

# МЕТОДИКА РАСЧЁТА КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ КСЕНОНА В КРИСТАЛЛАХ $\text{UO}_2$ И $\text{PuO}_2$ ПРИ МД-МОДЕЛИРОВАНИИ

Кичигина Н.В.<sup>1\*</sup>, Гупта С.К.<sup>2</sup>, Некрасов К.А.<sup>1</sup>

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

<sup>2)</sup> Колледж Святого Ксавьера, г. Ахмедабад, Индия

\*E-mail: [grishechka1997@gmail.com](mailto:grishechka1997@gmail.com)

## A METHOD OF CALCULATING THE DIFFUSION COEFFICIENT OF XENON IN $\text{UO}_2$ AND $\text{PuO}_2$ AT MD-SIMULATION

Kichigina N.V.<sup>1\*</sup>, Gupta S.K.<sup>2</sup>, Nekrasov K.A.<sup>1</sup>

<sup>1)</sup> Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

<sup>2)</sup> St. Xavier's College, Ahmedabad, India

The results of molecular dynamics simulation of bulk xenon migration in  $\text{UO}_2$  and  $\text{PuO}_2$  crystals are analyzed and processed using the solution of the equation of diffusion of the gas atoms in finite nanocrystals with free surface. The values of the diffusion coefficient and the diffusion activation energy are obtained.

В работе проанализированы результаты молекулярно-динамического (МД) моделирования диффузии одиночных атомов ксенона в объёме модельных нанокристаллов  $\text{UO}_2$  и  $\text{PuO}_2$  из 5460 частиц, при температурах (2700÷3025) К.

Коэффициенты диффузии ксенона  $D_{\text{Xe}}$  определяли из зависимостей среднего квадрата смещения атомов  $\langle a^2 \rangle$  от времени. В связи с низкой подвижностью ксенона, графики  $a^2(t)$  для одиночных атомов представляли собой чередование горизонтальных участков и сравнительно коротких переходных областей, где атомы перемещались сравнительно быстро ( $D_{\text{Xe}} \sim 10^{-8} \div 10^{-7}$  см<sup>2</sup>/с). Получить значения  $D_{\text{Xe}}$  удалось только для указанных переходных областей.

Характерная зависимость усредненного квадрата смещения Хе  $\langle a^2(t) \rangle$  показана на рис. 1. При малых временах эти зависимости удовлетворяют известному соотношению Эйнштейна

$$\langle a^2(t) \rangle = 6D_{\text{Xe}} \cdot t, \quad (1)$$

тогда как в целом могут быть описаны решением уравнения диффузии ксенона в нанокристаллах со свободной поверхностью. Высота «плато» определяется эффективным радиусом нанокристалла по формуле

$$\langle a^2(t) \rangle_{\text{max}} = \left(1 - 6/\pi^2\right) \cdot R_{\text{eff}}^2 \approx 0.392 \cdot R_{\text{eff}}^2. \quad (2)$$

Оценка энергии активации диффузии в диоксидах как урана, так и плутония составила  $(4.1 \pm 1.5)$  эВ. Этот результат не противоречит расчётным оценкам

других авторов, а также экспериментальным данным, существующим для диоксида урана в области низких температур.



Рис. 1. Средний квадрат смещения атома ксенона  $\langle a^2(t) \rangle$  на участках высокой подвижности в  $\text{UO}_2$  при  $T = 3025 \text{ К}$