Оглавление

[1 Введение 2](#_Toc512109556)

[2 Литературный обзор 4](#_Toc512109557)

[2.1 Реактор на быстрых нейтронах со свинцовым теплоносителем 4](#_Toc512109558)

[2.2 Выбор материала для оболочек ТВЭЛ. 6](#_Toc512109559)

[2.3 Ферритно-мартенситные стали, состав и особенности. Сталь ЭП-823 6](#_Toc512109560)

[2.4 Физико-химическое взаимодействие стали со свинцовым теплоносителем в активной зоне реактора. 8](#_Toc512109561)

[2.4.1 Механизмы окисления чистого железа при взаимодействии с кислородом. 8](#_Toc512109562)

[2.4.2 Физико-химические аспекты взаимодействия стали со свинцом. 8](#_Toc512109563)

[2.5 Обоснование выбора компьютерного моделирования как основного метода исследования. 9](#_Toc512109564)

[2.5.1 Постановка компьютерного эксперимента. 9](#_Toc512109565)

[3 Метология исследований 11](#_Toc512109566)

[3.1 Компьютерное моделирование. 11](#_Toc512109567)

[3.1.1 Энергии и силы 11](#_Toc512109568)

[3.1.2 Молекулярная статика. 11](#_Toc512109569)

[3.1.3 Молекулярная динамика. 11](#_Toc512109570)

[3.2 Основные приближения, используемые во время моделирования. 12](#_Toc512109571)

[3.2.1 Статистические ансамбли. 12](#_Toc512109572)

[3.2.2 Термостат. 12](#_Toc512109573)

[3.2.3 Потенциалы. 12](#_Toc512109574)

[3.2.4 Ab-initio моделирование 12](#_Toc512109575)

[3.2.5 LAMMPS 12](#_Toc512109576)

[3.3 Обработка и визуализация выходных данных. 13](#_Toc512109577)

[3.3.1 Пакет Ovito. 13](#_Toc512109578)

[3.3.2 Пакет Origin. 13](#_Toc512109579)

[4 Компьютерный Эксперимент 13](#_Toc512109580)

[4.1 Расчет энергетически выгодных состояний. 13](#_Toc512109581)

[4.2 Моделирование эволюции роста оксидной пленки на поверхности стали. 13](#_Toc512109582)

[4.3 Моделирование облучения высокоэнергетическими частицами. 14](#_Toc512109583)

# Введение

В 1936 году Нильсом Бором на основании исследований Энрико Ферми была создана теоретическая модель ядерной реакции при захвате ядром атома нейтрона названная капельной моделью атомного ядра. В 1938 году Отто Ган и Фриц Штрассман открыли процесс деления ядер. Их заключение содержало гипотезу, что облучение ядра урана нейтронами может привести к образованию ядра с массой примерно в два раза меньше первоначальной. Через 4 года под руководством Ферми был создан первый в мире ядерный реактор в Чикагском университете в рамках Манхэттенского проекта. Позднее, в СССР, в 1954 году была запущена первая 5 МВт АЭС в г. Обнинске под руководством Игоря Курчатова. Так началась эра атомной энергетики. Далее – три «громких» аварии на АЭС Три-Майл-Айленд (1979), Чернобыльская-4 (1986), Фукусима-1 (2011). Каждая из аварий заставляла специалистов в области ядерной энергетики пересматривать проблему безопасности эксплуатации АЭС. Все три АЭС, так или иначе, имели воду в качестве теплоносителя.

В настоящий момент, в России, идет разработка реактора на быстрых нейтронах (БН) нового типа, реактор БРЕСТ. По сравнению с реакторами на тепловых нейтронах, реактор на быстрых нейтронах безопаснее: в реакторе нет высокого давления, практически отсутствует риск потери теплоносителя по причине выкипания, нет риска пароциркониевой реакции (реакция взаимодействия водяного пара и циркониевых оболочек).

Главная особенность реактора БН состоит в том, что они открывают возможность использования не делящихся в реакторах на тепловых нейтронах изотопов тяжёлых элементов. В топливный цикл могут быть вовлечены запасы 238U и 232Th, которых в природе значительно больше, чем 235U — основного топлива для реакторов на тепловых нейтронах. Кроме того, эти реакторы позволяют относительно безопасно избавиться от самых активных и долгоживущих изотопов в отработанном ядерном топливе, принципиально сократив срок его биологической опасности.

