

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВЫХ И СТРУКТУРНЫХ ПЕРЕХОДОВ В УРАНЕ И СПЛАВЕ U-MO МЕТОДОМ АТОМИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Л.Н. Колотова, С.В. Стариков

*Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
ул. Ижорская, д.13, стр.2, Москва, 125412 Российская Федерация,
E-mail: lada.kolotova@gmail.com*

THE STUDY OF PHASE AND STRUCTURAL TRANSITIONS IN URANIUM AND U-MO ALLOY VIA ATOMISTIC SIMULATION METHOD

L.N. Kolotova, S.V. Starikov

*Joint Institute for High Temperatures of Russian Academy of Sciences
13 Izhorskaya st., bldg.2, Moscow, 125412 Russian Federation,
E-mail: lada.kolotova@gmail.com*

В данной работе было выполнено исследование кубической и тетрагональной фаз сплава уран-молибден методом молекулярной динамики. Для чистого урана и сплава U–Mo при небольших температурах более стабильной является фаза, обладающая тетрагональной решеткой, близкая к метастабильной γ_0 -фазе, обнаруженной в экспериментах. По мере увеличения температуры происходит фазовый переход к квази-ОЦК фазе, обладающей кубической симметрией только на расстояниях порядках нескольких межатомных расстояний ли при усреднении по времени. Температура такого перехода зависит от концентрации молибдена.

The investigation of cubical and tetragonal phases of U-Mo alloy via molecular dynamics method has been carried out in the work. For pure Uranium and U-Mo alloy at low temperatures the more stable phase is the one with the tetragonal lattice that is close to the metastable γ_0 phase discovered in experiments. During the temperature growth the phase transition to a quasi body-centered cubic phase occurs. This phase has cubic symmetry only at distances of order of several interatomic distances or at time averaging. The temperature of such transition depends on Mo concentration.

Сплав уран-молибден является одним из кандидатов на роль перспективного ядерного топлива для реакторов нового поколения на быстрых нейтронах. Данный сплав отличается высокими показателями плотности, теплопроводности, повышенной коррозионной и радиационной стойкостью [1,2]. Несмотря на большой объем экспериментальных и теоретических исследований по фазовой диаграмме, структуре и кинетике фазовых переходов в системе уран-молибден [3,4] интерес к исследованию свойств металлических топлив и оптимизации дизайна топливных структур (например, дисперсное топливо) сохраняется.

Чистый уран может находиться в трех различных кристаллических фазах. Наиболее стабильной является α -фаза урана, обладающая ромбической решеткой. При высоких температурах наблюдается переход в тетрагональную β -фазу и кубическую объемноцентрированную (ОЦК) γ -фазу. Также в некоторых теоретических работах показывается, что тетрагональная объемно-центрированная (ОЦТ) фаза, является гораздо более стабильной чем β - или γ -фаза [5,6]. Стоит отметить, что наиболее лучшими техническими свойствами обладает кубическая γ -фаза, однако стабилизировать её при комнатной температуре чрезвычайно сложно. Поэтому уран легируют металлом с ОЦК-решеткой (ниобием или молибденом), что позволяет стабилизировать структуры, близкие к γ -фазе, при комнатной температуре.

В данной работе было выполнено исследование методом молекулярной динамики структур метастабильных гомогенных фаз U-Mo, образованных при кристаллизации расплава.

Показано, что при небольших концентрациях молибдена более стабильной является фаза, обладающая тетрагональной решеткой. Такая структура наблюдается в расчетах и для чистого урана. Данную структуру можно характеризовать как близкую к объемноцентрированной решетке с небольшим смещением центрального атома из центра базисной ячейки. Такая фаза близка к метастабильной γ_0 -фазе, обнаруженной в экспериментах. Результаты расчетов параметров ОЦТ решетки $a = b > c$ согласуются с экспериментальными данными и подтверждают анизотропию структуры сплава при малых концентрациях молибдена. По мере увеличения концентрации молибдена происходит фазовый переход к кубической структуре, однако этот переход осуществляется не за счет изменения положений атомов урана, а за счет накопления центров стабилизации кубической решетки, которыми являются атомы молибдена. При увеличении температуры происходит фазовый переход к квази-ОЦК фазе, обладающей кубической симметрией только на расстояниях порядка нескольких межатомных расстояний или при усреднении по времени. Температура такого перехода зависит от концентрации молибдена. Стоит отметить, что переход в высокотемпературную фазу весьма похож на переход ферромагнетик-парамагнетик, но связан с потерей корреляцией направлений атомных смещений в базисных ячейках [7,8].

Список использованных источников:

1. Sinha V., Hegde P., Prasad G., Dey G., Kamath H. // J. of Alloys and Comp. 2010. V. 506. № 1. P. 253-262.
2. Баранов В., Нечаев В., Продувалов Б., Шорников Д. // Атомная энергия. 2010. Т. 108. № 5. С. 288-293.
3. Konobeevskii S. T. et al. // J. Nuclear Materials. Journal of Nuclear Energy. Part B. Reactor Technology. 1959. V. 9. P. 75-89
4. Howlett B. W. // J. Nucl. Mater. 1970. V. 35. P. 278-292
5. Freyss M., Petit T., Crocombette J.-P. // J. Nucl. Mater. V.347. 2005. P. 44–51.
6. Hood R., Yang L., Moriarty J. // Phys. Rev. B. 2008. V. 78 P. 094119.
7. Starikov S.V., Kolotova L.N. // Scripta Mater. 2016. V. 113. P. 27–30.
8. Колотова Л.Н., Стариков С.В. // Физика металлов и металловедение. 2016. Т. 117. № 5. С. 506–512