

УДК 539.171.016

## Моделирование точечных дефектов при радиационном повреждении материалов протонами, нейтронами и тяжелыми ионами

ШИЛЯЕВ Б. А., СЛАБОСПИЦКИЙ Р. П., ЯМНИЦКИЙ В. А., ТИМОШЕВСКИЙ Г. Ф., КОЗИНА Г. П., ЛЬВОВ А. Н., МИГАЛЕНЯ В. Я.

Математическое моделирование начальной стадии радиационного повреждения конструктивных материалов под воздействием нейтронов, протонов и многозарядных ионов может быть осуществлено в соответствии со схемой (рис. 1) и предусматривает определение энергетических и пространственных характеристик первичных выбитых атомов (ПВА) по двум независимым вариантам, учитывающим упругое и неупругое взаимодействие, а также обобщение этих данных и их использование для вычисления суммарных спектров на различной глубине материала. Этот подход продиктован необходимостью учета неупругого взаимодействия, обуславливающего ~ 50% радиационного повреждения [1].

Использование для расчетов общепринятых в ядерной физике моделей процессов упругого и неупругого (ядерные реакции) взаимодействий бомбардирующих частиц с атомами облучаемого материала позволяет получить надежные данные даже в тех случаях, когда соответствующий экспериментальный материал отсутствует.

В случае упругого рассеяния учет процесса образования составного ядра позволяет повысить оцениваемую методом достоверность  $\chi^2$

воспроизведения экспериментальных результатов от 0,9 до ~ 0,96. Хорошее совпадение полученных теоретических кривых с экспериментом в широком диапазоне энергий протонов и нейтронов и массовых чисел облучаемых элементов подтверждает достоверность расчета.

Энергетические спектры ПВА  $d\sigma/dT$  при упругом рассеянии рассчитываются с помощью обычных кинематических соотношений с использованием дифференциальных поперечных сечений упругого рассеяния протонов (нейтронов), полученных описанным ранее [2] способом:

$$d\sigma/dT = 4\pi (d\sigma/d\Omega)/\Lambda E, \quad (1)$$

где  $E$  — энергия бомбардирующих частиц;  $\Lambda = 4Mm/(m + M)^2$ ;  $m$  — масса частицы;  $M$  — масса атома облучаемого элемента;  $T$  — энергия ПВА.

Существенная неоднородность пространственно-энергетических распределений ПВА [2] может приводить к появлению процессов каналирования или фокусировки. Без учета дифракционной структуры спектров ПВА влияние этих процессов на сечение образования точечных дефектов в расчетах будет упущено.

На последующем этапе программы исследований — в расчете спектров ПВА при неупру-

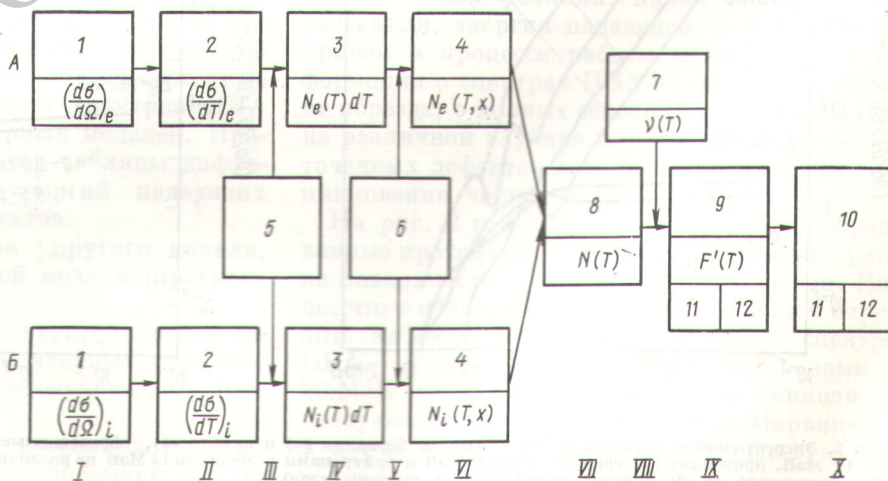


Рис. 1. Программа работ по математическому моделированию радиационного разрушения материалов:

