



Forschungszentrum Karlsruhe
Technik und Umwelt

Wissenschaftliche Berichte
FZKA 5642

Neutroneninduzierte Verlagerungsschädigung von Beryllium im Blanket eines (d,t)-Fusionsreaktors

D. Hermanutz

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik
Projekt Kernfusion

September 1995

**Forschungszentrum Karlsruhe
Technik und Umwelt**

**Wissenschaftliche Berichte
FZKA 5642**

**Neutroneninduzierte Verlagerungsschädigung
von Beryllium
im Blanket eines (d,t)-Fusionsreaktors**

Dieter Hermanutz

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik
Projekt Kernfusion

© 2013 Forschungszentrum Karlsruhe GmbH

Als Manuskript gedruckt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 76021 Karlsruhe

ISSN 0947-8620

Neutroneninduzierte Verlagerungsschädigung von Beryllium im Blanket eines (d,t)-Fusionsreaktors

Zusammenfassung:

Beryllium ist ein bevorzugter Kandidat für einen Neutronenmultiplier in Feststoffblankets von Fusionsreaktoren. Dies liegt hauptsächlich an seiner niedrigen (n,2n)-Reaktionsschwelle und seinen guten thermischen und mechanischen Eigenschaften. Das Verhalten unter intensiver Neutronenbestrahlung ist jedoch von entscheidender Bedeutung für die Verwendung in zukünftigen Fusionsreaktoren.

Verlagerungsschädigung in Beryllium wurde bisher mit unzureichenden Daten und methodischen Unzulänglichkeiten berechnet. Zunächst einmal benötigt man genaue Wirkungsquerschnittsdaten, um verlässliche Spektren der primären Rückstoßatome (PKA's) zu erhalten. Außerdem weist das NRT-Modell, das gewöhnlich zur Berechnung der durch PKA's initiierten sekundären Verlagerungen verwendet wird, prinzipielle Einschränkungen auf. Die zugrundeliegende Theorie der Schädigungsenergie (dem Teil der kinetischen Energie der PKA's, der elastisch auf Matrixatome übertragen wird) nach Lindhard ist streng gültig nur für Ionen mittlerer und hoher Masse mit mäßigen Energien in Targets desselben Elements.

In dieser Arbeit wurden verbesserte Schädigungsquerschnitte und Verlagerungsraten (*dpa/s*) in Beryllium berechnet unter Verwendung der Wirkungsquerschnittsdaten von ENDF/B-VI (mit einer stark verbesserten (n,2n)-Auswertung) und einer geeigneten Behandlung der Schädigungsenergie, die für fusionsrelevante Schädigung leichter Materialien geeignet ist.

„Die vorliegende Arbeit wurde im Rahmen des Projekts Kernfusion des Forschungszentrums Karlsruhe durchgeführt und ist ein von den Europäischen Gemeinschaften geförderter Beitrag im Rahmen des Fusionstechnologieprogramms.“

Abstract

Neutron induced displacement damage in beryllium in the blanket of a (d,t)-fusion reactor

Abstract:

Beryllium is a favoured candidate for a neutron multiplier in solid breeder blankets of fusion reactors. This is mainly due to its low (n,2n)-reaction threshold and because of its good thermal and mechanical properties. Its behaviour under intense neutron irradiation, however, is a crucial issue for its use in future fusion reactors.

Displacement damage in beryllium so far has been calculated both with data related and methodological deficiencies. First of all, there is a need to have accurate cross-section data in order to obtain reliable spectra of primary knock-on atoms (PKA's). Furthermore, there are principal restrictions of the NRT-model in general used to calculate secondary displacements initiated by PKA's. The underlying theory of damage-energy (part of kinetic energy of PKA transferred elastically to matrix atoms) according to Lindhard is strictly valid only for medium and heavy mass ions with moderate energies in targets of the same element.

In this work improved damage cross-sections and displacement rates (*dpa/s*) in beryllium have been calculated based on cross-section data from ENDF/B-VI (with a significantly improved (n,2n)-evaluation) and on an appropriate treatment of damage-energy that is suitable for fusion relevant damage of light mass materials.

„This work has been performed in the framework of the Nuclear Fusion Project of the Forschungszentrum Karlsruhe and is supported by the European Communities within the European Fusion Technology Program.“

EINLEITUNG: ÜBERBLICK	1
1 BERECHNUNG VON PKA-SPEKTREN	3
1.1 Einführung	3
1.2 Beryllium	5
1.3 Neutroneninduzierte Reaktionen	7
1.3.1 Reaktionsmechanismen	7
1.3.2 Reaktionskinematik	8
1.3.3 Wirkungsquerschnitte	10
1.3.4 Neutronenspektren aus (d,t)-Fusion	18
1.4 Multigruppenrechnung	19
1.4.1 Gruppenkonstanten	19
1.4.2 Daten: ENDF/B-VI	22
1.4.3 Processing Code: NJOY	24
1.5 PKA-Spektren in ${}^9\text{Be}$	25
1.5.1 NJOY-Berechnungen	25
1.5.2 PKA's aus (n, γ)	29
1.5.3 Spektrungemittelte PKA-Spektren	31
2 SEKUNDÄRE SCHÄDIGUNG	35
2.1 Einführung	35
2.2 Kaskadmodell und Kontinuitätsgleichungen	36
2.2.1 Stoßkaskade	36
2.2.2 Mittlere Schädigungsenergie	38
2.3 Berechnung der Schädigungsenergie	40
2.3.1 Elektronisches Bremsvermögen	41
2.3.2 Elastische Kernstreuung	52
2.3.3 Schädigungsenergie	60
2.4 NRT-Modell	73
2.4.1 Beschreibung des Modells	73
2.4.2 Diskussion des Modells	74
3 VERLAGERUNGSSCHÄDIGUNG	77
3.1 Berechnungen	77
3.2 Vergleichsrechnungen	83

4 ZUSAMMENFASSUNG	89
ANHÄNGE	89
Anhang A: Stoßintegral und minimaler Stoßabstand	91
Anhang B: Berechnung des Integrals in der Oen-Robinson-Formel	92
Anhang C: Asymptotische Entwicklung der Lindhard-Gleichung	93
Anhang D: Runge-Kutta-Verfahren zur Lösung der Lindhard-Gleichung	96
LITERATURVERZEICHNIS	97

Abbildung 1-1:	totaler Wirkungsquerschnitt für Neutronen in ${}^9\text{Be}$	7
Abbildung 1-2:	Veranschaulichung der Reaktionskinematik für neutroneninduzierte Kernreaktionen.....	9
Abbildung 1-3:	verwendete Wirkungsquerschnitte in ${}^9\text{Be}$	11
Abbildung 1-4:	elastischer Wirkungsquerschnitt für Neutronen in ${}^9\text{Be}$	12
Abbildung 1-5:	(n,2n)-Wirkungsquerschnitt in ${}^9\text{Be}$	13
Abbildung 1-6:	Vergleich von totalem, elastischem und (n,2n)-Wirkungsquerschnitt in ${}^9\text{Be}$	14
Abbildung 1-7:	(n, α)-Wirkungsquerschnitt in ${}^9\text{Be}$	15
Abbildung 1-8:	(n,t)-Wirkungsquerschnitt in ${}^9\text{Be}$; mit einzelnen Beiträgen	16
Abbildung 1-9:	(n, γ)-Wirkungsquerschnitt in ${}^9\text{Be}$	17
Abbildung 1-10:	Neutronenflußdichte an der ersten Wand (Feststoffblanket für DEMO/NET): Neutronenspektrum 1	18
Abbildung 1-11:	Struktur einer Unterbibliothek von ENDF	22
Abbildung 1-12:	elastischer Wirkungsquerschnitt für Neutronen in ${}^9\text{Be}$ in Gruppenform	25
Abbildung 1-13:	elastischer Wirkungsquerschnitt für Neutronen in ${}^9\text{Be}$ in Gruppenform im Vergleich zu Punktdaten	25
Abbildung 1-14:	verwendete Wirkungsquerschnitte für Neutronen in ${}^9\text{Be}$ in Gruppenform ..	26
Abbildung 1-15:	PKA-Spektren aus Gruppe 95 (14...15 MeV)	27
Abbildung 1-16:	${}^4\text{He}$ -Spektren aus Gruppe 95 (14...15 MeV).....	28
Abbildung 1-17:	${}^7\text{Li}$ -Spektren aus Gruppe 95 (14...15 MeV).....	28
Abbildung 1-18:	mittlere Rückstoßenergie für ${}^9\text{Be}(n,\gamma){}^{10}\text{Be}$	30
Abbildung 1-19:	PKA-Spektren in ${}^9\text{Be}$ durch das Neutronenspektrum im Feststoffblanket eines (d,t)-Fusionsreaktors.....	31
Abbildung 1-20:	relativer Anteil von PKA's mit kleineren Energien für ${}^9\text{Be}$ -, ${}^4\text{He}$ - und Summe aller PKA's.....	32
Abbildung 1-21:	relative Zusammensetzung der PKA's in ${}^9\text{Be}$	33
Abbildung 1-22:	${}^9\text{Be}$ -, ${}^4\text{He}$ - und Summe aller PKA's in ${}^9\text{Be}$ (durch das Neutronenspektrum im Feststoffblanket eines (d,t)-Fusionsreaktors)	34
Abbildung 2-1:	Veranschaulichung der Wechselwirkung eines PKA's mit einem Gitteratom	36
Abbildung 2-2:	binäre Komponenten der Stoßkaskade	39
Abbildung 2-3:	elektronischer Bremsquerschnitt nach Lindhard für ${}^9\text{Be}$	42
Abbildung 2-4:	reduzierter elektronischer Bremsquerschnitt für ${}^9\text{Be}$ und ${}^4\text{He}$	44
Abbildung 2-5:	elektronischer Bremsquerschnitt nach Oen-Robinson	46
Abbildung 2-6:	Extrapolationen für Bethe-Bloch: Biersack-Haggmark (A), linear (B).....	49
Abbildung 2-7:	Kombination des elektr. Bremsquerschnitts für ${}^9\text{Be}$ und Fit nach Ziegler...	49
Abbildung 2-8:	verbesserte elektronische Bremsquerschnitte	50

Abbildung 2-9: verbesserte elektronische Bremsquerschnitte (v) im Vergleich mit Lindhard (L).....	51
Abbildung 2-10: Lindhards $f(t^{1/2})$ -Funktion (Fit von Winterbon et al.).....	53
Abbildung 2-11: reduzierter Kernbremsquerschnitt nach Lindhard.....	54
Abbildung 2-12: Kernbremsquerschnitte nach Lindhard.....	55
Abbildung 2-13: Vergleich von elektronischem und Kernbremsquerschnitt nach Lindhard .	56
Abbildung 2-14: reduzierte Kernbremsquerschnitte: (v) verbessert, (L) Lindhard.....	57
Abbildung 2-15: verbesserte Kernbremsquerschnitte.....	58
Abbildung 2-16: verbesserte $f(t^{1/2})$ -Funktion nach Ziegler (v) im Vergleich zu Lindhard (L).....	59
Abbildung 2-17: Vergleich von verbessertem elektronischen. und Kernbremsquerschnitt.....	60
Abbildung 2-18: reduzierte Schädigungsfunktion (Lindhard) für $Z_1 = Z_2$	61
Abbildung 2-19: reduzierte Schädigungsfunktionen (Lindhard) für ${}^9\text{Be}$ und ${}^4\text{He}$	62
Abbildung 2-20: Schädigungsfunktionen (Lindhard).....	62
Abbildung 2-21: Schädigungseffizienz (Lindhard) für ${}^9\text{Be}$ und ${}^4\text{He}$	63
Abbildung 2-22: Verhältnis der Schädigungsfunktionen (Lindhard) zu ${}^9\text{Be}$	64
Abbildung 2-23: reduzierte Schädigungsfunktion für $Z_1 = Z_2$	67
Abbildung 2-24: reduzierte Schädigungsfunktion für $Z_1 = Z_2$; (v) verbessert, (L) Lindhard	68
Abbildung 2-25: Schädigungsfunktionen (verbessert).....	68
Abbildung 2-26: Schädigungsfunktionen für ${}^9\text{Be}$ und ${}^4\text{He}$; (v) verbessert, (L) Lindhard	69
Abbildung 2-27: Schädigungseffizienz (verbessert) für ${}^9\text{Be}$ und ${}^4\text{He}$	70
Abbildung 2-28: Verhältnis der Schädigungsfunktionen (verbessert) zu ${}^9\text{Be}$	71
Abbildung 2-29: relative Änderung der Schädigungsenergien durch verbesserte Rechnung (für ${}^9\text{Be}$ und ${}^4\text{He}$)	72
Abbildung 3-1: verbesserte Schädigungsfunktion für ${}^9\text{Be}$ in Gruppenform	78
Abbildung 3-2: Schädigungsenergie-Querschnitte in ${}^9\text{Be}$ (verbessert).....	78
Abbildung 3-3: Schädigungsenergie-Querschnitte in ${}^9\text{Be}$ (verbessert).....	79
Abbildung 3-4: Verlagerungsquerschnitte in ${}^9\text{Be}$ (verbessert)	79
Abbildung 3-5: Verlagerungsquerschnitte in ${}^9\text{Be}$ (verbessert)	80
Abbildung 3-6: relativer Anteil der PKA's am totalen Schädigungsenergie-Querschnitt....	81
Abbildung 3-7: Schädigungsenergie-Querschnitte in ${}^9\text{Be}$ (Lindhard)	83
Abbildung 3-8: Verlagerungsquerschnitte in ${}^9\text{Be}$ (Lindhard).....	83
Abbildung 3-9: verbesserte Schädigungsenergie-Querschnitte in ${}^9\text{Be}$ im Vergleich zu Lindhard (hell).....	84
Abbildung 3-10: relative Änderungen der Schädigungsenergie-Querschnitte in ${}^9\text{Be}$ im Vergleich zu Lindhard	85
Abbildung 3-11: relative Änderungen der totalen Schädigungsgrößen in ${}^9\text{Be}$ im Vergleich zu Lindhard.....	85
Abbildung 3-12: totale Verlagerungsquerschnitte in ${}^9\text{Be}$	87

Tabelle 1-1: ausgewählte Daten für ${}^9\text{Be}$	6
Tabelle 1-2: Gruppenstruktur (SPECTER) mit unterer Gruppengrenze in eV.....	21
Tabelle 1-3: Inhalt der ENDF/B-VI-Auswertung für ${}^9\text{Be}$	23
Tabelle 1-4: mittlere PKA-Energie aus Gruppe 95.....	27
Tabelle 1-5: mittlere PKA-Energie aus Neutronenspektrum 1.....	32
Tabelle 1-6: relativer Anteil der PKA-Energien aus Neutronenspektrum 1.....	33
Tabelle 2-1: Faktor für Oen-Robinson-Querschnitt.....	46
Tabelle 2-2: Schädigungsenergien nach Lindhard im Plateau-Bereich.....	63
Tabelle 2-3: Schädigungseffizienz (Lindhard) in %.....	64
Tabelle 2-4: Startwerte für Runge-Kutta-Verfahren (Berechnung der Schädigungsenergie).....	67
Tabelle 2-5: Schädigungseffizienz (verbessert) in %.....	70
Tabelle 2-6: Schädigungsenergien (verbessert) für $E=10^6$ eV.....	71
Tabelle 2-7: relative Änderung der Schädigungsenergien durch verbesserte Rechnung.....	72
Tabelle 3-1: dpa/s (verbessert) für verschiedene PKA's in ${}^9\text{Be}$ (Neutronenspektrum 1).....	82
Tabelle 3-2: dpa/s (verbessert) für verschiedene PKA's in ${}^9\text{Be}$ (Neutronenspektrum 2).....	82
Tabelle 3-3: relative Änderung der Schädigungsenergie-Querschnitte in ${}^9\text{Be}$ bei 14 MeV.....	84
Tabelle 3-4: dpa/s (Lindhard) für verschiedene PKA's in ${}^9\text{Be}$ (Neutronenspektrum 1).....	86
Tabelle 3-5: dpa/s (SPECTER) für verschiedene PKA's in ${}^9\text{Be}$ (Neutronenspektrum 1).....	87

EINLEITUNG: ÜBERBLICK

Die Fusionsforschung hat im Bereich der durch magnetischen Einschluß in einem Tokamak möglichen (d,t)-Fusion große Fortschritte erzielt. Ziel der weiteren Forschungsvorhaben im Rahmen des Europäischen Fusionstechnologieprogrammes [1] ist zunächst die Entwicklung eines Reaktors (International Thermonuclear Experimental Reactor, ITER [2]), der unter reaktortypischen Bedingungen den Nachweis dafür erbringen soll, daß in einem Tokamak auf der Basis der kontrollierten (d,t)-Fusion Leistungserzeugung möglich ist. In einer weiteren Stufe soll ein Demonstrationsreaktor (DEMO) projektiert werden, der prototypisch die Charakteristika eines kommerziellen Leistungsreaktors aufweisen soll.

Im Rahmen dieser Forschungsarbeiten spielt die Entwicklung von Blankets eine wichtige Rolle, da das Blanket in einem (d,t)-Fusionsreaktor entscheidende Funktionen ausübt. Seine primäre Aufgabe ist es, das benötigte Tritium in ausreichendem Maße zu produzieren (brüten). Weiter soll es die kinetische Energie der 14 MeV-Neutronen thermisch nutzbar machen und für ein gewisses Maß an Abschirmung sorgen.

Dabei werden verschiedene Konzepte des Blanketaufbaus weiterverfolgt, wobei stets Lithium in geeigneter Form (fest oder flüssig) als Brutstoff verwendet wird. In den keramischen Feststoffblankets wird es in Form von Silikaten oder Aluminaten verwendet. Um innerhalb dieser Konzepte eine Tritiumbrutrate größer eins (d.h. pro Quellneutron ein Tritiumkern) zu erzielen, bedarf es der Zugabe eines sogenannten Neutronenmultipliers, eines Materials also, daß in der Lage ist, die 14 MeV-Quellneutronen über geeignete (n,xn)-Reaktionen zu vervielfachen.

Beryllium ist ein bevorzugter Kandidat für diese Funktion aufgrund seiner niedrigen (n,2n)-Reaktionsschwelle (bei gleichzeitig geringem Absorptionsquerschnitt) und seinen guten thermischen und mechanischen Eigenschaften. Demgegenüber muß sein Verhalten unter der intensiven Neutronenbestrahlung in einem (d,t)-Reaktor genau untersucht werden. Die Bestrahlung verursacht unterschiedlich geartete Materialschäden: Schwellen durch Gasproduktion (vor allem Tritium und Helium in (n,t)- und (n, α)-Reaktionen) und Aktivierung durch die Erzeugung radioaktiver Kerne kann auf der Grundlage bestehender Daten mit guter Genauigkeit berechnet werden. Zusätzlich können geeignete Bestrahlungsexperimente in Spaltungsreaktoren oder 14 MeV-Experimente benutzt werden.

Strahlenschädigungen in Form von Gitteratomverlagerungen sind demgegenüber aus Mangel an verlässlichen Daten noch relativ unzureichend untersucht worden. Zu deren Berechnung benötigt man genaue Daten über die Sekundärenergieverteilung von neutroneninduzierten Kernreaktionen, um auf dieser Basis die Spektren der Rückstoßkerne (primary knock-on atoms, PKA) zuverlässig berechnen zu können. Die anschließende Stoßkaskade resultiert in sekundären Verlagerungen, die üblicherweise mit dem etablierten Strahlenschädigungsmodell von Norgett, Robinson und Torrens („NRT-Modell“) quantitativ erfaßt werden.

Als Maß für die Schädigung durch Verlagerungen berechnet man die energieabhängigen Schädigungsenergie- und Verlagerungsquerschnitte, sowie die Verlagerungen pro Gitteratom in der Zeiteinheit (displacements per atom s^{-1} , *dpa/s*).

Ziel dieser Arbeit ist es, verlässliche quantitative Aussagen über die neutroneninduzierte Strahlenschädigung in Form von Gitteratomverlagerungen in Beryllium zu machen. Schwerpunkt dabei ist die spezifische Neutronenbelastung im Blanket eines (d,t)-Fusionsreaktors.

In einem ersten Teil „Berechnung von PKA-Spektren“ werden dazu die benötigten PKA-Spektren auf der Basis der Kerndatenbibliothek ENDF/B-VI, die die benötigten Sekundär-energie-Verteilungen enthält, mit Hilfe des Processing Codes NJOY berechnet. Berücksichtigt werden dabei alle für die Schädigung relevanten Reaktionen. Im zweiten Kapitel „Sekundäre Schädigung“ werden Schädigungsfunktionen bereitgestellt. Dabei handelt es sich um den Anteil der PKA-Energie, der in kinetische Energie von weiteren Rückstoßatomen umgewandelt wird und damit für sekundäre Verlagerungen zur Verfügung steht. Die dem NRT-Modell zugrundeliegende Lindhard-Energiepartitionstheorie weist für leichte Materialien und hohe Ionenenergien substantielle Einschränkungen auf. Deshalb sollen neue, auf verbesserten Bremsquerschnitten basierende Schädigungsfunktionen entwickelt und die Abweichungen zu den Lindhard-Funktionen diskutiert werden.

Abschließend werden im dritten Kapitel „Verlagerungsschädigung“ aus PKA-Spektren und Schädigungsfunktionen die energieabhängigen Schädigungsenergie- und Verlagerungsquerschnitte berechnet. Für ein typisches Fusionspektrum errechnet man dazu die *dpa*-Rate in ${}^9\text{Be}$. Ein kritischer Vergleich mit den Größen aus der Lindhard-Theorie sowie aus dem Schädigungscode SPECTER zeigt die Auswirkungen der verbesserten Schädigungsfunktionen.

1 BERECHNUNG VON PKA-SPEKTREN

1.1 Einführung

Im (d,t)-Fusionsreaktor soll aus der Fusion von Deuterium und Tritium Energie gewonnen werden. Tatsächlich erhält man Reaktionsprodukte mit einer kinetischen Gesamtenergie von 17,6 MeV pro Reaktion:



Die α -Teilchen verlieren wegen des magnetischen Einschlusses im Tokamak ihre Energie bereits im Plasma und tragen so zur Plasmaheizung bei. Die Neutronen tragen jedoch den überwiegenden Anteil der in der Fusionsreaktion freigesetzten kinetischen Energie aus dem Plasma heraus, da sie praktisch keine Wechselwirkung im Plasma eingehen. Sie treffen dann auf die Erste Wand, Blankets, Divertoren und schließlich auf das Vakuumgefäß. In den unterschiedlichen Kernreaktionen werden sie moderiert und abgelenkt (vor allem durch elastische Streuung) oder absorbiert (unter Emission von Photonen, geladenen Teilchen oder wieder Neutronen). Im Endeffekt erhält man aus dem ursprünglichen nahezu monoenergetischen Neutronenfeld ein kontinuierliches Energiespektrum.

Um dieses Spektrum zu bestimmen führt man Transportrechnungen durch. Dabei haben sich verschiedene Verfahren durchgesetzt. Um die relativ komplizierte, dreidimensionale Geometrie in einem Tokamak adäquat einzubeziehen, verwendet man Monte-Carlo-Methoden. Im Abschnitt 1.3.4 „Neutronenspektren aus (d,t)-Fusion“ werden die Ergebnisse präsentiert.

In den Fusionsspektren erwartet man Neutronen im Bereich von thermischen Energien bis etwa 15 MeV, die dann im wesentlichen folgende Reaktionen induzieren können: elastische Streuung, Strahlungseinfang: (n, γ), Erzeugung leichter Elemente: (n,p), (n,t), (n, α), Neutronenmultiplikation: (n,xn), unelast. Streuung: (n,n' γ). Man unterscheidet dabei zwischen exothermen und endothermen Reaktionen (Schwellenreaktionen).

Als Maß für die Häufigkeit einer Reaktion verwendet man im allgemeinen den Reaktionswirkungsquerschnitt und daraus abgeleitete Größen. Als Wirkungsquerschnitt einer Reaktion definiert man:

$$\sigma = \frac{\dot{N}}{\Phi}$$

\dot{N} Anzahl der Reaktionen pro Streuzentrum und Zeiteinheit

Φ Flußdichte der einfallenden Teilchen (Neutronen)

Dimension des Wirkungsquerschnitts ist die Fläche, als Einheit verwendet man oft $1 \text{ barn} = 1 \text{ b} = 10^{-24} \text{ cm}^2$.

Neben diesem integrierten, oft in Abhängigkeit von der Energie gegebenen Wirkungsquerschnitt verwendet man Energie- und Winkelverteilungen (oder auch korrelierten Energie-Winkel-Verteilungen) der Sekundärteilchen. Diese Verteilungen (Spektren) werden als differentielle, im Falle der Energie-Winkel-Verteilungen auch als doppelt-differentielle Wirkungsquerschnitte bezeichnet.

$$\begin{aligned}\sigma(E, T) &= \frac{d\sigma(E)}{dT} && \text{Energieverteilung (barn / MeV), kurz: Spektrum} \\ \sigma(E, \mu) &= \frac{d\sigma(E)}{d\mu} && \text{Winkelverteilung (barn / sr)} \\ \sigma(E, T, \mu) &= \frac{d^2\sigma(E)}{d\mu dT} && \text{korrelierte Energie - Winkel - Verteilung (barn MeV}^{-1} \text{ sr}^{-1})\end{aligned}$$

$\mu = \cos \theta$ Kosinus des Streuwinkels

T Energie eines Sekundärteilchens

Zur quantitativen Erfassung der Strahlenschädigung in Form von Gitteratomverlagerungen benötigt man die Energieverteilung der durch neutroneninduzierte Kernreaktionen entstandenen Rückstoßkerne (bzw. schweren Sekundärteilchen). Die Erzeugung dieser "primary knock-on atoms" (PKA) bezeichnet man auch als primäre Schädigung, während die durch die PKA's erzeugten Verlagerungen die sekundäre Schädigung darstellen. Die PKA's lösen also eine Kaskade von Verlagerungen aus, die wir im Kapitel 2 „Sekundäre Schädigung“ genauer untersuchen werden.

Die zu berechnenden Schädigungsgrößen sind der Schädigungsenergie-Querschnitt σ_{dam} , Verlagerungsquerschnitt σ_{D} und die Zahl der Verlagerungen pro Gitteratom (displacements per atom, dpa) in Abhängigkeit von der Neutronenenergie E . Sie stellen eine Kombination aus primärer und sekundärer Schädigung dar [3,4]:

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{dam}}(E) &= \sum_{\text{alle Reaktionen } i} \sigma_{\text{dam},i}(E) = \sum_{\text{alle Reaktionen } i} \sigma_i(E) \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} K_i(E, T) \bar{v}_i(T) dT \\ &= \sum_{\text{alle Reaktionen } i} \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} \frac{d\sigma_i(E)}{dT} \bar{v}_i(T) dT = \sum_{\text{alle Reaktionen } i} \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} \sigma_{\text{PKA},i}(E, T) \bar{v}_i(T) dT \\ \sigma_{\text{D}}(E) &= \sum_{\text{alle Reaktionen } i} \sigma_{\text{D},i}(E) = \sum_{\text{alle Reaktionen } i} \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} \sigma_{\text{PKA},i}(E, T) N_{\text{d},i}(T) dT \\ dpa/s &= \int \sigma_{\text{D}}(E) \Phi(E) dE\end{aligned} \tag{1}$$

E	Energie des Neutrons
T_{\min}, T_{\max}	min. und max. kinetische Energie des PKA
$\sigma_{\text{dam},i}(E)$	Schädigungsenergie - Querschnitt für Reaktion i (barn eV)
$\sigma_{\text{D},i}(E)$	Verlagerungsquerschnitt für Reaktion i (barn)
$\sigma_i(E)$	Kernreaktionsquerschnitt für Reaktion i
$K_i(E, T)$	Transfer - Wahrscheinlichkeit (eV^{-1})
$\sigma_{\text{PKA},i}(E, T)$	PKA - Spektrum (Energie T) aus Reaktion i (barn / eV): primäre Schädigung
$\bar{v}_i(T)$	mittl. Schädigungsenergie für PKA (eV): sekundäre Schädigung
$N_{\text{d},i}(T)$	mittl. Zahl der Gitteratomverlagerungen pro PKA: sekundäre Schädigung
$\Phi(E)$	Flußdichte der Neutronen ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)

$K_i(E, T)$ beschreibt die Wahrscheinlichkeit, daß ein Neutron der Energie E ein PKA der Energie T im Reaktionskanal i erzeugt.

In elastischen und inelastischen Kernreaktionen der Neutronen mit der Energie E werden unterschiedliche PKA's mit einer bestimmten kinetischen Energie T erzeugt, die abhängig ist von der Primärenergie, der Art der zugrundeliegenden Kernreaktion und der jeweiligen Reaktionskinematik.

In diesem Kapitel betrachten wir zunächst das Target, nämlich Beryllium (^9Be) im Blanket des Tokamakreaktors. Im weiteren werden die Reaktionen untersucht, die für die PKA-Erzeugung eine Rolle spielen, und außerdem die für die (d,t)-Fusion typischen Neutronenspektren.

Die anschließenden Berechnungen der PKA-Spektren werden auf der Basis der Kerndatenbibliothek ENDF/B-VI [5] mit Hilfe des Processing Codes NJOY [6] in einer Multigruppenrechnung durchgeführt. Die Ergebnisse werden abschließend graphisch präsentiert und analysiert, wobei auch über das primäre Neutronenspektrum gemittelte Verteilungen zur Veranschaulichung herangezogen werden.

1.2 Beryllium

Die wichtigste Aufgabe des Blankets im (d,t)-Fusionsreaktor ist das Erbrüten des Tritiums. Dazu eignet sich Lithium als Brutstoff, das über die Reaktionen $^6\text{Li}(n, \alpha)\text{t}$ und $^7\text{Li}(n, n'\alpha)\text{t}$ Tritium produzieren kann. Die erste Reaktion weist einen $1/v$ -Verlauf des Wirkungsquerschnittes auf mit einer Resonanz bei ca. 0,25 MeV. Während hier ein Neutron absorbiert wird, hat die zweite Reaktion den Vorteil, daß das emittierte Neutron wieder tritiumproduzierende Reaktionen eingehen kann. Andererseits liegt die Reaktionsschwelle bei etwa 3,5 MeV, so daß diese Reaktion gegenüber der ersten untergeordnet ist. Zum effektiven Brüten ist des-

halb eine Moderation der 14 MeV-Neutronen sinnvoll. In Konkurrenz dazu treten parasitäre Absorptionsreaktionen, die die Tritiumbrutrate senken.

Im keramischen Feststoffblanket wird Lithiumorthosilikat (Li_4SiO_4) als Brutstoff eingesetzt, das eine noch höhere Lithiumdichte aufweist als reines Lithium-Metall und dessen Tritiumbeweglichkeit sehr groß ist. Neutronenverluste durch Absorptionsreaktionen können jedoch nicht über die ${}^7\text{Li}(n,n'\alpha)t$ -Reaktion in ausreichendem Maße ersetzt werden, da vor allem durch inelastische Streuung am Sauerstoff die Neutronen unter die Schwelle dieser Reaktion abgebremst werden. Deshalb müssen Neutronenmultiplier eingesetzt werden, die über (n,xn) -Reaktionen Neutronen erzeugen können. Für 14 MeV-Neutronen tritt dabei im wesentlichen nur die $(n,2n)$ -Reaktion auf.

Als Neutronenmultiplier wird Beryllium wegen seiner günstigen kernphysikalischen und auch materialtypischen Eigenschaften bevorzugt. Es besitzt einen hohen $(n,2n)$ -Wirkungsquerschnitt mit einer sehr niedrigen Schwelle von 1,75 MeV und weist nur eine geringe Neutronenabsorption auf. Unter seinen Materialeigenschaften fällt vor allem die hohe Wärmeleitfähigkeit und der hohe Schmelzpunkt auf. Außerdem ist Beryllium mechanisch und chemisch sehr beständig. Seine Dichte ist recht gering, was die Masse der Blanketelemente, trotz hoher Berylliumanteile, in einem vertretbaren Rahmen beläßt. Negativ wirkt sich die starke Toxizität des Metalls (vor allem bei der Verarbeitung) und sein Schwellverhalten unter intensiver Neutronenbelastung aus. Durch die beschränkten Ressourcen ist außerdem der Kapitaleinsatz für Beryllium sehr hoch.

Zusammenfassend werden einige Daten präsentiert, die für die Berechnungen verwendet werden (oder von allgemeinem Interesse sind) [7-10]:

Tabelle 1-1: ausgewählte Daten für ${}^9\text{Be}$

Dichte:	1,8024 g cm ⁻³
Atommasse:	9,012 amu
Schmelztemperatur:	1557 K
Gitterabstand:	2,29x10 ⁻¹⁰ m
mittleres Ionisierungspotential:	63 eV
Schwellenenergie für Verlagerungen:	31 eV

1.3 Neutroneninduzierte Reaktionen

1.3.1 Reaktionsmechanismen

Die theoretische Beschreibung der durch Neutronen induzierten Kernreaktionen (unter Einbeziehung der elastischen Streuung) erfolgt über verschiedene Reaktionsmechanismen bzw. Reaktionsmodelle. Diese können anhand der charakteristischen Energieabhängigkeit des totalen Wirkungsquerschnittes σ_{tot} , der die Summe aller Partialquerschnitte aus elastischer und nichtelastischen Reaktionen darstellt, erläutert werden. Im Rahmen dieser Arbeit sind dabei nur einige Aspekte interessant, vor allem die resultierenden Wirkungsquerschnitte und Winkel- bzw. Energieverteilungen der Sekundärteilchen (vgl. Musiol et al. [11], Marmier et al. [12]).

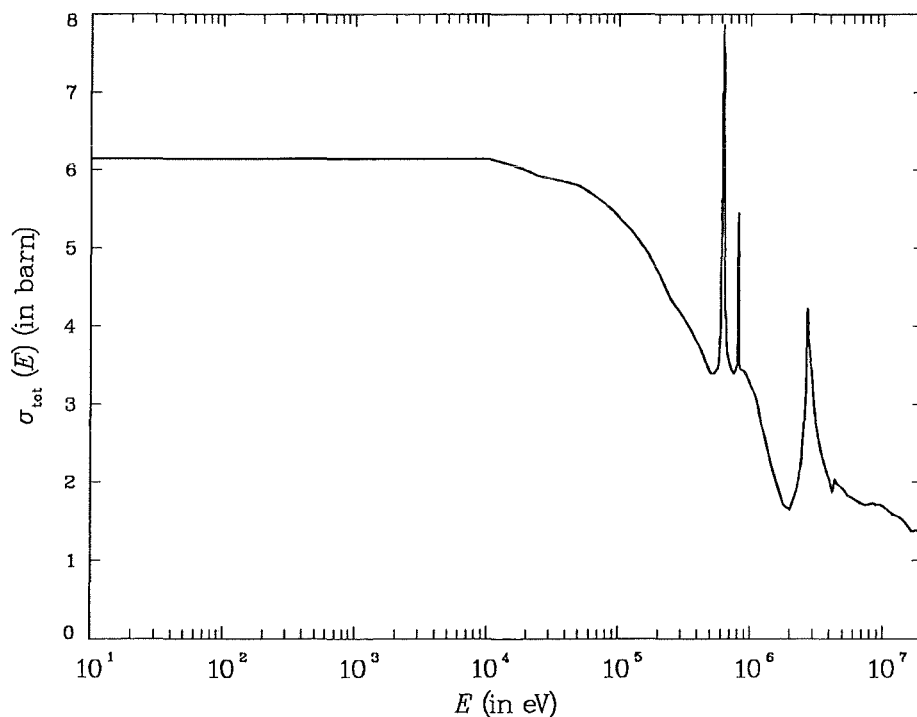


Abbildung 1-1: totaler Wirkungsquerschnitt für Neutronen in ${}^9\text{Be}$

Ein möglicher Reaktionsmechanismus wird als direkte Wechselwirkung (direct interaction, DI) bezeichnet und spielt vor allem oberhalb einigen MeV eine wichtige Rolle. Innerhalb einer sehr kurzen Wechselwirkungszeit (ca. 10^{-22} s) reagieren nur wenige Nukleonen des Targets mit dem einfallenden Neutron. Dabei wird eine relativ geringe Anzahl von Freiheitsgraden angeregt. Der Wirkungsquerschnitt ist schwach energieabhängig, seine Winkelverteilung hat ein beugungsähnliches Bild mit einer mehr oder minder ausgeprägten Vorwärtsausrichtung.

Ein anderer Reaktionsmechanismus, der über den interessanten Energiebereich bis etwa 15 MeV gut verwendet werden kann, erfolgt über die Bildung eines Zwischenkerns (compound nucleus, CN). Nach einer schnellen Absorption des einfallenden Neutrons und dem gleichmäßigen Energieübertrag auf alle Nukleonen zerfällt der Compound-Kern ($\tau \approx 10^{-16} \dots 10^{-18}$ s), wobei nach der Amnesieannahme (Bohr) der Zerfall unabhängig von der Bildung ist. Der Wirkungsquerschnitt kann deshalb in diese beiden Anteile faktorisiert werden. Außerdem erwartet man eine um 90° symmetrische Winkelverteilung.

Je nach Primärenergie sind verschiedene Anregungen des CN möglich: Für sehr geringe Energien wird er praktisch gar nicht angeregt, das Neutron bewegt sich im Kernpotential und kann Einteilchenresonanzen mit einer Breite von $\Gamma \approx O(1 \text{ MeV})$ anregen. Im Bereich von diskreten CN-Niveaus erhält man im totalen Wirkungsquerschnitt Breit-Wigner-Resonanzen mit Breiten um 1 eV und sehr viel kleiner. Noch höhere Energien bewirken aufgrund der Energieunschärfe eine Anregung mehrerer CN-Niveaus, die im Rahmen der Hauser-Feshbach-Theorie behandelt werden. Schließlich kommt man in den Bereich, in dem eine statistische Beschreibung der angeregten Niveaus notwendig wird (Weißkopf-Ewing). Im Restkern wird dann ein Kontinuum angeregt. Die Teilchenspektren im Ausgangskanal können vereinfacht durch ein Verdampfungsmodell beschrieben werden.

Mangelt es an verlässlichen experimentellen Daten über Energie- und Winkelverteilungen, so ist man auf Modellrechnungen angewiesen. Bisherige PKA-Berechnungen (z.B. [3,13-15,52]) erfolgten u.a. unter Verwendung des Verdampfungsmodells, das aber für leichte Kerne, wie ${}^9\text{Be}$, nicht angewendet werden kann.

1.3.2 Reaktionskinematik

Ein einfallendes Neutron der Energie E tritt in Wechselwirkung mit den Atomen des Targets. Dabei können verschiedene Reaktionskanäle belegt werden, die je verschiedene Endzustände hervorbringen. Interessant für unsere Berechnungen ist die Energie der Sekundärteilchen, wobei wir alle schweren Teilchen als PKA identifizieren können. Für ${}^9\text{Be}$ sind dies alle Teilchen ab der Masse 4 u (d.h. α -Teilchen und schwerere Teilchen). Im Prinzip können alle Sekundärteilchen zur Schädigung beitragen. Doch zum einen erwartet man nur vernachlässigbar wenige leichte Teilchen (s. 1.3.3.4 „Tritiumproduktion: (n,t)“), und zum anderen erfahren sie größere inelastische Energieverluste, die nicht zur Schädigung beitragen (s. 2.3.3 „Schädigungsenergie“).

