

محاسبه تحلیلی بیناب هسته‌های پس‌زده ناشی از برهم‌کنش کَشسان نوترون‌های سریع با انرژی ۰/۱ تا ۱۰ مگاالکترون‌ولت به‌منظور تعیین آسیب‌های جابه‌جایی در کربن و سیلیکون

پیمان رضاییان^۱ و سپیده شفیعی^{۲*}

^۱ پژوهشکده کاربرد پرتوها، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی، تهران، ایران.

^۲ پژوهشکده فیزیک و شتابگرها، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی، تهران، ایران.

*تهران، انتهای خیابان کارگر شمالی، سازمان انرژی اتمی، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، پژوهشکده فیزیک و شتابگرها، کدپستی: ۱۴۳۹۵۸۳۶

پست الکترونیکی: sshafiei@aeoi.org.ir

چکیده

در این تحقیق آسیب‌های جابه‌جایی ناشی از نوترون‌های سریع با انرژی ۰/۱۵ تا ۱۰ مگاالکترون‌ولت در کربن و سیلیکون با استفاده از کد TRIM محاسبه شده است. در این محدوده انرژی برهم‌کنش غالب، پراکندگی کَشسان می‌باشد. برای استفاده از این کد اطلاعاتی مانند انرژی هسته‌ی پس‌زده‌شده، زاویه پراکندگی و عمقی که در آن برهم‌کنش رخ داده، ضروری است. به‌دست آوردن انرژی و زاویه پراکندگی هسته‌های پس‌زده‌شده، مستلزم دراختیارداشتن بیناب هسته‌های پراکنده‌شده می‌باشد. بیناب هسته‌های پس‌پراکنده‌شده کربن و سیلیکون با استفاده از یک روش تحلیلی برای ارتباط دادن توابع توزیع آماری مختلف ولی مرتبط، محاسبه شد. مقایسه داده‌های به‌دست آمده با نتایج تجربی صحت بیناب‌های محاسبه‌شده را تأیید می‌کند. محاسبات نشان می‌دهد که آسیب‌های جابه‌جایی ایجادشده در کربن کمتر از میزان آسیب‌های جابه‌جایی ایجادشده در سیلیکون می‌باشد که ناشی از آستانه انرژی جابه‌جایی بالاتر کربن می‌باشد.

کلیدواژگان: آسیب جابه‌جایی، نوترون‌های سریع، کربن، سیلیکون، بیناب هسته پس‌زده‌شده، توزیع آماری.

۱. مقدمه

به‌طور کلی واکنش‌های نوترون به دو دسته واکنش‌های کَشسان و ناکَشسان تقسیم می‌شود [۱]. در یک واکنش کَشسان، هسته‌ی هدف از نظر انرژی داخلی و ترکیب ایزوتوپی دچار تغییر نمی‌شود. واکنش‌های ناکَشسان نیز به دو گروه واکنش‌های غیرکَشسان و جذبی تقسیم می‌شوند. در یک واکنش غیرکَشسان، پس از برهم‌کنش ترکیب ایزوتوپی هسته هدف تغییر نمی‌کند اما هسته در حالت برانگیخته قرار می‌گیرد. در واکنش‌های جذبی نیز نوترون فرودی ناپدید و در

نوترون‌ها ذرات بدون بار هستند، که به‌صورت غیرمستقیم در محیط یون‌سازی می‌کنند. در اثر برهم‌کنش نوترون با محیط، هسته‌های پس‌زده و فوتون ایجاد می‌شود. فوتون‌ها به‌طور معمول از طریق برهم‌کنش‌های سه‌گانه فوتوالکتریک، کامپتون و تولید زوج با محیط برهم‌کنش می‌کنند که نتیجه‌ی این برهم‌کنش تولید الکترون است. هسته‌های پس‌زده در اثر برهم‌کنش‌های نوترون، نیز معمولاً از طریق برهم‌کنش کولنی سبب ایجاد فرآیندهای یونش و برانگیزش در محیط می‌شوند.

کانال خروجی واکنش، محصولات دیگر از جمله نوترون، فوتون و هسته‌های پس‌زده ایجاد می‌شود. نوع و انرژی هسته ایجادشده در اثر برهم‌کنش نوترون با محیط علاوه بر نوع هدف به انرژی نوترون فرودی نیز بستگی دارد [۱].

هسته‌های پس‌زده از لحظه برخورد با هدف، با اتم‌های محیط برهم‌کنش کولنی انجام می‌دهند. در صورتی که در اثر برخورد این هسته‌ها با اتم‌های شبکه، انرژی بیش از آستانه انرژی جابه‌جایی اتم، به اتم داده شود، اتم از مکان خود در شبکه بلوری جابجا می‌شود و به این ترتیب شبکه بلوری دچار آسیب می‌شود. هسته‌های پس‌زده در نهایت در عمقی متناسب با بردشان متوقف خواهند شد. با توجه به این که در برهم‌کنش نوترون با ماده معمولاً هسته‌های پس‌زده با توان توقف بالا ایجاد می‌شود، در نتیجه امکان ایجاد آسیب جابه‌جایی در ماده‌ای که در معرض پرتوهای نوترون قرار می‌گیرد وجود دارد.

درخصوص ایجاد آسیب‌های جابه‌جایی ناشی از نوترون ذکر این نکته ضروری است که با توجه به این که نوترون‌ها بدون بار هستند، می‌توانند تا عمق ماده بدون برهم‌کنش حرکت کنند و سپس در اثر برهم‌کنش با محیط یک ذره باردار سنگین ایجاد کنند. در نتیجه در برهم‌کنش نوترون با یک ماده، ذرات باردار با انرژی‌های مختلف و در عمق‌های مختلف ماده ایجاد می‌شود. بنابراین هنگامی که یک ماده در معرض پرتوهای نوترون قرار می‌گیرد این امکان وجود دارد که آسیب جابه‌جایی در عمق‌های مختلف از ماده به وجود آید [۲، ۳].

