

聚变堆用典型金属工程材料辐照损伤机理

汤晓斌^{1,2} 刘健¹ 陈飞达¹ 黄海¹ 李欢¹ 陈达^{1,2}

1 (南京航空航天大学 核科学与工程系 南京 210016)

2 (江苏省核能装备材料工程实验室 南京 210016)

摘要 聚变堆中极端辐照环境下,核工程材料的安全与可靠性对保障核能产业可持续发展具重大意义。采用蒙特卡罗程序包 Geant4 建立了聚变堆辐照环境下的材料损伤模型,从材料的位移损伤率和杂质沉积等方面研究了 CLAM 钢、F82H 钢、 α -Fe 三种聚变堆用典型金属工程材料分别在中子、质子、重离子轰击下的辐照损伤机理。研究表明,中子对材料的辐照损伤主要为位移损伤;质子和重离子对材料造成的位移损伤呈 Bragg 峰曲线分布,且损伤区域与粒子射程均集中在材料表层,其中 14.67 MeV 质子射程为 512 μm ,0.82 MeV ^3He 离子射程仅为 2.1 μm 。系统分析了聚变堆用典型金属工程材料的损伤形成机理,为进一步研究材料受辐照后宏观性能与微观结构变化提供了理论依据。

关键词 蒙特卡罗方法,金属工程材料,位移损伤率,杂质沉积

中图分类号 TL341

DOI: 10.11889/j.0253-3219.2015.hjs.38.120601

聚变堆内金属材料的性能稳定与聚变堆的安全发展有着密切的联系^[1-2]。因此,研究聚变堆内高温、高压、强辐照复杂环境下材料的失效和破坏行为对于保证聚变堆使用寿命及其安全性具有重大意义。以往研究发现:中子辐照会使材料发生诸如低温辐致硬化和脆化、元素偏析、蠕变、肿胀以及高温氢脆^[3-5]等变化,严重影响材料宏观性能,对聚变堆的运营造成安全隐患,尤其是在先进核能系统高速发展的今天,聚变堆内严酷的工况条件对聚变堆工程材料提出了更高的安全性能要求。

利用各种辐照实验探究材料在辐照前后宏观性能及微观结构的变化规律是研究材料辐照损伤效应最直观的方法。本文欲研究中子、质子及重离子对聚变堆用典型金属工程材料的微观损伤机理。由于实验技术水平的限制,实现对实验条件的严格可控及实验结果的精确测量依然有不小的困难,尤其在原子尺度上研究材料辐照损伤微观机理,目前尚只能通过计算机模拟方法进行。随着计算机技术的发展和理论基础的完善,利用计算机模拟手段已阐明了许多材料辐照损伤机理,逐渐成为解决材料科学中实际问题的重要组成部分^[6-8]。

本文采用蒙特卡罗方法从材料的辐照位移损伤率及杂质沉积等方面研究了聚变堆用典型金属材料 CLAM 钢、F82H 钢以及 α -Fe 在不同能量的中子、质子及重离子轰击下的辐照损伤机理。

1 模拟方法

本文采用蒙特卡罗粒子输运软件 Geant4 进行模拟计算^[9],图 1 为进行计算的几何模型示意图,该几何结构由三部分构成。

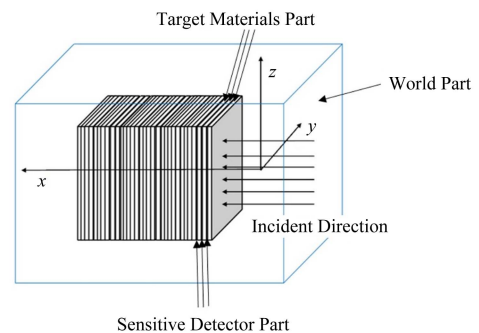


图 1 Geant4 几何模型构建示意图
Fig.1 Geometric model of Geant4 simulation.

中央高校基本科研业务费科研基地创新基金(No.3082015NJ20150021)、江苏省博士后科研资助计划项目(No.1401091C)、中国博士后科学基金(No.2014M561642)资助

第一作者:汤晓斌,男,1978 年出生,2009 年于南京航空航天大学获博士学位,现从事核能与核技术工程研究

Supported by the Fundamental Research Funds for the Central Universities (No.3082015NJ20150021), the Jiangsu Planned Projects for Postdoctoral Research Funds (No.1401091C), China Postdoctoral Science Foundation (No.2014M561642)

First author: TANG Xiaobin, male, born in 1978, graduated and awarded a doctoral degree in Nanjing University of Aeronautics and Astronautics in 2009, research area is nuclear energy and nuclear technology engineering

