

Р. Ю. Махмуд-Ахунов, М. Ю. Тихончев, В. В. Светухин

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ДИОКСИДА УРАНА МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ¹

Аннотация. *Актуальность и цели.* Диоксид урана используется в качестве топлива большинства современных ядерных энергетических реакторов. При эксплуатации температура топлива может превышать 2000 К, давление газообразных продуктов деления урана внутри топливного сердечника может достигать 100 атм. Это может привести к изменению микроструктуры топлива, его распуханию, рекристаллизации, спеканию зерен. Детальное экспериментальное исследование свойств ядерного топлива вблизи критических температур затруднено ввиду сложности таких экспериментов. Одним из путей получения информации в этом случае является математическое моделирование. Настоящая работа посвящена расчетному исследованию процессов плавления кристаллов диоксида урана, в том числе и наноразмерного диапазона. *Материалы и методы.* Моделирование проводилось методом молекулярной динамики с использованием программного комплекса DL_POLY. Транслируемая ячейка была выбрана в виде кубического кристалла со структурой флюорита. Кубические кристаллиты строились путем трансляции элементарной ячейки по трем направлениям. При расчете использовались периодические граничные условия (бесконечный кристалл) и нулевые граничные условия (свободный кристалл в вакууме). Потенциал межатомного взаимодействия был выбран в форме Борна-Майера, некоторые из параметров которого взяты в виде кусочно-линейных медленно меняющихся функций температуры. *Результаты.* В настоящей работе путем молекулярно-динамического моделирования проведено исследование фазовых превращений диоксида урана. Используются три различные методики определения температуры перехода в суперионное состояние и температуры плавления. Получены расчетные оценки температур как для макрокристалла диоксида урана, так и для кубических нанокристаллов размером от 2,2 до 4,4 нм. Установлено снижение этих температур с уменьшением размера нанокристалла. *Выводы.* Для определения критических температур были использованы три следующих метода: 1) анализ вида функции радиального распределения; 2) анализ изменения структурного фактора рассеяния; 3) анализ зависимости энтальпии от температуры. В случае рассмотрения макрокристаллов предпочтителен метод структурного фактора, так как получаемые зависимости имеют хорошо выделяемые линейные участки. Это упрощает дальнейший анализ. В случае нанокристаллов лучшим оказался метод энтальпии, так как он обладает меньшей погрешностью. Согласно полученным результатам температуры фазовых переходов в нанокристаллах UO_2 существенно снижаются с уменьшением их размера.

Ключевые слова: молекулярная динамика, диоксид урана, плавление нанокристаллов.

R. Yu. Makhmud-Akhunov, M. Yu. Tikhonchev, V. V. Svetukhin

¹ Работа выполнена при поддержке Минобрнауки в рамках государственного задания на 2012–2014 гг., федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 годы» и «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007–2012 годы», а также при частичной поддержке гранта РФФИ: проект № 12-08-97076-р_поволжье_a.

SIMULATION OF PHASE TRANSFORMATIONS OF URANIUM DIOXIDE BY MOLECULAR DYNAMICS METHOD

Abstract. *Background.* Uranium dioxide is a fuel employed in the majority of modern nuclear power reactors. The operation temperature of the fuel can exceed 2000K, the pressure of the gaseous fission products of uranium in the fuel core is sometimes above 100atm. This may cause fuel microstructural changes, its swelling, recrystallization, and grain sintering. It is difficult to perform a detailed experimental study of nuclear fuel properties at critical temperatures due to hard environmental conditions. Thus, to obtain the required information, the mathematical simulation is commonly used. This paper presents calculations of melting processes in uranium dioxide crystals comprising nano-scale crystals. *Materials and methods.* The simulation was performed by molecular dynamics method using DL_POLY code. The translated cell was chosen as a cubic crystal with the fluorite structure. Cubic crystallites were built by translating the unit cell in three directions. The periodic boundary conditions (an infinite crystal) and zero boundary conditions (a free crystal in vacuum) were used while calculating. Interatomic interaction potential was chosen in the Born-Mayer form. Some of its parameters were taken in the form of piecewise linear slowly varying temperature functions. *Results.* The paper describes the investigation of uranium dioxide phase transformations performed by molecular dynamics simulation. Three different methodologies were used to determine the temperature of superionic state transition and the melting point. Temperatures both for uranium dioxide macrocrystal and for cubic nanocrystals with the size of 2.2–4.4 nm were estimated. The relation of the nanocrystal size reduction to temperature decrease was registered. *Conclusions.* The three following methods were used for critical temperature determination: 1) the analysis of the type of radial distribution function; 2) the analysis of structural scattering factor changes; 3) the analysis of the enthalpy – temperature dependence. The structural factor method is more preferable for macrocrystals because the dependences obtained have well-defined linear regions. It simplifies a further analysis. The enthalpy method is more suitable for nanocrystals due to its higher accuracy. The results showed that the phase transition temperatures in nanocrystals of UO_2 decrease significantly with the reduction of the crystal size.

Key words: molecular dynamics, uranium dioxide, melting point of nanocrystals.

