

中国散裂中子源靶站重要部件的辐照损伤 计算与分析*

于全芝 殷雯 梁天骄†

(中国科学院物理研究所散裂中子源靶站谱仪工程中心,北京凝聚态物理国家重点实验室,北京 100190)

(2010年5月21日收到;2010年8月10日收到修改稿)

本文采用高能粒子输运程序 MCNPX 2.5.0,对中国散裂中子源(CSNS)靶站重要部件所使用的钨、SS316 不锈钢与 Al-6061 等材料,由于中子与质子辐照所引起的损伤能量截面与原子离位截面进行了计算,对钨靶体、靶的不锈钢容器、慢化器与反射体的铝容器等部件的辐照损伤量——原子离位次数(displacement per atom, DPA)进行了计算与分析,并给出了质子束斑形状对靶体及靶容器 DPA 峰值的影响. 这些计算与分析对正在建设的中国散裂中子源靶站的设计及参数选择具有重要的实际意义.

关键词: 中国散裂中子源, 损伤能量截面, 原子离位截面, DPA

PACS: 25.40.Sc, 61.80.-x

1. 引言

中国散裂中子源(CSNS)是质子能量为 1.6 GeV、束流功率为 100 kW、脉冲频率为 25 Hz 的多学科研究装置^[1]. 散裂中子源靶站的核心部件靶体-慢化器-反射体(TMR)处在高能量、高通量的中子与质子的辐射环境下,势必引起材料的辐照损伤. 材料的辐照损伤主要指原子离位次数(DPA)及气体产生,前者是指因辐照造成的原子离位,导致材料的晶格错位与缺陷;后者则是指由辐照产生的 H, He 造成的材料肿胀与脆变. 本文主要讨论由辐照造成的原子离位损伤. 与先前采用 Bertini 物理模型计算损伤能量截面^[2]不同,本文将选用 CEM2K 核反应模型,计算钨、不锈钢、铝等几种重要材料的损伤能量截面与原子离位截面,计算并分析 CSNS 靶站的钨靶体、靶的不锈钢容器、慢化器与反射体的铝容器的 DPA 分布,对比不同质子束斑形状对靶体与靶容器 DPA 峰值的影响. 这些计算与分析对预估靶站关键部件的使用寿命、确定部件维护方式、确保靶站的有效运行等,具有重要的实际意义.

2. 损伤能量截面与原子离位截面的计算方法

辐射粒子与材料的点阵原子发生碰撞,形成一系列的初级碰撞过程与级联碰撞过程,产生大量的离位原子,具体过程为:当入射粒子与靶材料中的点阵原子发生碰撞,原子获得反冲能,如果反冲能大于原子的离位阈值 E_d ,该原子将离开自己的点阵位置,形成离位原子,该原子称为初级碰撞原子(primary knock-on atom, PKA);入射粒子与材料原子发生碰撞,能够产生若干个具有不同能量的初级碰撞原子,这些初级碰撞原子可能具有相当大的能量,又会继续与其他点阵原子发生碰撞,使之发生离位并形成二级碰撞原子,以及后续一系列的级联碰撞原子,产生相当数目的离位原子-空穴对,导致材料的晶格错位与缺陷. 以下是损伤能量截面、原子离位截面及 DPA 的具体计算方法.

2.1. 损伤能量截面的计算方法

高能粒子输运程序 MCNPX 2.5.0^[3]是美国 Los Alamos 国家实验室开发的高能粒子输运程序,包含

* 国家自然科学基金(批准号:11075203, 91026009)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: tjliang@aphy.iphy.ac.cn

多种核反应物理模型及截面数据,能够准确地描述高能粒子在物质中的多种反应过程,包括对入射粒子引起材料原子的损伤能量的计算. 根据损伤能量截面的定义^[2]

$$\sigma_{\text{damage}}(E) = T/xN_v, \quad (1)$$

式中 T 为损伤能量, x 为薄靶厚度,通常取 0.1 cm, N_v 为材料的原子数密度,对 W184, Fe56, Al27, 它们的原子数密度分别为 6.3×10^{22} , 8.5×10^{22} , 6.0×10^{22} atoms/cm³. 如果是混和材料,则需要对材料中各成分的原子数密度按其含量比例取值.

