



## بررسی تاثیر پراکندگی همسانگرد و غیرهمسانگرد در برهمکنش الاستیک نوترون بر سطح مقطع آسیب جابجایی ایزوتوپ $^{56}\text{Fe}$

الهه مسلمی مهنی<sup>۱</sup>، فرخ خوش احوال<sup>۲\*</sup>، رضا پورایمانی<sup>۱</sup>، محمد امین امیرخانی دهکردی<sup>۲</sup>

۱. گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه اراک، ۳۸۴۸۱۷۷۵۸۴، اراک-ایران

۲. پژوهشکده راکتور و ایمنی هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، ۱۴۱۵۵۱۳۳۹، تهران-ایران

### چکیده:

برهمکنش الاستیک نوترون، نقش مهمی در جابجایی اتم‌های ماده دارد، و باعث آسیب در مواد و تاسیسات هسته‌ای می‌شود. این برهمکنش می‌تواند به دو صورت همسانگرد و غیرهمسانگرد صورت گیرد. هدف از این پژوهش، بررسی تاثیر نوع پراکندگی الاستیک نوترون از ایزوتوپ  $^{56}\text{Fe}$ ، بر روی سطح مقطع آسیب جابجایی است، که از مدل‌های جابجایی NRT، arc-dpa و rpa در آن استفاده شده است. در این محاسبات، از روش شبیه‌سازی برخورد دو جسمی استفاده شده است. برای محاسبه سطح مقطع آسیب جابجایی نوترون، داده‌های هسته‌ای نظیر سطح مقطع برهمکنش الاستیک و ضرایب لژاندر لازم است، که این داده‌ها از کتابخانه ENDF/B-VI توسط زبان برنامه‌نویسی FORTRAN 90 فراخوانی شده‌اند. نتایج نشان می‌دهد، در انرژی‌های بالا، سطح مقطع آسیب جابجایی پراکندگی غیرهمسانگرد نسبت به پراکندگی همسانگرد، برای همه مدل‌های جابجایی کاهش یافته است.

کلمات کلیدی: پراکندگی، همسانگرد، غیرهمسانگرد، سطح مقطع آسیب، برهمکنش الاستیک، آهن

## Evaluation of the Isotropic and Anisotropic Scattering Effects in the Damage Cross Section of Elastic Neutron Interaction with $^{56}\text{Fe}$ Isotope

Elaheh Moslemi Mehni<sup>1</sup>, Farrokh Khoshahval<sup>2,\*</sup>, Reza Pour Imani<sup>1</sup>, M. A. Amirkhani Dehkordi<sup>2</sup>

1. Faculty of science, Arak University, 3848177584, Arak, Iran

2. Reactor and Nuclear Safety Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute (NSTRI), 141551339, Tehran, Iran

**Abstract:** The elastic interaction plays an important role in displacing atoms from their lattice position. This interaction is considered as isotropic and anisotropic. The purpose of this study is evaluation of two types of elastic scattering effects in neutron damage cross section using several displacing models (NRT, arc-dpa and rpa). The Binary Collision Approximation (BCA) method is used in the calculations. The nuclear data from ENDF/B-VI library such as elastic cross section and Legendre coefficient are also used in these calculations by Fortran 90. The result shows that, neutron anisotropic scattering from the iron target is reduced at the higher energy for all of the models.

**Keyword:** Scattering, Isotropic, Anisotropic, Damage cross section, Elastic interaction, Iron

\*Corresponding author E-mail: [fkhoshahval@aeoi.org.ir](mailto:fkhoshahval@aeoi.org.ir)

## ۱. مقدمه

برهمکنش الاستیک نوترون، نقش بسیار مهمی در جابجایی اتم‌ها از شبکه اتمی خود دارد، این جابجایی‌ها، باعث بوجود آمدن آسیب در مواد و تاسیسات هسته‌ای می‌گردد [۱]. آسیب تابش نوترون در ماده، اغلب توسط پارامتری به نام جابجایی به ازای هر اتم یا  $dpa^1$  اندازه‌گیری می‌شود. یعنی میانگین تعداد دفعاتی که یک اتم، در طول تابش از محل شبکه خود جابجا می‌شود. سطح مقطع آسیب  $\sigma_D(E)$ ، کمیت اساسی در محاسبه  $dpa$  بوجود آمده در ماده می‌باشد [۲].

