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

На правах рукописи

ПОЛОВНИКОВ ПАВЕЛ ВАСИЛЬЕВИЧ

# МОДЕЛИРОВАНИЕ МИКРОСТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ В ЯДЕРНОМ ТОПЛИВЕ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ

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

#### АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени кандидата технических наук Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук (ИБРАЭ РАН)

НАУЧНЫЙ РУКОВОДИТЕЛЬ: Тарасов Владимир Иванович, кандидат физико-математических наук

ОФИЦИАЛЬНЫЕ ОППОНЕНТЫ: Лиханский Владимир Валентинович, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное учреждение «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»»

Янилкин Алексей Витальевич, кандидат физико-математических наук, Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова» (ФГУП «ВНИИА»)

ВЕДУЩАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ: Акционерное общество «Институт реакторных материалов» (АО «ИРМ»)

Защита состоится 27 ноября 2025 г. в 14:00 на заседании диссертационного совета 24.1.496.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук по адресу: 115191, г. Москва, ул. Большая Тульская, д. 52

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук и на сайте https://ibrae.ac.ru/contents/651/

Автореферат разослан «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2025 г.

Ученый секретарь диссертационного совета



И.И. Линге

#### ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

#### Актуальность темы исследования

Ядерное топливо ключевой элемент ядерной энергетики, составляющей значительную энергобаланса современной часть промышленности. Количество атомных электростанций в России и в мире неуклонно возрастает, при этом одновременно повышаются требования к безопасности используемых объектов ядерной энергетики. В ИБРАЭ РАН фундаментальные исследования сфере обеспечения проводятся безопасности атомной энергетики, при этом основная используемая методология – комплексный анализ безопасности объектов энергетики с использованием современных компьютерных технологий. Это выражается в разработке современных компьютерных кодов, описывающих процессы, происходящие в ядерных реакторах и других объектах ядерного топливного цикла.

Центральным элементом активной зоны большинства энергетических реакторов является стержневой тепловыделяющий элемент (твэл) с находящимся внутри ядерным топливом. В ИБРАЭ РАН разрабатываются [1, БЕРКУТ-У 21 И колы SFPR [3] для термомеханических и физико-химических процессов в твэлах при их эксплуатации в реакторах на быстрых и тепловых нейтронах. В России также разрабатываются и активно используются другие твэльные коды: для тепловых реакторов — СТАРТ (АО «ВНИИНМ») [4], РТОП (АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ») [5]; для быстрых реакторов — КОРАТ (АО «ВНИИНМ») [6, 7], ДРАКОН (АО «ГНЦ РФ-ФЭИ»).

Актуальность развития моделей в твэльных кодах обусловлена необходимостью повышения точности прогнозирования поведения твэлов в различных режимах эксплуатации. Подходы, используемые при разработке кодов ИБРАЭ РАН, основаны на современных физических моделях, описывающих физические процессы, происходящие в твэле и топливе, и реализации этих молелей В виде математических Отличительным компонентом твэльных кодов БЕРКУТ-У и SFPR является механистической модуль MFPR [8, 9], также разрабатываемый в ИБРАЭ РАН, для описания поведения топлива различных видов и в различных реакторных режимах, включая аварийные. Уравнения, описывающие состояние топлива, содержат большое количество микроскопических экспериментальные данные о которых ограничены отсутствуют, особенно для перспективных видов топлива. Соответственно, возникает задача оценки или расчета таких параметров.

Данная задача может быть решена путем применения современных методов атомистического моделирования (Молекулярная Динамика, Кинетический метод Монте-Карло, и др.), которые помогают избежать проведения ряда дорогостоящих экспериментов при определении

параметров изучаемого материала. Найденные с помощью дополнительных расчетов микропараметры помогают точнее описывать процессы, происходящие в топливе под облучением.

Кроме того, по мере развития теории появления И экспериментальных данных возникает необходимость в разработке новых математических моделей, описывающих процессы в топливе, и включения их в топливный код. Это увеличивает надежность и предсказательную способность кола. что может быть использовано для безопасности эффективности ядерных И установок, топливного цикла и обеспечения радиационной безопасности.

Диссертация посвящена решению таких задач и практическому применению полученных результатов.

#### Цель и задачи исследования

Цель диссертационного исследования — разработка усовершенствованных математических моделей, описывающих влияние нейтронного облучения на микроструктуру и параметры ядерного топлива и на выход продуктов деления из топлива, и последующее внедрение результатов в топливные коды MFPR и БЕРКУТ.

Для достижения поставленной цели сформулированы следующие задачи:

- определение параметров радиационно-стимулированной диффузии в нитридном топливе;
- определение параметров мгновенного выхода продуктов деления из материала ядерного топлива под оболочку твэла по механизмам отдачи (recoil) и выбивания (knock-out);
- разработка, верификация и валидация моделей, описывающих механизмы роста и коагуляции радиационных пор и пузырей в ядерном топливе под облучением, имплементация в топливный код MFPR:
- а) модели коагуляции подвижных внутризеренных пузырей на основе теории Ланжевена;
- б) модели коагуляции малоподвижных крупных пор в рим-зоне облученного топлива  $UO_2$  в тепловых реакторах;
- в) моделей, описывающих «взрывное» распухание интерметаллидного уранового топлива;
- внедрение полученных результатов в топливные коды MFPR и БЕРКУТ.

#### Научная новизна работы

Рассчитаны коэффициенты атермальной (радиационностимулированной) диффузии для нитридного топлива на основе совместного использования методов Монте-Карло и молекулярной динамики. С помощью свободно распространяемого программного пакета SRIM [10] (англ. Stopping and Range of Ions in Matter) рассчитаны физические параметры, необходимые для описания механизмов мгновенного выхода продуктов деления из приповерхностной области топливной таблетки для нитридного и оксидного видов топлива.

Разработана модель коагуляции подвижных внутризеренных пузырей на основе теории Ланжевена, позволяющая обосновать и уточнить существующие модели броуновской коагуляции пузырей и распухания топлива, использующие упрощенные подходы теории случайных блужданий. На основе разработанной модели получены более точные по сравнению с упрощенными подходами корреляционные выражения для ядра парных столкновений в уравнении Смолуховского, которые могут быть также применены для решения задач коагуляции аэрозолей, образующихся в результате выхода продуктов деления в атмосферу под защитной оболочкой реакторной установки.