对 neutron 辐照引起的损伤能量截面的计算,分为三个能段:对能量 > 150 MeV 的中子引起的损伤能量截面,采用 CEM2K^[4] 物理模型描述粒子与物质的反应过程,并计算出损伤能量,再通过(1)式获得损伤能量截面;对能量在 20—150 MeV 范围的中子损伤能量截面,采用中子与材料相互作用的 La150n^[5] 数据库计算出损伤能量,再通过(1)式获得损伤能量截面;对能量 < 20 MeV 时中子的损伤截面,直接采用 ENDF6.0^[6] 中的损伤截面数据. 对质子辐照引起的损伤能量截面的计算,也分为三个能段:对能量 > 150 MeV 的质子损伤能量截面,采用 CEM2K 物

理模型计算出损伤能量;对能量在 20—150 MeV 的质子,采用质子与材料相互作用的 La150h^[7] 数据库计算出损伤能量,再通过(1)式获得损伤能量截面;对能量 < 20 MeV 时质子的损伤能量截面,采用 SRIM 程序^[8] 的计算结果^[9]. 通过该方法计算获得的损伤能量截面,将应用于 CSNS 靶站关键部件的辐射损伤的计算中.

2.2. 中子与质子引起的损伤能量截面

在 CSNS 靶站物理设计中,采用的钨靶密度为 19.2 g/cm³; SS316 不锈钢作为靶容器,密度为 7.92 g/cm³,元素组成为 Mn(2.0 at%, at% 为原子数百分比), Si(2.0 at%), Cr(18.1 at%), Ni(11.3 at%), Mo(1.4 at%), Fe(64.7 at%); Al-6061 作为慢化器、反射体的容器,密度为 2.7 g/cm³,组成为 Al(98.1 at%),并含有极少量的 Mg, Si, Cu, Cr 等成分.

图 1 给出了中子与质子的损伤能量截面,分别对应了(a)钨、(b)SS316 不锈钢以及(c)Al-6061 这三种材料. 总的说来,在 > 1 MeV 的能段,中子的损伤能量截面要稍大于质子的损伤能量截面,在 20 MeV, 150 MeV 能段出现交叉,则是由程序所采用的

