

УДК 538.911

ИЗУЧЕНИЕ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ НИТРИДА УРАНА МЕТОДОМ АТОМИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Цепляев В.И.^{1,2}

¹ *Московский физико-технический институт (государственный университет),
Московская область, г. Долгопрудный, 141700, Институтский пер., 9*

² *Объединенный институт высоких температур РАН,
Москва, 125412, Ижорская ул., 13*

vazyktc@mail.ru

Аннотация

В работе представлены результаты исследования фазового перехода нитрида урана из кубической структуры в ромбоэдрическую. При помощи атомистического моделирования были рассчитаны энтальпии возможных структур UN, и рассчитаны параметры наиболее устойчивой структуры.

Ключевые слова: фазовый переход нитрида урана, кубическая структура, ромбоэдрическая структура.

THE INVESTIGATION OF PHASE DIAGRAM OF URANIUM NITRIDE BY THE METHOD OF MOLECULAR DYNAMICS

Tseplyaev V.I.^{1,2}

¹ *Moscow Institute of Physics and Technology (State University)
Russia, Dolgoprudny, Moscow Region, 1417009*

² *Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences (JIHT RAS)
Russia, Moscow, 125412*

The work presents results of investigation of phase transition of UN from cubic to rhombohedral structure. Enthalpy of every possible structures were calculated using the method of molecular dynamics. Thanks to this calculations parameters of most stable structure were received.

Keywords: phase transition in NU, cubic structure, rhombohedral structure.

1. Введение

Благодаря высокой теплопроводности, высокой температуре плавления и большой плотности нитрид урана (UN) является одним из перспективнейших топлив для атомных реакторов четвертого поколения. Поэтому важно иметь представление о его фазовой диаграмме для решения дальнейших задач, связанных с поведением топлива при большом радиационном фоне. Известно, что нитрид урана при нулевом давлении имеет кубическую (Fm-3m) структуру NaCl. В соответствии с экспериментальными исследованиями [1–2], при давлениях порядка 30 ГПа происходит фазовый переход кубической структуры UN в ромбоэдрическую (R-3m). В данной работе проведено исследование этого явления методом молекулярной динамики.

2. Потенциалы для моделирования сплавов U-Mo

Всякая ромбоэдрическая структура представима в виде тройной гексоганальной с параметрами c/a и a . В частном случае, значению параметра $c/a = 2.45$ соответствует кубиче-

ская структура, т.е., структура NaCl является частным случаем ромбоэдрической структуры. Согласно теоретическим работам [3, 4] нитрид урана при высоких давлениях переходит в структуру с параметром $c/a \sim 2.95$.

За основу анализа структуры нитрида урана было взято термодинамическое правило: энергия Гиббса G при устойчивом равновесии термодинамической системы с фиксированной температурой и давлением минимальна. Кроме того, при низкой температуре фактически выполняется соотношение $G = U + PV - TS \approx U + PV = H$. Таким образом, при низкой температуре наибольшей термодинамической стабильностью обладает система с минимальной энтальпией. Вторым фактором, влияющим на стабильность структуры, является изотропность давления.

3. Результаты

В работе был произведен термодинамический расчет энтальпии структур с различным параметром c/a (рис. 1). Приведенные результаты данной работы демонстрируют фазовый переход в нитриде урана из кубической структуры ($c/a = 2.45$) в ромбоэдрическую структуру с соотношением $c/a \approx 2.95$ при давлении $P = 32$ ГПа. В квантовых расчетах [3, 4] давление перехода 19 ГПа в структуру с $c/a = 2.95$ и 32 ГПа с $c/a > 2.9$ соответственно.

