

납, 철, 실리콘의 KERMA 와 손상 자료 생산 및 비교

Generation and Comparison of KERMA and Damage Data of Lead, Iron and Silicon

길충섭, 김도현, 김정도, 장종화
한국원자력연구소
대전광역시 유성구 덕진동 150

요 약

원자력 관련 시설의 차폐체와 구조재로 널리 쓰이는 납 과 철 그리고 계측기 등에 이용되는 실리콘의 중성자에 의한 KERMA 자료를 평가핵자료집 ENDF/B-VI.8, JENDL-3.3 그리고 JEFF-3.0을 이용하여 계산하고 비교, 분석하였다. 또한 중성자 조사에 의한 재료 손상 자료도 생산하여 원자의 변위(DPA) 계산 방법을 모색하였다. 재료 손상은 아주 낮은 에너지에서는 흡수, 그 다음 에너지 구간에서는 탄성산란, 높은 에너지에서는 비탄성 산란에 의해 주로 영향을 받는 것으로 나타났다.

Abstract

The KERMA and damage data of lead, iron and silicon were generated from ENDF/B-VI.8, JENDL-3.3 and JEFF-3. The KERMA by the elastic, inelastic and disappearance reactions were calculated, respectively. The damage data by neutron irradiation were also generated and tried to calculate DPA of the materials. The material damage is mainly made by absorption reaction at lower energy, elastic next and inelastic scattering reactions at higher energy.

1. 서 론

원자력 시설의 heating은 중요한 요소이며, 차폐체나 구조재의 설계에 영향을 준다. Heating은 그림 1에서 보듯 중성자 heating과 광자 heating으로 구분할 수 있다. 중성자 heating은 중성자 속에 비례하며, 중성자 반응으로부터 생성되는 하전 입자의 운동에너지로부터 생성된다. 광자 heating 또한 중성자 반응으로부터 생성되는 광자 속에 비례한다. 따라서 heating은 생성된 하전 입자의 운동에너지로부터 계산될 수 있다.

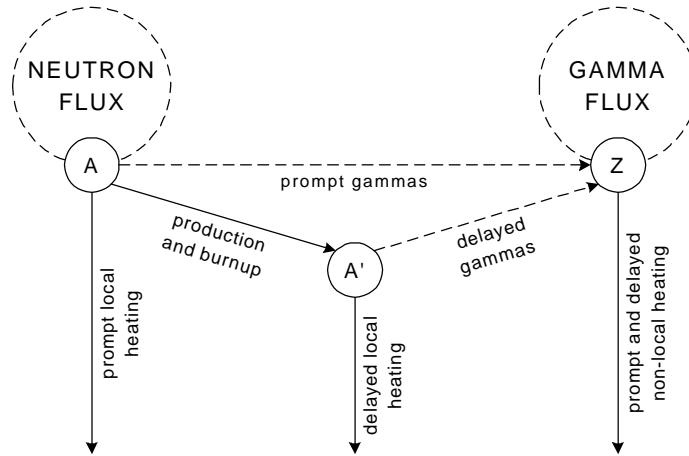


그림 1. Component of Nuclear Heating

Heating은 KERMA(Kinetic Energy Release in Materials) factor로 다음과 같이 표현될 수 있다.

$$H(E) = \sum_i \sum_j \rho_i k_{ij}(E) \Phi(E) \quad \dots\dots (1)$$

여기서 ρ_i 는 물질 i 의 원자 수밀도이고, $k_{ij}(E)$ 는 물질 i 의 j 반응에 의한 KERMA이고 $\Phi(E)$ 는 중성자나 광자 속이다. KERMA $k_{ij}(E)$ 는 eV.barn 단위를 갖는데 핵계산에서의 미세 단면적 자료처럼 이용된다.

본 연구에서는 차폐체 재료로 널리 쓰이는 납과, 구조재에 많이 함유된 철 그리고 각종 계측기나 반도체 기기에 쓰이는 실리콘의 KERMA를 계산하고 손상 자료를 이용하여 DPA(Displacements Per Atom)를 계산하는 방법을 모색하였다.

