

# РАСЧЕТЫ ОБРАЗОВАНИЯ ПЕРВИЧНЫХ РАДИАЦИОННЫХ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В ГРАФИТЕ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВТОРИЧНЫХ НЕЙТРОНОВ И $\pi^-$ -МЕЗОНОВ, КОТОРЫЕ РОЖДАЮТСЯ В РАЗЛИЧНЫХ КАНАЛАХ ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ГРАФИТА ПРОТОНАМИ С ЭНЕРГИЕЙ 450 ГэВ

*А. И. Рязанов\**, *Е. В. Семенов*

*Российский научный центр «Курчатовский институт»  
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 1 декабря 2009 г.

Разработана теоретическая модель и проведены расчеты скоростей образования первичных радиационных точечных дефектов, образующихся в графите под действием вторичных нейтронов и  $\pi^-$ -мезонов, которые рождаются в различных каналах ядерных реакций при облучении графита пучком протонов с энергией 450 ГэВ. Расчеты проведены на основе базы ядерных данных ENDF-VII для энергий вторичных частиц, не превышающих 150 МэВ. Показано, что наибольшую скорость генерации точечных радиационных дефектов в графите создают нейтроны, скорость образования дефектов от которых на порядок превышает значение данной величины для  $\pi^-$ -мезонов.

Облучение материалов быстрыми частицами приводит ко многим физическим эффектам, например, к неустойчивости дислокационных петель в диэлектриках при облучении быстрыми электронами [1], образованию субкаскадов атомных столкновений в твердых телах под действием нейтронного облучения [2]. Настоящая работа посвящена формированию точечных дефектов в графите при взаимодействии с ним протонов высоких энергий. Рассмотрены процессы образования точечных дефектов под действием вторичных нейтронов и  $\pi^-$ -мезонов. Сечение образования для вторичных нейтронов интервале энергий от нескольких десятков МэВ до 10 ГэВ изменяется от 0.1 б до 0.6 б. Для  $\pi^-$ -мезонов в том же диапазоне энергий сечение образования варьируется от 0.1 мб до 100 мб [3]. Взаимодействие пучков заряженных частиц с материалом коллиматоров является актуальной задачей современных ускорителей высокой энергии, таких как БАК в ЦЕРНе.

Найдем скорости образования первичных радиационных дефектов, образующихся под действием

быстрых вторичных нейтронов или пионов, которые возникают в графите под действием распада продуктов ядерных реакций с различными зарядовыми числами  $Z$  при взаимодействии пучка протонов с энергией 450 ГэВ с графитом. Для этого найдем спектры первично выбитых атомов (ПВА) (атомов отдачи) или дифференциальные сечения рассеяния нейтронов на атомах углерода с использованием базы ядерных данных ENDF-VII [3] для диапазона энергий вторичных частиц до 150 МэВ и сечения образования первичных радиационных точечных дефектов в графите. На основе полученных результатов рассчитаем скорости образования первичных радиационных дефектов, образующихся под действием быстрых вторичных нейтронов на различных расстояниях от пучка протонов с энергией 450 ГэВ для нижней части спектров нейтронов с энергиями до 150 МэВ.

Полное сечение образования точечных радиационных дефектов ( $\sigma_d$ ) для нейтрона с энергией  $E$  в предельно общем виде можно представить как

$$\sigma_d(E) = \sum_i \int \frac{d\sigma_i(T, E)}{dT} \nu(T) dT, \quad (1)$$

\*E-mail: alexander.ryazanov@cern.ch

где  $\nu(T)$  — каскадная функция для атома углерода в графите,  $d\sigma_i(T, E)/dT$  — дифференциальное сечение взаимодействия нейтрона с атомом кристаллической решетки графита, который в результате взаимодействия приобретает кинетическую энергию  $T$ ,  $E$  — энергия налетающей частицы, образующейся в результате ядерных реакций,  $i$  — индекс суммирования по различным каналам ядерных реакций.

