

평가핵자료를 이용한 철의 DPA 단면적 계산 및 비교분석

Calculation and Comparative Analysis of Fe-56 DPA Cross Sections
Processed from Evaluated Nuclear Data Libraries

김정도, 조영식, 장종화, 길충섭
한국원자력연구소

요약

공개된 최신 평가핵자료집 ENDF/B-VI, JEF-2.2, JENDL-3.2, BROND-2.2 및 CENDL-2.1 의 철 자료로부터 NJOY94.105 의 HEATR 모듈을 이용해 DPA 단면적을 구하고 이를 PWR 압력용기의 중성자 스펙트럼을 이용한 철의 이탈을 계산을 통해 상호비교분석하였다.

Abstract

DPA cross sections of Fe-56 were calculated with the current evaluated nuclear data libraries from ENDF/B-VI, JEF-2.2, JENDL-3.2, BROND-2.2 and CENDL-2.1 using HEATR module of NJOY94.105. The DPA rates were also calculated with the neutron spectra in PWR pressure vessel and the results from each library were intercompared.

1. 서론

중성자 조사에 의한 재료의 손상(damage)은 핵분열로나 핵융합로의 설계 및 해석에 있어 중요한 고려대상 중의 하나이다. 조사손상을 일으키는 여러 가지 방사능 효과로서 직접 발열, 기체 생성이나 격자 결함 생성을 들 수 있다. 이들 양을 계산하기 위해서 핵반응 단면적이 이용되는데 실제로 각종 평가 핵자료집이 이용되어 왔다.

Rossin[1]이 DPA (Displacement per Atom)를 손상정도를 평가하는 양으로 제창한 후 Doran[2]은 이탈단면적 (Displacement Cross Section)이라는 표현을 사용하면서 미국의 초기 평가핵자료집인 ENDF/B-II 자료를 이용한 계산 결과를 내놓았다. 1970년대에 생산, 사용되어 온 DPA 자료집을 보면, 네덜란드 ECN의 DAMSIG77[3] (DLC-81/DOSDAM77-81로 등록)은 영국의 UKNDL과 미국의 ENDF/B-III를 (그 후 개량된 DAMSIG81에서는 ENDF/B-VI 사용), 미국 ORNL의 DLC-55/RECOIL[4]과 ANL의 MACKLIB-IV[5]는 ENDF/B-IV를 사용하였으며 ASTM의 권장자료집인 E693-79[6]도 ENDF/B-VI 자료를 사용해 계산되었다. 그 후 1980년대에는 미국의 새로운 평가핵자료집 ENDF/B-V에 의한 자료[7]가 생산되어 발표되었으나 ENDF/B-V가 비공개인 관계로 미국 이외에서는 사용할 수 없었다. 1990년대에 들어와서는 선진원자력개발국들이 자국의 평가핵자료집을 전부 공개하고 있어 이를 이용한 새로운 DPA 계산이 수행되고 있다. 현재 공개되어 있는 최신자료집으

로는 미국의 ENDF/B-VI, OECD/NEA의 JEF-2.2, 일본의 JENDL-3.2, 러시아의 BROND-2.2 그리고 중국의 CENDL-2.1 등이 있다. 이들 자료집은 각기 독자적으로 개발한 것이므로 핵반응자료에 차이가 있어 이들로부터 계산된 DPA 단면적에도 차이를 보이게 된다. 여기서는 이들 자료집에 의한 철의 DPA 단면적의 차를 조사 분석하였다. 참고로 현재 우리나라의 PWR에 대한 압력용기 조사시험 보고서를 보면 미국이 사용중인 47군 DPA 단면적 자료를 사용하고 있다.