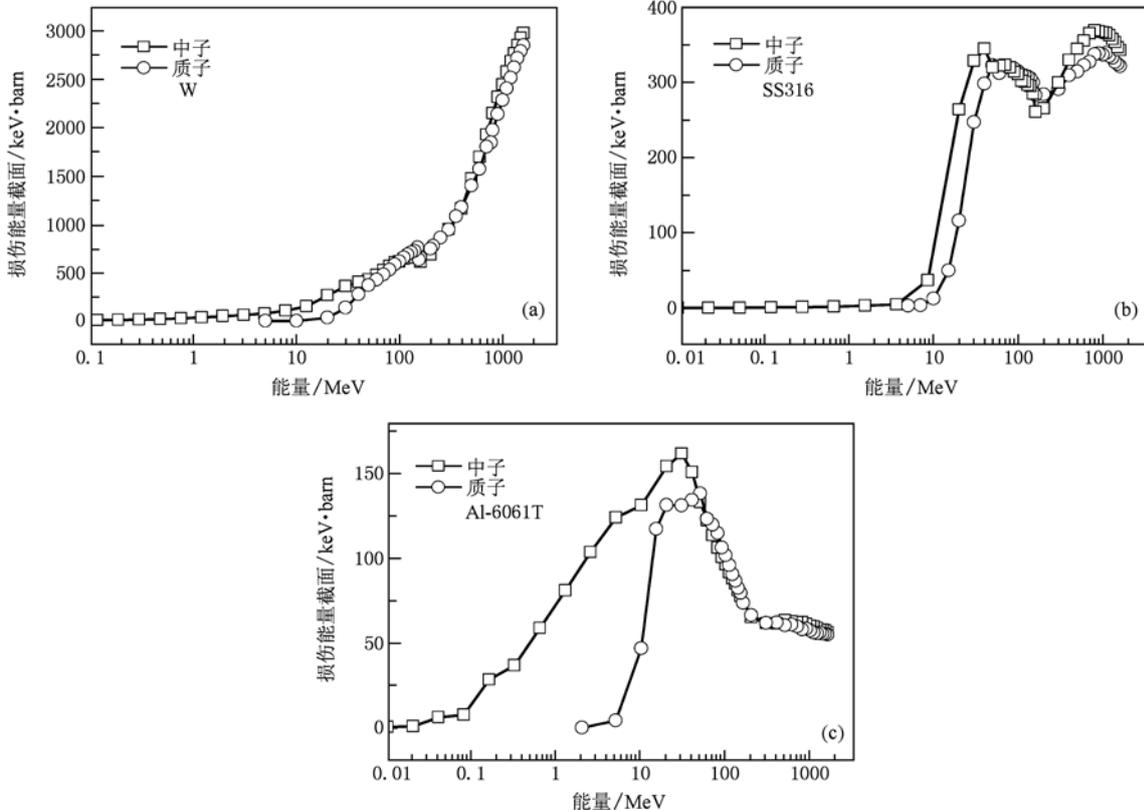


图 1 中子与质子辐照引起的材料损伤截面(1 barn = 10⁻²⁴ cm²) (a)钨; (b)SS316; (c)Al-6061

物理模型与实验数据的不连续连接造成的. 通过与文献 [2] 损伤能量截面的比较可以看出, 采用 CEM2K 物理模型获得的结果要稍大于采用 Bertini 的计算结果^[2], 其原因在于: Bertini 是单纯的强子级联反应模型, 虽然在计算损伤能量时可以添加预平衡与蒸发过程, 但它描述粒子与材料原子的相互作用过程相对简单; CEM2K 则集合了 Dubna 级联模型、Exciton 激子模型、GEM 蒸发模型、RAL 裂变模型、Fermi-breakup 模型及光核反应模型等, 能够比较全面地描述高能粒子在物质中的各种反应及相互作用过程, 尤其在计算剩余核、裂变产物、轻核产生及碰撞-反弹过程时, 较其他模型更为准确^[10]. 这是我们目前采用 CEM2K 模型计算损伤能量与损伤能量截面的原因.

2.3. 原子离位截面计算

由损伤能量截面 $\sigma_{\text{damage}}(E)$, 可以很容易地获得原子离位截面 $\sigma_{\text{dis}}(E)$, 即^[2]

$$\sigma_{\text{dis}}(E) = \frac{\beta}{2T_d} \sigma_{\text{damage}}(E), \quad (2)$$

式中 $\beta = 0.8$ 表示原子离位效率, 可由不同的物理模型修正, 2 表示这样的损伤能量来源于二体碰撞, 由两个原子共享, T_d 表示引起材料原子离位的能量阈值, 对 W, Fe, Al, 其离位阈值分别为 90 eV, 40 eV, 27 eV. SS316 不锈钢为混和材料, 但是由于含量占绝大多数的成分如 Fe, Cr, Ni 及 Mn, 其原子离位的能量阈值均为 40 eV, 尽管 Mo 的离位阈值为 60 eV, 但由于该成分在不锈钢混和材料中所占比例较小, 所以在计算时 SS316 不锈钢的原子离位能量阈值取 40 eV; 同理, Al-6061T 混和材料的原子离位能量阈值取 27 eV. 这样的近似对本文所用到的混和材料离位截面的影响很小, 可以不予考虑.

2.4. DPA 的计算方法

在辐照时间 t 内, 由中子或质子引起的 DPA 可表示为

$$\text{DPA} = \left(\int \sigma_{\text{dis}}(E) \cdot \varphi(E) dE \right) \cdot t, \quad (3)$$

式中 $\varphi(E)$ 表示中子或质子的通量.

总的说来, 计算由中子或质子辐照引起的 DPA, 首先要计算它们引起的损伤能量截面 $\sigma_{\text{damage}}(E)$, 然后根据不同材料的原子离位阈值, 计算出材料的位移截面 $\sigma_{\text{dis}}(E)$, 最后将中子或质子的通量与原子离位截面进行卷积, 获得辐照时间 t 内由粒子

辐照引起的部件 DPA 值. 由于在计算通量时采用了 mesh tally 的方法对网格进行了细致地划分, 得出中子、质子通量的空间分布, 因此可以获得 DPA 在空间上的详细分布情况; 对某一个网格上的中子通量与离位截面进行卷积计算, 则可以获得 DPA 在能量空间上的分布情况. 另外, 部件的 DPA 是由中子与质子共同辐照造成的, 故材料的 DPA 应该是中子引起的 DPA 与质子引起的 DPA 之和.

3. CSNS 靶站关键部件的 DPA 计算模型与结果

3.1. 靶站物理计算模型

CSNS 靶站的核心系统为靶-慢化器-反射体系统 (TMR), 靶体选用 15 片厚度不同的钨 (W) 靶, 外包薄钽片, 冷却剂为重水, 尺寸为 13 cm 宽 (x)、5 cm 高 (z)、65 cm 长 (y); 靶容器由 SS316 不锈钢加工而成, 包围靶体与冷却水; 耦合液氢慢化器 (CHM) 位于靶体的下方, 退耦合水慢化器 (DWM) 及退耦合窄化液氢慢化器 (DPHM) 位于靶体的上方, 慢化器容器均由 Al-6061T 加工而成; 直径为 70 cm 的金属铍作为内反射体, 内有冷却重水, 采用 Al-6061T 作为铍反射体的容器; 外围采用不锈钢作为外部反射体, 同时兼顾内层屏蔽体的功能^[9]. 应当指出的是, CSNS 的靶站模型还在继续优化中. 图 2 为靶站 TMR 计算模型剖面图 (y - z 方向). 高能质子轰击钨

