



UA0801495

ХФТИ 2006-4

НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК УКРАИНЫ
Национальный научный центр
«Харьковский физико-технический институт»

Б.А. Шляев, В.Н. Воеводин

**РАСЧЕТЫ ПАРАМЕТРОВ РАДИАЦИОННОГО
ПОВРЕЖДЕНИЯ МАТЕРИАЛОВ НЕЙТРОНАМИ
ИСТОЧНИКА ННЦ ХФТИ/ ANL USA
С ПОДКРИТИЧЕСКОЙ СБОРКОЙ,
УПРАВЛЯЕМОЙ УСКОРИТЕЛЕМ ЭЛЕКТРОНОВ**

Препринт

**Харьков
2006**

УДК 539.171.016:539.2:581.3

РАСЧЁТЫ ПАРАМЕТРОВ РАДИАЦИОННОГО ПОВРЕЖДЕНИЯ МАТЕРИАЛОВ НЕЙТРОНАМИ ИСТОЧНИКА ННЦ ХФТИ/ ANL USA С ПОДКРИТИЧЕСКОЙ СБОРКОЙ, УПРАВЛЯЕМОЙ УСКОРИТЕЛЕМ ЭЛЕКТРОНОВ: Препринт ХФТИ 2006-4 / Б.А. Шилиев, В.Н. Воеводин. - Харьков: ННЦ ХФТИ, 2006. 20 с.

Представлены возможности нейтронного источника ННЦ ХФТИ/ANL USA с подкритической сборкой, управляемого ускорителем электронов с энергией 200 МэВ и мощностью пучка 100 кВт для экспериментального изучения и моделирования процессов радиационного повреждения реакторов деления и синтеза. Обсуждаются вопросы влияния неравновесных процессов взаимодействия нейтронов с возрастанием их энергии на энергетический спектр первично-выбитых атомов, сечения радиационного повреждения и уровни генерации гелия и водорода. Приводятся результаты расчётов зависимости сечения радиационного повреждения от энергии нейтронов в диапазоне 0,1...200 МэВ, скорости набора дозы радиационного повреждения и генерации атомов гелия и водорода для железа, бериллия, сталей 304SS и T91. Приводятся сравнения с известными аналогичными результатами.

Рис. 13, табл. 2, список лит. – 23 назв.

1. ВВЕДЕНИЕ

Экспериментальное исследование индуцированного нейтронами радиационного повреждения структурных материалов ядерных установок атомной энергетики является фундаментальным направлением в определении ресурса элементов их конструкций и может значительно дополнить существенную базу данных для развития математических моделей описания происходящих при облучении радиационно-материаловедческих процессов. Макроскопические радиационные повреждения элементов структуры активной зоны ядерно-энергетических установок (ЯЭУ) являются следствием одновременно происходящих двух фундаментально важных типов взаимодействия частиц излучений с атомами материала:

- атомных смещений, образующих дефекты матрицы вакансионного типа и межузельные структуры из смещенных атомов и дислокационных петель;

- ядерных реакций, создающих атомы чужеродных элементов.

Ядерные реакции приводят к образованию в металлах атомов газа - гелия и водорода, которые захватываются и удерживаются вакансиями и вакансионными кластерами. Захват и удержание атомов газа вакансиями и вакансионными кластерами существенно влияет на эволюцию первичного радиационного повреждения, изменяя температурную зависимость динамических параметров их поведения, - подвижности и разложения. При высоких температурах $T \geq 0,5 T_m$ (T_m - температура плавления облучаемого металла) атомы He способны мигрировать вакансионным механизмом последовательного замещения на границы зерен или раздела двух фаз с образованием пузырьков газа, что приводит к драматическому охрупчиванию металлов. При более низкой температуре $0,2 T_m < T < 0,5 T_m$ гелиевое охрупчивание возникает при концентрации около 1 ат.% [1,2].

Важным следствием образования и накопления радиационных повреждений при облучении металлов высокоэнергетичными частицами является их упрочнение (увеличение предела текучести δ_y) и охрупчивание (уменьшение предела прочности).

Вклад в упрочнение вносят два типа компонентов радиационной микроструктуры [3]:

- кластеры точечных дефектов (вакансий и смещенных атомов);
- локальные выделения атомов газа, приводящие к возникновению пузырьков.

Основные знания о кинетике образования дефектов радиационной микроструктуры получены с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ТЕМ) и малоуглового рассеяния нейтронов (SANS) [4]. Представленные на рис. 1 и 2 результаты механических испытаний образцов сталей ясно свидетельствуют о сильном воздействии атомов гелия и водорода на механические свойства, приводящем к упрочнению и потере пластичности [5, 6].

При обсуждении вклада гелия в упрочнение сталей используется «модель дисперсионного барьерного упрочнения», вызванного дискретными препятствиями скольжению дислокаций. В этой модели увеличение предела текучести δ_y описывается выражением [3]:

$$\Delta\sigma_y = M\alpha\mu b \cdot \sqrt{RN} \approx \sqrt{RN},$$

где N – концентрация пузырьков гелия, R – их средний радиус, M – средняя величина параметра Тэйлора для поликристалла в напряженном состоянии, α – мощность помех малых кластеров дефектов, μ – модуль сдвига, b – вектор Бюргера движения дислокаций. В соответствии с этой моделью, вклад пузырьков гелия в упрочнение, описываемое функцией \sqrt{RN} , возрастает очень слабо с увеличением концентрации атомов He, и на начальном этапе облучения упрочнение возрастает благодаря радиационному повреждению смещенными атомами.

