МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В АРГОН-КСЕНОНОВОЙ ЯДЕРНО-ВОЗБУЖДАЕМОЙ ПЛАЗМЕ, СОДЕРЖАЩЕЙ НАНОКЛАСТЕРЫ УРАНА

А.П. Будник, А.В. Сипачёв

ГНЦ РФ Физико-энергетический институт, г. Обнинск, 249033 Калужская область, пл. Бондаренко, 1

Аннотация

Разработана модель кинетических процессов в аргон-ксеноновой газовой ядерно-возбуждаемой плазме, содержащей нанокластеры урана различных размеров. Модель включает эволюционные уравнения для функции распределения электронов по энергиям, концентраций как различных газовых компонент плазм, так и пылевых частиц, имеющих различные заряды и размеры.

Разработан метод решения уравнений модели и алгоритм для численного решения системы уравнений и создан комплекс программ для математического моделирования.

Методами математического моделирования получены данные о временной эволюции компонентного состава возбуждаемой осколками деления пылевой аргон-ксеноновой ядерно-возбуждаемой плазмы, а также линейного коэффициента усиления слабого сигнала лазерного излучения такой средой. Впервые при математическом моделировании учтен процесс разрушения нанокластеров осколками деления.

MATHEMATICAL SIMULATION OF KINETIC PROCESSES IN ARGON-XENON NUCLEAR-EXITED PLASMA, CONTAINING NANOCLUSTERS OF URANIUM"

A.P. Budnik, A.V. Sipachev

State Scientific Center of Russian Federation, A.I. Leypunski Institute of Physics and Power Engineering, Russia, Obninsk, 249033

A model of kinetic processes in argon-xenon nuclear-exited plasma containing different sized uranium nanoclusters was developed. The model includes evolutionary equations for function of electrons energy distribution, concentration various the components of plasma and dust particles with different size and charge.

The method of the solution and algorithm of numerical calculations of system equations is developed and software complex for mathematical simulation were created.

The influence of crushing uranium nanoclusters on the kinetic processes in nuclear- excited active argon-xenon containing different sized nanoclusters of uranium media was investigated by the methods of numerical simulation.

1. ВВЕДЕНИЕ

Прошло около 30 лет с тех пор, когда было предложено применять распыленные в активной газовой среде мелкодисперсные урансодержащие частицы для преобразования ядерной энергии в энергию оптического излучения [1–3].

Применение мелкодисперсных урансодержащих частиц по сравнению с традиционно применяющимися методами гетерогенной ядерной накачки активных газовых сред может повысить долю энергии, выносимой осколками деления из конденсированной фазы в газовую среду, в десять и более раз. Это создает предпосылки для повышения эффективности преобразования ядерной энергии в энергию оптического излучения.

Рассеяние и поглощение лазерного излучения активной средой, содержащей мелкодисперсные урансодержащие частицы, является существенным фактором препятствующим развитию генерации лазерного излучения в такой среде.

В последнее время было предложено использовать лазерно-активные газовые среды, облучаемые нейтронами и содержащие нанокластеры соединений урана [4–5]. Расчетно-теоретические исследования показали, что возможно получить усиление лазерного излучения в ядерно-возбуждаемой аргон-ксеноновой пылевой газовой плазме[4–5]. Это позволяет рассчитывать на создание способа и устройств с высокой эффективностью прямого преобразования кинетической энергии осколков деления в энергию когерентного оптического излучения. Эффективность прямого преобразования ядерной энергии в этом случае может возрасти более чем на порядок.

Однако в исследованиях [4–5] рассматривался только монодисперсный аэрозоль. Процесс возможного разрушения кластеров не рассматривался.

Укажем процессы, в которых нанокластеры могут разрушаться.

Во-первых, разрушение нанокластера содержащего делящиеся элементы в нейтронных полях может происходить при делении атомного ядра, находящегося внутри или на поверхности нанокластера.

Во-вторых, разрушение нанокластера может происходить при столкновениях с ним движущего осколка деления.

