

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

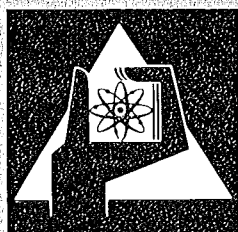
Juni 1975

KFK 2091

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik
Projekt Schneller Brüter

**Berechnung der Dampfdrücke von oxidischen Brennstoffen
bis 5000 K bei Gleichgewichts-
und Nichtgleichgewichtsverdampfung**

W. Breitung



**GESELLSCHAFT
FÜR
KERNFORSCHUNG M.B.H.
KARLSRUHE**

Als Manuskript vervielfältigt

Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

GESELLSCHAFT FÜR KERNFORSCHUNG M. B. H.
KARLSRUHE

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

KFK 2091

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik

Projekt Schneller Brüter

Berechnung der Dampfdrucke von oxidischen Brennstoffen bis 5000 K
bei Gleichgewichts- und Nichtgleichgewichtsverdampfung

W. Breitung

Gesellschaft für Kernforschung mbH., Karlsruhe

Kurzfassung

Im ersten Teil der vorliegenden Arbeit wird am Beispiel von UO_2 die Verdampfungskinetik von Mehrstoffsystemen untersucht. Die i. a. inkongruent ablaufende Verdampfung führt dazu, daß man zwei konträre Formen von stationärer Verdampfung unterscheiden muß: die Gleichgewichtsverdampfung und die "erzwungen-kongruente" Verdampfung. Im ersten Fall bleibt trotz der inkongruenten Verdampfung an der Oberfläche eine homogene Zusammensetzung des Materials erhalten. Dies wird durch hinreichend große Diffusionsströme innerhalb der verdampfenden Substanz gewährleistet, die dadurch inkongruent verdampft. Bei der erzwungen kongruenten Verdampfung hingegen, die bei intensiver Verdampfung auftritt, entstehen wegen der hohen Abdampfraten Konzentrationsgradienten im Material. Die verdampfende Oberfläche ändert ihre Zusammensetzung derart, daß eine kongruente Verdampfung eintritt. Die beiden genannten Verdampfungsformen führen zu unterschiedlichen Dampfdrücken. Bei Reaktorstörfällen mit Kühlmittelverlust muß erzwungen kongruente Verdampfung erwartet werden.

Der zweite Teil der Arbeit enthält die Dampfdruckberechnung von UO_{2+x} und $(\text{U,Pu})_{2+x}$ für beide Verdampfungsformen bis zu Temperaturen von 5000 K. Hierzu wurde die Methode von Rand und Markin (1967) benutzt, unter Verwendung der neuesten thermodynamischen Daten. In den Temperatur- und Stöchiometriebereichen, für die experimentelle Ergebnisse vorliegen, ist die Übereinstimmung zwischen gemessenen und berechneten Totaldrücken gut. Dies unterstützt die Rechenergebnisse bei höheren Temperaturen.

Calculation of Vapor Pressures of Oxide Fuels up to 5000 K for

Equilibrium and Nonequilibrium Evaporation

Abstract

In the first part of this work the evaporation kinetics of multi-component systems is studied with UO_2 as the example. The evaporation, which is generally incongruent, implies that two opposing types of steady-state evaporation must be distinguished: equilibrium evaporation and "forced congruent" evaporation. In the first case, a homogeneous composition of the material is maintained despite incongruent evaporation from the surface. This is ensured by sufficiently large diffusion flows towards the evaporating surface within the substance. By contrast, forced congruent evaporation occurring in the case of intensive evaporation gives rise to concentration gradients in the material, which are due to the high evaporation rates. The evaporating surface changes its composition such that congruent evaporation of the material takes place. The two types of evaporation indicated entail different vapor pressures. In some prompt critical reactor incidents forced congruent evaporation must be anticipated.

The second part of this work contains the calculation of the vapor pressures of UO_{2+x} and $(U,Pu)O_{2+x}$ for both types of evaporation up to temperature of 5000 K. The calculating procedures are based on the method of Rand and Markin (1967) incorporating the recent thermodynamic data. The agreement between the measured and calculated total pressures is good for the ranges of temperature and stoichiometry for which experimental results are available. This supports the results calculated for higher temperature ranges.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung
2. Untersuchung zur Verdampfungskinetik von Mehrstoffsystemen
 - 2.1 Stationäre Verdampfungsformen
 - 2.2 Transiente Verdampfungsformen
3. Berechnung von Gleichgewichts-Dampfdrucken
 - 3.1 Berechnungsmethode für Uranoxid
 - 3.2 Thermodynamische Daten für $\text{UO}_{2\pm x}$
 - 3.3 Ergebnisse und Vergleich mit Messungen an UO_2
 - 3.4 Berechnungsmethode für (U, Pu)-Mischoxid
 - 3.5 Thermodynamische Daten für $(\text{U, Pu})\text{O}_{2\pm x}$
 - 3.6 Ergebnisse und Vergleich mit Messungen an $(\text{U, Pu})\text{O}_{2-x}$
4. Berechnung von Dampfdrucken bei erzwungen kongruenter Verdampfung
 - 4.1 Berechnungsverfahren
 - 4.2 Thermodynamische Daten
 - 4.3 Ergebnisse und Vergleich mit Gleichgewichts-Dampfdrucken
 - 4.3.1 für Uranoxid
 - 4.3.2 für (U, Pu)-Mischoxid
5. Zusammenfassung

1. Einleitung

Die Dampfdrucke von oxidischen Brennstoffen werden für die Sicherheitsuntersuchungen an schnellen Reaktoren benötigt, da sie den Unfallablauf in mehrfacher Hinsicht beeinflussen.

Bei einem prompt kritischen Störfall, in einem schnellen natriumgekühlten Reaktor z.B., werden im wesentlichen zwei Unfallphasen von den Brennstoff-Dampfdrücken beeinflusst. Während der Einleitphase tritt flüssiger Brennstoff in das Kühlmittel aus, wenn Brennstäbe an lokalisierten Stellen versagen. Der Dampfdruck im Stabzentrum ist entscheidend für die Menge des ausgetriebenen Brennstoffs, somit für die Heftigkeit der Brennstoff-Natrium-Reaktion und durch den positiven Void-Koeffizienten für den weiteren Verlauf der Exkursion. Während der folgenden Disassembly- oder Coreabschaltphase kommt es zu einer radialen und axialen Bewegung des Brennstoffs. Die Zeit, bis das Core eine unterkritische Konfiguration erreicht hat, hängt ebenfalls vom Dampfdruckaufbau ab. Diese beiden Unfallphasen bestimmen wesentlich den Unfallablauf, da sie über die während der Exkursion insgesamt freigesetzte Energie entscheiden.

Bei der Sichtung der bisherigen Dampfdruckmessungen an Brennstoffmaterialien muß man streng unterscheiden zwischen

- a) Experimenten nach konventionellen Meßverfahren und
- b) Kurzzeit-Experimenten mit intensiver Oberflächenverdampfung mittels Laserbestrahlung.

Diese beiden Gruppen von Verfahren unterscheiden sich grundlegend in der Art der Verdampfung. Bei den konventionellen Methoden bleibt die Zusammensetzung der verdampfenden Oberfläche während des Abdampfvorgangs erhalten, so daß hierbei der thermodynamische Gleichgewichtsdruck gemessen wird. Bei den Lasermethoden hingegen verändern die hohen Verdampfungsraten die Zusammensetzung der verdampfenden Oberfläche, dadurch erhält man Dampfdrucke, die sich von den Gleichgewichtsdrücken unterscheiden. Derartige Verdampfungsformen sind auch bei Reaktorstörfällen mit Kühlmittelverlust zu erwarten.

Für Uranoxid gibt es eine Reihe von Meßergebnissen bis zu 3400 K, die aber keine gute Übereinstimmung aufweisen, während für (U, Pu)-Mischoxid nur zwei Messungen bis 2400 K existieren. Vor kurzem wurden auch Dampfdruckbestimmungen mit Hilfe von Lasern oberhalb von 4000 K begonnen. Die Ergebnisse, die erst kleine Temperaturintervalle umfassen, sind noch mit relativ großen Unsicherheiten behaftet, so daß die Dampfdrucke von oxidischen Brennstoffen derzeit nicht hinreichend genau bekannt sind. Dies gilt insbesondere für Temperaturen über 3000 K.

Die im folgenden gezeigten Rechnungen für den Dampfdruck von Oxidbrennstoffen sollen eine Vergleichsmöglichkeit mit den bisherigen Meßergebnissen bieten und Dampfdruckdaten durchgehend bis zu Temperaturen von 5000 K liefern. Insbesondere wird untersucht, ob und wie weit sich der bei schneller Verdampfung einstellende Totaldruck von thermodynamischem Gleichgewichtsdampfdruck unterscheidet. Bis zu Temperaturen um 2700 K stützen sich die Rechnungen auf verfügbare thermodynamische Daten. Oberhalb von 2700 K wurden diese durch Extrapolation oder, soweit möglich, aus theoretischen Modellen gewonnen. Die damit verbundenen Unsicherheiten bei hohen Temperaturen wirken sich jedoch nur schwach aus, weil die Rechenergebnisse mit wachsender Temperatur zunehmend unempfindlicher gegenüber einer Variation der benutzten thermodynamischen Daten werden. Es wurden noch keine Spaltprodukte berücksichtigt, so daß die Ergebnisse für Oxidbrennstoffe mit kleinen Abbränden gültig sind.

2. Untersuchung zur Verdampfungskinetik von Mehrstoffsystemen

Die folgende Analyse von kontinuierlich ablaufenden Verdampfungsprozessen ist auf alle inkongruent verdampfenden Mehrstoffsysteme übertragbar, also auf viele feste oder flüssige Ionenverbindungen und Metallegierungen. Da in dieser Arbeit Brennstoffoxide interessieren, dient das U-O-System als Beispiel. Bei den folgenden Überlegungen wird Isothermie vorausgesetzt. Ein Temperaturgradient innerhalb der verdampfenden Probe wirkt sich nur wenig auf die Dampfdrucke bei stationärer Verdampfung aus.

2.1 Stationäre Verdampfungsformen

Während eines Coreunfalls kann es bei einem aufgeheizten Brennstab zur Verdampfung von Brennstoff in anfangs vorhandenen Leervolumina kommen, weiterhin zur freien Abdampfung in die umgebende Atmosphäre, oder, im Fall des Blasensiedens, zur Verdampfung in ein abgeschlossenes aber wachsendes Volumen. All diesen Prozessen ist gemeinsam, daß Material an einer Oberfläche aus einem kondensierten in einen gasförmigen Zustand übergeht und daß die Zusammensetzungen der beiden Phasen unterschiedlich sind. Der sich über der Phasengrenze aufbauende Dampfdruck hängt davon ab, welche Zusammensetzung die Oberflächenschicht während des Verdampfungsprozesses annimmt.

Ihre Zusammensetzung wird bestimmt von den Netto-Verdampfungsströmen in die Gasphase und von dem Diffusionsstrom, der aus dem Inneren des Brennstoffoxids zur verdampfenden Oberfläche fließt. Diese Ströme sind in Fig.1 für die Verdampfung von UO_2 dargestellt. Die Pfeile deuten an, daß Sauerstoff

überproportional ver-

dampft. Der Rand bewegt

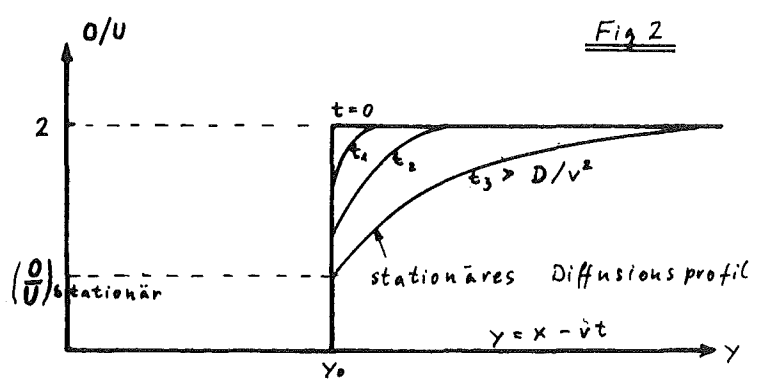
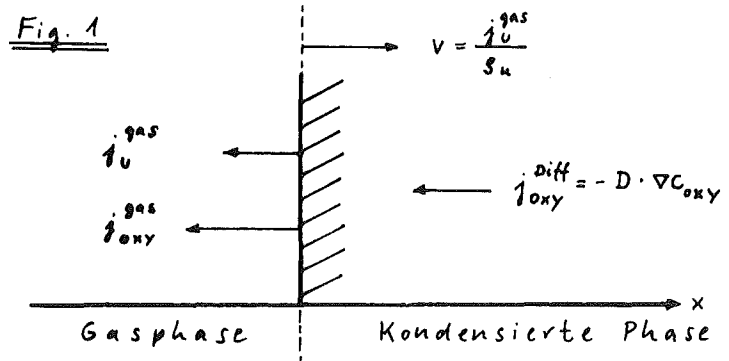
sich mit der Addampfgeschwindigkeit v , die sich aus dem Uranstrom über die Gasphase j_u^{gas} und der Urandichte in der Matrix ρ_u ergibt.

Dieses Randwertproblem wurde in das mitbewegte Koordinatensystem $y=x-vt$ transformiert

und mittels Laplace-Transformation gelöst. Fig.2

zeigt qualitativ die Sauerstoffkonzentration

in der Matrix für verschiedene Zeiten im mitbewegten Koordinatensystem. Nach einer Anlauf-



zeit t_3 stellt sich ein stationärer Zustand ein, der dadurch gekennzeichnet ist, daß sich das Sauerstoffprofil während der folgenden Verdampfung nicht mehr ändert. Für das stationäre Sauerstoffprofil ergibt sich die folgende Ortsabhängigkeit im mitbewegten Koordinatensystem:

$$c_{\text{Ox}}(y) = c_{\infty} \left(1 - k \cdot e^{-\frac{v}{D}y} \right) \quad (1)$$

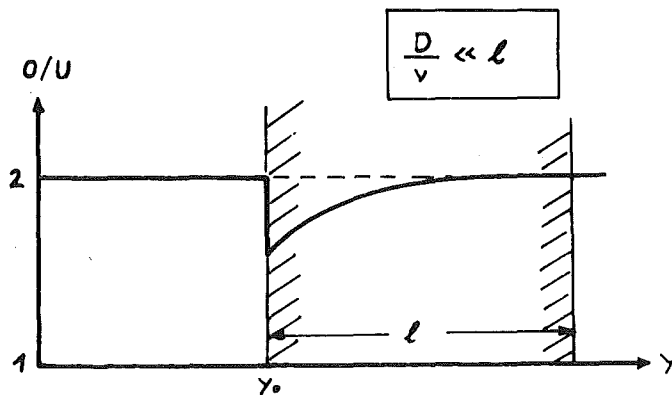
wobei der Faktor k von den Gasströmen j_u^{gas} und j_o^{gas} abhängt. v ist die Abdampfgeschwindigkeit und D ist der Diffusionskoeffizient der Sauerstoffionen im festen oder flüssigen Oxid. Nach Einstellung des stationären Sauerstoffprofils bewirkt die weitere Verdampfung lediglich eine Verschiebung der an Sauerstoff verarmten Randzone, so daß aus Bilanzgründen die Dampfphase nun dieselbe Zusammensetzung wie das verdampfende Oxid haben muß. Diese Form der stationären Verdampfung wird daher

im folgenden als "erzwungen kongruent" bezeichnet. Fig.3 veranschaulicht dies für die stationäre Verdampfung von UO_2 . In der kondensierten Phase nähert sich das O/U-Verhältnis exponentiell dem Wert 2, gemäß Gleichung (1).

Die Tiefe der an Sauerstoff verarmten Randzone hängt vom Verhältnis D/v ab. Die Einstellung eines stationären Sauerstoffprofils im Uranoxid erzwingt ein O/U-Verhältnis von 2 in der Gasphase. Diese Gasphase ist die Gleichgewichtsatmosphäre der Oberflächenschicht, sofern unmittelbar an der Phasengrenze thermodynamisches Gleichgewicht besteht. Bei den hohen Temperaturen, die

Fig.3

Erzwungen kongruente Verdampfung von UO_2



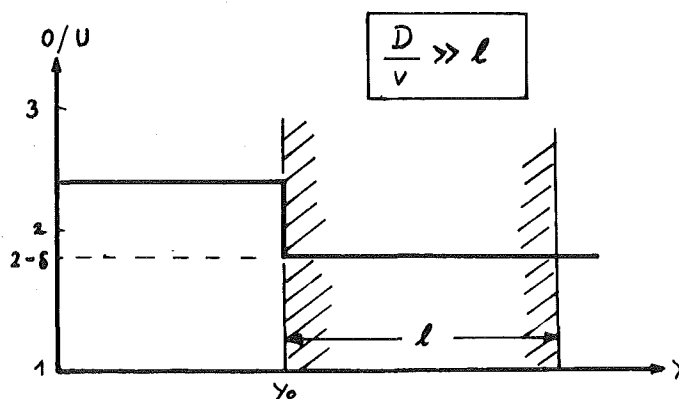
unter Störfallbedingungen auftreten, entstehen Brennstoffdampfdrucke in der Größenordnung von Atmosphären. Da die freien Weglängen in der Gasphase bei solch hohen Drucken sehr klein werden, z.B. 1 μm bei 1 atm, ist die Wahrscheinlichkeit für die Rückstreuung eines verdampfenden Moleküls hoch. Dadurch ist die Einstellung eines thermodynamischen Gleichgewichts zwischen Oberfläche und angrenzender Dampfschicht gewährleistet. Unter dieser Bedingung ist der bei "erzwungen kongruenter Verdampfung" auftretende Dampfdruck der Gleichgewichtsdruck des unterstöchiometrischen Oxids an der Oberfläche.

Die Einstellung eines stationären Sauerstoffprofils in der Oberflächenschicht kennzeichnet die erzwungen kongruente Verdampfung eines Oxids. Solch ein stationäres Profil stellt sich nicht ein, wenn das Verhältnis D/v groß ist, d.h. wenn die Verdampfungsgeschwindigkeit klein oder die Beweglichkeit der Sauerstoffionen im Oxid groß ist. In diesem Fall können die unterschiedlichen Verdampfungsraten der einzelnen Komponenten auf Grund einer inkongruenten Verdampfung durch die Festkörperströme so ausgeglichen werden, daß die verdampfende Oberfläche jederzeit die Zusammensetzung der Oxidmatrix behält (Fig.4). Falls das thermodynamische

Gleichgewicht an der Phasengrenze besteht, stellt die Dampfphase die Gleichgewichtsatmosphäre des verdampfenden Oxids dar. Da der herrschende Druck der Gleichgewichts-Dampfdruck des Oxids ist, wird dieser Verdampfungstyp als Gleich-

Fig. 4

Gleichgewichts verdampfung von UO_2



gewichtsverdampfung bezeichnet. Das Oxid behält zwar eine homogene Zusammensetzung, aber das Sauerstoffdefizit δ wächst mit zunehmender Verdampfungszeit.

Der Dampfdruck bei Gleichgewichtsverdampfung kann sehr verschieden von dem der erzwungen kongruenten Verdampfung sein. Wenn man das Beispiel Uranoxid nimmt, baut sich im ersten Fall der Druck von UO_2

auf, während im zweiten Fall der Druck von unterstöchiometrischem UO_{2-x} entsteht. Das Sauerstoffdefizit x hängt dabei von der Temperatur ab. Allgemein unterscheiden sich die Dampfdrucke der beiden Verdampfungsarten umso stärker, je größer der Unterschied im Sauerstoffpotential $\overline{\Delta G}_{O_2}$ und in der freien Bildungsenthalpie ΔG_f^O von stöchiometrischem und unterstöchiometrischem Oxid ist.

Nach Einstellung einer stationären Verdampfung dient die Größe des Quotienten D/v als Kriterium für die Verdampfungsform. Wenn D/v , welches die Dimension einer Länge hat, vergleichbar wird mit den Ausdehnungen des verdampfenden Oxids, kann die Verdampfung als Gleichgewichtsverdampfung angesehen werden. Wenn D/v hingegen um Größenordnungen kleiner ist als diese Ausdehnung, liegt eine erzwungen kongruente Verdampfung vor.

Gute Beispiele für diese unterschiedlichen Verdampfungsarten liefern die verschiedenen Meßverfahren zur Dampfdruckbestimmung von Uranoxid. Bei den Dampfdruckmessungen mit Knudsenzellen ist das verdampfende Oxid in einer Zelle eingeschlossen, aus der die Dampf-moleküle nur durch ein kleines Loch in das äußere Vakuum und eine Nachweisapparatur entweichen können. Dadurch ergeben sich sehr kleine Abdampfgeschwindigkeiten, bei 2000 K etwa 10^{-7} cm/s. Der Diffusionskoeffizient von Sauerstoff in UO_2 liegt bei 2000 K bei 10^{-4} cm²/s, so daß sich für D/v ein Wert von 10^3 cm ergibt, gegenüber einer Probenausdehnung von 1 mm. Die Verdampfung mittels Knudsenzelle stellt eine nahezu ideale Gleichgewichtsverdampfung dar.

Die neueren Verdampfungstechniken mittels Laseraufheizung liefern dagegen gute Beispiele für eine erzwungen kongruente Verdampfung, da das Verhältnis von D/v sehr klein wird. Die Abdampfgeschwindigkeit v beträgt bei 4000 K etwa 1 cm/s. Eine obere Abschätzung für den unbekanntem Diffusionskoeffizient der Sauerstoffionen D in der Oxidschmelze läßt sich mit Hilfe der kinetischen Gastheorie machen. In einem idealen Gas gilt für den Diffusionskoeffizienten $D = \frac{1}{3} l \bar{v}$, wobei l die freie Weglänge und \bar{v} die mittlere Geschwindigkeit der Gasmoleküle ist. Setzt man für l den Abstand der Ionen in der Oxidschmelze von 10 \AA und für \bar{v} ihre mittlere Geschwindigkeit bei 4000 K ein, so ergibt sich $D = 10^{-2}$ cm²/s. Dies ist ein oberer

Grenzwert, weil die Ionen sich in der Oxidschmelze nicht unbehindert von Stoß zu Stoß wie Gasmoleküle bewegen, sondern von einer Potentialmulde in eine benachbarte wechseln, wobei für jeden Platz eine gewisse Aufenthaltsdauer besteht. Für den Quotienten D/v kann ein Wert von 10^{-3} cm erwartet werden, was sehr viel kleiner ist als typische Abmessungen der verdampfenden Probe.

Die Gleichgewichtsverdampfung und die erzwungen kongruente Verdampfung stellen zwei Grenzfälle stationärer Verdampfungsformen dar. Dazwischen ist jeder Übergangstyp möglich. Entscheidend ist, welche Zusammensetzung sich an der Oxidoberfläche auf Grund des dynamischen Gleichgewichts zwischen Gas- und Festkörperströmen einstellt. Bei jedem Verdampfungsprozeß muß durch Anwendung des D/v -Kriteriums der Verdampfungstyp festgestellt werden, ehe gemessene oder berechnete Dampfdruckwerte übernommen werden dürfen.

2.2 Transiente Verdampfungsformen

Die bisherigen Untersuchungen befaßten sich lediglich mit Verdampfungsvorgängen, die nach Erreichen eines stationären Zustands auftreten. Dabei blieb die Zeit bis zur Einstellung eines stationären Diffusionsprofils unberücksichtigt. Es ist diejenige Zeit, nach der alle zeitabhängigen Terme der analytischen Lösungsfunktion als konstant angesehen werden können. Die charakteristische Größe hierfür ist der Quotient D/v^2 .

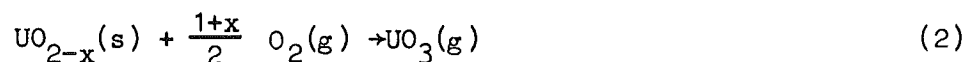
Für das oben erwähnte Beispiel der Laserverdampfung von UO_2 ergibt sich $D/v^2 = 10^{-3}$ s, d.h. etwa 1 ms nach Beginn der Laserbestrahlung ist der stationäre Verdampfungszustand erreicht. An der Oberfläche stellt sich bei einer Temperatur von 4000 K eine Stöchiometrie von $O/U = 1.88$ ein. Die Reduktion der Oberfläche, die von einem O/U -Verhältnis von 2 ausgeht, verläuft sehr schnell. So beträgt die Stöchiometrieabnahme nach 1 μ s 50% und nach 100 μ s bereits 90% der Gesamtabnahme, die im stationären Zustand nach 1 ms erreicht wird. Das bedeutet, daß die Zusammensetzung der verdampfenden Oxidober-

fläche bei Laserverdampfung und bei den Verdampfungen unter Reaktorstörfall-Bedingungen innerhalb von 100 μ s in die Nähe der stationären Zusammensetzung kommt. Da sich auch die Dampfdrucke über dem Oxid mit der Oberflächenzusammensetzung ändern, müssen die Verdampfungszeiten bei Laserverdampfungen größer als 100 μ s sein, damit die gemessenen Dampfdrucke für die Unfallanalyse relevant sind. Dies gilt insbesondere für Dampfdruckmessungen an (U,Pu)-Mischoxid, weil hier die Dampfdrucke bei gegebener Temperatur stark von der Zusammensetzung des Oxids, vor allem seiner Stöchiometrie, abhängen.

3. Berechnung von Gleichgewichtsdampfdrucken

3.1 Berechnungsmethode für Uranoxid

Wie im vorigen Abschnitt gezeigt, besteht bei einer idealen Gleichgewichtsverdampfung kein Konzentrationsgradient in der verdampfenden Substanz, obwohl die Verdampfung an der Oberfläche i.a. inkongruent abläuft. Wenn an der verdampfenden Oberfläche thermodynamisches Gleichgewicht zwischen gasförmiger und kondensierter Phase besteht, ist der entstehende Dampfdruck der Gleichgewichtsdruck des verdampfenden Körpers. Die Gleichgewichtsdampfdrucke lassen sich nach dem Massenwirkungsgesetz aus thermodynamischen Daten berechnen. Dies haben erstmals Rand und Markin [1] für (U,Pu)-Mischoxid durchgeführt. Die Methode wird am folgenden Beispiel erläutert: Bildung von gasförmigen UO_3 über festen unterstöchiometrischem Uranoxid bei der Temperatur T. Die Verdampfungsreaktion lautet:



Für die freie Reaktionsenthalpie ΔG_T ergibt sich aus dem Massenwirkungsgesetz:

$$\Delta G_T = \Delta G_T^0 + RT \ln \frac{P_{UO_3}}{x' UO_{2-x} (P_{O_2})^{\frac{1+x}{2}}}$$

Nach Einstellung des Gleichgewichts ist $\Delta G_T = 0$. Der Molenbruch x' von UO_{2-x} in der festen Phase ist eins und die freie Standard-Reaktionsenthalpie ΔG_T^0 ergibt sich aus den freien Standard-Bildungsenthalpien der beteiligten Verbindungen:

$$\Delta G_T^0 = \Delta G_{f,T}^0 [UO_3(g)] - \Delta G_{f,T}^0 [UO_{2-x}(s)]$$

So daß man erhält:

$$\Delta G_{f,T}^0 [UO_3(g)] - \Delta G_{f,T}^0 [UO_{2-x}(s)] - \left(\frac{1+x}{2}\right)RT \ln p_{O_2} + RT \ln p_{UO_3} = 0$$

p_{O_2} ist der Sauerstoff-Partialdruck des verdampfenden Uranoxids bei der Temperatur T. Wenn die thermodynamischen Funktionen der ersten drei Terme bekannt sind, kann aus dieser Gleichung der Gleichgewichtspartialdruck von $UO_3(g)$ berechnet werden. Mit $RT \ln p_{O_2} = \Delta \bar{G}_{O_2}$ ergibt sich:

$$\log p_{UO_3} = \frac{\Delta G_{f,T}^0 [UO_{2-x}(s)] - \Delta G_{f,T}^0 [UO_3(g)] + \frac{1+x}{2} \Delta \bar{G}_{O_2}}{RT \ln 10} \quad (3)$$

Die beiden ersten Terme im Zähler von Gleichung (3) beruhen auf der Energieänderung die im System auftritt, wenn ein Uranatom aus der kondensierten Verbindung UO_{2-x} in das gasförmige Oxid übergeht. Der Druck von UO_3 wird umso größer, je positiver die Differenz dieser Terme ist, d.h. je stabiler die gasförmige gegenüber der kondensierten Verbindung ist. Der dritte Term berücksichtigt, daß beim Verdampfen von UO_{2-x} zu UO_3 zusätzlicher Sauerstoff aus dem Festkörper in die Gasphase übergehen muß. Dafür wird weitere Energie benötigt, da der Sauerstoff im Festkörper gebunden vorliegt. Die kennzeichnende Größe $\Delta \bar{G}_{O_2}$, die freie partielle molare Enthalpie von Sauerstoff, ist umso negativer, je stärker die Bindung ist, und entsprechend nimmt der Partialdruck von UO_3 ab.

3.2 Thermodynamische Daten für $UO_{2\pm x}$

Für die Rechnung benötigt man die drei folgenden Größen:

1. $\Delta G_f^\circ(T)$ der Gase UO_3 , UO_2 , UO , U , O
 2. $\Delta G_f^\circ(T,x)$ von
 3. $\Delta \bar{G}_{O_2}(T,x)$ von
- } festen und flüssigem $UO_{2\pm x}$

In den nächsten Abschnitten werden die bisher veröffentlichten Daten miteinander verglichen und die Unsicherheiten abgeschätzt. Weiterhin werden die Extrapolationen der Daten für solche (T,x) Bereiche erläutert, für die keine Messungen vorliegen.

1. Freie Standardbildungsenthalpie der Gase

In Tabelle 1 sind für die verschiedenen Gase die bisher veröffentlichten Werte der Standardbildungsenthalpien ΔH_f° und Standardbildungsentropien ΔS_f° zusammengestellt. Die Berechnungsgrundlagen für diese Werte stammen aus Verdampfungsexperimenten, bei denen die Dampfatmosfera massenspektrometrisch untersucht wurde. Die Ergebnisse stimmen gut überein für U und UO_3 , weniger gut für UO_2 und UO . Der Grund liegt darin, daß es Verdampfungsbedingungen gibt, bei denen U bzw. UO_3 die bei weitem überwiegende Komponente im Dampf ist, gegenüber der alle anderen vernachlässigt werden können. Die Gase UO bzw. UO_2 treten dagegen immer mit merklichen Anteilen von U bzw. UO_3 auf. Das erschwert die Auswertung und führt zu größeren Unsicherheiten in ΔH_f° und ΔS_f° .

Bei linearer Extrapolation der Funktionen aus Tab.1 bis auf 5000 K unterscheiden sich die Ergebnisse für UO um 25 kcal, für UO_2 um 10 kcal, für UO_3 und U um weniger als 5 kcal. Die in Tabelle 1 und 2 aufgeführten freien Bildungsenthalpien sind die freien Reaktionsenthalpien für die Bildung der jeweiligen Verbindung aus Sauerstoff und flüssigem Metall. Bei Temperaturen oberhalb vom Siedepunkt des Metalls müßte entsprechend der Definition der freien Bildungsenthalpie diese Phasen-

änderung berücksichtigt werden. Sie verändert die ΔG_f° -Werte aller Oxide bei gegebener Temperatur um einen bestimmten Betrag. Da aber in Gleichung (3) zur Berechnung der Dampfdrucke immer die Differenz zwischen den ΔG_f° -Werten einer gasförmigen und einer kondensierten Verbindung des Metalls auftritt, fällt dieser Betrag wieder heraus. Für die Berechnung der Dampfdrucke ist daher die Phasenänderung des Metalls ohne Bedeutung, so daß direkt die linear extrapolierten ΔG_f° -Werte benutzt werden dürfen.

2. Freie Standardbildungsenthalpie von UO_{2+x} .

Die freie Standardbildungsenthalpie ΔG_f° von stöchiometrischem Uranoxid ($x=0$) ist mit guter Genauigkeit bekannt. Die Ausdrücke 1-3 aus Tabelle 2 ergeben eine Diskrepanz von nur 4 kcal bei 5000 K. Bei der Extrapolation muß oberhalb des Schmelzpunktes T_M die Schmelzwärme ΔH_{fus} berücksichtigt werden. Aus ΔH_{fus} und den thermodynamischen Daten für festes Uranoxid ergibt sich ΔG_f° für flüssiges Uranoxid:

$$\begin{aligned} \Delta G_f^\circ(l) &= \Delta H_f^\circ(l) - T \Delta S_f^\circ(l) \\ &= \Delta H_f^\circ(s) + \Delta H_{fus} - T \left\{ \Delta S_f^\circ(s) + \frac{\Delta H_{fus}}{T_M} \right\} \end{aligned}$$

ΔG_f° des flüssigen Oxids steigt oberhalb von T_M weniger steil mit der Temperatur an als ΔG_f° des festen Oxids, bei T_M selbst sind die freien Bildungsenthalpien gleich groß. In dieser Arbeit wurde $T_M = 3113$ K von Hein et al. [7] und $\Delta H_{fus} = 18.2$ kcal/Mol von Leibowitz et al. [8] benutzt.

Die Bildungsenthalpien von unterstöchiometrischem Uranoxid haben Ackermann et al. [4] durch Integration der partiellen Größe $\bar{\Delta G}_{O_2}$ berechnet. Sie fanden, daß ΔG_f° von UO_{2-x} in guter Näherung proportional zum $\frac{O}{U}$ -Verhältnis $(2-x)$ ist:

$$\Delta G_{f,T}^\circ [UO_{2-x}(s)] = \left(\frac{2-x}{2} \right) \Delta G_{f,T}^\circ [UO_{2.00}(s)] \quad (4)$$

Die Gleichung ermöglicht, die $\Delta G_{f,T}^{\circ}$ -Werte von unterstöchiometrischen Oxiden aus dem von UO_2 zu berechnen. In Abb.1 ist die lineare Beziehung (4) als Gerade eingezeichnet und zum Vergleich die von [4] bei 2500 K berechneten Werte. Auch die von Tentenbaum und Hunt [6] zwischen 2000 und 2700 K gemessenen $\Delta G_{f,T}^{\circ}$ -Werte werden von Gleichung (4) innerhalb der experimentellen Fehlergrenzen wiedergegeben. Es wurde daher angenommen, daß Gleichung (4) auch 5000 K gültig ist.

Für überstöchiometrisches Uranoxid existieren nur Messungen bei tiefen Temperaturen. Abb.2 zeigt eine Zusammenstellung für 1300 K. Auch hier ergibt sich in guter Näherung ein linearer Zusammenhang zwischen $\Delta G_{f,T}^{\circ}(x)$ und x . Die $\Delta G_{f,T}^{\circ}$ -Werte von UO_{2+x} wurden aus den Werten für UO_2 und $UO_{2.15}$ berechnet:

$$\Delta G_{f,T}^{\circ}[UO_{2+x}] = \left(1 - \frac{x}{0.15}\right) \Delta G_{f,T}^{\circ}[UO_2] + \frac{x}{0.15} \Delta G_{f,T}^{\circ}[UO_{2.15}] \quad (5)$$

Für die Rechnung wurde $\Delta G_{f,T}^{\circ}[UO_2(s)]$ von [4] und $\Delta G_{f,T}^{\circ}[UO_{2.15}(s)]$ von [1] benutzt, weiterhin die Annahme, daß die lineare Beziehung (5) bis 5000 K gültig ist.

3. Sauerstoffpotential in UO_{2+x}

In dieser Arbeit wurden die Sauerstoffpotentiale verwendet, die sich aus dem theoretischen Modell von Blackburn [9] ergeben. Dieses Modell liefert $\Delta \bar{G}_{O_2}$ -Werte bis zu 6000 K. Sie stimmen gut mit den gemessenen Sauerstoffpotentialen überein. In Abb.3a und 3b ist $\Delta \bar{G}_{O_2}$ über der Temperatur aufgetragen, Kurvenparameter ist das $\frac{O}{U}$ -Verhältnis. Die $\Delta \bar{G}_{O_2}$ -Werte für $\frac{O}{U} < 1.90$ wurden aus Fig.1 von [6] berechnet und oberhalb von 2705 K linear extrapoliert.

3.3 Ergebnisse und Vergleich mit Messungen an UO_2

Tabelle 3 zeigt die Ergebnisse für die Gleichgewichtsverdampfung von $\text{UO}_{1.90}$ bis $\text{UO}_{2.01}$. In der Rechnung fanden die neuesten von Ackermann et al. [4] (1974) empfohlenen ΔG_f^0 -Werte Anwendung. Dies sind Nr. 4, 9, 14, 18, 19 aus Tabelle 1 und Nr. 3 aus Tabelle 2. Abbildung 4 zeigt einen Vergleich des berechneten und gemessenen Totaldrucks von $\text{UO}_{2.00}$ bei Gleichgewichtsverdampfung.