收稿日期:2015-10-09,修回日期:2015-11-03

1) world 部分: world 是边长为 450 mm×450 mm×450 mm 的立方体,其作用是限定粒子输运空间即任何粒子的输运都只能在 world 范围内,一旦超出 world 部分,系统将自动终结该粒子的输运。

2) 靶材料部分: 靶材料为 400 mm×320 mm×320 mm 的长方体构成,为使本工作具有更高的理论意义与实用价值,本文选取的靶材料为国内特有的低活化马氏体钢 CLAM 钢、国际聚变堆候选材料 F82H 钢、以及聚变堆常用材料的主要成分 α -Fe(纯铁)三种材料,在本文中每次计算分别填充上述三

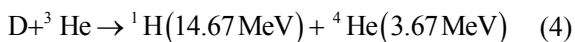
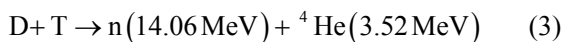
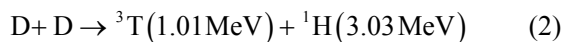
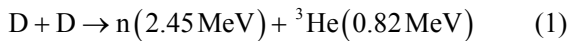
种材料。CLAM 与 F82H 的材料成分以及本文所需的其它参数如表 1 所示。

3) 敏感探测器部分: 敏感探测器由 0.02 mm×320 mm×320 mm 的小长方体薄片构成,即沿着粒子入射方向将靶材料平均分为 20 000 层,每层均设置一份敏感探测器,通过记录每一层中的粒子相关信息,从而获得整个靶材料的损伤效应。计算位移损伤率时未加滤波器,计算粒子沉积时为准确获得粒子的沉积信息加了特定滤波器。

表 1 靶材料 CLAM 和 F82H 的参数
Table 1 Parameters of target materials CLAM and F82H.

元素 Element	原子序数 Atomic number	摩尔质量 Molar mass / g·mol ⁻¹	离域能 Delocalization energy / eV	质量分数 Mass fraction / %	
				CLAM	F82H
Fe	26	55.847	17.4	88.69	90.01
Cr	24	51.996	28	9.0	7.46
C	12	12.011	31	0.12	0.9
Mn	25	54.938	40	0.5	0.21
P	15	30.973	25	0.03	0
S	16	32.061	25	0.02	0
N	7	14.006	25	0.02	0
W	74	183.85	44	1.6	2.23
Ni	28	58.701	28	0.02	0

聚变堆内存在高温、高压以及强辐照,在此环境下材料损伤极其严重。聚变堆中主要进行如下核反应:



即存在快中子、质子、 α 粒子和 ${}^3\text{He}$ 等。本文利用 Geant4 建立了材料损伤模型,分别模拟了上述粒子对典型聚变堆材料的损伤,具体为:

1) 中子在 14.1 MeV 和 2.45 MeV 能量下分别对 CLAM 钢、F82H 钢、 α -Fe 三种材料辐照损伤计算;

2) 质子在 14.67 MeV 和 3.03 MeV 能量下分别对 CLAM 钢、F82H 钢、 α -Fe 三种材料的辐照损伤计算;

3) 重离子(主要包括 3.67 MeV 的 α 粒子和 0.83 MeV 的 ${}^3\text{He}$ 离子)对 CLAM 钢、F82H 钢、 α -Fe 三种材料的辐照损伤计算。

在 Geant4 中,粒子与物质相互作用的物理过程包含电磁相互作用模块和强相互作用模块。电磁相互作用包括多次散射、电离、光电效应、韧致辐射等过程,该模块使用的数据库文件来源于 Livermore 实验室的 EEDL、ENSDF、EPDL97、EADL 库。粒子之间的弹性散射、非弹性散射和原子核嬗变等包含于强相互作用模块中。

中子与物质的相互作用属于强相互作用,本文对低于 20 MeV 的中子采用基于 ENDF/B-VI 反应截面文件的 G4NDL3.11 模块。弹性散射采用两体碰撞近似类 G4LElastic(重荷除外);在处理质子和中子的非弹性散射和核嬗变物理过程时选用 Bertini(19.9 MeV–9.9 GeV)、LEP(9.5 GeV–25 GeV)和 QGSP(15 GeV–100 TeV)实现不同能量段的互补模型。 ${}^3\text{He}$ 和重荷粒子的非弹性作用采用类 G4BinaryLightIonReaction, 电离作用采用类 G4ionIonisation。

