محاسبه طیف اتم های پس زده ناشی از تابش نوترون های تک انرژی بر روی آهن با استفاده از برنامه AMTRACK

محمدی،علی*(۱) - حمیدی،سعید(۱)- حاجی نیا، علی (۲) – اسدی، محسن(۳) – کیانی، حسین (۲)

دانشگاه اراک - دانشکده فیزیک[1]

سازمان انرژی اتمی[2]

سازمان انرژی اتمی اصفهان، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، پژوهشکده مواد [3]

چکیده :

طیف انرژی اتمهای بیرون افتاده از ساختار کریستالی آهن همچنین توزیع زاویه‌ای و مکانی آنها برای بررسی آسیب‌های ناشی از تابش نوترون باید محاسبه گردند. برنامه AMTRACK به منظور محاسبه این اطلاعات توسعه داده شده است. این نرم افزار خروجی PTRAC کد MCNPX را دریافت و با تحلیل آن اطلاعات مربوط به یونهای پس زده شده و همچنین سینماتیک برخورد را بدست می‌دهد. در نهایت اطلاعات بدست آمده با استفاده از محاسبات مونت کارلو و نرم افزار AMTRACK توافق خوبی را با نتایج حاصل از محاسبات قطعی و تئوری نشان می‌دهند.

واژگان کلیدی: آسیب تابشی، PKA، MCNPX Code، ENDF، NJOY Code، AMTRACK ، TRIM Code ، JANIS Code

مقدمه :

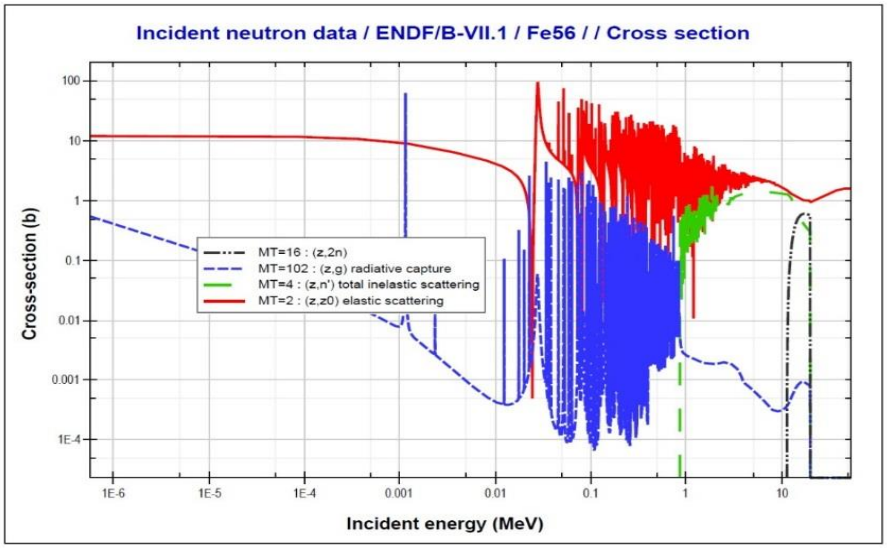
علم تابش بر روی مواد، توصیف کننده تابش در گستره انواع مواد و انواع تابش می باشد. برخی از عمیق ترین اثرات تابش بر روی ماده در قلب راکتورهای هسته ای رخ می دهد. جائیکه اتم های ساختار تشکیل دهنده مواد در طول عمر خود بارها و بارها از محل خود جابجا می گردند. برای اینکه تاسیسات هسته ای به هدف نهائی خود دست یابند، باید فهم عمیقی از اثرات تابش روی مواد به منظور طراحی و همچنین تولید مواد هسته ای جدید مقاوم در برابر تابش وجود داشته باشد[1]. انواع این تابش ها قابلیت جابجائی اتم ها را از محل خود در شبکه دارند، که این پدیده اساس فرآیندی است که منجر به تغییرات بیان شده در ساختار مواد می گردد[1]. آسیب تابشی، توصیف کننده حالت مواد تحت تابش است در حالیکه آثار تابش به رفتار عیوب در جامد بعد از تشکیل آنها باز می گردد، بنابراین باید در مورد غلظت تعادلی عیوب نقطه ای و فرآیند پخش آنها اطلاعات کاملی موجود باشد. ریشه اثرات تابش بر روی مواد، در رویدادهای اولیه ناشی از اینکه یک ذره پرانرژی به هدف ضربه می زند، می باشد. زمانی که این رویداد رخ می دهد، چندین فرآیند شکل

