

锆基合金中子辐照损伤模拟的初设条件优化

蔡光博 杨 亮 郭古青

(南京航空航天大学 材料科学与技术学院 南京 211106)

摘要 分子动力学(Molecular dynamics, MD)是研究材料原子尺度结构及其变化的重要模拟方法,可用于模拟材料的粒子辐照损伤。由于该方法不包含核数据,通常对初始化条件进行简化处理,如初级撞出原子(Primary Knock-on Atom, PKA)的条件设定和材料结构模型的建立。采用粒子输运软件 GEANT4 模拟中子辐照 Zr、Zr₂Cu 和 Zr₂Ni, 得到其 PKA 能谱,发现不同能量入射中子对应的 PKA 最高能量可达几十甚至几百 keV,且三种材料中 PKA 能谱非常接近。计算三种 Zr 基合金的 PKA 数目,发现其分布非常接近,表明分子动力学模拟时可采用简化结构模型,以研究 Zr 基合金、Fe 基合金;此外,计算了 PKA 散射角,获得不同能量中子产生的 PKA 最佳散射角,为分子动力学模拟所需的 PKA 运动方向提供理论依据。

关键词 结构损伤, 中子辐照, 分子动力学, 粒子输运, 初级离位原子, 核材料

中图分类号 TL341

DOI: 10.11889/j.0253-3219.2017.hjs.40.020202

Optimizing initial conditions for simulating neutron radiation-induced damage to Zr-based metals

CAI Guangbo YANG Liang GUO Guqing

(College of Material Science and Technology, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 211106, China)

Abstract Background: Molecular dynamic (MD) method has been widely used in simulation of particle radiation-induced micro-structure damage in materials. There is no nuclear database in MD simulation, thus, simplified processing is adopted in some initial conditions, such as primary knock-on atom (PKA) and structural model of the material. **Purpose:** This study aims to obtain the optimal initial conditions for MD to simulate the particle radiation-induced structural damage. **Methods:** GEANT4 software was applied for simulating neutron radiating Zr-based metals (Zr, Zr₂Cu and Zr₂Ni). The PKA spectra excited by incident neutrons were tracked and detected. Thereafter the PKA scattering angel distribution was calculated. **Results:** It is found that PKA energy in these three metals increases with the neutron energy, and exists a cut off value of dozens or hundreds keV. In addition, it is revealed that the PKA energy spectra in these three metals are very similar. The preferred scattering angles of PKAs were estimated. **Conclusion:** Damage of Zr-based metals caused by cascaded collision of PKAs with dozens or even hundreds of keV energies is significant for MD simulation. Some simplified structural models are suitable for approximating the radiation damage in alloys (such as Zr-based alloys and Fe-based alloys) via MD simulation, and estimated preferred scattering angles of PKAs is helpful for optimizing the moving direction of a PKA.

Key words Structural damage, Neutron irradiation, MD, Particle transport, PKA, Nuclear materials

国家自然科学基金(No.U1332112、No.51471088)、中央高校基本科研业务费专项资金(No.NE2015004)、江苏高校优势学科建设工程资助

第一作者: 蔡光博, 男, 1991 年出生, 2014 年毕业于湖北科技学院, 现为硕士研究生, 研究领域为中子辐照核材料的计算机模拟研究

通信作者: 杨亮, E-mail: yangliang@nuaa.edu.cn

收稿日期: 2016-10-17, 修回日期: 2016-11-30

Supported by National Natural Science Foundation of China (No.U1332112, No.51471088), the Fundamental Research Funds for the Central Universities (No.NE2015004) and the Priority Academic Program Development (PAPD) of Jiangsu Higher Education Institutions

First author: CAI Guangbo, male, born in 1991, graduated from Hubei University of Science and Technology in 2014, master student, major in nuclear energy and nuclear technology engineering