Развита теория коагуляции малоподвижных пор на основе модели их слияния в процессе роста. На основе проведенных исследований разработана модель коагуляции крупных пор в периферийной области таблетки («рим-зоне») облученного топлива  ${\rm UO}_2$  в реакторах на тепловых нейтронах, а также более сложная модель, описывающая «взрывное» распухание интерметаллидных соединений урана в процессе облучения в исследовательских реакторах. Для новых моделей разработана численная схема с применением метода Монте-Карло, выполнена верификация и валидация моделей на имеющихся экспериментальных данных.

# Теоретическая и практическая значимость работы

Найденные значения микропараметров внедрены в усовершенствованный твэльный код БЕРКУТ-У, аттестованный до 12% тяжелых атомов, и используются при выполнении расчетных обоснований безопасности РУ БРЕСТ-ОД-300, БР-1200 и БН-1200М в составе интегрального кода ЕВКЛИД/V2. Модели, описывающие эволюцию пористости в рим-зоне, включены в код SFPR/C++, являющегося модулем аттестованных кодов ТІТАN-1 и ТІТАN-2, которые используются для расчетного моделирования энергетических реакторов типа ВВЭР с оксилным топливом.

Полученные результаты расширили диапазон моделируемых процессов указанных кодов, уточнили микроскопические параметры, используемые в моделях топливного модуля. Усовершенствованные модели позволяют более точно описывать процессы образования газонаполненных пор и пузырей, и, как следствие, более адекватно описывать изменение облучением. теплофизических свойств топлива под коэффициенты атермального компонента самодиффузии в ядерном топливе процессы, более точно описывать происходящие микроуровне, в частности поведение точечных дефектов и газообразных продуктов деления. Определенные в работе параметры радиационного

выбивания продуктов деления из топлива использовались для анализа результатов ампульных тестов по измерению выхода радиоактивных изотопов газа из облученного СНУП-топлива.

Полученные с помощью моделирования методом Монте-Карло результаты позволили описать распухание топлива  $UO_2$  в периферийной зоне топливной таблетки. Кроме этого разработанная техника позволила объяснить явление «взрывного» распухания, наблюдавшееся в интерметаллидном топливе и влияющее на безопасность эксплуатации топлива в исследовательских реакторах.

#### Методология и методы исследования

Методология диссертационного исследования основывалась на математическом моделировании процессов, протекающих в ядерном топливе под облучением. Математическое описание основывалось на подходе, рассматривающем объект моделирования в рамках условий его эксплуатации. В диссертационном исследовании применялись следующие методы:

- описание поведения изучаемого объекта в виде системы уравнений, отражающей физическую модель;
- критический анализ, обзор и обобщение современного состояния моделей описания процессов в рим-зоне облученного ядерного топлива, эволюции пористости в различных видах топлива и различных условиях облучения, выхода ГПД из топлива под оболочку твэла;
- реализация алгоритмов и методов решения систем дифференциальных уравнений;
- программная реализация моделей в виде расчетного кода;
   оценка эффективности используемых алгоритмов и повышение их эффективности;
  - тестирование кодов с использованием аналитических тестов;
- обобщение и анализ экспериментальных данных, проведение верификационных расчётов;
- использование математического аппарата и математического анализа для вывода необходимых зависимостей параметров, исходя из физики начального представления описываемых процессов;
  - методы семейства Монте-Карло;
  - методы Молекулярной динамики;
- проведение многовариантных расчётов и статистический анализ результатов расчётов, оценка погрешностей расчётов отдельных параметров.

#### Положения, выносимые на защиту

– Значения баллистических множителей, определяющих коэффициенты атермальной диффузии атомов U и N в топливе UN;

- Параметры прямого выхода продуктов деления из приповерхностной области топливного стержня;
- Интерполяционные выражения для ядер парных столкновений броуновских частиц, рассчитанные на основе теории Ланжевена;
- Математическое обоснование и уточнение аналитического выражения, описывающего поведение пористости в рим-зоне, для его использования в топливном коде MFPR;
- Математическая модель аномального роста пористости в интерметаллидном топливе, облучаемом в исследовательских реакторах.

### Степень достоверности и апробация результатов

Достоверность и обоснованность результатов работы подтверждается:

- сравнением полученных аналитических зависимостей с результатами численного моделирования аналогичных систем;
- сравнением получаемых расчетных результатов с имеющимися экспериментальными данными;
- соответствием полученных результатов и выводов (в том числе для хорошо изученных видов топлива) общепринятым понятиям, отраженным в научной литературе.

# Личный вклад автора

Личный вклад автора заключается в:

- участии в постановке задач исследований, анализе литературы и обобщении результатов исследований других авторов;
- проведении молекулярно-динамических расчетов с помощью пакета прикладных программ LAMMPS и Монте-Карло расчетов с помощью пакета SRIM;
- выводе аналитических зависимостей, связывающих концентрацию пор с пористостью в рим-зоне облученного топлива и в интерметаллидных видах топлива;
- разработке численной схемы на основе метода Монте-Карло для моделирования эволюции пористости в материале топлива и интерпретации результатов расчетов;
- имплементации разработанных моделей, полученных зависимостей и рассчитанных параметров в топливный код MFPR.

# Апробация результатов работы

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

– Школа молодых ученых ИБРАЭ РАН в 2013, 2014, 2017, 2018 гг. (г. Москва, Россия);

- 13я международная конференция «WWER Fuel Performance, Modelling and Experimental Support». Несебыр, Болгария, 2019;
- Отраслевой семинар «Физика радиационных повреждений материалов атомной техники». Обнинск, 2024 г.

# Публикации

По теме диссертации опубликовано 4 научных работы в международных журналах, индексируемых в международной базе данных Scopus и входящих в Russian Science Citation Index.

# Структура и работы

Диссертация состоит из Введения, 3 Глав, Заключения, списка литературы из 170 библиографических ссылок. Общий объём работы составляет 103 страницы, включая 7 таблиц и 32 рисунка.

#### СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** диссертационной работы обоснована актуальность выбранной темы, сформулированы цель и задачи исследования. Подробно рассмотрены научная новизна и практическая значимость результатов, степень достоверности и личный вклад автора. Приведены данные об апробации работы, указаны положения, выносимые на защиту, и приведена информация о публикациях, связанных с темой исследования. Также представлена информация о структуре и объеме работы.

**В первой главе** приводится обзор процессов, происходящих в ядерном топливе при облучении, а также подходов, используемых для их моделирования с помощью топливных кодов.

