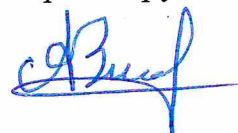


Федеральное ГОСУДАРСТВЕННОЕ бюджетное учреждение науки
ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИБРАЭ РАН)

На правах рукописи



ЗАДОРОВНИЙ АНТОН ВАЛЕРЬЕВИЧ

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ СМЕШАННОГО НИТРИДНОГО
УРАН-ПЛУТОНИЕВОГО ТОПЛИВА ПОД ОБЛУЧЕНИЕМ**

Специальность 2.4.9 – Ядерные энергетические установки,
топливный цикл, радиационная безопасность

ДИССЕРТАЦИЯ
на соискание учёной степени
кандидата технических наук

Научный руководитель:
кандидат физико-математических наук
Озрин Владимир Драганович

Москва – 2025

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	4
1 Современное состояние исследований смешанного нитридного уран-плутониевого топлива под облучением	13
1.1 Общие сведения о нитридном топливе	13
1.2 Технология производства смешанного нитридного топлива	17
1.3 Подходы к моделированию поведения смешанного нитридного топлива	18
1.4 Влияние продуктов деления на теплопроводность смешанного нитридного топлива	22
1.5 Реакторные испытания нитридного топлива в быстрых реакторах	25
1.5.1 Твэлы с газовым подслоем	26
1.5.2 Твэлы с жидкометаллическим подслоем	32
1.6 Выводы к главе 1	34
2 Основные характеристики твэльного кода БЕРКУТ-У	36
2.1 Общая информация о твэльном коде	36
2.2 Архитектура кода и взаимодействие модулей	37
2.3 Расчетная схема твэла быстрого реактора	39
2.4 Описание моделей кода БЕРКУТ-У	41
2.4.1 Тепловой модуль	41
2.4.2 Механический модуль	43
2.4.3 Усовершенствованный топливный модуль	44
2.5 Выводы к главе 2	54
3 Усовершенствование и доработка отдельных моделей кода БЕРКУТ-У поведения смешанного нитридного уран-плутониевого топлива	56

3.1	Межзёренный транспорт продуктов деления и их выход из топлива	56
3.2	Распухание топлива.....	60
3.3	Теплопроводность выгоревшего топлива	61
3.4	Выводы к главе 3	66
4	Моделирование экспериментов по облучению твэлов со смешанным нитридным уран-плутониевым топливом в быстрых реакторах	68
4.1	Характеристика экспериментальных твэлов и параметры их эксплуатации..	71
4.2	Параметры моделирования твэлов	72
4.3	Анализ результатов моделирования твэлов.....	74
4.4	Выводы к главе 4	80
5	Влияние различных характеристик смешанного нитридного уран-плутониевого топлива на его поведение под облучением.....	81
5.1	Влияние исходных параметров топлива	81
5.1.1	Влияние размера топливного зерна	81
5.1.2	Влияние содержания кислорода и углерода в топливе.....	88
5.2	Влияние температуры топлива	93
5.3	Влияние жидкометаллического подслоя на эксплуатацию твэла	96
5.4	Выводы к главе 5	100
	ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	101
	СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ И УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ	104
	СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	107

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы исследования

В соответствии с Энергетической стратегией России на период до 2035 г. [1] в стране должны быть спроектированы и построены инновационные атомные электрические станции (АЭС) с реакторами на быстрых нейтронах с жидкометаллическими теплоносителями, например, такими как БРЕСТ-ОД-300 и БР-1200 (свинцовый теплоноситель), а также БН-1200М (натриевый теплоноситель). Госкорпорацией «Росатом» реализуется проектное направление «Прорыв», нацеленное на создание и промышленную реализацию замкнутого ядерного топливного цикла на базе реакторов на быстрых нейтронах (быстрых реакторов) [2–4] с использованием тепловыделяющих элементов (ТВЭЛОВ) со смешанным нитридным уран-плутониевым (СНУП) топливом [5]. СНУП топливо рассматривается в качестве основного топливного материала для Опытно-демонстрационного энергокомплекса с быстрым реактором БРЕСТ-ОД-300, сооружаемым на базе Сибирского химического комбината в г. Северск¹.

Следует отметить, что с советских времен и по настоящее время Россия удерживает первенство по разработке и эксплуатации реакторных установок (РУ) с экспериментальными и энергетическими реакторами на быстрых нейтронах с натриевым теплоносителем. Единственные действующие ² (по данным на начало 2025 г.) в мире промышленные энергетические быстрые реакторы – БН-600 и БН-800, при этом основным топливом является урановое оксидное и смешанное оксидное уран-плутониевое (МОКС) топливо соответственно. За время их эксплуатации накоплено большое количество экспериментальных данных, предоставляющих базу для отработки теоретических подходов и валидации различных компьютерных расчетных кодов. Однако СНУП топливо недостаточно

¹ По данным на начало 2025 г. реактор БРЕСТ-ОД-300 в 2026–2027 гг. пройдет физический пуск, ввод в эксплуатацию с подачей электроэнергии в сеть запланирован в 2028 г.

² Новый китайский быстрый реактор CFR-600 находится в опытно-промышленной эксплуатации.

исследовано и испытано до высоких значений его выгорания³. Для экспериментальных исследований СНУП топлива до более высоких значений выгорания потребуется еще не один год. В связи с этим, на важное место выходят твэльные расчетные коды, моделирующие поведение твэлов под облучением. Подобные коды являются полезным инструментом прогнозирования поведения в том числе СНУП топлива при различных условиях эксплуатации реактора.

Обязательным требованием любой деятельности в области использования атомной энергии является обеспечение безопасности. Требования к обеспечению безопасности определяются федеральными нормами и правилами в области использования атомной энергии [6], международно признанными руководствами по безопасности [7]. В соответствии с этими документами безопасность эксплуатации АЭС должна быть обоснована путём проведения детерминистических и вероятностных анализов безопасности и сопровождаться оценками интервалов неопределенностей получаемых результатов. Особое внимание обращается к проектируемым РУ с быстрыми реакторами. Поэтому, в частности, необходимо предварительное обоснование (прогнозирование) работоспособности твэла со СНУП топливом при облучении в быстром реакторе, которое осуществляется посредством использования твэльных кодов.

Научно-техническая проблема, на решение которой направлена данная диссертационная работа, заключается в разработке соответствующего современным требованиям расчетного кода, предназначенного для моделирования поведения твэлов при облучении в быстрых реакторах с жидкометаллическим теплоносителем (натриевым или свинцовым) в режимах нормальной эксплуатации и нарушений нормальной эксплуатации, и позволяющего исследовать тепловые, механические, физико-химические процессы в твэле (в топливных таблетках, зазоре «таблетки–оболочка» и оболочке

³ По данным на начало 2025 г. СНУП топливо испытано до максимального выгорания ~ 9,9 % тяж. ат. (твэл ОУ-10, облученный в исследовательском быстром реакторе БОР-60).

твэла) под облучением. В частности процессы, протекающие в СНУП топливе под облучением: наработка и выход продуктов деления (ПД) из топлива и его распухание.

Примером такого расчетного инструмента является расчетный код БЕРКУТ-У. БЕРКУТ-У (Быстрый энЕргетический Реактор Код Улучшенный Топливный-Усовершенствованный) – это твэльный код, разрабатываемый с 2012 года в Институте проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук (ИБРАЭ РАН) для моделирования поведения твэлов с оксидным и нитридным топливом в реакторах на быстрых нейтронах с жидкометаллическим теплоносителем [8, 9]. Механистические модели топливного модуля MFPR/R кода БЕРКУТ-У основаны на современных представлениях о механизмах, управляющих основными физико-химическими процессами, протекающими в топливе при облучении, что существенно повышает предсказательную способность такого кода по сравнению с другими. Код БЕРКУТ-У продолжает совершенствоваться и валидироваться на данных послереакторных исследований экспериментальных твэлов, облученных в реакторах БОР-60 и БН-600.

Настоящая диссертационная работа направлена на усовершенствование в твэльном коде БЕРКУТ-У математических моделей поведения СНУП топлива под облучением, валидацию кода на экспериментальных данных, а также на расчетное исследование и анализ результатов моделирования поведения топлива под облучением. Конечной стратегической целью является обеспечение специалистов атомной отрасли аттестованным расчетным инструментом, позволяющим описывать поведение твэлов со СНУП топливом под облучением в быстрых реакторах, для восполнения пробелов из-за ограниченности экспериментальной базы или использования его в качестве твэльного модуля в интегральных расчетных кодах, предназначенных для анализа и обоснования безопасности АЭС.

Цель и задачи исследования

Целью диссертационной работы – усовершенствование твэльного кода БЕРКУТ-У в части моделей поведения СНУП топлива под облучением в быстром реакторе и его валидация на данных послереакторных исследований (ПРИ) экспериментальных твэлов со СНУП топливом.

Для достижения поставленной цели сформулированы и решены следующие задачи:

- анализ и обобщение научных работ и результатов исследований других авторов по теме диссертационной работы, сбор экспериментальных данных и информации о проводимых расчетных исследованиях (моделировании) СНУП топлива;
- разработка и внедрение в твэльный код БЕРКУТ-У модели учета влияния твердых фазовых включений (преципитатов) на теплопроводность СНУП топлива в процессе его выгорания (расчет эффективной теплопроводности топлива);
- разработка и внедрение в твэльный код БЕРКУТ-У моделей, учитывающих влияние открытой и закрытой пористости СНУП топлива на его набухание и выход газообразных продуктов деления (ГПД) и гелия;
- разработка расчетных моделей экспериментальных твэлов со СНУП топливом с газовым и жидкометаллическим подслоем;
- разработка матрицы валидации и проведение валидации твэльного кода БЕРКУТ-У на данных ПРИ экспериментальных твэлов со СНУП топливом, облученных в быстрых реакторах БОР-60 и БН-600;
- выполнение детерминистских и многовариантных расчётов по моделированию поведения твэлов со СНУП топливом под облучением в быстром

реакторе с использованием разработанного твэльного кода БЕРКУТ-У и анализ полученных результатов;

– анализ влияния технологических параметров СНУП топлива, а также эксплуатационной температуры топлива на его поведение в процессе выгорания в условиях облучения в быстром реакторе.

Научная новизна работы

Впервые в твэльный код БЕРКУТ-У внедрена модель учета влияния твердых фазовых включений (преципитатов) на теплопроводность СНУП топлива в процессе его выгорания.

Впервые на основе сравнительного анализа данных исследований экспериментальных твэлов со СНУП топливом и результатов расчетов кода БЕРКУТ-У получены эмпирические зависимости параметров моделей, учитывающие влияние открытой и закрытой пористости топлива на его набухание, выход ГПД и гелия от исходных параметров топливных таблеток.

Впервые выполнена валидация твэльного кода БЕРКУТ-У на данных ПРИ твэлов и определены значения погрешностей расчёта набухания СНУП топлива и выхода газов из него.

Впервые с помощью твэльного кода БЕРКУТ-У проанализированы и определены параметры СНУП топлива, существенно влияющие на его поведение в процессе выгорания в условиях облучения в быстрых реакторах.

Практическая значимость результатов работ

Усовершенствованные модели поведения СНУП топлива были включены в твэльный код БЕРКУТ-У, который используется для обоснования возможности продления облучения экспериментальных твэлов со СНУП топливом в реакторе

БН-600, что позволило получить результаты экспериментальных исследований СНУП топлива до 9 % тяж.ат.

На базе полученных автором работы данных твэльный код был аттестован в 2021 г. (аттестационный паспорт регистрационный №533 от 13.11.2021 г.) в том числе для моделирования твэлов со СНУП топливом до выгорания 12,1% тяж.ат., что позволило аттестовать интегральный код ЕВКЛИД/V2 с кодом БЕРКУТ-У в качестве твэльного модуля. Код ЕВКЛИД/V2 используется для обоснования безопасности АЭС с РУ БРЕСТ-ОД-300 и БН-1200М при тяжелых авариях.

Разработанные расчетные модели экспериментальных твэлов использованы для проведения валидации кода БЕРКУТ-У, а также применимы для расчетов кодом БЕРКУТ-У в качестве твэльного модуля в составе интегрального кода ЕВКЛИД/V2.

Результаты расчетов кодом БЕРКУТ-У основных параметров СНУП топлива использовались для интерпретации результатов ПРИ и формирования предложений по оптимизации параметров СНУП топлива.

Результаты, полученные в ходе данного исследования, позволили обеспечить организации атомной отрасли современным аттестованным твэльным кодом БЕРКУТ-У, обеспечивающим расчётное обоснование (прогнозирование) работоспособности твэлов действующих и проектируемых РУ с быстрыми реакторами с натриевым или свинцовым теплоносителями.

Основные положения, выносимые на защиту

Модель, учитывающая влияние твердых фазовых включений (преципитатов) на теплопроводность выгоревшего СНУП топлива.

Модели, учитывающие влияние открытой и закрытой пористости СНУП топлива на его распухание, выход ГПД и гелия.

Расчетные модели экспериментальных твэлов со СНУП топливом с газовым и жидкометаллическим подслоем, необходимые для расчетов с помощью кода БЕРКУТ-У.

Результаты валидации кода БЕРКУТ-У на данных ПРИ экспериментальных твэлов со СНУП топливом, облученных в быстрых реакторах БОР-60 и БН-600.

Результаты моделирования и анализа влияния параметров СНУП топлива (размер топливного зерна), а также эксплуатационной температуры на его поведение под облучением.

Достоверность и обоснованность результатов работы

Достоверность и обоснованность результатов работы подтверждается:

- сравнением результатов расчетов с данными ПРИ экспериментальных твэлов со СНУП топливом, облученных в быстрых реакторах;
- применением научно-обоснованных расчётных методик и физических моделей. Расчетные исследования проведены с помощью аттестованного в Ростехнадзоре твэльного кода БЕРКУТ-У;
- публикацией результатов в рецензируемых научных журналах и представлением на ведущих российских и международных конференциях и семинарах.

Полученные результаты отображены в отчётах о научно-исследовательских работах, выпущенных в рамках проектного направления «Прорыв» и прошедших экспертизу ведущими специалистами отечественных предприятий атомной отрасли.

Личный вклад автора

Постановка задач исследования, поиск в открытых публикациях, анализ и обобщение научных работ и результатов исследований других авторов по теме диссертационной работы.

Разработка эмпирических зависимостей параметров моделей распухания СНУП топлива, выхода ГПД и гелия от исходных параметров топливных таблеток.

Подготовка расчетных моделей твэлов со СНУП топливом с газовым и жидкометаллическим подслоем для расчетов с помощью твэльного кода БЕРКУТ-У.

Разработка и программная реализация в твэльном коде БЕРКУТ-У модели расчета эффективной теплопроводности выгоревшего СНУП топлива.

Разработка матрицы валидации для твэльного кода БЕРКУТ-У и его валидация на данных ПРИ экспериментальных твэлов со СНУП топливом, облученных в быстрых реакторах БОР-60 и БН-600.

Проведение с помощью твэльного кода БЕРКУТ-У детерминистских расчетов и анализ влияния основных параметров СНУП топлива, а также эксплуатационной температуры на его поведение под облучением.

Апробация работы

Результаты диссертации докладывались и обсуждались на следующих российских и международных конференциях и семинарах:

- XX, XXII научные школы молодых ученых ИБРАЭ РАН, г. Москва, Россия, 2019 г., 2023 г.;
- Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2019», г. Москва, Россия, 2019 г.;

- 63-я Всероссийская научная конференция МФТИ, г. Москва, Россия, 2020 г.;
- Международная конференция молодых специалистов, ученых и аспирантов по физике ядерных реакторов «Волга-2020» (ICNPR-2020), г. Москва, Россия, 2020 г.;
- International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles: Sustainable Clean Energy for the Future (FR-22), Vienna, Austria, 2022;
- Молодежная научно-практическая конференция АО «ВНИИНМ» «Материалы и технологии в атомной энергетике», г. Москва, Россия, 2022 г.;
- XII Международная конференция по реакторному материаловедению, посвященная 60-летию материаловедческого комплекса АО «ГНЦ НИИАР», г. Казань, Россия, 2024 г.;
- Workshop on Fuel Performance Assessment and Behaviour for Liquid Metal Cooled Fast Reactors, Vienna, Austria, 2025.

Публикации

По теме диссертации опубликовано 10 научных работ, из них 4 статьи в журналах из перечня, утвержденного ВАК Минобрнауки России, или, входящих в международные реферативные базы данных и системы цитирования Scopus и Web of Science, 6 – в материалах российских и международных конференций и семинаров.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, 5 глав, заключения и списка литературы из 113 библиографических ссылок. Общий объем работы составляет 120 страниц, включая 10 таблиц и 40 рисунков.

1 Современное состояние исследований смешанного нитридного уран-плутониевого топлива под облучением

Объектом исследования в диссертационной работе является смешанное нитридное уран-плутониевое (СНУП) топливо с примесями углерода и кислорода, и ПД, образовавшиеся в процессе облучения в быстром реакторе. Предметом исследования является поведение СНУП топлива под облучением в быстром реакторе, в частности, распухание топлива, наработка и выход ГПД из него.

В данной главе в соответствии с объектом и предметом исследования в рамках диссертационной работы проведён анализ современных научных публикаций, экспериментальных данных и результатов компьютерного моделирования, посвящённых поведению ядерного топлива при облучении в быстрых реакторах. Рассматриваются ключевые аспекты, связанные с процессами и явлениями, протекающими в топливе при облучении, а также с параметрами топлива и характеристиками облучения, влияющими на его поведение.

1.1 Общие сведения о нитридном топливе

Не смотря на то, что диоксид урана, как топливо, широко распространен и применяется в ядерной промышленности для различных типов ядерных реакторов (например, реакторов с водой под давлением, реакторов с кипящей водой, быстрых реакторов), ведутся работы по использованию других видов топлива, а также по поиску и исследованию перспективных материалов. Например, МОКС (смешанное оксидное уран-плутониевое) топливо представляет интерес, поскольку оно позволяет экономить природный уран и повторно использовать плутоний. Данный тип топлива в ограниченных масштабах, как в России, так и за рубежом, используется в тепловых реакторах. Одна из причин выбора такого типа топлива заключается в повторном использовании ценного делящегося материала – плутония.

С проектированием и вводом в эксплуатацию реакторных установок с быстрыми реакторами [11, 12] открываются возможности полномасштабного использования плутония в таких реакторах. Так в качестве топлива для быстрых реакторов с содержанием плутония в различное время рассматривались и разрабатывались [13, 14]:

- металлическое топливо $(U,Pu)Zr$ – в США, Великобритании, России, Индии и Южной Корее;
- смешанное оксидное топливо $(U,Pu)O_2$ (МОКС) – в России, Франции, Японии, Великобритании, США, Германии, Индии, в Китае;
- смешанное карбидное топливо $(U,Pu)C$ – в России, Франции, Индии, США;
- смешанное нитридное топливо $(U,Pu)N$ (ЧНУП) – в России, США, Франции, Японии.

Для перехода на новый тип топлива необходимо иметь достаточно подробные данные, характеризующие его физико-химические свойства и совместимость с другими материалами РУ. В таблице 1.1 приведены физические свойства урановых и плутониевых видов топлива [13, 14]. Явное преимущество металлических видов заключается в их высокой плотности и теплопроводности, но они существенно проигрывают по температуре плавления. На рисунке 1.1 показаны характеристики теплопроводности для различных видов топлива стехиометрического состава. Здесь преимущество металлов очевидно. Однако плотное уран-плутониевое металлическое топливо не позволяет достигать достаточно глубокого выгорания (из-за высокого газового распухания) и поэтому непригодно для использования в быстрых реакторах.

Таблица 1.1 – Свойства урановых и плутониевых видов топлива [13, 14]

Тип топлива		Температура плавления, К	Теоретическая плотность, г/см ³	Коэффициент теплопроводности, Вт/(м·К)	
				1000К	2000К
Металлическое	U	1408	19,0	28,5	–
	Pu	913	19,9	–	–
	(U _{0,8} Pu _{0,2})Zr	1343	15,6	~25,0	–
Оксидное	UO ₂	3238	10,97	3,7	3,0
	PuO ₂	2670	11,46	3,1	2,0
	(U _{0,8} Pu _{0,2})O ₂	3023	11,08	2,6	2,4
Нитридное	UN	2870	14,3	21,0	–
	PuN	2770	14,2	–	–
	(U _{0,8} Pu _{0,2})N	3070	14,32	15,8	20,1

Для проектирования быстрых реакторов важную роль играют также нейтронно-физические характеристики топлива и характеристики безопасности. При этом при расчетах особое внимание уделяется нейтронному спектру, поскольку от него зависит коэффициент воспроизводства: чем жестче спектр, тем выше коэффициент воспроизводства. Самый жесткий спектр образуется в топливе, не содержащем замедлителя, каким является, например, плотное металлическое топливо.

Хотя металлическое топливо имеет лучшую теплопроводность и потенциал для быстрых реакторов, его существенные недостатки в поведении под

облучением делают оксидное или нитридное топливо безусловно предпочтительным выбором для современных тепловых реакторов и широко применяемым в быстрых.

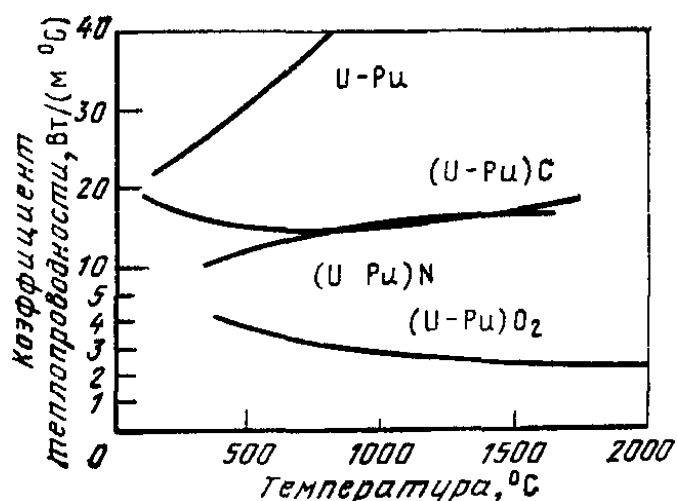


Рисунок 1.1 – Зависимость коэффициента теплопроводности различных видов топлива от температуры [14]

В настоящее время отечественный реактор БН-800 эксплуатируется с полной загрузкой МОКС топливом. В последнее время в России проводятся исследования СНУП топлива, которое, благодаря сочетанию благоприятных физико-химических свойств, высокой плотности, теплопроводности и температуры плавления, а также возможности работы при высоких степенях выгорания [5, 13], рассматривается в качестве основного топливного материала для быстрого реактора БРЕСТ-ОД-300 [3] и, в перспективе, для проектируемого быстрого реактора БР-1200.

Основными компонентами СНУП являются нитриды урана (UN) и плутония (PuN), образующие твёрдый раствор с кристаллической решёткой типа NaCl. В зависимости от состава, возможны также двухфазные состояния, включающие отдельные области UN и PuN, особенно при значительных различиях в

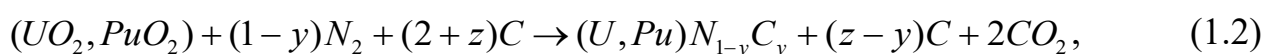
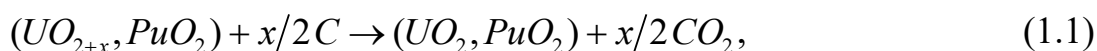
концентрациях компонентов. Такая структура обеспечивает хорошую термическую стабильность и высокую плотность материала, что положительно влияет на эффективность использования топлива.

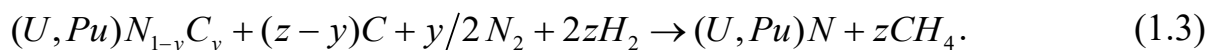
Однако, стоит заметить, что для более эффективного использования плотного топлива в быстрых реакторах с жидкометаллическим теплоносителем целесообразно применение жидкометаллического подслоя в ТВЭЛ (смотреть п.1.5.2). Относительным недостатком СНУП топлива является поглощение нейтронов в реакции $^{14}\text{N}(n, p)^{14}\text{C}$, что несколько ухудшает нейтронный баланс и способствует образованию углерода ^{14}C с большим периодом полураспада [13].

1.2 Технология производства смешанного нитридного топлива

Производство высококачественного СНУП топлива представляет собой сложную технологическую задачу, связанную с необходимостью получения однородного материала с заданным составом, минимальным содержанием примесей и контролируемой микроструктурой.

В настоящее время основным методом промышленного получения смешанных мононитридов урана и плутония является реакция карботермического синтеза, состоящая в восстановлении диоксида урана и плутония углеродом в атмосфере азота при температурах 1750–2100 К, которую можно представить тремя основными уравнениями [15, 16]:





При использовании указанной технологии неизбежным является наличие в нитридном топливе примесей кислорода и углерода, обычно, на уровне $\sim 0,1-0,2$ % по массе (масс. %). Наличие этих примесей существенно сказывается на эксплуатационных свойствах СНУП топлива, влияя как на его распухание в процессе облучения, так и поведение ПД, их распределение по связанным состояниям и, в конечном счёте, на выход из топлива.

В зависимости от температуры и концентрации кислород может быть растворён в кристаллической матрице или выделяться в виде отдельной оксидной фазы [17]. Растворимость кислорода в UN мала и составляет ~ 3 ат.% при $T = 1200$ К. Карбиды урана и плутония растворимы в мононитриде и образуют твёрдый раствор типа $(U, Pu)N_{1-x}C_x$ [18]. Влияние примесей на итоговое распухание нитридного топлива будет анализироваться в п. 5.1.2.

1.3 Подходы к моделированию поведения смешанного нитридного топлива

Для математического моделирования комплексного поведения ТВЭЛОВ ядерных реакторов во всех режимах работы с целью обеспечения их безопасности, надежности и эффективности используют, так называемые, ТВЭЛЬНЫЕ КОДЫ.

Практика использования ТВЭЛЬНЫХ КОДОВ в мире насчитывает более 50 лет. Первые работы были связаны с разработкой и использованием подобных кодов для реакторов на тепловых нейтронах с водяным теплоносителем. В последние годы работа над ТВЭЛЬНЫМИ КОДАМИ связана с разработкой проектов быстрых реакторов с натриевым, свинцовым или свинцово-висмутовым теплоносителями в различных странах: БРЕСТ-ОД-300, БР-1200, БН-1200М (Россия), CFR600, CLEAR (Китай), MYRRHA (Бельгия) ASTRID (Франция) и других [11, 12].

В настоящее время имеется ряд отечественных твэльных кодов, разработанных в ИБРАЭ РАН, АО «ВНИИНМ», АО «ГНЦ РФ-ФЭИ» и НИЦ «Курчатовский институт» [19, 20] и предназначенных для моделирования поведения твэлов в условиях облучения быстрых реакторов: БЕРКУТ (БЕРКУТ-У) [8–10], КОРАТ (КОРАТ-Конструктор) [21], РТОП [22], ДРАКОН (ДРАКОН-М), КОНДОР, PINCOD [23], TEGAS [24] и другие.

В настоящее время для моделирования поведения и обоснования работоспособности твэлов со СНУП топливом в быстрых реакторах используются аттестованные твэльные коды БЕРКУТ-У, КОРАТ-Конструктор и ДРАКОН-М. Коды имеют схожие принципы и подходы моделирования твэлов быстрых реакторов.

Код БЕРКУТ-У разрабатывается в ИБРАЭ РАН с 2012 года [8–10]. Особенность кода БЕРКУТ-У заключается в топливном модуле MFPR/R, в котором самосогласованным образом моделируются основные физико-химические процессы, происходящие в топливе под облучением: наработка и радиоактивные взаимопревращения ПД, термохимические процессы, включая распределение ПД по молекулярным и фазовым состояниям, изменение микроструктуры топлива, внутри- и межзеренный перенос ПД, и их выход в свободный объем твэла в зазор «таблетки–оболочка».

Код ДРАКОН-М разрабатывается в АО «ГНЦ РФ-ФЭИ» [19]. Математическая модель, реализованная в коде ДРАКОН-М, является развитием кода КОНДОР для возможности рассмотрения отдельного и совместного деформирования топливного сердечника и оболочки в едином расчетном процессе. Данный код позволяет оперативно проводить оценку НДС твэлов быстрых реакторов, как с оксидным, так и нитридным топливом.

Код КОРАТ-Конструктор разрабатывается в АО «ВНИИНМ» и НИЦ «Курчатовский институт». Код разработан на основе кода КОРАТ, созданного в

АО «ВНИИНМ» [21], и механического модуля РТОП-М [22]. Код является средством проведения инженерных расчётов. Расчёт основан на самосогласованном решении теплофизической и механической задач, описывающих распространение тепла, раздельное и контактное деформирование топливного столба и оболочки с учётом их ползучести и распухания.

Из наиболее известных зарубежных разработок следует отметить коды GERMINAL (CEA/DEC Франция) [25, 26], BISON (INL, США) [27, 28] и TRANSURANUS (ITU, Германия) [29].

Твэльный код GERMINAL разрабатывается в CEA/DEC (Франция) с 1980 г. [25, 26]. Он используется для предварительных оценок термомеханического поведения твэлов с оксидным топливом для быстрых реакторов с натриевым теплоносителем в штатных и аварийных режимах. Код обеспечивает моделирование разнообразных процессов в топливе (растрескивание, эволюция пористости, изменение диаметра внутренней и внешней поверхностей таблетки, перераспределение плутония и кислорода, распухание и т.д.), наработки ГПД и выхода из топлива, деформирование оболочки (тепловое расширение, радиационная ползучесть и распухание), изменения величины зазора «топливо–оболочка», МВТО, переноса тепла в зазоре, плавления топлива и аксиального массопереноса. Эволюция размеров центрального отверстия описывается в рамках модели миграции пористости в радиальном направлении (газовый транспорт UO , UO_2 , UO_3 , PuO , PuO_2) и залечивания микротрещин в градиенте температуры. Вместе с тем, скорость выхода ГПД описывается в рамках простой корреляционной зависимости от выгорания и температуры.

Твэльный конечно-элементный код BISON разрабатывается в INL (США) [27, 28]. Код предназначен для моделирования твэлов с разными видами топлива, включая твэлы легководных реакторов, шаровые микротвэлы, металлическое топливо и другие. В коде самосогласованно решаются уравнения термомеханики

и диффузии ПД как для аксиальной (2D), так и для 3D-геометрии. Модели топлива описывают зависимость его свойств от температуры и выгорания, газовое распухание, усадку топлива, тепловую и радиационную деформацию, растрескивание, наработку ГПД и их выход. В код имплементированы модели мгновенной пластической деформации, термической и радиационной ползучести. Также в код включены модели теплопередачи в зазоре «таблетки–оболочка», MBTO и эволюции давления в зазоре «таблетки–оболочка».

Твэльный код TRANSURANUS разрабатывается в ITU (Германия) [29] для описания состояния твэлов в ядерных реакторах как на тепловых, так и быстрых нейтронах. Большинство важных функций кода TRANSURANUS были разработаны в 1973–1984 годах в Техническом университете Дармштадта и параллельно в 1978–1982 годах в Исследовательском центре Карлсруэ, код под названием URANUS. В коде реализована модульная структура, что позволяет легко включать в его состав новые физические модели. Помимо возможности моделировать поведение твэлов разной конструкции код позволяет моделировать поведение твэлов в разных режимах эксплуатации, включая аварийные. Модели кода реализованы в, так называемом, «1,5D-подходе», однако, для анализа локальных эффектов допускается использование 2D и 3D моделей. Изначально код включал в тепловой и термомеханический модули, а также набор моделей, описывающих поведение топлива: выход газа, усадка и распухание, перераспределение плутония, миграция пор и радиальное распределение пористости, формирование и схлопывание центральной пористости. Изменения геометрии твэла, такие как усадка, распухание, растрескивание топлива и другие, определяются возникшими напряжениями.

Следует отметить, что во всех зарубежных расчётных кодах отсутствуют модели поведения СНУП топлива, что связано с ориентацией стран на использование в быстрых реакторах МОКС или металлического топлива. Это

значит, что применительно к отечественным проектам РУ их невозможно использовать. Кроме того, зарубежные коды недоступны российским специалистам для адаптации и модификации под особенности отечественных проектов и валидированы на базе экспериментальных данных, полученных, в основном, на зарубежных экспериментальных РУ.

Такие доводы свидетельствуют о необходимости в разработке отечественных ТВЭЛных кодов, валидированных на экспериментальных данных, полученных на отечественных быстрых реакторах.

