

34.072740

BRO343205



AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO

**SIMULAÇÃO DE DANOS E EFEITOS DA RADIAÇÃO
EM MATERIAIS ESTRUTURAIS**

OLEXIY KUZNETSOV

Dissertação apresentada como parte dos
requisitos para obtenção do Grau de
Mestre em Ciências na Área de
Tecnologia Nuclear - Reatores.

Orientador:
Dr. José Rubens Maiorino

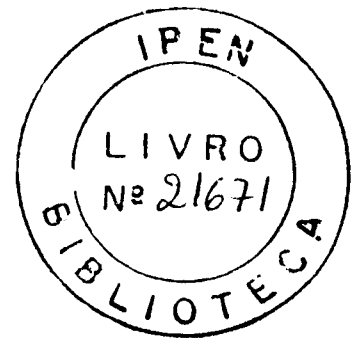
São Paulo

1998

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
Autarquia associada à Universidade de São Paulo

**SIMULAÇÃO DE DANOS E EFEITOS DA RADIAÇÃO
EM MATERIAIS ESTRUTURAIS**

OLEXIY KUZNETSOV



Dissertação apresentada como parte dos requisitos para obtenção do grau de Mestre em Ciências na Área de Tecnologia Nuclear - Reatores.

Orientador:
Dr. José Rubens Maiorino

SÃO PAULO

1998

Aos meus pais

AGRADECIMENTOS

Ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, IPEN-CNEN/SP, pela possibilidade de realizar este trabalho.

À organização CNPq cujo apoio financeiro foi essencial.

Ao meu orientador e diretor da Diretoria dos Reatores do Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Dr. José Rubens Maiorino, pela oportunidade de trabalho, pelo seu interesse, auxílio e conselhos, muito importantes durante o desenvolvimento desta dissertação.

Ao meu co-orientador e chefe da Divisão de Engenharia do Núcleo, Dr. José Augusto Perrotta, pela grande participação na orientação, pela ajuda e preocupação sincera em todas as questões, tanto ligadas ao trabalho, como à minha estadia no Brasil.

Ao Dr. Georgi Lucki pela sua participação ativa no desenvolvimento da dissertação, pelas discussões científicas e lingüísticas, muito úteis, que ajudaram essencialmente este trabalho.

Aos meus amigos e colegas da Divisão e da Diretoria pelo ambiente favorável ao trabalho e pela atmosfera de amizade criada na Diretoria, pela ajuda em conhecer o Brasil, seus costumes e idioma, pela sua gentileza e bondade, em especial à Myrthes Castanheira.

Aos professores de pós-graduação do IPEN: Dra. Anna Maria Graciano Figueiredo, Dr. Luís Antônio Albiac Terremoto, Dr. João Manoel Losada Moreira, Dr. Luis Filippe Carvalho Pedroso de Lima, Dr. Goro Hiromoto, Dr. Georgi Lucki, Dra. Brigitte Roxana Soreanu Pecequilo, Dra. Marina Fallone Koskinas, Dr. Waldemar Alfredo Monteiro, Dr. Valdemir Gutierrez Rodrigues pela atitude profissional e pela compreensão nas dificuldades do idioma.

Ao Dr. Luciano Pagano Júnior e ao Dr. Athur Moses Motta (*The Pennsylvania State University*) por fornecer o programa TRIM e, ao último, reforço minha gratidão pelas informações e consultas em várias questões ligadas a esta dissertação, bem como pelo ajuda no fornecimento do programa SPECTER.

Ao Dr. L.R. Greenwood (*Pacific Northwest National Laboratory*) que gentilmente forneceu o programa SPECTER.

À Cristiane Layher Takeda (Faculdade de Filosofia e Letras, USP) pela ajuda na tradução e redação da dissertação, pelos sábados e domingos, que foram passados comigo no micro, pela sua paciência e hospitalidade.

À chefia do Centro Científico Nacional da Ucrânia, Instituto de Física e Tecnologia de Kharkov, em particular ao diretor Professor Dr. I.M. Neklyudov, pelas recomendações que ajudaram a continuação do meu trabalho no campo da ciência.

Ao Professor Dr. Ivan Cunha Nascimento (Instituto de Física, USP) pelo sábio conselho sobre a escolha da instituição, o que me levou ao IPEN.

A todas as pessoas do IPEN que direta ou indiretamente, possibilitaram a realização deste trabalho.

Ao Brasil pelo seu calor e sua alegria.

SIMULAÇÃO DE DANOS E EFEITOS DA RADIAÇÃO EM MATERIAIS ESTRUTURAIS

Olexiy Kuznetsov

RESUMO

A caracterização do comportamento dos materiais estruturais empregados no ambiente de irradiação é um dos principais elementos no projeto de reatores nucleares. Várias instalações experimentais são usadas para simular os efeitos da radiação nas propriedades dos materiais. Frequentemente, as instalações disponíveis não reproduzem, em todos os sentidos, as condições da irradiação simulada e, portanto, são necessários procedimentos de correlação da irradiação para que os resultados obtidos nos experimentos de simulação possam ser usados no projeto do reator. Neste trabalho são apresentados os aspectos relacionados à simulação dos efeitos da radiação com uma revisão crítica dos parâmetros de dano que são usados na correlação da irradiação. Por método de simulação computacional, estes parâmetros foram calculados para vários tipos de irradiação com nêutrons e com íons leves (alfas e prótons) e também foram comparados. Os materiais estudados são: aços AISI 304, 348L* e níquel. No trabalho são apresentados a metodologia para implantação homogênea dos íons no material e também o programa computacional, em Turbo Pascal, de simulação da irradiação com nêutrons. Os resultados obtidos podem servir como referências quantitativas para experimentos de simulação planejados.

SIMULATION OF RADIATION DAMAGE AND EFFECTS IN STRUCTURAL MATERIALS

Olexiy Kuznetsov

ABSTRACT

The characterization of structural materials behavior under irradiation is one of the basic elements in nuclear reactor's design. Various irradiation facilities are used to simulate the radiation effects on material properties. Frequently, existing facilities do not, in all respects, reproduce the irradiation conditions which are simulated. Therefore, procedures of irradiation correlation are necessary, so that the obtained data from simulation experiments can be used in reactor's design. In the present work the relevant aspects of radiation effects simulation and the critical review of damage parameters used for correlation are presented. These parameters were calculated by computer simulation technique for various types of neutron and light ions (protons and helium ions) irradiation and were also compared. The investigated materials are AISI 304, 348L* stainless steels and nickel. The methodology of homogeneous ion implantation into a material and a Turbo Pascal computer program for neutron irradiation simulation are presented. The obtained results may serve as the quantitative reference data for simulation experiments planned.

SUMÁRIO

	Página
1 INTRODUÇÃO.....	1
1.1 PROBLEMAS CONTEMPORÂNEOS DO DESENVOLVIMENTO DA TECNOLOGIA DOS MATERIAIS DE USO NUCLEAR.....	1
1.2 OBJETIVOS E ASPECTOS RELEVANTES DO TRABALHO.....	3
2 DANOS DA RADIAÇÃO.....	6
2.1 DESENVOLVIMENTO DE DANOS DA RADIAÇÃO.....	6
2.1.1 Processos primários.....	7
2.1.2 Cinética dos defeitos.....	12
2.1.3 Formação da estrutura defeituosa.....	17
2.1.4 Propriedades dos materiais.....	19
2.2 SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DOS DANOS DA RADIAÇÃO.....	21
2.3 CÓDIGOS COMPUTACIONAIS.....	23
2.3.1 Programa TRIM.....	23
2.3.2 Programa MARLOWE.....	24
2.3.3 Programa MOLDY-CASK.....	24
2.3.4 Programa SPECTER.....	25
3 METODOLOGIA DO ESTUDO.....	26
3.1 FUNDAMENTOS FÍSICOS DOS EXPERIMENTOS DE SIMULAÇÃO.....	26
3.1.1 Dose da irradiação.....	30
3.1.2 Grau de similaridade dos espectros de PKAs.....	31
3.1.3 Relação entre as taxas de produção dos defeitos e produtos das reações nucleares.....	32
3.1.4 Distribuição das áreas primárias da cascata e aglomerados iniciais por seu tamanho.....	34
3.1.5 Temperatura da irradiação.....	37
3.2 IRRADIAÇÃO COM NÊUTRONS.....	38
3.2.1 Programa NOBL.....	38
3.2.2 Metodologia dos cálculos das características básicas da irradiação.....	45
3.3 IRRADIAÇÃO COM ÍONS.....	47
3.3.1 Implantação homogênea.....	47

3.3.2 <i>Modo de transmissão</i>	54
3.3.3 <i>Metodologia dos cálculos das características básicas de irradiação</i>	55
4 CÁLCULOS E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS	56
4.1 IMPLANTAÇÃO HOMOGÊNEA DE ÍONS	56
4.2 IRRADIAÇÃO COM NÊUTRONS E COM ÍONS	64
4.3 ANÁLISE E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS	72
5 CONCLUSÕES	75
APÊNDICE - PROGRAMA NOBL.....	77
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	99

1 INTRODUÇÃO

1.1 Problemas contemporâneos do desenvolvimento da tecnologia dos materiais de uso nuclear

A energia nuclear é considerada como uma das alternativas principais para a geração de energia elétrica. Atualmente, cerca de 17% do total da geração de energia elétrica tem origem nuclear, que tem sido fornecida principalmente por reatores térmicos a água leve (*Light Water Reactor, LWR*). O desenvolvimento dos reatores e a melhoria do seu desempenho operacional estão baseados fundamentalmente na escolha de materiais e combustíveis adequados.

Tendo em vista que os materiais utilizados nos reatores nucleares estão sujeitos a um ambiente com altos níveis de irradiação, principalmente neutrônica, temperaturas elevadas e alta pressão, a escolha destes materiais está condicionada ao comportamento deles no ambiente (irradiação, altas vazões, pressões, temperaturas, etc.) e é um dos pontos limitantes no comportamento operacional.

Nas últimas décadas, foram descobertos e estudados numerosos fenômenos físicos sob irradiação com partículas de alta energia e com campos eletromagnéticos de alta frequência denominados como danos da radiação. Inchamento, fluência (*creep*) e endurecimento por radiação, fragilização por radiação de alta temperatura, transformações da estrutura e de fase causadas por radiação, aceleração dos processos de corrosão, fenômenos da superfície, tais como: erosão, empolamento (*blistering*), escama (*flaking*), arrancamento (*sputtering*); tornaram-se objeto principal do estudo científico da física de danos da radiação e da metalurgia física.

Até hoje, uma enorme quantidade de informação já foi obtida sobre o comportamento dos materiais estruturais dos reatores rápidos e térmicos. Parte significativa dos dados foi conseguida diretamente nas condições operacionais das instalações nucleares atuantes. Por

outro lado, os estudos teóricos nesta área auxiliaram a compreender a natureza física da interação da radiação com a matéria, os mecanismos de danos por radiação e levaram a recomendações cientificamente fundamentadas para o desenvolvimento de novos materiais e o aperfeiçoamento dos materiais existentes. O trabalho realizado permitiu otimizar as condições de operação das usinas nucleares, aumentar a eficiência e a segurança delas. Dentro de programas nucleares nacionais foram desenvolvidos critérios e normas de projeto e execução das instalações, determinadas as condições de exploração e as exigências do funcionamento para os materiais dos reatores em construção ¹.

É necessário notar que os reatores do próximo século dependerão completamente do desenvolvimento de materiais com propriedades adequadas ao ambiente de funcionamento nestes reatores, o que faz com que as pesquisas nesta área sejam extremamente importantes. Neste sentido, o projeto de construção do reator internacional experimental termonuclear (*International Thermonuclear Experimental Reactor, ITER*) tornou-se um grande estímulo no desenvolvimento da tecnologia dos materiais de uso nuclear. No ano de 1998 termina a fase de projeto de engenharia e começa a construção do reator ².

Atualmente, na área dos materiais de uso nuclear é necessário resolver problemas - chave que são: 1) a criação de uma base de dados completa das propriedades dos materiais usados e dos materiais em perspectiva de uso, irradiados pelo fluxo integrado dos nêutrons até 10^{23} nêutrons/cm² ^{3,4}; 2) a adaptação dos critérios de projeto (*design criteria*) que já foram desenvolvidos, para as condições de funcionamento mais severas no reator termonuclear (em particular, a determinação mais precisa das fronteiras de exploração segura dos materiais como, por exemplo, as admissíveis concentrações de hélio no material^{5,6}); 3) o estudo da influência das doses baixas e médias da irradiação com nêutrons na degradação das propriedades dos materiais de vaso de pressão dos reatores rápidos, em particular, os estudos dos mecanismos de fragilização intergranular de alta temperatura e do trincamento atribuível à corrosão sob tensão acompanhado pela irradiação (*Irradiation Assisted Stress Corrosion Cracking, IASCC*), sobre as quais ainda não se tem compreensão completa ⁷⁻¹¹.

Várias instalações experimentais de irradiação tem sido usadas para a resolução dos problemas citados acima¹². Suas capacidades são avaliadas do ponto de vista de produção

da dose de dano, do espectro dos átomos deslocados por choque primário, das taxas de transmutação nuclear, em particular, a taxa de produção do hélio, junto com a exequibilidade do experimento controlado. Neste sentido, as técnicas da irradiação das amostras com feixe iônico têm certas vantagens em comparação com os experimentos diretos nos reatores e são amplamente usadas no estudo de danos da radiação e na obtenção dos resultados experimentais. Infelizmente, devido à natureza diferente das partículas, os dados da irradiação com íons não podem ser usados como dados quantitativos de simulação para irradiação com nêutrons. Fica claro que, mesmo usando as fontes de nêutrons, é necessário estabelecer uma metodologia para avaliar, nos materiais, os efeitos da radiação em certas condições, freqüentemente não-realizáveis, usando dados acessíveis ou meios acessíveis da irradiação¹³. Este problema de correlação da irradiação também é uma tarefa atual.

Com o desenvolvimento das técnicas computacionais, os modelos matemáticos mostraram-se adequados na análise dos processos de danos da radiação nos materiais. Os trabalhos de simulação computacional revelaram-se tão proveitosos que dentro dos projetos levanta-se a exigência de se antecipar todos os experimentos mais importantes em física de danos da radiação pela análise computacional. Por enquanto, um problema não resolvido nesta área é a criação de um modelo seguro da evolução da microestrutura do material¹⁴.

1.2 Objetivos e aspectos relevantes do trabalho

No IPEN, a Divisão de Engenharia do Núcleo desenvolveu uma especificação própria para aço inoxidável austenítico a ser utilizado como revestimento de varetas combustíveis em reatores PWR¹⁵. O aço desenvolvido, denominado 348L*, pode substituir com vantagens o aço inoxidável austenítico AISI 304 que é o mais comum. Portanto, para este novo material, faz-se necessário um estudo teórico e experimental sobre danos e efeitos da radiação (nêutrons). No entanto, o Brasil não possui um reator de teste de materiais com alto fluxo de nêutrons, onde se possa irradiar amostras deste material. Pode-se contornar este fato, utilizando-se uma tentativa de substituir nêutrons por íons e correlacionar os danos e efeitos no material para as diferentes partículas. Isto pode ser feito utilizando-se

prótons e alfas de alta energia produzidos em Ciclotron. O IPEN e IEN dispõem de Ciclotron que pode irradiar amostras deste material.

Um programa de irradiação de amostras dos aços 348L* e AISI 304 com partículas alfa e prótons em Ciclotron foi iniciado pela Divisão de Engenharia do Núcleo. Neste programa, amostras serão caracterizadas antes de irradiar e depois da irradiação. Serão analisadas: propriedades físicas (resistividade); propriedades mecânicas (tensão de escoamento, tensão de ruptura, ductilidade, dureza, *creep*) e características metalográficas (microscopia óptica e eletrônica de varredura).

O objetivo deste trabalho é a simulação computacional dos danos da radiação dos nêutrons e dos íons nos materiais estruturais. Estrategicamente o trabalho obedece ao esquema mostrado na figura 1. O esquema proposto inclui: estudo da fenomenologia da interação dos íons e nêutrons com a matéria; determinação das características básicas e condições da equivalência da produção dos defeitos aos diferentes tipos de irradiação; simulação computacional da irradiação com íons e com nêutrons nas condições equivalentes; análise comparativa dos resultados e, se for necessário, correção dos parâmetros da irradiação com íons; extrapolação da microestrutura dos materiais nas propriedades macroscópicas.

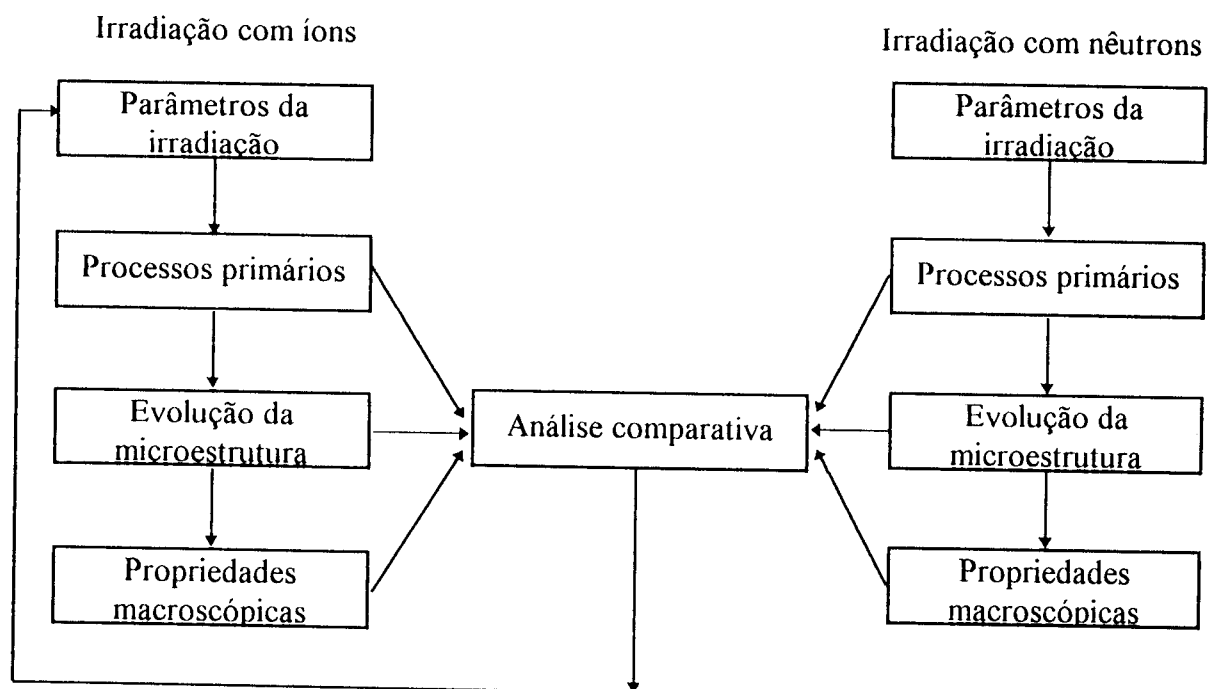


Figura 1. Estratégia da simulação computacional.

Esta dissertação é a realização da primeira parte deste plano. São estudados os danos da radiação nos aços inoxidáveis AISI 304, 348L* e em níquel sob a irradiação com prótons, íons de hélio e nêutrons, sendo propostos os métodos de determinação dos parâmetros básicos da irradiação com íons e das características de produção dos defeitos sob irradiação com íons e com nêutrons. Estas características são comparadas com o objetivo de revelar melhores parâmetros da irradiação iônica para simular os processos primários da irradiação neutrônica.

2 DANOS DA RADIAÇÃO

Danos da radiação é um conjunto largo de processos físicos de interação da radiação com os materiais, que leva à mudança de suas propriedades com todas as conseqüências tecnológicas decorrentes. Aqui entram: as interações elásticas e inelásticas das partículas incidentes com os átomos do sólido, as cascatas das colisões de átomo-átomo, a difusão dos átomos da matéria, os processos da evolução da estrutura defeituosa, a deformação do material e etc.

2.1 Desenvolvimento de danos da radiação

Sob irradiação, os materiais sofrem diversas reestruturações (transformações) internas. As partículas incidentes excitam os subsistemas eletrônico e atômico, o que leva a várias perturbações com tempos de vida diferentes. Conseqüentemente, há mudanças das características macroscópicas, causadas por estas perturbações, que são diferentes por sua duração. De uma forma geral, de acordo com sua duração, os efeitos da radiação podem ser divididos em dois grandes grupos¹⁶: 1) os efeitos que desaparecem depois da suspensão da irradiação; 2) os efeitos que ficam depois da suspensão da irradiação.

Ao primeiro grupo pertencem, por exemplo, o aumento brusco local da temperatura, a aceleração da fluência (*creep*) dos materiais, a migração adicional dos defeitos causada pelas ondas elásticas no cristal que surgem durante a recombinação espontânea dos pares de Frenkel instáveis, e alguns outros efeitos. O segundo grupo inclui os processos que se referem às reestruturações consideráveis do subsistema atômico. Por exemplo: as diversas violações da periodicidade da estrutura cristalina (produção dos defeitos), os processos de transmutação na matriz inicial como resultado das reações nucleares e as transformações de fase nas ligas. É óbvio que para a relaxação destas mudanças, é necessário um tempo

considerável de recozimento (*annealing*) e, em alguns casos, como, por exemplo, nos produtos de transmutação com baixa mobilidade, a relaxação é impossível.

O quadro geral de danos da radiação é apresentado pelo esquema da figura 2.

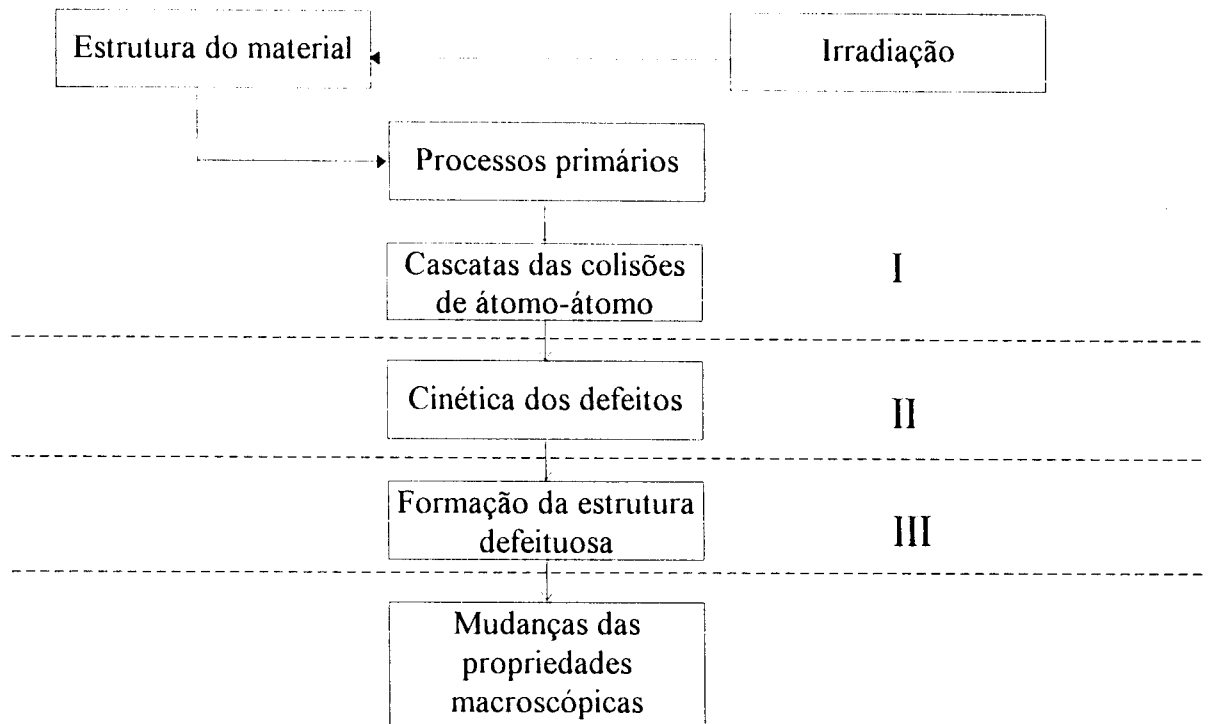


Figura 2. O esquema dos estágios básicos de danos da radiação dos materiais¹⁷:

I - o estágio dinâmico; II - o estágio difusional; III - o estágio da evolução da microestrutura.

2.1.1 Processos primários

Os processos ligados à frenagem das partículas num cristal são detalhadamente discutidos nos excelentes trabalhos dedicados a este tema¹⁸⁻²⁰.

Baseando-se nos dados experimentais e teóricos existentes, o quadro do desenvolvimento da cascata da irradiação, a partir do momento de produção do átomo deslocado por choque primário (*Primary Knock-on Atom, PKA*) com a energia E_0 até a produção das estruturas características nesta área, pode ser apresentado pelo esquema ilustrado na figura 3. O modelo ilustrativo deste esquema está na figura 4.

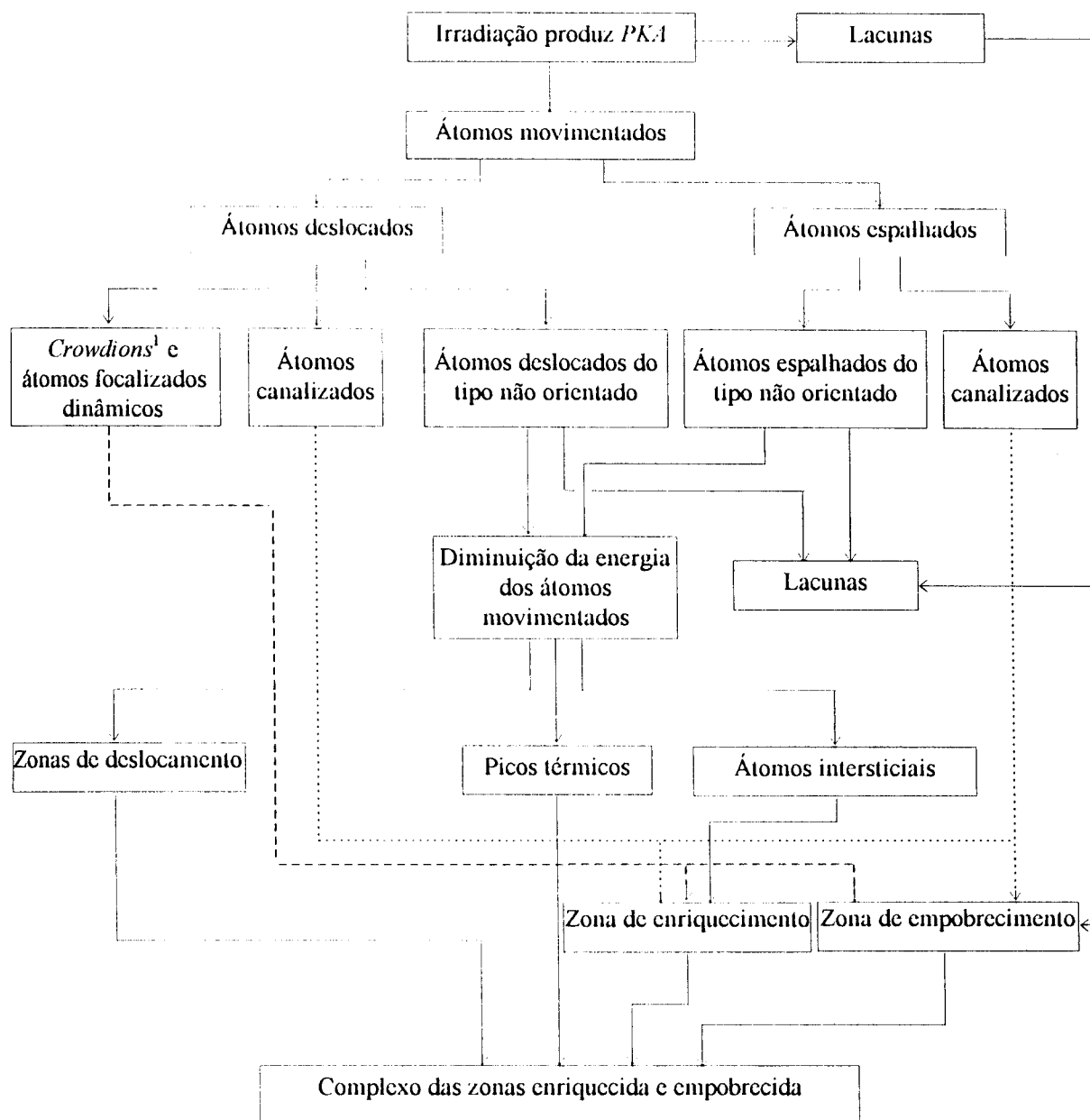


Figura 3. O esquema do desenvolvimento da cascata dos deslocamentos atômicos no cristal²¹.

A cascata dos deslocamentos começa pelo *PKA*. Colidindo com os átomos da rede, o *PKA* produz os átomos secundários, os quais, por sua vez, dão origem aos átomos terciários e etc. Parte da energia do *PKA* gasta-se nas substituições e nos deslocamentos dos átomos, resultando na produção dos pares de Frenkel isolados. O restante da energia gasta-se nas excitações eletrônicas e na ionização, e é absorvida pelo cristal como energia

¹ Crowdion é uma configuração unidimensional dos átomos intersticiais (vide a figura 4).

térmica. Quando há energias altas do *PKA* (10^4 - 10^5 eV) a área da cascata pode dividir-se em sub-áreas ou sub-cascatas. O tempo médio do desenvolvimento da cascata é 10^{-13} s. Os defeitos produzidos durante este tempo, em resultado dos processos dinâmicos (a canalização, a focalização, as excitações eletrônicas), levam ao aparecimento da distribuição característica das lacunas e dos átomos intersticiais e à criação da “zona esvaziada”. A área ocupada pela cascata ou sub-cascata produzida tem o tamanho linear de ordem de 10 a 500Å. Esta área atua como embrião na distribuição posterior dos defeitos e as suas características espaciais dependem da energia da partícula incidente, da temperatura da irradiação, da dose da irradiação, da estrutura defeituosa inicial e de alguns outros parâmetros.