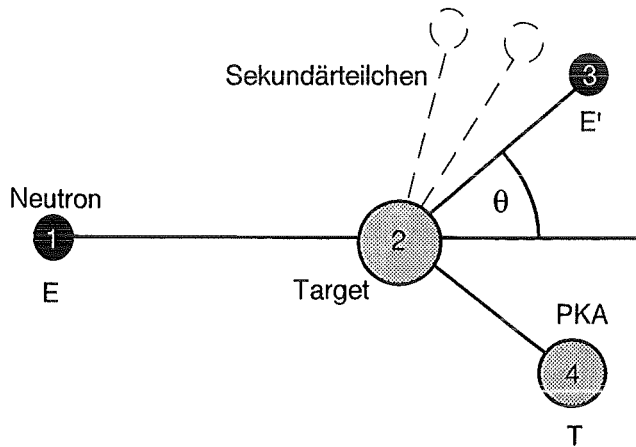


Abbildung 1-2: Veranschaulichung der Reaktionskinematik für neutroneninduzierte Kernreaktionen

Gesucht ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Neutron der Energie E ein PKA einer bestimmten Sorte mit der Energie T produziert:

$$K_i(E, T) = \frac{1}{\sigma_i(E)} \frac{d\sigma_i(E)}{d\mu} \frac{d\mu}{dT}; \quad \mu = \cos\theta$$

$\frac{d\sigma_i(E)}{d\mu}$ Winkelverteilung des Wirkungsquerschnitts für Reaktion i

$\frac{d\mu}{dT}$ differentielle Änderung des Streuwinkels mit der Rückstoßenergie

Für einfache Zwei-Teilchen-Reaktionen besteht ein eindeutiger Zusammenhang zwischen Neutronenenergie E , Rückstoßenergie T und Streuwinkel θ . Die entsprechende nichtrelativistische Formel ergibt sich aus Anwendung der Impuls- und Energieerhaltung (Winkel im Schwerpunktssystem) [3,12]:

$$T(E, E_x, \theta) = \hat{m}_3 E_x + \hat{m}_1 \hat{m}_4 E - 2(E E_x \hat{m}_1 \hat{m}_3 \hat{m}_4)^{1/2} \cos\theta \quad (2)$$

$E_x = \hat{m}_2 E + Q$ totale kinetische Energie der Endteilchen

Q Energie - Masse - Konversion

θ Winkel zwischen Teilchen 1 und 3

$\hat{m}_i = \frac{m_i}{m_1 + m_2}$ reduzierte Masse für Teilchen i

Maximale und minimale Rückstoßenergien ergeben sich für $\theta = 180^\circ$ (Rückstreuung) und $\theta = 0^\circ$ (Vorwärtsstreuung). Durch die Einführung des Q -Wertes ist auch eine Behandlung

inelastischer Reaktionen wie (n,t) oder (n, α) möglich. Der Q -Wert einer Reaktion bezeichnet die Energie des einfallenden Neutrons im Schwerpunktsystem, bei der die Reaktion stattfinden kann. Die effektive Schwelle ist dann die Energie im Laborsystem, bei dem der Q -Wert der Reaktion erreicht wird:

$$Q_{\text{eff}} = \frac{m_1 + m_2}{m_2} Q$$

Im Falle der elastischen Streuung hat man $Q=0$ und $\hat{m}_1 = \hat{m}_3$, $\hat{m}_2 = \hat{m}_4$, so daß sich ein sehr einfacher Zusammenhang ergibt:

$$T = 2\hat{m}_1\hat{m}_2E(1 - \cos\theta) = 4\hat{m}_1\hat{m}_2E \sin^2(\theta / 2) \quad (3)$$

Reaktionen, bei denen drei oder mehr Teilchen entstehen, lassen eine solch einfache Berechnung der Sekundärenergie nicht zu. Hier benötigt man Korrelationen zwischen Streuwinkel und Energien aller sekundären Teilchen in Abhängigkeit von der Primärenergie. Entsprechende Wirkungsquerschnitte mit korrelierten Energie-Winkel-Verteilungen nennt man DDX-Daten (doppelt-differentielle Wirkungsquerschnitte, $\sigma(E, T, \mu)$).

1.3.3 Wirkungsquerschnitte

Wie oben gezeigt (Gleichung (1)), ist es nötig, Wirkungsquerschnitte für die relevanten Reaktionen bereitzustellen. Dabei sind Winkel- bzw. Sekundärenergieverteilungen vonnöten, wenn man die Energieverteilung, d.h. die Spektren, der PKA's berechnen will.

Für die Schädigungsberechnung sind die Reaktionen heranzuziehen, die nicht vernachlässigbare Anteile zur Schädigung beisteuern. Neben der Größe des Wirkungsquerschnittes spielt dabei auch die Verteilung der Energieüberträge an die PKA's und das zu erwartende einfallende Neutronenspektrum eine wichtige Rolle.

Naturgemäß liefert die elastische Streuung einen großen Beitrag, da sie über einen hohen Wirkungsquerschnitt verfügt und keine Schwelle aufweist. Andere Reaktionen ((n,2n), (n, α), (n,t)) werden aufgrund ihres Schwellverhaltens weniger beitragen. Die (n,p)- und die (n,d)-Reaktion treten für 14 MeV-Neutronen erst gar nicht auf (Schwelle bei 14,2 MeV bzw. 16,3 MeV). Eine Ausnahme stellt in mancher Hinsicht der Strahlungseinfang in ^9Be dar, also die $^9\text{Be}(n,\gamma)^{10}\text{Be}$ -Reaktion. Trotz niedrigem Wirkungsquerschnitt erwartet man gerade für niederenergetische Neutronen (E bis etwa 1 keV) hochenergetische PKA's durch den γ -Rückstoß.

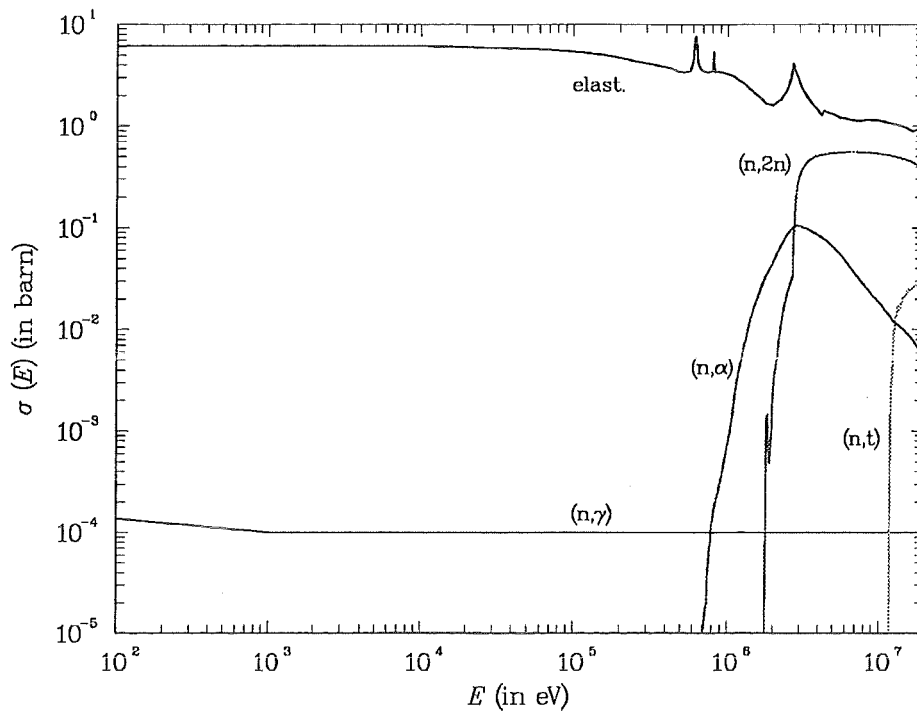


Abbildung 1-3: verwendete Wirkungsquerschnitte in ${}^9\text{Be}$

Die benötigten Wirkungsquerschnittsdaten für die Berechnungen dieser Arbeit stammen aus der Kerndatenbibliothek ENDF/B-VI. Näheres siehe dazu in Kapitel 1.4.2.

Die konsequente Behandlung der neutroneninduzierten Kernreaktionen im Zusammenhang mit der Berechnung von PKA-Spektren erfordert die Untersuchung der durch die Sekundärteilchen (vor allem leichte geladene Teilchen und Photonen) ausgelösten sequentiellen Reaktionen.

Gerade die ${}^9\text{Be}(\alpha,n){}^{12}\text{C}$ -Reaktion als bedeutendste sequentielle Reaktion in ${}^9\text{Be}$ ist in der Lage, aus den leichten PKA's (hier α -Teilchen), die vergleichsweise wenig zur Schädigung beitragen (bei gleicher Energie), schwere PKA's (hier ${}^{12}\text{C}$) zu erzeugen. Aus den vorliegenden Daten [16-19] kann man jedoch entnehmen, daß der Effekt für die Verlagerungsschädigung vernachlässigt werden kann. Demnach beträgt die Neutronenausbeute für α -Energien unter 9 MeV max. 300 pro 10^6 α -Teilchen, wobei noch keine Aussage über die Ausbeute von stabilem ${}^{12}\text{C}$ gegeben ist [16]. Dies rechtfertigt die Vernachlässigung der (α,n) -Reaktion (und damit aller sequentiellen Reaktionen) für die Berechnung von PKA-Spektren für die neutroneninduzierte Schädigung von ${}^9\text{Be}$.

1.3.3.1 elastische Streuung: (n,n)

Die elastische Streuung ist die im relevanten Energiebereich bis ca. 15 MeV dominierende Kernreaktionen für Neutronen in ^9Be . Elastische Streuung tritt bei jeder Energie, insbesondere bei niedrigeren Energien auf. Die PKA's sind Eigenionen, der Fall also, der in den bisherigen Schädigungsrechnungen als übliche Voraussetzung eingegangen ist.

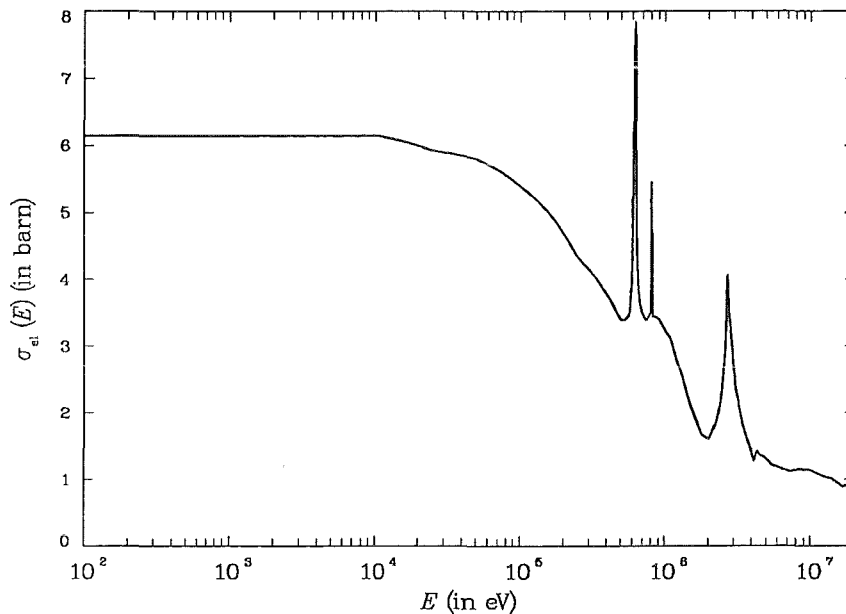


Abbildung 1-4: elastischer Wirkungsquerschnitt für Neutronen in ^9Be

Winkelverteilungen des elastischen Streuquerschnitts liegen üblicherweise als abgebrochene Legendre-Reihenentwicklungen vor [15,20]:

$$\sigma_{\text{el}}(E, \mu) = \frac{1}{2\pi} \sigma_{\text{el}}(E) \sum_l \frac{2l+1}{2} a_l(E) P_l(\mu)$$

$\sigma_{\text{el}}(E)$ integrierter elastischer Wirkungsquerschnitt

$P_l(\mu)$ Legendre - Polynom vom Grad l

$a_l(E)$ Entwicklungskoeffizient

Daraus kann dann sehr einfach die Transfer-Wahrscheinlichkeit bzw. die Energieverteilung der PKA's bestimmt werden (s. auch [3]):

$$K_{el}(E, T) = \frac{1}{\sigma_{el}(E)} \sigma_{el}(E, \mu) \frac{d\mu}{dT}; \quad \text{mit } \frac{d\mu}{dT} = \frac{1}{2\hat{m}_1\hat{m}_2E}$$

$$\Rightarrow K_{el}(E, T) = \sum_l \frac{2l+1}{4\hat{m}_1\hat{m}_2E} a_l(E) P_l \left(1 - \frac{T}{2\hat{m}_1\hat{m}_2E} \right)$$

$$\sigma_{PKA,el}(E, T) = \sigma_{el}(E) \sum_l \frac{2l+1}{4\hat{m}_1\hat{m}_2E} a_l(E) P_l \left(1 - \frac{T}{2\hat{m}_1\hat{m}_2E} \right)$$

Im Falle der ⁹Be-Daten aus ENDF/B-VI liegen die Winkelverteilungen in direkten Winkelkoordinaten vor. Der Processing Code NJOY berechnet jedoch daraus wieder Legendre-Komponenten.

Wegen $\hat{m}_1 = 0,1; \hat{m}_2 = 0,9$ erhält man für 14 MeV-Neutronen ⁹Be-PKA's mit Energien bis $T_{max}(E = 14 \text{ MeV}) = 4\hat{m}_1\hat{m}_2E = 0,36E = 5,04 \text{ MeV}$.

1.3.3.2 Neutronenvervielfachung: (n,2n)

Gerade die niedrige (n,2n)-Reaktionsschwelle bei 1,57 MeV (effektive Schwelle bei 1,75 MeV) ist mit dafür verantwortlich, daß ⁹Be als effektiver Neutronenmultiplier verwendet werden kann. Tatsächlich zeigt es sich, daß der (n,2n)-Querschnitt alle anderen Schwellenreaktionen übertrifft.

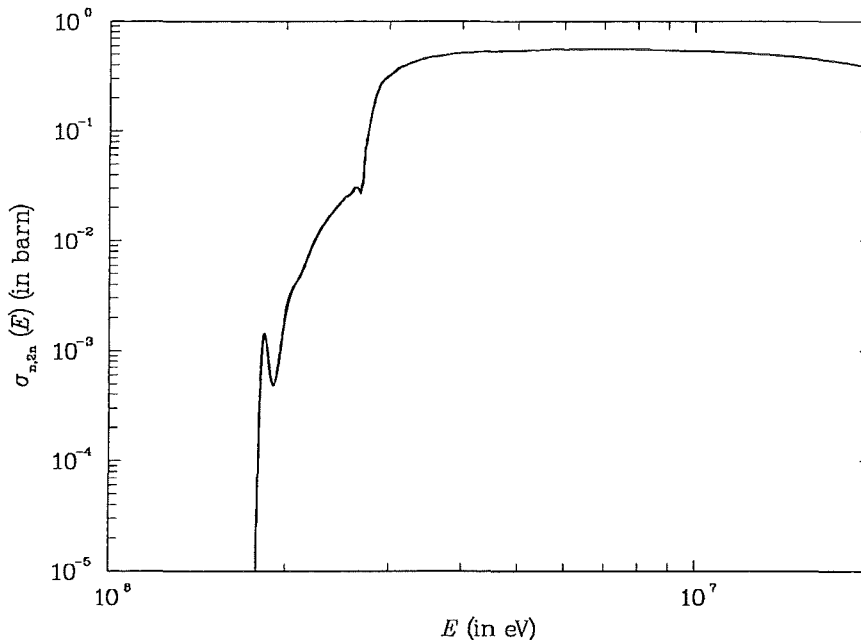


Abbildung 1-5: (n,2n)-Wirkungsquerschnitt in ⁹Be

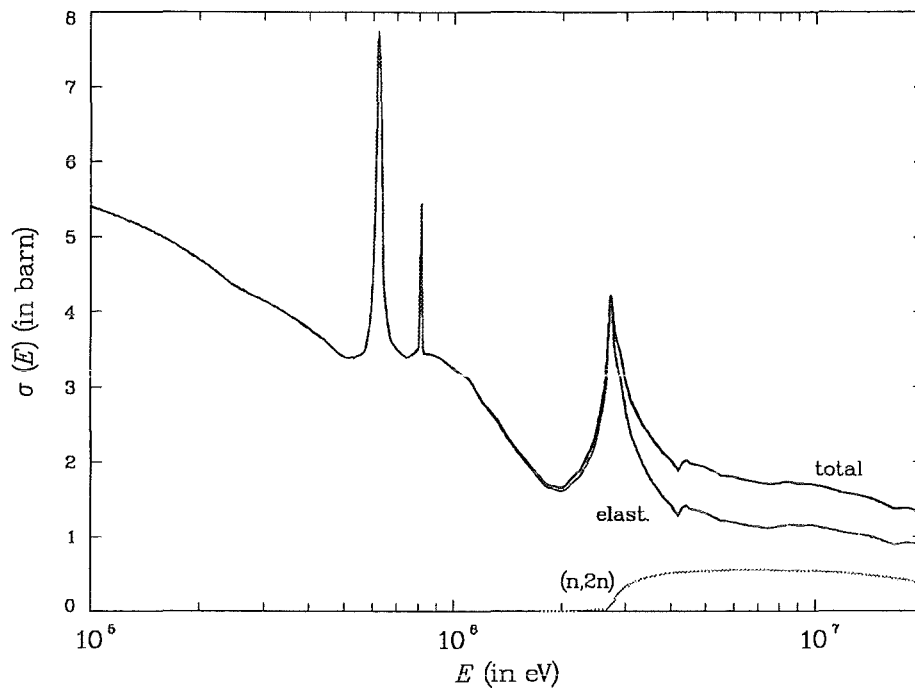
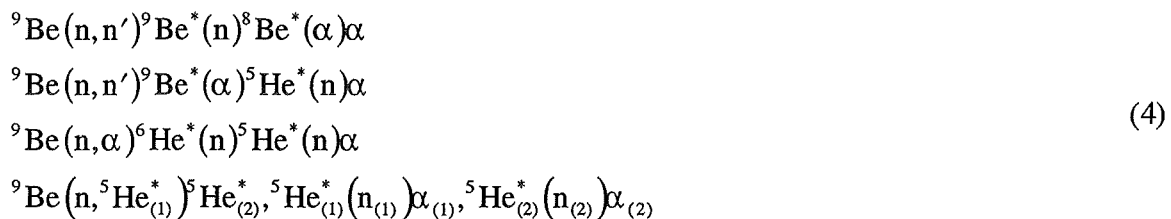


Abbildung 1-6: Vergleich von totalem, elastischem und (n,2n)-Wirkungsquerschnitt in ${}^9\text{Be}$

Problematisch ist dabei, daß in den verschiedenen Reaktionskanälen [21]



jeweils 2 α -Teilchen als PKA's auftauchen, die sich deutlich von den Gitteratomen unterscheiden. In bisherigen Schädigungsrechnungen wurde dem nur ungenügend Beachtung geschenkt.

Die (n,2n)-Reaktion ist keine einfache 2-Körper-Reaktion, was die Berechnung der PKA-Spektren über einfache kinematische Betrachtungen erschwert. Man benötigt deshalb DDX-Daten für die α -Teilchen, die erstmals in der aktuellen ENDF/B-VI-Version vorliegen. Ausgehend von experimentellen DDX-Daten, sowie vorliegenden Kerndaten über Anregungsniveaus (und deren Breiten) in den Zwischenkernen ${}^9\text{Be}$, ${}^8\text{Be}$, ${}^6\text{He}$ und ${}^5\text{He}$ haben Perkins et al. [21] eine Monte-Carlo-Auswertung obiger Reaktionskanäle durchgeführt. Dabei können alle Kanäle in guter Näherung als zeitlich folgende Zwei-Körper- und Zerfallsreaktionen betrachtet werden.

Mit den Daten dieser Neuauswertung erhält man für 14 MeV-Neutronen α -PKA's bis zu 11,2 MeV.

1.3.3.3 Heliumproduktion: (n, α)

Die (n, α)-Reaktion besitzt eine niedrige Schwelle von 0,60 MeV (effektiv 0,67 MeV) und ist nach den beiden oben aufgeführten Reaktionen die nächstwichtigste.

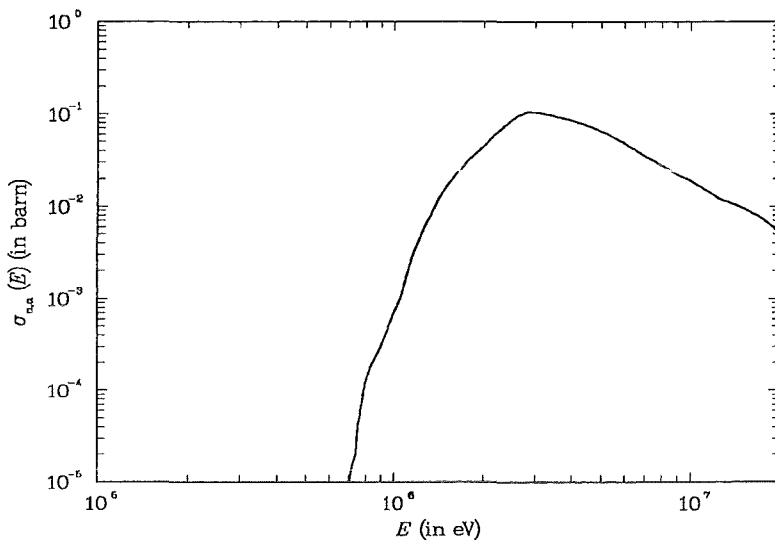
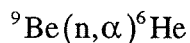


Abbildung 1-7: (n, α)-Wirkungsquerschnitt in ${}^9\text{Be}$

Eine Besonderheit für die Berechnung der Strahlenschädigung in ${}^9\text{Be}$ ist, daß beide Endteilchen als PKA's gezählt werden müssen:



${}^6\text{He}$ ist ein β -Strahler (${}^6\text{He} \rightarrow {}^6\text{Li} + e^- + \bar{\nu}_e$) mit einer Halbwertszeit von $\tau = 8,07 \cdot 10^{-3} \text{ s}$ [22]. Da die Kollisionsphase der Verlagerungskaskade, wie in 2.4.2 näher erläutert wird, bei ca. 10^{-13} s liegt [23], muß man den zusätzlichen Rückstoß durch das β -Teilchen nicht berücksichtigen, da während der Kollisionsphase ${}^6\text{He}$ als stabil angesehen werden kann.

In obiger Reaktion läuft die Reaktion über den Grundzustand des ${}^6\text{He}$ -Kernes. Höhere Anregungszustände in ${}^6\text{He}$ zerfallen in ein α -Teilchen und zwei Neutronen, so daß die entsprechende Reaktion ein Kanal der (n,2n)-Reaktion ist (s. Gleichung (4)).

Aus Gleichung (2) kann man die maximalen Energien für α und ${}^6\text{He}$ bestimmen bei einer Neutronenenergie von 14 MeV:

$$\alpha: \quad T_{\max} = 11,8 \text{ MeV}$$

$${}^6\text{He}: \quad T_{\max} = 9,6 \text{ MeV}$$

1.3.3.4 Tritiumproduktion: (n,t)

Die Tritiumproduktion spielt in ${}^9\text{Be}$ eine untergeordnete Rolle, denn die Schwelle liegt mit effektiv 11,6 MeV so hoch, daß nur ein kleiner Anteil der Fusionsneutronen in der Lage ist, eine (n,t)-Reaktion einzugehen. Andererseits ist diese Reaktion im Bereich des Fusionspeaks, nach elastischer und (n,2n)-Reaktion, die dritt wichtigste.

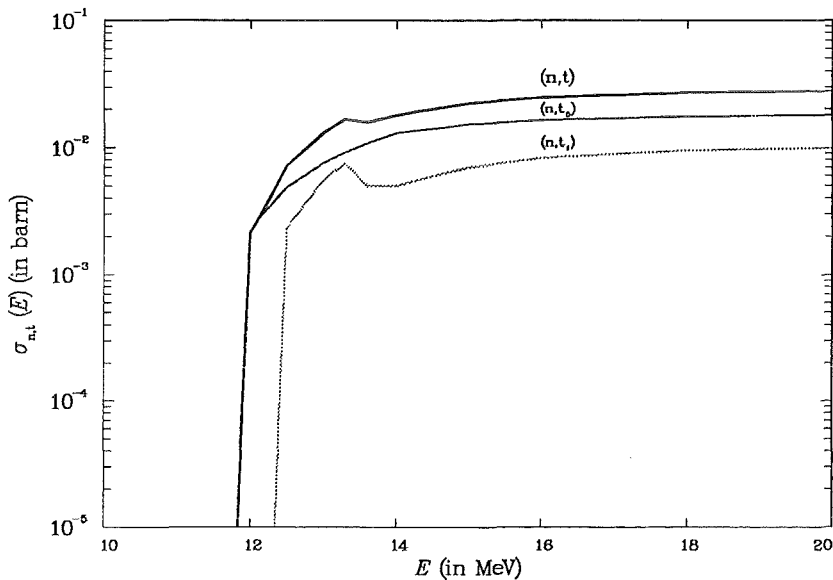


Abbildung 1-8: (n,t)-Wirkungsquerschnitt in ${}^9\text{Be}$; mit einzelnen Beiträgen

In den ENDF/B-VI-Daten liegen zwei Anteile an der Reaktion vor. Zum einen die (n,t₀)-Reaktion mit dem Restkern ${}^7\text{Li}$ im Grundzustand und die (n,t₁)-Reaktion mit ${}^7\text{Li}$ im ersten angeregten Zustand. Im zweiten Kanal erwartet man noch ein Photon von 0,477 MeV, das aber in die PKA-Berechnung nicht integriert wird. Das liegt daran, daß erstens der zusätzliche Rückstoß sehr klein ist (ca. 12 eV, vgl. Gleichung (8)) ist und zweitens der Anteil der (n,t₁)-Reaktion an der Gesamtschädigung schon sehr gering ist.

Beide Tritonen werden als isotrop emittiert in ihrem Schwerpunktssystem betrachtet. Für 14 MeV-Neutronen erhält man gemäß Gleichung (2) als maximale Rückstoßenergie des ${}^7\text{Li}$ -Kernes $T_{\text{max}}(E = 14 \text{ MeV}) = 3,22 \text{ MeV}$.

1.3.3.5 Strahlungseinfang: (n,γ)

Nach Einfang des Neutrons in das Gitteratom kann der vergrößerte Kern, sofern er, wie im Falle des ${}^{10}\text{Be}$, lange genug stabil ist ($\tau = 1,62 \cdot 10^6 \text{ a}$, [22]), seine Anregung durch Strahlung abbauen. Der Strahlungseinfang ist exotherm, tritt also schon bei thermischen Energien auf.

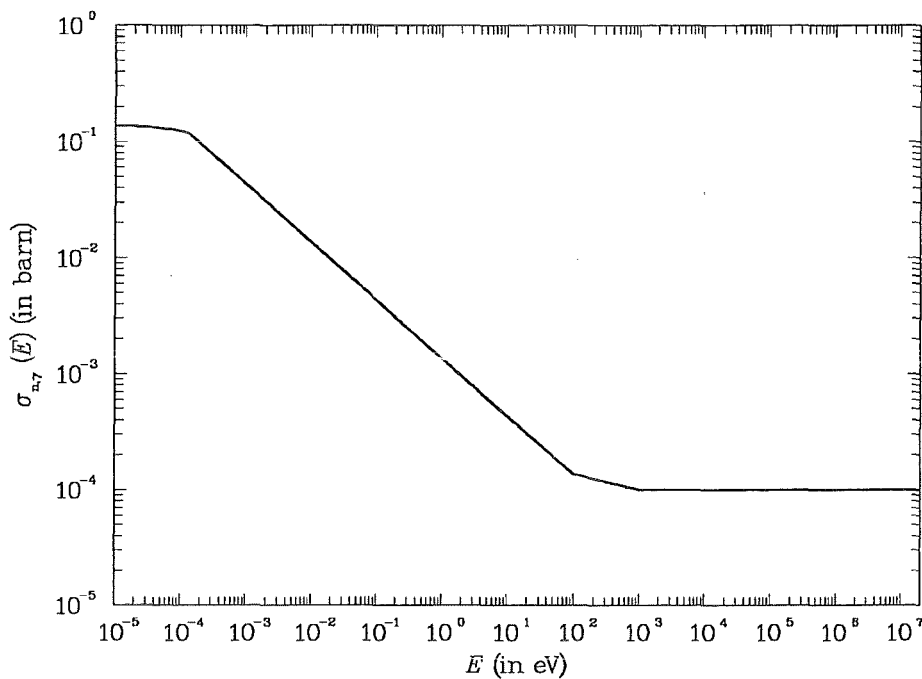


Abbildung 1-9: (n,γ) -Wirkungsquerschnitt in ${}^9\text{Be}$

Für ${}^{10}\text{Be}$ liegen in ENDF/B-VI Daten für Photonen aus den Niveaus bei 0,8535 MeV, 2,59 MeV, 3,368 MeV, 3,444 MeV, 5,958 MeV und 6,81 MeV vor [5]. Dabei wird angenommen, daß das Photonenspektrum für alle Neutronen-Einfallsenergien gleich ist. Da zweifellos Photonen aus noch höheren Niveaus auftauchen werden, muß, um die Energieerhaltung zu gewährleisten, die Multiplizität, d.h. Ausbeute, der Photonen gemäß

$$Y(E) = Y(0) \frac{E|_{c.m.} + |Q|}{|Q|} \quad (5)$$

$Y(0)$ Multiplizität bei thermischen Energien
 $E|_{c.m.}$ Energie des Neutrons im center of mass System (Schwerpunktssystem)
 Q Q -Wert der (n,γ) -Reaktion ($Q = -6,82$ MeV)

angesetzt werden [5].

Die Photonenemission wird isotrop behandelt. Daten über Winkelkorrelationen oder Zerfallsketten liegen nicht vor, so daß keine PKA-Energieverteilungen für eine bestimmte Neutronenenergie berechnet werden können. Einzig eine Aussage über die jeweils mittlere PKA-Energie ist möglich (s. 1.5.2 „PKA's aus (n,γ) “).

1.3.4 Neutronenspektren aus (d,t)-Fusion

Zur Berechnung der Verlagerungen pro Atom dpa gemäß Gleichung (1) wird die energieabhängige Flußdichte der primären Neutronen $\Phi(E)$ benötigt. Mit dieser Verteilung kann man auch die PKA-Spektren über das Neutronenspektrum mitteln und erhält somit in anschaulicher Weise Aussagen über die Abhängigkeit der resultierenden PKA-Verteilung von der primären Neutronenverteilung.

Die gemittelten PKA-Spektren hängen dann nur noch von der Sekundärenergie ab; man erhält also die Energieverteilung der PKA's bezogen auf ein spezifisches Neutronenspektrum:

$$\sigma_{PKA}(T) = \frac{\int \sigma_{PKA}(E, T) \Phi(E) dE}{\int \Phi(E) dE} \quad (6)$$

Für die Strahlenschädigung von Beryllium im Blanket eines (d,t)-Fusionsreaktors benötigt man die Flußdichteverteilung der Fusionsneutronen im Blanket. Eine entsprechende Transportberechnung wurde von U. Fischer [24] mit dem Monte-Carlo-Transportprogramm MCNP durchgeführt. Die Eingangsdaten beruhen auf dem DEMO/NET-Reaktor mit 2200 MW Fusionsleistung (Spezifikationen in [25]). Als Blanketmodell wurde das von M. Dalle Donne et al. [26] konzipierte keramische Feststoffblanket mit Beryllium als Neutronenmultiplier verwendet.

In dieser Konstellation erhält man folgende Neutronenflußdichte an der ersten Wand:

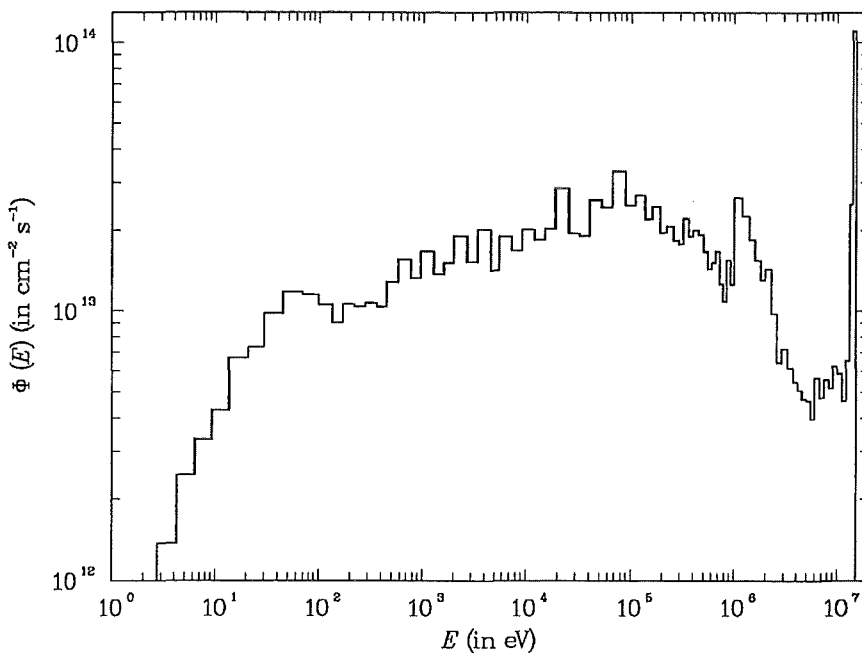


Abbildung 1-10: Neutronenflußdichte an der ersten Wand (Feststoffblanket für DEMO/NET):
Neutronenspektrum 1

Neben den primär auftreffenden 14 MeV-Neutronen im Fusionspeak wird das Spektrum vor allem durch die gestreuten Neutronen mit niedrigeren Energien bestimmt, die ca. 92 % des gesamten Neutronenflusses ausmachen. Dabei beträgt die totale Flußdichte

$$\Phi_{\text{tot},1} = 1,235 \cdot 10^{15} \text{ Neutronen} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}.$$

Die mittlere PKA-Energie liegt bei ca. 2,3 MeV.

Als Vergleichsspektrum, auch für die Berechnung der Schädigungsgrößen, dient die Neutronenflußdichte für ein aktualisiertes Blanketmodell [27], deren mittlere Energie bei 2,2 MeV liegt bei einer totalen Flußdichte von

$$\Phi_{\text{tot},2} = 1,322 \cdot 10^{15} \text{ Neutronen} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}.$$

Dabei unterscheidet sich die Energieverteilung nur sehr unwesentlich von der in Abbildung 1-10 gezeigten.

1.4 Multigruppenrechnung

1.4.1 Gruppenkonstanten

Für die Darstellung und Berechnung von PKA-Spektren $\sigma_{\text{PKA}}(E, T)$ benötigt man i.a. sehr viele Energiepunkte, sowohl für Primär- als auch Sekundärenergien. Mit den heute zu Verfügung stehenden Rechnerleistungen und nicht-deterministischen Verfahren (Monte-Carlo-Verfahren) ist das prinzipiell durchführbar.

Früher jedoch verlangten die begrenzten Kapazitäten eine vereinfachte Behandlung. Deshalb wurde der relevante Energiebereich in eine bestimmte Anzahl von Gruppen eingeteilt und jeder Gruppe ein gemittelter Wert für Wirkungsquerschnitte, Flußdichten usw. zugewiesen. Somit erhält man für kontinuierliche physikalische Größen einen Satz von Gruppenkonstanten. Zur Berechnung der PKA-Spektren in ${}^9\text{Be}$ kommt im Rahmen dieser Arbeit der Processing Code NJOY [6] zum Einsatz, dessen Resultate in der Regel Gruppenkonstanten sind.

Die formale Ableitung der Gruppenkonstanten erfolgt an der Gleichung für den Neutronentransport, der Boltzmann-Gleichung für die Neutronenflußdichte (s. dazu [28]). Nach Integration dieser Gleichung über eine Energiegruppe g erhält man folgende Gruppenkonstanten, die in ihrer allgemeinen Form orts- (und zeit-)abhängig sind [29]:

$$\begin{aligned}
 \Phi_g(x) &= \int_g \Phi(x, E) dE && \text{Gruppenflu\ss e} \\
 \sigma_{r,g}(x) &= \frac{\int_g \sigma_r(x, E) \Phi(x, E) dE}{\Phi_g(x)} && \text{Gruppenwirkungsquerschnitte} \\
 \sigma_{x,g' \rightarrow g}(x) &= \frac{\int_g dE \int_{g'} dE' \sigma_x(x, E' \rightarrow E) \Phi(x, E)}{\Phi_g(x)} && \text{Gruppen - Gruppen - Matrix}
 \end{aligned} \tag{7}$$

mit

$$\begin{aligned}
 \sigma_r(x, E) & \quad \text{Reaktionsquerschnitt, orts- und energieabh\angig} \\
 \sigma_x(x, E' \rightarrow E) & \quad \text{\u00dcbergangsquerschnitt von Energie } E' \text{ nach } E \\
 & \quad \text{(Neutron } \rightarrow \text{ beliebiges Sekund\arteilchen)}
 \end{aligned}$$

Die Gruppenwirkungsquerschnitte und - Matrizen, wozu auch die PKA-Spektren z\ahlen, sind also gewichtete Mittelwerte der entsprechenden kontinuierlichen Gr\o\ss en innerhalb einer Energiegruppe. Die Wichtung erfolgt durch das Wichtungsspektrum Φ , das im Grunde die gesuchte Neutronenflu\ss dichte ist.

Die berechneten Gruppenkonstanten h\ang en von der verwendeten Gruppenstruktur (Breite und Anzahl der Gruppen) und der Form von Φ innerhalb der jeweiligen Gruppe ab. Ist die Gruppenbreite sehr gro\ss, dann kann eine \u00c4nderung des Wichtungsspektrums innerhalb dieser Gruppe deutliche Abweichungen der Gruppenkonstanten hervorrufen. Je feiner die verwendete Gruppenstruktur, umso weniger entscheidend ist das verwendete Wichtungsspektrum. In diesem Fall kann ein f\u00fcr die entsprechende Anwendung repr\asentatives Spektrum gew\ahlt werden.

F\u00fcr Fusionsanwendungen eignet sich eines der in NJOY zur Verf\u00fcgung stehenden Spektren. Es wurde f\u00fcr Berechnungen in schnellen Reaktoren und Fusionsblankets konzipiert und besteht aus dem Fusionspeak, einem Spalt- und anschlie\ss endem $1/E$ -Abbremspektrum, sowie einem thermischen Maxwellspektrum.

Als Gruppenstruktur wird eine spezielle 100-Gruppen-Struktur aus dem Sch\adigungscode SPECTER [4] verwendet, so da\ss in einfacher Weise Berechnungen aus dieser Arbeit mit denen aus SPECTER verglichen werden k\o nnen.

Tabelle 1-2: Gruppenstruktur (SPECTER) mit unterer Gruppengrenze in eV

Nr.	Energie	Nr.	Energie	Nr.	Energie	Nr.	Energie
1	1,000x10 ⁻⁴	26	1,700x10 ²	51	8,800x10 ⁴	76	2,000x10 ⁶
2	1,000x10 ⁻³	27	2,200x10 ²	52	1,100x10 ⁵	77	2,300x10 ⁶
3	1,000x10 ⁻²	28	2,800x10 ²	53	1,350x10 ⁵	78	2,600x10 ⁶
4	2,300x10 ⁻²	29	3,600x10 ²	54	1,600x10 ⁵	79	2,900x10 ⁶
5	5,000x10 ⁻²	30	4,500x10 ²	55	1,900x10 ⁵	80	3,300x10 ⁶
6	7,600x10 ⁻²	31	5,750x10 ²	56	2,200x10 ⁵	81	3,700x10 ⁶
7	1,150x10 ⁻¹	32	7,600x10 ²	57	2,550x10 ⁵	82	4,100x10 ⁶
8	1,700x10 ⁻¹	33	9,600x10 ²	58	2,900x10 ⁵	83	4,500x10 ⁶
9	2,550x10 ⁻¹	34	1,275x10 ³	59	3,200x10 ⁵	84	5,000x10 ⁶
10	3,800x10 ⁻¹	35	1,600x10 ³	60	3,600x10 ⁵	85	5,500x10 ⁶
11	5,500x10 ⁻¹	36	2,000x10 ³	61	4,000x10 ⁵	86	6,000x10 ⁶
12	8,400x10 ⁻¹	37	2,700x10 ³	62	4,500x10 ⁵	87	6,700x10 ⁶
13	1,275x10 ⁰	38	3,400x10 ³	63	5,000x10 ⁵	88	7,400x10 ⁶
14	1,900x10 ⁰	39	4,500x10 ³	64	5,500x10 ⁵	89	8,200x10 ⁶
15	2,800x10 ⁰	40	5,500x10 ³	65	6,000x10 ⁵	90	9,000x10 ⁶
16	4,250x10 ⁰	41	7,200x10 ³	66	6,600x10 ⁵	91	1,000x10 ⁷
17	6,300x10 ⁰	42	9,200x10 ³	67	7,200x10 ⁵	92	1,100x10 ⁷
18	9,200x10 ⁰	43	1,200x10 ⁴	68	7,800x10 ⁵	93	1,200x10 ⁷
19	1,350x10 ¹	44	1,500x10 ⁴	69	8,400x10 ⁵	94	1,300x10 ⁷
20	2,100x10 ¹	45	1,900x10 ⁴	70	9,200x10 ⁵	95	1,400x10 ⁷
21	3,000x10 ¹	46	2,550x10 ⁴	71	1,000x10 ⁶	96	1,500x10 ⁷
22	4,500x10 ¹	47	3,220x10 ⁴	72	1,200x10 ⁶	97	1,600x10 ⁷
23	6,900x10 ¹	48	4,000x10 ⁴	73	1,400x10 ⁶	98	1,700x10 ⁷
24	1,000x10 ²	49	5,250x10 ⁴	74	1,600x10 ⁶	99	1,800x10 ⁷
25	1,350x10 ²	50	6,600x10 ⁴	75	1,800x10 ⁶	100	1,900x10 ⁷

Bei der verwendeten Gruppenstruktur und den recht glatten Wirkungsquerschnitten für ⁹Be spielt das Wichtungsspektrum praktisch keine Rolle. Änderungen der Gruppenkonstanten durch andere Spektren liegen hier im allgemeinen weit unter 1%.