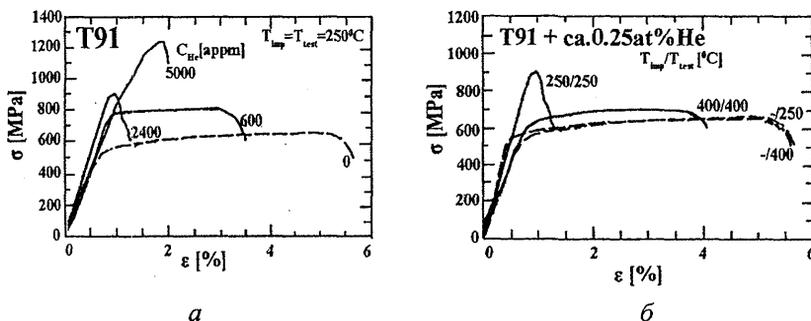


Рис. 1. Кривые механических испытаний образцов стали Т91 на растяжение (нагрузка δ / деформация ϵ , скорость изменения нагрузки $8,5 \cdot 10^{-3}/\text{с}$): а – после имплантации гелия до концентрации 0 ... 0,5 ат% (при 250°C); б – при различных температурах испытаний (250°C и 400°C) после имплантации 0,25 ат.% He (0,4 дра)

2. РАДИАЦИОННЫЕ УСЛОВИЯ ЯЭУ И УСЛОВИЯ ИМИТАЦИИ РАДИАЦИОННЫХ ПОВРЕЖДЕНИЙ НЕЙТРОНАМИ ИСТОЧНИКА ННЦ ХФТИ/ANL USA

Параметры нейтронного радиационного повреждения материалов конструкций активной зоны (АЗ) и корпуса давления реактора ВВЭР-1000 представлены в табл. 1 [7]. На рис. 3 обозначены области величин скоростей образования смещений и генерации атомов He в различных существующих и разрабатываемых в настоящее время источниках нейтронов [8]. Здесь же приведены данные для разрабатываемого в ННЦ ХФТИ (совместно с ANL USA) источника нейтронов с управляемой ускорителем электронов подкритической сборкой. Источник нейтронов с энергией 14 МэВ на основе реакции T(d,n) был запущен в 1965 г. в ННЦ ХФТИ и работает до сих пор (см. рис.3 RTNS). Нейтроны этого источника образуют энергетический спектр ПВА в железе с максимальной энергией 1 МэВ и средней энергией ~ 50 кэВ (с учетом неупругого рассеяния нейтронов). Скорость набора дозы радиационного повреждения составляет $\approx 0,01 \dots 0,02$ дпа/год. Для имитации радиационного нейтронного повреждения в материалах конструкций существующих и разрабатываемых ЯЭУ нужны более высокие параметры (см. табл. 1).

Таблица 1

Параметры радиационного повреждения нержавеющей стали в
активных зонах существующих и разрабатываемых ЯЭУ

Параметр	Имплантация	Реактор деления на быстрых нейтронах	Реактор синтеза	Источник нейтронов реакции расщепления	Источник нейтронов ННЦ ХФТИ/ANL USA
дпа/с	$1,5 \cdot 10^{-6}$	10^{-6}	10^{-6}	$2 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-8}$
ат. He/ат. с	$1,5 \cdot 10^{-8}$	$2 \cdot 10^{-13}$	$6 \cdot 10^{-12}$	$3 \cdot 10^{-10}$	$1,5 \cdot 10^{-14}$
He/дпа	10^{-2}	$2 \cdot 10^{-7}$	$6 \cdot 10^{-6}$	$1,5 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-7}$

Характер радиационного повреждения металлов зависит от скорости набора дозы (дпа/с) радиационного повреждения смещений, которая определяет направление процессов эволюции первично-созданной радиационной микроструктуры; скорость генерации атомов He влияет на плотность и геометрические размеры образуемых им пузырьков газа; соотношение указанных скоростей (т.е. отношение ат. He/ дпа) и температура среды определяют “критические” величины этих параметров, резко усиливающих процесс упрочнения облучаемых материалов (прирост предела текучести δ_y).

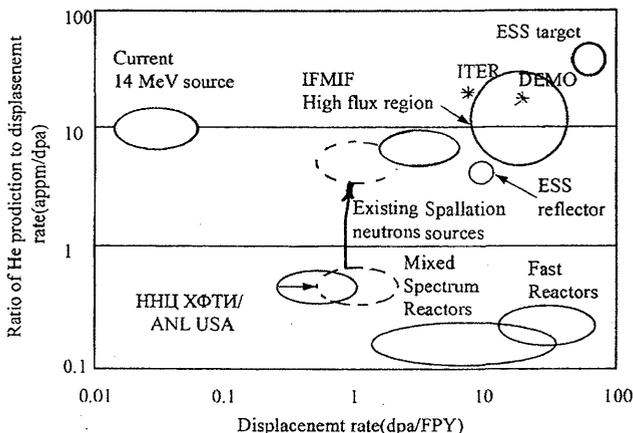


Рис.3. Диапазоны величин скорости создания дефектов (NRT) и генерации атомов He в нержавеющей стали нейтронами различных ЯЭУ: источника RTNS-II (14 МэВ); реакторов со смешанным спектром нейтронов – HFIR, HFR, CM-2; существующими источниками нейтронов на основе реакции расщепления (spallation) – PIREX, SINQ, LAMPF и ISIS, реакторов синтеза – ITER, DEMO; разрабатываемого европейского нейтронного источника расщепления – ESS; источника нейтронов на основе реакции $Li(d,n)$ -IFMIF ($E_d = 45$ МэВ) [8]

Установившаяся интенсивность потока нейтронов в подкритической сборке, управляемой ускорителем электронов с энергией 200 МэВ при подкритичности $K_{эфф} = 0,98$, при умножении потока нейтронов внешней мишени за счет реакций деления изотопов урана (20% ^{235}U) и реакций множественного рождения нейтронов (n, xn), достигает в центре АЗ величины $\Phi = 3,7 \cdot 10^{13}$ н/см²с [10]. Этот поток нейтронов обеспечивает максимальную скорость набора дозы радиационного повреждения для железа $3 \cdot 10^{-8}$ dpa /с (т.е., ~ 1 dpa/год), скорость генерации атомов He $\approx 1,5 \cdot 10^{-14}$ ат.Не/с.атом, и He/dpa = $5 \cdot 10^{-7}$ (см. табл. 1).

Увеличение интенсивности внешнего источника нейтронов за счет включения второго ускорителя и облучения мишени встречным пучком электронов той же мощности (см. рис.4) позволит продвинуть область параметров до 2 dpa/год (см. рис.3, пунктир).

