Contribution ID: **26** Type: **Устный | Oral**

Молекулярно-динамическое исследование спекания диоксида урана

Thursday, 19 November 2020 15:30 (15 minutes)

Благодаря своим уникальным свойствам и разнообразным приложениям в энергетической промышленности, диоксид урана представляет большой технологический интерес. Спекание считается одним из основных процессов при изготовлении таблеток диоксида урана. Несмотря на то, что в данное время существует много работ посвященных спеканию диоксида урана, зависимость данного процесса от взаимной кристаллографической ориентации зерен остается изученной не до конца.
В нашей работе рассмотрено влияние различных углов взаимной кристаллографической ориентации наночастиц на коэффициенты поверхностной и зернограничной диффузии урана. Исследование проводилось с использованием потенциала Поташникова, Боярченкова [1]. Все расчеты проведены в nve-ансамбле в диапазоне температур от 1700 К до 2500 К. Для устранения поверхностных дефектов были использованы периодические граничные условия. Из зависимости коэффициентов диффузии от температуры были получены энергии активации различных механизмов диффузии. Была проверена возможность обобщения результатов, полученных для зависимости уплотнения от времени на двухчастичной модели, на многочастичную систему. Также, была построена модель для оценки вклада различных кристаллографических ориентаций в общий коэффициент зернограничной диффузии. Все расчеты проведены с использованием пакета LAMMPS [2].

Литература

1. Поташников С.И. и др. Моделирование массопереноса в диоксиде урана методом молекулярной динамики с использованием графических процессоров // АЭЭ. 2007. Т. 5. С. 86-93.
2. Plimpton S.J. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J Comp Phys. 1995. V. 117. P. 1-19.

Primary authors: ORLOVA, Yuliia (JIHT RAS); Dr KOLOTOVA, Lada (JIHT RAS)

Presenter: ORLOVA, Yuliia (JIHT RAS)

Session Classification: Материаловедение и технологии материалов

Track Classification: Материаловедение и технологии материалов