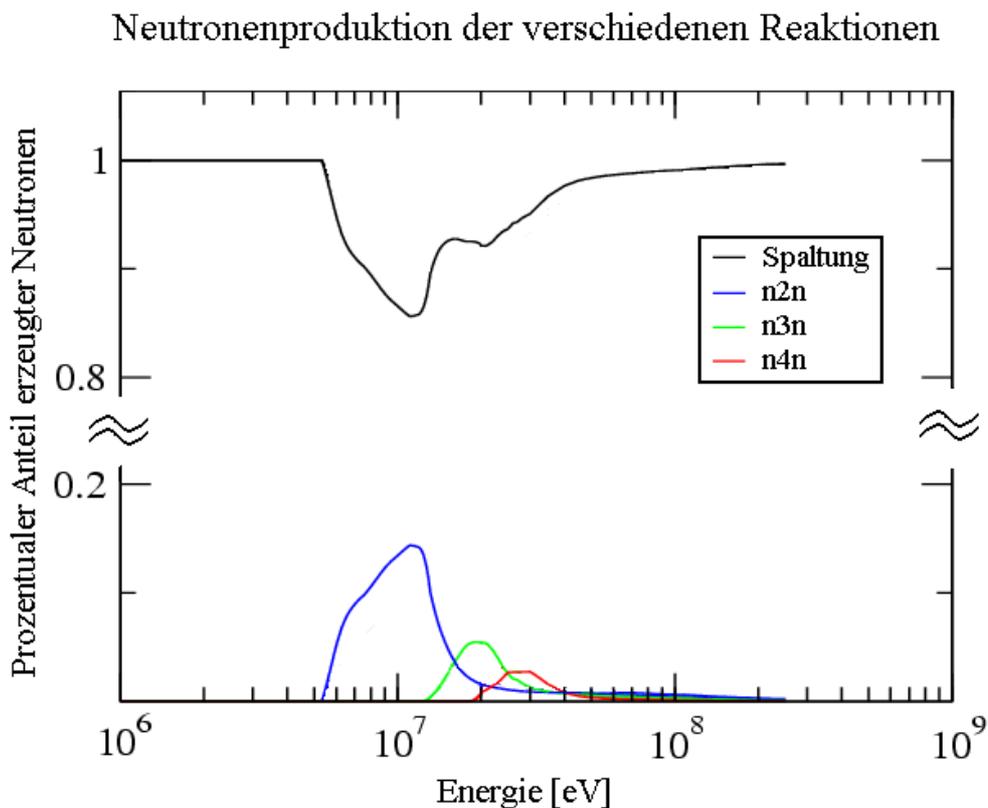
**Abbildung 5.2: Neutronenproduktion nach Gleichung (37), [29]**

Für niedrige Energien ist die Näherung für die Neutronenabsorption in Gleichung (37) völlig ausreichend. Allerdings treten schon oberhalb 10 keV Prozesse wie die inelastische Streuung ( $n,n'$ ) auf, die berücksichtigt werden müssen. Bei dieser Reaktion wird die absolute Anzahl Neutronen zwar nicht geringer aber die Neutronen werden zu niedrigeren Energien gestreut bei denen die Spaltrate der Aktinide stark zurückgehen kann (Abbildung 5.6). Abbildung 5.3 zeigt das Verhältnis zwischen Spaltung und inelastischer Streuung ( $n,n'$ ) jeweils pro Absorption für Uran-235. Während die Spaltreaktion über den gesamten Energiebereich einen erheblichen und meist den größten Anteil der Neutronenabsorption besitzt, nimmt der Neutronenabsorptionsanteil der ( $n,n'$ ) Reaktion erst ab ca. 100 keV vergleichbare Größen an, steigt dann bis weit über die Hälfte aller absorbierten Neutronen an um ab ca.  $10^7$  eV wieder stark abzusinken und ab ca.  $10^8$  eV nur noch eine untergeordnete Rolle zu spielen. Abbildung 5.3 zeigt sehr deutlich dass die ( $n,n'$ ) Reaktion in einem großen Energiebereich sogar mehr Neutronen absorbiert als die Spaltreaktion. Ebenfalls klar zu erkennen ist der geradezu spiegelbildliche Verlauf der beiden Kurven zwischen  $10^5$  und  $10^7$  eV, der die Dominanz der beiden Reaktionen in diesem Energiebereich verdeutlicht. In der klassischen Neutronenbilanz nach Gleichung (37) wird unter anderem die ( $n,n'$ ) Reaktion nicht berücksichtigt.



**Abbildung 5.3: Spaltung und (n,n') pro absorbierten Neutron am Beispiel von Uran-235 [29]**

Ebenfalls nicht berücksichtigt werden die (n,xn) Prozesse die in höheren Energiebereichen einen erheblichen Anteil zur Neutronenproduktion beitragen. Dies wird in Abbildung 5.4 wiederum am Beispiel von Uran-235 gezeigt.



**Abbildung 5.4 : Vergleich des prozentualen Anteils produzierter Neutronen pro Reaktion am Beispiel von U-235 [29]**

Abbildung 5.4 zeigt nur den Neutronenproduktionsvergleich zwischen der Spaltung und den (n,xn)-Reaktionen bis  $x = 4$ . Reaktionen wie die (n,n')-Reaktion wurden nicht berücksichtigt weil sie die absolute Anzahl Neutronen im System nicht erhöhen, andere Reaktionen wie z.B. die (n,2np) oder (n,5n) Reaktion wurden nicht miteinbezogen werden, weil ihre Berechnung aus den ENDF-Daten sehr aufwendig und mit Programmen wie HIENPROC oder NJOY zum gegenwärtigen Zeitpunkt nicht möglich ist (siehe Kapitel 5.3). Es wurde allerdings darauf geachtet, dass nur der absolute Zuwachs der Anzahl Neutronen im System pro Reaktion berücksichtigt wird.

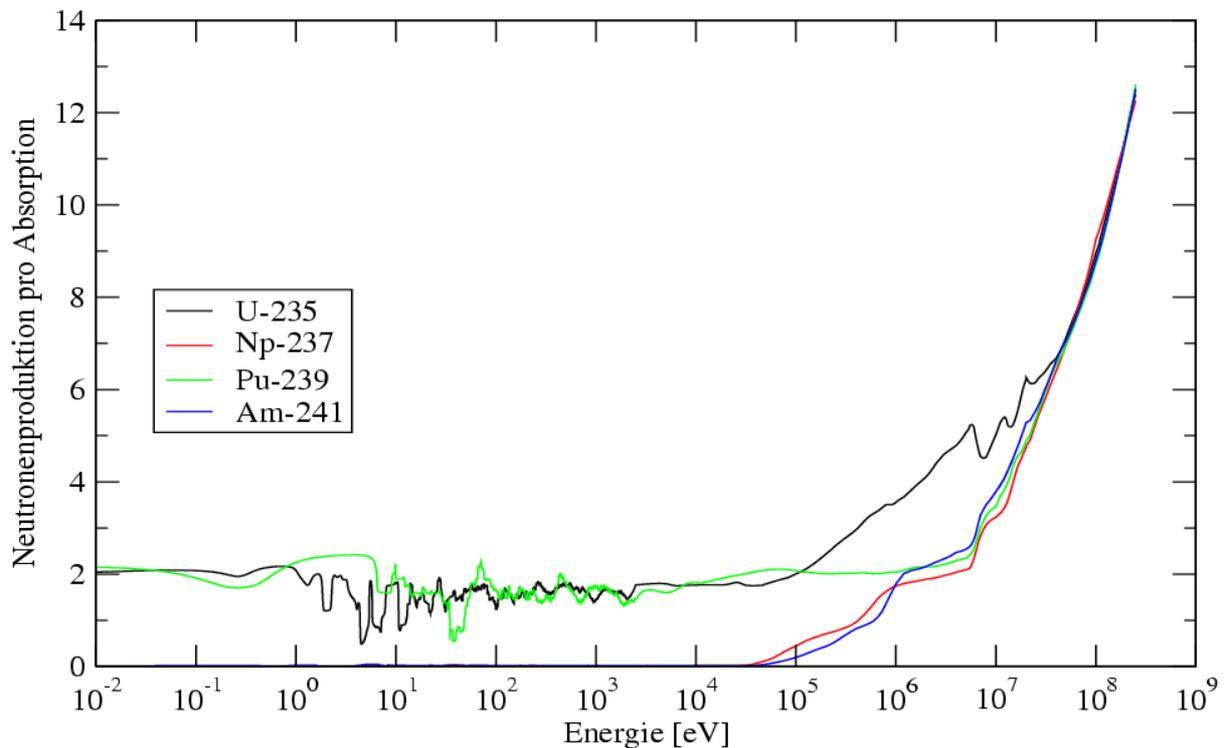
Trotz der Einschränkungen ist die große Bedeutung der (n,xn) Reaktionen bei der Neutronenproduktion im betrachteten Energiebereich sehr gut erkennbar. Allein die (n,2n) Reaktion erzeugt in ihrem Maximum bei 12,1 MeV fast 1/6 so viele Neutronen wie die Spaltung bei dieser Energie erzeugt.

Die Vergleiche für die Absorption und die Produktion von Neutronen zeigen deutlich das Gleichung (37) für höhere Energien zu ungenau ist. Eine bessere Darstellung der Neutronenbilanz ist in der Praxis mit den derzeitigen ENDF-Daten sehr schwierig (siehe Kapitel 5.3). Als bessere Näherung an die Realität als Gleichung (37) kann Gleichung (38) betrachtet werden:

$$\eta = \frac{\nu^* \sigma_f + x^* \sigma_{n,xn}}{\sigma_{nel}} \quad (38)$$

Neben den Neutronen aus der Spaltung werden hier auch die Neutronen aus den (n,xn) Reaktionen, für  $2 \leq x \leq 4$ , berücksichtigt. Für die Absorption wird die nicht elastische Streuung eingesetzt in der alle Reaktionen bis auf die elastische Streuung zusammengefasst sind.

Bis 20 MeV gibt Gleichung (38) sehr gut die Anzahl produzierter Neutronen pro Absorption wieder. Oberhalb 20 MeV treten vermehrt Reaktionen wie z.B.: (n,2np) Reaktionen auf, die nicht einzeln aufgeführt werden können und deshalb die exakte Berechnung der produzierten Neutronen nicht ermöglichen. Für die (n,xn) Reaktionen ist bis 20 MeV meist die Miteinberechnung bis  $x = 3$  ausreichend. Abbildung 5.5 veranschaulicht Gleichung (38).



**Abbildung 5.5 : Neutronenproduktion pro Absorption nach Gleichung (38), [29]**

Genauer zu bestimmen ist die Wahrscheinlichkeit der Spaltung pro Absorption.

In Anlehnung an Gleichung (37) wird das Verhältnis  $r_f$  Spaltung pro Absorption klassisch nach Gleichung (39) berechnet:

$$r_f = \frac{\sigma_f}{\sigma_f + \sigma_\gamma} \quad (39)$$

Veranschaulicht wird Gleichung (39) in Abbildung 5.6.