آسیب جابه‌جایی نوترون به‌ویژه برای آشکارسازهایی که امکان استفاده از آن‌ها در میدان‌های آمیخته وجود دارد، حائز اهمیت می‌باشد. براین اساس در سال ۲۰۱۴، با استفاده از کد محاسباتی FLUKA آسیب‌های جابه‌جایی ساختاری ایجادشده در الماس ناشی از نوترون محاسبه شد [۴]. اگرچه الماس عموماً در هادرون‌تراپی و یا کاربردهای فضایی استفاده

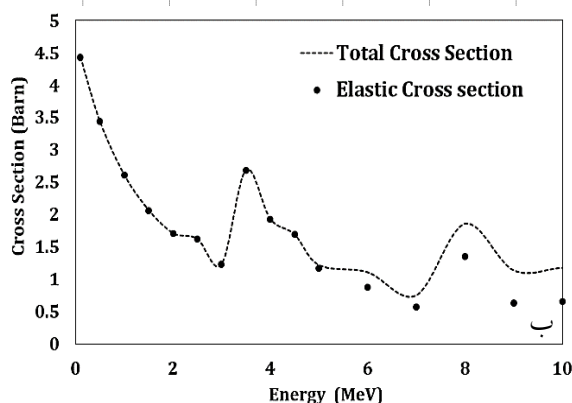
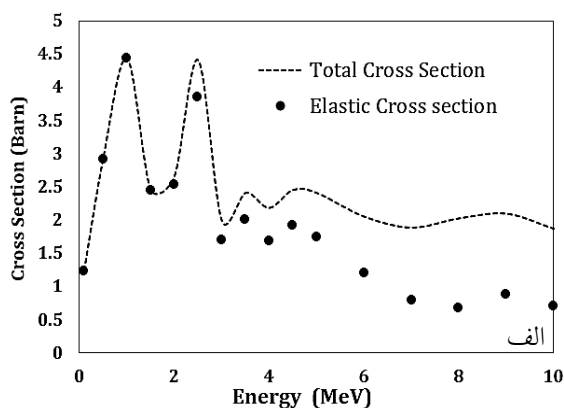
می‌شود، اما در هر دو این کاربردها احتمال قرارگرفتن در معرض نوترون نیز برای آن وجود دارد. هم‌چنین در سال ۲۰۱۸ با استفاده از کد SRIM جابه‌جایی ایجادشده بر واحد اتم بلور SiC در اثر تابش نوترون بررسی شد [۵].

یکی از موادی که در آشکارسازها (به‌خصوص آشکارسازهای سد سطحی) مورد استفاده قرار می‌گیرد، سیلیکون می‌باشد. این آشکارسازها نیز ممکن است در حین استفاده در معرض پرتوهای نوترون قرار گیرند. از این رو بررسی آسیب‌های جابه‌جایی آن مورد توجه است. براین اساس در این مقاله، آسیب‌های جابه‌جایی ناشی از نوترون‌ها در بلور سیلیکون و کربن در محدود انرژی ۰/۱۵ تا ۱۰ مگاالکترون‌ولت بررسی شده است. لازم به ذکر است که در این محدوده، برهم‌کنش غالب، پراکندگی کشسان می‌باشد. محاسبات نرخ آسیب جابه‌جایی با استفاده از کد TRIM انجام شد [۶].

محاسبات با استفاده از کد TRIM.DAT انجام شده است. به‌منظور انجام محاسبه در این مد، نیاز به آماده‌سازی یک فایل ورودی شامل اطلاعاتی از قبیل نوع یون، محل برهم‌کنش، زاویه حرکت و انرژی آن می‌باشد. هنگامی که با نوترون‌ها سروکار داریم، در اثر برهم‌کنش نوترون هسته‌های پس‌زده نیز ممکن است تولید شود. براین اساس برای انجام محاسبات در کد TRIM باید اطلاعات مربوط به این ذرات وارد شود. به‌منظور به‌دست آوردن این اطلاعات از کدهای محاسباتی مرسوم MCNP، GEANT4، FLUKA استفاده می‌شود [۴، ۵]. در این کدها اطلاعات مورد نظر با در نظر گرفتن جزئیات برهم‌کنش ذره فرودی با اتم‌های محیط به‌دست می‌آید. برای محدوده‌هایی از انرژی که کانال‌های مختلف برهم‌کنش فعال هستند، تنها روش ممکن، استفاده از این کدها می‌باشد. اما در محدوده‌هایی از انرژی که برهم‌کنش‌های نوترون‌ها محدود می‌باشند (به‌عنوان مثال برهم‌کنش کشسان غالب باشد)، استفاده از این کدها علی‌رغم این که می‌تواند

این فایل حاوی اطلاعاتی در مورد یون‌های تولیدشده در اثر برخورد نوترون با ماده است. این اطلاعات شامل نوع یون برهم‌کنش‌کننده، عدد اتمی، انرژی یون، مختصات محل برهم‌کنش و زاویه فرودی یون است. در این مقاله اطلاعات مربوط به یون تولیدشده شامل انرژی یون، عمق برهم‌کنش در هدف و زاویه پراکندگی یون در اثر برهم‌کنش نوترون با اتم‌های دو ماده کربن و سیلیکون در محدود انرژی ۰/۱۵ تا ۱۰ مگاالکترون‌ولت با استفاده از برنامه‌نویسی در محیط ++C به دست آمد. در محاسبات تنها برهم‌کنش غالب نوترون با اتم‌های دو ماده کربن و سیلیکون در نظر گرفته شد.

