

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung I

Abstract..... III

1 Einleitung 1

1.1 Stand von Wissenschaft und Technik zu Beginn des Vorhabens 4

1.1.1 Rechenverfahren..... 10

1.1.2 Arbeiten anderer Arbeitsgruppen 11

1.1.3 Zuvor durchgeführte Arbeiten des Antragstellers 11

1.2 Strukturierung des Arbeitsprogramms 14

2 Temperaturfeldberechnungen 17

2.1 Bestimmung der Nachzerfallswärme..... 17

2.1.1 Berechnungen mit KENOREST 20

2.1.2 Berechnungen mit TRITON..... 23

2.1.3 Weitere Berechnungen 24

2.2 Beteiligung am *Decay Heat Blind Test* von SKB..... 25

2.2.1 Beschreibung des Benchmarks und der Ergebnisse 26

2.3 Temperaturfeldberechnungen beladener Behälter..... 29

2.3.1 Das Rechenprogramm COBRA-SFS 32

2.3.2 Modell eines generischen Transport- und Lagerbehälters 32

2.3.3 Vergleichsstudie des COBRA-SFS-Modells..... 38

2.3.4 Semi-analytisches vereinfachtes Modell 40

2.3.5 Transiente Temperaturverteilungen: Exemplarische Ergebnisse eines
Trocknungsprozesses 42

3 Brennstabverhalten 45

3.1 Zirkoniumhydride und Wasserstoff-Festkörperlöslichkeit..... 45

3.2 Gestalt der Hydridausscheidungen bzw. der Hydridorientierung 50

3.3 Hüllrohrkriechen bei radial orientierten Hydriden 50

3.4	Molekulardynamische Simulation der Wasserstoff-Zirkonium-Kristalle.....	58
3.4.1	Embedded Atom Method	59
3.4.2	Ausgewählte Ergebnisse.....	64
3.4.3	Weitere Untersuchungen: Steuerungsparameterstudie	69
3.4.4	Zusammenfassung und Ausblick	73
3.5	Sprödbbruchübergangstemperatur	74
3.5.1	Testschema für Ringdrucktests zur Bestimmung der DBTT	75
3.5.2	Ringdrucktests an M5	79
3.5.3	Ringdrucktests an Zircaloy-4.....	80
3.5.4	Ringdrucktests an Zirlo	81
3.5.5	Zusammenfassung der Ergebnisse der Ringdrucktests.....	82
3.6	Weiterentwicklung von TESP-ROD	85
3.6.1	Axiale Diffusion von Wasserstoff im Hüllrohr	85
3.6.2	Zusammenfassung der weiteren Arbeiten.....	90
4	Datenbanken und Schnittstellen.....	93
4.1	Datenbank der Nachzerfallswärmeleistung.....	93
4.2	BR3ZL	94
4.3	TSSd/p-Datenbank und Analysewerkzeug	96
5	Internationaler Rechenbenchmark zum Brennstabverhalten	99
6	Zusammenfassung und Ausblick	101
	Literaturverzeichnis	105
	Abbildungsverzeichnis	111
	Tabellenverzeichnis	117
A	Publikationsliste.....	119
A.1	Journal-Artikel und Konferenzbeiträge	119
A.2	Konferenz- und Seminarbeiträge	120
A.3	Weitere.....	121

B	Verwendete Python Scripte zur Erstellung der Potentiale für LAMMPS.....	123
B.1	Anhang 1: Python script zum Erstellen des tabellierten Potentials	123
B.2	Anhang 2: Eingabe Datei zur Simulation von reinem Zirkonium	126
B.3	Anhang 3: Eingabe Datei zur Simulation von Zirkonium mit 50 wppm Wasserstoff	127
C	Benchmark for thermo-mechanical fuel rod behaviour during dry storage Specifications	129
C.1	Introduction	129
C.2	General aim.....	129
C.3	Codes.....	130
C.4	Fuel rod state	133
C.5	Shutdown, wet storage and drying procedure.....	137
C.6	Dry storage period.....	140
C.7	Parameters to be calculated	142
C.8	File format of parameters	143
C.9	Schedule	143