

**Аннотационный отчет по результатам выполнения проекта
«Разработка межатомных потенциалов для построения моделей ядерного топлива
с содержанием плутония»**

исполнитель: Смирнова Д.Е., лаб. 1.2.2.2 НИЦ-1 ТЭС ОИВТ РАН

Цели и задачи исследования: Проект был направлен на создание теоретической модели для описания свойств топлива, предназначенного для использования в реакторах на быстрых нейтронах (U-Pu-N). В рамках заявленного проекта была проведена следующая работа:

- был выполнен обзор имеющейся литературы по тематике с целью изучения основных подходов, предложенных для исследования систем с содержанием плутония квантовыми методами;
- путем проведения квантово-механических расчетов были получены эталонные данные для разработки межатомных потенциалов;
- на основе рассчитанных квантово-механических данных был сконструирован межатомный потенциал, который позволил описать взаимодействие компонентов в системе U-Pu-N;
- была проведена верификация построенного потенциала (путем расчета физических и диффузионных характеристик и сопоставления результатов с экспериментальной информацией).

Результаты работы: В ходе решения задачи сначала был получен потенциал для исследования бинарной системы U-N. Далее он был модифицирован путем добавления третьего компонента – плутония. При разработке потенциала для моделирования (U,Pu)N использовался формализм модели «потенциала с угловой зависимостью» (Angular dependent potential — ADP [1]). Поиск потенциальных функций выполнялся методом «согласования по силе». Идея метода заключается в конструировании потенциала по *ab initio* данным, полученных из квантово-механических расчетов для набора различных эталонных структур. При построении потенциала используются такие величины, как энергии структур, компоненты тензора напряжений и силы, действующие на атомы. В данном случае при поиске потенциала использовались данные о 174 структурах различного состава. Проведенный анализ показал, что полученный набор потенциальных функций (далее обозначен как ADP U-Pu-N) воспроизводит эталонные данные с необходимой точностью. Для потенциала, можно привести следующие численные характеристики точности описания эталонных данных: среднеквадратичные отклонения составляют 0.22 эВ/Å при описании сил, 0.038 эВ при описании энергии и 0.057 МПа при описании напряжений.

Более точные представления об области применимости полученного потенциала были получены по результатам его верификации. Как было отмечено выше, построенный потенциал ADP U-Pu-N содержит функции, описывающие межатомные взаимодействия между атомами нескольких типов — U, Pu и N. Это означает, что он позволяет моделировать многокомпонентную систему, содержащую все три элемента. В ходе верификации потенциала ADP U-Pu-N было установлено, что он воспроизводит стабильные структуры нитридов UN, PuN, (U,Pu)N, а также чистого урана в высокотемпературной ОЦК фазе. Точность описания параметров решетки, оцененная по сравнению с экспериментальными данными, составляет от 0.1 до 2%, в зависимости от типа структуры.

В качестве примера применения потенциала приведен расчет зависимости параметра решетки смешанного нитрида (U, Pu)N от содержания плутония. Соединение (U, Pu)N имеет кристаллическую структуру, аналогичную структуре UN. При этом в определенной части узлов решетки атомы урана замещены атомами плутония. Соотношение атомов урана и плутония определяется установленной концентрацией компонентов. В ходе верификации предложенного межатомного потенциала ADP U-Pu-N был проведен анализ изменения структуры нитрида при переходе от UN к случаям с добавлением Pu.

Как показано на рисунке 1, при добавлении плутония в UN параметр решетки нитрида увеличивается (по сравнению с параметром решетки UN без добавок). Такой результат был получен в работах [2,3]. Расчеты, выполненные в рамках данной работы с построенным потенциалом, показывают такой же характер. Данные, представленные на рисунке 1, соответствуют нулевому давлению и комнатной температуре. Максимальное относительное расхождение между рассчитанной и экспериментальной величинами a составляет менее 1% (при нулевом содержании плутония в нитриде UN).

