

Изучение особенностей строения и фазового перехода моноклинных и тетрагональных фаз в сплаве U-Mo**Научный руководитель – Колотова Лада Николаевна****Гордеев Илья Сергеевич***Аспирант*

Московский физико-технический институт, Москва, Россия

E-mail: gordeevilu@gmail.com

Благодаря уникальными ядерными свойствам уран широко применяется в атомной промышленности. С помощью молекулярно-динамического моделирования изучены структурные свойства орторомбических, моноклинных и объемно-центрированных тетрагональных фаз сплавов U-Mo. В работе был использован потенциал ADP-формата[1]. При легировании урана молибденом из чистого α -U происходит последовательность сдвиговых превращений между метастабильными фазами: орторомбическая α' \rightarrow моноклинная α'' \rightarrow объемно центрированную тетрагональную γ^0 \rightarrow объемно-центрированную кубическую с удвоенной постоянной решетки γ^s \rightarrow оцк γ . Исследовано влияние содержания сплава на структуру этих фаз. Показано, что увеличение концентрации молибдена приводит к увеличению моноклинного угла, делая фазу более похожей на γ^0 -фазу. В свою очередь, тетрагональное искажение решетки γ^0 с перемещением центрального атома в основной ячейке вдоль направления $\langle 001 \rangle$ делает ее более похожей на α'' -фазу. Оба этих эффекта уменьшают необходимый сдвиг в атомных положениях для $\alpha'' \rightarrow \gamma^0$ -фазового перехода.

Источники и литература

- 1) Starikov, S.; Kolotova, L.; Kuksin, A.Y.; Smirnova, D.; Tseplyaev, V. Atomistic simulation of cubic and tetragonal phases of U-Mo alloy: Structure and thermodynamic properties // J. Nucl. Mater. 2018, 499, 451–463.