## 低能中子在锆中产生的辐照损伤的计算机模拟研究\*

崔振国1) 勾成俊1) 侯氢1)† 毛莉2) 周晓松2)

1)(四川大学原子核科学技术研究所,辐射物理及技术教育部重点实验室,成都 610065)

2)(中国工程物理研究院核物理与化学研究所,绵阳 621900)

(2013年1月27日收到;2013年4月15日收到修改稿)

以 GEANT4 为基础采用蒙特卡罗方法对能量为 1 MeV 的中子在锆材料中的输运过程进行了模拟分析. 首 先计算得出: 反冲核的能量主要分布在 1 keV 和 15 keV 之间, 中子和靶核发生两次弹性碰撞的平均空间距离为 29.47 mm. 由于中子和靶核在发生连续两次弹性碰撞过程中产生的两个反冲核能量较低, 它们的空间距离又比较大, 由此可以推测出: 由初级离位原子产生的后续级联碰撞可以看做是一系列独立的子级联碰撞过程, 同时也计算了中 子在靶材的不同深度区域内产生的反冲核数目和平均能量. 其次, 利用蒙卡方法计算得到的结果, 采用分子动力学 方法, 分别计算了五种不同能量下的初级离位原子产生的级联碰撞情况, 给出了初级离位原子的能量与其产生的次 级离位原子数目之间的关系以及不同能量下的初级离位原子产生的损伤区域范围等情况, 通过蒙特卡罗方法和分 子动力学方法的结合, 给出了能量为 1 MeV 的中子在锆材料中产生的初级辐照损伤分布图像.

关键词: 辐照损伤, 级联碰撞, 蒙特卡洛模拟, 分子动力学 PACS: 61.80.Hg, 61.80.Az, 61.72.J- DOI: 10.7498/aps.62.156105

#### 1引言

在反应堆中高通量的中子环境下,反应堆壁材 料会因辐照产生大量的离位原子,在材料内部形成 一系列的缺陷,这些缺陷也可能会发生聚集效应形 成团簇,同时,材料中的氢、氦也会造成材料的肿 胀和脆化<sup>[1]</sup>,材料的性能会因此而改变,明确中子 在材料中产生缺陷的形成机理以及各类缺陷的行 为对于材料寿命的研究和反应堆的使用安全显得 十分重要<sup>[2]</sup>.美国能源部的报告<sup>[3]</sup>指出:在反应堆 内的极端环境条件下,材料性能的优劣程度成为制 约核能发展的关键问题之一. 锆合金由于具有低的 中子吸收率等特点,在核反应堆中有着广泛的应用, 所以,对于锆及其合金材料在极端条件下的辐照损 伤效应的研究在核材料领域得到越来越多的重视. 除了实验上的研究之外,利用计算机模拟手段从微 观层次研究材料各种缺陷的形成和演化对于阐明 和理解材料的辐照损伤机理起着重要作用,例如, 通过计算机模拟的手段,已经明确了材料中的位错 与缺陷团簇的相互作用会对材料的硬度有影响<sup>[4]</sup>. 利用计算机进行模拟计算的方法有第一性原理、 分子动力学、蒙特卡罗以及更宏观的连续介质热 力学<sup>[4]</sup>等,不同的方法处理不同时空尺度的物理过 程和物理现象,通过多尺度模拟可以给出材料的辐 照效应随时间演化的完整图像.

对于研究发生在时间尺度为皮秒量级的初级 辐照损伤过程,基于两体碰撞近似的蒙特卡罗方 法模拟是主要手段.可用于模拟中子与原子碰撞 过程的程序主要有 MCNP, GEANT4 等.在采用蒙 特卡罗方法模拟的过程中,中子与原子发生一系 列两体碰撞而逐渐损失能量,材料中的靶原子受到 反冲作用获得足够能量而形成初级反冲原子 (primary knock-on atom, PKA) PKA 产生的级联碰撞是 反应堆中的快中子产生缺陷的重要原因<sup>[5]</sup>.然而, MCNP 和 GEANT4 等蒙特卡罗模拟程序包并不对 PKA 引起的级联碰撞过程进行模拟.对原子级联 碰撞过程的模拟可采用的方法目前也主要是基于

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金 (批准号: 91126001, 11175124) 资助的课题.