Die verschiedenen Ergebnisse zeigen Diskrepanzen bis zu einem Faktor von 4. Dies ist größtenteils auf die unterschiedlichen Meßmethoden zurückzuführen, denn die Verdampfung erfolgt bei [14], [17] und [18] an freien, unverhüllten Proben (free-evaporation bzw. transpiration-method). Es ist bekannt, daß diese Methoden leicht zu kleine Drucke liefern, weil ein Teil der Dampfmoleküle an kälteren Stellen im System kondensieren und somit dem Nachweis entgehen kann. Hinzu kommt, daß sich über der Probe nicht der volle Gleichgewichtsdruck aufbaut, wenn die Dampfmoleküle zu schnell abgezogen werden. Auch hier bei UO_2 liegen die damit erhaltenen Ergebnisse systematisch tiefer als diejenigen Messungen, bei denen Knudsen-Zellen benutzt wurden (Abb. 4). Da bei dieser Anordnung der Aufbau einer Gleichgewichtsatmosphäre gesichert ist, kann man davon ausgehen, daß die Knudsen-Messungen die wahren Gleichgewichtsdampfdrucke wiedergeben.

Bei den Messungen von Reedy, Chasanov [19] oberhalb von 3100 K verringerte sich die Stöchiometrie des Uranoxids während des Versuchs von 2.00 auf 1.94. Diese Reduktion ist vermutlich die Ursache für den relativ starken Knick in der Dampfdruckkurve. Die Drucke von $\text{UO}_{2.00}$ dürften etwas höher liegen.

Die Übereinstimmung der Rechnung mit den Knudsen-Messungen ist im gesamten Temperaturbereich von 1600–3400 K sehr gut. In Abb. 5 ist der berechnete Totaldruck zusammen mit den Partialdrucken aller Dampfkomponenten als Funktion der Temperatur aufgetragen. Die Komponenten UO_2 und UO_3 machen bei allen Temperaturen mehr als 99% des Totaldrucks aus.

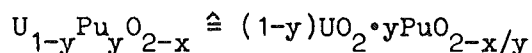
Die gute Übereinstimmung zwischen Messung und Rechnung zeigt, daß die verwendete Methode eine verlässliche Berechnung von Dampfdrücken ermöglicht und daß die benutzten freien Bildungsenthalpien, sowie ihre lineare Extrapolation zu höheren Temperaturen, mit keinen großen Fehlern behaftet sind. Diese Daten wurden daher auch für die Berechnungen an (U,Pu)-Mischoxid übernommen.

3.4 Berechnungsmethoden für (U,Pu)-Mischoxid

Die Berechnung von Dampfdrücken nach dem Massenwirkungsgesetz, wie sie in Abschnitt 3.1 erläutert wurde, läßt sich auch bei Mischoxiden anwenden, wenn diese eine ideale Lösung eingehen. Rand und Markin [1] haben dies für (U,Pu)-Mischoxid durch einen Vergleich der freien Bildungsenthalpien nachgewiesen. Ihre Rechnung bezog sich auf Temperaturen kleiner als 1150 K und Plutoniumanteile x_{Pu} kleiner als 30%. Es gibt experimentelle Ergebnisse [31], die darauf hinweisen, daß die ideale Lösung auch bei höherem T und x_{Pu} angenommen werden kann:

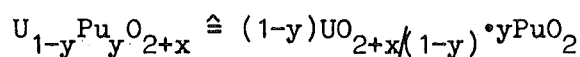
- a) Schmelz- und Erstarrungstemperaturen von Mischoxid für Pu-Gehalte zwischen 0 und 100% stimmen sehr gut mit den Temperaturen überein, die sich aus den Schmelzpunkten von reinem UO_2 und PuO_2 nach den Gesetzen der idealen Lösung ergeben.
- b) Der Gitterparameter von Mischoxid liegt zwischen denen von UO_2 und PuO_2 und ist weiterhin eine lineare Funktion des Pu-Gehalts. Dieses Verhalten ist typisch für ideale Lösungen (Vegard-Regel).

In dieser Arbeit wurde für alle Temperaturen und Pu-Gehalte ideales Verhalten angenommen. Unter dieser Voraussetzung darf das Mischoxid bei der Berechnung der Dampfdrucke in Uranoxid und Plutoniumoxid zerlegt werden. In den Teilsystemen gelten die thermodynamischen Funktionen des U-O- bzw. des Pu-O-Systems. Über das Reduktions- und Oxidationsverhalten wurden die üblichen Annahmen gemacht, nämlich, daß unterstöchiometrisches Mischoxid als eine Lösung aus stöchiometrischem Uranoxid und unterstöchiometrischem Plutoniumoxid angesehen werden kann:



Dies zeigten Messungen des Sauerstoffpotentials von Markin, McIver [21]. Bei der Reduktion gibt zunächst das Plutoniumoxid Sauerstoff ab, weil die niedrigste Wertigkeit des Uran von +4 in UO_2 erreicht ist, während das Plutonium bis auf seinen dreiwertigen Zustand reduziert werden kann. Zur Kennzeichnung des Oxidationszustands von unterstöchiometrischen Mischoxid genügt daher die Angabe der Plutoniumvalenz V_{Pu} . Erst wenn das Plutoniumoxid auf $PuO_{1.5}$ reduziert ist, setzt bei weiterer Reduktion eine merkliche Sauerstoffabgabe des Uranoxids ein.

Überstöchiometrisches Mischoxid verhält sich wie eine Mischung aus stöchiometrischem Plutoniumoxid und überstöchiometrischen Uranoxid:



Der höchste Oxidationszustand von Plutonium ist im PuO_2 erreicht, während Uran bis auf U_3O_8 oxidiert werden kann.

3.5 Thermodynamische Daten für $(U,Pu)O_{2\pm x}$

Für die Dampfdruckberechnung bei Mischoxiden braucht man die folgenden thermodynamischen Größen:

1. $\Delta G_f^\circ(T)$ der Dampfkomponenten UO_3 , UO_2 , UO , U , PuO_2 , PuO , Pu , O
2. $\Delta G_f^\circ(T,x)$ von festem überstöchiometrischen Uranoxid
 $\Delta G_f^\circ(T,z)$ von festem unterstöchiometrischem Plutoniumoxid
3. $\Delta \bar{G}_{O_2}^\circ(T,x)$ von $(U,Pu)O_{2\pm x}$

1. Freie Standardbildungsenthalpien der Gase

Für die ΔG_f° der uranhaltigen Gase wurden dieselben Werte benutzt wie bei der Dampfdruckberechnung für reines Uranoxid. Die ΔG_f° der plutoniumhaltigen Gase sind in Tabelle 1 zusammengestellt. Sie sind insgesamt weniger genau bekannt als die ΔG_f° -Werte der uranhaltigen Gase; die Unsicherheiten betragen etwa 10 kcal/Mol. Das liegt daran, daß sich bei Verdampfungsexperimenten mit Plutoniumoxiden die Stöchiometrie des Oxids wegen des locker gebundenen Sauerstoffs leichter verändert als bei Uranoxiden. Diese erhöhten Fehlermöglichkeiten schlagen nicht stark auf den berechneten Totaldruck durch, weil die Dampfdrucke der uranhaltigen Gase bei allen Temperaturen überwiegen.

2. Freie Standardbildungsenthalpien der festen Oxide

ΔG_f° von überstöchiometrischem Oxid wurde mit Gleichung (4) Abschnitt 3.2.2 berechnet. Nach Ackermann et al. [4] zeigen neuere Arbeiten, daß die absolute Standardentropie S_{298}° von festem PuO_2 bisher um 2,3 kcal/Mol zu positiv und ΔH_f° um 0,5 kcal/Mol zu negativ angenommen war. Diese Korrekturen führen in Tab.2 von Ausdruck Nr.4 auf Nr.7. Auch die von Rand und Markin [1] berechneten ΔG_f° für unterstöchiometrische Plutoniumoxide wurden um die genannten Beträge korrigiert und in dieser Rechnung benutzt. (Nr.8-16 in Tab.2).

Alle Bildungsenthalpien wurden linear extrapoliert, wobei oberhalb des Schmelzpunkts von 3073 K eine Schmelzwärme von 20 kcal/Mol in die Rechnung einging. Diese Werte von [13] stehen in guter Übereinstimmung mit Messungen von [30] und [31].

3. Sauerstoffpotential von $(\text{U,Pu})\text{O}_{2\pm x}$

Das Sauerstoffpotential von (U,Pu)-Mischoxid wurde in den Arbeiten [25, 21, 26, 27] untersucht. Der erfaßte Temperaturbereich geht von 1000 bis 2550 K, und die Plutoniumvalenz variiert zwischen 3.2 und 3.98. Die Ergebnisse der letzten drei Arbeiten ergänzen sich sehr gut, wie Abb.11a zeigt und ergeben einen verläßlichen Datensatz für das

genannte (T, V_{Pu}) -Gebiet. Die Unsicherheiten dürften nicht größer als einige kcal/Mol sein. Chasnanov hat das Modell von Blackburn [5] zur Berechnung von $\Delta \bar{G}_{\text{O}_2}$ auf Mischoxid erweitert und Sauerstoffpotentiale bis 6000 K angegeben [28, 29]. Bei 2500 K unterscheiden sich diese Werte von den Messungen Tetenbaums [27] um etwa 10 kcal. Für diese Berechnung wurden die Werte von Tetenbaum extrapoliert und bei hohen Temperaturen den theoretisch ermittelten angepaßt. Das ergibt die in Abbildung 11b dargestellten Kurven mit dem Kurvenparameter V_{Pu} zwischen 4.0 und 3.0. Die möglichen Fehler im Sauerstoffpotential werden auf ± 5 kcal bei 3500 K und ± 10 kcal bei 5000 K geschätzt. Die Herkunft der übrigen Kurven in Abb. 11b wird in Abschnitt 4.2 erläutert.

3.6 Ergebnisse und Vergleich mit Messungen an $(\text{U,Pu})\text{O}_{2-x}$

In Tabelle 4 sind die Ergebnisse für Mischoxide mit 20% Plutonium und verschiedenen Stöchiometrien wiedergegeben. Die Spalten enthalten von links nach rechts die Temperatur in K, die Logarithmen der in atm gemessenen Partialdrucke von PuO_2 , PuO , Pu , UO_3 , UO_2 , UO , U , O_2 , O und des Totaldrucks. In den beiden letzten Spalten ist das $\text{O}/(\text{U+Pu})$ - und das $\text{Pu}/(\text{U+Pu})$ -Verhältnis in der Gasphase aufgeführt.

Für stöchiometrisches Oxid sind die berechneten Partialdrucke in Abb. 6 als Funktion der Temperatur dargestellt. UO_3 ist die bei allen Temperaturen überwiegende Komponente. Die Stöchiometrieabhängigkeit der Partialdrucke ist für eine feste Temperatur in Abb. 7 gezeigt. Mit zunehmender Stöchiometrie geht der Gleichgewichtsdruck der sauerstoffarmen Komponenten zurück, während der der sauerstoffreichen stark ansteigt. Der Totaldruck nimmt zwischen $\text{O}/\text{M}=1.92$ und $\text{O}/\text{M}=2.00$ um fast eine Zehnerpotenz zu.

Dieses Verhalten geht auch aus den bisher unternommenen Dampfdruckmessungen an (U,Pu) -Mischoxid hervor. Abb. 8 vergleicht die Stöchiometrieabhängigkeit von gemessenen und berechneten Totaldrucken für zwei feste Temperaturen. Die Übereinstimmung ist sehr befriedigend, da die Rechnung über den gesamten V_{Pu} -Bereich innerhalb der experimentellen Fehlergrenzen der beiden Messungen liegt.

Die Temperaturabhängigkeit der Totaldrucke ist in Abb.9 für zwei feste Plutoniumvalenzen dargestellt. Bei stöchiometrischem Mischoxid ($V_{Pu}=4.0$) steht nur ein Meßpunkt für einen Vergleich zur Verfügung; er fällt mit der Rechnung zusammen. Bei einer Plutoniumvalenz von 3.6 können drei Messungen an Mischoxiden mit verschiedenen Plutoniumgehalten für einen Vergleich herangezogen werden. Auch hier ergibt sich eine gute Übereinstimmung im gesamten experimentell erfaßten Temperaturbereich von 1900-2400 K.

Die Übereinstimmung der Rechnung mit allen drei Messungen [22, 32, 33] bestätigt die verwendeten thermodynamischen Daten und unterstützt die Rechenergebnisse bei höheren Temperaturen.

4. Berechnung von Dampfdrucken bei erzwungen kongruenter Verdampfung

4.1 Berechnungsverfahren

Die erzwungen kongruente Verdampfung eines Mehrstoffsystems ist dadurch gekennzeichnet, daß nach einer Anlaufphase zeitlich unveränderte Diffusionsprofile im verdampfenden Material bestehen. Bei der Verdampfung von UO_2 z.B., stellt sich in der Randschicht des Oxids ein stationäres Sauerstoffprofil ein. Es wird während der folgenden Verdampfung lediglich verschoben, so daß das O/U-Verhältnis in der Gasphase in diesem Beispiel jederzeit gleich 2 sein muß. Die damit in ihrer Zusammensetzung festgelegte Dampfatmosfera ist die Gleichgewichtsatmosfera der Oxidoberfläche, wenn thermodynamisches Gleichgewicht zwischen gasförmiger und kondensierter Phase besteht. Dies ist oberhalb von 3000 K wegen der hohen Dampfdrucke und den damit verbundenen kleinen Weglängen der Gasmoleküle gewährleistet. Von der Dampfzusammensetzung kann man unter dieser Bedingung auf die Zusammensetzung der Oxidoberfläche schließen. Dazu bestimmt man dasjenige Uranoxid, dessen Gleichgewichtsatmosfera bei der gegebenen Temperatur das geforderte O/U-Verhältnis von 2 aufweist. Der Gleichgewichtsdruck dieses Oxids, das bei hohen Temperaturen immer unterstöchiometrisch ist, ergibt den Dampfdruck von UO_2 bei erzwungen kongruenter Verdampfung.

Die Zusammensetzung der Oxidoberfläche, die sich bei der erzwungen kongruenten Verdampfung einstellt, hängt von der Temperatur ab. Da bei der Verdampfung von Oxiden das O/U-Verhältnis in der Dampfphase mit wachsender Temperatur zunimmt, muß die Stöchiometrie der Oberflächenschicht abnehmen, damit das vorgegebene O/U-Verhältnis von 2 bei der Verdampfung eingehalten wird. In Abb.12 ist diese Zusammensetzung der Uranoxidoberfläche für einige Temperaturen, längs der Kurve für erzwungen kongruenten Verdampfung, eingetragen.

Uranoxid ist ein Zweistoffsystem. Bei der Verdampfung von (U,Pu)-Mischoxid, einem Dreistoffsystem, muß zusätzlich das unterschiedliche Verdampfungsverhalten von Uran und Plutonium berücksichtigt werden. Da bei einer gegebenen Temperatur aus einem Mischoxid weniger Plutonium verdampft als seinem Molenbruch entspricht, ergibt sich an der verdampfenden Oberfläche eine Plutoniumanreicherung. Dies führt bei einer kontinuierlichen Verdampfung nach der Anlaufphase zu einer stationären Plutoniumanreicherung in der Randzone. Betrachtet man z.B. die erzwungen kongruente Verdampfung von $(U_{.80}Pu_{.20})O_2$, so muß sich an der Oberfläche aus Bilanzgründen dasjenige Mischoxid bilden, das bei der Verdampfung ein U:Pu:O-Verhältnis von .80:.20:2. in der Gasphase ergibt. Unter der Voraussetzung, daß thermodynamisches Gleichgewicht an der Phasengrenze herrscht, ist der Gleichgewichtsdampfdruck dieses Oberflächenoxids der Dampfdruck von $(U_{.80}Pu_{.20})O_2$ bei erzwungen kongruenter Verdampfung. Die Oberfläche ist mit Plutonium angereichert und mit Sauerstoff abgereichert, beide Konzentrationsveränderungen nehmen mit wachsender Temperatur zu. In Abb.13 ist die Zusammensetzung des Mischoxids an der verdampfenden Oberfläche für einige Temperaturen längs der Kurve für erzwungen kongruente Verdampfung eingetragen.

4.2 Thermodynamische Daten

Für die Berechnung der Dampfdrucke bei erzwungen kongruenter Verdampfung benötigt man das Sauerstoffpotential von stark unterstöchiometrischem U- bzw. (U,Pu)-Oxid. Da es hierzu nur wenige Messungen gibt, mußten die fehlenden Daten ergänzt werden. In diesem Abschnitt soll kurz erläutert werden, welche Annahmen dabei gemacht wurden und auf welche Meßergebnisse die Ergänzung gestützt ist.

Tetenbaum und Hunt [6] haben den Druck von atomarem Sauerstoff P_O über unterstöchiometrischem Uranoxid gemessen. Das O/U-Verhältnis bewegte sich zwischen 1.86 und 2.00. Blackburn hat Sauerstoffdrucke auch für O/U-Werte unter 1.86 theoretisch ermittelt [5]. Aus dem Druck des atomaren Sauerstoffs kann das Sauerstoffpotential $\Delta\bar{G}_{O_2}$ nach der folgenden Beziehung berechnet werden:

$$\Delta\bar{G}_{O_2} = 2\Delta G_f^O[O(g)] + 2RT \ln 10 \cdot \log p_O$$

Die so gewonnenen Daten umfassen den Temperaturbereich von 2100-2700 K. Die $\Delta\bar{G}_{O_2}$ -Werte aus den beiden Quellen ergänzen sich gut. Abbildung 10 zeigt einen Vergleich bei 2705 K, der höchsten Meßtemperatur von [6]. Die Daten wurden über 2705 K hinaus linear extrapoliert, sie sind in Abb.3a und b gestrichelt dargestellt.

Für Uran-Plutonium-Oxid liegen nur Messungen von $\Delta\bar{G}_{O_2}$ bis zu einer Plutoniumvalenz von 3.0 vor. Ein Vergleich der Sauerstoffpotentiale von U- und (U,Pu)-Oxid zeigt, daß die $\Delta\bar{G}_{O_2}$ -Werte von Uranoxiden insgesamt tiefer liegen und daß sie sich an diejenigen der Mischoxide mit $V_{Pu}=3.0$ anschließen. Daher wurde der folgende Reduktionsverlauf für (U,Pu)-Mischoxid angenommen: Zuerst gibt nur das Plutoniumoxid Sauerstoff ab, während das Uran vierwertig bleibt. Wenn eine Plutoniumvalenz von 3.0 erreicht ist, bleibt diese erhalten, und nur das Uran wird bei weiterem Sauerstoffentzug reduziert. Von nun an bestimmt die Uranvalenz den Sauerstoffpartialdruck des Mischoxids. Es wird angenommen, daß das (U,Pu)-Mischoxid dasselbe $\Delta\bar{G}_{O_2}$ besitzt wie reines Uranoxid mit derselben Uranvalenz. Diese Einteilung des Reduktionsvorgangs in diskrete Schritte stellt nur eine erste Näherung der tatsächlich ablaufenden Sauerstoffabgabe dar. In Wirklichkeit beginnt das Uranoxid Sauerstoff abzugeben, bevor eine Plutoniumvalenz von 3 erreicht ist, und diese wird bei weiterer Reduktion auch etwas unter den Wert 3 sinken. Es wurden keine Anstrengungen unternommen, die Sauerstoffaufteilung zwischen Uran- und Plutoniumoxid genauer zu berechnen, weil Testrechnungen ergaben, daß eine Sauerstoffverschiebung zwischen den beiden Oxidsystemen keinen großen Einfluß auf den Totaldruck hat. Es bleibt natürlich eine Unsicherheit

im Sauerstoffpotential für ein festes O/M-Verhältnis. Sie sind für die stark unterstöchiometrischen Mischoxide auf 10 kcal/Mol geschätzt. In Abb.11b sind diese gestrichelt dargestellt.

4.3 Ergebnisse und Vergleich mit Messungen

4.3.1 Uranoxid

In Abb.12 sind Dampfdrucke von UO_2 oberhalb von 3000 K für beide Verdampfungsarten gegenübergestellt. Die berechneten Totaldrucke bei Gleichgewichtsverdampfung ergeben eine Gerade in der $\log p - \frac{1}{T}$ -Darstellung, deren Steigung einer Verdampfungsenthalpie ΔH_{vap} von 128.4 kcal/Mol entspricht. Bei der Gleichgewichtsverdampfung hat die verdampfende Oberfläche bei allen Temperaturen die Zusammensetzung O/U=2.

Bei der erzwungen kongruenten Verdampfung hingegen wird die verdampfende Oberflächenschicht, deren Gleichgewichtsatmosphäre ein $\frac{O}{U}=2$ aufweist, mit wachsender Temperatur zunehmend unterstöchiometrischer. Diese Änderung in der Zusammensetzung ist der Grund dafür, daß der Totaldruck schneller mit T wächst, als dies bei Gleichgewichtsverdampfung der Fall ist. Mit abnehmendem O/U-Verhältnis verringern sich die Bindungskräfte pro Uranion im Uranoxid. Dies führt zu größeren Gitterparametern, geringeren Verdampfungsenergien und damit zu höheren Dampfdrucken bei unterstöchiometrischen Oxiden.

Die Berechnungen wurden mit den freien Bildungsenthalpien von Rand und Markin [1] wiederholt, um zu prüfen, inwieweit das unterschiedliche Verdampfungsverhalten von den verwendeten thermodynamischen Daten abhängt. Wie schon in Abb.2 gezeigt, ergeben diese ΔG_f^O -Werte zwar insgesamt zu niedrige Totaldrucke, aber die Unterschiede zwischen beiden Verdampfungsarten bleiben erhalten. Die Unterschiede in den Totaldrucken sind auch relativ stabil gegenüber einer Variation der benutzten $\Delta \bar{G}_{O_2}$ -Werte. Die in Abb.12 mit 1a gekennzeichnete Dampfdruckkurve stimmt mit den Ergebnissen von [34] überein.

Abb.12 enthält weiterhin die Ergebnisse der bisherigen Verdampfungsexperimente mittels Laseraufheizung. Es muß darauf hingewiesen werden, daß diese ersten Meßergebnisse nicht als gesicherte Werte angesehen

werden können, da vor allem die Temperaturbestimmung noch Schwierigkeiten bereitet. Ohse et al. [20] haben die Temperatur pyrometrisch gemessen, geben aber keine Fehlergrenzen an. Da auch Angaben über das zugrunde gelegte Emissionsvermögen der flüssigen Oxidschicht fehlen, ist eine nachträgliche Abschätzung der Temperaturunsicherheit schwierig. Die von [20] angegebenen Meßwerte streuen um die berechnete Gleichgewichtskurve. Von den Verdampfungsbedingungen her müßte man höhere Dampfdrucke erwarten. Bober et al. [21] bestimmen die Temperatur aus der adiabatischen Expansion der Dampfvolke in das Vakuum hinein mit einer Genauigkeit von 10%. Die Dampfdruckbestimmung ist derzeit mit einem Fehler von 30% behaftet. Mit diesen Fehlergrenzen ergibt sich das in Abb.12 eingezeichnete Meßfeld. Die vorläufigen Ergebnisse von Bober et al. liegen insgesamt etwas tiefer als die berechneten Dampfdrucke.

4.3.2 Uran-Plutonium-Oxid

Die berechneten Totaldrucke für die Verdampfung von $(U_{.80}Pu_{.20})O_{2.00}$ sind in Abb.13 dargestellt. Im Gegensatz zum Uranoxid unterscheiden sich hier die Dampfdrucke der beiden Verdampfungsarten beträchtlich.

Der Grund liegt darin, daß der Sauerstoffpartialdruck von stöchiometrischem Mischoxid mehrere Zehnerpotenzen größer ist als der von UO_2 . Bei der Gleichgewichtsverdampfung stellt das Mischoxid daher an der verdampfenden Oberfläche sehr viel mehr Sauerstoff zur Verfügung als UO_2 . Dadurch wird die Bildung von $UO_3(g)$, der sauerstoffreichsten Dampfkomponente, stark begünstigt. Dies hat einen hohen Totaldruck zur Folge, weil der Gleichgewichtsdruck von $UO_3(g)$ bei allen Temperaturen den Hauptbetrag zum Totaldruck von stöchiometrischem Mischoxid liefert. (Vergl. Abb.6).

Bei erzwungen kongruenter Verdampfung hingegen kann nur der Sauerstoff zur Bildung von gasförmigen Oxiden herangezogen werden, der im verdampfenden Volumenelement selbst enthalten ist. Diese Beschränkung verhindert eine starke Bildung von $UO_3(g)$, so daß der Totaldruck bei dieser Verdampfungsart merklich kleiner sein muß. Der Unterschied verringert sich mit wachsender Temperatur, da die ver-

dampfende Oberfläche zunehmend unterstöchiometrischer wird. Bei 3000 K ist der Dampfdruck bei erzwungen kongruenter Verdampfung um einen Faktor 7, bei 5000 K um einen Faktor 2 niedriger.

Die Zusammensetzung der Oxidoberfläche ist in Abb.13 für einige Temperaturen eingetragen. Bei der jeweiligen Temperatur hat die Dampfphase über der Oxidoberfläche dieselbe Zusammensetzung wie das verdampfende Mischoxid, nämlich U:Pu:O=0.80:0.20:2.00.

Abb.13 enthält weiterhin die von Ohse et al. [20] mittels Laseraufheizung gemessenen Dampfdrucke von $(U_{.80}Pu_{.20})O_{1.96}$. Von den experimentellen Verdampfungsbedingungen her sollten diese Meßpunkte der Kurve für erzwungen kongruente Verdampfung zugeordnet werden. Die starke Krümmung des Meßpunkt-Feldes deutet darauf hin, daß zumindest eine der zu bestimmenden Meßgrößen, Dampfdruck und Temperatur, noch mit einem größeren Fehler behaftet ist. Da keine Fehlergrenzen für die pyrometrische Temperaturbestimmung angegeben werden, ist ein eindeutiger Vergleich zwischen Messung und Rechnung nicht möglich.

Ein abschließender Vergleich der berechneten Totaldrucke von (U,Pu)-Mischoxid und Uranoxid bei erzwungen kongruenter Verdampfung (Abb.12 und 13) zeigt, daß diese Drucke bis etwa 3300 K gleich groß sind. Dies ist zu erwarten, da auch die Sauerstoffmenge, die bei der Verdampfung zur Verfügung steht, bei beiden Oxiden gleich groß ist. Oberhalb von 3300 K steigt der Totaldruck des Mischoxids langsamer an, weil die verdampfende Oberfläche zunehmend reicher an Plutoniumoxid wird, welches einen niedrigeren Dampfdruck als Uranoxid aufweist.

5. Zusammenfassung

Der erste Teil der vorliegenden Arbeit enthält eine allgemeine Analyse zur Verdampfungskinetik von Mehrstoffsystemen. Mehrstoffsysteme, wie z.B. Ionenmischkristalle und Metallegierungen, verdampfen i.a. inkongruent, d.h. die auftretende Dampfphase hat eine andere Zusammensetzung als die kondensierte Phase. Dadurch wird bei einem Verdampfungsvorgang die Zusammensetzung der verdampfenden Oberfläche verändert. Diese Störung an der Oberfläche induziert Diffusionsströme in der verdampfenden Substanz, weil die einzelnen Komponenten in der kondensierten Phase beweglich sind. Die Diffusionsströme und die Teilchenströme in der Gasphase bestimmen zu jedem Zeitpunkt die Zusammensetzung der verdampfenden Oberfläche. Diese wiederum beeinflusst den Verdampfungsprozeß, so daß die Oberflächenzusammensetzung während der Verdampfung bekannt sein muß, ehe Dampfdrucke berechnet werden können.

Die kontinuierliche Verdampfung einer Substanz stellt, mathematisch gesehen, ein Diffusionsproblem mit beweglichem Rand dar. Es wurde im mitbewegten Koordinatensystem mittels Laplace-Transformation gelöst. Die Ergebnisse sollen im folgenden am Beispiel des Zweistoffsystems UO_2 erläutert werden:

Bei der Verdampfung von stöchiometrischem Uranoxid treten in der Dampfphase vier uranhaltige Gase auf, und zwar U , UO , UO_2 und UO_3 . Wegen des hohen Anteils von UO_3 in der Gasphase verdampft Sauerstoff überproportional, so daß die Oberfläche sofort nach Beginn der Verdampfung an Sauerstoff verarmt. Nach einer Anlaufphase, über deren Dauer weiter unten Angaben gemacht werden, stellt sich in der Randzone unterhalb der verdampfenden Oberfläche eine stationäre Sauerstoffverteilung ein. Das Sauerstoffdefizit ist an der verdampfenden Oberfläche am größten und klingt mit $\exp\left[-\frac{v}{D} \cdot x\right]$ exponentiell in das Innere des Oxids ab. Dabei ist x die Entfernung von der Oberfläche, D der Diffusionskoeffizient der Sauerstoffionen in der kondensierten Phase und v die Wandergeschwindigkeit der verdampfenden Oberfläche. D und v hängen von der Temperatur ab. Wenn D/v , das die Dimension einer Länge hat, sehr viel kleiner ist als die Ausdehnung der verdampfenden UO_2 -Probe, beschränkt sich die Störung im Sauerstoffgehalt auf eine Randschicht des

Uranoxids. Nach Erreichen der stationären Verdampfung wird die exponentiell abklingende Störung nicht mehr verändert und die fortschreitende Verdampfung bewirkt lediglich eine Verschiebung der Störung zum Probenende hin. Daher muß aus Massenbilanzgründen die entstehende Dampfphase dieselbe Zusammensetzung wie das Uranoxid haben, also in diesem Beispiel ein O/U-Verhältnis von 2. Die Einstellung eines stationären Sauerstoffprofils in dem verdampfenden Uranoxid erzwingt eine kongruente Verdampfung des Materials. Daher wurde diese Form der stationären Verdampfung, bei der D/v sehr viel kleiner als die Ausdehnung der Probe ist, als "erzwungen kongruente" Verdampfung bezeichnet.

Gute Beispiele für diese Verdampfungsform liefern die neueren Verdampfungsstechniken mittels Laseraufheizung. In diesem Fall kann für den Quotienten D/v ein Wert von 10^{-3} cm erwartet werden, was sehr viel kleiner ist als typische Abmessungen der verdampfenden Probe. Erzwungen kongruente Verdampfung muß auch bei Reaktorstörfällen erwartet werden bei denen es zur Verdampfung von Brennstoff in die umgebende Atmosphäre oder in größere Hohlräume kommt. Mit freier Abdampfung von Brennstoff ist z.B. bei Kühlmittelverlust-Unfällen zu rechnen, bei denen nach Abschmelzen der Hüllrohre nackte Brennstoffsäulen von ihrer Mantelfläche her verdampfen.

Die zur erzwungen kongruenten Verdampfung konträre Verdampfungsform liegt vor, wenn D/v sehr viel größer als die Ausdehnung der verdampfenden Probe ist. In diesem Fall sind die Sauerstoffionen im Oxid so beweglich, daß der überproportionale Sauerstoffverlust an der verdampfenden Oberfläche jederzeit durch einen Diffusionsstrom aus dem Inneren des Uranoxids ausgeglichen werden kann. Als Folge davon behält das verdampfende Uranoxid trotz der inkongruenten Verdampfung eine homogene Sauerstoffverteilung. Die Dampfphase über dem Oxid ist immer die Gleichgewichtsatmosphäre des verdampfenden Bodenkörpers. Diese Verdampfungsform wird als Gleichgewichtsverdampfung bezeichnet. Die beiden besprochenen Verdampfungsformen haben unterschiedliche Dampfdrucke zur Folge, weil die Zusammensetzung der verdampfenden Oberfläche verschieden ist.

Gleichgewichtsverdampfung und erzwungen kongruente Verdampfung stellen zwei Grenzfälle stationärer Verdampfungsformen dar, zwischen denen jeder Übergangstyp möglich ist. Entscheidend ist welche Zusammensetzung die verdampfende Oberfläche während des Verdampfungsvorgangs annimmt. Sie ergibt sich aus dem dynamischen Gleichgewicht zwischen den Strömen in der Gasphase und den Diffusionsströmen in der kondensierten Phase. Bei jedem stationären Verdampfungsprozeß kann durch Anwendung des D/v -Kriteriums der Verdampfungstyp festgestellt werden.

Die charakteristische Zeit für die Einstellung eines stationären Verdampfungszustandes ergibt sich aus dem Quotienten D/v^2 . Für das oben erwähnte Beispiel der Laserverdampfung von UO_2 bei 4000 K erhält man $D/v^2 = 10^{-3} s$, d.h. etwa 1ms nach Beginn der Aufheizung ist die stationäre erzwungen kongruente Verdampfung erreicht. Die Reduktion der Oberfläche verläuft sehr schnell, so beträgt die Abnahme des O/U-Verhältnisses nach 1µs 50% und nach 100µs bereits 90% der gesamt-abnahme die nach 1ms erreicht wird.

Im zweiten Teil der Arbeit werden die Dampfdrucke von UO_{2+x} und $(U_{.80}Pu_{.20})O_{2+x}$ für Gleichgewichtsverdampfung sowie die Dampfdrucke der stöchiometrischen Oxide UO_2 und $(U_{.80}Pu_{.20})O_2$ für erzwungen kongruente Verdampfung berechnet. Bei allen Rechnungen wurde thermodynamisches Gleichgewicht zwischen der kondensierten Phase und der darüber befindlichen Gasschicht angenommen. Die Berechnung der Gleichgewichtsdrucke erfolgte nach der Methode von Rand und Markin (1967) aus dem Massenwirkungsgesetz und entsprechenden thermodynamischen Daten. Alle bisher veröffentlichten freien Standardbildungsenthalpien ΔG_f^0 der beteiligten gasförmigen und kondensierten Verbindungen sind in Tab.1 und 2 zusammengestellt. Für die Rechnungen wurden die bis Ende 1974 zugänglichen Daten benutzt. Die berechneten Gleichgewichtsdrucke von UO_{2+x} sind in Tab.3 für verschiedene Stöchiometrien bis zu Temperaturen von 5000 K angegeben. Abb.4 zeigt einen Vergleich mit gemessenen Dampfdrucken von UO_2 . Die Übereinstimmung mit den relevanten Gleichgewichtsmessungen ist über den gesamten Temperaturbereich von 1600 bis 3000 K als gut zu bezeichnen. Tab.4

zeigt die berechneten Gleichgewichtsdampfdrucke von $(U_{.80}Pu_{.20})O_{2+x}$ für verschiedene Stöchiometrien bis zu Temperaturen von 5000 K. Im gesamten Temperatur- und Stöchiometriebereich, für den Meßergebnisse vorliegen, stimmen Messung und Rechnung innerhalb der experimentellen Fehlergrenzen überein (Abb. 8 und 9).

Das Berechnungsverfahren für die Dampfdrucke bei erzwungen kongruenter Verdampfung geht davon aus, daß bei dieser Verdampfungsform sich diejenige Oberflächenzusammensetzung einstellt, bei der die Substanz kongruent verdampft. Für die Berechnung an UO_2 z.B., wurde daher bei einer festen Temperatur dasjenige unterstöchiometrische Uranoxid UO_{2-x} bestimmt, das bei der Verdampfung ein O/U-Verhältnis von 2 in der Gasphase liefert. Der Dampfdruck über diesem UO_{2-x} ist der Dampfdruck von UO_2 bei erzwungen kongruenter Verdampfung unter der betreffenden Temperatur. In Abb.12 sind die so berechneten Dampfdrucke für Temperaturen oberhalb von 3000 K, zusammen mit den Gleichgewichtsdampfdrucke von UO_2 , dargestellt. Abb.13 zeigt dieselben Dampfdrucke für $(U_{.80}Pu_{.20})O_2$. Bei der Verdampfung von (U,Pu)-Mischoxid, einem Dreistoffsystem, muß zusätzlich das unterschiedliche Verdampfungsverhalten von Uran und Plutonium berücksichtigt werden.

Bei Uran-Plutonium-Mischoxiden unterscheiden sich die berechneten Dampfdrucke für die beiden Verdampfungsarten beträchtlich. Hieraus ergeben sich Konsequenzen für theoretische und experimentelle Untersuchungen:

- a) Bei der Störfallanalyse von schnellen Reaktoren muß die jeweils vorliegende Verdampfungsform bestimmt werden damit die zutreffenden Dampfdrucke verwendet werden können.
- b) Bei den Dampfdruckmessungen an Brennstoffoxiden mittels Laser-aufheizung können wegen der rapiden Sauerstoffverarmung der verdampfenden Oberfläche keine Gleichgewichtsdampfdrucke gemessen werden. Die Verdampfungszeiten sollten daher größer als 100µs sein, damit eine stationäre erzwungen kongruente Verdampfung gewährleistet ist. Bei kürzeren Verdampfungszeiten erhält man undefinierte Dampfdrucke die zwischen denen der erzwungen kongruenten Verdampfung und der Gleichgewichtsverdampfung liegen.

Ich danke Herrn Dr. M. Bober, Herrn Dr. H.-U.Karow und Herrn Dr. K. Schretzmann vom Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik für den Hinweis auf die unterschiedlichen Verdampfungsmöglichkeiten von Oxiden und für die ständigen Diskussionen über die Verdampfungskinetik.

