

УДК 538.911, 544.344.015.4, 539.2

Исследование свойств кубической и тетрагональной структур сплава уран-молибден
методом молекулярной динамики

Л.Н. Колотова^{1,2}

¹ Московский физико-технический институт (государственный университет)

²Объединенный Институт Высоких Температур РАН

Несмотря на большой объем экспериментальных и теоретических исследований по фазовой диаграмме, структуре и кинетике фазовых переходов в системе уран-молибден, выполненных в 50х – 70х годах [1,2] интерес к исследованию свойств металлических топлив и оптимизации дизайна топливных структур (например, дисперсное топливо) сохраняется. Во многом он поддерживается стремлением к переходу на низкообогащенное плотное топливо для исследовательских реакторов.

В данной работе было выполнено исследование методом молекулярной динамики структур метастабильных гомогенных фаз U-Mo, образованных при кристаллизации расплава. Показано, что при небольших концентрациях молибдена более стабильной является фаза, обладающая тетрагональной решеткой. Данную структуру можно характеризовать как близкую к объемноцентрированной решетке с небольшим смещением центрального атома из центра базисной ячейки. Результаты расчетов согласуются с экспериментальными данными и подтверждают анизотропию структуры сплава при малых концентрациях молибдена. По мере увеличения концентрации молибдена происходит плавный переход к кубической структуре, однако этот переход осуществляется не за счет изменения положений атомов урана, а за счет накопления центров стабилизации кубической решетки, которыми являются атомы молибдена. Рассчитана кривая равновесия между ОЦТ и ОЦК фазой сплава на Т-х диаграмме.

Литература

1. *Konobeevskii S. T. [et al.] An investigation of structural changes caused by neutron irradiation of a uranium molybdenum alloy. // J. Nuclear Materials. Journal of Nuclear Energy. Part B. Reactor Technology. - 1959. - V. 9. - P. 75-89*
2. *Howlett B. W. A study of the shear transformations from the gamma-phase in uranium-molybdenum alloys containing 6.0–12.5 at % molybdenum // J. Nucl. Mater. - 1970. - V. 35. - P. 278-292*