

## محاسبات آسیب تابش به منظور شبیه‌سازی تابش نوترون با تابش یون و توسعه برنامه محاسباتی AMTRACK

علی محمدی<sup>۱</sup>، سعید حمیدی<sup>۱</sup> و محسن اسدی اسد آباد<sup>۲</sup>

۱. گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه اراک، اراک

۲. پژوهشکده مواد و سوخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، ایران

(دریافت مقاله: ۱۳۹۵/۱۱/۰۲؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۶/۰۹/۲۰)

### چکیده

یکی از مهم‌ترین نتایج تابش نوترون بر روی هدف جابه‌جایی اتم‌های ماده از محل ثابت خود در شبکه کریستالی در پی یک واکنش هسته‌ای می‌باشد، که این پدیده موجب ایجاد آسیب تابشی نوترونی می‌شود. آسیب تابشی نوترونی را می‌توان با استفاده از تابش یون‌های سبک و سنگین شبیه‌سازی کرد، این روش شرایط انعطاف پذیری را در زمان تابش یون فراهم می‌آورد. داشتن دانش مقدماتی از اتم‌های پس زده شده اولیه (PKA) و همچنین چگونگی توزیع عیوب نقطه‌ای ثانویه نسبت به انرژی اتم‌های پس زده اولیه نخستین گام برای شبیه‌سازی آسیب تابشی نوترونی می‌باشد، سپس محاسبه میزان آسیب "جابه‌جایی به ازای هر اتم شبکه (DPA)" و چگونگی نفوذ عمقی آسیب در نمونه مراحل بعدی محاسبات است. در این مطالعه از کد MCNPX و کد SRIM به ترتیب برای شبیه‌سازی برهم‌کنش نوترون و یون‌های پر انرژی با مواد استفاده شده و سپس یک برنامه جدید (AMTRACK) با نرم‌افزار MATLAB نوشته شده که مشخصات PKAها و همچنین مشخصات عیوب نقطه‌ای ایجاد شده را مورد تجزیه و تحلیل قرار می‌دهد. با مقایسه طیف اتم‌های پس زده شده و همچنین طیف وزنی عیوب نقطه‌ای ناشی از یون‌ها و نوترون‌ها چگونگی آسیب یونی و نوترونی مقایسه می‌شود و بهترین یون‌ها برای شبیه‌سازی آسیب تابشی نوترونی در راکتورها تعیین می‌شوند. هدف نهایی ما این است که با توسعه برنامه‌ای مقدمات فیزیکی و آزمایشگاهی لازم برای جایگزینی تابش یون به جای تابش نوترون را فراهم کرده و از این طریق به آسیب تابشی نوترونی دست پیدا کنیم.

واژه‌های کلیدی: آسیب تابشی، تولید عیوب، طیف پس زنی مقدماتی، طیف وزنی پس زنی، کد MCNPX، کد SRIM، برنامه AMTRACK

### ۱. مقدمه

نوترون فراهم می‌کند. مهم‌ترین اثر تابش جابه‌جایی اتم‌ها از موقعیت تعادل خود در یک جامد است، لذا نیاز است سلسله مراتب فیزیکی آسیب پس از تابش یون و تابش نوترون بررسی شود. پس از تابش ذره اولیه برهم‌کنش هسته‌ای که بین ذره

تابش ذرات باردار [۱] یک روش برای شبیه‌سازی اثرات تابش

۱. Primary knock on atoms

۲. Displacement per atom

تابیده شده و اتم شبکه رخ می‌دهد موجب می‌شود که بخشی از انرژی ذره تابیده شده به صورت انرژی پس زنی به اتم انتقال یابد و باعث جابه‌جایی آن اتم از محل ثابت خود شود، که اتم بیرون افتاده اولیه یا PKA (Primary knock on atom) نامیده می‌شود. انرژی لازم جهت این جابه‌جایی در حدود  $20 \text{ eV}$  تا  $40 \text{ eV}$  است، سپس PKA با انرژی جنبشی باقی مانده در هدف حرکت کرده و اتم‌های ثانویه بیرون افتاده را ایجاد می‌کند و منجر به تشکیل آبخاری از اتم‌های جابه‌جا شده می‌شود [۲].

انگیزه‌های مهمی برای استفاده از تابش یون‌ها جایگزین تابش نوترون وجود دارد. این روش به خوبی پاسخ درستی در فرایندهای پایه می‌دهد و علاوه بر این پتانسیل ذخیره کردن مقادیر زیادی زمان و هزینه را دارد. طبیعت آزمایش‌های تابش نوترون انعطاف پذیری برای مطالعات در شرایط مختلف را ندارد، یا به طور دقیق‌تر ابزارهای مورد نیاز برای بررسی فرایند آسیب تابش را ندارد. شبیه‌سازی این فرایند به وسیله تابش یون‌ها به آسانی تغییر شرایط تابش را مهیا می‌سازد [۲، ۳].

در تحقیقات اثرات پرتودهی ناشی از پرتودهی با ذرات مختلفی مانند نوترون، الکترون، یون‌های سبک و سنگین بررسی شده‌اند. یون‌های پر انرژی می‌توانند برای شبیه‌سازی اثرات تابش نوترونی در اجزای مختلف راکتورها استفاده شوند و دلیل استفاده از پرتودهی یونی جایگزین پرتودهی نوترونی شامل موارد زیر می‌باشد.

- عدم استفاده از منابع نوترونی برای پرتودهی مواد
- عدم وجود پرتوزایی پسماند پس از پرتودهی یون‌های سنگین و فعالیت بسیار پایین پس از پرتودهی یون‌های سبک
- امکان کنترل شرایط تابش مثل دما، انرژی ذره، زمان تابش و سطح آسیب
- نرخ آسیب بالا توسط پرتودهی یونی در زمان‌های تابش کوتاه
- صرفه جویی در زمان و هزینه
- محاسبه طیف انرژی PKAها و طیف وزنی جابه‌جایی‌ها برای هم ارزی ریز ساختاری بین تابش یون و تابش نوترون بسیار مهم هستند، که در این کار برنامه‌ای به نام AMTRACK

برای تعیین این موارد توسعه داده شده است [۴]. در این روش کد SRIM و کد MCNPX به ترتیب برای شبیه‌سازی فعل و انفعالات یون‌های پر انرژی و نوترون‌ها با اهداف به کار می‌روند. در کد MCNPX از سطوح مقاطع ENDF/B-VII استفاده شده است و استفاده از سایر سطوح مقاطع قبلی ENDF تأثیر قابل توجهی در نتایج نخواهد داشت.