Преобразуем интеграл, стоящий под знаком суммы, к следующему виду [4]:

$$\sigma_d^i(E) = \sigma(E) \int_{E_d}^{T^{max}} \left[ \frac{1}{\sigma} \frac{d\sigma}{d\Omega}(E, \phi) \right] \frac{d\Omega}{dT} \nu(T) dT, \quad (2)$$

где  $\sigma(E)$  — соответствующее полное сечение рассеяния,  $d\Omega$  — элемент телесного угла,  $\phi$  — угол рассеяния в системе центра масс,  $T^{max} = \gamma E$  — максимально возможная энергия ПВА, соответствующая углу для упругого столкновения,  $E_d$  — пороговая энергия образования дефектов в облучаемом материале;  $\gamma$  определена ниже в формуле (4),

$$T = \eta_1 \eta_2 E + \frac{\eta_1}{\eta_2} E_m - 2\eta_1 (E E_m)^{1/2} \cos \phi, \quad (3)$$

$$\eta_1 = \frac{1}{1 + A_T}, \quad \eta_2 = \frac{A_T}{1 + A_T}, \quad \gamma = 4\eta_1 \eta_2, \quad (4)$$

$A_T$  — масса атома мишени. Проанализируем полученное выражение для случая упругого и неупругого соударений. Для первого из закона сохранения энергии имеем  $E_m = \eta_2^2 E$ . Таким образом, формулу (3) можно представить как

$$T = \frac{1}{2} \gamma E (1 - \cos \phi). \quad (5)$$

Следовательно, выражение  $d\Omega/dT$  преобразуется к следующему виду:

$$\frac{d\Omega}{dT} = -2\pi \frac{d \cos \phi}{dT} = \frac{4\phi}{\gamma E} = \frac{4\phi}{T^{max}}. \quad (6)$$

Упругому рассеянию при низких энергиях соответствует изотропное распределение. Для энергий больше 2 МэВ в графите рассеяние является существенно анизотропным. Перепишем уравнение (2) в терминах  $\mu = \cos \phi$ . Пусть  $p(E, \mu)$  — вероятность того, что нейтрон с энергией  $E$  испытает рассеяние на угол  $\arccos \mu$ . Тогда уравнение (2) можно представить в следующем виде:

$$\sigma_d^{el}(E) = \sigma \int_{-1}^{1-\gamma} p(E, \mu) \nu [T(E, \mu)] d\mu, \quad (7)$$

где величина  $r = 2E_d/T^{max}$ , ею можно пренебречь, если энергия ПВА заметно превышает пороговую энергию образования дефектов.

Для расчетов сечения образования дефектов используется база данных для сечений ядерных реакций ENDF-VII, где угловые распределения для рассеяния нейтрона на атоме решетки нормированы на единицу. Поскольку угловое распределение рассеяния нейтронов в общем случае имеет азимутальную симметрию, оно может быть представлено в виде сумм полиномов Лежандра [5].

Рассмотрим процесс неупругого рассеяния. Для энергий, не слишком превышающих порог неупругого рассеяния  $(n, n')$ , вклад в сечение образование дефектов можно получить, суммируя вклады от реакций  $(n, n')$  с учетом их порога реакции  $Q$  (здесь и далее положительного). Из закона сохранения энергии для реакций типа  $(n, n')$  имеем

$$E_m = \eta_2 (\eta_2 E - Q). \quad (8)$$

Подставив (8) в уравнение (3), получим следующее выражение для кинетической энергии ПВА:

$$T = \frac{1}{2} \gamma \left[ E - \mu \left( E \left( E - \frac{Q}{\eta_2} \right) \right)^{1/2} \right] - Q \eta_1. \quad (9)$$

Следовательно, выражение  $d\Omega/dT$  преобразуется к следующему виду:

$$\frac{d\Omega}{dT} = \frac{4\pi}{\gamma} [E(E - Q/\eta_2)]^{1/2}. \quad (10)$$

Верхние и нижние пределы интегрирования будут определяться значениями соответственно  $\mu = -1$  и  $\mu = 1$ . Для реакций  $(n, n')$ , переходя к интегрированию по переменной  $\mu$ , получим

$$\sigma_d^{(n, n')} = \sigma^{(n, n')}(E) \int_{-1}^1 p(E, \mu) \nu [T(E, \mu)] d\mu. \quad (11)$$

Опуская вычисления, отметим, что для реакций  $(n, \gamma)$  с пороговой энергией реакции  $Q_\gamma$  значения максимальной и минимальной энергий для атома отдачи будут определяться выражением

$$T^{min/max} = \frac{E}{1 + A_T} + \frac{1}{2(1 + A_T)} \times \left( \frac{A_T}{1 + A_T} \frac{E}{c} - \frac{Q_\gamma}{c} \right)^2 \mp \frac{\sqrt{2E}}{1 + A_T} \times \left( \frac{A_T}{1 + A_T} \frac{E}{c} - \frac{Q_\gamma}{c} \right), \quad (12)$$

