

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ NRT-ФОРМУЛЫ ДЛЯ РАСЧЕТА СЕЧЕНИЙ СМЕЩЕНИЯ АТОМОВ МАТЕРИАЛА, ОБЛУЧАЕМОГО НУКЛОНАМИ ПРОМЕЖУТОЧНЫХ И ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

А.Ю. Конобеев*, Ю.В. Конобеев, Ю.А Коровин***

* *Обнинский институт атомной энергетики, г. Обнинск*

** *ГНЦ РФ Физико-энергетический институт им. А.И. Лейпунского, г. Обнинск*



Исследовано поведение каскадной функции, определяющей число созданных дефектов в материале, при высоких энергиях налетающих ионов. Проведены расчеты сечений смещения атомов для ряда материалов с атомным номером $Z=13-28$, облучаемых протонами с энергиями до 25 ГэВ. Показано, что сечение смещения может быть вычислено с использованием NRT-формулы с погрешностью 5-20% относительно более точного расчета.

ВВЕДЕНИЕ

При заданном спектре первичных частиц скорость накопления повреждающей дозы материала определяется сечением смещения атомов σ_d , которое может быть рассчитано с помощью следующего выражения:

$$\sigma_d = \int \frac{d\sigma}{dT} v(T) dT, \quad (1)$$

где $d\sigma/dT$ – дифференциальное сечение передачи кинетической энергии T первичному выбитому атому (ПВА) при взаимодействии с падающей частицей; $v(T)$ – каскадная функция.

Каскадная функция $v(T)$ в (1) определяет количество атомов материала, смещенных из узлов кристаллической решетки под действием ПВА с кинетической энергией T (число созданных пар Френкеля).

В настоящее время при вычислении повреждающей дозы материалов широко используется формула для $v(T)$, полученная в работе [1] (модель NRT-стандарт),

$$v(T)_{\text{NRT}} = \frac{0.8}{2E_d} \tilde{T}(T), \quad (2)$$

где E_d – эффективная пороговая энергия смещений; $\tilde{T}(T)$ – энергия, затраченная на создание повреждений, равная

$$\tilde{T}(T) = \frac{T}{1 + kg(\epsilon)}, \quad (3)$$

$$g(\varepsilon) = 3.4008 \varepsilon^{1/6} + 0.40244 \varepsilon^{3/4} + \varepsilon, \quad (4)$$

$$k = 0.1337 Z_1^{1/6} (Z_1 / A_1)^{1/2}, \quad (5)$$

$$\varepsilon = [A_2 T / (A_1 + A_2)] [a / (Z_1 Z_2 e^2)], \quad (6)$$

$$a = (9\pi^2 / 128)^{1/3} a_0 [Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}]^{-1/2}, \quad (7)$$

где a_0 – боровский радиус; e – заряд электрона; Z_1, A_1 и Z_2, A_2 – атомный номер и массовое число налетающего иона и материала соответственно.

Применимость формул (2)–(7), согласно [1], ограничивают, по крайней мере, два условия:

а) энергия ПВА не должна превышать некоторого максимального значения:

$$T_{\max} < 0.025 Z_1^{4/3} A_1, \text{ МэВ} \quad (8)$$

(к примеру, для ^{27}Al $T_{\max} = 20.6$ МэВ, ^{58}Ni – 123 МэВ, ^{184}W – 1429 МэВ),

б) атомный номер и массовое число ПВА и материала должны быть близки $Z_1 \approx Z_2, A_1 \approx A_2$.

При облучении материалов нуклонами высоких энергий спектр ядер отдачи может включать в себя область энергий, заметно превышающих T_{\max} (см. рис.1). Кроме того, в ядерных реакциях образуются ионы с Z_1 и A_1 , заметно отличающимися от характеристик материала.

При получении формул (2)–(7) предполагалось, что электронная тормозная способность иона пропорциональна его скорости, т.е. $(dE/dx)_e \sim T^{1/2}$. Между тем, с увеличением энергии иона функция $(dE/dx)_e$ достигает максимального значения, затем уменьшается и при высоких энергиях определяется формулой Бете. Следует отметить, что отклонение экспериментальных значений $(dE/dx)_e$ от зависимости $\sim T^{1/2}$ наблюдается при энергиях, заметно меньших величины T_{\max} , определяемой условием (8).