1.4.2 Daten: ENDF/B-VI

Die ENDF-Kerndatenbibliothek (Evaluated Nuclear Data File) ist eine Sammlung von "ausgewerteten Daten" (evaluated data sets), wobei experimentelle Daten und theoretische Modellrechnungen kombiniert und in geeigneter Weise parametrisiert und tabelliert werden. Die Bibliothek wurde für Anwendungen und Aufgaben in der Kerntechnik zusammengestellt. Neuerdings ist sie auch für Fusionsanwendungen erweitert worden (Daten bis 20 MeV, DDX-Daten). Sie liegt in der aktuellen Version VI [5] vor. Die Formatbeschreibung (ENDF-6, [20]) beinhaltet sowohl Angaben über die Anordnung der Daten in den Libraries, als auch die Formeln zur Rekonstruktion bzw. Anwendung der tabellierten Daten.

Es existieren ein A- und eine B-Library, wobei A z.T. unvollständige, nicht getestete Daten enthält. Die B-Library ist die Referenz-Datenbibliothek und wird zu Auswertungen empfohlen, da die integrierten Daten vollständig und getestet sind.

Die ENDF-Bibliothek wird in folgender, etwas vereinfacht dargestellter Struktur organisiert:

$$\text{NSUB} \left\{ \begin{array}{l} \text{MAT}_1 \\ \text{MAT}_2 \\ \vdots \\ \text{Material} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} \text{MF}_1 \\ \text{MF}_2 \\ \vdots \\ \text{File} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} \text{MT}_1 \\ \text{MT}_2 \\ \vdots \\ \text{Section} \end{array} \right\}$$

Abbildung 1-11: Struktur einer Unterbibliothek von ENDF

Dabei werden die Unterbibliotheken NSUB im wesentlichen nach den Projektilen aufgeteilt. Für diese Arbeit wird natürlich nur die Neutronen-Bibliothek (Incident Neutron Data) benötigt und davon nur das Material MAT=425 ($=^9\text{Be}$). Die Files (MF) beinhalten jeweils eine bestimmte Klasse von Informationen, z.B MF=3 sind energieabhängige Wirkungsquerschnitte, MF=4 Winkelverteilungen, MF=6 DDX-Daten, MF=12 Multiplizitäten von Photonen. Sie selbst sind wiederum in Sections (MT) unterteilt, die hauptsächlich die einzelnen Kernreaktionen beschreiben. Jede Reaktion erhält so ihre eindeutige MT-Nummer, z.B. 2 elastische Streuung, 16 (n,2n), usw.

Die ENDF/B-VI-Auswertung für ^9Be wurde von Perkins, Plechaty und Howerton [30] am LLNL (Lawrence Livermore National Laboratory, California) durchgeführt. Folgende Daten liegen vor (Auswahl):

Tabelle 1-3: Inhalt der ENDF/B-VI-Auswertung für ${}^9\text{Be}$

MF	MT	Beschreibung
1	451	generelle Informationen zur Auswertung, Inhaltsverzeichnis
2	151	Resonanzparameter; hier nur der effektive Streuradius
3	1	totaler Wirkungsquerschnitt
3	2	elastischer Wirkungsquerschnitt
3	16	(n,2n)
3	102	(n, γ)
3	103	(n,p)
3	104	(n,d)
3	105	(n,t)
3	107	(n, α)
3	700	(n, t_0)
3	701	(n, t_1)
4	2	Winkelverteilung für elastische Streuung
6	16	(n,2n)-DDX
6	700	(n, t_0)-DDX
6	701	(n, t_1)-DDX
6	800	(n, α)-DDX
12	102	Photon-Multiplizitäten
14	102	Photon-Winkelverteilungen
15	102	kontinuierliche Photon-Spektren

Die Rekonstruktion der doppelt-differentiellen Wirkungsquerschnitte (DDX) aus den Files 4 und 6 erfolgt nach folgenden Formeln:

$$\sigma(\mu, E, E') = \sigma(E)Y(E)f(\mu, E, E') / 2\pi$$

$\sigma(E)$ energieabhängiger Wirkungsquerschnitt (MF = 3)

$Y(E)$ Multiplizität des emittierten Teilchens (MF = 4,6)

$f(\mu, E, E')$ Verteilungsfunktion in eV^{-1} (MF = 4,6)

mit

E Energie des einfallenden Neutrons

E' Energie des emittierten Teilchens (jeweils im L - System (Labor))

μ Kosinus des Streuwinkels

Handelt es sich um eine einfache Zwei-Körper-Reaktion so gilt:

$$f(\mu, E, E') = f(\mu, E) \delta(E' - \varepsilon_3)$$

$\delta(x)$ Diracsche Deltafunktion

ε_3 Energie des emittierten Teilchens im C.M.-System

und $f(\mu, E)$ entweder in File 4 oder 6

Für komplexe Reaktionen liegt $f(\mu, E, E')$ in File 6 vor.

Die Daten der ENDF-Bibliothek verwenden folgende Einheiten: eV (Energien), barn (Wirkungsquerschnitte), Kelvin (Temperaturen), Neutronenmassen (Massen), Sekunden (Zeit).

1.4.3 Processing Code: NJOY

Aus den Daten der ENDF-Bibliothek sollen PKA-Spektren in Multigruppen berechnet werden. Dazu eignet sich der Processing Code NJOY, der punktweise und gruppenweise Wirkungsquerschnitte und Matrizen aus ENDF/B-Files produziert.

NJOY besteht aus verschiedenen Modulen für unterschiedliche Aufgaben, die über das eigentliche NJOY-Modul gesteuert werden. Für die Berechnung der PKA-Spektren werden im wesentlichen folgende Module benötigt:

- RECONR [31]: Rekonstruktion von Punkt-Wirkungsquerschnitten auf ein einheitliches Energiegitter mit linearer Interpolation
- GROUPE [29]: Berechnung von Multigruppen-Wirkungsquerschnitten und -Matrizen

Die Berechnung verläuft dann in folgender Kette:

$$\text{ENDF / B - VI} \xrightarrow{\text{RECONR}} \text{PENDF} \xrightarrow{\text{GROUPE}} \text{GENDF}$$

RECONR verarbeitet die ENDF/B-VI-Daten in ein PENDF (pointwise ENDF). GROUPE berechnet Gruppenkonstanten der Wirkungsquerschnitte und Übergangsmatrizen und schreibt die Ergebnisse in ein GENDF (groupwise ENDF).

In der verwendeten Version von NJOY trat ein Fehler beim Bearbeiten der (n, t_1) -Reaktion auf, der die Berechnung der PKA-Spektren verhinderte. Durch eine Modifizierung des ENDF-Tapes dahingehend, daß die Information über das anschließende Photon gelöscht wurde, konnten die Spektren doch noch berechnet werden.

1.5 PKA-Spektren in ⁹Be

1.5.1 NJOY-Berechnungen

Mit NJOY wurden aus den ENDF/B-VI-Daten für ⁹Be zum einen Gruppenwirkungsquerschnitte und zum anderen Teilchenspektren in der speziellen 100-Gruppenstruktur aus SPECTER berechnet.

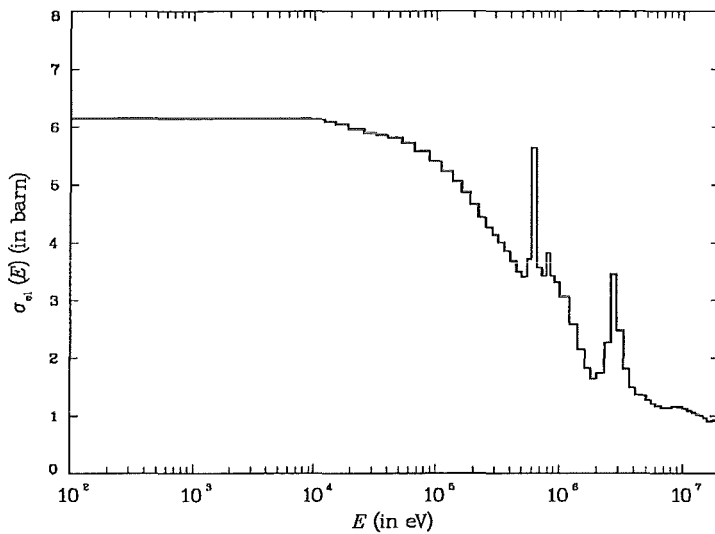


Abbildung 1-12: elastischer Wirkungsquerschnitt für Neutronen in ⁹Be in Gruppenform

In folgender Abbildung erkennt man gut den Effekt der Gruppenberechnung auf Resonanzen im Wirkungsquerschnittsverlauf:

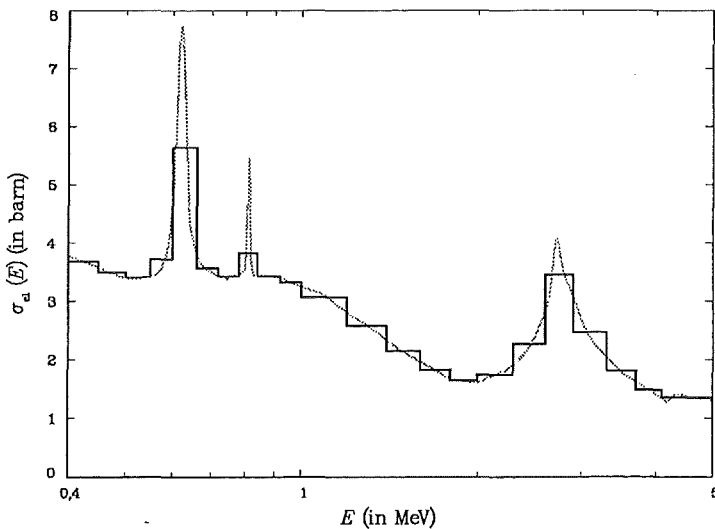


Abbildung 1-13: elastischer Wirkungsquerschnitt für Neutronen in ⁹Be in Gruppenform im Vergleich zu Punktdaten

Für alle relevanten Reaktionen erhält man dann die in Abbildung 1-14 gezeigten Gruppenwirkungsquerschnitte. Man vergleiche diese mit den Punktdaten in Abbildung 1-3.

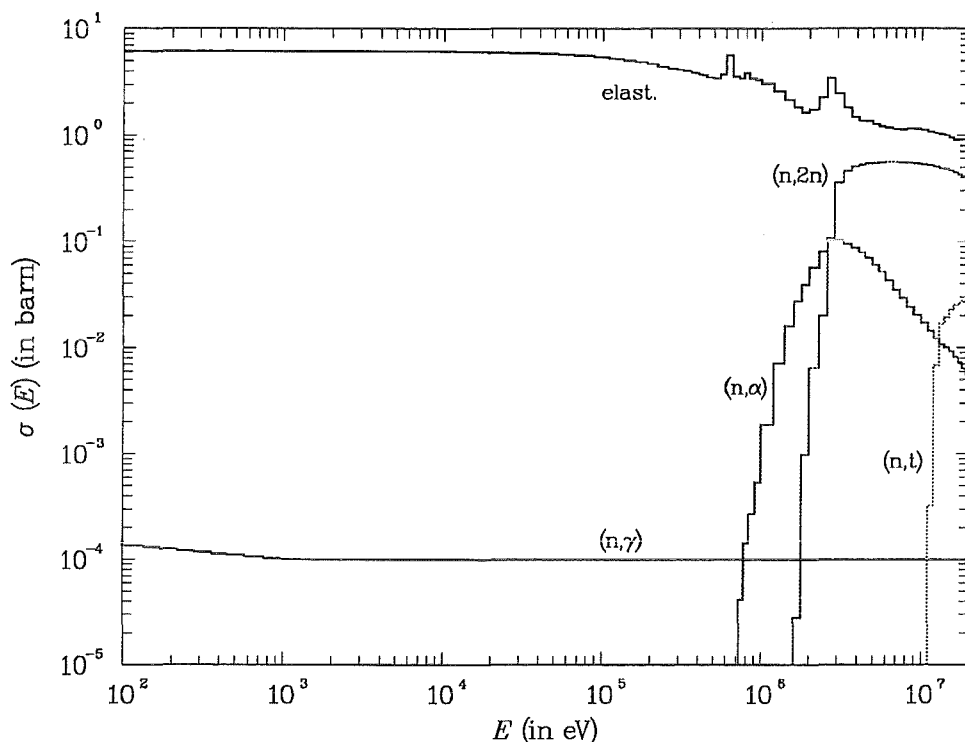


Abbildung 1-14: verwendete Wirkungsquerschnitte für Neutronen in ${}^9\text{Be}$ in Gruppenform

Für alle Reaktionen außer (n,γ) konnten somit die PKA-Spektren bestimmt werden. Für (n,t_1) wurde das zusätzliche Photon ignoriert. Zusammenfassend erhält man folgende PKA's:

- ${}^9\text{Be}$ aus: (n,n)
- ${}^7\text{Li}$ $(n,t_0), (n,t_1)$
- ${}^6\text{He}$ (n,α)
- ${}^4\text{He}$ $(n,2n), (n,\alpha)$

Die Darstellung der Spektren kann sowohl in barn (integrierte Spektren), als auch in barn/eV (differentielle Spektren) erfolgen. Die Summation eines integrierten Spektrums über die Sekundärgruppen ergibt den Gruppenwirkungsquerschnitt der entsprechenden Primärgruppe. Differentielle Spektren müssen dazu erst mit der Gruppenbreite multipliziert werden.

Während barn die Standardausgabe von NJOY ist, ist barn/eV (oder barn/MeV) die gebräuchliche Einheit für Teilchenspektren und wird in dieser Arbeit vorwiegend verwendet (vor allem in Diagrammen).

Aus dem Fusionspeak (d.h. Gruppe 95, 14...15 MeV) erwartet man die in Abbildung 1-15 gezeigten PKA-Spektren. Dabei erhält man folgende mittlere PKA-Energien:

Tabelle 1-4: mittlere PKA-Energie aus Gruppe 95

	⁹ Be	⁴ He			⁶ He	⁷ Li		
		(n,2n)	(n,α)	sum.		(n,t ₀)	(n,t ₁)	sum.
mittl. PKA-Energie in eV	6,6x10 ⁵	2,3x10 ⁶	8,0x10 ⁶	2,3x10 ⁶	5,8x10 ⁶	1,75x10 ⁶	1,6x10 ⁶	1,7x10 ⁶

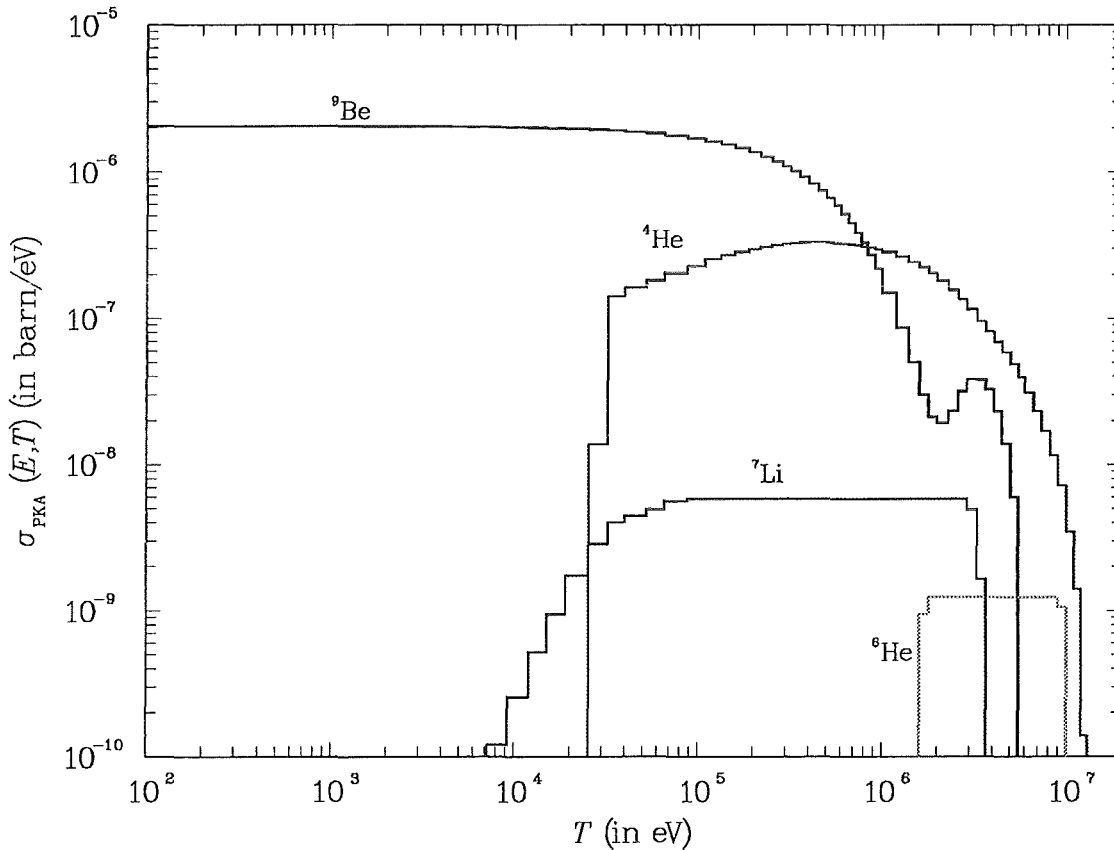


Abbildung 1-15: PKA-Spektren aus Gruppe 95 (14...15 MeV); Beiträge für ⁴He und ⁷Li summiert

Während die PKA's aus der elastischen Streuung mit jeder Energie auftreten (vgl. Gleichung (3)) und damit die mittlere Energie bei nur 0,66 MeV liegt, sind die leichten PKA's zu höheren Energien hin konzentriert. Dies ist durch die Coulomb-Barriere für die Emission geladener Teilchen bedingt, weswegen diese Teilchen mit höheren Energien austreten.

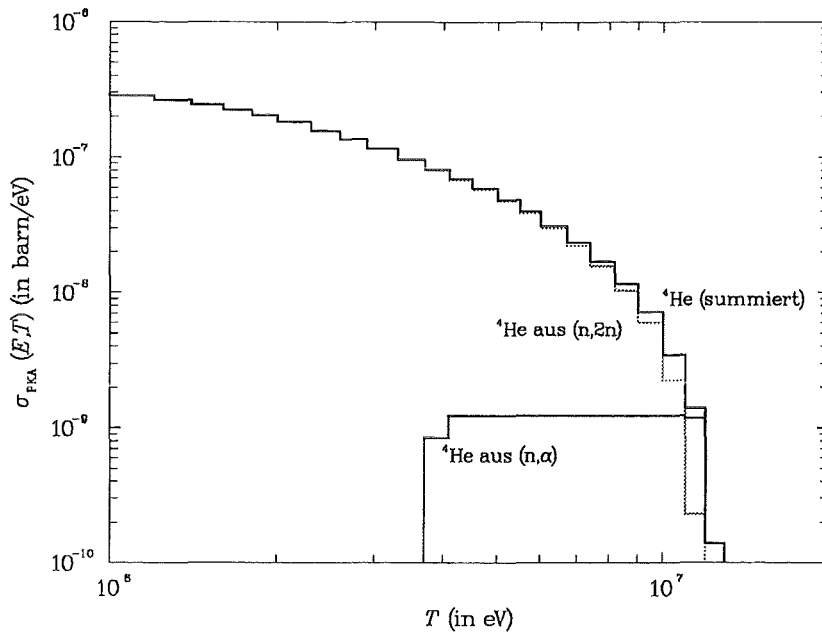


Abbildung 1-16: ^4He -Spektren aus Gruppe 95 (14...15 MeV)

^4He -PKA's stammen aus der (n,2n)- und der (n, α)-Reaktion. Wegen des deutlich höheren Wirkungsquerschnitts der (n,2n)-Reaktion im Bereich des Fusionspeaks (vgl. Abbildung 1-3) wird das Spektrum dieser Ionen vor allem durch diese Reaktion bestimmt. Andererseits setzt sich der Hochenergieanteil verstärkt aus dem (n, α)-Beitrag zusammen (oberhalb 10 MeV zu mindestens 30 %).

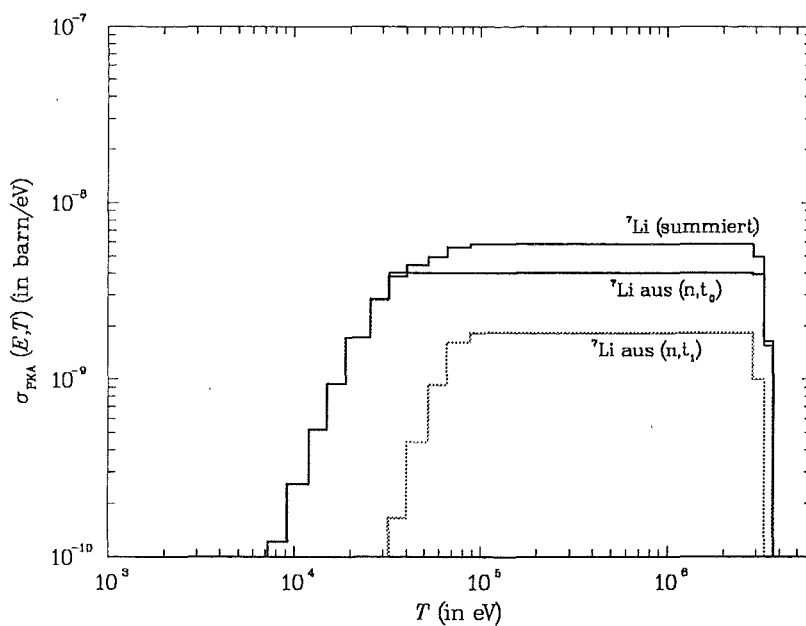


Abbildung 1-17: ^7Li -Spektren aus Gruppe 95 (14...15 MeV)

Für ^7Li hat man über nahezu den gesamten Energiebereich der Ionen einen Anteil von ca. 30 % aus der (n, t_1)-Komponente.

1.5.2 PKA's aus (n, γ)

Für die Berechnung der Energieverteilung der PKA's aus der (n, γ)-Reaktion liegen neben dem Reaktionsquerschnitt nur Multiplizitäten und Verteilungsfunktionen der Photonen in den ENDF/B-VI-Daten vor, jedoch keine Daten über γ - γ -Winkelkorrelationen. Unter der Annahme, daß die intermediären Zustände relativ kurzlebig sind, so daß die Photon-Emissionen unabhängig sind, kann man dann die mittlere Energie der PKA's berechnen [4]:

$$\begin{aligned}\bar{T}(E) &= \frac{1}{2m_n(A+1)}(E_{\gamma_1}^2 + \dots + E_{\gamma_i}^2) + \frac{E}{A+1}; \text{ in eV} \\ &= \frac{536,77}{A+1}(E_{\gamma_1}^2 + \dots + E_{\gamma_i}^2) + \frac{E}{A+1}\end{aligned}\quad (8)$$

m_n Masse des Neutrons (MeV)

A Masse des Kerns in Neutronenmassen (^9Be : $A = 8,93478$)

E_{γ_i} Energie des i -ten Photons (MeV)

E Energie des einfallenden Neutrons (eV)

Der erste Beitrag beschreibt den Rückstoß durch die Photonenemission, der zweite den Beitrag durch den Neutroneneinfang. Dabei sind die relativen Intensitäten der emittierten Photonen noch nicht berücksichtigt. Dies kann folgendermaßen geschehen:

$$\bar{T}(E) = \frac{536,77}{A+1} Y(E) \int_{E_\gamma(\min)}^{E_\gamma(\max)} E_\gamma^2 f(E_\gamma \leftarrow E) dE_\gamma + \frac{E}{A+1} \quad (9)$$

$Y(E)$ Multiplizität der Photonen

$f(E_\gamma \leftarrow E)$ Verteilungsfunktion der Photonen - Energien, $\int_0^{E_\gamma(\max)} f(E_\gamma \leftarrow E) dE_\gamma = 1$

Nach den ENDF-Daten ist das Integral im ersten Term unabhängig von der Neutronenenergie und hat den Wert 22,998. Die Multiplizität soll linear zwischen $Y(10^{-5} \text{ eV}) = 1,60949$ und $Y(2 \cdot 10^7 \text{ eV}) = 5,8487$ angesetzt werden, d.h.

$$Y(E) = 2,1196 \cdot 10^{-7} E \cdot \text{eV}^{-1} + 1,60949$$

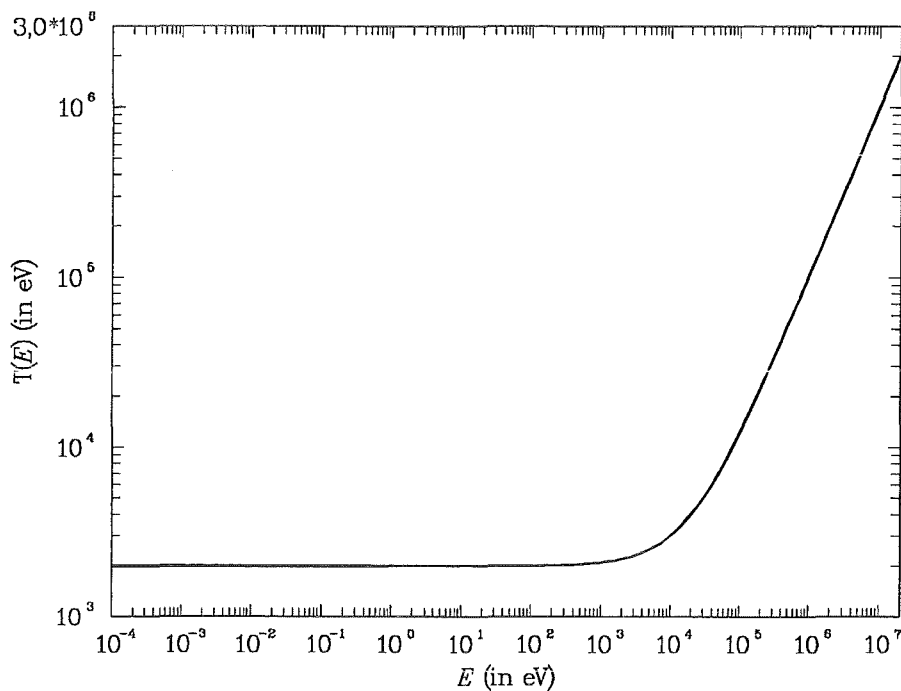


Abbildung 1-18: mittlere Rückstoßenergie für ${}^9\text{Be}(n,\gamma){}^{10}\text{Be}$

Demnach erhält man einen Energieanteil von mindestens

$$\frac{536,77}{A+1} 22,998 \cdot 1,60949 \text{ eV} \approx 2000 \text{ eV}$$

für die PKA's durch den Photonen-Rückstoß. Somit können schon thermische Neutronen über den Strahlungseinfang Schädigung verursachen. Bis in den keV-Bereich hinein ist dieser Anteil der wesentliche Beitrag zur Rückstoßenergie.

Für hohe Energien (ab $O(0,1 \text{ MeV})$) hat man schließlich $\bar{T} \approx 0,1 \cdot E$ (d.h. für 14...15 MeV-Neutronen hat man $\bar{T} = 1,45 \text{ MeV}$, vgl. mit Tabelle 1-4). Wegen des niedrigen Wirkungsquerschnitts von 10^{-4} barn ab 1 keV trägt dann diese Reaktion praktisch nicht mehr zur Schädigung bei.

Aufgrund der Einschränkung, daß man nur mittlere Rückstoßenergien berechnen kann, erhält man keine PKA-Spektren im eigentlichen Sinn. Vereinfachend erhält man die Energie der PKA's für einfallende Neutronen aus der Primärgruppe g_E , indem man für die Gruppengrenzen die mittlere Rückstoßenergie gemäß Gleichung (9) berechnet und den Mittelwert dieser Energien der Sekundärgruppe g_T zuweist:

$$g_E = \{E_{\min}, E_{\max}\}$$

$$\bar{T}(g_E) = \frac{\bar{T}(E_{\min}) + \bar{T}(E_{\max})}{2} \in g_T$$

Dies ist unter Berücksichtigung des sehr geringen Anteils an der Gesamtschädigung vertretbar, zumal die beiden Rückstoßenergien meist in einer einzigen Gruppe liegen. Für Neutronen aus der Primärgruppe 95 (14...15 MeV) erhält man so ^{10}Be -PKA's in der Sekundärgruppe 73 (1,4...1,6 MeV).

1.5.3 Spektrungemittelte PKA-Spektren

Mit den Fusionsspektren aus 1.3.4 kann man nun die berechneten PKA-Spektren über die Primärgruppen mitteln (vgl. mit Gleichung (6)):

$$\sigma_{\text{PKA}}(g') = \frac{\sum \sigma_{\text{PKA}}(g, g') \Phi(g)}{\sum \Phi(g)} \quad (10)$$

mit dem Gruppenfluß $\Phi(g)$ (Neutronenspektrum 1, s. Abbildung 1-10).

Damit erhält man dann folgende PKA-Spektren:

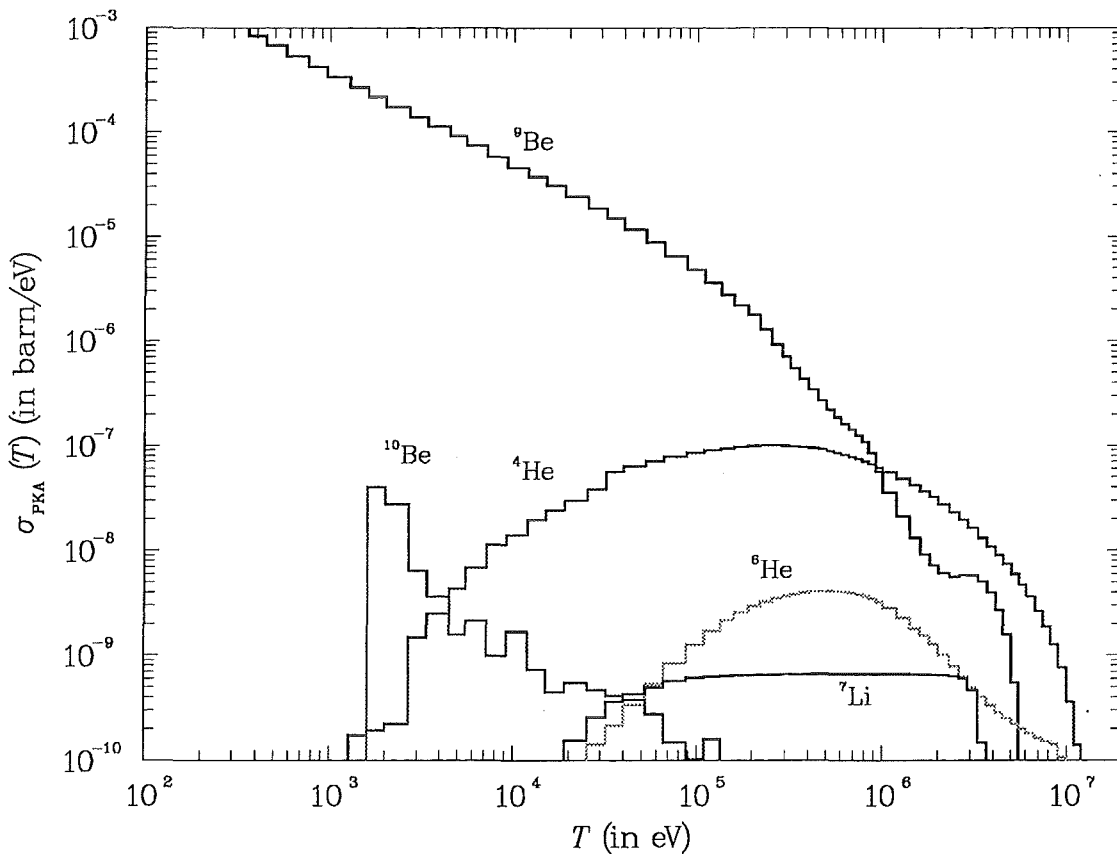


Abbildung 1-19: PKA-Spektren in ^9Be durch das Neutronenspektrum im Feststoffblanket eines (d,t)-Fusionsreaktors

Bedingt durch die kinematischen Grenzen verschwinden mit steigender Energie nacheinander ¹⁰Be (oberhalb Gruppe 73/ d.h. 1,6 MeV), ⁷Li (81/ 4,1 MeV), ⁹Be (84/ 5,5 MeV), ⁶He (91/ 11 MeV) und schließlich ⁴He (93/ 13 MeV).

Damit ergeben sich für die verschiedenen Ionen folgende mittlere PKA-Energien:

Tabelle 1-5: mittlere PKA-Energie aus Neutronenspektrum 1

	⁹ Be	⁴ He			⁶ He	⁷ Li			¹⁰ Be
		(n,2n)	(n,α)	sum.		(n,t ₀)	(n,t ₁)	sum.	
mittl. PKA-Energie in eV	6,16x10 ⁴	1,78x10 ⁶	2,72x10 ⁶	1,82x10 ⁶	1,99x10 ⁶	1,70x10 ⁶	1,55x10 ⁶	1,66x10 ⁶	2,14x10 ⁵

Betrachtet man das Spektrum aller PKA's, so hat dieses eine mittlere Energie von 1,38x10⁵ eV.

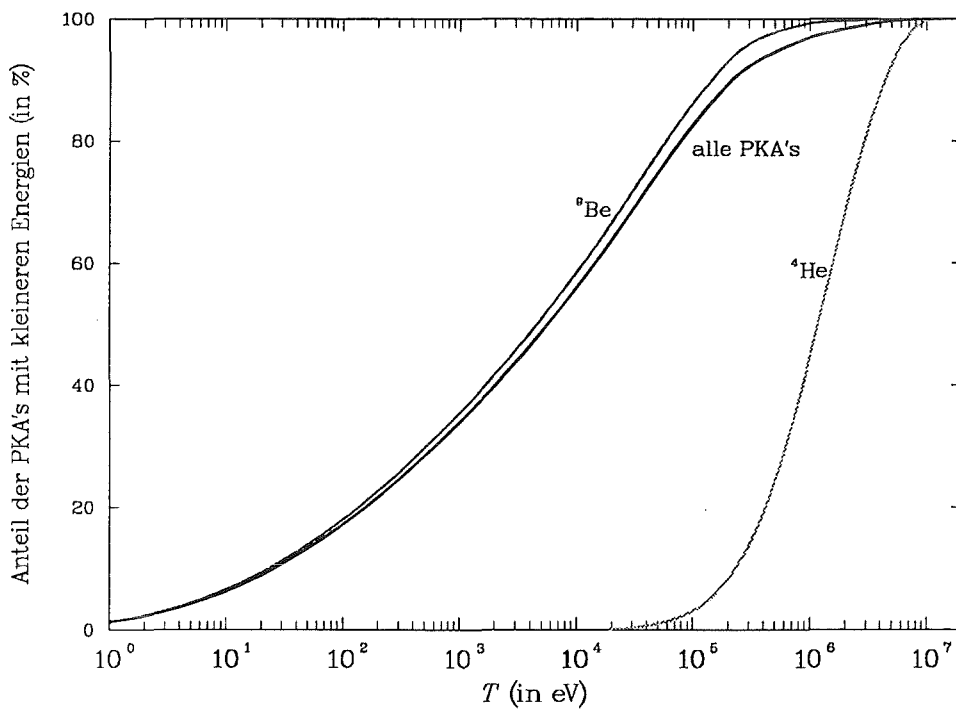


Abbildung 1-20: relativer Anteil von PKA's mit kleineren Energien für ⁹Be-, ⁴He- und Summe aller PKA's

Interessant ist auch die relative Verteilung der PKA-Energien (vgl. Abbildung 1-20). In folgender Tabelle 1-6 sind dabei alle niederenergetischen PKA's unterhalb 1 MeV zusammengefaßt, während die höherenergetischen in verschiedene Energiebereiche aufgegliedert werden. Man beachte dabei, daß die Summe der PKA's mit Energien kleiner 1 MeV bzw. größer 1 MeV 100 % ergibt.

Tabelle 1-6: relativer Anteil der PKA-Energien aus Neutronenspektrum 1

PKA-Energie	(in %) ⁹ Be	⁴ He			⁶ He	⁷ Li			¹⁰ Be	alle PKA's
		(n,2n)	(n,α)	sum.		(n,t ₀)	(n,t ₁)	sum.		
< 1 MeV	99,3	45,2	29,3	44,6	43,7	29,3	31,7	30,0	98,9	96,9
> 1 MeV	0,72	54,8	70,7	55,4	56,3	70,7	68,3	70,0	11,1	3,08
> 2 MeV	0,31	31,4	40,6	31,8	30,2	40,5	34,2	38,7	-	1,67
> 4,1 MeV	0,05	11,0	21,3	11,4	13,9	-	-	-	-	0,84
> 10 MeV	-	0,14	3,67	0,28	0,04	-	-	-	-	0,01

Demnach setzt sich das ⁹Be-Spektrum vor allem aus niederenergetischen Ionen zusammen. 99,3 % aller ⁹Be-PKA's liegen unterhalb 1 MeV. Von den leichten Ionen besitzen vor allem die He-PKA's einen ausgeprägten hochenergetischen Ast. Damit erhöht sich dann der Anteil aller PKA's oberhalb 1 MeV auf über 3 % (gegenüber 0,7 % für die elastischen PKA's).

Wie schon aus den Wirkungsquerschnitten (s. S. 10 ff.) abzusehen war, werden vorrangig elastische PKA's erzeugt. Für immer höhere Energien treten jedoch verstärkt die leichten PKA's auf, und hier in erster Linie die α-Teilchen.

