

УДК 539.186.3 (575.2) (04)

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБЛАСТЕЙ РАЗУПОРЯДОЧЕНИЯ
АЛЬФА-ОТДАЧИ ^{238}U И ОТНОШЕНИЯ АКТИВНОСТЕЙ
ЧЕТНЫХ ИЗОТОПОВ УРАНА В ГАЛЕНИТЕ И ХАЛЬКОЗИНЕ**

Н.Л. Кучеренко – канд. физ-мат. наук
Международный университет Кыргызстана, Институт Мультимедиа

The results of an experiment of computer modeling for ratio of uranium even isotopes activities in halleinite and chalcocite are given.

Неравновесные физические системы радиоактивных изотопов с течением времени приходят в равновесное состояние, причем в это равновесное состояние они приходят с известной скоростью, которая не зависит от внешних факторов. Именно это обстоятельство позволяет использовать указанные системы в качестве естественных индикаторов в различных задачах, связанных с изучением земной коры и происходящих в ней процессов. В частности, задачи разделения потоков подземных вод и выявления источников питания подземных вод, изучение сезонных перемещений границ подземных потоков, геохронологические задачи, экологические задачи и др. [1].

Такой неравновесной системой радиоактивных изотопов являются четные изотопы урана ^{234}U и ^{238}U . Фракционирование четных изотопов урана было открыто в 1953 г. В.В. Чердынцевым и П.И. Чаловым [2]. При взаимодействии урансодержащих природных минералов с растворами, последние обогащаются атомами ^{234}U относительно ^{238}U , т.е. имеют избыток легкого изотопа.

За период, прошедший после обнаружения неравновесного урана, накоплена значительная информация о распространенности этого явления в природе. Ясно, что основной причиной разделения ^{234}U и ^{238}U являются ядерные процессы, в результате которых в природных минералах при распаде ^{238}U образуются области разупорядочения. Однако само разделение происходит только при взаимодействии твердой фазы (минералы) с жидкой фазой (природные растворы) [3].

Ранее для изучения механизма разделения четных изотопов урана были разработаны следующие модели [4]:

1) аналитическая модель, позволяющая вычислять по выведенной вероятностной формуле отношение активностей $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ в разупорядоченных областях зерна минерала:

$$\frac{^{234}\text{U}}{^{238}\text{U}} = \frac{\lambda_{234} N_{234}}{\lambda_{238} N_{238}} \Big|_R = \frac{\left[\frac{e^{-\lambda_4 t}}{e^{-\lambda_8 t}} + \frac{\lambda_4}{\lambda_4 - \lambda_8} \left(1 - \frac{e^{-\lambda_4 t}}{e^{-\lambda_8 t}} \right) - \frac{\lambda_4}{\lambda_8} P_{Th} (e^{\lambda_8 t} - 1) \right] \left[(1 - P_{pic})(2^{D_{tr}} - 1) + P_{pic} \right] + \frac{\lambda_4}{\lambda_8} P_{Th} (e^{\lambda_8 t} - 1)}{\Delta C_u(t) V_{pic} (1 - D_{tr}) + D_{tr}},$$

где

$\lambda_4 = 2.67 \cdot 10^5$ – константа распада ^{234}U ;
 $\lambda_8 = 4.5 \cdot 10^9$ – константа распада ^{238}U ;

t – время, прошедшее с начала распада (в начальный момент времени в зерне минерала отношение активностей равно единице);

V_{pic} – объем пика смещения (разупорядоченной области) при распаде ^{238}U ;

D_{ir} – коэффициент, определяющий долю дополнительных разрушений (кроме пиков смещений) в рассматриваемой области;

P_{pic} – доля атомов ^{234}U , находящихся в области образовавшихся пиков смещения;

P_{Th} – вероятность того, что атом отдачи ^{234}Th не выйдет за пределы, образованного им пика смещения;

$\Delta C_U(t)$ – изменение концентрации урана в рассматриваемой области за время t .

2) модель парных случайных столкновений – численная модель, моделирующая трек атома отдачи ^{234}Th и каскад вторичных ливней методом Монте-Карло; позволяет сделать оценку объемов и форм пиков смещений в различных веществах.

3) модель парных коррелированных столкновений – численная модель, моделирующая трек атома отдачи ^{234}Th и каскад вторичных ливней в кристаллической решетке вещества.

4) численная модель расчета отношения активностей $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ в зерне минерала.

Используя указанные выше модели, были получены теоретические оценки отношения активностей в киновари, антимоните, кварце, цирконе, флюорите, барите, кальците, гематите, которые хорошо согласуются с имеющимися эмпирическими данными. В настоящей статье приводятся результаты подобных расчетов для халькозина (Cu_2S) и галенита (PbS).

Халькозин и галенит – минералы типа сульфидов, присутствуют в осадочных породах, в значительных количествах накапливаются в зонах вторичного обогащения сульфидных месторождений. В частности, встречаются в Джеккагане, Алмалыке, Ак-Тюзе и других месторождениях. Для расчетов использовались данные, приведенные в табл. 1.