1.4 Влияние продуктов деления на теплопроводность смешанного нитридного топлива

Гетерогенные системы встречаются в жизни не менее часто, чем системы гомогенные к которым относится и СНУП топливо. Исходное СНУП топливо, помимо нитридов урана и плутония, включает примеси, значительная часть которых – это углерод и кислород, а в процессе выгорания в топливе образуются ПД, и могут формироваться вторичные фазы. Возникает вопрос о вычислении (моделировании) свойств такого материала, в частности, его теплопроводности.

Макроскопическая неоднородная система, состоящая из однородных частей (компонентов), разграниченных поверхностями раздела, называется гетерогенной системой (или смесью) [30]. Все многообразие структур смесей можно разбить на несколько групп, представленных на рисунке 1.2.

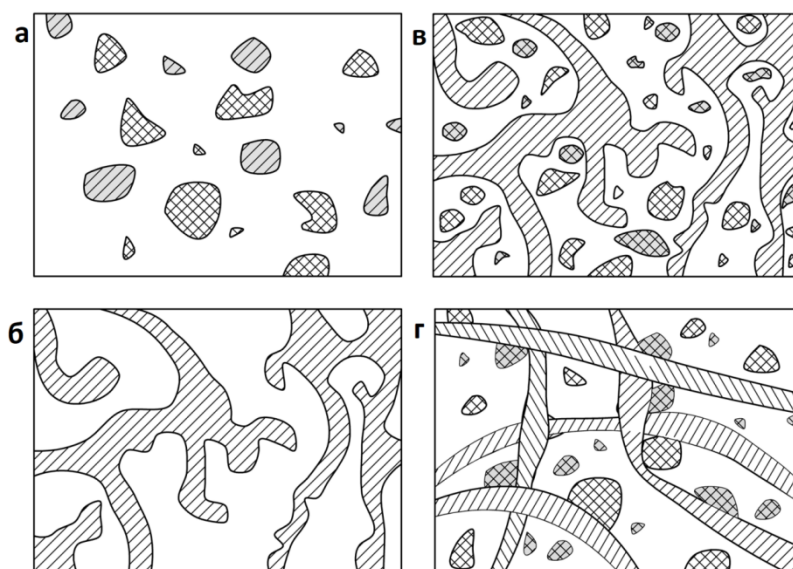


Рисунок 1.2 – гетерогенные системы с различной структурой: а – структура с включениями; б – структура с взаимопроникающими компонентами; в, г – комбинированные структуры с взаимопроникающими компонентами и включениями.

Понятие «обобщенная проводимость» (теория обобщенной проводимости) объединяет ряд структурно-чувствительных свойств физико-механических смесей, т.е. свойств, величина которых для смеси в целом зависит не только от концентраций компонентов в смеси (таких, например, как плотность или удельный объем), но и от структуры смеси и ориентации границ раздела компонентов в силовом поле. Для смесей и композиционных материалов такими свойствами являются диэлектрическая и магнитная проницаемости, теплопроводность, модули сдвига, упругость и т.д. [31].

В обобщенной теории проводимости [32] рассматриваются системы с изолированными включениями (рисунок 1.3). Двухкомпонентная система состоит из связующего материала 1, в котором случайным образом распределены изолированные включения 2 одного или нескольких компонентов, не контактирующих друг с другом; разнообразие форм включений не учитывается.

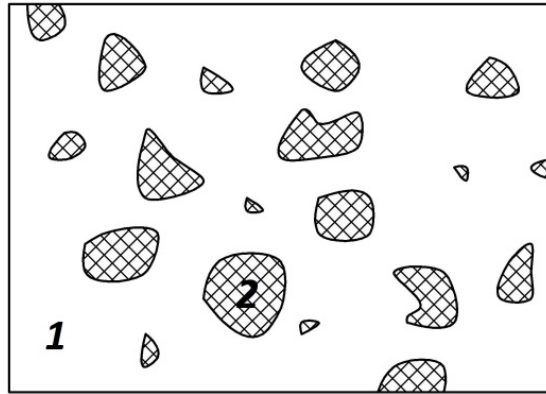


Рисунок 1.3 – Гетерогенная двухкомпонентная система:
1 – связующий материал; 2 – изолированные включения.

Эффективная теплопроводность гетерогенной двухкомпонентной системы может быть представлена в виде [32]:

$$\lambda_{эфф} = \lambda_m \cdot \left(1 - V_1 \cdot \left(\frac{1}{1 - \lambda_1 / \lambda_m} - \frac{1 - V_1}{3} \right)^{-1} \right), \quad (1.4)$$

где λ_m и λ_1 – теплопроводности однородной матрицы и включений одного типа соответственно, а V_1 – объемная доля включений одного типа.

Для трехкомпонентной системы (рисунок 1.4), состоящей из связующего материала и изолированных включений двух типов 1 и 2, используется следующее выражение [30]:

$$\lambda_{эфф} = \lambda_m \cdot \left\{ \frac{V_1}{1 - V_m} \left[1 - (1 - V_m) \cdot \left(\frac{1}{1 - \lambda_1 / \lambda_m} - \frac{V_m}{3} \right)^{-1} \right] + \frac{V_2}{1 - V_m} \left[1 - (1 - V_m) \cdot \left(\frac{1}{1 - \lambda_2 / \lambda_m} - \frac{V_m}{3} \right)^{-1} \right] \right\}, \quad (1.5)$$

где λ_m , λ_1 и λ_2 – коэффициенты теплопроводности однородной матрицы и включений типа 1 и 2, соответственно, а V_m , V_1 и V_2 – объемная доля однородной матрицы и включений типа 1 и 2.

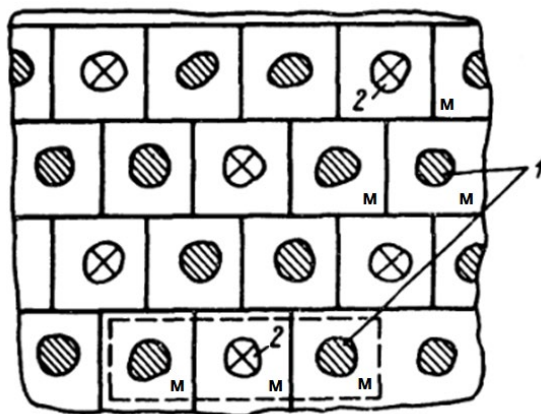


Рисунок 1.4 – Схематическое изображение упорядоченной трехкомпонентной смеси: м – однородная матрица; 1 – включения типа 1; 2 – включения типа 2

Помимо теории Оделевского и Дульнева [32, 30] существует ряд других подходов: теоретические работы Максвелла-Эйкена, Гамильтона и других авторов [33–38].

1.5 Реакторные испытания нитридного топлива в быстрых реакторах

Зарубежный опыт исследований СНУП топлива ограничен ~200 твэлами, облученными до максимального выгорания 18 % тяж. ат. при максимальной линейной мощности 45–130 кВт/м [39, 40]. В нашей стране до 2000-х годов получены результаты облучения ~1300 твэлов с нитридным урановым топливом в реакторе БР-10 [41,]. Тем не менее, полученные в то время результаты исследований не могли в полной мере служить для обоснования работоспособности твэлов со СНУП топливом. К тому же необходима была информация о поведении такого топлива в прототипах твэлов реакторов БРЕСТ-

ОД-300, БР-1200 и БН-1200М. Поэтому в рамках проекта «Прорыв» была разработана Комплексная программа расчетно-экспериментального обоснования (КПРЭО) использования СНУП топлива в этих реакторах. Согласно программе и по сей день проводятся реакторные испытания твэлов в промышленном реакторе БН-600 и исследовательских реакторах МИР и БОР-60 [42–44]. Достигнуты максимальное выгорание СНУП топлива ≥ 9 % тяж.ат. и повреждающая доза в материале оболочки твэла ~ 112 сна [44].

1.5.1 Твэлы с газовым подслоем

Отечественный опыт по реакторному облучению нитридного топлива в твэлах с газовым (гелиевым) подслоем включает сотни твэлов со СНУП топливом, облученных в реакторах БОР-60 и БН-600.

В 2000–2005 гг. в реакторе БОР-60 были облучены твэлы со СНУП топливом с содержанием 45 и 60 % Pu, изготовленные в АО «ВНИИНМ», в рамках совместного с КАЭ (Франция) эксперимента БОРА-БОРА [45, 46]. Максимальное достигнутое выгорание в этом эксперименте – 12,1 % тяж. ат.

С 2012 г. и по сей день продолжают испытания облучательных устройств с твэлами прототипов реакторов БРЕСТ-ОД-300, БР-1200 и БН-1200М в реакторе БОР-60. Особенность этих облучательных устройств (ОУ) заключается в том, что на любом этапе облучения, при перегрузке реактора, из них можно извлечь несколько твэлов и вернуть устройство обратно в реактор для продолжения испытаний. Также с 2013 г. проводятся испытания твэлов экспериментальный ТВС в промышленном быстром реакторе БН-600. Загружаются как комбинированные ЭТВС (4 твэла со СНУП топливом, остальные с оксидным), так и с полной загрузкой нитридных твэлов. На начало 2025 г. в этих экспериментах достигнуто максимальное выгорание 9,9 % тяж. ат. (твэл ОУ-10 в реакторе БОР-60).

Ниже представлено описание экспериментальных данных из опубликованных (находящихся в открытом доступе) источников с исходными данными, достаточными для разработки расчетных моделей для проведения моделирования твэльным кодом: два типа экспериментальных ТВС: комбинированная сборка КЭТВС №1 и №7 содержащие твэлы типа БН-600 и сборка ЭТВС №5 — твэлы типа БРЕСТ-ОД-300.

Конструкции, геометрические параметры твэлов и условия облучения представлены в работах [47–49] и приведены ниже. Отличительными особенностями твэлов рассматриваемых ЭТВС являются их геометрические параметры и соответствующие размеры топливных таблеток.

Твэлы со СНУП топливом, представленные сборками КЭТВС-1, КЭТВС-7 и ЭТВС-5, характеризуются следующими параметрами [47–49]:

Диаметр оболочки:

- Для КЭТВС-1 и КЭТВС-7: наружный – 6,9 мм, внутренний – 6,1 мм;
- Для ЭТВС-5: наружный – 9,7 мм, внутренний – 8,7 мм.

Диаметр топливной таблетки:

- КЭТВС-1: 5,8 мм с допуском -0,1 мм;
- КЭТВС-7: 5,9 мм с допуском -0,1 мм;
- ЭТВС-5: 8,5 мм с допуском -0,1 мм.

Материал оболочки:

- КЭТВС-1 и КЭТВС-7: аустенитная сталь ЧС68-ИД х.д.;
- ЭТВС-5: ферритно-мартенситная сталь ЭП823-Ш.

Условия облучения твэлов со СНУП топливом для сборок КЭТВС-1, КЭТВС-7 и ЭТВС-5 включают следующие параметры [47–49]:

Число микрокампаний:

- КЭТВС-1: 3;
- КЭТВС-7: 4;
- ЭТВС-5: 4.

Максимальная линейная мощность, кВт/м:

- КЭТВС-1: 38,3;
- КЭТВС-7: 38,3;
- ЭТВС-5: 40,0.

Максимальное выгорание, % тяж.ат.:

- КЭТВС-1: 5,5;
- КЭТВС-7: 7,5;
- ЭТВС-5: 3,8.

Максимальная доза, сна:

- КЭТВС-1: 55,0;
- КЭТВС-7: 74,0;
- ЭТВС-5: 48,0.

Максимальная температура оболочки твэла, °С:

- КЭТВС-1: 676,0;
- КЭТВС-7: 671,0;
- ЭТВС-5: 642,0.

Далее представлены опубликованные (находящихся в открытом доступе) экспериментальные данные по количеству газов под оболочкой ТВЭЛА и набуханию топлива.

Измерение количества газа, а также свободного объёма (т.е. объёма свободного пространства под оболочкой) в ТВЭЛАх выполнялось на установке лазерного прокола. Прокол оболочки ТВЭЛА осуществлялся сфокусированным лучом лазера, который через специальную систему светопередачи подавался на оболочку ТВЭЛА, проплавлял её, а содержащийся в ТВЭЛЕ газ выходил в герметизированную измерительную систему. Анализ состава газовой фазы под оболочкой проводился масс-спектрометрическим методом. Полученные результаты для КЭТВС-1, -7 и ЭТВС-5 представлены в таблицах 1.2 [47], 1.3 [48] и 1.4 [48] соответственно.

Таблица 1.2 – Результаты определения количества и состава внутритвэльного газа КЭТВС-1 [47]

№ ТВЭЛА	Свободный объем, см ³	Объем газа при н.у., см ³	Состав газовой фазы, объем газа при н.у., см ³		
			гелий	криптон	ксенон
5	28,7	88,4	48,02	3,39	36,56
64	25,9	116,8	43,32	5,14	67,92
99	26,2	107,1	49,98	4,61	51,91
123	27,4	96,4	50,27	3,46	42,15

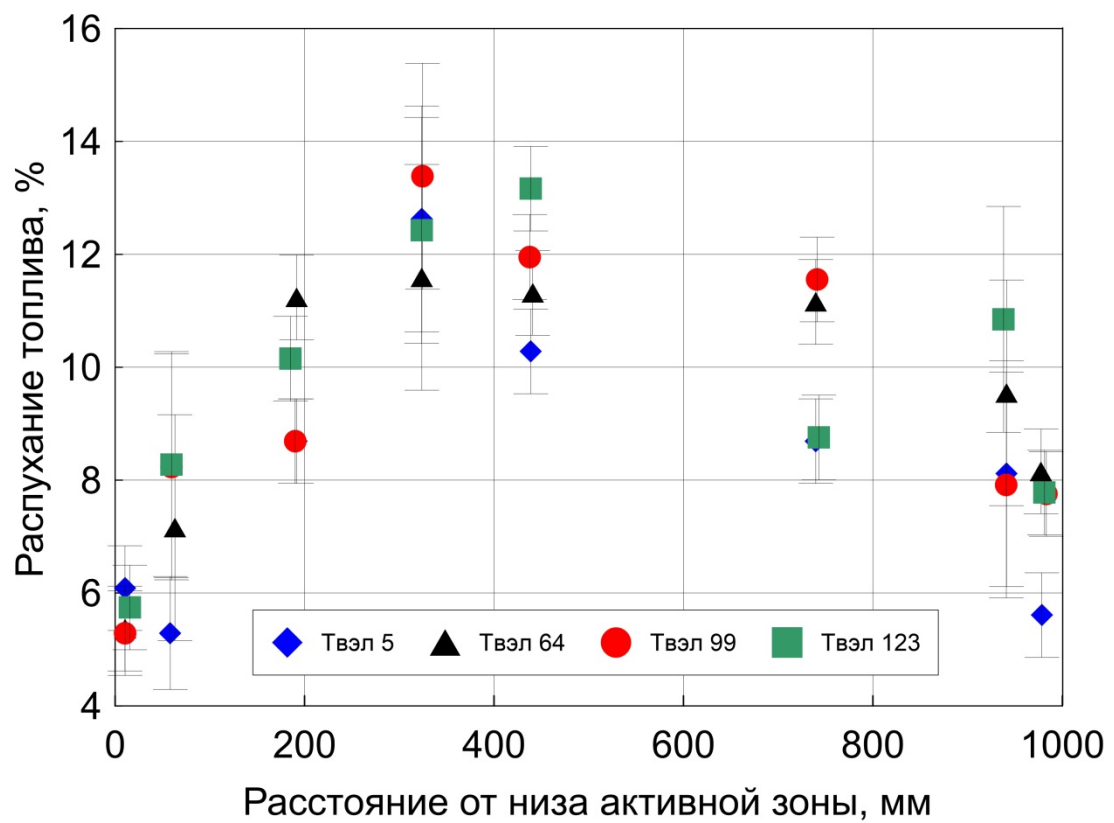
Таблица 1.3 – Результаты определения количества и состава внутритвального газа КЭТВС-7 [48]

№ твэла	Свободный объем, см ³	Объем газа при н.у., см ³	Состав газовой фазы, объем газа при н.у., см ³		
			гелий	криптон	ксенон
5	25,7	126,7	47,08	5,88	73,23
64	27,9	128,1	48,14	5,82	73,53
99	25,6	116,6	45,09	5,15	65,54
123	25,3	121,1	44,06	5,63	70,73

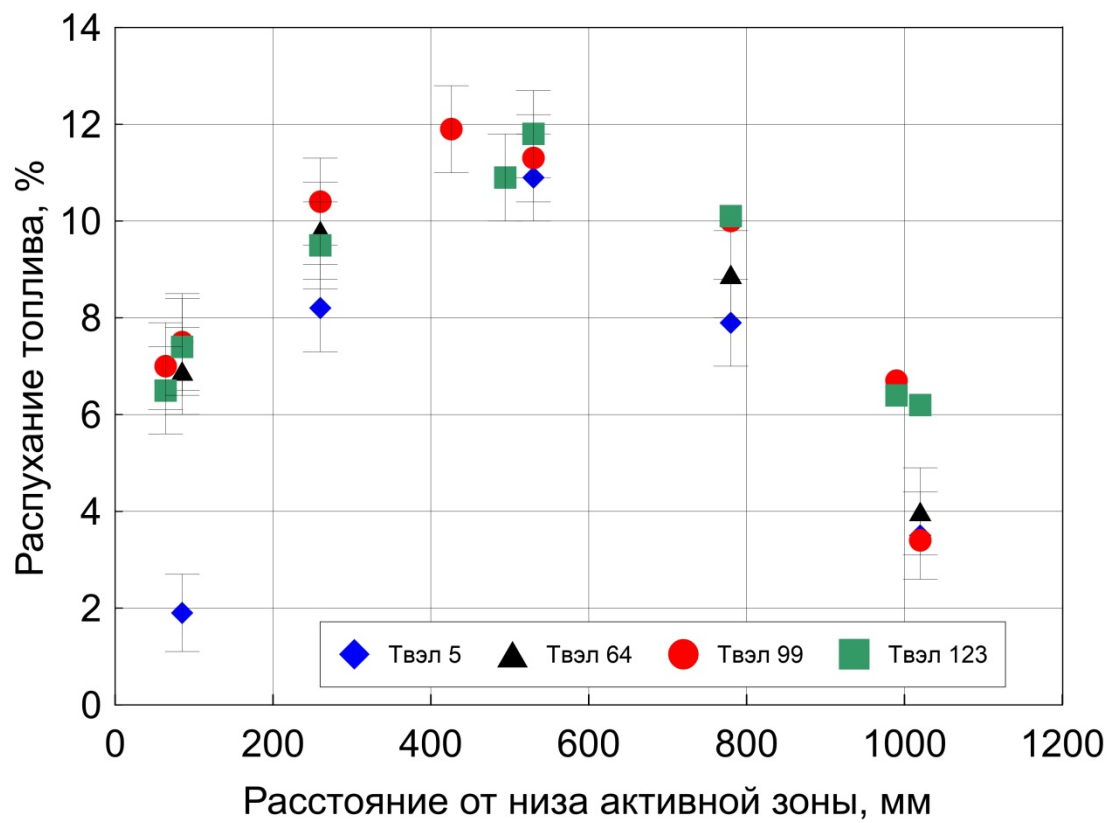
Таблица 1.4 – Результаты определения количества и состава внутритвального газа ЭТВС-5 [48]

№ твэла	Свободный объем, см ³	Объем газа при н.у., см ³	Состав газовой фазы, объем газа при н.у., см ³		
			гелий	криптон	ксенон
32	63,0	75,2	62,4	0,9	11,6
37	63,0	82,5	62,7	1,4	18,1
42	60,3	91,8	64,2	2,0	25,2
51	62,3	79,0	62,6	1,2	15,0

На рисунке 1.5 представлены экспериментальные данные по распуханию топлива для твэлов КЭТВС-1, КЭТВС-7 и ЭТВС-5.



а)



б)

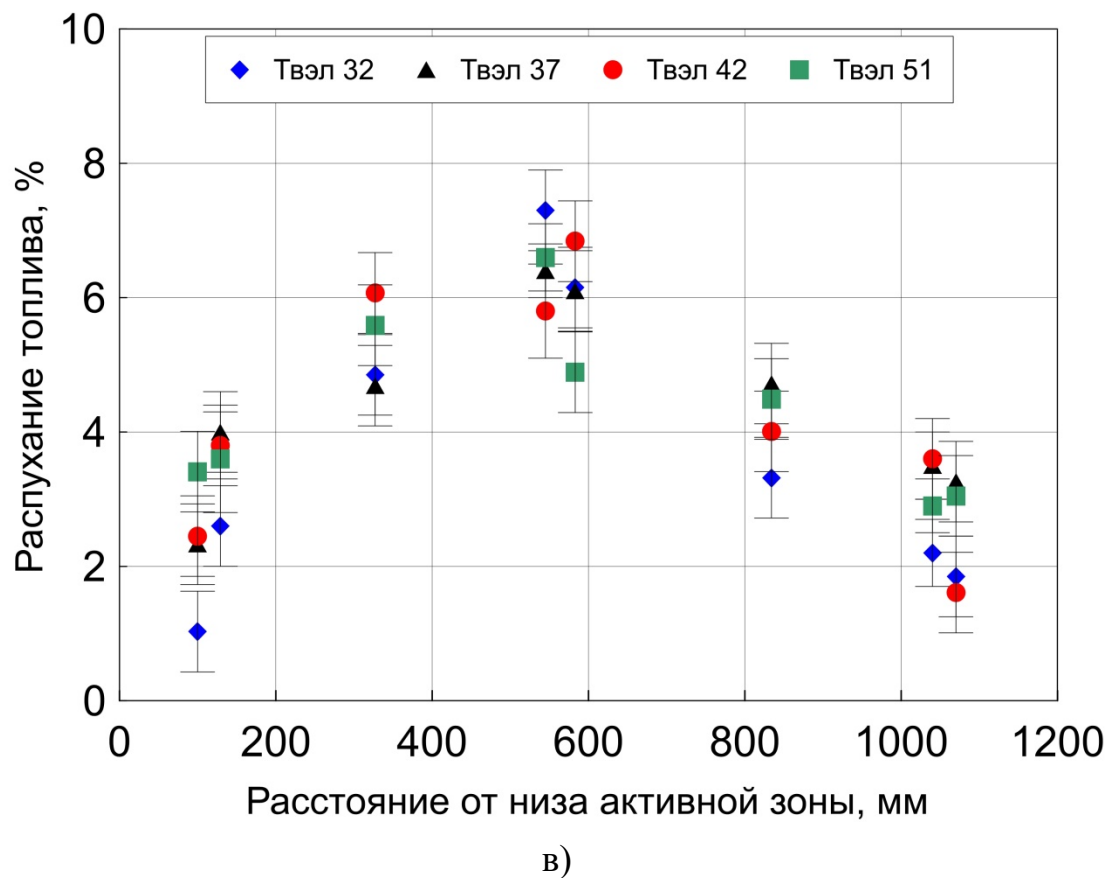


Рисунок 1.5 – Экспериментальные данные по распуханию топлива твэлов КЭТВС-1 (а), КЭТВС-7 (б) и ЭТВС-5 (в) [47, 48]

Дополнительная информация по реакторным испытаниям и послереакторным исследованиям экспериментальных твэлов со СНУП топливом представлена в работах [40–59].

1.5.2 Твэлы с жидкометаллическим подслоем

Для более эффективного использования в быстрых реакторах с жидкометаллическим теплоносителем плотного топлива с целью понижения эксплуатационной температуры топлива целесообразно применение жидкометаллического подслоя в твэле.

Жидкометаллический подслой в твэле обеспечивает высокую теплопроводность зазора «таблетки–оболочка» и, соответственно, более низкую

температуру топлива, так как теплосъем происходит лучше. Испытания твэлов с жидкометаллическим (свинцовым) подслоем прототипа реактора БРЕСТ-ОД-300 проводятся в реакторе БОР-60. Первый твэл показал прогрессирующее взаимодействие оболочки со свинцовым подслоем (рисунок 1.6) [56], что, впрочем, не было подтверждено в последующих аналогичных экспериментальных твэлах [58].

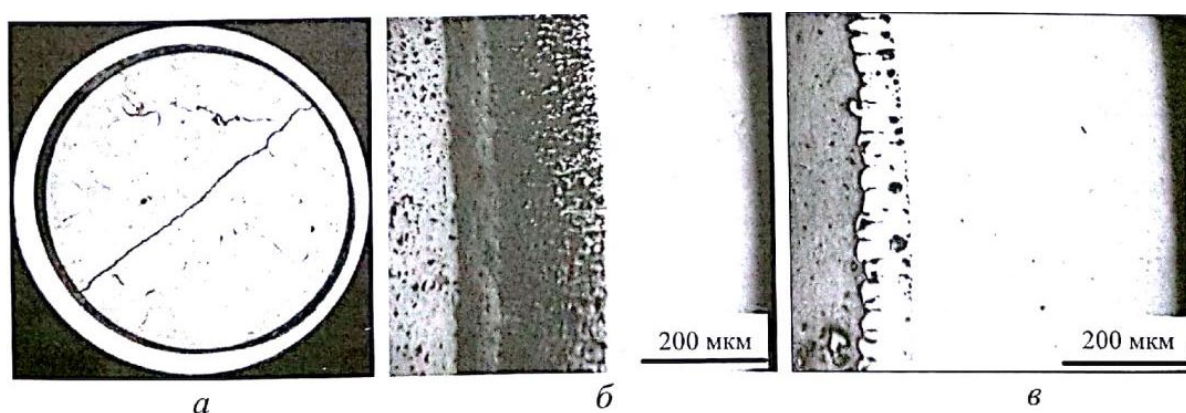


Рисунок 1.6 – Поперечное сечение твэла со свинцовым подслоем:
а – общий вид; б, в – зона растворения и осаждения материала на внутренней поверхности оболочки соответственно [56]

Для снижения коррозионного повреждения оболочки специалистами рекомендовано исключить никель во внутритвэльных элементах (пружина, проставка и др.), а также разработать коррозионно-стойкую хромистую ферритную сталь, легированную элементами с большим сродством к кислороду, чем Fe и Cr, такими, как Al и Si, в том числе для достижения эффекта самозалечивания защитных оксидных пленок [57]. Также запланированы работы по доработке твэлов: корректировка состава материала подслоя, путем легирования элементами материала оболочки твэла, и оптимизация технологических режимов.

1.6 Выводы к главе 1

СНУП топливо рассматривается в качестве основного топливного материала для проекта быстрого реактора БРЕСТ-ОД-300 и БР-1200. Оно имеет ряд преимуществ по сравнению с оксидным топливом, но не исследовано до высоких значений выгорания при облучении в быстрых реакторах.

Поэтому существует необходимость в моделировании поведения СНУП топлива и проведения обоснования работоспособности ТВЭЛов с таким топливом при испытаниях в быстрых реакторах. В связи с этим, на данный момент до получения результатов экспериментальных исследований важно использовать, ТВЭЛные расчетные коды для моделирования поведения ТВЭЛов под облучением, которые могут служить инструментом в предсказании поведения СНУП топлива при различных условиях эксплуатации быстрого реактора.

Для описания эволюции теплофизических свойств СНУП топлива в процессе эксплуатации необходимо учитывать ряд процессов, происходящих в топливе при его облучении в быстром реакторе. Одним из таких процессов является накопление ПД и образование вторичных фаз в топливе, которые в свою очередь влияют на состояние топлива, в частности, на его теплопроводность. При моделировании поведения СНУП топлива данный факт можно учитывать в рамках теории обобщенной проводимости.

Зарубежные ТВЭЛные коды по моделированию ТВЭЛов со СНУП топливом отсутствуют, разрабатываются несколько отечественных аналогов, которые необходимо валидировать на данных ПРИ. Для получения данных ПРИ таких ТВЭЛов в России проводятся реакторные испытания экспериментальных ТВЭЛов со СНУП топливом в быстрых ректорах БОР-60 и БН-600.

Для максимального использования потенциала СНУП топлива необходимо находить баланс в параметрах топлива и твэла. Например, использовать жидкометаллический подслой в твэле для снижения температуры топлива.

2 Основные характеристики твэльного кода БЕРКУТ-У

Поскольку механистический расчетный твэльный код БЕРКУТ-У представляет собой сложный программный комплекс, требующий детального рассмотрения перед изложением результатов исследования, ниже приведена информация о нем: назначение, архитектура кода и взаимодействие модулей, а также описание расчетной схемы моделируемого объекта.

2.1 Общая информация о твэльном коде

Твэльный код БЕРКУТ-У предназначен для самосогласованного моделирования тепловых, механических, физико-химических процессов и расчётного обоснования работоспособности (обоснование безопасности) стержневых цилиндрических твэлов с оксидным (диоксид урана или смешанное оксидное уран-плутониевое (МОКС)) и нитридным топливом (нитридное урановое или смешанное нитридное уран-плутониевое (СНУП)) с газовым или жидкометаллическим подслоем при эксплуатации в реакторах на быстрых нейтронах с жидкометаллическим теплоносителем [8–10].

Код БЕРКУТ-У является мультимасштабным, в котором моделируемые процессы и явления характеризуются диапазоном их варьирования от 1 нм до 1 м.

Микромасштаб (масштаб топливного зерна):

- генерация ПД, их радиоактивные превращения и внутризеренный транспорт;
- эволюция микроструктуры дефектов топлива;
- зарождение и рост газонаполненной пористости;
- образование химических соединений и их распределение по конденсированным фазам.

Мезомасштаб (масштаб топливной таблетки):

- межзёренный транспорт и выход ПД из таблетки;
- эволюция исходной пористости;
- образование отложений на поверхности топлива;
- деформация и растрескивание таблетки;

Макромасштаб (масштаб твэла):

- теплопередача и теплообмен с теплоносителем;
- изменение давления газа внутри твэла;
- изменение геометрии твэла, возникновение деформаций и напряжений;
- закрытие зазора между таблетками и оболочкой, МВТО и возможное повреждение оболочки.

2.2 Архитектура кода и взаимодействие модулей

Автономная версия твэльного кода БЕРКУТ-У реализована в виде отдельного приложения, предназначенного для проведения самостоятельных расчётов по моделированию поведения твэлов. Основным режимом работы кода БЕРКУТ-У является пакетный режим проведения расчётов, в котором вся входная информация подается в него в виде заранее подготовленного входного файла (расчетной модели твэла) текстового формата.

Исходная геометрия твэла, параметры топлива (плотность, изотопный состав, содержание примесей, размер топливного зерна), временные зависимости линейной мощности, скорости набора дозы в оболочке твэла и температуры теплоносителя используются при разработке расчетных моделей твэлов и задаются в качестве исходных данных во входном файле кода БЕРКУТ-У.

Выходные файлы кода БЕРКУТ-У текстового формата содержат в себе информацию по расчетным параметрам всех моделируемых процессов описанных выше.

Твэльный код БЕРКУТ-У имеет модульную архитектуру (рисунок 2.1) и состоит из следующих модулей с условными названиями [8–10]:

- управляющий модуль – обеспечивает ввод и обмен данными между модулями, организацию процесса вычислений, создание точек возобновления расчетов и вывод расчётных результатов конкретной задачи;

- тепловой модуль – моделирует осевое и радиальное распределение температуры в твэле при заданных источниках тепловыделения и определённых условиях теплопередачи на внешней поверхности оболочки твэла;

- механический модуль – прогнозирует текущие размеры, напряженно-деформированное состояние топливных таблеток и оболочки твэла;

- усовершенствованный топливный модуль MFPR/R – самосогласованно моделирует процессы, происходящие в топливе: наработка, радиоактивные взаимопревращения и транспорта ПД в топливе, внутризеренный и межзеренный перенос ПД, термохимические превращения в топливе, включая распределение ПД по молекулярным и фазовым состояниям, эволюция микроструктуры топлива, выход ПД в открытую пористость и свободный объем твэла;

- модуль, описывающий зазор между топливными таблетками и оболочкой – моделирует перераспределение ПД по фазовым (конденсированным и газовым) состояниям и их перенос по зазору между топливными таблетками и оболочкой, для газового зазора рассчитывает теплопроводность газовой смеси в зависимости от состава вышедших ГПД, для жидкометаллического подслоя моделирует растворение оболочки и перенос продуктов коррозии в жидкометаллическом подслое;

– модуль оболочки твэла – моделирует эволюцию дефектной структуры материала оболочки под внешнем нейтронном облучением; зарождение и развитие газонаполненной пористости в оболочке; накопление повреждающей дозы; изменение состава материала оболочки; науглероживание и азотирование оболочки твэла.