а выражение для  $d\Omega/dT$  принимает вид

$$\frac{d\Omega}{dT} = 2\pi \frac{1 + A_T}{\sqrt{2E}} \left( \frac{A_T}{1 + A_T} \frac{E}{c} - \frac{Q_\gamma}{c} \right)^{-1}. \quad (13)$$

Соответствующие значения для реакций типа  $(n, x)$ , где  $x = n', p, \alpha$  и другие [6]:

$$T^{min/max} = \frac{BE}{(1 + A_T)^2} + \left( \frac{A_T E}{1 + A_T} - Q \right) \times \left( 1 + \frac{B}{x} \right)^{-1} \mp \frac{2}{1 + A_T} \times \left( \frac{A_T E^2}{1 + A_T} - QE \right)^{1/2} \left( \frac{1}{x} + \frac{1}{B} \right)^{-1/2}, \quad (14)$$

$$\frac{d\Omega}{dT} = \pi(1 + A_T) \left( \frac{1 + A_T}{A_T E^2} \left( \frac{1}{x} + \frac{1}{B} \right) \right)^{1/2}, \quad (15)$$

где  $B = A_T + 1 - x$ , а  $x$  — масса образовавшейся частицы в атомных единицах массы.

Рассмотрим подробнее выражение для каскадной функции, входящей в уравнение (1). Каскадная функция  $\nu(E)$  — полное число дефектов, образованных ПВА с энергией  $E$ . Простое выражение для каскадной функции было получено Кинчином и Пизом [7] в приближении двухчастичного взаимодействия между атомами:

$$\nu(T) = E/2E_d,$$

$E_d$  — пороговая энергия образования точечного дефекта в кристаллической решетке облучаемого материала. Дальнейшее развитие разрабатываемая теория получила в работах Норретта, Робинсона и Торренса [8], где вместо кинетической энергии ПВА  $E$  используется аналитическое выражение для энергии, затраченной только на упругие столкновения ПВА с атомами кристаллической решетки (модель NRT-стандарт).

Для расчетов скоростей образования дефектов были использованы данные ENDF-VII (информация по упругим и неупругим сечениям взаимодействия, а также угловые распределения частиц). Спектры вторичных частиц были получены моделированием с помощью программного комплекса FLUKA [9], основанного на методе Монте-Карло и позволяющего эффективно моделировать физические процессы с участием частиц высоких энергий вплоть до диапазона в нескольких десятков ТэВ. Для пороговой энергии образования точечных дефектов в графите использовано типичное значение  $E_d = 25$  эВ.

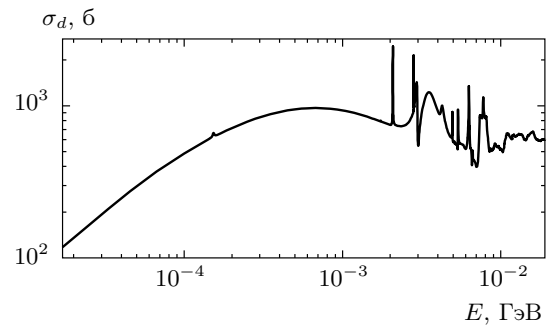


Рис. 1. Сечение образования дефектов для вторичных нейтронов

Используя данные ENDF-VII и формулы (1), (7) и (11), найдем сечения образования первичных радиационных дефектов в графите (рис. 1) и на основе полученных результатов рассчитаем скорости образования первичных радиационных дефектов, образующихся под действием быстрых вторичных нейтронов на различных расстояниях вдоль пучка протонов с энергией 450 ГэВ.

Величина скорости образования первичных радиационных точечных дефектов определяется формулой

$$G_d = \frac{n_p}{\tau} \int_{E_d}^{T^{max}} \Phi(E) \sigma_d(E) dE, \quad (16)$$

где  $n_p$  — полное число протонов в пучке ( $1.1 \cdot 10^{11}$ ),  $\tau$  — интервал между пучками, равный 26 нс,  $\Phi(E)$  — энергетический спектр вторичных частиц, имеющих энергию  $E$  и взаимодействующих с графитовым материалом. Данные по спектрам различных вторичных частиц, образующихся при взаимодействии пучка протонов с энергией 450 ГэВ с графитом, были получены с помощью программы FLUKA и представляют собой эволюцию спектра вдоль облучаемого образца (см. рис. 2, 3). Расчеты скорости образования дефектов под действием вторичных нейтронов представлены на рис. 4.

