

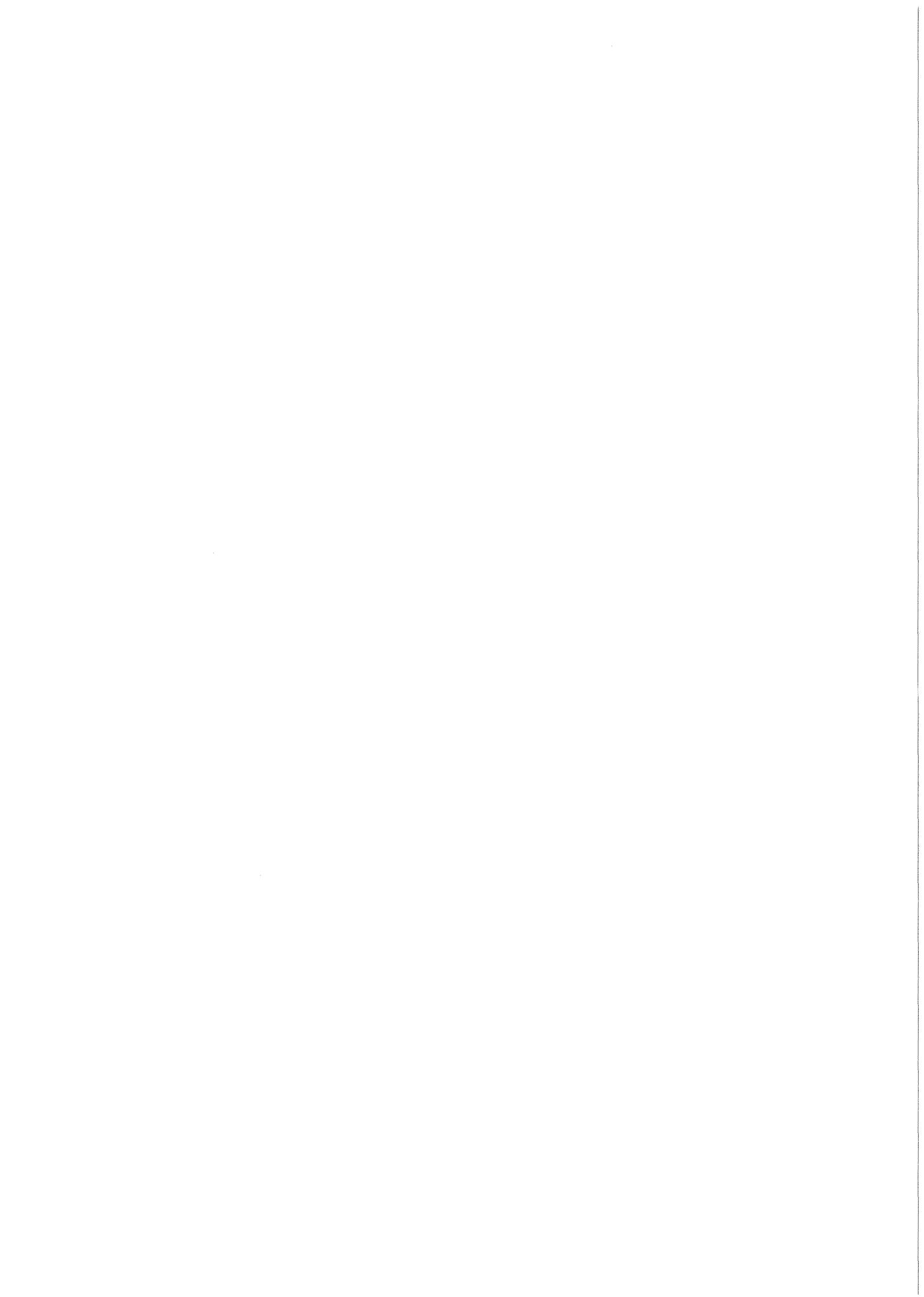
KfK 3325
Juni 1982

Untersuchungen zur Brennstab- und Brennelementmechanik und zum Thema Simulationsbestrahlungen

**Statusbericht
des Instituts für Reaktortechnik
der Technischen Hochschule Darmstadt
für das Projekt Schneller Brüter
am 1.10.1981 im
Kernforschungszentrum Karlsruhe**

Projekt Schneller Brüter

Kernforschungszentrum Karlsruhe



KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Projekt Schneller Brüter

KfK 3325

UNTERSUCHUNGEN ZUR BRENNSTAB- UND BRENNELEMENTMECHANIK
UND ZUM THEMA SIMULATIONSBESTRAHLUNGEN

Statusbericht des Instituts für Reaktortechnik
der Technischen Hochschule Darmstadt für das
Projekt Schneller Brüter
am 1.10.1981 im Kernforschungszentrum Karlsruhe

mit Beiträgen von:

G. Böcking^{*}, K. Ehrlich^{**}, K. Exel^{*}, G. Kaltenthaler^{*},
K. Laßmann^{***}, K.H. Leister^{*}, T. Preußner^{*}, K. Schmelz^{*}

* Institut für Reaktortechnik der TH Darmstadt (Prof. W. Humbach)

** Institut für Material- und Festkörperforschung des KfK

*** Institut für Reaktorentwicklung des KfK

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

Als Manuskript vervielfältigt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
ISSN 0303-4003

Zusammenfassung

Der vorliegende Bericht gibt 8 Einzelvorträge wieder, die im Rahmen eines Informationstages vom Institut für Reaktortechnik der Technischen Hochschule Darmstadt (IRT) am 01.10.1981 im Kernforschungszentrum Karlsruhe für das Projekt Schneller Brüter (PSB) gehalten wurden. Die Vorträge stellen einen Rechenschaftsbericht über die im IRT durchgeführten Arbeiten zur Brennstab- und Brennelementmechanik und zum Projekt Simulationsbestrahlungen dar, die beide vom Projekt Schneller Brüter des Kernforschungszentrum gefördert werden.

Der gegenwärtige Stand des Brennstabrechenprogrammes URANUS wird ausführlich dokumentiert. Insbesondere wird auf die grundlegende Struktur des Codes, auf die verschiedenen Versionen und Materialdatenvarianten, und auf typische Ergebnisse von URANUS-Rechnungen eingegangen. Ein Beitrag beschäftigt sich mit prinzipiellen Untersuchungen zur Behandlung der instationären Wärmeleitungsgleichung, ein weiterer Beitrag geht gezielt auf URANUS-Untersuchungen zum Kühlmittelblockade-Experiment Mol 7c ein. Darüber hinaus wird ein Bericht über die derzeitige Anwendung des URANUS-Rechenprogrammes durch das Kernforschungszentrum Karlsruhe gegeben.

Zum Projekt Simulationsbestrahlungen wird über Untersuchungen an Modellegierungen (binäre Kupferlegierungen) berichtet. Das Meßverfahren und einige Ergebnisse sind dargestellt. Einige Aspekte zum Schwellverhalten ferritischer und austenitischer Stähle werden aufgezeigt. Über erste Ergebnisse zum Schwellverhalten der Modellwerkstoffe Eisen (für Ferrite) und Nickel (für Austenite) bei Schwerionenbestrahlung wird berichtet. Über die Stabilität von Ausscheidungen bei Bestrahlung einer Al-Mg-Si-Legierung wird berichtet. Die Ergebnisse führen auf ein neues Modell, daß eine quantitative Beschreibung ermöglicht. Die zukünftigen Entwicklungen der Simulationsbestrahlungen werden umrissen.

Studies on the Mechanics of Fuel Rods and Fuel Subassemblies - Studies on the Simulation Irradiation Project

Summary

This report includes eight single papers presented by the Institut für Reaktortechnik IRT (Institute for Reactor Engineering) of the Darmstadt Technical University at an information meeting held at the Karlsruhe Nuclear Research Center on October 1, 1981 on behalf of the Fast Breeder Project (PSB). The papers are a report of activities performed at the IRT on the mechanics of fuel rods and fuel subassemblies and on the Simulation Irradiation Project, both activities being promoted by the Fast Breeder Project of the Karlsruhe Nuclear Research Center.

The present status of the URANUS fuel rod computer code is documented in detail. Special attention is paid to the fundamental structure of the code, the different versions and material data variants and the typical results of computations using URANUS. One contribution is dedicated to fundamental studies on the treatment of the equation of non-steady-state heat conduction, another contribution specifically deals with investigations using URANUS and relating to the coolant blockage experiment Mol 7c. Besides, a report is presented about the present use of the URANUS computer code by the Karlsruhe Nuclear Research Center.

Regarding the Simulation Irradiation Project investigations on model alloys (binary copper alloys) are reported. The measuring technique and some results are described. Some aspects concerning the swelling behavior of ferritic and austenitic steels are indicated. First results are given on the swelling behavior of the model materials iron (for ferrites) and nickel (for austenites) exposed to irradiation by heavy ions. An account is given of the stability of segregations resulting from the irradiation of an Al-Mg-Si alloy. The results lead to the establishment of a new model allowing description in quantitative terms. The future developments of simulation irradiations are outlined.

Inhaltsübersicht

Brennstab- und Brennelementmechanik

- 1.) T. Preußer: Stand der Entwicklung des URANUS-Rechenprogrammes
Seiten 1 - 35
- 2.) G. Böcking: URANUS-Untersuchungen zur Kühlkanaltemperatur für
Mol 7c.
Seiten 36 - 48
- 3.) G. Kaltenthaler: Untersuchungen zur transienten Version von URANUS
Seiten 49 - 65
- 4.) K. Laßmann: Zur Anwendung von URANUS im Kernforschungszentrum
Karlsruhe
Seiten 66 - 71

Simulationsbestrahlungen

- 5.) K.-H. Leister: Simulationsbestrahlungen von binären Kupferlegier-
ungen
Seiten 72 - 80
- 6.) K. Exel: Schwellverhalten von Ferriten und Austeniten bei
Schwerionenbestrahlung
Seiten 81 - 92
- 7.) K. Schmelz: Simulationsbestrahlung von ausscheidungshärtenden
Al- und Ni-Legierungen
Seiten 93 - 102
- 8.) K. Ehrlich: Zusammenfassende Darstellung des experimentellen
Programmes zur Simulation von Strahlenschäden -
Stand und Ausblick
Seiten 103 - 109

1.) Stand der Entwicklung des URANUS-Rechenprogrammes

von Timm Preußer

Vortrag anläßlich des Statusberichtes des IRT am
01.10.1981 in Karlsruhe.

Dieser Text enthält einige zusätzliche Bemerkungen,
die sich aus der Diskussion im Anschluß an den Vor-
trag ergaben.

Die Entwicklung des URANUS-Brennstabrechenprogrammes am IRT in Darmstadt wird nun seit knapp zehn Jahren betrieben und von Anfang an vom PSB des KfK unterstützt. International bekannte Stabrechenprogramme gibt es heute jedoch in großer Vielzahl, und damit stellt sich natürlich sofort die Frage nach dem Sinn unserer eigenen Entwicklung, nach der Einordnung in einen internationalen Standard, nach den Vorzügen. Ich möchte ausdrücklich betonen, daß wir uns solche kritischen Fragen im Laufe der Entwicklung des Codes immer wieder selbst gestellt haben - und nicht erst heute, um Ihnen auf dem Statusbericht darüber zu berichten. Und wir könnten uns an einem Hochschulinstitut natürlich durchaus auch ein gemütlicheres Leben vorstellen, als durch andauernde Forschungs- und Entwicklungsarbeit unseren Code den ständig wachsenden Anforderungen anzupassen. Wo liegt also die Motivation für unsere Arbeit? Und warum glauben wir, daß unser Rechenprogramm so gut ist, daß es einen Vergleich mit anderen nicht scheuen muß? Ich möchte diese beiden Fragen ganz an den Anfang meiner heutigen Ausführungen stellen und versuchen, sie ehrlich zu beantworten.

Für die Arbeit an einer Hochschule steht normalerweise eine projekt- und termingebundene Entwicklung nicht im Vordergrund. Fundierte, von möglichst vielen Seiten betrachtete Ergebnisse von wissenschaftlicher Qualität werden gegenüber kurzfristig erzielten Erfolgen höherbewertet. Daß eine solche mehr gründliche Vorgehensweise häufig mehr Zeit braucht, als an anderen Stellen vielleicht zur Verfügung steht, ist ohne Frage richtig, obwohl gerade die URANUS-Entwicklung mit einem Aufwand von nur knapp 12 Mann-

jahren zeigt, daß diese Methode durchaus zu konkurrenzfähigen Ergebnissen führen kann. Ich möchte dazu ein Beispiel nennen: Mit die ersten Untersuchungen vor der Entwicklung unseres Rechenprogrammes war die seinerzeit von den Herren Laßmann und Fabian /1/ geführte Diskussion zur Philosophie der gestaffelten Analyse von Brennstäben, die sehr früh zu dem Ergebnis kam, daß nur sich ergänzende ein- und mehrdimensionale Untersuchungen am Brennstab zu einem ausreichenden Verständnis des Brennstabgeschehens führen werden. Diese Erkenntnis wurde auf der kürzlich in Paris abgehaltenen 6. Smirt-Konferenz als neuer und für die Zukunft extrem wichtiger Weg diskutiert. Entsprechende Programme liegen in Darmstadt bereits seit Mitte der siebziger Jahre vor.

Ein zweites Beispiel: Ebenfalls mit die ersten Untersuchungen, die Herr Laßmann für URANUS durchführte, beschäftigten sich mit der prinzipiellen Struktur eines Brennstabrechenprogrammes /2/. Das Ergebnis dieser Untersuchungen führte zu einem logischen Aufbau, der während der folgenden 10 Jahre kein einziges Mal modifiziert werden mußte und alle Code-Ergänzungen zur statistischen Störfallanalyse, zu den fortgeschrittenen Brennstabkonzepten und sogar zur transienten Version ohne eine Veränderung der Codestruktur erlaubte. Nun ist URANUS natürlich kein Wunderprogramm, das alle anderen Entwicklungen überflüssig machen kann. Wir sehen in der bisherigen und weiteren Arbeit am URANUS-System vielmehr die Aufgabe, prinzipielle Entwicklungen durchzuführen, die dann auch von anderen übernommen werden können. Und mit eines der fundamentalen Ergebnisse dieser Entwicklung ist eben die enorme Klarheit im logischen Aufbau und die enorme Flexibilität des Codes, der LWR- und SBR- und Karbidversion, transiente, statistische, Design-Version und weitere Varianten permanent inkorporiert hat und somit ein sehr vielseitiges Instrument ist, das dennoch leicht zu handhaben ist und kurze Rechenzeiten erlaubt. Die Weitsichtigkeit des PSB, das uns ohne Termindruck den unerläßlichen Freiraum für diese prinzipiellen Überlegungen gelassen hat, möchte ich deutlich hervorheben. Ich möchte diesen einleitenden Punkt, an dem uns in Darmstadt recht viel liegt, nun aber verlassen und auf den eigentlichen Stand des Programmes zu sprechen kommen.

URANUS ist ein integraler Brennstabcode, der die Analyse des gesamten Stabes - also Brennstoff, Gasspalt, Plenum und Hülle - sowie des Kühlmittels und die eventuell außerhalb liegende Struktur bis hin zum Bypass bei Einzelstabexperimenten erlaubt. Das Hauptaugenmerk ist dem Verhalten von Brennstoff und Hülle gewidmet, und zwar in erster Linie dem mechanischen, thermischen und bestrahlungsinduzierten Verhalten. Die Entwicklung von URANUS begann etwa 1972/73, erste Ergebnisse wurden 1975 auf dem Gebiet der LWR-Brennstäbe gewonnen /3/. Die stationäre Stabversion wurde 1977 fertiggestellt, gefolgt von der Statistik-Version /4/ und der extrem schnell laufenden Design-Version für Auslegungsrechnungen. Seit 1978 wurde detailliert an der Karbidvariante gearbeitet /5,6,7/, und seit 1980 ist auch die transiente Version fertiggestellt /8,9/. All die verschiedenen Versionen sind permanent im Code enthalten und können frei miteinander kombiniert werden. Vom Grade der Detailliertheit her gehört URANUS in die Gruppe der großen Stabrechenprogramme, wie GAPCON, COMETHE, FRUMP oder SATURN. Die mechanische Behandlung basiert auf der Superposition eindimensionaler radialer und axialer Modelle, die zu einer quasi-zweidimensionalen Analyse führt. Die geometrische Struktur des Stabes, das zweifach nicht-lineare mechanische Verhalten, Temperaturen und alle relevanten physikalischen Effekte - von Abbrand über Schwellen, Spaltgasfreisetzung, Nachsintern bis zu relocation und Zentralkanalbildung - werden detailliert behandelt.

Die eigentliche Brennstabstrukturanalyse wird zeitlich diskret durchgeführt, so daß die logische Struktur zunächst durch eine alles umfassende Zeitschleife gebildet wird (Abb.1). Im Inneren dieser Schleife wird die eigentliche Brennstabanalyse lokal durchgeführt. Die bekannten Wechselwirkungen der physikalischen Phänomene, besonders die thermisch-mechanische Wechselwirkung, lassen dabei nur iterative Lösungen zu, so daß die Analyse nochmals durch eine Iterationsschleife umschlossen ist. Zur axialen Betrachtung des Brennstabes wird dieser in Scheiben aufgeschnitten, wobei in jedem Schnitt die Berechnung lokal durchgeführt wird. Aus der axialen Kopplung aller Schnitte kann dann auf das Verhalten des gesamten Brennstabes geschlossen werden. Auf zwei Punkte möchte ich schon an dieser Stelle aufmerksam machen:

Das Makrostepkonzept zur Lastvorgabe, und die automatische Zeitschrittsteuerung. Ich werde später darauf zurückkommen.

Die rechentechnische Behandlung ist in Form einzelner Komponenten gegliedert, in denen in sich geschlossene Aufgaben erfüllt werden, wie z.B. die Temperaturberechnung oder die mechanische Analyse. Für die Beschreibung von komplexem Materialverhalten sind physikalische Modelle entwickelt worden, die ebenfalls in eigenen Komponenten enthalten sind, so daß eine insgesamt sehr übersichtliche und flexible modulare Programmstruktur entsteht. Insgesamt enthält URANUS zur Zeit etwa 95 Unterprogramme (Abb.2). Trotz dieser Vielzahl von Komponenten, auf die ich gar nicht weiter eingehen möchte, bleibt die beschriebene Struktur deutlich sichtbar.

Am Beispiel des "Systems von gestaffelten Programmversionen und Materialdatenvarianten" (Abb.3) möchte ich Ihnen die Flexibilität des Programmes einmal demonstrieren: der potentielle Benutzer kann sich zunächst entscheiden zwischen stationärer und transientscher Rechnung. Unabhängig davon kann er wählen, ob er eine statistische oder eine deterministische Analyse durchführen will; anschließend, ob er die sehr schnell laufende Thermal-Version zur rein thermischen Analyse, die Design-Version mit vereinfachter Mechanik oder die umfassende thermomechanische Performance-Version einsetzen will. Völlig unabhängig von diesen Entscheidungen kann zwischen Schnitt- und Stabrechnung entschieden werden. Zur Behandlung unterschiedlicher Reaktorkonzepte existieren drei URANUS-Varianten: Leichtwasser, Schnellbrüter und Schnellbrüter-Karbid-Variante, die sich in den Materialdaten und einigen physikalischen Modellen voneinander unterscheiden.

Die sicherlich einfachsten möglichen Rechnungen in dieser Staffelung stellen Analysen der Hülle allein da, mit denen z.B. das bestrahlungsinduzierte Längenwachstum eines LWR-Stabes untersucht wurde. Als derzeit kompliziertesten Fall möchte ich transiente Untersuchungen zum gesamten Stab inklusive Kühlmittel und Struktur nennen, die bis zum Schmelzen von Brennstoff oder Hülle oder zum Verdampfen des Kühlmittels führen. Typische Störfallanalyse vom Typ TOP, TUCOP, LOFT bzw. RIA und LOCA für den LWR sind möglich, was die Vielseitigkeit des URANUS-Systems deutlich aufzeigt.

Die selbstgestellte Aufgabe, im Sinne einer logischen Struktur alle Versionen und Varianten innerhalb des selben Programmsystems zu etablieren, bringt natürlich als Konsequenz die Forderung nach entsprechender Kompatibilität mit sich. Diese Frage stellt sich vor allem bei Modellen, die nicht auf streng physikalischer Basis stehen. Während es für die prinzipielle Behandlung der Mechanik oder den Algorithmus zur transienten Temperaturberechnung beispielsweise vollkommen gleich ist, ob Leichtwasser- oder Schnellbrüterstäbe analysiert werden, darf man für spezielle Bedingungen konzipierte Modelle zum Nachverdichten oder zur Spaltgasfreisetzung natürlich nicht ohne weiteres völlig frei kombinieren, zumal die überwiegende Zahl unserer Werkstoffmodelle transientes Materialverhalten noch nicht ausreichend berücksichtigt. In jedem Fall ist jedoch die programmtechnische Formulierung aller Probleme 100%ig konsistent und kompatibel; dies zeigt sich unter anderem daran, daß URANUS-Unterprogramme mit geringstfügigstem Aufwand in andere Codes implementiert werden konnten.

Zur Statistik-Version muß man ehrlicherweise noch bemerken, daß sie zur Zeit nicht voll einsatzfähig ist. Das liegt einfach an den bis vor kurzem begrenzten personellen Möglichkeiten. Nachdem die beiden neuen Mitarbeiter eingestellt werden konnten, Herr Böcking und Herr Kaltenthaler, ist unsere Situation nun deutlich verbessert, und wir hoffen, daß der Anschluß auf diesem Gebiet schnell wieder gefunden werden kann. Gerade im Hinblick auf die Störfallanalyse und auch in Verbindung mit der transienten Version muß ein Schwerpunkt zukünftiger Arbeit wieder auf diesem Gebiet liegen.

Genau genommen gehört zur Beschreibung der Struktur des Rechenprogrammes noch eine Erläuterung der dazugehörigen Peripherie. Ich möchte es damit bewenden lassen, nur kurz auf das Vorhandensein von Datenaufbereitungsprogrammen und Ergebnisauswerteprogrammen inclusive graphischer Darstellungen hinzuweisen sowie auf etwa 15 Testprogramme, mit denen einzelne Programmteile rückwirkungsfrei überprüft werden können. Hier wie in der gesamten Programmverwaltung, System-Maintenance und Dokumentation liegt natürlich eine Menge "unsichtbarer" Arbeit, die häufig unterschätzt wird. In diesen Bereich gehören - um zwei eben schon angesprochene Beispiele zu nennen - auch die Arbeiten zur vollauto-

matischen belastungs- und beanspruchungsabhängigen Zeitschrittsteuerung, die zu einem wesentlich verbesserten Programmverhalten an konvergenzkritischen Stellen geführt haben, oder die Entwicklung eines neuen MAKROSTEP-Konzeptes zur Eingabe von Randbedingungen und Belastungen, die zeitvariabel während der Rechnung eingelesen werden und durch ein spezielles Umspeichersystem den Kernspeicherbedarf minimieren. Beide Arbeiten haben erheblichen Einfluß auf den extrem schnellen Ablauf unserer transienten Rechnungen; das MAKROSTEP -Konzept ist außerdem der erste Schritt zu der geplanten Restartfähigkeit des Codes für statische und transiente Rechnungen. Ich möchte nicht versäumen, an dieser Stelle den Namen von Herrn Kohl zu nennen, der als Datenverarbeitungsfachmann eine Vielzahl dieser und weiterer Punkte betreut und auch, was sicher nicht selbstverständlich ist, vor Übergabe einer neuen Code-Version an KfK unsere Programme auf die Belange Ihrer Rechenanlage voreinstellt, was schnellen Einsatz und einwandfreies Funktionieren garantiert. Unsere routinemäßig durchgeführten ständigen parallelen Erprobungen auf mehreren Rechenmaschinen und Compilern sichern zudem eingebrachte Änderungen wirksam ab.

Ich möchte diese Punkte jedoch jetzt nicht weiter ausführen, wir sind im Rahmen unserer Halbjahresberichte ja bereits mehrmals auf diese Vorgehensweisen eingegangen. Vielmehr möchte ich zurück zur eigentlichen Berechnung gehen und kurz erläutern, wie die thermische und mechanische Analyse durchgeführt wird. Ausführlichere Beschreibungen finden Sie in einer ganzen Reihe von Publikationen /5,9,10/, die Sie jederzeit von uns erhalten können. Tabelle 1 zeigt außerdem einen stichwortartigen Überblick über die grundlegenden URANUS-Merkmale.

Wegen des hohen numerischen Aufwandes mehrdimensionaler Analysen wurde zur Beschreibung des mechanischen Verhaltens des Stabes für URANUS eine quasi-zweidimensionale Vorgehensweise gewählt, die sich aus der axialen Kopplung jeweils eindimensionaler Schnittrechnungen ergibt. Die Anzahl der axialen Schnitte sowie die radiale Diskretisierung für jeden Schnitt können vom Benutzer frei gewählt werden (Abb.4,5). Die aus der eindimensionalen Betrachtungsweise herrührenden Einschränkungen sind

- Annahme von Rotationssymmetrie, und
- Annahme eines modifizierten ebenen Dehnungszustandes in axialer Richtung.

Innerhalb der sich durch die radiale Diskretisierung ergebenden Grobzonen gilt dabei eine mechanisch exakte Beschreibung; die freien Konstanten in diesen geschlossenen Lösungen werden durch Randbedingungen bestimmt.

Die mechanische Berechnung findet für jeden einzelnen Schnitt statt. Aus der mechanischen Beschreibung der Schnitte l und $l+1$ kann eine Aussage zur Scheibe l getroffen werden, aus der Kopplung aller Scheiben wiederum kann auf das mechanische Verhalten des gesamten Stabes geschlossen werden. Allerdings muß diese Aussage in mehrfacher Hinsicht überprüft werden. Wird durch die Kopplung der Scheiben eine Relativverschiebung zwischen Hülle und Brennstoff hervorgerufen, so treten im Kontaktfall Reibkräfte auf, die in der bisherigen Rechnung noch nicht berücksichtigt wurden. Ferner können bereits vorhandene Reibkräfte größer als die Haftkraft werden oder es kann der axiale Kontakt zwischen zwei Scheiben verlorengehen. Diese Fragen müssen also nach jeder schnittweisen Berechnung des Stabes überprüft werden und es liegt auf der Hand, daß eine befriedigende Lösung nur iterativ zu erreichen ist.

Die eigentlichen mechanischen Grundgleichungen für den Schnitt bauen auf der Theorie 2. Ordnung auf, die die Behandlung großer Verformungen zuläßt. Folgende Effekte werden berücksichtigt: Elastizität, thermische Ausdehnung, Plastizität, Kriechen, Schwellen, Reißen und Nachsintern. Die Beschreibung berücksichtigt damit gleichermaßen mechanische wie werkstoffabhängige Nichtlinearitäten und die Rechnung muß naturgemäß iterativ durchgeführt werden. Durch Einstellen der Konvergenzkriterien und Dämpfung eventuellen Überschwingverhaltens arbeitet URANUS inzwischen auch bei den besonders kritischen Karbidbrennstoffen bei wechselndem Kontakt (Zyklusbetrieb) sehr zufriedenstellend.

Plastizität und Reißen werden in einem speziellen Modell behandelt. Reißen tritt immer dann auf, wenn die Bruchdehnung überschritten oder das Plastifizierungsvermögen aufgebraucht ist. Abb.6 zeigt die zugrundeliegende Modellvorstellung; Risse sind in allen drei Raumrichtungen zugelassen, wobei die Rißstruktur nicht vorgegeben, sondern auf Grund allgemeiner mechanischer Prinzipien berechnet wird. Oberhalb gewisser Temperaturschranken werden Ausheilprozesse ermöglicht. Untersuchungen zum Rißverhalten unter zyklischer Belastung zeigen, daß die geometrische Änderung des Brennstoffes infolge von relocation-Effekten einen deutlichen und nicht zu vernachlässigenden Beitrag liefert.

Die grundlegende Voraussetzung zur Beschreibung von schnell ablaufenden, transienten Störfällen mit einem Brennstabrechenprogramm ist die instationäre Temperaturberechnung, also die Lösung der allgemeinen Wärmeleitungsgleichung. Herr Kaltenthaler /11/ wird noch detailliert auf diesen Punkt eingehen, so daß ich mich mit einigen prinzipiellen Erläuterungen begnüge. Der sehr geringe axiale Wärmestrom im Brennstab und die Forderung von Rotations-symmetrie erlauben einen eindimensionalen radialen Ansatz für den Stab. Für das Kühlmittel wird ein eindimensionaler axialer Ansatz gemacht, wobei - ähnlich wie bei der axialen Kopplung der mechanischen Größen - eine Kopplung der Temperaturen in jedem Schnitt erfolgt.

Ausgehend von der stationären Lösung der Wärmeleitungsgleichung wurde ein Ansatz entwickelt, der die zeitabhängigen Terme als Zusatzterm enthält /8/. Dies hat den großen Vorteil, daß im stationären Fall immer die analytisch bestimmte Lösung dasteht und daß die geometrische Form der Temperaturverteilung auch mit wenigen Stützstellen erzielt werden kann. Das Verfahren kann zwischen jeder betrachteten Zone eine Unstetigkeit im Temperaturprofil berücksichtigen, wie sie z.B. im Spalt oder bei Rissen im Brennstoff auftritt. Es wird ein gemischt implizit-expliziter Ansatz verwendet. Die Verknüpfung der Gleichungen für einzelne radiale Zonen über die von Zone zu Zone fließenden Wärmeströme führt letztendlich auf ein tridiagonales Gleichungssystem, das mit üblichen Ansätzen gelöst wird.

Das neue Verfahren wurde nach sehr sorgfältigen Test und Vergleichen mit analytischen Lösungen in das URANUS-System übernommen. Herr Kaltenthaler wird auch auf die Art dieser Tests näher eingehen. Heute liegt somit ein mechanisch und thermisch sehr detailliertes Programmsystem vor, das in den derzeit bei uns und in Karlsruhe durchgeführten Rechnungen sehr gute Ergebnisse liefert. Der typische Fall einer stationären Vorbestrahlung mit anschließender Transiente wird routinemäßig behandelt.

Interessant wird die instationäre Rechnung vor allem dann, wenn Brennstoffschmelzen auftritt. URANUS erlaubt derzeit die Untersuchung von Störfällen bis zum Einsetzen von Materialbewegungen. Die zuzuführende Schmelzwärme im Bereich Solidus-Liquidus wird berücksichtigt, und die Ausbildung und das Wandern von Schmelzrädien kann analysiert werden.

Für das Blockadeexperiment Mol-7c wurde darüberhinaus ein Verfahren entwickelt, daß die abzweigenden und später wieder hinzukommenden Kühlmittelströme beschreibt. Hierzu wird Herr Böcking /12/ noch ausführlich berichten.

Derzeitiges Hauptanwendungsgebiet sind Untersuchungen zu den transienten Kühlmittelblockadeexperimenten Mol-7c, zu Transient Oberpower Experimenten, zu hochbelasteten Karbidstäben und, seit neuestem und mit Unterstützung durch das Internationale Büro, zu Halden-Rampen-Experimenten. Vielleicht erscheint es auf den ersten Blick erstaunlich, daß ein vom PSB geförderte Code wieder an LWR-Stäben eingesetzt wird. Nun, wir interessieren uns wie gesagt hauptsächlich für prinzipielle Entwicklungen, und die Vielfalt experimenteller transienter Ergebnisse der Halden-Gruppe hilft uns bei der Entwicklung transienter SBR-Modelle deutlich weiter. Ganz prinzipiell stellt ja die Verifikation eines so umfangreichen Programmes ein nicht zu unterschätzendes Problem dar, und um noch einmal die Smirt-6 zu zitieren: dort wurde sogar behauptet, daß ein Code erst mit der Akzeption durch eine Reaktor-Genehmigungsbehörde als ausreichend verifiziert angesehen werden kann.

Selbst wenn man nicht ganz so weit geht, muß man doch sehen, daß ein Rechenprogramm ohne umfangreiche Verifikation, die sich in der Regel über Jahre erstreckt, wertlos ist. Für URANUS wurde und wird eine Verifikation in drei Ebenen angestrebt:

- Vergleich der Lösungen aus dem Rechenprogramm mit bekannten, in der Regel analytischen Lösungen. Diese Vergleiche, die jedoch nur in speziellen Fällen realisierbar sind, wurden für URANUS so weit wie nur möglich durchgeführt und zur vollsten Zufriedenheit abgeschlossen.
- Vergleich mit anderen Rechenprogrammen. Hierzu wurden Arbeiten zum Vergleich der Rechenprogramme FRUMP-SATURN-URANUS durchgeführt, zum Vergleich GAPCON-Thermal-2-URANUS /13/, zum Vergleich TPROF-URANUS und zum Vergleich des URANUS-Programmes mit der EPRI-Studie /14/. In Arbeit ist ein Vergleich URANUS-GAPCON-Th-3-FRAPCON, ein Vergleich mit dem argentinischen BACO-Code, und eine Teilnahme an einem internationalen Vergleich, der vom Halden-Projekt initiiert wurde. Außerdem wurde ein teilweiser Vergleich der URANUS-THERMAL-Version zu den Programmen SAS und BREDA durchgeführt. Wenngleich natürlich immer Diskrepanzen zwischen den Ergebnissen unterschiedlicher Codes auftreten werden, so besticht URANUS immer wieder durch die Konsistenz der Ergebnisse; die extrem starke Rückwirkung der einzelnen Modelle aufeinander wird in aller Regel sehr gut verarbeitet. Einzelne Abweichungen können meistens eindeutig auf Modelle zum Werkstoffverhalten zurückgeführt werden, die wir der offenen Literatur entnommen haben.
- Als dritten Punkt sehen wir den direkten Vergleich mit Experimenten. Hier wurden inzwischen eine ganze Reihe von Ergebnissen gewonnen, obwohl wir in keiner Weise mit Gruppen konkurrieren können, die mit erheblicher manpower hunderte von Experimenten verifiziert haben. Um alle Versionen einigermaßen gleichmäßig zu verifizieren, wurden sowohl Oxid- als auch Karbid-SBR-Stäbe nachgerechnet, sowie einige LWR-Stäbe. Die derzeitige Anwendung von URANUS auf Mol-7c von unserer Seite her und auf CABRI von Ihnen her muß natürlich eigentlich auch zu dem Punkt Verifikation am Experiment gezählt werden.

Wenn ich vorhin gesagt habe, daß ein Programm ohne Verifikation wertlos ist, so gilt das gleiche für ein Programm ohne Dokumentation. Zu diesem Punkt wurden deshalb ganz besondere Anstrengungen gemacht, und als Ergebnis liegen heute zwei dicke Bände eines Betriebshandbuches /15,16/ vor. Band 1 enthält in Form von Veröffentlichungen die Theorie des Programmes, Band 2 eine detaillierte Benutzeranleitung inklusive einer ausführlichen Darstellung der im Programm verwendeten Modelle. Ohne eine solche Dokumentation wäre beispielsweise der Einsatz im KfK nicht möglich gewesen. Diese Dokumentation wird laufend ergänzt und angepaßt, was natürlich eine erhebliche, aber in der Regel unsichtbare Arbeit darstellt.

Am Beispiel unserer Arbeiten zur Karbid-Variante - eine umfangreiche Publikation / 5 / ist bei Nucl. Techn. im Druck - möchte ich kurz unsere grundsätzlichen Probleme bei der Einbringung von Modellen und Daten skizzieren. Sie wissen, daß wir nicht experimentell mit Brennstoffen oder unter inpile-Bedingungen arbeiten können. Wir sind also auf Ergebnisse anderer angewiesen. Die Qualität veröffentlichten Materials streut naturgemäß, und so sehen wir es als eine wichtige Aufgabe an, kritische Untersuchungen an auf dem Markt befindlichen Daten und Modellen durchzuführen.

Abb.7 zeigt beispielsweise einen Vergleich verschiedener Autoren zur Wärmeleitfähigkeit in UC. In dieser Form werden ständig unsere Materialdaten mit neuesten Ergebnissen verglichen, und wir hoffen so, stets über aktuelle Daten zu verfügen. Jüngstes Ergebnis ist z.B. die Übernahme der IA-PSB-Referenzdaten zum schnellen Brüter. In den Fällen aber, wo keine Modelle vorliegen, müssen wir unter Umständen auch selbst entwickeln. Abb.8 zeigt als Beispiel eine Liste ausgewerteter experimenteller Daten zur Spaltgasfreisetzung in Karbiden, - sie soll durch ihre Länge beeindrucken! -, Abb.9 die Ergebnisse des aus dieser Analyse hervorgegangenen Spaltgasfreisetzungmodells im Vergleich zu experimentellen Punkten. Wir müssen jedoch betonen, wie auch früher schon, daß Modellentwicklung eigentlich nicht unsere Aufgabe ist. Auch unser Kooperationsvertrag PSB-IRT sieht regelmäßig vor, daß Modelle von Ihrer Seite einzubringen sind. Detaillierte

Entwicklungen physikalischer Modelle gehen - von Einzelfällen abgesehen - über den Rahmen unserer Möglichkeiten hinaus.

Ein Vortrag über den Stand eines Rechenprogrammes kann nicht ohne Darstellung einiger wesentlicher Ergebnisse stehen bleiben, und ich möchte Ihnen deshalb in den folgenden Bildern einige unserer Resultate zeigen. Herr Böcking und Herr Kaltenthaler werden nachher noch etwas gründlicher auf Details eingehen.

Abb.10 zeigt von uns gerechnete Temperaturen für Brennstoff-zentral- und Oberflächentemperatur sowie Hülltemperaturen für das TUI-Experiment GOCAR-4. Ich möchte Sie auf die minutiös nachge-fahrene Leistungsgeschichte aufmerksam machen, die wir aus dem Meßschrieb entnommen haben; über 200 Leistungs- und Kühlkanal-temperaturänderungen wurden über das MAKROSTEP-Konzept problem-los eingegeben. Der schraffierte Bereich stellt den Bereich dar in dem sich die Anzeige des Zentral-Thermoelementes bewegte.

Abb.11 zeigt für das gleiche Experiment die Tangentialspannungs-verteilung im Brennstoff zu unterschiedlichen Zeiten; der Abbau der thermischen Spannungen durch Kriechen ist deutlich zu er-kennen, ebenso - für Radien größer 2 mm - die Störung des ther-moelastischen Bereiches durch aufgetretene Risse. Weitere Ergeb-nisse zu diesem Experiment sind in einem kleinen Bericht nieder-gelegt / 7/.

Abb.12 zeigt für den KfK-Karbidstab K2-2 den nach Bestrahlung gemessenen Hüllrohrdurchmesser über der Stablänge sowie URANUS-Ergebnisse; es konnte aus diesem Vergleich auf das Nachsinterer-verhalten des Stabes rückgeschlossen werden. Diese und weitere Untersuchungen wurden im Rahmen einer Studienarbeit am Institut durchgeführt.

Für ein anderes Karbidstabexperiment DN1DP2, ebenfalls von TUI, wurden Brennstofftemperaturen, Abbrand, Hüllrohrverformungen und erstmalig die Ausbildung von typischen Brennstoff-Struktur-zonen berechnet (Abb.13); es ergibt sich eine erfreuliche Über-einstimmung mit dem Experiment, obwohl gerade auf dem Gebiet der Umstrukturierung der Karbide noch einige Arbeit zu investieren sein wird.

Als Glanzlicht möchte ich noch den Vergleich unserer Rechnungen mit dem URANUS-Blockademodell /18/ für Mol-7c gegen eine Rechnung ohne Blockademodell vorführen (Abb.14); Sie sehen, wie sehr eine normale Brennstabanalyse die Kühlmitteltemperaturen im kritischen Blockadebereich unterschätzt. Viel wichtiger aber ist es, daß solche Anomalien im Temperaturverlauf numerisch sicher und problemlos mit URANUS behandelt werden können; mir ist derzeit kein anderer integraler Brennstabcode bekannt, der solche Experimente nachrechnen könnte.

