

МОДЕЛИРОВАНИЕ СОСТОЯНИЙ ГЕКСАФТОРИДА УРАНА НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ФАЗ

Шекунов Г.С.^{1*}, Гупта С.К.², Некрасов К.А.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Колледж Святого Ксавьера, г. Ахмедабад, Индия

*E-mail: grishechka1997@gmail.com

URANIUM HEXAFLUORIDE INTERPHASE BOUNDARY SIMULATION

Shekunov G.S.^{1*}, Gupta S.K.², Nekrasov K.A.¹

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾ St. Xavier's College, Ahmedabad, India

A model of uranium hexafluoride is suggested, which is based on empiric paired potentials of U-U, F-F, U-F used for both intra- and intermolecular interactions. Obtained parameters of the potentials provide quantitative simulation of the gas-crystal system, including the dependence of the saturated vapor pressure on temperature.

Существующие модели недостаточно точно описывают картину фазовых переходов в гексафториде урана. Так, модель, основанная на сферических парных потенциалах взаимодействия молекул, не позволяет предсказывать поведение твердой фазы. В данной работе моделирование фазовых переходов проводилось на основе парных сферически симметричных потенциалов взаимодействия ионов U-U, U-F, F-F. Объём моделируемой области определялся по формуле:

$$V > N \cdot \left(\frac{4}{(ab)^3} - \frac{P_s(T)}{kT} \right)^{-1}, \quad (1)$$

где kT – приведённая температура, a – средний линейный размер элементарной ячейки; b – коэффициент от 1,5 до 2; $P_s(T)$ – зависимость давления насыщенного пара от температуры. Созданная модель позволяет точно предсказывать поведение как твердой, так и газообразной фаз.

Потенциалы взаимодействия восстановлены с помощью динамического метода из зависимости постоянной решётки кристаллического UF_6 от температуры. Учёт теплового расширения кристалла позволил существенно расширить температурный диапазон модели. Давление насыщенного пара рассчитывали по формуле:

$$P(T, V) = \frac{N_{Gas}}{V_{Gas}} kT - \frac{1}{6V_{Gas}} \cdot \left[\sum_{i=1}^{N_{Gas}} \sum_{j \neq i, j=1}^N U'_{ij}(r_{ij}) \cdot r_{ij} \right], \quad (2)$$

где N_{Gas} – число молекул газа в системе; V_{Gas} – объём газа в системе; $U'_{ij}(r_{ij})$ – производная потенциала взаимодействия частиц i и j на расстоянии r_{ij} между ними.

Все расчёты проводились с использованием метода молекулярной динамики. Использовали распараллеливание вычислений на графических процессорах, что позволило значительно оптимизировать процесс и скорость вычислений.

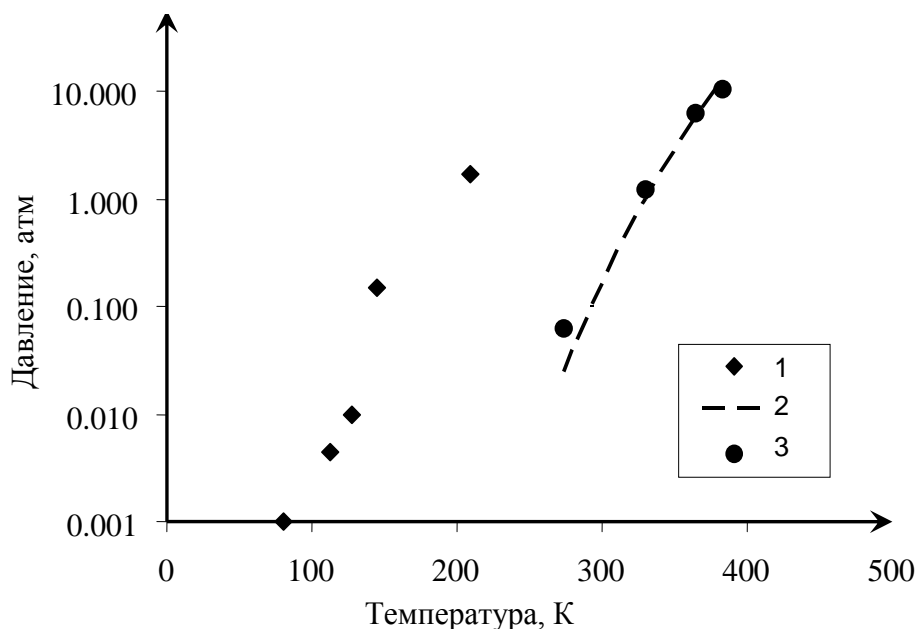


Рис. 1. Давление насыщенных паров UF_6 над кристаллом. 1 – расчёт с потенциалом Леннарда-Джонса; 2 – эксперимент; 3 – расчёт с потенциалами, предложенными в настоящей работе.

В результате работы воспроизведена зависимость давления насыщенного пара от температуры (см. рис. 1). Полученные потенциалы можно экстраполировать на систему с любым количеством молекул.

1. Малышев В.В. Экспериментальное исследование сжимаемости гексафторида урана в широкой области параметров состояния В.В. Малышев. М.: Наука, (1973).
2. J. C. Taylor and P. W. Wilson. The structures of fluorides X. Neutron powder diffraction profile studies of UF_6 at 193°K and 293°K Elsevier Science USA, (1975.)
3. Молекулярно-динамическое восстановление межчастичных потенциалов в диоксиде урана по тепловому расширению С.И. Поташников, А.С. Боярченко, К.А. Некрасов, А.Я. Купряжкин ISJAEE. – 2007. – № 8. – С. 43-52.