$$DPA = t \int_{E_{min}}^{E_{max}} dE \phi(E) \sigma_D^t(E) \quad (1)$$

رابطه (۱) نشان می‌دهد، تعداد اتم‌های جابجا شده با میزان سطح مقطع آسیب رابطه مستقیم دارد. که در آن  $\phi(E)$  شار نوترون و  $t$  مدت زمان تابش است. از آنجایی که شار فرودی نوترون، شامل تعداد بسیار زیادی ذره نوترون است، بنابراین تغییرات بسیار کوچک در محاسبه سطح مقطع باعث بوجود آمدن خطا بسیار بزرگی در محاسبه آسیب می‌شود. از این رو، در نظر گرفتن نوع برهمکنش و مدل‌های جابجایی مختلف در دقت محاسبه آسیب بسیار تاثیرگذار است. در برهمکنش الاستیک، دو نوع پراکندگی همسانگرد و غیرهمسانگرد برای پراکندگی نوترون از اتم‌های هدف وجود دارد [۱]. نوع پراکندگی نوترون از اتم‌های ماده هدف با جرم اتمی سبک و متوسط با یکدیگر متفاوت است، و در دقت محاسبه سطح مقطع آسیب بسیار تاثیرگذار است.

محاسبه آسیب از روش‌های مختلفی نظیر روش برخورد دوجسمی<sup>۲</sup>، روش مونت کارلو<sup>۳</sup> و روش دینامیک<sup>۴</sup> مولکولی صورت می‌گیرد. در این پژوهش، از روش برخورد دوجسمی استفاده شده است. برای محاسبه سطح مقطع آسیب در روش شبیه‌سازی برخورد دوجسمی، از مدل‌های جابجایی مختلفی نظیر<sup>۵</sup> KP، NRT<sup>۶</sup>، arc-dpa و rpa<sup>۷</sup> استفاده می‌شود. بعضی از این مدل‌ها معایبی دارند که به مرور زمان، توسط مدل‌های جدیدتر اصلاح شده‌اند. به عنوان مثال، مدل NRT نمی‌تواند تعداد اتم‌های منتقل شده از موقعیت اولیه در یک شبکه اتمی، به شبکه جدید و جابجا شدن با سایر اتم‌های کریستال را پیش‌بینی کند. تعداد این جابجایی‌ها توسط آزمایش‌های تابش ترکیبی نوترون و یون به صورت تجربی اندازه‌گیری می‌کنند. آنالیز داده‌های ترکیبی پرتوهای نوترون و یون، تعداد جابجایی‌های واقعی را بیشتر از مقدار پیش‌بینی شده توسط مدل NRT نشان داده است [۳-۶]. دو مدل arc-dpa و rpa به دلیل آن که در روابط خود از ضرایبی استفاده می‌کنند که از روش دینامیک مولکولی برگرفته شده است، مقدار دقیق‌تری از مقدار آسیب‌ها و تعداد جابجایی‌ها را در ماده، به دست می‌دهند [۳].

آهن، یکی از مواد اصلی در ساختار تاسیسات هسته‌ای، محسوب می‌شود. در یک نمونه طبیعی آهن درصد فراوانی ایزوتوپ‌های پایدار  $^{54}\text{Fe}$ ،  $^{56}\text{Fe}$  و  $^{57}\text{Fe}$  و  $^{58}\text{Fe}$  به ترتیب ۵/۹، ۹۱/۷۲، ۲/۱ و ۰/۲۸ است. از بین این ایزوتوپ‌های پایدار، ایزوتوپ  $^{56}\text{Fe}$