Soweit unsere Ergebnisse, die gut übereinstimmen. Wir wollen nicht den Eindruck erwecken, daß unser Code ein Universalprogramm ist, das sämtliche Probleme lösen kann. Trotz der beschriebenen Vielseitigkeit des Codes haben wir deutliche Grenzen, die ich im folgenden kurz andiskutieren möchte:

Problematisch - wie derzeit wohl in den meisten Codes - sind alle Werkstoffdaten und -modelle, die unter stationären Bedingungen und out-of-pile gewonnen werden. Wir wissen recht gut, daß schon die einfachsten Materialdaten, beispielsweise der Elastizitätsmodul, der aus Zugversuchen gewonnen wird, allenfalls bei niedrigen Abbränden sicher bekannt ist. Rechnungen bis zu hohen Abbränden müssen also mit großer Vorsicht betrachtet werden; und wenn, wie in unserem Falle, Ergebnisse für hohe Abbrände nicht in ausreichendem Maße gegen Experimente verifiziert werden konnten, sieht man eine deutliche Beschränkung der Fähigkeiten des Codes. Modelle zum transienten Schwellen, zum transienten Gasverhalten und zur transienten Umstrukturierung sind ebenfalls noch nicht eingebracht. Wir sehen hier unsere zukünftigen Aufgaben bereits recht klar, können derzeit aber nicht umhin, hier einen deutlich sichtbaren Mangel zu konstatieren. Materialtransportphänomene werden ebenfalls noch nicht behandelt, so daß Rechnungen bis maximal zu ersten gravierenden Zerstörungen des Stabes durchgeführt werden können. Auch das Problem des Kühlmittelsiedens ist noch nicht endgültig gelöst, hieran wird allerdings bereits detailliert gearbeitet.

Häufig wird die Frage nach der "Genauigkeit" eines Rechenprogrammes gestellt. Wir sind, wie wohl die meisten Code-Entwickler, schon recht zufrieden, wenn Zentraltemperaturen im Bereich $\pm 5\%$ mit denen des Experimentes übereinstimmen. Im Bereich um $1800\text{ }^{\circ}\text{C}$ sind jedoch auch $\pm 5\%$ absolut schon ein weiterer Bereich und natürlich können hier auch Probleme mit allen temperaturabhängigen Modellen auftreten. Ein bisher ungelöstes Problem stellt z.B. die durch Überschätzung von Temperaturen stark ansteigende Gasfreisetzung dar, die ihrerseits über den direkten Einfluß auf den Wärmedurchgang im Spalt die Temperaturen weiter hoch treiben kann; dadurch kann man in unglücklichen Fällen zu einer völligen Fehleinschätzung des experimentellen Verlaufes kommen. Dies beeinträchtigt durchaus die von uns eigentlich angestrebte hohe Zuverlässigkeit des Programmes.

Andere Punkte sind nicht minder gravierend: Wenn ich vorhin in der Regel gute Übereinstimmungen zu Experimenten und anderes Codes aufgeführt habe, so sind manchmal auch Fehlschläge zu konstatieren. Untersuchungen zum Zentralkanalradius für den stationären Teil des Experimentes Mol 7c /18/, die gemeinsam mit den Herren Laßmann und Kramer durchgeführt wurden, zeigen beispielsweise eine recht deutliche Überschätzung der Radien im oberen Stabbereich, wie Abb. 15 zeigt. Hier muß also das verwendete Modell noch einmal genauer betrachtet werden, und wir haben gerade eine Diplomarbeit mit dieser Fragestellung gestartet. Ein anderes Beispiel: Während unser Karbid-Spaltgasfreisetzungsmodell für die Mol 11 - Stäbe beispielsweise gute Ergebnisse lieferte, so unterschätzte es die in den TUI-Experimenten gemessene Freisetzung teilweise sehr erheblich. Damit ergibt sich sofort die Frage, inwieweit empirische Modelle überhaupt physikalisch überprüft werden können, und warum wir nicht ein physikalisches Modell einsetzen. Wir wissen aus der detaillierten Arbeit mit dem Assmann-Stehle-Nachverdichtungsmodell /19/ für LWR-Stäbe noch recht gut, wie schwer es schon ist, Anfangsporositäten, Porengrößenverteilungen und Porenradien für normale und experimentelle Stäbe zu erhalten. In aller Regel verlangen physikalisch detaillierte Modelle ebenso detaillierte Eingabegrößen, die häufig nicht bekannt sind, woraus sich leider eine erhebliche Einschränkung in der Anwendung ergibt. Empirische Modelle wiederum können nur Fälle

vom Typ der Eichexperimente richtig wiedergeben; geringfügige Änderungen (z.B. andere Leistung) führen u.U. bereits zu gravierenden Fehlern. Um es kurz zu machen: Wir müssen uns bei der Anwendung des Codes dieser Einschränkungen bewußt sein und mit den Grenzen des Codes leben. Es wird Fälle geben, wo URANUS besser abschneidet als vergleichbare Programme, aber der umgekehrte Fall ist ebenso wahrscheinlich.

Soviel zu den Ergebnissen unserer Rechnungen. Ich möchte zum letzten Punkt meines Vortrages kommen:

Ein Statusbericht in in gewissem Sinne auch ein Rechenschaftsbericht: Haben wir die Ihnen vertraglich zugesicherten Leistungen eigentlich auch erbracht? Ich glaube, wir können dies mit einem uneingeschränkten, ehrlichen "ja" beantworten. Die im Arbeitsprogramm für die Jahre 1979-1981 und dem im vergangenen Jahr zusätzlich vereinbarten Arbeitsprogramm für die Untersuchung der Mol-7c-Experimente beschriebenen Punkte waren die folgenden, und ich habe jeweils den Status der Projekte vermerkt:

Arbeitsprogramm 1979 - 1981

Weiterentwicklung

transiente Version	abgeschlossen
Karbid-Version	abgeschlossen
Modelle und Daten	läuft stetig
Peripherie- und Plotprogramme	abgeschlossen

Verifikation anhand

analytischer Lösungen	abgeschlossen
Vergleich mit anderen Codes	läuft stetig
Vergleich mit Experimenten	läuft stetig

Dokumentation

größtenteils abgeschlossen

Rechnungen zu	
statistischer Störfallanalyse	_____
transienter Störfallanalyse	laufen
fortgeschrittene Brennstabkonzepte	abgeschlossen
Behandlung der Kühlkanalblockade	
Blockademodell	abgeschlossen
thermische Untersuchungen Mol-7c	laufen
Untersuchungen zu weiteren Modelle	laufen
Übergabe an Karlsruhe	abgeschlossen
	+ halbjährliche Aktualisierung
Halbjahresberichte	regelmäßig

Zum Abschluß möchte ich noch unsere Vorstellungen zu weiterem Vorgehen für die nächsten 5 Jahre skizzieren:

Arbeitsprogramm 1982 - 1984 (Entwurf)

Weiterentwicklung

transiente Materialdaten + Modelle
transiente Gasfreisetzung
transiente Umstrukturierung
Behandlung der Schmelze
Restart-Fähigkeit
Kühlmittelsieden

Verifikation

Vergleich mit anderen Codes 
BACO
GAPCON
transiente Codes

Vergleich mit Experimenten 
Halden
KfK
TUI

Dokumentation		abschließen / stetig aktualisieren
Rechnungen	zu	statistischen Störfallunter- suchungen transienter Störfallunter- untersuchungen Kühlkanalblockade Mol-7c-3 Mol-7c-Folgeprogramm
Wartung	aller Programmteile + Peripherieprogramme	
geplante Publikationen		Transiente Version Blockadmodell zusammenfassender Bericht Mol-7c/ 1 u. 2 Vergleich URANUS-GAPCON Vergleich URANUS-BACO Vergleich URANUS-TPROF Halbjahresberichte für PSB

Wir werden dieses Programm noch in diesem Herbst detailliert be-
gründen und diskutieren.

Ich hoffe, daß ich Ihnen einen guten Überblick geben konnte,
und daß Sie erkennen konnten, daß wir Ihnen ein gutes Instrument
für Ihre und unsere Arbeiten zur Verfügung gestellt haben.

Literatur

- / 1/ K. Laßmann, Der integrale Brennstabcode URANUS;
H. Fabian, Zweidimensionale Brennstabberechnung nach der
Finitelementmethode; atw, Jahrgang XXI, Nr. 6, S. 307-310,
Juni 1976
- / 2/ K. Laßmann, The structure of fuel element codes, Nucl. Eng.
Des., Vol. 57, No. 1, S. 27-39, April 1980
- / 3/ K. Laßmann, A. Moreno, The light-water-reactor version of
the URANUS integral fuel-rod code, atke, Bd. 30, S. 207-215,
1977
- / 4/ K. Laßmann, The statistical version of the URANUS-programme,
Nucl. Eng. Des., Vol. 56, No. 1, S. 35-40, Februar 1980
- / 5/ T. Preußer, Modeling of carbide fuel rods, Nucl. Techn.,
im Druck
- / 6/ T. Preußer, The carbide version of the integral fuel rod
code URANUS, SMiRT-6, Sektion D 4/2, Paris, August 1981
- / 7/ T. Preußer, Analysis of the carbide fuel element GOCAR-4
using the URANUS fuel rod code, Bericht rtda-58-81, IRT,
Techn. Hochschule Darmstadt, 1981, Veröffentlichung in
Vorbereitung
- / 8/ K. Laßmann, Die transiente Version des Rechenprogrammes
URANUS, atw, Jahrgang XXII, Nr. 7, S. 521-524, Oktober 1977
- / 9/ K. Laßmann, T. Preußer, An advanced method for transient
temperature calculation in fuel element structural analysis,
Bericht rtda-65-81, IRT, Technische Hochschule Darmstadt,
Veröffentlichung in Vorbereitung
- /10/ K. Laßmann, URANUS- a computer programme for the thermal
and mechanical analysis of the fuel rods in a nuclear reac-
tor, Nucl. Eng. Des., Vol. 45, No. 2, S. 325-342, Februar 1978

- /11/ G. Kaltenthaler, Untersuchungen an der transienten Version von URANUS, in: Statusbericht des IRT 1981, Bericht rtda-64-81, IRT, Technische Hochschule Darmstadt, 1981
- /12/ G. Böcking, URANUS-Untersuchungen zu Kühlkanaltemperaturen für Mol 7c, in: Statusbericht des IRT 1981, Bericht rtda-64-81, IRT, Technische Hochschule Darmstadt, 1981
- /13/ K. Laßmann, S. Kelppe, L. Mattila, Comparative evaluation of the steady state fuel rod thermal behaviour code GAPCON-THERMAL-2 and the integral fuel rod performance code URANUS, VTT Technical Research Center of Finland, Nucl. Eng. Lab., Report 34, Helsinki, 1978
- /14/ K. Laßmann, Preliminary comparison of URANUS code results with results from EPRI modeling code evaluation project, Nucl. Eng. Des., Vol. 56, No. 1, S. 151-161, Februar 1980
- /15/ Dokumentation URANUS, Hauptabschnitt A, Theorie des Rechenprogrammes, Bericht rtda-63-81, IRT, Technische Hochschule Darmstadt, 1981
- /16/ Dokumentation URANUS, Hauptabschnitt B, Betriebshandbuch, Bericht rtda-49-80, IRT, Technische Hochschule Darmstadt, 1980
- /17/ K. Laßmann, T. Preußner, G. Böcking, Das URBLOC-Modell zur Behandlung von Kühlmittelblockaden mit integralen Brennstabcodes, Bericht rtda-66-81, IRT, Technische Hochschule Darmstadt, 1981, Veröffentlichung in Vorbereitung
- /18/ W. Kramer, K. Laßmann, T. Preußner, Theoretische Untersuchungen zum Zentralkanal beim Experiment Mol 7c/1 mit dem URANUS-Rechenprogramm, Bericht rtda-51-80, IRT, Technische Hochschule Darmstadt, 1980
- /19/ H. Assmann, H. Stehle, Thermal and in-reactor densification of UO_2 , Nucl. Eng. Des., Vol. 48, S. 49 ff, 1978

TABELLE 1:

DIE 20 GRUNDLEGENDEN MERKMALE DES URANUS-SYSTEMS IN STICHWORTEN:

1. INTEGRALER BRENNSTABCODE.
2. QUASI-ZWEIDIMENSIONALER MECHANISCHER ANSATZ.
3. GROSSE VERFORMUNGEN (THEORIE 2. ORDNUNG).
4. NICHTLINEARES WERKSTOFFVERHALTEN.
5. VARIABLES MULTIZONENKONZEPT.
6. BERECHNUNG DER RISSTRUKTUR.
7. BERECHNUNG DER AXIALEN REIBKRÄFTE.
8. TRANSIENTE TEMPERATURBERECHNUNG, GEMISCHT IMPLIZIT-EXPLIZITER ANSATZ; ANSATZFUNKTION.
9. BEHANDLUNG VON KÜHLMITTEL UND STRUKTUR.
10. BEHANDLUNG VON GESCHMOLZENEM BRENNSTOFF BZW. HÜLLE.
11. BEHANDLUNG VERDAMPFENDEN KÜHLMITTELS.
12. KÜHLMITTEL-BLOCKADEMODELL.
13. KONSEQUENTE BLOCKSTRUKTUR.
14. AUTOMATISCHE ZEITSCHRITTSTEUERUNG.
15. MAKROSTEP-KONZEPT ZUR ZEITVARIABLEN VORGABE VON BELIEBIGEN BELASTUNGEN.
16. MEHRERE VERSIONEN: SCHNITT-, STAB-, PERFORMANCE-, DESIGN-, THERMAL-, STATISTIK-, TRANSIENTE VERSION.
17. MEHRERE WERKSTOFF-VARIANTEN ZUR BEHANDLUNG VON LWR-, SBR- UND KARBIDBRENNSTÄBEN.
18. SEHR KURZE RECHENZEITEN.
19. PERIPHERIE-PROGRAMME ZUM AUFBEREITEN VON EINGABEDATEN, ZUM AUSWERTEN VON ERGEBNISSEN (SPEZIELLE PLOTTER-SOFTWARE), UND ZUM TESTEN EINZELNER KOMPONENTEN.
20. AUSGEFEILTE THEORETISCHE UND PROGRAMMTECHNISCHE DOKUMENTATION.

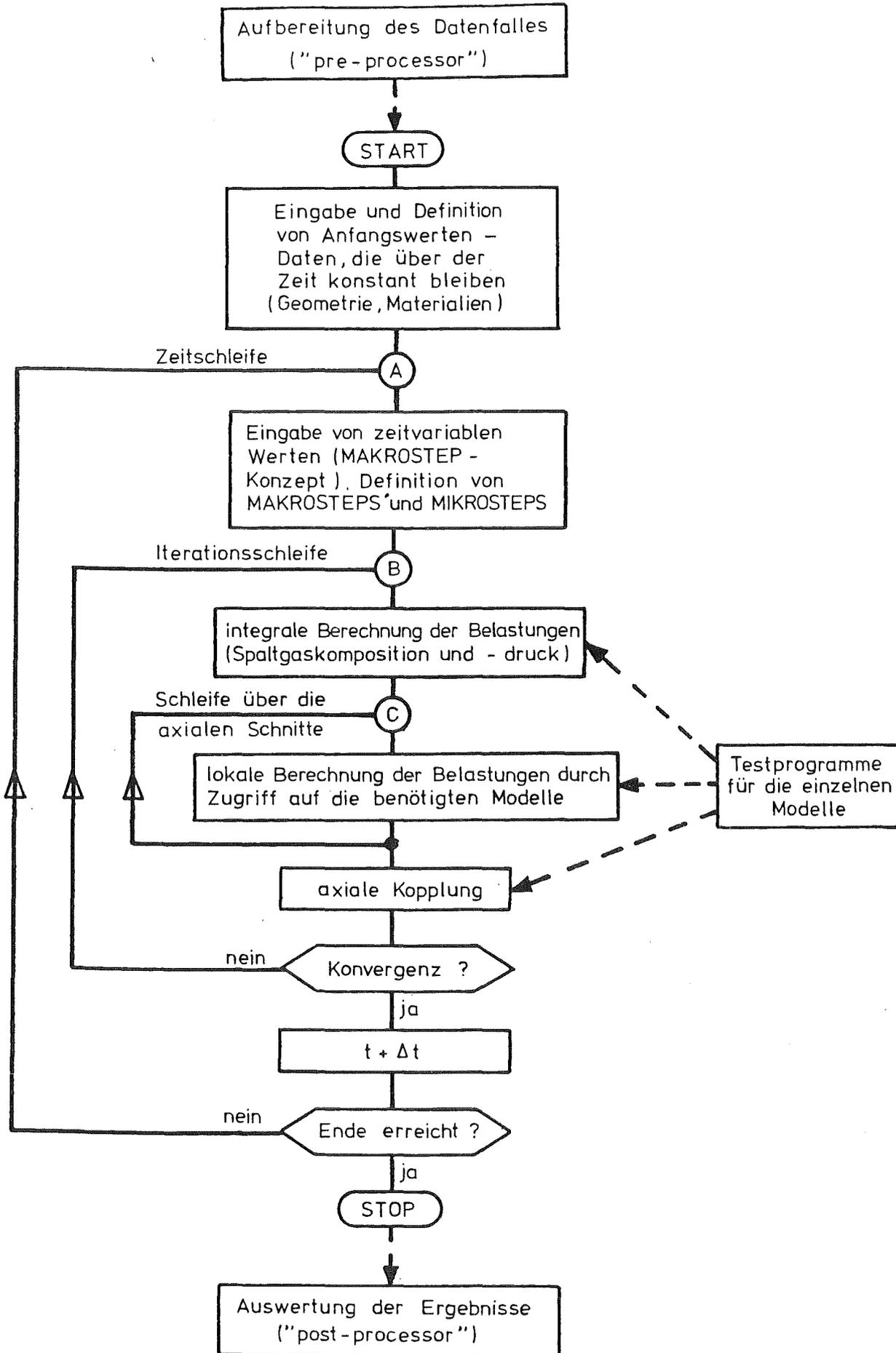
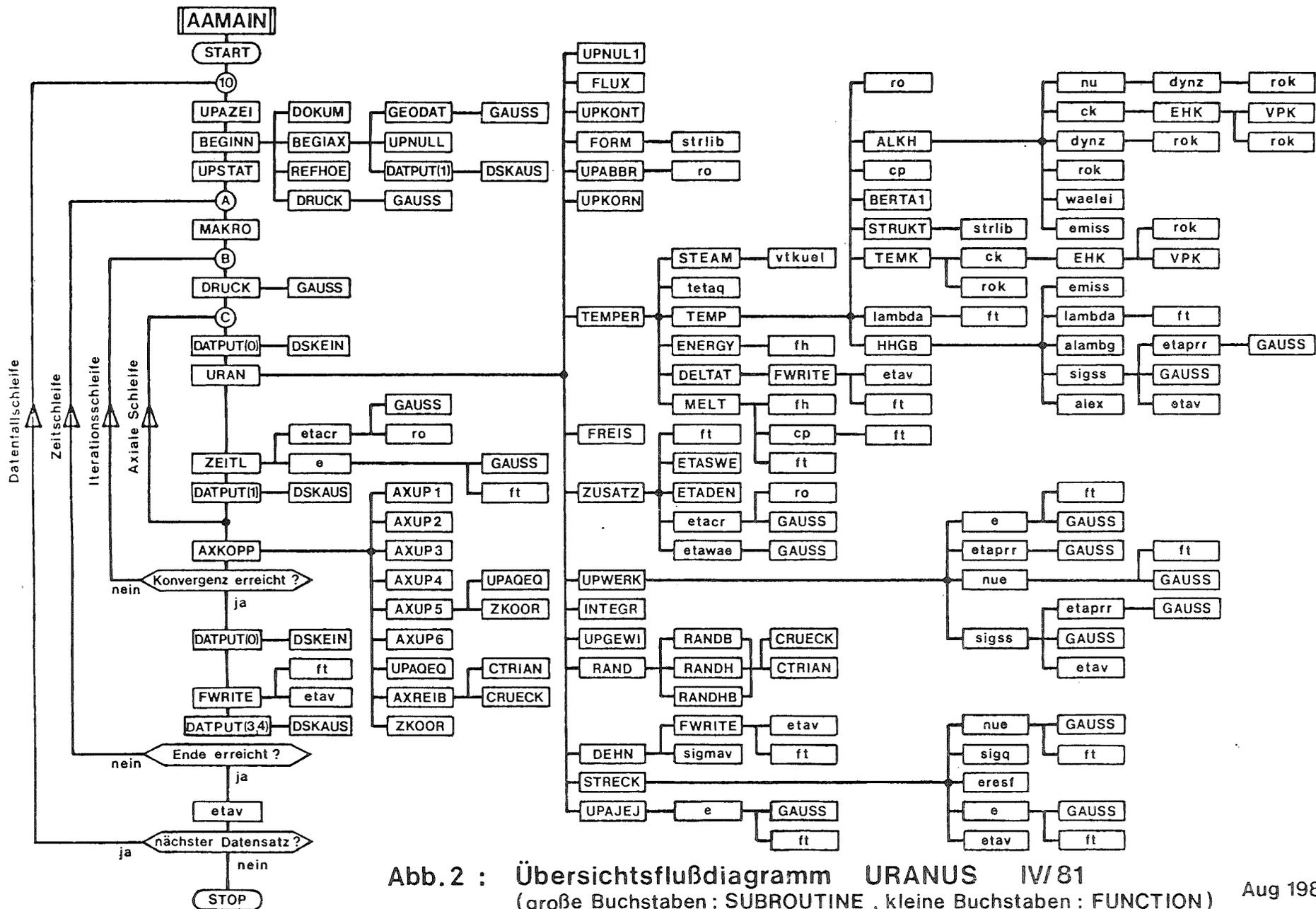


Abb. 1 : URANUS-System. Struktur des Rechenprogrammes (—) und Verknüpfung mit der Peripherie (- - -)



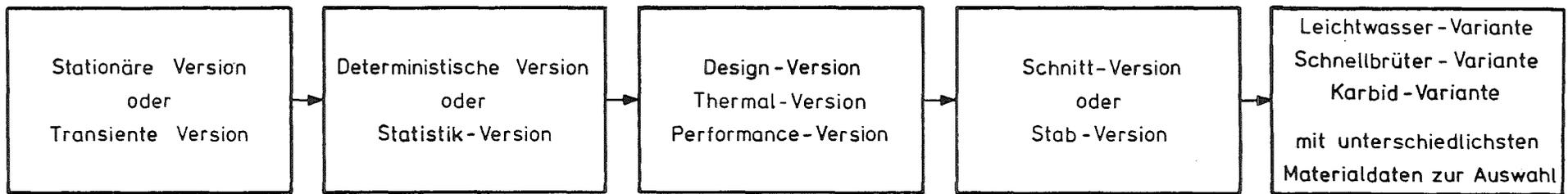


Abb. 3 : URANUS. System von gestaffelten Programmversionen und Materialdatenvarianten, die beliebig kombiniert werden können

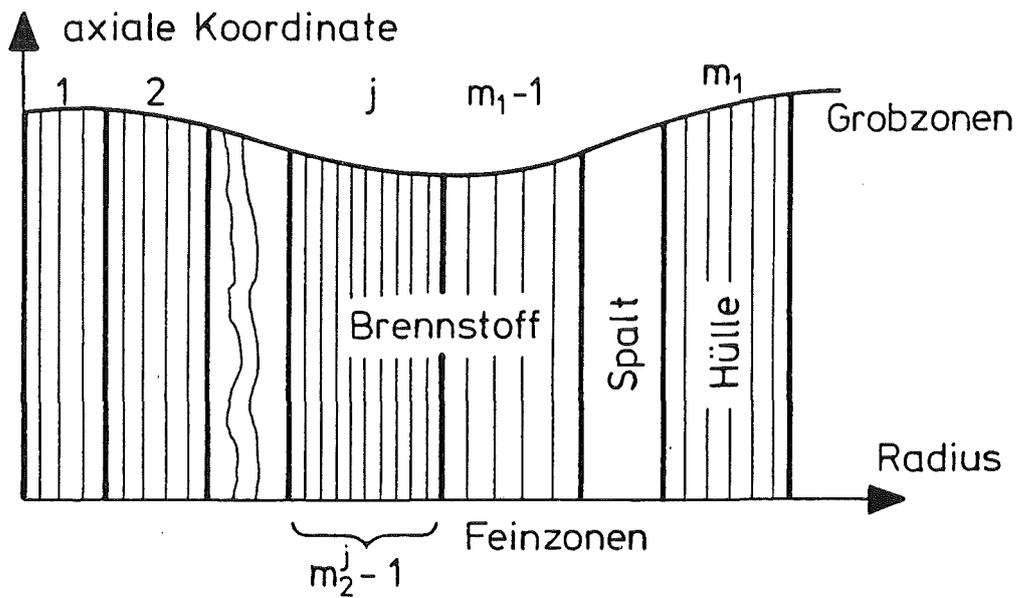


Abb. 4 : Radiale Diskretisierung im Schnitt I

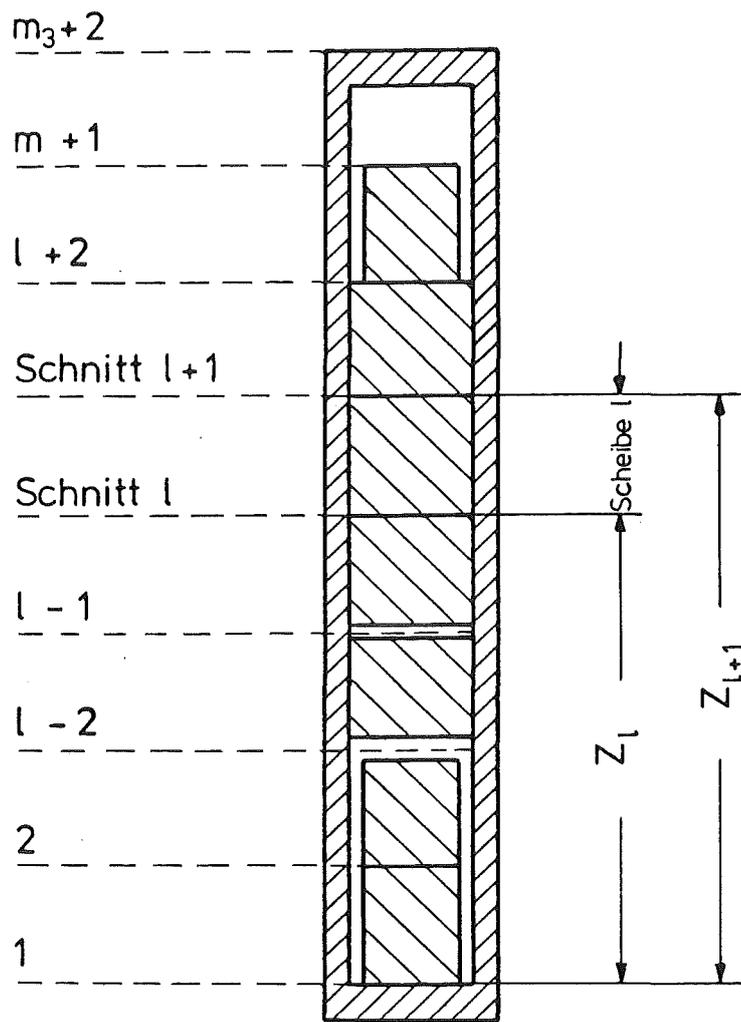


Abb. 5 : Geometrie des Brennstabes

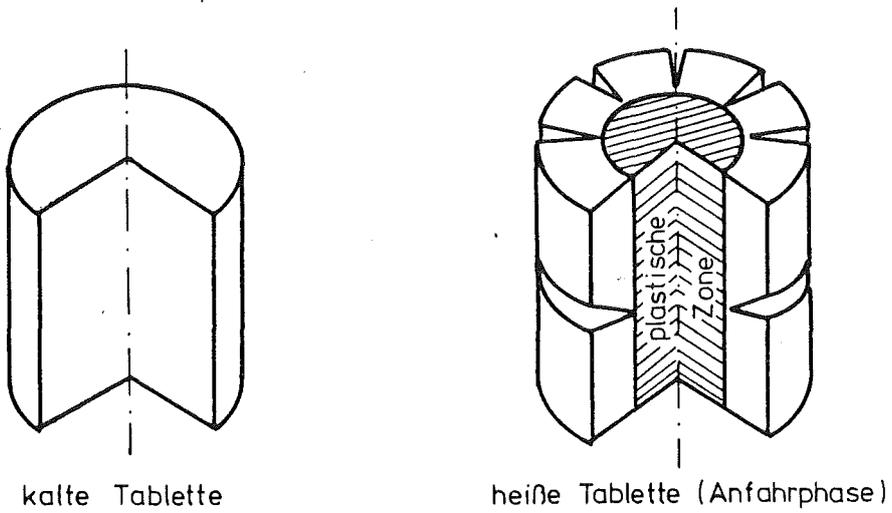


Abb. 6 : Gerissene Brennstofftablette

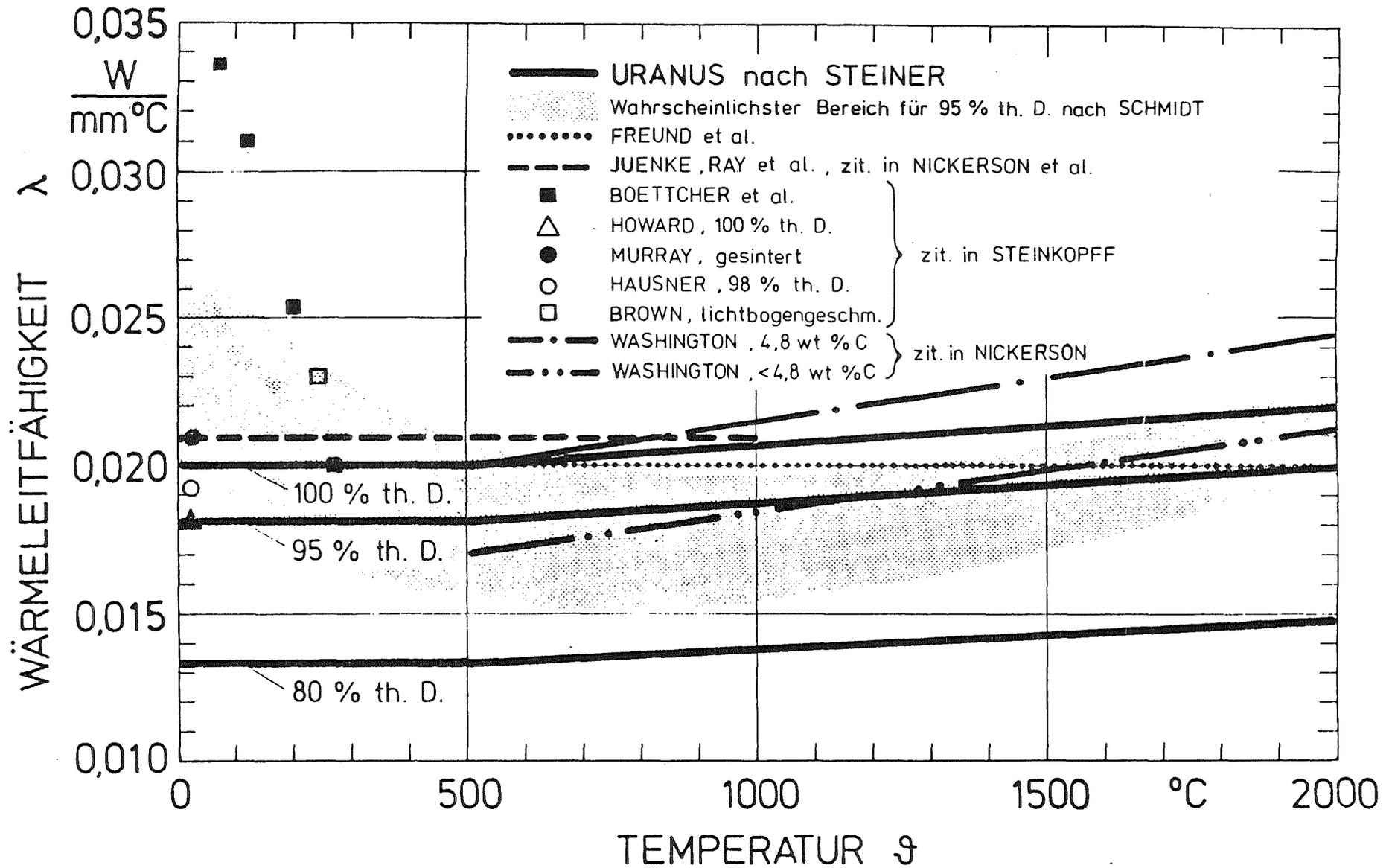


Abb. 7 : Wärmeleitfähigkeit λ für UC nach mehreren Autoren

Nr. in Abb.9	Experiment	Brennstoff	Dichte	Bonding	Abbrand at%	Zentraltemp. ϑ_z °C	Spaltgasfreisetzung %
1	VG 6a KVE 94	(U,Pu)C	86,7% th.D.	He	1,4	1200	4,3
2	VG 6a KVE 102	(U,Pu)C	87,6% th.D.	He	5,08	1200	10,03
3	VG 6a KVE 103	(U,Pu)C	87,6% th.D.	He	4,85	1200	17,1
4	VG 6c KVE 114	(U,Pu)C	87,1% th.D.	Ar	2,27	1200	2,2
5	Mol-11 K1-1 TE 4,10	UC	93,5% th.D. 90,6% sm.D.	He	3,94	1500	26,5-27,6
6	Mol-11 K2-1 TE 6,7,8	(U,Pu)C	83,2% th.D. 79,9% sm.D.	He	4,14	1600	37,1
7	Mol-11 K2-1 integral	(U,Pu)C	83,2% th.D. 79,9% sm.D.	He			16,1
8	Mol-11 K2-2 TE 6,7,8	(U,Pu)C	83,2% th.D. 79,9% sm.D.	He	6,87	1450	37,1
9	MOL-11 K2-2 TE 10	(U,Pu)C	83,2% th.D. 79,9% sm.D.	He	7,05	1450	39,6
10	Mol-11 K2-2 integral	(U,Pu)C	83,2% th.D. 79,9% sm.D.	He			21,0
11	typische Werte	(U,Pu)C	niederdicht	He	10	1700	40,0
12	DFR 330/1	(U,Pu)C	niederdicht	Na	4,82	1400	15,3-17,6
13	CV 012	(U,Pu)C	81% sm.D.	He	3	1650	27
14	CV 1285	(U,Pu)C	80% sm.D.	He	6,9	1820	30,2
15	CV 1299	(U,Pu)C	78% sm.D.	He	6,9	1810	31,2
16	CV 1300	(U,Pu)C	77% sm.D.	He	6,9	1810	33,0
17	CV 1554	(U,Pu)C	71% sm.D.	He	4,7	1830	42,4
18	CV 1557	(U,Pu)C	70% sm.D.	He	4,7	1830	51,2
19	CV 135	(U,Pu)C	78% sm.D.	He	1,7	2130	76,7
20	a)	(U,Pu)C	82% sm.D.	He	7		16 -17,8
	b)		85% sm.D.	Na	7,2		2,5
21	a)	(U,Pu)C	hochdicht	He			1
	b)		niederdicht		11		37
22	versch.Exp.	(U,Pu)C	88-99% th.D.	Na	2,4-11		3,2-21,3
23				He		1000	3
24					4	850	0
25		(U,Pu)C	hochdicht	He	5-10 12-13	bis 850 > 900	< 1 28-30
26		UC			ab 10 ab 5 2-3	900 1200 1100-1200	erhöhte Freis. erhöhte Freis. 1-10
27	Schätzwerte	UC			2-3	1500-1700	10-30
28		UC	80-85% th.D.		2-3		4-10
29	Mol-11 K2-3	(U,Pu)C	83% th.D.	He	ab 0,7		erhöhte Freis.
30	Mol-11 K2-2	(U,Pu)C	83% th.D.	He	ab 2	1450	erhöhte Freis.
31	Mol-11 K2-3	(U,Pu)C	83% th.D.	He	6,38		24
32	Mol-15	(U,Pu)C		Na	9	1100-1350	14-27

Abb. 8 : Tabelle 1. Übersicht der ausgewerteten Literaturstellen zur Spaltgasfreisetzung.

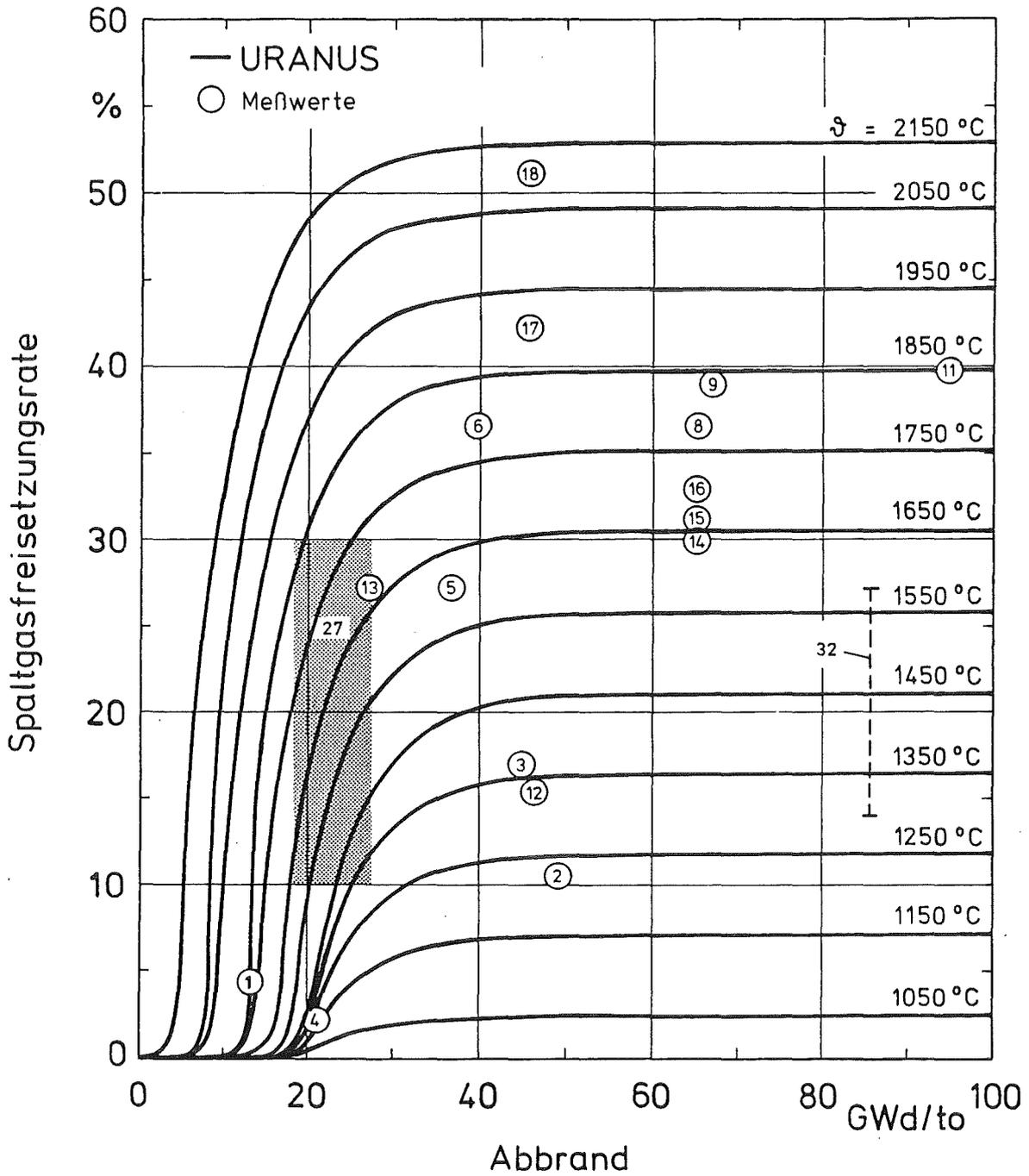


Abb. 9 : Spaltgasfreisetzung als Funktion des Abbrands; Meßwerte s. Tabelle 1.