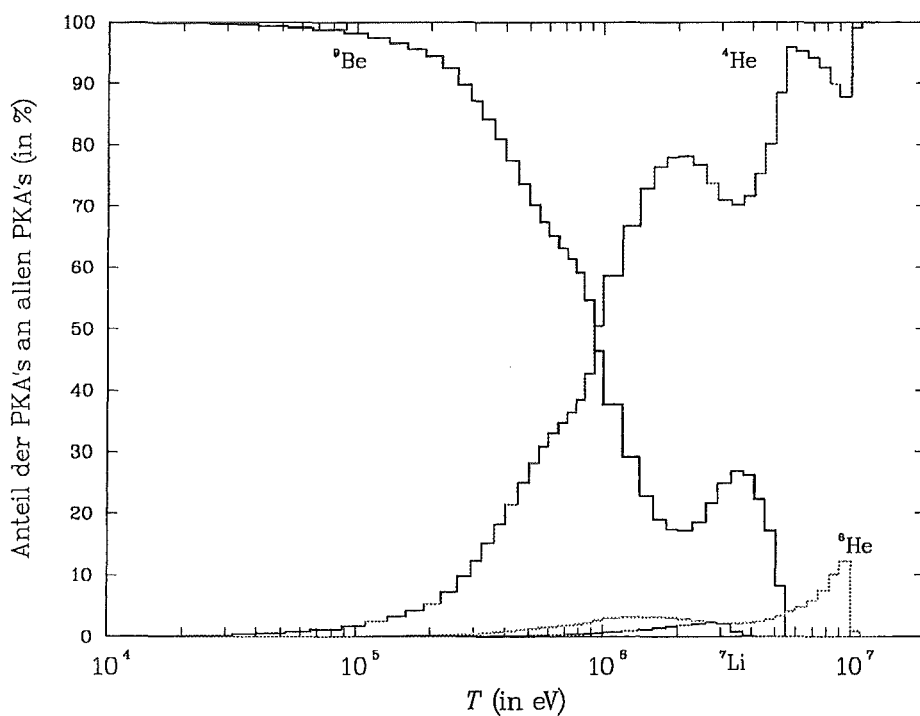


Abbildung 1-21: relative Zusammensetzung der PKA's in ⁹Be

Unterhalb von 1 MeV überwiegen die ⁹Be-PKA's. Etwa bei dieser Energie hat man dann gleiche Anteile von ⁹Be und ⁴He. Mit steigender Energie sinkt der Anteil der ⁹Be-PKA's auf 17 % bis 26 % (1...4,1 MeV). In diesem Energiebereich setzt sich das gesamte PKA-Spektrum zu

ca. 70 % ^4He , 3 % ^6He und 1...2 % ^7Li zusammen. Nach Verschwinden der elastischen PKA's oberhalb von 5,5 MeV hat man einen Anteil von ca. 90 % ^4He und 10 % ^6He .

Zusammenfassend ergibt sich folgendes Bild: Unterhalb von 0,1 MeV erwartet man 84% aller PKA's, die zu 98 % ^9Be -Ionen sind. Bis etwa 1 MeV hat man dann einen wachsenden Anteil von ^4He -PKA's, die schließlich häufiger auftreten als ^9Be . Oberhalb 1 MeV findet man noch 3 % aller PKA's, die sich im wesentlichen aus ^4He , ^9Be und ^6He zusammensetzen.

Wie zu erwarten war, sind ^7Li - und ^{10}Be -PKA's nur in sehr geringem Maße vorhanden. Im Energiebereich von 1 bis 3,3 MeV hat man einen ^7Li -Anteil zwischen 0,5 und 2 % an allen PKA's (bzw. 1 bis 3 % an ^4He -PKA's). Der ^{10}Be -Anteil ist über den gesamten Energiebereich verschwindend. Der größte Anteil liegt im Energiebereich von 1,4 bis 1,6 MeV mit gerade mal 0,08 % aller PKA's (bzw. 0,11 % der ^4He -PKA's).

Das PKA-Spektrum in ^9Be wird also für niedrige Energien (etwa kleiner als 0,1 MeV) durch elastische PKA's bestimmt, für hohe Energien (ab 1 MeV) durch einen immer größeren Anteil der ^4He -PKA's (vgl. Abbildung 1-22).

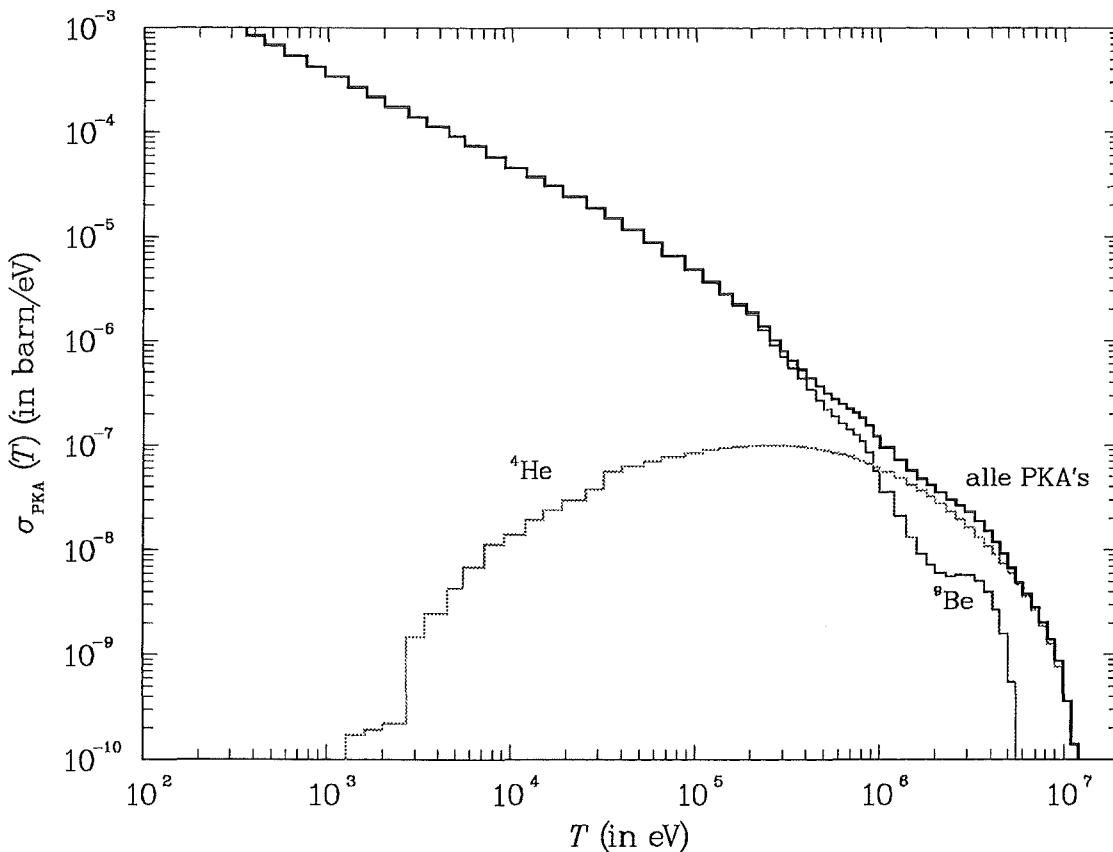


Abbildung 1-22: ^9Be -, ^4He - und Summe aller PKA's in ^9Be (durch das Neutronenspektrum im Feststoffblanket eines (d,t)-Fusionsreaktors)

2 SEKUNDÄRE SCHÄDIGUNG

2.1 Einführung

In neutroneninduzierten Kernreaktionen werden PKA's in ${}^9\text{Be}$ erzeugt, deren Masse, Ladung und Energieverteilungen wir kennen. Diese PKA-Erzeugung faßt man auch oft unter dem Begriff „primäre Schädigung“ zusammen. Denn nun sind es diese Ionen, die ihrerseits in Wechselwirkung mit den Gitteratomen des Targets treten und ihre Energie in einer Kaskade abgeben und damit weitere Rückstoßatome erzeugen (manchmal als secondary knock-on atoms, SKA's, bezeichnet). Ziel unserer Berechnungen soll eine Aussage über die mittlere Zahl der sekundären Verlagerungen durch ein PKA der Energie E sein.

In diesem Kapitel werden wir zunächst die Wechselwirkung von Ionen mit den Atomen des Targets betrachten. Dabei kann man die Stoßkaskade in eine Kette binärer Stöße zerlegen, wobei Energie inelastisch an das Elektronensystem und elastisch an den Atomrumpf abgegeben wird. Die kinetische Energie der PKA's wird also aufgeteilt, partitioniert, zwischen den Elektronen, die näherungsweise keine weitere Schädigung verursachen, und dem Atomrumpf. Dieser letzte Anteil, den man Schädigungsenergie oder Schädigungsfunktion (bezeichnet mit E_{dam} oder \bar{v}) nennt, wird in einer Kontinuitätsgleichung zu berechnen sein.

Schließlich korreliert man die Schädigungsenergie mit der dadurch erzeugten Anzahl von Verlagerungen in dem etablierten Schädigungsmodell von Norgett, Robinson und Torrens („NRT-Modell“).

In der vorliegenden Form des NRT-Modells gibt es einige gravierende Einschränkungen, die die Anwendbarkeit für fusionsbedingte Strahlenschädigung in Beryllium stark beeinträchtigen. Streng darf man dieses Modell nur für zumindest mittelschwere Ionen (Rückstoßkerne) in Targets mit annähernd der gleichen Kernladungszahl verwenden. Für die Berechnung der Verlagerungen in Beryllium hat man jedoch ganz andere Bedingungen, nämlich leichte Ionen mit stark unterschiedlichen Kernladungszahlen in einem leichten Target. Außerdem ist die dem NRT-Modell zugrundeliegende Energiepartitions-Theorie von Lindhard oberhalb von etwa 100 bis 200 keV/amu nicht mehr gültig, während man in Beryllium PKA's mit Energien bis zu mehreren MeV/amu zu erwarten hat.

Um diesen veränderten Anforderungen gerecht zu werden, sollen einige Verbesserungen in das Lindhard-Modell integriert werden. Zum einen wird für die elektronische Abbremsung ein neues Niederenergiekonzept eingeführt und für höhere Energien an die Bethe-Bloch-Formel angepaßt, zum anderen wird ein verbessertes universelles interatomares Potential zur Berechnung der elastischen Kernstreuung verwendet. Die dadurch erzielten Änderungen werden abschließend diskutiert und mit der Lindhard-Energiepartition verglichen.

2.2 Kaskadmodell und Kontinuitätsgleichungen

2.2.1 Stoßkaskade

Ein primär erzeugtes Rückstoßatom durchdringt das Targetmaterial und tritt dabei in Wechselwirkung mit den Elektronen und Kernen der jeweiligen Atome. Wir untersuchen dabei das Verhalten einer additiven Schädigungsgröße, einer physikalischen Größe also, deren Wert in jeweils unabhängigen Ereignissen geändert wird.

Die Grundannahmen für die Herleitung einer entsprechenden Kontinuitätsgleichung sind:

- Additivität der Schädigungsgröße
- nur mittlere Effekte werden betrachtet
- monoatomares Target

An folgendem Schaubild sollen die im weiteren Verlauf verwendeten Bezeichnungen eingeführt und veranschaulicht werden:

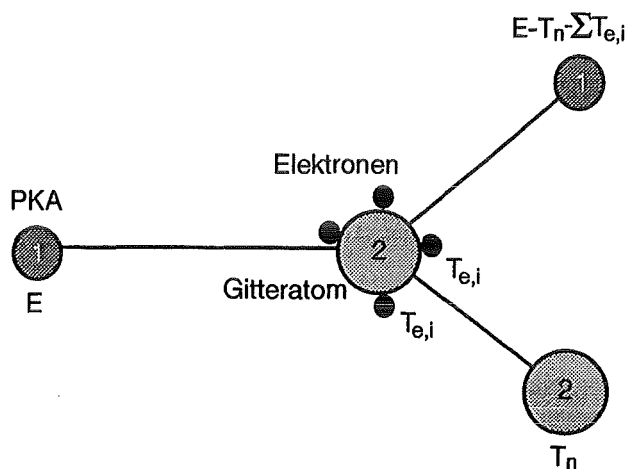


Abbildung 2-1: Veranschaulichung der Wechselwirkung eines PKA's mit einem Gitteratom

Die zu betrachtende Schädigungsgröße v besitze vor der Bestrahlung den Wert 0. Nach Bestrahlung mit einem Teilchen der Energie E sei der mittlere Wert dieser Größe $\bar{v}(E)$. Das PKA 1 bewege sich eine Wegstrecke dR im Medium mit der Dichte N . Dann ist die Wahrscheinlichkeit, daß das PKA einen Stoßprozeß am Atom 2 mit Energieübertrag T an den Kern und $T_{e,i}$ an die einzelnen Elektronen eingeht, $NdRd\sigma_{1,2e}$, wenn $d\sigma_{1,2e}$ der Wirkungsquerschnitt für einen Stoß von Teilchen 1 an Teilchen 2 und Elektronen mit entsprechenden Energieüberträgen ist.

Betrachtet man nun die Aufteilung der Größe $\bar{v}(E)$ auf die Teilchen 1, 2 und Elektronen (Indizierung von $\bar{v}(E)$ mit 1, 2 und e), so kann man folgende Kontinuitätsgleichung nach Integration über alle möglichen Stöße erhalten [32]:

$$\bar{v}_1(E) = NdR \int d\sigma_{1,2e} \left\{ \bar{v}_1(E - T - \sum_i T_{e,i}) + \bar{v}_2(T - U) + \sum_i \bar{v}_e(T_{e,i} - U_i) \right\} + (1 - NdR \int d\sigma_{1,2e}) \bar{v}_1(E)$$

U Bindungsenergie des Kerns im Gitter

U_i Bindungsenergie des Elektrons i am Kern

wobei der letzte Term die Wahrscheinlichkeit dafür darstellt, daß kein Stoß erfolgt.

Damit ergibt sich die fundamentale Gleichung:

$$\int d\sigma_{1,2e} \left\{ \bar{v}_1(E - T - \sum_i T_{e,i}) - \bar{v}_1(E) + \bar{v}_2(T - U) + \sum_i \bar{v}_e(T_{e,i} - U_i) \right\} = 0$$

bzw. für Eigenionen-Bestrahlung:

$$\int d\sigma_{2,2e} \left\{ \bar{v}_2(E - T - \sum_i T_{e,i}) - \bar{v}_2(E) + \bar{v}_2(T - U) + \sum_i \bar{v}_e(T_{e,i} - U_i) \right\} = 0$$

In analoger Weise erhält man eine Kontinuitätsgleichung für den Anteil, den die Elektronen tragen:

$$\int d\sigma_{e,2e} \left\{ \bar{v}_e(E - T - \sum_i T_{e,i}) - \bar{v}_e(E) + \bar{v}_2(T - U) + \sum_i \bar{v}_e(T_{e,i} - U_i) \right\} = 0 \quad (11)$$

wobei $d\sigma_{e,2e}$ der Wirkungsquerschnitt für einen Elektronenstoß am Teilchen 2 samt dessen Elektronen mit Energieüberträgen T und $T_{e,i}$ darstellt.

An dieser Stelle kann schon eine erste weitere Annahme, die im weiteren ständig verwendet wird, eingeführt werden:

- Elektronen erzeugen keine freien Rückstoßkerne (d.h. verursachen keine weitere Schädigung, s. Näherung (A), Seite 38).
- Elektronenanregung erfolgt individuell für jedes Elektron.

Damit erhält man aus Gleichung (11) folgende vereinfachte und separat lösbare Gleichung:

$$\sum_i \int d\sigma'_{e,2e} \left\{ \bar{v}_e(E - T_{e,i}) - \bar{v}_e(E) + \bar{v}_e(T_{e,i} - U_i) \right\} = 0$$

mit $d\sigma'_{e,2e}$ dem Wirkungsquerschnitt für Elektronenstoß an 2 mit Energieübertrag $T_{e,i}$ an ein Elektron.

2.2.2 Mittlere Schädigungsenergie

Im folgenden identifizieren wir $\bar{v}(E)$ mit der Schädigungsenergie, also dem Energieanteil der PKA's, der in kinetische Energie von Rückstoßkernen umgewandelt wird. Im folgenden können einige Näherungen und Vereinfachungen eingeführt werden, die sich für die Berechnung von $\bar{v}(E)$ als vorteilhaft erweisen werden.

Die erste Näherung (A) wurde oben bereits verwendet. Elektronen sollen keine Recoils (oder zumindest mit verschwindender Energie) erzeugen. Dies kann angesichts der im NRT-Modell (s. Kapitel 2.4) verwendeten Schwellenenergie für Verlagerungen mit hinreichender Genauigkeit angenommen werden. Einschränkungen bestehen, wenn die Elektronen ihre Energie sehr schnell (z.B. Frank-Condon-Prinzip, Auger-Effekt) an den Kern abgeben, oder wenn ihre Energien im Bereich von MeV liegen.

Die zweite Näherung (B) beinhaltet die Vernachlässigung der atomaren Bindungsenergie U . Diese liegt im Bereich weniger eV, so daß die Annahme (auch in Hinsicht auf das NRT-Verlagerungsmodell) gerechtfertigt ist, sofern E nicht in der Größenordnung von U liegt.

Eine dritte Approximation (C) ist die Annahme, daß die Energieüberträge an die Elektronen relativ gesehen vernachlässigt werden können, d.h. $T_{e,i} \ll E - T$. Dies gilt jedenfalls, sofern E nicht zu klein ist. Für hohe Energien gilt nämlich nach Gleichung (3) $T_{e,i} \propto E(m_e/M_{PKA})$.

Die vierte Approximation (D) ist die für die weitere Berechnung entscheidende, da sie die Einführung von elektronischen Brems- und elastischen Streuquerschnitten erlaubt. Demnach sollen die Abbremsungen am Kern bzw. an den Elektronen unkorreliert sein, d.h. die entsprechenden Anteile können rechnerisch getrennt werden. Wenn man berücksichtigt, daß für kleine Stoßparameter (wo Kernbremsung vorherrscht) praktisch keine Elektronenanregung auftritt, und diese erst bei sehr großen Stoßparametern wirksam wird, dann ist diese vierte Näherung sinnvoll.

Unter Verwendung dieser Näherungen kann man die Stoßkaskade in folgende binäre Stöße zerlegen:

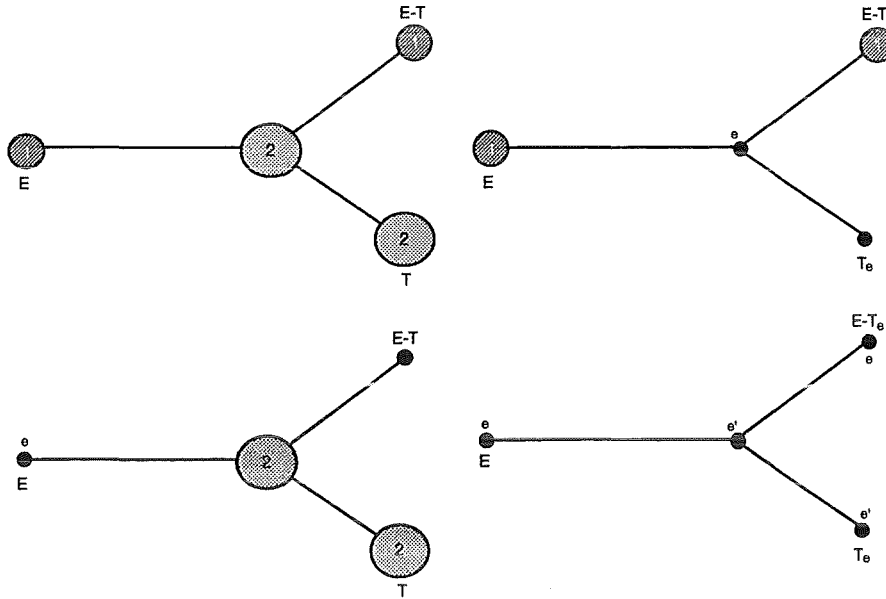


Abbildung 2-2: binäre Komponenten der Stoßkaskade

Analog zur obigen Ableitung der Kontinuitätsgleichungen erhält man nun unter Berücksichtigung der eingeführten Approximationen und Verwendung von

$$N_e = Z_2^V N \text{ (Dichte der Elektronen im Elektronengas des Targets)}$$

$$\bar{v}(E - T_e) \approx \bar{v}(E) - T_e \bar{v}'(E) \text{ (da } T_e \ll E, \text{ vgl. Näherung (C))}$$

folgende Kontinuitätsgleichungen:

$$\bar{v}'_1(E) S_{1e}(E) = \int d\sigma_{1,2} \{ \bar{v}_1(E-T) - \bar{v}_1(E) + \bar{v}_2(T) \} + Z_2^V \int d\sigma_{1,e} \bar{v}_e(T_e)$$

$$\bar{v}'_2(E) S_{2e}(E) = \int d\sigma_{2,2} \{ \bar{v}_2(E-T) - \bar{v}_2(E) + \bar{v}_2(T) \} + Z_2^V \int d\sigma_{2,e} \bar{v}_e(T_e)$$

$$\int d\sigma_{e,2} \{ \bar{v}_e(E-T) - \bar{v}_e(E) + \bar{v}_2(T) \} + Z_2^V \int d\sigma_{e,e} \{ \bar{v}_e(E-T_e) - \bar{v}_e(E) + \bar{v}_e(T_e) \} = 0$$

bzw. mit Näherung (A):

$$\int d\sigma_{e,e} \{ \bar{v}_e(E-T_e) - \bar{v}_e(E) + \bar{v}_e(T_e) \} = 0$$

mit

- $d\sigma_{x,2}$ elast. Streuquerschnitt für r Teilchen x auf Gitteratom 2 mit Energieübertrag T
- $d\sigma_{x,e}$ elast. Streuquerschnitt für r Teilchen x auf Elektron e mit Energieübertrag T_e
- $S_{xe}(E) = \int d\sigma_{x,e} T_e$ elektronischer Bremsquerschnitt für Teilchen x

Die Behandlung dieses Systems gekoppelter inhomogener Integro-Differentialgleichungen reduzieren wir auf die Lösung der homogenen Gleichungen (vgl. Lindhard et al. [32]). Wir dürfen mit guter Genauigkeit die damit erzielten Ergebnisse als Schädigungsfunktionen verwenden, da der inhomogene Anteil, die elektroneninduzierte Schädigung, vernachlässigt werden kann.

den kann (bedingt vor allem durch Näherung (A)). Trotzdem erfordert die genaue Analyse der Verlagerungsschädigung eine entsprechende konsequente Behandlung der Elektronen. Dies ist aber nicht im Rahmen dieser Arbeit vorgesehen.

Damit beschränkt sich unsere Aufgabe auf die Lösung von

$$\bar{v}'_2(E)S_{2e}(E) = \int d\sigma_{2,2} \{ \bar{v}_2(E-T) - \bar{v}_2(E) + \bar{v}_2(T) \} \quad \text{Lindhard-Glg. für } Z_1 = Z_2 \quad (12)$$

und anschließend

$$\bar{v}'_1(E)S_{1e}(E) = \int d\sigma_{1,2} \{ \bar{v}_1(E-T) - \bar{v}_1(E) + \bar{v}_2(T) \} \quad \text{Lindhard-Gleichung für } Z_1 \neq Z_2 \quad (13)$$

2.3 Berechnung der Schädigungsenergie

Lindhards Energiepartitionstheorie ist die Grundlage des NRT-Modells, das als etabliertes Schädigungsmodell schon vielfach verwendet wurde. In Lindhards Arbeiten [32-34,41] wurden bisherige Erkenntnisse in der Physik von Ion-Target-Wechselwirkungen in geschlossener Form aufgearbeitet. Einige wesentliche Ergebnisse dieser Arbeiten sind auch heute noch von wichtiger Bedeutung, wenn es auch neuere Ansätze in einigen Teilbereichen der Theorie gibt, wie wir unten (s.S. 44ff. und 56ff.) noch genauer sehen werden.

Wesentliche Aspekte der Lindhard-Theorie betreffen die elektronische Abbremsung von niederenergetischen Ionen und den elastischen Streuquerschnitt für ein Thomas-Fermi-Atom. Mit diesen Ansatzpunkten hat Lindhard eine Schädigungsfunktion berechnet, die wir abschließend präsentieren wollen.

Die Einschränkungen in der Berechnung der Schädigungsenergie nach Lindhard (vgl. S. 35) für die durch Fusionsneutronen induzierte Strahlenschädigung in leichten Materialien erfordert einige effiziente Verbesserungen. Im Rahmen dieser Arbeit werden das elektronische Bremsvermögen und die elastische Kernstreuung durch neuere Berechnungen ergänzt. Die Lindhard-Gleichung (12 bzw. 13) wird in ihrer homogenen Form übernommen.

Für das elektronische Bremsvermögen wird im Niederenergiebereich ein neuer Ansatz verwendet, der unter Berücksichtigung des minimalen Stoßabstandes näherungsweise ein Schwellenverhalten für die Elektronenanregung aufweist. Im Bereich hoher Energien wird die Bethe-Bloch-Formel verwendet. Zur Überbrückung der beiden Energiebereiche werden zwei Verfahren getestet und mit einem analytischen Fit nach Ziegler et al. [8] verglichen. Dieser Vergleich wird die Wahl einer Parametrisierung des elektronischen Bremsquerschnittes für alle betrachteten Ionen ermöglichen.

Die elastische Kernstreuung wird gemäß dem Ansatz von Lindhard durch die $f(t^{1/2})$ -Funktion beschrieben, die nun durch ein neues, universales, interatomares Potential bestimmt wird.

Die numerische Berechnung der Schädigungsenergie wird zunächst für Eigenionen ($^{\circ}\text{Be}$) und anschließend für alle beteiligten Ionen durchgeführt. Diese Neuberechnung wird mit den Lindhard-Schädigungsfunktionen verglichen.

2.3.1 Elektronisches Bremsvermögen

2.3.1.1 für Lindhard-Energiepartition

Bohr [35] hat schon früh den Abbremsvorgang von ionisierten Teilchen in Materie untersucht und dabei eine Trennung von elektronischen und nuklearen Energieverlusten erkannt. Bethe und Bloch [36,37] haben die quantenmechanische Wechselwirkung des Ions mit dem Elektronenplasma untersucht und eine Bremsformel für energetische Ionen in Materie entwickelt. Weitere Untersuchungen betrafen die effektive Ladung des Ions [38] sowie die Skalierung von Energieverlust-Querschnitten [39].

Nach Arbeiten von Fermi und Teller [40] über die Proportionalität von Bremsquerschnitt und Geschwindigkeit des Ions widmete sich Lindhard [41] der Wechselwirkung von nichtrelativistischen, geladenen Teilchen mit quantisierten Elektronplasmen. Seine Theorie beruht auf folgenden Grundannahmen:

- Das freie Elektronengas besteht aus Elektronen mit 0 K (Beschreibung durch ebene Wellen) vor einem Hintergrund von gleichförmig verteilter positiver Ladung.
- Das ungestörte Elektronengas besitzt eine homogene Dichte.
- Die Wechselwirkung des geladenen Teilchens mit dem Elektronengas ist eine Störung desselben.
- Alle Teilchen sind nichtrelativistisch.

Damit findet er für niedrige Energien einen geschwindigkeitsproportionalen elektronischen Bremsquerschnitt [32], oder genauer*:

* In der Literatur werden im allgemeinen keine SI-Einheiten verwendet. Dieser Konvention folgend werden entsprechende physikalischen Größen in cgs-Einheiten verwendet, jedoch in SI-Einheiten umgerechnet angegeben.

$$S_e = \frac{1}{N_2} \left(\frac{dE}{dx} \right)_e = \xi_e \cdot 8\pi e^2 a_0 \frac{Z_1 Z_2}{Z} \frac{v}{v_0}; \text{ für } v < v_1 \approx v_0 Z_1^{2/3} \left(v_0 = \frac{e^2}{\hbar} \approx 2,2 \cdot 10^6 \text{ m s}^{-1} \right)$$

$$\xi_e \approx Z^{1/6}$$

$$Z^{2/3} = Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}$$

mit:

 N_2 Dichte des Targets $(dE/dx)_e$ spezifischer Energieverlust durch elektronische Abbremsung e Elementarladung ($e^2 = 2,307 \cdot 10^{-28} \text{ J m}$) a_0 Bohr'scher Radius ($a_0 = 5,29 \cdot 10^{-11} \text{ m}$) Z_i Kernladung für Ion b zw. Target v Geschwindigkeit des Ions v_0 Bohr'sche Geschwindigkeit

Oft schreibt man, um die Proportionalität mit der Energie zu betonen,

$$S_e = \tilde{k} \sqrt{E}$$

$$\tilde{k} = 1,20608 \cdot 10^{-20} \frac{Z_1^{7/6} Z_2}{Z M_1^{1/2}} \cdot \text{eV}^{1/2} \text{ m}^2$$

 M_1 Masse des Ions in amu

und dem numerischen Vorfaktor gemäß

$$\frac{8\sqrt{2}\pi a_0 \hbar}{\sqrt{u}} = 1,20608 \cdot 10^{-20} \text{ eV}^{1/2} \text{ m}^2; u = 931 \text{ MeV}/c^2$$

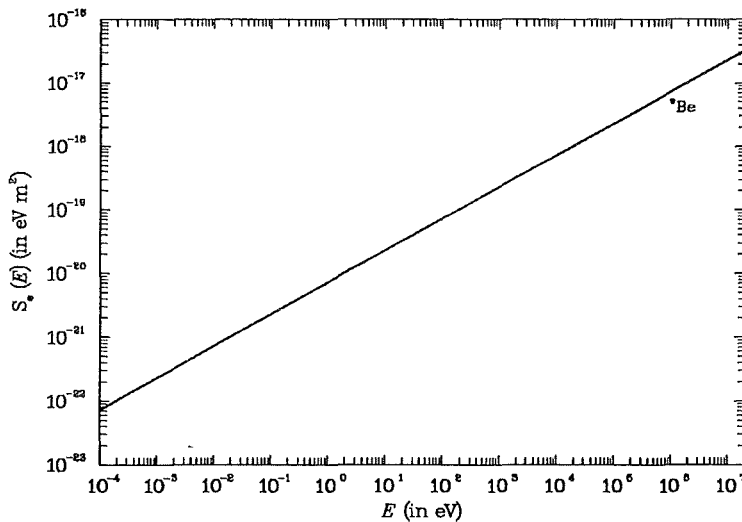


Abbildung 2-3: elektronischer Bremsquerschnitt nach Lindhard für ${}^9\text{Be}$

Lindhard verwendet in seinen Arbeiten reduzierte Größen, die in einfacher Weise eine Skalierung von Bremsquerschnitten ermöglichen. Unter Verwendung der Abschirmlänge (vgl. Gleichungen (17,18))

$$a = \left(\frac{9\pi^2}{128} \right)^{1/3} \frac{a_0}{Z^{1/3}} = \frac{0,8853a_0}{Z^{1/3}}$$

und der Reichweite

$$R = \frac{1}{N_2} \int_0^E \frac{dE'}{S(E')}$$

definiert man demgemäß folgende reduzierte Größen:

$$\varepsilon = E \frac{a M_2}{Z_1 Z_2 e^2 (M_1 + M_2)} \quad \text{reduzierte Energie}$$

$$\rho = R N_2 M_2 \cdot 4\pi a^2 \frac{M_1}{(M_1 + M_2)^2} \quad \text{reduzierte Reichweite}$$

mit den Massen der Teilchen M_1 und M_2 in amu.

Damit schreibt man den reduzierten elektronischen Bremsquerschnitt wie folgt:

$$\left(\frac{d\varepsilon}{d\rho} \right)_e = S_e \frac{M_1 + M_2}{4\pi e^2 a Z_1 Z_2 M_1} = k\varepsilon^{1/2}$$

$$\text{mit } k = 2,550156 \cdot 10^{-17} \frac{\text{m}^{3/2}}{a^{3/2}} \frac{Z_1^{2/3} Z_2^{1/2}}{Z} \frac{(M_1 + M_2)^{3/2}}{M_1^{3/2} M_2^{1/2}}$$

und dem numerischen Vorfaktor gemäß

$$\frac{\sqrt{8} a_0 \hbar}{\sqrt{u} e} = 2,550156 \cdot 10^{-17} \text{ m}^{3/2}; u = 931 \text{ MeV} / c^2$$

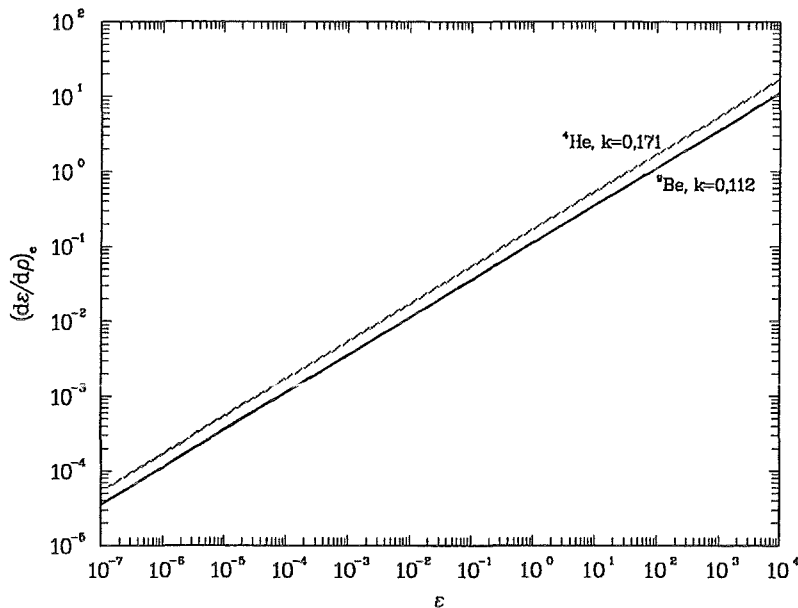


Abbildung 2-4: reduzierter elektronischer Bremsquerschnitt für ${}^9\text{Be}$ und ${}^4\text{He}$

Folgende Einschränkungen des elektronischen Bremsquerschnittes werden konstatiert [32,42]:

- ist gültig bis maximal $25M_1Z_1^{4/3}$ keV
- Proportionalität ist nicht über den gesamten Geschwindigkeitsbereich gegeben
- für $Z_1 \leq 10$ fluktuiert (möglicherweise) ξ_e um $Z^{1/6}$

2.3.1.2 für verbesserte Energiepartition

a) Niederenergie-Näherung

Im Bereich niedriger Energien haben Oen und Robinson [43] unter Einbeziehung des minimalen Stoßabstandes zwischen Ion und Targetatom eine Formel für den inelastischen Energieverlust an die Elektronen vorgeschlagen:

$$\Delta E_e = \frac{0,045}{\pi a^2} \tilde{k} \sqrt{E} e^{-0,3r_0/a}$$

mit:

a Abschirmlänge des interatomaren Potentials

\tilde{k} Proportionalitätsfaktor für S_e (Lindhard)

r_0 minimaler Stoßabstand

Die Vorteile dieser Formulierung liegen darin, daß

- der minimale Stoßabstand als eine wichtige physikalische Größe eingeführt wird und
- der elektronische Energieverlust relativ schnell gegen 0 geht (für kleine Energien), so daß näherungsweise ein Schwellenverhalten erreicht wird. Tatsächlich werden nämlich elektronische Freiheitsgrade erst ab einer bestimmten Energie angeregt [44].

Aus dem Energieverlust kann nun mittels

$$S_e = 2\pi \int_0^{s_c} s \Delta E_e ds$$

s Stoßparameter

s_c maximaler Stoßabstand aus Gitterstruktur des Targets

der zugehörige Bremsquerschnitt berechnet werden:

$$S_e = \frac{0,09}{a^2} \tilde{k} \sqrt{E} \int_0^{s_c} s e^{-0,3r_0(s,E)/a} ds \quad (14)$$

Den minimalen Stoßabstand $r_0(s, E)$ bestimmt man aus (vgl. Anhang A)

$$1 - \frac{V(r_0)}{E_c} - \frac{s^2}{r_0^2} = 0$$

$V(r_0)$ interatomares Potential

$E_c = \frac{M_2}{M_1 + M_2} E$ Energie des Ions im Schwerpunkt

Für höhere Energien ist $V(r_0)/E_c \approx 0$, d.h. $r_0 \approx s$, und damit gilt:

$$S_e = \tilde{k} \sqrt{E} (1 - \alpha)$$

$$\alpha = \left(1 + 0,3 \frac{s_c}{a} \right) e^{-0,3s_c/a} \quad (15)$$

Die Berechnung des Integrals in der Oen-Robinson-Formel (14) ist in Anhang B ausgeführt.

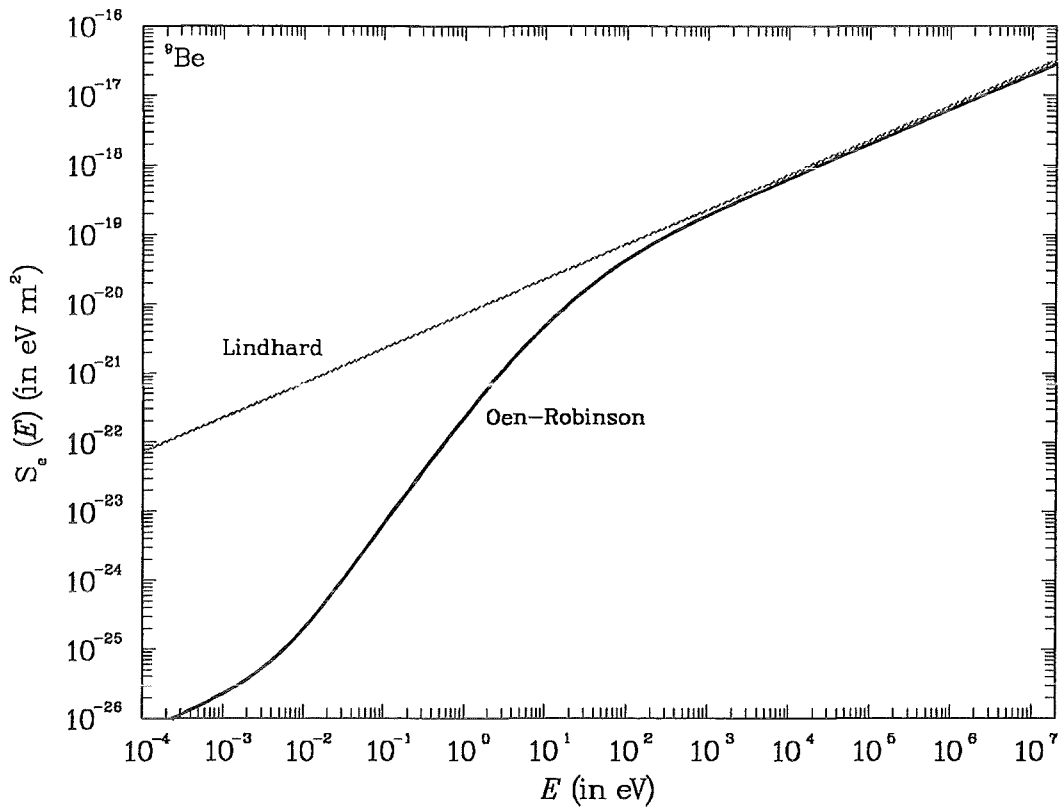


Abbildung 2-5: elektronischer Bremsquerschnitt nach Oen-Robinson

Damit ist der elektronische Bremsquerschnitt nach Oen-Robinson stets kleiner als der Lindhard-Querschnitt, und zwar mindestens um den Faktor $1-\alpha$. Für die betrachteten Ionen ergeben sich folgende Werte:

Tabelle 2-1: Faktor für Oen-Robinson-Querschnitt

	${}^9\text{Be}$	${}^4\text{He}$	${}^6\text{He}$	${}^7\text{Li}$	${}^{10}\text{Be}$
$1-\alpha$ (in %)	91,1	88,7	88,7	90,1	91,1

b) Hochenergie-Näherungen

Nach den Ergebnissen aus Kapitel 1 erwartet man Ionen bis zu mehreren MeV/amu in Beryllium. Dies ist weit jenseits der Gültigkeit der Niederenergienäherung. Für Energien ab ca. 200 keV/amu gilt (im nichtrelativistischen Falle) die Bethe-Bloch-Formel [8,36,37]

$$S_e = \frac{2\pi e^4 (Z_1^*)^2 Z_2 M_1}{E m_e} \ln \left(\frac{4E m_e}{\langle I \rangle M_1} \right)$$

- e Elementarladung ($e^2 = 2,307 \cdot 10^{-28} \text{ J m}$)
 Z_1^* effektive Ladung des Ions
 Z_2 Kernladung des Targets
 M_1 Masse des Ions
 m_e Masse des Elektrons
 $\langle I \rangle$ mittleres Ionisierungspotential des Targets

Das mittlere Ionisierungspotential für Beryllium beträgt 63 eV [7].

c) Effektive Ladungen

Der Ionisierungsgrad eines Teilchens beim Durchgang durch Materie wird vor allem von dessen Energie abhängen. Für hohe Geschwindigkeiten darf man annehmen, daß alle Elektronen abgestreift sind, während für immer kleinere Geschwindigkeiten die effektive Ladung ebenfalls geringer wird.