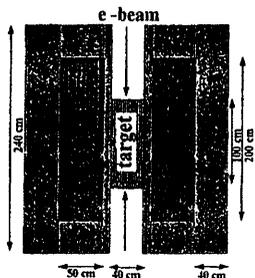


Рис.4. Кольцеобразная активная зона подкритического реактора, управляемого двумя ускорителями электронов [9]

Для увеличения отношения $\text{He}/\text{дра}$ необходим более жесткий энергетический спектр нейтронов. Хорошими спектральными характеристиками обладает энергетический спектр внешнего источника нейтронов подкритической сборки НИЦ ХФТИ/ANL USA [10] (см. рис. 5 и 6). Этот спектр нейтронов обеспечивает высокое интегральное сечение образования смещений ($\delta_d = 1123$ барна, что в $\sim 1,3$ раза выше, чем интегральное сечение смещений для Fe в спектре нейтронов деления урана – 235) [11] и более высокое (в ~ 22 раза) интегральное сечение генерации атомов He.

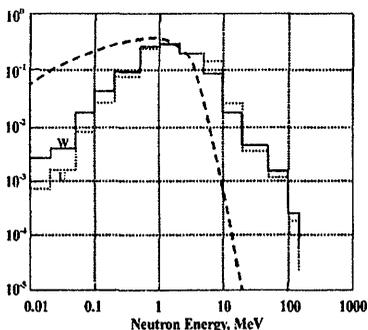


Рис.5. Нормированный энергетический спектр нейтронов внешнего источника от мишени из чистого урана и вольфрама, бомбардируемой электронами с энергией 200 МэВ. ----- - установленный энергетический спектр нейтронов в АЗ подкритической сборки после усиления внешнего потока нейтронов в процессе реакций нейтронов (n, xn) уранового топлива подкритической сборки с коэффициентом деления 50 ($K_{эф} = 0,98$)

Но обеспечить необходимую скорость набора дозы радиационного повреждения, определяемую произведением сечения смещений δ_d и плотности потока нейтронов Φ , этот источник нейтронов не может.

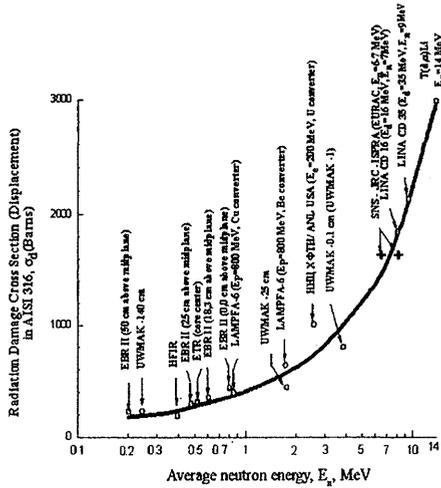


Рис.6. Зависимость сечения радиационного повреждения стали 316SS от средней (по спектру) энергии нейтронов

3. РАСЧЕТЫ ОБРАЗОВАНИЯ АТОМОВ ГАЗА (He и H) В МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ КОНСТРУКЦИЙ ЯЭУ

Прежде, чем проводить расчеты образования новых элементов в ядерных реакциях трансмутации, необходимо разработать схему превращений изотопов, входящих в состав материалов конструкций ЯЭУ, в стационарном потоке нейтронов. Это связано с тем, что образцы исследуемых материалов находятся в потоке нейтронов в АЗ ЯЭУ длительное время для набора необходимой дозы облучения. При этом возникают ядерные реакции или радиоактивные превращения на втором этапе, в котором участвуют изотопы или элементы, образованные в ядерных реакциях первого этапа. На рис. 7 представлена такая схема для бериллия, используемого в качестве отражателя/замедлителя в нейтронном источнике ННЦ ХФТИ/ANL USA. Как видно из схемы, основное количество гелия образуется под действием быстрых нейтронов в реакции $(n, 2n)$, поперечное сечение которой в 4,5 раза выше сечения реакции (n, α) . Образующий в реакции $(n, 2n)$ изотоп ^8_4Be нестабилен ($T_{1/2} = 7,00 \cdot 10^{-17}\text{c}$, [12]) и естественным образом распадается на два атома гелия. Интегральное сечение этой реакции в спектре нейтронов деления урана-235 составляет 144 мбарн, а при энергии нейтронов, равной 14,5 МэВ, оно возрастает до 524 мбарн [13].

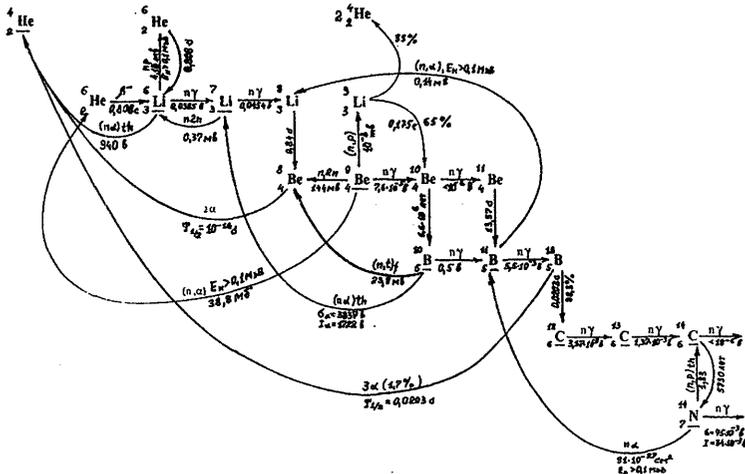


Рис.7. Схема превращений бериллия в потоке нейтронов спектра реакторов с водой под давлением

Для стали 304SS (материал корпуса внешней мишени источника) схема превращений изотопов входящих в ее состав элементов, в потоке нейтронов смешанного спектра реакторов водо-водяного типа представлена на рис.8. В этой схеме обращает на себя внимание реакция образования водорода (n,p), в которой участвуют изотопы всех элементов стали, но при этом образуются обогащенные нейтронами короткоживущие элементы ($T_{1/2} \sim 10^{-3}c$), β^- -распад которых приводит к материнскому изотопу. Таким образом, в реакциях (n,p) происходит непрерывное образование атомов водорода, но изотопный и элементный состав стали при этом практически не изменяется.