<sup>1</sup> Displacement per atom

<sup>2</sup> Binary Collision Approximation

<sup>3</sup> Monte Carlo

<sup>4</sup> Molecular Dynamic

<sup>5</sup> Kinchin Pease

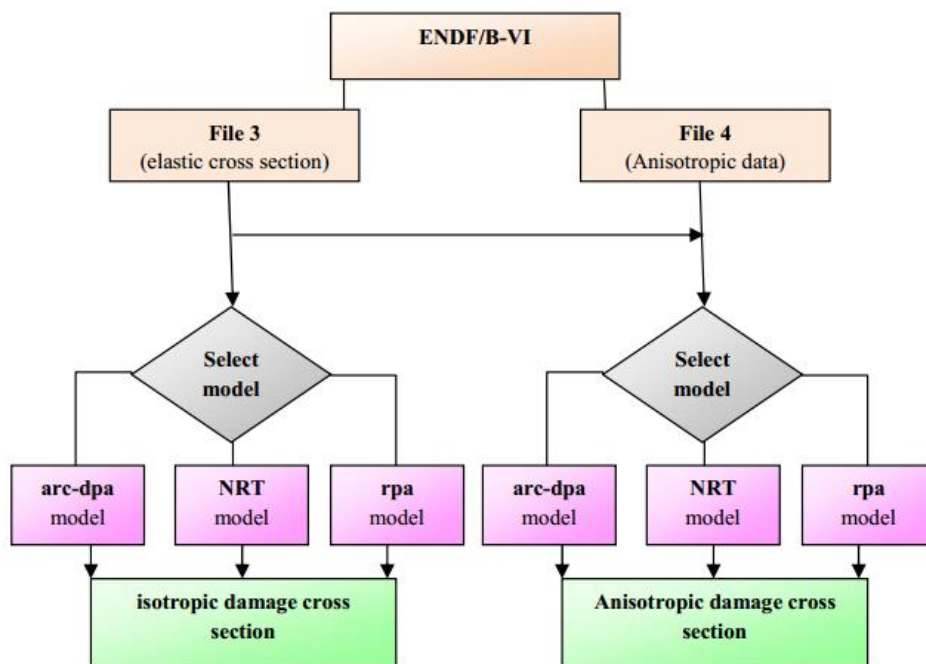
<sup>6</sup> Norgett - Rabinson - Torren

<sup>7</sup> replacement per atom

بیشترین درصد فراوانی را دارد. بنابراین، بررسی میزان سطح مقطع این ایزوتوپ درک بسیار خوبی از میزان آسیب در یک نمونه طبیعی آهن به دست می‌دهد [۷]. همچنین با توجه به اینکه بیشترین آسیب ایجاد شده در ماده ناشی از برهمکنش الاستیک است [۲]، این واکنش برای انجام محاسبات انتخاب شده است. تفاوت در ماهیت پراکندگی‌های همسانگرد و غیرهمسانگرد، در ایجاد اختلاف میان جابجایی‌های اتمی و اختلاف میان سطح مقطع آسیب جابجایی، تاثیرگذار است. از این رو، هدف اصلی در این پژوهش، محاسبه و بررسی اختلاف بین سطح مقطع آسیب پراکندگی همسانگرد و غیرهمسانگرد برهمکنش الاستیک نوترون با آهن، در مدل‌های جابجایی NRT، arc-dpa و rpa است.

## ۲. روش کار

در این پژوهش، سطح مقطع آسیب، پراکندگی همسانگرد و غیرهمسانگرد نوترون با استفاده از داده‌های هسته‌ای کتابخانه ENDF/B-VI و سه مدل جابجایی NRT، arc-dpa و rpa محاسبه شده است. شکل ۱ نحوه محاسبه سطح مقطع آسیب و گردش داده‌ها در برنامه را نمایش می‌دهد. همانطور که در نمودار مشاهده می‌شود، فایل ۳ کتابخانه ENDF/B-VI، حاوی داده‌های سطح مقطع برهمکنش الاستیک نوترون است. که این داده‌ها در محاسبه سطح مقطع آسیب پراکندگی همسانگرد و غیرهمسانگرد استفاده شده است، اما داده‌های فایل ۴ که حاوی ضرایب مربوط به پراکندگی غیرهمسانگرد است، تنها برای محاسبه سطح مقطع آسیب پراکندگی غیرهمسانگرد استفاده شده است.



