

**Vilniaus Universitetas**  
**Fizikos fakultetas**  
**Bendrosios fizikos ir spektrometrijos katedra**

Danielius Lingis

**JONIZUOJANČIOSIOS SPINDULIUOTĖS SUKURTŲ TAŠKINIŲ DEFEKTŲ  
PASISKIRSTYMO RBMK REAKTORIAUS GRAFITE TYRIMAS**

Magistrantūros studijų baigiamasis darbas

Aplinkos ir cheminės fizikos studijų programa

Studentas

Danielius Lingis

Darbo vadovas

Dr. Artūras Plukis

Recenzentas

Doc. Dr. Alytis Gruodis

Katedros vedėjas

prof. dr. (HP) Valdas Šablinskas

Vilnius 2017

## Turinys

|  |    |
|--|----|
| Įvadas.....  | 3  |
| Darbo uždaviniai.....                                | 3  |
| 1.Literatūros apžvalga .....                         | 4  |
| 1.1. Neutronų sąveika su medžiaga .....              | 4  |
| 1.2. Elektringųjų dalelių sąveika su medžiaga.....   | 6  |
| 1.3. Grafitas.....                                   | 7  |
| 1.4. RBMK-1500 reaktorius .....                      | 8  |
| 1.5. Neutronų sukelti defektai grafite .....         | 9  |
| 1.6. Taškinių defektų dinamika.....                  | 13 |
| 1.7. Skaitinis modeliavimas .....                    | 15 |
| 1.7.1. MCNP programa .....                           | 15 |
| 1.7.2. SRIM programa.....                            | 15 |
| 1.7.3. GEANT4 programų paketas.....                  | 17 |
| 1.8. Grafito Ramano spektrometrija.....              | 17 |
| 2. Tyrimo metodika .....                             | 23 |
| 2.1. Modeliavimas MCNP programa .....                | 23 |
| 2.2. Modeliavimas SRIM programa .....                | 23 |
| 2.3. Skaičiavimai „SPECTER“ programa.....            | 24 |
| 2.4. Modeliavimas GEANT4 programa.....               | 24 |
| 2.5. Anglies jonų implantavimas .....                | 25 |
| 2.6. Grafito Ramano sklaidos spektrų matavimas ..... | 27 |
| 2.7. Grafito terminis apdorojimas .....              | 27 |
| 2.8. Tyrimo eiga.....                                | 28 |
| 3. Tyrimo rezultatai .....                           | 30 |
| Apibendrinimas.....                                  | 38 |
| Išvados.....   | 39 |
| Literatūros sąrašas .....                            | 40 |
| Summary.....   | 45 |
| Priedas 1. SRIM įvesties bylos pavyzdys.....         | 47 |
| Padėka.....  | 48 |

## **Įvadas**

Grafitas branduoliniuose reaktoriuose gali būti naudojamas kaip lėtiklis, neutronų reflektorius bei aukštai temperatūrai atsparus struktūrinis reaktoriaus aktyviosios zonos elementas. Šis lėtiklis buvo panaudotas pirmos ir antros kartos reaktoriuose, taip pat bus naudojamas trečios bei ketvirtos kartos aukštatemperatūrinuose reaktoriuose. Neutronų spinduliuotei veikiant grafitą, jame atsiranda atominiai defektai [1], sukeliama tuštumų ir ertmių susidarymas [2], atsiranda mikrostruktūrinių pokyčių [3], kinta grafito matmenys [4] ir kt. Dėl šių priežasčių reikia įvertinti grafito struktūrinius pokyčius bei spinduliuotės sukeltas pažeidas, siekiant nustatyti galimą grafito eksploatavimo laiką bei tvarkymo galimybes. Vertinti sukurtas pažeidas grafito eksperimentiškai yra sunku dėl neutronų aktyvacijos sukulto radioaktyvumo, todėl plačiai paplitęs teorinis vertinimas Monte Karlo metodais makroskopiniu lygmeniu, o mikroskopiniu lygmeniu pažeidų evoliucijai simuliuoti naudojami molekulinės dinamikos metodai [5]. Eksperimentiškai nustatyta, kad grafitą apšvitinant aukštose temperatūrose reikalinga didesnė dozė sukurti pažeidas, kurios gaunamos žemesnėje temperatūroje [6]. Taip pat nustatyta, kad apšvitintą grafitą kaitinant, jame išsiskiria energija ir mažėja defektų skaičius [7]. Dėl to reikia atsižvelgti į temperatūros įtaką defektų evoliucijai grafito. Apžvelgiant skirtingų branduolinių reaktorių grafito pažeidas, buvo nustatyta, kad RBMK-1500 reaktoriams pažeidų vertinimas nėra atliktas.

## **Darbo tikslas**

Įvertinti taškinių defektų susidarymą ir defektų kiekio pokytį reaktoriaus grafito skaitinio modeliavimo ir eksperimentinių tyrimų metodais.

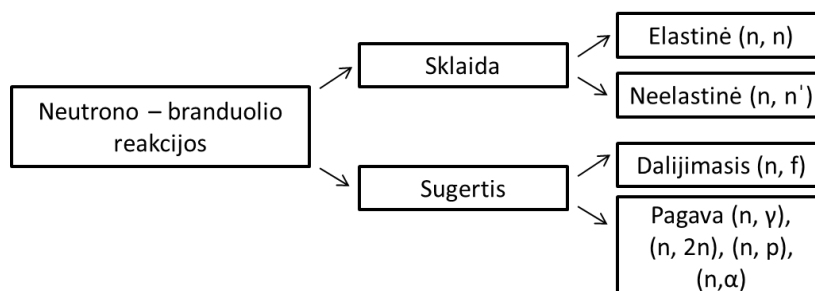
## **Darbo uždaviniai**

1. Atlikti neutronų sąveikos su grafitu skaitinį modeliavimą ir įvertinti neutronų sukeltų taškinių defektų susidarymo spartą reaktoriaus grafito MCNP, SRIM, „SPECTER“ ir GEANT4 programomis.
2. Skaitinio modeliavimo būdu parinkti optimalias jonų implantavimo sąlygas siekiant grafito bandinyje sukurti pažeidas, ekvivalenčias neutronų sukuriams reaktoriuje.
3. Atlikti  $^{12}\text{C}$  jonų implantavimą į bandinius ir įvertinti terminio apdorojimo įtaką bandinių paviršiaus struktūrai Ramano spektrometrijos metodu.

## 1.Literatūros apžvalga

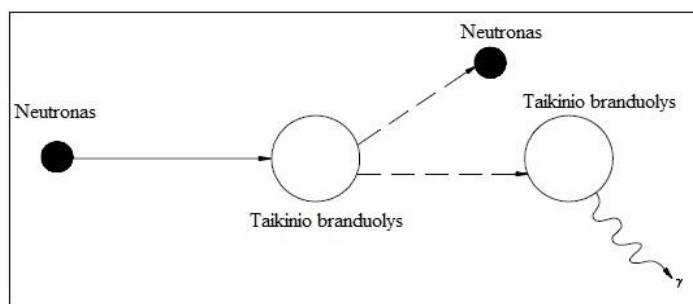
### 1.1. Neutronų sąveika su medžiaga

Neutronai yra neutralios dalelės, todėl sąveikaujant yra neveikiamos Kulono jėgos. Neutronai praktiškai nesąveikauja su laisvaisiais elektronais, nes sąveikos skerspjūvis yra labai mažas. Dėl palyginti mažo neutronų tankio reaktoriuje, galima nevertinti ir jų tarpusavio sąveikos. Neutronų sąveikos su branduoliais vyksmus galima sugrupuoti į sklaidą bei sugertį. Supaprastinta pagrindinių reakcijų schema pateikta 1 pav. Skliaustuose nurodomos reakcijos:  $n$  – neutronas,  $n'$  – antrinis neutronas,  $f$  – dalijimosi fragmentas,  $p$ ,  $\gamma$  ir  $\alpha$  – atitinkamai protonas, fotonas ir alfa dalelė.



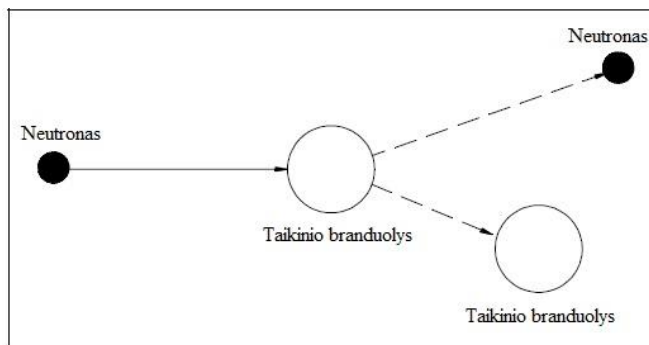
1 pav. Pagrindinių neutrono ir branduolio reakcijų klasifikavimas.

Neutrons neelastic scattering is a process where a nucleus suggests an incident neutron ( $n$ ), radiates a lower kinetic energy neutron ( $n'$ ) and remains excited. The nucleus returns to its ground state, releasing excess energy as a gamma quantum. In this way, the energy of scattered neutrons and the cross-section depend on the energy of the incident neutron and the density of the medium [8]. The principle scheme of the process is shown in Fig. 2.



2 pav. Neelastic neutron scattering principle scheme. Adapted from [9].

Another scattering mechanism is called elastic scattering. In this process, the energy of the neutron becomes the kinetic energy of the nucleus. The principle scheme of elastic scattering is shown in Fig. 3.



3 pav. Elastinės neutrono sklaidos principinė schema. Adaptuota pagal [9].

Elastinė sklaida tarp neutrono ir branduolio gali vykti dviem būdais: rezonansinė elastinė sklaida ir potencialinė sklaida. Pirmojo vyksmo metu neutronas yra sugeriamas branduolio, o po to išspinduliuojamas antrinis neutronas. Branduolys, išspinduliuavęs antrinį neutroną, grįžta į pagrindinę būseną nespinduliuodamas fotonų. Potencialinė sklaida yra vyksmas, kai neutronas priartėja pakankamai arti branduolio ir yra išsklaidomas branduolinės jėgos stūmos tarp branduolio ir neutrono. Šiuo atveju neutronas yra nesugeriamas, o procesas vyksta, kai neutrono energija viršija 1 MeV [9]. Tokios ir didesnės energijos neutronai yra dažniau elastiškai sklaidomi, negu sugeriami [10].

Neutronų sugertis gali vykti dviem mechanizmais: pagavos reakcijos ir dalijimosi reakcijos. Būdingos pagavos reakcijos yra  $(n,p)$ ,  $(n,\alpha)$ ,  $(n,2n)$ ,  $(n,\gamma)$  ir kt. Pirmosios trys reakcijos yra būdingos greitiesiems neutronams (energija virš 1 MeV), o  $(n,\gamma)$  reakcija paprastai vyksta su lėtaisiais neutronais (energija iki 300 eV) [10]. Reakcijų metu branduolys sugeria neutroną ir tampa sužadintu. Tada, grįždamas į pagrindinę būseną, išspinduliuoja nukleonus arba gamą kvantą. Dalijimosi reakcijų metu neutronas yra sugeriamas branduolio, o sužadintimas relaksuoja branduoliui dalijantis į keletą fragmentų.

Neutronai, vykstant tampriems susidūrimams, dalį savo energijos perduoda branduoliui. Pasitelkus energijos ir impulso tvermės dėsnius, išsklaidyto neutrono energijos lygtis laboratorinėje atskaitos sistemoje yra [11]:

$$E_1 = E_0 \frac{M^2 + m^2 + 2Mm \cos \theta}{(M+m)^2} \quad (1)$$

čia  $E_0$  – pradinė neutrono energija,  $M$  ir  $m$  – atitinkamai branduolio ir neutrono masė,  $\theta$  – kampas tarp pradinio ir išsklaidyto neutrono. Tarkime branduolio ir neutrono susidūrimas yra centrinis, t.y.  $\theta=180^\circ$ . Tokiu atveju išsklaidyto neutrono energija yra mažiausia [11]:

$$E_1 = E_0 \left( \frac{M-m}{M+m} \right)^2 \approx E_0 \left( \frac{A-1}{A+1} \right)^2 = \alpha E_0. \quad (2)$$

Kadangi neutrono energija priklauso nuo sklaidos kampo  $\theta$ , galima apskaičiuoti vidutinę neutrono energiją po vieno sklaidos įvykio. Atsižvelgus į kampo ir energijos pasiskirstymą, gauname neutrono energijos po susidūrimo tikimybės tankį [11]:

$$P(E_1)dE_1 = \frac{(A+1)^2}{4AE_0} dE_1 = \frac{dE_1}{(1-\alpha)E_0}. \quad (3)$$

Energijos pasiskirstymas bus tarp  $E_1(\min)=\alpha E_0$ , ir  $E_0$ , todėl vidutinė neutrono energija po vieno susidūrimo bus [11]:

$$\overline{E_1} = \frac{1}{2}(1 + \alpha)E_0, \quad (4)$$

Atsižvelgus į (2) formulę, galima daryti išvadą, kad neutronai geriau lėtinami sklaidant lengvaisiais branduoliais, nes tokio susidūrimo metu perduodamas didesnis impulsas nei sunkiųjų branduolių atveju.

## 1.2. Elektringųjų dalelių sąveika su medžiaga

Elektringosios dalelės su medžiaga sąveikauja Kulono jėga – dalelė kuria elektrinį lauką, kuris veikia medžiagos atomus. Dalelės, kurios sunkesnės už elektronus, energiją praranda sužadinant arba jonizuojant medžiagos atomus, esančius arti krintančiosios dalelės trajektorijos. Kai elektringoji dalelė yra sunkusis jonas, atsiranda papildomas energijos praradimo procesas. Jono energijos praradimą atstumo vienetui galima aprašyti parametru, vadinamu stabdomąja geba [12]:

$$\frac{-dE}{dx} = \left(\frac{dE}{dx}\right)_e + \left(\frac{dE}{dx}\right)_n, \quad (5)$$

čia indeksai  $e$  ir  $n$  sumoje nurodo elektroninius ir branduolinius energijos nuostolius. Priklausomai nuo jono energijos, medžiagoje prarandamos energijos procesą galima skirstyti į du mechanizmus – neelastinę sklaidą, arba elektroninius nuostolius ir elastinius susidūrimus, arba branduolinius energijos nuostolius, kai sąveikauja jonas ir medžiagos atomas. Neelastinės sklaidos atveju energija perduodama atomo elektronams juos perkeliant į aukštesnius atomo energijos lygmenis arba išmušant juos iš atomo. Kadangi jonas sąveikauja su žymiai mažesnės masės dalelėmis, krintančiojo jono trajektorija beveik nepakinta. Elektroniniai energijos nuostoliai proporcingi jono greičiui (energijai) ir pasireiškia visame jono energijų intervale.

Branduoliniai energijos nuostoliai, arba NIEL (angl. *non-ionizing energy-loss*), yra būdingi esant žemesnei krintančiojo jono energijai. Jono-branduolio sąveika aprašoma Kulono jėga tarp dviejų teigiamų krūvių, o sklaidos įvykio rezultatas yra ne tik prarasta jono energija, bet ir pakitusi sklaidimo kryptis. Vykstant jono-branduolio sąveikai gali pakisti ne tik krintančiojo jono kryptis,

tačiau sklaidantis atomas taip pat gali būti išmuštas iš pradinės savo vietos – atsiranda gardelės pažeidimas. Šie energijos nuostoliai naudojami skaičiuojant gardelės pažeidimus vykdamas jonų implantavimo eksperimentus. Kai vyksta elastinė jono sklaida, NIEL gali būti aprašyta [13]:

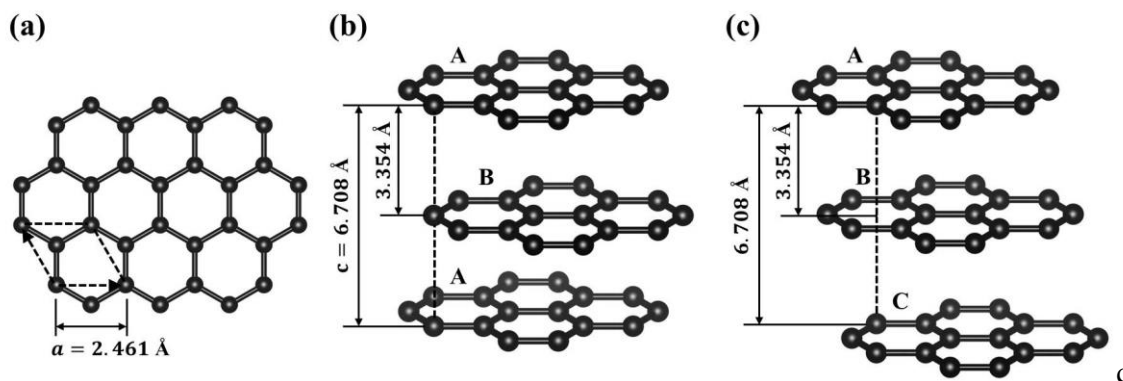
$$\frac{dE}{dx_n} = n_A \int_{E_d}^{E_{max}^R} E_R L(E_R) \frac{d\sigma(E, E_R)}{dE_R} dE_R, \quad (6)$$

čia  $n_A$  – atomų tankis,  $E$  – krintančios dalelės kinetinė energija,  $E_R$  ir  $E_{max}^R$  yra atatrunkos atomo energija ir maksimali energija, perduodama atatrunkos atomui,  $E_d$  – atomo išmušimo iš gardelės energija,  $L(E_R)$  – *Lindhard partition* funkcija, kuri nurodo kokia energijos dalis yra perduodama susidūrimo metu tarp branduolių (žr. [14]), o  $d\sigma(E, E_R)$  yra diferencialinis elastinės Kulono sklaidos skerspjūvis elektronams, protonams ir jonams. Sandauga  $T = E_R L$  vadinama pažaidos energija – ji nurodo, kiek energijos medžiagoje atiduoda kinetinės energijos  $E_R$  atatrunkos branduolys išmušant atomus.

### 1.3. Grafitas

Anglis turi 6 elektronus, kurie pasiskirstę konfigūracijoje  $1s^2 2s^2 2p^2$ . Egzistuoja mažas energijos skirtumas tarp 2s ir 2p būsenų, todėl lengva sužadinti vieną elektroną iš 2s būsenos į 2p būseną. Dėl šios priežasties anglis turi keturis laisvuosius valentinius elektronus, kurie gali sudaryti ryšius su kitais atomais. Orbitalių kombinacija vadinama hibridizacija, o anglis gali turėti 3 hibridizacijas:  $sp^3$ ,  $sp^2$  ir  $sp$ . Esant išorinei perturbacijai, pvz., artimoje aplinkoje esantis vandenilis, susiformuoja būseną iš vienos s orbitalės ir trijų p orbitalių (px, py, pz). Susiformavusios 4 naujos hibridinės orbitalės sudaro tetraedrinę struktūrą. Ši struktūra vadinama  $sp^3$  konfigūracija. Surinkus daug skirtingų  $sp^3$  hibridizacijos anglies atomų į vieną kristalą, gaunama deimanto struktūra. Tokioje struktūroje tarp artimų anglies atomų ryšiai yra vienodi ir labai stiprūs, todėl deimantas yra viena tvirčiausių žinomų medžiagų.

Kita svarbi struktūra yra  $sp^2$  hibridizacija. Ji sudaryta iš vienos s orbitalės ir dviejų p orbitalių – px ir py ir lieka viena laisva 2p orbitalė. Jos sudaro plokštumos struktūrą, o kristalas, sudarytas iš tokių struktūrų yra grafitas. Struktūros plokštumoje tarp atomų veikia stiprūs ryšiai, o tarp sluoksnių veikia tik silpnos Van der Waals jėgos. Ideali kristalinė grafito struktūra pavaizduota 4 pav. Nors tiek grafitas, tiek deimantas yra inertiniai, veikiant aukštam slėgiui ir aukštai temperatūrai grafitas virsta į deimantą. Nustojus slėgti, deimantas, nors ir stabilus, po truputį virsta į grafitą.



4 pav. Kristalinė grafito struktūra (a) ir galimos sluoksnių kombinacijos ABABAB (b) ir ABCABC (c). Adaptuota pagal [15].