In der Lokalen-Dichte-Approximation, wie sie für die Berechnung von elektronischen Energieverlusten verwendet wird [8], kann man unter der zusätzlichen Annahme, daß der Ladungszustand des Ions unabhängig vom Target ist, folgende wichtige Skalierungsregel ableiten [8]:

$$\frac{S_{e,2}}{S_{e,1}} = \frac{(Z_2^*)^2}{(Z_1^*)^2} \quad (\text{für zwei Ionen bei gleicher Geschwindigkeit und im selben Target})$$

Z_i^* effektive Ladung der Ionen

Die effektive Ladung eines Ions hängt also von dessen Geschwindigkeit ab. Man schreibt oft

$$Z_1^* = Z_1 \gamma$$

mit dem effektiven Ladungsfaktor γ .

Für Protonen soll dabei stets $\gamma = 1$ gelten, d.h. es ist stets von einem Elektron befreit [8]. Für Helium kann man aus experimentellen Daten folgende Energieabhängigkeit des effektiven Ladungsfaktors ableiten [8]:

$$\gamma_{\text{He}}^2 = 1 - \exp\left(-\sum_{i=0}^5 a_i (\ln E)^i\right); \quad E \text{ in keV / amu, } E \geq 1$$

$$a_0 = 0,2865 \quad a_1 = 0,1266 \quad a_2 = -0,001429$$

$$a_3 = 0,02402 \quad a_4 = -0,01135 \quad a_5 = 0,00175$$

Für schwere Ionen wird folgende Parametrisierung nach Bohr und Northcliffe verwendet [8]:

$$\gamma_1^2 = 1 - \exp(-0,92v_1 / (v_0 Z_1^{2/3})) \quad (16)$$

mit v_1 der Geschwindigkeit des Ions.

Dabei wird angenommen, daß alle Elektronen, deren klassische Bahngeschwindigkeit kleiner ist als die Ionengeschwindigkeit, vom Ion abgestreift sind.

d) Überbrückungsmodelle

Für Nieder- und Hochenergiebereiche hat man nun jeweils einen Ansatz für den elektronischen Bremsquerschnitt. Um auch im Zwischenbereich einen hinreichend genauen Querschnitt zu erhalten, sollen beide Querschnitte nach dem von Biersack und Haggmark [45] vorgeschlagenen Schema kombiniert werden:

$$\frac{1}{S_e} = \frac{1}{S_e^{(l)}} + \frac{1}{S_e^{(h)}}$$

S_e kombinierter elektronischer Bremsquerschnitt

$S_e^{(l)}$ Niederenergie - Ansatz

$S_e^{(h)}$ Hochenergie - Ansatz

Dieses Interpolationsschema erfordert jedoch zunächst eine Extrapolation der Bethe-Bloch-Formel auf Energien unterhalb ihres Gültigkeitsbereiches. Mit der von Biersack und Haggmark [45] vorgeschlagenen Form

$$S_e^{(h)} = \frac{2\pi e^4 (Z_1^*)^2 Z_2 M_1}{E m_e} \ln \left(\frac{4E m_e}{\langle I \rangle M_1} + 1 + C \frac{\langle I \rangle M_1}{4E m_e} \right)$$

$$C = 5 \text{ außer für } Z_1 < 3: C = 100 Z_1 / Z_2$$

hat man im Übergangsbereich eine akzeptable Übereinstimmung mit experimentellen Daten. Eine lineare Extrapolation [46] der Bethe-Bloch-Formel liefert demgegenüber zu geringe Werte.

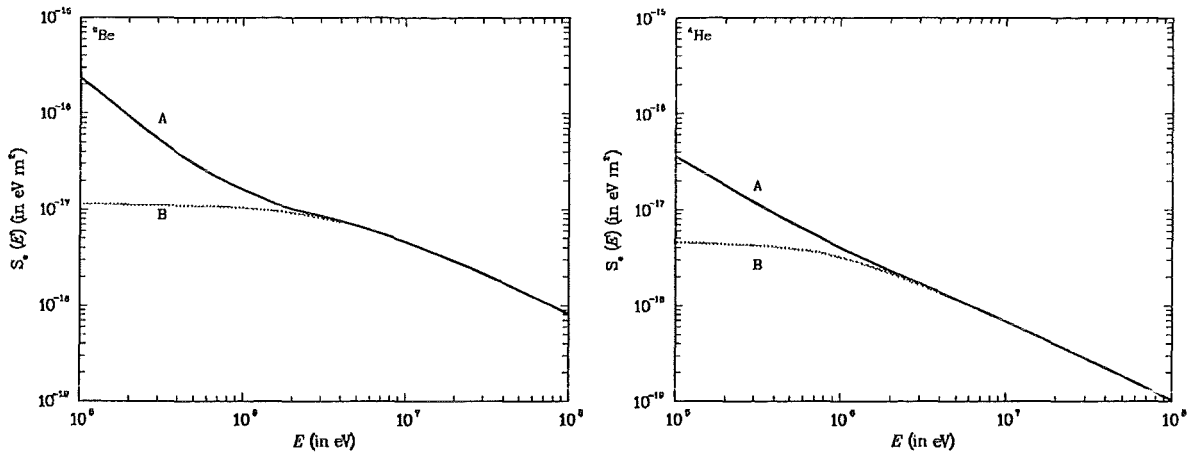


Abbildung 2-6: Extrapolationen für Bethe-Bloch: Biersack-Haggmark (A), linear (B)

Da die effektive Ladung nach Gleichung (16) nur für Energien oberhalb etwa 200 keV/amu gilt, wurde der Wert der effektiven Ladung unterhalb dieser Grenze als konstant angesetzt.

Kombiniert man nun den Niederenergie-Ansatz nach Oen-Robinson mit dem Hochenergie-Ansatz nach Biersack-Haggmark mit dem vorgeschlagenen Interpolationsschema von Biersack-Haggmark, so erhält man folgenden elektronischen Bremsquerschnitt:

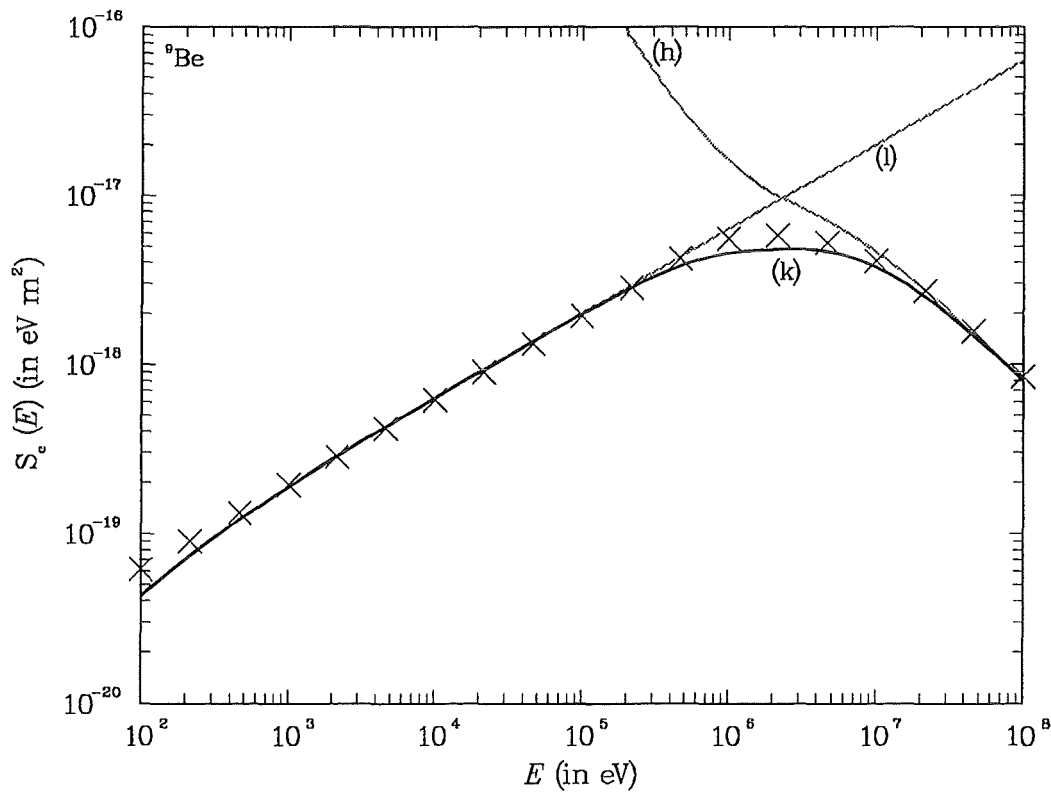


Abbildung 2-7: Kombination des elektr. Bremsquerschnitts für ${}^9\text{Be}$ und Fit nach Ziegler: Niederenergie-Ansatz (l), Hochenergie-Ansatz (h), Kombination (k), Fitpunkte (Kreuze)

Dabei zeigt sich (mit Ausnahme der He-Ionen) eine gute bis hervorragende Übereinstimmung mit dem analytischen Fit nach Ziegler et al., der vor allem auf experimentelle Daten beruht. Um eine konsistente Behandlung der Querschnitte nicht zu verletzen, wurde auch für die He-Ionen dieser kombinierte Ansatz verwendet.

Zusammenfassend ergeben sich folgende elektronische Bremsquerschnitte für die betrachteten Ionen (dabei liegt die Kurve für ^{10}Be nur sehr knapp oberhalb der für ^9Be , so daß diese wie auch in folgenden Abbildungen nicht mitgezeichnet wird):

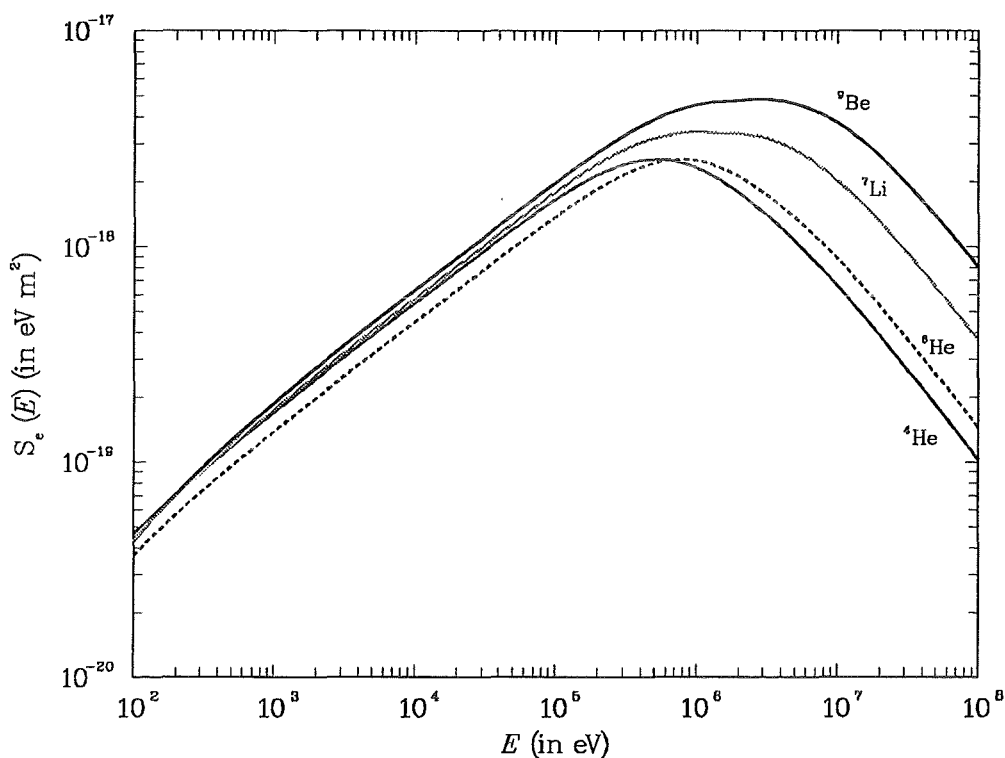


Abbildung 2-8: verbesserte elektronische Bremsquerschnitte

Auf der folgenden Seite sind die neu berechneten elektronischen Bremsquerschnitte für alle betrachteten PKA's im Vergleich zu den Lindhard-Querschnitten dargestellt.

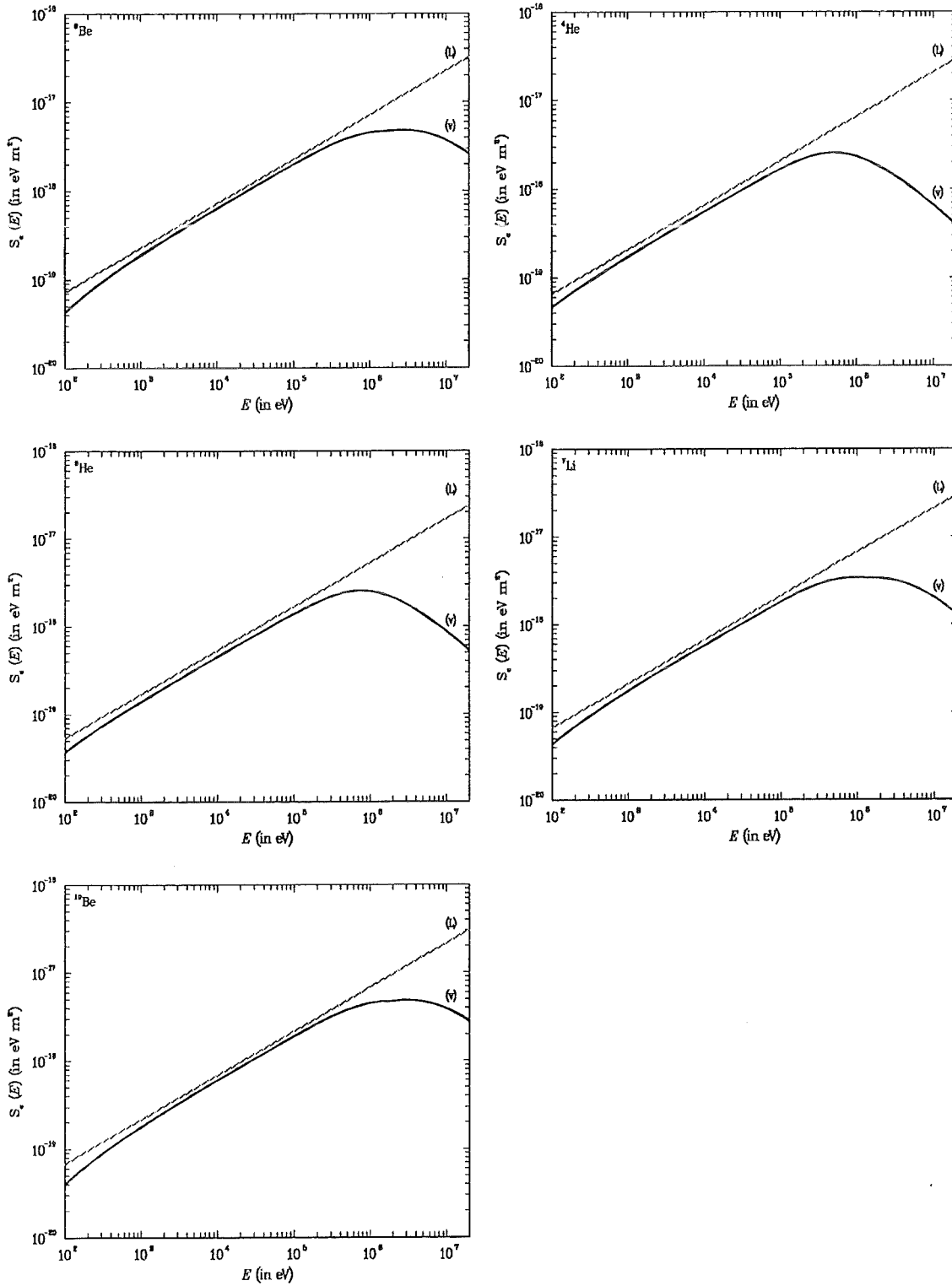


Abbildung 2-9: verbesserte elektronische Bremsquerschnitte (v) im Vergleich mit Lindhard (L)

2.3.2 Elastische Kernstreuung

2.3.2.1 für Lindhard-Energiepartition

Als weitere Eingangsgröße zur Lösung der Lindhard-Gleichung wird der differentielle Wirkungsquerschnitt $d\sigma_{1,2}$ für den Energieübertrag an den Targetkern benötigt. Im relevanten Energiebereich der Ionen unterhalb 14 MeV darf man sich dabei auf die elastische Kernstreuung beschränken.

Zur Bestimmung des Wirkungsquerschnittes kann man von den interatomaren Potentialen ausgehen. Mit der Bestimmung des Streuwinkels aus dem Stoßintegral (s. Anhang A) und dem zugehörigen Energieübertrag an den Rückstoßkern kann man daraus den gesuchten differentiellen Wirkungsquerschnitt berechnen.

Aufgrund ihrer universellen Verwendbarkeit haben statistische Atommodelle weite Verbreitung gefunden. Lindhard verwendet für seine Energiepartition das Thomas-Fermi-Modell [47]. Prinzipiell wird das Potential als Kombination einer Coulomb-Wechselwirkung der punktförmigen positiven Kerne $Z_1 Z_2 e^2 / r$ und einer Abschirmung durch die negative Elektronenwolken $\Phi(r/a)$ behandelt:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi(r/a) \quad (17)$$

r Abstand der Atome

a charakteristische Abschirmlänge

Die Thomas-Fermi-Funktion $\Phi(r/a)$ wird von Lindhard mit der Abschirmlänge

$$a = \frac{0,8853 a_0}{Z^{1/3}} \quad (18)$$

verwendet.

Damit erhält er für nichtrelativistische Energien folgende universelle Form für den differentiellen Wirkungsquerschnitt [32]:

$$d\sigma = \pi a^2 \cdot \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}); \quad t = \epsilon^2 \sin^2(\theta/2) = \epsilon^2 \frac{T}{T_{\max}} \quad (19)$$

Die Variable t kombiniert Primärenergie ϵ und Sekundärenergie T (bzw. Streuwinkel θ) in einer physikalischen Größe, beschreibt also im wesentlichen den Impulsübertrag auf das Primärteilchen. Für alle Ion-Target-Kombinationen und alle nichtrelativistischen Energien beschreibt dann die $f(t^{1/2})$ -Funktion die elastische Kernstreuung. Für diese Funktion, die vom

verwendeten interatomaren Potential abhängt, haben Winterbon et. al. [48] eine analytische Näherung berechnet:

$$f(t^{1/2}) = \lambda' t^{1/6} \left(1 + (2\lambda' t^{2/3})^{2/3} \right)^{-3/2} \quad (20)$$

$$\lambda' = 1,309$$

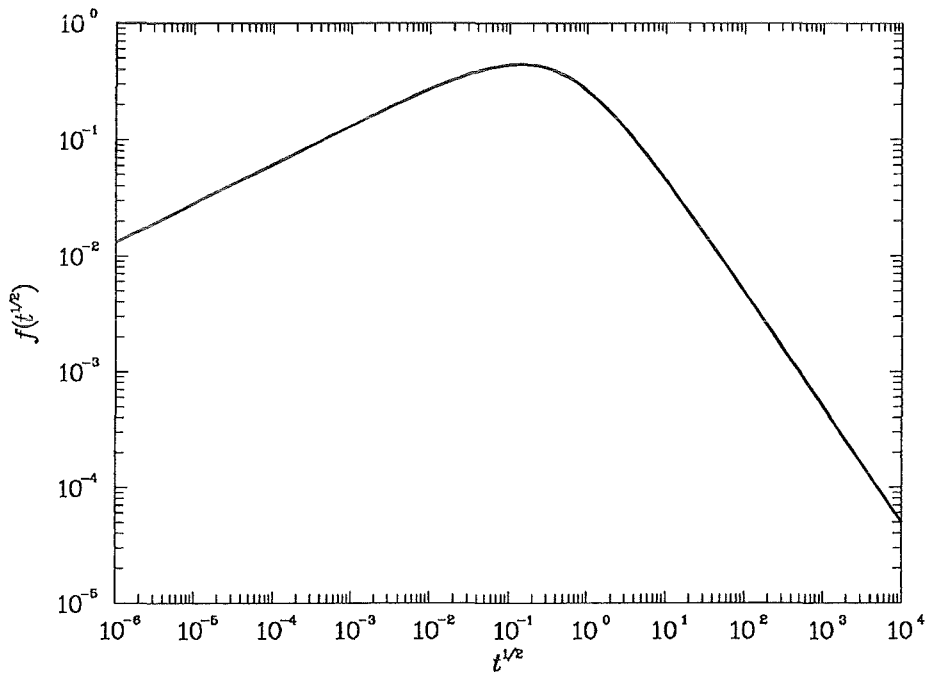


Abbildung 2-10: Lindhards $f(t^{1/2})$ -Funktion (Fit von Winterbon et al.)

Mit der $f(t^{1/2})$ -Funktion läßt sich in einfacher Weise der nukleare Bremsquerschnitt berechnen [32]:

$$\left(\frac{d\varepsilon}{d\rho} \right)_n = \frac{1}{\varepsilon} \int_0^{\varepsilon} f(t^{1/2}) d(t^{1/2}) \quad (21)$$

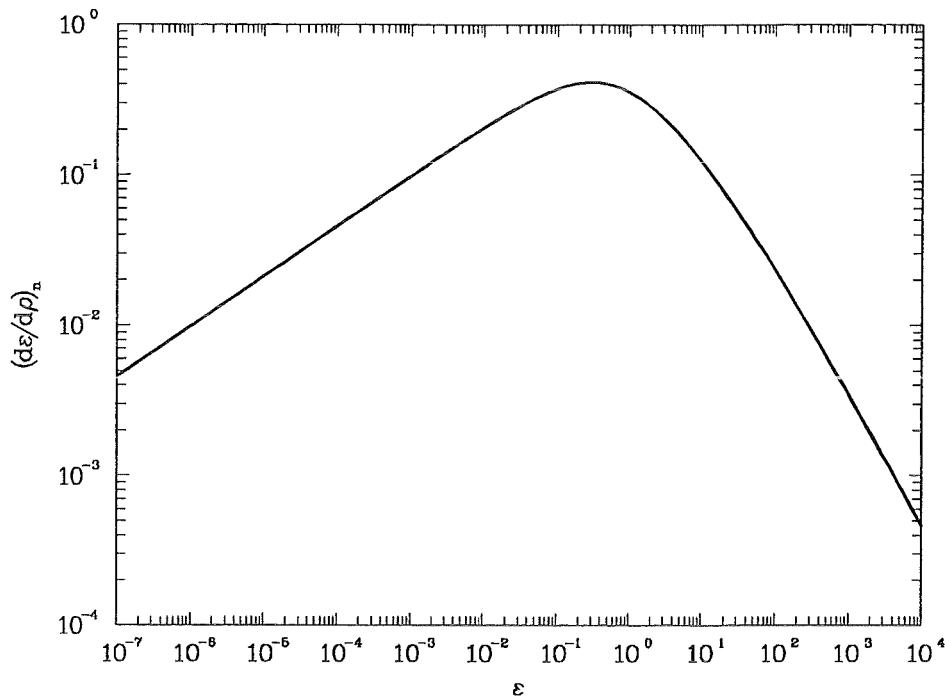


Abbildung 2-11: reduzierter Kernbremsquerschnitt nach Lindhard

Dieser Ansatz für die elastische Kernstreuung beinhaltet nach Lindhard folgende Einschränkungen:

- Vereinfachung der Stoßparameter in einer einfachen Variablen t .
- Für höhere Energien und kleine Winkel ist die Abschirmung geringer (Elektronen des Ions sind völlig abgestreift).
- Für große Winkel hat man auch Energieüberträge an Elektronen, d.h. die Streuung ist nicht rein elastisch.
- Für kleine Energien ist das Thomas-Fermi-Modell unzulässig, da der Stoßabstand zu groß ist.
- Auch für Atome mit niedriger Kernladungszahl (etwa $Z < 10$) ist das Thomas-Fermi-Modell zu ungenau.

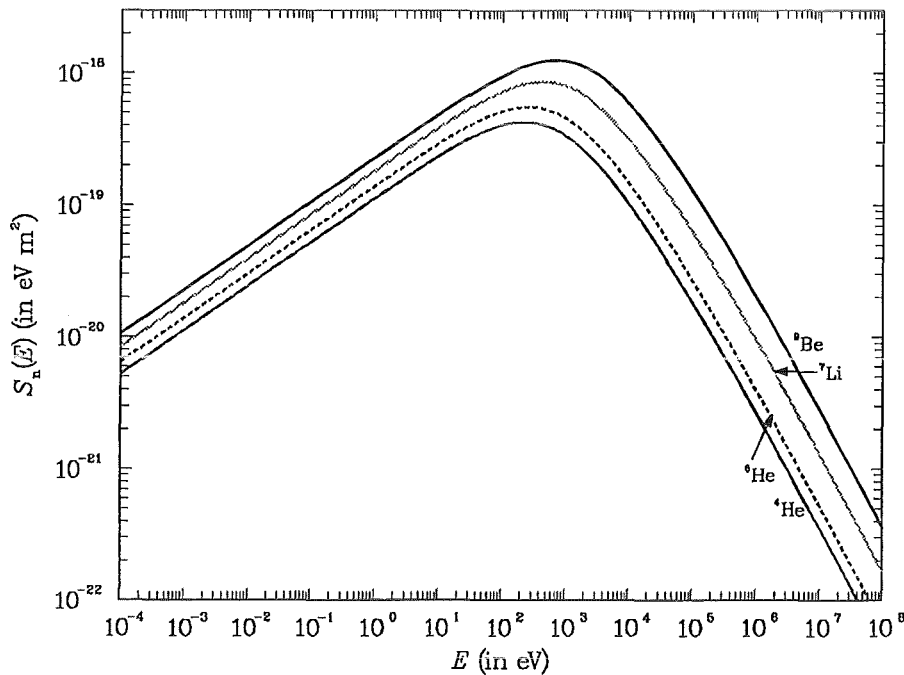


Abbildung 2-12: Kernbremsquerschnitte nach Lindhard

Aus den elektronischen und nuklearen Bremsquerschnitten, wie in Abbildung 2-13 für ${}^9\text{Be}$ gezeigt, kann man bereits das Verhalten der zugehörigen Schädigungsenergie ablesen. S_e beschreibt nämlich den inelastischen und S_n die elastischen Energieverluste, die dann zur Schädigung beitragen. Dabei interessieren jedoch nicht die absoluten Größen (wohl aber z.B. bei Reichweitebestimmungen), als vielmehr das Verhältnis der einzelnen Beiträge zur Summe, also z.B. $S_e/(S_e+S_n)$.

Für kleine Energien geht dieses Verhältnis gegen 0, d.h. die Schädigungsenergie verhält sich zunächst wie die Energie, bleibt aber stets kleiner. Bei ungefähr 8 keV (${}^9\text{Be}$) sind beide Energieverlustbeiträge gleich groß, die Schädigungsenergie wird in etwa diesem Energiebereich auf die Hälfte der Primärenergie gesunken sein. Für immer höhere Energien geht das Verhältnis gegen 1, d.h. die Schädigungsenergie wird nicht mehr steigen und in ein Plateau münden.

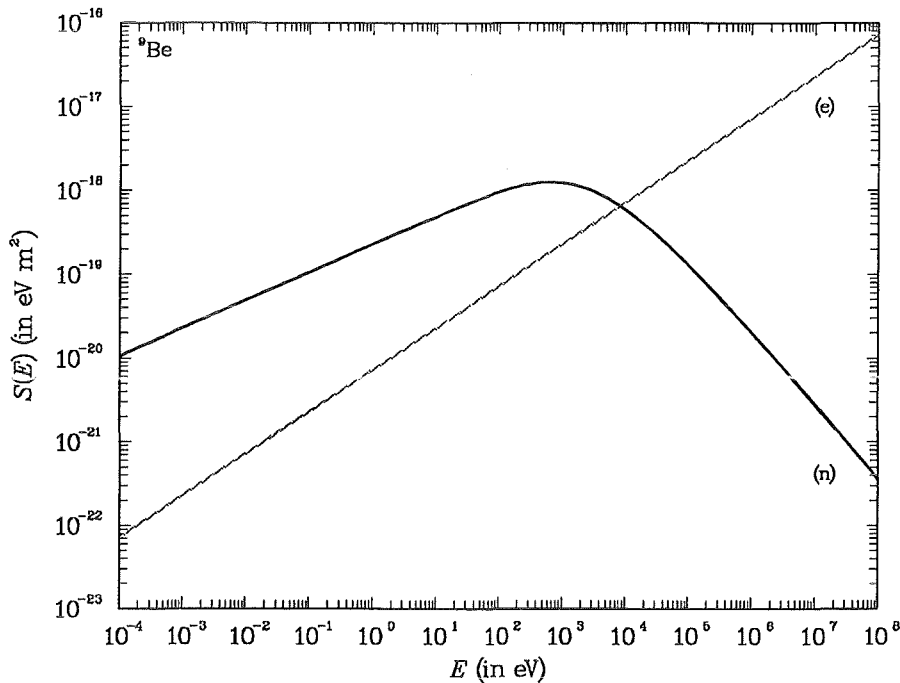


Abbildung 2-13: Vergleich von elektronischem und Kernbremsquerschnitt nach Lindhard

2.3.2.2 für verbesserte Energiepartition

Das von Lindhard verwendete interatomare Potential besitzt, wie oben aufgeführt, einige substantielle Einschränkungen. In dieser Arbeit soll ein verbessertes Potential und der daraus abgeleitete elastische Streuquerschnitt verwendet werden.

Um interatomare Potential zu berechnen, benötigt man die Ladungsverteilungen der Stoßpartner. Den klassischen Modellen (Bohr, Thomas-Fermi, Molière) fehlt eine explizite Schalenstruktur, und sie skalieren einfach mit der Kernladung. Deshalb sind sie wenig geeignet für Atome mit Kernladung $Z < 10$. Neuere Hartree-Fock-Verteilungen berücksichtigen die Kristallstruktur im Festkörper und ermöglichen so präzisere Potentialberechnungen.

Ziegler et al. [8] haben aus experimentellen und theoretischen Daten für etliche Ion-Target-Kombinationen ein universales Potential berechnet, indem sie die Daten an eine Exponentialentwicklung der Abschirmfunktion $\Phi(r/a_u)$ gefittet haben. Sie erhalten mit einer neuen Abschirmlänge a_u ein Potential, dessen Standardabweichung zu 106 experimentell bestimmten interatomaren Potentialen etwa 5% beträgt:

$$\Phi_u = 0,1818e^{-3,2x} + 0,5099e^{-0,9423x} + 0,2802e^{-0,4028x} + 0,2817e^{-0,2016x}; \quad x = r/a_u$$

$$a_u = \frac{0,8853a_0}{Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23}}$$

Der zugehörige Bremsquerschnitt in reduzierten Einheiten kann ebenfalls analytisch gefittet werden:

$$\left(\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right)_n = \frac{1}{2} \frac{\ln(1+a\varepsilon)}{\varepsilon + b\varepsilon^c + d\varepsilon^{1/2}}; \quad (\varepsilon < 30)$$

$$= \frac{1}{2} \frac{\ln(1+1,1383\varepsilon)}{\varepsilon + 0,01321\varepsilon^{0,21226} + 0,19593\varepsilon^{1/2}}$$

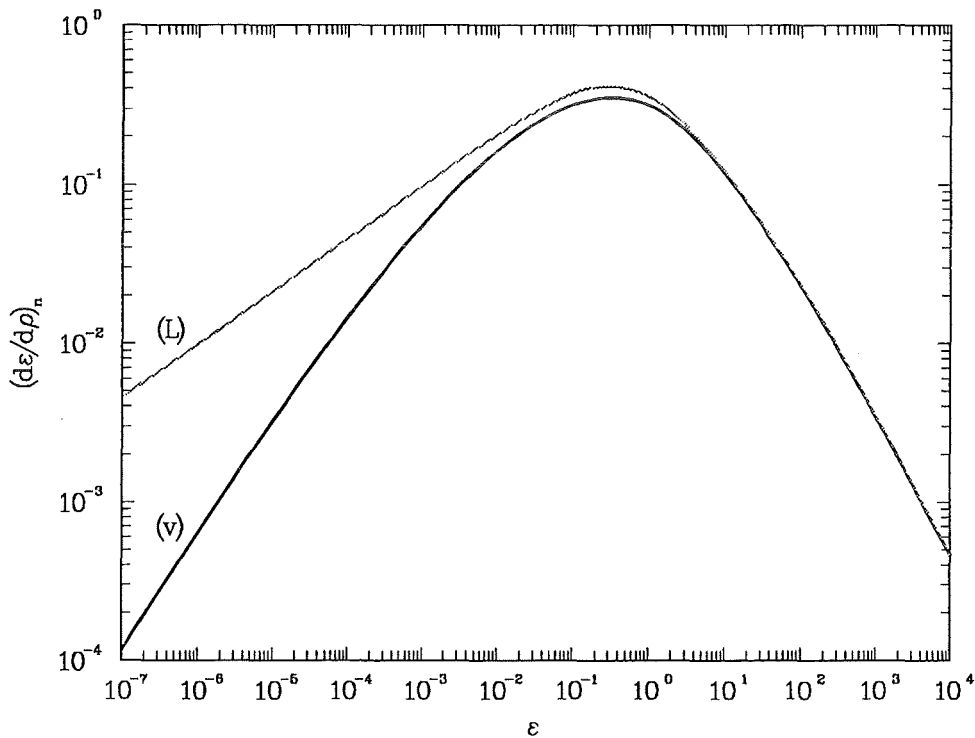


Abbildung 2-14: reduzierte Kernbremsquerschnitte: (v) verbessert, (L) Lindhard

Für hohe Energien geht die Streuung in unabschirmte Rutherfordstreuung über, [8]:

$$\left(\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right)_n = \frac{\ln \varepsilon}{2\varepsilon}; \quad (\varepsilon > 30)$$

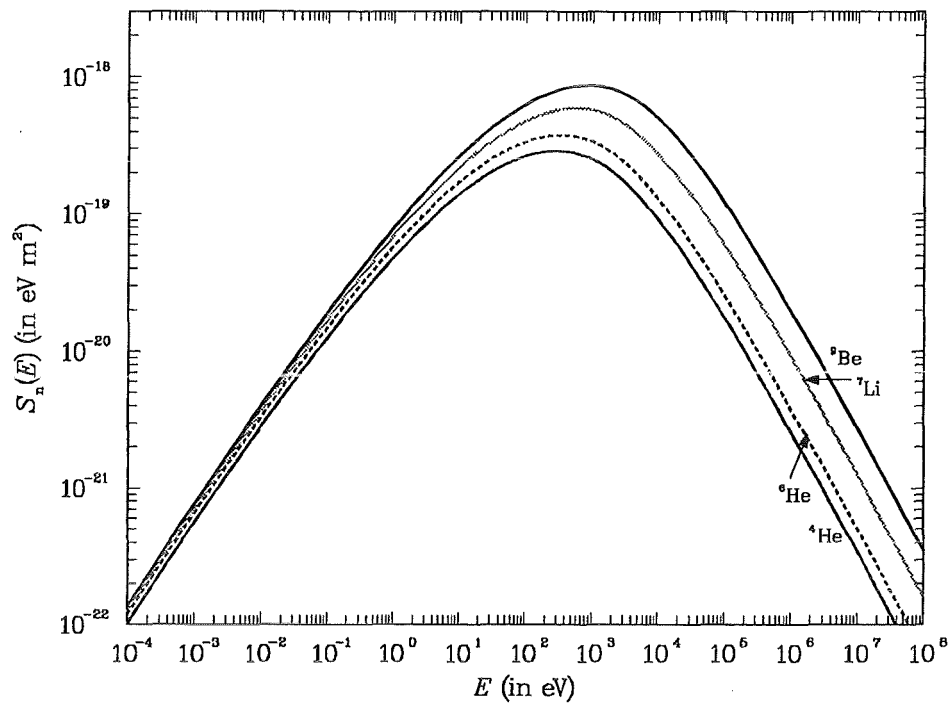


Abbildung 2-15: verbesserte Kernbremsquerschnitte

Aus der Inversen der Gleichung (21), nämlich

$$f(x) = \frac{d}{dx}(x S_n(x)),$$

kann man die $f(t^{1/2})$ -Funktion berechnen und erhält

$$f(x) = \frac{\ln A}{2B} + \frac{ax}{2AB} - \frac{x \ln A(1 + bcx^{c-1} + dx^{1/2})}{2B^2}$$

mit $A = 1 + ax$

$$B = x + bx^c + dx^{1/2}; \quad x = t^{1/2}$$

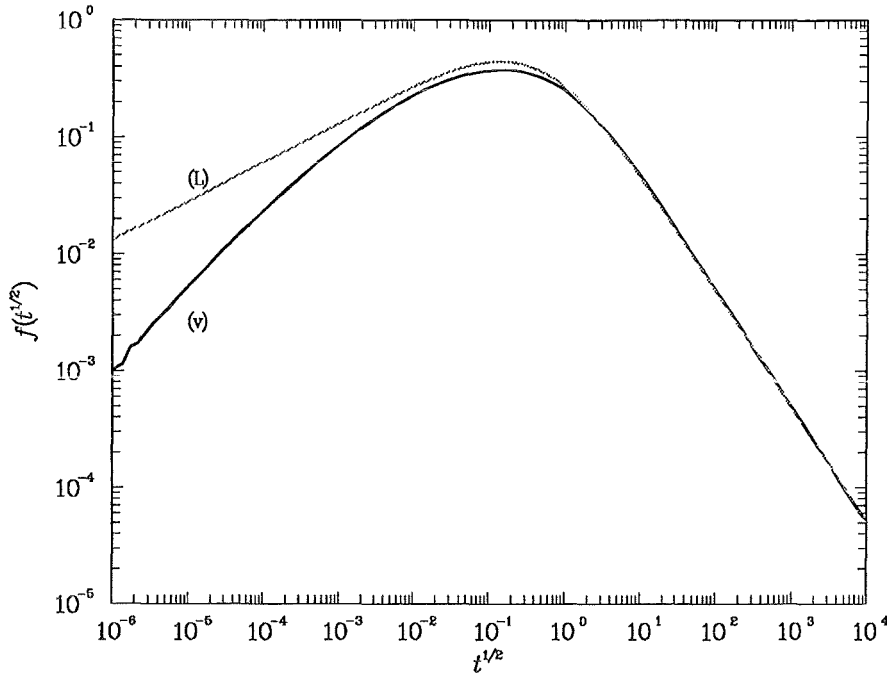


Abbildung 2-16: verbesserte $f(t^{1/2})$ -Funktion nach Ziegler (v) im Vergleich zu Lindhard (L)

Für die Berechnungen ist es sinnvoll, eine analytische Näherung dieser Funktion für $x \rightarrow 0$, d.h. $\epsilon \rightarrow 0$, zu verwenden:

$$f(x) \rightarrow \frac{a(2-c)}{2b} x^{1-c} = f_1 t^{f_2} = 77,02439 t^{0,39387} \quad (22)$$

$$f_1 = 77,02439$$

$$f_2 = 0,39387$$

Auch für die verbesserten Querschnitte (s. Abbildung 2-17) läßt sich das erwartete Verhalten der Schädigungsfunktionen ablesen. Jedoch zeigt die numerische Berechnung, daß für sehr kleine Energien das erwartete physikalische Verhalten, nämlich daß keine inelastischen Energieverluste auftreten, nicht schnell genug erreicht wird. Deshalb muß S_e entsprechend modifiziert werden, wie in Anhang C erläutert (s. auch Seite 66).

Ab 10^4 eV ist $S_e/(S_e+S_n)$ kleiner als bei Lindhard, so daß die Schädigungsenergien größer sein werden. Bei ebenfalls etwa 8 keV (für ${}^9\text{Be}$ -PKA's) sind beide Energieverluste gleich groß. Durch den Einfluß des Hochenergie-Ansatzes nach Bethe-Bloch steigt jedoch S_e immer langsamer an, was dazu führt, daß die Steigung der Schädigungsfunktion nicht sehr schnell sinkt. Um 3 MeV ist dann S_e maximal und $S_e/S_n \approx 500$, bei 100 MeV dann $S_e/S_n \approx 2000$. Die Schädigungsenergien werden also weiter ansteigen und kein Plateau ausbilden.