شکل ۱: نمودار گردش داده‌ها برای محاسبه سطح مقطع آسیب جابجایی در پراکندگی همسانگرد و غیرهمسانگرد

## ۱.۲. محاسبه مدل‌های جابجایی ثانویه

در محاسبه آسیب سطح مقطع الاستیک، سه مدل جابجایی ثانویه NRT، arc-dpa و rpa بکار رفته‌اند. تابع  $\nu$  تعداد جابجایی‌های ثانویه را تخمین می‌زند و به صورت زیر تعریف شده است:

$$\nu(T) = \begin{cases} 0 & T < E_d \\ 1 & E_d \leq T \leq 2E_d / \beta \\ \frac{\beta T \xi(T)}{2E_d} & T \geq 2E_d / \beta \end{cases} \quad (2)$$

که در آن  $E_d$  انرژی جابجایی،  $T$  انرژی آسیب و  $\xi(T)$  برای مدل NRT صورت زیر تعریف شده است:

$$\xi_{NRT}(T) = 1 \quad (3)$$

$\xi(T)$  برای مدل arc-dpa صورت زیر تعریف شده است:

$$\xi_{arc-dpa}(T) = \frac{1 - C_{arc-dpa}}{\left(2E_d/\beta\right)^{b_{arc-dpa}}} T^{b_{arc-dpa}} + C_{arc-dpa} \quad (4)$$

$C_{arc-dpa}$  و  $b_{arc-dpa}$  پارامترهای ثابت هستند، که در جدول ۱ آورده شده است. همچنین  $\xi(T)$  برای مدل rpa به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\xi_{rpa}(T) = \left( \frac{b_{rpa}^{C_{rpa}}}{\left(2E_d/\beta\right)^{C_{rpa}}} + 1 \right) \frac{T_d^{C_{rpa}}}{b_{rpa}^{C_{rpa}} + T_d^{C_{rpa}}} \quad (5)$$

$C_{rpa}$  و  $b_{rpa}$  پارامترهای ثابت هستند (جدول ۱) [۳].

جدول ۱: پارامترهای ثابت در مدل arc-dpa و rpa برای آهن [۳]

Material	$E_d$ (eV)	$b_{arc-dpa}$	$C_{arc-dpa}$	$b_{rpa}$ (eV)	$C_{rpa}$	$\beta$
Fe	۴۰	-۰/۵۶۸	۰/۲۸۶	۱۰۱۸	۰/۹۵	۰/۸

## ۲.۲. محاسبه سطح مقطع آسیب برهمکنش الاستیک نوترون

در پراکندگی همسانگرد نوترون، احتمال توزیع پراکندگی در همه زوایا یکسان است، اما در پراکندگی غیر همسانگرد احتمال پراکندگی در همه زوایا یکسان نیست. معادله سطح مقطع آسیب پراکندگی همسانگرد برای نوترون فرودی با انرژی  $E$  به صورت زیر تعریف شده است [۱]:

$$\sigma_D^{Isotropic}(E) = \frac{\sigma_s(E)}{2} \int_{-1}^1 d\mu v [T\{E_R(\mu)\}] \quad (6)$$

$\sigma_s(E)$  سطح مقطع برهمکنش الاستیک نوترون با اتم ماده هدف است که در فایل ۳ کتابخانه ENDF/B-VI داده شده است.  $\mu$  کسینوس زاویه پراکندگی در سیستم مرکز جرم است. تابع  $v$  بر حسب انرژی پس‌زنی  $E_R$  و انرژی آسیب  $T$  تعریف شده است [۶]. و تعداد جابجایی‌های ثانویه را بدست می‌دهد. این تابع در مدل‌های مختلفی نظیر NRT، arc-dpa و rpa بیان شده است [۳].

سطح مقطع آسیب برای پراکندگی غیرهمسانگرد به صورت زیر تعریف شده است [۱]:

$$\sigma_D^{Anisotropic}(E) = \sigma_s(E) \int_{-1}^1 d\mu v [T\{E_R(\mu)\}] \sum_{\ell=0}^{NL} \frac{2\ell+1}{2} a_\ell(E) P_\ell(\mu) \quad (7)$$

$P_\ell(\mu)$  توابع لژاندر، پارامتر  $a_\ell(E)$  ضرایب لژاندر است که از فایل ۴ کتابخانه ENDF/B-VI فراخوانی شده است. پارامتر NL نیز ماکزیمم مرتبه لژاندر می‌باشد.

