

KİÇİK ENERJİLİ ELEKTRONLARIN TƏSİRİLƏ SUYUN RADIOLİZİ PROSESİNİN RİYAZİ MODELLEŞDİRİLMƏSİ

Y.D.Cəfərov

Azərbaycan Milli EA Radiasiya problemləri institutu AZ1143, Bakı, F.Ağayev 9

azirp@rambler.ru

Monte-Karlo, birqat toqquşma və addımlama metodlarından istifadə edərək, Mathcad programı əsasında, kiçik enerjili elektronların ($E=1, 2.5, 5, 10$ keV) təsirilə suyun (maye faza) radiolizi prosesi riyazi modelləşdirilmişdir. Bu model əsasında elektronlarla su molekulları arasında qeyri-elastiki toqquşmadan alınan fiziki (birqat ionlaşmış molekulyar orbitallar- $H_2O_i^+$, öz enerjisini birinci elektron-həyacanlanma enerjisinə qədər itirmiş elektron- e_{sub}^- və elektron-həyacanlanma halları- A^1B_1, B^1A_1 , Ridberq halı, diffuzion zolaq, dissosiativ həyacanlanma və plazmon) və fiziki-kimyəvi ($OH, e_{aq}^-, H, H_3O^+, H_2, H_2O_2, HO_2, O_2, OH, O_2^-, HO_2^-$) mərhələ məhsullarının radiasiya-kimyəvi cırımları təyin edilmişdir.

Kiçik (0.05÷10 keV), orta (10÷100 keV) və ya yüksək (100÷5000 keV) enerjili elektronlar su daxilindən keçərkən, su molekulları ilə elastiki və qeyri-elastiki toqquşmada öz kinetik enerjilərini tədricən itirirlər. Enerjinin radiasiya itkisi mexanizminə görə, qeyri-elastiki toqquşma zamanı prosesin fiziki mərhələsində ($<10^{-15}$ san.) müxtəlif molekulyar orbitalların (MO) birbaşa birqat ionlaşması- $H_2O_i^+$, öz enerjisini birinci elektron-həyacanlanma enerjisinə qədər itirmiş elektron- e_{sub}^- və elektron-həyacanlanma halları: A^1B_1, B^1A_1 , Ridberq halı (Ry), diffuzion zolaq (db), dissosiativ həyacanlanma (de) və plazmon (ce-kollektiv həyacanlanma) kimi aktiv araləq hissəciklər yaranır. Bu hissəciklər su və ya su məhlulları daxilində gedən fiziki, kimyəvi və bioloji proseslərə güclü təsir göstərdiklərinə görə, elmin müxtəlif sahələrində (atom, nüvə və plazma fizikası, astrofizika, atmosfer hadisələrinin modelləşdirilməsi, radiokimyə, radiobiologiya və i.a.) onların rolunu öyrənməklə, gələcəkdə baş verə biləcək hadisələri əvvəlcədən proqnozlaşdırmaq olar. Bu səbəbdən də həmin hissəciklərin əmələ gəlməsini və sərfini həm nəzəri, həm də təcrübi olaraq öyrənmək əsas problemlərdəndir.

Elektron zərbəsilə su molekulunun ionlaşmasının ($e, 2e$) effektiv en kəsiyinin inandırıcı qiymətini [1-6] müəllifləri müxtəlif təcrübə üsullarını tətbiq etməklə, [7-16]

müəllifləri isə müxtəlif nəzəri yanaşmalardan istifadə edərək təyin etmişlər.

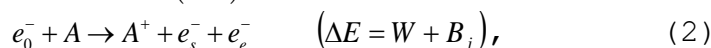
Hələlik elektron zərbəsilə su molekullarının həyacanlanması barədə heç bir ədəbiyyat mövcud deyil. Lakin fotoadsorbsiyalı spektroskopiya metodundan istifadə edərək [17-19] müəllifləri suyun elektron-həyacanlanma hallarını təyin etmişlər. Hal-hazırda təcrübi nəticələrə əsaslanaraq müxtəlif poliempirik metodlar tətbiq etməklə [20-24] müəllifləri suyun elektron həyacanlanma hallarının effektiv en kəsiyini nəzəri hesablamışlar.