Literatur:

- [1] Rand, M.H., Markin, T.L.; AERE-R 5560 (1967)
- [2] Ackermann, R.J., Thorn, R.J.; Thermodynamics Vol. I, IAEA 1966, 243
- [3] Ackermann, R.J., Chang, A.T.; J.Chem. Thermodynamics 5 (1973), 873
- [4] Ackermann, R.J., Chandrasekharaiah, M.S.; IAEA Symp. on Thermodyn. of Nucl. Mat. Vienna Okt. 1974, Paper IAEA-SM-190/44
- [5] Blackburn, P.E.; J. Nucl. Mat. 46 (1973) 244
- [6] Tetenbaum, M., Hunt, P.D.; J. Chem. Phys. 49 (1968) 4739
- [7] Hein, R.A., Flagella, P.N.; GEMP-578 (1968)
- [8] Leibowitz, L., Mishler, L.W., Chasanov, M.G.; J. Nucl. Mat. 29 (1969) 356
- [9] Belle, J.; Uranium Dioxide: Properties and Nuclear Applications. Naval Reactors, Division of Reactor Development, USAEC
- [10] Ackermann, R.J., Gilles, P.W., Thorn, R.J.; Chem. Phys. 25 (1956) 1089
- [11] Ivanov, V.E. et al.; Thermodyn. of Nucl. Mat. IAEA, Vienna (1962) 735
- [12] Ohse, R.W.; J. Chem. Phys. 44 (1966) 1375
- [13] Ohse, R.W., Berrie, P.G., Bogensberger, H.G., Fischer, E.A.; IAEA Symposium on Thermodyn. of Nucl. Mat., Vienna Okt. 1974, Paper IAEA-SM-190/8
- [14] Alexander, C.A., Ogden, J.S., Cunningham, G.W.; BMI-Report 1789 (1967)
- [15] Tetenbaum, M., Hunt, P.D.; J. Nucl. Mat. 34 (1970) 86
- [16] Pattoret, A., Drowart, I., Smoes, S.; Thermodyn. of Nucl. Mat. IAEA Vienna (1967) 613

- [17] Chapman, A.T., Meadows, R.E.; Report ORNL-3587(1964)
- [18] Voronov, N.M., Danilin, A.S., Kovalev, I.T.; Thermodyn. of Nucl. Mat. IAEA Vienna (1962) 789
- [19] Reedy, G.T., Chasanov, M.G.; J.Nucl.Mat. 42 (1972) 341
- [20] Bober, M., Karow, H.U., Schretzmann, K.; IAEA Symposium on Thermodyn. of Nucl.Mat. Vienna, Okt. 1974, Paper IAEA-SM-190/34
- [21] Markin, T.L., McIver, E.J.; in 'Plutonium 1965', 845
- [22] Ohse, R.W., Olson, W.M.; in 'Plutonium 1970', 743
- [23] Dean, G., Boivineau, J.C., Chereau, P., Marcon, J.P.; in 'Plutonium 1970', 753
- [24] ANL-7650 (Jan-Dez.1969) 23
- [25] Javed, N.A., Roberts, J.T.A.; ANL-7901 (Febr. 1972)
- [26] Woodley, R.E.; HEDL-TME-72-85 (Mai 1972)
- [27] Tetenbaum, M.; IAEA Symposium on Thermodyn. of Nucl.Mat. Vienna, Okt.1974, Paper IAEA-SM-190/41
- [28] Chasanov, M.G.; ANL-RDP-10 (Okt.1972)
- [29] Gabelnick, S.D., Chasanov, M.G.; ANL-7867 (Okt.1972)
- [30] Ogard, A.E., Reavis, J.G., Leary, J.A.; Proc.of 16th Conf. on Remote Syst.Technology (1969) 295
- [31] Lyon, W.L., Baily, W.E.; J.Nucl.Mat. 22 (1967) 332
- [32] Battles, J.E., Shinn, W.A., Blackburn, P.E., Edwards, R.K.; in 'Plutonium 1970', 733

- [33] Pascard, R.; in "The Plutonium-Oxygen and Uran-Plutonium-Oxygen Systems: A Thermochemical Assessment" IAEA Technical Report Series No 79 (1967) 64

- [34] Bogensberger, H.G., Fischer, E.A.; KFK 1273/2 (1973) 123-2

Tab. 1: Freie Standard-Bildungsenthalpie von Gasen

$$\Delta G_{f,T}^{\circ} = \Delta H_f^{\circ} - T \cdot \Delta S_f^{\circ}$$

Nr.	Gas	$\Delta H_f^{\circ} \left[\frac{\text{kcal}}{\text{Mol}} \right]$	$\Delta S_f^{\circ} \left[\frac{\text{cal}}{\text{Mol K}} \right]$	Temp. [K]	Quelle	Bemerkung
1	UO ₃ (g)	-219,87	- 27,15	1700 - 2500	[1]	
2		-198,5	- 19,0	1230 - 1600	[2]	
3		-202,08	- 20,79	1400 - 1800	[2]	
4		-200,0	- 19,4	850 - 1450	[3]	
5	UO ₂ (g)	-123,4	- 5,70	1700 - 2150	[1]	} verschiedene Auswertungen der experi- mentellen Ergebnisse von Ackermann, Gilles, Thorn, J.Chem.Phys.25(1956)1089
6		-121,5	- 4,24	1600 - 2400	[2]	
7		-121,5	- 5,45	1600 - 2400	[4]	
8		-116,3	- 0,5	1700 - 2150	[4]	
9		-115,5	- 1,9	2080 - 2705	[4]	
10	UO(g)	- 10,87	+ 11,22		[1]	
11		- 10,35	+ 11,6	1600 - 2400	[2]	
12		- 8,8	+ 10,3		[5]	
13		- 4,4	+ 15,6	1700 - 2150	[4]	
14		- 7,8	+ 13,8	1800 - 2200	[4]	
15	U(g)	115,3	+ 26,10		[1]	
16		116,8	+ 26,8	1775 - 2175	[2]	
17		118,77	+ 26,82	1720 - 2340	[4]	
18		117,5	+ 27,0	1800 - 2400	[4]	

Nr.	Gas	$\Delta H_f^{\circ} \left[\frac{\text{kcal}}{\text{Mol}} \right]$	$\Delta S_f^{\circ} \left[\frac{\text{cal}}{\text{Mol k}} \right]$	Temp. [K]	Quelle	Bemerkung
19	O(g)	61,245	+ 16,07	1500 - 3000	[4]	
20	PuO ₂ (g)	-113,1	- 4,35	1650 - 2100	[1]	
21		-108,5	- 4,3	1700 - 2100	[2]	
22		-102,7	+ 3,16	2100 - 2300	[22]	
23		-117,7	- 5,05		[23]	
24		-105,4	- 5,1		[24]	
25		-112,6	- 6,6	1600 - 2150	[4]	
26	PuO(g)	- 29,0	12,1	1650 - 2100	[1,23]	
27		- 28,5	9,7	1600 - 2150	[4]	
28		- 30,7	10,5	1640 - 2125	[2]	
29		- 22,0	11,7		[24]	
30		- 17,5	13,5		[24]	
31	Pu(g)	80,5	23,0	1133 - 1792	[1]	
32		80,5	22,94	1392 - 1793	[2]	
33		85,3	26,0	1691 - 1952	[2]	
34		78,3	21,0	1210 - 1620	[4]	

Tab.2 Freie Standard-Bildungsenthalpie von festen Oxiden

$$\Delta G_{f,T}^{\circ} = \Delta H_f^{\circ} - T\Delta S_f^{\circ}$$

Nr.	Substanz	$\Delta H_f^{\circ} \left[\frac{\text{kcal}}{\text{Mol}} \right]$	$\Delta S_f^{\circ} \left[\frac{\text{cal}}{\text{Mol K}} \right]$	Temp. [K]	Quelle	Bemerkung
1	UO ₂ (s)	-258,9	-41,48		[1]	berechnet aus ΔH° und ΔS°
2		-258,65	-40,64	1500 - 2400	[2]	
3		-258,6	-41,3	1800 - 2400	[4]	
4	PuO ₂ (s)	-249,5	-40,3	970 - 1410	[1]	
5		-251,6	-40,25	1000 - 2100	[2]	
6		-244,2	-41,4		[24]	
7	PuO _{2.00}	-249,0	-42,6	1600 - 2150	[4]	
8	PuO _{1.95}	-242,6	-39,9	970 - 1410	[1]	korrigiert in ΔH_f° um + 0,5 kcal/Mol ΔS_f° um -2,3 cal/Mol K
9	PuO _{1.90}	-237,0	-38,0	970 - 1410	[1]	
10	PuO _{1.85}	-231,6	-36,4	970 - 1410	[1]	
11	PuO _{1.80}	-226,6	-35,2	970 - 1410	[1]	
12	PuO _{1.75}	-222,0	-34,4	970 - 1410	[1]	
13	PuO _{1.70}	-217,5	-33,8	970 - 1410	[1]	
14	PuO _{1.65}	-213,1	-33,3	970 - 1410	[1]	
15	PuO _{1.61}	-209,5	-32,9	970 - 1410	[1]	
16	PuO _{1.50}	-199,8	-31,9	1600 - 2150	[4]	
17	UO _{2.15} (s)	-263,87	-42,49		[1]	

Tabelle 3: Gleichgewichtsdampfdrucke von UO_{2+x}

Stöchiometrie		Temp. in K	$\Delta\bar{G}_{O_2}$ kcal/Mol	ΔG_f^O	Partialdrucke atm						Stöchiometrie	Totaldruck atm	
der kondensierten Phase					in der Gasphase								
(O/M) SOL	TEMP	CO2	GFUO2S	P-UO3	P-UO2	P-UO	P-U	P-O2	P-O	(O/M) GAS	P-TOTAL		
1.9000	2000.	-180.0	-167.2	3.35E-12	8.94E-08	2.81E-06	2.99E-07	2.13E-20	9.64E-14	0.9345	3.19E-06		
1.9000	2100.	-174.0	-163.3	4.19E-11	5.09E-07	9.62E-06	7.62E-07	7.78E-19	1.21E-12	0.9768	1.09E-05		
1.9000	2200.	-168.0	-159.4	4.15E-10	2.47E-06	2.95E-05	1.79E-06	2.04E-17	1.21E-11	1.0203	3.38E-05		
1.9000	2300.	-162.0	-155.4	3.37E-09	1.05E-05	8.22E-05	3.89E-06	4.03E-16	9.88E-11	1.0684	9.65E-05		
1.9000	2400.	-156.0	-151.5	2.30E-08	3.94E-05	2.10E-04	7.93E-06	6.21E-15	6.78E-10	1.1224	2.57E-04		
1.9000	2500.	-150.0	-147.6	1.35E-07	1.33E-04	4.97E-04	1.53E-05	7.69E-14	3.99E-09	1.1828	6.46E-04		
1.9000	2600.	-143.1	-143.7	7.61E-07	4.13E-04	1.02E-03	2.36E-05	9.41E-13	2.24E-08	1.2691	1.45E-03		
1.9000	2700.	-136.1	-139.7	3.78E-06	1.18E-03	1.97E-03	3.52E-05	9.57E-12	1.11E-07	1.3614	3.19E-03		
1.9000	2800.	-129.2	-135.8	1.68E-05	3.13E-03	3.64E-03	5.10E-05	8.25E-11	4.89E-07	1.4548	6.84E-03		
1.9000	2900.	-122.2	-131.9	6.70E-05	7.74E-03	6.45E-03	7.21E-05	6.12E-10	1.95E-06	1.5446	1.43E-02		
1.9000	3000.	-115.3	-128.0	2.44E-04	1.81E-02	1.10E-02	9.95E-05	3.98E-09	7.08E-06	1.6275	2.94E-02		
1.9000	3100.	-109.0	-124.0	7.71E-04	3.96E-02	1.91E-02	1.50E-04	2.05E-08	2.24E-05	1.6886	5.96E-02		
1.9000	3200.	-102.8	-120.6	2.10E-03	7.70E-02	2.97E-02	2.04E-04	9.55E-08	6.59E-05	1.7441	1.09E-01		
1.9000	3300.	-96.5	-117.2	5.33E-03	1.42E-01	4.43E-02	2.68E-04	4.05E-07	1.82E-04	1.7949	1.92E-01		
1.9000	3400.	-90.3	-113.8	1.28E-02	2.52E-01	6.46E-02	3.48E-04	1.58E-06	4.72E-04	1.8421	3.30E-01		
1.9000	3500.	-84.0	-110.5	2.92E-02	4.33E-01	9.22E-02	4.45E-04	5.68E-06	1.16E-03	1.8868	5.56E-01		
1.9000	3600.	-78.5	-107.1	5.99E-02	7.18E-01	1.36E-01	6.22E-04	1.71E-05	2.57E-03	1.9187	9.16E-01		
1.9000	3700.	-73.0	-103.7	1.18E-01	1.16E+00	1.95E-01	8.53E-04	4.85E-05	5.46E-03	1.9504	1.48E+00		
1.9000	3800.	-67.6	-100.4	2.25E-01	1.82E+00	2.76E-01	1.15E-03	1.30E-04	1.11E-02	1.9823	2.34E+00		
1.9000	3900.	-62.1	-97.0	4.16E-01	2.80E+00	3.83E-01	1.53E-03	3.32E-04	2.19E-02	2.0146	3.62E+00		
1.9000	4000.	-56.6	-93.6	7.43E-01	4.22E+00	5.22E-01	2.01E-03	8.08E-04	4.16E-02	2.0474	5.53E+00		
1.9000	4100.	-51.6	-90.3	1.25E+00	6.20E+00	7.20E-01	2.74E-03	1.78E-03	7.46E-02	2.0738	8.25E+00		
1.9000	4200.	-46.6	-86.9	2.06E+00	8.96E+00	9.78E-01	3.69E-03	3.78E-03	1.30E-01	2.1007	1.21E+01		
1.9000	4300.	-41.5	-83.5	3.30E+00	1.27E+01	1.31E+00	4.89E-03	7.74E-03	2.21E-01	2.1280	1.76E+01		
1.9000	4400.	-36.5	-80.2	5.19E+00	1.78E+01	1.73E+00	6.40E-03	1.53E-02	3.66E-01	2.1556	2.51E+01		
1.9000	4500.	-31.5	-76.8	7.99E+00	2.45E+01	2.26E+00	8.28E-03	2.95E-02	5.92E-01	2.1835	3.53E+01		
1.9000	4600.	-26.8	-73.4	1.15E+01	3.31E+01	2.96E+00	1.10E-02	5.33E-02	9.24E-01	2.2064	4.90E+01		
1.9000	4700.	-22.1	-70.1	1.73E+01	4.43E+01	3.84E+00	1.43E-02	9.38E-02	1.41E+00	2.2294	6.70E+01		
1.9000	4800.	-17.4	-66.7	2.48E+01	5.86E+01	4.92E+00	1.85E-02	1.61E-01	2.13E+00	2.2524	9.06E+01		
1.9000	4900.	-12.7	-63.3	3.51E+01	7.66E+01	6.24E+00	2.37E-02	2.71E-01	3.14E+00	2.2755	1.21E+02		
1.9000	5000.	-8.0	-59.9	4.90E+01	9.90E+01	7.84E+00	3.00E-02	4.47E-01	4.57E+00	2.2985	1.61E+02		

Tabelle 3: Gleichgewichtsdampfdrucke von UO_{2+x}

Stöchiometrie	Temp. in K	$\Delta\bar{G}_{O_2}$ kcal/Mol	ΔG_f^0	Partialdrucke atm						Stöchiometrie	Totaldruck atm
der kondensierten Phase				in der Gasphase							
(O/M) SOL	TEMP	GO2	GFUO2S	P-UO3	P-UO2	P-UC	P-U	P-O2	P-O	(O/M) GAS	P-TOTAL
1.9100	2000.	-178.5	-168.1	4.14E-12	9.14E-08	2.38E-06	2.10E-07	3.11E-20	1.16E-13	0.9558	2.68E-06
1.9100	2100.	-172.3	-164.1	5.24E-11	5.20E-07	8.02E-06	5.18E-07	1.17E-18	1.48E-12	1.0001	9.06E-06
1.9100	2200.	-166.1	-160.2	5.26E-10	2.52E-06	2.42E-05	1.18E-06	3.15E-17	1.50E-11	1.0481	2.79E-05
1.9100	2300.	-159.9	-156.2	4.33E-09	1.07E-05	6.65E-05	2.50E-06	6.38E-16	1.24E-10	1.1027	7.97E-05
1.9100	2400.	-153.7	-152.3	2.98E-08	4.01E-05	1.68E-04	4.99E-06	1.01E-14	8.63E-10	1.1651	2.13E-04
1.9100	2500.	-147.5	-148.4	1.76E-07	1.35E-04	3.94E-04	9.40E-06	1.27E-13	5.13E-09	1.2346	5.39E-04
1.9100	2600.	-140.8	-144.4	9.56E-07	4.18E-04	8.29E-04	1.55E-05	1.45E-12	2.78E-08	1.3202	1.26E-03
1.9100	2700.	-134.2	-140.5	4.57E-06	1.19E-03	1.65E-03	2.45E-05	1.38E-11	1.33E-07	1.4087	2.87E-03
1.9100	2800.	-127.5	-136.5	1.95E-05	3.13E-03	3.13E-03	3.77E-05	1.12E-10	5.70E-07	1.4956	6.32E-03
1.9100	2900.	-120.8	-132.6	7.55E-05	7.72E-03	5.69E-03	5.61E-05	7.83E-10	2.21E-06	1.5773	1.35E-02
1.9100	3000.	-114.1	-128.6	2.67E-04	1.79E-02	9.92E-03	8.15E-05	4.82E-09	7.80E-06	1.6520	2.82E-02
1.9100	3100.	-107.8	-124.7	8.47E-04	3.93E-02	1.71E-02	1.21E-04	2.52E-08	2.48E-05	1.7136	5.74E-02
1.9100	3200.	-101.4	-121.2	2.33E-03	7.63E-02	2.63E-02	1.62E-04	1.19E-07	7.36E-05	1.7693	1.05E-01
1.9100	3300.	-95.0	-117.8	5.92E-03	1.40E-01	3.91E-02	2.11E-04	5.10E-07	2.04E-04	1.8202	1.86E-01
1.9100	3400.	-88.6	-114.4	1.43E-02	2.49E-01	5.66E-02	2.70E-04	2.01E-06	5.33E-04	1.8677	3.21E-01
1.9100	3500.	-82.2	-111.1	3.27E-02	4.28E-01	8.04E-02	3.42E-04	7.31E-06	1.32E-03	1.9131	5.42E-01
1.9100	3600.	-76.8	-107.7	6.69E-02	7.09E-01	1.18E-01	4.80E-04	2.19E-05	2.91E-03	1.9447	8.97E-01
1.9100	3700.	-71.3	-104.3	1.32E-01	1.14E+00	1.71E-01	6.62E-04	6.16E-05	6.16E-03	1.9764	1.45E+00
1.9100	3800.	-65.8	-100.9	2.50E-01	1.80E+00	2.42E-01	8.97E-04	1.65E-04	1.25E-02	2.0085	2.30E+00
1.9100	3900.	-60.3	-97.5	4.59E-01	2.76E+00	3.36E-01	1.20E-03	4.18E-04	2.46E-02	2.0413	3.58E+00
1.9100	4000.	-54.8	-94.1	8.19E-01	4.15E+00	4.59E-01	1.58E-03	1.01E-03	4.66E-02	2.0747	5.48E+00
1.9100	4100.	-49.8	-90.7	1.37E+00	6.10E+00	6.36E-01	2.18E-03	2.20E-03	8.30E-02	2.1006	8.19E+00
1.9100	4200.	-44.9	-87.4	2.23E+00	8.80E+00	8.69E-01	2.96E-03	4.62E-03	1.44E-01	2.1270	1.21E+01
1.9100	4300.	-39.9	-84.0	3.56E+00	1.25E+01	1.17E+00	3.97E-03	9.35E-03	2.43E-01	2.1538	1.75E+01
1.9100	4400.	-35.0	-80.6	5.57E+00	1.74E+01	1.55E+00	5.25E-03	1.83E-02	4.00E-01	2.1808	2.50E+01
1.9100	4500.	-30.0	-77.2	8.52E+00	2.40E+01	2.04E+00	6.86E-03	3.49E-02	6.44E-01	2.2080	3.52E+01
1.9100	4600.	-25.4	-73.8	1.26E+01	3.25E+01	2.68E+00	9.18E-03	6.23E-02	9.99E-01	2.2301	4.88E+01
1.9100	4700.	-20.7	-70.4	1.82E+01	4.34E+01	3.49E+00	1.21E-02	1.09E-01	1.52E+00	2.2522	6.68E+01
1.9100	4800.	-16.1	-67.0	2.60E+01	5.74E+01	4.50E+00	1.58E-02	1.85E-01	2.27E+00	2.2743	9.03E+01
1.9100	4900.	-11.5	-63.6	3.65E+01	7.49E+01	5.73E+00	2.04E-02	3.08E-01	3.35E+00	2.2963	1.21E+02
1.9100	5000.	-6.9	-60.3	5.07E+01	9.68E+01	7.23E+00	2.61E-02	5.02E-01	4.85E+00	2.3184	1.60E+02

(O/M) SOL	TEMP	CO2	GFU02S	P-U03	P-U02	P-U0	P-U	P-02	P-0	(O/M) GAS	P-TOTAL
1.9200	2000.	-177.0	-169.0	5.09E-12	9.30E-08	2.00E-06	1.46E-07	4.54E-20	1.40E-13	0.9762	2.24E-06
1.9200	2100.	-170.6	-165.0	6.53E-11	5.28E-07	6.65E-06	3.51E-07	1.75E-18	1.82E-12	1.0236	7.53E-06
1.9200	2200.	-164.2	-161.0	6.64E-10	2.56E-06	1.98E-05	7.77E-07	4.86E-17	1.87E-11	1.0772	2.32E-05
1.9200	2300.	-157.8	-157.1	5.52E-09	1.08E-05	5.37E-05	1.60E-06	1.01E-15	1.56E-10	1.1399	6.61E-05
1.9200	2400.	-151.4	-153.1	3.85E-08	4.06E-05	1.34E-04	3.12E-06	1.63E-14	1.10E-09	1.2118	1.78E-04
1.9200	2500.	-145.0	-149.1	2.30E-07	1.37E-04	3.10E-04	5.75E-06	2.10E-13	6.60E-09	1.2910	4.53E-04
1.9200	2600.	-138.6	-145.2	1.19E-06	4.21E-04	6.73E-04	1.01E-05	2.23E-12	3.45E-08	1.3741	1.11E-03
1.9200	2700.	-132.2	-141.2	5.50E-06	1.19E-03	1.38E-03	1.71E-05	1.99E-11	1.60E-07	1.4569	2.59E-03
1.9200	2800.	-125.8	-137.2	2.27E-05	3.12E-03	2.69E-03	2.78E-05	1.51E-10	6.63E-07	1.5362	5.86E-03
1.9200	2900.	-119.4	-133.3	8.49E-05	7.67E-03	5.00E-03	4.36E-05	1.00E-09	2.49E-06	1.6095	1.28E-02
1.9200	3000.	-113.0	-129.3	2.91E-04	1.77E-02	8.92E-03	6.65E-05	5.85E-09	8.59E-06	1.6761	2.70E-02
1.9200	3100.	-106.5	-125.3	9.30E-04	3.89E-02	1.52E-02	9.72E-05	3.10E-08	2.75E-05	1.7378	5.52E-02
1.9200	3200.	-100.0	-121.9	2.57E-03	7.55E-02	2.33E-02	1.29E-04	1.48E-07	8.20E-05	1.7926	1.02E-01
1.9200	3300.	-93.5	-118.4	6.56E-03	1.39E-01	3.44E-02	1.66E-04	6.42E-07	2.29E-04	1.8446	1.80E-01
1.9200	3400.	-87.0	-115.0	1.59E-02	2.46E-01	4.95E-02	2.10E-04	2.55E-06	6.01E-04	1.8926	3.12E-01
1.9200	3500.	-80.5	-111.6	3.66E-02	4.21E-01	6.99E-02	2.62E-04	9.40E-06	1.49E-03	1.9389	5.30E-01
1.9200	3600.	-75.0	-108.2	7.45E-02	6.98E-01	1.03E-01	3.70E-04	2.80E-05	3.29E-03	1.9704	8.79E-01
1.9200	3700.	-69.5	-104.8	1.46E-01	1.12E+00	1.49E-01	5.12E-04	7.84E-05	6.95E-03	2.0023	1.43E+00
1.9200	3800.	-64.0	-101.4	2.77E-01	1.77E+00	2.11E-01	6.97E-04	2.08E-04	1.41E-02	2.0349	2.27E+00
1.9200	3900.	-58.5	-98.0	5.06E-01	2.71E+00	2.94E-01	9.34E-04	5.27E-04	2.76E-02	2.0682	3.54E+00
1.9200	4000.	-53.0	-94.6	9.00E-01	4.07E+00	4.02E-01	1.23E-03	1.27E-03	5.22E-02	2.1023	5.43E+00
1.9200	4100.	-48.1	-91.2	1.49E+00	5.98E+00	5.61E-01	1.72E-03	2.73E-03	9.23E-02	2.1278	8.13E+00
1.9200	4200.	-43.2	-87.8	2.42E+00	8.63E+00	7.70E-01	2.37E-03	5.65E-03	1.59E-01	2.1537	1.20E+01
1.9200	4300.	-38.3	-84.4	3.84E+00	1.22E+01	1.04E+00	3.22E-03	1.13E-02	2.67E-01	2.1799	1.74E+01
1.9200	4400.	-33.4	-81.0	5.96E+00	1.71E+01	1.39E+00	4.30E-03	2.19E-02	4.37E-01	2.2064	2.49E+01
1.9200	4500.	-28.5	-77.6	9.07E+00	2.35E+01	1.83E+00	5.68E-03	4.13E-02	7.01E-01	2.2330	3.51E+01
1.9200	4600.	-23.9	-74.2	1.33E+01	3.18E+01	2.43E+00	7.68E-03	7.29E-02	1.08E+00	2.2541	4.86E+01
1.9200	4700.	-19.4	-70.8	1.91E+01	4.25E+01	3.17E+00	1.02E-02	1.26E-01	1.64E+00	2.2753	6.65E+01
1.9200	4800.	-14.8	-67.4	2.72E+01	5.61E+01	4.11E+00	1.35E-02	2.11E-01	2.43E+00	2.2964	9.00E+01
1.9200	4900.	-10.3	-64.0	3.80E+01	7.32E+01	5.26E+00	1.76E-02	3.49E-01	3.56E+00	2.3174	1.20E+02
1.9200	5000.	-5.7	-60.6	5.25E+01	9.46E+01	6.67E+00	2.27E-02	5.63E-01	5.14E+00	2.3385	1.59E+02

Tabelle 3: Gleichgewichtsdampfdrucke von UO_{2+x}

Stöchiometrie	Temp. in K	$\Delta\bar{G}_{O_2}^{\circ}$ kcal/Mol	ΔG_f°	Partialdrucke atm							Stöchiometrie	Totaldruck atm
der kondensierten Phase				in der Gasphase								
(O/M) SOL	TEMP	GO2	GFUO2S	P-UO3	P-UO2	P-UC	P-U	P-O2	P-O	(O/M) GAS	P-TOTAL	
1.9300	2000.	-175.0	-169.8	6.67E-12	9.48E-08	1.59E-06	9.02E-08	7.50E-20	1.81E-13	1.0026	1.77E-06	
1.9300	2100.	-168.5	-165.9	8.48E-11	5.37E-07	5.29E-06	2.18E-07	2.87E-18	2.33E-12	1.0528	6.04E-06	
1.9300	2200.	-162.1	-161.9	8.55E-10	2.60E-06	1.58E-05	4.87E-07	7.86E-17	2.37E-11	1.1119	1.89E-05	
1.9300	2300.	-155.6	-157.9	7.06E-09	1.09E-05	4.28E-05	1.01E-06	1.62E-15	1.98E-10	1.1815	5.48E-05	
1.9300	2400.	-149.2	-153.9	4.89E-08	4.09E-05	1.07E-04	1.98E-06	2.58E-14	1.28E-09	1.2605	1.50E-04	
1.9300	2500.	-142.7	-149.9	2.90E-07	1.38E-04	2.48E-04	3.68E-06	3.31E-13	8.28E-09	1.3454	3.90E-04	
1.9300	2600.	-136.3	-145.9	1.49E-06	4.22E-04	5.43E-04	6.57E-06	3.45E-12	4.29E-08	1.4304	9.73E-04	
1.9300	2700.	-129.9	-141.9	6.79E-06	1.19E-03	1.12E-03	1.12E-05	3.02E-11	1.97E-07	1.5127	2.33E-03	
1.9300	2800.	-123.5	-138.0	2.77E-05	3.12E-03	2.19E-03	1.85E-05	2.27E-10	8.12E-07	1.5894	5.36E-03	
1.9300	2900.	-117.1	-134.0	1.03E-04	7.65E-03	4.10E-03	2.94E-05	1.48E-09	3.03E-06	1.6590	1.19E-02	
1.9300	3000.	-110.7	-130.0	3.50E-04	1.77E-02	7.35E-03	4.54E-05	8.54E-09	1.04E-05	1.7213	2.54E-02	
1.9300	3100.	-104.3	-126.0	1.10E-03	3.86E-02	1.27E-02	6.81E-05	4.39E-08	3.28E-05	1.7771	5.25E-02	
1.9300	3200.	-97.9	-122.5	2.99E-03	7.47E-02	1.97E-02	9.24E-05	2.04E-07	9.64E-05	1.8279	9.76E-02	
1.9300	3300.	-91.5	-119.1	7.52E-03	1.37E-01	2.93E-02	1.21E-04	8.64E-07	2.66E-04	1.8750	1.74E-01	
1.9300	3400.	-85.1	-115.6	1.80E-02	2.42E-01	4.26E-02	1.57E-04	3.36E-06	6.89E-04	1.9200	3.03E-01	
1.9300	3500.	-78.7	-112.2	4.08E-02	4.14E-01	6.06E-02	2.00E-04	1.21E-05	1.69E-03	1.9642	5.18E-01	
1.9300	3600.	-73.2	-108.8	8.29E-02	6.86E-01	8.95E-02	2.83E-04	3.58E-05	3.72E-03	1.9960	8.62E-01	
1.9300	3700.	-67.7	-105.4	1.62E-01	1.10E+00	1.29E-01	3.94E-04	1.00E-04	7.85E-03	2.0285	1.40E+00	
1.9300	3800.	-62.2	-102.0	3.06E-01	1.73E+00	1.84E-01	5.38E-04	2.65E-04	1.59E-02	2.0619	2.24E+00	
1.9300	3900.	-56.7	-98.5	5.59E-01	2.66E+00	2.56E-01	7.23E-04	6.67E-04	3.10E-02	2.0961	3.50E+00	
1.9300	4000.	-51.1	-95.1	9.91E-01	3.99E+00	3.51E-01	9.57E-04	1.60E-03	5.87E-02	2.1312	5.39E+00	
1.9300	4100.	-46.3	-91.7	1.63E+00	5.86E+00	4.93E-01	1.36E-03	3.38E-03	1.03E-01	2.1557	8.09E+00	
1.9300	4200.	-41.5	-88.3	2.62E+00	8.44E+00	6.83E-01	1.90E-03	6.88E-03	1.75E-01	2.1805	1.19E+01	
1.9300	4300.	-36.7	-84.8	4.11E+00	1.20E+01	9.30E-01	2.62E-03	1.36E-02	2.92E-01	2.2055	1.73E+01	
1.9300	4400.	-31.9	-81.4	6.32E+00	1.67E+01	1.25E+00	3.56E-03	2.59E-02	4.75E-01	2.2306	2.47E+01	
1.9300	4500.	-27.1	-78.0	9.55E+00	2.29E+01	1.66E+00	4.77E-03	4.80E-02	7.56E-01	2.2559	3.49E+01	
1.9300	4600.	-22.7	-74.6	1.39E+01	3.10E+01	2.21E+00	6.53E-03	8.36E-02	1.16E+00	2.2758	4.83E+01	
1.9300	4700.	-18.2	-71.2	1.99E+01	4.14E+01	2.91E+00	8.82E-03	1.42E-01	1.74E+00	2.2956	6.61E+01	
1.9300	4800.	-13.7	-67.7	2.80E+01	5.47E+01	3.78E+00	1.18E-02	2.37E-01	2.57E+00	2.3153	8.93E+01	
1.9300	4900.	-9.3	-64.3	3.90E+01	7.14E+01	4.87E+00	1.55E-02	3.86E-01	3.75E+00	2.3350	1.19E+02	
1.9300	5000.	-4.8	-60.9	5.35E+01	9.22E+01	6.21E+00	2.02E-02	6.17E-01	5.37E+00	2.3547	1.58E+02	

(O/M) SOL	TFMP	GO2	GFUO2S	P-U03	P-U02	P-U0	P-U	P-02	P-0	(O/M) GAS	P-TOTAL
1.9400	2000.	-173.0	-170.7	8.70E-12	9.61E-08	1.25E-06	5.53E-08	1.24E-19	2.32E-13	1.0291	1.40E-06
1.9400	2100.	-166.5	-166.7	1.10E-10	5.43E-07	4.18E-06	1.35E-07	4.68E-18	2.97E-12	1.0840	4.86E-06
1.9400	2200.	-160.0	-162.7	1.10E-09	2.62E-06	1.25E-05	3.03E-07	1.27E-16	3.02E-11	1.1500	1.54E-05
1.9400	2300.	-153.5	-158.7	8.98E-09	1.10E-05	3.40E-05	6.36E-07	2.59E-15	2.50E-10	1.2274	4.57E-05
1.9400	2400.	-147.0	-154.7	6.17E-08	4.11E-05	8.52E-05	1.25E-06	4.10E-14	1.74E-09	1.3131	1.28E-04
1.9400	2500.	-140.5	-150.7	3.64E-07	1.38E-04	1.98E-04	2.34E-06	5.21E-13	1.04E-08	1.4024	3.39E-04
1.9400	2600.	-134.1	-146.7	1.85E-06	4.22E-04	4.36E-04	4.24E-06	5.33E-12	5.34E-08	1.4877	8.64E-04
1.9400	2700.	-127.7	-142.7	8.34E-06	1.19E-03	9.04E-04	7.36E-06	4.60E-11	2.43E-07	1.5679	2.11E-03
1.9400	2800.	-121.3	-138.7	3.38E-05	3.10E-03	1.78E-03	1.23E-05	3.40E-10	9.94E-07	1.6409	4.93E-03
1.9400	2900.	-114.9	-134.7	1.24E-04	7.59E-03	3.35E-03	1.98E-05	2.19E-09	3.69E-06	1.7060	1.11E-02
1.9400	3000.	-108.5	-130.7	4.19E-04	1.75E-02	6.03E-03	3.08E-05	1.24E-08	1.25E-05	1.7639	2.40E-02
1.9400	3100.	-102.2	-126.7	1.29E-03	3.82E-02	1.05E-02	4.75E-05	6.23E-08	3.90E-05	1.8142	5.01E-02
1.9400	3200.	-95.9	-123.1	3.46E-03	7.37E-02	1.65E-02	6.61E-05	2.82E-07	1.13E-04	1.8605	9.39E-02
1.9400	3300.	-89.6	-119.7	8.60E-03	1.35E-01	2.48E-02	8.88E-05	1.16E-06	3.08E-04	1.9043	1.69E-01
1.9400	3400.	-83.3	-116.2	2.02E-02	2.38E-01	3.65E-02	1.17E-04	4.42E-06	7.90E-04	1.9468	2.96E-01
1.9400	3500.	-77.0	-112.8	4.54E-02	4.06E-01	5.24E-02	1.53E-04	1.55E-05	1.92E-03	1.9894	5.06E-01
1.9400	3600.	-71.5	-109.4	9.19E-02	6.72E-01	7.75E-02	2.17E-04	4.59E-05	4.21E-03	2.0217	8.46E-01
1.9400	3700.	-65.9	-105.9	1.79E-01	1.08E+00	1.12E-01	3.02E-04	1.28E-04	8.86E-03	2.0550	1.38E+00
1.9400	3800.	-60.4	-102.5	3.37E-01	1.70E+00	1.59E-01	4.14E-04	3.37E-04	1.79E-02	2.0893	2.21E+00
1.9400	3900.	-54.8	-99.0	6.15E-01	2.60E+00	2.22E-01	5.58E-04	8.44E-04	3.49E-02	2.1245	3.47E+00
1.9400	4000.	-49.3	-95.6	1.09E+00	3.90E+00	3.05E-01	7.41E-04	2.02E-03	6.59E-02	2.1607	5.36E+00
1.9400	4100.	-44.6	-92.2	1.77E+00	5.72E+00	4.33E-01	1.07E-03	4.19E-03	1.14E-01	2.1841	8.04E+00
1.9400	4200.	-39.9	-88.7	2.82E+00	8.24E+00	6.04E-01	1.53E-03	8.39E-03	1.94E-01	2.2077	1.19E+01
1.9400	4300.	-35.2	-85.3	4.39E+00	1.17E+01	8.29E-01	2.13E-03	1.62E-02	3.20E-01	2.2315	1.72E+01
1.9400	4400.	-30.5	-81.8	6.70E+00	1.63E+01	1.12E+00	2.94E-03	3.05E-02	5.16E-01	2.2553	2.46E+01
1.9400	4500.	-25.8	-78.4	1.00E+01	2.23E+01	1.50E+00	4.00E-03	5.58E-02	8.15E-01	2.2792	3.47E+01
1.9400	4600.	-21.4	-75.0	1.45E+01	3.02E+01	2.01E+00	5.54E-03	9.60E-02	1.24E+00	2.2977	4.81E+01
1.9400	4700.	-17.0	-71.5	2.06E+01	4.04E+01	2.66E+00	7.58E-03	1.61E-01	1.85E+00	2.3161	6.57E+01
1.9400	4800.	-12.7	-68.1	2.89E+01	5.33E+01	3.48E+00	1.02E-02	2.65E-01	2.72E+00	2.3345	8.86E+01
1.9400	4900.	-8.3	-64.6	4.00E+01	6.95E+01	4.51E+00	1.36E-02	4.27E-01	3.94E+00	2.3528	1.18E+02
1.9400	5000.	-3.9	-61.2	5.45E+01	8.97E+01	5.78E+00	1.80E-02	6.75E-01	5.62E+00	2.3711	1.56E+02