کد جدید پردازشگر SPECTRA-PKA توسط گیلبرت و همکارانش [۵] و همچنین کد DART توسط لیونویل و همکاران [۶] توسعه داده شده است که آنها طیف PKA را می‌توانند محاسبه کنند. این کدها و همچنین کدهای دیگری که محاسبات آسیب را انجام می‌دهند تا کنون در ایران در دسترس نبوده‌اند به همین دلیل برنامه AMTRACK توسعه داده شد. کد MCNPX خروجی Ptrac را تولید می‌کند که حاوی اطلاعات مربوط به برهم‌کنش‌های نوترون می‌باشد و کد SRIM خروجی به نام Collision.txt تولید می‌کند که اطلاعات مربوط به برهم‌کنش‌های یون‌ها را ذخیره می‌کند. برنامه AMTRACK این خروجی‌ها را تحلیل می‌کند و قادر است کلیه اطلاعات مربوط به PKA حاصل از تابش یون‌ها و نوترون‌ها شامل نوع یون، انرژی، محل تولید و زاویه حرکتی PKAها و همچنین اطلاعات مربوط به جابه‌جایی‌های ثانویه ناشی از حرکت PKAها را استخراج کند. روش MCNPX+AMTRACK قابلیت‌هایی را دارد که کدهای قبلی نداشتند، برخی از این قابلیت‌ها عبارتند از:

- کد MCNPX از سطوح مقاطعی استفاده می‌کند که نسبت به انرژی کاملاً پیوسته هستند.
- کد MCNPX قادر است انواع مواد ترکیبی را در هندسه‌های مختلف دریافت کند و برنامه AMTRACK می‌تواند PKAهای ناشی از هر عنصر را مجزا کند.
- MCNPX+AMTRACK قادر است اطلاعات جامع PKAها شامل نوع یون، انرژی، مکان تولید و مسیر حرکت را بدهد.
- برنامه AMTRACK قادر است اطلاعات مربوط به PKAها را دسته‌بندی و جداسازی کند.
- برنامه AMTRACK می‌تواند بین PKAهای ناشی از

واکنش‌های مختلف تمایز ایجاد کند.

هدف اصلی این مطالعه تخمین پارامترهای آسیب (شامل طیف اولیه پس زنی و طیف وزنی پس زنی‌ها، مقدار آسیب و پروفایل آسیب و تعیین یون مناسب جایگزین تابش نوترون) توسط دو کد مشهور MCNPX و SRIM و همچنین برنامه جدید AMTRACK می‌باشد. بیشتر مدل‌های محاسباتی آسیب القایی نوترونی بر روی مواد ساختاری و الکترونیکی اطراف راکتور متمرکز هستند [۲]. فولادهای زنگ‌نزن به صورت اساسی از عنصر آهن تشکیل شده‌اند به همین دلیل در این مقاله پارامترهای آسیب برای تابش نوترون‌های راکتورهای PWR و همچنین یون‌های سبک و سنگین بر روی عنصر آهن  $Fe^{56}$  محاسبه شده‌اند. در نهایت نویسندگان قصد دارند یون مناسب برای شبیه‌سازی آسیب تابشی محفظه تحت فشار راکتور روسی VVER-1000 را انتخاب کنند و به عنوان نمونه شار راکتور بوشهر را در نظر گرفته‌اند.

## ۲. اصول و روش‌ها

### ۲.۱. محاسبات آسیب در کد SRIM

کد اسریم یک کد محاسباتی مونت کارلو می‌باشد که برهم‌کنش‌های یون‌های پرانرژی با اهداف را شبیه‌سازی می‌کند [۷-۱۰]. به منظور محاسبه پارامترهای آسیب جابه‌جایی القا شده توسط نوترون‌ها و یون‌ها این کد دارای دو گزینه می‌باشد:

1. Detail calculation with full damage cascade (for ion calculation)
2. Recoil cascades from neutrons, etc. (full cascades) using Trim.dat

کد اسریم در هر دو مورد دو خروجی به نام‌های Collision.txt و Vacancy.txt تولید می‌کند. در گزینه اول پس از تابش یون‌ها این کد کلیه اطلاعات مربوط به PKA های ناشی از تابش یون‌ها و جابه‌جایی‌های ثانویه پس از حرکت PKA ها را در فایل Collision.txt ذخیره می‌کند. در شکل ۱ قسمتی از فایل Collision.txt نمایش داده شده است.

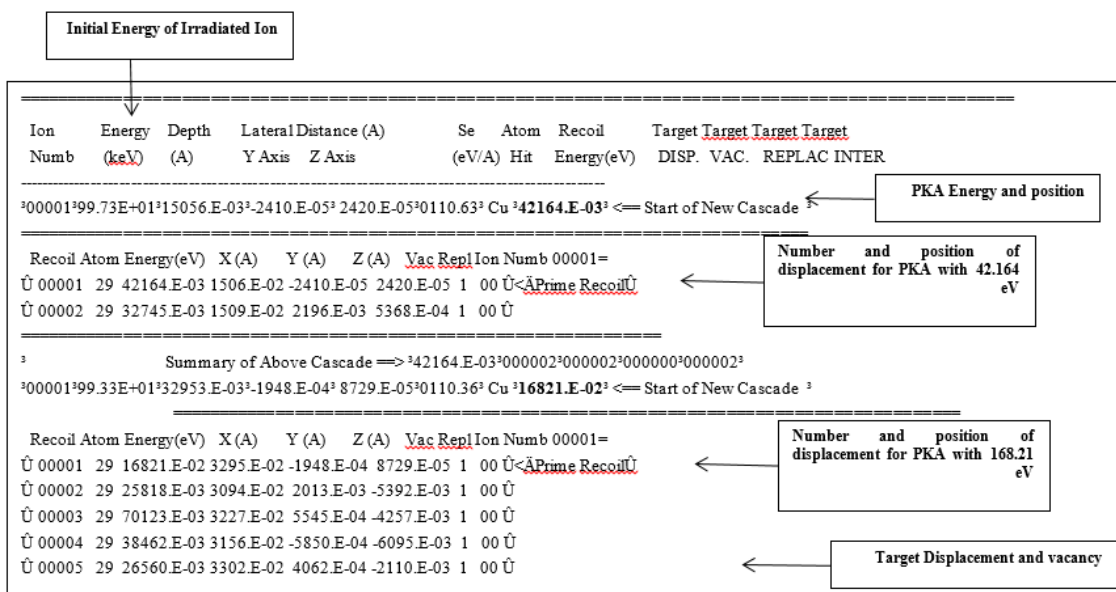
در این مطالعه یون‌های (H, He, N, Ar, Ne, Fe, Cu, Kr) با انرژی ۱ MeV برای مطالعات اثرات ریز ساختاری تابش یون استفاده شده‌اند. در شکل ۱ بخشی از اطلاعات مربوط به تابش

یون Kr با انرژی ۱ MeV بر روی مس را مشاهده می‌کنید، برهم‌کنش‌های کولنی پیش از برخورد انرژی آن را کاهش داده به طوری که یون Kr با انرژی ۹۹۷/۳ keV اولین برخورد مستقیم با اتم‌های مس را انجام داده است و یک اتم پس زده با انرژی ۴۲/۲ eV تولید شده است، سپس اتم پس زده شده در نمونه حرکت کرده و دو جابه‌جایی تولید می‌کند. کد اسریم این قابلیت را ندارد که تمامی اطلاعات موجود در خروجی Collision.txt را تجزیه و تحلیل کند، بنابراین نویسندگان برنامه AMTRACK را توسط نرم‌افزار MATLAB نوشتند که این خروجی را آنالیز کرده و کلیه اطلاعات مربوط به PKA ها و همچنین جابه‌جایی‌ها ناشی از هر PKA را استخراج کند. نتایج این تجزیه و تحلیل در بخش نتایج آورده شده‌اند. خروجی بعدی کد اسریم (Vacancy.txt) که از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است شامل اطلاعات مربوط به چگونگی پروفایل عمقی نفوذ آسیب تابشی پس از تابش یون‌ها است.

