

НАУЧНАЯ СЕССИЯ ОБЩЕГО СОБРАНИЯ ЧЛЕНОВ РАН  
“75 ЛЕТ АТОМНОЙ ОТРАСЛИ. ВКЛАД АКАДЕМИИ НАУК”

НОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ЯДЕРНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

© 2021 г. А. В. Дуб<sup>a,\*</sup>, А. И. Рудской<sup>b,\*\*</sup>

<sup>a</sup> Акционерное общество “Наука и инновации” Государственной корпорации по атомной энергии “Росатом”, Москва, Россия

<sup>b</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

\*E-mail: AlVDub@rosatom.ru

\*\*E-mail: rector@spbstu.ru

Поступила в редакцию 15.01.2021 г.  
После доработки 20.01.2021 г.  
Принята к публикации 21.02.2021 г.

В статье, подготовленной по материалам доклада, представленного на Общем собрании членов РАН 8 декабря 2020 г., формулируются новые материаловедческие и технологические подходы для обеспечения безопасности и экономической эффективности эксплуатации ядерно-энергетических установок нового поколения. Подчеркивается важность комплементарного применения многоуровневого моделирования, проведения ускоренных радиационных испытаний свойств материалов и изделий в обоснование конструкторских решений, а также необходимость создания перспективной нормативной базы и стандартов для внедрения новых методов конструирования материалов и производственных технологий. Отмечено, что ряд перспективных проектов по разработке новых материалов успешно реализуется в кооперации с институтами РАН. Перечислены основные направления сотрудничества отраслевых НИИ и академических институтов в интересах ядерной энергетики.

*Ключевые слова:* отбор кандидатных материалов, компьютерное материаловедение, имитационные испытания, реакторные испытания.

DOI: 10.31857/S0869587321050078

Стратегия развития Госкорпорации “Росатом” предполагает активное освоение в ближайшие 10 лет новых технологий по ряду крупных направлений: традиционные водо-водяные энергетиче-

ские реакторы (ВВЭР) и перспективные ВВЭР-С и ВВЭР-СКД, реакторы на быстрых нейтронах БН-1200 и БРЕСТ, жидкосольевые реакторы на расплавах солей, высокотемпературные газоохлаждаемые реакторы, атомные станции малой мощности, конструкционные материалы топлива, аддитивные и другие технологии [1]. Успех/эффективность развития каждого из этих технологических направлений связан с выходом за традиционные базы данных по материалам и необходимостью исследования механизмов их поведения в новых условиях [2]. Неслучайно Научно-технический совет Госкорпорации “Росатом” принял решение выделить отдельную материаловедческую программу, одна из задач которой состоит в том, чтобы существенно сократить сроки разработки новых материалов для их использования в перспективных проектах. Уже перед началом реализации этой программы количество исходных кандидатных материалов превышало сотню. Возможность работы с ними в обозримое время требовала новых подходов. С этой целью было организовано взаимодействие предприятий “Росатома” с институтами РАН и уни-



ДУБ Алексей Владимирович – доктор технических наук, профессор, первый заместитель генерального директора АО “Наука и инновации”, научный руководитель приоритетного направления научно-технологического развития Госкорпорации “Росатом” “Материалы и технологии”. РУДСКОЙ Андрей Иванович – академик РАН, ректор СПбПУ Петра Великого.