Branduolinėje energetikoje grafitui keliami aukšti reikalavimai, tokie kaip didelis švarumas (virš 99,8%), didelis šiluminis laidumas ir kuo didesnis atsparumas spinduliuotės poveikiui. Šiuo tikslu yra keletas specializuotų grafito rūšių, kurios skiriasi tankiu, minimaliu dujų priemaišų kiekiu, stiprumu ir kt. Branduolinėje energetikoje naudojamas grafitas yra polikristalinė medžiaga, sudaryta iš didelio kiekio kristalų. Kristalai sudaryti iš grafeno sluoksnių, kuriuose anglies atomai sudaro šešiakampių tinklą, kur atstumas tarp atomų  $a=2,461 \text{ \AA}$ , o atstumas tarp geometriškai gretimų sluoksnių yra  $c=6,708 \text{ \AA}$ . Dėl tarp sluoksnių esančios silpnos van der Waals sąveikos, sluoksniai gali išslysti iš idealios rikiuotės ir gali susidaryti ABC kombinacijos (4 pav. c). Gardelėje esančio anglies atomo ryšio energija yra apie 7 eV [6].

#### 1.4. RBMK-1500 reaktorius

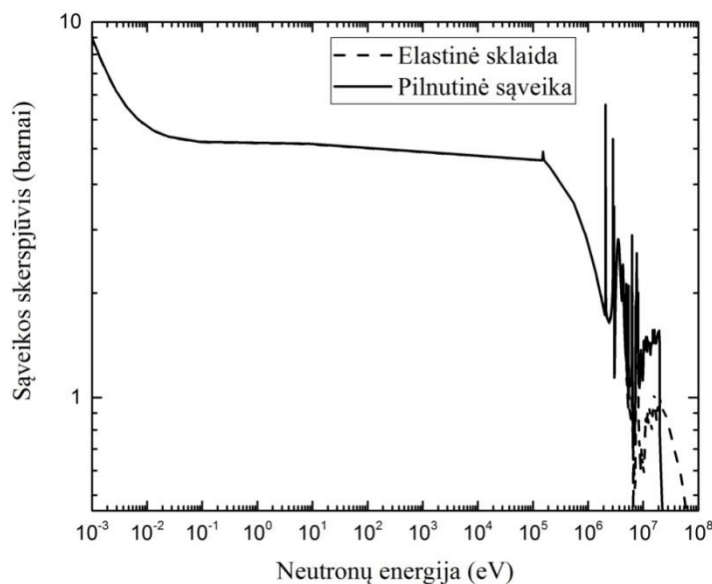
RBMK-1500 (rus. *Реактор Большой Мощности Канальный*) yra lengvuoju ( $\text{H}_2\text{O}$ ) vandeniu aušinamas kanalinio tipo reaktorius, kuriame grafitas naudojamas kaip neutronų lėtklis ir reflektorius. Reaktoriuje naudojamas 2,0 – 2,4% įsodrinimo  $\text{UO}_2$  kuras, kuris talpinamas į 13,6 mm skersmens cirkonio apvaskalą – vamzdelį. 18 kuro vamzdelių sudaro kuro rinklę. Kuro išdegimas siekia 12 – 16 MWd/kg 2% įsodrinimo kurui ir nemažesnis nei 21 MWd/kg 2,4% įsodrinimo kurui [16]. Reaktoriaus aktyvioji zona yra cilindro formos ir sudaryta iš 2488 grafito kolonų, kurių kiekvienos aukštis yra 8 m ir kurias sudaro skirtingų tipų grafito blokai. Viršutinę ir apatinę kolonos dalį sudaro 0,5 m aukščio grafito reflektoriai (atspindi neutronų spinduliuotę atgal į aktyviają zoną). Grafito kolona yra stačiakampio, kurio pagrindas yra 0,25 m kraštinės ilgio kvadratas, formos, o blokų aukščiai siekia 0,2, 0,3 ir 0,6 m. 2044 blokuose yra 0,114 m skersmens vertikali tuštuma, skirta kuro rinklei, valdymo strypui ar kitai įrangai. Likusios 444 kolonos užpildomos grafitu ir naudojamos kaip šoninis neutronų reflektorius. Tarp grafito bloko ir kuro kanalo yra papildomai įterpiami 0,011 m storio ir 0,02 m aukščio grafito žiedai. Šie žiedai vienas kito atžvilgiu orientuoti taip, kad vienas liestųsi su kanalu, o kitas liestųsi su grafito bloku – tokiu būdu užtikrinamas



šilumos pernešimas. Reaktoriui dirbant normaliuoju režimu grafito žiedo temperatūra siekia apie 350 °C, o grafito bloko temperatūra siekia apie 550 °C. Reaktoriaus aktyviosios zonos tuštuma užpildoma helio-azoto dujų mišiniu siekiant išvengti grafito oksidacijos ir pagerinti šilumos pernešimą tarp grafito ir kuro kanalų.

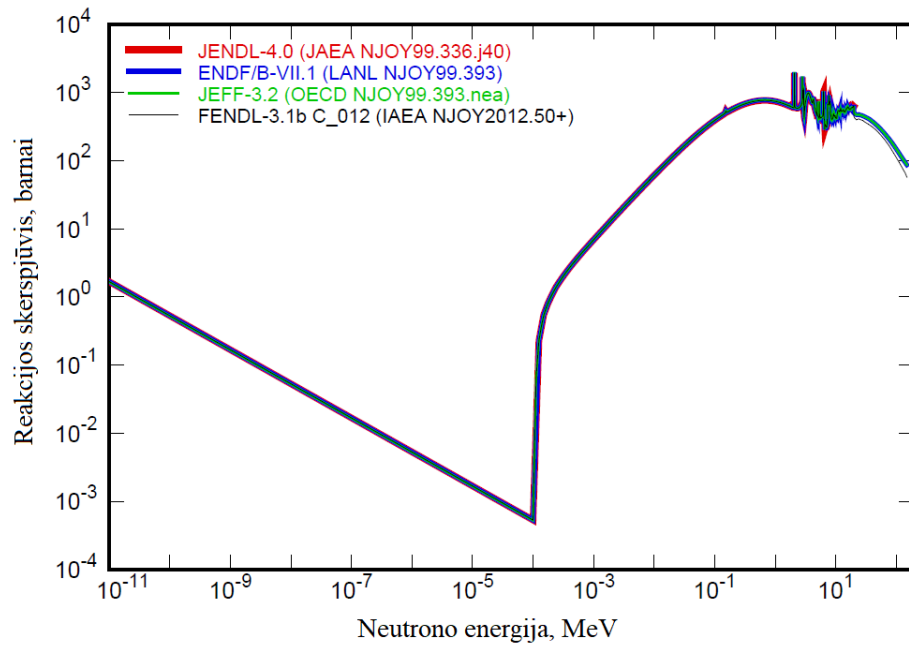
### 1.5. Neutronų sukelti defektai grafite

Egzistuoja keli keliai, kaip neutronas gali sukelti defektus kristale. Vienas iš mechanizmų yra branduolinės reakcijos. Sugėręs neutroną ir išspinduliuodamas dalelę branduolys patiria atotrūkį ir gali būti išmuštas iš savo pozicijos. Kaip minėta anksčiau, mažos energijos neutronams būdinga pagava, o dėl išspinduliuotų gama kvantų patiriamas priešingos krypties impulsas. Neutro sugerties skerspjūvis  $^{12}\text{C}$  ir  $^{13}\text{C}$  branduoliams yra mažas, palyginti su elastinės sklaidos skerspjūviu, tai neutro sugerties įvykių yra žymiai mažiau už sklaidos įvykius. Elastinės sklaidos skerspjūvio ir pilnutinio sąveikos skerspjūvio palyginimas pateiktas 5 pav.



5 pav. Neutro ir elementinės anglies pilnutinės sąveikos ir elastinės sklaidos skerspjūvių priklausomybė nuo neutro energijos. Adaptuota pagal [17].

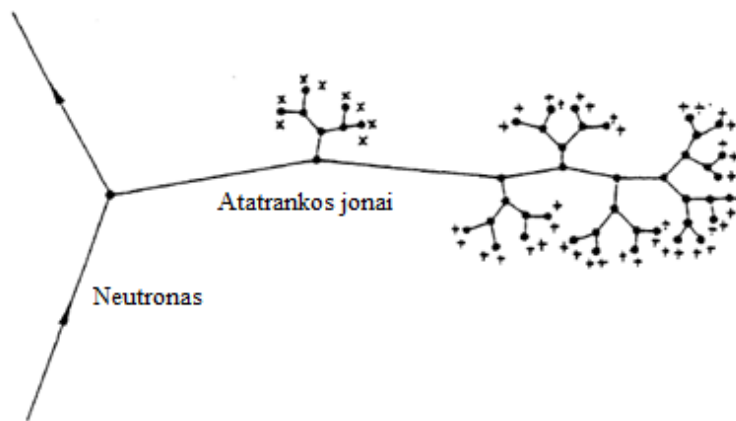
Tik nuo maždaug 5 MeV pilnutinis sąveikos skerspjūvis stipriau padidėja už elastinės sklaidos skerspjūvį, o to priežastis yra neelastinės sklaidos skerspjūvio didėjimas. Neutro sukulto išmušimo reakcijos skerspjūvio priklausomybė nuo energijos pateikta 6 pav. Paveiksle matomas stiprus lūžis ir spartus reakcijos skerspjūvio padidėjimas ties  $10^{-4}$  MeV energijos riba. Ši riba atspindi slenkstinę energiją, kuri reikalinga anglies atomą išmušti iš gardelės. Nuo šios ribos tiesiškai didėjantis reakcijos skerspjūvis mažėjant neutro energijai yra susijęs su didėjančiu pagavos reakcijos skerspjūviu.



6 pav. Anglies atomo išmušimo reakcijos skerspjūvio priklausomybė nuo neutrono energijos, skirtingų duomenų bazių duomenys. Adaptuota pagal [18].

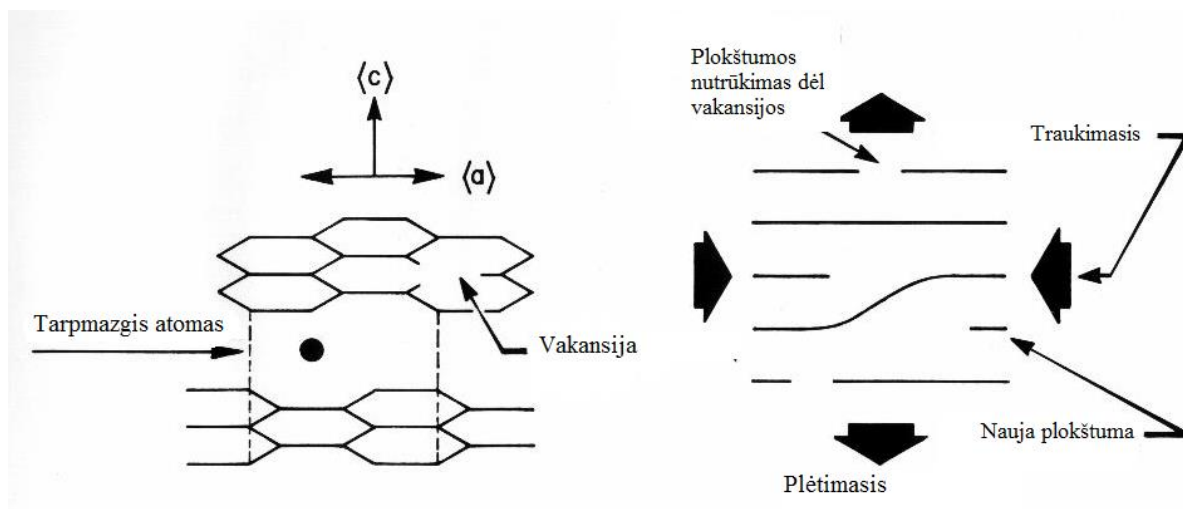
Didžioji dalis grafito kristalo defektų susidaro vykstant elastinei ir neelastinei anglies atomų sklaidai. Krentantis neutronas gali išmušti anglies atomą iš kristalo vietos, o išmuštas atomas, priklausomai nuo gautos energijos, gali išmušti kitus atomus. Dydis, kuris nurodo kiek išmuštų atomų tenka vienam medžiagos atomui yra DPA (angl. *displacement per atom*). Išmuštų pirminių atomų PKA (angl. *primary knock-on atom*) skaičius ir energija priklauso nuo krintančiojo neutrono energijos. Kai neutrono energija yra didelė, gali vykti neelastinė sklaida, kai išmuštasis atomas yra sužadintoje būsenoje ir vėliau išspinduliuoja fotoną.

Dėl išmuštų atomų grafito kristaluose susidaro Frenkelio poros – vakansijos gardelėje, kur buvo anglies atomas, ir išmuštieji atomai. Remiantis Kinchin–Pease modeliu, pirminiai neutrono – anglies atomo susidūrimai vyksta izotropiškai perduodant vidutinę energiją. Pirminis išmuštasis atomas yra jonizuotas, todėl energiją praranda atiduodamas elektronams, sąveikaudamas su gardele ir susidurdamas su kitais anglies atomais – tokiu atveju sukuriama išmuštų atomų kaskada. Kai išmuštieji atomai neturi pakankamai energijos, kad išmuštų kitus atomus, vyksta tolimesnis atomų judėjimas, kol pasiekiami termodinaminė pusiausvyra. Neutronų spinduliuotės inicijuotos kaskados pavyzdys grafitui pateiktas 7 pav.



7 pav. Neutrono inicijuotos pažeidimų kaskados grafite schema. Adaptuota pagal [19].

Stabdomas atomas sukuria papildomas išmuštų atomų grupes, o jos paprastai sudarytos iš 5 – 10 atomų [20]. Išmuštieji anglies atomai difunduoja tarp grafito sluoksnių ir gali rekombinuoti su gardelės vakansijomis. Taip pat išmuštieji atomai gali kauptis tarp sluoksnių, o tokie įstrigę atomai vadinami tarpmazgiais (angl. *interstitial*). Tarp sluoksnių defektai lemia kristalo plėtimąsi statmenai sluoksniams (8 pav. c ašis), o dėl vakansijų jungimosi lygiagrečios plokštumos traukiasi (8 pav. a ašis), bei gali atsirasti plokštumos trūkis. Išmuštų atomų poveikis grafito kristalui pateiktas 8 pav.



8 pav. Išmuštų atomų poveikis grafito kristalinei struktūrai. Adaptuota pagal [21].

Pirminis išmuštasis atomas dažniausiai turi pakankamai energijos, kad galėtų išmušti papildomus atomus. Vienas PKA, kuris gautas susiduriant 2 MeV neutronui, gali sukelti apie 1500 papildomų išmušimų prieš sustojant, todėl galima teigti, kad neutronų reaktoriuje pažeidimai atsiranda dėl atatranks jonų [19]. Išmuštieji atomai taip pat sklaidomi elastiškai ir neelastiškai. Didžiausią energiją turinčių atatranks atomų (10 MeV sukurtas PKA vidutiniškai turi 650 keV energijos) siekis yra labai mažas lyginant su neutrono inicijuoto pirminio išmušimo įvykiais, todėl PKA inicijuoti pažeidimai yra lokalūs – vyksta netoli nuo PKA susidarymo.

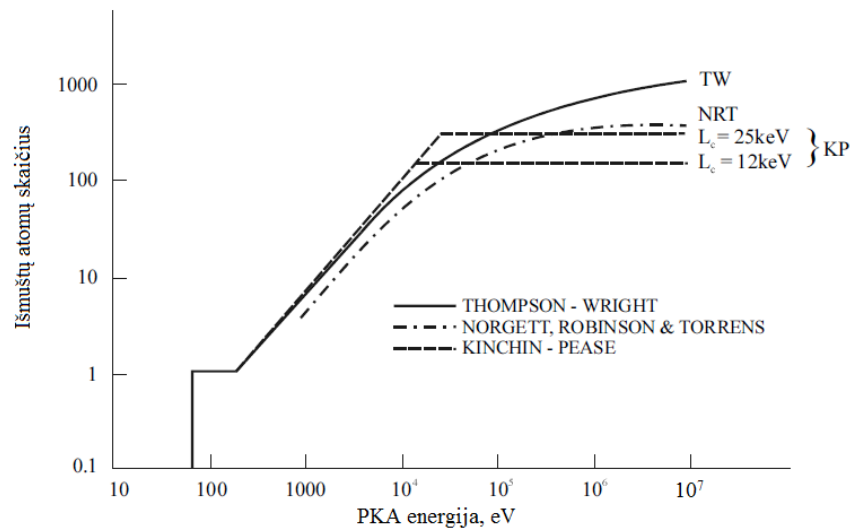
Siekiant įvertinti atomų išmušimus buvo sukurta keletas modelių. Vienas pirmųjų modelių yra Kinchin-Pease modelis, kuriuo remiantis intervale nuo tam tikros slenkstinės energijos iki viršutinės energijos sukurtų Frenkelio porų skaičius tiesiškai priklauso nuo pradinės PKA energijos [22]. Žemiau slenkstinės energijos  $E_d$  jokių naujų išmušimų neįvyksta, o jei PKA energija viršija tam tikrą viršutinę energijos ribą  $E_c$ , papildomų išmušimų neatsiranda, nes traktuojama, kad susidūrimų su atomais nevyksta, o krintančių atomų energija prarandama jonizuojant ir sužadinant aplinkinius atomus [23]. Remiantis šiuo modeliu išmuštų atomų skaičiaus  $\nu(T)$  priklausomybė nuo pažeidimo energijos  $T$  pateikta (7) formulėje:

$$\nu(T) = \begin{cases} 0, & \text{kai } T < E_d \\ 1, & \text{kai } E_d < T < 2E_d \\ \frac{T}{2E_d}, & \text{kai } 2E_d < T < E_c \\ \frac{E_c}{2E_d}, & \text{kai } T \geq E_c \end{cases}, \quad (7)$$

Šiuo metu dažniausiai naudojamas ir standartiniu skaičiuojant atominius išmušimus laikomas modelis yra NRT (pagal autorių pavardes: Norgett, Robbinson, Torrens). Remiantis šiuo modeliu, sukurtų taškinių defektų skaičius kaskadoje [24]:

$$\nu = \frac{\kappa T}{2E_d}, \text{ kai } T > \frac{2E_d}{\kappa}, \quad (8)$$

čia  $T$  – pažeidimo energija. Kaip galima pastebėti, ši formulė yra panaši į Kinchin-Pease formulę, tačiau papildomai įvertinamas išmušimo efektyvumas (angl. *displacement efficiency*)  $\kappa$ . Nustatyta, kad šis efektyvumas nepriklauso nuo energijos, temperatūros ir pačio taikinio ir yra apytiksliai lygus 0,8. Kinchin-Pease ir NRT modelių palyginimas pateiktas 9 pav. Čia pateiktas dar ir Thompson-Wright modelis, kuris yra patobulintas Kinchin-Pease modelis įvertinus atomo stabdymo gebos įtaką. Tarp modelių iki 10 – 100 keV PKA energijos skirtumai yra nežymūs ir išauga tik toliau didėjant PKA energijai.



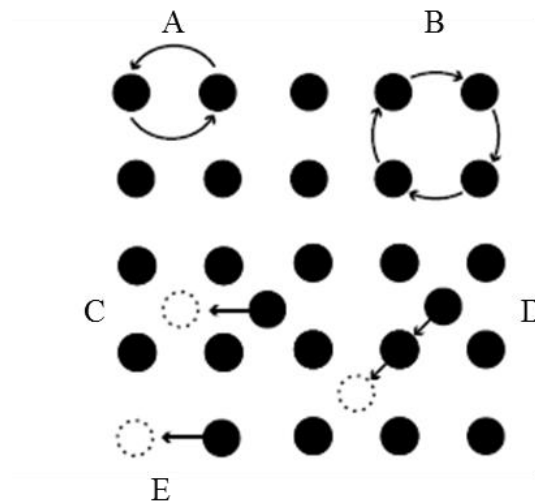
9 pav. Išmuštų atomų skaičiaus priklausomybė nuo PKA energijos remiantis skirtingais modeliais. Adaptuota pagal [6].

## 1.6. Taškinių defektų dinamika

Išmušimų kaskados pabaiga yra itin svarbus etapas, nes tai yra pradinis etapas, kai susidarę defektai gali difunduoti, aglomeruoti arba rekombinuoti. Laikinėje perspektyvoje kaskadą galima skirstyti į 4 etapus: 1) susidūrimų iniciacijos; 2) terminio šuolio (angl. *thermal spike*, *heat spike*); 3) gesimo (angl. *quenching*); 4) defektų rekombinacijos (angl. *annealing*). Pirmas etapas vyksta kai energingas atatrunkos jonas inicijuoja tolimesnių susidūrimų kaskadą. Šis etapas trunka tol, kol egzistuoja atomų, kurių energijos užtenka sukurti tolimesnius išmušimus. Šiame etape sukurti gardelės defektai yra nestabilūs. Antrajame etape susidūrimų energija yra paskirstoma tarp artimų gardelės atomų. Etapas vadinamas terminio šuolio dėl to, kad esant sunkiam atatrunkos atomui ir tankiai medžiagai antriniai susidūrimai vyksta labai arti vienas kito ir gaunamas didelis energijos išsiskyrimo tankis – lokalus temperatūros šuolis [25]. Trečiajame etape sistema grįžta į termodinaminę pusiausvyrą. Šiuo metu susidaro stabilūs gardelės defektai – defektų sankaupos arba pavieniai defektai. Didžioji dalis pradinių sukurtų defektų rekombinuoja ir tik nedidelė dalis tampa stabiliais defektais. Ketvirtoji stadija vyksta tol, kol kaskados regione nelieka mobilių defektų arba inicijuojama kita kaskada. Ši stadija trunka nuo kelių nanosekundžių, o stadijos trukmę lemia temperatūra ir apšvitos sąlygos [23].

