

07,10

Зависимость температуры суперионного перехода от характерного размера и морфологии наноксидов актинидов

© А.П. Чернышев

Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН,
Новосибирск, Россия
Новосибирский государственный технический университет,
Новосибирск, Россия
E-mail: alfred.chernyshev@solid.nsc.ru

Поступила в Редакцию 19 февраля 2024 г.

В окончательной редакции 19 февраля 2024 г.

Принята к публикации 15 марта 2024 г.

Рассмотрена возможность применения правила Бредага для определения температуры суперионного перехода в стехиометрических наноксидах актинидов. Проведено сопоставление нанотермодинамического подхода с расчетами методом молекулярной динамики. Показано, что как морфология, так и характерный размер нанобъектов диоксидов актинидов существенно влияют на температуру суперионного перехода: температура суперионного перехода при фиксированном значении характерного размера нанобъектов растет в последовательности сферические наночастицы–нанопроволоки–тонкие пленки и уменьшается с уменьшением характерного размера. Обсуждается возможность управления температурой суперионного перехода в нанобъектах диоксидов актинидов.

Ключевые слова: Наночастицы диоксидов актинидов, нанопроволоки диоксидов актинидов, тонкие пленки диоксидов актинидов, правило Бредага, суперионный переход, критерий Линдемманна.

DOI: 10.61011/FTT.2024.04.57795.30

1. Введение

При суперионном переходе наблюдается резкое увеличение ионной проводимости материалов. В литературе этот переход также называется переходом Бредага или λ -переходом. К соединениям, переходящим в суперионное состояние при нагревании, относятся химические соединения, имеющие структуру флюорита [1]. В настоящей статье рассматриваются нанобъекты, состоящие из диоксидов актинидов AnO_2 (здесь An — это Am, Np, Pa, Pu, Th и U). Структура флюорита (пространственная группа $Fm\bar{3}m$) является общей для этих соединений. Кристаллическую решетку со структурой флюорита можно рассматривать как комбинацию гранецентрированной кубической подрешетки, содержащей катионы An , и простой кубической подрешетки с анионами кислорода. В литературе есть экспериментальные и рассчитанные методом молекулярной динамики (МД) данные по суперионному переходу в макроскопических ThO_2 [2] и UO_2 [3–5], а также расчеты методом МД, подтверждающие наличие такого перехода в макроскопическом PuO_2 [6,7]. Для остальных диоксидов актинидов нет экспериментальных или расчетных данных, указывающих на наличие или отсутствие в этих химических соединениях суперионного перехода. В настоящей работе принято, что поскольку рассматриваемые диоксиды актинидов имеют структуру флюорита, то все они при нагревании переходят в суперионное состояние.

На атомном уровне суперионный переход в диоксидах актинидов можно описать следующим образом.

С повышением температуры в кислородной подрешетке увеличивается количество антифренкелевских дефектов, состоящих из кислородной вакансии и межузельного аниона кислорода. Соответственно, в кислородной подрешетке увеличивается степень беспорядка, в то время как катионы актинидов остаются в своих идеальных положениях, соответствующих гранецентрированной кубической кристаллической решетке [1]. При температурах выше температуры суперионного перехода (T_λ) анионы кислорода быстро диффундируют через кристаллическую решетку, что обуславливает высокую ионную проводимость диоксидов актинидов в этой области температур [3].