Elektronlarla su molekulu arasında səpilmənin tam effektiv en kəsiyi [25-30] müəllifləri tərəfindən təyin edilmişdir. Təcrübə və nəzəri hesablamalardan alınan nəticələri müqayisə etdikdə görünür ki, 30 eV enejidən böyük qiymətlərdə onlar üst-üstə düşür, kiçik qiymətlərdə isə kənara çıxmalar müşahidə olunur.

Radioliz prosesinin hər iki mərhələlərində (fiziki və fiziki-kimyəvi) əmələ gələn məhsulların radiasiya-kimyəvi cırımlarını isə [31-41] müəllifləri müxtəlif yanaşmalarda nəzəri hesablamışlar. Müxtəlif müəlliflərin həm nəzəri həm də təcrübi aldıkları nəticələrlə bizim aldığımız nəticələr arasında müəyyən xəta tərtibində uyğunluqlar var.

Təqdim olunan işdə kiçik enerjili ($T=1.0; 2.5; 5.0; 10$ keV) elektronların təsirilə suyun (maye faza) radiolizi prosesinin riyazi modeli verilmişdir. Prosesin fiziki ($<10^{-15}$ san.)

və fiziki-kimyavi (10^{-15} - 10^{-12} san.) mərhələlərində əmələ gələ biləcək ilkin məhsulların radiasiya-kimyəvi çıxımları hesablanmışdır. Modeldə MO-ların ionlaşma prosesinin effektiv en kəsiyi üçün Mott tənliyinin daha təkmilləşmiş formulasından [7], müxtəlif növ elektron-həyəcənlanma hallarının effektiv en kəsikləri üçün isə [13] müəlliflərinin təklif etdikləri tənliklərdən istifadə edilmişdir. Hesablama Monte-Karlo, birqat toqquşma və addımlama metodlarından istifadə edərək, Mathcad proqramı əsasında aparılmışdır.



burada, e_0^- , e_s^- və e_e^- -uyğun olaraq ilkin, səpilən və təpilən elektronlar, A-maddə molekulları, A^+ , A^* , A^{**} -uyğun olaraq onların ionlaşma, həyəcənlanma və ifrat həyəcənlanma hallarıdır. Bu proseslər zamanı ötürülən enerji (ΔE), (1) halında molekulun həyəcənlanma enerjisinə (E_{0n}), (2) halında isə j-cı molekulyar orbitaldən təpilən elektronun kinetik enerjisi (W) və uyğun orbitalin rabitə enerjisinin (B_j)

NƏZƏRİ METODLAR VƏ ALINAN NƏTİCƏLƏR

Kiçik enerjili elektronlarla su molekulları arasında qeyri-elastiki toqquşmada enerji balansını ən sadə halda $T = E_s + \Delta E$ şəklində ifadə etmək olar ki, burada, T və E_s uyğun olaraq elektronun toqquşmadan əvvəl və sonrakı kinetik enerjisi, ΔE isə qeyri-elastiki toqquşma zamanı elektron tərəfindən su molekuluna ötürülən enerjidir. Bu enerji su molekulunun elektron-həyəcənlanmasına (1) və MO-ların ($1a_1$, $2a_1$, $1b_2$, $3a_1$, $1b_1$) birbaşa birqat ionlaşmasına (2) sərf olunur

cəminə bərabər olur. Səpilən və təpilən elektronların kinetik enerjiləri uyğun olaraq $E_s = 0$ -dan $E_s^{\max} = T - B_j$ -ya və $W = 0$ -dan $W^{\max} = (T - B_j)/2$ -yə qədər dəyişə bilər.