Для расчетов скорости образования первичных радиационных дефектов, образующихся под действием быстрых вторичных  $\pi^-$ -мезонов на различных расстояниях от пучка протонов с энергией 450 ГэВ, для определения сечения взаимодействия  $\pi^-$ -мезонов с атомом кристаллической решетки графита использовалась формула МакКинли и Фешбаха [10], которая учитывает релятивистский характер взаимодействия частиц и дает приемлемый результат для легких элементов, таких как графит.

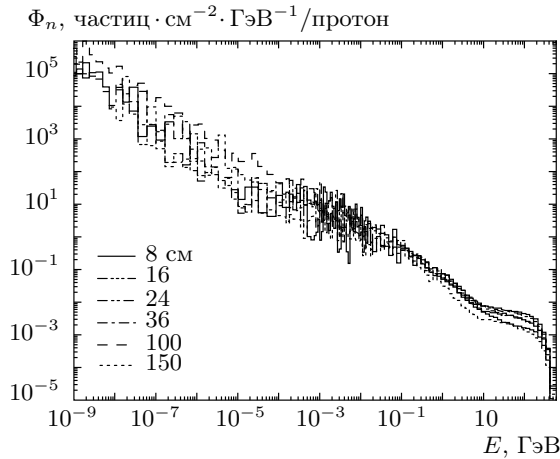


Рис. 2. Энергетические спектры вторичных нейтронов, образующихся при взаимодействии пучка протонов с энергией 450 ГэВ с графитом вдоль оси пучка

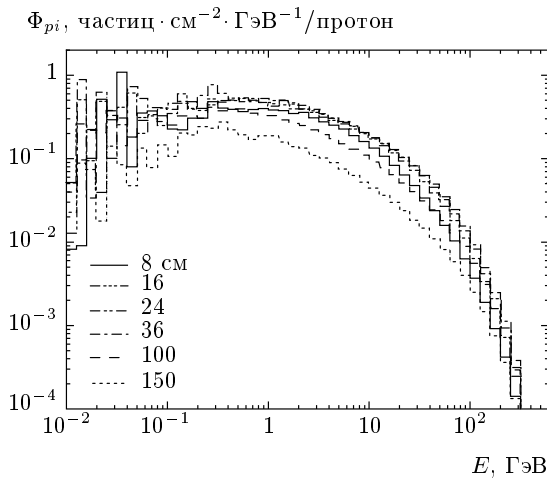


Рис. 3. Энергетические спектры вторичных π⁻-мезонов, образующихся при взаимодействии пучка протонов с энергией 450 ГэВ с графитом вдоль оси пучка

Дифференциальное сечение упругого рассеяния релятивистских π⁻-мезонов  $d\sigma(E, E_p)/dE$  на атомах кристаллической решетки облучаемого материала рассчитывается как

$$\frac{\sigma(E, E_p)}{dE} = \frac{4\pi a_0^2 Z_T^2 E_R^2}{m_p^2 c^4} \frac{1 - \beta^2}{\beta^4} \times \left[ 1 - \beta^2 \frac{E}{E_m} + \pi \frac{Z_T \beta}{137} \left( \left( \frac{E}{E_m} \right)^{1/2} - \frac{E}{E_m} \right) \right] \frac{E_m}{E^2}, \quad (17)$$

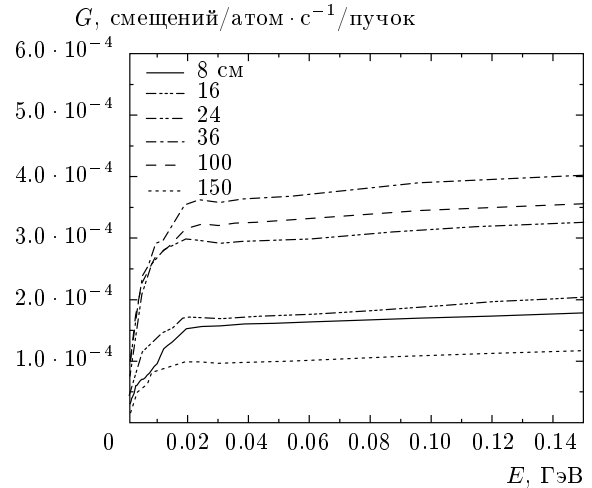


Рис. 4. Скорость образования дефектов под действием вторичных нейтронов вдоль оси пучка протонов с энергией 450 ГэВ