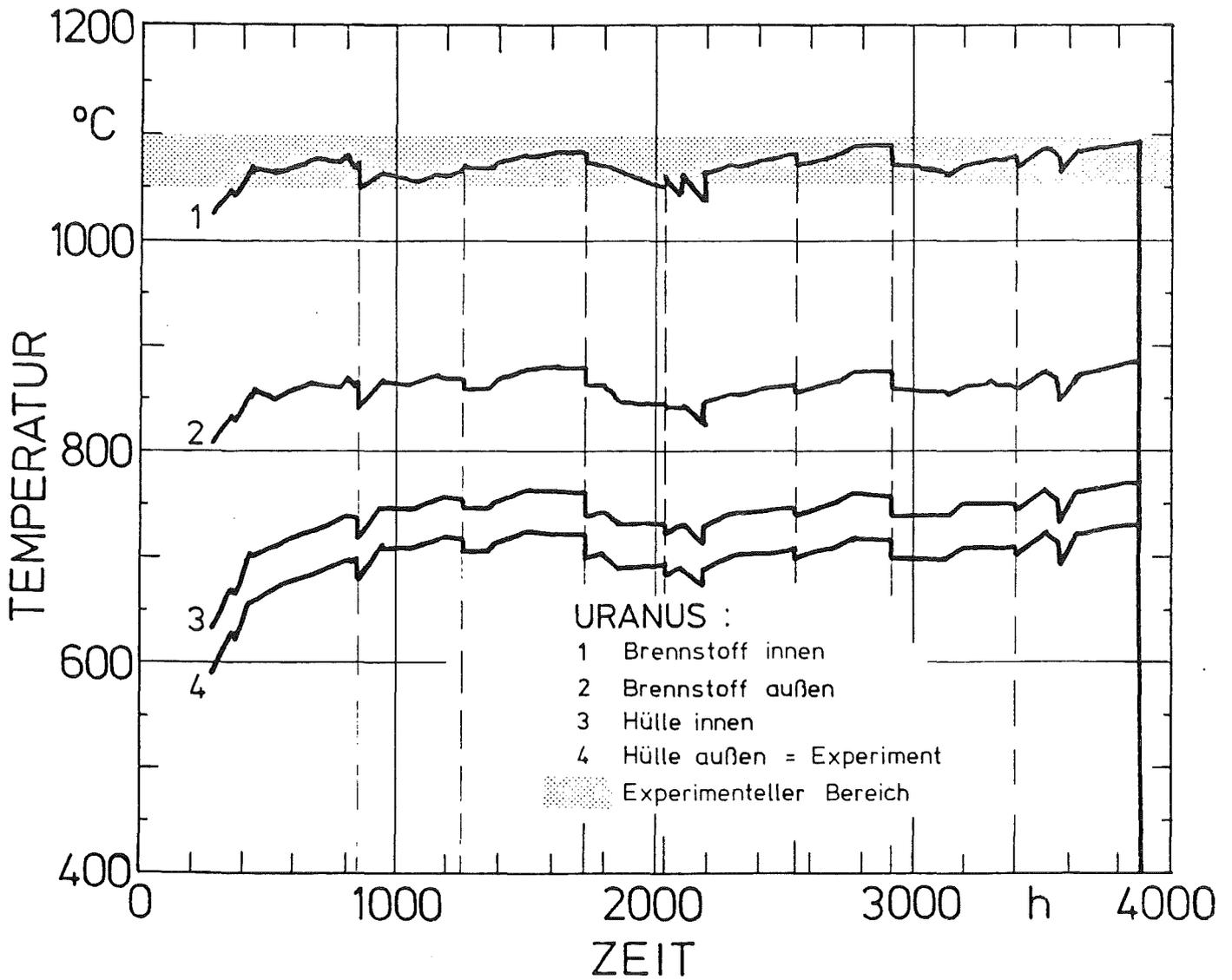


Abb. 10 : Temperaturverteilung über der Zeit bei konstanter Gas-konzentration im Spalt ; URANUS-Rechnung gegen Experiment.

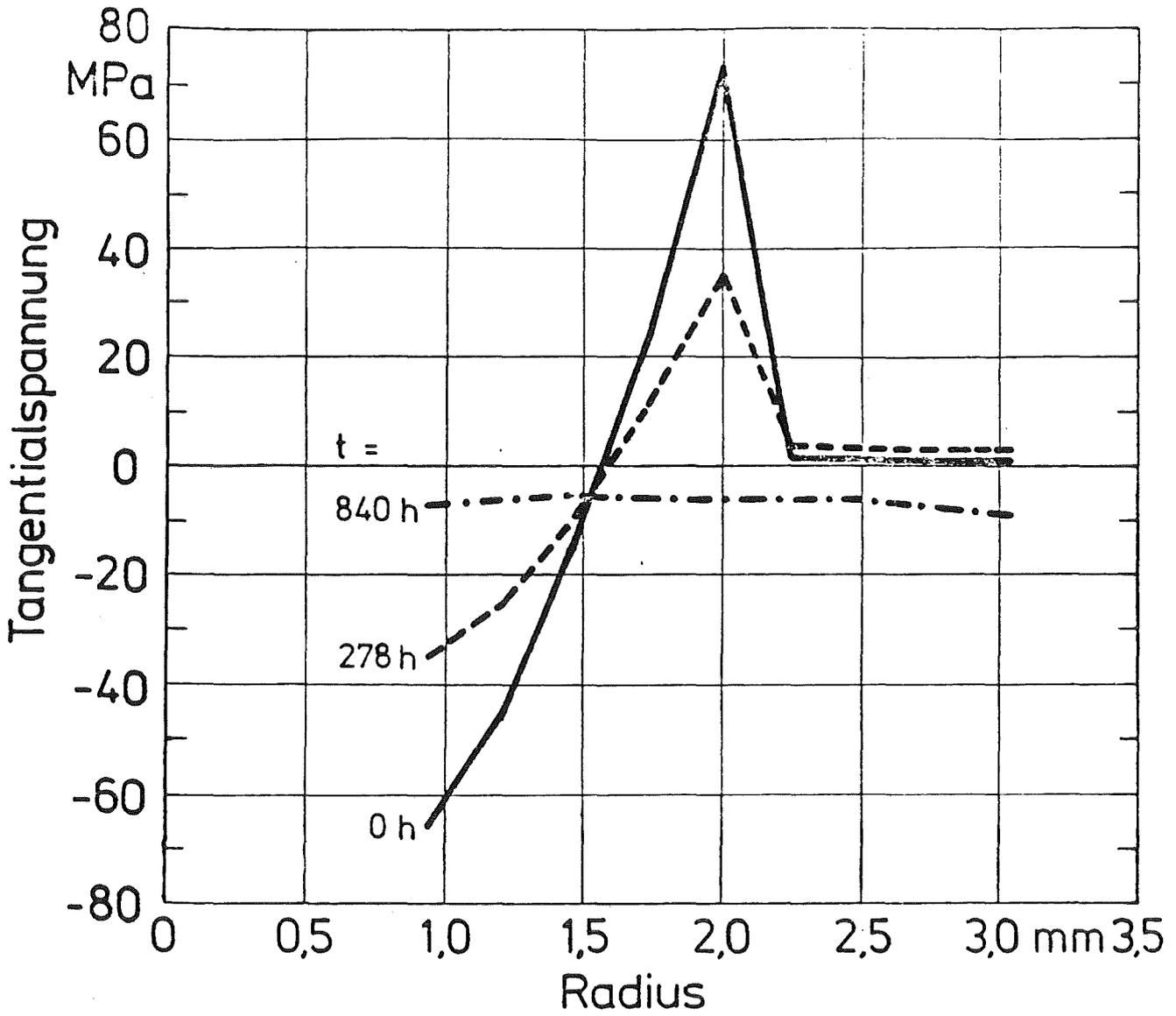


Abb. 11 ; Radialer Verlauf der Tangentialspannung; URANUS-Rechnung.

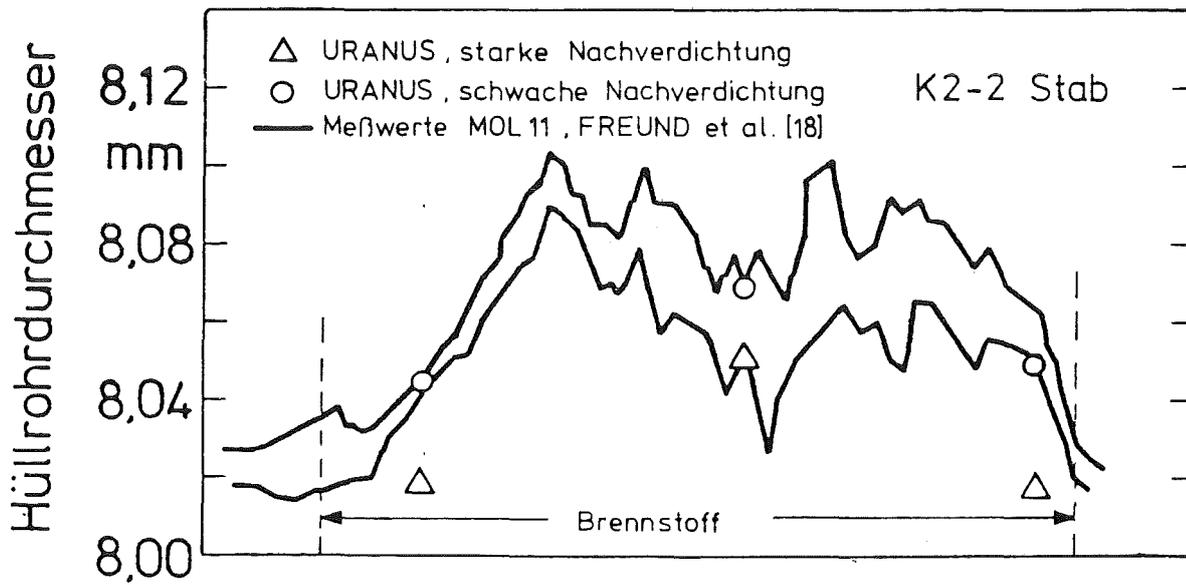


Abb. 12 : Hüllrohrdurchmesser des Prüflings K2-2 .

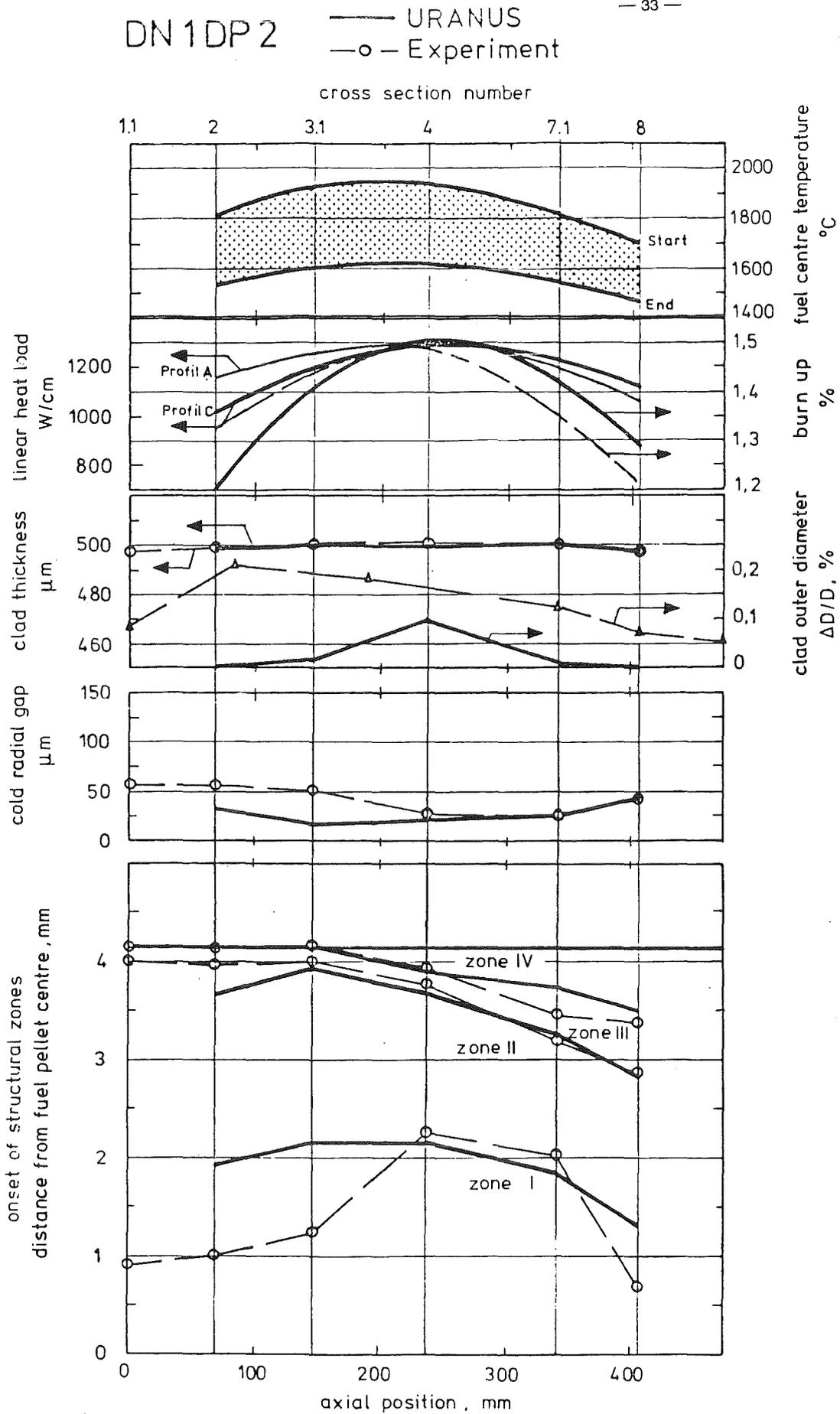


Abb. 13

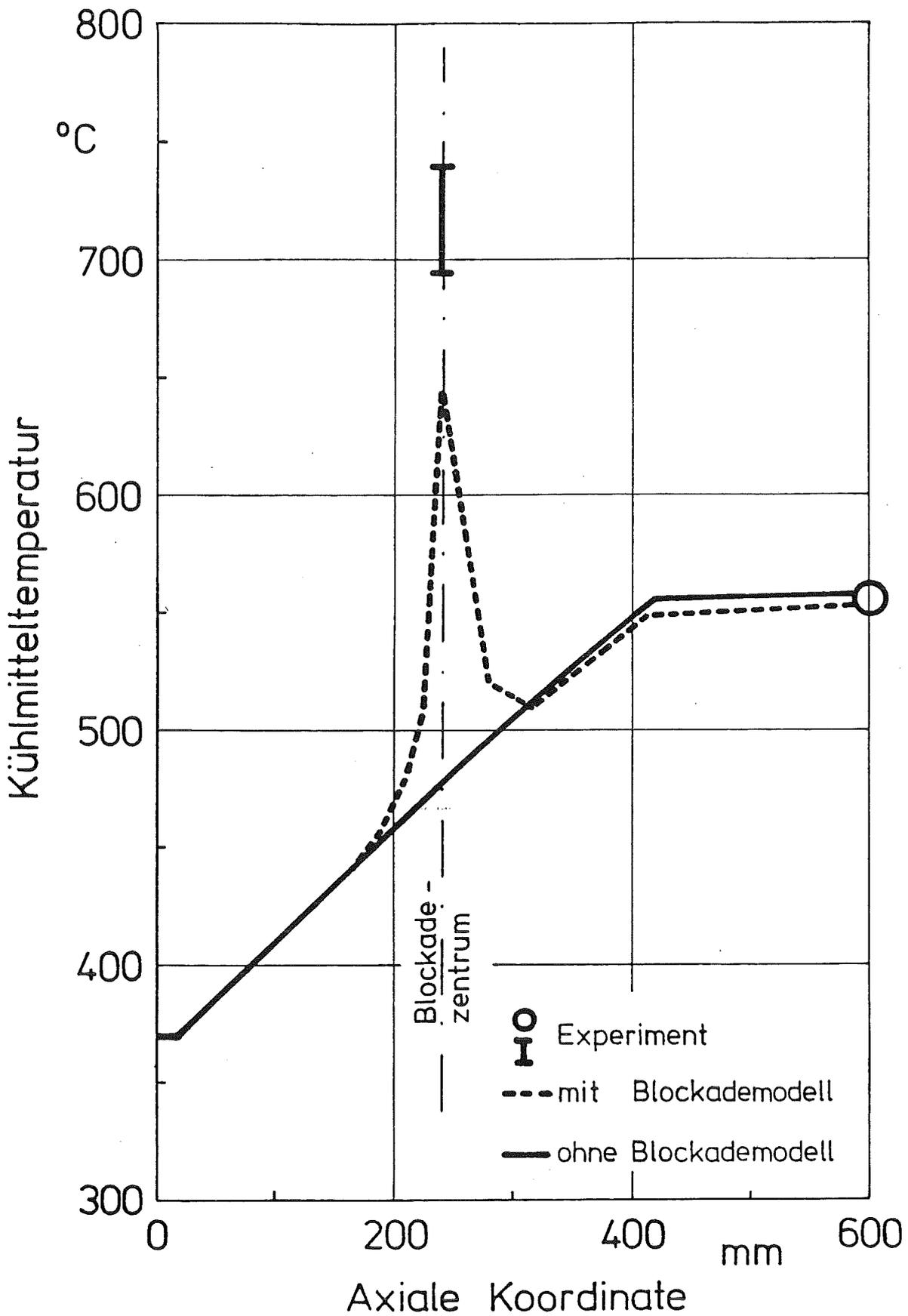


Abb. 14 : Axialer Verlauf der Kühlmitteltemperatur mit und ohne Blockadmodell für Experiment Mol-7C ; URANUS - Rechnung

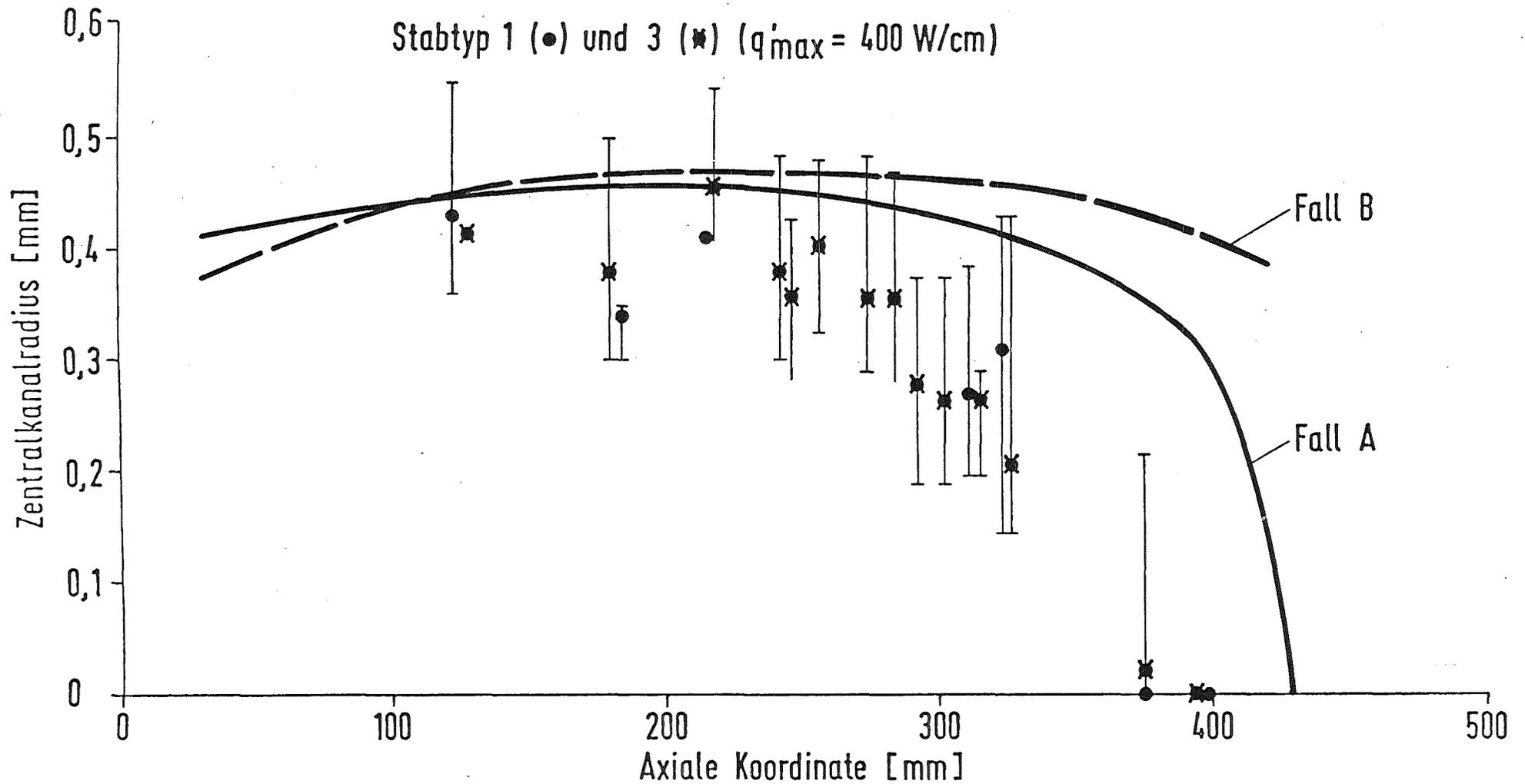


Abb.15 : Zentralkanalradius in Abhängigkeit von der axialen Koordinate
(Ende des 4. Zyklus ohne Transiente; Stabtyp 1 und 3)

2.) URANUS-Untersuchungen zu Kühlkanaltemperaturen für Mol 7c

von G. Böcking

Vortrag anlässlich des Statusberichtes des IRT
am 01.10.1981 in Karlsruhe

1. Einleitung

Im Folgenden wird über URANUS-Untersuchungen zu Kühlkanaltemperaturen für das Kühlmittel-Blockadeexperiment Mol 7c berichtet. Verbesserungen am Kühlmittelmodell des integralen Brennstabcodes URANUS /1/ durchzuführen war Bestandteil des erweiterten Arbeitsprogrammes des Zusammenarbeitsvertrages IRT-PSB. Dies war besonders in Hinsicht auf transiente Stabrechnungen von Interesse.

In Zusammenarbeit mit Herrn Laßmann wurde von uns ein Modell /2/ entwickelt, das sich inzwischen sowohl bei stationären, als auch bei transienten Rechnungen bestens bewährt hat. Insbesondere konnten von uns Untersuchungen zu LOF- und Blockadeexperimenten durchgeführt werden. Die dabei erzielten Ergebnisse stimmen sehr gut mit den experimentellen Werten, bzw. den von anderen Codes ermittelten Werten überein.

2. Kühlmittelgleichung

Ausgehend von der allgemeinen Kontinuitätsgleichung für eine eindimensionale Stromröhre und der vollständigen totalen eindimensionalen Energiegleichung kamen wir nach einigen Vereinfachungen zur Bilanzgleichung für das Kühlmittel. In dieser sind, axial und zeitlich variabel, Kühlkanalquerschnitt, Kühlmitteldruck, Kühlmittelmenge, volumenspezifische Leistungen, Wärmezufuhr und abfuhr und Wärmemengen, die durch zuströmendes Kühlmittel zugeführt werden, enthalten. Auf letztere sei noch einmal besonders hingewiesen, da bei der Behandlung der Blockadeexperimente zuströmendes Kühlmittel von großer Bedeutung ist und auch für sich ändernde Kühlmittelströme die Kontinuitätsgleichung erfüllt sein muß. Eine ausführliche Herleitung findet sich in /2/.

3. Blockademodell

Ebenfalls in Zusammenarbeit mit Herrn Laßmann wurde von uns ein parametrisches Modell URBLOC /3/ zur Beschreibung poröser Blockaden entwickelt. Dieses Blockademodell beschreibt den axialen Kühlmittelstrom an einem Stab mit einer porösen Blockade. Wichtig ist hierbei, daß dieses Modell ein rein parametrisches Modell ist. Die einzelnen Parameter wie die Restströmung durch die Blockade, sowie die Länge des Störungsbereichs vor und hinter der Blockade, müssen für unterschiedliche Geometrien jeweils neu an Hand von Versuchsergebnissen geeicht werden.

In Abb. 1 ist dargestellt, welches axiale Kühlmittelprofil wir z.B. für die Experimente Mol 7c/1-2 als Grundlage für unsere URANUS-Rechnungen ermittelt haben. Die Werte für diese Zeichnung wurden mit Hilfe des URANUS-Peripherieprogramms URBLOC ermittelt, in dem das Blockademodell implementiert ist. Es versteht sich dabei von selbst, daß die Behandlung der Kühlmittelhydraulik bei URANUS nicht mit der anspruchsvollerer Thermohydraulikcodes wie THESYS oder SABRE verglichen werden kann, da URANUS ein Brennstabcode ist, für den die Kühlmitteltemperatur immer nur eine Randbedingung zur Ermittlung der Verhältnisse im Stab sein kann.

4. Mol 7c

Im Folgenden möchte ich nun auf die Ergebnisse einiger Rechnungen zu den Versuchen der Experimentreihe Mol 7c /4,5/ eingehen. Bei den Mol 7c-Experimenten handelt es sich um transiente Blockadexperimente zum SNR300. Die Experimentalanordnung besteht aus einem 37-Stabbündel mit 30 aktiven Stäben und 7 Dummystäben (Abb.2). Dabei sind die aktiven Stäbe in 3 Reihen um einen Zentraldummy angeordnet. Etwa in der Mitte des Bündels befindet sich eine poröse Blockade, die die beiden inneren Stabreihen umfaßt und durch einen zusätzlichen Kühlmittelstrom aus dem Zentraldummy gekühlt werden kann. Zeitlich gesehen bestehen die Versuche aus einem stationären Teil von ca. 300 h und einem transienten Teil unterschiedlicher Länge. Während des stationären Teils des Versuchs wird die Blockade durch die Zusatzkühlung auf Kühlmittelintrittstemperatur herabgekühlt. Das Einleiten der

Transienten geschieht durch Abstellen dieser Zusatzkühlung. Auf Grund der Thermoelementmessungen und der umfangreichen Nachuntersuchungen in den "Heißen Zellen" steht fest, daß nach Abschalten der Zusatzkühlung das Kühlmittel in der Blockade verdampft, die Stäbe in der Blockade versagen und sich danach andere Geometrien bilden, die nach einiger Zeit wieder kühlbar werden.

Da unser Rechencode nur einzelne Stäbe, jedoch keine Stabbündel behandeln kann, wurden von uns drei repräsentative Stäbe des 37-Stabbündels ausgewählt (Abb.3). Es handelt sich dabei um zwei Stäbe der inneren Stabreihe, einmal mit, einmal ohne Thermoelement, und einen Stab der äußeren Stabreihe ohne Thermoelement. Auf den Stab mit Thermoelement, sowie den Stab der äußeren Stabreihe wird im Folgenden nicht näher eingegangen, da nach unseren Rechnungen der Stab der inneren Stabreihe ohne Thermoelement der am höchsten belastete Stab ist.

Auf Abb.4 sind die von uns verwendete Diskretisierung sowie das axiale Leistungsprofil dargestellt. Dabei wurde im Bereich der Blockade eine feine Diskretisierung gewählt, um eine Vergleichsmöglichkeit zu den im Versuch gemessenen Werten zu haben.

Unserer Rechnung zu Mol 7c liegt, wie bereits erwähnt, das folgende axiale Kühlmittelprofil zu Grunde (Abb.1). Im Blockadebereich liegt danach eine Restströmung von ca. 10% vor, die sich aus Temperaturmessungen beim ersten Versuch ergeben. Für den stationären Teil des Experiments wird ein zusätzlicher Kühlmittelstrom angenommen, der die Blockade nahezu auf Kühlmittelintrittstemperatur herabkühlt. Mit diesen Vorgaben ergaben sich für Mol 7c folgende Ergebnisse; zunächst einige axiale Kühlmitteltemperaturprofile für verschiedene Zeitpunkte (Abb.5):

Beachten Sie bitte den unterschiedlichen Maßstab. Die roten Punkte stellen Thermoelementmessungen dar.

- a) Im Stationären Zustand steigt die Kühlmitteltemperatur nahezu linear bis zur Blockade an. Im Bereich der Blockade sinkt die Temperatur durch die Zusatzkühlung beinahe auf Eintrittstemperatur ab, um dann hinter der Blockade wieder anzusteigen.

- b) Nach Einsetzen der Transienten steigt die Temperatur in der Blockade an und
- c) erreicht nach einiger Zeit die Siedetemperatur.
- d) Es entsteht nun eine Dampfblase, die sich vom oberen Rand der Blockade nach unten ausbreitet. Nach unseren Rechnungen ergeben sich danach stationäre Verhältnisse.

Auf Abb.6 sieht man den Einfluß der Kühlmitteltemperatur auf den Brennstoff. Die obere Linie zeigt jeweils die Zentraltemperatur, die untere die Kühlmitteltemperatur und die mittlere die Brennstoffoberflächentemperatur. Beachten Sie auch hier bitte den unterschiedlichen Maßstab.

- a) Im stationären Fall erkennt man deutlich die Temperaturabsenkung im Brennstoff im Bereich der Blockade.
- b) Der Temperaturanstieg des Kühlmittels wirkt sich zunächst durch die thermische Trägheit des Brennstoffs auf die Zentraltemperatur nicht aus.
- c) Nach einiger Zeit ist die Temperaturabsenkung im Bereich der Blockade ausgeglichen,
- d) so daß, wenn nach Einsetzen des Siedens im Kühlmittel, wenn der Stab als nahezu adiabat betrachtet wird, die Brennstoffzentraltemperatur steil ansteigt.

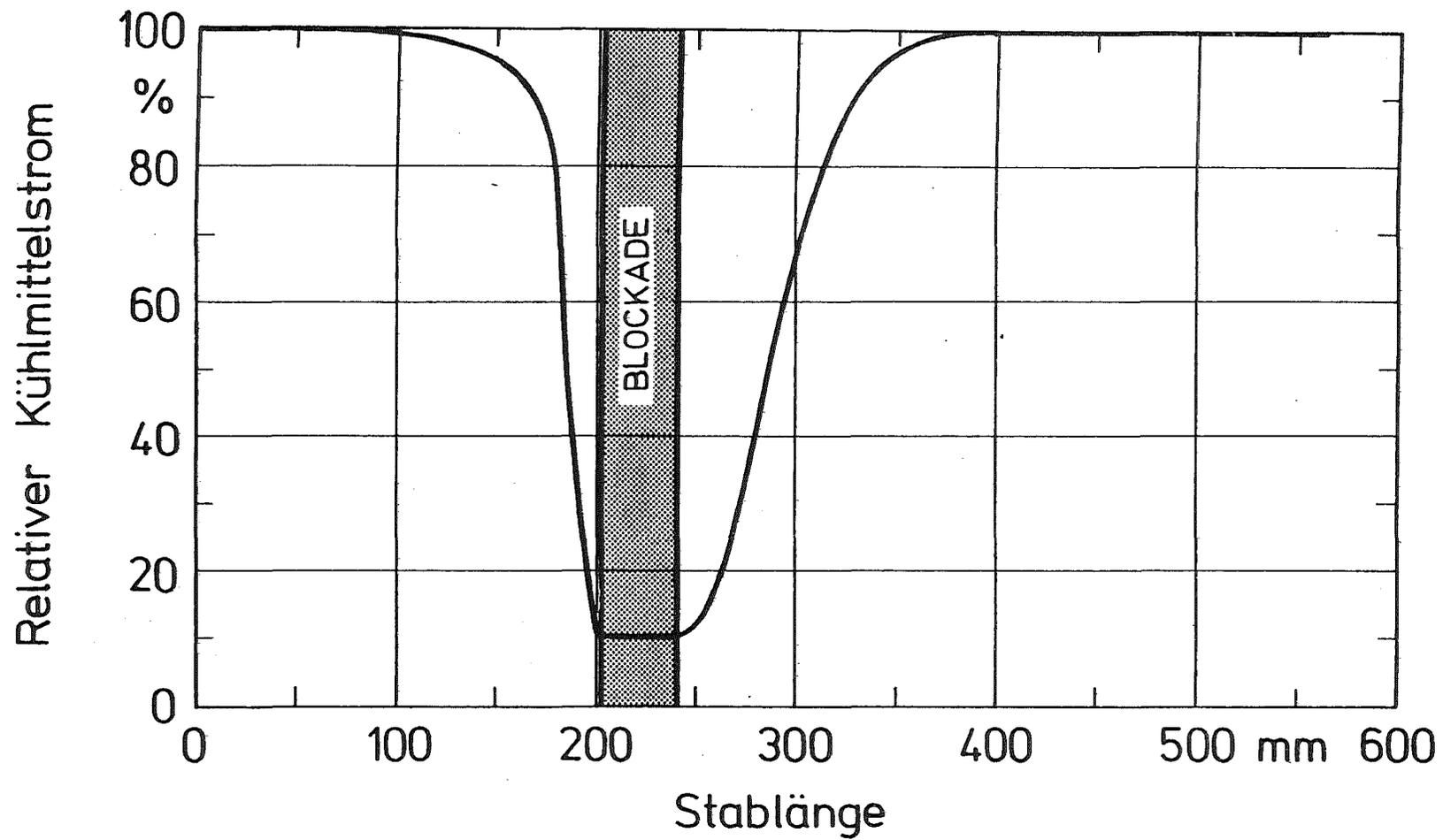
Auf der Abb.7 wird der Meßschrieb eines Thermoelements in der Blockade mit zwei URANUS-Rechnungen verglichen. Die gezackte Linie stellt dabei den Ausschrieb des Thermoelements dar, die darüberliegende Linie eine URANUS-Rechnung, bei der die Wärmeabfuhr in das Strukturmaterial der Blockade nicht berücksichtigt wurde. Der Stab mit dem Kühlmittel wird als adiabat betrachtet. Bei der zweiten Rechnung wurde diese Wärmeabfuhr in das Strukturmaterial berücksichtigt. Es zeigt sich, daß diese Rechnung sehr viel besser mit dem beim Versuch gemessenen zeitlichen Temperaturgradienten übereinstimmt. Gerade diese Übereinstimmung muß als einer der großen Erfolge unseres Rechenprogramms in Bezug auf Mol 7c gesehen werden.

5. Zusammenfassung

Abschließend kann gesagt werden, daß die Kühlmitteltemperaturen, die für uns eigentlich nur eine Randbedingung zur Berechnung der Verhältnisse im Brennstoff darstellen, bis zum Einsetzen des Siedens von uns sowohl im axialen als auch im zeitlichen Verlauf gut ermittelt werden. Für den Bereich des Siedens, sowie eine eventuellen Kühlung der Blockade durch Natriumdampf, wird demnächst ein Verdampfungsmodell eingesetzt werden, das die Verdampfungsenthalpie des Kühlmittels berücksichtigt und eine Berechnung der Temperaturen des Kühlmitteldampfes ermöglicht. Dieses Modell wird es uns unter Umständen auch ermöglichen, die Verhältnisse in Siedewasserreaktoren zu berechnen. Detaillierte Untersuchungen zum Brennstoffverhalten für Mol 7c bauen auf diesen Grundlagen auf. Sie wurden zum Teil bereits begonnen bzw. sind in Vorbereitung.