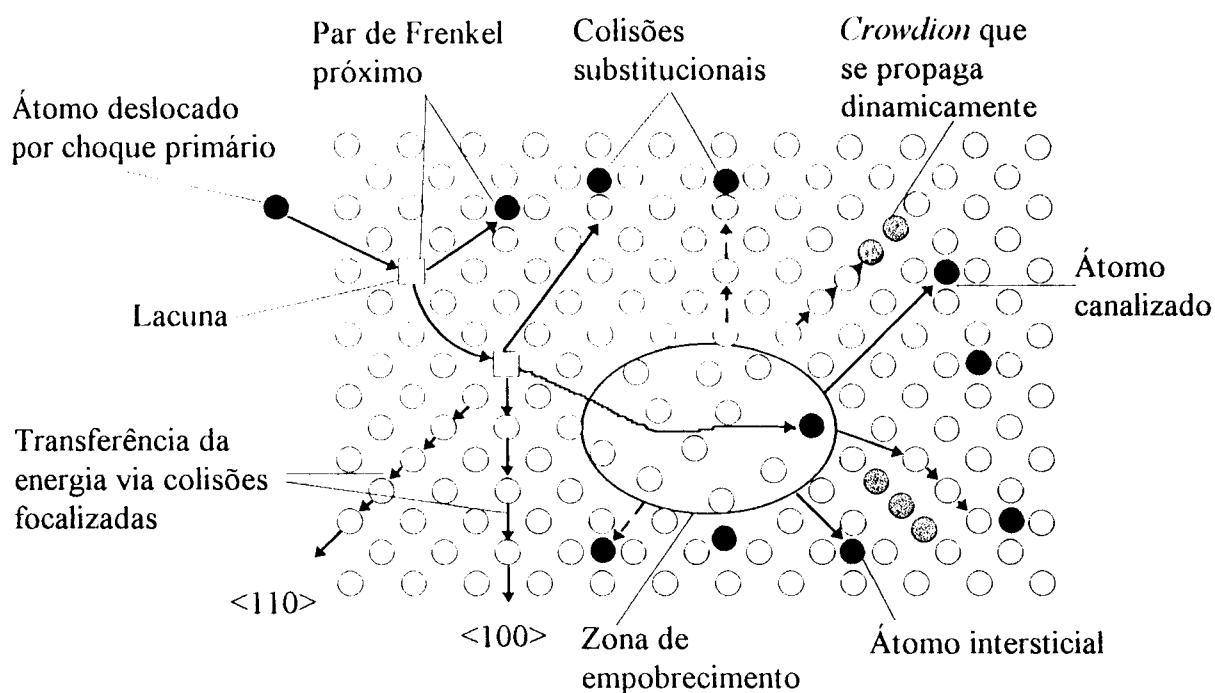


Figura 4. O modelo de danos da radiação, durante a colisão de um nêutron com o átomo da rede cristalina²².

A maioria das lacunas e dos átomos intersticiais que foi produzida no estágio das colisões de cascata aniquila-se e o número de pares de Frenkel sobreviventes constitui apenas uma pequena fração do número total dos deslocamentos. No caso das cascatas e sub-cascatas produzidas pelos *PKAs* de alta energia, a alta concentração local dos pares de Frenkel e, também, as temperaturas altas no volume da cascata levam a mais um efeito

importante: a parte considerável das lacunas e dos átomos intersticiais forma os aglomerados primários, *clusters* (*cluster* é uma imperfeição da rede cristalina que é constituída por alguns defeitos puntiformes do mesmo tipo). Os *clusters* primários lacunares formam-se na zona central da cascata e os *clusters* primários intersticiais formam-se na periferia da cascata. A simulação pelo método da dinâmica molecular e os resultados experimentais indicam com toda evidência o caráter atérmico desses processos²³⁻²⁶. Além disso, a fração das lacunas fixadas nos *clusters* lacunares não é exatamente igual à fração correspondente nos *clusters* intersticiais.

Nos últimos trabalhos dedicados a este assunto^{27, 28}, foi proposta a concepção que considera separadamente os deslocamentos dos átomos e a produção dos defeitos. O processo de produção dos defeitos é mostrado esquematicamente na figura 5.

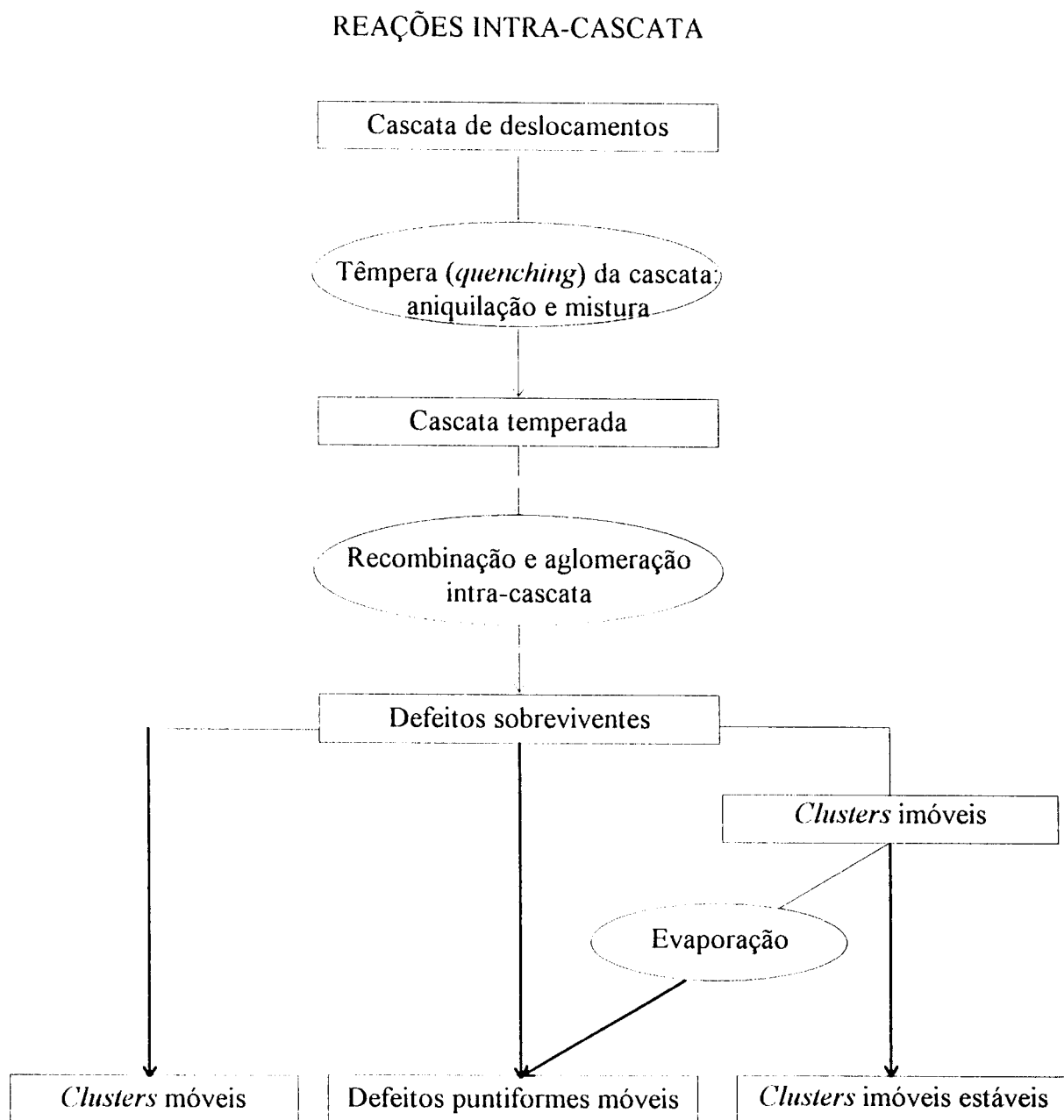


Figura 5. Ilustração esquemática do processo de produção dos defeitos nas condições de danos de cascata. Os blocos retangulares e ovais significam a configuração dos defeitos e dos processos respectivamente ²⁷.

2.1.2 Cinética dos defeitos

O estado termodinâmico do material danificado é extremamente desequilibrado. Todavia, a velocidade de transição para o estado de equilíbrio, ou pelo menos, para o estado intermediário com energia livre menor depende da mobilidade (cinética) dos defeitos e dos átomos do material.

Os experimentos de medida do coeficiente da resistividade das amostras irradiadas à temperatura do hélio líquido durante o processo de recozimento isocrônico deram a interpretação dos mecanismos de volta da estrutura ao estado de equilíbrio.

A maior parte das pesquisas foi feita com cobre cujas curvas são consideradas como protótipos. Na figura 6 é mostrada uma dessas curvas depois da irradiação com elétrons.

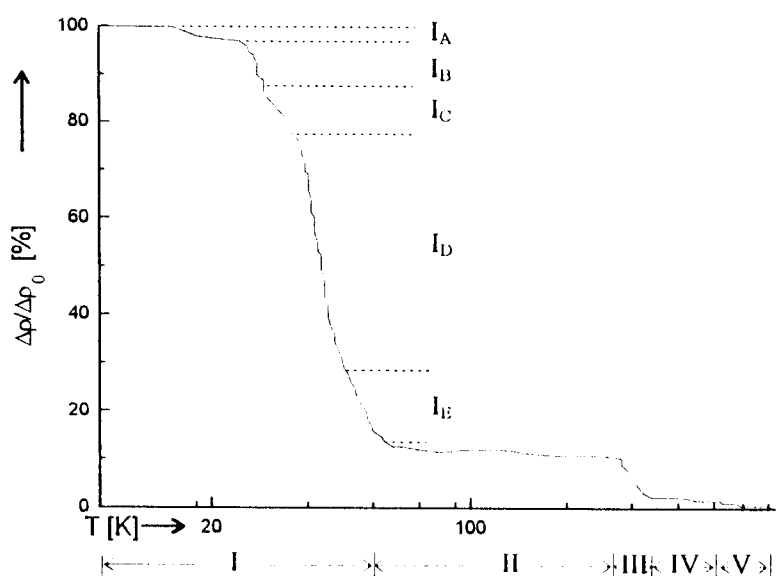


Figura 6. O esboço da curva de recuperação isocrônica para Cu que foi irradiado pelos elétrons a 4 K. A resistividade elétrica é a propriedade de medida²⁹.

As diferentes partes da curva foram denominadas como os estágios de I a V. Em alguns estágios destacam-se, mais ou menos claro, subestágios. A porcentagem da

recuperação (*recovery*) da resistividade no estágio dado e a presença do próprio estágio não são iguais para os diferentes tipos de irradiação e os diferentes materiais. Por exemplo, o estágio I não foi achado no Au, Cd e V; no Al e Pt, o recozimento acaba depois do estágio III³⁰; no resultado da irradiação com íons pesados de ~100 MeV e com nêutrons rápidos de Ni, Cu, Fe observou-se a redução anômala do estágio I^{31,32}.

São propostos dois modelos distintos para recozimento (*annealing*) dos defeitos: 1) o modelo mono - intersticial³³ (*One-Interstitial Model, OIM*); 2) o modelo bi - intersticial³⁴ (*Two-Interstitial Model, TIM*). Apesar da maioria dos dados experimentais manifestarem a favor de *TIM*^{35, 36}, abaixo, é dada a descrição sucinta dos mecanismos propostos da recuperação por ambos modelos.

O estágio I, subestágios A,B,C:

Ambos modelos atribuem o recozimento nesses subestágios à recombinação dos pares próximos. A sobreposição considerável das distorções da rede leva à aniquilação dos intersticiais com as próprias lacunas. Três subestágios diferentes são ligados com a existência de três diferentes direções e distâncias entre os defeitos. O grau de cinética da reação² é 1.

Ambos modelos consideram a configuração do átomo intersticial em forma de haltere como única configuração estável. *TIM* introduz a configuração metaestável dos átomos intersticiais que é *crowdion* e que existe apenas durante a irradiação. Nos metais que revelam a migração ativada pelas baixas temperaturas ocorrem os processos de conversão da configuração de tipo *crowdion* para a configuração estável em forma de haltere.

O estágio I, subestágio D:

OIM - a recombinação correlata (a recombinação durante a migração livre dos intersticiais com as próprias lacunas); o começo de nucleação dos aglomerados intersticiais.

² Na teoria das taxas de reação, as mudanças nas concentrações dos defeitos pontiformes dC de algum tipo que desaparecem migrando para os sorvedouros no intervalo de tempo dt são proporcionais à concentração dos mesmos defeitos elevada a certa potência n ($dC/dt \sim C^n$). Esta potência é chamada a ordem ou grau de cinética da reação.

TIM - aniquilação dos pares *crowdion*-lacuna situados numa mesma linha; nucleação dos “*clusters* difusionais” nos centros locais dos agrupamentos intersticiais via migração e captura dos *crowdions*. O crescimento dos *clusters* como resultado da junção dos átomos intersticiais próximos.

O grau de cinética da reação é 1.

O estágio I, subestágio E:

OIM - recombinação dos átomos intersticiais durante a migração livre com as lacunas de outros átomos; a continuação de formação dos *clusters* intersticiais.

TIM - aniquilação dos pares *crowdion*-lacuna não situados numa mesma linha; a continuação de formação dos *clusters* pelo mecanismo do estágio I-D.

O grau de cinética da reação é 2.

O estágio II:

OIM - desintegração dos complexos átomo intersticial - átomo intersticial e o crescimento dos *clusters* intersticiais.

TIM - reestruturação dos “*clusters* difusionais” em anéis de discordância. Os átomos intersticiais adicionais podem ser absorvidos pelos *clusters* intersticiais sob ação do campo atrativo elástico do *cluster*. Sob doses altas de irradiação, a grande probabilidade de produção dos pares átomo intersticial-lacuna originados pelos diferentes eventos dos deslocamentos leva à aniquilação desses pares e ao recozimento adicional.

O grau de cinética da reação é 2.

O estágio III:

OIM - migração livre das lacunas e, através da ativação térmica, sua aniquilação com os átomos intersticiais nos *clusters* ou a reação das lacunas entre si com a formação dos *clusters* lacunares.

TIM - migração livre dos átomos intersticiais; aniquilação com as lacunas distantes ou a formação dos pequenos *clusters* intersticiais; migração das bi-lacunas que se tornam móveis sob essas temperaturas e aniquilação com parte dos átomos intersticiais.

O grau de cinética da reação é 2.

O estágio IV:

OIM - dissolução dos pequenos *clusters* lacunares e intersticiais; crescimento dos grandes aglomerados lacunares.

TIM - migração livre das lacunas; aniquilação completa das lacunas e formação dos grandes aglomerados lacunares.

O estágio V:

OIM e *TIM* - o recozimento da microestrutura formada nos estágios anteriores e retorno ao equilíbrio termodinâmico.

Sob a irradiação de alta temperatura, o processo da acumulação e do recozimento dos defeitos acontece simultaneamente. Esquemáticamente o recozimento dos defeitos da radiação é apresentado na figura 7.

A consequência principal desses processos é a mudança das características da microestrutura (discordâncias lineares, contornos de grão, anéis das discordâncias e cavidades formadas) e da microquímica (distribuição do soluto, precipitados, estrutura de fase).

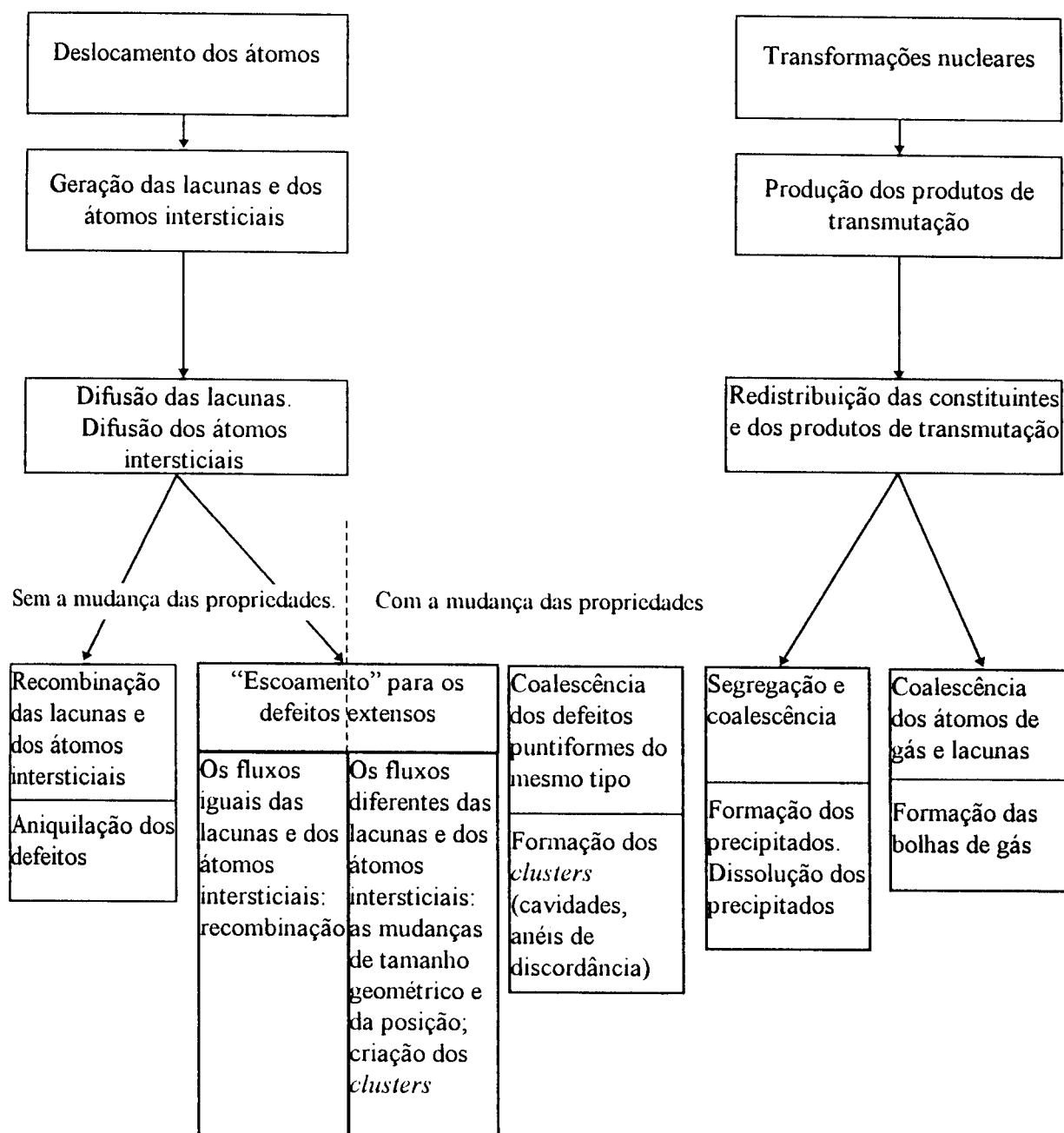


Figura 7. A esquema do recozimento dos defeitos da radiação²².

2.1.3 Formação da estrutura defeituosa

A formação da estrutura defeituosa no material irradiado é um fenômeno extremamente complicado que envolve numerosos mecanismos interativos.

Na figura 8 é mostrada a escala temporal da evolução dos danos da radiação.

Os fenômenos de longo prazo da irradiação são causados pela acumulação dos fenômenos de curto prazo da irradiação e o comportamento do material sob irradiação sempre fica sob influência dos fenômenos de curto prazo.

A fenomenologia da evolução da microestrutura inclui o complexo de co-difusão e co-precipitação dos átomos de gás, dos defeitos puntiformes e dos constituintes químicos. A força motriz principal da evolução da microestrutura é o fluxo líquido dos defeitos puntiformes, que existe devido à assimetria de absorção pelos sorvedouros e devido ao acoplamento deste fluxo dos defeitos puntiformes com os átomos do soluto.

O caminho da evolução da microestrutura é controlado pela combinação das variáveis da irradiação e das variáveis do material. Ao primeiro grupo referem-se a temperatura, o fluxo, o espectro energético, o fluxo integrado, a tensão, o ambiente químico e a história temporal destas variáveis. Ao segundo grupo das variáveis referem-se a microestrutura e microquímica do material determinadas pelo processo de fabricação (metalúrgico e termomecânico).

A descrição detalhada e discussão do processo da evolução da microestrutura nos materiais pode ser encontrada em numerosos trabalhos dedicados a este assunto³⁸⁻⁴⁰.

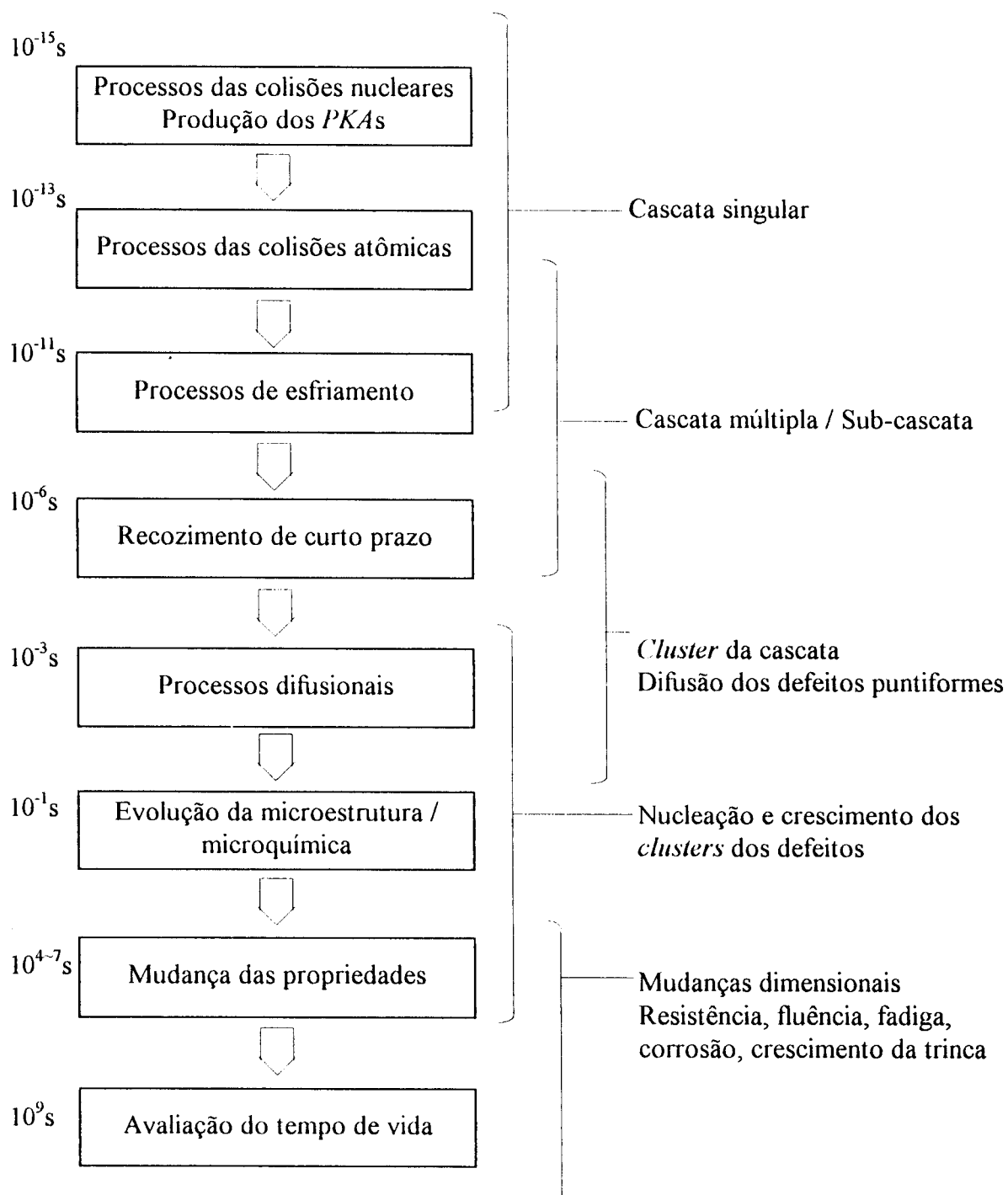


Figura 8. O quadro da evolução no tempo de danos da radiação com os fenômenos representativos para os vários estágios da evolução de dano³⁷.

2.1.4 Propriedades dos materiais

Para os materiais dos reatores nucleares, além dos habituais requisitos de alta resistência térmica, mecânica e resistência à corrosão, requerem-se novas exigências específicas ligadas à estabilidade destas propriedades aos efeitos da radiação.

A classificação funcional e os principais materiais utilizados estão mostrados na tabela 1. As propriedades gerais que são consideradas na seleção dos materiais de reatores nucleares e a influência da irradiação nestas propriedades estão reunidas na tabela 2⁴¹.

Tabela 1. Classificação dos principais materiais do reator

CLASSIFICAÇÃO	FUNÇÃO	MATERIAIS PRINCIPAIS
Combustível nuclear	Tem a função de conter os elementos físeis e férteis que irão produzir as fissões da reação em cadeia	Urânio, plutônio, tório
Estruturas	São todos os materiais utilizados como estrutura e revestimento dos diversos componentes do reator	Zircaloy, aço inox, ligas de níquel
Moderadores	Tem a função de moderar a energia dos nêutrons produzidos na fissão e também servem como refletores na periferia do núcleo do reator de forma a minimizar a fuga de nêutrons do núcleo	Grafite, água leve, água pesada, berílio
Absorvedores (controlador)	Tem a função de manter, de forma controlada, a reação em cadeia dentro do núcleo reator	Boro, cádmio, háfnio, índio, prata, gadolínio
Refrigerantes	Tem a função de retirar o calor gerado no núcleo do reator devido às fissões nucleares	Hélio, CO ₂ , água leve, água pesada, metais líquidos (NaK, Na)
Blindagem	Tem a função de servir de barreira para a radiação (blindar) de forma a atenuar os efeitos desta sobre os componentes estruturais ou o meio exterior ao reator	Água leve, elementos de médio e alto número atômico (Pb, Fe, etc)

Tabela 2. Efeitos da radiação nas propriedades dos materiais.

PROPRIEDADE	EFEITO DA RADIAÇÃO	APLICAÇÃO PRINCIPAL
A) NUCLEAR		
Seção de choque macroscópica de fissão	diminui	material do combustível fissil
Reatividade	diminui	desempenho do combustível
Queima do combustível	aumenta	desempenho do combustível
B) FÍSICA		
Resistividade elétrica	aumenta	fluxo de corrente
Susceptibilidade magnética	diminui	geração de campo magnético
Resistividade magnética (<i>magnetoresistivity</i>)	diminui	
C) TÉRMICA		
Condutividade térmica	diminui	transferência de calor por condução
Difusividade térmica	diminui	
Coefficiente de expansão térmica	aumenta ligeiramente	compatibilidade térmica
D) MECÂNICA		
Tensão de escoamento	aumenta (material recozido) varia com a temperatura de irradiação (material encruado)	materiais estruturais
Tensão de ruptura	aumenta (material recozido) varia com a temperatura de irradiação (material encruado)	materiais estruturais
Tensão de escoamento cíclica	aumenta	materiais estruturais
Ductilidade	diminui	materiais combustíveis e estruturais
Dureza	aumenta	materiais de controle e estruturais
Fragilização	aumenta	materiais estruturais
Temperatura de transição dúctil-frágil	aumenta	materiais estruturais
Fluência (<i>creep</i>)	aumenta	materiais estruturais
Tempo de ruptura por <i>creep</i>	diminui	materiais estruturais
Resistência à fadiga	aumenta (alto ciclo) diminui (baixo ciclo)	materiais estruturais

A formação da estrutura defeituosa nos materiais durante a irradiação tem como consequência as mudanças das propriedades destes materiais. Com o tempo, essas mudanças levam à degradação essencial das características iniciais, especialmente, das propriedades mecânicas do material. Diminuem-se a ductilidade e a tenacidade de impacto (*impact toughness*) do material, aceleram-se os processos de corrosão, mudam-se os tamanhos geométricos, etc (vide tabela 2). A partir de certo momento, o material cessa de responder às especificações requeridas de operação e é necessário efetuar a troca, que é um dos mais caros procedimentos na manutenção do reator.

Tudo isto exige dos materiais empregados no ambiente da irradiação não apenas propriedades necessárias, mas também que sejam suficientemente resistentes aos efeitos da radiação.

2.2 Simulação computacional dos danos da radiação

A simulação computacional dos danos da radiação nos materiais pode ser usada tanto para o estudo qualitativo como quantitativo dos processos envolvidos.

Existem duas áreas maiores de simulação computacional dos danos da radiação: 1) simulação de formação dos danos de cascata (estágio dinâmico de produção dos defeitos); 2) simulação da cinética da evolução da microestrutura.

Nos estágios dinâmicos de produção dos defeitos, o problema central é a predição do número e da distribuição dos defeitos da rede cristalina como resultado da frenagem e do espalhamento das partículas incidentes e de reestruturação atômica da cascata. Para isto, é necessário achar, no sistema irradiado, a distribuição das partículas incidentes no espaço, em energia e no tempo. Este problema é tratado pela teoria de transporte e as distribuições encontram-se via solução da equação de transporte, freqüentemente chamada de equação de Boltzman. Em seguida, a energia depositada pelas partículas incidentes no material é analisada para obtenção da seguinte informação: 1) a energia perdida na ionização durante o golpe dos átomos na cascata; 2) a energia de dano (a energia perdida nos núcleos) e o número das lacunas produzidas na cascata de colisões; 3) a energia de dano e o número das

colisões sublumières durante as quais não acontece o deslocamento do átomo da sua posição na rede cristalina, assim a energia é gasta nas oscilações da rede (fónons).

A técnica de simulação de Monte Carlo é a base para vários procedimentos de transporte. Esta técnica tem certas vantagens sobre as formulações analíticas (vide por exemplo o trabalho de Winterbon⁴²) baseadas na teoria de transporte. Ela permite o tratamento mais rigoroso das colisões elásticas, a consideração explícita da superfície e das interfaces, bem como a determinação fácil das distribuições angulares e de energia.

A abordagem mais comum, para a solução dos problemas de deposição da energia na matéria sob a irradiação com partículas energéticas, é a aproximação das colisões binárias. Nesta aproximação, a trajetória da partícula em movimento é construída como uma série de colisões binárias isoladas. A vantagem principal da aproximação das colisões binárias é a necessidade de pouca informação para descrever o material.

Com o desenvolvimento das ferramentas computacionais necessárias, a simulação por método de dinâmica molecular tornou-se o meio principal de estudo do desenvolvimento espacial e temporal da cascata das colisões gerada pelas interações das partículas energéticas com o sólido. Esta técnica soluciona as equações clássicas do movimento do conjunto dinâmico das partículas que representam o sistema ao qual as condições periódicas de contorno são aplicadas. A simulação por método de dinâmica molecular inclui explicitamente os efeitos térmicos e é usada com grande sucesso no estudo da fase de resfriamento da cascata^{43, 24}.

A simulação da evolução da microestrutura dos materiais progrediu da teoria padrão das taxas^{44, 45} (*Standart Rate Theory, SRT*) até a concepção de assimetria de produção⁴⁶ (*Production Bias, PB*). O modelo de *SRT* foi formulado dentro da teoria de taxas das reações químicas com as equações correspondentes para a cinética dos defeitos. Neste modelo, a produção dos defeitos é pressuposta: em forma das lacunas e dos átomos intersticiais isolados, homogênea no espaço e uniforme no tempo. Esta descrição da produção dos defeitos é correta apenas para danos da radiação produzidos via transferência da energia perto do limiar dos deslocamentos, por exemplo, pelos elétrons de 1 MeV. No caso de produção dos defeitos em forma das cascatas e subcascatas, como, por exemplo, durante a irradiação com nêutrons de fissão ou fusão, os danos da radiação são produzidos

em forma de defeitos puntiformes e dos *clusters* por isso, o *SRT* não descreve adequadamente processos tais como: inchamento, fluência e crescimento por irradiação.