Введение

В большинстве современных ядерных реакторов в качестве топлива используется диоксид урана. Из таблеток диоксида урана формируются топливные сердечники тепловыделяющих элементов (ТВЭЛ) [1]. Во время эксплуатации таблетки подвергаются воздействию высоких температур и давления, облучению, механическим нагрузкам. При номинальной мощности реактора температура на оси ТВЭЛА может превышать 2000 К, а давление газообразных продуктов деления урана внутри герметичного ТВЭЛА может достигать 80–100 атм [2]. Поскольку диоксид урана обладает малой теплопроводностью, то в топливном сердечнике возникает высокий температурный градиент [3]. Все это может привести к изменению микроструктуры топлива, его распуханию, рекристаллизации, спеканию зерен [2].

Детальное экспериментальное исследование свойств ядерного топлива вблизи критических температур не проводилось ввиду сложности таких экспериментов. Одним из путей получения информации в этом случае является математическое моделирование. Широко распространенным на сегодня явля-

ется метод молекулярной динамики, который позволяет получать информацию об энергетических, термодинамических и структурных свойствах различных материалов. В данной работе с помощью этого метода проведено исследование процессов плавления кристаллов диоксида урана, в том числе и наноразмерного диапазона.

1. Описание метода

Моделирование проводилось с использованием программного комплекса DL_POLY [4]. Транслируемая ячейка была выбрана в виде кубического кристалла со структурой флюорита. Кубические кристаллиты строились путем трансляции элементарной ячейки по трем направлениям. При расчете использовались периодические граничные условия (бесконечный кристалл) и нулевые граничные условия (свободный кристалл в вакууме) В табл. 1 приведены размеры моделируемых кристаллитов и соответствующее число атомов в них.

Таблица 1

Моделируемые кристаллы

Размер элементарных ячеек	5×5×5	6×6×6	7×7×7	8×8×8	10×10×10
Размер, Å	27,35	32,82	38,29	43,76	54,70
Количество атомов	1500	2592	4116	6114	12000

Потенциал межатомного взаимодействия был выбран в форме Борна – Майера, что обеспечило минимальный набор параметров, некоторые из которых взяты в виде кусочно-линейных медленноменяющихся функций температуры:

$$U_{eff}(r_{ij}, T) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{z_i(T)z_j(T)e^2}{r_{ij}} + f(T)(b_i + b_j) \exp\left(\frac{a_i + a_j - r_{ij}}{b_i + b_j}\right) - \frac{c_i c_j}{r_{ij}^6}, \quad (1)$$

где первое слагаемое соответствует кулоновскому взаимодействию, а второе и третье – потенциалу Борна – Майера [5]. Значения независимых от температуры параметров потенциала были взяты из работы [6].

Для восстановления параметров потенциала $z_i(T)$ и $f(T)$ были использованы экспериментальные данные по тепловому расширению решетки UO_2 и изменению энтальпии [7]. В нашей предыдущей работе [8] были подобраны зависимости дробного заряда иона кислорода и параметра f от температуры. В настоящей работе мы используем эти зависимости (формула (2)) в подправленном виде после исправления допущенных ранее неточностей:

$$\begin{cases} z(T) = z_0 \left[1 + \alpha \frac{T_0 - T}{T_0} \right], & \text{где } \alpha = \begin{cases} 9,6092 \cdot 10^{-3}, T < T_0, & z_0 = 1,192966, \\ 29,27444 \cdot 10^{-3}, T > T_0, & T_0 = 2666K; \end{cases} \\ f(T) = f_0 \left[1 + \beta \frac{T'_0 - T}{T'_0} \right], & \text{где } \beta = \begin{cases} 9,34793 \cdot 10^{-2}, T < T'_0, & f_0 = 0,3540625, \\ 2,59565 \cdot 10^{-1}, T > T'_0, & T'_0 = 2627K. \end{cases} \end{cases} \quad (2)$$

На рис. 1 можно видеть, что найденные по этой методике значения параметров дробного заряда и $f(T)$ имеют две характерные линейные области с переходом при температуре вблизи 2670 К – температуре перехода в супер-ионное состояние [7]. Более подробно вопросы обоснования температурной зависимости указанных параметров потенциала рассмотрены в наших предыдущих работах [8, 9].