В активной зоне реактора БН не должно быть замедлителя нейтронов. Такое требование полностью исключает возможность использования воды и углеводородов в качестве теплоносителя. Так, нужно использовать металлы с большим атомным номером, которые будут плохо замедлять нейтроны, и которые будут легкоплавкими, к примеру, натрий, ртуть, свинец. Хотя у ртути температура плавления находится в области комнатной температуры, от ртути отказались из-за ее высокой коррозионной активности. Натрий, обладая высокой теплоемкостью, горит и пенится на воздухе, что вызывает трудности в эксплуатации. Свинец является перспективным металлом, не лишенным недостатков, который будет использоваться в качестве теплоносителя в реакторе БРЕСТ. Один из недостатков свинца – отсутствие исследований по взаимодействию его с конструкционными материалами в активной зоне.

Одним из условий безопасной эксплуатации ядерных реакторов с жидкометаллическим теплоносителем является использование коррозионностойких конструкционных материалов, и прежде всего – сталей ферритно-мартенситного класса, способных выдерживать интенсивное коррозионное воздействие со стороны теплоносителя в течение всего проектируемого срока эксплуатации в активной зоне реактора. Основным методом защиты материала является использование поверхностных оксидных защитных слоев, предотвращающих прямой контакт теплоносителя непосредственно с материалом. Однако встает вопрос о физико-химическом поведении самих оксидных покрытий, включая их эволюцию под воздействием окружающей среды и внешних радиационных и термомеханических нагрузок в процессе эксплуатации. Прямые испытания роста и стабильности защитных покрытий требуют использования сложного оборудования и значительного времени, а также значительных финансовых затрат. В связи с этим, для оценки свойств покрытий широко применяются методы аналитического и численного моделирования. Существующие подходы и методики моделирования позволяют описать механизм окисления стали в теплоносителе, а значит и помочь в разработке подходов, позволяющих улучшить свойства, используемых материалов.

Именно поэтому целью данной работы является исследование поведения ферритно-мартенситных сталей с жидкометаллическим свинцом методами компьютерного моделирования.

# Литературный обзор

## Реактор на быстрых нейтронах со свинцовым теплоносителем

Реактор на быстрых нейтронах – ядерный реактор, в активной зоне которого отсутствует замедлитель нейтронов, а спектр энергии нейтронов близок к энергии нейтронов деления (). Нейтроны с такой энергией называются быстрыми.

Для поддержания цепной ядерной реакции нейтроны, которые появились в результате деления ядра должны взаимодействовать с другими атомами. Вероятность такой реакции зависит от энергии нейтрона.

Природный уран содержит в себе три изотопа 238U, 235U и остатки 234U как продукта распада 238U. Изотоп 238U составляет большую часть природного урана () и делится только при энергиях нейтрона более 5 МэВ. Около природного урана составляет 235U, который делится при взаимодействии с нейтронами любых энергий, но особенно хорошо нейтронами низкоэнергетического спектра. Когда любой из этих изотопов подвергается делению, они выделяют нейтроны с распределением энергии в области 1-2 МэВ. Поток нейтронов с энергиями более 2 МэВ слишком мал, чтобы поддержать деление в 238U, а поток нейтронов с более низкой энергией (<2 МэВ) слишком мал, чтобы поддержать деление в 235U.

В реакторе на быстрых нейтронах есть возможность поддержания цепной реакции с изотопом 238U. Как было сказано, для поддержания реакции с 238U нейтроны должны быть быстрыми, а это значит, что в реакторе не должно быть замедлителя нейтронов (проходя сквозь замедлитель нейтрон теряет энергию из-за упругих столкновений с атомами замедлителя) как в реакторах на тепловых нейтронах (вода, графит).

Во время ядерной реакции, в результате деления ядра, выделяется полезная тепловая энергия. В реакторах на тепловых нейтронах замедлитель, то бишь вода, являлся и теплоносителем, который отводил тепло из активной зоны для дальнейшего парообразования и выработки электрической энергии. Так как в БН реакторе воду использовать нельзя, то нужно выбрать такой материал, который будет плохо замедлять нейтроны и, одновременно, хорошо отводить тепло. На такую роль хорошо подходят жидкие металлы, например, свинец [].

