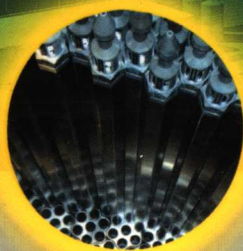
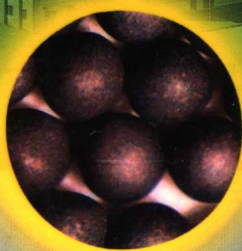
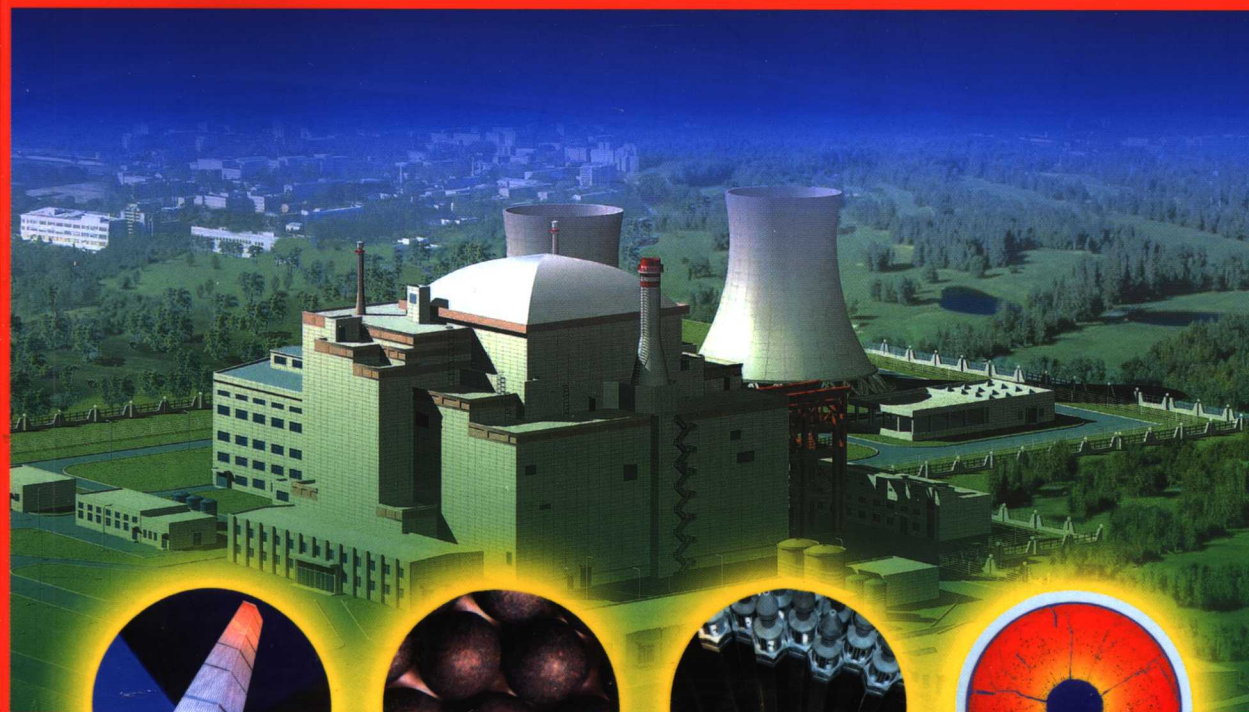




核材料科学与工程

材料辐照效应

● 郁金南 编著



化学工业出版社

 核材料科学与工程

材料辐照效应

● 郁金南 编著



化学工业出版社

· 北京 ·

图书在版编目 (CIP) 数据

材料辐照效应/郁金南编著. —北京: 化学工业出版社, 2007. 1

(核材料科学与工程)

ISBN 978-7-5025-9905-8

I. 材… II. 郁… III. 材料辐照效应 IV. TL34

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2007) 第 004882 号

责任编辑: 陈志良

文字编辑: 刘志茹

责任校对: 宋 玮

装帧设计: 于 兵

出版发行: 化学工业出版社 (北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011)

印 刷: 化学工业出版社印刷厂

装 订: 三河市万龙印装有限公司

720mm×1000mm 1/16 印张 36 字数 675 千字 2007 年 6 月北京第 1 版第 1 次印刷

购书咨询: 010-64518888 (传真: 010-64519686) 售后服务: 010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书, 如有缺损质量问题, 本社销售中心负责调换。

定 价: 85.00 元

版权所有 违者必究

序

20 世纪最惊人的科技成就之一就是人类实现了原子核内部巨大能量的释放。1945 年 8 月先后在广岛和长崎两颗原子弹爆炸成功，可以说是最突出和最震撼人心的表现，它导致第二次世界大战迅速结束。其后不久又实现了氢弹试验。20 世纪 50 年代以后大批核反应堆接连兴建和运行并入电网，人们实现了可控的核裂变反应，驾驭了核能这匹烈马，使它造福于人类，成为现代能源的一个组成部分。核能出现在当代人类的面前，对于这个世界投出了巨大的阴影，也射放出希望的光芒。至今人们仍以很大的精力改善它、发展它，更对可控热核聚变的成功不断追求和探索。

