2. G. Carneiro, J. Nascimento, A. Freitas, IEEE Trans. Image Proces., 21(3), 968-82 (2012).
3. O. Ronneberger, P. Fischer, T. Brox, LNCS, 9351, 234-241 (2015).
4. Z. Zhou, M. Rahman, N. Tajbakhsh, J. Liang, LNCS, 11045, 3-11 (2018).
5. N. Ibtehaz, S. Rahman, Neural Networks 121, 74-87 (2020).

МЕЖЧАСТИЧНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ВОЗДЕЙСТВИЯ КАСКАДОВ СТОЛКНОВЕНИЙ НА ГАЗОВЫЕ ПУЗЫРЬКИ В ДИОКСИДЕ ПЛУТОНИЯ

Сеитов Д.Д.[1], Пицхелаури С.С.[1], Некрасов К.А.[1], Купряжкин А.Я.[1]

[1)] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: seitov_1992@mail.ru

THE INTERPARTICLE POTENTIALS FOR MOLECULAR DYNAMIC SIMULATION OF THE IMPACT OF COLLISION CASCADES ON GAS BUBBLES IN PLUTONIUM DIOXIDE

Seitov D.D.[1], Pitskhelaury S. S.[1], Nekrasov K.A.[1], Kupryazhkin A.Ya.[1]
[1)] Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The influence of interaction potentials choice on the molecular dynamics simulation of radiogenic gas bubble re-solution under the collision cascades impact in PuO_2 crystal is studied. This choice is shown to fundamentally affect the amount of energy transferred to a bubble from the fast particles.

Газовые пузырьки в объёме кристаллов ядерного топлива $(U,Pu)O_2$ и UO_2 аккумулируют радиогенные газы, препятствуя их выходу на поверхность зерна. Перерастворение одиночных атомов газа в объём кристалла, происходит при взаимодействии пузырьков с высокоэнергетическими продуктами ядерного распада [1]. Для выяснения механизмов такого взаимодействия на атомарном уровне актуально использование вычислительного моделирования, в том числе метода молекулярной динамики.

В настоящей работе рассмотрено влияние выбора парных потенциалов взаимодействия на результаты молекулярно-динамического моделирования перерастворения пузырьков гелия и ксенона в нанокристаллах PuO_2. Пузырьки имели форму сфер 2,2 нм в диаметре. Концентрация атомов ксенона и гелия в пузырьках составляла, соответственно, 1 и 3 атома на месте одной молекулы PuO_2. Размещали пузырёк в центре кубического кристаллита PuO_2, линейный размер которого составлял 17,3 нм вдоль каждого ребра. Изучали процесс взаимодействия

пузырька с быстрым ионом уран-235 энергии 87,7 кэВ, возникавшим при альфа-распаде плутония-239.

Потенциалы взаимодействия атомов He и Xe с ионами плутония и кислорода в области высоких энергий строили посредством сопряжения экранированного кулоновского взаимодействия ядер (ZBL [2]) с потенциалами, предложенными в работах [3-5]. Показано, что моделирование взаимодействия ксенона с кристаллом потенциалами [3] систематически приводило к резкому увеличению количества энергии, передаваемой пузырьку, вплоть до 70 % от первоначальной энергии быстрого иона уран-235. Изучена связь механизмов передачи энергии с особенностями формы потенциалов взаимодействия.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-32-90274.

1. K. Govers, C. L. Bishop, D. C. Parfitt, S. E. Lemehov, M. Verwerft, R. W. Grimes, J. Nucl. Mater. 420, 282 (2012).

2. J. Ziegler, J. Biersack, U. Littmark, The Stopping and Range of Ions in Solids, Pergamon Press, Oxford, 1, 321 (1985).

3. A. E.Thompson, B. Meredig, C. Wolverton, J. Phys.: Condens. Matter 26, 105501 (2014).

4. R. W. Grimes, R. H. Miller, C. R. A. Catlow, J. Nucl. Mater. 172, 123 (1990).

5. A. Ya. Kupryazhkin, K. A. Nekrasov, M. V. Ryzhkov, B. Delley, “Determination of potentials of interaction between rare gases and multiply charged ions” in Rarefied Gas Dynamics: 23rd International Symposium, Whistler, British Columbia, Canada, CD-ROM (2002).