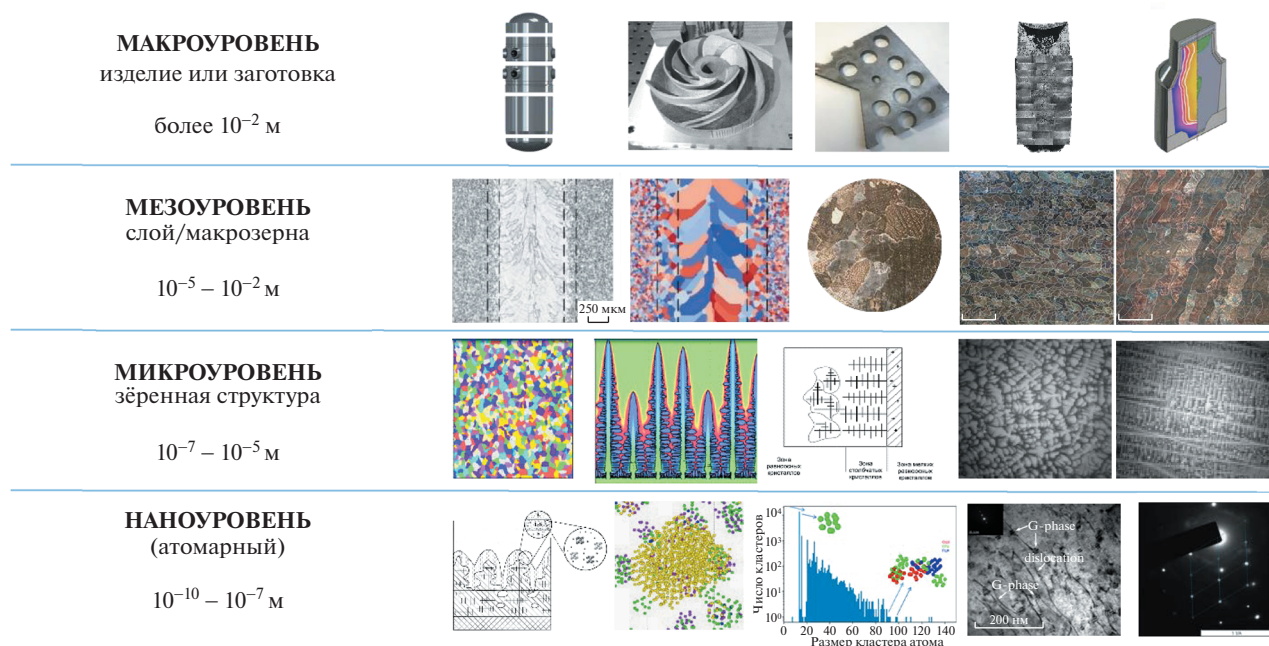


Рис. 1. Генезис материалов – взаимосвязь структурных уровней

верситетами. Академия наук тесно вплетена во все проекты, связанные с атомным материаловедением.

Подчеркнём, что основные подходы к новым материалам, использовавшиеся в атомной отрасли на рубеже 1970–1980-х годов, фактически исчерпаны. Конструкционные материалы, закладываемые в новые энергетические технологии, должны обеспечивать работоспособность реакторов при высоком давлении, высоких температурах (более  $650^{\circ}\text{C}$ ) и высоких повреждающих дозах (более  $140 \text{ сна}^1$ ) [2]. Один из базовых подходов состоит в том, чтобы при материаловедческом обосновании с самого начала технологической цепочки закладывалась связь микро-, мезо- и макропараметров структуры новых материалов, с одной стороны, с их энергетическим состоянием и локальным взаимодействием в условиях эксплуатации – с другой (рис. 1) [3].

Концепция отбора кандидатных материалов представляет собой пирамиду, состоящую из нескольких уровней: компьютерное материаловедение на первом этапе [3–8], ускоренные имитационные испытания на этапе оценки кандидатных материалов [9–14] и, утверждённый Ростехнадзором полный набор исследований, включая реакторные испытания, для окончательного выбора с обоснованием. Чтобы в ограниченное время достичь нужных результатов, работа с подбором