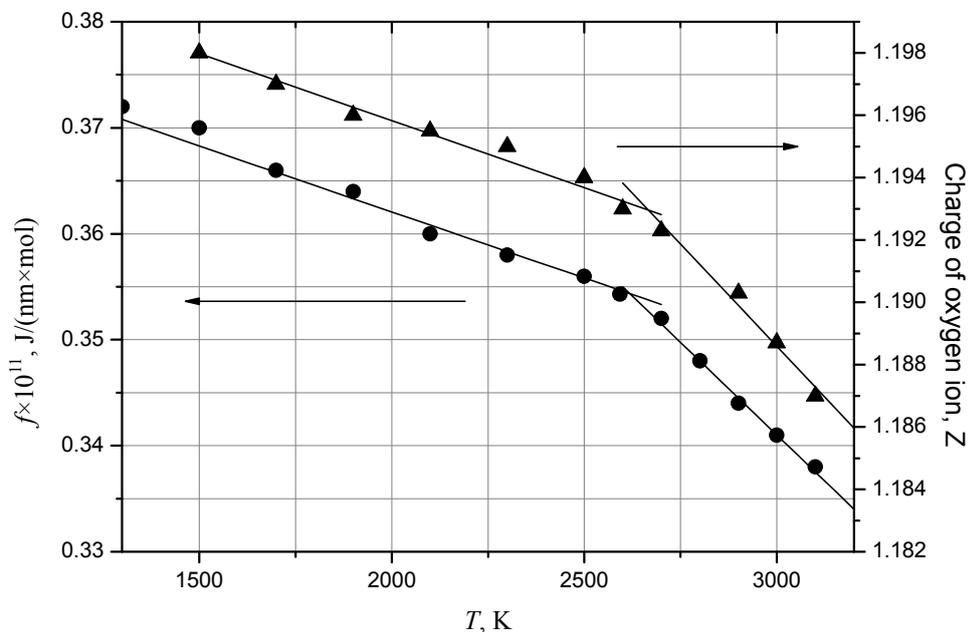


Рис. 1. Зависимость параметра f_0 и дробного заряда иона кислорода от температуры и кусочно-линейная аппроксимация с переходом вблизи точки 2670 К

Для всех расчетов шаг численного интегрирования был выбран равным 5 фс, радиус обрезания потенциала в случае использования нулевых граничных условий задавался таким образом, чтобы область действия потенциала охватывала все частицы системы, и варьировался в пределах от 55 до 105 ангстрем в зависимости от размера кристаллита. В случае периодических условий использовался радиус 10 ангстрем.

2. Определения точки плавления

Для идентификации точки плавления в молекулярной динамике существует несколько методов. Наиболее распространенные следующие: анализ вида радиальной функции распределения (РФР), метод структурного фактора; анализ изменения энтальпии. Рассмотрим отдельно каждый метод.

2.1. Радиальная функция распределения

Вид этой функции является графическим представлением упорядоченности расположения частиц в кристаллической решетке [10]. Математически РФР описывает вероятность нахождения частиц на расстоянии R от заданной точки [11]. Вычисляется РФР по формуле

$$g(R) = \frac{V}{N} \frac{N(R, \Delta R)}{4\pi R^2 \Delta R}, \quad (3)$$

где N – число частиц моделируемого кристалла $N(R, \Delta R)$ – число частиц, находящихся в сферическом слое шириной ΔR .

Вид РФР позволяет качественно оценить, находится материал в расплавленном или кристаллическом состоянии. Для упорядоченного состояния кристалла РФР представляет собой последовательность резких четких пиков, положение которых соответствует закономерности расположения атомов.

Следует отметить, что первый пик присутствует всегда, в любом фазовом состоянии. Тогда как второй и последующие пики при высоких температурах становятся более пологими и исчезают вовсе, когда кристалл переходит в расплавленное состояние.

На рис. 2 показаны РФР для бесконечного кристалла. Хорошо видно, что при температуре 2500 К второй пик хорошо различим, а при 3500 К совсем исчезает, так как кристалл находится в жидком состоянии. Отсюда следует, что температура плавления может находиться между двумя этими температурами.

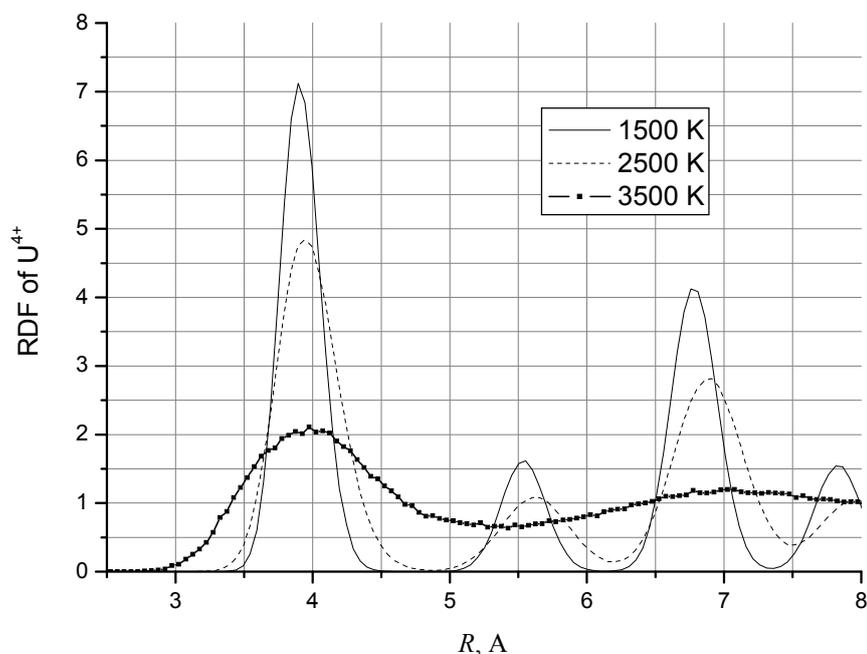


Рис. 2. Радиальная функция распределения ионов урана для бесконечного кристалла при различных температурах

Применим аналогичные рассуждения для нанокристалла. На рис. 3 показаны РФР ионов урана нанокристалла $5 \times 5 \times 5$ при различных температурах. Здесь при температуре 1200 К кристаллическая структура еще сохраняется (второй и последующие пики еще различимы), тогда как температура 1800 К соответствует расплавленному состоянию (отсутствует второй пик).