## ۳. نتایج و بحث

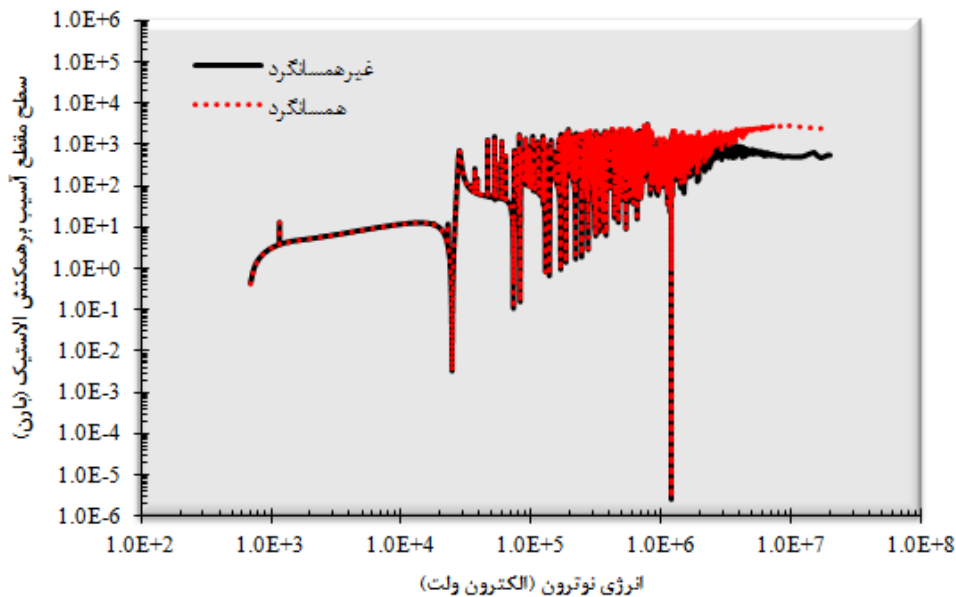
### ۳.۱. مقایسه سطح مقطع آسیب همسانگرد و غیرهمسانگرد برهمکنش الاستیک

سطح مقطع آسیب پراکندگی همسانگرد و غیرهمسانگرد نوترون با ایزوتوپ  $^{56}\text{Fe}$ ، به ترتیب برای سه مدل مختلف جابجایی ثانویه NRT، arc-dpa و rpa محاسبه شده است. نتایج به ترتیب در شکل‌های ۳، ۴ و ۵ نمایش داده شده است. در جدول ۲، محاسبات برای سه انرژی مختلف ۱۰ KeV، ۲ MeV و ۲۰ MeV آورده شده است.

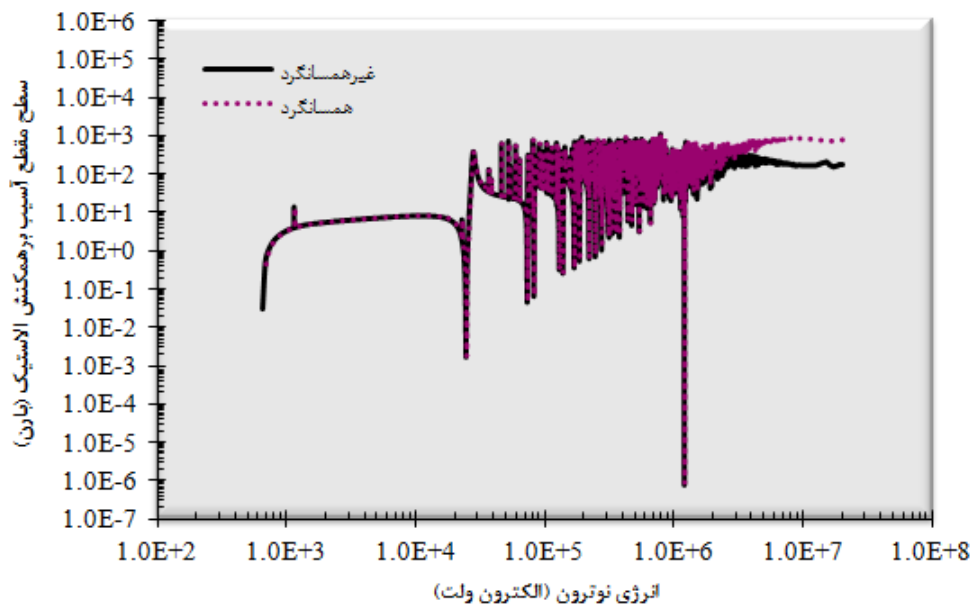
جدول ۲: نتایج محاسبه سطح مقطع آسیب برهمکنش الاستیک نوترون با  $^{56}\text{Fe}$  برای سه انرژی مختلف