Формула NRT-стандарт получена исходя из представлений о том, что передача энергии атомам решетки осуществляется, главным образом, за счет упругих столкновений. Недавние исследования [2,3] показали, что в области энергий ПВА, соответствующих относительно высокой величине $(dE/dx)_e$, такой механизм не является основным и в передаче энергии атомам решетки важную роль играет возбуждение электронной системы. При таких энергиях экспериментальные значения сечений смещения для различных ионов [2,3] заметно отличаются от вычисленных с применением формул (2)–(7).

Целью настоящей работы являлось рассмотрение применимости модели NRT-стандарт для расчета числа дефектов в материалах, облучаемых нуклонами промежуточных и высоких энергий, проведение расчета сечений смещения атомов с учетом реалисти-

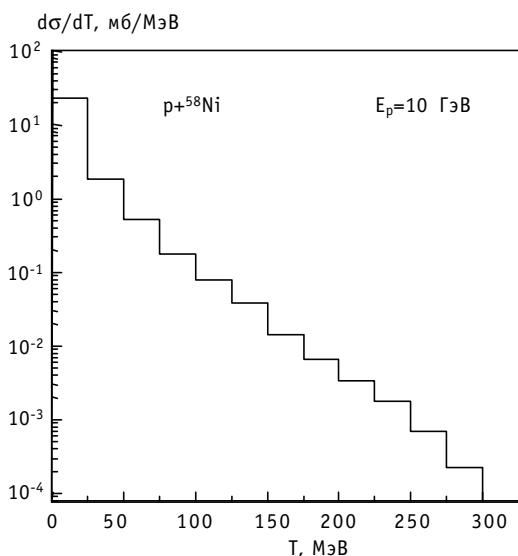


Рис.1. Рассчитанный спектр ядер отдачи при облучении ^{58}Ni протонами с энергией 10 ГэВ ($T_{\max} = 123$ МэВ)

ческих величин каскадной функции.

КАСКАДНАЯ ФУНКЦИЯ ДЛЯ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ИОНОВ

Полное число дефектов, образованных ионом (Z_1, A_1) с энергией E_0 в материале (Z_2, A_2) при условии, что основным механизмом передачи энергии атомам решетки являются упругие столкновения, равно

$$\nu(E_0) = \frac{0.8}{2E_d} \int_0^{E_0} \frac{(dE/dx)_{casc}}{(dE/dx)_e + (dE/dx)_n} dE, \quad (9)$$

где $(dE/dx)_{casc}$ - удельные потери энергии, идущие на создание повреждений; $(dE/dx)_e$ - электронная тормозная способность; $(dE/dx)_n$ - удельные потери энергии на упругие столкновения (ядерные потери).

Удельные потери энергии $(dE/dx)_{casc}$ и ядерные потери $(dE/dx)_n$ определяются следующими интегралами:

$$\left(\frac{dE}{dx} \right)_{casc} = N \int_0^{\alpha E} \frac{d\sigma(E, T)}{dT} \tilde{T}'(T) dT, \quad (10)$$

$$\left(\frac{dE}{dx} \right)_n = N \int_0^{\alpha E} \frac{d\sigma(E, T)}{dT} T dT, \quad (11)$$

где N - число атомов вещества в единице объема; $\tilde{T}'(T)$ - энергия, затраченная на создание повреждений; αE - максимальная энергия, переданная в упругом столкновении, $\alpha = 4A_1A_2/(A_1+A_2)^2$.

Дифференциальное сечение передачи кинетической энергии T атому решетки $d\sigma(E, T)/dT$ определяется согласно [4,5].

