

## Estudio del aporte de electrones y positrones a la distribución de $dpa$ en materiales sólidos

I. Piñera<sup>†</sup>, C. M. Cruz, Y. Abreu, A. Leyva

Centro de Aplicaciones Tecnológicas y Desarrollo Nuclear, La Habana, Cuba; ipinera@ceaden.edu.cu

<sup>†</sup>autor para la correspondencia:

Recibido el 15/7/2008. Aprobado en versión final el 03/07/2009.

**Sumario.** Se presentan los resultados del cálculo de la distribución de desplazamientos atómicos ( $dpa$ ) inducidos por la radiación gamma en muestras del material superconductor YBCO, aplicando el método introducido por los autores, que se apoya en las expresiones de la teoría de la dispersión elástica y en la simulación por Monte Carlo de los procesos físicos involucrados en la misma, haciendo uso del código MCNPX. Se tiene en cuenta el aporte de electrones y positrones, así como el de las diferentes especies atómicas presentes en el material de estudio. Los resultados obtenidos muestran que cuando se consideran los positrones también en el cálculo, el valor total de  $dpa$  casi se duplica a los 10 MeV de radiación gamma incidente, en relación a cuando solo se tienen en cuenta los electrones. Y se pudo observar que a esa energía incidente los positrones contribuyen en un 7% más que los electrones al total de  $dpa$ , aunque los electrones mantienen un aporte predominante hasta alrededor de los 8 MeV de radiación gamma incidente.

**Abstract.** The contribution from positrons to the displacements per atom ( $dpa$ ) distribution induced by the gamma irradiation on YBCO superconducting slabs is presented. The procedure implemented previously by the authors was adapted to take into account the contribution from positrons to  $dpa$  induced by the gamma radiation. The results show that, when positrons are considered in the atom displacement process, the total  $dpa$  almost doubles at 10 MeV of incident gamma radiation. At that energy positrons contribute 7% more to the total  $dpa$  than electrons, although electrons maintain having the highest contribution up to about 8 MeV.

**Palabras clave.** Daño por radiación gamma 61.80.Ed, simulación por Monte Carlo 02.70.Uu, YBCO 74.72.-h.

### 1 Introducción

En trabajos previos se reporta un procedimiento para el cálculo de la distribución de los desplazamientos atómicos inducidos por la radiación gamma en materiales sólidos, el cual fue aplicado en láminas superconductoras de  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  (YBCO) [1, 2]. Es bien conocido que los desplazamientos atómicos son producidos por las partículas cargadas muy enérgicas (electrones y positrones) producidas durante la interacción de los rayos gamma con el material. A bajas energías de la radiación gamma solamente los electrones juegan un papel, pero al aumentar la energía de los fotones, la producción de positrones se hace importante y por lo tanto el papel de los positro-

nes en la formación de desplazamientos atómicos también es trascendente.

Un primer intento en evaluar el aporte de los positrones a la distribución de  $dpa$  fue reportado por Fukuya y Kimura [3], donde usaron las expresiones teóricas de los diferentes procesos de interacción de los fotones con el material para estimar los desplazamientos inducidos en el hierro.

En el presente trabajo se aplica el Método Clásico asistido por Monte Carlo (MCMC) introducido anteriormente [1], extendido para evaluar también la contribución de los positrones al valor total de  $dpa$  en el YBCO. En este sentido fue usada la simulación por Monte Carlo para obtener las distribuciones de flujo de

los electrones y positrones secundarios, las cuales son usadas para calcular los perfiles de  $dpa$  para diferentes energías incidentes. El rango de energías seleccionado va desde 1.25 MeV (para asegurar la producción de positrones) hasta 10 MeV. Cada uno de los cuatro átomos que constituyen el material de estudio fue analizado.

## 2 Procedimiento de cálculo

La simulación involucra todos los procesos físicos que tienen lugar en los procesos de interacción de la radiación gamma el material. Fue usado el sistema de códigos MCNPX - 2.6b [4], teniendo en cuenta que da directamente la distribución energética de flujo a través de su salida \*F4, separando inclusive las contribuciones de electrones y positrones con el uso de la opción ELC de la card FT.