انرژی نوترون (الکترون ولت)	مدل جابجایی ثانویه	سطح مقطع آسیب غیرهمسانگرد (بارن)	سطح مقطع آسیب همسانگرد (بارن)	اختلاف (بارن)
$1 \times 10^4$	NRT	۱۲/۰۲۷	۱۲/۱	-۰/۰۷۳
	arc-dpa	۷/۸۷۵۵	۷/۸۶۷۴	-۰/۰۰۸۱
	rpa	۳۳/۱۹۴	۳۳/۵۶۰	-۰/۳۶۶
$2 \times 10^6$	NRT	۴۳۶/۲۹	۶۹۴/۳۸	-۲۵۸/۰۹
	arc-dpa	۱۳۶/۶۱	۲۱۳/۵۳	-۷۶/۹۲
	rpa	۴۲۲۶/۴	۶۸۰۳/۴	-۲۵۷۷
$20 \times 10^6$	NRT	۵۶۳/۹۹	۲۵۶۳/۷	-۱۹۹۹/۷۱
	arc-dpa	۱۷۰/۳۸	۷۵۳/۵۶	-۵۸۳/۱۸
	rpa	۵۵۷۵/۴	۲۵۶۷۱/۹	-۲۰۰۹۶/۵

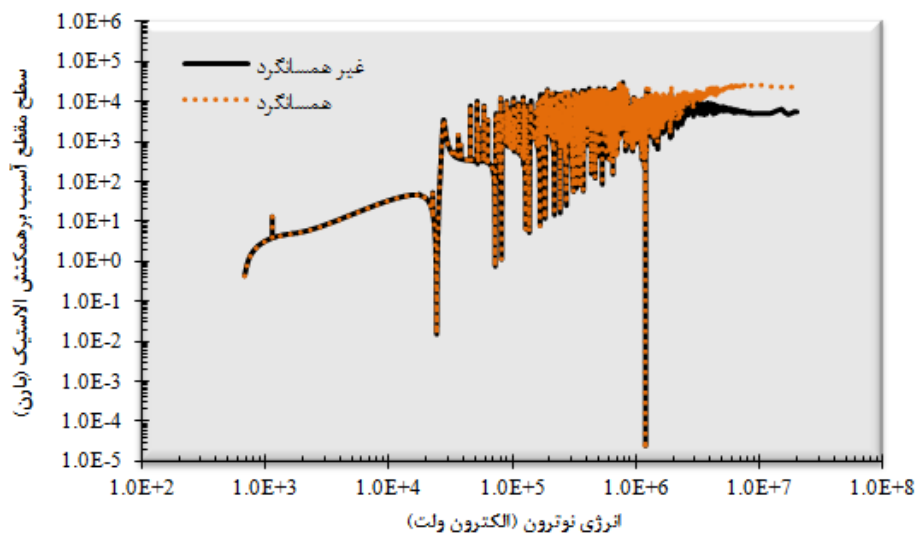
همانطور که مشاهده می‌شود، سطح مقطع آسیب پراکندگی غیرهمسانگرد، برای همه مدل‌های جابجایی، نسبت به پراکندگی همسانگرد، کمتر است. اختلاف سطح مقطع آسیب در این دو پراکندگی، در انرژی‌های کم، نظیر  $10\text{ KeV}$  بسیار کم است، ولی در انرژی‌های حدود  $2\text{ MeV}$  به میزان قابل ملاحظه‌ای افزایش یافته است، و در انرژی‌های بالاتر این اختلاف بسیار زیاد است، به عنوان مثال اختلاف در انرژی  $20\text{ MeV}$  برای مدل‌های جابجایی  $\text{arc-dpa}$ ،  $\text{NRT}$  و  $\text{rpa}$  به ترتیب  $583/18$ ،  $1999/71$  و  $20096/5$  بارن است. دلیل افت سطح مقطع آسیب جابجایی در انرژی‌های بالا، کاهش احتمال برهمکنش، و افزایش احتمال پراکندگی در زوایای رو به جلو می‌باشد [۱].