O modelo de *PB* representa de forma mais realista o processo de produção dos defeitos, levando em consideração a formação e a aniquilação dos *clusters* primários, bem como sua função de sorvedouros e de fontes dos defeitos, demonstrando assim, a boa concordância com os resultados experimentais¹⁴.

2.3 Códigos computacionais

2.3.1 Programa TRIM

TRIM⁴⁷ (*TRansport of Ions in Matter*) é o programa que calcula frenagem e alcance dos íons (10 eV - 2 GeV/amu) na matéria usando tratamento mecânico - quântico completo das colisões íon incidente - átomo do material. O cálculo é feito muito eficientemente pelo uso de um algoritmo estatístico, que introduz o caminho livre de percurso (*free flight path*) entre as colisões que depende da energia da partícula, e depois faz a média dos resultados de colisões sobre o espaço intermediário. Durante as colisões, o íon e o átomo têm o potencial de Coulomb efetivo incluindo interações de troca e correlação entre as camadas eletrônicas sobrepostas. O íon tem interação de alta distância criando excitações eletrônicas e *plasmon*³ dentro do alvo. Isto é feito pela inclusão da descrição da estrutura coletiva eletrônica do alvo e a estrutura da ligação interatômica, quando o cálculo é iniciado. O estado de carga do íon dentro do alvo é descrito usando o conceito da carga efetiva, que inclui a dependência da velocidade e blindagem de longo alcance devido ao mar coletivo dos elétrons do alvo.

O programa aceita os alvos complexos feitos de materiais compostos de até oito camadas, cada uma com material diferente. TRIM calcula a distribuição tri-dimensional final

³ Na teoria da frenagem eletrônica, o alvo irradiado é considerado como a coleção dos elétrons interagentes, ou seja, como plasma; e as perdas da energia da partícula incidente são atribuídas ao efeito de polarização dos elétrons e à flutuação da densidade do plasma. As flutuações da densidade do plasma que se propagam como as ondas longitudinais são chamadas *plasmons*

dos íons e também todos os fenômenos cinéticos associados com a perda da energia pelo íon: danos do alvo, arrancamento (*sputtering*), ionização e produção dos fónons. Todas as cascatas dos átomos do alvo são detalhadamente seguidas.

2.3.2 Programa MARLOWE

MARLOWE ⁴⁸ é um programa amplo de simulação das cascatas dos deslocamentos atômicos em vários sólidos cristalinos que usa a aproximação das colisões binárias para construir as trajetórias das partículas. O tratamento do espalhamento atômico usa o potencial de Coulomb efetivo com a aproximação de Moliere para a função efetiva atômica de Tomas-Fermi. As perdas inelásticas são incluídas no programa usando a modificação da teoria de Firsov. O procedimento de colisões simultâneas, quando elas ocorrem, é usado. Um modelo simples de vibração térmica é incluído, usando os deslocamentos dos átomos da rede, distribuídos de acordo com a função gaussiana. Para simular o desenvolvimento da cascata no tempo, MARLOWE sempre segue a partícula mais rápida para o instante dado.

O alvo pode ser perfeito ou pode conter lacunas, átomos intersticiais ou também impurezas substitucionais nas posições especificadas. O cristal pode ter qualquer estrutura descrita pelas coordenadas ortorrômbicas e pode ter vários tipos de átomos. O alvo pode ser policristalino ou amorfo, podendo ser constituído de várias camadas, cada uma com sua própria estrutura.

MARLOWE analisa muitas propriedades da cascata gerada. A análise disponível inclui as distribuições de alcances dos átomos de recuo primários, direções e distribuições dos comprimentos das seqüências substitucionais, distribuições das separações dos pares e outras informações detalhadas da cascata.

2.3.3 Programa MOLDY-CASK

MOLDY-CASK ²⁴ é um novo programa de dinâmica molecular para estudos de deslocamentos da cascata de alta energia nos metais e ligas. O programa usa as capacidades

de processamento vetorizado de supercomputadores CRAY-2 para determinação das forças e energias e, também incorpora o uso do potencial isotrópico de muitos corpos que permite estudar os efeitos da cascata nas ligas metálicas de transição.

O algoritmo vetorizado implementado aumenta muito a eficiência do tempo empregado e torna possível conduzir as simulações nos cristais que têm até um milhão de átomos. Conseqüentemente, as simulações podem ser executadas para cascata de energia suficientemente alta para que se possa observar o colapso da cascata e interações subcascatas.

2.3.4 Programa SPECTER

SPECTER⁴⁹ é o programa de cálculo simplificado de dano da irradiação com nêutrons. As seções de choque de dano-energia do deslocamento por nêutrons foram calculadas na faixa de energia de 10^{-10} a 20 MeV. Os cálculos foram feitos na grade da energia de 100 pontos usando as seções de choque da biblioteca ENDF/B-V⁵⁰ e o código computacional DISCS⁵¹. O espalhamento elástico é precisamente tratado, incluindo a distribuição angular do ENDF/B-V. O espalhamento inelástico considera ambas distribuições, discreta e contínua, ao nível nuclear. As reações múltiplas (n, x n) usam a técnica de Monte Carlo para deduzir a distribuição dos átomos de recuo do material. No estado final, as reações (n,d) e (n,t) são tratadas como (n,p) e a reação (n,³He) é tratada como (n,⁴He). Esta aproximação não tem significação grande, pois os deslocamentos causados pelas partículas carregadas (deuterium, tritium, ³He) são habitualmente menos do que 10% do total dos deslocamentos. Ao mesmo tempo, as propriedades químicas dos isótopos correspondentes são iguais. A reação (n, γ) e o decaimento β posterior são incluídos usando o tratamento de coincidência γ - γ , a correlação angular, a correlação β -neutrino e a energia incidente do nêutron. O modelo do Lindhard foi usado para o cálculo da energia disponível para os deslocamentos nucleares a cada energia do átomo de recuo.

O usuário precisa fornecer apenas o espectro energético dos nêutrons. SPECTER calcula as médias pelo espectro dos deslocamentos, o espectro energético dos átomos de recuo, a produção de gás e a energia de dano total.

3 METODOLOGIA DO ESTUDO

3.1 Fundamentos físicos dos experimentos de simulação

Do ponto de vista do projeto de reatores, há dois tipos de informação que são necessários: as propriedades dos materiais sob as condições operacionais nominais e o comportamento do material nas condições da sua capacidade limiar. A primeira informação permite aos engenheiros calcular o comportamento dos materiais durante o funcionamento normal e a segunda informação permite estabelecer os limites operacionais para os materiais.

É claro que os resultados mais representativos do ponto de vista do comportamento dos materiais podem ser obtidos somente em condições de operação do reator. Entretanto, devido a certas razões, as pesquisas dos mesmos processos da radiação nos reatores não permitem estabelecer claramente as tendências nos efeitos estudados. Estas razões são:

- diferenças por sua natureza e espectro de energia dos fluxos de irradiação para diferentes reatores;
- condições complicadas da metrologia da irradiação;
- cargas térmicas e mecânicas variáveis;
- dificuldade da pesquisa diferencial da contribuição de numerosos fatores que influem nos processos de dano.

Além disso, a irradiação dos materiais estudados diretamente nos reatores com os fluxos dos nêutrons necessários exige um longo tempo do experimento e maiores despesas materiais em comparação com os métodos rápidos da irradiação iônica em aceleradores.

Na realização dos experimentos de simulação, a questão principal é o estabelecimento da metodologia de análise de danos e correlação da irradiação. Isto subentende uma exaustiva análise dos efeitos da radiação à luz das diferenças no espectro dos *PKAs*, nas

taxas de transmutação e deslocamento que existem entre a irradiação que é simulada e a irradiação de simulação, e desenvolvimento dos procedimentos de transposição dos dados obtidos nas condições de simulação para serem aplicados nos projetos das instalações nucleares e termonucleares.

São cinco itens na análise de danos e correlação da irradiação^{52, 37}:

I. Caracterização do ambiente da irradiação.

Isto inclui:

- 1) tipo das partículas incidentes que vai determinar toda fenomenologia da interação com a matéria;
- 2) espectro energético que é diretamente relacionado ao espectro dos *PKAs*;
- 3) fluxo que determina a taxa de produção de danos;
- 4) fluxo integrado (fluence) para escalonar os efeitos da radiação;
- 5) temperatura que determina todos os processos ativados por ela;
- 6) carga externa que junto com a irradiação causa a fluência do material mesmo quando não é observada a fluência por temperatura;
- 7) composição química, estado estrutural e de fase do material irradiado que são os parâmetros procurados para os materiais suficientemente resistentes aos efeitos da radiação.

II. Caracterização do estado defeituoso nascente.

Os parâmetros básicos que foram propostos para caracterizar esse estado são^{53, 54}:

- 1) a taxa de produção dos defeitos:

$$K = \int_{\bar{E}_2}^{\infty} dE_2 \cdot v(E_2) \int_{E_{1min}}^{\infty} dE_1 \cdot \phi(E_1) \frac{d\sigma(E_1, E_2)}{dE_2} ; \quad (1)$$

2) a função de distribuição dos defeitos pela energia dos átomos deslocados por choque primário (*Primary Knock-on Atoms, PKAs*):

$$P(E_2) = \frac{v(E_2)}{K} \cdot \int_{E_{1\min}}^{\infty} dE_1 \cdot \phi(E_1) \frac{d\sigma(E_1, E_2)}{dE_2} \quad ; \quad (2)$$

3) a taxa de produção dos átomos de transmutação:

$$K_p = \int_0^{\infty} dE_1 \cdot \phi(E_1) \cdot \sigma_p(E_1) \quad ; \quad (3)$$

4) a função de correlação das coordenadas de produção dos *PKAs*:

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = \left[\frac{1}{K^2} \cdot \int_{\vec{E}_2}^{\infty} dE_2 \int_{\vec{E}'_2}^{\infty} dE'_2 \cdot v(E_2) \cdot v(E'_2) \cdot p(E_2, \vec{r}, E'_2, \vec{r}') \right] - 1 \quad ; \quad (4)$$

onde E_1 é a energia das partículas incidentes; E_2 é a energia dos átomos deslocados por choque primário; $E_{1\min}$ é a energia mínima das partículas incidentes que pode criar *PKA*; $v(E_2)$ é a função de dano; $\phi(E_1)$ é o espectro normalizado da energia das partículas

incidentes; $\frac{d\sigma(E_1, E_2)}{dE_2}$ é a seção de choque diferencial para colisão que tem átomo de recuo em intervalo dE_2 à energia E_2 ; $\sigma_p(E_1)$ é a seção de choque de formação dos produtos das reações nucleares; $p(E_2, \vec{r}, E'_2, \vec{r}')$ é a função de probabilidade de formação do *PKA* com energia E_2 em ponto \vec{r} e do *PKA* com energia E'_2 em ponto \vec{r}' ; \vec{E}_2 é a energia do deslocamento.

III. Caracterização do comportamento de dano.

A eficiência da produção efetiva dos defeitos e dos *clusters*, a nucleação e o crescimento dos defeitos secundários, o comportamento das discordâncias sob irradiação, a formação das cavidades, a estabilidade dos precipitados, os efeitos da microquímica e todos os efeitos sinérgicos desses fenômenos são exemplos da caracterização do comportamento de dano.

IV. Evolução no tempo da microestrutura e microquímica.

V. Correlação microestrutura/microquímica - propriedade.

As principais etapas nos experimentos de simulação podem ser formuladas da seguinte maneira:

- análise de danos da radiação, que é simulada, conforme os itens acima (de I a V);
- indicação do ambiente da irradiação de simulação que fornece semelhança melhor nos efeitos da radiação, especialmente nos fenômenos que na escala do tempo de evolução dos danos são de curto prazo;
- correlação das divergências de desenvolvimento de danos, relativamente da irradiação simulada, com as propriedades finais.

As características do estado defeituoso nascente (item II) podem ser aceitas como sendo as características confrontadas dos dois tipos de irradiação. As condições da equivalência de dois tipos de irradiação serão igualdades dessas características. Mas, nos experimentos de simulação, onde uma das principais tarefas é a diminuição do tempo de obtenção dos resultados, todas estas condições são violadas. A primeira condição contradiz a própria idéia de experimento rápido; a violação da segunda está ligada com a particularidade de interação das diversas partículas com a matéria; a terceira condição complica essencialmente o experimento, exigindo o uso do método de irradiação com multifeixe; a quarta condição é violada na diferente geometria das cascatas produzidas pelos ions. Por isto, foram formuladas e aprovadas experimentalmente as condições mais "flexíveis"²², a saber:

1. Igualdade da dose de danos (em deslocamentos por átomo, DPA):

$$D = \sigma_d F t \quad , \quad (5)$$

onde F é o fluxo das partículas incidentes, σ_d é seção de choque de produção dos defeitos, t é tempo da irradiação.

2. Igualdade do coeficiente da similaridade Z , dos espectros de $PKAs$, a 1 (espectros de produção de danos):

$$Z = \int_{\tilde{E}_1}^{\infty} dE_2 \cdot \min[P_n(E_2), P_i(E_2)] \quad , \quad (6)$$

onde P_n e P_i são as funções de distribuição dos defeitos pela energia dos $PKAs$ para diferentes tipos comparados de irradiação.

3. Igualdade da relação entre a taxa de produção de produtos das reações nucleares e a taxa da produção dos danos:

$$\frac{K_{pn}}{K_n} = \frac{K_{pi}}{K_i} \quad , \quad (7)$$

onde K_{pn} e K_{pi} são taxas de produção dos produtos de transmutação e K_n e K_i são taxas de produção dos defeitos para diferentes tipos comparados de irradiação.

4. Similaridade na distribuição das áreas primárias da cascata e aglomerados iniciais por seu tamanho;

5. Similaridade nos processos de difusão.

3.1.1 Dose da irradiação

Uma variável importante para escalonar os efeitos da radiação é o fluxo integrado. Mas o fluxo integrado não é a medida adequada da capacidade das partículas para danificar um material. As partículas, diferentes por seu tipo e iguais por sua energia, produzem na rede cristalina quantidades diferentes de defeitos. Fisicamente, a medida mais justificada para a dose de dano é o número total dos deslocamentos por um átomo do material irradiado (DPA),

$$D_j = K_j \cdot t = \sigma_{Dj} \cdot F_j \cdot t \quad , \quad (8)$$

onde K é a taxa de produção dos defeitos; F_j é a densidade do fluxo das partículas tipo j ; $\sigma_{Dj} = K_j / F_j$ é seção de choque de produção dos defeitos.

Se soubermos o espectro das partículas incidentes e a taxa de produção dos defeitos de irradiação com íons e com nêutrons, é fácil determinar o tempo da irradiação com íons que corresponda ao fluxo integrado requerido dos nêutrons.

Todavia, a comparação dos efeitos da microestrutura que se baseia apenas no conceito do DPA não é uma boa aproximação, pois esta grandeza é calculada da energia total depositada nas colisões nucleares e ignora completamente a diferença na distribuição espacial de produção dos defeitos. Apesar disso, para comparação dos efeitos da radiação em dois espectros de *PKAs* similares o número de DPA é razoavelmente bom parâmetro de correlação²⁸.

3.1.2 Grau de similaridade dos espectros de *PKAs*

Uma característica da irradiação extremamente importante é o espectro energético dos *PKAs* produzidos. Dele depende fortemente a estrutura defeituosa do material que se forma durante a irradiação e, conseqüentemente, as propriedades deste material.

Foi proposta⁵³ a função de densidade de probabilidade de produção do defeito por *PKA* com energia T sob irradiação com partículas tipo j como sendo a característica mais conveniente de formação dos defeitos a ser confrontada:

$$P_j(T) = \frac{v(T) \left\langle \frac{d\sigma_j}{dT} \right\rangle}{\int_{E_d}^{E_{\max}} dT' v(T') \left\langle \frac{d\sigma_j}{dT'} \right\rangle} \quad , \quad (9)$$

onde $v(T)$ é função de dano; E_d é energia do deslocamento; E_{\max} é a energia máxima do *PKA*. Grandeza $\langle d\sigma(T,E)/dT \rangle$ é espectro dos *PKAs* e encontra-se da equação

$$\left\langle \frac{d\sigma}{dT} \right\rangle = \int_{E_{\min}}^{\infty} dE \Phi(E) \frac{d\sigma(T, E)}{dT} \quad (10)$$

onde E é a energia das partículas incidentes, $\Phi(E)$ é o espectro energético das partículas que produz *PKAs* no volume irradiado; $\frac{d\sigma(T, E)}{dT}$ é seção de choque da produção do *PKA* com energia T em dT .

O espectro energético das partículas incidentes, $\Phi(E)$, também depende da distância percorrida no material. Portanto, a expressão (9) pode ser escrita como

$$P_j(T, x) = \frac{v(T) \int_{E_{\min}}^{\infty} dE \Phi(E, x) \frac{d\sigma(T, E)}{dT}}{\int_{E_d}^{E_{\max}} dT' v(T') \int_{E_{\min}}^{\infty} dE \Phi(E, x) \frac{d\sigma(T', E)}{dT}} \quad (11)$$

O coeficiente da similaridade dos espectros de *PKAs* de dois tipos de irradiação é a área de superposição de duas figuras, limitadas pelas curvas P_i e P_j ,

$$Z_{ij}(x) = \int_{E_d}^{E_{\max}} dT \min[P_i(T, x), P_j(T, x)] \quad (12)$$

Esta grandeza mostra qual fração dos átomos deslocados foi produzida nas condições similares e toma valores de $0 < Z \leq 1$. O valor $Z = 1$ corresponde à similaridade ideal. Variando o tipo de irradiação e de espectro $\Phi(E)$ que, por sua vez, é determinado pela energia das partículas incidentes, pode-se indicar as melhores condições da similaridade.

3.1.3 Relação entre as taxas de produção dos defeitos e produtos das reações nucleares

São dois tipos básicos de interação dos nêutrons com os átomos do material que resultam nos efeitos macroscópicos de danos da radiação: 1) deslocamento dos átomos, que

cria os defeitos intersticiais e lacunares; 2) transmutações nucleares, que resultam na criação de elementos de impureza, dos quais o mais importante é o hélio.

As taxas altas de produção do hélio vão acelerar a nucleação das cavidades que pode levar a um nível inaceitável de inchamento. Mais ainda, as taxas aceleradas de produção do hélio vão levar a maiores fluxos de hélio para contornos de grão, o que causa fragilização via nucleação e crescimento das bolhas nestes contornos de grão. A influência do hélio na evolução da microestrutura efetua-se das seguintes maneiras: o hélio pode alterar as taxas de recombinação, aprisionando as lacunas e/ou os átomos intersticiais, e também pode mudar a fração relativa dos diferentes sorvedouros⁵⁵.

A taxa de produção do DPA, a taxa de produção do hélio e a razão He/DPA são parâmetros de grande importância na correlação dos efeitos da radiação. Contudo, a dependência dos processos da radiação desses parâmetros não é simples. É bem conhecido que, para as taxas similares de danos, as diferenças na razão He/DPA levam a mudanças consistentes na microestrutura irradiada⁵⁶. Ao mesmo tempo, foi mostrado que não há variações sistemáticas no fluxo do hélio para contornos de grão e na microestrutura resultante das bolhas nos contornos de grão com variação da razão He/DPA⁵⁷. Evidentemente, o fornecimento da razão He/DPA nos experimentos de simulação, que é similar à razão esperada no reator, não é equivalente para a taxa de produção do hélio examinada. Entretanto, a informação sobre a influência do hélio na microestrutura, que é obtida pela variação da razão He/DPA tanto por meio de variação de taxa de DPA como de taxa de produção do hélio, pode ser muito útil para examinar os efeitos do hélio nos experimentos de simulação.

As taxas de produção dos defeitos K_D , e do acúmulo de produtos das reações nucleares K_{prn} , na espessura do material calculam-se com o auxílio das seguintes equações:

$$K_D = \int_0^{E_{\max}} \sigma_D(x, E) \cdot f(E) dE \quad , \quad (13)$$

$$K_{prn} = \int_0^{E_{\max}} \sigma_{prn}(x, E) \cdot f(E) dE \quad , \quad (14)$$

onde $f(E)$ é o espectro da energia dos íons incidentes; $\sigma_D(x,E)$ é a seção de choque de produção dos defeitos; $\sigma_{pm}(x,E)$ é a seção de choque de formação dos átomos de transmutação.

3.1.4 Distribuição das áreas primárias da cascata e aglomerados iniciais por seu tamanho

Estudos experimentais e por simulação computacional mostram que, no caso da alta energia dos átomos de recuo, 2 - 200 keV^{58, 59}, os danos gerados de uma cascata são altamente localizados no espaço. Isto resulta na grande eficiência de formação dos *clusters* de ambos tipos : *clusters* lacunares e intersticiais. Junto com a assimetria da produção (*production bias*) e a assimetria de aniquilação (*annihilation bias*) na faixa das temperaturas do inchamento, este fenômeno contribui fortemente na formação das cavidades²⁷.

Infelizmente, não existe um parâmetro único que descreva adequadamente todos os processos da irradiação induzidos por defeitos, que podem ocorrer sob as condições de danos de cascata.

Os seguintes parâmetros foram propostos²⁸ como mais importantes, especialmente para modelos avançados de danos da radiação:

- fator da mistura do deslocamento (*Displacement Mixing Factor, DMF*);
- fração dos defeitos agrupados (*Cluster Defect Fraction, CDF_{i,v}*);
- fração dos defeitos pontiformes isolados (*Isolated point Defect Fraction, IDF_{i,v}*).

Estes parâmetros são definidos como a fração dos deslocamentos produzidos pelo *PKA* isolado, calculados com o auxílio do modelo NRT⁶⁰ (denominado pelos nomes dos autores, Norgett, Robinson, Torrens). Este modelo é uma versão modificada do modelo do Kinchin e Pease e, em geral, aceito como um padrão internacional para cálculo dos deslocamentos nos materiais irradiados.

DMF é definido como o número das substituições, em relação ao NRT-deslocamentos, que ocorreram durante as fases de colisão e de têmpera da cascata.

$CDF_{i,v}$ é definida como a parte dos defeitos, em relação ao NRT-deslocamentos, que “sobreviveu” à recombinação correlata na cascata e inclui os *clusters* móveis como, por exemplo, bi-intersticiais e bi-lacunares, e os *clusters* maiores, imóveis. Subscritos “i” e “v” significam que esta fração em geral não é igual para as intersticiais e lacunas.

$IDF_{i,v}$ é definida como a parte dos defeitos, em relação ao NRT-deslocamentos, que “sobreviveu” à recombinação correlata na cascata e inclui as monolacunares e monointersticiais.

Estes parâmetros dependem fortemente da energia do *PKA* e, em princípio, podem servir como características confrontadas de dois tipos de irradiação. Entretanto, a análise de produção dos defeitos sob as condições de danos de cascata tem que incluir estabilidade térmica e mobilidade dos *clusters*, junto com a possibilidade da re-dissolução em cascata dos *clusters* existentes. Infelizmente, até agora, a magnitude da fração dos *clusters* móveis lacunares e intersticiais não é conhecida.

Para comparar a eficiência de produção dos *clusters* sob vários tipos de irradiação usam-se a fração dos *PKAs* produzidos com energia menor do que T e a fração dos defeitos produzidos por todos os *PKAs* com energia menor do que T ^{61, 62}.

A primeira grandeza determina-se pela expressão,

$$F(T) = \frac{1}{\sigma_{E_d}} \int \left\langle \frac{d\sigma}{dT} \right\rangle dT', \quad (15)$$

onde $\left\langle \frac{d\sigma}{dT} \right\rangle$ é o espectro dos *PKAs* (vide a equação 10), $\sigma = \int_{E_d}^{T_{\max}} \left\langle \frac{d\sigma}{dT} \right\rangle dT$ é a seção de choque total de produção do *PKA*, E_d é a energia do deslocamento e T_{\max} é a energia máxima possível do átomo de recuo.

A segunda grandeza determina-se pela expressão,

$$W(T) = \frac{\int_{E_d}^T P(T') dT'}{\int_{E_d}^{T_{\max}} P(T') dT'} \quad (16)$$

onde $P(T)$ é a função de densidade de probabilidade de produção do defeito por PKA com energia T (vide a equação 9).

Como o número médio dos pares de Frenkel N produzidos pelo PKA é a função única da energia T , as $F(T)$ e $W(T)$ podem ser convertidas para $F(N)$ e $W(N)$. Desta maneira, a função $F(N)$ representa as frações dos *clusters* de todos os tamanhos menor do que N e a função $W(N)$ representa as frações dos defeitos que constituem os *clusters* de todos os tamanhos menor do que N . Contudo, as funções $F(N)$ e $W(N)$ não refletem o fato de partição da cascata em algumas subcascatas espacialmente separadas, no caso de alta energia do átomo de recuo, e não dão na forma quantitativa a distribuição dos *clusters* dos defeitos pelo seu tamanho.

Recentemente, foi proposto um procedimento de estimativa da formação dos *clusters* dos defeitos, nos materiais irradiados com nêutrons⁶³. Este procedimento baseia-se na estimativa da função de probabilidade para o PKA , com energia E_p , criar n *clusters* dos defeitos num evento de cascata isolado $P(n, E_p)$, em experimentos de irradiação com íons. Usando esta função e espectro energético dos $PKAs$, $W(E_p)$, produzidos pelos nêutrons, a distribuição dos *clusters* dos defeitos sob irradiação com nêutrons pode ser avaliada da seguinte expressão:

$$\int W(E_p) P(n, E_p) dE_p, \quad n=1, 2, 3, \dots \quad (17)$$

Mas este procedimento subentende a ausência da interação entre as cascatas e o efeito da interação intercascata exige análise adicional.

3.1.5 Temperatura da irradiação

A condição necessária para similaridade da mudança do estado estrutural e de fase do material, durante a irradiação no reator e no acelerador, é manter a similaridade dos processos de difusão. As taxas de produção dos danos no acelerador são aumentadas em 2 a 5 ordens de grandeza, o que leva à violação na similaridade dos processos de difusão com as condições do reator.

Os efeitos básicos ligados ao aumento da taxa de danos são: o deslocamento (*shift*) pela temperatura da dependência inchamento-temperatura, a dispersão da estrutura porosa, o aumento da estabilidade térmica das cavidades e anéis lacunares, as mudanças nos processos de transformação de fase (segregação, estabilidade do soluto sólido, dissolução dos precipitados, ordenação-desordenação).

Para a reprodução do inchamento nos materiais, durante o experimento de simulação com a taxa de produção dos defeitos aumentada é necessário o ajuste da temperatura em relação à temperatura de operação do reator. Este ajuste é causado pela necessidade de conservação da relação entre a taxa de produção dos defeitos e a taxa de absorção deles pelos sorvedouros, para que se possa reproduzir o nível de saturação dos defeitos da irradiação que é simulada.

No caso, quando a difusão é controlada por um mecanismo qualquer, com energia de ativação E_m , é necessário aumentar a temperatura no experimento de simulação em comparação com a temperatura de operação do reator na grandeza ΔT^{64} ,

$$\frac{\Delta T^\circ}{T} = \left(1 - \frac{kT}{E_m} \ln \frac{K_j}{K_n} \right)^{-1} - 1, \quad (18)$$

onde K_j e K_n são as taxas de produção dos defeitos no caso de irradiação com íons e com nêutrons respectivamente. A expressão mais rigorosa, aplicável para diferentes regimes do inchamento foi deduzida por Mansur⁶⁵.

A associação da mudança da temperatura nos experimentos rápidos de simulação com o ajuste da temperatura que é necessário para reproduzir o inchamento pode servir como boa aproximação para simular a evolução da microestrutura. Em favor disso, atestam a forte correlação do inchamento com a formação de fases induzidos por radiação⁵⁶ e a mesma densidade aproximada das discordâncias nos experimentos de simulação em comparação com os experimentos no reator⁶⁶.

Entretanto, alguns aspectos ligados ao deslocamento da temperatura precisam ser considerados. Os parâmetros da irradiação, tais como temperatura e taxa de dano, nas condições de dano de cascata têm grande influência na taxa efetiva dos defeitos produzidos que contribuem na precipitação dos mesmos, e na densidade dos sorvedouros^{14, 28}. Isto vai influir no ajuste da temperatura. Além disso, nos materiais com vários componentes, o mecanismo de difusão caracteriza-se pelo espectro das energias de ativação.

A prática mostra²² que atingir as condições da similaridade dos processos de difusão é um problema bastante complicado e é indispensável uma teoria, fundamentada fisicamente, para tal correlação.

3.2 Irradiação com nêutrons

3.2.1 Programa NOBL

Para obter as características básicas da irradiação com nêutrons foi criado o programa NOBL. A descrição e a fonte do programa NOBL são dadas no apêndice.

O programa NOBL é o código de Monte Carlo, tridimensional, de transporte dos nêutrons através do material multicomponente. O objetivo principal do programa é o cálculo das energias, coordenadas e cossenos de direção dos átomos de recuo num alvo plano amorfo. Para isto, é usado o tratamento clássico de colisões binárias entre o nêutron e o átomo do material. São consideradas as colisões elásticas e inelásticas que levam o núcleo a um nível excitado. Esta informação é gravada no formato de arquivo de entrada "RECOILS.DAT" do programa TRIM. A cascata completa dos átomos de recuo é

calculada com auxílio do TRIM. O programa NOBL também calcula a produção de hélio e hidrogênio e os momentos estatísticos da distribuição, tais como, valor médio, variância, assimetria (*skewness*) e curtose (*kurtosis*), das posições de produção destes produtos das reações nucleares.

O programa utiliza as seções de choque da biblioteca ENDF/B-IV⁶⁷. Os dados para cada núcleo do alvo são processados com auxílio do código NJOY⁶⁸ no formato ACE (A Compact Endf).

Descrição do programa.

O programa permite analisar dois espectros energéticos de nêutrons: o espectro monoenergético, com energia E_0 e o espectro de fissão, que é dado pela densidade de Cranberg:

$$N(E) = e^{-E} \sinh(2E)^{1/2} \quad (19)$$

A direção incidente dos nêutrons pode constituir o ângulo θ com a normal à superfície do alvo ou a direção incidente pode ser distribuída isotropicamente. A definição dos eixos de coordenadas é igual à definição dada no programa TRIM.

A história de cada nêutron começa em ponto (0,0,0) do alvo. A energia do nêutron E é amostrada de acordo com a distribuição de nêutrons pela energia e os cossenos de direção incidente são amostrados de acordo com a distribuição angular.

O espectro (19) tem o seguinte esquema de amostragem da energia⁶⁹:

Estabelecemos $x = -\ln \xi_1$, $y = -\ln \xi_2$, onde ξ_1 e ξ_2 são os números aleatórios no intervalo]0, 1[. Aceitamos x se $(y - x - 1)^2 < 4x$. Para x aceito estabelecemos $E=2x$.