Согласно современным представлениям движущийся с характерной скоростью $v \sim 10^9$ см/с в конденсированной среде осколок деления создает вблизи оси трека (сердечник трека) область расплава, температура достигает примерно 10 кК, а характерный поперечный размер порядка 1 нм. Это должно, на наш взгляд, приводить к разрушению нанокластеров размером около 10 нм. Нетрудно оценить, что при характерных удельных мощностях энерговклада в газовую среду, обеспечиваемых нейтронным излучением импульсных ядерных реакторов равных сотням Вт в см³ с длительностью импульса около ста мкс при плотности газовой активной среды близкой плотности газа при нормальных условиях разрушение нанокластера при делении атомного ядра, находящегося внутри его, должно происходить гораздо реже, чем при столкновении осколком деления с нанокластером.

Далее ограничимся рассмотрением процесса разрушения кластеров только при столкновении осколка деления с нанокластером. Это ограничивает область применения результатов указанными выше условиями.

Настоящая работа посвящена разработке модели кинетических процессов в аргон-ксеноновой газовой ядерно-возбуждаемой плазме, содержащей нанокластеры урана различных размеров. Впервые в модели учтены процессы дробления нанокластеров урана при столкновении с осколком деления.

Модель включает эволюционные уравнения для функции распределения электронов по энергиям, концентраций как различных газовых компонент плазмы, так и пылевых частиц, имеющих различные заряды и размеры.

Разработан метод решения уравнений модели и алгоритм для численного решения системы уравнений и создан комплекс программ для математического моделирования.

Методами математического моделирования получены данные о временной эволюции компонентного состава возбуждаемой осколками деления пылевой аргон-ксеноновой ядерно-возбуждаемой плазмы, а также линейного коэффициента усиления слабого сигнала лазерного излучения такой средой.

2. МОДЕЛЬ КИНЕТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ВОЗБУЖДАЕМОЙ ОСКОЛКАМИ ДЕЛЕНИЯ ПЫЛЕВОЙ АРГОН-КСЕНОНОВОЙ ЛАЗЕР-НО-АКТИВНОЙ СРЕДЕ С УЧЕТОМ РАЗРУ-ШЕНИЯ УРАНОВЫХ НАНОКЛАСТЕРОВ

Модель кинетических процессов в возбуждаемой осколками деления аргон-ксеноновой лазерно-активной среде с монодисперсной пылевой компонентой была разработана в работах [4,5]. Примем эту модель за основу.

В кинетической модели аргон-ксеноновой среды с монодисперсной пылевой компонентой в газовой компоненте учитывались атомарные (Ar^+ , Xe^+) и гомоядерные молекулярные ионы аргона и ксенона (Ar_2^+ , Xe_2^+), гетероядерный ион $ArXe^+$ и молекула ArXe, атомы аргона и ксенона в возбужденных состояниях, а также эксимеры аргона и ксенона (рис. 1).

Для возбужденного атома ксенона рассматриваются отдельно уровни 6s, восемь 5d подуровней и шесть 6р подуровней, а подуровни 7р и 7s состояний объединялись в единый уровень (рис. 2). Все остальные состояния ксенона объединены в одно состояние, обозначенное Xe*.

Последовательность основных кинетических процессов, ведущих к созданию в аргон-ксеноновой среде инверсной заселенности следующая. Осколки деления, взаимодействуя с аргон-ксеноновой средой, теряют энергию главным образом на образование атомарных ионов и возбужденных атомов аргона. Далее в столкновениях атомарных ионов Ar^+ и возбужденных атомов аргона с атомами аргона и ксенона образуются как возбужденные атомы ксенона, так и атомарные ионы ксенона Xe^+ , а также молекулярные гомоядерные Ar_2^+ , Xe_2^+ и гетероядерные ионы $ArXe^+$.



Рис. 1. Энергетическая диаграмма рассматриваемых в кинетической модели состояний



Рис. 2. Энергетическая диаграмма рассматриваемых в кинетической модели состояний атома ксенона, на переходах между которыми возможно получить генерацию лазерного излучения

Заселение верхних возбужденных состояний атома ксенона (обозначенных как PS) происходит в результате диссоциативной рекомбинации молекулярных ионов $ArXe^+$, Xe_2^+ . В дальнейшем в результате столкновений с атомами аргона происходит заселение верхних лазерных уровней для переходов с длиной волны 1.73 мкм, 2.03 мкм и 2.65 мкм. Расселение лазерных уровней идет по нескольким каналам – за счет гашения возбуждения в столкновениях с электронами плазмы и радиационным путем в результате вынужденного и спонтанного излучения. Эти процессы приводят к заселению нижних лазерных уровней, которые тушатся в столкновениях с атомами аргона и электронами, заселяя при этом более низколежащие возбужденные состояния атомов ксенона.

