

**Исследование фазового перехода, вызванного повышением давления в нитриде 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 исследуется фазовый переход из кубической фазы низкого давления в ромбоэдрическую фазу высокого давления. Для определения наиболее устойчивой структуры были использованы термодинамическое и механическое условия равновесия системы. По результатам работы были сделаны оценки энтальпии различных структур, по которым установлено, что при низких температурах фазовый переход происходит при давлении около 29 ГПа, что хорошо согласуется с экспериментальным значением [1,2]. Так же получена фазовая диаграмма конденсированного UN в широком диапазоне температур и давлений. Результаты расчетов сравниваются с доступными экспериментальными [1-2] и теоретическими [3-4] данными.

Автор выражает благодарность Старикову С.В. за полезные обсуждения.

Литература

1. Bihan T, Idiri M and Heathman S 2003 J. Alloys Comp. 358 120–5
2. Olsen S, Gerward L and Benedict U 1985 J. Appl. Cryst. 18 37–41
3. Mei Z and Stan M 2014 J. Alloys Comp. 588 648–53
4. Modak P and Verma K 2011 Phys. Rev. B 84 024108