Corresponding author: YANG Liang, E-mail: yangliang@nuaa.edu.cn

Received date: 2016-10-17, accepted date: 2016-11-30

反应堆材料受到高通量中子辐照时, 将产生微观与宏观尺度的结构损伤, 导致其性能发生改变, 因此开发耐辐照损伤的核材料成为研究热点^[1-5]。粒子辐照首先在材料微观结构诱发点缺陷(空位/原子对), 再通过空位聚集而形成较大空穴、空洞, 导致材料变脆, 从而造成材料性能退化甚至失效^[6-7]。由于中子辐照实验条件及防护要求的限制, 目前较难通过实验方法观察核材料的点缺陷产生与演化过程。因此, 研究人员广泛利用计算机模拟手段进行研究。特别是分子动力学方法, 已广泛用于模拟材料微观尺度点缺陷的产生与演化过程^[8-14], 为判断材料的辐照损伤机制及筛选耐辐照材料提供理论依据。

分子动力学模拟时, 通常在结构模型中对某一原子赋予一定动能, 假定其为入射中子碰撞所激发, 即初级撞出原子(Primary Knock-on Atom, PKA)^[15-16]。该 PKA 具有较大动能, 使大量原子发生碰撞, 引发级联效应(Effect of Collision Cascade, ECC)。级联效应导致原子发生位移, 产生空位原子对, 形成若干点缺陷^[17-20]。此外, 分子动力学可观察点缺陷的演化过程。由于 PKA 是级联效应的根源, 故其初始条件的设定对分子动力学模拟有很大影响。分子动力学不能模拟 PKA 的产生过程, 并缺乏相应核数据, 因此目前对 PKA 的初始条件设定一般进行简化, 易产生两个问题: 1) 如何合理地设定 PKA 能量; 2) PKA 的初始运动方向对级联效应有很大影响, 包括碰撞次数、传递能量、运动路径等。此外, 为方便模拟, 一般会简化结构模型。例如, 建立纯 Fe 的结构模型^[21-23], 以近似模拟各种钢材的辐照损伤机制。该简化处理的可靠性需进行论证。

1 模拟方法

中子辐照材料时, 与靶材原子发生碰撞, 使其发生位移, 成为具有一定动能的反冲原子。在核反应堆中, 可产生能量较高的快中子。如裂变堆中, 中子能量可达 2 MeV, 在设计的聚变堆中, 中子能量可达 14 MeV。当高能中子辐照核材料时, 与靶材原子的相互作用较为复杂, 除弹性散射和非弹性散射之外, 还会发生核反应^[24], 如(n, n)、(n, xn)反应等, 产生的次级中子对 PKA 类型、能谱等造成影响; 另外, 带电粒子反应如(n, p)、(n, He)等, 不仅对 PKA 能谱产生影响, 而且使靶核原子在离位时发生嬗变。因此, 需要一种较精确的模拟软件对高能中子辐照产生的 PKA 进行追踪, 以便更精确得到 PKA 的相关数据。

GEANT4 是欧洲粒子中心开发的基于蒙特卡

罗方法的开源程序包, 可模拟不同粒子(如中子)的运输过程, 能准确探测和追踪 PKA 原子^[25-26]。通过材料成分、密度及三维尺寸的设定, 可建立材料的几何模型。再设定中子能量及出射方向, 从而实现粒子运输。中子能量范围从 250 eV 到几个 TeV, 能覆盖裂变堆甚至聚变堆的中子能量范围。此外, GEANT4 程序不仅能探测并记录入射中子与靶原子直接作用产生的 PKA 粒子, 还能追踪各种中子核反应产生的次级粒子及间接产生的 PKA 粒子。为追踪 PKA 粒子的运动规律及获得相关数据, 在 GEANT4 中编入若干新函数进行计算。

本工作选用 10^5 个能量分别为 0.1 MeV、0.3 MeV、0.5 MeV、0.7 MeV、1 MeV、2 MeV、3 MeV、4 MeV、5 MeV、6 MeV、7 MeV、8 MeV、9 MeV、10 MeV、11 MeV、12 MeV、13 MeV 和 14 MeV 的中子进行模拟。Zr 基合金是一种应用较为广泛的核材料(如 Zr-2 和 Zr-4)^[27], 因此选择纯 Zr 建立结构模型。作为对照, 两种二元合金 Zr_2Cu 和 Zr_2Ni 也进行模拟。为获得具有足够统计意义的 PKA 数量, 沿着中子入射方向, 将靶材厚度设置为 2 cm。