В модели с монодисперсной пылевой компонентой процессы взаимодействия электронов и ионов с заряженными нанокластерами описывались следующими "плазмохимическими" реакциями:

$$e + Dl \to Dl(-); \tag{1}$$

$$e + D1(n-) \to D1[(n+1)-]; \qquad (2)$$

$$I(+) + D1(n-) \to D1[(n-1)-];$$
(3)

$$I(+) + D1 \to D1(+) \tag{4}$$

Здесь введены обозначения: e – соответственно электрон; D1, D1(+), D1(n-) – соответственно электрически нейтральный, положительно и отрицательно заряженные нанокластеры радиусом 10 нм; n – заряд нанокластера в единицах заряда электрона; I(+) – любой положительно заряженный атомарный или молекулярный ион газовой смеси.

Учет процессов дробления урановых нанокластеров при столкновении с ними осколков деления требует отказаться от монодисперсности аэрозоля.

Далее рассмотрим простейшую модель - трехкомпонентную (по размерам) пылевую компоненту. Пусть пылевые частицы имеют сферическую форму. Для определенности положим, что радиусы частиц различных компонент 5 нм,10 нм и 20 нм.

Тогда реакции (1)–(4) должны быть дополнены реакциями с нанокластерами других размеров

$$e + D2 \to D2(-); \tag{5}$$

$$e + D2(n-) \to D2[(n+1)-]; \tag{6}$$

$$I(+) + D2(n-) \to D2[(n-1)-]; \tag{7}$$

$$I(+) + D2 \to D2(+); \tag{8}$$

$$e + Dh \rightarrow Dh(-);$$
 (9)

$$e + Dh(n-) \to Dh[(n+1)-]; \tag{10}$$

$$I(+)+Dh(n-) \to Dh[(n-1)-]; \qquad (11)$$

$$I(+) + Dh \to Dh(+); \tag{12}$$

где D2, D2(+), D2(n-), Dh, Dh(+), Dh(n-) – соответственно электрически нейтральный, положительно и отрицательно заряженные нанокластеры радиусами 20 нм и 5 нм; n – заряд нанокластера в единицах заряда электрона; I(+) – любой положительно заряженный атомарный или молекулярный ион газовой смеси.

Также должны быть добавлены реакции дробления нанокластеров осколками деления. Примем для упрощения вычислений простейшую модель дробления, в которой при дроблении радиус продуктов дробления уменьшается в два раза по сравнению с начальным. Таким образом из одного кластера образуется восемь кластеров с радиусом вдвое меньше.

Тогда реакции дробления нанокластеров можно записать в следующем символическом виде:

$$D2 + ff \to 8D1 + ff; \tag{13}$$

$$D2(-) + ff \to 7D1 + D1(-) + ff$$
; (14)

$$D2(2-) + ff \to 6D1 + 2D1(-) + ff;$$
 (15)

$$D2(3-) + ff \to 5D1 + 3D1(-) + ff$$
; (16)

$$D2(4-) + ff \to 4D1 + 4D1(-) + ff;$$
 (17)

$$D2(5-) + ff \to 3D1 + 5D1(-) + ff;$$
 (18)

$$D2(6-) + ff \rightarrow 2D1 + 6D1(-) + ff$$
; (19)

$$D2(7-) + ff \rightarrow D1 + 7D1(-) + ff$$
; (20)

$$D2(8-) + ff \to 8D1(-) + ff;$$
 (21)

$$D2(9-) + ff \rightarrow 7D1(-) + D1(2-) + ff;$$
 (22)

$$D2(10-) + ff \rightarrow 6D1(-) + 2D1(2-) + ff$$
; (23)

$$D1 + ff \rightarrow 8Dh + ff;$$
 (24)

$$D1(-) + ff \rightarrow 7Dh + Dh(-) + ff$$
; (25)

$$D1(2-) + ff \to 6Dh + 2Dh(-) + ff$$
; (26)

$$D1(3-) + ff \rightarrow 5Dh + 3Dh(-) + ff ; \qquad (27)$$

$$D1(4-) + ff \rightarrow 4Dh + 4Dh(-) + ff; \qquad (28)$$

$$Dl(5-) + ff \rightarrow 3Dh + 5Dh(-) + ff ; \qquad (29)$$

$$D1(6-) + ff \rightarrow 2Dh + 6Dh(-) + ff ; \qquad (30)$$

$$D1(7-) + ff \rightarrow Dh + 7Dh(-) + ff; \qquad (31)$$

$$D1(8-) + ff \rightarrow 8Dh(-) + ff ; \qquad (32)$$

$$D1(9-) + ff \rightarrow 7Dh(-) + Dh(2-) + ff$$
; (33)

$$D1(10-) + ff \to 6Dh(-) + 2Dh(2-) + ff;$$
 (34)