Unter Berücksichtigung der gesamten Absorption und nach derselben Argumentation wie bei Gleichung (38) wird Gleichung (39) zu Gleichung (40) modifiziert und in Abbildung 5.7 dargestellt.

$$r_f = \frac{\sigma_f}{\sigma_{nel}} \quad (40)$$

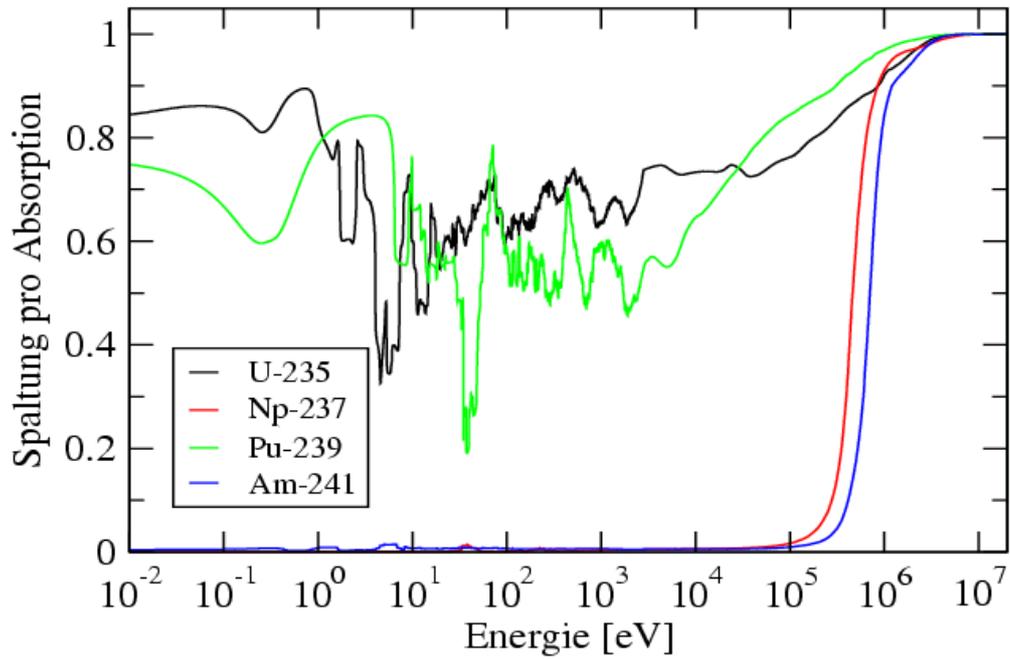


Abbildung 5.6 : Spaltung pro Absorption nach der klassischen Berechnung für niedrige Energien nach Gleichung (39), [29]

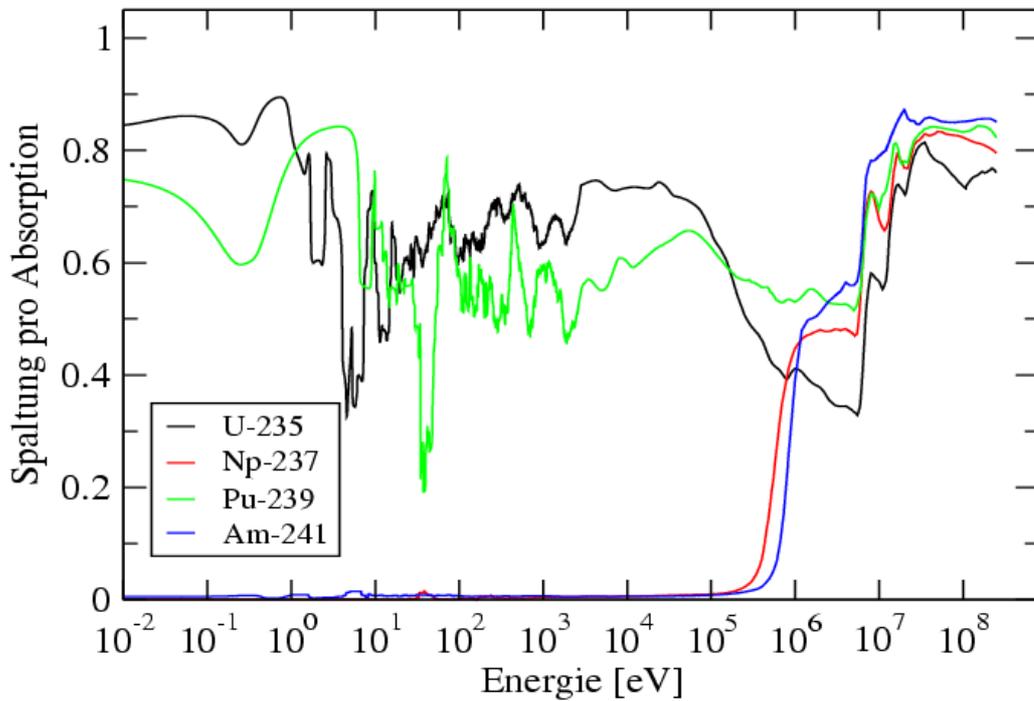


Abbildung 5.7 : Spaltung pro Absorption nach Gleichung (40), [29]

Zusammenfassend kann man sagen, dass die neuen Neutronenbilanzen der Gleichungen (38) und (40) die Realität für Energien oberhalb 1 MeV wesentlich besser wiedergeben als die klassischen Bilanzen nach Gleichung (37) und (39). Unterhalb 10 keV gibt es praktisch keinen Unterschied zwischen den Gleichungen (37) und (39) und zwischen den Gleichungen (38) und (40), da die zusätzlichen Reaktionen unterhalb 10 keV keine Rolle spielen. Für eine noch genauere Beschreibung der Neutronenbilanzen, die allerdings nur für Energien oberhalb 20 MeV sinnvoll ist, müssten auch Reaktionen, wie z.B.: die  $(n,2np)$  oder  $(n,2n\alpha)$  Reaktion die die Anzahl Neutronen im System steigern berücksichtigt werden, was mit den derzeitigen ENDF-Daten und Berechnungsprogrammen wie NJOY und HIENPROC nicht möglich ist.

### **5.3 Gegenwärtig vorhandene ENDF-Daten für Kernreaktionen oberhalb 20 MeV**

In den verschiedenen ENDF-Datenbanken, wie ENDF/B-VI [27], JENDL-HE (JHE) [29] und Anwendungen aus ISTC Projekten [31], reichen die MT 1 (totale Wirkungsquerschnitt), MT 2 (elastische Streuung) und MT 5 (siehe Anhang C) Querschnittsdaten (MF 3) über die 20 MeV-Grenze hinaus. In neuen High Energy Datenbanken, wie z.B. JENDL-HE [29] ist auch MT 18 (Spaltquerschnitt) oder die speziell für hohe Energien eingeführte MT 200er Reihe bis über die 20 MeV Grenze hinaus vorhanden.

Allgemein sind für die Wirkungsquerschnitte im ENDF-System die MF-Nummer 3 definiert worden (siehe Kapitel 3.2). Oberhalb 20 MeV gibt es abgesehen von den genannten Wirkungsquerschnitten, die eine Zusammenfassung mehrerer Querschnitte beinhalten (Ausnahme MT18), aber keine Daten. In manchen neueren ENDF-Datenbanken, wie JENDL-HE [29], ENDF/B-VI [27], LANL/HE.1 High Energy File [28] oder NRG-2003 [30] sind aber in MF-6 (Energie-Winkelbeziehungen für emittierte Partikel) unter MT 5 Kernreaktionsprodukte gespeichert. Für einige Reaktionen wie z.B.: die  $(n,2n)$ -Reaktion vervollständigen diese Daten entsprechende MT-Sektionen von MF 3 für Energien oberhalb 20 MeV [29]. Dieser Rückschluss vom Restkern und seinem Ausgangsmaterial auf die Reaktion ist jedoch nicht immer eindeutig. Es ist möglich dass verschiedene Reaktionen zu demselben Restkern führen. Für die  $(n,xn)$ -Reaktionen ist der Rückschluss allerdings eindeutig. Deshalb wird für die Berechnung der  $(n,xn)$  Reaktionen diese Option von

HIENPROC verwendet. So überprüft HIENPROC ob im verwendeten ENDF-File unter MF-6, ein MT-5 File vorhanden ist. Ist dies der Fall berechnet HIENPROC dann aus den verfügbaren Recoilspektren der Reaktionskerne die (n,2n)-, (n,3n)- und (n,4n)-Reaktionen für Energien oberhalb 20 MeV, die in dem Querschnittsfile MF-3 (für Energien oberhalb 20 MeV) nicht vorhanden sind.

# Kapitel 6

## Zusammenfassung

Die Erweiterung der bestehenden 69-Gruppenbibliothek auf 78 Gruppen bis 150 MeV ist für kerntechnische Anwendungen, wie die ADS-Transmutation, von großem Interesse.

Kapitel 1 und 2 beinhalten physikalische und mathematische Grundlagen für Multigruppenrechnungen. Kapitel 3 befasst sich mit der praktischen Durchführung der Erzeugung von mikroskopischen und makroskopischen Gruppenkonstanten und stellt die wichtigsten Programme vor, die für die Erstellung der Bibliotheken in dieser Arbeit verwendet wurden. Bei der Erzeugung der mikroskopischen Gruppenkonstanten werden zwei Programme benutzt. Das weltweit meist verwendete Programm zur Verarbeitung von ENDF-Daten NJOY und das am Institut für Reaktorsicherheit des FZKs entwickelte Programm HIENPROC. HIENPROC besitzt im Gegensatz zu NJOY die Möglichkeit die  $(n,2n)$ ,  $(n,3n)$  und  $(n,4n)$  Querschnitte auch oberhalb der 20 MeV Grenze zu berechnen. Diese Reaktionen sind wichtig für Abbrandrechnungen für Energien im MeV-Bereich, was in Kapitel 5 verdeutlicht wird. Außerdem wird in Kapitel 3, das weltweit meist benutzte Daten-Format für nukleare Daten, das ENDF-Format, vorgestellt, dessen Format auch die in dieser Arbeit verwendeten nuklearen Daten haben, mit denen die Gruppenkonstanten berechnet werden. In Kapitel 4 wird das Programm HIENPROC, das für die Berechnung der mikroskopischen Gruppenkonstanten oberhalb 10 MeV verwendet wird, einer Gültigkeitsprüfung unterzogen. Bei dieser Prüfung werden die Ergebnisse des etablierten Programms NJOY mit den Ergebnissen von HIENPROC, was für einige Querschnitte möglich ist, verglichen. Anhand der Prüfungsergebnisse konnten Verbesserungen an HIENPROC erreicht werden. So konnten z.B. große Abweichungen im Resonanzgebiet der Querschnitte durch eine Änderung der Interpolation des Wichtungsspektrums korrigiert werden.

Die Übereinstimmung der vergleichbaren Gruppenkonstanten ist über den gesamten Energiebereich zufrieden stellend. Die verbliebenen geringen Abweichungen oberhalb 20 MeV liegen im niedrigen Prozentbereich ( $< 5\%$ ). Für diese Abweichungen konnte trotz verschiedener Ansatzpunkte keine Ursache gefunden werden und es ist unklar welches der beiden Programme in diesem Bereich genauer rechnet.

Mit den neu erzeugten mikroskopischen Gruppenkonstanten wurde eine erste Version einer 78-Gruppenbibliothek erstellt. Diese Bibliothek enthält Gruppenkonstanten für 9 wichtige Materialien für ADS-Untersuchungen. Für die temperaturabhängige Resonanzabschirmung

wurden die Berechnungen für 6 verschiedene Temperaturen und für 19 verschiedene Untergrundquerschnitte durchgeführt. Die Materialien, die Temperaturen und die Untergrundquerschnitte sind in Kapitel 4 aufgelistet.

Außerdem werden in Kapitel 4 die makroskopischen Gruppenkonstanten der neuen 78-Gruppenbibliothek, mittels einer nulldimensionalen Neutronenflussrechnung für eine typische ADS-Reaktor Zone, mit der etablierten 69-Gruppenbibliothek verglichen. Diese ersten Ergebnisse, die mit KAPROS erstellt wurden, sind zufrieden stellend, bedürfen aber vor allem im thermischen Bereich weiterführende Untersuchungen.

In Kapitel 5 sind die Ergebnisse einer Quellenrecherche über die gegenwärtig vorhandenen ENDF-Daten zusammengefasst. Diese war sowohl für die Berechnung der mikroskopischen Gruppenkonstanten, als auch für die Erstellung der Neutronenbilanzen, die ebenfalls in Kapitel 5 festgehalten sind, wichtig. Die Ergebnisse zeigen dass es, für genauere Multigruppenrechnungen und Neutronenbilanzen oberhalb 20 MeV, notwendig ist die ENDF-Datenbasis für Energien oberhalb 20 MeV zu erweitern oder Programme wie HIENPROC und NJOY weiter zu entwickeln.

Bei den in Kapitel 5 behandelten Neutronenbilanzen wurde gezeigt, dass die klassische Neutronenbilanz oberhalb 100 keV ungenau sein kann. Innerhalb der Möglichkeiten die die gegenwärtige ENDF-Datenlage, sowie die Berechnungsprogramme gewährleisten, wurden verschiedene Neutronenbilanzen auf ihre Gültigkeit untersucht und das beste Ergebnis in dieser Arbeit festgehalten.