شکل ۳: مقایسه سطح مقطع آسیب جابجایی در پراکندگی همسانگرد و غیرهمسانگرد نوترون از اتم  $^{56}\text{Fe}$  با استفاده از مدل جابجایی  $\text{NRT}$



شکل ۴: مقایسه سطح مقطع آسیب جابجایی در پراکندگی همسانگرد و غیرهمسانگرد نوترون از اتم  $^{56}\text{Fe}$  با استفاده از مدل جابجایی arc-dpa



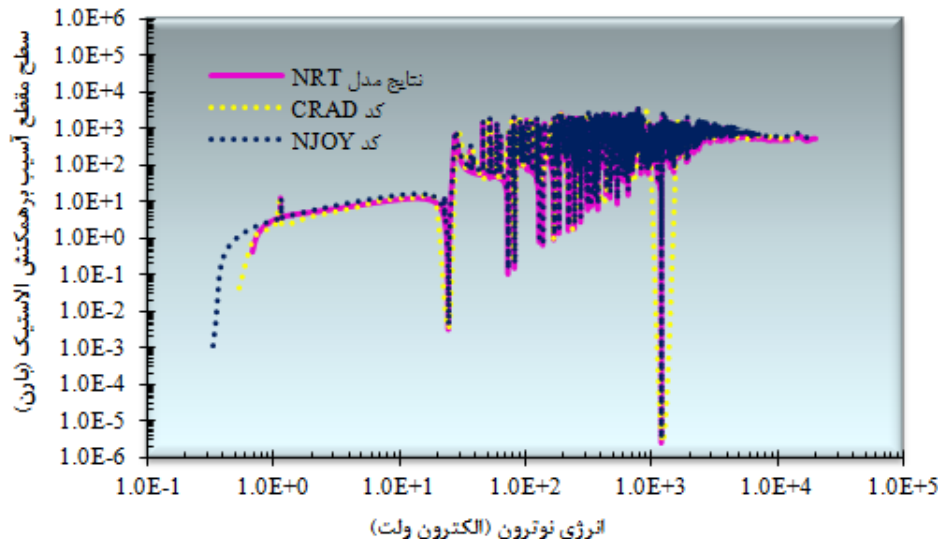
شکل ۵: مقایسه سطح مقطع آسیب جابجایی در پراکندگی همسانگرد و غیرهمسانگرد نوترون از اتم  $^{56}\text{Fe}$  با استفاده از مدل جابجایی rpa

### ۲.۳. مقایسه محاسبات سطح مقطع آسیب جابجایی در برهمکنش الاستیک با کدهای CRaD و NJOY

سطح مقطع آسیب جابجایی، در اثر پراکندگی غیرهمسانگرد نوترون با ایزوتوپ  $^{56}\text{Fe}$ ، توسط کدهای CRaD و NJOY در شکل ۲ نشان داده شده است [۸، ۶]. از آنجایی که کد NJOY سطح مقطع آسیب را با استفاده از مدل جابجایی NRT محاسبه می‌کند [۸]. بنابراین، ابتدا محاسبات سطح مقطع آسیب با مدل جابجایی NRT، برای مقایسه در نظر گرفته شده است. شکل ۲ نشان



می‌دهد که محاسبات سطح مقطع آسیب برهمکنش الاستیک در این پژوهش با نتایج این دو کد تطابق بسیار خوبی دارد و نتایج حاصل از محاسبات سطح مقطع آسیب، معتبر است.