A amostragem dos cossenos de direção da distribuição isotrópica é realizada pelo esquema padrão⁷⁰:

para os números ξ_1 e ξ_2 aleatórios no intervalo]0, 1[obtém-se

$$\begin{cases} w = 2 \cdot \xi_1 - 1; \\ u = \rho \cdot \cos \varphi; \\ v = \rho \cdot \sin \varphi; \end{cases} \quad (20)$$

onde $\rho = \sqrt{1 - w^2}$ e $\varphi = \pi (\xi_2 - 1/2)$.

A distância l percorrida pelo nêutron do ponto inicial até a primeira colisão é amostrada de acordo com a probabilidade de colisão com o átomo do material no intervalo l e $l+dl$ que é dada pela fórmula:

$$p(l) = e^{-\Sigma_t l} \Sigma_t, \quad (21)$$

onde Σ_t é a seção de choque macroscópica total. O esquema de amostragem é o seguinte:

$$l = -\frac{1}{\Sigma_t} \ln \xi, \quad (22)$$

onde ξ é o número aleatório no intervalo $]0, 1[$.

O tipo de átomo, com o qual acontece a colisão, é determinado de acordo com a probabilidade de espalhamento neste átomo. Sejam A_1, A_2, \dots, A_n n tipos de átomos que constituem o alvo amorfo e p_1, p_2, \dots, p_n as probabilidades de colisão do nêutron com estes átomos. As probabilidades p_i são dadas pelas seguintes relações:

$$p_i = \frac{\Sigma_t^i}{\Sigma_t} = \frac{N_i \sigma_t^i}{N_1 \sigma_t^1 + N_2 \sigma_t^2 + \dots + N_n \sigma_t^n}, \quad (23)$$

onde N_i é a concentração dos átomos tipo A_i e σ_t^i é a seção de choque total de espalhamento dos nêutrons nos átomos A_i .

Se o número aleatório ξ , onde $0 \leq \xi \leq 1$, é tal que

$$p_1 + \dots + p_{i-1} \leq \xi < p_1 + \dots + p_i,$$

o ξ determina o átomo tipo A_i

Analogamente é determinado o tipo de colisão com o tipo de átomo do alvo escolhido, onde as probabilidades p_i são dadas pelas expressões:

$$p_i = \frac{\sigma_{E_i}^j}{\sigma_i^j} = \frac{\sigma_{E_i}^j}{\sigma_{E_{i1}}^j + \sigma_{E_{i2}}^j + \dots + \sigma_{E_{im}}^j}, \quad (24)$$

onde $\sigma_{E_i}^j$ é a seção de choque para a reação nuclear tipo E_{vi} para o átomo tipo A_j .

Consideram-se as colisões elásticas e inelásticas que levam o núcleo do alvo a um estado excitado. Em analogia com o programa SPECTER descrito no item 2.3.4, as reações (n,d) e (n,t) são tratadas como (n,p) e (n, ^3He) como (n, ^4He).

Como resultado da colisão elástica o átomo do alvo adquire a energia

$$E_R = E \cdot \frac{2A(1-\mu)}{(A+1)^2}, \quad (25)$$

e a energia do nêutron espalhado é igual a

$$E_n = E \cdot \left(1 - \frac{2A(1-\mu)}{(A+1)^2} \right), \quad (26)$$

onde E é a energia inicial do nêutron no sistema laboratório, $A = \frac{m_A}{m_n}$ é a razão entre a massa do átomo do alvo e a massa do nêutron, $\mu = \cos \theta$ é o cosseno do ângulo entre a direção incidente e a espalhada do nêutron no sistema do centro de massa. O espalhamento no sistema do centro de massa é considerado como isotrópico.

Os cossenos dos ângulos de espalhamento no sistema laboratório para os átomos de recuo e os nêutrons são iguais respectivamente a:

$$a_R = \cos \theta_R = \sqrt{\frac{1-\mu}{2}} \quad (27)$$

e

$$a_n = \cos\theta_n = \frac{1 + A\mu}{\sqrt{1 + A^2 + 2A\mu}} \quad (28)$$

Como resultado da colisão inelástica a energia do átomo de recuo é determinada pela expressão:

$$E_R = -\frac{\varepsilon}{(1+A)} + \frac{2 \cdot E \cdot A}{(1+A)^2} \cdot \left(1 - \mu \sqrt{1 - B \cdot \frac{\varepsilon}{E}}\right) \quad (29)$$

e a energia do nêutron espalhado é igual a

$$E_n = E - \frac{\varepsilon \cdot A}{(1+A)} - \frac{2 \cdot E \cdot A}{(1+A)^2} \cdot \left(1 - \mu \sqrt{1 - B \cdot \frac{\varepsilon}{E}}\right) \quad (30)$$

onde ε é a energia de um nível excitado em relação ao estado fundamental do núcleo e

$$B = \frac{(m_n + m_A)}{m_A}$$

Os cossenos dos ângulos de espalhamento no sistema laboratório são determinados pelas expressões:

$$a_R = \frac{1 - \mu \sqrt{1 - B \cdot \frac{\varepsilon}{E}}}{\left(2 - B \cdot \frac{\varepsilon}{E} - 2 \cdot \mu \sqrt{1 - B \cdot \frac{\varepsilon}{E}}\right)^{1/2}} \quad (31)$$

para o átomo de recuo, e

$$a_n = \frac{1 + A\mu \sqrt{1 - B \cdot \frac{\varepsilon}{E}}}{\left(1 + A^2 \left[1 - B \cdot \frac{\varepsilon}{E}\right] + 2 \cdot A \cdot \mu \sqrt{1 - B \cdot \frac{\varepsilon}{E}}\right)^{1/2}} \quad (32)$$

para nêutron espalhado.

Como no caso das colisões elásticas, o espalhamento dos nêutrons no sistema de centro de massa é considerado como isotrópico.

Os novos cossenos de direção (u',v',w') do nêutron espalhado no sistema de coordenada inicial são encontrados via rotação do vetor unitário, direcionado ao longo do eixo **OX** (figura 9) com os cossenos de direção (u,v,w) , pelo esquema (33)⁷¹:

$$\begin{cases} u' = u \cdot a - b \cdot c \cdot \sqrt{1-u^2}; \\ v' = v \cdot a + \frac{u \cdot v \cdot b \cdot c - w \cdot b \cdot d}{\sqrt{1-u^2}}; \\ w' = w \cdot a + \frac{v \cdot b \cdot d + u \cdot w \cdot b \cdot c}{\sqrt{1-u^2}}; \end{cases} \quad (33)$$

onde a , $b \cdot c$, e $b \cdot d$ são as coordenadas do vetor unitário **OP**, figura 9. Desta figura segue que $a = \cos \theta_1$, $b = \sin \theta_1 = \sqrt{1-a^2}$, $c = \cos \varphi$ e $d = \sin \varphi$.

A direção **OP** constitui com a direção incidente **OX** do nêutron o ângulo θ_1 , cujo cosseno é determinado pela expressão (28) ou (32). O ângulo azimutal φ é amostrado isotropicamente.

No caso de $1-u^2 \approx 0$ o esquema da rotação é:

$$\begin{cases} u' = a \cdot u; \\ v' = b \cdot c; \\ w' = b \cdot d. \end{cases} \quad (34)$$

Como os vetores de direção do átomo de recuo **OP_r**, do nêutron incidente **OX** e do nêutron espalhado **OP** têm de ficar num plano, os cossenos de direção do átomo de recuo são determinados pelas mesmas fórmulas (33) e (34) nas quais θ_1 é substituído pelo θ_2 e φ é substituído pelo $\varphi + \pi$ (figura 9).

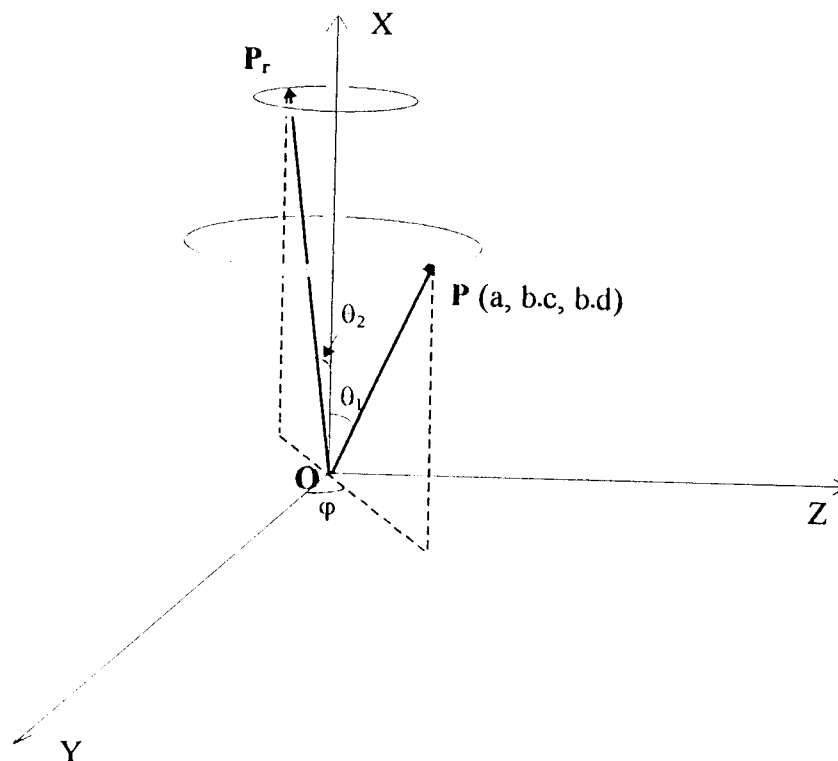


Figura 9. O esquema de espalhamento do nêutron no sistema de coordenadas cujo eixo **OX** é direcionado ao longo da direção de incidência do nêutron com o átomo do alvo.

A história do nêutron acaba no caso de fuga do nêutron fora do alvo ou no caso da reação que não é considerada pelo programa.

Os momentos estatísticos da distribuição das posições de produção dos átomos de hélio têm a mesma definição que no programa TRIM-95.

É preciso notar duas peculiaridades do programa NOBL:

1) a maioria dos processos que leva à produção dos átomos de recuo não é considerada. Isto concerne às reações: (n, α) , (n, p) onde os alfas, os prótons e os núcleos residuais produzidos têm a energia bem grande para causar o número essencial dos átomos de recuo; (n, γ) onde os átomos de recuo são associados com a emissão de raios gama, com a energia finita do nêutron incidente e com o decaimento beta posterior; e às reações múltiplas (n, xn) . Contudo, a análise das seções de choque para os elementos do aço mostrou que, para certas faixas da energia dos nêutrons, a probabilidade dessas reações é

bem pequena (ou igual a zero) em comparação com a probabilidade das colisões elásticas e inelásticas consideradas. Por isto, para certos espectros de energia dos nêutrons a negligência dessas reações é legítima. Todavia, o programa é feito de um modo que permite, no caso da necessidade, levar em conta estes processos com as mudanças relativamente pequenas na fonte;

2) o espalhamento dos nêutrons no sistema de centro de massa é considerado como isotrópico, o que em geral não é correto, especialmente para os nêutrons de alta energia. Isto vai introduzir uma certa distorção no espectro energético dos átomos de recuo e, como consequência, um certo desvio na quantidade dos defeitos produzidos pelos átomos de recuo. Contudo, este fato não vai influir na distribuição espacial dos defeitos para as amostras com espessuras pequenas ($\sim 100 \mu\text{m}$).

3.2.2 Metodologia dos cálculos das características básicas da irradiação

A produção de hélio e de hidrogênio, no caso da irradiação com nêutrons possui a seguinte peculiaridade: as maiores fontes desses gases nas ligas, que contêm o níquel, no espectro dos nêutrons com componente significativo dos nêutrons térmicos são as reações de duas etapas $^{58}\text{Ni}(n,\gamma) ^{59}\text{Ni}(n,\alpha) ^{56}\text{Fe}$ e $^{58}\text{Ni}(n,\gamma) ^{59}\text{Ni}(n,p) ^{59}\text{Co}$. Para calcular a produção do hélio ou do hidrogênio dessas reações é usada a seguinte fórmula^{72, 73}:

$$\frac{N(G)}{N_0(^{58}\text{Ni})} = \frac{\sigma_G}{\sigma_T} + \frac{\sigma_G \cdot e^{-\sigma_\gamma \phi \cdot t}}{(\sigma_\gamma - \sigma_T)} - \frac{\sigma_G \cdot \sigma_\gamma \cdot e^{-\sigma_T \phi \cdot t}}{(\sigma_\gamma - \sigma_T) \cdot \sigma_T} \quad (35)$$

onde $N(G)$ é o número dos átomos de gás (hélio ou hidrogênio) produzidos; $N_0(^{58}\text{Ni})$ é o número inicial dos átomos do ^{58}Ni ; σ_G , σ_T , σ_γ referem-se às seções de choque para as reações $^{59}\text{Ni}(n,g)$, onde g é partículas alfa ou prótons, $^{59}\text{Ni}(n, \text{absorção total})$ e $^{58}\text{Ni}(n,\gamma)$ respectivamente; ϕ é o fluxo dos nêutrons; t é o tempo da irradiação.

No espectro de nêutrons do reator, as seções de choque que entram na fórmula (35) são valores médios sobre o espectro total de nêutrons, e o fluxo é a somatória sobre todas as energias dos nêutrons.

O espectro energético dos *PKAs* é encontrado dos valores das energias dos átomos de recuo obtidos pelo NOBL. A probabilidade de produção do átomo de recuo com energia E_2 no dE_2 é a razão da seção de choque diferencial e total.

$$P(E_2)dE_2 = \frac{1}{\sigma} \left(\frac{d\sigma}{dE_2} \right) dE_2 \quad , \quad (36)$$

onde $P(E_2)$ é a densidade de probabilidade, determinada pelas energias dos átomos de recuo e σ encontra-se do TRIM.

Para calcular a densidade de probabilidade de produção do defeito por *PKA* (eq. 11) além do espectro dos *PKAs* é necessário saber a função de dano $\nu(T)$. Esta última é encontrada do modelo de Kinchin e Peas modificado:

$$\begin{aligned} \nu &= 1 \quad , \quad \text{se } E_D < E_v < 2.5 E_D \quad , \\ \nu &= \frac{0.8 \cdot E_v}{2 \cdot E_D} \quad , \quad \text{se } E_v > 2.5 E_D \quad , \end{aligned} \quad (37)$$

onde E_D é a energia de deslocamento e E_v é a parte da energia que foi para produção dos defeitos.

A energia E_v é encontrada usando a teoria de Lindhard e outros⁷⁴ de partição da energia entre as reações de frenagem eletrônicas e nucleares, na aproximação analítica dada pelo modelo NRT⁶⁰.

3.3 Irradiação com íons

Os experimentos de irradiação com as partículas leves podem ser feitos de três modos: 1) implantação das partículas na amostra; 2) transmissão das partículas através da amostra; 3) combinação do primeiro e do segundo modo.

A escolha do modo da irradiação depende dos objetivos experimentais colocados. O primeiro modo permite acumular de forma rápida as partículas implantadas no volume da amostra e estudar os efeitos ligados à presença desses elementos como, por exemplo, a fragilização de alta temperatura causada pelo hélio. O segundo modo aplica-se para o estudo dos efeitos, basicamente causados pelos deslocamentos, como por exemplo, da fluência por irradiação. O terceiro modo permite variar a razão íon implantado/DPA e, assim, estudar a dependência dos fenômenos de dano dessa razão, como por exemplo, a nucleação das bolhas e cavidades.

3.3.1 Implantação homogênea

Devido à sua influência nas propriedades, a presença do hélio no material é ponto crucial durante os testes de simulação. Apesar de ser significativamente menor, a influência do hidrogênio nas propriedades dos materiais não pode ser desprezada completamente e também exige estudo.

Abaixo, estão apresentados os aspectos ligados ao problema da irradiação com os átomos de hélio. Estes aspectos são os mesmos para irradiação com os prótons, assim a metodologia proposta para a abordagem do problema da implantação homogênea de hélio pode ser diretamente aplicada no caso da irradiação com prótons.

A vantagem principal da irradiação com íons de hélio é a possibilidade da simulação simultânea de acumulação de hélio com a produção dos defeitos. Os requisitos principais para as condições de irradiação com íons (partículas alfa), relacionados à simulação da irradiação com nêutrons em reatores são:

1. A igualdade da concentração do hélio sob a irradiação com nêutrons e com íons:

$$C_{\text{He}|n}(\vec{r}) = C_{\text{He}|He}(\vec{r})$$

Notamos que, no caso da irradiação com nêutrons, o hélio é formado homoganeamente no volume da amostra. Ao contrário, sob a irradiação com íons de certa energia a acumulação do hélio é fortemente heterogênea.

2. A igualdade da relação entre acumulação da concentração do hélio e a dose de danos e a relação correspondente da irradiação simulada.

A primeira condição pode ser obtida pelo feixe dos íons com espectro energético especial. A técnica padrão de irradiação com íons é baseada no feixe iônico primário de certa energia e o jogo giratório dos degradadores da energia, ou seja, os filtros, como mostrado na figura 10. Este método fornece a distribuição energética desejada.

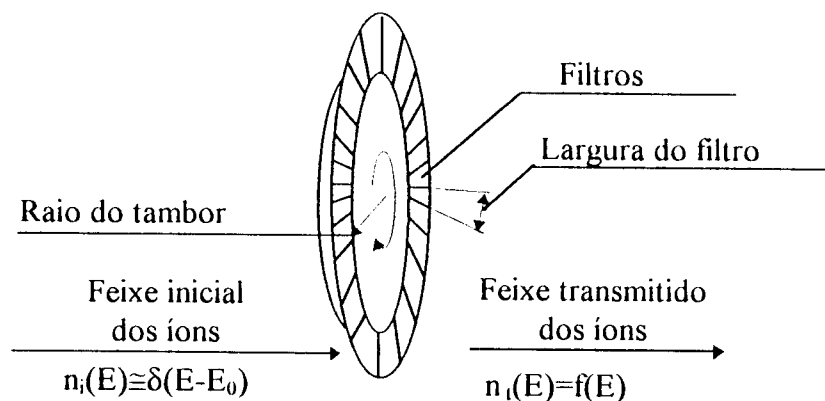


Figura 10. O esquema da irradiação.

O problema é determinar o espectro energético dos íons do hélio para obter a seguinte condição representada pela equação:

$$\int_0^{E_{\text{max}}} \kappa(x, E) \cdot f(E) dE = \text{constante} \quad (38)$$

onde $\kappa(x, E)$ é a taxa da implantação do hélio por ion, $f(E)$ é o espectro energético dos ions no feixe, E_{\max} é a energia máxima dos ions.

A equação (38) é a equação integral do tipo Fredholm da primeira espécie. Este problema é bem conhecido como mal-condicionado, ou seja, a solução é extremamente sensível às pequenas mudanças ou erros na entrada de dados. Métodos especializados foram desenvolvidos para as equações deste tipo, freqüentemente chamadas de problemas inversos. O método de regularização é usado para obter a solução para a função $f(E)$ ⁷⁵. Para obter a função $\kappa(x, E)$ o código TRIM é usado.

O problema seguinte é determinar o jogo de filtros que produz a distribuição, média no tempo, mais próxima possível à distribuição $f(E)$ dos ions pela energia. Este problema pode ser formulado da seguinte maneira: determinar o número necessário mínimo de filtros e as espessuras deles para prover uma distribuição de energia contínua (média no tempo).

O método para determinar as espessuras dos filtros inclui os seguintes procedimentos (vide figura 11):

1. Determinação da espessura x para o primeiro filtro da equação (39),

$$x = \int_{E_{\text{irr}}}^{E_1} \frac{dE}{S(E)}, \quad (39)$$

onde função $S(E) = \frac{dE}{dx}$ é poder de frenagem determinado pelo código TRIM; E_1 é a energia arbitrária no limite da distribuição $f(E)$; E_{irr} é a energia da irradiação inicial.

2. Determinação do espectro energético $\tilde{f}_1(E)$ dos ions transmitidos através do primeiro filtro.

3. Substituição da forma da curva de distribuição obtida pela forma retangular com a área igual e altura igual ao máximo do espectro $\tilde{f}_1(E)$.

4. Estimativa da energia que corresponde ao máximo da distribuição subsequente.

5. Execução dos procedimentos 1, 2, 3 para o segundo filtro.

6. Correção da espessura do segundo filtro e repetição dos procedimentos 1, 2, 3 para este filtro.

O procedimento 6 repete-se até os lados adjacentes dos retângulos tornarem-se praticamente coincidentes.

Seguindo desta maneira, as espessuras de todos os filtros são determinadas.

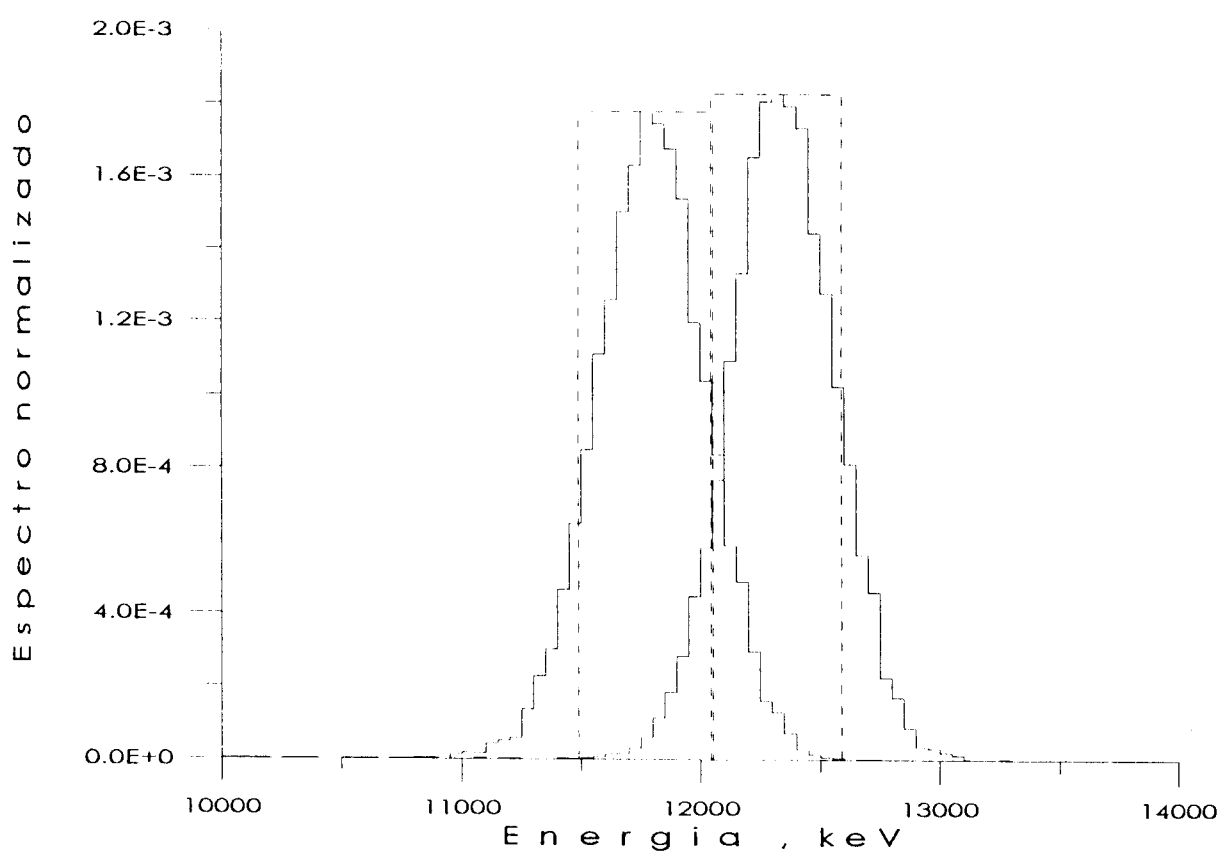


Figura 11. Dois espectros da energia dos íons do hélio depois da irradiação através dos filtros de alumínio com as espessuras 0,258 mm e 0,252 mm. A energia inicial dos íons é 28 Mev.

O método proposto para selecionar as espessuras dos filtros leva a uma distribuição de energia bastante contínua e com número mínimo de filtros. O espectro obtido difere do espectro requerido dado pela equação (38). A boa concordância com o espectro requerido pode ser obtida por uma escolha adequada da largura de cada filtro, levando ao controle de

tempo da irradiação através do filtro utilizado. As larguras dos filtros combinados em jogo, como é mostrado na figura 10 podem ser calculadas da condição do mínimo do funcional:

$$\frac{\partial I(\alpha_1, \dots, \alpha_N)}{\partial \alpha_i} = 0 \quad , \quad i=1, 2, 3, \dots, N \quad , \quad (40)$$

onde

$$I = \int_0^{E_{\max}} \left(\sum_{i=1}^N \alpha_i \cdot \tilde{f}_i(E) dE - f(E) \right)^2 dE \quad , \quad (41)$$

sob condição

$$\sum_{i=1}^N \alpha_i = 1 \quad , \quad (42)$$

onde, $\alpha_i = \frac{l_i}{2\pi R}$, l_i é largura do filtro, R é raio do tambor e N é número total dos filtros.

No caso de feixe inicial de íons não monoenergéticos, a não-linearidade na dependência do poder de frenagem da energia vai causar uma expansão adicional da energia dos íons depois da passagem através do filtro. Este fator pode ser dominante na distribuição da energia final.

Propõe-se duas maneiras de abordagem para este problema, mostrado esquematicamente na figura 12: 1) estatística; 2) fenomenológica.

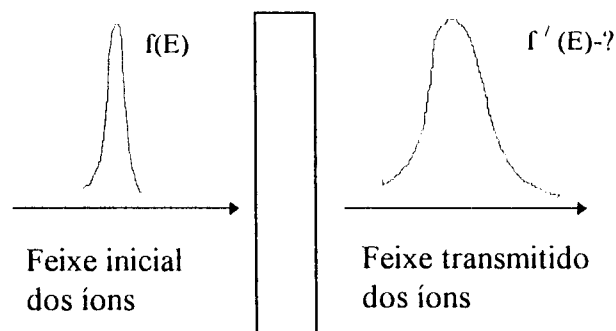


Figura 12. Distribuição de energia antes e depois do filtro.

1) O método estatístico inclui os seguintes procedimentos:

a) geração do número estatisticamente representativo das energias distribuídas de acordo com a distribuição inicial no feixe;

b) para este conjunto das energias, determinação das energias dos íons transmitidos através do filtro, com auxílio do TRIM;

c) cálculo do número suficiente de momentos estatísticos da distribuição energética dos íons transmitidos (é suficiente calcular o valor médio, variância, assimetria, curtose);

d) recuperação da função de densidade pelos momentos estatísticos⁷⁶.

2) Fenomenologicamente, a distribuição de energia pode ser encontrada através dos seguintes raciocínios:

As distribuições energéticas das partículas, antes e depois do filtro f e f' respectivamente, estão ligadas pela relação

$$f(E)dE = f'(E')dE' \quad , \quad (43,a)$$

ou

$$f'(E') = f(E) \frac{dE}{dE'} \quad , \quad (43,b)$$

onde E é energia da partícula incidente e E' é energia da partícula transmitida através do filtro.

Consideraremos duas partículas com as energias E_1 e E_2 , sendo $E_2 > E_1$. Depois do filtro, as energias E_1' e E_2' dessas partículas estarão ligadas com a espessura do filtro pelas seguintes relações:

$$L = \int_{E_1}^{E_2} \frac{dE}{S(E)} \quad , \quad (44)$$

e

$$L = \int_{E_2}^{E_1} \frac{dE}{S(E)} \quad , \quad (45)$$

onde $S(E)=dE/dx$ é poder de frenagem.

A diferença das equações (45) e (44) é

$$\int_{E_2}^{E_1} \frac{dE}{S(E)} - \int_{E_1}^{E_2} \frac{dE}{S(E)} = 0 \quad , \quad (46)$$

ou

$$\int_{E_2}^{E_1} \frac{dE}{S(E)} + \int_{E_1}^{E_2} \frac{dE}{S(E)} - \int_{E_1}^{E_2} \frac{dE}{S(E)} - \int_{E_2}^{E_1} \frac{dE}{S(E)} = 0 \quad (47)$$

Finalmente temos que,

$$\int_{E_1}^{E_2} \frac{dE}{S(E)} = \int_{E_1}^{E_2} \frac{dE}{S(E)} \quad (48)$$

Se os valores das energias E_1 e E_2 são próximos, ou seja, $E_2=E_1+\delta E$, onde $\delta E \ll E_1$, a função sub-integral $1/S(E)$ pode ser substituída pela função linear e a relação (48) pode ser reescrita na forma:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{1}{S(E_1')} + \frac{1}{S(E_2')} \right) \cdot \delta E' \cong \frac{1}{2} \left(\frac{1}{S(E_1)} + \frac{1}{S(E_2)} \right) \cdot \delta E \quad , \quad (49)$$

onde $\delta E' = E_2' - E_1'$. Quanto menor valor δE mais rigorosa a equação (49), de onde

$$\frac{\delta E}{\delta E'} = \frac{S(E_2') + S(E_1')}{S(E_2) + S(E_1)} \cdot \frac{S(E_1) \cdot S(E_2)}{S(E_1') \cdot S(E_2')} \quad (50)$$

Substituindo na equação (43, b), obtém-se

$$f'(E_1') = f(E) \cdot \frac{S(E_2') + S(E_1')}{S(E_2) + S(E_1)} \cdot \frac{S(E_1) \cdot S(E_2)}{S(E_1') \cdot S(E_2')} \quad (51)$$

Levando ao limite $E_2 \longrightarrow E_1$ (obviamente que $E_2' \longrightarrow E_1'$) tem-se que,

$$f'(E_1') = f(E) \cdot \frac{S(E_1)}{S(E_1')} \quad (52)$$

Desta maneira, dado o valor de E_1 e determinando da equação (44) o valor de E_1' , pode-se encontrar o valor f' para a energia E_1' . Repetindo este procedimento para um grande número de energias pode-se recuperar, ponto por ponto, a função f' .

3.3.2 Modo de transmissão

A irradiação com prótons ou com íons de hélio em modo de transmissão tem um aspecto muito importante: para as energias altas, tipicamente de 16 MeV para os prótons e de 30 MeV para as partículas alfa, ocorrem as reações nucleares, como no caso da irradiação com os nêutrons, produzindo a razão He/DPA similar^{77, 78}. Como foi mostrado recentemente⁷⁹, os núcleos residuais dessas reações dão contribuição significativa para o espectro total dos *PKAs*, o que leva quase à duplicação das taxas de DPA. Estes resultados mostram que as pesquisas dos danos de deslocamento não elásticos são indispensáveis para a correta caracterização dos parâmetros de dano, tais como o espectro de *PKAs* e a taxa de produção de DPA induzidos pelas partículas leves.

3.3.3 Metodologia dos cálculos das características básicas de irradiação

A dose de dano encontra-se diretamente do programa TRIM.

No caso da implantação do hélio, para cálculos da sua distribuição espacial e da distribuição de danos, é necessário conhecer as funções $\sigma_D(x,E)$, $\sigma_{He}(x,E)$ e $\kappa(x,E)$ (equações 13, 14 e 38). O programa TRIM é usado para obter os valores dessas funções em pontos particulares da coordenada espacial e da energia e , por meio de interpolação linear nas células não Cartesianas, é obtida a expressão analítica das funções e o seu valor em ponto arbitrário.

