

Расчётный комплекс ACDAM для исследований ядерных физических свойств материалов в условиях длительного нейтронного облучения

**А. И. Блохин, Н. А. Дёмин, В. Н. Манохин, И. В. Сипачев,
Д. А. Блохин, В. М. Чернов**

Представлены возможности базового комплекса ACDAM, включающего библиотеки рекомендованных микроскопических сечений нейтронных активационных сечений ACDAM/ACT, данных по распадам ACDAM/DEC и радиационной повреждаемости (сечений смещений на атом) ACDAM/DDDL для расчетов активации, трансмутации и первичной радиационной повреждаемости (ПРП) (смещений на атом — сна) материалов, длительно облучаемых нейтронами с разными энергетическими спектрами (до 20 МэВ).

Ключевые слова: ядерные данные, библиотеки, коды, комплекс ACDAM, нейтронные спектры, конструкционные материалы ядерной техники, ядерные физические свойства.

The general description of ACDAM computational system is given. The system includes the recommended microscopic activation neutron cross section library ACDAM/ACT, decay data library ACDAM/DEC and radiation damage library (displacement per atom) ACDAM/DDDL for calculations the activation, transmutation and primary radiation damage for materials, irradiated for a long time by various neutron spectra with neutron energy up to 20 MeV.

Keywords: nuclear data libraries, software, ACDAM package, neutron spectra, structural materials for nuclear technology, nuclear and physical properties.

Введение

Безопасная эксплуатация действующих и разрабатываемых ядерных энергетических установок (ЯЭУ) на основе ядерных реакторов деления и термоядерного синтеза, в том числе и после их вывода из эксплуатации, во многом определяется научно обоснованным прогнозом радиационной стойкости конструкционных материалов, уровнями их активации и трансмутации, радиационным воздействием на окружающую среду. Возникает также важная проблема возврата конструкционных материалов для повторного их использования за срок не более 100 лет после завершения облучения в ядерных реакторах (новый класс малоактивируемых конструкционных материалов). Исследования всех этих вопросов требуют:

— наличия российского ядерно-физического комплекса (библиотек и кодов) по расчетам ядерно-физических свойств материалов при их длительном

нейтронном облучении, конкурентоспособно интегрируемого в соответствующие мировые комплексы (МАГАТЭ и др.);

— знания нейтронных спектров и режимов облучения;

— знания композиционных составов (основных и примесных элементов) конструкционных материалов.

В процессе длительного облучения материалов нейтронами возникает ряд эффектов, влияющих на работоспособность материалов в составе ЯЭУ:

— генерация динамически устойчивых радиационных дефектов (ПРП) в процессе нейтронного облучения материалов (параметр сна, учитывающий выбитые атомы как от нейтронов, так и от продуктов ядерных реакций);

— общее изменение композиционного элементного состава материала за счет трансмутации элементов в ядерных реакциях;

— сохранение и поддержание концентрации отдельных легирующих элементов, специально вводимых в исходный состав материалов (например, бора), для улучшения их функциональных свойств (например, жаропрочности);

— активация во время эксплуатации и спад активации (охлаждение) после прекращения эксплуатации;

— возможности повторного использования в ядерной технике (рециклирование) облученных материалов.

Проблема расчета активации, трансмутации и ПРП материалов при их нейтронном облучении должна быть обеспечена компонентами (библиотеками и кодами):

— библиотека микроскопических ядерных данных по сечениям взаимодействия нейтронов и вторичных частиц, образованных в ходе протекания нейтронных реакций;

— библиотека распадных характеристик радиоактивных ядер;

— энергетические зависимости нейтронных полей, в которых находятся материалы;

— первоначальный состав облучаемых материалов с включением полного набора легирующих и примесных элементов и их изотопного состава;

— условия облучения материалов (нейтронные поля, время нахождения в них, временные зависимости нейтронной нагрузки и т.п.);

— время нахождения (охлаждения) материалов без облучения;

— программный комплекс по обеспечению проведения расчетов изменения нуклидного состава материалов при облучении;

— программные средства подготовки исходных ядерных и физических данных для обеспечения расчетов активации/трансмутации и ПРП конкретных конструкционных материалов.

В данной работе рассмотрены структура и возможности созданного в Центре ядерных данных ГНЦ РФ-ФЭИ имени А.И.Лейпунского (ЦЯД ГНЦ РФ-ФЭИ) ядерно-физического комплекса ACDAM, который обеспечивает исследования динамики накопления ПРП (сна), накопления и спада наведенной активности и ядерных (радиоактивных) наработок элементов в материалах при их длительном нейтронном облучении с энергиями нейтронов до 20 МэВ.

Комплекс ACDAM

Библиотека ядерных данных ACDAM для обеспечения ядерно-физических расчетов состоит из трёх основных частей [1], которые непрерывно попол-

няются и модифицируются, исходя из получаемого нового ядерного знания и требований к конструкционным материалам ядерных реакторов:

1. Библиотека нейтронных сечений активации и трансмутации элементов ACDAM/ACT (ACTivation/Transmutation neutron cross-section base).

2. Библиотека распадных данных ACDAM/DEC (DECay data library).

3. Библиотека повреждений ACDAM/DDDL (Damage data library).