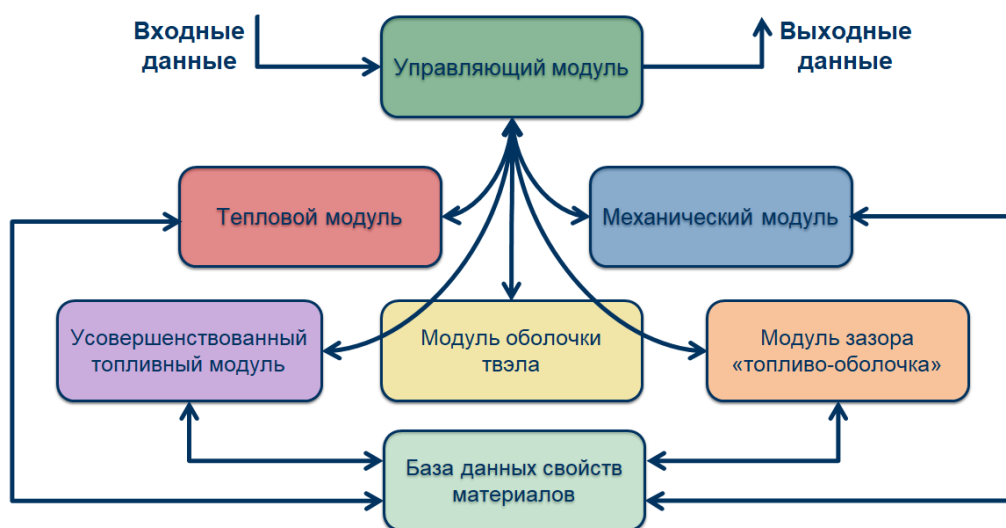


Рисунок 2.1 – Модульная архитектура твэльного кода БЕРКУТ-У

Код БЕРКУТ-У также включает в себя базу данных, содержащую механические и теплофизические свойства материалов твэлов быстрых реакторов, данные из которой передаются в каждый из модуль по их запросу.

Особое внимание в данной работе уделяется усовершенствованному топливному модулю кода БЕРКУТ-У [9].

2.3 Расчетная схема твэла быстрого реактора

Расчётная схема твэла быстрого реактора в твэльном коде БЕРКУТ-У представлена на рисунке 2.2.

Весь твэл в общем случае разбивается на пять отдельных элементов: нижний и верхний компенсационные объемы, нижний и верхний торцевые экраны и активная часть твэла. При этом все перечисленные элементы, кроме активной части, являются опциональными и могут отсутствовать в зависимости от конкретной модификации твэла.

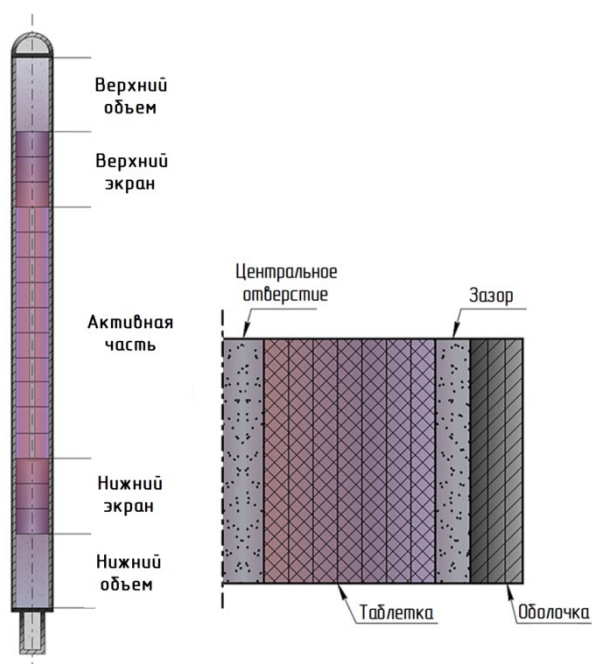


Рисунок 2.2 – Расчётная схема твэла быстрого реактора

Для описания начальной и текущей геометрии твэла, а также задания граничных условий в коде используется разбиение каждого элемента твэла на ячейки произвольной высоты в осевом направлении (осевая ячейка) и на цилиндрические осесимметричные слои в радиальном направлении. Например, осевая ячейка активной части состоит из области центрального отверстия (при наличии), столба таблеток топлива, зазора «таблетки–оболочка» и оболочки твэла (рисунок 2.2). Количество осевых ячеек и цилиндрических слоев определяется в зависимости от конкретной моделируемой задачи.

Соседние осевые ячейки деформируются независимо друг от друга, взаимное влияние осевых ячеек осуществляется через общее газовое давление под оболочкой твэла, т.е. реализуется 1,5D-подход.

Применимость используемых расчётных схем и геометрических моделей подтверждается сравнением с результатами расчётов по альтернативным расчетным кодам, а также результатами валидации твэльного кода БЕРКУТ-У, представленными в главе 4.

2.4 Описание моделей кода БЕРКУТ-У

В рамках данной работы будет достаточно понимание работы только трех модулей и их моделей: теплового, механического и топливного. Остальные модули непосредственного влияния на данные исследования не оказывают, описание их моделей отражено в описании модулей зазора и оболочки твэла.

2.4.1 Тепловой модуль

Тепловой модуль предназначен для расчета температурного поля по всему твэлу, включая активную часть твэла, торцевые экраны и компенсационные объемы. Модель теплового модуля учитывает следующие факторы:

- зависимость теплофизических свойств всех материалов твэла от температуры, а для топлива и от выгорания;
- изменение величины зазора между таблетками и оболочкой;
- изменение состава газа под оболочкой вследствие выхода ГПД;
- радиационный обмен между топливом и оболочкой.

Имеются две возможности решения тепловой задачи. Первый способ предполагает отсутствие тепловых перетоков (с торцов ячейки) по осевой составляющей, при этом одномерное (вдоль координаты r) уравнение теплопроводности решается в радиальном направлении (с боковых поверхностей

ячейки) для сечений каждой заданной осевой ячейки по высоте твэла с соответствующими данной высоте граничными условиями. Такой способ получил название 1,5D (или 1D) подход.

Также реализована опция решения двумерного (в координатах (r, z)) уравнения теплопроводности, т.е. 2D подход. Для 2D расчета тепловые потоки рассчитываются как в радиальном, так и в аксиальном направлении для каждой осевой ячейки. Аксиальные потоки зависят от положения рассматриваемой ячейки относительно ее соседей, с которыми данная ячейка соприкасается.

Результатом работы теплового модуля является детальное радиальное распределение температуры в каждой осевой ячейке твэла (в каждом осевом сечении твэла), схематично представленное на рисунке 2.3, где $T_{\text{табл_внутр}}, T_{\text{табл_внеш}}$ – температуры внутренней и внешней поверхности таблетки; $T_{\text{обол_внутр}}, T_{\text{обол_внеш}}$ – температуры внутренней и внешней поверхности оболочки; $\Delta T_{\text{табл}} = T_{\text{табл_внутр}} - T_{\text{табл_внеш}}$, $\Delta T_{\text{зазор}} = T_{\text{табл_внеш}} - T_{\text{обол_внутр}}$, $\Delta T_{\text{обол}} = T_{\text{обол_внутр}} - T_{\text{обол_внеш}}$; $\lambda_{\text{табл}}$, $\lambda_{\text{зазор}}$ и $\lambda_{\text{обол}}$ – теплопроводности материала таблетки, зазора «таблетки–оболочка» и оболочки соответственно.

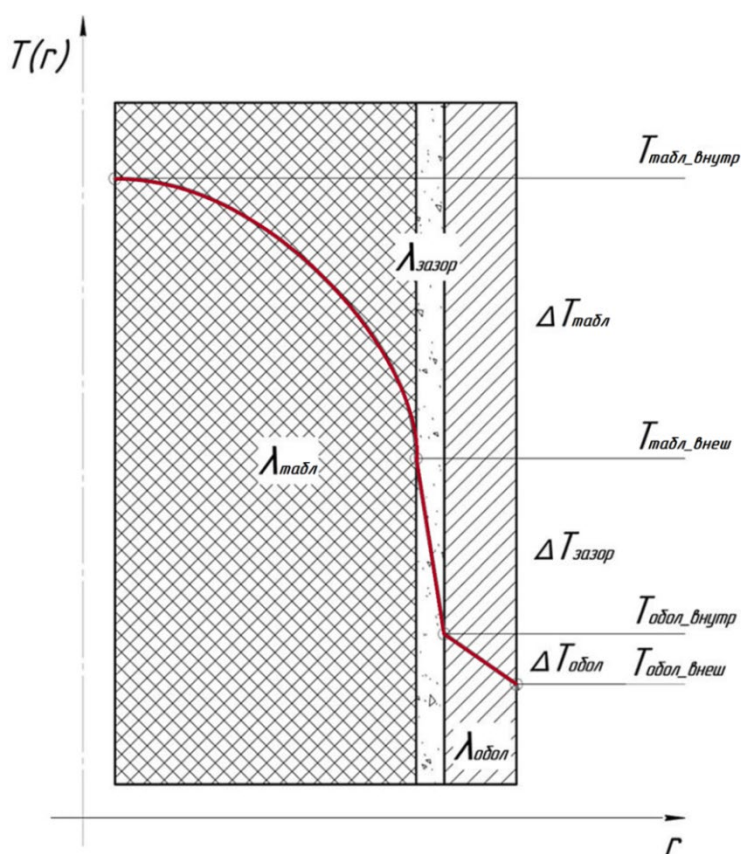


Рисунок 2.3 – Характерное радиальное распределение температуры для осевой ячейки активной части ТВЭЛ

2.4.2 Механический модуль

Механический модуль прогнозирует текущие размеры и описывает НДС топливных таблеток и оболочки ТВЭЛ. Модели позволяют точно анализировать и прогнозировать НДС таблеток и оболочки ТВЭЛ в условиях механических нагрузок.

Анализ условий работы ТВЭЛов быстрых реакторов позволил выделить следующие основные физические процессы и явления, которые следует учитывать при моделировании их поведения (обоснование работоспособности):

- зависимость теплофизических и механических свойств всех материалов ТВЭЛ от температуры, топлива – от выгорания; оболочки – повреждающей дозы;

- градиент температуры и радиационного распухания по толщине оболочки;
- изменение давления газа под оболочкой и давление теплоносителя;
- распухание таблеток, механическое взаимодействие между таблетками и оболочкой при исчезновении зазора «таблетки–оболочка»;
- деформации: термическая и радиационная ползучесть; термические, упругие; связанные с распуханием оболочки и топлива.

Механический модуль моделирует:

- эволюцию НДС монолитных топливных таблеток и таблеток со сквозными радиальными трещинами;
- эволюцию НДС оболочки твэла, накопление деформационных повреждений;
- разрушение твэла и его причины.

2.4.3 Усовершенствованный топливный модуль

Усовершенствованный топливный модуль MFPR/R кода БЕРКУТ-У разработан на основе одноименного автономного кода, изначально предназначавшегося для описания поведения оксидного топлива в пределах одной топливной таблетки [60, 61]. В рамках проекта «Коды нового поколения» проектного направления «Прорыв» произведено обобщение моделей топливного модуля MFPR/R для моделирования поведения нитридного, в частности СНУП, топлива в быстрых реакторах.

Топливный модуль включает в себя модели наиболее важных процессов, сопровождающих изменение состояния топлива при различных режимах работы

реактора, таких как генерация ПД, их радиоактивные превращения и внутризеренный транспорт; эволюция исходной пористости; зарождение и рост газонаполненной пористости; межзеренный транспорт и выход ПД из топлива; образование химических соединений и их распределение по конденсированным фазам; эволюция микроструктуры дефектов топлива.

Для каждой осевой ячейки, на которые разбивается твэл согласно расчетной схеме, производится её моделирование в соответствии с заданным во входных данных сценарием, каждая топливная ячейка рассматривается в виде ансамбля идентичных топливных зерен. Описание изменения свойств отдельных зерен и транспорта в них ПД при штатных и внештатных режимах работы реакторной установки является предметом особого внимания в моделях топливного модуля. Полный выход ПД из топливного столба твэла находится суммированием по всем топливным осевым ячейкам.

Макромодели топливного модуля MFPR/R

Физические модели топливного модуля основаны как на авторских разработках, так и на существующих, в том числе из работ [62–106].

В модели топливного модуля MFPR/R все ПД со сходными физико-химическими свойствами отнесены к одному и тому же классу химических элементов. Всего введено 22 класса, состав которых представлен в таблице 2.1.

Таблица 2.1 – Классы химических элементов в модуле MFPR/R

№	Класс	Состав	№	Класс	Состав
1	U	U, Pu	12	Zr	Zr
2	Pu	Pu, Np, Am, Cm	13	La	La, Pm, Pr, Sm, Y, Gd, Tb
3	Cs	Cs, Rb, Ag, Na	14	Ce	Ce
4	I	I, Br	15	Eu	Eu
5	Mo	Mo, W	16	Nd	Nd
6	Ru	Ru	17	Nb	Nb
7	Pd	Pd	18	Sb	Sb
8	Rh	Rh	19	Te	Te, Se, Sn, As, Cd, Ga, Ge, In
9	Tc	Tc	20	He	He
10	Ba	Ba	21	H	H, D, T
11	Sr	Sr	22	Xe	Ar, Kr, Xe

К перечисленным выше элементам в СНУП топливе следует добавить азот, а также кислород и углерод, которые, как правило, присутствуют в этом виде топлива в форме примесей (~0,1–0,2 масс.%).

В топливном модуле MFPR/R выделяются несколько базовых топливных макромоделей, в частности: наработка ПД, их внутризёренный и межзёренный

транспорт и выход в открытую пористость, набухание топлива, как газового, так и твердотельного.

Модель фазовой структуры облученного топлива

В модели фазовой структуры топливного модуля MFPR/R облученное топливо рассматривается как гетерогенная система, состоящая из нескольких многокомпонентных фаз.

По своим физико-химическим свойствам ПД разбиты на группы: (1) благородные газы (БГ) – Хе, Кг; (2) летучие ПД – щелочные металлы Cs, Rb и металлоиды I, Те; (3) слабо летучие ПД – металлы Мо, Ru, Pd, Rh, Тс, металлоид Sb и щелочноземельные элементы Ва, Sr; (4) нелетучие ПД – металлы Zr, Nb и редкоземельные элементы La, Се, Nd, Eu.

Равновесный фазовый состав СНУП топлива представляется как:

- фаза твердого раствора ПД и монокарбида (U,Pu)C в монокитриде смеси урана и плутония. При моделировании термодинамики системы компонентами твердого раствора являются U(N,C), Pu(N,C), цезий Cs, щелочноземельные элементы Ва и Sr, а также их нитриды в форме $BaN_{2/3}$ и $SrN_{2/3}$, цирконий, ниобий и теллур в форме Zr, ZrN, Nb, NbN, Nb_2N , Те, редкоземельные элементы La, Се, Eu, Nd и их нитриды LaN, CeN, EuN, NdN, металлоид Sb, металлы Мо, Ru, Pd, Rh, Тс и нитрид молибдена в форме $MoN_{1/2}$. При наличии в топливе примесей кислорода и углерода основная фаза твёрдого раствора включает оксиды и карбиды U, Pu, Zr, La, Се, Nd и Nb;
- металлическая фаза, представляющая собой твёрдый раствор Мо, Ru, Pd, Rh и Тс;
- конденсированная фаза CsI;
- фаза «полоторного» нитрида урана U_2N_3 ;

– вторичная конденсированная оксидная фаза: твёрдый раствор из смешанного диоксида $(U, Pu)O_2$ с примесями растворимых оксидов ПД ZrO_2 , $LaO_{3/2}$, CeO_2 , $CeO_{3/2}$, $NdO_{3/2}$, BaO , SrO , EuO , $EuO_{3/2}$, NbO , NbO_2 ;

– вторичная конденсированная карбидная фаза, состоящая из высших карбидов плутония, и ПД PuC_2 , CeC_2 , Mo_2C , BaC_2 , SrC_2 , LaC_2 и NdC_2 , которая рассматривается как твёрдый раствор;

– газовая фаза, включающая следующие компоненты: U , UN , UN_2 , Pu , PuN , PuN_2 , Cs , CsI , Cs_2 , I , I_2 , Mo , MoN , Ru , Pd , Rh , Tc , Ba , Ba_2 , Sr , Sr_2 , Zr , ZrN , La , LaN , Ce , CeN , Eu , Nd , NdN , Nb , Te , Te_2 , Xe , N_2 , N , а также газообразные оксиды и карбиды ПД

и другие фазы.

Базисным компонентом рассматриваемой системы является смешанный уран-плутониевый мононитрид, точнее, твёрдый раствор $(U_{1-z}Pu_z)N$, в котором растворены ПД. Под газовой фазой здесь подразумевается система паров ПД, формирующихся в межзеренных пузырях и в открытой пористости. ПД, а также азот, кислород и углерод, «освободившиеся» в зерне в результате деления актинидов, диффундируют к границам зерна. По предположению, вторичные конденсированные фазы – твердые фазовые включения (преципитаты), включая «полуторный» нитрид урана U_2N_3 , могут формироваться на границах, разделяющих зерна и межзеренные газовые пузыри, или границах пор, а также на границе топливо — газовый зазор; другие возможности их расположения внутри топливной матрицы не рассматриваются. Все вторичные смешанные фазы рассматриваются при термодинамическом моделировании как идеальные твердые растворы. Считается, что существование этих фаз определяется только термодинамическими условиями. Подсистема «преципитаты – газовая фаза»

является равновесной, и она находится в равновесии с поверхностным слоем твердого раствора.

Модель внутризеренного транспорта ПД в топливе

Предполагается, что примесные атомы, образовавшиеся при делении актинидов, присутствуют в матрице в атомарной форме и диффундируют к границам зерна. Для упрощения задачи диффузии зерно рассматривается в виде сферы. Задача переноса формулируется отдельно для двух примесных подсистем, существующих в топливе: благородные газы (БГ), растворённые в топливной матрице, и химически активные ПД и молекулы соединений, которые из них формируются. В силу практически нулевой растворимости в топливной матрице, БГ склонны к образованию газовой фазы внутри топливных зерен – внутризеренных пузырей. Предполагается, что химически активные ПД не участвуют в формировании внутризеренных пузырей. Размеры внутризеренных пузырей могут варьироваться в широком диапазоне, однако для простоты принят бимодальный подход, согласно которому БГ в матрице существуют в виде двух мод: атомы и «усредненные» идентичные пузыри с размерами, меняющимися со временем. Поведение внутризеренных пузырей моделируется с учетом процессов их нуклеации, коалесценции и захвата внутризеренного газа. С другой стороны, рассматриваются также конкурирующие процессы: термическое и радиационное перерастворение (на этапе облучения), которое играет чрезвычайно важную роль в эволюции внутризеренной пористости на этапе облучения.

Модель межзеренного транспорта ПД и выхода в открытую пористость из топлива

Межзеренная пористость подразделяется на две группы: пузыри на гранях (ПГ) зерен и пузыри на ребрах (ПР) зерен. Оба вида пористости заполняются диффундирующими из зерна газообразными ПД и их химическими соединениями. На границе «твердое тело–газовая фаза» могут образовываться

конденсированные фазы — преципитаты. Рассматривается два механизма заполнения: испарение ПД в пузыри с границы зерна, на которую падает диффузионный поток (равный произведению плотности потока ПД на площадь покрытия поверхности зерна пористостями), и «рециркуляционный» механизм, тесно связанный со стеканием диффундирующих по границам зерен ПД и их радиационным перерастворением за счет выбивания из пористости фрагментами деления [107, 108]. В обоих случаях концентрация БГ в приграничном слое является граничным условием для задачи внутризеренной диффузии.

Процесс роста пузырей на гранях зерна может достигать стадии насыщения, соответствующей их слиянию и образованию так называемых перколяционных каналов на поверхности зерен по направлению к стыкам. Стадия насыщения обычно ассоциируется с достижением 50%-го покрытия поверхности зерен пузырями (порог перколяции) [109]. В этом случае каналы считаются открытыми, и «избыточное» (т.е. превышающее пороговое) количество ПД переносится из пузырей на гранях в пузыри на ребрах за характерное время переноса, которое характеризуется неким феноменологическим параметром $\tau^{\text{ПГ} \rightarrow \text{ПР}}$.

Пористость на рёбрах зёрен рассматривается в виде туннелей, которые считаются частично открытыми для перетока газа из них в открытую пористость (ОП), причем степень «открытости» зависит от внешних параметров (давление, температура) и радиуса туннеля. Если радиусы туннелей достигли некоторого критического значения, считается, что рост пузырей на ребрах достиг насыщения, а сама пористость оказывается полностью открытой (весь входящий в пористость поток ПД мгновенно переносится в открытую пористость). Если по каким-то причинам (например, при повышении температуры) радиус канала оказывается выше критического, то, аналогично пузырям на гранях, «избыточное» (превышающее пороговое) количество ПД переносится из пузырей на ребрах в

открытую пористость, причем характерное время процесса также определяется неким феноменологическим параметром $\tau^{\text{ПР} \rightarrow \text{ОП}}$.

При формулировке модели переноса рассматриваются четыре подсистемы:

- твердый раствор ПД и кислорода/азота в топливной матрице;
- газы и твердые преципитаты в пузырьках на гранях;
- газы и твердые преципитаты в пузырьках на ребрах;
- газы в открытой пористости.

Изначально в модели кода принята следующая модель перераспределения потоков ПД. Часть (доля) диффузионного потока из зерна J_{gr} , характеризуемого параметром ξ_2 (< 1), захватывается пузырьками на гранях (поток $J_{gr \rightarrow GF} = \xi_2 J_{gr}$). На стадии насыщения возникает поверхностный поток R_2 из пузырьков на гранях, который вместе с оставшейся частью диффузионного потока $J_{gr \rightarrow GE+OP} = (1 - \xi_2) J_{gr}$ перераспределяется между пузырьками на ребрах (доля ξ_3 , $J_{GE+OP \rightarrow GE} = \xi_3 (J_{gr \rightarrow GE+OP} + R_2)$) и открытой пористостью в соотношении $\xi^{(3)} : (1 - \xi^{(3)})$ ($J_{GE+OP \rightarrow OP} = (1 - \xi_3) (J_{gr \rightarrow GE+OP} + R_2)$). Кроме того, в случае насыщения пузырьков на ребрах, возникает поток R_3 из пузырьков на ребрах в открытую пористость. Параметры ξ_2 и ξ_3 рассчитываются соответственно в модели «рециркуляции» ПД и в модели формирования туннелей в пузырьках на ребрах.

Визуальное представление перераспределения потоков ПД в исходной модели представлено на рисунке 2.4.

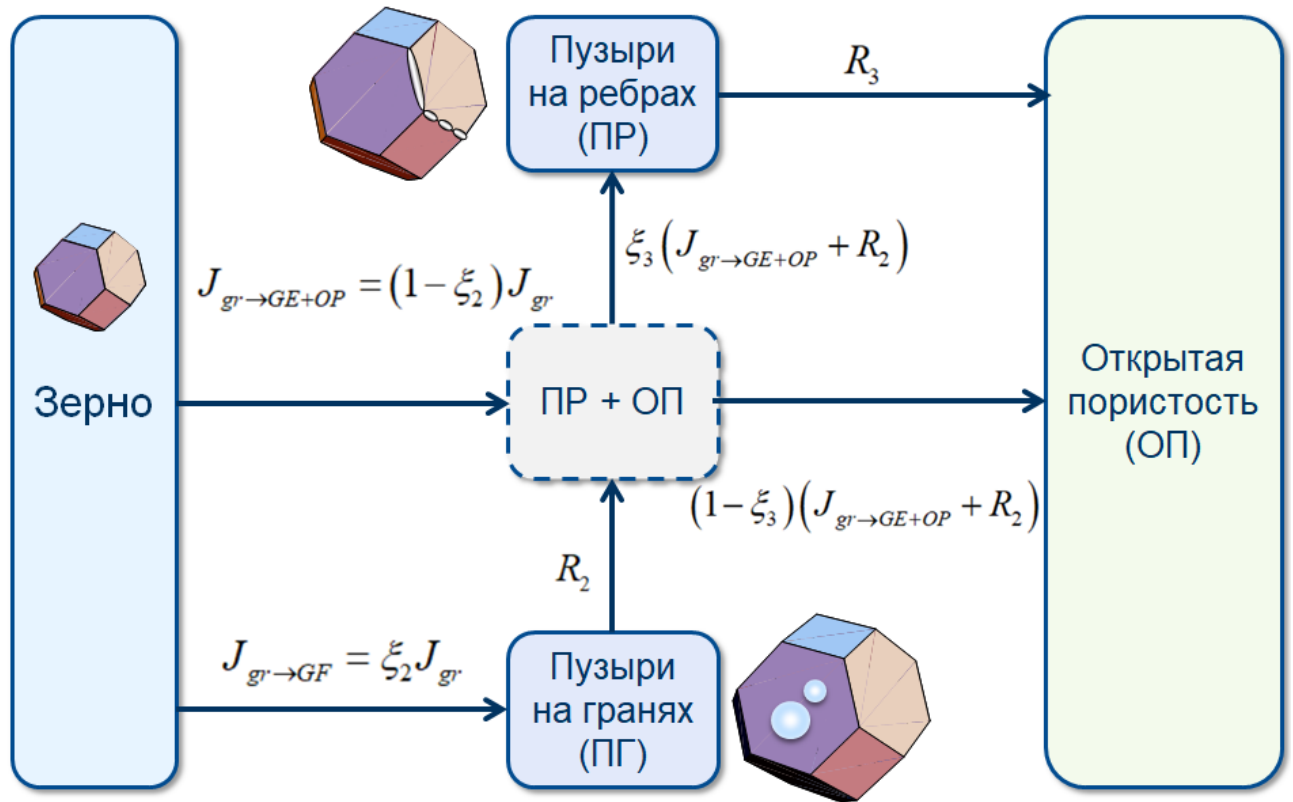


Рисунок 2.4 – Схема исходной модели транспорта ПД в топливе

В итоге в исходной модели количество ПД в пузырях на гранях и на ребрах, и в открытой пористости, описывается системой уравнений:

$$\begin{aligned}
 \dot{Y}_{GF} &= \xi_2 J_{gr} - R_2, \\
 \dot{Y}_{GE} &= \xi_3 \left((1 - \xi_2) J_{gr} + R_2 \right) - R_3, \\
 \dot{Y}_{OP} &= (1 - \xi_3) \left((1 - \xi_2) J_{gr} + R_2 \right) + R_3
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

Распухание топлива

Изменение объёма (распухание) топливной таблетки ΔV , которое возникает в процессе облучения, можно представить в виде суммы:

$$\Delta V = \Delta V_{gs} + \Delta V_{ss}, \quad (2.2)$$

где ΔV_{gs} – изменение объема, связанное с газовым распуханием, определяемым суммарным объёмом внутри- и межзёренных газовых пузырей и пор, ΔV_{ss} – изменение объема, связанное с твердотельным распуханием, определяемым процессами распада актинидов и накоплением ПД в топливе в конденсированном виде.

Вклад в твердотельное распухание могут давать три группы процессов: (1) формирование вторичных конденсированных фаз – преципитатов: ΔV_p ; (2) изменение объёма матрицы (U, Pu)N, связанное с процессами деления атомов U и Pu: ΔV_m ; (3) изменение параметра кристаллической решетки (U, Pu)N: ΔV_l , соответственно:

$$\Delta V_{ss} = \Delta V_p + \Delta V_m + \Delta V_l. \quad (2.3)$$

Оценка дополнительного объёма топлива, ΔV_p , связанного с формированием преципитатов, может быть получена с использованием приближения аддитивности посредством соотношения:

$$\Delta V_p = \sum_{i \in p} N_i v_i, \quad v_i = M_i \rho_i^{-1}, \quad (2.4)$$

где N_i и v_i – число атомов (молекул) типа i и их молярный объём, соответственно, а M_i и ρ_i – молярная масса и плотность компонента i . В правой части (2.4) суммирование ведется по всем преципитатам.

Изменение объема матрицы оценивается следующим образом:

$$\Delta V_m = v_{UN} \sum_{i \in ss} N_i - V_0, \quad (2.5)$$

где V_0 – исходный объем топлива, v_{UN} – эффективный объем UN (предполагается, что $v_{UN} \approx v_{PuN}$); суммирование ведется по всем компонентам матричного твердого раствора, растворимым в матрице ПД (Zr , La , Ce , Nd , Nb), которые могут рассматриваться как атомы замещения.

Для расчета поправки ΔV_l , связанной с изменением параметра a кристаллической решетки $(U, Pu)N$, в коде используется корреляционная формула, основанная на данных рентгенографических измерений, проведенных в рамках экспериментов БОРА-БОРА [46, 59] в диапазоне выгораний B от 4,5 до 12,0% тяж. ат.:

$$\Delta V_l / V_0 \approx 0,00103B. \quad (2.6)$$

2.5 Выводы к главе 2

В данной главе представлена информация о расчетном твэльном коде БЕРКУТ-У. Приведены информация о назначении кода и его архитектуре,

описание основных модулей кода и их моделей, а также расчетной схемы моделируемого объекта (твэла).

Поскольку код БЕРКУТ-У представляет собой сложный программный комплекс, изложенная информация позволяет составить общую картину о нем и понять суть проведенных в данной работе усовершенствований кода, проанализировать результаты моделирования поведения твэлов со СНУП топливом, а также исследования по влиянию определенных параметров на его поведение под облучением.

3 Усовершенствование и доработка отдельных моделей кода БЕРКУТ-У поведения смешанного нитридного уран-плутониевого топлива

Основными топливными параметрами, косвенно определяющие поведение (работоспособность) ТВЭЛА, являются распухание топлива, выход из него (количество) ГПД и гелия в свободный объем под оболочку ТВЭЛА. Распухание непосредственно оказывает влияние на изменение размеров топливных таблеток, закрытие зазора «таблетки–оболочка», МВТО, в случае выбора зазора, а выход ГПД – на количество ГПД и давление в ТВЭЛЕ. Поэтому моделирование этих двух процессов имеет принципиальный характер.

Анализ получаемых экспериментальных данных ПРИ ТВЭЛОВ со СНУП топливом показал, что в моделях кода БЕРКУТ-У при моделировании поведения топлива необходим учет его закрытой и открытой пористости. В связи с этим была выполнена работа по модификации моделей выхода газов из топлива (смотреть п. 3.1) и его распухания (смотреть п. 3.2).

Еще одним усовершенствованием кода (п. 3.3) стала модернизация модели теплопроводности СНУП-топлива. В отличие от ранее используемой корреляционной зависимости, которая вследствие отсутствия экспериментальных данных не учитывала влияние выгорания и накопления продуктов деления (ПД). Новая модель явно включает воздействие этих факторов на теплопроводность топливной матрицы.

Общее представление и подробное описание основных топливных моделей изложено в п. 2.4.3.

3.1 Межзеренный транспорт продуктов деления и их выход из топлива

В изначальной модели выхода ГПД в свободный объем ТВЭЛА через технологическую пористость предполагалось, что в самом начале облучения, пока еще не сформировалась межзеренная пористость, весь газ захватывается

технологическими порами (смотреть п. 2.4.3, рисунок 2.4). Однако по мере роста выгорания и формирования открытой пористости доля ГПД, захватываемая порами снижается. Усовершенствованная модель (рисунок 3.1) учитывает тот факт, что некоторая часть x_{OP} потока J_{gr} ГПД из топливных зерен ($J_{gr \rightarrow OP} = x_{OP} J_{gr}$) непосредственно попадает в свободный объем твэла через открытую технологическую пористость, а также в результате мгновенного (через механизмы выбивания и отдачи) и диффузионного выхода из приповерхностных областей топливной таблетки. Оставшаяся часть $(1 - x_{OP}) J_{gr}$ потока ГПД частично (x_{CP}) захватывается закрытыми технологическими порами, а частично перераспределяется между пузырями на границе зерен. Поскольку в настоящее время имеет место большая неопределенность в величине открытой технологической пористости топлива, а также отличия полной площади поверхности таблетки от геометрической площади, величина x_{OP} рассматривается как эмпирический (феноменологический) параметр, оптимальное значение которого определяется в результате сравнения результатов расчетов с экспериментальными данными.

Поток, $J_{gr \rightarrow CP}$ захватываемый закрытыми технологическими порами представляется в виде:

$$J_{gr \rightarrow CP} = x_{CP} (1 - x_{OP}) J_{gr}, \quad (3.1)$$

где коэффициент x_{CP} рассчитывается по формуле:

$$x_{CP} = \frac{1}{1 + b / b_{\max}}, \quad (3.2)$$

где b – выгорание топлива, $b_{\max}$ – эмпирический (феноменологический) параметр, который также определяется по итогам валидации.