O espectro energético dos *PKAs* é obtido dos valores das energias dos átomos de recuo calculados pelo TRIM.

No caso da irradiação com íons, a metodologia para calcular a densidade de probabilidade de produção do defeito por *PKA* é a mesma usada no caso da irradiação com os nêutrons.

4 CÁLCULOS E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

4.1 Implantação homogênea de íons

O primeiro grupo dos resultados apresentados é ligado ao problema da implantação homogênea de íons.

A figura 13 mostra o espectro da energia que produz implantação homogênea de hélio no níquel (para uma espessura de $100\mu\text{m}$), calculado da equação (38). A seção de choque macroscópica da implantação correspondente está mostrada na figura 14. São dados para a comparação, o espectro homogêneo e a seção de choque da implantação correspondente.

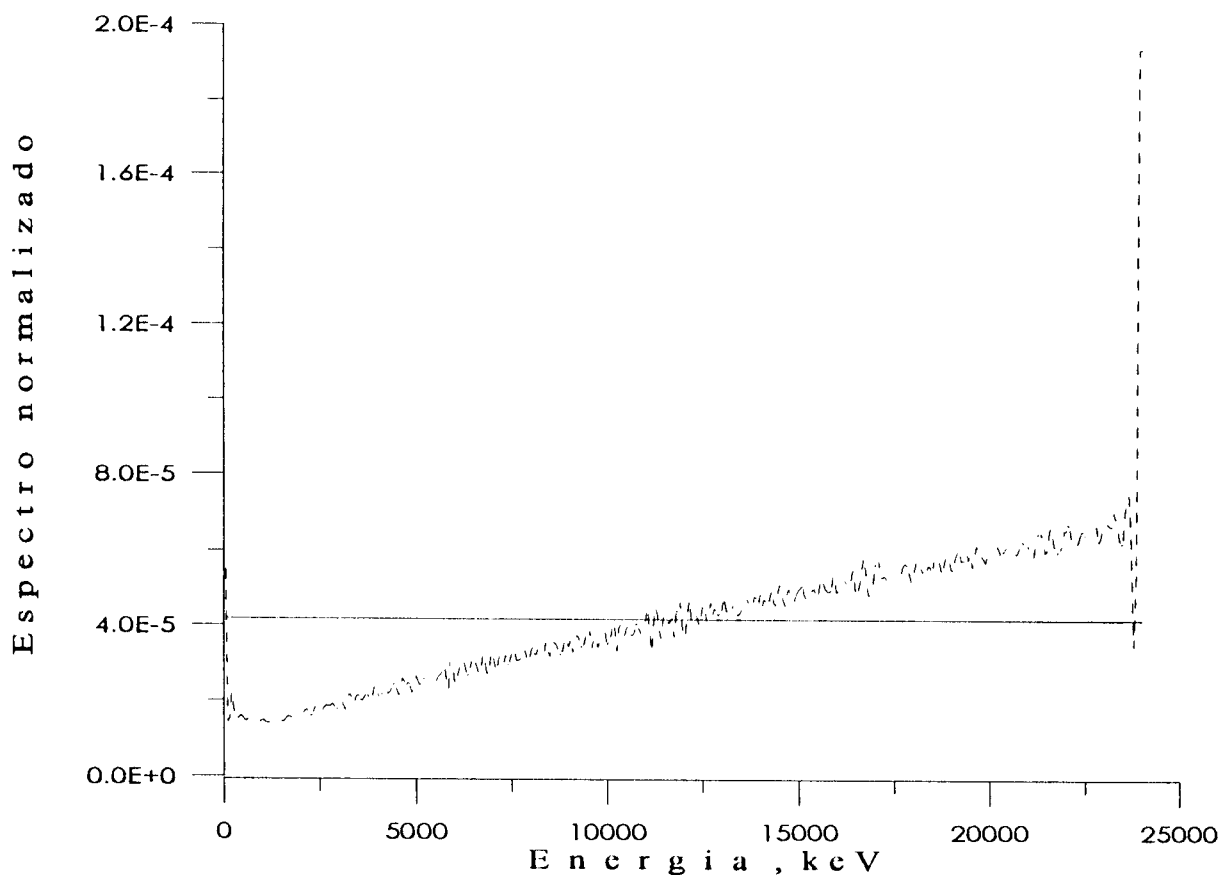


Figura 13. Espectros normalizados da energia dos íons do hélio. Curva sólida corresponde ao espectro homogêneo dos íons.

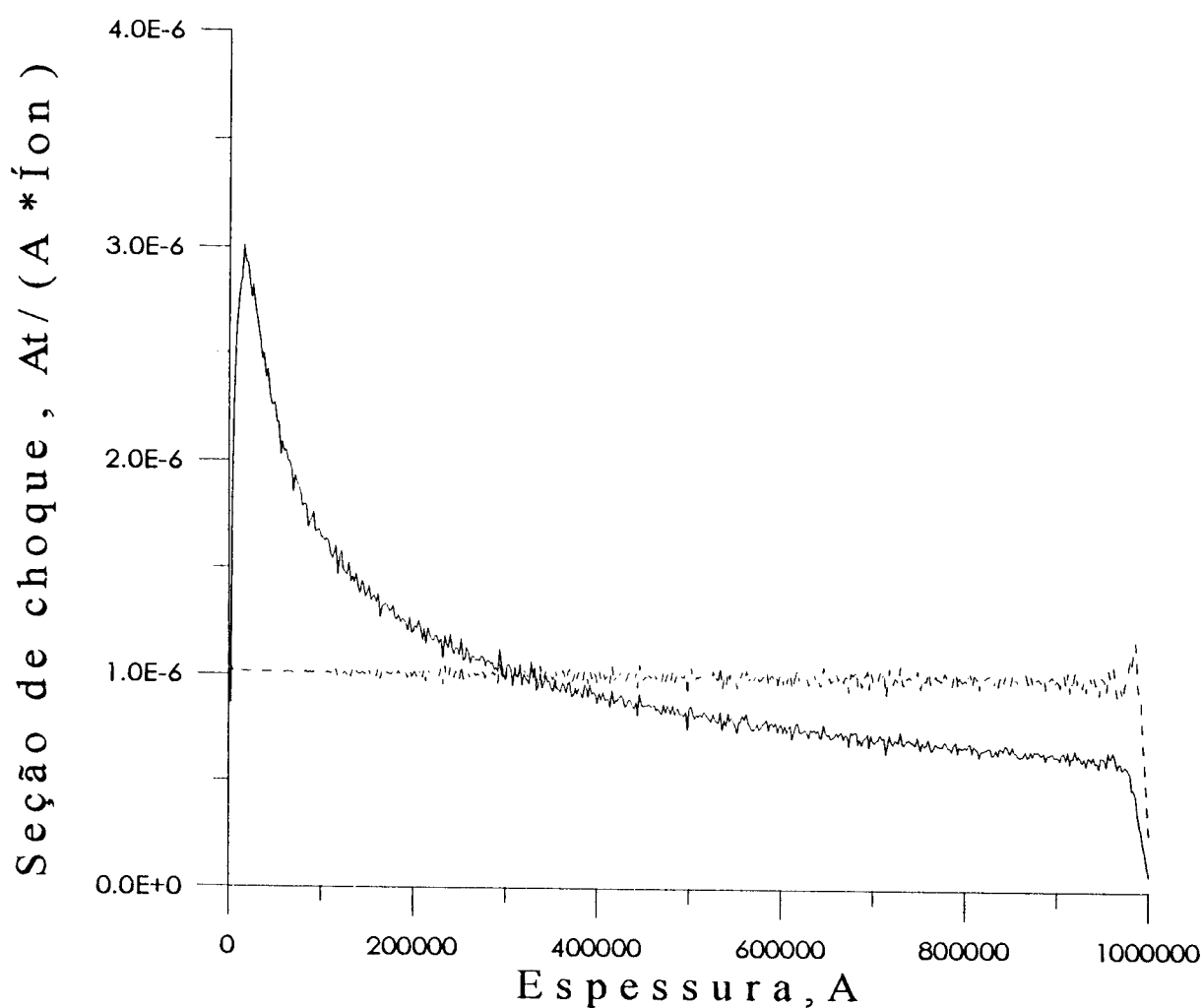


Figura 14. Seções de choque macroscópicas da implantação do hélio pela espessura da amostra. Curva sólida corresponde a seção de choque produzida pelo espectro homogêneo dos íons

Na figura 15, é apresentado o espectro energético (médio no tempo) calculado com o uso do jogo giratório de filtros de igual largura. O alumínio foi escolhido como o material para os filtros. A seção de choque macroscópica correspondente é mostrada na figura 16. O espectro calculado da equação (38) e a seção de choque correspondente são também apresentados nas figuras 15 e 16.

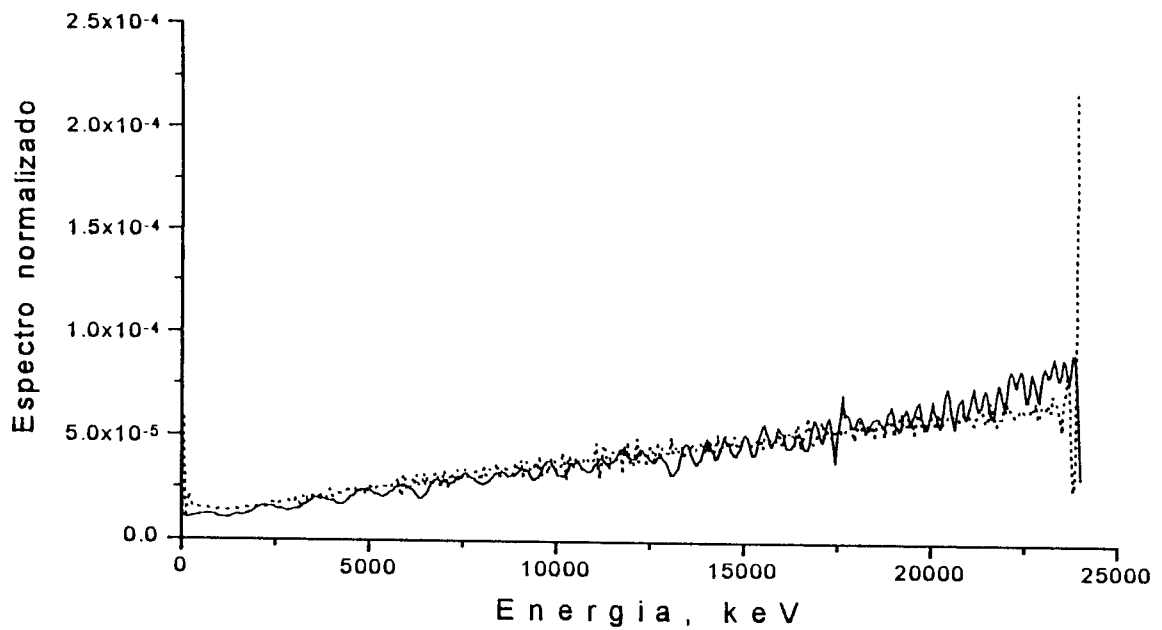


Figura 15. Espectros normalizados da energia de íons de hélio. A curva pontilhada representa o espectro calculado da equação (38).

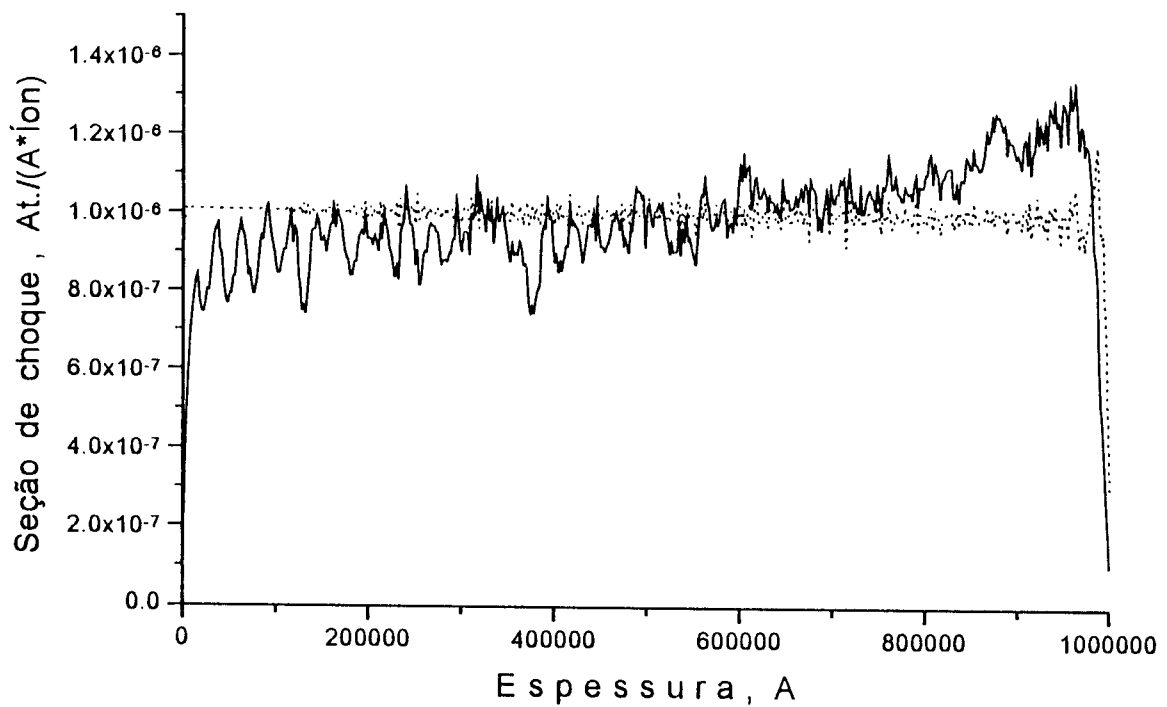


Figura 16. Seções de choque macroscópicas da implantação de hélio pela espessura da amostra de níquel. A curva pontilhada representa a seção de choque correspondente ao espectro calculado da equação (38).

Na figura 17, é apresentado o espectro energético dos íons de hélio, no caso de ajuste das larguras dos filtros. Na figura 18, é mostrada a seção de choque macroscópica correspondente. O espectro da equação (38) e a seção de choque macroscópica correspondente são mostrados pelas curvas pontilhadas.

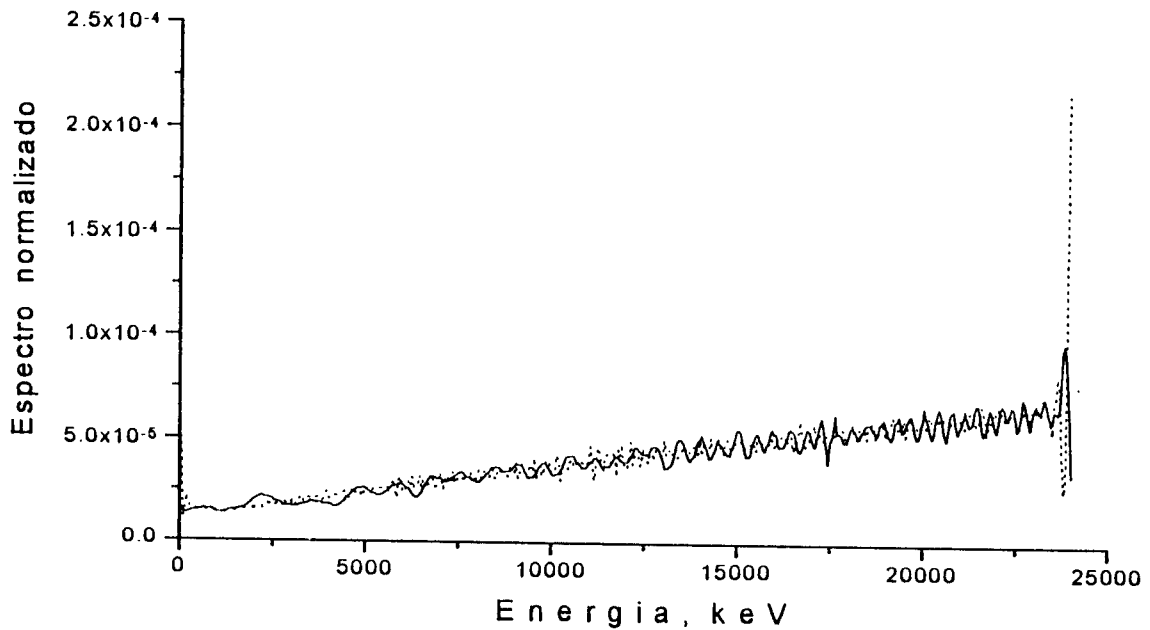


Figura 17. Espectros normalizados da energia dos íons do hélio.

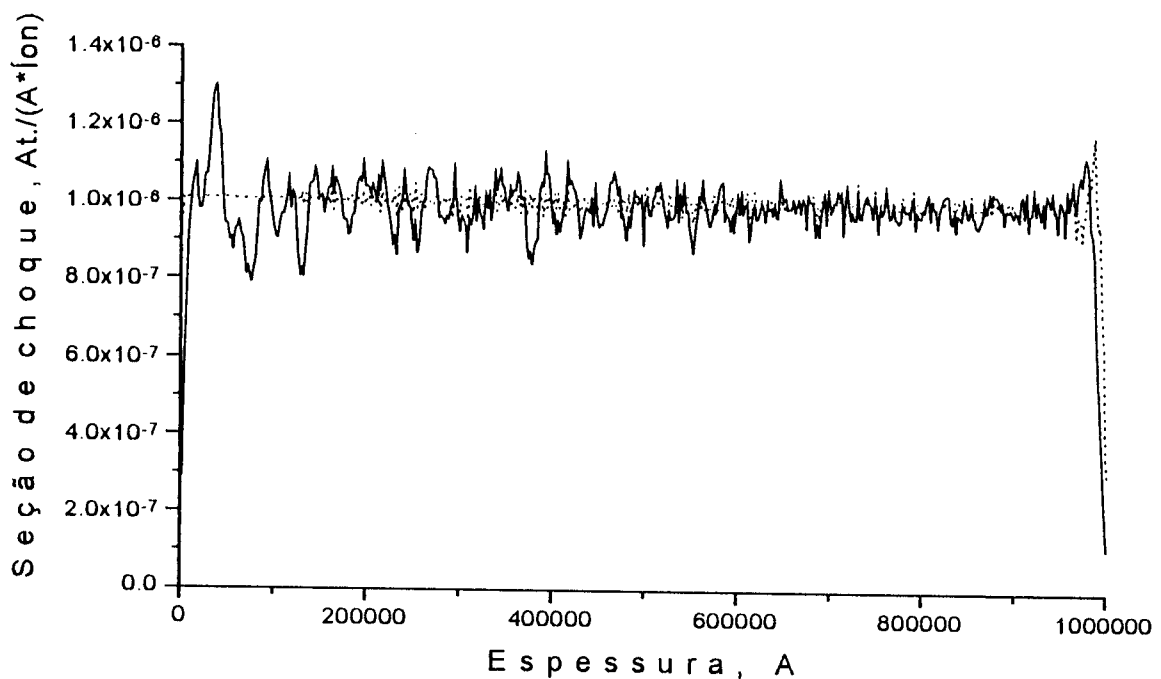


Figura 18. Seções de choque macroscópicas da implantação do hélio pela espessura da amostra de níquel.

Na tabela 3, são dadas as espessuras dos filtros de alumínio e as energias mais prováveis no feixe depois do filtro. Este jogo de filtros produz o espectro energético dos íons de hélio da figura 15. A energia inicial dos íons é igual a 28 MeV.

Tabela 3. Espessuras dos filtros e as energias mais prováveis dos íons .

Filtro	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Espessura, mm	0,08	0,085	0,09	0,095	0,1005	0,106	0,111	0,1165	0,122	0,128
Energia, keV	23850	23600	23300	23050	22700	22450	22150	21800	21450	21150

11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22
0,134	0,14	0,146	0,152	0,158	0,164	0,17	0,176	0,182	0,188	0,194	0,2005
20800	20450	20050	19700	19350	18950	18550	18150	17650	17300	16900	16400

23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34
0,207	0,213	0,2195	0,226	0,2325	0,239	0,2455	0,252	0,258	0,2645	0,271	0,2775
15950	15550	15050	14500	14050	13450	12850	12400	11800	11250	10550	9850

35	36	37	38	39	40	41	42	43
0,284	0,2905	0,297	0,3035	0,31	0,3165	0,323	0,3295	0,336
9200	8500	7650	6850	6000	4950	3700	2350	550

Para estimar o efeito do espalhamento angular dos íons depois do filtro e, também, o efeito de difusão dos defeitos puntiformes e dos íons implantados, o modelo numérico⁸⁰ foi adaptado para as condições da irradiação do níquel através do jogo giratório dos filtros. Os resultados desta simulação mostraram que os processos de difusão vão favorecer à

homogeneidade dos defeitos e dos íons implantados e, também mostraram que o espalhamento angular dos íons não introduz efeito notável no processo de implantação.

As espessuras calculadas dos filtros são válidas apenas para o feixe inicial monoenergético. Na prática, o feixe inicial dos íons não é monoenergético, e a expansão da distribuição energética do feixe inicial pode ser um fator dominante na expansão da distribuição energética final depois do filtro.

A ilustração desse fator está na figura 19. O feixe monoenergético dos íons e o feixe dos íons com a distribuição energética de Gauss foram transmitidos através do filtro de alumínio. As distribuições finais foram obtidas usando o método estatístico descrito no item 3.3.1.

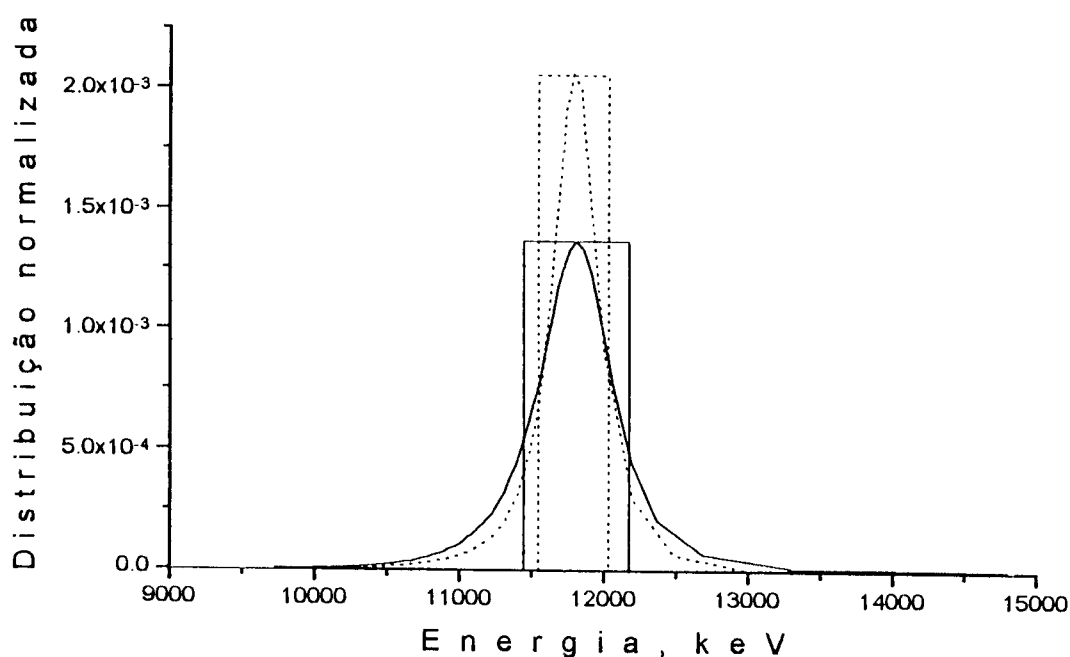


Figura 19. As distribuições energéticas dos íons de hélio depois do filtro de alumínio com espessura de 0,258 mm. A curva pontilhada corresponde ao feixe inicial monoenergético de 28 MeV; a curva contínua corresponde ao feixe inicial dos íons distribuídos pela energia de acordo com a distribuição de Gauss com o desvio padrão de 140 keV e a energia média de 28 MeV.

Os desvios-padrão das distribuições energéticas dos feixes transmitidos são $\sigma_1=250$ keV, para feixe inicial monoenergético, e $\sigma_2=370$ keV para feixe inicial não monoenergético. É fácil notar que o σ_2 é maior que $\sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_0^2}$, onde $\sigma_0=140$ keV é o

desvio padrão da distribuição inicial do feixe não monoenergético; e que o desvio padrão adicional, necessário para igualar a desigualdade, é quase igual a σ_1 . A largura do retângulo, que substitui a curva da distribuição energética (vide o método para determinar as espessuras dos filtros no item 3.3.1), é quase dupla, no caso do feixe inicial não monoenergético.

Na figura 20, são mostradas as seções de choque macroscópicas de produção das lacunas e dos átomos intersticiais dos quatro principais elementos sob a implantação homogênea do hélio nos aços AISI 304 e 348L*; e nas tabelas 4 e 5, são dadas as suas composições químicas. Foram usados nos cálculos os valores médios nas faixas de concentrações para Cr e Ni, indicados nas tabelas 4 e 5 ; e a concentração máxima foi usada para Mn para Mn

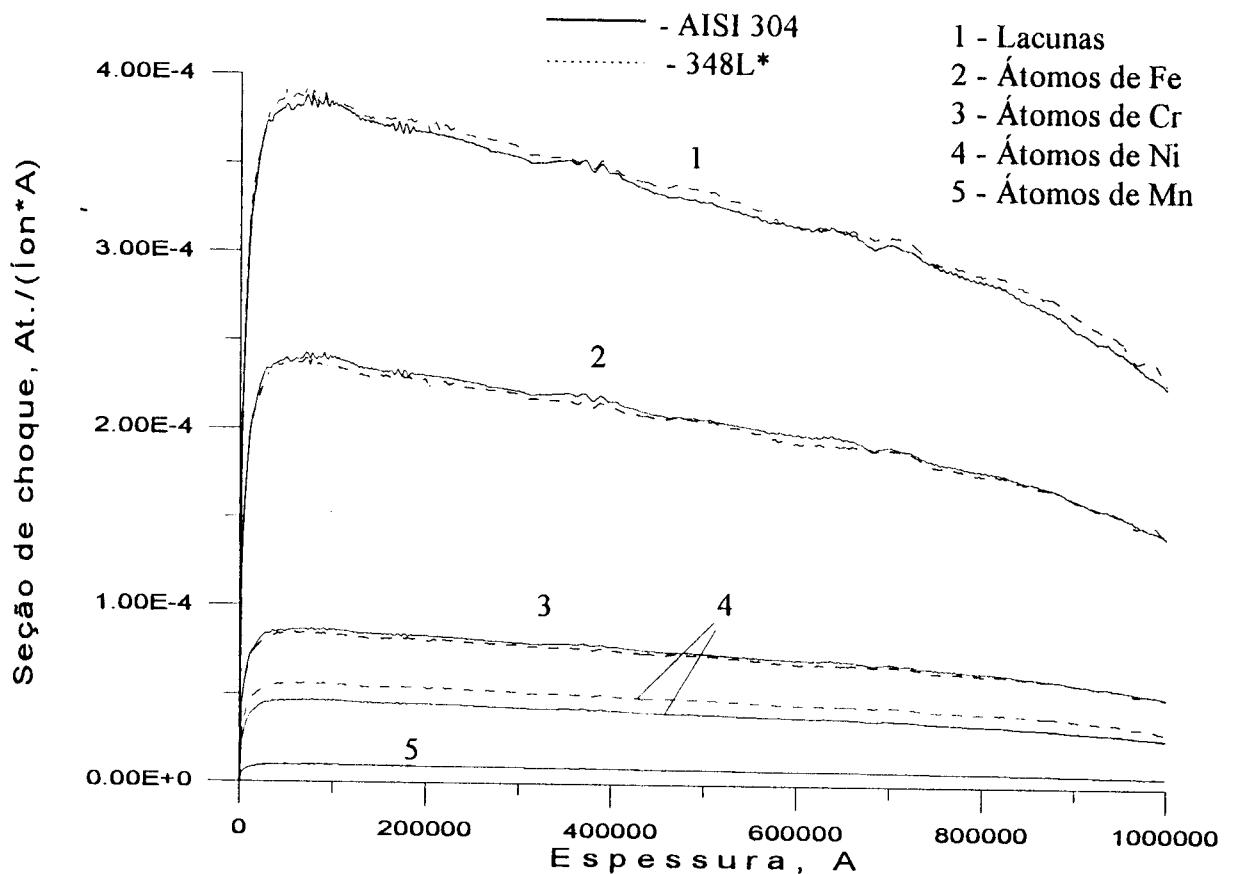


Figura 20. Seções de choque macroscópicas de produção das lacunas e dos átomos de Fe, Cr, Ni, Mn intersticiais durante a irradiação com íons de hélio distribuídos pela energia, de acordo com os espectros que produzem a implantação homogênea nos aços AISI 304 e 348L*.

Na figura 21, são mostradas as seções de choque macroscópicas de produção das lacunas e dos átomos intersticiais dos quatro principais elementos sob a implantação homogênea do hidrogênio nos aços AISI 304 e 348L*.