2 结果与讨论

2.1 对 PKA 的初始动能优化

中子不带电荷, 不存在与原子的库仑作用, 只考虑中子与原子核的作用, 因而中子在材料中穿透性强。分子动力学模拟时, 由于目前计算能力的限制, 建立的结构模型一般仅包含几万到几十万原子, 其一维尺寸不到微米量级^[13]。由于模型体积小, 因此入射粒子在模型内连续激发 PKA 的可能性很小。通常认为只能激发一个 PKA 粒子, 因此, 需预先设置 PKA 粒子动能。

通过 GEANT4 模拟中子运输过程, 可追踪所有 PKA 的产生过程及相关信息。图 1 显示不同能量入射中子分别在 Zr、 Zr_2Cu 和 Zr_2Ni 中产生的 PKA 平均能谱。可观察到, PKA 平均能量随入射中子能量增大。如中子能量为 1 MeV 时, PKA 平均能量约为 15 keV; 中子能量为 14 MeV 时, PKA 平均能量在 80-90 keV 之间。图 2 表示不同能量入射中子在纯 Zr 中产生的 PKA 能谱(Zr_2Cu 和 Zr_2Ni 的 PKA 能谱图与 Zr 相似, 未列出)。从理论而言, 只要 PKA 能量在图 2 能谱范围内, 均可作为分子动力学模拟的 PKA 初始动能, 但仍需进一步探讨如何合理设定 PKA 初始动能。比如, 在众多的分子动力学模拟工作中, 通常将 PKA 能量设置为几个 keV, 以模拟级联效应^[13]。但从本文数据可知, 裂变堆甚至聚变堆

中所产生的 PKA 能量有较大概率达到几十甚至几百 keV, 因此, 进行分子动力学模拟核材料时, 研究初始动能为几十甚至几百 keV 的 PKA 粒子依然具有重要的研究意义。

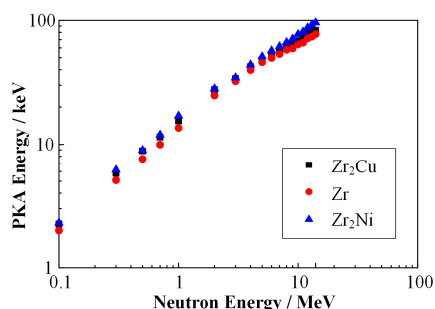


图1 不同能量入射中子产生的平均 PKA 能量

Fig.1 Average PKA energies produced by incident neutrons with different energies.

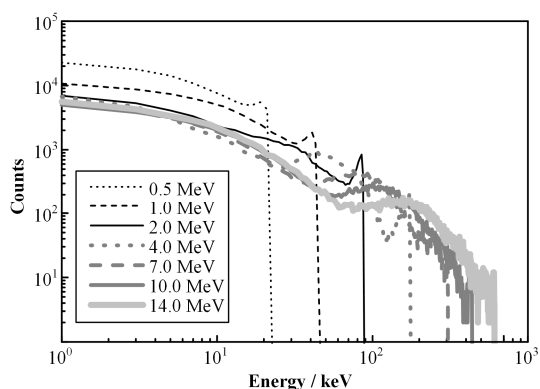


图2 不同能量入射中子在纯 Zr 中产生的 PKA 能谱

Fig.2 PKAs spectra in pure zirconium produced by incident neutrons with different energies.