С учетом этих определений, оставшийся после прямого захвата газа открытыми и закрытыми порами поток в межзеренные пузыри определяется выражением:

$$\tilde{J}_{gr} = J_{gr} - x_{OP} J_{gr} - \frac{1 - x_{OP}}{1 + b / b_{\max}} J_{gr} = \left(1 - x_{OP} - \frac{1 - x_{OP}}{1 + b / b_{\max}} \right) J_{gr} = \frac{b(1 - x_{OP})}{b + b_{\max}} J_{gr}, \quad (3.3)$$

В частности, потоки газа в пузыри на гранях и пузыри на ребрах определяются выражениями $\xi_2 \tilde{J}_{gr}$ и $(1 - \xi_2) \tilde{J}_{gr}$ соответственно (рисунок 3.1).

Опосредованный поток $J_{GF \rightarrow CP}$ газа в закрытую пористость, обусловленный коалесценцией пузырей на гранях с закрытыми порами, аппроксимируется выражением:

$$J_{GF \rightarrow CP} = x_{GF \rightarrow CP} \xi_2 \tilde{J}_{gr}, \quad (3.4)$$

где $x_{GF \rightarrow CP}$ – эмпирический (феноменологический) параметр, имеющий смысл доли потока газа из зерна в пузыри на гранях, захватываемой закрытой пористостью за счет коалесценции (т.е. в виде пузырей).

Визуальное представление перераспределения потоков ПД в модифицированной модели представлено на рисунке 3.1.

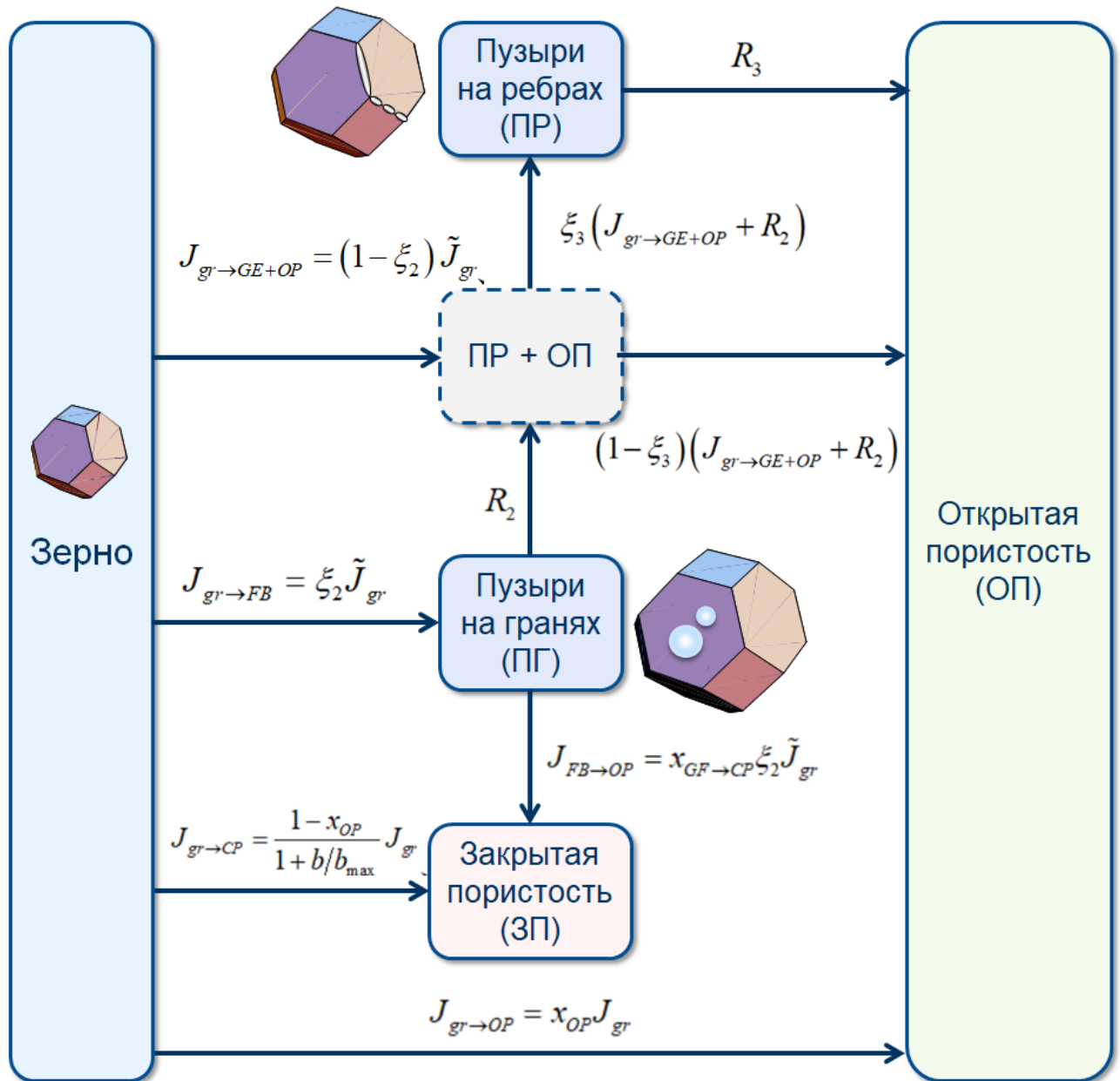


Рисунок 3.1 – Схема модифицированной модели выхода ПД из топлива

В итоге в усовершенствованной модели количество ПД в пузырях на ребрах, в пузырях на гранях и в открытой пористости, описывается системой уравнений:

$$\begin{aligned}
 \dot{Y}_{GF} &= \xi_2 (1 - x_{CP}) \tilde{J}_{gr} - R_2, \\
 \dot{Y}_{GE} &= \xi_3 \left((1 - \xi_2) \tilde{J}_{gr} + R_2 \right) - R_3, \\
 \dot{Y}_{OP} &= (1 - \xi_3) \left((1 - \xi_2) \tilde{J}_{gr} + R_2 \right) + R_3 + x_{OP} J_{gr}, \\
 \dot{Y}_{CP} &= \frac{1 - x_{OP}}{1 + b/b_{\max}} J_{gr} + x_{CP} \xi_2 \tilde{J}_{gr}.
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

3.2 Распухание топлива

В отличие от потока в закрытые поры в виде атомов (смотреть п. 2.4.3), поток в виде пузырей приводит к распуханию закрытых пор. Число пузырей, захватываемых закрытыми порами в единице объема в единицу времени, равно $J_{GF \rightarrow CP} / n_{GF}$, где n_{GF} - число атомов газа в пузырях на гранях. Пусть V_{GF} - текущий объем пузыря на гранях. Полагая, что при слиянии пузыря на гранях с закрытой порой, её объём увеличивается на V_{GF} , получается, что скорость $\dot{s}_{CP}$ распухания закрытых пор рассчитывается как:

$$\dot{s}_{cp} = J_{GF \rightarrow CP} \frac{V_{GF}}{n_{GF}} = x_{GF \rightarrow CP} \frac{V_{GF}}{n_{GF}} J_{gr \rightarrow GF}. \tag{3.6}$$

Стоит отметить, что в рассматриваемой модели объем закрытых технологических пор растет только за счет захвата части межзеренных пузырей и не меняется при колебаниях температуры, в частности при перезагрузках ТВС.

По итогам проведенной работы по моделированию твэлов и сравнению с экспериментальными данными по набуханию СНУП топлива и количеству газов в твэле, были определены все эмпирические (феноменологические) параметры перечисленные выше, с которыми код был валидирован на всех имеющихся экспериментальных данных.

3.3 Теплопроводность выгоревшего топлива

В коде БЕРКУТ-У свойства материалов твэла (топлива, оболочки и др.), задаются во внутренней базе данных. В частности, для теплопроводности СНУП-топлива (с относительным содержанием плутония (Pu) от 0 до 1 и температурным диапазоном до 1600 К) реализована корреляционная зависимость [110], выраженная уравнением:

$$\begin{aligned}\lambda_m &= [AT^2 + BT + C] \cdot [(1-p)/(1+2p)], \\ A &= 4,558 \cdot 10^{-5} y^3 - 7,734 \cdot 10^{-5} y^2 + 4,180 \cdot 10^{-5} y - 1,159 \cdot 10^{-5}, \\ B &= -1,044 \cdot 10^{-1} y^3 + 1,726 \cdot 10^{-1} y^2 - 9,464 \cdot 10^{-2} y + 3,307 \cdot 10^{-2}, \\ C &= 5,852 \cdot 10^{-1} y^3 - 8,291 \cdot 10^{-1} y^2 + 3,051 \cdot 10^{-1} y + 1,126,\end{aligned}\tag{3.7}$$

где T – температура, p – пористость и y – содержание плутония.

Данная зависимость рекомендована при обосновании работоспособности твэлов со СНУП топливом, применима только для «свежего» топлива и не учитывает (вследствие отсутствия экспериментальных данных) влияние выгорания, а именно накопления ПД и образование вторичных конденсированных фаз в топливе, приводящих к образованию гетерогенной системы, которая напрямую влияет на теплопроводность топлива.

В рамках данной работы в коде БЕРКУТ-У реализован учет выгорания топлива (расчет эффективной теплопроводности СНУП топлива) в рамках обобщенной теории теплопроводности многофазной гетерогенной системы с изолированными конденсированными фазами (преципитатами), образующимися в процессе облучения. Это возможно благодаря тому, что данный процесс моделируется усовершенствованный топливным модулем кода БЕРКУТ-У

Для описания теплопроводности многофазной системы, возникающей в реальном облученном топливе, в качестве основы рассматривается зависимость (1.4), предложенная В.И. Оделевским [32]. Для эффективной теплопроводности $\lambda_{эфф}$ введен коэффициент влияния K на теплопроводность однородной матрицы λ_m :

$$\lambda_{эфф} = \lambda_m \times K, \quad (3.8)$$

где K – коэффициент влияния, который зависит от числа фазовых включений (в целом неограниченное количество) и теплопроводности и объемной доли каждого из них:

$$K = 1 - \sum_{k=1}^{N_{фаз}} V_k \left(\frac{1}{1 - \lambda_k / \lambda_m} - \frac{V_m}{3} \right)^{-1};$$

$$\sum_{k=1}^{N_{фаз}} V_k + V_m = 1, \quad (3.9)$$

где $N_{\text{фаз}}$ – число фазовых включений, λ_m , λ_k – коэффициенты теплопроводности однородной матрицы и фазовых включений соответственно; V_m , V_k – объемные доли матрицы и фазовых включений соответственно.

Стоит отметить, что похожие подходы к моделированию теплопроводности СНУП топлива рассматриваются в работах [111–113].

Расчет эффективной теплопроводности СНУП топлива

Для иллюстрации эффектов, описываемых моделью, был проведён расчет эффективной теплопроводности СНУП топлива с помощью кода БЕРКУТ-У на примере моделирования облучения топливной таблетки до выгорания 12 % тяж.ат. при его фиксированных значениях скорости деления и температуры топлива.

В расчете предполагалось, что начальная плотность топлива составляет ~ 85 % от теоретического значения, топливо содержит примеси ~ 0,1 масс. % углерода и кислорода, а размер топливного зерна 10 мкм. Температура топлива принята равной 1400К (порядок рабочей температуры топлива при облучении в твэлах быстрых реакторов по расчетам кодом БЕРКУТ-У).

При моделировании кодом БЕРКУТ-У предполагается, что ПД образуются в матрице (U, Pu)N. Химически активные ПД диффундируют к границам зерен и образуют отдельные твердые фазы (преципитаты). Рассматривается следующий список преципитатов: металлическая фаза (Mo, Tc, Ru, Rh, Pd), нитридная фаза (Ba_3N_2 , Sr_3N_2), иодид цезия (CsI), теллуридная фаза (BaTe, Cs_2Te), интерметаллическая фаза (Ru_3U , Rh_3U , Pd_3U), оксидная фаза (UO_2 , PuO_2 , BaO, SrO и др.), Карбидная фаза (UC, BaC_2 , SrC_2 и др.) и фаза U_2N_3 .

На рисунке 3.2 представлены полученные в расчете объемные доли вторичных фаз, образующиеся в СНУП топливе при облучении. В данном случае

видно, что с ростом выгорания основной вклад в дополнительный объем системы дают включения двух фаз: U_2N_3 и металлической.

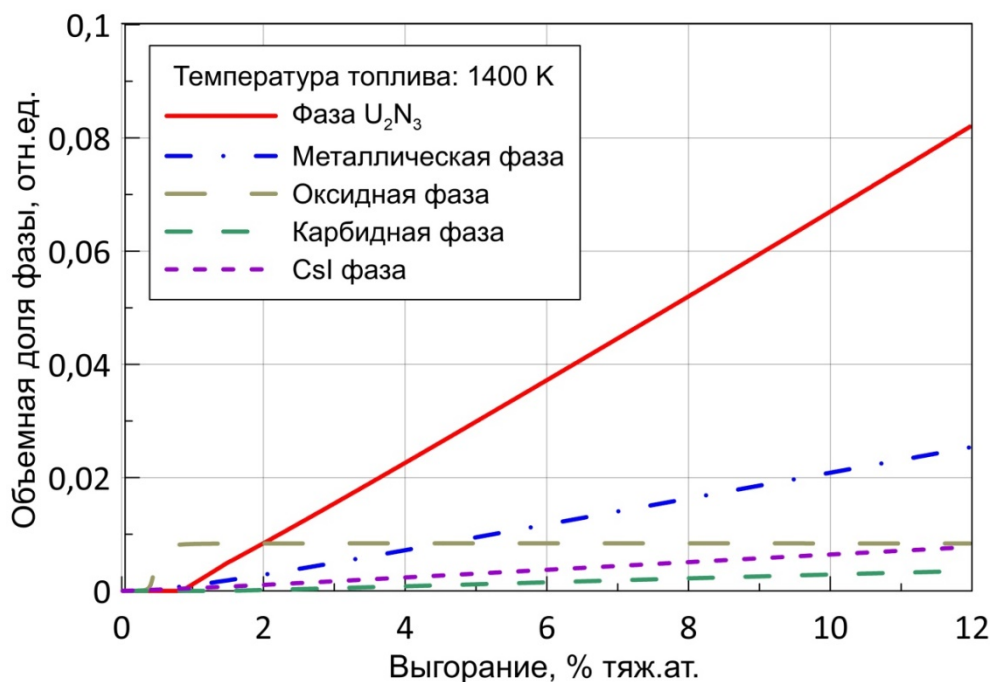


Рисунок 3.2 – Изменение объемного содержания вторичных фаз от выгорания СНУП топлива

На рисунке 3.3 представлен результат расчета эффективной теплопроводности для данного топлива. Обозначения на рисунке 3.3 совпадают с обозначениями переменных в формуле (3.8). Из полученных результатов следует, что по мере роста выгорания и накопления фазы U_2N_3 в матрице $(U, Pu)N$ теплопроводность гетерогенной системы снижается. Вклад других вторичных фаз незначителен.

На рисунках 3.4 и 3.5 представлены зависимости коэффициента влияния из зависимости (3.8) и теплопроводности топлива от его температуры при различных значениях выгорания топлива. Рассматриваются значения температуры топлива от 400 до 1800К с шагом 200К и выгорания топлива – с шагом 5% тяж. ат.

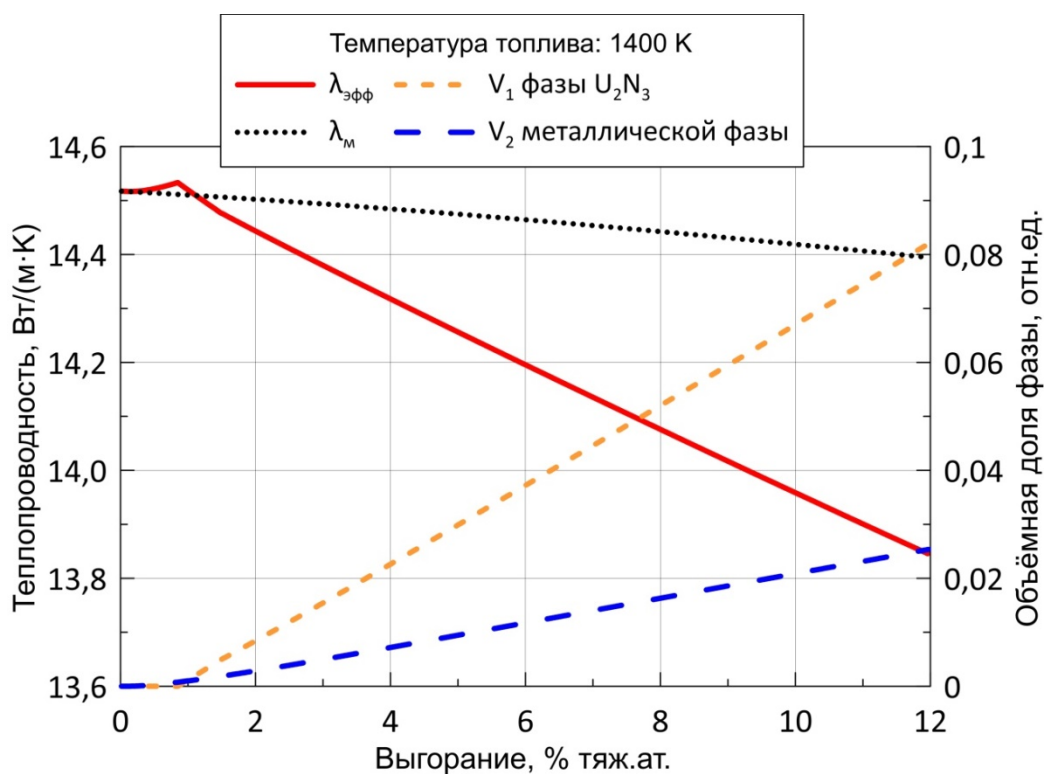


Рисунок 3.3 – Изменение теплопроводности и объемного содержания вторичных фаз от выгорания СНУП топлива

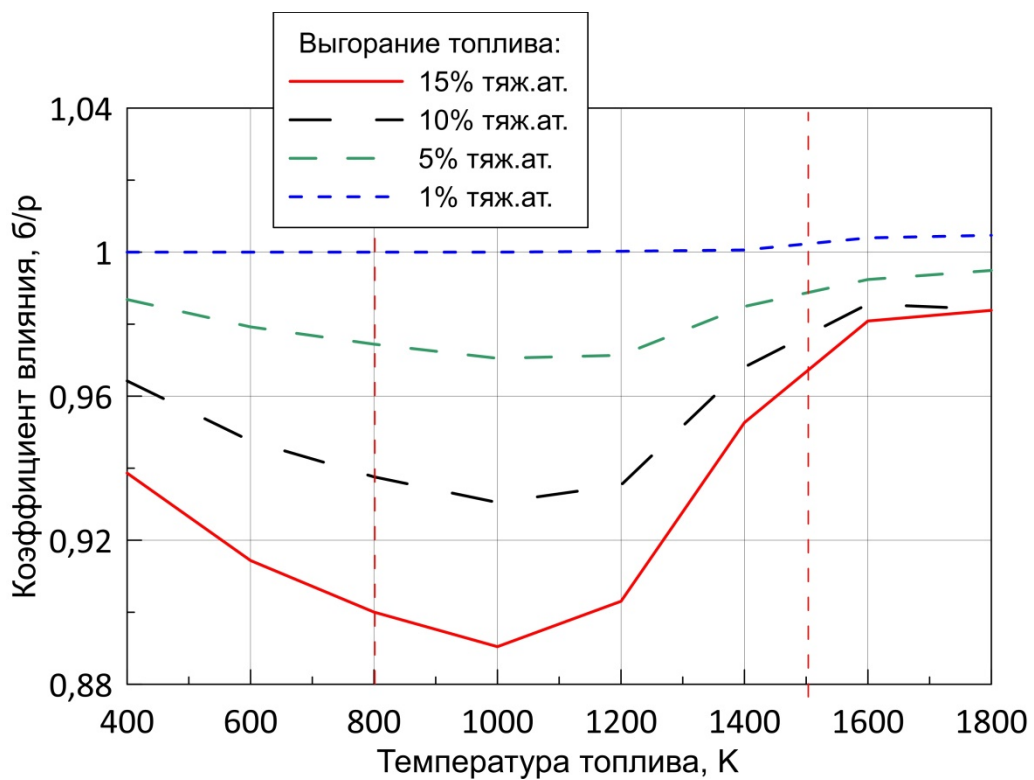


Рисунок 3.4 – Коэффициент влияния вторичных фаз на теплопроводность топлива

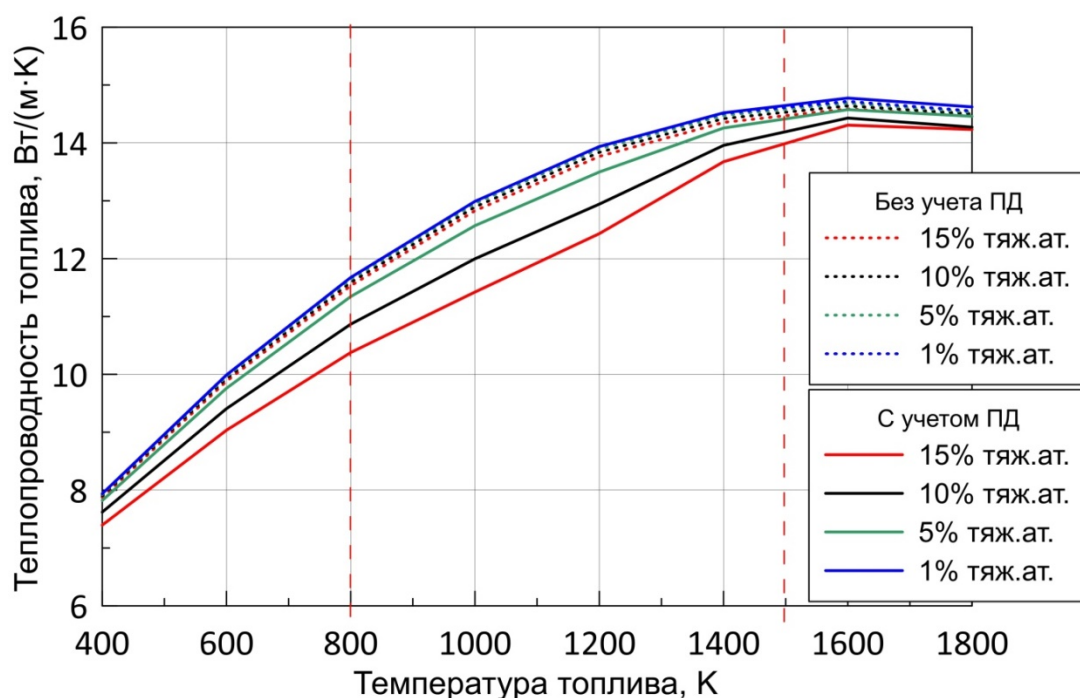


Рисунок 3.5 – Изменение теплопроводности СНУП топлива с его выгоранием

Видно, что с увеличением выгорания топлива его теплопроводность падает из-за образования вторичных фаз. Максимальное влияние оказывается при температуре топлива $\sim 1000\text{K}$.

3.4 Выводы к главе 3

В данной главе приведено краткое описание усовершенствований моделей поведения СНУП топлива в коде БЕРКУТ-У.

Это учет влияния открытой и закрытой пористости СНУП топлива на его распухание, выход ГПД и гелия. Данная доработка позволила более точно моделировать эти процессы, что показала валидация кода на данных ПРИ экспериментальных твэлов, облученных в быстрых реакторах.

Также внедрение в твэльный код БЕРКУТ-У модели расчета эффективной теплопроводности выгоревшего СНУП топлива; показано влияние

образовавшихся в процессе облучения в СНУП топливе твердых преципитатов на его эффективную теплопроводность.

В итоге получена оценка влияние преципитатов, образующихся при облучении СНУП топлива с примесями кислорода и углерода на его теплопроводность в зависимости от выгорания и температуры.

При достижении выгорания топлива $\sim 12\%$ тяж. ат. при определенных условиях его облучения и исходном состоянии эффективная теплопроводности может уменьшиться на величину до 10%. В совокупности с другими эффектами это приводит к изменению эксплуатационной температуры топлива, оказывая влияние на его дальнейшее состояние.

4 Моделирование экспериментов по облучению ТВЭЛОВ со смешанным нитридным уран-плутониевым топливом в быстрых реакторах

Как было сказано выше действующие в России быстрые реакторы, как экспериментальные, так и энергетические, являются платформой для проведения реакторных испытаний, в частности экспериментов по облучению ЭТВС, содержащих ТВЭЛЫ со СНУП топливом. Эксперименты проводятся в рамках «Комплексной программы расчетно-экспериментального обоснования использования плотного топлива для реакторов на быстрых нейтронах», как и послереакторные исследования, выполняемые в АО «ГНЦ НИИАР» [40–59].

Все материалы послереакторных исследований используются для разработки расчетных моделей кода БЕРКУТ-У и проведения валидации некоторого перечня расчетных параметров ТВЭЛА для которых получены экспериментальные данные.

Валидируемыми расчетными параметрами, для которых имеются экспериментальные данные, являются: геометрические размеры (аксиальные и радиальные) топливных таблеток и оболочки ТВЭЛА; количество ГПД и гелия в свободном объеме ТВЭЛА; давление внутри ТВЭЛА; распухание топлива; радиальное распределение пористости топлива и содержания ПД в нем. Эти параметры позволяют прямо или косвенно проверить правильность моделирования некоторых моделируемых процессов, происходящих в топливе при облучении.

Для проверки работоспособности моделей внедренных в код БЕРКУТ-У была составлена матрица валидации кода (таблица 4.1), согласно которой проведена валидация вышеперечисленных параметров на данных послереакторных исследований экспериментальных ТВЭЛОВ со СНУП топливом сборок КЭТВС-1, 2, 3, 6, 7, ЭТВС-4, 5, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17 и 18,

облученных в реакторе БН-600, а также ОУ-1, 2 и 4, ОУ эксперимента БОРА-БОРА, облученных в реакторе БОР-60.

Таблица 4.1 – Матрица валидации кода БЕРКУТ-У для ТВЭЛОВ со СНУП топливом

Валидационный тест («+» – применим для проверки, «-» – не применим для проверки)	Профилометрия ТВЭЛОВ	Количество газа под оболочкой ТВЭЛА	Диаметры топливных таблеток	Диаметральный зазор «таблетки– оболочка»	Распухание топлива	Радиальные профили пористости	Радиальное распределение элементов
КЭТВС-1	+	+	+	+	+	+	+
КЭТВС-2	+	+	+	+	+	+	+
КЭТВС-3	+	+	+	+	+	+	+
ЭТВС-4	+	+	+	+	+	+	+
ЭТВС-5	+	+	+	+	+	+	+
КЭТВС-6	+	+	+	+	+	+	+
КЭТВС-7	+	+	+	+	+	+	+
ЭТВС-8	+	+	+	+	+	+	+
ЭТВС-9	+	+	+	+	+	+	+

Продолжение таблицы 4.1

Валидационный тест («+» – применим для проверки, «–» – не применим для проверки)	Профилометрия ТВЭЛОВ	Количество газа под оболочкой ТВЭЛА	Диаметры топливных таблеток	Диаметральный зазор «таблетки– оболочка»	Распухание топлива	Радиальные профили пористости	Радиальное распределение элементов
ЭТВС-10	+	+	+	+	+	+	+
ЭТВС-11	+	+	+	+	+	+	+
ЭТВС-12	+	+	+	+	+	+	+
ЭТВС-13	+	+	+	+	+	+	+
ЭТВС-14	+	+	+	+	+	+	+
ЭТВС-16	+	+	+	+	+	+	+
ЭТВС-17	+	+	+	+	+	+	+
ЭТВС-18	+	+	+	+	+	+	+
ОУ-1	+	+	+	+	+	+	+
ОУ-2	+	+	+	+	+	+	+
ОУ-4	+	+	+	+	+	+	+
БОРА-БОРА	+	+	–	–	+	+	+

В данной работе представлена валидация кода БЕРКУТ-У на данных послереакторных исследований экспериментальных ТВЭЛОВ из опубликованных (находящихся в открытом доступе) работ, а именно на данных по ТВЭЛАм сборок КЭТВС-1, КЭТВС-7 и ЭТВС-5 для ключевых параметров: количества (выход)

ГПД в свободной объеме твэла и распухания топлива. Для формирования целостной картины валидации, анализ также выполнен по совокупности данных всех исследуемых сборок, облученных в реакторах БН-600 и БОР-60, без привязки к конкретным твэлам.

4.1 Характеристика экспериментальных твэлов и параметры их эксплуатации

В данной работе рассматриваются два типа ЭТВС: комбинированные сборки №1 (КЭТВС-1) и №7 (КЭТВС-7), содержащие твэлы типа БН-600, и сборка №5 (ЭТВС-5) – все твэлы типа БРЕСТ-ОД-300. Конструкции, геометрические параметры твэлов и условия облучения приведены в работах [47–49]. Отличительными особенностями твэлов представленных ЭТВС являются их геометрические параметры и соответствующие размеры топливных таблеток. Параметры твэлов используемые для расчетов и условия их эксплуатации приведены в таблицах 4.2 и 4.3 соответственно.

Таблица 4.2 – Параметры твэлов со СНУП топливом

Параметр	КЭТВС-1	КЭТВС-7	ЭТВС-5
Диаметр оболочки, мм наружный/внутренний	6,9 / 6,1		9,7 / 8,7
Диаметр таблеток, мм наружный/внутренний	5,8 ^{-0,1} / –	5,9 ^{-0,1} / –	8,5 ^{-0,1} / –
Материал оболочки твэла	ЧС68-ИД х.д.		ЭП823-Ш
Топливо	(U, Pu)N		

Таблица 4.3 – Условия облучения твэлов со СНУП топливом

Параметр	КЭТВС-1	КЭТВС-7	ЭТВС-5
Число микрокампаний	3	4	4
Время облучения, эфф. сут	433,1	589,2	589,2
Максимальная линейная мощность, кВт/м	38,3	38,3	39,9
Максимальное выгорание топлива, % тяж. ат.	5,5	7,5	3,8
Максимальная повреждающая доза, сна	55,0	74,0	48,0
Максимальная температура оболочки твэла, °С	676	671	642

4.2 Параметры моделирования твэлов

При моделировании поведения твэлов использовались параметры с базовыми значениями, приведёнными в таблице 4.2. Предполагалось, что начальная плотность топлива составляет ~85 % от теоретического значения (пористость ~15 %). Исходный состав топлива включал 14 % плутония, ~0,1 % примесей углерода и ~0,1 % – кислорода, а размер топливного зерна составлял 10 мкм. Модельные условия облучения, а именно время облучения, максимальные линейная мощность, выгорание, повреждающая доза и температура оболочки твэла, соответствовали данным из таблицы 4.3 [47].

Поскольку неопределенности в данных об изготовлении ТВЭЛОВ и условиях облучения вносят погрешность в расчетные результаты, на моделируемые характеристики топлива и оболочки влияют условия облучения и геометрические параметры ТВЭЛОВ. Для экспериментов со СНУП топливом был составлен перечень варьируемых параметров и определены диапазоны их варьирования от базовых значений (таблица 4.4).