La muestra fue definida con una geometría en forma de lámina de YBCO con dimensiones 1.5 cm x 1.5 cm x 1.5 mm (subdividida en celdas con 1.0 mm x 1.0 mm x 0.1 mm). El proceso de irradiación fue simulado con un flujo de  $2 \times 10^7$  fotones incidiendo perpendicularmente sobre la cara más grande de la muestra. En las simulaciones la energía de los fotones incidentes fue variada de 1.25 a 10.0 MeV. En todos los casos, los resultados mostrados están normalizados al número total de historias.

Como se mencionó antes, el MCMC es la base del procedimiento de cálculo usado en este trabajo, introduciendo un pequeño cambio para el caso de los positrones. Este consiste en un cambio parcial en la fórmula de McKinley-Feshbach [5] para la sección transversal, usada originalmente para la dispersión elástica de los electrones con los átomos. Este cambio afecta la sección eficaz de  $dpa$  y la energía cinética promedio de los átomos desplazados, a través del término  $\pi\alpha\beta$ . A continuación se muestra la expresión final para la sección eficaz de  $dpa$ , en la cual el signo positivo del ( $\pm$ ) corresponde a los electrones y el negativo a los positrones.

$$\sigma_{dpa}(E) = \nu(T) \cdot \frac{\pi Z_a^2 r_0^2}{\beta^4 \gamma^2} \left[ \tau - 1 - \beta(\beta \pm \pi\alpha) \ln \tau \pm 2\pi\alpha\beta(\sqrt{\tau} - 1) \right] \quad (1)$$

$E$  es la energía cinética de los electrones o positrones y  $T$  es la energía cinética promedio transferida a los átomos desplazados.

La función de daño  $\nu(T)$  es calculada usando el modelo de Kinchin-Pease [6],  $Z_a$  es el número atómico del átomo en cuestión,  $r_0$  el radio clásico del electrón,  $\alpha = Z_a/137$ ,  $\beta$  la fracción de la velocidad del electrón (positrón) a la velocidad de la luz,  $\gamma^2 = 1/(1 - \beta^2)$ ,  $\tau = T_m / T_d$ , siendo  $T_d$  la energía de desplazamiento y  $T_m = 2E(E + 2mc^2)/Mc^2$  la energía cinética máxima de los átomos desplazados, cuya masa es  $M$ .

## 3 Análisis de los resultados

Aplicando el procedimiento del MCCM fue calculado

el número del desplazamiento por átomo ( $N_{dpa}$ ), como una suma extendida por toda la distribución de flujo de electrones y positrones calculada a una profundidad  $z$  dada  $\Phi(E, z)$  (Ec. (2)), donde  $n_k$  es la fracción relativa del átomo  $k$  en su sitio cristalino. Esta expresión fue aplicada para todos los átomos en el YBCO, tomando los siguientes valores: átomos de oxígeno ( $k = O$ ) con  $T_d = 20\text{eV}$  y  $n_O = 4/7$ , átomos de cobre ( $k = Cu$ ) con  $T_d = 25\text{eV}$  y  $n_{Cu} = 2/3$ , átomos de ytrio ( $k = Y$ ) con  $T_d = 25\text{eV}$  y  $n_Y = 1$  y átomos de bario ( $k = Ba$ ) con  $T_d = 25\text{eV}$  y  $n_{Ba} = 1$ . Estos resultados son mostrados en la figura 1 para el caso de los electrones y en la figura 2 para el caso de los positrones.

$$N_{dpa} = \sum_k \left( n_k \sum_i N_{dpa,k}^s(E_i) \Phi(E_i, z) \Delta E_i \right) \quad (2)$$

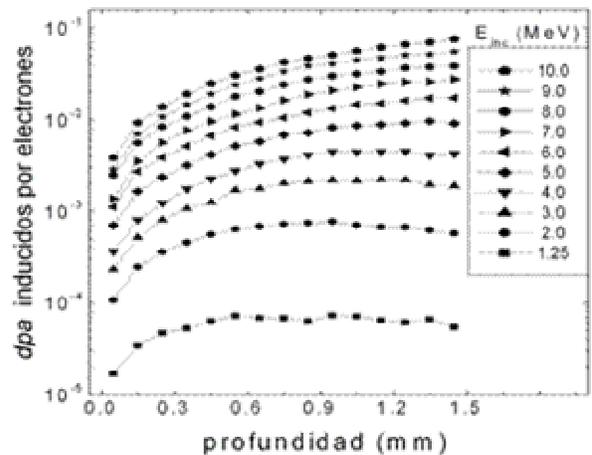


Figura 1. Distribuciones de  $dpa$  inducidos por los electrones para diferentes energías incidentes. Las líneas continuas son guías visuales.