Для расчетов уровня генерации гелия и водорода в материалах элементов конструкций ЯЭУ, подверженных облучению нейтронами, в настоящей работе была использована статистическая модель атомного ядра, реализованная программой ALICE [14]. Программа рассчитывает энергетические зависимости сечений ядерных реакций под действием нейтронов, протонов, дейтронов и α - частиц с энергией от 1 до 300 МэВ с шагом по энергии 1 МэВ с образованием ядра-продукта и испусканием 0...10 протонов и 0...17 нейтронов, и учитывает прямые (предравновесные) ядерные процессы.

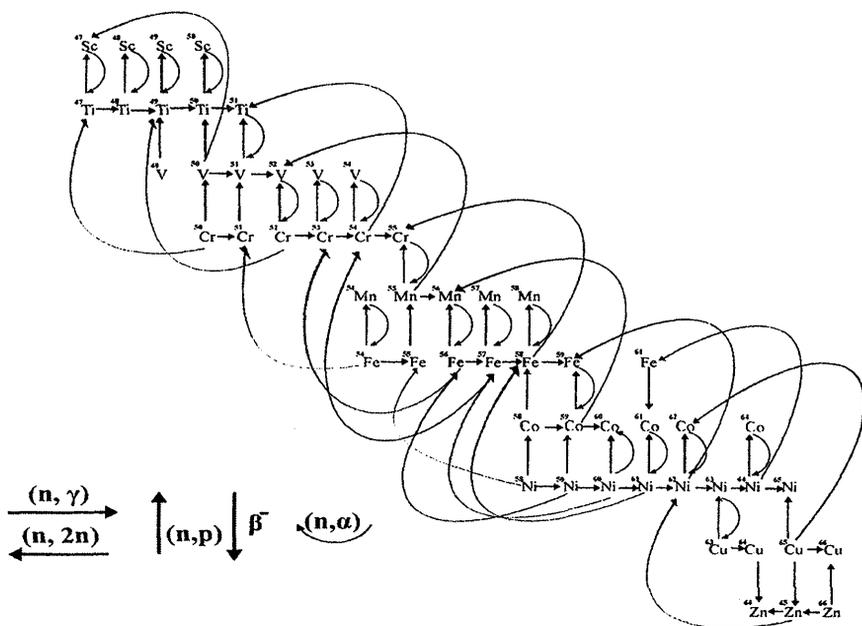


Рис. 8. Схема превращений изотопов элементов, входящих в состав стали 304SS, в ядерных реакциях трансмутации в потоке нейтронов в АЗ ВВЭР-1000

На рис.9 приведены результаты расчетов функций возбуждения реакций Fe (n, xH) и Fe (n, xHe).

Здесь же для сравнения приведены результаты расчета образования водорода и гелия в нержавеющей стали с использованием программ SPECTER и LANET, шивка расчетов которых проведена при энергии нейтронов 20 МэВ [5]. Следует отметить, что в программе SPECTER расчеты сечений ядерных реакций проводятся по испарительной модели атомного ядра, не учитывающей прямых ядерных процессов, вклад которых в поперечные сечения возрастает с увеличением энергии нейтронов. В несоответствии результатов расчетов сечений реакции Fe (n, xHe) по программам DIDACS и LANET, использующих модель внутриядерного каскада и метод Монте-Карло, виновата последняя, так как она лицензирована для правильного расчета образования атомов газа при энергиях нейтронов выше 100 МэВ и мишеней с высоким номером Z в периодической системе (в частности, для W), и почти в 2 раза занижает

величины сечений для элементов средней части с $Z = 20...40$ [15]. Программа DISCA расчета поперечных сечений ядерных реакций реализует модель внутриядерного каскада с учетом испарения частиц из возбужденного конечного ядра-продукта и предназначена для высоких энергий нейтронов до ~ 200 МэВ. Более высокие поперечные сечения ядерных реакций образования водорода в нержавеющей стали связаны с присутствием в ней $\sim 8\%$ никеля, изотоп которого ^{58}Ni имеет низкий энергетический порог ($Q_{\text{пр}} = +0,395$ МэВ, реакция экзоэнергетичная).

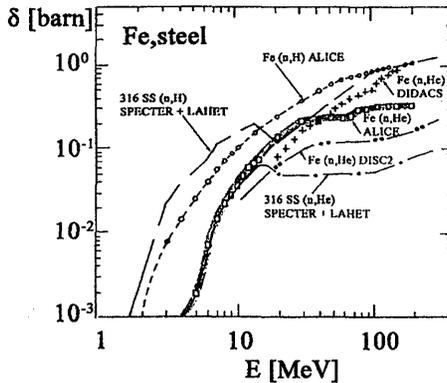


Рис.9. Зависимость генерации водорода и гелия в чистом железе (Fe) и нержавеющей стали 316 SS от энергии нейтронов. Расчеты проведены с использованием различных моделей, учитывающих прямые ядерные процессы, увеличивающие вклад в поперечные сечения ядерных реакций с возрастанием энергии нейтронов

Интегральное сечение генерации продуктов ядерных реакций трансмутации $\delta_{\text{He,H}}$ для элемента, облучаемого нейтронами с энергетическим спектром $\Phi(E)$, рассчитывается для конкретного i -го изотопа этого элемента $\delta_{\text{He,H}}^i$. По всем возможным каналам ядерных реакций "К" с образованием He или H с последующим суммированием

$$\sigma_{\text{He,H}}^i = \sum_k \int_0^{E_{\text{max}}} \sigma_k^i(E) \Phi(E) dE,$$

где $\sigma_k^i(E)$ – энергетическая зависимость сечения ядерной реакции «k», и затем учитывается изотопный состав элемента

$$\bar{\sigma}_{\text{He,H}} = \sum_i \sigma_{\text{He,H}}^i = \sum_i \sum_k \int_0^{E_{\text{max}}} \sigma_k^i(E) \Phi(E) dE.$$

4. РАСЧЕТЫ ДОЗЫ РАДИАЦИОННОГО ПОВРЕЖДЕНИЯ МАТЕРИАЛОВ ОБРАЗЦОВ, ИССЛЕДУЕМЫХ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО В РАЗЛИЧНЫХ ЯЭУ

Энергетические спектры нейтронов разрабатываемых в настоящее время источников нового поколения, управляемых ускорителями заряженных частиц высокой энергии, имеют различную конфигурацию в зависимости от материала внешней мишени и энергии ускоряемых частиц, определяющих верхнюю границу энергии нейтронов. Существующие библиотеки поперечных сечений радиационного повреждения материалов (например, ENDF/B-1Y, ENDF/B-Y, JENDL 3.3, WIMS и т.д.) ориентированы на энергетические спектры нейтронов реакторов деления и синтеза (т.е., до ~ 14,5 МэВ), а верхняя граница энергетических спектров нейтронов источников нового поколения превышает 200 МэВ и часто достигает значений 600...1000 МэВ. Поэтому необходимы методы определения уровня радиационного повреждения материалов, облучаемых нейтронами, протонами и γ -квантами такой высокой энергии, а также программы расчетов сечений радиационного повреждения материалов в этой области энергий бомбардирующих частиц, иницилирующих ядерные реакции с множественным рождением частиц-продуктов.