Как показал анализ, из-за быстрого убывания $d\sigma(E, T)/dT$ с ростом энергии T интегрирование выражения (10) с хорошей точностью может быть проведено при верхнем пределе, не превышающем T_{max} - энергетический предел применимости NRT-формулы. Поэтому выражения (9)-(11) могут быть использованы для расчета числа повреждений при произвольной энергии иона при условии, что энергия \tilde{T}'

в формуле (10) определяется согласно выражениям (3)-(7), т.е. $\tilde{T}' = \tilde{T}$.

В настоящей работе каскадная функция вычислялась для различных ионов, взаимодействующих с ^{58}Ni . Электронная тормозная способность рассчитывалась согласно [4] при энергиях ионов до 0.0125 МэВ/нуклон в диапазоне энергий 0.0125 - 12 МэВ/нуклон бралась из таблиц [6] и вычислялась в соответствии с [7] при энергиях выше 12 МэВ/нуклон.

На рис.2 показана каскадная функция при облучении ^{58}Ni ионами ^{27}Al и ^{48}Ti . Видно, что в области относительно малых энергий значения $n(T)$, рассчитанные с помощью NRT-формулы и с использованием реалистической зависимости $(dE/dx)_e$, близки. Начиная с определенной энергии функция $\nu(T)$ резко возрастает и различие между $\nu(T)$ и $\nu(T)_{NRT}$ становится заметным.

Обсуждаемое поведение каскадной функции относится к случаю, когда основным источником генерации пар Френкеля являются упругие столкновения атомов. В работах [2,3] показано, что в области энергий ионов, соответствующих высоким значениям $(dE/dx)_e$, часть энергии, затраченной на электронное возбуждение, передается атомам решетки. В этом случае упругие столкновения играют второстепенную роль в создании повреждений, и экспериментальные значения сече-

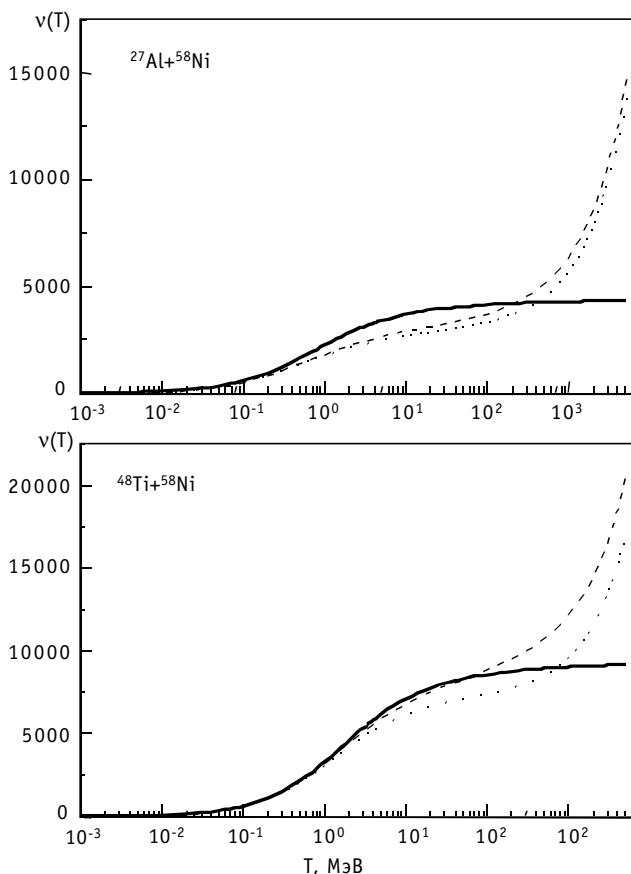


Рис.2. Каскадная функция при облучении ^{58}Ni ионами ^{27}Al и ^{48}Ti : — расчет по модели NRT-стандарт; - - - вычисления проведены с помощью выражений (9)-(11) и экспериментальных значений электронной тормозной способности; - использованы выражения (9)-(11), экспериментальные значения $(dE/dx)_e$, дополнительно учтена поправка, возникающая из-за различий экспериментальных и рассчитанных сечений смещения для ионов

к механизму передачи энергии при высоких значениях электронной тормозной способности $(dE/dx)_e$.