Su molekulunun j-cı MO-ın birqat ionlaşmasının effektiv en kəsiyini hesablamaq üçün Mott tənliyinin daha təkmilləşmiş formulasından [3] istifadə olunmuşdur:

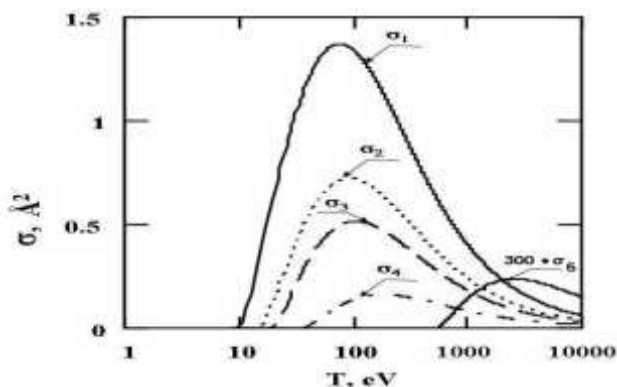
$$\frac{d\sigma_j(W,T)}{dW} = \frac{S}{B_j(t+u+1)} \left\{ \frac{1}{(w+1)^2} + \frac{1}{(t-w)^2} - \frac{1}{(w+1)(t+w)} + \frac{4u}{3} \left[\frac{1}{(w+1)^3} + \frac{1}{(t-w)^3} \right] \right\}, \quad (2)$$

burada, $t = \frac{T}{B_j}$, $w = \frac{W}{B_j}$, $u = \frac{U_j}{B_j}$, $S = 4\pi a_0^2 N_j \left(\frac{R}{B_j} \right)^2$,

U_j və N_j j-cı MO-a uyğun elektronun kinetik enerjisi və sayı, a_0 -Bor radiusu, $R=13.61$ eV Ridberq enerjisidir. B_j , N_j və U_j -nın müxtəlif MO-a uyğun qiymətləri 1-ci cədvəldə verilmişdir.

Əgər (2) ifadəsini təpilən elektronların enerjilərinin bütün mümkün qiymətlərinə görə, yəni $W=0$ -dan W^{\max} -a qədər inteqrallasaq, j-cı MO-a uyğun qeyri-elastiki toqquşmada birqat ionlaşmanın effektiv en kəsiyinin ilkin (şəkil 1) elektronun kinetik enerjisindən asılılıq ifadəsini alarıq:

$$\sigma_j(T) = \int_0^{W^{\max}} \frac{d\sigma_j(W,T)}{dW} dW \quad (3)$$



Şəkil 1. Kiçik enerjili elektronların təsiri ilə su molekullarının j-cı MO-a (σ_1 - $1a_1$, σ_2 - $2a_1$, σ_3 - $1b_2$, σ_4 - $3a_1$, σ_5 - $1b_1$) uyğun birbaşa birqat ionlaşmanın effektiv en kəsiyinin onun kinetik enerjisindən asılılığı.

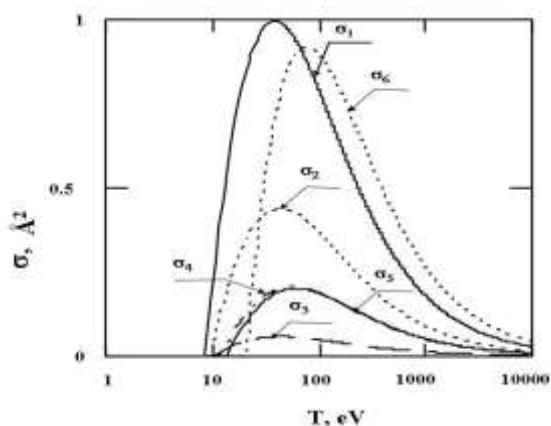
İonlaşmanın tam effektiv en kəsiyini almaq üçün (3) ifadəsini MO-ların sayına görə cəmləmək lazımdır [11]:

$$\sigma(T) = \sum_{j=1}^{N_{MO}} \sigma_j(T) \quad (4)$$

burada, $N_{MO}=5$ su molekulunun MO-larının sayıdır.

Elektronlarla su molekulları arasında qeyri-elastiki toqquşmada elektronun əsas haldan (0), n-ci həyəcanlanma halına keçidin effektiv en kəsiyi [13]

$$\sigma_{0n} = \frac{4\pi\alpha_0^2 R}{T + B + E_{0n}} \left[a \ln\left(\frac{T}{R}\right) + b + c \frac{R}{T} \right] \quad (5)$$



Şəkil 2. Kiçik enerjili elektronların təsiri ilə su daxilində yaranan elektron-həyəcanlanma (σ_1 - A^1B_1 , σ_2 - B^1A_1 , σ_3 -Ridberq halı (Ry), σ_4 -diffuzion zolaq (db), σ_5 -dissosiativ həyəcanlanma (de) və σ_6 -plazmon (ce)) hallarının effektiv en kəsiklərinin onun enerjisindən asılılığı.