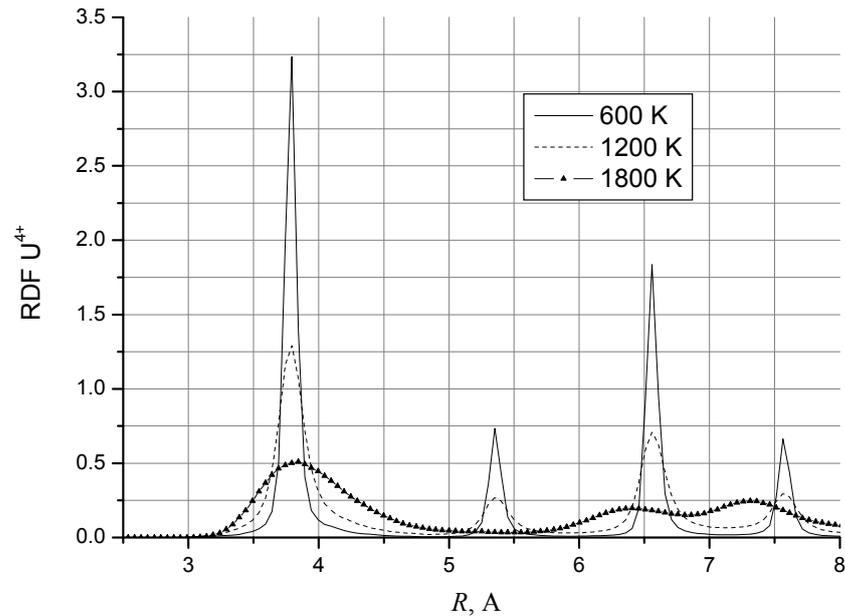


Рис. 3. Радиальная функция распределения ионов урана для нанокристалла $5 \times 5 \times 5$ при различных температурах

Очевидно, что таким методом очень трудно найти точку начала плавления, поэтому этот метод более подходит для оценки фазового состояния системы при конкретной заданной температуре.

2.2. Метод структурного фактора

Этот метод основан на анализе динамики изменения структурного фактора [14]. С этой целью вычисляется нормированный квадрат модуля структурного фактора отдельно для подрешеток урана и кислорода в направлениях (001), (010) и (100) в соответствии с формулой

$$\left| S_{\alpha}(\vec{k}) \right|^2 = \frac{1}{N^2} \left[\left(\sum_{n=1}^N \cos(\vec{k} \cdot \vec{r}_n) \right)^2 + \left(\sum_{n=1}^N \sin(\vec{k} \cdot \vec{r}_n) \right)^2 \right], \quad (4)$$

где индекс α соответствует атомам урана или кислорода; N – количество атомов в системе; \vec{k} – базисный вектор обратной решетки выбранного направления; \vec{r}_n – радиус-вектор атома системы.

При 0 K кристалл представляет собой идеальную структуру, структурный фактор которой равен единице. Напротив, при высоких температурах для расплавленного состояния квадрат модуля структурного фактора стремится к нулю, а его численные оценки колеблются в диапазоне 0,01–0,04. К сожалению, времени моделирования не достаточно, чтобы в области температуры плавления перевести кристалл из твердого в расплавленное состояние. В связи с этим значение квадрата модуля структурного фактора не опускается ниже 0,2 даже при высоких температурах.

Величина структурного фактора определяет интенсивность отражения при рентгеновской дифракции на кристаллах для определенных направлений.

При этом известно, что логарифмическая зависимость интенсивностей дифракционных максимумов представляет собой линейную функцию от температуры. Теоретически эта зависимость получается в приближении Эйнштейна, когда колебания атомов считаются независимыми осцилляторами при температурах выше комнатной [12]. Следовательно, в методе молекулярной динамики при неизменном характере колебаний атомов зависимость логарифма модуля структурного фактора от температуры также должна быть линейной.

На рис. 4 в логарифмическом масштабе показана зависимость квадрата модуля структурного фактора, усредненного по трем независимым направлениям (001), (010) и (100). Усреднение проводилось с целью уменьшения амплитуды разброса точек и упрощения анализа результатов.