为得到每种粒子在材料中沉积的能量,进而计算出位移损伤率,本文在设置的 20 000 份敏感探测器上,首先利用 Tracking Hit 类函数,统计每一次 Run 后,所有碰撞点信息,如碰撞前粒子能量、动量、入射角度、坐标,碰撞后的动能、角度、坐标,通过位置信息获得每一个碰撞点归属的敏感探测

器，然后将该步沉积的能量累加到对应的探测器，如此便可得到入射粒子在每个探测器上沉积的总能量，最后归一于单个粒子，便可对获得的信息进行后续处理。

粒子入射方向为[100]方向，即垂直于靶材料截面入射，根据敏感探测器获得的粒子沉积能量，可用式(5)计算缺陷数：

$$N_d(E) = \begin{cases} 0 & E < E_d \\ 1 & E_d \leq E < 2.5E_d \\ 0.4E_D(E)/E_d & E \geq 2.5E_d \end{cases} \quad (5)$$

式中， N_d 为缺陷数； E 为初级碰撞原子(Primary Knock-on Atom, PKA)的能量； E_d 为离域能； $E_D(E)$ 为 PKA 的损伤能，可由式(6)求得：

$$E_D(E) = \frac{E}{1+k \cdot g(\varepsilon)} \quad (6)$$

$$\varepsilon = \frac{E}{30.724Z_1Z_2\sqrt{Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}}(1+A_1/A_2)} \quad (7)$$

$$g(\varepsilon) = 3.4008\varepsilon^{1/6} + 0.40244\varepsilon^{3/4} + \varepsilon \quad (8)$$

$$k = 0.1337Z_1^{1/6}(Z_1/A_1)^{1/2} \quad (9)$$

式中， Z_1 与 Z_2 为撞击与被撞击的原子序数； A_1 与 A_2 为上述两种原子的质量数^[10-11]。由此，可以计算得到平均每个原子的位移次数(Displacement Per Atom, DPA)。将所得 DPA 数值除以模拟所用的注量，便可得到单位注量下的位移损伤率(Displacement Damage Rate, DDR)，即：

$$R = \frac{\text{DPA}}{\phi} \quad (10)$$

式中， R 为所求 DDR 值； ϕ 为模拟所用注量。

当中子与材料中原子发生相互作用时，会使原子发生离位，在单位注量下由此产生的位移损伤率称为总的 DDR。其中，由中子直接引发的原子离位称为非电离 DDR，而由中子与原子核相互作用产生的次级粒子（如质子、 α 粒子）引发的原子离位称为电离 DDR，由于电离 DDR 对材料损伤的贡献较小，因此本文针对中子，主要研究非电离 DDR 与总 DDR 对材料造成的损伤；针对质子与重离子，研究总 DDR 对材料造成的损伤。

在计算粒子沉积时，通过探测器上的滤波器将其他粒子屏蔽只留下所研究的粒子，再判断粒子动能降到截断值以下后所处的位置，利用该处的探测器记录下粒子的信息。最后取均值归一于单个粒子入射后产生的 H、 ^3He 和 ^4He 在探测器中的分布。

2 结果与讨论

2.1 中子及其非电离作用产生的位移损伤率分布

计算了能量为 14.1 MeV 和 2.45 MeV 的中子及其非电离作用对 CLAM、F82H、 α -Fe 三种材料的损伤。每一次仿真计算，入射中子个数均为 10^6 。一共计算了 6 组，数据归一化后得到单个中子造成的材料的 DDR 分布如图 2、3 所示。为更好地研究中子对材料的损伤效应，列出了具有代表性的中子对 α -Fe 损伤效应特征数据，如表 2 所示。

由图 2、3 可知，对于 14.1 MeV 和 2.45 MeV 的中子辐照，其在三种材料造成的总位移损伤和非电离损伤的 DDR 随深度的分布曲线均呈现先上升后下降趋势，在损伤达到峰值之后，随着深度增加损伤程度以指数形式递减。在相同的深度下，有 $\alpha\text{-Fe}_{\text{DDR}} > \text{F82H}_{\text{DDR}} \approx \text{CLAM}_{\text{DDR}}$ 。分布曲线与横坐标围成的面积为单位注量下中子对材料造成的位移损伤数，从图 2、3 中可以看到，14.1 MeV 和 2.45 MeV 中子产生损伤的规律相同，均是在 α -Fe 中产生的位移损伤最大，在 CLAM 和 F82H 中产生的位移损伤几乎一致。因为 α -Fe 为纯铁，不含合金元素，由此可推知，合金元素的添加能减少中子对材料的损伤。

