

# 核燃料用 $\gamma$ -U 合金的成分规律

苑峻豪<sup>1</sup>, 董丹丹<sup>2</sup>, 王清<sup>1</sup>, 王英敏<sup>1</sup>, 羌建兵<sup>1</sup>, 李晓娜<sup>1</sup>, 董闯<sup>1</sup>, 黄火根<sup>3</sup>,  
柯海波<sup>3</sup>, 张培<sup>3</sup>, 张鹏国<sup>3</sup>, 刘天伟<sup>4</sup>

(1. 大连理工大学 三束材料改性教育部重点实验室, 辽宁 大连 116024)

(2. 大连大学, 辽宁 大连 116622)

(3. 中国工程物理研究院, 四川 江油 621907)

(4. 表面物理与化学重点实验室, 四川 江油 621907)

**摘要:** 铀合金作为一种重要核燃料, 其体心立方结构的高温稳定的  $\gamma$ -U 合金具有较好的综合性能, 是合金设计所追求的目标。本文引入描述稳定固溶体结构的“团簇加连接原子”模型, 用于建立  $\gamma$ -U 固溶体合金的结构模型和相应成分式, 指出其结构单元为体心立方第一近邻配位多面体团簇加 3 个连接原子构成。进而利用该结构单元对现有合金成分进行了解析, 能够稳定形成体心立方 bcc 结构的合金均满足上述模型, 如  $[\text{Mo-U}_{14}]\text{Mo}_3$  (U-10.7Mo),  $[\text{Zr-U}_{14}]\text{Nb}_3$  (U-7.5Nb-2.5Zr, 即不锈钢) 等, 这些合金实际上均在各自体系中具有最优良的结构稳定性, 显示出优异的耐蚀性。本文证实, 基于团簇加连接原子模型的成分设计方法在预测  $\gamma$ -U 合金成分与性能上具有重要指导价值。

**关键词:** 铀合金; 团簇加连接原子结构模型; 固溶体; 成分; 耐蚀性能

中图分类号: TG146.8

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2020)01-0225-08

## 1 核燃料的历史演变

随着核工程的发展, 作为核电站主要应用的轻水反应堆也在不断改进。到现在为止, 人们已经在普遍使用第 3 代反应堆, 并且第 4 代反应堆也在紧锣密鼓地研发中。随着反应堆产能效率的提高, 人们对堆内核燃料的各项性能指标也有了更高的要求。例如, 在早期的沸水反应堆中, 核燃料在 70 个大气压 285 °C 的沸水中运行; 而在随后的压水反应堆中, 燃料需要维持在 150 个大气压大于 300 °C 的水中使用<sup>[1]</sup>; 到现在还在研发中的第 4 代超临界水堆中, 更是达到了 250 个大气压 500 °C 的超临界水环境。

在人们对核燃料外界环境提出更高要求的同时, 随着美国提出降低试验和研究用反应堆富集度计划 (reduced enrichment for research and test reactor, RERTR), 在全世界范围内拥有核技术的国家也相继开始降低核燃料的富集度。20 世纪 50、60 年代时, 早期核反应堆所使用的核燃料均为 U-235 低富集度的燃料<sup>[2]</sup>。随着人们对高功率的追求, 高富集度核燃料一度兴起, 这样的核燃料有着较高的功率和较长的循环周期, 一度被广泛使用<sup>[3]</sup>。但是随着接下来的研究,

人们意识到高密度的民用核燃料会极大地提高核扩散的风险。富集度为 90% 以上的高富集核燃料甚至可以直接作为核武器的原料。随着 1974 年印度进行核试验后, 美国的核不扩散政策发生了重大转变, 开始限制高富集度核燃料的流通与出口。1978 年, 美国能源部提出了降低研究和实验反应堆用燃料富集度计划 (RERTR)<sup>[3]</sup>, 旨在降低民用核工业中高富集度核燃料的使用, 逐渐以低富集度核燃料代替高富集燃料。在全球范围内限制铀浓缩的基础上, 没有了高富集度核燃料的流通, 也就极大地限制了核武器的研发, 大大降低了核扩散的潜在风险。

以低富集度燃料替代高富集度燃料, 为了保证核电站的发电功率, 就必须保证 U-235 在反应堆中的数量, 以低富集度燃料取代高富集度燃料。故提高燃料的铀密度, 增加反应堆内的燃料数量, 就成了使用低富集度燃料后的通用办法。

目前, 根据国际核燃料循环评估 (international nuclear fuel cycle evaluation, INFCE) 会议提出的意见, 低富集度化准则归结为以下 4 点: (1) 反应堆的安全裕度不降低, (2) 燃料元件的可靠性不降低, (3) 反应堆的性能下降在一定范围内, (4) 运行费用上升在

收稿日期: 2019-01-22

基金项目: 国家重点研发计划(2017YFB0702400); 科学挑战专题(TZ2016004); 表面物理与化学重点实验室学科发展基金(XKFZ201706)

作者简介: 苑峻豪, 男, 1993 年生, 博士生, 大连理工大学三束材料改性教育部重点实验室, 辽宁 大连 116024, E-mail: yuanjunhao@outlook.com

一定范围内。目前 RERTR 项目的主要方向之一就是开发高密度核燃料<sup>[4]</sup>。

铀合金燃料较之于铀陶瓷,有着导热性好,铀密度高,加工性能好等优点,但是在尺寸稳定性、抗辐照肿胀方面有着明显的劣势。近年来,由于人们对铀密度的要求越来越高,曾经一度被铀陶瓷燃料所替代的铀合金燃料重新回到人们的视野。美国等国家已经在研发与应用方面已经取得了一系列进展。

## 2 燃料用铀合金特性

作为燃料用铀合金,需要满足尺寸稳定性、强度、耐蚀性、抗辐照等一系列条件。特别是耐蚀性,对于燃料来说,其需要在具有辐照,高温高压水环境的条件下长时间运行,其化学稳定性决定了是否能在燃料能耗结束前保持一个相对稳定的化学状态。由于燃料储存在狭小的密闭包壳中。化学状态的改变会造成燃料体积等各方面的变化,从而导致包壳内环境产生变化,造成事故隐患。金属铀在固态下有 3 种同素异形体<sup>[5]</sup>,其中 bcc 结构的高温  $\gamma$  相最适合于作为金属铀燃料,各种合金化元素在其中具有较高的固溶度,这便于通过成分来调控合金性能,降低  $\gamma$  相的相区温度,增加  $\gamma$  相的稳定性。如目前广泛研究的 U-Mo 合金,在添加一定量的 Mo 后可以在室温下得到稳定的  $\gamma$  相铀合金。适当的合金化,如添加少量的 Zr、Ti 等元素,也可以起到提高合金耐蚀性和强度等作用。此外, $\gamma$  相不同于正交结构的  $\alpha$  相与四方结构的  $\beta$  相,其具有高对称性的 bcc 结构,在辐照生长的过程中,不会产生各项异性的生长,且其尺寸变化相对较小。最后, bcc 结构具有应用所需的力学性能,它的强度较高,韧性也不差。

由此可知,最理想的合金状态是获得稳定的 bcc 相。但是,通常情况下,铀合金在室温状态很难以 bcc 的状态存在(除 U-Mo 与部分 U-Nb 合金)。在无法达到这种理想状态时,亚稳相对于合金化元素也具有较高的固溶度,同时具有近似  $\gamma$  相的优秀性能可以通过快速冷却得到过饱和的亚稳态组织。在无法得到 bcc 结构时,可以用较为接近的亚稳相替代。