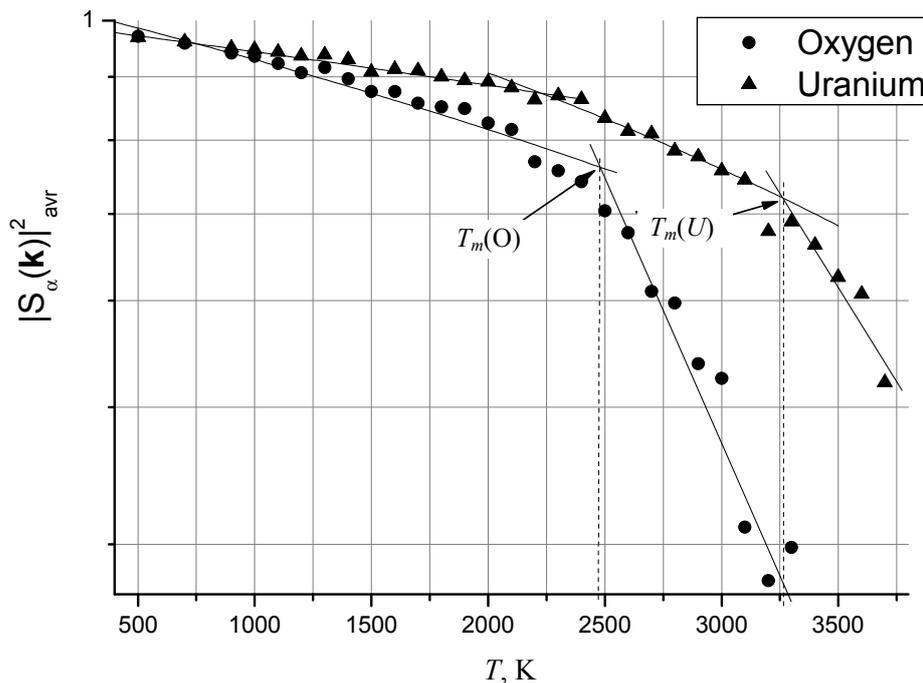


Рис. 4. Температурные зависимости квадрата модуля структурного фактора, усредненного по направлениям (001), (010) и (100), отдельно для решеток урана и кислорода с линейной аппроксимацией между точками фазовых переходов в области 2400 и 3200 К

Видно, что на данной зависимости для ионов кислорода и урана можно выделить несколько характерных областей. До температур 2200 К происходит линейное изменение структурного фактора. Далее в области температуры перехода в суперионное состояние 2200–2500 К происходит постепенное изменение характера колебаний атомов кислорода, которые, в свою очередь, меняют амплитуду колебаний атомов урана, и угол наклона зависимостей существенно меняется. Линейный характер зависимостей сохраняется до температуры плавления кристалла 3200 К, дальнейшие изменения связаны с переходом в расплавленное состояние. При температуре 3600 К решетка атомов урана разрушается и структурный фактор скачком меняется от значе-

ний 0,5 до 0. Это показывает, что температура 3600 К существенно превышает точку плавления, поскольку разрушение решетки происходит за несколько десятков шагов интегрирования. Аппроксимируя линейные участки методом наименьших квадратов и находя соответствующие точки пересечения, получили значения для температур фазовых переходов 2470 ± 400 К и 3260 ± 280 К, которые согласуются с рекомендациями МАГАТЭ 2670 и 3120 К соответственно [7]. Указанные погрешности расчетов вычислены на основе оценок точности аппроксимации по методу наименьших квадратов.

Используя описанный выше подход по оценке изменения структурного фактора с ростом температуры, можно судить о фазовых переходах и для нанокристаллов. Для примера рассмотрим нанокристалл размером $5 \times 5 \times 5$. Полученные результаты изменения структурного фактора представлены на рис. 5. Полученная зависимость имеет характерные линейные (в логарифмических координатах) области. Температуры фазовых переходов определяли как точки пересечения аппроксимационных прямых. Полученные значения составили 930 ± 260 К и 1500 ± 300 К для подрешеток кислорода и урана соответственно.

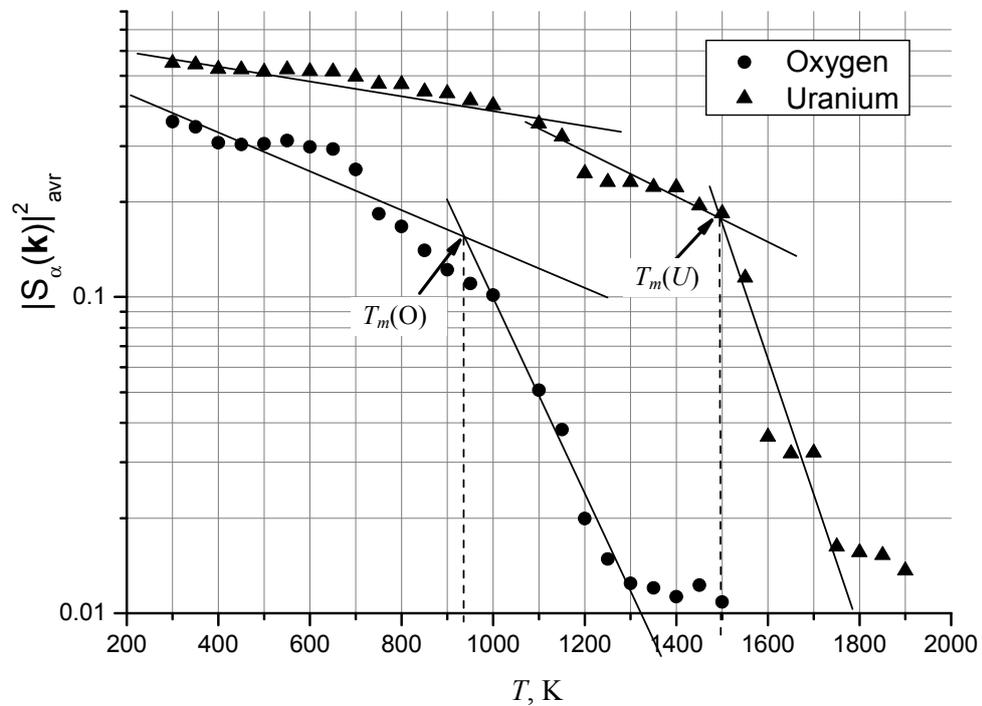


Рис. 5. Температурные зависимости квадрата модуля структурного фактора, усредненного по направлениям (001), (010) и (100), для кубического нанокристалла размером $5 \times 5 \times 5$ элементарных ячеек