БРЕСТ - энергоблок с быстрым реактором со свинцовым теплоносителем и мононитридным уран-плутониевым топливом с двухконтурной схемой отвода тепла к турбине с закритическими параметрами пара. Особенности реактора БРЕСТ []:

1. Использование высококипящего (), радиационно стойкого и слабо активируемого свинцового теплоносителя, химически пассивного при контакте с водой и воздухом, что позволяет осуществлять теплоотвод при низком давлении и исключает пожары, химические и тепловые взрывы при разгерметизации контура, течах парогенератора и любых перегревах теплоносителя;
2. Использование плотного () и теплопроводного мононитридного топлива, работающего при низких температурах ();
3. Использование бесчехловых ТВС с широкой решеткой твэлов в активной зоне, умеренной энергонапряженности (максимальная ~), исключающим потерю теплоотвода при локальном перекрытии проходного сечения в ТВС, обеспечивающим высокий уровень естественной циркуляции теплоносителя;
4. Высокая теплоаккумулирующей способностью свинцового контура.

Основные технические характеристики ядерных ректоров типа БРЕСТ-300 и БРЕСТ-1200 представлены в таблице 2.1.

Таблица 2.1 – Технические характеристики реакторов БРЕСТ-300 и БРЕСТ-1200 []

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Характеристика | БРЕСТ-300 | БРЕСТ-1200 |
| Тепловая мощность, МВт | 700 | 2800 |
| Электрическая мощность, МВт | 300 | 1200 |
| Число ТВС в активной зоне, шт. | 185 | 332 |
| Диаметр активной зоны, м | 2,3 | 4,755 |
| Высота активной зоны, м | 1,1 | 1,1 |

Продолжение таблицы 2.1

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Диаметр ТВЭЛа, м | 0,0091; 0,0096; 0,00104 | 0,0091; 0,0096; 0,00104 |
| Топливо активной зоны | UN+PuN | UN+PuN |
| Топливная загрузка, т | 16 | 63.9 |
| Коэффициент воспроизводства | ≈1 | ≈1 |
| Температура входа/выхода свинца, ˚C | 420/540 | 420/540 |
| Кампания топлива, лет | 5 | 5-6 |
| Мощностной эффект, % DK/K | 0,16 | 0,15 |
| оболочки твэлов, °С | 650 | 650 |
| КПД нетто энергоблока, % | 43 | 43 |

Существует, однако, не мало «узких мест», связанных с использованием свинцовой технологии на быстрых реакторах: в большом объеме интегральной схемы БРЕСТ не обеспечивается равномерность поддержания кислородного потенциала в узком разрешенном диапазоне. Чтобы обеспечить работоспособность тепловыделяющих элементов, необходимо найти оптимальное для заданного уровня и диапазона изменения температур содержание кислорода в теплоносителе и стабильно поддерживать его на этом уровне в течение всего срока эксплуатации реакторной установки. Перед конструкторами и исследователями стоят такие глобальные вопросы:

1. Как влияет облучения в реальных реакторных условиях на поведение в свинце на тепловыделяющие элементы и топливную композицию?
2. Каков уровень работоспособности конструкционных материалов в свинце при принятой температуре и при высоких дозах облучения нейтронами?

## Выбор материала для оболочек ТВЭЛ.

## Ферритно-мартенситные стали, состав и особенности. Сталь ЭП-823

Так как материал будет работать в условиях агрессивной среды расплавленного свинца, облучения потоками ионизирующего излучения и высокой температуры, то к нему существуют определенные требования, а именно, материал должен быть коррозионно стойким, радиационно стойким и жаропрочным. В соответствии с такими условиями работы нужно выбрать такие легирующие элементы, которые смогут обеспечить нужные характеристики выбранному материалу.

Легирующие элементы:

1. Углерод. Концентрации выбираются таким образом, чтобы получить ферритную фазу. Кроме этого, углерод образует карбиды с высокой прочностью межатомных связей.
2. Хром. Добавляют в сталь для того, чтобы повысить коррозионную стойкость.
3. Молибден. Повышает сопротивление стали к ползучести при высоких температурах.
4. Ванадий. Обеспечивает устойчивость стали к перегреву. Измельчает зерно и повышает прочность и вязкость
5. Вольфрам. Совместно с углеродом способствует образованию карбидов и мартенсита, что приводит к высоким значениям твердости и увеличивает износостойкость.
6. Бор. Добавка бора к легированным сталям позволяет значительно снизить степень их легированности такими элементами, как хром, никель и молибден, при одновременном сохранении необходимого уровня прокаливаемости и других механических свойств.

Состав стали представлен в таблице 2.2. Ферритно-мартенситные стали обладают такими преимуществами, как слабая подверженность распуханию под действием нейтронного облучения, более высокая теплопроводность и меньший коэффициент термического расширения []. С другой стороны, они подвержены низкотемпературному охрупчиванию и имеют меньшую стойкость к повышенным температурам [].