2. DPA 단면적

격자 결합 cascade는 중성자 반응에 의한 최초의 반조(recoil)핵이 결정격자내에서 충돌에 의해 에너지가 감소되면서 일어난다. 이 때 이탈원자의 수는 일어날 수 있는 전 손상에너지 E_a 와 하나의 원자를 그의 격자위치에서 이탈시키는데 필요한 에너지 E_d 에 의해 결정된다. 일반적으로 DPA는 Norgett-Robinson-Torrens (NRT) 모델[8]의 개량형인 Kinchin-Pease 식, 즉

$$DPA = \kappa \frac{E_a}{2E_d}$$

으로부터 구할 수 있다. 여기서 κ 는 이탈효율로서 0.8이 권장되고 있으며 E_d 의 값은 여러 경험자료로부터 얻어져 발표되고 있으며 ASTM standard 로서의 추천값도 있고 철에 대한 값은 40 eV이다.

금번 계산 과정에서는 NJOY 코드[9] 시스템의 HEATR 모듈을 사용하였다. 이 모듈에서는 ENDF 포맷의 평가핵자료를 처리하여 E_a 에 핵반응단면적을 곱한 (barn·eV) 단위의 손상에너지 생성단면적을 계산한다. 전 손상에너지 단면적은 각종 부분핵반응에 의한 단면적의 합으로 이루어지는데 HEATR 에서는 탄성산란, 비탄성산란 및 중성자 소멸반응의 세가지 부분반응도 출력된다.

3. 철의 DPA 단면적 계산

철원소는 4가지 동위원소 즉 Fe-54, Fe-56, Fe-57 그리고 Fe-58로 이루어져 있는데, 이 중에서 Fe-56이 92 % 이상을 점하고 있다. 금번 비교 검토 과정에서는 Fe-56 만을 선정하여 계산하였다. 선정된 5가지 평가핵자료는 ENDF/B-VI.1, JEF-2.2, JENDL-3.2, BROND-2.2 및 CENDL-2.1 이고 이를 NJOY-94.105 처리 시스템의 HEATR 모듈로 처리하여 각 Fe-56 자료집으로부터 철의 손상에너지 생성단면적을 계산하였다. 여기에 NRT 모델 factor $\kappa/2E_d$ 를 곱하여 barn 단위의 DPA 단면적을 유도하였다. 이 때 사용된 κ 값은 0.8 이고 E_d 값은 40 eV 이다.

ENDF/B-VI.1 자료에 의한 DPA 단면적을 그림 1에 나타내었다. 그림에서 보면 거의 1 MeV 까지는 탄성산란에 의해, 그리고 1 MeV 근방에서부터 비탄성산란에 의한 영향이 보이며 낮은 에너지 영역에서는 (n,v) 반응에 의한 값이 전부이다. 그 밖에 (n,p) 반응이나 (n,a) 반응에 의한 효과는 각 반응의 시단에너지에 의한 5 MeV 근방에서부터 나타나고 있다. 핵자료집에 의해 큰 차이를 보이는 BROND-2.2 와 JENDL-3.2 의 결과를 그림 2에 실었다. 여기서 보면 낮은 에너지 영역에서는 BROND-2.2 값이 큰 반면 높은 에너지 영역에서는 JENDL-3.2 의 탄성산란단면적에 의한 효과가 크게 나타났음을 볼 수 있다.

생산된 자료의 비교검토를 위해 국내 PWR 계산에서 얻은 조사시험캡슐 및 원자로 압력

용기(RPV) 내면과 용기 두께의 1/4, 1/2 및 3/4 지점이 되는 용기내부, 그리고 외표면의 중성자 스펙트럼을 사용하여 이탈율을 계산하였다.