具体而言,本文进行了以往合金成分和结构数据的整合<sup>[6-9]</sup>,从中发现,铀钼体系的合金能够获得在室温下稳定的  $\gamma$  相结构,通常在 Mo 的质量分数大于 U-8Mo,对应于原子分数式  $U_{82.2}Mo_{17.8}$ (本研究中成分的质量分数式统一写为 U-xM 形式,原子分数式写为  $U_yM_z$  形式),就可以在铸态下得到完全的 bcc 单相结构。U-10.5Mo(对应于原子分数式  $U_{77.5}Mo_{22.5}$ )附近的铀钼合金具有最优秀的耐蚀性能,在相图上对应

$\gamma$  相的偏析点,此时  $\gamma$  相最为稳定。铀钼体系合金中, $\gamma$  相的偏析点  $U_{82.4}Nb_{17.6}$ ,可以获得室温  $\gamma$  相稳定组织。而在其它如铀锆、铀钽系合金中,无论以何种比例添加合金化元素,都不能将  $\gamma$  相稳定至室温。这说明各元素对于  $\gamma$  相的稳定能力是不同的,有文献指出<sup>[7]</sup>, bcc 结构稳定性与元素的 d 电子相关。除此之外,能否将  $\gamma$  相稳定至室温,还有工艺条件等外因影响,如冷却速率等,均会在一定成分范围内影响合金的组织结构<sup>[10]</sup>。

除了铀钼体系,人们对于铀钼体系的合金<sup>[6,10-12]</sup>,也做了大量的工作。和钼相比,钼对于  $\gamma$  相的稳定能力要稍弱一些,但是加入足够的 Nb 后,通过淬火快冷的方式,可同样将  $\gamma$ -U 合金稳定在室温状态。具有适当成分与正确工艺的 U-Nb 合金,也可以获得不亚于 U-Mo 合金的优秀耐蚀性能。但是 U-Nb 合金的缺点在于其力学性能,U-Nb 体系合金的耐蚀性能普遍差于 U-Mo 合金。

U-Mo、U-Nb 系合金之外,Ti 和 Zr 也是经常用于提高铀合金性能的添加元素。这两种元素较之于 Mo 和 Nb,最大的问题在于,它们无法将  $\gamma$ -U 合金稳定至室温<sup>[6]</sup>。从制备  $\gamma$ -U 合金的角度讲,它们的能力有限,但是在提高强度、阻碍界面扩散等方面<sup>[13]</sup>,均具有各自优秀的性能。因此,Ti 和 Zr 也常常作为合金元素添加至铀合金中,改善性能。

总体而言,为了满足燃料用铀合金的性能指标,需要得到高  $\gamma$ -U 稳定性的稳态或者亚稳态的铀合金组织。这就要求在合金设计中,找出影响铀合金结构稳定性的关键因素,以其作为指导,设计出性能优异的燃料用铀合金。

## 3 高稳定 $\gamma$ -U 合金固溶体的理想成分式

由于溶质原子与溶剂原子的化学相互作用,在溶质原子的周围,会产生局部的非均匀分布,称其为化学近程序,而这种局域结构散布于溶剂原子的晶体点阵之中。固溶体合金的性能,很大程度上取决于近程序的结构。前期提出的“团簇加连接原子”稳定固溶体结构模型<sup>[14,15]</sup>,具有良好综合性能的工业合金成分均源自少数几种满足原子间相互作用的短程序结构,而理想的合金化学短程序结构可以描述为团簇和连接原子两部分,其中团簇是指围绕某个原子为心的最近邻配位多面体(例如 BCC 的  $\gamma$ -U 的团簇配位数为 14),对应于最强的短程序局域结构,连接原子则置于团簇之间,位于次近邻。由此,任何固溶体结构均满足简单的团簇成分式: [团簇](连接原子)<sub>x</sub>, 即 1 个团簇与 x 个连接原子相匹配。这种表达形式揭示了固溶体中存在化学短程序的成分

和结构最小单元,只涉及最近邻的团簇和次近邻的连接原子。团簇加连接原子模型是在化学近程序上对原子平均成分的近似模型。化学近程序的结构单元即为金属合金的成分载体,也是能够描述固溶体合金的成分载体。例如,最为广泛使用的弹壳黄铜 Cu-30Zn 就可以用  $[\text{Zn-Cu}_{12}]\text{Zn}_4$  的团簇成分式描述,对于 fcc 短程序结构模型为以溶质 Zn 为心、最邻壳层为 Cu 原子的  $[\text{Zn-Cu}_{12}]$  立方八面体团簇,加上 4 个 Zn 连接原子。这种源自化学短程序的简单成分式解释了工业合金的成分来源问题,也就是说,优质合金对应于高稳定性的局域结构单元。这为实施合金成分优化提供了一种全新思路,并已经运用于传统固溶体合金,如多元合金化的 bcc  $\beta$ -Ti 和  $\beta$ -Zr、马氏体时效不锈钢和含微量 Fe 的 Cu-Ni 白铜合金的成分设计<sup>[16-19]</sup>。

团簇加连接原子模型有 3 种原子的占位:中心、第 1 近邻的壳层以及位于连接原子。具有 bcc 结构的  $\gamma$ -U 固溶体相,其第 1 近邻分为 8 个原子以及 6 个原子的 2 个亚层。下面应用该模型,考虑原子间相互作用模式确定第 1 近邻团簇,确定常用 U 基固溶体合金的成分式。

首先确定中心原子。根据合金化元素  $M$  与基体 U 之间的混合焓,将合金化元素分为两类。一类是 Mo、Zr、Ti 等,与 U 作用的混合焓为负<sup>[20,21]</sup>,即在固溶体中,U 与这些元素更倾向于近邻。在构建团簇模型时这类元素放在中心位置。另外一类以 Nb<sup>[22]</sup>为代表,与 U 呈正混合焓,有成分分离趋势,团簇中心则由溶剂 U 占据。

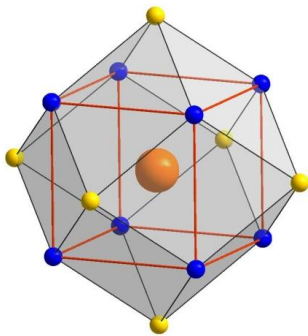


图 1 bcc 结构菱形十二面体团簇,中心(红色大球)为与基体 U(小球)呈负混合焓的溶质原子;第 1 近邻的 2 个亚层分别用蓝色和黄色标出

Fig.1 bcc structure rhombohedral dodecahedron cluster. The center atom (large red ball) is solute atom with negative enthalpy of mixing with matrix U (small ball); the two sublayers of the first neighbor are indicated in blue and yellow

其次,确定壳层原子占据。体心立方结构的第 1 近邻团簇为菱形十二面体(图 1),具有两个亚第 1 近邻壳层,分别为 8(构成立方体)和 6 个(覆盖于立方体的六个面心上)原子。当溶质少的时候,14 个第 1 近邻完全由溶剂 U 占据,构成  $[\text{M-U}_{14}]$  团簇;当有足够多的溶质时,假设形成类似于 CsCl (B2 结构)体心立方超结构的局域团簇,即最近的 8 个位置由 U 占据,而第二亚层完全由溶质 M 占据,则团簇呈  $[\text{M(U)-U}_8\text{M}_6]$  形式,从原子间相互作用角度考虑,显然这 2 种团簇在相应的溶质成分范围内最稳定。