برای محاسبات آسیب تابشی نوترون در کد اسریم از گزینه دوم استفاده می‌شود. این گزینه برای انجام محاسبات آسیب نیاز به یک فایل ورودی به نام Trim.dat دارد. این فایل باید حاوی کلیه اطلاعات مربوط به PKA ها پس از تابش نوترون باشد (عدد اتمی، انرژی، مختصات مکانی و کسینوس زوایای حرکتی PKA نسبت به جهت تابش نوترون) که در شکل ۲ قسمتی از این فایل نمایش داده شده است. برای تهیه ورودی Trim.dat نویسندگان از ترکیب کد MCNPX+AMTRACK استفاده کرده‌اند. در بخش ۲.۲ جزئیات این محاسبات آورده شده است.

### ۲.۲. محاسبات کد MCNPX

در این مطالعه کد MCNPX با قابلیت شبیه‌سازی برهم‌کنش‌های نوترون، گاما و الکترون با مواد ترکیبی و در هندسه مختلف سه بعدی استفاده شده است [۱۱]. یکی از خروجی‌های متنوع کد MCNPX فایل Ptrac می‌باشد، این خروجی کد را برای انجام محاسبات مربوط به PKA ها واجد شرایط می‌کند [۱۲]. این خروجی حاوی اطلاعات هر تاریخچه در کد MCNPX



شکل ۱. بخشی از خروجی Collision.txt کد اسریم که مربوط به تابش یون کریپتون بر روی اتم مس می باشد.

Event Name	Atom Numb	Energy (eV)	Depth X (A)	Lateral-Position Y (A) Z (A)	Atom Direction		
10001	→ 26	→ 0.0738	→ 37644000	→ 80610000	→ -70712000	0.26372	-0.14484 → -0.16882
10002	→ 26	→ 3.040	→ 7436100	→ 45746000	→ 64769000	0.1350	-0.216706 → -0.36427
10003	→ 26	→ 46030	→ 34010000	→ -18474000	→ 11945000	0.1405	-0.25085 → -0.30385
10004	→ 26	→ 12.79	→ 7188700.00	→ 33738000	→ -2151900	0.4188	-0.10779 → -0.11606

شکل ۲. ترکیب فایل Trim.dat که به عنوان ورودی کد اسریم توسط برنامه AMTRACK استخراج می شود.

انجام محاسبات مربوطه آورده شده است. سه عنصر آهن، کرم و نیکل عناصر اصلی فولادها را تشکیل می دهند.

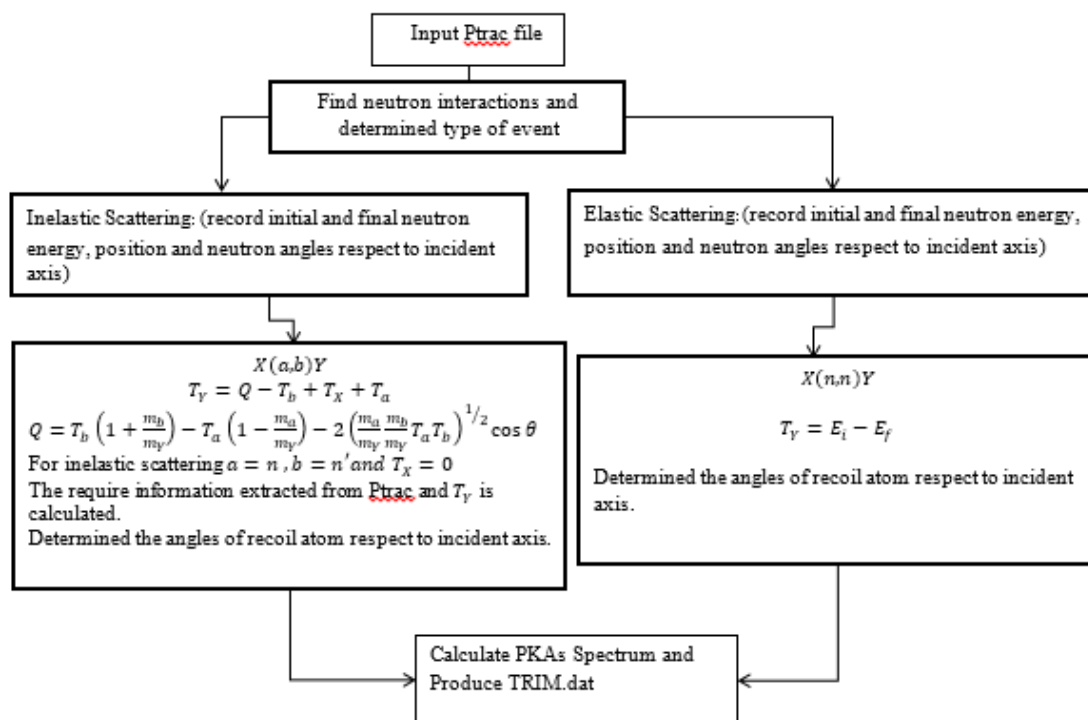
برای این عناصر در محدوده طیف راکتورهای PWR (۱ eV تا چندین MeV) سطح مقطع های کشسان و ناکشسان در برخورد ها نسبت به سایر سطح مقطع های نوترونی غالب هستند. در مقاله [۴] جزئیات این سطح مقطع ها آورده شده است. بنابراین در برنامه حاضر محاسبات را به برخوردهای کشسان و ناکشسان نوترون محدود کرده ایم.