Развитие библиотеки ядерных нейтронных сечений ACDAM/ACT для обеспечения анализа активации и трансмутации конструкционных материалов

Одной из основных задач, решаемых в рамках данной работы, является создание библиотеки ядерных активационных данных по сечениям взаимодействия нейтронов для обеспечения расчетов активации и изменения химического состава конструкционных материалов, длительно находящихся в нейтронных полях различных типов ядерно-энергетических установок со спектром нейтронов до 20 МэВ [1 – 3]. В работе [1] был представлен обзор состояния различных национальных библиотек активационных ядерных сечений, где было показано, что в области энергий нейтронов до 20 МэВ наиболее информативно полная — библиотека EAF-99 [4], которая после окончания работ по формированию библиотеки FENDL-2/A [5] является наиболее надежной и отражает современный уровень знаний по статусу оцененных ядерных нейтронных сечений. В состав библиотеки EAF-99 включены элементы от водорода ($Z = 1$) до фермия ($Z = 100$).

Однако для целей настоящей и последующих работ были рассмотрены элементы от водорода ($Z = 1$) до полония ($Z = 84$), которые охватывают всю совокупность неделящихся материалов. Формируемая в рамках настоящих исследований библиотека активационных сечений будет обозначаться как ACDAM/ACT [1 – 3]. В ее составе общее число включенных изотопов равно 704. Для них представлено примерно 11000 различных нейтронных реакций в области энергий нейтронов до 20 МэВ. Наряду со стабильными изотопами в состав библиотеки ACDAM/ACT входят ядерные данные для радиоактивных изотопов, которые образуются в процессах трансмутации элементов. В состав радиоактивных изотопов включены изотопы с временами жизни (период полураспада) более 12 ч. Для каждого изотопа приведен полный набор нейтронных сечений, энергетические пороги которых ниже 20 МэВ.

Этот набор включает такие каналы ядерных реакций как: $(n,2n)$, (n,p) , (n,d) , (n,t) , $(n,He3)$, (n,α) , (n,np) , (n,nd) , (n,nt) , $(n,2p)$, $(n,p\alpha)$, $(n,n\alpha)$, (n,γ) и ряд других более сложных реакций типа $(n,n2\alpha)$ для области легких ядер. Общепринятой формой представления оцененных ядерных данных является формат *endf-6* [6], рекомендованный Международной комиссией по ядерным данным в качестве унифицированного стандартного формата представления оцененных ядерных данных. Поэтому стартовая формируемая библиотека активационных нейтронных сечений *ACSDAM/ACT* [1 – 3] представлена в формате *endf-6*.

Таким образом, сформированная в работах [1 – 3] стартовая библиотека активационных сечений *ACSDAM/ACT*, основанная на библиотеке *FENDL-2/A* [5], серии библиотек *EAF* [4, 7] и ряде новых оцененных ядерных данных [1, 2, 8], подготовленных в ЦЯД ГНЦ РФ-ФЭИ, позволяет выполнить полнообъемный анализ трансмутационных и активационных процессов в конструкционных материалах для области энергий нейтронов до 20 МэВ. В [1 – 3], на примере анализа изменения элементного состава перспективных сталей и ванадиевых сплавов в процессе их облучения в нейтронных спектрах быстрых (БН-600) и термоядерных (ДЕМО-РФ) реакторов, были продемонстрированы возможности библиотеки *ACSDAM* [2, 3]. В данной работе продолжены работы по подготовке новых современных оцененных ядерных данных и включению их в состав библиотеки *ACSDAM*.

Оценка активационных ядерных нейтронных сечений

В последние годы во многих странах, развивающих ядерную энергетику, уделяется большое внимание экспериментальным исследованиям активационных характеристик различных групп элементов и их изотопов. В первую очередь, это вызвано необходимостью разработки новых перспективных конструкционных материалов для нового поколения ядерных энергетических реакторов деления и термоядерного синтеза, а также возросшими требованиями экологической безопасности радиоактивных материалов, высвобождающихся в процессе эксплуатации различных ЯЭУ.

Широкий круг экспериментальных исследований по измерениям активационных сечений долгоживущих радиоизотопов выполнен в России (РНИЦ “Курчатовский институт”, Радиевый институт имени В.Г. Хлопина, ЦЯД ГНЦ РФ-ФЭИ), Японии, Китае, Германии, Бельгии и Нидерландах. Полученные новые экспериментальные данные продемонстри-

ровали, что во многих случаях имеющиеся оцененные ядерные данные по сечениям активации различных элементов нуждаются в корректировке и, в ряде случаев, необходим комплекс работ по их полному пересмотру. В частности, в работах [9, 10], подготовленных в ЦЯД ГНЦ РФ-ФЭИ для проекта *FENDL-2*, было показано, что имеющиеся расхождения в различных файлах оцененных ядерных данных могут быть устранены на основе новых методов оценки ядерных данных, развитых в ЦЯД ГНЦ РФ-ФЭИ. Ряд полученных в ЦЯД ГНЦ РФ-ФЭИ новых оцененных данных по сечениям пороговых реакций был использован при формировании библиотеки *FENDL-2/A*. Последующие работы в области оценки ядерных данных для пороговых реакций [9] показали, что в библиотеках *FENDL-2/A* и *EAF-99* имеются существенные недостатки, требующие проведения новых исследований в области анализа поведения сечений и подготовки новых оцененных ядерных данных.

