

МД-моделирование диоксида урана

И.В. Новомлинский^{1,2}, А.С. Колокол¹, А.Л. Шимкевич¹, Фёдорова М.Б.¹

¹НИЦ «Курчатовский институт»

²Московский физико-технический институт (государственный университет)

Исследованию диоксида урана методом молекулярной динамики (МД) посвящено много работ [1-2]. Интерес к нему вызван двумя причинами.

Первая (практическая) связана с переносными свойствами диоксида урана как топлива для ядерных реакторов, поскольку атомная динамика определяет многие процессы, важные для нормальной работы топлива, особенно при высоких температурах.

Вторая (фундаментальная) связана с изучением возможного механизма «плавления» кислородной подрешетки и перехода системы в суперионное состояние по анионному носителю заряда. Поскольку это явление изучено не полностью, то вопрос остается открытым.

Вместе с тем, в опубликованных работах мало внимания уделяется подробному описанию МД-моделей UO_2 и расчетному анализу. Более того, некоторые численные результаты в разных работах не согласуются. Возможно, это связано с применяемым парным потенциалом.

Исследования структурных характеристик диоксида урана показывают наличие аномальной подвижности кислорода в области высоких температур. Ряд авторов полагают наличие суперионного перехода в данной системе. Однако, вопрос остается до сих пор открытым. Основной причиной является отсутствие парного потенциала, позволяющего адекватно воспроизвести параметр решетки при высоких температур. Так же отсутствует внимание к росту среднеквадратичного отклонения атомов кислорода в области 2000К, что соответствует рабочим температурам в центре топливной таблетки.

Молекулярно-динамическое (МД) моделирование является зачастую единственным способом получения необходимой информации о свойствах UO_2 при воздействии специфических внешних факторов. В настоящее время проведено множество исследований различных свойств этого материала с помощью методов МД. Выбор потенциала взаимодействия атомов UO_2 является наиболее важным этапом всего моделирования. Несмотря на значительный прогресс компьютерного моделирования за последние годы, исследователям пока не удалось создать парный потенциал диоксида урана, способный воспроизводить значительную часть экспериментальных данных свойств материала в актуальном диапазоне температур. Особенно высокотемпературный диапазон свойств UO_2 воспроизводится существующими парными потенциалами со значительными разногласиями в данных.

Возможно понимание диффузионных механизмов в области высоких температур на атомарном уровне в оксидном топливе можно получить используя рамановский коэффициент негаусовости [3].

Литература.

1. Якимчук С.Ю., Харитонов В.С., Шимкевич А.Л. Тонкие эффекты моделирования диоксида урана методом молекулярной динамики // Ядерная физика и инжиниринг, Т. 2. № 2., 2011г.
2. А.Я. Купряжный и др., Диффузия кислорода в диоксиде урана в области фазовых переходов // Журнал технической физики, том 74, вып. 2., 2004, с. 114-117.
3. A. Rahman Correlations in the Motion of Atoms in Liquid Argon // Phys.rev. V.137, 1964