

УДК 538.911, 544.344.015.4, 539.2

Атомистическое моделирование образования дефектов и структурных переходов в сплаве U-Mo при пролете высокоэнергетичных ионов

Л.Н. Колотова^{1,2}

¹ Московский физико-технический институт (государственный университет)

²Объединенный Институт Высоких Температур РАН

Сплав уран-молибден является одним из кандидатов на роль перспективного ядерного топлива для реакторов нового поколения на быстрых нейтронах. Для описания эволюции ядерного топлива в условиях эксплуатации важна информация о структурных и фазовых переходах, происходящих в нем при облучении тяжелыми высокоэнергетичными ионами (осколками деления) [1].

В данной работе исследуется образование дефектов и структурных переходов в сплаве U-Mo при пролете высокоэнергетичных ионов методом атомистического моделирования. Используется двухтемпературная атомистическая модель с учетом электронного давления и электронной теплопроводности [2]. Такая модель описывает ионную подсистему с помощью молекулярной динамики, в то время как электронная подсистема рассматривается в приближении сплошной среды. Исследуются различные механизмы структурных переходов, происходящих при облучении. Так например, результаты показывают, что образование дефектов возможно без плавления и последующей кристаллизации. Рассчитаны пороговые значения энергвкладов ионов для образования дефектов в различных условиях. Показана эволюция профилей напряжений, электронной и ионной температуры в различных частях расчетной ячейки после пролета высокоэнергетичных ионов.

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. *Pisarev V. V., Starikov S. V. Atomistic simulation of ion track formation in UO₂ // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2014. – Т. 26. – №. 47. – С. 475401.*