Таблица 4.4 – Варьируемые параметры для моделирования экспериментов со СНУП топливом

Параметр	Диапазон варьирования
Максимальная мощность тепловыделения	$\pm 10 \%$
Максимальная температура оболочки	$-50 \text{ }^{\circ}\text{C}$
Внешний диаметр оболочки	$\pm 0,03 \text{ мм}$
Внутренний диаметр оболочки	$\pm 0,03 \text{ мм}$
Диаметр топливных таблеток	$\pm 0,05 \text{ мм}$
Плотность топлива	$\pm 1,0 \%$ теор.
Размер топливных зерен	$\pm 50 \%$
Содержание плутония в топливе	$\pm 0,5 \%$
Содержание кислорода в топливе	$\pm 60 \%$
Содержание углерода в топливе	$\pm 30 \%$

Входные параметры варьировались одновременно в соответствующих диапазонах и генерировались исходя из нормального распределения. В результате были получены расчетные интервалы (полосы) неопределенности распухания

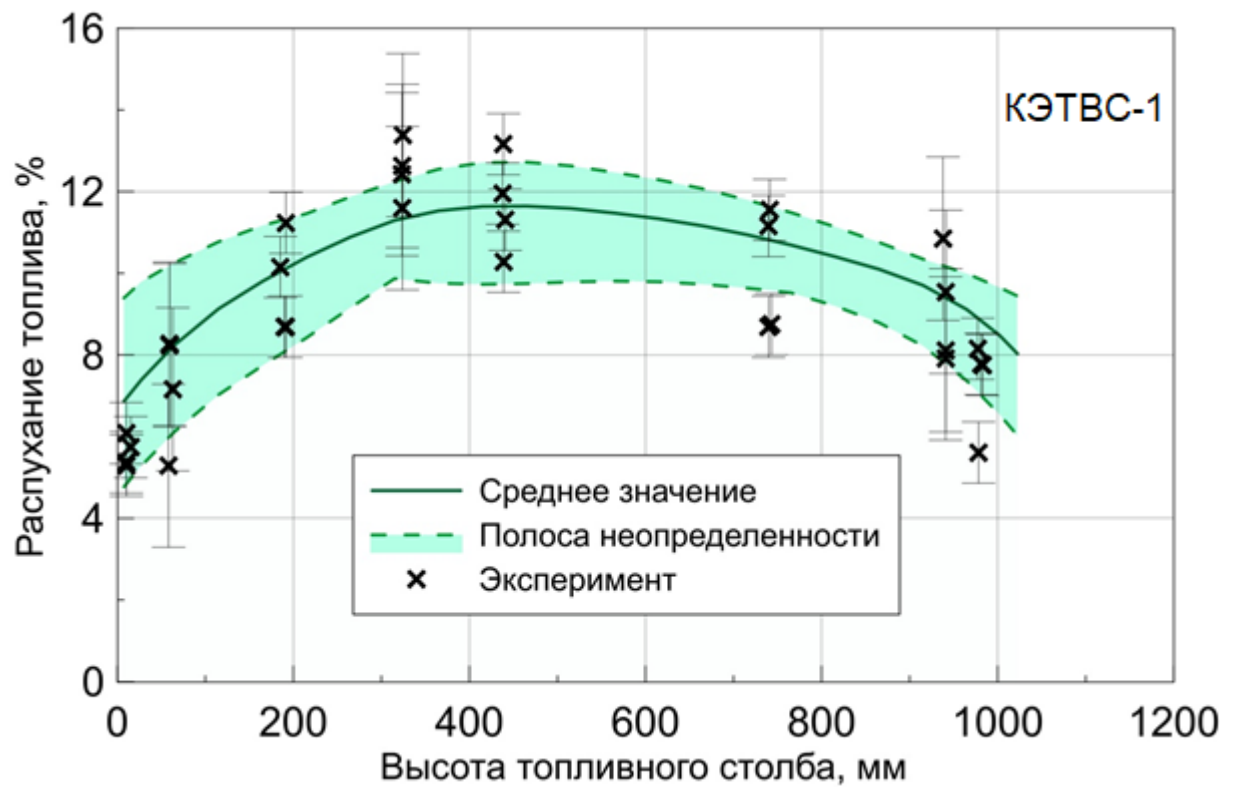
СНУП топлива и количества (выхода) ГПД под оболочкой твэла. Поскольку твэлы КЭТВС-1, КЭТВС-7 и ЭТВС-5 в одной ТВС имели сходные технологические характеристики и условия облучения, то в этих экспериментах рассчитанные результаты усреднялись отдельно для каждой ЭТВС.

4.3 Анализ результатов моделирования твэлов

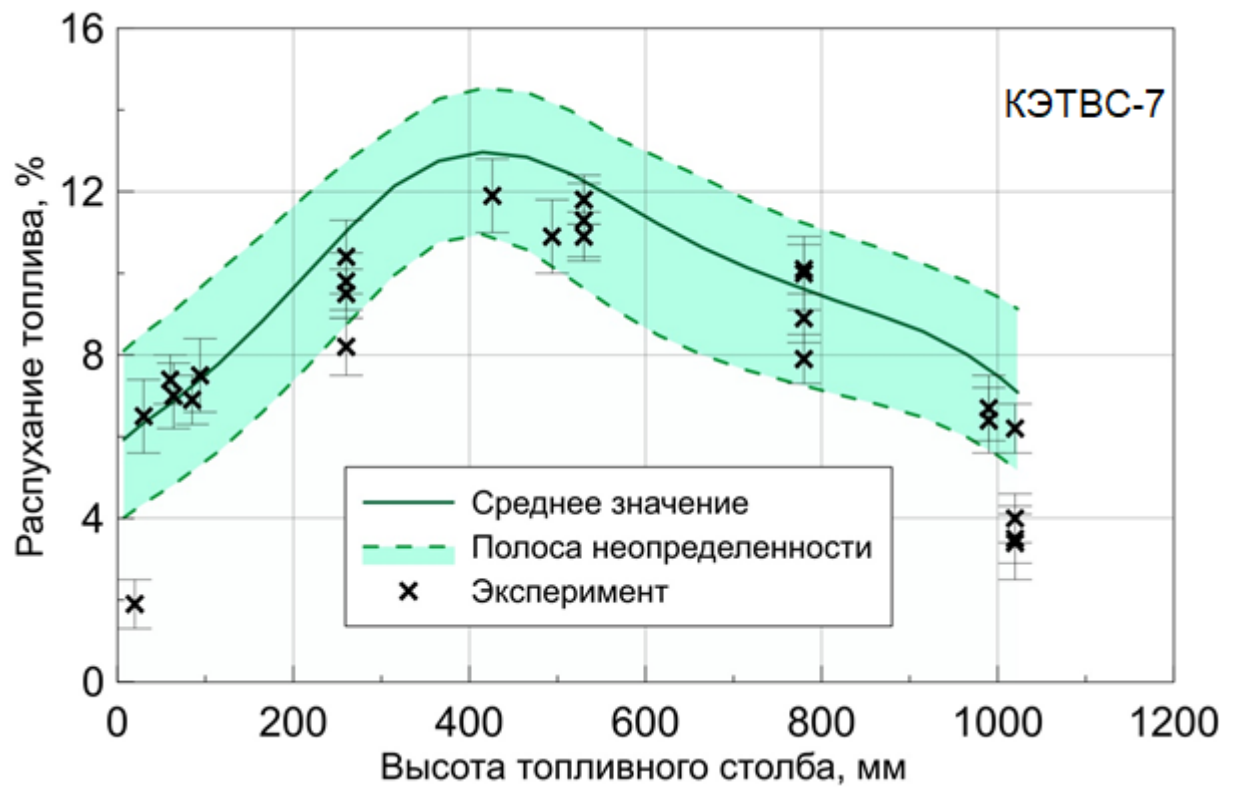
Экспериментальные данные по распуханию СНУП топлива были получены двумя методами: планиметрическими измерениями диаметров таблеток и измерениями плотности топлива. Результаты расчётов высотных (осевых) профилей распухания в срединных частях твэлов №№5, 64, 99, 123 сборок КЭТВС-1 и КЭТВС-7 №№32, 37, 42, 51 ЭТВС-5 показаны на рисунке 4.1.

Видно, что расчеты достаточно хорошо воспроизводят результаты измерений: для трехборок экспериментальные точки лежат, в основном, в пределах полос неопределенности между минимумом и максимумом. Присутствует относительно небольшое занижение распухания в центральной области твэлов ЭТВС-5, которое, по-видимому, может быть связано с различием между расчетными и реальными параметрами топлива и/или эксплуатационной температурой топлива (значительное влияние этих характеристик обсуждается в главе 5).

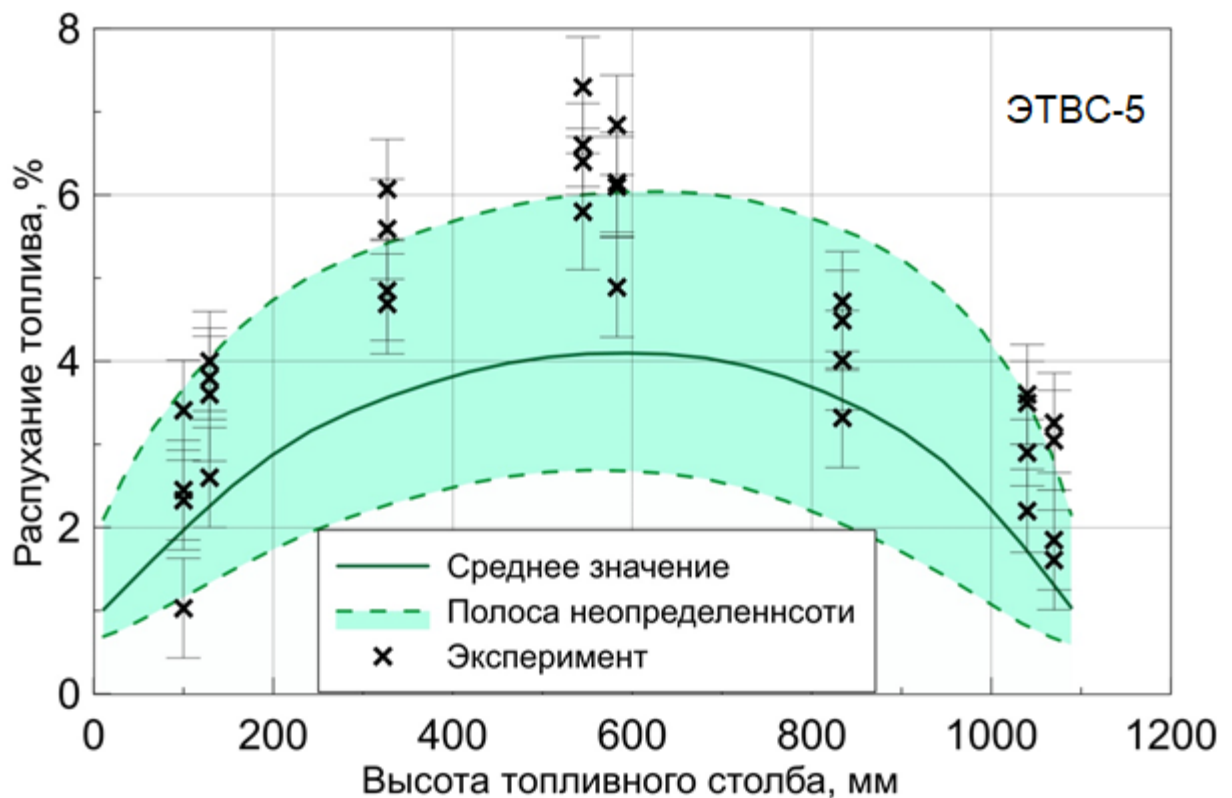
Отметим, что для всех рассматриваемых твэлов расчётный вклад твердотельного распухания в полное распухание составляет приблизительно 2–4 %. Расчет показывает, что твердотельное распухание связано, преимущественно, с формированием фазы полуторного нитрида U_2N_3 и вторичных оксидных фаз. Основной вклад в распухание даёт газовая компонента; отношение вкладов газового и твердотельного распухания составляет ~4:1, ~3:1 и ~1:1 для КЭТВС-1, КЭТВС-7 и ЭТВС-5 соответственно.



а)



б)



в)

Рисунок 4.1 – Результаты анализа неопределенности распухания топлива в сравнении с экспериментом в твэлах КЭТВС-1 (а), КЭТВС-7 (б) и ЭТВС-5 (в)

Расчетные данные по количеству газа, вышедшего под оболочку твэла, вместе с результатами измерений приведены на рисунке 4.2. Экспериментальные данные по объёму газа, вышедшего из СНУП топлива под оболочку твэлов, были получены на установке лазерного прокола. Анализ состава газовой фазы под оболочкой проводился масс-спектрометрическим методом. Сравнение результатов расчёта объемов ГПД под оболочками твэлов на конец кампании с данными ПРИ [47–49] показывает, что для КЭТВС-7 и ЭТВС-5 экспериментальные данные по объемам ГПД (ксенон и криптон) лежат между расчетными минимумом и максимумом, находясь в удовлетворительном согласии друг с другом. В то же время, экспериментальные данные для сборки КЭТВС-1 имеют заметный разброс, почти в два раза, при том, что все четыре

исследованных твэла состояли из практически идентичного топлива и облучались в весьма близких условиях. Этот разброс с большой вероятностью связан с недостаточно отработанной технологией производства топлива, так как эта сборка была испытана одной из первых в рамках программы облучения экспериментальных твэлов со СНУП топливом.

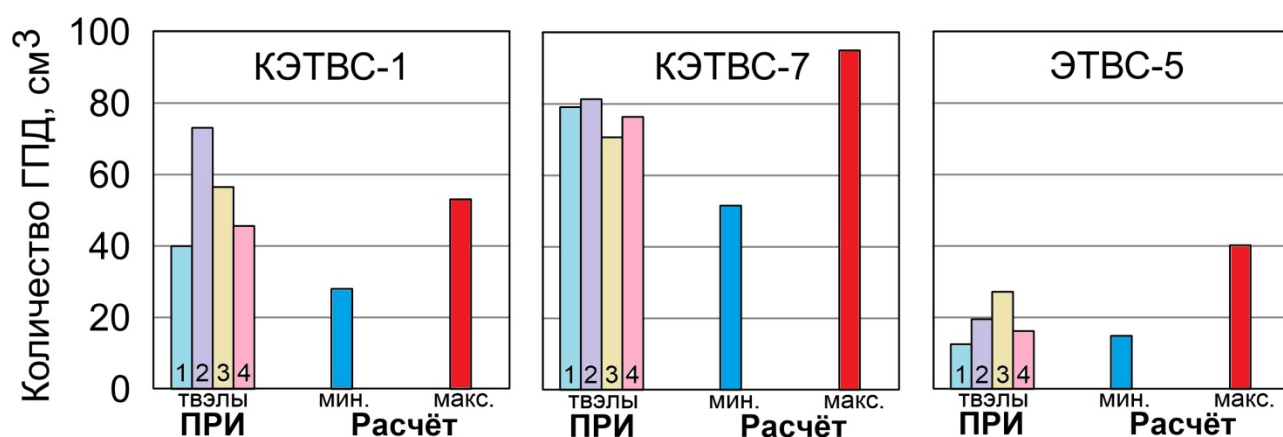
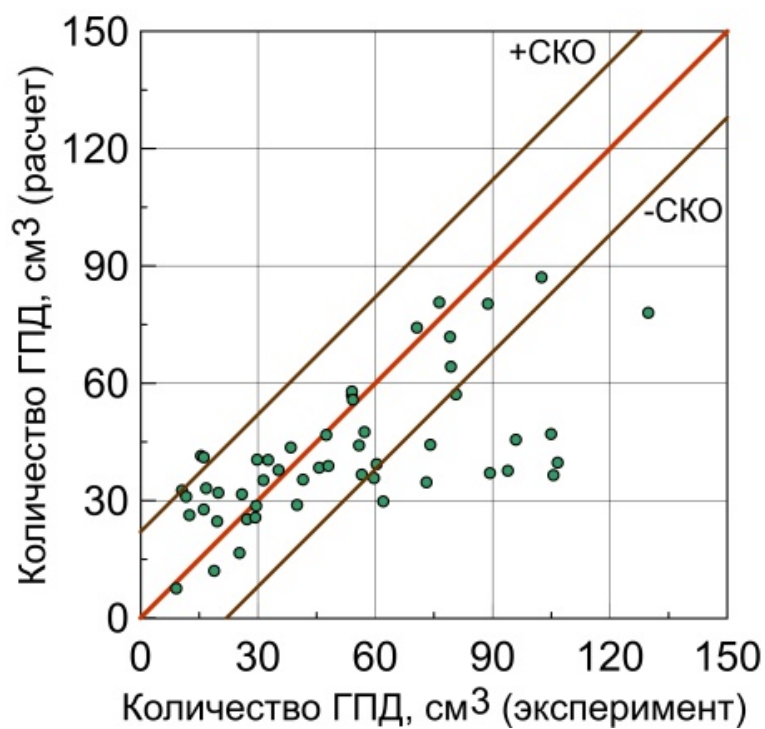


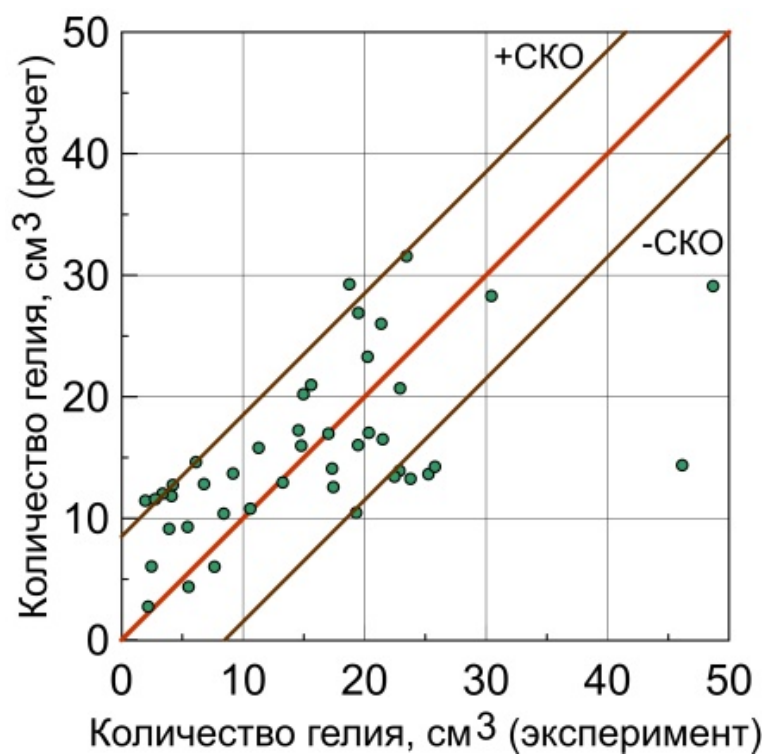
Рисунок 4.2 – Результаты анализа неопределенности количества ГПД в сравнении с экспериментом в твэлах КЭТВС-1, КЭТВС-7 и ЭТВС-5

Помимо исследования данных по каждому экспериментальному твэлу отдельно, проведен совместный анализ данных для всех (~100) экспериментальных твэлов ЭТВС, включенных в матрицу валидации (таблица 4.1) по максимальному распуханию топлива, количеству ГПД и гелия в свободном объеме твэла. Анализ результатов, представленных на рисунке 4.3, показал, что расчетные данные удовлетворительно согласуются с соответствующими экспериментальными значениями. Большая их часть лежит на диагонали, и почти все точки лежат в пределах коридора среднеквадратичного отклонения. Значительные отклонения, особенно в выходе ГПД, с большой вероятностью связаны с отсутствием большинства в материалов ПРИ данных о

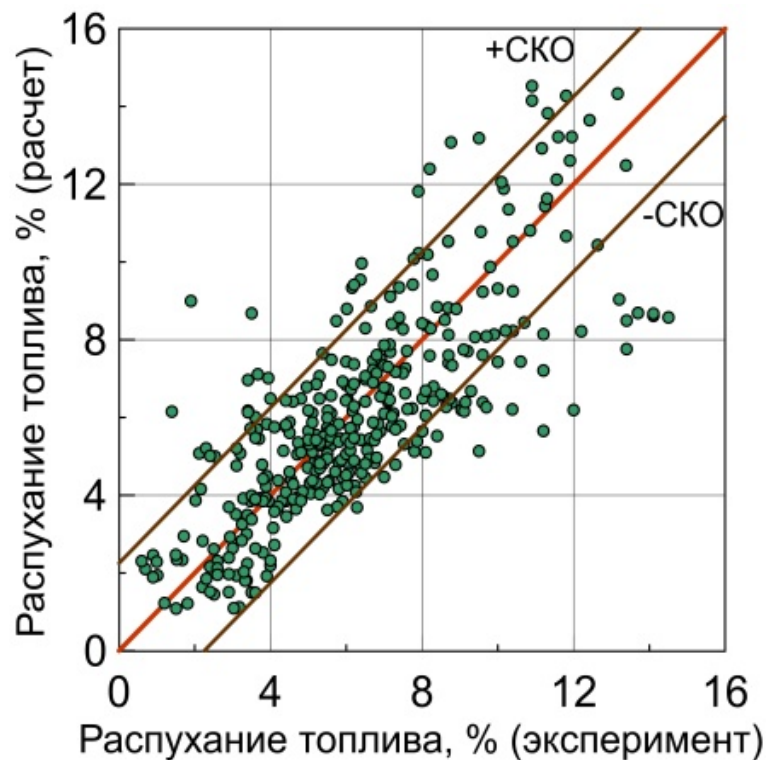
соотношении закрытой и открытой пористости как в исходном, так и в облученном топливе.



а)



б)



в)

Рисунок 4.3 – Результаты расчетов и измерений выхода ГПД (а), гелия (б) из топлива и его распухания (в)

Интервалы значений погрешностей для выхода ГПД и гелия, распухания СНУП топливом, полученных в результате валидации кода, равны $[-26,4\%; +150,0\%]$, $[-11,7\%; +21,3\%]$ и $[-19,7\%; +48,3\%]$ соответственно. По итогам валидации область определения кодом БЕРКУТ-У этих параметров по выгоранию топлива принята до 12,1 % тяж.ат.

Сравнение расчетных результатов с данными ПРИ свидетельствует о том, что твэльный код БЕРКУТ-У позволяет удовлетворительно прогнозировать параметры твэлов со СНУП топливом при облучении в быстрых реакторах.

4.4 Выводы к главе 4

Полученные в данной работе результаты моделирования твэльным кодом БЕРКУТ-У свидетельствуют о том, что код позволяет удовлетворительно прогнозировать поведение СНУП топлива в условиях облучения в быстрых реакторах.

Составлена матрица валидации кода БЕРКУТ-У, проведена валидация и получены удовлетворительные значения погрешностей расчётных параметров состояния твэлов со СНУП топливом, а именно по распуханию топлива, количеству ГПД и гелия в свободном объеме твэла.

Вместе с тем, следует отметить ограниченность экспериментального материала. Для более детальной настройки и валидации твэльного кода БЕРКУТ-У требуются дополнительные данные, касающиеся как исходного нуклидного состава, распределения по размерам топливных зерен, исходной пористости и т.д., так и изменения этих параметров топлива по времени облучения. Для «тонкой» настройки отдельных моделей кода требуется также проведение отдельных экспериментальных исследований с фиксированными параметрами, включая ампульные тесты. Дальнейшая валидация кода планируется по мере появления новых экспериментальных данных.

5 Влияние различных характеристик смешанного нитридного уран-плутониевого топлива на его поведение под облучением

Одними из исходных параметров СНУП топлива, значительно влияющих на его поведение, являются исходный размер топливного зерна, содержание в нем примесей кислорода и углерода, а также его температура, при которой оно облучается в ядерном реакторе. В частности информация о влиянии на поведение топлива представлена как в работах по послереакторным исследованиям [40–57], так и в научно-исследовательской работе [59] о влиянии облучения быстрыми нейтронами на микроструктуру и распухание уран-плутониевого нитридного топлива.

5.1 Влияние исходных параметров топлива

Для исследования влияния исходных параметров СНУП топлива на его поведение под облучением была проведена серия расчетов с использованием усовершенствованного топливного модуля MFPR/R кода БЕРКУТ-У. При этом в течение всего расчета не менялись размеры таблеток и оболочки твэла, зазора «таблетки–оболочка», оставались постоянными скорость делений и температура топлива, которая составляла 1400 К. Расчет проводился до максимального значения выгорания топлива 12 % тяж. ат. Топливо – СНУП (плотность 85 % от теоретического значения, содержание плутония 14 %, содержание примесей углерода и кислорода – 0,1 %).

5.1.1 Влияние размера топливного зерна

Учитывая вышесказанное, рассматривается влияние исходного размера топливного зерна на такие параметры как твердотельное и газовое распухание, выход ГПД (ксенон и криптон) в зазор между таблетками и оболочкой.

Как было сказано ранее, в коде БЕРКУТ-У изменение объёма топливной таблетки, которое возникает в процессе облучения, представляет собой сумму газового распухания, определяемое суммарным объёмом внутри- и межзёрненных газовых пузырей и пор, и твердотельного, связанного с процессами распада актинидов и накоплением ПД в топливе в конденсированных фазах.

На рисунке 5.1 представлены вклады газового и твердотельного в общее распухание топлива в зависимости от его выгорания при фиксированных размере топливного зерна (10 мкм) и температуре облучения топлива (1400 К).

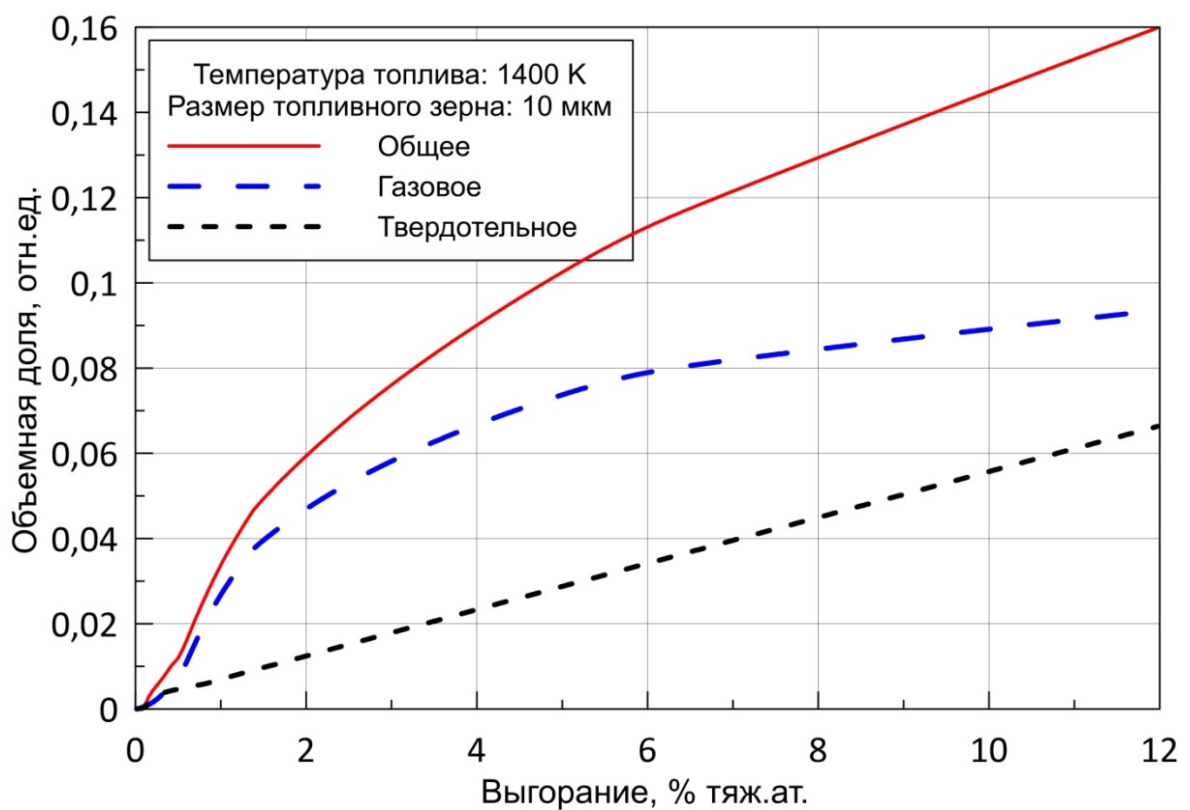


Рисунок 5.1 – Распухание СНУП топлива

Общее распухание СНУП топлива увеличивается с выгоранием, на ранних стадиях быстрее за счет активного газового распухания из-за образования газовых продуктов деления и пузырей, но затем замедляется, поскольку система стремится к равновесию между образованием газов и их удержанием в топливе, и становится преимущественно определяемым твердотельным распуханием.

Согласно отечественным данным послереакторных исследований размер топливного зерна в основном варьируется от 5 до 25 мкм. Поэтому рассматриваются 5 расчетов с размерами зерна: 5, 10, 15, 20 и 25 мкм.

На рисунках 5.2–5.4 представлены зависимости объемных долей твердотельного и газового распухания, относительного выхода ксенона из топливной таблетки в зазор «таблетки–оболочка» от выгорания топлива при разных исходных размерах топливного зерна.

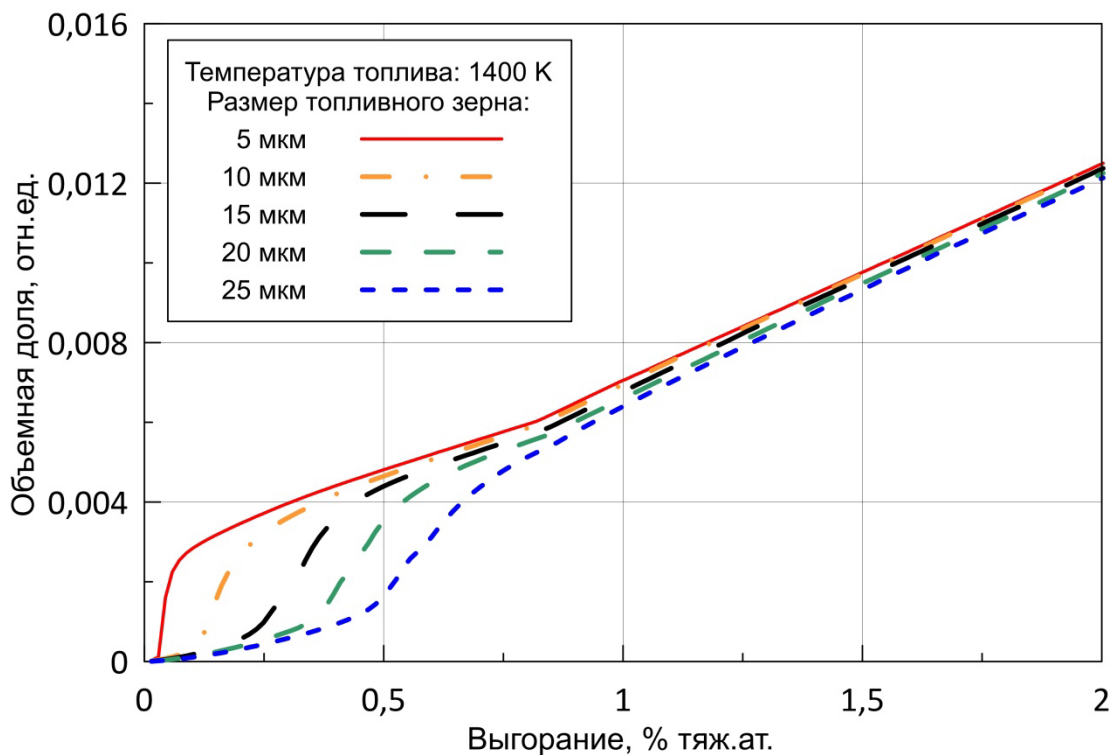


Рисунок 5.2 – Объемная доля твердотельного распухания СНУП топлива

Для более детальной прорисовки рисунок 5.2 построен только до 2 % тяж. ат. выгорания топлива, при выгораниях выше 2 % тяж. ат. величина твердотельного распухания для разных размеров топливного зерна практически совпадают и определяется главным образом степенью выгорания. Размер топливного зерна существенно влияет на процесс твердотельного распухания на ранних стадиях выгорания ($< \sim 1\%$). Различия связаны с тем, что формирование твердотельных преципитатов начинается с момента времени диффузионного выхода ПД на границу зерна, которое растёт с ростом радиуса топливного зерна R_{grain} , как $t \sim R_{grain}^2 / D$, где D – коэффициент диффузии ПД.