В разделе 1.1 описываются радиационно-стимулированные процессы в материале ядерного топлива. Исследования в области радиационного материаловедения показывают, что процессы, происходящие в твердых телах при облучении и определяющие свойства материала, во многом зависят от диффузионной подвижности точечных дефектов и внедренных атомов. Радиационные материалы и атомы подвергаются воздействию осколков деления, нейтронов и заряженных частиц, что вызывает различные первичные и вторичные эффекты, включая образование различных дефектов кристаллической решетки. Такое воздействие приводит к ускорению диффузии и формированию газонаполненной пористости, влияющей на свойства материала.

В разделе 1.2 описываются процессы, определяющие изменение пористости топлива под облучением. Локальное выгорание на краю топливной таблетки в тепловых реакторах может существенно превосходить его среднее значение, что приводит к образованию структуры высокого выгорания на периферии таблетки, характеризующейся наличием субмикронных зерен и микропор. Такая реструктуризация топлива ускоряет процессы локального распухания и выхода газообразных продуктов

деления. Повышение пористости с увеличением выгорания и наличие крупных пор влияют на теплопроводность и механическую прочность топлива. Наличие этой зоны может ограничить срок эксплуатации топливных сборок, и по этой причине моделирование ее образования является актуальной задачей при определении работоспособности твэла.

В разделе 1.3 приводится краткий обзор подходов, применяемых в компьютерных кодах для моделирования процессов в ядерном топливе. В последние десятилетия были разработаны физические модели, описывающие поведение топлива в различных условиях его эксплуатации и основанные на современных знаниях и физических законах. В рамках этих моделей решаются системы связанных физических уравнений, что позволяет предсказывать изменение свойств топлива на основе состояния его микроструктуры. Предложенные подходы к моделированию охватывают широкий диапазон временных и пространственных масштабов, от атомистического уровня до уровня топливных таблеток, что обеспечивает лучшее понимание свойств ядерного топлива в условиях его эксплуатации.

посвящена рассмотрению Вторая глава радиационностимулированных процессов в реакторных материалах и их моделированию. Одним из ключевых процессов при облучении является образование и пространственный перенос непрерывно образующихся продуктов деления (ПД), поведение которых влияет на микроструктуру и свойства топлива, в частности, увеличивается его пористость и появляются микротрещины. Такие процессы и их влияние на состояние топлива необходимо учитывать в механистических топливных кодах. К таким кодам относится топливный разрабатываемый **САРАИ** PAH. MFPR, В Кол учитывает микроскопические параметры, описывающие поведение кристаллических дефектов, а также изменение теплофизических и термохимических свойств топлива. В частности в коде MFPR используются коэффициенты диффузии и параметры пролета осколков деления в топливе. Ввиду отсутствия данных моделировании для новых видов топлива, при ИΧ микропараметры зачастую берутся, исходя из известных значений для видов топлива или ИЗ самостоятельных оценок. определение используемых микропараметров для новых видов топлива является актуальной задачей.

В работе приводится описание процессов атермальной диффузии и мгновенного выхода ПД из приповерхностных областей топлива. Подвижность частиц в материале топлива определяется двумя главными внешними параметрами — температурой T и скоростью деления  $\dot{F}$  . Коэффициент диффузии при этом может быть представлен в виде суммы трех слагаемых:

$$D(T, \dot{F}) = D^{int}(T) + D^{vac}(T, \dot{F}) + D^{ath}(\dot{F}). \tag{1}$$

Слагаемое  $D^{int}(T)$  соответствует коэффициенту термической диффузии, возникающей в результате теплового движения атомов и молекул, механизм которой преобладает при высоких температурах  $(T>1400~\mathrm{C}^\circ),~D^{vac}(T,\dot{F})$  — коэффициент диффузии в неравновесном поле вакансий, возникающих под облучением, который доминирует при средних температурах  $(1000~\mathrm{C}^\circ < T < 1400~\mathrm{C}^\circ)$ . Последний член,  $D^{ath}(\dot{F})$ , соответствует радиационно-стимулированной (или атермальной) диффузии, возникающей в радиационных каскадах смещений и зонах локального проплавления. Это слагаемое может быть описано в виде эмпирического соотношения:

$$D^{ath}(\dot{F}) = A\dot{F},\tag{2}$$

где A — коэффициент пропорциональности (или баллистический множитель), экспериментальные оценки которого соответствуют значениям  $(1,5\pm0,6)\times10^{-39}\,\mathrm{m}^5$  для  $UO_2$  и  $(2,3\pm1,0)\times10^{-40}\,\mathrm{m}^{-5}$  для UC. Аналогичные оценки для  $(U,Pu)O_2$  составляют  $1,2\times10^{-39}\,\mathrm{m}^5$ .

Еще одним атермальным процессом, влияющим на выход ПД, является радиационно-стимулированный выход продуктов деления из приповерхностной области таблетки по механизмам отдачи и выбивания вследствие пролета осколков деления. На начальных стадиях облучения или при низкой температуре эти механизмы выхода ПД являются основными.

Отношение скорости выхода ПД R к скорости образованию ПД (B) по механизму отдачи может быть представлено в виде [11]:

$$\left(\frac{R}{B}\right)^{rec} = \frac{\mu_{ff}S}{4V},\tag{3}$$

где S и V — площадь поверхности и объем топливного образца соответственно, а  $\mu_{ff}$  — средняя длина пролета осколка деления.

Чтобы найти поток выбитых атомов типа i нужно решить интегродифференциальные уравнения для концентрации  $C_i\left(x,t\right)$  выбиваемых частиц [11]. Найденное в [11] стационарное решение таких уравнений позволяет записать конечное выражение для относительного выхода частиц в виде:

$$\left(\frac{R}{B}\right)^{ko} = \frac{S_{tot}}{V} \mu_U^{ko} I\left(\frac{\lambda_U^{ko}}{\lambda_i}\right), \tag{4}$$

где  $S_{tot}$  — полная поверхность топливного образца,  $\mu_U^{ko}$  — микроскопический параметр модели, характеризующий среднюю длину пролета выбиваемых атомов, I(x) — гладкая функция, для короткоживущих изотопов (x << 1) стремящаяся к x/8, для стабильных изотопов — к 1/2. В диссертационной работе показано, что уравнение (4) справедливо лишь для короткоживущих ПД, для долгоживущих и стабильных элементов получены уточненные формулы; см. детали также в [12].

Для оксидного и нитридного топлива в диссертационной работе значения микроскопических параметров  $A, \mu_{ff}$ совместным применением Монте-Карло полученные метода приближения столкновений, использованием парных динамики. Результаты молекулярной ЭТИХ расчетов включены соответствующие механистические модели топливного кода MFPR.