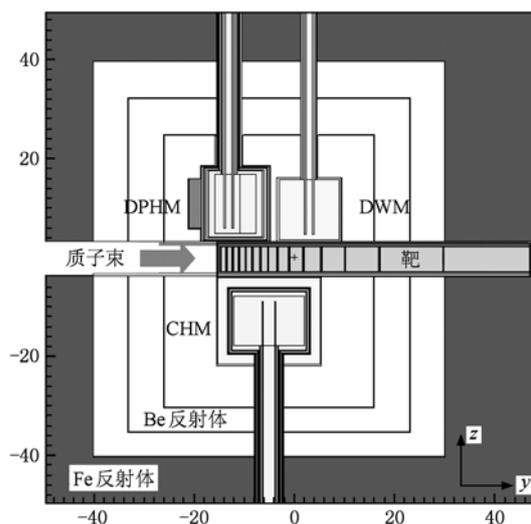


图 2 CSNS 靶站核心部件 (TMR) 计算模型纵剖面图 (y - z): 主要包括钨靶体, 三个慢化器 (CHM, DPHM, DWM), 铍/铁反射体. 质子束沿 y 方向入射

靶,在靶站 TMR 上发生强烈的散裂反应,产生大量的、能谱分布很宽的中子与质子,不可避免的造成材料的辐射损伤. 计算时,如无特殊说明,质子束为高斯型(半高宽为 $x = 7.06 \text{ cm}, z = 2.35 \text{ cm}$),束流功率为 100 kW,年运行 5 000 h.

3.2. CSNS 靶站重要部件 DPA 计算结果

3.2.1. 靶体(W)

CSNS 靶体是发生散裂反应最剧烈的部件,钨靶内的中、高能的中子与质子的通量高,而且中、高能中子与质子对应的原子离位截面较大,所以产生的 DPA 也较大. 图 3 分别给出了靶内由中子与质子辐照引起的 DPA 在 x - y 面上的分布情况. 可以看出,对靶体而言,中子辐照引起的 DPA 集中在靶前端 4—5 cm 处,峰值为 0.87 DPA/y;而质子辐照引起的 DPA 则集中在靶的最前端,峰值为 2.26 DPA/y. 这主要是由散裂反应造成的中子与质子在靶体

的通量分布不同引起的. 当 1.6 GeV 的高能质子束轰击重金属钨靶,与钨原子核发生强烈的散裂反应,产生大量的高能中子,这些高能中子与钨原子发生碰撞,引起原子位移,由于散裂反应的级联过程发生在距离靶前端一段距离的地方,所以我们看到由中子引起的 DPA 集中在距离靶前端 4—5 cm 处,而不是靶的最前端;与中子不同,质子作为与钨靶相互作用的入射粒子,其最高通量与能量都集中在靶的最前端,并且质子束的通量与能量随着与靶原子的散裂反应而降低,造成其 DPA 峰值出现在靶的最前端,并呈现出随质子束的入射方向逐渐减小的趋势. 由于材料的 DPA 是由中子与质子共同引起的,图 3(c) 给出了靶体内由中子与质子共同辐照引起的 DPA 分布. 可以看出, DPA 峰值为 2.88 DPA/y,出现在靶体的位置较单由质子引起的 DPA 峰值稍微后移,表明了中子与质子对 DPA 共同的影响结果.