Tabelle 3: Gleichgewichtsdampfdrucke von UO_{2+x}

Stöchiometrie	Temp. in K	$\Delta \bar{G}_{O_2}$ kcal/Mol	ΔG_f^O	Partialdrucke atm							Stöchiometrie	Totaldruck atm
der kondensierten Phase				in der Gasphase								
(O/M) SOL	TEMP	GO2	GFUO2S	P-UO3	P-UO2	P-UO	P-U	P-O2	P-O	(O/M) GAS	P-TOTAL	
1.9500	2000.	-169.7	-171.6	1.34E-11	9.78E-08	8.41E-07	2.45E-08	2.85E-19	3.52E-13	1.0761	9.63E-07	
1.9500	2100.	-163.3	-167.6	1.63E-10	5.50E-07	2.89E-06	6.36E-08	1.01E-17	4.36E-12	1.1388	3.50E-06	
1.9500	2200.	-156.9	-163.5	1.57E-09	2.64E-06	8.87E-06	1.51E-07	2.57E-16	4.29E-11	1.2136	1.17E-05	
1.9500	2300.	-150.5	-159.5	1.25E-08	1.11E-05	2.47E-05	3.34E-07	4.96E-15	3.47E-10	1.2976	3.61E-05	
1.9500	2400.	-144.1	-155.5	8.35E-08	4.12E-05	6.33E-05	6.89E-07	7.47E-14	2.35E-09	1.3863	1.05E-04	
1.9500	2500.	-137.7	-151.5	4.79E-07	1.38E-04	1.50E-04	1.34E-06	9.06E-13	1.37E-08	1.4743	2.90E-04	
1.9500	2600.	-131.3	-147.4	2.41E-06	4.20E-04	3.33E-04	2.48E-06	9.08E-12	6.96E-08	1.5576	7.58E-04	
1.9500	2700.	-124.9	-143.4	1.07E-05	1.18E-03	6.96E-04	4.39E-06	7.68E-11	3.14E-07	1.6333	1.89E-03	
1.9500	2800.	-118.5	-139.4	4.29E-05	3.08E-03	1.38E-03	7.44E-06	5.57E-10	1.27E-06	1.7005	4.51E-03	
1.9500	2900.	-112.1	-135.4	1.56E-04	7.53E-03	2.61E-03	1.22E-05	3.53E-09	4.68E-06	1.7597	1.03E-02	
1.9500	3000.	-105.7	-131.3	5.22E-04	1.73E-02	4.74E-03	1.92E-05	1.97E-08	1.58E-05	1.8124	2.26E-02	
1.9500	3100.	-99.3	-127.3	1.62E-03	3.78E-02	8.24E-03	2.93E-05	9.97E-08	4.94E-05	1.8609	4.77E-02	
1.9500	3200.	-92.8	-123.8	4.35E-03	7.28E-02	1.28E-02	4.04E-05	4.55E-07	1.44E-04	1.9064	9.02E-02	
1.9500	3300.	-86.4	-120.3	1.08E-02	1.33E-01	1.92E-02	5.38E-05	1.89E-06	3.93E-04	1.9504	1.63E-01	
1.9500	3400.	-79.9	-116.8	2.56E-02	2.34E-01	2.80E-02	7.05E-05	7.25E-06	1.01E-03	1.9944	2.89E-01	
1.9500	3500.	-73.5	-113.4	5.74E-02	4.00E-01	4.01E-02	9.09E-05	2.57E-05	2.47E-03	2.0395	5.00E-01	
1.9500	3600.	-68.1	-109.9	1.14E-01	6.60E-01	6.02E-02	1.33E-04	7.34E-05	5.33E-03	2.0709	8.40E-01	
1.9500	3700.	-62.7	-106.5	2.19E-01	1.06E+00	8.85E-02	1.92E-04	1.98E-04	1.10E-02	2.1034	1.38E+00	
1.9500	3800.	-57.3	-103.0	4.06E-01	1.66E+00	1.27E-01	2.70E-04	5.06E-04	2.20E-02	2.1369	2.22E+00	
1.9500	3900.	-51.9	-99.6	7.28E-01	2.55E+00	1.80E-01	3.74E-04	1.23E-03	4.22E-02	2.1713	3.50E+00	
1.9500	4000.	-46.5	-96.1	1.27E+00	3.81E+00	2.50E-01	5.10E-04	2.88E-03	7.86E-02	2.2065	5.42E+00	
1.9500	4100.	-41.9	-92.6	2.04E+00	5.59E+00	3.59E-01	7.56E-04	5.82E-03	1.35E-01	2.2285	8.13E+00	
1.9500	4200.	-37.4	-89.2	3.21E+00	8.05E+00	5.07E-01	1.10E-03	1.14E-02	2.25E-01	2.2505	1.20E+01	
1.9500	4300.	-32.8	-85.7	4.94E+00	1.14E+01	7.03E-01	1.57E-03	2.15E-02	3.68E-01	2.2725	1.74E+01	
1.9500	4400.	-28.2	-82.3	7.45E+00	1.59E+01	9.62E-01	2.21E-03	3.96E-02	5.88E-01	2.2945	2.49E+01	
1.9500	4500.	-23.6	-78.8	1.10E+01	2.18E+01	1.30E+00	3.07E-03	7.10E-02	9.19E-01	2.3165	3.51E+01	
1.9500	4600.	-19.5	-75.4	1.57E+01	2.95E+01	1.77E+00	4.40E-03	1.18E-01	1.37E+00	2.3305	4.84E+01	
1.9500	4700.	-15.4	-71.9	2.19E+01	3.93E+01	2.38E+00	6.21E-03	1.92E-01	2.02E+00	2.3445	6.58E+01	
1.9500	4800.	-11.3	-68.4	3.02E+01	5.19E+01	3.16E+00	8.65E-03	3.05E-01	2.92E+00	2.3584	8.85E+01	
1.9500	4900.	-7.2	-65.0	4.11E+01	6.76E+01	4.15E+00	1.19E-02	4.77E-01	4.17E+00	2.3723	1.18E+02	
1.9500	5000.	-3.1	-61.5	5.52E+01	8.73E+01	5.40E+00	1.61E-02	7.32E-01	5.85E+00	2.3860	1.54E+02	

101

(O/M)SOL	TEMP	GO2	GFUO2S	P-U03	P-U02	P-UC	P-U	P-02	P-0	(O/M)GAS	P-TOTAL
1.9600	2000.	-166.4	-172.5	2.05E-11	9.86E-08	5.60E-07	1.08E-08	6.53E-19	5.33E-13	1.1313	6.69E-07
1.9600	2100.	-160.1	-168.4	2.40E-10	5.52E-07	1.98E-06	2.97E-08	2.16E-17	6.39E-12	1.2040	2.56E-06
1.9600	2200.	-153.8	-164.4	2.24E-09	2.64E-06	6.25E-06	7.49E-08	5.20E-16	6.11E-11	1.2869	8.57E-06
1.9600	2300.	-147.6	-160.3	1.73E-08	1.10E-05	1.78E-05	1.74E-07	9.49E-15	4.80E-10	1.3751	2.91E-05
1.9600	2400.	-141.3	-156.3	1.12E-07	4.10E-05	4.67E-05	3.77E-07	1.36E-13	3.17E-09	1.4633	8.81E-05
1.9600	2500.	-135.0	-152.2	6.28E-07	1.37E-04	1.13E-04	7.67E-07	1.58E-12	1.81E-08	1.5466	2.51E-04
1.9600	2600.	-128.6	-148.2	3.11E-06	4.17E-04	2.53E-04	1.45E-06	1.55E-11	9.09E-08	1.6253	6.74E-04
1.9600	2700.	-122.2	-144.1	1.37E-05	1.17E-03	5.33E-04	2.60E-06	1.28E-10	4.06E-07	1.6949	1.72E-03
1.9600	2800.	-115.8	-140.1	5.43E-05	3.04E-03	1.07E-03	4.48E-06	9.13E-10	1.63E-06	1.7556	4.17E-03
1.9600	2900.	-109.4	-136.1	1.96E-04	7.43E-03	2.03E-03	7.44E-06	5.68E-09	5.94E-06	1.8091	9.67E-03
1.9600	3000.	-103.0	-132.0	6.48E-04	1.71E-02	3.71E-03	1.20E-05	3.13E-08	1.99E-05	1.8570	2.15E-02
1.9600	3100.	-96.4	-128.0	2.02E-03	3.72E-02	6.41E-03	1.80E-05	1.60E-07	6.25E-05	1.9043	4.57E-02
1.9600	3200.	-89.8	-124.4	5.43E-03	7.16E-02	9.93E-03	2.46E-05	7.35E-07	1.83E-04	1.9498	8.72E-02
1.9600	3300.	-83.2	-120.9	1.36E-02	1.31E-01	1.48E-02	3.24E-05	3.09E-06	5.02E-04	1.9952	1.59E-01
1.9600	3400.	-76.6	-117.4	3.21E-02	2.30E-01	2.15E-02	4.21E-05	1.19E-05	1.30E-03	2.0419	2.85E-01
1.9600	3500.	-70.0	-114.0	7.24E-02	3.92E-01	3.05E-02	5.38E-05	4.25E-05	3.18E-03	2.0909	4.98E-01
1.9600	3600.	-64.7	-110.5	1.41E-01	6.46E-01	4.66E-02	8.15E-05	1.17E-04	6.74E-03	2.1218	8.41E-01
1.9600	3700.	-59.5	-107.0	2.66E-01	1.04E+00	6.95E-02	1.21E-04	3.06E-04	1.37E-02	2.1537	1.39E+00
1.9600	3800.	-54.2	-103.5	4.86E-01	1.62E+00	1.02E-01	1.75E-04	7.61E-04	2.69E-02	2.1865	2.24E+00
1.9600	3900.	-49.0	-100.1	8.58E-01	2.48E+00	1.45E-01	2.50E-04	1.80E-03	5.11E-02	2.2200	3.54E+00
1.9600	4000.	-43.7	-96.6	1.47E+00	3.72E+00	2.05E-01	3.49E-04	4.09E-03	9.37E-02	2.2541	5.50E+00
1.9600	4100.	-39.3	-93.1	2.34E+00	5.45E+00	2.97E-01	5.31E-04	8.07E-03	1.59E-01	2.2743	8.25E+00
1.9600	4200.	-34.8	-89.6	3.64E+00	7.84E+00	4.24E-01	7.90E-04	1.54E-02	2.63E-01	2.2945	1.22E+01
1.9600	4300.	-30.4	-86.2	5.53E+00	1.11E+01	5.95E-01	1.15E-03	2.86E-02	4.24E-01	2.3146	1.77E+01
1.9600	4400.	-25.9	-82.7	8.26E+00	1.54E+01	8.22E-01	1.66E-03	5.15E-02	6.70E-01	2.3347	2.53E+01
1.9600	4500.	-21.5	-79.2	1.21E+01	2.12E+01	1.12E+00	2.35E-03	9.03E-02	1.04E+00	2.3546	3.56E+01
1.9600	4600.	-17.7	-75.7	1.69E+01	2.87E+01	1.55E+00	3.48E-03	1.45E-01	1.52E+00	2.3640	4.88E+01
1.9600	4700.	-13.8	-72.3	2.32E+01	3.82E+01	2.12E+00	5.09E-03	2.28E-01	2.20E+00	2.3734	6.60E+01
1.9600	4800.	-10.0	-68.8	3.15E+01	5.04E+01	2.87E+00	7.31E-03	3.51E-01	3.14E+00	2.3827	8.83E+01
1.9600	4900.	-6.1	-65.3	4.22E+01	6.57E+01	3.82E+00	1.04E-02	5.32E-01	4.40E+00	2.3920	1.17E+02
1.9600	5000.	-2.3	-61.8	5.59E+01	8.48E+01	5.04E+00	1.45E-02	7.93E-01	6.09E+00	2.4012	1.53E+02

Tabelle 3: Gleichgewichtsdampfdrucke von UO_{2+x}

Stöchiometrie	Temp. in K	$\bar{\Delta G}_{O_2}^{\circ}$ kcal/Mol	ΔG_f°	Partialdrucke atm							Stöchiometrie	Totaldruck atm
der kondensierten Phase				in der Gasphase								
(C/M) SOL	TEMP	GO2	GFUO2S	P-UO3	P-UO2	P-UO	P-U	P-O2	P-O	(O/M) GAS	P-TOTAL	
1.9700	2000.	-162.2	-173.4	3.49E-11	9.90E-08	3.31E-07	3.76E-09	1.88E-18	9.04E-13	1.2196	4.34E-07	
1.9700	2100.	-155.8	-169.3	4.02E-10	5.53E-07	1.18E-06	1.06E-08	6.07E-17	1.07E-11	1.3108	1.75E-06	
1.9700	2200.	-149.4	-165.2	3.71E-09	2.64E-06	3.77E-06	2.72E-08	1.43E-15	1.01E-10	1.4072	6.44E-06	
1.9700	2300.	-143.0	-161.2	2.83E-08	1.10E-05	1.08E-05	6.44E-08	2.56E-14	7.88E-10	1.5017	2.20E-05	
1.9700	2400.	-136.6	-157.1	1.82E-07	4.08E-05	2.86E-05	1.42E-07	3.60E-13	5.16E-09	1.5887	6.97E-05	
1.9700	2500.	-130.2	-153.0	1.01E-06	1.36E-04	6.97E-05	2.93E-07	4.10E-12	2.91E-08	1.6657	2.07E-04	
1.9700	2600.	-123.9	-149.0	4.84E-06	4.13E-04	1.60E-04	5.83E-07	3.80E-11	1.43E-07	1.7302	5.79E-04	
1.9700	2700.	-117.6	-144.9	2.07E-05	1.16E-03	3.45E-04	1.10E-06	2.99E-10	6.20E-07	1.7859	1.52E-03	
1.9700	2800.	-111.3	-140.8	8.00E-05	3.01E-03	7.06E-04	1.99E-06	2.03E-09	2.43E-06	1.8347	3.80E-03	
1.9700	2900.	-105.1	-136.7	2.82E-04	7.32E-03	1.37E-03	3.45E-06	1.21E-08	8.66E-06	1.8787	8.99E-03	
1.9700	3000.	-98.7	-132.7	9.11E-04	1.68E-02	2.55E-03	5.77E-06	6.39E-08	2.84E-05	1.9197	2.03E-02	
1.9700	3100.	-92.4	-128.6	2.74E-03	3.65E-02	4.55E-03	9.25E-06	3.06E-07	8.65E-05	1.9603	4.39E-02	
1.9700	3200.	-86.0	-125.0	7.14E-03	7.02E-02	7.25E-03	1.34E-05	1.33E-06	2.46E-04	2.0014	8.48E-02	
1.9700	3300.	-79.7	-121.5	1.73E-02	1.28E-01	1.11E-02	1.86E-05	5.26E-06	6.56E-04	2.0441	1.57E-01	
1.9700	3400.	-73.4	-118.0	3.98E-02	2.24E-01	1.65E-02	2.54E-05	1.93E-05	1.65E-03	2.0891	2.82E-01	
1.9700	3500.	-67.0	-114.5	8.74E-02	3.82E-01	2.40E-02	3.40E-05	6.55E-05	3.94E-03	2.1368	4.97E-01	
1.9700	3600.	-61.9	-111.1	1.68E-01	6.29E-01	3.72E-02	5.33E-05	1.75E-04	8.22E-03	2.1668	8.42E-01	
1.9700	3700.	-56.8	-107.6	3.11E-01	1.01E+00	5.63E-02	8.16E-05	4.41E-04	1.65E-02	2.1976	1.39E+00	
1.9700	3800.	-51.7	-104.1	5.57E-01	1.58E+00	8.34E-02	1.22E-04	1.06E-03	3.18E-02	2.2290	2.25E+00	
1.9700	3900.	-46.6	-100.6	9.70E-01	2.41E+00	1.21E-01	1.79E-04	2.45E-03	5.95E-02	2.2608	3.56E+00	
1.9700	4000.	-41.5	-97.1	1.64E+00	3.61E+00	1.73E-01	2.57E-04	5.40E-03	1.08E-01	2.2929	5.54E+00	
1.9700	4100.	-37.2	-93.6	2.58E+00	5.28E+00	2.54E-01	4.00E-04	1.04E-02	1.80E-01	2.3109	8.31E+00	
1.9700	4200.	-32.9	-90.1	3.96E+00	7.60E+00	3.66E-01	6.09E-04	1.94E-02	2.95E-01	2.3289	1.22E+01	
1.9700	4300.	-28.6	-86.6	5.96E+00	1.08E+01	5.20E-01	9.09E-04	3.52E-02	4.70E-01	2.3467	1.77E+01	
1.9700	4400.	-24.3	-83.1	8.80E+00	1.50E+01	7.26E-01	1.33E-03	6.21E-02	7.35E-01	2.3645	2.53E+01	
1.9700	4500.	-20.0	-79.6	1.28E+01	2.06E+01	9.98E-01	1.92E-03	1.07E-01	1.13E+00	2.3821	3.56E+01	
1.9700	4600.	-16.2	-76.1	1.77E+01	2.78E+01	1.39E+00	2.89E-03	1.69E-01	1.65E+00	2.3903	4.87E+01	
1.9700	4700.	-12.5	-72.6	2.42E+01	3.71E+01	1.92E+00	4.27E-03	2.63E-01	2.37E+00	2.3984	6.59E+01	
1.9700	4800.	-8.7	-69.1	3.27E+01	4.90E+01	2.60E+00	6.20E-03	4.02E-01	3.36E+00	2.4065	8.80E+01	
1.9700	4900.	-4.9	-65.6	4.36E+01	6.39E+01	3.49E+00	8.87E-03	6.03E-01	4.69E+00	2.4146	1.16E+02	
1.9700	5000.	-1.2	-62.2	5.75E+01	8.24E+01	4.62E+00	1.25E-02	8.91E-01	6.46E+00	2.4227	1.52E+02	

-12-

(O/M) SOL	TEMP	G02	GFUC2S	P-U03	P-U02	P-UG	P-U	P-D2	P-U	(O/M) GAS	P-TOTAL
1.9800	2000.	-158.0	-174.2	5.87E-11	9.83E-08	1.94E-07	1.30E-09	5.41E-18	1.53E-12	1.3308	2.94E-07
1.9800	2100.	-151.5	-170.2	6.68E-10	5.48E-07	7.00E-07	3.74E-09	1.71E-16	1.79E-11	1.4357	1.25E-06
1.9800	2200.	-145.0	-166.1	6.09E-09	2.61E-06	2.25E-06	9.80E-09	3.93E-15	1.68E-10	1.5364	4.88E-06
1.9800	2300.	-138.5	-162.0	4.58E-08	1.09E-05	6.52E-06	2.36E-08	6.89E-14	1.29E-09	1.6268	1.75E-05
1.9800	2400.	-132.0	-157.9	2.91E-07	4.02E-05	1.73E-05	5.28E-08	9.52E-13	8.40E-09	1.7042	5.79E-05
1.9800	2500.	-125.5	-153.8	1.60E-06	1.34E-04	4.25E-05	1.11E-07	1.07E-11	4.70E-08	1.7693	1.78E-04
1.9800	2600.	-119.3	-149.7	7.46E-06	4.06E-04	1.00E-04	2.33E-07	9.36E-11	2.24E-07	1.8191	5.14E-04
1.9800	2700.	-113.1	-145.6	3.11E-05	1.13E-03	2.22E-04	4.63E-07	6.99E-10	9.48E-07	1.8627	1.39E-03
1.9800	2800.	-106.9	-141.5	1.17E-04	2.95E-03	4.64E-04	8.76E-07	4.52E-09	3.62E-06	1.9023	3.53E-03
1.9800	2900.	-100.7	-137.4	4.02E-04	7.16E-03	9.21E-04	1.59E-06	2.57E-08	1.26E-05	1.9399	8.50E-03
1.9800	3000.	-94.5	-133.4	1.27E-03	1.64E-02	1.75E-03	2.76E-06	1.30E-07	4.05E-05	1.9773	1.95E-02
1.9800	3100.	-88.4	-129.3	3.70E-03	3.56E-02	3.21E-03	4.71E-06	5.85E-07	1.20E-04	2.0142	4.27E-02
1.9800	3200.	-82.3	-125.7	9.35E-03	6.83E-02	5.26E-03	7.21E-06	2.39E-06	3.30E-04	2.0532	8.33E-02
1.9800	3300.	-76.2	-122.1	2.20E-02	1.24E-01	8.23E-03	1.06E-05	8.98E-06	8.56E-04	2.0946	1.55E-01
1.9800	3400.	-70.1	-118.6	4.92E-02	2.18E-01	1.26E-02	1.52E-05	3.12E-05	2.10E-03	2.1387	2.82E-01
1.9800	3500.	-64.0	-115.1	1.05E-01	3.70E-01	1.87E-02	2.14E-05	1.01E-04	4.89E-03	2.1852	4.99E-01
1.9800	3600.	-59.1	-111.6	1.98E-01	6.09E-01	2.95E-02	3.47E-05	2.00E-04	1.00E-02	2.2141	8.47E-01
1.9800	3700.	-54.1	-108.1	3.61E-01	9.76E-01	4.54E-02	5.49E-05	6.35E-04	1.98E-02	2.2435	1.40E+00
1.9800	3800.	-49.2	-104.6	6.38E-01	1.53E+00	6.84E-02	8.46E-05	1.48E-03	3.76E-02	2.2731	2.27E+00
1.9800	3900.	-44.2	-101.1	1.09E+00	2.33E+00	1.01E-01	1.28E-04	3.32E-03	6.92E-02	2.3030	3.60E+00
1.9800	4000.	-39.3	-97.6	1.83E+00	3.49E+00	1.46E-01	1.88E-04	7.12E-03	1.24E-01	2.3328	5.59E+00
1.9800	4100.	-35.1	-94.1	2.83E+00	5.11E+00	2.17E-01	3.00E-04	1.34E-02	2.05E-01	2.3485	8.38E+00
1.9800	4200.	-31.0	-90.6	4.30E+00	7.36E+00	3.16E-01	4.68E-04	2.44E-02	3.30E-01	2.3641	1.23E+01
1.9800	4300.	-26.8	-87.0	6.40E+00	1.04E+01	4.53E-01	7.15E-04	4.33E-02	5.22E-01	2.3795	1.78E+01
1.9800	4400.	-22.7	-83.5	9.36E+00	1.45E+01	6.39E-01	1.07E-03	7.49E-02	8.08E-01	2.3948	2.54E+01
1.9800	4500.	-18.5	-80.0	1.35E+01	1.99E+01	8.89E-01	1.57E-03	1.26E-01	1.23E+00	2.4107	3.56E+01
1.9800	4600.	-14.8	-76.5	1.86E+01	2.69E+01	1.25E+00	2.39E-03	1.98E-01	1.78E+00	2.4169	4.87E+01
1.9800	4700.	-11.1	-73.0	2.53E+01	3.60E+01	1.73E+00	3.58E-03	3.05E-01	2.55E+00	2.4239	6.58E+01
1.9800	4800.	-7.4	-69.5	3.39E+01	4.75E+01	2.36E+00	5.25E-03	4.60E-01	3.59E+00	2.4307	8.78E+01
1.9800	4900.	-3.7	-66.0	4.50E+01	6.19E+01	3.18E+00	7.59E-03	6.84E-01	4.99E+00	2.4376	1.16E+02
1.9800	5000.	-0.0	-62.5	5.91E+01	8.00E+01	4.23E+00	1.08E-02	1.00E+00	6.84E+00	2.4445	1.51E+02

Tabelle 3: Gleichgewichtsdampfdrucke von UO_{2+x}

Stöchiometrie	Temp. in K	$\Delta\bar{G}_{O_2}$ kcal/Mol	ΔG_f°	Partialdrucke atm							Stöchiometrie	Totaldruck atm
der kondensierten Phase				in der Gasphase								
(O/M) SOL	TEMP	GO2	GFUO2S	P-UO3	P-UO2	P-UO	P-U	P-O2	P-O	(O/M) GAS	P-TOTAL	
1.9900	2000.	-151.6	-175.1	1.29E-10	9.69E-08	8.55E-08	2.55E-10	2.71E-17	3.43E-12	1.5303	1.83E-07	
1.9900	2100.	-145.1	-171.0	1.42E-09	5.39E-07	3.19E-07	7.90E-10	7.94E-16	3.87E-11	1.6291	8.60E-07	
1.9900	2200.	-138.6	-166.9	1.25E-08	2.57E-06	1.06E-06	2.20E-09	1.71E-14	3.51E-10	1.7119	3.64E-06	
1.9900	2300.	-132.0	-162.8	9.10E-08	1.07E-05	3.15E-06	5.63E-09	2.83E-13	2.62E-09	1.7794	1.39E-05	
1.9900	2400.	-125.5	-158.7	5.62E-07	3.93E-05	8.59E-06	1.33E-08	3.71E-12	1.66E-08	1.8344	4.85E-05	
1.9900	2500.	-119.0	-154.6	3.00E-06	1.31E-04	2.16E-05	2.93E-08	3.95E-11	9.04E-08	1.8806	1.56E-04	
1.9900	2600.	-112.5	-150.5	1.41E-05	3.96E-04	5.07E-05	6.10E-08	3.49E-10	4.32E-07	1.9213	4.62E-04	
1.9900	2700.	-106.0	-146.4	5.88E-05	1.11E-03	1.12E-04	1.20E-07	2.63E-09	1.84E-06	1.9599	1.28E-03	
1.9900	2800.	-99.5	-142.2	2.22E-04	2.87E-03	2.32E-04	2.26E-07	1.71E-08	7.05E-06	1.9988	3.33E-03	
1.9900	2900.	-93.0	-138.1	7.63E-04	6.98E-03	4.60E-04	4.06E-07	9.79E-08	2.47E-05	2.0399	8.22E-03	
1.9900	3000.	-86.5	-134.0	2.42E-03	1.60E-02	8.70E-04	7.03E-07	4.99E-07	7.93E-05	2.0846	1.93E-02	
1.9900	3100.	-80.5	-129.9	6.84E-03	3.47E-02	1.64E-03	1.27E-06	2.11E-06	2.27E-04	2.1257	4.34E-02	
1.9900	3200.	-74.5	-126.3	1.68E-02	6.64E-02	2.76E-03	2.05E-06	8.16E-06	6.09E-04	2.1702	8.65E-02	
1.9900	3300.	-68.5	-122.8	3.84E-02	1.20E-01	4.44E-03	3.18E-06	2.90E-05	1.54E-03	2.2176	1.65E-01	
1.9900	3400.	-62.5	-119.2	8.37E-02	2.11E-01	6.94E-03	4.79E-06	9.60E-05	3.68E-03	2.2672	3.05E-01	
1.9900	3500.	-56.5	-115.7	1.75E-01	3.58E-01	1.06E-02	7.06E-06	2.96E-04	8.39E-03	2.3183	5.52E-01	
1.9900	3600.	-52.1	-112.2	3.11E-01	5.89E-01	1.76E-02	1.28E-05	6.83E-04	1.63E-02	2.3389	9.35E-01	
1.9900	3700.	-47.8	-108.7	5.38E-01	9.44E-01	2.86E-02	2.24E-05	1.50E-03	3.04E-02	2.3592	1.54E+00	
1.9900	3800.	-43.4	-105.1	9.03E-01	1.48E+00	4.51E-02	3.81E-05	3.18E-03	5.51E-02	2.3792	2.48E+00	
1.9900	3900.	-39.1	-101.6	1.48E+00	2.25E+00	6.97E-02	6.32E-05	6.47E-03	9.67E-02	2.3990	3.90E+00	
1.9900	4000.	-34.7	-98.1	2.36E+00	3.37E+00	1.05E-01	1.02E-04	1.27E-02	1.65E-01	2.4185	6.01E+00	
1.9900	4100.	-31.2	-94.5	3.49E+00	4.94E+00	1.64E-01	1.78E-04	2.18E-02	2.61E-01	2.4225	8.88E+00	
1.9900	4200.	-27.6	-91.0	5.08E+00	7.11E+00	2.50E-01	3.02E-04	3.65E-02	4.04E-01	2.4265	1.29E+01	
1.9900	4300.	-24.1	-87.5	7.26E+00	1.01E+01	3.73E-01	5.01E-04	5.97E-02	6.13E-01	2.4305	1.84E+01	
1.9900	4400.	-20.5	-84.0	1.02E+01	1.40E+01	5.47E-01	8.12E-04	9.54E-02	9.12E-01	2.4345	2.58E+01	
1.9900	4500.	-17.0	-80.4	1.41E+01	1.92E+01	7.90E-01	1.29E-03	1.49E-01	1.33E+00	2.4385	3.57E+01	
1.9900	4600.	-13.4	-76.9	1.94E+01	2.60E+01	1.12E+00	1.98E-03	2.32E-01	1.93E+00	2.4441	4.87E+01	
1.9900	4700.	-9.7	-73.4	2.63E+01	3.48E+01	1.55E+00	2.99E-03	3.52E-01	2.74E+00	2.4497	6.57E+01	
1.9900	4800.	-6.1	-69.8	3.52E+01	4.60E+01	2.13E+00	4.44E-03	5.27E-01	3.84E+00	2.4553	8.76E+01	
1.9900	4900.	-2.5	-66.3	4.64E+01	6.00E+01	2.89E+00	6.50E-03	7.74E-01	5.31E+00	2.4609	1.15E+02	
1.9900	5000.	1.1	-62.8	6.07E+01	7.75E+01	3.87E+00	9.35E-03	1.12E+00	7.25E+00	2.4666	1.50E+02	

-111-

(O/M) SOL	TEMP	GO2	GFUO2S	P-U03	P-U02	P-U0	P-U	P-02	P-0	(O/M) GAS	P-TOTAL
2.0000	2000.	-108.0	-176.0	3.03E-08	9.40E-08	3.44E-10	4.26E-15	1.58E-12	8.28E-10	2.2470	1.25E-07
2.0000	2100.	-104.0	-171.9	1.89E-07	5.22E-07	2.25E-09	4.06E-14	1.50E-11	5.32E-09	2.2688	7.18E-07
2.0000	2200.	-100.0	-167.7	9.94E-07	2.48E-06	1.24E-08	3.15E-13	1.16E-10	2.89E-08	2.2897	3.52E-06
2.0000	2300.	-96.0	-163.6	4.53E-06	1.03E-05	5.90E-08	2.04E-12	7.54E-10	1.35E-07	2.3096	1.50E-05
2.0000	2400.	-92.0	-159.5	1.82E-05	3.80E-05	2.47E-07	1.14E-11	4.18E-09	5.57E-07	2.3286	5.70E-05
2.0000	2500.	-88.0	-155.4	6.56E-05	1.26E-04	9.19E-07	5.50E-11	2.02E-08	2.05E-06	2.3465	1.95E-04
2.0000	2600.	-84.4	-151.2	2.06E-04	3.82E-04	3.22E-06	2.55E-10	8.03E-08	6.55E-06	2.3539	5.97E-04
2.0000	2700.	-80.8	-147.1	5.92E-04	1.07E-03	1.03E-05	1.06E-09	2.88E-07	1.92E-05	2.3608	1.69E-03
2.0000	2800.	-77.2	-143.0	1.58E-03	2.76E-03	3.01E-05	3.95E-09	9.41E-07	5.23E-05	2.3672	4.43E-03
2.0000	2900.	-73.6	-138.8	3.95E-03	6.70E-03	8.21E-05	1.35E-08	2.84E-06	1.33E-04	2.3731	1.09E-02
2.0000	3000.	-70.0	-134.7	9.28E-03	1.53E-02	2.09E-04	4.24E-08	7.94E-06	3.16E-04	2.3786	2.52E-02
2.0000	3100.	-66.0	-130.6	2.13E-02	3.33E-02	4.86E-04	1.16E-07	2.22E-05	7.37E-04	2.3921	5.58E-02
2.0000	3200.	-62.0	-126.9	4.30E-02	6.37E-02	9.93E-04	2.76E-07	5.82E-05	1.63E-03	2.4062	1.09E-01
2.0000	3300.	-58.0	-123.4	8.20E-02	1.16E-01	1.91E-03	6.15E-07	1.44E-04	3.43E-03	2.4201	2.03E-01
2.0000	3400.	-54.0	-119.8	1.50E-01	2.02E-01	3.55E-03	1.31E-06	3.38E-04	6.91E-03	2.4336	3.64E-01
2.0000	3500.	-50.0	-116.3	2.67E-01	3.43E-01	6.35E-03	2.65E-06	7.54E-04	1.34E-02	2.4468	6.30E-01
2.0000	3600.	-46.6	-112.7	4.41E-01	5.65E-01	1.14E-02	5.61E-06	1.49E-03	2.40E-02	2.4485	1.04E+00
2.0000	3700.	-43.1	-109.2	7.08E-01	9.06E-01	2.00E-02	1.14E-05	2.84E-03	4.18E-02	2.4502	1.68E+00
2.0000	3800.	-39.7	-105.7	1.11E+00	1.42E+00	3.38E-02	2.23E-05	5.22E-03	7.06E-02	2.4520	2.64E+00
2.0000	3900.	-36.2	-102.1	1.70E+00	2.16E+00	5.58E-02	4.22E-05	9.31E-03	1.16E-01	2.4538	4.05E+00
2.0000	4000.	-32.8	-98.6	2.55E+00	3.24E+00	8.98E-02	7.72E-05	1.61E-02	1.86E-01	2.4556	6.08E+00
2.0000	4100.	-29.2	-95.0	3.78E+00	4.75E+00	1.40E-01	1.35E-04	2.76E-02	2.94E-01	2.4598	8.99E+00
2.0000	4200.	-25.7	-91.5	5.49E+00	6.84E+00	2.14E-01	2.31E-04	4.61E-02	4.54E-01	2.4639	1.30E+01
2.0000	4300.	-22.1	-87.9	7.84E+00	9.69E+00	3.21E-01	3.84E-04	7.51E-02	6.87E-01	2.4681	1.86E+01
2.0000	4400.	-18.6	-84.4	1.10E+01	1.35E+01	4.71E-01	6.24E-04	1.20E-01	1.02E+00	2.4723	2.62E+01
2.0000	4500.	-15.0	-80.8	1.53E+01	1.86E+01	6.81E-01	9.93E-04	1.87E-01	1.49E+00	2.4765	3.62E+01
2.0000	4600.	-11.5	-77.3	2.07E+01	2.52E+01	9.75E-01	1.57E-03	2.83E-01	2.13E+00	2.4790	4.93E+01
2.0000	4700.	-8.1	-73.7	2.78E+01	3.36E+01	1.37E+00	2.42E-03	4.21E-01	2.99E+00	2.4815	6.62E+01
2.0000	4800.	-4.6	-70.2	3.68E+01	4.44E+01	1.91E+00	3.67E-03	6.16E-01	4.15E+00	2.4841	8.79E+01
2.0000	4900.	-1.2	-66.6	4.81E+01	5.81E+01	2.61E+00	5.48E-03	8.88E-01	5.68E+00	2.4867	1.15E+02
2.0000	5000.	2.3	-63.1	6.23E+01	7.50E+01	3.54E+00	8.06E-03	1.26E+00	7.68E+00	2.4894	1.50E+02

