



Таким образом, метод диализа позволяет успешно разделить серную кислоту и сульфат никеля с высоким коэффициентом разделения. При этом среднее отношение концентрации серной кислоты к концентрации сульфата никеля в диализате составило 36,8 раз, при том, что в исходном растворе отношение концентраций составляло 3,7.

Работа выполнена при финансовой поддержке Госзадания: «Проект FZEN-2020-0022».

### Список литературы

1. ICSC: 0063 Международная карта химической безопасности. Сульфат никеля (II).
2. Информационная карта потенциально опасного химического и биологического вещества. Серная кислота. Свидетельство о государственной регистрации серия АТ № 000058 от 17.06.94. – М.: РПОХВ, 1994. – 5 с.
3. Анализ российского рынка никель-металлогидридных аккумуляторов. 2015. DISCOVERY Research Group. 69 с.
4. Анализ российского рынка никель-кадмиевых аккумуляторов. 2015. DISCOVERY Research Group. 57 с.

УДК 621.039.59

## ОЦЕНКА ВЕЩЕСТВЕННОГО СОСТАВА ОТРАБОТАВШЕГО НИТРИДНОГО ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА

М.В. Мазанников<sup>1\*</sup>, А.М. Потапов<sup>1,2</sup>, Ю.П. Зайков<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

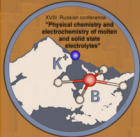
<sup>2</sup>Уральский государственный горный университет, Екатеринбург, Россия

\*e-mail: mazannikov.m@yandex.ru

Для разработки технологии переработки отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) необходимо знать его не только элементный, но и вещественный состав. Химический анализ “горячего”, высокоактивного топлива весьма затруднителен. Для оценки вещественного состава эффективным инструментом является термодинамическое моделирование.

Целью настоящей работы является расчёт равновесного вещественного состава нитридного ОЯТ методами термодинамического моделирования.

Моделирование проводили с использованием программного пакета HSC Chemistry 9.9 [1]. В качестве исходных данных использовали изотопный состав нитридного ОЯТ, приведённый в технической справке [2]. С точки зрения химии изотопы одного элемента неразличимы,



поэтому их содержание суммировали. Таким способом был получен исходный элементный состав.

В основе термодинамических расчетов в HSC Chemistry лежит метод минимизации свободной энергии Гиббса. Программа рассматривает всевозможные реакции исходных элементов с образованием всех веществ, имеющих в её базе данных, и вычисляет равновесный состав, имеющий минимальную свободную энергию. Параметры термодинамического равновесия системы определяются решением математической задачи о нахождении экстремума с учетом некоторых ограничений, таких как уравнения баланса масс вещества и условий нормировки. Вещественный состав был рассчитан для трех температур: 450, 600 и 700 °C.

В таблице, представлены результаты моделирования. Показаны соединения, мольный процент которых более 0.1%.

Соединением с наибольшим содержанием является  $U_{0.8}Pu_{0.2}N$ . Остальные актиниды и нитриды присутствуют в виде нитридов, которые неограниченно растворимы в фазе этого двойного нитрида. Большая часть благородных металлов образует интерметаллиды типа  $URu_3$ ,  $UPd_3$ ,  $URh_3$ . Результаты подтверждаются данными, приведёнными в обзоре [3].

**Таблица.** Равновесный вещественный состав нитридного ОЯТ при 450, 600, 700 °C по результатам термодинамического моделирования.

| №<br>п/п | Соединение/<br>элемент | Количество вещества, мол. % |        |        |
|----------|------------------------|-----------------------------|--------|--------|
|          |                        | 450 °C                      | 600 °C | 700 °C |
| 1        | $(U_{0.8}Pu_{0.2})N$   | 45.85                       | 45.21  | 44.92  |
| 2        | UN                     | 33.89                       | 34.36  | 34.60  |
| 3        | PuN                    | 4.666                       | 4.773  | 4.810  |
| 4        | $U_2N_3$               | 3.170                       | 3.140  | 3.087  |
| 5        | Xe(g)                  | 1.809                       | 1.806  | 1.803  |
| 6        | ZrN                    | 1.491                       | 1.489  | 1.486  |
| 7        | NdN                    | 1.295                       | 1.293  | 1.2911 |
| 8        | CeN                    | 0.8068                      | 0.8055 | 0.8043 |
| 9        | Mo                     | 0.8069                      | 0.8164 | 0.7811 |
| 10       | Cs(g)                  | 0.03412                     | 0.2305 | 0.4974 |
| 11       | $URu_3$                | 0.5029                      | 0.4835 | 0.4674 |
| 12       | Cs                     | 0.8332                      | 0.6545 | 0.4276 |
| 13       | LaN                    | 0.4265                      | 0.4258 | 0.4253 |
| 14       | Tc                     | 0.4233                      | 0.4226 | 0.4220 |
| 15       | PrN                    | 0.4135                      | 0.4128 | 0.4121 |
| 16       | $UPd_3$                | 0.3994                      | 0.3988 | 0.3982 |



| №<br>п/п | Соединение/<br>элемент | Количество вещества, мол. % |         |        |
|----------|------------------------|-----------------------------|---------|--------|
|          |                        | 450 °C                      | 600 °C  | 700 °C |
| 17       | Ba                     | 0.4137                      | 0.4029  | 0.3907 |
| 18       | SmN                    | 0.3618                      | 0.3612  | 0.3606 |
| 19       | Mo <sub>2</sub> C      | 0.4310                      | 0.3816  | 0.3462 |
| 20       | Cs <sub>2</sub> Te     | 0.2332                      | 0.2219  | 0.1977 |
| 21       | MoN <sub>0.5</sub>     | 0.02337                     | 0.09453 | 0.1872 |
| 22       | AmN                    | 0.1820                      | 0.1817  | 0.1814 |
| 23       | Sr                     | 0.1502                      | 0.1717  | 0.1643 |
| 24       | Rh <sub>3</sub> U      | 0.1586                      | 0.1576  | 0.1567 |
| 25       | Kr(g)                  | 0.1527                      | 0.1524  | 0.1522 |
| 26       | YN                     | 0.1498                      | 0.1496  | 0.1493 |
| 27       | Ru                     | 0.03798                     | 0.09384 | 0.1395 |
| 28       | CsI                    | 0.1438                      | 0.1412  | 0.1372 |
| 29       | Ag                     | 0.1151                      | 0.1149  | 0.1148 |

### Список литературы

1. Roine. A. HSC Chemistry® [Software], Outotec, Pori 2018. Software available at [www.outotec.com/HSC](http://www.outotec.com/HSC).
2. Хачересов Г.А., Белых К.О. Радиационные характеристики ОТВС РУ БРЕСТ-ОД-300 Инв. № E214-4572 от 11.08.2014.
3. Arai Y. // Nitride fuels. Comprehensive Nuclear Materials. Amsterdam: Elsevier, 2012. V. 3. P. 41–54.

УДК 621.039.59

### ТЕРМОГРАВИМЕТРИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА АЗОТИРОВАНИЯ МОНОНИТРИДА УРАНА

М.В. Мазанников<sup>1\*</sup>, А.М. Потапов<sup>1,2</sup>, А.И. Вылков<sup>1</sup>, Ю.П. Зайков<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>Уральский государственный горный университет, Екатеринбург, Россия

\*e-mail: [mazannikov.m@yandex.ru](mailto:mazannikov.m@yandex.ru)

Взаимодействие мононитрида урана с азотом идёт по двум параллельным реакциям с образованием двух основных продуктов – UN<sub>1.5</sub> и UN<sub>2</sub>:

