

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА В ДИОКСИДЕ УРАНА

Разработан пакет программ по расчету коэффициентов объемной и поверхностной диффузии ионов кислорода и урана методом молекулярной динамики.

При моделировании использовались приближения модели полностью ионного кристалла с целочисленными значениями зарядов ионов урана (+4) и кислорода (-2). Короткодействующее взаимодействие описывали в приближении 'жестких' ионов. В качестве граничных условий использовали "нулевые" граничные условия.

При изменении числа ионов в моделируемом кристалле от 1500 до 8748 температура плавления моделируемого кристаллита увеличивается с 1600 К до 3000 К и при дальнейшем росте числа ионов практически не меняется, что позволяет выбрать размер моделируемого кристаллита, при котором его макроскопические свойства соответствуют реальному кристаллу.

Для проверки работоспособности модели проведен расчет изменения объема моделируемого кристаллита при его плавлении. Значение температуры плавления и изменения объема кристалла при плавлении находится в удовлетворительном согласии с данными экспериментов других авторов.

Выполнены расчеты коэффициентов высокотемпературной диффузии двухзарядных анионов кислорода и четырехзарядных катионов урана. Получена температурная зависимость коэффициентов диффузии кислорода в объеме и на поверхности. Показано, что плавление анионной подрешетки на поверхности (суперионный переход), так же как и плавление самой решетки, начинается при более низкой температуре, чем объемное.

Получены температурные зависимости коэффициентов поверхностной диффузии ионов кислорода и урана.

Разработан и реализован интерфейс программы.