其次,根据溶质原子的量及其与溶剂之间的作用模式,确定连接原子。在存在高低温固态相变的体系中,需要在固态相变下维持相同的成分式,即结构单元的成分和原子总数一致,而只进行壳层和连接原子的个数调整。由于低温相  $\alpha$ -U 具有 12 配位,连接原子个数为 1~6,其团簇式的原子个数因此为 14~19,而高温 bcc 相  $\gamma$ -U 具有 14 配位而连接原子个数至少为 1 个,此时原子个数为最少的 16 个,这样,具有相同原子个数的高温 bcc 相的团簇式只能含有 1~4 个连接原子,相应地,低温态的  $\alpha$ -U 必须具有 3 到 6 个连接原子。通过总结过现有的 U 合金,作者指出<sup>[23]</sup>,高稳定性的体心立方  $\gamma$ -U 合金,其连接原子个数均为 3,由溶质原子与 U 共同组成,即  $(\text{M,U})_3$ ,两类原子的具体个数由其总量控制,即需要首先满足构建第 1 近邻团簇的要求,最后填入连接位置。

这样就获得了  $[\text{M(U)-(U, M)}_{14}](\text{M, U})_3$  团簇成分通式,具体分:

对于与 U 作用的混合焓为负的合金化元素  $M=(\text{Mo,Ti,Zr})$ ,有低溶质的  $[\text{M-U}_{14}](\text{M, U})_3$  和高溶质的  $[\text{M-U}_8\text{M}_6](\text{M, U})_3$  模型;

对于与 U 作用的混合焓为正的合金化元素  $M=\text{Nb}$ ,有低溶质的  $[\text{U-U}_{14}](\text{M,U})_3$  和高溶质的  $[\text{U-U}_8\text{M}_6](\text{M,U})_3$  模型。

综上所述,一个实际的合金成分,当转化成 18 原子成分式时,越接近上述 4 种成分式,则说明该合金具有高的结构稳定性,溶质分布趋向均匀,对应成分为优质合金,能够充分发挥合金化元素的作用。

下面进行现有 U 合金的 18 原子团簇式成分解析,并建立其与耐蚀性的关系。

### 3.1 U-Mo 二元固溶体合金

$\gamma$ -U(Mo)固溶体是最有代表性的 U 合金体系<sup>[6]</sup>。前期工作表明,少量的添加 Mo,就会对铀合金中的  $\gamma$  相产生强烈的稳定作用,当 Mo 含量高于 8% (原子分数式  $\text{U}_{82.2}\text{Mo}_{17.8}$ ) 时,U 合金在铸态下就可以得到单一的  $\gamma$  相。根据上文建立的成分式规则,对 U-Mo 二

元合金进行成分解析。首先采用 $[\text{Mo-U}_{14}](\text{Mo,U})_3$ 的形式解析低溶质成分的合金，由于 Mo 含量均超过中心原子为 1 个的成分 ( $\text{U}_{94.44}\text{Mo}_{5.56}$ )，所以不存在用溶剂原子 U 补齐中心原子的情况。当 Mo 含量超过连接原子为 3 个 Mo 的成分时 ( $\text{U}_{77.8}\text{Mo}_{22.2}$ )，Mo 原子进入壳层位置，但是并未达到能够补齐次近邻 6 个原子的成分，故依然优先选择维持连接原子为 3 个 Mo 的稳定结构。解析结果如表 1、图 2 所示<sup>[6]</sup>。U-Mo 合金中，耐蚀性能最好的成分对应应在 U-10.7Mo，即  $[\text{Mo-U}_{13.9}\text{Mo}_{0.1}]\text{Mo}_3 = \text{U}_{77.08}\text{Mo}_{22.92}$ ，这个成分式非常接近于理想的 18 原子体心立方固溶体团簇式  $[\text{Mo-U}_{14}]\text{Mo}_3 = \text{U}_{77.8}\text{Mo}_{22.2}$ 。

### 3.2 U-Nb 二元固溶体合金

$\gamma$ -U(Nb)固溶体是另一类常见  $\gamma$  相型合金。相比于 Mo，Nb 对  $\gamma$  相的稳定作用弱一些，U-8Nb (18.21 at% Nb) 以上的 U 合金通过淬火可以将  $\gamma$  相保

表 1 U-Mo 合金成分式解析及耐蚀性能

Table 1 Cluster formulas and corrosion behavior of U-Mo alloys (condition: 343 °C water corrosion)<sup>[6]</sup>

Composition, ω/%	Composition, at%	Cluster formula	Failure time/d
U-6Mo	$\text{U}_{86.33}\text{Mo}_{13.67}$	$[\text{Mo-U}_{14}](\text{Mo}_{1.5}\text{U}_{1.5})$	10
U-9Mo	$\text{U}_{80.30}\text{Mo}_{19.70}$	$[\text{Mo-U}_{14}](\text{Mo}_{2.5}\text{U}_{0.5})$	63
<b>U-10.7Mo</b>	<b><math>\text{U}_{77.08}\text{Mo}_{22.92}</math></b>	<b><math>[\text{Mo-U}_{13.9}\text{Mo}_{0.1}]\text{Mo}_3</math></b>	<b>&gt;100</b>
<b>U-10.3Mo</b>	<b><math>\text{U}_{77.78}\text{Mo}_{22.22}</math></b>	<b><math>[\text{Mo-U}_{14}]\text{Mo}_3</math></b>	<b>Ideal</b>
U-11.5Mo	$\text{U}_{75.62}\text{Mo}_{24.38}$	$[\text{Mo-U}_{13.6}\text{Mo}_{0.4}]\text{Mo}_3$	63
U-15Mo	$\text{U}_{69.55}\text{Mo}_{30.45}$	$[\text{Mo-U}_{12.5}\text{Mo}_{1.5}]\text{Mo}_3$	49

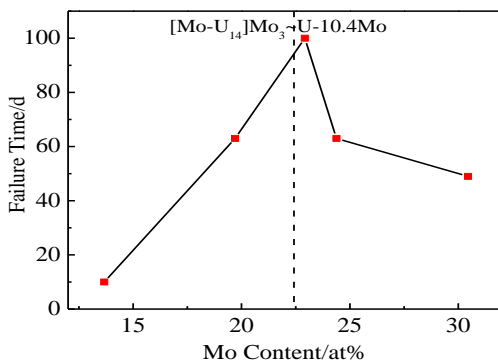


图 2 U-Mo 合金成分及耐蚀性能 (343 °C 水蚀失效时间)，虚线标出了接近最佳耐蚀能力合金的理想成分式及相应质量分数

Fig.2 Cluster formulas and corrosion behavior of U-Mo alloys (condition: 343 °C water corrosion); the dash line indicates the alloy corresponding to the ideal cluster formula and its mass percent which are close to the optimal corrosion resistance<sup>[6]</sup>