Dėl gardelės šiluminių virpesių defektai gali difunduoti. Jei defektai yra šiluminėje pusiausvyroje su aplinka, tada judėjimas vadinamas savidifuzija (angl. *self-diffusion*). Judėjimas vyksta kai atsiranda lokalus defektų koncentracijos gradientas. Pagrindiniai defektų difuzijos mechanizmai pateikti 10 pav. Raidėmis A ir B pažymėtose vietose vyksta atomų apsikeitimas pozicijomis: A dalyje vyksta linijinis apsikeitimas, o B dalyje – žiedinis. Šiais atvejais apsikeitimas vyksta nepriklausomai nuo defektų buvimo kristale, o pats procesas reikalauja daug energijos ir kristaluose, kuriuose yra daug defektų, tampa nesvarbiu. Raide C pažymėtoje dalyje vyksta tarpmazgio judėjimas tarp atomų. Procesas reikalauja daug energijos ir paprastai vyksta su atomais,

kurie yra mažesni už gardelės atomus. D dalyje pavaizduotas tarpmazgio peršokimas į gardelės atomo poziciją jį perkeliant į tarpmazgį. Tokia difuzija gali vykti su atomais, kurių dydis yra panašus arba didesnis už gardelės atomų dydį [26]. E dalyje parodytas atomo peršokimas į vakansijos vietą. Šiuo atveju atomas peršoka iš savo pozicijos gardelėje į vakansijos vietą, o vakansija, analogiškai, pereina į buvusią atomo vietą. Dažniausiai kristale vyksta D ir E tipo difuzijos [23].



10 pav. Pagrindiniai gardelės atomų difuzijos mechanizmai: A – linijinis atomų pasikeitimas vietomis; B – žiedinis atomų pasikeitimas vietomis; C – tarpmazgio judėjimas tarp atomų; D – tarpmazgio peršokimas į gardelės atomo poziciją; E – atomo peršokimas į vakansijos vietą. Adaptuota pagal [23].

Esant aukštai temperatūrai, pavieniai tarpmazgiai gali jungtis į aglomeracijas. Tokios aglomeracijos susidaro dėl tarpmazgių mobilumo, o ryšių energijos yra 1 eV eilės – aglomeracijos yra atsparios disociacijai į tarpmazgius prie mažų temperatūrų. Lyginant su tarpmazgiais, gardelės vakansijos paprastai turi mažesnes susidarymo energijas, tačiau didesnes migracijos energijas, todėl yra mažiau mobilios. Vakansijų aglomeracijos yra mažiau stabilios, nes ryšių energijos yra 0,1 eV eilės [23]. Aukštoje temperatūroje didėja tarpmazgių ir vakansijų migracija, todėl didėja ir tikimybė rekombinuoti tarpusavyje. Nerekombinavę defektai gali toliau migruoti ir sąveikauti su priemaišų atomais, kitais kristalo defektais.

Dėl neutronų sukurtų taškinių defektų grafito lieka papildoma energija ir ši energija gali būti išlaisvinama kaitinant grafitą. Ši energija vadinama Wigner energija, o pats procesas vadinamas atkaitinimu (angl. *thermal annealing*). Paprastai kaitinant spinduliuotės paveiktą grafitą stiprus energijos išlaisvinimas atsiranda ties maždaug 200 °C [7, 27]. Šis procesas rodo, kad kaitinant grafitą aukštesnėje nei 200 °C temperatūroje taškinių defektų kiekis mažėja.

## 1.7. Skaitinis modeliavimas

Šiuolaikiniai kompiuterių pajėgumai leidžia atlikti itin daug resursų reikalaujančius skaičiavimus. Dėl šios priežasties teoriniam dalelių sąveikos su medžiaga vertinimui sukurta nemažai metodų, tokių kaip Monte Karlo, molekulių dinamikos (angl. *Molecular Dynamics*) ar kt. Molekulinės dinamikos metodu atomų sąveika vertinama tik mažose sistemose, todėl tampa sunku vertinti dalelių pernašą makroskopiniu lygmeniu [5]. Kita vertus, Monte Karlo metodais vertinamos didelės sistemos, tačiau juose neįskaitoma susidariusių defektų tolimesnė dinamika [28]. Šio darbo metu naudotos Monte Karlo metodu besiremiančios programos. Monte Karlo metodo esmė yra ta, kad tikimybiniai skirstiniai sudaromi vertinant daugelio atsitiktinai sugeneruotų pavienių dalelių sąveiką – kuo didesnis skaičius dalelių, tuo labiau tikėtinas gautas rezultatas. Vertinant gautus rezultatus reiktų atsižvelgti, kad jie gauti tik nurodytai sąveikai pasibaigus, t.y. tolimesnė sukurtų taškinių defektų sąveika nevertinama.

### 1.7.1. MCNP programa

MCNP (angl. *Monte Carlo N-Particle*) yra Monte Karlo metodu paremta dalelių pernašos programa, kuri gali būti naudojama modeliuojant neutronų, elektronų, fotonų ir kitų dalelių transportavimą medžiagoje. Programoje dalelės pernaša vertinama pasirinktoje erdvėje nuo jos atsiradimo iki dingimo, t.y. dalelė sekama nuo šaltinio iki išnykimo sąveikaujant su medžiaga arba pabėgimo iš tiriamos erdvės [29].

Prieš atliekant skaitinį modeliavimą būtina tiksliai aprašyti eksperimento geometriją. MCNP programoje geometrija aprašoma celėmis (regionais), kuriose nurodomi jas ribojantys paviršiai bei celę sudaranti medžiaga. Taip pat nurodomas dalelės sekimo svarbos parametras (angl. *importance*) tam tikroje celėje. Šis parametras naudojamas nutraukti dalelės pernašą celėje, jeigu svarbos reikšmė lygi 0. Vėliau aprašomi paviršiai nurodant jų koordinates ir dalelių šaltinis.

Vienas iš MCNP programos privalumų – veidrodinės plokštumos. Kiekviena į jas krintanti dalelė yra atspindima atgal į aktyvią celę. Kitas svarbus MCNP privalumas – PTRAC (angl. *particle track output card*) funkcija. Tinkamai nustačius sekimo parametrus MCNP sukuria atskirą bylą, kurioje talpinami pasirinkti dalelių parametrai – pozicija Dekarto koordinatinių sistemoje, krypties kosinusai, energija, taip pat dalelės atsiradimo priežastis, celė, kurioje dalelė yra ir kt. PTRAC funkcija gali sekti neutronus, protonus, sunkiuosius, lengvuosius jonus ir kitas daleles. Reakcijų skerspjuviai gaunami naudojant ENDF-VII bibliotekos duomenis.

### 1.7.2. SRIM programa

SRIM (angl. *stopping and range of ions in matter*) yra atviros prieigos programa, kuri plačiai naudojama vertinant jonų pluoštelio sąveikos su medžiaga sąveiką bei parametrus, atsižvelgiant į

kvant-mechaninius jono-atomo susidūrimo bruožus. SRIM programa taip pat naudoja Monte Karlo metodą. Programa remiasi metodika, kai jonų judėjimas medžiagoje traktuojamas kaip nepriklausomų dvinarių susidūrimų su atomais rezultatas, o metodas vadinamas *BCA* (angl. *binary collision approximation*). Šiuo atveju tarp judančių jonų negali vykti susidūrimai, o sukurtos Frenkelio poros laikomos stabiliomis [30]. Esant mažiems atstumams tarp branduolių, branduolinė stūma gali būti traktuojama kaip Kulono sąveika. Esant didesniems atstumams, elektronų debesys ekranuoja branduolius vieną nuo kito. Dėl šios priežasties stūmos potencialas  $V(r)$  aprašomas kaip Kulono jėga tarp dviejų branduolių su tam tikra ekranavimo (angl. *screening*) funkcija  $\varphi$ :

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \varphi\left(\frac{r}{a}\right), \quad (9)$$

čia  $Z_1, Z_2$  – branduolio krūvio skaičiai,  $r$  – atstumas tarp branduolių,  $a$  – ekranavimo atstumas. Funkcija  $\varphi\left(\frac{r}{a}\right)$  yra suma eksponenčių, kurios aprašo elektronų tarpusavio sąveiką esant mažiems atstumams, o viršijus ekranavimo atstumą  $a$ , ekranavimo funkcija nepriklauso nuo krūvio skaičiaus  $Z$ . SRIM naudoja Ziegler, Biersack ir Littmark (ZBL), arba universalų stūmos potencialą. Šis potencialas gautas pritaikant universalią ekranavimo funkciją pavieniams teoriškai įvertintiems branduolių stūmos potencialams ir puikiai tinka vertinant didelės energijos susidūrimus [31].

Standartinėse išvesties bylose SRIM gali pateikti: iš krintančių jonų į taikinio atomus perduotą energiją, taip pat energijas, kurią sugeria taikinio atomas, kurią sugeria atomas dėl krintančio jono Kuloninio stabdymo, taip pat sukurtų vakansijų skaičių ir pan. SRIM programa yra patogi tuo, kad galima naudoti pagal tam tikrus reikalavimus paruoštą įvesties bylą.

Programoje egzistuoja 3 pagrindiniai skaičiavimų metodai: 1) Kinchin-Pease metodas (K-P); 2) monosluoksnių metodas; 3) pilnų kaskadų metodas (angl. *Full Cascades*, F-C). Remiantis monosluoksnių metodu, krintantysis jonas turi susidurti kiekviename taikinio monosluoksnyje. Tokiu būdu kiekvienas susidūrimas įvertinamas be aproksimacijų. Šis metodas labiau svarbus vertinant taikinio dulkinimą (angl. *sputtering*), tačiau pakankamai tiksliai skaičiuojami ir kiti parametrai. Pilnų kaskadų metodu kiekvienas atatrunkos atomas yra sekamas tol, kol jo energija nukrinta žemiau minimalios išmušimo energijos. SRIM autoriai rekomenduoja pilnų kaskadų metodą vertinant taikinio pažaidas [32], tačiau kai kurie autoriai kritikuoja jį dėl neatitikimų su kitais metodais, todėl rekomenduoja naudoti Kinchin-Pease metodą su patobulinimais [33].

Egzistuoja keletas SRIM trūkumų, į kuriuos būtina atsižvelgti vertinant pažaidas. Pirmiausia skaičiavimuose traktuojama, kad kiekvienas krintantysis jonas sąveikauja su šviežiu taikiniu, t.y. nėra prieš tai kritusių jonų įtakos. Kitas svarbus trūkumas yra tas, kad taikinio temperatūra skaičiavimų metu yra 0 K ir nevertinami jokie šiluminiai efektai, dėl kurių kinta taikinio pažaidos. Taip pat vienas iš trūkumų yra tai, kad SRIM kodu modeliuojama tik amorfinė medžiaga, todėl



neatsižvelgiama į kai kuriuos kristalinių medžiagų ypatumus: pvz., nuo dalelės judėjimo krypties kristale priklauso išmušimo energija [5].

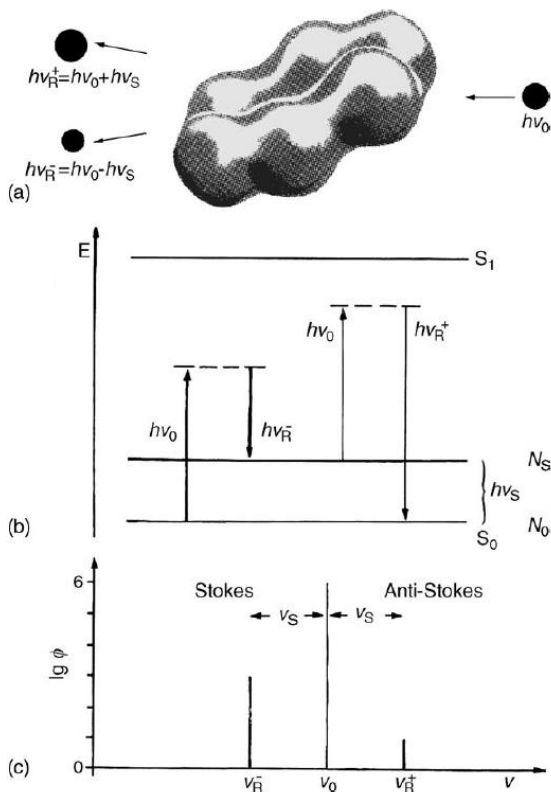
### 1.7.3. GEANT4 programų paketas

GEANT4 (angl. *GEometry ANd Tracking*) yra atviros prieigos C++ pagrindu parašytas ir CERN vystomas programų paketas, skirtas dalelių pernašos medžiagoje modeliavimui remiantis Monte Karlo metodu. Paketas ypatingas tuo, kad vartotojas gali pasirinkti ir redaguoti daugelį modeliavimo aspektų: detalią objekto geometriją bei supančias medžiagas, fizikos procesus bei modelius, kurie nustato dalelių sąveikas, dalelių sekimo parametrus, išorinius magnetinius laukus, detektorių atsako funkcijas, vykstančių procesų vizualizacijas ir kt. [34]. Naudojant GEANT4, vartotojas turi pats parašyti programą naudodamas C++ klasių bibliotekas ir vėliau ją kompiliuoti. Programų paketas naudojamas daugelyje sričių, tačiau pagrindinės yra medicininiai bei branduoliniai tyrimai. Nors GEANT4 paketas branduolinių tyrimų srityje dažniau naudojamas modeliuojant jonizuojančiosios spinduliuotės detektorius, tačiau puikiai tinka vertinant atominius išmušimus [35]. GEANT4 aplinkoje vietoje ZBL potencialo, naudojamo SRIM, naudojamas ekranuotos Kulono sklaidos (angl. *screened Coulomb scattering*) potencialas. SRIM aplinkoje naudojama aproksimacija, kai tikslus mažų kampų rezultatas ekstrapoliuojamas dideliems kampams, o GEANT4 aplinkoje tikslus sklaidos kampas vertinamas kaip smūgio parametro (angl. *impact parameter*) (atstumas tarp tiesės, išilgai kurios judėjo dalelė prieš sklaidą, ir branduolio) funkcija [36]. Metodo esmė yra ta, kad vykstant sklaidai, klasikinės judėjimo lygtys yra integruojamos ir gaunamas tikslus sklaidomos dalelės ir atatrakos branduolio sekimas [37].

### 1.8. Grafito Ramano spektrometrija

Kai bandinys yra veikiamas monochromatinės spinduliuotės, fotonams sąveikaujant su medžiaga didžioji dalis jų yra sklaidoma elastiškai, t.y. šviesos dažnis ir bangos ilgis nepakinta. Tai vadinama Reilėjaus sklaida (angl. *Rayleigh scattering*). Vykstant neelastinei sklaidai yra sugerama arba atiduodama energija molekulei sugeriant vieno dažnio fotoną ir išspinduliuojant kito dažnio fotoną. Jei pradinės spinduliuotės dažnis  $\nu_0$  yra didesnis nei išsklaidytos – stebima Ramano Stokso sklaida, o jei mažesnis – stebima Ramano anti-Stokso sklaida. 11 pav. pateikta Ramano sklaidos schema: (a) dalyje pavaizduotas netampriosios fotono sklaidos molekulėje procesas, kai gali būti išspinduliuotas mažesnio  $\nu_R^-$  arba didesnio dažnio  $\nu_R^+$  kitas fotonas, (b) dalyje pavaizduotos Ramano šuolio energinės diagramos, kur  $N$  raide pažymėtas nesužadintas energinis lygmuo,  $N_s$  pažymėtas pirmasis sužadintasis lygmuo,  $h\nu_s$  – energijos skirtumas tarp pirmojo sužadintojo ir nesužadintojo lygmenų, (c) dalyje pavaizduotas tokio proceso Ramano spektras. Ramano Stokso sklaida vyksta tada, kai molekulės yra sužadintos iš žemesnio vibracinio ar rotacinio lygmens į aukštesnį ir fotonas

praranda energiją. Anti-Stokso sklaida vyksta, kai molekulė ar atomas atiduoda energiją išsklaidytam fotonui pereinant į žemesnį lygmenį. Kadangi molekulės vibracinių ir rotacinių lygmenų užpildymas priklauso nuo temperatūros, esant termodinaminei pusiausvyrai žemesni lygmenys yra labiau užpildyti nei aukštesnieji, todėl Stokso Ramano sklaida vyksta dažniau nei anti-Stokso [38].



11 pav. Ramano sklaidos schema: (a) netamprioji fotono sklaida susiduriant su molekule, (b) Ramano šuolio energinė diagrama, (c) Ramano spektras. Adaptuota pagal [39].

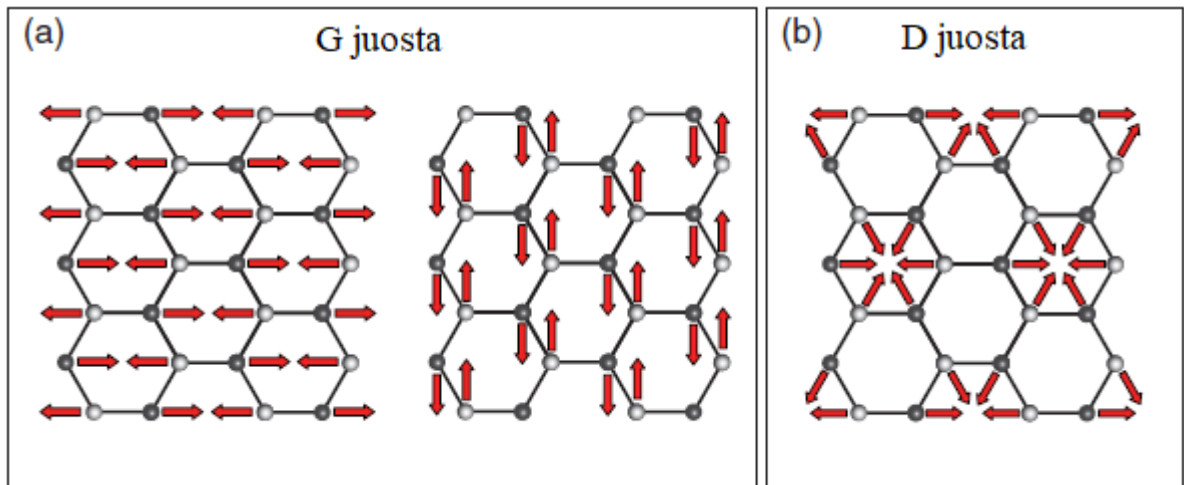
Dviatomė molekulė, patekusi į elektromagnetinės bangos elektrinį lauką, poliarizuojasi. Indukuotasis dipolinis momentas:

$$\mu_{ind} = \alpha \cdot E, \quad (10)$$

čia  $\alpha$  – molekulės poliarizuojamumas, o  $E$  – elektrinio lauko stipris. Virpant molekulei, kinta jos poliarizuojamumas, todėl kinta ir indukuotasis dipolinis momentas. Ramano juostų stipris nusakomas Ramano šuolio momento kvadratu, kurio modulis priklauso nuo molekulės poliarizuojamumo išvestinės nuo nuokrypio nuo pusiausvyros padėties [40]. Vadinasi juo stipresnė molekulės poliarizuojamumo kaita, tuo stipresnis juostos intensyvumas. Ramano sklaidos spektruose matomos ryšių, kurių virpesio metu kinta molekulės poliarizuojamumas, juostos intensyvumo priklausomybė nuo bangos poslinkio ( $\text{cm}^{-1}$ ).