СЕЧЕНИЯ СМЕЩЕНИЯ АТОМОВ МАТЕРИАЛА ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИМИ НУКЛОНАМИ

В данной работе сечения смещения под действием протонов с энергиями от 0.1 до 25 ГэВ были рассчитаны для нескольких материалов. Расчет спектра ядер отдачи осуществлялся методом Монте-Карло с помощью программы CASCADE/INPE [9].

Для всех образующихся в ядерных реакциях ядер с $Z \geq 3$ вычислялось число создаваемых дефектов с использованием различных каскадных функций: модель NRT-стандарт, формулы (9)-(11) с учетом реалистической зависимости $(dE/dx)_e$ от энергии и те же формулы с учетом поправки, возникающей из-за различий экспериментальных и рассчитанных сечений смещения для ионов.

На рис. 3 приведен вклад ядер с различным массовым числом в сечение смещения ^{58}Ni при неупругих взаимодействиях с протонами, обладающими энергией 10 ГэВ. Расчеты проведены с использованием модели NRT-стандарт и на основе

ний смещения для ионов

σ_d^{exp} оказываются заметно ниже (в 2-3 раза) значе-

ний σ_d^n , рассчитанных с учетом только упругого механизма передачи энергии.

В работе [8] была предложена простая модель, позволяющая установить функциональную зависимость между отношением

$\sigma_d^{\text{exp}} / \sigma_d^n$ и $(dE/dx)_e$. Это, в свою очередь, дает возможность приблизительно учесть смену механизма создания повреждений при вычислении $v(T)$. Рассчитанные значения каскадной функции с использованием экспериментальных данных о

сечении смещения σ_d^{exp} приведены на рис.2. Видно, что несмотря на суще-

ственное различие σ_d^{exp} и

σ_d^n , функция $v(T)$ относительно слабо чувствительна

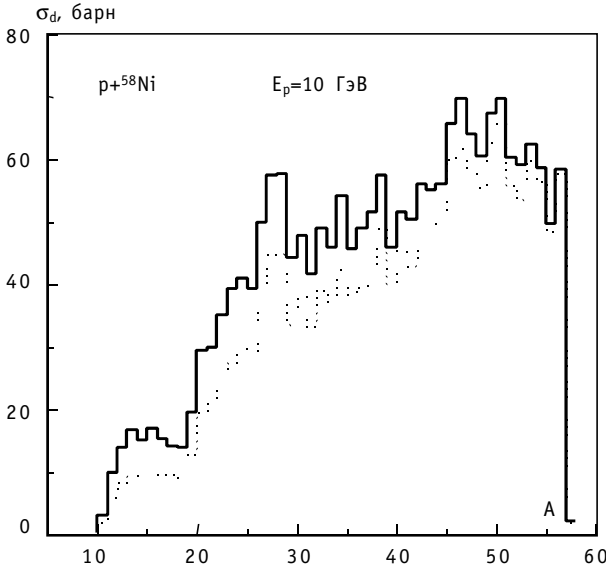


Рис.3. Вклад ядер с различным массовым числом в сечение смещения для ^{58}Ni при неупругих взаимодействиях с протонами с энергией 10 ГэВ (обозначения те же, что и на рис.2)

ти энергий, соответствующих убыванию электронных тормозных потерь, не оказывает влияния на сечение σ_d для нуклонов. Причиной является тот факт, что средняя кинетическая энергия, переданная ПВА при взаимодействиях нуклонов с ядрами, относительно невелика. На рис. 5 показана средняя энергия $\langle T \rangle$, переданная ПВА при неупругих взаимодействиях протонов с некоторыми ядрами. Согласно рис. 5, с увеличением энергии протона средняя энергия $\langle T \rangle$ вначале возрастает вплоть до энергий протона $\sim 1 - 7$ ГэВ, достигая относительно небольших значений, а затем слабо меняется.

Рассмотренные особенности сечений смещения относятся к неупругому каналу взаимодействия нуклонов с ядрами. При упругом рассеянии протонов основной вклад в сечение смещения атомов дает область энергий ПВА, при которых различие результатов, полученных с использованием различных каскадных функций, становится несуще-

формул (9)-(11) с учетом реалистической зависимости электронных потерь и поправки, возникающей из-за различий

σ_d^{exp} и σ_d^n .