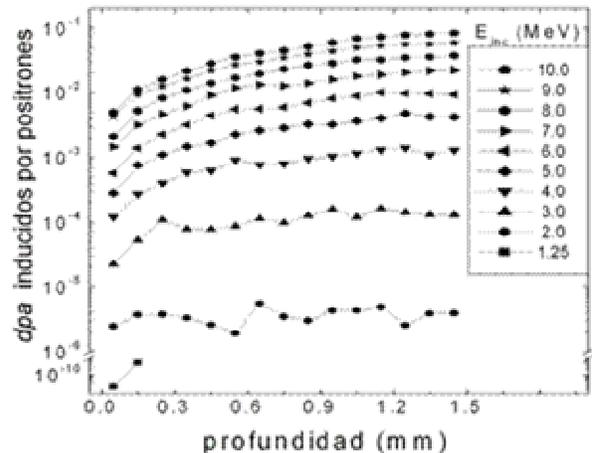


Figura 2. Distribuciones de  $dpa$  inducidos por los positrones para diferentes energías incidentes. Las líneas continuas son guías visuales.

Es importante notar la similitud en estos perfiles y en la forma de los mismos: los valores de  $dpa$  son siempre más altos a mayor energía gamma incidente en todo el

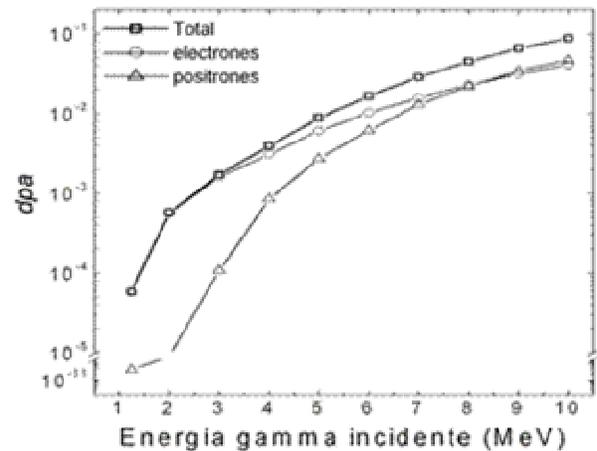
volumen de la muestra y el daño incrementa drásticamente con la profundidad a medida que la energía incidente se incrementa. También se puede observar que a bajas energías gamma son mayores los desplazamientos producidos por los electrones, pero a medida que aumenta dicha energía se va haciendo menor la diferencia, llegando incluso a ser un poco mayor el aporte de los positrones para 10 MeV de radiación gamma incidente. Esto se puede notar mejor si tomamos los valores totales de *dpa* para cada energía, promediando por todo el espesor de la muestra, lo cual se puede ver en la figura 3. Los electrones tienen una contribución mayor al total de *dpa* hasta alrededor de los 8 MeV de radiación incidente, a partir de la cual los *dpa* inducidos por positrones comienzan a predominar, llegando a aportar un 53.4 % al total de *dpa* para una energía incidente de 10 MeV, casi un 7 % más que el aporte correspondiente de los electrones a esa energía.

De aquí la importancia de considerar también los positrones cuando se haga un cálculo de este tipo. Nótese que el valor total ( $e^- + e^+$ ) de *dpa* para una energía gamma incidente de 10 MeV (0.0869) duplica al valor correspondiente cuando solo son considerados los electrones en el cálculo (0.0405), más exactamente, cuando son incluidos los positrones en el cálculo, el valor total de *dpa* aumenta en un 115 %.