Стехиометрические диоксиды актинидов AnO_2 плавятся конгруэнтно, без появления линий солидуса и ликвидуса. Так, например, стехиометрический диоксид тория плавится конгруэнтно, а в гипостехиометрическом оксиде температуры ликвидуса и солидуса могут четко наблюдаться уже при $O/Th = 1.98$ [2]. Характер перехода диоксидов актинидов в суперионное состояние также зависит от их стехиометрии [2,3,6–8]. Для AnO_2 суперионный переход является переходом λ -типа и его температура определяется правилом Бредага:

$$T_\lambda(\infty) \approx 0.85 \cdot T_m(\infty), \quad (1)$$

здесь $T_m(\infty)$ — температура плавления макроскопического образца. Знак ∞ здесь и ниже показывает, что данная величина характеризует макроскопическое твердое тело. Гипостехиометрические диоксиды актинидов

Таблица 1. Дополнительные физические параметры, используемые для расчета температуры Бредига нанобъектов

AnO ₂	AmO ₂	NpO ₂	PaO ₂	PuO ₂	ThO ₂	UO ₂
$T_{\lambda}(\infty)$, К	—	—	—	2320 ¹ [13] 2350 ¹ [7] 2100 ¹ [6]	3091 ± 6 [2], 3040 ¹ [14]	2670 ± 30 [3,4] 2715 ± 100 [8]
$0.85T_m(\infty)$, К ²	2028	2611 ± 50	2720 ± 60	2564 ± 28	3103 ± 20	2652 ± 20

Примечание. ¹ Моделирование методом МД; ² согласно формуле (1).

AnO_{2-x} переходят в суперионное состояние посредством фазового перехода первого рода, температура которого зависит от x [2,3]. В гиперстехиометрических диоксидах актинидов AnO_{2+x} с увеличением температуры происходит постепенное увеличение концентрации дефектов, то есть наблюдается „диффузный“ переход в суперионное состояние без, собственно, резкого фазового перехода [2,3].

Нанотермодинамический метод, использованный в настоящей статье, позволяет практически одновременно исследовать целый класс соединений (например, AnO₂ в нанодиапазоне характерных размеров). В то же время расчеты методом МД требуют больших затрат компьютерного времени и поэтому, как правило, проводятся для наночастиц одной формы и одинакового состава. Так в работах [9–11] проведены расчеты зависимости температуры плавления и температуры суперионного перехода от характерного размера кубических наночастиц UO₂. Целью настоящей работы явилось исследование нанотермодинамическим методом зависимости температуры суперионного перехода от характерного размера и морфологии стехиометрических наноксидов актинидов разной морфологии в широком диапазоне характерных размеров.

2. Теория

Начало плавления вещества характеризуется критерием плавления Линдемманна [12]. В соответствии с этим критерием плавление происходит при выполнении условия

$$\sqrt{\langle \sigma^2 \rangle} \geq \xi \cdot h, \quad (2)$$

здесь $\sqrt{\langle \sigma^2 \rangle}$ обозначает среднеквадратическое смещение атомов от их положения равновесия (СКС), ξ — определенная доля межатомного расстояния h , при котором происходит плавление. Температура суперионного перехода диоксидов актинидов $T_{\lambda}(\infty)$ может быть рассчитана по правилу Бредига (1) или получена экспериментально (табл. 1).

Суперионный переход диоксидов актинидов сопровождается частичным или полным разупорядочением кислородной подрешетки их кристаллической структуры, так что можно говорить о „плавлении“ этой подрешетки [1]. Правило Бредига дает однозначное соотношение между

$T_m(\infty)$ и $T_{\lambda}(\infty)$, что указывает на то, что суперионный переход начинается также при выполнении критерия Линдемманна:

$$\sqrt{\langle \sigma^2 \rangle_{\text{ox}}} \geq \xi_{\text{ox}} \cdot h. \quad (3)$$