## Anhang A

### Die Gruppengrenzen der 78 Gruppen Bibliothek

Gruppe	untere Grenze	obere Grenze	Gruppe	untere Grenze	obere Grenze
78	1.000000E-03	5.000000E-03	39	2.100000E+00	2.600000E+00
77	5.000000E-03	1.000000E-02	38	2.600000E+00	3.300000E+00
76	1.000000E-02	1.500000E-02	37	3.300000E+00	4.000000E+00
75	1.500000E-02	2.000000E-02	36	4.000000E+00	9.877000E+00
74	2.000000E-02	2.500000E-02	35	9.877000E+00	1.597000E+01
73	2.500000E-02	3.000000E-02	34	1.597000E+01	2.770000E+01
72	3.000000E-02	3.500000E-02	33	2.770000E+01	4.805000E+01
71	3.500000E-02	4.200000E-02	32	4.805000E+01	7.550000E+01
70	4.200000E-02	5.000000E-02	31	7.550000E+01	1.487000E+02
69	5.000000E-02	5.800000E-02	30	1.487000E+02	3.673000E+02
68	5.800000E-02	6.700000E-02	29	3.673000E+02	9.069000E+02
67	6.700000E-02	8.000000E-02	28	9.069000E+02	1.425000E+03
66	8.000000E-02	1.000000E-01	27	1.425000E+03	2.239000E+03
65	1.000000E-01	1.400000E-01	26	2.239000E+03	3.519000E+03
64	1.400000E-01	1.800000E-01	25	3.519000E+03	5.530000E+03
63	1.800000E-01	2.200000E-01	24	5.530000E+03	9.118000E+03
62	2.200000E-01	2.500000E-01	23	9.118000E+03	1.503000E+04
61	2.500000E-01	2.800000E-01	22	1.503000E+04	2.478000E+04
60	2.800000E-01	3.000000E-01	21	2.478000E+04	4.085000E+04
59	3.000000E-01	3.200000E-01	20	4.085000E+04	6.734000E+04
58	3.200000E-01	3.500000E-01	19	6.734000E+04	1.110000E+05
57	3.500000E-01	4.000000E-01	18	1.110000E+05	1.830000E+05
56	4.000000E-01	5.000000E-01	17	1.830000E+05	3.025000E+05
55	5.000000E-01	6.250000E-01	16	3.025000E+05	5.000000E+05
54	6.250000E-01	7.800000E-01	15	5.000000E+05	8.210000E+05
53	7.800000E-01	8.500000E-01	14	8.210000E+05	1.353000E+06
52	8.500000E-01	9.100000E-01	13	1.353000E+06	2.231000E+06
51	9.100000E-01	9.500000E-01	12	2.231000E+06	3.679000E+06
50	9.500000E-01	9.720000E-01	11	3.679000E+06	6.066000E+06
49	9.720000E-01	9.960000E-01	10	6.066000E+06	1.000000E+07
48	9.960000E-01	1.020000E+00	9	1.000000E+07	1.380000E+07
47	1.020000E+00	1.045000E+00	8	1.380000E+07	1.500000E+07
46	1.045000E+00	1.071000E+00	7	1.500000E+07	2.000000E+07
45	1.071000E+00	1.097000E+00	6	2.000000E+07	2.710000E+07
44	1.097000E+00	1.123000E+00	5	2.710000E+07	3.680000E+07
43	1.123000E+00	1.150000E+00	4	3.680000E+07	5.000000E+07
42	1.150000E+00	1.300000E+00	3	5.000000E+07	7.000000E+07
41	1.300000E+00	1.500000E+00	2	7.000000E+07	1.000000E+08
40	1.500000E+00	2.100000E+00	1	1.000000E+08	1.500000E+08

Tabelle A.1 : Die Gruppengrenzen (in eV) der 78-Gruppenstruktur

## Anhang B

### Die Abweichungen der Gruppenkonstanten zwischen NJOY und HIENPROC

In Anhang B sind die Abweichungen der Gruppenkonstanten von NJOY und HIENPROC der ersten 9 Gruppen (150 – 10 MeV) für alle in dieser Arbeit berechneten Isotope mit Ausnahme von Sauerstoff-16, Eisen-56 und Plutonium-239 die in Kapitel 4.1 zu finden sind, aufgeführt. Die Abweichungen wurden für den totalen-, den elastischen- und für Spaltmaterialien auch für den Spaltquerschnitt berechnet.

#### **Blei-208 :**

##### totaler Wirkungsquerschnitt :

maximaler absoluter Fehler : 0.810108E-01 barn

durchschnittlicher absoluter Fehler : 0.208569E-02 barn

maximaler relativer Fehler : 0.162113E+01 %

durchschnittlicher relativer Fehler : 0.442126E-01 %

##### elastischer Wirkungsquerschnitt :

maximaler absoluter Fehler : 0.740960E-01 barn

durchschnittlicher absoluter Fehler : 0.192648E-02 barn

maximaler relativer Fehler : 0.289160E+01 %

durchschnittlicher relativer Fehler : 0.807636E-01 %

#### **Wismut-209 :**

##### totaler Wirkungsquerschnitt :

maximaler absoluter Fehler : 8.169079E-02 barn

durchschnittlicher absoluter Fehler : 2.121626E-03 barn

maximaler relativer Fehler : 1.617341E+00 %

durchschnittlicher relativer Fehler : 4.429507E-02 %

elastischer Wirkungsquerschnitt :

maximaler absoluter Fehler : 0.749242E-01 barn

durchschnittlicher absoluter Fehler : 0.186188E-02 barn

maximaler relativer Fehler : 0.290483E+01 %

durchschnittlicher relativer Fehler : 0.769663E-01 %

**Uran-235 :**

totaler Wirkungsquerschnitt :

maximaler absoluter Fehler : 0.740495E-01 barn

durchschnittlicher absoluter Fehler : 0.202150E-02 barn

maximaler relativer Fehler : 0.131699E+01 %

durchschnittlicher relativer Fehler : 0.387458E-01 %

elastischer Wirkungsquerschnitt :

maximaler absoluter Fehler : 0.607970E-01 barn

durchschnittlicher absoluter Fehler : 0.211017E-02 barn

maximaler relativer Fehler : 0.197062E+01 %

durchschnittlicher relativer Fehler : 0.776310E-01 %

Spaltquerschnitt :

maximaler absoluter Fehler : 0.164647E-01 barn

durchschnittlicher absoluter Fehler : 0.691234E-03 barn

maximaler relativer Fehler : 0.100071E+01 %

durchschnittlicher relativer Fehler : 0.379642E-01 %

**Neptunium-237 :**

totaler Wirkungsquerschnitt :

maximaler absoluter Fehler : 0.693526E-01 barn

durchschnittlicher absoluter Fehler : 0.195316E-02 barn

maximaler relativer Fehler : 0.124377E+01 %

durchschnittlicher relativer Fehler : 0.377003E-01 %

### **Neptunium-237 :**

#### elastischer Wirkungsquerschnitt :

maximaler absoluter Fehler : 0.553620E-01 barn  
durchschnittlicher absoluter Fehler : 0.197505E-02 barn  
maximaler relativer Fehler : 0.183033E+01 %  
durchschnittlicher relativer Fehler : 0.712833E-01 %

#### Spaltquerschnitt :

maximaler absoluter Fehler : 0.158045E-01 barn  
durchschnittlicher absoluter Fehler : 0.674364E-03 barn  
maximaler relativer Fehler : 0.887339E+00 %  
durchschnittlicher relativer Fehler : 0.360492E-01 %

### **Uran-238 :**

#### totaler Wirkungsquerschnitt :

maximaler absoluter Fehler : 0.750475E-01 barn  
durchschnittlicher absoluter Fehler : 0.205908E-02 barn  
maximaler relativer Fehler : 0.132280E+01 %  
durchschnittlicher relativer Fehler : 0.391944E-01 %

#### elastischer Wirkungsquerschnitt :

maximaler absoluter Fehler : 0.640986E-01 barn  
durchschnittlicher absoluter Fehler : 0.236586E-02 barn  
maximaler relativer Fehler : 0.226623E+01 %  
durchschnittlicher relativer Fehler : 0.942046E-01 %

#### Spaltquerschnitt :

maximaler absoluter Fehler : 0.119600E-01 barn  
durchschnittlicher absoluter Fehler : 0.408506E-03 barn  
maximaler relativer Fehler : 0.840208E+00 %  
durchschnittlicher relativer Fehler : 0.273058E-01 %

**Americium-241 :**

totaler Wirkungsquerschnitt :

maximaler absoluter Fehler : 0.695448E-01 barn  
durchschnittlicher absoluter Fehler : 0.198806E-02 barn  
maximaler relativer Fehler : 0.123043E+01 %  
durchschnittlicher relativer Fehler : 0.379626E-01 %

elastischer Wirkungsquerschnitt :

maximaler absoluter Fehler : 0.621567E-01 barn  
durchschnittlicher absoluter Fehler : 0.190570E-02 barn  
maximaler relativer Fehler : 0.200950E+01 %  
durchschnittlicher relativer Fehler : 0.680411E-01 %

Spaltquerschnitt :

maximaler absoluter Fehler : 0.193059E-01 barn  
durchschnittlicher absoluter Fehler : 0.547377E-03 barn  
maximaler relativer Fehler : 0.925942E+00 %  
durchschnittlicher relativer Fehler : 0.273070E-01 %

## Anhang C

### Die MT Nummern des ENDF-6 Formates

Quelle: ENDF-102, Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File

ENDF- 6, April 2001, [3]

		Description	Comments
1	(n,total)	Neutron total cross sections. Sum of MT=2, 4, 5, 11, 16-18, 22-26, 28-37, 41-42, , 44-45, 102-117.	Redundant. Undefined for incident charged particles.
2	(z,z <sub>0</sub> )	Elastic scattering cross section for incident particles.	
3	(z,nonelastic)	Nonelastic neutron cross section. Sum of MT=4, 5, 11, 16-18, 22-26, 28-37, 41-42, , 44-45, 102-117.	Redundant. For photon production only.
4	(z,n)	Production of one neutron in the exit channel. Sum of the MT=50-91.	Redundant. For incident neutrons, this is inelastic scattering (MT=50 is undefined).
5	(z,anything)	Sum of all reactions not given explicitly in another MT number. This is a partial reaction to be added to obtain MT=1.	Each particle can be identified and its multiplicity given in File 6. Not allowed in Files 4, 5.
6-9		Not allowed in version 6.	<sup>9</sup> Be(n,2n) in version 5.
10	(z,continuum)	Total continuum reaction; includes all continuum reactions and excludes all discrete reactions.	Redundant; to be used for derived files only.
11	(z,2nd)	Production of two neutrons and a deuteron, plus a residual.	
12-15		Unassigned.	
16	(z,2n)	Production of two neutrons and a residual <sup>1</sup> . Sum of MT=875-891, if they are present.	
17	(z,3n)		
18	(z,fission)		
19	(n,f)		
20	(n,nf)	Second-chance fission <sup>2</sup> .	
21	(n,2nf)	Third-chance fission <sup>2</sup> .	
22	(z,nα)	Production of a neutron and an alpha particle, plus a residual.	
23	(n,n3α)	Production of a neutron and three alpha particles, plus a residual.	
24	(z,2nα)	Production of two neutrons and an alpha particle, plus a residual.	

<sup>1</sup> The "residual" is the remainder after the reaction specified by MT has taken place (for example, A-1 after an n,2n reaction on target A). This "residual" may break up further if LR>0.

<sup>2</sup> Note that the partial fission cross section are not defined for incident charged particles.

Tabelle C.1 : MT 1-24 des ENDF-Formates [3]

		Description	Comments
25	(z,3n $\alpha$ )	Production of three neutrons and an alpha particle, plus a residual.	
26		Not allowed in version 6.	Version 5: (n,2n) isomeric state; used in file 8 and 6, 9, or 10.
27	(n,abs)	Absorption; sum of MT=18 and MT=102 through MT=117	Rarely used.
28	(z,np)	Production of a neutron and a proton, plus a residual.	
29	(z,n2 $\alpha$ )	Production of a neutron and two alpha particles, plus a residual.	
30	(z,2n2 $\alpha$ )	Production of two neutrons and two alpha particles, plus a residual.	
31		Not allowed for version 6.	Used only as an LR flag.
32	(z,nd)	Production of a neutron and a deuteron, plus a residual.	
33	(z,nt)	Production of a neutron and a triton, plus a residual.	
34	(z,n <sup>3</sup> He)	Production of a neutron and a <sup>3</sup> He particle, plus a residual.	
35	(z,nd2 $\alpha$ )	Production of a neutron, a deuteron, and 2 alpha particles, plus a residual.	
36	(z,nt2 $\alpha$ )	Production of a neutron, a triton, and 2 alpha particles, plus a residual.	
37	(z,4n)	Production of 4 neutrons, plus a residual.	
38	(n,3nf)	Fourth-chance fission cross section <sup>2</sup> .	
39		Not allowed for version 6.	Used only as an LR flag.
40		Not allowed for version 6.	Used only as an LR flag.
41	(z,2np)	Production of 2 neutrons and a proton, plus a residual.	
42	(z,3np)	Production of 3 neutrons and a proton, plus a residual.	
43		(Unassigned)	
44	(z,n2p)	Production of a neutron and 2 protons, plus a residual.	
45	(z,np $\alpha$ )	Production of a neutron, a proton, and an alpha particle, plus a residual.	
46-49		Not allowed in Version 6.	Version 5: description of 2 <sup>nd</sup> neutron from <sup>9</sup> Be(n,2n) reactions to excited states.