برای بررسی برهم‌کنش غالب با توجه به نوع هدف و انرژی نوترون فرودی سطح مقطع کل واکنش در نظر گرفته شد. شکل ۱ سطح مقطع کل و کشسان را نشان می‌دهد.



شکل (۱): سطح مقطع برهم‌کنش‌های غالب نوترون با الف:

سیلیکون-۲۸ و ب: کربن-۱۲ [۸].

همان‌گونه که در شکل ۱ مشاهده می‌شود، برای سیلیکون تا انرژی ۵ مگاالکترون‌ولت بیش از ۸۰٪ از واکنش‌ها را

منجر به جواب‌های قابل قبول شود، اما زمان‌بر خواهد بود. در چنین مواردی می‌توان با استفاده از روش‌های تحلیلی بیناب هسته‌های پس‌زده‌شده را محاسبه کرد. در این روش با ارتباط دادن توابع توزیع آماری مختلف ولی مرتبط، از سطح مقطع دیفرانسیلی پراکندگی کشسان نوترون‌ها برای محاسبه بیناب ذرات باردار ایجادشده استفاده می‌شود. از این روش پیش از این برای محاسبه آسیب‌های بیولوژیکی ناشی از پروتون‌ها روی ساختار DNA با استفاده از کد GEANT4 استفاده شده است. بهره‌گیری از این روش محاسباتی در تعیین بیناب پروتون‌های پس‌پراکنده‌شده ناشی از برهم‌کنش نوترون سرعت محاسبات را افزایش داده است [۷].

با توجه به ویژگی‌های این روش، در این مقاله بیناب هسته‌های پس‌پراکنده‌شده کربن و سیلیکون در برهم‌کنش کشسان با نوترون با استفاده از این روش، محاسبه شد. لازم به ذکر است که ابتدا صحت بیناب محاسبه با مقایسه داده‌ها با نتایج تجربی سنجیده شد و سپس با استفاده از آن فایل ورودی کد TRIM تهیه و نرخ آسیب جابه‌جایی ناشی از تابش نوترون به نمونه‌ها محاسبه شد.

۲. مواد و روش‌ها

در این تحقیق آسیب جابه‌جایی ناشی از تابش نوترون به نمونه‌ها با استفاده از کد TRIM محاسبه شد. این کد بر پایه شبیه‌سازی برخوردهای اتم-یون می‌باشد. در این کد تاریخچه هر برخورد تکی اتم-یون در نظر گرفته می‌شود و در خروجی جزئیات برخوردها از جمله مقدار انرژی که صرف یونش شده است، تعداد فونون‌های تولیدشده، برد ذرات، پهن‌شدگی انرژی، تعداد حفره‌های ایجادشده در اثر برهم‌کنش یون و اتم هدف و مقدار انرژی که صرف یونش شده است در فایل‌های جداگانه محاسبه می‌شود. محاسبات در مد TRIM.DAT انجام شد. اجرای برنامه در این مد نیازمند فایل ورودی است.

اصل پایستگی انرژی و تکانه در یک پراکندگی کشسان نوترون محاسبه می‌شود. این روش تعیین بیناب انرژی ذرات پس‌پراکنده‌شده در اثر برهم‌کنش کشسان نوترون‌های سریع، روش استاندارد برای ارتباط دادن تابع‌های توزیع آماری متفاوت ولی مرتبط به یکدیگر است.

با توجه به این‌که با یک پراکندگی کشسان سروکار داریم و قوانین پایستگی انرژی جنبشی و تکانه خطی به‌صورت هم‌زمان معتبر هستند، ارتباط ریاضی میان زاویه پراکندگی نوترون و انرژی جنبشی هسته پراکنده‌شده به‌صورت زیر نوشته می‌شود [۱۰]:

$$E_A = E_n \left(1 - \frac{2 \cos^2(\varphi) + A^2 - 1 + 2 \cos(\varphi) \sqrt{\cos^2(\varphi) + A^2 - 1}}{(1 + A)^2} \right) \quad (۳)$$

در این رابطه A جرم اتمی هسته هدف است. با توجه به رابطه ۲ می‌توان برای هر انرژی مشخص نوترون، بیناب هسته‌های پراکنده‌شده در یک پراکندگی کشسان را به‌دست آورد. براین‌اساس این بیناب برای هر نوترون فرودی، انرژی هسته پس‌زده‌شده را محاسبه کرد. پارامتر دیگری که برای محاسبات با کد TRIM مورد نیاز است، زاویه حرکت یون در ماده می‌باشد. برای تعیین این زاویه از رابطه زیر استفاده شد.

$$E_A = \frac{4AE_n}{(A+1)^2} \times \cos^2 \theta \quad (۴)$$

علاوه‌براین پارامتر دیگری که به‌عنوان ورودی کد مد نظر می‌باشد عمق برهم‌کنش است. نوترون به‌دلیل این‌که فاقد برهم‌کنش کولنی است، در مقایسه با ذرات باردار می‌تواند در عمق بیش‌تری از ماده نفوذ کند و با ماده در عمق‌های بیش‌تر برهم‌کنش کنند. در نتیجه زمانی که هدفی در معرض پرتوهای نوترونی قرار می‌گیرد، با توجه به این‌که امکان تولید هسته‌های پس‌زده در هر عمقی از آن وجود دارد، آسیب جابه‌جایی ممکن است در تمامی ضخامت ماده رخ دهد. برخلاف

پراکندگی‌های کشسان تشکیل می‌دهند و برای هسته‌ی کربن تا انرژی ۸ مگاالکترون‌ولت حدود ۸۰٪ از واکنش‌ها، کشسان می‌باشند. بنابراین می‌توان گفت که تا انرژی ۱۰ مگاالکترون‌ولت سهم عمده از کل محصولات برهم‌کنش را یون‌های سیلیکون و کربن تولیدشده در اثر پراکندگی کشسان نوترون تشکیل می‌دهند.