2.3. Зависимости энтальпии системы от температуры

На рис. 6 представлены зависимости приведенной энтальпии для кубических нанокристаллов различных размеров. Качественно эти зависимости имеют одинаковый характер для кристаллов различных размеров: вначале происходит плавный рост, затем наблюдаются два скачка энтальпии. Первый

скачок на величину примерно 0,5 эВ/ат. связан с переходом кристалла в супер-ионное состояние, второй более резкий скачок на величину примерно 1,5 эВ/ат. связан с плавлением кристалла. Поскольку повышение температуры проводилось ступенчатым образом, а время моделирования на каждой температурной точке было ограничено, то в качестве критических выбирались точки, которые лежат на середине отрезка резкого роста энтальпии. Рассчитанные таким образом температуры приведены в табл. 2. Согласно полученным результатам обе эти температуры существенно снижаются с уменьшением размера кристалла. Так, температура плавления наименьшего из рассмотренных кристаллов (размером 2,7 нм) оказывается примерно в два раза ниже температуры плавления макрокристалла диоксида урана. С увеличением размера обе температуры быстро возрастают.

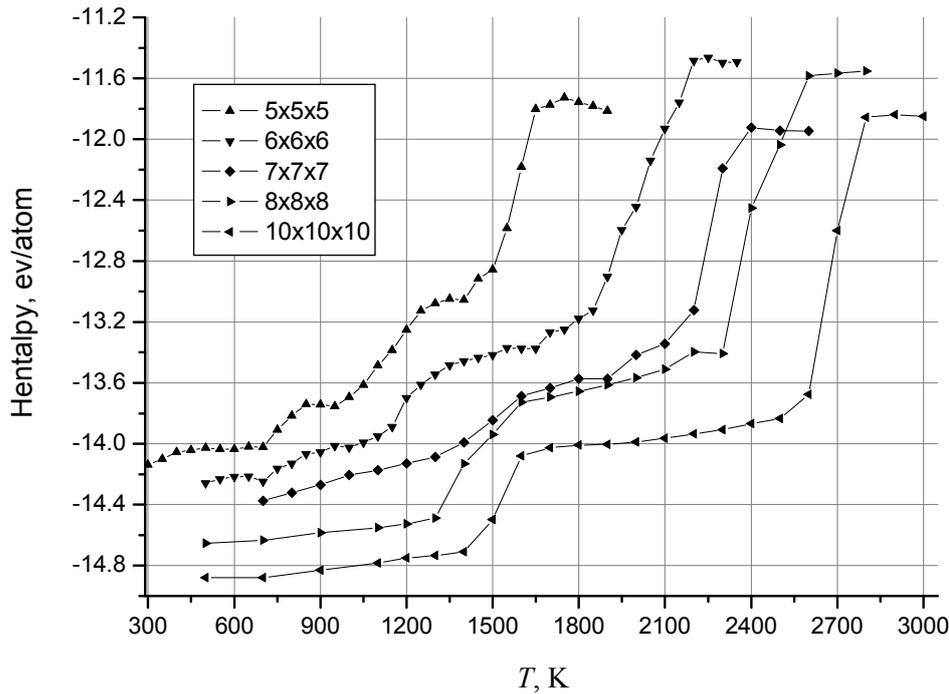


Рис. 6. Зависимость приведенной на атом энтальпии от температуры для кубических нанокристаллов различных размеров (размеры указаны в элементарных ячейках)

Таблица 2

Температуры фазовых переходов для кубических нанокристаллов

Размер элементарных ячеек	T плавления решетки кислорода, К	T плавления решетки урана, К
5×5×5	1125 ± 25	1525 ± 25
6×6×6	1200 ± 25	2025 ± 25
7×7×7	1450 ± 50	2300 ± 50
8×8×8	1450 ± 50	2400 ± 50
10×10×10	1500 ± 50	2700 ± 50

В литературе нет экспериментальных данных о температуре плавления наноразмерных кристаллов UO_2 . Однако для металлов известно, что с уменьшением размера кристалла до десятков нанометров его температура плавления резко уменьшается [13]. Таким образом, результаты моделирования показывают, что и для диоксида урана справедливо такое уменьшение.

Для бесконечного кристалла зависимость энтальпии от температуры, представленная на рис. 7, не имеет таких особенностей, как для нанокристаллов. Вплоть до температуры 3700 К наблюдается плавное увеличение, затем происходит небольшой скачок, который связан с полным расплавлением кристалла. То есть в данном случае сложно идентифицировать точки перехода в суперионное состояние и состояние плавления.