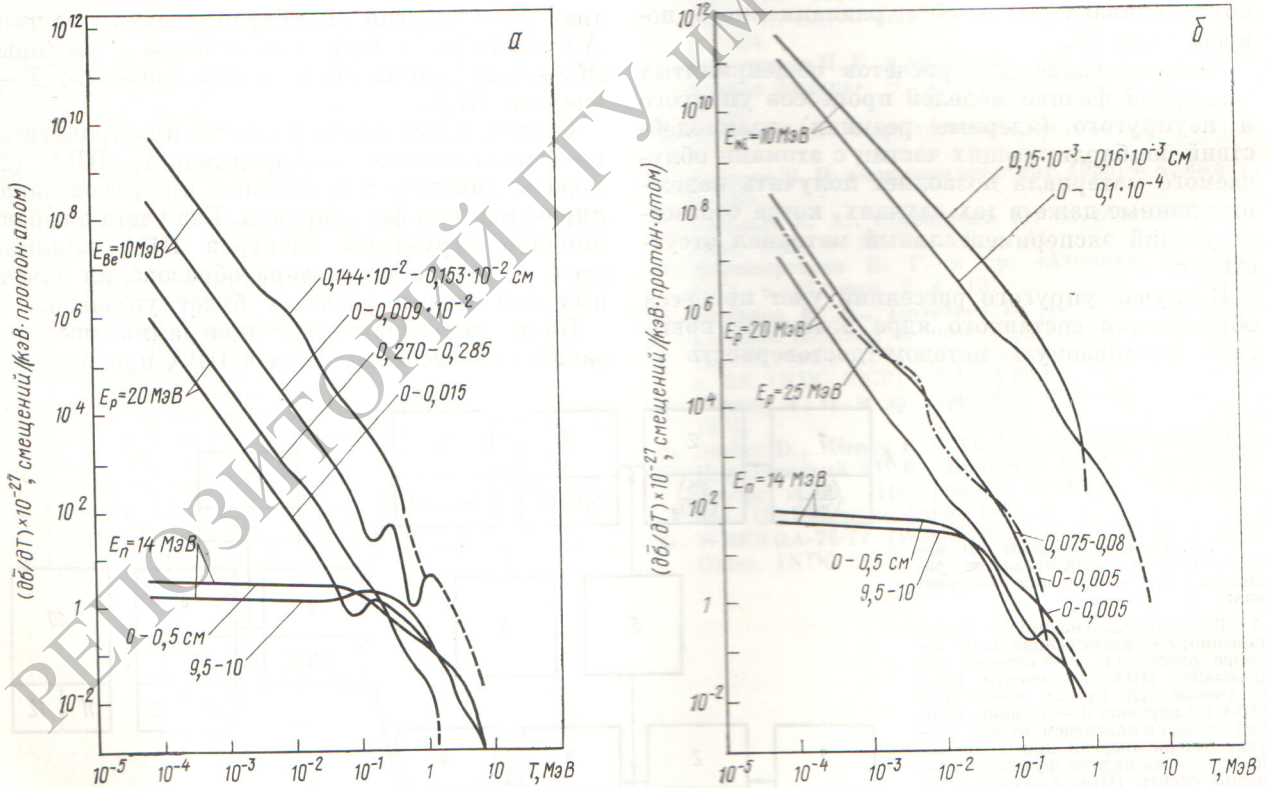
А и Б — упругие и неупругие столкновения; 1 — дифференциальное сечение рассеяния; 2 — сечение образования ПВА; 3 — спектр ПВА с учетом  $\Delta E$  пучка; 4 — спектр ПВА по глубине; 5 — разброс энергии частиц в падающем пучке; 6 — учет потери энергии при торможении; 7 — каскадная функция; 8 — общий спектр ПВА; 9 — спектр точечных дефектов; 10 — скопления дефектов, примесные нарушения и дефекты; 11 — расчет; 12 — эксперимент; I — X — этапы исследования

гом рассеянии бомбардирующих частиц — используется модель предравновесного распада [3]. Спектры ПВА в этом случае определяются из энергетических спектров вторичных частиц — продуктов различных ядерных реакций:  $(p, p')$ ,  $(p, n)$ ,  $(p, d)$ ,  $(p, \alpha)$ ,  $(n, n')$ ,  $(n, \alpha)$ ,  $(n, p)$  и т. п. На современном уровне развития этой модели угловое распределение продуктов реакции в системе центра масс (или инерции) приходится принимать изотропным.