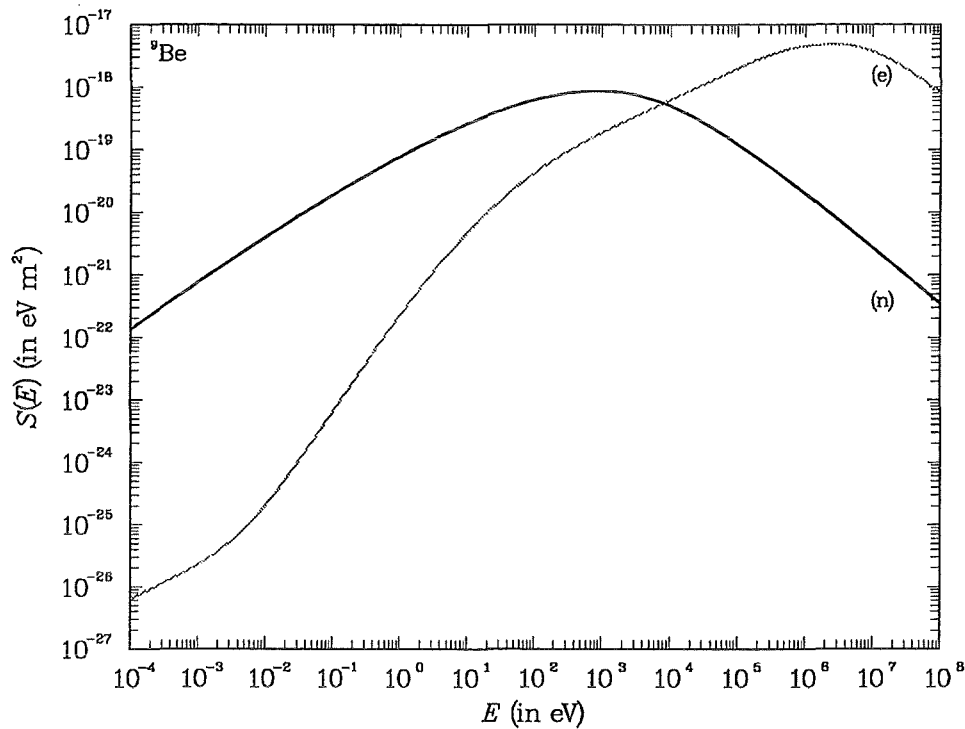


Abbildung 2-17: Vergleich von verbessertem elektronischen. und Kernbremsquerschnitt

2.3.3 Schädigungsenergie

2.3.3.1 für Lindhard-Energiepartition

Mit dem Ansatz für den elastischen Streuquerschnitt gemäß Gleichung (19) lautet nun die homogene Lindhard-Gleichung (12) in reduzierten Größen (im Falle der Eigenionenbestrahlung, d.h. $Z_1 = Z_2$):

$$\bar{v}'(\varepsilon) \left(\frac{d\varepsilon}{d\rho} \right)_e = \int_0^{\varepsilon^2} \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) \{ \bar{v}(\varepsilon - t/\varepsilon) - \bar{v}(\varepsilon) + \bar{v}(t/\varepsilon) \} \quad (23)$$

Lindhard hat diese Gleichung mit seinen Ansätzen für den elektronischen Bremsquerschnitt und den elastischen Streuquerschnitt numerisch gelöst und asymptotische Abhängigkeiten festgestellt. Demnach gilt

$$\text{für } \varepsilon \text{ hinreichend groß: } \bar{v} \propto \frac{1}{k}$$

$$\text{für } \varepsilon \text{ hinreichend klein: } \varepsilon - \bar{v} \propto k$$

Kombiniert man beide Eigenschaften, so kommt man auf folgende funktionale Abhängigkeit von $\bar{\nu}(\epsilon)$:

$$\bar{\nu}(\epsilon) = \frac{\epsilon}{1 + k \cdot g(\epsilon)} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \text{und } g(\epsilon) &\rightarrow 0 \quad (\epsilon \rightarrow 0) \\ g(\epsilon) &\rightarrow \epsilon \quad (\epsilon \rightarrow \infty) \end{aligned}$$

Die semi-empirische Funktion $g(\epsilon)$ wurde von Lindhard graphisch konstruiert. Robinson [49] hat dafür einen analytischen Fit erstellt, der in das NRT-Modell integriert wurde:

$$g(\epsilon) = 3,4008 \cdot \epsilon^{1/6} + 0,40244 \cdot \epsilon^{3/4} + \epsilon \quad (25)$$

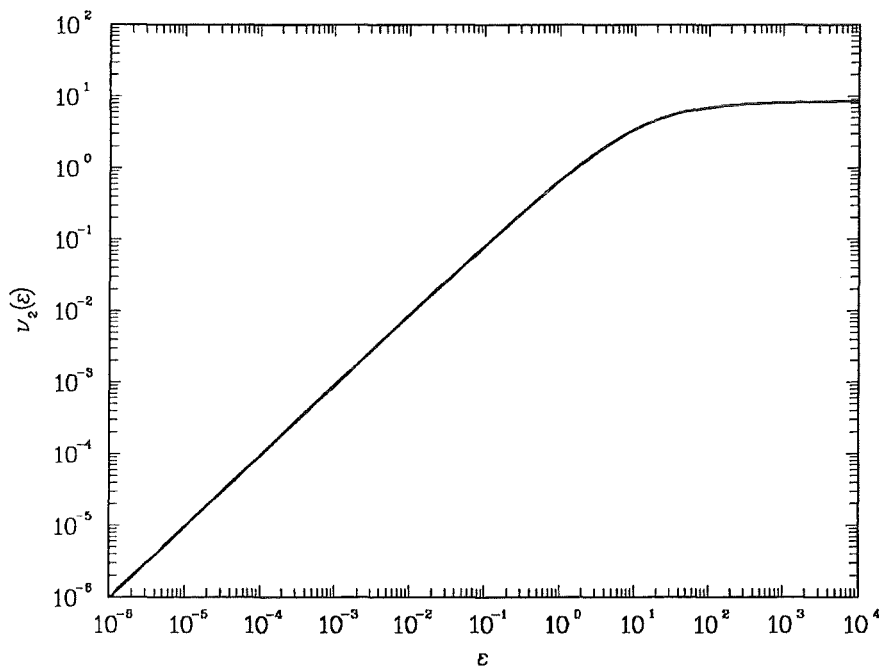


Abbildung 2-18: reduzierte Schädigungsfunktion (Lindhard) für $Z_1 = Z_2$

In dieser Form kann die Berechnung der Schädigungsenergie streng nur für den Fall $Z_1 = Z_2$ angewandt werden, da die Lindhard-Gleichung gerade für diesen Fall aufgestellt und gelöst wurde. Tatsächlich steckt jedoch in dem Parameter k eine formale, aber irreführende Abhängigkeit von den Materialgrößen Z_1 , Z_2 , A_1 und A_2 . Bisherige Schädigungsrechnungen mit dem NRT-Modell haben sich dieser rein formalen Abhängigkeit bedient, um auch den Fall $Z_1 \neq Z_2$ zu behandeln.

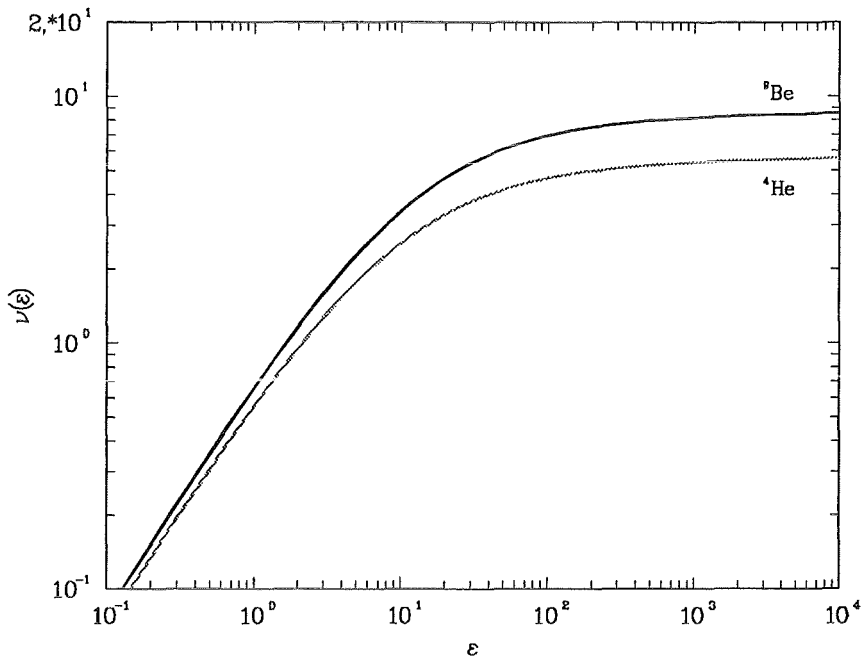


Abbildung 2-19: reduzierte Schädigungsfunktionen (Lindhard) für ${}^9\text{Be}$ und ${}^4\text{He}$

Die folgende Abbildung zeigt die Schädigungsfunktionen für alle betrachteten Ionen. Dabei zeigt sich, daß diese zunächst proportional der Energie sind um dann immer flacher zu steigen, bis sie in einen Plateau-Bereich einmünden.

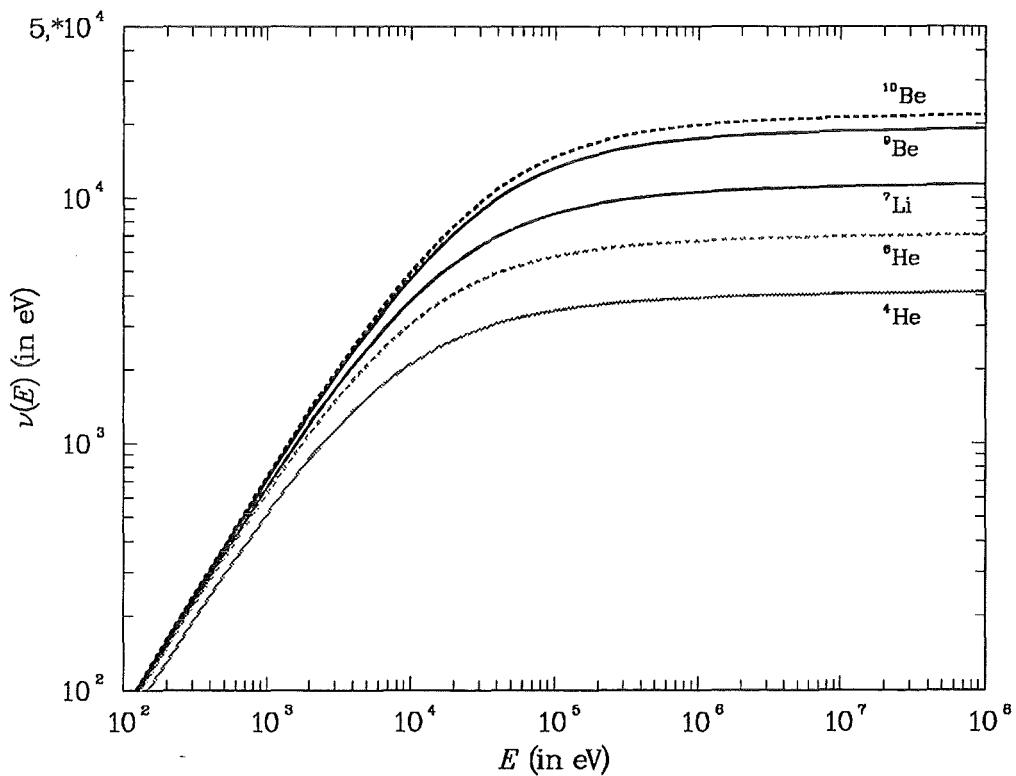


Abbildung 2-20: Schädigungsfunktionen (Lindhard)

Der Plateau-Bereich beginnt ab ca. 0,1 MeV (für leichte Ionen) bis 1 MeV (für schwerere Ionen). Für höhere Energien wächst die Schädigungsenergie praktisch nicht mehr und bleibt auf folgenden Werten:

Tabelle 2-2: Schädigungsenergien nach Lindhard im Plateau-Bereich

	⁹ Be	⁴ He	⁶ He	⁷ Li	¹⁰ Be
Schädigungsenergie in eV	1,9x10 ⁴	4,1x10 ³	7,1x10 ³	1,1x10 ⁴	2,2x10 ⁴
bezogen auf ⁹ Be (in %)	100	21	37	59	113

Für die leichteren Ionen ist die Schädigungsenergie immer kleiner als für z.B. ⁹Be. Dies rührt daher, daß der elastische Energieverlust am Kern stärker sinkt als die elektronische Abbremsung.

Betrachtet man die Schädigungseffizienz, also das Verhältnis von Schädigungsenergie zur Gesamtenergie $\bar{\nu}(E)/E$, so erhält man für ⁹Be und ⁴He folgendes Bild (die anderen Ionen liegen zwischen beiden Kurven):

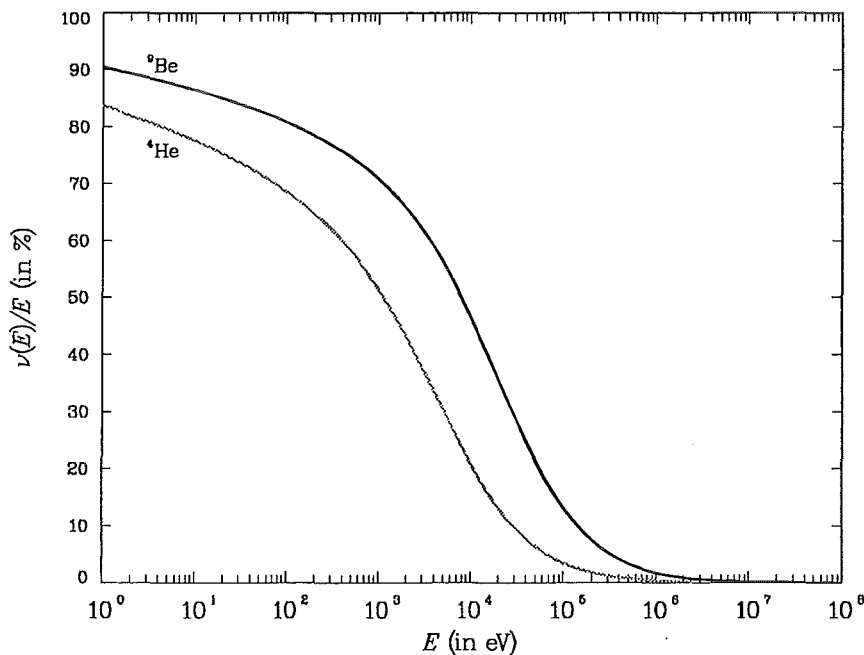


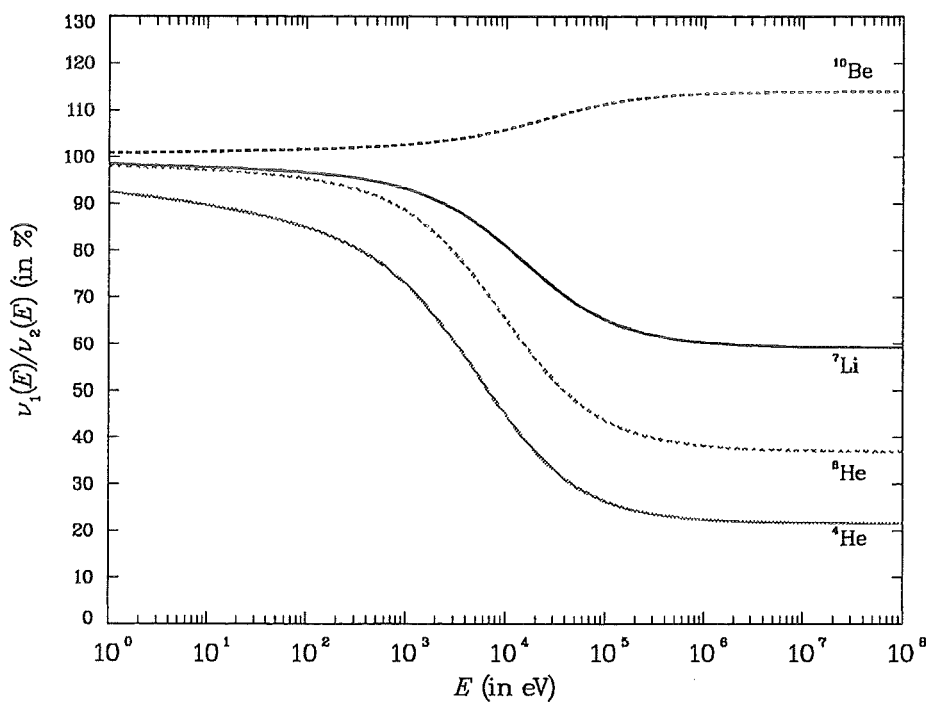
Abbildung 2-21: Schädigungseffizienz (Lindhard) für ⁹Be und ⁴He

Zunächst ist die Schädigungseffizienz sehr hoch (bei mehr als 80 %). Ab etwa 1...10 eV sinkt sie dann sehr rasch ab und erreicht 50 % bei etwa 1 keV (für ⁴He) bzw. 8...10 keV (für ⁹Be). Für höhere Energien hat man dann folgende Werte:

Tabelle 2-3: Schädigungseffizienz (Lindhard) in %

E in eV	${}^9\text{Be}$	${}^4\text{He}$	${}^6\text{He}$	${}^7\text{Li}$	${}^{10}\text{Be}$
$1,1 \times 10^5$	12,2	3,18	5,29	7,94	13,6
$1,0 \times 10^6$	1,74	0,39	0,67	1,05	1,98
$1,0 \times 10^7$	0,19	0,04	0,07	0,11	0,21

Das Verhältnis der Schädigungsfunktionen $\bar{\nu}_1$ für $Z_1 \neq Z_2$ zur Eigenionen-Schädigungsfunktion $\bar{\nu}_2$ zeigt folgende Energieabhängigkeit:

Abbildung 2-22: Verhältnis der Schädigungsfunktionen (Lindhard) zu ${}^9\text{Be}$

2.3.3.2 für verbesserte Energiepartition

a) Entwicklung eines numerischen Verfahrens

Mit dem verbesserten elektronischen Bremsquerschnitt und der neuen $f(t^{1/2})$ -Funktion sollen nun die Schädigungsfunktionen für Eigenionen und für Fremdionen gemäß (12) und (13) berechnet werden.

Die sich zunächst anbietende direkte Iteration dieser Gleichungen hat sich als unbrauchbar erwiesen. Für die Schädigungsenergie nach Lindhard konnte selbst bei Wahl des Robinson-Fits (s. Gleichungen (24), (25)) als Startfunktion keine Konvergenz erzielt werden. Der

Grund hierfür ist in der Differenz $\{\bar{v}_2(E-T) - \bar{v}_2(E) + \bar{v}_2(T)\}$ zu suchen. Bereits kleine Änderungen in $\bar{v}_2(E)$ können hier große relative Abweichungen verursachen und den Wert des Integrals drastisch verändern, so daß die folgenden Iterationen immer weiter auseinanderlaufen.

Andererseits zeigt die aus der Kontinuitätsgleichung berechnete Steigung an, wohin die gesuchte Funktion korrigiert werden sollte. Wenn insbesondere die berechnete Steigung mit der tatsächlichen in einem gewissen Bereich übereinstimmt, so kann man erwarten, daß die Lösungsfunktion relativ eng an der augenblicklichen Iteration liegt.

Diese Erfahrung propagiert eine indirekte Iteration, mit einer oberen und unteren Schranke. Das Verfahren hängt an der Annahme, daß eine zu große Funktion, sofern sie glatt genug ist, stets kleinere berechnete Ableitungen liefert (und umgekehrt). Mit verschiedenen Funktionen in der originalen Lindhard-Berechnung konnte diese Annahme empirisch überprüft werden.

Zwischen diesen beiden Funktionen kann nun iteriert werden. Dabei wird punktweise in Abhängigkeit von der Differenz der berechneten und der tatsächlichen Ableitung korrigiert. Hier konnte bis $\varepsilon = O(10^{-1})$ Konvergenz erzielt werden, oberhalb davon zeigte sich ein irreguläres Verhalten.

Für kleine ε liegen nämlich beide Startfunktionen sehr dicht beieinander (Abweichung nur wenige Prozent) und die Steigung liegt nahe bei 1. Damit wird die verlangte Monotonie der Schädigungsfunktion erreicht. Anders liegt der Fall, wenn ε sehr groß wird. Dann kann die Monotonie verletzt werden und obige Differenz im Integranden auch negative Beiträge liefern.

Dieses iterative Verfahren kann also, selbst mit einigen kleineren Verbesserungen, nicht über den gesamten gewünschten Energiebereich, d.h. ε bis etwa $O(10^4)$, verwendet werden. Für den noch übrigen Energiebereich soll deshalb ein modifiziertes Runge-Kutta-Verfahren eingesetzt werden.

Problematisch für die Anwendung eines Runge-Kutta-Verfahrens ist, daß die zu lösende Gleichung keine gewöhnliche Differentialgleichung, sondern eine integro-differentielle Gleichung ist. Die rechte Seite hängt nicht nur von dem aktuellen Funktionswert ab, sondern vom gesamten Verlauf der gesuchten Funktion bis zur aktuell zu berechnenden Stelle. Diese Schwierigkeit kann umgangen werden, wenn erstens eine Startfunktion über einen gewissen Bereich vorgegeben ist und zweitens die Zwischenschritte des Verfahrens in einen Spline-Fit der Funktion aufgenommen werden, so daß die Integralberechnung auf diesen Bereich zugreifen kann. Als konkretes Runge-Kutta-Verfahren kommt das in Anhang D vorgestellte Schema zum Einsatz.

b) verwendetes numerisches Verfahren

Für die Berechnung der Schädigungsfunktionen über den gesamten relevanten Energiebereich bietet sich nach dem zuvor gesagten die Kombination aus Iteration und anschließendem Runge-Kutta-Verfahren an. Das Runge-Kutta-Verfahren selbst konnte ohne Startfunktion über einige Energiedekaden nicht erfolgreich angewendet werden, so daß die Iteration nötig ist, um diese Startfunktion zu liefern.

Zur Bestimmung einer geeigneten Startfunktion für die Iteration wurde die Lindhard-Gleichung für $\varepsilon \rightarrow 0$ asymptotisch entwickelt, wobei aus physikalischen Überlegungen der elektronische Bremsquerschnitt unterhalb einer gewissen Schwelle E_0 durch ein vorgegebenes Potenzverhalten angepaßt werden mußte (s. Anhang C). Damit konnte dann für alle Ionen Konvergenz bis $\varepsilon = O(10^{-1})$ erzielt werden, wobei für die Fremdionen-Berechnung ($\bar{v}_1(\varepsilon)$) die vollständige Lösung der Eigenionen-Berechnung ($\bar{v}_2(\varepsilon)$) mitverwendet wurde. Berechnet wurden jeweils 10 Punkte pro Dekade ab $E_{\min} = 10^{-5}$ eV mit der Schwellenenergie $E_0 = 10^{-2}$ eV. Noch kleinere Anfangsenergien brachten keine Verbesserungen (bis $E_{\min} = 10^{-7}$ eV).

Der Einfluß einer anderen willkürlichen Schwelle E_0 ($10^{-3} \dots 10^1$ eV) wirkte sich im wesentlichen auf die Konvergenzgeschwindigkeit der Iteration aus, da sich die Startfunktionen als ungünstig erwiesen. Trotzdem lagen die Ergebnisse im Konvergenzbereich i.a. deutlich weniger als 1 % auseinander. Inwieweit sich der Potenzansatz des elektronischen Bremsquerschnitts unterhalb der Schwelle E_0 auswirkt, wurde exemplarisch an einem veränderten Exponenten untersucht (vgl. Anhang C: $d\varepsilon/d\rho \propto \varepsilon^{2,78774}$ statt $\varepsilon^{1,78774}$). Wieder zeigten sich nur sehr geringe Änderungen von weniger als 1 %.

Somit kann man konstatieren, daß die Iteration im wesentlichen unabhängig von dem willkürlichen asymptotischen Ansatz für $d\varepsilon/d\rho$ ist. Zudem ist durch die Wahl einer sehr tief angesetzten Schwelle ($E_0 = 10^{-2}$ eV) nur ein kleiner Bereich im Verlauf der Schädigungsenergie willkürlich. Oberhalb von E_0 wird dann mit den tatsächlichen Querschnitten korrekt weitergerechnet.

Die so berechneten Schädigungsfunktionen dienen nun als Startfunktion für das anschließende Runge-Kutta-Verfahren. Der Startwert für dieses Verfahren wurde aus dem Vergleich von der aus der Lindhard-Gleichung berechneten Ableitung mit der tatsächlichen Steigung der verwendeten Schädigungsfunktion ermittelt. Ein Startwert mit $\bar{v}'(\varepsilon) \approx 1$ führt jedoch zu einem Versagen des Verfahrens, so daß man möglichst hohe Startwerte verwenden sollte. Für die verschiedenen relevanten Ionen wurden folgende Startwerte verwendet:

Tabelle 2-4: Startwerte für Runge-Kutta-Verfahren (Berechnung der Schädigungsenergie)

	⁹ Be	⁴ He	⁶ He	⁷ Li	¹⁰ Be
Startwert (in eV)	100	7	20	20	20

Als Schrittweite haben sich 250 pro Dekade (d.h. $h = (10^{1/250} - 1)\epsilon = 0,009253 \epsilon$) als günstig erwiesen. Kleinere Schrittweiten brachten kaum Verbesserungen (z.B. 500 pro Dekade ergibt Effekt von $O(10^{-5} \dots 10^{-4})$)

c) Ergebnisse und Vergleich mit Lindhard

Zunächst wurde die reduzierte Schädigungsfunktion für $Z_1 = Z_2$ berechnet:

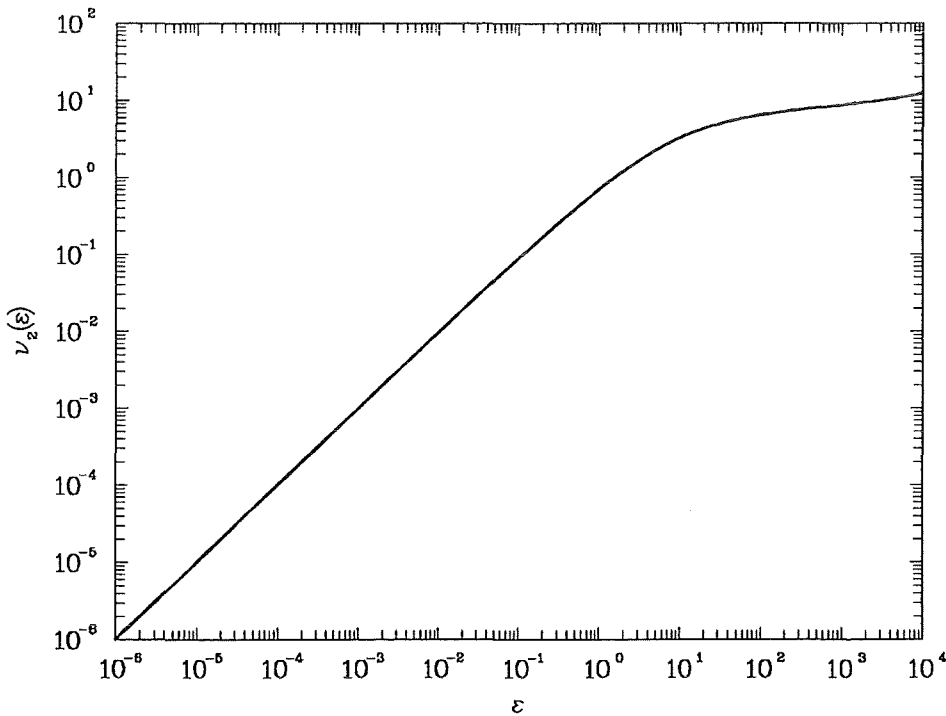


Abbildung 2-23: reduzierte Schädigungsfunktion für $Z_1 = Z_2$

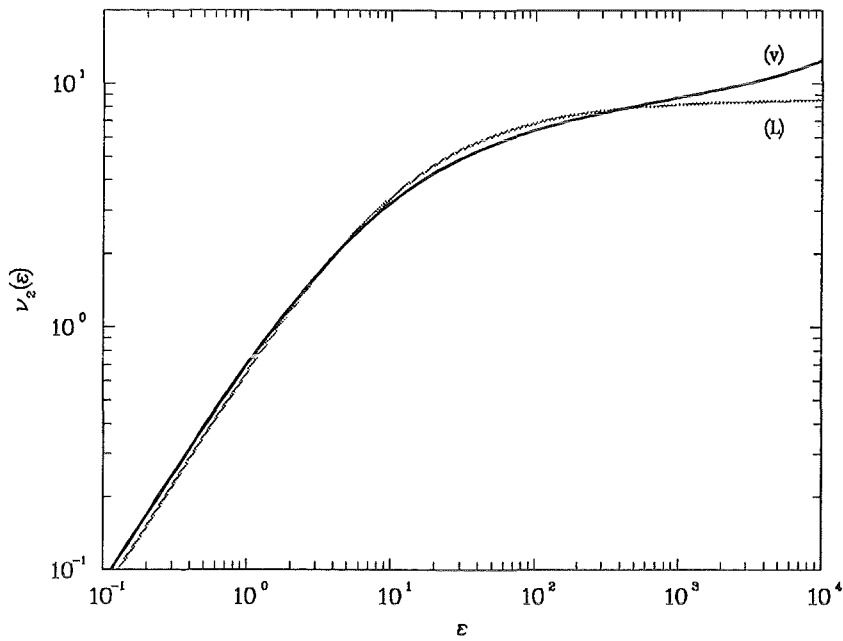


Abbildung 2-24: reduzierte Schädigungsfunktion für $Z_1 = Z_2$; (v) verbessert, (L) Lindhard

Mit dieser Kurve ist dann die Berechnung aller gewünschten Schädigungsfunktionen möglich. In physikalischen Einheiten erhält man folgende Schädigungsenergien für die unterschiedlichen PKA's:

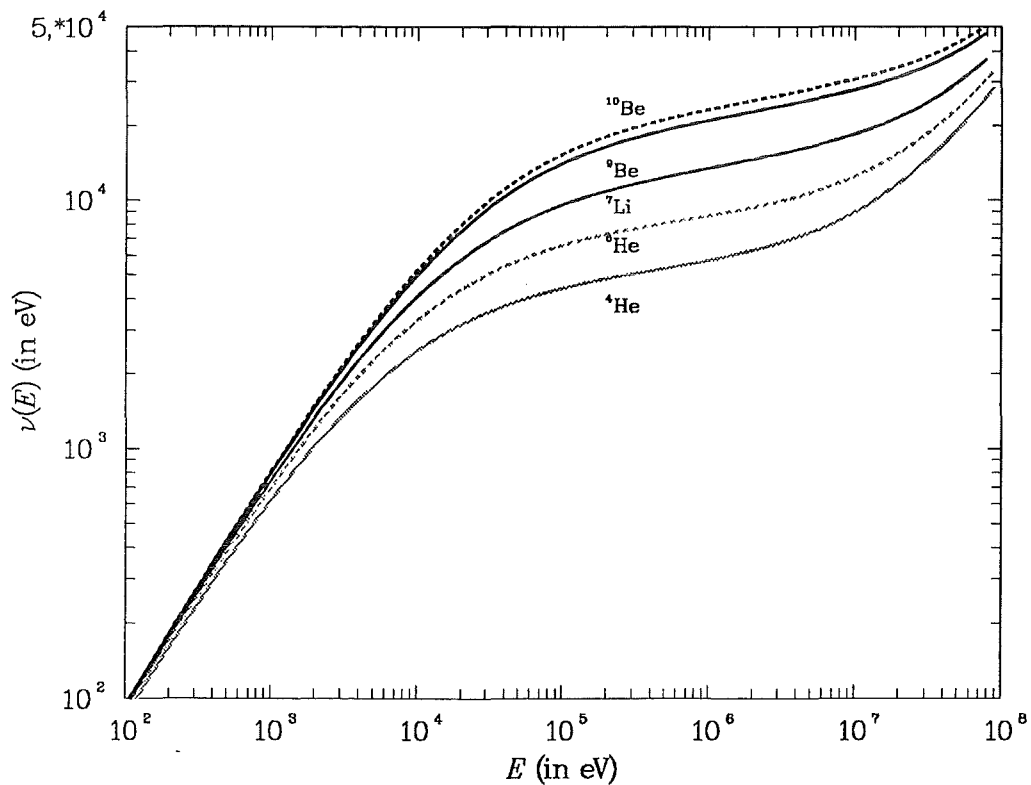


Abbildung 2-25: Schädigungsfunktionen (verbessert)

Analog den Ergebnisse nach Lindhard steigen die Funktionen zunächst wie die Energie. Der Anstieg verflacht dann für höhere Energien, ohne jedoch zu einem Plateau zu führen. Vielmehr wächst die Schädigungsenergie für sehr hohe Energien (für leichte Ionen ab einigen MeV, für schwerere ab ca. 10...20 MeV) sehr stark an. Hier macht sich der verbesserte elektronische Bremsquerschnitt bemerkbar, der gemäß der Bethe-Bloch-Formel wieder drastisch sinkt.

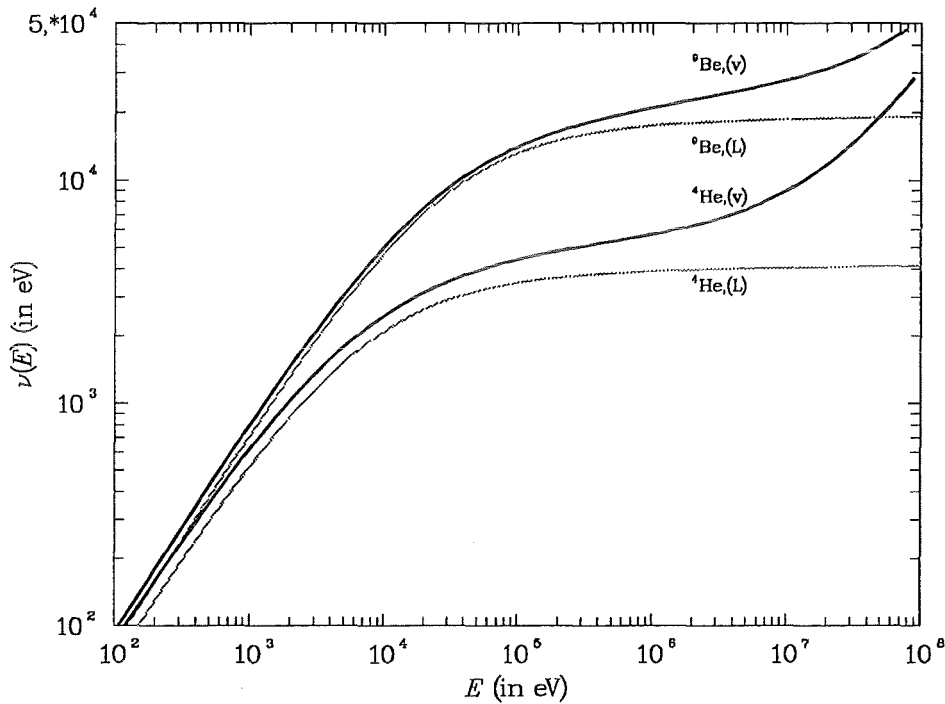


Abbildung 2-26: Schädigungsfunktionen für ${}^9\text{Be}$ und ${}^4\text{He}$; (v) verbessert, (L) Lindhard

Im Vergleich zu Lindhard liegen alle Schädigungsfunktionen höher, man erwartet also eine größere Schädigungseffizienz.