一个伟大的影响人类历史的科技时代的兴起，必然要经过一段路程，核时代也不会例外，不过核时代的兴起却似乎有着一种特点，那就是它十分紧凑和急迫，就在 20 世纪的 30~40 年代的十几年间，急剧跃起。它把那么多科学上、工程上重大的创新和创建快速而又严格地联贯在一起，其取得科学和技术紧密结合的方式和取得的速度都是令人叹为观止和深深思考的。我们不妨稍加回顾，而且就从 1931 年说起。

- 1931 年，伊伦娜·约里奥-居里继她母亲居里夫人在 1897 年发现放射元素 Po(钋)之后，在实验中发现，用 Po 所发射的 α 射线轰击铍 (Be) 时，可以释放出穿透力很强的“射线”。

- 1932 年 2 月 Chadwick 用一系列实验证明 Po-Be 反应所得的穿透力很强的产物就是中子。

- 1932 年 9 月 12 日，中子发现不到 7 个月，Szilard 就提出来一种概念：有可能通过中子链式反应实现原子能的释放，而且提出了用这种方法可以制造原子弹。他的这一远见比实际出现“裂变”早了 5 年。

- 1934 年 Szilard 申请了原子弹方案的专利，以便保密加以保护，(1935 年他将专利无偿赠予英国)。

- 1934 年 Fermi 用中子轰击铀。并发现将中子慢化后轰击效率更高。Szilard 还提出“临界质量”的必要性。

- 1938 年 12 月 21 日 Otto Hahn 发表文章证实用中子轰击铀的产物中有较轻的原子 Ba(钡)，次年人们采用 Fission 这一名词。

- 1939 年 Szilard 得到消息后就提出既然放出了质量较轻的碎块，那就应该伴有多余的中子。当年 2 月 5 日 Bohr 提出 ^{235}U 和 ^{238}U 的核行为不一样。在铀中表现出慢中子裂变行为的是 ^{235}U 。1939 年 7 月 3 日 Szilard 写信给 Fermi 提出可

以用石墨慢化铀栅来实现链式反应。

从以上9年间一连串的发现，可以看出这时候核能释放的利用已展出它的前景和重要的意义，几乎呼之欲出。正在此时，1939年9月1日德国入侵波兰，爆发了第二次世界大战。同年10月11日 Szilard 就联系爱因斯坦向美国总统罗斯福递交了有名的“爱因斯坦信”，提请罗斯福注意研制原子武器，以免德国领先。

这一建议当时并未立即受到足够的重视和响应。一方面是美国当时尚未参战，另一方面是科学和技术上尚存在着很多重要的问题需要回答。时过三年许多问题明朗化了，目标和方案也愈来愈加清楚。例如： ^{235}U 能不能用快中子裂变， ^{238}U 在吸收中子后能不能得到一个新的94号元素，都得到了回答。1941年2月26日 Glenn Seaborg 证实了94号元素的存在。1941年3月6日 Seaborg 和同事分离出 ^{239}Np ，几天后它就衰变成 ^{239}Pu (钚)，质量仅仅有 $0.25\mu\text{g}$ 。这一个有更好裂变能力的人工新元素第一次诞生。

1941年12月7日，日本偷袭珍珠港，12月8日美国对日本宣战。

1941年12月18日，美国举行第一次S-1计划会议，实际上正式开始了对“裂变武器”的全面启动，也就是后来1942年8月的曼哈顿计划。

这个列入国家最优先级AAA的计划，不受资金的限制，要全速进行，十分庞大复杂。其目的和日程越来越明确，这个浩大的物理工程系统中包含着大量的涉及多种领域的科学技术难题。但其核心和有形的汇集点，就是制出足够数量的两种“核材料”，一是大约64kg的高浓缩 ^{235}U ，二是制造出重约6.2kg的人工元素 ^{239}Pu ，三是把它们加工分别制成部件，组装成两件武器。这三件事每一件的背后都有针对性的研究和工程建设和生产，为了保险起见，有些工作得多路并行地实施以免出差错和贻误时间。

以钚材料来说，要知道之前根本不存在这个元素，它是1941年3月6日才第一次人工制出来的，为量仅 $0.25\mu\text{g}$ 。为了建立制钚的反应堆，首先在芝加哥大学的冶金实验室建立了一个CP-1堆，费米负责这一研究。1942年9月15日开始收到建堆所需要的高纯石墨和金属铀。从11月16日起CP-1建设以每日24小时工作进行，到12月2日CP-1临界，这是人们历史上建成的第一个临界装置，证明反应堆的方案可行。同月决定在橡树岭再建一个研究堆X-10和钚分离厂，目的是必须要造出少量的钚提供材料研究，要了解钚的各种性能、行为和合金化等。一年之后，X-10堆于1943年11月达到临界，可以生产以克计的钚供材料钚本身研究的需要。实际上就在1943年，芝加哥大学冶金实验室的材料科学家们，已经在用一些不到 $50\mu\text{g}$ 的微粒钚，镶在有机玻璃中观察钚的金相了，也用这样小的样品测到钚的密度并发现了某些相变。可见当年对金属钚性能需要了解的紧急之情。

