

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №16-52-48008 ИНД_оми.

1. R. W. Grimes, R. H. Miller, C. R. A. Catlow. J.of Nucl. Mater. 172 (1990) 123-125.
2. Kupryazhkin A. Ya., Nekrassov K. A., Ryzhkov M. V., Delley B., "Determination of potentials of interaction between rare gases and multiply charged ions" in Whistler, British Columbia, Canada, 20-25 July 2002, CD-ROM.
3. Бычков В. Л., Радциг А. А., Смирнов Б. М. Восстановление потенциала взаимодействия иона с атомами и молекулами из данных о подвижности ионов в газе // ТВТ. 1978. Т. 16. № 4. С. 713-716.
4. Некрасов К. А., Купряжкин А. Я. Восстановление потенциала взаимодействия атомов гелия с ионами фтора по данным междоузельной диффузии и растворимости гелия во фторидах щелочноземельных металлов // ТВТ. 2001. Т. 39. № 2. С. 229-234.

МЕЖЧАСТИЧНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ ГЕЛИЯ В КРИСТАЛЛАХ UO_2 И PuO_2 ПРИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЯХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Сеитов Д.Д.^{1*}, Некрасов К.А.¹, Гупта С.К.², Акылбеков А.Т.³

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Колледж Святого Ксавьера, г. Ахмедабад, Индия

³⁾ Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева г. Астана, Казахстан

*E-mail: seitov_1992@mail.ru

THE INTERPARTICLE POTENTIALS OF HELIUM IN UO_2 AND PUO_2 AT HIGH INTERACTION ENERGIES

Seitov D.D.^{1*}, Nekrasov K.A.¹, Gupta S.K.², Akilbekov A.T.³

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾ St. Xavier's College, Ahmedabad, India

³⁾ L.N.Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Annotation. The known potentials of interaction of helium atoms with oxygen, uranium and plutonium ions in the crystals of the oxide nuclear fuel are studied with respect to their use in the simulation of high-energy processes such as the collision cascades. The energies of migration of helium obtained with these potentials are compared to the experimental data.

В предыдущих работах [1-3] были предложены различные наборы потенциалов для моделирования взаимодействия гелия с ионами в кристаллах оксидного ядерного топлива UO_2 и PuO_2 . Представляет интерес исследование этих потенциалов на применимость при высоких энергиях взаимодействия, характерных для каскадов столкновений, возникающих в оксидном топливе при нейтронном

облучении и при альфа-распадах, чему и посвящена настоящая работа. Рассмотрена возможность экстраполяции известных потенциалов в область малых расстояний (соответствующих высокоэнергетическим столкновениям) посредством экранированного потенциала

$$U_{ij}(r_{ij}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{z_i z_j e^2}{r_{ij}} \Phi_{ij}(r_{ij}), \quad (1)$$

где z_i и z_j – атомные номера i -й и j -й частиц, Φ_{ij} – функция экранирования, представляющая собой линейную комбинацию нескольких экспонент, для чего использовали потенциал в форме

$$U_{ij}(r_{ij}) = \frac{A_{1,ij} e^{-B_{1,ij} r_{ij}} + A_{2,ij} e^{-B_{2,ij} r_{ij}} + A_{3,ij} e^{-B_{3,ij} r_{ij}}}{r_{ij}}. \quad (2)$$

Рассмотренные в работе потенциалы по качеству воспроизведения коэффициента и энергии активации диффузии гелия, известных из эксперимента (например, [4]). Результаты сопоставления представлены на рисунке 1.

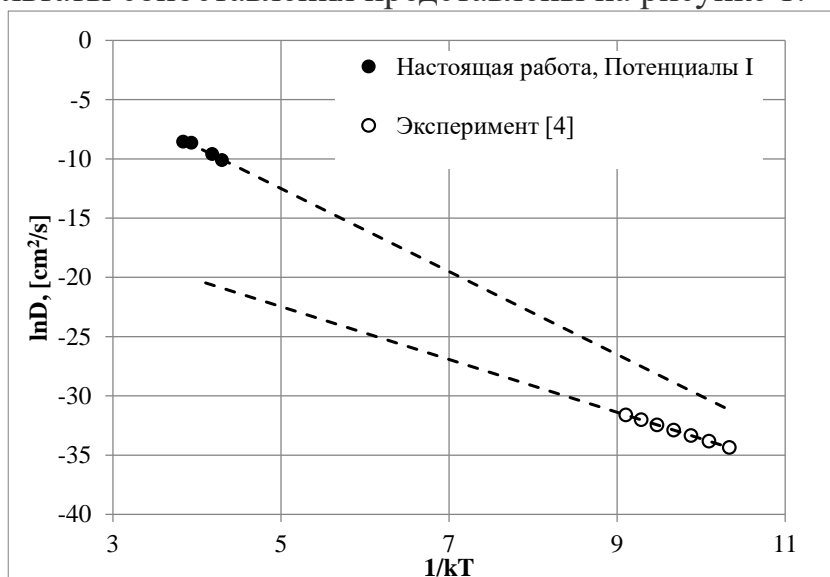


Рис. 1. Зависимости коэффициента диффузии гелия в UO_2 от температуры

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №16-52-48008 ИНД_оми.

1. Kupryazhkin A. Ya., Nekrassov K. A., Ryzhkov M. V., Delley B., in Rarefied Gas Dynamics: 23rd International Symposium, Whistler, British Columbia, Canada, 20-25 July 2002, CD-ROM.
2. Бычков В. Л., Радциг А. А., Смирнов Б. М., ТВТ, 16, 713-716 (1978).
3. Некрасов К. А., Купряжкин А. Я., ТВТ, 39, 229-234 (2001).
4. Roudil D., Deschanel X., Trocellier P. et al, J. Nucl. Mater., 325, 148-158 (2004).