Здесь индекс ox указывает, что параметры относятся к кислородной подрешетке. Этот вывод подтверждается результатами расчетов методом молекулярной динамики температурной зависимости $\langle \sigma^2 \rangle_{\text{ox}}$ ионов кислородной подрешетки диоксидов нептуния [15], плутония [6] и урана [16]. Действительно для UO₂ расчеты показали, что $T_{\lambda}(\infty) \approx 2600$ К (это значение практически совпадает с экспериментальными значениями, представленными в табл. 2) и что в температурном интервале 2000–2500 К величина $\langle \sigma^2 \rangle_{\text{ox}}$ растет практически линейно с температурой. При 2600 К начинается резкое увеличение $\langle \sigma^2 \rangle_{\text{ox}}$, что обусловлено началом суперионного перехода и подтверждает применимость (3) для определения T_{λ} . Расчет $\langle \sigma^2 \rangle_{\text{ox}}$ и $\langle \sigma^2 \rangle$ для анионной и катионной решеток NpO₂, соответственно, был выполнен в температурном интервале 300–2000 К, что не позволило авторам работы [15] определить значение $T_{\lambda}(\infty)$, поскольку оно не попадает в исследованный ими температурный интервал (табл. 1). Из расчетов методом МД, проведенных для PuO₂ в температурном интервале 300–3600 К [6], следует, что резкое увеличение $\langle \sigma^2 \rangle_{\text{ox}}$ происходит при температуре около 2100 К. Это расчетное значение температуры суперионного перехода в PuO₂ меньше, чем полученное методом МД в работах [7,13] (табл. 1) и меньше, чем полученное по правилу Бредига (1). Отсутствие экспериментальных данных по температуре суперионного перехода в PuO₂ не позволяет оценить надежность МД расчетов, выполненных в работах [6,7,13], поэтому в настоящей работе принимается значение $T_{\lambda}(\infty)$, определенное по правилу Бредига (табл. 1). Таким образом, из расчетов методом МД [6,16] следует, что с увеличением температуры СКС анионов кислорода, находящихся в узлах кристаллической решетки, растет быстрее, чем СКС катионов An. Поэтому критерий Линдемманна (3) в кислородной кристаллической подрешетке выполняется при более низкой температуре, чем критерий Линдемманна (2) для плавления всего образца, то есть $T_{\lambda}(\infty) < T_m(\infty)$.

Зависимость $\langle \sigma^2 \rangle$ от характерного размера и морфологии нанобъектов описывается следующим феномено-

Таблица 2. Физические параметры

AnO ₂	T _m (∞), [20,21] К	ΔH(∞), [21] kJ · mol ⁻¹	ΔS _m (∞) ¹ , J · mol ⁻¹ · K ⁻¹	ΔS _{vib} (∞), J · g-atom ⁻¹ · K ⁻¹	a, [20] nm	h, (9) nm
AmO ₂	2386	—	—	7.7 ²	0.5375 [22]	0.2327
NpO ₂	3072 ± 50	70 ± 6	22.8	7.6 ± 0.7	0.54338	0.2353
PaO ₂	3200 ± 60	—	—	7.7 ²	0.5446	0.2358
PuO ₂	3017 ± 28	64 ± 6	21.2	7.1 ± 0.7	0.53951	0.2336
ThO ₂	3651 ± 17	88 ± 6	24.1	8.0 ± 0.6	0.55971	0.2424
UO ₂	3120 ± 20	75 ± 3	24.0	7.3 ± 0.3	0.5471 [23]	0.2369

Примечание. ¹Значение ΔS_m(∞) определялось по формуле ΔS_m(∞) = ΔH_m(∞)/T_m(∞). ²Оценка с использованием среднего значения ΔS_m(∞) (см. описание в тексте).

логическим уравнением [17]:

$$\langle \sigma^2(\chi + \delta\chi, T) \rangle - \langle \sigma^2(\chi, T) \rangle = (\alpha - 1) \langle \sigma^2(\chi, T) \rangle d\chi, \quad (4)$$

где χ = n_s/n_v, n_s и n_v — количество поверхностных атомов и количество атомов, расположенных внутри нанобъекта, соответственно; T — абсолютная температура. В этом уравнении α — постоянная материала, которую можно рассчитать по формуле [18]:

$$\alpha = \langle \sigma_s^2 \rangle / \langle \sigma_v^2 \rangle = 1 + 2\Delta S_{vib}(\infty) / (3R), \quad (5)$$

здесь величины ⟨σ_s²⟩ и ⟨σ_v²⟩ — относятся к поверхностным атомам и атомам, расположенным внутри нанобъекта, соответственно; ΔS_{vib}(∞) — отнесенная к одному грамм-атому колебательная составляющая энтропии плавления ΔS_m, R — универсальная газовая постоянная.

