

ПРИПОВЕРХНОСТНЫЕ КАСКАДЫ СТОЛКНОВЕНИЙ В ДИОКСИДЕ ПЛУТОНИЯ. МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Панов А.Ю.¹, Некрасов К.А.^{1*}, Хохряков В.В.²

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России

Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²) Южно-Уральский институт биофизики,

г. Озёрск, Россия

*E-mail: kirillnkr@mail.ru

NEAR-SURFACE COLLISION CASCADES IN PLUTONIUM DIOXIDE. A MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION

Panov A.Yu.¹, Nekrasov K.A.^{1*}, Khokhryakov V.V.²

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²) South-Urals Biophysics Institute, Ozyorsk, Russia

A molecular dynamics simulation of α -decay-induced near-surface cascades of collisions in $^{239}\text{PuO}_2$ crystals is performed to study the process of release of Pu cations from the surface due to the cascades. The cascades were initiated at 3.74 nm under the surface and directed at the angles $\theta \in [-30^\circ; +45^\circ]$ relative to it. As a result, the average number of Pu atoms released from a spherical $^{239}\text{PuO}_2$ particle of $1 \cdot 10^{-6}$ m radius is estimated to be 0.90 atoms/decay, in good agreement with the experiment.

Существование атомной промышленности создает потенциальную опасность попадания в окружающую среду и в организм человека альфа-излучающих изотопов ^{238}Pu , ^{239}Pu , ^{241}Am . Диоксиды плутония и америция труднорастворимы, так что основным механизмом перехода радиоактивных изотопов из твердой фазы в окружающие жидкости считается воздействие на кристаллическую решётку ядер отдачи, возникающих в результате альфа-распада [1-3]. Формирующиеся каскады столкновений сопровождаются локальным разрушением кристалла и выходом наночастиц различного размера (включая одиночные катионы) с границы раздела фаз.

В настоящей работе для исследования указанного процесса проведено моделирование приповерхностных каскадов столкновений в диоксиде $^{239}\text{PuO}_2$ методом молекулярной динамики. Рассмотрены кристаллиты кубической формы из 393216 частиц, изолированные в вакууме. Парные потенциалы взаимодействия на средних и больших расстояниях совпадали с предложенными для моделирования PuO_2 в работе [4], а на малых расстояниях (при высокоэнергетических столкновениях) – с функциями экранирования [5].

Каскады столкновений инициировали созданием иона «отдачи» ^{235}U с энергией 87.7 кэВ на расстоянии 3.74 нм от поверхности. Направление вектора начальной скорости иона ^{235}U относительно поверхности варьировали в диапазоне углов $\theta \in [-30^\circ; +45^\circ]$. Модельное время эволюции каскадов достигало 18 пс.

В результате работы определены количества катионов плутония, выбивавшихся каскадами столкновений с поверхности кристаллита, в зависимости от направления начальной скорости катиона «отдачи». Максимум составил 220 катионов, при $\theta = +30^\circ$.

На основании данных настоящей и предыдущих работ получена оценка количества распыляемых катионов, которое могло бы (в среднем) приходиться на один α -распад в сферической микрочастице PuO_2 радиусом 1 мкм. Указанная величина, составившая 0.90 атомов/распад, хорошо совпала с известным экспериментальным значением, равным 0.72 атомов/распад [3]. Отметим, что без специального моделирования приповерхностных каскадов, проведенного в настоящей работе, результаты совпадали с экспериментом существенно хуже (0.17 атомов/распад).

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. Potashnikov S.I., Boyarchenkov A.S. et al., Journal of Nuclear Materials, 419, 217-225 (2011).
5. Batrikov V.V, Khokhryakov V.V., Zhukovsky M.V., Problems of Radiation Safety, No.2 (66), 3-10 (2012).

О СИНХРОНИЗАЦИИ ТРАЕКТОРИЙ РЕШЕНИИ СИСТЕМЫ ДВУХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ВО ВРЕМЕНИ

Гольдштейн С.Л.¹, Грицюк Е.М.¹, Аверьянова А.Н.¹, Хушанг М.^{1*}

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

*E-mail: mhushang@mail.ru

ABOUT SYNCHRONIZATION TRAJECTORY OF THE SOLUTION OF TWO DIFFERENTIAL EQUATIONS ON TIME

Goldstein S.L.¹, Gritsyuk E.M.¹, Averianova A.N.¹, Khushang M.^{1*}

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Annotation. The model of investment service the information space of clinical epidemiology

В качестве одного из вариантов вложенного пространства нами рассмотрен фазовый портрет типа «цикл». На рис. 1 показано такое вложение.