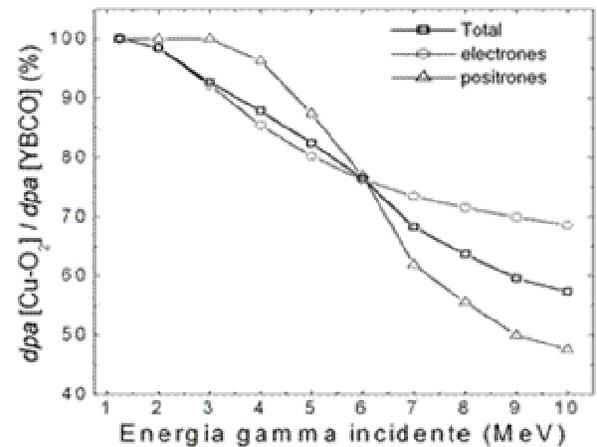
También fue estudiado el aporte de cada átomo al valor total de *dpa*. Fue considerado el aporte de los planos Cu-O<sub>2</sub> tomando juntos los efectos de los átomos de oxígeno y de cobre en estos sitios, para una mejor comparación con trabajos previos. Los resultados muestran que en el caso de los positrones el aporte de los átomos de ytrio y de bario al daño total es menor que el de los planos Cu-O<sub>2</sub>. Estos átomos tienen un aporte máximo del 12.8 % (Y) y 39.6 % (Ba) para 10 MeV de radiación incidente, aunque estos aportes son mayores que en el caso de los electrones a esa misma energía (10.5 % para el Y y 20.9 % para el Ba). Además, los desplazamientos de Y producidos por positrones empiezan a tener lugar para una radiación incidente de 4 MeV y los de Ba a partir de los 6 MeV. Este resultado podría respaldar el hecho de que los desplazamientos de Y y Ba no son decisivos en los posibles cambios provocados en este material a bajas y medias energías [7, 8].

Luego, el aporte principal al daño total viene de los sitios planares Cu-O<sub>2</sub>, tanto para los electrones como para los positrones. La figura 4 muestra el aporte de los planos Cu-O<sub>2</sub> al total de *dpa*, para los casos separados de electrones y positrones, así como para el total de ambas partículas. Es claramente observado que bajo irradiación de hasta 3 MeV, los *dpa* de positrones solamente tienen lugar en los planos Cu-O<sub>2</sub>, e incluso estos predominan sobre los *dpa* planares producidos por electrones hasta aproximadamente los 6 MeV, cuando representan alrededor del 77 % del total. Al aumentar la energía incidente, el aporte de los positrones a los *dpa* planares es superado por el correspondiente de los electrones, siendo cercano al 48 % a los 10 MeV contra el 69 % en el caso de los electrones. Todo esto resulta en que los *dpa* planares

aportan un 57.4 % al total de *dpa* en la muestra a esa energía.



**Figura 3.** Valores totales de *dpa*, así como los aportes de electrones y positrones, para diferentes energías incidentes. Las líneas continuas son guías visuales.



**Figura 4.** Aporte de los planos de Cu-O<sub>2</sub> al total de *dpa* inducido por los electrones, por los positrones y por ambos juntos. Las líneas continuas son guías visuales.

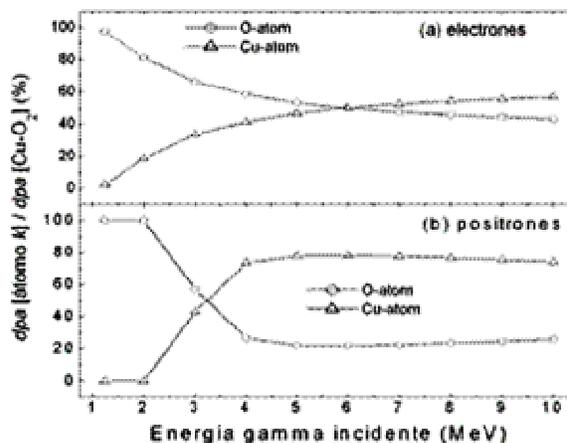
Los aportes individuales de los átomos de oxígeno y de cobre a los *dpa* planares se muestran en la figura 5 para los electrones y positrones. De esta figura es posible observar que el comportamiento en ambos casos es muy similar, el aporte de los átomos de oxígeno disminuye al incrementar la energía incidente mientras que el aporte de los átomos de cobre aumenta. Este comportamiento es más notable en el caso de los positrones, en el cual el aporte de los átomos de O disminuye (aumenta el de Cu) en un 74 % en el rango de energía estudiado contra solamente un 55 % para el caso de los electrones. Otra observación interesante es que para los positrones los *dpa* de Cu comienzan a predominar a una energía cercana a los 3 MeV, que es más baja que para el caso de los electrones (cerca de los 6 MeV). Se nota también que el aporte máximo de los átomos de Cu (mínimo de los de