### ۳.۲. طیف اتم های پس زده اولیه

طیف PKA ها کمیت بسیار مهمی در به دست آوردن تصویری از توزیع انرژی آسیب و شکل نهایی جابه جایی ها می باشد [۲، ۱۳، ۱۴]. طیف بهنجار شده اتم های پس زده توسط رابطه (۱) بیان می شود:

$$P(E_i, T) = \frac{1}{N} \int_T^T dT \frac{d\sigma(E_i, T)}{dT}, \quad (1)$$

می باشد، که عبارتند از نوع ذره، مکان و زاویه حرکت آن و نوع واکنشی که ذره انجام داده است. هر زمانی که برخورد رخ دهد به اطلاعات، تعیین یون ضربه خورده، محل برخورد، نوع برخورد، زاویه حرکت نوترون قبل و بعد از برخورد، انرژی نوترون قبل و بعد از برخورد، و غیره دست می یابیم. با توجه به اطلاعات فوق می توان به اطلاعات مربوط به یون ضربه دیده دست پیدا کرد، این اطلاعات شامل، نوع یون، انرژی اولیه آن، محل یون، زاویه حرکت و زمان تولید آن نسبت به زمان ورود نوترون به محیط می باشد. برای دستیابی و استخراج اطلاعات فوق از فایل Ptrac برنامه AMTRACK توسط نرم افزار MATLAB نوشته شده است. این برنامه قادر است ماتریس PKA ها شامل کلیه اطلاعات مورد نیاز را استخراج و طیف PKA ها را رسم و همچنین میانگین انرژی یون های پس زده شده بیشینه و کمینه انرژی آنها را به ازای هر انرژی نوترون ورودی، محاسبه کند. در شکل ۳ نمودار گردشی این کد برای



شکل ۳. نمودار گردش برنامه AMTRACK برای تحلیل خروجی Ptrac و تحلیل سینماتیک برخورد نوترون‌ها.

## ۲.۴. طیف وزنی پس زنی

تابع دیگری که باید محاسبه شود، طیف وزنی پس زنی  $W(E, T)$  است که نشان دهنده تعداد جابه‌جایی‌هایی است که توسط اتم‌های پس زده با انرژی کمتر از  $T$  تولید می‌شود [۱۳]، [۱۴]. در حقیقت این تابع طیف پس زنی اولیه را با تعداد عیوب در هر برگشت توزین می‌کند:

$$W(E_i, T) = \frac{1}{G} \int_{T_d}^T dT \frac{d\sigma(E_i, T)}{dT} g(T), \quad (2)$$

که  $W(E, T)$  کسری از تعداد جابه‌جایی‌هایی بین حداقل انرژی جابه‌جایی  $T_d$  و انرژی  $T$  می‌باشد،  $T$  انرژی PKA،  $g(T)$  تعداد جابه‌جایی برای پس زنی اولیه با انرژی  $T$ ،  $G$  تعداد کل جابه‌جایی‌ها در اثر عبور ذره تابشی با انرژی  $E_i$ ، و  $d\sigma(E_i, T)$  سطح مقطع دیفرانسیلی برای اینکه ذره تابشی با انرژی  $E_i$  یک اتم پس زده با انرژی  $T$  تولید کند.

واضح است اگر انرژی  $T$  برابر با حداکثر انرژی پس زنی  $T_m$  قرار داده شود نتیجه انتگرال برابر  $G$  خواهد بود.

که  $P(E_i, T)$  کسری از تعداد اتم‌های پس زده شده بین حداقل انرژی جابه‌جایی  $T_d$  و انرژی  $T$ ،  $N$  تعداد کل پس زنی‌ها در اثر عبور ذره تابشی با انرژی  $E_i$  می‌باشد و  $d\sigma(E, T)$  سطح مقطع دیفرانسیلی برای ذره تابشی با انرژی  $E_i$  است که یک اتم پس زده با انرژی  $T$  تولید کند و سطح مقطع انتقال انرژی نامیده می‌شود. واضح است اگر انرژی  $T$  برابر با حداکثر انرژی پس زنی قرار داده شود نتیجه انتگرال برابر  $N$  خواهد بود.

سطح مقطع انتقال انرژی تابع بسیار پیچیده‌ای از انرژی و نوع ذره تابشی می‌باشد، بنابراین در اینجا طیف  $P(E_i, T)$  برای تابش یون‌ها از طریق تحلیل  $\text{Collision.txt}$  و برای تابش نوترون‌ها با استفاده از تحلیل Ptrac توسط برنامه AMTRACK صورت می‌گیرد. همه ذرات در نتیجه عبور از ماده در یک حالت میانی یک PKA تولید می‌کنند که آسیب نهایی در نتیجه حرکت این PKA حاصل می‌شود، مطابق با این موضوع هر چقدر طیف PKA‌ها ناشی از عبور ذرات مختلف به یکدیگر نزدیک‌تر باشند در نهایت منجر به آسیب‌های یکسان‌تر خواهند شد.

$$G = \int_{T_d}^{T_m} dT \frac{d\sigma(E, T)}{dT} g(T). \quad (3)$$

اینکه کسر جابه‌جایی‌های تولیدی به سمت پس‌زنی‌های با انرژی پایین متمایل هستند یا به سمت پس‌زنی‌های با انرژی بالا در شکل و ترکیب عیوب تولیدی مؤثر است. هر چقدر طیف پس‌زنی به سمت انرژی‌های بالا متمایل باشد نشان دهنده تشکیل آبشارهای جابه‌جایی بزرگ‌تری می‌باشد و هر قدر به سمت انرژی‌های پایین متمایل باشد نشان دهنده تولید جابه‌جایی‌ها به شکل زوج‌های تکی (Frankel pair) می‌باشد.

در اینجا برای تابش یون‌ها تابع  $G$  و  $W(E, T)$  توسط دو کد SRIM+AMTRACK به دست می‌آید. در ابتدا یون مورد نظر در کد اسریم بر روی هدف تابش می‌شود و در نهایت خروجی Collision.txt را کد اسریم نتیجه می‌دهد سپس با استفاده از برنامه AMTRACK این خروجی تحلیل شده و اطلاعات مربوط به اتم‌های پس‌زده اولیه و ثانویه استخراج می‌شود. برای تابش نوترون‌ها تابع  $G$  و  $W(E, T)$  توسط ترکیب MCNPX+SRIM+AMTRACK استخراج خواهد شد، بدین ترتیب که ابتدا نوترون‌ها را در کد MCNPX بر روی هدف می‌تابانیم و خروجی Ptrac که حاوی اطلاعات مربوط به برهم‌کنش نوترون‌ها با هدف است را به دست آورده و با تحلیل آن توسط برنامه AMTRACK اطلاعات مربوط به اتم‌های پس‌زده اولیه را تعیین کرده و همچنین ورودی TRIM.dat را محاسبه می‌کنیم. فایل TRIM.dat حاوی اطلاعات اتم‌های پس‌زده اولیه به عنوان ورودی کد اسریم استفاده شده و PKAها توسط کد اسریم بر روی هدف تابش می‌شود. کد اسریم در نهایت Collision.txt را خروجی می‌دهد، سپس با تحلیل این فایل، اطلاعات مربوط به اتم‌های پس‌زده ثانویه ناشی از تابش نوترون‌ها به دست می‌آید.