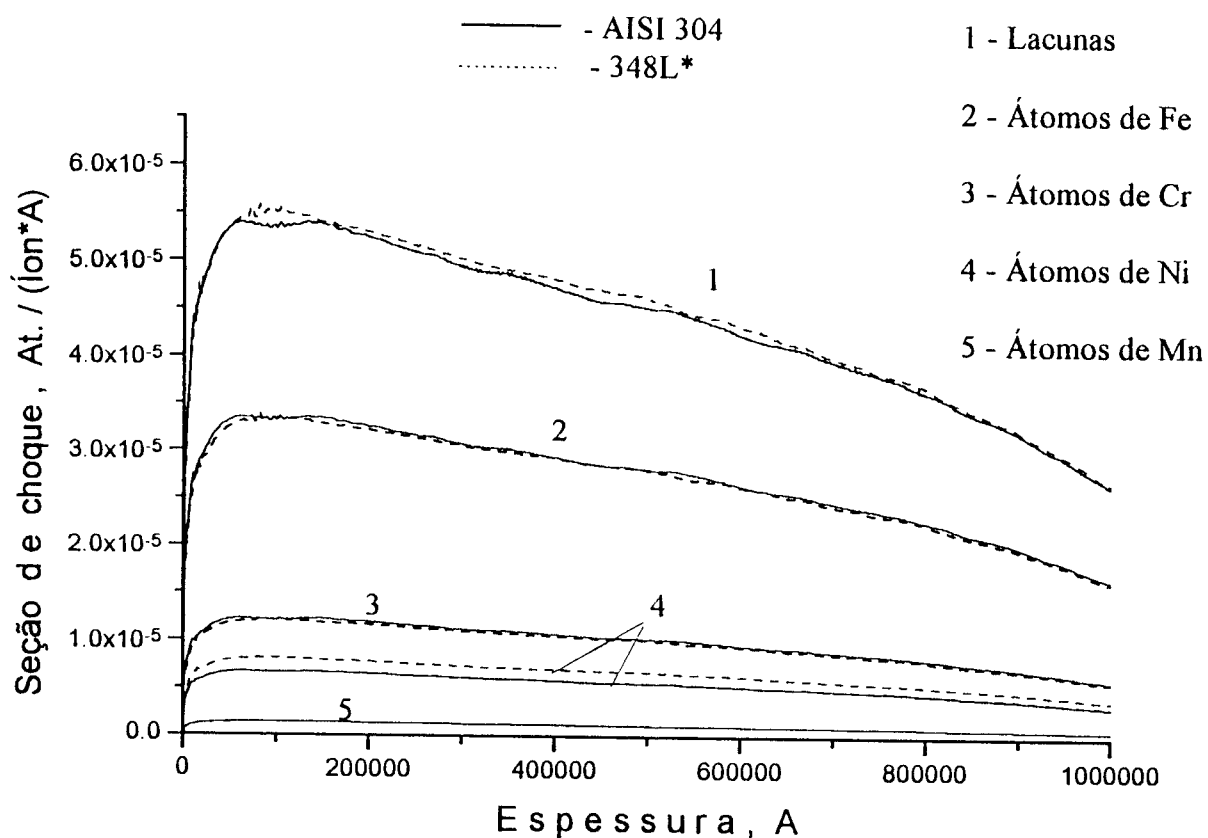


Figura 21. Seções de choque macroscópicas de produção das lacunas e dos átomos de Fe, Cr, Ni, Mn intersticiais durante a irradiação com os prótons distribuídos pela energia, de acordo com os espectros que produzem a implantação homogênea nos aços AISI 304 e 348L*.

Tabela 4. Composição química do aço inoxidável austenítico tipo 348L*¹⁵.

ELEMENTO	COMPOSIÇÃO (% em peso)	VARIAÇÃO PERMITIDA NA FAIXA ESPECIFICADA (% em peso)
C	0,030 máx	0,005
Mn	2,00 máx	0,04
P	0,015 máx	0,005
S	0,005 máx	0,005
Si	0,50 máx	0,05
Cr	17,00-20,00	0,2
Ni	10,00-13,00	0,15
N	0,04-0,06	0,01
Nb	10 x %C + 0,1	(Nb + Ta) 0,05
Co	0,05 máx	0,01
Ta	0,03 máx	-x-
B	0,002 máx	-x-

Tabela 5. Composição química do aço inoxidável austenítico tipo AISI 304⁸¹.

ELEMENTO	COMPOSIÇÃO (% em peso)
C	0,08 máx
Mn	2,00 máx
P	0,045 máx
S	0,03 máx
Si	1,00 máx
Cr	18,00-20,00
Ni	8,00-11,00

4.2 Irradiação com nêutrons e com íons

O segundo grupo dos resultados contém os parâmetros básicos de dano da radiação com os nêutrons, os prótons e os íons de hélio.

Na figura 22, são dadas as taxas de DPA durante a irradiação com nêutrons, íons de hélio e prótons no aço 348L*. Os fluxos dos íons são equivalentes à corrente das partículas de $1\mu\text{A}$ ou $6,24 \times 10^{12}$ partículas/s com colimação de 1 cm^2 (para os íons de hélio a corrente das partículas de $1\mu\text{A}$ corresponde à corrente elétrica de $2\mu\text{A}$). O fluxo dos nêutrons é aceito como igual a 10^{14} nêutron/s cm^2 .

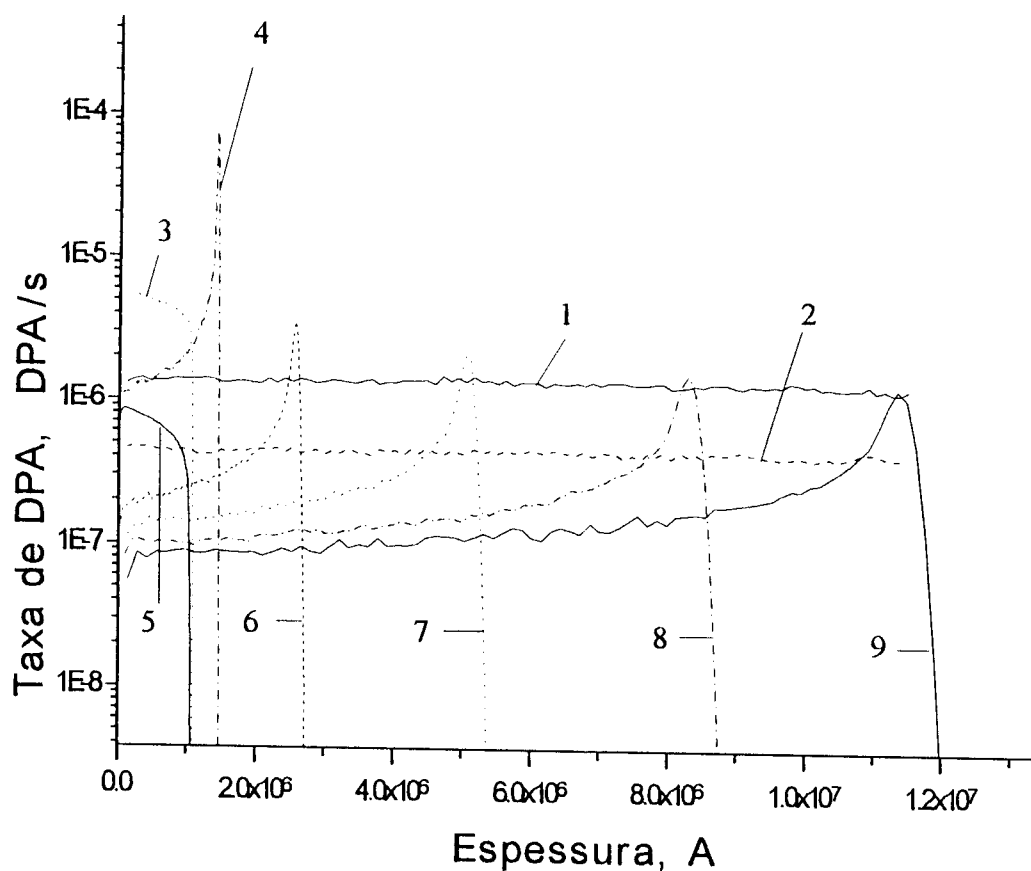


Figura 22. Taxas de DPA. Tipos de irradiação: 1) nêutrons de 14 MeV; 2) nêutrons de fissão; 3) íons de hélio distribuídos de acordo com a equação (38) onde a energia máxima no feixe é 23,75 MeV; 4) íons de hélio de 28 MeV; 5) prótons distribuídos de acordo com a equação (38) onde a energia máxima no feixe é 5,75 MeV; 6) prótons de 10 MeV; 7) prótons de 15 MeV; 8) prótons de 20 MeV; 9) prótons de 24 MeV¹;

¹ Doravante, os dados apresentados de irradiação com íons de hélio ou com prótons, no modo de implantação homogênea, correspondem às condições de irradiação aqui indicadas.

Na figura 23, são mostradas as relações entre as velocidades de acúmulo do hélio e a produção das lacunas nos aços AISI 304 e 348L* sob a implantação homogênea do hélio, sob a irradiação com nêutrons de 14 MeV e sob a irradiação com nêutrons de fissão. É suposto o estágio inicial da irradiação com os nêutrons.

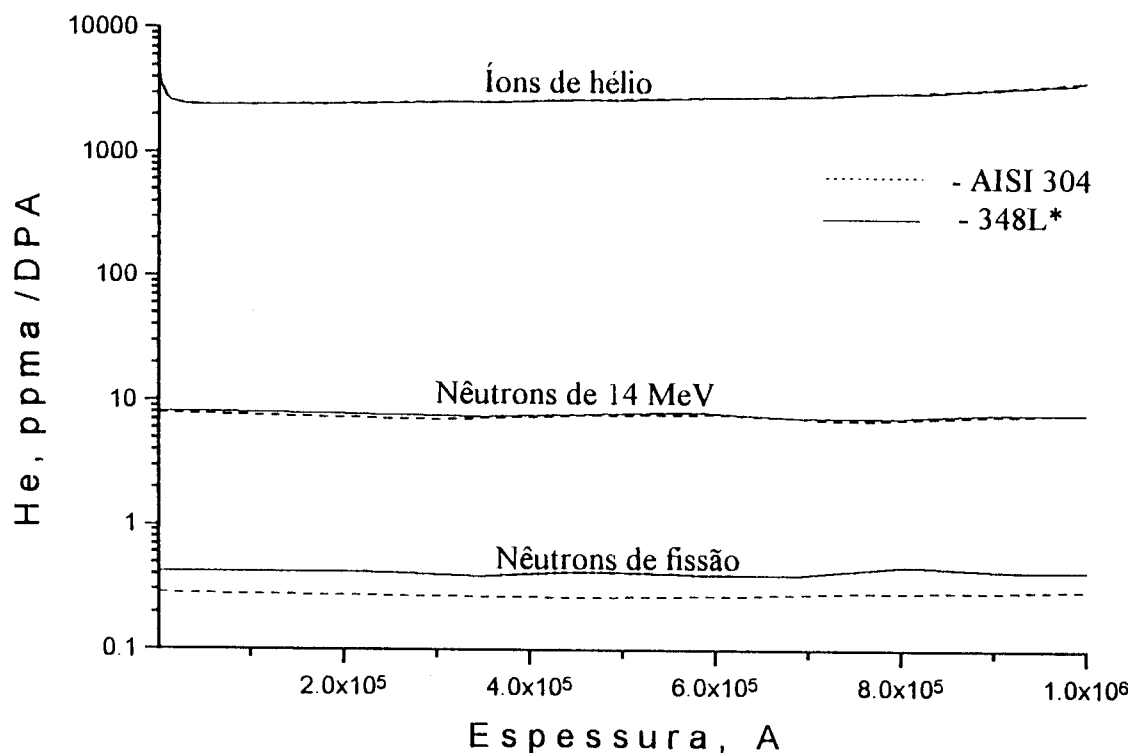


Figura 23. Relações entre as velocidades de acúmulo do hélio e produção dos deslocamentos sob a irradiação com íons de hélio distribuídos pela energia de acordo com o espectro da equação (38), sob a irradiação com os nêutrons de 14 MeV e sob a irradiação com nêutrons de fissão.

Na figura 24, são mostradas as relações entre as velocidades de acúmulo do hidrogênio e a produção das lacunas nos aços AISI 304 e 348L* sob a implantação homogênea do hélio, sob a irradiação com nêutrons de 14 MeV e sob a irradiação com nêutrons de fissão. É suposto o estágio inicial da irradiação com os nêutrons.

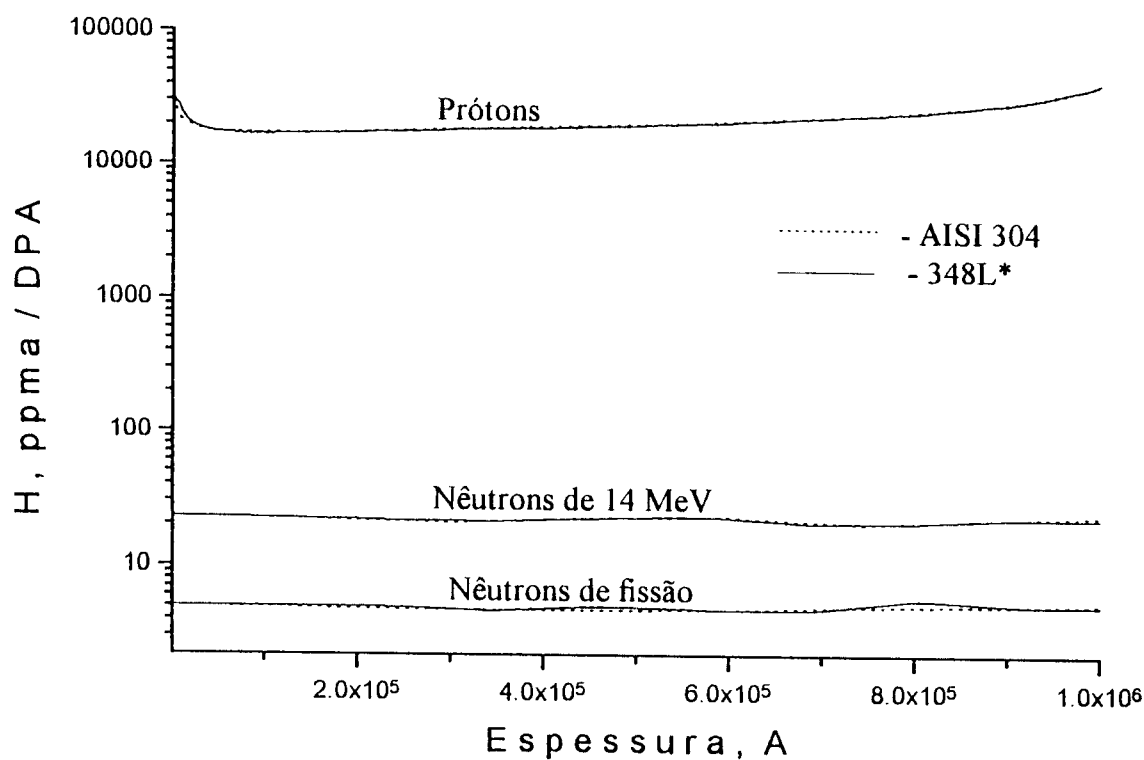


Figura 24. Relação das velocidades de acúmulo do hidrogênio e produção dos deslocamentos sob a irradiação com íons de hélio distribuídos pela energia de acordo com o espectro da equação (38), sob a irradiação com nêutrons de 14 MeV e sob a irradiação com nêutrons de fissão.

Na figura 25, são dadas as concentrações do hélio formado versus o fluxo integrado dos nêutrons nos aços AISI 304 e 348L* durante a irradiação com os nêutrons de 14 MeV, com os nêutrons de fissão e com os nêutrons térmicos.

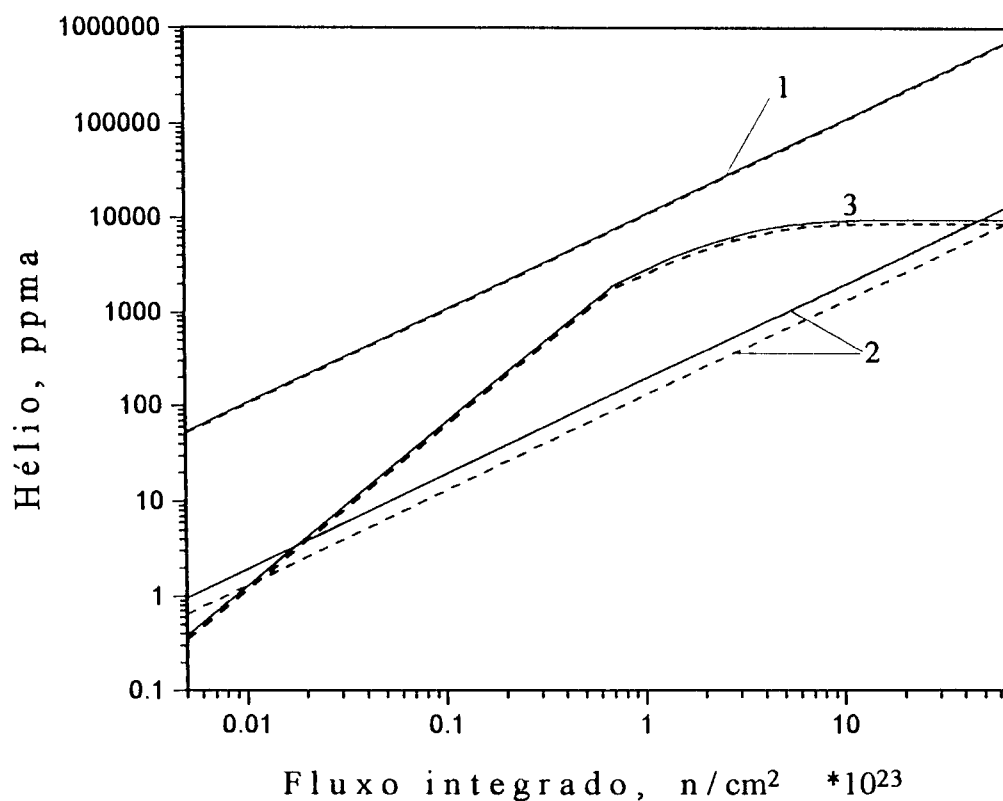


Figura 25. Concentrações do hélio versus o fluxo integrado dos nêutrons. Tipos da irradiação: 1) nêutrons de 14 MeV; 2) nêutrons de fissão; 3) nêutrons térmicos, com a distribuição energética de Maxwell (temperatura assumida igual a 500 K). As curvas tracejadas pertencem ao aço AISI 304.

Na figura 26, são dadas as concentrações do hidrogênio acumulado versus o fluxo integrado dos nêutrons nos aços AISI 304 e 348L* durante a irradiação com os nêutrons de 14 MeV, com os nêutrons de fissão e com os nêutrons térmicos.

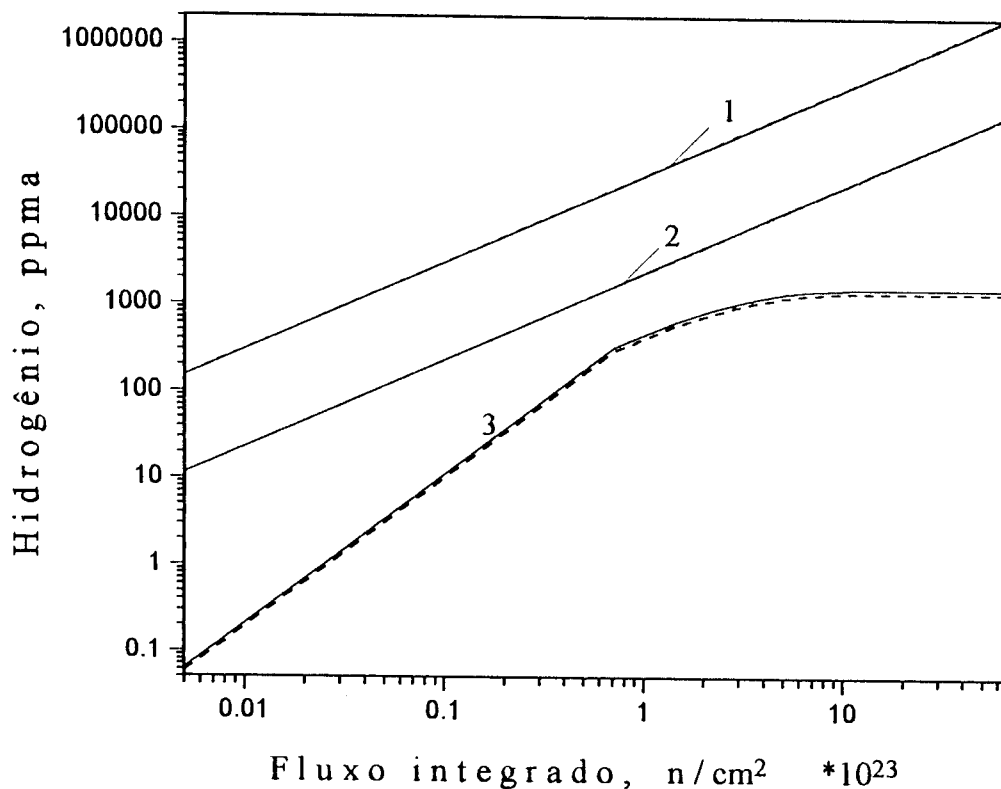


Figura 26. Concentrações do hidrogênio versus o fluxo integrado dos nêutrons da irradiação. Tipos da irradiação: 1) nêutrons de 14 MeV; 2) nêutrons de fissão; 3) nêutrons térmicos, com a distribuição energética de Maxwell (temperatura assumida igual a 500 K). As curvas tracejadas pertencem ao aço AISI 304. Nos casos 1 e 2 as curvas tracejadas coincidem com as curvas sólidas.

Na figura 27, são mostrados os espectros energéticos dos *PKAs* no aço 348L* durante a irradiação com nêutrons, íons de hélio e prótons.

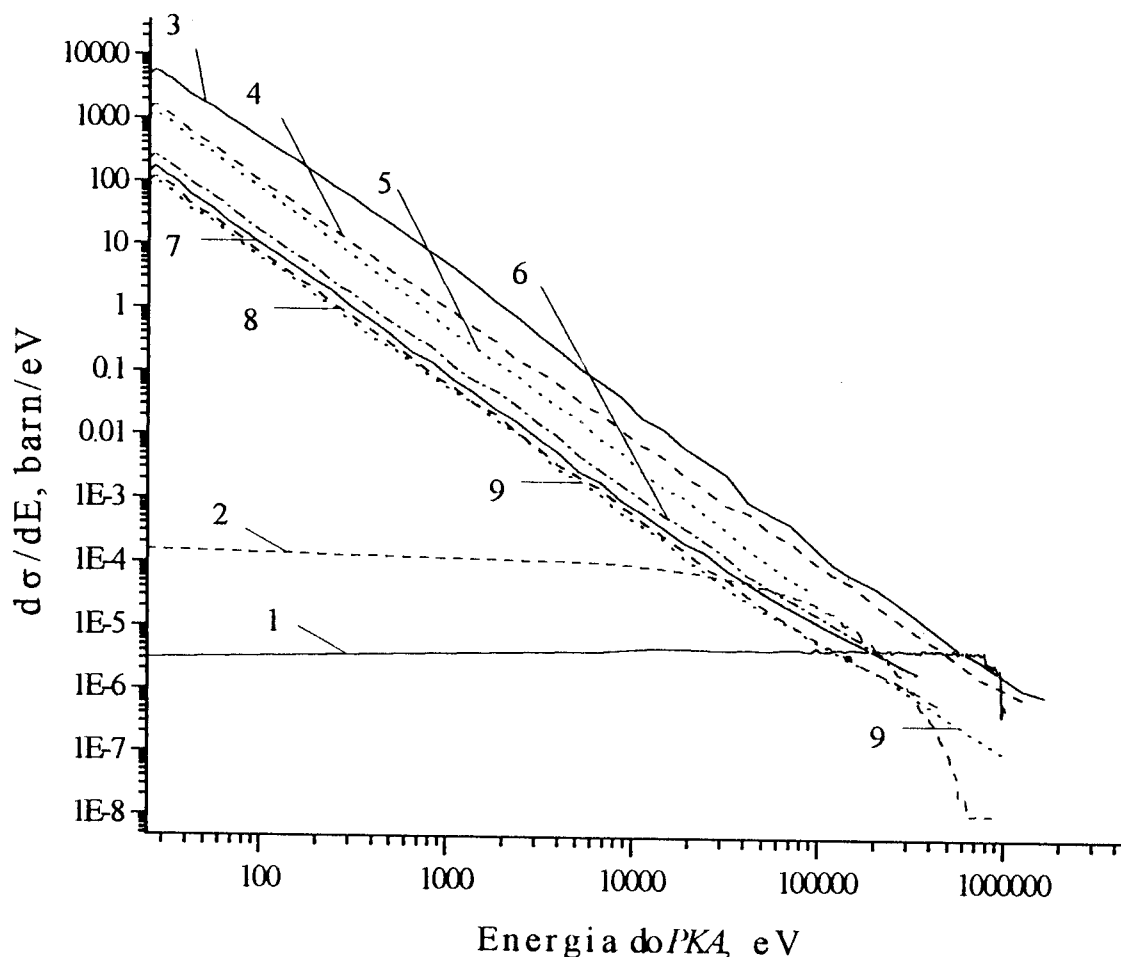


Figura 27. Os espectros energéticos dos *PKAs* no aço 348L* determinados como $\sigma \cdot \frac{n(E)}{n_t}$, onde n_t é o número total dos *PKAs* por partícula irradiada,

$n(E)$ é o número dos *PKAs* por partícula irradiada por unidade da energia cujas energias são de E até $E+dE$ e σ é a sessão de choque de produção do *PKA*. Tipos da irradiação: 1) nêutrons de 14 MeV; 2) nêutrons de fissão; 3) íons de hélio distribuídos de acordo com a equação (38); 4) íons de hélio de 28 MeV; 5) prótons distribuídos de acordo com a equação (38); 6) prótons de 10 MeV; 7) prótons de 15 MeV; 8) prótons de 20 MeV; 9) prótons de 24 MeV. Os espectros 3-9 são dados na profundidade de 50 μm do alvo irradiado.

Na figura 28, são mostradas as densidades de probabilidade de produção do defeito por *PKA* no aço 348L* durante a irradiação com nêutrons, íons de hélio e prótons.

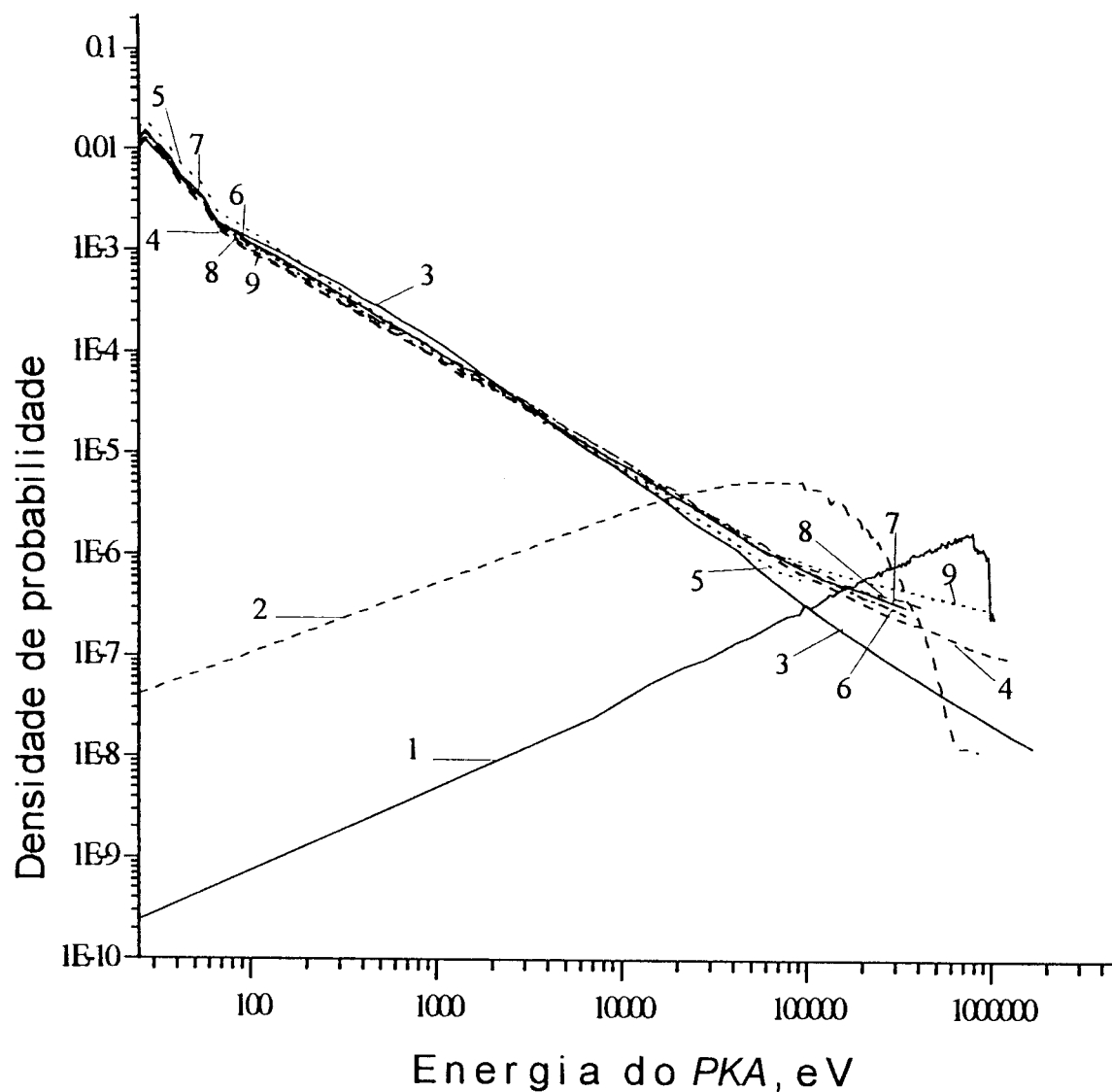


Figura 28. As densidades de probabilidade de produção do defeito por *PKA* no aço 348L* determinadas pela equação (11). Tipos da irradiação: 1) nêutrons de 14 MeV; 2) nêutrons de fissão; 3) íons de hélio distribuídos de acordo com a equação (38); 4) íons de hélio de 28 MeV; 5) prótons distribuídos de acordo com a equação (38); 6) prótons de 10 MeV; 7) prótons de 15 MeV; 8) prótons de 20 MeV; 9) prótons de 24 MeV. Os espectros 3-9 são dados na profundidade de 50 μm do alvo irradiado.

4.3 Análise e discussão dos resultados

Da análise do primeiro grupo de dados apresentados, pode-se concluir que, usando o jogo giratório dos filtros, pode ser esperada boa homogeneidade dos íons implantados. É evidente (vide figuras 16 e 18) que o procedimento de ajuste das larguras dos filtros tem influência substancial na distribuição final dos átomos de hélio. Na realização da implantação homogênea, o procedimento de ajuste pode ser extremamente necessário, pois a preparação dos filtros finos é um problema tecnológico complicado.

A expansão da distribuição energética depois do filtro, devido à expansão inicial e ao efeito de não linearidade do poder de frenagem, vai levar à diminuição essencial do número dos filtros dados na tabela 3, empregados durante a implantação homogênea com o feixe monoenergético.

Os espectros energéticos dos íons de hélio, que produzem a implantação homogênea do hélio nos aços AISI 304 e 348L*, são idênticos ao espectro da figura 13 para o níquel.

Analisando-se as figuras 20 e 21, observa-se que a implantação homogênea do hélio e do hidrogênio produz os defeitos puntiformes distribuídos quase homogeneamente pela espessura da amostra. Para as temperaturas elevadas da irradiação, a difusão dos defeitos vai favorecer a homogeneidade da acumulação deles.

Como se vê nas figuras 20 e 21, a diferença no conteúdo dos elementos de composição vai causar as diferenças na produção dos deslocamentos dos átomos correspondentes.

O segundo grupo dos resultados apresenta, de maneira comparativa, as características básicas de dano da radiação nos aços AISI 304 e 348L* sob diferentes tipos da irradiação.

As taxas de DPA apresentadas na figura 22 permitem avaliar as diferentes condições da irradiação do ponto de vista da distribuição dos deslocamentos em função da espessura da amostra. Como se vê, as energias máximas dos íons disponíveis no Ciclotron do IPEN (a saber: 24 MeV para os prótons e 28 MeV para os íons de hélio) vão permitir irradiar as

amostras com as espessuras máximas de 1130 μm , no caso da irradiação com prótons, e de 130 μm , no caso da irradiação com os íons de hélio.