与开建X-10堆的同时，美国在西北部地区购地780平方英里土地开建Han-

ford 工厂作为大规模生产铀和分离铀的基地。这是一个重大的工程, Hanford 一个堆就要装 200t 天然铀, 1200t 石墨, 每秒就需要 5t 冷却水。1944 年第一个堆建成之后, 又连续扩大堆的数目, 到了 1945 年, Hanford 两个月产铀可达 21kg 之多, 它为核武器提供了足够的材料, 按计划制成了 1945 年 8 月投放的原子弹。一个全新的人工元素, 1941 年年初才刚被发现, 到 1945 年 8 月就用它为主体发展成震撼世界的武器, 为期只有四年半的时间! 这是了不起的神奇的速度, 也显示出理论研究、科学实验和工程技术紧密结合的巨大威力。

从这一简短回顾, 从 1931~1945, 短短 15 年核科学技术在一段相当集中的时间内乍然降临, 不仅带来了一个崭新的技术领域, 而且它的以科学促进技术发展的模式也启迪和催促着很多国家向前发展的思考。

第二次世界大战结束了 60 多年, 核科学技术的发展和探索从未停止过, 它对国防、政治、社会、生活、能源等都发挥着重大的影响。其中特别量大面广的是核能的利用。核能的利用, 其难度和要求或许比武器更大。它的能量释放应是可控的, 可以调节, 必须安全, 必须长期, 堆型也是多样化, 这当中“核材料”仍是核心。随着几十年的研究和应用, 核材料的品种和形式日益更新, 质量更高, 寿命更长, 不论是燃料或结构材料都研究得更加透彻, 取得的使用经验也愈加丰富。截至 2006 年, 全世界有 37 个国家正在运行的发电的反应堆共计 442 座, 合共提供全世界电力的 17%, 总输出约 400000MW。美国、法国、日本三个国家的核电厂占全球核电厂的 47%, 所提供的核电占全世界核电的 57%。在这个核科技时代, 核电已经成为世界能源的一个组成部分。它存在着争议, 但势头仍在发展。至于长远的未来热核发电更是人们执着追求的前景。核时代带来的核能利用和其中的核材料将是一个没有止境的领域。

“材料科学及工程”作为一门学科盛起于 20 世纪 60 年代, 它把人们对材料科技的活动概括为四个要素, 那就是材料的制备与加工; 材料的组织和结构; 材料的性能和材料的应用行为。这是指材料作为一个总体而言, 核材料的研制和应用当然也涵盖在这四个要素之中。不过各类材料都有它的特殊应用环境和目标要求。于是各类材料也会出现它所具有的独特的内容和问题。

“核材料”并没有一个明确的定义和限定范围, 现在国内外的核材料书刊大多是“核反应堆材料”。它包括重元素的裂变反应堆和轻元素的聚变堆。聚变堆尚在工程可能性论证之中, 裂变堆则已经大量地工业化和商用, 并具有材料方面丰富的内容。

一个核反应堆, 它的核心是一个能量密度很高的热源。处在那里的材料自然将面临高温、高温度梯度, 高热流、高速流场的作用下, 这本身已构成很特殊的问题。但是, 在这以外最特殊的因素仍然是核性能和中子的作用。几乎所有的堆用材料都得考虑它自身的核性能, 它的各种核截面: 裂变截面, 吸收截面, 散

射，慢化等。材料在大量中子的轰击下，或者会发生一些核反应造成新的元素（包括气体），本身的成分将发生改变。或者在中子的大量轰击下在内部形成了大量缺陷，缺陷的长期迁移和积累会对材料的形状、尺寸、力学性能等造成严重的影响。总之，核材料的一个很大特点是它在使用过程中本身不是静止的而是不断在变化，它在中子的作用下会发生什么变化？能使用多久？会不会危及安全？有什么办法能增长它的使用效能和寿命？这关系到一代一代反应堆的改进和发展问题，也是核材料的独特问题。

在这里我们不妨举出一个颇具特色的具体例子稍以助兴。那就是铀和钚合金受到中子轰击后发生的“辐照生长”的现象，这是一个核材料比较老的故事，但很有示范性的意义。

铀和钚是最重要的两个金属核燃料。室温的 α 铀呈底心斜方点阵，室温的 α 钚呈单斜系。固态铀有三个同素异晶体，固态钚有 6 个同素异晶体。这都是一般少见的材料特点。