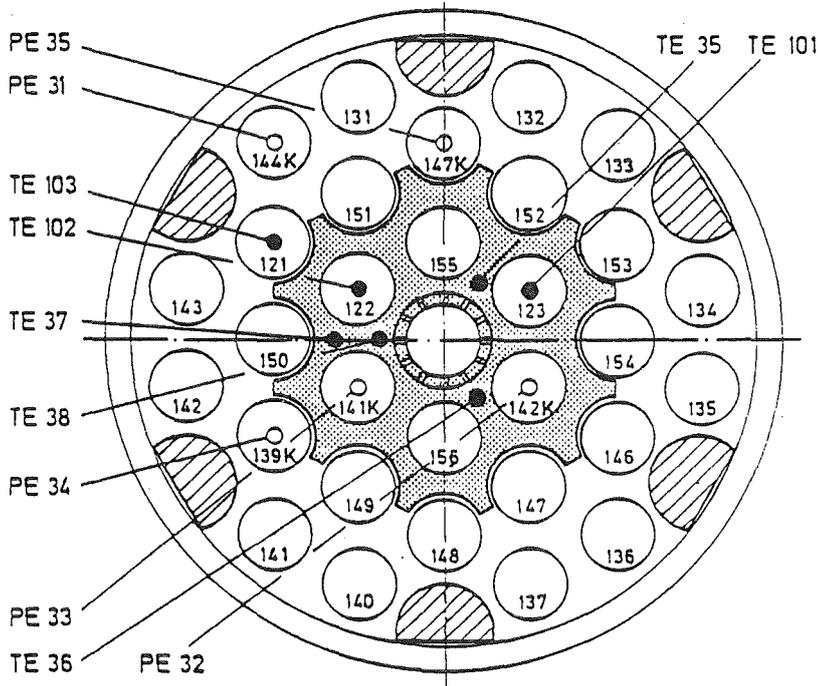
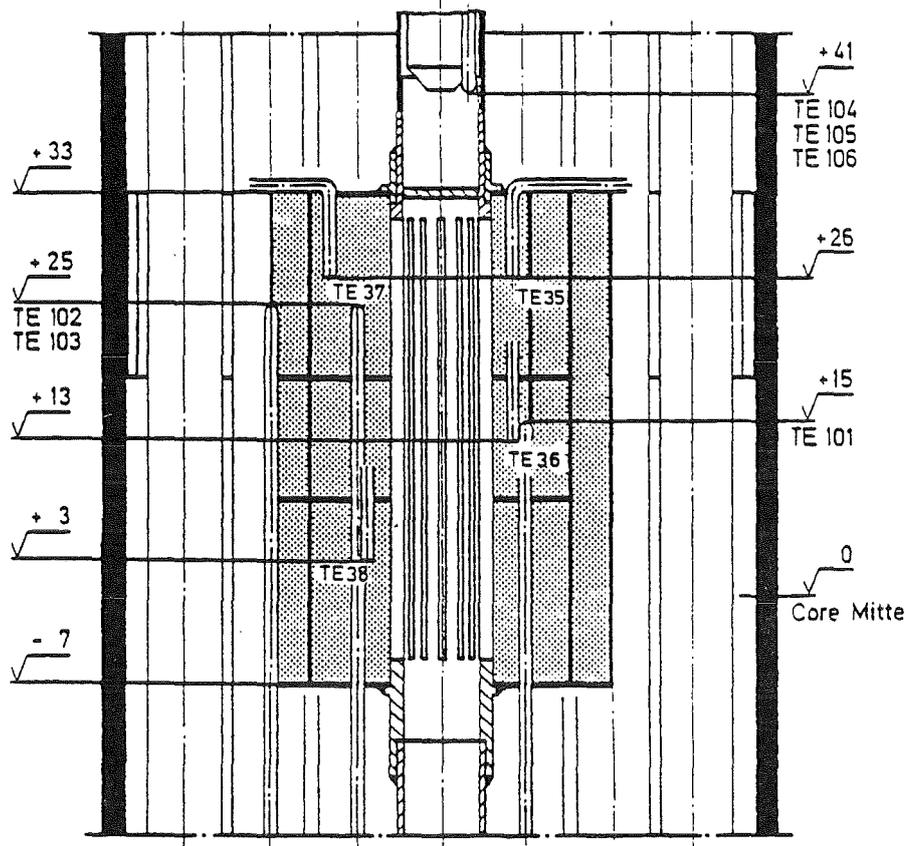
Literatur

- /1/ K. Laßmann, URANUS - a computer programme for the thermal and mechanical analysis of the fuel rods in a nuclear reactor, Nucl. Eng. Des., Vol 45/2, p. 325-342, February 1978
- /2/ K. Laßmann, T. Preußner, An advanced method for transient temperature calculation in fuel element structural analysis, Bericht RTDA-65-81, Veröffentlichung in Vorbereitung
- /3/ K. Laßmann, T. Preußner, G. Böcking, Ein Kühlmittel-Blockademodell für eine quasi-zweidimensionale Brennstabbeschreibung, Bericht RTDA-66-81, Veröffentlichung in Vorbereitung
- /4/ J. Aberle, W. Kramer, A. Rahn, K. Schleisiek, L. Schmidt, Unveröffentlichter Bericht KfK, 1978
- /5/ J. Aberle, W. Kramer, K. Schleisiek, A. Rahn
Unveröffentlichter Bericht KfK, 1979
- /6/ G. Karsten, W. Kramer, K. Schleisiek, Material Relocation Phenomena in the in-Pile Blockage Experiments Mol 7c, Ninth Meeting of the Liquid Metal Boiling Working Group (LMBWG) Rome, 4th - 6th June, 1980



Experiment Mol 7C/2
URANUS - Rechnung

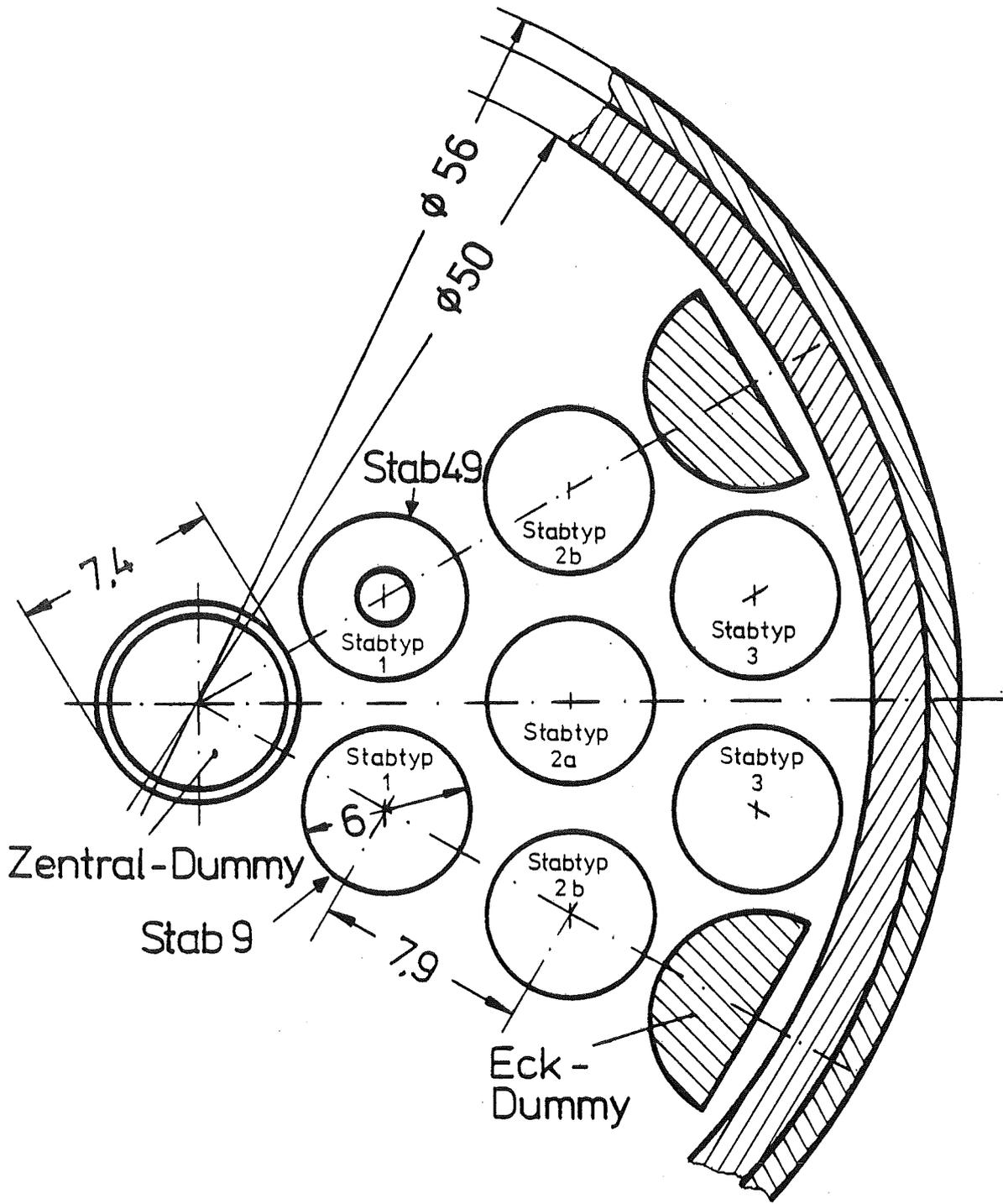
Abb.1 : Kühlmittelstrom nach dem URBLOC-Modell ;
10 % Blockadekühlung , axiale Asymmetrie .



- TE 35 - TE 38 Thermoelemente in der Blockade
- TE 101 - TE 103 Zentraltemperatur - Thermoelement im Brennstab
- TE 104 - TE 106 HT - Thermoelemente im Zentraldummy
- PE 31 - PE 35 Brennstab - Innendruck - Überwachung

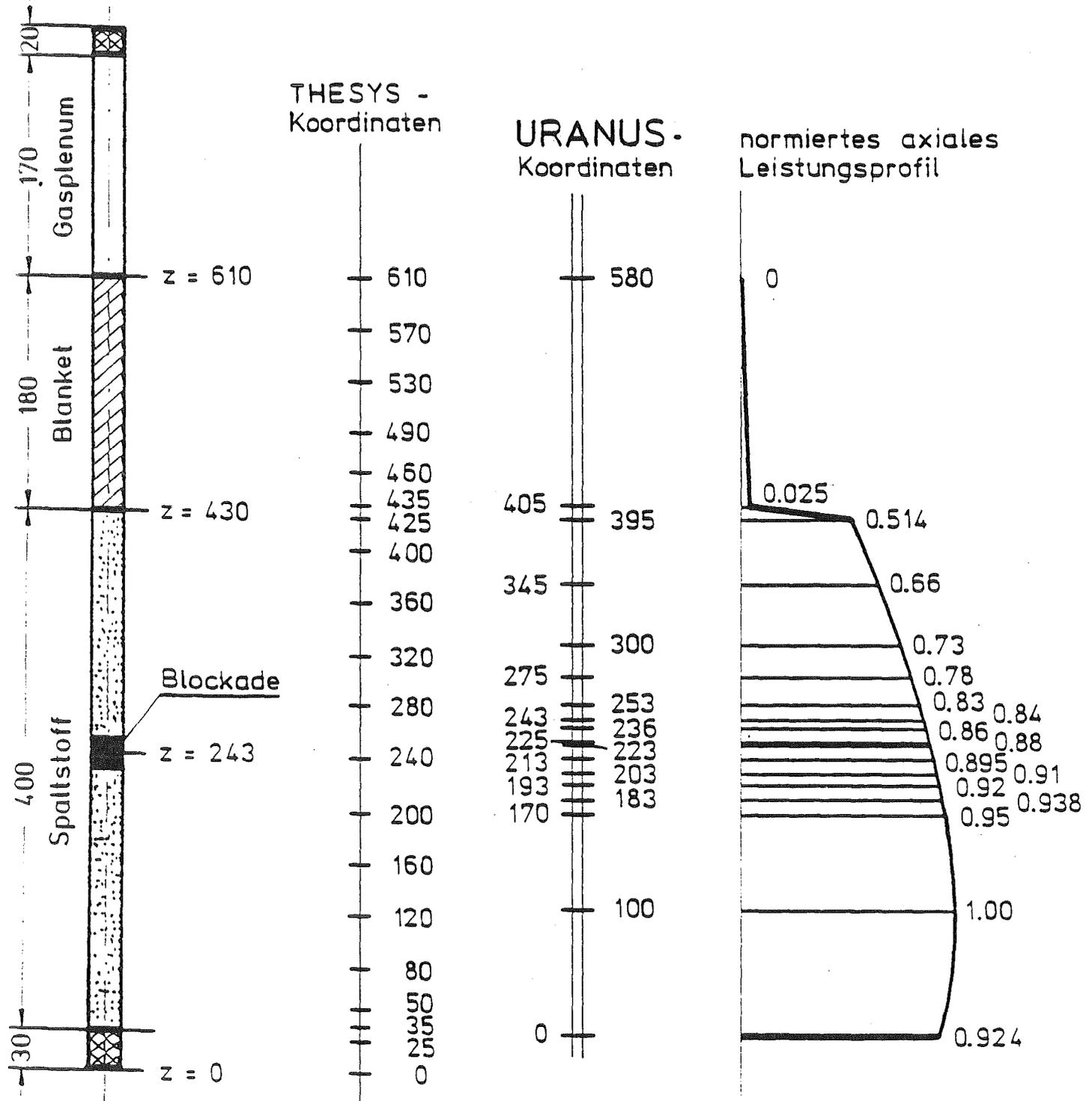
Mol 7C/1

Abb. 2 : Experimentalanordnung Mol 7C/1
(entnommen aus /6/)



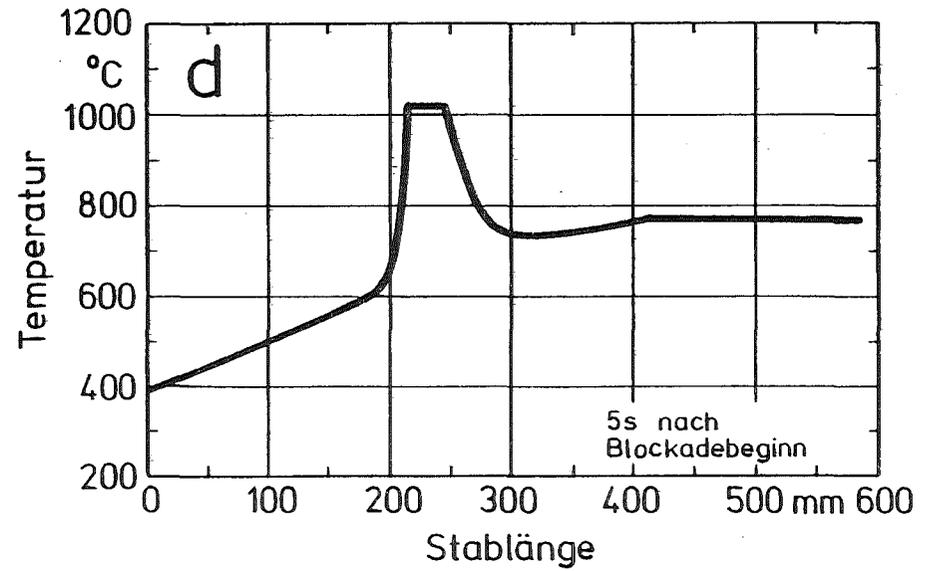
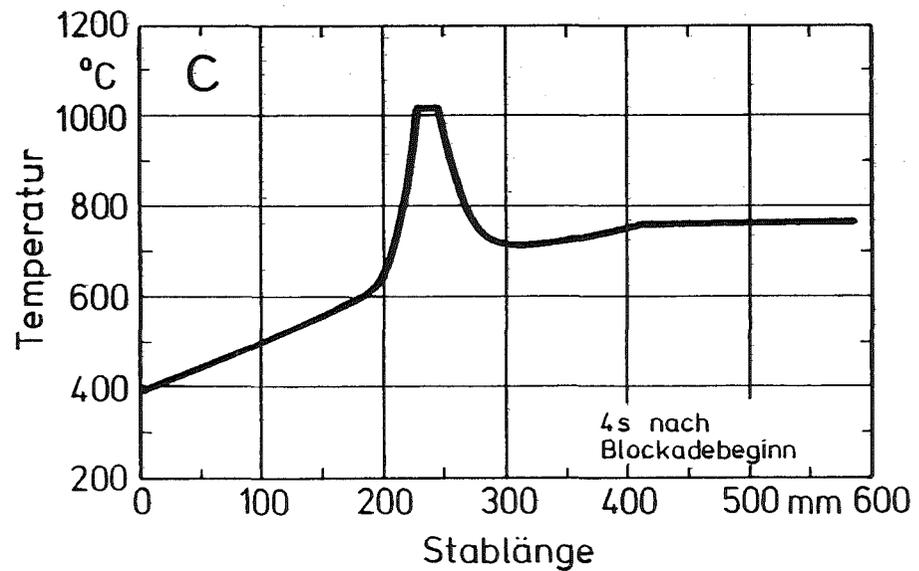
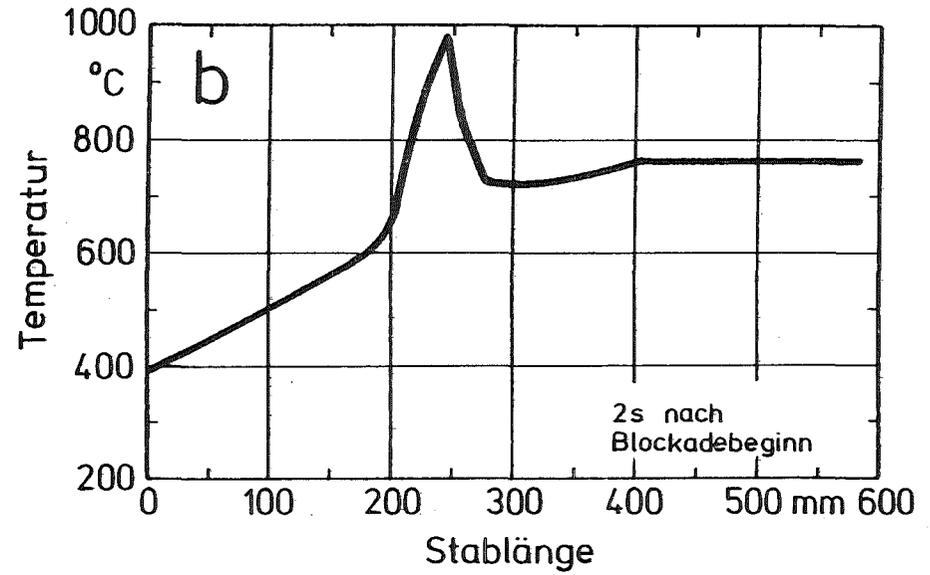
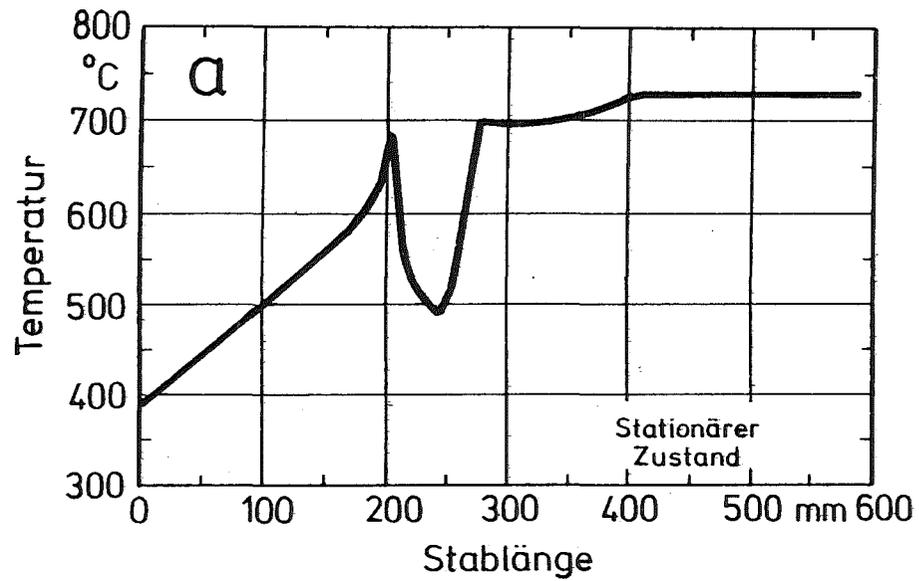
Experiment Mol 7C/1 | Abb.3: Experimentanordnung Mol 7C/1

Brennstab -
Abmessungen



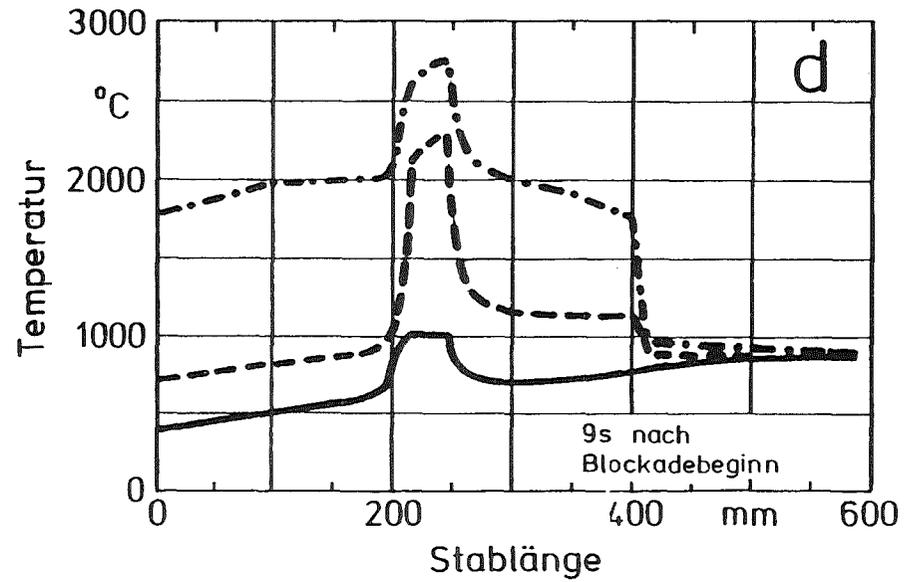
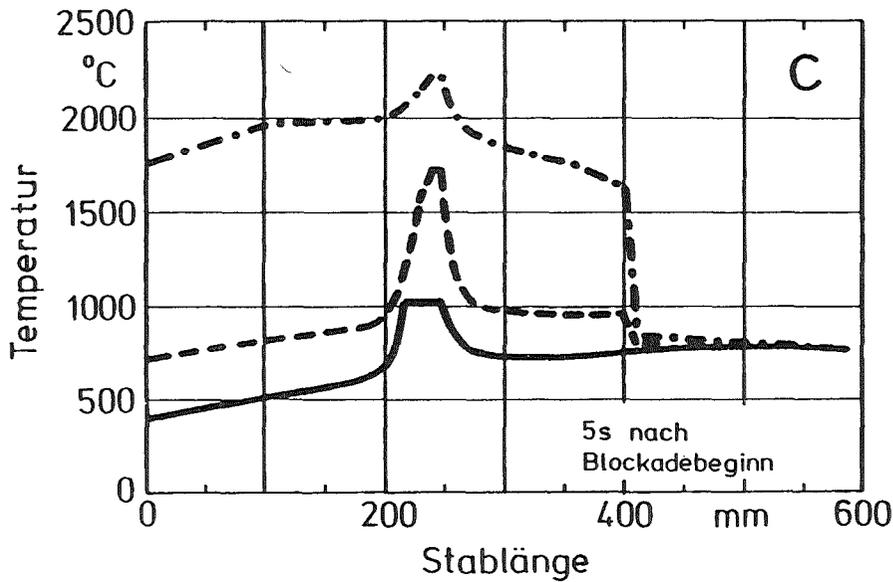
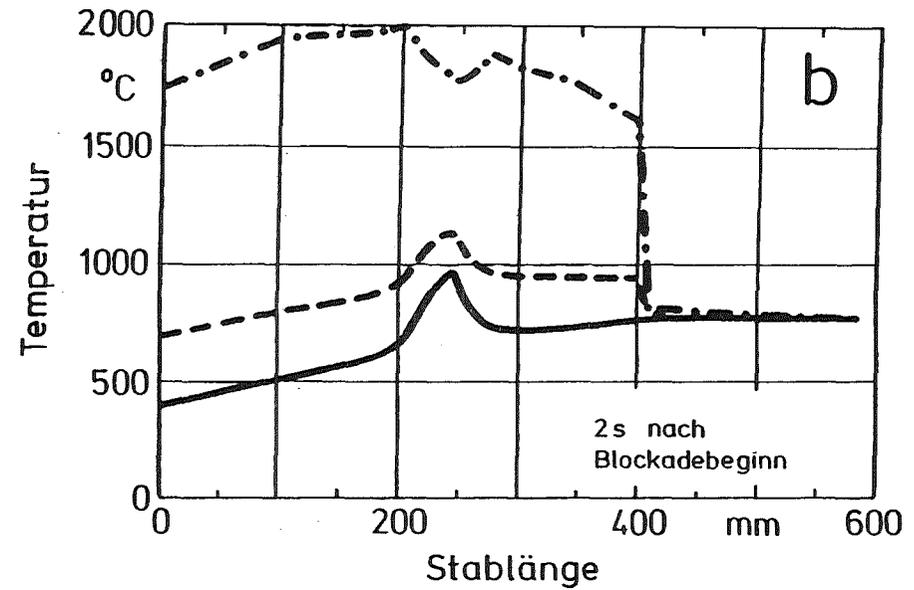
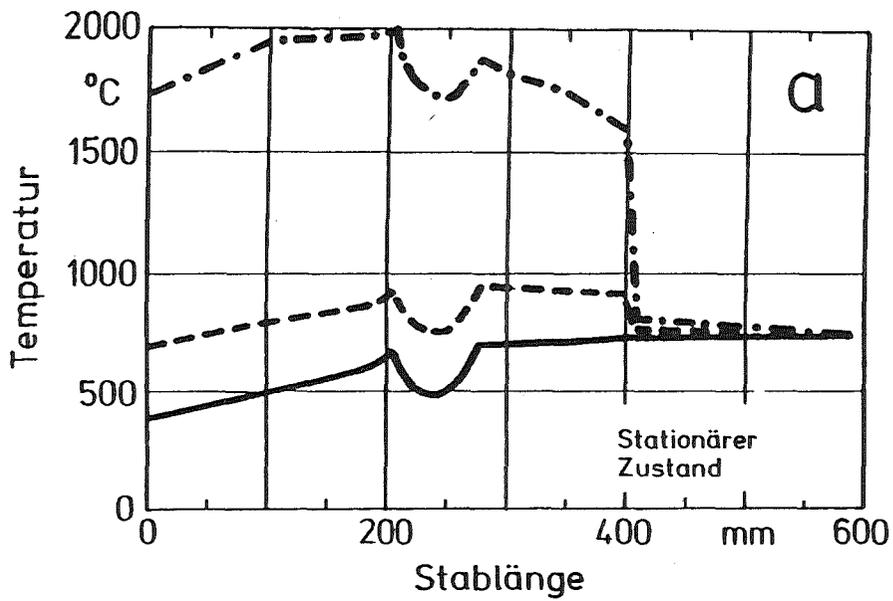
Mol. 7C/2

Abb. 4 : Axiale Geometrie und
Leistungsprofil



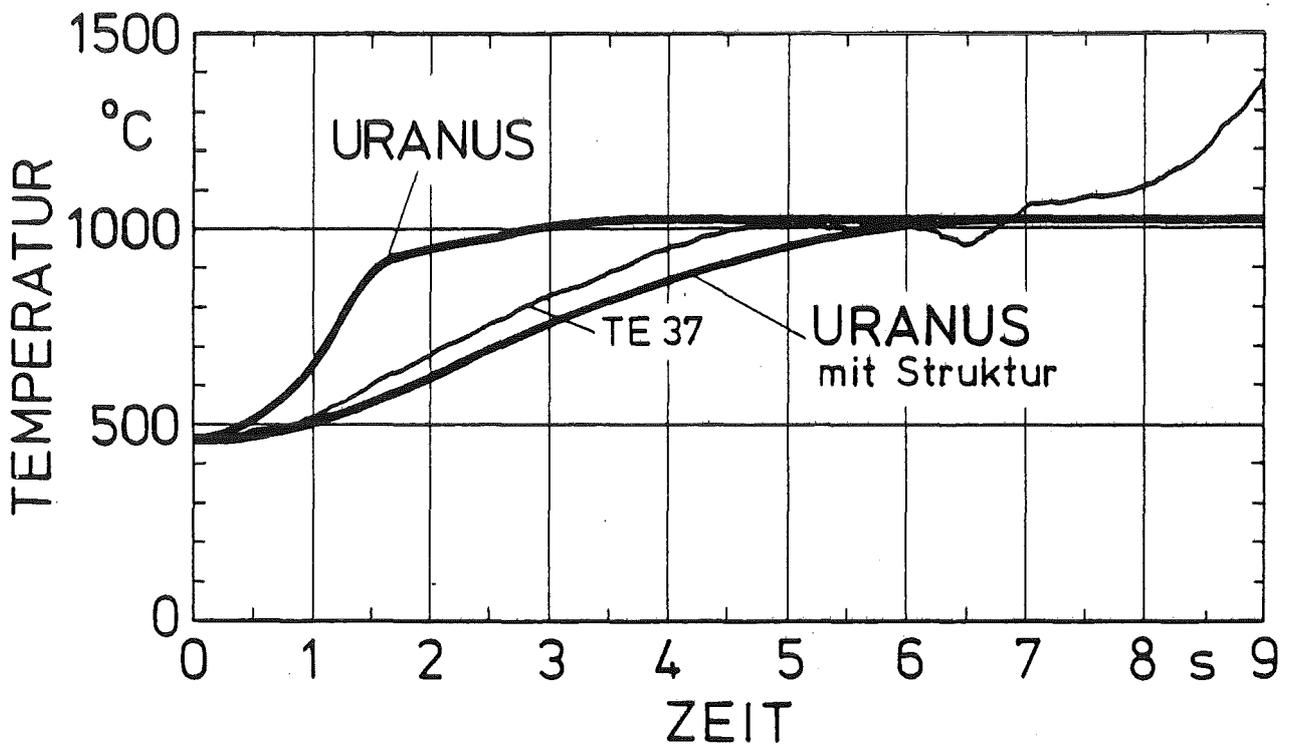
Experiment Mol 7C/2
URANUS-Rechnung

Abb. 5 : Kühlmitteltemperatur zu 4 ausgesuchten
Zeitpunkten



Experiment Mol 7C/2
URANUS-Rechnung

Abb. 6 : Zentraltemperatur (---), Brennstoffrandtemp. (---) und Kühlmitteltemp. (—) zu 4 ausges. Zeitpunkten



Experiment Mol 7C/2

Abb.7 : Zeitlicher Verlauf der Kühlmitteltemperatur, URANUS gegen Experiment

3. Untersuchungen zur transienten Version von URANUS

von G. Kaltenthaler

Vortrag anlässlich des Statusberichtes des IRT am 01.10.1981
in Karlsruhe

Ein wesentliches Klassifizierungsmerkmal zwischen Brennstab-rechenprogrammen, die zur thermischen und mechanischen Auslegung von Brennstäben entwickelt wurden, ist die Unterscheidung in "steady-state" und "transiente" Codes.

Steady state Codes können ausschließlich quasi-stationäre Bedingungen beschreiben und sind deshalb in der Regel zur Beurteilung von Störfallexperimenten völlig ungeeignet. Zur Analyse sehr schnell ablaufender Belastungsänderungen sind transiente Codes erforderlich, die eine instationäre Temperaturberechnung ermöglichen, und die Verwendung von Materialdaten und Modellen für nicht konstante Lastbedingungen erlauben.

Die seit zwei Jahren eingesetzte transiente Version URANUS-T ging aus dem einst von LASSMANN /1,2/ entwickelten TEMPT-System hervor, das bereits vor einigen Jahren im Kernforschungszentrum Karlsruhe zum Einsatz kam. URANUS-T ermöglicht die Beschreibung sowohl stationärer, quasi-stationärer als auch transienter Vorgänge. Sowohl das Verhalten eines Brennstabes, als das des Kühlmittels sowie einer an das Kühlmittel möglicherweise angrenzenden Struktur kann zuverlässig und ohne numerische Probleme beschrieben werden. Darüberhinaus ermöglicht URANUS die Behandlung von Kühlmittelverlust-Störfällen (LOF) sowie der Kühlmittelblockade.

Parallel zur Entwicklung des Codes wurden - was eigentlich selbstverständlich ist - fortlaufende Untersuchungen zur Kontrolle und Verifizierung des Codes durchgeführt. Über diese nunmehr abgeschlossenen Untersuchungen soll hier berichtet werden.

Besonderen Stellenwert für die Entwicklung und Verifizierung von URANUS-T wurde stets den folgenden Punkten eingeräumt:

- 1) Numerik und Stabilität des in URANUS verwendeten Verfahrens
- 2) Einordnung des Verfahrens in andere bekannte Verfahren
- 3) Vergleich von Lösungen aus URANUS mit analytischen Lösungen
- 4) Aktualisierung und Verfeinerung der in URANUS verwendeten Modelle
- 5) Erweiterung der Einsatzmöglichkeiten und Vielseitigkeit von URANUS
- 6) Vergleichsrechnungen mit URANUS zu anderen bekannten transienten Codes

Bevor nun über die an der transienten Version durchgeführten Untersuchungen berichtet wird, werden zum besseren Verständnis zunächst die allgemeinen Grundzüge des in URANUS verwendeten Ansatzverfahrens zur instationären Temperaturberechnung /1,2,3/ aufgezeigt.

Vor der mathematischen Formulierung des Problems wird der Brennstab sowohl in axialer als auch in radialer Richtung diskretisiert, wie es in Abb.1 und Abb.2 dargestellt ist. Sodann wird, von der allgemeinen Wärmeleitungsgleichung ausgehend, eine diskrete Zone i betrachtet. Durch Einführen einer zeitabhängigen fiktiven Leistungsdichte erhält man eine Ansatzfunktion /2/ für die Temperatur einer Zone i ; diese ist vom Typ der stationären Lösung. Einsetzen dieser Funktion in die Wärmebilanzgleichung zweier benachbarter Zonen i und $i+1$ und die Verwendung eines Zeitansatzes führt mit den entsprechenden Randbedingungen auf ein gemischt implizit-explizites, tri-diagonales Gleichungssystem. Dieses kann anschließend mit einem speziellen Gauß-Algorithmus gelöst werden.

Entscheidender Vorteil des Ansatzverfahrens ist es, daß für stationäre Bedingungen stets die exakte Lösung erzielt wird, und daß auch für instationäre Rechnungen die Form des radialen Temperaturprofiles wesentlich besser als mit anderen Verfahren angenähert werden kann. Dies zeigt sich u.a. in sehr guten Ergebnissen auch bei grober Diskretisierung.

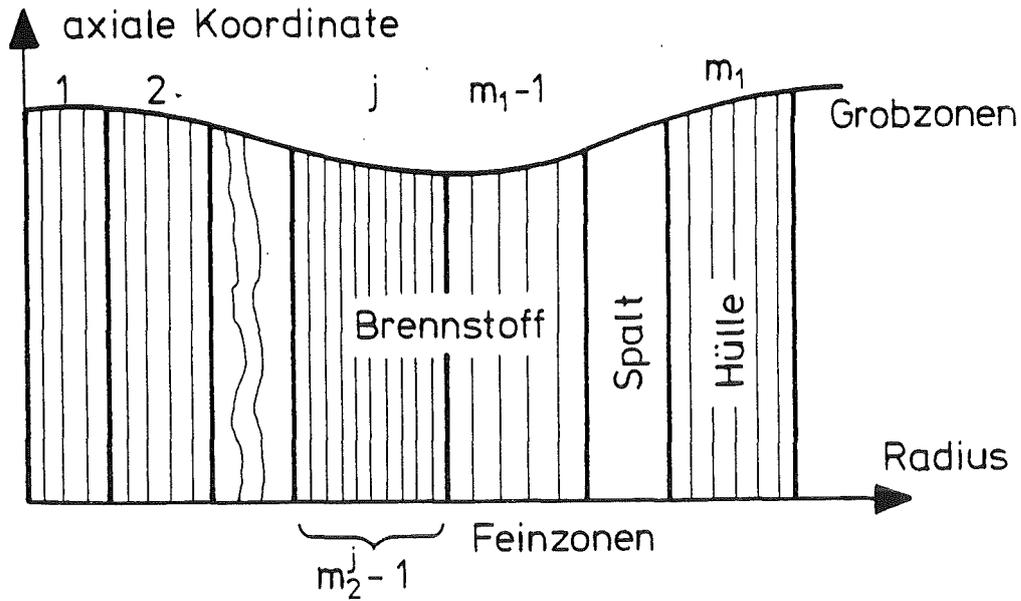


Abb.1 Radiale Diskretisierung im Schnitt l

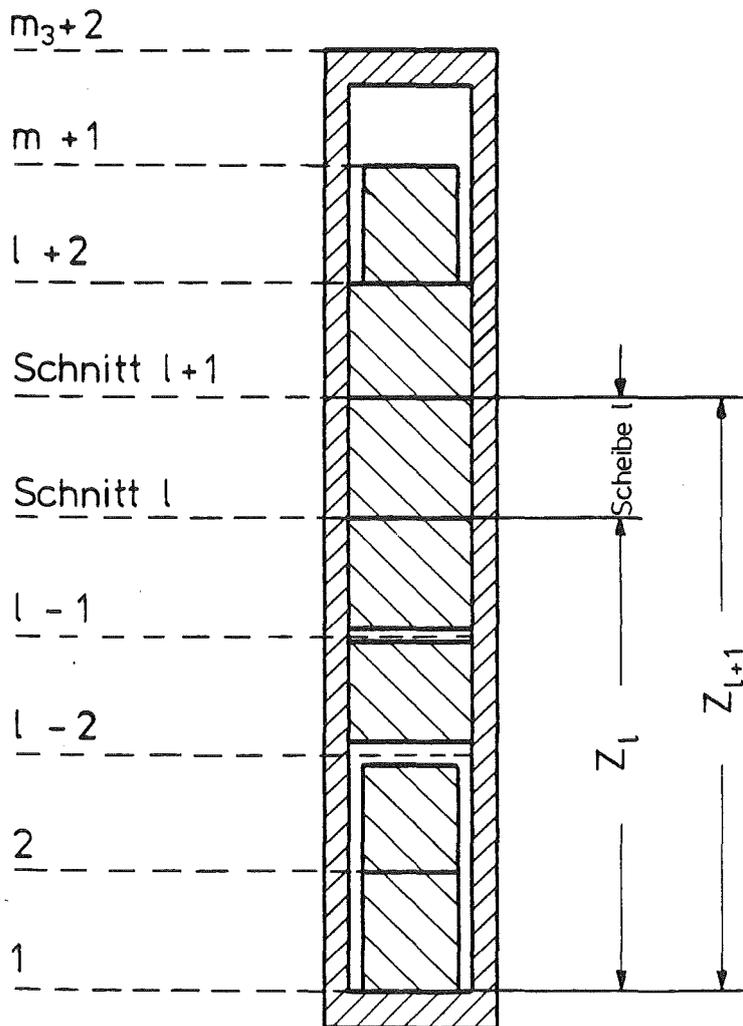


Abb.2 Geometrie des Brennstabes

Da innerhalb einer diskreten Zone i die Temperatur sowie die Werkstoffkennwerte im allgemeinen weder räumlich noch zeitlich konstant sind, werden für diese Größen sowohl räumliche als auch zeitliche Mittelungsvorschriften definiert.

Mittelungsvorschriften

räumlich: $\bar{u} = w_{\text{innen}}^i u_{\text{innen}}^i + w_{\text{außen}}^i u_{\text{außen}}^i$

$$\text{mit } 0 \leq w_{\text{innen}}^i \leq 1$$

$$w_{\text{innen}}^i + w_{\text{außen}}^i = 1$$

zeitlich: $\tilde{u}^i = \alpha \bar{u}_{n+1}^i + (1-\alpha) \bar{u}_n^i$

$$\text{mit } 0 \leq \alpha \leq 1$$

Mittels der räumlichen Wichtfaktoren, wie hier am Beispiel der Temperatur dargestellt, können nicht nur Aussagen für die Zonenränder, sondern auch für jeden beliebigen Punkt innerhalb einer Zone gemacht werden.

Durch die Wahl des zeitlichen Wichtfaktors α erhält man für:

- $\alpha = 0$ einen expliziten Ansatz
- $\alpha = 1$ einen impliziten Ansatz
- für $\alpha = 0,5$ einen zeitzentrierten Ansatz

Der zeitzentrierte Ansatz entspricht dem z.B. in MARSAL /4/ benutzten Ansatz nach CRANK-NICOLSON.

Ziel der im folgenden beschriebenen ersten Untersuchung war die Kontrolle und Überprüfung des Ansatzverfahrens nach LASSMANN /1/. Durch Vergleich dieses Verfahrens mit einem numerischen Lösungsverfahren nach CRANK-NICOLSON /4/ sollte das Ansatzverfahren auf zuverlässige Arbeitsweise überprüft werden. Das CRANK-NICOLSON-Verfahren nimmt eine Sonderstellung unter den Differenzenverfahren ein - der Diskretisationsfehler verringert sich auf $O[(\Delta t_{n+1})^2 + (\Delta x)^2]$ gegenüber $O[(\Delta t_{n+1}) + (\Delta x)^2]$ bei impliziter Anwendung des Verfahrens - und wird häufig zur Lösung partieller parabolischer Differentialgleichungen eingesetzt.

Bei Anwendung des Differenzenverfahrens nach CRANK-NICOLSON auf die instationäre Wärmeleitungsgleichung erhält man im betrachteten Fall ebenfalls ein tridiagonales Gleichungssystem (Kaltenthaler /5/). Ein Koeffizientenvergleich ergab, daß, nach Anpassung der in der Herleitung beider Verfahren getroffenen Voraussetzungen, sich die Koeffizienten des Ansatzverfahrens vollkommen in die nach CRANK-NICOLSON überführen lassen.

Das CRANK-NICOLSON-Verfahren wurde für einfache Fälle programmiert, so daß nach dem analytischen Vergleich auch ein numerischer Vergleich vorgenommen werden konnte.

Zunächst wurde eine Betrachtung im stationären Bereich vorgenommen, und die Ergebnisse beider Verfahren mit der analytischen Lösung verglichen. Es lagen dieser Rechnung konstante Stoffwerte zugrunde sowie eine Leistungsgeschichte, wie sie Abb.3 zeigt.