此外, 从图 2 可知, 当入射中子能量一定时, 产生的 PKA 能量有一个截断值。如入射中子能量分别为 1 MeV 和 14 MeV 时, PKA 能量的截断值约为 46 keV 和 600 keV。根据能量守恒公式^[28]:

$$E = \frac{4M_n M}{(M_n + M)^2} E_n \cos^2 \theta \quad (1)$$

式中: M_n 表示中子质量; M 为靶核质量; E_n 为入射中子能量; θ 为反冲原子出射角度。由式(1)可知, 当入射中子能量一定、 θ 为 0° 时, 中子与原子核发生对心碰撞, 靶原子获得最大能量。例如, 入射中子能量为 1 MeV 时, 反冲原子的最大能量为 43 keV; 入射中子能量为 14 MeV 时, 反冲核最大能量为 602 keV。图 2 所示截断值与式(1)的推导数值吻合, 证明了本模拟工作的可靠性。

对于核裂变堆甚至聚变反应堆, 其核材料多选用各种合金材料, 如锆基合金和铁基合金 (各种钢材)。在合金中, 除了主体元素, 通常也包含多种其他元素, 甚至微量元素, 以调节和优化性能, 但结

构变得较为复杂, 因此进行分子动力学研究时, 合金材料很难进行建模, 通常选用对应的简单结构模型进行近似模拟 (如用纯 Fe 模型近似各种钢材)。由图 1、2 可知, Zr 与 Zr_2Cu 和 Zr_2Ni 两种二元合金成分相比, 中子辐照产生的 PKA 能谱比较接近。图 3 为 PKA 数量对应入射中子能量的分布。如图 3 所示, 入射中子能量一定时, 三种材料中产生的 PKA 数量非常接近。进一步可推断, 入射中子能量一定时, 三种材料中的辐照损伤相当。因此利用分子动力学进行模拟时, 可用纯 Zr 结构模型代替 Zr_2Cu 和 Zr_2Ni 。在 Zr_2Cu 和 Zr_2Ni 中, Zr 含量为 67%, 而对于 Zr-2 和 Zr-4 核材料, 其 Zr 含量可达 98%, 近似于纯 Zr^[27], 故而可推断, 当中子辐照 Zr-2 和 Zr-4 时, 其 PKA 能谱以及 PKA 数目应与纯 Zr 结果非常接近。因此, 虽然不能直接利用分子动力学模拟 Zr-2 和 Zr-4 的中子辐照损伤, 但可通过模拟纯 Zr 模型进行近似研究。进一步推论, 对于包含多种成分和结构较复杂的各种合金材料, 可通过模拟其对应的简单结构模型获得近似结果。

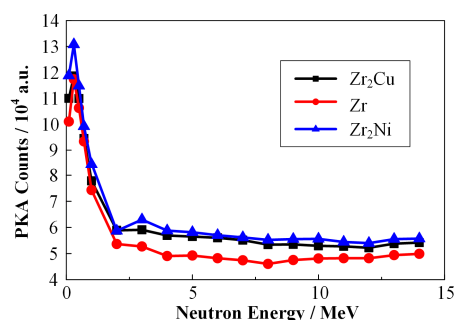


图3 不同能量入射中子分别在 Zr_2Cu 、Zr、 Zr_2Ni 中产生的 PKA 计数分布

Fig.3 Distribution of PKA counts produced by incident neutrons with different energies in Zr_2Cu , Zr and Zr_2Ni .

2.2 对 PKA 散射角的优化

在分子动力学研究中, 为方便计算, PKA 速度方向通常定为垂直于晶界方向, 而晶界一般设置为平行模型表面或某一特殊晶面, 即 PKA 方向简化为平行某一晶面甚至模型表面。构建结构模型时, 由于所含原子一般不超过几十万, 体量较小, 只设置 1-2 个晶界。晶界通常被视为移位原子及剩余空位的吸收区。在 PKA 诱发级联效应时, PKA 与晶界的距离和方向对模拟结果影响很大, 尤其影响碰撞次数、传递能量和移位原子的运动路径^[13]。因此, 研究 PKA 速度方向对分子动力学模拟具有重要意义。

通过 GEANT4 模拟中子输运过程, 可追踪任一由中子辐照产生的 PKA 粒子。在程序设定中, 将中子入射方向设为与材料表面平行, 将 PKA 散射角定义为 PKA 速度方向与中子入射方向之间的夹角。