Archive of SID

www.SID.ir

می گیرد، ابتدا اتم از جایگاه خود در شبکه جابجا می گردد. هنگامی که یک اتم جابجا می شود، پشت سر خود یک جای خالی باقی می گذارد و اتم جابجا شده نهایتا در بین مکان های شبکه جای می گیرد و به یک اتم بین نشین تبدیل می گردد. رویداد آسیب تابش به صورت انتقال انرژی از ذره پرتابه به جامد تعریف می شود، که پس از اتمام رویداد توزیع اتم های هدف را مشخص می کند.

در این مطالعه برهم کنش نوترون با اتمهای هدف مورد بررسی قرار گرفته است. انواع برهم کنش های نوترون – هسته عبارتند از پراکندگی الاستیک، پراکندگی غیرالاستیک، اندرکنش (n,2n) و اندرکنش (n,γ) می‌باشد. در این مقاله محدوده انرژی نوترون از 10keV تا 1MeV در نظر گرفته شده، در این محدوده انرژی با توجه به شکل ۱ که برای آهن رسم شده، پراکندگی های غیر الاستیک و اندرکنش های (n,2n) و (n,γ) قابل صرفنظر هستند، لذا فقط پراکندگی الاستیک لحاظ شده است. محاسبه طیف انرژی اتمهای بیرون افتاده اولیه بعلاوه مکان و زاویه پراکندگی آنها اولین قدم در راستای پیش بینی دقیق اثرات تابش می‌باشد.[2].



شکل۱: مقایسه سطح مقاطع مختلف آهن (کد JANIS)

این اطلاعات به عنوان ورودی برای کدهای محاسباتی آسیب تابش نظیر کد TRIM در نظر گرفته می شود و باید به دقت محاسبه گردند. به دلیل اینکه عنصر آهن در ساختارهای اطراف راکتور بیشترین استفاده را دارند، اکثر مدلهای آسیب تابشی ناشی از نوترون تاکنون بر روی مواد ساختاری به ویژه آهن متمرکز شده‌اند، به همین دلیل در مقاله حاضر فلز آهن انتخاب شده است. شبیه سازی تابش نوترون بر روی آهن توسط کد MCNPX صورت گرفته است و با تحلیل نتایج آن توسط

www.SID.ir
of SID

برنامه AMTRACK که نویسندگان آنرا با استفاده از نرم افزار متلب نوشته اند، اطلاعات مورد نظر از یون پس زده شده بدست می‌آید. از طرفی با استفاده از محاسبات نرخ واکنش در روابط تئوری نیز می توان طیف انرژی PKA ها را بدست آورد. در نهایت با مقایسه نتایج حاصل از خروجی برنامه AMTRACK با محاسبات قطعی صحت و اعتبار محاسبات تایید می‌گردد.

روش کار:

به منظور محاسبه طیف اتم های بیرون افتاده اولیه(PKA) ناشی از عبور نوترون از ماده با استفاده از کد MCNPX [3] ماده مورد نظر به ضخامت 1cm و سطح $1cm^2$، و چشمه نوترونی صفحه‌ای با توزیع یکنواخت شبیه سازی شده است. کد MCNPX یک فایل خروجی تحت عنوان PTRAC چاپ می کند، این خروجی حاوی اطلاعات هر NPS 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 و زاویه حرکت یون می باشد. برای دستیابی و استخراج اطلاعات فوق از فایل PTRAC یک برنامه جانبی به نام AMTRACK توسط نرم‌افزار MATLAB نوشته شده است. این برنامه قادر است ماتریس PKA ها شامل کلیه اطلاعات مورد نیاز را استخراج، و طیف PKA ها را رسم کند.