2. 이론적 배경

KERMA는 다음과 같이 직접 모든 반응에 대해 계산할 수 있다. 즉

$$k_{ij}(E) = \sum_l E_{ijl}(E) \sigma_{ijl}(E) \quad \dots\dots (2)$$

모든 2차 생성입자의 운동에너지의 합으로 표시될 수 있다. 여기서 E_{ijl} 은 i 핵종의 j 반응에서 생성되는 l 핵종의 운동에너지이다. 그러나 평가 핵자료집에는 모든 2차 생성 입자의 에너지 스펙트럼 자료가 수록되어 있지 않다. 따라서 NJOY⁽¹⁾ 코드에서는 energy-balance method로 KERMA를 계산한다. 즉

$$k_{ij}(E) = (E + Q_{ij} - E_{ijn} - E_{ij\gamma}) \sigma_{ij}(E) \quad \dots (3)$$

여기서 Q_{ij} 는 물질 i 에서 j 반응의 Q 값이다. E_{ijn} 과 $E_{ij\gamma}$ 는 각각 2차 중성자와 광자의 총 에너지이다. 평가핵자료에는 모든 반응의 광자 생성 자료가 수록되어 있지 않기 때문에 탄성 산란을 제외한 반응 자료(MT=3), 비 탄성 반응자료(MT=4) 등을 종종 이용한다. 식 (3)은 다음과 같이 다시 쓸 수 있으며,

$$k_{ij}(E) = (E + Q_{ij} - E_{ijn} - E_{ij\gamma}) \sigma_{ij}(E) \quad \dots (4)$$

여기서 중성자에 의한 기여는

$$k_{ij}(E) = (E + Q_{ij} - E_{ijn} - E_{ij\gamma}) \sigma_{ij}(E) \quad \dots (5)$$

로 표현할 수 있다. Q 값은 탄성 및 비탄성 산란 반응에서 영(zero)이다.

3. DPA 생산 방법

중성자 조사에 의해 야기되는 재료 손상은 원자력 관련 시설 설계에서 고려해야 할 매우 중요한 요소이다. 재료 손상은 직접적인 heating, 가스 생산 및 격자에 결함 발생 등으로 나타날 수 있다. 원자의 변위와 물질의 다양한 특성 사이에는 실험적으로 관계가 있다고 알려져 있다. 변위가 생긴 원자 수는 하나의 원자를 변위시키는 에너지(E_d)와 총 이용할 수 있는 에너지(E_a)에 의존한다. 따라서 다음과 같이 DPA를 표현할 수 있다.^{2)~6)}

$$DPA = \frac{E_a}{2E_d} \quad \dots (6)$$

여기서 E_d 값은 실험식으로부터 얻을 수 있으며, E_a 값은 KERMA로부터 계산 될 수 있다. NJOY 코드의 HEATR 모듈에서 계산되는 손상자료(damage energy production cross section)는 단위가 eV.barn 이다. 따라서 식 (1)로부터 수밀도와 중성자의 곱으로 단위가 eV/sec 가 되고 E_d 로 나누어 displacements(cm)/sec 가 된다. 어떤 물질의 변위는 중성자 속과 원자수밀도를 알 수 있으면 손상자료를 이용하여 구할 수 있다. 표 1에는 DPA를 계산하는데 필요한 대표적인 E_d 값을 정리하였다.

표 1. DPA 계산에 이용되는 E_d (eV) 값

핵종	E_d (eV)	핵종	E_d (eV)
Be	31	Co	40
C	31	Ni	40
Mg	25	Cu	40
Al	27	Zr	40
Si	40	Nb	40
Ca	40	Mo	60
Ti	40	Ag	60
V	40	Ta	90
Cr	40	W	90
Mn	40	Au	30
Fe	40	Pb	25

4. 자료 비교 및 분석

그림 2 ~ 4 는 Si-28, Fe-56 그리고 Pb-208의 중성자에 의한 KERMA 및 손상자료 계산 결과이다. 각 핵종의 KERMA를 세가지 평가 핵자료집으로부터 계산하여 비교 하였다.

4-1. Si-28 KERMA

JEFF-3과 JENDL-3.3에서는 거의 차이가 없다. ENDF/B-VI.8의 KERMA 값이 100 eV 아래에서 약간 작은 데 이는 중성자 흡수반응에 의한 KERMA 차이이다. 재료 손상자료를 살펴보면, 약 100 eV까지는 흡수반응, 1 MeV 근처까지는 탄성산란반응 그 이후는 비탄성산란 반응에 의해 재료의 손상이 발생함을 확인 할 수 있다.