İlkin elektronlar və ya onların yaratdıqları yeni nəsil δ -elektronlar hər bir qeyri-elastiki toqquşmada öz enerjilərinin müəyyən hissəsini itirirlər ki, bu proses elektronun enerjisinin yenidən qeyri-elastiki toqquşma yarada bilənə kimi izlənilir. Enerjisi T olan elektron su molekulu ilə qeyri-elastiki toqquşmada, hər bir akt zamanı itirdiyi orta enerjinin miqdarı $\Delta E(T)$, aşağıda göstərilən ifadəyə ekvivalent götürülmüşdür [38, 39, 41]:

$$\Delta E(T) = \sum_n P_{0n}(T)E_n + \sum_j P_j(T)\varepsilon_j(T) \quad (4),$$

burada, $P_{0n}(T) = \frac{\sigma_{0n}(T)}{\sigma_{tot}(T)}$ n-ci həyəcanlanma halına

keçidin, $P_j(T) = \frac{\sigma_j(T)}{\sigma_{tot}(T)}$ j-cı MO-ın

ionlaşmasına uyğun hadisələrin baş vermə

ehtimalları, $\sigma_{tot}(T) = \sum_n \sigma_{0n}(T) + \sum_j \sigma_j(T)$ -tam

effektiv en kəsik, $\varepsilon_j(T) = \int_{B_j}^T \varepsilon \frac{d\sigma_j(T)}{d\varepsilon} d\varepsilon$ -enerjisi

T-olan elektronun j-cı MO-da bir elektron-müsbət ion cütünün yaratması üçün hesablanan orta enerjidir.

Model əsasında su molekullarının beş MO-larının birqat ionlaşmasına və altı elektron-həyəcanlanma halları üçün hesablama aparılmışdır. Cədvəl 1-də $1a_1$, $2a_1$, $1b_2$, $3a_1$, $1b_1$ MO-na uyğun birqat ionlaşmanın, cədvəl 2-də isə A^1B_1 , B^1A_1 , Ridberq halı (Ry), diffuzion zolaq (db), dissosiativ həyəcanlanma (de) və plazmon (ce) elektron-həyəcanlanma hallarına uyğun radiasiya-kimyəvi çıxımlarının hesablamaadan alınan nəticələri verilmişdir.

Cədvəl 1. Kiçik enerjili elektronların təsirilə su molekulasının MO-ına ($1a_1$, $2a_1$, $1b_2$, $3a_1$, $1b_1$) uyğun birbaşa birqat ionlaşmanın radiasiya-kimyəvi çıxımı

Molekulyar orbitallar	N	B_j , eV	U_j , eV	T, keV			
				1	2.5	5	10
$1a_1$	2	539.7	793.4	1.685	1.687	1.689	1.691
$2a_1$	2	36.88	70.71	0.951	0.950	0.954	0.957
$1b_2$	2	19.83	48.36	0.697	0.701	0.704	0.704
$3a_1$	2	15.57	59.52	0.259	0.260	0.263	0.265
$1b_1$	2	12.61	61.91	0.0003	0.0005	0.0007	0.0009

Cədvəl 2. Kiçik enerjili elektronların təsirilə su daxilində yaranan elektron-həyacanlanm (A^1B_1 , B^1A_1 , Ridberq halı (Ry), diffuzion zolaq (db), dissosiativ həyacanlanma (de) və plazmon (ce)) hallarının radiasiya-kimyəvi çıxımları