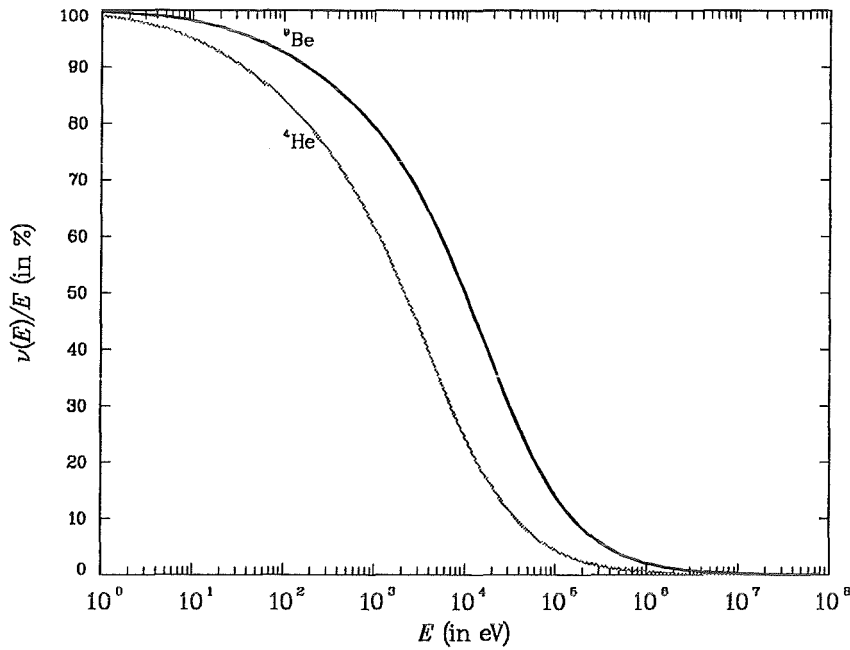


Abbildung 2-27: Schädigungseffizienz (verbessert) für ⁹Be und ⁴He

Für kleine Energien hat man eine Schädigungseffizienz von annähernd 100 %. Erst ab ca. 100 eV folgt dann ein drastischer Abfall. Die 50 %-Schranke wird später als bei Lindhard erreicht: bei etwa 2 keV für ⁴He und mehr als 10 keV für ⁹Be. Für immer höhere Energien liegt die Schädigungseffizienz weit oberhalb den Werten für die Lindhard-Funktionen (vgl. Tabelle 2-3):

Tabelle 2-5: Schädigungseffizienz (verbessert) in %

<i>E</i> in eV	⁹ Be	⁴ He	⁶ He	⁷ Li	¹⁰ Be
1,1x10 ⁵	13,1	4,06	6,07	8,90	14,3
1,0x10 ⁶	2,10	0,57	0,87	1,34	2,32
1,0x10 ⁷	0,28	0,09	0,12	0,18	0,31

Betrachtet man für die verbesserten Schädigungsfunktionen den Quotienten $\bar{\nu}_1(E)/\bar{\nu}_2(E)$ (Schädigungsfunktion für Fremdionen zu Eigenionen) so erhält man folgendes Bild:

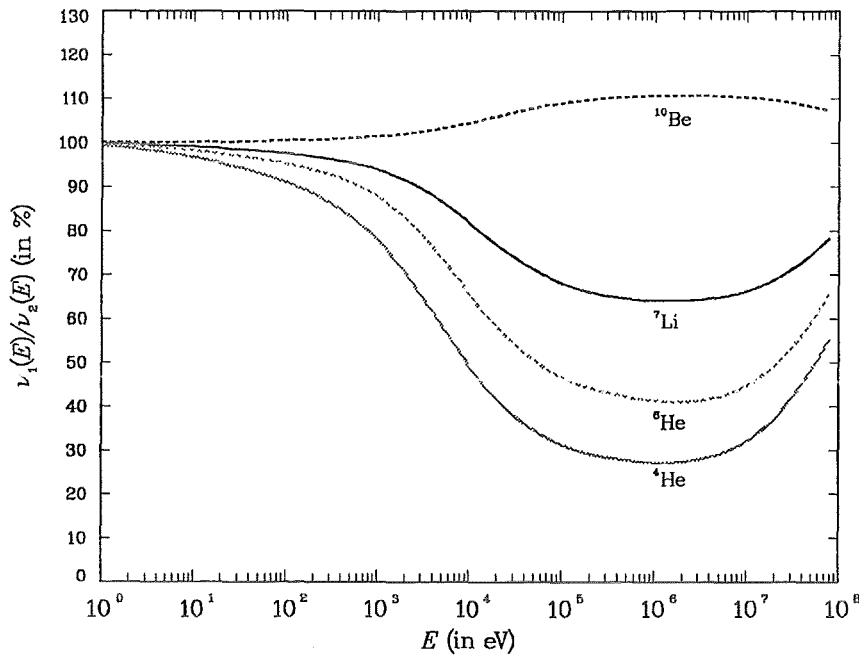


Abbildung 2-28: Verhältnis der Schädigungsfunktionen (verbessert) zu ${}^9\text{Be}$

Im Gegensatz zu den Ergebnissen der Lindhard-Theorie hat man für kleine Energien (bis etwa 10 eV) praktisch identische Schädigungsfunktionen. Im Energiebereich von $O(10^5 \dots 10^7 \text{ eV})$ sind die Quotienten annähernd konstant (die Schädigungsenergien sind nicht konstant!). Für etwa 1 MeV sind die Quotienten extremal und die Schädigungsenergien weisen folgende Werte auf:

Tabelle 2-6: Schädigungsenergien (verbessert) für $E=10^6 \text{ eV}$

	${}^9\text{Be}$	${}^4\text{He}$	${}^6\text{He}$	${}^7\text{Li}$	${}^{10}\text{Be}$
Schädigungsenergie in eV	$2,1 \times 10^4$	$5,7 \times 10^3$	$8,7 \times 10^3$	$1,3 \times 10^4$	$2,3 \times 10^4$
bezogen auf ${}^9\text{Be}$ (in %)	100	27	41	64	111

Anhand der ${}^9\text{Be}$ -Ionen (Eigenionen) und ${}^4\text{He}$ -Ionen (leichtes Ion, deutlich verschieden vom Gitteratom) sollen nun die durch die verbesserten Querschnitte erzielten Änderungen in den Schädigungsfunktionen diskutiert werden. Dazu ist im folgenden die relative Änderung der verbesserten zur alten (Lindhard) Schädigungsfunktion über der Energie der Ionen aufgetragen:

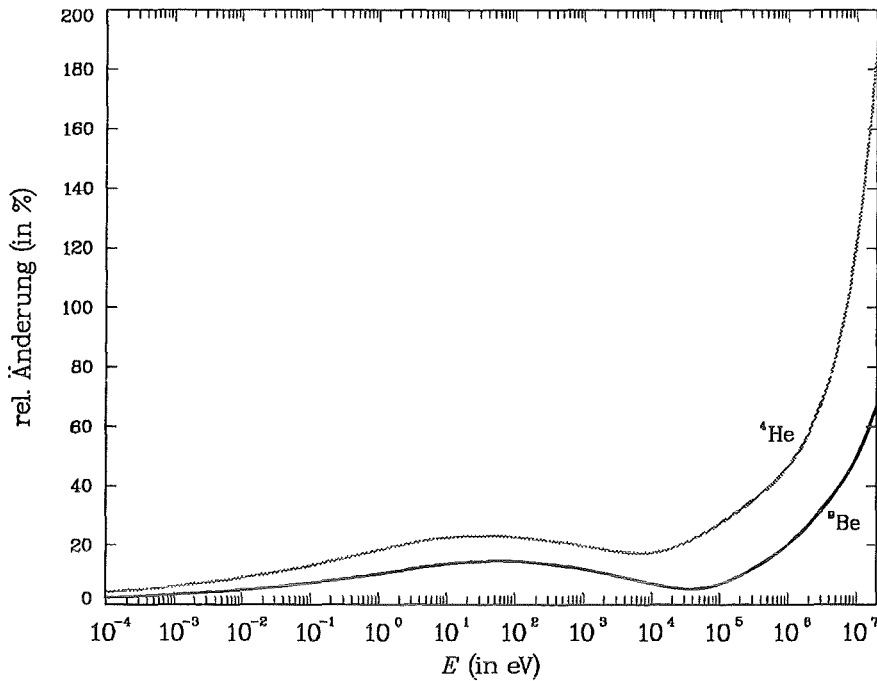


Abbildung 2-29: relative Änderung der Schädigungsenergien durch verbesserte Rechnung (für ${}^9\text{Be}$ und ${}^4\text{He}$)

Dabei erkennt man, daß für ${}^4\text{He}$ die erzielte Änderung größer ist als für die Eigenionen. Der Verlauf in Abhängigkeit von der Ionenenergie ist jedoch sehr ähnlich: bis etwa 10 eV schwacher Anstieg auf ca. 10 % (${}^9\text{Be}$) bzw. 20 % (${}^4\text{He}$), danach Abfall auf ein Minimum bei ca. 40 keV (${}^9\text{Be}$) bzw. 7 keV (${}^4\text{He}$). Für höhere Energien steigt die Abweichung dramatisch an, besonders für ${}^4\text{He}$ (bei etwa 7 MeV Verdopplung der Schädigungsenergie):

Tabelle 2-7: relative Änderung der Schädigungsenergien durch verbesserte Rechnung (in %)

E in eV	${}^9\text{Be}$	${}^4\text{He}$
$1,1 \times 10^5$	7,08	27,8
$1,0 \times 10^6$	20,2	46,4
$2,0 \times 10^6$	26,8	57,5
$3,3 \times 10^6$	32,4	69,5
$4,1 \times 10^6$	35,1	76,3
$7,4 \times 10^6$	43,8	101,8
$1,0 \times 10^7$	49,2	120,4

Zusammenfassend kann man feststellen, daß vor allem für die leichten Ionen gravierende Änderungen in Größe und Verlauf der Schädigungsenergie auftreten. Die verbesserten Schädigungsfunktionen liegen höher als die entsprechenden aus der Lindhard-Theorie. Dies ist hauptsächlich durch die stärkere Abnahme der elektronischen Abbremsung für geringe Ener-

gien (im Vergleich zur nuklearen Abbremsung) bedingt. So steht bereits für thermische Energien mehr Schädigungsenergie zur Verfügung. Im Hochenergiebereich, dort, wo der elektronische Bremsquerschnitt langsamer ansteigt, um schließlich gemäß Bethe-Bloch zu sinken, steigen die Schädigungsfunktionen wieder sehr stark an. Dabei verringert sich die relative Differenz zwischen den verschiedenen Ionen, so daß dann (oberhalb etwa 100 MeV) in grober Näherung die Schädigung unabhängig von den Massen und Ladungen der Ionen ist.

Anders als bei Lindhard spielt die Energie der Ionen für die Schädigungsenergie über den gesamten Bereich eine Rolle. Bei Lindhard wird ab $O(10^5 \text{ eV})$ ein Plateau erreicht, so daß noch größere Ionenenergien keine größere Schädigung verursachen. Mit den verbesserten Schädigungsfunktionen hat man jedoch einen deutlichen Anstieg auch für höhere Energien (oberhalb einigen MeV). Damit spielt die Energieverteilung von PKA's auch in diesem Bereich für die Verlagerungsschädigung eine wichtige Rolle.

2.4 NRT-Modell

2.4.1 Beschreibung des Modells

Zur Bestimmung der Strahlenschädigung durch Gitteratomverlagerungen benötigt man die mittlere Anzahl der sekundären Verlagerungen N_d in Abhängigkeit von der Energie der PKA's. Ausgangspunkt des von Norgett, Robinson und Torrens vorgeschlagenen Modells zur Berechnung von N_d (NRT-Modell, [42]) ist das Kinchin-Pease-Modell (s. [42]):

$$N_d(E) = \begin{cases} 0 & ; 0 \leq E < E_d \\ 1 & ; E_d \leq E < 2E_d \\ E/2E_d & ; 2E_d \leq E < E_1 \\ E_1/2E_d & ; E_1 \leq E \end{cases}$$

Oberhalb E_d treten permanente Verlagerungen auf. Dabei verlieren die PKA's ihre Energie durch elastische Streuung an den Gitteratomen, die durch das Modell einer harten Kugel charakterisiert sind. Oberhalb der Energie E_1 treten dann nur noch elektronische Energieverluste auf, so daß keine weiteren Verlagerungen stattfinden können.

Nach Computer-Simulationen von Stoßkaskaden (Modell binärer Stöße, [50,51]) haben Norgett et al. eine modifizierte Kinchin-Pease-Formel aufgestellt:

$$N_d(E) = \begin{cases} 0 & ; 0 \leq E_{\text{dam}} < E_d \\ 1 & ; E_d \leq E_{\text{dam}} < 2,5E_d \\ \kappa \frac{E_{\text{dam}}}{2E_d} & ; 2,5E_d \leq E_{\text{dam}} \end{cases} \quad (26)$$

E_d Schwellenenergie für permanente Verlagerungen

E_{dam} Schädigungsenergie

κ Effektivitätsfaktor

Der Effektivitätsfaktor ist nahezu unabhängig von der Energie (außer für $E \rightarrow E_d$) und wird mit dem Wert 0,8 angegeben (s. [42,50,51]).

Norgett et al. verwenden die Lindhard-Energiepartition zur Bestimmung von $E_{\text{dam}}(E)$, so daß ihr Modell in folgender Weise beschrieben werden kann:

N_d gemäß Gleichung (26)

$$\kappa = 0,8$$

$$E_{\text{dam}} = \frac{E}{1 + k \cdot g(\epsilon)}$$

$$g(\epsilon) = 3,4008 \cdot \epsilon^{1/6} + 0,40244 \cdot \epsilon^{3/4} + \epsilon$$

$$k = 0,1337 \cdot Z_1^{1/6} \left(\frac{Z_1}{M_1} \right)^{1/2}$$

$$\epsilon = E \frac{a M_2}{Z_1 Z_2 e^2 (M_1 + M_2)}$$

$$a = \left(\frac{9\pi^2}{128} \right)^{1/3} \frac{a_0}{Z^{1/3}}$$

Dabei ist für k vereinfachend $Z_1 = Z_2$ gesetzt, und

$$Z^{2/3} = Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}$$

2.4.2 Diskussion des Modells

Das NRT-Modell in der vorliegenden Form ist als etabliertes und standardisiertes Strahlenschädigungsmodell anerkannt. Im Zusammenhang mit der Frage nach der physikalischen Bedeutung dieses Modells ergeben sich einige Ansatzpunkte zur kritischen Betrachtung.

Eine wesentliche Voraussetzung des NRT-Modells liegt in der Gültigkeit der Lindhard-Energiepartitionstheorie, wie sie im vorigen dargestellt wurde. Danach müssen die einzelnen Stoßprozesse, und damit die einzelnen Verlagerungen, unkorreliert sein. Ansonsten kann das Konzept der Verlagerungen als Produktion eines Frenkelpaares aus Loch und Zwischengitterplatz nicht angewandt werden (s. dazu [51]). Auf die Einschränkungen der Lindhard-Theorie für Energiebereiche und Materialgrößen wurde schon oben (S. 35, 44, 54) eingegangen.

Problematisch ist das Konzept einer festen und im wesentlichen willkürlich gewählten Schwelle E_d für Verlagerungen, gemittelt über verschiedene Kristallrichtungen, unabhängig von Temperatur, Kristallstruktur usw. Der zusätzliche Effektivitätsfaktor κ wird als konstant betrachtet, obwohl schon Robinson [49] ein steigendes κ für $E \rightarrow E_d$ festgestellt hat.

Um die augenblicklichen Unwägbarkeiten des NRT-Modell bezüglich der Proportionalität von E_{dam} und N_d mit den Parametern κ und E_d auszuklammern, sollte man den Schädigungsenergie-Querschnitt σ_{dam} verwenden, der PKA-Spektren und Schädigungsenergie kombiniert.

Mit der Berechnung von Verlagerungen pro Atom (dpa) durch das NRT-Modell verbindet man zunächst die Vorstellung von stabilen Gitterveränderungen. Tatsächlich scheint es jedoch so zu sein, daß die NRT- dpa nur ein Korrelationsparameter für unterschiedliche Strahlenbelastungen darstellen. Umfangreiche Untersuchungen (s. dazu [23]) haben gezeigt, daß Bildung und anschließender Zerfall einer Verlagerungskaskade in zumindest drei sich überlappende Bereiche eingeteilt werden kann. Die Kollisionsphase, in der alle Verlagerungen auftreten, dauert um 10^{-13} s. Die anschließende Abkühlungsphase (bis etwa 10^{-11} s) sorgt für Rekombination, Cluster-Bildung und Austauschreaktionen und wird durch eine Diffusionsphase ergänzt, in der die Defekte bei entsprechend hoher Temperatur im Gitter diffundieren. Hochenergetische PKA's initiieren stark lokalisierte Stoßkaskaden, die sich in Subkaskaden auffächern können. Innerhalb dieser Kaskadenzonen können nicht mehr einzelne Frenkelpaare verfolgt werden, vielmehr werden in der Abkühlungsphase zahllose Austausch- und Rekombinationseffekte erwartet. Die Zahl der aus einer Kaskade übrigbleibenden stabilen Gitterdefekte ist demnach nur ein Bruchteil der NRT- dpa . In [23] findet man eine Zusammenstellung geeigneter Größen, die physikalische Schädigung plausibler beschreiben können als das herkömmliche Konzept von NRT-Verlagerungen.

In dieser Arbeit sollen lediglich die Unsicherheiten des NRT-Modells bezüglich der Schädigungsenergie für ein leichtes Target (wie es ${}^9\text{Be}$ ist) und Energie der PKA's durch verbesserte Rechnungen verringert werden. Im folgenden Kapitel werden die Schädigungsgrößen σ_{dam} , σ_D und dpa/s berechnet und die erzielten Änderungen zu den Lindhard-Werten analysiert.



3 VERLAGERUNGSSCHÄDIGUNG

3.1 Berechnungen

Ziel dieser Arbeit ist es, die neutroneninduzierte Verlagerungsschädigung in ${}^9\text{Be}$ zu berechnen. Zu deren quantitativer Erfassung eignen sich die Größen

Schädigungsenegie - Querschnitt	σ_{dam}
Verlagerungsquerschnitt	σ_{D}
Verlagerungen pro Atom (s^{-1})	dpa / s

(Definitionen s. Gleichung (1))

Dabei sind die Querschnitte unabhängig vom Spektrum der einfallenden Neutronen, während die Verlagerungen pro Atom für jeweils ein spezifisches Neutronenspektrum berechnet werden. Wegen der Einschränkungen des NRT-Modells bezüglich der Parameter κ und E_d sollte man stets den Schädigungsenegie-Querschnitt mitverwenden, der unabhängig von diesen Größen ist.

Im ersten Teil wurden die PKA-Spektren für alle relevanten Reaktionen (bzw. alle relevanten PKA's) berechnet, im zweiten Teil neue Schädigungsfunktionen für die unterschiedlichen PKA's bereitgestellt. Da die PKA-Spektren in Gruppenform vorliegen, bietet es sich an, auch die Schädigungsfunktionen in dieser Weise zu verwenden. Denn man berechnet (am Beispiel von σ_{dam})

$$\sigma_{\text{dam}}(g) = \sum_i \sigma_{\text{dam},i}(g) = \sum_i \sum_{g'} \sigma_{\text{PKA},i}(g, g') \bar{v}_i(g') \quad (\text{vgl. (1)})$$

Dabei stellt $\bar{v}_i(g')$ den Gruppenwert der Schädigungsfunktion für das entsprechende PKA dar. Diesen Wert erhält man als Mittelwert von $\bar{v}_i(E)$ aus der Gruppe g' :

$$\bar{v}_i(g') = \frac{1}{\Delta E} \int_{g'} \bar{v}_i(E) dE$$

ΔE Breite der Gruppe g'

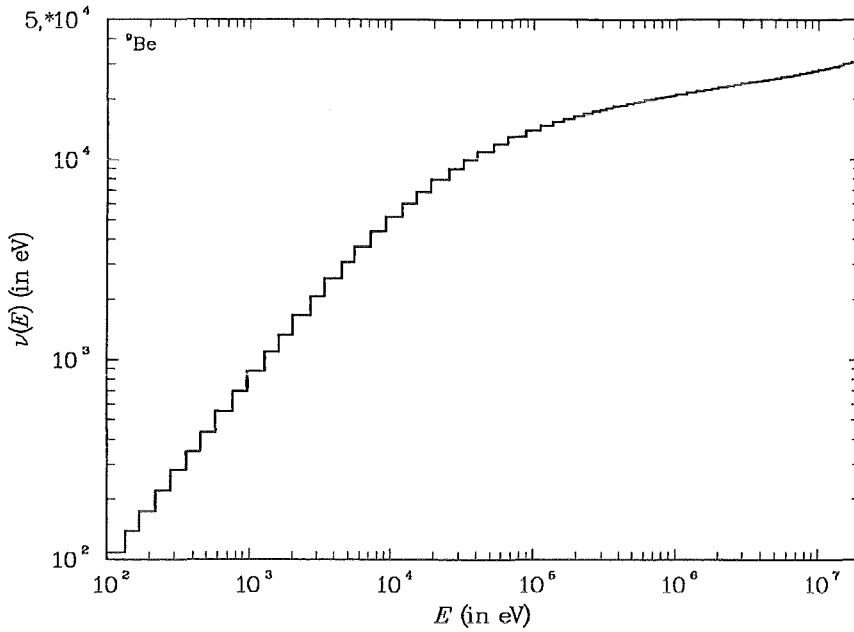


Abbildung 3-1: verbesserte Schädigungsfunktion für ⁹Be in Gruppenform

Folgende Abbildungen zeigen die neu berechneten Schädigungsenergie- und Verlagerungsquerschnitte für die neutroneninduzierte Strahlenschädigung in ⁹Be ($E_d = 31$ eV, [4]):

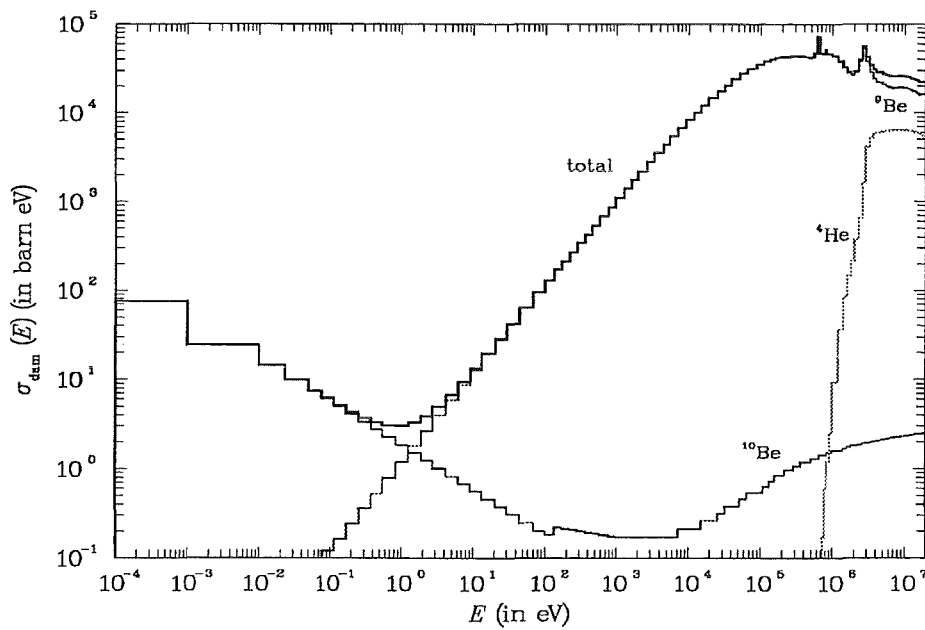


Abbildung 3-2: Schädigungsenergie-Querschnitte in ⁹Be (verbessert)

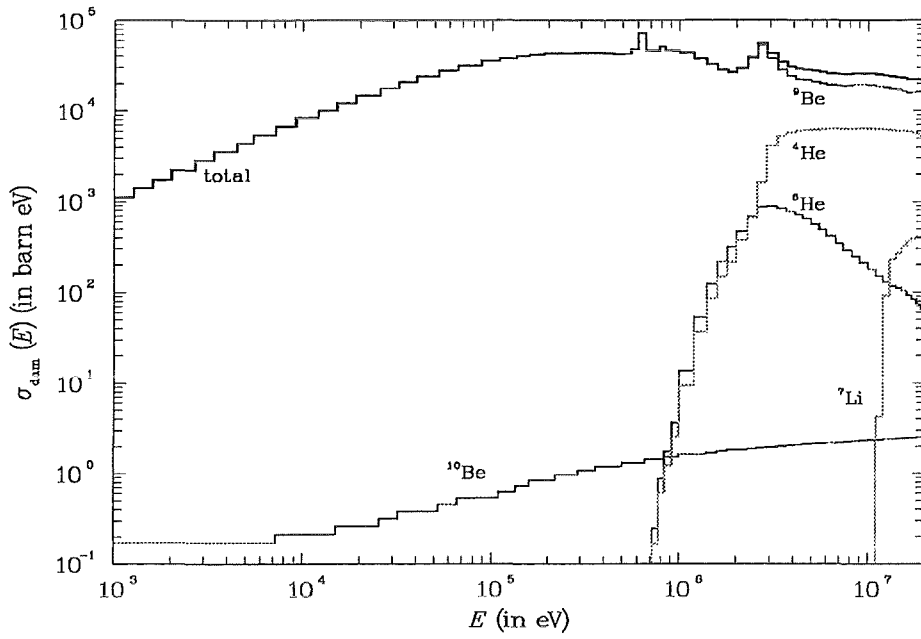


Abbildung 3-3: Schädigungsenergie-Querschnitte in ${}^9\text{Be}$ (verbessert)

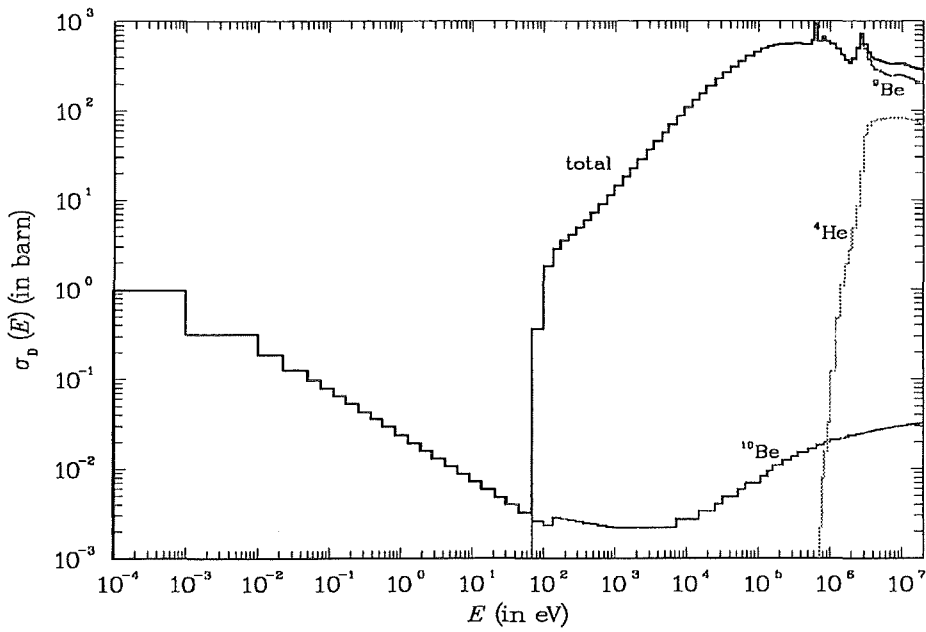


Abbildung 3-4: Verlagerungsquerschnitte in ${}^9\text{Be}$ (verbessert)

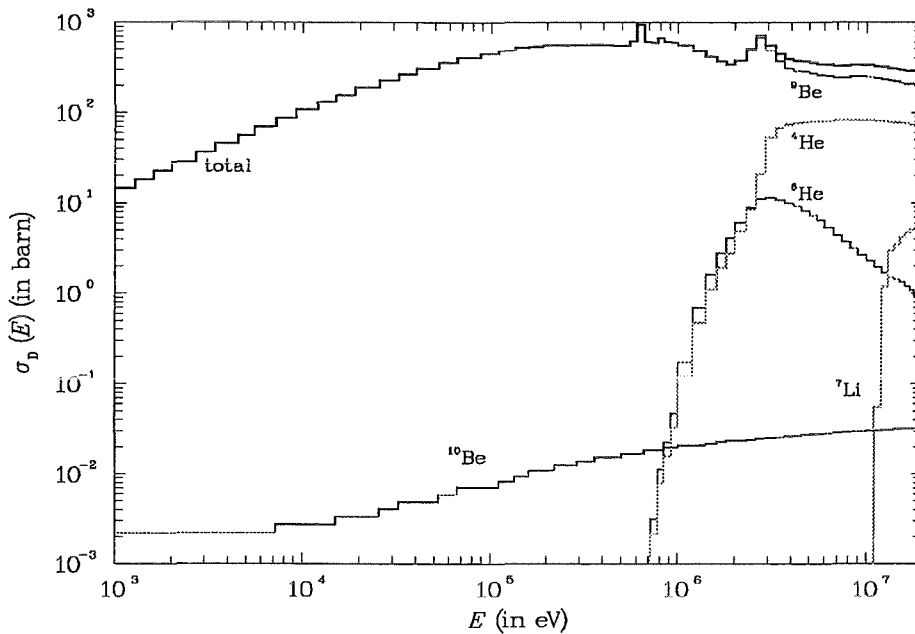


Abbildung 3-5: Verlagerungsquerschnitte in ${}^9\text{Be}$ (verbessert)

Die Schädigungsenergie-Querschnitte σ_{dam} zeigen deutlich, daß sie PKA-Spektren und zugehörige Schädigungsenergien $\bar{v}(E)$ gegenseitig wichten. Für die elastischen PKA's weist das Spektrum für niedrige Energien einen fast konstanten Verlauf auf, während die Schädigungsfunktion stark ansteigt. Dies ist dann auch das Verhalten für σ_{dam} . Im Bereich hoher Energien ab $O(10^5 \text{ eV})$ ist $\bar{v}(E)$ nur schwach energieabhängig, so daß der resultierende Verlauf von σ_{dam} von der Energieabhängigkeit des elastischen Streuquerschnitts (s. Abbildung 1-4) herührt. Lediglich für sehr hohe Energien (einige MeV), wo $\bar{v}(E)$ wieder stärker ansteigt, sinkt σ_{dam} weniger stark ab als der elastische Wirkungsquerschnitt.

Für die PKA's aus den Schwellenreaktionen wird im wesentlichen die Energieabhängigkeit des nuklearen Wirkungsquerschnitts reproduziert, wobei für sehr hohe Energien der Verlauf nach oben abgeändert ist. Der Strahlungseinfang zeigt das erwartete Verhalten, daß schon thermische Neutronen für ein hohes Maß an Strahlenschädigung sorgen, da dort bereits 2 keV an Schädigungsenergie bereitstehen. Für hohe Energien bleibt der Wirkungsquerschnitt konstant, $\bar{v}(E)$ steigt jedoch langsam an, so daß die Querschnitte ebenfalls leicht wachsen.

Der totale Schädigungsenergie-Querschnitt wird bis Energien um 10^{-1} eV fast ausschließlich durch den Anteil aus dem Strahlungseinfang bestimmt, da für die ${}^{10}\text{Be}$ -PKA's die Schädigungsenergie schon mindestens 2 keV beträgt. Ab etwa 10 eV bestimmt die elastische Streuung den totalen Schädigungsenergie-Querschnitt bedingt durch den hohen Wirkungsquerschnitt und anwachsender Schädigungsenergie. Der Wirkungsquerschnitt der (n,γ) -Reaktion sinkt hier dramatisch ab, so daß ihr Anteil immer kleiner wird. Ab etwa 2 MeV wirken sich die Schwellreaktionen auch in σ_{dam} aus. Dabei sind es in erster Linie die α -Teilchen, die dann in erheblichem Maße beitragen.

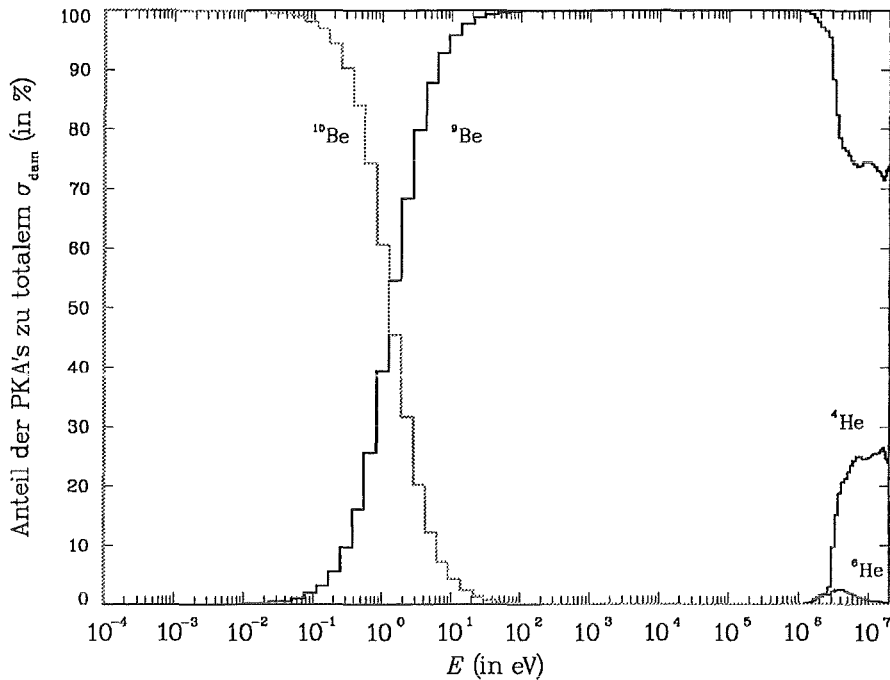


Abbildung 3-6: relativer Anteil der PKA's am totalen Schädigungsenergie-Querschnitt

Für Schädigungsenergien größer als $2,5E_d$ sind σ_{dam} und σ_D proportional (vgl. Definition der Größen). Nur im Falle der elastischen Streuung treten PKA's mit Energien unterhalb dieser Grenze auf, wobei dann σ_D schnell gegen 0 geht. Sinkt die Energie der primären Neutronen unter $O(100 \text{ eV})$, so erwartet man einen immer größeren Anteil der erzeugten PKA's, deren Energie kleiner als $2,5E_d$ ist. Der Verlagerungsquerschnitt wird dann sehr schnell klein, da nach dem NRT-Modell nur noch eine weitere Verlagerung auftritt bzw. für $E < E_d$ überhaupt keine mehr.

Nach Gleichung (3) muß E mindestens 86 eV betragen, damit die max. Rückstoßenergie bei 31 eV ($=E_d$) liegt. Unterhalb 86 eV verschwindet σ_D für die elastische Streuung (d.h. unterhalb der Energiegruppe 23, d.h. 69 eV).

Für alle anderen Reaktionen erwartet man keine PKA's mit entsprechend niedrigen Energien, so daß σ_{dam} und σ_D über den gesamten Energiebereich proportional sind. Im resultierenden totalen Verlagerungsquerschnitt erwartet man deshalb ein stark ausgeprägtes Minimum unterhalb 69 eV, wo nur die (n,γ) -Reaktion mit ihrem stark abfallenden Querschnitt beiträgt.

Am Verlauf des totalen Verlagerungsquerschnitts kann man feststellen, daß oberhalb etwa 10^5 eV eine besonders hohe Schädigung zu erwarten ist. Man kann auch sagen, daß für Neutronen in diesem Bereich die Schädigung besonders effektiv ist. Dabei spielt die Größe des elastischen Wirkungsquerschnitts die entscheidende Rolle, weniger die zu erwartende Schädigungsenergie.

Mit den Verlagerungsquerschnitten σ_D aus Abbildung 3-4 erhält man für die einzelnen PKA's folgende Verlagerungen pro Atom und Sekunde *dpa/s*:

Tabelle 3-1: *dpa/s* (verbessert) für verschiedene PKA's in ^9Be (Neutronenspektrum 1)

	^9Be	^4He			^6He	^7Li			^{10}Be	Sum.
		(n,2n)	(n, α)	sum.		(n,t ₀)	(n,t ₁)	sum.		
<i>dpa/s</i>	3,82	1,65	7,58	1,73	1,07	3,28	1,37	4,65	1,63	4,00
	$\times 10^{-7}$	$\times 10^{-8}$	$\times 10^{-10}$	$\times 10^{-8}$	$\times 10^{-9}$	$\times 10^{-10}$	$\times 10^{-10}$	$\times 10^{-10}$	$\times 10^{-11}$	$\times 10^{-7}$
in % der Summe	95,3	4,1	0,2	4,3	0,3	0,08	0,03	0,12	0,004	100

Damit wird der überwiegende Anteil durch die elastische Streuung aufgebracht (95,3 %), ansonsten sind es die α -Teilchen (4,3 %), die den übrigen Beitrag leisten. Alle anderen PKA's sind für die Verlagerungen von untergeordneter Bedeutung (insgesamt 0,4 %).

Von den Neutronen aus dem Fusionspeak werden 8,4 % der Verlagerungen verursacht, von schnellen Neutronen (oberhalb 1 MeV) 32,6 %. Vergleicht man diese Anteile mit dem einfallenden Neutronenspektrum (8,9 % aus Gruppe 95, 27,8 % oberhalb 1 MeV), so erkennt man, daß die 14 MeV-Neutronen im selbem Maße zur Verlagerungsschädigung beitragen wie zum gesamten Neutronenspektrum, die schnellen Neutronen jedoch verstärkt Schädigung verursachen. Dies ist durch den hohen Verlagerungsquerschnitt in diesem Bereich bedingt.

Berechnet man die *dpa*-Raten für das aktualisierte Neutronenspektrum (Nr. 2), so ergeben sich im wesentlichen die gleichen Werte:

Tabelle 3-2: *dpa/s* (verbessert) für verschiedene PKA's in ^9Be (Neutronenspektrum 2)

	^9Be	^4He			^6He	^7Li			^{10}Be	Sum.
		(n,2n)	(n, α)	sum.		(n,t ₀)	(n,t ₁)	sum.		
<i>dpa/s</i>	3,85	1,67	7,71	1,75	1,09	3,26	1,36	4,62	1,69	4,05
	$\times 10^{-7}$	$\times 10^{-8}$	$\times 10^{-10}$	$\times 10^{-8}$	$\times 10^{-9}$	$\times 10^{-10}$	$\times 10^{-10}$	$\times 10^{-10}$	$\times 10^{-11}$	$\times 10^{-7}$
in % der Summe	95,3	4,1	0,2	4,3	0,3	0,08	0,03	0,12	0,004	100

Die totale *dpa*-Rate liegt gerade 1 % über dem Wert für das Neutronenspektrum 1, wobei die totale Flußdichte sogar 7 % größer ist.

3.2 Vergleichsrechnungen

Um den Einfluß der neuen Schädigungsfunktionen auf die Schädigungsgrößen zu untersuchen, wurden mit denselben PKA-Spektren, aber jetzt mit den Schädigungsfunktionen nach Lindhard, Querschnitte und *dpa*-Raten berechnet. Dabei zeigen die Querschnitte σ_{dam} und σ_{D} einen sehr ähnlichen Verlauf:

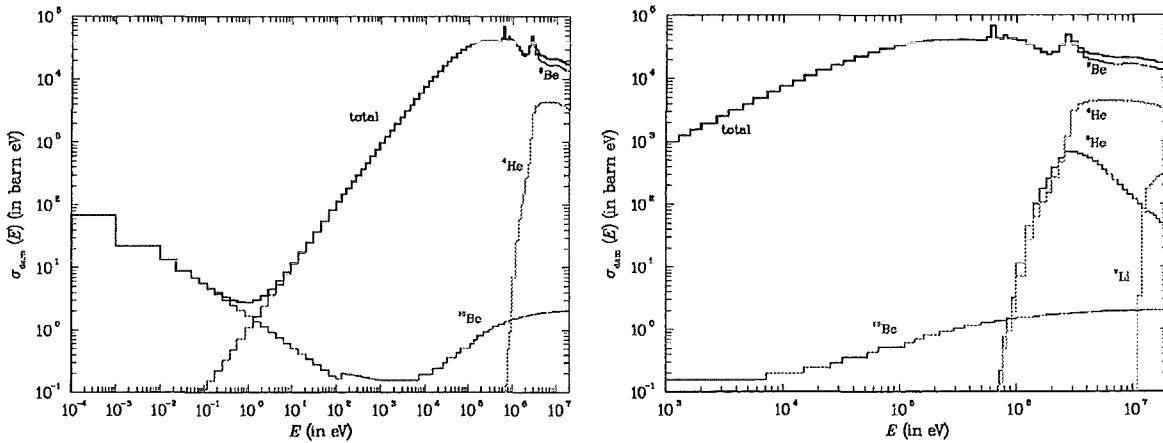


Abbildung 3-7: Schädigungsenergie-Querschnitte in ⁹Be (Lindhard)

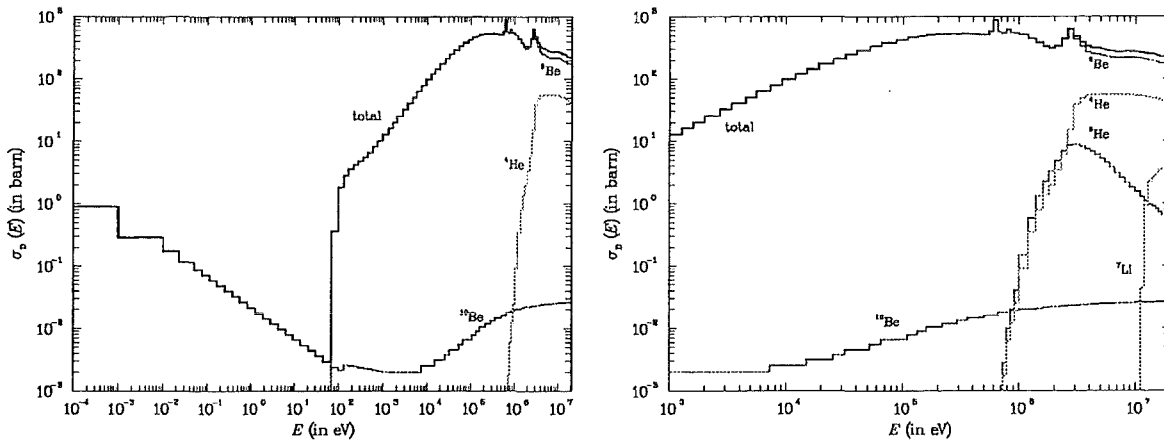


Abbildung 3-8: Verlagerungsquerschnitte in ⁹Be (Lindhard)

Da die Schädigungsfunktionen nach Lindhard kleiner sind als die verbesserten, liegen auch die Querschnitte unterhalb der verbesserten Querschnitte. Besonders gravierend sind (analog zu den Schädigungsfunktionen) die Abweichungen ab einigen MeV.