Энтропия плавления может быть записана в следующем виде [19]:

$$\Delta S_m = \Delta S_{vib} + \Delta S_{conf} + \Delta S_{el}, \quad (6)$$

где ΔS_{conf} и ΔS_{el} — конфигурационная и электронная энтропии соответственно. Вкладом ΔS_{el} в энтропию плавления AnO₂ можно пренебречь, а величину ΔS_{conf} можно оценить по формуле [19]:

$$\Delta S_{conf} = -R(x_A \ln x_A + x_V \ln x_V), \quad (7)$$

где x_A и x_V — мольные доли основного вещества и вакансий соответственно, x_A = 1/(1 + ΔV/V), ΔV — изменение объема вещества при плавлении, V — объем вещества перед плавлением и x_V = 1 - x_A. Формула (7) справедлива для гомогенного расплава. Величины ΔV и V рассчитывались по значениям плотности диоксида урана в твердом и жидком состоянии при температуре плавления: 9555 и 8860 kg/m³ [4] соответственно. Расчет показал, что

$$\Delta S_{conf}(\infty) = 2.167 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$$

или

$$0.722 \text{ J} \cdot \text{g-atom}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}.$$

Отсюда следует, что

$$\begin{aligned} \Delta S_{vib}(\infty) &= \Delta S_m(\infty) - \Delta S_{conf}(\infty) \\ &\approx 7.28 \text{ J} \cdot \text{g-atom}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}. \end{aligned}$$

Для других диоксидов нет доступных литературных данных по их плотности в жидком и твердом состоянии при температуре плавления, что не позволило рассчитать их конфигурационную энтропию. Тем не менее, поскольку рассчитанное для UO₂ значение ΔS_{conf}(∞) близко к погрешности в определении величины ΔS_m(∞) для других AnO₂ (см. табл. 2), то для расчетов было принято, что ΔS_{vib}(∞) ≈ (ΔS_m(∞))/n. Здесь n — это количество атомов в молекуле, поэтому единицей измерения ΔS_{vib}(∞) является J · g-atom⁻¹ · K⁻¹ [18]. Энтальпии плавления PaO₂ и AmO₂ отсутствуют в литературе, поэтому в качестве первого приближения для AmO₂ и PaO₂ было принято среднее (по данным, приведенным в табл. 2) значение ΔS_m(∞), равное 23.1 J · mol⁻¹ · K⁻¹.

Параметр χ сферических и кубических наночастиц, нанопроволок и тонких пленок имеет простейшую форму [24]:

$$\chi = \frac{n_s}{n_v} = (D/D_0 - 1)^{-1}, \quad (8)$$

здесь D — характерный размер нанобъектов (например, диаметр сферических наночастиц и нанопроволок, толщина тонких пленок и длина ребра кубических наночастиц); D₀ = 2(3 - d)h; d = 0, 1 и 2 для сферических (или кубических) наночастиц, нанопроволок и тонких пленок соответственно. Для структуры флюорита параметр h был определен в [24] как