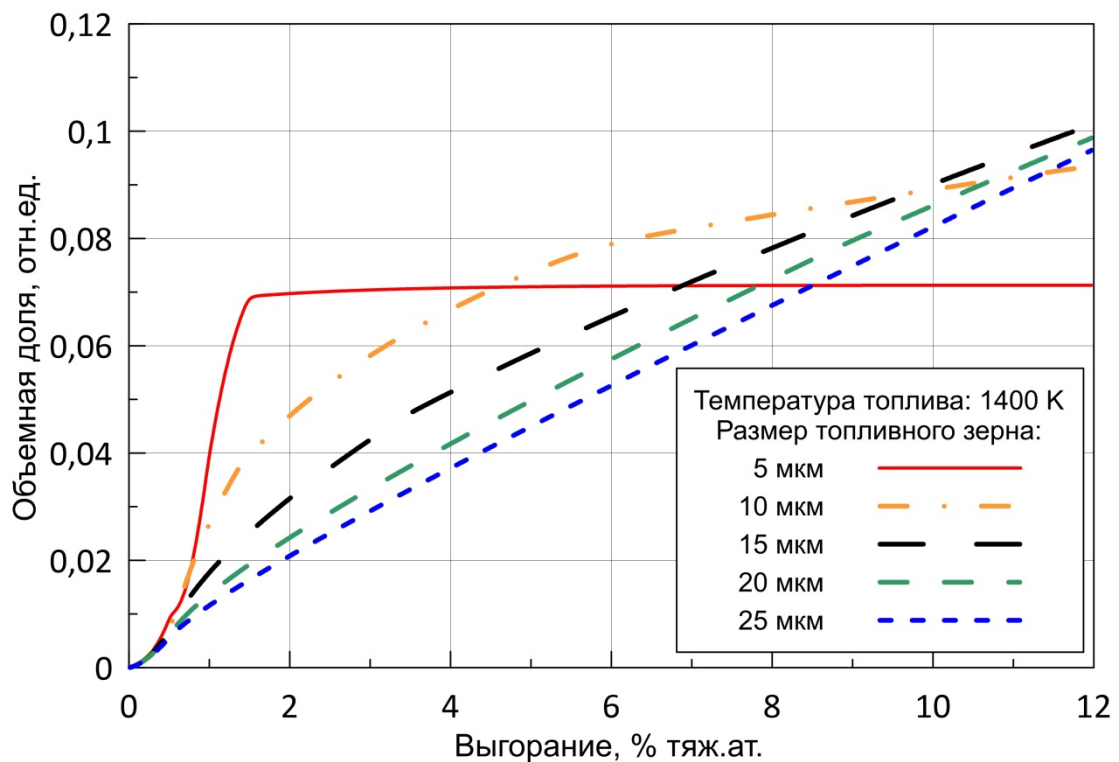


Рисунок 5.3 – Объемная доля газового распухания СНУП топлива

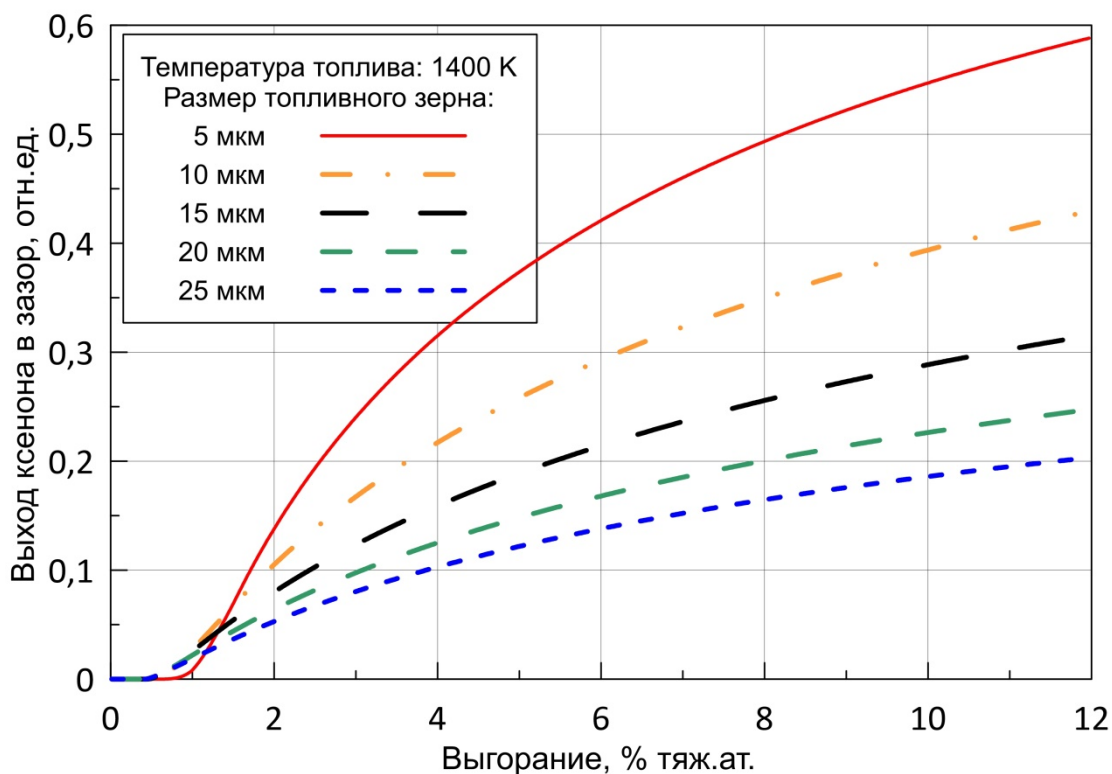


Рисунок 5.4 – Относительный выход ксенона из топливной таблетки

Что касается газового распухания и выхода ксенона на рисунках 5.3 и 5.4 видна существенная зависимость от размера зерна на протяжении всего времени облучения. Чем меньше размер зерна, тем больше газовое распухание и больше выход ГПД. Это также связано с тем, что атомам газа необходимо некоторое время, чтобы продиффундировать до границы зерна, и, следовательно, чем меньше зерно, тем меньше время для выхода на границу зерна и наоборот.

Для полного понимания взаимного влияния, на рисунках 5.5–5.7 представлены зависимости при трех разных температурах топлива: 1000, 1400 и 1800 К и размерах топливного зерна: 5, 15 и 25 мкм, которые показывают сильное влияние температуры топлива, что будет показано ниже (смотреть п. 5.2).

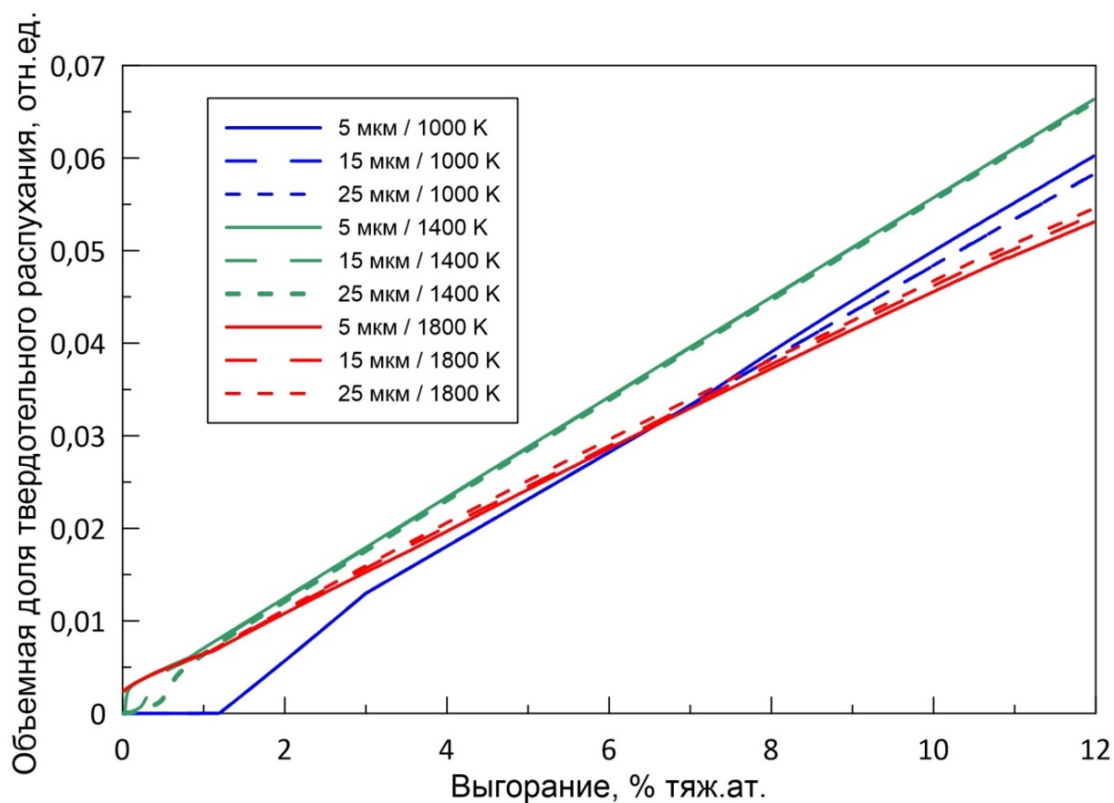


Рисунок 5.5 – Твердотельное распухание при разных температурах и размерах зерна

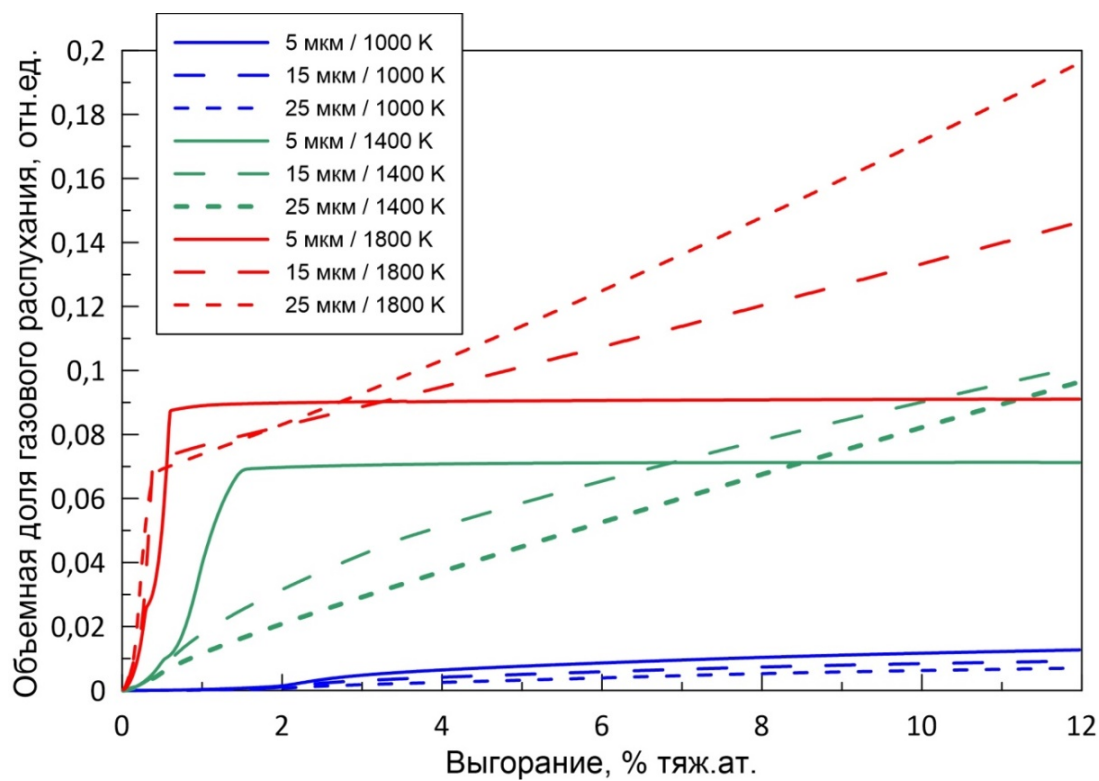


Рисунок 5.6 – Газовое распухание при разных температурах и размерах зерна

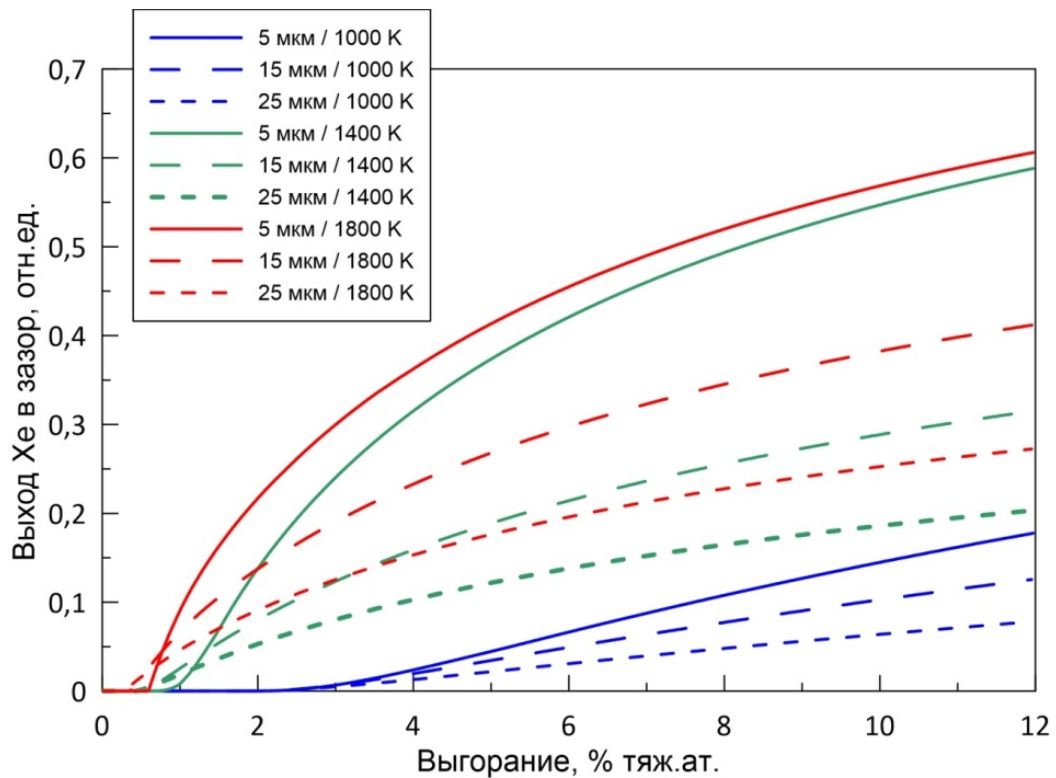


Рисунок 5.7 – Выход ксенона при разных температурах и размерах зерна

Твердотельное распухание топлива линейно растет в процессе его выгорания и значительно не меняет свое поведение для разных значений температуры и размера топливного зерна. При таких условиях конечные значения объемной доли твердотельного распухания топлива при его выгорании ~12% тяж.ат. лежат в интервале от 5 до 7%.

Газовое распухание ядерного топлива значительно зависит как от температуры топлива, так и от размера топливного зерна. С увеличением температуры топлива (от 1000 К до 1800 К) объемная доля газового распухания за счет ускорения диффузии газовых продуктов деления становится значительно выше для всех размеров зерен. При более высоких температурах (например, 1800 К) наблюдается более быстрый и значительный рост объемной доли газового распухания на ранних стадиях выгорания, это касается и малых размеров топливного зерна. С ростом выгорания топлива при размерах топливных зерен около 5 мкм скорость распухания снижается и выходит на плато, связано это с

установлением равновесия между образованием газов и их удержанием в топливе.

Таким образом, оптимальный выбор размера топливного зерна и контроль температуры являются ключевыми факторами для управления газовым распуханием и обеспечения надежности работы ТВЭЛов в быстром реакторе.

5.1.2 Влияние содержания кислорода и углерода в топливе

Как уже было сказано ранее, исходное СНУП топливо содержит небольшое количество примесей кислорода и углерода. Кислород и углерод участвуют в образовании твердых фазовых включений (оксидная и карбидная фазы) и их количество может по-разному влиять на общее распухание топлива.

На рисунке 5.8 представлены вклады оксидной и карбидной фаз в распухание топлива в зависимости от выгорания при фиксированном размере топливного зерна (10 мкм) и температуры облучения (1400 К).

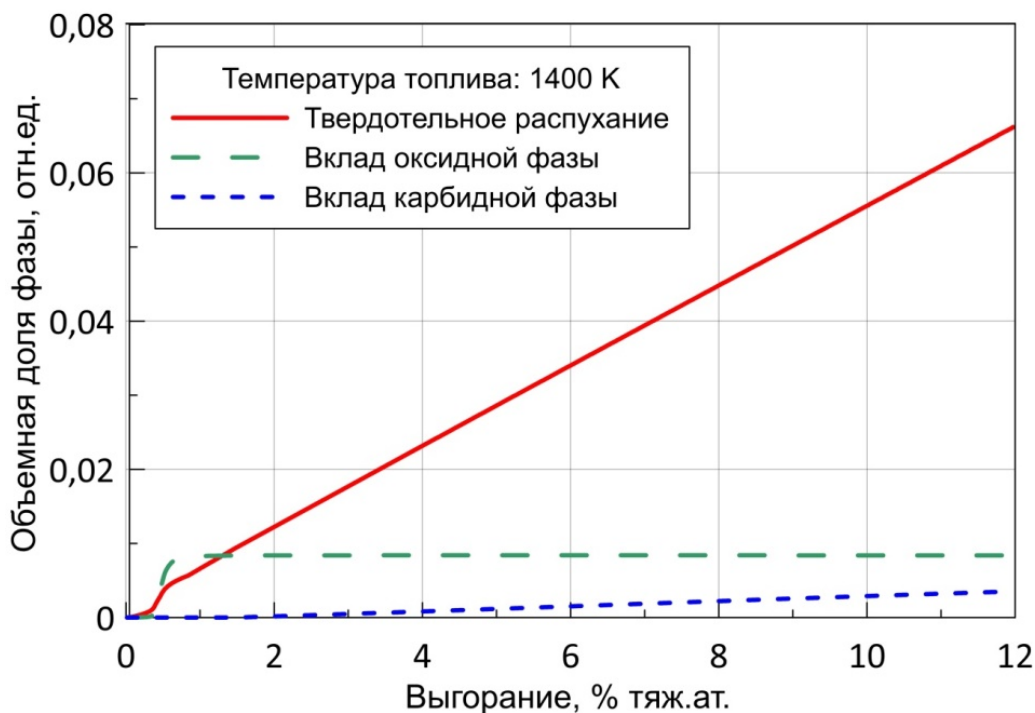


Рисунок 5.8 – Вклад оксидной и карбидной фаз в твердотельное распухание топлива

Далее рассматривается влияние исходного содержания кислорода и углерода в топливе на твердотельное распухание топлива и его вторичные фазы: оксидную, карбидную и нитридную при различном содержании кислорода и углерода в топливе. Согласно отечественным данным послереакторных исследований массовая доля углерода и кислорода в основном варьируется от 0,05 до 0,15 масс. %. Поэтому рассматриваются по три расчета с содержанием углерода/кислорода: 0,05, 0,1 и 0,15 масс. %.

1. Исходное топливо без углерода и с тремя значениями содержания кислорода: 0,05; 0,1 и 0,15 масс. %. На рисунках 5.9 и 5.10 представлены зависимости оксидной фазы и суммарного твердотельного распухания топлива от его выгорания.

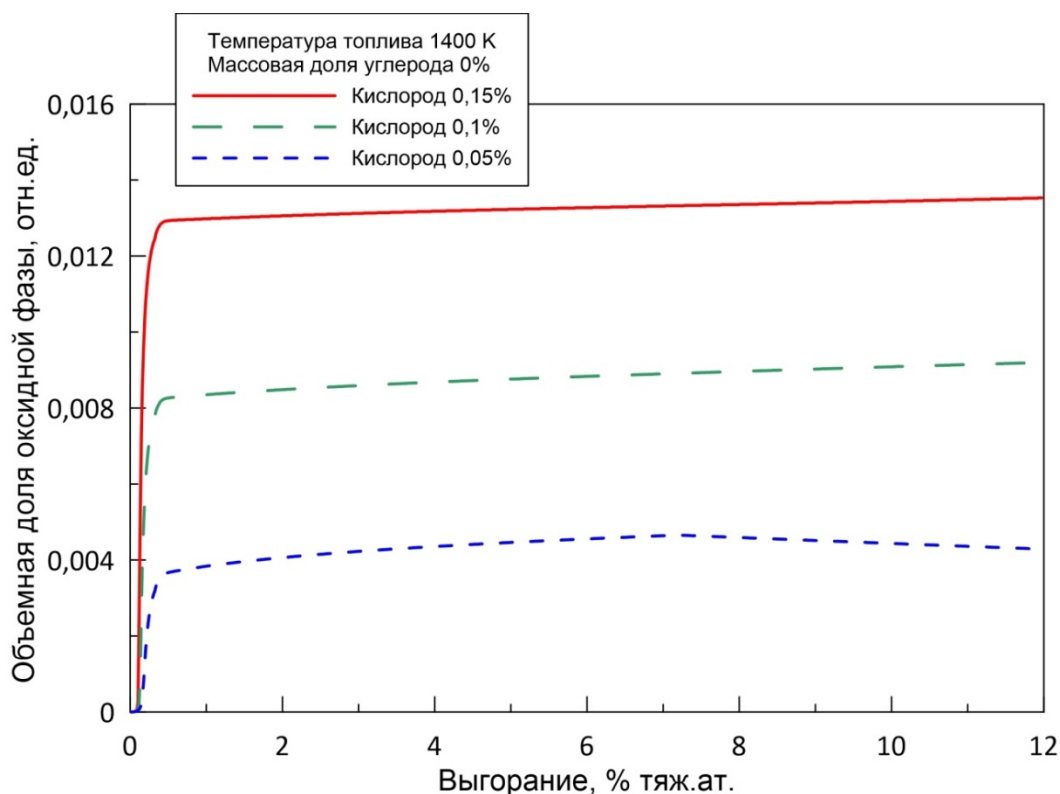


Рисунок 5.9 – Объемная доля оксидной фазы в топливе

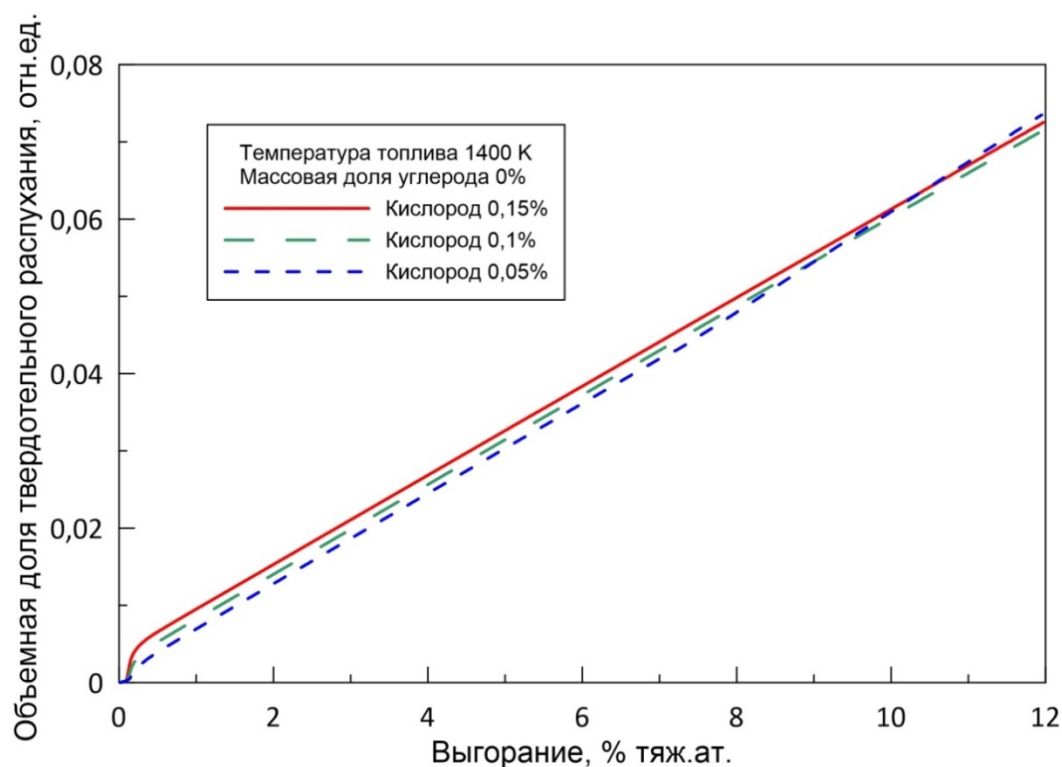


Рисунок 5.10 – Объемная доля твердотельного распухания топлива

Видна явная зависимость фазового состава от концентрации кислорода. В частности, с увеличением содержания кислорода в топливе растет доля оксидной фазы, причем резко возрастает только до выгорания 0,5 % тяж. ат., далее почти не меняется в процессе выгорания топлива. Данное влияние хорошо видно на зависимости суммарного твердотельного распухания топлива от его выгорания (рисунок 5.10).

2. Исходное топливо без кислорода и с тремя значениями содержания углерода: 0,05; 0,1 и 0,15 масс. %. На рисунках 5.11 и 5.12 представлены зависимости карбидной фазы и суммарного твердотельного распухания топлива от его выгорания.

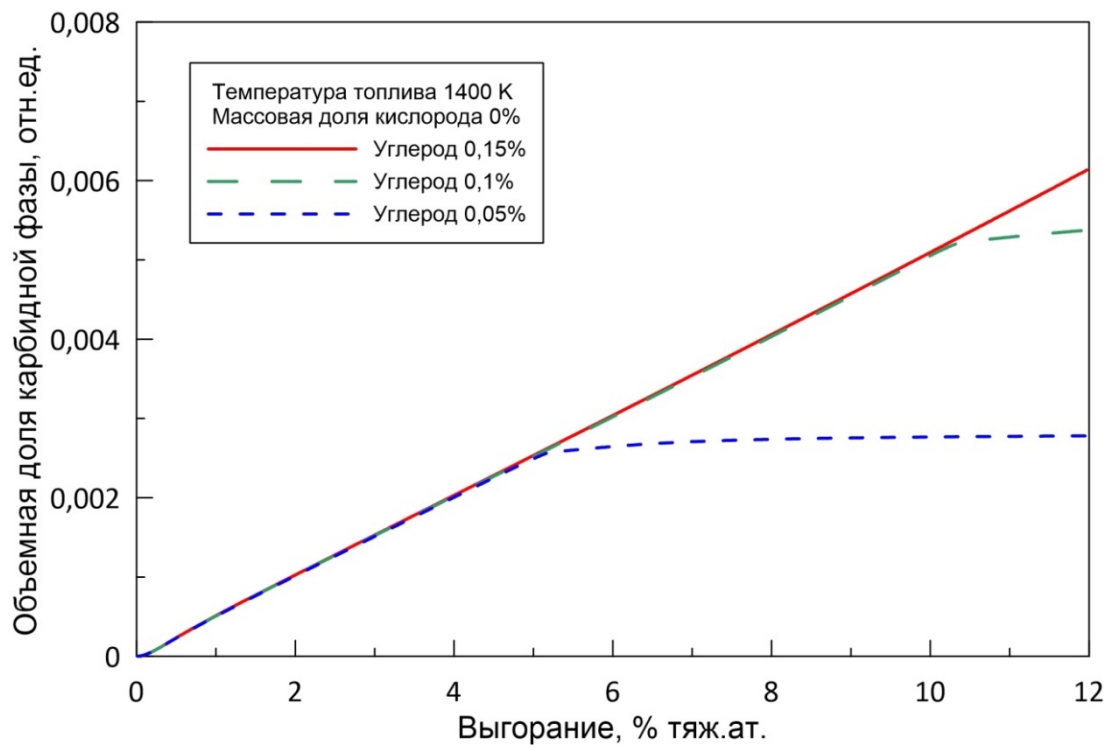


Рисунок 5.11 – Объемная доля карбидной фазы в топливе

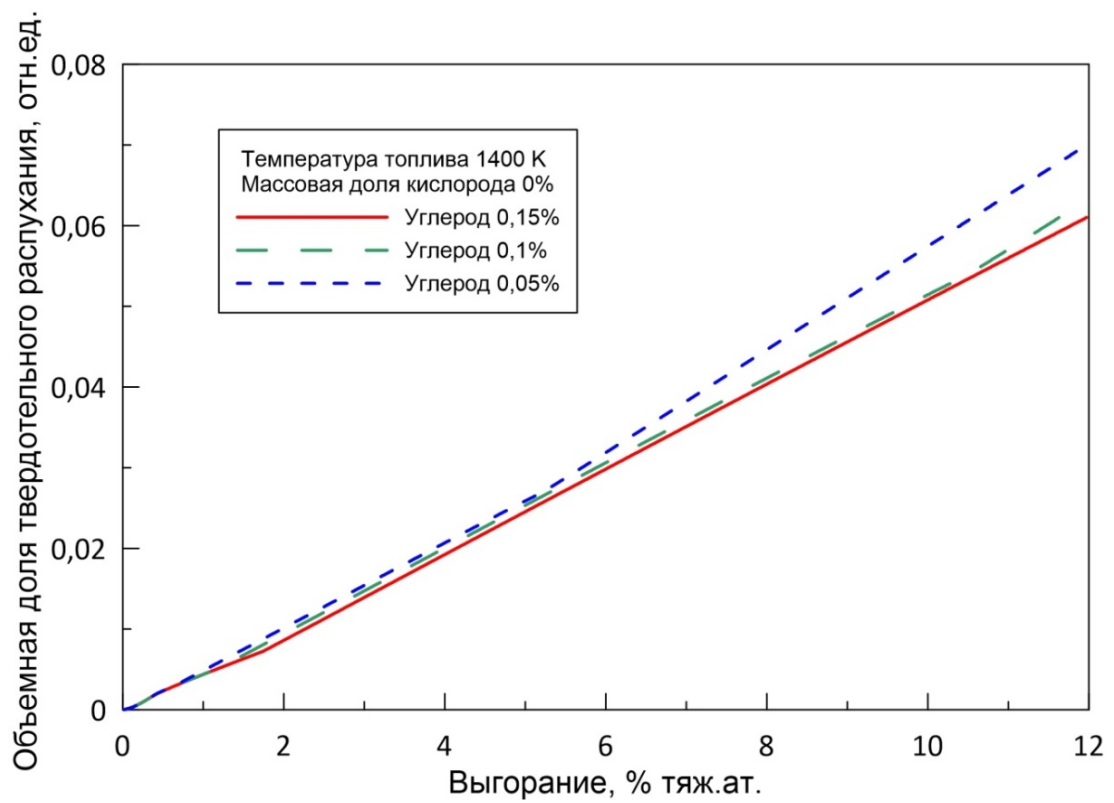


Рисунок 5.12 – Объемная доля твердотельного распухания топлива

Из графиков видно, что доля карбидной фазы монотонно растет, кроме «переломных» моментов для содержания углерода 0,05 и 0,1 масс. % при выгорания 5 и 10 % тяж. ат. соответственно, когда доля карбидной фазы выходит на константу.

Также для полного представления, на рисунках 5.13 и 5.14 представлены зависимости суммарного твердотельного распухания при трех разных температурах топлива: 1000, 1400 и 1800 К и содержаний кислорода/углерода: 0,05, 0,1 и 0,15 масс. %. Заметное влияние температуры проявляется при более высоких выгораниях.