留至室温。

对于 U-Nb 合金，在富 U 端，U-Nb 的混合焓为正，即这 2 种原子倾向于相互分离并各自聚集，故使用团簇式  $[\text{U-U}_{14}](\text{U,Nb})_3$ ；当溶质 Nb 含量较多时，需要引入  $\text{U-U}_8(\text{U,Nb})_6](\text{U,Nb})_3$  来描述  $\gamma$ -U(Nb)化学近程结构。

U-Nb 二元合金系列成分的耐 343 °C 水蚀性能如表 2 和图 3 所示<sup>[6]</sup>。根据前面建立的成分式确定规则，首先采用  $[\text{U-U}_{14}](\text{Nb,U})_3$  的形式解析低溶质合金成分，当 Nb 含量超过连接原子为 3 个 Nb 的成分时 ( $\text{U}_{83.3}\text{Nb}_{16.7}$ )，Nb 原子进入壳层位置，当 Nb 原子达到能够补齐次近邻 6 个原子的高溶质成分限时，优先选择次近邻 6 个原子均为 Nb 所占据，即  $[\text{U-(U}_8\text{Nb}_6)]-(\text{U,Nb})_3$  形式；在未达到或接近 Nb 可以占据 6 个次近邻位置的情况时，仍然维持连接原子为 3 个 Nb 的稳定结构。从该体系的解析中可以看出，Nb 含量越高，U-Nb 合金具有越好的耐蚀性能，U-20Nb 对应团簇成分式  $[\text{U-U}_8\text{Nb}_6](\text{U}_2\text{Nb}_1) \sim \text{U-19.9Nb}$  为该体系理想的成分。

U-Nb 合金的淬火产物成分转变点<sup>[11]</sup>可以通过 18 原子成分式中 Nb 原子的个数来衡量。当 Nb 原子的个数在 1 附近 (小于 2) 时，U-Nb 合金亚稳相的淬火产物为  $\alpha'$ ；当个数大于 2 小于 3 时，形成  $\alpha''$ ；在 3 以上，形成  $\gamma^0$  或者  $\gamma$ ，成分与相的关系如图 4 所示。

### 3.3 U-Mo-Nb 三元固溶体合金

$\gamma$ -U(Mo,Nb)固溶体是最有代表性的三元体系铀合金，具有比二元体系合金更好的耐蚀性能与稳定的组织。前人对 U-Mo-Nb 体系合金做了大量的工作<sup>[6]</sup>去探究成分与耐蚀性能的联系。如表 3 及图 5 所示，根据上文建立的成分式规则，首先采用  $[\text{Mo-U}_{14}](\text{Mo,Nb,U})_3$  的形式解析低溶质成分，当 Mo 含量不超过中心原子为 1 个的成分 ( $\text{U}_{94.44}\text{Mo}_{5.56}$ ) 时，用溶剂原子 U 补齐中心原子，即  $[(\text{Mo,U})-\text{U}_{14}](\text{Nb,U})_3$ ；当 Mo 含量超过中心原子为 1 个的成分 ( $\text{U}_{94.44}\text{Mo}_{5.56}$ )

表 2 U-Nb 合金成分式解析及耐蚀性能

Table 2 Cluster formulas and corrosion behavior of U-Nb alloys (Condition: 343 °C water corrosion)<sup>[6]</sup>

Composition, ω/%	Composition, at%	Cluster formula	Failure time/d
U-8Nb	$\text{U}_{81.78}\text{Nb}_{18.21}$	$[\text{U-U}_{13.7}\text{Nb}_{0.3}]\text{Nb}_3$	7
U-9Nb	$\text{U}_{79.78}\text{Nb}_{20.21}$	$[\text{U-U}_{13.4}\text{Nb}_{0.6}]\text{Nb}_3$	14
U-11Nb	$\text{U}_{75.95}\text{Nb}_{24.05}$	$[\text{U-U}_{12.7}\text{Nb}_{1.3}]\text{Nb}_3$	14
U-12Nb	$\text{U}_{74.11}\text{Nb}_{25.89}$	$[\text{U-U}_{12.3}\text{Nb}_{1.7}]\text{Nb}_3$	21
U-16Nb	$\text{U}_{67.20}\text{Nb}_{32.79}$	$[\text{U-U}_{11.1}\text{Nb}_{2.9}]\text{Nb}_3$ $=[\text{U-U}_{8.1}\text{Nb}_{5.9}]\text{U}_3$	49
<b>U-20Nb</b>	<b><math>\text{U}_{60.96}\text{Nb}_{39.04}</math></b>	<b><math>[\text{U-(U}_8\text{Nb}_6)](\text{U}_{2.0}\text{Nb}_{1.0})</math></b>	<b>&gt;125</b>
<b>U-19.9Nb</b>	<b><math>\text{U}_{61.11}\text{Nb}_{38.89}</math></b>	<b><math>[\text{U-(U}_8\text{Nb}_6)](\text{U}_2\text{Nb}_1)</math></b>	<b>Ideal</b>



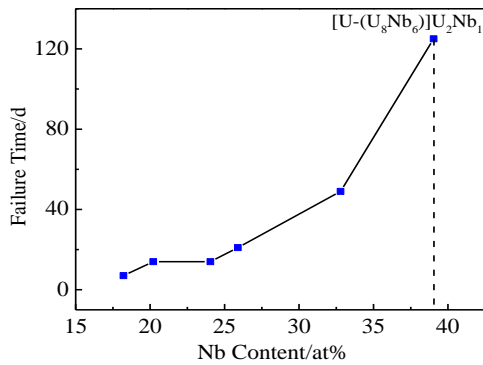


图 3 U-Nb 合金成分及耐蚀性能 (343 °C 水蚀失效时间), 虚线处标出了最佳耐蚀合金, 完全对应于理想成分式

Fig.3 Cluster formulas and corrosion behavior of U-Nb alloys (condition: 343 °C water corrosion); the dash line indicates the alloy corresponding to the ideal cluster formula and its mass percent which are close to the optimal corrosion resistance<sup>[6]</sup>

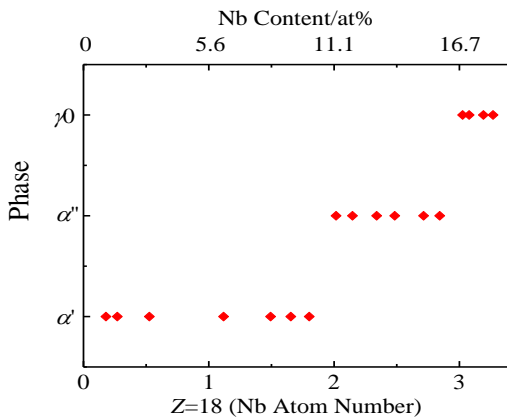


图 4 团簇成分式中 Nb 原子总数与所淬火产物的对应关系 (数据来自文献[11])

Fig.4 Relationship between the number of Nb atoms in the cluster formulas and these alloys' quenching products (the data is from Ref.[11])

但是 Mo 和 Nb 的总含量不超过 Z=18 中 4 个原子时, 采用  $[\text{Mo}-\text{U}_{14}](\text{Mo},\text{Nb},\text{U})_3$  成分式, 当 Mo 和 Nb 含量超过 Z=18 中 4 个原子时, 根据混合焓判据, 本工作首先考虑将 Nb 原子进入壳层, 当所有 Nb 原子进入壳层仍不能满足时, 将 Mo 原子也放入壳层。但需要注意溶质原子进入壳层时, 保留连接原子为单一原子的形式, 即  $[\text{Mo}-(\text{U},\text{Mo},\text{Nb})_{14}]\text{Mo}_3$ 。需要注意的是, 根据之