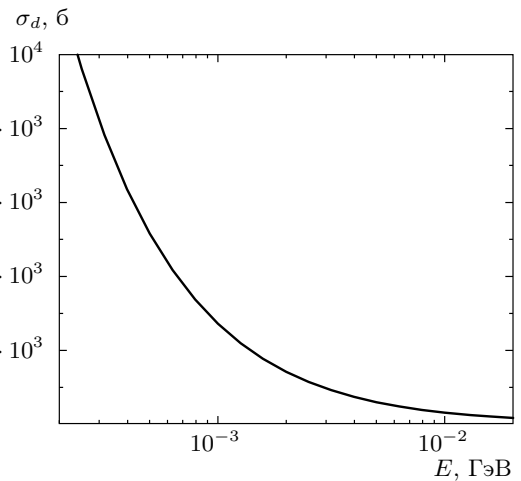
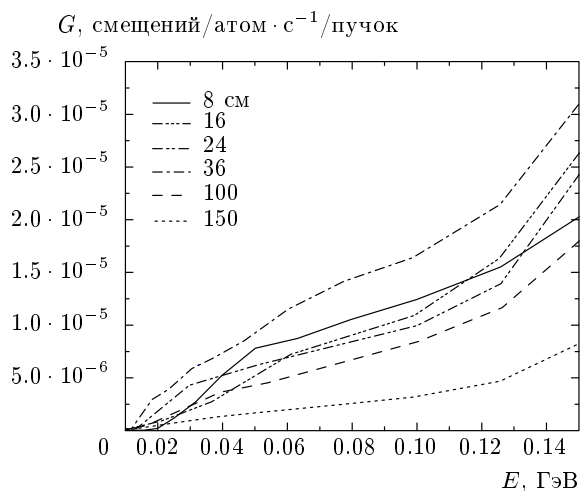


Рис. 5. Сечение образования дефектов для вторичных π⁻-мезонов

$$\beta = \frac{v_p}{c}, \quad E_R = \frac{e^2}{2a_0},$$

$$E_m = \frac{2E_p(E_p + 2m_p c^2)}{M_T c^2}. \quad (18)$$

Здесь  $a_0$  — боровский радиус,  $m_p$  — масса π⁻-мезона,  $M_T$  — масса атома мишени,  $e$  — заряд электрона,  $c$  — скорость света,  $Z_T$  — заряд атома мишени,  $v_p$  — скорость пиона,  $E_p$  — кинетическая энергия пиона. Для расчета скоростей образования дефектов (DPA) на различных расстояниях от пучка протонов с энергией 450 ГэВ могут использоваться значения спектров быстрых π⁻-мезонов, представленные на рис. 3. На рис. 5 и рис. 6 представлены



**Рис. 6.** Скорость образования дефектов под действием вторичных  $\pi^-$ -мезонов вдоль оси пучка протонов с энергией 450 ГэВ

результаты расчетов соответственно сечения образования дефектов и скоростей образования дефектов под действием  $\pi^-$ -мезонов.

Сравнение сечений образования точечных радиационных дефектов для нейтронов и  $\pi^-$ -мезонов показывает, что в интервале энергий от 25 эВ (пороговая энергия образования дефекта кристаллической решетки в графите) до 150 МэВ вклад вторичных нейтронов в радиационную повреждаемость графита превышает соответствующее значение скорости образования дефектов под действием вторичных пионов, и превышает ее приблизительно на порядок.

Авторы признательны А. Феррари (ЦЕРН) за проведение расчетов спектров вторичных частиц с использованием программного комплекса FLUKA. Работа выполнена при финансовой поддержке Роснауки РФ (грант № 01.164.1 2.НВ08).

## ЛИТЕРАТУРА

1. А. И. Рязанов, А. В. Клапцов, Письма в ЖЭТФ **81**, 474 (2005).
2. Е. В. Метелкин, А. И. Рязанов, Е. В. Семенов, ЖЭТФ **134**, 469 (2008).
3. <http://www.nndc.bnl.gov/exfor/endf11.htm>.
4. Gary S. Was, *Fundamentals of Radiation Materials Science. Metals and Alloys*, Springer, Berlin (2007).
5. ENDF-6 Formats Manual, 103 (2005).
6. Н. Huang and N. Ghoniem, J. Nucl. Mater. **199**, 221 (1993).
7. G. H. Kinchin and R. S. Pease, Rep. Progr. Phys. **18**, 1 (1955).
8. M. T. Robinson, J. Nucl. Mater. **216**, 1 (1994).
9. [www.fluka.org](http://www.fluka.org).
10. W. A. McKinley and H. Feshbach, Phys. Rev. **74**, 1759 (1948).