در ادامه این مقاله با استفاده از محاسبات صورت گرفته توسط روابطی که در ادامه به آن ها اشاره می گردد.(محاسبات قطعی)، طیف PKA محاسبه و با خروجی برنامه AMTRACK به منظور اعتبار سنجی مقایسه می گردد. به علت خنثا بودن بار الکتریکی نوترون، برخورد های الاستیک بین نوترون ها و هسته ها مشابه برخورد کره های سخت در نظر گرفته می شود. هنگامی که نوترون ها از میان یک جامد عبور می کنند، یک احتمال هر چند محدود وجود دارد که آن ها با یک اتم شبکه برخورد نموده و یک انرژی پس زنی را به اتم وارد کنند. این احتمال توسط $\sigma_S(E_i,E_f,\Omega)$ تعریف می گردد. که E_i,E_f به ترتیب انرژی قبل و نهایی بعد از برخورد و Ω زاویه سه بعدی است که نوترون در آن پراکنده می شود. سطح مقطع پراکندگی دیفرانسیلی به صورت زیر بیان می گردد.

$$\sigma_S(E_i,\Omega)=\int \sigma_S(E_i,E_f,\Omega)\,dE_f$$

احتمال پراکندگی کلی برای نوترون هایی با انرژی E_i برابر است با:

$$\sigma_s(E_i)=\int \sigma_s(E_i,\Omega)d\Omega$$

www.SID.ir

Archive of SID

می توان با استفاده از اصل پایستگی انرژی و اندازه حرکت خطی در دستگاه های آزمایشگاه و مرکز جرم و انجام یک سری عملیات ریاضی انرژی پس زنی به اتم ضربه دیده (T) را محاسبه نمود و از آن برای محاسبه سطح مقطع دیفرانسیلی $\sigma_s(E_i,\mathrm{T})$ استفاده کرد که آن احتمالی است که یک نوترون با انرژی E_i، که در اثر برخورد با یک اتم به جرم M به صورت الاستیک پراکنده شده، یک انرژی پس زنی T را به اتم ضربه خورده وارد می کند. که T برحسب انرژی نوترون و زاویه پراکندگی به صورت رابطه روبرو بیان می گردد:

$$T = \frac{\gamma}{2} E_i (1-\cos\phi)$$

که در این رابطه $\gamma = \frac{4A}{(1+\mathrm{A})}$ است. با استفاده از روابط ریاضی می توان رابطه زیر را بدست آورد:

$$\sigma_s(\mathrm{E}_i,\mathrm{T})\,\mathrm{dT} = 2\pi\sigma_s(\mathrm{E}_i,\phi)\sin\varphi\,\mathrm{d}\phi$$

اکنون می توان تعداد اتم های پس زده شده در هر cm^3 از هدف به ازای تابش $\Phi(\mathrm{E})(\frac{n}{cm^2})$ را محاسبه نمود:

$$\int_{T1}^{T2} \sigma_s(\mathrm{E}_i,\mathrm{T})\,\mathrm{dT}\,\Phi(\mathrm{E})\,\mathrm{N}_i$$

$$\int_{T1}^{T2} \sigma_s(\mathrm{E}_i,\mathrm{T})\Phi(\mathrm{E})\,\mathrm{N}_i\mathrm{dT} = \int 2\pi\sigma_s(\mathrm{E}_i,\phi)\Phi(\mathrm{E})\,\mathrm{N}_i\sin\varphi\,\mathrm{d}\phi$$