### ۳. نتایج

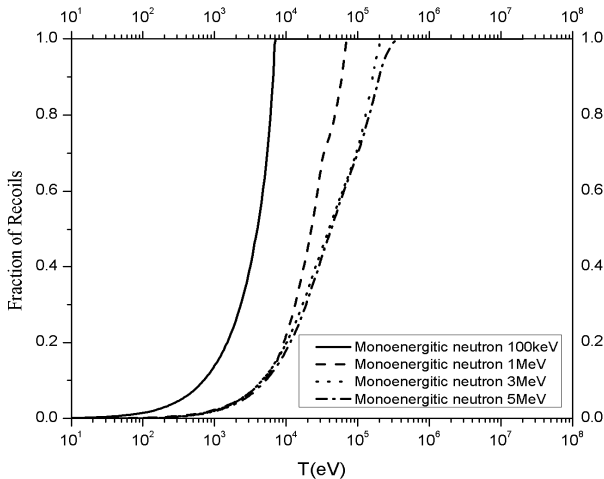
طیف پس‌زنی برای تابش یون‌های تک انرژی ۱ MeV (H, He, Ne, Ar, Fe, Cu, Kr) بر روی هدف مس محاسبه شده است. به منظور انجام این محاسبات کد اسریم را اجرا کرده و

خروجی Collision.txt را توسط برنامه AMTRACK تحلیل کرده و اطلاعات مربوط به اتم‌های پس‌زده شده اولیه پس از تابش یون‌ها را استخراج می‌کنیم. گروه بندی انرژی [sand-ia-640] برای دسته‌بندی انرژی PKAها انتخاب شده و نتایج در شکل ۴ نشان داده شده است. در این شکل می‌بینیم تابش یون‌های سبک و سنگین یک طیف گسترده از انرژی‌های PKA از حداقل انرژی جابه‌جایی تا حداکثر انرژی پس‌زنی را پوشش می‌دهند. با این حال هر چقدر انرژی یون تابشی بالاتر باشد تمایل برای تولید PKAها با انرژی بالاتر بیشتر است.

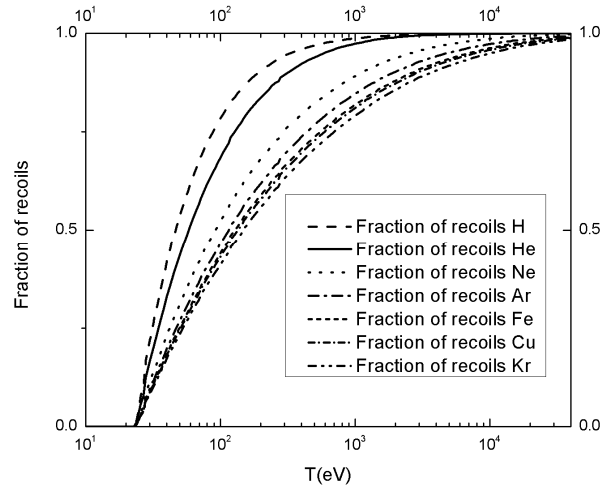
در شکل ۵ طیف پس‌زنی برای نوترون‌های تک انرژی با انرژی‌های ۱۰۰ keV، ۱ MeV، ۳ MeV و ۵ MeV نشان داده شده است. برای به دست آوردن طیف پس‌زنی ابتدا نوترون‌ها در کد MCNPX بر روی  $^{56}\text{Fe}$ ، تابش شده و سپس خروجی Ptrac توسط AMTRACK تحلیل و نتایج رسم شده‌اند. نوترون‌ها محدوده تغییر انرژی کمی دارند و تمایل به تولید PKAها با انرژی‌های بالا را دارند.

در اینجا اختلاف بین طیف پس‌زنی نوترون‌ها و یون‌ها مشهود است؛ این موضوع اثبات می‌کند نمی‌توانیم طیف اتم‌های پس‌زده یکسانی ناشی از یون‌ها و نوترون‌ها به دست آوریم؛ ولی به معنی این نیست که یون‌ها قادر به شبیه‌سازی آسیب‌القا شده توسط نوترون‌ها نیستند، بلکه با در نظر گرفتن این موارد باید شرایط آزمایشگاهی هنگام تابش یون به گونه‌ای تعیین شود که این تفاوت در نظر گرفته شود.

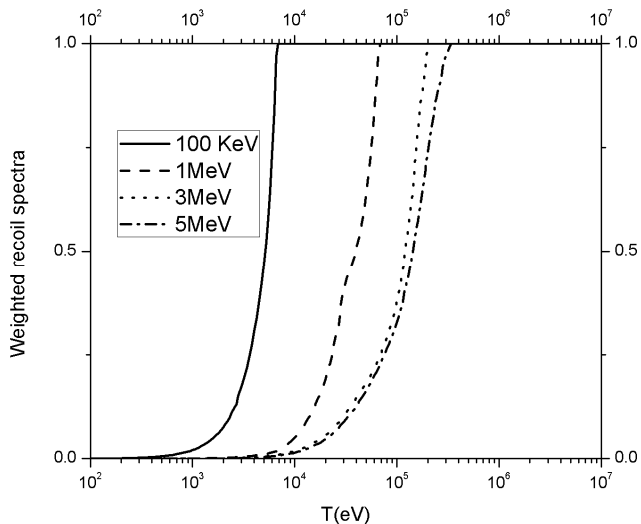
طیف وزنی پس‌زنی یون‌ها نیز با تحلیل خروجی اسریم به دست می‌آید. در شکل ۶ طیف وزنی پس‌زنی برای یون‌های تابیده شده بر روی مس را مشاهده می‌کنید. همان‌طور که مشاهده می‌کنید طیف پروتون‌ها نشان می‌دهد بیشترین درصد جابه‌جایی‌ها توسط PKAهای کم انرژی تولید می‌شود و در نتیجه شکل جابه‌جایی به صورت زوج‌های تکی و یا خوشه‌های کوچک می‌باشد. در عوض یون‌های سنگین در دنباله انتهایی خود نشان از تولید بیشتر جابه‌جایی‌ها در PKAهای پرانرژی و آسیب به شکل خوشه‌های فضایی بزرگ‌تر می‌باشد. به عنوان مثال در شکل ۶ نیمی از PKAهای ناشی از



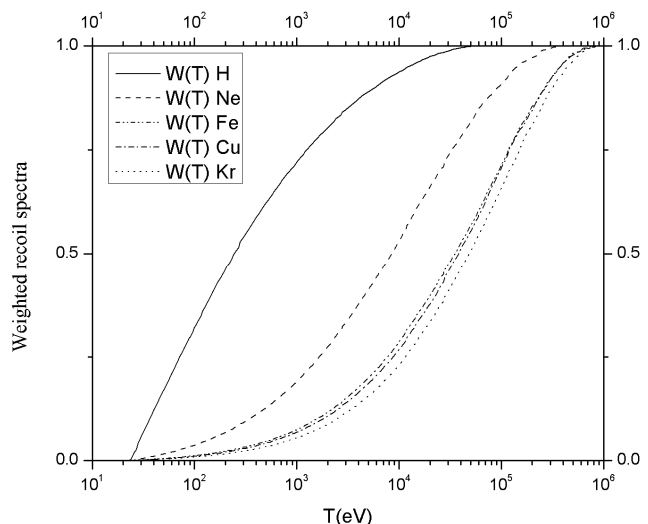
شکل ۵. طیف اتم‌های پس زده اولیه نوترون‌های تک انرژی با انرژی‌های ۱۰۰ keV، ۱ MeV، ۳ MeV، ۵ MeV، بر روی هدف <sup>۵۶</sup>Fe.