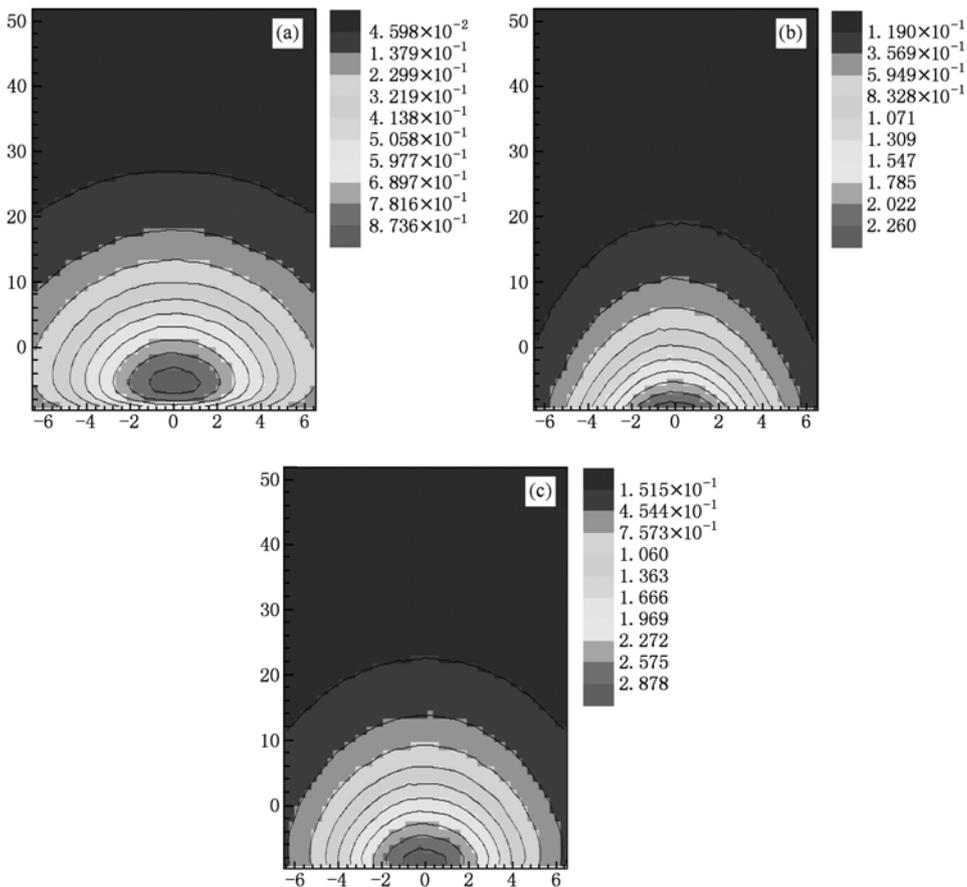


图 3 钨靶体由 (a) 中子、(b) 质子及 (c) 中子与质子共同辐照引起的 DPA 分布 (x - y), 较强的 DPA 出现在靶前端区域, 对应的峰值分别为 0.87, 2.26, 2.88 DPA/y.

在能量空间上,我们在中子与质子 DPA 都较大的第二片靶上截取中间的一个小网格,计算该

网格的中子与质子的通量与 DPA 的分布情况. 图 4 (a) 给出了中子与质子的通量分布, 可以看出, 除了在 1.6 GeV 能段附近, 质子通量大于中子通量外, 在其他大部分能段上, 中子通量要大于质子通量, 这也表明了此处发生了强烈的级联核反应. 图 4 (b) 不同能量的中子与质子对 DPA 的贡献在能量空间上的分布, 可以看出, 中子产生的 DPA 具

有较宽的能量分布, 而且在大部分能段上都要大于质子的 DPA, 但是由于质子通量在 1.6 GeV 能段附近有较高的通量, 必然引起较大的 DPA. 将各能段上的 DPA 相加, 则该网格上中子的总 DPA 为 0.86/y, 而质子的为 2.10/y, 即此处质子辐照引起的 DPA 要大于中子辐照的结果. 其他部件的 DPA 在能量空间上的分布可同理获得.