Общее число стабильных или практически стабильных изотопов (время жизни более 10^{10} лет) составляет 283. В диапазоне энергий падающих нейтронов до 20 МэВ может происходить до 14 различных ядерных реакций, из них 11 реакций являются пороговыми. Принимая во внимание, что многие ядерные реакции приводят к образованию остаточных ядер в основном и изомерном состояниях, необходимо исследовать более 5000 функций возбуждения ядерных реакций на стабильных изотопах. Экспериментальные данные имеются примерно для 1000 ядерных реакций. При этом большинство измерений выполнено в области энергий нейтронов 14 - 15 МэВ и, главным образом, для реакций $(n,2n)$, (n,p) , (n,α) и $(n, \text{inl-meta})$. Здесь *inl-meta* обозначает канал ядерной реакции, в которой при неупругом рассеянии нейтрона образуется ядро в метастабильном долгоживущем состоянии. В то же время число ядерных реакций, для которых имеется достаточное количество экспериментальных данных, чтобы надежно описать их функции возбуждения во всем диапазоне энергий падающих нейтронов от порога до 20 МэВ, составляет примерно 30, и эти реакции относятся к дозиметрическим данным. Для большинства других каналов пороговых ядерных реакций экспериментальных данных очень мало.

Поэтому для предсказания пороговых ядерных сечений широко используют вычисления функций возбуждения различных каналов ядерных нейтронных реакций, основанных на применении теоретических моделей ядерных реакций. Как правило, параметры теоретических моделей подбирают по более широкому набору ядерных характеристик, и, в частности,

ориентируются на различного вида эмпирические и полуэмпирические систематики ядерных сечений в области энергий падающих нейтронов 14 – 15 МэВ.

Систематика ядерных сечений в области энергий нейтронов 14,5 МэВ

Исследованию и разработке систематик нейтронных сечений пороговых реакций при энергии падающих нейтронов 14-15 МэВ посвящено достаточно много работ (например, монография [11] и ссылки в ней). Эти эмпирические систематики основаны на экспериментальных данных и могут быть использованы для оценки и отбора наиболее надежных функций возбуждения среди тех, которые не имеют экспериментальных данных и получены на основе теоретических моделей.

В частности, в работе [11] выполнена компиляция сечений пороговых реакций в области энергий нейтронов 14,5 МэВ, построены их систематики в зависимости от параметров ядра-мишени и подготовлена скелетная таблица рекомендованных ядерных нейтронных сечений при энергии начального нейтрона 14,5 МэВ для всей совокупности стабильных изотопов от водорода до висмута. Эти исследования были основаны на результатах экспериментальных работ, выполненных до 1998 года. Как уже отмечалось выше, в последние годы был выполнен широкий круг новых экспериментальных исследований по измерению как новых каналов ядерных реакций для новых изотопов, так и по уточнению ряда измерений, выполненных много лет назад. Это привело к необходимости пересмотра и корректировки многих ядерных данных для библиотеки активационных сечений.

В данной работе подобные исследования выполнены на основе анализа всей совокупности опубликованных после 1998 года экспериментальных исследований по измерению сечений пороговых реакций в области энергий нейтронов 14 – 15 МэВ и включенных в международную библиографическую систему СИНДА [12] и международную библиотеку ЭКСФОР [13]. Из анализа представленной в библиотеке ЭКСФОР [13] информации отметим статистику по новым измерениям активационных сечений, когда после 1998 года были получены новые экспериментальные результаты по измерению сечений пороговых реакций для 162 наборов данных, которые включают комбинацию различных стабильных изотопов и различных каналов ядерных реакций. Следует отметить, что, в основном, эти измерения были выполнены активационным методом. Полученные данные служат одним из критериев при отборе и анализе функций возбуждения пороговых

реакций, полученных как на основе теоретических расчетов, так и анализируемых в других наборах оцененных ядерных данных. Однако, несмотря на то, что систематики ядерных сечений при энергии нейтронов 14 – 15 МэВ играют важную роль, все же их предсказаний недостаточно, чтобы решить проблему расхождения в оцененных данных, представленных в различных библиотеках. Поэтому имеется настоятельная необходимость в разработке систематик других величин и параметров, характеризующих функции возбуждения в более широком диапазоне энергий нейтронов.

Анализ и оценка ядерных нейтронных сечений в рамках теоретических моделей

Экспериментальные данные для большинства сечений конструкционных материалов, как уже отмечалось, недостаточны для однозначного понимания поведения функций возбуждения различных ядерных реакций. В такой ситуации необходимо использовать при проведении работ по оценке ядерных данных теоретические расчеты, основанные на применении современных моделей ядерных реакций, так как они дают возможность экстраполировать и интерполировать расчетные сечения в область энергий, где экспериментальные данные отсутствуют либо они не полны. Для полной уверенности во внутренней самосогласованности оцененных ядерных данных модельные расчеты должны одновременно воспроизводить как можно более полный набор существующих экспериментальных данных по тем каналам ядерных реакций, где они имеются. В ЦЯД ГНЦ РФ-ФЭИ традиционно ведутся работы по развитию теоретических моделей для описания широкой совокупности ядерных реакций вплоть до высоких энергий. Многие из этих разработок включены в международные рекомендации по применению теоретических подходов в оценке ядерных данных. Разработанные подходы были широко применены при формировании российской Библиотеки Рекомендованных Оцененных Нейтронных Данных БРОНД-2.2 [14] и ее новой современной версии БРОНД-3 [15], предназначенной для расчетов ядерно-физических параметров реакторов деления. Подобные подходы были использованы в данной работе для получения энергетических зависимостей функций возбуждения пороговых реакций в области энергий нейтронов до 20 МэВ.