با توجه به این‌که در این مقاله بررسی‌ها برای برهم‌کنش‌های کشسان انجام شده است، می‌توان گفت مقدار آسیب‌های جابه‌جایی با یک تخمین رو به پایین محاسبه شده است. معمولاً سطح مقطع‌های دیفرانسیلی پراکندگی کشسان نوترون از اهداف مختلف، $\frac{d\sigma}{d\Omega(\varphi)}$ ، در کتابخانه‌هایی نظیر ENDF که امروزه به‌صورت الکترونیک در دسترس هستند، موجود می‌باشد [۸]. این کمیت نشان‌دهنده تعداد نوترون‌هایی می‌باشد که در یک پراکندگی کشسان در زاویه فضایی $\Omega(\varphi)$ تا $\Omega(\varphi) + d\Omega(\varphi)$ پراکنده شده‌اند.

با توجه به پایستگی تکانه زاویه‌ای و انرژی جنبشی، انتظار می‌رود انرژی و زاویه پراکندگی نوترون‌های پراکنده‌شده مرتبط با انرژی و زاویه پراکندگی هسته‌های پراکنده‌شده باشد. این ارتباط را به‌صورت ریاضی می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega(\theta)} = \frac{d\sigma}{d\Omega(\varphi)} \frac{d\Omega(\varphi)}{d\Omega(\theta)} \quad (۱)$$

$$\frac{d\sigma}{dE_A} = \frac{d\sigma}{dE_n} \frac{dE_n}{dE_A} \quad (۲)$$

در روابط ۱ و ۲، $\frac{d\sigma}{d\Omega(\theta)}$ سطح مقطع دیفرانسیلی (زاویه‌ای) $\frac{d\sigma}{dE_A}$ سطح مقطع دیفرانسیلی (انرژی) هسته‌های پراکنده‌شده در یک پراکندگی کشسان نوترون است. هم‌چنین $\frac{d\sigma}{dE_n}$ نیز سطح مقطع دیفرانسیلی (انرژی) نوترون‌های فرودی است. مقادیر سطح مقطع‌های دیفرانسیلی در سمت چپ روابط ۱ و ۲ از کتابخانه ENDF قابل استخراج می‌باشد. پارامتر کلیدی در تعیین مقادیر سطح مقطع برای هسته‌های پس‌زده‌شده در تعیین مقادیر سطح مقطع کلیدی است. این دو پارامتر کلیدی نیز، با استفاده از $\frac{dE_n}{dE_A}$ و $\frac{d\Omega(\varphi)}{d\Omega(\theta)}$

غیرکشسان برهم‌کنش‌های غالب نوترون برای این مسئله باشند، تابع تجمعی احتمال برهم‌کنش کشسان به صورت رابطه زیر تعریف می‌شود:

$$CDF_{el} = \frac{\Sigma_{el}}{\Sigma_{el} + \Sigma_{in}} \quad (7)$$

که Σ_{el} و Σ_{in} به ترتیب سطح مقطع پراکندگی کشسان و غیرکشسان نوترون است. برای مشخص کردن نوع واکنش یک عدد تصادفی بین صفر و یک تولید می‌شود. اگر این عدد از مقدار رابطه ۶ کم‌تر باشد واکنش به صورت کشسان و در غیر این صورت ناکشسان در نظر گرفته می‌شود. سپس با استفاده از رابطه ۲ و ۳ به ترتیب انرژی هسته پس‌زده شده و با زاویه پراکندگی آن محاسبه می‌شود. الگوریتم برنامه ++C که مبتنی بر روش مونت کارلو می‌باشد در شکل ۲ نشان داده شده است.

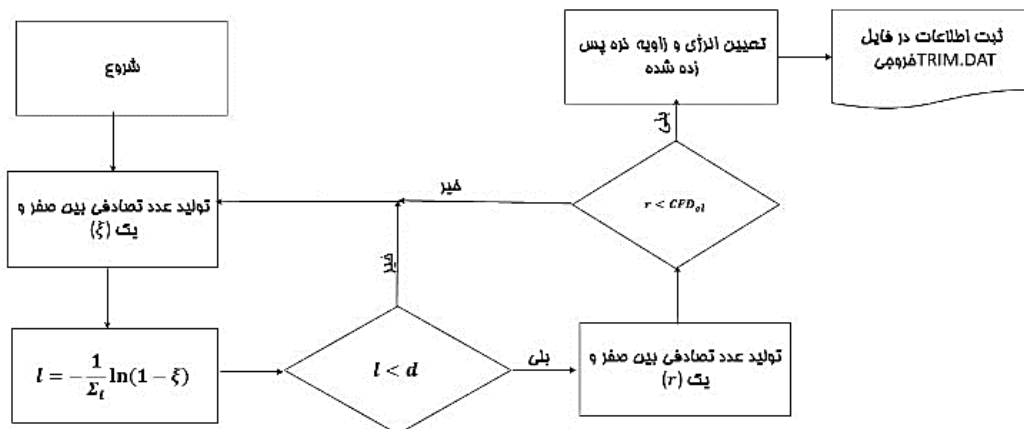
حالتی که با ذرات باردار سروکار داریم آسیب جابه‌جایی در ماده تا یک عمق مشخص از آن به وجود می‌آید. بنابراین تعیین عمق برهم‌کنش نوترون از اهمیت برخوردار است. احتمال برهم‌کنش نوترون به صورت زیر نوشته می‌شود [۱]:

$$P(x) = \Sigma_t e^{-\Sigma_t x} \quad (5)$$

در این رابطه Σ_t سطح مقطع ماکروسکوپی نوترون در ماده هدف و x مکانی است که برهم‌کنش در آن رخ می‌دهد. با تعیین تابع تجمعی با استفاده از رابطه ۴، محل وقوع برهم‌کنش از رابطه زیر تعیین شد:

$$l = -\frac{1}{\Sigma_t} \ln(1 - \xi) \quad (6)$$

در این رابطه ξ عدد تصادفی بین صفر و یک و با توزیع یکنواخت می‌باشد. بنابراین با استفاده از رابطه ۵ ابتدا محل برهم‌کنش نوترون تعیین می‌شود. در مرحله بعد، نوع واکنش تعیین می‌شود. با فرض این‌که واکنش‌های کشسان و