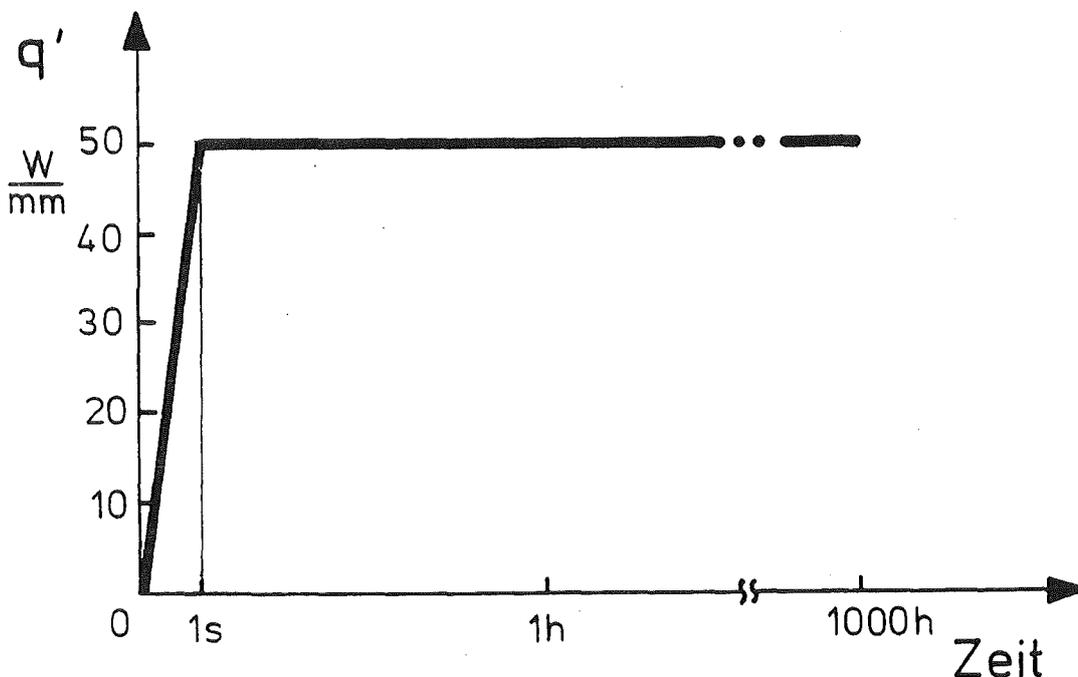


Abb.3 Leistungsgeschichte für die Vergleichsrechnung

Im stationären Bereich lag eine radiale Temperaturverteilung zwischen ca. 2000 °C innen und 400 °C außen vor. Unabhängig von der gewählten Diskretisierung betragen die maximalen Abweichungen der Ergebnisse beider Verfahren weniger als 0,5 °C und waren mit der analytischen Lösung praktisch identisch (vgl. Tabelle 1).

R mm		0	1	2	3
	anal.Lös.	1991,55	1892,08	1593,66	1096,30
v [°C]	LAS	1991,44	1891,98	1593,59	1096,27
	CRN	1991,63	1892,15	1593,72	1096,33
R _{b,a} = 4 mm		v _k = 400 °C		λ = 0,0025	
q' = 40 $\frac{W}{mm}$		t = 1h		$\frac{W}{mm^2 \cdot °K}$	

Tabelle 1: Vergleich der Ergebnisse zur analytischen Lösung im stationären Fall

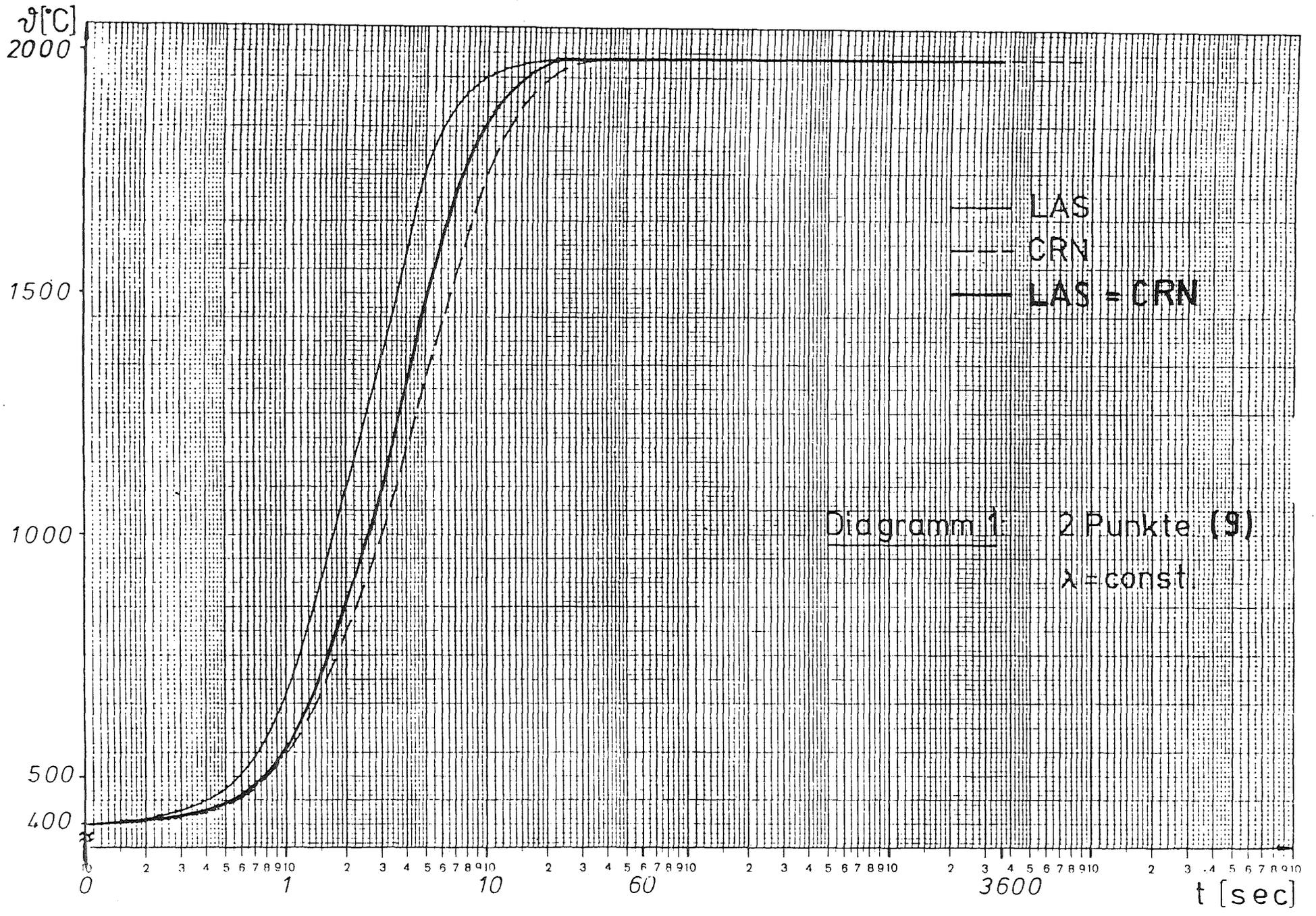
Analytische Lösung für Vollpellet im stationären Fall:

$$v(R) = \frac{q'''}{4\lambda} (R_a^2 - R^2) + v_k$$

$$\text{mit: } q''' = \frac{q'}{\pi R_a}$$

Im Bereich des transienten Leistungsanstieges traten hingegen in Abhängigkeit von der Anzahl der betrachteten Punkte zum Teil erhebliche Unterschiede auf, die jedoch mit hinreichend feiner Diskretisierung verschwanden.

Diagramm 1 zeigt die Zentraltemperatur des eben beschriebenen Stabes während der Leistungstransienten und dem folgenden stationären Teil. Für eine extrem grobe Diskretisierung von nur 2 Punkten im Brennstoff ergeben sich Abweichungen während der Rampe, die auf die unterschiedliche Wichtung für die Leistungsdichte zurückzuführen sind.



Wählt man hingegen eine feinere Diskretisierung von beispielsweise 9 Punkten, so decken sich die Ergebnisse ziemlich genau, wie man an der mittleren Kurve erkennen kann.

Aus der Identität der Ergebnisse beider Verfahren bei hinreichend feiner Diskretisierung konnte geschlossen werden, daß das Ansatzverfahren richtig arbeitet.

Ziel einer weiteren Untersuchung war es, eine Aussage darüber zu gewinnen, wie das Ansatzverfahren in die bekannten Verfahren

	Methode der finiten Elemente	FEM
und	Finit-Differenzenverfahren	FDM

einzuordnen ist.

Bei der Methode der finiten Elemente stellt sich eine Variationsaufgabe, bei der ein zu minimierendes Integral das approximierte Temperaturprofil als Lösung liefert.

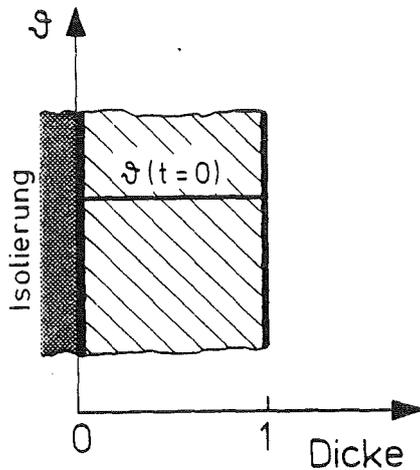
Das Finit-Differenzenverfahren hingegen approximiert die Ableitungen der zu lösenden Differentialgleichung durch Differenzenquotienten.

Nach Diskretisierung des Brennstabes kann das Problem in allen drei Fällen auf ein Gleichungssystem überführt werden, dessen Koeffizientenmatrix Bandstruktur besitzt. Dieses ist mittels bekannter numerischer Verfahren lösbar und liefert das gesuchte Temperaturprofil durch Approximation an den Gitterpunkten.

In der Literatur sind bereits verschiedentlich Vergleiche zwischen der Methode der finiten Elemente und dem Finit-Differenzenverfahren angestellt worden, LASSMANN /6/.

Nach MYERS /7/ liefert die Methode der finiten Elemente im Vergleich zur exakten Lösung etwas höhere Werte, das Finit-Differenzenverfahren hingegen etwas kleinere. Als Begründung wird das Über- bzw. Unterschätzen der geometrischen Eigenwerte angegeben. Mit zunehmender Anzahl von Elementen nähern sich nach MYERS die Ergebnisse beider Verfahren gegenseitig an.

In einer anderen Literaturstelle war eine Studie von EMERY, SUGIHARA, JONES /8/ beschrieben. Sie untersuchten das Abklingverhalten der Temperatur an einer ebenen Platte mit isolierter Rückwand (vgl. Abb.4) und berechneten diesen Vorgang zum einen nach der Methode der finiten Elemente, als auch nach dem Finit-Differenzenverfahren. Anhand von Abb.5 - gezeigt sind die Temperaturen zu einem festen Zeitpunkt über dem Abstand von der isolierten Plattenseite - können ihre Ergebnisse diskutiert werden.



Randbedingungen für
Zeiten $t > 0$

links : $\frac{\partial \theta}{\partial x} (x=0, t) = 0$

rechts : $\theta (x=1, t) = 0$

Abb. 4 Aufbau der von EMERY/SUGIHARA/JONES untersuchten Platte

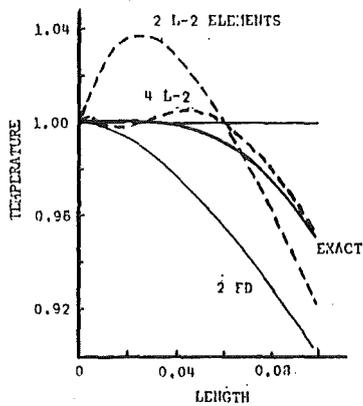


Abb.5: Ergebnisse nach EMERY/SUGIHARA/JONES /8/

Gegenüber der exakten Temperaturverteilung in der Platte (fette Kurve) neigt die Methode der finiten Elemente (gestrichelt) zu kleinen Zeiten und bei grober Diskretisierung zum Überschwingen. Das Finit-Differenzenverfahren hingegen unterschätzt die exakte Lösung bei grober Diskretisierung. Eine Annäherung an das tatsächliche Temperaturprofil konnte in beiden Fällen durch Verfeinerung der Diskretisierung erreicht werden.

Es lag also auf der Hand, einmal nachzuprüfen, ob sich durch geeignete Einstellung der Wichtfaktoren im Ansatzverfahren nicht eine optimale Lösung erzielen läßt, die die typischen Abweichungen der Methode der finiten Elemente und des Finit-Differenzenverfahrens vermeidet.

Zunächst wurden die Matrixkoeffizienten der Methode der finiten Elemente und des Finit-Differenzenverfahrens mit denen des Ansatzverfahrens verglichen. Für den einfachen Fall der Platten-geometrie konnte exemplarisch ein Koeffizient des Ansatzverfahrens, bei geeigneter Einstellung der räumlichen Wichtfaktoren, direkt in die entsprechenden Koeffizienten der Methode der finiten Elemente bzw. des Finit-Differenzenverfahrens überführt werden (LASSMANN /6/). Analogien im Aufbau der restlichen Koeffizienten ließen vermuten, daß dies generell gezeigt werden kann.

Mit den so ermittelten Wichtfaktoren wurden im Anschluß Rechnungen mit URANUS durchgeführt, die analog zu EMERY/SUGIHARA/JONES /8/ das Abklingverhalten der Temperatur studierten. Als Anfangstemperaturverteilung galt im Brennstoff 2500°C , in Hülle und Kühlmittel 370°C , wie in Abb. 6 dargestellt.

Bei entsprechend der aus dem Koeffizientenvergleich gewonnenen Einstellung der Wichtfaktoren zeigt sich für die "Einstellung Methode der finiten Elemente" deutliches Überschwingen (Abb.7). Dargestellt sind die Temperaturen an den radialen Gitterpunkten für unterschiedliche Diskretisierung. Für die "Einstellung Finit-Differenzenverfahren" zeigt sich hingegen deutliches Unterschätzen der Temperaturen (Abb.8).

In Konsequenz dieser Untersuchung wurden die Wichtfaktoren des Ansatzverfahrens nun so eingestellt, daß die mit URANUS erzielten Temperaturen genau zwischen den beiden Verfahren liegen (Abb.9). Es wird sinngemäß von einer "optimalen Kombination von Methode der finiten Elemente und Finit-Differenzenverfahren" gesprochen, obwohl dies, wegen der prinzipiell unterschiedlichen Ansätze, streng mathematisch vielleicht nicht ganz richtig ist.

Obgleich bei feiner Diskretisierung alle Unterschiede verschwinden, darf man auf den prinzipiellen Erfolg des Vergleiches dennoch stolz sein.

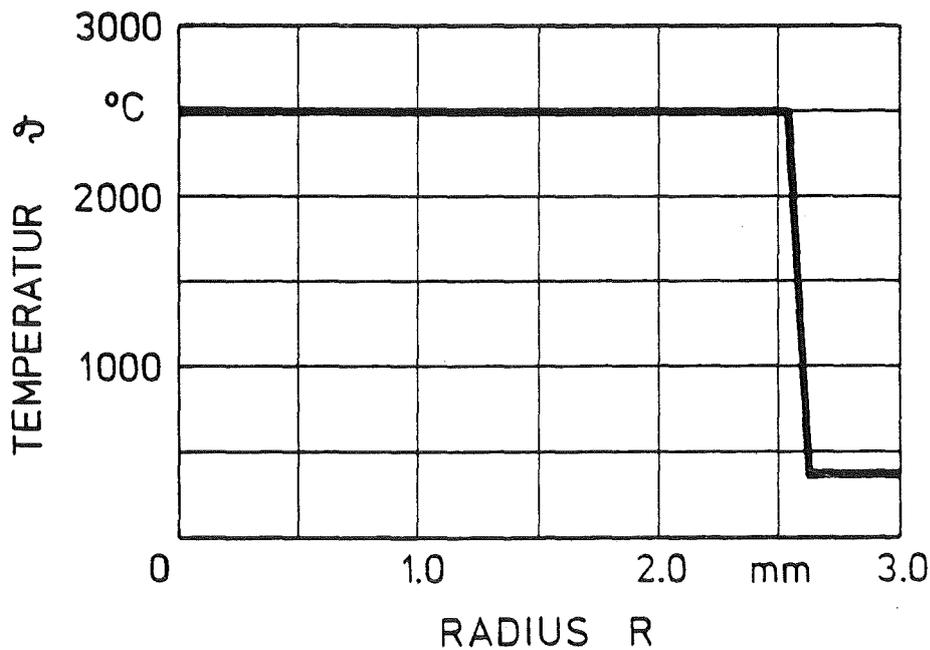


Abb. 6 Anfangs-Temperaturverteilung im Brennstab

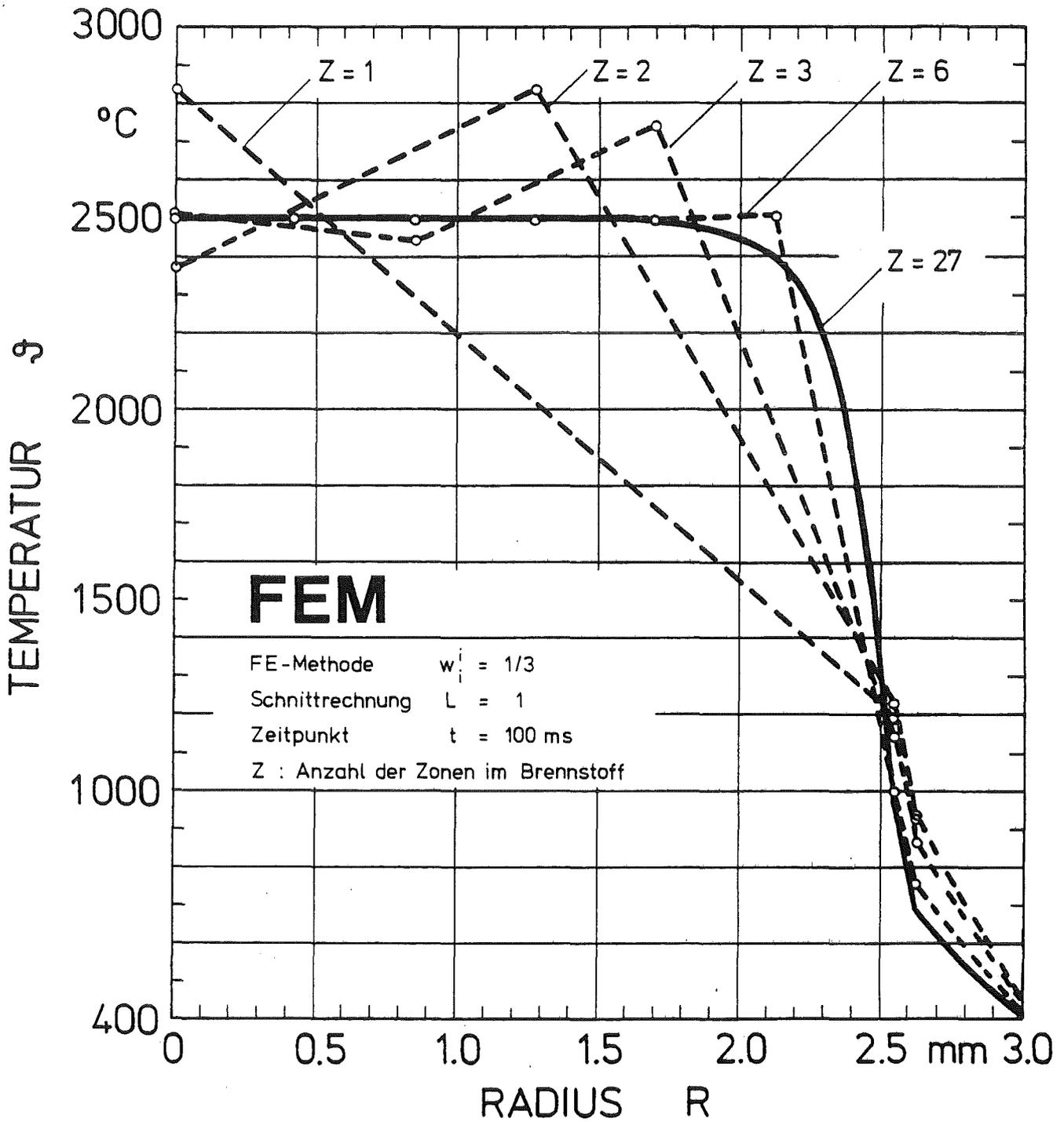


Abb. 7 Approximiertes Temperaturprofil nach der Finit-Element-Methode (FEM) ; URANUS-Rechnung

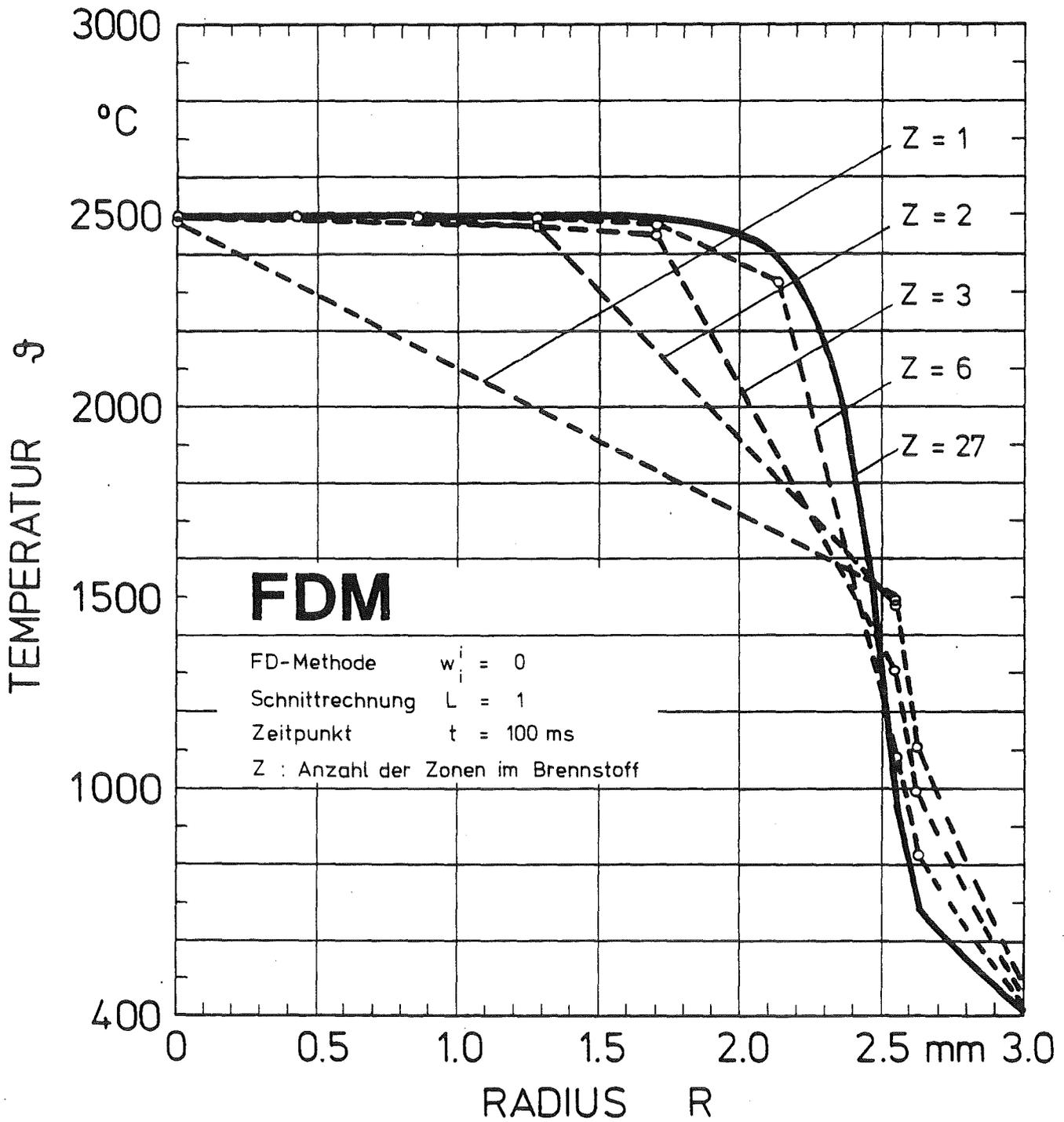


Abb. 8 Approximiertes Temperaturprofil nach der Finit-Differenz-Methode (FDM) ; URANUS-Rechnung

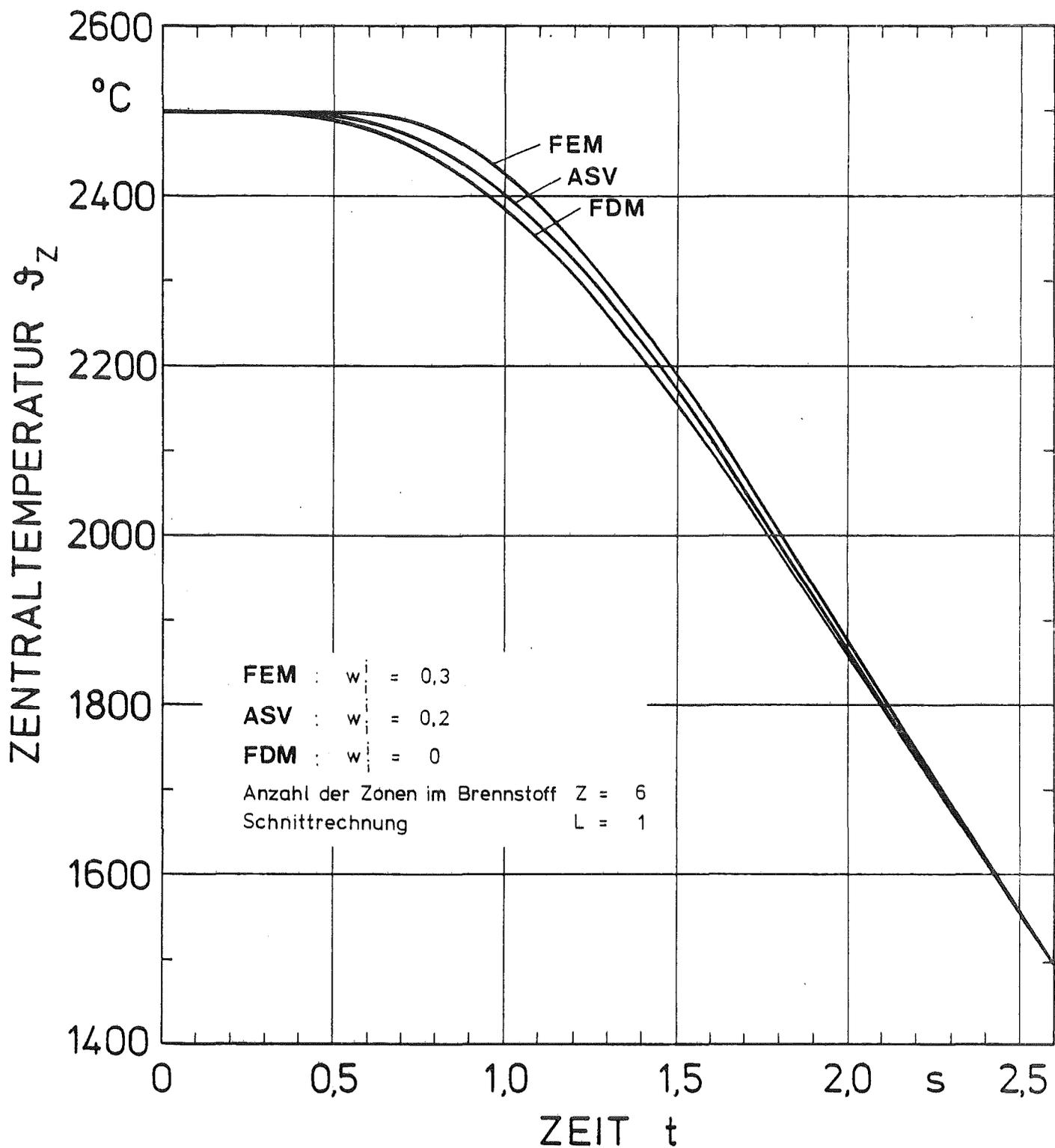


Abb. 9 Lösung des Ansatzverfahrens ASV als Mittelwert der Lösung aus FEM und FDM URANUS-Rechnung

Die nächste Untersuchung diene zur Einstellung des zeitlichen Wichtfaktors α . Wie bereits erwähnt, erfolgt die Temperaturberechnung mit einem gemischt implizit-expliziten Verfahren. Zur Vermeidung numerischer Instabilitäten während transienter Bedingungen wurde der zeitliche Wichtfaktor auf $\alpha = 0,6$ - gegenüber $\alpha = 0,5$ bei CRANK-NICOLSON - gesetzt, also etwas mehr in Richtung implizites Verfahren. In stationären Lastbereichen erfolgt über die automatische Zeitschrittsteuerung in URANUS eine Umschaltung des zeitlichen Wichtfaktors auf $\alpha = 1$, wenn der Zeitschritt größer als 6 min. wird. In diesem Fall wird die Temperaturberechnung dann mit einem rein impliziten Verfahren durchgeführt.

Als letztes wird noch kurz über das für URANUS entwickelte Modell zur Behandlung einer an das Kühlmittel angrenzenden Struktur berichtet, die vor allem für die Analyse von Einzelstabkontifigurationen bei Störfallexperimenten wichtig ist. Es wurde ein Zehn-Zonenmodell entwickelt, in dem für die Struktur axial und radial frei wählbare Werkstoffkombinationen mit temperaturabhängigen, werkstoffbezogenen Stoffwerten berücksichtigt werden können. Außerdem können in axialer Richtung unterschiedliche Strukturgeometrien behandelt werden. Die Gleichungen für die Struktur werden zusammen mit der Gleichung für das Kühlmittel und den Gleichungen für den Brennstab in einem geschlossenen System gelöst.

Durch das neue Strukturmodell wurde ein entscheidender Beitrag für die Beurteilung beliebiger Störfallexperimente geleistet und die Vielseitigkeit von URANUS noch erweitert.

Abschließend sei noch ein Diagramm für eine Rechnung mit Struktur gezeigt. Der Temperaturverlauf in Abb.10 stellte sich bei einem Schnellbrüterstab im abfallenden Bereich einer sehr schnellen Leistungstransienten ein. Zwischen Hülle und Brennstoff bestand zu diesem Zeitpunkt Kontakt. Wie man erkennen kann, wird in der Rechnung ein radialer Wärmestrom zwischen Brennstoff und Hülle, zwischen Hülle und Kühlmittel als auch zwischen Kühlmittel und Struktur berücksichtigt.

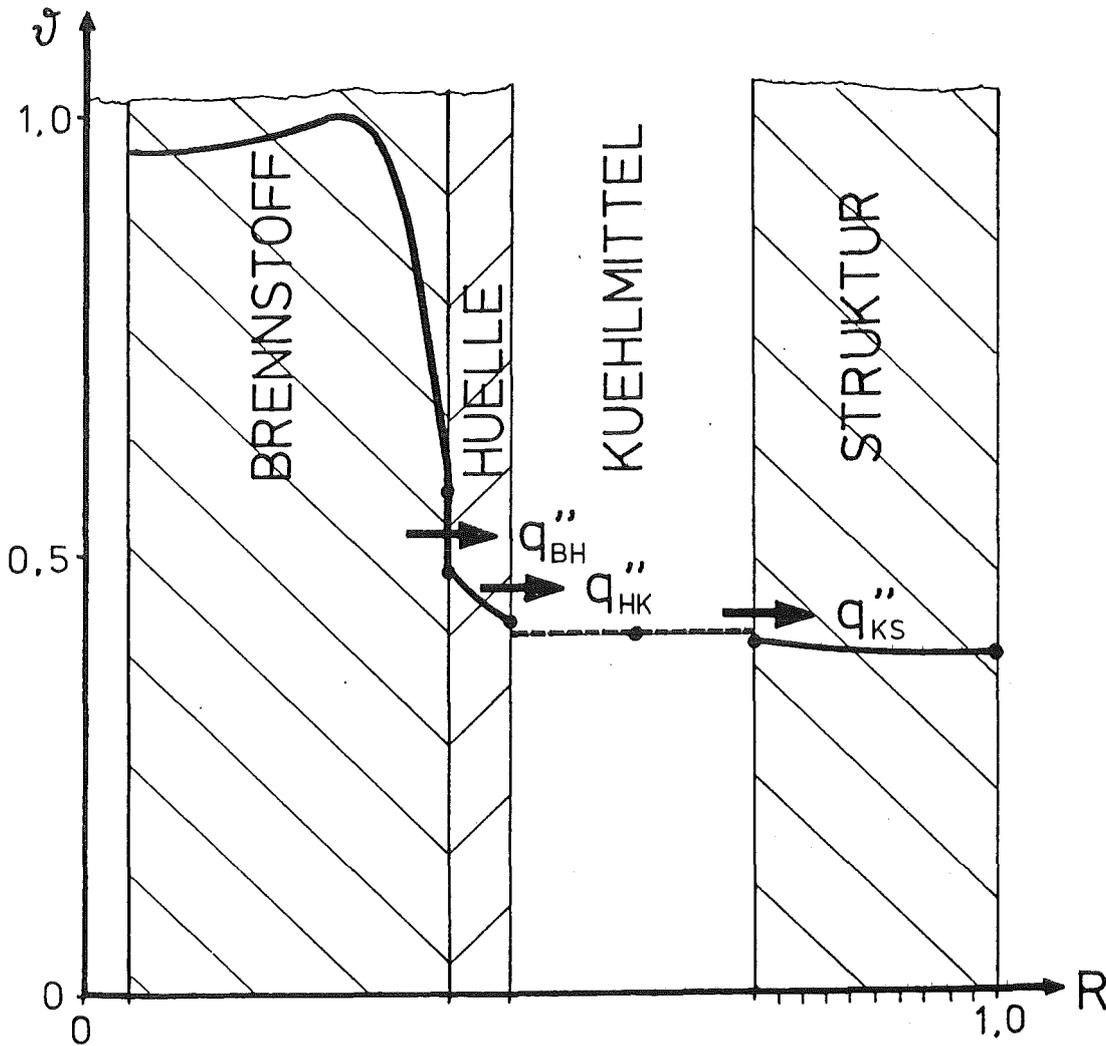


Abb.10: Temperaturprofil bei Rechnung mit Struktur

Anhand der zahlreichen Untersuchungen kann abschließend folgendes Fazit gezogen werden. Die transiente Version URANUS-T darf als sicher und zuverlässig zur Beschreibung beliebiger Lastfälle bezeichnet werden. Sie zeichnet sich besonders durch die Vielseitigkeit bezüglich unterschiedlichster Stabkonfigurationen aus und benötigt zudem nur vergleichbar kurze Rechenzeiten.

Literatur

- /1/ K. Laßmann, Persönliche Mitteilung, Mai 1980
- /2/ K. Laßmann, Die transiente Version des Rechenprogrammes URANUS, atomwirtschaftlich, Sonderdruck aus Jahrgang XXII, Nr. 7 (Oktober 1977)
- /3/ K. Laßmann, T. Preusser, An advanced method for transient temperature calculation in fuel element structural analysis, Bericht RTDA-65-81, Veröffentlichung in Vorbereitung
- /4/ D. Marsal, Die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen in Wissenschaft und Technik, BI Wissenschaftsverlag, Mannheim/Wien/Zürich
- /5/ G. Kaltenthaler, Untersuchungen zur transienten Temperaturberechnung in einem Brennstab, Diplomarbeit D-230-16, Institut für Reaktortechnik, Technische Hochschule Darmstadt, August 1980
- /6/ K. Laßmann, Einordnung des Ansatzverfahrens in andere bekannte numerische Verfahren zur Lösung der allg. Wärmeleitungsgleichung, Seminarvortrag im IRT Darmstadt, Herbst 1980, persönliche Mitteilung
- /7/ G.E. Myers, Analytical Methods in Conduction Heat Transfer, Mc Graw-Hill, New York, 1971
- /8/ A.F. Emery, K. Sugihara, A.T. Jones, A Comparison of Some of the Thermal Characteristics of Finite-Element and Finite-Difference Calculations of Transient Problems, Numerical Heat Transfer, vol. 2, pp 97-113, 1979

4.) Zur Anwendung von URANUS im Kernforschungszentrum Karlsruhe

von K. Laßmann

Vortrag anlässlich des Statusberichtes des IRT am 01.10.1981
in Karlsruhe

Das Rechenprogramm URANUS, das ausführlich in den vorangegangenen Beiträgen dargestellt wurde, erfüllt alle allgemeinen Grundvoraussetzungen einer Codeeinführung:

- der Code ist brauchbar,
- es ist ein großes Entwicklungspotential im IRT vorhanden,
- und die Dokumentation und Codepflege ist vorbildlich.

Darüber hinaus ist über eine sehr enge Zusammenarbeit zwischen dem KfK und dem IRT ein direkter Zugriff möglich.

URANUS wurde 1979 im Kernforschungszentrum eingeführt, seit dieser Zeit werden regelmäßig Programmversionen übernommen bzw. ausgetauscht. Übergabemodalitäten sind fest geregelt und gut erprobt.

Das Rechenprogramm URANUS wird im Bereich MOL 7C (s. Vortrag Böcking) und im Bereich CABRI eingesetzt. Die Aufgaben im Rahmen des CABRI-Vorhabens sind:

- Festlegung der experimentellen Bedingungen
- Vorausberechnung der Experimente
- Nachrechnungen und endgültige Interpretation.

Die Grenzen dieses Rechenprogramms sind erreicht, wenn große Materialbewegungen auftreten. Vergleicht man die im CABRI-Vorhaben eingesetzten Rechenprogramme, dann ähnelt URANUS am ehesten dem englischen Code TRAFIC.

Es werden folgende spezielle Ziele verfolgt:

- Untersuchung "einfacher" Brennstabmodelle
- Verbesserung dieser Modelle
- Hilfestellung für andere Rechenprogramme.

Die Tabelle 1 zeigt die CABRI-Testmatrix und die Experimente, die mit dem URANUS-Rechenprogramm untersucht wurden. Die Abb. 1 zeigt den sinnvollen Einsatzbereich, die folgenden Abbildungen 2 und 3 geben einen Eindruck von der Art der erzielten Ergebnisse.

Der relative Anteil von URANUS-Rechenkosten (in Abb. 4 mit rel. Anteil HDI bezeichnet) an den gesamten Rechenkosten der IRE-CABRI-Interpretationsgruppe demonstriert, daß URANUS einen festen Platz im gesamten Codespektrum eingenommen hat.