Таблица 2.2 – Химический состав ферритно-мартенситной стали ЭП-823 []

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Марка стали | Содержание основных легирующих элементов, мас. % | | | | | | | |
| 16Х12МВСБФР  (ЭП-823) | C | Cr | Mo | V | W | Nb | B | Другие |
| 0,14-0,18 | 10,0-12,0 | 0,6-0,9 | 0,2-0,4 | 0,7 | 0,2-0,4 | 0,0-0,6 | 0,5-0,8Ni; 1,1-1,3Si |

## Физико-химическое взаимодействие стали со свинцовым теплоносителем **в активной зоне реактора.**

### Механизмы окисления чистого железа при взаимодействии с кислородом.

При отсутствии облучения, то есть, в случае наличия системы сталь + теплоноситель рост оксидной пленки проходит таким образом:

* адсорбция молекулярного кислорода на чистой поверхности металла;
* диссоциация молекул кислорода на атомы и их хемосорбция;
* возникновение зародышей оксидов на локальных участках поверхности;
* формирование и рост пленки оксида;
* вынос железа через пленку, который сопровождается обратным потоком вакансий, идущих вглубь матрицы;

Далее подробно про окисление железа кислородом.

В соответствии с диаграммой состояний Fe–O при высоких температурах (𝑇> 570 °𝐶) может сформироваться оксидная пленка, содержащая три основных устойчивых оксида: непосредственно примыкающая к поверхности закись железа 𝐹𝑒𝑂 (вюстит), закись–окись 𝐹𝑒3𝑂4 (магнетит) и, затем, внешняя часть оксидной пленки 𝐹𝑒2𝑂3 (гематит).

Коррозионная стойкость стали в жидкометаллическом свинцовом теплоносителе достигается благодаря образованию на поверхности стали оксидного покрытия, препятствующего переносу компонентов, стали в теплоноситель.

### Физико-химические аспекты взаимодействия стали со свинцом.

Важным параметром в случае свинцового теплоносителя является концентрация растворенного в нем кислорода. При концентрации кислорода выше коррозионная активность свинца резко увеличивается.

Поскольку сталь имеет сложный химический состав, растущая пленка имеет неоднородный по толщине состав и именно это в значительной степени влияет на качество и стойкость покрытия.

## Обоснование выбора компьютерного моделирования как основного метода исследования.

Как было показано ранее, окисление стали в окружении жидкометаллического теплоносителя – сложный, многостадийный процесс, и если взаимодействие стали со свинцом хоть как-то изучено, то влияние облучения на процесс роста оксидной пленки совершенно не ясен. Такие исследования не проводились по нескольким причинам:

1. Дороговизна исследований. Для облучения образцов нужно иметь высокоэнергетический нейтронный источник вкупе со свинцовым теплоносителем, который будет омывать образец. То есть, нужен готовый исследовательский реактор.
2. Время исследований. Пленка растет довольно быстро, и если нужно исследовать начальные стадии процесса окисления, то такое исследование невозможно реализовать физически так как такой процесс занимает слишком короткий промежуток времени.
3. Невозможность поддерживать постоянные условия испытания. Тут имеется ввиду, что для построения хоть какой-то вразумительной модели нужно «накопить статистику». В реальных исследованиях даже малые доли отклонения от заданных параметров, к примеру, состав стали или флюенс нейтронов, могут приводить к совершенно разным результатам.

Таким образом мы приходим к очевидному выводу, что нужно использовать компьютерное моделирование. Оно имеет ряд преимуществ, а именно:

1. Возможность контроля всех параметров системы.
2. Возможность наблюдения начальных стадий окисления.
3. Дешевизна исследований.

### Постановка компьютерного эксперимента.

Теперь, поставлена задача: «Как свинец взаимодействует с хромистой сталью под облучением?». Такую задачу следует разбить на подзадачи:

1. Расчет энергетически выгодных состояний.
   1. Адсорбция молекулы кислорода на поверхности. Её диссоциация.
   2. Движение атомарного кислорода по решетке железа.
2. Моделирование эволюции роста оксидной пленки на поверхности стали.
   1. Рост оксидной пленки на поверхности чистого железа.
   2. Рост оксидной пленки на поверхности железо+12%хрома.
   3. Рост оксидной пленки на поверхности железо+30%хрома.
   4. Рост оксидной пленки на поверхности железо+хром+алюминий.
3. Моделирование облучения высокоэнергетическими частицами.
   1. Каскад в чистом железе.
      1. Каскад в объеме чистого железа.
      2. Каскад на поверхности чистого железа.
   2. Каскад в окисленном железе.
      1. Каскад в окисленном железе.
      2. Каскад в окисленном железе+12%хром.
      3. Каскад в окисленном железе+30%хром.
      4. Каскад в окисленном железе+хром+алюминий.

