

МД- моделирование плавления и λ - перехода в стехиометрическом диоксиде урана

Е.С.Якуб

*Одесский государственный экономический университет,
Одесса, Украина*

Предложен новый вариант ионной модели для стехиометрического диоксида урана, воспроизводящий опытные значения плотности твердого стехиометрического UO_2 в широком интервале температур. Представлены и обсуждаются результаты молекулярно-динамического моделирования UO_2 при высоких температурах как в твердой, так и в жидкой фазах на основе нового быстрого метода вычисления кулоновских сил. Свойства жидкого UO_2 , рассчитанные на основе той же потенциальной модели, хорошо согласуются с имеющимися опытными данными и предсказаниями других теоретических моделей. Моделирование обнаруживает характерные признаки предплавильного λ -перехода при температурах, близких к наблюдаемым в опыте ($T_\lambda=2670$ К). Вблизи точки λ -перехода найдено сильное отклонение коэффициента самодиффузии кислорода от Аррениусова поведения.