4. 결과 및 토의

생산된 철의 DPA 자료를 이용해 PWR의 압력용기 조사시험에서 주로 취급되는 조사시험캡슐과 압력용기 각 부분에서의 철의 이탈율을 계산하여 표 1에 정리하였다. 표 1에서는 각 핵자료집 자료간의 상대적인 비교를 위해 ENDF/B-VI.1을 기준으로 하여 다른 자료의 상대적인 차이를 백분율로 나타내었다. 또한 압력용기내에서의 철의 이탈율의 각 반응별 변화를 ENDF/B-VI.1 자료를 사용하여 표 2에 정리하였다. 표 1의 전체 이탈율을 보면 JENDL-3.2의 결과를 제외하고는 모두 ENDF/B-VI.1 결과의 7% 이내에 머물고 있다. 그러나 JENDL-3.2의 결과는 20% 이상의 차이를 보이고 있다. 그런데 이 것은 주로 탄성산란에 의한 효과로 나타났으며 비탄성 산란에 의한 결과는 JENDL-3.2가 더욱 ENDF/B-VI.1에 접근하고 있다. 소멸(disappearance) 반응에 의한 결과는 BROND-2.2와 JEF-2.2에서 큰 차이를 보이고 있다. 그림 3은 이 결과를 보여주고 있다. 표 2에서 보듯이 PWR 압력용기의 경우 탄성산란에 의한 영향이 80% 내외이고 소멸 반응에 의한 영향은 1% 이하임을 감안할 때 소멸 반응에 의한 영향을 무시할 수 있다. 그러나 10 MeV 이상의 고속 영역이 중요시되는 핵융합로 문제에서는 이 부분이 중요하게 되므로 평가핵자료의 재검토가 요망된다.

현재 PWR의 압력용기에 대한 조사시험에서는 조사 파라메타로서 각각 1 MeV 이상, 0.1 MeV 이상의 고속중성자속과 DPA 값을 내놓고 있는데 DPA 값의 에너지 효과를 보기 위해 표 3에 각각 1 MeV와 0.1 MeV를 기준으로 상하의 이탈율을 조사하였다. 압력용기내에서 1 MeV 이하는 약 50 ~ 70%, 그리고 0.1 MeV 이하만을 보면 5% 미만임을 알 수 있다. 즉 PWR 압력용기에서의 철의 이탈율은 95% 이상이 0.1 MeV보다 큰 에너지의 중성자에 의한 것임을 알 수 있다.

5. 결론

DPA 단면적을 계산하기 위해서는 핵반응 단면적 자료가 요구되므로 반응단면적의 정확도가 DPA에 크게 영향을 준다. 선진원자력개발국들이 독자 개발하여 공개한 최신 평가핵자료들로부터 철의 DPA 값을 계산하고 국내 PWR 압력용기에서 계산된 중성자속을 이용하여 철의 이탈율을 비교 분석하였다. 전 이탈율 결과는 전체적으로 JENDL-3.2의 결과를 제외하면 거의 일치하고 있다. JENDL-3.2의 큰 차이는 주로 탄성산란단면적에 의한 것으로 밝혀졌다. 한편 소멸반응에 의한 영향은 BROND-2.2와 JEF-2.2에서 크게 나타나고 있어 앞으로 상세한 검토가 요망된다.

감사의 글

본 연구는 과학기술부가 지원하는 원자력개발 중장기과제 중 “핵자료체제 구축” 과제의 일환으로 수행하였다.

참고문헌

1. A. D. Rossin, Nucl. Sci. Eng., 9, 137 (1961).
2. D. G. Doran, Nucl. Sci. Eng., 49, 130 (1972).
3. W. L. Zijp, K. H. Appelman, H. J. Nlthenius and H. C. Rieffe, ECN-36 (1978).
4. T. A. Gabriel, J. D. Amburgey and N. M. Green, ORNL-TM-5160 (1976).
5. Y. Gohar and M. A. Abdou, ANL/FPP/TM-106 (1978).
6. ASTM recommended practice E693-79, Annual Book of ASTM Standards, Part 45 (1980).
7. L. R. Greenwood and R. K. Smither, IAEA-TECDOC-263, p.185 (1981).
8. M. J. Norgett, M. T. Robinson and I. M. Torrens, Nucl. Eng. Design, 33, 50 (1975).
9. R. E. MacFarlane and D. W. Muir, LA-12740-M (1994).