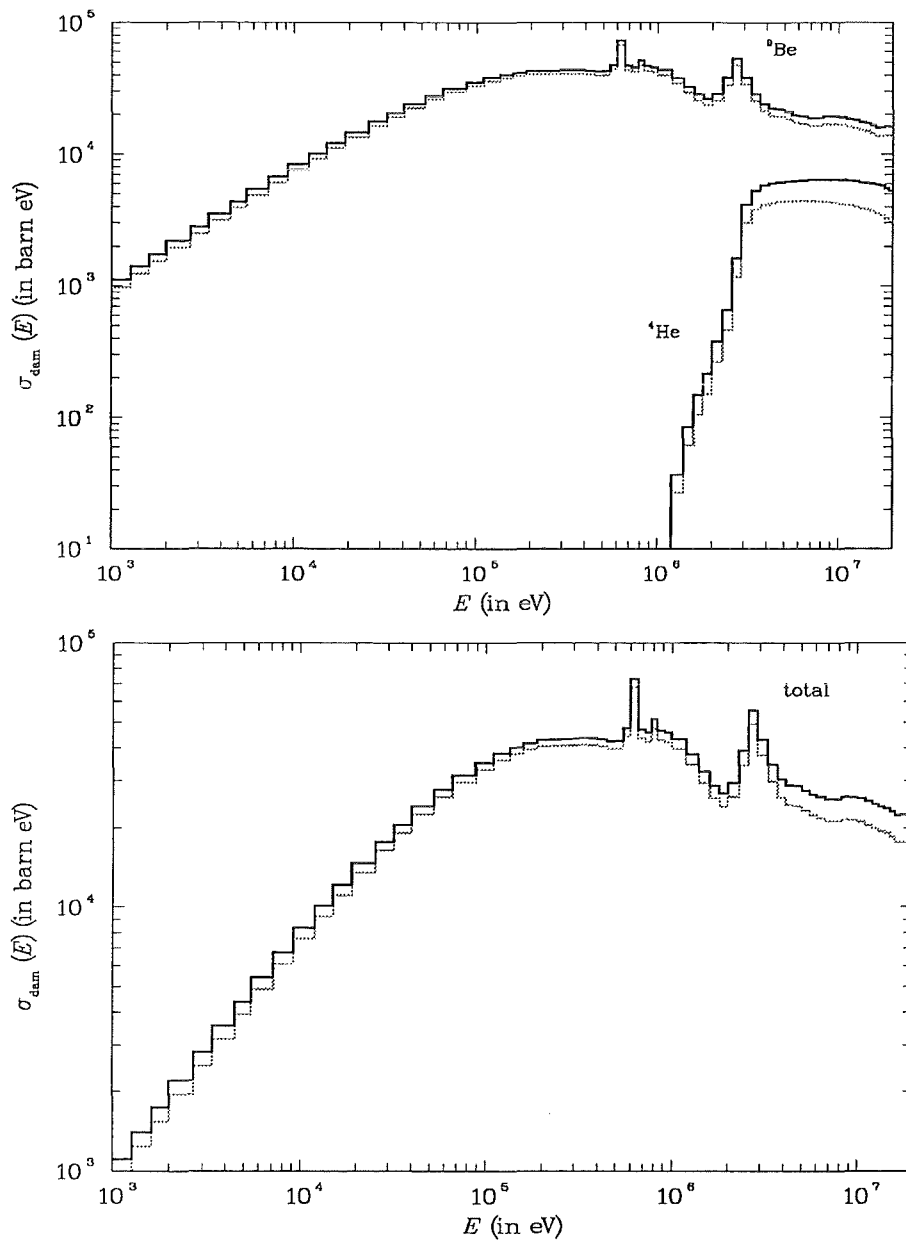


Abbildung 3-9: verbesserte Schädigungsenergie-Querschnitte in ⁹Be im Vergleich zu Lindhard (hell)

Eine genauere Betrachtung der relativen Änderung von σ_{dam} für die einzelnen PKA's zeigt, daß die leichten PKA's stark erhöhte Querschnitte aufweisen. Im Bereich des Fusionspeaks erhält man folgende prozentuale Änderungen in σ_{dam} :

Tabelle 3-3: relative Änderung der Schädigungsenergie-Querschnitte in ⁹Be bei 14 MeV

	⁹ Be	⁴ He	⁶ He	⁷ Li	¹⁰ Be	Sum.
rel. Änderung von σ_{dam} in %	15	59	59	32	21	24

In Abhängigkeit von der Energie erhält man folgende Kurven:

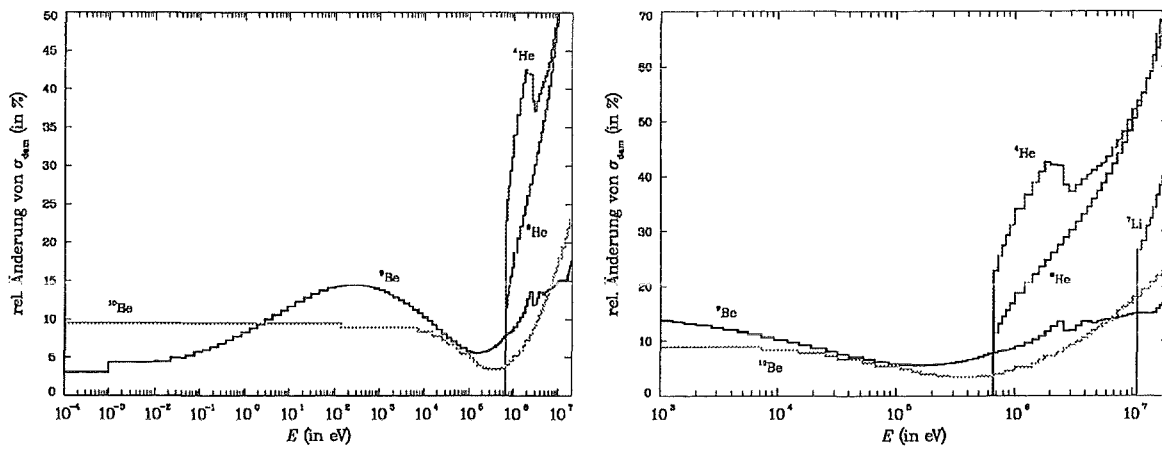


Abbildung 3-10: relative Änderungen der Schädigungsenergie-Querschnitte in ${}^9\text{Be}$ im Vergleich zu Lindhard

Besonders anschaulich zeigen sich die erzielten Änderungen an den totalen Querschnitten σ_{dam} und σ_{D} :

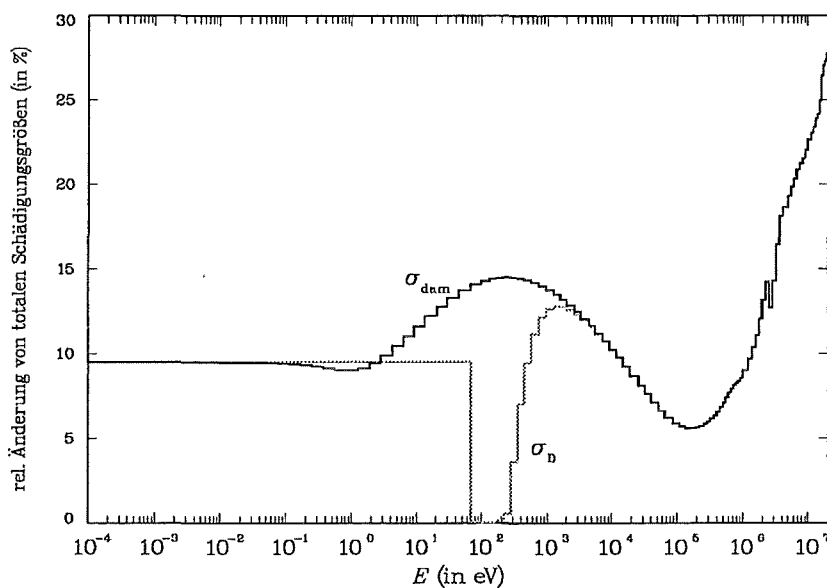


Abbildung 3-11: relative Änderungen der totalen Schädigungsgrößen in ${}^9\text{Be}$ im Vergleich zu Lindhard

Dabei weist σ_{dam} große Änderungen im Energiebereich von ca. 30 eV bis 1 keV (um 13 %) und für sehr hohe Energien auf (ab ca. 3 MeV um mindestens 14 %, für 14 MeV-Neutronen um 24 %). Auch σ_{D} zeigt ein ähnliches Verhalten mit Ausnahme des Bereichs, in dem sich die Schwelle E_{d} in der elastischen Streuung auswirkt. Im Intervall von ca. 70 bis 200 eV hat man so nur sehr schwache Änderungen von weniger als 1 %.

Mit den Verlagerungsquerschnitten nach Lindhard erhält man folgende dpa/s (mit prozentualer Änderung durch die verbesserten Werte):

Tabelle 3-4: dpa/s (Lindhard) für verschiedene PKA's in ^9Be (Neutronenspektrum 1)

	^9Be	^4He			^6He	^7Li			^{10}Be	Sum.
		(n,2n)	(n, α)	sum.		(n,t ₀)	(n,t ₁)	sum.		
dpa/s	3,52	1,08	4,68	1,13	7,90	2,48	1,04	3,53	1,48	3,64
	$\times 10^{-7}$	$\times 10^{-8}$	$\times 10^{-10}$	$\times 10^{-8}$	$\times 10^{-10}$	$\times 10^{-10}$	$\times 10^{-10}$	$\times 10^{-10}$	$\times 10^{-11}$	$\times 10^{-7}$
in % der Summe	96,6	3,0	0,1	3,1	0,2	0,07	0,03	0,1	0,004	100
rel. Abweichung der verbesserten dpa/s (in %)	8,5	52,8	61,9	53,2	35,9	32,3	31,4	32,0	10,2	10,0

Für die leichten PKA's hat man demnach sehr deutliche Abweichungen von etwa 30 % (^7Li) bis 50 % (^4He) durch die verbesserten $\bar{v}(E)$. Im Falle der Eigenionen liegt die Abweichung bei ca. 8 %. Sie tragen einen noch höheren Anteil (96,6 %) an der totalen dpa -Rate. Diese ist in der verbesserten Rechnung um 10 % höher als in der Lindhard-Rechnung.

$$\text{Lindhard: } dpa/s = 3,64 \cdot 10^{-7}; \quad dpa/a = 11,5$$

$$\text{verbessert: } dpa/s = 4,00 \cdot 10^{-7}; \quad dpa/a = 12,6$$

Mit dem Schädigungs-Code SPECTER [4] kann man für ein gewähltes Neutronenspektrum Schädigungsraten in allen Elementen berechnen. Dabei liegen PKA-Spektren und Verlagerungsquerschnitte als Datenbibliotheken vor, die auf den Wirkungsquerschnitten von ENDF/B-V basieren. Wie üblich werden die sekundären Verlagerungen nach dem NRT-Modell berechnet, wobei in den entsprechenden Formeln $Z_1 = Z_2$ gesetzt wurde. Dies führt dazu, daß der Parameter k (im Robinson-Fit, vgl. Gleichungen (24) und (25)) für leichte Ionen zu klein (z.B. für ^4He 0,106 statt 0,171) und damit die berechnete Schädigungsenergie zu groß ist. SPECTER berechnet also für die leichten Ionen zu hohe Verlagerungsquerschnitte, was sich dann im totalen Verlagerungsquerschnitt auswirkt:

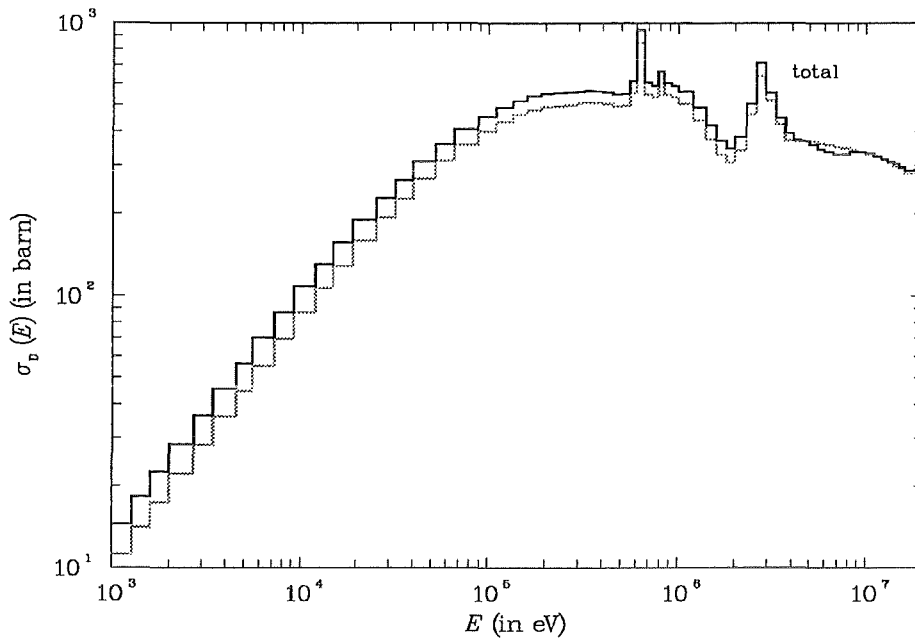


Abbildung 3-12: totale Verlagerungsquerschnitte in ⁹Be: verbesserte (dunkel), SPECTER (hell)

Über weite Energiebereiche ist σ_d kleiner als der neu berechnete. Ab etwa 4 MeV wirken sich jedoch die nicht korrekt berechneten Anteile, vor allem aus der (n,2n)-Reaktion, aus, indem σ_d etwa so groß wird wie in der verbesserten Rechnung. Damit werden die *dpa*-Anteile deutlich überschätzt. Außerdem wird in der Berechnung des (n, γ)-Anteils die Schädigungsenergie durch die PKA-Energie ersetzt, so daß auch dieser Beitrag überhöht ist.

Tabelle 3-5: *dpa/s* (SPECTER) für verschiedene PKA's in ⁹Be (Neutronenspektrum 1)

	⁹ Be	⁴ He (n,2n)	⁶ He	¹⁰ Be	Sum.
<i>dpa/s</i>	$3,35 \times 10^{-7}$	$2,56 \times 10^{-8}$	$1,99 \times 10^{-9}$	$3,01 \times 10^{-10}$	$3,63 \times 10^{-7}$
in % der Summe	92,3	7,0	0,5	0,08	100
rel. Abweichung der verbesserten <i>dpa/s</i> (in %)	14	-35	-46	-95	10,3

Letztlich erhält man aus SPECTER folgende totale *dpa*-Rate:

$$\text{SPECTER: } dpa/s = 3,631 \cdot 10^{-7}; \quad dpa/a = 11,5$$

Dies ist praktisch identisch mit dem Wert aus der Lindhard-Rechnung (s. S. 86).



4 ZUSAMMENFASSUNG

Im Rahmen der Entwicklung von keramischen Feststoffblankets für (d,t)-Tokamakreaktoren ist Beryllium ein bevorzugter Kandidat für die Funktion des Neutronenmultipliers. Dabei ist eines der zu untersuchenden Probleme die durch die intensive Neutronenbelastung ($2,2 \text{ MW/m}^2$ für den DEMO-Reaktor) zu erwartende Materialschädigung. Die vorliegende Arbeit will dazu einen Beitrag leisten, indem die Schädigung in Form von Gitteratomverlagerungen untersucht und entsprechende Schädigungsparameter berechnet wurden.

Bisherigen Rechnungen mangelte es an verlässlichen Daten über die Energieverteilung der in durch primäre Neutronen induzierten Kernreaktionen erzeugten Rückstoßkerne (PKA's). Außerdem weist die dem NRT-Modell zugrundeliegende Schädigungsenergie nach Lindhard substantielle Einschränkungen im Hinblick auf leichte Materialien und hohe PKA-Energien auf. Diese Unsicherheiten sollen durch die in der vorliegenden Arbeit eingebrachten Verbesserungen entscheidend reduziert werden, so daß, basierend auf den Resultaten dieser Arbeit, neutroneninduzierte Verlagerungsschädigung in Beryllium zuverlässig berechnet werden kann.

Zunächst wurden PKA-Spektren auf der Basis von Kerndaten der ENDF/B-VI-Bibliothek (mit einer Neuauswertung der (n,2n)-Reaktion) mit Hilfe des Processing Codes NJOY berechnet. Berücksichtigt wurden dabei die elastische Streuung und die (n,2n)-, (n, α)-, (n,t)- und (n, γ)-Reaktionen. Die Verteilungen der darin erzeugten PKA's (^9Be , ^4He , ^6He , ^7Li und ^{10}Be) wurden über ein repräsentatives Fusionspektrum gemittelt:

- Die mittlere PKA-Energie beträgt 0,14 MeV; dabei haben 84 % aller PKA's eine Energie von weniger als 0,1 MeV bzw. 97 % weniger als 1 MeV.
- Unterhalb etwa 0,1 MeV erwartet man praktisch ausschließlich ^9Be , oberhalb von 1 MeV in immer stärkerem Maße ^4He mit einem kleinen Beitrag von ^6He (um 10 %).

Zur Berechnung der Schädigungsenergien wurden verbesserte elektronische Bremsquerschnitte (verändertes Niederenergiekonzept und Anpassung an Bethe-Bloch für hohe Energien) und elastische Kernstreuquerschnitte verwendet. Für die verschiedenen PKA's konnten so die jeweiligen Schädigungsenergien explizit berechnet werden. Dabei erwies sich eine analytische Modifizierung des elektronischen Bremsquerschnitts unterhalb von 0,01 eV als unumgänglich, was jedoch keinen nennenswerten Einfluß auf die Ergebnisse zeigte.

- Die verbesserten Schädigungsfunktionen liegen höher als bei Lindhard, vor allem für leichte Ionen. Die Abweichungen betragen um 10 bis 20 % (unterhalb einigen MeV).
- Für Energien ab einigen MeV steigen die Schädigungsenergien wieder stark an (keine Plateau-Bildung wie bei Lindhard). In diesem Bereich hat man starke Zuwächse zu den Lindhard-Funktionen (z.B. Verdoppelung für ^4He bei 7 MeV).

Die mittlere Zahl von sekundären Gitteratomverlagerungen wurde unter Einbeziehung der neuen Schädigungsfunktionen mit dem NRT-Modell berechnet (mit einer Schwellenenergie von 31 eV).

Kombiniert man nun PKA-Spektren und Schädigungsenergie bzw. Anzahl der sekundären Verlagerungen, so erhält man Schädigungsenergie- bzw. Verlagerungsquerschnitte. Dabei eignen sich erstere als von speziellen Verlagerungsparametern (z.B. Schwellenenergie) unabhängige Schädigungsgrößen, während letztere, multipliziert mit einem spezifischen Neutronspektrum, die Berechnung von *dpa* (Verlagerungen pro Atom) erlauben.

- Die Querschnitte sind über den gesamten Energiebereich größer als für die Lindhard-Berechnung, besonders gravierend für die Anteile durch leichte PKA's. Für 14 MeV hat man eine totale Zunahme von 24 %.
- Für geringe Neutronenenergien (kleiner als etwa 100 eV) wird Schädigung hauptsächlich durch ^{10}Be aus der (n, γ)-Reaktion verursacht. Ansonsten sind es die elastischen PKA's, ab ca. 2 MeV auch ^4He (mit bis zu 25 % Anteil am totalen Querschnitt).
- Die Verlagerungsschädigung in ^9Be ist besonders effektiv für Neutronen oberhalb etwa 0,1 MeV und dabei nur relativ schwach energieabhängig.
- Die *dpa*-Rate beträgt ca. $4,0 \times 10^{-7}$ pro Sekunde bzw. 12,6 pro Jahr. Dieser Wert ist um 10,0 % bzw. 10,3 % höher als der Lindhard- bzw. SPECTER-Wert.
- Der Schädigungs-Code SPECTER, dessen Daten auf ENDF/B-V basieren, verwendet für leichte PKA's zu hohe Schädigungsenergien, was zu überhöhten Verlagerungsquerschnitten vor allem für hohe Energien führt. Außerdem wird beim (n, γ)-Beitrag die Schädigungsenergie durch die PKA-Energie ersetzt, so daß der entsprechende Beitrag zur *dpa*-Rate ebenfalls deutlich überschätzt wird.

Anhang A: Stoßintegral und minimaler Stoßabstand

Betrachtet man die Wechselwirkung zweier Teilchen, deren Kraftvektor auf der Verbindungslinie der Massenpunkte liegt, so kann man durch Koordinatentransformation auf das Schwerpunktsystem (c.m.-System) das Problem als die Bewegung eines Teilchens mit der reduzierten Masse in einem Zentralpotential beschreiben.

Das Potential soll zeit- und geschwindigkeitsunabhängig sein, d.h. es handelt sich um ein kugelsymmetrisches Potential. Wenn dann für das Gesamtsystem Energie- und Impulserhaltung gilt, so kann man folgendes Stoßintegral ableiten [8]:

$$\Theta = \pi - 2 \int_{r_0}^{\infty} \frac{s dr}{r^2 (1 - V(r)/E_c - s^2/r^2)}$$

- Θ Streuwinkel im c. m.-System
- s Stoßparameter
- $V(r)$ interatomares Potential
- E_c Energie des Teilchens im c. m.-System

Als Potential wird das universale Potential nach Ziegler et al. [8] (siehe Kapitel 2.3.2.2) verwendet. Den minimalen Stoßabstand r_0 bestimmt man aus der Nullstelle des Nenners im Stoßintegral. Es gilt also:

$$1 - V(r_0)/E_c - s^2/r_0^2 = 0$$

Als Verfahren zur Berechnung dieser Nullstelle eignet sich das Newton-Verfahren mit dem Startwert s . Bezeichnet man

$$F(r) = 1 - V(r)/E_c - s^2/r^2$$

so erhält man r_0 in folgender Weise:

$$r_0 := s$$

$$r_{n+1} := r_n - \frac{F(r_n)}{F'(r_n)}; n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\left| \frac{r_{n+1} - r_n}{r_n} \right| \leq \delta \Rightarrow r_0 := r_{n+1}$$

Für höhere Energien ist $V(r_0)/E_c \approx 0$, d.h. $r_0 \approx s$.

Anhang B: Berechnung des Integrals in der Oen-Robinson-Formel

Zur Berechnung des Integrals im elektronischen Bremsquerschnitt nach Oen-Robinson (s. Gleichung (14)) kann man eine Vereinfachung vornehmen, wenn man berücksichtigt, daß für hinreichend großen Stoßparameter s der minimale Stoßabstand r_0 durch s genähert werden kann. Dann kann das Integral teilweise analytisch gelöst werden:

$$\begin{aligned} \int_0^{s_c} s e^{-0,3r_0(s,E)/a} ds &= \int_0^{\tilde{s}} s e^{-0,3r_0(s,E)/a} ds + \int_{\tilde{s}}^{s_c} s e^{-0,3s/a} ds \\ &= \int_0^{\tilde{s}} s e^{-0,3r_0(s,E)/a} ds + \frac{a^2}{0,09} \left[e^{-0,3\tilde{s}/a} (1 + 0,3\tilde{s}/a) - e^{-0,3s_c/a} (1 + 0,3s_c/a) \right] \end{aligned}$$

Die Grenze $\tilde{s} = \tilde{s}(E)$ wird mit steigender Energie monoton sinken, so daß ab einer bestimmten Energie $\tilde{s} = 0$ gesetzt werden kann und das Integral vollständig analytisch berechnet werden kann. Man erhält also Gleichung (15).

Zur Bestimmung von \tilde{s} prüft man die relative Änderung des Integranden, wenn man $r_0 = s$ setzt:

$$\left| \frac{s e^{-0,3s/a} - s e^{-0,3r_0(s,E)/a}}{s e^{-0,3s/a}} \right| \leq \delta; \quad \delta \ll 1, \text{ z.B. } \delta = 10^{-4}$$

$$\Rightarrow r_0 - s \leq \frac{a}{0,3} \delta = s_m \delta; \quad \left(s_m = \frac{a}{0,3} \right)$$

d.h.

$$r_0(s, E) \leq s + s_m \delta \Rightarrow \tilde{s} = s$$

Ist nun \tilde{s} hinreichend klein, so kann $\tilde{s} = 0$ gesetzt werden für alle Energien oberhalb der aktuellen Energie. Als akzeptabler Wert hat sich $\tilde{s} \leq a/10$ erwiesen, so daß man folgende Bedingung hat:

$$r_0(s, E_0) \leq \frac{a}{10} + s_m \delta = s_m (0,03 + \delta) \Rightarrow \tilde{s} = 0 \text{ für alle } E > E_0 \text{ (d.h. } r_0 \equiv s)$$

Anhang C: Asymptotische Entwicklung der Lindhard-Gleichung

Die Lindhard-Gleichung (vgl. Gleichung (23))

$$\bar{v}'(\epsilon) \left(\frac{d\epsilon}{d\rho} \right)_e = \int_0^{\epsilon^2} \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) \{ \bar{v}(\epsilon - t/\epsilon) - \bar{v}(\epsilon) + \bar{v}(t/\epsilon) \} \quad (C.1)$$

soll für kleine ϵ entwickelt werden. Für die Schädigungsfunktion erwartet man dabei, daß sie wie ϵ gegen 0 geht, weil für sehr geringe Energien keine elektronischen Freiheitsgrade angeregt werden und nur ein elastischer Energieübertrag an das Gitteratom auftritt [32,44]. Es gilt also

$$\bar{v}(\epsilon) \rightarrow \epsilon; \quad \bar{v}'(\epsilon) \rightarrow 1 \quad \text{für } \epsilon \rightarrow 0$$

Als Ansatz für die Schädigungsfunktion soll eine dem Robinson-Fit (vgl. Gleichung (24)) ähnliche Form gewählt werden:

$$\bar{v}(\epsilon) = \frac{\epsilon}{1 + c\epsilon^x} \approx \epsilon(1 - c\epsilon^x) \quad (C.2)$$

mit zunächst freien Parametern c und x ($c, x > 0$).

Die $f(t^{1/2})$ -Funktion für das verbesserte interatomare Potential nach Ziegler et al. [8] hat folgendes asymptotisches Verhalten (vgl. Gleichung (22)):

$$f(t^{1/2}) = f_1 t^{f_2} = 77,02439 t^{0,39387} \quad (C.3)$$

Setzt man die beiden Entwicklungen (C.2) und (C.3) in Gleichung (C.1) ein, so geht die rechte Seite über in

$$\begin{aligned} & \int_0^{\epsilon^2} dt \frac{1}{2} f_1 t^{f_2-3/2} \left\{ \left[\epsilon - t/\epsilon - c(\epsilon - t/\epsilon)^{1+x} \right] - \left[\epsilon - c\epsilon^{1+x} \right] + \left[t/\epsilon - c(t/\epsilon)^{1+x} \right] \right\} = \\ & = \frac{1}{2} f_1 c \int_0^{\epsilon^2} dt \cdot t^{f_2-3/2} \left\{ \epsilon^{1+x} - (\epsilon - t/\epsilon)^{1+x} - (t/\epsilon)^{1+x} \right\} \end{aligned}$$

Unter Beachtung von

$$(\epsilon - t/\epsilon)^{1+x} = \epsilon^{1+x} (1 - t/\epsilon^2)^{1+x}$$

und der Reihenentwicklung von $1 - (1 - t/\varepsilon^2)^{1+x}$ für $t/\varepsilon^2 \rightarrow 0$, d.h.

$$\begin{aligned} 1 - (1 - t/\varepsilon^2)^{1+x} &\approx 1 - \left(1 - \binom{1+x}{1} \frac{t}{\varepsilon^2} + \binom{1+x}{2} \left(\frac{t}{\varepsilon^2} \right)^2 - \binom{1+x}{3} \left(\frac{t}{\varepsilon^2} \right)^3 \pm \dots \right) = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \binom{1+x}{n} \left(\frac{t}{\varepsilon^2} \right)^n = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\varepsilon^{2n}} (-1)^{n+1} \binom{1+x}{n} t^n \end{aligned}$$

erhält man für die rechte Seite

$$\frac{1}{2} f_1 c \varepsilon^{1+x} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\varepsilon^{2n}} (-1)^{n+1} \binom{1+x}{n} \int_0^{\varepsilon^2} dt \cdot t^{f_2 - 3/2 + n} - \frac{1}{2} f_1 c \varepsilon^{-(1+x)} \int_0^{\varepsilon^2} dt \cdot t^{f_2 - 1/2 + x}$$

Die Integrale können einfach analytisch gelöst werden, und man erhält dann folgende asymptotische Form der Lindhard-Gleichung:

$$\left(\frac{d\varepsilon}{d\rho} \right)_e = \frac{1}{2} f_1 c \varepsilon^{2f_2+x} \left(\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{1}{f_2 - 1/2 + n} \binom{1+x}{n} - \frac{1}{f_2 + 1/2 + x} \right) \quad (\text{C.4})$$

Das Potenzverhalten der $f(t^{1/2})$ -Funktion erzwingt also ein entsprechendes Verhalten des elektronischen Bremsquerschnitts, oder aber man muß eine Schwelle für elektronische Anregung einführen (nach Miller et al. [44]). Verwendet man den Bremsquerschnitt nach Lindhard, der proportional $\varepsilon^{1/2}$ ist, so muß wegen

$$2f_2 + x = 1/2 \Rightarrow 0,78774 + x = 1/2$$

der Parameter x kleiner als 0 sein. Damit hat aber $\bar{v}(\varepsilon)$ ein asymptotisch falsches Verhalten. Selbst für den Bremsquerschnitt nach Oen-Robinson, der sehr viel schneller gegen 0 geht, kann man mit dem verwendeten Iterationsverfahren keine Konvergenz erreichen, da $\bar{v}(\varepsilon)$ für kleine ε unphysikalisch wird.

Um dieses Problem zu umgehen, kann man folgenden Ansatz machen. Unterhalb einer gewissen Energie ε_0 soll der elektronische Bremsquerschnitt ein bestimmtes Potenzverhalten zeigen, das physikalische Anfangsbedingungen von $\bar{v}(\varepsilon)$ garantiert:

$$\left(\frac{d\varepsilon}{d\rho} \right)_e = b \varepsilon^m \text{ für } \varepsilon \leq \varepsilon_0$$

b bestimmt man aus der Stetigkeitsbedingung für $\varepsilon = \varepsilon_0$. Wählt man $x=1$, so erhält man

$$m = 2f_2 + x = 1,78774$$

$$c = \frac{2b}{f_1 \cdot 1,18142}$$

wobei 1,18142 den Wert des Klammersausdrucks in Gleichung (C.4) darstellt.

Anhang D: Runge-Kutta-Verfahren zur Lösung der Lindhard-Gleichung

Zur Lösung der Lindhard-Gleichungen (12) und (13) wird folgendes Runge-Kutta-Verfahren eingesetzt (hier für $Z_1 = Z_2$ vorgestellt):

Schreibt man die Lindhard-Gleichung um

$$\bar{v}'(\varepsilon) = \frac{1}{(d\varepsilon/d\rho)_e} \int_0^{\varepsilon^2} \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) \{ \bar{v}(\varepsilon - t/\varepsilon) - \bar{v}(\varepsilon) + \bar{v}(t/\varepsilon) \}$$

und bezeichnet man die rechte Seite mit $f(\varepsilon, \bar{v}(\varepsilon))$, so hat man folgendes verallgemeinertes Anfangswertproblem:

$$\bar{v}'(\varepsilon) = f(\varepsilon, \bar{v}(\varepsilon)), \quad \bar{v}(\varepsilon) \text{ gegeben für } 0 \leq \varepsilon \leq \varepsilon_n$$

Dann erhält man $\bar{v}(\varepsilon_{n+1})$ in folgender Weise [53]:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{n+1} &= \varepsilon_n + h \\ k_{n1} &= f(\varepsilon_n, \bar{v}(\varepsilon_n)) \\ k_{n2} &= f(\varepsilon_n + \frac{1}{2}h, \bar{v}(\varepsilon_n) + \frac{1}{2}h k_{n1}) \\ k_{n3} &= f(\varepsilon_n + \frac{1}{2}h, \bar{v}(\varepsilon_n) + \frac{1}{2}h k_{n2}) \\ k_{n4} &= f(\varepsilon_n + h, \bar{v}(\varepsilon_n) + h k_{n3}) \\ k_n &= \frac{h}{6} (k_{n1} + 2k_{n2} + 2k_{n3} + k_{n4}) \\ \bar{v}(\varepsilon_{n+1}) &= \bar{v}(\varepsilon_n) + k_n \end{aligned}$$

Da die Berechnung über einige Dekaden läuft, wird, um die Anzahl der benötigten Schritte zu minimieren, die Schrittweite

$$h = (10^{1/s} - 1) \varepsilon_n$$

gewählt. Dabei ist s die Zahl der diskreten Energiepunkte pro Dekade und ε_n die jeweils aktuelle reduzierte Energie.

LITERATURVERZEICHNIS

- [1] Commission of the European Communities, *The European Programme for Controlled Nuclear Fusion*, EUR 6268 EN/1986
- [2] International Thermonuclear Experimental Reactor, *Establishment of ITER: Relevant Documents* (IAEA, Vienna, 1988)
- [3] G.R. Odette and D.R. Doiron, *Neutron-energy-dependent defect production cross sections for fission and fusion applications*, Nucl. Tech. 29 (1976) 346-368
- [4] L.R. Greenwood and R.K. Smither, *SPECTER: Neutron damage calculations for materials irradiations*, Argonne National Laboratory, ANL/FPP/TM-197 (Jan. 1985)
- [5] Evaluated Nuclear Data File B, Version VI, National Neutron Cross Section Center, Brookhaven National Laboratory, Upton, New York
- [6] R.E. MacFarlane, D.W. Muir and R.M. Boicourt, *The NJOY Nuclear Data Processing System, Volume I: User's Manual*, LANL, LA-9303-M, Vol. I (ENDF-324) (May 1982)
- [7] J.F. Ziegler, *Handbook of stopping cross sections for energetic ions in all elements* (Pergamon, New York, 1980)
- [8] J.F. Ziegler, J.P. Biersack and U. Littmark, *The stopping and range of ions in solids* (Pergamon, New York, 1985)
- [9] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, *Solid State Physics* (Holt-Saunders, Tokyo, 1981)
- [10] G. Busch und H. Schade, *Vorlesungen über Festkörperphysik* (Birkhäuser, Basel, 1973)
- [11] G. Musiol et al., *Kern- und Elementarteilchenphysik* (VCH, Weinheim, 1988)
- [12] P. Marmier and E. Sheldon, *Physics of nuclei and particles* (Academic Press, New York, 1969)
- [13] D.G. Doran and N.J. Graves, *Displacement cross sections and PKA spectra: tables and applications*, Hanford, HEDL-TME 76-70 (Dec. 1976)

- [14] D.G. Doran, *Neutron displacement cross sections for stainless steel and tantalum based on a Lindhard model*, Nucl. Sci. Eng. 49 (1972) 130-144
- [15] J.D. Jenkins, *Primary-recoil atom spectra from ENDF/B data*, Nucl. Sci. Eng. 41 (1970) 155-163
- [16] J.H. Gibbons and R.L. Macklin, *Total cross section for ${}^9\text{Be}(\alpha, n)$* , Phys. Rev. 137 (1965) B1508-1509
- [17] J.K. Bair and J. Gomez del Campo, *Neutron yields for an alpha-particle bombardment*, Nucl. Sci. Eng. 71 (1979) 18-28
- [18] M.E. Anderson and M.R. Hertz, *Thick target yields for the ${}^9\text{Be}(\alpha, n)$ reaction*, Nucl. Sci. Eng. 44 (1971) 437-439
- [19] K.W. Geiger and L. van der Zwan, *Radioactive neutron source spectra from ${}^9\text{Be}(\alpha, n)$ cross section data*, Nucl. Instr. Meth. 131 (1975) 315-321
- [20] P.F. Rose and C.L. Dunford, *ENDF-102: Data formats and procedures for the Evaluated Nuclear Data File ENDF-6*, Brookhaven National Laboratory, BNL-NCS-44945 (Jul. 1990)
- [21] S.T. Perkins, E.F. Plechaty and R.J. Howerton, *A reevaluation of the ${}^9\text{Be}(n, 2n)$ reaction and its effect on neutron multiplication in fusion blanket applications*, Nucl. Sci. Eng. 90 (1985) 83-98
- [22] E. Browne and R.B. Firestone, *Table of radioactive isotopes* (Wiley-Interscience, New York, 1986)
- [23] S.J. Zinkle and B.N. Singh, *Analysis of displacement damage and defect production under cascade damage conditions*, J. Nucl. Mater. 199 (1993) 173-191
- [24] U. Fischer, priv. Mitteilung, Nov. 1993
- [25] M. Dalle Donne et al., *DEMO-relevant Test Blankets for NET/ITER. BOT Helium Cooled Solid Breeder Blanket*, Kernforschungszentrum Karlsruhe, KfK 4928 u. 4929 (Oct. 1991)

- [26] M. Dalle Donne et al., *Conceptual design of a helium cooled solid breeder blanket based on the use of a mixed bed of beryllium and Li_4SiO_4 pebbles*, Proc. 17th. Symp. on Fusion Technology, Rome, Sept. 14-18, 1992
- [27] M. Dalle Donne et al., *European DEMO BOT solid breeder blanket*, Kernforschungszentrum Karlsruhe, KfK 5429 (Nov. 1994)
- [28] K. Wirtz und K.H. Beckurts, *Elementare Neutronenphysik* (Springer, Berlin, 1958)
- [29] R.E. MacFarlane and D.W. Muir, *The NJOY Nuclear Data Processing System, Volume III: The GROUPE, GAMINR, and MODER Modules*, LANL, LA-9303-M, Vol. III (ENDF-324) (Oct. 1987)
- [30] S.T. Perkins, E.F. Plechaty and R.J. Howerton, *^9Be evaluated cross sections for ENDF/B-VI*, LLNL, Jan. 1986
- [31] R.E. MacFarlane, D.W. Muir and R.M. Boicourt, *The NJOY Nuclear Data Processing System, Volume II: The NJOY, RECONR, BROADR, HEATR, and THERMR Modules*, LANL, LA-9303-M, Vol. II (ENDF-324) (May 1982)
- [32] J. Lindhard, V. Nielsen and M. Scharff, *Integral equations governing radiation effects*, Mat.-fys. Medd. 33 (1963) no. 10
- [33] J. Lindhard, M. Scharff and H. Schiøtt, *Range concepts and heavy ion ranges*, Mat.-fys. Medd. 33 (1963) no. 14
- [34] J. Lindhard and M. Scharff, *Energy dissipation by ions in the keV region*, Phys. Rev. 124 (1961) 128-130
- [35] N. Bohr, *On the theory of the decrease of velocity of moving electrified particles on passing through matter*, Phil. Mag. 25 (1913) 10
- [36] H.A. Bethe, *Bremsformel für Elektronen relativistischer Geschwindigkeiten*, Z. f. Phys. 76 (1932) 293
- [37] F. Bloch, *Bremsvermögen von Atomen mit mehreren Elektronen*, Z. f. Phys. 81 (1933) 363

- [38] N. Bohr, *Scattering and stopping of fission fragments*, Phys. Rev. 57 (1940) 654
- [39] J. Knipp and E. Teller, *On the energy loss of heavy ions*, Phys. Rev. 59 (1941) 659
- [40] E. Fermi and E. Teller, Phys. Rev. 72 (1947) 399
- [41] J. Lindhard, *On the properties of a gas of charged particles*, Mat.-fys. Medd. 28 (1954) no. 8
- [42] M.J. Norgett, M.T. Robinson and I.M. Torrens, *A proposed method of calculating displacement dose rates*, Nucl. Eng. Des. 33 (1975) 50-54
- [43] O.S. Oen and M.T. Robinson, *Computer studies of the reflection of light ions from solids*, Nucl. Instr. Meth. 132 (1976) 647-653
- [44] M.S. Miller and J.W. Boring, *Total inelastic energy loss by heavy ions stopped in a gas*, Phys. Rev. A9 (1974) 2421-2433
- [45] J.P. Biersack and L.G. Haggmark, *A Monte Carlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets*, Nucl. Instr. Meth. 174 (1980) 257-269
- [46] H. Huang and N. Ghoniem, *Neutron displacement damage cross sections for SiC*, J. Nucl. Mater. 199 (1993) 221-230
- [47] A. Sommerfeld, Z. f. Physik 78 (1932) 283
- [48] K.B. Winterbon, P. Sigmund and J.B. Sanders, *Spatial distribution of energy deposited by atomic particles in elastic collisions*, Mat.-fys. Medd. 37 (1970) no. 14
- [49] M.T. Robinson, *The dependence of radiation effects on the primary recoil energy*, in: *Radiation-Induced Voids in Metals*, ed. J.W. Corbett and L.C. Ianniello, USAEC-Report, CONF-710601 (1972) 397-429
- [50] M.T. Robinson and I.M. Torrens, *Computer simulation of atomic-displacement cascades in solids in the binary-collision approximation*, Phys. Rev. B9 (1974) 5008-5024

- [51] I.M. Torrens and M.T. Robinson, *Computer simulation of atomic displacement cascades in metals*, in: *Radiation-Induced Voids in Metals*, ed. J.W. Corbett and L.C. Ianniello, USAEC-Report, CONF-710601 (1972) 739-756
- [52] T.A. Gabriel , J.D. Amburgey and N.M. Greene, *Radiation-damage calculations: primary knock-on Atom spectra, displacement rates and gas production rates*, Nucl. Sci. Eng. 61 (1976) 21-32
- [53] H. Heuser, *Gewöhnliche Differentialgleichungen* (Teubner, Stuttgart, 1989)