As taxas de DPA produzidas pelos íons de hélio são maiores em aproximadamente uma ordem de grandeza em comparação com as taxas de DPA produzidas pelos prótons. Infelizmente, o aumento do fluxo dos íons incidentes é limitado pelas taxas realizáveis de remoção de calor da amostra durante a irradiação. Isto resulta que a taxa máxima de dano é de cerca de 10^{-5} DPA/s⁸², apenas 1 a 1,5 ordens de grandeza maior em comparação com as taxas produzidas pelos nêutrons.

Da análise das relações He/DPA e H/DPA (vide as figuras 23 e 24) pode-se concluir que, durante a implantação homogênea, estas grandezas superam significativamente as grandezas correspondentes da irradiação com nêutrons. Todavia, nos experimentos da simulação, é muito fácil ajustar estas relações. Por exemplo, pode-se permitir a certa fração dos íons implantados passar sem degradação da energia e, assim, ajustando esta fração, mudar as relações He/DPA e H/DPA.

Para os valores típicos do fluxo do feixe dos íons no ciclotron, a concentração uniforme do hélio ou do hidrogênio de 100 ppma (partes por milhão atômicos) pode ser facilmente atingida em uma hora na amostra com espessura de 100 μm .

É interessante notar o efeito de composição na produção do hélio durante a irradiação com os nêutrons (vide figuras 23 e 25). No espectro de fissão, a razão He/DPA e a concentração de hélio formado são menores em aproximadamente duas vezes para o aço AISI 304 em comparação com o aço 348L*. A análise das seções de choque das reações (n, α) para os elementos de composição desses aços mostrou que estas diferenças essenciais são causadas pelo ¹⁰B, cuja presença foi simulada no aço 348L* e não foi simulada no aço 304. Pode-se ver que até pequenas quantidades de boro ($\sim 4 \cdot 10^{-4}$ % em peso) produzem quantidade substancial de hélio. Contudo, devido às concentrações pequenas do ¹⁰B nos aços, esta impureza é queimada antes do material chegar ao limite da vida útil. Para os fluxos integrados altos, a reação de duas etapas ⁵⁸Ni(n, γ) ⁵⁹Ni(n, α) ⁵⁶Fe pode tornar-se a fonte principal do hélio, como é mostrado na figura 25. Quanto maior a componente térmica do fluxo, maior a contribuição deste fator. Entretanto, sob irradiação com nêutrons

rápidos, esta fonte do hélio pode ser ignorada, pois a conversão do ^{58}Ni em ^{59}Ni nestas energias é desprezível.

A produção do hidrogênio é maior em aproximadamente 10-15 vezes, sob irradiação com nêutrons de fissão e, em 3 vezes, sob irradiação com nêutrons de 14 MeV em comparação com a produção do hélio (vide figura 26). As razões de H/DPA são maiores também na mesma proporção em comparação com as razões de He/DPA (vide figura 24). Como se vê na figura 26, a reação de duas etapas $^{58}\text{Ni}(n,\gamma) ^{59}\text{Ni}(n,p) ^{59}\text{Co}$ para os fluxos integrados dos nêutrons térmicos altos tem a mesma influência na produção do hidrogênio, como no caso da produção do hélio. Mas esta influência é expressada menos fortemente e, também, pode ser desprezada sob irradiação com nêutrons rápidos.

Os espectros energéticos dos *PKAs* produzidos (vide figura 27) mostram diferença essencial entre a irradiação com nêutrons e a irradiação com íons leves. Isto é causado pelos diferentes mecanismos de transferência da energia para os átomos de recuo. Os íons leves interagem com os átomos do alvo basicamente via interações coulombianas, que favorecem fortemente a transferência energética pequena ($\frac{d\sigma(E,T)}{dT} \approx \frac{1}{E \cdot T^2}$ onde E é a energia do íon incidente e T é a energia do átomo de recuo). Em contrário, os nêutrons interagem via forças nucleares que resultam na produção dos átomos de recuo de alta energia.

O grau de similaridade entre a irradiação com os nêutrons e com os íons leves é bastante pequeno (vide figura 28). De acordo com o critério dado pela equação (6), para os tipos considerados da irradiação com íons, o valor do Z é de 0,2 a 0,6 para nêutrons de fissão, e de 0,1 a 0,4 para nêutrons de 14 MeV. Os valores máximos do Z correspondem à irradiação com os prótons de 24 MeV.

5 CONCLUSÕES

A revisão dos aspectos ligados à simulação de danos da radiação, produzidos em um ambiente determinado, por meio das instalações de irradiação disponíveis, mostrou que há vários parâmetros de dano que, juntos, determinam os efeitos da radiação no material. A simulação ideal seria o fornecimento de todos estes parâmetros iguais aos parâmetros de dano do ambiente da irradiação simulada.

Os resultados dos cálculos apresentados neste trabalho e os dados da literatura indicam que a simulação ideal é impossível, ou seja, é impossível reproduzir todos os efeitos da radiação e, conseqüentemente, caracterizar completamente o comportamento do material no ambiente da irradiação determinado¹. Na prática, durante os testes de simulação, é possível fornecer apenas alguns parâmetros de dano, simultaneamente iguais aos parâmetros correspondentes da irradiação no reator.

O caminho produtivo para simular os danos da radiação com auxílio das instalações disponíveis seria: a simulação da influência dos parâmetros específicos nos processos específicos da radiação e nas propriedades do material; o destaque dos parâmetros que são mais importantes na simulação dos aspectos dados dos efeitos da radiação; através do estudo dos processos da radiação individuais, a compreensão de como eles combinam para produzir danos macroscópicos no material.

O fator principal e mais atraente, nos experimentos de simulação da irradiação com nêutrons por meio da irradiação com íons leves (prótons e alfas), é a possibilidade simultânea da simulação da acumulação do hélio com a produção dos defeitos nas amostras de espessuras relativamente grandes. Isto vai permitir analisar o comportamento volumétrico dos materiais estudados². A possibilidade de variar e bem controlar os parâmetros experimentais (ambiente da irradiação), e a possibilidade de ajustar facilmente a razão He/dpa sobre a extensão completa (0 - 50 ppma/dpa) das simulações dos reatores são grandes méritos do uso dos íons leves, embora os espectros energéticos dos *PKAs* sejam

¹ A única possibilidade de simulação ideal seria a irradiação do material no mesmo ambiente onde ele será empregado, o que na maioria dos casos é impossível.

² Do ponto de vista teórico, é necessário ter certo número de grãos na espessura do material examinado.

diferentes. Outra vantagem é que os níveis da radioatividade induzida são moderados, o que facilita o exame de pós-irradiação.

Em contrapartida a estes benefícios, há o problema do crescimento da dissipação do calor e a diminuição da seção de choque de dano com o crescimento da energia das partículas incidentes, o que limita as taxas de produção de danos. Contudo, os últimos estudos⁷⁹ da componente não-elástica do espectro dos *PKAs*, que são produzidos como resultado das reações nucleares, mostraram que a influência desta componente, tanto na dureza do espectro dos *PKAs* como no número total dos deslocamentos é essencial, de tal maneira que a irradiação com os íons leves simula a irradiação com os nêutrons significativamente melhor do que se pensava antes.

Os procedimentos computacionais desenvolvidos permitem achar os mais adequados parâmetros da irradiação de simulação, conforme os objetivos colocados nos experimentos e, também, auxiliam a análise destes experimentos à luz dos parâmetros de dano calculados.

Acreditamos que o desenvolvimento da metodologia de simulação dos processos individuais da radiação em instalações experimentais como o Ciclotron do IPEN e o reator IEA-R1, é uma etapa importante na criação da tecnologia de testes de materiais estruturais de uso nuclear no IPEN e, conseqüentemente, no país. Como continuidade, baseando-se nos princípios de simulação formulados e nos procedimentos computacionais desenvolvidos neste trabalho, pretende-se estabelecer procedimentos experimentais de simulação do processo de fragilização dos aços feríticos que são usados como material do vaso de pressão nos reatores do tipo PWR (*Pressurized Water Reactor*).

APÊNDICE

PROGRAMA NOBL

1 DESCRIÇÃO DAS CONSTANTES, DOS TIPOS E DAS VARIÁVEIS

1.1 Unidade NEUTRLIB

Constantes:

n_elmax número máximo dos elementos que entram na composição do alvo;
n_evmax número máximo dos tipos das reações nucleares;
n_csx, n_csy número máximo das colunas e das linhas das matrizes das seções de choque, respectivamente.

Tipos:

ary, ary1 vetor real e inteiro de 1 a *n_evmax*, respectivamente.

1.2 Programa NOBL

Constantes:

Na número de Avogadro;
mn massa atômica do nêutron;
dirdat diretório onde ficam os arquivos de dados para as seções de choque.

Tipos:

massiv vetor real de 1 a *n_csx*;
massivp ponteiro para *massiv*;
mas vetor dos ponteiros para *massiv* de 1 a *n_csy*;
Csection registro;

Os campos do registro *Csection*:

Q valor de Q da reação;
energ matriz das energias;
csect matriz das seções de choque correspondente à matriz das energias;
k, l número máximo das linhas e número dos elementos na última linha, respectivamente, das matrizes *energ* e *csect*;
kcur, lcur o número atual da linha e da coluna, respectivamente, das matrizes *energ* e *csect*;
csp ponteiro para *Csection*;
Crs vetor dos ponteiros para *Csection*;

<i>Inform</i>	registro;
Os campos do registro <i>Inform</i> :	
<i>numero</i>	número do elemento;
<i>massa</i>	massa do elemento;
<i>N</i>	número dos átomos do elemento em 1 cm ³ do alvo;
<i>P</i>	soma das probabilidades para determinar o tipo de átomo com o qual acontece a colisão;
<i>ev</i>	vetor dos números das reações nucleares consideradas para o elemento;
<i>n_ev</i>	número das reações nucleares em consideração;
<i>Pev</i>	soma das probabilidades para determinar o tipo da reação nuclear;
<i>Cs</i>	vetor dos ponteiros para estrutura do tipo <i>Csection</i> ;
<i>informp</i>	ponteiro para variável do tipo <i>Inform</i> ;
<i>infop</i>	vetor dos ponteiros para <i>Inform</i> .
<i>rType</i>	conjunto numérico para onde inscrevem-se os números das reações nucleares que são consideradas.

Variáveis:

<i>inf</i>	vetor dos ponteiros para estrutura do tipo <i>infop</i> . Alocando na memória o o registro do tipo <i>Inform</i> e seus campos, através da referência às variáveis, acessam-se estes campos;
<i>dens</i>	densidade do material irradiado;
<i>E0</i>	energia inicial dos nêutrons. Quando $E0=0$, as energias dos nêutrons amostram-se de acordo com a densidade do Cranberg. Enquanto isto, o limite superior da energia é de 17 MeV;
<i>Ed</i>	energia de deslocamento;
<i>angl</i>	ângulo entre a normal à superfície do alvo e a direção incidente do nêutron. Se $angl \leq -\frac{\pi}{2}$ ou $angl \geq \frac{\pi}{2}$, a distribuição pelo ângulo sólido é assumida isotrópica;
<i>D</i>	espessura do alvo;
<i>x, y, z</i>	coordenadas do nêutron;
<i>u, v, w</i>	os co-senos de direção do nêutron;
<i>ur, vr, wr</i>	os co-senos de direção do recuo;
<i>E</i>	energia do nêutron;
<i>Er</i>	energia do recuo;
<i>aa</i>	co-seno do ângulo de espalhamento do nêutron no sistema de centro de massa;
<i>aar</i>	co-seno do ângulo de espalhamento do recuo no sistema de centro de massa;
<i>Total</i>	seção de choque total;
<i>E_llim</i>	vetor das energias limiares do nêutron para deslocar os átomos do alvo em posição intersticial;
<i>E_llim_max</i>	valor máximo dos elementos do vetor <i>E_llim</i> ;
<i>react</i>	números das reações que têm de ser lidos do arquivo de dados que contem as seções de choque;
<i>n_el</i>	número dos elementos que constituem o alvo;
<i>n_ev</i>	número das reações indicadas para consideração;
<i>nc</i>	número das colisões feitas por um nêutron;

<i>who</i>	elemento com o qual aconteceu a colisão;
<i>what</i>	tipo da reação para o elemento escolhido;
<i>np</i>	número total das histórias de nêutron;
<i>n_he</i>	número dos átomos de hélio produzidos;
<i>n_h</i>	número dos átomos de hidrogênio produzidos;
<i>n_R</i>	número dos átomos de recuo;
<i>n_pr</i>	número dos nêutrons que produziram os recuos;
<i>newpart, newcol</i>	variáveis do tipo boaleana . Se <i>newpart=true</i> , começa a nova história do nêutron. Quando acontece a colisão do nêutron com o átomo do alvo <i>newcol=true</i> ;
<i>lok</i>	matriz adicional para onde gravam-se os valores atuais das seções de choque para todas as reações em consideração;
<i>MRp_He, Strag_He, Skew_He, Kurt_He</i>	momentos estatísticos (valor médio da coordenada x, desvio padrão, assimetria e curtose) da distribuição espacial dos lugares de produção dos átomos de hélio;
<i>Sx_He, Sx_2_He, Sx_3_He, Sx_4_He</i>	soma das coordenadas x, dos quadrados de x, dos cubos de x e das quartas potências de x das posições de produção dos átomos de hélio;
<i>MRp_H, Strag_H, Skew_H, Kurt_H</i>	momentos estatísticos (valor médio da coordenada x, desvio padrão, assimetria e curtose) da distribuição espacial dos lugares de produção dos átomos de hidrogênio;
<i>Sx_H, Sx_2_H, Sx_3_H, Sx_4_H</i>	soma das coordenadas x, dos quadrados de x, dos cubos de x e das quartas potências de x das posições de produção dos átomos de hidrogênio;
<i>idum</i>	variável usada pelo gerador dos números aleatórios;
<i>cha</i>	variável do tipo char que gerencia a saída do programa;
<i>frec</i>	variável do tipo text , que é atribuída ao arquivo "recoils.dat".

2 EXECUÇÃO DO PROGRAMA

A função *ran2f* da unidade *neutrlib* é a geradora dos números aleatórios de L'Ecuyer⁷⁵ com o longo período ($>2 * 10^{18}$) distribuídos isotropicamente no intervalo]0, 1[.

A leitura dos dados de entrada do arquivo "neutr.dat", a alocação das estruturas na memória, o preenchimento dos campos dos registros e a abertura do arquivo "recoils.dat" são efetuados pela rotina *Loaddata*. A descrição do arquivo de entrada "neutr.dat" é dada abaixo.

A rotina *transfer* faz a análise e alocação na memória das seções de choque das reações indicadas no arquivo "neutr.dat". As seções de choque são lidas dos arquivos de dados da biblioteca ENDF/B-IV. Estes dados são inicialmente processados e gravados no formato ACE. As seções de choque são guardadas na forma de matriz, suas linhas são alocadas dinamicamente na memória e também preenchidas durante a leitura dos dados. O gerenciamento dos arquivos de dados para as seções de choque é efetuado com auxílio da unidade *dirs* que não é apresentada. Esta unidade pode ser substituída pela simples chamada da rotina *transfer* com o nome do arquivo de dados como parâmetro. No texto da rotina *transfer* são apresentados os comentários explicativos.

Depois da alocação na memória dos dados necessários, começa a história do nêutron. Na rotina *fonte* são fornecidas as características iniciais do nêutron. A última linha das matrizes das seções de choque é assumida como atual.

A posição de colisão do nêutron com o átomo do alvo é determinada na rotina *position*. Em primeiro lugar é chamada a rotina *CSTotal*. Aqui determina-se a seção de choque total para a energia dada, via aproximação linear entre dois valores vizinhos da energia (vide os comentários no texto do programa). Depois, determinam-se o caminho livre percorrido e as novas coordenadas do nêutron. Se o nêutron sai fora do material, uma nova história tem início. Considere-se que nas direções *y* e *z* o alvo é infinito.

Quando a colisão acontece dentro do material, a variável *newcol* assume valor *true* e é chamada rotina *collision*. Nesta rotina, determina-se o átomo com o qual aconteceu a colisão, baseando-se nas seções de choque totais para os átomos do alvo que foram calculadas na rotina *CSTotal*. Depois, é chamada a rotina *Csevent* onde determinam-se as seções de choque para todas as reações de modo análogo à rotina *CSTotal*. Em seguida determina-se a reação nuclear para o átomo determinado.

No caso da reação que é considerada, executa-se a rotina correspondente. Para as colisões elásticas e inelásticas estas rotinas são *elcol* e *incol*; para a produção do hélio e do hidrogênio a rotina é *gas*. Os eventos que não são considerados podem ser introduzidos facilmente via criação da rotina correspondente e de poucas mudanças no bloco do programa.

No caso das colisões elásticas e inelásticas executa-se a rotina *newdir*, onde determinam-se os novos co-senos de direção do nêutron. Os dados necessários são gravados no arquivo "recoil.dat" pela rotina *recdata*. Depois disso, o programa retorna à rotina *position*.

A história do nêutron termina pela chamada da rotina *escape* e o programa retorna à rotina *fonte*.

A saída do programa efetua-se pelo apertado da tecla "Q". É chamada a rotina *recgas*, onde gravam-se os momentos estatísticos da distribuição das posições de produção de gás junto com a outra informação estatística (número total das histórias, número total dos recuos, número dos nêutrons que produziram os recuos, número dos átomos de hélio e de hidrogênio produzidos no alvo). A rotina final é *disposeall*, que remove as estruturas alocadas na memória do computador.

Quando o valor da energia máxima da distribuição energética é grande ($> 1\text{MeV}$) a informação alocada na memória do computador pode atingir algumas centenas de **kilobytes** para cada átomo do alvo. Por isto, é necessário usar toda a memória disponível do computador assim, a compilação do programa tem de ser feita no modo protegido do Borland Pascal.

3 ARQUIVO DE ENTRADA "neutr.dat"

A seguir, apresenta-se o exemplo do arquivo de entrada para o programa NOBL "neutr.dat"

```

8.0
4
53
1 2 16 17 22 28
51 52 53 54 55 56 57 58 59 60
61 62 63 64 65 66 67 68 69 70
71 72 73 74 75 76 77 78 79 80
81 82 83 84 85 86 87 88 89 90
91
102 103 104 105 106 107

24000 52.00 0.185
25055 54.4661 0.02
26000 55.85 0.68
28000 58.71 0.115
1.4e7 25
0
1e-1
-3

```

O formato numérico dos dados deve corresponder ao formato admissível na linguagem Turbo Pascal. A disposição dos dados entre si é arbitrária contudo, a seqüência dos dados tem de ser cumprida de acordo com a lista abaixo.

A lista dos dados de entrada:

1. Densidade do material, g/cm^3 .
2. Número dos elementos que constituem o material (não deve ser maior do que o número máximo dado na unidade NEUTRLIB pela constante n_{elmax}).
3. Número das reações nucleares (não deve ser maior do que o número máximo dado na unidade NEUTRLIB pela constante n_{evmax}).
4. Tipos das reações de acordo com o formato ENDF.

A quantidade dos números seguintes e o número das reações nucleares indicado (item 3) têm de ser iguais. É obrigatório a indicação da reação 1 (seção de choque total).

5. Número (no formato ENDF), massa atômica, conteúdo relativo de massa para o primeiro elemento do material irradiado.

Número, massa atômica, conteúdo relativo de massa para o segundo elemento do material irradiado. E assim por diante até, o último elemento de composição do material. O número destes dados tem de ser igual ao número dos elementos indicado anteriormente (item 2).

6. Energia do nêutron. Se a energia é igual 0, considera-se o espectro de fissão.

7. Energia do deslocamento. Para a maioria dos átomos metálicos esta energia tem valor ≈ 25 eV.

8. O ângulo entre a normal à superfície do alvo e a direção de incidência do nêutron em graus. Se o valor deste ângulo é maior ou igual a $\pi/2$ ou, menor ou igual a $-\pi/2$, é assumida a distribuição isotrópica pelo ângulo sólido.

9. Espessura do alvo em centímetros.

10. Número inteiro negativo para iniciar a seqüência dos números aleatórios. Para mudar a seqüência é necessário indicar outro número negativo.


```

        else idum:= -idum;
idum2:= idum;
for j:= NTAB+8 downto 1 do begin
  k:= trunc(idum/IQ1);
  idum:= IA1*(idum-k*IQ1)-k*IR1;
  if (idum < 0) then idum:= idum+IM1;
  if (j <= NTAB) then iv[j]:= idum
                        end;
iy:= iv[1];
                        end;
k:= trunc(idum/IQ1);
idum:= IA1*(idum-k*IQ1)-k*IR1;
if (idum < 0) then idum:= idum+IM1;
k:= trunc(idum2/IQ2);
idum2:= IA2*(idum2-k*IQ2)-k*IR2;
if (idum2 < 0) then idum2:= idum2+IM2;
j:= 1+trunc(iy/NDIV);
iy:= iv[j]-idum2;
iv[j]:= idum;
if(iy < 1) then iy:= iy+IMM1;
lok:= AM*iy;
if RNMX <= lok then ran2f:= RNMX
                    else ran2f:= lok;
end;

```

```

BEGIN
END.

```

```

{$A+,B-,D+,E+,F-,G-,I+,L+,N-,O-,P-,Q-,R-,S+,T-,V+,X+,Y+}
{$M 16384,0,655360}
PROGRAM NOBL;
uses crt,neutrlib,dirs;
const Na = 0.602204345;
      mn = 1.008664967;
      dirdat ='Crossect';
type
  massiv = array [1..n_csx] of real;
  massivp = ^massiv;
  mas = array[1..n_csy] of massivp;
  CSections = record
    Q:real;
    energ:mas;
    csect:mas;
    k,l,
    kcur,lcur:integer;
  end;
  csp = ^CSections;
  Crs = array [1..999] of csp;

```

```

Inform = record
    numero:longint;
    massa,N:real;
    P: real;
    ev:aryi;
    n_ev:integer;
    Pev:ary;
    Cs : Crs;
end;
informp = ^inform;
infop   = array[1..n_elmax] of informp;
rType  = set of byte;

var inf           :infop;
    dens,E0,Ed,angl,D,
    x,y,z,u,v,w,
    ur,vr,wr,
    E,Er,aa,aar,Total      : real;
    E_llim                :array [1..n_elmax] of real;
    E_Llim_max            :real;
    react                 :rtype;
    n_el,n_ev,nc,who,what  :integer;
    np,n_he,n_h,n_R,n_pr  :longint;
    newpart,newcol        :boolean;
    lok                    :array[1..n_elmax,1..n_evmax] of real;
    MRp_He,Strag_He,Skew_He,Kurt_He,
    Sx_He,Sx_2_He,Sx_3_He,Sx_4_He      :real;
    MRp_h,Strag_h,Skew_h,Kurt_h,
    Sx_h,Sx_2_h,Sx_3_h,Sx_4_h          :real;
    idum                      :longint;
    cha                        :char;
    frec                       :text;

procedure transfer(f_name:string);
label 1;
var fl: text;
    s: string[82];
    sigma,es: array [0..2] of string[11];
    sE: string[1];
    evs: string[3];
    numbers,bufQs: string[11];
    code,i,j,k,l,n_elcur,n_eve: integer;
    numeri:longint;
    E_ulim,E_lim,E_lok,energy,number: real;
begin
    sE:='E';
    assign(fl,f_name);
    {Ligação o arquivo de dados com o elemento de composição}
    reset(fl);

```



```

readln(f1,s);
readln(f1,s);
numbers:=copy(s,2,10);
insert(sE,numbers,9);
val(numbers,number,code);
numberi:=round(number);
i:=1;
while (i<=n_el)and(Inf[i]^numero<>numberi) do i:=i+1;
If i>n_el then begin
    close(f1);
    exit;           {O elemento não indicado no arquivo de entrada}
end
else n_elcur:=i;
repeat           {Busca o "capítulo" com as seções de choque para os nêutrons}
    readln(f1,s);
until (s[72]='3');
if E0=0 then E_ulim:=1.7E7           {Determinação dos limites das energias consideradas}
    else E_ulim:=E0;
E_llim[n_elcur]:=0.5*Ed*sqr(mn+Inf[n_elcur]^massa)/(mn*Inf[n_elcur]^massa);
E_lim:=E_llim[n_elcur]*0.95;
Inf[n_elcur]^n_ev:=0;
repeat           {Grande loop}
    readln(f1,s);
bufQS:=copy(s,13,10);           {Leitura do valor de Q da reação}
    readln(f1,s);
    evs:=copy(s,73,3);           {Leitura do tipo da reação}
    while evs[1]=' ' do delete(evs,1,1);
    val(evs,n_eve,code);
if (n_eve<256)and(n_eve in react) then begin           {Reação é considerada ou não?}
    repeat           {Verificação, se tem alguns dados que ficam dentro das limites da}
        readln(f1,s);           {energia}
    es[0]:=copy(s,2,10);
        insert(sE,es[0],9);
        val(es[0],E_lok,code);
    until (E_lok>=E_lim)or((s[75]='0')and(s[74]=' '));
    if ((s[75]='0')and(s[74]=' '))or(E_lok>E_Ulim) then goto 1;
    new(Inf[n_elcur]^cs[n_eve]);           {Alocação das matrizes das energias e seções de choque}
    insert(sE,bufQS,9);
    val(bufQS,Inf[n_elcur]^cs[n_eve]^Q,code);           {Preenchimento do campo Q}
    if code<>0 then Inf[n_elcur]^cs[n_eve]^Q:=0;
    Inf[n_elcur]^n_ev:=Inf[n_elcur]^n_ev+1;
    Inf[n_elcur]^ev[Inf[n_elcur]^n_ev]:=n_eve;
    k:=0;
    j:=0;
    repeat
        k:=k+1;
        l:=0;
        new(Inf[n_elcur]^cs[n_eve]^energ[k]);           {Alocação das linhas de matrizes das energias e}
        new(Inf[n_elcur]^cs[n_eve]^csect[k]);           {seções de choque}
        repeat

```

```

for j:=0 to 2 do begin
  l:=l+1;
  es[j]:=copy(s,22*j+2,10);
  insert(sE,es[j],9);
  sigma[j]:=copy(s,13+22*j,10);
  if sigma[j][length(sigma[j])-1] in ['0'..'9'] then insert(sE,sigma[j],8)
    else insert(sE,sigma[j],9);
  val(es[j],Inf[n_elcur]^cs[n_eve]^energ[k]^l,code); {Preenchimento das linhas}
  val(sigma[j],Inf[n_elcur]^cs[n_eve]^csect[k]^l,code);
  end;
  readln(f1,s);
  until (E_ulim<Inf[n_elcur]^cs[n_eve]^energ[k]^l)or
    (trunc(l/n_csx)=1)or((s[75]='0')and(s[74]=' ')or(code<>0);
  until ((s[75]='0')and(s[74]=' ')or
    (E_ulim<Inf[n_elcur]^cs[n_eve]^energ[k]^l)or(code<>0);
  Inf[n_elcur]^cs[n_eve]^k:=k;
  if code <>0 then Inf[n_elcur]^cs[n_eve]^l:=l-1
    else Inf[n_elcur]^cs[n_eve]^l:=l;
  writeln(Inf[n_elcur]^numero,' ',n_eve,' ',k,' ',l);
  end;{if}
l:while n_eve<>0 do begin
  readln(f1,s);
  evs:=copy(s,73,3);
  while evs[1]=' ' do delete(evs,1,1);
  val(evs,n_eve,code);
  end;
  readln(f1,s);
  until (s[75]='0')and(s[72]='0');
end;

```

```

procedure loaddata;
var f: text;
    i,j: integer;
    ev: aryi;
    procent: real;
    mask: string;
    Dir: DirList;
begin
  assign(f,'neutr.dat');
  reset(f);
  readln(f,dens,n_el,n_ev);
  react:=[];
  for i:=1 to n_ev do begin
    read(f,ev[i]);
    react:=react+[ev[i]];
  end;
  for i:=1 to n_el do begin
    new(inf[i]);
    read(f,Inf[i]^numero,Inf[i]^massa,procent);
  end;
end;

```

```

Inf[i]^n:=procent*dens*Na/Inf[i]^massa;
      end;
read(f,E0,Ed,angl,D,idum);
angl:=angl*pi/180;
close(f);

GoDir(dirdat);
InitDirList(Dir);
Mask:='*.lib';
loaddirlist(Dir,Mask,5,Files);
dir.info:=dir.root;
for i:=1 to dir.total do begin
  transfer(dir.info^.name);
  dir.info:=dir.info^.next;
end; {for}
if E0=0 then begin          {Determinação da limite inferior da energia do nêutron}
  E_Llim_max:=0;
  for i:=1 to n_el do if E_Llim_max<E_Llim[i] then E_Llim_max:=E_Llim[i];
    END;
KillDirList(dir);

n_R:=0;
np:=0;
n_he:=0;
n_h:=0;
n_pr:=0;
Sx_He:=0;
Sx_2_He:=0;
Sx_3_He:=0;
Sx_4_He:=0;
Sx_h:=0;
Sx_2_h:=0;
Sx_3_h:=0;
Sx_4_h:=0;

assign(frec,'recoils.dat');
rewrite(frec);
writeln(frec,'          TRIM Recoil Cascade Calculation          ');
writeln(frec,'  FORMAT: Top 10 lines are comments, with line 6 describing experiment ');
writeln(frec,'  FORMAT: Line 6 will be written into file COLLISON.TXT if activated. ');
writeln(frec,'  FORMAT: Data Table has 10 numbers/line, with free format. ');
writeln(frec,'          Typical Data File          ');
writeln(frec,'          Recoils from neutrons          ');
writeln(frec,'  Incident          Recoil Data          ');
writeln(frec,'  Particle  Atomic Energy Depth Lateral-Posit.  Recoil Direction ');
writeln(frec,' Numb Energy Numb  (eV) (A)  (A)  (A) Cos(X) Cos(Y) Cos(Z) ');
writeln(frec,' ');
end;

```

```

procedure fonte;
var ksi,r,fi,xx,yy: real;
    i,j: integer;
begin
np:=np+1;
newpart:=false;
nc:=0;
newcol:=true;
if (angl<=-pi/2)or(angl>=pi/2) then begin
ksi:=ran2f(idum);
w:=2*ksi-1;
r:=sqrt(1-sqr(w));
ksi:=ran2f(idum);
fi:=0.5*pi*(2*ksi-1);
u:=r*cos(fi);
v:=r*sin(fi);
                                end
                                else begin
u:=cos(angl);
v:=-sin(angl);
w:=0;
                                end;

x:=0;
y:=0;
z:=0;

if E0=0 then
repeat
repeat
ksi:=ran2f(idum);
xx:=-ln(ksi);
ksi:=ran2f(idum);
yy:=-ln(ksi);
until (sqr(yy-xx-1)<4*xx);
E:=2*xx*1E6;
until (E<=1.7E7)and(E>E_Llim_max)
else E:=E0;
for i:=1 to n_el do for j:=1 to Inf[i]^n_ev do
Inf[i]^cs[Inf[i]^ev[j]]^kcur:=Inf[i]^cs[Inf[i]^ev[j]]^k;
end;

procedure escape;
begin
if keypressed then cha:=readkey;
newpart:=true;
nc:=0;
end;