Ⅹ 1. Iron displacement rate for a Korean PWR

Position Library	Capsule	0 T	1/4 T	1/2 T	3/4 T	T
Total (dpa/sec)						
ENDF/B-VI	*5.692e-10	1.180e-10	7.672e-11	5.008e-11	3.189e-11	1.790e-11
JEF-2.2	5.820e-10	1.199e-10	7.825e-11	5.108e-11	3.249e-11	1.822e-11
	**(+2.5)	(+1.6)	(+2.0)	(+2.0)	(+1.9)	(+1.8)
JENDL-3.2	6.971e-10	1.355e-10	9.172e-11	6.121e-11	3.956e-11	2.237e-11
	(+22.5)	(+14.8)	(+19.6)	(+22.2)	(+24.1)	(+25.0)
BROND-2.1	5.396e-10	1.170e-10	7.362e-11	4.735e-11	2.981e-11	1.667e-11
	(-5.2)	(-0.9)	(-4.0)	(-5.5)	(-6.5)	(-6.9)
CENDL-2.1	5.468e-10	1.167e-10	7.475e-11	4.814e-11	3.031e-11	1.688e-11
	(-3.9)	(-1.1)	(-2.6)	(-3.9)	(-5.0)	(-5.7)
Elastic scattering (dpa/sec)						
ENDF/B-VI	4.983e-10	8.415e-11	6.203e-11	4.312e-11	2.862e-11	1.638e-11
JEF-2.2	5.132e-10	8.750e-11	6.413e-11	4.435e-11	2.932e-11	1.674e-11
	(+3.0)	(+4.0)	(+3.4)	(+2.9)	(+2.5)	(+2.2)
JENDL-3.2	6.263e-10	1.015e-10	7.706e-11	5.427e-11	3.631e-11	2.086e-11
	(+25.7)	(+20.6)	(+24.2)	(+25.9)	(+26.9)	(+27.4)
BROND-2.2	4.686e-10	8.253e-11	5.927e-11	4.050e-11	2.656e-11	1.510e-11
	(-6.0)	(-1.9)	(-4.5)	(-6.1)	(-7.2)	(-7.8)
CENDL-2.1	4.761e-10	8.298e-11	6.010e-11	4.120e-11	2.705e-11	1.537e-11
	(-4.5)	(-1.4)	(-3.1)	(-4.5)	(-5.5)	(-6.2)
Inelastic scattering (dpa/sec)						
ENDF/B-VI	6.878e-11	3.066e-11	1.434e-11	6.812e-12	3.180e-12	1.392e-12
JEF-2.2	6.679e-11	2.929e-11	1.379e-11	6.592e-12	3.099e-12	1.364e-12
	(-2.9)	(-4.5)	(-3.8)	(-3.2)	(-2.6)	(-2.0)
JENDL-3.2	6.856e-11	3.067e-11	1.431e-11	6.787e-12	3.166e-12	1.386e-12
	(-0.3)	(+0.03)	(-2.1)	(-0.4)	(-0.4)	(-0.4)
BROND-2.1	6.815e-11	2.939e-11	1.392e-11	6.677e-12	3.145e-12	1.386e-12
	(-0.9)	(-4.1)	(-2.9)	(-2.0)	(-1.1)	(-0.4)
CENDL-2.1	6.871e-11	3.061e-11	1.432e-11	6.803e-12	3.176e-12	1.390e-12
	(-0.1)	(-0.2)	(-0.1)	(-0.1)	(-0.1)	(-0.1)
Disappearance (dpa/sec)						
ENDF/B-VI	2.097e-12	3.151e-12	3.331e-13	1.445e-13	8.386e-14	1.207e-13
JEF-2.2	1.903e-12	3.026e-12	3.104e-13	1.306e-13	7.477e-14	1.128e-13
	(-9.3)	(-4.0)	(-6.8)	(-9.6)	(-10.8)	(-6.6)
JENDL-3.2	2.135e-12	3.260e-12	3.340e-13	1.442e-13	8.422e-14	1.244e-13
	(+1.8)	(+3.5)	(+0.3)	(-0.2)	(+0.4)	(+3.1)
BROND-2.1	2.862e-12	4.996e-12	4.215e-13	1.690e-13	1.007e-13	1.818e-13
	(+36.5)	(+58.6)	(+26.5)	(+17.0)	(+20.1)	(+50.6)
CENDL-2.1	2.021e-12	3.093e-12	3.096e-13	1.342e-13	7.938e-14	1.188e-13
	(-3.6)	(-1.8)	(-7.1)	(-7.1)	(-5.3)	(-1.6)