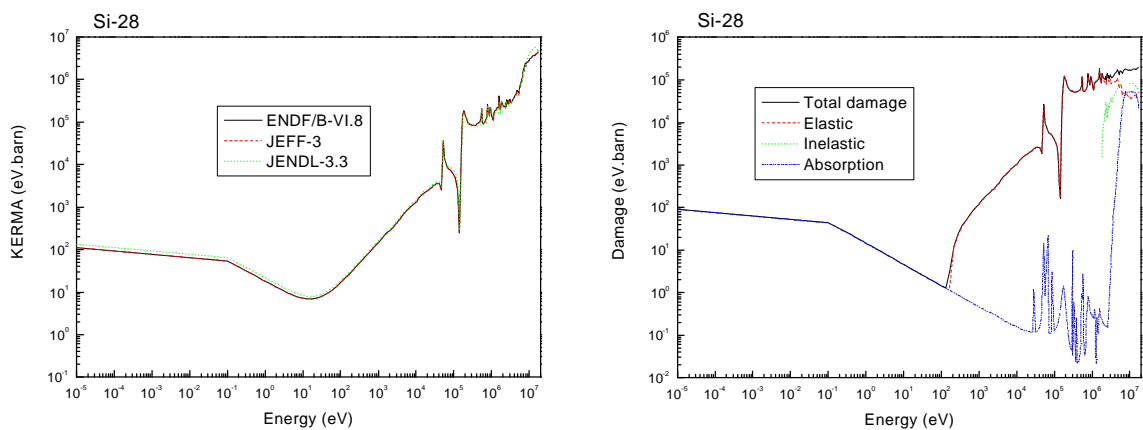


그림 2. Si-28 KERMA 와 손상자료 비교

4-2. Fe-56 KERMA

ENDF/B-VI.8은 3 keV 아래에서 JEFF-3과 JENDL-3.3 자료보다 약간 크다. 1 MeV 이상에서는 세자료 모두 큰 차이를 보이고 있다. 이는 비탄성 산란반응에 의한 KERMA의 차이에 기인한다. Fe-56 손상자료 역시 약 500 eV 아래에서는 흡수반응이, 약 1 MeV 까지는 탄성, 그 이후는 비탄성 산란반응이 재료에 손상을 주는 것을 알 수 있다.

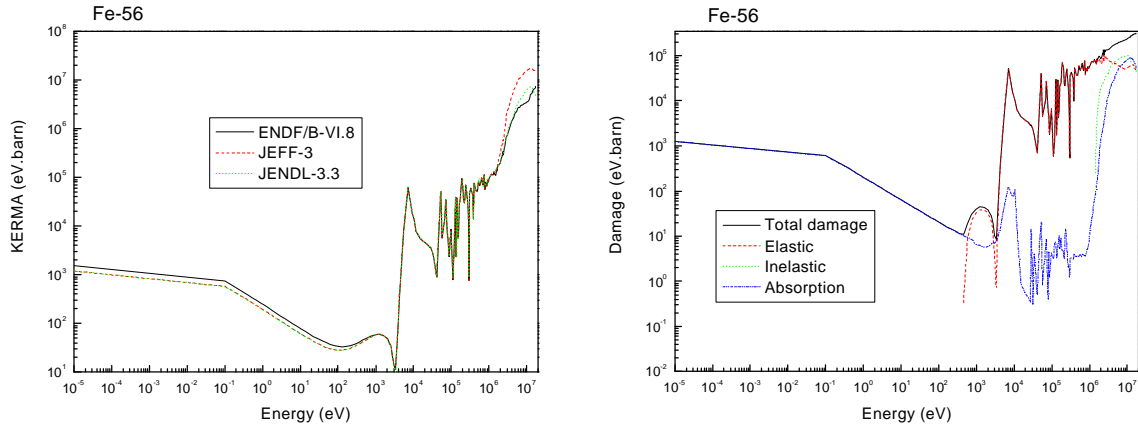


그림 3. Fe-56 KERMA 와 손상자료 비교

4-3. Pb-208 KERMA

평가 핵자료집 간에 MeV 이상에서를 제외하면 거의 차이가 없다. 재료 손상자료는 흡수반응에 의한 1 keV 아래에서의 값은 상대적으로 매우 작다. MeV 영역까지는 탄성 산란반응이, 그 이상은 비탄성 산란반응에 의해 재료에 손상을 준다.