Таблица 1

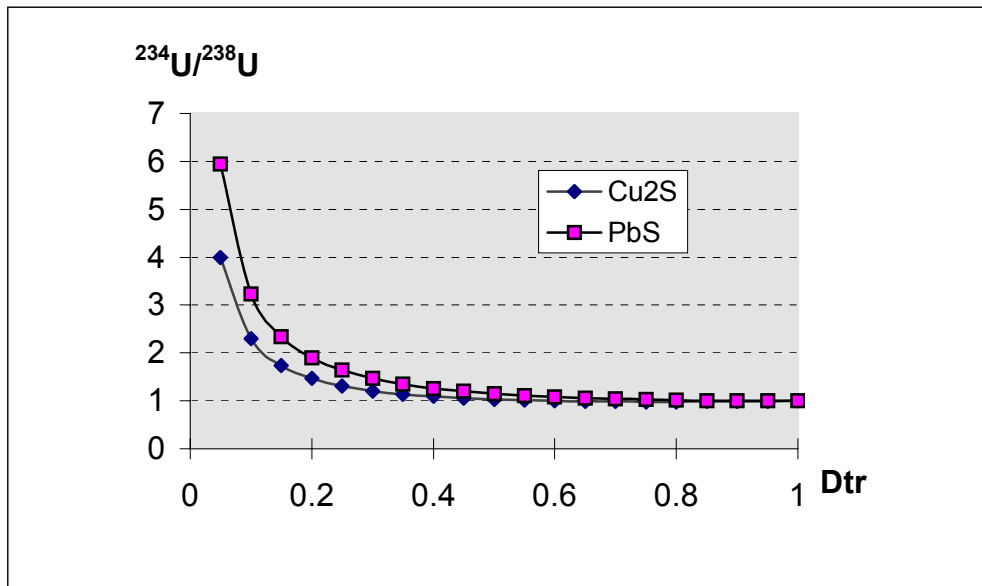
Минерал	Химический состав, %	Плотность, г/см ³	Молекулярная масса	Ионные радиусы элементов, Å
Халькозин	Cu – 79.86 S – 20.14	5.6	159.152	Cu ¹⁺ – 0.98 S ²⁻ – 1.82
Галенит	Pb – 86 S – 13,4	7.59	239.26	Pb ²⁺ – 1.26 S ²⁻ – 1.82

Для халькозина и галенита моделировался трек атома отдачи и каскад вторичных ливней. Для каждого соединения просчитывались 100 реализаций. Использовалась модель случайных столкновений. Это позволило оценить вероятность, что атом отдачи останется в области пика смещения, объем и форму разупорядоченной области. Затем по формуле были вычислены значения отношения активностей четных изотопов урана в областях пиков смещений. Эти значения соответствуют значениям отношения активностей $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$, наблюдаемым в природных растворах (табл. 2 и рисунок).

Таблица 2

Минерал	Интервальная оценка вероятности, что атом отдачи от распада ^{238}U остался в пике смещения	Точечная оценка объемов пиков смещений, Å ³
Халькозин Cu ₂ S	0.07–0.20	1433.61
Галенит PbS	0.25–0.43	2211.72

Примечание: отклонения от средних значений объемов составляют 10–12%; интервальная оценка проводилась для уровня значимости 0.05.



Зависимость отношения активностей $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ от доли разрушений в урансодержащей области для халькозина и галенита; концентрация урана в начальный момент времени в урансодержащей области зерна минерала $\text{Cd}=1.85 \cdot 10^{-5} \text{ г/см}^3$; время распада – $2 \cdot 10^5$ лет.

Отношения активностей рассчитывались при различных временах распада, концентрациях урана в урансодержащей области и в зависимости от доли дополнительных разрушений (трещин). Считалось, что в начальный момент времени в урансодержащей области наблюдается равновесное отношение активностей $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}=1$. На рисунке представлена зависимость полученных значений $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ для концентрации урана $\text{Cd}=1.85 \cdot 10^{-5} \text{ г/см}^3$ и времени распада $t=2 \cdot 10^5$ лет. Как видно, реальные значения отношения активностей $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$, соответствующие природным условиям (доля разрушений $D_{tr}:0.1-0.8$), для халькозина находятся в пределах от 1 до 2, для галенита – от 1 до 3.

Литература

1. Чалов П.И. Неравновесный уран как индикатор процессов в гидросфере // Водные ресурсы. – 1982. – №5.
2. Чердынцев В.В., Чалов П.И. Явление естественного разделения урана-234 и урана-238. Открытия в СССР. – М.: ЦНИИПИ, 1977. – С. 28.
3. Чалов П.И. Изотопное фракционирование природного урана. – Фрунзе: Илим, 1975. – 236 с.
4. Кучеренко Н.Л. Моделирование отношения активностей четных изотопов урана в разупорядоченных структурах зерен минералов // Наука и новые технологии. – Бишкек, 1998. – С. 30–38.