前建立的规则, 溶质优先占据次近邻壳层, 其次占据连接原子。如表 3 所示, 不存在可以用单一溶质原子填满 6 个次近邻壳层原子的成分。故保留连接原子为单一原子的形式。

图 5 所示为 U-Mo-Nb 的二元以及三元体系钼合金成分与耐蚀性能的关系。对于 U-Mo-Nb 系列合金进行了团簇式解析, 通过与二元合金的整体对比, 确定了耐蚀性优秀的合金成分区间, 即 U 含量在 85 at%~90 at%, Mo 含量 15 at%~25 at%, Nb 含量低于 7 at%, 如图 5 黑体圈出。在此范围内, 耐蚀性能最佳、最具代表性的是 U-9Mo-1.4Nb, 具有单一的  $\gamma$  相与非常优秀的耐蚀性能, 对应于 18 原子团簇模型为  $[\text{Mo}-\text{U}_{14}](\text{Mo}_{2.5}\text{Nb}_{0.5})$ , 其中 U 的个数正是理想的 14 个, 而 Mo 和 Nb 的个数总和为 4 个。同时也看到, 连接原子中, Mo 和 Nb 的个数不是整数, 说明有进一步成分优化的可能。另一个具有优秀耐蚀性能的成分 U-7Mo-2Nb, 其团簇成分式为  $[\text{Mo}-\text{U}_{14}](\text{Mo}_{1.8}\text{Nb}_{0.8}\text{U}_{0.4})$ , 与前面的 U-9Mo-1.4Nb 一样具有成分优化的空间, 其成分式接近理想团簇成分式  $[\text{Mo}-\text{U}_{14}](\text{Mo}_2\text{Nb}_1)$ 。虽然在实验中 U-7.5Mo-3Nb ( $[\text{Mo}-\text{U}_{13.9}\text{Nb}_{0.1}](\text{Mo}_{1.9}\text{Nb}_{1.1})$ ) 很接近理想成分形式  $[\text{Mo}-\text{U}_{14}](\text{Mo}_2\text{Nb}_1)$ , 但是在实验中, 该合金出现了明显的枝晶组织, 说明成分出现了较大的偏析, 从而可能导致耐蚀性能严重下降。在进一步的工作中, 希望能够验证该合金是否能够有优秀的耐蚀性能。

### 3.4 U-Zr、U-Ti 体系合金

根据上文建立的成分式规则, 同样对 U-Zr 及 U-Ti 体系合金做出成分解析。首先采用  $[\text{Zr}(\text{Ti})-\text{U}_{14}](\text{Zr}(\text{Ti}),\text{Nb},\text{U})_3$  的形式解析成分, 当 Zr(Ti)含量超过中心原子为 1 个的成分但是 Zr(Ti)和 Nb 的总含量不超过 Z=18 中 4 个原子时, 采用  $[\text{Zr}(\text{Ti})-\text{U}_{14}](\text{Zr}(\text{Ti}),\text{Nb},\text{U})_3$  成分式, 当 Mo 和 Nb 含量超过 Z=18 中 4 个原子时, 根据混合焓判据, 本工作首先考虑将 Nb 原子进入壳层, 当所有 Nb 原子进入壳层仍不能满足时, 将 Zr(Ti)原子也放入壳层。

对于 U-Zr 体系的优秀性能合金, 最具代表性的是 U-7.5Nb-2.5Zr 合金, 即“不锈铀”, 其具有优秀的耐蚀性能, 其原子分数为  $\text{U}_{77.8}\text{Nb}_{16.7}\text{Zr}_{5.5}$ , 其成分式几乎就是  $[\text{Zr}-\text{U}_{14}]\text{Nb}_3$ 。该成分式以 U-Zr 二元的 CN14 团簇加以 3 个 Nb 为连接原子, 具有优秀的结构稳定性以及性能。除不锈铀外, U-Nb-Zr 系列的合金中, Nb 含量不变时, 增加 Zr 的含量, Zr 含量越高, 耐蚀性能越好, 如表 4 所示。

对于 U-Ti 体系的合金, 二元合金常见的有 U-0.78Ti, 原子分数式  $\text{U}_{96.2}\text{Ti}_{3.8}$ , 接近于成分式  $[(\text{Ti}_{0.5}\text{U}_{0.5})\text{U}_{14}]\text{U}$

表 3 U-Mo-Nb 合金成分式解析及耐蚀性能

Table 3 Cluster formulas and corrosion behavior of U-Mo-Nb alloys (condition: 343 °C water corrosion)<sup>[6]</sup>