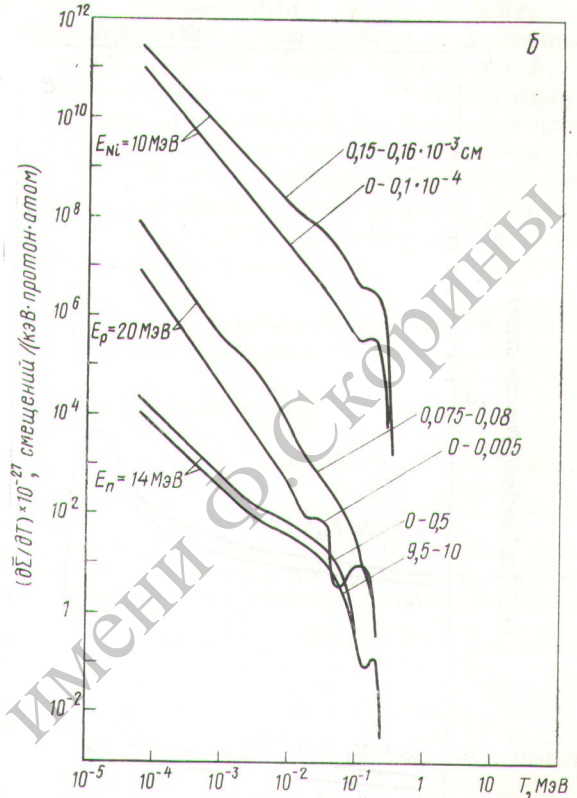
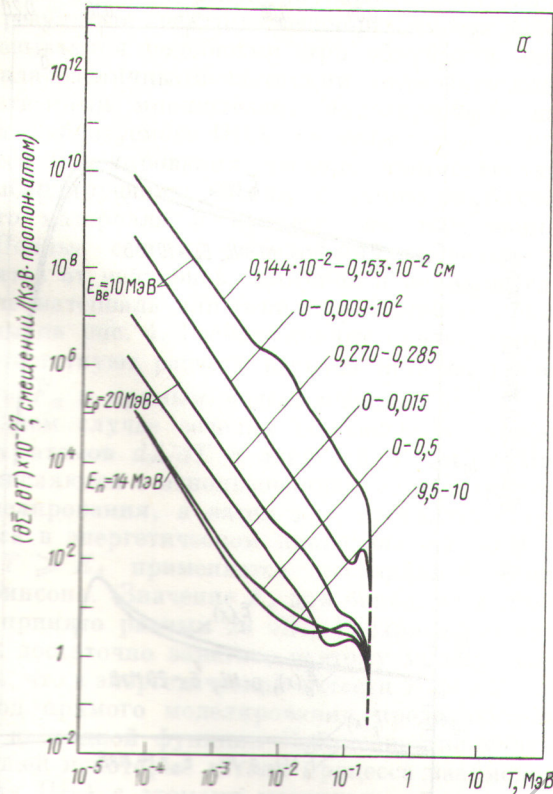
Диапазон энергий ионов при проведении имитационных работ практически простирается от 0,01 до 1 МэВ/нуклон. Нижняя энергетическая граница определяется необходимостью учета анизотропии кристаллической решетки, верхняя — практически достижимыми энергиями осколков деления ядер и нейтронов в атомном реакторе.

В указанном энергетическом диапазоне, как показали расчеты, уже не применима формула Резерфорда: необходим учет экранирования кулоновского потенциала. В то же время вклад неупругих ион-ионных процессов еще пренеб-

режимо мал. Расчет пространственных и энергетических распределений ПВА с учетом экранирования кулоновского потенциала проводился по формулам Линхарда [4]. Полученные значения близки к расчетным, приведенным в работе [5]. Упомянутые выше распределения справедливы только для очень тонких мишеней и моноэнергетических пучков первичных частиц. В образцах конечной толщины происходит энергетическое и геометрическое «уширение» первичного пучка за счет взаимодействия с ядрами атомов материала и процесса многократного рассеяния первичных частиц. Необходимо также учитывать спектр первичных частиц и геометрические характеристики исходного пучка. При учете этих факторов спектры ПВА усредняются по глубине материала и не соответствуют спектрам в тонких образцах. Кроме того, глубина проникновения частиц в материал не вполне эквивалентна среднему пробегу частиц. Учет реальных условий может быть осуществлен методом прямого статистического моделирования (метод Монте-Карло).