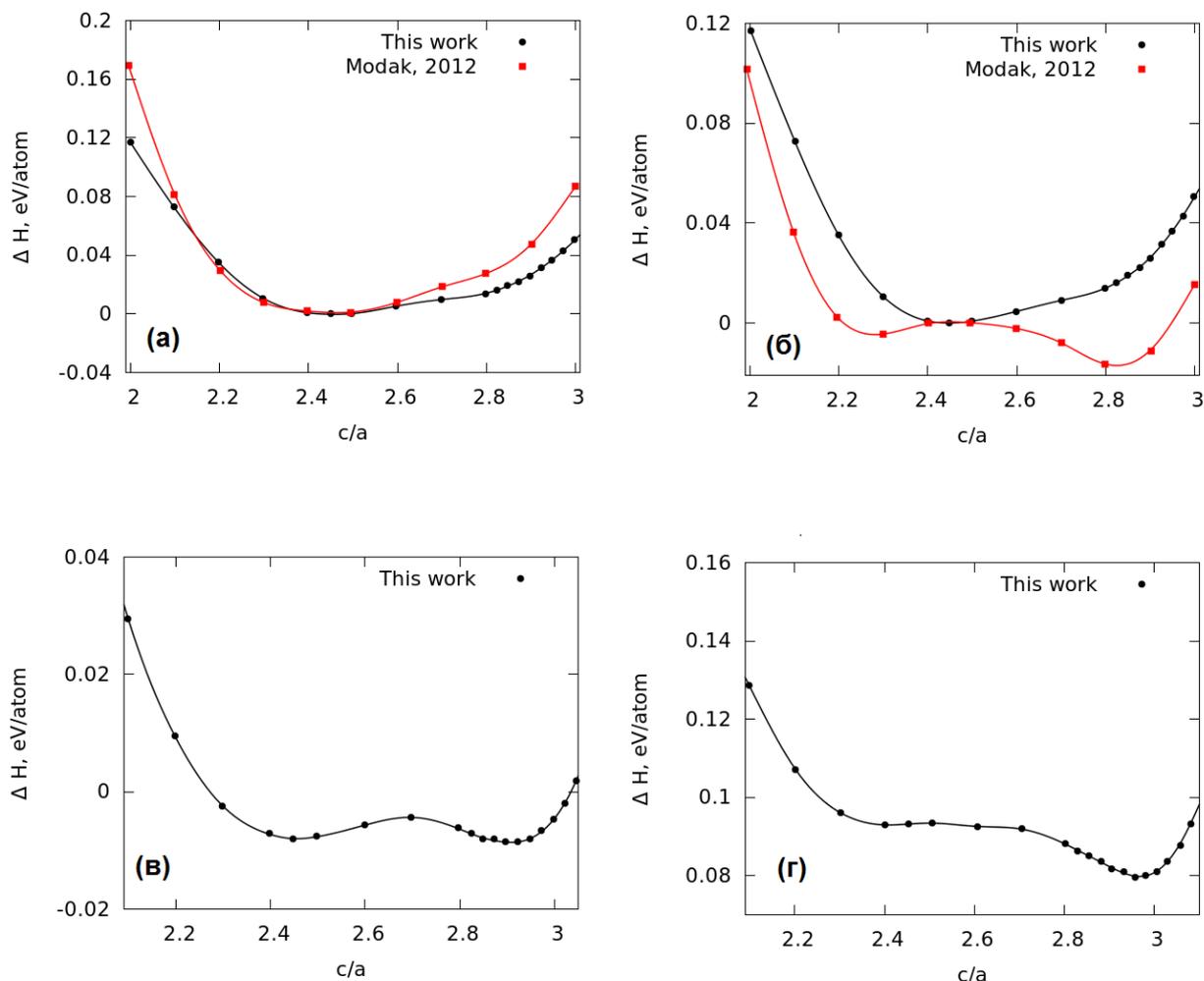


Рис. 1. Зависимость энтальпии структуры от параметра c/a при различных давлениях. а) 10 ГПа, б) 20 ГПа, в) 32 ГПа, г) 55 ГПа

Более точную зависимость c/a от давления можно получить, используя условие изотропности давления (рис. 2). Хотя наиболее устойчивой является структура с наименьшей

энергией Гиббса, фазового перехода в эту структуру не происходит, если она обладает большой анизотропией давления, так как не реализуются необходимые внешние условия.

4. Выводы

Результаты данной работы демонстрируют, что в нитриде урана действительно должен наблюдаться фазовый переход при давлении около 32 ГПа. Соотношение c/a , определяющее структуру при высоком давлении, является функцией от давления. Чем выше давление, тем больше должно быть значение c/a . В дальнейшем планируется выполнить исследование фазовой диаграммы нитрида урана при высокой температуре вплоть до плавления.

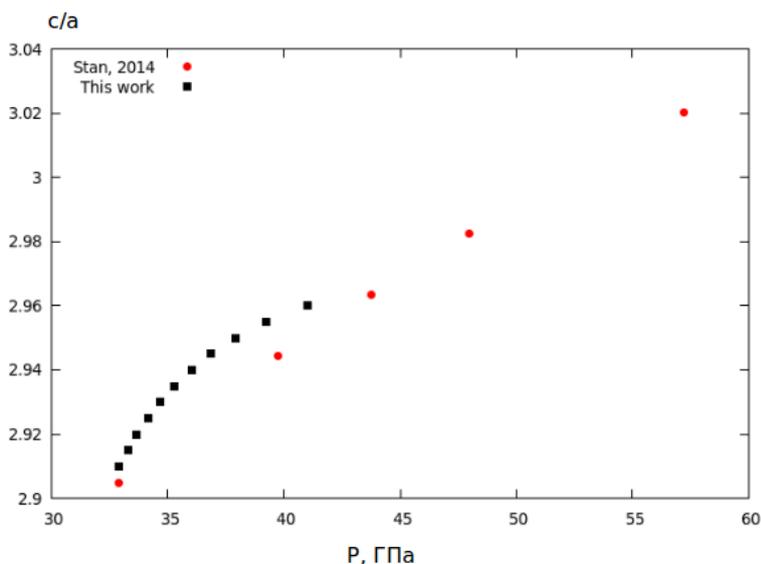


Рис. 2. Зависимость параметра c/a структуры, обладающей свойствами изотропии от давления

Благодарности и ссылки на гранты

Работа выполнена при поддержке стипендии президента ПФИ РАН 2 (руководители Г.Э. Канель). Расчеты проводились на вычислительных кластерах «Ломоносов» МГУ и МВС-100К (МСЦ РАН).

Литература

1. Bihan et al. // *J. Alloys and Comp.*, V. 358, P. 120 (2003).
2. J. Staun Olsen, L. Gerward, U. Benedict // *J. Appl. Cryst.*, V. 18 Pp. 37–41 (1985).
3. P. Modak, A.K. Verma // *Phys. Rev. B*, V. 84, P. 024108 (2011).
4. Mei et al. // *J. Nucl. Mat.*, V. 440, P. 63 (2013).

Статья поступила в редакцию 21 ноября 2014 г.