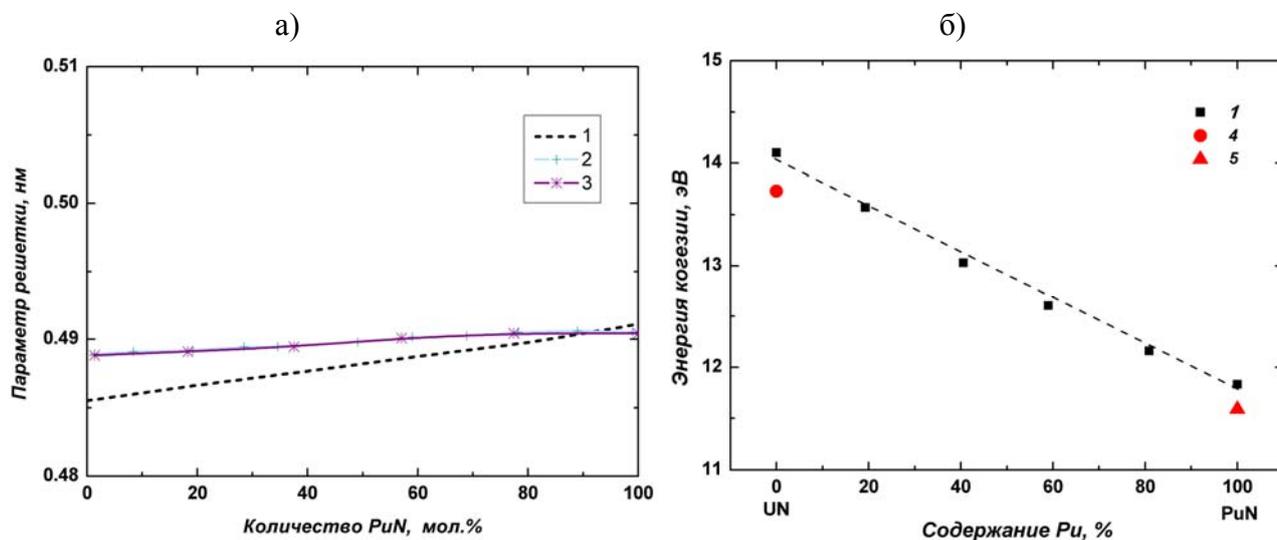


Рисунок 1 – Характеристики смешанного нитрида (U+Pu)N в зависимости от содержания плутония: а – параметр решетки, б – энергия когезии.

1 — результаты настоящего расчета с предложенным потенциалом ADP U-Pu-N; 2 — данные из работы [2]; 3 — данные из работы [3]; 4 — данные из работы [4]; 5 — данные из работы [5]

Литература

- [1] Y. Mishin, M. Mehl, D. Papaconstantopoulos. *Acta materialia*. 53. (2005) 4029–4041.
- [2] M. Salleh, J. Macdonald, G. Saunders, and P. D. V. Du Plessis, *Journal of Materials Science* 21 (1986) 2577
- [3] S.L. Hayes, J.K. Thomas and K.L. Peddicord. *Journal of nuclear materials* 171. (1990) 271-288.
- [4] S.L. Hayes, J.K. Thomas and K.L. Peddicord. *Journal of nuclear materials* 171. (1990) 262.
- [5] V.J. Tennery, E.S. Bomar. *J. Amer. Ceram. Soc.* 54. (1971) 247.

Список публикаций соискателя по тематике проекта за 2014-2015 гг.

1. A.Yu. Kuksin, S.V. Starikov, D.E. Smirnova, V.I. Tseplyaev. *The diffusion of point defects in uranium mononitride: combination of DFT and atomistic simulation with novel potential*. Journal of alloys and compounds. 2015. В печати.

2. С.В. Стариков, А.Ю. Куксин, Д.Е. Смирнова. *Атомистическое моделирование поведения дефектов в нитриде урана*. Сборник тезисов Шестой Международной конференции «Кристаллофизика и деформационное поведение перспективных материалов», Москва, 26-28 мая 2015 г., электронное издание на CD.

**Промежуточные результаты по теме проекта были представлены соискателем лично в виде докладов на следующих конференциях:
(в 2015 г.)**

Молекулярно-динамическое моделирование поведения дефектов в нитриде урана.
С.В. Стариков, А.Ю. Куксин, Д.Е. Смирнова. Научный семинар «Физика радиационных повреждений материалов атомной техники», Обнинск, 21-23 апреля 2015 г.