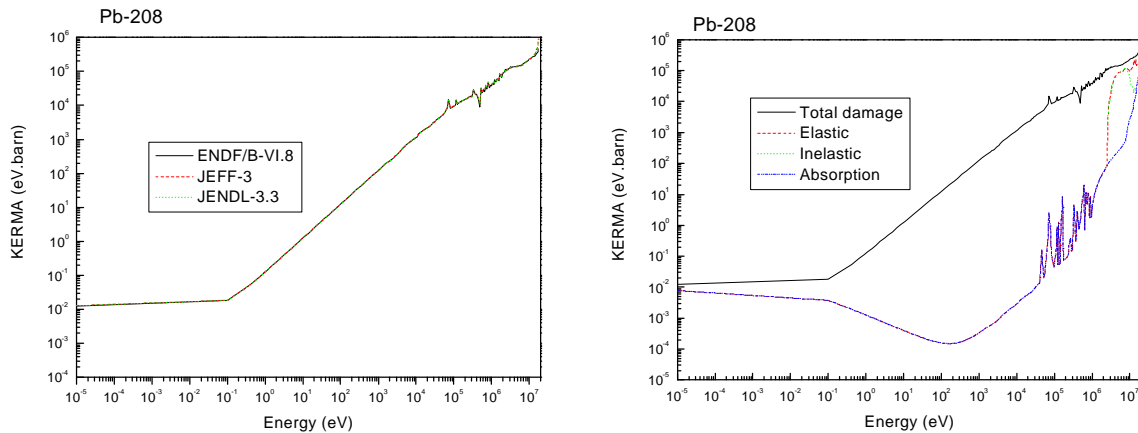


그림 4. Pb-208 KERMA 와 손상자료 비교

KERMA는 낮은 에너지에서의 흡수반응에 의한 것 보다 keV 이상에서의 탄성 또는 비탄성산란 반응에 의한 값이 훨씬 크다. 특히 무거운 핵종에서는 흡수반응에 의한

KERMA는 상대적으로 매우 작다.

5. 요약

원자력 관련시설의 차폐체와 구조재 등의 자료로 쓰이는 핵종들의 KERMA를 계산하고 평가핵자료집간에 차이를 살펴보았다. MeV 이상에서는 평가핵자료집간에 차이를 보이고 있다. 따라서 고에너지 핵자료에서의 KERMA 자료에 주의할 필요가 있다.

재료 손상은 수백 eV까지는 흡수반응에 의해, 그 다음부터 MeV까지는 탄성산란, 고에너지에서는 비탄성 반응에 의해 주도됨을 확인할 수 있었다. 또한 흡수반응에 의한 손상은 탄성, 비탄성 산란 반응에 의한 것보다 상대적으로 작았다.

앞으로 실제 원자력 시설의 중성자속을 계산하고, 최신 평가핵자료집의 손상자료를 이용하여 재료 물질들의 DPA등을 계산할 계획이며, 광자에 의한 KERMA도 생산하여 활용할 예정이다.

본 연구는 과학기술부의 원자력연구개발 중장기 계획 사업중 “원자력 연구 개발용 핵자료 평가.구축” 과제 수행에 따른 결과물이다.

참 고 문 헌

1. R. E. MacFarlane, D.W. Muir, "The NJOY Nuclear DataProcessing System, Version 91," LA-12740-M (Oct. 1994).
2. T.A. Gabriel, J.D. Amburgy, and N. M. Greene, "Radiation-Damage Calculations : Primary Knock-On Atom Spectra, Displacement Rates, and Gas Production Rates," Nucl. Sci. Eng. 61, 21 (1976).
3. D.G. Doran, "Neutron Displacement Cross Sections for Stainless Steel and Tantalum Based on a Lihard Model," Nucl. Sci. Eng. 49, 130 (1972)
4. L.R. Greenwood and R. K. Smither, "Displacement Damage Calculations with ENDF/B-V," in Proceedings of the Advisory Group Meeting on Nuclear Data for Radiation Damage Assessment and Reactor Safety Aspects, Oct. 12-16, 1981, IAEA, Vienna, Austria (1981).
5. M. T. Robinson, in Nuclear Fusion Reactors (British Nuclear Energy Society, London, (1970).
6. J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff, and P.V. Thomsen, Kgl, Dan나, Viden나, Sel나, Mat-Fys. Medd. 33 (1963)