*) Read as 5.692 x 10⁻¹⁰

**) Percent difference relative to ENDF/B-VI

㉞ 2. Percentage of partial DPA rate relative to total (ENDF/B-VI.1)

Position Library	Capsule	0 T	1/4 T	1/2 T	3/4 T	T
Total	*5.692e-10	1.180e-10	7.672e-11	5.008e-11	3.189e-11	1.790e-11
Elastic	4.983e-10 (87.5)	8.415e-11 (71.3)	6.203e-11 (80.9)	4.312e-11 (86.1)	2.862e-11 (89.7)	1.638e-11 (91.5)
Inelastic	6.878e-11 (12.1)	3.066e-11 (26.0)	1.434e-11 (18.7)	6.812e-12 (13.6)	3.180e-12 (10.0)	1.392e-12 (7.8)
Disappearance	2.097e-12 (0.4)	3.151e-12 (2.7)	3.331e-13 (0.4)	1.445e-13 (0.3)	8.386e-14 (0.3)	1.207e-13 (0.7)

*) Read as 5.692×10^{-10}

㉞ 3. Energy dependence of DPA rate in RPV (ENDF/B-VI.1)

Position	$E \geq 1$ MeV	$E < 1$ MeV	$E \geq 0.1$ MeV	$E < 0.1$ MeV
0 T	*7.684e-11 (65%)	4.056e-11 (35%)	1.116e-10 (95%)	5.800e-12 (5%)
1/4 T	3.906e-11 (51%)	3.758e-11 (49%)	7.399e-11 (97%)	2.650e-12 (3%)
1/2 T	1.960e-11 (39%)	3.043e-11 (61%)	4.788e-11 (96%)	2.150e-12 (4%)
3/4 T	9.595e-12 (30%)	2.226e-11 (70%)	3.015e-11 (95%)	1.700e-12 (5%)
1 T	4.311e-12 (24%)	1.355e-11 (76%)	1.653e-11 (93%)	1.330e-12 (7%)