Zusammenfassend kann folgendes gesagt werden:

- Das Rechenprogramm URANUS hat in verschiedenen Projekten (z.B. CABRI, MOL 7C) einen festen Platz innerhalb des Codespektrums im KfK eingenommen.
- Sämtliche Entwicklungsarbeiten werden detailliert zwischen dem KfK und dem IRT abgesprochen.
- Die Zusammenarbeit funktioniert reibungslos, ist vorbildlich und sollte unbedingt fortgesetzt werden.

frisch UO ₂	TOP	A1 ⁺ A1R	A2 ⁺	A3 ⁺	A4	A5(?)
	LOF/TOP	B1 ⁺	B2 ⁺	B3 ⁺	B4	B5
1% Abbrand (UPu)O ₂	TOP	AI1 ⁺	AI2	AI3	AI4	(AI5)
	LOF/TOP	BI1	BI2	BI3	BI4	(BI5)
5% Abbrand (UPu)O ₂	TOP	AH1	AH2	AH3	AH4	AH5
	LOF/TOP	BH1	BH2	BH3	BH4	BH5

+ bereits durchgeführt ○ URANUS-Einsatz

Tab.1 : Überblick über die CAPRI-Testmatrix

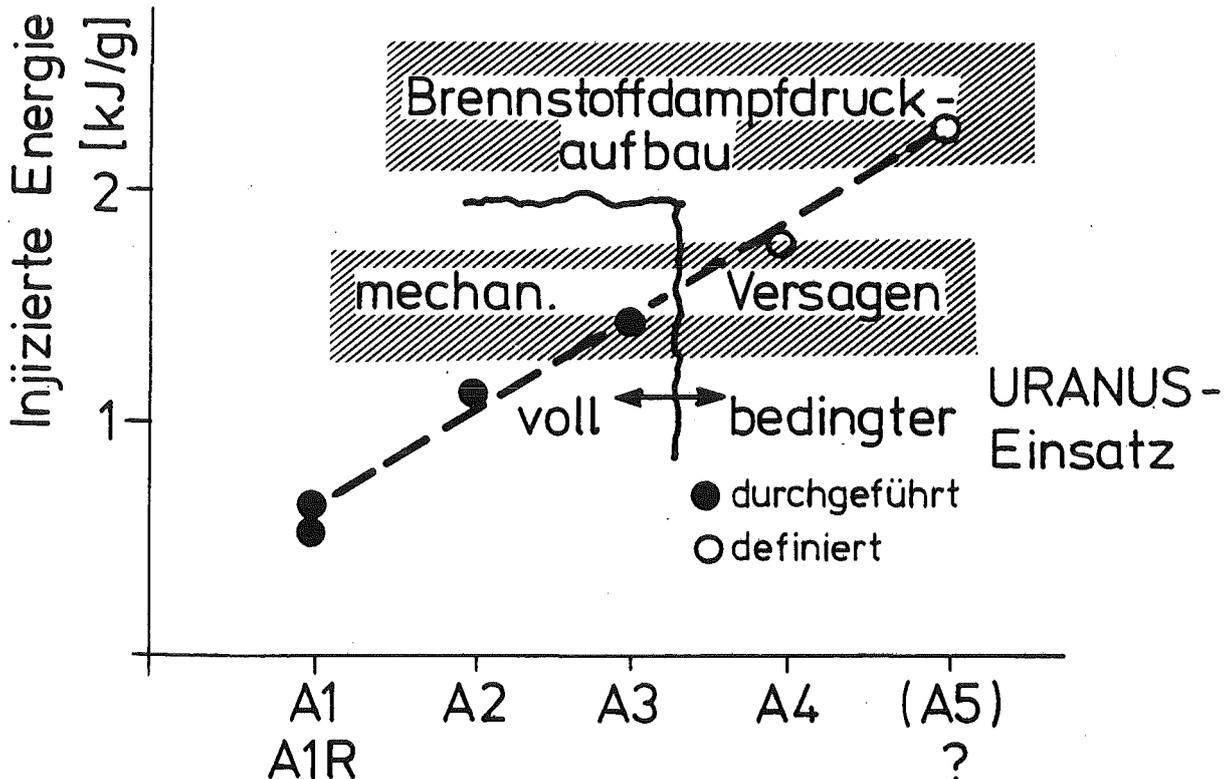
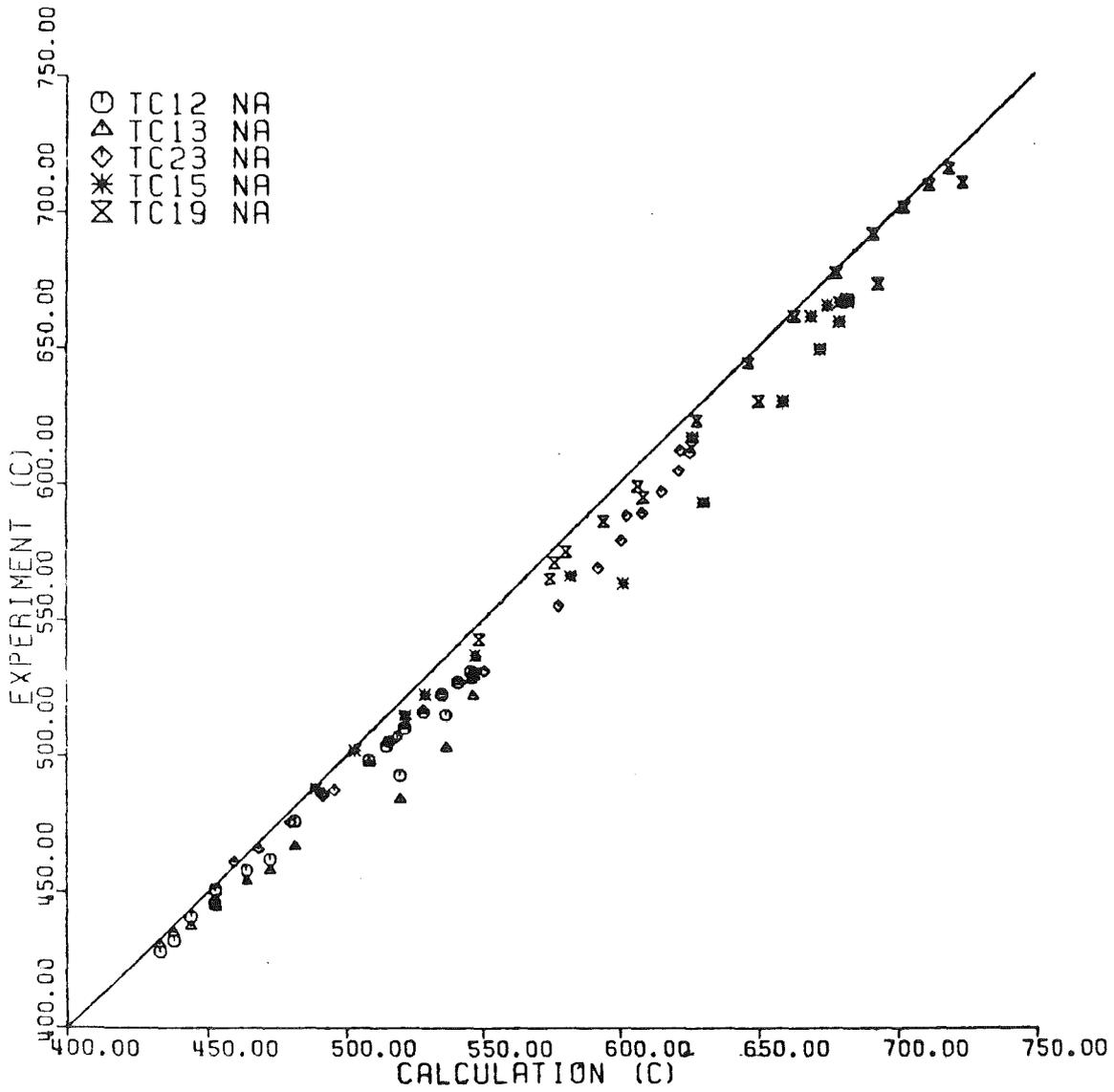


Abb. 1: Injizierte Energie für die Experimente der A-Serie



CHANNEL THERMOCOUPLES

Abb. 2: Vergleich zwischen gemessenen Kühlkanaltemperaturen und Ergebnissen des Rechenprogramms URANUS zu diskreten Zeiten (CABRI-Experiment AlR)

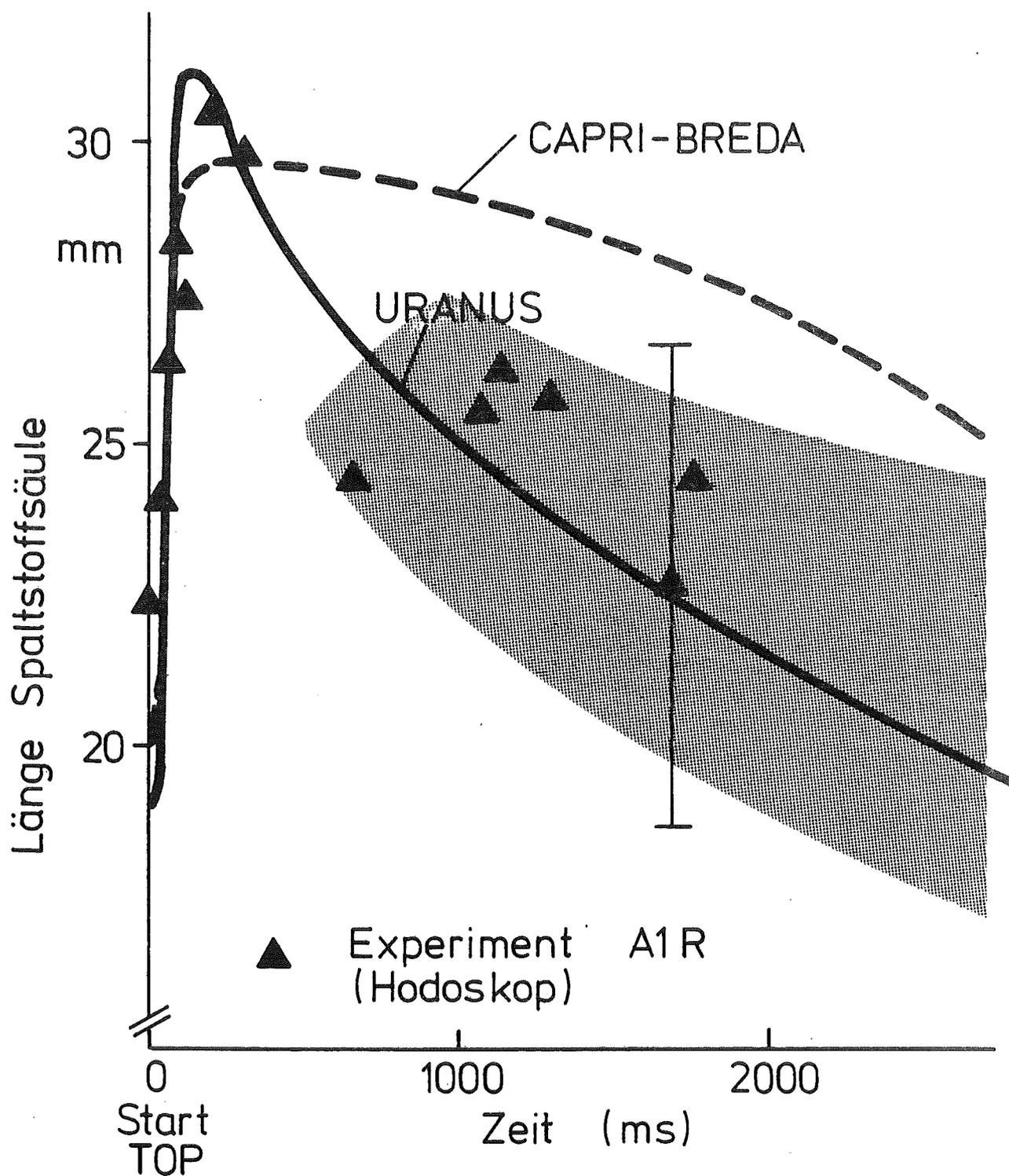


Abb. 3: Verlängerung der Spaltstoffsäule in Abhängigkeit von der Zeit; Vergleich zwischen Hodoskop-Ergebnissen und theoretischen Werten (CABRI-Experiment A1R)

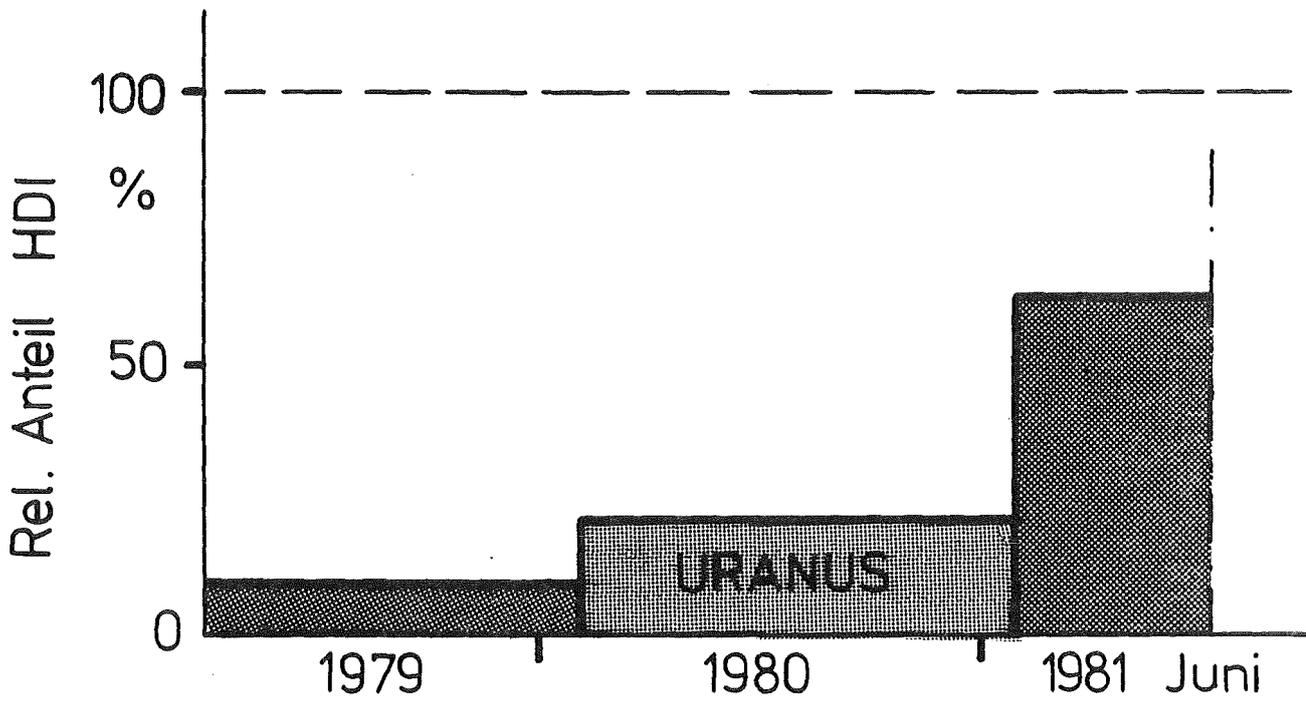
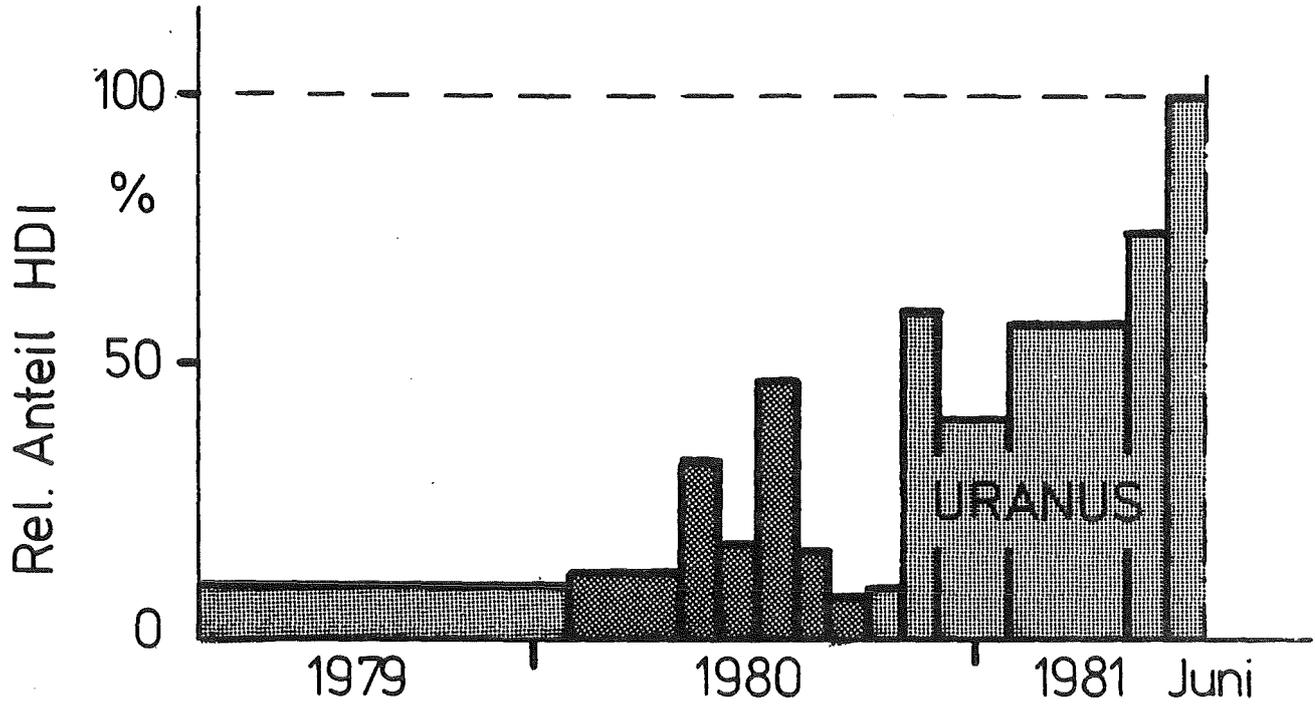


Abb. 4: Relativer Anteil der URANUS-Rechenkosten innerhalb der KfK/IRE-CABRI-Interpretationsgruppe.

5.) Simulationsbestrahlungen von binären Kupferlegierungen

von K.-H. Leister

Vortrag anlässlich des Statusberichtes des IRT am 01.10.1981
in Karlsruhe

Dieser Vortrag wird über ein Experiment berichten, das in den letzten beiden Jahren am Institut für Reaktortechnik in Zusammenarbeit mit Herrn Dr. Ehrlich vom IMF II und der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) in Darmstadt durchgeführt wurde. Es handelt sich hierbei um "Simulationsbestrahlungen von binären Kupferlegierungen". Mit dieser Methode wird die Neutronenbestrahlung eines schnellen Reaktors oder eines Fusionsreaktors durch energiereiche Schwerionen simuliert.

Die Vorteile dieser Methode sind

- a) die hohen Schädigungsraten
die bringen mit sich, daß die Bestrahlungszeiten erheblich verkürzt werden
- b) die bessere Kontrolle der Bestrahlungsparameter wie Temperatur und Schädigungsrate
- c) das Fehlen der radioaktiven Aktivierung
- d) die Vergleichbarkeit der Energie der Schwerionen mit den Energien der Primäratome bei einem Neutronen-Atomstoß im Gitter

Als Nachteile sind zu nennen

- a) die geringe Schädigungstiefe von weniger als 0,1 μm
- b) die Nähe der Oberfläche, die damit verbunden ist.
Die Oberfläche wirkt als starke Senke für Defekte
- c) die Implantation der Ionen
- d) die Veränderungen der Oberfläche durch Sputtern
- e) das Fehlen von Helium
- f) die Temperaturverschiebung des Schwellens

Motivation

1976 bzw. 1977 wurde von Venker, Ehrlich und Giesecke die Vermutung ausgesprochen, daß unterschiedliche Diffusionsgeschwindigkeiten der Komponenten einer Legierung bei der Bestrahlungs-

temperatur zu einer Reduktion des Volumenschwellens führen können /1/, /2/. Unter Schwellen versteht man in diesem Zusammenhang die geometrische Veränderung des Werkstoffs durch Agglomeration von Leerstellen, die bei der Bestrahlung entstehen und die Versprödung. Die These wurde damals anhand einiger Beispiele demonstriert. Um sie experimentell zu überprüfen, wurden in diesem Experiment verschiedene Modellegierungen, d.h. Kupferlegierungen bestrahlt.

Auswahl der Legierungen

Ausschlaggebend für die Wahl von Kupferlegierungen war vereinfacht gesagt die Tatsache, daß sehr viele Eigenschaften von Kupferlegierungen bekannt sind. Zu nennen sind folgende Punkte:

- a) die Diffusionskoeffizienten sehr vieler Elemente in Kupfer sind bekannt oder werden untersucht
- b) man kennt den Diffusionsmechanismus, d.h. man weiß, daß die Diffusion von Fremdatomen über den Leerstellenmechanismus abläuft
- c) man kennt die thermodynamischen Eigenschaften vieler Kupferlegierungen
- d) Kupfer scheint für die Präparation und die Elektronenmikroskopie gut geeignet zu sein
- e) Kupferionen lassen sich am Testinjektor der GSI leicht herstellen und beschleunigen

Für die Legierungselemente wurden als Auswahlkriterien herangezogen:

- a) die Größe der Tracerdiffusionskoeffizienten dieser Elemente in der Kupfermatrix, weil sie etwas über die Bevorzugung oder Benachteiligung dieser Elemente bei Leerstellensprüngen aussagen
- b) die Löslichkeit, damit keine Ausscheidungen auftreten
- c) für das System Cu-Ni spielte der Interdiffusionskoeffizient eine Rolle, der zwar lediglich etwas über das Diffusionsverhalten des gesamten Systems aussagt, dafür aber die Konzentrationsabhängigkeit enthält.

Als Legierungskomponenten wurden die in der Tabelle angegebenen Elemente ausgewählt. Dort ist außerdem das Verhältnis der Diffusionskoeffizienten dieser Elemente in Kupfer zum Selbstdiffusionskoeffizienten von Kupfer bei 500 °C aufgetragen. Bei dieser Bestrahlungstemperatur etwa liegt das Maximum des Schwellens.

Element	Au	Be	Sb	Ag	Ni	Cu	Pt
$\frac{D}{D_{Cu}}$ (500 °C)	500	175	125	17.5	2.25	1	0.03

Es wurden von allen Systemen Legierungen mit 0,1 at.% und 1 at% Fremdelementanteil hergestellt. Von der Cu-Ni-Variante existieren außerdem 10 at%, 20 at%, 30 at%, 40 at% und 50 at% Ni-haltige Legierungen.

Probenpräparation

Als Ausgangsmaterial dienten Reinstmetalle, die dann am Max-Planck-Institut in Stuttgart zu Legierungen verschmolzen wurden. Durch Sägen, Schleifen, Kaltverformen, Stanzen und Rekristallisationsglühen bei 600 °C im Vakuum erhält man Proben von 3 mm Durchmesser und etwa 100 µm Dicke. Diese Proben wurden vor der Bestrahlung einseitig elektrolytisch vorpoliert, um eine möglichst glatte Oberfläche zu erhalten.

Bestrahlungen

Die Bestrahlung der Proben erfolgte am Testinjektor der GSI. Dieser elektrostatische Beschleuniger liefert Cu^+ -Ionen mit 200 keV Energie. Das ist etwa die Energie, die ein schnelles Neutron maximal auf ein Kupferatom übertragen kann. Die Ionen schädigen das Material relativ homogen bis in eine Tiefe von 60 nm bis 80 nm, wo sie dann als Zwischengitteratome deponiert werden. Das bedeutet, daß wir nur eine sehr dünne Schicht mit Strahlenschäden vorliegen haben. Wir sind dabei, ein Verfahren zu entwickeln, mit dem die Schichtdicke direkt gemessen werden kann.

Der Strahlstrom liegt bei etwa $2.1 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ oder 1.3×10^{13} Cu^+ -Ionen/ $(\text{cm}^2 \cdot \text{s})$. Das entspricht einer Schädigungsrate von etwa $0.1 \text{ dpa}/\text{s}$. Die Bestrahlungen dauerten jeweils 10 min, so daß sich eine Gesamtdosis von 7.8×10^{15} Cu^+ -Ionen/ cm^2 oder 60 dpa ergibt.

Von jeder Legierung und vom Reinstkupfer wurden wenigstens 9 Proben bei Temperaturen zwischen 400°C und 600°C in 25°C -Abständen bestrahlt.

Auswertung

Die bestrahlten Proben wurden von der Rückseite elektrolytisch gedünnt, so daß Bereiche entstehen, die in unserem 100 kV-Elektronenmikroskop durchstrahlbar sind. Es interessieren die bei der Bestrahlung entstandenen Leerstellenagglomerate, d.h. die (engl.) "voids", die zum Schwellen des Materials führen. Diese Poren werden durch die Elektronenmikroskopie sichtbar. Die mikroskopierten Bereiche wurden photographiert, so daß eine quantitative Analyse durchgeführt werden konnte. Aus der Größenverteilung der Poren, der abgebildeten Fläche und der Probendicke errechnet sich dann das Schwellen $\frac{\Delta V}{V - \Delta V} \approx \frac{\Delta V}{V}$. Dabei sind ΔV das Porenvolumen und V das Werkstoffvolumen, das diese Poren enthält.

Ergebnisse

Die folgenden Abbildungen zeigen exemplarisch jeweils das Schwellen der Werkstoffe über der Bestrahlungstemperatur aufgetragen, wie es sich direkt aus den Messungen und der beschriebenen Auswertung ergibt. Abb. 1 zeigt das Schwellen von reinem Kupfer. Das Maximum des Schwellens liegt bei 500°C Bestrahlungstemperatur mit einem Wert von etwa 2%. Die anderen Schwellkurven weichen zum Teil erheblich davon ab. Der generelle Verlauf ist jedoch überall erkennbar. Trotz der großen Fehler, die in unserem Meßverfahren begründet sind, lassen sich 0.1%ige und 1% Legierungen sehr gut unterscheiden.

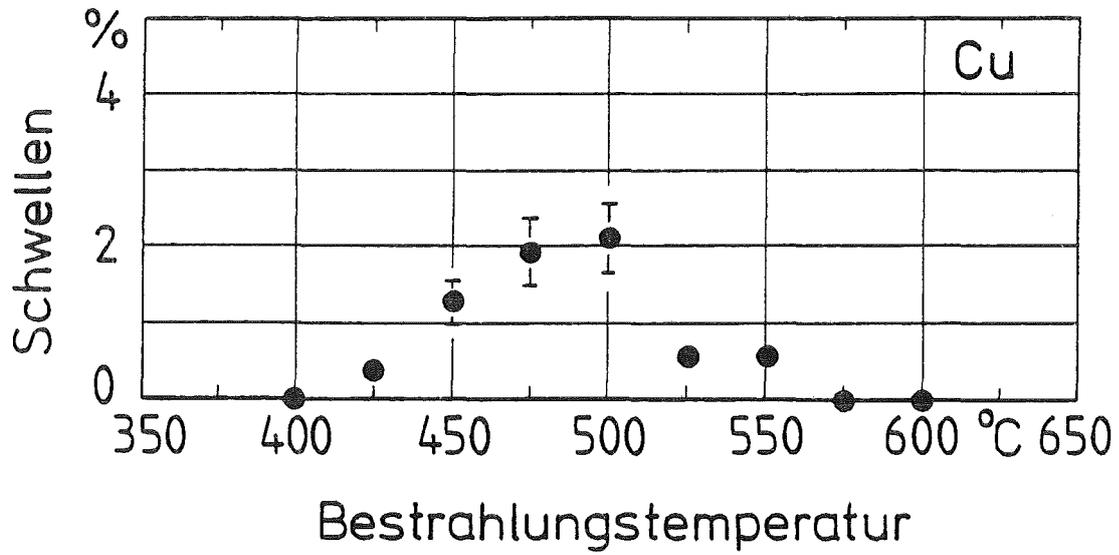


Abb. 1 Volumenschwellen von Reinstkupfer in Abhängigkeit von der Bestrahlungstemperatur nach Bestrahlungen mit $7.8 \cdot 10^{15}$ Cu⁺-Ionen / cm²

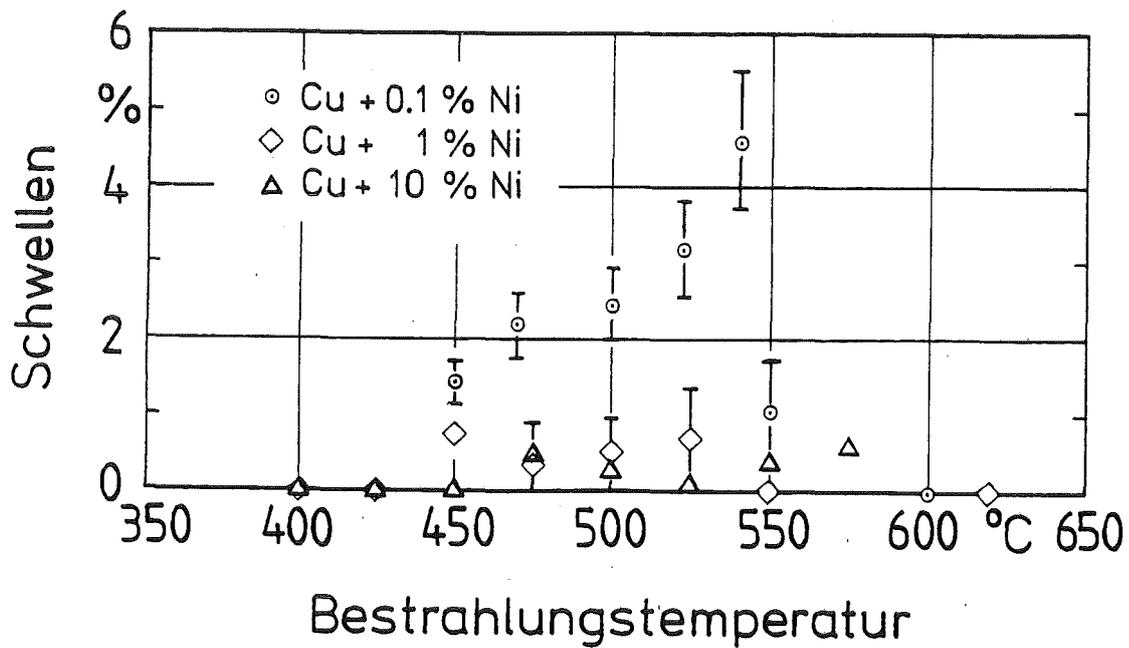


Abb. 2 Volumenschwellen verschiedener Cu-Ni-Legierungen in Abhängigkeit von der Bestrahlungstemperatur nach Bestrahlungen mit $7.8 \cdot 10^{15}$ Cu⁺-Ionen / cm²

Zu den Cu-Ni-Legierungen (Abb.2) ist zu sagen, daß das Schwellen von 1% Ni-Gehalt stark reduziert wird; 10% Ni bringen keinen wesentlichen Effekt mehr. Bei der Cu-20% Ni-Legierung wurde über den gesamten Temperaturbereich kein Schwellen beobachtet, das gleiche gilt für die Cu-50% Ni-Legierung. Aus diesem Grund wurden die Legierungen mit 30 und 40% Ni-Gehalt nicht bestrahlt.

Diskussion

Die gewonnenen Ergebnisse sollen nun diskutiert werden. Wir hatten uns zum Ziel gesetzt herauszufinden, ob die Vermutung von Venker, Ehrlich und Giesecke allgemein gültig ist. Sie besagt, wie zu Beginn des Vortrags erwähnt, daß unterschiedliche Diffusionsgeschwindigkeiten der Komponenten einer Legierung bei der Bestrahlungstemperatur zu einer Reduktion des Schwellens führen können.

In Abb. 3 sind die maximalen Schwellwerte der einzelnen Legierungen gegen die normierten Tracerdiffusionskoeffizienten der Fremdelemente in Kupfer bei 500 °C aufgetragen.

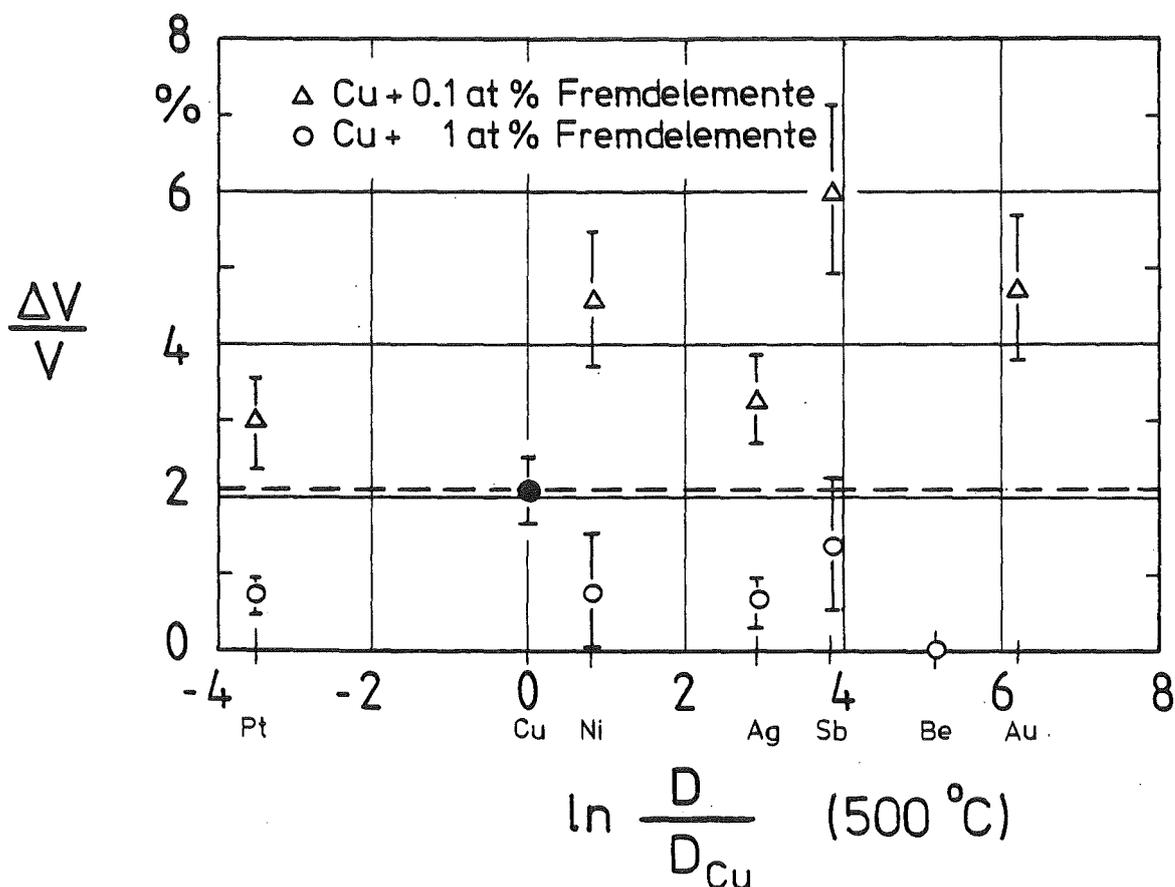


Abb. 3 Maximale Schwellwerte der bestrahlten Legierungen in Abhängigkeit vom normierten Diffusionskoeffizienten der Fremdelemente in Cu

Dabei wird ein deutlicher Trend widerspiegelt. Bei den 0.1%igen Legierungen wurde stärkeres Schwellen gemessen als in reinem Kupfer; die 1% Fremdelementanteile reduzieren das Schwellen deutlich.

Danach kann man nach dem jetzigen Stand der Dinge sagen, daß keine eindeutige Abhängigkeit des Schwellens von Diffusionskoeffizienten festgestellt werden konnte. Dieses Ergebnis stimmt überein mit Messungen von Farrell und Houston an Aluminiumlegierungen /3/. Was hingegen sehr deutlich wird, ist die Tatsache, daß das Schwellen stark von der Konzentration der Fremdelemente in der Kupfermatrix abhängt.

Momentan existiert ein theoretischer Ansatz von Garner und Wolfer, der den Einfluß des Diffusionskoeffizienten von Fremdatomen auf die Keimbildungsrate beschreibt /4/. Die Keimbildungsrate liefert die Dichte der "voids". Man kann zeigen, daß eine schnelle Diffusion von Fremdatom-Leerstellenpaaren die Keimbildungsrate reduziert, während eine langsame Diffusion die Keimbildung verstärkt. Daß Reduktion und Verstärkung von der Konzentration abhängen, kann nicht erklärt werden.

Was weiterhin auffällt, ist die Verschiebung des Schwellmaximums zu höheren und zu tieferen Temperaturen gegenüber dem Wert für reines Kupfer. Abb.4 zeigt die Temperaturen, bei denen das Schwellen maximal ist, wieder als Funktion des Verhältnisses der Diffusionskoeffizienten.

Die Streuung der Werte ist sehr deutlich, eine systematische Abhängigkeit von Diffusionskoeffizienten ist nicht zu erkennen. Eine solche Abhängigkeit ist auch nicht zu erwarten, wie aus Abb. 5 hervorgeht, die auf Rechnungen beruht. Hier ist die Temperatur maximalen Schwellens als Funktion der Schädigungsrate aufgetragen. Als Parameter wird die Bewegungsenergie der Leerstellen benutzt, die exponentiell in den Diffusionskoeffizienten eingeht. Es zeigt sich nur eine geringe Abhängigkeit. Starken Einfluß auf die Temperaturverschiebung haben Potentialbarrieren an den Porenoberflächen, die durch Segregation verursacht werden können, und Versetzungen.

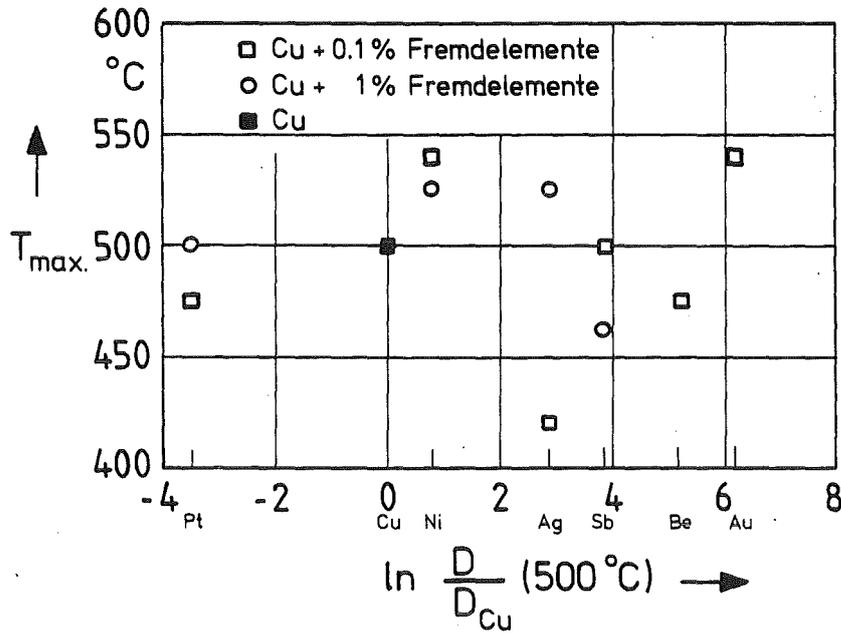


Abb. 4 Temperaturen der Schwellmaxima der bestrahlten Legierungen in Abhängigkeit vom normierten Diffusionskoeffizienten der Fremdelemente in Cu

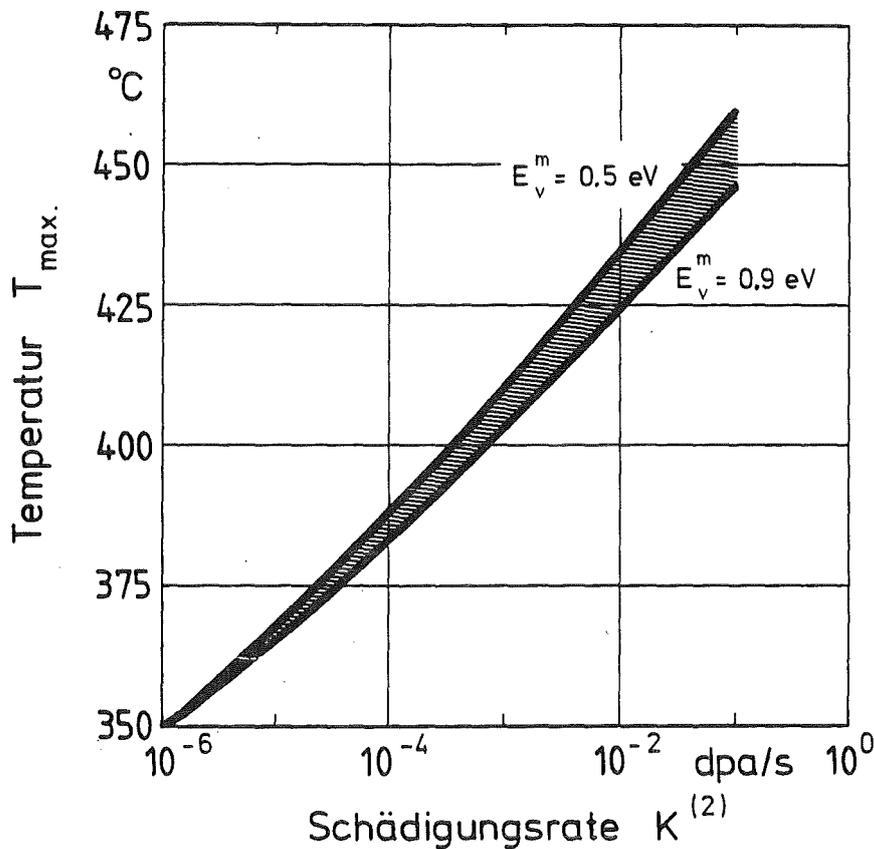


Abb. 5 Temperaturen des Schwellmaximums in Kupfer als Funktion der Schädigungsrate. Die Bewegungsenergie der Leerstellen wurde variiert. (nach /5/)

Ausblick

Was noch offen bleibt in diesem Zusammenhang ist das Schwellverhalten dieser Legierungen bei geringer Fremdatomkonzentrationen. Für Untersuchungen in dieser Frage scheint das Cu-Ni-System gut geeignet, weil mit 0.1at% Ni das Schwellen doppelt so groß, und mit 1% Ni halb so groß ist als das Schwellen von reinem Kupfer. Hier liegt eine sehr starke Konzentrationsabhängigkeit vor. Außerdem sollte das Verhalten der Versetzungen in den Legierungen bei Bestrahlung untersucht werden. Versetzungen scheinen zumindest bei einigen Legierungen eine große Rolle zu spielen, weil Poren gerade an Versetzungsknoten auftreten.