Tabelle C.2 : MT 25-49 des ENDF-Formats [3]

		Description	Comments
50	(y,n <sub>0</sub> )	Production of a neutron, leaving the residual nucleus in the ground state.	Not allowed for incident neutrons; use MT=2.
51	(z,n <sub>1</sub> )	Production of a neutron, with residual in the 1st excited state.	
52	(z,n <sub>2</sub> )	Production of a neutron, with residual in the 2nd excited state.	
	...		
	...		
90	(z,n <sub>40</sub> )	Production of a neutron, with residual in the 40th excited state.	
91	(z,n <sub>c</sub> )	Production of a neutron in the continuum not included in the above discrete representation.	
92-100		(Unassigned)	
101	(n,disap)	Neutron disappearance; equal to sum of MT=102-117.	Rarely used.
102	(z,γ)	Radiative capture.	
103	(z,p)	Production of a proton, plus a residual. Sum of MT=600-649, if they are present.	For incident protons, this is inelastic scattering (MT=600 is undefined).
104	(z,d)	Production of a deuteron, plus a residual. Sum of MT=650-699, if they are present.	For incident deuterons, this is inelastic scattering (MT=650 is undefined).
105	(z,t)	Production of a triton, plus a residual. Sum of MT=700-749, if they are present.	For incident tritons, this is inelastic scattering (MT=700 is undefined).
106	(z, <sup>3</sup> He)	Production of a <sup>3</sup> He particle plus a residual. Sum of MT=750-799, if they are present.	For incident <sup>3</sup> He particles, this is inelastic scattering (MT=750 is undefined).
107	(z,α)	Production of an alpha particle, plus a residual. Sum of MT=800-849, if they are present.	For incident alpha particles, this is inelastic scattering (MT=800 is undefined).
108	(z,2α)	Production of 2 alpha particles, plus a residual.	
109	(z,3α)	Production of 3 alpha particles, plus a residual.	
110		(Unassigned)	
111	(z,2p)	Production of 2 protons, plus a residual.	
112	(z,pα)	Production a proton and an alpha particle, plus a residual.	

Tabelle C.3 : MT 50-112 des ENDF-Formats [3]

		<b>Description</b>	<b>Comments</b>
113	(z,t2 $\alpha$ )	Production of a triton and 2 alpha particles, plus a residual.	
114	(z,d2 $\alpha$ )	Production of a deuteron and 2 alpha particles, plus a residual.	
115	(z,pd)	Production of proton and a deuteron, plus a residual.	
116	(z,pt)	Production of proton and a triton, plus a residual.	
117	(z,d $\alpha$ )	Production of deuteron and an alpha particle, plus a residual.	
118-119		(Unassigned)	
120		Not allowed for version 6.	Version 5: target destruction - nonelastic minus total (n,n' $\gamma$ )
121-150		(Unassigned)	
151	(n,RES)	Resonance parameters that can be used to calculate cross sections at different temperatures in the resolved and unresolved energy regions.	Incident neutrons only.
152-200		(Unassigned)	
201	(z,Xn)	Total neutron production.	Redundant; use in derived files only.
202	(z,X $\gamma$ )	Total gamma production.	Redundant; use in derived files only.
203	(z,Xp)	Total proton production.	Redundant; use in derived files only.
204	(z,Xd)	Total deuteron production.	Redundant; use in derived files only.
205	(z,Xt)	Total triton production.	Redundant; use in derived files only.
206	(z,X $^3\text{He}$ )	Total $^3\text{He}$ production.	Redundant; use in derived files only.
207	(z,X $\alpha$ )	Total alpha particle production.	Redundant; use in derived files only.
208	(z,X $\pi^+$ )	Total $\pi^+$ production.	For use in high-energy evaluations.
209	(z,X $\pi^0$ )	Total $\pi^0$ production.	For use in high-energy evaluations.
210	(z,X $\pi^-$ )	Total $\pi^-$ production.	For use in high-energy evaluations.
211	(z,X $\mu^+$ )	Total $\mu^+$ production.	For use in high-energy evaluations.

**Tabelle C.4 : MT 113-211 des ENDF-Formats [3]**

		Description	Comments
212	(z,X $\mu^-$ )	Total $\mu^-$ production.	For use in high-energy evaluations.
213	(z,X $\kappa^+$ )	Total $\kappa^+$ production.	For use in high-energy evaluations.
214	(z,X $\kappa^0_{(long)}$ )	Total $\kappa^0_{(long)}$ production.	For use in high-energy evaluations.
215	(z,X $\kappa^0_{(short)}$ )	Total $\kappa^0_{(short)}$ production.	For use in high-energy evaluations.
216	(z,X $\kappa^-$ )	Total $\kappa^-$ production.	For use in high-energy evaluations.
217	(z,Xp)	Total anti-proton production.	For use in high-energy evaluations.
218	(z,Xn)	Total anti-neutron production.	For use in high-energy evaluations.
219-250		(Unassigned)	
251	(n,...)	$\overline{\mu}_L$ , average cosine of the scattering angle (laboratory system) for elastic scattering of neutrons.	Derived files only.
252	(n,...)	$\xi$ , average logarithmic energy decrement for elastic scattering of neutrons.	Derived files only.
253	(n,...)	$\gamma$ , average of the square of the logarithmic energy decrement divided by twice the average logarithmic energy decrement, for elastic scattering of neutrons.	Derived files only.
254-300		(Unassigned)	
301-450	(z,...)	Energy release parameters, $\overline{E}$ , $\overline{\sigma}$ , for total and partial cross sections; MT=300 plus the reaction MT number, e.g., MT=302 is the elastic scattering kerma.	Derived files only.
451	(z,...)	Heading or title information; given in File 1 only.	
452	(z,...)	$\overline{\nu}_T$ , average total (prompt plus delayed) number of neutrons released per fission event.	
453		(Unassigned)	
454	(z,...)	Independent fission product yield data.	

Tabelle C.5 : MT 212-454 des ENDF-Formats [3]

		Description	Comments
455	(z,...)	$\bar{\nu}_d$ , average number of delayed neutrons released per fission event.	
456	(z,...)	$\bar{\nu}_p$ , average number of prompt neutrons released per fission event.	
457	(z,...)	Radioactive decay data.	
458	(n,...)	Energy release in fission for incident neutrons.	
459	(z,...)	Cumulative fission product yield data.	
460-464		(Unassigned)	
465-466		Not allowed in version 6.	Version 5: delayed and prompt neutrons from spontaneous fission.
467-499		(Unassigned)	
500		Total charged-particle stopping power.	
501		Total photon interaction.	
502		Photon coherent scattering.	
503		(Unassigned)	
504		Photon incoherent scattering.	
505		Imaginary scattering factor.	
506		Real scattering factor.	
507-514		(Unassigned)	
515		Pair production, electron field.	
516		Pair production; sum of MT=515, 517.	Redundant.
517		Pair production, nuclear field.	
518		Not allowed in version 6.	
519-521		(Unassigned)	
522		Photoelectric absorption.	Version 5: MT=602.
523		Photo-excitation cross section.	
524-525		(Unassigned)	
526		Electro-atomic scattering.	
527		Electro-atomic bremsstrahlung.	
528		Electro-atomic excitation cross section.	
529-531		(Unassigned)	
532		Not allowed in version 6.	Version 5: ( $\gamma$ ,n).
533		Atomic relaxation data.	Version 5: total photonuclear
534	K	(1s <sup>1/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	

Tabelle C.6 : MT 455-534 des ENDF-Formats [3]

		Description	Comments
535	L1	(2s <sup>1/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
536	L2	(2p <sup>1/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
537	L3	(2p <sup>3/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
538	M1	(3s <sup>1/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
539	M2	(3p <sup>1/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
540	M3	(3p <sup>3/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
541	M4	(3d <sup>3/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
542	M5	(3d <sup>5/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
543	N1	(4s <sup>1/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
544	N2	(4p <sup>1/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
545	N3	(4p <sup>3/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
546	N4	(4d <sup>3/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
547	N5	(4d <sup>5/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
548	N6	(4f <sup>5/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
549	N7	(4f <sup>7/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
550	O1	(5s <sup>1/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
551	O2	(5p <sup>1/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
552	O3	(5p <sup>3/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
553	O4	(5d <sup>3/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
554	O5	(5d <sup>5/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	

Tabelle C.7 : MT 535-554 des ENDF-Formats [3]

		Description	Comments
555	O6	(5f <sup>5/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
556	O7	(5f <sup>7/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
557	O8	(5g <sup>7/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
558	O9	(5g <sup>9/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
559	P1	(6s <sup>1/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
560	P2	(6p <sup>1/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
561	P3	(6p <sup>3/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
562	P4	(6d <sup>3/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
563	P5	(6d <sup>5/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
564	P6	(6f <sup>5/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
565	P7	(6f <sup>7/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
566	P8	(6g <sup>7/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
567	P9	(6g <sup>9/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
568	P10	(6h <sup>9/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
569	P11	(6h <sup>11/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
570	Q1	(7s <sup>1/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
571	Q2	(7p <sup>1/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
572	Q3	(7p <sup>3/2</sup> ) subshell photoelectric or electro-atomic cross section.	
573-599		(Unassigned)	
600	(z,p <sub>0</sub> )	Production of a proton leaving the residual nucleus in the ground state.	Not allowed for incident protons; use MT=2.
601	(z,p <sub>1</sub> )	Production of a proton, with residual in the 1st excited state.	

Tabelle C.8 : MT 555-601 des ENDF-Formats [3]

		Description	Comments
602	(z,p <sub>2</sub> )	Production of a proton, with residual in the 2nd excited state.	Version 5: photoelectric absorption; see MT=522.
603	(z,p <sub>3</sub> )	Production of a proton, with residual in the 3rd excited state.	
604	(z,p <sub>4</sub> )	Production of a proton, with residual in the 4th excited state.	
	...		
	...		
649	(z,p <sub>c</sub> )	Production of a proton in the continuum not included in the above discrete representation.	
650	(z,d <sub>0</sub> )	Production of a deuteron leaving the residual nucleus in the ground state.	
651	(z,d <sub>1</sub> )	Production of a deuteron, with the residual in the 1st excited state.	
652	(z,d <sub>2</sub> )	Production of a deuteron, with the residual in the 2nd excited state.	
	...		
	...		
699	(z,d <sub>c</sub> )	Production of a deuteron in the continuum not included in the above discrete representation.	
700	(z,t <sub>0</sub> )	Production of a triton leaving the residual nucleus in the ground state.	
701	(z,t <sub>1</sub> )	Production of a triton, with residual in the 1st excited state.	
702	(z,t <sub>2</sub> )	Production of a triton, with residual in the 2nd excited state.	
	...		
	...		
749	(z,t <sub>c</sub> )	Production of a triton in the continuum not included in the above discrete representation.	
750	(n, <sup>3</sup> He <sub>0</sub> )	Production of a <sup>3</sup> He particle leaving the residual nucleus in the ground state.	
751	(n, <sup>3</sup> He <sub>1</sub> )	Production of a <sup>3</sup> He, with residual in the 1st excited state.	
	...		
	...		

**Tabelle C.9 : MT 602-751 des ENDF-Formats [3]**

		Description	Comments
799	$(n, {}^3\text{He}_c)$	Production of a ${}^3\text{He}$ in the continuum not included in the above discrete representation.	
800	$(z, \alpha_0)$	Production of an alpha particle leaving the residual nucleus in the ground state.	
801	$(z, \alpha_1)$	Production of an alpha particle, with residual in the 1st excited state.	
	...		
	...		
849	$(z, \alpha_c)$	Production of an alpha particle in the continuum not included in the above discrete representation.	
850		(Unassigned)	
851-870		Lumped reaction covariances.	
871-874		(Unassigned)	
875	$(z, 2n_0)$	Production of 2 neutrons with residual in the ground state.	
876	$(z, 2n_1)$	Production of 2 neutrons with residual in the 1st excited state.	
	...		
891	$(z, 2n_c)$	Production of 2 neutrons in the continuum not included in the above discrete representation.	
892-999		(Unassigned)	

**Tabelle C.10 : MT 799-999 des ENDF-Formats [3]**

## Anhang D

### Das Fortran-Programm STFILE und die zugehörige Eingabedatei *f78v01.d*

Das Programm STFILE wird verwendet um mit der Eingabedatei *f78v01.d* das Steuerfile F78v01 zu erzeugen.