شکل ۲: مقایسه سطح مقطع آسیب جابجایی مدل NRT برای برهمکنش الاستیک نوترون

با فلز  $^{56}\text{Fe}$  با کدهای CRAD و NJOY [۸, ۶]

#### ۴. نتیجه‌گیری

دقت محاسبات سطح مقطع آسیب به پارامترهای مختلفی بستگی دارد. در نظر گرفتن نوع پراکندگی (همسانگرد و غیرهمسانگرد) نوترون از اتم‌های ماده هدف، و محاسبه تعداد جابجایی‌های ثانویه، در دقت محاسبات سطح مقطع آسیب بسیار تاثیرگذار است. در این پژوهش، با استفاده از زبان برنامه نویسی FORTRAN 90، داده‌های هسته‌ای کتابخانه ENDF/B-VI فراخوانی شده‌اند، سپس با استفاده از روابط سطح مقطع آسیب جابجایی، در دو پراکندگی مختلف برای مدل‌های جابجایی ثانویه NRT، arc-dpa و rpa محاسبه شده است. در انرژی ۱۰ KeV، برای مدل‌های جابجایی arc-dpa، NRT و rpa، سطح مقطع آسیب جابجایی پراکندگی غیر همسانگرد، نسبت به پراکندگی همسانگرد، به ترتیب ۰/۱، ۰/۶ و ۱ درصد، کاهش یافته است. در انرژی ۲۰ MeV این نسبت برای مدل‌های جابجایی arc-dpa، NRT و rpa، به ترتیب ۷۶، ۷۷ و ۷۸ درصد، کاهش یافته است. نتایج نشان می‌دهد، اختلاف سطح مقطع آسیب پراکندگی همسانگرد و غیر همسانگرد نوترون، در ایزوتوپ  $^{56}\text{Fe}$ ، برای هر سه مدل جابجایی با افزایش انرژی، افزایش یافته است. بنابراین، در انرژی‌های بالا به دلیل اینکه پراکندگی غیرهمسانگرد است، اختلاف دو سطح مقطع آسیب پراکندگی‌های همسانگرد و غیرهمسانگرد، در مدل‌های مختلف جابجایی با یکدیگر بسیار زیاد است.





## ۵. مراجع

1. Saha, Uttiyoarnab, and K. Devan, The effect of anisotropy of elastic scattering of neutrons in the DPA cross sections of light and medium mass nuclei, *Proceedings of the DAE-BRNS symposium on nuclear physics. V, 61*(2016).
2. Saha, Uttiyoarnab, K. Devan, and S. Ganesan, A study to compute integrated dpa for neutron and ion irradiation environments using SRIM-2013, *Journal of Nuclear Materials* 503, 30-41 (2018).
3. Nordlund, Kai, et al, Improving atomic displacement and replacement calculations with physically realistic damage models, *Nature communications* 9.1, 1-8 (2018).
4. Kirk, M. A. and Blewitt, T. H., Atomic rearrangements in ordered fcc alloys during neutron irradiation. *Metall. Mater. Trans. A9*, 1729–1737 (1978).
5. Nordlund, K., Ghaly, M. and Averback, R. S., Mechanisms of ion beam mixing in metals and semiconductors, *J. Appl. Phys.* 83, 1238–1246 (1998).
6. Saha, Uttiyoarnab, et al., Neutron radiation damage studies in the structural materials of a 500 MWe fast breeder reactor using DPA cross-sections from ENDF/B-VII. 1, *Pramana* 90.4, 46 (2018).
7. ASTM E693-12, *Standard Practice for Characterising Neutron Exposures in Iron and Low Alloy Steels in Terms of Displacements Per Atom (DPA)*, E 706 (ID)
8. Macfarlane, Robert, et al., *The NJOY Nuclear Data Processing System, Version 2016*, (No. LA-UR-17-20093. Los Alamos National Lab.(LANL), Los Alamos, NM (United States), 2017).