Literatur

- /1/ H. Venker, P. Giesecke, K. Ehrlich, Proc. Intern. Conf. on Radiation Effects in Breeder Reactor Structural Materials Scottsdale, Arizona 1977
- /2/ H. Venker, K. Ehrlich, J. of Nucl. Mat. 60 (1976) 347
- /3/ K. Farrell and J.T. Houston, J. of Nucl. Mat. 83 (1979) 57-66
- /4/ F.A. Garner, W.G. Wolfer, 1980 , wird veröffentlicht in J. of Nucl. Mat.
- /5/ L.K. Mansur, Nucl. Techn. 40 (1978) 5-34

6.) Schwellverhalten von Ferriten und Austeniten bei Schwerionenbestrahlung

von K. Exel

Vortrag anlässlich des Statusberichtes des IRT am 01.10.1981
in Karlsruhe

1. Motivation

Die Motivation für die Arbeit ist aus den Bildern 1a und 1b ersichtlich. Bild 1a zeigt einen ferritisch - austenitischen Stahl, der mit Ni^+ -Ionen der Energie 5 MeV bei 625 °C mit einer Dosis von 160 dpa bestrahlt wurde. Im austenitischen Korn beobachtet man Poren, im ferritischen hingegen keine.

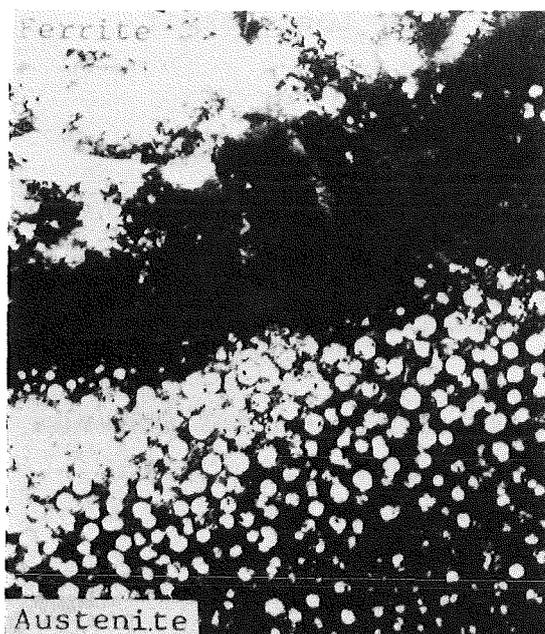


Bild 1a. Porenbildung in Ferrit-Austenit.
H.G. Johnston /1/

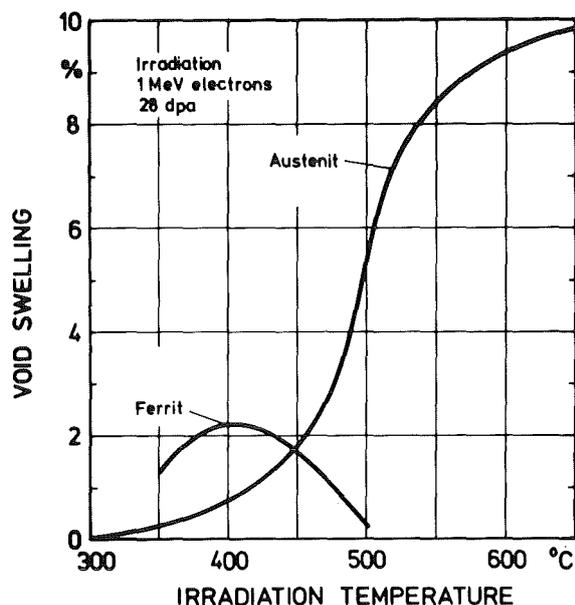


Bild 1b. Schwellverhalten von Ferrit und Austenit bei Elektronenbestrahlung

Bild 1b zeigt das Schwellverhalten eines Ferriten und eines Austeniten bei der Bestrahlung mit 1 MeV Elektronen über der Temperatur.

Aus den beiden, der Literatur entnommenen Beispiele ist ersichtlich, daß ferritische Stähle gegenüber austenitischen bei (Neutronen) Schwerionen bzw. Elektronenbestrahlung ein stark reduziertes Schwellen zeigen.

Ferritische Stähle scheinen somit ein für den Einsatz im schnellen Brutreaktor prädestinierter Werkstofftyp zu sein.

Es stellt sich nun die Frage, warum austenitische Stähle stärker Schwellen als ferritische.

2. Vergleich Austenit - Ferrit

Zunächst ist zu klären in welchen Eigenschaften sich die beiden Werkstofftypen unterscheiden. Solche Eigenschaften sind in Tabelle 1 aufgelistet. Sie ist nicht vollständig, da nur solche Punkte aufgeführt sind, die auf das Schwellen einen entscheidenden Einfluß haben können.

Der auffälligste Unterschied ist der Gittertyp. Hieraus ergeben sich die für Experimente verwendbaren Modellwerkstoffe Eisen und Nickel. Ein weiterer Unterschied liegt in den Hauptlegierungselementen Chrom bei den Ferriten und Nickel bei den Austeniten. Außerdem unterscheiden sich die Werkstoffe in der Löslichkeit und der Diffusionsgeschwindigkeit von Kohlenstoff.

Das Diffusionsverhalten von Gitterdefekten spielt ebenfalls eine Rolle. Im folgenden wird kurz auf die einzelnen Punkte eingegangen.

2a Gittertyp

Zur Untersuchung des Einflusses der Gitterstruktur auf das Schwellen, wurden die Modellwerkstoffe reinst Eisen und reinst Nickel mit Nickel⁺-Ionen bestrahlt. Die Energie der Ionen war 200 keV, die Gesamtdosis betrug 30 dpa.

Bild 2 zeigt das Ergebnis dieses Experimentes.

FERRIT	AUSTENIT
GITTERTYP	
krz	kfz
MODELLWERKSTOFF	
Fe $a = 2.86 \text{ \AA}$	Ni $a = 3.52 \text{ \AA}$ $a_{\gamma\text{Fe}} = 3.63 \text{ \AA}$
HAUPTLEGIERUNGSELEMENTE	
Cr	Ni , Cr je nach Ni u. Cr Gehalt $\alpha + \gamma$ oder γ Struktur
LÖSLICHKEIT VON KOHLENSTOFF	
Fe (α) bei RT $10^{-5} \%$ bei 723 °C 0.035 %	Ni bei 400 °C 0.1 %
Fe + 8%Cr bei 700 °C 0.05 %	
Fe + 13%Cr bei 700 °C < 0.05 %	
DIFFUSIONSGESCHWINDIGKEIT VON KOHLENSTOFF IN α -Fe , γ -Fe	
DIFFUSION VON LEERSTELLEN ZWISCHENGITTERATOME	
⋮	

Tab. 1 : Vergleich Ferrit - Austenit

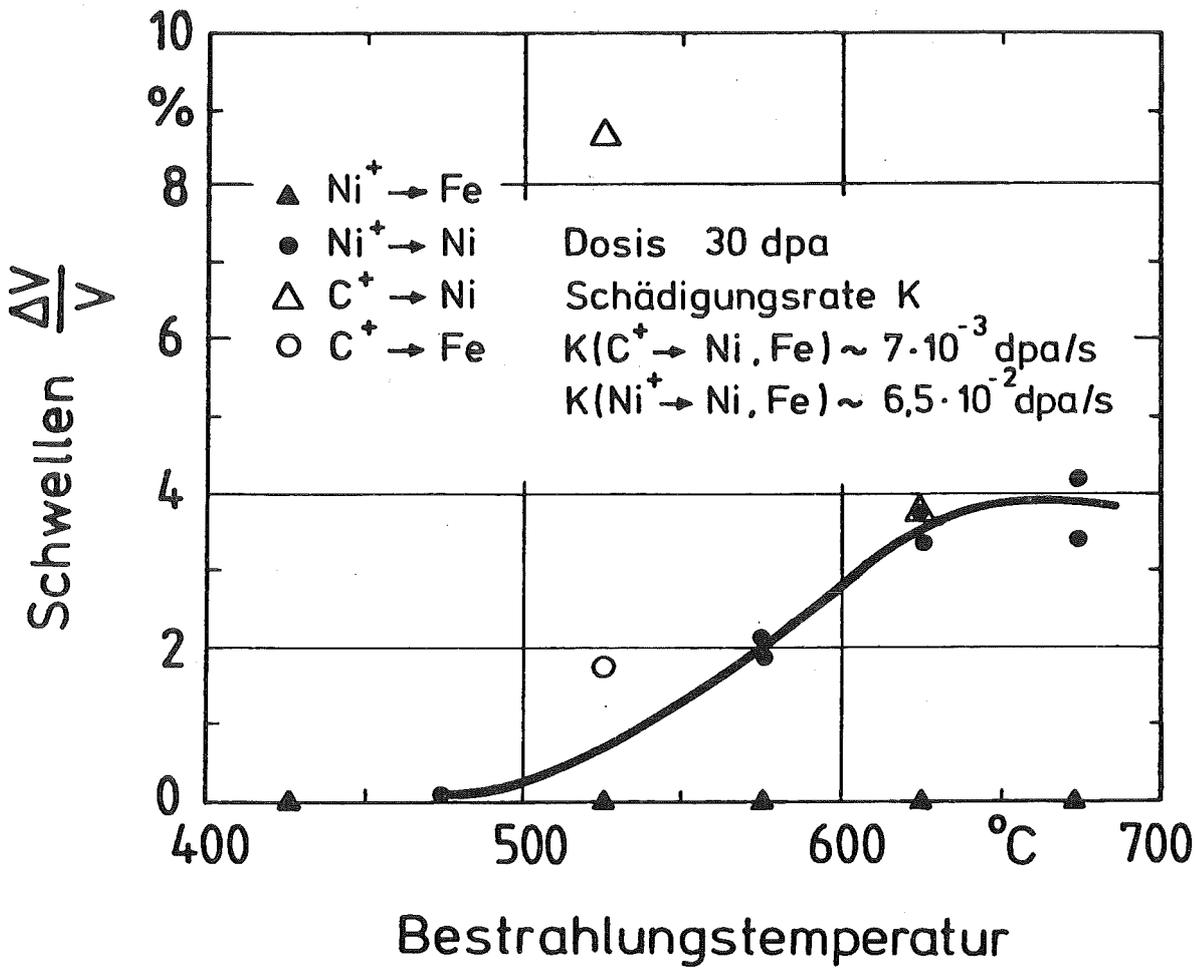


Bild 2. Schwellverhalten von Eisen und Ni bei Ni^+ und C^+ -Ionen Bestrahlung

Aufgetragen ist das Volumenschwellen über der Temperatur. Es zeigt sich, daß Eisen der Modellwerkstoff für die Ferrite nicht schwillt. Im gesamten Temperaturbereich wurden keine Poren beobachtet. Nickel, der Modellwerkstoff für die Austenite zeigt ein typisches Schwellverhalten.

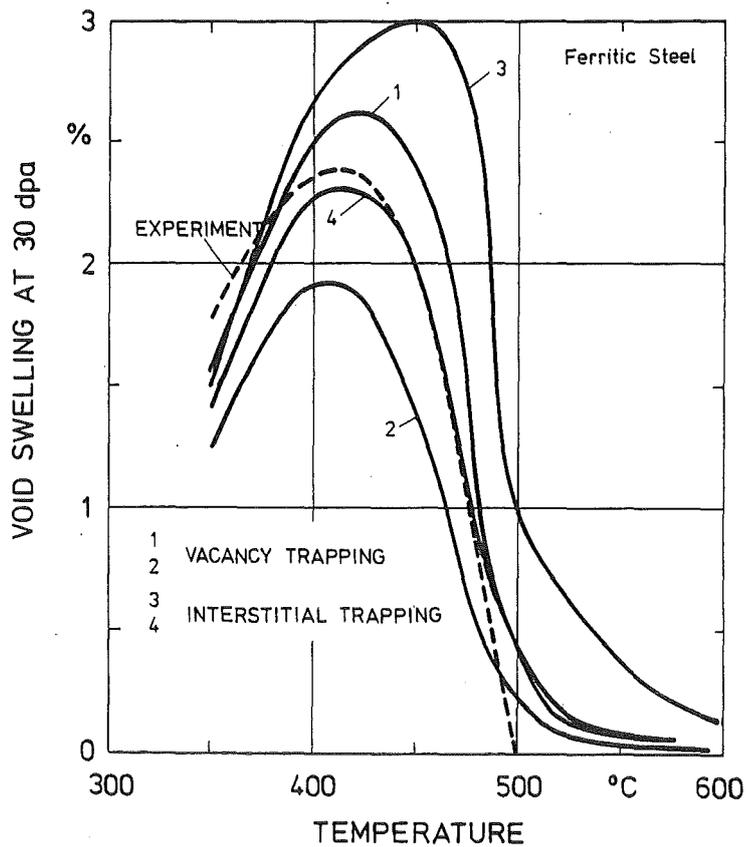
Das Schwellverhalten der Modellwerkstoffe entspricht dem der Ferrite und Austenite. Man kann hieraus folgern, daß der Gittertyp und die damit verbundenen Eigenschaften einen entscheidenden Einfluß auf das Schwellverhalten haben.

2b Legierungselemente

Durch die Hauptlegierungselemente Chrom bei ferritischen sowie Nickel und Chrom bei austenitischen Stählen wird, wie bereits erwähnt, die Gitterstruktur bestimmt.

Der Einfluß der Legierungselemente auf das Schwellen wird zur Zeit durch die Wechselwirkung der substitutionell oder interstitiell gelösten Legierungselemente mit den Punktdefekten, dem sogenannten Trappingmechanismus, erklärt.

Hierzu ein Beispiel aus der Literatur.



nach M.R. Hayns, T.M. Williams
Journal of Nucl. Mat. 74

Bild 3. Schwellen eines ferritischen Stahls - experimentell und theoretisch

Abbildung 3 zeigt den experimentellen Verlauf des Schwellens eines ferritischen Stahls, der mit 1 MeV Elektronen bestrahlt wurde. Eingezeichnet ist außerdem das mit verschiedenen Trappingmodellen berechnete Schwellen. Bei den Kurven 1 und 2 wurde mit einem Leerstellentrapping gerechnet, bei den Kurven 3 und 4 mit einem Zwischengitteratomtrapping.

Am besten wird der experimentelle Verlauf durch die Kurve 4 beschrieben.

Die Kurven 1 und 2 unterscheiden sich nur durch die Konzentration der Trappingzentren. Es ist also möglich das Schwellen durch beide Modelle bei passender Wahl der Parameter zu beschreiben.

2c Löslichkeit und Diffusionsgeschwindigkeit von Kohlenstoff in α -Fe und γ -Fe

Wenn Trappingmechanismen bei der Reduzierung des Schwellens in Ferriten eine Rolle spielen, so ist Kohlenstoff ein möglicher, wenn nicht sogar der Trappingpartner für Gitterdefekte. Entscheidend für die Anzahl der getrappten Defekte ist die Konzentration und der Diffusionskoeffizient von Kohlenstoff in α -Fe und γ -Fe.

Die Diffusionskoeffizienten von Kohlenstoff in α -Fe und γ -Fe in Nickel und einer Eisen-Nickellegierung sind in Bild 4 dargestellt. Der Diffusionskoeffizient von Kohlenstoff in α -Fe ist um 2-3 Zehnerpotenzen größer als in den übrigen Werkstoffen.

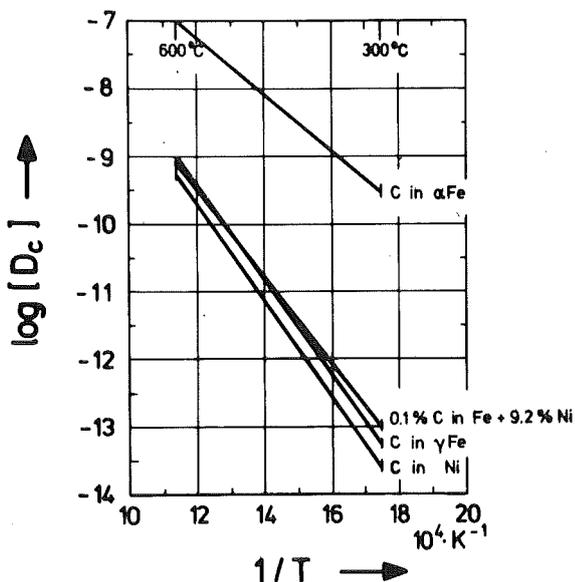


Bild 4. Diffusionskoeffizient von C in α und γ -Fe und Ni

Man erwartet also auf grund dieser Tatsache ein verstärktes Trappen von Defekten in α -Fe durch Kohlenstoff und ein damit verbundenes reduziertes Schwellen.

Um zu prüfen, ob diese Vermutung zutrifft, wurde Eisen und Nickel mit C^+ -Ionen ($E = 200 \text{ keV}$) mit einer Dosis von 30 dpa bestrahlt. Die Bestrahlungstemperatur betrug $525 \text{ }^\circ\text{C}$ und $625 \text{ }^\circ\text{C}$.

Das Schwellen von Nickel (siehe Bild 2) bei der Bestrahlung mit Kohlenstoff liegt deutlich höher als das Schwellen von Nickel bei der Bestrahlung mit Nickel. Für Eisen ist bei der Bestrahlung mit Kohlenstoff nur ein Meßpunkt ($525 \text{ }^\circ\text{C}$) vorhanden. Im Gegensatz zur Bestrahlung mit Nickel tritt hierbei jedoch Porenbildung auf. Die $625 \text{ }^\circ\text{C}$ -Probe wurde bei der Fertigpräparation zerstört.

Wenn ein Trapping von Defekten am Kohlenstoff vorliegen würde, müßte man eine Reduktion des Schwellens bei der Bestrahlung mit Kohlenstoff erwarten. Dies ist jedoch nicht der Fall. Bei der Deutung dieser Versuche ist jedoch Vorsicht geboten: Die Proben wurden zwar mit der gleichen Dosis (30 dpa) bestrahlt, die Schädigungsrate bei den Bestrahlungen mit Kohlenstoff war jedoch um eine Zehnerpotenz kleiner als bei der Bestrahlung mit Nickel. Ein Vergleich der Ergebnisse ist als nur bedingt möglich.

Um den Einfluß des Kohlenstoffs auf das Schwellen genau zu untersuchen ist es notwendig, den Kohlenstoff vor der Bestrahlung zu implantieren. Danach ist eine Bestrahlung unter den gleichen Bedingungen wie bei den Reinstmetallen möglich.

2d Diffusion von Leerstellen und Zwischengitteratomen

In Tabelle 2 und 3 sind exemplarisch einige Literaturdaten der Diffusionskoeffizienten von Eisen, Nickel austenitischen und ferritischen Stählen aufgelistet. Signifikante Unterschiede zwischen Eisen und Nickel bzw. ferritischen und austenitischen Stählen sind nicht vorhanden.

Das unterschiedliche Schwellen durch Diffusionsdaten zu erklären ist also nicht möglich.

	D_i^0 $\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$	D_v^0 $\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$	E_m^v eV	E_m^i eV	E_f^v eV	E_f^i eV	Lit.
αFe		0.5	1.28				/3/
			0.68	0.33			/4/
	0.001	0.58	1.3	0.6			/5/
	0.001	0.58	0.6	0.2			/5/
FV 607	0.001	0.6	1.35	0.3	1.35		/6/

Tab. 2 : Diffusionsdaten von Leerstellen und Zwischengitteratomen in Fe und Ferriten

	D_i^0 $\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$	D_v^0 $\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$	E_m^v eV	E_m^i eV	E_f^v eV	E_f^i eV	Lit.
Ni	0.008	0.19	1.0	0.15	1.77		/7/
	0.12	0.062	1.38	0.15	1.39	4.08	/8/
	0.08	0.19	1.2	0.15	1.6		/9/
	0.008	0.016	1.38	0.15	1.39		/10/
			1.38				/11/
	0.03	0.14	1.38	0.15	1.39		/12/
316	0.001	0.58	1.4	0.2	1.6		/12/
316			1.3			/11/	
FV 548			1.3			/11/	

Tab. 3 : Diffusionsdaten von Leerstellen und Zwischengitteratomen in Ni und Austeniten

$$D_v = D_v^0 \cdot \exp[-E_m^v/k \cdot T] ; \quad D_i = D_i^0 \cdot \exp[-E_m^i/k \cdot T]$$

$D_{v,i}$ = Leerstellen - bzw. Zwischengitteratomdiffusionskoeffizient

$E_m^{v,i}$ = Bewegungsenergie der Leerstellen (v)
bzw. Zwischengitteratome (i)

$E_f^{v,i}$ = Bildungsenergie der Leerstellen (v)
bzw. Zwischengitteratome (i)

2e Korngrößeneffekte

In der Gegenüberstellung der beiden Materialtypen wurde auf den Einfluß der Korngröße auf das Schwellen nicht eingegangen. Sie könnte jedoch einen wesentlichen Einfluß haben.

So hat zum Beispiel der ferritische Stahl 1.4914 eine bedeutend kleinere Korngröße als der austenitische Stahl 1.4970 (Bild 5a und b).

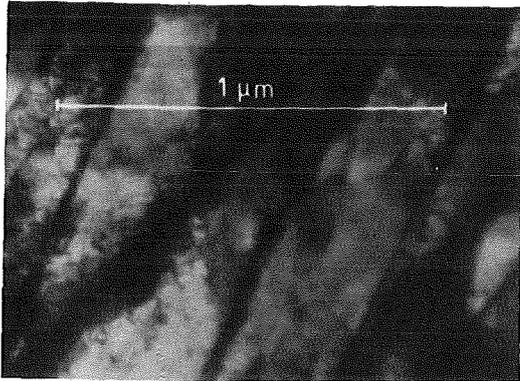


Bild 5a. Korngröße beim ferritischen Stahl DIN 1.4914

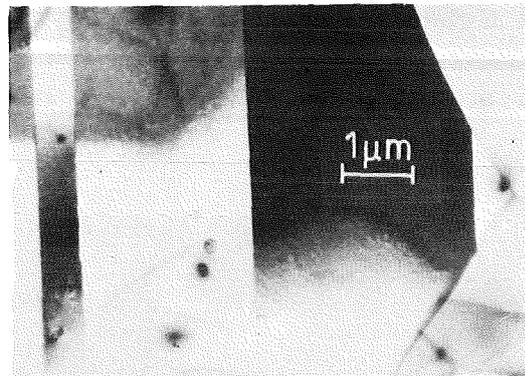


Bild 5b. Korngröße beim austenitischen Stahl DIN 1.4970

Der Einfluß der Korngröße auf das Schwellen kann durch die Reduktion der Leerstellenübersättigung an den Korngrenzen erklärt werden. Dies wird an folgendem Bild erläutert:

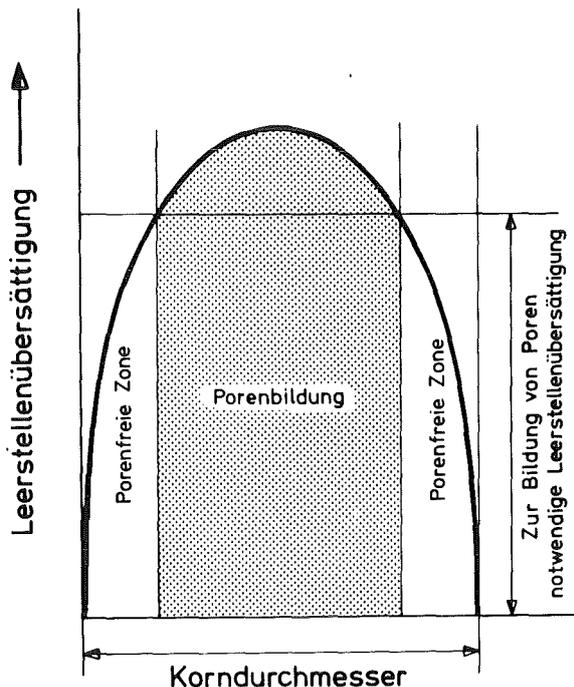


Bild 6. Einfluß der Korngröße auf die Porenbildung

Die Korngrenze stellt für Defekte eine Senke dar. Hierdurch entsteht an den Korngrenzen eine Zone geringerer Leerstellendichte. Zur Porenbildung ist jedoch eine gewisse Leerstellenübersättigung notwendig, die in diesem Fall nur im Inneren des Korns erreicht wird. Am Rande des Korns entsteht deshalb eine porenfreie Zone. Die Dicke der porenfreien Zone ist von der Korngröße unabhängig. Bei genügend kleinen Körnern ist der Anteil der porenfreien Zone am Gesamtvolumen der Körner so groß, daß eine merkliche Reduktion des Gesamtschwellens erfolgt.

Ein anschauliches Beispiel hierfür zeigen die Bilder 7a und 7b.

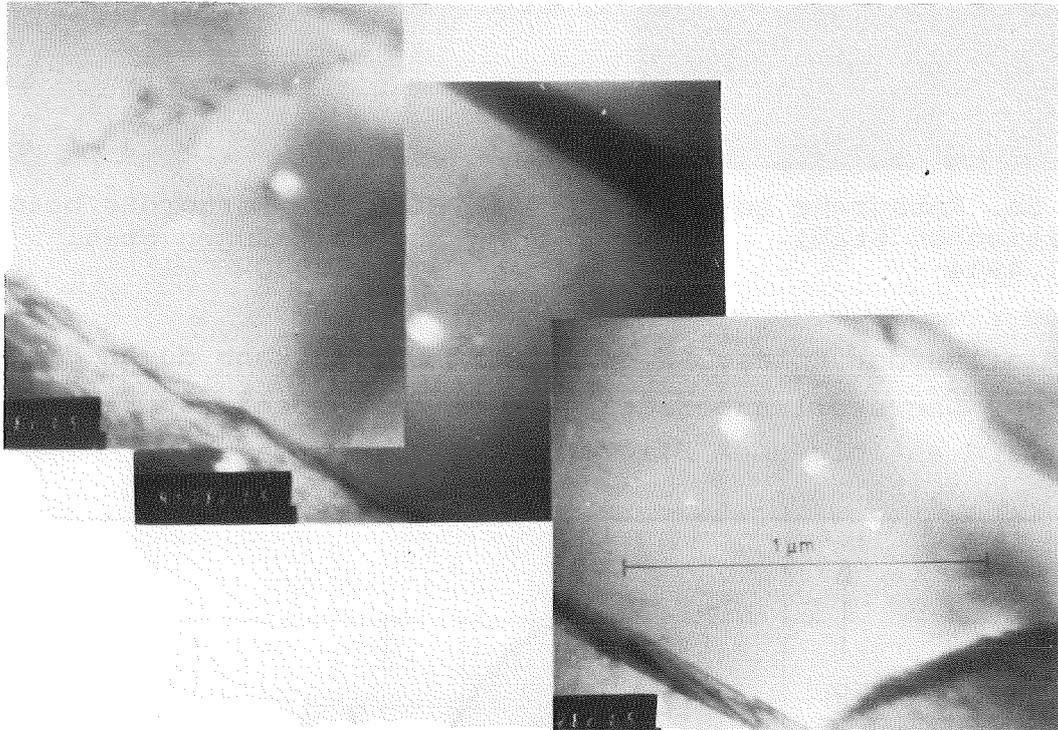


Bild 7a. Cu bestrahlt mit Cu^+ - Ionen $E = 200 \text{ keV}$,
Dosis $\sim 30 \text{ dpa}$, $\vartheta = 475 \text{ }^\circ\text{C}$,
 $\Delta V/V \sim 0,3\%$, Porendichte $\sim 2.5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$

Bild 7a zeigt ein längliches Korn in dem nur in der Mitte Poren auftreten. Die Breite des Korns beträgt etwa 1 μm . Es handelt sich hierbei um Kupfer das mit Kupferionen der Energie 200 keV bei 475 $^{\circ}\text{C}$ mit einer Dosis von 30 dpa bestrahlt wurde.

Die Targets wurden aus einer auf elektrolytischem Wege hergestellten Folie gewonnen. Das Korn der elektrolytisch hergestellten Folie ist extrem klein.

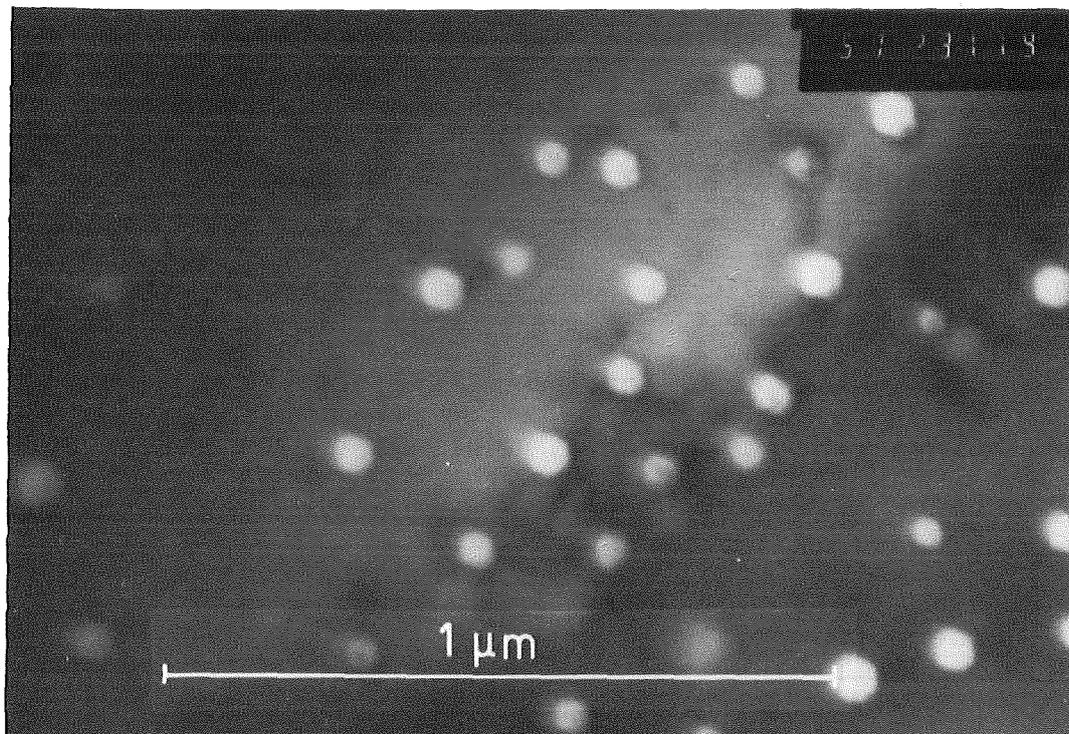


Bild 7b. Cu (Korn $> 5 \mu\text{m}$) bestrahlt mit Cu^+ - Ionen
 $E = 200 \text{ keV}$, Dosis $\sim 30 \text{ dpa}$, $T = 475 \text{ }^{\circ}\text{C}$,
 $\Delta V/V \sim 3\%$, Porendichte $\sim 4 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$

Bild 7b zeigt die Porenverteilung im inneren eines großen Korns. Es handelt sich hierbei ebenfalls um Kupfer, das mit den gleichen Bedingungen bestrahlt wurde.

Die Korngröße könnten also einen großen Einfluß auf das Schwellverhalten der Ferrite und Austenite haben.

3. Zusammenfassung und Ausblick

Der Einfluß des Gittertyps auf das Schwellen von Ferriten und Austeniten kann an den beiden Modellwerkstoffen Eisen und Nickel gezeigt werden. Die hierfür verantwortlichen Mechanismen sind nicht geklärt.

Der Einfluß des Kohlenstoffs auf das Schwellen kann nicht durch Kohlenstoffbestrahlung untersucht werden. Er muß durch eine Vorimplantation des Kohlenstoffs und einer sich anschließenden Bestrahlung erfolgen.

Korngrößeneffekte bei Eisen und Nickel müssen untersucht werden.

Schwerionenbestrahlung von technischen Legierungen zur Überprüfung der so gewonnenen Erkenntnisse müssen sich daran anschließen.

Literatur

- / 1/ H.G. Johnston, J.Nucl. Mat., 54 (1975) 24
- / 2/ M.R. Hayns, T.M. Williams, J. Nucl. Mat., 74 (1978) 151
- / 3/ M. Mondino, A. Seeger, Scripta Metallurgica Vol. 11 (1977) 817
- / 4/ R.A. Johnson, Physical Review, Vol. 134 (1964) p.A. 1329
- / 5/ L.D. Schepper, EPC 1980 Darmstadt
- / 6/ M.R. Haynns, J. Nucl. Mat., 74 (1978) 151
- / 7/ R. Bullong and R.C. Perrin, AEC Symposium Series 26 (1972) 769
- / 8/ J.B. Whitley, G.L. Kulinsky, P. Wilkes, H.V. Smith Jr.,
J. Nucl. Mat., 79 (1979) 159
- / 9/ A.H. Yoo, J. Nucl. Mat., 68 (1977) 193
- /10/ M.H. Yoo, J. Nucl. Mat., 85x86 (1979) 571
- /11/ A. Foremann, B.N. Sing, Proceedings of the International
Conferenc by Irradiation Behaviour of Metallic Materials
for Fast Reactor Core Components, June 1979, Ajaccio Corse
- /12/ S. Maydet, J. Nucl. Mat., 82 (1972) 271

7.) Simulationsbestrahlungen von
ausscheidungshärtenden Al- und Ni-Legierungen

von K. Schmelz

Vortrag anlässlich des Statusberichtes des IRT
am 01.10.1981 in Karlsruhe

In diesem Vortrag wird über die Untersuchungen zum Verhalten von Ausscheidungen in Legierungen bei Bestrahlung berichtet. Für die Versuche haben wir folgende Motivationen:

Motivation

Es sind sehr oft Phasenausscheidungen, die es gestatten, gewünschte mechanische Eigenschaften einer Legierung zu erreichen. So wird bei ausscheidungshärtenden Legierungen die Versetzungsbewegung durch Phasenausscheidungen behindert. Die Bestrahlung kann die Größe und Dichte der Ausscheidungen ändern, diese ganz auflösen oder neue eventuell unerwünschte Ausscheidungen erzeugen. Damit können sich die geforderten mechanischen Eigenschaften signifikant ändern.

Eine weitere Motivation für unsere Untersuchungen ist der Einfluß von Ausscheidungen auf das Porenschwellen. Man findet bei einigen γ' -gehärteten Nickelbasislegierungen, zum Beispiel Nimonic PE 16, ein geringes Porenschwellen. B. Jahnke /1/ fand in seiner Dissertation an unserem Institut auch eine Verringerung des Schwellens durch Ausscheidungen in einer Al-Mg-Si-Legierung.

Ausgangssituation

Die Ausgangssituation dieser Untersuchungen stellt sich wie folgt dar. In der Literatur werden verschiedene Auflösungsmechanismen für Ausscheidungen bei Bestrahlung beschrieben, zum Beispiel der "Recoil"-Mechanismus. Bei geordneten Ausscheidungen kann es zur "Disorder"-Auflösung kommen.

Eine weitere Ursache für die Veränderung der Ausscheidungsstruktur ist der bei bestimmten Temperaturen durch die Bestrahlung stark erhöhte Diffusionskoeffizient. Dies ist eine Folge der erhöhten Leerstellen- und Zwischengitteratomkonzentrationen. Durch die Bestrahlung werden so Vorgänge ermöglicht, die bei den gegebenen Temperaturen rein thermisch nicht ablaufen können. Es kann auf Grund dieser Ursachen zur Auflösung oder Veränderung bestehender Ausscheidungen kommen.

Allgemein kann man jedoch feststellen: es liegt kein einheitliches Bild über das Verhalten selbst strukturell vergleichbarer Ausscheidungen bei Bestrahlung vor. Im Gegensatz zum Porenschwellen ist es bis jetzt bei Ausscheidungen nicht möglich, hinreichend gut von Schwerionenbestrahlungen auf Neutronenbestrahlungen zu schließen. Bei solchen Vergleichen fand man bisweilen stark abweichende Ergebnisse.

Direkt für uns bot sich die Möglichkeit, an die Arbeiten von W.V. Vaidya /2/ und B. Jahnke /1/ anzuknüpfen. Vaidya bestrahlte in Karlsruhe einige γ' -härtende Nickellegierungen, eine Al-Mg-Si-Legierung und eine Eisen-Kupfer-Legierung. Jahnke untersuchte in Darmstadt das Porenschwellen in Aluminium und einer Al-Mg-Si-Legierung mit verschiedenen Ausscheidungszuständen. Wir konnten von ihm die vorhandene Legierung und einige experimentelle Erfahrungen übernehmen.

Al-Mg-Si-Legierungen

Zunächst wird über die Arbeiten von U. Scheuer /3/ mit einer quasibinären Al-Mg-Si-Legierung der Zusammensetzung A-1,5% Mg_2Si berichtet. Diese Legierung wurde ausgewählt, weil das Porenschwellen bei Simulationsbestrahlungen bereits bekannt war. Die Untersuchung des Ausscheidungsverhaltens bei den Bestrahlungen boten sich also direkt an. Außerdem war die Präparation weitgehend erschlossen.

Bestrahlt wurden Proben, die β'' oder β' -Ausscheidungen enthielten. Beide Phasen wirken härtend, es sind geordnete Ausscheidungen der Zusammensetzung Mg_2Si .

Die β'' -Nadeln sind kohärent und haben monokline Struktur. Sie wurden nach dem Lösungsglühen durch eine 26 Stunden Auslagerung im Ölbad bei 180 °C erzeugt.

Die β' -Ausscheidungen haben Stäbchenform, eine tetragonale Struktur und sind teilkohärent. Sie wurden nach dem Lösungsglühen durch 30 Minuten auslagern im Vakuum bei 300 °C erzeugt.

Die wärmebehandelten Legierungen wurden in bekannter Weise elektrolytisch vorpoliert und am Testinjektor der GSI in Darmstadt bestrahlt. Die Bestrahlungen erfolgten mit 240 keV Aluminiumionen bis zu Dosen von 60 dpa. Die Bestrahlungstemperaturen waren 50, 150, 195 und 250 °C. Nach der Bestrahlung wurden die Proben an unserem Elektronenmikroskop im Hellfeld und im Dunkelfeld untersucht.

Ergebnisse

Die β'' -Ausscheidungen zeigten nur einen sehr geringen Kontrast und keine Überstrukturreflexe. Sie konnten nur in Anwesenheit von Biegekonturen abgebildet werden. Die Auswertung mußte sich daher auf qualitative Aussagen beschränken. Die Bestrahlung führte sowohl bei 50 °C als auch bei 150 °C zur Auflösung der Ausscheidungen.