где *ff* – осколок деления.

Всего в модернизированной модели рассматривалось 86 компонент и учитывалось 747 реакций в аргон-ксеноновой среде.

3. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ КИНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Кинетическая модель локальной кинетики газовой плазмы представляет собой в общем случае систему уравнений, описывающую процессы атомной, молекулярной, ионной, электронной и радиационной кинетики.

Для данного круга реакций с участием веществ $X_1, ..., X_n$ для произвольного набора реакций полная система уравнений, описывающая эволюцию во времени концентрации частиц n компонент, имеет вид

$$\frac{d[X_i]}{dt} = \sum_{k} [v_{ik} - \mu_{ik}] R_k + R_{Xi}^{FF} + R_{Xi}^D,$$

 $i = 1, \cdots, n$
(35)

Здесь $[X_i]$ – концентрация частиц вещества *i*-го сорта; индекс *k* указывает реакцию; μ_{ik} и v_{ik} – стехиометрические коэффициенты для реакции *k*; R_k – суммарная скорость локальной *k* реакции, которая в данной точке определяется только концентрацией частиц и сферически симметричной частью функции распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ); R_{Xi}^{FF} , R_{Xi}^{D} – скорости изменения концентрации *i*-компоненты под действием осколков деления и при столкновениях пылевыми и газовыми частицами.

Для нахождения констант электронной кинетики в определенные моменты времени необходимо решать уравнение Больцмана для $f_0(\varepsilon, t)$ (сферически симметричной части ФРЭЭ). Считая, что распределение электронов по энергиям устанавливается намного быстрее, чем изменяется концентрация электронов, уравнение Больцмана можно представить в виде

$$\varepsilon^{1/2} f_0(\varepsilon, t) \frac{\mathrm{d}n_e(t)}{\mathrm{d}t} = \\ = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varepsilon} \left\{ n_e \sqrt{\frac{2e}{m}} \varepsilon^2 \frac{2m}{M} N Q_m(\varepsilon) \left[f_0(\varepsilon, t) + \frac{kT}{e} \frac{\mathrm{d}f_0}{\mathrm{d}\varepsilon} \right] \right\} + \\ + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varepsilon} \left\{ \frac{2\pi}{3} n_e^2 \sqrt{\frac{2e}{m}} \frac{q^2}{e^2} \ln\Lambda \times \left[P(\varepsilon) \frac{\mathrm{d}f_0}{\mathrm{d}\varepsilon} + Q(\varepsilon) f_0 \right] \right\} + \\ + St \left[f_0(\varepsilon, t) \right] + St_{ed} \left[f_0(\varepsilon, t) \right], \qquad (35)$$

где ε , *m*, *e* – соответственно энергия; масса и заряд электрона; n_e – концентрация электронов;

$$P(\varepsilon,t) = 2\int_{0}^{z} f_{0}(x,t) x^{3/2} dx + 2\varepsilon^{3/2} \int_{0}^{z} f_{0}(x,t) dx, \qquad (36)$$

$$Q(\varepsilon,t) = 3\int_{0}^{z} x^{1/2} f_0(x,t) \mathrm{d}x, \qquad (37)$$

 л – кулоновский логарифм, равный отношению дебаевского и кулоновского радиусов

$$\Lambda = \frac{I_D}{r_C}, \quad I_D = \left(\frac{k_B T_e}{4\pi n_e e^2}\right)^{1/2}, \quad r_c = \frac{2q^2}{3k_B T_e}$$
(38)

Уравнение (35) записано в системе единиц СГСЭ.

Первый член уравнений описывает влияние изменения во времени концентрации электронов на распределение электронов по энергиям, второй - упругие потери, третий – электрон-электронные соударения, $St(f_0(u,t))$ – интеграл неупругих столкновений электрона с компонентами газовой среды (атомы, ионы, молекулы).