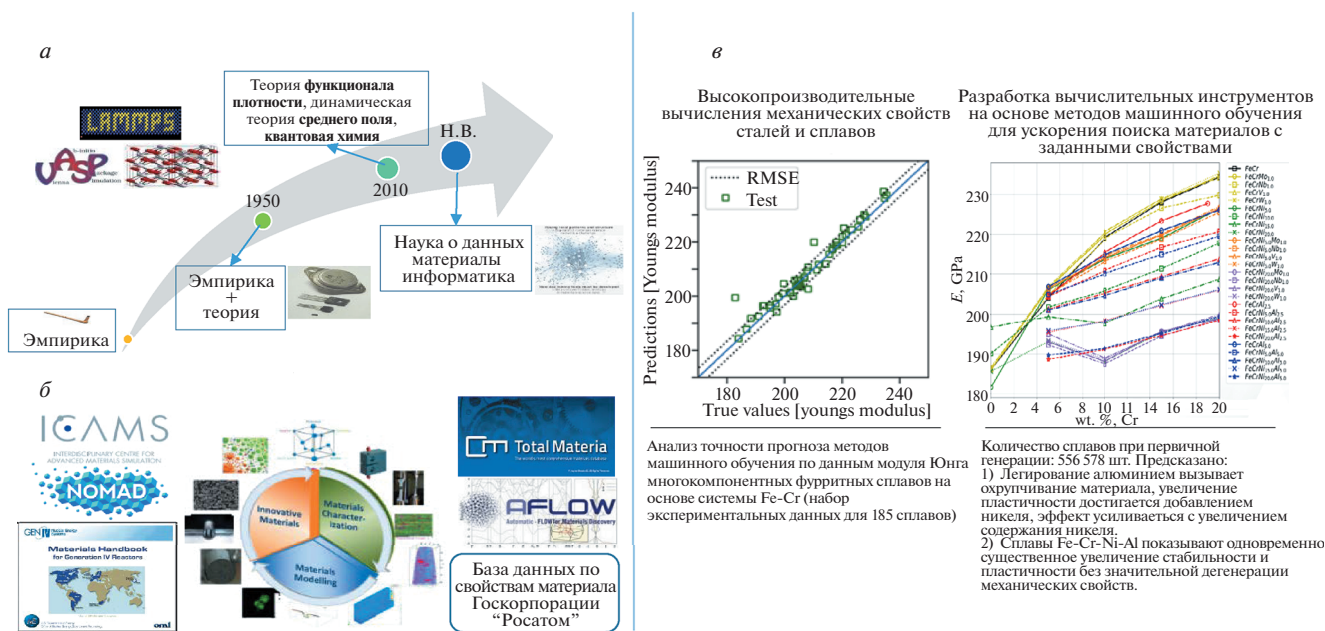
кандидатных материалов должна трансформироваться в стандартные процедуры: расчётные коды, программы и методики.

Основная задача компьютерного материаловедения – отбор кандидатных материалов из большого числа вариантов. Инструментом здесь служат теория функционала плотности, динамическая теория среднего поля и квантовая химия. Вычислительные инструменты предполагают использование методов машинного обучения для ускоренного поиска материалов с заданными свойствами и верификацию по базам данных [3–8]. Так, нами проведена оценка более 550 тыс. вариантов различных сплавов, которая показала, что многокомпонентные (более 4 элементов) ферритно-мартенситные стали – основной материал для изготовления реакторных корпусов – демонстрируют одновременно существенное увеличение стабильности и пластичности без значительной деградации механических свойств (рис. 2).

Следует отметить, что работы в области компьютерного материаловедения собираются в единой Базе данных по свойствам материалов Госкорпорации “Росатом”, которая формируется как отдельный проект.

Для ускоренных имитационных исследований радиационной стойкости конструкционных материалов используется ускоритель заряженных частиц “Тандем” (Физико-энергетический институт им. А.И. Лейпунского) – новая и уникальная для России установка, лучшая в своём классе, позволяющая получить результат быстрее, чем в реакторных экспериментах. Ускорители давно

<sup>1</sup> Смещение на атом (сна) – характеристика, отражающая степень воздействия радиации на конструкционные материалы.



**Рис. 2.** Роль компьютерного материаловедения в разработке методик отбора кандидатных материалов (а); проекты, центры и базы данных в области компьютерного материаловедения (б); подбор материалов с наилучшими свойствами (модуль Юнга) (в)

применялись для реакторного материаловедения [9–14]. Вопрос состоял в том, чтобы эту методику использовать как стандарт. На специальных типах образцов, облучённых в ускорителе, нам удалось продемонстрировать механизмы и воздействие разных видов облучения не только на структуру материала, но и на их свойства. При этом дозовая нагрузка на образец достигала 200 сна, имитируя деградацию микроструктуры так же, как при реакторном облучении. Однако в условиях реакторных испытаний этот процесс занял бы более 5–10 лет, при облучении на ускорителе – часы.