В данной работе представлены результаты теоретических расчетов различных каналов ядерных реакций, которые включены в библиотеку ACDAM. Для данных изотопов экспериментальные данные по

полному сечению и угловым распределениям нейтронов в упругом канале в области энергий нейтронов 100 кэВ – 30 МэВ были использованы для определения параметров оптической модели в нейтронном канале. Ядерные данные подготовлены для следующих реакций: полное сечение, сечение упругого рассеяния, сечение радиационного захвата нейтронов, сечение (n,p) , (n,d) , (n,t) , (n,α) , $(n,2n)$, (n,np) , $(n,n\alpha)$. Основное внимание было уделено взаимосогласованному описанию экспериментальных данных, в особенности современных данных, на основе модельных расчетов. Представленные оценки ядерных данных базируются на анализе экспериментальных данных, опубликованных и представленных в числовой форме (апрель 2008 года) с использованием программных комплексов SCAT [16], ECIS [17] и GNASH [18]. Эти оцененные данные были значительно улучшены в сравнении с предыдущей работой [1].

Программа GNASH [18], основанная на статистической модели Хаузера – Фешбаха, была применена в данной работе для анализа и расчетов различных ядерных реакций, вызванных нейтронами на изотопах основных конструкционных материалов. Эта программа позволяет одновременно описать все энергетически возможные каналы нейтронных реакций, сечения образования вторичных гамма-квантов и спектры эмиссии вторичных частиц и гамма-квантов. Полученные наборы сечений и их дифференциальные характеристики внутренне взаимосогласованы, и автоматически выполняется согласование по энерговыделению.

Некоторые выводы

В данной работе получено удовлетворительное описание всех рассмотренных каналов ядерных реакций в рамках единого самосогласованного подхода на основе применения теоретической модели. Полученные результаты расчетов были использованы в качестве новых наборов оцененных ядерных данных в развиваемой библиотеке активационных данных (Центр Ядерных Данных ГНЦ РФ-ФЭИ).

Представленные выше систематики играют важную роль в оценке и предсказании сечений пороговых реакций в области энергий падающих нейтронов 14 – 15 МэВ и используются также для нормировки теоретических функций возбуждения. Унифицированные энергетические зависимости сечений пороговых реакций, разработанные в данной работе, позволяют расширить число параметров, которые могут быть использованы для оценки сечений и отбора теоретических функций возбуж-

дения во всей области энергий нейтронов от порога до 20 МэВ. Однако, нужна дальнейшая работа, чтобы точнее определить предсказательную возможность этих систематик и пределы их применения.

В целом можно заключить, что получено удовлетворительное описание всех рассмотренных каналов ядерных реакций в рамках единого самосогласованного подхода на основе применения теоретической модели. Полученные результаты расчетов были использованы в данной работе в качестве новых наборов оцененных ядерных данных в развиваемой библиотеке активационных данных ACDAM/ACT.

Формирование библиотеки активационных нейтронных сечений

Используя описанный выше подход, а также новые результаты исследований по описанию пороговых реакций на основе применения теоретических моделей, в данной работе для конструкционных материалов были подготовлены новые файлы оцененных ядерных данных для основных и примесных элементов и их изотопов. Полученные данные были внедрены в формируемую в ЦЯД ГНЦ РФ-ФЭИ новую версию библиотеки активационных данных. Были подготовлены новые наборы оцененных ядерных данных примерно для 1170 реакций для каналов ядерных реакций: (n,γ) , $(n,2n)$, (n,p) , (n,α) , (n,np) , (n,d) , $(n,n\alpha)$. Для основных элементов конструкционных материалов таких как железо, хром, титан, ванадий, никель, цирконий, медь и др., были пересмотрены также сечения радиационного захвата,

Таблица 1

Статистика подготовленных новых оцененных ядерных данных для активационной библиотеки ACDAM/ACT

Канал реакции	tot	g	m	m 1	m 2
(n,γ)	223	163	56	4	4
$(n,2n)$	314	115	108	7	7
(n,p)	138	40	40		
(n,np)	74	15	15		
(n,α)	92	14	14		
(n,d)	102	9	9		
(n,t)	10	2	2		
$(n,3n)$	157	45	44	1	1
$(n,n\alpha)$	62	8	8		
$(n,2n\alpha)$	1				

tot — полное сечение реакции (сумма $m+g$ или $m1+m2+g$); $g(\text{round})$ — сечение образования дочернего ядра в основном состоянии; m — сечение образования дочернего ядра в метастабильном состоянии; $m1$ — сечение образования дочернего ядра в 1-ом метастабильном состоянии, если дочернее ядро имеет не одно метастабильное состояние; $m2$ — сечение образования дочернего ядра в 2-ом метастабильном состоянии.

которые важны при рассмотрении активационных характеристик в спектре нейтронов ядерных и термоядерных реакторов.

В табл. 1 приведена основная количественная информация по подготовленным оригинальным оцененным данным для различных каналов реакций.

Выбор и формирование библиотеки распадных данных ACDAM/DEC

Как показано выше, второй по важности библиотекой ядерных данных для задачи активации материалов является библиотека характеристик распада радиоактивных ядер, которые образуются в ядерных реакциях. Набор характеристик распада радиоактивных ядер должен включать как минимум следующую информацию:

- периоды полураспада ядра;
- виды (каналы) радиоактивного распада;
- интенсивности и энергии бета+ и бета- и т.п. переходов, при которых происходит трансмутация исходного ядра в дочернее;
- энергии и интенсивности гамма-квантов, с помощью которых происходит снятие возбуждения в дочернем ядре.