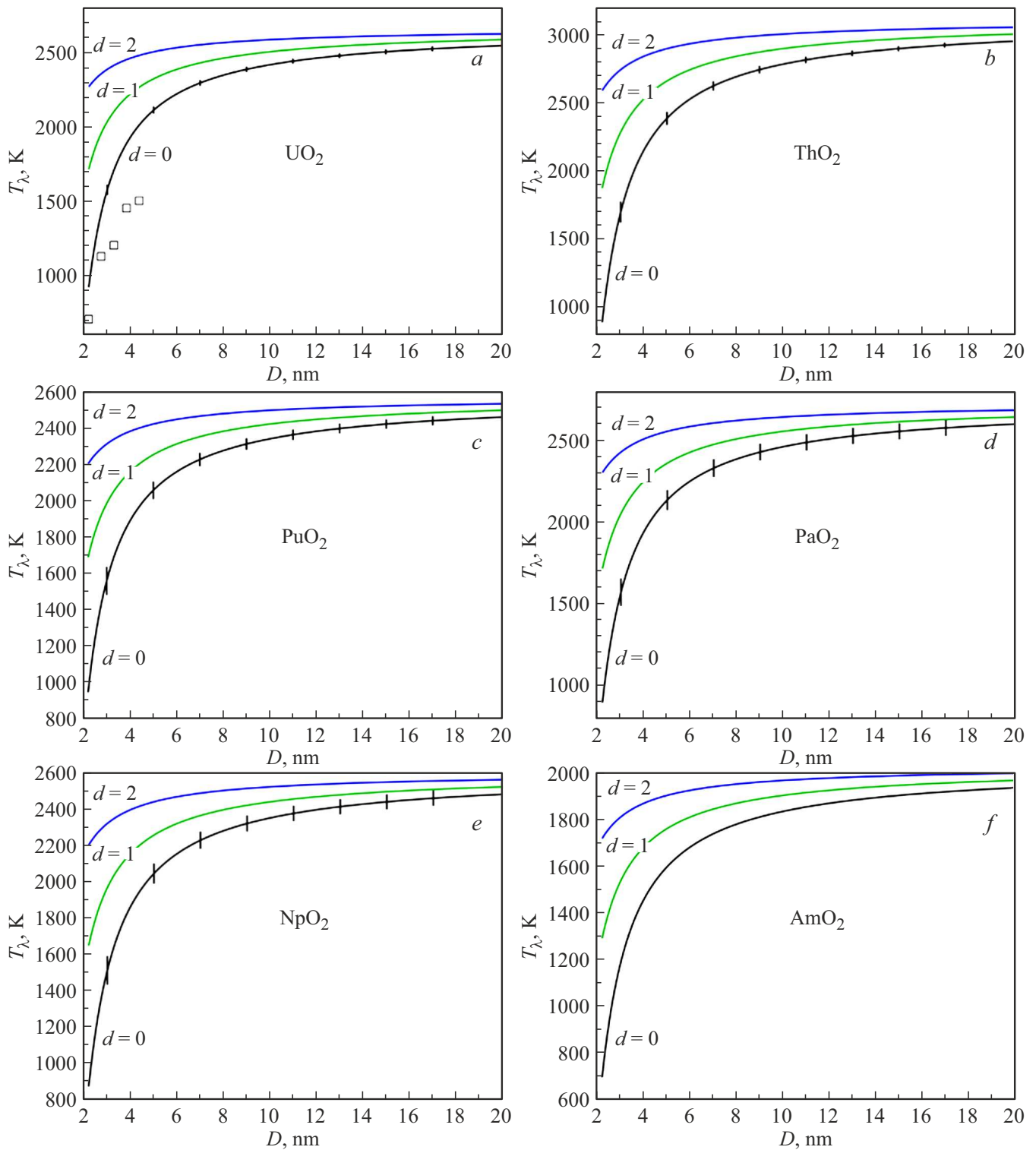
$$h = \frac{\sqrt{3}}{4} a, \quad (9)$$

где a — параметр решетки (табл. 2). Решение уравнения (2) дает зависимость ⟨σ²⟩ от χ:

$$\langle \sigma^2(\chi) \rangle = \langle \sigma^2(\infty) \rangle \exp[(\alpha - 1)\chi]. \quad (10)$$

Поскольку T_m обычно выше температуры Дебая, то можно использовать высокотемпературное приближение [17]:

$$\langle \sigma^2(\chi, T) \rangle = \varphi(\chi)T, \quad (11)$$



Влияние размера и морфологии нанобъектов на температуру λ -перехода (суперионного перехода): *a* — UO_2 , *b* — ThO_2 , *c* — PuO_2 , *d* — PaO_2 , *e* — NpO_2 , *f* — AmO_2 . Здесь $d = 0, 1$ и 2 для сферических или кубических наночастиц, нанопроволок и тонких пленок соответственно. Квадратные метки — это данные из [9], которые были получены с помощью MD-моделирования.