Composition, ω/%	Composition, at%	Total content of added element, at/%	Cluster formula	Failure time/d
U-2Mo-2Nb	U <sub>90.49</sub> Mo <sub>4.68</sub> Nb <sub>4.83</sub>	9.51	[(Mo <sub>0.8</sub> U <sub>0.2</sub> )-U <sub>14</sub> ](Nb <sub>0.9</sub> U <sub>2.1</sub> )	0~1
U-6Mo-1.5Nb	U <sub>83.16</sub> Mo <sub>13.38</sub> Nb <sub>3.46</sub>	16.84	[Mo-U <sub>14</sub> ](Mo <sub>1.4</sub> Nb <sub>0.6</sub> U <sub>1.0</sub> )	14~28
U-4Mo-4Nb	U <sub>82.02</sub> Mo <sub>8.85</sub> Nb <sub>9.14</sub>	17.98	[Mo-U <sub>14</sub> ](Mo <sub>0.6</sub> Nb <sub>1.6</sub> U <sub>0.8</sub> )	7~14
<b>U-7.5Mo-1.5Nb</b>	<b>U<sub>80.21</sub>Mo<sub>16.40</sub>Nb<sub>3.39</sub></b>	19.79	<b>[Mo-U<sub>14</sub>](Mo<sub>2.0</sub>Nb<sub>0.6</sub>U<sub>0.4</sub>)</b>	<b>98~112</b>
<b>U-7Mo-2Nb</b>	<b>U<sub>80.18</sub>Mo<sub>15.30</sub>Nb<sub>4.51</sub></b>	19.82	<b>[Mo-U<sub>14</sub>](Mo<sub>1.8</sub>Nb<sub>0.8</sub>U<sub>0.4</sub>)</b>	<b>168~182</b>
U-6Mo-3Nb	U <sub>80.13</sub> Mo <sub>13.11</sub> Nb <sub>6.77</sub>	19.87	[Mo-U <sub>14</sub> ](Mo <sub>1.4</sub> Nb <sub>1.2</sub> U <sub>0.4</sub> )	42~56
U-6.4Mo-3Nb	U <sub>79.36</sub> Mo <sub>13.91</sub> Nb <sub>6.73</sub>	20.64	[Mo-U <sub>14</sub> ](Mo <sub>1.5</sub> Nb <sub>1.2</sub> U <sub>0.3</sub> )	14~28
U-9Mo-0.5Nb	U <sub>79.31</sub> Mo <sub>19.57</sub> Nb <sub>1.12</sub>	20.69	[Mo-U <sub>14</sub> ](Mo <sub>2.5</sub> Nb <sub>0.2</sub> U <sub>0.3</sub> )	14~28
U-2Mo-8Nb	U <sub>77.95</sub> Mo <sub>4.30</sub> Nb <sub>17.75</sub>	22.05	[(Mo <sub>0.8</sub> U <sub>0.2</sub> )-U <sub>13.8</sub> Nb <sub>0.2</sub> ] <sub>3</sub> Nb <sub>3</sub>	7~14
<b>U-7.8Mo-2.5Nb</b>	<b>U<sub>77.78</sub>Mo<sub>16.67</sub>Nb<sub>5.56</sub></b>	22.22	<b>[Mo-U<sub>14</sub>](Mo<sub>2</sub>Nb<sub>1</sub>)</b>	<b>Ideal</b>
<b>U-9Mo-1.4Nb</b>	<b>U<sub>77.56</sub>Mo<sub>19.33</sub>Nb<sub>3.11</sub></b>	22.44	<b>[Mo-U<sub>13.9</sub>Nb<sub>0.1</sub>](Mo<sub>2.5</sub>Nb<sub>0.5</sub>)</b>	<b>168~182</b>
<b>U-7.5Mo-3Nb</b>	<b>U<sub>77.29</sub>Mo<sub>16.07</sub>Nb<sub>6.64</sub></b>	22.71	<b>[Mo-U<sub>13.9</sub>Nb<sub>0.1</sub>](Mo<sub>1.9</sub>Nb<sub>1.1</sub>)</b>	<b>28~42</b>
U-10.5Mo-0.5Nb	U <sub>76.51</sub> Mo <sub>22.39</sub> Nb <sub>1.10</sub>	23.49	[Mo-U <sub>13.8</sub> Nb <sub>0.2</sub> ] <sub>3</sub> Mo <sub>3.0</sub>	70~84
U-10.5Mo-1.5Nb	U <sub>74.64</sub> Mo <sub>22.10</sub> Nb <sub>3.26</sub>	25.36	[Mo-U <sub>13.4</sub> Nb <sub>0.6</sub> ] <sub>3</sub> Mo <sub>3.0</sub>	28~42
U-9Mo-3Nb	U <sub>74.57</sub> Mo <sub>18.92</sub> Nb <sub>6.51</sub>	25.43	[Mo-U <sub>13.4</sub> Nb <sub>0.6</sub> ] <sub>3</sub> (Mo <sub>2.4</sub> Nb <sub>0.6</sub> )	7~14
U-6Mo-6Nb	U <sub>74.41</sub> Mo <sub>12.59</sub> Nb <sub>13</sub>	25.59	[Mo-U <sub>13.4</sub> Nb <sub>0.6</sub> ] <sub>3</sub> (Mo <sub>1.3</sub> Nb <sub>1.7</sub> )	14~28
U-4Mo-8Nb	U <sub>74.31</sub> Mo <sub>8.38</sub> Nb <sub>17.31</sub>	25.69	[Mo-U <sub>13.4</sub> Nb <sub>0.6</sub> ] <sub>3</sub> (Mo <sub>0.5</sub> Nb <sub>2.5</sub> )	28~42
U-12Mo-0.5Nb	U <sub>73.81</sub> Mo <sub>25.11</sub> Nb <sub>1.08</sub>	26.19	[Mo-U <sub>13.3</sub> Nb <sub>0.2</sub> Mo <sub>0.5</sub> ] <sub>3</sub> Mo <sub>3.0</sub>	42~56
U-12Mo-1.5Nb	U <sub>72.01</sub> Mo <sub>24.79</sub> Nb <sub>3.20</sub>	27.99	[Mo-U <sub>12.9</sub> Mo <sub>0.5</sub> Nb <sub>0.6</sub> ] <sub>3</sub> Mo <sub>3.0</sub>	14~28
U-12Mo-2Nb	U <sub>71.14</sub> Mo <sub>24.63</sub> Nb <sub>4.24</sub>	28.86	[Mo-U <sub>12.8</sub> Mo <sub>0.4</sub> Nb <sub>0.8</sub> ] <sub>3</sub> Mo <sub>3.0</sub>	7~14
U-12Mo-3Nb	U <sub>69.41</sub> Mo <sub>24.31</sub> Nb <sub>6.28</sub>	30.59	[Mo-U <sub>11.5</sub> Mo <sub>1.4</sub> Nb <sub>1.1</sub> ] <sub>3</sub> Mo <sub>3.0</sub>	7~14
U-12Mo-4Nb	U <sub>67.73</sub> Mo <sub>24.01</sub> Nb <sub>8.26</sub>	32.27	[Mo-U <sub>12.2</sub> Mo <sub>0.3</sub> Nb <sub>1.5</sub> ] <sub>3</sub> Mo <sub>3</sub>	14
U-8Mo-8Nb	U <sub>67.55</sub> Mo <sub>15.96</sub> Nb <sub>16.48</sub>	32.45	[Mo-U <sub>12.1</sub> Nb <sub>1.9</sub> ] <sub>3</sub> (Mo <sub>1.9</sub> Nb <sub>1.1</sub> )	42~56
U-4Mo-12Nb	U <sub>67.38</sub> Mo <sub>7.96</sub> Nb <sub>24.66</sub>	32.62	[Mo-U <sub>12.2</sub> Nb <sub>1.8</sub> ] <sub>3</sub> (Mo <sub>0.4</sub> Nb <sub>2.6</sub> )	42~56
U-15Mo-2Nb	U <sub>66.22</sub> Mo <sub>29.69</sub> Nb <sub>4.09</sub>	33.78	[Mo-U <sub>12.0</sub> Mo <sub>1.3</sub> Nb <sub>0.7</sub> ] <sub>3</sub> Mo <sub>3</sub>	14~28
U-16Mo-4Nb	U <sub>61.56</sub> Mo <sub>30.55</sub> Nb <sub>7.89</sub>	38.44	[Mo-U <sub>11.1</sub> Mo <sub>1.5</sub> Nb <sub>1.4</sub> ] <sub>3</sub> Mo <sub>3</sub>	14~28
U-12Mo-8Nb	U <sub>61.41</sub> Mo <sub>22.85</sub> Nb <sub>15.73</sub>	38.59	[Mo-U <sub>11.1</sub> Mo <sub>0.1</sub> Nb <sub>2.8</sub> ] <sub>3</sub> Mo <sub>3</sub>	14~28
U-10Mo-10Nb	U <sub>61.34</sub> Mo <sub>19.02</sub> Nb <sub>19.64</sub>	38.66	[Mo-U <sub>11.1</sub> Nb <sub>2.9</sub> ] <sub>3</sub> (Mo <sub>2.4</sub> Nb <sub>0.6</sub> )	7~14
U-8Mo-12Nb	U <sub>61.26</sub> Mo <sub>15.20</sub> Nb <sub>23.54</sub>	38.74	[Mo-U <sub>11.1</sub> Nb <sub>2.9</sub> ] <sub>3</sub> (Mo <sub>1.7</sub> Nb <sub>1.3</sub> )	28~42
U-4Mo-16Nb	U <sub>61.11</sub> Mo <sub>7.58</sub> Nb <sub>31.31</sub>	38.89	[Mo-U <sub>11.0</sub> Nb <sub>3.0</sub> ] <sub>3</sub> (Mo <sub>0.4</sub> Nb <sub>2.6</sub> )	42~56
U-20Mo-4Nb	U <sub>55.94</sub> Mo <sub>36.52</sub> Nb <sub>7.54</sub>	44.06	[Mo-U <sub>10.0</sub> Mo <sub>2.6</sub> Nb <sub>1.4</sub> ] <sub>3</sub> Mo <sub>3</sub>	7~14
U-16Mo-8Nb	U <sub>55.80</sub> Mo <sub>29.15</sub> Nb <sub>15.05</sub>	44.2	[Mo-U <sub>10.1</sub> Mo <sub>1.2</sub> Nb <sub>2.7</sub> ] <sub>3</sub> Mo <sub>3</sub>	7~14
U-12Mo-12Nb	U <sub>55.67</sub> Mo <sub>21.81</sub> Nb <sub>22.52</sub>	44.33	[Mo-U <sub>10.0</sub> Nb <sub>4.0</sub> ] <sub>3</sub> (Mo <sub>2.9</sub> Nb <sub>0.1</sub> )	28~42
U-8Mo-16Nb	U <sub>55.54</sub> Mo <sub>14.5</sub> Nb <sub>29.96</sub>	44.46	[Mo-U <sub>10.0</sub> Nb <sub>4.0</sub> ] <sub>3</sub> (Mo <sub>1.6</sub> Nb <sub>1.4</sub> )	14~28
U-4Mo-20Nb	U <sub>55.41</sub> Mo <sub>7.24</sub> Nb <sub>37.36</sub>	44.59	[Mo-U <sub>8</sub> Nb <sub>6</sub> ] <sub>3</sub> (Mo <sub>1.3</sub> Nb <sub>0.7</sub> U <sub>1</sub> )	42~56