Tabelle 3: Gleichgewichtsdampfdrucke von UO_{2+x}

Stöchiometrie	Temp. in K	$\Delta\bar{G}_{O_2}$ kcal/Mol	ΔG_f^O	Partialdrucke atm						Stöchiometrie	Totaldruck atm
der kondensierten Phase				in der Gasphase							
(O/M) SOL	TEMP	GO2	GFUO2S	P-UO3	P-UO2	P-UC	P-U	P-O2	P-O	(O/M) GAS	P-TOTAL
2.0050	2000.	-60.0	-176.1	1.30E-05	9.64E-08	8.40E-13	2.48E-20	2.77E-07	3.47E-07	3.0614	1.38E-05
2.0050	2100.	-60.0	-171.9	3.76E-05	5.35E-07	1.18E-11	1.09E-18	5.69E-07	1.04E-06	3.0430	3.98E-05
2.0050	2200.	-60.0	-167.8	9.87E-05	2.54E-06	1.31E-10	3.42E-17	1.09E-06	2.80E-06	3.0242	1.05E-04
2.0050	2300.	-60.0	-163.7	2.38E-04	1.05E-05	1.18E-09	7.93E-16	1.99E-06	6.94E-06	3.0015	2.58E-04
2.0050	2400.	-60.0	-159.5	5.34E-04	3.88E-05	8.80E-09	1.41E-14	3.43E-06	1.59E-05	2.9720	5.92E-04
2.0050	2500.	-60.0	-155.4	1.12E-03	1.29E-04	5.60E-08	2.00E-13	5.68E-06	3.43E-05	2.9334	1.29E-03
2.0050	2600.	-59.5	-151.3	2.33E-03	3.90E-04	2.95E-07	2.11E-12	9.92E-06	7.28E-05	2.8906	2.80E-03
2.0050	2700.	-59.0	-147.1	4.59E-03	1.09E-03	1.38E-06	1.86E-11	1.66E-05	1.46E-04	2.8397	5.84E-03
2.0050	2800.	-58.6	-143.0	8.61E-03	2.82E-03	5.75E-06	1.41E-10	2.68E-05	2.79E-04	2.7819	1.17E-02
2.0050	2900.	-58.1	-138.9	1.55E-02	6.83E-03	2.18E-05	9.28E-10	4.19E-05	5.10E-04	2.7186	2.29E-02
2.0050	3000.	-57.6	-134.7	2.67E-02	1.56E-02	7.53E-05	5.39E-09	6.36E-05	8.95E-04	2.6523	4.34E-02
2.0050	3100.	-55.2	-130.6	5.19E-02	3.38E-02	2.06E-04	2.05E-08	1.28E-04	1.77E-03	2.6252	8.79E-02
2.0050	3200.	-52.8	-127.0	8.97E-02	6.47E-02	4.91E-04	6.64E-08	2.46E-04	3.35E-03	2.6008	1.58E-01
2.0050	3300.	-50.5	-123.4	1.48E-01	1.17E-01	1.09E-03	1.97E-07	4.55E-04	6.09E-03	2.5776	2.73E-01
2.0050	3400.	-48.1	-119.9	2.36E-01	2.05E-01	2.32E-03	5.51E-07	8.11E-04	1.07E-02	2.5552	4.55E-01
2.0050	3500.	-45.7	-116.3	3.68E-01	3.47E-01	4.71E-03	1.45E-06	1.40E-03	1.82E-02	2.5337	7.39E-01
2.0050	3600.	-42.8	-112.8	5.81E-01	5.71E-01	8.86E-03	3.34E-06	2.53E-03	3.13E-02	2.5241	1.19E+00
2.0050	3700.	-39.8	-109.2	8.95E-01	9.15E-01	1.61E-02	7.35E-06	4.44E-03	5.23E-02	2.5149	1.88E+00
2.0050	3800.	-36.9	-105.7	1.35E+00	1.43E+00	2.83E-02	1.55E-05	7.56E-03	8.49E-02	2.5061	2.90E+00
2.0050	3900.	-33.9	-102.1	1.99E+00	2.18E+00	4.85E-02	3.16E-05	1.25E-02	1.35E-01	2.4977	4.36E+00
2.0050	4000.	-31.0	-98.6	2.88E+00	3.26E+00	8.07E-02	6.20E-05	2.02E-02	2.08E-01	2.4895	6.45E+00
2.0050	4100.	-27.6	-95.0	4.19E+00	4.78E+00	1.28E-01	1.12E-04	3.36E-02	3.24E-01	2.4896	9.45E+00
2.0050	4200.	-24.3	-91.5	6.00E+00	6.88E+00	1.98E-01	1.96E-04	5.45E-02	4.94E-01	2.4898	1.36E+01
2.0050	4300.	-20.9	-87.9	8.45E+00	9.73E+00	3.00E-01	3.35E-04	8.64E-02	7.37E-01	2.4901	1.93E+01
2.0050	4400.	-17.6	-84.4	1.17E+01	1.36E+01	4.46E-01	5.58E-04	1.34E-01	1.08E+00	2.4905	2.69E+01
2.0050	4500.	-14.2	-80.8	1.60E+01	1.86E+01	6.53E-01	9.10E-04	2.04E-01	1.56E+00	2.4910	3.70E+01
2.0050	4600.	-10.8	-77.3	2.16E+01	2.52E+01	9.36E-01	1.44E-03	3.07E-01	2.22E+00	2.4927	5.03E+01
2.0050	4700.	-7.4	-73.8	2.89E+01	3.37E+01	1.32E+00	2.24E-03	4.55E-01	3.11E+00	2.4944	6.74E+01
2.0050	4800.	-3.9	-70.2	3.81E+01	4.44E+01	1.84E+00	3.42E-03	6.62E-01	4.30E+00	2.4963	8.93E+01
2.0050	4900.	-0.5	-66.7	4.97E+01	5.80E+01	2.53E+00	5.13E-03	9.48E-01	5.87E+00	2.4982	1.17E+02
2.0050	5000.	2.9	-63.1	6.41E+01	7.49E+01	3.43E+00	7.57E-03	1.34E+00	7.92E+00	2.5002	1.52E+02

-94-

(O/M)SGL	TEMP	GO2	GFUD2S	P-U03	P-U02	P-UC	P-U	P-02	P-0	(O/M)GAS	P-TOTAL
2.0100	2000.	-54.8	-176.1	2.55E-05	9.82E-08	4.45E-13	6.83E-21	1.03E-06	6.68E-07	3.1023	2.73E-05
2.0100	2100.	-54.3	-172.0	7.55E-05	5.44E-07	6.11E-12	2.87E-19	2.21E-06	2.04E-06	3.0778	8.03E-05
2.0100	2200.	-53.9	-167.8	2.02E-04	2.58E-06	6.61E-11	8.57E-18	4.44E-06	5.64E-06	3.0583	2.15E-04
2.0100	2300.	-53.4	-163.7	4.97E-04	1.07E-05	5.81E-10	1.91E-16	8.39E-06	1.43E-05	3.0400	5.30E-04
2.0100	2400.	-53.0	-159.6	1.13E-03	3.94E-05	4.27E-09	3.28E-15	1.50E-05	3.34E-05	3.0205	1.22E-03
2.0100	2500.	-52.5	-155.4	2.42E-03	1.31E-04	2.67E-08	4.49E-14	2.57E-05	7.29E-05	2.9975	2.65E-03
2.0100	2600.	-51.9	-151.3	4.95E-03	3.95E-04	1.43E-07	4.87E-13	4.35E-05	1.52E-04	2.9708	5.54E-03
2.0100	2700.	-51.3	-147.2	9.60E-03	1.10E-03	6.75E-07	4.43E-12	7.09E-05	3.02E-04	2.9385	1.11E-02
2.0100	2800.	-50.6	-143.0	1.78E-02	2.85E-03	2.86E-06	3.44E-11	1.11E-04	5.69E-04	2.8999	2.13E-02
2.0100	2900.	-50.0	-138.9	3.15E-02	6.91E-03	1.09E-05	2.32E-10	1.70E-04	1.03E-03	2.8551	3.96E-02
2.0100	3000.	-49.4	-134.8	5.37E-02	1.58E-02	3.83E-05	1.38E-09	2.52E-04	1.78E-03	2.8047	7.16E-02
2.0100	3100.	-47.8	-130.6	9.57E-02	3.42E-02	1.14E-04	6.23E-09	4.25E-04	3.22E-03	2.7666	1.34E-01
2.0100	3200.	-46.2	-127.0	1.52E-01	6.54E-02	2.95E-04	2.38E-08	6.95E-04	5.62E-03	2.7296	2.24E-01
2.0100	3300.	-44.7	-123.4	2.32E-01	1.18E-01	7.08E-04	8.23E-08	1.10E-03	9.48E-03	2.6923	3.62E-01
2.0100	3400.	-43.1	-119.9	3.45E-01	2.07E-01	1.62E-03	2.65E-07	1.70E-03	1.55E-02	2.6547	5.71E-01
2.0100	3500.	-41.5	-116.4	5.02E-01	3.50E-01	3.52E-03	7.99E-07	2.56E-03	2.47E-02	2.6172	8.83E-01
2.0100	3600.	-39.0	-112.8	7.60E-01	5.76E-01	6.89E-03	2.00E-06	4.26E-03	4.06E-02	2.5973	1.39E+00
2.0100	3700.	-36.6	-109.3	1.12E+00	9.22E-01	1.30E-02	4.77E-06	6.90E-03	6.52E-02	2.5781	2.13E+00
2.0100	3800.	-34.1	-105.7	1.63E+00	1.44E+00	2.38E-02	1.08E-05	1.09E-02	1.02E-01	2.5593	3.20E+00
2.0100	3900.	-31.7	-102.2	2.32E+00	2.20E+00	4.21E-02	2.37E-05	1.68E-02	1.56E-01	2.5412	4.73E+00
2.0100	4000.	-29.2	-98.6	3.24E+00	3.28E+00	7.25E-02	4.97E-05	2.54E-02	2.33E-01	2.5235	6.85E+00
2.0100	4100.	-26.1	-95.1	4.64E+00	4.80E+00	1.16E-01	9.25E-05	4.08E-02	3.57E-01	2.5191	9.96E+00
2.0100	4200.	-22.9	-91.5	6.53E+00	6.90E+00	1.83E-01	1.67E-04	6.42E-02	5.36E-01	2.5150	1.42E+01
2.0100	4300.	-19.8	-88.0	9.06E+00	9.76E+00	2.81E-01	2.94E-04	9.88E-02	7.88E-01	2.5110	2.00E+01
2.0100	4400.	-16.6	-84.4	1.24E+01	1.36E+01	4.25E-01	5.04E-04	1.49E-01	1.14E+00	2.5073	2.77E+01
2.0100	4500.	-13.5	-80.9	1.67E+01	1.86E+01	6.29E-01	8.43E-04	2.21E-01	1.62E+00	2.5037	3.78E+01
2.0100	4600.	-10.1	-77.3	2.24E+01	2.52E+01	9.04E-01	1.34E-03	3.30E-01	2.30E+00	2.5046	5.12E+01
2.0100	4700.	-6.7	-73.8	2.99E+01	3.37E+01	1.28E+00	2.10E-03	4.86E-01	3.22E+00	2.5056	6.85E+01
2.0100	4800.	-3.4	-70.2	3.92E+01	4.44E+01	1.78E+00	3.22E-03	7.03E-01	4.44E+00	2.5067	9.06E+01
2.0100	4900.	0.0	-66.7	5.10E+01	5.79E+01	2.45E+00	4.85E-03	1.00E+00	6.04E+00	2.5080	1.18E+02
2.0100	5000.	3.4	-63.1	6.56E+01	7.48E+01	3.33E+00	7.18E-03	1.41E+00	8.12E+00	2.5093	1.53E+02

-14-

Tabelle 4: Gleichgewichtsdampfdrucke von $U_{.80}Pu_{.20}O_{2+x}$

$U_{.80}Pu_{.20}O_{1.922}$

TEMP	LOGPUO2	LOG PU0	LOG PU	LOGUO3	LOGUO2	LOGUO	LOGU	LOGO2	LOGO	LOGPTOT	(O/M)G	(PU/M)G
1500	-13.36	-11.04	-13.13	-14.86	-12.33	-13.59	-17.95	-22.01	-16.41	-11.02	1.0452	0.9491
1600	-12.10	-9.98	-12.06	-13.36	-11.03	-12.27	-16.45	-20.09	-14.89	-9.94	1.0808	0.9142
1700	-10.99	-9.05	-11.12	-12.04	-9.88	-11.10	-15.13	-18.38	-13.55	-8.98	1.1291	0.8667
1800	-10.01	-8.22	-10.28	-10.85	-8.86	-10.07	-13.96	-16.87	-12.35	-8.11	1.1892	0.8075
1900	-9.12	-7.47	-9.53	-9.81	-7.95	-9.14	-12.91	-15.52	-11.29	-7.23	1.2584	0.7394
2000	-8.33	-6.80	-8.85	-8.87	-7.12	-8.31	-11.96	-14.30	-10.32	-6.61	1.3329	0.6663
2100	-7.59	-6.23	-8.32	-7.96	-6.38	-7.61	-11.21	-13.10	-9.41	-5.97	1.4300	0.5770
2200	-6.92	-5.71	-7.84	-7.13	-5.70	-6.97	-10.52	-12.01	-8.57	-5.37	1.5260	0.4914
2300	-6.30	-5.23	-7.40	-6.38	-5.08	-6.38	-9.90	-11.01	-7.80	-4.81	1.6163	0.4141
2400	-5.74	-4.79	-7.00	-5.69	-4.52	-5.85	-9.33	-10.09	-7.10	-4.28	1.6990	0.3472
2500	-5.23	-4.39	-6.63	-5.06	-4.00	-5.35	-8.80	-9.25	-6.46	-3.79	1.7736	0.2910
2600	-4.74	-4.03	-6.32	-4.45	-3.51	-4.92	-8.35	-8.43	-5.85	-3.33	1.8510	0.2403
2700	-4.29	-3.70	-6.04	-3.89	-3.07	-4.52	-7.94	-7.67	-5.28	-2.90	1.9220	0.1995
2800	-3.87	-3.39	-5.77	-3.37	-2.66	-4.14	-7.55	-6.97	-4.75	-2.49	1.9880	0.1670
2900	-3.49	-3.10	-5.52	-2.89	-2.27	-3.80	-7.19	-6.32	-4.26	-2.10	2.0504	0.1410
3000	-3.12	-2.83	-5.29	-2.43	-1.91	-3.47	-6.86	-5.71	-3.80	-1.73	2.1098	0.1201
3100	-2.80	-2.59	-5.08	-2.02	-1.59	-3.18	-6.56	-5.14	-3.37	-1.39	2.1664	0.1033
3200	-2.52	-2.40	-4.92	-1.67	-1.31	-2.94	-6.31	-4.60	-2.97	-1.10	2.2221	0.0896
3300	-2.26	-2.22	-4.77	-1.34	-1.06	-2.71	-6.07	-4.10	-2.59	-0.83	2.2763	0.0784
3400	-2.02	-2.05	-4.63	-1.03	-0.82	-2.49	-5.85	-3.63	-2.23	-0.56	2.3289	0.0690
3500	-1.80	-1.89	-4.50	-0.74	-0.59	-2.29	-5.64	-3.19	-1.90	-0.31	2.3801	0.0612
3600	-1.59	-1.73	-4.34	-0.47	-0.38	-2.09	-5.41	-2.80	-1.60	-0.08	2.4186	0.0554
3700	-1.39	-1.58	-4.20	-0.23	-0.18	-1.89	-5.19	-2.43	-1.31	0.14	2.4560	0.0504
3800	-1.20	-1.43	-4.07	0.01	0.01	-1.71	-4.99	-2.08	-1.04	0.36	2.4924	0.0461
3900	-1.02	-1.30	-3.94	0.23	0.20	-1.53	-4.79	-1.75	-0.79	0.56	2.5280	0.0423
4000	-0.85	-1.17	-3.81	0.44	0.37	-1.37	-4.61	-1.44	-0.55	0.75	2.5629	0.0390
4100	-0.69	-1.05	-3.71	0.65	0.53	-1.21	-4.45	-1.13	-0.31	0.94	2.6018	0.0358
4200	-0.54	-0.93	-3.61	0.84	0.69	-1.07	-4.29	-0.83	-0.08	1.12	2.6402	0.0330
4300	-0.39	-0.82	-3.51	1.03	0.84	-0.93	-4.14	-0.55	0.13	1.30	2.6785	0.0306
4400	-0.25	-0.72	-3.42	1.21	0.98	-0.80	-4.00	-0.28	0.34	1.47	2.7168	0.0284
4500	-0.11	-0.62	-3.33	1.38	1.11	-0.67	-3.86	-0.02	0.53	1.63	2.7556	0.0264
4600	0.01	-0.49	-3.14	1.48	1.24	-0.49	-3.61	0.10	0.66	1.74	2.7427	0.0264
4700	0.09	-0.36	-2.97	1.58	1.37	-0.32	-3.36	0.21	0.78	1.85	2.7299	0.0264
4800	0.19	-0.24	-2.80	1.67	1.49	-0.15	-3.13	0.33	0.89	1.96	2.7170	0.0263
4900	0.28	-0.12	-2.63	1.76	1.60	0.01	-2.91	0.43	1.00	2.06	2.7043	0.0263
5000	0.37	-0.01	-2.48	1.85	1.71	0.17	-2.69	0.53	1.11	2.16	2.6915	0.0262

$U_{.80}Pu_{.20}O_{1.93}$

TEMP	LOGPU02	LOGPU0	LOGPU	LOGU03	LOGU02	LOGJC	LOGU	LOG02	LOG0	LOGPTOT	(O/M)G	(PU/M)G
1500	-13.27	-11.21	-13.56	-14.59	-12.33	-13.85	-18.48	-21.49	-16.15	-11.17	1.0738	0.9284
1600	-12.02	-10.15	-12.49	-13.10	-11.03	-12.52	-16.97	-19.57	-14.63	-10.09	1.1245	0.8807
1700	-10.91	-9.22	-11.54	-11.78	-9.88	-11.36	-15.64	-17.88	-13.20	-9.12	1.1909	0.8179
1800	-9.93	-8.39	-10.70	-10.61	-8.86	-10.32	-14.45	-16.38	-12.11	-8.25	1.2700	0.7430
1900	-9.05	-7.65	-9.95	-9.57	-7.95	-9.39	-13.40	-15.03	-11.04	-7.45	1.3567	0.6613
2000	-8.26	-6.98	-9.27	-8.63	-7.12	-8.55	-12.44	-13.82	-10.09	-6.72	1.4452	0.5785
2100	-7.53	-6.41	-8.73	-7.73	-6.38	-7.84	-11.68	-12.63	-9.17	-6.06	1.5533	0.4837
2200	-6.87	-5.88	-8.25	-6.91	-5.70	-7.19	-10.98	-11.55	-8.34	-5.44	1.6543	0.3991
2300	-6.26	-5.41	-7.80	-6.16	-5.08	-6.60	-10.34	-10.57	-7.58	-4.86	1.7457	0.3272
2400	-5.71	-4.97	-7.40	-5.48	-4.52	-6.06	-9.76	-9.66	-6.89	-4.32	1.8272	0.2683
2500	-5.19	-4.57	-7.02	-4.85	-4.00	-5.56	-9.22	-8.83	-6.25	-3.82	1.9001	0.2210
2600	-4.72	-4.21	-6.70	-4.25	-3.51	-5.12	-8.75	-8.03	-5.65	-3.34	1.9741	0.1805
2700	-4.27	-3.87	-6.40	-3.70	-3.07	-4.71	-8.32	-7.29	-5.09	-2.90	2.0424	0.1488
2800	-3.86	-3.56	-6.13	-3.19	-2.66	-4.33	-7.92	-6.61	-4.57	-2.48	2.1066	0.1240
2900	-3.48	-3.27	-5.87	-2.71	-2.27	-3.97	-7.54	-5.97	-4.08	-2.08	2.1675	0.1043
3000	-3.13	-3.00	-5.63	-2.27	-1.91	-3.64	-7.20	-5.37	-3.62	-1.70	2.2255	0.0887
3100	-2.80	-2.76	-5.40	-1.87	-1.59	-3.33	-6.87	-4.82	-3.21	-1.36	2.2778	0.0765
3200	-2.54	-2.56	-5.23	-1.52	-1.31	-3.08	-6.60	-4.31	-2.82	-1.06	2.3291	0.0666
3300	-2.29	-2.38	-5.07	-1.20	-1.06	-2.84	-6.34	-3.82	-2.45	-0.78	2.3784	0.0583
3400	-2.05	-2.20	-4.91	-0.90	-0.82	-2.62	-6.10	-3.38	-2.11	-0.52	2.4259	0.0515
3500	-1.83	-2.04	-4.76	-0.62	-0.59	-2.41	-5.88	-2.95	-1.78	-0.27	2.4717	0.0458
3600	-1.62	-1.88	-4.60	-0.36	-0.38	-2.20	-5.63	-2.58	-1.49	-0.03	2.5040	0.0416
3700	-1.43	-1.72	-4.44	-0.13	-0.18	-1.99	-5.39	-2.23	-1.21	0.19	2.5354	0.0381
3800	-1.25	-1.57	-4.30	0.10	0.01	-1.80	-5.17	-1.90	-0.95	0.40	2.5660	0.0350
3900	-1.07	-1.43	-4.15	0.31	0.20	-1.62	-4.96	-1.58	-0.71	0.60	2.5960	0.0323
4000	-0.91	-1.30	-4.02	0.52	0.37	-1.44	-4.76	-1.28	-0.47	0.79	2.6256	0.0299
4100	-0.75	-1.17	-3.89	0.71	0.53	-1.28	-4.57	-1.00	-0.25	0.98	2.6530	0.0278
4200	-0.60	-1.05	-3.76	0.89	0.69	-1.12	-4.38	-0.74	-0.04	1.15	2.6804	0.0260
4300	-0.46	-0.93	-3.65	1.06	0.84	-0.96	-4.20	-0.49	0.16	1.32	2.7080	0.0244
4400	-0.33	-0.82	-3.53	1.23	0.98	-0.82	-4.03	-0.24	0.35	1.48	2.7359	0.0229
4500	-0.20	-0.71	-3.42	1.39	1.11	-0.68	-3.87	-0.01	0.54	1.63	2.7643	0.0216
4600	-0.09	-0.58	-3.24	1.49	1.24	-0.50	-3.62	0.12	0.67	1.75	2.7542	0.0216
4700	0.01	-0.45	-3.07	1.59	1.37	-0.33	-3.39	0.24	0.79	1.86	2.7442	0.0215
4800	0.11	-0.33	-2.90	1.69	1.49	-0.16	-3.16	0.35	0.91	1.97	2.7343	0.0215
4900	0.21	-0.22	-2.74	1.78	1.60	-0.00	-2.94	0.47	1.02	2.07	2.7244	0.0214
5000	0.30	-0.10	-2.59	1.87	1.71	0.15	-2.73	0.57	1.13	2.17	2.7146	0.0214

U.₈₀Pu.₂₀⁰1.94

TEMP	LOGPU02	LOGPU0	LOGPU	LOGU03	LOGUC2	LOGU0	LOGU	LOGU2	LOGU	LOGPT0T	(O/M)G	(PU/M)G
1500	-13.16	-11.44	-14.11	-14.27	-12.33	-14.18	-19.13	-20.83	-15.82	-11.38	1.1269	0.8873
1600	-11.92	-10.38	-13.03	-12.78	-11.03	-12.85	-17.61	-18.93	-14.31	-10.28	1.2047	0.8169
1700	-10.83	-9.45	-12.08	-11.47	-9.88	-11.67	-16.27	-17.25	-12.98	-9.30	1.3002	0.7302
1800	-9.85	-8.62	-11.24	-10.30	-8.86	-10.63	-15.07	-15.76	-11.80	-8.40	1.4058	0.6348
1900	-8.98	-7.88	-10.49	-9.26	-7.95	-9.69	-14.01	-14.42	-10.74	-7.58	1.5124	0.5397
2000	-8.20	-7.22	-9.81	-8.32	-7.12	-8.85	-13.04	-13.22	-9.78	-6.83	1.6131	0.4517
2100	-7.48	-6.64	-9.26	-7.43	-6.38	-8.13	-12.26	-12.05	-8.88	-6.14	1.7267	0.3608
2200	-6.82	-6.12	-8.77	-6.63	-5.70	-7.48	-11.54	-10.99	-8.06	-5.50	1.8274	0.2866
2300	-6.22	-5.65	-8.32	-5.89	-5.08	-6.88	-10.89	-10.01	-7.31	-4.90	1.9159	0.2282
2400	-5.68	-5.21	-7.90	-5.21	-4.52	-6.33	-10.29	-9.12	-6.62	-4.34	1.9945	0.1830
2500	-5.17	-4.81	-7.52	-4.59	-4.00	-5.83	-9.74	-8.30	-5.99	-3.82	2.0654	0.1483
2600	-4.70	-4.44	-7.18	-4.00	-3.51	-5.37	-9.25	-7.53	-5.40	-3.33	2.1356	0.1203
2700	-4.27	-4.10	-6.87	-3.46	-3.07	-4.95	-8.80	-6.81	-4.85	-2.87	2.2011	0.0988
2800	-3.86	-3.79	-6.58	-2.96	-2.66	-4.55	-8.37	-6.15	-4.34	-2.43	2.2626	0.0821
2900	-3.49	-3.50	-6.31	-2.49	-2.27	-4.19	-7.98	-5.53	-3.86	-2.03	2.3205	0.0690
3000	-3.14	-3.23	-6.06	-2.05	-1.91	-3.85	-7.61	-4.95	-3.42	-1.64	2.3750	0.0586
3100	-2.83	-2.97	-5.82	-1.67	-1.59	-3.53	-7.26	-4.43	-3.02	-1.29	2.4194	0.0509
3200	-2.57	-2.77	-5.62	-1.34	-1.31	-3.26	-6.96	-3.95	-2.64	-0.99	2.4630	0.0445
3300	-2.32	-2.58	-5.44	-1.03	-1.06	-3.02	-6.68	-3.49	-2.28	-0.71	2.5045	0.0392
3400	-2.09	-2.40	-5.27	-0.74	-0.82	-2.78	-6.42	-3.06	-1.95	-0.45	2.5441	0.0348
3500	-1.87	-2.24	-5.11	-0.47	-0.59	-2.56	-6.17	-2.65	-1.63	-0.19	2.5822	0.0311
3600	-1.68	-2.06	-4.93	-0.23	-0.38	-2.33	-5.90	-2.31	-1.35	0.04	2.6064	0.0285
3700	-1.49	-1.90	-4.75	-0.00	-0.18	-2.12	-5.65	-1.98	-1.09	0.26	2.6302	0.0263
3800	-1.31	-1.75	-4.59	0.21	0.01	-1.92	-5.40	-1.67	-0.84	0.46	2.6537	0.0244
3900	-1.14	-1.60	-4.43	0.42	0.20	-1.72	-5.17	-1.37	-0.60	0.66	2.6770	0.0227
4000	-0.98	-1.46	-4.28	0.61	0.37	-1.54	-4.95	-1.09	-0.37	0.85	2.7004	0.0212
4100	-0.83	-1.32	-4.12	0.78	0.53	-1.35	-4.72	-0.85	-0.17	1.02	2.7143	0.0201
4200	-0.69	-1.19	-3.96	0.95	0.69	-1.17	-4.50	-0.62	0.02	1.19	2.7285	0.0192
4300	-0.55	-1.06	-3.81	1.10	0.84	-1.00	-4.28	-0.41	0.20	1.34	2.7432	0.0184
4400	-0.42	-0.94	-3.67	1.25	0.98	-0.84	-4.08	-0.20	0.38	1.49	2.7582	0.0176
4500	-0.30	-0.82	-3.54	1.39	1.11	-0.68	-3.88	0.00	0.54	1.64	2.7738	0.0169
4600	-0.19	-0.69	-3.36	1.50	1.24	-0.51	-3.64	0.14	0.68	1.75	2.7673	0.0169
4700	-0.08	-0.56	-3.19	1.61	1.37	-0.34	-3.41	0.27	0.80	1.87	2.7609	0.0168
4800	0.02	-0.44	-3.03	1.71	1.49	-0.18	-3.19	0.39	0.93	1.98	2.7546	0.0168
4900	0.11	-0.33	-2.88	1.80	1.60	-0.02	-2.98	0.51	1.04	2.08	2.7484	0.0167
5000	0.21	-0.22	-2.73	1.89	1.71	0.12	-2.78	0.63	1.15	2.18	2.7423	0.0166

$U_{.80}Pu_{.20}O_{1.95}$

TEMP	LOGPU02	LOGPU0	LOGPU	LOGU03	LOGU02	LOGU0	LOGU	LOGU02	LOGU	LOGPTOT	(O/M)G	(PU/M)G
1500	-13.09	-11.66	-14.62	-13.97	-12.33	-14.47	-19.71	-20.25	-15.53	-11.56	1.2041	0.8270
1600	-11.86	-10.62	-13.58	-12.47	-11.03	-13.15	-18.22	-18.32	-14.01	-10.46	1.3242	0.7228
1700	-10.76	-9.71	-12.66	-11.15	-9.88	-11.99	-16.91	-16.61	-12.66	-9.45	1.4611	0.6051
1800	-9.79	-8.89	-11.85	-9.97	-8.86	-10.96	-15.74	-15.09	-11.46	-8.53	1.5988	0.4895
1900	-8.92	-8.17	-11.12	-8.92	-7.95	-10.04	-14.70	-13.73	-10.39	-7.68	1.7259	0.3877
2000	-8.14	-7.51	-10.46	-7.97	-7.12	-9.20	-13.76	-12.51	-9.43	-6.90	1.8373	0.3043
2100	-7.43	-6.93	-9.89	-7.10	-6.38	-8.47	-12.94	-11.37	-8.54	-6.18	1.9430	0.2348
2200	-6.78	-6.40	-9.37	-6.30	-5.70	-7.80	-12.19	-10.34	-7.74	-5.51	2.0348	0.1824
2300	-6.19	-5.92	-8.90	-5.58	-5.08	-7.19	-11.51	-9.40	-7.00	-4.89	2.1161	0.1434
2400	-5.65	-5.48	-8.47	-4.91	-4.52	-6.63	-10.89	-8.53	-6.32	-4.31	2.1892	0.1143
2500	-5.15	-5.08	-8.07	-4.30	-4.00	-6.11	-10.31	-7.74	-5.70	-3.77	2.2557	0.0923
2600	-4.69	-4.70	-7.71	-3.74	-3.51	-5.64	-9.78	-7.00	-5.13	-3.27	2.3169	0.0756
2700	-4.27	-4.35	-7.37	-3.21	-3.07	-5.19	-9.29	-6.32	-4.60	-2.80	2.3733	0.0627
2800	-3.87	-4.03	-7.05	-2.73	-2.66	-4.79	-8.84	-5.69	-4.11	-2.36	2.4252	0.0526
2900	-3.51	-3.73	-6.76	-2.28	-2.27	-4.40	-8.41	-5.10	-3.65	-1.94	2.4731	0.0446
3000	-3.16	-3.45	-6.48	-1.86	-1.91	-4.05	-8.02	-4.55	-3.22	-1.55	2.5172	0.0382
3100	-2.86	-3.19	-6.21	-1.49	-1.59	-3.71	-7.62	-4.07	-2.83	-1.21	2.5485	0.0337
3200	-2.60	-2.97	-5.99	-1.18	-1.31	-3.43	-7.29	-3.62	-2.47	-0.91	2.5799	0.0299
3300	-2.36	-2.77	-5.78	-0.88	-1.06	-3.16	-6.98	-3.19	-2.13	-0.63	2.6099	0.0267
3400	-2.14	-2.59	-5.59	-0.61	-0.82	-2.92	-6.69	-2.79	-1.81	-0.37	2.6388	0.0241
3500	-1.93	-2.41	-5.40	-0.35	-0.59	-2.68	-6.41	-2.41	-1.51	-0.12	2.6667	0.0218
3600	-1.73	-2.23	-5.20	-0.12	-0.38	-2.44	-6.12	-2.09	-1.24	0.10	2.6846	0.0202
3700	-1.55	-2.06	-5.01	0.10	-0.18	-2.22	-5.85	-1.78	-0.99	0.32	2.7026	0.0188
3800	-1.37	-1.90	-4.84	0.31	0.01	-2.01	-5.59	-1.48	-0.75	0.52	2.7207	0.0176
3900	-1.20	-1.75	-4.67	0.50	0.20	-1.81	-5.34	-1.20	-0.52	0.72	2.7390	0.0165
4000	-1.05	-1.61	-4.50	0.69	0.37	-1.62	-5.11	-0.94	-0.30	0.90	2.7577	0.0156
4100	-0.90	-1.46	-4.33	0.85	0.53	-1.42	-4.85	-0.72	-0.11	1.07	2.7664	0.0150
4200	-0.76	-1.32	-4.15	1.01	0.69	-1.23	-4.61	-0.51	0.08	1.23	2.7756	0.0145
4300	-0.63	-1.19	-3.99	1.15	0.84	-1.05	-4.39	-0.30	0.25	1.38	2.7853	0.0140
4400	-0.50	-1.06	-3.84	1.30	0.98	-0.88	-4.17	-0.11	0.42	1.52	2.7955	0.0136
4500	-0.38	-0.94	-3.69	1.43	1.11	-0.72	-3.96	0.07	0.58	1.66	2.8062	0.0132
4600	-0.27	-0.80	-3.51	1.54	1.24	-0.54	-3.72	0.21	0.71	1.78	2.7996	0.0132
4700	-0.16	-0.67	-3.34	1.64	1.37	-0.37	-3.48	0.33	0.84	1.89	2.7930	0.0132
4800	-0.06	-0.55	-3.17	1.74	1.49	-0.21	-3.26	0.46	0.96	2.00	2.7865	0.0132
4900	0.04	-0.44	-3.02	1.83	1.60	-0.06	-3.05	0.57	1.07	2.10	2.7801	0.0133
5000	0.13	-0.32	-2.86	1.92	1.71	0.09	-2.84	0.69	1.18	2.20	2.7737	0.0133

U._{0.80}Pu._{0.20}O_{1.96}

TEMP	LOGP UO2	LOG PUO	LOG PU	LOGUC3	LOGUC2	LOGJC	LOGU	LOGO2	LOGO	LOGPTOT	(O/M)S	(PU/M)G
1500	-13.02	-11.88	-15.14	-13.68	-12.33	-14.76	-20.30	-19.67	-15.24	-11.72	1.3156	0.7442
1600	-11.79	-10.86	-14.13	-12.17	-11.03	-13.46	-18.84	-17.70	-13.70	-10.60	1.4854	0.6048
1700	-10.70	-9.97	-13.24	-10.83	-9.88	-12.31	-17.55	-15.97	-12.34	-9.56	1.6601	0.4664
1800	-9.73	-9.17	-12.45	-9.54	-8.86	-11.29	-16.41	-14.42	-11.13	-8.60	1.8200	0.3485
1900	-8.87	-8.45	-11.75	-8.57	-7.95	-10.38	-15.39	-13.04	-10.05	-7.72	1.9582	0.2577
2000	-8.09	-7.81	-11.11	-7.61	-7.12	-9.56	-14.47	-11.80	-9.07	-6.91	2.0764	0.1912
2100	-7.38	-7.22	-10.52	-6.76	-6.38	-8.81	-13.61	-10.70	-8.20	-6.15	2.1715	0.1457
2200	-6.74	-6.69	-9.98	-5.98	-5.70	-8.12	-12.84	-9.69	-7.41	-5.46	2.2547	0.1127
2300	-6.16	-6.20	-9.49	-5.27	-5.08	-7.50	-12.13	-8.78	-6.69	-4.82	2.3284	0.0886
2400	-5.62	-5.75	-9.03	-4.62	-4.52	-6.92	-11.48	-7.94	-6.03	-4.22	2.3943	0.0707
2500	-5.13	-5.34	-8.62	-4.02	-4.00	-6.39	-10.88	-7.17	-5.42	-3.67	2.4534	0.0573
2600	-4.68	-4.95	-8.22	-3.47	-3.51	-5.90	-10.31	-6.47	-4.87	-3.16	2.5008	0.0477
2700	-4.26	-4.59	-7.85	-2.97	-3.07	-5.44	-9.78	-5.83	-4.35	-2.69	2.5435	0.0401
2800	-3.87	-4.26	-7.51	-2.50	-2.66	-5.02	-9.30	-5.23	-3.88	-2.24	2.5820	0.0342
2900	-3.51	-3.95	-7.19	-2.06	-2.27	-4.62	-8.84	-4.67	-3.43	-1.83	2.6169	0.0294
3000	-3.17	-3.66	-6.89	-1.55	-1.91	-4.25	-8.42	-4.15	-3.02	-1.44	2.6485	0.0255
3100	-2.87	-3.38	-6.59	-1.31	-1.59	-3.89	-7.99	-3.71	-2.65	-1.10	2.6665	0.0230
3200	-2.62	-3.16	-6.34	-1.01	-1.31	-3.59	-7.62	-3.29	-2.31	-0.81	2.6862	0.0208
3300	-2.38	-2.94	-6.10	-0.73	-1.06	-3.31	-7.28	-2.89	-1.98	-0.54	2.7056	0.0190
3400	-2.16	-2.75	-5.88	-0.47	-0.82	-3.05	-6.96	-2.52	-1.68	-0.28	2.7247	0.0174
3500	-1.96	-2.56	-5.67	-0.23	-0.59	-2.80	-6.65	-2.17	-1.39	-0.04	2.7437	0.0161
3600	-1.76	-2.37	-5.45	-0.01	-0.38	-2.55	-6.34	-1.86	-1.13	0.18	2.7563	0.0151
3700	-1.58	-2.20	-5.25	0.20	-0.18	-2.32	-6.05	-1.57	-0.89	0.39	2.7693	0.0143
3800	-1.40	-2.03	-5.05	0.40	0.01	-2.10	-5.77	-1.30	-0.65	0.59	2.7827	0.0135
3900	-1.24	-1.87	-4.87	0.59	0.20	-1.89	-5.51	-1.04	-0.43	0.78	2.7967	0.0128
4000	-1.08	-1.72	-4.69	0.77	0.37	-1.69	-5.26	-0.79	-0.22	0.96	2.8113	0.0122
4100	-0.94	-1.57	-4.50	0.92	0.53	-1.49	-4.99	-0.58	-0.04	1.12	2.8156	0.0120
4200	-0.80	-1.42	-4.31	1.07	0.69	-1.29	-4.73	-0.39	0.14	1.27	2.8202	0.0117
4300	-0.67	-1.28	-4.14	1.21	0.84	-1.11	-4.49	-0.20	0.30	1.41	2.8253	0.0115
4400	-0.54	-1.14	-3.97	1.34	0.98	-0.93	-4.25	-0.02	0.46	1.55	2.8309	0.0113
4500	-0.42	-1.01	-3.80	1.47	1.11	-0.76	-4.03	0.15	0.62	1.69	2.8368	0.0111
4600	-0.31	-0.88	-3.62	1.57	1.24	-0.58	-3.79	0.28	0.75	1.80	2.8301	0.0112
4700	-0.20	-0.75	-3.45	1.67	1.37	-0.41	-3.55	0.40	0.87	1.91	2.8235	0.0113
4800	-0.10	-0.62	-3.28	1.77	1.49	-0.24	-3.33	0.52	0.99	2.02	2.8169	0.0113
4900	0.00	-0.51	-3.12	1.87	1.60	-0.09	-3.11	0.64	1.11	2.12	2.8103	0.0114
5000	0.10	-0.39	-2.96	1.96	1.71	0.06	-2.90	0.75	1.22	2.22	2.8037	0.0115

