

Исследование фазовой диаграммы нитрида урана методом атомистического моделирования

В.И.Цепляев

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Объединенный институт высоких температур РАН

Нитрид урана (UN) является перспективным топливом для атомных реакторов четвертого поколения. UN обладает большой температурой плавления и теплопроводностью, что открывает новые возможности перед конструкторами атомных реакторов. Однако на данный момент нитрид урана остается наименее изученным из перспективных ядерных топлив. В то же время метод атомистического моделирования является мощным инструментом исследования и способен дать необходимую информацию о физических свойствах вещества.

В данной работе при помощи атомистического моделирования исследуются фазовые переходы нитрида урана в широком диапазоне давлений и температурах. В частности, исследуется фазовый переход из кубической фазы низкого давления в ромбоэдрическую фазу высокого давления. По результатам работы были сделаны оценки, по которым установлено, что фазовый переход происходит при давлении около 35 ГПа, что хорошо согласуется с экспериментальным значением [1,2]. Кроме того выполнено моделирование плавления нитрида урана в широком интервале давлений. Результаты расчетов сравниваются с доступными экспериментальными данными.

Литература

1. J. Staun Olsen, L. Gerward, U. Benedict. A New High-Pressure Phase of Uranium nitride Studied by X-ray Diffraction and Synchrotron Radiation - J. Appl. Cryst. V. 18, 37 (1985).
2. T. Le Bihan, M. Idiri, S. Heathman. New investigation of pressure-induced rhombohedral distortion of uranium nitride - Journal of Alloys and Compounds V. 358, 120 (2003).