Характеристики каскадов, образующихся из-за пролетов фрагментов деления в диоксиде урана и мононитриде урана, рассчитывались с помощью пакета прикладных программ SRIM, разработанных в США [13]. Изотопы  $^{95}{
m Sr}$  и  $^{138}{
m Xe}$  были выбраны в качестве типичных представителей продуктов деления, поскольку их выход близок к максимальному в легкой и тяжелой группах ПД соответственно. Для каждой пары «топливо-фрагмент деления» SRIM-расчетов проведено несколько сотен ДЛЯ удовлетворительной статистики и надежной оценки распределения выбитых атомов по энергиям. Дополнительно были рассчитаны средние длины пробега как функции энергии для осколков <sup>95</sup>Sr и <sup>138</sup>Xe, аналогичные расчеты были проведены для выбиваемых атомов U, O (в топливе UO<sub>2</sub>) и U, N (в топливе UN).

С помощью найденных функций распределения были рассчитаны усредненные параметры для первичных выбитых атомов (ПВА), которые приведены в Таблице 1. Видно, что средние энергии ПВА в нитридном топливе на 5 - 10% меньше, а количество образующихся ПВА на 20% больше, чем в оксидном топливе. Количество N-ПВА составляет ~60% от что объясняется в первую очередь О-ПВА, концентрацией атомов азота и кислорода в топливе. Полученные значения заметно отличаются от более ранних значений, представленных в [14]. Главная причина состоит в переоценке в [14] средних энергий ПВА (102 кэВ для U-ПВА и 11 кэВ для О-ПВА); соответственно средние количества ПВА были значительно недооценены (28 шт. и 116 шт. для U-ПВА и О-ПВА, соответственно).

Рассчитанные средние значения для энергии, числа и длины пробега выбитых КО-атомов (КО - от англ. knock-out) в топливе UO $_2$  и UN представлены в таблице 2. Видно, что средние энергии и длины пробега КО-атомов изменяются в достаточно узких пределах (от 140 эВ до 175 эВ и от 1.11 нм до 1.24 нм, соответственно), тогда как среднее количество существенно зависит от характеристик осколка деления и типа топлива.

Из таблиц 1 и 2 следует, что произведение  $n_U^{ko}\mu_U^{ko}$ , которое определяет интенсивность потока атомов выбивания намного больше для КО-атомов, чем для ПВА-атомов. Это согласуется с выводом [11] об определяющей роли атомов выбивания высокого порядка в механизме knock-out.

Таблица 1 - Средние энергии, количества и длины пролета осколков деления и ПВА-атомов в топливе UO<sub>2</sub> и UN

	<sup>95</sup> Sr в UO <sub>2</sub>	<sup>95</sup> Sr в UN	<sup>138</sup> Хе в UO <sub>2</sub>	<sup>138</sup> Хе в UN
Осколки деления				
Энергия, МэВ	102,0	102,0	71,4	71,4
Длина, мкм	8,22	7,15	6,55	5,67
ПВА-U				
Энергия, кэВ	4,21	3,87	6,24	5,91
Количество	775	956	888	1103
Длина, нм	3,96	3,84	4,58	4,49
ПВА-О или ПВА-N				
Энергия, кэВ	1,60	1,60	2,21	2,01
Количество	707	413	869	513
Длина, нм	5,43	5,44	6,71	6,30

Таблица 2 - Средние энергии, количества и длины пролета KO-атомов в  ${\rm UO_2}$  и UN

	<sup>95</sup> Sr в UO <sub>2</sub>	<sup>95</sup> Sr в UN	<sup>138</sup> Хе в UO <sub>2</sub>	<sup>138</sup> Хе в UN
ko-U				
Энергия, эВ	169	159	175	174
Количество	18200	30400	30900	53000
Длина, нм	1,21	1,20	1,24	1,24
ko-O или ko-N				
Энергия, эВ	140	140	152	149
Количество	62200	50700	106000	87500
Длина, нм	1,11	1,11	1,17	1,15

Анализ поведения атомов топлива при пролете ПВА был проведен при помощи молекулярно-динамических расчетов с использованием пакета прикладных программ LAMMPS [15] (находится в свободном доступе). В базовых расчетах образец топлива был представлен как параллелепипед размером  $25 \times 25 \times 25$  элементарных ячеек (для UO<sub>2</sub> 187500 атомов). При расчетах мононитрида И диоксида урана были использованы АDР-потенциал [16] и потенциал Якуба [17] соответственно; оба потенциала универсальным ZBL-потенциалом [18] для сшиты коротких расстояниях. взаимодействий на Рассчитанные средние квадратичные смещения для различных пар ПВА-КО-атомов представлены на рисунке 1 на примере топлива UN.

Некоторые расчеты были повторно проведены для системы размером  $50\times50\times50$ , а также были проведены расчеты с альтернативным потенциалом MOX-07 [19] для топлива  $UO_2$ . Было показано незначимое отличие результатов этих и базовых расчетов.

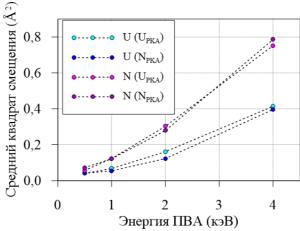


Рисунок 1 — Средний квадрат смещения KO-атомов при упругих столкновениях с ПВА с разной начальной энергией в UN

Совмещение полученных результатов с распределением ПВА по энергиям позволяет оценить среднее смещение атомов, приходящееся на один осколок деления. Результаты вычисления баллистического множителя A в уравнении (2) для атомов урана и кислорода/азота приведены в таблице 3.

Таблица 3 - Баллистический множитель A для атермальной диффузии, м<sup>5</sup>

		111
Атом	$\mathrm{UO}_2$	UN
U	$5,2\times10^{-43}$	$1,3\times10^{-42}$
О или N	$1,1\times10^{-42}$	$2,4\times10^{-42}$

Атермальные коэффициенты диффузии в нитридном топливе в 2,5 раза больше, чем в оксидном топливе. Оцененные значения величины A для UO<sub>2</sub> находятся в разумном согласии с результатами молекулярнодинамических расчетов, представленными в литературе [20, 21]. Это позволяет предполагать, что полученный результат для топлива UN является достаточно надежным и может быть использован в топливном коде MFPR. Это особенно ценно, поскольку данный вид топлива относительно характеристик слабо изучен, зачастую ДЛЯ его отсутствуют экспериментальные измерения и исследования.