(原子分数式 U<sub>96.9</sub>Ti<sub>3.1</sub>)。需要注意的是, U-0.78Ti 对应的并不是稳定的 bcc 结构合金, 而是亚稳的 α' 相, 根据作者在近 α-Ti 合金中所获取的经验, 这里采用原子总数为 16 的团簇成分式来描述。Ti 元素对于 bcc-U 的结构稳定性有限, 且在含量较高的时候会形成 U<sub>2</sub>Ti, 破坏单相固溶体结构, 故 Ti 含量较低。

系列 U-Nb-Ti 合金耐蚀实验表明 (表 4), 在 Nb 含量不变的情况下, Ti 含量添加越高, 耐蚀性能反而

越差。这说明想要得到 U-Ti 体系的 bcc 结构合金, 需要添加较多的 Nb 等对结构进行稳定, 再适量添加 Ti 合金达到优化性能的目的。相对耐蚀性最好的成分 U-4Nb-2Ti (U<sub>82.32</sub>Nb<sub>8.97</sub>Ti<sub>8.71</sub>) 对应的团簇形式为 [Ti-U<sub>14</sub>](Ti<sub>0.6</sub>Nb<sub>1.6</sub>U<sub>0.8</sub>) (U<sub>82.23</sub>Nb<sub>8.90</sub>Ti<sub>8.87</sub>), 由于该体系的 bcc 结构合金较少, 目前无法对其作出精确的判断, 但是可以参考 U-Nb-Zr 体系, 给出 [Ti-U<sub>14</sub>]<sub>3</sub>Nb<sub>3</sub> 的理想成分式作为后续工作的参考。

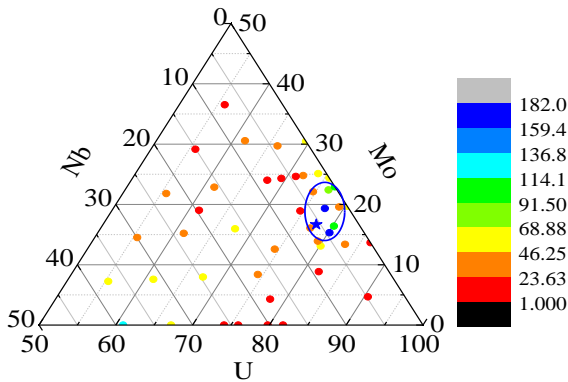


图 5 U-Mo-Nb 合金成分与耐蚀性能 (343 °C 水蚀失效时间), 五角星标出理想成分式 $[Mo-U_{14}](Mo_2Nb_1)$ 的位置

Fig.5 Cluster formulas and corrosion behavior of U-Mo-Nb alloys (condition: 343 °C water corrosion); the five-pointed star indicates the alloy corresponding to the ideal cluster formula  $[Mo-U_{14}](Mo_2Nb_1)$ <sup>[6]</sup>

表 4 U-Nb-Ti/Zr 合金成分式解析及耐蚀性能

Table 4 Cluster formulas and corrosion behavior of U-Nb-Ti/Zr alloys (Condition: 343 °C water corrosion)

Composition, ω/%	Composition, at%	Cluster formula	Failure time/d
<b>U-4Nb-2Ti</b>	<b>U<sub>82.32</sub>Nb<sub>8.97</sub>Ti<sub>8.71</sub></b>	<b>[Ti-U<sub>14</sub>]</b> <b>(Ti<sub>0.6</sub>Nb<sub>1.6</sub>U<sub>0.8</sub>)</b>	<b>8</b>
<b>U-5.1Nb-2.6Ti</b>	<b>U<sub>88.88</sub>Nb<sub>11.11</sub>Ti<sub>11.11</sub></b>	<b>[Ti-U<sub>14</sub>](Ti<sub>1</sub>Nb<sub>2</sub>)</b>	<b>Ideal</b>
U-4Nb-4Ti	U <sub>75.32</sub> Nb <sub>8.39</sub> Ti <sub>16.29</sub>	[Ti-U <sub>13.6</sub> Nb <sub>0.4</sub> ] (Ti <sub>1.9</sub> Nb <sub>1.1</sub> )	1
U-4Nb-10Ti	U <sub>58.91</sub> Nb <sub>7.02</sub> Ti <sub>34.07</sub>	[Ti-U <sub>10.6</sub> Ti <sub>2.1</sub> Nb <sub>1.3</sub> ]- Ti <sub>3</sub>	0
U-4Nb-2Zr	U <sub>85.87</sub> Nb <sub>9.36</sub> Zr <sub>4.77</sub>	[(Zr <sub>0.9</sub> U <sub>0.1</sub> )-U <sub>14</sub> ] (Nb <sub>1.7</sub> U <sub>1.3</sub> )	14
U-4Nb-4Zr	U <sub>81.64</sub> Nb <sub>9.09</sub> Zr <sub>9.26</sub>	[Zr-U <sub>14</sub> ] (Zr <sub>0.6</sub> Nb <sub>1.7</sub> U <sub>0.7</sub> )	14
<b>U-4Nb-10Zr</b>	<b>U<sub>70.30</sub>Nb<sub>8.38</sub>Zr<sub>21.33</sub></b>	<b>[Zr-U<sub>12.7</sub>Nb<sub>1.3</sub>]</b> <b>(Zr<sub>2.8</sub>Nb<sub>0.2</sub>)</b>	<b>96</b>
<b>U-2.5Nb-7.4Zr</b>	<b>U<sub>77.78</sub>Nb<sub>5.55</sub>Zr<sub>16.67</sub></b>	<b>[Zr-U<sub>14</sub>](NbZr<sub>2</sub>)</b>	<b>Ideal</b>

