

## Введение

В связи с проведением расчетно-экспериментальных исследований смешанного нитридного уран-плутониевого (СНУП) ядерного топлива в реакторе БН-600 [1], которое предполагается использовать в опытно-демонстрационной реакторной установке БРЕСТ-ОД-300 и коммерческом реакторе БН-1200, а также в связи с исследованиями смешанного оксидного уран-плутониевого топлива в реакторе БН-800 [2], стали актуальны работы по термодинамическому моделированию химического состава ОЯТ и его взаимодействия с оболочкой твэла.

В интересах этих работ проводилось термодинамическое моделирование для определения и анализа:  
– химического состава нитридного и оксидного ОЯТ;  
– причин повышенной коррозии материала оболочки твэлов со СНУП ядерным топливом по сравнению с случаем взаимодействия с оксидным уран-плутониевым ядерным топливом.

## Термодинамическое моделирование химического состава ОЯТ

При постановке задачи расчета равновесного состава нитридного и оксидного ОЯТ задавались концентрации химических элементов в нитридном и оксидном твэлах комбинированной экспериментальной ТВС (КЭТВС) (рисунок 1), рассчитанные с помощью программ ПРИЗМА и РИСК [3,4]. Расчет термодинамически равновесного химического состава ОЯТ проводился с использованием программного продукта HSC Chemistry 7.1 [5] и программного комплекса TeDu [6] с учетом термодинамических свойств более чем 900 индивидуальных веществ. Состав рассчитывался для диапазона температур от 600 до 1700°C, что соответствует минимальной и максимальной температурам топлива во время кампании. Полученный вещественный состав (рисунок 2, 3) использовался для термодинамического моделирования взаимодействия ОЯТ с материалом оболочки экспериментального твэла.

## Термодинамическое моделирование взаимодействия ОЯТ с материалом оболочки твэла

В качестве материала оболочки для КЭТВС используется сталь ЧС 68 ХД. Химический состав стали приведен в таблице 1. Температура оболочки твэла лежит в диапазоне 400-700°C (рисунок 4). Максимальная температура топлива на внешней поверхности таблетки – 1500°C (рисунок 5). В результате расчетов получены зависимости равновесных составов от температуры для систем с нитридным и оксидным ОЯТ. Наиболее интересно поведение нитрида хрома. Из рисунка 6 видно наличие нитрида до 500°C и его диссоциация свыше этой температуры. Также в составе системы при температуре выше 500°C появляется нитрид дихрома (рисунок 7).

## Список использованных источников

- Zabudko L.M. et al. Development of innovative fast reactor nitride fuel in Russian Federation: state-of-art. Proc. International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles: Next Generation Nuclear Systems for Sustainable Development 26–29 June 2017 Yekaterinburg, Russian Federation, Book of Abstracts, p 57.
- Kuznetsov A. BN-800 core with MOX fuel. Proc. International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles: Next Generation Nuclear Systems for Sustainable Development 26–29 June 2017 Yekaterinburg, Russian Federation, Book of Abstracts, p 330.
- Модестов Д.Г., Программа решения задач ядерной кинетики РИСК 2014, препринт ФГУП «РФЯЦ ВНИИТФ», № 243, 2014.
- Зацепин О.В. Расчеты методом Монте-Карло по программе ПРИЗМА нейтронно-физических характеристик активной зоны ВВЭР-1000 /О.В. Зацепин, Я.З. Кандиев, Е.А. Кашаева и др. // ВАИТ, сер. «Физика ядерных реакторов». – 2011. – Вып.4.- С.64 - 74.
- Antti Roine HSC Chemistry 7.11, Finland, Pori, Outotec, 2011, <http://www.outotec.com/hsc>.
- Пешкичев И.В., Куропатенко В.Ф., Макеева И.Р. [и др.] // Программный комплекс TeDu для решения задач термодинамического моделирования. Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». 2018. Т.11, №1. С. 84-94.

## Равновесный химический состав нитридного и оксидного ОЯТ

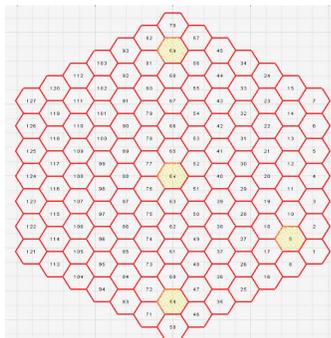


Рисунок 1 - Комбинированная экспериментальная ТВС, содержащая твэлы на основе СНУП-топлива

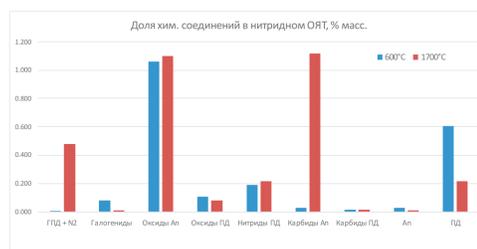


Рисунок 2 - Массовые доли групп химических соединений в нитридном ОЯТ для равновесного случая

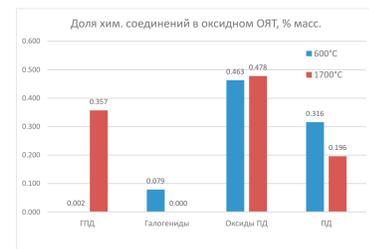


Рисунок 3 - Массовые доли групп химических соединений в оксидном ОЯТ для равновесного случая

