

In total, four groups of heaters (GH) were installed on the spacecraft, each with a power of 48 W, two GH on the CHP. Turn on the GN when the values of the readout signals of the control sensors of the set point of inclusion are reached, turn off the GH when the values of the readout control signals are reached.[2]

1. Галицейский Б.М., Данилов Ю.И., Дрейцер Г.А., Кошкин В.К. Теплообмен в энергетических установках космических аппаратов; -Машиностроение, 272 с.(1975).
2. Фаворский О.Н., Каданер Я.С. Вопросы теплообмена в космосе. Высш. шк., 280 с. (1972).

РАСПЫЛЕНИЕ ВЕЩЕСТВА С ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛОВ PuO₂. МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Помосова А.А.*, Некрасов К.А.

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

*E-mail: anna.pom96@mail.ru

RELEASE OF MATERIAL FROM THE PuO₂ CRYSTALS. A MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION

Pomosova A.A.^{1*}, Nekrasov K.A.¹

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Annotation. The process of release of PuO₂ molecules and clusters from the surface of PuO₂ crystals caused by the α -decay collision cascades is studied using the molecular dynamics simulation. The amount of material knocked-out this way is calculated depending on the depth of the cascade initialization with respect to the surface. The estimated rate of the release (0.85 atoms/decay for a spherical ²³⁹PuO₂ particle of the radius of 1 micron) is in good agreement with the experiment (0.72 atoms/decay for the same particle).

Основным механизмом перехода плутония из кристалла PuO₂ в окружающую среду, согласно экспериментальным данным [1-3], является распыление частиц с поверхности, обусловленное каскадами столкновений, возникающими в результате альфа-распадов. Распространение таких каскадов вблизи поверхности вызывает её разрушение, в том числе отрыв как одиночных молекул PuO₂, так и кластеров из десятков и сотен молекул от кристалла.

Настоящее исследование проведено в продолжение работ [4-5], посвященных моделированию каскадов столкновений в PuO₂ методом молекулярной динамики. Аналогично этим работам, рассматривали кристаллиты кубической формы

из 393216 частиц, изолированные в вакууме. Использовали приближение парного взаимодействия частиц с потенциалами из работы [4].

Каскады столкновений моделировали созданием иона «отдачи» ^{235}U с энергией 87.7 кэВ на расстояниях от 2.16 нм до 8.5 нм от поверхности. Направление исходной скорости иона «отдачи» ^{235}U варьировали случайным образом. Эволюцию каскадов отслеживали до завершения процесса восстановления поверхности после завершения дефектообразования, связанного с каскадом, в течение времени примерно $2 \cdot 10^{-11}$ с.

Получены средние значения количества катионов плутония, выбивавшихся с поверхности кристаллита, в зависимости от глубины инициализации каскада. Результаты приведены в таблице 1. Эти данные позволили уточнить оценку предсказываемой интенсивности выхода плутония с поверхности микрочастиц PuO_2 в окружающую среду. Экспериментальное значение этой величины известно для микрочастиц PuO_2 радиусом 1 мкм и составляет 0.72 атома на распад [3]. Настоящая работа для таких частиц даёт 0.85 атомов на распад – результат, несколько более точный, чем в предыдущей работе [5] (0.90 атомов/распад).

Средние количества катионов плутония, выбиваемых каскадами столкновений

Глубина возникновения каскада, нм	Среднее количество катионов
2.16	119
3.74	92
5.32	59
6.9	34
8.48	19

1. Fleischer R.L., Raabe O.G., Health Physics, 32, 253-257 (1977).
2. Fleischer R.L., Health Physics, 29, 69-73 (1975).
3. Fleischer R.L., Raabe O.G. Health Physics, 35, 5-45-98 (1978).
4. Хохряков В.В., Некрасов К.А., Вопросы радиационной безопасности, 1, 55-67, (2015).
5. Панов А.Ю., Некрасов К.А., Хохряков В.В., Тезисы докладов II Международной молодёжной научной конференции: Физика. Технологии. Инновации ФТИ-2015. Екатеринбург: УрФУ, 132-133 (2015).