

Молекулярно-динамическое исследование перехода твердого диоксида урана в суперионное состояние

Е.С. Якуб

(Одесский государственный экономический университет, Одесса, Украина)

Предложена модификация модели взаимодействия ионов в кристалле диоксида урана, пригодная для его компьютерного моделирования при высоких температурах. Проведено исследование поведения термодинамических свойств и коэффициентов диффузии в диапазоне температур 1500 – 3500 К в твердой и жидкой фазах. Вычислены плотность, энергия, теплоемкость, коэффициенты теплового расширения и изотермической сжимаемости, радиальные функции распределения, автокорреляционные функции скорости, коэффициенты диффузии ионных и концентрации френкелевских пар. Представлены результаты подробного изучения области перехода в суперионное состояние на больших ячейках.

Наличие перехода подтверждается резкими пиками теплоемкостей, теплового расширения и обнаруженным неаррениусовым поведением диффузии в интервале температур 2600 - 2800 К. Результаты сравниваются с существующими расчетами и имеющимися экспериментальными данными.