Ramano spektrometrija yra vienas iš plačiausiai naudojamų metodų vertinant grafito paviršiaus pokyčius. Metodikos pagrindiniai privalumai yra tai, kad technika yra jautri, nedestruktyvinė, nereikia didelių matmenų bandinių ir kt. Grafito Ramano spektras pasižymi 2 pagrindinėmis

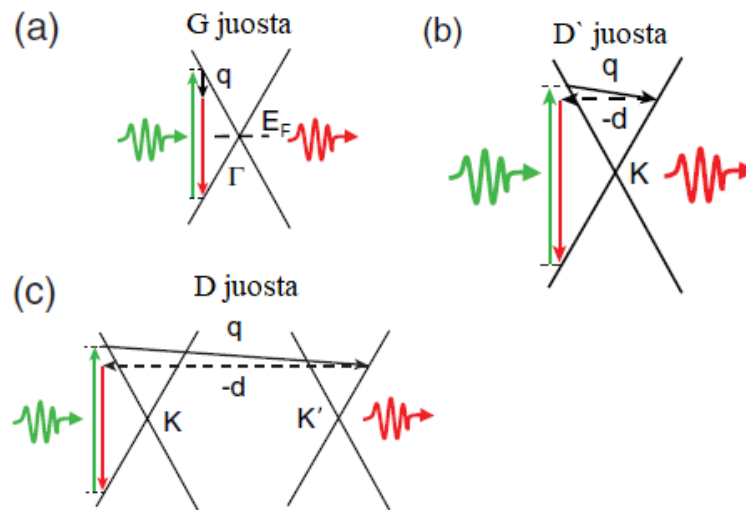
pirmosios eilės juostomis G ir D. G juosta ties  $\sim 1580 \text{ cm}^{-1}$  vadinama charakteringąja, ir ji matoma visuose  $sp^2$  hibridizacijos sistemose Ramano sklaidos spektruose. G juosta atspindi tarp  $sp^2$  hibridizacijos atomų porų besiplečiančius ryšius, kaip parodyta 12 pav. kairėje pusėje [41].



12 pav. Anglies atomų virpėjimas atsirandant (a) G juostai ir (b) D juostai. Adaptuota pagal [39].

Šiuo atveju krintantysis fotonas sužadina virtualią elektrono-skylės porą. Impulso tvermės dėsnis reikalauja, kad elektrono ir skylės impulsų suma būtų lygi nuliui. Elektronas arba skylė sukuria (arba sugeria) kvaziimpulso  $q$  fononą, kurio energija  $\hbar\omega$ , o  $\omega$  fonono dažnis. Tada vyksta spindulinė elektrono ir skylės rekombinacija – išspinduliuojamas fotonas, kurio bangos ilgio padidėjimas priklauso nuo fononui perduotos energijos [42]. Vyksmo schema pateikta 13 pav. (a) dalyje. Šio vyksmo metu gali dalyvauti tik Brillouin zonos  $\Gamma$  taške esantys fononai ( $q=0$ ), o procesas vyksta tik su vienu fononu.

Antroji pagrindinė juosta grafito Ramano spektre ties  $\sim 1330 \text{ cm}^{-1}$  žinoma kaip D (kai kur D1) arba defektų juosta. Ši juosta idealiaame grafito yra negalima dėl impulso tvermės dėsnio ir atsiranda tik esant kristalo netvarkai. Egzistuojant kristalo defektams, aktyvuojasi 12 pav. dešinėje pusėje pavaizduotas atomų virpėjimas, o tokia moda vadinama kvėpavimo (angl. *breathing mode*). Kadangi branduolinis grafitas yra polikristalinė medžiaga, tai atsiranda defektų ties kristalų ribomis (angl. *grain boundary*) ir visada stebimas antrosios juostos atsiradimas. Krintančiojo fotono sužadintas elektronas išspinduliuoja fononą, impulsui pakintant  $q$  verte, o tada jis sklaidomas defekto grįžta į pradinę poziciją ir gali rekombinuoti. Šiuo atveju defektas gali bet koks gardelės simetrijos trūkis:  $sp^3$  defektas, vakansijos sritis, kristalų riba ar kt. [39]. Procesų vyksmo schema pateikta 13 pav. (c) dalyje.



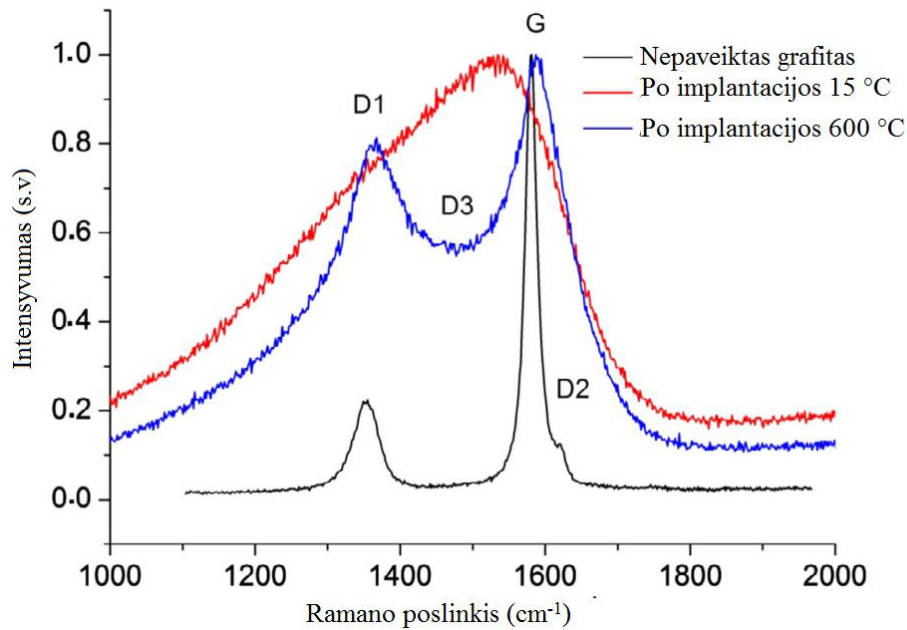
13 pav. Fotonų sklaida lemianti (a) G juostos ir (b) D juostos atsiradimą Ramano spektruose. Čia  $q$  yra fonono impulsas, o brūkšniais pažymėta elastingė sklaida dėl defekto. Adaptuota pagal [39].

Bendru atveju D juostos intensyvumas atspindi netvarką bandinyje, taip pat juostos intensyvumas didėja mažėjant kristalų dydžiui. Veikiant spinduliutei, D juostos intensyvumas didėja, nurodant defektų kaupimąsi ir struktūros tapimą netvarkia.

Grafito Ramano spektruose taip pat pasirodo  $D'$  (kai kur  $D_2$ ) juosta ties  $1620\text{ cm}^{-1}$ , kuri yra D juostos virštonis. Šios juostos intensyvumas didėja, didėjant tarpui tarp grafeno sluoksnių [43]. Kaip ir D juostai,  $D'$  juostai atsirasti reikalingi defektai.  $D'$  juostos atsiradimo procesas pavaizduotas 13 pav. (b) dalyje. Šiuo atveju sklaida nevyksta  $K'$  taške.

Tipinis Ramano spektras ir būdingos juostos šviežiame branduoliniame grafite (juoda spalva) ir paveiktame spinduliuotės (mėlyna ir raudona spalva) pateiktos 14 pav. Kai grafito bandinys yra veikiamas intensyvios spinduliuotės, struktūra gali būti stipriai pažeista ir tokio bandinio Ramano spektras šiek tiek pakeičia formą: atsiranda papildoma juosta tarp D ir G juostų (14 pav. esanti  $D_3$  juosta).  $D_3$  juosta yra plati juosta ties maždaug  $1500\text{ cm}^{-1}$  atsirandanti stipriai netvarkiuose bandiniuose. Kai kurie autoriai teigia, kad ši juosta susijusi su  $sp^3$  hibridizacijos atomų buvimu  $sp^2$  hibridizacijos struktūrose arba amorfine anglimi [43]. Grafito Ramano spektruose atsiranda ir daugiau juostų, tačiau šiame darbe jos nebus nagrinėjamos.

14 pav. Ramano sklaidos spektrai pateikti spinduliuotės nepaveiktam bandiniui bei skirtingose temperatūrose jonais implantuotiems bandiniams. Abiem implantavimo atvejais bandinys gavo tą patį  $\phi = 6 \cdot 10^{16}\text{ cm}^{-2}$  jonų įtėkį (7,4 DPA implantavimo gylyje pagal SRIM), tačiau spektrų forma skiriasi. Implantavimui vykstant aukštesnėje temperatūroje sparčiau vyksta defektų migracija, todėl dalis pirminių defektų rekombinuoja tarpusavyje bei sąveikaujant su gardelėje esančiais defektais. Dėl šios priežasties po implantavimo aukštoje temperatūroje amorfinė juosta nėra tokia aukšta kaip implantavimo žemoje temperatūroje juosta bei matomos D ir G juostos.



14 pav. Nepaveikto (juoda spalva) ir jonais paveikto (raudona ir mėlyna spalva) grafito Ramano spektrai, gauti naudojant 515 nm spinduliuotę, o jonų implantavimas vyko skirtingose temperatūrose. Adaptuota pagal [43].

Turint idealios struktūros grafitą ir sukiant defektus, jo Ramano spektre atsispindi 3 pagrindinės amorfizacijos stadijos: 1) grafito virtimas į nanokristalinį grafitą, 2) nanokristalinio grafito virtimas į mažai amorfinę  $sp^3$  anglį, 3) mažai amorfinės anglies virtimas stipriai amorfine anglimi [44]. Pagrindiniai efektai, aprašantys pirmąją stadiją, yra tokie: a) G juostos smailė pasistumia iš  $\sim 1580 \text{ cm}^{-1}$  į  $\sim 1600 \text{ cm}^{-1}$  sritį dėl išaugusio D' juostos intensyvumo, b) atsiranda D juosta ir padidėja D ir G juostų intensyvumų santykis  $I(D)/I(G)$ , c) padidėja juostų plotis. Pagrindinis struktūrinis pokytis yra perėjimas iš monokristalinės į polikristalinę medžiagą, o struktūroje praktiškai nėra  $sp^3$  sričių. Antrojoje stadijoje G juostos smailės padėtis iš  $\sim 1600 \text{ cm}^{-1}$  pasikeičia į  $\sim 1510 \text{ cm}^{-1}$ , o  $I(D)$  ir  $I(G)$  juostų santykis artėja į nulį. Tvarkingų šešiakampių žiedų struktūroje didėjant kristalo netvarkai atsiranda vis daugiau  $sp^3$  hibridizacijos sričių, o atstumas tarp defektų  $L_D$  mažėja, todėl tvarkingų žiedų skaičius ima mažėti, o kartu su juo mažėja ir D juostos intensyvumas [44]. Kadangi G juosta priklauso tik nuo  $sp^2$  porų ryšių plėtimosi,  $I(G)$  lieka nepakitęs, todėl  $I(D)/I(G)$  mažėja. Antrosios stadijos pabaigoje kristalo struktūra yra sudaryta iš daugiausia  $sp^2$  sričių, kurios turi penkiakampių, šešiakampių ir aukštesnio laipsnio netvarkingų žiedų konfigūracijas ir nedidelio kiekio  $sp^3$  sričių. Trečiosios stadijos metu  $sp^3$  sričių kiekis kristale stipriai auga, o  $sp^2$  sritys keičiasi iš žiedinių į grandinių tipo. Ramano spektre G juostos smailė slenkasi iš  $\sim 1510 \text{ cm}^{-1}$  į  $\sim 1570 \text{ cm}^{-1}$  dažnių sritį,  $I(D)$  ir  $I(G)$  juostų santykis tampa artimu 0.

Vertinant juostų D ir G intensyvumų santykį, galima spręsti apie bandinio paviršiaus struktūros netvarką, pvz., atstumą tarp defektų  $L_D(\text{nm})$  ir taškinių defektų tankį  $n_D(\text{cm}^{-2})$  esant bet kokiam lazerio žadinimo bangos ilgiui  $\lambda_L(\text{nm})$  grafene [45]:

$$L_D^2 = (1,8 \pm 0,5) \cdot 10^{-9} \lambda_L^4 \left( \frac{I(D)}{I(G)} \right)^{-1}, \quad (11)$$

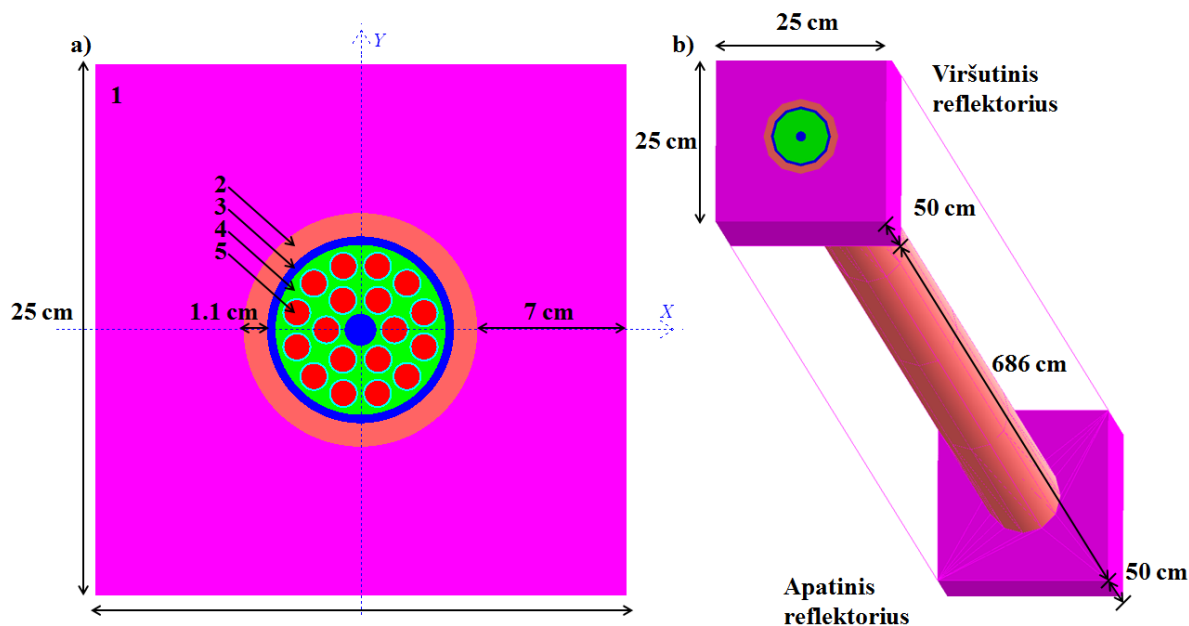
$$n_D = \frac{(1,8 \pm 0,5) \cdot 10^{22}}{\lambda_L^4} \left( \frac{I(D)}{I(G)} \right), \quad (12)$$

čia  $I(D)$  ir  $I(G)$  yra atitinkamai juostų D ir G intensyvumai. Esant mažai netvarkai ar perturbacijoms, rekomenduotina naudoti plotų po smailėmis santykius, nes tai simbolizuoja proceso tikimybę, o kai netvarka yra didelė, labiau rekomenduojama naudoti juostų amplitudžių intensyvumus bei juostos pločius pusėje aukščio – FWHM (angl. *full width at half maximum*) [46].

## 2. Tyrimo metodika

### 2.1. Modeliavimas MCNP programa

Modeliavimo objektu pasirinkta viena kuro rinklė apsupta grafito kolonos. Objektą sudaro 686 cm grafito kolona su kuro rinkle bei 50 cm aukščio grafito reflektoriai viršuje ir apačioje kolonos, o schema MCNP programos aplinkoje pateikta 15 pav. Realioomis sąlygomis kiekviena grafito kolona su kuro rinkle yra apsupta keleto kitų kolonų, iš kurių dalelės gali judėti į tiriamąją koloną. Panaudojus atspindinčias plokštumas, gaunamos panašios sąlygos, tačiau skaitiškai modeliuojama tik viena kolona, o tai leidžia supaprastinti ir sutrumpinti skaičiavimus. Modeliavime naudojamas vidutinio išdegimo 2,4 % įsodrinimo kuras. Neutronų ir jonų erdvinio pasiskirstymo vertinimui grafito kolona pagal radialinį profilį padalinama į 0,5 cm storio žiedus. Skaičiuojamas tokios konfigūracijos kritiškumas bei neutronų ir atatranksos jonų srautų pasiskirstymai. Susidariusių atatranksos jonų pagrindiniai parametrai gaunami panaudojus PTRAC funkciją.



15 pav. Vienos kuro rinklės grafito kolonoje vaizdas. Skaičiais pažymėtos dalys: 1 – grafito blokas, 2 – grafito žiedas, 3 – kuro rinklės vamzdelis, 4 – aušinimo vanduo, 5 –  $\text{UO}_2$  kuras.

### 2.2. Modeliavimas SRIM programa

Prieš atliekant atatranksos jonų sąveikos su grafito gardele skaitinį modeliavimą, MCNP programa sumodeliuotas jonų erdvinis pasiskirstymas SRIM programai pateikiamas nurodytu formatu (žr. 1 priedą): identifikacinis pavadinimas, numeris, kinetinė energija (eV), pozicija erdvėje (Å) ir krypties kosinusai. Modeliuojant MCNP programa jonų srautui būdinga cilindrinė simetrija. SRIM programa negali modeliuoti cilindro, todėl modeliuojamas grafito kubas, o aprašant atatranksos jonų pozicijas daromas koordinačių pakeitimas: atatranksos jono pozicija (radiusas ir aukštis) MCNP modeliuotoje grafito kolonoje keičiama į gylį bandinyje bei poziciją plokštumoje.

Tokia įvesties byla naudojama atatranksos jonų sąveikos su grafitu modeliavimui. Modeliuojant vertinamas susidariusių taškinių defektų skaičius jonui, taip pat defektų erdvinis pasiskirstymas. Modeliuojant atatranksos jonų sąveiką su medžiaga naudojami Kinchin-Pease (K-P) ir Full-Cascades (F-C) metodai.

SRIM programoje spinduliuotės atomų energija yra prarandama dėl elektroninių sužadinių, perduodama gardelės fononams arba prarandama dėl gardelės ryšių nutraukimo. Siekiant įvertinti sukurtas pažaidas pagal NRT metodą, SRIM aplinkoje pažaidos energija vertinama taip [33]:

$$T_{paž} = E_i^0 - E_i^I - E_T^I = E_i^P + E_T^P, \quad (13)$$

čia  $E_i^0$  – jonų spinduliuotės energija,  $E_i^I$  – pirminių jonų prarasta energija dėl jonizacijų,  $E_T^I$  – atatranksos jonų prarasta energija dėl jonizacijų,  $E_i^P$  – fononams perduota spinduliuotės energija,  $E_T^P$  – fononams perduota atatranksos energija. Šiuo atveju pažaidos energija yra jonų pluošto ir energijos, prarastos dėl jonizacijų, skirtumas arba perduotos energijos fononams suma.

### 2.3. Skaičiavimai „SPECTER“ programa

Taškinių defektų susidarymo spartai vertinti naudota „SPECTER“ programa. Tai yra atviros prieigos programa, kuri sukurta 1985 metais Argono nacionalinėje laboratorijoje, JAV, o jos pagrindinis privalumas yra tas, kad vartotojui reikia pateikti tik neutronų srauto duomenis. Programa pritaiko neutronų sąveikos bibliotekų bylas vartotojo nurodytai energijų grupių struktūrai ir apskaičiuoja parametrus: DPA vidurkius, dujų (He) pasigaminimą bei kt. Programa naudoja plačiai naudojamas neutronų sąveikos skerspjūvių bibliotekas ENDF/B-IV ir ENDF/B-V [47]. Vertinant taškinius defektus „SPECTER“ programa reikia atsižvelgti į pagrindinius trūkumus: DPA spartos apskaičiuojamos remiantis vien tik skerspjūvių bibliotekomis, t.y. neatsižvelgiant į neutronų ir jonų sąveikos su medžiagą ypatumus. Taškinių defektų susidarymo mechanizme neatsižvelgiama į aplinkos temperatūrą bei simuliuojama neutronų sąveika ne su grafitu, bet su anglimi kaip elementu, todėl neatsižvelgiama į tankį bei gardelei būdingus parametrus.