здесь $\varphi(\chi)$ является независимой от температуры функцией χ . Подстановка (11) в (10) дает следующее уравнение:

$$\varphi(\chi) = \varphi(\infty) \exp[(\alpha - 1)\chi]. \quad (12)$$

Из (11) и (2) следует справедливое для нанобъектов при их температуре плавления $T_m(\chi)$ соотношение $\varphi(\chi) = (\xi h)^2 / T_m(\chi)$. Для макроскопических твердых тел ($\chi = \infty$) при $T_m(\infty)$ соответственно имеем,

что $\varphi(\infty) = (\xi h)^2 / T_m(\infty)$. Подстановка последних двух уравнений в (10) приводит к следующему соотношению между $T_m(\chi)$ и $T_m(\infty)$ [17]:

$$T_m(\chi) = T_m(\infty) \exp(-(\alpha - 1)\chi). \quad (13)$$

Аналогично, из (10)–(12) и (3), заменив $T_m(\infty)$ и $T_m(\infty)$ на $T_\lambda(\infty)$ и $T_\lambda(\chi)$ соответственно, можно получить, что

$$T_\lambda(\chi) = T_\lambda(\infty) \exp(-(\alpha - 1)\chi). \quad (14)$$

С другой стороны, соотношение (14) может быть получено прямой подстановкой (13) в (1). Из (14) следует, что температура суперионного перехода в нанобъектах, как и их температура плавления, зависит от χ . Этот вывод подтверждается МД моделированием, выполненным в [9] для кубических наночастиц. Из (1), (13) и (14) также следует, что в рамках теории плавления Линдемманна правило Бредага справедливо не только для макроскопических тел, но и для нанобъектов.

3. Результаты расчетов и обсуждение

Расчеты T_λ с использованием десяти наборов парных потенциалов (НПП) были выполнены методом МД в [10,11]. В зависимости от выбранного НПП температура суперионного перехода кубических наночастиц UO_2 имела значения больше или меньше температуры плавления. Следует отметить, что первый результат не имеет физического смысла для наночастиц UO_2 . При использовании НПП MOX-07 было получено, что для UO_2 $T_\lambda(\infty) = 2590$ К [10], что практически совпадает с экспериментальным значением этой величины (табл. 2). Однако проведенный с помощью этого НПП расчет показал очень слабую зависимость T_λ от характерного размера наночастиц UO_2 [10,11]. С другой стороны, МД-моделирование суперионного перехода в кубических наночастицах UO_2 , выполненное в [9], показало сильную зависимость T_λ от размера наночастиц (в диапазоне размеров 2.2–5.5 nm, рисунок, *a*). Расчеты температуры суперионного перехода, выполненные в настоящей работе с использованием нанотермодинамического метода, и результаты расчетов, выполненные методом МД в [9], хорошо согласуются между собой (рисунок, *a*). Используя данные, взятые из [9], для вычисления отношения $T_\lambda(D)/T_m(D)$, мы получили, что это отношение соответствует правилу Бредага с заниженным коэффициентом перед T_m :

$$T_\lambda(D) = (0.64 \pm 0.05)T_m(D). \quad (15)$$

Как следует из проведенных нанотермодинамическим методом расчетов (рисунок), температура суперионного перехода при фиксированном значении характерного размера нанобъектов растет в последовательности сферические наночастицы–нанопроволоки–тонкие пленки (рисунок). Различие в T_λ для рассматриваемых нанобъектов уменьшается по мере увеличения их характерного

размера. Расчеты проводились по формулам (1), (5) и (14), в которых использовались табличные данные о макроскопических параметрах $S_m(\infty)$, $T_m(\infty)$ и $T_\lambda(\infty)$. Таким образом, точность расчетов (вертикальные отрезки на рисунке) определяется точностью используемых для расчетов табличных величин (табл. 1 и 2).