Уровень радиационного повреждения в единицах смещений/атом или dpa (defect per atom) рассчитывается в соответствии с выражением

$$dpa = t \cdot \int_0^{E_{\max}} \sigma_d(E) \cdot \Phi(E) d(E),$$

где $\delta_d(E)$ – энергетическая зависимость поперечного сечения образования точечных дефектов (пар Френкеля, вакансии - межузельный атом) в материале, облучаемом частицами с энергиями от нуля до E_{\max} , которая является верхней границей энергетического спектра. Поперечное сечение образования точечных дефектов $\delta_d(E)$ [16]

$$\sigma_d(E) = \int_{2E_d}^{T_{\max}} \left[\frac{\partial \delta}{\partial T}(E) \right] \cdot \nu(T) dT,$$

где T – энергия первично-выбитого атома (ПВА);

$\frac{\partial \delta}{\partial T}(E)$ – энергетический спектр ПВА с максимальной энергией T_{\max} ,

образуемый бомбардирующими материал частицами с энергией E ; E_d – энергетический порог смещения атома облучаемого материала из места его расположения в кристаллической решетке; $\nu(T)$ – каскадная функция, описываемая выражением:

$$\nu(T) = \left(\frac{\beta}{2E_d}\right) \cdot T_{dam},$$

где T_{dam} - величина энергии ПВА, которая расходуется на кинетический (баллистический) процесс смещения атомов материала из их стационарных положений в кристаллической решетке, остальная часть энергии ПВА передается электронам среды в процессе непрерывного ионизационного торможения ПВА при его движении в материале; $\beta = 0,8$ и является константой, характеризующей эффективность образования точечных дефектов первично-выбитым атомом с энергией T [17].

В ядерных реакторах с водой под давлением энергетический спектр нейтронов простирается до ~ 10 МэВ и образует в облучаемом материале сплошной энергетический спектр ПВА с максимальной энергией $T_{max} = 0,71$ МэВ (Fe), основную часть радиационного повреждения создают ПВА с энергией до 100 кэВ. В реакторах на быстрых нейтронах основной вклад в радиационное повреждение материалов вносят ПВА с энергией до 200 кэВ. В реакторе синтеза монохроматические нейтроны с энергией 14,1 МэВ создают сплошной энергетический спектр ПВА с максимальной энергией 1 МэВ (см. рис.10). Нейтроны с энергией 200 МэВ (верхняя граница энергетического спектра нейтронов внешнего источника нейтронов ННЦ ХФТИ/ANL USA с подкритической сборкой, управляемой ускорителем электронов с энергией 200 МэВ) создают в железе спектр ПВА с максимальной энергией ≈ 14 МэВ. Верхняя граница энергетического спектра нейтронов на основе реакции расщепления (spallation) достигает 1000 МэВ, а максимальная энергия ПВА в железе ≈ 70 МэВ. Оставляя в стороне вопросы нагревания мишеней за счет неупругих потерь энергии ПВА при их движении в материале, обратим внимание на сложность моделирования траекторий и событий (столкновений) таких частиц с длинным пробегом, что требует мощных ресурсов ЭВМ.

Для вычисления сечений образования точечных дефектов $\delta_d(E_n)$ нейтронами с энергиями E_n необходимо рассчитать образованные нейтронами этих энергий энергетические спектры ПВА $\frac{\partial \delta}{\partial T}(E_n)$. При упругом рассеянии нейтронов низкой энергии основную роль в их взаимодействии с атомами материала играет упругое рассеяние, расчет кинематики которого достаточно прост.

С увеличением энергии частиц процесс упругого рассеяния усложняется, угловые распределения частиц – продуктов взаимодействия, обнаруживают дифракционную картину, определяемую размерами атомов материала и длиной волны де Бройля бомбардирующей частицы.

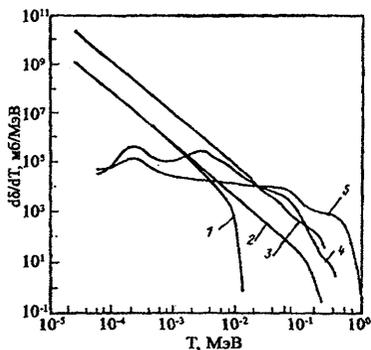


Рис. 10. Энергетические спектры ПВА в никеле, образованные:

- 1 - электронами с энергией 20 МэВ;
- 2 - электронами с энергией 300 МэВ;
- 3 - протонами с энергией 20 МэВ;
- 4 - нейтронами спектра реактора EBR-II;
- 5 - нейтронами с энергией 14 МэВ

С увеличением энергии бомбардирующих частиц открываются каналы новых пороговых ядерных реакций, кинетика этих реакций изменяется, наряду с равновесными процессами появляются прямые ядерные процессы выбивания нуклонов из атомных ядер, вклад которых в полное поперечное сечение ядерного взаимодействия возрастает с увеличением энергии. Поэтому для расчетов энергетических спектров ПВА используются ядерно-физические модели, описывающие кинетику различных ядерных реакций, продукты которых и являются первично-выбитыми атомами различной энергии и зарядности. Поэтому в 1976 г. в НИЦ ХФТИ был создан расчетно-вычислительный программный комплекс ИМИТАТОР [18] для имитации радиационного повреждения материалов частицами различной природы и энергии, реализованный на ЭВМ БЭСМ-6, ЕС 30-40 и др. (см. рис. 11). Первый уровень моделирования в масштабе нуклон-ядерного взаимодействия бомбардирующих частиц с атомами материалов различного элементного состава содержит программы, реализующие на ЭВМ расчеты кинетики различных ядерных реакций, вычисление энергетических спектров ПВА и спектра масс ядер отдачи – продуктов ядерных реакций.