α -U 的晶体结构请参看图 1。其中图 (a) 是 α -U 晶体的立体示意图。它有三个互相垂直而不等长的晶轴 a_0, b_0, c_0 ，在底心斜方点阵的每个结点上各有两个原子，像哑铃样的安排着。可以看出它的“ c ”面来回错开，形成像 ABAB……那样的晶面层次。图 (b) 是“ c ”面的投影，图 (c) 是“ a ”面的投影。这样的结

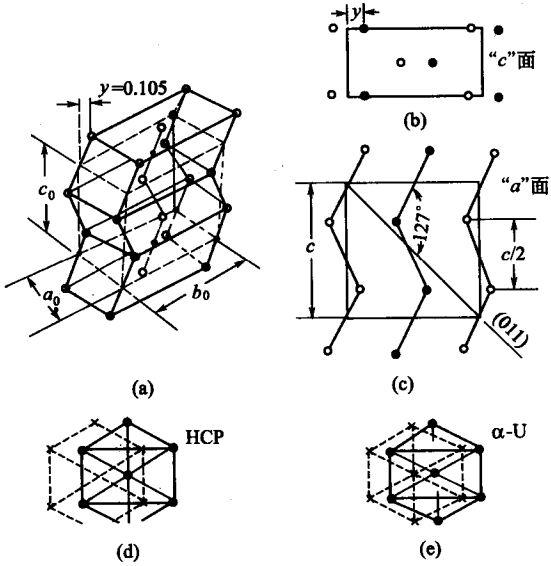


图 1 α -U 的晶体结构和密排六方点阵的对比（作者制于 1963）

- (a) α -U 结构的立体示意图。底心斜方点阵，每阵点有 2 个原子。晶体的“ c ”面呈 ABAB……排列；
- (b) α -U 的“ c ”面投影，A 面和 B 面沿 b 轴错开 $2y=0.21b$ ；
- (c) α -U 的“ a ”面投影，显示“ b ”面的折曲角为 127° ；
- (d) 密排六方结构（HCP）中“ c ”面 A、B 二层相互错开 $2y=0.33b$ ；
- (e) α -U 的“ c ”面投影，类似图 (b)， $2y=0.21b$

构和 Al, Cu, Fe 等立方晶体很不一样,它具有各向异性(如各个方向的膨胀系数有很大差别)。在中子的长期作用下, α 铀沿着 b 轴方向越变越长,沿着 a 轴的方向越来越短,造成了“辐照生长”现象。这等于是中子辐照下,能把铀原子的 (100) 晶面越来越多地转化成 (010) 晶面。这在早年的生产铀的堆中,成为人们对铀棒十分关心的问题,花不少精力去把铀棒的晶粒度细化并且使晶粒的位向混乱排列,以使众多晶粒的方向性尺寸变化互相抵消掉。

图 2 是铀合金的例子,也是有关“辐照生长”。图中的合金是含有 5% (质量分数)Pu 的 Zr-Pu 合金。根据相图,它应该是 Pu 溶在 α -Zr 中的固溶体。是早年 (1961)ANL 为研制快中子增殖堆而试验的材料。样品装在 NaK 罐中于 MTR 堆中照射,燃耗在 0.8%~1.8% 之间。所造成的辐照生长十分惊人。长度增长到 4 倍,截面积减小,合金密度降了 3%。

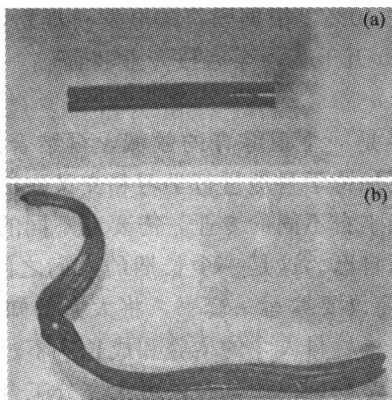


图 2 Zr-Pu 合金辐照

(a) 典型的辐照前 Zr-5%Pu(质量分数)合金样品;(b) Zr-5%Pu(质量分数)

燃料的辐照生长 (JNM, Jan, 1961)

请注意,这个例子中的材料实际上是 α -Zr,晶体结构是密排六方。如果和前一例的 α -U 相比较,从图 1 中的图 (d) 和图 (e) 可以看出二者在结构上是十分相似的。这里燃料是 Pu 而体现出特异生长效应的则是锆。效应所以如此剧烈是因为在加工时造成了严重的织构变化而且给它以足够的空间。如果比较它的“生长指数”则很和文献中的 α -U 单晶体的 $[010]$ 方向的“生长指数”相近。

当然,这样的例子说明 Pu-Zr、U-Pu-Zr 这样的燃料很难在快堆中使用了,后来快中子堆便大量采用了混合的铀钚氧化物燃料。但由于金属燃料有其本身的优势,几十年来 ANL 一直有人在不断地研究解决 U-Pu-Zr 体系,并在 EBR-II 堆上进行长期试验,燃耗竟然达到了 18.4% (原子分数)。可以看出取得的成功,这说明金属型燃料仍是快堆燃料一个有力的竞争者。对锆合金来说应该还有立方相的路子。