<sup>†</sup>通讯作者. E-mail: qhou@scu.edu.cn

<sup>© 2013</sup> 中国物理学会 Chinese Physical Society

两体碰撞近似的蒙特卡罗模拟,相应的代表性程序 包有 TRIM 和 MARLOWE 等. 在这种基于两体碰 撞近似的原子级联碰撞过程模拟中.原子获得足够 能量而成为离位原子后就不再被空位捕获. 近来 年,随着计算机技术的发展,分子动力学方法也被 用于研究原子级联碰撞过程的模拟,其摒弃了两体 碰撞近似,可以更真实地模拟原子级联碰撞过程. 已经有分子动力学模拟结果展示了离位原子和空 位的再捕获过程<sup>[6]</sup>.目前,反应堆材料在中子辐照 下的辐照损伤效应的多时空图像还远未建立.本文 也只研究反应堆中的中子在锆材料的靶材中产生 的初级辐照损伤效应,首先采用蒙特卡罗方法研究 了能量为1 MeV 的中子在靶材中产生的 PKA 能量 分布以及 PKA 数目的空间分布情况, 然后采用分 子动力学方法计算了五种不同能量的 PKA 产生的 级联碰撞过程,通过蒙特卡罗方法和分子动力学方 法的结合,从而获得了低能中子在锆材料中产生的 初级辐照损伤情况. 有文献报道<sup>[7]</sup>已经指出: 材料 中的初级辐照损伤情况会对长时间的损伤演化结 果有显著影响,所以,本文在原子层次给出的中子 产生的辐照损伤效应对后续在更长的时间尺度和 更大的空间尺度的辐照损伤模拟研究有一定的参 考意义.

2 物理模型和计算方法

#### 2.1 PKA 原子能谱和空间分布的计算

我们采用 GEANT4 程序模拟了中子在锆材料中的输运过程,获得 PKA 的能量分布和密度分布. GEANT4<sup>[8]</sup>是由欧洲核子中心开发的一套基于蒙特卡罗方法的模拟开源程序包,具体应用时,要根据入射粒子的能量选择合适的物理模型并进行二次编程来得到所要计算的物理量.由于裂变堆中的中子能量通常小于 2 MeV,所以采用了 QGSP. BIC. HP 预编译的物理模型.该模型适用于能量从0.025 eV 到 20 MeV 的中子与物质相互作用过程的模拟计算,其中使用了双级联物理模型处理中子和靶核之间的相互作用过程,这样可以更好的描述在中子和物质相互作用过程,这样可以更好的描述在中子和物质相互作用过程,这样可以更好的描述在中子和物质相互作用过程中产生的次级粒子输运情况,也采用了预复合的物理模型,用于描述强子动力学模型所不能描述的低能核子与原子核的非弹性碰撞过程.在核裂变反应堆中,入射中子 的能量有一个介于热中子 (0.025 eV) 和裂变中子 (2 MeV) 之间的广阔分布, 能量分布特征因反应堆 型不同而不同. 在本文中, 入射中子的能量选取为 1 MeV, 垂直入射到锆靶中.

#### 2.2 PKA 产生的级联碰撞过程计算

根据利用蒙卡方法得到的锆靶的不同深度内 PKA 的数目和平均能量,我们采用自行编制的分 子动力学程序包,模拟了 PKA 产生的级联碰撞过 程.原子间相互作用的势函数采用的是 Mendelev 与 Ackland 构建的嵌入原子势 (EAM)<sup>[9]</sup>,模拟的盒 子选择了包含 81 万个原子的体系,由于反冲核的 能量都是在十几个 keV 的量级,体系的尺度远远大 于 PKA 可能产生的损伤区域的范围.模拟的体系 温度设定为 0 K,在体系的三个方向上都采用了周 期性边界条件.

#### 3 模拟结果和讨论

#### 3.1 PKA 的能谱与空间分布情况

PKA 的能量直接关系到初级损伤区域的范围, Dierckex<sup>[10]</sup>研究已经表明:在级联碰撞过程中,当 PKA 的能量小于 200 keV 的时候, PKA 的能谱会对 离位原子、空位等缺陷的产生有影响.中子在靶材 中输运的时候会和靶核发生弹性散射、非弹性散 射、核俘获等相互作用过程,裂变堆中的中子能量 较低,大部分发生的都是弹性散射,在弹性散射过 程中,系统的总能量是守恒的,中子损失的能量等 于 PKA 获得的能量,中子的能量和 PKA 的能量关 系<sup>[11]</sup>如下:

$$E = \left(\frac{mu + \sqrt{M^2 - m^2(1 - u^2)}}{M + m}\right) E_i, \quad (1)$$
$$E_p = E_i - E. \quad (2)$$