В качестве условия нормировки для $f_0(\varepsilon,t)$ используется

$$\int_{0}^{\infty} f_0(\varepsilon, t) \varepsilon^{1/2} d\varepsilon = 1$$
(39)

Интегрируя по энергии уравнение (35) в пределах от 0 до ∞ , можно получить уравнение для эволюции электронной концентрации

$$\frac{\mathrm{d}n_e}{\mathrm{d}t} = n_e \left(v_i - v_\alpha \right) - \beta n_e^2 \,, \tag{40}$$

где v_i, v_α – частоты ионизации и прилипания; β – коэффициент рекомбинации.

Уравнение (35) решалось численно. При помощи интегроинтерполяционного метода строилась трехточечная консервативная конечно-разностная схема первого порядка аппроксимации. Полученная система уравнений решается методом прогонки с последующими итерациями из-за нелинейности уравнения до выполнения условия

$$\max\left|\left(f_i^{s+1}-f_i^s\right)\middle/f_i^s\right|<\varepsilon, \ i=1,...,N,$$

где f_i^{s+1} , f_i^s – значения на s+1 и s – итерациях; N – число разбиений интервала интегрирования по энергии, которое варьируется от 500 до 12000.

Константы процессов с участием электронов плазмы находятся усреднением соответствующих сечений $Q_{j}(\varepsilon)$ по ФРЭЭ, определяемой из уравнения Больцмана

- - -

$$\frac{\partial N_{\tilde{k}}}{\partial t} = F_{\tilde{k}} + Q_{ion,\tilde{k}} - \sum_{\tilde{k}} f_{dust,\tilde{k},i}^{ion} N_{dust,i} N_{\tilde{k}} + \\
+ \sum_{\tilde{k}} f_{dust,\tilde{k},i+1}^{ion} N_{dust,i+1} N_{\tilde{k}} ,$$
(41)
$$\frac{\partial N_{dust,i}}{\partial t} = \sum_{\tilde{k}} f_{dust,\tilde{k},i+1}^{ion} N_{dust,i+1} N_{\tilde{k}} - \\
- \gamma_e \int_{0}^{\infty} 4\pi v r_0^2 n_e \left(1 - \frac{ie^2}{r_0 \varepsilon}\right) \theta \left(1 - \frac{ie^2}{r_0 \varepsilon}\right) N_{dust,i} f_0 d\varepsilon + \\
+ \gamma_e \int_{0}^{\infty} 4\pi v r_0^2 n_e \left(1 - \frac{(i-1)e^2}{r_0 \varepsilon}\right) \theta \left(1 - \frac{(i-1)e^2}{r_0 \varepsilon}\right) \times \\
\times N_{dust,i-1} f_0 d\varepsilon ,$$
(42)

где $N_{\tilde{k}}(z,r,t)$ – концентрация ионов \tilde{k} -сорта; m_e – масса электрона; v – частота столкновений электронов с атомами; N_{dust,i} – концентрация наночастиц с зарядом $q = -i \cdot e$, где i – целое число; $Q_{ion,e}$, $Q_{ion,\tilde{k}}$ – члены, описывающие процессы ионизации и возбуждения атомов ионом, который можно считать движущимися прямолинейно, а $F_{\tilde{k}}(\{N_{\tilde{k}}\},t)$ – члены, описывающие локальную кинетику \tilde{k} -й компоненты (рождение и уничтожение частиц \tilde{k} -сорта, в том числе и вследствие радиационных переходов и плазмохимических реакций); γ_e – вероятность того, что электрон, сталкиваясь с пылевой частицей, прилипает к ней; f^{ion}_{dust k̃i} – константа скорости зарядки пылевых частиц положительными ионами \tilde{k} -сорта с зарядом равным $q = -ie; \theta - \phi$ ункция Хэвисайда; ε – кинетическая энергия электрона,

$$St_{ed} = -\sum_{i} \pi r_0^2 \gamma_e v \left(1 - \frac{ie^2}{r_0 \varepsilon} \right) \theta \left(1 - \frac{ie^2}{r_0 \varepsilon} \right) N_{dust,i} f_0$$

 интеграл столкновений, описывающий прилипание электронов к пылевым частицам.