В третьей главе описываются различные виды пористости и модели их эволюции. Рассматриваются различные механизмы роста и коагуляции радиационной пористости, образованной газонаполненными пузырями и порами. Код MFPR моделирует процессы зарождения и эволюции пористости, образованной газонаполненными пузырями и порами, вплоть до

образования рим-зоны, характеризующейся реструктуризацией топлива и образованием крупных пор на периферии топливного столба. Особенно важным является процесс образования рим-зоны на периферии топливной таблетки, поскольку эта зона характеризуется сильной реструктуризацией топлива и образованием крупных пор. Адекватное моделирование концентрации, размера пор и пузырей критически важно для надежной оценки теплопроводности материала топлива, распухания топлива и выхода из него ПД. При этом атермальные процессы, которые описывались во второй главе, влияют на эволюцию пористости, поскольку участвуют как в переносе ГПД, так и в выбивании атомов с поверхности пор и пузырей.

Раздел посвящен моделированию коагуляции 3.1 броуновских частиц в рамках теории Ланжевена. Задача решается в общей постановке в применении к броуновским частицам во всем диапазоне чисел Кнудсена, а в пределе малых чисел решение этой задачи может быть использовано для описания коагуляции диффундирующих частиц, в частности, подвижных внутризеренных газовых пузырей в топливе. Кроме того, общее решение, применимое к аэрозольным частицам, может быть системных интегральных кодах высокого позволяющих моделировать тяжелые аварии на АЭС при рассмотрении поведения ПД, вышедших из топлива при аварии и образующих аэрозоли в атмосфере под защитной оболочкой реакторной установки.

Эволюция распределения коагулирующих частиц по размерам с течением времени может быть описана с помощью кинетической модели, основанной на уравнении Смолуховского. Для частиц, равномерно распределенных в пространстве, в предположении, что столкнувшиеся частицы с радиусами  $R_1$  и  $R_2$  мгновенно сливаются, образуя новую

частицу радиуса  $R_{12} = \sqrt[3]{R_1^3 + R_2^3}$ , уравнение Смолуховского для концентрации частиц n(R,t) имеет вид:

$$\frac{\partial n(R,t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{\infty} \beta(R_{1},R_{2}) n(R_{1},t) n(R_{2},t) \delta\left(R - \sqrt[3]{R_{1}^{3} + R_{2}^{3}}\right) dR_{1} dR_{2}$$

$$- n(R,t) \int_{0}^{\infty} \beta(R,R_{1}) n(R_{1},t) dR_{1}$$
(5)

где  $\beta(R_1,R_2)$  — ядро коагуляции, величина которого пропорциональна вероятности столкновения двух произвольных частиц с радиусами  $R_1$  и  $R_2$  в единице объема,  $\delta(x)$  — дельта-функция Дирака.

В «кинетическом» режиме, который соответствует быстрому перемешиванию частиц между столкновениями (в случае диффузионной

миграции частиц этот режим соответствует условию  $R_i, R_i \ll \bar{r}$ , где  $\bar{r}$  – среднее расстояние между частицами [22]), многочастичная задача сводится к рассмотрению вероятности столкновения двух частиц. Данный подход существенно упрощает описание процесса коагуляции и обосновывает применение парного ядра столкновений  $\beta(R_1, R_2)$  для разреженных систем в кинетическом уравнении (5).

При рассмотрении двух частиц, движущихся по независимым траекториям  $\vec{r}_1(t)$  и  $\vec{r}_2(t)$  вероятность их столкновения может быть оценена скорость заметания объема эффективной частицей траектория  $\vec{r}_{12}(t)$  движения  $R_{12} = R_1 + R_2$ которой определяется соотношением  $\vec{r}_{12}(t) = \vec{r}_1(t) - \vec{r}_2(t)$ . теории В рамках Ланжевена траектория движения частицы і находится из уравнения:

$$m_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} = -f_i \vec{v}_i + \overrightarrow{X}_i, \tag{6}$$

где  $m_i$  и  $f_i$  – масса и коэффициент трения частицы, соответственно,  $\overrightarrow{v}_i$  – вектор скорости частицы,  $\overrightarrow{X}_i$  – стохастическая быстро флуктуирующая сила, действующая на частицу со стороны окружающего пространства. Уравнение для относительного движения двух частиц, описывающее миграцию эффективной частицы, может быть получено из найденных решений  $\vec{r}_i(t)$  для каждой из частиц.

заметаемого эффективной расчета объема, Монте-Карло: случайно распределенные метол точки-маркеры располагались прямоугольном В параллелепипеде, полностью покрывающем траекторию частицы. Расчет количества заметенных маркеров позволял оценивать долю пространства, заметенного частицей в единицу времени. Длина каждой рассчитанной траектории, характеризуемая числом шагов  $k = t/\tau_0$ , увеличивалась до тех пор, пока средняя скорость заметания объема  $\beta = \delta \langle V \rangle / \delta t$  не достигала постоянного значения, при этом рассчитываемая скорость сравнивалась со скоростью заметания в свободно-молекулярном режиме.

Результаты расчетов средних значений  $(\delta V/\delta t)/(V_0/\tau) = \beta/\beta_{fm}$ позволили получить интерполяционную формулу:  $\frac{\beta}{\beta_{fm}} = \frac{\Gamma + A\Gamma^2 + B\Gamma^3}{1.5 + C\Gamma + D\Gamma^2 + B\Gamma^3}.$ 

$$\frac{\beta}{\beta_{fm}} = \frac{\Gamma + A\Gamma^2 + B\Gamma^3}{1,5 + C\Gamma + D\Gamma^2 + B\Gamma^3}.$$
 (7)

В данной корреляции  $\Gamma = 6D_{12}/R_{12}\bar{c}_{12} = 3\sqrt{\pi/2}\,\mathrm{Kn_D}$  – безразмерный параметр, характеризующий режим движения эффективной частицы, где  $\bar{c}_{12}$  — ее тепловая скорость,  $D_{12} = D_1 + D_2$  — ее коэффициент диффузии, Кпр – диффузионное число Кнудсена. Параметры зависимости (7) находились с помощью метода наименьших квадратов, и обеспечили точность в пределах ≈ 1%, сравнимую со значениями погрешности в экспериментах. Данная зависимость корректно сходится к 1 в пределе  $\Gamma\gg$ 1, соответствующему свободно-молекулярному движению частиц, и к 2Г/3

в пределе  $\Gamma \ll 1$ , соответствующему диффузионному движению частиц (в том числе и подвижных газовых пузырей в топливе).

Полученный результат позволяет дополнительно обосновать и уточнить существующие модели, построенные с использованием упрощенных подходов (например, различные модификации модели случайных блужданий).