(1) 式中的 *m* 和 *M* 分别代表中子和 PKA 的质 量, *E*<sub>i</sub> 和 *E* 分别表示中子的入射能量和出射能量, *u* 表示中子出射角的余弦值, *E*<sub>P</sub> 代表 PKA 的能量.入 射中子在能量逐渐变化的过程中,和锆材料的靶核 发生弹性碰撞过程的截面也会发生相应的变化,因 此,中子在靶材里面输运的过程中产生的 PKA 能 量具有一定的分布, PKA 能量的分布计算结果如图 1 所示.



图 1 能量为 1 MeV 的中子产生的 PKA 能量分布

从图 1 可以看出, 能量为 1 MeV 的中子在锆 材料的靶材中产生的大部分 PKA 的能量都分布 在 1 keV 到 15 keV 之间, PKA 的能谱峰值出现在 5 keV 左右, 大部分的 PKA 能量都大于锆材料中的 原子离位阈值 (27.5 eV), 由此可知: 能量为 1 MeV 的中子在锆材料的靶材中产生的 PKA 能量的分布 情况对于后续研究级联碰撞产生的辐照效应有着 重要影响.

如果中子在靶材中产生的 PKA 能量足够高, 就会在靶材中激起一个离位级联碰撞,产生大量的 次级离位原子, Gao 等<sup>[12]</sup>利用分子动力学方法研 究表明:如果由 PKA 产生的级联碰撞过程在空间 区域发生重叠效应很强,缺陷的数目就会减少,由 此可知:级联碰撞过程的重叠效应会对缺陷的研究 有一定影响,明确在级联碰撞的过程中能否发生级 联碰撞重叠效应具有重要的意义.因此,我们分析 了中子和锆材料的靶核在连续发生两次弹性散射 碰撞的过程中产生的 PKA 空间距离分布情况,能 量为1 MeV 的中子在锆材料的靶材中产生的 PKA 空间距离分布计算结果如图 2 所示.

从图 2 可知, 能量为 1 MeV 的中子在锆材料的 靶材中输运的时候, 通过和靶核发生两次连续弹性 散射碰撞过程产生的 PKA 空间距离近似成 Pearson 分布, 两个 PKA 的空间距离大部分都分布在 6 mm 到 8 mm 之间, 空间距离的平均值为 29.47 mm, 结 合后面采用分子动力学方法进行模拟计算得到的 结果可知, 能量为十几个 keV 的 PKA 在级联碰撞 过程中产生的损伤区域也不过是在纳米的量级, 两 个 PKA 的空间距离远远大于其在级联碰撞中产 生的损伤区域, 所以, 在采用分子动力学方法模拟 PKA 在后续过程中产生的级联碰撞的时候, 在体系 的给定区域内只需给定一个原子做为 PKA, 这样模 拟出来的结果是可靠的.



图 2 能量为 1 MeV 的中子在两次连续弹性碰撞过程中产生的 PKA 空间距离分布

中子在靶材中产生的辐照损伤效应不仅和 PKA 的能量有关,而且与其产生的 PKA 数目的多 少相关.具有一定能量的中子在靶材中经过多次碰 撞逐渐慢化的过程中,要在靶材中穿行一定的距离, 在不同的深度区域内,中子的能量不同,中子和靶 核碰撞的次数也不同,所以,中子在靶材的不同空 间区域内产生的 PKA 能量和数目也有所不同.由 于 PKA 的状态对于后续的级联碰撞过程有很大影 响,了解中子在靶材不同深度区域内产生的 PKA 分布情况对于后续采用分子动力学方法在更小尺 度下对 PKA 在级联碰撞过程中产生的损伤效应研 究具有重要意义.表1中给出了能量为1 MeV 的中 子在锆材料的靶材中的十个不同深度区域内产生 的 PKA 平均能量和数目的分布情况.