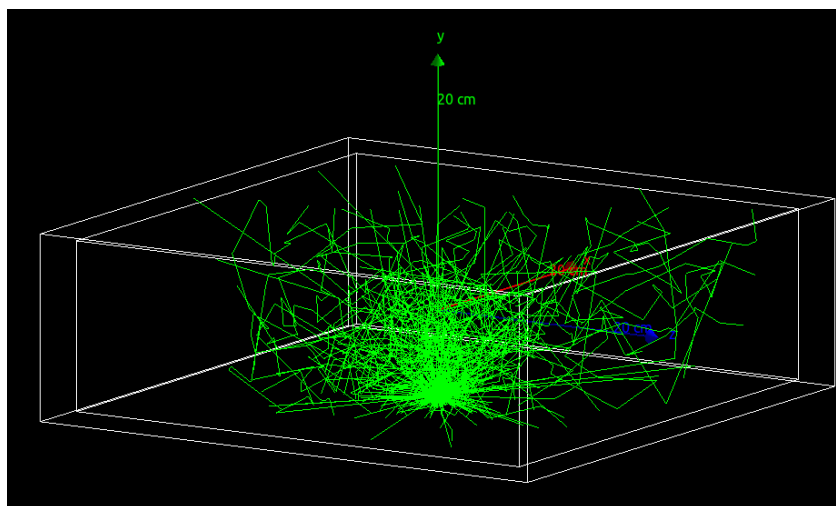
### 2.4. Modeliavimas GEANT4 programa

Dalelių pernašai grafite vertinti naudojama GEANT4 programos 10.3 versija. Kadangi branduoliniame reaktoriuje neutronų energijos siekia iki 20 MeV, sąveikai su medžiaga modeliuoti pasirenkamas *NeutronHPphysics* modelis, kuris naudoja ENDF/B-VII reakcijų skerspjūvių bibliotekos duomenis. Prie esamo modelio buvo pridėtas terminų neutronų sklaidos modelis, kuris atsižvelgia į kai kuriuos atomų parametrus: chemiškai surištų atomų vibracijos, išilginis judėjimas ir sukimasis turi įtakos reakcijų skerspjūviams ir sklaidos energijoms. Elektringųjų dalelių sąveikos fizikai aprašyti buvo pasirinktas kartotinės sklaidos (angl. *multiple scattering*, *MSC*) modelis, nes naudojami skaičiavimų algoritmai yra detalesni negu pavienių sklaidos įvykių modelio. Vertinant



jonų sąveiką su medžiaga naudojama pavienių Kulono sklaidos įvykių modelis, nes naudojant jį galima nustatyti tokią pat išmušimo energiją, kuri naudota SRIM skaičiavimuose [48].

Kadangi GEANT4 neturi galimybės naudoti veidrodines plokštumas dalelėms, vietoje grafito kolonos su kuru modelyje naudojamas mažesnių matmenų grafito blokas ir MCNP kodu gautas neutronų spektras. Grafito kubo modelis pateiktas 16 pav.: vidinis stačiakampis gretasienis yra grafitas, o išorinis stačiakampis yra riba, iki kurios atliekamas modeliavimas.



16 pav. GEANT4 aplinkoje modeliuojama 300 neutronų sąveika su grafitu. Šiuo atveju neutronai leidžiami Y ašies (į viršų) kryptimi iš pozicijos 0 -6,65 0 cm.

Pagal RBMK-1500 kolonos matmenis, didžiausias atstumas yra tarp grafito kolonos kampo ir kuro rinklės vamzdelio – jis apytiksliai lygus 13,3 cm. Modelyje grafito bloko kraštine išilgai Y ašies pasirenkamas šis matmuo. Modeliuojant nustatyta, kad kitų dviejų kraštinių didinimas rezultatų žymiai nekeičia, todėl, siekiant pagreitinti skaičiavimus, kraštinių matmenys yra 40 cm. Nustatomas izotropinis neutronų šaltinio kampinis pasiskirstymas, bet vertinama sąveika tik tų neutronų, kurie sklinda grafite.

Modelyje naudojamas GEANT4 duomenų bazėje esantis *G4\_GRAPHITE\_POROUS* grafitas, kurio tankis atitinka RBMK-1500 reaktoriuje naudojamo grafito tankį – 1,7 g/cm<sup>3</sup>. Nurodoma, kad grafito temperatūra siekia 750 K. Vertinant neutronų sąveiką su grafitu, renkama informacija apie dalelių energijos praradimą atstumo vienetui, taip pat atitransos jonų skaičių, jų energiją, erdvinį pasiskirstymą ir kt. parametrus. Pažaidos energija GEANT4 pakete įvertinama pagal tokią formulę:

$$T = E_{kin} \cdot L(E), \quad (14)$$

čia  $E_{kin}$  yra antrinių dalelių kinetinės energijos, o  $L(E)$  yra *Lindhard partition* funkcija.

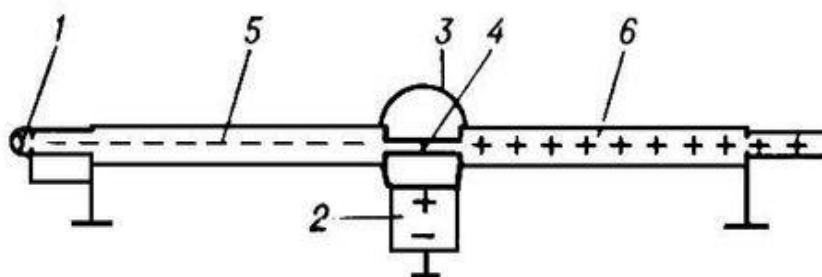
## 2.5. Anglies jonų implantavimas

Pagrindinis neutronų sąveikos su reaktoriaus grafitu mechanizmas yra anglies atomų išmušimai ir atitransos jonų sukurtos kitų atomų jonizacijos ir sužadinimai, susidedantys iš išmušimų kaskadas.

Implantavimo metu anglies jonų stabdymas medžiagoje taip pat sukuria tankias kaskadas, kur atitrūkusios energija yra didelė. Dėl šių priežasčių jonų sąveika su grafitu yra panaši į neutronų. Kadangi didžioji dalis pažaidų grafito atsiranda dėl neutronų sukurtų anglies atitrūkusios jonų sąveikos, anglies jonų implantavimas sukuria tokio pačio tipo pažaidas grafito.

Apšvitęs jonais metodas yra geras tuo, kad sukuriamas reikiama grafito gardelės struktūrinė pažaida, tačiau bandinys, priešingai nei veikiant neutroninei spinduliuotei, netampa radioaktyviu. Taip pat vienas iš pagrindinių privalumų yra galimybė pasiekti didelės dozės galias, t.y. reikiamas DPA skaičius gali būti sukuriamas per žymiai trumpesnę laiką nei neutronų spinduliuotės atveju.

Jonų implantavimo eksperimentams atlikti buvo naudojamas Tandetron 4110A (*General Ionex Corp.*) tandeminio tipo tiesinis jonų greitintuvas. Greitintuvo sistemos schema pateikta 17 pav.



17 pav. Greitintuvo *Tandetron 4110A* supaprastinta schema: neigiamų jonų šaltinis (1), aukšto įtampos generatorius (2), greitintuvo vamzdis (3), krūvio keitimo celė (4), neigiamų jonų pluoštelis (5), teigiamų jonų pluoštelis (6). Adaptuota pagal [49].

Sunkiųjų jonų šaltinyje *Hiconex 834* sukurti cezio jonai išmuša iš anglies taikinio jonus, o išmuštieji jonai greitintuvo sistemoje atlenkiami magnetais. Iš pradžių yra greitinami neigiami jonai, o tada aukšto įtampos generatoriumi jų krūvis keičiamas į teigiamą ir toliau vyksta greitinimas. Fokusavimo sistemoje esantis elektrostatinis kvadrupolinis lęšis fokusuoja ir nukreipia link magneto teigiamų jonų pluoštelį, pašalindamas neutralias komponentes bei nepageidaujamos krūvio būsenos teigiamus jonus ir tada pluoštelis nukreipiamas į bandinį. Dėl aparatūros ypatumų, stabilus implantavimo procesas gaunamas esant didelėms jonų pluoštelio energijoms (apie 2 MeV) [49]. Implantavimo metu pusė bandinio uždengta aliuminio folija, todėl ši paviršiaus dalis lieka nepaveikta. Tyrimo naudotų bandinių nuotrauka pateikta 18 pav. Kaip matoma, bandinių ilgis ir plotis yra po ~1 cm, o aukštis svyruoja nuo 0,7 cm iki 1,2 cm. Siekiant daryti kuo mažiau įtakos bandinių paviršiumi, jie po atskėlimo iš grafito kolonos nebuvo papildomai apdoroti.



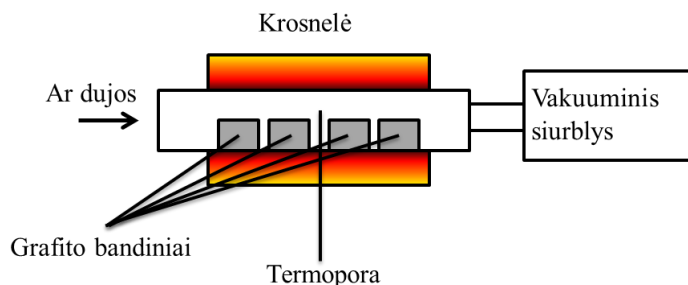
18 pav. Tyrime naudoti RBMK reaktoriaus kolonos grafito bandiniai.

## 2.6. Grafito Ramano sklaidos spektrų matavimas

Bandinių Ramano sklaidos spektrai išmatuoti Renishaw inVia Ramano spektrometru naudojant 633 nm bangos ilgio lazerinę spinduliuotę. Matavimai atlikti FTMC esančioje Spektroelektrochemijos laboratorijoje. Lazerio galia siekia 1-5 mW, o matavimų metu spindulio intensyvumas bandinio plokštumoje – 10%. Bandinio paviršiaus analizė atlikta naudojant 50x mikroskopo objektyvą. Esant tokiam didinimui analizuojamas 1-2  $\mu\text{m}^2$  bandinio paviršiaus plotas. Kiekvieno tyrimo metu analizuoto bandinio spektro registravimas vyko 100 sekundžių, spektrą centruojant ties 1800  $\text{cm}^{-1}$  juosta. Darbo spektrometru pradžioje ir pabaigoje buvo matuojamas silicio spektras, norint įvertinti galimą matavimo skalės pasislinkimą. Grafito bandiniuose matuoti atsitiktinai pasirinkti taškai, o viename bandinyje matuotų taškų skaičius yra nemažesnis už 5 taškus. Analizuojant Ramano sklaidos spektrus, rezultatai normuojami pagal maksimalią intensyvumo vertę į vienetą.

## 2.7. Grafito terminis apdorojimas

Grafito bandinių terminiam apdorojimui naudotos įrangos supaprastinta schema parodyta 19 pav. Įranga sudaryta iš techniškai švaraus (99,9%) argono dujų baliono, elektrinės krosnelės, termoporos su voltmetru, kaitinimo vamzdelio ir vakuuminio siurblio.



19 pav. Grafito terminio apdorojimo įranga.

Pirmiausia grafito bandiniai įvedami į vamzdelį prie krosnelės, tada atliekamas vamzdelio vakuumavimas. Išvakuumavus vamzdelį, į jį 10 sekundžių leidžiamas argonas. Kaitinimo metu

argono baliono bei dujų išėjimo vožtuvai išlieka šiek tiek atidaryti, palaikant dujų srautą. Grafito bandinių kaitinimas buvo atliekamas 400, 600 ir 800 °C temperatūrose, pasiekus darbinę temperatūrą kaitinant 5 valandas. Praėjus kaitinimo laikui grafito bandiniai aušinami atmosferos ore.

## 2.8. Tyrimo eiga

Tyrimo metu siekiama ištirti RBMK reaktoriaus grafito dėl neutronų poveikio sukurtų pažeidimų evoliuciją. Šiam tikslui pasitelkiamas skaitinis neutronų ir jonų sąveikos su grafitu modeliavimas, kurio metu įvertinami jonų implantavimo parametrai, pagal kuriuos sukurtos pažeidimos yra ekvivalenčios neutronų sukurtosioms reaktoriaus grafito. Pirmiausia atliekamas neutronų sąveikos su reaktoriaus grafitu skaitinis modeliavimas MCNP programa. Įvertinamas grafito kolonos konfigūracijos kritiškumas, neutronų bei jonų srautų pasiskirstymas, taip pat atatrakos jonų erdvinis pasiskirstymas. Naudojant MCNP, srautas skaičiuojamas vienai šaltinio dalelei (t.y. neutronui), todėl realiomis sąlygomis gaunamas srautas  $\Phi$  aprašomas formule [50]:

$$\Phi = \frac{P \cdot \bar{\nu}}{(1,6022 \cdot 10^{-13}) \cdot w_f} \cdot \frac{1}{k_{eff}} \cdot \Phi_{F4}, \quad (15)$$

čia  $P$  – kuro rinklės galia (W),  $\bar{\nu}$  – vidutinis neutronų skaičius, gaunamas dalijantis branduoliui,  $w_f$  – per vieną skilimą išsiskirianti energija (MeV),  $k_{eff}$  – MCNP programa apskaičiuotas neutronų daugėjimo koeficientas,  $\Phi_{F4}$  – MCNP įvertintas neutronų srautas ( $\text{cm}^{-2}$ ). Remiantis [51] šaltiniu, vidutinis neutronų skaičius dalijantis  $^{235}\text{U}$  branduoliui yra  $\bar{\nu} = 2,4355 \pm 0,0023$ , o vidutinė skilimo metu išsiskyrusi energija siekia 200 MeV. Atatrakos jonų erdvinį pasiskirstymą MCNP gali pateikti PTRAC išvesties byloje, kurios supaprastinimo tikslu naudojama atviros prieigos programa „ParsNIP“ [52], leidžianti PTRAC bylas supaprastinti pagal pasirinktus parametrus. Pagal SRIM programos reikalavimus apdorota MCNP PTRAC byla naudojama atatrakos jonų sąveikos su grafitu skaitiniam modeliavimui. Įvertinamas taškinių defektų erdvinis pasiskirstymas, jų skaičius vienam krintančiajam jonui. Atlikus skaitinį modeliavimą, DPA spartą galima apskaičiuoti pagal tokią formulę:

$$DPA = \frac{N_n \cdot N_{vak}}{N_{atomų}}, \quad (16)$$

čia  $N_n$  yra atsirandančių per laiko vienetą neutronų skaičius,  $N_{vak}$  yra vidutinis vakansijų skaičius vidutinės energijos neutronui, o  $N_{at}$  yra pilnutinis atomų skaičius tūryje. Atsižvelgus į vidutinę atatrakos jonų energiją ir pažeidimos energiją, NRT metodu įvertinama taškinių defektų susidarymo sparta.

MCNP programa gautas neutronų srauto pasiskirstymas naudojamas „SPECTER“ ir GEANT4 programose. „SPECTER“ programa įvertinama realias sąlygas atitinkančio neutronų srauto kuriamų pažaidų spartos priklausomybė nuo atstumo grafite. GEANT4 aplinkoje įvertinama atatrunkos jonų energija, sukuriamų taškinių defektų koncentracijos priklausomybė nuo atstumo bei DPA sparta grafite. Skirtingais metodais gauti rezultatai palyginami tarpusavyje ir su literatūros duomenimis.

Atsižvelgus į jonų implantavimo ir neutronų sąveikos su reaktoriaus grafitu procesų panašumus, skaitinio modeliavimo metu parenkamos sąlygos ekvivalenčioms pažaidoms sukurti. SRIM programa simuliuojamas įvairių energijų  $^{12}\text{C}$  jonų implantavimas į grafito gardelę ir įvertinamas jonų įtėkis, reikalingas tam tikrai DPA vertei pasiekti:

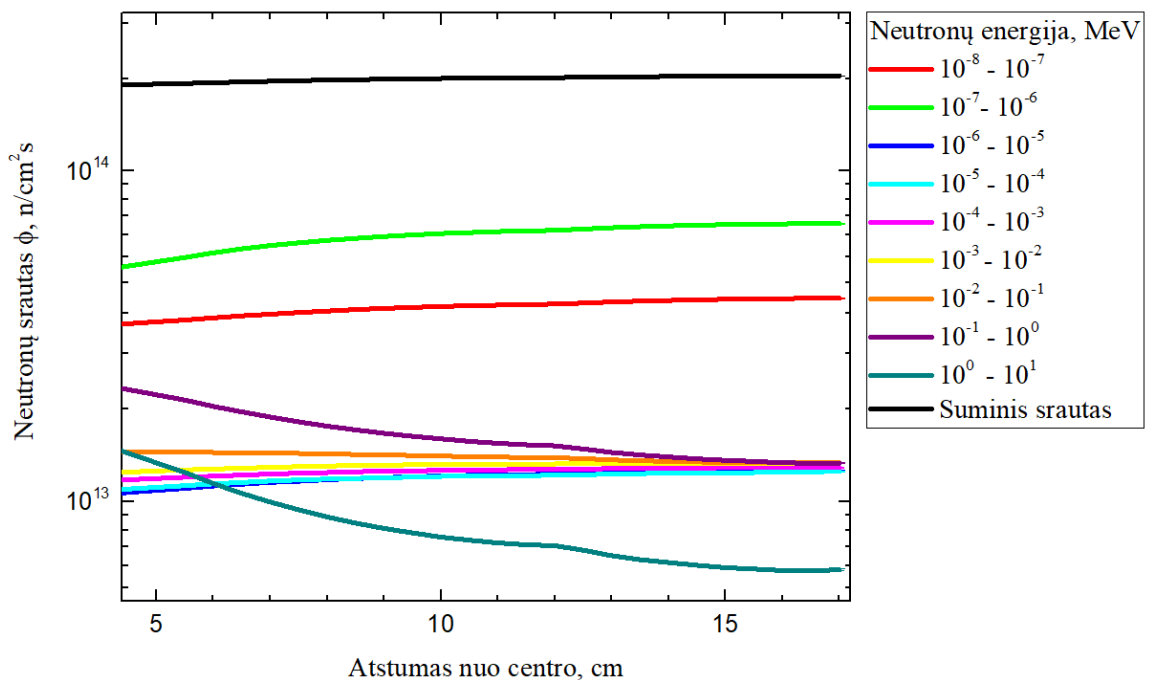
$$DPA = \frac{v\varphi}{n}, \quad (17)$$

čia  $v$  – vakansijų skaičius angstromui-jonui ( $\frac{vac}{\text{Å} \cdot \text{jonas}}$ ),  $\varphi$  – jonų įtėkis (jonai/cm<sup>2</sup>), o  $n$  – atomų tankis (cm<sup>-3</sup>). Remiantis gautaisiais rezultatais, atliekamas jonų implantavimas į grafito bandinius.

Implantavimo metu bandinio paviršiuje sukuriamų pažaidų kokybinis vertinimas atliekamas Ramano spektrometrine įranga. Atsižvelgus į tai, kad reaktoriuje pažaidos sukuriamos esant aukštos temperatūros sąlygoms, atliekamas bandinių terminis apdorojimas. Bandinių Ramano spektrai matuojami po kiekvieno terminio apdorojimo etapo ir, atsižvelgus į gautus spektrus, pagal D ir G juostų intensyvumų santykius vertinama atkaitinimo įtaka grafito paviršiaus pažaidų mažinimui ir pradinės struktūros atsistatymui.

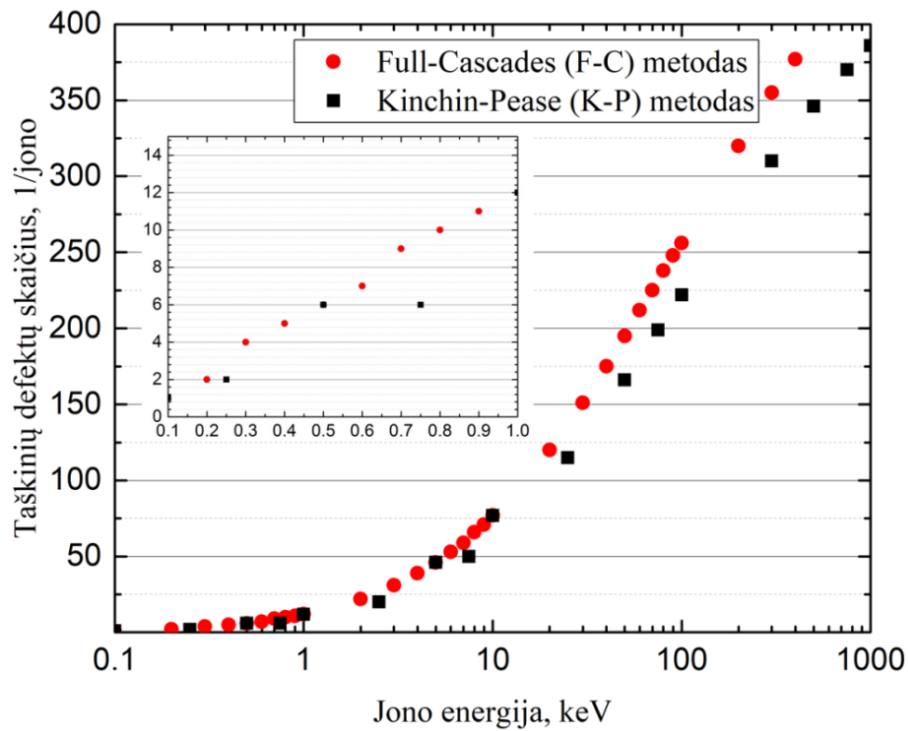
### 3. Tyrimo rezultatai

Vidutinė vienos kuro rinklės galia siekia apie 2,6 MW. MCNP apskaičiuotas tokios kuro rinklės ir grafito matricos neutronų daugėjimo koeficientas yra  $k_{eff} = 1,03$ . Pagal (15) formulę apskaičiuojamas realias reaktoriaus sąlygas atitinkantis neutronų srautas. Bendro srauto vertė kinta nuo  $\phi = 1,82 \cdot 10^{14} \text{ n/cm}^2 \text{ s}$  prie kuro rinklės iki  $\phi = 1,94 \cdot 10^{14} \text{ n/cm}^2 \text{ s}$  prie grafito bloko išorinio kampo, o srauto vidurkis yra  $\phi = 1,88 \cdot 10^{14} \text{ n/cm}^2 \text{ s}$ . Tokiu būdu apskaičiuotos neutronų srauto vertės atitinka literatūroje pateiktas vertes [53,54,55]. Neutronų srauto priklausomybė nuo atstumo grafito nuo kuro rinklės centro pateikta 20 pav.