Elektron-həyacanlanma halları	Həyacanlanma enerjisi, eV	Sabitlər			T, keV			
		a	b	c	1	2.5	5	10
A^1B_1	8.4	0.7532	0.4751	0.0675	0.870	0.877	0.872	0.875
B^1A_1	10.1	0.3900	0.1500	0.0015	0.412	0.407	0.413	0.409
Ry	12.26	0.0465	0.0282	-0.010	0.052	0.053	0.057	0.055
db	12.93	0.2380	0.0010	0.0265	0.267	0.269	0.264	0.260
de	14.1	0.2473	-0.010	0.0150	0.218	0.212	0.208	0.214
ce	21.4	1.2951	0.0120	0.7532	1.089	1.086	1.087	1.094

Fiziki mərhələ məhsulları sonrakı fiziki-kimyəvi mərhələdə: e_{sub}^- -elektronlar elastiki toqquşma və dipol relaksasiyası nəticəsində öz kinetik enerjisini tədricən itirərək (10^{-15} ÷ 10^{-12} saniyə müddətində) istilik elektronlarına çevrilirlər və nəticədə solvatlaşır ($e_{sub}^- \rightarrow e_{aq}^-$), H_2O^+ ionları ion-

molekulyar reaksiya nəticəsində H_3O^+ ionuna və OH radikalına, elektron-həyacanlanm məhsulları relaksasiya, avto-ionizasiya və dissosiasiya nəticəsində növbəti məhsullarını əmələ gətirirlər. Fiziki mərhələ məhsullarının $\sim 10^{-12}$ saniyə müddətində əmələ gətirə biləcəkləri növbəti məhsulların [40] faizlə qiyməti cədvəl 3-də verilmişdir.

Cədvəl 3. Fiziki mərhələ məhsullarının əmələ gətirə biləcəyi məhsulların faizlə miqdarı

Fiziki məhsullar	G/100 eV	Əmələ gəlmə kanalları	faiz, %
e_{sub}^-	3.592	e_{aq}^-	100
H_2O^+	3.592	$H_3O^+ + OH$	100
A^1B_1	0.870	H_2O $H + OH$	25 75
B^1A_1	0.412	H_2O $H_2 + H_2O_2$	45 55
Ry	0.487	H_2O	23
db		$H + OH$	20
de		$H_3O^+ + OH + e_{aq}^-$	57
ce	1.089	$H_3O^+ + OH$ $H^* + OH$	92.2 7.8

Hesablamada $\sim 10^{-12}$ san müddətinə qədər gedən radioliz prosesinin fiziki və fiziki-kimyəvi mərhələlərində əmələ gələn məhsulların radiasiya-kimyəvi çıxımları təyin edilmiş

və alınan nəticələr (cədvəl 4) müxtəlif müəlliflərin nəzəri [31, 42] və təcrübələrdən aldıkları nəticələrilə müqayisəli şəkildə verilmişdir.

Cədvəl 4. Kiçik enerjili elektronların təsirlə su daxilində gedən radioliz prosesinin fiziki-kimyəvi mərhələsində (10^{-15} - 10^{-12} san.) əmələ gələn məhsulların radiasiya-kimyəvi çıxımları

İlkin məhsullar	Turner[42]	Kaplan[31]	Təcrübi nəticələr	Bizim nəticələr
OH	8.4	5.85	5.9	5.624
e_{aq}^-	6.3	5.16	4.7	4.874
H	2.1	0.61	0.7	0.75
H_3O^+	6.3	5.16	4.8	4.874
H_2	0.3	0.39	0.45	0.227
H_2O_2	0.3	0.39	-	0.227
HO_2	-	-	-	-
O_2	-	-	-	-
OH^-	-	-	-	-
O_2^-	-	-	-	-
HO_2^-	-	-	-	-

Su daxilində gedən radioliz prosesinin fiziki və fiziki-kimyəvi mərhələlərində aktiv aralıq məhsullar üçün bizim model əsasında hesablanmış aralıq məhsulların radiasiya-kimyəvi çıxımları, müxtəlif müəlliflərin müxtəlif yanaşmalarda apardıqları nəzəri hesablamardan və təcrübələrdən alınan nəticələr arasında müəyyən xəta tərtibində uyğunluq var.