Р и с. 2. Энергетические спектры выбитых атомов бериллия (а) и никеля (б), образованные ионами бериллия и никеля с энергией 10 МэВ, протонами с энергией 20 и 2,5 МэВ и нейтронами с энергией 14 МэВ на различной глубине материала (цифры у кривых — расстояние от облучаемой поверхности и толщина слоя)



Р и с. 3. Энергетические спектры выбитых атомов бериллия (а) и никеля (б) в слоях указанной толщины (цифры у кривых) на различной глубине с учетом каскадного процесса

При моделировании (в отличие от работы [6]) исходные данные о пространственных распределениях и энергетических спектрах частиц вводятся непосредственно из расчетов по ядерным моделям и учитываются потери энергии бомбардирующих частиц по мере проникновения их в материал. Метод прямого моделирования оформлен специальной программой КАСКАД, имеющей прямые информационные связи с программой расчета спектров ПВА с помощью различных ядерных моделей. Программа использует двумерные таблицы дифференциальных сечений и энергий падающих частиц для следующих каналов:

один комплект спектров упругого канала, рассчитанных по оптической модели (программа «Оптика»);

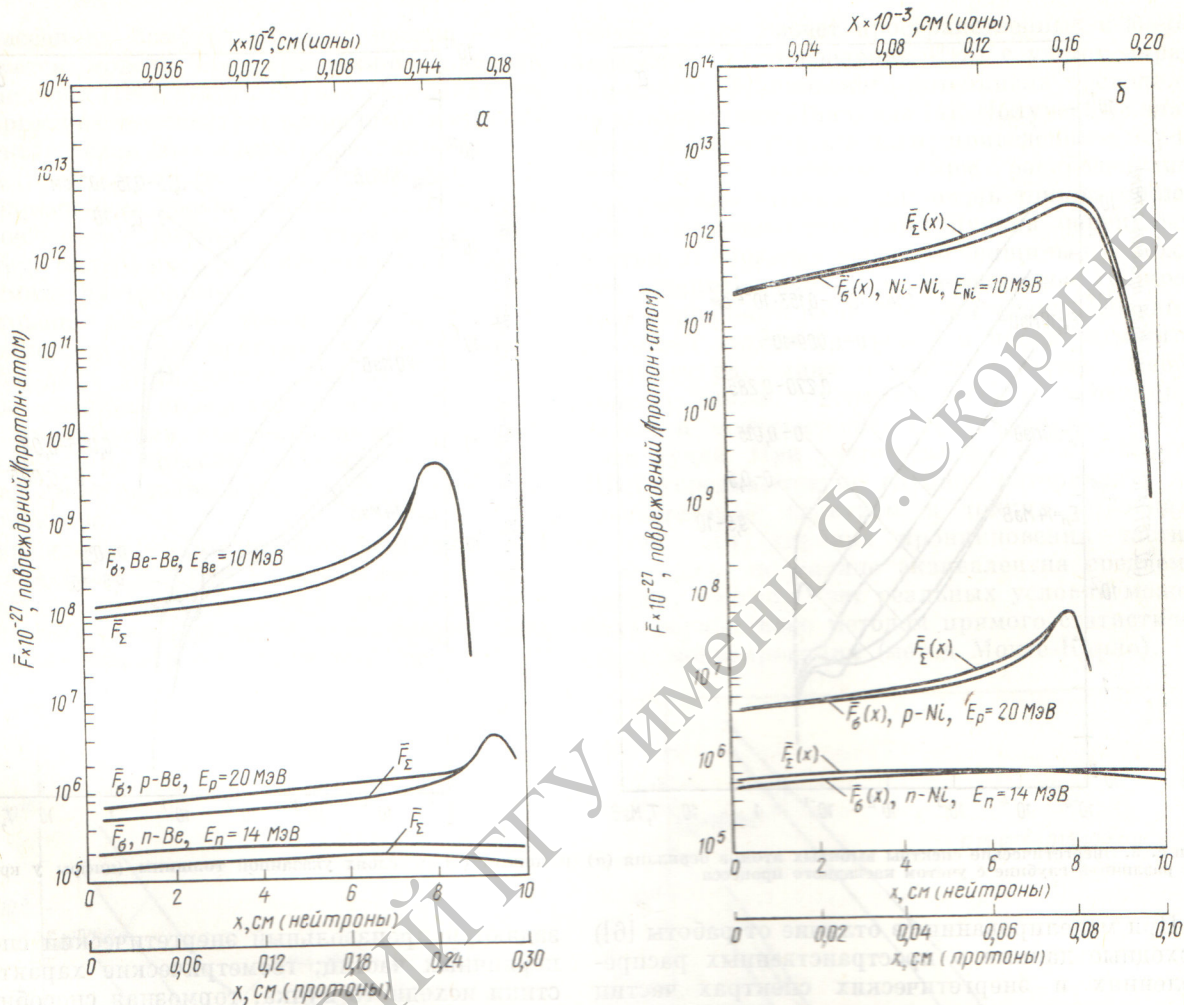
один комплект спектров неупругого канала (спектры вторичных частиц ядерных реакций, рассчитанные по модели предравновесного распада);