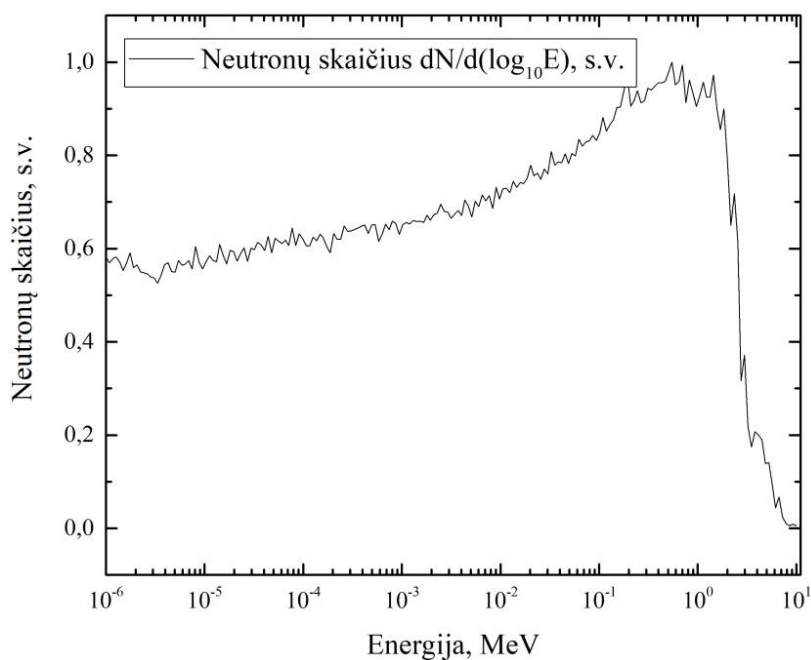
20 pav. Skaitinio modeliavimo metu gautų skirtingų energijų neutronų srauto priklausomybė nuo atstumo.

Didėjant atstumui, didelės energijos neutronų indėlis į bendrą srautą mažėja – atsiranda daugiau mažos energijos neutronų. Didelės energijos (0,1 – 10 MeV) srityje matomas srauto netolygumas ties 12 – 13 cm atstumu. Mažesnės nei 0,1 MeV energijos neutronams ties šia riba toks efektas nestebimas. Tai susiję su šioje srityje naudojamomis atspindinčios plokštumomis. Pagal MCNP atatrunkos jonų parametrus modeliuojant SRIM programa gauta, kad vienas atatrunkos jonas sukuria 160 – 172 vakansijų pagal Kinchin-Pease metodą ir 202 – 210 išmušimų pagal pilnų kaskadų metodą. Verčių išsibarstymas gautas dėl riboto dalelių skaičiaus Monte Karlo simuliacijos metu. Pagal MCNP vienam neutronui tenka vidutiniškai 13,8 atatrunkos jonų, kurių energija didesnė už 1 keV, t.y. MCNP nevertina jonų, kurių energija mažesnė už 1 keV. SRIM programa modeliuotų sukuriamų taškinių defektų priklausomybė nuo krintančiojo jono energijos pateikta 21 pav. Gauta, kad 1 keV energijos jonas gali sukelti apie 12 išmušimų, todėl vertinant rezultatus reikia atsižvelgti į tai, kad neįskaitomi papildomi išmušimai.



21 pav. Sukurtų tąskinių defektų skaičiaus priklausomybė nuo jono energijos grafite.

Atsižvelgus į atatrąkos jonų skaičių ir vakansijų skaičių jonui, pagal (16) formulę *K-P* ir *F-C* metodais apskaičiuotos DPA spartos yra, atitinkamai,  $R_{KP} = (1,45 \pm 0,11) \cdot 10^{-8} s^{-1}$  ir  $R_{FC} = (1,77 \pm 0,06) \cdot 10^{-8} s^{-1}$ . Pagal šias vertes per vienerius reaktoriaus veikimo metus grafito kolona vidutiniškai patiria  $DPA_{KP} = 0,46 \pm 0,04$  ir  $DPA_{FC} = 0,56 \pm 0,02$ . Pagal SRIM rezultatus atatrąkos jonų vidutinė energija yra 100 keV ir 0,9 % šios energijos perduodama tiesiogiai gardelės fononams, o 12,4 % šios energijos gardelės fononams atitenka per atatrąkos jonus. Pagal (8) ir (13) formules gauta, kad NRT metodu gauta DPA sparta lygi  $R_{NRT} = (1,48 \pm 0,05) \cdot 10^{-8} s^{-1}$ , arba  $DPA_{NRT} = 0,47 \pm 0,02$  per vienerių metų laikotarpį. Remiantis MCNP neutronų srauto rezultatais ir GEANT4 programa gauta, kad tirtame tūryje DPA sparta yra  $R_{GEANT} = (1,11 \pm 0,10) \cdot 10^{-8} s^{-1}$ , arba  $DPA_{GEANT} = 0,35 \pm 0,03$  per vienerius veikimo metus. Pagal MCNP neutronų srauto erdvinį pasiskirstymą „SPECTER“ programa įvertinama DPA priklausomybė nuo atstumo. Gauta, kad pažaidų kūrimo sparta kinta nuo  $R_{SPECTER} = (2,54 \pm 0,20) \cdot 10^{-8} s^{-1}$  arčiau centro iki  $R_{SPECTER} = (1,99 \pm 0,16) \cdot 10^{-8} s^{-1}$  prie grafito bloko išorės, o vidutinis pažaidų kiekis per vienerių metų laikotarpį yra  $DPA_{SPECTER} = 0,72 \pm 0,06$ . Lyginant metodų rezultatus matoma, kad GEANT4 sukurtų pažaidų skaičius yra mažesnis nei gautų kitais metodais. Kadangi GEANT4 modelyje nenaudojamos atspindinčios plokštumos, didelė dalis galinčių sukelti išmušimus neutronų pabėga iš tiriamojo tūrio. Tai patvirtina 22 pav. pavaizduotas neutronų energinis pasiskirstymas ties tiriamojo tūrio riba. Kaip matoma, didelė dalis greitųjų neutronų pabėga iš grafito.

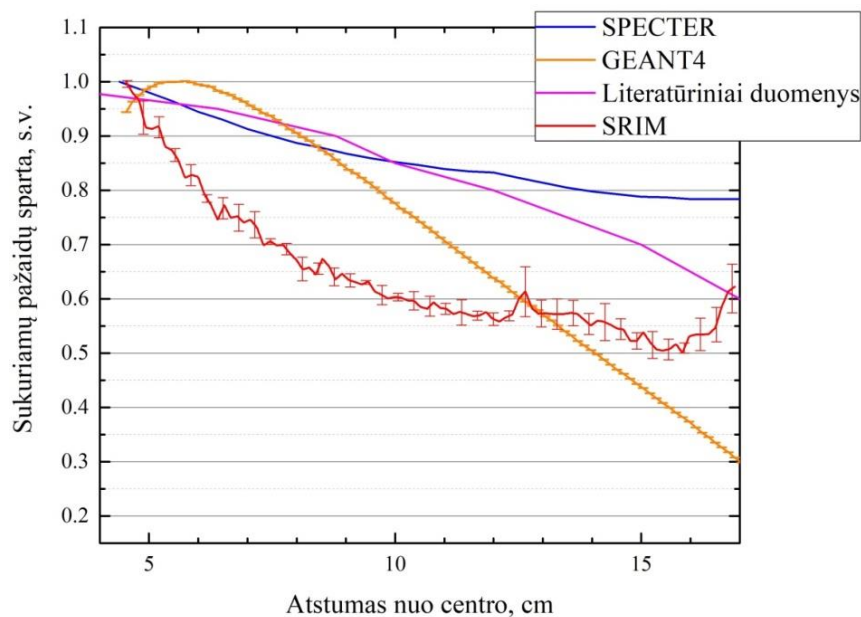


22 pav. GEANT4 programa gautas neutronų energinis pasiskirstymas ties tiriamojo tūrio riba.

„SPECTER“ gautos didesnės vertės gali būti paaiškintos tuo, kad apskaičiuojant naudojami tik reakcijų skerspjūviai – t.y. neatsižvelgiama į SRIM ir GEANT4 naudotą išmušimų energiją, taip pat neatsižvelgiama į mažesnę nei natūralaus grafito tankį. SRIM F-C ir K-P metodais gautos vertės yra panašios bei paklaidų ribose sutampa su NRT metodo rezultatais. Visais metodais gautų verčių vidurkis yra  $DPA = 0,51 \pm 0,12$ . Kituose reaktoriuose, kuriuose grafitas naudojamas kaip lėtklis, DPA vertės per metus siekia nuo 0,2 iki 0,9 [56], todėl gautosios DPA vertės atitinka teorinius vertinimus.

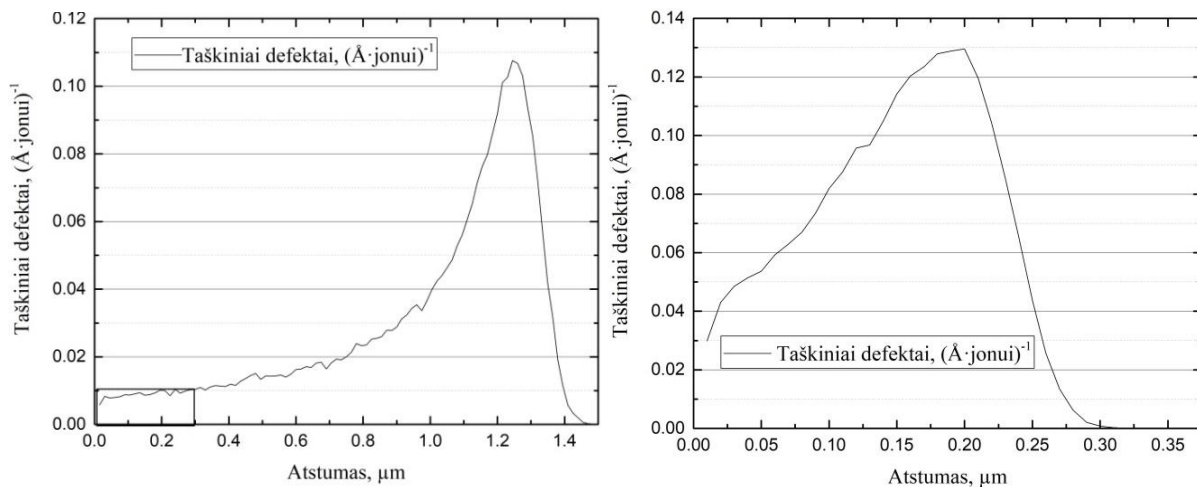
Sukūriamų pažaidų spartų priklausomybės nuo atstumo grafito pateiktos 23 pav. Pažaidų spartos normuotos į maksimalias vertes. Visomis programomis gaunama vienoda tendencija – grafito sukuriama daugiau pažaidų arčiau centro, o tolstant DPA kiekis mažėja. Tai susiję su didesniu išmušimų reakcijos skerspjūviu didesnės energijos neutronams bei atatrunkos branduolių sukeliomomis didesnėmis kaskadomis [18]. GEANT4 programa gauta, kad didėjant atstumui, pažaidų intensyvumas pradžioje šiek tiek padidėja, tačiau vėliau tiesiškai mažėja. Dėl pabėgusių iš tiriamojo tūrio neutronų atsiranda skirtumas tarp literatūroje nurodomos kreivės ir GEANT4 kreivės tolstant nuo neutronų šaltinio. SRIM rezultatai rodo, kad pažaidų intensyvumas iš karto stipriai mažėja, tačiau artėjant prie grafito bloko krašto intensyvumo mažėjimas sulėtėja – matoma atspindėtų neutronų įtaka. Padidėjęs skirtumas tarp literatūros duomenų kreivės ir SRIM kreivės gali atsirasti dėl modeliavimo ypatybių – neįskaitytų žemesnės nei 1 keV energijos atatrunkos jonų įtakos. „SPECTER“ rezultatai rodo, kad pažaidų intensyvumas tolygiai mažėja didėjant atstumui, kaip tai rodo ir literatūriniai duomenys [6].





23 pav. DPA spartos priklausomybės nuo atstumo grafite naudojant skirtingas programas ir literatūros duomenis.

Atliekant skaitinį modeliavimą SRIM programa įvertinta skirtingų energijų  $^{12}\text{C}$  jonų kuriamų taškinių defektų pasiskirstymo priklausomybė nuo atstumo grafite. Nustatyta, kad keičiant energiją kinta implantavimo gylis bei taškinių defektų pasiskirstymas. 70 keV ir 700 keV energijos  $^{12}\text{C}$  jonų kuriamų taškinių defektų profiliai pateikti 24 pav. Kadangi neutronų sukurtų anglies atitrūkusių didžiausia energija siekia apie 650 keV, o tiesinis jonų greitintuvas stabiliau veikia esant didesnėms pluoštelėlių energijoms, pasirinkti 700 keV energijos  $^{12}\text{C}$  jonai. Didžioji dalis implantuotų  $^{12}\text{C}$  jonų pasiskirsto apie 1,25  $\mu\text{m}$  gylyje – šioje srityje taip pat ženkliai kinta taškinių defektų skaičius. Tačiau taškinių defektų skaičiaus didėjimas bandinio paviršiniuose sluoksniuose yra nežymus (iki 0,3  $\mu\text{m}$ , sritis pažymėta stačiakampiu) lyginant su implantavimo gyliu. 70 keV energijos implantavimo metu kuriamų taškinių defektų skaičius žymiai išauga nuo pat bandinio paviršiaus.



24 pav.  $^{12}\text{C}$  jonų kuriamų taškinių defektų priklausomybė nuo atstumo: kairėje – 700 keV energijos, dešinėje – 70 keV energijos.

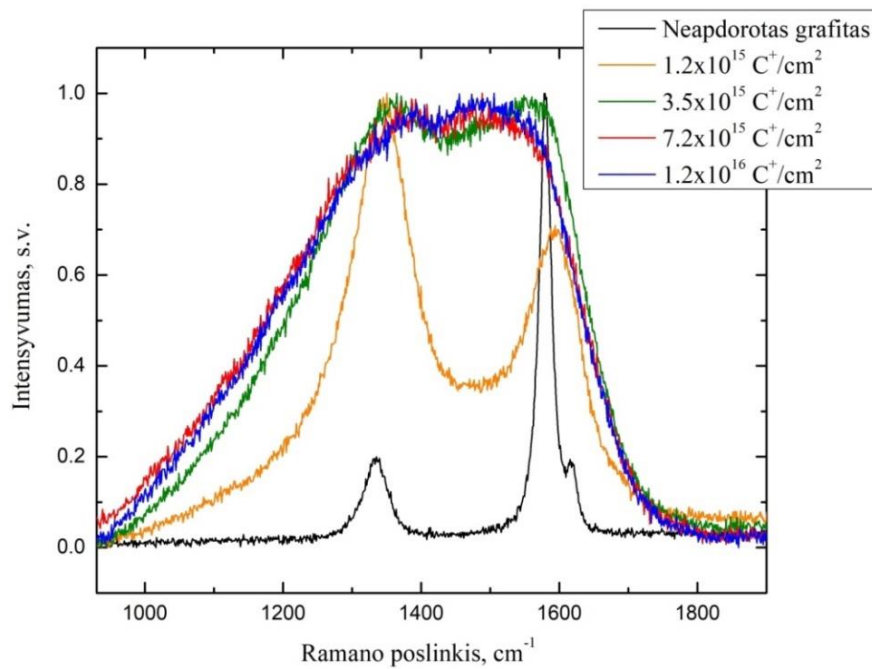
Šis sukurtų taškinių defektų pasiskirstymo skirtumas susijęs su jonų energijos praradimo mechanizmais, veikiančiais esant skirtingoms jono energijoms jam lėtėjant. Atsižvelgus į tai, kad milimetrų eilės atstumuose neutronų sukeltų pažaidų koncentracijos grafito yra pasiskirsčiusios stochastiškai, be pastebimos priklausomybės nuo gylio [23], galima teigti, kad srityje iki 0,3  $\mu\text{m}$  700 keV  $^{12}\text{C}$  jonų sukurtos pažaidos yra ekvivalenčios neutronų sukurtoms pažaidoms reaktoriaus grafito.

Siekiant įvertinti skirtingą pažaidų kiekį grafito, grafito bandiniai buvo paveikti  $1,2 \cdot 10^{15}$ ,  $3,5 \cdot 10^{15}$ ,  $7,2 \cdot 10^{15}$  ir  $1,2 \cdot 10^{16}$  jonų/ $\text{cm}^2$  įtėkais. Kadangi Ramano spektrometrijoje lazerio spindulio siekis grafito yra 40-70 nm [57], SRIM programa įvertinti pažaidų kiekiai 50 nm gylyje bei implantavimo gylyje (1,25  $\mu\text{m}$ ) pateikti 1 lentelėje, taip pat pateikiamas ir pažaidų vidurkis jonų paveiktoje bandinio srityje. Matoma, kad anglies jonų įtėkis  $\Phi = 3,5 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-2}$  implantavimo gylyje grafito sukuria panašų skaičių pažaidų kaip neutronų spinduliuotė reaktoriuje per vienerius metus. Siekiant atkurti neutronų sukeltas pažaidas implantavimo gylyje, t.y.  $DPA = 0,51$  dozė, reikalingas 700 keV energijos  $\Phi = 3,9 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-2}$  anglies jonų įtėkis.

1 lentelė. Grafito bandinių DPA vertės implantavimo gylyje (1,25  $\mu\text{m}$ ) ir bandinio paviršiuje (50 nm gylyje) pagal SRIM F-C metodą.

| Jonų įtėkis, $\text{cm}^{-2}$ | DPA vertė 1,25 $\mu\text{m}$ gylyje | DPA vertė 50 nm gylyje | DPA vidurkis |
|-------------------------------|-------------------------------------|------------------------|--------------|
| $1,2 \cdot 10^{15}$           | 0,15                                | 0,01                   | 0,04         |
| $3,5 \cdot 10^{15}$           | 0,45                                | 0,03                   | 0,13         |
| $7,2 \cdot 10^{15}$           | 0,92                                | 0,07                   | 0,27         |
| $1,2 \cdot 10^{16}$           | 1,51                                | 0,11                   | 0,44         |

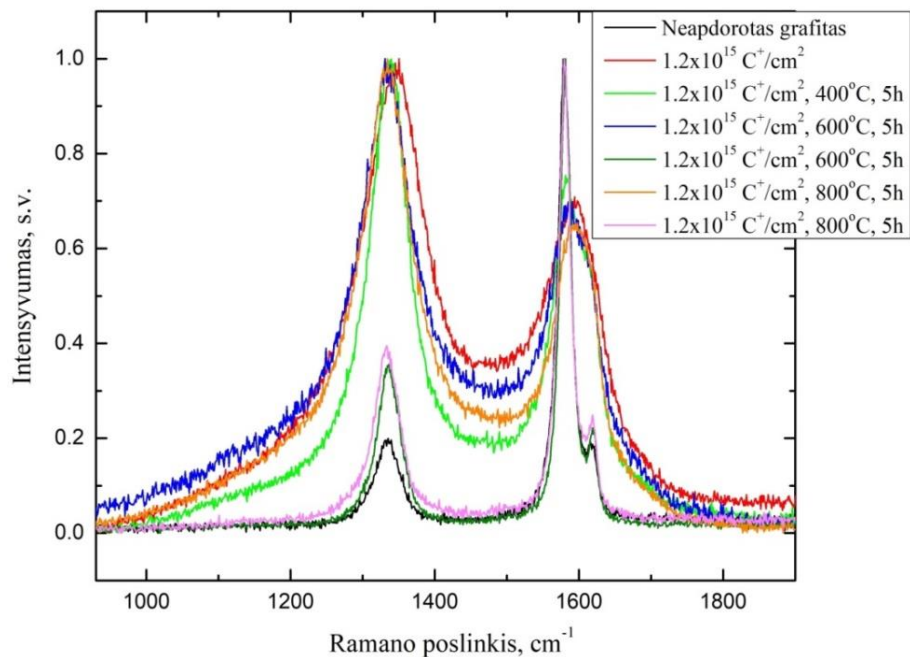
Implantavimo srautai pasirinkti pagal implantavimo gylyje patiriamą DPA kiekį apimant intervalą nuo 0,1 DPA iki 1,5 DPA. Šiomis dozėmis paveiktų ir implantavimo nepaveiktų bandinių Ramano spektrai pateikti 25 pav.  $7,2 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-2}$  įtėkį patyręs bandinys dėl techninių kliūčių buvo atkaitintas tik vieną kartą, todėl darbe jo Ramano spektrai po atkaitinimo ir tolimesni rezultatai nepateikiami. Jonais nepaveikto grafito spektras pavaizduotas juoda spalva. Kadangi branduolinis grafitas yra porėta polikristalinė medžiaga, defektų juosta yra iškilusi ir nepaveiktame bandinyje, taip pat iškilusi ir D' juosta. Geltona spalva pažymėtame spektre matoma, kad po implantavimo stipriai išaugo defektų juostos intensyvumas – jis tapo didesniu už G juostos intensyvumą. Taip pat matoma, kad G juostos smailė pasislinko į didesnio dažnio sritį dėl išaugusios D' juostos įtakos. Žalia spalva pažymėtame spektre matoma stipriai išaugusi D3 juosta – intensyvumas beveik lygus defektų ir charakteringosios juostos intensyvumams. Grafito charakteringosios juostos smailė pasislinko į mažesnio dažnio sritį – dėl sukurtų defektų grafitas tampa amorfiniu. Raudona ir mėlyna spalvomis pažymėtuose spektruose D ir G juostas pradeda užgožti viena D3 juosta, o pats grafitas tampa stipriai amorfiniu.