Изучались все типы металлических материалов для атомной энергетики (рис. 3, 4). На рисунке 4 представлена схема, которая демонстрирует, каким образом можно перейти от ускоренных методов облучения к измерению микротвёрдости и микроиндентированию, провести пересчёт в механические свойства и определить критическую температуру для перехода из вязкого состояния в хрупкое, а также макропоказатели трещиностойкости и при этом подтвердить, что именно такие образцы являются представительными для конкретного типа и класса стали. Важнейший итог этих работ – создание стандарта испытаний на основе предложенной методики, позволившей за счёт непосредственного измерения структурно-чувствительных параметров материала определить влияние различных температур облучения на радиационную стойкость, а следовательно, и на ресурс материала.

Заключительная часть – ускоренные реакторные испытания. Госкорпорация “Росатом” обладает развитой экспериментальной базой, значительную часть которой составляют действующие исследовательские ядерные установки. Совместная работа институтов Госкорпорации “Росатом” и НИЦ “Курчатовский институт” показала возможность проведения ускоренных реакторных испытаний с увеличением дозы облучения образцов более чем в 10 раз. При этом учитывалось поведение внешней окружающей среды.

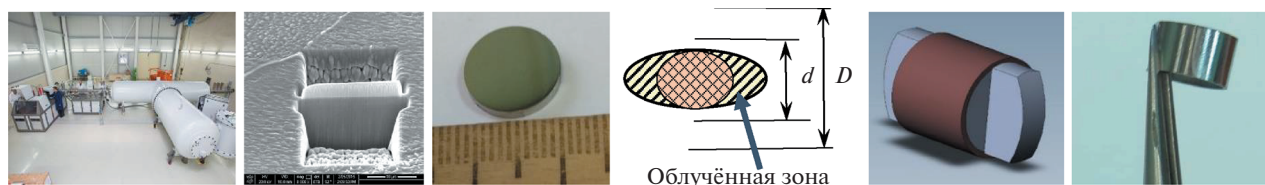
Таким образом, всего за два года (!) был отобран основной материал для внутрикорпусных устройств перспективного реактора ВВЭР-СКД, который сейчас проходит реакторные испытания. При этом осуществлён последовательный отбор сплава сначала по критерию поведения при радиационном набухании, затем при коррозионном растрескивании в водной среде сверхвысоких параметров, либо при водородном охрупчивании и тепловом старении. Сопротивление хрупкому разрушению и коррозионная прочность обеспечены после ионного облучения до 200 сна, что соответствует запредельному сроку службы материала в реальных условиях.

Получены образцы перспективного конструкционного материала толерантного топлива на основе карбида кремния. Реализован полный цикл его производства от компьютерного моделирования до экспериментальных изделий, освоен опыт работы с волокнами из SiC. Фактически создана новая отрасль атомной энергетики.

Ускоритель ионов  
TANDETRON (ФЭИ)

Для материалов крупногабаритных  
элементов конструкций

Для материалов тонкостенных трубок  
(оболочек твэлов)



Механизмы деградации:

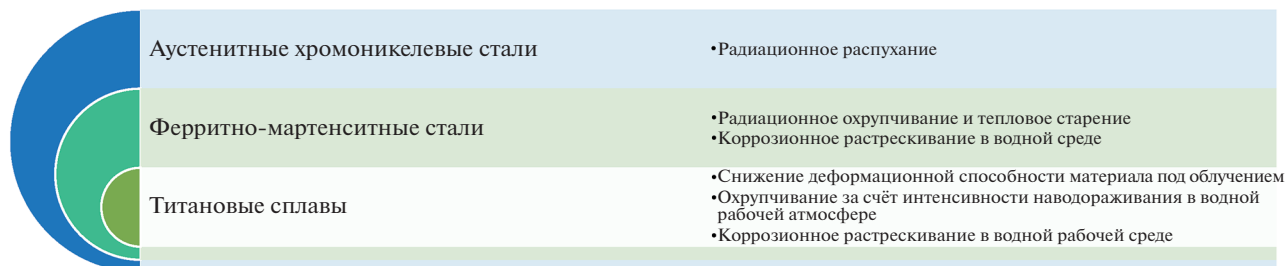


Рис. 3. Ускоренные имитационные исследования радиационной повреждаемости конструкционных материалов