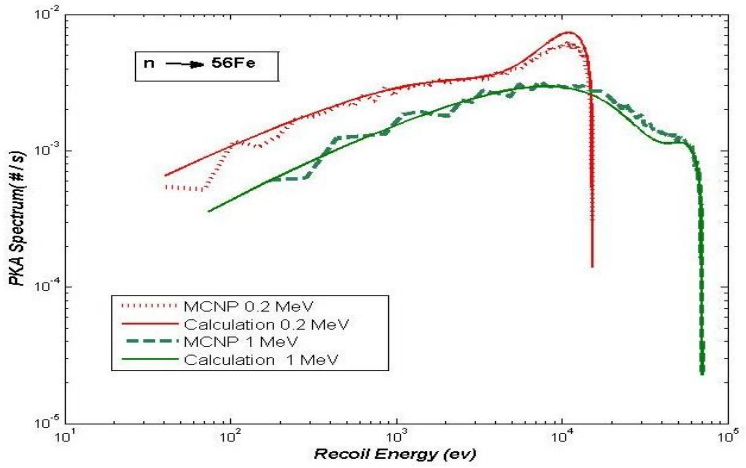
که N_i دانسیته اتمی هدف است. می توان $\sigma_s(\mathrm{E}_i,\phi)$ را مطابق رابطه زیر توسط توابع لژاندر بسط داد:

$$\sigma(\mathrm{E}_i,\mu) = \frac{\sigma_s(\mathrm{E})}{4\pi}\sum_l (2\mathrm{l}+1)\,\mathrm{a}_l(\mathrm{E})\,\mathrm{P}_l(\mu)$$

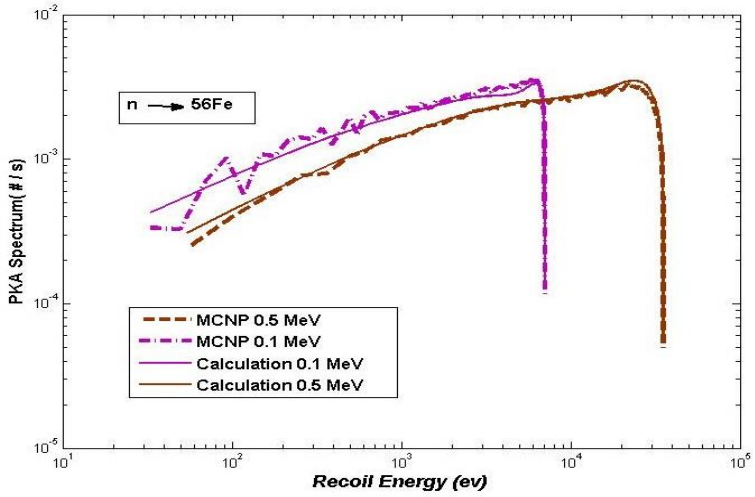
اینجا $\cos\phi = \mu$ است. $\mathrm{a}_l(\mathrm{E})$ و $\sigma_s(\mathrm{E})$ از روی فایل های ۳ و ۴ کتابخانه ENDF با توجه به هر انرژی خوانده شده است[4]. همچنین با توجه به دمای نمونه مورد بررسی (۲۹۳ کلوین) $\sigma_s(\mathrm{E})$ از خروجی کد پردازش داده هسته ای NJOY استخراج گردیده است[5]. به منظور حل عددی انتگرال فوق برنامه ای توسط نرم افزار MATLAB نوشته شده است. در شکل ۲ و ۳ طیف تعداد اتم های به بیرون پرتاب شده آهن، به ازای برخورد نوترون با انرژی 1 ، 0.2، 0.5 و 0.1 مگا

www.SID.ir
Archive of SID

الکترون ولت آمده است. مقایسه نتایج حاصل از محاسبات مونت کارلو و نتایج حاصل از محاسبات قطعی به صورت رضایت بخشی بر یکدیگر منطبق هستند.