На рис.4 показаны сечения смещения для неупругих взаимодействий протонов с ^{58}Ni при энергиях от 0.1 до 25 ГэВ. Сечение, полученное с помощью модели NRT-стандарт, отличается от сечения σ_d , рассчитанного на основе более точных подходов в пределах 5-20% в зависимости от энергии первичных протонов.

Отмеченное увеличение значений функции $v(T)$ по сравнению с $v(T)_{\text{NRT}}$ (рис.2) в обла-

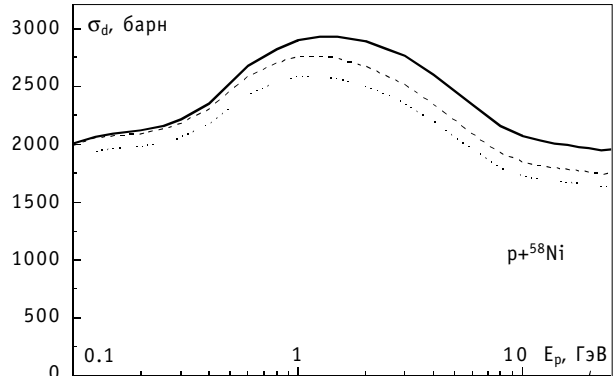


Рис.4. Сечения смещения для неупругих взаимодействий протонов с ^{58}Ni , рассчитанные с использованием различных каскадных функций (обозначения те же, что на рис.2)

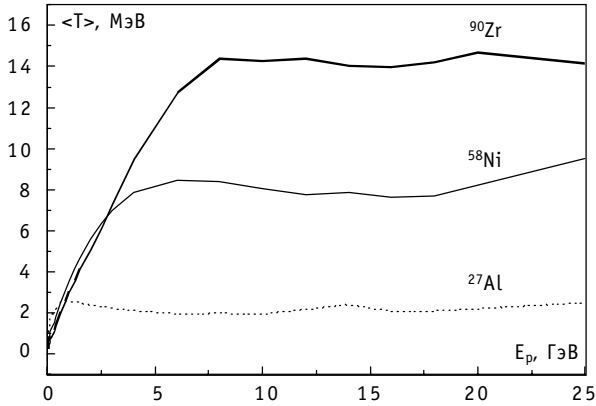


Рис.5. Средняя энергия $\langle T \rangle$, переданная ПВА при неупругих взаимодействиях протонов с ядрами ^{27}Al , ^{58}Ni , ^{90}Zr

ственным. При высоких энергиях ПВА, для которых это различие существенно, основной вклад в сечение смещения вносят неупругие взаимодействия.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрено поведение каскадной функции, определяющей число созданных пар Френкеля в материале, при высоких энергиях налетающих ионов. Показано, что при энергиях ионов выше $0.025 Z_1^{4/3} A_1$ МэВ предсказания на основе модели NRT-стандарт существенно отличаются от полученных на основе реалистических каскадных функций.

Проведены расчеты сечения смещения атомов для ряда материалов с атомными номерами Z от 13 до 28 под действием протонов с энергиями вплоть до 25 ГэВ. Показано, что сечение смещения может быть рассчитано на основе модели NRT-стандарт с погрешностью 5-20% относительно более точного расчета.