层数	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
深度/cm	0—10	10—20	20—30	30—40	40—50	50—60	60—7	70—80	80—90	90—100
能量/keV	9.752	6.907	5.071	3.721	2.840	1.999	1.434	0.922	0.642	0.421
数目	12	14	12	9	7	5	4	2	2	1

表 1 能量为 1 MeV 的中子在靶材不同深度区域内产生的 PKA 平均能量和数目的分布

从表 1 可知,随着靶材深度的增加, PKA 的平均能量和数目都逐渐的减小.在某一深度区域内,如果 PKA 的数目越多,平均能量越高,表示在该深度区域内 PKA 在后续的级联碰撞过程中产生的损伤效应越显著,所以,可以根据 PKA 的平均能量和数目推断出其在靶材的不同深度区域内产生的损伤情况.为了具体考察不同能量下的 PKA 在级联碰撞过程中产生的损伤效应,我们采用分子动力学方法模拟计算了第 1, 2, 4, 7, 10 层中的 PKA 产生的级联碰撞损伤效应.

# 3.2 PKA 产生的次级离位原子数目和损 伤区域

在中子辐照的环境下,材料的微观结构会不断 的发生变化,因辐照而产生的空位和间隙原子缺陷 会不断的生成、扩散和聚集,随着时间的推移,在 材料的一定区域内会发生空洞肿胀的现象,空洞肿 胀尺寸的变化情况取决于材料因辐照而产生的空 位-间隙原子对的数目<sup>[13]</sup>,通过计算空位和间隙原 子的数目和演化情况就可以分析出材料内部的损 伤情况,所以,计算 PKA 在级联碰撞过程中产生的 次级离位原子的数目对于研究材料的性能变化具 有重要的意义. 根据表 1 中得到的数据, 采用分子 动力学方法计算了不同能量下的 PKA 产生的次级 离位原子的数目. 在级联碰撞过程中, 缺陷的数目 随时间的变化而不同,在点阵原子离开原来所处的 晶格位置比较小的情况下,随着时间的推移,可能 会发生离位原子的复位现象,所以,在确定级联碰 撞过程中产生的离位原子数目的时候,设定当点阵 原子离开原来晶格位置的距离大于一个晶格长度 的情况下,其成为一个次级离位原子,当体系演化 结束后, 五种不同能量下的 PKA 产生的次级离位 原子数目随 PKA 能量变化的趋势如图 3 所示.

从图 3 可知, PKA 产生的次级离位原子数目和 PKA 的能量近似的成线性关系, PKA 能量在逐渐 增大的过程中其产生的离位原子也越多.同样是采 用了多体间原子相互作用势, Bacon 等<sup>[14]</sup>给出了 不同材料下的 PKA 能量和次级离位原子数目的关 系也是成线性的, Heinisch 和 Singh<sup>[15]</sup>在铜材料中 利用两体相互作用的 MARLOWE 程序模拟了原子 间的级联碰撞过程, 也得出了类似的结论, 根据这 样的线性关系可以推测出不同能量下的 PKA 产生 的次级离位原子的数目. 如果 PKA 能量较高, 产生 的次级离位原子的能量也会较高,其可能会进一步 产生子级联碰撞过程,但是,Takahashi等<sup>[16]</sup>在锆 材料中模拟了能量为20 keV的PKA产生的级联碰 撞情况,结果表明:子级联碰撞过程是否发生对于 整个体系最终缺陷原子的数目是没有影响的.



PKA 在级联碰撞过程中产生的次级离位原子 分布在体系的空间区域内,形成了一系列的点缺陷, 这些间隙缺陷和空位缺陷的分布和行为对于材料 的结构特性有很大的影响,所以,我们分析计算了 PKA 产生的间隙原子在空间的分布范围,其值大小 用间隙原子距离所有间隙原子组成体系质心的平 均距离来标定的,距离以晶格长度为单位. 图 4 给 出了不同能量下的 PKA 产生的次级离位原子在空 间的分布情况,图 5 显示了 PKA 产生的损伤区域 大小随 PKA 能量的变化关系.