один комплект спектров рассеяния иона на ионе материала. Кроме того, с помощью таблиц

задаются произвольный энергетический спектр первичных частиц; геометрические характеристики исходного пучка, тормозная способность вещества для падающих частиц и ионов.

При расчете методом Монте-Карло генерируются точка реакции, канал реакции, угол рассеяния, энергия падающей частицы и т. п., причем в процессе работы накапливается информация о спектрах ПВА на различной глубине образца, о полных сечениях образования ПВА на различной глубине и о сечении образования точечных дефектов как функции глубины проникновения частиц в материал.

На рис. 2 приведены спектры ПВА, образованные протонами, нейтронами и ионами в районе поверхности и в конце пробега частиц. Видно, что в области  $T > 1$  кэВ для никеля и бериллия наблюдается хорошее подобие спектров ПВА, образованных 14-МэВ нейтронами и 20-МэВ протонами. Данные для никеля согласуются с результатами работы Марвика [7], в которой, однако, отсутствует обнаруженная тонкая структура спектров ПВА.



Р и с. 4. Полные сечения образования точечных дефектов при бомбардировке бериллия (а) и никеля (б) ионами с энергией 10 МэВ, протонами с энергией 20 МэВ и нейтронами с энергией 14 МэВ на различной глубине

Следующий этап моделирования — подсчет сечения образования точечных дефектов. Простейший способ подсчета — применение для каждого ПВА какой-либо каскадной функции:

$$\bar{F}_\sigma = \int_{2E_d}^{T_{\text{макс}}} (d\sigma/dT) k dT, \quad (2)$$

где  $E_d$  — энергетический порог смещения атома из равновесного положения в кристаллической решетке;  $T_{\text{макс}}$  — максимальная энергия в спектре ПВА;  $k$  — каскадная функция. Сравнение различных каскадных функций с данными экспериментов и машинного моделирования показало, что для широкого круга материалов наиболее пригодна универсальная каскадная функция Робинсона [8]. Однако для

энергии ПВА  $> 0,2$  МэВ использование известных функций не учитывает деталей процесса образования ПВА.

Последнее соображение заставило в случае ПВА с  $T \geq 0,2$  МэВ использовать метод прямого моделирования для расчета сечения образования выбитых атомов  $d\Sigma/dT$  [9]. Для этого используются вводимые в программу КАСКАД сечения ион-ионных взаимодействий. На рис. 3 приведены найденные методом прямого моделирования энергетические спектры смещенных атомов в слоях материала с учетом каскадного процесса (т. е. с учетом образования вторичных, третичных и прочих выбитых атомов). Учет каскадного процесса увеличивает число смещенных атомов низкой энергии (особенно в случае облучения материала нейтронами с энергией

14 МэВ, как это следует из сравнения рис. 2 и 3). В результате спектры смещенных атомов  $d\Sigma/dT$  оказываются подобными при облучении материала различными частицами, отличаясь количественным множителем. Моделирование каскада, образуемого ПВА, не отличается от процесса моделирования каскада взаимодействия бомбардирующих частиц с атомами облучаемого материала в процессе их торможения.