图4为不同能量入射中子产生的PKA的散射角分布,表1为图4峰值处的弹性散射与非弹性散射贡献的PKA数目。由图4(a-b)可知,当入射中子能量较低时,出现一个明显强峰,表明此时PKA在70°左右具有最可能的出射角度,源于此时弹性散射计数高(如表1所示)。此外,分布在0°-90°的PKA明显多于90°-180°的PKA。由弹性碰撞理论^[28]与表1数据可知,入射中子与靶原子核发生初次弹性散

射时,产生的PKA散射角分布在0°-90°之间;当中子一次碰撞后偏离原入射方向,再次与靶原子发生二次甚至多次碰撞时,产生的PKA散射角分布于整个0°-180°区间。而发生初次碰撞的几率大于二次及多次碰撞,故综合而言,碰撞效应主要贡献于0°-90°区间。如图4(c-f)所示,当中子能量较高时,除了82°最强峰以外,在18°和52°出现两个强峰。

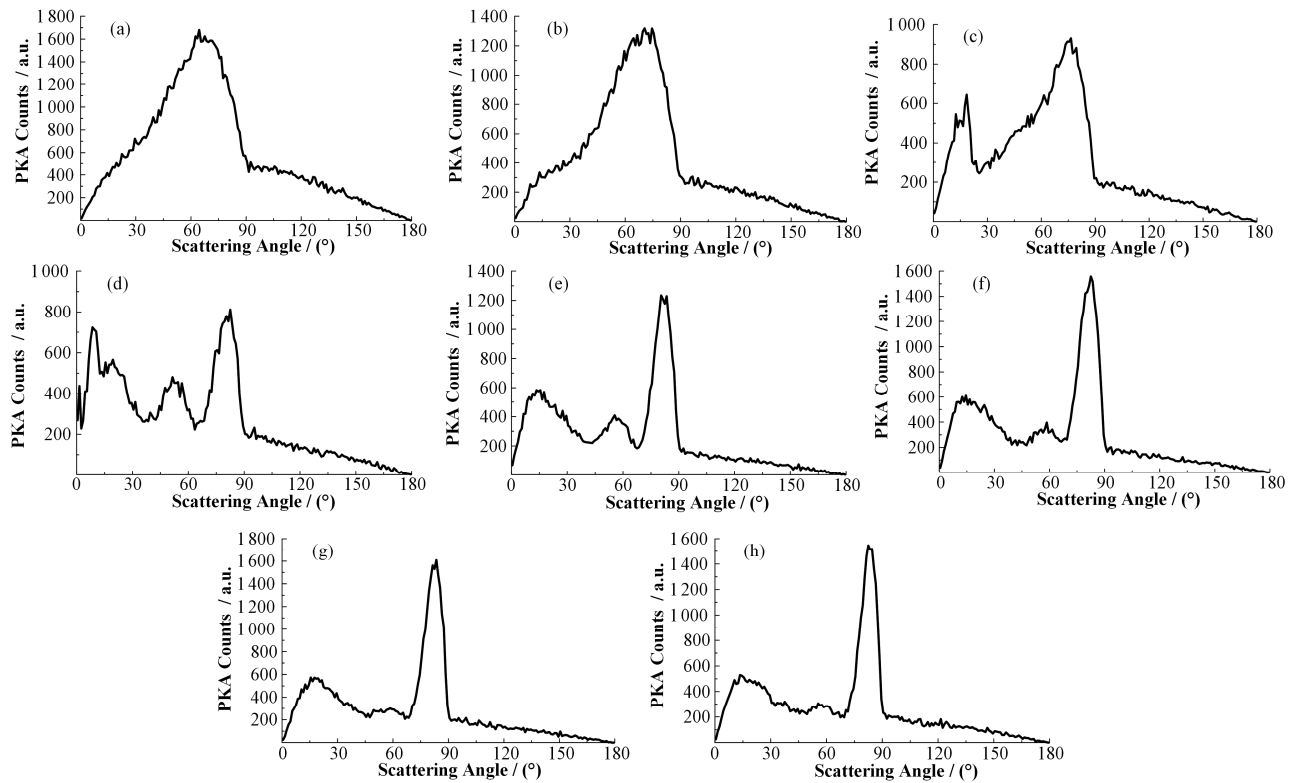


图4 不同能量入射中子产生的PKA散射角分布
(a) 0.5 MeV, (b) 1 MeV, (c) 2 MeV, (d) 4 MeV, (e) 7 MeV, (f) 9 MeV, (g) 12 MeV, (h) 14 MeV
Fig.4 Scattering angles distributions of PKA caused by incident neutrons with different energies.
(a) 0.5 MeV, (b) 1 MeV, (c) 2 MeV, (d) 4 MeV, (e) 7 MeV, (f) 9 MeV, (g) 12 MeV, (h) 14 MeV

表1 入射中子数为 10^5 时散射角峰值处弹性散射与非弹性散射的PKA数值

Table 1 Counts of both inelastic and elastic scattering corresponding to the peaks of scattering angles of PKAs when the number of incident neutrons is 10^5 .

入射中子能量 Incident neutron energy / MeV	约 18° About 18°		约 52° About 52°		约 70° About 70°		约 82° About 82°	
	非弹性散射	弹性散射	非弹性散射	弹性散射	非弹性散射	弹性散射	非弹性散射	弹性散射