#### STFILE :

```
C-AUFNSTFL          AUFNSTFL
C
C      AUFNEHMEN STEUERFILE
C
C MODIFICATION 07/2003 (DIMENSION CHECKS)
      PARAMETER (NMAX=150 ,NAMMAX=10 ,NAMAX=400 ,NBMAX=800)
      INTEGER
SV(NMAX) ,ADR(NMAX) ,GR(NMAX) ,NN(NMAX) ,KZFM(NMAX) ,A(NMAX,5) ,
1  ADRF(NMAX) ,NFRM(NMAX) ,B(NBMAX)
      REAL*8  NAMEN(NAMMAX) ,NA(NAMAX) ,END ,NH(NMAX)
      EQUIVALENCE
(A(1,1) ,ADRF(1) ,SV(1)) , (A(1,2) ,NFRM(1) ,ADR(1)) ,
1  (A(1,3) ,GR(1)) , (A(1,4) ,NN(1)) , (A(1,5) ,KZFM(1))
      character*40 dsni ,dsno ,dsns
      data END/'ENDE      '/
C
C      EINGABE FORMATGEBUNDEN
C
C      I=1
C
C      FUER JEDEN QUERSCHNITTSTYP
C
C      SP  1      NAME DES QUERSCHNITTSTYPS
C          6      1 NUR FUER DIFF.RECHN.  2 NUR FUER P1-RECHN.
C              3  NUR FUER SN-RECHN.
C          7      1 NUR NICHT H2SONDER  2 NUR H2SONDER
C              3  NUR FUER REMO-KORREKTUR
C          8      1 STANDARDTYP
C          9      0 SKALARTYP  1 VEKTORTYP
C         10      1 NICHT FUER H2  2 NUR FUER H2
C              3  NUR FUER MAT. MIT REMO-KORREKTUR
C         11-12  FORMELGRUPPENNUMMER
C         13      ANZAHL TYPEN VON GRUBA
C         14      ANZAHL BEREITS BERECHNETE TYPEN
C         18      FORMELNUMMER FUER BERECHNUNG MISCHUNGSABH. WQ
C              1  MATERIALUNABHAENGIG
C              2  SUM(ISOTOPE)<SKALARTYPEN>
C              3  SUM(ISOTOPE)<VEKTORTYPEN>
C              4  SUM(ISOTOPE)<DIFFUSIONSKONSTANTE>
C              5  NICHT DEFINIERT FUER MISCHUNG
C              6  MAT.ABH. UNABH. CHI
C         19-23  NAMEN GRUBATYPEN
C         24-28
```

```

C          29-33  NAMEN BEREITS BERECHNETER TYPEN
C          ..-..
C
C          I=1
C
C          SP  1      ENDE
C
C          SP  1      QUERSCHNITT FUER WICHTUNG
C
C          SP  1      QUERSCHNITT FUER WICHTUNG REMO
C
C          FUER JEDE FORMELGRUPPE
C
C          SP  1      ANZAHL FORMELN
C
C          FUER JEDE FORMEL
C
C          SP  1- 2    FORMELNUMMER
C                      LISTE AUS GRUCAL 'GRUDRSTF' MIT STEUERFILE
FORMELN
C          3          1 NICHT FUER H2  2 NUR FUER H2
C                      3 NUR FUER MAT. MIT REMO-KORREKTUR
C          4          ANZAHL BENOETIGTER TYPEN
C          5-14      RECHTSBUENDIG
C                      NUMMERN DER NAMEN DER BENOETIGTEN TYPEN
C          15-24     RECHTSBUENDIG
C                      BEDINGUNG DES JEWEILS BENOETIGTEN TYPIS
C                      0  N.GE.1
C                      1  N.EQ.1
C                      2  N.GT.1
C                      3  K.EQ.0.OR.K.EQ.3
C                      4  K.EQ.1.OR.K.EQ.4
C                      5  N.GE.0
C
C          I=1
C
C          SP  1      0
C
C          SP  1      NAME STEUERFILE
C          SP  9      DATUM AUFNAHME STEUERFILE
C          SP 17      TEXT
C
C          NOUT=6
C          WRITE (6, '(' INPUT DATA SET ? ')')
C          READ (5, '(A)') DSNI
C          WRITE (6, '(' PRINT DATA SET ? ')')
C          READ (5, '(A)') DSNO
C          WRITE (6, '(' STEUERFILE DATA SET ? ')')
C          READ (5, '(A)') DSNS
C          CLOSE (UNIT=5)
C          OPEN (UNIT=5, ACCESS='SEQUENTIAL', FILE=DSNI, STATUS='OLD')
C          OPEN (UNIT=1, ACCESS='SEQUENTIAL', FILE=DSNS,
* FORM='UNFORMATTED')
C          IF (DSNO(1:1).NE.'*') THEN
C              CLOSE (UNIT=6)
C              OPEN
C          (UNIT=6, FILE=DSNO, FORM='FORMATTED', ACCESS='SEQUENTIAL')
C          ENDIF

```

```

WRITE (6,6)
WRITE (6,20)
20 FORMAT ('1QUERSCHNITTSTYPEN' /
*' OS      00000 0000 111 11      1 12222 22222 23333' /
*' P      12345 6789 012 34      8 90123 45678 90123' /
*' ')
REWIND 1
M=0
IN=2
101 M=M+1
IF(M.GT.NMAX)STOP 1
READ (5,1)      NH(M),SV(M),GR(M),NN(M),KZFM(M),NAMEN
1 FORMAT (A5,I4,I3,I2,I4,10A5)
IF(NH(M).EQ.END) GO TO 110
WRITE (6,2) M, NH(M),SV(M),GR(M),NN(M),KZFM(M),NAMEN
2 FORMAT (1H ,I2,5X,A5,I5,I4,I3,I5,1H ,10A6)
ADR(M)=IN
N=NN(M)/10
N=NN(M)-9*N
IF (N.EQ.0) GO TO 101
DO 102 K=1,N
IN=IN+1
IF(IN.GT.NAMAX)STOP 2
102 NA(IN)=NAMEN(K)
GO TO 101
110 READ (5,1) NA(1)
WRITE (6,11) NA(1)
11 FORMAT (' WICHT: ',A8)
READ(5,1) NA(2)
WRITE (6,12) NA(2)
12 FORMAT (' WREM: ',A8)
M=M-1
DO 111K=1,M
111 ADR(K)=ADR(K)+M
NDAT=5*M+1
WRITE (1) NDAT,M,((A(I,K),K=1,5),I=1,M)
WRITE (6,21)
21 FORMAT(1H1)
WRITE (6,6) NDAT,M
6 FORMAT (1H ,2I3)
WRITE (6,3) ((A(I,K),K=1,5),I=1,M)
3 FORMAT (1H ,5(I5,I4,I4,I3,I5,4X))
NDAT=IN+M
NDAT1=2*NDAT+1
WRITE (1) NDAT1,NDAT,(NH(I),I=1,M),(NA(I),I=1,IN)
WRITE (6,6)
WRITE (6,6) NDAT
WRITE (6,4) (NH(I),I=1,M)
WRITE (6,4) (NA(I),I=1,IN)
4 FORMAT (1H ,20A6)
WRITE (6,22)
22 FORMAT ('1FORMELGRUPPEN' /
*' OS      000 000000111111111122222' /
*' P      N      123 456789012345678901234' /
*' ')
M=0
IN=0
121 M=M+1
IF(M.GT.NMAX)STOP 3

```

```

    READ(5,5) NFRM(M)
5  FORMAT (I1)
    IF (NFRM(M).EQ.0) GO TO 130
    WRITE (6,6) M,NFRM(M)
    ADRF(M)=IN
    N=NFRM(M)
    DO 122 I=1,N
    IF(IN+K.GT.NBMAX)STOP 4
    READ (5,7) (B(IN+K),K=1,4)
7  FORMAT (I3,I1,I10,I10)
    WRITE (6,8) (B(IN+K),K=1,4)
8  FORMAT (11X,I4,I2,I10,I10)
122 IN=IN+4
    GO TO 121
130 M=M-1
    N=2*M+1
    IF(M.GT.NMAX)STOP 5
    DO 131 I=1,M
131 ADRF(I)=ADRF(I)+N
    NDAT=N+IN
    WRITE (1) NDAT,M,((A(I,K),K=1,2),I=1,M),(B(I),I=1,IN)
    WRITE (6,21)
    WRITE (6,6) NDAT,M
    WRITE (6,9) ((A(I,K),K=1,2),I=1,M)
9  FORMAT (1H,15(I4,I2,2X))
    WRITE (6,10) (B(I),I=1,IN)
10 FORMAT (1H,4(2I4,2I10,2X))
    READ(5,13) (NA(I),I=1,10)
13 FORMAT(10A8)
    M=20
    WRITE(1) M,(NA(I),I=1,10)
    WRITE (6,14) (NA(I),I=1,10)
14 FORMAT ('0STEUERFILE ',A8/' VOM ',A8/'0',8A8)
    STOP
    END

```

Mit der Eingabedatei *f78v01.d* erzeugt das Fortran-Programm STFILE das Steuerfile F78V01. Die Änderungen in *f78v01.d* im Vergleich zur Vorgängereingabedatei *f69ud06.d* sind **fett** hervorgehoben. Die Bedeutungen der Eingabegrößen sind in der Datei STFILE dokumentiert.

*f78v01.d* :

FCAPT	0	110	5FCAPT
FDPAG	0	110	5FDPAG
FFISS	0	110	5FFISS
FELSC	0	110	5FELSC
FTOT1	0	110	5FTOT1
FELS1	0	110	5FELS1
FEL01	0	110	5FEL01
SCAPT	10	211	2SCAPTFCAPT

SDPAG	0	211	2SDPAGFDPAG
SFISS	10	211	2SFISSFFISS
SE	10	211	2SELSCFELSC
SE1		211	2SELSCFELS1
SE01		211	2SELSCFEL01
SN2N	10	310	2SN2N
<b>SN2NL</b>	<b>0</b>	<b>410</b>	<b>2SN2N</b>
SN2NI	10	310	2SN2NI
SN3N	10	310	2SN3N
<b>SN3NL</b>	<b>0</b>	<b>410</b>	<b>2SN3N</b>
SN4N	10	310	2SN4N
<b>SN4NL</b>	<b>0</b>	<b>410</b>	<b>2SN4N</b>
SGP	10	310	2SGP
<b>SGX</b>	<b>10</b>	<b>310</b>	<b>2SGX</b>
SGALP	10	310	2SGALP
SDAMT	0	310	2SDAMT
SDAME	0	310	2SDAME
SDAMI	0	310	2SDAMI
SDAMD	0	310	2SDAMD
KERMT	0	310	2KERMT
KERMK	0	310	2KERMK
XSONE	0	310	2XSONE
<b>MULT2</b>	<b>0</b>	<b>410</b>	<b>2MULT2</b>
<b>MULT3</b>	<b>0</b>	<b>410</b>	<b>2MULT3</b>
<b>MULT4</b>	<b>0</b>	<b>410</b>	<b>2MULT4</b>
DLAM1	0	410	2DLAM1
DLAM2	0	410	2DLAM2
DLAM3	0	410	2DLAM3
DLAM4	0	410	2DLAM4
DLAM5	0	410	2DLAM5
DLAM6	0	410	2DLAM6
EHIGH	0	410	2EHIGH
SGG	10	310	2SGG
SGGI	10	310	2SGGI
SI	0	310	2SINSC
STOT	10	11 5	2SI SN2N SE SCAPTSFISS
STOTU		1150	5SCAPTSFISSELSCSINSCSN2N
STOT1	0	2 2	2STOTUFTOT1
STOTH		22 4	2SCAPTSFISSSI SN2N
SEH		12 2	2STOT1STOTH
NU	0	410	1NUE
NUD1	0	410	1NUED1
NUD2	0	410	1NUED2
NUD3	0	410	1NUED3
NUD4	0	410	1NUED4
NUD5	0	410	1NUED5
NUD6	0	410	1NUED6
NUDS5	0	11 5	1NUD1 NUD2 NUD3 NUD4 NUD5
NUD	0	16 2	1NUD6 NUDS5
NUP	0	12 2	1NU NUD
SEM1	0	2312	2MUEL SE1 SEH
SEM01	0	511	2MUEL SE01
SIMI	0	511	2MUIL SI
SH1		16 2	2SEM1 SIMI
SH01		16 2	2SEM01SIMI
NUSF	10	5 2	2NU SFISS
NUSFP	0	5 2	2NUP SFISS
NU1SF	0	5 2	2NUD1 SFISS
NU2SF	0	5 2	2NUD2 SFISS
NU3SF	0	5 2	2NUD3 SFISS
NU4SF	0	5 2	2NUD4 SFISS
NU5SF	0	5 2	2NUD5 SFISS
NU6SF	0	5 2	2NUD6 SFISS