$U_{.80}Pu_{.20}O_{1.97}$

TEMP	LOGPU02	LOGPU0	LOGPU	LOGU03	LOGU02	LOGU0	LOGU	LOGO2	LOGO	LOGPTOT	(O/M)G	(PU/M)G
1500	-12.95	-12.15	-15.75	-13.34	-12.33	-15.11	-20.99	-18.98	-14.89	-11.87	1.5022	0.6175
1600	-11.72	-11.13	-14.73	-11.83	-11.03	-13.79	-19.51	-17.03	-13.36	-10.69	1.7037	0.4656
1700	-10.63	-10.22	-13.82	-10.50	-9.88	-12.64	-18.20	-15.32	-12.01	-9.61	1.8877	0.3378
1800	-9.67	-9.42	-13.02	-9.32	-8.86	-11.61	-17.04	-13.79	-10.81	-8.61	2.0450	0.2421
1900	-8.81	-8.70	-12.30	-8.26	-7.95	-10.69	-16.00	-12.43	-9.74	-7.69	2.1777	0.1744
2000	-8.03	-8.06	-11.66	-7.31	-7.12	-9.86	-15.07	-11.20	-8.77	-6.84	2.2906	0.1275
2100	-7.33	-7.46	-11.04	-6.47	-6.38	-9.09	-14.18	-10.13	-7.92	-6.07	2.3743	0.0975
2200	-6.69	-6.91	-10.48	-5.71	-5.70	-8.39	-13.38	-9.15	-7.14	-5.36	2.4466	0.0759
2300	-6.11	-6.41	-9.96	-5.01	-5.08	-7.76	-12.65	-8.26	-6.43	-4.71	2.5094	0.0601
2400	-5.58	-5.96	-9.49	-4.37	-4.52	-7.17	-11.98	-7.44	-5.78	-4.10	2.5641	0.0484
2500	-5.09	-5.54	-9.06	-3.78	-4.00	-6.64	-11.36	-6.69	-5.18	-3.54	2.6120	0.0395
2600	-4.64	-5.14	-8.63	-3.25	-3.51	-6.12	-10.76	-6.02	-4.64	-3.03	2.6452	0.0335
2700	-4.22	-4.77	-8.24	-2.76	-3.07	-5.65	-10.21	-5.41	-4.14	-2.56	2.6748	0.0287
2800	-3.84	-4.42	-7.87	-2.30	-2.66	-5.21	-9.69	-4.84	-3.68	-2.12	2.7013	0.0248
2900	-3.48	-4.10	-7.53	-1.83	-2.27	-4.80	-9.21	-4.30	-3.25	-1.71	2.7253	0.0217
3000	-3.14	-3.80	-7.21	-1.48	-1.91	-4.42	-8.76	-3.81	-2.85	-1.32	2.7471	0.0191
3100	-2.84	-3.52	-6.89	-1.14	-1.59	-4.06	-8.32	-3.38	-2.49	-0.98	2.7593	0.0175
3200	-2.59	-3.29	-6.62	-0.85	-1.31	-3.75	-7.94	-2.97	-2.15	-0.70	2.7746	0.0161
3300	-2.36	-3.07	-6.38	-0.58	-1.06	-3.46	-7.58	-2.59	-1.83	-0.43	2.7900	0.0148
3400	-2.14	-2.86	-6.14	-0.33	-0.82	-3.19	-7.24	-2.23	-1.54	-0.18	2.8058	0.0138
3500	-1.93	-2.67	-5.92	-0.09	-0.59	-2.94	-6.93	-1.90	-1.25	0.06	2.8220	0.0128
3600	-1.74	-2.48	-5.69	0.12	-0.38	-2.68	-6.60	-1.61	-1.00	0.28	2.8309	0.0123
3700	-1.55	-2.29	-5.46	0.32	-0.18	-2.44	-6.29	-1.33	-0.77	0.48	2.8406	0.0118
3800	-1.38	-2.12	-5.25	0.51	0.01	-2.21	-5.99	-1.08	-0.54	0.67	2.8510	0.0114
3900	-1.22	-1.95	-5.05	0.69	0.20	-1.99	-5.72	-0.83	-0.33	0.86	2.8621	0.0110
4000	-1.06	-1.80	-4.86	0.86	0.37	-1.79	-5.45	-0.60	-0.13	1.03	2.8739	0.0106
4100	-0.91	-1.63	-4.65	1.01	0.53	-1.58	-5.17	-0.40	0.05	1.19	2.8764	0.0105
4200	-0.77	-1.48	-4.46	1.15	0.69	-1.37	-4.90	-0.22	0.22	1.33	2.8792	0.0105
4300	-0.64	-1.33	-4.27	1.28	0.84	-1.18	-4.64	-0.05	0.38	1.47	2.8824	0.0104
4400	-0.52	-1.19	-4.09	1.41	0.98	-1.00	-4.40	0.12	0.54	1.61	2.8859	0.0103
4500	-0.39	-1.06	-3.91	1.53	1.11	-0.82	-4.16	0.28	0.68	1.74	2.8897	0.0103
4600	-0.28	-0.91	-3.71	1.63	1.24	-0.64	-3.90	0.39	0.80	1.85	2.8775	0.0106
4700	-0.17	-0.77	-3.52	1.72	1.37	-0.46	-3.65	0.50	0.92	1.95	2.8651	0.0109
4800	-0.07	-0.64	-3.33	1.81	1.49	-0.29	-3.41	0.60	1.03	2.05	2.8524	0.0111
4900	0.03	-0.51	-3.15	1.90	1.60	-0.12	-3.18	0.70	1.14	2.15	2.8396	0.0114
5000	0.13	-0.39	-2.98	1.98	1.71	0.04	-2.95	0.80	1.24	2.24	2.8267	0.0116

$U_{.80}Pu_{.20}O_{1.98}$

TEMP	LOGPU02	LOGPU0	LOGPU	LOGU03	LOGU02	LOGU0	LOGU	LOG02	LOG0	LOGPTOT	(O/M)G	(PU/M)G
1500	-12.87	-12.42	-16.37	-12.99	-12.33	-15.45	-21.68	-18.28	-14.55	-11.97	1.7466	0.4747
1600	-11.65	-11.39	-15.33	-11.50	-11.03	-14.13	-20.18	-16.36	-13.03	-10.72	1.9573	0.3366
1700	-10.56	-10.48	-14.40	-10.18	-9.88	-12.96	-18.85	-14.67	-11.69	-9.58	2.1355	0.2351
1800	-9.60	-9.67	-13.58	-9.01	-8.86	-11.92	-17.67	-13.16	-10.50	-8.54	2.2827	0.1650
1900	-8.74	-8.94	-12.85	-7.96	-7.95	-11.00	-16.62	-11.81	-9.43	-7.59	2.4042	0.1177
2000	-7.96	-8.29	-12.19	-7.01	-7.12	-10.16	-15.67	-10.60	-8.47	-6.72	2.5046	0.0856
2100	-7.26	-7.67	-11.54	-6.19	-6.38	-9.38	-14.76	-9.55	-7.63	-5.93	2.5704	0.0664
2200	-6.62	-7.11	-10.95	-5.43	-5.70	-8.67	-13.93	-8.60	-6.87	-5.21	2.6257	0.0524
2300	-6.04	-6.61	-10.42	-4.75	-5.08	-8.02	-13.17	-7.73	-6.17	-4.55	2.6726	0.0421
2400	-5.51	-6.14	-9.92	-4.12	-4.52	-7.42	-12.48	-6.94	-5.53	-3.94	2.7126	0.0344
2500	-5.02	-5.71	-9.47	-3.54	-4.00	-6.88	-11.84	-6.21	-4.94	-3.38	2.7471	0.0285
2600	-4.57	-5.29	-9.01	-3.02	-3.51	-6.35	-11.21	-5.57	-4.42	-2.88	2.7669	0.0248
2700	-4.16	-4.91	-8.59	-2.55	-3.07	-5.86	-10.63	-4.99	-3.93	-2.41	2.7846	0.0218
2800	-3.77	-4.55	-8.19	-2.11	-2.66	-5.41	-10.08	-4.44	-3.48	-1.97	2.8008	0.0194
2900	-3.41	-4.22	-7.83	-1.69	-2.27	-4.99	-9.58	-3.93	-3.06	-1.57	2.8157	0.0173
3000	-3.07	-3.91	-7.49	-1.31	-1.91	-4.60	-9.11	-3.46	-2.67	-1.19	2.8296	0.0156
3100	-2.77	-3.61	-7.15	-0.98	-1.59	-4.22	-8.65	-3.05	-2.32	-0.86	2.8376	0.0145
3200	-2.52	-3.37	-6.87	-0.70	-1.31	-3.91	-8.25	-2.66	-1.99	-0.58	2.8498	0.0136
3300	-2.29	-3.15	-6.60	-0.43	-1.06	-3.61	-7.88	-2.29	-1.68	-0.31	2.8628	0.0128
3400	-2.07	-2.93	-6.36	-0.19	-0.82	-3.34	-7.53	-1.95	-1.39	-0.06	2.8766	0.0120
3500	-1.86	-2.73	-6.12	0.05	-0.59	-3.08	-7.20	-1.62	-1.12	0.17	2.8914	0.0114
3600	-1.66	-2.53	-5.87	0.25	-0.38	-2.81	-6.86	-1.35	-0.88	0.38	2.8981	0.0111
3700	-1.48	-2.34	-5.63	0.44	-0.18	-2.56	-6.53	-1.10	-0.65	0.58	2.9057	0.0109
3800	-1.30	-2.15	-5.40	0.62	0.01	-2.32	-6.22	-0.85	-0.43	0.76	2.9141	0.0107
3900	-1.14	-1.98	-5.18	0.79	0.20	-2.10	-5.92	-0.62	-0.23	0.94	2.9232	0.0106
4000	-0.98	-1.81	-4.98	0.96	0.37	-1.88	-5.64	-0.40	-0.03	1.11	2.9332	0.0104
4100	-0.83	-1.64	-4.75	1.10	0.53	-1.67	-5.35	-0.22	0.14	1.26	2.9343	0.0105
4200	-0.69	-1.48	-4.54	1.23	0.69	-1.46	-5.07	-0.05	0.30	1.40	2.9357	0.0106
4300	-0.56	-1.32	-4.34	1.36	0.84	-1.26	-4.80	0.11	0.46	1.54	2.9373	0.0107
4400	-0.43	-1.18	-4.14	1.48	0.98	-1.07	-4.54	0.26	0.61	1.67	2.9391	0.0108
4500	-0.31	-1.04	-3.96	1.60	1.11	-0.89	-4.30	0.41	0.75	1.79	2.9411	0.0109
4600	-0.19	-0.88	-3.74	1.69	1.24	-0.69	-4.02	0.51	0.86	1.89	2.9233	0.0115
4700	-0.08	-0.73	-3.52	1.77	1.37	-0.51	-3.75	0.60	0.97	1.99	2.9050	0.0121
4800	0.02	-0.59	-3.32	1.85	1.49	-0.33	-3.49	0.68	1.07	2.08	2.8863	0.0127
4900	0.12	-0.45	-3.13	1.93	1.60	-0.15	-3.24	0.77	1.17	2.17	2.8671	0.0132
5000	0.22	-0.32	-2.94	2.01	1.71	0.01	-3.00	0.85	1.27	2.26	2.8476	0.0138

$U_{.80}Pu_{.20}O_{1.99}$

TEMP	LOGPU02	LOGPU0	LOGPU	LOGU03	LOGU02	LOGU0	LOGU	LOG02	LOG0	LOGPTOT	(O/M)G	(PU/M)G
1500	-12.76	-13.56	-18.77	-11.73	-12.33	-16.71	-24.19	-15.77	-13.29	-11.59	2.7445	0.0808
1600	-11.53	-12.36	-17.38	-10.41	-11.03	-15.22	-22.35	-14.19	-11.94	-10.28	2.7682	0.0654
1700	-10.45	-11.30	-16.16	-9.24	-9.88	-13.90	-20.72	-12.80	-10.75	-9.12	2.7869	0.0541
1800	-9.49	-10.36	-15.08	-8.20	-3.86	-12.73	-19.27	-11.56	-9.70	-8.09	2.8020	0.0456
1900	-8.64	-9.52	-14.11	-7.28	-7.95	-11.68	-17.98	-10.45	-8.75	-7.16	2.8147	0.0391
2000	-7.86	-8.76	-13.24	-6.44	-7.12	-10.73	-16.81	-9.45	-7.90	-6.33	2.8254	0.0340
2100	-7.16	-8.08	-12.46	-5.68	-6.38	-9.89	-15.77	-8.54	-7.12	-5.57	2.8368	0.0296
2200	-6.53	-7.47	-11.75	-4.99	-5.70	-9.11	-14.82	-7.71	-6.42	-4.88	2.8469	0.0262
2300	-5.95	-6.90	-11.10	-4.35	-5.08	-8.41	-13.96	-6.95	-5.78	-4.26	2.8560	0.0233
2400	-5.42	-6.38	-10.51	-3.77	-4.52	-7.76	-13.16	-6.26	-5.19	-3.68	2.8643	0.0210
2500	-4.93	-5.91	-9.97	-3.24	-4.00	-7.17	-12.43	-5.62	-4.64	-3.15	2.8721	0.0191
2600	-4.47	-5.46	-9.45	-2.75	-3.51	-6.62	-11.75	-5.03	-4.15	-2.66	2.8779	0.0176
2700	-4.06	-5.05	-8.98	-2.30	-3.07	-6.11	-11.12	-4.50	-3.69	-2.21	2.8836	0.0163
2800	-3.67	-4.67	-8.54	-1.88	-2.66	-5.63	-10.53	-4.00	-3.26	-1.79	2.8893	0.0152
2900	-3.31	-4.32	-8.13	-1.49	-2.27	-5.19	-9.98	-3.53	-2.86	-1.40	2.8948	0.0142
3000	-2.97	-3.99	-7.75	-1.13	-1.91	-4.78	-9.47	-3.10	-2.49	-1.04	2.9004	0.0134
3100	-2.66	-3.68	-7.38	-0.81	-1.59	-4.39	-8.98	-2.71	-2.16	-0.72	2.9032	0.0129
3200	-2.41	-3.42	-7.07	-0.54	-1.31	-4.06	-8.56	-2.35	-1.84	-0.45	2.9115	0.0125
3300	-2.18	-3.18	-6.77	-0.29	-1.06	-3.75	-8.16	-2.01	-1.54	-0.19	2.9208	0.0121
3400	-1.95	-2.95	-6.50	-0.06	-0.82	-3.46	-7.78	-1.70	-1.27	0.04	2.9313	0.0118
3500	-1.75	-2.74	-6.24	0.16	-0.59	-3.19	-7.43	-1.40	-1.00	0.27	2.9429	0.0115
3600	-1.55	-2.52	-5.96	0.35	-0.38	-2.91	-7.06	-1.15	-0.77	0.47	2.9475	0.0116
3700	-1.36	-2.31	-5.70	0.53	-0.18	-2.65	-6.71	-0.91	-0.55	0.66	2.9527	0.0117
3800	-1.19	-2.12	-5.45	0.71	0.01	-2.41	-6.39	-0.68	-0.35	0.84	2.9586	0.0118
3900	-1.02	-1.93	-5.21	0.87	0.20	-2.17	-6.07	-0.47	-0.15	1.01	2.9650	0.0119
4000	-0.86	-1.76	-4.99	1.02	0.37	-1.95	-5.78	-0.27	0.04	1.17	2.9721	0.0119
4100	-0.71	-1.58	-4.75	1.16	0.53	-1.73	-5.47	-0.10	0.20	1.31	2.9710	0.0123
4200	-0.56	-1.40	-4.52	1.29	0.69	-1.51	-5.17	0.05	0.36	1.45	2.9699	0.0127
4300	-0.43	-1.24	-4.30	1.41	0.84	-1.31	-4.89	0.20	0.51	1.58	2.9687	0.0131
4400	-0.30	-1.09	-4.09	1.53	0.98	-1.11	-4.63	0.35	0.65	1.70	2.9675	0.0134
4500	-0.17	-0.94	-3.90	1.64	1.11	-0.93	-4.37	0.49	0.79	1.82	2.9664	0.0138
4600	-0.05	-0.77	-3.66	1.72	1.24	-0.73	-4.08	0.57	0.90	1.92	2.9465	0.0147
4700	0.06	-0.62	-3.44	1.80	1.37	-0.54	-3.81	0.66	1.00	2.01	2.9260	0.0157
4800	0.17	-0.47	-3.23	1.88	1.49	-0.35	-3.54	0.74	1.10	2.10	2.9048	0.0167
4900	0.27	-0.32	-3.02	1.95	1.60	-0.18	-3.29	0.81	1.19	2.19	2.8832	0.0176
5000	0.37	-0.19	-2.83	2.03	1.71	-0.01	-3.04	0.89	1.29	2.28	2.8611	0.0186

TEMP	LOGPU02	LOGPU0	LOGPU	LOGU03	LOGU02	LOGU0	LOGU	LOG02	LOG0	LOGPTOT	(O/M)G	(PU/M)G
1500	-12.70	-14.51	-20.72	-10.73	-12.33	-17.71	-26.20	-13.76	-12.29	-10.70	2.9940	0.0105
1600	-11.46	-13.16	-19.05	-9.54	-11.03	-16.08	-24.09	-12.45	-11.07	-9.51	2.9876	0.0117
1700	-10.37	-11.97	-17.58	-8.49	-9.88	-14.65	-22.22	-11.30	-10.01	-8.46	2.9802	0.0128
1800	-9.40	-10.91	-16.27	-7.56	-8.86	-13.37	-20.56	-10.28	-9.06	-7.52	2.9721	0.0140
1900	-8.54	-9.97	-15.10	-6.73	-7.95	-12.22	-19.07	-9.36	-8.21	-6.68	2.9633	0.0150
2000	-7.76	-9.12	-14.05	-5.93	-7.12	-11.19	-17.73	-8.53	-7.44	-5.93	2.9540	0.0161
2100	-7.05	-8.38	-13.16	-5.27	-6.38	-10.29	-16.58	-7.73	-6.72	-5.22	2.9508	0.0159
2200	-6.41	-7.70	-12.35	-4.63	-5.70	-9.47	-15.54	-6.99	-6.06	-4.57	2.9479	0.0158
2300	-5.82	-7.09	-11.60	-4.04	-5.08	-8.72	-14.58	-6.32	-5.46	-3.98	2.9452	0.0158
2400	-5.28	-6.52	-10.93	-3.50	-4.52	-8.04	-13.71	-5.71	-4.91	-3.44	2.9427	0.0157
2500	-4.79	-6.01	-10.30	-3.01	-4.00	-7.41	-12.90	-5.14	-4.41	-2.94	2.9404	0.0156
2600	-4.33	-5.54	-9.74	-2.54	-3.51	-6.83	-12.18	-4.60	-3.92	-2.47	2.9410	0.0152
2700	-3.91	-5.10	-9.23	-2.11	-3.07	-6.30	-11.51	-4.10	-3.49	-2.04	2.9418	0.0148
2800	-3.52	-4.70	-8.75	-1.70	-2.66	-5.81	-10.88	-3.64	-3.08	-1.63	2.9429	0.0145
2900	-3.15	-4.32	-8.30	-1.33	-2.27	-5.35	-10.30	-3.21	-2.70	-1.26	2.9442	0.0142
3000	-2.81	-3.97	-7.88	-0.98	-1.91	-4.92	-9.76	-2.80	-2.35	-0.91	2.9457	0.0140
3100	-2.50	-3.65	-7.48	-0.68	-1.59	-4.52	-9.25	-2.45	-2.02	-0.60	2.9461	0.0140
3200	-2.25	-3.37	-7.14	-0.42	-1.31	-4.18	-8.80	-2.11	-1.72	-0.34	2.9527	0.0140
3300	-2.01	-3.12	-6.83	-0.18	-1.06	-3.86	-8.38	-1.79	-1.43	-0.09	2.9605	0.0140
3400	-1.78	-2.88	-6.53	0.04	-0.82	-3.56	-7.99	-1.49	-1.17	0.14	2.9694	0.0141
3500	-1.57	-2.65	-6.24	0.25	-0.59	-3.28	-7.61	-1.21	-0.91	0.35	2.9793	0.0141
3600	-1.37	-2.42	-5.95	0.44	-0.38	-3.00	-7.23	-0.98	-0.69	0.54	2.9826	0.0146
3700	-1.18	-2.20	-5.66	0.61	-0.18	-2.73	-6.86	-0.76	-0.48	0.73	2.9862	0.0151
3800	-1.00	-2.00	-5.40	0.77	0.01	-2.47	-6.52	-0.55	-0.28	0.90	2.9902	0.0155
3900	-0.83	-1.80	-5.14	0.93	0.20	-2.23	-6.19	-0.35	-0.09	1.06	2.9946	0.0160
4000	-0.67	-1.62	-4.90	1.08	0.37	-2.00	-5.88	-0.16	0.09	1.22	2.9993	0.0165
4100	-0.51	-1.43	-4.65	1.21	0.53	-1.77	-5.56	-0.01	0.25	1.35	2.9962	0.0173
4200	-0.37	-1.25	-4.41	1.33	0.69	-1.55	-5.26	0.14	0.40	1.49	2.9928	0.0182
4300	-0.23	-1.08	-4.18	1.45	0.84	-1.35	-4.97	0.28	0.55	1.61	2.9892	0.0190
4400	-0.09	-0.92	-3.96	1.56	0.98	-1.15	-4.69	0.42	0.68	1.73	2.9854	0.0199
4500	0.03	-0.76	-3.75	1.67	1.11	-0.96	-4.43	0.54	0.82	1.85	2.9813	0.0207
4600	0.16	-0.59	-3.51	1.75	1.24	-0.75	-4.13	0.63	0.92	1.94	2.9592	0.0224
4700	0.27	-0.43	-3.28	1.83	1.37	-0.56	-3.85	0.70	1.02	2.04	2.9363	0.0242
4800	0.38	-0.27	-3.05	1.90	1.49	-0.37	-3.58	0.78	1.12	2.12	2.9127	0.0260
4900	0.49	-0.12	-2.84	1.97	1.60	-0.20	-3.32	0.85	1.21	2.21	2.8885	0.0279
5000	0.59	0.02	-2.64	2.04	1.71	-0.02	-3.08	0.92	1.30	2.29	2.8638	0.0298

$U_{.80}Pu_{.20}O_{1.999}$

TEMP	LOGPUO2	LOGPUO	LOGPU	LOGUO3	LOGUO2	LOGJ0	LOGU	LOGO2	LOGO	LOGPTOT	(O/M)G	(PU/M)G
1500	-12.70	-14.64	-20.97	-10.60	-12.33	-17.84	-26.46	-13.51	-12.16	-10.58	3.0034	0.0079
1600	-11.46	-13.27	-19.27	-9.43	-11.03	-16.19	-24.30	-12.24	-10.97	-9.41	2.9977	0.0092
1700	-10.37	-12.06	-17.76	-8.40	-9.88	-14.74	-22.40	-11.11	-9.91	-8.37	2.9909	0.0105
1800	-9.40	-10.99	-16.43	-7.48	-8.86	-13.45	-20.72	-10.12	-8.98	-7.45	2.9830	0.0118
1900	-8.53	-10.03	-15.23	-6.66	-7.95	-12.29	-19.21	-9.22	-8.14	-6.62	2.9741	0.0132
2000	-7.75	-9.16	-14.15	-5.92	-7.12	-11.25	-17.85	-8.42	-7.38	-5.88	2.9644	0.0145
2100	-7.04	-8.41	-13.25	-5.22	-6.38	-10.34	-16.68	-7.63	-6.67	-5.17	2.9607	0.0147
2200	-6.39	-7.73	-12.42	-4.58	-5.70	-9.52	-15.63	-6.90	-6.02	-4.53	2.9572	0.0148
2300	-5.81	-7.11	-11.67	-4.00	-5.08	-8.76	-14.66	-6.24	-5.42	-3.94	2.9538	0.0150
2400	-5.27	-6.54	-10.98	-3.47	-4.52	-8.07	-13.78	-5.64	-4.88	-3.41	2.9506	0.0151
2500	-4.77	-6.02	-10.34	-2.98	-4.00	-7.44	-12.96	-5.09	-4.38	-2.91	2.9476	0.0152
2600	-4.31	-5.55	-9.78	-2.51	-3.51	-6.86	-12.23	-4.55	-3.90	-2.45	2.9477	0.0149
2700	-3.89	-5.11	-9.25	-2.08	-3.07	-6.33	-11.56	-4.06	-3.47	-2.01	2.9481	0.0147
2800	-3.50	-4.70	-8.77	-1.68	-2.66	-5.83	-10.93	-3.60	-3.06	-1.61	2.9488	0.0145
2900	-3.13	-4.32	-8.32	-1.31	-2.27	-5.37	-10.34	-3.17	-2.68	-1.24	2.9497	0.0143
3000	-2.79	-3.97	-7.90	-0.95	-1.91	-4.94	-9.80	-2.77	-2.33	-0.89	2.9509	0.0141
3100	-2.48	-3.64	-7.49	-0.66	-1.59	-4.54	-9.28	-2.41	-2.01	-0.58	2.9510	0.0142
3200	-2.22	-3.37	-7.15	-0.41	-1.31	-4.20	-8.83	-2.08	-1.70	-0.32	2.9576	0.0143
3300	-1.98	-3.11	-6.83	-0.17	-1.06	-3.88	-8.41	-1.76	-1.42	-0.08	2.9652	0.0144
3400	-1.76	-2.87	-6.53	0.05	-0.82	-3.58	-8.01	-1.47	-1.15	0.15	2.9739	0.0145
3500	-1.54	-2.64	-6.24	0.26	-0.59	-3.29	-7.64	-1.19	-0.90	0.36	2.9837	0.0145
3600	-1.34	-2.41	-5.94	0.45	-0.38	-3.01	-7.25	-0.96	-0.68	0.55	2.9867	0.0151
3700	-1.15	-2.19	-5.66	0.62	-0.18	-2.74	-6.88	-0.74	-0.47	0.73	2.9902	0.0157
3800	-0.97	-1.98	-5.39	0.78	0.01	-2.48	-6.54	-0.53	-0.27	0.90	2.9940	0.0162
3900	-0.80	-1.78	-5.13	0.94	0.20	-2.24	-6.21	-0.34	-0.08	1.07	2.9981	0.0168
4000	-0.64	-1.60	-4.89	1.08	0.37	-2.01	-5.90	-0.15	0.10	1.22	3.0025	0.0173
4100	-0.48	-1.41	-4.63	1.21	0.53	-1.78	-5.58	0.00	0.26	1.36	2.9990	0.0182
4200	-0.34	-1.23	-4.39	1.34	0.69	-1.56	-5.27	0.15	0.41	1.49	2.9953	0.0192
4300	-0.20	-1.05	-4.16	1.45	0.84	-1.35	-4.98	0.29	0.55	1.62	2.9914	0.0201
4400	-0.06	-0.89	-3.94	1.56	0.98	-1.15	-4.70	0.42	0.69	1.74	2.9871	0.0211
4500	0.06	-0.73	-3.73	1.67	1.11	-0.96	-4.44	0.55	0.82	1.85	2.9827	0.0220
4600	0.19	-0.56	-3.48	1.75	1.24	-0.76	-4.14	0.63	0.92	1.95	2.9603	0.0239
4700	0.30	-0.40	-3.25	1.83	1.37	-0.56	-3.86	0.71	1.03	2.04	2.9370	0.0258
4800	0.42	-0.24	-3.03	1.90	1.49	-0.38	-3.59	0.78	1.12	2.13	2.9130	0.0278
4900	0.52	-0.09	-2.81	1.98	1.60	-0.20	-3.33	0.86	1.21	2.21	2.8884	0.0298
5000	0.63	0.05	-2.61	2.04	1.71	-0.03	-3.08	0.92	1.30	2.29	2.8633	0.0319

U.⁸⁰Pu.²⁰O_{2.000}

TEMP	LOGPU02	LOGPU0	LOGPU	LOGU03	LOGU02	LOGU0	LOGU	LOG02	LOG0	LOGPTOT	(O/M)G	(PU/M)G
1500	-12.70	-14.77	-21.23	-10.48	-12.33	-17.97	-26.71	-13.26	-12.03	-10.46	3.0109	0.0059
1600	-11.46	-13.38	-19.48	-9.32	-11.03	-16.30	-24.52	-12.02	-10.86	-9.30	3.0061	0.0072
1700	-10.37	-12.15	-17.95	-8.31	-9.88	-14.83	-22.59	-10.93	-9.82	-8.28	3.0000	0.0086
1800	-9.39	-11.06	-16.58	-7.40	-8.86	-13.53	-20.88	-9.96	-8.90	-7.37	2.9925	0.0100
1900	-8.52	-10.09	-15.36	-6.59	-7.95	-12.36	-19.34	-9.09	-8.07	-6.56	2.9838	0.0115
2000	-7.74	-9.21	-14.26	-5.87	-7.12	-11.31	-17.96	-8.20	-7.23	-5.82	2.9740	0.0131
2100	-7.03	-8.45	-13.34	-5.17	-6.38	-10.39	-16.79	-7.52	-6.62	-5.12	2.9699	0.0135
2200	-6.38	-7.77	-12.50	-4.54	-5.70	-9.56	-15.72	-6.81	-5.97	-4.49	2.9659	0.0138
2300	-5.79	-7.14	-11.73	-3.96	-5.08	-8.80	-14.74	-6.17	-5.38	-3.91	2.9619	0.0142
2400	-5.25	-6.56	-11.03	-3.43	-4.52	-8.11	-13.84	-5.57	-4.85	-3.37	2.9581	0.0145
2500	-4.75	-6.03	-10.38	-2.95	-4.00	-7.47	-13.02	-5.03	-4.35	-2.88	2.9545	0.0148
2600	-4.30	-5.55	-9.81	-2.48	-3.51	-6.89	-12.29	-4.50	-3.88	-2.42	2.9543	0.0147
2700	-3.87	-5.11	-9.28	-2.05	-3.07	-6.35	-11.61	-4.01	-3.44	-1.99	2.9543	0.0146
2800	-3.48	-4.70	-8.79	-1.66	-2.66	-5.85	-10.97	-3.55	-3.04	-1.59	2.9547	0.0144
2900	-3.11	-4.32	-8.34	-1.29	-2.27	-5.39	-10.39	-3.13	-2.66	-1.22	2.9552	0.0143
3000	-2.77	-3.97	-7.91	-0.95	-1.91	-4.96	-9.84	-2.73	-2.31	-0.87	2.9560	0.0142
3100	-2.46	-3.64	-7.51	-0.64	-1.59	-4.56	-9.32	-2.38	-1.99	-0.56	2.9559	0.0144
3200	-2.20	-3.36	-7.16	-0.39	-1.31	-4.21	-8.86	-2.05	-1.69	-0.31	2.9623	0.0146
3300	-1.96	-3.10	-6.83	-0.16	-1.06	-3.89	-8.44	-1.74	-1.41	-0.07	2.9698	0.0147
3400	-1.73	-2.86	-6.53	0.07	-0.82	-3.59	-8.04	-1.44	-1.14	0.16	2.9783	0.0149
3500	-1.52	-2.63	-6.24	0.27	-0.59	-3.30	-7.66	-1.17	-0.89	0.37	2.9879	0.0150
3600	-1.32	-2.39	-5.94	0.46	-0.38	-3.02	-7.27	-0.94	-0.67	0.56	2.9909	0.0157
3700	-1.13	-2.17	-5.65	0.63	-0.18	-2.75	-6.90	-0.72	-0.46	0.74	2.9941	0.0163
3800	-0.95	-1.96	-5.38	0.79	0.01	-2.49	-6.55	-0.52	-0.26	0.91	2.9976	0.0169
3900	-0.77	-1.76	-5.12	0.94	0.20	-2.25	-6.22	-0.32	-0.07	1.07	3.0014	0.0175
4000	-0.61	-1.58	-4.87	1.09	0.37	-2.02	-5.91	-0.14	0.10	1.23	3.0055	0.0181
4100	-0.46	-1.38	-4.62	1.22	0.53	-1.79	-5.59	0.02	0.26	1.37	3.0018	0.0192
4200	-0.31	-1.20	-4.37	1.34	0.69	-1.57	-5.28	0.16	0.41	1.50	2.9978	0.0202
4300	-0.17	-1.03	-4.14	1.46	0.84	-1.36	-4.99	0.30	0.56	1.62	2.9935	0.0213
4400	-0.03	-0.86	-3.92	1.57	0.98	-1.16	-4.71	0.43	0.69	1.74	2.9888	0.0223
4500	0.10	-0.71	-3.70	1.67	1.11	-0.96	-4.44	0.56	0.82	1.86	2.9840	0.0234
4600	0.22	-0.53	-3.46	1.75	1.24	-0.76	-4.15	0.64	0.93	1.95	2.9612	0.0254
4700	0.34	-0.37	-3.23	1.83	1.37	-0.57	-3.86	0.72	1.02	2.04	2.9375	0.0275
4800	0.45	-0.21	-3.00	1.91	1.49	-0.38	-3.59	0.79	1.12	2.13	2.9132	0.0297
4900	0.56	-0.06	-2.79	1.98	1.60	-0.20	-3.33	0.86	1.22	2.21	2.8882	0.0319
5000	0.66	0.08	-2.58	2.05	1.71	-0.03	-3.08	0.93	1.31	2.30	2.8626	0.0341