25 pav. Jonais paveiktų ir nepaveikto bandinių Ramano spektrai.

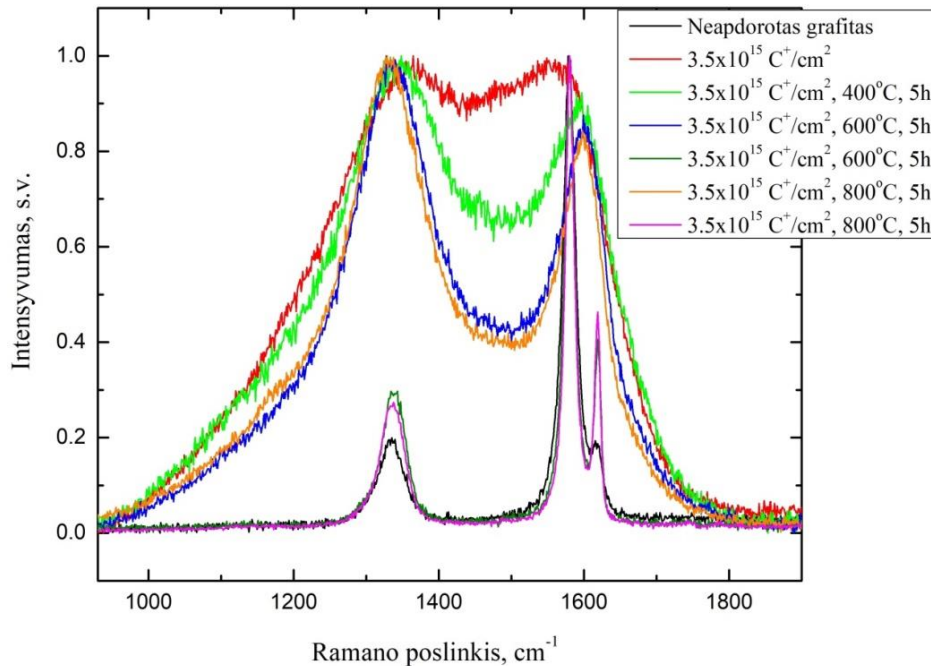
Pagal Ramano spektrus ir SRIM rezultatus galima teigti, kad DPA vertei implantavimo gylyje artėjant prie 1 grafito bandinys tampa stipriai amorfizuotu.

Po kiekvieno atkaitinimo etapo grafito buvo pamatuoti bandinių Ramano spektrai stebint temperatūros įtaką taškinių defektų koncentracijos pokyčiams grafito paviršiuje. 26, 27 ir 28 pav. pateikti  $\phi = 1,2 \cdot 10^{15}$ ,  $\phi = 3,5 \cdot 10^{15}$  ir  $\phi = 1,2 \cdot 10^{16}$  jonų/cm<sup>2</sup> įtekiais paveiktų bandinių Ramano spektrai.



26 pav. Grafito bandinio nepaveiktos srities ir  $1,2 \cdot 10^{15}$  jonų/cm<sup>2</sup> įtekiau paveiktos srities Ramano spektrai prieš atkaitinimą ir po atkaitinimo skirtingose temperatūrose.

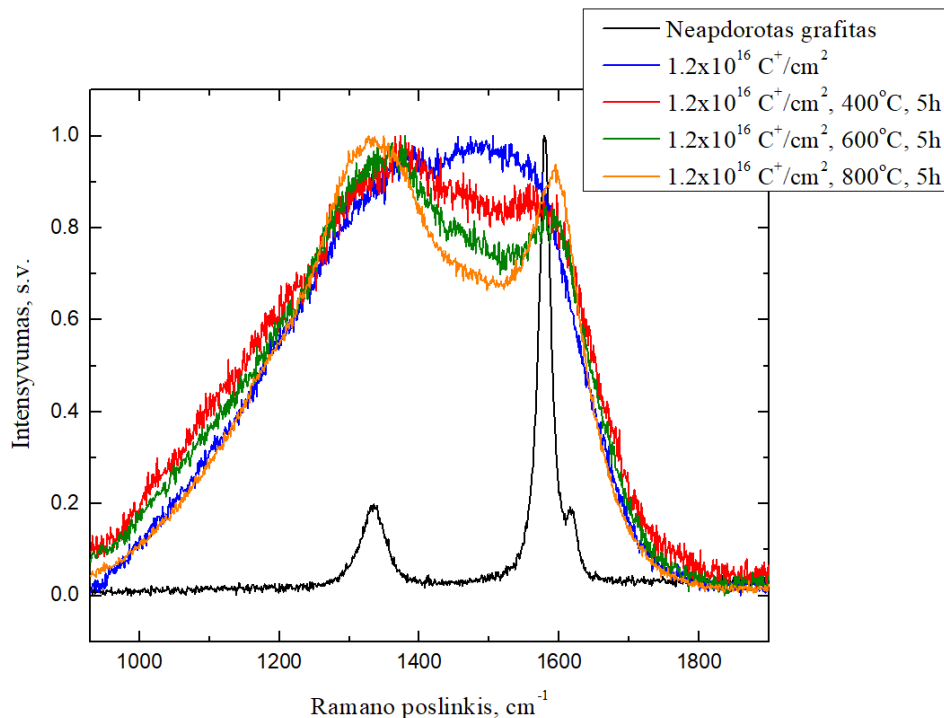
Tyrimo metu pastebėta, kad jonais nepaveiktos sritys po terminio apdorojimo likdavo nepakitusios – Ramano spektruose pastebimo pokyčio neatsirado. To priežastis yra polikristalinis grafito būvis ir natūraliai jame esantys defektai.  $\phi = 1,2 \cdot 10^{15}$  jonų/cm<sup>2</sup> įtėkiu paveikto bandinio Ramano spektre kaitinimo skirtingose temperatūrose rezultatas yra amorfinės D3 juostos smailės intensyvumo mažėjimas, kartu mažėjant ir D juostos pločiui pusės maksimumo aukštyje.



27 pav. Grafito bandinio nepaveiktos srities ir  $3,5 \cdot 10^{15}$  jonų/cm<sup>2</sup> įtėkiu paveiktos srities Ramano spektrai prieš atkaitinimą ir po atkaitinimo skirtingose temperatūrose.

$\phi = 3,5 \cdot 10^{15}$  jonų/cm<sup>2</sup> įtėkiu paveiktobandinio D3 juosta yra stipriau iškilusi nurodant didesnę bandinio amorfizaciją, tačiau po kaitinimo šios juostos intensyvumas žymiai sparčiau mažėja lyginant su  $\phi = 1,2 \cdot 10^{15}$  jonų/cm<sup>2</sup> įtėkiu paveiktu bandiniu. Po kaitinimo 600 °C temperatūroje buvo pastebėta, kad  $\phi = 1,2 \cdot 10^{15}$  ir  $\phi = 3,5 \cdot 10^{15}$  jonų/cm<sup>2</sup> dozėmis paveikti grafito bandiniai atsikaitino nevienodai – vieni taškai rodo, kad Ramano spektro forma priartėjo prie švaraus bandinio Ramano spektro, o kiti taškai rodo, kad defektų juostos intensyvumas sumažėjo ne taip stipriai. Netolygumai galėjo atsirasti dėl netolygaus defektų pasiskirstymo: implantavimo metu atsirasdavo srovės fliktuacijos, o pats implantavimas buvo skenuojantis – t.y. vienos bandinio sritys galėjo gauti didesnę jonų srautą, o kitos sritys – žymiai mažesnę. Kadangi grafitas yra stipriai sugerianti matomą šviesą medžiaga, o šviesa sklaidoma tik viršutinių paviršiaus sluoksnių, Ramano spektruose gali atsispindėti netolygios defektų koncentracijos [58]. Kita priežastis gali būti RBMK-1500 grafito esančios priemaišos [59]. Kaitinimo metu dėl migracijos į paviršių pakilus net mažam kiekiui priemaišų, jos gali būti aktyvuotos lazerio ir daryti Ramano spektrui įtaką [60]. Be to, bandinių paviršius nebuvo papildomai apdorotas, todėl skelto paviršiaus nelygumai bei polikristalinė grafito struktūra galėjo daryti įtaką netolygiam atkaitinimui.

$1,2 \cdot 10^{16}$  jonų/cm<sup>2</sup> įtėkiu paveikto bandinio prieš atkaitinimą darytame Ramano spektre tampa sunku išskirti D ir G juostas – vyrauja amorfinė D3 juosta, kuri nurodo stiprų bandinio struktūros netvarkingumą. Kaitinant šį bandinį Ramano spektruose matosi amorfinės D3 juostos mažėjimas ir ryškėja atskiros D ir G juostos.



28 pav. Grafito bandinio nepaveiktos srities ir  $1,2 \cdot 10^{16}$  jonų/cm<sup>2</sup> įtėkiu paveiktos srities Ramano spektrai prieš atkaitinimą ir po atkaitinimo skirtingose temperatūrose.

Matuojant grafitą po kaitinimų matoma tendencija – pirmiausia mažėja amorfinės juostos intensyvumas, o defektų juostos intensyvumas pradeda mažėti tik dingus amorfinei juostai. Tai rodo grįžimą iš trečiosios į antrąją, o esant mažesniai pažeidimų kiekiui – grįžimas į pirmą stadiją amorfizacijos procese.

Vertinant juostų intensyvumą, pasirinktas intensyvumo amplitudės vertinimas. Tyrimo metu įvertintų D ir G juostų intensyvumų santykiai pateikti 2 lentelėje.

Lentelė 2. Pagrindiniai Ramano spektrų D ir G juostų intensyvumų dėsningumai.

| Jonų įtėkis,<br>cm <sup>-2</sup> | Po implantavimo                |      | 400 °C                         |      | 600 °C                         |      | 800 °C                         |      |
|----------------------------------|--------------------------------|------|--------------------------------|------|--------------------------------|------|--------------------------------|------|
|                                  | I <sub>D</sub> /I <sub>G</sub> | σ    | I <sub>D</sub> /I <sub>G</sub> | σ    | I <sub>D</sub> /I <sub>G</sub> | σ    | I <sub>D</sub> /I <sub>G</sub> | σ    |
| $1,2 \cdot 10^{15}$              | 1,38                           | 0,25 | 1,24                           | 0,13 | 0,38                           | 0,17 | 0,31                           | 0,12 |
| $3,5 \cdot 10^{15}$              | 1,02                           | 0,02 | 1,07                           | 0,05 | 0,36                           | 0,07 | 0,25                           | 0,04 |
| $1,2 \cdot 10^{16}$              | -                              | -    | 1,10                           | 0,03 | 1,19                           | 0,10 | 1,08                           | 0,02 |
| Nepaveiktas                      | 0,18                           | 0,06 |                                |      |                                |      |                                |      |

Ramano spektruose, kuriuose stipriai išaugusi amorfinė juosta ir negalima atskirti D ir G juostų, intensyvumų santykiai nevertinami. Bandiniuose, kuriuose pasireiškia netolygus atsikaitinimo

efektas, t.y. intensyviai mažėja tik amorfinės juostos intensyvumas, juostų intensyvumų santykiai kinta nežymiai, todėl lentelėje jie nepateikti.

Pagal intensyvumų santykių pokyčius ir Ramano spektrus galima teigti, kad tyrimo metu matytas pokytis tarp visų trijų amorfizacijos stadijų. Taip pat matoma, kad 0,15 ir 0,45 DPA dozes gavusių bandinių po kaitinimo 800 °C temperatūroje etapo D ir G juostų intensyvumų santykiai priartėjo prie nepaveikto bandinio santykio – beveik visi sukurti pažeidimai buvo panaikinti.

### Apibendrinimas

Darbo metu buvo atliktas neutronų ir atatrakos jonų sąveikos su branduolinio grafito kolona vertinimas MCNP, SRIM, „SPECTER“ ir GEANT4 programų paketais. Pasitelkiant neutronų srauto duomenis įvertinta grafito kolonos DPA vertė po vienerių metų skirtingais metodais yra lygi  $DPA_{KP} = 0,46 \pm 0,04$ ,  $DPA_{FC} = 0,56 \pm 0,02$ ,  $DPA_{NRT} = 0,47 \pm 0,02$ ,  $DPA_{GEANT} = 0,35 \pm 0,03$  ir  $DPA_{SPECTER} = 0,72 \pm 0,06$ , o šių verčių vidurkis yra  $DPA = 0,51 \pm 0,12$ . Tokie verčių nuokrypiai gauti dėl neįvertintų tam tikrų fizikinių procesų programose. Gautos vertės palyginamos su kitų reaktorių, kuriuose kaip lėtiklis naudojamas grafitas, duomenimis. Taip pat palyginamas neutronų sukeltų pažeidimų pokytis grafite tostant nuo neutronų šaltinio ir gauta, kad sukeltų pažeidimų kiekis priklauso nuo neutronų energinio spektro ir tostant nuo neutronų šaltinio mažėja.

Darbo metu atliekamas 700 keV anglies jonų implantavimas į grafito bandinius  $1,2 \cdot 10^{15}$ ,  $3,5 \cdot 10^{15}$ ,  $7,2 \cdot 10^{15}$  ir  $1,2 \cdot 10^{16}$  jonų/cm<sup>2</sup> įtėkiais siekiant aprėpti dozių intervalą nuo 0,1 iki 1,5 DPA. Po implantavimo proceso grafito bandiniai matuojami Ramano spektrometrine įranga lyginant juos tarpusavyje bei su jonais nepaveiktomis sritimis. Paveikus bandinius jonais stebimas defektų juostos intensyvumo padidėjimas, taip pat padidėja defektų juostos dispersija, o charakteringosios G juostos smailė slenkasi į didesnio dažnio sritį. DPA vertei implantavimo gylyje artėjant prie 1 Ramano spektruose vietoje atskirų D ir G juostų pradeda dominuoti plati D3 juosta, kuri nurodo bandinio amorfizaciją. Atliekant grafito bandinių atkaitinimus 400, 600 ir 800 °C temperatūrose registruoti Ramano spektrų pokyčiai bei vertinta atkaitinimo įtaka. Gauta, kad kaitinimo metu pirmiausia sumažėja amorfinės juostos intensyvumas bei pagal spektruose esančias tendencijas matomas perėjimas iš trečios į antrą, o vėliau ir į pirmąją stadiją amorfizacijos procese. Bandiniuose, kuriuose sukurta mažiau pažeidimų, po atkaitinimo pastebėti netolygumai Ramano spektruose įvairiuose taškuose. Netolygumai paaiškinami netolygiu implantavimu, grafite esančių priemaišų įtaka, polikristaliniu grafito būviu bei skelto paviršiaus nelygumais. Pagal D ir G juostų intensyvumų santykius gaunamas defektų koncentracijos mažėjimas.

Pagal teorinį vertinimą, parinkus tam tikrus jonų implantavimo bei terminio apdorojimo parametrus, laboratorinėse sąlygose galima sukurti pažeidimus, ekvivalentinius neutronų sukurtiems reaktoriaus grafite, ir stebėti jų evoliuciją.

## Išvados

1. Didžiausi nuokrypiai nuo skirtingomis programomis įvertinto neutronų sukeliamų pažeidimų vidurkio  $DPA = 0,51 \pm 0,12$  gauti vertinant „SPECTER“ programa (~41% daugiau) bei GEANT4 programų paketu (~31% mažiau) yra nulemti nepakankamai tikslaus fizikinių procesų vertinimo pasirinktose metodikose. Naudojant SRIM metodiką gauti rezultatai labiausiai sutampa su standartiniu laikomo NRT metodo rezultatais, todėl ji tinkamiausia praktikoje.
2. Įvertinus reaktoriaus grafite neutronų sukuriamų  $^{12}\text{C}$  atatrakos jonų energiją ir pažeidimų sukūrimo procesą bei atsižvelgus į technines galimybes, parinktas 700 keV  $^{12}\text{C}$  jonų įtekis  $\Phi = 3,9 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$  implantavimo metu grafito bandinyje sukuria pažeidimas, ekvivalenčias neutronų sukurtoms pažeidoms reaktoriaus grafito lėtiklyje per vienerių metų eksploatacijos laikotarpį.
3. Ramano spektrometrijos metodu stebima  $^{12}\text{C}$  jonų implantavimo metu grafito bandinyje sukurtų ir 400 – 800 °C temperatūroje atkaitintų pažeidimų rekombinacija; pirmiausia rekombinuoja amorfinė komponentė, o iki  $DPA = 0,45$  paveiktuose grafito bandiniuose stebimas žymus pažeidimų sumažėjimas ar net visiškai pradinės struktūros atsistatymas.

