

Р и с. 2. Распределение по глубине концентрации внедренных в ниобий ионов ${}^3\text{He}$ энергией 9 кэВ при $\Phi = 1,5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$ (левая шкала) и дефектов (правая шкала):

— расчет; ● — статистическая погрешность расчета; ○ — эксперимент [7]

точно близок к экспериментальному. Это действительно имеет место при внедрении ${}^3\text{He}$ энергией 9 кэВ в ниобий [7], как показано на рис. 2 ($\Phi = 1,5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$). Небольшое различие для хвоста распределения, вероятно, связано с каналированием внедряемых ионов (образец поликристаллический) и диффузией гелия. Во втором случае $C_d(x) < n(x)$ для всех $x < R_p^{\text{макс}}$, кроме,

возможно, приповерхностной области мишени. Этот вариант справедлив для протонов энергией < 15 кэВ и для дейтронов энергией < 5 кэВ, внедряемых в ниобий и вольфрам, когда мала вероятность взаимодействия с дефектами и водород быстро диффундирует, вызывая характерное распределение с максимумом концентрации на поверхности. Экспериментально такое распределение было обнаружено в вольфраме, облученном протонами энергией 7,5 кэВ [8]. Но уже для трития, как показали расчеты [9], следует ожидать, по меньшей мере, частичной его стабилизации. Необходимо, однако, учесть, что при облучении мишени смешанным потоком ионов водорода и гелия возможно изменение условий стабилизации за счет дефектов, созданных ионами гелия. В таком случае приведенные выше распределения концентрации атомов и дефектов могут послужить исходными данными для расчетов диффузии и стабилизации внедренных атомов.

Поступило в Редакцию 5.1.78

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. McCracken G. «Rep. Prog. Phys.», 1975, v. 38, p. 244.
2. Kornelson E. «Rad. Effects», 1972, v. 13, p. 227.
3. Picraux S., Bottiger J., Rud N. «J. Nucl. Mater.», 1976, v. 63, p. 110.
4. Аккерман А. Ф., Никитунев Ю. М., Ботвин В. А. Решение методом Монте-Карло задач переноса быстрых электронов в веществе. Алма-Ата, «Наука», 1972.
5. Roth J. e.a. «J. Nucl. Mater.», 1976, v. 63, p. 120.
6. Youngblood G., Myhra S., Deford J. «Phys. Rev.», 1969, v. 188, p. 1101.
7. Scherzer B. e.a. «J. Nucl. Mater.», 1976, v. 63, p. 110.
8. Landford W. e.a. «Appl. Phys. Lett.», 1976, v. 28, p. 566.
9. Akkerman A. «Phys. Stat. Sol.», 1977, v. 83b, p. K145.

УДК 621.039.51:539.125.52

Алгоритмы оценки локальных возмущений линейных функционалов потока излучения методом Монте-Карло

ПОЛЕВОЙ В. Б.

Расчет малых возмущений линейных функционалов потока прямым блужданием с применением корреляционных весов рассматривался в работах [1, 2]. Аналогичный подход может быть развит и для сопряженного блуждания: псевдочастицы испускаются из области детектора, блуждают в невозмущенной системе до источника, и на одном наборе траекторий вычисляются невозмущенный функционал обычным образом (например, [3—7]) и его возмущение с помощью сопряженных корреляционных весов как математическое ожидание случайной величины:

$$\xi_{\Delta}^{+} = \sum_i^l S(x_i) W_i^{+} \left[\frac{S'(x_i)}{S(x_i)} \prod_{j=0}^i \frac{K'(x_j \rightarrow x_{j+1})}{K(x_j \rightarrow x_{j+1})} \times \right. \\ \left. \times \frac{\varphi'(x_0)}{\varphi(x_0)} - 1 \right], \quad (1)$$

где l — число столкновений на траектории псевдочастицы; W_i^{+} — текущий вес обычного сопряженного блуждания; $S(x)$ — распределение источников частиц; $\varphi(x)$ — функция чувствительности детектора; $K(x_j \rightarrow x_{j+1})$ — плотность вероятности перехода псевдочастицы из точки x_j в точку x_{j+1} фазового пространства $X = \{r, E, \Omega\}$ (штрихами здесь и далее отмечаются параметры возмущенной среды).