	Inelastic	Elastic	Inelastic	Elastic	Inelastic	Elastic	Inelastic	Elastic
0.5	0	469	0	1 253	0	1 588	0	1 107
1	47	284	12	850	10	1 300	8	965
2	438	237	19	497	22	915	23	782
4	433	142	27	458	29	283	47	769
7	504	77	44	366	23	146	25	1 172
9	417	43	75	330	27	187	28	1 325
12	449	60	79	204	22	182	21	1 454
14	453	59	74	187	27	196	30	1 536

由表 1 可知, 当入射中子能量较高时, 可与靶材原子发生核反应, 如(n, n')和(n, 2n)等, 产生的 PKA 会导致 18°出现强峰。该结果表明, 此时 PKA 最可能出射方向对应于 18°、52°和 82°三个角度。当入射中子能量很大时, 由图 4(g-h)和表 1 可知, 52°峰的强度会逐渐降低, 源于此时弹性和非弹性散射沿该角度产生 PKA 概率降低, 而更倾向于 18°和 82°散射角出射。综上, 可获得在不同能量中子入射时, 对应的 PKA 最优出射角度, 有助于指导分子动力学模拟的 PKA 速度方向设定。例如, 模拟裂变堆核材料的辐照效应时, 主要考虑低于 2 MeV 中子所导致的 PKA, 其散射角度定为 70°左右为宜; 当模拟裂变堆核材料的辐照效应时, 需考虑典型的 14 MeV 中子问题, 则 PKA 的散射角度设置为 18°和 82°为宜。

3 结语

对于分子动力学模拟材料的粒子辐照效应, 优化其初始条件及验证其结构模型的选取至关重要。本文采用 GEANT4 模拟三种 Zr 基材料的中子输运过程, 获得了对应的 PKA 信息, 可解决上述问题。结果表明, 高能入射中子辐照 Zr 基材料时, 产生的 PKA 最高能量达几十甚至几百 keV; 在不同 Zr 材料中产生的 PKA 数量比较接近, 形成的 PKA 能谱也非常相似, 因此可证实, 进行分子动力学模拟材料辐照效应时, 采用简化的结构模型进行近似处理是可行的; 此外, 本文对中子辐照产生的 PKA 散射角进行了计算, 评估了不同能量入射中子产生 PKA 的最佳散射角。上述研究结果对于核材料, 尤其是裂变堆和聚变堆核材料的模拟计算工作具有重要参考价值。