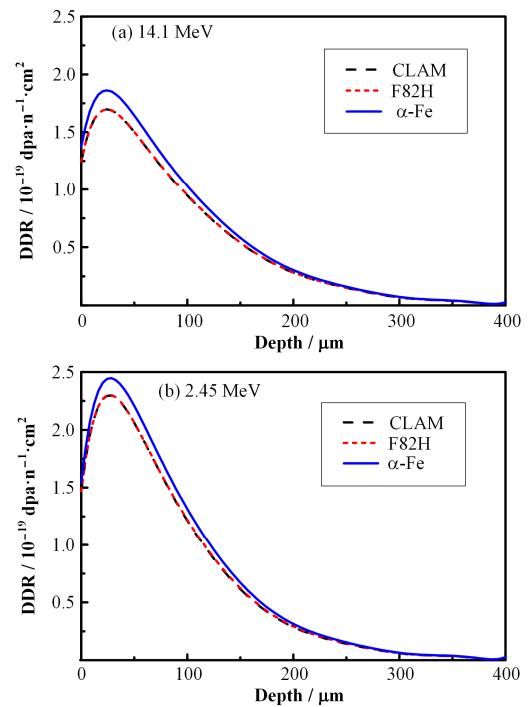


图 2 14.1 MeV (a)与 2.45 MeV (b)中子辐照后 CLAM、F82H、 α -Fe 三种材料位移损伤率随深度分布
Fig.2 DDR distribution as a function of depth in three materials (CLAM, F82H and α -Fe) after neutron irradiations at 14.1 MeV (a) and 2.45 MeV (b).

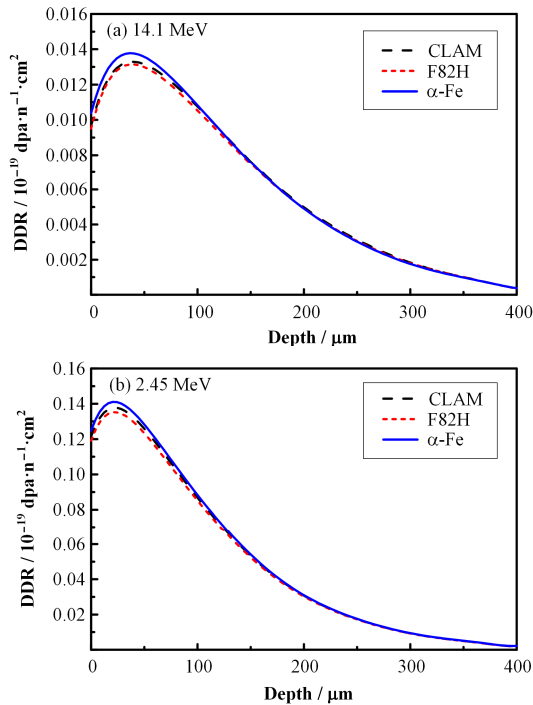


图3 14.1 MeV (a)与 2.45 MeV (b)中子在 CLAM、F82H、 α -Fe 三种材料中产生的非电离位移损伤率随深度的分布
Fig.3 DDR distribution generated by non-ionizing effect of neutron as a function of depth in three materials (CLAM, F82H and α -Fe) after neutron irradiations at 14.1 MeV (a) and 2.45 MeV (b).

从图 2、3 中可以发现,低能量的中子在材料中造成的位移损伤率大于高能的中子,其原因在于,高能中子在材料中沉积的能量相对较少,故传递给材料中原子的能量也较少,从而导致产生上述现象。

表 2 总结了中子在 α -Fe 总的损伤数据。表 2 中列出的损伤类型为总损伤和非电离损伤,对于这两种损伤,均列出了入射中子能量为 2.45 MeV 和 14.1 MeV 时的损伤数据。峰值深度表示中子在材料中造成最大缺陷数时对应的入射深度,用来表征损伤最严重区域;DDR 峰值表示中子对材料能造成的最大损伤,能给材料的辐照稳定性和预期寿命提供最可靠估计;损伤平均数量级可用于快速比较和估算中子对材料造成的损伤程度;损伤深度指损伤 DPA 下降到峰值一半时的深度,用来表征中子有效损伤射程。由表 2 可知,2.45 MeV 中子对应的非电离损伤 DDR 峰值为 14.1 MeV 中子非电离损伤 DDR 峰值的 10 倍多,可知非电离损伤效应随着中子能量的增加而减少。对于总的位移损伤,2.45 MeV 中子产生的峰值为 14.1 MeV 中子峰值的 1.31 倍,两种能量峰值深度和损伤深度对应相当。

由总位移损伤和非电离位移损伤数据分析可知,随着中子入射能量的增加,在材料中沉积的能量反而减少,进一步可推知高能中子对材料的位移损伤程度也会减少。

表 2 中子对 α -Fe 的损伤数据
Table 2 Data of neutron damage to α -Fe.