# Метология исследований

## Компьютерное моделирование.

В настоящее время в физике конденсированного состояния существует несколько основных методов компьютерного моделирования структурно-энергетических трансформаций на атомном уровне: динамический метод (метод молекулярной динамики), вариационный метод (или метод молекулярной статики), метод статистических испытаний (или метод Монте-Карло) и их различные сочетания.

Если расположить современные методы моделирования, используемые в физике, по возрастанию размеров моделируемых систем и времени моделирования, то картина получится следующей:

1. Ab initio методы.
2. Ab initio методы, использующие приближения
3. Методы использующие полуэмпирические потенциалы
4. Метод Монте-Карло
5. Методы конечных элементов

### Энергии и силы

### Молекулярная статика.

Считаем энергию, а не силу

### Молекулярная динамика.

Метод молекулярной динамики по сравнению с другими методами компьютерного моделирования обладает несколькими важными преимуществами. Во-первых, он позволяет решать задачи, касающиеся проблем структурно-энергетических трансформаций как в кристаллических, так и в некристаллических материалах, деформации и аморфизации атомных систем в условиях температурно-силовых воздействий. Во-вторых, он дает возможность соизмерять динамику исследуемых процессов с реальным временем.

## Основные приближения, используемые во время моделирования.

### Статистические ансамбли.

Статистическим ансамблем физической системы называется набор всевозможных состояний данной системы, отвечающих определённым критериям. Примерами статистического ансамбля являются:

1. Микроканонический ансамбль, описывающий состояния системы с заданными (постоянными) энергией, импульсом и моментом импульса системы;
2. Канонический ансамбль, описывающий состояния системы с постоянным числом частиц;
3. Большой канонический ансамбль, описывающий состояния системы с переменным числом частиц (и с заданным химическим потенциалом);

Так как исследуемая система обменивается энергией с окружающей средой имеет постоянный объем и постоянное количество частиц, то ансамблю, который будет моделироваться – NVT, или канонический.

### Термостат.

Для симуляции NVT ансамбля будет использоваться NVE (микроканонический) ансамбль + термостат Берендсена.

### Потенциалы.

От потенциала зависит все.

### Ab-initio моделирование

Достоинством расчётов из первых принципов является точное описание атомного взаимодействия с учётом квантовых эффектов. Недостатком — невозможность расчёта за разумное время микроскопических систем с достаточно большим числом частиц, например, атомов (практически редко более 100).

### LAMMPS

LAMMPS – открытый код для молекулярной динамики.

Плюсы:

1. Простота написания скриптов и низкий порог вхождения.
2. Возможность распараллеливания.
3. Полная документация по программе.

## Обработка и визуализация выходных данных.

### Пакет Ovito.

Замечательная вещь.

### Пакет Origin.

Лучше, чем Excel.

# Компьютерный Эксперимент

## Расчет энергетически выгодных состояний.

При достижении поверхности молекула диссоциирует и инкорпорируется в кристаллит железа, что сопровождается резким уменьшением энергии системы. При дальнейшем протягивании атома кислорода (уже потерявшего второй атом из молекулы, который остался вблизи поверхности) наблюдается периодическое изменение энергии, связанное со смещением атомов матрицы вблизи траектории перемещаемого атома кислорода со своих позиций.

Кислород движется по решетке по октаэдрическим позициям

## Моделирование эволюции роста оксидной пленки на поверхности стали.

Молекулярно-динамическое моделирование продемонстрировало высокую эффективность захвата кислорода из газовой фазы как чистым железом, так и сплавом Fe-12%Cr. Однако в обоих случаях эффективно преобразуются в оксид только несколько поверхностных атомных слоев металла, после чего рост оксида резко тормозится. Влияние хрома сводится в основном к замедлению процесса формирования первичной оксидной пленки и уменьшению ее толщины. Кристаллическая структура образующего первичного оксида не является магнетитом, а значительно больше напоминает вюстит (FeO).

## Моделирование облучения высокоэнергетическими частицами.

Облучение высокоэнергетическими частицами особо не влияет на характер роста оксидных пленок. При отсутствии пленки на поверхности чистого железа происходит распыление поверхности. Пленка блокирует распыление.