在图 4 中, 三个坐标轴的单位为晶格常数, Ep 表示 PKA 的初始能量, 通过不同能量下的 PKA 产 生的次级离位原子在空间的分布情况可知:不同能 量下的 PKA 产生的损伤区域不同, 而且, 在不同的 空间区域内,次级离位原子的密度也有所不同.从 图 5 中 PKA 的能量与其产生的损伤区域大小的关 系可以看出,随着 PKA 能量的增加, PKA 产生的损 伤区域也逐渐的扩大, 而能量为 9.752 keV 的 PKA 相比能量为 6.907 keV 的 PKA 产生的损伤区域略 小一些,我们通过图 3 可知,能量为 9.752 keV 相比 能量为 6.907 keV 的 PKA 产生了更多的次级离位 原子,对比图 4(a) 和 (b) 可以看出,当 PKA 的能量 为 6.907 keV 的情形下, 次级离位原子大多数都是 以单个间隙原子的形态存在的, 而 PKA 的能量为 9.752 keV 的情形下,次级离位原子的密度较大,形 成了次级离位原子团簇,由于间隙原子团簇比间隙 原子有较低的扩散速率,在模拟时间内, PKA 在能 量为 9.752 keV 的情况下产生的辐照损伤区域略小

于 PKA 能量为 6.907 keV 的情形.级联碰撞过程 中产生的损伤区域大小也与原子在发生级联碰撞 过程中是否会发生子级联碰撞过程有关, Stoller<sup>[17]</sup> 采用分子动力学方法在铁材料中模拟了 PKA 产生 的损伤情况,当 PKA 的能量升高到 40 keV 的时候, 级联碰撞过程就分成几个子级联过程,分别形成不 同尺寸的损伤区域,同样,前面提到的 Takahashi<sup>[16]</sup> 在锆材料的模拟过程中也发现了级联碰撞过程中 会产生很多的子级联碰撞过程的情形,这些研究都 表明: PKA 产生的损伤区域范围与损伤形态和其 能量的大小是密切相关的,在本文的模拟过程中, PKA 的能量都小于 10 keV,能量相对较低,并没有 观察到原子在级联碰撞过程中有子级联碰撞过程 的产生.



图 4 不同能量下的 PKA 产生的次级离位原子在空间的分布情况 (a)  $E_P = 9.752$  keV; (b)  $E_P = 6.907$  keV; (c)  $E_P = 3.721$  keV; (d)  $E_P = 1.434$  keV; (e)  $E_P = 0.421$  keV



### 4 结 论

首先采用蒙特卡罗方法计算了能量为1 MeV 的中子在锆材料的靶材中产生的初级离位原子 的能量和空间分布情况,计算结果表明:能量为 1 MeV 的中子在锆材料中产生的大部分 PKA 的能 量都分布在 1 keV 到 15 keV 之间.其次,根据 PKA 的平均能量和数目分布情况,采用分子动力学方法 计算了五种不同能量下的 PKA 产生的级联碰撞损 伤效应,研究表明: PKA 产生的次级离位原子数目 和 PKA 的能量大小近似成线性关系, PKA 产生的 损伤区域大小也和 PKA 的能量成正比,根据本文 的计算结果,画出了能量为 1 MeV 的中子在锆材料 的靶材中的不同深度区域内产生的辐照损伤示意 图,如图 6 所示.

结合分子动力学计算的结果以及图 6 中给 出的能量为 1 MeV 的中子在锆材料的靶材不同 深度区域内产生的损伤模拟示意图可知, 在靶材 表面附近,中子辐照产生的 PKA 能量高,数目多, PKA 产生的损伤区域的密集程度大,随着深度的 增加, PKA 的能量和数目都在逐渐的减小, PKA 产生的损伤区域的密度也在逐渐减小.由于能量 9.752 keV 的 PKA 产生的辐照损伤区域相比能量 为 6.907 keV 的 PKA 产生的损伤区域要略小一些, 所以,随着深度的增加,中子在靶材中产生的损伤 区域的范围先增加后减小.图6中给出的中子在靶 材不同深度区域内产生的损伤示意图,只是根据中 子产生的 PKA 能量和数目分布情况,粗略地反映 了由能量为1 MeV 的中子在靶材中产生的辐照损 伤初始阶段的分布情况,后续阶段的情形可以做进 一步的研究.



图 6 能量为 1MeV 的中子在靶材的不同深度区域内产生的辐照损伤模拟示意图

本文只计算了能量为1 MeV 的中子在锆材料 的靶材中产生的辐照损伤效应,在实际情况中,中 子的能量具有一个连续的分布,在级联碰撞过程中, 温度也会对缺陷和团簇的产生有一定的影响<sup>[18]</sup>, 很多因素都决定着中子在材料中引起的辐照损伤 的形成和演化过程,更广泛的问题还需要做更大规 模的计算和进一步的研究和探讨.