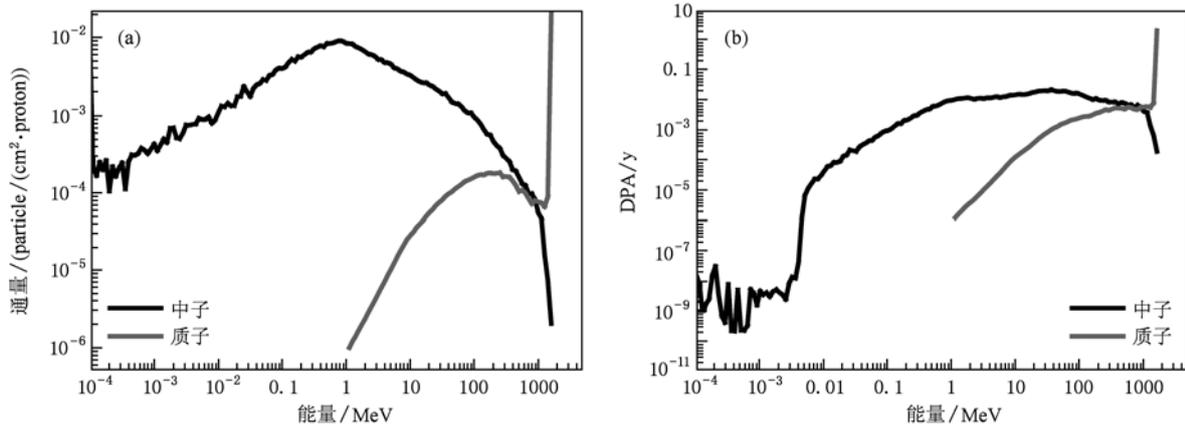


图 4 第二片钨靶中间一个小网格上的(a)中子与质子的通量分布与(b)不同能量的中子与质子对 DPA 的贡献分布情况

3.2.2. 靶容器 (SS316)

靶容器是包围钨靶与重水的 SS316 不锈钢容器, 包括前后及上下左右六个面, 由于位于靶前端的容器受到中子与质子的辐照较其他五个面严重, 因此该面的 DPA 分布将直接决定整个靶容器的寿命, 靶容器的该面也称为靶窗. 图 5 给出了靶窗由 (a) 中子与 (b) 质子辐照引起的 DPA 分布 ($x-z$). 可以看出, 在靶窗上, 中子辐照引起的 DPA 分布区域较大, 峰值 (1.08 DPA/y) 出现在中心位置, 并且呈现出向四周匀滑下降的趋势; 与之相比, 虽然质子

辐照引起的 DPA 峰值较大 (1.27 DPA/y), 但区域相对集中, 而且表现出与质子束流形状相似的扁平分布. 我们知道, 靶窗上的质子来源于加速器产生的高能质子, 而中子则来源于两部分, 一是质子打到靶窗上发生散裂反应产生的中子, 一是质子打靶产生的反向中子. 由于靶窗较薄 (0.2 cm), 该处的散裂反应尚未完全展开, 故靶窗中子主要来源于质子打靶产生的反向中子, 因此靶窗的辐照损伤主要是由质子及在钨靶上产生的反向中子造成的.

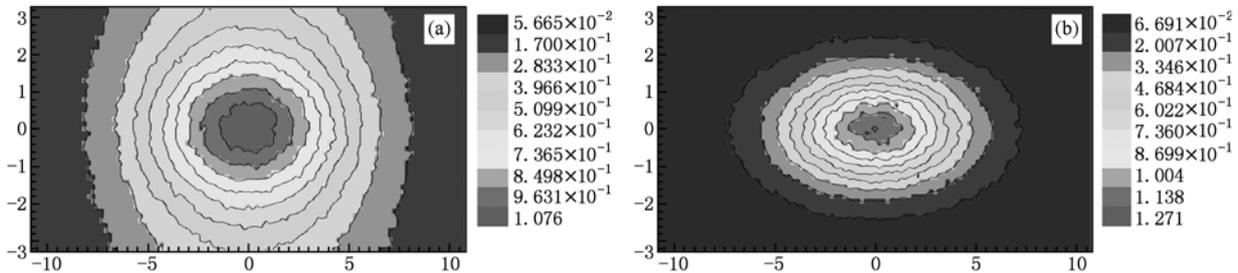


图 5 不锈钢靶容器 (SS316) 分别由 (a) 中子与 (b) 质子辐照引起的 DPA 分布 ($x-z$). 较强的 DPA 出现在靶容器的中心区域, 对应的峰值分别为 1.08, 1.27 DPA/y

3.2.3. 慢化器与反射体容器 (Al-6061T)

CSNS 采用的三个慢化器与铍反射体均采用 Al-

6061T 容器, 由于这些铝容器分布在靠近靶体的地方, 所以也要考虑由于粒子辐照引起的材料损伤.

由于 CHM 的摆放位置经过优化,即处在靶体中子泄漏最大的地方,而且在铝容器外面没有其他两个慢化器的退耦合层(吸收快中子),所以靠近靶体的 CHM 铝容器的中子通量最高,其 DPA 值可以作为慢化器与反射体铝容器的最大估计. 图 6 是贴近靶体的 CHM 铝容器的 DPA 分布($y-x$),可以看出,无论是峰值强度(中子的峰值为 0.78 DPA/y,质子的

为 0.02 DPA/y)还是分布区域,中子辐照引起的 DPA 都远大于质子辐照的结果. 这表明在离开靶体一定距离后,质子的能量与通量都迅速下降,因此由质子引起的慢化器与反射体容器的 DPA 可以不予考虑,包括其他远离靶体的部件,由质子辐照引起的 DPA 都可以暂且忽略不计.