Проведенное в настоящей работе исследование показало, что изменять T_λ можно путем изменения морфологии и/или характерного размера нанобъектов AmO_2 . Уже при характерном размере 20 nm разница в значениях T_λ для сферических наночастиц и тонких пленок составляет около 100 К (рисунок). С уменьшением характерного размера нанобъектов эта разница быстро растет и при характерном размере 3–4 nm превосходит 500 К. В соответствии с правилом Бредага диоксиды актинидов, имеющие наименьшее значение T_m имеют и наименьшее значение T_λ . Поэтому из исследованных диоксидов актинидов наименьшие значения $T_\lambda(D)$ имеет AmO_2 (рисунок, *f*), а наибольшие значения имеют ThO_2 и PaO_2 (рисунок, *b* и *d* соответственно). Следует отметить, что если нанобъекты находятся в матрице из другого вещества и имеют с ней когерентную или полукогерентную границу, то это оказывает влияние на их температуру плавления [24] и, соответственно, может оказывать влияние на T_λ . В настоящей статье эффект влияния матрицы на T_λ не рассматривался.

4. Заключение

На настоящий момент проведено очень мало исследований суперионного перехода в диоксидах актинидов на наноуровне [9–11,25–27]. Имеющиеся в литературе результаты МД-моделирования посвящены изучению T_λ в кубических наночастицах UO_2 с характерным размером от 2.2 до 8.8 nm [9–11] и носят противоречивый характер. Они сильно зависят от НПП, используемых для моделирования, и не учитывают влияние морфологии на T_λ нанобъектов.

Среди доступных в литературе [9–11] результатов расчетов методом МД, выполненных для кубических наночастиц UO_2 , только результаты [9] позволяют получить аналог правила Бредага, справедливый в нанодиапазоне характерных размеров. Теоретический анализ с использованием нанотермодинамического метода, проведенный в настоящей работе для UO_2 , ThO_2 , PuO_2 , PaO_2 , NpO_2 и AmO_2 , а также МД-моделирование, проведенное в [9] для кубических наночастиц UO_2 , показали, что правило Бредага выполняется для нанобъектов, состоящих из диоксидов актинидов. Таким образом, нанодиоксиды актинидов могут быть использованы в суперионном состоянии для разработки новых технологий. Температура перехода нанодиоксидов актинидов в суперионное состояние существенно уменьшается при характерных размерах меньше 10–15 nm (рисунок). Расчеты, проведенные нанотермодинамическим методом, также показали, что температурой суперионного перехода можно управлять,

меня характерный размер и морфологию нанобъектов AnO_2 .