рассмотрены процессы коагуляции разделе 3.2 неподвижных пор в рим-зоне облученного UO<sub>2</sub> топлива в тепловых реакторах. Рим-зона ядерного топлива образуется на периферии топливного характеризуется экстремальными значениями столба относительно низкими температурами, выгорания И сильной реструктуризацией материала с образованием субмикронных зерен и крупных пор. Поскольку диффузионная подвижность пор резко падает с ростом их радиуса, наблюдаемые в рим-зоне крупные поры (с характерным размером 1-2 мкм) оказываются практически неподвижными. Для описания эволюции пористости на периферии топливных таблеток UO<sub>2</sub> была разработана модель, описывающая поведение случайно распределенных неподвижных пор в процессе их роста и слияния при столкновениях. Разработанная модель имплементирована в код MFPR.

Из-за условий на периферии топливного столба образующиеся поры можно рассматривать неподвижными, а коагуляция между такими порами происходит только вследствие столкновений в результате роста пустот (а не их перемещения). При малой концентрации достаточно рассматривать только парные столкновения растущих пор, однако при повышенных концентрациях необходимо учитывать и столкновения более высокого решения такой задачи была разработана порядка. Для полидисперсная численная схема эволюции функции распределения пор по размерам, описываемой концентрацией пор  $c_n(t)$ , где n – число вакансий в поре, с учетом парных и тройных столкновений. При рассмотрении двойных и тройных столкновений кинетическое уравнение Смолуховского для  $c_n$ сводится к виду:

$$\begin{split} \frac{\partial}{\partial t}c_n &= -\frac{\partial}{\partial n}(u_nc_n) + \frac{1}{2}\int\limits_0^\infty \int\limits_0^\infty \beta_{k,m}^{(2)}c_kc_m\delta(n-k-m)dkdm - c_n\int\limits_0^\infty \beta_{n,k}^{(2)}c_kdk \\ &+ \frac{1}{3!}\int\limits_0^\infty \int\limits_0^\infty \int\limits_0^\infty \beta_{k,m,l}^{(3)}c_kc_mc_l\delta(n-k-m-l)dkdmdl \\ &- \frac{1}{2}c_n\int\limits_0^\infty \int\limits_0^\infty \beta_{n,k,m}^{(3)}c_kc_mdkdm \end{split}$$

где вероятность парных столкновений равна скорости заметания окружающего объема эффективной частицей радиуса  $R_{12} = R_1 + R_2$ :

$$\beta_{k,m}^{(2)} = 4\pi (R_k + R_m)^2 \left( \frac{dR_k}{dt} + \frac{dR_m}{dt} \right). \tag{9}$$

При этом вероятность тройного столкновения пары частиц k и m с третьей частицей l определяется дополнительным объемом  $V_{km;l}$ , заметаемым образовавшейся частицей. Поскольку слияние столкнувшейся пары пор и образование новой сферической пустоты происходит в результате относительно быстрого процесса поверхностной диффузии, ее можно с хорошей точностью считать мгновенной (по сравнению с относительно медленным процессом роста пор за счет объемной диффузии). При таком рассмотрении ядро тройных столкновений принимает вид:

$$\beta_{kml}^{(3)} = \beta_{km}^{(2)} V_{km;l} + \beta_{lk}^{(2)} V_{lk;m} + \beta_{ml}^{(2)} V_{ml;k}. \tag{10}$$

Численное решение кинетического уравнения (8) и сравнение с экспериментальными измерениями эволюции пористости в рим-зоне облученного топлива [23] представлено на рисунке 2, где также приведены аналитические зависимости, полученные в приближении среднего поля. В рассматриваемом экспериментальном исследовании изучалась морфология топлива тепловых реакторов, облученного до локальных выгораний, превышающих 240 ГВтСут/т. Параметры пористости исследовались в зависимости от расстояния до центра таблетки, на рисунке показано сравнение с расчетами для периферийной части таблетки.

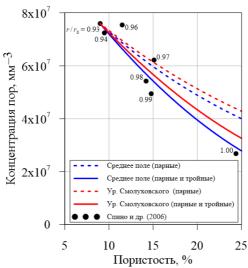


Рисунок 2 — Сравнение результатов расчета зависимости концентрации пор от пористости, полученных в рамках теории Смолуховского и в приближении среднего поля, с экспериментальными данными [23]

Из рисунке 2 видно, что рассчитанная зависимость концентрации от пористости, найденная с помощью усовершенствованной кинетической модели, находится в удовлетворительном согласии с измерениями, и довольно близка к решению, найденному в приближении среднего поля с учетом тройных столкновений:

$$\overline{c} = c_0 exp\left(-4(S - S_0) - 4\xi(S^2 - S_0^2)\right),\tag{11}$$

где  $\bar{c}$  - средняя концентрация пор, S — пористость, а  $c_0$  и  $S_0$  - начальные значения. Это позволяет обосновать использование аналитического решения в топливном коде MFPR для анализа поведения пористости в рим-зоне облученного топлива.

Дополнительно найденное решение полидисперсной системы уравнений Смолуховского (8) сравнивалось с результатами моделирования методом Монте-Карло (рисунок 3). Сравнение этих результатов дополнительно обосновывает практическое применение упрощенного аналитического решения (11) во всем диапазоне наблюдаемых значений пористости до 25 %.

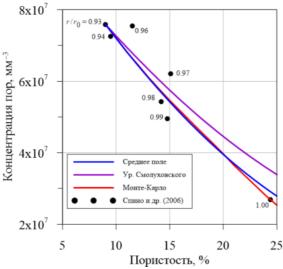


Рисунок 3 — Сравнение детерминистических и стохастических расчетов (на основе теории Смолуховского и метода Монте-Карло, соответственно) для зависимости концентрации пор от пористости в условиях эксперимента [23]

**Раздел 3.3** посвящен изучению явления «взрывного распухания», наблюдаемого в некоторых видах интерметаллидного топлива ( $U_6$ Fe,  $U_6$ Mn,  $U_3$ Si,  $U_3$ SiAl) при низкотемпературном облучении в исследовательских реакторах с высокой скоростью выгорания топлива. В экспериментах наблюдалось, что при превышении величины распухания  $\sim 60\%$ 

происходило резкое («взрывное») увеличение скорости распухания, сопровождаемое образованием аномально крупных пор, достигающих размера в несколько десятков микрон, в некоторых случаях приводящее к механическому разрыву образцов. Для объяснения такого поведения топлива в работе предложен механизм, используемый ранее для моделирования поведения пористости в рим-зоне  $UO_2$ , но в условиях сверхвысокой пористости учитывающий, помимо парных и тройных столкновений пор, столкновения более высоких порядков.