شکل (۲): الگوریتم مورد استفاده برای آماده‌سازی فایل ورودی برنامه TRIM.

Phonon.txt استخراج شد [۹].

$$T_{dam} = E_T^P - E_i^P \quad (7)$$

در این رابطه T_{dam} انرژی آسیب جابه‌جایی، E_T^P و E_i^P به ترتیب انرژی ذرات فرودی و انرژی اتم‌های پس‌زده شده در اثر برخورد ذرات فرودی است که به فونون تبدیل شده است. انرژی آسیب جابه‌جایی به ازای تعداد یون‌های پس‌زده شده به دست می‌آید. با توجه به این‌که تعداد سیلیکون‌های

با انجام این مراحل فایل ورودی کد TRIM آماده می‌شود.

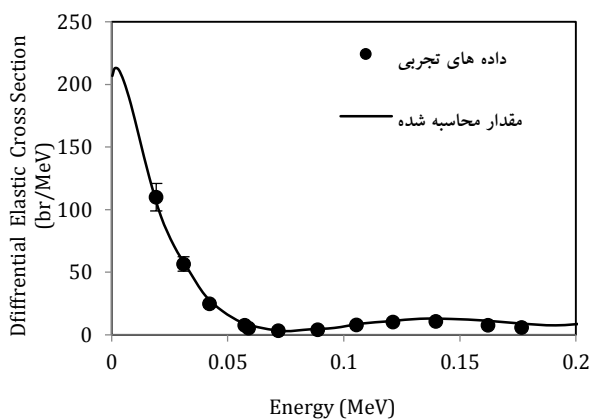
در این مقاله با استفاده از این روش فایل‌های ورودی حاوی اطلاعات هسته پراکنده شده سیلیکون و کربن برای نوترون‌های با انرژی‌های ۰/۱۵ تا ۱۱ مگا الکترون‌ولت تعیین شد. برای اجرای برنامه از ۱۰۰۰۰۰ نوترون استفاده شد. با استفاده از فایل‌های ورودی برنامه TRIM اجرا شد. انرژی آسیب جابه‌جایی از رابطه زیر و با استفاده از اطلاعات فایل

اتم‌های ماده را که در اثر برخورد ذرات فرودی جابه‌جا شده‌اند نشان می‌دهد. بنابراین برای محاسبه آن کافی است تعداد جابه‌جایی‌ها را به‌ازای تعداد کل اتم‌های ماده محاسبه کنیم. حجم ماده ۰/۰۵ سانتی‌متر مکعب در نظر گرفته شده است.

۳. نتایج

در این مقاله برای تعیین بیناب هسته‌های پراکنده‌شده در برهم‌کنش کشسان نوترون از روشی متفاوت استفاده شده است، در ابتدا داده‌های حاصل از این روش با داده‌های تجربی مقایسه و ارزیابی شد. با توجه به این‌که برای هسته سیلیکون داده‌های تجربی یافت نشد، ارزیابی براساس بیناب هسته‌های آهن پراکنده‌شده در برهم‌کنش کشسان با نوترون‌های سریع با انرژی ۳/۰۱ مگاالکترون‌ولت و بیناب هسته‌های کربن پس‌زده‌شده در برهم‌کنش کشسان با نوترون‌های ۳/۱ مگاالکترون‌ولت انجام شد.

نتایج محاسبات مربوط به بیناب هسته‌های آهن پراکنده‌شده در برهم‌کنش کشسان با نوترون به‌همراه مقادیر تجربی اندازه‌گیری‌شده در مرجع [۱۲] در شکل ۳ نشان داده شده است.



شکل (۳): بیناب هسته‌های آهن-۵۶ پراکنده‌شده در اثر برهم‌کنش کشسان با نوترون‌های ۳/۰۱ مگاالکترون‌ولت.

پس‌زده‌شده به انرژی نوترون فرودی وابسته است، محاسبات باید برحسب تعداد نوترون فرودی تبدیل شود. برای این منظور در هر انرژی نوترون، تعداد یون‌های پراکنده‌شده به‌ازای ۱۰۰۰۰۰ نوترون فرودی تعیین شد و سپس انرژی آسیب جابه‌جایی به‌ازای تعداد یون‌های پس‌زده‌شده، به انرژی آسیب جابه‌جایی به‌ازای نوترون فرودی تبدیل شد. در این پژوهش تعداد جابه‌جایی‌ها از مدل نورگت، رابینسون، تورنس^۱ که به اختصار NRT نامیده می‌شود، محاسبه شد [۱۰]. در این مدل آبخارهایی از برخورد یون و اتم شبیه سازی شده است که در هر آبخار توالی برخوردهای دوتایی اتم‌های جابه‌جا شده در شبکه کریستالی دنبال می‌شود. در این مدل برهم‌کنش اتم‌ها بر اساس پتانسیل دو جسمی در نظر گرفته شده است. در صورتی که انرژی یک اتم پس‌زده بیش از آستانه انرژی جابه‌جایی باشد آن اتم به‌عنوان اتم جابه‌جا شده در نظر گرفته می‌شود و هم‌چنان پرتابه آن دنبال می‌شود در غیر این صورت پیگیری پرتابه اتم از آبخار حذف می‌شود.