Полные сечения образования точечных дефектов от нейтронов, протонов и ионов по глубине материала для бериллия и никеля приведены на рис. 4. Расположенные парами кривые соответствуют расчету каскада методом Робинсона  $\bar{F}_\sigma$  и прямым моделированием  $\bar{F}_\Sigma$ . В последнем случае сечения образования смещенных атомов  $d\Sigma/dT$  с энергией  $T \geq 0,2$  МэВ вычисляются с использованием метода прямого моделирования, а затем для каскадного процесса в энергетическом диапазоне  $0,2 \text{ МэВ} \geq T \geq E_d$  применяется каскадная функция Робинсона. (Значение  $E_d$  для бериллия и никеля принято равным 24 эВ.) Расхождение кривых достаточно заметно, поэтому можно полагать, что в энергетической области  $T \geq 0,2$  МэВ метод прямого моделирования предпочтительнее каскадной функции Робинсона, не учитывая некоторые детали процесса взаимодействия ПВА с атомами материала.

Результаты расчета распределения точечных дефектов по глубине позволяют получить коэф-

фициенты для пересчета флюенса нейтронов применительно к облучению того же материала протонами или ионами. Для нейтронов с  $E_n = 14$  МэВ и протонов с  $E_p = 20$  МэВ в приповерхностном слое коэффициент пересчета флюенса равен 0,18, а для нейтронов и ионов никеля ( $E = 10$  МэВ) он составляет  $2,3 \cdot 10^{-6}$ . Для бериллия коэффициенты пересчета флюенса равны 0,3 и  $1,5 \cdot 10^{-3}$  (для нейтронов и ионов бериллия соответственно).

Поступила в Редакцию 20.IX.77  
В окончательной редакции 13.XII.77

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Logan C., Anderson I., Mukherjee A. «J. Nucl. Mater.», 1973, v. 48, p. 233.
2. Шиялев Б. А. и др. Препринт ХФТИ-76-45. Харьков, 1976.
3. Лопатко И. Д., Слабоспицкий Р. П., Чегорян М. А. В кн.: Тезисы докладов XXVI совещания по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра. Л., «Наука», 1976, с. 392.
4. Lindhard L., Scharff M., Schiøf H. «Mat.-fys. medd. danske vid. selskab», 1963, v. 33, N 14, p. 41.
5. Johnston W. e.a. «J. Nucl. Mater.», 1973, v. 47, p. 155.
6. Кеворкян Ю. Р. Препринт ИАЭ-2476. М., 1974.
7. Marwick A. «J. Nucl. Mater.», 1975, v. 55, p. 259.
8. Robinson M. In: Nuclear Fusion Reactors. British Nuclear Energy Society. L., 1974, p. 140.
9. Козина Г. П. и др. В кн.: Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. Вып. 1 (4). Харьков, изд. ХФТИ, 1977, с. 25.

УДК 621.039.3

## Разделение изотопов хлора термодиффузией в жидкой фазе

РАБИНОВИЧ Г. Д., ИВАХНИК В. П.

В литературе опубликовано небольшое число работ по разделению изотопов хлора термодиффузией.

Впервые Клузиус и Диккель, применяя метод термодиффузионного разделения, осуществили в газообразном HCl обогащение  $^{35}\text{Cl}$  и  $^{37}\text{Cl}$  до 99,5% [1]. Возможность разделения изотопов хлора термодиффузией в жидкой фазе исследовалась Фурнье [2], а также Абельсоном и Гувером [3], которые в качестве рабочего вещества использовали  $\text{CCl}_4$ .

На перспективность применения жидкофазного термодиффузионного процесса было обращено внимание Александером [4], определившим для изотопов хлора в трихлорэтилене

и в хлористом бутиле значение термодиффузионных постоянных  $\alpha = 0,1$  [5, 6]. В газовых изотопических смесях это значение, как правило, не превышает 0,02. Однако удельный расход тепла на единицу обогащенного продукта в газовой и жидкофазной термодиффузии практически одинаков [7]. Тем не менее последнюю следует рассматривать как более выгодный процесс, использующий низкопотенциальное тепло, которое во много раз дешевле, чем электрическая энергия, необходимая при газовой термодиффузии.

Исследование, выполненное в 1974 г., ставило целью установить технологическую целесообразность обогащения изотопов хлора в жидкой