参考文献

- Mansur L K, Rowcliffe A F, Nanstad R K, *et al.* Materials needs for fusion, generation IV fission reactors and spallation neutron sources-similarities and differences[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2004, **329-333**(Part A): 166-172. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2004.04.016.
- Yvon P, Carre F. Structural materials challenges for advanced reactor systems[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2009, **385**(2): 217-222. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2008.11.026.
- Zinkle S J, Busby J T. Structural materials for fission & fusion energy[J]. *Materials Today*, 2009, **12**(11): 12-19. DOI: 10.1016/S1369-7021(09)70294-9.
- 白新德, 王社管, 马春来, 等. 离子轰击模拟中子辐照在核材料研究中的应用[J]. *原子能科学技术*, 1996, **30**(5): 469-474.
- BAI Xinde, WANG Sheguan, MA Chunlai, *et al.* Application of simulation of neutron irradiation by ion bombardment in nuclear material research[J]. *Atomic Energy Science and Technology*, 1996, **30**(5): 469-474.
- Zinkle S J, Was G S. Materials challenges in nuclear energy[J]. *Acta Materials*, 2013, **61**(3): 735-758. DOI: 10.1016/j.actamat.2012.11.004.
- Wirth B D. How dose radiation damage materials?[J]. *Science*, 2007, **318**(5852): 923-924. DOI: 10.1126/science.1150394.
- Sickafus K E, Kotomin E A, Uberuaga B P. Radiation effects in solid, NATO science series II: mathematic, physics and chemistry[M]. Amsterdam: Springer Press, 2007.
- Nordlund K, Gao F. Formation of stacking-fault tetrahedra in collision cascades[J]. *Applied Physics Letters*, 1999, **74**(18): 2720-2722. DOI: 10.1063/1.123948.
- Bacon D J, Gao F, Osetsky Y N. The primary damage state in fcc, bcc and hcp metals as seen in molecular dynamics simulations[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2000, **276**(1-3): 1-12. DOI: 10.1016/S0022-3115(99)00165-8.
- 贺新福, 杨鹏, 杨文. Fe-Cu 合金基体损伤的分子动力学模拟研究[J]. *金属学报*, 2011, **47**(7): 954-957. DOI: 10.3724/SP.J.1037.2011.00207.
- HE Xinfu, YANG Peng, YANG Wen. Molecular dynamics simulation of matrix radiation damage in Fe-Cu alloy[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2011, **47**(7): 954-957. DOI: 10.3724/SP.J.1037.2011.00207.
- Soneda N, Diaz R T. Defect production, annealing kinetics and damage evolution in α -Fe: an atomic-scale computer simulation[J]. *Philosophical Magazine A*, 2009, **78**(5): 995-1019. DOI: 10.1080/01418619808239970.
- 王建伟, 尚新春, 吕国才. bcc-Fe 空位浓度对辐照损伤影响的分子动力学模拟[J]. *材料工程*, 2011, **10**: 15-18.
- WANG Jianwei, SHANG Xinchun, LYU Guocai. Molecular dynamics simulation of vacancy concentration on irradiation cascades damage effects in bcc-Fe[J]. *Journal of Materials Engineering*, 2011, **10**: 15-18.
- Bai X M, Voter A F, Hoagland R G, *et al.* Efficient annealing of radiation damage near grain boundaries via interstitial emission[J]. *Science*, 2010, **327**(5973): 1631-1634. DOI: 10.1126/science.1183723.