## 4 结 论

1) 对于与理想团簇模型偏差较大的成分, 通常不会具有太好的性能, 如 U-20Mo-4Nb 等。

2) 发现一些成分, 具有优秀的耐蚀性能, 同时能够很好的满足团簇式, 如 U-10.7Mo (约 $[Mo-U_{14}](Mo_3)$ ), U-9Mo-1.4Nb (约 $[Mo-U_{14}](Nb_{2.5}Mo_{0.5})$ ), U-7.5Nb-2.5Zr (约 $[Zr-U_{14}](Nb_3)$ ) 等; 这是因为满足理想团簇式的成分, 在原子与电子结构上都更加稳定。在具有稳定的电子结构的同时, 耐蚀性能会随着电子结构的稳定而趋于优秀。

3) 有一些耐蚀性能优秀的成分, 和团簇成分式的

对应关系不明显, 如 U-7Mo-2Nb ( $[Mo-U_{14}](Mo_{1.8}Nb_{0.8}U_{0.4})$ ) 等, 需要进行进一步的研究, 该系列合金有可能还存在成分优化的空间, 但也不排除实验成分存在杂质等偏差。另外 U-Nb 的二元合金, 随着 Nb 含量的增多耐蚀性能增强, 已经证明是因为随着 Nb 增加而出现的  $\gamma$ -Nb 相具有优秀的耐蚀性能, 从而整体的耐蚀性能增加, 应排除在以  $\gamma$ -U 为基础的铀合金耐蚀性能考量范围之外。

4) 总体而言, 成分解析的结果存在一个趋势, 添加相同的合金化元素, 通常耐蚀性能会随着成分越来越接近理想“团簇加连接原子”模型而越来越优秀, 这说明模型在铀合金解析的领域有效, 可以在铀合金燃料成分设计中起到指导作用。

## 参考文献 References

[1] Masayoshi Hasegawa(长谷川正义). Translated by Sun Shouren(孙守仁). *Handbook of Nuclear Reactor Materials* (核反应堆材料手册)[M]. Beijing: Atomic Energy Press, 1987

[2] Fan Yumao, Li Zengqiang. *Nuclear Safety*[J], 2011(1): 74

[3] Sinha V P, Prasad G J, Hegde P V *et al.* *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2009, 473(1-2): 238

[4] Peng Feng(彭 凤), Fu Rong(傅 蓉). *Chinese Journal of Nuclear Science and Engineering*(核科学与工程)[J], 1998(3): 18

[5] Morrell J S. *Uranium Processing and Properties*[M]. Berlin: Springer, 2013

[6] Bostrom W A, Burkart M W, Halteman E K. *PART I, Alloys Without Protective Cladding*[C]. Pittsburgh: Westinghouse Electric Corp Atomic Power Div, 1957

[7] Hofman G L, Meyer M K, Ray A E. *Proc Int Reduced Enrichment for Research and Test Reactors Conf*[C]. US: DOE, 1998

[8] Tangri K, Williams G I. *Journal of Nuclear Materials*[J], 1961, 4(2): 226

[9] Sinha V P, Hegde P V, Prasad G J *et al.* *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2010, 491(1): 753

[10] Brown D W, Bourke M A M, Clarke A J *et al.* *Journal of Nuclear Materials*[J], 2016, 481: 164

[11] Tangri K, Chaudhuri D K. *Journal of Nuclear Materials*[J], 1965, 15(4): 278

[12] Koike J, Kassner M E, Tate R E *et al.* *Journal of Phase Equilibria* [J], 1998, 19(3): 253

[13] Ewh A, Perez E, Keiser D D *et al.* *Defect and Diffusion Forum. Trans Tech Publications*[J], 2011, 312: 1055

[14] Hong H L, Wang Q, Dong C *et al.* *Scientific Reports*[J], 2014,

- 4: 7065 328
- [15] Dong Dandan(董丹丹). *Thesis for Doctorate*(博士论文)[D]. Dalian: Dalian University of Technology, 2017
- [16] Wang Q, Ji C J, Wang Y M *et al. Metal Mater Trans A*[J], 2013, 44: 1872
- [17] Pang C, Wang Q, Zhang R Q *et al. Mater Sci Eng A*[J], 2015, 626: 369
- [18] Li Z, Zhang R, Zha Q *et al. Progress in Natural Science: Materials International*[J], 2014, 24(1): 35
- [19] Zhang J, Wang Q, Wang Y M *et al. Mater Res*[J], 2010, 25: 328
- [20] Takeuchi A, Inoue A. *Materials Transactions*[J], 2005, 46(12): 2817
- [21] Vamberskiy Y V, Udovskiy A L, Ivanov O S. *Journal of Nuclear Materials*[J], 1973, 46(2): 192
- [22] Vamberskiy Y V, Udovskiy A L, Ivanov O S. *Journal of Nuclear Materials*[J], 1975, 55(1): 96
- [23] Pang Chang(庞 贇). *Thesis for Doctorate*(博士论文)[D]. Dalian: Dalian University of Technology, 2015

## Composition Rule of $\gamma$ -U Alloys for Nuclear Fuel

Yuan Junhao<sup>1</sup>, Dong Dandan<sup>2</sup>, Wang Qing<sup>1</sup>, Wang Yingmin<sup>1</sup>, Qiang Jianbing<sup>1</sup>, Li Xiaona<sup>1</sup>, Dong Chuang<sup>1</sup>,  
Huang Huogen<sup>3</sup>, Ke Haibo<sup>3</sup>, Zhang Pei<sup>3</sup>, Zhang Pengguo<sup>3</sup>, Liu Tianwei<sup>4</sup>

(1. Key Laboratory of Materials Modification by Laser, Ion and Electron Beams of Ministry of Education,

Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

(2. Dalian University, Dalian 116622, China)

(3. China Academy of Engineering Physics, Jianguo 621907, China)

(4. Science and Technology on Surface Physics and Chemistry Laboratory, Mianyang 621907, China)

**Abstract:** As an important nuclear fuel,  $\gamma$ -U alloys with the body centered cubic (bcc) structure have high temperature stability and comprehensive performance among uranium alloys, which are the target of recent alloy design. In the present paper, a cluster-plus-glue-atoms structure model, which is used to describe solid solution alloys, were applied to build the component formulas of  $\gamma$ -U solution alloys, and clarify that the structural unit of  $\gamma$ -U alloys is composed of bcc first neighbor coordination polyhedron cluster and three glue atoms. Further, an enormous amount of the existing alloy components were analyzed based on the model. Results indicate that all the bcc-stable alloys satisfy the model, such as [Mo-U<sub>14</sub>]Mo<sub>3</sub> (U-10.7Mo), [Zr-U<sub>14</sub>]Nb<sub>3</sub> (U-7.5Nb-2.5Zr, i.e., Mulberry alloy), which all exhibit the best structural stability in their respective systems and show excellent corrosion resistance. Therefore, the component design method based on cluster-plus-glue-atoms model clusters has important guiding value in predicting alloys composition and performance.

**Key words:** uranium alloy; cluster-plus-glue-atoms structure model; solid solution; components; corrosion resistance

---

Corresponding author: Dong Chuang, Ph. D., Professor, Key Laboratory of Materials Modification by Laser, Ion and Electron Beams of Ministry of Education, Dalian University of Technology, Dalian 116024, P. R. China, E-mail: dong@dlut.edu.cn