

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ОРТОРОМБИЧЕСКОЙ ФАЗЫ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ ДИОКСИДА УРАНА UO_2

А.М. Молодец

Институт проблем химической физики РАН

Известно, что уравнение состояния Ми-Грюнайзена может быть записано с опорой не только на ударную адиабату (см. [1]) или «холодную кривую», но и на любую другую, например, комнатную изотерму

$$P - P_S = \frac{\gamma}{V} (E - E_S)$$

где $P_S = P_S(V)$, $E_S = E_S(V)$ - соответственно давление и энергия вдоль изотермы, $\gamma = \gamma(V)$ объёмная зависимость коэффициента Грюнайзена. Этот приём может быть использован для построения уравнения состояния на основе экспериментальных данных по изотермическому сжатию полиморфных модификаций твёрдых тел в алмазных наковальнях.

В настоящее время в научной литературе опубликована экспериментальная изотерма фазы высокого давления диоксида урана с орторомбической кристаллической структурой [2]. Таким образом, две функции P_S и E_S для уравнения состояния Ми-Грюнайзена этого материала имеются. В данной работе предложено новое функциональное соотношение для $P_S = P_S(V)$, позволяющее восстановить третью необходимую функцию $\gamma = \gamma(V)$ по изотерме $P_S(V)$. Этот результат вместе с уравнением состояния для флюоритной фазы низкого давления из [3] позволяют построить уравнение состояния орторомбической фазы высокого давления диоксида урана в диапазоне давлений 40-80 ГПа.

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

[1] McQueen R.G., Marsh S.P., Taylor J.W., Fritz J.N., Carter W. Equation of State of Solids from Shock Wave Measurements //In: High-Velocity Impact Phenomena/ Ed. Kinslow R. Academic Press New York and London 1970.

[2] M. Idiri, T. Le Behan, S. Heathman, J. Rebizant, Behavior of actinide dioxides under pressure: UO_2 and ThO_2 , Physical Review B. 70 (1) (2004) 014113 (8 pages).

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

**THE EQUATION OF STATE FOR HIGH PRESSURE ORTHORHOMBIC
PHASE OF URANIUM DIOXIDE UO₂**

A.M. Molodets

Institute of Problem of Chemical Physics RAS

It is known that Mie-Gruneisen equation of state can be written with a support not only on a shock adiabat or « a cold curve » (see [1]), but also on any another one, for example, on a room isotherm

$$P - P_S = \frac{\gamma}{V} (E - E_S)$$

where $P_S=P_S(V)$, $E_S=E_S(V)$ - accordingly pressure and energy along an isotherm, $\gamma = \gamma(V)$ volume dependence of Gruneisen factor. This way can be used for construction of the equation of state on the basis of experimental data on isothermal compression of polymorphic modifications of solids in diamond anvils.

Now in the scientific literature the experimental isotherm of high pressure phase of uranium dioxide with orthorhombic crystal structure is published [2]. Thus, two functions $P_S=P_S(V)$, $E_S=E_S(V)$ for Mie-Gruneisen equation of this material are available. In this work the new function for $P_S=P_S(V)$ is suggested. This function allows to define the third necessary function $\gamma = \gamma(V)$. This result together with the equation of state of low pressure fluorite phase UO₂ from [3] allows constructing the equation of state of a high pressure orthorhombic phases of uranium dioxide in a range of pressure 40-80 GPa.

The research is executed at financial support of Presidium RAS program "Heat physics and mechanics of extreme power effects".

[1] McQueen R.G., Marsh S.P., Taylor J.W., Fritz J.N., Carter W. Equation of State of Solids from Shock Wave Measurements //In: High-Velocity Impact Phenomena/ Ed. Kinslow R. Academic Press New York and London 1970.

[2] M. Idiri, T. Le Behan, S. Heathman, J. Rebizant, Behavior of actinide dioxides under pressure: UO₂ and ThO₂, Physical Review B. 70 (1) (2004) 014113 (8 pages).

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