

НЕКОНГРУЭНТНОЕ ФАЗОВОЕ РАВНОВЕСИЕ В ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ПРОДУКТАХ НАГРЕВА ДИОКСИДА УРАНА

© Иосилевский Игорь Львович,¹⁺ Грязнов В.К.,² Семенов Александр Моисеевич,³ Якуб Е.С.,⁴ Фортов Владимир Евгеньевич,^{2*} С. Ronchi⁵ и G.J. Hyland⁶

¹ Московский физико-технический институт (ГУ). Институтский пер., 9. г. Долгопрудный. Московской обл. Россия 141700.

² Институт проблем химической физики РАН. Институтский просп., 14. Московская область. Ногинский р-н. г. Черноголовка 142432. Россия.

³ Московский энергетический институт. Ул. Красноказарменная, 14. Москва 111250. Россия.

⁴ Одесский государственный медицинский университет. Одесса. Украина.

⁵ European Commission. JRC. Institute for Transuranium Elements. Karlsruhe. Germany.

⁶ University of Warwick. Coventry. United Kingdom.

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: неконгруэнтное фазовое равновесие, диоксид урана, теоретическая модель, параметры смеси, алгоритм расчета.

Резюме

На основе единого теоретического представления («химической модели плазмы») построена модель неконгруэнтного фазового равновесия (испарения) в высокотемпературных продуктах нагрева диоксида урана, как в многокомпонентной, частично ионизованной, сильно взаимодействующей смеси атомов, молекул и атомных и молекулярных ионов. На основе теоретической модели создан эффективный численный алгоритм, реализованный в рамках универсального машинного кода «SANA-IV», позволяющий находить параметры смеси в условиях одновременного химического, ионизационного и фазового равновесия. Выбранный подход позволил впервые корректно воспроизвести общую структуру фазовой границы в продуктах нагрева диоксида урана, по многим признакам радикально отличающуюся от аналогичной структуры фазовой границы испарения «обычных» веществ. Полученные результаты помимо общезначимого интереса имеют важное прикладное значение в свете проблемы безопасности ядерной энергетики.