В настоящее время имеется несколько полно-объемных библиотек данных по распадам, разработанных в рамках национальных программ по ядерным данным. Среди них отметим такие, как ENDF/B-VI, JEF-2.2, UK-DECAY, REAC/DEC, EAF-99/DECAY, FENDL-2/D, которые представлены в международных и национальных базах ядерных данных, созданных в США, странах ЕС, Англии, Японии, МАГАТЭ [20 – 22].

Для целей данной работы необходима такая библиотека данных по распадам, которая в своем составе включала бы всю совокупность дочерних радиоактивных ядер, образующихся в ядерных реакциях с нейтронами. Так как в данной работе за основу такой библиотеки активационных сечений выбрана библиотека EAF-99 [4], то в качестве библиотеки данных по распадам была выбрана библиотека FENDL-2/D, которая, с одной стороны, полностью совместима с библиотеками FENDL-2/A [5] и EAF-99 [4, 7], а с другой стороны (на данный момент времени), является наиболее отестированной из перечисленных выше библиотек для решения задачи активации материалов.

Библиотека данных по распадам ACDAM/DEC сформирована на базе библиотек FENDL-2/D и EAF-99. В библиотеку ACDAM/DEC включены данные по распадам для ~1900 радиоактивных изотопов от трития H-3 до полония Po-210, состав

которых согласован с каналами нейтронных реакций в библиотеке ACDAM/ACT. Для многих элементов и их изотопов были подготовлены новые оцененные данные. В состав исходной библиотеки FENDL-2/D был добавлен ряд изотопов из библиотек ENDF/B-VI и JEF-2.2 для согласования с библиотекой нейтронных активационных сечений ACDAM/ACT.

Формирование и состав библиотеки сечений смещений на атом ACDAM/DDDL

Первичная радиационная повреждающая доза $K(t)$, накопленная в материале при облучении за время t , обычно характеризуется числом сна и определяется скоростью K_d генерации устойчивых пар Френкеля (сна/с). В общем виде скорость создания смещений $K_d(t)$ в момент времени t при облучении материалов нейтронным потоком $\Phi(E, t)$ определяется как (например, [23, 24]):

$$K_d = \int_{E_{\min}}^{\infty} \sigma_d(E) \Phi(E) dE, \quad (1)$$

где $E_{\min}$ — минимальная энергия налетающей частицы, приводящая к выбиванию атомов решетки, $\sigma_d(E)$ — сечение смещения:

$$\sigma_d(E) = \int_{T_d}^{T_{\max}} v(T) \frac{d\sigma(E, T)}{dT} dT. \quad (2)$$

Здесь $\frac{d\sigma(E, T)}{dT}$ — полное дифференциальное сечение образования первично выбитого атома с энергией T при энергии налетающей частицы E ; $v(T)$ — каскадная функция, характеризующая среднее число смещенных атомов в каскаде соударений; T_d — пороговая энергия смещений; $T_{\max}$ — максимальная энергия отдачи, полученная атомом после удара.

Полное сечение смещения $\sigma_d(E)$ определяется суммой парциальных сечений смещений за счет процессов упругого и неупругого взаимодействия нейтронов с ядрами материала, сечений ядерных реакций (n, p) , (n, α) , $(n, 2n)$ и др., а также видом каскадной функции $v(T)$. Согласно (2), для того, чтобы рассчитать число смещенных атомов в кристаллическом веществе, необходимо знать величину пороговой энергии смещения T_d , требуемой для необратимого смещения атома из узла кристаллической решетки в какое-либо промежуточное положение (образование пары Френкеля). В кристаллах величина T_d зависит от направления движения выбитого атома после удара в кристаллической

решетке и меняется в зависимости от типа и положения атома внутри решетки. На эксперименте эта величина обычно определяется по энергии сублимации и в среднем (для оценок), часто принимается обычно равной 25 эВ.

На основе сделанного анализа литературных источников в данной работе выполнена компиляция экспериментальных результатов по измерению пороговых энергий смещений атомов в различных реакторных материалах и чистых металлах, облученных как нейтронами, так и на ускорителях заряженных частиц. Проанализировано примерно 300 источников (журналы, материалы конференций, отечественные и зарубежные препринты и отчеты). Выполнено разделение экспериментальных данных по двум основным категориям:

- с учетом ориентации вылета выбитого атома относительно узла кристаллической решетки,
- с усреднением по всем возможным направлениям (основной объем экспериментальной информации).

Проведен анализ опубликованных работ по построению теоретических моделей для описания исследуемых процессов с точки зрения их практической значимости для возможного применения в расчетах. Показано, что применение ряда теоретических моделей для анализа и описания экспериментальных данных позволяет получить удовлетворительное согласие с экспериментальными

данными для чистых однокомпонентных материалов. Это, в свою очередь, позволяет предсказать на основе применения теоретических подходов недостающие данные по пороговым энергиям смещения для элементов, экспериментальные данные по которым отсутствуют либо противоречивы. Для практических расчетов числа сна сформирована соответствующая сравнительная табл. 2 рекомендованных значений пороговых энергий смещения для 41 элемента и их изотопов (колонка 1), входящих в состав конструкционных сталей и сплавов.

В табл. 2 приведены пороговые энергии смещений T_d , рекомендованные в [25] (колонка 2), а также данные, которые в настоящее время используются в комплексе NJOY [26] (колонка 3), широко применяемом в практических приложениях. В табл. 2 приведены также подготовленные в данной работе величины T_d (колонка 4), которые рекомендуются для практических приложений и использованы в данной работе.