U.80^{Pu}.20^O2.004

TEMP	LOGPU02	LOGPU0	LOGPU	LOGU03	LOGU02	LOGU0	LOGU	LOGU2	LOGU	LOGPTOT	(O/M)G	(PU/M)G
1500	-12.70	-16.02	-23.74	-9.21	-12.32	-19.21	-29.21	-10.74	-10.78	-9.19	3.0845	0.0003
1600	-11.46	-14.48	-21.70	-8.21	-11.02	-17.40	-26.72	-9.81	-9.75	-8.19	3.0770	0.0006
1700	-10.37	-13.12	-19.89	-7.33	-9.87	-15.80	-24.53	-8.98	-8.84	-7.30	3.0706	0.0009
1800	-9.39	-11.92	-18.29	-6.54	-8.85	-14.38	-22.58	-8.24	-8.04	-6.52	3.0645	0.0014
1900	-8.52	-10.84	-16.86	-5.84	-7.94	-13.10	-20.84	-7.59	-7.32	-5.81	3.0580	0.0021
2000	-7.74	-9.87	-15.57	-5.20	-7.12	-11.96	-19.27	-6.99	-6.67	-5.18	3.0507	0.0029
2100	-7.03	-9.02	-14.48	-4.60	-6.37	-10.96	-17.92	-6.38	-6.05	-4.57	3.0464	0.0037
2200	-6.38	-8.26	-13.48	-4.04	-5.70	-10.05	-16.69	-5.83	-5.48	-4.01	3.0409	0.0045
2300	-5.79	-7.56	-12.57	-3.54	-5.08	-9.22	-15.58	-5.33	-4.96	-3.50	3.0343	0.0055
2400	-5.25	-6.92	-11.74	-3.07	-4.51	-8.46	-14.55	-4.86	-4.49	-3.03	3.0264	0.0065
2500	-4.75	-6.33	-10.97	-2.65	-3.99	-7.76	-13.61	-4.44	-4.05	-2.60	3.0173	0.0076
2600	-4.30	-5.80	-10.31	-2.24	-3.51	-7.13	-12.77	-4.01	-3.63	-2.19	3.0112	0.0084
2700	-3.87	-5.31	-9.69	-1.85	-3.07	-6.55	-12.00	-3.61	-3.24	-1.80	3.0044	0.0093
2800	-3.48	-4.86	-9.11	-1.50	-2.65	-6.01	-11.29	-3.24	-2.88	-1.44	2.9970	0.0101
2900	-3.11	-4.44	-8.57	-1.17	-2.27	-5.51	-10.62	-2.89	-2.54	-1.11	2.9892	0.0110
3000	-2.77	-4.05	-8.07	-0.86	-1.91	-5.04	-10.00	-2.57	-2.23	-0.80	2.9809	0.0119
3100	-2.46	-3.70	-7.64	-0.57	-1.58	-4.63	-9.45	-2.24	-1.92	-0.50	2.9784	0.0124
3200	-2.20	-3.42	-7.27	-0.33	-1.31	-4.27	-8.98	-1.93	-1.63	-0.26	2.9827	0.0128
3300	-1.96	-3.15	-6.93	-0.11	-1.06	-3.94	-8.53	-1.64	-1.36	-0.03	2.9878	0.0133
3400	-1.73	-2.89	-6.60	0.10	-0.82	-3.63	-8.11	-1.37	-1.10	0.19	2.9936	0.0137
3500	-1.52	-2.65	-6.29	0.30	-0.59	-3.33	-7.71	-1.11	-0.86	0.40	3.0001	0.0142
3600	-1.32	-2.42	-5.99	0.48	-0.38	-3.04	-7.32	-0.89	-0.64	0.59	3.0042	0.0148
3700	-1.13	-2.20	-5.70	0.65	-0.18	-2.77	-6.96	-0.67	-0.42	0.77	3.0086	0.0154
3800	-0.95	-1.99	-5.43	0.82	0.01	-2.52	-6.61	-0.46	-0.24	0.94	3.0134	0.0160
3900	-0.77	-1.79	-5.17	0.97	0.19	-2.28	-6.28	-0.27	-0.05	1.10	3.0185	0.0166
4000	-0.61	-1.60	-4.93	1.12	0.37	-2.05	-5.97	-0.08	0.13	1.25	3.0239	0.0172
4100	-0.46	-1.41	-4.67	1.24	0.53	-1.81	-5.64	0.07	0.29	1.39	3.0199	0.0183
4200	-0.31	-1.23	-4.42	1.36	0.69	-1.59	-5.33	0.21	0.44	1.52	3.0156	0.0194
4300	-0.17	-1.05	-4.18	1.48	0.83	-1.38	-5.03	0.34	0.58	1.64	3.0109	0.0204
4400	-0.03	-0.88	-3.96	1.59	0.98	-1.18	-4.75	0.47	0.71	1.76	3.0058	0.0215
4500	0.10	-0.72	-3.74	1.69	1.11	-0.98	-4.48	0.59	0.84	1.87	3.0004	0.0226
4600	0.22	-0.56	-3.50	1.77	1.24	-0.78	-4.19	0.68	0.95	1.97	2.9905	0.0245
4700	0.34	-0.39	-3.27	1.85	1.37	-0.59	-3.91	0.76	1.05	2.06	2.9958	0.0264
4800	0.45	-0.24	-3.05	1.93	1.49	-0.41	-3.65	0.84	1.15	2.15	2.9984	0.0284
4900	0.56	-0.09	-2.84	2.00	1.60	-0.23	-3.39	0.92	1.24	2.23	2.9964	0.0304
5000	0.66	0.05	-2.64	2.07	1.71	-0.06	-3.15	0.99	1.34	2.32	2.8939	0.0324

$U_{.80}Pu_{.20}O_{2.008}$

TEMP	LOGPU02	LOGPU0	LOGPU	LOGU03	LOGU02	LOGU0	LOGU	LOG02	LOG0	LOGPTOT	(O/M)G	(PU/M)G
1500	-12.70	-17.28	-26.25	-7.96	-12.33	-20.47	-31.73	-8.23	-9.52	-7.76	4.0901	0.0000
1600	-11.46	-15.59	-23.91	-7.10	-11.32	-18.51	-28.94	-7.59	-8.64	-6.97	3.6769	0.0000
1700	-10.37	-14.10	-21.84	-6.35	-9.88	-16.77	-26.48	-7.03	-7.87	-6.26	3.4489	0.0001
1800	-9.39	-12.77	-20.00	-5.68	-8.85	-15.23	-24.29	-6.53	-7.18	-5.61	3.3149	0.0002
1900	-8.52	-11.59	-18.36	-5.09	-7.94	-13.85	-22.34	-6.08	-6.57	-5.03	3.2318	0.0004
2000	-7.74	-10.52	-16.88	-4.55	-7.12	-12.61	-20.58	-5.68	-6.02	-4.50	3.1773	0.0006
2100	-7.03	-9.59	-15.62	-4.03	-6.37	-11.53	-19.06	-5.24	-5.48	-3.98	3.1497	0.0010
2200	-6.38	-8.75	-14.46	-3.55	-5.70	-10.54	-17.68	-4.85	-4.99	-3.51	3.1275	0.0015
2300	-5.79	-7.98	-13.41	-3.12	-5.08	-9.64	-16.42	-4.48	-4.54	-3.08	3.1085	0.0021
2400	-5.25	-7.27	-12.45	-2.72	-4.51	-8.81	-15.26	-4.15	-4.13	-2.68	3.0911	0.0029
2500	-4.75	-6.62	-11.56	-2.35	-3.99	-8.05	-14.20	-3.85	-3.76	-2.31	3.0743	0.0039
2600	-4.30	-6.05	-10.80	-1.99	-3.51	-7.38	-13.27	-3.51	-3.39	-1.95	3.0625	0.0048
2700	-3.87	-5.51	-10.09	-1.65	-3.07	-6.75	-12.40	-3.21	-3.04	-1.61	3.0497	0.0059
2800	-3.48	-5.02	-9.43	-1.34	-2.65	-6.17	-11.60	-2.92	-2.72	-1.29	3.0359	0.0071
2900	-3.11	-4.56	-8.81	-1.05	-2.27	-5.63	-10.86	-2.65	-2.42	-0.99	3.0209	0.0084
3000	-2.77	-4.13	-8.24	-0.78	-1.91	-5.12	-10.16	-2.40	-2.15	-0.72	3.0046	0.0099
3100	-2.46	-3.77	-7.78	-0.53	-1.58	-4.69	-9.59	-2.16	-1.85	-0.44	3.0001	0.0106
3200	-2.20	-3.47	-7.39	-0.28	-1.31	-4.33	-9.09	-1.82	-1.57	-0.20	3.0027	0.0113
3300	-1.96	-3.19	-7.02	-0.06	-1.06	-3.99	-8.62	-1.55	-1.31	0.02	3.0056	0.0120
3400	-1.73	-2.93	-6.67	0.14	-0.82	-3.66	-8.18	-1.30	-1.07	0.23	3.0088	0.0127
3500	-1.52	-2.68	-6.35	0.33	-0.59	-3.36	-7.77	-1.06	-0.84	0.42	3.0123	0.0134
3600	-1.32	-2.45	-6.04	0.51	-0.38	-3.07	-7.38	-0.83	-0.62	0.61	3.0175	0.0140
3700	-1.13	-2.23	-5.76	0.68	-0.18	-2.80	-7.01	-0.61	-0.41	0.79	3.0232	0.0146
3800	-0.95	-2.02	-5.48	0.84	0.01	-2.55	-6.66	-0.41	-0.21	0.96	3.0293	0.0152
3900	-0.77	-1.82	-5.23	1.00	0.19	-2.31	-6.34	-0.21	-0.02	1.12	3.0357	0.0157
4000	-0.61	-1.63	-4.98	1.14	0.36	-2.08	-6.02	-0.03	0.16	1.28	3.0424	0.0163
4100	-0.46	-1.44	-4.72	1.27	0.53	-1.84	-5.69	0.12	0.31	1.41	3.0383	0.0174
4200	-0.31	-1.25	-4.46	1.33	0.68	-1.62	-5.38	0.25	0.46	1.53	3.0337	0.0185
4300	-0.17	-1.07	-4.22	1.50	0.83	-1.40	-5.08	0.39	0.60	1.66	3.0286	0.0196
4400	-0.03	-0.90	-3.99	1.60	0.97	-1.20	-4.79	0.51	0.73	1.77	3.0231	0.0208
4500	0.10	-0.74	-3.78	1.70	1.11	-1.01	-4.52	0.63	0.86	1.88	3.0171	0.0219
4600	0.22	-0.58	-3.54	1.79	1.24	-0.81	-4.24	0.72	0.97	1.98	3.0001	0.0236
4700	0.34	-0.42	-3.32	1.87	1.36	-0.62	-3.96	0.81	1.07	2.08	2.9824	0.0253
4800	0.45	-0.26	-3.10	1.95	1.48	-0.44	-3.70	0.89	1.18	2.17	2.9640	0.0271
4900	0.56	-0.12	-2.90	2.03	1.60	-0.26	-3.45	0.97	1.27	2.25	2.9451	0.0289
5000	0.66	0.02	-2.70	2.10	1.71	-0.09	-3.21	1.05	1.37	2.34	2.9256	0.0307

100

U.80^{Pu}.20^O2.04

TEMP	LOGPU02	LOGPU0	LOGPU	LOGU03	LOGU02	LOGU0	LOGU	LOG02	LOG0	LOGPTOT	(O/M)G	(PU/M)G
1500	-12.70	-17.78	-27.25	-7.45	-12.32	-20.97	-32.72	-7.23	-9.02	-7.02	6.3572	0.0000
1600	-11.46	-16.09	-24.91	-6.50	-11.02	-19.00	-29.93	-6.59	-8.14	-6.29	5.0625	0.0000
1700	-10.37	-14.60	-22.84	-5.85	-9.87	-17.27	-27.48	-6.03	-7.37	-5.62	4.3463	0.0000
1800	-9.39	-13.27	-21.00	-5.18	-8.85	-15.73	-25.29	-5.53	-6.68	-5.01	3.9252	0.0001
1900	-8.52	-12.09	-19.36	-4.59	-7.94	-14.35	-23.34	-5.09	-6.07	-4.46	3.6646	0.0001
2000	-7.74	-11.02	-17.88	-4.05	-7.11	-13.11	-21.58	-4.68	-5.52	-3.95	3.4958	0.0002
2100	-7.03	-10.07	-16.57	-3.55	-6.37	-12.00	-20.01	-4.29	-5.00	-3.46	3.3931	0.0003
2200	-6.38	-9.20	-15.37	-3.10	-5.70	-10.99	-18.59	-3.94	-4.54	-3.02	3.3192	0.0005
2300	-5.79	-8.41	-14.28	-2.68	-5.08	-10.07	-17.29	-3.62	-4.11	-2.62	3.2642	0.0008
2400	-5.25	-7.69	-13.28	-2.30	-4.51	-9.23	-16.09	-3.32	-3.72	-2.25	3.2218	0.0011
2500	-4.75	-7.02	-12.36	-1.95	-3.99	-8.45	-15.00	-3.05	-3.36	-1.90	3.1879	0.0016
2600	-4.30	-6.42	-11.55	-1.61	-3.51	-7.76	-14.02	-2.76	-3.01	-1.56	3.1667	0.0021
2700	-3.87	-5.87	-10.80	-1.30	-3.07	-7.11	-13.12	-2.49	-2.68	-1.25	3.1474	0.0026
2800	-3.48	-5.36	-10.10	-1.01	-2.66	-6.51	-12.28	-2.24	-2.38	-0.95	3.1294	0.0033
2900	-3.11	-4.88	-9.45	-0.73	-2.27	-5.95	-11.51	-2.01	-2.10	-0.68	3.1120	0.0041
3000	-2.77	-4.44	-8.85	-0.48	-1.91	-5.43	-10.78	-1.79	-1.84	-0.43	3.0947	0.0051
3100	-2.46	-4.05	-8.33	-0.24	-1.59	-4.97	-10.14	-1.56	-1.58	-0.18	3.0861	0.0059
3200	-2.20	-3.71	-7.87	-0.04	-1.32	-4.58	-9.58	-1.34	-1.32	0.02	3.0876	0.0068
3300	-1.96	-3.40	-7.44	0.14	-1.07	-4.20	-9.05	-1.13	-1.10	0.21	3.0882	0.0077
3400	-1.73	-3.11	-7.04	0.31	-0.83	-3.85	-8.55	-0.94	-0.89	0.39	3.0879	0.0087
3500	-1.52	-2.83	-6.66	0.47	-0.61	-3.52	-8.09	-0.75	-0.68	0.56	3.0868	0.0098
3600	-1.32	-2.58	-6.32	0.63	-0.39	-3.22	-7.66	-0.56	-0.48	0.73	3.0900	0.0107
3700	-1.13	-2.34	-5.99	0.78	-0.19	-2.94	-7.26	-0.38	-0.29	0.89	3.0929	0.0116
3800	-0.95	-2.12	-5.69	0.93	-0.00	-2.67	-6.89	-0.20	-0.11	1.04	3.0954	0.0126
3900	-0.77	-1.91	-5.40	1.07	0.18	-2.41	-6.53	-0.04	0.07	1.19	3.0976	0.0135
4000	-0.61	-1.70	-5.13	1.20	0.35	-2.17	-6.19	0.12	0.23	1.33	3.0993	0.0145
4100	-0.46	-1.50	-4.86	1.32	0.51	-1.93	-5.85	0.26	0.38	1.46	3.0963	0.0157
4200	-0.31	-1.32	-4.60	1.43	0.66	-1.70	-5.53	0.39	0.52	1.58	3.0925	0.0168
4300	-0.17	-1.13	-4.35	1.54	0.81	-1.49	-5.22	0.51	0.66	1.69	3.0881	0.0180
4400	-0.03	-0.96	-4.11	1.64	0.95	-1.28	-4.93	0.63	0.79	1.81	3.0830	0.0193
4500	0.10	-0.80	-3.89	1.74	1.09	-1.08	-4.65	0.74	0.92	1.92	3.0774	0.0205
4600	0.22	-0.63	-3.66	1.83	1.22	-0.89	-4.37	0.84	1.03	2.01	3.0649	0.0220
4700	0.34	-0.48	-3.44	1.91	1.34	-0.70	-4.11	0.93	1.14	2.11	3.0518	0.0236
4800	0.45	-0.33	-3.23	1.99	1.46	-0.52	-3.85	1.02	1.24	2.20	3.0379	0.0251
4900	0.56	-0.18	-3.03	2.07	1.57	-0.35	-3.60	1.10	1.34	2.29	3.0234	0.0267
5000	0.66	-0.04	-2.83	2.14	1.68	-0.18	-3.37	1.18	1.43	2.37	3.0083	0.0283

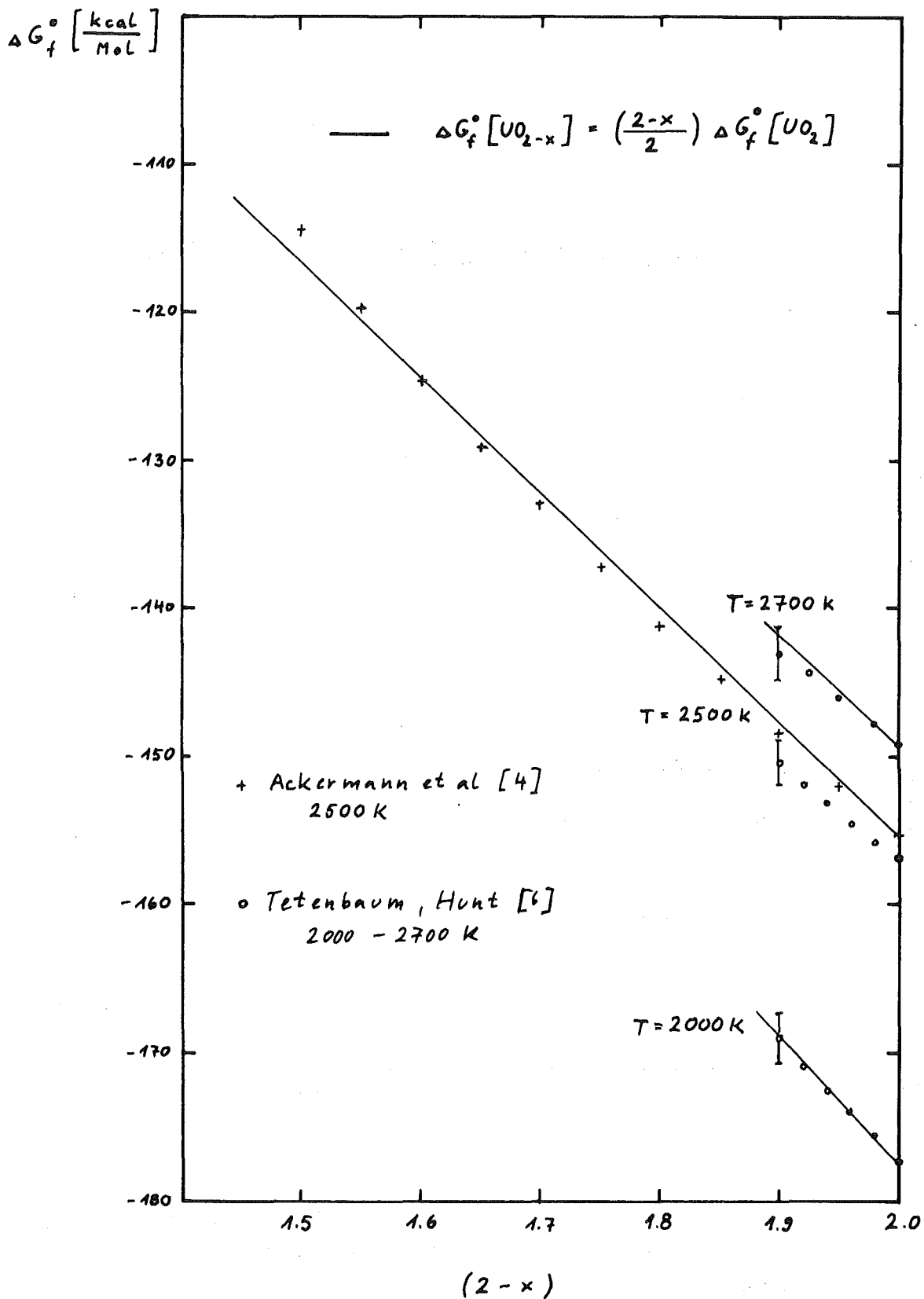


Abb. 1 Freie Standardbildungsenthalpie ΔG_f° von UO_{2-x} in Abhängigkeit vom O/U-Verhältnis bei verschiedenen Temperaturen.

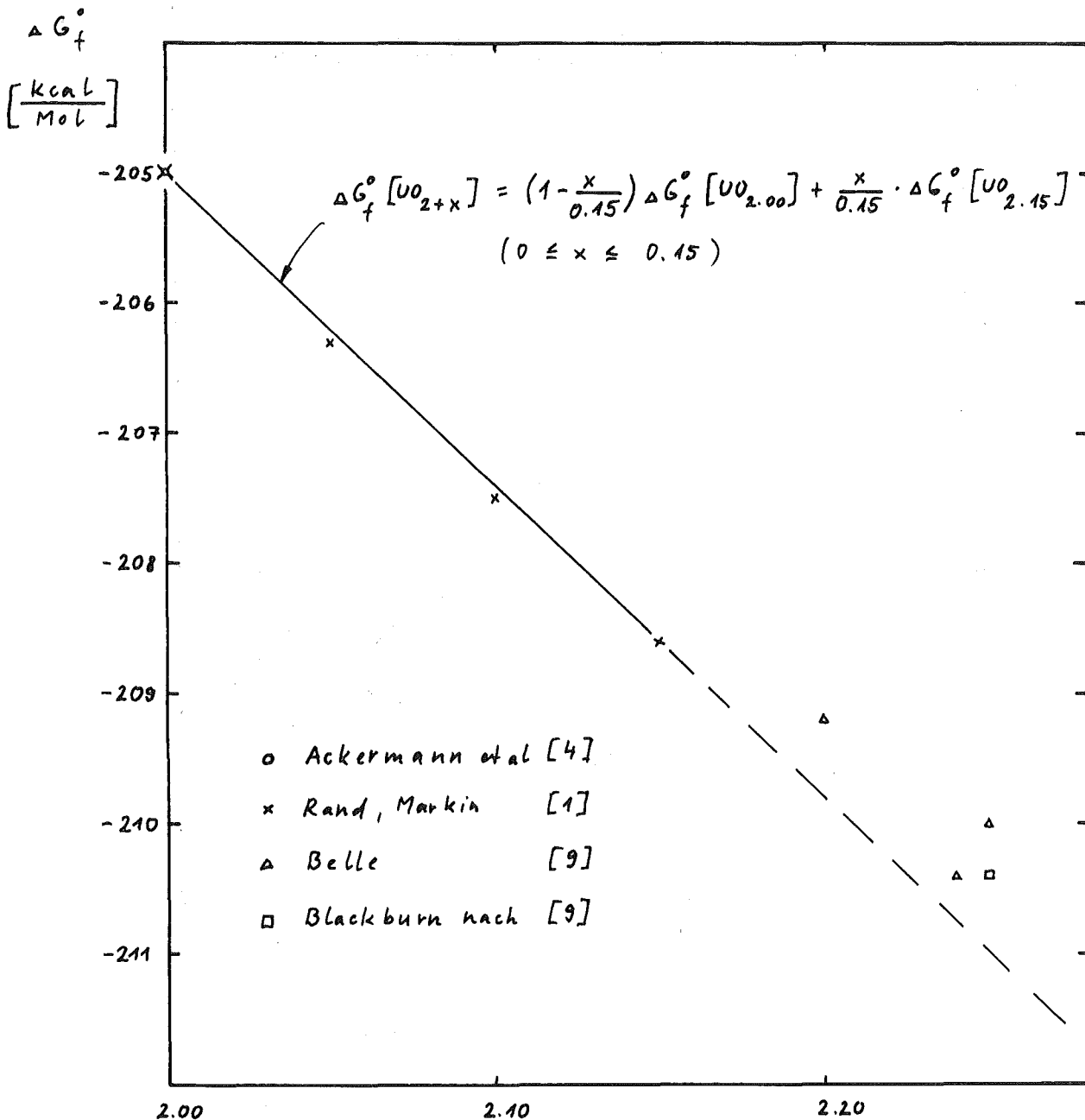


Abb. 2 Freie Standardbildungsenthalpie ΔG_f° von UO_{2+x} in Abhängigkeit vom O/U-Verhältnis bei 1300 K.

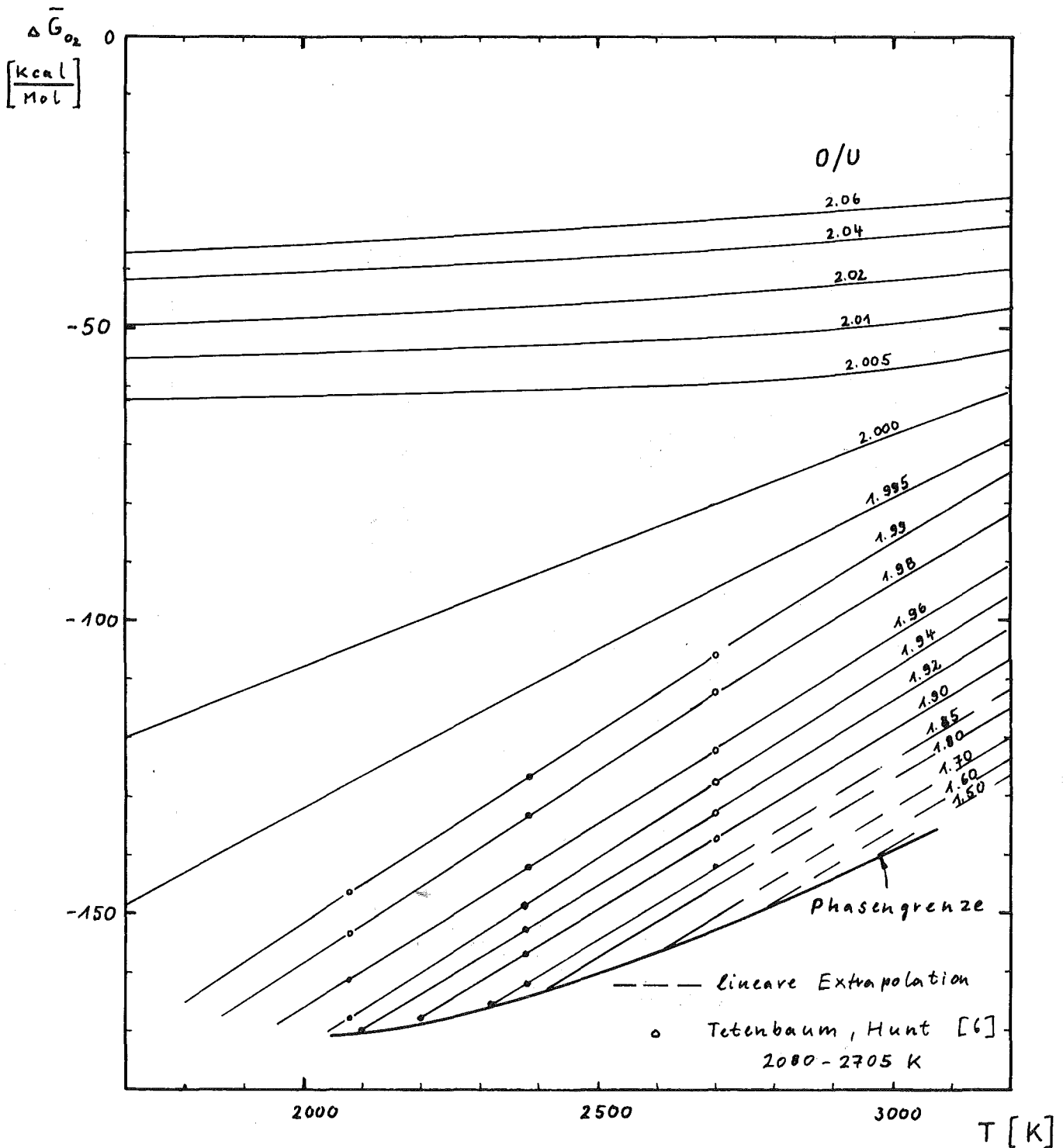


Abb. 3a Sauerstoffpotential $\Delta \bar{G}_{O_2}$ von $UO_{2 \pm x}$ als Funktion der Temperatur nach Blackburn-Modell. Kurvenparameter ist das O/U-Verhältnis. $\Delta \bar{G}_{O_2}$ -Werte berechnet aus Fig. 1 [5] und Fig. 8 [29].

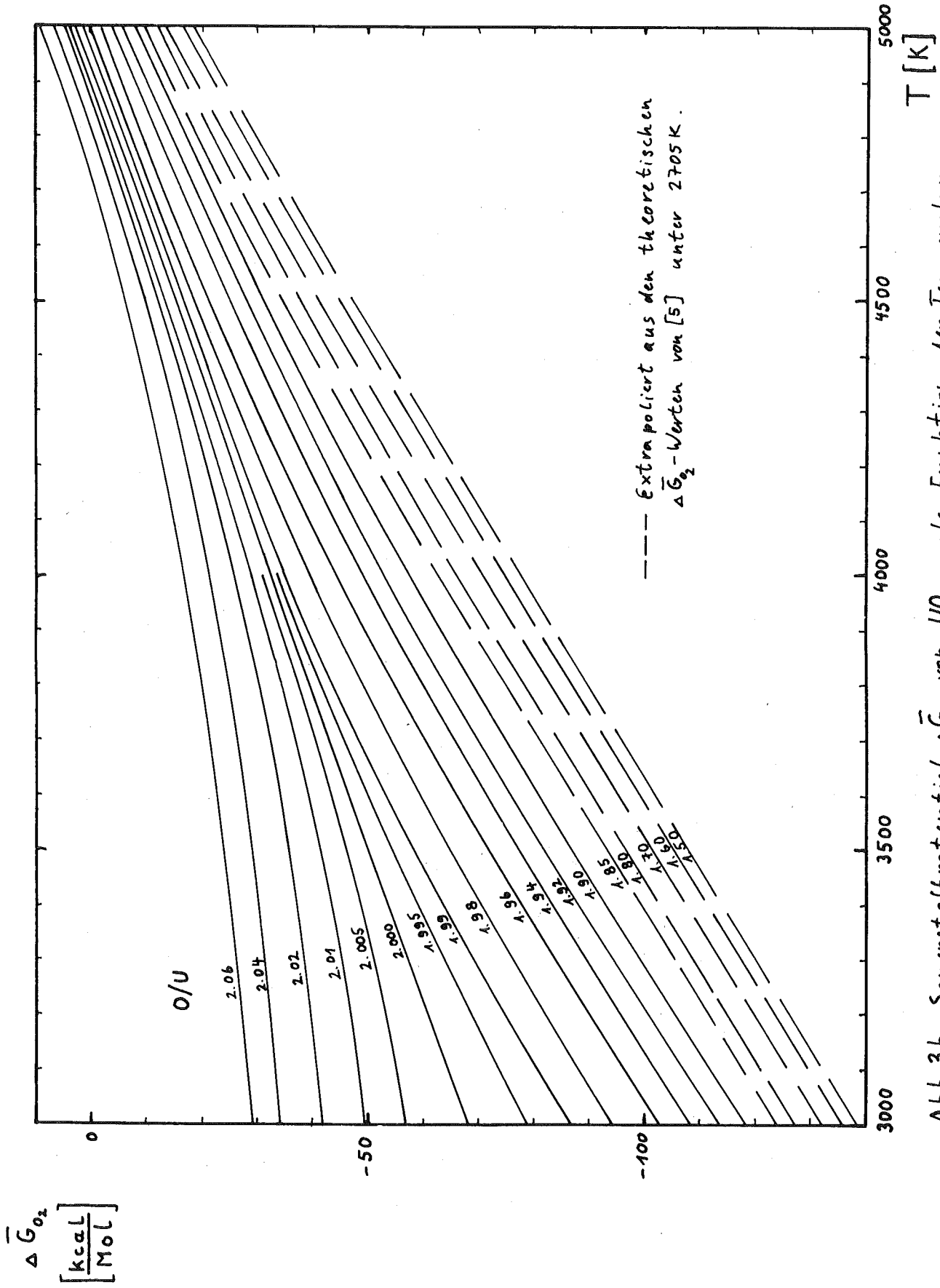


Abb 3b Sauerstoffpotential $\Delta \bar{G}_{O_2}$ von UO_{2+x} als Funktion der Temperatur nach Blackburn-Modell. Kurvenparameter ist das O/U-Verhältnis. $\Delta \bar{G}_{O_2}$ -Werte berechnet aus Fig. 1 [5] und Fig. 8 [29].

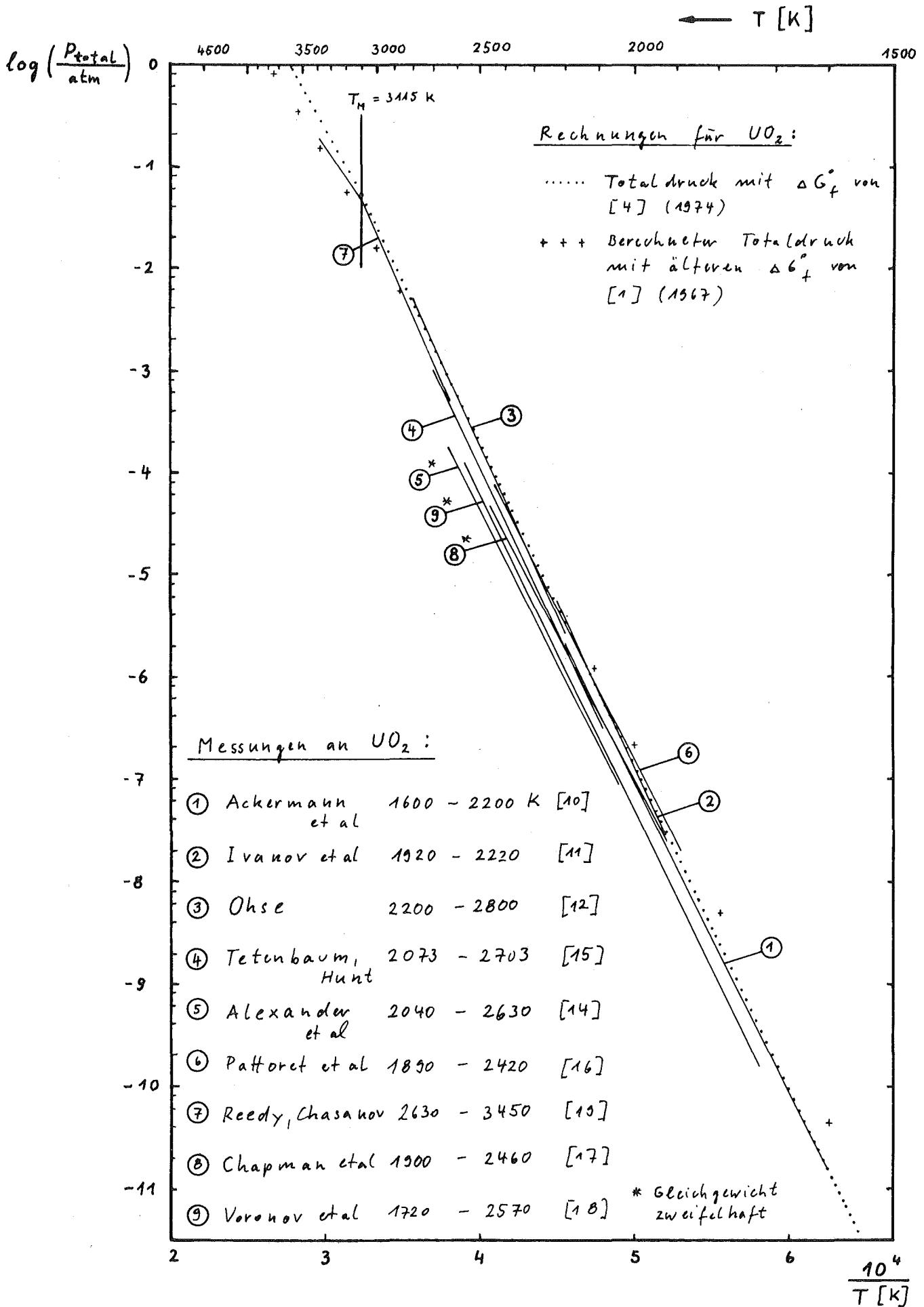


Abb. 4 Gemessene und berechnete Gleichgewichtsdampfdrücke von UO_2 als Funktion der Temperatur.

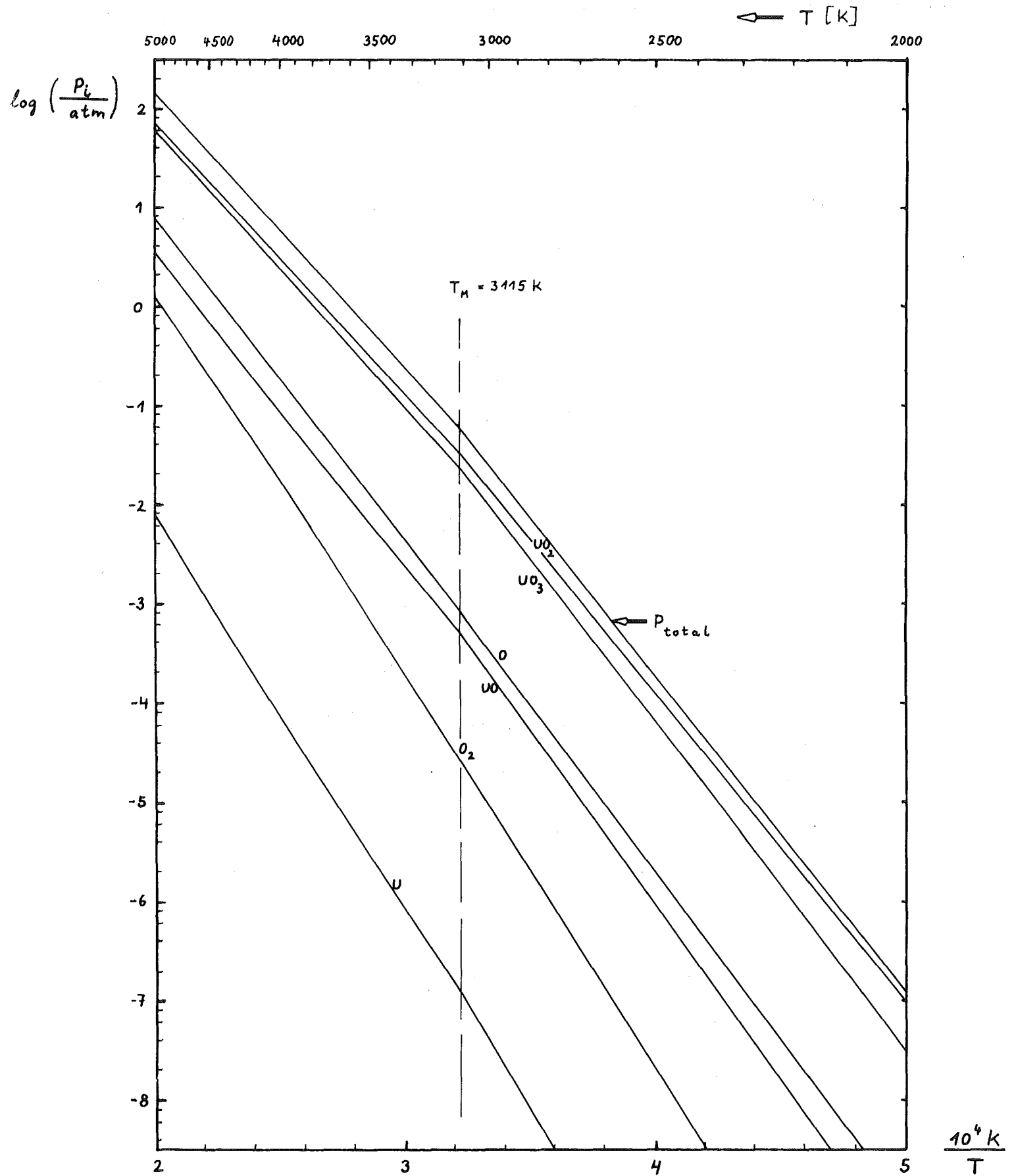


Abb. 5 Berechnete Partialdrücke über UO_2 als Funktion der Temperatur bei Gleichgewichtsverdampfung.