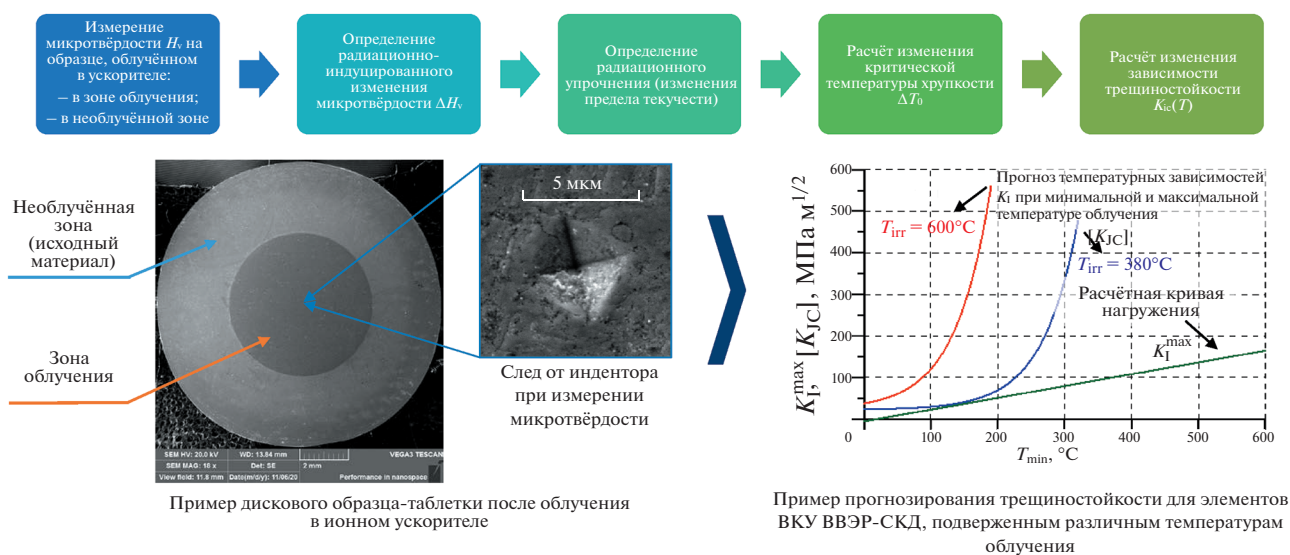


Рис. 4. Прогнозирование сопротивления хрупкому разрушению (трещиностойкости) конструкционных материалов по результатам испытаний образцов, облучённых в ионном ускорителе

Подобраны композиции жаропрочных материалов, упрочнение которых обеспечивается за счёт выделения наноразмерных фаз, что позволяет увеличить сроки их эксплуатации при обычных температурах в 100 раз, либо поднять температуру эксплуатации установки на 50°C. Кроме того, показано, что в ферритно-мартенситных сталях за счёт радиационного воздействия появляются высокодисперсные наноразмерные фазы, которые не выделяются при обычных условиях, что приводит к равномерному упрочнению материала. При этом наноразмерные фазы образуются при

относительно высоких температурах (более 400–500°C). Иными словами, создаётся новая радиационная технология упрочнения сплавов ферритно-мартенситного класса, которые можно использовать и в обычных условиях. Ещё одно важное направление – селективное удаление атомов под действием облучения ускоренными частицами, при котором инициируется процесс замены атомов исходного химического соединения на новые атомы, содержащиеся в ионном пучке.

В настоящее время мы располагаем *аддитивными технологиями* – высокопроизводительной

системой селективного лазерного плавления металлических порошков (3D-принтер по металлу), уникальным с точки зрения материаловедения оборудованием российского производства. В относительно малом объёме жидкого расплава концентрируется большая энергия за счёт лазерного или электронного луча. Поэтому без рассеяния или поглощения можно обеспечить целенаправленное воздействие на микроструктуру металла, начиная с формирования первичной кристаллической структуры, за счёт модуляции параметров пучкового излучения, которое помимо теплового воздействия генерирует ультразвуковые колебания.