هنگامی که انرژی اتم‌های جابه‌جا شده کمتر از آستانه جابه‌جایی می‌شود توالی جابه‌جایی‌ها پایان می‌یابد. اثر گرمایی با دادن یک جابه‌جایی گوسی رندوم به هر اتم براساس مدل دی‌بای تقریب زده می‌شود. انرژی غیرکشسان نیز در این مدل در نظر گرفته شده است. در نهایت تعداد جابه‌جایی‌ها براساس این مدل از رابطه زیر به‌دست می‌آید [۹].

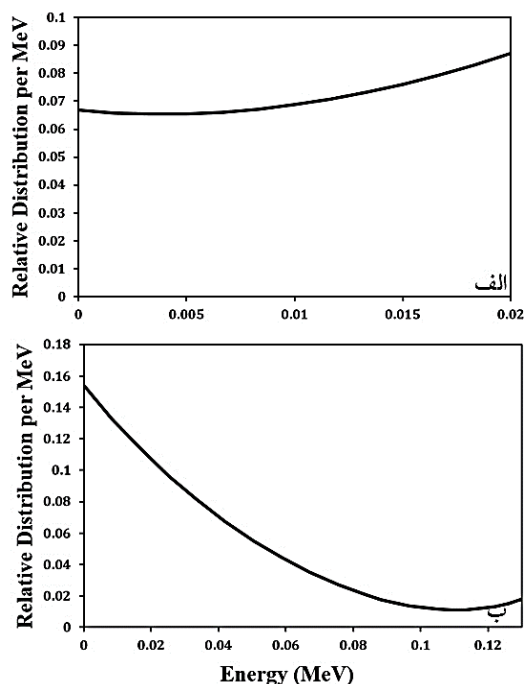
$$U_{NRT} = \frac{0.8 \times T_{dam}}{2E_d} \quad (8)$$

در این رابطه E_d انرژی آستانه جابه‌جایی می‌باشد. این انرژی برای سیلیکون و کربن به ترتیب ۲۵ و ۷۰ الکترون‌ولت است. آسیب جابه‌جایی ایجادشده در ماده با محاسبه تعداد جابه‌جایی‌های به‌ازای واحد اتم، DPA به‌دست می‌آید.

تعداد جابه‌جایی‌ها به‌ازای واحد اتم، DPA، در واقع تعداد

¹ Norgett, Robinson, Torrens (NRT)

شکل‌های ۳ و ۴ از مراجع [۱۲] و [۱۳] با استفاده از نرم‌افزار SCAN IT استخراج شده‌اند و براین اساس ممکن است عدم دقت کمتر از ۱۰٪ در مقادیر استخراج شده وجود داشته باشد. با توجه به ارزیابی انجام شده برای روش تحلیلی، از آن برای تعیین بیناب هسته‌های سیلیکون و کربن استفاده شد. در شکل ۵ نمونه‌ای از بیناب محاسبه شده برای سیلیکون-۲۸ تولید شده در برهم‌کنش با نوترون‌ها با انرژی ۰/۱ و ۶ مگاالکترون‌ولت نشان داده شده است.

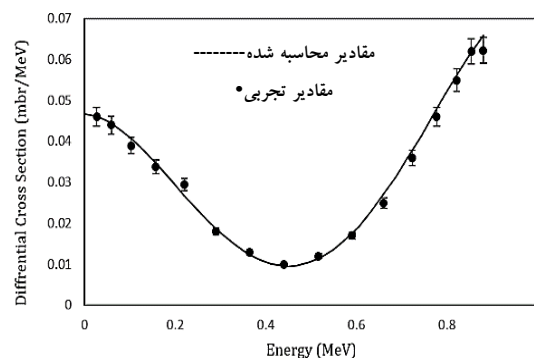


شکل (۵): بیناب محاسبه شده هسته‌های سیلیکون-۲۸ پراکنده شده در برهم‌کنش کشسان با نوترون‌های الف: ۰/۱ مگاالکترون‌ولت، ب: ۶ مگاالکترون‌ولت.

براین اساس برای انرژی‌های متفاوت برای هسته‌های کربن-۱۲ و سیلیکون-۲۸ بیناب هسته‌های پس‌پراکنده محاسبه شد. در مرحله بعد با استفاده از الگوریتم نشان‌داده شده در شکل ۲ فایل ورودی برای کد TRIM آماده شد و آسیب‌های جابه‌جایی ناشی از تابش نوترون بر روی یک لایه سیلیکون و کربن به ضخامت ۲۰۰۰ میکرومتر نیز محاسبه شد. معیار در نظر گرفتن ضخامت نمونه کربن و سیلیکون، ضخامت آشکارسازهای سیلیکونی و کربنی موجود است. بیش‌ترین انرژی نوترون در

شکل ۳ نشان می‌دهد که میان داده‌های تجربی و مقادیر محاسبه شده هم‌خوانی وجود دارد. اندازه‌گیری سطح مقطع دیفرانسیلی هسته‌های آهن-۵۶ در مرجع [۱۲] با روش بیناب نمایی نوترون‌های سریع با استفاده از زمان پرواز در یک شتاب‌دهنده و اندوگراف آلدرماستون ۶ مگا‌ولت انجام شده است. نوترون‌های پراکنده شده از یک هدف از آهن-۵۶ که در فاصله ۱۱/۱ سانتی‌متری از چشمه قرار گرفته بود در زاویه ۳۰ تا ۱۳۷ درجه آشکارسازی و بیناب نمایی شدند.