Используя комплекс NJOY [26] и наборы рекомендованных файлов оцененных нейтронных данных из различных библиотек оцененных ядерных данных (таблица 2, колонка 5), а также рекомендованные в данной работе величины T_d (колонка 4) были подготовлены наборы данных по сечениям смещения на атом для всех базовых элементов и их изотопов, которые входят в составы разрабатываемых сталей и сплавов. Колонка 1 представляет перечень разрабо-

Таблица 2

Состав библиотеки сечений сна ACDAM/DDDL и компиляция пороговых энергий T_d , эВ из различных источников

Элемент/изотоп для ACDAM/DDDL	Greenwood's Data [25], T_d	NJOY [26], T_d	Рекомендованное значение (данная работа), T_d	Источник файлов оцененных нейтронных данных
1	2	3	4	5
H-1, He-3,4, Li-6,7	10,0	25,0	10,0	БРОНД-2.2
Be-9, C-12	31,0	31,0	31,0	БРОНД-3, БРОНД-2.2
B-10,11, Na-23, Mg, Si, Pb	25,0	25,0	25,0	БРОНД-2.2, ENDF/B-VI
N-14, O-16, F-19	30,0	25,0	25,0	БРОНД-2.2, ENDF/B-VI
Al -27	27,0	27,0	27,0	БРОНД-2.2
P, S	30,0	25,0	30,0	ENDF/B-VI
Cl, K	40,0	25,0	30,0	ENDF/B-VI
Ca, Ti	40,0	40,0	30,0	ENDF/B-VI
V-nat, 50, 51, Cr-nat, 50,52,53,54, Mn -55, Fe-nat, 54,56,57,58, Co-59, Ni-nat, 58,59,60,61,62,64, Cu-nat, 63, 65, Zr-nat, 90,91,92,94,96, Nb -93	40,0	40,0	40,0	БРОНД-2.2, БРОНД-3, ENDF/B-VI
Mo-nat, Ag-107,109	60,0	60,0	60,0	ENDF/B-VI
Ta-181	53,0	90,0	90,0	ENDF/B-VI
W-182,183,184,186	90,0	90,0	90,0	ENDF/B-VI
Pt-nat	—	25,0	40,0	БРОНД-2.2
Au-197	30,0	30,0	30,0	БРОНД-2.2

танных на данный момент времени элементов и их изотопов, входящих в состав библиотеки ACDAM/DDDL.

Усовершенствование методов расчета активации и изменения нуклидного состава материалов при облучении их нейтронами

Для создания базового программного комплекса, необходимого для решения данной ядерно-физической и материаловедческой задачи, был адаптирован комплекс программ FISPACT [27, 28], рекомендованный в качестве отестированного кода для решения задачи активированности материалов для проблемы ИТЭР группой экспертов МАГАТЭ. В настоящее время комплекс программ FISPACT входит в европейскую систему EASY [28], которая объединяет различные библиотеки ядерных данных и программные коды для анализа наведенной активности различных материалов и является стандартизованным в странах Европы (ЕС) программным комплексом. Следует отметить, что система EASY была рекомендована также для применения в задачах ИТЭР как базовая программа для решения задачи трансмутации элементов в нейтронных полях с определенной групповой структурой в энергетическом представлении нейтронных спектров, так как этот комплекс был нацелен на корректный учет структуры спектра нейтронов в области 14-МэВ-ного пика, характерного для термоядерного реактора.

Секцией ядерных данных МАГАТЭ был организован международный тест по проверке точности расчета эффектов трансмутации материалов в ходе их облучения нейтронами заданного энергетического спектра. В этом тесте приняли участие несколько организаций из различных стран, в том числе из России. Основной задачей теста было проведение расчетов по накоплению радиоактивных элементов в процессе их облучения в заданном нейтронном спектре. Анализ полученных результатов показал, что имеются значительные расхождения между результатами, полученные разными авторами [29]. Наиболее точные расчетные результаты были получены на базе комплекса программ FISPACT [27].

Базовой библиотекой ядерных данных в системе EASY является библиотека нейтронных сечений и сечений взаимодействия вторичных заряженных частиц EAF-99 [4] (версия 1999 года), а также библиотека характеристик распада радиоактивных ядер, являющихся продуктами взаимодействия нейтронов и вторичных заряженных частиц с исходными элементами.

Основной в библиотеке EAF-99 [4] является библиотека нейтронных сечений, которая определяет

уровень наведенной активности в облученных материалах. Нейтронная часть библиотеки EAF-4 (версия 1992 – 1994 гг.) была рекомендована в качестве базовой библиотеки активационных нейтронных сечений FENDL-2/A [5], разработанной группой экспертов МАГАТЭ в рамках проекта FENDL (1-я и 2-я его версии) для ее использования в различных международных проектах по созданию термоядерных установок, в частности для проекта ИТЭР.

Следует отметить, что исторически библиотека EAF была создана на основе компиляции нейтронных сечений, отобранных из различных национальных библиотек ядерных данных. В частности, стартовая версия библиотеки EAF основана на английской библиотеке активационных сечений UKACT-1, нидерландской библиотеке RCN-3, американской библиотеке REAC, российской библиотеке активационных данных ADL-3.