Самыми известными зарубежными программами для расчета поперечных сечений радиационного повреждения и спектров ПВА являются SPECTER [19], SPALL-S [20], NPRIM [21] и NJOY.

Эти программы ориентированы на расчеты уровней радиационного повреждения, скорости набора дозы и уровней генерации атомов гелия и водорода в существующих водо-водяных реакторах, реакторах на быстрых нейтронах и реакторах синтеза. Программа SPECTER основана на испарительной модели ядерных реакций и поэтому не может быть использована при облучении материалов нейтронами с энергией выше 20 МэВ.

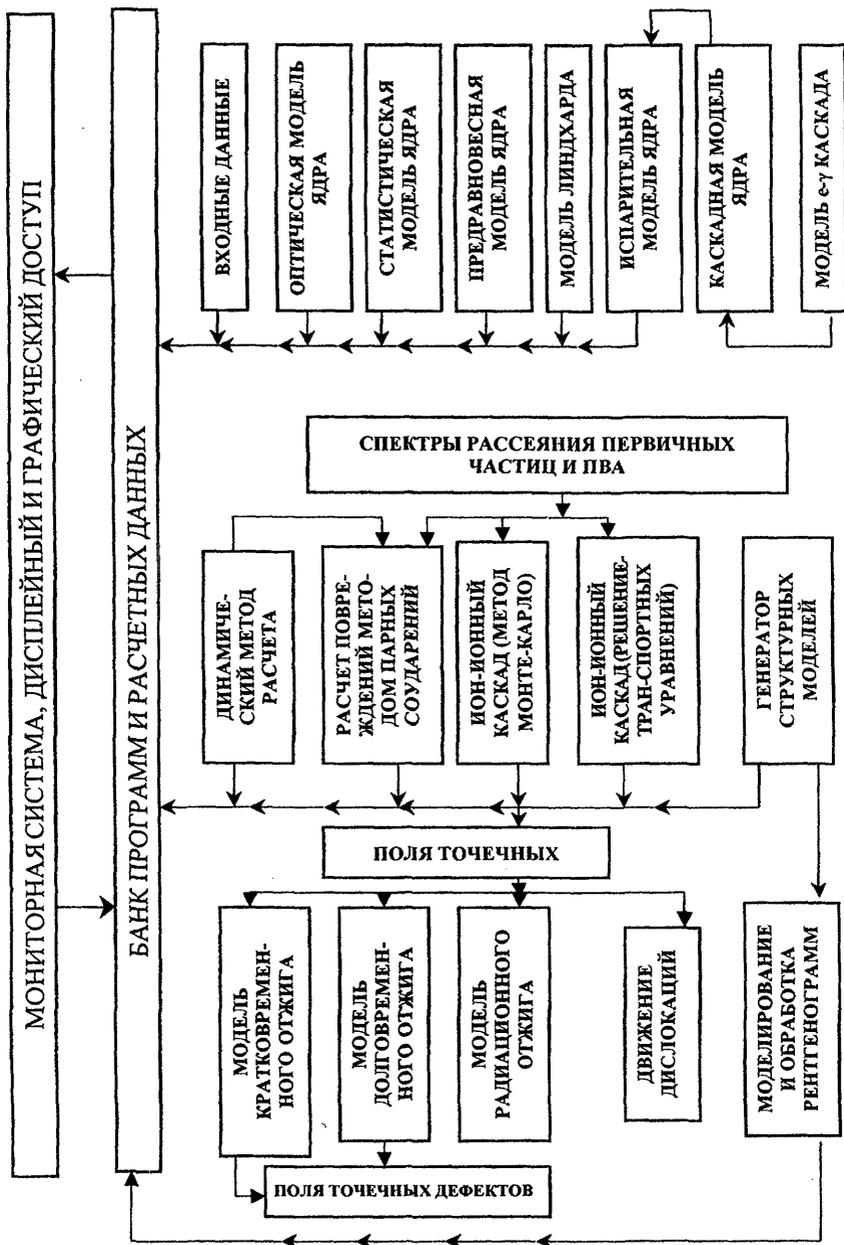


Рис. 1.1. Блок-схема программного комплекса ИМИТАТОР

На рис. 12 представлены кривые зависимостей сечений радиационного повреждения ^{56}Fe нейтронами $\delta_d(E)$ различных энергий, рассчитанные с помощью ЭВМ - программ, использующих различные библиотеки поперечных сечений ядерных реакций [22].

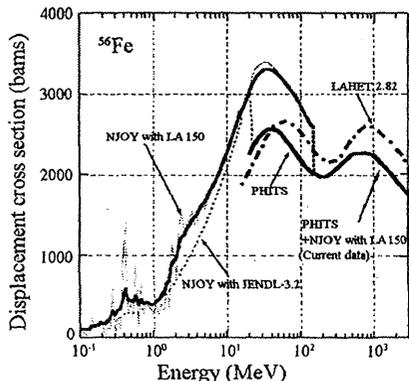


Рис.12. Сравнение зависимостей поперечных сечений смещений, рассчитанных по различным программам для ЭВМ, включающим разные модели ядерных реакций железа с нейтронами. ----- энергия сшиваний расчетов NJOY с библиотекой ядерных констант LA 150, с расчетами PHITS и LANET [23]

