

УДК 538.9

Описание взаимной диффузии урана и молибдена на основе атомистического моделирования

Т.С.Костюченко, А.Ю.Куксин

Объединенный институт высоких температур РАН

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Диффузионные процессы играют важную роль в поведении материалов под воздействием радиационного облучения. Поэтому процессы диффузии активно исследуются для перспективных топливных материалов, в том числе для сплавов урана и молибдена. При измерении коэффициента самодиффузии в гамма-уране была обнаружена аномально высокая диффузионная подвижность в сравнении с другими металлами с объемно-центрированной кубической решеткой [1,2]. Однако механизмы диффузии в сплавах урана все еще не до конца исследованы. В данной работе рассматриваются проявления вакансионного и межузельного механизмов диффузии в гамма-уране и на границе урана и молибдена.

В работе представлена модель взаимной диффузии, основанная на пошаговом микроскопическом подходе: с использованием данных о концентрациях и подвижностях дефектов. Все коэффициенты и оценки производились в рамках атомистического моделирования. Также проведен анализ основных приближений, используемых при описании взаимной диффузии.

В описанной модели рассматривается одномерная диффузионная зона на границе объемноцентрированных кубических фаз урана и молибдена. Изменение концентраций в расчетных областях определяются направленными потоками компонент. Сами потоки зависят от градиента концентрации и коэффициента диффузии соответствующего типа атомов. В свою очередь коэффициент диффузии зависит от концентраций и подвижностей дефектов. Локальные концентрации дефектов зависят от концентрации урана и являются равновесными, они рассчитываются из энтальпии образования дефектов. Зависимость энтальпии образования от концентрации урана была получена на основе статических расчетов. Подвижность дефектов определяется экспоненциальной зависимостью от энергии миграции. Энергия миграции также зависит от концентрации урана и определена на основе МД моделирования.

Из полученных концентрационных зависимостей для энергии миграции дефектов можно заключить, что с ростом концентрации урана подвижность дефектов увеличивается. Энергии образования дефектов указывают на то, что в равновесии в изучаемых сплавах преобладает равновесная концентрация междоузлий. Было проведено сравнение результатов

расчетов коэффициентов самодиффузии и взаимной диффузии с имеющимися экспериментальными данными [1-3].

Для расчетов применялся межатомный потенциал из работы [4] в формате модели погруженного атома с учетом угловых зависимостей.

Литература

1. *Bochvar A.A., Kuznetsova V.G., Sergeev V.S.*, in Lectures of Soviet Scientists. // Atomizdat, Moscow, 1959, p.370.
2. *Peterson N.L., Rothman S.J.* Diffusion in Gamma Uranium. //Phys. Rev., 1964, v. 136, p. A842.
3. *Ke Huang, Dennis D. Keiser Jr., and Yongho Sohn.*, Interdiffusion, Intrinsic Diffusion, Atomic Mobility, and Vacancy Wind Effect in γ (bcc) Uranium-Molybdenum Alloy. // Metallurgical and Materials Transactions A., 02 October 2012.
4. *Смирнова Д.Е., Куксин А.Ю., Стариков С.В. и др.* // Физика металлов и металловедение, 2015, Т. 116, №3, с. 1-11.