## Характеристики оболочки твэла

Химический состав, %	
C	0.06
Si	0.44
Mn	1.5
S	0.009
P	0.014
Cr	16
Ni	14.8
Mo	1.98
Co	0.02
Ti	0.34
B	0.002
N <sub>2</sub>	0.008
Fe	64.827

Таблица 1 - Химический состав стали ЧС 68 ХД - материала оболочки КЭТВС

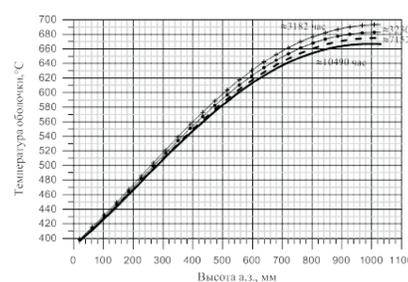


Рисунок 4 - Распределение температуры на внутренней поверхности оболочки в различные моменты времени

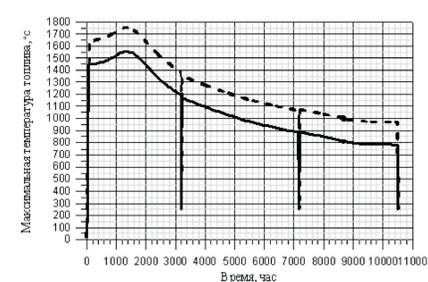


Рисунок 5 - Изменение температуры топлива во времени в среднем сечении: в центре топлива (---) и на наружной поверхности

## Коррозия материала оболочки твэла с нитридным ОЯТ

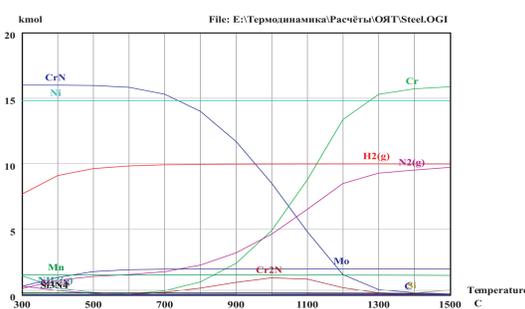


Рисунок 6 - Нитрид хрома в диапазоне температур от 300 до 1300°C

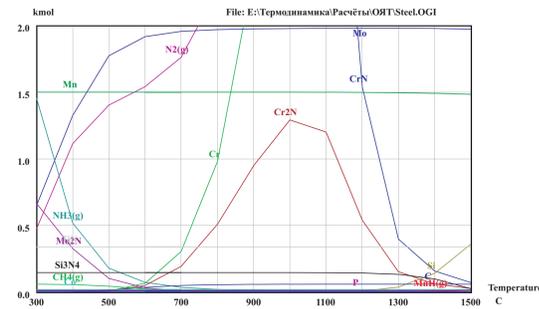


Рисунок 7 - Нитрид дихрома в диапазоне температур от 500 до 1500°C

## Коррозия материала оболочки твэла с оксидным ОЯТ

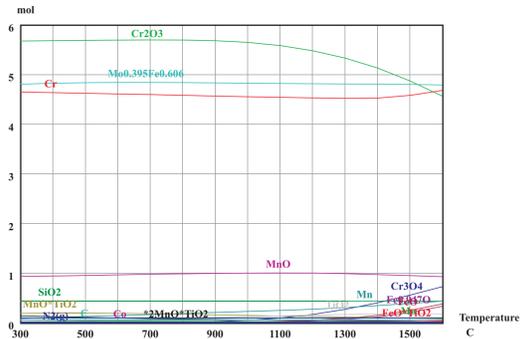


Рисунок 8 - Оксиды хрома в диапазоне температур от 300 до 1550°C

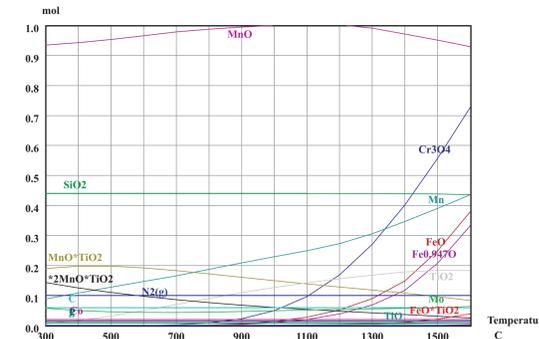


Рисунок 9 - Оксиды хрома в диапазоне температур от 300 до 1550°C

## Основные результаты работы:

- Рассчитаны химически равновесные составы нитридного и оксидного ОЯТ комбинированной экспериментальной ТВС. Результаты моделирования дают представление о химическом составе ОЯТ, что важно для корректировки технологии переработки ОЯТ.
- Проведено термодинамическое моделирование взаимодействия материала оболочки твэла с компонентами нитридного и оксидного ОЯТ КЭТВС. Результаты моделирования позволяют сделать вывод о вероятных причинах повышенной коррозии стали ЧС 68 ХД при взаимодействии с нитридным топливом посредством реакций образования и диссоциации нитридов хрома.