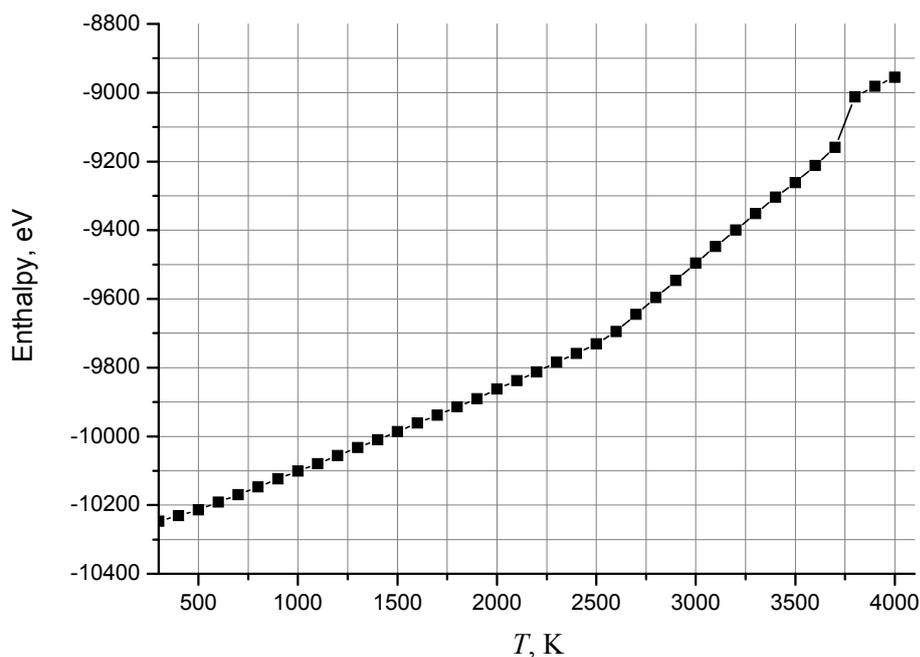


Рис. 7. Зависимость энтальпии от температуры для бесконечного кристалла UO_2

Таким образом, в случае рассмотрения макрокристаллов предпочтительнее метод структурного фактора, так как получаемые зависимости имеют хорошо выделяемые линейные участки, что упрощает дальнейший анализ. А в случае нанокристаллов лучше оказался метод энтальпии, так как он обладает меньшей погрешностью.

Заключение

В настоящей работе путем молекулярно-динамического моделирования проведено исследование фазовых превращений диоксида урана. Для определения критических температур было использовано несколько методов: 1) анализ вида функции радиального распределения; 2) анализ изменения структурного фактора рассеяния; 3) анализ зависимости энтальпии от температуры.

При определении точки плавления бесконечного макрокристалла эффективным оказался второй метод, тогда как при рассмотрении нанокристал-

литов – третий. Найденные значения температуры суперионного перехода 2470 ± 400 К и плавления 3260 ± 280 К в пределах погрешности согласуются с известными экспериментальными данными. При рассмотрении нанокристаллов в диапазоне размеров 2,7–5,5 нм установлено снижение этих температур с уменьшением размера.

Список литературы

1. Кесслер, Г. Ядерная энергетика : пер. с англ. / Г. Кесслер. – М. : Энергоиздат, 1986. – 264 с.
2. Дементьев, Б. А. Ядерные энергетические реакторы : учебник для вузов / Б. А. Дементьев. – М. : Энергоатомиздат, 1990. – 352 с.
3. Емельянов, И. Я. Конструирование ядерных ректоров : учеб. пособие для вузов / И. Я. Емельянов, В. И. Михан, В. И. Солонин. – М. : Энергоиздат, 1982. – 400 с.
4. The DL POLY 4 User Manual. – URL: ftp://ftp.dl.ac.uk/ccp5/DL_POLY/DL_POLY_4.0/DOCUMENTS/USRMAN4.03.pdf (дата обращения: 21.03.2012)
5. Born, M. Zur gittertheorie der ionenkristalle / M. Born, J. E. Mayer // Z. Phys. – 1932. – Bd 75. – S. 1–18.
6. Yamasaki, S. Evaluation of Thermal Conductivity Hyperstoichiometric UO_{2+x} by Molecular Dynamics Simulation / S. Yamasaki, T. Arima, K. Idemitsu et al. // International Journal of Thermophysics. – 2007. – V. 28, № 2. – P. 661–673.
7. Thermophysical Properties Database of Materials for Light Water Reactors and Heavy Water Reactors. IAEA (2006). – URL: http://www.pub.iaea.org/MTCD/publications/PDF/te_1496_web.pdf (дата обращения: 01.03.2012).
8. Нагорнов, Ю. С. Построение температурно-зависимого потенциала межчастичного взаимодействия для диоксида урана / Ю. С. Нагорнов, Р. Ю. Махмуд-Ахунов, Ю. М. Тихончев, Б. М. Костишко, В. Н. Голованов, В. В. Светухин // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 3. – С. 156–164.
9. Нагорнов, Ю. С. О температурной зависимости межатомного потенциала при молекулярно-динамическом моделировании свойств диоксида урана / Ю. С. Нагорнов, Р. Ю. Махмуд-Ахунов, В. В. Светухин // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Математическое моделирование физических процессов. – 2010. – № 10. – С. 27–34.
10. MD simulations of melting in 2D LJ systems. – URL: <http://fliiby.com/file/65867/j9jh9eokml.html> (дата обращения: 10.06.2012).
11. Radial distribution function – Wikipedia. – URL: http://en.wikipedia.org/wiki/Radial_distribution_function (дата обращения: 12.05.2012).
12. Киттель, Ч. Введение в физику твердого тела / Ч. Киттель. – М. : Наука, 1978. – 791 с.
13. Гусев, А. И. Нанокристаллические материалы: получение и свойства / А. И. Гусев. – Екатеринбург : УрО РАН, 1998. – 198 с.