以上例子目的在于形象地说明核材料所具有的一种独特性。核材料所解决的难题很多都是和材料在中子作用下的行为有关，一种反应堆的成败及推广和核材料的突破有十分密切的关系。当然，这只是“一面”之辞，核能的未来发展决定着许多相关因素的综合考虑。关于第四代反应堆已有一些新的议论，从长期的观点看，核能还将面临不少新颖的考虑。

我国早自 20 世纪 50 年代中期就着手致力于核反应堆事业，从事不同类型反应堆的设计建造和运行。为了迎接未来发展的需要，大学里也成立了相应的核科学专业以培养人才，其中也包括“核材料专业”。几十年来这些人才在各个岗位上为国家作出了巨大的贡献和成绩，他们也成长为很有经验和造就的专家。

中国的核能发电起步虽然较晚，但这些年来发展迅速，已经以多种方式建设起不同等级的核电站。当前亚洲的核电正在升温，在建设中的有 18 座，占世界正在建设中反应堆数量的 70%。根据国家核电发展规划，到 2020 年我国核电总装机容量将争取达到 4000 万千瓦，今后核专业将面临一个对人才更加需要增长和提高的形势。

材料科学及工程已经是一个很综合的领域，再结合到核“物理工程”的特点，这就需要人们能够更加跨学科地进行学习和交叉融汇，这不是大学四年所能促成的。核材料人才可能来自不同的专业，需要在不同的背景和基础上去培养自己，和在不同岗位上提高自己。这是一个长期的人们之间千差万别的学习过程。因此 2000 年秋有一些人商议要编写一套书，将大家的知识汇集起来，提供相互参考和学习，这会有助于核材料人才的培养和成长。不过这个工作会很困难，因为涉及的学科门类很多，差别也很大，必须由大家分工合作来完成，但大家都有工作在身，要花时间来写书也很不容易。

尽管如此，大家还是齐心坚持，一直没有放弃这一计划的初衷，一个个都完成了，到 2007 年 3 月最后一本书稿收齐。这套书一共有 12 本，参加的写作者有 60 多人，全套书有 500 万字以上，也算是相当大的一件工程。从时间来说要比预计的日期推迟了不少；不过，那只是预计太不现实了，这么一套书，那么多人写，要一定在某一限定时间都交齐，很难。只能说：终于收齐了，完成了。而且，一本本似乎都很精彩。

第一本，《核材料导论》。这是《核材料科学与工程》合集的首卷，注重在整体和全面的论述，并介绍多个学科的基础。包括原子核物理，核反应堆物理，核反应堆热工流体力学，核反应堆设计和安全。具体讨论核材料的种类、组成和功能结构时则把重点放在裂变反应堆材料上。又各用一章篇幅介绍聚变堆材料和空间核电源材料。本书可谓是跨很多学科和应用领域的核材料大全，作者人员也比较多。

第二本，《核材料物理基础》。这也是一本属于基础的书，专门阐述材料的物理基础，注重材料物理的普遍性而不是它核方面的特性。书中阐明了材料晶体

学、缺陷、结构、形变、相图、相变等，并不专门针对核材料而在实例中包含了不少核材料，它是特别为非材料专业的读者设计编写的。

第三本，《核材料化学》。也是提供基础性化学方面的论述。如化学反应热力学，动力学，溶液与萃取，材料的氧化，电化学等。本书更趋于向核方面趋近，特别写了一章材料的核化学与辐射化学，以及一章在反应堆工况中材料的腐蚀，涉及压水堆，液态金属，熔盐等不同环境。

第四本，《材料辐照效应》。本书是针对核材料的一个特殊问题，但偏重于基础性，如固体中原子碰撞的基本理论和产生缺陷的过程，计算损伤剂量的方法，辐照缺陷的聚集和演化。进而到宏观的辐照效应，如气泡，裂变产物，材料的辐照硬化和脆化等。对聚变堆的严重辐照损伤问题的研究也给以了注意。是一本介绍辐照效应新进展的专述。

第五本，《核燃料》。核燃料是核能的核心，我国研制核燃料已有几十年的历史，研制和生产核燃料是体现一个国家核能和核力量的基础。本书内容涉及铀、钍、钚、钚、钚和锂及其化合物的生产、加工、性能和使用，还有辐射防护及临界安全等问题，也有专门章节讨论陶瓷燃料和高温气冷堆包覆颗粒燃料，纵横交叉，颇为全面深入。

第六本，《核结构材料》。没有结构材料当然就构不成一个核反应堆整体和它结构上的安全。核结构材料的种类很多，本卷重点论述了三大品类。一是锆合金系统，大量用于热中子堆的燃料包壳；二是钢和镍合金系统，用于包壳，压力容器，回路系统等；三是铝合金系统，常用于研究试验堆中。本卷用 8 章论述了锆合金，讨论了它的性质，管材加工，腐蚀和堆内行为，用 5 章讨论钢，3 章讨论铝合金，周邦新先生特为之作序。

