Слайд 3

Существующие реакторы будь то РБМК или ВВЭР, кроме своих достоинств имеют ряд недостатков. Так, они все используют медленные нейтроны для поддержания цепной реакции. Именно тут есть упущенная возможность. Используя быстрые нейтроны можно замкнуть цикл воспроизводства топлива и нарабатывать его прямо в активной зоне. Конечно, сразу появляется проблема, ведь в реакторах на быстрых нейтронах не получится использовать воду в качестве замедлителя. Так, например, это может быть жидкий металл, который не будет взаимодействовать с нейтронами и конструкционными материалами и будет хорошо отводить тепло.

Слайд 4

Читаем.

Спрашивается, а причем тут кислород. Отвечаю. Основным методом защиты материала является использование поверхностных оксидных защитных слоев, предотвращающих прямой контакт теплоносителя непосредственно с материалом.

Слайд 5

Читаем.

Слайд 6

К конструкционным материалам выдвигаются определенные требования. В свете выше сказанного, можно говорить о коррозионной и радиационной стойкости. Примером такого материала является ферритно-мартенситная сталь ЭП-823.

Слайд 8

Как было сказано, кислород в свинец добавляют для роста защитных покрытий на поверхности конструкционных элементов. Но какую концентрацию следует выбрать это другой вопрос. Выбирая концентрацию ниже 10-7 сталь растворяется в свинце, что не есть хорошо. При концентрации выше 10-5 кислород будет создавать оксид на поверхности стали.

Существуют три типа оксидов, растущих на поверхности железа, это вюстит, который не устойчив ниже 570 ˚С, магнетит и гематит.

Слайд 9

В исследовании по окислению стали в расплаве свинца в течении 1100 и 2000 часов формировалась оксидная пленка. Внешняя, пористая часть пленки со столбчатой структурой растет от начальной границы раздела «твердый металл/жидкий свинец» в сторону расплава, а внутренняя, более компактная, растет в сторону матрицы. Согласно данным спектрального анализа внешняя столбчатая часть оксидной пленки содержит железо и кислород. Достигая критической толщины (~ 18 мкм), пленка отслаивается. Насыщенный кислородом жидкий свинец попадает на поверхность стали, и окисление возобновляется.

Слайд 10

В исследовании по комплексному воздействию облучения 5 МэВ протонами и расплавленного свинца на сталь в течении 80 часов были получены похожие результаты. Во-первых, пленка состояла из двух слоев: внешнего и внутреннего. В зоне облучения структура верхнего слоя пленки пористая. Также в месте удара протонами пленка отслаивается.

Слайд 12

Предыдущая экспериментальная установка уникальна в своем роде, других таких нет. Построить ее – значит потратить большие средства. Но даже с установкой изучить начальную стадию процесса, которая занимает пикосекунды невозможно. На помощь приходит компьютерный эксперимент, в котором возможно контролировать все параметры системы и наблюдать процесс на начальных этапах.

Существуют два подхода. С использованием полуэмпирических потенциалов и без их использования. Когда потенциалы не используются, в течении расчета решаются квантовомеханические уравнения которые очень затратны по времени, но очень точны. Использование полуэмпирических потенциалов позволяет увеличить масштаб моделируемых систем и очень сильно уменьшить время самого моделирования пожертвовав при этом точностью расчетов.

Для прослеживания за эволюцией системы используют метод молекулярной динамики, а для нахождения равновесного состояния системы – метод молекулярной статики.

Читаем

Слайд 13

В момент создания ММД использовались парные потенциалы, но с увеличением сложности моделируемых систем они перестали правильно описывать вообще все. Теперь используют многочастичные потенциалы. Одним из таких является потенциал класса ReaxFF.

Слайд 16

Согласно экспериментальным данным кислород в теплоносителе присутствует в формах O; PbO и O2. С помощью DFT исследовалась система, содержащая железо и молекулу PbO. На рисунке (в) показана конфигурация системы при расположении молекулы на расстоянии 1,97 Å над поверхностью и кислород образует связь с атомом железа, при этом межатомное расстояние в молекуле незначительно увеличивается. На рисунке (г) молекула оксида свинца находится на расстоянии 1,50 Å над поверхностью. В таком положении атом кислорода образует связи с двумя атомами железа, при этом можно говорить о диссоциации молекулы оксида свинца, поскольку межатомное расстояние в молекуле сильно увеличивается.

Как видно из рисунка, зарядовая плотность кислорода смещается к атому железа на поверхности в конфигурации (а) и к двум атомам железа на поверхности в конфигурации (б). При этом видно, что химическая свзяь между кислородом и атомом свинца отсутствует, то есть можно говорить о диссоциации молекулы оксида свинца.

При взаимодействии теплоносителя с поверхностью стали, происходит захват молекул поверхностью и последующая диссоциация. Дальнейшее оксиление проходит благодаря атомарному кислороду.

Слайд 16

Моделирование диссоциации проводилось методом протяжки, т.е. над поверхностью железа создавалась молекула кислорода O2 и, в дальнейшем, один из атомов «тянулся» к поверхности, второй же атом «подтягивался» к первому. При достижении поверхности молекула разрушается, 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, в решетке, перемещается по октаэдрическим позициям.

Слайд 17

Слайд 18

Слайд 19

Пик энергетического спектра нейтронов сдвинут в область ≈0,1 МэВ, а средняя энергия при этом, лежит в интервале . Пролетая по решетке, нейтрон может выбить атом из своего центра равновесия создавая при этом первичный дефект ПВА (первично выбитый атом). В случае упругого столкновения величина кинетической энергии, переданной ПВА.