References

1. Kessler G. *Yadernaya energetika: per. s angl.* [Nuclear power: translation from English]. Moscow: Energoizdat, 1986, 264 p.
2. Dement'ev B. A. *Yadernye energeticheskie reaktory: uchebnyk dlya vuzov* [Nuclear power reactors: textbook for universities]. Moscow: Energoatomizdat, 1990, 352 p.
3. Emel'yanov I. Ya., Mikhan V. I., Solonin V. I. *Konstruirovaniye yadernykh rektorov: ucheb. posobie dlya vuzov* [Construction of nuclear reactors: tutorial for universities]. Moscow: Energoizdat, 1982, 400 p.

4. The DL POLY 4 User Manual. Available at: ftp://ftp.dl.ac.uk/ccp5/DL_POLY/DL_POLY_4.0/DOCUMENTS/USRMAN4.03.pdf (accessed 21 March 2012)
5. Born M., Mayer J. E. Z. *Phys.* 1932, part 75, pp. 1–18.
6. Yamasaki S., Arima T., Idemitsu K. et al. *International Journal of Thermophysics*. 2007, vol. 28, no. 2, pp. 661–673.
7. *Thermophysical Properties Database of Materials for Light Water Reactors and Heavy Water Reactors. IAEA (2006)*. Available at: http://www.pub.iaea.org/MTCD/publications/PDF/te_1496_web.pdf (accessed 1 March 2012).
8. Nagornov Yu. S., Makhmud-Akhunov R. Yu., Tikhonchev Yu. M., Kostishko B. M., Golovanov V. N., Svetukhin V. V. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2010, no. 3, pp. 156–164.
9. Nagornov Yu. S., Makhmud-Akhunov R. Yu., Svetukhin V. V. et al. *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Seriya: Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov* [Problems of atomic science and technology. Series: Mathematical modeling of physical processes]. 2010, no. 10, pp. 27–34.
10. *MD simulations of melting in 2D LJ systems*. Available at: <http://fliiby.com/file/65867/j9jh9eokml.html> (accessed 10 June 2012)
11. *Radial distribution function*. *Wikipedia*. Available at: http://en.wikipedia.org/wiki/Radial_distribution_function (accessed 12 May 2012).
12. Kitel' Ch. *Vvedenie v fiziku tverdogo tela* [Introduction into solid state physics]. Moscow: Nauka, 1978, 791 p.
13. Gusev A. I. *Nanokristallicheskie materialy: poluchenie i svoystva* [Nanocrystalline material: production and properties]. Ekaterinburg: UrO RAN, 1998, 198 p.

Махмуд-Ахунов Руслан Юсупович

младший научный сотрудник,
Научно-исследовательский
технологический институт
имени С. П. Капицы, Ульяновский
государственный университет
(Россия, г. Ульяновск,
ул. Университетская Набережная, 1,
корпус 4)

E-mail: rusmru@yandex.ru

Makhmud-Akhunov Ruslan Yusupovich

Junior research fellow, Research
Technological Institute named after
S. P. Kapitza, Ulyanovsk State
University (Building 4, 1 Universitetskaya
Naberezhnaya street, Ulyanovsk, Russia)

Тихончев Михаил Юрьевич

кандидат физико-математических наук,
начальник лаборатории, Научно-
исследовательский технологический
институт имени С. П. Капицы,
Ульяновский государственный
университет (Россия, г. Ульяновск,
ул. Университетская Набережная, 1,
корпус 4)

E-mail: tikhonchev@sv.ulsu.ru

Tikhonchev Mikhail Yuryevich

Candidate of physical and mathematical
sciences, head of laboratory, Research
Technological Institute named
after S.P. Kapitza, Ulyanovsk State
University (Building 4, 1 Universitetskaya
Naberezhnaya street, Ulyanovsk, Russia)

Светухин Вячеслав Викторович

доктор физико-математических наук,
профессор, директор Научно-
исследовательского технологического
института имени С. П. Капицы,
Ульяновский государственный
университет (Россия, г. Ульяновск,
ул. Университетская Набережная, 1,
корпус 4)

E-mail: slava@sv.ulsu.ru

Svetukhin Viacheslav Viktorovich

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, Head of Research
Technological Institute named after
S. P. Kapitza, Ulyanovsk State
University (Building 4, 1 Universitetskaya
Naberezhnaya street, Ulyanovsk, Russia)

УДК 538.95

Махмуд-Ахунов, Р. Ю.

**Моделирование фазовых превращений диоксида урана методом
молекулярной динамики / Р. Ю. Махмуд-Ахунов, М. Ю. Тихончев, В. В. Све-
тухин // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-
математические науки. – 2013. – № 3 (27). – С. 199–211.**