Конфликт интересов

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

- [1] P.C.M. Fossati, A. Chartier, A. Boule. *Front. Chem.* **9**, 723507 (1921).
- [2] C. Ronchi, J.P. Hiernaut. *J. Alloys Compd.* **240**, 179 (1996).
- [3] J.P. Hiernaut, G.J. Hyland, C. Ronchi. *Int. J. Thermophys.* **14**, 259 (1993).
- [4] International Atomic Energy Agency, Thermophysical properties database of materials for light water reactors and heavy water reactors. Final report of a coordinated research project 1999–2005. Non-serial Publications, IAEA-TECDOC-1496, IAEA, Vienna (2006). 397 p.
- [5] М.А. Корнева, С.В. Стариков. *ФТТ* **58**, 1, 170 (2016).
- [6] S.D. Gänay, B. Akgenç. *Taşseven. High Temp. Mater. Proc.* **35**, 10, 999 (2016).
- [7] D. Bathellier, M. Lainet, M. Freyss, P. Olsson, E. Bourasseau. *J. Nucl. Mater.* **549**, 152877 (2021).
- [8] T.R. Pavlov, M.R. Wenman, L. Vlahovic, D. Robba, R.J.M. Konings, P. Van Uffelen, R.W. Grimes. *Acta Materialia* **139**, 138 (2017).
- [9] Р.Ю. Махмуд-Ахунов, М.Ю. Тихончев, В.В. Светухин. *ЖТФ* **83**, 8, 8 (2013).
- [10] S.I. Potashnikov, A.S. Boyarchenkov, K.A. Nekrasov, A.Ya. Kupryazhkin. *J. Nucl. Mater.* **419**, 217 (2011).
- [11] А.С. Боярченко, С.И. Поташников, К.А. Некрасов, А.Я. Купряжкин. *Расплавы* **2**, 32 (2012).
- [12] С.С. Бацанов. *Журн. физ. химии* **86**, 11, 1890 (2012).
- [13] M.W.D. Cooper, S.T. Murphy, M.J.D. Rushton, R.W. Grimes. *J. Nucl. Mater.* **461**, 206 (2015).
- [14] K. Kobayashi, M. Okumura, H. Nakamura, M. Itakura, M. Machida, M.W.D. Cooper. *Sci. Rep.* **12**, 9808 (2022).
- [15] M. Chollet, J. Leéchelle, R.C. Belin, J.-C. Richaud. *J. Appl. Cryst.* **47**, 1008 (2014).
- [16] H. Zhang, X. Wang, J.F. Douglas. *J. Chem. Phys.* **151**, 071101 (2019).
- [17] F.G. Shi. *J. Mater. Res.* **9**, 1307 (1994).
- [18] Q. Jiang, H.X. Shi, M. Zhao. *J. Chem. Phys.* **111**, 5, 2176 (1999).
- [19] А.П. Регель, В.М. Глазов. *ФТП* **29**, 5, 782 (1995).
- [20] C. Guéneau, A. Chartier, P. Fossati, L. Van Brutzel, P. Martin. 7.03-Thermodynamic and thermophysical properties of the actinide oxides. In *Comprehensive Nuclear Materials*. 2nd ed. Elsevier (2020). V. 7. P. 111–154.
- [21] R.J.M. Konings, O. Beneš, A. Kovács, D. Manara, D. Sedmidubský, L. Gorokhov, V.S. Iorish, V. Yungman, E. Shenyavskaya, E. Osina. *J. Phys. Chem. Ref. Data* **43**, 013101 (2014).
- [22] E. Epifano, C. Guéneau, R.C. Belin, R. Vauchy, F. Lebreton, J.-C. Richaud, A. Joly, C. Valot, P.M. Martin. *Inorg. Chem.* **56**, 7416 (2017).
- [23] G. Leinders, T. Cardinaels, K. Binnemans, M. Verwerft. *J. Nucl. Mater.* **459**, 135 (2015).
- [24] Q. Jiang, Z. Wen, *Thermodynamics of Materials*. Higher Education Press, Beijing and Springer-Verlag, Berlin Heidelberg (2011). 300 p.
- [25] F. Cappia, D. Hudry, E. Courtois, A. Janßen, L. Luzzi, R.J.M. Konings, D. Manara. *Mater. Res. Express* **1**, 025034 (2014).
- [26] F. Cappia, R. Jovani-Abril, J. Spino, L. Luzzi, A. Janßen, D. Manara. *Prog. Nuc. Energ.* **72**, 11 (2014).
- [27] M. Jin, M. Khafizov, C. Jiang, S. Zhou, C.A. Marianetti, M.S. Bryan, M.E. Manley, D.H. Hurley. *J. Phys.: Condens. Matter.* **33**, 275402 (2021).

Редактор Т.Н. Василевская