学校编码：10384　　　　分类号____密级____

学号：20720141150106　　　　UDC____

厦门大学

硕　士　学　位　论　文

辐照条件下部分金属型铀基核燃料与锆基包壳材料的相图计算

Phase Diagram Calculation of Partial Metal Uranium-based Nuclear Fuel and Zirconium-based Cladding Material under Irradiation

李林阳

指导教师姓名：王 翠 萍 教 授

专 业 名 称：材 料 工 程

论文提交日期：2017 年　月

论文答辩日期：2017 年　月

学位授予日期：2017 年　月

答辩委员会主席：

评阅人：

2017 年月

厦门大学学位论文原创性声明

本人呈交的学位论文是本人在导师指导下,独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果，均在文中以适当方式明确标明，并符合法律规范和《厦门大学研究生学术活动规范（试行）》。

另外，该学位论文为（　　　　　　　　　　　　）课题（组）的研究成果，获得（　　　　　　　　）课题（组）经费或实验室的资助，在（　　　　　　　　）实验室完成。（请在以上括号内填写课题或课题组负责人或实验室名称，未有此项声明内容的，可以不作特别声明。）

声明人（签名）：

年　　月　　日

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人同意厦门大学根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》等规定保留和使用此学位论文，并向主管部门或其指定机构送交学位论文（包括纸质版和电子版），允许学位论文进入厦门大学图书馆及其数据库被查阅、借阅。本人同意厦门大学将学位论文加入全国博士、硕士学位论文共建单位数据库进行检索，将学位论文的标题和摘要汇编出版，采用影印、缩印或者其它方式合理复制学位论文。

本学位论文属于：

（　　）1.经厦门大学保密委员会审查核定的保密学位论文，于　　年　　月　　日解密，解密后适用上述授权。

（　　）2.不保密，适用上述授权。

（请在以上相应括号内打“√”或填上相应内容。保密学位论文应是已经厦门大学保密委员会审定过的学位论文，未经厦门大学保密委员会审定的学位论文均为公开学位论文。此声明栏不填写的，默认为公开学位论文，均适用上述授权。）

声明人（签名）：

年　　月　　日

摘 要

核能是一种非常有潜力的新能源，核能的产生需要在核反应堆中进行。核燃料元件（核燃料＋包壳）材料是核反应堆中至关重要的一部分。然而核燃料元件材料在使用过程中不可避免地会受到辐照的影响，从而导致相稳定性发生改变。因此，为了保证核燃料元件能够安全高效地运行，研究辐照条件下核燃料元件的相图是十分有必要的。本论文基于 CALPHAD 方法，对金属型核燃料 U-X 二元合金、包壳材料 Zr-X 二元合金在辐照条件下的相图进行了计算，主要的研究成果如下：

(1) 基于文献报道的 U-X (X: Mo, Zr) 各二元系的热力学参数和扩散参数，建立了辐照条件下的有效自由能模型，研究了不同辐照条件对缺陷浓度、自扩散系数、自由能和平衡相图的影响，并计算了不同辐照条件下 U-X (X: Mo, Zr) 各二元合金的平衡相图。结果表明，辐照对高温部分的平衡相图影响很小；但是在低温部分，U-Mo 和 U-Zr 合金相图中分别出现了连续固溶的 γ(U, Mo) 和 γ(U, Zr) 相，从而发生了两个不变系反应。即在辐照条件下，原本在高温时稳定存在的 γ 相也能在低温时稳定存在。该研究结果从热力学角度合理地解释了 Bleiberg 等人的实验结果，可为 U 基金属型核燃料的设计提供重要的理论指导。

(2) 基于文献报道的 Zr-X (X: Nb, Mo) 各二元系的热力学参数和扩散参数，建立了辐照条件下的有效自由能模型，研究了不同辐照条件对缺陷浓度、自扩散系数、自由能和平衡相图的影响，并计算了不同辐照条件下 Zr-X (X: Nb, Mo) 各二元合金的平衡相图。结果表明，在辐照条件下，高温部分的平衡相图与热力学平衡相图基本一致；但是在低温部分，Zr-Nb 和 Zr-Mo 合金相图中分别出现了连续固溶的 BCC (βZr, Nb) 和 BCC (βZr, Mo) 相，从而发生了两个不变系反应，同时 Nb 在 (αZr) 中的固溶度会增加。该研究结果与 Turkin 等人的计算结果取得了良好的一致性，可为 Zr 基包壳材料的合金设计提供重要的理论基础。

关键词： 核燃料元件；辐照；相图；热力学计算

Abstract

Nuclear energy is a very promising new energy, and it needs to be carried out in the nuclear reactors. Nuclear fuel element (nuclear fuel + cladding) materials are a key part of nuclear reactor materials.However, the nuclear fuel element materials are inevitably subject to irradiation during its application, with the appearance of irradiation effects, resulting in the change of phase stability.Therefore, in order to ensure that nuclear fuel element can operate safely and efficiently, it is necessary to study the phase diagram of nuclear fuel element under irradiation conditions.In this paper, based on the CALPHAD method, the equilibrium phase diagram of the metal nuclear fuel U-X binary alloy and the cladding material Zr-X binary alloy under irradiation conditions are calculated. The main work is presented as follows:

(1) Based on the thermodynamic parameters and diffusion data of the binary systems of U-X (X: Mo, Zr) reported in the literature, the effective free energy model is used to calculatethe equilibrium phase diagrams of the nuclear fuel U-X (X: Mo, Zr) binary alloy under different irradiation conditions.The results show that the irradiation can hardly affect the phase relationships at high temperatures. However, under irradiation, in U-Mo and U-Zr binary alloy, the γ(U, Mo) and the γ(U, Zr) phase are remarkably stabilized at lower temperatures, respectively, leading to the emergence of two invariant reactions.That is, due to the effect of irradiation, the high-temperature stable γ phase can also be stable at low temperatures. The results of the present work give a reasonable explain to the experimental results of Bleiberg *et al.,*and provide guidance to the design of metallic U-based nuclear fuel.

(2) Based on the thermodynamic parameters and diffusion data of the binary systems of Zr-X (X: Nb, Mo) reported in the literature, the effective free energy model is used to calculatethe equilibrium phase diagrams of the nuclear fuel Zr-X (X: Nb, Mo) binary alloy under different irradiation conditions.The calculated results show that the equilibrium phase diagram under irradiation and the thermodynamic equilibrium phase diagram are basically the same at high temperatures. Whereas,

under irradiation, in Zr-Nb and Zr-Mo binary alloy, the BCC (βZr, Nb) and the BCC (βZr, Mo) phase are remarkably stabilized at lower temperatures, respectively, leading to the emergence of two invariant reactions, and the solubility of Nb in (αZr) will increase. The results of the present work are consistent with the calculated results of Turkin *et al.*, and provide important theoretical guidance for the design of Zr-based cladding materials.

Keywords: Nuclear Fuel Element, Irradiation, Phase Diagram, Thermodynamic Assessment

目 录

CONTENTS