<b>SN2NM</b>	<b>0</b>	<b>5</b>	<b>2</b>	<b>2MULT2SN2NL</b>
<b>SN3NM</b>	<b>0</b>	<b>5</b>	<b>2</b>	<b>2MULT3SN3NL</b>
<b>SN4NM</b>	<b>0</b>	<b>5</b>	<b>2</b>	<b>2MULT4SN4NL</b>
NUDF5	0	11	5	2NU1SFNU2SFNU3SFNU4SFNU5SF
NUSFD	0	16	2	2NU6SFNUDF5
SMI	1	620		3SINSCP0IIK
P0NIL	1	2610		3P0NIK
P03IL	1	2610		3P03IK
P04IL	1	2610		3P04IK
SMN	1	620		3SN2N P0NIK
SMN2N	1	6	2	3SN2NMP0NIL
SMN3N	1	6	2	3SN3NMP03IL
SMN4N	1	6	2	3SN4NMP04IL
P0ET	1	2510		1P0EIK
P1ET	1	2510		1P1EIK
P2ET	1	2510		1P2EIK
P3ET	1	2510		1P3EIK
P4ET	1	2510		1P4EIK
<b>SME</b>	<b>1</b>	<b>813</b>		<b>3SELSCP0ET FELSC</b>
SMTOT	11	9	3	3SMI SME SMN2N
SBE	0	10	1	2SME
SBI	0	10	1	2SMI
SBN2N	0	10	1	2SMN
SDN2N	0	12	2	2SN2N SBN2N
SREMG	0	11	5	2SCAPTSFISSSBE SBI SBN2N
SREM	10	12	2	2SREMGSDN2N
STR	10	12	2	2STOT1SH1
STRTR	0	12	2	2STOT SH01
DIFKO	10	13	1	4STR
SME1	01	1913		3SELSCP1ET FELS1
SMI1	1	620		3SINSCP1IIK
SMT1	1	2002		3SME1 SMI1
SME01	1	1913		3SELSCP1ET FEL01
SMI01	1	2101		3SMI1
SMT01	11	2002		3SME01SMI01
SMT02	1	1913		3SELSCP2ET FELSC
SMT03	1	1913		3SELSCP3ET FELSC
SMT04	1	1913		3SELSCP4ET FELSC
SMT05	1	1913		3SELSCP5ET FELSC
CHI	10	1410		6CHI
CHID1	0	1410		6CHID1
CHID2	0	1410		6CHID2
CHID3	0	1410		6CHID3
CHID4	0	1410		6CHID4
CHID5	0	1410		6CHID5
CHID6	0	1410		6CHID6
1/V	10	1510		11/V
DE	1	17		1
ENDE				
STOTW				
STROW				
1				
0101		1		0
1				
0302		12		11
1				
0201		1		1
1				
2201		1		1
1				
1902		12		11
1				
1002		12		10

1		
2901	1	0
2		
4234	1234	1011
1303	123	101
1		
2403	123	555
1		
5301	1	0
1		
2005	12345	55555
1		
2102	12	15
1		
2301	1	1
1		
3501	1	5
1		
3401	1	5
1		
2002	12	55
1		
3100		
1		
4102	12	22
1		
1303	123	101
1		
2402	12	55
1		
2501	1	0
1		
2004	1234	5555
2		
1902	12	11
1902	13	11
1		
4501	1	0
1		
5201	1	0
1		
2501	1	0
0		

F78V01 05.08.04 78-GRP. BASIS F69UD06 WITH EXTENSIONS FOR E GT 20MEV

## Anhang E

### Berechnungsvorschriften für Querschnittstypen mit GRUCAL im Steuerfile F78V01

TZ TEILCHENZAHL DES MATERIALS IN DER MISCHUNG

SUM(K)<...> SUMME UEBER K VON ...

E MITTLERE ENERGIE DER GRUPPE

DE(L) ENERGIEINTERVALL DER STUETZPUNKTE

U LETHARGIE DER MITTLEREN ENERGIE DER GRUPPE

DU DIFFERENZ DER LETHARGIEN DER GRUPPENGRENZEN

STW(L) SIGMA TOTAL ZUR WICHTUNG MIT STOTW

L STUETZPUNKTINDEX

G BETRACHTETE GRUPPE G

H EINSTREUGRUPPE H

(G-H) STREUWERT AUS GRUPPE G NACH GRUPPE H

N ANZAHL DATEN

K VERARBEITUNGSKENNZIFFER

MAT.H2 FALLS ALS MATERIAL WASSERSTOFF VORLIEGT

DIFF-RECH. NACHFOLGENDE DIFFUSIONSRECHNUNG

P1-RECH. NACHFOLGENDE P1-RECHNUNG

SN-RECH. NACHFOLGENDE SN-RECHNUNG

H2SONDER WASSERSTOFFSONDERBEHANDLUNG

FCAPT SKALAR FORMEL 1  
BERECHNUNG F-FAKTOR MIT FCAPT  
FCAPT VON GRUBA MIT N.GE.1

FDPAG SKALAR FORMEL 1  
BERECHNUNG F-FAKTOR MIT FDPAG  
FDPAG VON GRUBA MIT N.GE.1

FFISS SKALAR FORMEL 1  
BERECHNUNG F-FAKTOR MIT FFISS  
FFISS VON GRUBA MIT N.GE.1

FELSC SKALAR FORMEL 1  
BERECHNUNG F-FAKTOR MIT FELSC  
FELSC VON GRUBA MIT N.GE.1

FTOT1	SKALAR	FORMEL 1
	BERECHNUNG F-FAKTOR MIT FTOT1	
	FTOT1 VON GRUBA MIT N.GE.1	
FELS1	SKALAR	FORMEL 1
	BERECHNUNG F-FAKTOR MIT FELS1	
	FELS1 VON GRUBA MIT N.GE.1	
FEL01	SKALAR	FORMEL 1
	BERECHNUNG F-FAKTOR MIT FEL01	
	FEL01 VON GRUBA MIT N.GE.1	
SCAPT	SKALAR STANDARD	FORMEL 3
	TZ*SCAPT *FCAPT	
	SCAPT VON GRUBA MIT N.EQ.1	
	FCAPT AUS DATEN MIT N.EQ.1	
SDPAG	SKALAR	FORMEL 3
	TZ*SDPAG *FDPAG	
	SDPAG VON GRUBA MIT N.EQ.1	
	FDPAG AUS DATEN MIT N.EQ.1	
SFISS	SKALAR STANDARD	FORMEL 3
	TZ*SFISS *FFISS	
	SFISS VON GRUBA MIT N.EQ.1	
	FFISS AUS DATEN MIT N.EQ.1	
SE	SKALAR STANDARD	FORMEL 3
	TZ*SELSC *FELSC	
	SELSC VON GRUBA MIT N.EQ.1	
	FELSC AUS DATEN MIT N.EQ.1	
SE1	SKALAR	FORMEL 3
	TZ*SELSC *FELS1	
	SELSC VON GRUBA MIT N.EQ.1	
	FELS1 AUS DATEN MIT N.EQ.1	
SE01	SKALAR	FORMEL 3
	TZ*SELSC *FEL01	
	SELSC VON GRUBA MIT N.EQ.1	
	FEL01 AUS DATEN MIT N.EQ.1	
SN2N	SKALAR STANDARD	FORMEL 2
	TZ*SN2N	
	SN2N VON GRUBA MIT N.EQ.1	
SN2NL	SKALAR	FORMEL 22
	UEBERNEHMEN SN2N	
	SN2N VON GRUBA MIT N.EQ.1	

SN2NI	SKALAR STANDARD TZ*SN2NI SN2NI VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 2
SN3N	SKALAR STANDARD TZ*SN3N SN3N VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 2
SN3NL	SKALAR UEBERNEHMEN SN3N SN3N VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 22
SN4N	SKALAR STANDARD TZ*SN4N SN4N VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 2
SN4NL	SKALAR UEBERNEHMEN SN4N SN4N VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 22
SGP	SKALAR STANDARD TZ*SGP SGP VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 2
SGX	SKALAR STANDARD TZ*SGX SGX VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 2
SGALP	SKALAR STANDARD TZ*SGALP SGALP VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 2
SDAMT	SKALAR TZ*SDAMT SDAMT VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 2
SDAME	SKALAR TZ*SDAME SDAME VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 2
SDAMI	SKALAR TZ*SDAMI SDAMI VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 2
SDAMD	SKALAR TZ*SDAMD SDAMD VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 2
KERMT	SKALAR TZ*KERMT	FORMEL 2

KERMT VON GRUBA MIT N.EQ.1 KERMK SKALAR TZ*KERMK KERMK VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 2
XSONE SKALAR TZ*XSONE XSONE VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 2
MULT2 SKALAR UEBERNEHMEN MULT2 MULT2 VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 22
MULT3 SKALAR UEBERNEHMEN MULT3 MULT3 VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 22
MULT4 SKALAR UEBERNEHMEN MULT4 MULT4 VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 22
DLAM1 SKALAR UEBERNEHMEN DLAM1 DLAM1 VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 22
DLAM2 SKALAR UEBERNEHMEN DLAM2 DLAM2 VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 22
DLAM3 SKALAR UEBERNEHMEN DLAM3 DLAM3 VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 22
DLAM4 SKALAR UEBERNEHMEN DLAM4 DLAM4 VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 22
DLAM5 SKALAR UEBERNEHMEN DLAM5 DLAM5 VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 22
DLAM6 SKALAR UEBERNEHMEN DLAM6 DLAM6 VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 22
EHIGH SKALAR UEBERNEHMEN EHIGH EHIGH VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 22

<p>SGG SKALAR STANDARD  TZ*SGG  SGG VON GRUBA MIT N.EQ.1</p>	<p>FORMEL 2</p>
<p>SGGI SKALAR STANDARD  TZ*SGGI  SGGI VON GRUBA MIT N.EQ.1</p>	<p>FORMEL 2</p>
<p>SI SKALAR  TZ*SINSC  SINSC VON GRUBA MIT N.EQ.1</p>	<p>FORMEL 2</p>
<p>STOT SKALAR STANDARD  SI +SN2N +SE +SCAPT +SFISS  SI AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG  SN2N AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG  SE AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG  SCAPT AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG  SFISS AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG</p>	<p>FORMEL 20</p>
<p>STOTU SKALAR  SCAPT +SFISS +SELSC +SINSC +SN2N  SCAPT VON GRUBA MIT N,K BELIEBIG  SFISS VON GRUBA MIT N,K BELIEBIG  SELSC VON GRUBA MIT N,K BELIEBIG  SINSC VON GRUBA MIT N,K BELIEBIG  SN2N VON GRUBA MIT N,K BELIEBIG</p>	<p>FORMEL 20</p>
<p>STOT1 SKALAR  TZ*STOTU *FTOT1  STOTU AUS DATEN MIT N.EQ.1  FTOT1 AUS DATEN MIT N.EQ.1</p>	<p>FORMEL 3</p>
<p>STOTH SKALAR  SCAPT +SFISS +SI +SN2N  SCAPT AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG  SFISS AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG  SI AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG  SN2N AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG</p>	<p>FORMEL 20</p>
<p>SEH SKALAR  STOT1 -STOTH  STOT1 AUS DATEN MIT N.EQ.1  STOTH AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG</p>	<p>FORMEL 21</p>
<p>NU SKALAR  UEBERNEHMEN NUE  NUE VON GRUBA MIT N.EQ.1</p>	<p>FORMEL 22</p>

NUD1	SKALAR UEBERNEHMEN NUED1 NUED1 VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 22
NUD2	SKALAR UEBERNEHMEN NUED2 NUED2 VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 22
NUD3	SKALAR UEBERNEHMEN NUED3 NUED3 VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 22
NUD4	SKALAR UEBERNEHMEN NUED4 NUED4 VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 22
NUD5	SKALAR UEBERNEHMEN NUED5 NUED5 VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 22
NUD6	SKALAR UEBERNEHMEN NUED6 NUED6 VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 22
NUDS5	SKALAR NUD1 +NUD2 +NUD3 +NUD4 +NUD5 NUD1 AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG NUD2 AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG NUD3 AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG NUD4 AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG NUD5 AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	FORMEL 20
NUD	SKALAR NUD6 +NUDS5 NUD6 AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG NUDS5 AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	FORMEL 20
NUP	SKALAR NU -NUD NU AUS DATEN MIT N.EQ.1 NUD AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	FORMEL 21
SEM1	SKALAR MUEL *SE1 MUEL VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 19
SE1	AUS DATEN MIT N.EQ.1 MUEL *SEH MUEL VON GRUBA MIT N.EQ.1 SEH AUS DATEN MIT N.EQ.1	FORMEL 19

