

**Аннотационный отчет в Фонд поддержки молодых ученых ОИВТ РАН ФПМУ  
лаборанта отдела №1.2.2 НИЦ-1 ТЭС ОИВТ РАН Цепляева В.В. по гранту ФПМУ  
ОИВТ РАН ЗА 2014/2015 гг.**

### **Цели проекта**

Основной целью проекта было исследование фазовых переходов в нитриде урана, в частности, исследование фазового перехода кубического UN в ромбоэдрическую структуру. Для проведения исследования был использован метод атомистического моделирования.

### **Результаты**

В работе был тщательно исследован фазовый переход из кубического в ромбоэдрический нитрид урана, вызванный повышением давления. Во время учетного периода были сформулированы окончательные критерии устойчивости нитрида: структура равновесна, если она имеет изотропный тензор напряжений, а так же обладает минимумом энергии Гиббса. Используя эти критерии, было получено давление фазового перехода (29 ГПа) при нулевой температуре, так же был найден обратный фазовый переход, который имеет место при давлениях порядка 93 ГПа. Найдена зависимость параметров ромбоэдрической структуры от давления. Так же при нулевой температуре была показана эквивалентность критериев равновесия, поэтому при помощи критерия изотропности тензора напряжений была найдена фазовая диаграмма этого перехода. Оказалось, что ромбоэдрическая структура существует в ограниченной области P, T - диаграммы, причем максимальная температура существования ромбоэдрической структуры не превышает 1200 К.

### **Перечень личных выступлений (в качестве докладчика) соискателя на конференциях:**

1. Цепляев В.И. Исследование фазовой диаграммы нитрида урана методом атомистического моделирования. 56-ая научная конференция Московского физико-технического института, ноябрь 2013.
2. Цепляев В.И. Исследования фазовых переходов в нитриде урана методом атомистического моделирования. 11-ая Российская ежегодная конференция «Физико-химия и технология неорганических материалов», ИМЕТ РАН, сентябрь 2014
3. Цепляев В.И. Исследование фазовой диаграммы нитрида урана методом атомистического моделирования. 57-ая научная конференция Московского физико-технического института, ноябрь 2014.

4. Цепляев В.И. Изучение фазовой диаграммы нитрида урана методом атомистического моделирования. 8-я Всероссийская школа-семинар "Аэротермодинамика и физическая механика классических и квантовых систем», ИПМех РАН, Москва, декабрь 2014.
5. Цепляев В.И., Стариков С.В. Атомистическое моделирование фазовых переходов в моонитриде урана. Шестая Международная конференция "Кристаллофизика и деформационное поведение перспективных материалов», МИСИС, Москва, май 2015.
6. Tseplyaev V.I., Starikov S.V. The investigation of phase transitions in uranium mononitride with using of molecular dynamics simulation. XXX International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter, Elbrus, march 2015.
7. Цепляев В.И. Исследование фазовых переходов в нитриде урана методом атомистического моделирования. 12-ая Российская ежегодная конференция «Физико-химия и технология неорганических материалов», ИМЕТ РАН, октябрь 2015.

Так же в ноябре запланировано выступление на 58-ой конференции МФТИ.

#### **Перечень публикаций:**

1. Tseplyaev V.I., Starikov S.V., The atomistic simulation of pressure-induced phase transition in uranium mononitride. Journal of Physics: Conference Series. (в печати)
2. Kuksin A Y, Starikov S V, Smirnova D E, Tseplyaev V I. The diffusion of point defects in uranium mononitride: combination of DFT and atomistic simulation with novel potential. Journal of Alloys and Compounds. (2015) DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jallcom.2015.10.223>
3. Цепляев В.И. Изучение фазовой диаграммы в нитриде урана методом атомистического моделирования. Физико-химическая кинетика в газовой динамике, т. 16, в. 6 (2014)