3.2.4. 质子束斑形状对器件 DPA 峰值的影响分析

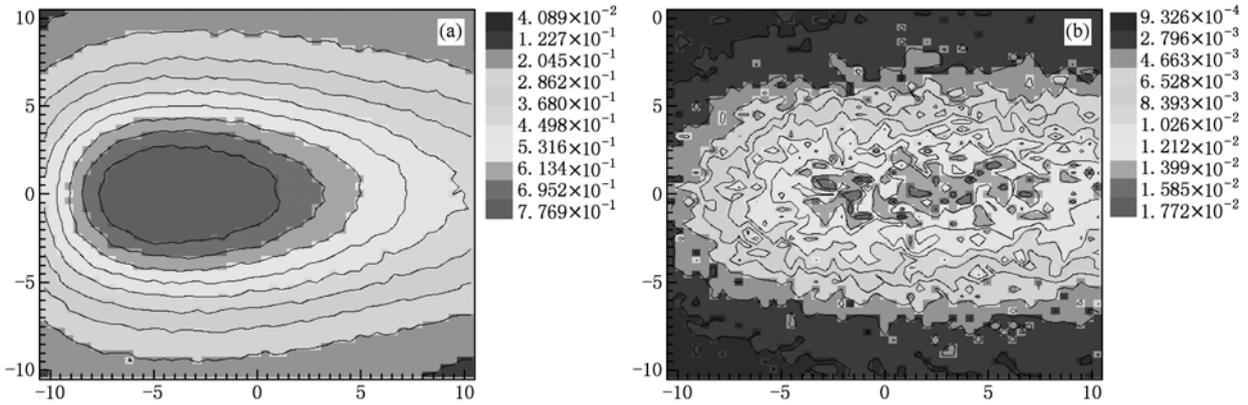


图 6 CHM 慢化器靠近靶体的铝容器(Al-6061T)由(a)中子及(b)质子辐照引起的 DPA 分布($y-x$),较强的 DPA 出现在铝容器的中心偏前端区域,对应的峰值分别为 0.78,0.02 DPA/y

质子束斑形状代表了质子流强的空间分布,它对部件的 DPA 峰值有着重要的影响. CSNS 加速器产生的质子束流入射到钨靶上,其束斑在空间上($x-z$ 方向)为双高斯分布,可以表示为

$$p(x,y) = \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\left(\frac{x}{a}\right)^2 + \left(\frac{z}{b}\right)^2\right]\right\}, \quad (4)$$

式中 a, b 分别代表了束斑在 x 与 z 方向上的偏移量. 在 x, z 方向上,束斑的半高宽分别为

$$f_x = (8\ln 2)^{1/2} a = 2.3548a,$$

$$f_z = (8\ln 2)^{1/2} b = 2.3548b,$$

目前在 CSNS 靶站设计中,垂直于质子束入射方向的靶横截面为 13 cm × 5 cm,我们取束斑的覆盖面积为 12 cm × 4 cm,并假设质子束流在空间上有三种分布:1) 质子束流在 x, z 方向上的偏移量分别为 3 cm 与 1 cm,则其半高宽分别为 $f_x = 7.06$ cm, $f_z = 2.35$ cm;2) 质子束流在 x, z 方向上的偏移量分别为 2.4 cm 与 0.8 cm,则半高宽分别为 $f_x = 5.65$ cm, $f_z = 1.88$ cm;3) 质子束流在 x, z 方向上的偏移量分别为 2 cm 与 0.67 cm,则半高宽分别为 $f_x = 4.71$ cm, $f_z = 1.57$ cm. 上述三种质子斑意味着质子通量在空间上具有不同的分布,这将影响部件的 DPA 峰值及其空间分布,尤其对靶体与靶容器的 DPA 峰值有着重要的影响. 表 1 给出了双高斯分布

的质子束流在三种不同半高宽下所对应的靶体与靶容器的 DPA 峰值. 可以看出,随着质子束流的半高宽不断减小,中子与质子引起的 DPA 峰值都逐渐增大,而且质子的 DPA 增幅更大. 这样的计算与分析,结合靶体与靶容器使用寿命,能够对加速器产生的质子束流形状提出合理的要求.