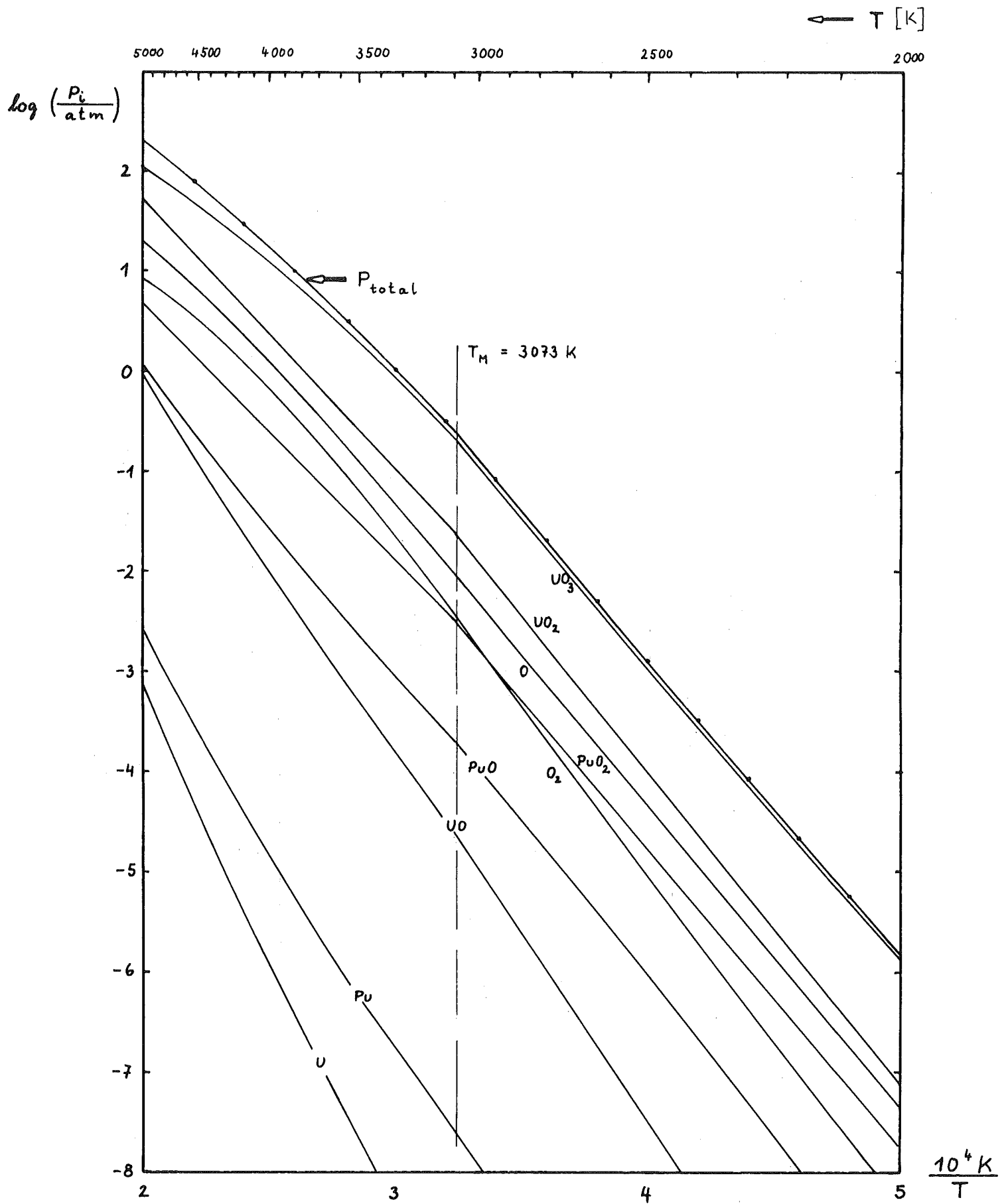


Abb. 6 Berechnete Gleichgewichts-Partialdrücke über $(U_{.80}Pu_{.20})O_2$ als Funktion der Temperatur.

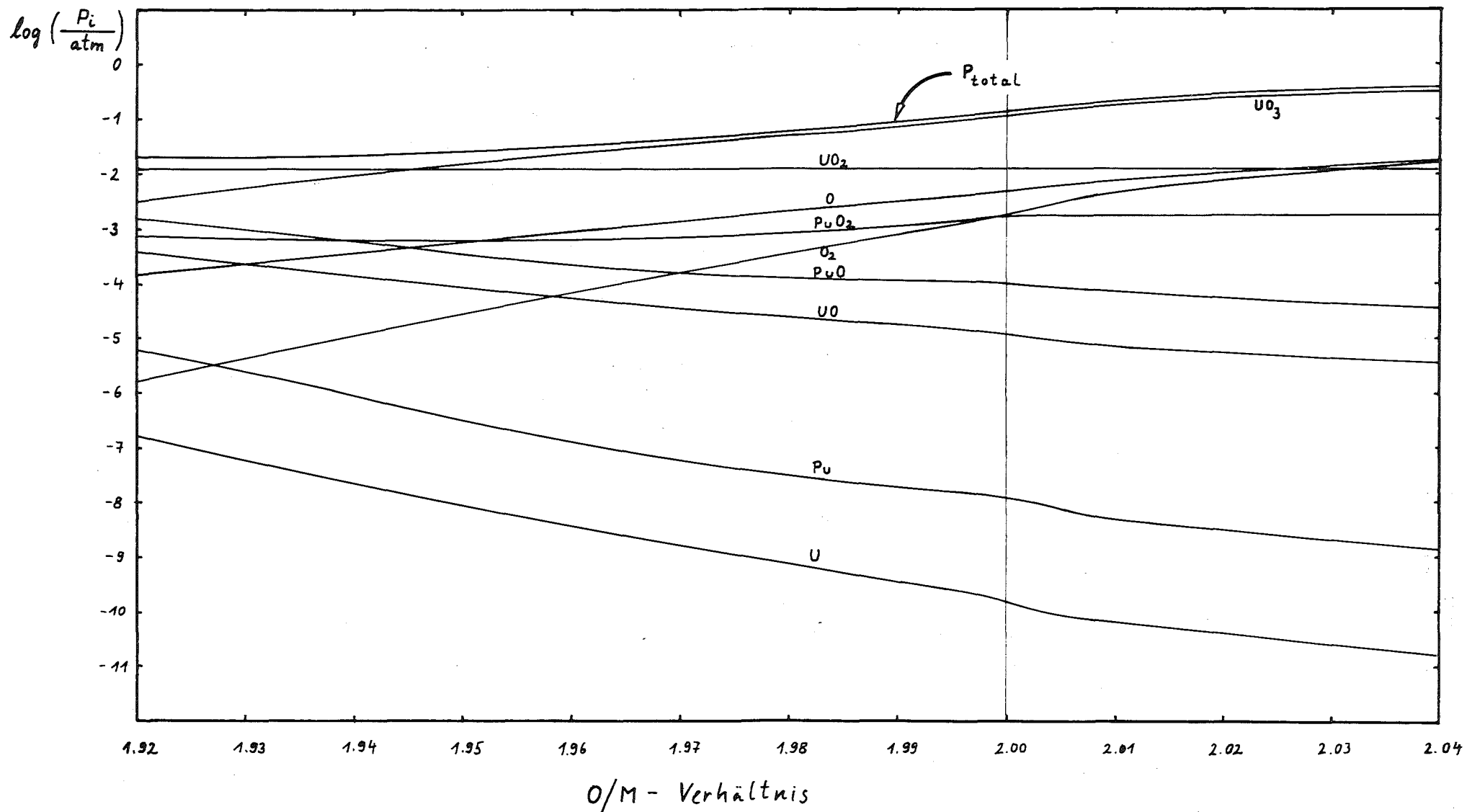


Abb. 7 Berechnete Gleichgewichts-Partialdrucke über $(U_{.80}Pu_{.20})O_{2\pm x}$ als Funktion der Stöchiometrie bei 3000 K.

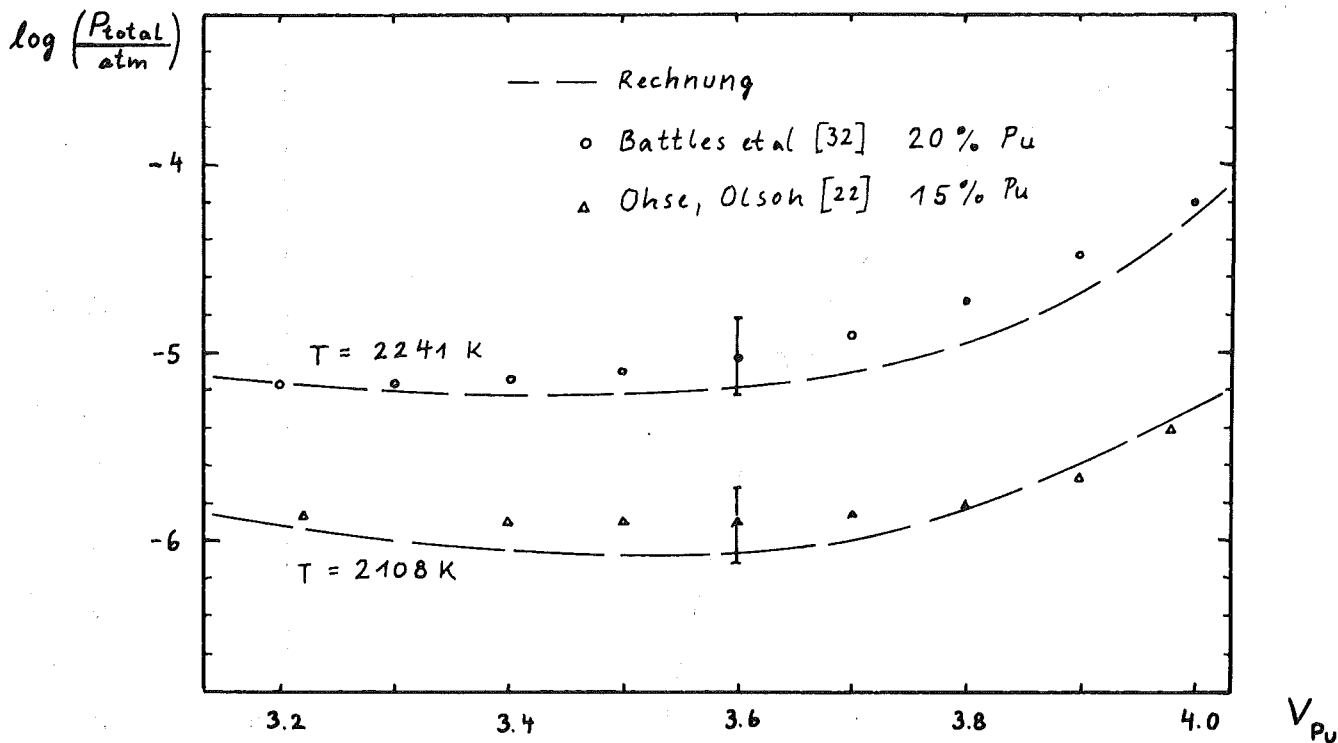


Abb. 8 Berechnete und gemessene Gleichgewichtsdampfdrücke von $(\text{U,Pu})\text{O}_{2-x}$ als Funktion der Plutoniumvalenz für zwei feste Temperaturen.

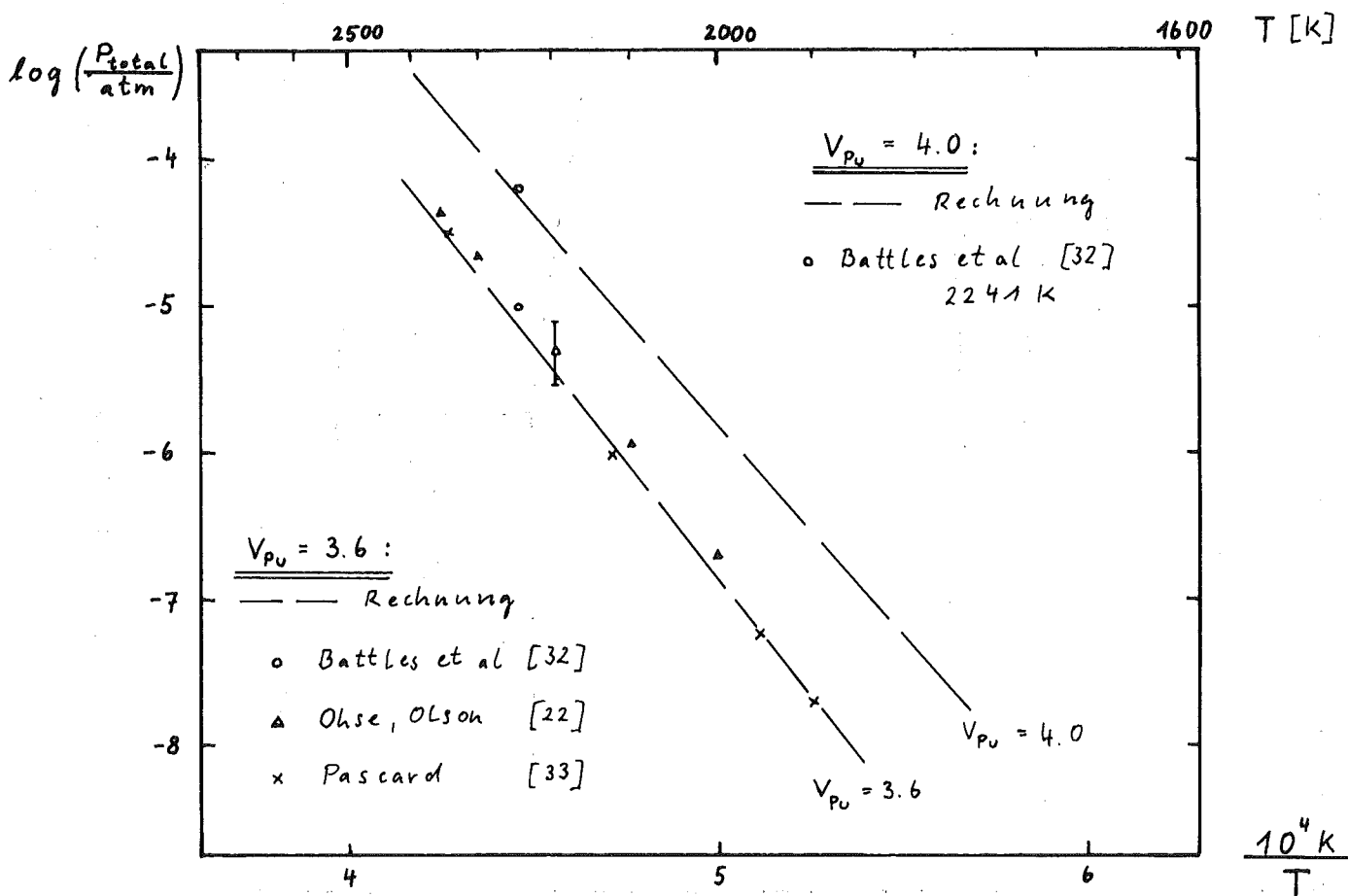


Abb. 9 Berechnete und gemessene Gleichgewichtsdampfdrücke von $(\text{U,Pu})\text{O}_{2-x}$ als Funktion der Temperatur für zwei feste Plutoniumvalenzen.

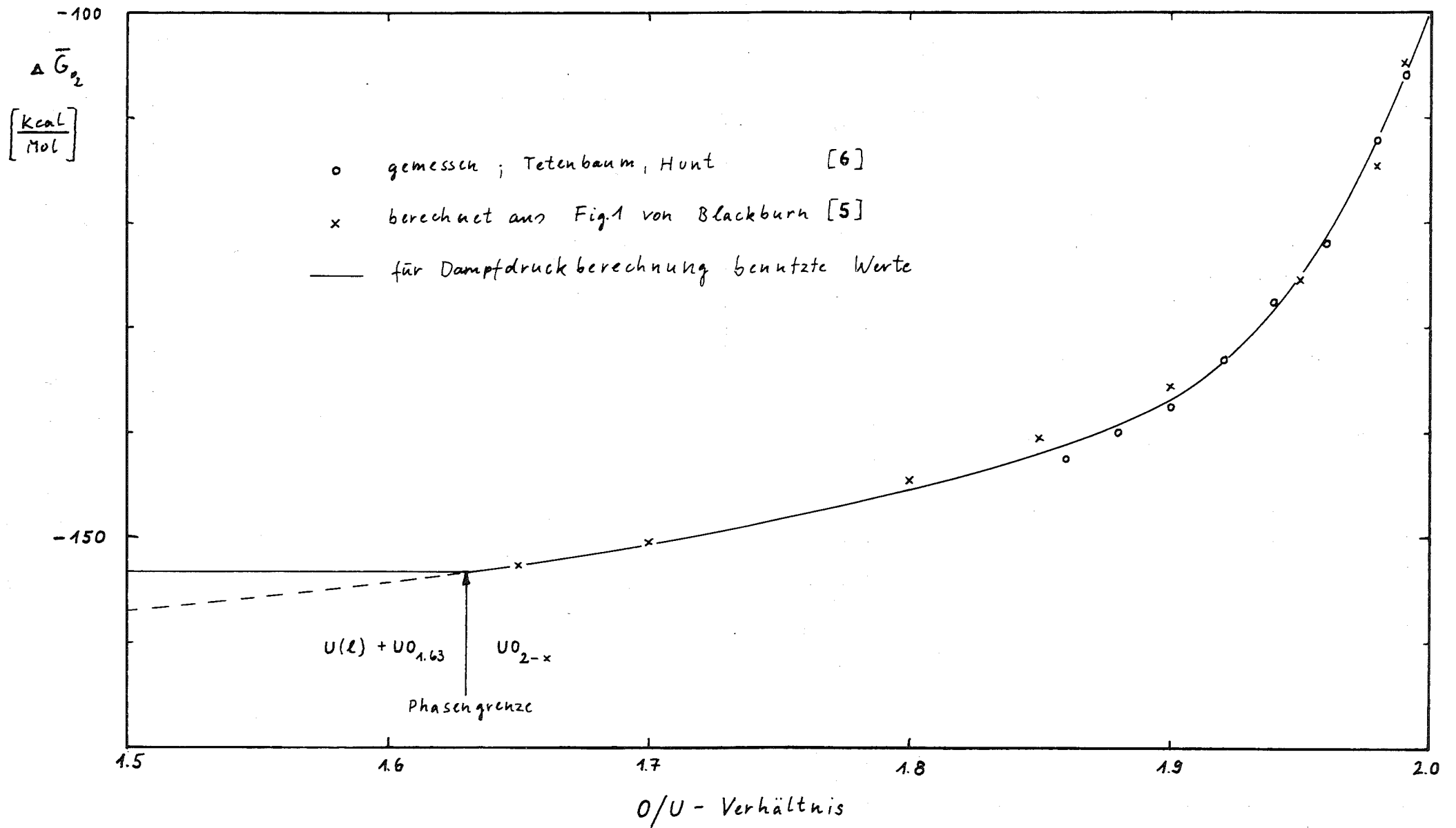


Abb. 10 Sauerstoffpotential $\Delta \bar{G}_{O_2}$ von UO_{2-x} bei 2705 K. Extrapolation der gemessenen $\Delta \bar{G}_{O_2}$ -Werte zu niedrigeren Stöchiometrien mittels Blackburn-Modell [6].

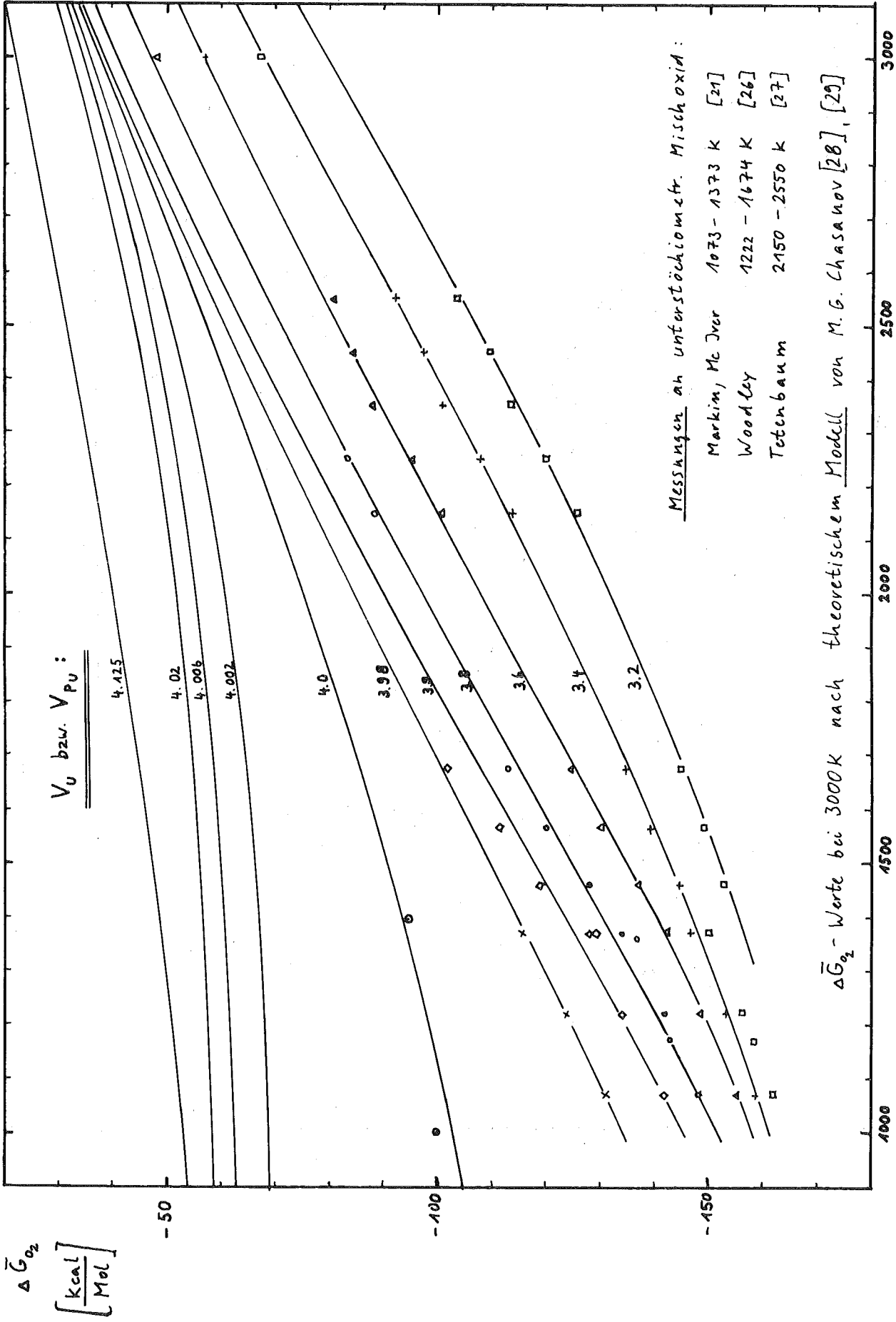


Abb. 11a Sauerstoffpotential $\Delta \bar{G}_{O_2}$ von (U, Pu) -Mischoxid als Funktion der Temperatur. Kurvenparameter ist die Uran- bzw. Plutoniumvalenz.

$\Delta \bar{G}_{O_2}$
 [kcal]
 [Mol]

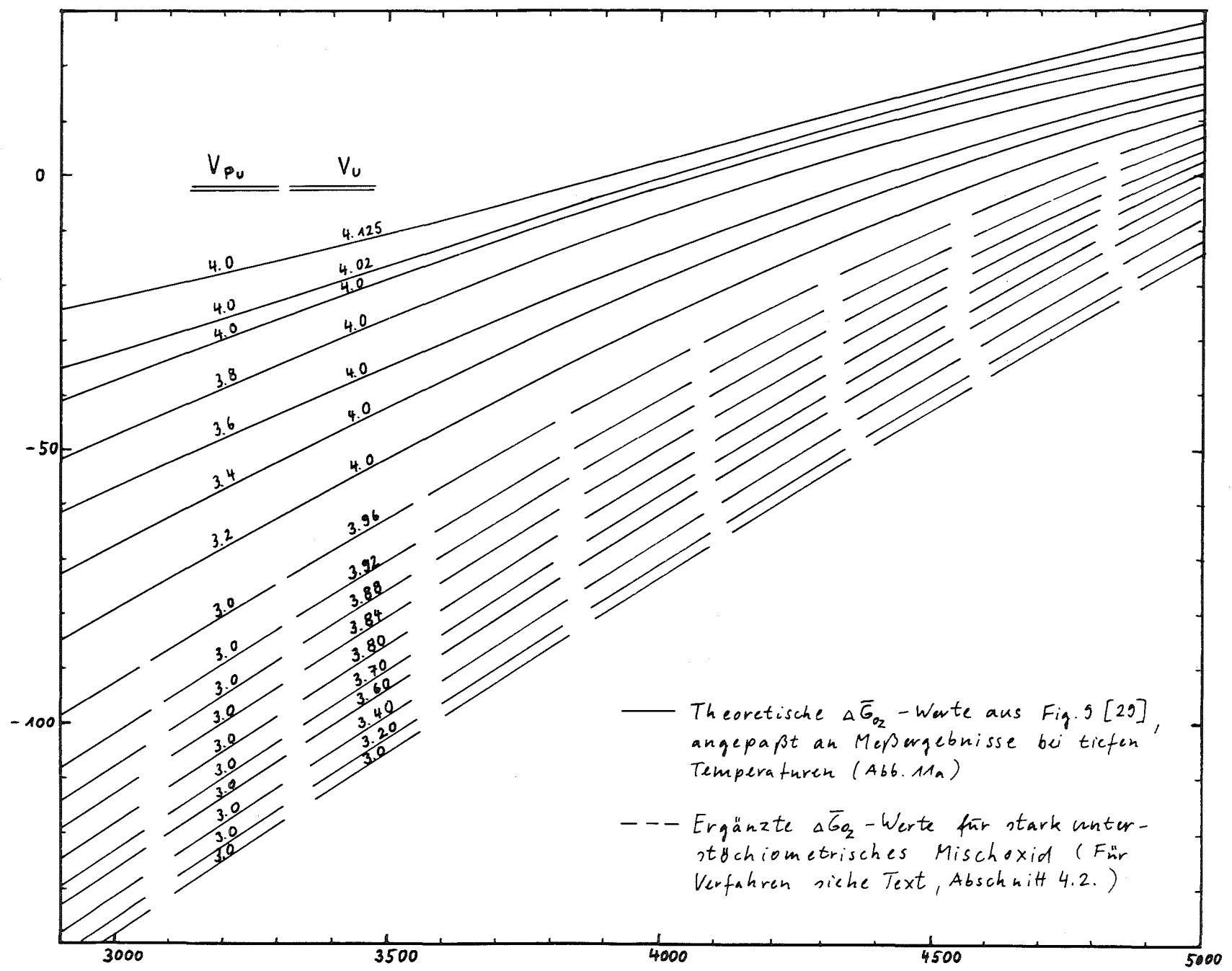


Abb 116 Sauerstoffpotential $\Delta \bar{G}_{O_2}$ von (U,Pu)-Mischoxid als Funktion der Temperatur. Kurvenparameter ist die Uran- und Plutoniumvalenz.

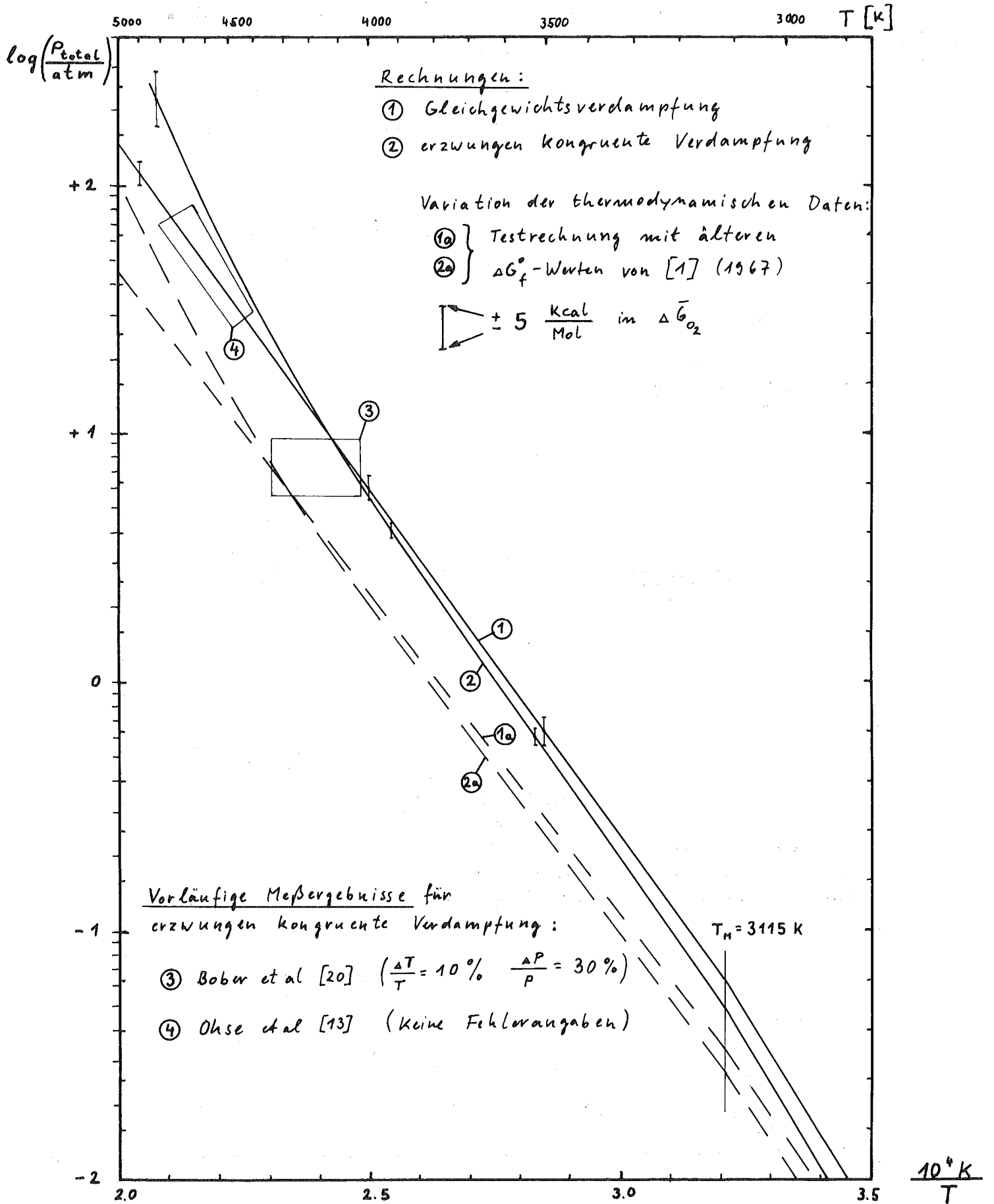


Abb. 12 Berechneter Totaldampfdruck von UO_2 bei Gleichgewichts-
 verdampfung und erzwungen kongruenter Verdampfung
 als Funktion der Temperatur.

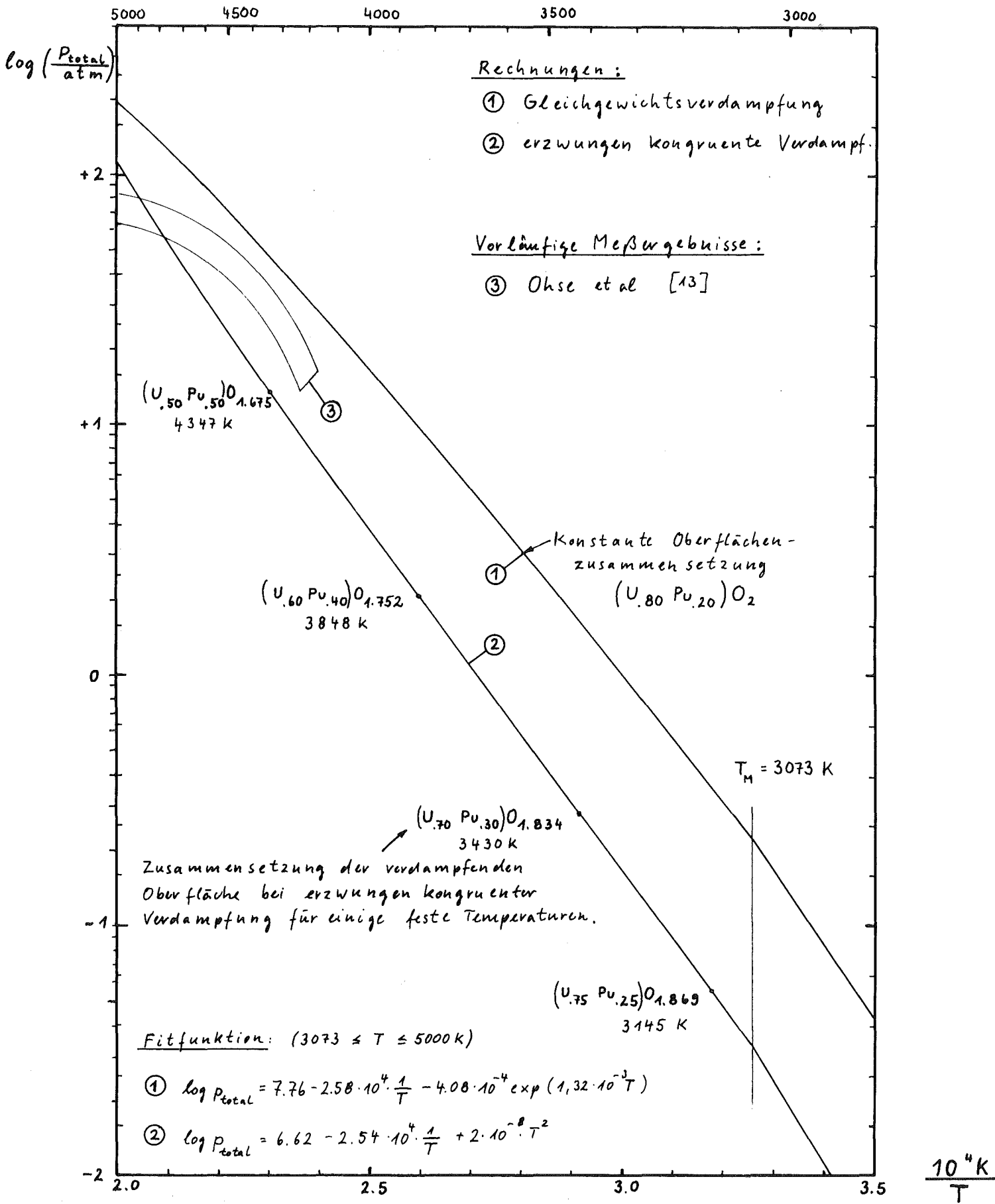


Abb. 13 Berechneter Totaldampfdruck von (U_{0.80} Pu_{0.20})O₂ bei Gleichgewichtsverdampfung und erzwungen kongruenter Verdampfung als Funktion der Temperatur.