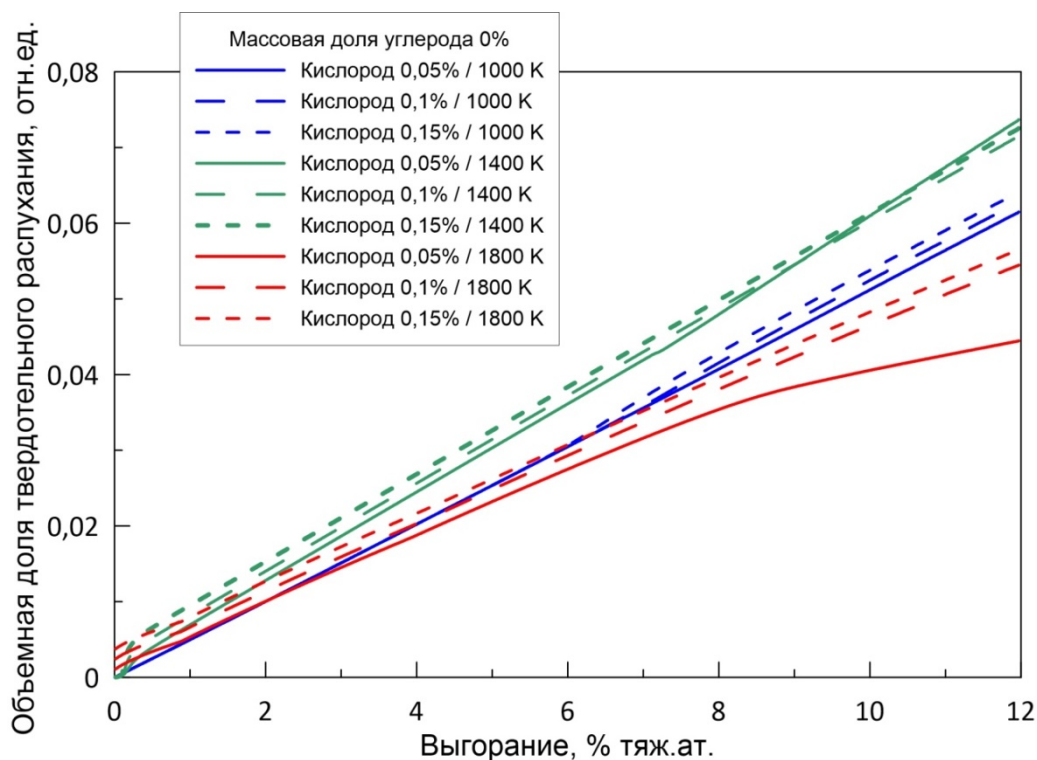


Рисунок 5.13 – Твердотельное распухание при разных температурах и содержании кислорода

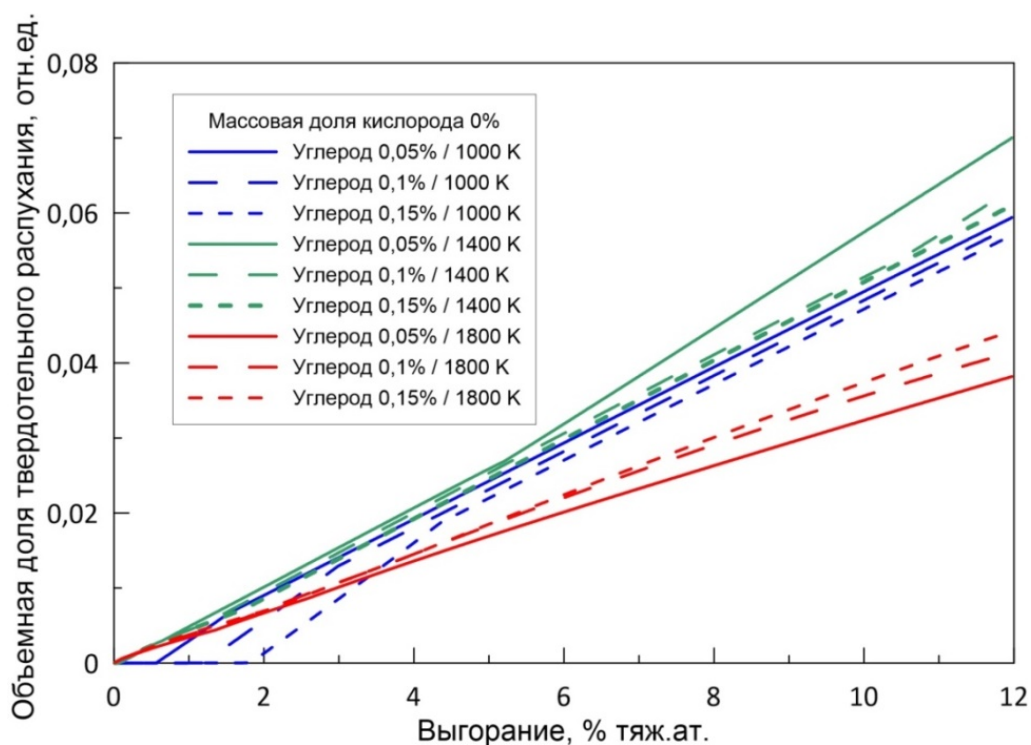


Рисунок 5.14 – Твердотельное распухание при разных температурах и содержании углерода

Твердотельное распухание топлива линейно растет в процессе его выгорания и значительно не меняет свое поведение для разных значений температуры и содержания примесей. При таких условиях конечные значения объемной доли твердотельного распухания топлива при его выгорании ~12% тяж.ат. при нулевых содержаниях углерода и кислорода лежат в интервале от 4 до 8% и от 5 до 7% соответственно.

5.2 Влияние температуры топлива

Как было показано выше, одним из наиболее важных факторов, влияющих на распухание и выход ГПД в свободный объем твэла, является температура, при которой облучается топливо. Расчеты проводились при фиксированных значениях размера топливного зерна 10 мкм, содержании углерода и кислорода по 0,1 масс. %. На рисунках 5.15–5.17 представлены зависимости распухания топлива и

выхода ГПД (ксенона) от выгорания топлива при различных значениях температуры топлива.

Температурная зависимость твердотельного распухания оказывается незначительной. В отличие от твердотельного газовое распухание и, соответственно, выход ГПД из топлива, растут с ростом температуры. В частности, для средней температуры эксплуатации топлива $\sim 1400\text{K}$ газовое распухание не превышает 10 % при достижении выгорания 12 % тяж. ат. Поэтому при эксплуатации необходимо учитывать влияние температуры топлива на его поведение, например, одним из эффективных решений является использование жидкометаллического подслоя (ЖМП) в качестве материала между топливом и оболочкой ТВЭЛ (смотреть п. 5.3).

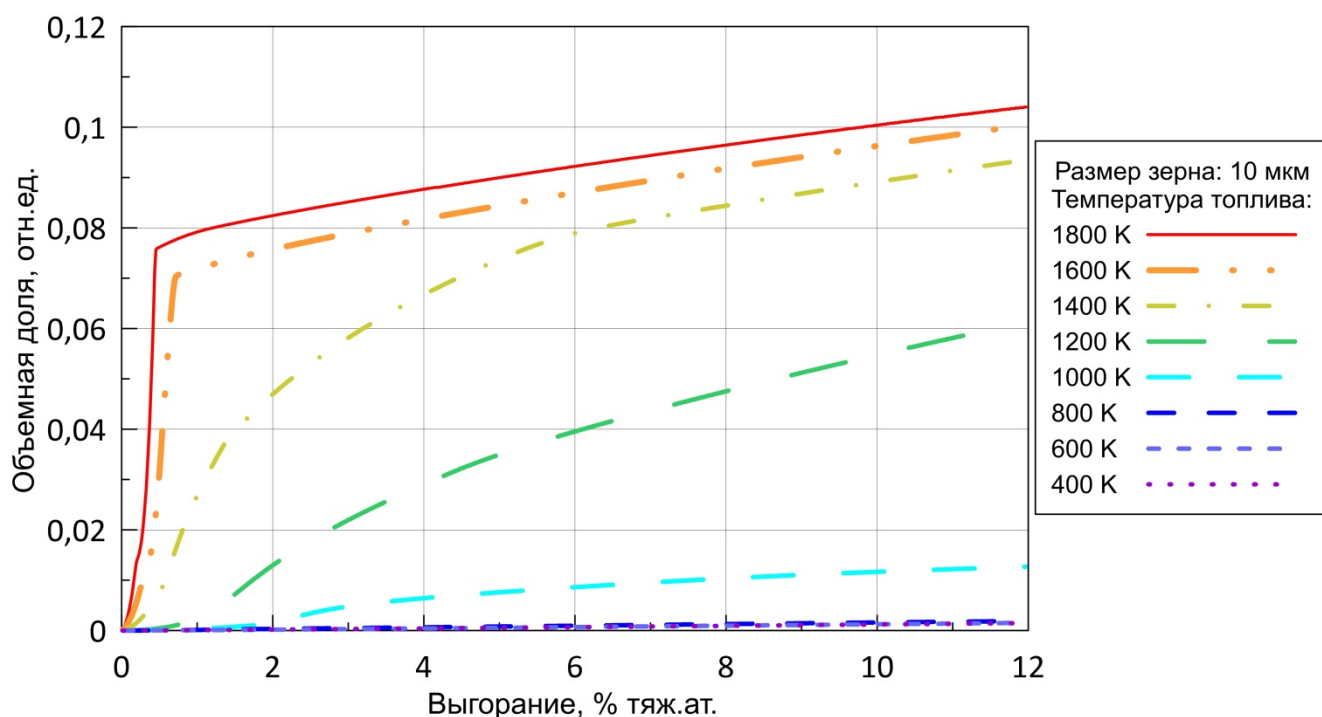


Рисунок 5.15 – Суммарное газовое распухание топлива при различной температуре топлива

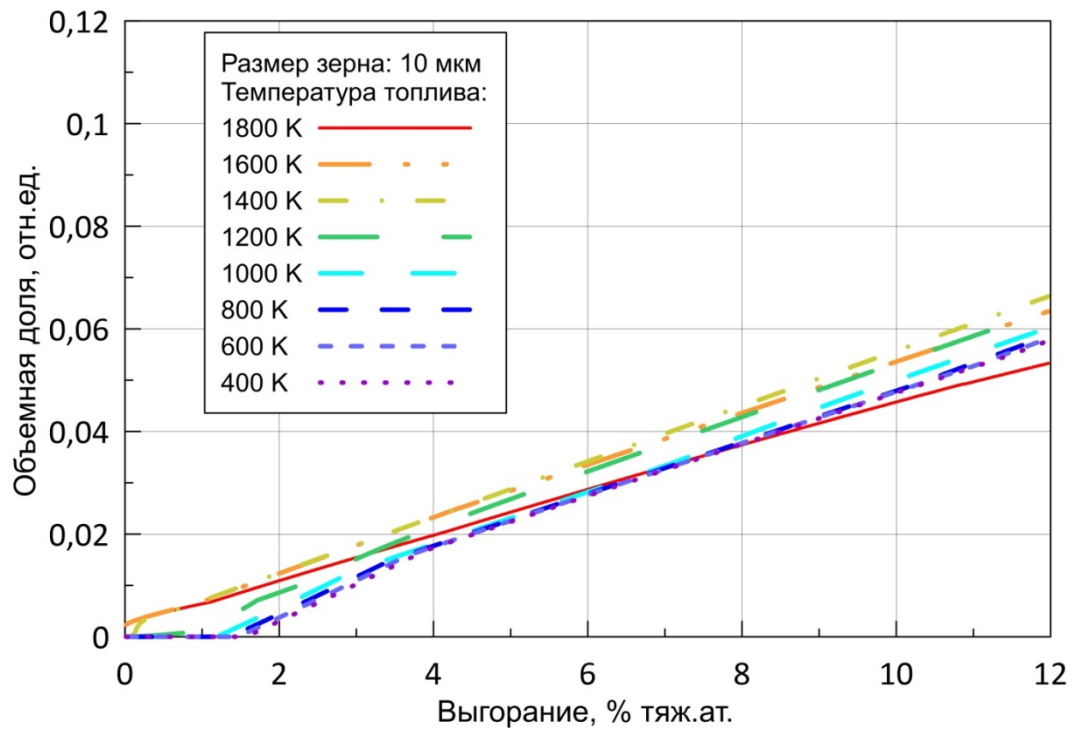


Рисунок 5.16 – Суммарное твердотельное распухание топлива при различной температуре топлива

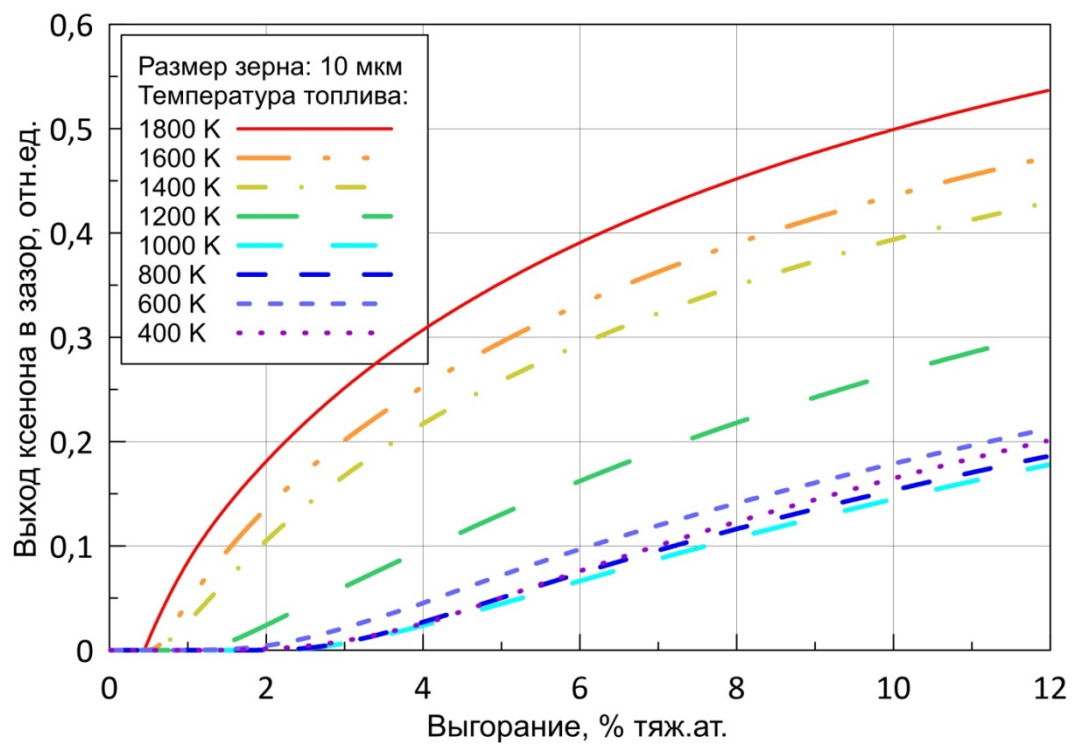


Рисунок 5.17 – Относительный выход ксенона из топлива при различной температуре

5.3 Влияние жидкометаллического подслоя на эксплуатацию твэла

Для более эффективного использования плотного СНУП топлива в быстрых реакторах с жидкометаллическим теплоносителем целесообразно применение жидкометаллического подслоя в твэле [57, 59]. Жидкометаллический подслей в твэле обеспечивает более высокую теплопроводность зазора «таблетки–оболочка» и, соответственно, более низкую температуру топлива.

Ниже рассматривается моделирование твэлов со СНУП топливом, до выгорания топлива ~11 % тяж. ат. Отличительной особенностью двух расчетов является материал подслоя в твэле и размер топливной таблетки, то есть величина зазора «таблетки–оболочка». Параметры твэлов используемые для расчетов приведены в таблице 4.2.

Таблица 5.1 – Параметры твэлов со СНУП топливом

Параметр	Твэл №1	Твэл №2
Материал подслоя	Гелий	Свинец
Диаметр оболочки, мм наружный/внутренний	9,4 / 8,4	
Диаметр таблеток, мм наружный/внутренний	8,1 ^{-0,1} / –	7,9 ^{-0,1} / –
Топливо	(U, Pu)N	

Сравнения расчетных параметров СНУП топлива экспериментального твэла в случаях свинцового и гелиевого подслоя представлены на рисунках 5.18–5.22.

Несмотря на то, что зазор «таблетки–оболочка» для жидкометаллического подслоя заметно больше на протяжении всего времени облучения, жидкометаллический подслой позволяет снизить температуру топлива на 300–400 °С и тем самым снизить выход ГПД и распухание топлива. Линейное поведение общего распухания топлива связано с существенным снижением газового распухания, где твердотельное распухание становится преобладающим.

Вероятнее всего, данные обстоятельства позволят увеличить максимальное выгорание топлива до более высоких значений. Для подтверждения данного эффекта необходимо проведения экспериментальных испытаний таких нитридных ТВЭЛОВ с жидкометаллическим подслоем в быстрых реакторах.

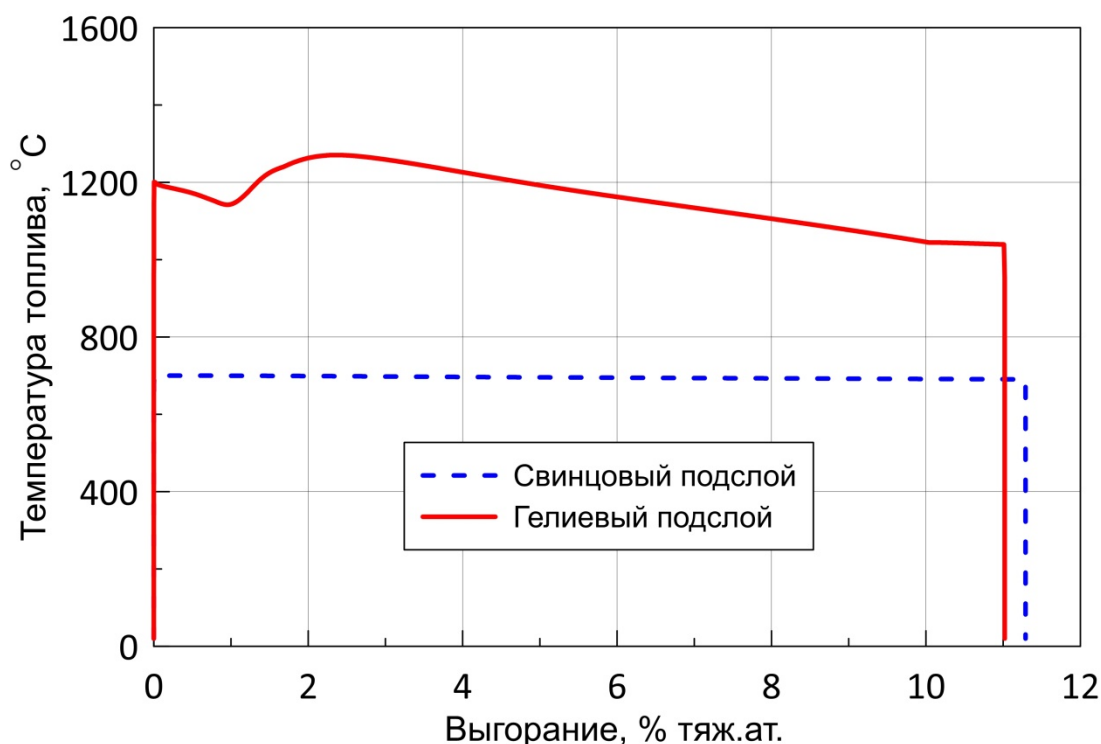


Рисунок 5.18 – Расчетная максимальная температура топлива

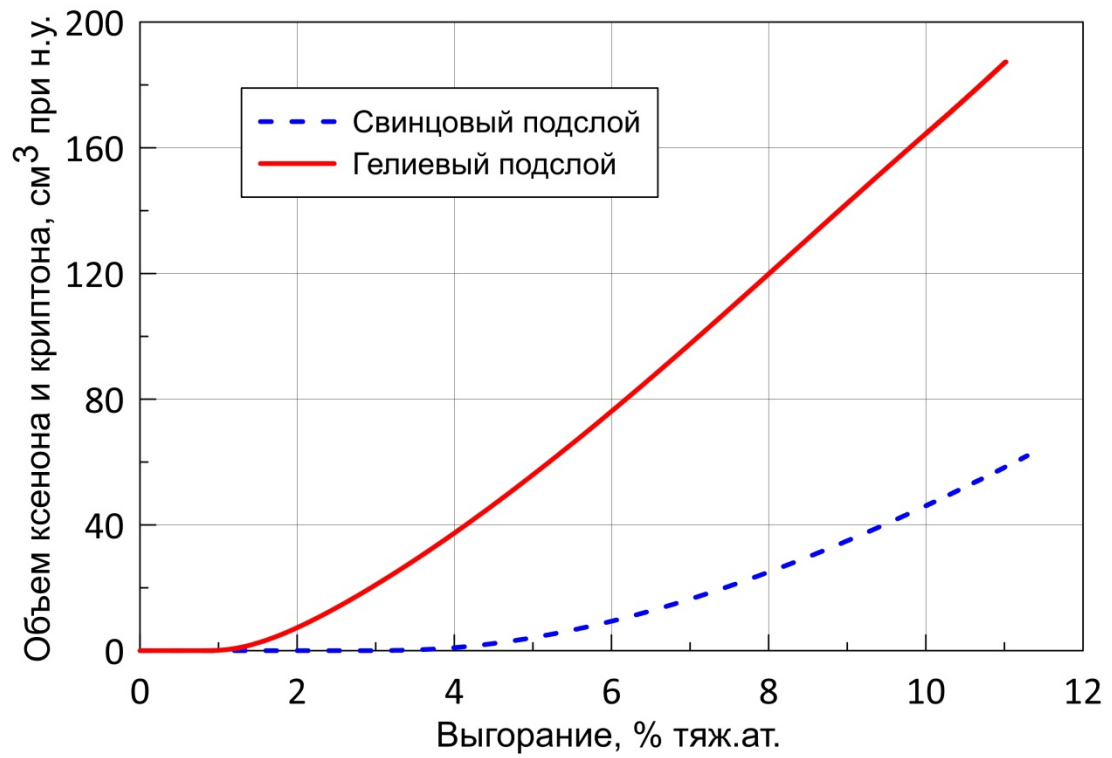


Рисунок 5.19 – Расчетный выход ксенона и криптона в свободный объем ТВЭЛ

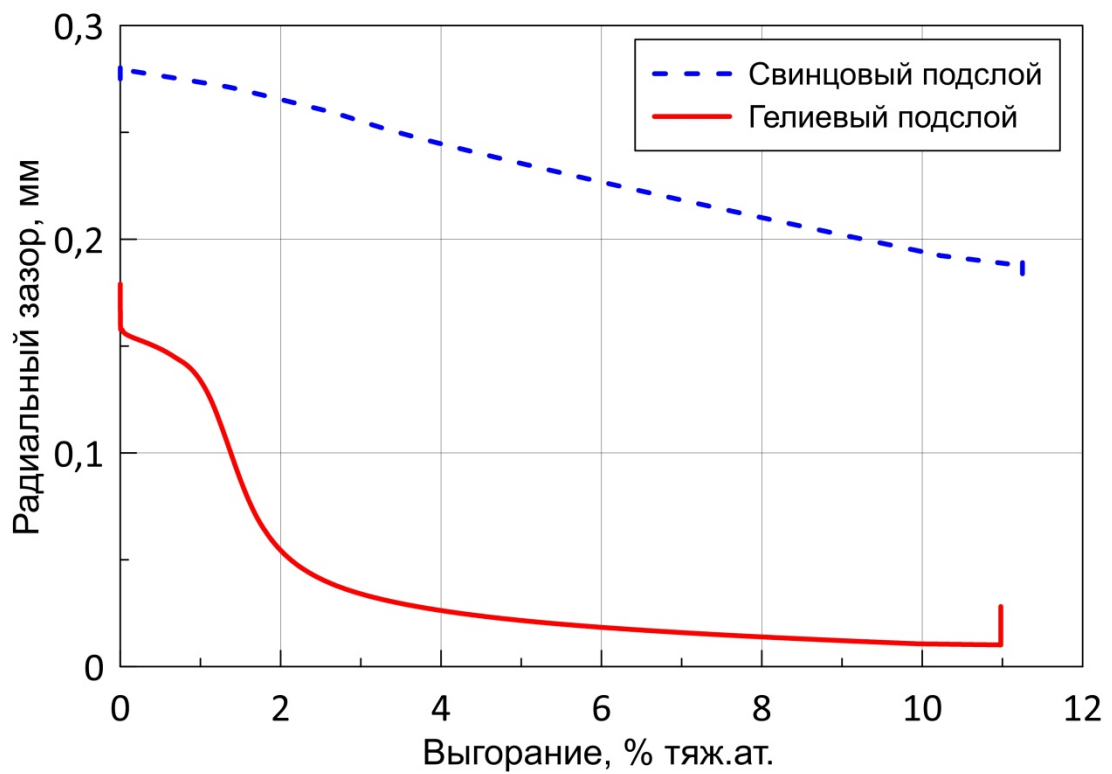


Рисунок 5.20 – Изменение зазора «таблетки–оболочка»

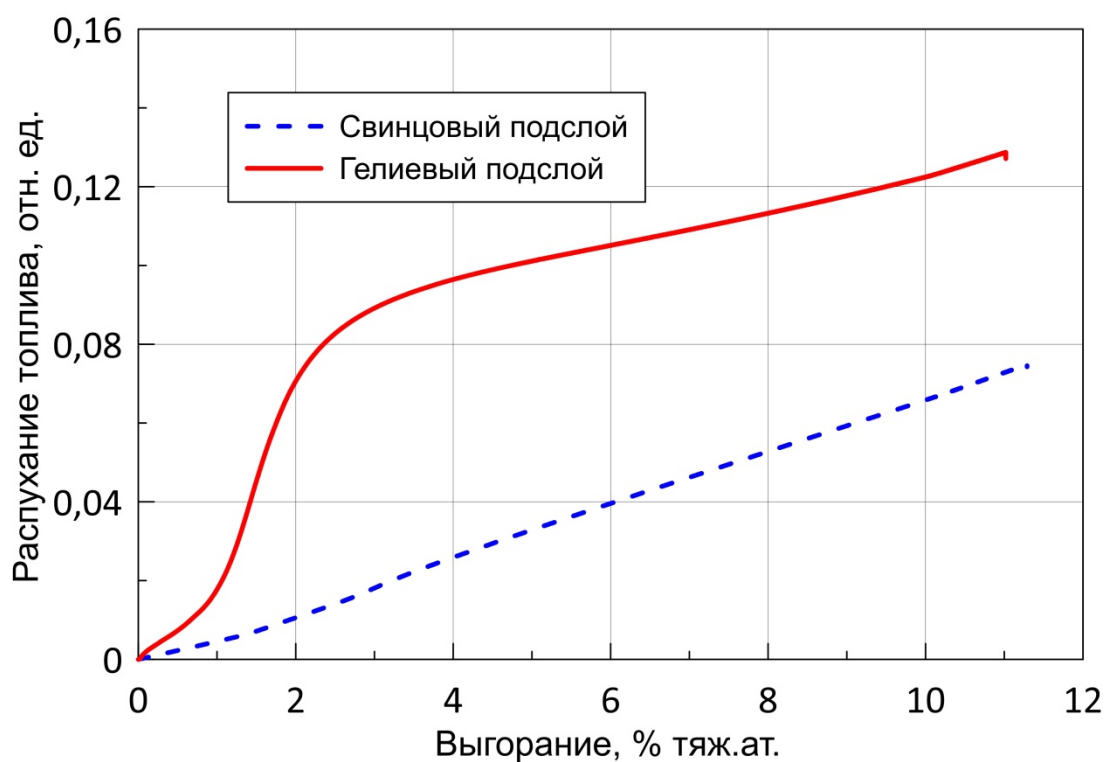


Рисунок 5.21 – Расчетное максимальное распухание топлива

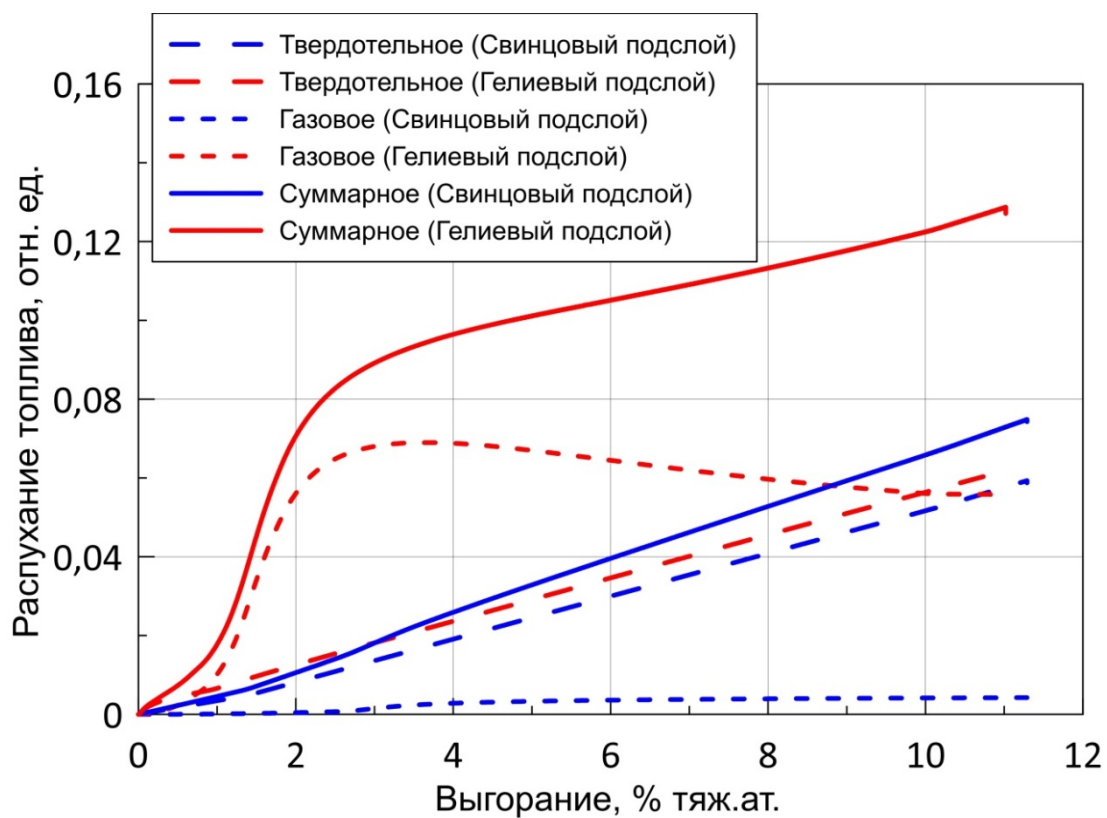


Рисунок 5.22 – Твердотельное и газовое распухания топлива

5.4 Выводы к главе 5

С помощью твэльного кода БЕРКУТ-У проведено сравнение распухания топлива и выхода ГПД для различных значений размера топливных зерен, содержания углерода и кислорода в топливе, а также для различных значений температуры топлива.

Сравнение показывает необходимость в производстве СНУП топлива с меньшим содержанием примесей и стремление к снижению температуры топлива в процессе его эксплуатации, например, используя жидкометаллический подслоя в твэле. В целом, для раскрытия полного потенциала СНУП топлива необходим поиск оптимального баланса его параметров с учетом особенностей технологии изготовления и их влияния на безопасность эксплуатации и экономические показатели.

Для детального анализа влияния исходных параметров СНУП топлива на его поведение под облучением необходим анализ чувствительности путём варьирования этих параметров в заданном интервале. Совместное варьирование исходных параметров топлива и параметров эксплуатации в расчетах кодом БЕРКУТ-У позволят оценить реальное состояние топлива при различных режимах эксплуатации реактора.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках диссертационной работы проведено усовершенствование твэльного кода БЕРКУТ-У в части моделей поведения СНУП топлива под облучением в быстром реакторе и его валидация на данных послереакторных исследований экспериментальных нитридных твэлов.

В результате выполнения диссертационной работы:

- проведен сбор и анализ литературы с целью определения степени актуальности исследования, посвященного нитриднему топливу, включая его производство и использование реакторах на быстрых нейтронах. Кроме того, проанализированы работы, связанные с расчетными исследованиями (моделированием) СНУП топлива, влиянием ПД на теплофизические свойства нитридного топлива в процессе выгорания, а также рассмотрены возможные подходы к компьютерному моделированию этих процессов;

- внедрена в твэльный код БЕРКУТ-У модель расчета эффективной теплопроводности выгоревшего СНУП топлива; показано влияние образовавшихся в процессе облучения в СНУП топливе твердых преципитатов на его теплопроводность;

- разработаны и внедрены в твэльный код БЕРКУТ-У модели, учитывающие влияние открытой и закрытой пористости СНУП топлива на его набухание, выход ГПД и гелия;

- разработана матрица валидации кода БЕРКУТ-У, разработаны расчетные модели твэлов, проведена валидация твэльного кода БЕРКУТ-У на данных ПРИ экспериментальных твэлов со СНУП топливом, облученных в быстрых реакторах БОР-60 и БН-600; оценены погрешности расчёта твэльным кодом набухания СНУП топлива и выхода газов из него;

- выполнены моделирование и анализ влияния параметров СНУП топлива (размер топливного зерна, содержание примесей кислорода и углерода), а также эксплуатационной температуры на его поведение под облучением.

К перспективам дальнейшей разработки темы исследования следует отнести задачи:

- усовершенствование и доработка моделей отдельных физических процессов, происходящих в СНУП топливе;

- валидация твэльного кода на расширенном наборе экспериментальных данных, полученных на действующих энергетических реакторных установках (БН-600, БН-800) и экспериментальных стендах, а также, на введенных в будущем в эксплуатацию проектируемых энергетических реакторных установок БРЕСТ-ОД-300, БР-1200 и БН-1200М;

- оценка погрешностей расчетов по новой методике, согласно документу «Рекомендации по оценке погрешностей и неопределенностей результатов расчетных анализов безопасности атомных станций» Федеральной службой по экологическому, технологическому и атомному надзору;

- проведение анализа чувствительности путём варьирования в заданном интервале значений исходных параметров СНУП топлива и параметров эксплуатации, который позволит оценить реальное состояние топлива и твэла в целом при различных режимах эксплуатации реактора.

- моделирование с помощью твэльного кода БЕРКУТ-У поведения твэлов со СНУП топливом реакторных установок на быстрых нейтронах с целью расчётного обоснования работоспособности таких твэлов.