نتایج مقایسه داده‌های تحلیلی بیناب هسته‌های کربن پس‌زده شده در برهم‌کنش کشسان با نوترون‌های ۳/۱ مگاالکترون‌ولت و داده‌های تجربی که از مرجع [۱۳] استخراج شده است در شکل ۴ نشان داده شده است.



شکل (۴): بیناب هسته‌های کربن-۱۲ پراکنده شده در اثر برهم‌کنش کشسان با نوترون‌های ۳/۱ مگاالکترون‌ولت.

تعیین سطح مقطع دیفرانسیلی هسته‌های کربن-۱۲ در مرجع مذکور با استفاده از روش پس‌زنی هسته انجام شد. باریکه نوترونی حاصل از واکنش $T(p,n)^3He$ در یک شتاب‌دهنده و اندوگراف به یک شمارنده تناسبی تابیده شد و انرژی هسته‌های پس‌زده تعیین گردید.

همان‌گونه که در شکل ۴ مشاهده می‌شود، میان مقادیر سطح مقطع دیفرانسیلی محاسبه شده و مقادیر تجربی هم‌خوانی وجود دارد. میزان اختلاف نسبی میان مقادیر محاسبه شده و مقادیر تجربی در شکل‌های ۳ و ۴ کمتر از ۱۰٪ می‌باشد. ذکر این نکته ضروری است که داده‌های تجربی نشان داده شده در

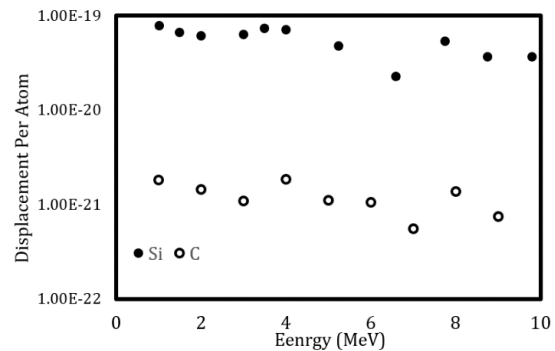
قرار می‌گیرد و در نهایت این انرژی منجر به محاسبه آسیب جابه‌جایی می‌شود، میزان عدم قطعیت آسیب‌ها نیز برابر با عدم قطعیت توان توقف خواهد بود.

همان‌گونه که در شکل ۶ مشاهده می‌شود، در یک انرژی مشخص نوترون، میزان آسیب جابه‌جایی‌های ایجاد شده بر واحد اتم، در سیلیکون بیشتر از کربن می‌باشد. این موضوع ناشی از آستانه انرژی جابه‌جایی این دو عنصر است. این انرژی برای کربن در حدود ۷۰ الکترون‌ولت است، برای سیلیکون در حدود ۲۵ الکترون‌ولت می‌باشد.

۴. نتیجه‌گیری

بررسی آسیب در مواد مختلف یکی از موضوعات مورد علاقه محققین مختلف می‌باشد. یکی از مواردی که به‌عنوان آسیب مد نظر می‌باشد جابه‌جایی بر واحد اتم است. این پارامتر نشان‌دهنده‌ی تعداد اتم‌هایی می‌باشد که در اثر برهم‌کنش تابش فرودی با شبکه اتمی ماده هدف، از مکان مشخص خود در شبکه بلوری جابه‌جا شده است و تعداد آن متناسب با زوج‌های فرنکل تولید شده می‌باشد. از این رو در این مقاله این روش برای محاسبه‌های آسیب‌های جابه‌جایی ناشی از پرتوهای نوترون در کربن و سیلیکون استفاده شده است. در این مقاله آسیب‌های جابه‌جایی نوترون‌ها بر روی سیلیکون و کربن محاسبه شد. با توجه به این‌که نوترون‌های تولیدی در شتاب‌دهنده‌ها مد نظر بود ناحیه انرژی بررسی ۰/۱ تا ۱۰ مگاالکترون‌ولت در نظر گرفته شد. برای محاسبه بیناب ذرات باردار پراکنده شده از یک روش تحلیلی بر مبنای مرتبط کردن دو توزیع آماری سطح مقطع دیفرانسیلی پراکندگی کشسان نوترون (تعداد نوترون‌های پراکنده شده در یک بازه زاویه فضایی) و سطح مقطع دیفرانسیلی پراکندگی هسته‌های پس‌زده (تعداد هسته‌های پس‌زده شده در یک بازه انرژی) استفاده شد. مقایسه با اندازه‌گیری‌های تجربی صحت بیناب محاسبه شده به این روش

این مقاله ۱۰ مگاالکترون‌ولت است و انرژی‌های ۲۸۰ و ۱۳۰ کیلوالکترون‌ولت بیش‌ترین مقدار انرژی‌هایی هستند که می‌توانند به ترتیب به هسته کربن و سیلیکون پس‌زده منتقل شوند. برد ذرات کربن در این انرژی در محیط کربن ۶ میکرومتر و برد ذرات سیلیکون در محیط سیلیکون حدود ۴ میکرومتر است. این مقادیر بیشترین بردهای ممکن است و با این وجود مشاهده می‌شود که بسیار کمتر از ضخامت مد نظر می‌باشد. در شکل ۶ مقایسه میان آسیب جابه‌جایی در کربن-۱۲ و سیلیکون-۲۸ نشان داده شده است. مقادیر جابه‌جایی بر واحد اتم، همان‌گونه که پیش از این نیز بیان شد، با استفاده از کد TRIM تعیین شده است. برای تخمین میزان عدم قطعیت محاسبات، باید عدم قطعیت‌های سیستماتیک و آماری در نظر گرفته شوند. عدم قطعیت آماری، با توجه به تعداد یون‌های تابیده شده به هدف تعیین می‌شود.