Сечения взаимодействия нанокластеров с электронами и константы скоростей реакций зарядки нанокластеров ионами плазмы определялись согласно теоретическим моделям элементарных процессов в пылевой плазме [7–9]. Практическая реализация расчетных моделей приведена также в [10,11].

Сечение разрушения нанокластеров при столкновении с осколком деления полагалось равным πr_0^2 .

В аргон-ксеноновой лазерно-активной среде диссоциативная рекомбинация ионов $ArXe^+$ и Xe_2^+ является определяющим процессом, приводящим к заселению верхних лазерных уровней на переходах 1.73 и 2.03 мкм.

В связи с этим при разработке модели кинетических процессов в этой среде особое внимание уделялось корректному учету взаимодействия многозарядных отрицательно заряженных нанокластеров с положительно заряженными ионами газовой плазмы. Следует отметить, что при математическом моделировании зарядки нанокластеров принципиально важно учитывать дискретность передачи электрического заряда из-за того, что заряды нанокластеров относительно невелики.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для математического моделирования кинетических процессов в аргон-ксеноновой среде, содержащей нанокластеры, использовался комплекс программ, созданный на основе программных средств, описанных в [4–5]. В отличие от ранее созданных, он позволяет проводить математическое моделирование с учетом многозарядных кластеров и ионов.

При математическом моделировании, предполагалось, что нанокластеры имеют сферическую форму с радиусами равными 5 нм, 10 нм и 20 нм. Коэффициенты прилипания электронов и ионов к нанокластерам принимались равными 1. Причем учитывались реакции с нанокластерами с зарядом до n = 10. Далее представлены на рис. 3–10. типичные результаты расчетов смеси Ar-Xe (2000/1). Начальное давление газовой смеси полагалось равным 0.5 атм, а начальная температура равной 300°К. Полагалось, что удельная мощность энерговклада осколков деления в среду зависела от времени по закону $P(t) = P_{\text{max}} \cdot t/\tau \cdot \exp(1-t/\tau)$, где $\tau = 70$ мкс и $P_{\text{max}} = 46$ BT/см³.



Рис. 3. Зависимость от времени удельной мощности энерговклада



Рис. 4. Зависимость от времени концентраций пылевых частиц разных радиусов



Рис. 5. Функция распределения электронов по энергиям: 1 – начальное распределение, 2 – распределение при t = 5 нс, 3 – распределение в максимуме мощности накачки при t = 70 мкс



Рис.6. Зависимость от времени концентрации заряженных нанокластеров радиусом 5 нм в аргон-ксеноновой смеси при начальной концентрации нанокластеров 10¹² см⁻³



Рис. 7. Зависимость от времени концентрации заряженных нанокластеров радиусом 10 нм в аргон-ксеноновой смеси при начальной концентрации нанокластеров 10¹¹ см⁻³

Особо отметим результаты математического моделирования зависимости от времени линейного коэффициента усиления газовой средой на длине волны 1.73 мкм (см. рис.1). Несмотря на ослабление лазерного излучения нанокластерами урана, рассчитанное по данным работы [4], полный линейный коэффициент усиления пылевой аргон-ксеноновой плазмой достаточно быстро становится положительным.



Рис. 8. Зависимость от времени концентрации заряженных нанокластеров радиусом 20 нм в аргон-ксеноновой смеси при начальной концентрации нанокластеров 10¹¹ см⁻³



Рис. 9. Зависимость от времени концентраций электронов e ионов ArXe⁺ и Ar₂⁺, а также удельного объемного отрицательного (в единицах электронного заряда) нанокластеров



Рис. 10. Зависимость от времени линейного коэффициента усиления и ослабления лазерного излучения на длине волны 1.73 мкм. 1 – коэффициент усиления лазерного излучения газовой средой, 2 – коэффициент ослабления лазерного излучения нанокластерами урана, 3 – полный линейный коэффициент усиления пылевой аргон-ксеноновой плазмы

4. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕНЕРАЦИИ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ПЫЛЕВОЙ АРГОН-КСЕНОНОВОЙ АКТИВНОЙ СРЕДЕ

Разработанная модель кинетических процессов в аргон-ксеноновой газовой среде содержащей нанокластеры различных размеров использовалась для моделирования генерации лазерного излучения в плоскопараллельном резонаторе.