- 14 Bacon D J, Calder A F, Gao F. Defect production due to displacement cascades in metals as revealed by computer simulation[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 1997, **251**: 1–12. DOI: 10.1016/S0022-3115(97)00216-X.
- 15 马佳文, 巩文斌, 张伟, 等. 内嵌金属的多壁碳纳米管辐射损伤研究[J]. *核技术*, 2016, **39**(6): 060503. DOI: 10.11889/j.0253-3219.2016.hjs.39.060503.
MA Jiawen, GONG Wenbin, ZHANG Wei, *et al.* Theoretical study on irradiation damage of metal-filled multi-walled carbon nanotubes[J]. *Nuclear Techniques*, 2016, **39**(6): 060503. DOI: 10.11889/j.0253-3219.2016.hjs.39.060503.
- 16 Calder A F, Bacon D J, Barashev A V, *et al.* Effect of mass of the primary knock-on atom on displacement cascade debris in alpha-iron[J]. *Philosophical Magazine Letters*, 2008, **88**(1): 43–53. DOI: 10.1080/09500830701733004.
- 17 李融武, 潘正瑛. 聚变 α 粒子对材料辐照损伤瞬态行为的研究[J]. *核技术*, 1995, **18**(4): 203–208.
LI Rongwu, PAN Zhengying. Temporal development of radiation damage caused by fusion α -particles[J]. *Nuclear Techniques*, 1995, **18**(4): 203–208.
- 18 Nordlund K, Ghaly M, Averback R S, *et al.* Defect production in collision cascades in elemental semiconductors and fcc metal[J]. *Physical Review B*, 1998, **57**(13): 7556–7570. DOI: 10.1103/PhysRevB.57.7556.
- 19 吕铮, 刘春明. 快中子反应堆核心结构材料的辐照损伤[J]. *材料与冶金学报*, 2011, **10**(3): 203–208. DOI: 10.14186/j.cnki.1671-6620.2011.03.002.
LYU Zheng, LIU Chunming. Irradiation damage of structural materials for fast reactor application[J]. *Journal of Materials and Metallurgy*, 2011, **10**(3): 203–208. DOI: 10.14186/j.cnki.1671-6620.2011.03.002.
- 20 Gilbert M R, Dudarev S L, Derlet P M, *et al.* Structure and metastability of mesoscopic vacancy and interstitial loop defects in iron and tungsten[J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2008, **20**(34): 345214. DOI: 10.1088/0953-8984/20/34/345214.
- 21 Terentyev D A, Malerba L, Chakarova R, *et al.* Displacement cascades in Fe-Cr: a molecular dynamics study[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2006, **349**(1–2): 119–132. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2005.10.013.
- 22 Becquart C S, Domain C, van Duysen J C, *et al.* The role of Cu in displacement cascades examined by molecular dynamics[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2001, **294**(3): 274–287. DOI: 10.1016/S0022-3115(01)00421-4.
- 23 Malerba L, Terentyev D, Olsson P, *et al.* Molecular dynamics simulation of displacement cascades in Fe-Cr alloys[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2004, **329–333** (Part B): 1156–1160. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2004.04.270.
- 24 Gilbert M R, Marian J, Sublet J C. Energy spectra of primary knock-on atoms under neutron irradiation[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2015, **467**(Part 1): 121–134. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2015.09.023.
- 25 Agostinelli S, Allison J, Amako K, *et al.* Geant4 - a simulation toolkit[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A*, 2003, **506**(3): 250–303. DOI: 10.1016/S0168-9002(03)01368-8.
- 26 Apostolakis J, Asai M, Bogdanov A G, *et al.* Geometry and physics of the Geant4 toolkit for high and medium energy applications[J]. *Radiation Physics and Chemistry*, 2009, **78**(10): 859–873. DOI: 10.1016/j.radphyschem.2009.04.026.
- 27 王旭峰, 李中奎, 周军, 等. Zr 合金在核工业中的应用及研究进展[J]. *热加工工艺*, 2012, **41**(2): 71–74. DOI: 10.3969/j.issn.1001-3814.2012.02.021.
WANG Xufeng, LI Zhongkui, ZHOU Jun, *et al.* Application and research progress of zirconium alloy in nuclear industry[J]. *Hot Working Technology*, 2012, **41**(2): 71–74. DOI: 10.3969/j.issn.1001-3814.2012.02.021.
- 28 杨朝文. 电离辐射防护与安全基础[M]. 北京: 原子能出版社, 2009: 1–215.
YANG Chaowen. Ionizing radiation protection and safety[M]. Beijing: Atomic Energy Publishing House, 2009: 1–215.