شکل ۴. طیف اتم‌های پس زده اولیه برای تابش یون‌های تک انرژی ۱ MeV بر روی هدف مس. (H, He, Ne, Ar, Fe, Cu, Kr)



شکل ۷. طیف وزنی پس زنی نوترون‌های تک انرژی با انرژی‌های ۱۰۰ keV، ۱ MeV، ۳ MeV، ۵ MeV، بر روی هدف <sup>۵۶</sup>Fe.



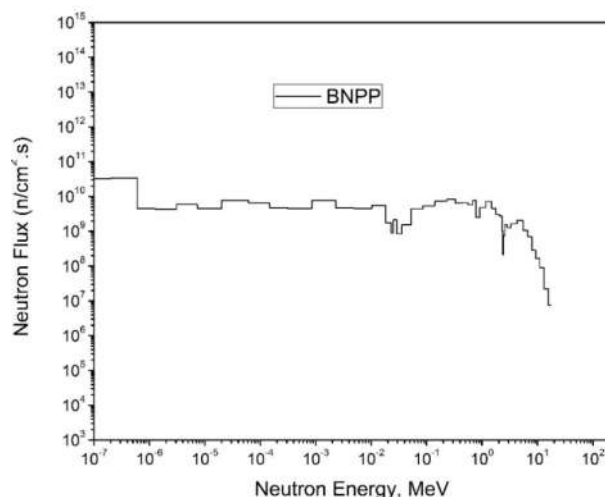
شکل ۶. طیف وزنی پس زنی برای تابش یون‌های تک انرژی ۱ MeV بر روی هدف مس. (H, He, Ne, Ar, Fe, Cu, Kr)

AMTRACK آن را تحلیل کرده و طیف وزنی پس زنی نوترون‌ها را به دست می‌دهد. در کد MCNPX از سطح مقطع‌های ENDF/B-VII استفاده شده است و استفاده از سایر سطح مقطع‌های قبلی ENDF تأثیر قابل توجهی در نتایج نخواهد داشت.

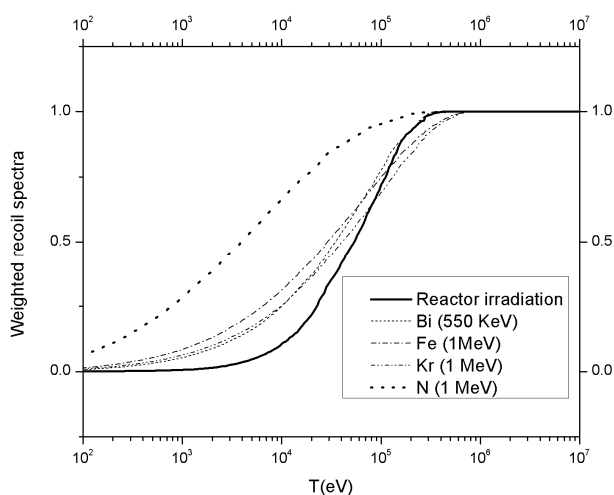
در شکل ۷ طیف وزنی پس زنی نوترون‌ها برای تابش نوترون‌های تک انرژی با انرژی‌های ۱۰۰ keV، ۱ MeV، ۳ MeV و ۵ MeV بر روی <sup>۵۶</sup>Fe نشان داده شده است. مقایسه شکل های ۶ و ۷ نشان می‌دهد یون‌های سنگین آسیب را در

پروتون با انرژی کمتر از ۱ keV و میانگین ۶۰ eV تولید شده‌اند در حالی که همین تعداد از PKA های ناشی از Kr با انرژی کمتر از ۳۰ keV و میانگین ۵ keV تولید شده‌اند.

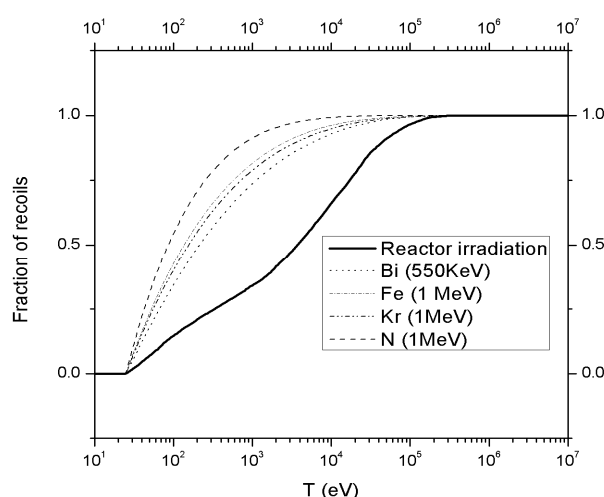
برای به دست آوردن طیف وزنی نوترون‌ها پس از تحلیل Ptrack (فایل خروجی MCNPX) برنامه AMTRACK فایل Trim.dat را تولید که این فایل به عنوان ورودی کد اسریم برای محاسبه آسیب تابشی نوترونی استفاده می‌شود. سپس کد اسریم خروجی Collision.txt را برای نوترون‌ها تولید می‌کند و برنامه



شکل ۸. طیف شار گروه بندی شده راکتور بوشهر.



شکل ۹. طیف وزنی پس زنی برای تابش یونهای Bi, Fe, Kr, N که با تابش نوترونهای راکتور بوشهر بر روی هدف  $^{56}\text{Fe}$  مقایسه شده است.



شکل ۱۰. طیف اتمهای پس زده اولیه برای تابش یونهای N, Fe, Kr, Bi که با تابش نوترونهای راکتور بوشهر بر روی هدف  $^{56}\text{Fe}$  مقایسه شده است.

طیف راکتور بوشهر بر روی محفظه تحت فشار راکتور از مقالات [۱۵، ۱۶] استخراج شد و در شکل ۸ نمایش داده شده است.

بنابراین طیف های  $P(E, T)$  و  $W(E, T)$  را برای شار نوترونی راکتور بوشهر بر روی محفظه تحت فشار راکتور و همچنین یونهای Bi, Fe, Kr, N, رسم و با مقایسه طیفها، یون مناسب و انرژی آن را تعیین می کنیم. نتایج این محاسبات در شکل های ۹ و ۱۰ نمایش داده شده اند.

