

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ НИТРИДЕ УРАНА МЕТОДОМ АТОМИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В.И. Цепляев, С.В. Стариков, А.Ю. Куксин

*Объединенный институт высоких температур РАН
ул. Ижорская, 13 стр.2, Москва, Российская Федерация
E-mail: vazyktc@mail.ru*

THE INVESTIGATION OF PHASE TRANSITIONS IN CRYSTAL URANIUM NITRIDE VIA ATOMISTIC SIMULATION

V.I. Tseplyaev, S.V. Starikov, A.Yu. Kuksin

*Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences
13 Izhorskaya str., bd.2, Moscow, Russian Federation.
E-mail: vazyktc@mail.ru*

В данной работе при помощи метода молекулярной динамики были исследованы фазовые переходы в кристаллическом нитриде урана. Расчеты показывают, что при давлении около 30 ГПа происходит фазовый переход из кубического UN (Fm-3m) в ромбоэдрическую (R-3m) структуру. Также при помощи различных критериев стабильности структур в работе произведена оценка кривой равновесия на P-T диаграмме между кубической и ромбоэдрической фазами.

In this work we have studied the pressure-induced phase transitions in crystal uranium mononitride via molecular dynamics method. According to our calculations the phase transition from cubic Fm-3m structure to rhombohedral R-3m structure occurs at pressure about 30 GPa. The estimation of the equilibrium curve in P=T diagram between cubic and rhombohedral phases has also been carried out in the work via various stability criteria of structures.

Актиноиды и их соединения являются топливом для атомных реакторов, поэтому они являются предметом множества исследований. Одним из таких соединений является нитрид урана, который благодаря таким свойствам, как высокая теплопроводность, плотность и температура плавления, является многообещающим кандидатом на роль топлива для атомных реакторов четвертого поколения. К сожалению, несмотря на его очевидные преимущества по сравнению с наиболее распространенным диоксидом урана, этот материал все еще слабо изучен и требует дополнительных исследований. На данный момент фазовая диаграмма нитрида являлась объектом исследований [1, 2], однако в этих экспериментальных работах поведение UN при высоких давлениях так и не было изучено. Так же не изучено поведение данного материала при высоких температурах, на данный момент имеются лишь теоретические оценки [3, 4]. В этой работе для исследования фазовых переходов в UN использовался метод молекулярной динамики, хорошо зарекомендовавший себя в задачах исследования поведения материалов на молекулярном уровне.

Для проведения молекулярно-динамических расчетов использовалась расчетная ячейка, состоящая из 1500 атомов UN, шаг интегрирования 0.1 фемтосекунда. Силы взаимодействия рассчитывались с использованием модифицированного потенциала [5], нацеленного на повышение точности в описании исследуемого фазового перехода. Для исследования стабильности использовались два критерия: во-первых, наиболее стабильная структура при постоянных температуре и давлении должна обладать минимальной энергией Гиббса, а во-вторых, равновесная структура должна обладать изотропией тензора напряжений (что эквивалентно $P_{xx}=P_{yy}=P_{zz}$). Результаты статических расчетов при нулевой температуре

показали, что фазовый переход из кубической структуры в ромбоэдрическую происходит при давлении порядка 30 ГПа, что хорошо соотносится с доступными экспериментальными и теоретическими оценками. Кроме того, показано, что параметр c/a равновесной ромбоэдрической структуры зависит от давления и произведена оценка этой зависимости. При помощи динамических расчетов при конечной температуре получена оценка кривой равновесия ромбоэдрической и кубической структур.

Список использованных источников:

1. *Bihan T., Idiri M., Heathman S.* // J. Alloys and Comp. 2003 V. 358, P. 120.
2. *Olsen J. S., Gerward L., Benedict U.* // J. Applied Crystallography. 1985. V. 18, P. 37
3. *Modak P., Verma K.* // Phys. Rev. B. 2011 V. 84, P. 024108.
4. *Mei Z., Stan M.* // J. Nucl. Mat. 2013 V. 440 P. 63.
5. *Starikov S., Kuksin A., Smirnova D., Tseplyaev V.* // J. Alloys and Comp. 2016.