## Literatūros saraksts

- [1] T. D. Burchell, L. L. Snead, The effect of neutron irradiation damage on the properties of grade NBG-10 graphite, *Journal of Nuclear Materials*, Vol. 371, p. 18-27, 2007;
- [2] H.M. Freeman, A.N. Jones, M.B. Ward, F.S. Hage, N. Tzelepi, Q.M. Ramasse, A.J. Scott, R.M.D. Brydson, On the nature of cracks and voids in nuclear graphite, *Carbon*, Vol. 103, p. 45-55, 2016;
- [3] C. Karthik, J. Kane, D. P. Butt, W. E. Windes, R. Uvic, Neutron irradiation induced microstructural changes in NBG-18 and IG-110 nuclear graphites, *Carbon*, Vol. 85, p. 124-131, 2015;
- [4] B. J. Marsden, M. Haverty, W. Bodel, G. N. Hall, A. N. Jones, P. M. Mummery, M. Treifi, Dimensional change, irradiation creep and thermal/mechanical property changes in nuclear graphite, *International Materials Reviews*, Vol. 61, issue 3, p. 155-182, 2016;
- [5] A. J. McKenna, T. Trevethan, C. D. Latham, P. J. Young, M. I. Heggie, Threshold displacement energy and damage function in graphite from molecular dynamics, *Carbon*, Volume 99, p. 71-78, 2016;
- [6] IAEA, Irradiation damage in graphite due to fast neutrons in fission and fusion systems, Viena, Austrija, 2000;
- [7] T. Iwata, Fine structure of Wigner energy release spectrum in neutron irradiated graphite, *Journal of Nuclear Materials*, Vol. 133-134, p. 361-364, 1985;
- [8] W. Hauser, H. Feshbach, The Inelastic Scattering of Neutrons, *Phys. Rev.* 87, 366, 1952;
- [9] Department of Energy Fundamentals, *Nuclear Physics and Reactor Theory*, DOE-HDBK-1019/1-93, JAV, 1996;
- [10] J. R. Dunning, G. B. Pegram, G. A. Fink, D. P. Mitchell, Interaction of Neutrons with Matter, *Phys. Rev.* 48, 265, 1935;
- [11] John Lilley, *Nuclear Physics: Principles and Applications*, Wiley, JAV, 2001;
- [12] M. S. Dresselhaus, R. Kalish, *Ion Implantation in Diamond, Graphite and Related Materials*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Vokietija, 1992;
- [13] C. Leroy, P.G. Rancoita, *Silicon Solid State Devices and Radiation Detection*, World Scientific Publishing, Singapūras, 2012;
- [14] S. R. Messenger, E. A. Burke, M. A. Xapsos, G. P. Summers, R. J. Walters, I. Jun, T. Jordan, NIEL for Heavy Ions: An Analytical Approach, *IEEE Transactions on Nuclear Science*, Vol. 50, issue 6, p. 1919–1923, 2003;
- [15] Z. Zhou, The structure of (nuclear) graphite: From the atomic to the macro scales, doktaro disertacija, RST/Radiation, Science and Technology, Faculty of Applied Sciences, 2016;



- [16] K. Almenas, A. Kaliatka, E. Ušpuras, *Ignalina RBMK-1500, A Source Book*, Lietuva, 196 p., 1998;
- [17] <http://www.nndc.bnl.gov/sigma/getPlot.jsp?evalid=14971&mf=3&mt=1&nsb=10> [žiūrėta 2017-01-25];
- [18] C. Konno, Differences among KERMA or DPA data calculated from JENDL-4.0, ENDF/B-VII.1, JEFF-3.2 and FENDL-3.1b with NJOY, Technical Meeting (F4-TM-52919), IAEA Headquarters, Vienna, Austria, June 13-16, 2016;
- [19] R. E. Nightingale, *Nuclear Graphite*, Academic Press, JAV, 1962;
- [20] L.L. Snead, T.D. Burchell, Y. Katoh, Swelling of nuclear graphite and high quality carbon fiber composite under very high irradiation temperature, *Journal of Nuclear Materials*, Vol. 381, issues 1–2, p. 1-210, 2008;
- [21] Timothy D. Burchell, Lance L. Snea, The effect of neutron irradiation damage on the properties of grade NBG-10 graphite, *Journal of Nuclear Materials*, Vol. 371, issues 1-3, p. 18–27, 2007;
- [22] G. H. Kinchin, R. S. Pease, The Displacement of Atoms in Solids by Radiation, *Reports on Progress in Physics*, Volume 18, Issue 1, p. 1-51, 1955;
- [23] G. S. Was, *Fundamentals of Radiation Materials Science*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Vokietija, 2007;
- [24] M.J. Norgett, M.T. Robinson, I.M. Torrens, A proposed method of calculating displacement dose rates, *Nuclear engineering and design*, Vol. 33, issue 1, p.50-54, 1975;
- [25] C. Race, *A Radiation Damage Cascade, chapter from The Modelling of Radiation Damage in Metals Using Ehrenfest Dynamics*, Springer Berlin Heidelberg, Vokietija, 2011;
- [26] J. Pelleg, *Mechanism of Diffusion, chapter from Diffusion in Ceramics*, Springer International Publishing, Šveicarija, 2016;
- [27] M. Lasithiotakis, B. Marsden, J. Marrow, A. Willets, Application of an independent parallel reactions model on the annealing kinetics to irradiated graphite waste, *Journal of Nuclear Materials*, Vol. 381, p. 83–91, 2008;
- [28] F. Chen, X. Tang, Y. Yang, H. Huang, J. Liu, D. Chen, Characterization of neutron induced damage effect in several types of metallic multilayer nanocomposites based on Monte Carlo simulation, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, Vol. 358, p. 88-92, 2015;
- [29] X-5 Monte Carlo Team, MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5, Los Alamos National Laboratory, 2003;
- [30] P. Vladimirov, S. Bouffard, Displacement damage and transmutations in metals under neutron and proton irradiation, *Comptes Rendus Physique*, Vol. 9, issues 3-4, p. 303-322, 2008;
- [31] J. F. Ziegler, M. D. Ziegler, J. P. Biersack, *SRIM – The Stopping and Range of Ions in Matter*, SRIM Company, 2008;

- [32] J. F. Ziegler, M. D. Ziegler, J. P. Biersack, SRIM - The stopping and range of ions in matter (2010), Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B, Volume 268, Issue 11-12, p. 1818-1823, 2010;
- [33] R.E. Stoller, M.B. Toloczko, G.S. Was, A.G. Certain, S. Dwaraknath, F.A. Garner, On the use of SRIM for computing radiation damage exposure, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, Vol. 310, p. 75–80, 2013;
- [34] S. Agostinelli et al., Geant4—a simulation toolkit, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A, Vol. 506, issue 1, p. 250-303, 2003;
- [35] A. Kılıç, E. Piliçer, İ. Tapan, E. N. Özmutlu, Simulation of displacement damage for silicon avalanche photo-diodes, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A, Vol. 658, issue 1, p. 70-72, 2011;
- [36] R.A. Weller, M.H. Mendenhall, D.M. Fleetwood, A screened Coulomb scattering module for displacement damage computations in Geant4, IEEE Transactions on Nuclear Science, Vol. 51, issue 6, p. 3669–3678, 2004;
- [37] M. H. Mendenhalla, R. A. Wellerb, An algorithm for computing screened Coulomb scattering in Geant4, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B, Vol. 227, issue 3, p. 420–430, 2005;
- [38] G. S. Bumbrah, R. M. Sharma, Raman spectroscopy – Basic principle, instrumentation and selected applications for the characterization of drugs of abuse, Egyptian Journal of Forensic Sciences, Vol. 6, Issue 3, Pages 209-215, 2016;
- [39] P. K. Chu, L. Li, Characterization of amorphous and nanocrystalline carbon films, Materials Chemistry and Physics, Vol. 96, p. 253-277, 2006;
- [40] V. Šablinskas, J. Čeponkus, *Modernioji Molekulių Virpesinė Spektrometrija*, Vilnius, Lietuva, 2014;
- [41] J. Eapen, R. Krishna, T.D. Burchell, K. L. Murty, Early Damage Mechanisms in Nuclear Grade Graphite under Irradiation, Materials Research Letters, Vol. 2, issue 1, p. 43-50, 2014;
- [42] V. Zolyomi, J. Koltai, J. Kurti, Resonance Raman spectroscopy of graphite and graphene, Phys. Status Solidi B, Vol. 248, issue 11, p. 2435-2444, 2011;
- [43] G. Silbermann, N. Moncoffre, N. Toulhoat, N. Béreard, A. Perrat-Mabilon, G. Laurent, L. Raimbault, P. Sainsot, J.-N. Rouzaud, D. Deldicque, Temperature effects on the behavior of carbon 14 in nuclear graphite, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, Volume 332, p. 106-110, 2014;
- [44] A. C. Ferrari, J. Robertson, Interpretation of Raman spectra of disordered and amorphous carbon, Physical Review B, Vol. 61, issue 20, p. 14095-14107, 2000;

- [45] R. Trusovas, G. Račiukaitis, G. Niaura, J. Barkauskas, G. Valušis, R. Pauliukaitė, Recent Advances in Laser Utilization in the Chemical Modification of Graphene Oxide and Its Applications, *Advanced Optical Materials*, Vol. 4, issue 1, p. 37-65, 2016;
- [46] L. G. Cançado, A. Jorio, E. H. Martins Ferreira, F. Stavale, C. A. Achete, R. B. Capaz, M. V. O. Moutinho, A. Lombardo, T. Kulmala, A. C. Ferrari, Quantifying defects in graphene via Raman spectroscopy at different excitation energies, *Nano Letters*, Vol. 11, issue 8, p. 3190-3196, 2011;
- [47] L.R. Greenwood, R. K. Smither, *SPECTER: Neutron damage calculations for materials irradiations*, Argonne National Laboratory, 1985;
- [48] <http://www.sr-niel.org/index.php/sr-niel-treatment-in-geant4-test58> [žiūrėta 2017-04-30];
- [49] M. Gaspariūnas, Gamtinių bandinių elementinės sudėties tyrimas PIXE analizės metodu, Magistrantūros studijų baigiamasis darbas, Vilniaus Universitetas, fizikos fakultetas, Bendrosios fizikos ir spektroskopijos katedra, p. 36, 2009;
- [50] L. Snoj, M. Ravnik, Calculation of Power Density with MCNP in TRIGA reactor, International Conference Nuclear Energy for New Europe, 2006;
- [51] <https://www-nds.iaea.org/sgnucdat/a6.htm> [žiūrėta 2017-05-25];
- [52] ParsNIP, Parser for PTRAC files produced by MCNP, <https://sourceforge.net/p/ptracparser/wiki/ParsNIP%20home/> [žiūrėta 2017-05-25];
- [53] E. Narkūnas, A. Šmaižys, P. Poškas, Analysis of Nitrogen Impurity Impact on 14C Generation in RbmK-1500 Reactor, EPRI Workshop, Germany, 2009;
- [54] D. Ancius, D. Ridikas, V. Remeikis, A. Plukis, R. Plukiene, M. Cometto, Evaluation of the activity of irradiated graphite in the Ignalina Nuclear Power Plant RBMK-1500 reactor, *NUKLEONIKA*, Vol. 50(3), 2005;
- [55] E. Narkūnas, A. Šmaižys, P. Poškas, Reaktoriaus rbmk-1500 konstrukcinių elementų neutroninės aktyvacijos skaitinis vertinimas, *Energetika*, T. 55. Nr. 4, 2009;
- [56] W. Windes, T. Burchell, R. Bratton, *Graphite Technology Development Plan*, Idaho National Labs, 2007;
- [57] L. Avotina, A. Marcu, M. Lungu, A. Stancalie, C. Grigorescu, AG. Ilie, C. Porosnicu, L. Mihai, D. Sporea, C. Lungu, S. Somacescu, G. Kizane, D. Savastru, S. Antohe, Power density influence on laser-induced graphite structural modifications, *Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures*, Vol. 11, issue 3, p. 973-981, 2016;
- [58] M.R. Ammar, N. Galy, J.N. Rouzaud, N. Toulhoat, C.E. Vaudey, P. Simon, N. Moncoffre, Characterizing various types of defects in nuclear graphite using Raman scattering: Heat treatment, ion irradiation and polishing, *Carbon*, Vol. 95, p. 364-373, 2015;

- [59] A. Puzas, V. Remeikis, Ž. Ežerinskis, P. Serapinas, A. Plukis, G. Duškesas, Mass spectrometric determination of impurities in reactor core graphite for radioactive waste composition modelling, *Lithuanian Journal of Physics*, Vol. 50, issue 4, p. 445-449, 2010;
- [60] P. T. Araujo, M. Terrones, M. S. Dresselhaus, Defects and impurities in graphene-like materials, *Mater. Today*, Vol. 15, issue 3, p. 98–109, 2012;

Danielius Lingis

## INVESTIGATION OF RADIATION INDUCED POINT DEFECTS DISTRIBUTION IN RBMK REACTOR GRAPHITE.

### Summary

The aim of this work was to evaluate the point defect production and variation in RBMK reactor graphite using numerical modelling and experimental research methods.

This paper discusses neutron interaction with matter and point defect creation mechanisms in graphite crystals, brief introduction is made to MCNP, SRIM, „SPECTER“ and GEANT4 applications. Using these applications numerical modelling was performed to obtain the rate of displacements created by both the neutrons and carbon ions. MCNP was used to evaluate neutron and recoil ion flux and distributions. These results were simultaneously used by SRIM, „SPECTER“ and GEANT4 applications to obtain the distribution of rate of displacements. Values of displacement per atom after full-power-year calculated by SRIM Full-Cascades and Kinchin-Pease techniques are, accordingly,  $DPA_{FC} = 0,56 \pm 0,02$  and  $DPA_{KP} = 0,46 \pm 0,04$ . These values are in good agreement with the value obtained by NRT technique:  $DPA_{NRT} = 0,47 \pm 0,02$ . „SPECTER“ method gives greater value of  $DPA_{SPECTER} = 0,72 \pm 0,06$  and GEANT4 gives smaller value of  $DPA_{GEANT} = 0,35 \pm 0,03$  because of features and limitations of both methods. The average value obtained by all methods is  $DPA = 0,51 \pm 0,12$ . Although obtained values differ, all of them fall in the range of values reported in literature, so the chosen methods are suitable for evaluation of DPA in RBMK-1500 reactor graphite. For better accuracy SRIM technique should be used.

According to similarities in defect creation processes by both the ion implantation technique and neutron irradiation, numerical modelling was used to assess the ion beam interaction with graphite. It was determined that 700 keV energy  $^{12}\text{C}$  ions of fluence  $\Phi = 3,9 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-2}$  gives equivalent DPA to that given by neutrons after full-power-year.

RBMK-1500 graphite samples were irradiated with 4 different fluences of 700 keV energy  $^{12}\text{C}$  ions:  $1,2 \cdot 10^{15}$ ,  $3,5 \cdot 10^{15}$ ,  $7,2 \cdot 10^{15}$  and  $1,2 \cdot 10^{16}$  ions/cm<sup>2</sup>, which gives DPA of 0,15, 0,45, 0,92 and 1,51 at the depth of implantation. Raman spectra of these samples were obtained after implantation and after thermal annealing stages of 5 h at 400, 600 and 800 °C temperatures. According to positions and intensity of Raman D and G bands thermal annealing process was observed qualitatively and it was determined that structure damage of less than  $DPA = 0,45$  could be almost fully removed by thermal annealing at 800 °C temperature.

LINGIS, Danielius. *Jonizuojančiosios spinduliuotės sukurtų taškinių defektų pasiskirstymo RBMK reaktoriaus grafite tyrimas: Aplinkos ir cheminės fizikos magistrantūros studijų baigiamasis darbas*. Vad. Artūras Plukis. Vilnius: Vilniaus universitetas Fizikos fakultetas, 2017, 48 p.

Šio darbo tikslas buvo įvertinti taškinių defektų susidarymą RBMK-1500 reaktoriaus grafite skaitinio modeliavimo ir eksperimentinių tyrimų metodais. Literatūros apžvalgoje aptariami pagrindiniai neutronų sukeltų taškinių defektų susidarymo reaktoriaus grafite ypatumai. Teorinio vertinimo dalyje modeliuojama neutronų ir jonų sąveika su medžiaga MCNP, SRIM, „SPECTER“ ir GEANT4 programomis. Įvertintos taškinių defektų sukūrimo spartos, jų priklausomybė nuo atstumo grafite, rezultatai palyginti su literatūriniais duomenimis. Darbo metu nustatytas jonų implantavimo sukurtų pažaidų ekvivalentiškumas neutronų sukurtoms pažaidoms, atliktas 700 keV energijos jonų implantavimas į grafitą. Ramano spektrometrijos metodu įvertinta jonų apšvitos įtaka grafito bandinių paviršiaus struktūrai. Galiausiai įvertinta jonais apšvitintų bandinių terminio apdorojimo įtaka sukurtų defektų rekombinacijai ir struktūriniam atsistatymui.

### Priedas 1. SRIM įvesties bylos pavyzdys

| Name | Numb | (eV)   | X_(Å)      | Y_(Å) | Z_(Å) | Cos(X)    | Cos(Y)    | Cos(Z)    |
|------|------|--------|------------|-------|-------|-----------|-----------|-----------|
| Carb | 6000 | 43304  | 1326140643 | 0     | 0     | -0.61788  | 0.59501   | -0.51399  |
| Carb | 6000 | 36483  | 1325221827 | 0     | 0     | 0.26471   | 0.42208   | -0.86705  |
| Carb | 6000 | 362250 | 1324305532 | 0     | 0     | -0.069907 | 0.99412   | 0.082733  |
| Carb | 6000 | 11406  | 1323807359 | 0     | 0     | 0.33765   | -0.71031  | 0.61762   |
| Carb | 6000 | 18924  | 1323736616 | 0     | 0     | -0.75449  | 0.64695   | -0.11046  |
| Carb | 6000 | 10077  | 1322536632 | 0     | 0     | 0.47278   | -0.038007 | -0.88036  |
| Carb | 6000 | 110980 | 1322322981 | 0     | 0     | 0.40617   | -0.90827  | -0.10034  |
| Carb | 6000 | 118470 | 1321623981 | 0     | 0     | 0.91746   | -0.35689  | 0.1758    |
| Carb | 6000 | 34098  | 1320702843 | 0     | 0     | -0.67508  | -0.73759  | -0.015413 |
| Carb | 6000 | 24441  | 1320700997 | 0     | 0     | 0.90383   | 0.19721   | -0.37973  |
| Carb | 6000 | 795280 | 1319722507 | 0     | 0     | 0.7409    | 0.51177   | -0.43492  |
| Carb | 6000 | 27408  | 1319496192 | 0     | 0     | -0.22383  | 0.16517   | 0.96053   |
| Carb | 6000 | 11716  | 1319218125 | 0     | 0     | -0.05748  | -0.75921  | -0.64831  |
| Carb | 6000 | 15874  | 1318373194 | 0     | 0     | -0.80628  | -0.20553  | -0.55468  |
| Carb | 6000 | 34991  | 1317383251 | 0     | 0     | -0.94588  | -0.23172  | -0.2272   |
| Carb | 6000 | 25458  | 1317242843 | 0     | 0     | -0.35677  | 0.21978   | 0.90797   |
| Carb | 6000 | 26275  | 1317093945 | 0     | 0     | 0.022418  | 0.63888   | -0.76898  |
| Carb | 6000 | 23816  | 1317092271 | 0     | 0     | 0.43458   | -0.51796  | -0.73679  |
| Carb | 6000 | 251360 | 1316820187 | 0     | 0     | -0.56181  | 0.77666   | 0.2849    |
| Carb | 6000 | 43733  | 1314991296 | 0     | 0     | 0.51608   | -0.67696  | 0.52477   |
| Carb | 6000 | 10655  | 1314938780 | 0     | 0     | -0.10214  | 0.83887   | 0.53466   |
| Carb | 6000 | 38336  | 1314897701 | 0     | 0     | 0.5947    | -0.62221  | 0.5091    |
| Carb | 6000 | 13555  | 1314855222 | 0     | 0     | -0.78586  | -0.096859 | -0.61077  |
| Carb | 6000 | 38769  | 1314757009 | 0     | 0     | -0.33138  | -0.90613  | 0.2629    |
| Carb | 6000 | 43268  | 1314692261 | 0     | 0     | -0.97907  | -0.17001  | 0.11189   |
| Carb | 6000 | 21466  | 1314508022 | 0     | 0     | 0.34935   | 0.92085   | -0.17317  |
| Carb | 6000 | 46416  | 1314501274 | 0     | 0     | 0.18481   | 0.32976   | -0.9258   |
| Carb | 6000 | 11824  | 1314409419 | 0     | 0     | -0.30533  | 0.94325   | 0.13061   |
| Carb | 6000 | 12825  | 1313717802 | 0     | 0     | 0.37481   | -0.13234  | -0.91761  |
| Carb | 6000 | 37901  | 1313650416 | 0     | 0     | -0.048967 | -0.90989  | 0.41194   |

### **Padėka**

Nuoširdžiai dėkoju VMTI FTMC BTS vedėjui prof., habil. dr. Vidmantui Remeikiui už suteiktą galimybę atlikti magistro darbą FTMC. Taip pat nuoširdžiai dėkoju darbo vadovui dr. Artūriui Plukiui už vadovavimą, idėjas, patarimus, motyvaciją. Dėkoju kolegei Elenai Lagzdinai už nuolatinį palaikymą, motyvaciją, pagalbą sprendžiant problemas, idėjų generavimą. Dėkoju j.m.d. Mindaugui Gaspariūnui ir dr. Vitalij Kovalevskij už visapusę pagalbą atliekant jonų implantavimo eksperimentus. Už suteiktą galimybę atlikti Ramano spektrometrinius matavimus Spektroelektrochemijos laboratorijoje dėkoju jos vadovui prof. habil. dr. Gediminui Niaurai, o už pagalbą atliekant Ramano matavimus dėkoju dr. Ievai Matulaitienei. Taip pat dėkoju dr. Ritai Plukienei ir dr. Dariui Germanui už konsultacijas ir naudingus patarimus atliekant skaitinį modeliavimą MCNP kodu. Dėkoju BTS vyr. inžinieriui Rimantui Davidoniui už pagalbą ruošiant įrankius, taip pat konsultacijas ir technines diskusijas. Dėkoju Antanui Bukartui už konsultacijas atliekant modeliavimą GEANT4 programų paketu. Taip pat esu dėkingas visiems branduolinių tyrimų skyriaus darbuotojams už vertingus patarimus, palaikymą, tikslingas diskusijas.