شکل (۶): آسیب‌های جابه‌جایی ایجاد شده در کربن و سیلیکون به صورت تابعی از انرژی نوترون فرودی.

در این تحقیق تعداد نوترون‌های فرودی به‌اندازه کافی بزرگ در نظر گرفته شد تا خطای آماری در حدود ۱٪ باشد. اما برای تعیین خطای سیستماتیک باید در نظر داشته باشیم، که کد TRIM از جداول SRIM برای تعیین توان توقف استفاده می‌کند. بر اساس داده‌های موجود [۶] در این کد، میزان عدم قطعیت توان توقف کربن در کربن ۵٪ و توان توقف سیلیکون در سیلیکون ۶٪ می‌باشد. با توجه به این‌که این مقادیر توان توقف در محاسبه انرژی منتقل شده به ماده هدف مورد استفاده

را تایید کرد. مقدار به‌دست آمده آسیب جابه‌جایی برای کربن از مرتبه 10^{-21} و برای سیلیکون از مرتبه 10^{-19} به‌دست آمد. مقادیر به‌دست آمده با مقادیر محاسبه‌شده توسط محققین دیگر [۴] هم‌خوانی دارد. البته اختلافاتی در اعداد وجود دارد که به‌دلیل اعمال‌نکردن برهم‌کنش‌های ناکشسان نوترون‌ها می‌باشد. نتایج به‌دست آمده نشان می‌دهد که در نتیجه پرتودهی سیلیکون با نوترون به‌ازای هر نوترون فرودی در هر 10^{19} اتم یک جابه‌جایی رخ می‌دهد در حالی که این عدد برای کربن در هر 10^{21} اتم می‌باشد. براین اساس می‌توان گفت که کربن در برابر

پرتوهای نوترونی مقاومت بیشتری دارد و آسیب‌های جابه‌جایی کم‌تری در آن ایجاد می‌شود. این اثر به‌دلیل تفاوت در آستانه انرژی جابه‌جایی کربن و سیلیکون است. این انرژی برای کربن و سیلیکون به ترتیب ۷۰ و ۲۵ الکترون‌ولت است. با توجه به مقاومت پرتویی کربن در برابر میدان‌های آمیخته برای اهداف آشکارسازی در کاربردهای فضایی از این ماده استفاده می‌شود. البته سیلیکون نیز به‌دلیل ویژگی‌هایی که دارد برای بیناب‌نمایی در میدان‌های پرتویی شتاب‌دهنده‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرد. از این‌رو بررسی آسیب پرتویی در هر دو ماده از اهمیت برخوردار است.

۵. مراجع

- [1] J.R. Lamarsh. Introduction to nuclear engineering, 2nd edition, Addison Wesley, (1983).
- [2] T. Tsang. Neutron damage and recovery studies of SiPMs, IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference Proceedings (NSS/MIC), (2018).
- [۳] علی محمدی، محسن اسدی اسدآباد، سعید حمیدی و محمد امین امیرخانی دهکردی. بررسی مشخصات اتم‌های پس‌زده اولیه (PKA) و آسیب ناشی از تابش نوترون در فولاد زنگ‌نزن ۳۱۶، فیزیک کاربردی ایران، ۹(۳) (۱۳۹۸) ۵-۱۵.
- [4] M. Guthoff, W. de Boer and S. Müller. Simulation of beam induced lattice defects of diamond detectors using FLUKA, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 735(2014) 223–228.
- [5] U. Saha, K. Devan and S. Ganesan. A study to compute integrated dpa for neutron and ion irradiation environments using SRIM-2013, Journal of Nuclear Material, 503(2018) 30–41.
- [6] J.F. Ziegler, M.D. Ziegler, and J.P. Biersack. SRIM–The stopping and range of ions in matter, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 268(11) (2010) 1818–1823.
- [7] A. Zabihi, S. Incerti, Z. Francis, G. forozani, F. Semsarha, A. Moslehi, P. Rezaeian and M.A. Bernal. Computational approach to determine the relative biological effectiveness of fast neutrons using the Geant4-DNA toolkit and a DNA atomic model from the Protein Data Bank, PHYSICAL REVIEW E, 99(2019) 052404.
- [8] M.B. Chadwick, M. Herman, P. Obložinský, M.E. Dunn, Y. Danon, A.C. Kahler, D.L. Smith, B. Pritychenko, G. Arbanas, R. Arcilla, R. Brewer, D.A. Brown, R. Capote, A.D. Carlson, Y.S. Cho, H. Derrien, K. Guber, G.M. Hale and P.G. Young. ENDF/B-VII. 1 nuclear data for science and technology: cross sections, covariances, fission product yields and decay data. Nuclear Data Sheets, 112(12) (2011) 2887–2996.
- [9] J.B. Marion and F.C. Young. Nuclear reaction analysis. Graphs and tables Amsterdam: North-Holland publications, (1968).
- [10] R.E. Stoller, M.B. Toloczko, G.S. Was, A.G. Certain, S. Dwaraknath and F.A. Garner. Erratum to “On the use of SRIM for computing radiation damage exposure” [Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B 310(2013) 75–80], Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B459(2019) 196–197.
- [11] M.J. Norgett, M.T. Robinson and I.M. Torrens. A proposed method of calculating displacement dose rates, Nuclear Engineering and Design, 33(1975) 50–54.
- [12] W.B. Gilboy and J.H. Towle, a neutron scattering study of ⁵⁶Fe, Nuclear Physics, 64(1) (1965) 130–146.
- [13] D. Lister and A. Sayres. Elastic Scattering of Neutrons from Carbon and Oxygen in the Energy Range 3.0 to 4.7 MeV, Physical Review, 143(1966) 748–758.