*) Read as 7.684×10^{-11}

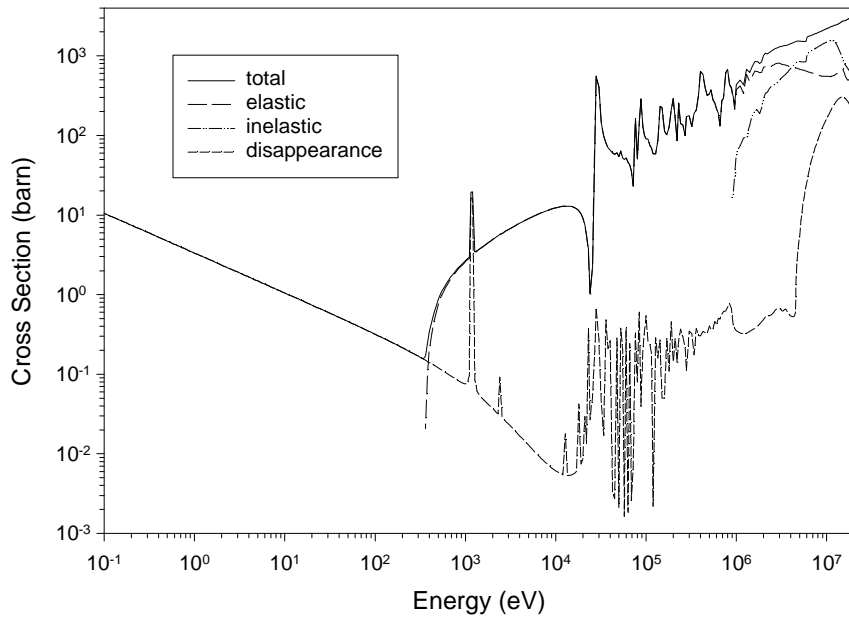


그림 1. DPA Cross Section for Fe-56 using ENDF/B-VI

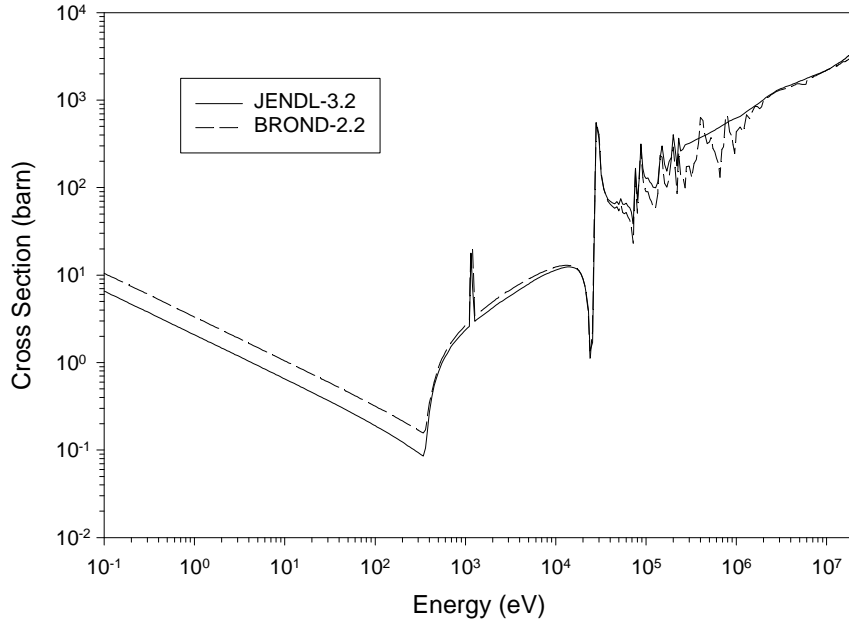


그림 2. Comparison of Fe-56 DPA Cross Sections for JENDL-3.2 and BROND-2.2

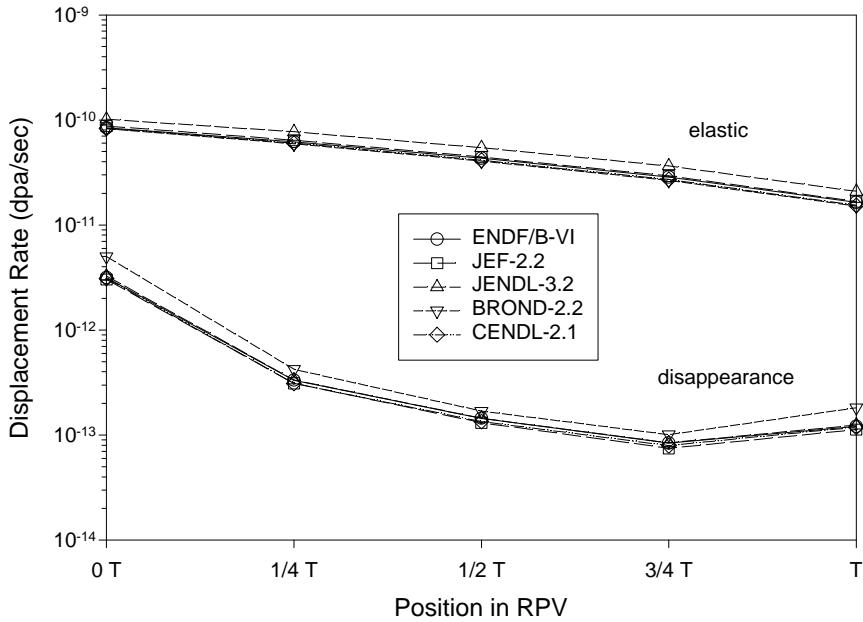


그림 3. Radial dependence of Fe-56 DPA rate for elastic and disappearance reaction in RPV