表 1 不同半高宽的高斯双高斯分布的质子束流对靶体与靶容器 DPA 峰值的影响(100 kW/y)

高斯分布 (FWHM, cm)	靶		靶容器	
	中子	质子	中子	质子
$x = 7.06, z = 2.35$	0.87	2.26	1.08	1.27
$x = 5.65, z = 1.88$	1.03	2.88	1.45	1.98
$x = 4.71, z = 1.57$	1.16	3.45	1.63	2.81

4. 讨 论

材料的 DPA 值代表着材料的原子位移量,是部件在辐照环境下使用寿命的重要参考依据. 以上对 CSNS 靶体、靶容器、慢化器与反射体容器的 DPA 的计算与分析,可以明确产生 DPA 的粒子来源、DPA 的空间分布、峰值出现的位置及大小等,由此可以预估这些部件的使用寿命. 根据英国散裂中子源

(ISIS)^[11]的运行经验,钨材料在小于 10 个 DPA 下可以有效工作,故在 100 kW 的束流功率下,其寿命大约为 3 年;如果 SS316 不锈钢的 DPA 限值为 10,则靶容器寿命为 4—5 年;而 Al-6061T 的限值大约为 20 个 DPA,故慢化器与反射体容器的使用寿命较长. 另外,质子束斑形状代表了质子的空间分布,对部件的 DPA 有着重要的影响,可以结合部件的使用寿命对质子束流形状提出合理的要求. 当然,部件

的使用寿命还受其他因素的影响,如因气体(H, He 等)产生而造成的材料肿胀、因热量沉积而造成的疲劳损伤等,该计算与分析工作正在进行中. 本文关于损伤能量截面的计算方法与结果、部件 DPA 的计算及寿命估算、质子束斑形状对部件 DPA 的影响分析等,对正在建设的中国散裂中子源具有重要的实际意义.

- [1] Wei J, Fu S N, Tang J Y, Tao J Z, Wang D S, Wang F W, Wang S 2009 *Ches. Phys. C* **33** 1033
- [2] Yin W, Liang T J, Yu Q Z, Jia X J 2010 *J. Nucl. Mater.* **398** 100
- [3] MCNP/MCNPX CCC-730, Monte Carlo N-Particle Transport Code System Including MCNP5 1. 40 and MCNPX 2. 5. 0 and Data libraries, 2006
- [4] Mashnik V 2001 ENDF-102, Data formats and procedures for the evaluated nuclear data file ENDF-6, Bnlncs-44945-01/04-Rev. , National Nuclear Data Center, Brookhaven National Laboratory, Upton, New York
- [5] Chadwick M B, Young P G, Shiba S, Little S C, Macfarlane R E, Prael R E, Water L S 1999 *Nucl. Sci. Eng.* **131** 293
- [6] Mashnik S G, Sierk A J, Bersillon O, Gabriel T 1998 *Nucl. Instr. Meth. A* **414** 68
- [7] Ziegler J F, Biersack J P, Littmark U 1985 *The stopping and range of ions in solids* (New York: Pergamon)
- [8] Lu W, Wechsler M S, Dai Y 2006 *J. Nucl. Mater.* **356** 280
- [9] *Initial Design Report of China Spallation Neutron Source for the Target Station and Instruments* (Institute of High Energy Physics) 2010. 2 (in Chinese) [散裂中子源初步设计报告 - 靶站谱仪分册(中科院高能物理研究所)2010. 2]
- [10] Detlef Filges, Frank Goldenbaum 2009 *Handbook of Spallation Research: Theory, Experiments and Applications*, Wiley-veh Verlag GmnH & Co. KgaA, Weinheim
- [11] Chen J, Ullmaier H, Floßdorf T, Kühnlein W, Duwe R, Carsughi F, Broome T 2001 *J. Nucl. Mater.* **298** 248

Calculation and analysis of DPA in the main components of CSNS target station*

Yu Quan-Zhi Yin Wen Liang Tian-Jiao[†]

(Engineering Centre of CSNS Target Station and Instruments, Institute of Physics,
Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

(Received 21 May 2010; revised manuscript received 10 August 2010)

Abstract

The damage energy cross sections and displacement cross sections of W, SS316 and Al-6061, which will be used in the CSNS (China Spallation Neutron Source) target station, were calculated with the high energy transport code MCNPX 2.5.0. The DPA (Displacement Per Atom) distributions were also calculated and analyzed for the main components in the CSNS target station, such as the W target, the target vessel, the moderators and reflector vessels. Based on the DPA caused by neutrons and protons, the lifetime of these components were estimated. The influence of the proton beam profile on the peak value of DPA for W target and target vessel were also presented. These calculations and analyses are very important for the under going CSNS project.

Keywords: CSNS, damage energy cross section, displacement cross section, DPA

PACS: 25.40.Sc, 61.80.-x

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11075203, 91026009).

[†] Corresponding author. E-mail: tjliang@aphy.ac.cn