第七本，《轻水堆燃料元件》。世界核电厂总数中，轻水反应堆占 80%。轻水堆分压水堆和沸水堆两种，压水堆占其中的四分之三，是目前世界上最主要的核电堆型。从本卷起，各卷的性质就进入工程实际的实例，内容就更加综合了。本卷以大量篇幅详细地介绍从 UO_2 粉末到 UO_2 芯块，到燃料棒和燃料组件的全部过程，以及控制棒等，最后又介绍国际上轻水堆元件发展趋向。

第八本，《重水堆燃料元件》。重水堆是由加拿大发展起来的一种堆型，用重水做慢化剂和冷却剂，用天然 UO_2 做燃料，简写作 CANDU-PWR。我国秦山三期从加拿大引进了两台 CANDU-6 核电机组，并建成了一条核燃料元件生产线。CANDU 堆有很多优点和特点，可以利用天然铀，可以把 ^{235}U 燃烧到最大程度，将来发展也可能利用轻水堆的乏燃料。本书很详细地论述了它的特色、结构、材料、元件生产和未来发展的可能走向。

第九本，《高温气冷堆燃料元件》。高温气冷堆用氦气做冷却剂，石墨做反射层、慢化剂和堆芯结构材料。采用包覆燃料颗粒弥散在石墨基体中的全陶瓷型燃

料元件。气体出口温度可达到 950℃。它在使用核材料上和水堆大不相同。本书简介了世界上已有的高温气冷堆类型，用大量篇幅详述了我国的模块式实验堆 HTR-10 的燃料元件的生产过程和辐照考验。

第十本，《快中子堆燃料元件》。快中子堆的作用在于增殖，能进行 Pu-U-Pu 燃料循环，各国发展的路线基本上一致。早期使用金属型燃料，当前多采用 (U, Pu)O₂ 混合氧化物做燃料。冷却剂常用液态金属钠。燃料和包壳材料接受的快中子通量大 (约 $3 \times 10^{15} / \text{cm}^2 \cdot \text{s}$)，最终承受的损伤剂量也大。不论在材料和工作环境方面都和热中子堆大不一样。本书就快中子堆的历史加以回顾，对当前加以详述，对未来加以展望。

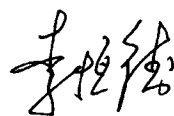
第十一本，《研究试验堆燃料元件制造技术》。研究试验堆的作用是从中引出中子和 γ 射线，提供科学试验和材料考验等。研究试验堆的重要特征是它的中子通量，根据通量高低可以进行不同的试验。因此这种堆的类型和核燃料元件是多种多样的。本卷在讨论研究试验堆的类型、功能应用后，选取了几种有代表性的燃料元件的制造工艺进行介绍，它们在材料和形状上和动力堆大不相同。

第十二本，《聚变堆材料》。聚变能作为一种可控工程是人们一直在努力追求的目标，研究工作也在大量进行。聚变堆对未来要在工程实施中付诸应用的材料给予极大的挑战。像第一壁材料受到的中子谱就具有大量的 14.1MeV 的中子，而且还有大量的带离子，因此第一壁材料受到的辐照损伤和表面溅射都很严重。本书作者对聚变堆各种部件的材料现在研究的成果进行了详细的整理和分析，可以给人相当全面的了解。

从以上简短对 12 本书的扫描中，可以看出每一本的编著者都在努力写出自己的特点。大家付出了长期的辛勤劳动，终于构成了现在的巨作。这在核材料领域中很可能在国内外都是没有的。我们为此成功感到欣慰，也希望这一套书能对国内核材料工作者提供有用的参考，对在此领域中进修的人提供有助的学习资料。也在此刻回顾这一历程时向所有参与的编著者们表示祝贺和感谢，对他们所在的工作单位也致以敬意。

在阅读这些书稿时，也的确看到一些不足，也许付印之前会得到改正。但没有发现的也许还有。12 本中有些图片和叙述会有重复，这也许可以理解，因为每一本书都是独立的。有些名词不一致，也希望这些不同用法都可以接受。未被发现或已来不及改正的错误只能请读者谅解了。

清华大学教授
中国工程院院士
中国材料研究学会名誉理事长



2007 年 4 月

前言

在庆贺李恒德先生八十寿辰之际，倡议撰写一套《核材料科学与工程》系列图书，以实现李恒德先生的意愿。我受命编写其中之一的《材料辐照效应》，作为李恒德先生的学生，是应尽的义务。可是真正动笔之时，方知写书之艰辛，迟迟未曾启动。直到 2005 年年底，在李恒德先生和白新德教授的鼓励和督促下，才启动编写，这时才稍稍领悟到李恒德先生教学、科研生涯的艰辛和伟大。