Для качественного анализа поведения системы с учетом парных и столкновений тройных аналитическая модель, разработанная среднего описания зависимости приближении поля ДЛЯ концентрации пор от пористости рим-зоны UO2, была модифицирована для равновесного состояния рассмотрения пор, a также существенно усовершенствована описания кинетики процесса ДЛЯ Равновесное состояние пор характеризуется внутренним избыточным (по сравнению с внешним) давлением  $\Delta P = 2\gamma/R$ , где  $\gamma$  - коэффициент поверхностного натяжения, *R* - радиус поры. Такое состояние объясняется высокой пластичностью интерметаллидного топлива, которое переходит в аморфное состояние в процессе облучения. В отличие от неравновесных пор в рим-зоне UO<sub>2</sub>, при слиянии которых сохранялся их полный объем, в рассматриваемом случае сохраняется лишь полное число газовых атомов в порах, что, в силу условия равновесности образовавшихся при слиянии пор, приводит к более существенному распуханию. Так, при слиянии двух пор радиусами  $R_1$  и  $R_2$  образовавшаяся равновесная пора имеет радиус  $R_{12} =$  $\sqrt{R_1^2 + R_2^2}$ , т.е. сохраняется полная площадь поверхности пор.

Для анализа эволюции пористости во времени на ранних этапах облучения было получено новое кинетическое уравнение, описывающее скорость изменения пористости топлива S с учетом только парных столкновений:

$$\frac{(1+S)(V(S))^{\frac{1}{3}}dS}{S(1+3S)}dS = 3\pi \cdot \left[\frac{3}{4\pi}\right]^{2/3}\alpha,\tag{12}$$

где V(S) – средний объем пор, определяемый соотношением

$$V(S) = \bar{V}_0 \frac{S(1+3S)^{4/3}}{S_0(1+3S_0)^{4/3}},\tag{13}$$

свойства облучаемого материала задаются коэффициентом  $\alpha = \frac{kTD_g\bar{c}_g}{\gamma}$ , где  $D_g$  и  $\bar{c}_g$  – коэффициент диффузии и концентрация газа, соответственно.

Для более поздней стадии облучения было найдено решение с учетом парных и тройных столкновений, которое принимает более сложный вид:

$$\frac{dS}{dt} = 3\pi \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{2/3} \alpha \frac{S}{V^{1/3}} \frac{1 + 4S + 9S^2}{(1+S)^2}.$$
 (14)

$$V(S) = V_0 \frac{S(1+4S+9S^2)^{8/9}}{S_0(1+4S_0+9S_0^2)^{8/9}} \exp\left[\frac{4}{9\sqrt{5}} \operatorname{atan} \frac{\sqrt{5}(S-S_0)}{1+2(S+S_0)+9SS_0}\right].$$
(15)

Для качественного сравнения предсказаний модели с результатами измерений неизвестный параметр  $\alpha$  подбирался таким образом, чтобы наилучшим образом соответствовать экспериментальным точкам; его значения приведены в таблице 5. Полученные таким образом значения по порядку величину согласуются с характерным значением  $\alpha=10^{-15}$  м/с, оцениваемым при тех же условиях облучения для топлива UO2. Для каждого вида топлива скорость деления составляла  $G=2\cdot 10^{20}$  м $^{-3}$ с $^{-1}$ , начальная концентрация пузырьков была оценена с использованием экспериментальных данных [24] как  $N_0=2,5\cdot 10^{21}$  м $^{-3}$ , а начальная пористость выбиралась с использованием первых экспериментальных точек.

Таблица 5 - Значения параметра  $\alpha$  для различных видов топлива

		1 '	1	, ,	
Материал	$U_3Si_2$	$U_3Si$	U <sub>3</sub> SiAl	$U_6Mn$	U <sub>6</sub> Fe
α (м/c)	$2,7 \cdot 10^{-15}$	$2 \cdot 10^{-15}$	$2 \cdot 10^{-15}$	$3.8 \cdot 10^{-15}$	$6,5\cdot 10^{-15}$

Рассчитанная временная зависимость пористости для различных топливных материалов с использованием этих значений представлена на рисунке 4. Видно качественное согласие с измерениями на начальной и более поздней стадиях облучения (пока распухание ниже 50-60%).

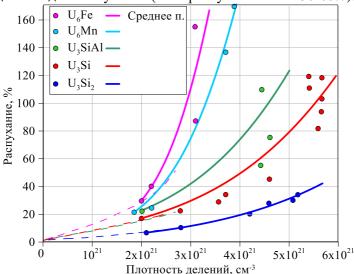


Рисунок 4 — Сравнение экспериментальных данных с результатами расчетов (сплошные линии) в приближении среднего поля. Пунктирные линии на начальном временном интервале представляют собой кривые экстраполяции, приведенные в экспериментальной работе [24]

Однако при более высоких значениях распухания скорость распухания заметно недооценивается, что является указанием на важную роль столкновений более высокого порядка на этой стадии эволюции пористости. Для решения этой задачи был разработан подход, основанный на методе Монте-Карло.

При проведении численных расчетов оказалось, что, начиная с определенного значения пористости, все поры в системе сливались в одну за один временной шаг независимо от его величины. Этот эффект возникал изза экстремально высокой скорости роста пористости, что было следствием упрощенного предположения о мгновенной релаксации пор, что приводило в конечном итоге к нефизическому результату. Для устранения данного недостатка модели была учтена конечная скорость релаксации пор в топливной матрице. Для этой цели может быть использовано уравнение релаксации в вязком материале, каким является аморфизированное в процессе облучения интерметаллидное топливо. В пределе ньютоновской ползучести, обоснованном для аморфных материалов [25], можно записать:

$$\dot{R}_P \approx \frac{\Delta P}{4\eta} R,\tag{8}$$

где  $\Delta P$  – избыточное давление поры радиуса R.

На рисунке 5 показаны расчетные зависимости пористости для различных материалов с коэффициентами диффузии атомов газа  $D_g$  и вязкостью  $\eta$ , приведенными в таблице 6 и настроенными таким образом, чтобы наилучшим образом соответствовать экспериментальным точкам. Полученные результаты демонстрируют плавную зависимость пористости от времени (в отличие от рисунка 5) и находятся в хорошем качественном соответствии с результатами измерений.

Таблица 6: Значения параметров  $D_a$  и  $\eta$ .

