

# АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ И ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В СПЛАВЕ U–Mo ПРИ ТЕРМИЧЕСКИХ И РАДИАЦИОННЫХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ

*Колотова Л.Н.,\* Стариков С.В.*

*ОИВТ РАН, Москва, Россия*

*\*lada.kolotova@gmail.com*

Сплав U-Mo является одним из кандидатов на роль перспективного ядерного топлива для реакторов нового поколения на быстрых нейтронах. Несмотря на большой объем экспериментальных и теоретических исследований по фазовой диаграмме, структуре и кинетике фазовых переходов в системе U-Mo, интерес к исследованию свойств металлических топлив и оптимизации дизайна топливных структур (например, дисперсное топливо) сохраняется.

В работе показано, что при небольших концентрациях молибдена более стабильной является объемноцентрированная тетрагональная (ОЦТ)  $\gamma^0$  фаза. Такая структура наблюдается в расчетах и для чистого урана. Показано, что структура высокотемпературной  $\gamma$ -фазы является квази-кубической со смещением центрального атома, но эти смещения различны в различных элементарных ячейках. Поэтому  $\gamma$ -фаза начинает обладать кубической симметрией только на расстояниях свыше нескольких межатомных расстояний или при усреднении по времени. В работе рассмотрены различные механизмы структурных превращений при облучении сплава уран-молибден. Показано, что не только плавление и последующая кристаллизация системы, но и другие фазовые переходы 1 рода могут быть причиной образования дефектов при облучении. В частности, фазовый переход между двумя кристаллическими фазами сплава уран-молибден ( $\alpha \rightarrow \gamma$ ) в процессе облучения быстрыми тяжелыми ионами (БТИ) приводит к образованию точечных дефектов после стадии релаксации обратного перехода. Более того, результаты моделирования показывают, что генерация точечных дефектов может происходить без какого-либо фазового перехода. Также рассчитаны пороговые энерговклады БТИ, облучение которыми приводит к формированию дефектов в различных условиях.