Оценка (1) будет несмещенной, если $K(x' \rightarrow x) \neq 0$ при $K'(x' \rightarrow x) \neq 0$; $\varphi(x) \neq 0$ при $\varphi'(x) \neq 0$, т. е. требуется, чтобы все траектории псевдочастиц, которые возможны в возмущенной среде, были возможны и в невозмущенной среде. Если эти условия не выполняются, то всегда можно подобрать промежуточную среду, в которой будут возможны все траектории невозмущенной и возмущенной задач, и осуществлять в ней сопряженное блуждание. Осредняемая при этом случайная величина

$$\eta_{\Delta}^* = \sum_{i=0}^l W_i^* \left[S'(x_i) \prod_{j=0}^i \frac{K'(x_j \rightarrow x_{j+1})}{K^*(x_j \rightarrow x_{j+1})} \frac{\varphi'(x_0)}{\varphi^*(x_0)} - S(x_i) \prod_{j=0}^i \frac{K(x_j \rightarrow x_{j+1})}{K^*(x_j \rightarrow x_{j+1})} \frac{\varphi(x_0)}{\varphi^*(x_0)} \right]. \quad (2)$$

(Звездочкой отмечены параметры промежуточной среды.)

Оценки (1) и (2) эффективны, когда область возмущения захватывает детектор или же составляет большую часть объема рассматриваемой системы при нелокализованном источнике. Аналогичные оценки возмущений прямым блужданием эффективны, когда область возмущения и детектор нелокализованы.

В настоящей статье рассматривается эффективный способ оценки локальных возмущений при нелокализованном источнике и детекторе, основанный на совместном применении сопряженного и прямого блужданий. Связка прямого и сопряженного блужданий осуществляется на поверхности возмущенного объема.

Можно показать, что поток $F(x)$ в системе источником $S(x)$ равен сумме:

а) потока $F_0(x)$, генерируемого в системе с черным объемом V_0 произвольной формы;

б) потока $F_{\Gamma}(x)$, генерируемого в системе источником $S_{\Gamma}(x)$ на поверхности Γ объема V_0 :

$$S_{\Gamma}(x) = \begin{cases} -(\mathbf{n}\Omega) F_0(x) & \text{при } \mathbf{r} \in \Gamma \text{ (} \mathbf{n} \text{ — внешняя нормаль в } x \text{),} \\ 0 & \text{иначе;} \end{cases}$$

в) потока $F_V(x)$, генерируемого в системе источником

$$S_V(x) = \begin{cases} S(x) & \text{при } \mathbf{r} \in V_0, \\ 0 & \text{иначе,} \end{cases}$$

т. е. $F(x) = F_0(x) + F_{\Gamma}(x) + F_V(x)$.

Для оценки возмущения линейного функционала $L = \int F(x) \varphi(x) dx$ достаточно, очевидно, смоделировать методом Монте-Карло только компоненты $F_{\Gamma}(x)$ и $F_V(x)$ потока $F(x)$, приняв за V_0 возмущенный объем системы. Эта цель достигается применением следующего алгоритма 1:

1. Возмущенный объем заменяется черным телом.
2. Равномерно на поверхности Γ тела разыгрываются координаты точки рождения \mathbf{r}_0 псевдочастицы.
3. Энергия псевдочастицы E_0 разыгрывается из априорного спектра $F(E)$ на поверхности Γ .
4. Направление полета Ω_0 разыгрывается изотропно в полусфере $(\mathbf{n}\Omega) > 0$.

Полученные таким образом координаты $x_0^* = (\mathbf{r}_0, E_0, \Omega_0)$ являются выборочными значениями из распределения $S_{\Gamma}(x) = \tilde{F}(E)/2\pi\Pi$, где Π — площадь поверхности Γ .

5. Прослеживаются сопряженным блужданием из x_0^* траектории N^+ псевдочастиц с начальным весом $W_0^+ = 1$ и оценивается поток

$$F_0(x) = M\hat{F}_0(x_0); \quad \hat{F}_0(x_0) = \sum_{i=0}^l W_i^+ S(x_i); \quad x_0 = (\mathbf{r}_0, E_0, -\Omega_0),$$

где l — число столкновений на траектории псевдочастицы; M — символ математического ожидания.

6. Восстанавливается среда в возмущенном объеме.