Материал	$U_3Si_2$	U <sub>3</sub> Si	U <sub>3</sub> SiAl	U <sub>6</sub> Mn	U <sub>6</sub> Fe
$D_g (\text{m}^2/\text{c})$	$2,9 \cdot 10^{-20}$	$4,3\cdot10^{-21}$	$2,2\cdot 10^{-21}$	$0,5 \cdot 10^{-20}$	$0,3\cdot 10^{-20}$
η (Πa·c)	$1,5\cdot10^{14}$	$1,10^{13}$	$1.10^{13}$	$8,2\cdot10^{12}$	$9,5\cdot10^{12}$

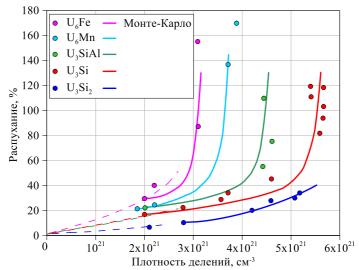


Рисунок 5 — Рассчитанная зависимость пористости от числа делений в единице объема для случая конечной скорости релаксации пор в сравнении с экспериментальными данными [24]

В заключении перечислены основные результаты диссертационной работы, выносимые на защиту.

#### ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИИ

В рамках диссертационного исследования поставленная цель была выполнена: разработаны усовершенствованные физические модели, описывающие влияние облучения на микроструктуру и параметры ядерного топлива, результаты исследований имплементированы в современный топливный код MFPR.

Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи:

- определены параметры радиационно-стимулированной диффузии в ядерном топливе;
- определены параметры мгновенного выхода продуктов деления из материала ядерного топлива под оболочку твэла по механизмам отдачи (recoil) и выбивания (knock-out);
- проведена разработка, верификация и валидация моделей, описывающих механизмы роста и коагуляции радиационных пор и пузырей:
- а) модель коагуляции подвижных внутризеренных пузырей на основе теории Ланжевена;
- б) модель коагуляции крупных пор в рим-зоне облученного топлива  $UO_2$  в тепловых реакторах;

- в) модель, описывающая «взрывное» распухание интерметаллидного уранового топлива;
- полученные результаты и разработанные модели имплементированы в топливный код MFPR.

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).

#### ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

- 1. Tarasov V. I., **Polovnikov P. V.** MFPR model parameters of the athermal irradiation-induced transport in nuclear fuels //Defect and Diffusion Forum. Trans Tech Publications Ltd, 2017. T. 375. P. 71-83.
- 2. **Polovnikov P. V.**, Azarov I. B., Veshchunov M. S. Advancement of the kinetic approach to Brownian coagulation on the base of the Langevin theory //Journal of Aerosol Science. 2016. T. 96. P. 14-23.
- 3. Tarasov V. I. **Polovnikov P. V.** et al. Development of the MFPR/R code for characterization of the rim zone and high burnup structure evolution in UO2 fuel pellets //Journal of Nuclear Materials. 2019. T. 517. P. 214-224.
- 4. **Polovnikov P. V.**, Tarasov V. I., Veshchunov M. S. Modelling of breakaway swelling in intermetallic fuels during low-temperature irradiation //Journal of Nuclear Materials. 2022. T. 558. C. 153362.

#### СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1. Boldyrev A. V. et al. Journal of Nuclear Materials. 2025. T. 603. C. 155417.
  - 2. Boldyrev A. V. et al. Atomic Energy. 2020. T. 127. C. 356-361.
- 3. Veshchunov M. S. et al. Nuclear engineering and design. -2011.-T.241.-Ne. 8.-C.2822-2830.
  - 4. АО «ВНИИНМ», Краткое описание СТАРТ-4А. 2023.
- 5. Лиханский В. В. и др. Ядерная физика и инжиниринг. 2010. Т. 1. №. 2. С. 104-122.
  - 6. Иванов Ю. А. и др. Материалы ядерной техники. 2019. С. 107-107.
- 7. Хоружий O. B. И др. XI конференция реакторному ПО материаловедению, посвящённая 55-летию отделения реакторного материаловедения АО" ГНЦ НИИАР". – 2019. – С. 104-108.
- 8. Veshchunov M. S. et al. Nuclear Engineering and Design. 2006. T. 236.  $N_{\odot}$ . 2. C. 179-200.

- 9. Veshchunov M. S. et al. Journal of nuclear materials. -2007. T. 362. No. 2-3. C. 327-335.
  - 10. Ziegler J.F. Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B 268 (2010) 1818–1823.
- 11. Olander D.R. Fundamental Aspects of Nuclear Reactor Fuel Elements, TID-26711-Pl (1976), p. 289–299.
- 12. Tarasov V.I., **Polovnikov P.V.** Defect and Diffusion Forum. Trans Tech Publications Ltd, 2017. T. 375. C. 71-83.
- 13. Ziegler J. F. et al. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. -2010. T. 268. No. 11-12. C. 1818-1823.
  - 14. Nilsson G. J. Nucl. Mater. 20 (1966) 215.
- 15. Thompson A. P. et al. Computer Physics Communications. -2022.-T.271.-C.108171.
  - 16. Kuksin A.Y. et al. J. Alloy. Comp. 658 (2016) 385–394.
  - 17. Yakub E. et al. J. Chem. Phys. 127 (2007) 094508.
- 18. Ziegler J.F. et al. The stopping and range of ions in solids, Pergamon, New York, 1985.
  - 19. Potashnikov S.I. et al., J. Nucl. Mater. 419 (2011) 217–225.
  - 20. Martin G. et al., J. Nucl. Mater. 385 (2009) 351–357.
  - 21. Cooper M.W.D. et al. ,J. Nucl. Mater. 481 (2016) 125–133.
- 22. **Polovnikov P. V.** et al. //Journal of Aerosol Science. 2016. T. 96. P. 14-23.
  - 23. Spino J.et al. J. Nucl. Mater. 354 (2006) 66.
  - 24. Finlay M.R. et al. J. Nucl. Mater. 325 (2004) 118-128.
  - 25. Wilkinson D.S. and M. F. Ashby. Acta Metallurgica 23 (1975) 1277-1285.

#### Половников Павел Васильевич Моделирование микроструктурных изменений в ядерном топливе при облучении

# Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата технических наук

Подписано в печать 23.09.2025 Формат  $60 \times 84\ 1/16$ . Усл. печ. л. 1,25. Уч.-изд. л. 1,05.

Тираж 100 экз. Печать на аппарате МФУ Konica Minolta bzihub. ИБРАЭ РАН. 115191, Москва, ул. Большая Тульская, 52 Телефон: 8-495-955-22-66