损伤类型 Type of damage	中子能量 Neutron energy / MeV	峰值深度 Depth of peak / mm	DDR 峰值 Peak of DDR / $10^{-21} \text{ dpa} \cdot \text{n}^{-1} \cdot \text{cm}^2$	损伤平均数量级 Average order of magnitude of damage	损伤深度 Depth of damage / mm
总损伤 Total damage	2.45	28.32	244.7	10^{-19}	109
	14.1	24.28	186.1	10^{-19}	113
非电离损伤 Non-ionizing damage	2.45	20.22	14.11	10^{-20}	125
	14.1	36.38	1.378	10^{-21}	162

2.2 质子产生的 DDR 及沉积深度分布

2.2.1 质子产生的 DDR 随深度分布

利用 Geant4 分别计算了聚变堆中 D-T 反应产生的 14.67 MeV 和 3.03 MeV 质子对 CLAM 钢、F82H 钢、 α -Fe 三种材料的损伤情况。本次计算的质子数量为 10^6 个,最后归一到单个质子对材料造成的损伤。图 4 是质子对材料造成的 DDR 随材料深度的分布情况。表 3 中列出了质子对材料造成位移损伤一些具体特征数据。

由图 4 可知,不同能量的质子对三种材料造成的位移损伤均呈 Bragg 峰曲线分布,位移损伤都集中在材料的表层。相同能量的质子对三种材料的损伤程度几乎相同。结合图 4 与表 3 可知,在这三种材料中,3.03 MeV 质子损伤深度均远小于 14.67 MeV 质子,但是前者造成的 DDR 峰值远大于后者,因而 3.03 MeV 质子对材料损伤也不可忽视。

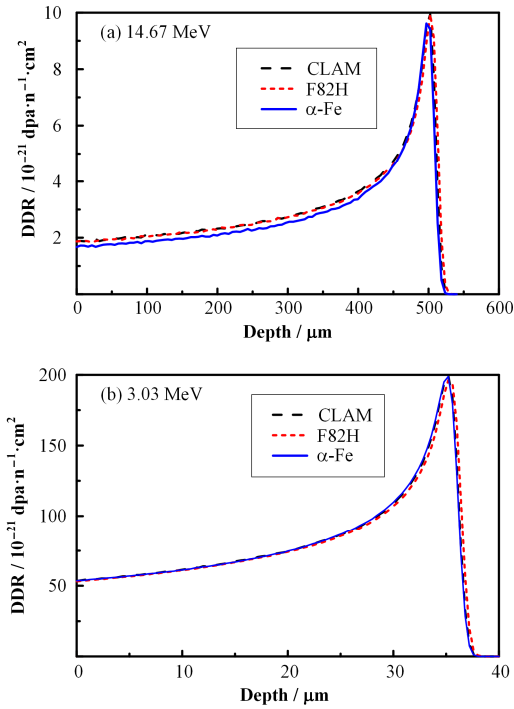


图 4 14.67 MeV (a)与 3.03 MeV (b)质子辐照后在 CLAM、F82H、 α -Fe 三种材料位移损伤率随深度分布
Fig.4 DDR distribution as a function of depth in three materials (CLAM, F82H and α -Fe) after proton irradiations at 14.67 MeV (a) and 3.03 MeV (b).

表 3 质子对三种靶材料造成损伤数据

Table 3 Proton damage data in three materials (CLAM, F82H and α -Fe).

质子能量 / MeV	靶材料 Target materials	峰值深度 Depth of peak / μm	DDR 峰值 value / 10^{-21} dpa·n ⁻¹ ·cm ⁻²	损伤深度 Depth of damage / μm
14.67	CLAM	501.75	10.12	534.32
	F82H	503.05	10.04	537.11
	α -Fe	499.72	9.913	534.25
3.03	CLAM	35.16	199.6	38.92
	F82H	35.36	198.0	39.11
	α -Fe	35.06	199.7	38.74

2.2.2 质子沉积深度分布

质子最后以稳定的形态如氢复合物沉积在材料中，造成材料脆化和肿胀，因此研究氢在材料中的沉积机理具有重要意义。本文研究了 14.67 MeV 和 3.03 MeV 的质子在材料中沉积的浓度随深度的变化规律，结果如图 5 所示，对应的特征损伤数据如表 4 所示。