Библиотека исходных нейтронных сечений EAF-99 представлена в общепринятом международном формате ENDF. Однако для практических применений эта библиотека переработана в фиксированный набор групповых представлений и сформирована во внутреннем формате одного из модулей программы FISPACT. Фактически комплекс FISPACT предоставил пользователям возможность его применения только в том представлении, которое зафиксировано в программе. Поэтому возникает определенная трудность при применении комплекса FISPACT для расчета в нейтронных полях с аномальной групповой структурой. Другим недостатком комплекса FISPACT является его привязанность к библиотекам групповых констант и невозможность прямого использования библиотеки EAF в поточечном представлении. Следует особо отметить, что отмеченные недостатки в комплексе FISPACT не являются его прямыми недостатками и проистекают из желания применить данный комплекс для обычных энергетических реакторов, имеющих свою структуру в групповом представлении нейтронных полей.

Заключение

Создан российский комплекс ядерно-физических данных ACDAM для обеспечения ядерно-физических исследований активации и изменений нуклидных составов конструкционных материалов (сталей и сплавов) при их длительных нейтронных облучениях в различных ядерных реакторах.

На основе анализа качества оцененных ядерных данных в различных зарубежных библиотеках, а также выполненных в Центре Ядерных Данных ГИЦ РФ-ФЭИ работ по подготовке оцененных ядерных

данных на основе применения теоретических моделей и на основе развитых систематик в энергетическом поведении нейтронных сечений, подготовлены новые наборы оцененных файлов ядерных данных для широкой совокупности ядер.

Выполнены работы по включению новых оцененных ядерных данных в формируемую российскую библиотеку активационных сечений ACDAM/ACT.

Создан программный модуль, который позволяет подготовить библиотеку одnogрупповых сечений, усредненных по произвольной структуре исходного нейтронного спектра. Данный модуль привязан к исходной библиотеке ядерных данных, представленной в формате *endf-6* в поточечном представлении, и не зависит от библиотек групповых констант, подготовленных в оригинальной версии комплекса FISPACT.

Для целей тестирования и сравнения с оригинальной версией комплекса FISPACT создан программный модуль для обработки и представления в заданной групповой структуре исходной библиотеки ядерных сечений в формате, совместимом с форматом представления библиотеки групповых констант в комплексе FISPACT.

Разработан обработчик результатов расчета трансмутации с целью выделения каналов газонакопления (водорода, трития и гелия) и расчета скоростей реакций накопления для водорода, трития и гелия.

Разработанные средства были протестированы на исходной библиотеке EAF-99, а также были выполнены аналогичные расчеты с библиотеками FENDL-2/A и российской версией библиотеки активационных сечений ACDAM, разрабатываемой в рамках данной работы.

Сформирована новая версия библиотеки ядерных нейтронных сечений ACDAM/ACT. Подготовлены новые наборы оцененных ядерных данных для ~1200 реакций типа (n,γ) , $(n,2n)$, (n,p) , (n,α) , (n,np) , $(n,n\alpha)$. Подготовлены и внедрены в новую версию библиотеки активационных данных новые файлы ядерных данных для изотопов основных конструктивных элементов (Fe, Cr, Ti, V, Ni, Nb, Mo, Cu, Zn, Ta, W, Zr).

Сформирована новая версия библиотеки распадных данных ACDAM/DEC.

Проведена работа по анализу и отбору наиболее полных файлов оцененных ядерных данных (Al, Ti, V, Cr, Fe, Ni, Co, Mn, Cu, Nb, Zr, Mo, W) для расчетов уровня ПРП сна и энергий первично выбитых атомов в конструктивных материалах ядерных реакторов.

Сформирована новая версия библиотеки сечений радиационных повреждений для широкого набора элементов и их изотопов.

Подготовленный российский комплекс ядерно-физических данных ACDAM является в настоящее время наиболее современной базой данных для задачи обеспечения исследований активационных свойств и параметров ПРП облученных материалов различными нейтронными спектрами в области энергий нейтронов до 20 МэВ.

Литература

1. Блохин А.И., Манохин В.Н., Фурсов Б.И., Андрианов А.Н., Чернов В.М. Обеспечение исследований активационных и трансмутационных характеристик конструкционных материалов ядерно-физическими данными. ВАНТ, серия "Материаловедение и новые материалы", 2004, вып. 63, № 2, с. 46 – 89.
2. Блохин А.И., Демин Н.А., Чернов В.М. Нейтронные источники для исследования конструкционных материалов. ВАНТ, серия "Материаловедение и новые материалы", 2006, вып. 66, № 1, с. 70 – 87.
3. Блохин А.И., Демин Н.А., Леонтьева-Смирнова М.В., Потапенко М.М., Чернов В.М. Активация и трансмутация конструкционных материалов российского производства в различных нейтронных полях. ВАНТ, серия "Материаловедение и новые материалы", 2006, вып. 66, № 1, с. 88 – 104.
4. Kopecky J., Sublet J.-Ch., Forrest R.A. The European Activation File: EAF-99 cross section library. UKAEA FUS 408, 1998, 125 p.
5. Pashchenko A.B., Wienke H., Kopecky J., Sublet J.-Ch., Forrest R.A. FENDL/A2.0 Neutron Activation Cross Section Data Library for Fusion Applications. Report IAEA-NDS-173, Vienna, 1998, 129 p.
6. ENDF-102. Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File ENDF-6. Edited by: V.McLane, C.L.Dunford, P.F.Rose. Report BNL-NCS-44945 (1990), Rev. February 1997, 341 p.
7. Forrest R.A., Kopecky J., Sublet J.-Ch. The European Activation File: EAF-2003 cross section library. UKAEA FUS 486, 2002, 130 p.
8. Блохин А.И., Демин Н.А., Блохин Д.А., Чернов В.М. Комплекс ACDAM для расчётов радиационной повреждаемости, активации, трансмутации и охлаждения конструкционных материалов, облучаемых разными нейтронными спектрами. Российский семинар "Теория и многоуровневое моделирование дефектов, явлений и свойств материалов ядерной техники" (ТММ-2008)", 4 – 6 июня 2008 г., г. Москва, Тезисы докладов. М.: ВНИИНМ, 2008, с. 22.
9. Blokhin A.I., Manokhin V.N. Comparison of Threshold Reaction Cross Sections for the Ti, V, Cr, Fe, Ni, Cu and Zn Isotopes from Evaluated Data Libraries. Report INDC(CCP)-412, IAEA, Vienna, 1998, 45 p.
10. Блохин А.И., Манохин В.Н., Насырова С.М. Изучение функций возбуждения пороговых нейтронных реакций методом подобия. Препринт ФЭИ-2620, г. Обнинск, 1997, 41 с.