Литература

1. Norgett M.J., Robinson M.T., Torrens I.M. A Proposed Method of Calculating Displacement Dose Rates // Nuclear Engineering and Design. – 1975. - V.33. - P. 50-54.
2. Dunlop A., Lesueur D. Damage Creation via Electronic Excitations in Metallic Targets // Radiat. Effects and Defects in Solids. – 1993. - V. 126. - P. 123-128.
3. Dunlop A., Lesueur D., Legrand P., Dammak H. Effects Induced by High Electronic Excitations in Pure Metals: a Detailed Study in Iron // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. – 1994. - V. B90. - P. 330-338.
4. Lindhard J., Scharff M., Schiott H.E. Range Concepts and Heavy Ion Ranges // K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. - 1963. - V. 33. - № 14.
5. Winterborn K.B., Sigmund P., Sanders J.B. K. Spatial Distribution of Energy Deposited by Atomic Particles in Elastic Collisions // Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. – 1970. - V. 37. – № 14.
6. Немец О.Ф., Гофман Ю.В. Справочник по ядерной физике. – Киев: Наукова думка, 1975.
7. Ziegler J.F. Handbook of Stopping Cross-Sections for Energetic Ions in All Elements. - Pergamon Press, 1977.
8. Tombrello T.A. Damage in Metals from MeV Heavy Ions // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. - 1995. - V. B95. - P. 501-504.
9. Барашенков В.С., Конобеев А.Ю., Коровин Ю.А., Соснин В.Н. Программный комплекс CASCADE/INPE // Атомная энергия. – 1999. - Т. 87. - Вып. 4. - С.283-286.

Поступила в редакцию 9.11.2000

heating of fuel rod simulator, made on special heat-physical test facility is carried out. The results of modelling were used for examination of calculation technique of the heat-exchange in fuel rod subject to core and cladding melting.

УДК 51-72:621.039.73

Efficiency of Fission Products Transmutation \Yu.A. Kazansky, D.A.Klinov; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy.Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering)-Obninsk,2000.- 9 pages, 2 illustrations, 2 tables.-References, 4 titles.

The transmutation efficiency of dangerous fission products has been considered. Mathematical model and calculation results are presented. It is shown that there is not profit in radioactivity level on the Earth from transmutation if Nuclear Power under operating.

УДК 51-72:539.172.12

Application of NRT-formula for Calculation of Displacement Cross-sections for Materials Irradiated by Nucleons of Intermediate and High Energy \A.Yu. Konobeyev, Yu.V. Konobeev, Yu.A. Korovin; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy.Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering)-Obninsk,2000.- 6 pages, 5 illustrations.-References, 9 titles.

The behavior of cascade function for calculation of radiation damage in materials has been investigated at high energy of incident ions. The calculation of displacement cross-sections has been carried out for the number of materials with atomic number $Z=13-28$, irradiated by protons with the energy up to 25 GeV. It is shown that the displacement cross-section can be obtained within 5-20% error with the help of NRT-formula.

УДК 51-72:621.039.516.4

Results of the Simulation of Parameters of the Fuel Cycle for the WWER-1000 Reactor with $(m\%Th^{232}, n\%U^{235}, k\%Pu^{239})O_2$ Fuel Compositions \I.V. Shamanin, A.A. Ukhov, H.-J.Ruetten, K.Haas, W.Sherer; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy.Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering)-Obninsk,2000.- 12 pages, 4 illustrations, 12 tables.-References, 3 titles.

General parameters of the WWER Reactor using $(m\%Th^{232}, n\%U^{235}, k\%Pu^{239})O_2$ fuel are analyzed. In all considered variations it was assumed that the construction of the active core and the fuel element assemblies are standard as for WWER-1000 reactor. Operation periods of 3, 4 and 5 burnup cycles were examined.

The aim of this study was to investigate the ability of the WWER-1000 as a potential nuclear power installation for the utilization of weapon grade plutonium in thorium-based fuel.

УДК 621.311:621.039.004.7

Decommissioning of the First NPP \G.S.Kotikov; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy.Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering)-Obninsk,2000.- 5 pages, 1 tables.-References, 3 titles.

The materials about life cycle of the First NPP (Obninsk), with channel reactor are given in this paper. Now station exhaust the resource and in the near future its decommissioning will be made. On the basis of the decision of Government in the First NPP building should the Russian museum of atomic engineering organized.

УДК 621.039.83:539.1:047

Short-lived Radionuclides in Experimental Nuclear Medicine and Biological Studies \G.A. Petrova, V.M. Petriev, V.G. Skvortsov; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy.Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering)-Obninsk,2000.- 6 pages, 3 illustrations, 2 tables.-References, 6 titles.