7. Прослеживается прямым блужданием из x_0 траектория частицы с начальным текущим весом

$$W_0 = (\mathbf{n}\Omega_0) \frac{2\pi\Pi}{\tilde{F}(E_0)} \frac{1}{N^+} \sum_{j=1}^{N^+} \hat{F}_{0j}(x_0)$$

и начальным корреляционным весом $W_B = 1$.

8. Аналогично выбираются начальные координаты, веса и прослеживаются N_{Γ} траекторий частиц, которые и моделируют искомый компонент потока $F_{\Gamma}(x)$.

9. Разыгрываются обычным образом из объемного источника $S_V(x)$ и прослеживаются прямым блужданием траектории N_V частиц, которые и моделируют искомый компонент потока $F_{V_0}(x)$. Возмущение функционала L может быть оценено на $N_{\Gamma} + N_V$ траекториях методом корреляционных весов, а также коррелированной выборкой и т. п. Аналогичный алгоритм использован в работе [8] для расчета малых локальных возмущений реактивности ядерных реакторов.

Алгоритм 1 дает возможность оценивать эффекты сравнительно однородных локальных возмущений. Весьма часто встречаются сочетания слабого возмущения в относительно большом объеме V_1 и сильного возмущения в относительно малом объеме V_2 . При этом эффекты от каждого возмущения могут быть очень близки и разного знака. Простейшие примеры возмущений такого рода — сжатие облучаемого образца, компенсация эффекта Доплера активной зоны реактора перемещением регулирующего стержня. Алгоритм 1 в подобных ситуациях обеспечивает моделирование только компонентов $F_V(x)$ и $F_{\Gamma}(x)$ потока, но дает сравнительно низкую эффективность оценки влияния сильно локализованного возмущения. Целесообразно поток $F(x)$ в этом случае представить в виде суммы

$$F(x) = F_{\Gamma_2}(x) + F_{V_2}(x) + F_{\Gamma_1}(x)|_{V_2} + F_{V_1}(x)|_{V_2} + F_0(x),$$

где $F_{\Gamma_1}|_{V_2}$ и $F_{V_1}|_{V_2}$ — потоки, генерируемые соответствующими источниками в среде с черным телом в объеме V_2 . Эффективно смоделировать каждый компонент потока позволяет следующий алгоритм 2:

1—4. Операции такие же, как в алгоритме 1, если под возмущенным объемом понимать V_2 .

5. Прослеживаются сопряженным блужданием из x_0^* траектории N_2^+ псевдочастиц с единичным начальным весом и оцениваются потоки

$$F_2(x_0) = M\hat{F}_2(x_0); \quad \hat{F}_2(x_0) = \sum_{i=0}^l W_i^+ S(x_i);$$

$$F_2'(x_0) = M\hat{F}_2'(x_0);$$

$$\hat{F}_2'(x_0) = \sum_{i=0}^l W_i^+ S'(x_i) \prod_{j=0}^i \frac{K'(x_j \rightarrow x_{j+1})}{K(x_j \rightarrow x_{j+1})}.$$

Отличие F_2' и F обусловлено возмущением в V_1 .

6. Восстанавливается среда в V_2 .

7. Прослеживается прямым блужданием из x_0 траектория частицы с начальным текущим весом

$$W_0 = (n\Omega_0) \frac{2\pi\Pi_2}{\tilde{F}(E_0)} \frac{1}{N_2^+} \sum_{j=1}^{N_2^+} \hat{F}_{2j}(x_0)$$

и начальным корреляционным весом

$$W_B = \sum_{j=1}^{N_2^+} \hat{F}'_{2j}(x_0) / \sum_{j=1}^{N_2^+} \hat{F}_{2j}(x_0) \approx M \frac{F'_2(x_0)}{F_2(x_0)}$$

8. Аналогично выбираются начальные координаты, веса и прослеживаются N_{Γ_2} траекторий частиц, которые моделируют компонент потока $F_{\Gamma_2}(x)$.

9. Разыгрываются обычным образом из объемного источника $S_{V_2}(x)$ и прослеживаются прямым блужданием траектории N_{V_2} частиц, которые моделируют компонент потока $F_{V_2}(x)$.

10. По алгоритму 1 обрабатывается возмущенный объем V_1 , причем объем V_2 заменяется черным телом. В результате моделируются компоненты потока $F_{\Gamma_1}(x)|_{V_2}$ и $F_{V_2}(x)$ на $N_{\Gamma_1} + N_{V_1}$ траекториях.