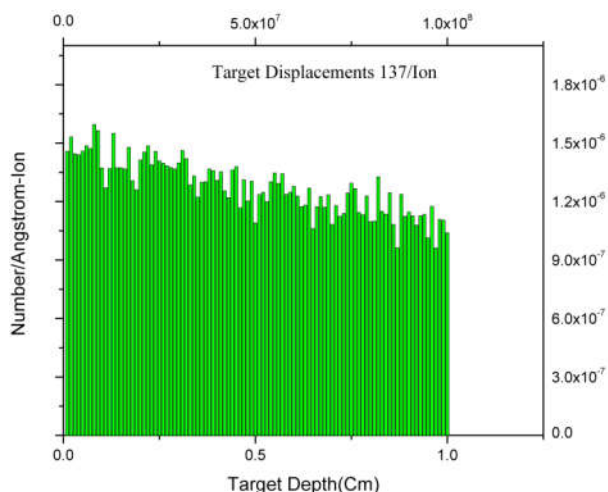
شکل ۹ نشان می دهد که طیف پس زنی یونها و نوترونها

شکل نزدیک تری به نوترونها تولید می کنند.

در مجموع بررسی این نمودارها نشان می دهد نوترونها آسیب را به شکل خوشه های بزرگ ایجاد می کنند، و آسیب یونهای سنگین نسبت به یونهای سبک به نوترونها نزدیک تر است.

در ادامه با استفاده از قابلیت های کدهای ترکیبی MCNPX+SRIM+AMTRACK آسیب راکتور روسی VVER-1000 (بوشهر) را محاسبه کرده و یون مناسب جهت شبیه سازی این مقدار آسیب را انتخاب می کنیم.





شکل ۱۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) پروفایل آسیب طیف نوترونی راکتور بوشهر بر روی  $Fe^{56}$ .

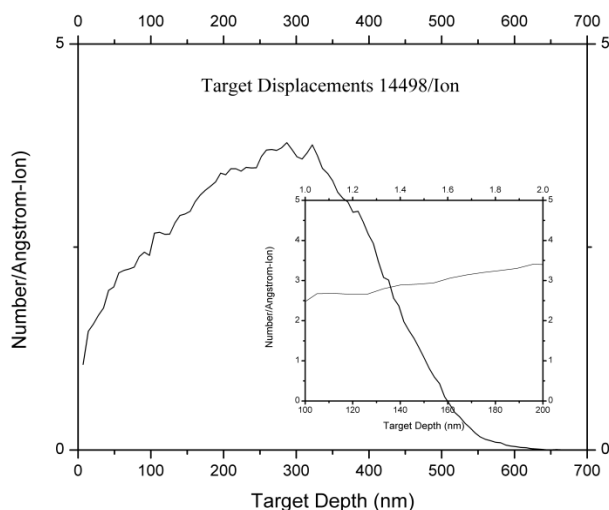
Vacancy.txt است. از طریق این فایل می‌توانیم پروفایل آسیب را رسم کنیم و مقدار dpa را نیز محاسبه کنیم. در شکل ۱۱ میزان آسیب به ازای هر PKA و همچنین پروفایل آسیب شار راکتور بوشهر بر روی  $Fe^{56}$  نشان داده شده است. همان طوری که مشاهده می‌شود نوترون‌ها پروفایل آسیب تقریباً یکنواختی را تا عمق ۱ cm در هدف ایجاد می‌کنند. شکل ۱۲ و ۱۳ پروفایل آسیب مربوط به تابش یون‌های  $Bi(550 \text{ keV})$  و  $Fe(1 \text{ MeV})$  را بر روی هدف  $Fe^{56}$  نمایش می‌دهند.

برای انتخاب قسمتی از نمونه تحت تابش به منظور تحلیل ریز ساختار پرتو دیده لازم است که پروفایل تابش در آن قسمت یکنواخت باشد. این موضوع به این دلیل است که قسمت یکنواخت به منظور تحلیل ریزساختاری در آزمایش‌ها از نمونه جدا می‌شود و انتظار داریم جزء جدا شده به صورت یکنواخت و تقریباً برابری آسیب دیده باشد. در شکل ۱۲ نشان داده می‌شود که تابش  $Bi$  نمی‌تواند پروفایل یکنواختی را ایجاد کند در حالی که تابش  $Fe$  یک پنجره ۱۰۰ nm با پروفایل آسیب یکنواخت فراهم می‌کند. این پنجره ۱۰۰ نانومتری در فاصله ۱۰۰ تا ۲۰۰ نانومتر جدا می‌شود. به نظر می‌رسد در فاصله ۲۰۰ تا ۳۰۰ نانومتر هم امکان انتخاب یک جزء یکنواخت وجود دارد، اما در ناحیه قله آسیب بیشترین تعداد از یون‌های بین نشین کاشته شده  $Fe$  وجود دارد که باعث

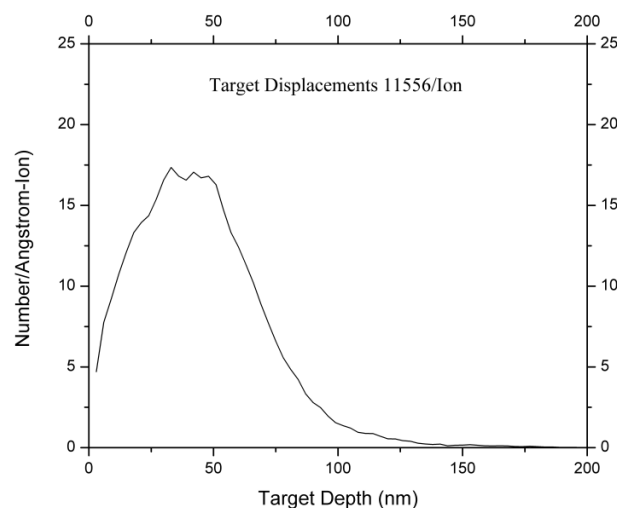
به یکدیگر نزدیک نیستند ولی این موضوع اصلاً مهم نیست بلکه مهم تعداد جابه‌جایی‌های تولید شده برای اتم‌های پس زده اولیه است که در شکل ۱۰ رسم شده است. این شکل نشان می‌دهد که یون‌های سنگین طیف پس زنی بسیار نزدیکی به طیف راکتور PWR دارند. در این شکل می‌بینیم که یون‌های  $Fe(1 \text{ MeV})$  و  $Bi(550 \text{ keV})$  نزدیک‌ترین طیف  $W(E, T)$  به طیف نوترونی راکتور بوشهر را دارند. اگر چه محاسبات فوق اختلاف فاحشی را بین  $W(E, T)$  حاصل از نیتروژن و طیف راکتور نشان می‌دهد (همچنین یون‌های سنگین‌تر نیز در دنباله‌ها کاملاً منطبق نیستند) ولی این بدان معنی نیست که نمی‌توانند به منظور محاسبات آسیب ناشی از تابش نوترون راکتور استفاده شوند، بلکه برای استفاده از آنها نیاز است محاسبات پیشرفته‌تری با استفاده از کدهای دینامیک مولکولی مثل کد lammps انجام گیرد و همچنین شرایط انجام آزمایش (تعیین دمای نمونه هنگام تابش) را نیز به نحوی تعیین کرد که آسیب نهایی حاصل از این دو تابش بتوانند به یکدیگر نزدیک شوند. اثرات نهایی ریز ساختار پرتو دیده توسط تعداد واقعی عیوبی که نهایتاً در آبشار جابه‌جایی باقی می‌مانند و همچنین توزیع فضائی آن عیوب تعیین خواهد شد.