- Yu Q Z, Yin W, Liang T J 2011 Acta Phys. Sin. 60 052501 (in Chinese)
  [于全芝, 殷雯, 梁天骄 2011 物理学报 60 052501]
- [2] Gary W S 2007 Fundamentals of Radiation Materials Science (Berlin: Springer) p12
- [3] Office of Basic Energy Sciences 2006 Basic Research Needs for Advanced Nuclear Energy Systems (U.S: Department Of Energy)
- [4] Samaras M, Victoria M, Hoffelner W 2009 J. Nucl. Mater 392 286
- [5] Bacon J D, Calder F A, Gao F 1997 J. Nucl. Mater. 251 1
- [6] Trachenko K, Zarkadoula E, Todorov T I, Dove T M, Dunstan J D, Nordlund K 2012 Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 277 6
- [7] Souidi A, Hou M, Becquart S C, Malerba L, Domain C, Stoller E R 2011 J. Nucl. Mater. 419 122
- [8] Maire M, Wright D H, Urban L 2004 GEANT4 Physics Reference Manual
- [9] Mendelev M I, Ackland G J 2007 Phil. Mag. Lett. 87 349

- [10] Dierckx R 1987 J. Nucl. Mater. 144 214
- [11] Yu G, Li X Q, Sha J J, Yu J N, Xu S Y, Cai C H 2004 Chinese Joural of Nuclear Science and Engineering 24 139 (in Chinese) [郁刚, 李晓 强, 沙建军, 郁金南, 许淑艳, 蔡崇海 2004 核科学与工程 24 139]
- [12] Gao F, Bacon J D, Flewitt J E P, Lewis A T 1997 J. Nucl. Mater. 249 77
- [13] Yu J N 2007 Materials Irradiation effect (Beijing: Chemical Industry Press) (in Chinese) [郁金南 2007 材料辐照效应 (北京: 化学工业出 版社) 第 125 页]
- [14] Bacon J D, Gao F, Osetsky Y N 2000 J. Nucl. Mater. 276 1
- [15] Heinisch H L, Singh B N 1992 Phil. Mag. A 67 407
- [16] Takahashi A, Hirose K, Soneda N, Kikuchi M 2006 Key Engineering Materials 306 923
- [17] Stoller E R 2000 Nuclear Engineering and Design 195 129
- [18] Gao F, Bacon D J, Howe L M, So C B 2001 J. Nucl. Mater. 294 288

## Computer simulation of radiation damage caused by low energy neutron in zirconium\*

 $\label{eq:cui} Cui\ Zhen-Guo^{1)} \quad Gou\ Cheng-Jun^{1)} \quad Hou\ Qing^{1)\dagger} \quad Mao\ Li^{2)} \quad Zhou\ Xiao-Song^{2)}$ 

1) (Key Laboratory for Radiation Physics and Technology of Ministry of Education, Institute of Nuclear Science and Technology, Sichuan University, Chengdu 610065, China)

2) (China Academy of Engineering Physics, Mian Yang 621900, China)

( Received 27 January 2013; revised manuscript received 15 April 2013 )

#### Abstract

Based on the Geant4 program-the package for simulating particle transportation in materials, simulations of the irradiation by neutrons with 1 MeV energy in zirconium were conducted The two adjacent elastic collisions between injected neutron and target atoms produce numerous primary knock-on atoms (PKA). It is found that the average distance of adjacent collisions is 29.47 mm, and the kinetic energy of most PKAs ranges from 1 keV to 15 keV. The damaged area induced by the PKAs is in nanometer scale, which is far less than the distance between the two PKAs. According to the fact that, the subsequent cascade collisions caused by the two PKAs can be considered as a set of independent processes, it is reasonable to study the cascade collisions of the PKAs by means of molecular dynamics method. The cascade collision progress of PKAs with different energies was performed, and the number of interstitial atoms and the size of the damaged regions in the material were extracted. Through the combination of Monte Carlo method and molecular dynamics simulation, a complete physical picture of the primary damage caused by the 1 MeV neutrons in the zirconium was obtained.

Keywords: radiation damage, cascade collision, Monte Carlo simulation, molecular dynamics

**PACS:** 61.80.Hg, 61.80.Az, 61.72.J-

DOI: 10.7498/aps.62.156105

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 91126001, 11175124).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: qhou@scu.edu.cn