SEM01	SKALAR	FORMEL 19
	MUEL *SE01	
	MUEL VON GRUBA MIT N.EQ.1	
	SE01 AUS DATEN MIT N.EQ.1	
SIMI	SKALAR	FORMEL 19
	MUIL *SI	
	MUIL VON GRUBA MIT N.EQ.1	
	SI AUS DATEN MIT N.EQ.1	
SH1	SKALAR	FORMEL 20
	SEM1 +SIMI	
	SEM1 AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	
	SIMI AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	
SH01	SKALAR	FORMEL 20
	SEM01 +SIMI	
	SEM01 AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	
	SIMI AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	
NUSF	SKALAR STANDARD	FORMEL 19
	NU *SFISS	
	NU AUS DATEN MIT N.EQ.1	
	SFISS AUS DATEN MIT N.EQ.1	
NUSFP	SKALAR	FORMEL 19
	NUP *SFISS	
	NUP AUS DATEN MIT N.EQ.1	
	SFISS AUS DATEN MIT N.EQ.1	
NU1SF	SKALAR	FORMEL 19
	NUD1 *SFISS	
	NUD1 AUS DATEN MIT N.EQ.1	
	SFISS AUS DATEN MIT N.EQ.1	
NU2SF	SKALAR	FORMEL 19
	NUD2 *SFISS	
	NUD2 AUS DATEN MIT N.EQ.1	
	SFISS AUS DATEN MIT N.EQ.1	
NU3SF	SKALAR	FORMEL 19
	NUD3 *SFISS	
	NUD3 AUS DATEN MIT N.EQ.1	
	SFISS AUS DATEN MIT N.EQ.1	
NU4SF	SKALAR	FORMEL 19
	NUD4 *SFISS	
	NUD4 AUS DATEN MIT N.EQ.1	
	SFISS AUS DATEN MIT N.EQ.1	

<p> NU5SF SKALAR  NUD5 *SFISS  NUD5 AUS DATEN MIT N.EQ.1  SFISS AUS DATEN MIT N.EQ.1 </p>	<p>FORMEL 19</p>
<p> NU6SF SKALAR  NUD6 *SFISS  NUD6 AUS DATEN MIT N.EQ.1  SFISS AUS DATEN MIT N.EQ.1 </p>	<p>FORMEL 19</p>
<p> SN2NM SKALAR  MULT2 *SN2NL  MULT2 AUS DATEN MIT N.EQ.1  SN2NL AUS DATEN MIT N.EQ.1 </p>	<p>FORMEL 19</p>
<p> SN3NM SKALAR  MULT3 *SN3NL  MULT3 AUS DATEN MIT N.EQ.1  SN3NL AUS DATEN MIT N.EQ.1 </p>	<p>FORMEL 19</p>
<p> SN4NM SKALAR  MULT4 *SN4NL  MULT4 AUS DATEN MIT N.EQ.1  SN4NL AUS DATEN MIT N.EQ.1 </p>	<p>FORMEL 19</p>
<p> NUDF5 SKALAR  NU1SF +NU2SF +NU3SF +NU4SF +NU5SF  NU1SF AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG  NU2SF AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG  NU3SF AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG  NU4SF AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG  NU5SF AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG </p>	<p>FORMEL 20</p>
<p> NUSFD SKALAR  NU6SF +NUDF5  NU6SF AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG  NUDF5 AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG </p>	<p>FORMEL 20</p>
<p> SMI VEKTOR  TZ*SINSC *P0IIK (G-H)  SINSC VON GRUBA MIT N.EQ.1  P0IIK VON GRUBA MIT N.GE.1 </p>	<p>FORMEL 10</p>
<p> P0NIL VEKTOR  UEBERNEHMEN P0NIK (G-H)  P0NIK VON GRUBA MIT N.GE.1 </p>	<p>FORMEL 25</p>
<p> P03IL VEKTOR  UEBERNEHMEN P03IK (G-H)  P03IK VON GRUBA MIT N.GE.1 </p>	<p>FORMEL 25</p>

P04IL	VEKTOR UEBERNEHMEN P04IK (G-H) P04IK VON GRUBA MIT N.GE.1	FORMEL 25
SMN	VEKTOR TZ*SN2N *P0NIK (G-H) SN2N VON GRUBA MIT N.EQ.1 P0NIK VON GRUBA MIT N.GE.1	FORMEL 10
SMN2N	VEKTOR TZ*SN2NM *P0NIL (G-H) SN2NM AUS DATEN MIT N.EQ.1 P0NIL AUS DATEN MIT N.GE.1	FORMEL 10
SMN3N	VEKTOR TZ*SN3NM *P03IL (G-H) SN3NM AUS DATEN MIT N.EQ.1 P03IL AUS DATEN MIT N.GE.1	FORMEL 10
SMN4N	VEKTOR TZ*SN4NM *P04IL (G-H) SN4NM AUS DATEN MIT N.EQ.1 P04IL AUS DATEN MIT N.GE.1	FORMEL 10
P0ET	VEKTOR TEMPERATUR-INTERPOLATION P0EIK P0EIK VON GRUBA MIT N.GE.1	FORMEL 52
P1ET	VEKTOR TEMPERATUR-INTERPOLATION P1EIK P1EIK VON GRUBA MIT N.GE.1	FORMEL 52
P2ET	VEKTOR TEMPERATUR-INTERPOLATION P2EIK P2EIK VON GRUBA MIT N.GE.1	FORMEL 52
P3ET	VEKTOR TEMPERATUR-INTERPOLATION P3EIK P3EIK VON GRUBA MIT N.GE.1	FORMEL 52
P4ET	VEKTOR TEMPERATUR-INTERPOLATION P4EIK P4EIK VON GRUBA MIT N.GE.1	FORMEL 52
SME	VEKTOR TZ*SELSC *FELSC *P0ET (G-H) MIT (G-G) ERSETZT DURCH (G-G) +((G-G+1)- ) (G-G+1) ERSETZT DURCH SELSC VON GRUBA MIT N.EQ.1	FORMEL 42  NUR MAT.REMO

P0ET	AUS DATEN MIT N.GE.1	
FELSC	AUS DATEN MIT N.EQ.1	
	AUS DATEN MIT N.EQ.1	FORMEL 13
TZ*SELSC	*FELSC *P0ET (G-H)	
SELSC	VON GRUBA MIT N.EQ.1	
P0ET	AUS DATEN MIT N.GE.1	
FELSC	AUS DATEN MIT N.EQ.1	
SMTOT	VEKTOR STANDARD	FORMEL 24
SMI	(G-H)+SME (G-H)+SMN2N (G-H)	
SMI	AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	
SME	AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	
SMN2N	AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	
SBE	SKALAR	FORMEL 53
	SUM(H.NE.G)<SME (G-H)>	
SME	AUS DATEN MIT N.GE.1	
SBI	SKALAR	FORMEL 53
	SUM(H.NE.G)<SMI (G-H)>	
SMI	AUS DATEN MIT N.GE.1	
SBN2N	SKALAR	FORMEL 53
	SUM(H.NE.G)<SMN (G-H)>	
SMN	AUS DATEN MIT N.GE.1	
SDN2N	SKALAR	FORMEL 21
	SN2N -SBN2N	
SN2N	AUS DATEN MIT N.EQ.1	
SBN2N	AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	
SREMG	SKALAR	FORMEL 20
	SCAPT +SFISS +SBE +SBI +SBN2N	
SCAPT	AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	
SFISS	AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	
SBE	AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	
SBI	AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	
SBN2N	AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	
SREM	SKALAR STANDARD	FORMEL 21
	SREMG -SDN2N	
SREMG	AUS DATEN MIT N.EQ.1	
SDN2N	AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	
STR	SKALAR STANDARD	FORMEL 21
	STOT1 -SH1	
STOT1	AUS DATEN MIT N.EQ.1	
SH1	AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	

STRTR	SKALAR	FORMEL 21
	STOT -SH01	
	STOT AUS DATEN MIT N.EQ.1	
	SH01 AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	
DIFKO	SKALAR STANDARD	FORMEL 23
	1./ (3.*STR )	
	STR AUS DATEN MIT N.EQ.1	
SME1	VEKTOR	FORMEL 13
	TZ*SELSC *FELS1 *P1ET (G-H)	
	SELSC VON GRUBA MIT N.EQ.1	
	P1ET AUS DATEN MIT N.GE.1	
	FELS1 AUS DATEN MIT N.EQ.1	
SMI1	VEKTOR	FORMEL 10
	TZ*SINSC *P1IHK (G-H)	
	SINSC VON GRUBA MIT N.EQ.1	
	P1IHK VON GRUBA MIT N.GE.1	
SMT1	VEKTOR	FORMEL 24
	SME1 (G-H)+SMI1 (G-H)	
	SME1 AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	
	SMI1 AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	
SME01	VEKTOR	FORMEL 13
	TZ*SELSC *FEL01 *P1ET (G-H)	
	SELSC VON GRUBA MIT N.EQ.1	
	P1ET AUS DATEN MIT N.GE.1	
	FEL01 AUS DATEN MIT N.EQ.1	
SMI01	VEKTOR	FORMEL 25
	UEBERNEHMEN SMI1 (G-H)	
	SMI1 AUS DATEN MIT N.GE.1	
SMT01	VEKTOR STANDARD	FORMEL 24
	SME01 (G-H)+SMI01 (G-H)	
	SME01 AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	
	SMI01 AUS DATEN MIT N,K BELIEBIG	
SMT02	VEKTOR	FORMEL 13
	TZ*SELSC *FELSC *P2ET (G-H)	
	SELSC VON GRUBA MIT N.EQ.1	
	P2ET AUS DATEN MIT N.GE.1	
	FELSC AUS DATEN MIT N.EQ.1	
SMT03	VEKTOR	FORMEL 13
	TZ*SELSC *FELSC *P3ET (G-H)	
	SELSC VON GRUBA MIT N.EQ.1	
	P3ET AUS DATEN MIT N.GE.1	

FELSC	AUS DATEN MIT N.EQ.1	
SMT04	VEKTOR	FORMEL 13
	TZ*SELSC *FELSC *P4ET (G-H)	
	SELSC VON GRUBA MIT N.EQ.1	
	P4ET AUS DATEN MIT N.GE.1	
	FELSC AUS DATEN MIT N.EQ.1	
SMT05	VEKTOR	FORMEL 13
	TZ*SELSC *FELSC *P5ET (G-H)	
	SELSC VON GRUBA MIT N.EQ.1	
	P5ET AUS DATEN MIT N.GE.1	
	FELSC AUS DATEN MIT N.EQ.1	
CHI	SKALAR STANDARD	FORMEL 35
	UEBERNEHMEN CHI	
	GEWICHT*CHI FUER MATERIALGEWICHTETES CHI	
	CHI VON GRUBA MIT N,K BELIEBIG	
CHID1	SKALAR	FORMEL 35
	UEBERNEHMEN CHID1	
	GEWICHT*CHI FUER MATERIALGEWICHTETES CHI	
	CHID1 VON GRUBA MIT N,K BELIEBIG	
CHID2	SKALAR	FORMEL 35
	UEBERNEHMEN CHID2	
	GEWICHT*CHI FUER MATERIALGEWICHTETES CHI	
	CHID2 VON GRUBA MIT N,K BELIEBIG	
CHID3	SKALAR	FORMEL 35
	UEBERNEHMEN CHID3	
	GEWICHT*CHI FUER MATERIALGEWICHTETES CHI	
	CHID3 VON GRUBA MIT N,K BELIEBIG	
CHID4	SKALAR	FORMEL 35
	UEBERNEHMEN CHID4	
	GEWICHT*CHI FUER MATERIALGEWICHTETES CHI	
	CHID4 VON GRUBA MIT N,K BELIEBIG	
CHID5	SKALAR	FORMEL 35
	UEBERNEHMEN CHID5	
	GEWICHT*CHI FUER MATERIALGEWICHTETES CHI	
	CHID5 VON GRUBA MIT N,K BELIEBIG	
CHID6	SKALAR	FORMEL 35
	UEBERNEHMEN CHID6	
	GEWICHT*CHI FUER MATERIALGEWICHTETES CHI	
	CHID6 VON GRUBA MIT N,K BELIEBIG	

1/V SKALAR STANDARD  
UEBERNEHMEN 1/V FUER GRUPPENSATZ  
1/V VON GRUBA MIT N,K BELIEBIG

FORMEL 34

DE VEKTOR  
DE(G)  $2./3. * (E(G)**1.5 - E(G+1)**1.5)$  DU(G)

FORMEL 31

## Anhang F

### Die NJOY-Eingabe Datei input.njoy für das Beispiel Pu-239 vom ENDF-File PU239N.JHE

```
'moder'  
20 -21  
'reconr'  
-21 -22  
'pendf tape for PU239 from PU239N.JHE'/  
9437 3 0  
.0005 /  
'PU239'/  
'processed by the njoy nuclear data processing system'/  
'see original PU239N.JHE file for details of evaluation'/
```

0/  
'broadr'  
-21 -22 -23  
9437 6 0 0 0  
.0005 1.e1 /  
300. 900. 1200. 1500. 2100. 3000.