İonlaşdırıcı şüaların (elektron və γ -kvant) təsirlə su və su məhlulları daxilində gedən prosesləri model əsasında hesablamaq

olar. Model əsasında atmosferdə aerosol daxilində kosmik şüaların təsirlə gedən proseslər, atom və nüvə energetikasında enerji daşıyıcısı və ya müxtəlif məqsədlərlə istifadə olunan su və su məhlulları daxilində gedən dəyişiklər, onkoloji xəstələrin elektron və γ -kvantlar vasitəsilə eyni istiqamətdə və müxtəlif istiqamətlərdən şüalanması zamanı udulma dozasının nano-, mikro- və ümumi dozanın təyininə və eləcə də kənar effektlərin minimum seçilməsində istifadə etmək olar.

ƏDƏBİYYAT

1. Bolorizadeh M.A., Rudd M.E. // Phys.Rev.A. 1986. 33. 882-6.
2. Hollman K.W., Kerby G.W., Rudd M.E., Miller J.H., Manson S.T. // Phys.Rev.A. 1988. 38. 3299-4.
3. Lindsay B.G. and Mangan M.A. In Photon and Electron Interactions with Atoms, Molecules and Ions, Landolt-Börnstein Vol. I/17, Subvolume C, edited by Y. Itikawa (Springer, New York, 2003)
4. Straub H.C, Lindsay B.G., Smith K.A., Stebbings R.F. // J. Chem. Phys. 1998. P.108.
5. M.V. V. S. Rao, I. Iga, and S. K. Srivastava, J. Geophys. Res. 100, 26421 (1995).
6. Schutten J., F.J. de Heer, Moustafa H.R, Boerboom A.J.H., and Kistemaker J. // J. Chem. Phys. 1966. 44. P.3924.
7. Y.-K.Kim, M.E.Rudd // Phys.Rev.A 1994. 50. P.3954.
8. M.Coplan, J.H.Moore, J.P.Doering // Rev.Mod.Phys. 1994. 66. P.985.
9. Y.-K.Kim, W.Hwang, N.M.Weinberger, M.A.Ali, M.E.Rudd // J.Chem. Phys. 1997. 106 (3). P.1026.
10. Dingfelder, D.Hantke, M.Inokuti, H.G.Paretzke // Radiat.Phys.Chem. 1998. 53. P.1.
11. Y.-K.Kim, W.R.Johnson, M.E.Rudd // Phys.Rev. A 2000. 61. 032702-4
12. M.A.Haynes, B.Lohmann // J.Phys. B 2000. 33. P.4711.
13. Y.-K.Kim, J.P.Desclaux // Phys. Rev. A 2002. 66. 012708-12.
14. D.Emaietzoglou, K. Karava, G.Papamichael, M.Moscovich // Phys. Med. Biol. 2003. 48. P.2355.