شکل۲: تعداد اتم های به بیرون پرتاب شده آهن به ازای انرژی پس زنی هدف، برای برخورد یک نوترون

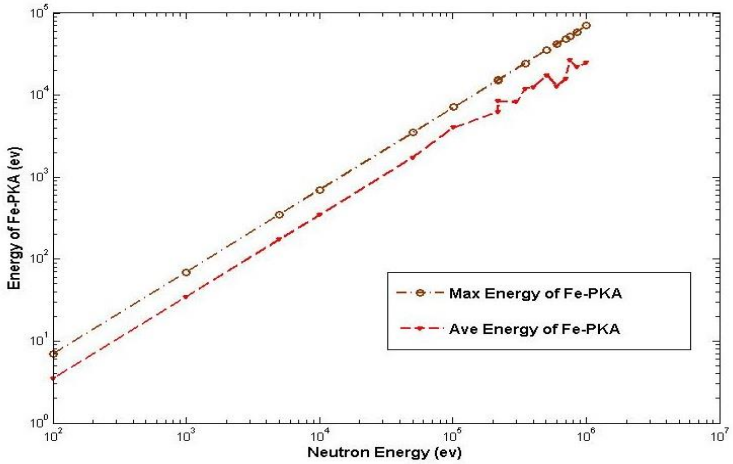


شکل۳: تعداد اتم های به بیرون پرتاب شده آهن به ازای انرژی پس زنی، برای برخورد یک نوترون

محاسبات مربوط به انرژی میانگین PKA ها و حداکثر انرژی PKA انجام گرفته است. در شکل ۴ نتایج مربوطه آورده شده است. رفتار انرژی میانگین در انرژی های بالای 100 keV افت و خیزهایی را نشان می دهد، که ناشی از وجود رزنانس های سطح مقطع پراکندگی در این ناحیه می‌باشد. سایر اطلاعات شامل تعداد PKA به ازای هر نوترون، توزیع

www.SID.ir

مکانی و زاویه‌ای آنها نیز در خروجی برنامه متلب قابل تحلیل می‌باشند. بعلاوه برنامه قادر است توزیع زاویه‌ای دردستگاه مرکز جرم وآزمایشگاه را نیز بدست آورد.



شکل۴: انرژی میانگین PKA ها و حداکثر انرژی PKA

بحث و نتیجه گیری:

با استفاده از روش مونت کارلو می‌توان به حجم زیادی از اطلاعات سینماتیک برخورد الاستیک دست یافت بدون اینکه نیاز به حل عددی انتگرال‌های پیچیده باشد، به علاوه حل این انتگرال‌ها به اطلاعات ورودی دقیقی نیاز دارد که باید از کتابخانه ENDF استخراج گردد. خروجی نرم‌افزار AMTRACK به عنوان ورودی کد TRIM مورد استفاده قرار می‌گیرد و نهایتا به میزان دقیقی از آسیب تابشی ناشی از تابش نوترون دست خواهیم یافت. برنامه‌ای که توسط نویسندگان تهیه شده به خوبی همه اطلاعات مورد نیاز را فراهم آورده و این امکان را فراهم می‌آورد تا به اطلاعات کاملی از برخورد نوترون و هدف دست یابیم، این اولین و مهمترین قدم در جهت محاسبه آسیب تابشی نوترون می‌باشد.

در ادامه این محاسبات برآنیم تا با وارد کردن سطح مقطع های سایر واکنش ها در انرژی‌های بالاتر و پایینتر از محدوده این مقاله، به حل دقیق‌تری از میزان آسیب در آینده دست یابیم.

مراجع:

1. Gary S. Was .Fundamentals of Radiation Material Science. Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2007
2. B. khorsandi, T. E. Blue, W. Windl, and J. Kulisek .TRIM Modeling of Displacement Damage in Sic for Monoenergetic Neutrons. C. R. Physique 9 (2008) 303–322
3. Denise B. Pelowitz, MCNPX™ USER'S MANUAL.

www.SID.ir
Archive

4. Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File ENDF/B-VI and ENDF/B-VII
5. D. W. Muir. R . M Boicourt. A. C. Kahler The NJOY Nuclear Data Processing System, Version 2012 .

Archive of SID

www.SID.ir