0/  
'unresr'  
-21 -23 -24  
9437 6 10 1  
300. 900. 1200. 1500. 2100. 3000.  
1.e10 1.e8 1.e6 5.e5 1.e5 6.e4 3.e4 1.e4 6.e3 3.e3

0/  
'groupr'  
-21 -24 0 -25  
9437 1 0 5 5 6 10 1  
'PU239/'  
300. 900. 1200. 1500. 2100. 3000.  
1.e10 1.e8 1.e6 5.e5 1.e5 6.e4 3.e4 1.e4 6.e3 3.e3

78  
1.000000E-03 5.000000E-03 1.000000E-02 1.500000E-02 2.000000E-02  
2.500000E-02 3.000000E-02 3.500000E-02 4.200000E-02 5.000000E-02  
5.800000E-02 6.700000E-02 8.000000E-02 1.000000E-01 1.400000E-01  
1.800000E-01 2.200000E-01 2.500000E-01 2.800000E-01 3.000000E-01  
3.200000E-01 3.500000E-01 4.000000E-01 5.000000E-01 6.250000E-01  
7.800000E-01 8.500000E-01 9.100000E-01 9.500000E-01 9.720000E-01  
9.960000E-01 1.020000E+00 1.045000E+00 1.071000E+00 1.097000E+00  
1.123000E+00 1.150000E+00 1.300000E+00 1.500000E+00 2.100000E+00  
2.600000E+00 3.300000E+00 4.000000E+00 9.877000E+00 1.597000E+01  
2.770000E+01 4.805000E+01 7.550000E+01 1.487000E+02 3.673000E+02  
9.069000E+02 1.425000E+03 2.239000E+03 3.519000E+03 5.530000E+03  
9.118000E+03 1.503000E+04 2.478000E+04 4.085000E+04 6.734000E+04  
1.110000E+05 1.830000E+05 3.025000E+05 5.000000E+05 8.210000E+05  
1.353000E+06 2.231000E+06 3.679000E+06 6.066000E+06 1.000000E+07  
1.380000E+07 1.500000E+07 2.000000E+07 2.710000E+07 3.680000E+07  
5.000000E+07 7.000000E+07 1.000000E+08 1.500000E+08

3 /  
3 251 'muel' /  
3 252 'xi' /  
3 253 'gbar' /  
3 258 'ubar' /  
3 259 '1/v' /  
6 /  
0/  
3 /  
6 /  
0/  
3 /  
6 /  
0/  
3 /  
6 /  
0/  
3 /  
6 /  
0/  
3 /  
6 /  
0/  
0/  
'matxsr'  
-25 0 +26/  
1 'njoy99.81fzk'/  
1 1 1 1  
'78 group neutron interaction library'/  
'n'  
78  
'nscat'  
1  
1  
'PU239' 9437 /  
'unresr'

-21 -23 -27

9437 6 10 1

300. 900. 1200. 1500. 2100. 3000.

1.e10 1000. 600. 300. 100. 60. 30. 10. 1. 1.e-3

0/

'groupr'

-21 -27 0 -28

9437 1 0 5 5 6 10 1

'PU239/

300. 900. 1200. 1500. 2100. 3000.

1.e10 1000. 600. 300. 100. 60. 30. 10. 1. 1.e-3

78

1.000000E-03 5.000000E-03 1.000000E-02 1.500000E-02 2.000000E-02

2.500000E-02 3.000000E-02 3.500000E-02 4.200000E-02 5.000000E-02

5.800000E-02 6.700000E-02 8.000000E-02 1.000000E-01 1.400000E-01

1.800000E-01 2.200000E-01 2.500000E-01 2.800000E-01 3.000000E-01

3.200000E-01 3.500000E-01 4.000000E-01 5.000000E-01 6.250000E-01

7.800000E-01 8.500000E-01 9.100000E-01 9.500000E-01 9.720000E-01

9.960000E-01 1.020000E+00 1.045000E+00 1.071000E+00 1.097000E+00

1.123000E+00 1.150000E+00 1.300000E+00 1.500000E+00 2.100000E+00

2.600000E+00 3.300000E+00 4.000000E+00 9.877000E+00 1.597000E+01

2.770000E+01 4.805000E+01 7.550000E+01 1.487000E+02 3.673000E+02

9.069000E+02 1.425000E+03 2.239000E+03 3.519000E+03 5.530000E+03

9.118000E+03 1.503000E+04 2.478000E+04 4.085000E+04 6.734000E+04

1.110000E+05 1.830000E+05 3.025000E+05 5.000000E+05 8.210000E+05

1.353000E+06 2.231000E+06 3.679000E+06 6.066000E+06 1.000000E+07

1.380000E+07 1.500000E+07 2.000000E+07 2.710000E+07 3.680000E+07

5.000000E+07 7.000000E+07 1.000000E+08 1.500000E+08

3 /

3 251 'muel' /

3 252 'xi' /

3 253 'gbar' /

3 258 'ubar' /

3 259 '1/v' /

6 /

0/

3 /  
6 /  
0/  
3 /  
6 /  
0/  
3 /  
6 /  
0/  
3 /  
6 /  
0/  
3 /  
6 /  
0/  
0/  
'matxsr'  
-28 0 +29/  
1 'njoy99.81fzk'/  
1 1 1 1  
'78 group neutron interaction library'/  
'n'  
78  
'nscat'  
1  
1  
'PU239' 9437 /  
'cccr'  
-25 00 00 30  
1 0 'inr487' /  
' PU239' /  
78 0 1 1 1  
'PU239' 'PU239' 'PU239N.JHE' 'PU239' 9437 10.88  
'stop'

## Anhang G

### Die GRUMA-Eingabe Datei *create\_gr78lib.input\_9*

```
'NOCOMP '  
'GRUMA '  
'OPEN '  
1 'G78P5001_0 '  
'HIENGLIB' 78 1 83 009 0 0  
1.50000E+08 1.00000E+08 7.00000E+07 5.00000E+07 3.68000E+07  
2.71000E+07 2.00000E+07 1.50000E+07 1.38000E+07  
1.00000E+07 6.06600E+06 3.67900E+06 2.23100E+06 1.35300E+06  
8.21000E+05 5.00000E+05 3.02500E+05 1.83000E+05 1.11000E+05  
6.73400E+04 4.08500E+04 2.47800E+04 1.50300E+04 9.11800E+03  
5.53000E+03 3.51900E+03 2.23900E+03 1.42500E+03 9.06900E+02  
3.67300E+02 1.48700E+02 7.55000E+01 4.80500E+01 2.77000E+01  
1.59700E+01 9.87700E+00 4.00000E+00 3.30000E+00 2.60000E+00  
2.10000E+00 1.50000E+00 1.30000E+00 1.15000E+00 1.12300E+00  
1.09700E+00 1.07100E+00 1.04500E+00 1.02000E+00 9.96000E-01  
9.72000E-01 9.50000E-01 9.10000E-01 8.50000E-01 7.80000E-01  
6.25000E-01 5.00000E-01 4.00000E-01 3.50000E-01 3.20000E-01  
3.00000E-01 2.80000E-01 2.50000E-01 2.20000E-01 1.80000E-01  
1.40000E-01 1.00000E-01 8.00000E-02 6.70000E-02 5.80000E-02  
5.00000E-02 4.20000E-02 3.50000E-02 3.00000E-02 2.50000E-02
```



## Literaturverzeichnis

- [1] C.H.M. Broeders,  
„Entwicklungsarbeiten für die neutronenphysikalische Auslegung von  
fortschrittlichen Druckwasserreaktoren (FDWR) mit kompakten Dreiecksgittern in  
hexagonalen Brennelementen“ ,  
KFK 5072, 1992
  
- [2] R. E. MacFarlane,  
„NJOY 99.0 : Code System for Producing Pointwise and Multigroup Neutron and  
Photon Cross Sections from ENDF /B Data“ ,  
Los Alamos National Laboratory, PSR-480, März 2000
  
- [3] Cross Section Evaluation Working Group, NNDC Brookhaven National Laboratory,  
„ENDF-102 Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File  
ENDF-6“ ,

Upton N.Y., USA, Nr. 11973-5000, April 2001

- [4] Atomgesetz der BRD, § 9a, Absatz 1  
„Verwertung radioaktiver Reststoffe und Beseitigung radioaktiver Abfälle“
- [5] D. Woll  
„GRUCAL, Ein Programmsystem zur Berechnung makroskopischer Gruppenkonstanten“,  
KFK 2108, 1975, siehe auch Online KAPROS HELP System
- [6] W. Maschek, X. Cheng, A. Rinejski, R. Stieglitz, IKET, J. Konys, IMF, G. Müller, IHM, C. Broeders, M. Schikorr, D. Struwe,  
„Partitioning und Transmutation: Eine neue Perspektive bei der Behandlung nuklearer Abfälle ?“,  
FZK Nachrichten Jahrgang 36, 2/2004
- [7] H. Röthemeyer,  
„Endlagerung radioaktiver Abfälle: Wegweiser für eine verantwortungsbewusste Entsorgung in der Industriegesellschaft“,  
Bundesamt für Strahlenschutz, 1991, VCH Verlagsgesellschaft
- [8] P. Rousseau,  
„Validation of Calculation Tools for the Estimation of Reaction Products in the Target of Accelerator Driven Systems“,  
Diplomarbeit, Universität Karlsruhe, Mai 2004
- [9] <http://t2.lanl.gov/> ,  
T-2 Nuclear Information Service, Los Alamos National Laboratory
- [10] G. Musiol, J. Ranft, R. Reif, D. Seeliger,  
„Kern- und Elementarteilchenphysik“,  
VCH Verlagsgesellschaft, 1988,

- [11] K. Wirtz,  
„Grundlagen der Reaktortechnik“,  
Universität Karlsruhe, Lehrstuhl für physikalische Grundlagen der Reaktortechnik,  
1966
- [12] C. Broeders, I. Broeders,  
„Studien zur Aktinidenumwandlung“, <http://inrwww.fzk.de>  
Projekt Nukleare Sicherheitsforschung, FZKA 6126, Jahresbericht 1997
- [13] <http://www.europhysicsnews.com/full/06/article8/article8.html>
- [14] D.G. Cacuci,  
„Energiesysteme Teil 2“,  
Vorlesungsskript, Universität Karlsruhe, Institut für Kerntechnik und Reaktorsicherheit,  
2003
- [15] Dieter Smidt,  
„Reaktortechnik“,  
Verlag: G. Braun Karlsruhe, 1970
- [16] H. Huschke,  
„Gruppenkonstanten für dampf- und natriumgekühlte schnelle Reaktoren in einer 26-  
Gruppendarstellung“,  
KFK 770, 1968
- [17] D. Woll,  
„Aufbau und Verwaltung der Gruppenbibliothek GRUBA“,  
KFK 1815, 1973
- [18] D. Woll,  
„Aufbau der Gruppenkonstantenbibliothek GRUBA und ihre Verwaltung durch das  
Programmsystem GRUMA“,

KFK 3745, 1984

- [19] Helmut Herold,  
„Unix Grundlagen“,  
Addison-Wesley Publishing Company, 1992
- [20] <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/nuclear/nucrea.html>
- [21] D. Woll,  
„GRUCAL /KAPROS3-Version, Dateiallokierung über Datasetname Version 3.0“,  
22.12.94
- [22] H. Bachmann,  
„Kurzbeschreibung des KAPROS-Moduls DIFF0 zur Berechnung der null-  
dimensionalen Multigruppen-Diffusionsgleichung und dessen Prüfmodul PDDIFF0“,  
Juni 1979
- [23] C. Broeders,  
„Kurzbeschreibung der KAPROS-Prozedur PLFLUX“,  
02.03.1982
- [24] V. Baylac-Domengetroy,  
„Investigations Related to the Generation of Reaction Products in the Target of  
Accelerator Driven Systems for Nuclear Waste Incineration“,  
Diplom-Arbeit, FZKA 6908, 2003
- [25] C. Broeders, persönliche Mitteilung
- [26] W. Höbel,  
„WQRG ein Hilfsprogramm zur Verarbeitung von SIGMN-Strukturen in  
KAPROS-Modulen“,  
KAPROS-Notiz Nr.57, April 1981

- [27] <http://www.nea.fr/dbforms/data/eva/evatapes> ,  
„ENDF/B-VI MOD 8 Revision“,  
Los Alamos National Laboratory, USA, Januar 2001
- [28] M.B. Chadwick, P.G. Young,  
„LANL/HE.1 High Energy File“,  
Los Alamos National Laboratory in Cooperation with ECN Petten and ENEA, Bologna  
Februar 1997,
- [29] T. Fukahori, A.Yu. Konobeyev,  
„JENDL-HE High Energy File“,  
Revision 1, Obninsk, Russland, September 2001
- [30] A.J. Koning,  
„NRG-2003 Revision 1“,  
NRG-Petten, Niederlande, Februar 2004
- [31] E.V. Gai, A.V. Ignatyuk, V.P. Lunev, Yu.N. Shubin, M.V. Skripova, N.N. Titarenko,  
„BROND-3“,  
ISTC, Russland, , Dezember 2002
- [32] L. S. Waters,  
„MCNPX user's manual, Version 2.4.0“,  
September 2002.