

ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СВЯЗЫВАНИЯ И ДИФФУЗИИ ГЕЛИЯ ВО ФТОРИДАХ КАЛЬЦИЯ, СТРОНЦИЯ И БАРИЯ

Осанова Э.Р.¹, Некрасов К.А.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого президента России Б.Н.Ельцина, г.Екатеринбург, Россия
E-mail: osanova.elvira@gmail.com

DYNAMIC SIMULATION OF BINDING AND DIFFUSION OF HELIUM IN CALCIUM, STRONTIUM AND BARIUM FLUORIDES

Osanova E.R.¹, Nekrasov K.A.¹

¹) The Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin, Ekaterinburg, Russia

A molecular dynamics simulation of helium diffusion in solid CaF₂, SrF₂ and BaF₂ was carried out using the empirical pair potentials reproducing the experimental strong binding of helium to cations in these crystals. The model diffusion coefficients and activation energies are determined.

Одним из перспективных направлений в атомной промышленности является внедрение высокотемпературных газоохлаждаемых реакторов (ВТГР), где в качестве теплоносителя используется гелий. Несмотря на достоинства использования гелия в качестве теплоносителя, стоит учитывать и негативные стороны, такие как влияние гелия на конструкционные материалы. Также в других типах реакторах, как и ВТГР, происходит накопление гелия в кристаллах оксидного топлива (UO₂, PuO₂, ThO₂), что может приводить к деградации эксплуатационных характеристик. Известен эффект гелиевого охрупчивания, который приводит к разрушению конструкционных материалов реактора, что в свою очередь может негативно сказываться на безопасной эксплуатации реакторных установок.

Из-за предельных экстремальных условий, таких как высокие дозы облучения, давление, высокая температура в активной зоне реактора, возможности экспериментального исследования кристаллов оксидного топлива ограничены, поэтому актуально проведение исследования структурных аналогов. Структурными аналогами оксидного топлива являются, в частности, кристаллы CaF₂, SrF₂, BaF₂, имеющие кристаллическую решетку типа флюорит.

Особенности взаимодействия окружения гелия в кристаллах оксидного топлива и структурных аналогов изучены недостаточно. Перспективным инструментом исследования явлений дефектообразования и переноса в кристаллах является метод молекулярной динамики, отличающийся высокой производительностью и достаточной точностью моделирования. Актуально исследование механизмов растворения гелия в кристаллической решетке и восстановление достоверных эмпирических потенциалов взаимодействия атома гелия с ионами кристаллов, применимых для молекулярно-динамического моделирования. Также, актуально

совершенствование методики восстановления потенциалов, уточнение описания физики взаимодействия атома с окружением.

На основании экспериментальных данных о диффузии и растворении гелия в кристаллах CaF_2 , SrF_2 , BaF_2 [1-3] ранее были восстановлены статические парные потенциалы взаимодействия пар He^-F^- , $\text{He}^-\text{Ca}^{2+}$, $\text{He}^-\text{Sr}^{2+}$, $\text{He}^-\text{Ba}^{2+}$ [4], которые характеризовались аномально сильным связыванием гелия с катионами. В настоящей работе с использованием молекулярно-динамического моделирования проведено сравнение потенциалов [4] с данными из газовой фазы и расчётами квантово-химическим методом Dmol. Рассчитаны частоты диффузионных скачков растворенного атома гелия при температурах от 1050 К до 1300 К, а также энергии активации междоузельной диффузии ED. При потенциалах [4] $ED(\text{CaF}_2)=2\pm 0,1$ эВ, $ED(\text{SrF}_2)=1,10\pm 0,08$ эВ, $ED(\text{BaF}_2)=1,2\pm 0,2$ эВ.

Результаты динамического моделирования с потенциалами [4] в целом лучше соответствовали экспериментальным данным, чем альтернативные потенциалы, однако существенно занижали энергии растворения гелия. В результате работы стало ясным, что использование парных потенциалов не является достаточным для описания поведения системы. Необходимо усложнение модели взаимодействия атома гелия с ионами с использованием многочастичных потенциалов.

1. Купряжкин А.Я., Попов Е.В. Междоузельная диффузия гелия во фторидах кальция, стронция и бария // Физика твердого тела. Т.26. вып.1. 160-163 с. (1984).
2. Kupryazhkin A.Ya, Kurkin A.V., Semenov O.V. Helium solubility, diffusion and interaction in ionic crystals // Journal of Nuclear. Materials. 208 v, 180-185 p. (1994).
3. Дудоров А.Г. , Купряжкин А.Я. Диффузия и растворимость гелия в монокристаллах фторида свинца в области суперионного перехода // ФТТ. Т. 40, № 4. 759-760 с. (1998).
4. Некрасов К.А., Купряжкин А.Я., Здобнухина Н.В., Рыжков М.В. Потенциалы взаимодействия атомов инертных газов с двухзарядными катионами // Вопросы атомной науки и техники. Серия «Материаловедение и новые материалы». 1(66). С. 105-111 (2006).