Искомое возмущение функционала L оценивается на $N_{\Gamma_2} + N_{V_2} + N_{\Gamma_1} + N_{V_1}$ траекториях частиц методом корреляционных весов.

В зависимости от характера конкретного возмущения и возмущаемого функционала нетрудно сконструировать адекватную вычислительную схему на основе приведенных алгоритмов.

Поступило в Редакцию 11. I. 78

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Михайлов Г. А. «Журн. вычисл. мат. и мат. физ.», 1967, т. 7, № 4, с. 915.
2. Золотухин В. Г. В кн.: Вопросы физики ядерных реакторов. Вып. 1. Обнинск, изд. ФЭИ, 1968, с. 140.
3. Хисамутдинов А. И. «Журн. вычисл. мат. и мат. физ.», 1968, т. 8, № 2, с. 467.
4. Kalos M. «Nucl. Sci. and Engng», 1968, v. 33, p. 284.
5. Irving D. «Nucl. Engng and Design», 1971, v. 15, p. 273.
6. Полевой В. Б. «Атомная энергия», 1973, т. 34, вып. 4, с. 296.
7. Полевой В. Б. В кн.: Ядерные константы. Вып. 20, ч. 2. М., Атомиздат, 1975, с. 176.
8. Lindauer E. «Ber. Forschungsarb. Inst. Kerntechn. Techn. Univ. Berlin», 1973, N 29 (Реф. журн. «Ядерная физика», 1975, вып. 4, № В724).

УДК 621.039.51

Распределение пористости в никеле при облучении ионами аргона

ЛЕБЕДЕВ С. Я., РУДНЕВ С. И.

Исследовано распределение пористости по глубине предварительно отожженных образцов никеля (99,9 ат.%) при облучении их ионами Ar^+ с энергией 1 МэВ при температуре 625 °С. Доза облучения составляла $7 \cdot 10^{16}$ ион/см², плотность тока 4–6 мкА/см². После облучения с поверхности образцов методом виброполировки снимали слои определенной толщины, затем с обратной стороны образцы электролитически утоняли и просматривали на электронном микроскопе.

При исследовании облученной поверхности образцов блистеры не были обнаружены, так как критическая

доза образования блистеров при указанных условиях составляет $(1,5 \div 2) \cdot 10^{17}$ ион/см² [1]. Электронно-микроскопическое исследование показало, что поры образуются на глубине 0,2–0,65 мкм. Начиная с глубины 0,45 мкм наряду с порами наблюдались дислокационные петли. График распределения объема полостей представлен на рис. 1. Согласно расчету, проведенному по известной методике [2], ионы аргона с энергией 1 МэВ пробегают ~0,6 мкм, а наибольшая плотность радиационных повреждений возникает на глубине ~0,5 мкм и для данной дозы облучения в пике повреждения составляет ~40 смещ./атом. Если принять во внимание, что все атомы аргона локализируются в довольно узком слое (~0,2 мкм) в конце пробега, то концентрация газа здесь достигает 3–4 ат.%. Если даже предположить, что весь аргон находится в порах, то на одну пору приходится всего три атома аргона, т. е. наблюдаемые поры являются вакансионными с незначительным количеством газа. На микрофотографии структуры облученных образцов никеля (рис. 2) видно, что концентрация пор на глубине 0,55 мкм примерно в 13 раз выше, а их средний диаметр в два раза меньше, чем на глубине 0,35 мкм.

На рис. 3 представлены экспериментально полученные распределения пор по размерам на различной глубине от поверхности облученных образцов, а в таблице приведены вычисленные параметры. Видно, что распухание на глубине 0,55 мкм вызвано в основном высокой концентрацией пор, а на глубине 0,35 мкм — размерами этих пор.

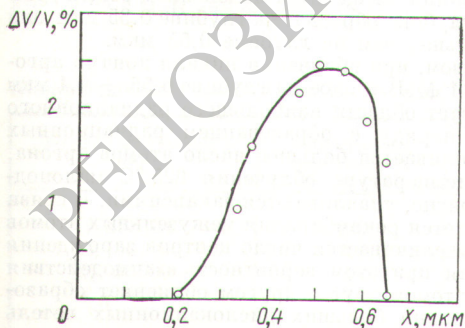


Рис. 1. Распределение объема полостей по глубине облученного образца