

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАВЛЕНИЯ НАНОКРИСТАЛЛОВ ДИОКСИДА УРАНА

© 2012 Р.Ю. Махмуд-Ахунов, М.Ю. Тихончев

Ульяновский государственный университет

Поступила в редакцию 20.11.2012

В работе методом молекулярной динамики проведено моделирование фазовых переходов наноразмерных кристаллов диоксида урана. Моделирование проведено на основе парных потенциалов с параметрами, зависящими от температуры. Рассчитаны температуры фазовых переходов для нанокристаллов в диапазоне размеров 2,2 – 4,4 нм. Показана существенная зависимость этих температур от линейного размера рассматриваемого кристалла.

Ключевые слова: молекулярная динамика, диоксид урана, плавление нанокристаллов

## ВВЕДЕНИЕ

В большинстве современных ядерных реакторов в качестве топлива используется диоксид урана. Из таблеток диоксида урана формируются топливные сердечники тепловыделяющих элементов (ТВЭЛ) [1]. Во время эксплуатации таблетки подвергаются воздействию высоких температур и давления, облучению, механическим нагрузкам. При номинальной мощности реактора температура на оси ТВЭЛа может превышать 2000 К, а давление газообразных продуктов деления урана внутри герметичного ТВЭЛа может достигать 80-100 атм [2]. Поскольку диоксид урана обладает малой теплопроводностью, то в топливном сердечнике возникает высокий температурный градиент [3]. Всё это может привести к изменению микроструктуры топлива, его растрескиванию, рекристаллизации, спеканию зерен [2].

Детальное экспериментальное исследование свойств ядерного топлива вблизи критических температур не проводилось в виду сложности таких экспериментов. Одним из путей получения информации в этом случае является математическое моделирование. Широко распространённым на сегодняшний день является метод молекулярной динамики, который позволяет получать информацию об энергетических, термодинамических и структурных свойствах различных материалов. В данной работе, с помощью этого метода проведено исследование процессов плавления кристаллов диоксида урана.

## 1. ОПИСАНИЕ МЕТОДА

Моделирование проводилось с использованием программного комплекса DL\_POLY [4].

Махмуд-Ахунов Руслан Юсупович, младший научный сотрудник НИТИ. E-mail: [rsmru@yandex.ru](mailto:rsmru@yandex.ru)  
Тихончев Михаил Юрьевич, кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией компьютерного моделирования неорганических материалов.  
E-mail: [tikhonchev@sv.ulsu.ru](mailto:tikhonchev@sv.ulsu.ru)

Транслируемая ячейка была выбрана в виде кубического кристалла со структурой флюорита. Кубические кристаллиты строились путем трансляции элементарной ячейки по трем направлениям. При расчете использовались периодические граничные условия (бесконечный кристалл) и нулевые граничные условия (свободный кристалл в вакууме) В таб. 1 приведены размеры моделируемых кристаллитов и соответствующее число атомов в них.

Потенциал межатомного взаимодействия был выбран в форме Борна-Майера, что обеспечило минимальный набор параметров, некоторые из которых взяты в виде кусочно-линейных медленноменяющихся функций температуры:

$$U_{eff}(r_{ij}, T) = \frac{z_i(T)z_j(T)e^2}{r_{ij}} + f(T)(b_i + b_j) \exp\left(\frac{a_i + a_j - r_{ij}}{b_i + b_j}\right) - \frac{c_i c_j}{r_{ij}^6}, \quad (1)$$

где первое слагаемое соответствует кулоновскому взаимодействию, а второе и третье — потенциалу Борна-Майера [5]. Значения независимых от температуры параметров потенциала были взяты из работы [6].

Для восстановления параметров потенциала  $z_i(T)$  и  $f(T)$  были использованы экспериментальные данные по тепловому расширению решётки  $UO_2$  и изменению энтальпии [7]. Были получены зависимости дробного заряда иона кислорода и параметра  $f$  от температуры в виде:

$$\begin{cases} z(T) = z_0 \left[ 1 + \alpha \frac{T - T_0}{T_0} \right], & \text{где } \alpha = \begin{cases} 9,61 \cdot 10^{-3}, & T < T_0 \\ -2,93 \cdot 10^{-2}, & T > T_0 \end{cases}, z_0 = 1,193, T_0 = 2666K \\ f(T) = f_0 \left[ 1 + \beta \frac{T - T_0}{T_0} \right], & \text{где } \beta = \begin{cases} 9,3 \cdot 10^{-2}, & T < T_0 \\ -2,6 \cdot 10^{-1}, & T > T_0 \end{cases}, f_0 = 0,354, T_0 = 2627K \end{cases} \quad (2)$$