Состав лазерно-активной среды – смесь Ar: Xe с соотношением 2000:1; начальные концентрации урановых пылевых частиц радиусом 5нм – 10^{12} см⁻³, радиусом 10 нм и 20 нм – 10^{11} см⁻³. Давление газа P = 0.5 атм, начальная температура 300 К. Длина резонатора L полагалась равной 250 см, коэффициент пропускания одного из зеркал – 0.2.

Линейный коэффициент ослабления лазерного излучения нанокластерами урана на длине волны 1.73 мкм согласно данным работы [6] полагался равным 1.8×10^{-3} см⁻¹, причем этот коэффициент ослабления нанокластерами таких размеров при дроблении будет оставаться практически неизменным.

Расчеты проводились для двух импульсов энерговклада (рис. 11) с максимальной удельной мощностью энерговклада 235 Вт/см³ (1) и с максимальной удельной мощностью энерговклада 46 Вт/см³ (2).

На рис. 12 представлены зависимости от времени плотностей мощности генерируемого активной средой пучка лазерного излучения на выходе из резонатора.



Рис. 11. Зависимость от времени удельной мощности энерговклада: 1 – максимальная мощность накачки 235 Вт/см³, 2 – максимальная мощность накачки 46 Вт/см³



Рис. 12. Зависимость от времени плотности мощности пучка лазерного излучения (обозначения как на рис. 11)

На рис. 13 представлено отношение выходной мощности пучка лазерного излучения к мощности энерговклада в активную среду η в зависимости от времени.



Рис. 13. Зависимость от времени отношения выходной мощности лазерного излучения к мощности энерговклада в активную среду (обозначения как на рис. 11)

Таким образом, впервые показано, что при учете дробления урана возможна генерация лазерного излучения на длине волны 1.73 мкм пылевой аргонксеноновой плазмой, возбуждаемой осколками деления в течение времени порядка 100 мкс.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе выполнения настоящей работы разработана модель кинетических процессов в аргон-ксеноновой газовой ядерно-возбуждаемой плазме, содержащей нанокластеры урана различных размеров. Модель включает эволюционные уравнения для функции распределения электронов по энергиям, концентраций, как различных газовых компонент плазм, так и пылевых частиц, имеющих различные заряды и размеры. Впервые учтен процесс разрушения нанокластеров осколками деления.

Разработан метод решения уравнений модели и алгоритм для численного решения системы уравнений и создан комплекс программ для математического моделирования.

Методами математического моделирования получены данные о временной эволюции компонентного состава возбуждаемой осколками деления пылевой аргон-ксеноновой ядерно-возбуждаемой плазмы, а также линейного коэффициента усиления слабого сигнала лазерного излучения такой средой.

Впервые показано, что при учете дробления урана возможно получить как усиление, так и генерацию лазерного излучения на длине волны 1,73 мкм используя в качестве активной среды пылевую аргонксеноновой плазму, возбуждаемую осколками деления в течение времени порядка 100 мкс.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект №08-08-00456)

СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

- е элементарный заряд,
- т масса электрона,
- *ε* − кинетическая энергия электрона,

v – скорость осколка деления,

v – частота столкновений электронов с атомами,

 $n_e(t)$ – концентрация электронов,

 $f_0(\varepsilon,t)$ – сферически симметричная часть функции распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ),

 $N_{\tilde{k}}(t)$ – концентрация частиц (атомов, ионов и др.) \tilde{k} -сорта,

 $S_0(f_0, \{N_{\tilde{k}}\})$ – полный интеграл столкновений,

 $Q_{ion,e}$, $Q_{ion,\tilde{k}}$ – члены, описывающие процессы ионизации и возбуждения атомов ионом,

$$F_{\tilde{k}}(\{N_{\tilde{k}}\},t)$$
 – члены, описывающие локальную кинетику \tilde{k} -й

компоненты (рождение и уничтожение частиц \tilde{k} -сорта, в том числе и вследствие радиационных переходов и плазмохимических реакций),

 $[X_i]$ – концентрация частиц вещества *i*-го сорта, индекс *k* указывает реакцию,

 μ_{ik} и V_{ik} – стехиометрические коэффициенты для реакции k,

 R_k – суммарная скорость локальной k реакции, которая в данной точке определяется только концентрацией частиц и сферически симметричной частью функции распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ),

