

**БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра физики твёрдого тела**

ДИПЛОМНАЯ РАБОТА
КОМПЬЮТЕРНОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В
УРАНЕ

Студента VI курса
Шалькевича Владислава
Евгеньевича.

Научный руководитель:
доцент кандидат физ.-мат. наук
Дорожкин Николай Николаевич

Рецензент:
доцент, кандидат физ.-мат. Наук
Батраков Константин
Германович

«ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ»
Зав. Кафедрой физики
твёрдого тела
профессор В. В. Углов
« » 2019 г.

Минск 2019

КОМПЬЮТОРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В УРАНЕ

РЕФЕРАТ

Дипломная работа 31 страница, 23 рисунка, 6 таблиц, 16 источников.

Целью дипломной работы является моделирование структурных параметров аллотропных модификаций урана и динамики фазовых переходов в уране при нагреве и охлаждении, определение термодинамических параметров (температура плавления, удельная энергия фазовых переходов).

Объектом исследования является модель кристаллической решетки урана, моделирование выполнено методом молекулярной динамики при помощи программного пакета LAMMPS.

В результате работы построена и изучена модель кристаллической решетки урана при нагреве и охлаждении. В модели использована скорость нагрева и охлаждения $\sim 10^{10}$ K/c. Получены 2 фазовых перехода при нагреве и один при охлаждении. Определены термодинамические параметры модели. Установлено, что фазовый переход при нагревании происходит по сдвиговому механизму, при охлаждении образуется аморфная структура.

КАМП'ЮТЭРНАЕ МАДЕЛЯВАННЕ ФАЗАВАГА ПЕРАХОДУ В УРАНЕ

РЭФЕРАТ

Дыпломная работа 31 старонка., 23 малюнка, 6 таблиц, 16 крыніц.

Мэтай дыпломнай працы з'яўляецца мадэляванне структурных параметраў алатропных мадыфікацый ўрану і дынамікі фазавых пераходаў у уране пры нагрэве і астуджэнні, вызначэнне тэрмадынамічных параметраў (тэмпература плаўлення, удзельная энергія фазавых пераходаў).

Аб'ектам даследавання з'яўляецца мадэль крышталічнай рашоткі ўрану, мадэляванне выканана метадам малекулярнай дынамікі пры дапамозе праграмнага пакета LAMMPS.

У выніку працы пабудавана і даследавана мадэль крышталічнай рашоткі ўрану пры нагрэве і астуджэнні. У мадэлі выкарыстаная хуткасць нагрэву і астуджэнні $\sim 10^{10}$ К/с. Атрыманы 2 фазавых пераходу пры нагрэве і адзін пры астуджэнні. Вызначаны тэрмадынамічныя параметры мадэлі. Устаноўлена, што фазавы пераход пры награванні адбываецца па сдвиговому механізму, пры астуджэнні ўтвораецца аморфная структура.

COMPUTER MODELLING OF PHASE TRANSITIONS IN URANIUM

ABSTRACT

Graduate work 31 pages, 23 figures, 6 tables, 16 references.

The aim of the thesis is to simulate the structural parameters of allotropic modifications of uranium and the dynamics of phase transitions in uranium during the process of heating and cooling, the determination of thermodynamic parameters (melting point, specific energy of phase transitions).

The object of the research is a model of the crystal lattice of uranium, the simulation was performed by the method of molecular dynamics using the LAMMPS software package.

As a result, the model of the crystal lattice of uranium was constructed and the behavior of the model during the process of heating and cooling was studied.

The model used the rate of heating and cooling $\sim 10^{10}$ K/s. Two phase transitions were obtained during heating and one during cooling. The thermodynamic parameters of the model are determined. It is established that the phase transition occurs upon heating by a shear mechanism, upon cooling an amorphous structure is formed.