В диапазоне энергий нейтронов от 0,1 до 150 МэВ расчеты проведены с помощью программы NJOY с библиотеками ядерных данных JENDL-3,2 и LA-150. Расчет $\delta_d(E)$ в области энергий нейтронов выше 150 МэВ проведен с помощью программ PHITS и LANET [23], которые занижают значения $\delta_d(E)$ в области энергий от 20 до 150 МэВ. В этих программах вычисление сечений ядерных реакций осуществляется моделью внутриядерного каскада. Различие программ PHITS и LANET заключается в отсутствие блока GEM [22] в последней, - программы расчета ядерных процессов испарения и деления конечных возбужденных ядер-продуктов. Кроме того, параметры программы LANET специально приспособлены для наилучшего расчета выхода нейтронов из вольфрама ($Z=72$) при его облучении протонами с энергией 1000 МэВ, поэтому расчеты для элементов с $Z=20...40$ занижаются в ~ 2 раза. Авторы расчетов [22] включили библиотеку ядерных данных LA 150, которая хорошо воспроизводит энергетические спектры нейтронов, в программу PHITS и произвели привязку полученных сечений $\delta_d(E)$ к аналогичной величине, рассчитанной программами NJOY+LANET в точке $E_n = 150$ МэВ. Результаты этой операции приведены на рис. 13. Здесь же представлены расчеты, проведенные с использованием программного комплекса ИМИТАТОР и DIDACS/88, в которых сечения ядерных реакций рассчитываются с учетом равновесных и предравновесных процессов. Ниже, в таблице 2, приведены параметры радиационного повреждения материалов конструкций источника нейтронов ННЦ ХФТИ/ANL USA.

Необходимо отметить высокий уровень генерации He в отражателе (Be), а также более низкий уровень его генерации в ферритомартенситных сталях (T91) по сравнению со сталями серии 300 (304SS), содержащих никель.

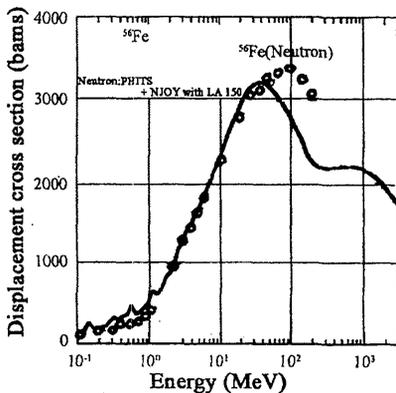


Рис.13. Сечения смещений атомов ^{56}Fe нейтронами. — результаты «сшивания» из рисунка 11; $\circ \circ \circ$ — результаты расчетов настоящей работы с использованием модели предравновесного + равновесного ядерных процессов взаимодействия нейтронов с ^{56}Fe (программа ALICE) [14]

Таблица 2.
 Параметры радиационного повреждения материалов конструкций источника нейтронов ННЦ ХФТИ / ANL USA в центре и на краю активной зоны подкритической сборки

Материал	Центр активной зоны: $\Phi = 3,7 \cdot 10^{13}$ н/см ² с					Край активной зоны: $\Phi = 3,8 \cdot 10^{12}$ н/см ² с				
	фра/с	фра/год	He ат/ат·с	He ат/ат·год	$\frac{\text{appHe}}{\text{год}}$	фра/с	фра/год	He ат/ат·с	He ат/ат·год	$\frac{\text{appHe}}{\text{год}}$
Be	$1,3 \cdot 10^{-8}$	0,412	$1,2 \cdot 10^{-11}$	$3,7 \cdot 10^{-4}$	908	$1,3 \cdot 10^{-9}$	0,04	$1,2 \cdot 10^{-12}$	$3,9 \cdot 10^{-5}$	908
304SS	$3,2 \cdot 10^{-8}$	1,01	$2 \cdot 10^{-14}$	$6,4 \cdot 10^{-7}$	0,64	$3,3 \cdot 10^{-9}$	0,104	$2,1 \cdot 10^{-15}$	$6,6 \cdot 10^{-8}$	0,64
T91(Fe-9Cr)	$3,2 \cdot 10^{-8}$	1,01	$1,5 \cdot 10^{-14}$	$4,8 \cdot 10^{-7}$	0,48	$3,3 \cdot 10^{-9}$	0,104	$1,6 \cdot 10^{-15}$	$4,9 \cdot 10^{-8}$	0,48

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Определение радиационного ресурса элемента конструкции ядерно-энергетической установки требует теоретических оценок и экспериментальных исследований результатов облучения частицами той же природы в заданном температурном режиме. Для экспрессного исследования необходимо либо увеличить плотность потока частиц, бомбардирующих образцы материалов, либо их энергию, что приводит к возрастанию скорости набора дозы радиационного повреждения и

сокращению времени, необходимого для достижения заданного уровня дозы.

Расчеты сечений радиационного повреждения различных материалов частицами различной природы и энергии являются очень трудоемкой задачей. Решение этой задачи требует значительных ресурсов ЭВМ при увеличении энергии частиц, так как необходимо проследить (моделировать) траектории и события, в которых участвуют вторичные частицы и ядра-продукты с большой кинетической энергией всех энергетически возможных ядерных реакций с атомами облучаемого материала. Увеличение энергии бомбардирующих материалов частиц требует корректного учета механизмов ядерных реакций, определяющих энергетический спектр вторичных частиц и ядер продуктов, их кинетическую энергию, что формирует энергетический спектр первично-выбитых атомов (ПВА). Существующие библиотеки ядерных данных, используемые в различных ЭВМ-программах расчетов поперечных сечений радиационного повреждения материалов, не содержат информации подобного рода. Поэтому при расчетах энергетических и угловых распределений продуктов ядерных реакций используются различные аппроксимации. Серьезность этого момента заключается в том, что только энергетический спектр ПВА является основой для количественного описания характера микроструктуры первичного радиационного повреждения. Единственным выходом в подобной ситуации является использование комплекса модельных представлений, описывающих кинематику процессов различных ядерных реакций, реализованных в виде соответствующих программ расчетов для ЭВМ.

В принципе, все это выполнимо, но остаются задачи, связанные с эволюцией первичного радиационного повреждения, механизмы которой и будут определять время жизни элемента конструкции ЯЭУ в конкретных радиационных условиях. Известно, что на процесс эволюции первичного радиационного повреждения влияют не только штатная термообработка материала элемента конструкции в процессе его изготовления, но и соотношение деталей микроструктуры первичного радиационного повреждения, которое определяется не только природой и энергией бомбардирующих материал частиц, но и плотностью их потока и температурой среды облучения. Поэтому создание источника нейтронов с необходимыми параметрами является одним из важнейших условий дальнейшего развития радиационного материаловедения и научного сопровождения безопасной эксплуатации ядерных энергетических систем.

Работа выполнена в рамках совместного украинско-американского проекта ННЦ ХФТИ и FNL (USA) № P-233.