```

```

procedure recdata;
var Es,Ers,xrs,yrs,zrs: string[15];
    xr,yr,zr: real;
begin
xr:=x*1e8; yr:=y*1e8; zr:=z*1e8;
str(E:9,Es);
delete(Es,length(Es)-2,2);
str(Er:9,Ers);
delete(Ers,length(ers)-2,2);
str(xr:9,xrs);
delete(xrs,length(xrs)-2,2);
if yr=0 then yrs:=' 0'
    else begin str(yr:9,yrs);
        delete(yrs,length(yrs)-2,2);
    end;
if zr=0 then zrs:=' 0'
    else begin str(zr:9,zrs);
        delete(zrs,length(zrs)-2,2);
    end;
append(frec);
writeln(frec,n_pr:4,' ':3,Es,' ':3,trunc(Inf[who]^numero/1e3):2,
' ':10-length(Ers),Ers,' ',xrs,' ',yrs,' ',zrs,ur:9:5,vr:9:5,wr:9:5);
end;

```

```

procedure newdir;
var b,br,delta,deltar,c,cr,D,Dr,dd,ddr,
    ksi,zero,ro,
    hu,hv,hw: real;
begin
b:=sqrt(1-sqr(aa));
br:=sqrt(1-sqr(aar));
ksi:=ran2f(idum);
delta:=pi*(2*ksi-1);
deltar:=pi+delta;
c:=cos(delta);
cr:=cos(deltar);
D:=sin(delta);
Dr:=sin(deltar);
zero:=(1-abs(u))-2e-11;
hu:=u;
hv:=v;
hw:=w;
if zero>0 then begin
ro:=sqrt(1-sqr(u));
u:=hu*aa-b*c*ro;
v:=hv*aa+(hv*hu*b*c-hw*b*d)/ro;
w:=hw*aa+(hv*b*d+hu*hw*b*c)/ro;
ur:=hu*aar-br*cr*ro;
vr:=hv*aar+(hv*hu*br*cr-hw*br*dr)/ro;

```

```

wr:=hw*aar+(hv*br*dr+hw*hu*br*cr)/ro;
    end
    else begin
u:=aa*hu;
v:=b*c;
w:=b*d;
ur:=aar*hu;
vr:=br*cr;
wr:=br*dr;
        end;
reccdata;
end;

```

```

procedure CSTotal;
var rt,lcur,kcur,i,j: integer;
begin
{Determinação da sessão de choque total}
Total:=0;
for i:=1 to n_el do begin
while (Inf[i]^cs[1]^kcur>0)and
(Inf[i]^cs[1]^energ[Inf[i]^cs[1]^kcur]^1>E) do
    Inf[i]^cs[1]^kcur:=Inf[i]^cs[1]^kcur-1; {Determinação da linha atual na matriz das}
kcur:=Inf[i]^cs[1]^kcur; {energias}
if kcur=0 then lok[i,1]:=0
    else BEGIN
if (kcur=Inf[i]^cs[1]^k) then Inf[i]^cs[1]^lcur:=Inf[i]^cs[1]^1
    else Inf[i]^cs[1]^lcur:=n_csx;
while Inf[i]^cs[1]^energ[kcur]^Inf[i]^cs[1]^lcur>=E do
    Inf[i]^cs[1]^lcur:=Inf[i]^cs[1]^lcur-1;
lcur:=Inf[i]^cs[1]^lcur; {Determinação da coluna atual.}
if lcur=0 then lcur:=1;
if lcur=n_csx then
    lok[i,1]:=Inf[i]^cs[1]^csect[kcur]^lcur+
        (E-Inf[i]^cs[1]^energ[kcur]^lcur)*
        (Inf[i]^cs[1]^csect[kcur+1]^1-Inf[i]^cs[1]^csect[kcur]^lcur)/
        (Inf[i]^cs[1]^energ[kcur+1]^1-Inf[i]^cs[1]^energ[kcur]^lcur)
    else
    lok[i,1]:=Inf[i]^cs[1]^csect[kcur]^lcur+
        (E-Inf[i]^cs[1]^energ[kcur]^lcur)*
        (Inf[i]^cs[1]^csect[kcur]^lcur+1-Inf[i]^cs[1]^csect[kcur]^lcur)/
        (Inf[i]^cs[1]^energ[kcur]^lcur+1-Inf[i]^cs[1]^energ[kcur]^lcur);
        END;
Total:=Total+lok[i,1]*Inf[i]^N;
        end; {for}
end;

```

```

procedure CSevent(el:integer);
var j,rt,kcur,lcur: integer;

```

```

begin
for j:=2 to inf[el]^n_ev do begin      {Ciclo pelas reações}
  rt:=inf[el]^ev[j];
  if (inf[el]^ev[j] in react)and(Inf[el]^cs[rt]^kcur>=1) THEN BEGIN {Reação é
                                                                    considerada ou não?}
while (Inf[el]^cs[rt]^kcur>0)and
  (Inf[el]^cs[rt]^energ[Inf[el]^cs[rt]^kcur]^1>E) do
  Inf[el]^cs[rt]^kcur:=Inf[el]^cs[rt]^kcur-1;{Determinação da linha atual na matriz}
  kcur:=Inf[el]^cs[rt]^kcur;                {das energias}
  If (kcur=0) then lok[el,j]:=0
    else BEGIN
    if kcur=Inf[el]^cs[rt]^k then Inf[el]^cs[rt]^lcur:=Inf[el]^cs[rt]^1
      else Inf[el]^cs[rt]^lcur:=n_csx;
while Inf[el]^cs[rt]^energ[kcur]^Inf[el]^cs[rt]^lcur>=E do
  Inf[el]^cs[rt]^lcur:=Inf[el]^cs[rt]^lcur-1;
  lcur:=Inf[el]^cs[rt]^lcur;                {Determinação da coluna atual.}
  if (lcur=n_csx) then
    lok[el,j]:=Inf[el]^cs[rt]^csect[kcur]^lcur+
    (E-Inf[el]^cs[rt]^energ[kcur]^lcur)*
    (Inf[el]^cs[rt]^csect[kcur+1]^1-Inf[el]^cs[rt]^csect[kcur]^lcur)/
    (Inf[el]^cs[rt]^energ[kcur+1]^1-Inf[el]^cs[rt]^energ[kcur]^lcur)
    else
    lok[el,j]:=Inf[el]^cs[rt]^csect[kcur]^lcur+
    (E-Inf[el]^cs[rt]^energ[kcur]^lcur)*
    (Inf[el]^cs[rt]^csect[kcur]^lcur+1-Inf[el]^cs[rt]^csect[kcur]^lcur)/
    (Inf[el]^cs[rt]^energ[kcur]^lcur+1-Inf[el]^cs[rt]^energ[kcur]^lcur);
    END {else kcur=0}
    END      {Reação é considerada ou não?}
  ELSE BEGIN
  lok[el,j]:=0;
  Inf[el]^cs[rt]^lcur:=0;
  END;{if}
  end;{for}
end;

```

```

procedure position;
var ksi,l: real;
    i,j,kcur,lcur,rt: integer;
begin
CSTotal;
ksi:=ran2f(idum);
l:=-1/Total*ln(ksi);
x:=x+u*l;
y:=y+v*l;
z:=z+w*l;
if u>0 then if (x-D)<0 then newcol:=true
  else newcol:=false
  else if x>0 then newcol:=true
  else newcol:=false;
end;

```

```

procedure collision;
var ksi1,ksi2,buf: real;
    j,i: integer;
begin
nc:=nc+1;
ksi1:=ran2f(idum);
ksi2:=ran2f(idum);
buf:=0;
for i:=1 to n_el do begin
    buf:=buf+lok[i,1]*Inf[i]^N/Total;
    Inf[i]^P:=buf      {Determinação das probabilidades para colisão com os elementos}
    end;
j:=0;
repeat
    j:=j+1;
    if ksi1<inf[j]^P then who:=j;          {Determinação do átomo}
until ksi1<inf[j]^P;
CSevent(who);
buf:=0;
for i:=2 to inf[who]^n_ev do begin
    buf:=buf+lok[who,i]/lok[who,1];
    Inf[who]^Pev[i]:=buf;      {Determinação das probabilidades para os eventos}
    end;
j:=1;
repeat
    j:=j+1;
    if ksi2<inf[who]^Pev[j] then what:=j;  {Determinação do evento}
until (ksi2<inf[who]^Pev[j])or(j=inf[who]^n_ev);
if ksi2>inf[who]^Pev[j] then escape;
end;

procedure elcol;
var ksi,mu,
    A,E_lok:real;
begin
if keypressed then cha:=readkey;
if (cha='Q')or(cha='q') then escape;
ksi:=ran2f(idum);
mu:=2*ksi-1;
A:=Inf[who]^massa/mn;
E_lok:=E*2*A*(1-mu)/sqr(A+1);
E:=E-E_lok;
Er:=E_lok;
aa:=(1+A*mu)/sqrt(1+sqr(A)+2*A*mu);
aar:=sqrt((1-mu)/2);
if E-E_llim[who]<0 then begin
    newpart:=true;
    newcol:=false
    end

```



```

        else newcol:=true;
n_r:=n_r+1;
if nc=1 then n_pr:=n_pr+1;
end;

procedure incol;
var ksi,mu,
    A,B,h,ee,
    test,E_lok:real;
begin
if keypressed then cha:=readkey;
if (cha='Q')or(cha='q') then escape;
ksi:=ran2f(idum);
ee:=Inf[who]^cs[inf[who]^ev[what]]^Q;
mu:=2*ksi-1;
A:=Inf[who]^massa/mn;
B:=(1+A)/A;
aa:=(1+A*mu*sqrt(1-B*ee/E))/sqrt(1+sqr(A)*(1-B*ee/E)+2*A*mu*sqrt(1-B*ee/E));
aar:=(1-mu*sqrt(1-B*ee/E))/sqrt(2-B*ee/E-2*mu*sqrt(1-B*ee/E));
E_lok:=2*E*A/sqr(1+A)*(1-mu*sqrt(1-B*ee/E));
E:=E-ee/B-E_lok;
Er:=-ee/(1+A)+E_lok;
if E-E_llim[Who]<0 then begin
    newpart:=true;
    newcol:=false
    end
    else newcol:=true;
n_r:=n_r+1;
if nc=1 then n_pr:=n_pr+1;
end;

```

```

procedure gas(var Sx,Sx_2,Sx_3,Sx_4,MRp,Strag,Skew,Kurt:real;var n:longint);
var i: integer;
    Vari,MRp_2,MRp_3,MRp_4: real;
begin
n:=n+1;
Sx:=Sx+x;
Sx_2:=Sx_2+sqr(x);
Sx_3:=Sx_3+sqr(x)*x;
Sx_4:=Sx_4+sqr(sqr(x));
MRp:=Sx/n;
MRp_2:=sqr(MRp);
MRp_3:=MRp_2*MRp;
MRp_4:=MRp_3*MRp;
Vari:=Sx_2/n-MRp_2;
Strag:=sqr(Vari);
if vari<>0 then begin
Skew:=Sx_3-3*MRp*Sx_2+3*MRp_2*Sx-n*MRp_3;

```

```

BEGIN
loaddata;
writeln('Loaded.');
```

```

repeat
  fonte;
  repeat
    position;
    if newcol then begin
      collision;
      if not newpart then begin
        case Inf[who]^ev[what] of
          2 :elcol;
          51..91 :incol;
          106,107: gas(Sx_He,Sx_2_He,Sx_3_He,Sx_4_He,MRp_He,Strag_He,
                    Skew_He,Kurt_He,n_He);
          103..105 :gas(Sx_h,Sx_2_h,Sx_3_h,Sx_4_h,MRp_h,Strag_h,Skew_h,Kurt_h,n_h);
        else escape;
      end;
      case Inf[who]^ev[what] of
        2,51..91 :newdir;
      end;
      if Inf[who]^ev[what] in [2,51..91,106,107] then begin
        if ((n_R)mod(100)=0) then writeln (n_R,' recoils recorded.');
```

```

        if ((n_R)mod(10000)=0) then begin
          Writeln(n_R,' recoils recorded.');
```

```

          Writeln(n_he,' helium atoms have been produced.');
```

```

          Writeln(n_h,' hidrogen atoms have been produced.');
```

```

          Writeln('Continue? Y/N');
```

```

          cha:=readkey;
```

```

          if (cha='N') or (cha='n') then cha:='Q';
```

```

          end;
```

```

          if ((n_he)mod(100)=0)and(n_he>0) then writeln (n_he,' atoms of helium have been
                                                                 produced.');
```

```

          end;
```

```

          end;{not newpart}
        end {newcol}
      else escape;
    until newpart;
  until (cha='Q')or(cha='q');
```

```

close(frec);
recgas;
disposeall;
writeln('End of the program.');
```

```

writeln('Total number of the particles = ',np);
END.
```

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.

- 1 - TAVASSOLI, A.A.; TOUBOUL, F. Austenitic stainless steel, status of the properties database and design rule development. *J. Nucl. Mater.*, v.233-237, p. 51-61, 1996.
- 2 - VELIKHOV, E.P. World power energetics. Fusion reactors. ITER project. *J. Nucl. Mater.*, v.233-237, p. 1-3, 1996.
- 3 - DAVIS, J.W.; SMITH, P.D. ITER material properties handbook. *J. Nucl. Mater.*, v. 233-237, p. 1593-1596, 1996.
- 4 - LANGLEY, R.A.; BOTERO, J. Material properties data base for plasma facing components for fusion reactors. *J. Nucl. Mater.*, v. 233-237, p. 1597-1600, 1996.
- 5 - TAVASSOLI, A.A. Assessment of austenitic stainless steel. *Fusion Engineering and Design*, v. 29, p. 371-390, 1995.
- 6 - KALININ, G.; GAUSTER, W.; MATERA, R.; TAVASSOLI, A-A.F.; ROWCLIFFE, A.; FABRITSEV, S.; KAWAMURA, H. Structural materials for ITER in-vessel component design. *J. Nucl. Mater.*, v. 233-237, p. 9-16, 1996.
- 7 - TAVASSOLI, A.A. Materials and operating conditions of fast breeder reactor internal structures. In:
SPECIALISTS MEETING ON INFLUENCE OF LOW DOSE IRRADIATION
ON DESIGN CRITERIA OF FIXED INTERNALS IN FAST REACTORS,
December 1-3, 1993, Gif-sur-Yvette, France. (IAEA-TECDOC-817).

- 8 - PICKER, C.; TAVASSOLI, A.A.; WAREING, J. Data collection on the effect of irradiation on the mechanical properties of austenitic stainless steels and weld metals. Idem ref. N^o 7.
- 9 - CHUNG, H.M.; RUTHER, W.E.; SANECKI, J.E.; HINS, A.; ZALUZEC, N.J.; KASSNER, T.F. Irradiation-assisted stress corrosion cracking of austenitic stainless steels: recent progress and new approaches. *J. Nucl. Mater.*, v. 239, p. 61-79, 1996.
- 10 - SCOTT, P. A review of irradiation assisted stress corrosion cracking. *J. Nucl. Mater.*, v. 211, p. 101-122, 1994.
- 11 - TRINKAUS, H.; ULLMAIER, H. High temperature embrittlement of metals due to helium: is the lifetime dominated by cavity growth or crack growth? *J. Nucl. Mater.*, v. 212-215, p. 303-309, 1994.
- 12 - ISINO, S. Implications of fundamental radiation damage studies in the research and development of materials for a fusion reactor. *J. Nucl. Mater.*, v. 239, p. 24-33, 1996.
- 13 - GARNER, F.A.; HEINISCH, H.L.; SIMONS, R.L.; MANN, F.M. Implications of neutron spectrum and flux differences on fission-fusion correlations at high neutron fluence. *Radiation Effects and Defects in Solids*, v. 113, p. 229-255, 1990.
- 14 - WOO, C.H.; SINGH, B.N.; SEMENOV, A.A. Recent advances in the understanding of damage production and its consequences on void swelling, irradiation creep and growth. *J. Nucl. Mater.*, v. 239, p. 7-23, 1996.
- 15 - CAMPOS, C.R. *Especificação técnica para barra em aço inoxidável austenítico tipo 348L**. Relatório da Divisão de Engenharia do Núcleo, IPEN, São Paulo, Nov. 1993. (R11.01-2130-ER-01/1).

- 16 - AGRANOVICH, V.M.; KIRSANOV, V.V. Production of radiation defects by collision cascades in metals. In: JONSON, R.A.; ORLOV, A.N. (Eds.) *Physics of radiation effects in crystals*. Amsterdam: Elsevier Science Publishers B.V., 1986. Capítulo 2.
- 17 - KIRSANOV, V.V.; ORLOV, A.M.; PARSHIN, A.L. Fizicheskie aspekty radiatsionnoi povrezhdaemosti metallov i splavov. (Aspectos físicos de danificação por radiação nos metais e ligas). In: GORYNIN, I.B.; PARSHIN, A.M. (Eds.) *Struktura i radiatsionnaja povrezhdaemost' konstruktsionnykh materialov. (Estrutura e danificação por radiação dos materiais de construção)*. Moscou, M.:Metalurgija, 1996. Capítulo 1.
- 18 - TOMPSON, M.W. *Defects and radiation damage in metals*. London: Cambridge University Press, 1969.
- 19 - LEHMANN, Chr. *Interaction of radiation with solids and elementary defect production*. Amsterdam: North-Holland Publishing Company, 1977.
- 20 - KUMAKHOV, M.A.; SHIRMER, G. *Atomic collision in crystals*. Amsterdam: Gordon and Breach Science Publishers, 1989.
- 21 - KIRSANOV, V.V.; SUVOROV, A.L.; TRUSHIN, Yu.V. *Protsessy radiatsionnogo defektoobrazovaniya v metallakh. (Processos de formação dos defeitos por radiação nos metais)*. Moscou, M.: Energoizdat, 1985.
- 22 - ZELENSKIY, V.F.; NEKLIUDOV, I.M.; CHERNIAEVA, T.P. *Radiatsionnye defecty i raspukhanie metallov. (Defeitos da radiação e inchamento dos metais)*. Kiev: Naykova Dymka, 1988.
- 23 - RAUCH, R.; PEISL, J.; SCHMALZBAUER, A.; WALLNER, G. Correlation of interstitials within defect cascades in Al(Zn) and Cu observed by diffuse x-ray scattering. *J. Nucl. Mater.*, v. 168, p. 101-108, 1989.

- 24 - DIAS de la RUBIA, T.; GUINAN, M.W. Progress in the development of a molecular dynamics code for high-energy cascade studies. *J. Nucl. Mater.*, v. 174, p. 151-157, 1990.
- 25 - ENGLISH, C.A.; PHYTHIAN, W.J.; FOREMAN, A.J.E. Considerations of recoil effects in microstructural evolution. *J. Nucl. Mater.*, v. 174, p. 135-140, 1990.
- 26 - GRASSE, D.; GUERARD, B.; PEISL, J. Fast neutron-irradiation of molybdenum studied by diffuse x-ray scattering. *J. Nucl. Mater.*, v. 120, p. 304-308, 1984.
- 27 - TRINKAUS, H.; SINGH, B.N.; WOO, C.H. Defect accumulation under cascade damage conditions. *J. Nucl. Mater.*, v. 212-215, p. 18-28, 1994.
- 28 - ZINKLE, S.J.; SIGN, B.N. Analysis of displacement damage and defect production under cascade damage conditions. *J. Nucl. Mater.*, v. 199, p. 173-191, 1993.
- 29 - YOUNG, F.W.Jr. Interstitial mobility and interactions. *J. Nucl. Mater.*, v. 69/70, p. 310-330, 1978.
- 30 - SHILLING, W.; BURGER, G.; ISEBECK, K.; WENZL, H. Annealing stages in the electrical resistivity of irradiated fcc metals. In: SEEGER, A.; SCHUMACHER, D.; SCHILLING, W.; DIEHL, J. (Eds) *Vacancies and interstitials in metals*. Amsterdam: North-Holland Publishing Company, 1977. Parte 3.
- 31 - IWATA, T.; IWASE, A. Radiation annealing in Ni and Cu by heavy ion irradiation. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, v. B61, p. 436-440, 1991.
- 32 - MATSUI, H.; TAKENANA, S.; GUINAN, M.W. Resistivity recovery in high purity iron after fission- and fussion- neutron irradiation. *J. Nucl. Mater.*, v. 155-157, p. 1284-1289, 1988.

- 33 - SCHILLING, W.; EHRHART, P.; SONNENBERG, K. Interpretation of defect reactions in irradiated metals by the one interstitial model. In: FUNDAMENTAL ASPECTS OF RADIATION DAMAGE IN METALS, Outubro 6-10, 1975, Gatlinburg.
- 34 - SEEGER, A. The interpretation of radiation damage in metals. Idem ref. N^o 33.
- 35 - KIENLE, W.; FRANK, W.; SEEGER, A. T. The interpretation of X-ray-scattering and electron-microscopy observations on electron-irradiated copper. *Radiation Effects*, v. 71, p. 163-178, 1983.
- 36 - SCHÜLE, W. On the recovery stages in fcc materials. *J. Nucl. Mater.*, v. 233-237, p. 969-973, 1996.
- 37 - ISHINO, S. Time and temperature dependence of cascade induced defect production in in situ experiments and computer simulation. *J. Nucl. Mater.*, v. 206, p. 139-155, 1993.
- 38 - ODETTE, G.R. Modeling of microstructural evolution under irradiation. *J. Nucl. Mater.*, v. 85/86, p. 533-545, 1979.
- 39 - BULLOUGH, R.; WOOD, M.H. *Theory of microstructural evolution*. Idem ref. N^o 16. Capítulo 3.
- 40 - MAZIASZ, P.J. Overview of microstructural evolution in neutron-irradiated austenitic stainless steel. *J. Nucl. Mater.* v. 205, p. 118-145, 1993.
- 41 - PERROTTA, J.A. *Curso de introdução à energia nuclear. Capítulo 2 - Engenharia do núcleo de reatores*. São Paulo: 1987. (RT-N/RT - IPEN/CNEN-SP)
- 42 - WINTERBON, B.K. Ion - implantation distributions in non-uniform targets: projected range. *Radiation Effects*, v. 39, p. 31-38, 1978.

- 43 - AGULLO-LOPEZ, F.; CATLOW, C.R.A. *Point defects in materials*. London: Academic Press, 1988.
- 44 - BRAILSFORD, A.D.; BULLOUGH, R. The theory of sink strengths. *Pilos. Trans. R. Soc. London. Ser. A*, v. 302, p. 87-137, 1981.
- 45 - MANSUR, L.K. Void swelling in metals and alloys under irradiation: an assesment of the theory. *Nuclear Technology*, v. 40, p. 5-34, 1978.
- 46 - WOO, C.H.; SINGH, B.N. Production bias due to clustering of point defects in irradiation-induced cascades. *Philosophical Magazine A*, v. 65, n. 4, p. 889-912, 1992.
- 47 - ZIEGLER, J.F.; BIRSACK, J.P.; LITTMARK, U.L. *The stopping and range of ion in solids*. New York, N.Y.: Pergamon Press, 1985.
- 48 - ROBINSON, M.T.; TORRENS, I.M. Computer simulation of atomic-displacement cascades in solids in the binary-collision approximation. *Physical Review B*, v. 9, n. 12, p. 5008-5024, 1974.
- 49 - GREENWOOD, L.R. *Code SPECTER*. Argone: Argone National Laboratory Report, 1985. (ANL/FPP/TM-197).
- 50 - KINSEY, R. *Data formats and procedures for the evaluated nuclear data file, ENDF*. Brookhaven National Laboratory Report, 1979. (BNL-NCS-50496).
- 51 - ODETTE, G.R.; DORIAN, D.R. *Nucl. Technol.*, v. 29, p. 346-368, 1976.
- 52 - ISHINO, S; UROGA, T. Damage analysis and irradiation correlation. *J. Nucl. Mater.*, v. 133/134, p. 78-84, 1985.

- 53 - GANN, V.V.; ROZHKOV, V.V.; YUDIN, O.V. Osnovy teorii imitatsii reaktornykh povrezhdenii materialov s pomosh'ju uskoritelei tjazhelykh ionov. (Fundamentos da teoria de simulaçao de danos dos materiais nos reatores usando os aceleradores dos ions pesados). *Voprosy Atomnoi Nauki i Tekhniki. Ser. Fizika Radiatsionnykh Povrezhdenii i Radiatsionnoe Materialovedenie*, n. 3 (11), p. 10-14, 1979.
- 54 - GANN, V.V.; YUDIN, O.V. Issledovanie stepeni podobija spectrov PVA pri imitatsii neitronnogo obluchenija tjazhiolymi neitronami. (Estudo do grau de similaridade dos espectros de PKAs durante a simulaçao da irradiaçao com nêutrons por meio dos ions pesados). *Voprosy Atomnoi Nauki i Tekhniki. Ser. Fizika Radiatsionnykh Povrezhdenii i Radiatsionnoe Materialovedenie*, n. 3 (22), p. 23-25, 1982.
- 55 - STOLLER, R.E. The influence of helium on microstructural evolution: implication for DT fusion reactors. *J. Nucl. Mater.*, v. 174, p. 289-310, 1990.
- 56 - PEDRAZA, D.F.; MAZIASZ, P.J.; LUEH, R.L. Helium effects on the microstructural evolution of reactor irradiated ferritic and austenitic steels. *Radiat. Eff. and Defects in Solids*, vol. 113, p. 213-228, 1990.
- 57 - SINGH, B.N.; FOREMAN, A.J.E. Some limitation of simulation studies using the ppm to dpa ratio as the helium generation rate. *J. Nucl. Mater.*, v. 179-181, p. 990-993, 1991.
- 58 - MUROGA, T.; KITAJIAMA, K.; ISHINO, S. The effect of recoil energy spectrum on cascade structures and defect production efficiencies. *J. Nucl. Mater.*, v. 133/134, 378-382, 1985.
- 59 - HEINISCH, H.L.; SINGH, B.N. The morphology of collision cascades as a function of recoil energy. *J. Nucl. Mater.*, v. 179-181, p. 893-896, 1991.

- 60 - NORGETT, M.J.; ROBINSON, M.T.; TORRENS, I.M. A proposed method of calculating displacement dose rates. *Nuclear Engineering and Design*, v. 33, p. 50-54, 1975.
- 61 - AVERBACK, R.S.; BENEDEK, R.; MERKLE, K.L. Ion-irradiation studies of damage function of copper and silver. *Physical Review B*, v. 18, p. 4156-4171, 1977.
- 62 - WIDERSICH, H. Effects of the primary recoil spectrum on long-range migration of defects. *Radiation Effects and Defects in Solids*, v. 113, p. 97-107, 1990.
- 63 - SEKIMURA, N.; KANZAKI, Y.; OKADA, S.R.; MASUDA, T.; ISHINO, S. Cascade damage formation in gold under self-ion irradiation. *J. Nucl. Mater.*, v.212-215, p. 160-163, 1994.
- 64 - PACKAN, N.H.; FARRELL, K.; STIEGLER, J.O. Correlation of neutron and heavy-ion damage. *J. Nucl. Mater.*, vol. 78, p. 143-155, 1978.
- 65 - MANSUR, L.K. Correlation of neutron and heavy-ion damage. *J. Nucl. Mater.*, vol. 78, p. 156-160, 1978.
- 66 - FARRELL, K. Experimental effects of helium on cavity formation during irradiation - a review. *Radiation Effects*, v. 53, p. 175-194, 1980.
- 67 - ROSE, P.F.; DUNFORD, C.L. *ENDF-102 data formats and procedures for the evaluated nuclear data file ENDF-VI*. Brookhaven National Laboratory, 1991.
- 68 - MACFARLANE, R.E.; MUIR, D.W.; BOICOURT, R. M. *The NJOY nuclear data processing system, volume I: user's manual*. Los Alamos National Laboratory Report, vol. 1, 1982. (LA-9303-M).
- 69 - EVERETT, C.J.; CASHWELL, E.D. *A second Monte Carlo sampler*. USAEC Report. Los Alamos Scientific Laboratory, 1974. (LA-5723-MS).

- 70 - CARTER, L.L.; CASHWELL, E.D. *Particle transport simulation with the Monte Carlo method*. ERDA Critical Review Series: TID-26607, 1975.
- 71 - CASHWELL, E.D.; EVERETT, C.J. *A practical manual on the Monte Carlo method for random walk problems*. New York, N.Y.: Pergamon Press, 1959.
- 72 - GREENWOOD, L.R. A new calculation of thermal neutron damage and helium production in nickel. *J. Nucl. Mater.*, v. 115, p. 137-142, 1983.
- 73 - GREENWOOD, L.R.; GARNER, F.A. Hydrogen generation arising from $^{59}\text{Ni}(n,p)$ reaction and its impact on fission-fusion correlations. *J. Nucl. Mater.*, v. 233-237, p. 1530-1534, 1996.
- 74 - LINDHARD, J.; NIELSEN, V.; SCHARFF, M.; THOMSEN, P.V. Integral Equations Governing Radiation Effects (Notes on Atomic Collisions, III). *Mat. Fys. Medd.*, v. 33, n. 10, 1963.
- 75 - PRESS, W.H.; TEUKOLSKY, S.A.; VETTERLING, W.T.; FLANNERY, B.P. *Numerical recipes in fortran. Second edition*. New York, N.Y.: Cambridge University Press, 1992.
- 76 - WINTERBON, K.B. *A fortran program to calculate Chebyshev inequalities and Gaussian integration parameters*. Chalk River, Ontario: Chalk River Nuclear Laboratories, Jul. 1974. (AECL - 4832).
- 77 - McELROY, R.J.; ATKINS, T. Dual beam irradiation under stress. *Rad. Effects*, v. 101, p. 163-166, 1986.
- 78 - JUNG, P. Helium production and long-term activation by protons and neutrons in metals for fusion reactor application. *J. Nucl. Mater.*, v.144, p. 43-50, 1987.
- 79 - DAUM, E.; BERTSCH, J.; MÖSLANG, A.; EHRLICH, K. Comparison of elastic and non-elastic displacement damage under light ion simulation irradiation. *J. Nucl. Mater.*, v. 233-237, p.959-963, 1996.

- 80 - GANN, V.V.; VOLOBUEV, A.V.; KUZNETSOV, A.Yu. Computer simulation of diffusion and accumulation of helium and point defects in metals during irradiation by helium ions. In:
XII INTERNATIONAL CONFERENCE ION-SURFACE INTERACTION.
1995. Zvenigorod. Russia. Materials of the XII international conference ION-SURFACE INTERACTION, p. 253-256, 1995.
- 81 - *Reactor Handbook, 2-nd ed.* New York: Materials Interscience Publisher Inc., 1960.
- 82 - ULMAIER, H. The simulation of neutron-induced mechanical property changes by light ion bombardment. *Ann. Chim. Fr.*, v. 9, p. 263-274, 1984.