由于时间的匆促，就在李恒德先生等译的《反应堆燃料元件的基本问题》，李文治教授编写的《辐照效应》（固体中原子碰撞部分）和周邦新院士等译的《材料科学与技术丛书核材料 I 和 II》等书的基础上，结合这几年的教学情况编写了《材料辐照效应》。

本书第 1 章介绍了材料辐照效应发展的历史、所研究的领域及承担的任务。第 2 章到第 4 章介绍了碰撞的基本理论和在固体中产生缺陷的过程，这是计算损伤剂量的基础，也是开展分子动力学模拟研究的必要知识。第 5 章介绍了各种辐照粒子产生辐照损伤的特性和相应的计算损伤剂量的方法，为研究生在工作中具体应用提供基础。第 6 章介绍了原始辐照缺陷的退火、聚集和演化的基本机制和相应的计算方法，对缺陷的复合率、扩散率，空位和间隙原子的速率方程组，空位团、间隙原子团的形核和生长过程，空洞（或气泡）长大方程，间隙位错圈的长大方程等都进行了具体介绍，特别是气泡（或气孔）的迁移、聚合和辐照重溶以及位错、晶界对气泡（或气孔）的钉扎，这些都将会在辐照样品的微观观察分析中得到具体应用。第 7 章介绍了金属核燃料和氧化物燃料的辐照行为，重点介绍氧化物燃料的辐照行为，特别是氧、锕系元素的重布以及裂变产物的迁移在燃料元件的安全中有着重要作用，也是芯块与包壳相互作用（PCI 效应）中的重要因素。PCI 的机制已趋成熟，可是本章未加展开，留待以后增补。第 8 章介绍了金属材料的辐照硬化、脆化和断裂的机制，这是核材料研究生必备的基本知识，在此基础上要加强对铁素体/马氏体钢的辐照硬化、脆化和断裂机制的研究。第 9 章介绍了辐照生长和蠕变的基本机制，在实际中有很多具体应用。而辐照疲劳是一门新兴的课题，正在发展之中，本章只介绍一些基本知识，留待研究生去探索。最后一章探索了聚变堆发展中的材料问题，这里仅限于包层的结构材料问题，它经受着最严重的辐照，必须研究材料的辐照效应。因此从试验方法到实验数据的分析应用都是崭新的课题，这章仅做了一些最基本的介绍。在材料辐照效应教学过程中，了解到研究生来自于不同的专业，因此书中数学演算过程不得不稍详细一些，便于理解。

近年来,材料辐照效应的研究,无论是实验研究还是计算机模拟实验研究都得到了长足的发展,特别是计算机的发展,提供了分子动力学模拟从碰撞过程直接产生的原始缺陷到缺陷退火、聚集和演化过程,以及相互连接,从深层次地揭示辐照产生缺陷和它的发展机制;在应力下模拟从位错源处不断产生位错,随后运动、缠结、堆积、相互作用到滑移带的出现,可以与实验直接比较,揭示了应力下塑性变形、硬化到断裂的发展机制。在实验方面,结合聚变堆材料的氢、氦与碰撞级联的协同作用,在材料的辐照脆性和力学性能的变化上积累了大量数据,正在揭示在低活性钢、钒合金和 SiCf/SiC 复合材料中嬗变的氢、氦对辐照脆性的作用;在辐照疲劳上有了相当多的数据,正需要归纳分析以期获得清晰的物理机制;这些资料相当丰富,由于时间有限,无法一一收录和归结到本书中,以供读者进一步开展研究之用。因此这本书仅作抛砖引玉之用。

本书编写过程中得到张品源研究员、贺新福和屈哲昊在计算机图形扫描、打字和技术上的支持和帮助,特别是褚凤敏博士、副研究员对本书的前 5 章进行了仔细的校对,梁雪元工程师对第 7 章做了重要的校正工作,特此表示感谢。同时在编写过程中得到家人的支持、帮助和理解,否则是难以完成这次编写工作的。

编 者
2007 年 1 月

目录

第 1 章 绪论	1
1.1 材料辐照效应的发展历史和概况	1
1.2 粒子辐照在固体中形成辐照缺陷的基本过程及其作用	2
1.3 辐照效应研究的领域和任务	5
参考文献	6
第 2 章 经典散射理论	7
2.1 二体碰撞	7
2.1.1 质心系	9
2.1.2 基本方程、能量传递公式	10
2.1.3 正碰撞的性质	14
2.2 原子间作用势	15
2.2.1 原子间相互作用势的一般描述 (Bohr 势、Born-Mayer 势)	15
2.2.2 Thomas-Fermi 势	17
2.2.3 Hartree 自洽势	21
2.2.4 镶嵌原子势	26
2.2.5 等效刚球势	28
2.3 碰撞截面	30
2.3.1 微分截面和能量传递微分截面	30
2.3.2 库仑势的微分截面	33
2.3.3 刚球散射的能量传递微分截面	35
2.3.4 碰撞的冲量近似法	36
2.3.5 Thomas-Fermi 势约化微分截面	42
参考文献	45
第 3 章 运动粒子的慢化和射程	46
3.1 运动粒子在固体内的慢化	47