ЛИТЕРАТУРА

1. H. Ulmaier, E. Camus. Low temperature mechanical properties of steels containing high concentration of helium // *Journal of Nuclear Materials*. 1997, v.251, p. 262 -268.
2. H. Ulmaier, J. Chen. Low temperature tensile properties of steels containing high concentration of helium // *JNM*. 2003, v. 318, p. 228 -233.
3. G.E. Lucas // *JNM* . 1993, v. 206, p.287.
4. J. Henry, M.- H. Mathon, P. Jung. Microstructural analysis of 9% Cr martensitic steels containing 0,5 at % helium // *JNM*. 2003, v. 318, p.249 – 259.
5. P. Jung, J. Henry, J. Chen, J.-C. Brachet. Effect of implanted helium on tensile properties and hardenes of 9% Cr martensitic stainless steels // *JNM* . 2003, v. 318, p.241 – 248.
6. P. Jung, C. Lui, J. Chen. Retention of implanted hydrogen and helium in martensitic stainless steels and their effects on mechanical properties // *JNM*. 2002, v. 296, p.165 – 173.
7. Б.А. Шиляев, Л.С. Ожигов, А.А. Пархоменко. *К вопросу об исследовании радиационного повреждения материалов нейтронами подкритической сборки ННЦ ХФТИ / ANL USA, управляемой ускорителем электронов с энергией 100...200 МэВ: Препринт ННЦ ХФТИ, ХФТИ 2006-2, Харьков ННЦ ХФТИ, 2006, 23 с.*
8. G.A. Cottrell, L.J. Baker. Structural materials for fusion and spallation sources // *JNM*. 2003, v. 318, p.260 – 266.
9. B. Bernardin, D. Ridicas, H. Safa. A prototype sub – critical reactor driven by electron accelerator // *Proc. Int. Conf. on Accelerator Application accelerator – driven transmutation technology and applications – Reno. Nevada, USA, 2001.*
10. Y. Gohar, I. Bailey, H. belch, D. Naberezhnev, P. Strons, I. Bolshinsky. Accelerator driven sub – critical assembly facility // *Матеріали українсько – американського семінару «Установка з підкритичною збіркою, керована прискорювачем часток» - Україна, Харків, 24 -25 лютого 2005. – «Спайк», Харків, 2005, с. 67 - 180.*
11. L.R. Greenwood. Neutron source characterization and radiation damage calculation for materials studies // *JNM*. 1982, v. 108-109, p.21 – 27.
12. R.A. Forrest, J. Ch. Sublet. The European activation file: EAF – 99 decay data library // *UKAEA Fus 409* . 1999, p.38.
13. В.М. Бычков, В.Н. Манохин, Б.А. Пашенко, В.Н. Пляскин. Сечения пороговых реакций, вызываемых нейтронами /Справочник. М.: Энергоиздат, 1982, 216 с.
14. M. Blann. Overlaid ALICE / 85/ 300 // Report Lawrence Livermore National Lab., UCID –20169. 1984, p.5.
15. F.A. Garner, B.M. Oliver, L.R. Greenwood, M.R. James, P.D. Ferguson, S.A. Maloy, W.F. Sommer. Determination of helium and hydrogen yield from

measurements on pure metals and alloys irradiated by mixed high energy proton and spallation neutron spectra in LANCE // *JNM*. 2001, v. 296, p.66 – 82.

16. Б.А. Шиляев, Р.П. Слабоспицкий, В.А. Ямницкий. Моделирование точечных дефектов при радиационном повреждении материалов протонами, нейтронами и тяжелыми ионами // *Атомная энергия*. 1978, вып. 3, том 45, с.193-197.

17. M.J. Norgett, M.T. Robinson, I.T. Torrens. A proposed method of calculation displacement dose rates // *Nucl. Eng. Des.* 1974, v. 33, p. 50.

18. Б.А. Шиляев, Г.Ф. Тимошевский, Р.П. Слабоспицкий. Расчет энергетических и пространственных распределений ПВА при упругом взаимодействии протонов с облучаемыми материалами // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика высоких энергий и атомного ядра»*. 1977, вып.1(4), с. 25-30.

19. L.R. Greenwood. SPECTER code for radiation damage calculations // In: Proc. Of IAIE Consultants Meeting on Nuclear Data for radiation Damage Estimates for reactor Structural Materials // *Santa Fe, New Mexico, USA*. May 1985. IEIA, INDC (NDC). 179/G. 1985, p. 13-18.

20. G. Prillinger. Nuclear data for high – energy neutron transport and damage calculation in steel // *Santa Fe, New Mexico, USA*. May 1985. IEIA, INDC (NDC). 179/G. 1985, p. 67-78.

21. S. Shimakawa, N. Sekimura. NPRIM computer code for radiation damage calculation // - <http://marie.g.t.n-tokyo.ac.jp/hprim/>.

22. M. Harada, N. Watanable, C. Kohno, S. Meigo, Y. Ikeda, K. Niita. DPA calculation for Japanese spallation neutron source // *JNM*. 2005, v. 343, p.197 – 204.

23. R.E. Prael, H. Lichtenstein. User guide to LCS: the LAHET code system // *LA-UR 89-3014, Los Alamos Nat. Lab.* 1989, p. 76.

Борис Анатольевич Шияев, Виктор Николаевич Воеводин

РАСЧЁТЫ ПАРАМЕТРОВ РАДИАЦИОННОГО ПОВРЕЖДЕНИЯ
МАТЕРИАЛОВ НЕЙТРОНАМИ ИСТОЧНИКА ННЦ ХФТИ/ANL USA
С ПОДКРИТИЧЕСКОЙ СБОРКОЙ, УПРАВЛЯЕМОЙ УСКОРИТЕЛЕМ
ЭЛЕКТРОНОВ

Ответственный за выпуск Л.М. Ракивненко

Редактор, корректор Т.И. Бережная
Компьютерный макет Т.В. Ситнянская

Подписано в печать 29.09.06. Формат 60x84/16. Ризопечать. Усл.п.л. 1,2.
Уч.-изд.л. 0,9. Тираж 100. Заказ № 37.

Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»
61108, г. Харьков, ул. Академическая, 1



Препринт, 2006, 1-20.