Перечисленные работы позволят повысить точность прогнозирования поведения твэлов со СНУП топливом и выполнять обоснование их работоспособности до более высоких значений выгорания топлива (~14–16% тяж.

ат.), что необходимо для реализации полноценной работы реакторов типа БР-1200 и БН-1200М на поздних этапах эксплуатации.

Исследования, результаты которых представлены в диссертации, являются частью работ, выполненных в рамках проекта «Коды нового поколения» проектного направления «Прорыв» и Государственного контракта на выполнение научно-исследовательских работ «Разработка интегрированных систем кодов нового поколения для разработки и обоснования безопасности ядерных реакторов, проектирования атомных электростанций, создания технологий и объектов ядерного топливного цикла (Государственные контракты № Н.4х.241.9Б.19.1017 от 21.12.2018 и № Н.4о.241.19.21.1068 от 14.04.2021).

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ

АО	– акционерное общество
АО «ВНИИНМ»	– АО «Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов имени академика А.А. Бочвара»
АО «ГНЦ НИИАР»	– АО «ГНЦ – Научно-исследовательский институт атомных реакторов»
АО «ГНЦ РФ – ФЭИ»	– АО «ГНЦ Российской Федерации – Физико-энергетический институт имени А.И. Лейпунского»
АЭС	– атомная электрическая станция
БЕРКУТ	– твэльный расчетный код
БГ	– благородные газы
БН	– реактор на быстрых нейтронах с натриевым теплоносителем
БН-600	– реактор на быстрых нейтронах с натриевым теплоносителем электрической мощностью 600 МВт
БОР-60	– научно-исследовательский реактор на быстрых нейтронах с натриевым теплоносителем электрической мощностью 60 МВт
БОРА-БОРА	– эксперимент по облучению экспериментальных твэлов со СНУП топливом
БР	– реактор на быстрых нейтронах со свинцовым теплоносителем
БРЕСТ-ОД-300	– опытно-демонстрационный реактор на быстрых нейтронах со свинцовым теплоносителем электрической мощностью 300 МВт
ВЗП	– внутризеренные пузыри

ГПД	– газообразные ПД
ГНЦ	– государственный научный центр
ЕВКЛИД	– интегральный расчетный код
ИБРАЭ РАН	– Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук
КПРЭО	– Комплексная программа расчетно-экспериментального обоснования (плотного топлива для реакторов на быстрых нейтронах)
КЭТВС	– комбинированная ЭТВС
МАГАТЭ	– Международное агентство по атомной энергии
масс. %.	содержание в массовых процентах
МВТО	– механическое взаимодействие «топливо–оболочка»
МЗП	– межзеренная пористость
МОКС	– смешанное оксидное уран-плутониевое топливо
МФТИ	– Московский физико-технический институт
НДС	– напряженно-деформированное состояние
НИЦ	– национальный исследовательский центр
н.у.	– нормальные условия
отн.ед	– относительные единицы
ОП	– открытая пористость
ОУ	– облучательное устройство
ПГ	– пузыри на гранях (зерна)
ПД	– продукты деления
ПР	– пузыри на ребрах (зерна)
ПРИ	– послереакторные исследования
ПС	– программное средство
Ростехнадзор	– Федеральная служба по экологическому,

	технологическому и атомному надзору
РУ	— реакторная установка
СКО	— среднеквадратичное отклонение
сна	— смещение на атом
СНУП	— смешанное нитридное уран-плутониевое (топливо)
тяж.ат.	— тяжёлых атомов
ТВС	— тепловыделяющая сборка
ТВЭЛ	— тепловыделяющий элемент
х.д.	— холоднодеформированный
ЧС68-ИД х.д.	— сталь 06Х16Н15М2Г2ТФР-ИД х.д.
ЭВМ	— электронная вычислительная машина
ЭК164-ИД х.д.	— сталь 07Х16Н19М2Г2БТР-ИД х.д.
ЭП823-Ш	— сталь 16Х12МВСФБР-Ш
ЭТВС	— экспериментальная ТВС
эфф. сут	— эффективные сутки
JOG	— Joint-Oxide Grain (столбчатые оксидные зерна)
MFPR/R	— топливный модуль кода БЕРКУТ-У
% тяж. ат.	— выгорание в процентах исходного числа тяжелых атомов

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 Энергетическая стратегия Российской Федерации на период до 2035 года / Утверждена распоряжением Правительства Российской Федерации от 9.06.2020 г. №1523-р.
- 2 Адамов Е.О., Орлов В.В., Рачков В.И. и др. Ядерная энергетика с естественной безопасностью: смена устаревшей парадигмы, критерии // Известия РАН. Энергетика. – 2015. – № 1. – С. 13–29.
- 3 Адамов Е.О. “Proryv” project – technological basement for large-scale nuclear energy. IAEA International conference on “Fast Reactors and Related Fuel Cycles: Next Generation Nuclear Systems for Sustainable Development” (FR17). 26–29 June 2017 // Book of Abstracts. – Ekaterinburg: State Atomic Energy Agency Corporation “Rosatom”. – 2017.
- 4 Белая книга ядерной энергетики. Замкнутый ЯТЦ с быстрыми реакторами / под общ. ред. проф. Е.О. Адамова // М.: Изд-во АО «НИКИЭТ», 2020. – 502 с.
- 5 Алексеев С.В., Зайцев В.А. Нитридное топливо для ядерной энергетики // Москва: Техносфера. – 2013. – 240 с.
- 6 НП-001-15 «Общие положения обеспечения безопасности атомных станций», федеральные нормы и правила в области использования атомной энергии, утверждены приказом Федеральной службы по экологическому, технологическому и атомному надзору от 17 декабря 2015 г. №552.
- 7 Safety assessment for facilities and activities. General safety requirements. IAEA safety standards. Series No. GSR Part 4 (Rev. 1). – IAEA, Vienna. – 2016. – STI/PUB/1714.

- 8 Болдырев А.В., Задорожный А.В., Озрин В.Д. и др. Валидация кода БЕРКУТ на результатах послереакторных исследований ТВЭЛОВ со смешанным нитридным уран-плутониевым топливом, облученных в БН-600 // Атомная энергия. – 2019. – № 127 (6). – С. 322–327.
- 9 A.V. Zadorozhnyi, A.V. Boldyrev, V.D. Ozrin, V.I. Tarasov, I.O. Dolinsky, S.Yu. Chernov. Mechanistic code BERKUT-U: self-consistent modeling of fuel rods thermomechanical behavior and processes in the fuel of fast breeder reactors // Proc. Int. Conf. FR-22. – IAEA, Vienna. – 2022.
- 10 A.V. Boldyrev, A.P. Dolgodvorov, I.O. Dolinskiy, V.D. Ozrin, P.V. Polovnikov, V.E. Shestak, V.I. Tarasov, A.V. Zadorozhnyi. Fuel performance code BERKUT-U to simulate the in-pile behavior of a single oxide or nitride fuel rod for fast reactors // Journal of Nuclear Materials. – 2015. – 603. – 155417.
- 11 Fast reactor database. International Atomic Energy Agency // IAEA-TECDOC-866. – 1996. – 216 p.
- 12 K.K. Kuriakose, S.A.V. Satya Murty, P. Swaminathan and Baldev Raj / Knowledge Management in Fast Reactors // Energy Procedia. – 2011. – № 7. – P. 672–677.
- 13 Адамов Е.О., Забудько Л.М., Матвеев В.И. и др. Сравнительный анализ преимуществ и недостатков использования металлического и нитридного смешанного уран-плутониевого топлива в быстрых реакторах // Известия РАН. Энергетика. – 2015. – № 2. – С. 3–15.
- 14 Чиркин В.С. Теплофизические свойства материалов ядерной техники. Справочник. – Атомиздат. – 1968. – 484 с.
- 15 Смирнов В.П., Павлов С.В., Иванов Д.В. и др. Установка карботермического синтеза нитридов для производства смешанного нитридного уран-плутониевого топлива // Атомная энергия. – 2018. – № 125 (5). – С. 284–287.

16 Бланк М.О., Егорова О.В., Ливенцова Н.В., Ливенцов С.Н., Шмидт О.В. Математическая модель технологического процесса карботермического синтеза смешанного нитридного уран-плутониевого топлива // Атомная энергия. – 2020. – № 129 (6). – С. 320–326.

17 Любимов Д.Ю., Дерябин И.А., Булатов Г.С., Гедговд К.Н. Термодинамическое моделирование фазового состава смешанного уран-плутониевого мононитрида с примесью кислорода при облучении быстрыми нейтронами выгораний в 140 ГВт д/т и температуре 900–1400 К // Атомная энергия. – 2015. – № 118 (1). – С. 24–29.

18 R. Agarwal, V. Venugopal, Chemical states of fission products in irradiated (U_{0.3}Pu_{0.7})C_{1+x} fuel at high burn-ups // Journal of Nuclear Materials. – 2006. – V. 359. – P. 122-131.

19 Поплавский В.М., Забудько Л.М., Шкабура И.А. и др. Топливо для перспективных быстрых натриевых реакторов – текущее состояние и планы // Атомная энергия. – 2010. – № 108 (4). – С. 212–216.

20 Марова Е.В., Осипов С.Л., Шепелев С.Ф. и др. Расчетная платформа для обоснования проекта РУ БН-1200 // Инновационные проекты и технологии ядерной энергетики: сборник тезисов. – 2016. – № 2. – С. 47–53.

21 Аттестационный паспорт ПС «КОРАТ» от 23.09.2009 №266.

22 Сорокин А.А., Улыбышев К.Е., Алиев Т.Н., Евдокимов И.А., Зборовский В.Г. Лиханский В. В. Разработка программных средств для моделирования термомеханического поведения ядерного топлива в реакторах на быстрых нейтронах. // Матем. моделирование. – 2013. – № 25 (4). – С. 29–43.

23 Аттестационный паспорт ПС «PINCOD» от 14.10.2014 №360.

- 24 Прошкин А.А., Захарко Ю.А., Субботин С.А. и др. Описание программы TEGAS для расчета поля температур и выхода газообразных продуктов деления в твэле. // Отчет ИАЭ, N 32/755787. – 1987. – 54 с.
- 25 M. Lainet, B. Michel, J.-C. Dumas, K. Samuelsson, M. Pelletier. Current status and progression of GERMINAL fuel performance code for SFR oxide fuel pins // IAEA-CN245-222, FR17. – 2017. – Yekaterinburg, Russia.
- 26 Lainett M. et al. GERMINAL, a fuel performance code of the PLEIADES platform to simulate the in-pile behaviour of mixed oxide fuel pins for sodium-cooled fast reactors // J. Nucl. Mater. – 2019. – Vol. 516. – P. 30–53.
- 27 C. Matthews, J. Galloway, C. Unal, S. Novascone, R. Williamson. BISON for Metallic Fuels Modelling // IAEA-CN245-366, FR17. – 2017. – Yekaterinburg, Russia.
- 28 J. D. Hales, R. L. Williamson, S. R. Novascone et al. BISON Theory Manual. The Equations Behind Nuclear Fuel Analysis // NL/EXT-13-29930 Rev. 3, Idaho National. – 2016.
- 29 Lassmann K. TRANSURANUS: a fuel rod analysis code ready for use // Journal of Nuclear Materials. – 1992. – Vol. 188. – P. 295–302.
- 30 Дульнев Г.Н., Заричняк Ю.П. Теплопроводность смесей и композиционных материалов // Ленинград: Энергия. – 1974. – 264 с.
- 31 Эдвабник В.Г. К теории обобщенной проводимости смесей // Современные проблемы науки и образования. – 2015. – № 1 (часть 2).
- 32 Оделевский В.И. Расчет обобщенной проводимости гетерогенных систем // Журнал технической физики. – 1951. – № 21 (6). – С. 667–685.

- 33 R. L. Hamilton and O. K. Crosser. Thermal Conductivity of Heterogeneous Two Component Systems // Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals. – 1962. – V. 1 (3). – P. 182–191.
- 34 Levy, F. L. A modified Maxwell-Eucken equation for calculating the thermal conductivity of two-component solutions or mixtures // Int. J. Refrigeration, 1981. – 4 (4). – P. 223–225.
- 35 Flourey, J., Carson, J., & Pham, Q. T. Modelling thermal conductivity in heterogeneous media with the finite element method // Food and Bioprocess Technology. – 2008. – 1(2). – P. 161–170.
- 36 Eucken, A. Allgemeine Gesetzmassigkeiten fur das Warmeleitvermogen verschiedener Stoffarten und Aggregatzustande. Forschung Gabiete Ingenieur. – 1940. – 11. – P. 6–20.
- 37 Maxwell, J. C. A Treatise on Electricity and Magnetism. (3rd ed) // New York, Dover Publications Inc. – 1954
- 38 Wang, J. F., Carson, J. K., North, M. F., & Cleland, D. J. A new approach to modelling the effective thermal conductivity of heterogeneous materials // International Journal of Heat and Mass Transfer. – 2006. – 49 (17,18). – P. 3075–3083.
- 39 Delage F., Carmack J., Lee C. e.a. Status of advanced fuel candidates for sodium fast reactor within the Generation IV International Forum // J. Nucl. Mater. – 2013. – V. 441. – P. 515–519.
- 40 Троянов В.М., Грачев А.Ф., Забудько Л.М., Скупов М.В. Перспективы использования нитридного топлива для реакторов на быстрых нейтронах с замкнутым топливным циклом // Атомная энергия. – №117 (2). – 2014. – С. 69–75.
- 41 Zabudko L.M., Kamaev A.A., Mamaev L.I., Trufanov A.A. Nitride fuel for advanced fast sodium reactors // In: Proc. of Global-2003. US, 16-20 Nov. – 2003. – p. 1679.

42 Троянов В.М., Грачев А.Ф., Забудько Л.М. и др. Программа и некоторые результаты дореакторных исследований смешанного нитридного уран-плутониевого топлива для быстрых реакторов // Атомная энергия. – 2014. – № 117 (4). – С. 192–197.

43 Адамов Е.О., Грачев А.Ф., Забудько Л.М. и др. Основные итоги выполнения комплексной программы расчетно-экспериментального обоснования твэлов со смешанным нитридным уран-плутониевым топливом реакторов БН-1200 и БРЕСТ // Атомная энергия. – 2021. – №131 (5). – С. 265–270.

44 Скупов М.В. Ядерное топливо для «быстрых» реакторов нового поколения // В книге: Новая технологическая платформа атомной энергетики. Тезисы докладов Всероссийской научно-практической конференции, посвященной 75-летию со дня основания Сибирского химического комбината. Томск. – 2024. – С. 24.

45 Рогозкин Б.Д., Степеннова Н.М., Федоров Ю.Е., и др. Результаты испытаний смешанного моноснитридного топлива ($45\%PuN + 55\%UN$ и $60\%PuN + 40\%UN$) в реакторе BOR-60 до выгорания $\sim 12\%$ т.ат. // Атомная энергия. – 2011. – № 110 (6). – С. 332–346.

46 B.D. Rogozkin, N.M. Stepennova, Yu.Ye. Fedorov, M.G. Shishkov, F.N. Kryukov, S.V. Kuzmin, O.N. Nikitin, A.V. Belyaeva, L.M. Zabudko, «Results of irradiation of $(U_{0.55}Pu_{0.45})N$ and $(U_{0.4}Pu_{0.6})N$ fuels in BOR-60 up to ~ 12 at.% burn-up» // J. Nucl. Mater. – 2013. – № 440. – P. 445–456.

47 Звир Е.А., Крюков Ф.Н., Гринь П.И. и др. Результаты исследования твэлов комбинированной экспериментальной тепловыделяющей сборки-1 после опытной эксплуатации в реакторе БН-600 // В кн.: Сб. трудов АО «ГНЦ НИИАР». Димитровград. – 2017. – № 3. – С. 76–84.

48 Звир Е.А., Крюков Ф.Н., Жителев В.А. и др. Результаты неразрушающих послереакторных исследований твэлов комбинированной экспериментальной тепловыделяющей сборки-6 // В кн.: Сб. трудов АО «ГНЦ НИИАР». Димитровград. – 2017. – № 3. – С. 3–8.

49 Грачёв А.Ф., Жеребцов А.А., Забудько Л.М. и др. Результаты исследования твэлов реактора БРЕСТ со смешанным уран-плутониевым топливом, облученным в БОР-60 и БН-600 // Атомная энергия. – 2018. – № 125 (5). – С. 278–284.

50 Троянов В.М., Грачев А.Ф., Забудько Л.М., Скупов М.В. Киреев Г.А. Программа дореакторных исследований нитридного топлива для реакторов на быстрых нейтронах // Атомная энергия. – 2014. – № 117 (4) – С. 192–197.

51 В.М. Троянов, А.Ф. Грачев, Л.М. Забудько, М.В. Скупов, Д.В. Зозуля. Программа и некоторые результаты реакторных испытаний смешанного нитридного топлива в быстрых реакторах // Атомная энергия. – 2015. – № 118 (2). – С. 75–79.

52 С.И. Поролло, С.Н. Иванов, Е.Е. Мариненко, Л.М. Забудько Анализ экспериментальных данных о газовыделении и распухании облученного в реакторе БР-10 мононитридного уранового топлива // Атомная энергия. – 2016. – № 121 (6). – С. 326–332.

53 Грачев А.Ф., Забудько Л.М., Глушенков А.Е., Иванов Ю.А, Киреев Г.А., Скупов М.В. Гильмутдинов И.Ф., Гринь П.И., Звир Е.А., Крюков Ф.Н., Никитин О.Н. Исследования смешанного нитридного уран-плутониевого топлива в рамках проекта ПРОРЫВ // Атомная энергия. – 2017. – № 122 (3). – С. 156–167.

54 Грачев А.Ф., Жеребцов А.А, Забудько Л.М., Звир Е.А., Крюков Ф.Н., Никитин О.Н., Скупов М.В., Иванов Ю.А., Поролло С.И. Результаты исследования твэлов типа БРЕСТ со смешанным нитридным уран-плутониевым

топливом облученных в БОР-60 и БН-600 // Атомная энергия. – 2018. – № 125 (5). – С. 278–284.

55 Грачев А.Ф., Забудько Л.М., Иванов Ю.А., Скупов М.В., Звир Е.А., Крюков Ф.Н., Никитин О.Н., Мариненко Е.Е., Поролло С.И. Результаты исследования твэлов реактора БН-600 со смешанным нитридным уран-плутониевым топливом и оболочкой из стали ЧС68-ИД // Атомная энергия. – 2019. – № 126 (3). – С. 160–166.

56 Крюков Ф.Н., Никитин О.Н., Кузьмин С.В. и др. Состояние нитридного топлива после облучения в быстрых реакторах // Атомная энергия. – 2012. – № 112 (6) – С. 336–340.

57 Адамов Е.О., Забудько Л.М., Мочалов Ю.С. и др. Разработка твэла с нитридным уран-плутониевым топливом с жидкометаллическим подслоем // Атомная энергия. – 2019. – № 127 (5). – С. 255–262.

58 Грачев А.Ф., Забудько Л.М., Мочалов Ю.С. и др. Послереакторные исследования твэлов с нитридным уран-плутониевым топливом с газовым и жидкометаллическим подслоем // Атомная энергия. – 2020. – № 129 (6). – С. 311–316.

59 Беляева А.В. Влияние облучения быстрыми нейтронами на микроструктуру и набухание уран-плутониевого нитридного топлива: дис. канд. техн. наук 1.3.8 / Беляева А.В. – Димитровград, 2022. – 125 с.

60 Veshchunov M.S., Ozrin V.D., Shestak V.E. e.a. Development of mechanistic code MFPR for modelling fission product release from irradiated UO₂ fuel // Nucl. Eng. Design. – 2006. – № 236. – P. 179–200.

61 M.S. Veshchunov, R. Dubourg, V.D. Ozrin, V.E. Shestak and V.I. Tarasov, Mechanistic modelling of uranium fuel evolution and fission product migration during irradiation and heating // J. Nucl. Mater. – 2017. – № 362. – P. 327–335.

62 M.S. Veshchunov, A.V. Boldyrev, V.D. Ozrin, V.E. Shestak, V.I. Tarasov. A new mechanistic code SFPR for modeling of single fuel rod performance under various regimes of LWR operation // Nucl. Eng. Design. – 2011. – № 241. – P. 2822–2830.

63 M.S. Veshchunov, A.V. Boldyrev, A.V. Kuznetsov, V.D. Ozrin, M.S. Seryi, V.E. Shestak, V.I. Tarasov, G.E. Norman, A.Yu. Kuksin, V.V. Pisarev, D.E. Smirnova, S.V. Starikov, V.V. Stegailov, A.V. Yanilkin. Development of the mechanistic fuel performance and safety code SFPR using the multi-scale approach // Nucl. Eng. Design. – 2015. – № 295. – P. 116–126.

64 Bolshov, L.A., Strizhov, V.F. The system of codes for realistic analysis of severe accidents // In: Proc. of ICAPP' 06 Reno, 4–8 June 2006, NV USA. – 2006. – P. 1415–1422. – P. 6439.

65 M.A. Mansouri, D.R. Olander // J. Nucl. Mater. – 1998. – № 254. – P. 22.

66 F.C. Iglesias, C.E.L. Hunt, D.S. Cox, N.A. Keller, R. D.Barrand, R.F. O'Conner and J.R. Mitchell. UO₂ oxidation and fission product release // Workshop on Chemical Reactivity of Oxide Fuel and Fission Product Release, Berkeley, England. – 1987, April 7-9.

67 H. Matzke. Gas release mechanisms in UO₂ – A critical review. Radiat. Eff. 53. – 1980. – P. 219.

68 B.J. Lewis, W.T. Thompson, F. Akbari, D.M. Thompson, C. Thurgood, J. Higgs. Thermodynamic and kinetic modeling of fuel oxidation behaviour in operating defective fuel // J. Nucl. Mater. – 2004. – № 328. – P. 180.

69 D.S. Cox, F.C. Iglesias, C.E.L. Hunt, N.A. Keller, R.D. Barrand, J.R. Mitchell, and R.F. O'Conner. Oxidation of UO₂ in air and steam with relevance to fission product releases // Proc. 192nd ACS Symp. on Chemical Phenomena Associated

with Radioactivity During Severe Nuclear Accidents, Anaheim, California. – 1986, September 7–12, NUREG/GP-078. – P. 2–35 – 2–39.

70 D.S. Cox, C.E.L. Hunt, R.F. O’Conner, R.D. Barrand and F.C. Iglesias. High-temperature oxidation behavior of UO₂ in air and steam // Proc. Int. Symp. on High-Temperature Oxidation and Sulphidation Processes, Hamilton, Ontario, Canada, August 26–30, 1990, Pergamon Press, ISBN 0–18–040415–4, AECL report, AECL–10442.

71 D.S. Cox, C.E.L. Hunt, Z. Liu, F.C. Iglesias, N.A. Keller, R.D. Barrand and R.F. O’Connor. A model for the release of low-volatility fission products in oxidising conditions // Proc. of 12 Annual Conference of the Canadian Nuclear Society, Saskatchewan, Canada, 1991, June, 9–12, AECL report, AECL–10440.

72 D.A. Powers, L.N. Kmetyk, R.C. Schmidt. A Review of the Technical Issues of Air Ingression During Severe Reactor Accidents // NUREG/CR-6218, SAND94-0731, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM. – 1994.

73 A.C.S. Sabioni, W.B. Ferraz, F. Millot. Effect of grain-boundaries on uranium and oxygen diffusion in polycrystalline UO₂ // J. Nucl. Mater. – 2000. – № 278. – P. 364–369.

74 B.J. Lewis, B. Andre, B. Morel, P. Dehaudt, D. Maro, P.L. Purdy, D.S. Cox, F.C. Iglesias, M.F. Osborne, R.A. Lorenz. Modelling the Release Behaviour of Caesium during Severe Fuel Degradation // J. Nucl. Matter. – 1995. – № 227. – P. 83–109.

75 B.J. Lewis, B.J. Corse, W.T. Thompson, M.H. Kaye, F.C. Iglesias, P. Elder, R. Dickson, Z. Liu. Low volatile fission-product release and fuel volatilization during severe reactor accident conditions // J. Nucl. Matter. – 1998. – № 252. – P. 235–256.

- 76 J. Abrefah, A.de Aguiar Briad, W. Wang, Y. Khalil, and D.R. Olander. High Temperature Oxidation of UO₂ in Steam-Hydrogen Mixtures // J. Nucl. Matter. – 1994. – № 208. – P. 98–110.
- 77 S.R. de Groot and P. Mazur. Non-Equilibrium Thermodynamics // North-Holland Publishers, Amsterdam. – 1962.
- 78 I.A. Kvasnikov. Theory of non-equilibrium systems, Editorial URSS Publishers, Moscow. – 2003.
- 79 C. Sari and G. Schumacher. Oxygen redistribution in fast reactor oxide fuel // J. Nucl. Mater. – 1976. – № 61. – P. 192–202.
- 80 B.V. Dobrov, V.V. Likhanskii, V.D. Ozrin, A.A. Solodov, M.P. Kissane and H. Manenc. Kinetics of UO₂ oxidation in steam atmosphere // J. Nucl. Matter. – 1998. – № 255. – P. 59.
- 81 Models for the Fuel Rod Materials Interactions during Reactor Core Degradation under Sever Accident Conditions at NPP. Ed. by V.F. Strizhov. – Proceedings of Nuclear Safety Institute of Russian Academy of Sciences (IBRAE RAS). Ed. by L.A. Bolshov, Nuclear Safety Institute (IBRAE) RAS. – Issue 1. – Moscow: Nauka. – 2007. – 127 p.: ill. – ISBN-02-036139-3.
- 82 M. Kinoshita, T. Sonoda, S. Kitajima, A. Sasahara, T. Kameyama, T. Matsumura, in: Proceedings of the 2004 International Meeting on LWR Fuel Performance. – Orlando, Florida. – September 19–22, 2004.
- 83 H.J. Matzke, L.M. Wang // J. Nucl. Mater. – 1996. – № 231. – P. 155.
- 84 H.J. Matzke, J. Spino // J. Nucl. Mater. – 1997. – № 248. – P. 170.
- 85 K. Nogita, K. Une, Nucl. Instrum // Meth. Phys. Res. – 1994. – B91. – 301.
- 86 S.A. Saltykov. Stereometrische Metallografie. Leipzig. – 1974.

- 87 C.C. Dollins, F.A. Nichols. In-pile intragranular densification of oxide fuels // J. Nucl. Mater. – 1978. – № 78. – P. 326.
- 88 M.V. Speight, W. Beere. Vacancy Potential and Void Growth on Grain Boundaries // Metal Sci. – 1975. – № 9. – P. 190.
- 89 R. Thetford, M. Mignanelli. The chemistry and physics of modelling nitride fuels for transmutation // J. Nucl. Mater. – 2003. – № 320. – P. 44-53.
- 90 J.C. Killeen and J.A. Turnbull. An experimental and theoretical treatment of the release of Kr from hypostoichiometric uranium dioxide // Proc. of Workshop Chemical Reactivity of Oxide Fuel and Fission Product Release. – Berkley. – April 7-9, 1987.
- 91 A.B. Lidiard // J. Nucl. Mater. – 1966. – № 19. – P. 106.
- 92 H. Matzke, Atomic Transport Properties in UO_2 and Mixed Oxides $(\text{U,P})\text{O}_2$ // J. Chem. Soc., Faraday Trans. II, 83. – 1987. – P. 1121–1142.
- 93 P.S. Maiya. Surface diffusion, surface energy, and grain-boundary free energy of uranium dioxide // J. Nucl. Mater. – 1971. – № 40. – P. 57.
- 94 G.B. Alcock, R.J. Hawkins, A.W.D. Hills, P. McNamara. Paper SM-66/36, IAEA, Symp. Thermodynamics, Vienna. – 1965. – P. 57.
- 95 Y. Arai, A. Maeda, K. Shiozawa, T. Ohmichi. Chemical forms of solid fission products in the irradiated uranium–plutonium mixed nitride fuel // J. Nucl. Mater. – 1994. – № 210. – P. 161–166.
- 96 Y. Arai. Nitride fuels // Comprehensive Nuclear Material. – 2012. – V. 3. – P. 41–54.
- 97 Y. Arai, M. Morita, T. Ohmichi. The effect of oxygen impurity on the characteristics of uranium and uranium-plutonium mixed nitride fuels // J. Nucl. Mater. – 1993. – № 202. – P. 70–78.

- 98 R. Agarwal, V. Venugopal, D. Sood. Calculation of thermodynamic parameters of U–Pu–N system with carbon and oxygen impurities // *J. Nucl. Mater.* – 1999. – № 270. – P. 301–308.
- 99 D. Yu. Lyubimov, A. V. Androsov, G. S. Bulatov, K. N. Gedgovd. Thermodynamic Modeling of Oxygen Dissolution in Uranium Mononitride at 900–1400 K // *Radiochemistry.* – 2014. – № 56 (5). – P. 496–500.
- 100 D. Sood, R. Agarwal, V. Venugopal. Phase diagram calculation of the U–Pu–N system with carbon and oxygen impurities // *J. Nucl. Mater.* – 1997. – № 247. – P. 293–300.
- 101 S. Imoto, H.J. Stocker. Preparation of uranium mononitride by the reaction of uranium dioxide with carbon and nitrogen // *Thermodynamics, IAEA-SM-66/14*, Vienna: IAEA. –1966. – vol. II. – P. 533–545.
- 102 Y. Arai, T. Iwai and T. Ohmichi. Chemical state of fission products in irradiated uranium carbide fuel // *J. Nucl. Mater.* – 1987. – № 151. – P. 63–71.
- 103 H. Kleykamp. Fission product precipitates in irradiated uranium carbonitride fuel // *J. Nucl. Mater.* – 2002. – № 300 . – P. 273–276.
- 104 R. Agarwal, V. Venugopal. Chemical states of fission products in irradiated (U_{0.3}Pu_{0.7})C_{1+x} fuel at high burn-ups // *J. Nucl. Mater.* – 2006. – № 359. – P. 122–131.
- 105 T.M. Besmann, D. Shin, T.B. Lindemer. Uranium nitride as LWR TRISO fuel: Thermodynamic modeling of U–C–N // *J. Nucl. Mater.* – 2012. – № 427. – P. 162–168.
- 106 J.E. Burke. D. Turnbull. Recrystallization and grain growth // *In Progress in Metal Physics*; Pergamon Press: London, UK. – 1952. – P. 220–292.

107 M.S. Veshchunov, V.I. Tarasov. An Advanced Model for Grain Face Diffusion Transport in Irradiated UO₂ Fuel. Part 1. Model Formulation // J. Nucl. Mater. – 2009. – № 392. – P. 78–84.

108 V.I. Tarasov, M.S. Veshchunov. An Advanced Model for Grain Face Diffusion Transport in Irradiated UO₂ Fuel. Part 2. Model Implementation and Validation // J. Nucl. Mater. – 2009. – № 392. – P. 85–89.

109 T.J. Heames, D.A. Williams, N.E. Bixler, A.J. Grimley, C.J. Wheatley, N.A. Johns, P. Domogala, L.W. Dickson, C.A. Alexander, I. Osborn-Lee, S. Zawadzki, J. Rest, A. Mason, R.Y. Lee. VICTORIA: A Mechanistic Model of Radionuclide Behaviour in the Reactor Coolant System under Severe Accident Conditions // NUREG/CR-5545. – 1992.

110 Arai Y., Suzuki Y., Iwai T. and Ohmichi T. Dependence of the thermal conductivity of (U, Pu)N on porosity and plutonium content // J. Nucl. Mater. – 1992. – 195. – P. 37–43.

111 Deryabin I.A., Lubimov D.Y., Bulatov G.S. and Gedgovd K.N. Modeling the influence of phase composition of U_{0,8}Pu_{0,2}N fuel with oxygen impurity on conductivity and diffusion of Xe atoms // VANT Material science and new materials. – 2015. – №80. – P. 95–101.

112 Deryabin I.A., Kharitonov V.S., Lubimov D.Y. Effect of fission products and oxygen and carbon impurities in (U, Pu)N on the heat-and-mass transfer coefficients and xenon yield // Atomic Energy. – 2016. – 121. – P. 96–105.

113 Любимов Д.Ю., Дерябин И.А., Булатов Г.С., Гедговд К.Н. Термодинамическое моделирование фазового состава смешанного уран–плутониевого мононитрида с примесью кислорода при облучении быстрыми нейтронами выгораний в 140 ГВт д/т и температуре 900–1400 К // Атомная энергия. – 2015. – №118 (1). – С. 24–29.