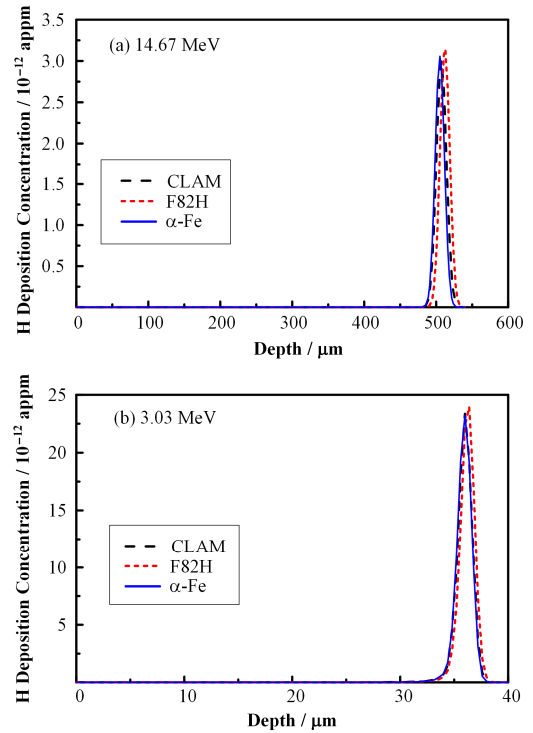


图 5 14.67 MeV (a)与 3.03 MeV (b)质子在 CLAM、F82H、 α -Fe 三种材料中产生的 H 沉积量随深度分布
Fig.5 Deposited H concentration as a function of depth in three materials (CLAM, F82H and α -Fe) after proton irradiations at 14.67 MeV (a) and 3.03 MeV (b).

表 4 质子沉积对靶材料造成损伤数据

Table 4 Deposited H data in three materials (CLAM, F82H and α -Fe).

质子能量 / MeV	靶材料 Target materials	沉积量峰值 Peak of deposition concentration / 10^{-12} appm	峰值对应深度 Depth of peak / μm
14.67	CLAM	3.011	507.3
	F82H	3.143	512.7
	α -Fe	2.910	507.3
3.03	CLAM	23.37	36.06
	F82H	24.68	36.22
	α -Fe	24.94	35.99

由图 5 和表 4 可以发现，14.67 MeV 和 3.03 MeV 的质子沉积量随深度分布曲线都呈现尖峰形状，但在沉积量峰值与峰值对应深度方面却差别巨大。14.67 MeV 质子产生的氢原子主要沉积在距入射材料表层 480–540 μm 范围内，3.03 MeV 质子产生的氢原子却几乎全部沉积在距表层 34–38 μm 范围内。3.03 MeV 质子对应的氢原子沉积量峰值接近 14.67 MeV 质子产生的氢原子沉积量峰值的 8 倍，因此必须重视氢原子在材料表面的沉积，防止其引起材料性能的退化。

2.3 重离子产生的 DDR 及沉积深度分布

2.3.1 重离子产生的 DDR 随深度分布

图 6 给出了 3.67 MeV α 粒子及 0.82 MeV 的 ^3He 离子在三种材料中产生的 DDR 随深度的分布。由图 6 可知, 每种粒子在三种材料的能量沉积几乎相同。3.67 MeV α 粒子在靶材料射程为 6 μm , ^3He 离子的射程为 1.5 μm , 可见重离子对材料损伤主要集中在材料最表层, 同时合金元素的添加不会改变材料对重离子的耐辐照性能。

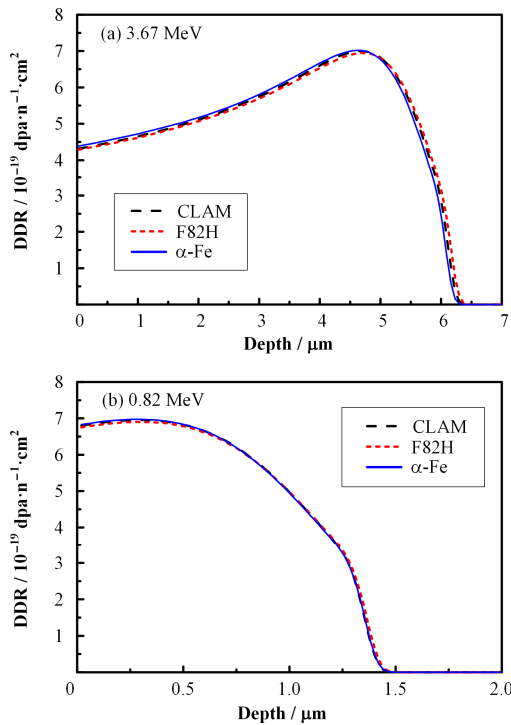


图 6 3.67 MeV α 粒子(a)与 0.82 MeV ^3He 离子(b)在 CLAM、F82H、 α -Fe 三种材料中产生的位移损伤率随深度分布
Fig.6 DDR distribution as a function of depth in three materials (CLAM, F82H and α -Fe) after α particle irradiation at 3.67 MeV (a) and ^3He ion irradiation at 0.82 MeV (b).