در ادامه این محاسبات لازم است میزان آسیب و پروفایل آسیب حاصل از نوترون و یون‌ها محاسبه شوند. همان طور که قبلاً نیز اشاره شد یکی از خروجی‌های کد اسریم فایل

۱. Injected interstitials



شکل ۱۳. پروفایل آسیب تابش یون  $Fe(1\text{ MeV})$  بر روی  $Fe^{56}$ .



شکل ۱۲. پروفایل آسیب تابش یون  $Bi(55\text{ keV})$  بر روی  $Fe^{56}$ .

است. ( $10^{12}\text{ ion/cm}^2$ )

#### ۴. جمع بندی

در این مطالعه یک روش مفید برای ارزیابی آسیب های نوترون-اتم و یون-اتم و همچنین معادل سازی آنها توسعه پیدا کرد. در این روش یک برنامه MATLAB نوشته شد که خروجی های MCNPX و SRIM را تجزیه تحلیل کرده و امکان محاسبه توزیع انرژی، مکانی و زاویه ای PKAها را فراهم آورد و در نتیجه محاسبات آسیب تابش روی ماده نیز قابل محاسبه خواهد بود. این روش برای محاسبات مواد ترکیبی نیز به خوبی کارآمد است و می تواند PKAهای ناشی از عناصر مختلف یک ماده را نیز دسته بندی نماید.

به منظور جایگزینی یون مناسب برای شبیه سازی آسیب تابش نوترون ها در اینجا یون  $Fe$  با انرژی  $1\text{ MeV}$  برای تابش انتخاب شد. این یون در هدف حدود  $600$  نانومتر برد دارد. در عمق  $100$  تا  $200$  نانومتری یک پروفایل آسیب تقریباً یکنواخت داریم. این ناحیه به عنوان ناحیه مناسب جهت انتخاب به منظور آزمون های ریز ساختاری پس از تابش انتخاب شد. طیف شار راکتور بوشهر برای مدت یک سال حدود  $3.49 \times 10^{-3}\text{ (dpa/year)}$  آسیب ایجاد می کند. این مقدار آسیب با تابش حدود  $(10^{12}\text{ ion}(Fe^{2+})/\text{cm}^2)$  ایجاد می شود. به عبارتی آسیب ناشی از یک سال تابش نوترونی می تواند با تابش چند دقیقه ای یون  $Fe$  معادل شود.

می شود این ناحیه برای آزمون های نهائی مکانیکی و ریز ساختاری مناسب نباشد. در نهایت تابش یون  $Bi$  با این انرژی نمی تواند یون مناسبی جهت بررسی نهایی باشد و یون  $Fe$  با انرژی  $1\text{ MeV}$  انتخاب می شود.

جهت محاسبه میزان آسیب نوترونی و یونی از رابطه (۴)

استفاده می کنیم.

$$Neutron\ Damage = \frac{\nu(\bar{T})n_{PKA}}{N} \text{ (dpa)} \quad (4)$$

در رابطه بالا  $\bar{T}$  میانگین انرژی PKAها است،  $\nu(\bar{T})$  تعداد جابه جایی ها برای یک PKA با انرژی میانگین (محاسبه و میانگین گیری توسط کد اسریم)،  $n_{PKA}$  تعداد PKAها برای جریان نوترونی مورد نظر و  $N$  چگالی اتمی هدف می باشد. با استفاده از طیف شکل ۸ جریان نوترونی راکتور بوشهر برای دوره کاری یک ساله بر روی محفظه تحت فشار راکتور برابر  $5.91 \times 10^{18}$  نوترون  $[15, 16]$ ، تعداد PKAها برای این شار نوترونی با استفاده از برنامه AMTRACK،  $2.16 \times 10^{18}$  است،  $\nu(\bar{T})$  با استفاده از کد اسریم  $137/PKA$  و چگالی اتمی آهن  $8.48 \times 10^{22}\text{ (at/cm}^3)$  می باشد. در نهایت آسیب نوترونی راکتور بوشهر بر روی آهن  $3.49 \times 10^{-3}\text{ (dpa/year)}$  می باشد.

تابش یون  $Fe$  با توجه به محاسبات انجام شده مقدار  $(3.48 \times 10^{-15}\text{ (dpa/(ion/cm}^2))$  در پنجره انتخاب شده ایجاد می کند. برای معادل سازی آسیب دو نمونه نیاز به تابش حدود

ترکیبی های قابل توجهی در طول سرد شدن فازی می شود با مقدار نهایی باقی مانده از تابش نوترونی یکسان شود.

در ادامه باید شرایط دمائی تابش یون را به نحوی تعیین کنیم که آسیب های نهایی پس از تابش که دستخوش باز

## مراجع

۱. م لامعی رشتی، ف قاسمی، س زارعی، ح سیار، ح آل ابراهیم، م خسروانی، م انصاری، م یاحقی، امیردامادی و ش س مدنی، مجله پژوهش فیزیک ایران ۲۱۵ (۱۳۹۴) ۱۱۹.
1. M Laméhi Rashti, F Ghasemi, S Zarei, H Sayyar, H Aleebrahim, M Khosravani, M Ansari, M Yahaghi, AH Mirdamadi, and SH Madani, *Iranian Journal of Physics Research* **15** 2 (2015) 119.
2. G S Was, "Fundamentals of Radiation Materials Science" (2013).
3. R S Averback, *Journal of Nuclear Materials* **216** (1994) 49.
4. A Mohammadi, S Hamidi, and M A Asadabad, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **412** (2017) 19.
5. M R Gilbert, J Marian, and J C Sublet, *Journal of Nuclear Materials* **467** (2015) 121.
6. L Luneville, D Simeone, and D Gosset, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **250** (2006) 71.
7. J F Ziegler, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* (2004) 1027.
8. J F Ziegler, M D Ziegler, and J P Biersack, SRIM – The Stopping and Range of Ions in Matter (2010), Ion Implantation Press (2010).
9. J P Biersack and J F Ziegler, "The Stopping and Range of Ions in Solids", *pergamon Press* (1982).
10. J F Ziegler, M D Ziegler, and J P Biersack, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **268** (2010) 1818.
11. D B Pelowitz, MCNPX User's Manual. Version 2.7.0, Los Alamos National Laboratory, LA-CP-11-00438 (2011).
12. B Khorsandi, T Blue, W Windl, J Kulisek, and S Dean, *Journal of ASTM International* **3** (2006) 100358.
13. P Vladimirov and S Bouffard, *Comptes Rendus Physique* **9** (2008) 303.
14. M T Robinson, *Journal of Nuclear Materials* **216** (1994) 1.
15. S Fazel, G Ardekani, and K Hadad, *Nuclear Energy and Technology* **3** (2017) 73.
16. S F Ghazi Ardekani and K Hadad, *Progress in Nuclear Energy* **99** (2017) 96.