3.1.1	核阻止本领和阻止截面	49
3.1.2	电子阻止本领	51
3.2	入射粒子在固体内的射程	57
3.2.1	入射粒子在固体内的射程	57
3.2.2	射程矢量和基本方程	65
3.2.3	平均投影射程和射程歧离	71
3.3	射程、射程投影的标准偏差	74
3.3.1	标准偏差	74
3.3.2	粒子沿深度的浓度分布	77
	参考文献	80

第4章 辐照缺陷的产生过程 81

4.1	基本概念	81
4.1.1	离位原子和初级离位原子	81
4.1.2	离位阈能和离位概率	83
4.2	初级离位原子在级联中产生的离位原子数	89
4.2.1	Kinchin-Pease 模型	90
4.2.2	Snyder 的修正模型	93
4.2.3	出射概率模型	94
4.2.4	改进性模型	98
4.2.5	能量配分理论——Lindhard 计算模型	102
4.2.6	Sigmund 离位处理	104
4.3	相关碰撞列	106
4.3.1	聚焦碰撞和辅助聚焦	106
4.3.2	聚焦换位碰撞——原子的长程传输	112
4.3.3	碰撞列和贫原子区的空位份额	116
4.3.4	沟道效应	118
4.3.5	聚焦和沟道对离位原子数的影响	122
4.4	辐照损伤峰	124
4.4.1	离位峰	125
4.4.2	热峰	127
4.4.3	裂变峰	130

4.5 MD 计算机模拟	132
4.5.1 级联碰撞与子级联	135
4.5.2 离位峰-MD 计算机模拟	137
4.6 离位峰中的原子混合	145
4.7 离位峰中的相变	147
参考文献	151
第 5 章 辐照损伤计算	154
5.1 损伤速率和损伤剂量	154
5.1.1 初级离位原子 (PKA) 的能量分布函数	154
5.1.2 离位原子密度和损伤剂量 (DPA)	156
5.2 中性粒子的辐照损伤	157
5.2.1 中子散射微分截面	158
5.2.2 初级离位原子的能量分布	160
5.2.3 中子辐照下的离位原子浓度和损伤分布	163
5.2.4 损伤函数	166
5.2.5 γ 射线引起的辐照损伤	168
5.3 带电粒子的辐照损伤	170
5.3.1 带电粒子产生的 PKA 的能量分布和损伤	171
5.3.2 重离子辐照损伤的分布	173
5.3.3 电子辐照损伤	177
5.3.4 裂变碎片辐照损伤	181
5.4 表面损伤	187
5.4.1 溅射机制和模型	187
5.4.2 溅射产额和择优溅射	188
5.4.3 Sigmund 溅射理论	192
参考文献	194
第 6 章 辐照缺陷的退火、聚集和肿胀	196
6.1 高温离位级联缺陷的存活和逸出	197
6.2 缺陷的相互作用导致辐照诱发的显微组织变化	204
6.3 缺陷的复合、扩散	210

6.3.1	空位和间隙原子的复合率	211
6.3.2	点缺陷之间以及与其他缺陷的反应	213
6.3.3	原子和原子尺寸的缺陷的反应	214
6.3.4	运动的点缺陷与位错的反应	215
6.3.5	扩散-限制的反应	217
6.4	缺陷的动力学过程、速率方程组	229
6.5	空位团、间隙原子团的形核和生长过程	234
6.5.1	空位团、间隙原子团的形核	235
6.5.2	空洞(或气泡)和间隙原子位错环的长大方程式	238
6.6	气泡(或气孔)的重溶	242
6.7	气泡(或气孔)的迁移和聚合	252
6.7.1	表面扩散引起的气泡迁移	253
6.7.2	气泡迁移率的一般处理	257
6.7.3	体扩散引起的气泡迁移	259
6.7.4	应力梯度下的气泡迁移	263
6.7.5	气泡聚合的速率常数	266
6.7.6	聚合造成的气泡长大	269
6.8	位错和晶界对气泡(或气孔)的钉扎	279
	参考文献	283
第7章	金属核燃料和氧化物燃料的辐照行为	287
7.1	金属核燃料的辐照行为	288
7.1.1	金属铀的辐照行为	288
7.1.2	尺寸不稳定性	290
7.1.3	辐照下铀的长大机制	292
7.1.4	铀的肿胀	293
7.1.5	辐照对铀的组织及力学性能的影响	295
7.1.6	铀合金	297
7.1.7	钍、钍铀和钍铀合金	303
7.1.8	钷和钷合金	305
7.2	氧化物燃料的辐照密实、肿胀和裂变气体释放	314
7.2.1	气孔和气泡的物理特性、辐照密实	317