2.3.2 重离子沉积深度分布

α 粒子和 ^3He 离子最后以稳定的形态如氮气甚至氮泡形式沉积在材料中, 造成材料脆化和肿胀, 研究氮的沉积对聚变堆材料安全可靠性的意义。本文利用 Geant4 计算了 3.67 MeV 的 α 粒子及 0.82 MeV 的 ^3He 离子最后形成的 ^4He 、 ^3He 原子在材料中的沉积, 如图 7 所示。

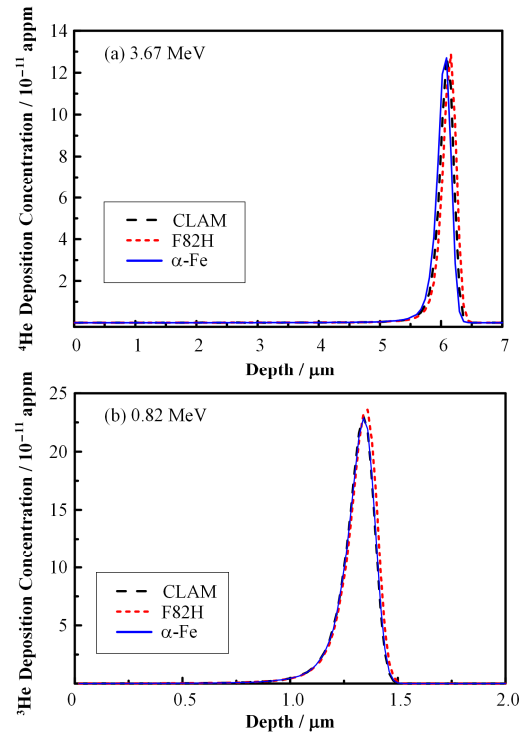


图 7 3.67 MeV α 粒子(a)与 0.82 MeV ^3He 离子(b)在 CLAM、F82H、 α -Fe 三种材料中产生的 ^4He (a)与 ^3He (b)沉积量随深度分布

Fig.7 Deposited ^4He (a) and ^3He (b) concentration as a function of depth in three materials (CLAM, F82H and α -Fe) after α particle irradiation at 3.67 MeV (a) and ^3He ion irradiation at 0.82 MeV (b).

从图 7 可知, ^4He 和 ^3He 在三种材料中的沉积也是几乎一致的, 呈现尖峰形状。沉积在材料中的 ^3He 与 ^4He 均在材料浅表面处, 且 ^3He 更接近材料表面。 ^3He 的沉积量峰值接近 ^4He 的两倍。图 7 中 ^3He 与 ^4He 的沉积量的峰的半高宽较小, 可见重离子沉积呈现末端聚集现象, 这符合重离子与物质作用的原理。

3 结语

本文研究了中子、质子以及重离子对中国低活化马氏体钢 CLAM 钢、国际 ITER 壁材料 F82H 钢以及 α -Fe 三种材料的辐照损伤机理。利用蒙特卡罗程序包 Geant4 建立了聚变堆辐照环境下中子、质子、 ^4He 以及 ^3He 离子对材料的损伤模型, 从材料的辐照位移损伤率及杂质沉积量等方面研究了上述三种聚变堆用典型金属工程材料在不同能量粒子轰击下的辐照损伤机理, 得到了以下结论:

- 1) 14.1 MeV 与 2.45 MeV 中子对材料的损伤主要为位移损伤, 且低能中子对材料的损伤更大。
- 2) 质子对材料的位移损伤主要集中在表层, 且

呈 Bragg 峰曲线分布，之后沉积在材料中的质子几乎全部聚集在材料表层，因此为提高材料在聚变堆中使用年限，在材料表层加大对质子防护必不可少。

3) α 粒子在材料中造成的位移损伤主要集中在材料最表层 6 μm 范围内，而 ^3He 离子则在 1.5 μm 范围内，并且重离子对三种材料的位移损伤率几乎相同，可见合金元素的添加不能减少重离子对材料的损伤。最后在材料中沉积的氦原子浓度远大于氢原子浓度，表明氦原子更易沉积在材料中，在材料服役期间必须加大对氦原子的防护。