O) es alcanzado alrededor de los 6 MeV en el caso de los positrones, mientras que en el caso de los electrones dicho máximo se alcanza al final del rango energético estudiado (10 MeV). Por lo tanto, el aporte principal de los positrones a los *dpa* planares proviene completamente de los desplazamientos de O hasta los 2 MeV de radiación incidente. A energías más altas, es observado un comportamiento creciente de los desplazamientos de Cu, prevaleciendo hasta los 3 MeV y alcanzando un máximo de aproximadamente el 78 % cerca a los 6 MeV, con un perfil casi invariable hasta los 10 MeV.

## 4 Conclusiones

El procedimiento del MCCM, implementado por los autores, fue adaptado para tener en cuenta el aporte de los positrones a los *dpa* inducidos por la radiación gamma en materiales sólidos. Con este fin, fue estudiado el aporte de los electrones y positrones a los *dpa* en el superconductor YBCO para un amplio rango de energías de la radiación gamma incidente.

Fue posible concluir que, cuando los positrones son considerados, el total de *dpa* incrementa por casi un factor de dos para fotones incidentes con energías de 10 MeV. A esta energía, los positrones aportan un 7 % más que los electrones al total de *dpa*, aunque los electrones mantienen un aporte superior hasta aproximadamente los 8 MeV. Por otro lado, fue encontrado un predominio del aporte de los sitios planares Cu-O<sub>2</sub> al total de *dpa* sobre el aporte de los átomos de ytrio y bario, siendo del 100 % hasta los 3 MeV e incluso aún predominando a los 10 MeV con casi un 48 %. Ahora, los *dpa* de O prevalecen a energías bajas y los de cobre a energías más altas para ambas partículas. Pero en el caso de los positrones, los *dpa* de Cu empiezan a ser dominantes a una energía relativamente baja, de aproximadamente 3 MeV y alcanzan su aporte máximo (de ~78 %) cercano a los 6 MeV.



**Figura 5.** Aporte de los átomos de oxígeno y de cobre a los *dpa* planares inducidos por los electrones (a) y por los positrones (b). Las líneas continuas son guías visuales.

## Referencias

1. I. Piñera, C. Cruz, Y. Abreu, A. Leyva, Phys. Stat. Sol. (a) 204/7, 2279 (2007).
2. I. Piñera, C. Cruz, A. Leyva, Y. Abreu, Nucl. Instrum. Meth. B 265/2, 536 (2007).
3. K. Fukuya, I. Kimura, J. Nucl. Sci. Technol. 40/6, 423 (2003).
4. J. S. Hendricks, G. W. McKinney, H. R. Trelle, J. W. Durkee, J. P. Finch, M. L. Fensin, M. R. James, D. B. Pelowitz, L. S. Waters, F. X. Gallmeier, J. C. David, MCNPX<sup>TM</sup> Version 2.6.B, Los Alamos National Laboratory report, LA-UR-06-3248 (June 2006).
5. W. A. McKinley, H. Feshbach, Phys. Rev. 74/12, 1759 (1948).
6. G. H. Kinchin and R. S. Pease, Report on Progress in Physics 18, 1 (1955).
7. A. Legris, F. Rullier-Albenque, E. Radeva, P. Lejay, J. Phys. I France 3, 1605 (1993).
8. B. I. Belevtsev, I. V. Volchok, N. D. Dalakova, V. I. Dotsenko, L. G. Ivanchenko, A. V. Kuznichenko, I. I. Lagvinov, Phys. Stat. Sol. (a) 181, 437 (2000).