

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ И ПЕРЕНОСНЫЕ СВОЙСТВА ДИОКСИДА УРАНА UO_2 ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ И ТЕМПЕРАТУРАХ

А.М. Молодец

Институт проблем химической физики РАН

Ранее в [1] путём анализа экспериментальных ударных адиабат диоксида урана в диапазоне до $\cong 100$ ГПа был обнаружен полиморфный переход UO_2 при давлении ударного сжатия 37 ГПа и температуре 1025 К.

В [2] проведено исследование UO_2 в алмазных наковальнях при изотермическом сжатии до 80 ГПа, что находится в диапазоне абсолютных измерений давления и внутренней энергии твердого тела в физике ударного сжатия. Это позволяет сочетать изотермические и ударноволновые данные для того, чтобы реконструировать термодинамические свойства (фазовая диаграмма, уравнения состояния), а также исследовать поведение коэффициента теплопроводности диоксида урана при высоких давлениях и температурах.

В данной работе сопоставляются результаты [1] и [2] и делается вывод о том, что полиморфный переход при ударном сжатии является полиморфным переходом флюоритного UO_2 в орторомбический UO_2 . Обсуждается возможность зеркального откола в диоксиде урана. Дается оценка наклона линии равновесия этих модификаций в области 40 ГПа и 300-1000 К и обсуждается местоположение тройной точки. Обосновано предположение о том, что расплав орторомбической фазы высокого давления UO_2 плотнее своего кристалла.

Для флюоритной фазы UO_2 рассчитаны объёмные зависимости характеристической температуры и коэффициента Грюнайзена в области давлений до 40 ГПа и температур до 3000 К. Эти расчёты использованы для вычисления решёточной составляющей коэффициента теплопроводности UO_2 по формуле Дугдала-МакДональда [3]. Показано, что температурная зависимость коэффициента теплопроводности диоксида урана определяется квадратным корнем из температуры.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы Президиума РАН "Теплофизика и механика интенсивных энергетических воздействий".

[1] A.M. Molodets, V.E. Fortov, Phase Transitions in Uranium dioxide at High Pressures and Temperatures, JETP Letters. 80 (3) (2004) 172-175.

[2] M. Idiri M. et al. "Behavior of actinide dioxides under pressure: UO_2 and ThO_2 ", Phys.Rev.B, 2004, v.70, 014113

[3] J.S. Dugdale, D.K. MacDonald, Latic Thermal Conductivity, Phys. Rev., v.98, pp. 1751-1752, (1955)

THERMODYNAMIC AND TRANSPORT PROPERTIES OF URANIUM DIOXIDE UO_2 AT HIGH PRESSURES AND HIGH TEMPERATURES

A.M. Molodets

Institute of Problem of Chemical Physics RAS

Earlier in [1] by the analysis of experimental uranium dioxide shock adiabat in a range up to $\cong 100$ GPa a polymorphic transition in UO_2 has been found at the shock pressure 37 GPa and temperature 1025 K. In [2] the investigations of UO_2 in diamond anvils cells are carried out at isothermal compression up to 80 GPa. Thus, the range of isothermal compression for uranium dioxide appears combined with a range of absolute measurements of pressure and internal energy of solid in shock compression physics. It allows combining the isothermal and shockwave data to reconstruct thermodynamic properties (the phase diagram, the equations of state) and also to investigate the behavior of thermal conductivity at high pressures and temperatures.

In this work the results [1] and [2] are compared and we make a conclusion that polymorphic transition at shock compression is polymorphic transition of fluorite UO_2 to orthorhombic UO_2 . The possibility of mirror spall in uranium dioxide is discussed. The estimation of a slope of an equilibrium line of these modifications is given in the range up to 40 ГПа and 300-1000 K. The position data of a triple point is discussed. The equation of state for orthorhombic UO_2 in a range of pressure 40-80 GPa is constructed and the assumption that the melt of orthorhombic phase UO_2 are more dense than the crystal is justified.

The volume dependences of characteristic temperature and Grüneisen factor in the range of pressure up to 40 GPa and temperatures up to 3000 K are calculated for fluorite phase of UO_2 . These results are used for calculation lattice component of thermal conductivity UO_2 under Dugdal-MacDonald's formula [3]. It is shown that temperature dependence of thermal conductivity can be described by a square root from temperature. The research is executed at financial support of Presidium RAS program "Heat physics and mechanics of extreme power effects".

[1] A.M. Molodets, V.E. Fortov, Phase Transitions in Uranium dioxide at High Pressures and Temperatures, JETP Letters. 80 (3) (2004) 172-175.

[2] M. Idiri M. et al. "Behavior of actinide dioxides under pressure: UO_2 and ThO_2 ", Phys.Rev.B, 2004, v.70, 014113

[3] J.S. Dugdale, D.K. MacDonald, Lattice Thermal Conductivity, Phys. Rev., v.98, pp. 1751-1752, (1955)