4) 对比三种不同粒子对材料的损伤特点可以发现，中子对材料的损伤深度远大于质子与重离子，低能中子对材料造成的损伤高于高能中子，在材料中添加合金元素能减少中子对材料的损伤；与中子对材料产生的损伤特点不同，质子与重离子对材料的损伤均集中在材料表层，产生位移损伤率也远小于中子，合金元素的添加不能有效减少质子与重离子对材料的损伤；虽然重离子的损伤深度远小于质子，但产生的氦原子沉积浓度远大于氢原子。

参考文献

- Huang H, Tang X, Chen F, *et al.* Radiation damage resistance and interface stability of copper-graphene nanolayered composite[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2015, **460**: 16–22. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2015.02.003
- Chen F, Tang X, Yang Y, *et al.* Investigation of structural stability and magnetic properties of Fe/Ni multilayers irradiated by 300 keV Fe^{10+} [J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2014, **452**(1): 31–36. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2014.04.039
- Alamo A, Bertin J L, Shamardin V K, *et al.* Mechanical properties of ^9Cr martensitic steels and ODS-FeCr alloys after neutron irradiation at 325 C up to 42 dpa[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2007, **367**: 54–59. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2007.03.166
- Nishiyama Y, Onizawa K, Suzuki M, *et al.* Effects of neutron-irradiation-induced intergranular phosphorus segregation and hardening on embrittlement in reactor pressure vessel steels[J]. *Acta Materialia*, 2008, **56**(16): 4510–4521. DOI: 10.1016/j.actamat.2008.05.026
- Gilbert M R, Dudarev S L, Zheng S, *et al.* An integrated model for materials in a fusion power plant: transmutation, gas production, and helium embrittlement under neutron irradiation[J]. *Nuclear Fusion*, 2012, **52**(8): 083019. DOI: 10.1088/0029-5515/52/8/083019
- Domain C, Becquart C S, Malerba L. Simulation of radiation damage in Fe alloys: an object kinetic Monte Carlo approach[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2004, **335**(1): 121–145. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2004.07.037
- Korkut T, Korkut H. FLUKA simulations of DPA in $^6\text{H-SiC}$ reactor blanket material induced by different radiation fields frequently mentioned in literature[J]. *Journal of Fusion Energy*, 2013, **32**(1): 66–70. DOI: 10.1007/s10894-012-9525-5
- Barashenkov V S. Monte Carlo simulation of ionization and nuclear processes initiated by hadron and ion beams in media[J]. *Computer Physics Communications*, 2000, **126**(1): 28–31. DOI: 10.1016/S0010-4655(99)00417-8
- Agostinelli S, Allison J, Amako K, *et al.* GEANT4-a simulation toolkit[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, 2003, **A506**(3): 250–303. DOI: 10.1016/S0168-9002(03)01368-8
- Norgett M J, Robinson M T, Torrens I M. A proposed method of calculating displacement dose rates[J]. *Nuclear Engineering and Design*, 1975, **33**(1): 50–54. DOI: 10.1016/0029-5493(75)90035-7
- Kinchin G H, Pease R S. The displacement of atoms in solids by radiation[J]. *Reports on Progress in Physics*, 1955, **18**(1): 1–51

Damage mechanism of typical metal engineering materials in fusion reactor under irradiation

TANG Xiaobin^{1,2} LIU Jian¹ CHEN Feida¹ HUANG Hai¹ LI Huan¹ CHEN Da^{1,2}

1(Department of Nuclear Science and Engineering, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China)

2(Jiangsu Key Laboratory of Nuclear Energy Equipment Materials Engineering, Nanjing 210016, China)

Abstract Background: It is significant to maintain the safety and reliability of nuclear engineering materials under a neutron irradiation environment. **Purpose:** This paper aims to investigate the irradiation damage mechanisms of CLAM, F82H and α -Fe under the bombardment of neutrons, protons and heavy ions respectively with the aspects of material displacement damage rate and impurities deposition. **Methods:** The model of material damage under irradiation of reactor was established using the Monte Carlo package Geant4. **Results:** Irradiation damage caused by neutrons was mainly displacement damage. The distribution of displacement damage caused by protons and heavy ions corresponded to Bragg peak curve, whose incident depth and damage area were concentrated in the surface of material. 14.67-MeV protons had an incident depth of 512 μm while 0.82-MeV ^3He ions were 2.1 μm only. **Conclusion:** The damage forming mechanism of metal engineering materials under extreme irradiation environment was systematically analyzed, which provided a theoretical basis for further research of material changes of macroscopic properties and microstructure after irradiation.

Key words Monte Carlo method, Metal engineering materials, Displacement damage rate, Impurities deposition

CLC TL341