Идёт поиск конструкционных материалов для одного из инновационных проектов атомной энергетики – жидкосолевого реактора. Топливо в таких установках будут растворять в расплаве солей FLiBe. Но в перспективе реактор могут перевести на более эффективную композицию ФЛИНАК (смесь фторидов лития, натрия и калия LiF-NaF-KF), которая при всей агрессивности способна растворять большее количество минорных актинидов. Уже подобран ряд материалов, подтверждающих возможность обеспечивать скорость их коррозии менее 30 мкм/год после 100 ч эксплуатации при 650°C в среде ФЛИНАК.

Новые условия эксплуатации и механизмы поведения материалов требуют проведения совместных с институтами РАН фундаментальных работ в области атомного материаловедения. К ним в первую очередь относятся работы:

- по изучению сочетания первопринципного моделирования свойств материалов на основе квантомеханических расчётов с использованием функционала плотности и последующего молекулярного моделирования на основе машинного обучения с использованием результатов этих расчётов на мезо- и макроуровне;
- по исследованию природы радиационного повреждения материалов при воздействии нейтронов и заряженных частиц;
- по изучению кинетических явлений при фазовых переходах и детальному исследованию динамики кристаллизации металлов с возможностью воздействия на неё синхротронным, лазерным и другими видами излучений.

Большой объём фундаментальных исследований будет выполняться в академических институтах. Можно сказать, что научные центры и институ-

туты РАН играют важнейшую роль в разработке новых материалов для атомной энергетики.

## ЛИТЕРАТУРА

1. *Ашурко Ю.М.* Перспективные реакторные технологии 4-го поколения и их развитие в рамках Международного форума “Поколение IV” // Сборник докладов научно-технической конференции “Теплофизика реакторов нового поколения” (Теплофизика-2018). 16–18 мая 2018 г., Обнинск. Обнинск: ГНЦ РФ–ФЭИ, 2018. С. 22–30.
2. Structural materials for generation IV nuclear reactors / By ed. P. Yvon. Sawston, Cambridge: Woodhead Publishing, 2017.
3. *Yanilkin A.V., Krasnikov V.S., Kuksin A.Yu., Mayer A.E.* Dynamics and kinetics of dislocations in Al and Al–Cu alloy under dynamic loading // International Journal of Plasticity. 2014. V. 55. P. 94–107.
4. *Wen C., Zhang Y., Wang C. et al.* Machine learning assisted design of high entropy alloys with desired property // Acta Materialia. 2019. V. 170. P. 109–117.
5. *Jurafsky D., Martin J.H.* Speech and language processing. International Edition, 2000.
6. *Tesauro G.* Temporal difference learning and TD-Gammon // Communications of the ACM. 1995. V. 38. № 3. P. 58–68.
7. *Li Z., Kermod J., De Vita A.* Molecular dynamics with on-the-y machine learning of quantum-mechanical forces // Physical review letters. 2015. V. 114. № 9. P. 096405.
8. *Behler J.* Representing potential energy surfaces by high-dimensional neural network potentials // Journal of Physics: Condensed Matter. 2014. V. 26. № 18. P. 183001.
9. Accelerator simulation and theoretical modelling of radiation effects in structural materials. IAEA Nuclear Energy Series NF-T-2.2. Vienna, 2018.
10. *Gary S.* Was Fundamentals of Radiation Materials Science. Metals and Alloys. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007.
11. *Taller S., Jiao Z., Field K.G., Was G.* Emulation of fast reactor irradiated T91 using dual ion beam irradiation // Journal of Nuclear Materials. 2019. V. 527. P. 151831.
12. *Taller S., Van Coevering G., Wirth B., Was G.* Predicting structural material degradation in advanced nuclear reactors with ion irradiation // Scientific Reports. 2021. V. 11. № 1. P. 2949.
13. *Was G.S., Jiao Z., Getto E. et al.* Emulation of reactor irradiation damage using ion beams // Scripta Materialia. 2014. V. 88. P. 33–36.
14. *Zinkle S.J., Snead L.L.* Opportunities and limitations for ion beams in radiation effects studies: Bridging critical gaps between charged particle and neutron irradiations // Scripta Materialia. 2018. V. 143. P. 154–160.