- 15 W. Hwang, Y.-K. Kim, and M. E. Rudd, J. Chem. Phys. 104. 2956 (1996).
- 16 C. Champion, J. Hanssen and P. A. Hervieux. J. Chem. Phys. 117. 197 (2002).
- 17 W. F. Chan, G. Cooper, and C. E. Brion, Chem. Phys. 178. 387 (1993).
- 18 Gürtler, V. Saile, and E. E. Koch, Chem. Phys. Lett. 51. 386 (1977).
- 19 Chutjian, R. I. Hall, and S. Trajmar, J. Chem. Phys. 63. 892 (1975).
- 20 D. Gorfinkiel, L. A. Morgan, and J. Tennyson, J Phys. B 35. 543 (2002).
- 21 W.A.Goddard III and W.J.Hunt, Chem.Phys.Lett. 24. 464 (1974).
- 22 N.W.Winter, W.A.Goddard III, and F.Bobrowicz // J.Chem.Phys.62. 4325 (1975).
- 23 J.J.Olivero, R.W.Stagat, and A.E.S.Green, J.Geophys.Res. 77. 4797(1972).
- 24 M. Zaider, D. J. Brenner, and W.E. Wilson, Rad. Res. 95. 231 (1983).
- 25 C. Szmytkowski, Chem. Phys. Lett. 136.363. (1987).
- 26 A. Zecca, G. Karwasz, S. Oss, R. Grisenti, and R. S. Brusa, J. Phys. 1987.B 20
- 27 H. Nishimura and K. Yano, J. Phys. Soc. Jpn. 57, 1951 (1988).
- 28 Z. Saglam and N. Aktekin, J. Phys. B 23. 1529 (1990).
- 29 Z. Saglam and N. Aktekin, J. Phys. B 24. 3491 (1991).
- 30 M. Kimura, O. Sueoka, A. Hamada, and Y. Itikawa, Adv. Chem. Phys. 111. 537 (2000).
- 31 И.Г.Каплан, А.М.Митерев, В.Я.Сухоносов // ХВЭ. 1986. Т. 20. №6. С. 495.
- 32 M.Dingfelder, M.Inokuti, H.G.Paretzke // Radiat.Phys.Chem. 2000. 59. P.255.
- 33 D.Emaietzoglou // Radiat.Phys.Chem. 2003. 66. P.373.
- 34 C.Champion, J.Hanssen, P.A.Hervieux // Phys.Rev.A 2001. 63. 052720-9.
- 35 C.Champion, J.Hanssen, P.A.Hervieux // Phys.Rev.A. 2002.65. 022710-9.
- 36 D.S.Milne-Brownlie, S.J.Cavanagh, B.Lohmann, at al. // Phys.Rev.A. 2004. 69. 032701-4
- 37 Y.-K.Kim // Phys.Rev.A 2001. 64. P.032713-10.
- 38 А.А.Гарибов, Я.Д.Джафаров, Е.А.Ширшов 4-я Международная конференция «Ядерная и радиационная физика». Алма-Ата. 2003. С.335.
- 39 Я.Д.Джафаров, А.А.Гарибов. Международная конференция «Физико-химические процессы в неорганических материалах (ФХП-9)» Кемерово. 2004. Т.1. С.32.
- 40 S.Uehara, H.Nikjoo // J. Radiat. Res. 2006. 47. P. 69.
- 41 Y.D.Jafarov, M.R.Hasanova, F.N.Nur-mammadova. The fifth Eurazian conference Nuclear science and its application, Ankara. 2008. P. 95.
- 42 J.E.Turner, R.N.Hamm, H.A.Wrighr, R.H.Rachie, J.L.Magee, A.Chatterjee, W.E.Bolch // Radiat. Phys. Chem. 1988. 32. P.503.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РАДИОЛИЗА ВОДЫ ПОД ДЕЙСТВИЕМ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЭЛЕКТРОНОВ

Я. Д. Джафаров

С использованием методов Монте-Карло и однократных столкновений проведено математическое моделирование физических и физико-химических стадий процесса радиолиза воды под действием низкоэнергетических электронов. Определены радиационно-химические выходы продуктов физической стадии (образованные в результате прямой однократной ионизации различных молекулярных орбиталей ионы $H_2O_i^+$, электроны недовозбуждения e_{sub}^- и электронно-возбужденные состояния A^1B_1 , B^1A_1 , ридберговские состояния, диффузионная полоса, состояния диссоциативного

возбуждения и плазмоны) и продуктов их последующего превращения в физико-химической стадии процесса (OH , e_{aq}^- , H , H_3O^+ , H_2 , H_2O_2 , HO_2 , O_2 , OH^- , O_2^- , HO_2^-).

**MATHEMATICAL MODELLING OF RADIOLYSIS PROCESS OF WATER UNDER
THE EFFECT OF LOW-ENERGY ELECTRONS**

Y.D.Jafarov

The radiolysis process of water (liquid phase) under the effect of low-energy electrons ($E=1, 2.5, 5, 10\text{keV}$) has mathematically been modelled using Monte-Carlo, single collision and legged methods of MathCAD program. On the basis of this model, the radiation-chemical yields of the physical (single ionized molecular orbitals- H_2O_i^+ , electron lost its energy up to a primary electron-excitation energy- e_{sub}^- and electron-excited states- A^1B_1 , B^1A_1 , Rydberg state, diffusion band, dissociative excitation and plasmon) and physicochemical (OH , e_{aq}^- , H , H_3O^+ , H_2 , H_2O_2 , HO_2 , O_2 , OH^- , O_2^- , HO_2^-) phase products obtained from the inelastic collision of electrons with water molecules have been determined.