

Двухтемпературная модель релаксации ионных треков в диоксиде урана

В.В. Писарев, С.В. Стариков

Московский физико-технический институт (государственный университет)
Объединенный институт высоких температур РАН

В работе рассмотрено применение двухтемпературной модели в молекулярно-динамическом моделировании для описания релаксации трека быстрого тяжелого иона в диоксиде урана.

Двухтемпературная модель используется в физике высокоэнергетических процессов для описания неравновесного состояния вещества, когда температура электронов отличается от температуры ионов [1]. В данном подходе электронная система и ионный остов вещества рассматриваются как две различные среды, обменивающиеся энергией посредством электрон-фононного взаимодействия. В работах [2,3] предложен способ включения двухтемпературной модели в молекулярно-динамические расчёты. В этом случае для ионов решаются уравнения движения для заданного потенциала взаимодействия и начальных условий с добавкой за счёт электрон-фононного взаимодействия, а для электронов на сетке решается уравнение теплопроводности:

$$C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \nabla(K_e \nabla T_e) - g \cdot (T_e - T_a),$$

где C_e – электронная теплоемкость единицы объема, K_e – электронная теплопроводность, T_e и T_a – температуры электронной и атомной подсистем, соответственно, g – коэффициент электрон-фононного взаимодействия, определяющий передачу энергии от электронов к атомам.

В данной работе предлагается модель электронной теплоемкости и теплопроводности для полупроводников и диэлектриков. Теплоемкость и теплопроводность брались зависящими от температуры с выходом на константу при температурах около 10 эВ.

В двухтемпературной МД модели рассмотрено формирование треков при пролете через диоксид урана быстрого тяжелого иона (осколка деления). Для МД моделирования использовался пакет LAMMPS [4]. Диоксид урана описывался потенциалом MOX-07 [5].

Предложенная параметризация электронных свойств позволяет воспроизвести формирование приповерхностных треков, наблюдаемых в диоксиде урана в реакторных

экспериментах. Также модель предсказывает снижение порога образования поверхностных треков по сравнению с треками в объеме (пороговый энерговклад около 20 кэВ/нм для приповерхностных треков и около 30 кэВ/нм для треков в объеме), что наблюдается в экспериментах [6].

Литература

1. Анисимов С.И., Лукьянчук Б.С. Избранные задачи теории лазерной абляции. - УФН. - 2002. - Т. 172. №3. - С. 301-333.
2. Duffy D.M., Rutherford A.M. The effect of electron-ion interactions on radiation damage simulations. - J. Phys.:Condens. Matter. - 2007. - V. 19. - P. 496201
3. Duffy D.M., Rutherford A.M. Including the effects of electronic stopping and electron-ion interactions in radiation damage simulations. - J. Phys.:Condens. Matter. - 2007. - V. 19. - P. 016207
4. Plimpton S.J. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. - J. Comp. Phys. - 1995. - V. 119. - P. 1-19.
5. Поташников С.И., Боярченков А.С., Некрасов К.А., Купряжкин А.Я. - Молекулярно-динамическое восстановление межчастичных потенциалов в диоксиде урана по тепловому расширению. - Альтернативная энергетика и экология. - 2007. - №8. - С. 43-52.
6. Matzke Hj. Radiation damage in crystalline insulators, oxides and ceramic nuclear fuels. - Radiation Effects. - 1982. - V. 64. - P. 3-33.