11. Manokhin V.N., Blokhin A.I. Low Energy Neutron Physics, subvolume A, part 2, Neutron Induced threshold reactions. Ed. By H.Shopper, Springer, 2000, 221 p.
12. CINDA-2006. The Comprehensive Index of Nuclear Reaction Data. OECD NEA № 6189, 2007, 5315 p.
13. EXFOR Library, version 2007. CD-disc from NDS, IAEA, Vienna, 2007, 70 p.
14. Blokhin A.I., Fursov B.I., Ignatyuk A.V., et al. Current Status of Russian Evaluated Neutron Data Libraries. Proc. International Conference on Nuclear Data for Science and Technology, Gatlinburg, Tennessee, USA, May 9-13, 1994, v. 2, p. 695.
15. Ignatyuk A.V., Fursov B.I. The latest BROND-3 developments. Proc. International Conference on Nuclear Data for Science and Technology, Nice, France, April 22 – 27, 2007, v. 2, p. 759 – 763.
16. Bersillon O. SCAT2: Un programme de modele optique spherique. Report CEA-N-2227, October 1981.
17. Raynal J. International Atomic Energy Agency Report IAEA SMR-9/8, 1970, p. 281.
18. Young P.G., Arthur E.D. Los Alamos National Laboratory Report LA-6947, 1977, p. 1 – 153.
19. ENSDF, version 2006, compiled by the NNDC, BNL, USA.
20. Handbook for calculation of nuclear reaction data. Reference input parameter library, IAEA-TECDOC-1034, IAEA, Vienna, August 1998.
21. Neutron-induced reaction file. (Comp. and Ed.) P.F. Rose: “ENDF-201, ENDF/B-VI Summary Documentation,” BNL-NCS-17541, 4th Edition, 1991.
22. Shibata K., Kawano T., Nakagawa T., et al. Japanese Evaluated Nuclear Data Library Version 3 Revision-3: JENDL-3.3, J. Nucl. Sci. Technol., 2002, v. 39, p. 1125.
23. ASTM E521 (1996) Standard Practice for Neutron Radiation Damage Simulation by Charged-Particle Irradiation. Annual Book of ASTM Standards, vol. 12.02, ASTM, Philadelphia, PA.
24. Gary S. Was. Fundamentals of radiation materials science. Metals and alloys, Springer, 2007, 827 p.
25. Greenwood L.R., Smither R.K. SPECTER: Neutron damage calculations for materials irradiations, ANL/FPP/TM-197, 1985, 40 p.
26. MacFarlane R.E., Muir D.W. The NJOY Nuclear Data Processing System, version 94.66, LANL, USA, 1996, 360 p.
27. Forrest R.A., Sublet J.-Ch. FISPACT-3 user manual. Report AEA/FUS/227, 1993, 59 p.
28. Forrest R.A. The European Activation System: EASY-99 Overview, UKAEA FUS 484, 2000, 24 p.
29. Cheng E.T., Forrest R.A., Paschenko A.B. Report on the second international activation calculational benchmark comparison study. INDC (NDS)-300, IAEA, Vienna, 1994, 23 p.

Блохин Анатолий Иванович — ГНЦ РФ Физико-энергетический институт имени А.И. Лейпунского (г. Обнинск, Калужская область), кандидат физико-математических наук, начальник теоретического отдела. Специалист в области ядерной физики, нейтроники, ядерных библиотек и кодов. E-mail: blokhin@ippe.ru.

Дёмин Николай Александрович — ГНЦ РФ Физико-энергетический институт имени А.И. Лейпунского, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник. Специалист в области ядерных физических свойств материалов и радиационной физики твердого тела.

Манохин Василий Николаевич — ГНЦ РФ Физико-энергетический институт имени А.И. Лейпунского, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник. Специалист в области ядерной физики.

Сипачев Иван Васильевич — ГНЦ РФ Физико-энергетический институт имени А.И. Лейпунского, инженер. Специалист в области ядерной физики.

Блохин Даниил Анатольевич — ОАО “Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов имени академика А.А. Бочвара”, инженер. Специалист в области ядерных физических свойств материалов и радиационной физики твердого тела.

Чернов Вячеслав Михайлович — ОАО “Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов имени академика А.А. Бочвара”, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник. Специалист в области радиационного материаловедения и радиационной физики конденсированного состояния. E-mail: chernovv@bochvar.ru.