

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ СУПЕРИОННОГО ПЕРЕХОДА В ДИОКСИДЕ УРАНА UO_2

Корнева М.А.

Московский физико-технический институт (государственный университет)
Объединенный институт высоких температур РАН

Целью исследования является изучение суперионного фазового перехода и процесса плавления в диоксиде урана UO_2 . Термин "суперионный переход" описывает фазовое превращение в бинарной упорядоченной системе, когда при нагреве одна из подрешеток теряет упорядоченность, а вторая остается в условном кристаллическом состоянии. Полное плавление наступает при более высоких температурах. Вопрос о том, в каких структурах и при каких условиях происходит суперионный переход остается открытым.

Одним из основных вопросов является принадлежность суперионного перехода к фазовым переходам первого или второго рода. Детальный анализ этой проблемы дан в работах [1, 2]. Большинство исследователей склоняются к тому, что суперионный переход нельзя называть переходом I рода, так как потеря порядка происходит непрерывно при нагреве за счет экспоненциального накопления дефектов (хотя температурный интервал этого перехода достаточно мал и его величина является предметом дискуссии). В то же время, от фазового перехода II рода суперионный переход отличается сильным различием в энтропиях выше и ниже температуры перехода. Поэтому некоторые исследователи называют данное фазовое превращение "диффузионным переходом", не используя терминологию фазовых переходов. Стоит также отметить, что существующие на данный момент феноменологические модели этого перехода исходят из эффекта взаимодействия дефектов друг с другом и подразумевают наличие коллективных локальных эффектов, как в переходах I рода. Остается открытым вопрос о поведении температуры перехода с увеличением давления и возможности описания этой зависимости ур. Клапейрона-Клаузиуса (как переход I рода) или уравнением Эренфеста (как переход II рода).

В данной работе при помощи атомистического моделирования исследуются фазовые переходы в диоксиде урана в широком диапазоне давлений и температур. Рассчитана зависимость числа дефектов в анионной подрешетке от температуры вплоть до температуры суперионного перехода. Исследована зависимость температуры исследуемых фазовых превращений от давления. В работе анализируется возможность описывать процесс суперионного перехода в рамках терминологии фазовых переходов первого и второго рода. Проведено сравнение полученных результатов с существующими феноменологическими теориями суперионных переходов

Литература

[1] *E. Yakub, C. Ronchi, I. Iosilevski*. Thermodynamic model of solid non-stoichiometric uranium dioxide – J.Phys.: Condens. Matter. – 2006. – V. 18, – P. 1227–1248.

[2] *E. Yakub, C. Ronchi, D. Staic*. Molecular dynamics simulation of premelting and melting phase transitions in stoichiometric uranium dioxide – J. Chem. Phys. – 2007. – V. 127, – P. 094508.