Die β' -Ausscheidungen wurden quantitativ ausgewertet. Als Meßparameter wurden die Ausscheidungsdichte und der Stäbchendurchmesser gewählt. Bei den Ergebnissen kann man zwischen zwei Fällen unterscheiden:

1. die Bestrahlungen bei 50 und 195 °C
2. die Bestrahlung bei 250 °C

Exemplarisch für den Bereich von 50-195 °C wird in Abb. 1 an der 50 °C Bestrahlung die relative Änderung der Ausscheidungsdichte mit der Dosis vorgestellt.

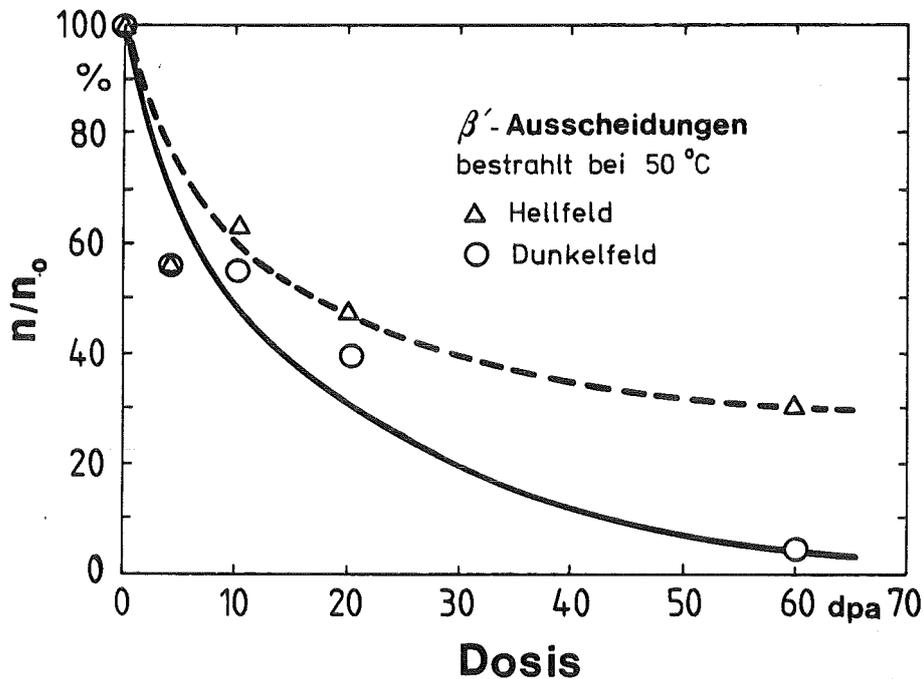


Abb. 1 Änderung der Dichte von β' -Ausscheidungen in der Al-Mg-Si-Legierung mit der Bestrahlungsdosis /3/

Die untere durchgezogene Linie markiert den Verlauf für Ausscheidungen, die im Dunkelfeld abgebildet wurden. Das sind Teilchen, deren innere Ordnung auch nach der Bestrahlung noch erhalten ist. Sie erzeugen noch Überstrukturreflexe. Die unterbrochene Linie wurde aus Messungen im Hellfeld bestimmt. Dabei handelt es sich vorwiegend um Teilchen deren Ordnung zerstört ist, deren Atome aber noch nicht das ursprüngliche Volumen verlassen haben. Für die Zerstörung der Gitterordnung sind also geringere Dosen notwendig als für die permanente Verlagerung von Atomen.

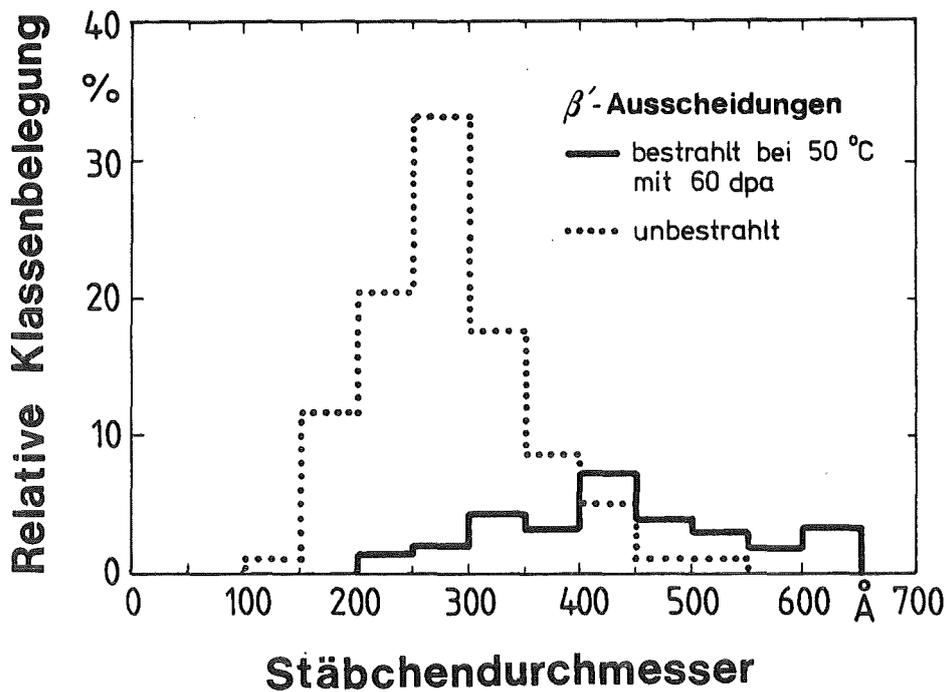


Abb. 2 Veränderung der Durchmesser­verteilung der β' -Stäbe in der Al-Mg-Si-Legierung nach einer Bestrahlung von 60 dpa bei 50 °C /3/.

In Abb. 2 sieht man wiederum beispielhaft an der 50 °C Bestrahlung die Veränderung der Durchmesser­verteilung der β' -Stäbe. Der unbestrahlte Zustand ist punktiert dargestellt, die Bestrahlung nach 60 dpa durchgezogen. Die Fläche der Verteilung für die unbestrahlte Legierung entspricht 100%. Die Fläche der Verteilung für die bestrahlte Legierung ist wegen der Reduktion der Teilchendichte kleiner. Man sieht, daß kleine Teilchen mit Durchmessern unter 200 Å nicht mehr auftauchen. Dagegen findet man am oberen Ende oberhalb 550 Å noch Ausscheidungen, die durch die Bestrahlung gewachsen sind. Schon an dieser Verteilung erkennt man, daß der mittlere Teilchendurchmesser während der Bestrahlung ansteigt.

Die Bestrahlungen bei 250 °C zeigen ein anderes Verhalten. Die bestrahlten Proben zeigten sowohl in der Teilchendichte wie auch in der Durchmesser­verteilung keinen wesentlichen Unterschied zu den Referenzproben. Diese Referenzproben werden von uns immer direkt neben den bestrahlten Proben abgedeckt montiert. Sie er-

fahren daher die gleiche thermische Behandlung wie die bestrahlten Proben, werden aber nicht bestrahlt. Bei den 250 °C Bestrahlungen überwiegen also die thermischen Effekte den Bestrahlungseinfluß wesentlich, obwohl die Auslagerungen bei 300 °C durchgeführt wurden.

Diskussion

Die Ergebnisse sind zunächst überraschend, weil sie mit den bekannten Modellen nicht übereinstimmen. Die Bestrahlungen bei 50 und 195 °C lassen vermuten, daß ein Vergrößerungsprozeß abläuft. Ähnlich wie bei einer rein thermisch bedingten Vergrößerung kommt es zum Wachsen großer und zum Auflösen kleiner Ausscheidungen.

Es wurde daher ein Modell entwickelt /3/, das den Einfluß der stark erhöhten Diffusion während der Bestrahlung auf die Vergrößerung berücksichtigt. Eine Auflösung der Ausscheidungen durch "Recoil"- oder "Disorderprozesse" wurde ebenfalls in das Modell aufgenommen.

Mit diesem Modell wurde die Verteilung der Stäbchendurchmesser nach einer Bestrahlung mit 60 dpa bei 50 °C berechnet. In Abb. 3 ist das Ergebnis dargestellt. Die aus der punktiert gezeichneten Ausgangsverteilung berechnete Endverteilung ist durchgezogen eingetragen. Gestrichen wurde die gemessene Verteilung eingezeichnet. Man sieht: Das Verschwinden kleiner Teilchen und Wachsen großer Teilchen wird durch das Modell beschrieben.

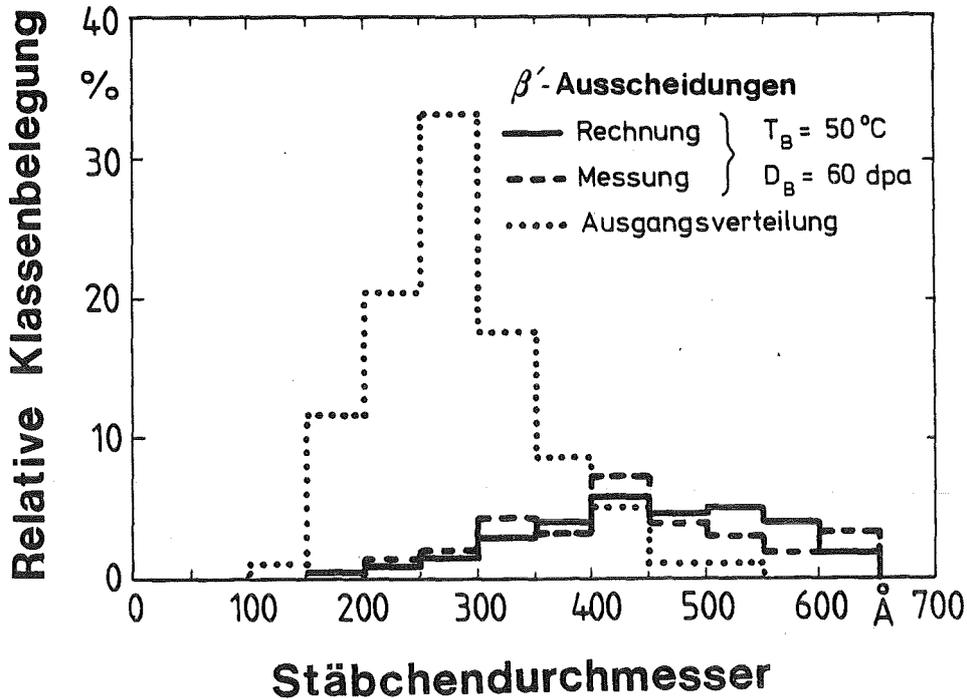


Abb. 3 Vergleich der mit dem Modell berechneten Verteilung nach der Bestrahlung mit den gemessenen Werten der β' -Ausscheidungen /3/

Die relative Abnahme der Ausscheidungsichte während der Bestrahlung wurde ebenfalls berechnet. Auch hier wurde das Modell durch die Messungen bestätigt. Die vollständige Auflösung der Ausscheidungen bei sehr hohen Dosen wird durch das Modell beschrieben.

Mit dem Modell kann auch das gefundene Temperaturverhalten erklärt werden. Die Bestrahlungen bei 50 und 195 °C unterscheiden sich nur wenig in der strahlungsinduzierten Diffusion, so daß ihr ähnliches Verhalten verständlich ist. Dagegen überwiegt bei 250 °C der thermische Anteil des Diffusionskoeffizienten den bestrahlungsinduzierten Anteil. Deshalb wird das Ausscheidungsverhalten bei der 250 °C Bestrahlung durch die thermische Vergrößerung bestimmt.

Neutronenbestrahlungen haben keine Veränderungen der Ausscheidungen gezeigt. Dieses Verhalten kann auch mit unserem Modell erklärt werden. Die "Recoil"- und "Discorderauflösung" ist sehr klein. Wegen der geringen Defektproduktion bei Neutronenbestrahlungen kann die bestrahlungsinduzierte Diffusion noch keine merkliche Vergrößerung verursachen.

Für zukünftige Tests des Modells empfiehlt sich die Auswahl einer binären Legierung mit möglichst einfachen Entmischungsverhalten und kugelförmigen Ausscheidungen. Bei den Bestrahlungen sollte die Defektproduktionsrate, also die Stromdichte variiert werden. Vor der Bestrahlung sollten die Wachstumsparameter gemessen werden und die bestrahlungsinduzierten Diffusionskoeffizienten bekannt sein.

Ni - Legierungen

Weiterhin soll über die an unserem Institut zur Zeit laufenden oder geplanten Arbeiten an Nickelbasislegierungen berichtet werden. Bekanntlich ist diese Legierungsgruppe als Strukturmaterial für zukünftige Reaktoren besonders interessant wegen ihrer Hochtemperaturfestigkeit und Schwellresistenz.

Wir wollen an die Arbeiten von Vaidya /2/ aus Karlsruhe anschließen. Vaidya hat auf Grund seiner experimentellen Befunde eine Hypothese aufgestellt. Danach sind die Randversetzungen an den Ausscheidungen Senken für herausgestoßene Atome. Die Atome werden so am Wegdiffundieren gehindert. Damit stabilisieren die Randversetzungen die Ausscheidungen bei der Bestrahlung.

Unsere Absicht ist es, diese Hypothese an technischen γ' -härtenden Nickelbasislegierungen zu prüfen. Wir wollen einmal die Verspannung der Ausscheidungen gegenüber der Matrix variieren, weiterhin beabsichtigen wir, außer den γ' -Ausscheidungen auch γ'' -Ausscheidungen zu untersuchen.

In einer Darstellung nach Decker und Mihalisin /4/ (Abb.4) findet man oben eine Zusammenstellung von Legierungen mit positiv verspannten γ' -Ausscheidungen. Die unten aufgeführten Legierungen haben weitgehend unverspannte γ' -Ausscheidungen. Die Pfeile sollen den Einfluß einzelner Zulegierungen auf die Verspannung andeuten.

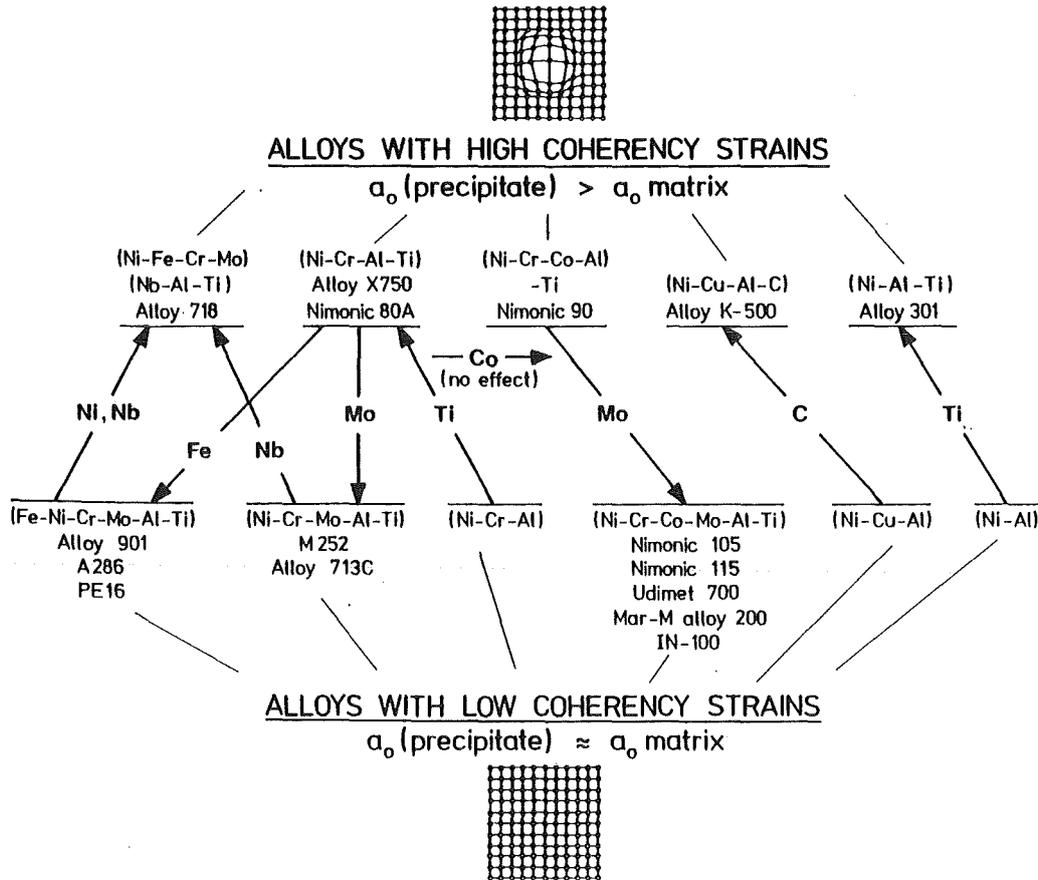


Abb. 4 Schematische Zusammenstellung einiger γ' härtender Nickellegierungen mit unterschiedlicher Verspannung zwischen Matrix und γ' -Ausscheidungen nach /4/

Von den angegebenen Werkstoffen haben wir zunächst für Versuche vorgesehen: Nimonic 105 und Nimonic 90. Diese Paarung unterscheidet sich in der Verspannung der Ausscheidungen. Nachteilig bei beiden Legierungen ist jedoch der hohe Kobaltgehalt, ein Umstand, der dem Einsatz in Reaktoren entgegensteht. Diese Untersuchungen sind daher mehr grundsätzlicher Natur.

Wir wollen auch die kerntechnisch relevanten Werkstoffe Nimonic PE 16, eine unverspannte Legierung, und dagegen Alloy 718, eine verspannte Legierung, untersuchen. Weiterhin beabsichtigen wir, Inconel 706 mit in das Programm aufzunehmen.

Mit den Legierungen Alloy 718 und Inconel 706 bietet sich die Möglichkeit, den Einfluß der Bestrahlung auf unterschiedliche Ausscheidungen zu untersuchen. In beiden Legierungen kann durch geeignete Wärmebehandlungen die tetragonale γ'' -Ni₃Nb-Phase erzeugt werden. Diese Ausscheidungen sind geordnet und können im

Dunkelfeld durch Überstruktureflexe abgebildet werden, eine wesentliche Voraussetzung für quantitative Untersuchungen.

Der augenblickliche Stand dieser Arbeiten ist folgender. Wir müssen noch teilweise die zu bestrahlenden Ausscheidungszustände festlegen. Bestrahlt wurde bis jetzt Nimonic 105, mit der Auswertung haben wir begonnen. Inconel 706 wurde gerade vor kurzem bestrahlt, Nimonic PE 16 ist weitgehend vorbereitet.

Zum Abschluß soll noch ein Vorteil unserer Simulationsbestrahlungen angesprochen werden, der sich für die Untersuchungen des Ausscheidungsverhaltens ergibt. Die hohen Defektproduktionsraten von bis zu 1 dpa/sec bringen einen enormen Zeitgewinn. Wir können daher in relativ kurzer Zeit viele Proben bestrahlen. Das erlaubt uns zum Beispiel, bei einer Legierung mehrere Wärmebehandlungszustände, also unterschiedliche Ausscheidungsstadien, zu untersuchen. Da jedoch in diesem Zeitrafferverfahren thermische Langzeiteffekte nicht hinreichend gut erfaßt werden können, ist eine Variation der Defektproduktion, also des Ionenstroms, angeraten.

Literatur

- /1/ B. Jahnke, Porenbildung in einer Al-Mg-Si-Legierung mit unterschiedlichen Ausscheidungszuständen und in Reinstaluminium nach Bestrahlung mit 100 keV Al-Ionen, Dissertation, Technische Hochschule Darmstadt, 1978, KfK 2614
- /2/ W.V. Vaidya, Über den Einfluß der Bestrahlung auf die Stabilität von Ausscheidungen, Dissertation, Universität Karlsruhe, 1977, KfK 2567
- /3/ U. Scheuer, Schwerionenbestrahlung von Al-Mg-Si-Legierungen zur Untersuchung der Stabilität von Ausscheidungen, Diplomarbeit D-225-5, Institut für Reaktortechnik der Technischen Hochschule Darmstadt, 1981
- /4/ R.F. Decker, J.R. Mihalisin, Coherency Strains in γ' Hardened Nickel Alloys, Transactions of the ASTM, Vol. 62, 1969, S. 481-489

8.) Zusammenfassende Darstellung des experimentellen Programms
zur Simulation von Strahlenschäden - Stand und Ausblick.

von K. Ehrlich

Vortrag anlässlich des Statusberichtes des IRT am 01.10.1981
in Karlsruhe

Bekanntlich zeigen technische Legierungen hinsichtlich ihres Schwellverhaltens unter Neutronenbestrahlung deutliche Schwankungen von einer zur anderen Materialcharge. Eine Möglichkeit, diesen Sachverhalt zu erklären, liegt in der Wirksamkeit von Legierungselementen niedriger Konzentration auf die Beweglichkeit von Leerstellen. Mit Hilfe des sog. Trappingmodells sollte bei einer bevorzugten Bindung von Leerstellen an substitutionell gelöste Atome eine Schwellreduzierung zu erreichen sein, Abb.1.

Anfang 1974 begannen im IRT entsprechende Untersuchungen an geeignet erscheinenden binären Kupferlegierungen, wobei die Porenbildung mit Hilfe von Cu-Ionen Bestrahlung simuliert wurde.

Die von Gieseke /1/ durchgeführten Experimente konnten jedoch nur teilweise die theoretisch vorhergesagte Schwellminderung als Funktion der Konzentration der zulegierten Elemente und der Bindungsenergie von Leerstellen-Atomkomplexen bestätigen, nämlich für die Zulegierung von Magnesium und Indium (Abb.2).

Zu diesem Zeitpunkt schlossen Venker und Ehrlich /2/ aus einer Reihe experimenteller Beobachtungen, daß sogenannte schnelldiffundierende Legierungselemente das Schwellen reduzieren könnten. Es lag daher nahe, in Fortführung zu der Arbeit von Gieseke, an weiteren einfachen Kupferlegierungen entsprechende Bestrahlungsexperimente durchzuführen. Die aus den durchgeführten Untersuchungen vorliegenden Ergebnisse sind im Rahmen dieser Veranstaltung von Herrn Leister dargestellt worden. Es scheint so, als ob auch das Diffusionsmodell die Ergebnisse nicht konsistent beschreiben kann. Man muß freilich hinzufügen, daß die an den Legierungen vorliegenden Diffusionsmessungen der Literatur zu entnehmen waren und deshalb noch gewisse Unsicherheiten bei der Interpretation der Ergebnisse vorliegen.

Hingegen wurde Übereinstimmung mit diesem Modell bei der Untersuchung von Fe-15 Cr-15 Ni-Legierungen erzielt, die mit unterschiedlichem Siliziumgehalt erschmolzen worden waren, Abb.3 /3/.

Eine eingehende Diskussion der nun vorliegenden Ergebnisse wird im Rahmen der bevorstehenden Dissertation von Herrn Leister erfolgen. Außerdem wird zu dieser Fragestellung von einigen Neutronenexperimenten, die das IMF anhand ausgewählter austenitischer Modell-Legierungen durchgeführt, eine abschließende Wertung von Trapping - bzw. Diffusionsmodell erwartet.

Ein anderes Schwerpunktsthema am IRT betrifft das Verhalten von Ausscheidungen im Hinblick auf die Porenbildung und die Stabilität unter dem Einfluß von Ionenbestrahlung. Zunächst wurde anhand einer ausscheidungsfähigen Aluminiumlegierung Al-Mg-Si nachgewiesen, daß die durch eine geeignete Wärmebehandlung erzeugten kohärenten Ausscheidungen zur Schwellunterdrückung führen, während inkohärente Ausscheidungen dies nicht tun Abb.4 /4,5/. Diese Ergebnisse stehen im Einklang mit den bereits vorangehenden theoretischen Überlegungen zur Wechselwirkung von Spannungsfeldern kohärenter Ausscheidungen mit Leerstellen.

Gegenwärtig werden orientierende Untersuchungen an den γ' -, bzw. γ'' -härtenden Legierungen PE 16, Inconel 706 und Inconel 718 durchgeführt, die das Ziel haben eingehendere Kenntnisse über die Stabilität der γ' - bzw. γ'' -Ausscheidungen in Abhängigkeit von den externen Bestrahlungsparameter zu studieren. Herr Schmelz berichtete eingehend über die Motivation und die ersten Experimente zu dieser Fragestellung im Rahmen dieser Veranstaltung.

Schließlich soll im Rahmen einer weiteren Dissertation untersucht werden, welche physikalischen Ursachen hinter dem sehr unterschiedlichen Schwellverhalten austenitischer und martensitischer Stähle liegt. Zwar existieren bereits einige theoretische Ansätze, die ein solches Verhalten nachträglich erklären, jedoch entbehren sie unseres Erachtens nach einer vernünftigen physikalischen Basis. Es ist vorgesehen den Stahl 1.4970 als den austenitischen Werkstoff und 1.4914 als den martensitischen Stahl für diese Untersuchungen heranzuziehen. Herr Exel berichtete über den Stand der Untersuchungen.

Die beiden letztgenannten Themen - "Stabilität von Ausscheidungen unter Bestrahlung" und "Schwellverhalten austenitischer Stähle im Vergleich zu martensitischen Werkstoffen" - werden in den nächsten Jahren im Rahmen der Simulation von Strahlenschäden am IRT schwerpunktmäßig bearbeitet werden.

Literatur:

- /1/ P. Gieseke, Einfluß substitutionell gelöster Fremdatome auf die Porenbildung in binären Kupferlegierungen, Dissertation an der T.H. Darmstadt und KfK-Bericht 2639, Juni 1978
- /2/ H. Venker und K. Ehrlich, Relation between Partial Diffusion Coefficients in Alloys and their Swelling Behaviour under Fast Neutron Irradiation, J. Nucl. Mater. 60 (1976) 347-349
- /3/ W.V. Vaidya, G. Hecker und K. Ehrlich, Unveröffentlichte Ergebnisse
- /4/ B. Jahnke, Porenbildung in einer Al-Mg-Si-Legierung mit unterschiedlichen Ausscheidungszuständen und in Reinstaluminium nach Bestrahlung mit 100 keV Al-Ionen, Dissertation T.H. Darmstadt und KfK-Bericht 2614, März 1978
- /5/ B. Jahnke und K. Ehrlich, Void Formation in an Al-Mg-Si-Alloy under different Precipitation Conditions after Irradiation with 100 keV Al Ions, J. Materials Science, 15 (1980), 831

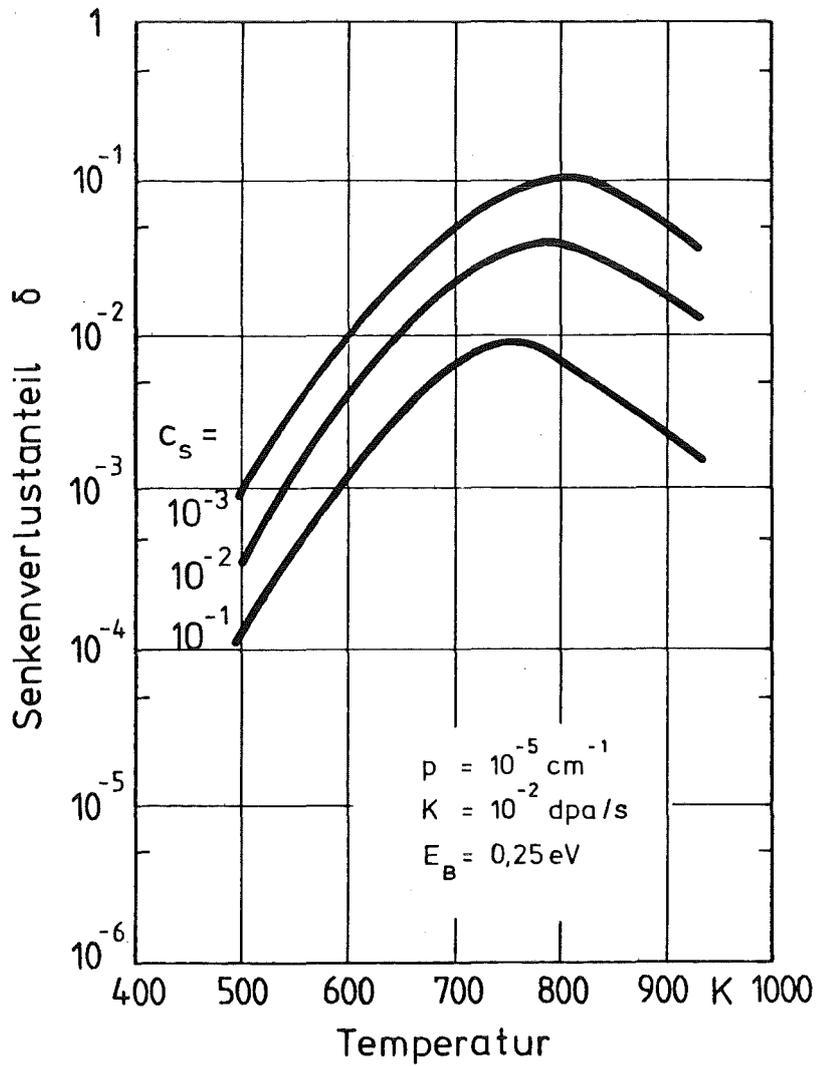


Abb. 1 Reduzierung des Senkenverlustanteils δ (Schwellreduzierung) als Funktion der Fremdatomkonzentration c_s in binären Kupferlegierungen /1/.

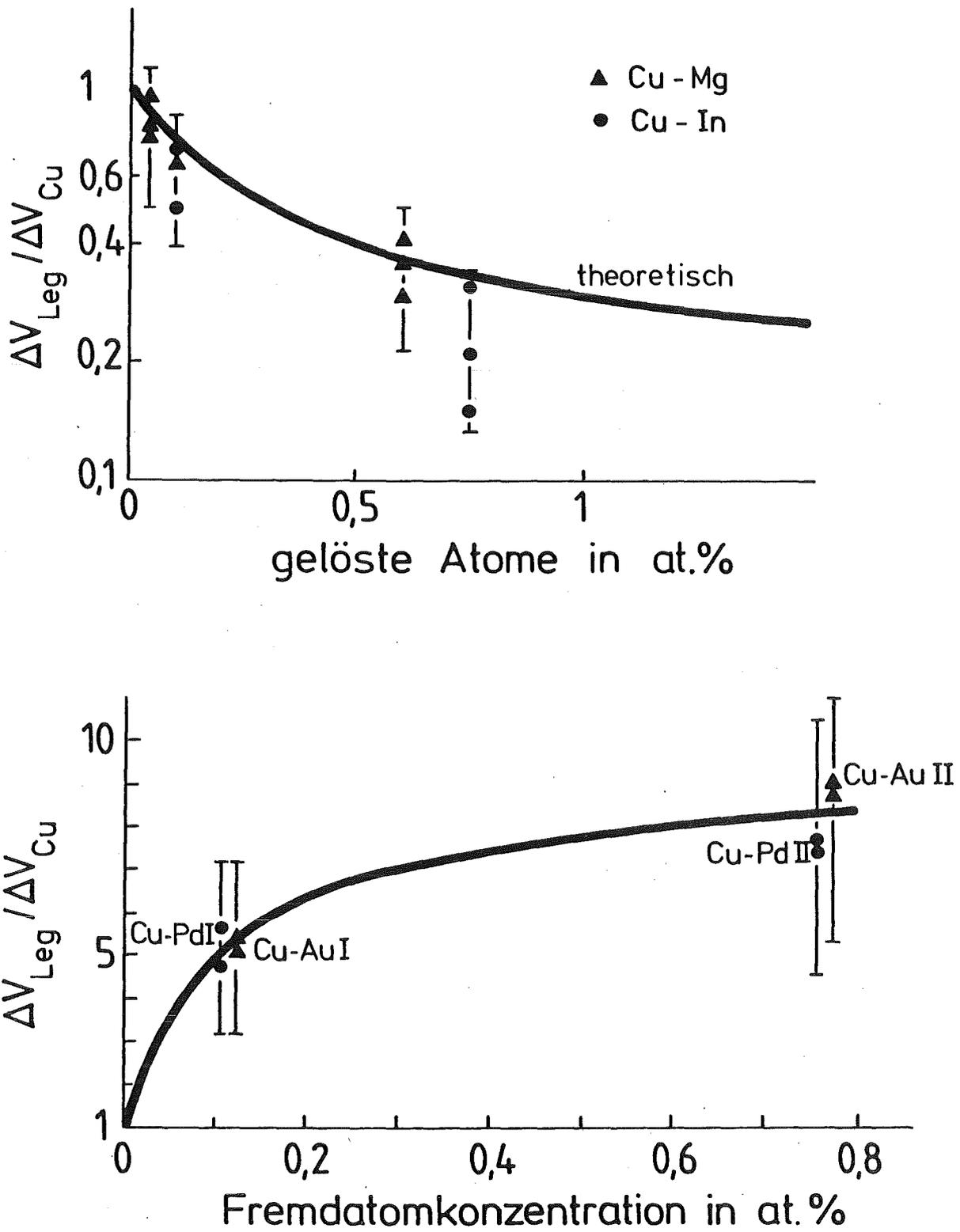


Abb. 2 Vergleich des Schwellverhaltens binärer Cu-Legierungen mit Reinstkupfer als Funktion der Zulegierung /1/.

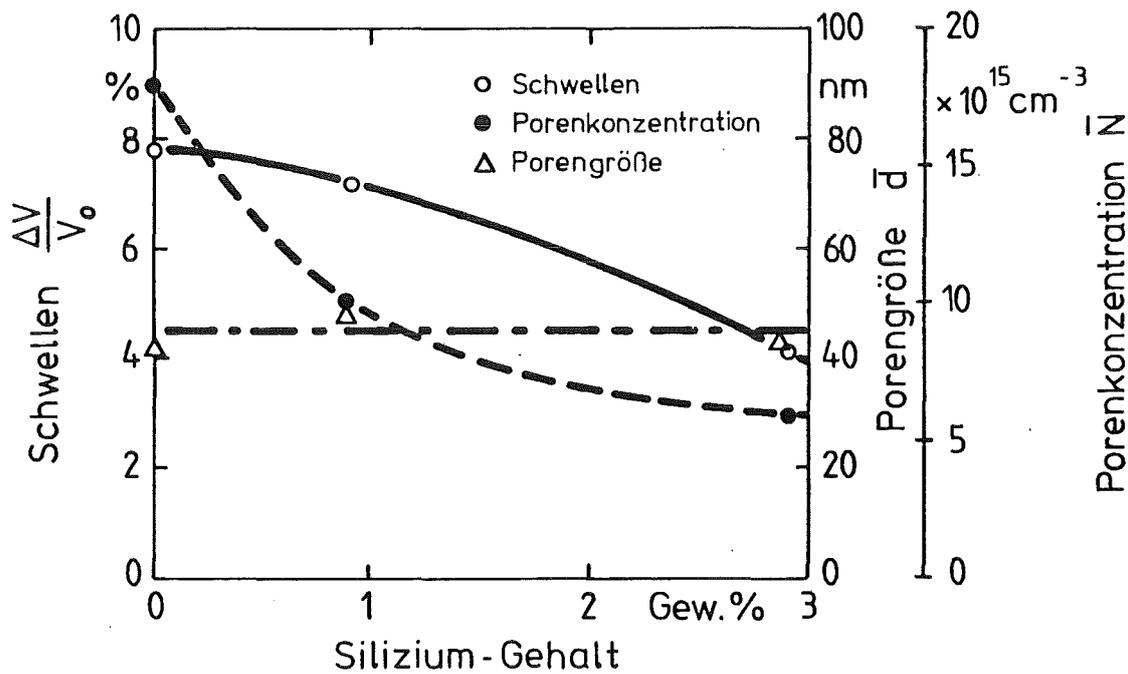


Abb. 3 Einfluß von Silizium auf die Schwelleigenschaften der Legierung Fe - 15 Cr - 15 Ni - Si Bestrahlungstemperaturen 575 °C, Dosis 70 dpa /3/.

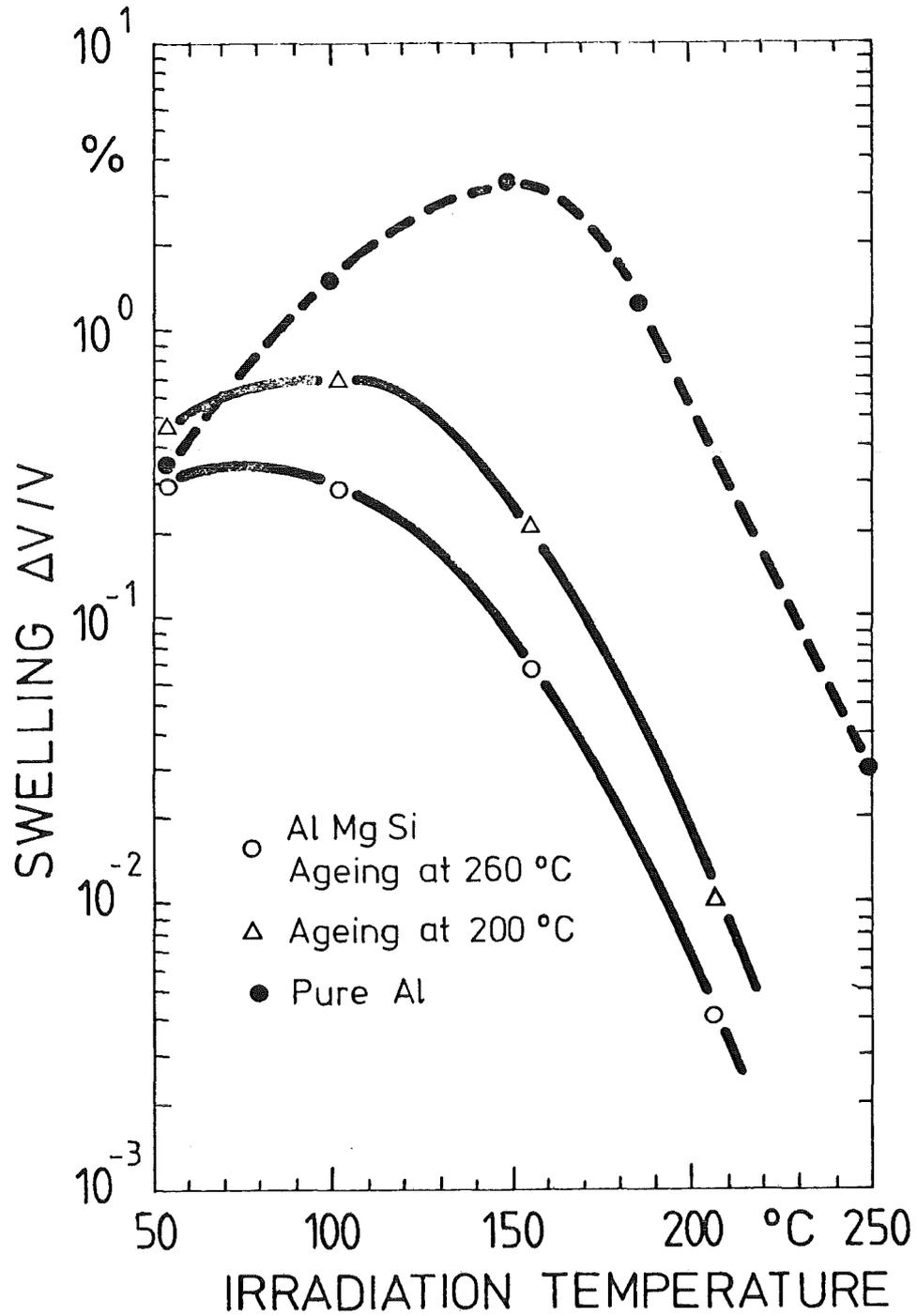


Abb. 4 Schwellverhalten der Legierung Al-Mg-Si mit inkohärenten Mg_2Si -Ausscheidungen im Vergleich zu Al. /4,5/ Dosis: 8×10^{16} Ionen/cm²