 $\mathbf{R}_{Xi}^{\text{FF}}, \mathbf{R}_{Xi}^{D}$ – скорости изменения концентрации *i* – компоненты под действием осколков деления и при столкновениях пылевыми и газовыми частицами,

– температура инертного газа,

М – масса атома,

 $St(f_0, \{N_{\tilde{k}}\})$ – интеграл неупругих столкновений электрона с компонентами газовой среды (атомы, ионы, молекулы),

 v_i и v_{α} – частоты ионизации и прилипания,

 β – коэффициент рекомбинации,

- ln Л кулоновский логарифм,
- *r*_d дебаевский радиус,
- *г*_С кулоновский радиус,
- *T_e* эффективная электронная температура.
- α коэффициент усиления лазерного излучения, см⁻¹,
- *r*₀ радиус наночастиц,

 $N_{dust,i}$ – концентрация наночастиц, с зарядом $q = -i \cdot e$, где *i* – целое число,

 γ_e – вероятность того, что электрон, сталкиваясь с пылевой частицей, прилипает к ней,

 $f_{\mathit{dust},\tilde{k},i+1}^{\mathit{ion}}$ – константа скорости зарядки пылевых частиц по-

ложительными ионами \tilde{k} -сорта,

 θ – функция Хэвисайда,

St_{ed} – интеграл столкновений, описывающий прилипание электронов к пылевым частицам,

P – удельная мощность энерговклада осколков деления в газовую среду, BT/cm^3 ,

*P*_{max} – максимальная удельная мощность энерговклада осколков деления в газовую среду, Вт/см³.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Miley G.H., McArhur D., DeYuong R., Prelas M. Fission reactor pumped laser: History and prospects: Proceedings Conferences 50 Years with nuclear fission. Washington 25-28 April -P. 333-342. Pub. American Nuclear Society. -1989.
- Prelas M.A., Boody F.P., Zediker M., Rowe M. A direct energy conversion technique based on an aerosol core reactor concept: 1984 IEEE International Conference on Plasma Science Publication Number 84CH1958-8. -1984. -P. 38.

- Prelas M.A., Romero J., Pearson E. A critical review of fusion system for radiolytic conversion of inorganics to gaseous fuels: Nuclear Technology/Fusion. -1982. -V.2. -№ 2. -P.143-164.
- А. П. Будник, В.А. Косарев, В.П. Лунев. Математическое моделирование генерационных характеристик активных газовых сред, содержащих нанокластеры соединений урана // Труды IV международной конференции «Физика лазеров с ядерной накачкой и импульсные реакторы» (ЛЯН-ИР-2007) в 2-х томах. ГНЦ РФ - ФЭИ, Обнинск, 2009, т. 1. С. 177–184.
- Будник А.П., Косарев В.А., Лунев В.П. Математическое моделирование кинетических процессов в газовой аргонксеноновой плазме, содержащей нанокластеры химических соединений урана // Препринт ФЭИ - 3141. – Обнинск. 2008. 23 с.
- Будник А.П., Лунев В.П. Расчётно-теоретические исследования методом Монте-Карло оптических и нейтроннофизических свойств аргон-ксеноновой газовой среды, содержащей нанокластеры урана и его химических соединений // 3-я Всероссийская школа-семинар "Аэрофизика и физическая механика классических и квантовых систем": Сборник научных трудов. – М.: ИПМех РАН. 2010. С. 42–49.
- Смирнов Б.М.Аэрозоли в газе и плазме. Учебное пособие. – М.: ИВТАН, 1990. 104 с.
- Фортов В.Е., Храпак А.Г., Храпак С.А., Молотков В.И., Петров О.Ф. Пылевая плазма // УФН. 2004. Т. 174. № 5. С. 495–544.
- 9. Цытович В.Н., Морфил Г.Е., Томас Х. Комплексная плазма: II элементарные процессы в комплексной плазме // Физика плазмы. 2003. Т. 29. № 1. С. 3–36.
- Алексеева И.В., Будник А.П. Двумерная модель неравновесных кинетических процессов в многокомпонентных газовых смесях при сверхзвуковом движении. // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2011. Т. 11. http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2011-02-01-001.pdf
- Алексеева И.В., Будник А.П. Двумерная модель негомогенных кинетических процессов в треках осколков деления в смеси инертных газов // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2011. Т. 11.

http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2011-02-01-002.pdf